



金属錯体分子を原料に用いた機能性材料の開発

早川知克, 岡亮平

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、構造解析

1. 背景と研究目的

本研究では水熱合成法を用いた新規 p 型半導体材料の開発を目指している。特に、Delafossite 型 CuGaO_2 に注目し、その特性評価及び CuGaO_2 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]。そして、環境汚染の社会問題化の解決に資する光触媒材料とすることを目指しているが、本結晶について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おらず、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がある。今回、放射光を用いて CuGaO_2 結晶の X 線回折データを測定し、そのための基礎データを取得するとともに、原子位置などの構造パラメータを得るための実験条件を探索することを目的とした。

2. 実験内容

試料は水熱条件で作製した CuGaO_2 結晶試料[1]で、前回 2023 年度に行った実験では 0.3mm ϕ キャピラリーを用いたが、X 線透過能や蛍光 X 線シグナルの発生の観点から、0.1mm ϕ キャピラリー管を用いて実験を行った。放射光エネルギーは 15.5 keV (0.8Å) で回折角 $2\theta=5\sim95$ でデータを取得した。 CuGaO_2 結晶データは Materials Project MP-4280 (trigonal $R\bar{3}m$) を用い、RIETAN-FP にて XRD データのシミュレーション及び解析を行った。

3. 結果および考察

SR-XRD データのピーク位置は三方晶 $R\bar{3}m$ の CuGaO_2 と合致することが分かった。X 線反射強度は 0.1mm ϕ キャピラリー管を使用していたことにより 4000 カウント程でバックグラウンドも相対的に高かった。0.3mm ϕ キャピラリー管を用いた場合と比較すると、試料は異なるものの、その場合は 8000 カウント程でありバックグラウンドも生じていたが補正した上で解析可能であった ($R_{wp}=11.5$, $S=1.45$)。今回もバックグラウンド曲線をフィッティングにより得て、差引することで X 線反射シグナルに対して Rietveld 解析を行った。

Fig.1 に解析結果の一例を示す。良好なフィッティング解析 ($R_{wp}=13.8$, $S=1.03$) により格子定数

$$a=b=2.97787 \text{ \AA},$$

$$c=17.1733 \text{ \AA},$$

$$\alpha=\beta=90.0^\circ, \gamma=120.0^\circ$$

などの構造パラメータを得ることができた。

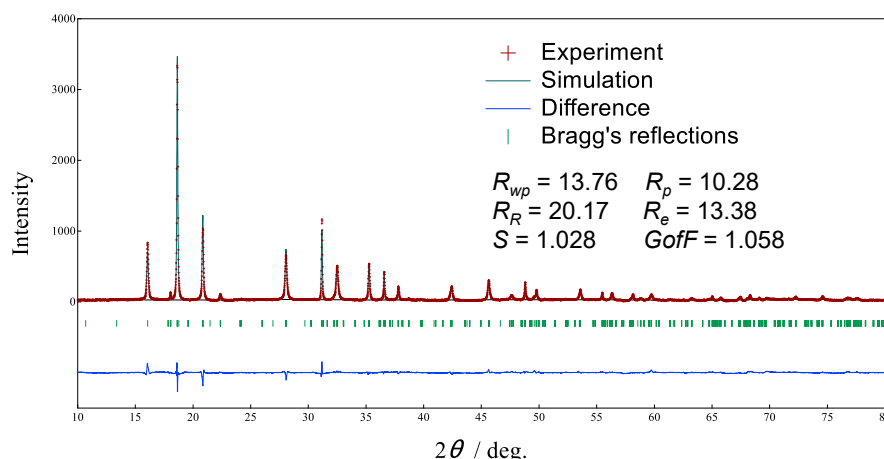


Fig.1 Result of Rietveld refinement for CuGaO_2 powder hydrothermally synthesized. $\text{CuGaO}_2(R\bar{3}m)$; $a=b=2.97787 \text{ \AA}$, $c=17.1733 \text{ \AA}$, $\alpha=\beta=90.0^\circ$, $\gamma=120.0^\circ$ ($R_{wp}=13.76$, $R_p=10.28$, $R_R=20.17$, $R_e=13.38$, $S=1.028$, $GofF=1.058$).

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.