

バンドギャップ可変 p 型半導体 $\text{Sn}_2\text{Nb}_{2-x}\text{Ta}_x\text{O}_7$

New p-type semiconductor $\text{Sn}_2\text{Nb}_{2-x}\text{Ta}_x\text{O}_7$ with variable band gap

産総研¹, 東京理科大² ○三溝朱音², 菊地直人¹, 池田紳太郎², 相浦 義弘¹, 西尾 圭史²

AIST¹, Tokyo Univ. Sci.², °A. Samizo², N. Kikuchi¹, S. Ikeda², Y. Aiura¹, K. Nishio²

E-mail: naoto-kikuchi@aist.go.jp

n 型半導体特性を示す透明酸化半導体 (TOS) は ITO や ZnO など数多く報告されているが、p 型を示す TOS の報告は限られている。これは透明酸化物の価電子帯上端 (VBM) が局在性の強い酸素 2p 軌道から構成されているためである。報告された p 型 TOS である Cu 系デラフォサイト化合物は VBM に Cu 3d 軌道を、また、 LnCuOCh (Ch=S, Se) に代表されるオキシカルコゲナイド化合物は S や Se の p 軌道を導入して、VBM の局在性を弱めている。しかし d および p 軌道と比較して、より大きな空間分布を持ち、かつ等方的な s 軌道からなる VBM を持つ透明酸化物が実用的な半導体特性の実現には望ましい¹⁾。この考えに基づき選択された Sn の 5s 軌道を VBM にもつ p 型 SnO が報告されているが、バンドギャップが間接的で狭く可視光領域において高い透明性はない²⁾。我々は VBM に Sn 5s 軌道成分を導入した新しいギャップ可変なワイドギャップ酸化半導体 $\text{Sn}_2\text{Nb}_{2-x}\text{Ta}_x\text{O}_7$ に注目し、その p 型半導体化に成功した。

$\text{Sn}_2\text{Nb}_{2-x}\text{Ta}_x\text{O}_7$ は x に関わらずパイロクロア単相を示し、全域固溶する。図 1 は $\text{Sn}_2\text{Nb}_{2-x}\text{Ta}_x\text{O}_7$ 粉末の拡散反射スペクトルから直接許容遷移を仮定して求めた Tauc プロットを示す。Tauc プロットより見積もられたバンドギャップ E_g は連続的に変化しており、 x により 2.4–3.0eV の範囲で E_g を制御できることが示された。表 1 に $\text{Sn}_2\text{Nb}_{2-x}\text{Ta}_x\text{O}_7$ 試料の

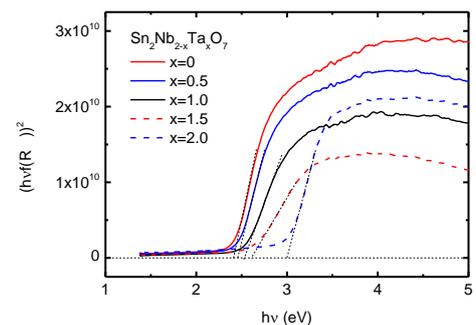


図 1 $\text{Sn}_2\text{Nb}_{2-x}\text{Ta}_x\text{O}_7$ 粉末の Tauc プロット

電気物性をまとめた。VBM が s 軌道性であるにも関わらず観測された移動度は 10^{-2} – 10^{-1} cm^2/Vs と低い。相対密度が低い (~60%) 圧粉体であることを考えると、焼結性の向上や薄膜化により移動度の向上が期待される。表 1 に示されるような 10^{17} – $10^{18}/\text{cm}^3$ のホールキャリアは Nb または Ta サイトへの Sn^{4+} の置換による p 型キャリア生成欠陥に由来すると考えられる。本講演では ^{119}Sn メスbauer分光の結果も踏まえてバンドギャップ可変 p 型半導体 $\text{Sn}_2\text{Nb}_{2-x}\text{Ta}_x\text{O}_7$ のキャリア生成機構について考察する予定である。

表 1 p 型 $\text{Sn}_2\text{Nb}_{2-x}\text{Ta}_x\text{O}_7$ の電気物性 (300 K)

x	Resistivity (Ωcm)	Carrier density ($/\text{cm}^3$)	Mobility (cm^2/Vs)	Seebeck coefficient ($\mu\text{V}/\text{K}$)	Band gap E_g (eV)
0	150	2.5×10^{17}	1.9×10^{-1}	+5.9	2.41
1.0	110	4.0×10^{17}	1.5×10^{-1}	+6.2	2.56
2.0	210	1.4×10^{18}	2.8×10^{-2}	+9.0	3.03

1) H. Kawazoe et. al, *MRS Bulletin* 25(8), 28 (2000) 2) Z. Wang et. al., *Adv. Mater.* 28, 3831 (2016)