

XAFS による CIS 系化合物太陽電池材料の局所構造解析

Local structural analysis of CIS and related compounds by XAFS

龍谷大先端理工 °別府 孝介

Ryukoku Univ., °Kosuke Beppu

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

CuInSe₂(CIS)系化合物は高効率薄膜太陽電池材料の有力候補として期待されている。高効率 CIS 系太陽電池では表面から内部にかけて組成が変化することが知られており、膜中の元素分布の変化は各元素の拡散能の違いにより形成されと考えられている。そのため、高効率 CIS 系太陽電池作製のためには薄膜構造の理解と、材料中の各元素の拡散能の評価が極めて重要となる。X 線吸収微細構造 (XAFS) 法は材料中のターゲット元素周囲の電子状態や局所構造を元素選択的に知ることができる強力な手法である。測定法を工夫することで空間分解能を持たせた測定を行うことや、結合の硬さに関する情報を得ることも可能である。我々はこれまでに XAFS を用いて CIS 系化合物太陽電池材料の欠陥構造、薄膜の深さ方向に対する構造や結合に関する情報を調べてきた。本発表では 2 種類の XAFS を用いた CIS 系化合物太陽電池材料に関する最近の検討について紹介する。

(1) 深さ分解 XAFS を用いた CIGSe 薄膜の表面近傍構造の評価[1,2]

深さ分解 XAFS は二次元検出器を用いることで薄膜の表面から内部の構造を調べることができる測定法である。三段階法によって作製された Cu(In,Ga)Se₂ (CIGSe) 薄膜の構造を深さ分解 XAFS により調べたところ、第二段階後の CIGSe 表面には Cu_{2-x}Se が形成していること、第三段階目で Cu 欠陥のある, Ga,In 過剰の CIGSe が形成していることを見積もることに成功した。また, CIGSe 薄膜へのアルカリ金属処理による構造変化についても検討したところ, Cs 処理によって CIGSe 薄膜の表面 20 nm 付近まで Cu 欠陥相へと変化することを見出した。

(2) 低温 XAFS を用いた CIGSe 中の結合の評価[3]

XAFS の解析によって得られるデバイワラー因子は結合の熱振動の寄与を表す因子である。結合の振動をアインシュタインモデルで近似することで、デバイワラー因子の温度依存性より結合のアインシュタイン温度を求めることができる。さらに、結合のアインシュタイン温度を比較することで、材料中の結合の硬さの比較を行うことができる。CIGSe では Cu-Se → In-Se → Ga-Se の順で化学結合が硬くなることが認められた。硬い結合を持つ元素は拡散しにくいと考えることができるため、この結果はこれまで報告されている CIGSe 薄膜の深さ方向の元素分布の変化も矛盾なく説明している。つまり、アインシュタイン温度を用いた結合の硬さの評価が、元素拡散の起こりやすさの指標としても利用できることを明らかにした。

【参考文献】

[1] K. Beppu *et. al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 58, 105502 (2019). [2] K. Beppu *et. al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 117, 043901 (2020). [3] 別府ら, 第 23 回 XAFS 討論会講演要旨集, O3-1 (2020).