

蛍光 X 線ホログラフィーを用いた CuInSe_2 単結晶の原子構造解析

Atomic structural analysis of CuInSe_2 single crystal by X-ray fluorescence holography

○北村優天¹、白方祥¹、三宅秀人²、八方直久³、細川伸也⁴、林好一⁵

(1. 愛媛大工、2. 三重大地域イノベ、3. 広島市大情報、4. 熊本大理工、5. 東北大金研)

○Yuma Kitamura¹, Sho Shirakata¹, Hideto Miyake², Naohisa Happo³, Shinya Hosokawa⁴, Kouichi Hayashi⁵

(1.Ehime Univ, 2.Mie Univ, 3.Hiroshima City Univ, 4.Kumamoto Univ, 5.Tohoku Univ)

E-mail:b845010a@mails.cc.ehime-u.ac.jp

はじめに

高効率な薄膜太陽電池材料である Cu(In, Ga)Se_2 (CIGS) が注目されている。その CIGS 薄膜作製段階において、Cu 欠損を持つ OVC 相の結晶構造がデバイス特性に影響を与えていることが知られているが、その構造は十分に理解されているとは言い難く、基本的な構造からの順を追っての理解が重要である。ところで、蛍光 X 線ホログラフィー法 (XFH) は結晶構造を三次元で記録する新しい手法である。その手法での ZnSnAs_2 のような II-IV-V₂ 族系カルコパイライト半導体の測定は報告されている[1]が、I-III-VI₂ 族系では報告がない。そこで本研究では、まず基本的である CuInSe_2 単結晶の XFH 測定を行った。

実験方法

測定に用いた CuInSe_2 単結晶は In 溶媒を用いて THM 法により成長された (100) 面を有するものである[2]。測定は Cu-K α 線を用いて、室温で行った。XFH 測定に用いた入射 X 線のエネルギーは 9.20eV から 13.20eV まで 0.25eV 刻みで 17 点であり、一入射エネルギーあたりの測定時間は 3 時間である。試料回転角は 0° から 70° である。測定時のデータの処理並びに動作制御は Lab VIEW で行った。

実験結果

Fig1 に入射 X 線エネルギー(a)9.20eV と(b)13.20eV における CuInSe_2 単結晶の Cu-K α ホログラムパターンを示す。どちらにも対称性の良いホログラムパターンが観察できる。さらに干渉模様が明瞭に確認できるところから、試料の結晶性が良いといえる。次に Fig2 に 9.20eV から 13.20eV までの 17 点のホログラムより再生した、Cu 原子中心における CuInSe_2 単結晶の陽イオン面 (Fig2 の右図に示す面) の原子像を示す。原子位置でイメージの強度が強くなっており、原子の配列が確認できた。現在は他の結晶面での原子像の再生および解析を行っている。

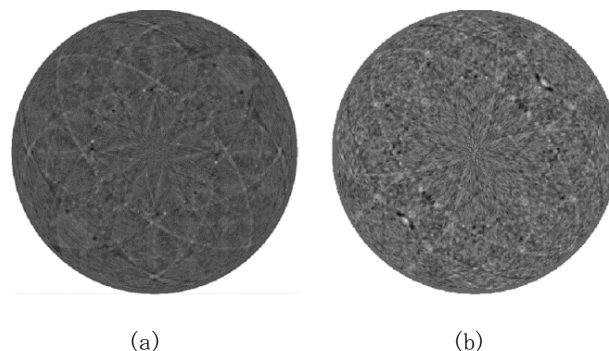


Fig 1 : 入射 X 線エネルギー (a) 9.20eV と (b) 13.20eV における CuInSe_2 単結晶のホログラムパターン

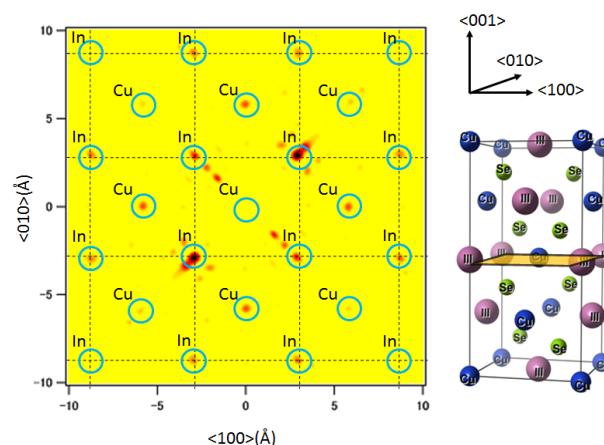


Fig2: Cu 原子中心における CuInSe_2 単結晶の原子像 (点線部と実線の青丸はそれぞれ、実際の CuInSe_2 単結晶の格子と各原子の位置を示す。)

参考文献

- [1] K. Hayashi, N. Uchitomi, N. Happo, S. Hosokawa; Jpn. J. Appl. Phys., **50** (2011) 01BF05
- [2] H. Miyake, K. Sugiyama; J. Cryst. Growth, **125** (1992) 548-552