

## 多元化合物の新規な物性と応用

世話人：脇田和樹(千葉工業大学), 米田 稔(岡山理科大学), 荒木秀明(長岡工業高等専門学校)

多元系機能材料は材料設計自由度の観点から、蛍光材料、熱電材料、磁性体、強誘電体、太陽電池材料など広範囲の分野で応用が検討されてきた。これらの材料から今回は「光機能材料」と「熱電材料」について最近注目されている多元化合物材料の新たに発見された物性やその原理、さらにはその応用について議論し、さらに多元系化合物であるからこそ出現する特徴的な物性についての理解を深め、多元系の特徴を生かしたデバイス開発の方向性が明確になることを目的として開催した。

前半には光機能材料である発光材料および太陽電池材料に関する招待講演 3 件と一般講演 1 件が行われた。静岡大学の原和彦先生より  $\text{BCl}_3$  と  $\text{NH}_3$  を原料とする CVD による六方晶 BN の薄膜成長についての講演があり、成長圧力を常圧から 20kPa に低下させることにより結晶性が向上し、励起子に起因するバンド端発光を観測したことが報告された。山形大学の北浦守先生からシンチレータ材料である  $\text{Cd}_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}:\text{Ce}$  結晶の伝導帯底部近傍の浅い電子トラップを調べるために自由電子レーザーからの中赤外光を用いトラップ準位の位置を明らかにし、この起源が  $\text{Gd}^{3+}$  イオンと酸素空格子からなる複合欠陥であることを提案した。また京都大学の野瀬嘉太郎先生から II-IV-V<sub>2</sub> 系化合物半導体である  $\text{ZnSnP}_2$  などの結晶成長、結晶構造および太陽電池への応用と今後の展開について紹介された。一般講演では  $\text{Zn}_{3(1-x)}\text{M}_{2x}\text{P}_2$  ( $\text{M} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}$ ) の存在を明らかにするとともに、その固溶限や結晶構造について報告した。

後半 1, 2 件目は熱電材料に関する招待講演であり、パナソニックの玉置洋正氏より、一次エネルギーの未利用熱を有効利用する熱電発電技術への開発に向けて、「多元欠陥化学による  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  系熱電変換材料の設計」について講演が行われた。密度汎関数(DFT)法に基づいて、十分なキャリア濃度がドーパされた n 型  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  の合成に成功し、さらに Bi を固溶した  $\text{Mg}_{3.2}\text{Sb}_{1.5}\text{Bi}_{0.49}\text{Te}_{0.01}$  という組成において高い熱電変換特性 ( $ZT = 1.5$ ) を実現したとのことであった。併せて、熱電変換材料の設計にて欠陥化学に基づく研究開発の重要性が紹介された。産業技術総合研究所の山本 淳氏に、講演「コンビナトリアル手法を用いた多元系熱電材料の最適化」をして戴いた。多元系熱電材料開発の鍵は、基本組成の周辺で熱電性能指数 Z を最大化するための組成最適化である。本講演では、高速評価を実現するためにサーマルプローブ法による局所的な熱物性評価法の開発、多元系の材料の解析のためのプログラムの開発について示された。さらに、多元系熱電材料における元素拡散試料の分析結果事例が紹介された。

後半 3 件目の講演からは、カルコゲナイド系多元化合物を用いた光触媒や太陽電池といった光吸収材料に関して招待講演 1 件、一般講演 5 件が行われた。甲南大学の池田茂先生より、化合物薄膜太陽電池における p 型半導体光吸収層材料の  $\text{CuInS}_2$  や  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  が、水の分解

反応における水素発生側の光電極として効果的に機能することについて、光触媒の基礎から最近の研究成果までの講演があった。また、関連した一般講演として類似化合物の  $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ ,  $\text{Cu}_2\text{ZnGeS}_4$ ,  $\text{Cu}_2\text{ZnGeSe}_4$  についてケステライト構造の安定性について活発な議論が交わされた。一方、CIGS 太陽電池に関連する材料に関して、蛍光 X 線ホログラフィーによる  $\text{CuIn}_3\text{Se}_5$  単結晶のカチオン原子像など印象深い講演や  $(\text{Cu,Ag})\text{InSe}_2$ ,  $(\text{Cu,Ag})\text{In}_5\text{Se}_8$ ,  $(\text{In,Ga})_2\text{Se}_3$  の結晶構造や光学的性質に関する基礎的な物性を詳細に調べた報告など今後のカルコゲナイド系材料の進展への寄与が期待される報告がなされた。

会場では常に 40 から 60 名の聴講者が興味ある講演によって入れ替わり、延べ 100 名を超え、各講演において活発な議論がなされ、多元系化合物研究者にとって有意義なシンポジウムであった。

= シンポジウムプログラム (敬称略, 登壇者のみ記載) ◆は招待講演, ◇は一般講演 =

- ◆六方晶 BN の薄膜成長とその深紫外発光評価 原和彦 (静岡大)
- ◆蛍光材料における結晶欠陥を赤外光で探る 北浦守 (山形大)
- ◆II-IV-V<sub>2</sub> 系化合物半導体の太陽電池への応用 野瀬嘉太郎 (京都大)
- ◇異原子価金属リン化合物間の固溶体  $\text{Zn}_{3(1-x)}\text{M}_{2x}\text{P}_2$  (M = Al, Ga, In) の固溶限, 結晶構造および発光 勝部涼司 (京大院工)
- ◆多元欠陥化学による  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  系熱電変換材料の設計 玉置洋正 (パナソニック)
- ◆コンビナトリアル手法を用いた多元系熱電材料の最適化 山本淳 (産技総合研)
- ◆多元系化合物半導体を用いた太陽光-水素エネルギー変換 池田茂 (甲南大)
- ◇第一原理計算によるアーバックエネルギーの解析:  $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$  および  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  の強い裾吸収 西脇光俊 (岐阜大工)
- ◇4 元カルコゲン化合物材料  $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$  の裾吸収における優位性 長屋圭祐 (岐阜大)
- ◇ $(\text{Cu, Ag})\text{InSe}_2$  と  $(\text{Cu, Ag})\text{In}_5\text{Se}_8$  系固溶体の結晶構造と光学的性質 石田智也 (龍谷大)
- ◇蛍光 X 線ホログラフィーを用いた  $\text{CuIn}_3\text{Se}_5$  単結晶の構造解析 白方祥 (愛媛大)
- ◇ $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$  太陽電池用の前駆物質  $(\text{In,Ga})_2\text{Se}_3$  の結晶構造と光学的性質 前田毅 (龍谷大)

