

III-V 族窒化物薄膜太陽電池の歪を考慮した計算解析

Simulation of III-V nitride solar cell with respect to strain effect

(独) 物材機構¹、中部大学² ○角谷 正友¹、Liwen Sang¹、長谷川文夫²、中野由崇²NIMS¹, Chubu Univ.² OM. Sumiya¹, L.W. Sang¹, F. Hasegawa², and Y. Nakano²

E-mail: SUMIYA.Masatomo@nims.go.jp

【はじめに】我々は、InGaN 厚膜を活性層にした III-V 族窒化物太陽電池に関する研究を行っている。III-V 族窒化物薄膜には多くの転位が発生するとともに極性による分極効果や歪によるピエゾ電界が内部に生じる。これらの効果が太陽電池特性にどのように影響するか検討することはデバイス設計の指針および変換効率の向上につながる。そこで、歪、光によるキャリア生成および再結合速度を考慮することができるプログラムを用いて解析したので報告する。

【実験方法】シミュレーションには STR Japan 社の計算プログラム SCSim ソフトを用いた。計算モデルは、+c 極性で p-GaN (100 nm) (Mg: $1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$)/i-In_{0.1}Ga_{0.9}N (100 nm) (n_c : 10^{15} or 10^{17}cm^{-3})/n-GaN (200 nm) (Si: $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$) の pin のヘテロ構造とした。歪のない下地の n-GaN 層に対して上層の膜が完全に歪んでいる場合とフリーな場合を設定して、転位密度を 10^6 および 10^{10}cm^{-2} 、キャリア寿命を 10^{-8} および 10^{-10}ssec と変化させて、p-GaN 層から AM1.5G を照射した場合の計算解析を行った。

【結果】歪がない場合には、転位密度を大きくすると開放端電圧 V_{oc} が 2.4V から 2.0V への減少が観察されたが、転位密度を 10^{10}cm^{-2} としてもバンドプロファイルの差異は見られなかった。また、InGaN 層のキャリア濃度やキャリア寿命を変化させても短絡電流密度 J_{sc} に大きな変化はなかった ($\sim 0.9 \text{mA/cm}^2$)。一方、歪を導入した場合には顕著な変化が得られた。 10^6cm^{-2} の転位密度でも図 1 に示すように、シャント抵抗が小さくなり (FF の値が 0.85 から 0.44 へ)、太陽電池特性が劣化する。図 2 に 1.7 V 印加時の伝導帯と価電子帯のプロファイルを示す。歪がない場合には光生成した電子が電極まで到達できる電界が生じているのに対して、歪が導入されることによって逆電界が形成され、生成されたキャリアが逆流することがわかった。p-GaN と i-InGaN 間のバンドオフセットも影響して、p/i 界面で再結合速度が $7 \times 10^{20} \text{sec}^{-1}$ (@1.7 V) となり極端にキャリアが失活する。InGaN 厚膜を活性層にする III-V 族窒化物太陽電池では転位密度よりも歪を解放する方が変換効率向上につながることを示唆された。

【謝辞】本研究の一部は JST-ALCA によって行われた。

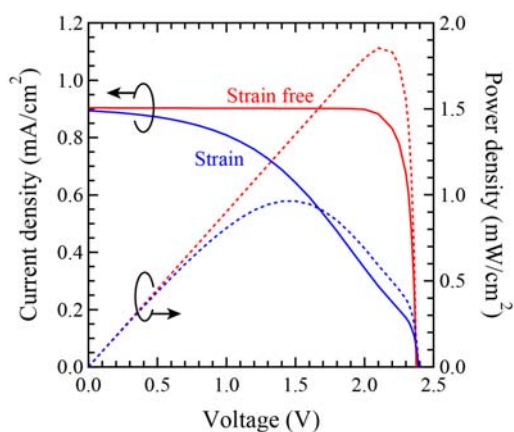


図 1 p-GaN (100 nm)/ i-In_{0.1}Ga_{0.9}N (100 nm)/n-GaN (200 nm) pin 構造において転位密度 10^6cm^{-2} 、InGaN 層中のキャリア密度 10^{15}cm^{-3} としたモデルにおいて歪がある場合 (青) とない場合 (赤) の計算された太陽電池特性。

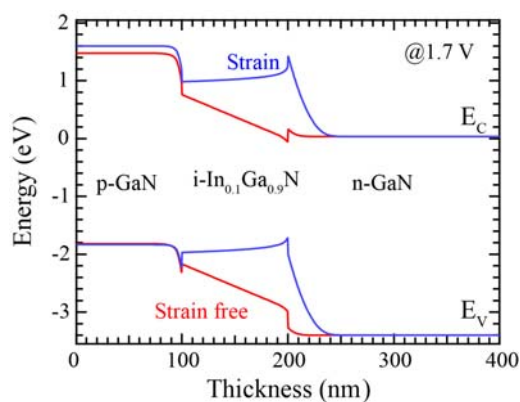


図 2 計算モデル (図 1) において印加電圧 1.7 V の時の伝導帯と価電子帯プロファイル。