

## ZnO 中の Mn 原子周辺局所構造と磁性に関する研究

山田浩臣<sup>1</sup>、小田泰史<sup>2</sup>、田淵雅夫<sup>3</sup>、竹田美和<sup>2</sup><sup>1</sup>名大工、<sup>2</sup>名大院工、<sup>3</sup>名大 VBL

## 【はじめに】

Mn 添加 ZnO は、室温以上のキュリー温度を持つ希薄磁性半導体になり得ると予測され、スピントロニクスデバイス等に应用できる材料として期待されている[1]。これまでの研究によると Mn 添加 ZnO 薄膜中の Mn の磁化値( $\mu_B/\text{Mn ion}$ )は Mn 濃度の増加に伴って減少する。これは反強磁性的超交換相互作用を持つ、Mn-O-Mn 構造が形成されたためと考えられる。しかし測定された磁化値の値には同じ Mn 濃度でもバラツキがあり、Mn が Zn をランダムに置換したものとは違う特異的な構造が形成されている可能性がある。そこで本研究では XAFS 測定によって、Mn 添加 ZnO 薄膜中の Mn 原子周辺局所構造を調べ、磁性との関係について考察した。

## 【XAFS 解析結果】

本研究では Mn 濃度 3.5, 5.9, 14.1at% の Mn 添加 ZnO 試料を対象として、まず EXAFS 測定を行った。測定は入射 X 線の電場ベクトル E を ZnO の c 面に垂直(E ⊥ c)、平行(E // c)にする二つの条件で行った。ZnO 中の Mn 周辺局所構造のモデルとして、Mn が Zn サイトを置換し、Mn 濃度が増加した時には第二近接の Zn サイトのうちの 1 つをも Mn 原子が置換すると考えた。このモデルの理論計算スペクトルは測定データに近いスペクトルとなったため測定データと理論計算とのフィッティングを行い、Mn 周辺の第二近接原子までの原子間距離と配位数の値を得た。

図 1 に Mn の第一近接と第二近接の配位数を示す。Mn 濃度に比例して Mn が増加し、Zn が減少する傾向が見られた。これらの配位数は Mn が Zn をランダムに置換しているときの値とほぼ一致した。このことから ZnO 中の Mn は Zn を置換した位置にあり、置換はランダムに起きていると考えられる。

続いて図 2 に XANES 測定の結果を示す。入射 X 線の偏光方向が異なる条件の XANES スペクトルには、明確な形状変化が確認された。このことから Mn 周辺局所構造に配向性があり、かつ異方性があることがわかった。これは Mn が母体の Zn を置換しているという EXAFS の結果とも一致している。従って、Mn 添加 ZnO 試料の Mn は Zn をランダムに置換した位置にあり、特異的な構造は作っていないことがわかった。

EXAFS 測定の結果から、Mn 原子周辺の原子配置にはひずみが見られた。そこで第二近接に Mn があって Mn-O-Mn 構造になっている場合について Mn 原子周辺の原子の立体配置と磁性の関係を検討した。その結果、ひずみが交換積分の大きさなどに及ぼす影響は数%以下で、Mn 添加 ZnO の磁性に大きな影響を与えないことがわかった。

[1]Detl,T.etal.,Science 287 (2000) 1019

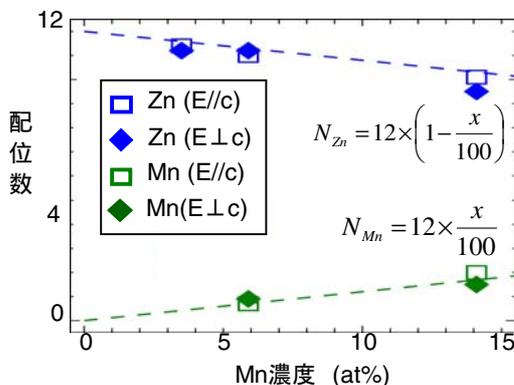


図 1 . Mn 第二近接の配位数

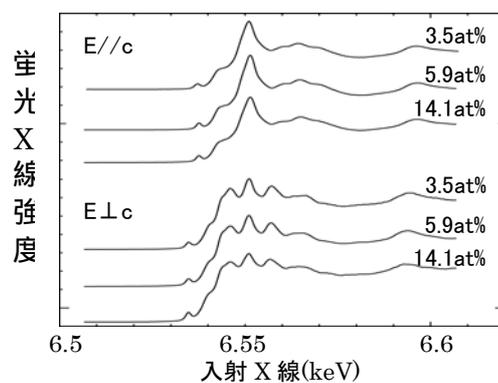


図 2 . XANES 測定結果