

立方晶ペロブスカイト酸化物群から見いだした 特異なナローバンドギャップ(~4 eV)を有するシリケート: BaSiO₃

An Exceptionally Narrow Band-Gap (~4 eV) Silicate

Predicted in the Cubic Perovskite Oxides: BaSiO₃

東工大フロンティア研¹, 東工大元素戦略研², 物材機構³, 高輝度光科学研究センター⁴

○平松秀典^{1,2}, 遊佐 斉³, 五十嵐 涼¹, 大石泰生⁴, 神谷利夫^{1,2}, 細野秀雄^{1,2}

MSL Tokyo Tech.¹, MCES Tokyo Tech.², NIMS³, JASRI⁴

°H. Hiramatsu^{1,2}, H. Yusa³, R. Igarashi¹, Y. Ohishi⁴, T. Kamiya^{1,2}, H. Hosono^{1,2}

E-mail: h-hirama@mces.titech.ac.jp

【緒言】近年の資源・環境問題を背景に、ユビキタス元素のみで構成され、安価で高い環境調和性をもつ新物質・材料の開拓が強く望まれている。その観点から、酸化物半導体は酸素を主成分とすることから有望な候補物質となる。現在実用化されている透明電極のITOや、ディスプレイ駆動用薄膜トランジスタのアモルファスIn-Ga-Zn-Oに代表されるように、既に実用化されている高性能酸化物半導体中の主成分カチオンは、電子配置 $(n-1)d^{10}ns^0$ ($n \geq 4$)をとる重金属に限られている。しかしながら、将来の社会情勢を勘案すると、クラーク数の高い軽金属カチオンを主成分とする高性能な酸化物半導体を見いだすことは、我々研究者への至上命令と言える。

本研究では、2011年に溝口らによって発見された新しい酸化物半導体である立方晶ペロブスカイトSrGeO₃ [1]において見られる、高い対称性に起因した超縮退と呼ばれる電子状態の有望物質をさらに幅広く探索するため、仮想化合物を含む35種類の立方晶ペロブスカイト型酸化物の電子構造を第一原理計算によって網羅的に計算した。

【結果】図1にバンドギャップの計算値と格子定数の関係をまとめた。計算結果の妥当性は、SrGeO₃ [1]における実験値とのよい一致によって確認した。この計算結果から、BaSiO₃がシリケートとしては非常に小さいバンドギャップ(約4 eV)を有し、電子の有効質量も $0.3m_e$ と小さく、軽元素を主成分とする高性能な酸化物半導体としての新しい有望物質であることを見いだした。さらに、これまで未報告だったBaSiO₃の立方晶相が実在することを、高圧下 *in-situ* XRD 測定により実験的に実証した(図2)。(2)

[1] H. Mizoguchi et al., *Nat. Commun.* **2**, 470 (2011). DOI: 10.1038/ncomms1484

[2] H. Hiramatsu et al., *Inorg. Chem.* **56**, 10535–10542 (2017). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b01510

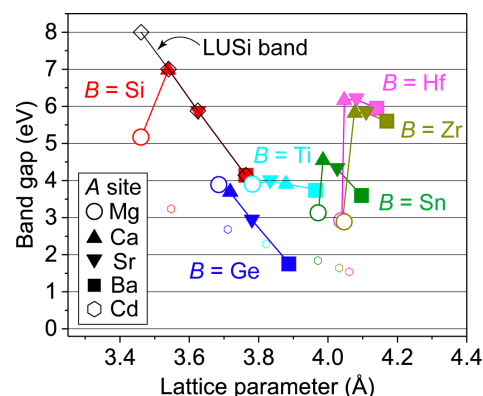


Fig. 1: Relationship between the calculated band gap and the lattice parameter for the cubic perovskites, ABO₃.

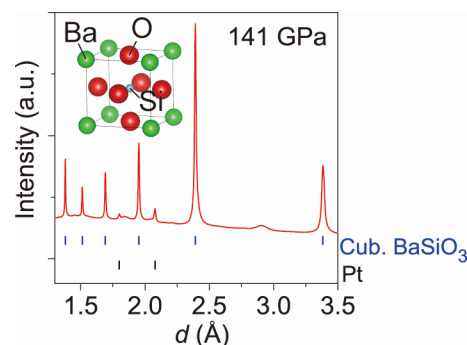


Fig. 2: The *in-situ* XRD pattern of cubic BaSiO₃ at 141 GPa.