3DAPT を用いた(Zn, Sn, Mn)As_2 薄膜の Mn 原子空間分布の推定

Estimation of the Mn atomic spatial distribution of (Zn, Sn, Mn)As_2 thin film using 3DAPT

○篠田 美幸[†1], 佐藤 海[1], 豊田 英之[1], 大前 洸斗[1,2], 間山憲仁[3], 内富 直隆[††1]

○M.Shinoda[†1], K.Sato[1], H.Toyota[1], H.Oomae[1,2], and N.Uchitomi[††1]

[1] Nagaoka University of Technology, Japan

[2] National Institute of Technology, Kushiro College, Japan

[3]Toshiba Nano Analysis Co., Ltd., Japan

E-mail : [†]s153151@stn.nagaokaut.ac.jp, [††]uchitomi@nagaokaut.ac.jp

1. 研究背景

化合物半導体 $ZnSnAs_2$ は、分子線エピタキシー（MBE）によって InP 基板上に格子整合し、磁性元素の Mn を添加することにより室温で強磁性を発現する半導体スピントロニクス材料である[1]。$ZnSnAs_2$:Mn 結晶中で Mn がどのような分布をしているのか 3D アトムプローブトモグラフィー(以下 3DAPT)を用いて調べた結果、成長した $ZnSnAs_2$:Mn はスピノーダル分解により不均一な Mn 分布となっていることが分かった。強磁性半導体では、磁性元素のクラスタリングが、磁気特性に強く影響することが報告されている[2]。そこで、不均一 Mn 分布と磁気特性の関連性を調べるため $ZnSnAs_2$:Mn エピタキシャル薄膜において 3DAPT のデータをさらに解析、Mn 原子空間分布を再構成し、結晶構造内の Mn のクラスタリングを確認することを目的とした。

2. 実験方法

3DAPT の 3 次元原子像から取得した As 原子座標と、理論的に構成したカルコパイライト構造の $ZnSnAs_2$ の As 原子座標を比較し、3 次元原子像上でのユニットセルの位置を推定する。このとき、As 原子間の最短距離が、理論では 4.158Å、3 次元原子像では 4.171Å（平均）であり、近い値となった。3 次元原子像から 4 ユニットセル分（1 辺 11.76Åの立方体）の座標情報を取り出し、理想格子の $ZnSnAs_2$ に 3 次元原子像から得た Mn 原子の座標を重ね合わせる。Mn 原子周辺のカチオンサイトと Mn 原子の距離を測り、最近接のカチオンサイト(Zn, Sn)に Mn を置換することで結晶再構成を試みた。このとき、全ての Mn 原子は、理想格子の原子間最近接距離(2.56Å)よりも距離が短い 2.5Å以内にあるカチオンサイトに置換された。

3. 結果

Fig.1 に再構成前と再構成後の 3 次元原子像を示す。各原子 Zn（水色）、Sn（黄緑色）、As（ピンク色）、Mn（黄色）で構成される。Mn 原子 12 個のうち、Zn と Sn にそれぞれ 6 個ずつ Mn 原子が置換された。また、Fig.2 は再構成結果の Mn と As のみ表示したもので、ここから Mn が 1 つからなる Mn monomer と、Mn が 4 つからなる Mn tetramer の Mn-As のクラスタリングを確認することができた。

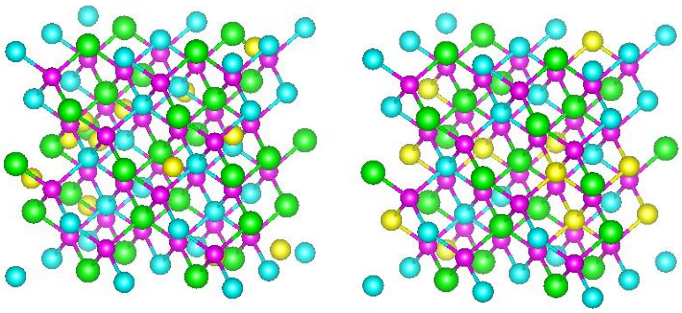

Fig.1 Mn 原子位置補正前（左）と補正後（右）

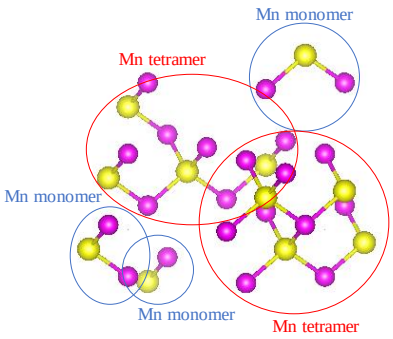

Fig.2 Mn-As クラスタの形態

4. 参考文献

[1] Naotaka Uchitomi, Shiro Hidaka, Shin Saito, Joel T. Asubar, and Hideyuki Toyota. Journal of Applied Physics 123, 161566 (2018)
[2] Hannes Raebiger, Andrés Ayuela, and J. von Boehm. PHYSICAL REVIEW B 72, 014465 (2005)

© 2018年 応用物理学会