



新しいPN型光触媒材料の局所構造解析

早川知克, 大塚喬仁, 橋本晴人

名古屋工業大学 工学専攻 生命応用化学系プログラム

キーワード : p型半導体、デラフォサイト型結晶、水熱合成、EXAFS、局所構造

1. 背景と研究目的

環境汚染の社会問題化に伴い、光触媒に注目が集まる中で、光触媒として活用できる新たなp型半導体材料の開拓が求められている。本研究は、これまでに合成条件、物性共に詳細な研究報告がなされていないp型半導体材料であるDelafossite型CuGaO₂の特性及び、CuGaO₂とn型半導体であるZnOとの複合化を試み、その光触媒特性について調査を行っている[1-3]。水熱条件の違いにより光電子特性の違いがあり、結晶構造を含めた多角的な検討を行う必要に迫られている。今回、放射光を用いてCuGaO₂(p型)半導体のX線回折データを測定し、原子位置などの構造パラメータを取得することを目指した。

2. 実験内容

試料は異なる水熱条件で作成した6つのCuGaO₂結晶試料で、水熱処理後の試料をろ過し、希硝酸溶液、希アンモニア溶液等で洗浄し室温で乾燥させた[1]。放射光エネルギーは15.5KeV(80Å)で回折角2θ=5~90でデータを取得した。CuGaO₂結晶データはMaterials Project MP-4280(trigonal R-3m)を用い、RIETAN-FPにてXRDデータのシミュレーションを行った。

3. 結果および考察

異なる水熱条件で合成したCuGaO₂粉末試料(CG0#1~#6)の放射光XRDパターンをFig.1に示す。合成条件により異なる着色を呈すが、SXRDデータのピーク位置はほぼ三方晶R-3mのCuGaO₂と合致することが分かった。X線反射強度は試料ごとに異なることも分かり、結晶構造パラメータの違いを反映することが示唆され、本測定によりCuGaO₂試料の諸特性と構造との相関を調査するための基礎的なデータを得ることができた。

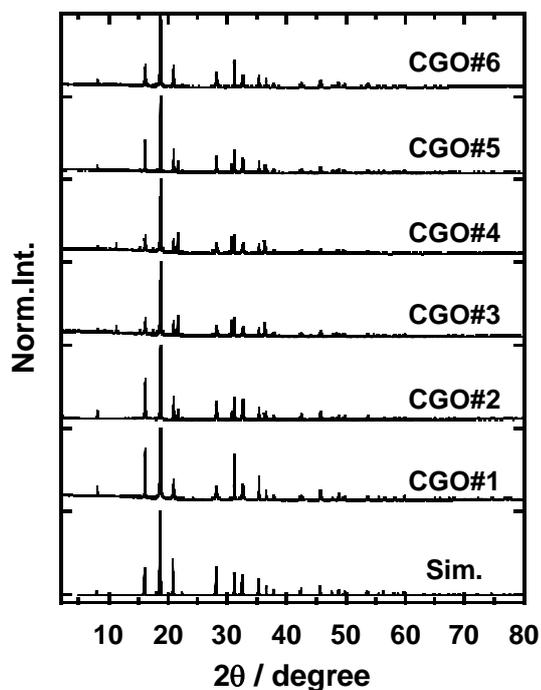


Fig.1 SXRD patterns of CuGaO₂ powder samples (CGO#1~#6) and simulated XRD pattern for mp-4280 trigonal R-3m CuGaO₂.

データを得ることができた。SXRDデータはベースライン補正後にRietveld解析を行った。一例として、CGO#6の結果をFig.2に示す。良好なフィッティング解析により格子定数($a=b=2.98105\text{ \AA}$, $c=17.1226\text{ \AA}$, $\alpha=\beta=90.0^\circ$, $\gamma=120.0^\circ$)などの構造パラメータを得ることができた。

4. 参考文献

[1] M.U. Choi, T. Hayakawa, *Mater. Res. Bull.* **113** (2019) 84-89. [2] M. Choi, S. Yagi, Y. Ohta, K. Kido, *J. Phys. Chem. Solids* **150** (2020) 109845. [3] M. Choi, C.Brabec, T. Hayakawa, *Ceramics* **5** (2022) 655-672.

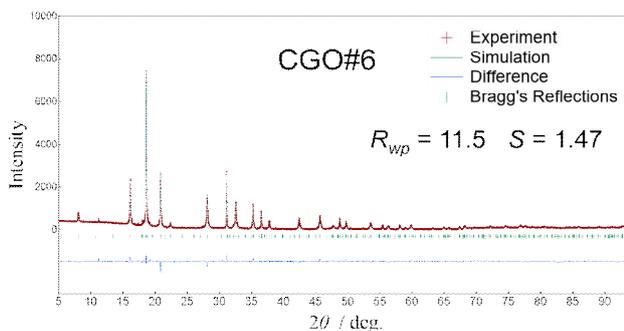


Fig.2 Result of Rietveld refinement for CGO#6 SXRD data.