

ALCA-Next

「エネルギー変換・蓄エネルギー」領域

2024 年度 年次報告書

2024 年度採択

[研究開発代表者名:岡田 至崇]

[東京大学先端科学技術研究センター 特任教授]

[研究開発課題名:高効率ラチェット型中間バンド太陽電池フィルムの研究開発]

主たる共同研究者:

[喜多 隆 (神戸大学大学院工学研究科 教授)]

[曾我部 東馬 (電気通信大学 i-パワーエネルギー・システム研究センター 教授)]

実施期間 : 2024 年 9 月 2 日～2025 年 3 月 31 日

§1. 研究開発成果の概要

高効率のラチェット中間バンド太陽電池を実現するためには、(1)Er ドープ自身が形成する中間準位に加えて、近接させた量子ドットアレイ、あるいは量子井戸が形成する量子準位に励起される光キャリアの Er^{3+} 中心(ラチェット準位)への遷移レートの制御と最大化、また (2) ELO 法を用いた薄膜 III-V 化合物太陽電池プロセスの高品質化と光閉じ込め構造の最適化を達成することが必要である。そこで中間バンド太陽電池としてどこまで高効率化また薄型フィルム化が見込めるかを明らかにすることを目的とする。

まず MBE 法により成膜した Er ドープ GaAs 薄膜の結晶性評価において、Er1000(ドープ量 $\sim 10^{21}\text{cm}^{-3}$ 相当)以下では表面平坦性が良好であるのに対し、それ以上では三次元成長に起因する凹凸が大きい表面になり ErAs の成長が進んだことが示唆された。

次に、Er ドープ GaAs 薄膜の発光基礎特性を計測し、室温における明確な Er イオン内殻遷移発光を確認した。発光強度の励起光強度依存性は有限濃度の希土類励起準位(ラチェット準位)による明瞭な励起飽和特性を観測した。この発光飽和特性は発光中心の寿命と励起捕獲断面積で決まり、実験データの解析の結果、ラチェット準位寿命がミリ秒オーダーであることが推定できるデータを得た。また、中間バンド導入による輻射再結合ロスや無輻射遷移過程が及ぼす影響についてシミュレーションを実施した。

さらに、非断熱分子動力学計算と Transformer モデルを組み合わせ、Er ドープした GaAs 中のラチェット準位および中間バンドにおけるキャリアダイナミクスを高精度かつ低コストで解析する手法を開発した。32 fs 間隔での予測により、従来の *ab initio* 計算と比べて約 32 倍の計算効率を実現し、従来手法である Bi-LSTM を上回る精度で *ab initio* 厳密解と極めて高い一致度を示した。これにより、材料探索やデバイス最適化に要する計算時間の大幅な短縮が可能となり、実用化に向けたキャリアダイナミクス解析の有効な指針が得られた。

【代表的な原著論文情報】

なし