

多結晶 n-, p-MoS₂ 薄膜のジャンクション特性について

日大生産工 ○XU CHENGHAO

指導教員 教授 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。近年、ペロブスカイトや二硫化モリブデン (MoS₂) などの新材料が、次世代太陽電池として期待されている。

2. 目的

本研究では、多結晶MoS₂薄膜におけるn型およびp型特性の形成条件を検討し、それらを積層した接合構造のバンド整合と内蔵電位を解析することを目的とする。得られた結果を基に、MoS₂太陽電池構造の実現可能性を考察する。

3. 実験方法および測定方法

3.1 原子状水素化処理

硫化モリブデン (MoS₂) 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。

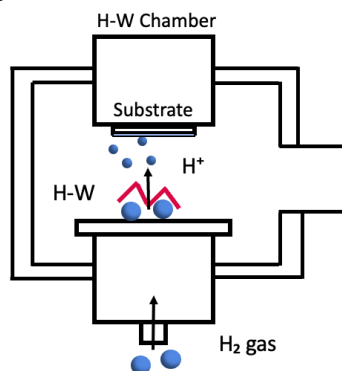


Fig.1 Atomic hydrogenation process

Table 1に水素化条件を示す。

Table 1 Hydrogenation conditions

Gas flow rate [sccm]	H ₂	5
Pressure [Pa]		10
Substrate distance [mm]		20
Substrate Temperature [°C]		26
Duration time [min]		30
Hot-Wire Temperature [°C]		800

3.2 作製のプロセス

まず、二硫化モリブデン (MoS₂) の n 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。

本研究の実験構成およびプロセスの概要を Fig.2 および Fig.3 に示す。ガラス基板上に Ti 電極を蒸着し、水素化処理を行い、吸着酸素などの不純物を除去して安定した n 型 MoS₂ 薄膜を得る。その後、成膜条件を調整し、p 型 MoS₂ 薄膜を作製する。最後に、ITZO を成膜して透明電極を形成し、デバイスを完成させる。

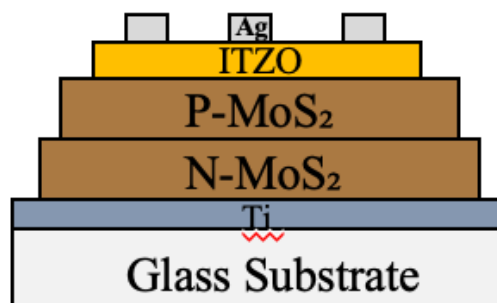
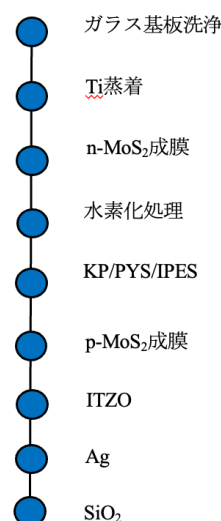
Fig.2 Structure diagram of a solar cell using MoS₂

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。

4. 実験結果および検討

4.1 PYS、KPおよびIPESの測定

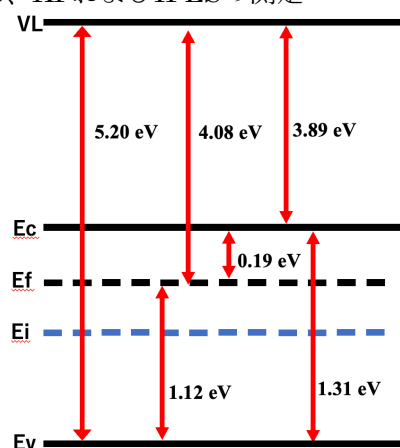


Fig. 4 Schematic Diagram for the band structure of MoS_2

Fig.4に示すように、 MoS_2 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。水素化処理を施すことにより、 MoS_2 薄膜の表面状態が改善され、フェルミ準位が導電帯端に近接していることが確認された。

この結果から、水素化処理によって安定したn型半導体特性を有する MoS_2 薄膜が得られたと考えられる。

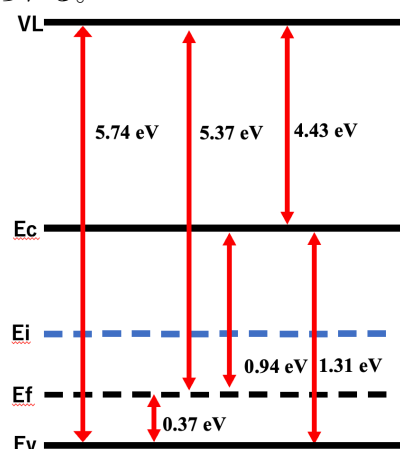


Fig.5 Schematic diagram of the band structure of hydrogenated MoS_2

成膜条件を調整して作製した MoS_2 薄膜の測定結果に基づき、エネルギーバンド構造を解析した (Fig. 5)。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。

4.2 バンド整合の評価

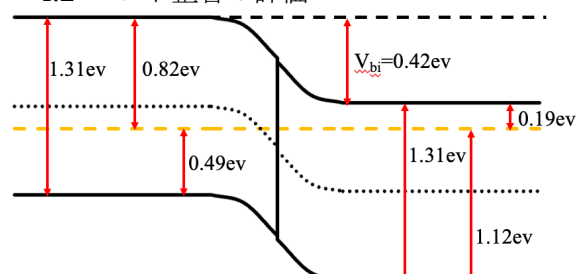


Fig.6 Band offset of MoS_2

Fig. 6に示すように、p- MoS_2 と n- MoS_2 の接合において、エネルギーバンドの整合が確認された。p 側ではフェルミ準位が価電子帯に近く、n 側では導電帯端に近接しているため、接合界面でバンドの曲がりが生じている。その結果、内部に 0.42 eV の内蔵電位 (V_{bi}) が形成され、電子と正孔の分離を促進する電界が発生することが分かった。このバンド構造から、p-および n-型 MoS_2 薄膜間で有効な PN 接合が形成されており、キャリア輸送が整流的に制御されることが示唆される。したがって、本接合は光電変換デバイスとして動作する可能性を有していると考えられる。

5. まとめ

本研究では、多結晶 MoS_2 薄膜におけるn型およびp型特性の形成条件を検討し、それぞれのエネルギーバンド構造をPYS、KPおよびIPES測定によって評価した。成膜条件を最適化することにより、n型およびp型の MoS_2 薄膜を安定的に作製できることが確認された。

そのバンド整合を解析した結果、約0.42 eVの内蔵電位 (V_{bi}) が確認された。さらに、IV特性において整流動作が観測され、キャリアの注入および遮断が方向依存的に制御されていることが明らかとなった。

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>