

TiO₂(100)面上の CaFe₂O₄ 薄膜のエピタキシャル成長

Epitaxial growth of CaFe₂O₄ films on TiO₂ (100) surface

東工大物質理工学院¹, KEK-PF², 元素戦略³ ○西山 奈菜¹, 増子 尚徳¹, 吉松 公平¹,

堀場 弘², 組頭 広志^{2,3}, 大友 明^{1,3}

Tokyo Tech. Dept. Chem. Sci. Eng.¹, KEK-PF², MCES.³, ○Nana Nishiyama¹, Hisanori Mashiko¹,

Kohei Yoshimatsu¹, Koji Horiba², Hiroshi Kumigashira^{2,3}, Akira Ohtomo^{1,2}

E-mail: nishiyama.n.ac@m.titech.ac.jp

【はじめに】CaFe₂O₄ (CFO) はバンドギャップが 1.9 eV の p 型半導体であり、鉄系酸化物の中では特異的に水の還元電位よりも伝導帯下端のエネルギーが高いため、可視光応答型の水分解光カソードに適していると考えられている[1]. しかし CFO 構造とよばれる特有の結晶構造 (Fig. 1, inset) を有するため、バルク単結晶の育成が困難であり、高压合成の例しか知られていない[2]. そこで本研究では、CFO(001)面とルチル(100)面の酸素配置の類似性に着目し、エピタキシャル安定化による CFO の合成を試みた.

【実験】パルスレーザ堆積法により、CFO 組成の焼結体ターゲットを用いて、基板温度 750°C、酸素分圧 10 mTorr の条件下で TiO₂ (100)基板上に薄膜を成長した. X 線回折 (XRD) の対称面反射から CFO 薄膜の面直配向性を、極点図測定から面内配向性を評価した.

【結果と考察】対称面の XRD パターン (Fig. 1) の $2\theta = 33.4^\circ$ に CFO 004 反射が観測され、TiO₂ (100)基板上に CFO 薄膜が(001)単一配向していることが分かった. また、極点図 (Fig. 2) の $2\theta = 33.2^\circ$, $\chi \approx 60^\circ$ に 6 つの CFO $\bar{3}02$ 反射が観測され、面内配向関係が TiO₂ (001) // CFO (010)であることが分かった. さらに、極点図上のスポット形状を詳細に解析することによって、面直から双葉のように微傾斜したツインドメインや、2 回回転対称の 6 つのスポットに対応する面内ドメインの存在が示唆された. このことは、CFO と TiO₂ で配列様式が異なる酸素八面体が界面で接続されることによって必然的に誘起されるエピタキシャル構造と考えられる. X 線吸収分光と可視光吸収分光による評価から Fe の価数が 3+であり、バンドギャップが 1.9 eV であることを確認した.

[1] S. Ida *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 17343 (2010).

[2] R. Das *et al.*, *Cryst. Growth Des.* **16**, 499 (2016).

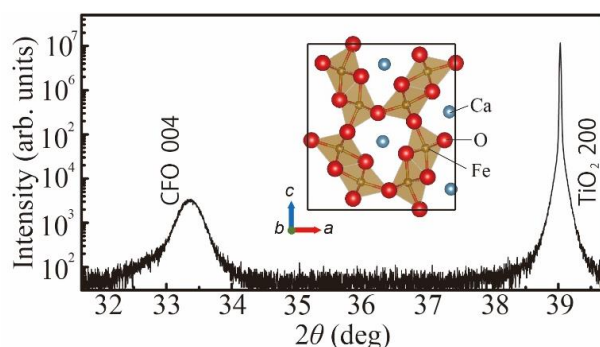


Fig.1. Out-of-plane XRD pattern of CaFe₂O₄ films around TiO₂ 200 reflection. Inset shows schematic CaFe₂O₄ structure.

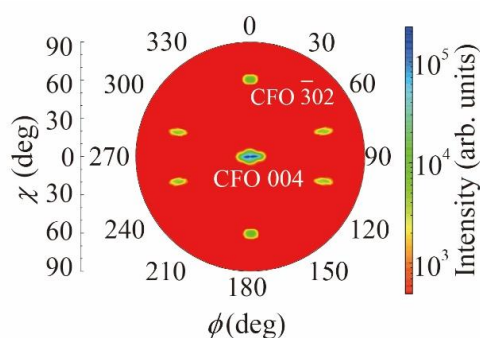


Fig.2. Pole-figure pattern of CaFe₂O₄ film taken at $2\theta = 33.2^\circ$, to which outer six-fold spots are assignable to $\bar{3}02$ reflections.