

硫化物 / ZnSnP₂ ヘテロ接合界面におけるバンドオフセット評価

Evaluation of band offset at heterojunction interface between ZnSnP₂ and sulfides

○中塚 滋¹、中元 宏¹、野瀬 嘉太郎¹、池田 茂²、白井 泰治¹ (1.京大院工、2.阪大太陽エネ研セ)

○Shigeru NAKATSUKA¹, Hiroshi NAKAMOTO¹, Yoshitaro NOSE¹, Shigeru IKEDA², Yasuharu SHIRAI¹

(1.Kyoto Univ., 2.Osaka Univ.)

E-mail: shigeru.nakatsuka.25c@st.kyoto-u.ac.jp

安価で豊富かつ安全な元素で構成されるカルコパイライト型化合物 ZnSnP₂ は 1.66 eV の直接遷移型バンドギャップを有し^[1]、光吸収係数が可視光領域において 10⁵/cm 程度^[2]であることから安価で高効率な薄膜太陽電池材料として期待される。しかし、本研究グループが Zn-Sn 前駆体薄膜とリン蒸気の反応を利用するリン化法により、Al/AZO/CdS/ZnSnP₂/Mo/Glass の構造を有する太陽電池セルの試作を行ったところ、その変換効率は 0.01%程度と小さかった。一般に、CIGS 太陽電池などのヘテロ接合を利用した太陽電池では、伝導帯のバンドオフセットが変換効率に大きな影響を与えている^[3]。そこで本研究では、ZnSnP₂ と CdS, ZnS, In₂S₃ といった種々の硫化物のヘテロ接合界面におけるバンドオフセットを調査することで最適なバッファ層材料を選定することを研究目的とした。

バンドオフセットの評価には、Kraut らが報告している XPS を利用した評価手法を用いた^[4]。この手法では、まず ZnSnP₂ および硫化物における価電子帯とコアレベルのエネルギー差 $\Delta E_{\text{VBM-CL}}^{\text{ZnSnP}_2}$, $\Delta E_{\text{VBM-CL}}^{\text{Sulfide}}$ に加え、ZnSnP₂ と硫化物界面におけるコアレベルのエネルギー差 ΔE_{CL} を XPS により求めることで価電子帯オフセット ΔE_{V} の評価を行った。次に、この価電子帯オフセットと ZnSnP₂ および硫化物のバンドギャップ $\Delta E_{\text{g}}^{\text{ZnSnP}_2}$, $\Delta E_{\text{g}}^{\text{Sulfide}}$ を考慮することで、伝導帯オフセット ΔE_{C} を求めた。なお本研究では、フラックス法により作製した ZnSnP₂ バルク結晶を XPS 測定に用い、種々の硫化物は化学溶液堆積法により作製した。上記の手法により調査した CdS/ZnSnP₂ ヘテロ接合のバンド図を図 1 に示す。CdS/ZnSnP₂ 界面の伝導帯オフセット ΔE_{C} をは約 -1.3 eV と見積もられ、CdS は ZnSnP₂ 薄膜太陽電池のバッファ層材料として不適切であることが示唆された。講演では、ZnS/ZnSnP₂, In₂S₃/ZnSnP₂ のオフセット評価結果とともに伝導帯バンドオフセットが太陽電池のセル特性に与える影響についても報告を行う。

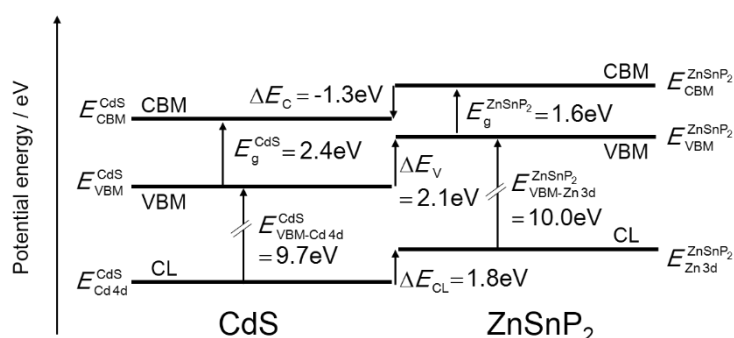


図 1. CdS / ZnSnP₂ ヘテロ接合界面におけるバンド図.

参考文献

- [1] J. L. Shay et al., *Ternary Chalcopyrite Semiconductors: Growth, Electronic Properties and Applications*, (1975).
- [2] H. Y. Shin et al. *Mater. Lett.*, **8**, 464 (1987).
- [3] T. Minemoto et al. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, **67**, 83 (2001).
- [4] E. A. Kraut et al., *Phys. Rev. Lett.*, **44**, 1620 (1980).