

(111)相 LSMO/(001)ZnO 積層膜の格子マッチング計算 (界面歪みエネルギーとクーロン極性エネルギー)

Calculations of Lattice Matching for (111)LSMO/(001)ZnO ;

Interface Distortion Energy and Coulomb Energy

三重大工¹, アドウェル², マドラス大³, 東京工科大⁴, タテホ化学⁵, 豊島製作所⁶

○森俊貴¹, 岡本晃暢¹, 岡田聡¹, 與倉三好^{1,2}, Rita John³, 毛塚博史⁴,

庭野一久⁵, 本林秀文⁶, 遠藤民生¹

Mie Univ.¹, Adwel R&D Co.,Ltd², Univ. of Madras, India³, Tokyo U. Tech.⁴,

Tateho Chemistry⁵, Toshima mfg. Co.,Ltd⁶

○Mori Toshiki¹, Akinobu Okamoto¹, Akira Okada¹, Miyoshi Yokura^{1,2}, Rita John³, Hiroshi Kezuka⁴,

Kazuhisa Niwano⁵, Hidefumi Motobayashi⁶, Tamio Endo¹

E-mail: t.mori@em.elec.mie-u.ac.jp

1. はじめに

本研究では、磁場や温度で大きく変調できる p-n 接合の実現を目指し、Mn 系酸化物である p 型半導体の La(Sr)MnO₃ を、n 型半導体の ZnO 上に積層する。接合特性は、薄膜の結晶配向に依存するので、今回は面直-面内配向成長の実験結果を示し、それを説明するために界面エネルギー(格子マッチングによる歪みエネルギーと格子点の極性によるクーロンエネルギー)による説明を試みた。

2. 実験方法と計算方法

薄膜作成には、イオンビームスパッタ法を用いた。まず、基板上に ZnO 下層膜を、次に LSMO 上層膜を種々の基板温度 Ts で堆積した。堆積中は酸素分子(ML)もしくは酸素プラズマ(PL)を種々の酸素分圧 Po で供給した。XRD の θ -2 θ 測定によって薄膜の面直配向割合の Ts 依存性を調べた。また、 ϕ スキャン測定、極点測定、In-plane(逆格子マップ)測定により面内配向を調べた。

配向性を説明するために、まず面内の 2 次元的な軸を考慮した格子マッチングの計算を行った。 θ -2 θ 測定で得られた薄膜の d 値から面内格子の伸縮の許容限度を見積った。上層薄膜結晶の面内軸を許容範囲で伸縮させることによって、下層膜の格子点に一致する点を探し、それによって最小公倍数マッチングが起こるとした。この時、上層膜結晶は少し歪むことになるので、この歪み面積を結晶成長時の界面での歪みエネルギーと考えた。歪み面積が大きい場合は、その配向成長は起こりにくいと考えられる。以上の手順では、熱膨張による格子定数の変化を考慮し、歪み面積(エネルギー)の温度依存性を求めた。次に、上層膜と下層膜のイオン間のクーロンエネルギーを求め、その総和の温度依存性を求めた。以上の 2 つのエネルギーの温度依存性から面内配向の実験結果を検討した。面内配向では A モードと B モードを定義し、A モードとは上下層の結晶基本軸が平行になっている場合であり、B-mode とはそれ以外の場合である。

3. 結果

立方晶 LSMO は、六方晶(001)ZnO/ sapphire 基板上に(001)、(110)、(111)の 3 相が配向成長した。実験で(111)相は B-mode が配向成長していることがわかった。Fig.1 に示すように、(111)相は A-mode のほうが歪みエネルギーが小さいという計算結果が得られ、それは成長しやすいことを示唆しているので、実験結果(B)を再現できていない。逆に、Fig.2 では B-mode のほうがクーロンエネルギーを得をするという計算結果が得られ、B-mode のほうが成長しやすいことを示唆しており、格子点の極性を考慮すると実験結果を再現できている。同様に(001)、(110)相についても計算を行った。

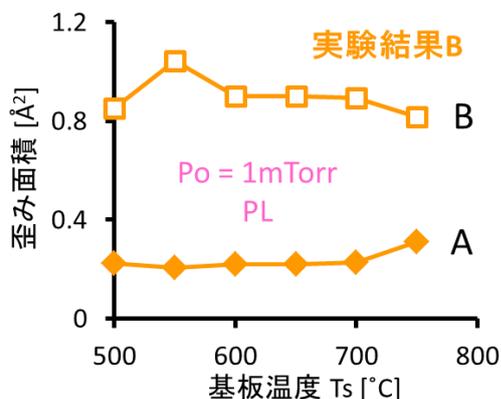


Fig.1 LSMO(111)の歪みエネルギーのTs依存性

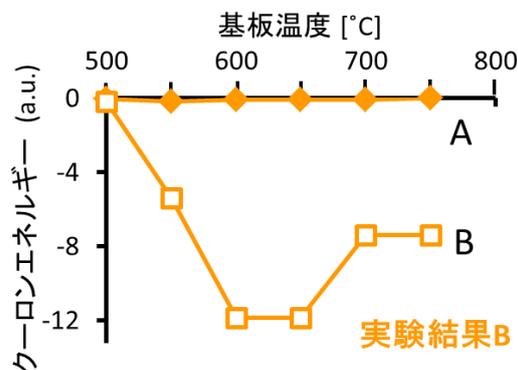


Fig.2 LSMO(111)のクーロンエネルギーのTs依存性