

Ba<sub>1-x</sub>TiO<sub>3</sub> のアクセプター準位の状態密度Density of States of Acceptor Levels in Ba<sub>1-x</sub>TiO<sub>3</sub>岡山大学院自然<sup>1</sup>, 産総研<sup>2</sup>, 岡山大異分野コア<sup>3</sup>, 岡山大自然生命<sup>4</sup> ○(M2) 藤井 沙耶<sup>1</sup>, 狩野 旬<sup>1</sup>, (M2) 那須 駿平<sup>1</sup>, (P) 押目 典宏<sup>2</sup>, 仁科 勇太<sup>1,3</sup>, 藤井 達生<sup>1</sup>, 池田 直<sup>1</sup>, 太田 弘道<sup>4</sup>Grad. Sch. of Sci. Tech., Okayama Univ.<sup>1</sup>, AIST<sup>2</sup>, RCIS, Okayama Univ.<sup>3</sup>, ASRC, Okayama Univ.<sup>4</sup>°Saya Fujii<sup>1</sup>, Jun Kano<sup>1</sup>, Shunpei Nasu<sup>1</sup>, Norihiro Oshime<sup>2</sup>, Yuta Nishina<sup>1,3</sup>, Tatsuo Fujii<sup>1</sup>, NaoshiIkeda<sup>1</sup>, Hiromi Ota<sup>4</sup>

E-mail: pfon8lys@s.okayama-u.ac.jp (藤井沙), jun@psun.phys.okayama-u.ac.jp (狩野)

遷移金属酸化物をワイドギャップな半導体として捉えたデバイス設計において、真空準位から見積もったバンド構造の定量的なエネルギー準位情報は、MOSFETなどのデバイス設計のみならず光触媒[1, 2]などの材料開発においても重要なパラメーターになりうる。我々はこれまで、BaTiO<sub>3</sub> (以下BTO)にBa, O欠損をそれぞれ導入した時のバンド構造変化を報告している[3]。化学量論組成比になるように制御されたBTOに対しO欠損処理を施したBTOは、禁制帯内にドナー準位を形成させn型半導体となる。一方Ba欠損を導入したBTOは電荷補償のためOイオンの欠損がカウンター的に起こり、その結果ドナー・アクセプターの両準位が形成されてしまいピュアなp型にはならない。よってカチオン欠損型のp型半導体はO欠損型のn型よりも複雑になり、バンド構造変化の仕組みがわからなかった。酸化物のバンド構造変化の仕組みを知ることは、新しいデバイスデザインに繋がるはずである。そこで本研究では、Ba欠損量を系統的に増やしたBTO粒子を合成し、p型半導体としてのバンド構造の変化を捉えることに成功したので報告する。

比較的多めのBa欠損の導入が可能な共沈法による試料合成を行った。予め秤量時にBaTiO<sub>3</sub>, Ba<sub>0.97</sub>TiO<sub>3</sub>, Ba<sub>0.95</sub>TiO<sub>3</sub>の組成式となるように3種の試料を合成し、光電子収量分光法(PYS)および光反射率測定によりそれぞれ、真空準位 $E_v$ から価電子帯上端のエネルギー準位に相当する $E_E$ , バンドギャップ $E_g$ を測定した。光反射率測定では反射率低下の際に2つの折れ曲がりが見られ、PYSでは価電子帯直前に2つの状態密度が見られ、禁制帯に存在する2つのアクセプター準位 $\alpha$ ,  $\beta$ の挙動を両実験から観測できた。図1に得られたエネルギー準位図を示す。欠損量の増加に連れてアクセプター準位 $\beta$ の状態密度が拡大している。よってBa欠損制御によりp型が支配的になっていく様子が見られた。これは大きな $E_g$ を持つバンド絶縁体BaTiO<sub>3</sub>特有のものであると考えられる。

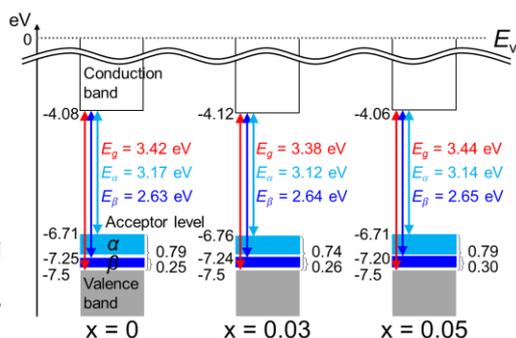


Fig. 1 Band structure of Ba<sub>1-x</sub>TiO<sub>3</sub>.  $E_{\alpha}$  and  $E_{\beta}$  are the energy of the acceptor level maximum. Since the donor level was not observed, it is omitted in this figure.

[1] I. Nakamura *et al.*, *J. Mol. Catal. A: Chem.* **161**, 205 (2000). [2] A. Kudo and Y. Miseki, *Chem. Soc. Rev.* **38**, 253 (2009). [3] N. Oshime *et al.*, *J. Appl. Phys.* **120**, 154101 (2016).