

LiH エピタキシャル薄膜の成長機構

Growth mechanism of a LiH epitaxial thin film

東北大院工¹, 東北大金研², 東北大 AIMR³○大口 裕之¹, 池庄司 民夫^{2,3}, 桑野 博喜¹, 白木 将³, 折茂 慎一^{2,3}, 一杉 太郎³Tohoku Univ. Graduate School of Engineering¹, Tohoku Univ. IMR², Tohoku Univ. AIMR³,○Hiroyuki Oguchi¹, Tamio Ikeshoji^{2,3}, Hiroki Kuwano¹, Shin-ichi Orimo^{2,3}, Susumu Shiraki³, Taro Hitosugi³

E-mail: oguchi@nanosys.mech.tohoku.ac.jp

【はじめに】 金属水素化物は、イオン伝導、水素貯蔵、磁性、超伝導、金属絶縁体転移などの多様な物性を示す興味深い材料である。近年、酸化物機能性材料のヘテロ界面では新物性の発現が多数報告されており、金属水素化物においてもヘテロ界面研究の展開、そして、水素化物エレクトロニクスの開拓が期待される。しかし、金属水素化物のエピタキシャル薄膜成長技術の発達が不十分なことや、成長機構についての理解が進んでいないことが、界面研究の障害となっている。そのような背景の中、我々は水素化リチウム (LiH) のエピタキシャル薄膜成長に成功し[1,2]、成長の基板依存性などを明らかにしてきた。そこで本講演では、LiH 薄膜の微視的な成長機構について報告を行う。

【実験】 真空中 (背圧 2×10^{-9} Torr) において、MgO(100)基板上に膜厚 1 μm 以上の Li 薄膜を室温で堆積した後、0.5 気圧の水素ガス雰囲気下で、液体状態の Li を水素化することにより LiH 薄膜を合成した。このプロセスを解析するため、第一原理分子動力学により、MgO(100)基板における LiH エピタキシャル薄膜成長過程のシミュレーションを行い、成長機構を原子レベルで明らかにした。

【結果】 MgO(100)基板と液体 Li の界面付近をシミュレートした結果を図 1(a)に示す。液体状態の Li 原子と O 原子の間には強い親和力が働いており、Li は MgO(100)基板表面では O 原子上のサイトを周期的に占有し、界面付近で Li が構造形成している。Mg 直上には空間があり、Li 液体中を拡散した H 原子がこの空間に入り、LiH 結晶が核生成する。このように、LiH の結晶核成長が MgO 基板表面から開始され、その結果エピタキシャル薄膜成長が進行するという成長機構が示唆される。

平坦な薄膜形成には、Li 液体が MgO 基板上で凝集せずに表面全体に広がることも必要である。図 1(b)は MgO(100)基板上に成長した LiH エピタキシャル薄膜表面の光学顕微鏡像を示す。平坦で均一な像が観察され、基板全体にわたって一様な薄膜が堆積しており、シミュレーションにより示唆される Li 原子と O 原子の間に働く強い親和力が重要であることを裏付けている。

[1] 大口ら, 第 60 回応用物理学会春季学術講演会

[2] 大口ら, 第 74 回応用物理学会秋季学術講演会

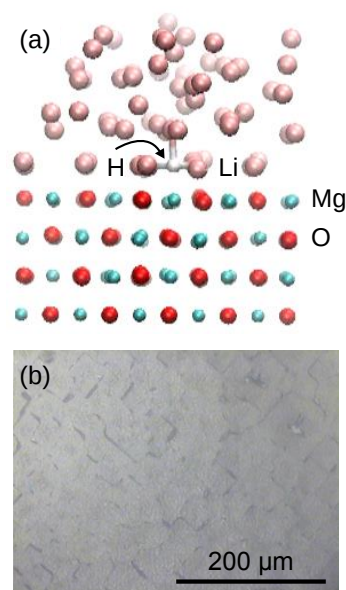


図 1 (a) 第一原理分子動力学により得られた MgO(100)基板と Li の界面の原子配置。青、赤、ピンク、白の球はそれぞれ Mg、O、Li、H を示す。基板温度として 327°C を仮定した。(b) MgO(100)基板上に成長した LiH エピタキシャル薄膜表面の光学顕微鏡像。平坦で均一な表面が観察された。黒く見える箇所は、Li の水素化に伴い[110]結晶方位に沿って生じたクラックである。