

鉄酸フッ化ビスマス薄膜の光学特性

Optical properties of bismuth iron oxyfluoride thin films

お茶大理¹, 北大電子研², 都立大理³○佐野 瑞歩¹, 上垣外 明子¹, 片山 司², 廣瀬 靖³, 近松 彰¹Ochanomizu Univ.¹, Hokkaido Univ.², Tokyo Metropolitan Univ.³°M. Sano¹, A. Kamigaito, T. Katayama², Y. Hirose³, A. Chikamatsu¹

E-mail: g2340636@edu.cc.ocha.ac.jp

【序論】遷移金属酸化物薄膜を簡便にフッ化する方法として、フッ素樹脂をフッ素源としたトポケミカルフッ化反応が注目されている[1]. 薄膜におけるフッ素樹脂を用いたトポケミカルフッ化反応では、金属フッ化物などの不純物相を形成することなく、単相の遷移金属酸フッ化物を合成できる. さらに、フッ素樹脂は室温、空气中で安定であり、還元試薬としても機能する. これまで我々は、鉄酸ビスマス $\text{Bi}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{FeO}_{2.9}$ エピタキシャル薄膜にポリフッ化ビニリデン (PVDF) を用いたトポケミカルフッ化反応を行い、反応温度によって結晶構造やフッ素量を制御することに成功した[2]. 本研究では、フッ素量の違いによるバンドギャップの変化を調べるために、フッ素量の異なる鉄酸フッ化ビスマス薄膜の紫外可視分光測定を行った.

【実験手法】ペロブスカイト型 $\text{Bi}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{FeO}_{2.9}$ 前駆体薄膜 (Pre) は、パルスレーザー堆積法により SrTiO_3 (001) 基板上に基板温度 500°C 、酸素分圧 1×10^{-2} Torr で堆積させた. 結晶構造とフッ素量の異なるペロブスカイト型 $\text{Bi}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{FeO}_{2.8}\text{F}_{0.2}$ 薄膜 (F0.2) と蛍石型 $\text{Bi}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{FeO}_{1.6}\text{F}_{2.1}$ 薄膜 (F2.1) は、Pre を PVDF とともに Ar 雰囲気下で 12 時間、それぞれ 200°C および 350°C 加熱することで作製した. 薄膜の光学特性は紫外可視分光計を用いて測定した. 得られた透過・反射スペクトルから消衰係数 k を求め、光吸収スペクトル α を算出した. 光学バンドギャップは、 $(\alpha h\nu)^{1/2}$ の Tauc's プロットで $(\alpha h\nu)^{1/2} = 0$ に外挿することにより決定した.

【結果と考察】Fig. 1 に、Pre, F0.2, F2.1 の光吸収スペクトル α と Tauc's プロットを示す. 2.0 eV 近傍で、F2.1 の α の値が Pre, F0.2 のものよりも大きいことが見て取れる. Tauc's プロット (Fig. 1 挿入図) の外挿では、薄膜由来である 2.5 eV 付近のピークに着目して行った. ペロブスカイト型の F0.2 は、Pre と変わらないバンドギャップ 2.0 eV を示した. 一方で、蛍石型構造の F2.1 ではバンドギャップが減少し、 1.6 eV であった. これらの結果は、フッ素量が大きく増加して結晶構造が変化することにより、価電子帯上端を形成する s-Bi, p-Bi, d-Fe, p-O 軌道間の混成が変化したためと考えられる.

【参考文献】[1] J. Wang *et al.*, Phys. Rev. Mater. **2**, 073407 (2018). [2] 佐野瑞歩ら, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会, 21p-D903-11 (2023).

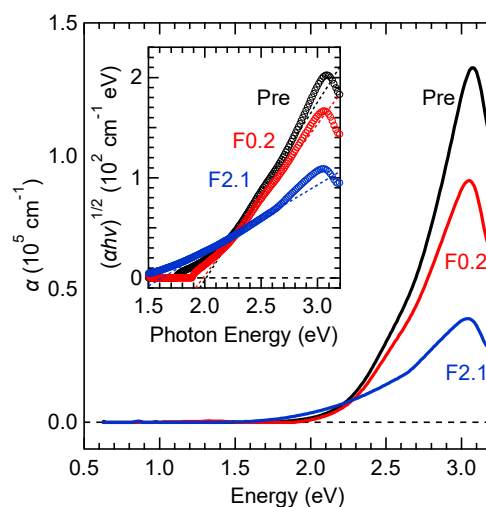


Fig. 1: Optical absorption spectra of the $\text{Bi}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{FeO}_{2.9}$ precursor, $\text{Bi}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{FeO}_{2.8}\text{F}_{0.2}$, and $\text{Bi}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{FeO}_{1.6}\text{F}_{2.1}$ films. The inset shows the Tauc's plots of $(\alpha h\nu)^{1/2}$ for these films.