

平成 30 年 6 月 13 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K06683

研究課題名(和文) 薄型シリコン太陽電池の高効率化に向けた高速・高精度な形状最適設計システムの開発

研究課題名(英文) Development of fast and accurate shape optimisation system to design high efficient thin Silicon solar cells

研究代表者

高橋 徹 (Takahashi, Toru)

名古屋大学・工学研究科・准教授

研究者番号：90360578

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は2次元Helmholtz方程式に関する2次元1周期多層構造系に対するアイソジオメトリック境界要素法を提案し、それと随伴変数法および準ニュートン法に基づく形状最適化システムを構築した。本システムにより高効率な薄型シリコン太陽電池を設計できる。四層モデル(空気/シリコン/銀/空気)のシリコン層における相対エネルギー吸収率の最大化を目的とした最適化においては、入射エネルギーの67%を吸収可能な形状が得られることを示した。公開した解析プログラムと併せて、本成果は今後のプラズモニクデバイスの開発に有意義である。一方で、3次元問題に対する研究成果も得られ、後続研究(平成30年度～)に活用できる。

研究成果の概要(英文)：We proposed a new isogeometric boundary element method for 2D singly periodic boundary value problems of 2D Helmholtz equation and developed a shape optimisation system based on the boundary element method, adjoint variable method, and quasi-Newton method. The system is capable to design high-efficient thin Silicon solar cells. In an optimisation problem to maximise the relative energy absorption rate in the silicon layer of a four-layer (air/Si/Ag/air) model, we could obtain the optimal shape that can absorb 67% of the incident energy. The present result together with the computer program posted on the Internet is significant to design plasmonic devices. Meanwhile, we obtained some results for 3D problems, which can be exploited for the succeeding research starting from FY2018.

研究分野：計算力学

キーワード：形状最適化 太陽電池 表面プラズモン 周期境界値問題 境界要素法 アイソジオメトリック解析

1. 研究開始当初の背景

太陽光発電が省エネルギー化に果たす役割は大きく、太陽電池の開発は分野横断的な重要テーマである。

最も普及が進むシリコン太陽電池の技術的課題は薄型化である。高価な結晶シリコンを減肉して、生産コストを抑えるためである。しかし、薄型化に伴い発電層 (i 層) における吸光の頻度は低下するため、入射面積当たりの発電効率は低下してしまう。このジレンマを解決するためには、入射光をシリコン内部に長く閉じ込めるメカニズムが必要である。

近年、そのメカニズムとして表面プラズモン (SP) が有力視されている¹。図1の過程 (a) ~ (e) に示すように、(a) 吸光されなかった入射光が、p 層に接着した金属膜に達すると、(b) SP (局在電磁波モード) が共鳴的に励起し得る。(c) 発生した SP は、厚さ方向よりも十分に長い金属/シリコン界面に沿って伝播経路を持つため、(d) シリコン内に散乱波が再励起する頻度は高まり、結果的に (e) 吸光率が高まる。

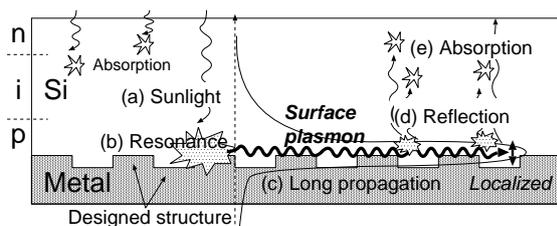


図1: 表面プラズモンによる光の閉じ込め。

上記のメカニズムによる光閉じ込めにおいては、電磁場解析に基づいて金属膜の形状を設計し、発電効率を最大化することがチャレンジとなる。半無限状のシリコンと金属が接合した場合 (理想的な場合) 伝播光 (入射波あるいは散乱波) と SP が相互に結合する (図1の過程 (b) と (d)) ためには、シリコン/金属界面に図1のような周期構造を設ければ SP が発生することは理論的に言えるが、その周期構造をどう設計すれば目的とする発電効率を高めることができるかは、数値的に検討せざるを得ない。

そこで本研究は、必要となる電磁場解析に対して境界要素法 (BEM) を適用する。現状、太陽電池等を含むプラズモニクス解析において最もポピュラーな解析手法は時間領域差分法 (FDTD) である。しかし、次の3つの理由により BEM はより適切と言える: 1) SP はシリコン/金属界面に局在した電磁場であるため、電磁場全体を離散化すべき FDTD は界面付近に膨大な数のグリッドを必要とし、計算負

荷が増大してしまう。一方、BEM は境界だけを離散化すればよいので特別に憂慮する必要はない; 2) FDTD は周波数 ω の関数として与えられる金属の誘電関数 $\epsilon(\omega)$ を時間領域において直接扱うことができないため、余計な計算負荷と精度低下を伴う。一方、BEM は周波数領域で定式化できるため、任意の誘電関数を直接扱える; 3) 電池を取り巻く空気 (真空) を考慮する場合、FDTD はその誘電体を有限領域に近似するための人工的な放射条件 (吸収境界条件) を必要とする。一方、BEM は放射条件を自動的に満足するために、無限領域として厳密に扱える。なお、しばしば用いられる周波数領域有限要素法は、2において BEM と同等であるが、1と3は FDTD と同じ理由により BEM に劣る。

ところが、今日標準的である BEM には改善が必要である。第1に形状表現の高精度化である。一般に利用されている区分一定要素あるいは線形要素は、離散化の手続きが簡単ではあるが、境界を折れ線近似するので離散化誤差は必然的に大きい。また、境界要素数の増加に対する離散化誤差の収束のレートは一般に低い。第2に計算アルゴリズムの高速化が必須である。標準的な BEM の必要計算量は、使用する境界要素数を n と表すと、 $O(n^3)$ である。そのため、金属膜の形状が複雑 (n が大きい) かつ最適化問題を扱う (順問題を多数解く) 場合、従来の BEM の計算コストの問題は深刻となる。これら二つの問題は、研究代表者が近年取り組んできた高速多重極アイソジオメトリック BEM^{2, 3, 4, 5} の研究に沿って解決し得る。

2. 研究の目的

以上を踏まえ、四つの目的を設定する:

- ① プラズモニクス解析のための高速・高精度 BEM の開発
- ② プラズモニクスデバイス開発のための汎用高速・高精度形状最適設計システムの開発

² T. Takahashi et al., An application of fast multipole method to isogeometric boundary element method for Laplace equation in two dimensions, Engineering Analysis with Boundary Elements, 36, 1766–1775, 2012.

³ 林, 高橋, 松本, 大規模音響問題における高速多重極アイソジオメトリック境界要素法の開発, 日本機械学会計算力学講演会講演論文集, 25, No.1506, 2012.

⁴ 林, 高橋, 松本, 非一樣 B-Spline に基づくアイソジオメトリック要素を用いた 2 次元 Helmholtz 方程式に対する高速多重極境界要素法, 日本機械学会計算力学講演会講演論文集, 26, No.2010, 2013.

⁵ 高橋 他, 2 次元波動問題に対するアイソジオメトリック境界要素法の高度化, 計算工学講演会論文集, 19, CDROM, 2014.

¹ H.A. Atwater et al., Plasmonics for improved photovoltaic devices, Nature Materials, 9, 205–213, 2010.

- ③ 表面プラズモンを用いた薄型シリコン太陽電池の形状最適設計の実施
- ④ 3次元問題に関する取り組み

3. 研究の方法

各目的に対する研究方法を順に示す。

- ① プラズモニクス解析のための高速・高精度 BEM の開発

既存の BEM が有する計算精度と計算コストの問題を解消し、現実的なプラズモニクス解析に資する高速・高精度 BEM を構成する。太陽電池の解析・設計を念頭として、 x 方向に周期的、 y 方向に一様、 z 方向に誘電体が積層した物理モデルを考える。最上層（空気あるいは真空を模擬）には TM 平面電磁波を与え、電磁場は時間調和的（角周波数を ω とする）であるとする。ここで、現実の太陽電池を 2 次元 1 周期構造（すなわち、無限大モデル）として扱うことは近似に他ならないが、太陽電池が充分薄いことを考慮すると妥当である^{6,7}。

上記の問題設定は、2 次元 Helmholtz 方程式に関する多層 2 次元 1 周期境界値問題として定式化できる。対応する境界積分方程式の離散化には、表現自由度の高いアイソジオメトリック要素⁸を用いる。具体的には、B スプライン基底を形状関数および補間関数とする一種のアイソパラメトリック要素（= アイソジオメトリック要素）に基づくアイソジオメトリック BEM（以下、IGBEM）を開発する。この IGBEM は研究代表者の先行研究^{2,3,4,5}をベースとしているが、本研究では対象とする問題を 1 周期境界値問題とする点において異なる。

一方、当該 IGBEM を高速化するために周期高速多重極法（pFMM⁹）を導入する。

また、シリコンおよび金属（銀など）の誘電関数は、Drude モデルあるいは文献データ¹⁰の補間によって取り扱えるようにする。

⁶研究計画時点では非周期構造を考えていた。

⁷表面プラズモンの励起には周期構造の存在が必要条件である。現実には即して有限周期を扱うと、外乱（例えば、エッジ効果）を誘起し得るために、かえって解析結果の見通しを悪くする可能性がある。

⁸T.J.R. Hughes et al., Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement, Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg., Vol.194, pp.4135–4195, 2005.

⁹Y. Otani et al., An FMM for periodic boundary value problems for cracks for Helmholtz' equation in 2D, Int. J. for Numerical Methods in Eng., 73, pp.381–406, 2008.

¹⁰Palik (E.D.), Handbook of Optical Constants of Solids 1, Academic Press, 1985.

- ② プラズモニクスデバイス開発のための汎用高速・高精度形状最適設計システムの開発

開発した高速・高精度 BEM と形状最適化アルゴリズムを結合して、プラズモニクスデバイス（多層 2 次元 1 周期構造体）の形状最適設計を行うためのシステムを構築する。具体的には、所定の目的関数を最大化ないしは最小化するような境界（層と層の界面）の形状を求めることが目的である。目的関数の境界形状に関する感度（形状微分 S ）を求めるためには、随伴変数法を用いる。このとき、主問題および随伴問題を解く必要があるが、そのソルバとして上記で開発する IGBEM を用いる。形状微分を評価するサブルーチンを完成した後、それを等式および不等式制約条件に対応可能な非線形最適化問題のソルバ（本研究はフリーソフト Ipopt を用いる）に組み込むことによって、本形状最適設計問題を解くためのシステムが構築できる。

- ③ 表面プラズモンを用いた薄型シリコン太陽電池の形状最適設計の実施

開発したシステムによって、薄型シリコン太陽電池に関する最適設計を実行する。

- ④ 3次元問題に関する取り組み

本研究は 2 次元問題を主眼とするが、今後の研究展開を見据えて、3 次元問題に関する BEM の高精度化（アイソジオメトリック化）および高速化についても研究を行う。

4. 研究成果

研究目的①～④に応じて研究成果を記す。以下、引用文献 [4]～[5] は、5. 節の「主な発表論文等」における【雑誌論文】および【学会発表】に列記した著作物を指す。

- ① プラズモニクス解析のための高速・高精度 BEM の開発

当該の TM 波を入射した多層 2 次元 1 周期構造系における電磁場解析を実行するための IGBEM の開発を行った [18, 17, 16, 15]。この種の IGBEM は報告例が無い。定式化の詳細としては、周期境界（B スプライン曲線として表現される）の構成方法については、端点を固定する上で有利な clamped なノットを用いた。

② プラズモニクスデバイス開発のための汎用高速・高精度形状最適設計システムの開発

薄型シリコン太陽電池の形状最適化のための計算システムの構築を行った [12, 1]。主問題および随伴問題を解くために導入した IGBEM は、高精度である事に加えて、形状の変更が容易であること、形状微分の計算に必要な境界接線微分の評価が容易であるというメリットがあることを明らかにした。一方で、研究実施計画の時点で危惧した形状の大きな変化（一部の境界要素だけが大きくなり過ぎる等）に伴う解析精度の低下については、アダプティブメッシュで対応することとしたが、境界が大きく変化すると自己交差（捻れ）と言った変形が根本的に問題となるため、基本的には境界の変化が小さい範囲で最適化を行う（場合によっては拘束条件を陽に与える）ように留意して対応した。

厳密解が導出可能な形状最適化問題を設定して、本システムの妥当性を検証した。

③ 表面プラズモンを用いた薄型シリコン太陽電池の形状最適設計の実施

開発したシステムを用いて、薄型シリコン太陽電池のシミュレーションを実施した。準備的な検討 [13] および発展的考察（周期長 L 、入射角 θ 、入射波長 λ 、材質等の影響；太陽光スペクトルを重みとして考慮した多目的最適化）¹¹を行った。本報告では [1] で発表した主要なシミュレーション結果について紹介する。

図 2 のように、シリコン厚さ $D_1 = 1\mu\text{m}$ の四層構造モデルを設定し、シリコン層における（入射されたエネルギーに対する）エネルギー吸収率 A の最大化するようなシリコン/銀界面の最適形状を探索した。まず、主となる三つの入力パラメータ（入射角 θ 、入射波長 λ 、周期長さ L ）を決定するための指針を決めた。すなわち、 θ は太陽電池デバイスを時々刻々に太陽の方向に傾斜させることができることを想定して、つねに垂直と定める。周期長さ L はフリーパラメータであるがデバイスが製作可能な範囲でなければならない。具体的には $L = 0.3\mu\text{m}$ と定めた。このとき、 λ は、 L と θ によって決定される入射波と表面プラズモンの分散曲線（ただし、各々の厚みは無限大であるとする）が交差するような入射波長の一つであって、太陽光に含まれる比率が高いもの、かつ、吸収率の高い周波数に選ぶことにすれば、表面プラズモンの励起、したがって光閉じ込めが期待できる。具体的には、 $\lambda = 0.77\mu\text{m}$ を選択した。

¹¹山本達郎, アイソジオメトリック境界要素法に基づく形状最適設計システムの開発と薄型太陽電池の高効率化に関する応用 名古屋大学大学院工学研究科, 修論, 2018.

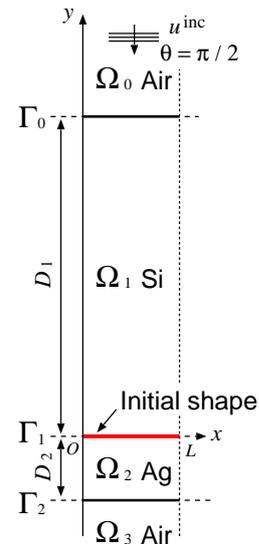


図 2: 空気/シリコン/銀/空気の四層モデル。 $x = 0 \sim L$ の一周分のみ表示。シリコン/銀の界面（境界 Γ_1 ）の形状を決定する。ここに、 $D_1 = 1$ 、 $D_2 = 0.2$ 、 $L = 0.3\mu\text{m}$ 。

本システムによる形状最適化を実行したところ、最適化の過程で相対エネルギー吸収率 A は図 3 のように推移した。第 52 ステップで収束判定がなされて停止したが、最終状態を初期値として再び最適化を実行すると、最終的に入射エネルギーの 67% が吸収可能¹² な形状が得られた（図 4）。また、図 5 は初期形状および最適形状における磁場強度の時間平均値をに比較している。最適化形状では磁場がシリコン内部で卓越していることがわかる。

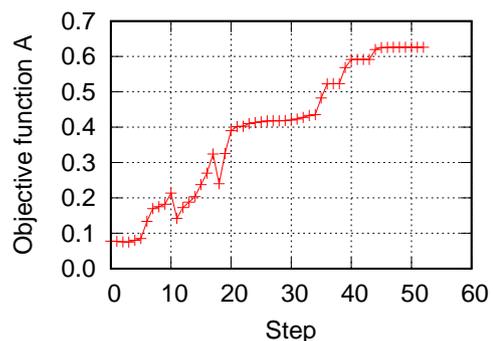


図 3: 相対エネルギー吸収率 A の収束履歴。最適化の再試行により、約 0.68 まで上昇。

ここで、図 4 に示したように、最適化された金属表面は滑らかな曲線を描く。そのため、現状のナノテクノロジー技術で容易に製作可能とは言い難い。しかし、超高精度加工技術がプラズモニクスを主要な応用対象としている¹³ こと

¹²実際は量子収率に応じて利得は下がる。

¹³L.T. Varghese et al., Resistless nanoimprinting in metal for plasmonic nanostructures, Small, 9,

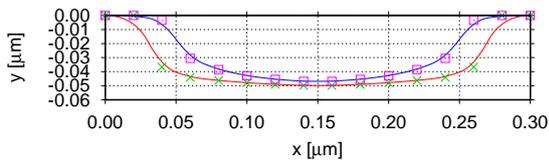
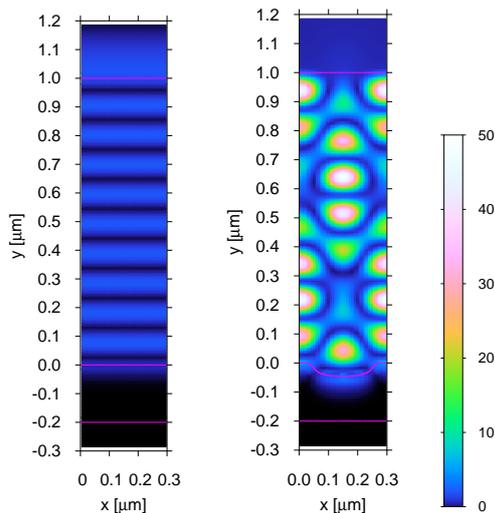


図 4: 初期形状 (直線 $y = 0$) および最適形状。後者は、再試行を行う前 (赤線) と後 (青線) w を比較。点は設計変数とした 2 次 B スプライン曲線のコントロールポイント (× が再試行前および □ が再試行後) を示す。



(a) 初期形状 (b) 最適形状

図 5: 初期形状と最適形状 (再試行後) における磁場強度の時間平均値の分布。

を考えれば、将来的には製作可能であると考えられる。

なお、pFMM の利用は反復解法 (具体的には GMRES 法) の前提を条件とするが、反復回数がネックとなり、pFMM の利用は避け、直接解法 (LU 分解) を用いることとした。この場合、LU 分解というよりもむしろ係数行列の評価に必要な周期 Green 関数の計算 (Kummer 変換を用いる方法) の計算負荷が高い。そこで周期 Green 関数の評価を積分表現によって行う方法の検討を行ったが、計算精度を担保することが難しいために、Kummer 変換を用いざるを得なかった。

この計算時間がネックとなって、研究計画時に予定していた太陽光スペクトル (エアマス 1.5) で重み付けした入射エネルギーを最大限に吸収可能とする形状最適化も試みたが、十分なデータを得るには至らなかった。

なお、文献 [1] で使用した解析プログラムはネット上に公開した (5. 節【その他】の項目 4 参照)。本研究成果と併せて、今後の薄型シリコン太陽電池を含むプラズモニックデバイスの

開発に有意義と考えられる。

④ 3次元問題に関する取り組み

① で開発した 2 次元周期 IGBEM の拡張として、3 次元音響問題 (ただし 2 層の周期透過問題) [2, 14, 8] および電磁波動散乱問題 (ただし周期表面を有する完全導体のみ) に対する IGBEM の開発 [9, 6] を行った。

また、3 次元低周波域 FMM の M2L 変換のブロッキングに関する高速化手法の開発 [4]、同 FMM に基づく 3 次元 Helmholtz 方程式に対する BEM の Inverse FMM を用いた前処理の開発 [3] とその並列実装 [5] も行った。これらは前記の 3 次元 IGBEM へも統合することは今後の課題であり、平成 30 年度より始まる後続研究の基礎として有用である。

なお、2 次元問題に関する派生的な研究 (ガラキン IGBEM の開発とクラック問題への適用 [10, 9]、動弾性問題に対する IGBEM の構成 [7]) についても基礎的な検討を行った。

5. 主な発表論文等

【雑誌論文】(計 4 件) 全て査読有り

- [1] Toru Takahashi, Tatsuro Yamamoto, Yuta Shimba, Hiroshi Isakari, Toshiro Matsumoto, A framework of shape optimisation based on the isogeometric boundary element method toward designing thin-silicon photovoltaic devices, Engineering with Computers, 2018, DOI: 10.1007/s00366-018-0606-6.
- [2] 角谷将基, 高橋徹, 飯盛浩司, 松本敏郎, 3 次元 Helmholtz 方程式の 2 周期境界値問題に対する isogeometric 境界要素法の開発, 計算数理工学論文集, 17 巻, pp.131–136, 2017.
- [3] Toru Takahashi, Pieter Coulier, Eric Darve, Application of the inverse fast multipole method as a preconditioner in a 3D Helmholtz boundary element method, Journal of Computational Physics, pp.406–428, 2017, DOI:10.1016/j.jcp.2017.04.016.
- [4] Toru Takahashi, Yuta Shimba, Hiroshi Isakari, Toshiro Matsumoto, An efficient blocking M2L translation for low-frequency fast multipole method in three dimensions, Computer Physics Communications, Vol.202, pp.151–164, 2016, DOI:10.1016/j.cpc.2016.01.008.

【学会発表】(計 14 件) 査読無し

- [5] Toru Takahashi, Chao Chen, Eric Darve, Parallelization of the IFMM-based preconditioner for 3D Helmholtz BEM, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (国際学会), 2018.
- [6] 平井哲朗, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎, 完全導体による 3 次元電磁波動散乱問題に対する IGBEM の開発, 日本機械学会東海支部第 67 期総会・講演会, 2018.
- [7] 小巻祐太, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎, 2 次元動弾性問題に対するアイソジオメトリック境界要素法の開発, 日本機械学会東海支部第 67 期総会・講演会, 2018.
- [8] 角谷将基, 榛葉祐太, 高橋徹, 3 次元 2 周期境界値問題への isogeometric 境界要素法の適用, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会, 2017.
- [9] 平井哲朗, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎, 3 次元電磁波動散乱問題に対するアイソジオメトリック境界要素法の構築, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会, 2017.
- [10] 平井哲朗, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎, 二次元一周期境界値問題に対するアイソジオメトリック境界要素法への Galerkin 法の適用, 日本計算工学会第 22 回計算工学講演会, 2017.
- [11] 平井哲朗, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎, 二次元周期境界値問題に対するアイソジオメトリックガラーキン境界要素法の開発, 日本機械学会東海支部第 66 回総会・講演会, 2017.
- [12] 山本達郎, 高橋徹, 飯盛浩司, 松本敏郎, アイソジオメトリック境界要素法に基づく形状最適化, 日本機械学会東海支部第 66 回総会・講演会, 2017.
- [13] 山本達郎, 高橋徹, 飯盛浩司, 松本敏郎, 表面プラズモンを利用した太陽電池の高効率化のための周期構造の最適設計, 日本機械学会第 29 回計算力学講演会, 2016.
- [14] 角谷将基, 高橋徹, 飯盛浩司, 松本敏郎, 3 次元 2 周期境界値問題に対するアイソジオメトリック境界要素法の開発, 日本機械学会第 29 回計算力学講演会, 2016.
- [15] Toru Takahashi, Yuta Shimba, Tatsuro Yamamoto, Masaki Sumiya, Hiroshi Isakari, Toshiro Matsumoto, A development of a periodic isogeometric boundary element method for plasmonic devices, The 12th World Congress on Computational Mechanics & The 6th Asia-Pacific

Congress on Computational Mechanics (国際学会), 2016.

- [16] 角谷将基, 榛葉祐太, 高橋徹, 飯盛浩司, 松本敏郎, 2 次元 Helmholtz 方程式に対する周期アイソジオメトリック境界要素法の開発と高速多重極法による高速化, 計算工学会第 21 回計算工学講演会, 2016.
- [17] 榛葉祐太, 高橋徹, 山本達郎, 飯盛浩司, 松本敏郎, 1 周期アイソジオメトリック境界要素法の開発と表面プラズモン解析への応用, 第 44 回電磁界理論シンポジウム, 2015.
- [18] 榛葉祐太, 高橋徹, 松本敏郎, 飯盛浩司, 波動問題の 1 周期境界値問題に対するアイソジオメトリック境界要素法の開発, 日本機械学会第 28 回計算力学講演会, 2015.

【図書】(計 0 件)

【産業財産権】(計 0 件)

【その他】(計 5 件)

- 1. 名古屋大学工学部機械・航空宇宙工学科「平成 30 年度機械・航空宇宙工学序論」: 平成 30 年 5 月 24 日に本研究の一部を新入生向けに講演。
- 2. 平成 30 年 3 月に解析プログラムをインターネット上 (<https://sourceforge.net/projects/igbemsomt>) にて公開。
- 3. 名古屋大学工学研究科主催の「テクノ・フェア名大 2017」: 平成 29 年 10 月 21 日に研究シーズ・研究成果展示 (出展タイトル『最適化に興味がある人、集合!』) において本研究の一部を一般向けに紹介。
- 4. 名古屋大学工学部機械・航空宇宙工学科「平成 29 年度機械・航空宇宙工学序論」: 平成 29 年 4 月 27 日に本研究の一部を新入生向けに講演。
- 5. 高大連携「平成 28 年度豊西総合大学」: 平成 28 年 11 月 2 日に愛知県立豊田西高校にて本研究の一部を高校生向けに講演。
- 6. 研究組織
 - (1) 研究代表者: 高橋徹 (Toru Takahashi; 研究者番号 90360578; 名古屋大学 工学研究科 准教授)
 - (2) 研究分担者: なし
 - (3) 連携研究者: なし

以上