

情報担体とその集積のための材料・デバイス・システム
2020 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

清水 荘雄

物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点
独立研究者

ウルツ鉱型極性材料による強誘電トンネル接合素子の創製と物性解明

§ 1. 研究成果の概要

本研究では新規強誘電体材料であるウルツ鉱型強誘電体材料について、強誘電体トンネル接合素子応用を目指した材料開発と、特に界面に着目した強誘電体物性の解明を目的として研究を行っている。二年次にあたる2020年度は、(1)ウルツ鉱型強誘電体材料のエピタキシャル成長、(2)ウルツ鉱型強誘電体材料の分極反転に対する密度汎関数法を用いた理論的検討を主として行った。

(1)ウルツ鉱型強誘電体材料のエピタキシャル成長については、導電性を持つNb-doped SrTiO₃ (Nb:STO) 基板上にSc濃度の異なる(Al,Sc)N薄膜を作製した。Nb:STO基板上に作製した(Al,Sc)N薄膜は面内に基板と特定の方角関係を持っていることからエピタキシャル成長していることが確認できた。一方で、この面内の方角関係はSc濃度によって変化していることがX線回折測定から明らかになった。またこれらの膜において、Sc濃度9-37%の組成域において、強誘電性を確認することができた。Sc濃度が大きな組成、またScが導入されていない組成について分極反転が観測されない要因について今後さらなる調査を行う予定である。

(2)ウルツ鉱型強誘電体材料の分極反転に対する密度汎関数法を用いた理論的検討については、分極反転が起こる場合に考えられる中間状態とのエネルギー差を考えることによって、軸性応力化において抗電界が小さくなりうることをはじめとして、機械的な変形によって抗電界を低減できる可能性を示すことができた。この理論的検討は、熱歪などを用いた実験的検証と対応させることができています。

また、これら以外の成果として、10nm程度の薄膜においても(Al,Sc)Nの残留分極が劣化しないこと、さらに(Ga,Sc)Nという新しい物質での強誘電性の確認等の研究も行った。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Impact of Deposition Temperature on Crystal Structure and Ferroelectric Properties of (Al_{1-x}Sc_x)N Films Prepared by Sputtering Method”, Shinnosuke Yasuoka, Takao Shimizu, Akinori Tateyama, Masato Uehara, Hiroshi Yamada, Morito Akiyama, and Hiroshi Funakubo, *Phys. Sta Solidi (a)* 218, 2100302, 2021.
- 2) “Thickness scaling of (Al_{0.8}Sc_{0.2})N films with remanent polarization beyond 100 μC cm⁻² around 10 nm in thickness”, Ryoichi Mizutani, Shinnosuke Yasuoka, Takahisa Shiraishi, Takao Shimizu, Akinori Tateyama, Masato Uehara, Hiroshi Yamada, Morito Akiyama, Osami Sakata, and Hiroshi Funakubo, *Appl. Phys. Express* 14, 105501, 2021.
- 3) “Demonstration of ferroelectricity in ScGaN thin film using sputtering method”, Masato Uehara, Ryoichi Mizutani, Shinnosuke Yasuoka, Takahisa Shiraishi, Takao Shimizu, Hiroshi Yamada, Morito Akiyama, and Hiroshi Funakubo *Appl. Phys. Lett.* 119, 172901, 2021.
- 4) “First principle study of the phase transition and polarization switching in AlN”, Kota Hasegawa, Takao Shimizu, and Naoki Ohashi, *J. Ceram. Soc. Jpn.* accepted. 2022.