

## X線光電子分光によるルチル型 $\text{Sn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{O}_2$ 薄膜のバンド端エネルギー評価

### Evaluation of band alignment of rutile- $\text{Sn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{O}_2$ by XPS

東大院理<sup>1</sup>, お茶大理<sup>2</sup>, 都立大院理<sup>3</sup> ○長島 陽<sup>1</sup>, 近松 彰<sup>2</sup>, 廣瀬 靖<sup>3</sup>

Univ. of Tokyo<sup>1</sup>, Ochanomizu Univ.<sup>2</sup>, Tokyo Metropolitan Univ.<sup>3</sup>

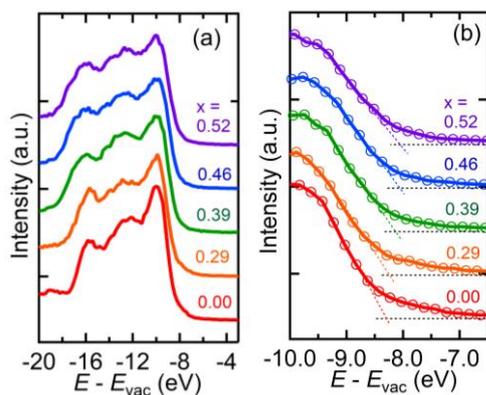
○Yo Nagashima<sup>1</sup>, Akira Chikamatsu<sup>2</sup> and Yasushi Hirose<sup>3</sup>

E-mail: nagashima@chem.s.u-tokyo.ac.jp

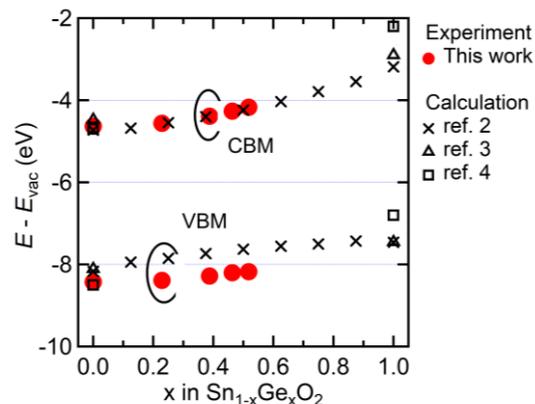
【背景】 代表的な酸化物半導体である  $\text{SnO}_2$  に  $\text{GeO}_2$  を固溶したルチル型  $\text{Sn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{O}_2$  (SGO) は、バンドギャップを  $\sim 3.7 \text{ eV} - \sim 4.7 \text{ eV}$  の範囲で変調可能な超ワイドギャップ半導体で、パワーエレクトロニクスデバイスや紫外光エレクトロニクスデバイス材料として期待されている[1,2]。また、第一原理計算によると Ge 固容量の増大に伴って価電子帯上端 (VBM) が大きく上昇することから、p 型ドーピングの可能性も提案されている[2-4]。これらの特性を生かしたデバイス応用にはバンド端のエネルギーを実験的に評価する必要があるが、我々の知る限り報告はない。今回は X 線光電子分光法 (XPS) を用いて SGO 薄膜 ( $x = 0 - 0.52$ ) の VBM を評価したので報告する。

【結果と考察】 パルスレーザー堆積法を用いて Nb:TiO<sub>2</sub> (001) 基板上に SGO 薄膜をエピタキシャル成長した[1]。結晶構造と組成は X 線回折およびエネルギー分散型 X 線分光により確認した。合成した SGO 薄膜は大気雰囲気中、850 °C で 8 時間アニールして表面の  $\text{Sn}^{2+}$  不純物を除いた後、O 1s 内殻電子および価電子帯の XPS スペクトルを測定した。O 1s ピークを基準として真空準位からのエネルギーを計算した価電子帯スペクトルを Fig. 1 に示す。Ge 含有量  $x$  の増大に伴って VBM は上昇し、第一原理計算による予想[2-4]と定性的に一致した。また、光学測定から求めた SGO の組成とバンドギャップの関係[1]を用いて伝導帯下端 (CBM) のエネルギーを計算した結果、SGO と  $\text{SnO}_2$  はタイプ II 型のヘテロ接合を形成することが実験からも示唆された (Fig. 2)。

【参考文献】[1] Y. Nagashima *et al.*, Chem. Mater. 34, 24, 10842 (2022). [2] H. Takane *et al.*, Phys. Rev. Materials 6, 084604. (2022). [3] S. Chae *et al.*, Appl. Phys. Lett. 114, 102104 (2019). [4] C. A. Niedermeier *et al.*, J. Phys. Chem. C 124, 47, 25721–25728. (2020).



**Fig. 1** (a) Valence band XPS spectra of the SGO thin films on Nb:TiO<sub>2</sub> (001) substrate with various Ge content  $x$ . (b) Enlarged spectra of (a) around the VBM.



**Fig. 2** VBM and CBM position of the SGO thin films determined by the XPS measurements. Energy from the vacuum level was calibrated with the O 1s peak position. Energy of the CBM was calculated from the VBM position and the optical bandgap estimated from the Ge content  $x$  in the film [1].