

18p-D7-1

Cu₂ZnSnS₄(CZTS)単結晶の中性子線回折解析**Neutron Diffraction of Cu₂ZnSnS₄ (CZTS) single crystal****豊田中研: 〇田島伸, 間広文、野崎洋、宮崎大工: 永岡章、吉野賢二****Toyota Central R&D Labs., Inc., OShin Tajima, Hirofumi Hazama, Hiroshi Nozaki****Miyazaki Univ., Akira Nagaoka, Kenji Yoshino****e-mail: e0954@mosk.tytlabs.co.jp**

目的: Cu₂ZnSnS₄(CZTS)は、次世代太陽電池用材料の一つとして期待されているが、現状でのその変換効率は低く、9%程度である。特性向上にはCZTSの基礎物性を理解する必要があると考え、CZTS単結晶の結晶構造解析を試みた。XRDではCuとZnが隣接元素のため解析困難であり、今回は中性子線回折を行った。その回折プロファイルをリートベルト解析し、各結晶サイトの元素占有率を求めた。

実験方法: CZTS単結晶は、既報[1, 2]のように合成した。得られた単結晶の組成は、Cu/Sn=1.96、Zn/Sn=1.10(ICP法)、密度は4.40Mg/m³(アルキメデス法)である。その単結晶をメノウ乳鉢で粉砕し、J-PARCのBL-20で粉末中性子線回折測定を行った。解析ソフトZ-Rietveldを用いて、中性子線回折パターンのリートベルト解析を行った。

結果: 結晶構造は、下図に示すようにKesterite構造であることがわかった。リートベルト解析から得られた組成はCu/Sn=1.96、Zn/Sn=1.09で、ICP法の結果とほぼ一致していた。Sサイトの欠損はほとんどなかった。2つあるCuサイトにはそれぞれ15%程度の欠損が入っており、Cuサイトへの他の元素の置換はほとんど無かった。Znサイトの欠損は少なく、Cu置換が3%程度あった。Snサイトにも10%程度の欠損があり、Zn置換が2%程度あった。CZTSの理想密度は4.56Mg/m³であり、試料のアルキメデス密度と比較するとCuサイトとSnサイトの欠損は妥当と考えられる。ただし、リートベルト解析値から換算された密度は、4.2Mg/m³であり、今回の解析では、CuとSnの欠損を過大評価している可能性がある。本実験は、

iMATERIA、課題番

号:2012BM0005で行った。

[1]A. Nagaoka et al.,
Jpn. J. Appl. Phys. **50**
(2011) 128001.

[2] A. Nagaoka et al.,
J. Crystal Growth **341**
(2012) 38.

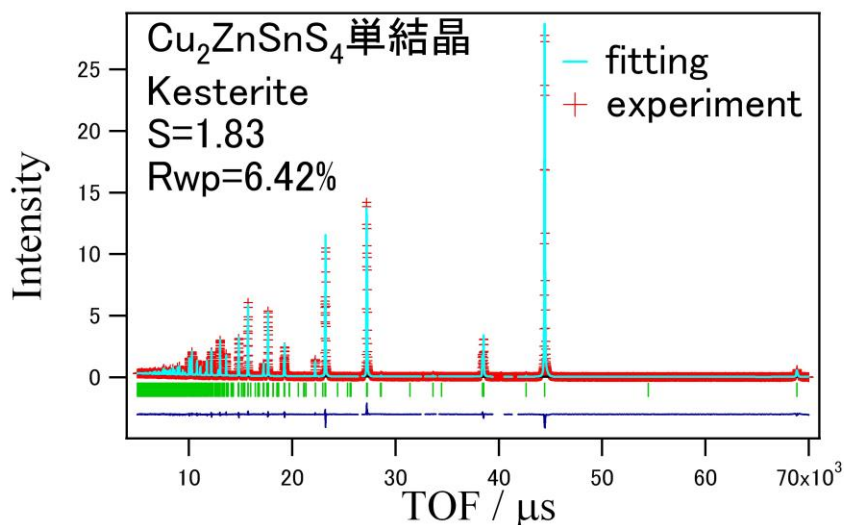


図1 中性子線回折スペクトルのリートベルト解析結果