

# 太陽電池用材料の高品質化に向けた結晶成長学的アプローチ

研究代表者名

東北大学・金属材料研究所・中嶋 一雄

研究分担者名

京都大学・エネルギー理工学研究所 吉川 暹、東北大学・電気通信研究所・庭野 道夫  
豊田工業大学・大下 祥雄、東京工業大学・量子ナノエレクトロニクス研究センター・山田 明  
東京大学・先端科学技術研究センター・岡田 至崇、東北大学・金属材料研究所・宇佐美 徳隆  
北陸先端科学技術大学院大学・大平 圭介

## 1. はじめに

太陽電池産業は、地球規模で深刻な問題となっているエネルギー・環境問題を背景に、結晶シリコン太陽電池を中心として急速に成長しているが、再生可能な代替エネルギー源としての地位確立にあたっては、現状の発電コストを半減することにより、一般社会に広く普及させなくてはならない。そのためには、多様な材料で研究開発が行われている太陽電池のエネルギー変換効率向上の実現が不可欠である。

太陽電池の変換効率改善にあたっては、光の有効利用や、キャリア再結合抑制のためのパッシベーション技術などデバイスの観点からの研究は、数多くなされているが、本質的な解決策は、太陽電池用材料の高品質化であり、結晶成長学的なアプローチが必要である。例えば、太陽電池の主要材料であるシリコンバルク多結晶の高品質化にあたっては、結晶成長の動的過程の下でバルク多結晶の結晶組織や欠陥がどのように形成され、どのようにすれば制御できるか、といった学術的な研究課題の解決が必要である。このような背景のもと、本所では、平成 16・17 年度の二度にわたり、「結晶シリコン太陽電池の高効率化における材料学的アプローチ」を開催し、材料科学の観点から高効率化への課題を議論した。この試みは、多くの太陽電池の会議がテクノロジーに偏りがちな中で、材料科学に特化したユニークな切り口の会議として国際ワークショップへと発展している。

今回のワークショップは、このコンセプトを多様な太陽電池用材料に対して拡張し、結晶成長を中心とする材料科学の観点から、材料の高品質化を目指すという共通認識のもとで、話題を提供しあい、現状の課題を抽出するとともに、その解決策を討議することとした。

この討議により、太陽電池用材料の結晶成長技術の向上のほか、実用化に要請される材料特性や、将来の研究開発の指針に関する情報や知識を得ることが出来る。特に、太陽電池に特化して研究を行っている研究者と、結晶成長の基礎研究に従事する研究者が、相互に話題を提供し討議することにより、新たな研究分野の発現や、太陽電池・結晶成長分野の発展が期待できる。このことは、社会の持続的発展の礎となるものである。

## 2. 研究経過

ワークショップは、5月22日-24日の3日間にわたり、東北大学金属材料研究所2号館講堂・会議室において開催した。プログラムの中で口頭講演の内容を下記に示す。口頭講演に加えて、若手研究者を中心とした21件のポスター講演も開催した。プログラムは、結晶シリコンだけでなく、薄膜シリコン、カルコパイライト化合物、シリサイド、有機材料など、多様な材料系にわたる。また、共通基盤技術としての評価技術についても議論した。

### 結晶シリコン

「高品質シリコンバルク多結晶の成長とデンドライト結晶の成長メカニズム」中嶋 一雄（東北大学）

「Q-Cellsの研究開発ロードマップ」Michael Bauer（Q-Cells）

「低コスト太陽電池用原料の冶金学的製法」Cao Chen（Xiamen University）

「多結晶シリコン中の亜粒界の総合的研究」沓掛 健太郎（東北大学）

「Si-Al 溶液からの一方向成長を利用したシリコンの精製」吉川 健（大阪大学）

「金属シリコンの電気化学的精製」Geir Martin Haarberg（SINTEF）

「多結晶シリコンの成長における坩堝品質の影響」Lars Arnberg（NTNU）

「多結晶シリコンの成長における酸素混入の熱力学的解析」松尾 整（九州大学）

「カーブロスからのシリコンのリサイクル」C.W. Lan（台湾大学）

### 薄膜シリコン

- 「微結晶シリコンの相転移における成長メカニズム」 Ruud Schropp (Utrecht Univ)
- 「ハイブリッド薄膜シリコン太陽電池の性能改善」 中島 明彦 (カネカ)
- 「フラッシュランプ加熱による微結晶シリコン成長のメカニズム」 大平 圭介 (JAIST)
- 「アモルファスシリコンの微結晶化プロセス」 T. H. Lee
- 「融液からのシリコン薄膜のエピタキシャル成長」 王 増梅 (大阪大学)

### 化合物半導体

- 「CIGS 太陽電池における共蒸着プロセス」 仁木 栄 (産総研)
- 「CIGS 太陽電池における熱処理の影響」 峯元 高志 (立命館大学)
- 「新規三元カルコパイライト」 Tomm Yvonne
- 「バリウムシリサイドのエピタキシャル成長」 末益 崇 (筑波大学)

### 有機材料

- 「色素増感太陽電池の成長プロセス」 早瀬 修二 (九州工業大)
- 「色素増感太陽電池用酸化チタンナノロッドの簡便な作製手法」 C. Patcharee (京都大学)
- 「チタンの陽極酸化によるナノチューブ形成」 木村 康男 (東北大学)

### 結晶評価技術

- 「ケルビンフォース顕微鏡による拡散長とライフタイムの評価」 瀧原 雅樹 (東京大学)
- 「EL イメージングによるシャント抵抗の評価」 宇佐美 徳隆 (東北大学)
- 「結晶シリコン中遷移金属不純物の不均一分布」 新船 幸二 (兵庫県立大学)
- 「光弾性効果を利用した結晶中の歪みの評価」 深沢 雅之 (京都工芸繊維大学)
- 「結晶成長における不純物の補償効果」 ダムリンマルワン (東京農工大学)
- 「EBIC による粒界面の電気特性評価」 Bin Chen (NIMS)



図 1 ワークショップの様子

表 1 に参加者の内訳を示す。特徴としては、民間企業からの参加者が多い点であり、太陽電池産業界からも、材料学的アプローチという視点が注目を集めていることを示している。

| 参加者内訳       | 人数    |
|-------------|-------|
| 国立大学法人      | 68 名  |
| 公立大学        | 1 名   |
| 私立大学        | 6 名   |
| 独立行政法人      | 4 名   |
| 特殊法人 (NEDO) | 4 名   |
| 民間企業        | 24 名  |
| 合計          | 107 名 |

表 1 参加者の内訳

### 3. 研究成果

5月22日・24日の3日間にわたり、太陽電池の高効率化に向けた太陽電池材料の高品質化に関するワークショップを行い、各種太陽電池材料の最新トピックを提供し合うことで、現状の課題を共有し、さらにその解決策を討議した。特に、結晶成長や結晶評価、太陽電池デバイスなど異なる専門分野からの国内外の研究者が議論を交わすことで、多角的な検討を行うことができた。以下に、当日発表のあったトピック中心に研究成果を抜粋して示す。

東北大学の中嶋からは、基調講演として、「高品質シリコンバルク多結晶の成長とデンドライト結晶の成長メカニズム」と題して、多結晶シリコン太陽電池の結晶学的な課題と東北大学が進めているデンドライト結晶を利用した高品質シリコンバルク多結晶の成長に関する講演があった。デンドライト結晶とは、一般には樹枝状結晶のことであるが、シリコン中のデンドライト結晶は、2本の双晶を中央に含み、特定の方位に急速に成長することを特徴としている。講演では、その場観察装置を用いてデンドライト結晶が成長する様子をクリアに観察した結果が紹介され、さらに結晶成長の学術的な観点からマイクロなスケールでのデンドライト結晶の成長メカニズムが解説された。

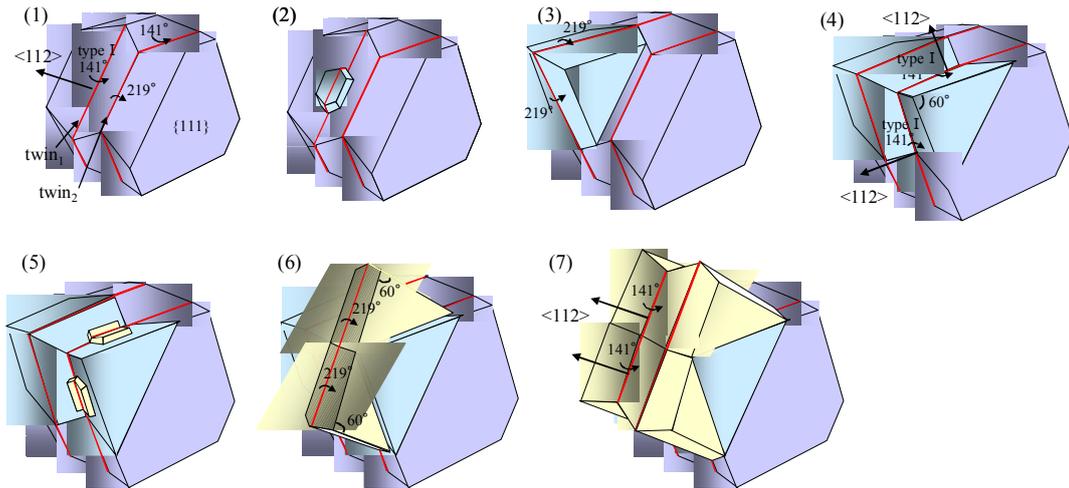


図2 デンドライトの成長メカニズム

次に、このデンドライト結晶を太陽電池用のシリコンバルク多結晶インゴットの成長に応用したものとして、デンドライト利用キャスト成長法が紹介された。この方法は、デンドライト結晶が急速にかつ特定の方位に成長することを利用し、坩堝底面に形成したデンドライト結晶をテンプレートとして、インゴット全体に粗大かつ方位の揃った結晶粒組織を得ることを特徴としている。このデンドライト結晶を利用したシリコンバルク多結晶において、高い太陽電池変換効率(10cm角)を記録したことが示された。また、インゴットの上部や下部での効率低下が見られず、高均質な結晶であることも強調された。さらに、デンドライト結晶を利用したシリコンバルク多結晶が高品質になる理由が、結晶組織の解析と欠陥評価を元に、亜粒界とその発生源となるランダム粒界に着目して議論された。

Conversion efficiency of solar cells with the same grain orientation

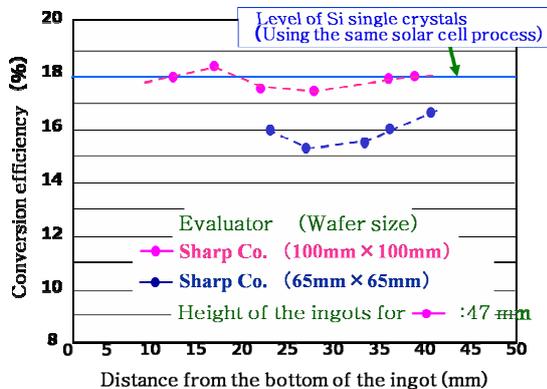


図3 高品質シリコンバルク多結晶を用いた太陽電池の変換効率

Photoluminescence (PL) images

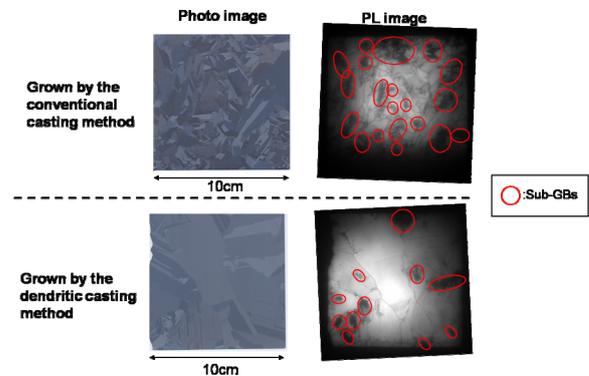


図4 従来法およびデンドライト利用キャスト法によって成長したSiバルク多結晶の組織と欠陥分布

東北大学の沓掛からは、「多結晶シリコン中の亜粒界の総合的研究」と題し、シリコンバルク多結晶中の亜粒界に関する、解析手法、分布、電気的特性、発生メカニズムの総合研究が報告された。転位や転位が集合した欠陥である亜粒界は、太陽電池特性に重大な影響を与える欠陥として問題視されている。本研究ではまず、亜粒界を結晶学的に検出する方法としてX線回折法を用いることを提案した。従来から用いられているSEM-EBSF法では、結晶方位解析の角度分解能が約 $1^\circ$ であるため、分解能以下の亜粒界は検出することができなかった。そこで、角度分解能の高いX線回折法を用い、さらにデンドライト利用キャスト成長法による結晶方位の揃ったシリコンバルク多結晶インゴットを用いることで、結晶全体において微少なずれ角を有する亜粒界も検出することを可能とした。次に亜粒界分布を特定した部分において、エレクトロルミネッセンス(EL)法を用いて、亜粒界の電気的な特性評価を行った。その結果、亜粒界は太陽電池特性に対してキャリアの再結合サイトとして働くのみならず、シャント欠陥としても重大な影響を与えることがわかった。亜粒界の発生メカニズムを明らかにするため、結晶方位の制御された複合種結晶を用いて、人工的に多結晶組織を制御したモデル結晶を成長させ、結晶成長過程における欠陥(転位・亜粒界)の発生を解析した。その結果、亜粒界は結晶成長の過程で、歪みを駆動力としてランダム粒界から発生することが示された。これらの結果は、シリコンバルク多結晶を高品質化する上で重要な指針となる。

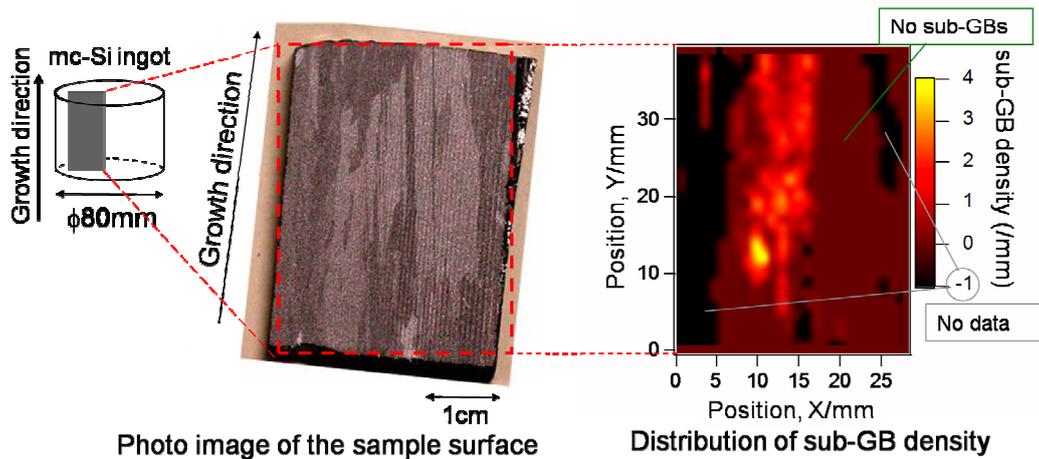


図5 シリコンバルク多結晶サンプルの断面写真と亜粒界密度分布

北陸先端大学院大学の太平からは、「フラッシュランプ加熱による微結晶シリコン成長のメカニズム」と題し、一部が本所との共同研究で行われた、フラッシュランプ加熱によるガラス基板上アモルファスシリコンからの微結晶シリコンの成長についての講演がなされた。薄膜シリコン太陽電池では、ガラス基板などの低コスト基板上に、高品質な微結晶シリコン薄膜を低温プロセスで形成することが課題の一つとなっている。太平らは、フラッシュランプによる短時間加熱によって、ガラス基板を損傷させることなく、アモルファスシリコンを微結晶シリコンに結晶化させる方法を提案している。発表では、この方法のコンセプトとともに、アモルファスシリコンの結晶化過程がフラッシュランプ加熱の熱伝導および結晶化エネルギーの観点から議論された。結晶化は試料のエッジから開始し、試料中央に向かって進展することが観察されたが、エッジからの熱の流入だけではすべての結晶化過程を説明できないことが示された。さらに、表面凹凸が結晶品質(少数キャリアライフタイム)に与える影響が検討され、フラットなものほど良好な結晶品質が得られることが示された。

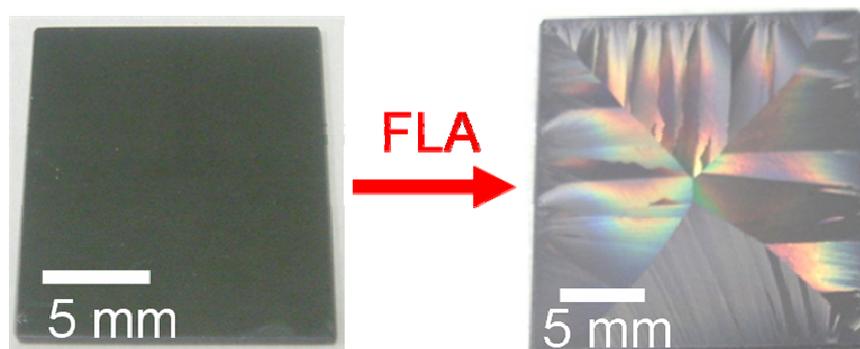


図6 フラッシュランプ加熱前後の試料表面写真

大阪大学の王からは、「融液からのシリコン薄膜のエピタキシャル成長」と題し、シリコン融液から高品質なシリコン結晶薄膜をシリコン基板上にエピタキシャル成長する方法が紹介された。高純度なシリコン原料の使用量の削減および高品質なエピタキシャル薄膜の形成を目指し、新たな成長法としてシリコン融液の滴下によるシリコン結晶のエピタキシャル成長が提案された。この方法は、従来の溶液を用いた LPE 成長に比較して、溶媒からの不純物の混入の問題がなく、また速い成長速度が得られるなどの特徴を持つ。発表では、この成長法に関する基礎的な検討結果が報告された。まず、エピタキシャル成長する基板の温度範囲が報告され、広い基板温度範囲(シリコン融点~シリコン融点-200°C)でエピタキシャル成長が観察されたことが示された。次に基板温度が結晶品質に与える影響が報告され、基板温度がシリコンの融点に近いほど、転位密度が低くキャリア拡散長が高いことが報告された。

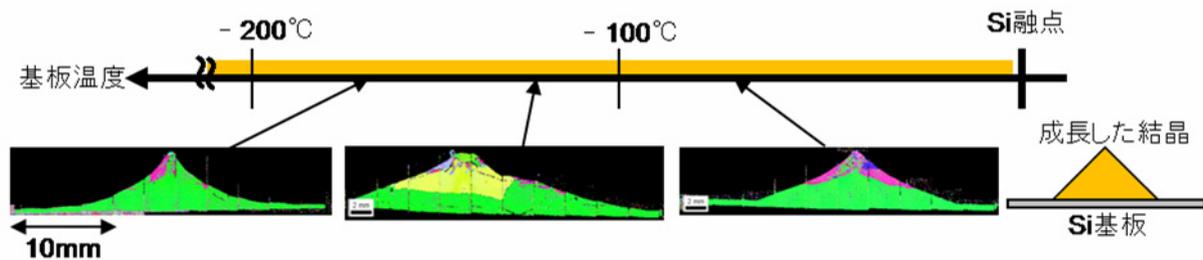


図7 シリコン融液の滴下によるシリコン結晶の成長においてエピタキシャル成長する基板温度範囲

上記の他にも、化合物半導体薄膜や有機材料について、結晶成長を中心とした最新の研究成果が報告された。CIGSなどのカルコパライト系の材料では、高品質な結晶を目指した、共蒸着プロセスや熱処理プロセスの導入が検討された。また、新しい薄膜太陽電池の材料として BaSrSi<sub>2</sub> が提案され、シリコン基板上的エピタキシャル成長における組成制御やドーピング技術についての検討が行われた。

また結晶評価技術に関しては、KFMによる多角的な結晶評価や赤外線を利用した歪み評価など新たな結晶評価手法が発表された。

また、シリコン結晶中の不純物に関して、金属不純物に関しては放射光を利用した不純物分布の解析結果が紹介され、ドーパント不純物に関しては、複数のドーパントによる抵抗率の補償効果が検討された。

このように、ワークショップ開催を中心に据えた本共同研究によって、太陽電池の高効率化に向けた材料の結晶学的な課題が明らかとなり、また、課題解決に向けた指針を得ることができた。

特に、バルク結晶シリコンと薄膜結晶シリコンの内容については、成果を取りまとめた本の出版を企画し、平成21年8月頃をめどに Springer 社より出版される予定である。以下は、そのコンテンツである。

“Crystal Growth of Silicon for Solar Cells”  
Springer

**Part I Feedstock**

1 Feedstock

Eivind J. Øvrelid, Kai Tang, Thorvald Engh, Merete Tangstad

**Part II Single Crystal**

2 Czochralski Si Crystal Growth for Photovoltaic Applications

C.W. Lan, C.K. Hsieh, W.C. Hsu

3 Float zone growth

H. Riemann, A.Luedge

**Part III Multicrystals**

4 Crystallization of Silicon by a Directional Solidification Method

Koichi Kakimoto

5 Mechanism of Dendrite Crystal Growth

Kozo Fujiwara, and Kazuo Nakajima

6 Generation Mechanism of Sub-grain Boundaries

Kentaro Kutsukake, Noritaka Usami, Kazuo Nakajima

7 New Crystalline Si Ribbon Materials for Photovoltaics

Giso Hahn, Axel Schönecker, Astrid Gutjahr

8 Crystal Growth of Spherical Silicon

Kosuke Nagashio, Kazuhiko Kuribayashi

**Part IV Thin Films**

9 Liquid Phase Epitaxy

Alain Fave

10 Vapor Phase Epitaxy

Mustapha Lemiti

11 Flash Ramp Annealing

Keisuke Ohdaira

12 Aluminum induced crystallization

Stephan Gall

#### **Part V Database**

13 Thermochemical and Kinetic Databases for the Solar Cell Silicon Materials

Kai Tang, Eivind J. Øvrelid, Gabriella Tranell, Merete Tangstad

#### 4. まとめ

「太陽電池用材料の高品質化に向けた結晶成長学的アプローチ」と題するワークショップを開催し、多様な太陽電池用材料を対象として、結晶成長を中心とする材料科学の観点から、材料の高品質化による太陽電池の高効率化を中心として議論を行った。107名の参加者を集め、ワークショップ開催を中心に据えた本共同研究によって、多様な材料をベースとする太陽電池の高効率化に向け、結晶学的な課題が明らかとなり、また、課題解決に向けた指針を得ることができた。特に、バルク結晶シリコンと薄膜結晶シリコンの内容については、成果を取りまとめた本の出版を企画し、Springer社より出版を行う。

# 格子欠陥研究の現状と今後の在り方

東北大学・金属材料研究所

米永 一郎、岩佐 義宏、千葉 晶彦、永井 康介、宇佐美 徳隆、大野 裕

## 1. はじめに

近年物質材料中の格子欠陥を制御し、さらに積極的に利用する観点での欠陥工学 Defect Engineering が注目されてきている。それはナノテクノロジーの要請の元で、2001年のイギリスの Homewood らによる転位工学 Dislocation Engineering、日本金属学会においても、「格子欠陥制御工学」、「機能元素のナノ材料科学」、「巨大ひずみ加工材料の特性と格子欠陥の役割」などのシンポジウムの提案にも見ることができる。格子欠陥は物質における規則的な原子配列の特異点として、物質の各種機能を左右する。そのため、それらの各種物性やその発現機構・機能を理解する〔欠陥効果〕の解明とその欠陥の排除を旨とする「欠陥抑制」研究が従来主流であった。上述のような現在注目されてきている研究動向は、無欠陥材料をひたすら希求するのではなく、欠陥の特異点を制御し利用する観点で注目されるであろう。ただ、そのような格子欠陥研究の現状を見ると、果たしてその能力と責務を十分に発揮しているといえるか？先述のように格子欠陥に関する研究は、材料の機能性とその向上に関わるため、その目的実現のために不可欠な基盤知識としてほぼすべての材料において展開されている。そして、国内、国外で各レベルでの学会、研究会、シンポジウム等が開催され、議論が進められる。ただ、それが逆に個別の材料での知識の展開と深化にとどまり、材料に依拠しない基盤知識としての格子欠陥研究の拡大になっているかを考えるとき、残念ながらそうとは言い難い。その原因としてはいくつか考えられる。まず、対象となる物質・材料の領域が金属、半導体、酸化物、金属ガラス、炭素ナノチューブ・フラーレン、タンパク質、有機材料等、多岐にわたって拡大していること、さらに、各分野での主たる興味がそれぞれ機械的特性制御、電子光学特性などの機能性の制御、構造欠陥の発生ないし発達の抑制など様々な物性評価・制御技術の開発など、その目的を異にすることなどである。このような状況で、格子欠陥に関する研究はその研究領域ないし学会の分散化が加速されていると認識せざるを得ない。

本共同研究は、いわゆる物質・材料の区分を超え、さらに基礎と実用の分野、理論と実験を問わず、材料における欠陥研究の現状を総括するワークショップを開催し、その共通となる基盤知識を確立し、今後のあるべき研究の方向性を忌憚なく議論することを目的とした。特に、従来タイプの研究会のように、特定の物質材料、新物質材料の開発や特異な現象の説明そのものではなく、金属、半導体、有機材料等、多岐にわたる物質材料で格子欠陥研究の現状をそれぞれの立場で議論し、今後の物質材料の開発のために有用な格子欠陥に共通する基盤的知識の確立とその裾野の拡大を目指した。

## 2. 研究経過

下記、2回のワークショップを開催した。以下に各ワークショップのプログラムを記す。

東北大学金属材料研究所ワークショップ

「格子欠陥研究の現状と今後の在り方」(第1回)

平成20年9月24日(水) 午前9時～午後4時30分

金属材料研究所2号館講堂

1-1. 開会挨拶

座長: 斎藤峰雄 (金沢大)

1-2. 「21世紀の格子欠陥研究に残された課題」の出版にあたって(2002年の宿題) 西谷滋人 (関西学院大)

1-3. タンパク質結晶の格子欠陥研究の現状 橋勝 (横浜市大)、小島謙一 (横浜創英短大)

1-4. カーボンナノチューブの欠陥-現状と課題 目良裕、前田康二 (東大)

座長: 大野裕 (東北大)

1-5. 半導体ナノ結晶成長と欠陥、ゆらぎ 河野日出夫 (阪大)

1-6. 先端シリコン物性開発 Impurity doping and defects in silicon nanowires 深田直樹 (NIMS)

1-7. ナノ金属・合金の水素吸蔵特性 山内美穂 (北大, JST-PRESTO), 北川宏 (九大, JST-CRESTO)

1-8. 液体金属脆性研究の現状 小泉大一 (明大)

座長: 西谷滋人 (関西学院大)

1-9. ボロン、ダイヤモンド結晶における高濃度ドーピングによる超伝導実現:一高圧による実現一

白井光雲、出倉春彦 (阪大)

1-10. 半導体中の点欠陥の第一原理計算 西松毅 (東北大)

1-11. 陽電子消滅法による半導体中の空孔型欠陥研究の現状と今後 井上耕治、長谷川雅幸 (東北大)

1-12. GaN 中転位の走査拡がり抵抗顕微鏡観察 上村祥史、枝川圭一 (東大)

座長: 前田康二 (東大)

1-13. 太陽電池の高効率化に向けた Si バルク多結晶の組織・欠陥制御

宇佐美德隆、沓掛健太郎、藤原航海三、中嶋一雄 (東北大)

1-14. 顕微鏡法を用いたナノ電子物性評価の現状と今後 大野裕 (東北大)

1-15. 電子線ホログラフィーによる電磁場解析 進藤大輔 (東北大)

1-16. 閉会挨拶

東北大学金属材料研究所ワークショップ

「格子欠陥研究の現状と今後の在り方」(第2回)

平成21年1月19日(月)~20日(火)  
金属材料研究所 COE棟 セミナー室1

2-1. 開会挨拶

座長: 大野裕 (東北大)

2-2. ナノ粒子の構造物性 保田英洋 (神戸大工)

2-3. フラージェンを使ったプラズマ溶射による炭素膜合成と炭素構造変化 吉見享祐 (東北大環境)

座長: 谷本久典 (筑波大数理物質)

2-4. 極限環境下での物質ナノ構造の破壊と創製 庭瀬敬右 (兵庫教育大)

2-5. カーボンナノチューブの融解および格子欠陥周辺の構造緩和 星野公三 (広島大総合)

2-6. Defects and Electronic Properties in IVth-group Nano Materials

K. Tanigaki, J. Tang, J. Ju and Z. Li (東北大WPI, 理)

2-7. クラスレート化合物の構造と物性 田中克志、金正煥、岡本範彦、乾晴行 (京大工)

座長: 庭瀬敬右 (兵庫教育大)

2-8. Direct Observation of Atomic Defects in Carbon Nanotubes 末永和知 (産総研)

2-9. 高延性バルク金属ガラスの開発 横山嘉彦、A. R. Yavari\*、井上明久\*、  
山崎徹、P. K. Liaw\*\*、藤田和孝\*\* (東北大金研、東北大WPI\*、兵庫県立大+、テネシー大\*\*、宇部高専\*\*)

2-10. 準結晶の転位と変形 枝川圭一 (東大生産研)

2-11. 金属ナノ結晶材の特異物性と粒界相転移 谷本久典、水林博 (筑波大数理物質)

2-12. 巨大ひずみ加工と格子欠陥 堀田善治 (九大工)

座長: 吉見享祐 (東北大環境)

2-13. Incipient plasticity of nanoindentation

渋谷陽二 (阪大工)

- 2-14. 超高速変形における点欠陥生成 佐藤裕樹 (東北大金研)
- 2-15. イオン照射による酸化物の欠陥生成機構 安田和弘 (九大工)
- 2-16. イオン照射によるナノ構造表面形成 新田紀子、  
長谷川季也、保田英洋、林禎彦\*、義家敏正\*、谷脇雅文\* (神戸大工、京大原子炉\*、高知科大\*)
- 座長: 保田英洋 (神戸大工)
- 2-17. クラック先端からの転位発生の3次元トモグラフィによる解析 東田賢二、田中将巳 (九大工)
- 2-18. 微小格子欠陥のダイナミクスの TEM その場観察 荒河一渡 (阪大超高压電顕)
- 2-19. 転位の可逆運動を利用した Fe<sub>3</sub>Al 合金の巨大擬弾性 安田弘行 (阪大工)
- 2-20. Co-Cr-Mo 系合金の動的・静的再結晶挙動と転位構造の関係 山中謙太、森真奈美、黒須信吾、松本洋明、千葉晶彦 (東北大金研)
- 座長: 東田賢二 (九大工)
- 2-21. E2<sub>i</sub> 型金属間化合物の構造空孔と機械的性質 木村好里 (東工大総合理工)
- 2-22. II-VI 半導体人工格子における格子欠陥解析 岡本範彦\*、現、Lianfeng Fu\*、N. D. Browning\*、\*\* (UC Davis\*、現京大工、Lawrence Livermore Nat. Lab. \*\*)
- 2-23. 引き上げ法シリコンの種子-結晶界面におけるミスフィット転位発生現象 太子敏則、大野裕、米永一郎 (東北大金研)
- 2-24. 閉会挨拶

### 3. 研究成果

ワークショップ「格子欠陥研究の現状と今後の在り方」は第1回を平成20年9月24日(水)に、第2回を平成21年1月19日(月)と20日(火)の両日に開催し、物理学会格子欠陥分科、応用物理学会・結晶工学、金属学会、機械学会、化学会などの分野からの参加があり、その参加者数は、各回それぞれ50名であった。

それらのワークショップでは、その目的に沿い、いろいろな物質・材料の格子欠陥、特に点欠陥と転位に関する特性評価と制御に関し、第一線にある研究者が講演を行った。また、最近の格子欠陥研究の特徴として、材料・物質のナノ構造化による利用の進展につれ、新たな物性の顕在化ないし発現が報告されつつあること、またそのための新しい観察法及び微細領域の精密評価法の発達があり、それらの成果も講演に含まれた。尚、各講演者にはさらに各分野での現状認識とその展望、問題点に関するコメントを求めた。

第一回ワークショップでは、1-2)格子欠陥研究における継続的懸案事項の紹介、1-3)巨大分子構造の生体材料の弾性特性研究の在り方、1-4)極微細構造デバイス性能に格子欠陥が直結するカーボンナノチューブ研究の現状、1-5)SiC、Si ナノワイヤー・ナノ粒子での原子配列のゆらぎ、確率的欠陥発生の理解に向けた課題、1-6)Si ナノワイヤデバイス実現のための不純物制御の最先端研究の現状、1-7)金属・合金における水素吸蔵特性のナノサイズ化による新現象の発現、1-8)長い歴史はあるが、液体金属による破壊強度・延性の低下に関する研究が進展しない状況、1-9)超伝導実現が期待されるボロン添加ダイヤモンドでの機構と半導体への展開、1-10)点欠陥研究への第一原理計算適用の可能性、1-11)半導体中の単原子空孔検出法として陽電子消滅法の展開の可能性、1-12)転位の一次元バンドによる細線の実現に向けた研究と新手法の確立、1-13)結晶粒界を利用した低コスト・高効率太陽電池のための基礎研究の現状、1-14)近接場電子顕微鏡法によるナノ領域での個別分光物性評価の実現に向けた課題、1-15)ホログラフィーを利用した電場と磁場の可視化の欠陥研究への展開について、報告され、討論が行われた。

第二回ワークショップでは、2-2)電子励起による GaSb ポーラス半導体の形成へ寄与する欠陥特性の解明の現状、2-3)プラズマを用いた炭素膜合成における構造相変態の機構、2-4)物質の破壊による再創製に向けた課題、2-5)カーボンナノチューブの諸機能について格子欠陥の構造緩和に及ぼす影響の解明、2-6)IV 族ナノ構造体の新物性応用研究の最先端、2-7)クラスレートの構造欠陥が核となる熱電物性の探索、2-8)カーボンナノチューブの点欠陥の直接観察、2-9)金属ガラスの延性に係る研究の現状と課題、2-10)回転対称性と準周期制を特徴とする準結晶の転位と機械的特性の研究の展望、2-11)金属ナノ粒子界面で発現する相転移と物性に関する熱力学的考察の現状、2-12)大量の格子欠陥が導入される状況下でのみ見出される新現象とその応用への展開、2-13)現在主要な機械的特性解明の手段となりつつあるナノインデンテーションでの局所塑性変形の現状、2-14)大量の原子空孔が形成される、転位運動を介さない超高速変形の可能性、2-15)照射によるイオントラック構造、選択的イオンはじき出し現象など酸化物セ

ラミックスでの格子欠陥研究、2-16)イオン照射を利用した半導体表面構造の創製、2-17)クラック先端での転位発生の3次元観察法の確立と応用、2-18)個々の転位と不純物との相互作用の直接観察、2-19)転位運動を利用した弾性制御、2-20)再結晶を支配する転位機構の解明と生体機能材料への応用、2-21)規則構造化合物の原子空孔を利用した耐熱合金の開発への課題、2-22)II-VI族半導体人工格子で発見された新しい格子欠陥の解明、2-23)結晶成長における界面でのミスフィット転位の発生機構の解明と結晶性制御への応用について報告され、討論が行われた。なお、両回のワークショップではその趣旨に添い、全て口頭講演として、一講演に対して、様々な視点・側面からの質問や集中的な討論ができるように企図した。

各講演の詳細については、アブストラクト集、東北大学金属材料研究所ワークショップ「格子欠陥研究の現状と今後の在り方」と「格子欠陥研究の現状と今後の在り方」(第2回)を参照されたい。(結晶欠陥物性学部門ホームページへ掲載)

#### 4. まとめ

本ワークショップは物質・材料によらず、物性の基盤知識としての格子欠陥研究の裾野の拡大を企図して、多様な分野での最先端研究の現状を相互に紹介し、直裁に議論することを行った。そのために、ワークショップでは有機・生体材料から半導体、金属、金属ガラスまでの広範な材料分野で第一線の若手研究者の方々により、それぞれの最新の欠陥研究で見出された現象や新しい評価法について、講演がなされた。特に、強調すべきことは、講演者・参加者が物理学会、金属学会のみならず、応用物理学会、さらに機械系や化学系学会等で活動中であり、異なる学会ゆえに、日常的には接点が非常に少なく、そのような皆様に、ある意味強制的に他分野での成果やトピックスに接してもらう機会となった。ただ、参加者より、普段聞けない、非常に新鮮な内容であったと指摘された。この観点で、研究の多様性と、その領域を越えた融合研究の必要性を認識する機会となったと考える。また、このような研究会の継続が合意された。

ワークショップ「格子欠陥研究の現状と今後の在り方」の概念図

