

シミュレーションによる $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ 光カソード電極の性能特性に及ぼす主要因子の抽出

Investigation of performance limiting key parameters in $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ photocathodes

産総研ナノ材料¹, 東大工² (P)Vikas Nandal¹, 関和彦¹, 小林宏之², 堂免一成²

AIST¹, Tokyo Univ.², Vikas Nandal¹, Kazuhiko Seki¹, Hiroyuki Kobayashi², Kazunari Domen²

E-mail: nk.nandal@aist.go.jp

$\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS)は安価な作成技術の進歩と太陽電池としての効率が22パーセントを超えること、及び太陽光エネルギーにより水を分解して水素に変換する効率(STH)が12.5パーセントに上る高い性能を示していることから注目されている。これまでの実験結果では $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS)の表面に CdS 層と Pt で修飾した光電極は、Ga 成分比 $x=\text{Ga}/(\text{In}+\text{Ga})$ を上げると水分解が開始する光応答オンセットポテンシャル(V_{onset})が向上するが、ポテンシャルがかかっている状態での電流値を下げる傾向が見られていた。成分比 x の最適値を決める要因としては、成分比 x による吸収波長、CdS/CIGS のバンド端ギャップの変化、に加えて N_B (CIGS 内バルクの欠陥)、 N_I (CdS/CIGS 界面の欠陥)、CdS 表面での電子の表面再結合速度 S_n の関与が考えられる。本研究では光学シミュレーションと半導体方程式とを組み合わせた計算により、これらの因子の複合的な特徴を抽出し、実験結果と比較した。CdS/CIGS 界面欠陥 N_I が低い場合には V_{onset} は CIGS 内バルクの欠陥 N_B に大きな影響を受けたが、 N_I が高い場合には V_{onset} は飽和しその飽和値は N_I により大きな影響を受けた。(図1) この結果は実験結果とも良い相関を示している。講演では、効率を最大にする成分比についても太陽電池と光電極とを比較して議論する予定である。

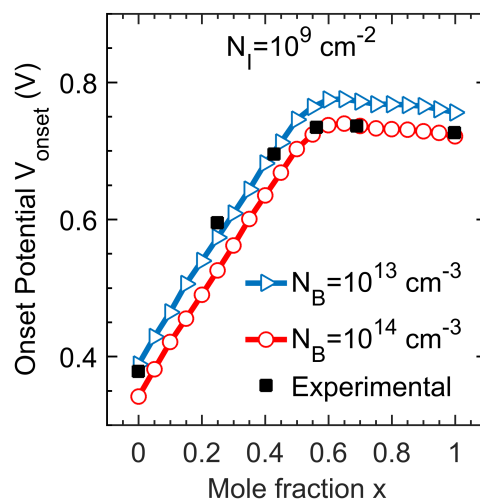


Fig. 1 (a) Variation of onset potential with mole fraction x for different bulk defect density N_B at high interface defect density N_I .