

令和 6 年 6 月 2 日現在

機関番号：13901

研究種目：若手研究

研究期間：2022～2023

課題番号：22K14500

研究課題名（和文）無機半導体転位における光応答の実験的観測

研究課題名（英文）Optical properties of plastically deformed ZnS in darkness

研究代表者

小椋 優 (OGURA, Yu)

名古屋大学・工学研究科・助教

研究者番号：70908152

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,600,000円

研究成果の概要（和文）：結晶中に存在する線状の結晶格子欠陥を「転位」という。近年の理論解析により、II-VI族化合物半導体の1つである硫化亜鉛（ZnS）中の転位において、その原子・電子構造が、キャリアをトラップすることで変化することがわかってきた。そこで本研究では、外部からの光照射に応答して変化する転位の電子構造について、光吸収測定を用いた実験的な観測に挑戦し、これに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

第一原理を用いた理論計算により、硫化亜鉛を含むII-VI族化合物半導体中の転位において、キャリアトラップにより、その原子・電子構造が変化することが明らかになってきた。こうした転位の原子・電子構造変化は、機械特性にとどまらず、様々な機能特性発現の起源となりうる。一方で、その実験的な観測はこれまで実施されてこなかった。本研究により、光励起による転位の電子構造変化の実験的な評価が可能となった。

研究成果の概要（英文）：Dislocations are linear crystal defects in crystalline materials. Recently, it was reported that dislocation cores have unique atomic and electronic structures in compound semiconductors. In this study, therefore, optical properties were examined for deformed ZnS crystals including glide dislocations.

研究分野：材料工学

キーワード：転位 光吸収特性

## 1. 研究開始当初の背景

結晶中に存在する線状の結晶格子欠陥を「転位(図1参照)」という。近年の理論解析により、II-VI 族化合物半導体の1つである硫化亜鉛(ZnS)中の転位において、その原子・電子構造がキャリアトラップにより変化することがわかってきた[1,2]。一方で、転位におけるそうした原子・電子構造変化について実験的な観測は未だ行われていない。そこで本研究では、転位を導入したZnS結晶について光吸収測定を実施し、キャリアトラップに伴う転位の電子構造変化について観測を試みた。

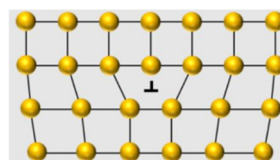


図1 転位の模式図。

## 2. 研究の目的

ZnS中の転位は、光励起キャリアをトラップすることによって、その原子・電子構造を変化させる可能性がある。そこで本研究では、光励起状態のZnS結晶について光吸収測定を行い、光励起の有無による光吸収特性変化について調査した。

## 3. 研究の方法

ZnS単結晶について、暗室下において室温変形試験を実施することにより、結晶中に転位を導入した。なお、使用した試料の形状は $3.0 \times 3.0 \times 7.5 \text{ mm}^3$ であり、側面は全て(001)面である。変形前後の試料について、紫外可視近赤外分光光度計(日本分光, V-770)を用いて光吸収特性評価を実施した。

## 4. 研究成果

投稿予定の学術論文に関わる内容を含むため、現時点での公表を差し控える。

## 参考

- [1] K. Matsunaga, S. Hoshino, M. Ukita, Y. Oshima, T. Yokoi, A. Nakamura, Carrier-trapping induced reconstruction of partial-dislocation cores responsible for light-illumination controlled plasticity in an inorganic semiconductor, *Acta Mater.* **195**, 645-653 (2020).
- [2] S. Hoshino, Y. Oshima, T. Yokoi, A. Nakamura, K. Matsunaga, DFT calculations of carrier-trapping effects on atomic structures of  $30^\circ$  partial dislocation cores in zincblende II-VI group zinc compounds, *Phys. Rev. Materials* **7**, 013603 (2023).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Ogura Yu, Nakamura Atsutomu, Kameyama Tatsuya, Kurokawa Yasuyoshi, Tochigi Eita, Shibata Naoya, Torimoto Tsukasa, Hoshino Sena, Yokoi Tatsuya, Matsunaga Katsuyuki	4. 巻 107
2. 論文標題 The effect of room temperature plastic deformation in darkness on the photoluminescence properties of ZnS	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the American Ceramic Society	6. 最初と最後の頁 2040 ~ 2047
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1111/jace.19564	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ogura Yu, Tsuchiya Yuki, Hoshino Sena, Yokoi Tatsuya, Matsunaga Katsuyuki	4. 巻 131
2. 論文標題 Photoplastic effect in MgO single crystals	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the Ceramic Society of Japan	6. 最初と最後の頁 628 ~ 631
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2109/jcersj2.23060	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計0件

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------