

太陽電池の電荷分離における化学ポテンシャルの役割

The role of chemical potential in charge separation in a solar cell



東北大金研 ^{○(PC)}原 康祐, 宇佐美 徳隆

Tohoku Univ. ^{○(PC)}Kosuke O. Hara, Noritaka Usami

E-mail: k-hara@imr.tohoku.ac.jp

【緒言】太陽電池は、光吸収により生じた過剰な電子と正孔が空間的に分離されることで動作する。このとき、半導体中の電荷移動の駆動力は擬フェルミ準位の勾配である。擬フェルミ準位は電気化学ポテンシャルと等価であり、したがって、これはドリフトと拡散の寄与を定式化している。しかし、電位分布と化学ポテンシャルのそれぞれの電荷分離への寄与は、定量的に明確でない。にもかかわらず、多くの論文・著書では、電荷分離は電場の存在によるものと証明なしに記述されている(例えば、[1,2])。Ruppel と Würfel [3] は、化学ポテンシャル利得の観点から太陽電池の変換効率の上限を導いたが、電荷分離における寄与は示さなかった。本研究では、太陽電池の数値シミュレーションと化学ポテンシャルの計算により、電荷分離における化学ポテンシャルの寄与を定量的に示すことを目的とする。

【方法】直接遷移バンドギャップを持つ仮想的な半導体の pn 接合を計算対象とし、太陽電池デバイスシミュレーションプログラム wxAMPS [4] により、余剰キャリア密度および太陽電池特性を計算した。バルク再結合要因としては、発光再結合のみを考慮した。一方、同じ構造に対して、光照射による化学ポテンシャル増分の pn 接合の両側での差($\Delta\mu$)を計算し、 $V_c = \Delta\mu/q$ の関係(q : 電荷)により期待される電圧を、シミュレーション結果の開放電圧(V_{oc})と比較した。

【結果と考察】バンドギャップ(E_g)と多数キャリア密度(n)を変数としてシミュレーションを行い、得られた V_{oc} を Fig. 1 に示す。なお、p 層の多数キャリア密度は n 層と等しいとした。図より、 V_{oc} は E_g 、 n とともに増大することが分かる。 E_g に対しては直線的であるが、 n に対しては、 $n = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 程度で最大値を取った後、減少傾向を示した。また、Fig. 1 に、 $\Delta\mu$ より期待される電圧(V_c)を併せて示す。いずれの E_g 、 n においても、 V_{oc} と V_c は良い一致を示すことが分かる。これは、開放電圧が生じる主要因は、化学ポテンシャル増分の勾配であることを示している。

【参考文献】[1] A. Shah, *et al.*, *Science* **285** (1999) 692. [2] J. Nelson, *The physics of solar cells*, Imperial College Press, London, 2003. [3] W. Ruppel and P. Würfel, *IEEE Trans. Electron Devices* **27** (1980) 877. [4] Y. Liu, *et al.*, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **98** (2012) 124.

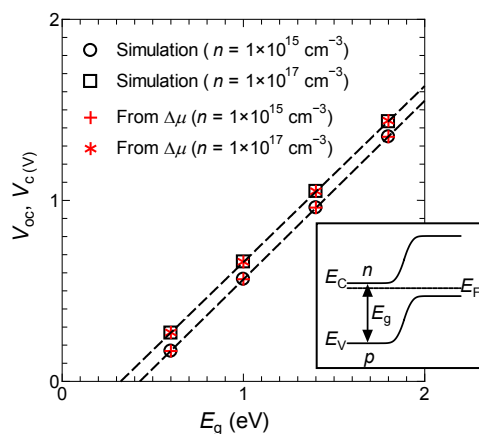


Fig. 1 Comparison between V_{oc} and V_c as a function of E_g and n . Dashed lines are the regression lines to V_{oc} .