

Mn ドープ BiFeO₃ 薄膜における バルク光起電力効果の理論的検討

Theoretical Study of Bulk Photovoltaic Effect

in Mn-doped BiFeO₃ Thin Film

兵庫県立大工¹ ○中嶋 誠二¹, (M2) 林本 竜¹, 藤沢 浩訓¹

Univ. of Hyogo¹ ○Seiji Nakashima¹, Ryu Hayashimoto¹, and Hironori Fujisawa¹

E-mail: nakashima@eng.u-hyogo.ac.jp

【はじめに】

バルク光起電力効果(BPVE(Bulk Photovoltaic Effect))は中心対称性を持たない結晶に光を照射することで起電流が発生する効果で、古くから知られている効果である^{1),2)}。しかしながら、そのメカニズムは近年解明されつつあり、電子波動関数の異方性に起因して、バンド間の光学遷移に伴いキャリアがシフトするシフト電流が提案されている。このシフト電流はこれまでにない高効率太陽電池実現の可能性があることから大変注目されている。我々は Zn, Mn ドープ BFO 薄膜において室温 145 V の開放端電圧の発生を報告している³⁾。しかしながら、短絡電流は小さく変換効率は極めて小さいという問題点がある。本研究では実験値より求めたバルク光起電力テンソルにより、最大の起電流が得られる照射光偏光方向と、起電流の向きを検討した。

【理論】

バルク光起電力効果にて発生する起電流 J_i は、バルク光起電力テンソル β_{ijk} 、照射光の電場 e_j, e_k とすると $J_i = \beta_{ijk}e_j e_k$ で表され、点群 3m の結晶では結晶対称性から

$$\begin{pmatrix} j_1 \\ j_2 \\ j_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_{15} & -\beta_{22} \\ -\beta_{22} & \beta_{22} & 0 & \beta_{15} & 0 & 0 \\ \beta_{31} & \beta_{31} & \beta_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1^2 \\ e_2^2 \\ e_3^2 \\ e_2 e_3 \\ e_3 e_1 \\ e_1 e_2 \end{pmatrix} \quad (1) \quad \text{と表される。}$$

この式を用いて、偏光方向と電流ベクトルの大きさ $|J|$ の関係をプロットした。

【結果及び考察】

我々は単結晶の Mn 1 at%ドープ BFO 薄膜の光起電力特性の結果から、 $\beta_{15}:\beta_{22}:\beta_{31}:\beta_{33} = -1.54:1.00:-1.10:1.91$ を得た。これらと(1)式から得られた、偏光方向と電流ベクトルの大きさ $|J|$ の関係を Fig. 1 に示す。この図は原点から各点までの方向が偏光方向、距離が最大値で規格化した $|J|$ に対応している。この結果から、偏光方向と $|J|$ の関係は $[111]_{R3c}$ を軸として3回回転対称となっており、点群 3m の結晶対称性を反映していることがわかる。また、この結果から、偏光方向 $[\bar{1}22]_{R3c}$ 、 $[2\bar{1}2]_{R3c}$ 、 $[2\bar{2}1]_{R3c}$ の時に $|J|$ が最大となり起電流の向きは、それぞれ $[0.785 -0.408 -0.408]_{R3c}$ 、 $[-0.408 0.785 -0.408]_{R3c}$ 、 $[-0.408 -0.408 0.785]_{R3c}$ 方向であることが予測できる。

参考文献

- 1) T. Choi, et al., Science **324**, 63 (2009).
- 2) P. Günter, et al., Ferroelectrics **13**, 297 (1976).
- 3) S. Nakashima et al., Jpn. J. Appl. Phys., **55**, 10TA07 (2016)

謝辞: 本研究の一部は科研費 No. JP19K04495 の支援で行われました

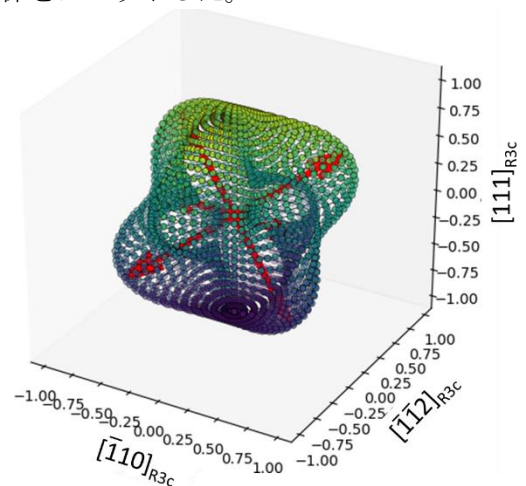


Fig. 1 Relationship between light polarization and normalized $|J|$.