SnS 太陽電池における V_{OC} > 0.7 V の可能性: フェルミ準位の制御性の観点から

Possibility of V_{OC} > 0.7 V in SnS solar cells in the aspect of tunability of Fermi level

東北大多元研 [1]，ダルムシュタット工科大学 [2]　◦鈴木 一誓 [1]，(D) Binxiang Huang [2]，
川西咲子 [1]，(M1)リン タクシン [1]，Andreas Klein [2]・小俣孝久 [1]
Tohoku Univ. [1], Technical Univ. of Darmstadt [2], ◦Issei Suzuki[1], Binxiang Huang[2],
Sakiko Kawanishi[1], Lin Zexin[1], Andreas Klein[2], Takahisa Omata[1]
E-mail: issei.suzuki@tohoku.ac.jp

【緒言】太陽電池の光吸収体で生成した電子とホールは、擬フェルミ準位の分裂により分離される。開放電圧（V_{OC}）はこの分裂幅によって決まるため、より高い V_{OC} を得るには、擬フェルミ準位がバンドギャップ内でなるべく広く分裂する必要がある。$CuGaSe_2$ 等では、フェルミ準位のとりうるエネルギー範囲が、材料固有の欠陥によるピニング準位で制限されるため、高い V_{OC} が得られない問題がある[1]。すなわち、光吸収体材料のポテンシャルをはかる上で、『フェルミ準位のとりうるエネルギー範囲がバンドギャップ内にどれだけ広がっているか』は、変換効率を左右する重要な性質である。硫化スズ（SnS）は、安価で豊富な元素からなる太陽電池材料である。SnS は通常 p 型伝導性を有するため、従来の SnS 太陽電池は n 型 CdS 等とのヘテロ接合により構成されるが、V_{OC} は 0.3–0.4 V と低い[2]。SnS と CdS 等のヘテロ界面では、SnS のフェルミ準位がほとんどシフトしないことが報告されており[3]、前述の $CuGaSe_2$ 等と同様に、SnS 固有の欠陥によるフェルミ準位ピニングが、低い V_{OC} の原因となっている可能性がある。本研究では、最近育成に成功した n 型 SnS 単結晶と、仕事関数の大きな MoO_3 薄膜の界面を作製し、電子構造を光電子分光法（XPS）で観察することで、SnS のフェルミ準位がとりうるエネルギー範囲を明らかにした。

【実験方法】Br ドープ n 型 SnS 単結晶を真空中でへき開し、0.5～16 nm の MoO_3 薄膜を熱蒸着法で堆積した。得られた界面における SnS のフェルミ準位の変化を XPS (Al Kα 線)で観察した。

【結果と考察】図 1 に、XPS により決定した n 型 SnS/MoO_3 界面のバンド構造を示す。MoO_3 との界面近傍において、SnS は 1 eV に達する大きなバンド屈曲を示した。このことは、SnS のフェルミ準位のとりうるエネルギー範囲が、少なくとも価電子帯の 0.95 eV 上から価電子帯上端まで広がっていること、および、この範囲に SnS 固有の欠陥によるピニング準位がないことを示している。したがって、界面欠陥の少ない理想的な接合の作製により少なくとも 0.7 V の V_{OC} は実現できるだろう。最近、n 型 SnS 薄膜の作製方法が開発され[4]、SnS のホモ pn 接合の形成が可能となった。ホモ接合は格子不整合がなく界面欠陥が低減されるため、そのような高い V_{OC} の実現に適している。

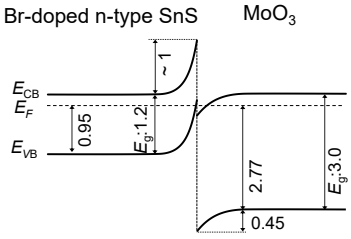

Fig.1 Band alignment of SnS/MoO_3 interfaces. All values are given in eV.

[1] Klein et al., *J. Phys.: Condens. Matter*. **2015**, 27, 134201.
[2] P. S. Pawar et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2020**, 12, 7001.
[3] A. Schneikart, A. Klein et al., *J. Phys. D. Appl. Phys.* **2013**, 46, 305109.
[4] 鈴木一誓 他『スパッタリング法による n 型 SnS 薄膜の作製』2020 年 応物 秋季シンポジウム