

極性 ZnO 単結晶表面の偏光依存硬 X 線光電子分光

Polarized Hard X-ray Photoemission Spectroscopy of Polar ZnO Single Crystal Surfaces

○大澤 健男¹, 上田 茂典¹, 鈴木 基寛², 大橋 直樹¹(1. 物材機構, 2. JASRI/SPRING-8)

○Takeo Ohsawa¹, Shigenori Ueda¹, Motohiro Suzuki², Naoki Ohashi¹

(1. NIMS, 2. JASRI/SPRING-8)

E-mail: ohsawa.takeo@nims.go.jp

【はじめに】 ウルツ鉱型結晶である酸化亜鉛 (ZnO) 半導体は, c 軸方向に沿って極性を有しており, その極性評価は電子構造をより良く理解するだけでなく, 電子デバイスや化学デバイスへと応用する上で重要である. 我々はこれまでに, 極性 $[c(+), c(-)]$ に基づく電子状態を非破壊に調べるにあたり, 硬 X 線と軟 X 線による光電子分光を測定し, 価電子帯に特徴的に現れるスペクトル形状に注目してきた.^[1,2] これらの極性に関連するスペクトル変化の起源を更に検討するにあたり, 硬 X 線での水平直線偏光および垂直直線偏光を励起光とし, 価電子帯スペクトルの偏光依存性を評価したので報告する.

【実験】 ZnO(0001) と (000 $\bar{1}$) 単結晶について測定を行った. 硬 X 線光電子分光 (HAXPES) 測定は, SPRING-8 BL15XU にて実施した. 励起光は 6 keV とした. 水平偏光 (H pol.) と, ダイヤモンド移相子を使用した垂直偏光 (V pol.) の両者において価電子帯スペクトルに注目し, その偏光依存性を測定した. 測定は室温で行った. また, 比較として, GaN 試料も測定した.

【結果】 図 1 に, ZnO(000 $\bar{1}$) 試料測定時の価電子帯スペクトルの偏光依存性を示す. 測定における直線偏光度 (P) は, $P = 1.0$ (H pol.) および $P = 0.7$ (V pol.) [精度 $\pm 5\%$] である. 2つのスペクトルを比較すると, V pol. では H pol. と比べてピーク強度が減少した. これは, V pol. での光イオン断面積が小さくなるためである. 次に, スペクトル形状に偏光依存性が見られた. 特に, 5 ~ 9 eV での形状変化が顕著であった. この結果は, GaN 試料においても観察されており, Zn 4s, Ga 4s の s 軌道成分によるものと考えられる. DFT 計算による局所状態密度をもとにスペクトルを再現した場合においても, 実験結果と良く整合しており, 当日は, 実験と計算を総括して, ZnO の電子状態を議論する.

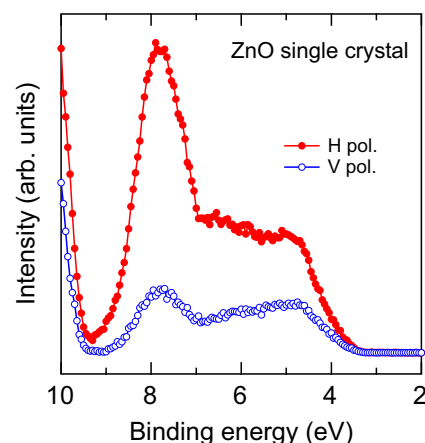


図 1: ZnO(000 $\bar{1}$) 単結晶試料における価電子帯スペクトルの偏光依存性 ($h\nu = 6$ keV).

参考文献

[1] Ohashi *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 122102 (2009).

[2] Williams *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 051902 (2012).