



# Mg を固溶させた ZnO 薄膜の局所構造 (1)

岡島敏浩<sup>1</sup>、賈軍軍<sup>2</sup>

1.あいちシンクロトロン光センター、2.早稲田大国際理工学センター

キーワード : XAFS, ウルツ鉱型酸化物合金, 圧電性

## 1. 背景と研究目的

ウルツ鉱型窒化物合金の場合、カチオン置換は、四面体構造の性質に起因して、ウルツ鉱型構造の  $c$  軸に沿った局所的な圧電性を維持することができ、圧電性を増大させる内部ひずみを生じさせる。これは、(Sc, Al)N 系または(Yb, Al)N 系で観察され、圧電定数  $e_{33}$  はドーパントの量とともに急速に増大する。これに対し、典型的なウルツ鉱型酸化物合金 (Mg, Zn)O では、圧電応答は Mg 濃度に弱い依存性しかない。一方、置換カチオンはアニオンと局所的なバイピラミッド構造、すなわち  $c$  軸に沿った鎖状構造を形成し、窒化物合金において弾性軟化を引き起こすことが示された[1]。これは(Mg, Zn)O 系では当てはまらない。このことは、(Mg, Zn)O 系における圧電性の起源を、原子レベルの陽イオンの局所構造から研究する必要があることを示唆している。本研究では、XAFS により Mg の添加量に対する  $Mg_xZn_{1-x}O$  の局所構造の変化を明らかにすることを目的としている。

## 2. 実験内容

Mg K 吸収端における XAFS 測定をあいちシンクロトロン光センター-BL1N2 で全電子収量法と部分蛍光収量法の同時測定で行った。RF スパッタリング法で熔融石英基板上に成膜した  $Mg_xZn_{1-x}O$  ( $x = 0.15, 0.25, 0.35$ ) 膜を、基板からはがし取り、試料ホルダーに張り付けた In シート上にこすりつけて測定試料とした。測定は、室温、超高真空下で行った。

## 3. 結果および考察

図 1 に、 $Mg_xZn_{1-x}O$  の各試料から得られた Mg K 吸収端の EXAFS スペクトルのフーリエ変換した結果を示す。1.6 Å 付近に見られるピークは第一近接配位の Mg-O に起因するものである。各試料から得られた第一近接配位のピークはほぼ同様な形状をしている。第一近接配位 (Mg-O) のピークをフィッティングした結果を表 1 に示す。今回の解析では、Mg が Zn サイトを置換していると仮定し、配位数を 4 に固定してフィッティングを行った。いずれの試料においても Mg-O の結合距離は 1.99 Å と得られた。今後、別に測定した BL5S1 で行った Zn K 端での EXAFS 測定の結果もあわせて、Mg の添加量に対する  $Mg_xZn_{1-x}O$  の局所構造を明らかにする。

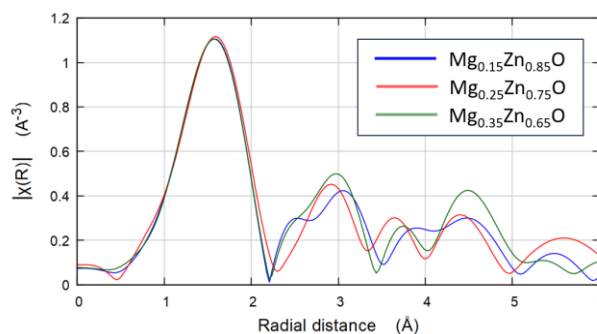


図 1  $Mg_xZn_{1-x}O$  ( $x = 0.15, 0.25, 0.35$ ) の Mg K-edge における EXAFS スペクトルのフーリエ変換

表 1  $Mg_xZn_{1-x}O$  ( $x = 0.15, 0.25, 0.35$ ) の第一近接配位のフィッティング結果

sample	N	d(Mg-O) / Å	D.W.
$Mg_{0.15}Zn_{0.85}O$	4	1.98(1)	0.0074(8)
$Mg_{0.25}Zn_{0.75}O$	4	1.99(0)	0.0077(11)
$Mg_{0.35}Zn_{0.65}O$	4	1.99(0)	0.0073(9)

## 4. 参考文献

1. J. Huang, Y. Hu, and S. Liu, Phys. Rev. B 108, 144106, (2022).