

金属/p-Zn₃P₂ 接合における界面反応と電子輸送特性

Interfacial reaction at metal/p-Zn₃P₂ junctions and electron transport property of them

京大院工¹, °(D)勝部 涼司¹, 野瀬 嘉太郎¹

Kyoto Univ.¹, °Ryoji Katsube¹, Yoshitaro Nose¹

E-mail: katsube.ryouji.72r@st.kyoto-u.ac.jp

はじめに 汎用元素で構成される Zn₃P₂ は、単接合薄膜太陽電池の光吸収層に適した光学的特性を有し、通常 p 型伝導を示す化合物半導体である。本研究では、太陽電池の高効率達成に重要な要素のひとつである p-Zn₃P₂ と金属との接合の電子輸送特性に着目した。金属と p-Zn₃P₂ との接合における Schottky 障壁高さ ϕ_B は金属の仕事関数 ϕ_W との相関がないと報告されており[1]、基本的な理論である Schottky や Bardeen のモデルが成立しない。この一因としては、接合界面で起こりうる化学反応による界面構造の変化が挙げられるが、界面構造と電子輸送特性の相関は詳細に検討されていない。また、Zn, P に他の金属を加えた三元系の平衡状態図は報告が少なく、界面構造を予想することも困難である。本研究では、各相の生成の Gibbs エネルギーから多元系の相平衡関係を考察できる化学ポテンシャル図を応用し、金属/p-Zn₃P₂ 界面で起こりうる化学反応の議論を試みる。さらに、金属/p-Zn₃P₂ 試料の電気的特性評価と断面観察を行うことで、金属/Zn₃P₂ 接合の特性を系統的に理解することを目的とした。本講演では、 ϕ_W が同程度だが ϕ_B が大きく異なる Ag と Al (Ag: $\phi_W = 4.28$ eV, $\phi_B = 0$ eV (Ohmic); Al: $\phi_W = 4.20$ eV, $\phi_B = 0.77$ eV) をモデルとして比較した結果を報告する。

実験方法 化学ポテンシャル図は、Karakaya and Thompson[2], Barin[3], Gómez-Acebo[4] の熱力学データを用い、畑田によって開発されたプログラム Chesta[5] により作図した。金属/p-Zn₃P₂ 試料は、物理気相輸送法で育成した p-Zn₃P₂ バルク多結晶をウエハ状に加工し、真空蒸着法で各金属を数 100 nm 程度成膜することで作製した。この試料に対し、断面 STEM-EDX 測定と I-V 測定を行い、界面構造と電子輸送特性の相関を考察した。

実験結果および考察 Figure 1 に 298.15 K における Ag-P-Zn 系および Al-P-Zn 系の化学ポテンシャル図を示す。ここで、各平面は各相の安定領域を示している。Ag-P-Zn 系では Ag と Zn₃P₂ の安定領域が接しており、熱力学的に Ag と Zn₃P₂ は平衡しうることが分かる。一方で、Al-P-Zn 系からは Al と Zn₃P₂ が平衡しないことが分かり、界面反応により半導体である AlP が形成されうることが読み取れる。Figure 2 に示すように I-V 特性が大きく異なる原因は、界面反応による半導体層形成の成否にあると予想される。さらに、Al/Zn₃P₂ ダイオードの I-V 曲線の解析により求めた理想因子は 2.4 と大きく、界面反応層が存在するという予想と矛盾しない。講演では、熱処理により界面拡散を促した試料の解析結果や断面 STEM-EDX 測定結果を交え、より詳細な議論を行う。

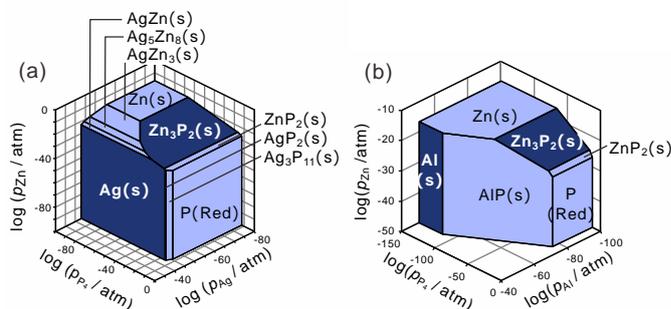


Figure 1. The chemical potential diagrams of (a) Ag-P-Zn and (b) Al-P-Zn system at 298.15 K.

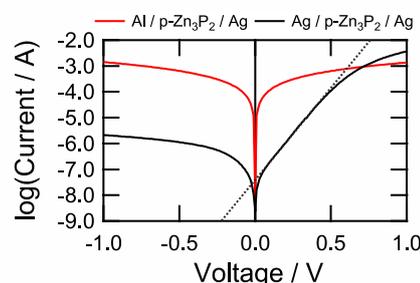


Figure 2. The I-V characteristics of Ag/Zn₃P₂ and Al/Zn₃P₂ junctions.

[1] N.C. Wyeth and A. Catalano, J. Appl. Phys. (1980).

[2] I. Karakaya and W.T. Thompson, Bull. Alloy Phase Diagr. (1988).

[3] I. Barin, *Thermochemical Data of Pure Substances* (1995). [4] T. Gómez-Acebo, Calphad (1998).

[5] <http://www.aqua.mtl.kyoto-u.ac.jp/chesta.html>