

## ベイズ最適化を用いた Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> 光吸収層の構造設計

### Structural design of CIGSe optical absorption layer by Bayesian Optimization

東工大工学院<sup>1</sup> (M2) 河西 竜輝<sup>1</sup>, 船木 顕広<sup>1</sup>, 西村 昂人<sup>1</sup>, 山田 明<sup>1</sup>

Dept. of Electrical and Electronic Engineering, Tokyo Tech.<sup>1</sup>

<sup>○</sup> Ryuki Kasai<sup>1</sup>, Akihiro Funaki<sup>1</sup>, Ryotaro Fukuda<sup>1</sup>, Takahito Nishimura<sup>1</sup>, Akira Yamada<sup>1</sup>

E-mail: kasai.r.aa@m.titech.ac.jp

#### 1.はじめに

Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>(CIGSe)太陽電池は高効率な薄膜太陽電池の一つとして注目されている。しかしながら変換効率に寄与するパラメータの多さ、および各パラメータが相互に依存していることから最適構造の解析が難しくなっている。本稿では「ベイズ最適化」を用いて高い変換効率を示すパラメータの組み合わせを探索し、その結果を分析したので報告する。

#### 2.実験方法

ZnO:B/CdS/表面層/CIGS 積層構造を有する CIGSe 太陽電池において SCAPS を用いたデバイス解析を実施した。太陽電池の最適化にあたり、CIGSe の裏面と表面から深さ  $0.4 \mu\text{m}$  (以降、中央) の箇所での Ga/(Ga+In) 比(GGI)の差  $\text{GGI}_{\text{back-mid}}$ , 中央と表面での GGI の差  $\text{GGI}_{\text{mid-front}}$ , 裏面から中央にかけての厚さ  $t_{\text{CIGS\_back}}$ , 中央から表面にかけての厚さ  $t_{\text{CIGS\_front}}$ ,  $t_{\text{CIGS\_back}}$  と  $t_{\text{CIGS\_front}}$  の合計値  $t_{\text{CIGS\_total}}$ , および CIGSe 層の電子拡散長  $L_n$ , の6パラメータに着目した。探索にあたり、Mo 電極との接合面における欠陥を想定し、その再結合速度を  $1.0 \times 10^7 \text{cm/s}$ ,  $1.0 \times 10^3 \text{cm/s}$ ,  $0 \text{cm/s}$  (なし) と変化させることにより、高効率に寄与するパラメータ条件を調べた。

#### 3.結果および考察

Fig1 に  $L_n=1.9 \mu\text{m}$ , 裏面再結合速度  $1.0 \times 10^7 \text{cm/s}$ ,  $t_{\text{CIGS\_total}}=3.0 \mu\text{m}$  に固定した際の変換効率のカラーマップを示す。色が濃い箇所は変換効率が高く、薄い箇所は変換効率が低い。カラーマップの横軸は  $t_{\text{CIGS\_front}}$  の値を、縦軸は  $\text{GGI}_{\text{mid-front}}$  の値を表す。①  $t_{\text{CIGS\_front}}$  が小さいとき、すなわち表面側の膜厚が小さい時は  $\text{GGI}_{\text{mid-front}}$  の値は0付近すなわち中央から表面にかけての Ga 組成は一定にすることで効率 24.8%、②表面側の膜厚が大きい時は中央から表面にかけて Ga 組成を少なくすることで効率 25.0%を達成できることがわかった。

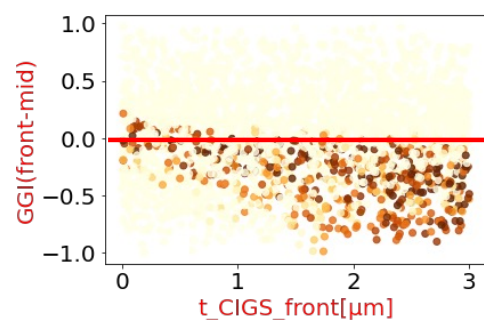


Fig1. Relationship between 2 parameters and conversion efficiency

当日は先述の6パラメータに対する変換効率の影響を詳細に議論する。

#### 謝辞

本研究はNEDOの助成により行われた。関係各位に感謝する。