

(様式第4号)

## XAFS による酸化物半導体の光誘起構造変化過程の研究 XAFS measurement of photo-induced structural change of semiconductor oxides

田中 大  
Hiroshi Tanaka

広島大学  
Hiroshima University

※長期利用課題は、実施課題名の末尾に期を表す (I)、(II)、(III) を追記すること。

### 1. 概要

Mg-Sn 酸化物への UV 照射による結晶構造、電子構造の変化を、X 線吸収スペクトル測定により調べた。その結果、Mg、O 原子の局所的な電子構造は UV 照射によって変化することが明らかになった。

### (English)

Structural and electronic change of Mg-Sn oxides after UV irradiation was measured by using XAFS spectroscopy. It was found that electronic structure was dependent on UV irradiation.

### 2. 背景と研究目的：

低炭素化社会実現のために再生可能なエネルギーデバイスの開発が急務になっている。本研究は、ワイドギャップ半導体において新規に発見された蓄電作用のメカニズム解明を目的としている<sup>[1]</sup>。本半導体はマグネシウムと亜鉛などを主成分とするノンレアメタル元素で構成されており、将来にわたって安定的な原料調達が可能である。しかも、蓄電池性能の指標であるエネルギー密度は 1200 Wh/kg (リチウムイオン電池は 200 Wh/kg) と極めて高く、次世代蓄電池として大きなポテンシャルがある。本半導体材料において蓄電作用が発現するためには、バンドギャップエネルギーよりエネルギーの大きな光 (紫外線) 照射が不可欠である。このことから、本材料では何らかの光誘起構造変化が示唆されるが、それが材料全体のものなのか、あるいは特定の元素周囲の局所的な構造変化なのかは不明である。さらに、蓄電作用の発現メカニズムも不明であり、3次元構造に起因するものなのか、低次元系に特有な電子局在化によるものなのか、あるいはその他のメカニズムによるのか不明である。本研究の目的は、半導体の局所構造・電子構造に及ぼす紫外線照射の影響を XAFS 測定により明らかにすることである。

### 3. 実験内容 (試料、実験方法の説明)

Mg-Sn-O薄膜のXAFSデータ

試料温度：300 K,

NEXAFS 測定：O-K 吸収端及び Mg-K 吸収端 NEXAFS

ビームライン：BL12

測定モード：試料電流測定モード

測定環境：超高真空

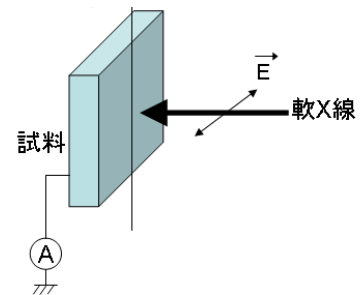
試料温度：300 K

本実験では、MgSnO 中に含まれる O 周囲の局所構造を観測する。そのため、O-K 吸収端付近の XAFS 測定を行う。蓄電量の異なる試料 3 個及び標準試料(MgO)1 個について測定する。さらに、Mg-K 吸収端の測定も行う。試料は  $12 \times 12 \times 0.5(\text{mm}^3)$  の SUS 基板上に膜厚 150 nm の MgSnO 薄膜を作製している。

簡単な実験レイアウトを右図に示す。

実験手順を以下に示す。

- ① 試料ホルダーに試料をマウントする。
- ② まず、標準試料(MgO)の O-K 吸収端(エネルギー掃引できれば Mg-K 吸収端まで)付近で吸収カーブを簡単に測定し、スペクトル形状を確認する。
- ③ 吸収カーブを確認した後、XAFS 測定を行う。測定エネルギー範囲は 500-1500 eV 程度。
- ④ 測定後、試料を取り替えて、同じ測定を行う(測定条件は同じ)。



#### 4. 実験結果と考察

図1、図2はそれぞれ、Mg-K吸収端、O-K吸収端のNEXAFSスペクトルである。

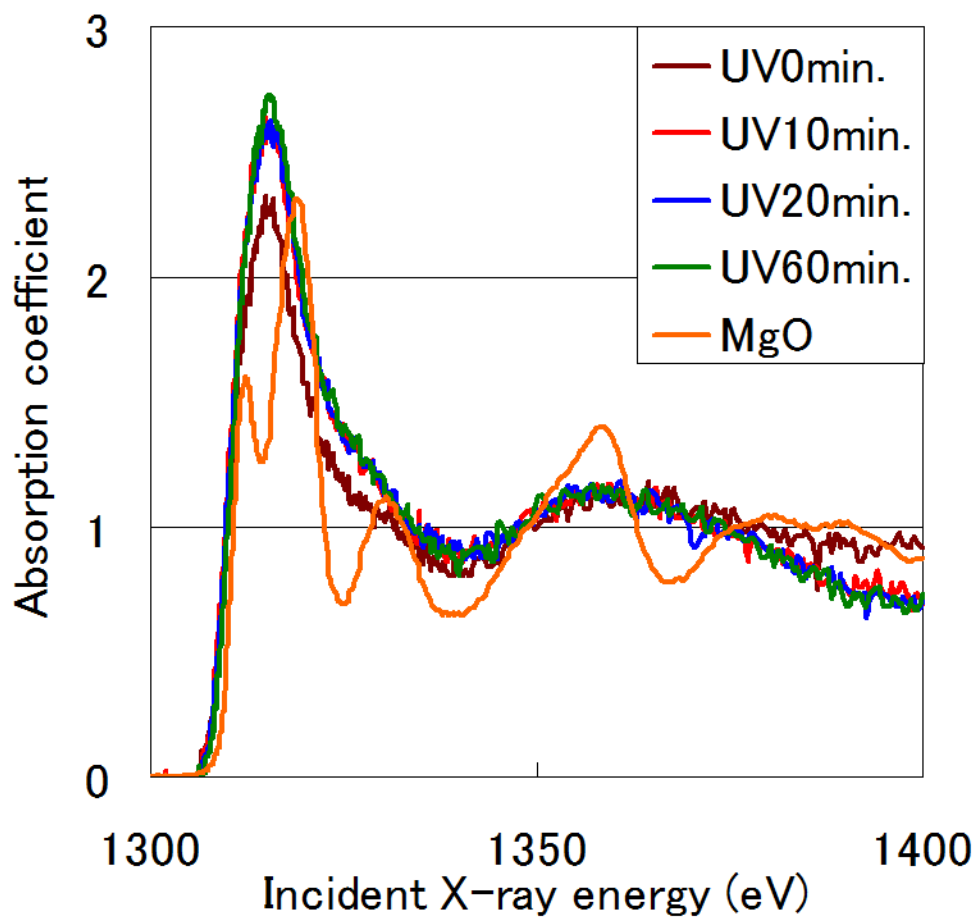


図1 XANES スペクトル(Mg-K吸収端)

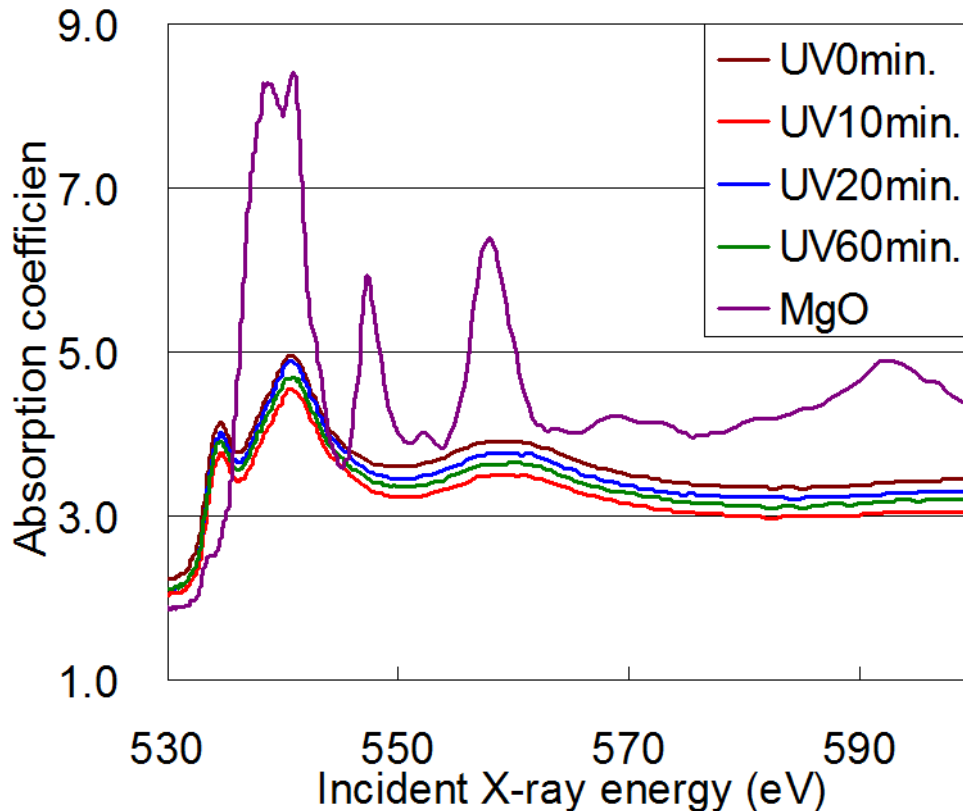


図2 XANES スペクトル(O-K 吸収端)

Mg-K 吸収端の XANES スペクトルより、吸収端は 0~20 min で増加していることから、価数が増えており、標準試料との比較によって 2<sup>+</sup>付近であることも分かった。

O-K 吸収端の XANES スペクトルより、吸収端は 0~60 min で変化しておらず、価数は影響を受けていないことが分かった。

また、価数は標準試料と比較すると 2<sup>+</sup>付近であることも分かった。

前回までの BL11 での実験で、本試料への紫外線照射によって、バンドギャップ内電子準位に電子がトラップされることが分かっている。トラップ準位形成の起源は明らかでないが、トラップ電子は Sn 原子に影響を及ぼしている事が明らかになった。

#### 5. 今後の課題：

さらに詳細な解析を進め、XAFS 測定のみならず、SAXS や XPS の実験等も行い、Mg-Sn 系酸化物半導体蓄電池における蓄電メカニズムを明らかにする。

#### 6. 論文発表状況・特許状況

なし。

#### 7. 参考文献

中澤明、“電子移動型着色ディスプレイ”、ITE Technical Report Vol.31,No9, PP-13~16, IDY2007-41・2007.

#### 8. キーワード (試料及び実験方法を特定する用語を 2~3)

・ X 線吸収スペクトル

物質を X 線で照射したときに原子の内殻軌道の電子を励起放出し、この空準位に高い準位の電子が移るときに放射される特性 X 線のこと。

・ 蓄電池

電気を蓄える機能があり、充放電過程を繰り返し行える電池のこと。

