

反応性真空アーク蒸着法によって生成した アナターゼ型 TiO₂ 膜の光学バンドギャップ

正員 滝川 浩史 (豊橋技科大)
 学生員 松井 健晃 (豊橋技科大)
 正員 榊原 建樹 (豊橋技科大)

Optical Bandgap of Anatase TiO₂ Film Prepared by Reactive Vacuum Arc Deposition Method

Hirofumi Takikawa, Member, Takaaki Matsui, Student-member, Tateki Sakakibara,
Member (Toyohashi University of Technology)

キーワード： 反応性真空アーク蒸着, アナターゼ型 TiO₂, 屈折率, 吸収係数, 光学バンドギャップ

アナターゼ型結晶の酸化チタン (TiO₂) は強い酸化活性力を持つ光触媒材料として知られ, 殺菌, 抗菌など環境浄化・保護分野での応用が検討されている⁽¹⁾。筆者らは, これまで, 反応性真空アーク蒸着法を用いてアナターゼ型 TiO₂ 膜が高速に生成できることを示した⁽²⁾。ここではその補足として, 光学バンドギャップの算定について述べる。

反応性真空アーク蒸着装置および成膜手順は文献(2)に示した。基板には, ソーダガラス基板 (26×38×1.0 mm, 屈折率: 1.523, 歪み点: 505 °C) を用いた。圧力 0.5 Pa で約 10 min 間の成膜後, 生成膜をチャンバから取り出し, 結晶化のため, 大気中のホットプレート上で 400 °C の加熱処理を約 1 時間行った。その後, X線回折分析により, 膜がアナターゼ型多結晶の TiO₂ であることを確かめた。

薄膜の光学バンドギャップは, 吸収端における膜の吸収係数-光子エネルギー特性から求められる。Tang らは, 透過率 T と反射率 R の波長特性を計測し, 次式を用いて吸収係数 α の波長特性を求めている⁽³⁾。

$$\alpha = -\frac{1}{d} \ln \frac{\sqrt{(1/T)^2(1-R)^4 + 4R^2} - (1/T)(1-R)^2}{2R^2} \dots \dots \dots (1)$$

ここで, d は膜厚である。一方, Martin らは, Swanepoel の手法⁽⁴⁾に基づき, 次式に従い, 透過率の計測結果のみから, 屈折率 n と d を求めた後, α を算出している⁽⁵⁾。

$$n = \sqrt{N + \sqrt{N^2 - s^2}} \dots \dots \dots (2)$$

$$N = 2s \frac{T_M - T_m}{T_M T_m} + \frac{s^2 + 1}{2} \dots \dots \dots (3)$$

$$\alpha = -\frac{1}{d} \ln(x) \dots \dots \dots (4)$$

$$x = \frac{E_M - \sqrt{E_M^2 - (n^2 - 1)^3(n^2 - s^4)}}{(n - 1)^3(n - s^2)} \dots \dots \dots (5)$$

$$E_M = \frac{8n^2s}{T_M} + (n^2 - 1)(n^2 - s^2) \dots \dots \dots (6)$$

ここで, T_M および T_m は, それぞれ, 透過率特性における極大値および極小値である。本論文では, 両者の手法で, 吸収係数を求めてみた。

図1に, UV-VIS スペクトロメータ (Varian社製, Cary 5) で計測した透過率および反射率の波長特性を示す。この透過率特性から式(2)および(3)を用いて計算した屈折率を図2に示す。ところで, Swanepoel の手法は, 吸収の強い波長範囲の屈折率の算定には適用困難である。そこで, 回転式分光エリプソメータ^{(6),(8)}によりエリプソメトリックパラメータ Δ および Ψ を計測し, Woollam⁽⁸⁾の光学特性解析シミュ

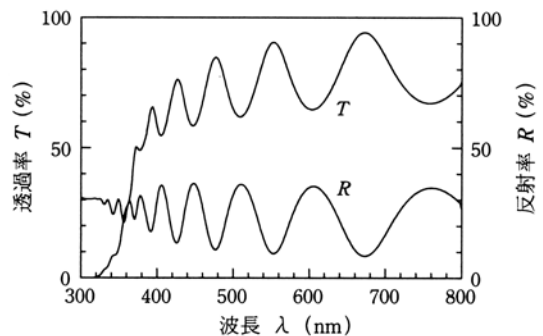


図1 アナターゼ型 TiO₂ 膜の透過率および反射率
Fig. 1. Transmittance and reflectance of anatase TiO₂ film.