

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	太陽光エネルギー変換応用を目的とした3元系亜鉛窒化物半導体の理論的研究
Title(English)	Theoretical Study of Ternary Zinc Nitride Semiconductors for Solar Energy Conversion
著者(和文)	菊地 諒介
Author(English)	Ryosuke Kikuchi
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第12094号, 授与年月日:2021年9月24日, 学位の種別:課程博士, 審査員:神谷 利夫,大場 史康,平松 秀典,熊谷 悠,山本 隆文
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第12094号, Conferred date:2021/9/24, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	要約
Type(English)	Outline

研究論文の概要

論文題目

“Theoretical Study of Ternary Zinc Nitride Semiconductors for Solar Energy Conversion”

太陽光エネルギー変換応用を目的とした 3 元系亜鉛窒化物半導体の理論的研究

再生可能エネルギー活用への要求が高まる中、太陽電池はキーデバイスとなっている。太陽電池材料研究の歴史は長く、変換効率が 20%を超える材料がいくつか生まれている。近年コストの観点から、直接遷移型の半導体による薄膜形成、低コストのプロセス、高効率を兼ね備えた光電変換材料が求められている。ここ 10 年で研究開発が急速に進むハロゲン化鉛ペロブスカイト材料では、塗布法という簡易な手法で 25%を超える高効率を実現できている。このため、点欠陥がデバイス特性に影響を及ぼしにくい、defect-tolerant な特性を有する半導体といわれている。この特性の起源として、鉛の s 軌道とハロゲンの p 軌道による反結合性軌道が価電子帯上端付近に寄与することで、ハロゲンのダングリングボンド準位が価電子帯内部に位置することが主張されている。しかしながら、直接遷移型の光電変換材料は、依然として貴金属、あるいは毒性元素が含まれているのが実情である。そこで、Zn-3d 軌道の寄与により defect-tolerant な既報材料と同様の電子構造を形成する可能性があり、地球上に豊富な元素で構成し得る 3 元系亜鉛窒化物に着目した。本研究では、第一原理計算を用い、最安定の結晶構造、電子物性、点欠陥の特性の予測を実施した。その結果、 SrZn_2N_2 が既報材料である CaZn_2N_2 と同様の anti- La_2O_3 型の結晶構造が最安定、かつ競合相に対して安定であり、単接合型太陽電池に適したバンドギャップ (1.59 eV) を有することを予測した。さらに、 YZn_3N_3 はこれまで 3 元系窒化物では例がない ScAl_3C_3 型の結晶構造が最安定でありながら、競合相に対し安定であり、2 接合型太陽電池のトップセルに適したバンドギャップ (1.80 eV) を有することを予測した。それに加え、 SrZn_2N_2 と YZn_3N_3 がそれぞれ直接遷移型のバンド構造に由来する高い吸収係数と小さな有効質量を有することを明らかにした。また、点欠陥の形成エネルギーの計算により、カチオン空孔に由来するアクセプタ準位が価電子帯内部、あるいは価電子帯上端付近の浅い位置に形成することを明らかにした。このような電子構造とそれに由来する点欠陥の特性は、太陽電池の活性層として非常に有用な特性である。