

研究論文

混合アニオン層状化合物 LaCuSeO の光学バンドギャップ内構造

東 伸彦*, 加藤達輝*, 中西 愛*, 的場正憲*, 木方邦宏**, 李 哲虎**, 神原陽一*

In-Gap States in Optical Band Gap of a Mixed Anion Layered Compound, LaCuSeO

by

Nobuhiko AZUMA*, Tatsuki KATO*, Manami NAKANISHI*, Masanori MATOBA*,
Kunihiro KIHOU**, Chul-Ho LEE**, and Yoichi KAMIHARA*

(Received Jul.13, 2018; Accepted Sep. 25, 2018)

Abstract

Undoped LaCuSeO is an electrically insulating mixed anion layered compound (MALC). Anisotropic optical band structure of uniaxially hot-pressed (HP) polycrystalline LaCuSeO was demonstrated. It was defined that directions for the measurements parallel/vertical to the pressing axis as $P_{//}$ / P_{\perp} . And we also defined a pellet which was not hot pressed and as-grown, as Undoped. The electronic properties of LaCuSeO were examined by measurement of reflectivity and analysis using Kubelka-Munk equation and Tauc plot. Optical band gap of Undoped is 2.7 eV, and those of $P_{//}$ and P_{\perp} are 2.6 eV. Activation energies were 0.63 eV for Undoped, 0.26 eV for $P_{//}$, and 0.36 eV for P_{\perp} .

Keywords: Mixed anion layered compounds, LaCuSeO, Optical band gap, Electronic band structure

1. 緒言

混合アニオン層状化合物 (Mixed Anion Layered Compounds: MALC) LaCuChO ($Ch = S, Se$)は逆 PbO 型 CuSe 層と PbO 型 LaO 層が互いに積層した正方晶をとり, その空間群は $P4/nmm$ (No.129), $Z=2$ である¹⁾. Table 1 に LaCuSO と LaCuSeO の室温での輸送特性をまとめる. この MALC は, p 型伝導であり, これまでにワイドギャップ半導体の

母相として主に着目されてきた²⁾. Hiramatsu らは, 絶縁体である LaCuChO ($Ch = S, Se$)において縮退伝導の生じる機構として, Cu 欠陥と, それに伴う Ch 欠陥によるギャップ内バンドの形成が有力であることを密度汎関数理論により明らかにした³⁾. これらの報告は, LaCuChO におけるキャリアドープには, 異価数イオン置換は本質では無く, Cu 欠陥量の調節が重要であることを示す. 実際に, $Ch=S$ の LaCuSO においては, Cu 欠陥に~1 at.%の欠陥が生じることで, その電気抵抗率は母相に比べて 100 万分の一以下に減少する⁴⁾.

平成 30 年 7 月 13 日受付

* 慶應義塾大学理工学部物理情報工学科: 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1

TEL 045-563-1151 FAX 045-566-1587

ubon.mza@keio.jp

Department of Applied Physics and Physico-Informatics, Faculty of Science and Technology, Keio University : 3-14-1 Hiyoshi, Yokohama, Kanagawa 223-8552, Japan.

** 産業技術総合研究所 省エネルギー研究部門 : 茨城県つくば市梅園 1-1-1 つくば中央第二

TEL 029-861-5268

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology 1-1-1, Tsukuba Chuo Daini, Tsukuba 305-8563, Japan

† : 連絡先/Corresponding author

Table 1 Transport properties of LaCuChO⁴⁾⁻⁶⁾ at 300 K.

	Seebeck coefficient (μ V/K)	Electrical resistivity (Ω cm)	Thermal conductivity (W/mK)
undoped LaCuSO	-	6.7×10^5 ⁴⁾	2.0(2) ⁴⁾
LaCu _{0.99} SO	16 ⁴⁾	0.26 ⁴⁾	2.4(3) ⁴⁾
hot-pressed LaCuSeO	-	1.0×10^4 ⁶⁾	2.5(3) ⁶⁾