

PbS 量子ドット超格子膜を光吸収層として用いた 中間バンド型太陽電池の理論的検討

Theoretical study of intermediate band solar cells using PbS quantum dot superlattice films as light absorbing layers

横浜国大理工¹ ○(B)増田 伊吹¹, 向井 剛輝¹

College of Engineering Science, Yokohama National Univ., ○I. Masuda, K. Mukai

E-mail: mukai-kohki-cv@ynu.ac.jp

【はじめに】現在主流のシリコン太陽電池の光電変換効率は 30%程度が原理的な限界であると見込まれており、更なる高い光電変換効率を実現するために、量子ドット(QD)超格子太陽電池が注目されている。QD が 3 次元的に周期配列することで形成された中間バンドにより熱損失と透過損失が抑えられることで、理論的光電変換効率は 70%に達すると見込まれている。しかし先行研究^[1]では、実際の QD でその中間バンド構造を再現できるかについては明らかになっていない。本研究では、コロイド型 PbS QD を用いた場合の中間バンド型太陽電池の光電変換特性を理論的に検討した。

【理論】既存の理論をベースに計算を実施した。(1), (2)式はそれぞれ価電子帯(VB)と伝導帯(CB)間、VB と中間バンド (Intermediate band, IB) 間のキャリアの遷移によって発生する電流を表している。第 1 項はキャリアの生成確率、第 2 項はキャリアの再結合確率を表している。

$$J_{CV} = \frac{2\pi q}{h^3 c^2} \left[C_0 H \int_{E_G}^{\infty} \frac{E^2}{\exp\left(\frac{E}{kT_s}\right) - 1} dE - \int_{E_G}^{\infty} \frac{E^2}{\exp\left(\frac{E - \mu_{CV}}{kT_0}\right) - 1} dE \right] \quad (1)$$

$$J_{VI} = \frac{2\pi q}{h^3 c^2} \left[C_0 H \int_{E_I}^{E_G} \frac{E^2}{\exp\left(\frac{E}{kT_s}\right) - 1} dE - \int_{E_I}^{E_G} \frac{E^2}{\exp\left(\frac{E - \mu_{VI}}{kT_0}\right) - 1} dE \right] \quad (2)$$

ここで q は電荷、 h はプランク定数、 c は光速、 C_0 は集光倍率、 H は $\sin^2 \theta_s$ 、 θ_s は地球から見た太陽の視半径で 0.267° 、 E_G 、 E_I はそれぞれ CB-VB、VB-IB 間のエネルギー差、 T_s は太陽の温度、 T_0 は太陽電池の温度、 μ_{CV} と μ_{VI} はそれぞれ CB-VB、VB-IB 間の擬フェルミ準位の差である^[1]。

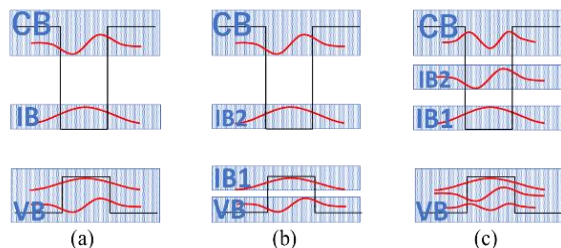


Fig. 1 Theoretical models with (a) one intermediate band, and (b), (c) two intermediate bands.

これらの式を Fig. 1 に示したモデルに適用した。ここで(a)は CB 側の基底準位が IB の元

になると考えた IB 1 つのモデル、(b)は VB 側と CB 側の基底準位それぞれが 2 つの IB の元になると考えたモデル、(c)は CB 側の基底準位と第一励起準位が 2 つの IB の元になると考えたモデルである。これらのモデルに、実測されている PbS QD のエネルギー準位^[2]を適用して、理論的変換効率を求めた。

【結果】粒径を 3.0~8.4 nm の範囲で変化したときの最大変換効率の計算結果を Fig. 2 に示す。この図より、PbS QD 超格子膜を光吸収層に用いた場合、粒径 4~5 nm 程度の PbS QD を光吸収層に用いることで、高い変換効率を持つ QD 超格子太陽電池を作製できることが示唆された。(b)の IB が 2 つのモデルでは、QD 粒径が 4.7 nm のとき最大変換効率 43.9%に達する。(a)の IB が 1 つのモデルでも、粒径が 3.4~4.3 nm の範囲であれば、変換効率は 40%を超える。一般に、IB 数が増えるほど吸収波長が広がり、変換効率は高くなると考えられているが、粒径が 4 nm 以下の範囲ではそのようになっていない。これは複数の IB で遷移キャリア数の極端な偏りが出てしまい、利用できないキャリアが多数生成してしまうためである。なお、(b), (c)のモデルで粒径が大きい場合の結果が示されていないが、この範囲ではキャリアの生成確率より再結合確率が大きく計算不能であった。

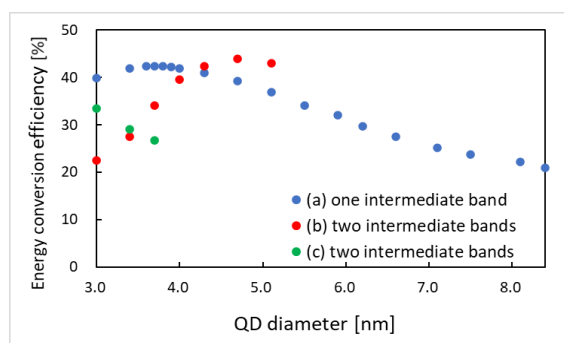


Fig. 2 Simulated relationship between the energy conversion efficiency and QD diameter.

【参考文献】

- [1] T. Nozawa et al., Appl. Phys. Lett. 98, 171108 (2011) 他.
- [2] M. C. Weidman et al., ACS Nano, 8, 6363-6371 (2014).