



太陽電池用化合物半導体材料の安定構造解析

太陽電池材料の安定構造の解析を基にした高効率化に関する大規模シミュレーション

研究・開発機関 : (株) 本田技術研究所 基礎研究開発センター
 利用施設 : (独) 海洋研究開発機構 地球シミュレータ ES2
 計算規模 : 計算速度 6.5Tflops (8 ノード)
 利用ソフトウェア : 第一原理計算 DFT 計算コード espresso-3.2.3/PWSCF

Before

- 太陽電池のコストを大幅に削減できる可能性のある CIS(CuInSe) 系化合物半導体太陽電池が、次世代の太陽電池として注目を浴びています。
- CIS(CuInSe) 系化合物半導体太陽電池の結晶欠陥の許容量や、結晶欠陥が効率に及ぼす影響を把握し、これを最適化することが重要な課題です。

After

- 第一原理計算シミュレーションにより、CIS(CuInSe) 系の化合物半導体太陽電池の結晶欠陥をつくる傾向が高い元素と、結晶中の欠陥サイトの同定を行い、系の全エネルギーを計算しました。
- その結果、Cu 欠陥が安定で、In 欠陥が生じにくいことがわかりました。

背景と目的

太陽光発電は、近未来のクリーンエネルギーの本命と考えられており、国家レベルの施策が行われ、ヨーロッパを中心に世界中で普及が始まっています。今後さらに普及を加速するためには、1W 当たりの太陽電池のコストを 100 円以下に低減する必要があると言われており、このコストを実現できる可能性のある薄膜型の化合物半導体太陽電池が、次世代の太陽電池として注目を浴びています。

太陽電池の変換効率を向上させるためには、表面反射損失、光吸収不足、直列抵抗損失、表面 / 界面 / バルク内でのキャリア再結合などの損失を低減することが必要です。化合物半導体太陽電池においては、効率を低下させる結晶欠陥の存在がプロセス上不可避なため、結晶欠陥の許容量や結晶欠陥が効率に及ぼす影響を把握し、これを最適化することが重要になります。

地球シミュレータにより第一原理計算コードを用いて、CIS(CuInSe) 系の化合物半導体太陽電池において、結晶欠陥をつくる傾向が高い元素と、結晶中の欠陥サイトの同定を行いました。



写真1. CIS 系化合物半導体太陽電池 (写真提供: (株) ホンダソルテック)

利用成果

太陽電池用カルコパライト系化合物半導体として、欠陥のない CuInSe₂ 結晶から、Cu、In 原子をそれぞれ欠損させて、第一原理シミュレーションにより系の全エネルギーを計算することにより、エネルギーの変化から欠陥の安定性を評価しました。図2に示すように、基本結晶構造(8原子)を8ユニットならべた64原子からなるスーパーセルをつくり、Cu、In 原子をそれぞれ1個欠損させた結晶(図3)のエネルギーを求めた結果を表1に示します。

表1から、完全結晶から In または Cu が1個抜ける反応エネルギーΔE は、それぞれ、+2.00eV、-0.11eV となり、Cu 欠陥が安定で、In 欠陥が生じにくいという、実験で得られる傾向と一致しました。今後さらに、光吸収に関する励起電子状態をより正確に扱う大規模シミュレーションを行うことにより、信頼性の高い欠陥特性評価を行うことができると期待されます。

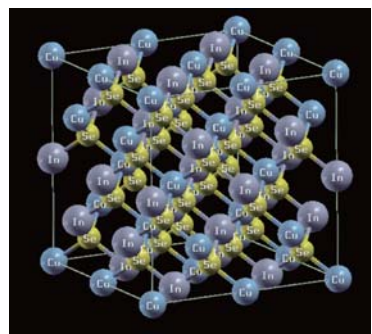


図2. 64原子 CuInSe₂ 完全結晶

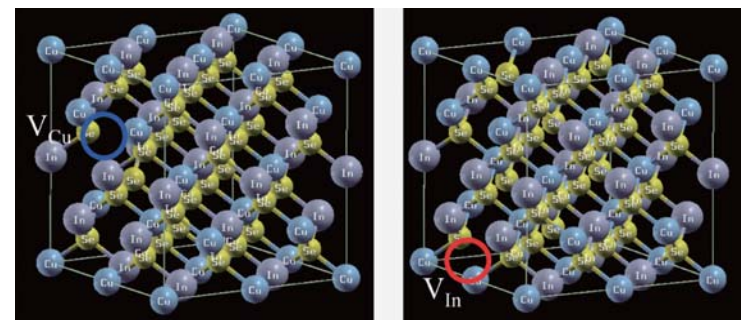


図3. Cu、In 欠陥導入構造

表1. CIS 欠陥構造モデルの全エネルギー

	原子数	構造	備考	全エネルギー (Ryd.)
CuInSe ₂	64	sc	8スーパーセル	-4191.04972581
CuIn _{1-x} Se ₂ (x=1/16)	63	sc	Inを1個抜く	-4054.31598364
In	1	sc	孤立系	-136.58647620
Cu _{1-x} InSe ₂ (x=1/16)	63	sc	Cuを1個抜く	-4103.42358992
Cu	1	sc	孤立系	-87.63449600