

太陽電池応用に向けた InP/GaP 系 Type II 量子ドット構造におけるバンドオフセットの検討

有本 岳史, 山根 啓輔, 堀 礼人, 若原 昭浩

豊橋技術科学大学 愛知県豊橋市天伯町字雲雀ヶ丘 1-1

E-mail: arimoto.takeshi.mu@tut.jp, wakahara@ee.tut.ac.jp

高効率 III-V/Si 多接合太陽電池のセル材料として、希薄窒化物半導体が期待されている。特にリン系希薄窒化物半導体は Si に格子整合させたまま、2 接合および 3 接合セルに必要とされる 1.5 eV~2.0 eV を実現できる数少ない材料の一つである。我々はこれまでに、InP 量子ドットを Si 格子整合系バリア材料(Ga(As)PN)で埋め込んだ Type-II バンドアライメントを提案し、光生成した電子と正孔を空間的に分離することでキャリアの長寿命化が期待できる、新たな太陽電池構造(図 1)を提案した^[1]。積層量子ドット構造における半導体デバイスの作製はレーザを中心に行われていた背景があり、Type-I バンドアライメントが用いられることが多い。電子と正孔を空間的に分離してしまう Type-II となる材料系における積層量子ドットに関する研究例は少なく、太陽電池として応用を試みている報告例はほとんどない。以上のことから提案する構造の設計指針を得るために、バンドオフセットのドットサイズ依存性を調べた。

バンドアライメントの計算には量子計算ソフト(nextnano++)を用いた。Si 基板上に成長軸を<0 0 1>として単一の InP 量子ドットを GaP、GaPN または GaAsPN バリア層で埋め込んだ試料構造を定義し、ドットサイズを変化させたときのバンド構造を計算した。GaPN と GaAsPN の伝導帯エネルギーと電子の有効質量については BAC (Band-Anticrossing)モデルより算出し、その他の物性値は Vegard 則による推定値を用いた。

図 2 に一例として、GaPN 中に InP(QD)x=y=15 nm z=5 nm の構造における、面内方向におけるバンド図を示す。CBO はバリア材料と量子ドット間の伝導帯オフセット、VBO はバリア材料と量子ドット間の価電子帯オフセットとする。図 3 にドットサイズを変化させた際、各材料における CBO の推移を示す。バリア材料が GaPN と GaAsPN の場合、ドットサイズが 10 nm から 50 nm の間において、GaP は 10 nm から 20 nm の点で、電子/正孔分離に十分なバンドオフセットが得られた。また VBO はいずれのバリア材料で 400 meV 以上の十分なオフセットを得られた。以上のことから Type-II 構造が実現可能な材料とドットサイズを示すことができた。

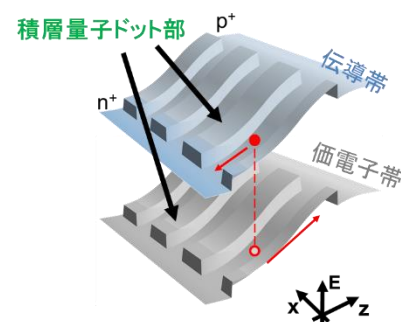


図 1 Type-II バンドアライメントを利用した太陽電池のコンセプト図

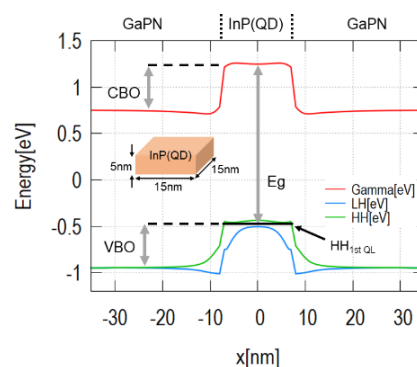


図 2 InP/GaPN 量子ドットの面内方向のバンド図の一例

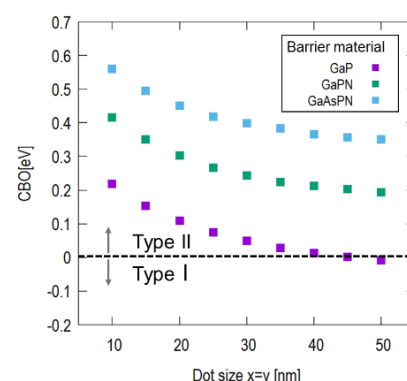


図 3 バリア材料を変化させた時の CBO の推移

謝辞：本研究は八洲環境技術振興財団の助成を受けて行われた。

[1] José Alberto Piedra Lorenzana et al., JJAP 60, 045502 (2021).