

CIS 系太陽電池における Mo 裏面電極の表面電子構造

Surface electronic structure of Mo-back electrode in CIS-based solar cells

鹿児島大¹, 産総研² ○大場 幹也¹, 上川 由紀子², 永井 武彦², 石塚 尚吾²,
西永 慈郎², 反保 衆志², 青野 祐美¹, 奥田 哲治¹, 寺田 教男^{1,2}
Kagoshima Univ.¹, AIST.², ○M. Oba¹, Y. Kamikawa², T. Nagai², S. Ishizuka²,
J. Nishinaga², H. Tampo², M. Aono¹, T. Okuda¹, N. Terada^{1,2}

E-mail: k7176881@kadai.jp

はじめに Cu(In,Ga)Se₂ (CIGS)太陽電池において、常用される Mo 裏面電極表面には電池プロセス中に Mo-Se 化合物層が形成される。当グループは超高真空中リフトオフにより露出させた CIGS 電池の Mo 電極表面の Mo-Se 層が MoSe₂ 単結晶と異なる電子構造(p 型的)を持つことで、CIGS 層裏側のバンドを上昇させることによる Back surface field (BSF)の増強と価電子帯上端 (VBM)の逆傾斜を緩和する、電池特性に有益なバンド接続の発現が推定されることを報告した。これまでに、この特異な電子構造が MoSe₂ 相中の Mo 欠損由来であることを示唆するデータが得られているものの、さらなる検討が必要と考えられた。今回、特異な電子構造の構造起源の明確化を目的として、Mo スパッタ膜を Se 化した表面の状態と Se 化温度の関係を調べ、電池中の当該表面との相関を検討した。

実験 ソーダライムガラス(SLG)基板上に Mo をスパッタ堆積し、Se を 100 nm、MBE 法によって室温蒸着した Se/Mo/SLG 構造を出発試料とした。続いて、高真空中で 30 分 *in-situ* アニールを行うことで Mo 表面を Se 化した。一部の試料では Mo 膜表面を自然酸化した後に Se 化を行った。Se 化表面の組成、仕事関数 ϕ はそれぞれ *in-situ* XPS、UPS スペクトルの cutoff により評価した。

結果 表 1 に金属的 Mo 膜表面を Se 化した試料の Mo : Se 比、 ϕ と Se 化温度の関係を示す。Se 化表面はいずれも単結晶の真空中劈開面と比べて Mo 欠損組成、顕著に高い ϕ を持つこと、また Se 化温度の上昇に伴い、欠損と ϕ が増大する傾向があることがわかる。表 2 に CIGS 電池中の Mo 電極表面の組成、 ϕ と電池プロセス最高温度の関係を示す。Mo 欠損、 ϕ の変動幅が表 1 よりも大きいものの、プロセス温度の上昇により Mo 膜 Se 化表面と同方向に変化していることがわかる。この結果は、Mo 電極表面の高い ϕ の構造起源が Mo ダイカルコゲナイド相における Mo 欠損であることを支持している。MoO₃ 相が支配的な自然酸化膜に Se を堆積し、400℃で処理を行ったところ、Se は処理後に観測されず、MoO_{3-x}が残存することが見出され、酸化領域上に Mo-Se 化合物は形成され難いことがわかった。MoO₃ は n 型、ワイドギャップかつ高い ϕ を持つことからホール伝導に寄与しないことが考えられる。この結果は Mo 電極の酸素濃度とその面内分布が CIS/Mo 界面の伝導パス領域を限定し、ポイントコンタクト制御に影響することを示唆している。

本研究の一部は新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)の支援により実施された。関係各位に感謝する。

Table 1. Changes in Mo:Se compositional ratio and work function of selenized surface of metallic Mo sputtered film in conjunction with selenization temperature.

Selenization temperature [°C]	Mo:Se	Work function ϕ [eV]
350	0.87 : 2.00	5.16
450	0.80 : 2.00	5.20
500	0.81 : 2.00	5.25
MoSe ₂ single crystal	1.00 : 2.00	4.38~4.42

Table 2. Changes in Mo:Se compositional ratio and work function of surface of Mo-back electrode in CIGSSe-based cell exposed by UHV lift off in conjunction with the highest temperature in fabrication process.

Cell process temperature [°C]	Mo:anion	Work function ϕ [eV]
400	0.86~0.87 : 2.00	4.77
550	0.84 : 2.00	4.94
600	0.69~0.70 : 2.00	5.15