

ドリフト拡散シミュレーションによる BaSi₂ 太陽電池の構造最適化

Device Structure Optimization of BaSi₂ solar cells via Drift-Diffusion Simulations

東芝マテリアル(株)¹, 東京工科大², 筑波大電物³, ○佐々木 敦也¹, 佐々木 亮人¹,

片岡 好則¹, 佐藤 光¹, 平林 英明¹, 齋藤 秀一¹, 小林 薫平¹, 高木 茂行², 佐野 伸行³

Toshiba Materials Co.,LTD.¹, Tokyo Univ. of Tech.², Univ. of Tsukuba³, ○Atsuya Sasaki¹, Akito Sasaki¹,

Yoshinori Kataoka¹, Akira Sato¹, Hideaki Hirabayashi¹, Shuichi Saito¹, Kumpei Kobayashi¹,

Shigeyuki Takagi², Nobuyuki Sano³

E-mail: atsuya.sasaki@toshiba.co.jp

[背景と目的] BaSi₂は太陽電池に適した禁制帯幅($E_g=1.3\text{eV}$)を持つ。また Si の 100 倍以上の光吸収係数を有するので、高効率薄膜太陽電池として期待される。しかし実用化には多くの課題があり、再結合等を考慮したデバイス特性予測、構造最適化が求められる。そこで、BaSi₂ 材料に適用可能な pn-Si ダイオード構造でのドリフト拡散シミュレータを構築し、pn-BaSi₂ 太陽電池の膜厚やキャリア密度 N_s の最適化を検討した。

[シミュレータの妥当性の確認] BaSi₂ の物性値は、実験[1]や理論[2]の文献の値を用いた。光照射は AM1.5 スペクトルをフィッティングして取入れた。構築したシミュレータの妥当性確認のため、pn-BaSi₂ の理論最大効率を計算した。膜厚は光吸収に十分な $2\mu\text{m}$ 、 N_s は拡散電位と禁制帯幅 1.3eV が等価になる値、再結合は放射再結合のみ考慮(Si の値を代用)した。図 1 に計算結果を示す。短絡電流 $J_{sc}=36.2\text{mA}/\text{cm}^2$ 、開放電圧 $V_{oc}=0.99\text{V}$ 、F 値 $FF=0.89$ となり、文献[3]に示される $E_g=1.3\text{eV}$ のホモ型太陽電池の理論最大値($J_{sc}=36\text{mA}/\text{cm}^2$ 、 $V_{oc}=1.0\text{V}$ 、 $FF=0.88$)と良い一致が得られた。

[計算結果・考察] 構築したシミュレータを用いて、表面再結合速度が支配的な条件のもとで、pn-BaSi₂($2\mu\text{m}$)における、短絡電流のキャリア密度(N_s)依存性を計算した。放射再結合とオージェ再結合は結晶 Si の値を代用した。また積層構造は、より高効率が得られるように薄膜化した n 型を上部層とする n 層(50nm)/p 層(1950nm)薄膜構造を仮定した。図 2(a)に短絡電流 J_{sc} の N_s 依存性、図 2(b)に上部 n 層空乏層幅 W の N_s 依存性を示す。図 2(a),(b)ともに N_s (上部 n 層) < N_s (下部 p 層)とすると、 J_{sc} および W の強い正の相関が得られた。これより、短絡電流増大には、上部 n 層側での空乏層幅の拡大が特性に重要であると明らかになった。光吸収係数が大きい pn-BaSi₂ は、表面再結合による影響が大きく、表層側に空乏層を拡げることで電流損失を抑制できる可能性が示唆される。

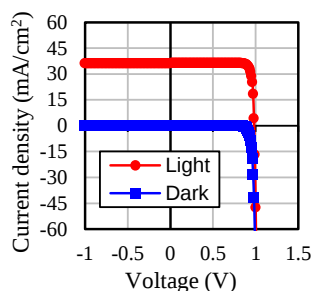


Fig.1: Theoretical maximum efficiency of pn-BaSi₂ solar cell. Calculation structure: (0.5 μm n-layer)/(1.5 μm p-layer)

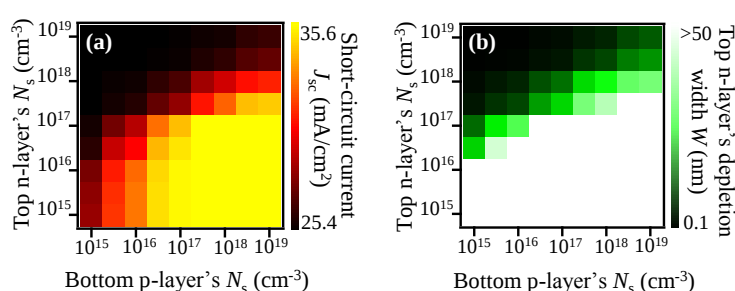


Fig.2 : Calculation of (a) J_{sc} and (b) W depending on carrier density (N_s) for pn-BaSi₂ solar cell. Metal (ohmic) contact is set as the surface boundary condition for the surface recombination rate to be dominant.

[参考文献] [1] K. Morita, Y. Inomata, and T. Suemasu, Thin Solid Films **508**, (2006) 363.

[2] D. B. Migas, V. L. Shaposhnikov, and V. E. Borisenko, phys. stat. sol. (b) **244**, No.7 (2007).

[3] F. H. Alhabib, S. N. Rashkeev, F. El-Mellouhi, *et al.*, npj. Computational Materials **1**, (2015) 15003.