

Ce:GAGG 結晶における浅い電子捕獲中心の起源

Nature of Shallow electron traps in Ce:GAGG crystals

山形大理¹, 名大院工², 東北大 NICHe³, 静岡大電研⁴

◦(M1) 八木橋 亨¹, 渡邊 真太², 北浦 守¹, 鎌田 圭³, 黒澤 俊介^{1,3}, 大西 彰正¹, 原 和彦⁴

Yamagata Univ.¹, Nagoya Univ.², Tohoku Univ. NICHe³, Shizuoka Univ. RIE⁴

◦(M1) T. Yagihashi¹, S. Watanabe², M. Kitaura¹, K. Kamada³, S. Kurosawa^{1,3}, A. Ohnishi¹, K. Hara⁴

E-mail: s14p033@st.yamagata-u.ac.jp

Ce³⁺イオンをドーブした Gd₃Al₂Ga₃O₁₂ (Ce:GAGG) 結晶は優れた発光特性を持ち、現在では医療診断や環境計測をはじめとして数々の分野で利用されている[1]。Ce:GAGG のシンチレーション発光には燐光成分が混在し、これは Ce³⁺イオンから励起された電子がその近傍に存在する欠陥に捕獲され電子捕獲中心を形成するために生じる[2]。電子捕獲中心を抑制することで Ce:GAGG の発光特性を向上させることができる。これまでの研究で、我々は浅い電子捕獲中心が酸素空孔に関連する複合欠陥であると指摘した[3]。しかし、その複合欠陥の起源は現時点で解明されたとはいえない。そこで本研究では、Ce:GAGG における浅い電子捕獲中心の起源を解明するために紫外光照射下において Ce³⁺: Gd_xLu_{3-x}Al₂Ga₃O₁₂ (x= 0, 1, 2, 3) 混晶の赤外吸収スペクトルを 16 K で測定した。その結果、Ce:GAGG (x=3)で 12000 cm⁻¹に観測された浅い電子捕獲中心による吸収帯が x とともに減少し x=0 において消失することを見出した。この結果は、Gd³⁺イオンが Ce:GAGG 中に形成される浅い電子捕獲中心の構成要素の一つとして必要不可欠であることを示す。

ガーネットには A, B, C で示される 3 つのカチオンサイトが存在する。A サイトは 8 つの酸素に、B サイトと C サイトはそれぞれ 6 つと 4 つの酸素に配位される。GAGG において Gd³⁺イオンは A サイトを占めるが、この Gd³⁺イオンに酸素空孔が隣接するときには電子は酸素空孔に局在化して深い電子トラップ準位を形成する[4]。一方、Gd³⁺イオンのような希土類イオンが B サイトや C サイトのアンチサイトを占める可能性はこれまでに議論されている[5,6]。我々も密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて、Gd³⁺イオンが B サイトまたは C サイトを占める固溶エネルギーを計算した。その結果、Ga³⁺/Al³⁺欠損の状態において Gd³⁺イオンが C サイトより B サイトに固溶しやすい傾向を持つことを明らかにした。以上の事実を考慮すると、酸素空孔に隣接した B サイトを占める Gd²⁺イオンが、Ce:GAGG における浅い電子捕獲中心であると考えられる。

[1] K. Kamada *et al.*, Cryst. Growth & Des. **11**, 4484-4490 (2011).

[2] M. Nikl *et al.*, Cryst. Growth & Des. **14**, 4827-4833 (2014).

[3] M. Kitaura *et al.*, Appl. Phys. Express **9**, 072602 (2016).

[4] F. Meng *et al.*, Phys. Status Solidi B **252**, 1394 (2015).

[5] V. Lupei, A. Lupei, C. Tiseanu *et al.* Phys. Rev., B **51**, 8-17 (1995).

[6] C. R. Stanek *et al.*, Phys. Status Solidi, B **243**, R75-R77 (2006).