

CIGS 太陽電池材料結構與特性

1. CIGS 元件構造

CIGS 薄膜太陽電池具有層狀結構，其典型結構為：蘇打玻璃(Soda-lime glass, SLG)/Mo 薄膜電極/p 型吸收層 CIGS 薄膜/n 型緩衝層 CdS 薄膜/雙層結構的 ZnO 薄膜窗口層(i-ZnO/n-ZnO)/抗反射層 MgF_2 /Ni-Al 電極薄膜

[1]，如圖 1 所示。

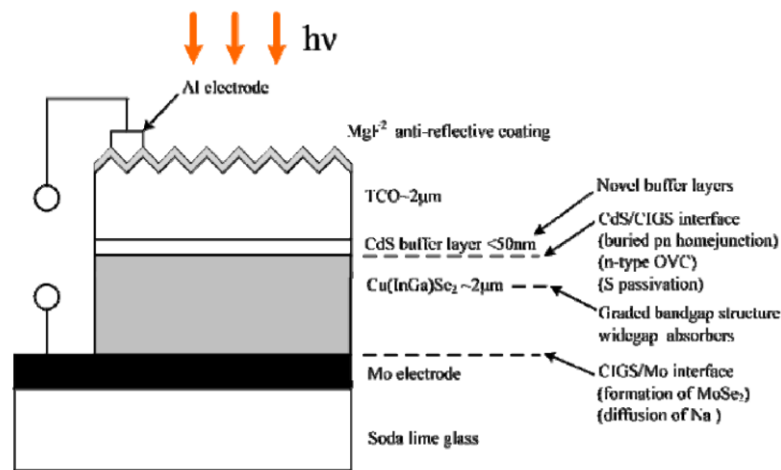


圖 1 CIGS 薄膜太陽電池結構示意圖[1]

2. CIGS 吸收層特性

I-III-VI₂ 的太陽電池薄膜的化學成分較佳的比值為 Cu : In : Se = 1 : 1 : 2 的成分組成，其銅對三族(Cu/III)最佳理想化學計量比值近於 0.93[26]。I-III-VI 族的 CIGS 薄膜太陽電池為黃銅礦(Chalcopyrite)晶體結構，而黃銅礦結構由閃鋅礦結構(Sphalerite)演變而來。閃鋅礦結構如圖 2 (a)所示，是以 II 族鋅和VI族硒原子組成的。黃銅礦結構如圖 2 (b)所示，I 族 Cu 和III族 In 元素取代II的 Zn 原子的位子，原本VI族的硒(Se)則維持不變，且黃銅礦立方晶格 c 軸方向單位長度大約為閃鋅礦結構的兩倍，故此結構實為兩個閃鋅礦結構所形成。在黃銅礦結構中每個銅原子都有四個鍵結連接到一個硒原子上，且每個鎳也有四個鍵結連接到一個硒原子上，所以表示每個 Se 原子有兩個鍵結到 Cu 和兩個鍵結到 In。由於黃銅礦結構中，有部分因不同原子半徑所造成的晶格畸變，因此，此結構之晶格比例 c/a 不等於 2，所以導致 I-VI (Cu-Se)原子和III-VI (InSe/Ga-Se)原子之間的鍵結強度也會不相同。

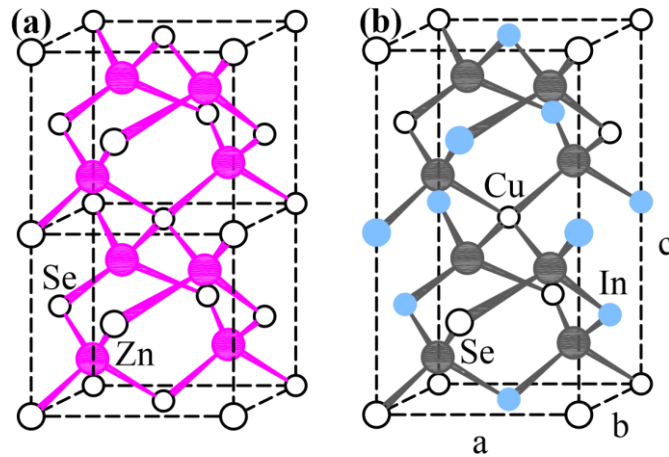


圖 2 (a)閃鋅礦結構 (b)黃銅礦結構[2]

由圖 3 所示， α - CuInSe_2 為黃銅礦結構屬於四方晶系(Tetragonal crystal system)，在室溫時，當 Cu 的化學成份比介於 24 至 24.5 at %，會有 $\text{CuInSe}_2(\alpha)$ 相存在，且當退火熱處理溫度達到 973K 時， CuInSe_2 薄膜的成分組成可容許約 5mol% 的變異誤差，這表示即便 CuInSe_2 薄膜成份組成偏離比值 $\text{Cu}:\text{In}:\text{Se}=1:1:2$ 的成份組成，只要在該組成區域範圍內，就能具有黃銅礦結構及其相同的物理和化學性質。然而 CuInSe_2 薄膜偏移化學組成時，處於富 Cu (Cu-rich) 的情況下，會得到混合的 α 和 Cu_2Se 的相。換句話說，當薄膜處於富 In (In-rich) 的情況下，會得到混合的 α 和有序缺陷化合物(Ordered defect compound, ODC)相存在。另外，在 $\text{Cu}_2\text{Se}-\text{In}_2\text{Se}_3$ 相圖中存在 β 與 γ 相分別是代表 $(\text{CuIn}_3\text{Se}_5)$ 、 $(\text{CuIn}_5\text{Se}_8)$ ，而 β 稱為有序空位化合物(Ordered vacancy compound, OVC)。

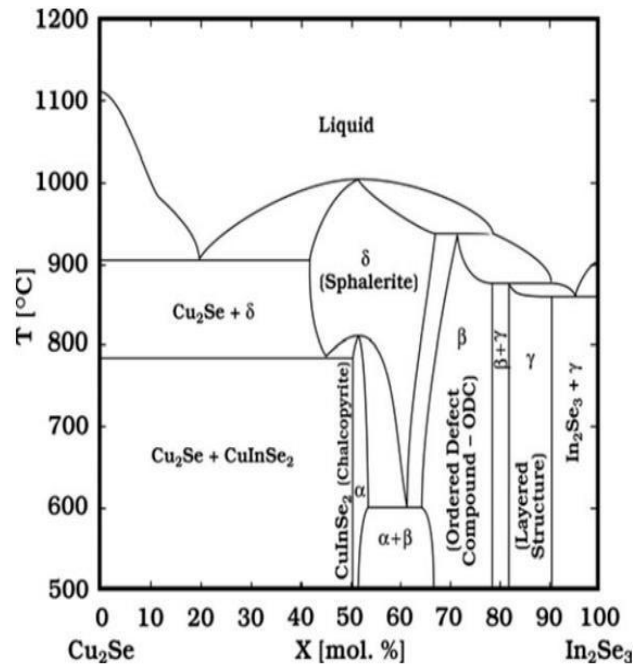


圖 3 $\text{Cu}_2\text{Se}-\text{In}_2\text{Se}_3$ 二元相圖[3]

由圖 4 所示，Cu 化學計量成份在 25 at % 時，CuInSe₂ 不會以單晶相的情況存在，且於室溫時，CuInSe₂ 單晶相的形成區間相當狹窄。另一方面，由圖中可以發現，隨著退火熱處理溫度提升，CuInSe₂ 單晶相的形成區間也隨之變寬，直到退火熱處理溫度超過 700°C(973K) 時，CuInSe₂ 單晶相的形成區間才又急速變窄。且 CuInSe₂ 單晶相的區間朝著富 In 方向寬化，Cu 化學計量成份在 22 至 24 at % 的區間，就能得到 CuInSe₂ 單晶相。

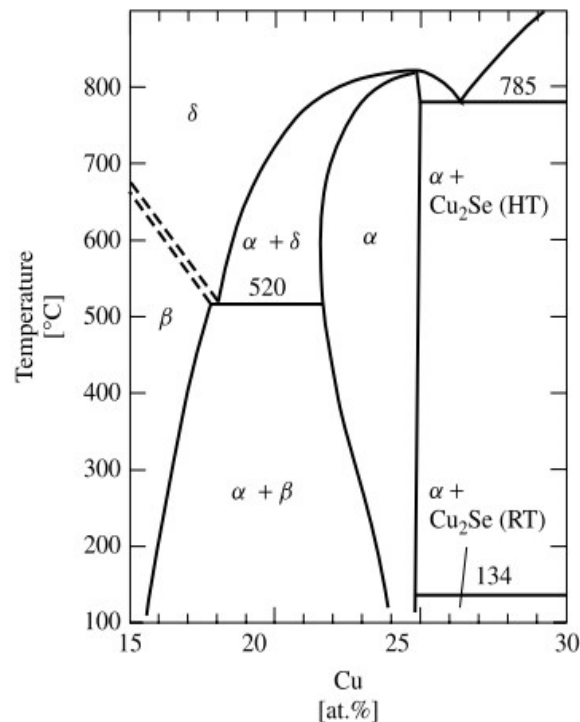


圖 4 CuInSe₂ 之相類似的二元相圖是延著藉由不同的熱處理溫度分析和結構相圖分析所建立的 In₂Se₃ 和 Cu₂Se 二元混合物曲線[4]

References

- [1] L. M. Mansfield, I. L. Repins, S. Glynn, M. D. Carducci, D. M. Honecker, J. W. Pankow, M. R. Young, C. DeHart, R. Sundaramoorthy, C. L. Beall, B. To, "Sodium-doped molybdenum targets for controllable sodium incorporation in CIGS solar cells" , Photovoltaic Specialists Conference (PVSC) 37th IEEE, 2011, pp. 3636-3641.
- [2] T. Markvart and L. Castaner, "Solar cells: materials and manufacture and operation" , Oxford, Elsevier Advanced Technology, 2005.
- [3] B. J. Stanbery, "Copper indium selenides and related materials for photovoltaic devices" , Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, 27, 2002, pp. 73-117.
- [4] M. Burgelman and A. Niemegeers, "Calculation of CIS and CdTe module efficiencies" , Solar Energy Materials and Solar Cells, 51, 1998, pp. 129-143.