

二硫化モリブデンを用いた太陽電池の作製

日本大学 生産工学研究科 ○XU CHENGHAO , 清水耕作

1. まえがき

太陽電池は再生可能エネルギー源として注目され、その効率向上およびコスト削減が研究の主要課題である。シリコンを用いた従来の太陽電池は広く普及しているが、新材料の開発が進展し、ペロブスカイトや二硫化モリブデン (MoS_2) などの次世代型太陽電池が高効率化と持続可能性の観点から期待されている。

2. 目的

二硫化モリブデン (MoS_2) は、その独特な光学的・電子的性質により、エレクトロニクスや光電デバイスで注目されている。本研究では、 MoS_2 を用いた高効率太陽電池の作製を目指す。

3. 実験方法および測定方法

3.1 原子状水素化処理

P型二硫化モリブデン (MoS_2) を成膜した後、原子状水素化処理を行った。その処理の機構はFig. 1示す。

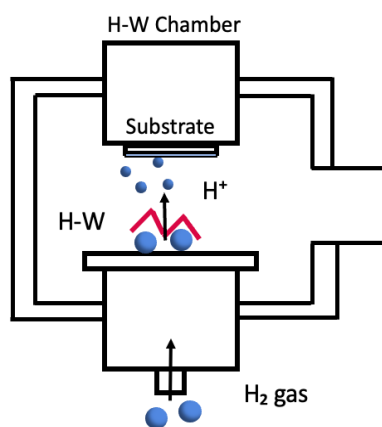


Fig.1 Atomic hydrogenation process

Table 1に水素化条件を示す。

Table 1 Hydrogenation conditions

Gas flow rate [sccm]	H ₂	20
	Ar	0.02
Pressure [Pa]	10	
Substrate distance [mm]	20	
Substrate Temperature [°C]	26	
Duration time [min]	12	
Hot-Wire Temperature [°C]	800	

3.2 作製のプロセス

まず、二硫化モリブデン (MoS_2) のP型成膜条件を検討し、成膜後に表面特性を評価する。その後、水素化処理を施し、再度表面特性測定を行い、薄膜表面がN型に変化したかを確認する。

Fig.2 および Fig.3 に示すように、 MoS_2 を用いた太陽電池の構造図とフローチャートである。ガラス基板の上にCr電極を蒸着し、P型 MoS_2 膜を作製する。次に、水素化処理によりP型 MoS_2 表面をN型に変換し、PN接合を形成する。その後、アニール処理を施して材料特性を向上させ、最終的にITOを成膜してデバイスを完成させる。

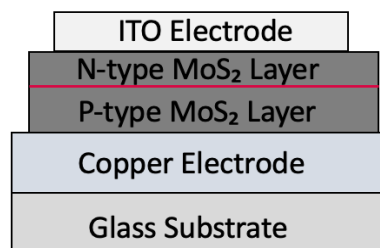


Fig.2 Structure diagram of a solar cell using MoS_2

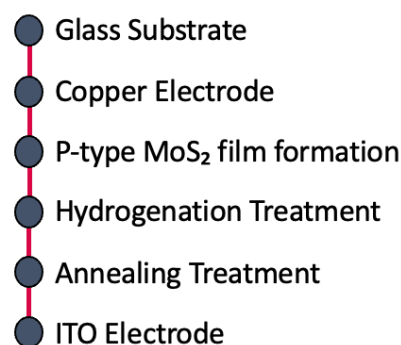


Fig.3 Flowchart of the Experimental

3.3 測定方法

電子光、光電子分光法およびケルビンプローブを用いて作製された MoS_2 薄膜のバンドプロファイルを検討した。当スパッタ膜についてバンドプロファイルおよびフェルミレベルの位置を評価した。なおサンプルはグローブボックス中で調整し、真空中でアニールを行った後、

評価を行った。伝導帯吸収端をIPES, 価電子帯吸収端をPYS法により評価し, その差をバンドギャップとして算出した。

作製したデバイスの評価は、IV特性曲線を測定して行う。IV曲線から、開放電圧 (Voc)、短絡電流 (Isc)、および変換効率などの重要なパラメータを算出し、デバイスの動作特性を確認する。

4. 実験結果および検討

4.1 PYS、KPおよびIPESの測定

Fig.4に示すように、MoS₂膜のエネルギーバンド構造とその半導体特性を示している。フェルミ準位が価電子帯に近接していることから、この膜はp型半導体であると確認できる。

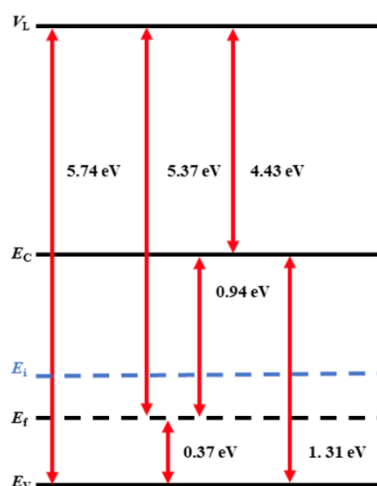


Fig. 4 Schematic Diagram for the band structure of MoS₂

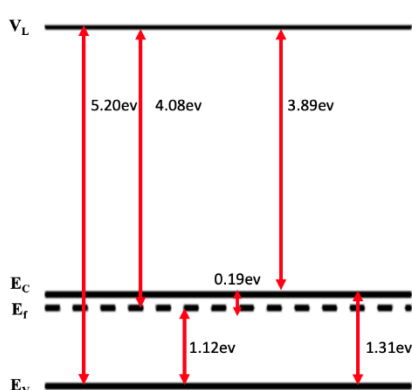


Fig.5 Schematic diagram of the band structure of hydrogenated MoS₂

水素化処理後の測定結果に基づき、MoS₂薄膜のバンドプロファイルを解析した (Fig.5)。バンドギャップエネルギーは5.20 eVから3.89 eVの範囲で観測され、Fermiレベルと伝導帯端

の間には0.19 eVの距離が確認された。この結果は、表面状態が水素化によって顕著に変化し、P型からN型への変換が示唆される。

4.2 I-V特性曲線の測定

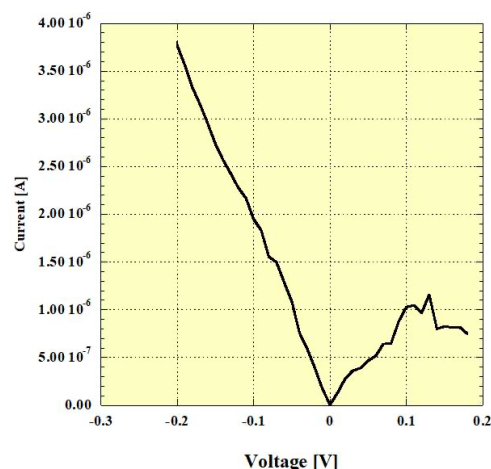


Fig.6 I-V Characteristic Curve

Fig. 6に示すように、デバイスの整流効果が確認された。負の電圧領域では、約-0.2V以下で電流が急激に減少し、 4×10^{-6} Aから 5×10^{-7} Aまで減少している。これは、逆方向バイアスでキャリアの流れが制限されていることを示している。一方、正の電圧領域では、0.1Vを超えると電流が再び増加し、順方向バイアスでキャリアが注入されデバイスが導通している。この結果から、デバイス内部でPN接合が形成されていることが確認された。形成されている可能性が高いと考えられる。

5. まとめ

この実験では、P型MoS₂膜に水素化処理を施し、N型への変換とPN接合の形成が確認された。PYS、KPおよびIPESの測定の結果、バンドギャップの変化とフェルミ準位の位置移動が観察され、P型からN型への変換が成功したことが示唆された。また、I-V特性曲線において、短絡電流 (Isc) および開放電圧 (Voc) が確認され、PN接合が適切に形成され、太陽電池デバイスが光電変換機能を持つことが確認された。

6. 参考文献

[1] A. Yamada and K. Yamashita, "Tensile properties of molybdenum disulfide thin films," **Journal of the Society of Materials Science, Japan**, vol. 73, no. 10, pp. 735-741, 2024. <https://doi.org/10.2472/jsms.73.735>