

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 3 年 6 月 1 日現在

機関番号：12102

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18H03767

研究課題名(和文)組成比制御によるシリサイド半導体の伝導型制御とガラス上の高効率ホモ接合太陽電池

研究課題名(英文) Conductivity control of semiconducting silicides by composition ratios and formation of homojunction solar cells on glass substrates

研究代表者

末益 崇 (Suemasu, Takashi)

筑波大学・数理工学系・教授

研究者番号：40282339

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 26,500,000円

研究成果の概要(和文)：これまでの研究で、p-BaSi<sub>2</sub>/n-Siヘテロ接合型太陽電池で動作を実証してきた。しかし、光電流の大部分はSi基板の寄与によるものであった。本研究では、光電流の大部分がBaSi<sub>2</sub>層の寄与によるBaSi<sub>2</sub>ホモ接合型太陽電池およびn-ZnO/p-BaSi<sub>2</sub>ヘテロ接合太陽電池を作製し、それらの動作を初めて実証した。また、BaSi<sub>2</sub>膜に含まれる欠陥の不活性化についても研究が進み、水素ドーピングにより欠陥が不活性化すること、さらに、その機構を第一原理計算で明らかにした。また、大面積堆積が可能なスパッタ法で作製したBaSi<sub>2</sub>太陽電池においても、太陽電池動作を初めて実証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

半導体バリウムシリサイド(BaSi<sub>2</sub>)は資源が豊富な元素で構成され、光吸収係数および禁制帯幅の視点で、太陽電池に適した新しい材料である。本研究において、BaSi<sub>2</sub>ホモ接合太陽電池の動作に成功したことは、既存の結晶Si太陽電池とのタンデム化により、資源が豊富な元素のみで構成されるSiベースの半導体においても、エネルギー変換効率30%超を狙える可能性が拓けるため、意義深いといえる。また、大面積薄膜の堆積に適したスパッタ法を用いて太陽電池動作を実証したことも重要な成果である。学術的には、BaSi<sub>2</sub>中の空孔型欠陥を水素で不活性化できること、また、その機構を明らかにした点に意義がある。

研究成果の概要(英文)：Barium disilicide (BaSi<sub>2</sub>) is one of the emerging materials for solar cell applications. It has a large absorption coefficient and a suitable band gap of 1.3 eV. In the past, p-BaSi<sub>2</sub>/n-Si heterojunction solar cells have been achieved. However, photons absorbed in the n-Si side contribute mostly to photocurrents. In this work, we achieved the first demonstration of BaSi<sub>2</sub>-pn homojunction solar cells and n-ZnO/p-BaSi<sub>2</sub> heterojunction solar cells, wherein photogenerated carriers in the BaSi<sub>2</sub> layers contribute mostly to the photocurrent. We have also investigated defects in BaSi<sub>2</sub> films. According to first-principles calculations, Si vacancies are most likely to form. We found by experiment that these defects are inactivated by atomic hydrogen doping, and the mechanism of inactivations is clarified based on first-principles studies. We further developed the BaSi<sub>2</sub> thin-film growth technique by sputtering, and demonstrated the first operation of n-BaSi<sub>2</sub>/p-Si solar cells.

研究分野：電子工学、結晶成長工学

キーワード：太陽電池 光吸収 pn接合 エネルギー変換効率 欠陥 空孔

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

研究代表者が2001年より注目しているバリウムダイシリサイド(BaSi<sub>2</sub>)は、新規太陽電池材料として以下の特徴をもつ。

1. 安全安心な元素で構成される禁制帯幅 1.3eV の間接遷移型半導体
2. Si(111)および Si(001)面へのエピタキシャル成長と禁制帯幅拡大が可能
3. 少数キャリア拡散長が 10μm と結晶粒サイズ(0.2μm)よりも格段に大きい
4. 光吸収係数が極めて大きく、CIGS 系を凌駕する
5. 不純物ドーピングにより、キャリアタイプおよびキャリア密度の制御が可能

[Review paper: T. Suemasu, N. Usami, J. Phys. D: Appl. Phys. 50, 023001 (2017). ]

研究代表者は、基礎研究の成果をベースに、2016年より BaSi<sub>2</sub>を用いた最も単純な p-BaSi<sub>2</sub>/n-Si ヘテロ接合太陽電池を作製し、2017年9月現在 12.1%を達成しているが、開放電圧が 0.5V 程度と小さいという問題がある。これは、図 1 に示すように BaSi<sub>2</sub>の電子親和力が 3.2eV と小さいため(末益他 JJAP 45, L519

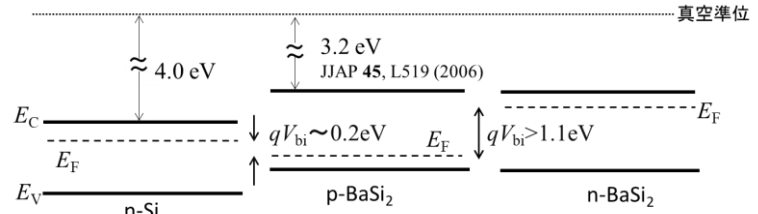


図 1. 真空準位を基準にした BaSi<sub>2</sub>および Si のバンドラインナップ。

(2006))、真空準位を基準にして接合前の p-BaSi<sub>2</sub>と n-Si ではフェルミ準位差が約 0.2eV と小さいことに起因する。このため、内蔵電位が約 0.2V と限られ、開放電圧が小さい。また、伝導型を反転させた n-BaSi<sub>2</sub>/p-Si では、ヘテロ界面のバンド不連続が光生成キャリアの輸送を阻害するため、太陽電池に不適である。一方、BaSi<sub>2</sub>-pn ホモ接合構造では、禁制帯幅に近い 1.3V 程度まで原理的に内蔵電位を拡大できる。このため、ヘテロ接合型に比べて開放電圧を 2 倍程度に増やせる。よって、禁制帯幅 1.1eV の結晶 Si 太陽電池では達成が困難な開放電圧 0.8V 以上が見込まれ、厚さ 1μm 程度で、25%を超える変換効率が実現可能である(末益 JJAP 54, 07JE01 (2015))。BaSi<sub>2</sub>-pn ホモ接合が得られれば、結晶 Si 太陽電池とのタンデム化により開放電圧を大幅に増加できるため、変換効率 35%へと、さらなる高みを目指すことが可能になる。

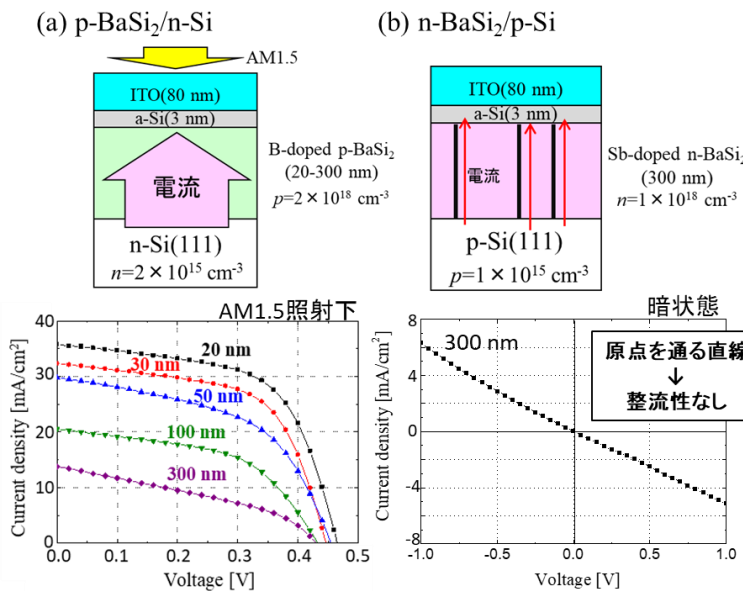


図 2.(a) p-BaSi<sub>2</sub>/n-Si の AM1.5 照射下の電流電圧特性(山下他 2017 年秋応物 8a-C11-9), (b)n-BaSi<sub>2</sub>/p-Si ダイオードの暗電流特性。原点を通る直線になっている。整流性が得られないのは、Sb ドープ n-BaSi<sub>2</sub> 膜に縦方向に電流リークパスが存在するためである。

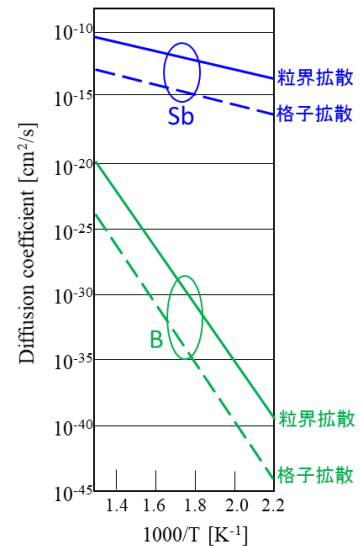


図 3. BaSi<sub>2</sub> 中の Sb および B の拡散係数。

BaSi<sub>2</sub>-pn 接合の安定動作に向けて解決すべき課題は、n-BaSi<sub>2</sub> 層の縦方向の電流リークパスを大幅に低減することである。図 2(a)に示す B ドープ p-BaSi<sub>2</sub> 層(ホール密度  $p=2\times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ )を用いた p-BaSi<sub>2</sub>/n-Si ダイオードでは、p-BaSi<sub>2</sub> の膜厚を 20—300nm で形成し、電流電圧特性に整流性と太陽電池動作を実証してきた(山下他 2017 年秋季応用物理学会 8a-C11-9)。このため、p-BaSi<sub>2</sub> の縦方向(矢印方向)の電流パスにはリークの問題は無い。一方、図 2(b)に示す Sb ドープ n-BaSi<sub>2</sub>(電子密度  $1\times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ )を用いた n-BaSi<sub>2</sub>/p-Si ダイオードでは、n-BaSi<sub>2</sub> の膜厚を 300nm で形成しても暗状態で既に電流電圧特性に整流性が現れない。これは電流リークパスが存在し、上部電極と p-Si が電氣的に短絡していることを示している。*a* 軸配向 BaSi<sub>2</sub> エピタキシャル膜(粒径約 0.2 $\mu\text{m}$ )は、3 回対称のドメイン構造をもち粒界が存在する(末益他 JJAP 43, L478(2004))。これまでの研究により、Sb が粒界に集まりリークパスになっていることが分かってきた。図 3 に示すとおり、BaSi<sub>2</sub> 中の Sb は、B に比べて拡散係数が極端に大きく(末益他 JJAP 53,04ER02(2014))、これを制御するのは容易ではない。また、15 族元素の他のドナー不純物(P, As)も拡散係数が Sb 同様に大きい。このため、ドナー不純物を使わずに、 $10^{18}\text{cm}^{-3}$  級の電子密度をもつ n-BaSi<sub>2</sub> 膜を形成する必要がある。

このような背景の中、アンドープ BaSi<sub>2</sub> 膜(300nm)の堆積時、Ba/Si フラックス比( $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}$ )を変えると、図 4 に示す通り  $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}=2.0\text{—}2.6$  でキャリア密度が  $10^{15}\text{cm}^{-3}$  前半まで下がり p 型になることを見出した。また、 $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}$  比がそれより小さくても大きくても n 型になり、化学量論組成(BaSi<sub>2</sub> 膜中の  $N_{\text{Ba 原子数}}/N_{\text{Si 原子数}}=0.5$ )から大きくズラすと、電子密度が  $10^{18}\text{cm}^{-3}$  まで増加することを見出した(高部他 2017 年秋季応用物理学会 8a-C11-2)。BaSi<sub>2</sub> 中では Si 不足および Si 過多の両方で Si 空孔が生じやすく、Si 空孔はドナーとして電子を供給することが、Kumar 等(NIMS)による第一原理計算で示された(2016 年春季応用物理学会 21a-S223-2)。図 4 の実験結果は彼らの計算結果と整合する。 $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}=2.0\text{—}2.6$  が p 型になるのは、残留 B がホールの供給源となるためと考えている。

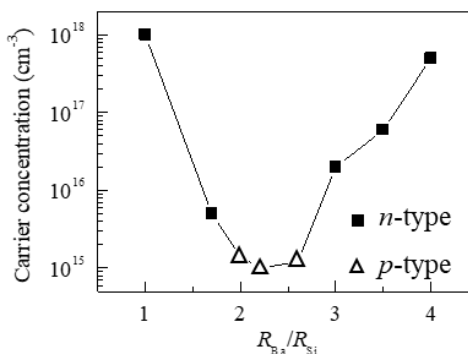


図 4. 堆積時の Ba/Si フラックス比による BaSi<sub>2</sub> 膜のキャリア密度変化(2017 年秋季応物 8a-C11-2)。

## 2. 研究の目的

目標とする pn 接合構造を図 5 に示す。ドナー不純物を使わずに、図 5 の矢印(→)で示す電子密度  $10^{18}\text{cm}^{-3}$  の n 型 BaSi<sub>2</sub> 膜と、光吸収層となるアンドープ p<sup>+</sup>-BaSi<sub>2</sub> 膜( $p=10^{15}\text{cm}^{-3}$ )を再現性よく形成し、電流電圧特性で整流性を獲得することを目的とする。

## 3. 研究の方法

図 5 に示す pn 積層構造を形成する際、まず、 $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}=2.2$  に固定して、B ドープ p-BaSi<sub>2</sub> 膜を形成する。ホール密度が  $10^{18}\text{cm}^{-3}$  を超えるように設定する。次に、undoped p-BaSi<sub>2</sub> 光吸収層については、 $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}=2.2$  に固定して、ホール密度が  $10^{15}\text{cm}^{-3}$  台と極めて小さくなるように設定する。最後の undoped n<sup>+</sup>-BaSi<sub>2</sub> エミッタ層を、 $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}$  比を 2.2 から大きくズラして BaSi<sub>2</sub> を形成して、n<sup>+</sup>-BaSi<sub>2</sub> 層を undoped p-BaSi<sub>2</sub> 層上に形成して pn 接合とする。これらの積層構造形成には、分子線エピタキシー(MBE)法を用いる。Si については電子銃で、Ba および B については、K セルを使い、るつぼの温度を精密に制御することで、 $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}$  を制御し、伝導型およびキャリア密度を制御する。

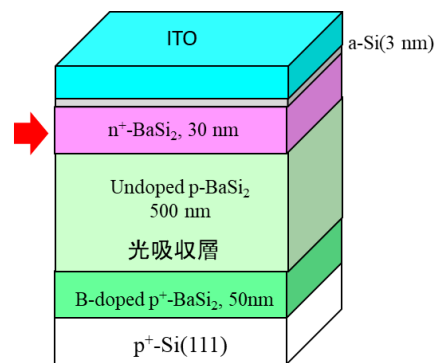


図 5. 目標とする BaSi<sub>2</sub>-pn ホモ接合太陽電池構造。

## 4. 研究成果

本研究助成により、査読付き学術論文誌 29 編に出版される成果を得た。代表的な成果を下記に示す。

### (1) ホモ接合型太陽電池の実証

BaSi<sub>2</sub>-ホモ接合型太陽電池を作製し、図 6 に示す通り、AM1.5 照射下において、開放電圧 0.11V、短絡電流密度 9.4mA/cm<sup>2</sup> の太陽電池動作を初めて実証した(末益他 Appl. Phys. Express 12, 041005 (2019), DOI: 10.7567/1882-0786/ab0c4f)。図 6(a)の内部量子効率スペクトルから、光電流は、BaSi<sub>2</sub> の禁制帯幅よりも高エネルギー側の光吸収によるものであり、BaSi<sub>2</sub> 層での光吸収により生じた光生成キャリアのみによる動作であるといえる。しかし、予想に反して変換効率が極端に小さいため、オランダ・デルフト工科大学の O.Isabella 博士の協力のもと、光電気シミュレーションを

行ったところ、図7に示す通り、ホモ接合型では、表面側の  $p^+$ -BaSi<sub>2</sub> エミッタ層での入射光子の吸収が大きく、その下の BaSi<sub>2</sub> 吸収層での光吸収が効果的に行われていないことが分かった。半導体の表面には欠陥が多いため、光吸収係数が大きい BaSi<sub>2</sub> では、表面層での欠陥を抑える必要があると考える。

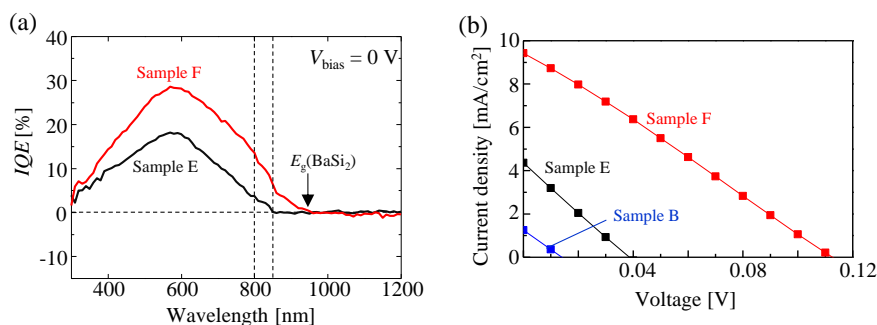


図6. BaSi<sub>2</sub>-pn ホモ接合太陽電池の(a) 内部量子効率スペクトル、(b) AM1.5 照射下での電流電圧特性。これにより、太陽電池動作を実証した。

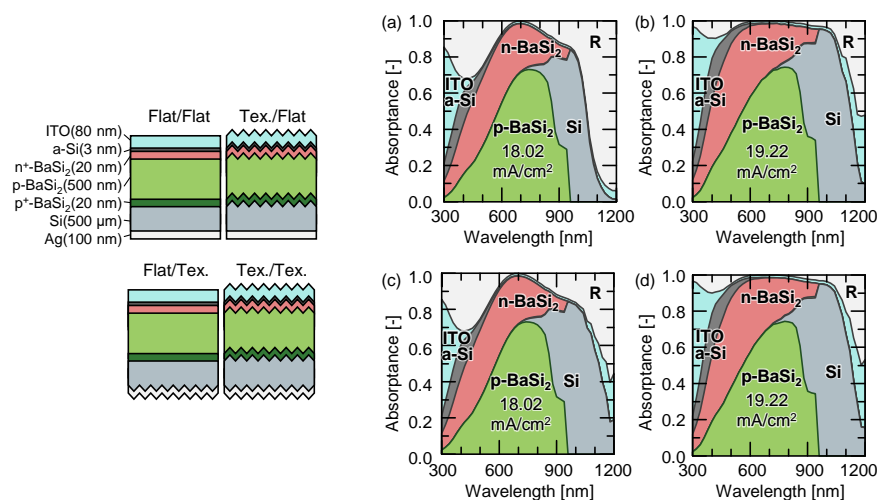


図7. 表面および裏面構造の違い(Flat または texture 構造)による BaSi<sub>2</sub>-pn ホモ接合太陽電池の各層における光吸収の割合。(a) Flat/Flat、(b) Texture/Flat、(c) Flat/Texture、(d) Texture/Texture 構造の場合。いずれの構造においても、赤色で示す表面側 BaSi<sub>2</sub> 層での光吸収が大きいことが分かる。

## (2) ヘテロ接合型太陽電池の実証

### ① n-ZnO/p-BaSi<sub>2</sub> ヘテロ接合太陽電池

表面での光吸収を抑えるため、表面側をワイドギャップ半導体 Al ドープ n-ZnO(n-AZO)とする太陽電池(図8)を設計した。図8(c)-(f)に、光電気シミュレーションで得られた光吸収の割合を示す。図7に比べて p-BaSi<sub>2</sub> 光吸収層での光吸収の割合が格段に大きくなっていることが分かる。そこで、AZO/p-BaSi<sub>2</sub> ヘテロ接合太陽電池を作製した。図9に示す通り、AM1.5 照射下において、太陽電池動作を得た。

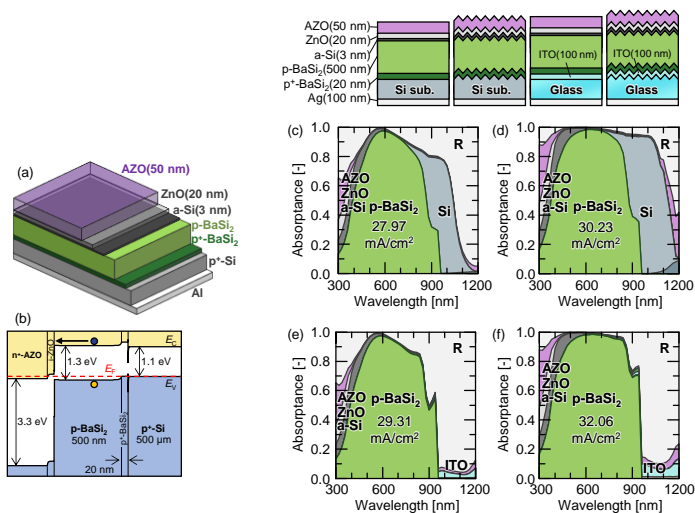


図8. (a) n-AZO/p-BaSi<sub>2</sub> の太陽電池積層構造、(b)バンドラインナップ。(c)-(f)表面および裏面構造の違い(Flat または texture 構造)による各層における光吸収の割合。いずれの構造においても、図7とは異なり、p-BaSi<sub>2</sub> 光吸収層での寄与が圧倒的に大きいことが分かる。

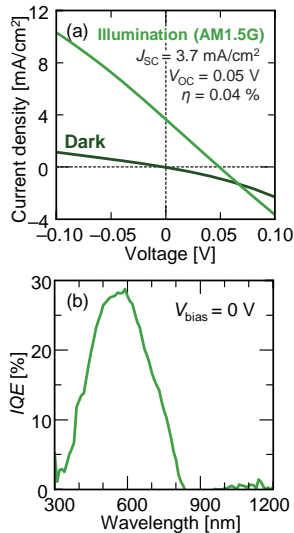


図 9. (a) n-AZO/p-BaSi<sub>2</sub> の AM1.5 照射下の太陽電池動作。(b) 内部量子効率スペクトル。

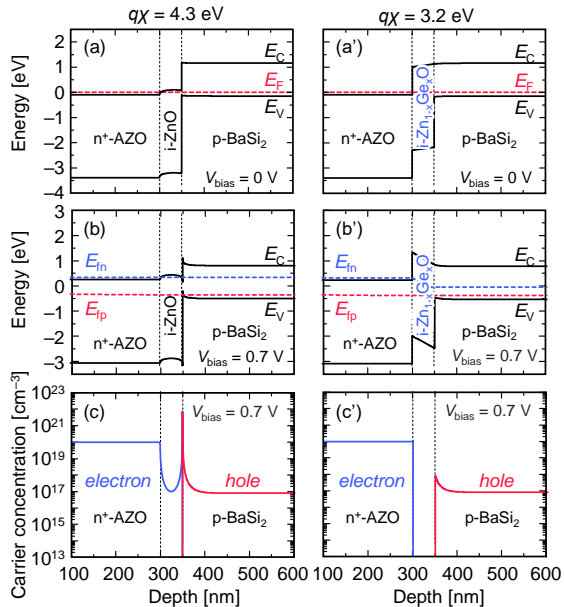


図 10. (a,a')n-AZO/p-BaSi<sub>2</sub> のバンド構造、(b,b')(c,c') 開放電圧付近( $V_{bias}=0.7$  V)の電子およびホール密度の分布。

この太陽電池では、図 10(c)に示す通り、ZnO/BaSi<sub>2</sub> ヘテロ界面において、電子とホールの両方が蓄積し、再結合が生じやすいと考えられる。そこで、図 10(b')(c')に示すように、BaSi<sub>2</sub> の電子親和力(3.2eV)に近い界面層を導入して、ヘテロ界面において電子とホールを空間的に分離する必要があるといえる(末益他, SOLMAT 230, 111181 (2021), DOI: 10.1016/j.solmat.2021.111181)。同様の界面層は、n-AZO/p-CIGS 太陽電池においても用いられており、CdS 層がその役割を果たす。そのような界面層の候補として、ZnGeO 層を考えている。Zn/Ge 比を制御することで、電子親和力を 3.2eV として、Cu<sub>2</sub>O 太陽電池が動作しており(Minami *et al.*, Appl. Phys. Express 9, 052301 (2016))、今後の研究が期待される。

## ②スパッタ法による n-BaSi<sub>2</sub>/p-Si ヘテロ接合太陽電池

これまでは MBE 法を用いて太陽電池を作製してきたが、MBE 法は大面積堆積には不向きであるため、実用化を念頭におき、MBE 法でのこれまでの成果を踏まえ、大面積堆積に向いているスパッタ法で BaSi<sub>2</sub> 太陽電池作製にも取り組んできた。スパッタ法では不純物ドーピングによる伝導型およびキャリア密度の制御が達成できていないため、作製した太陽電池構造は、undoped n-BaSi<sub>2</sub>/p-Si 構造である。この構造では、ヘテロ界面での大きなバンド不連続の影響で、光生成キャリアの輸送が阻害されるため、大きな変換効率は期待できないが、pn 接合の良し悪しは判断できる。図 11 に示す通り(末益他, Appl. Phys. Express 14, 051010 (2021), DOI: <https://doi.org/10.35848/1882-0786/abfb87>)、太陽電池動作をスパッタ法で形成した BaSi<sub>2</sub> 膜として初めて実証した。スパッタ法で形成した膜は、MBE 法での BaSi<sub>2</sub> 膜とは異なり多結晶膜であるが、分光感度は極端に大きく、結晶粒界の影響を受け難いなどの特徴を有する。今後は、スパッタ法を用いて、n-AZO/p-BaSi<sub>2</sub> 太陽電池の高効率化に取り組む。

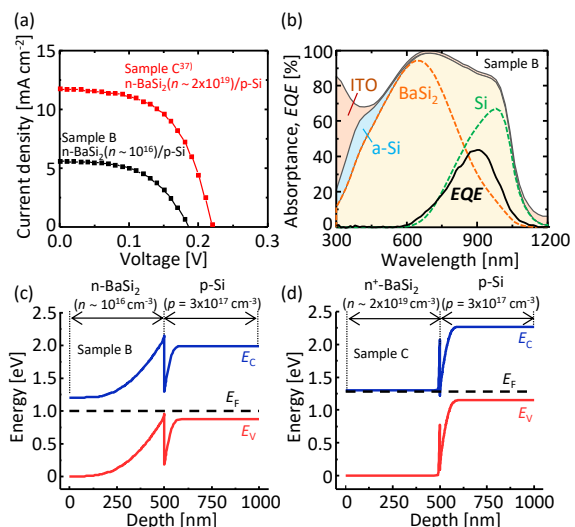


図 11. (a) AM1.5 照射下で得られた太陽電池動作、(b) 光電気シミュレーションによる光吸収の割合、(c)(d) n-BaSi<sub>2</sub>/p-Si ヘテロ構造のバンドアライメント。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計29件（うち査読付論文 28件 / うち国際共著 8件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Sugiyama Ryota, Yamashita Yudai, Toko Kaoru, Suemasu Takashi	4. 巻 59
2. 論文標題 Effects of sputtering pressure and temperature of ITO electrodes on the performance of p-BaSi <sub>2</sub> /n-Si heterojunction solar cells	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SFFA07.1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab70a8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yamashita Yudai, Sato Takuma, Toko Kaoru, Suemasu Takashi	4. 巻 59
2. 論文標題 Effects of molecular beam epitaxy growth conditions on grain size and lattice strain in a-axis-oriented BaSi <sub>2</sub> films	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SFFA09.1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab6b7a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Benincasa Louise, Xu Zhihao, Deng Tianguo, Sato Takuma, Toko Kaoru, Suemasu Takashi	4. 巻 59
2. 論文標題 Effects of boron and hydrogen doping on the enhancement of photoresponsivity and photoluminescence of BaSi <sub>2</sub> epitaxial films	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SFFA08.1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab6b83	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Montes A., Eijt S. W. H., Tian Y., Gram R., Schut H., Suemasu T., Usami N., Zeman M., Serra J., Isabella O.	4. 巻 127
2. 論文標題 Point defects in BaSi <sub>2</sub> thin films for photovoltaic applications studied by positron annihilation spectroscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 085304.1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5126264	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Nemoto T., Matsuno S., Sato T., Gotoh K., Mesuda M., Kuramochi H., Toko K., Usami N., Suemasu T.	4. 巻 59
2. 論文標題 Drastic enhancement of photoresponsivity in C-doped BaSi <sub>2</sub> films formed by radio-frequency sputtering	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SFFA06.1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab69dc	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sugiyama Shu, Yamashita Yudai, TOKO Kaoru, SUEMASU Takashi	4. 巻 59
2. 論文標題 Influence of Ba-to-Si deposition rate ratios on the electrical and optical properties of B-doped BaSi <sub>2</sub> epitaxial films	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SFFA04.1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab65ae	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Aonuki Sho, Yamashita Yudai, TOKO Kaoru, SUEMASU Takashi	4. 巻 59
2. 論文標題 Fabrication of As-doped n-type BaSi <sub>2</sub> epitaxial films grown by molecular beam epitaxy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SFF01.1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab5b7a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamashita Yudai, Sato Takuma, Saitoh Noriyuki, Yoshizawa Noriko, Toko Kaoru, Suemasu Takashi	4. 巻 126
2. 論文標題 Three-step growth of highly photoresponsive BaSi <sub>2</sub> light absorbing layers with uniform Ba to Si atomic ratios	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 215301.1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5128690	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Deng Tianguo, Xu Zhihao, Yamashita Yudai, Sato Takuma, Toko Kaoru, Suemasu Takashi	4. 巻 205
2. 論文標題 Modeling the effects of defect parameters on the performance of a p-BaSi2/n-Si heterojunction solar cell	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Solar Energy Materials and Solar Cells	6. 最初と最後の頁 110244.1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.solmat.2019.110244	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sato Takuma, Yamashita Yudai, Xu Zhihao, Toko Kaoru, Gambarelli Serge, Imai Motoharu, Suemasu Takashi	4. 巻 12
2. 論文標題 Correlation of native defects between epitaxial films and polycrystalline BaSi2 bulks based on photoluminescence spectra	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 111001.1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/ab476f	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Shohonov D.A., Migas D.B., Filonov A.B., Borisenko V.E., Takabe R., Suemasu T.	4. 巻 686
2. 論文標題 Effects of lattice parameter manipulations on electronic and optical properties of BaSi2	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Thin Solid Films	6. 最初と最後の頁 137436.1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tsf.2019.137436	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Benincasa Louise, Hoshida Hirofumi, Deng Tianguo, Sato Takuma, Xu Zhihao, Toko Kaoru, Terai Yoshikazu, Suemasu Takashi	4. 巻 3
2. 論文標題 Investigation of defect levels in BaSi2 epitaxial films by photoluminescence and the effect of atomic hydrogen passivation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics Communications	6. 最初と最後の頁 075005.1~10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/2399-6528/ab2fa1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する



1. 著者名 Xu Zhihao, Shohonov Denis A., Filonov Andrew B., Gotoh Kazuhiro, Deng Tianguo, Honda Syuta, Toko Kaoru, Usami Noritaka, Migas Dmitri B., Borisenko Victor E., Suemasu Takashi	4. 巻 3
2. 論文標題 Marked enhancement of the photoresponsivity and minority-carrier lifetime of BaSi <sub>2</sub> passivated with atomic hydrogen	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 065403.1~10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.3.065403	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Sato Takuma, Lombard Christian, Yamashita Yudai, Xu Zhihao, Benincasa Louise, Toko Kaoru, Gambarelli Serge, Suemasu Takashi	4. 巻 12
2. 論文標題 Investigation of native defects in BaSi <sub>2</sub> epitaxial films by electron paramagnetic resonance	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 061005 ~ 061005
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/ab2062	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yamashita Yudai, Takahara Yuuki, Sato Takuma, Toko Kaoru, Uedono Akira, Suemasu Takashi	4. 巻 12
2. 論文標題 Simple way of finding Ba to Si deposition rate ratios for high photoresponsivity in BaSi <sub>2</sub> films by Raman spectroscopy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 055506.1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/ab14b9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsuno Satoshi, Takabe Ryota, Yokoyama Seiya, Toko Kaoru, Mesuda Masami, Kuramochi Hideto, Suemasu Takashi	4. 巻 11
2. 論文標題 Significant photoresponsivity enhancement of polycrystalline BaSi <sub>2</sub> films formed on heated Si(111) substrates by sputtering	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 071401.1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/APEX.11.071401	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hoshida Hirofumi, Murakoso Naoki, Suemasu Takashi, Terai Yoshikazu	4. 巻 386
2. 論文標題 Identification of Vibrational Modes in BaSi <sub>2</sub> Epitaxial Films by Infrared and Raman Spectroscopy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Defect and Diffusion Forum	6. 最初と最後の頁 43~47
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4028/www.scientific.net/DDF.386.43	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamashita Yudai, Sato Takuma, Bayu Miftahullatif Enha, Toko Kaoru, Suemasu Takashi	4. 巻 57
2. 論文標題 Investigation of electrically active defects in undoped BaSi <sub>2</sub> light absorber layers using deep-level transient spectroscopy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 075801.1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.57.075801	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsuno Satoshi, Nemoto Taira, Mesuda Masami, Kuramochi Hideto, Toko Kaoru, Suemasu Takashi	4. 巻 12
2. 論文標題 Impact of deposition pressure and two-step growth technique on the photoresponsivity enhancement of polycrystalline BaSi <sub>2</sub> films formed by sputtering	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 021004.1~3
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/aafc70	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kodama Komomo, Yamashita Yudai, Toko Kaoru, Suemasu Takashi	4. 巻 12
2. 論文標題 Operation of BaSi <sub>2</sub> homojunction solar cells on p+-Si(111) substrates and the effect of structure parameters on their performance	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 041005.1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/ab0c4f	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamashita Yudai, Takahara Yuuki, Sato Takuma, Toko Kaoru, Uedono Akira, Suemasu Takashi	4. 巻 12
2. 論文標題 Simple way of finding Ba to Si deposition rate ratios for high photoresponsivity in BaSi2 films by Raman spectroscopy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 055506.1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/ab14b9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yudai Yamashita, Carlos Mario Ruiz Tobon, Rudi Santbergen, Miro Zeman, Olindo Isabella, Takashi Suemasu	4. 巻 230
2. 論文標題 Solar cells based on n-AZO/p-BaSi2 heterojunction: Advanced opto-electrical modelling and experimental demonstration	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Solar Energy Materials & Solar Cells	6. 最初と最後の頁 111181.1~11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.solmat.2021.111181	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Taira Nemoto, Sho Aonuki, Ryota Koitabashi, Yudai Yamashita, Masami Mesuda, Kaoru Toko, and Takashi Suemasu	4. 巻 14
2. 論文標題 Solar cell operation of sputter-deposited n-BaSi2/p-Si heterojunction diodes and characterization of defects by deep-level transient spectroscopy	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 051010.1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/abfb87	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Taira Nemoto, Ryota Koitabashi, Masami Mesuda, Kaoru Toko, and Takashi Suemasu	4. 巻 60
2. 論文標題 Comparison of C doping technique between SiC and C targets for high-photoresponsivity BaSi2 films by radio-frequency sputtering	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 058001.1~3
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/abf317	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sho Aonuki, Zhihao Xu, Yudai Yamashita, Kazuhiro Gotoh, Kaoru Toko, Noritaka Usami, Andrew B. Filonov, Siarhei A. Nikitsiuk, Dmitri B. Migas, Denis A. Shohonov, Takashi Suemasu	4. 巻 724
2. 論文標題 Mechanisms of carrier lifetime enhancement and conductivity-type switching on hydrogen-incorporated arsenic-doped BaSi <sub>2</sub>	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Thin Solid Films	6. 最初と最後の頁 138629.1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tsf.2021.138629	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yurika Haku, Sho Aonuki, Yudai Yamashita, Kaoru Toko, and Takashi Suemasu	4. 巻 14
2. 論文標題 Effect of post-annealing on the significant photoresponsivity enhancement of BaSi <sub>2</sub> epitaxial films on Si(111)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 021003.1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/abdc9f	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ryota Koitabashi, Taira Nemoto, Yudai Yamashita, Masami Mesuda, Kaoru Toko, and Takashi Suemasu	4. 巻 54
2. 論文標題 Formation of high-photoresponsivity BaSi <sub>2</sub> films on glass substrate by radio-frequency sputtering for solar cell applications	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics D: Applied Physics	6. 最初と最後の頁 135106.1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6463/abd434	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Taira Nemoto, Ryota Koitabashi, Masami Mesuda, Kaoru Toko, and Takashi Suemasu	4. 巻 13
2. 論文標題 Impact of radio-frequency power on the photoresponsivity enhancement of BaSi <sub>2</sub> films formed by sputtering	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 085511.1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/aba9a1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ryota Koitabashi, Taira Nemoto, Masami Mesuda, Kaoru Toko, and Takashi Suemasu	4. 巻 13
2. 論文標題 Fabrication of high-photoresponsivity BaSi2 films formed on conductive layers by radio-frequency sputtering	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 075506.1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ab9622	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計12件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 12件)

1. 発表者名 Y. Yamashita, T. Sato, K. Toko and T. Suemasu
2. 発表標題 Molecular beam epitaxy of BaSi2 light absorbers with smooth BaSi2/Si interface using three-step growth method
3. 学会等名 29th International Photovoltaic Science and Engineering Conference (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Aonuki, Y. Yamashita, K. Toko and T. Suemasu
2. 発表標題 Fabrication of As-doped n-type BaSi2 Films Grown by Molecular Beam Epitaxy
3. 学会等名 5th Asia-Pacific Conference on Semiconducting Silicides and Related Materials (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Yamashita, T. Sato, K. Toko, T. Suemasu
2. 発表標題 Molecular Beam Epitaxy of High-quality Undoped BaSi2 Light Absorbers using Threestep Growth Method
3. 学会等名 5th Asia-Pacific Conference on Semiconducting Silicides and Related Materials (国際学会)
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 L. Benincasa, H. Hoshida, T. Deng, T. Sato, Z. Xu, K. Toko, Y. Terai, and T. Suemasu
2 . 発表標題 Investigation of defect levels in undoped-BaSi <sub>2</sub> epitaxial films and the effect of atomic hydrogen passivation by photoluminescence measurement
3 . 学会等名 5th Asia-Pacific Conference on Semiconducting Silicides and Related Materials ( 国際学会 )
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Sato, Y. Yamashita, Z. Xu, L. Benincasa, K. Toko, S. Gambarelli, T. Suemasu
2 . 発表標題 Electron paramagnetic resonance spectra of BaSi <sub>2</sub> epitaxial films and bulk samples
3 . 学会等名 5th Asia-Pacific Conference on Semiconducting Silicides and Related Materials ( 国際学会 )
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Z. Xu, K. Gotoh, T. Deng, K. Toko, N. Usami, and T. Suemasu
2 . 発表標題 Significant improvement of optical properties of BaSi <sub>2</sub> due to atomic H passivation by radio-frequency plasma
3 . 学会等名 46th IEEE Photovoltaic Specialists Conference ( 国際学会 )
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Suemasu
2 . 発表標題 Semiconducting BaSi <sub>2</sub> solar cells and ultrafast current-induced domain wall motion in Mn <sub>4</sub> N
3 . 学会等名 4th Int. Conf. Energy Materials and Nanostructures ( 招待講演 ) ( 国際学会 )
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Suemasu
2. 発表標題 Rare-earth free Si-based new materials for high-efficiency solar cells
3. 学会等名 3rd Southeast Asia Collaborative Symposium on Energy Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Yamashita, T. Sato, K. Toko, T. Suemasu
2. 発表標題 Characterization of Defect Levels in BaSi <sub>2</sub> by DLTS and Significant Improvement of Photoresponsivity by Increasing Growth Temperature
3. 学会等名 MRS Spring Meeting and exhibit (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takashi Suemasu
2. 発表標題 Significant impact of Ba to Si deposition rate ratios during molecular beam epitaxy on electrical and optical properties of BaSi <sub>2</sub> absorber layers
3. 学会等名 The Forum on the Science and Technology of Silicon Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takashi Suemasu
2. 発表標題 Present status and future prospect of BaSi <sub>2</sub> solar cells
3. 学会等名 4th International Asian School Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takashi Suemasu
2. 発表標題 Recent achievements towards high-efficiency BaSi2 homojunction solar cells
3. 学会等名 10th International WorkShop on Crystalline Siliciod for Solar Cells (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計0件

〔取得〕 計3件

産業財産権の名称 珪化バリウム膜およびその製造方法	発明者 召田雅実、倉持豪人、末益崇	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、6478369	取得年 2018年	国内・外国の別 国内

産業財産権の名称 半導体装置およびその製造方法	発明者 末益崇、都甲薫、宇佐美徳隆、原康祐	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、6362044	取得年 2018年	国内・外国の別 国内

産業財産権の名称 珪化バリウム系積層材及びその製造方法	発明者 倉持豪人、召田雅実、末益崇	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、6347041	取得年 2018年	国内・外国の別 国内

〔その他〕

環境半導体・磁性体研究室 <a href="http://www.bk.tsukuba.ac.jp/~ecology/">http://www.bk.tsukuba.ac.jp/~ecology/</a> 環境半導体・磁性体研究室 <a href="http://www.bk.tsukuba.ac.jp/~ecology/publications.html">http://www.bk.tsukuba.ac.jp/~ecology/publications.html</a>
--

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件



8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------