理論限界効率を示す $BaSi_2$ 太陽電池のデバイスシミュレーション

Device simulation of $BaSi_2$ solar cells exhibiting theoretical limit efficiency

山梨大クリスタル研　°原 康祐

CCST, Univ. of Yamanashi　°Kosuke O. Hara

E-mail: khara@yamanashi.ac.jp

【はじめに】$BaSi_2$ は太陽電池の光吸収層に適した半導体であり、pn ホモ接合構造で変換効率 25%が期待されている [1]。光吸収係数が高く、また、希少な元素を必要としないため、安価で高効率な太陽電池となり得る。一方で、Shockley-Queisser の詳細平衡理論による理論限界効率は 33%であり、期待効率よりずっと高い。Würfel は、任意の光吸収層を 2 つのワイドギャップ物質(電子・正孔輸送層)で挟む構造が理論限界効率を示すことを、デバイスシミュレーションにより示した [2]。$BaSi_2$ でも理論限界効率に近づけるデバイス構造が明らかとなれば、高効率な太陽電池開発の指針となる。そこで、$BaSi_2$ を光吸収層とする理想的な太陽電構造と、それを実現できる電子・正孔輸送層の条件を明らかにすることを目的に研究を行った。

【方法】デバイスモデルは、厚さ 5 μm の n 型 $BaSi_2$ をそれぞれ 100 nm の電子・正孔輸送層で挟む構造とし、wxAMPS [3]によりシミュレーションを行った。$BaSi_2$ の物性値は文献値を用いた。ただし、光吸収係数はバンドギャップ (E_g) 以上で 10^4 cm^{-1} となるステップ関数とした。電子・正孔輸送層の E_g とイオン化エネルギー (IP) を変数として太陽電池特性への影響を調べた。

【結果と考察】Figure 1 に、シミュレーション結果の一例を示す。正孔輸送層と電子輸送層の E_g はそれぞれ 3.0、2.8 eV、IP はそれぞれ 4.6、6.1 eV としたときの結果である。(a)のバンドアラインメントより、正孔は表面(左)へ移動しやすく、電子は裏面(右)へ移動しやすい構造となっていることが分かる。(b)の太陽電池特性よりエネルギー変換効率は 33.2%であり、理論限界効率とほぼ一致する特性のシミュレーションに成功した。また、E_g と IP を変化させて計算することで、理論限界効率 −1%以内となる条件を明らかにした。正孔輸送層については $E_g \geq 2.4$ eV、$3.9 \leq IP \leq 4.9$ eV であり、電子輸送層について $E_g \geq 1.8$ eV、$3.0 \leq$ 電子親和力 ≤ 4.1 eV である。これらの条件を満たす材料を見つけることで、より高効率な $BaSi_2$ 太陽電池の開発が可能となる。

【参考文献】[1] T. Suemasu, JJAP **54**, 07JA01 (2015). [2] U. Würfel, et al., IEEE J. Photovolt. **5**, 461 (2015). [3] Y. Liu, et al., Sol. Energy Mater. Sol. Cells **98**, 124 (2012).

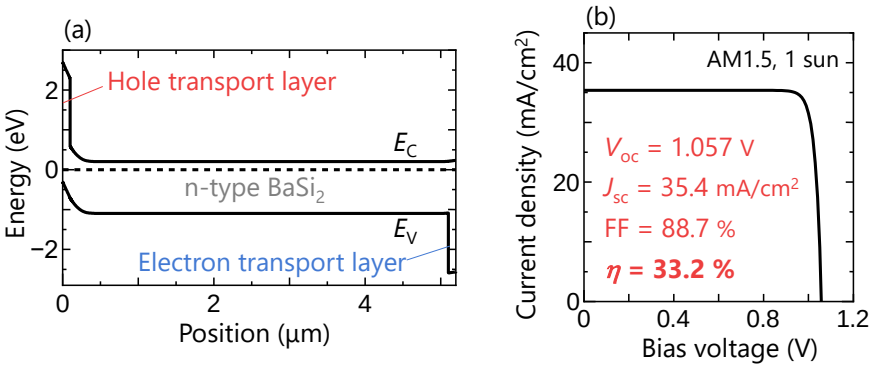

Figure 1 (a) Calculated band alignment and (b) characteristics of a theoretical-limit efficiency $BaSi_2$ solar cell.