

ミスフィット転位に誘起された PMN-PT/STO 界面変調構造

東北大学金属材料研究所 木口賢紀 白石貴久 今野豊彦
東北大学大学院工学研究科 範 滄宇

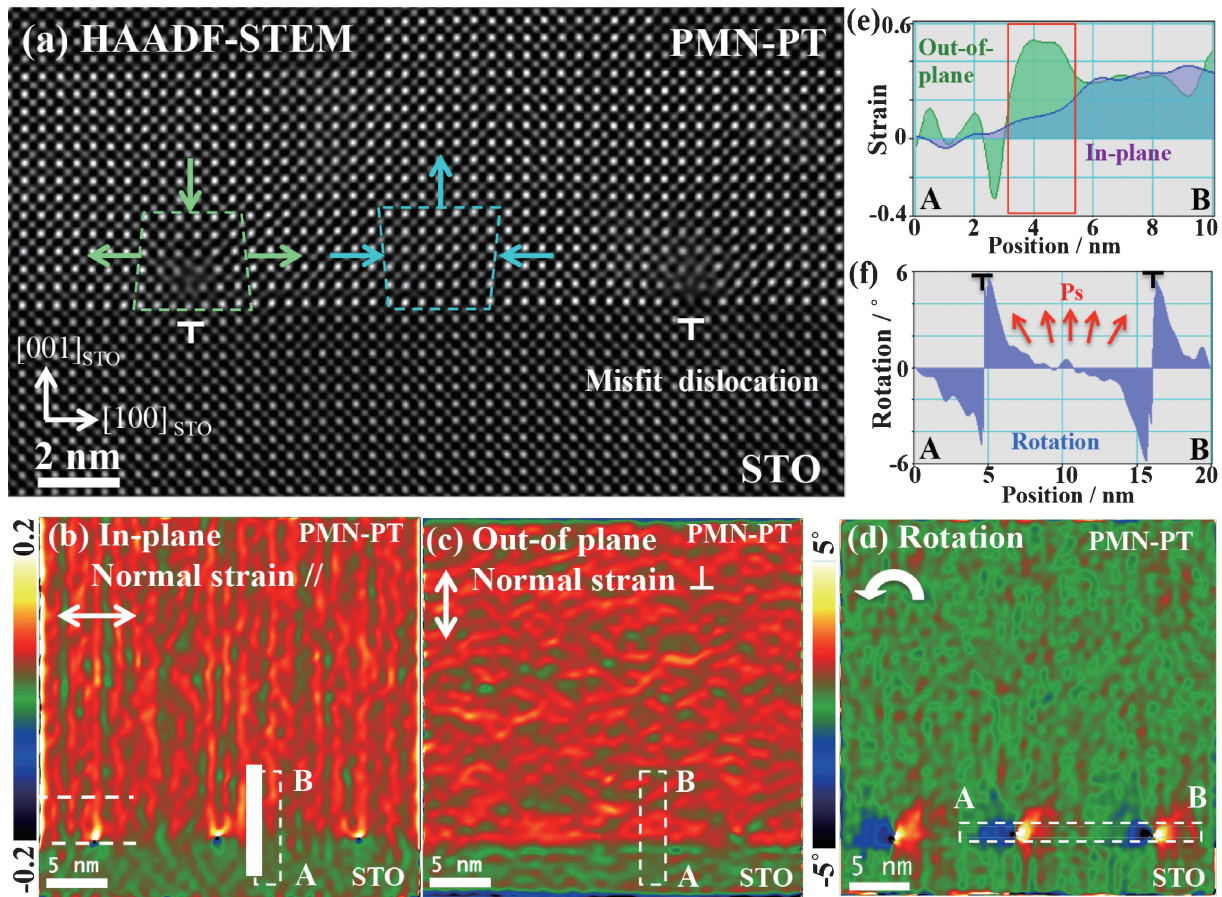


Fig. 1 PMN-PT エピタキシャル薄膜の(a) HAADF-STEM像, 歪みマップの(b) 面内垂直歪み成分, (c) 面外垂直歪み成分, (d) 剛体回転成分, (e) (b) (c) のラインプロファイル, (f) (d) ラインプロファイル.

Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-PbTiO₃ (PMN-PT) は巨大な誘電・圧電特性を示し、超音波アクチュエーターなど電子デバイスとして重要な材料である。Fig. 1 (a) は、Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-20 mol% PbTiO₃ (PMN-PT) 薄膜の HAADF-STEM 断面像で、SrTiO₃ (100) 面上に Cube-on-cube の方位関係でエピタキシャル成長している。原子レベルで急峻な薄膜/基板界面に沿って約 10 nm の周期で $\mathbf{b} = -\mathbf{a}[100]$ の刃状のミスフィット転位が導入されている⁽¹⁾。この転位芯の周囲(緑色点線)と隣接する転位間の領域(青色点線)に注目すると、転位芯の周囲では薄膜側に単位胞 1 個分の原子配列が抜けることで上に向かって収縮した台形型、転位間では上側に向かって膨張した台形型に原子が配列し、上下非対称な歪み勾配の存在を示している。Fig. 1 (a) を含む領域の幾何学的位相解析により、この原子変位場を SrTiO₃ 基板に対する歪み量として表したのが Fig. 1 (b) (c) であり、それぞれ界面に平行な垂直歪み成分と面外方向の垂直歪み成分の分布を示す⁽¹⁾。Fig. 1 (b) (c) の白点線で囲んだ領域 AB の膜厚方向プロファイルを Fig. 1 (e) に示す。Fig. 1 (a) で界面直上 2-3 nm の青点線領域では、PMN-PT 薄膜は面内方向に収縮、面外方向に伸張しており、バルク状態では擬立方晶(菱面体晶)相の組成で

あっても、ミスフィット転位が作り出す弾性場により正方晶相に向かって歪んだ単斜晶相であることを示している⁽¹⁾。つまり、成膜温度で格子ミスマッチが緩和するように転位が導入されるが、転位の作り出す弾性場によって界面層に対称性が破れた構造が形成される。Fig. 1 (a) で界面に平行な原子配列に注目すると、膜厚方向に正弦曲線の周期的原子変位場が存在する。Fig. 1 (d) (f) に格子回転マップと点線領域 AB の面内方向プロファイルを示す⁽¹⁾。転位芯の近傍では ±6° の範囲で、転位の中間領域では ±1-2° の範囲で格子回転が連続的に変化、つまり結晶の対称性・分極軸が局部的に回転していることを示す。この構造変調は、歪み勾配によって分極が誘起される「フレクソエレクトリック効果」発現の可能性を示唆している。本観察結果は、ミスフィット転位の弾性場に誘起されたフレクソエレクトリック効果を利用した圧電材料研究の更なる展開が期待される。

文 献

- (1) T. Kiguchi, C. Fan, T. Shiraishi and T. J. Konno: Jpn. J. Appl. Phys., **56** (2017), 10PB12.
(2018年10月1日受理)[doi:10.2320/materia.58.97]

Misfit Strain Induced Interface Structure in PMN-PT Epitaxial Thin Films; Takanori Kiguchi, Cangyu Fan, Takahisa Shiraishi and Toyohiko J. Konno

Keywords: STEM, PMN-PT, strain

TEM specimen preparation: ion milling TEM utilized: JEM-ARM200F ColdFEG (200 kV)