

## 窒化ホウ素中希土類ドーパントの原子レベル直接観察

<sup>a</sup>物質材料研究機構, <sup>b</sup>京都大学, <sup>c</sup>東京大学谷口尚<sup>a</sup>, 大場史康<sup>b</sup>, 田中功<sup>b</sup>, 石川亮<sup>c</sup>

## 【研究目的】

立方晶窒化ホウ素(c-BN)は大きなバンドギャップ( $E_g=6.2\text{eV}$ )を有し、光学素子や光電子デバイスへの応用が期待される材料である。我々は最近、イオンサイズの大きな希土類イオンを添加し発光特性を有する大型のc-BN単結晶の育成に成功した。しかし、母体結晶との大きなサイズミスマッチを有する希土類ドーパントがどのように結晶中に存在しているかの詳細は不明であった。本研究では、収差補正走査透過型電子顕微鏡(STEM)による原子サイズ電子プローブを用いたSTEM像観察および電子分光法により、本系における希土類ドーパントの存在サイトおよび価数状態の直接観察を試みた。

## 【成 果】

図にCe添加c-BN単結晶試料の原子分解能HAADF-STEM像およびEELSスペクトルを示す。HAADF-STEM像中においてドーパントのCe単原子がひとときわ明るい輝点として観察されている。HAADF像コントラストより、Ce原子はBN結晶中のカチオンであるBのサイトではなくアニオンのNサイトに置換していることが明らかとなった。また、EELSスペクトルから、Ceの価数状態は3価で存在していることがわかった。これらの結果は第一原理計算による複合欠陥モデルともよい一致を示しており、巨大サイズミスマッチを有する添加元素の置換メカニズムが本観察により初めて明らかとなった。本成果はPhys.Rev.Lett.誌に掲載された(Ishikawa et al., Phys.Rev.Lett.110,065504,2013)。

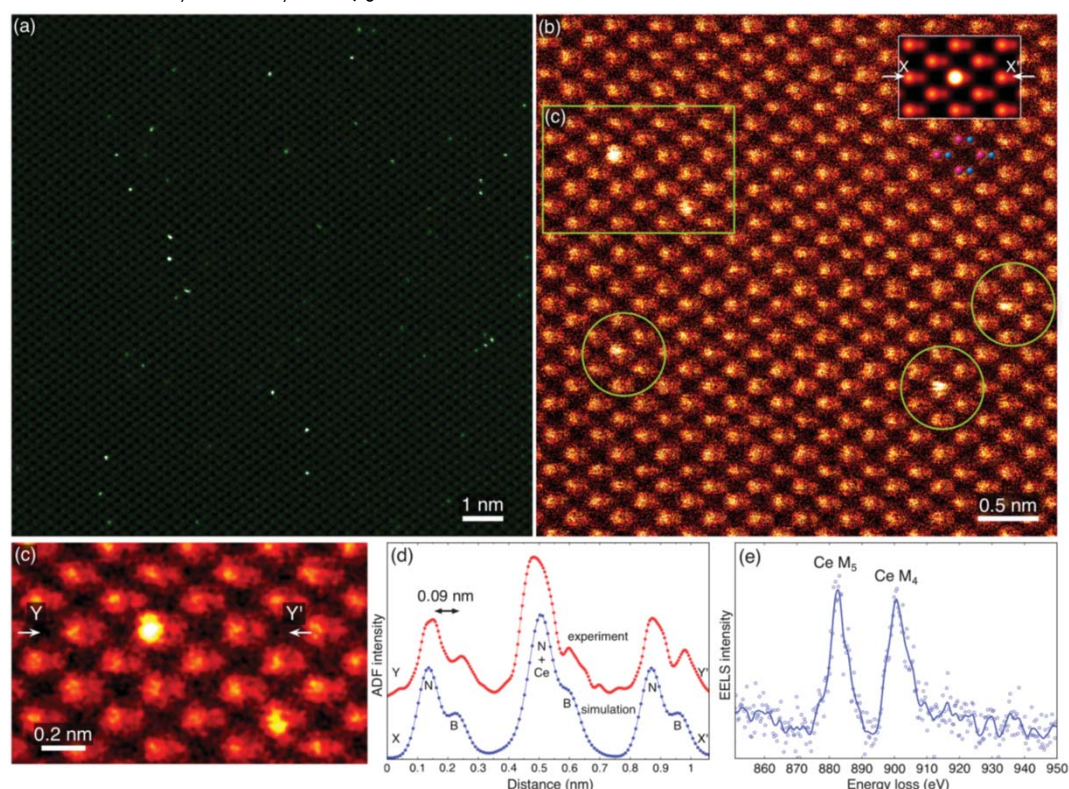


図1. Ce添加c-BN結晶のHAADF-STEM像, 強度プロファイル(a)-(d), およびEELSスペクトル(e)