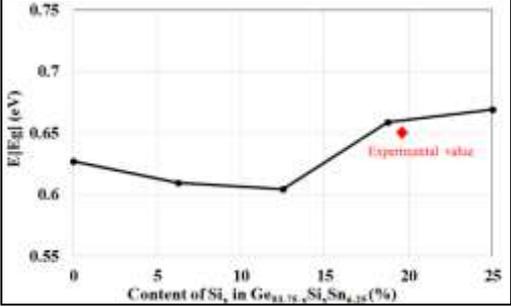


報告者	学科名	情報通信工学科	職名	教授	氏名	末岡 浩治
研究課題	新しい材料計算“箱庭法”の開発と太陽電池用半導体への適用					
研究組織	氏名	所属・職	専門分野	役割分担		
	代表	末岡 浩治	情報工学部情報通信工学科・教授	応用物理学	研究全般・箱庭法の開発	
	分担者	中塚 理	名古屋大学大学院工学研究科・教授	半導体工学	箱庭法の検証を目的とした実験（バンドギャップ）	
		泉妻 宏治	グローバルウェーブ・ジャパン社・部長	材料工学	箱庭法の検証を目的とした実験（原子配置）	
研究実績の概要	<p>1. 研究背景と目的</p> <p>本研究の目的は、半導体材料の物性を予測する新しい計算手法を開発することである。具体的には、第一原理計算の結果を熱統計力学的に扱うことにより、原子配置の実現確率と材料物性値を算出する手法を開発する。さらに、本手法をIV族混晶系太陽電池用半導体に適用し、SiSnC系とGeSnC系のバンドギャップを予測することを試みる。なお、この新しい計算手法を“箱庭法”と命名する。このような計算手法は前例がなく、学術的にも価値が高い成果が得られると考える。また、研究成果は産業界において、結晶の品質改善や製品の開発加速に寄与する意義を持つ。</p> <p>2. 研究成果の概要</p> <p>箱庭法を開発し、それを太陽電池の変換効率予測システムに組み込んだ。この全体像を図1に示す。IV族混晶半導体における添加元素（CやSn）の組成を与えれば、自動的にバンドギャップと変換効率を算出できるシステムとなっている。</p>					
	<p>太陽電池の変換効率予測システム開発の試み</p> <p>箱庭法(末岡研オリジナル) → 変換効率計算</p> <p>Si, Ge半導体中のC, Sn ⇒ 実現する原子配置</p> <p>バンド構造 ⇒ 光変換効率</p> <p>可能な原子配置をすべて考慮し、エネルギー計算の結果を統計力学で処理。</p> <p>実現する原子配置 ⇒ エネルギーバンド構造</p> <p>上で決めた原子配置についてバンドギャップ等を計算し、その期待値を算出。</p> <p>計算例: GeSiSn系のバンドギャップの期待値。</p> <p>(例) III-V族太陽電池のI-V特性</p>					

図1 太陽電池の変換効率予測システムの全体像と箱庭法の位置づけ

<p>研究実績 の概要</p>	<p>図 2 に GeSiSn 混晶系のバンドギャップ E_g の計算値 (実線) と実験値 (赤) を示す。実験は名古屋大学で行われたものである。現時点で実験値は1つしか得られていないが、計算と実験は望ましい一致を示している。さらに、Si や Ge 薄膜成長において添加原子が固溶度より数桁高い非平衡状態で取り込まれる機構の解明にも成功した。</p>  <p>図 2 GeSiSn 系のバンドギャップの計算値</p> <p>3. 研究成果および外部資金の取得状況</p> <p>本成果を学術誌 (ECS JSSST および日本機械学会論文集) に投稿し、採択された。また、本成果を含む内容について米国電気化学会 (ECS) から招待講演 (2018 年 10 月, メキシコ) の依頼を受けた。なお、本研究は現在実施中の科研費基盤研究 (H28-H30) と密接に関係しており、適用対象をパワーデバイスへ拡張することで、科研費の継続獲得を目指す。</p> <p>4. 今後の計画</p> <p>箱庭法は、原理的にあらゆる材料開発に適用可能である。現時点では、SiC や GaN などパワーデバイス用半導体の高品位化へ適用する計画である。</p>
<p>成果資料目録</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1) K. Toyosaki and K. Sueoka, "Density Functional Theory Calculations of Atomic Configurations and Bandgaps of C-, Ge-, and Sn-Doped Si Crystals for Solar Cells", ECS Journal of Solid State Science and Technology 6, (2017) P326. 2) S. Yamaoka, K. Kobayashi, and K. Sueoka, "Density Functional Theory Study of the Stress Impact on Formation Enthalpy of Intrinsic Point Defect around Dopant Atom in Ge Crystal", ECS Journal of Solid State Science and Technology 6 (2017) P383. 3) 只野快, 末岡浩治, "単結晶 Ge 薄膜の表面極近傍における C, Sn 原子の安定配置に関する第一原理解析", 日本機械学会論文集, 掲載決定.