

「未来を拓く多元系化合物の様々な機能性と物性」

Functionality and physical properties of multi-compounds for the future

主 催：多元系化合物・化合物太陽電池 研究会

日 時：2024 年 3 月 22 日（金）13：30～16：45

会 場：東京都市大学 世田谷キャンパス（7 号館 1 F 71B&オンライン）

世話人：荒木秀明（長岡高専）、永岡 章（宮崎大学）、米田 稔（岡山理科大学）

本シンポジウムでは、多元系化合物の多様性や機能性を改めて紹介し、理解を深めて戴くために、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、さらにはその応用などについて議論した。当該分野で著名な 6 人の先生方に招待講演を依頼し、現地会場で約 60 名、オンラインで約 20 名が参加され、質疑応答を現地およびオンラインのハイブリッドで行い、シンポジウムを盛況の内に終えることができた。

シンポジウムに先立って、杉山 睦 研究会委員長（東京理科大）より、今回の本シンポジウムを企画した経緯を説明し、また、本研究会が化合物太陽電池、多元化合物に関する知識および技術の向上・発展に寄与し、更に、会員相互の連絡支援を目的としていることを紹介し、本研究会への入会をシンポジウムの参加者に呼びかけた。

はじめに、沈 用球 先生（大阪公立大学）より、「3 元タリウム化合物の光学特性と新奇光誘起変形材料としての展開」と題してご講演を戴いた。Tl(タリウム)、金属元素(Me)と 6 族元素(X)から構成される 3 元タリウム化合物(TlMeX₂)が、Me や X の組み合わせで様々な物性を発現し、光照射による局所的な変形(光誘起変形現象)を使った光奇光駆動機構(マイクロロボット他)に注目が集まっているとのこと。TlInS₂ における光照射による表面形状プロファイルのポンプ光パワー依存性から、ポンプ光スポット領域で凸状に膨張変形や光の有無に応答する可逆的な変形を引き起こし、シミュレーション解析等から光吸収による光熱変換に伴う熱発生と熱膨張が主な原因であることが報告された。

2 番目の講演として、田中久仁彦 先生（長岡技科大）から「光学特性の観測による銅硫化物系太陽電池光吸収材料の評価」について講演を戴いた。フォトルミネッセンス(PL)法による光学特性評価(発光スペクトルの励起光強度依存性他)から欠陥の諸特性を解明できること、また、CL 法や EL 法に比較して非接触で評価できる PL 法の長所が紹介された。その後、太陽電池吸収材料(Cu₂SnS₃(CTS)、Cu₂Sn_{1-x}Ge_xS₃(CTGS)) 薄膜の PL 評価から、硫化処理温度と PL 発光スペクトルの相関を明らかにした。また、太陽電池デバイスの PL 評価のとき、窓層の物性に配慮した励起光を利用することで、光吸収層を選択的に PL 評価できることを紹介され、CTGS における Ge に関わるエネルギー準位、Ge 濃度の相関等について報告された。

応用物理学会春季学術講演会シンポジウム
未来を拓く多元系化合物の様々な機能性と物性
2024年3月22日(金) 13:30～16:45 東京都市大学(7号館)

杉山 睦 (東京理科大)
開会の言葉



沈用球 (大阪公立大)
3元タリウム化合物の光学特性と新奇光誘起変形材料としての展開



田中久仁彦 (長岡技科大)
光学特性観測による銅硫化物系太陽電池光吸収材料の評価



杉本 広紀 (PXP)
カルコバイライト化合物を用いたフレキシブル太陽電池の開発



江部 日南子 (山形大)
ハロゲン化鉛ペロブスカイト量子ドットの高効率発光デバイスへの応用



佐藤 直大 (NIMS)
多元系化合物の特異な熱輸送と熱電特性



宮田 全廣 (JAIST)
実験と第一原理電子・フォノン計算による新奇硫化物・リン化合物電材料のマテリアルデザイン



講演者の皆さん

(イラスト 佐藤勝昭 先生 (東京農工大学名誉教授))

3番目に、杉本 広紀 氏(株 PXP)より、「カルコパイライト化合物を用いたフレキシブル太陽電池の開発」と題して、PXP社の立ち上げ期から現在のパイロットラインの立ち上げが始まっていることのご紹介から、フレキシブル化が可能なペロブスカイト太陽電池とのタンデムの組み合わせを想定したより高い変換効率の実現を目指したボトムセルの開発についてご報告を戴いた。特に、カルコパイライト材料を用いたフレキシブル太陽電池の最近の研究成果について報告がなされ、 H_2Se を用いない製造方法やモジュール化のためのセル同士の接続方法、スパッタを用いたバッファ層などの新たな技術を開発した旨の報告があり、活発な議論が行われた。

休憩を挟んで、4番目のご講演としてオンラインにて、江部 日南子 先生(山形大理)より、「ハロゲン化鉛ペロブスカイト量子ドットの合成と発光デバイスへの応用」と題して、優れた発光量子収率と色純度、電荷輸送特性により、次世代のLED材料として期待されているハロゲン化鉛ペロブスカイト量子ドット(QD, $CsPbX_3$, $X = Cl, I, Br$)の魅力とQDの作製法について紹介して戴いた。特にCsカチオンのイオンサイズが小さく、結晶格子の歪みにより相安定性が低いことが課題となってきた赤色発光 $CsPbI_3$ について、粒径制御(ここでは小粒径化)することで相安定化を実現すると共に、 $CsPbI_3$ QDに対し酢酸メチルに溶解したヨウ化グアニジウム表面処理を行うことで、高効率かつ長寿命な赤色発光 $CsPbI_3$ QD-LEDの開発に成功したことが報告された。

5番目のご講演として佐藤 直大 氏(NIMS)より、「多元系化合物の特異な熱輸送と熱電特性」と題して、多元系材料の利点を活かした熱伝導率制御について、計算科学を通じたフェルミ準位近傍の電子構造や非調和性の強い局在化したフォノンモードといった材料設計方法や複合アニオン化合物の歪んだ局所構造が熱輸送に与える特異的な効果の研究成果についてご紹介を戴いた。特に、高い熱電変換のために必要な、低い熱伝導率の制御に関して、局所構造の観点から活発な議論が行われた。

シンポジウムの最後の講演として、宮田 全展 先生(JAIST)より、「実験と第一原理電子・フォノン計算による新奇硫化物・リン化合物熱電材料のマテリアルデザイン」と題して、実験と第一原理計算の協奏性による熱電材料開発についてご講演を戴いた。高速・高精度な電子輸送計算を実現した第一原理計算コードOpenMXと電子輸送計算コードBoltzTraPをつなぐインターフェースプログラムの開発や計算結果から予測したリン化合物の実験結果についてご紹介して戴いた。特に、軽元素であるリンを含みながら低い熱伝導率を持つAg-P系化合物について、その合成方法や熱輸送メカニズムに関して、活発な議論が行われた。

最後に、本シンポジウムにおいて様々な話題を提供してくださった講演者ならびに活発な議論に参加していただいた聴講者の方々に感謝の意を申し上げます。



シンポジウム会場の様子 (東京都市大学7号館1F71B)