

三元系ワイドギャップ Cu_2ZnI_4 の合成と電子物性の調査

Synthesis and Evaluation of Ternary Widegap Cu_2ZnI_4

中部大院工 ○山田 英明, 岡田 修治, 谷田 悠太, 山田 直臣

Chubu Univ. ○H. Yamada, S. Okada, Y. Tanida, N. Yamada

E-mail: n-yamada@isc.chubu.ac.jp

[背景と目的]

Cu_2ZnI_4 はCuI層と ZnI_2 層が交互に積層された自然超格子構造である(Fig. 1挿図 [1])。ただし、合成報告以外に研究報告はなく、物性は未知である。ごく最近CuIベースの紫色発光ダイオード(LED)が報告されており[2]、CuI層を持つ Cu_2ZnI_4 もLED用の発光材料として期待できると考えている。そこで粉体を合成し、フォトルミネッセンス(PL)測定したところ、室温で青紫色発光することを見出したので報告する。

[実験]

CuIとZnの混合粉末と固体 I_2 を真空アンプルに封じ切り、320 °Cで24 h反応させて粉体を合成した。X線回折法(XRD)と蛍光X線法(XRF)により構造と組成を決定した。また、PL測定により発光特性を評価した。

[結果と考察]

上述の合成法で単相の Cu_2ZnI_4 が得られた。Fig.1のとおり、実測のXRDパターンはリファレンスパターンと完全に一致しており、 Cu_2ZnI_4 の生成を確認できた。金属元素の組成は $\text{Zn} : \text{Cu} = 1.0 : 1.3$ で、若干Zn過剰であった。したがって、化学量論からのズレが大きくても結晶構造を維持することがわかった。

PL測定によって、室温下で光子エネルギー2.9 eVの青紫色発光が観察された(Fig. 2)。これはバンド間遷移、あるいは励起子遷移に起因する発光と考えられる。発光のピークエネルギーからバンドギャップは約3 eVと推定される。

現在、この粉体を出発原料とした薄膜化にも取り組んでいる。この取り組みについては当日報告する。

本研究は、科研費挑戦的研究（萌芽）[20K21242] の助成を受けて行われた。

[参考文献]

- [1] Blachnik et al., *Thermochim. Acta* **143**, 115 (1989).
- [2] Baek et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12**, 6037 (2020).

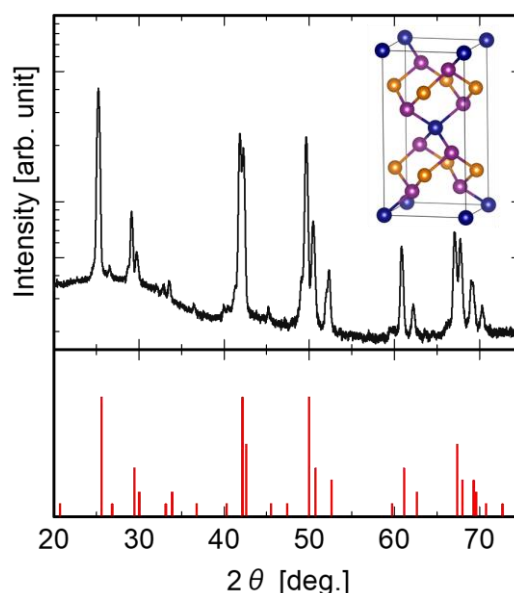


Fig.1 実測の XRD パターン(上)とリファレンスパターン(下) : 上部パネルの挿図は Cu_2ZnI_4 の構造

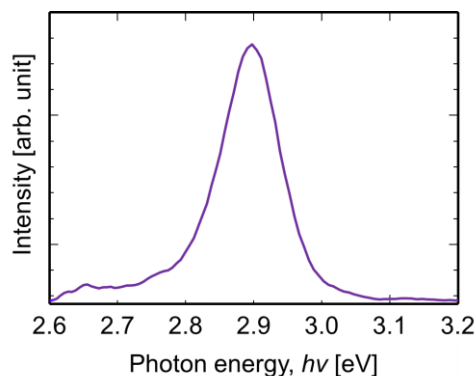


Fig.2 Cu_2ZnI_4 の PL スペクトル(励起波長 : 325 nm)