

直接遷移型ナローギャップ半導体; ウルツ鉱型 β -CuGaO₂Novel direct and narrow-gap oxide semiconductor; wurtzite β -CuGaO₂

阪大院工¹, 富山高専², 山梨大工³, NIMS⁴ °長谷 拓¹, 鈴木 一誓¹, 喜多 正雄²,
柳 博³, 田中 雅彦⁴, 勝矢 良雄⁴, 大橋 直樹⁴, 小俣 孝久¹

Osaka Univ.¹, Toyama Natl. Coll. Tech.², Univ. of Yamanashi³, NIMS⁴, °Hiraku Nagatani¹,

Issei Suzuki¹, Masao Kita², Hiroshi Yanagi³, Masahiko Tanaka⁴, Yoshio Katsuya⁴, Naoki Ohashi⁴,

Takahisa Omata¹

E-mail: omata@mat.eng.osaka-u.jp

新しいナローギャップ酸化物半導体として、ウルツ鉱型関連構造の β -NaFeO₂構造の酸化物に着目し探索を行ってきた。既に知られているこの構造の物質の中では β -AgGaO₂のバンドギャップ(2.2eV)が最も小さい。 β -AgGaO₂の価電子帯はAg 4d軌道とO 2p軌道から構成される。Cu 3d軌道のエネルギーはAg 4d軌道のそれよりも浅く、デラフォサイト型構造の α -AgGaO₂と α -CuGaO₂、カルコパイライト型構造のAgGaS₂とCuGaS₂ではいずれもCu化合物の方がバンドギャップは小さい。同様に β -NaFeO₂構造の酸化物においてもCu化合物はAg化合物よりもバンドギャップは小さいと期待されるが、 β -NaFeO₂構造のCuGaO₂についてはこれまで報告がない。本研究ではウルツ鉱型関連構造の酸化物半導体のバリエーションを広げることを目的とし、 β -NaFeO₂構造の β -CuGaO₂を合成し、結晶構造および光学的性質について研究した。

β -CuGaO₂は β -AgGaO₂の合成方法と同様に、前駆体 β -NaGaO₂中のNa⁺イオンをCu⁺イオンへと交換することで合成した。 β -NaGaO₂をCuClと混合し圧粉成形した後、真空中で250°C、48h焼成した。室温まで冷却後、水洗、真空乾燥し、粉末試料を得た。放射光を用いたXRDのRietveld解析により結晶構造を解析した。粉末試料の拡散反射スペクトルからエネルギーバンドギャップを決定した。汎関数にsX-LDAを使用したDFT法によりエネルギーバンド構造を計算した。

得られた試料の結晶構造は、空間群 $Pna2_1$, $a_0 = 5.46338 \text{ \AA}$, $b_0 = 6.61505 \text{ \AA}$, $c_0 = 5.27774 \text{ \AA}$ と決定され β -NaFeO₂型 β -CuGaO₂であることが明らかとなった。Fig.1に β -CuGaO₂の結晶構造をZnOとともに示す。 β -CuGaO₂の格子定数を擬ウルツ鉱型構造に換算すると、ZnOとの格子ミスマッチは ab 面で0.6%、 c 軸方向で1.3%と非常に小さい。このことは β -CuGaO₂のZnO上へのエピタキシャル成長や広い範囲での固溶体の生成を期待させる。エネルギーバンドギャップは1.47eVであり、単接合太陽電池の変換効率が最大となるバンドギャップに相当することが明らかとされた。エネルギーバンド構造の計算から、 β -CuGaO₂が直接遷移型半導体であることが示され、 β -CuGaO₂は薄膜太陽電池の光吸収体用材料に適した物質であることが明らかとなった。

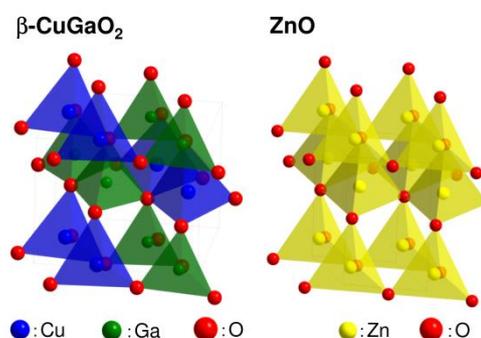


Fig. 1. Crystal structure of β -CuGaO₂ and ZnO.