

Solar Cell デバイスシミュレータの御提案

Advanced Algorithm & Systems

吾妻広夫

2012年1月25日

1st Step: 受光・光閉じ込め機構シミュレーション

- 透明導電膜特性
- 受光部テクスチャ
- デバイスの表面・裏面における分光反射・透過率の設定
- デバイス内部での光吸収分布

2nd Step: 半導体デバイスシミュレーション

- 直接遷移・間接遷移
- キャリアの3体再結合(オージェ再結合)
- 深い欠陥準位による再結合
- 表面・裏面パッシベーション膜の効果

1st Step: 受光・光閉じ込め機構シミュレーション

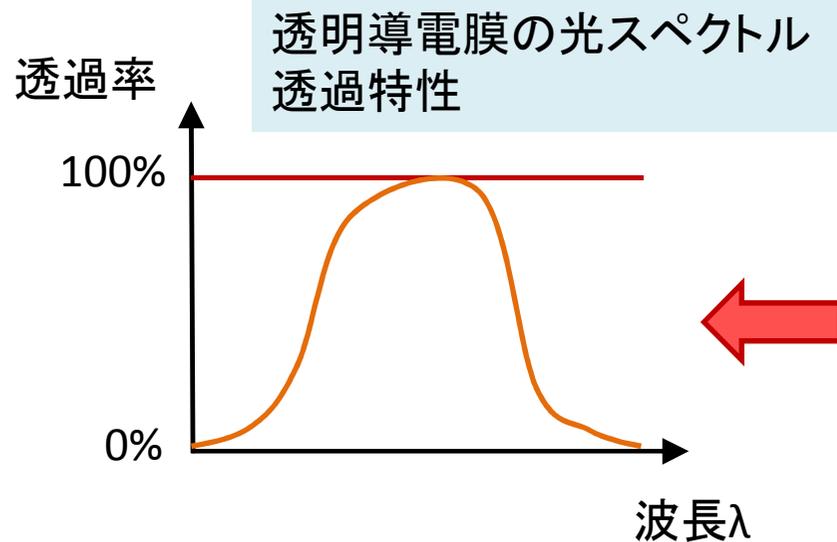
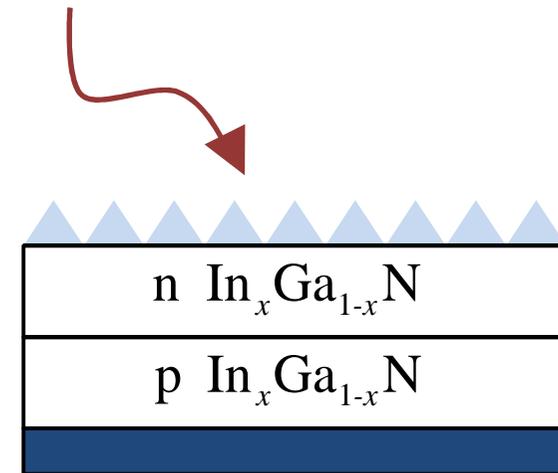
- (A) 透明導電膜特性
- (B) 受光部テクスチャ

透明導電膜候補材料

In_2O_3 ZnO SnO_2 PbO_2

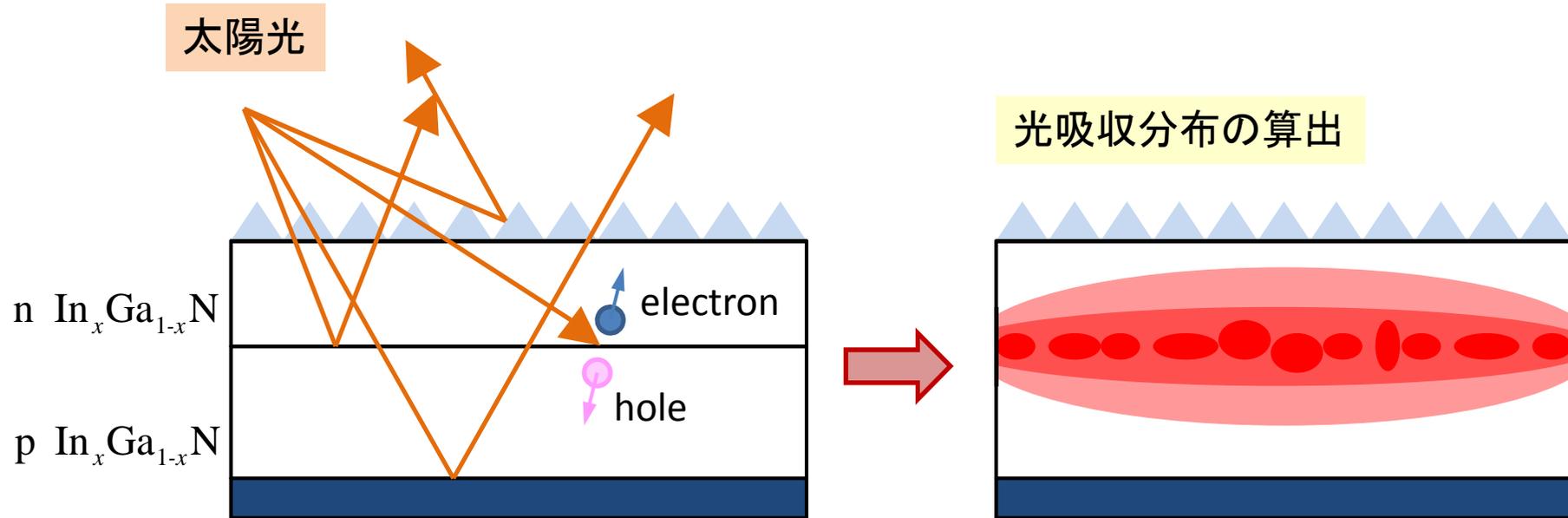
CdO ...

テクスチャ形状の最適化



このスペクトル特性曲線そのものを、デバイス・シミュレーションの際の、入力データとする

(C) デバイスの表面・裏面における分光反射・透過率の設定
(D) デバイス内部での光吸収分布



[問題点]

一般に、Si結晶の太陽電池に比べて、ガリウム砒素系半導体から成る太陽電池は、薄膜の厚みが非常に小さい。そのため、デバイス材料に応じて、異なるシミュレーション手法を適用する必要がある。窒化ガリウム系半導体から成るSolar Cellにおいても、同様のことが予想される。

→どのようなシミュレーション手法を選択するか判断が重要

受光・光閉じ込め機能のシミュレーション方法比較

Ray Tracing法	FDTD法 (finite-difference time-domain)
<p>ランダムに発生させた光線の経路を、反射、透過、吸収を考慮して、個別に追跡する。多数回、光線を発生させて、平均を取る。</p> <p>(古典的幾何光学 + モンテカルロ法)</p>	<p>マクスウェル方程式を、時間、空間について離散化し、差分法によって逐次的に解く。光線を、電磁波として正しく扱う。</p> <p>(波動光学 + 電磁気学)</p>
<p>光特有の、位相、回折、干渉等の効果を取り入れるのが苦手である。</p>	<p>位相、回折、干渉等の効果を、正しく取り入れることが可能である。</p>
<p>プログラムの作成が容易である。並列化も容易である。</p>	<p>比較的、規模の大きなプログラムになってしまう傾向が有る。並列化も、容易ではない。</p>
<p>計算時間は少なくて済む場合が多い。</p>	<p>計算時間が増大し易い。並列化方法が多くの研究者によって検討されている。</p>
<p>薄膜構造が苦手という見方が有る。</p>	<p>薄膜構造には、計算メッシュの微細化で対応。</p>



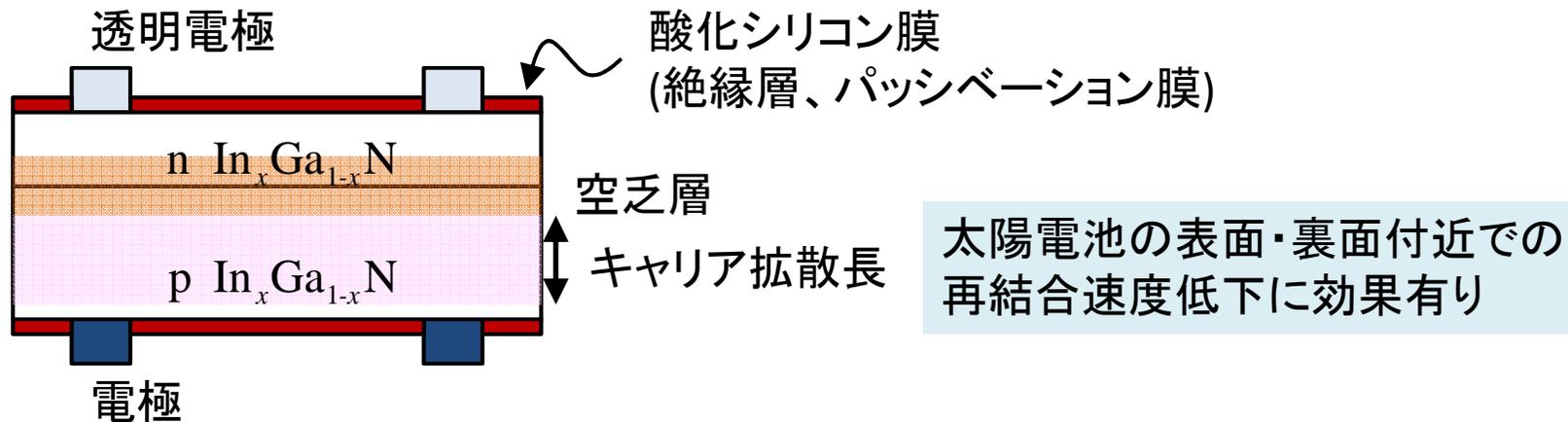
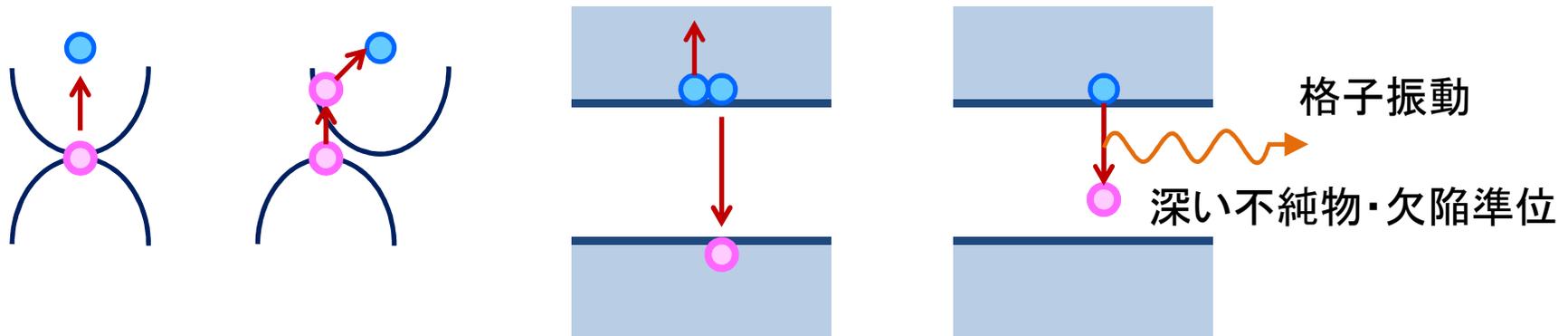
手軽にシミュレーション出来てしまうが、得られる知見は限られている



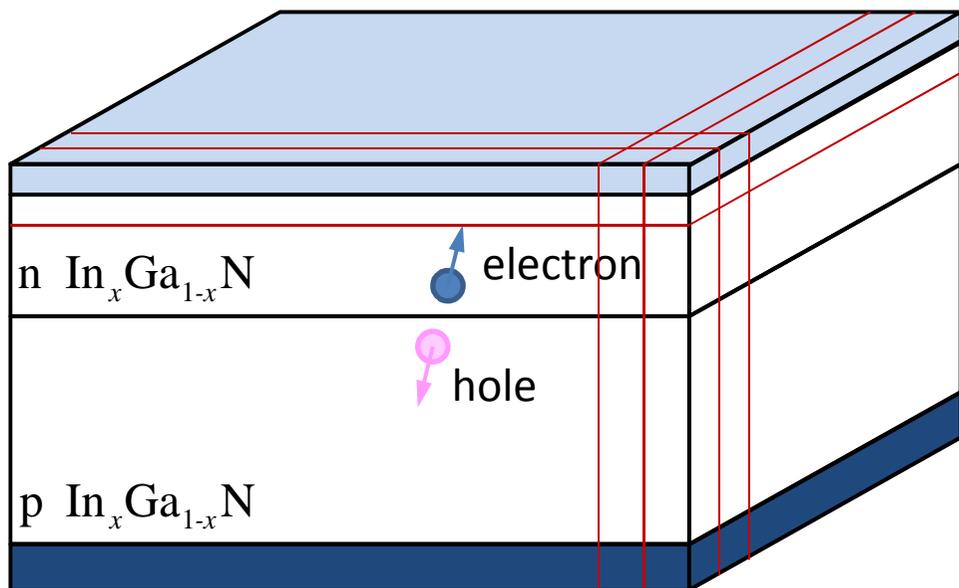
シミュレーション方法としては難しい部類に入るが、得られる結果は正確である

2nd Step: 半導体デバイスシミュレーション

- 直接遷移・間接遷移
- キャリアの3体再結合(オージェ再結合)
- 深い欠陥準位による再結合
- 表面・裏面パッシベーション膜の効果



ボルツマン輸送方程式の数値計算シミュレーション



デバイスをメッシュ分割



基礎物理方程式の差分化



メッシュ格子点上に欠陥を導入
(より現実的なモデルへの拡張)

差分解法

モンテカルロ法



どちらの解法を選択するか?

両者を併用するという考え方も有り得る

半導体バンド構造内でのキャリア輸送シミュレーションの精密化

1. キャリア寿命の評価
2. 光電変換効率の推定

早期の仕様確定のお願い

- Solar Cellの半導体材料、物性値を定めて、それに適したシミュレーション手法を選択する
- シミュレーションによって詳しく知りたい物理量、さほど重要でない(犠牲にして良い)物理量を決める[シミュレーション目的の明確化]
- 消費可能な時間・メモリ量の上限の設定
- シミュレーション結果の可視化方法について、大枠を定める

上記の事項に関して、研究者とプログラマの間で、十分な議論・検討の必要有り
[お客様の要望を明確にすること]
→円滑なソフトウェア開発の必須条件