

## 相平衡に基づく化合物太陽電池の研究ーリン化合物を例に

### Study on compound solar cells based on phase equilibria – phosphides as an example

京都大学 ○野瀬 嘉太郎, 勝部涼司

Kyoto Univ. ○Yoshitaro Nose, Ryoji Katsube

E-mail: nose.yoshitaro.5e@kyoto-u.ac.jp

現在, 太陽電池の光吸収層材料としては, 2 元系から 5 元系の多元系化合物が研究されている。取り扱う元素が多くなればなるほど, 多様な安定相が存在し, 目的の化合物を得るためのプロセス条件を詳細に検討する必要がある。また, 得られた化合物の物性は言うまでもなく, プロセス条件に依存する。このような背景の中で, 目的の化合物・物性を得るためにどのようにプロセスを構築していくか? は材料科学として興味深いテーマである。

多元系において化合物相が多数存在する場合, 反応プロセスを考察するには膨大な数の化学反応を考えなければならない。しかし, 全ての反応を考慮して議論することは思考経済上のコストパフォーマンスが非常に悪い。そこで, 多元系における反応過程を俯瞰するために, 系の相平衡関係が用いられる。化合物半導体を得るためのプロセスとして, 融液成長に代表される平衡論的なプロセスと気相成長などの非平衡プロセスに大別されるが, 平衡論のプロセスにおいては言うまでもなく, 非平衡プロセスにおいてもまずは考慮している系の相平衡を正しく把握することは重要である。

系の安定相を示したものとして, 相図 (平衡状態図) がある。2 元系の場合は縦軸に温度, 横軸に組成をとった平面に, 3 元系の場合は, 縦軸に温度をとった正三角柱中に相平衡関係を表すことができる。さらに 4 元系の場合は, ある温度の相平衡関係を正四面体中に表すことができる。これらを用いれば, 液相から固相を得るための条件や, CIGS の三段階法における相変化などを議論することができる。一方で通常の相図では, 基本的に液相や固相などの凝縮相のみを取り扱うことが多く, 大気圧下での議論がほとんどである。半導体の成膜プロセスでは気相を用いることが多く, 通常の相図を用いて議論することが難しい場合もある。そこで, 軸として化学ポテンシャルをとった化学ポテンシャル図が有用となる。気相における化学ポテンシャルはその分圧と一対一に関係づけられるため, 化学ポテンシャル図はそれぞれの気相化学種の分圧を軸にとった相図とも言える。これを用いることで, 単膜の成膜条件のみならず, ヘテロ界面の安定性なども議論することができる。

本講演では, 主にこれまで我々が行ってきたリン化合物半導体とその太陽電池に関連する研究について, 相図や化学ポテンシャル図を用いた例を紹介するとともに, これからの研究発展について議論する。