Cu(In,Ga)S_2 系固溶体の光学評価とバンドラインナップ

Optical properties and band-lineup of Cu (In,Ga)S_2 system

細木恵, 前田 毅, 西谷幹彦, 和田隆博 (龍谷大学　理工学部)

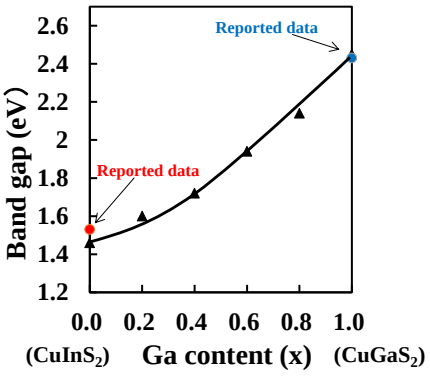
M. Hosoki, T. Maeda, M. Nishitani and T. Wada (Ryukoku University)

E-mail: twada@rins.ryukoku.ac.jp

【緒言】 Cu(In,Ga)Se_2 は高効率薄膜太陽電池材料として知られている。ドイツの ZSW は 21.7 %、日本のソーラーフロンティアは 22.3%の高効率 Cu(In,Ga)Se_2 太陽電池を作製している。Cu(In,Ga)Se_2 の Se を硫黄(S)に置換した Cu(In,Ga)S_2 太陽電池についても以前から研究が行われており、最近ソーラーフロンティアが 14.0 %の最高変換効率を達成した[1]。しかし、Cu(In,Ga)S_2 については Cu(In,Ga)Se_2 に比較して研究例が少なく、不明なことも多い。本研究では、Cu(In,Ga)S_2粉末の拡散反射スペクトルから決定したバンドギャップとPYS法を用いて測定したイオン化ポテンシャルから Cu(In,Ga)S_2 固溶体のバンドダイアグラムを作成した。

【実験方法】 Cu($In_{1-x}Ga_x$)S_2(x = 0～1.0)の化学組成になるように Cu, In, Ga, S を所定量秤量し、遊星ボールミルで N_2 雰囲気中・800 rpm・30 min の条件で粉砕・混合した。得られた混合物は 5 %H_2S(N_2)雰囲気中・550℃・30 min の条件で焼成した。合成した粉末を X 線回折で相を同定し、次に粉末の拡散反射スペクトルを測定し、禁制帯幅を決定した。光電子収量分光法によりイオン化エネルギーの測定を行い、価電子帯上端(VBM)の位置を決定した。

【結果】 Cu($In_{1-x}Ga_x$)S_2 (x = 0～1.0)の X 線回折図形から Ga の固有量が増加するほど回折ピークが高角度側にシフトしていることから Cu($In_{1-x}Ga_x$)S_2 固溶体が得られたことを確認した。Fig. 1 に Cu($In_{1-x}Ga_x$)S_2 固溶体の禁制帯幅を示す。Cu($In_{1-x}Ga_x$)S_2 の禁制帯幅は Ga の固溶量の増加とともに 1.45 eV (x = 0, $CuInS_2$)から 2.45 eV (x =1.0, $CuGaS_2$)まで連続的に変化する。Cu($In_{1-x}Ga_x$)S_2 固溶体のイオン化エネルギーの測定から、Ga の固溶量の増加とともに価電子帯上端(VBM)はわずかに上昇することがわかった。得られた Cu($In_{1-x}Ga_x$)S_2 固溶体の禁制帯幅と VBM の位置から Fig.2 に示すバンドラインナップを作成した。Ga の固溶量が増加しても $CuInS_2$ の VBM の位置は少ししか上昇しないが、伝導帯下端(CBM)は大きく上昇することがわかる。禁制帯幅とイオン化エネルギーの結果をもとにして、Cu-poor 組成の CIGS についても議論する予定である。



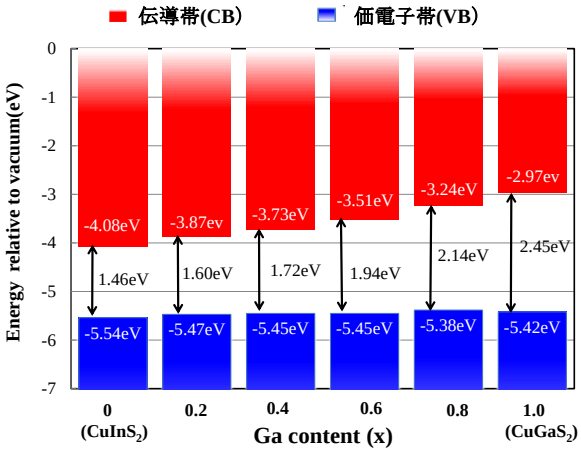


Fig.1 Band gap energies of Cu($In_{1-x}Ga_x$)S_2 system　Fig.2. Band-lineup of Cu($In_{1-x}Ga_x$)S_2 system

[1] H. Hiroi *et al.*, PVSC, 2015 IEEE 42nd (DOI:10.1109/PVSC.2015.7355655).

謝辞　本研究の一部は独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の支援により実施したものである。関係各位に感謝する。

© 2016年 応用物理学会