MBE 法による GaAs 基板上 $Cu(In, Ga)Se_2$ の結晶構造

Crystal structures of $Cu(In, Ga)Se_2$ layers on GaAs substrates by MBE

産総研太陽光発電研究センター　°西永 慈郎，菅谷 武芳，柴田 肇，仁木 栄

AIST, °Jiro Nishinaga, Takeyoshi Sugaya, Hajime Shibata, Shigeru Niki

E-mail: jiro.nishinaga@aist.go.jp

はじめに： $Cu(In, Ga)Se_2$ (CIGS)太陽電池は光吸収係数・変換効率が共に高く、低コスト・高効率太陽電池として期待されている。CIGS 太陽電池は青板ガラス基板上に作製され、多結晶 CIGS 薄膜を光吸収層として利用している。そのため、結晶粒内(Grain interior(GI))、および結晶粒界(Grain boundary(GB))それぞれの基礎的物性の理解が、高効率化への研究指針策定に重要である。そこで GB のない単結晶 CIGS 層を作製し、結晶構造およびアルカリ金属拡散に関する考察を行った。

実験結果と考察：MBE 法により GaAs(001)基板上に CIGS 単結晶薄膜を成長させた。基板温度 550℃、Ga 組成(GGI) 0.7、Cu 組成(CGI) 0.95 にて CIGS 層を成長し、その後 GGI 0.4 の CIGS 層を堆積させ、KF 処理(KF-PDT)を行った。得られた CIGS 太陽電池は変換効率 20%を示した。図 1 に断面明視野(BF)-STEM 像を示す。GaAs と格子整合する GGI 0.6-0.8 の単膜の場合、結晶欠陥のない高品質な CIGS 層を得られるが、GGI 0.5 以下の場合、格子歪による転位が形成される。図 1 に結晶粒界のような境界が確認される。これは環状暗視野(ADF)-STEM 像ではコントラストが発生しないことから、隙間でないことがわかった。図 2 にカルコパイライト構造と Antiphase domain (APD)のモデル図を示す。GaAs 基板を用いてエピタキシャル成長を行う場合、陽イオン(Cu, In, Ga)と陰イオン(Se)の APD の発生を抑制することができるが、I 族と III 族の APD は抑制できず、図 1 のような APD が発生する。この APD は Se 原子と 3 つの Cu 原子もしくは 3 つの III 族原子が結合する欠陥であり、{100}面に 2 次元的に発生する。この APD は成長温度を上昇させるか、マスク基板を用いた単一ドメイン構造により抑制できる。一方で、この APD は隙間がないために、アルカリ金属が拡散できないことが SIMS 測定より確認された。以上より、GaAs 基板上 CIGS 層は GB のない単結晶 CIGS 層として利用できることがわかった。

謝辞：本研究は経済産業省「革新的なエネルギー技術の国際共同研究開発事業」により実施されたものである。関係各位に感謝致します。

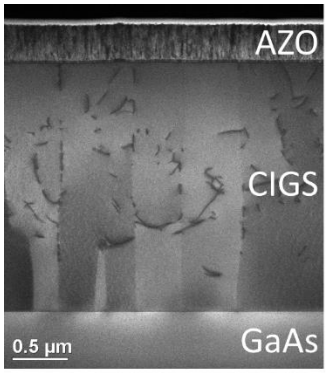

図 1. 断面 BF-STEM 像

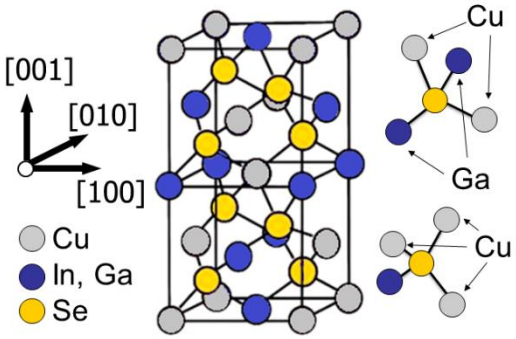

図 2. カルコパイライト構造と APD モデル図

© 2018年 応用物理学会