

第 81 回応用物理学会秋季講演会 に参加して

青 柳 風 香

Fuuka AOYAGI

物質化学専攻修士課程 2020 年度修了

1. はじめに

私は、2020 年 9 月 8 日から 11 日にオンライン上で開催された第 81 回応用物理学会秋季講演会に参加し、「第一原理計算による $\text{Ag}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 中での原子拡散の評価」という題目で講演を行った。今回参加した応用物理学会では、毎年、春と秋に学術講演会を開催している。春季は約 7,000 名、秋季は約 6,000 名が参加し、特に今回はオンライン開催となり、参加登録者数が 8000 人を超えた。今回は秋季学術講演会に参加し、私の講演に関して多数の研究者に興味を持ってもらう事ができ、数多くの議論をする事が出来た。

2. 研究概要

2.1 序論

最近 $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ (CIGSe) の Cu の一部を Ag に置き換えた $(\text{Cu}, \text{Ag})(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 太陽電池で 20% を超える変換効率が報告されている。Shafarman らは $(\text{Cu}, \text{Ag})(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 膜では、Ag が膜に均一に分布し、粒径が拡大すると報告している^[1]。私たちは、以前に、第一原理計算を用いて CuInSe_2 ^[2] および CuGaSe_2 ^[3] 中の原子拡散について報告した。また、最近、 $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ および $(\text{Cu}, \text{Ag})\text{InSe}_2$ 中の原子拡散についても評価した^[4]。本研究では、第一原理計算を用いて $\text{Ag}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 中の構成元素の原子移動の活性化エネルギーと拡散経路を評価し、 $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 系および $(\text{Cu}, \text{Ag})\text{InSe}_2$ 系と比較した。

2.2 実験方法

第一原理計算には、密度汎関数理論に基づく数値局在基底擬ポテンシャル法（計算コード：DMol3）を用いた。LST/QST（Linear and Quadratic Synchronous Transit）法と NEB（Nudged elastic band）法を用いて、 $\text{Ag}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 中の各原子の近接する Ag 空孔への移動の活性化エネルギー（ DE_m ）を算出した。

2.3 結果

図 1 (a) に $\text{Ag}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 系中の Ag, In, Ga 原子が近接する Ag 空孔 (V_{Cu}) に移動するときの DE_m を示す。比較のために、図 2 (b) に $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 系中の Cu, In, Ga 原子が近接する Cu 空孔 (V_{Cu}) に移動するときの DE_m を示す。 $\text{Ag}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 系中の原子拡散の DE_m は、いずれの $\text{Ga}/(\text{Ga} + \text{In})$ 比においても、 $\text{Ag} \rightarrow V_{\text{Ag}}$ が一番小さく、 $\text{In} \rightarrow V_{\text{Ag}}$, $\text{Ga} \rightarrow V_{\text{Ag}}$ の順に大きくなった。またいずれの元素の拡散においても、拡散経路中で最も DE_m が高くなる位置は八面体サイト近傍であることが分かった。 $\text{Ag}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 中の $\text{Ag} \rightarrow V_{\text{Ag}}$ の DE_m は、いずれの $\text{Ga}/(\text{Ga} + \text{In})$ 比においても $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 中の $\text{Cu} \rightarrow V_{\text{Cu}}$ の DE_m と比較して小さく、 $(\text{Cu}, \text{Ag})\text{InSe}_2$ 中の $\text{Ag} \rightarrow V_{\text{Cu}}$ の DE_m は、いずれの $\text{Ag}/(\text{Ag} + \text{Cu})$ 比においても $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ 中の $\text{Cu} \rightarrow V_{\text{Cu}}$ の DE_m よりも小さかった^[4]。これらのことは Ag を含む CIGSe 中では Ag は拡散しやすく、Shafarman らが報告したように Ag が膜に均一に分布し、薄膜の結晶粒成長に寄与することを裏付けている。

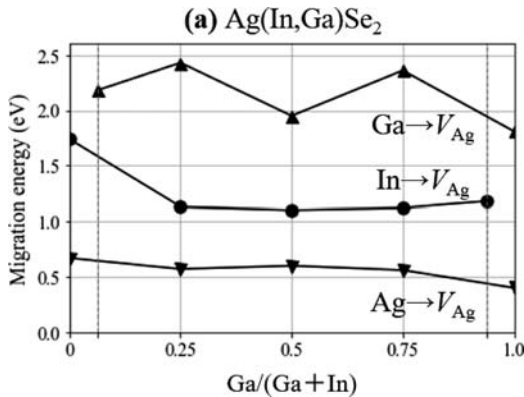


図1 Ag(In, Ga)Se₂中の原子移動の活性化エネルギー

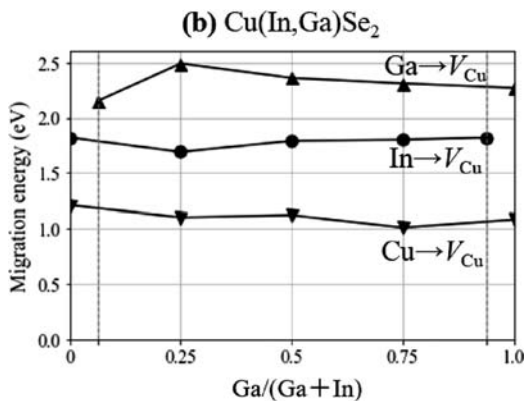


図2 Cu(In, Ga)Se₂中の原子移動活性化エネルギー

3. 発表について

今回は私にとって初めての学会で口頭講演発表ということもあり、自分の発表内容を理解してもらえるかどうか、上手く伝えられるかどうかなど不安を抱えていた。しかし、練習を重ねることでその不安を乗り越え、発表することが出来た。また、今回のような大きな規模の学会に参加して感じたことは、

今までに知らなかった研究分野と出会うことができ、知識の幅を広げることができたということである。今までは研究室の中でしか議論をしたことがなく、狭い世界に閉じこもって研究を行っていたが、他大学の先生と研究に関する討論をすることで、今後の研究での非常に参考になる意見を得られたり、異なる分野の専門家からの意見を得ることが出来たりしたので、研究に対する様々な取り組みや考えを知ることができて非常に刺激を受けた。

4. おわりに

今回コロナウイルスの影響もあり、直前まで開催出来るかどうか不安であった。実際、春季学術講演会は口頭発表が中止になる事態になっていた。そういった環境の中、今回無事発表を終えることができ、本当に良かったと感じている。今回のような学会への参加は、私にとって非常に良い経験になった。学生のうちに研究者の一員としてこのような発表をさせていただいたことは今後社会に出ていくうえで大きなプラスとなると思う。最後に、このような貴重な機会を与えて下さり、かつ丁寧にご指導いただいた和田隆博教授や研究室の皆様方に深く感謝したいと思う。

参考文献

- [1] N. Valdes, J. Lee, and W. Shafarman, *Solar Energy Materials and Solar Cells* 195 (2019) 155-159.
- [2] S. Nakamura, T. Maeda, and T. Wada, *Jpn. J. Appl. Phys.* 52, 04 CR 01 (2013).
- [3] S. Nakamura, T. Maeda, and T. Wada, *Phys. Status Solidi A* 210, 1317 (2013).
- [4] 青柳風香・前田 毅・和田隆博, 2020年第67回応用物理学会春季学術講演会, 13 a-A 202-2.