

21. cBN のバンドギャップの圧力依存性

中 谷 政 明

立方晶窒化ほう素 (cBN) はダイヤモンドと類似の結晶構造をしており、物理的・機械的性質は非常によく似ている。ダイヤモンドに次ぐ熱伝導度と硬さを持つなど、その材料的な興味は強く持たれている。しかしながら、良質な単結晶の作成が困難であったため、その物性に関する情報は少なかった。まして高压下の実験データは非常に乏しい。そこで本研究では基本的な物性の一つであるバンドギャップの、圧力に対する変化を求めることを目的とした。

実験は透過光測定によって cBN の基礎吸収端を求め、その圧力変化によってバンドギャップの圧力依存性を調べた。常圧での cBN のバンドギャップの値は、6.1~6.5 eV であり吸収端は 2000 Å 付近の紫外域である。光学窓としてはこれより低波長領域まで透過性のある材料を必要とするので、光学窓兼アンビルとして人工サファイアを用いた対向アンビル装置を使った。これによって装置を真空状態にしなくても、約 1900 Å までの高压下の光吸収測定が可能となった。

実験の結果、cBN の吸収端は低波長側へシフトすること、つまりバンドギャップは大きくなること、そしてその圧力係数は 6.0 meV/GPa であることが判明した。この結果はダイヤモンドにおけるバンドギャップの圧力依存性と同じ傾向である。cBN のバンドギャップの圧力係数が正であることは第一原理による理論も予想していることであるが、その予想値は本実験の結果の 1/2 を下回る。このことは実験結果と理論予想値がほぼ一致したダイヤモンドの場合とは異なる。