

ZnSnN₂ 結晶の作製と評価(1) ーバルク結晶合成ー

Synthesis of ZnSnN₂ crystals and Evaluation of Potential for Semiconductors

○川村 史朗¹、谷口 尚¹、山田 直臣² (1. 物質・材料研究機構、2. 中部大工)

°Fumio Kawamura¹, Takashi Taniguchi¹, Naoomi Yamada² (1.NIMS, 2.Chubu Univ.)

E-mail: KAWAMURA.Fumio@nims.go.jp

1. 緒言

Ⅲ-V族窒化物は幅広くバンドギャップをカバーしていることや優れた結晶の安定性により、発光素子からパワーデバイスまで広範囲に開発が進められているが、GaやInといった希少元素を使用することがデメリットとなる場合がある。特に次世代の高効率太陽電池材料開発においては安価な元素から構成されることが求められるため、バンドギャップを広くカバーすることが可能なⅢ-V族窒化物代替材料の開発が期待される。

ZnSnN₂ はⅢ-V族窒化物のⅢ族位置をⅡ族、Ⅳ族で置き換えた擬似Ⅲ-V族窒化物材料であり、第一原理計算から直接遷移の半導体 ($E_g=1.4\text{eV}$)である上に[1]、Sn 位置を Si や Ge で置き換えることで広いバンドギャップチューニングが可能であることが示唆されている。計算から求められた ZnSnN₂ 結晶のバンドギャップは、太陽電池の効率を最大化する値である。

ZnSnN₂ 結晶は大きな可能性を有しているが、分解温度が低く、これまでバルク結晶合成の報告例が無い上に、構造中の Zn、Sn 元素の配列も確定していない。

今回、ZnSnN₂ の高品質結晶合成の可否を高压合成を用いて検討し、得られた結晶を用いて半導体としての特性評価を行った。

2. 実験

結晶合成は、ダイヤモンドの量産で広く用いられているベルト型高压装置を用いて行った。高压下で結晶合成を行うことで ZnSnN₂ 結晶の分解温度を大きく上昇させることが可能となる。高温で結晶合成を行うことで高品質 ZnSnN₂ 結晶が得られることが期待される。

7万7千気圧(7.7GPa)の高压下で、ZnF₂、SnF₄、と窒素源である Li₃N (または NaN₃)を複分解反

応させることで ZnSnN₂ 結晶を合成した。

3. 結果と考察

図1に、7.7GPaで合成された ZnSnN₂ 結晶の XRD プロファイルを示す。

得られた結晶のピークは非常にシャープであり、リートベルト解析を行うにあたって十分に高い結晶性を有していることが分かった。

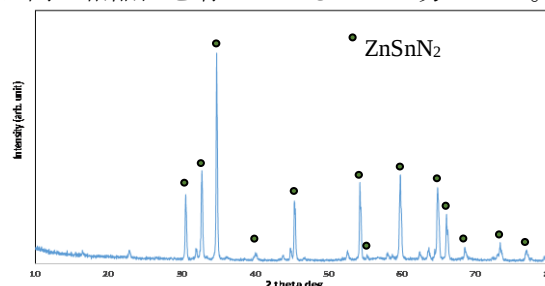


図1. 7.7GPaの圧力下で複分解反応を用いることで合成された ZnSnN₂ 結晶

合成された ZnSnN₂ 結晶の構造解析を行った結果、a,b 軸、c 軸方向それぞれにⅡ族とⅣ族が交互に配列するウルツァイト派生カルコパイライト型構造、(または β -NaFeO₂ 型構造)を有していることが判明した。

拡散反射法によりバンドギャップを測定した結果、ほぼ太陽電池の理論限界効率を発揮することの可能な $E_g=1.35\text{eV}$ を示した。(図.2)

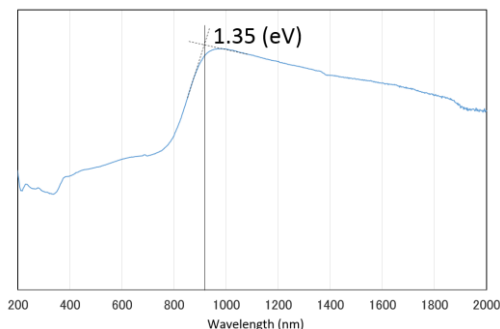


図2. バルク ZnSnN₂ 結晶の拡散反射測定結果

参考文献

[1] Lahourcade *et al.*, Adv. Mater. **25**, 2562 (2013).