

層状複合アニオン化合物 $Ba_3RE_2M_2Ch_2O_5$ の電子構造と発光特性

Electronic structure and luminescence properties of layered mixed anion compounds



東大院工¹, 東大院理², 阪大レーザー研³ °荻野拓¹, 龍田誠¹, 桂ゆかり², 市原義悠¹, 下山淳一¹, 山ノ井航平², 坪井瑞輝², 清水俊彦², 猿倉信彦², 岸尾光二¹

Univ. of Tokyo¹, °Hiraku Ogino¹, Makoto Tatsuda¹, Yukari Katsura², Jun-ichi Shimoyama¹, Kohei Yamanoi³, Mizuki Tsuboi³, Toshihiko Shimizu³, Nobuhiko Sarukura³, Kohji Kishio¹

E-mail: tuogino@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp

【緒言】 酸砒化物・酸硫化物などの層が積層した複合アニオン化合物は物質探索の余地が多く、様々な機能の発現が期待される。LaO 層と CuCh (Ch = S/Se) 層が積層した LaCuChO では、自然超格子により室温での励起子発光が報告されている[1]。我々はこれまで逆蛍石型層とペロブスカイト類縁酸化物層が積層した構造を持つ化合物を探索し、様々な化合物を報告してきた[2]。今回、CuCh (Ch = Se/Te) 層、AgSe 層を持ち、半導体層と絶縁体層が積層した一連の化合物を作製し、光学特性評価及び電子状態計算を行ったので報告する。

【実験】 試料は固相反応法により合成した。原料粉末をグローブボックス中で秤量・混合しペレット成型した後、石英管封管内で焼成を行った。試料は粉末 X 線回折法による相の同定と格子定数の評価、拡散反射率測定およびフォトルミネッセンス測定等を行った。

【結果と考察】 系統的な物質探索の結果、 $Sr_2ScCuSeO_3$, $AE_3RE_2Cu_2Ch_2O_5$ ($AE = Sr/Ba$, $RE = Sc/Lu$, $Ch = Se/Te$), $Ba_3Lu_2Cu_2Se_2O_5$, $Ba_3RE_2Ag_2Se_2O_5$ [$RE = Sc/Y/Sm \sim Lu$] などの化合物を発見した。逆蛍石型層の格子サイズに依存して積層する酸化物層の種類も変化し、CuSe, CuTe 層及び AgSe 層の場合、ペロブスカイト類縁酸化物層の B サイトが希土類で構成される化合物も生成することが分かった。図 1 のように拡散反射率測定の Tauc プロットから、光学バンドギャップは CuSe 層を持つ化合物で約 3 eV、AgSe 層を持つ化合物で ~ 2.5 eV と見積もられた。またいずれの化合物も LaCuSeO[3] などで報告されているようにバンド端に吸収ピークを示した。これらの化合物の発光スペクトルを測定したところ、図 2 のように $Sr_2ScCuSeO_3$ で 390 ~ 430 nm、 $Ba_3RE_2Ag_2Se_2O_5$ で 440 ~ 520 nm に発光を有することを確認した。一方 CuTe 層を持つ $Ba_3RE_2Cu_2Te_2O_5$ は明確な光学バンドギャップは定義できず、低温でも発光が観測できなかつた。これらの結果について電子状態計算の結果と合わせて報告する。[1] K. Ueda *et al.*, *Phys. rev. B* **69** (2004) 155305, [2] H. Ogino *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **101** (2012) 191901 [3] H. Kamioka *et al.*, *J. Lumin.* **112** (2005) 66.

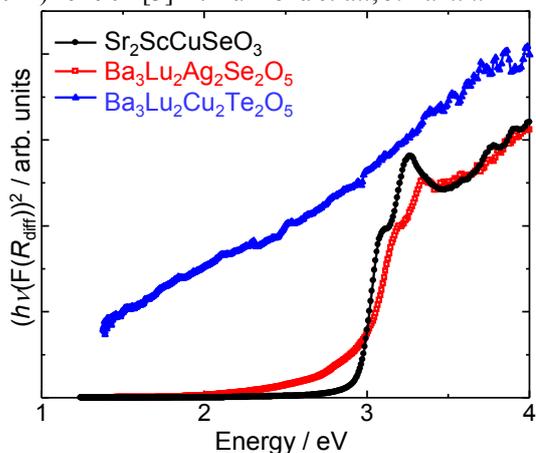


Fig. 1 Tauc plot of $(F(R)h\nu)^2$ vs $h\nu$ of $Sr_2ScCuSeO_3$, $Ba_3Lu_2Ag_2Se_2O_5$ and $Ba_3Lu_2Cu_2Te_2O_5$ at room temperature.

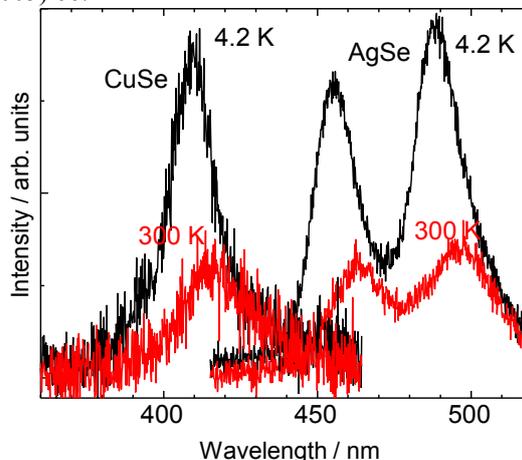


Fig. 2 Emission spectra of $Sr_2ScCuSeO_3$ and $Ba_3Lu_2Ag_2Se_2O_5$ excited by 290 nm Ti-Sapphire THG laser.