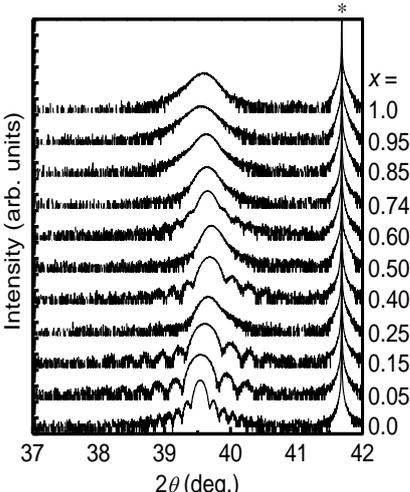


研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		受光デバイスに向けた単結晶 Cr <sub>2</sub> xFe <sub>2-2x</sub> O <sub>3</sub> 混晶半導体の作製と基礎物性評価			
研究テーマ (欧文) AZ		Growth and characterization of single crystalline Cr <sub>2</sub> xFe <sub>2-2x</sub> O <sub>3</sub> alloy for light-receiving optical devices			
研究氏 代表名 者	カタカナ CC	姓)オオシマ	名)タカヨシ	研究期間 B	2010 ~ 2012 年
	漢字 CB	大島	孝仁	報告年度 YR	2012 年
	ローマ字 CZ	OHSHIMA	TAKAYOSHI	研究機関名	東京工業大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		東京工業大学 工学部研究科 応用化学専攻・助教			
<p>概要 EA (600 字~800 字程度にまとめてください。)</p> <p>再生エネルギー活用のため、太陽光エネルギーを利用した太陽電池や光触媒などが近年注目を集めている。特に、安定な酸化物を用いた光触媒は、バンドギャップが大きいいため可視光を有効に利用できず、不純物添加などによるバンドギャップの狭帯化に関する研究が盛んに行なわれている。しかしながら、元来粉末での利用が主であったため、不純物添加と結晶粒界・欠陥の影響が混在しており、添加の効果を精密に評価することは困難であった。そこで我々はモデル実験として、光触媒の 1 つである Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> を対象とし、同一の結晶構造を持つ Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> との混晶化によるバンドギャップへの効果を単結晶薄膜を作製して精密に評価・議論した。</p> <p>(Cr<sub>x</sub>Fe<sub>1-x</sub>)<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 薄膜には、パルスレーザ堆積法を用い、c 面サファイア基板上に作製した。膜厚は、40-80 nm 程度である。その後、結晶性向上を狙い、大気中 1000°C、1h 熱処理を行なった。図は熱処理後の X 線回折パターンである。ラウエ干渉も確認でき、全組成にわたって良好な結晶性を持つ単結晶薄膜であると確認できた。これらの薄膜に対して吸収スペクトルを測定した。Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> は 2.1 eV、Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> は 3.0 eV 付近に吸収端があり、これらは報告されている値とほぼ一致している。中間組成薄膜については、その吸収係数が、さらに小さな 1.7 eV 付近から立ち上がっており、バンドギャップの狭帯化が確認できた。放射光を用いた価電子帯伝導帯の同定の結果、この新たなバンドギャップは Cr 3d 軌道と Fe 3d 軌道間遷移に対応していることが明らかとなり、バンドギャップの狭帯化を説明できた。このように、単結晶薄膜試料により、不純物添加や混晶化がバンドギャップに直接与える効果を詳細に検討することが可能となった。我々は、これらの知見を、他の遷移金属酸化物にも適応させてケミカルトレンドを把握するとともに、触媒などのバンドギャップ制御の指針を確立したいと考えている。</p>					
					
<p>図 混晶薄膜の X 線回折結果</p>					
キーワード FA	Bandgap narrowing	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Pulsed laser deposition	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA				研究課題番号 AA						
研究機関番号 AC				シート番号						

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>	Band-gap narrowing in alpha-(Cr <sub>x</sub> Fe <sub>1-x</sub> ) <sub>203</sub> solid-solution films							
	著者名 <sup>GA</sup>	H. Mashiko, T. Oshima, A. Ohtomo	雑誌名 <sup>GC</sup>	APPLIED PHYSICS LETTERS					
	ページ <sup>GF</sup>	241904-1~3	発行年 <sup>GE</sup>	2	0	1	1	巻号 <sup>GD</sup>	99
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	~	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	~	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	

欧文概要<sup>EZ</sup>

In the quest for realizing efficient photocatalysts, it is required to utilize sunlight spectrum for exciting photoelectrons. For this purpose, metal oxides with wide-band gap have been so far studied intensively to introduce in-gap states by impurity doping. However, the research is done by using ceramic powder and it is difficult to evaluate the bulk properties owing to the existence of defects and grain boundaries. This paper provides a cue to understanding bulk optical properties through studying Fe<sub>203</sub>-Cr<sub>203</sub> single crystalline films as a model system. Using pulsed-laser deposition, we have succeeded in the epitaxial growth of single crystalline alpha-(Cr<sub>x</sub>Fe<sub>1-x</sub>)<sub>203</sub> solid-solution films with atomically flat surfaces to observe intrinsic optical properties. Detailed optical characterization revealed the emergence of a new absorption band at 1.7 eV in the solid-solution films, which is considerably narrower than those of the end members (2.1/3.0 eV). This narrow bandgap was explained by the transition from occupied Cr d state to empty Fe d state, which was confirmed by the investigation of band structure using synchrotron radiation measurements. Our result presents the possibility to tailor band-gap of the solid-solution for developing a highly efficient visible light-driven photocatalysts.