28p-D3-1

面内分極軸配向した(100)$PbTiO_3$エピタキシャル薄膜のドメイン構造
Domain structure in (100)-oriented epitaxial $PbTiO_3$ thin films with in-plane polarization.

東工大院 [1]，名大 [2]，JST さきがけ [3]　°江原祥隆 [1]，山田智明 [2,3]，舟窪浩 [1]
Tokyo Tech. [1] Nagoya Univ. [2], JST-PRESTO [3] °Y. Ehara [1], T. Yamada [2,3] and H. Funakubo [1]
E-mail: ehara.y.aa@m.titech.ac.jp

【はじめに】強誘電体のドメイン構造は強誘電体の物性を大きく決定付けることが知られている。代表的な材料である$BaTiO_3$や$PbTiO_3$において詳細なドメイン構造解析を数多くされている。特にそれらのナノロッドや極薄膜ではトロイダル構造等の特殊なドメイン構造が報告され、注目されている。[1,2] 我々は(100)$KTaO_3$単結晶基板上に作製した$PbTiO_3$薄膜では、約50nm以下の膜厚でそれぞれ完全(100)配向(*a*ドメイン)していることを報告した。[3] Fig.1に、面内に(100)配向した50nmの膜について$PbTiO_3$膜のドメイン構造の解析結果の模式図を示した。$PbTiO_3$のユニットセルの[101]/[011]方向の面間隔$[(a^2+c^2)^{0.5}$=0.5696 nm]が$KTaO_3$の[110]方向の面間隔$[(a^2+c^2)^{0.5}$=0.5641 nm]とよく一致し(格子不整合1.0%)、$PbTO_3$膜が面内に二つの方向のドメインを有している。しかし、$KaTaO_3$基板の[100][010]方向と$PbTiO_3$膜の[100][010]方向は傾いていることがわかる。ここで膜厚が薄くなると、基板からの拘束が強くなり、ドメイン構造の傾きが小さくなる可能性が考えられる。そこで、今回は膜厚によるドメイン構造の変化を報告する。

【実験】(100)$KTaO_3$基板(a = 0.3989 nm)上に，膜厚約2 nmから30 nmの(100)配向したエピタキシャル$PbTiO_3$膜をMOCVD法により作製した。結晶構造は視斜角入射X線回折測定 (GI-XRD)を用いて評価した。

【結果】膜厚を変えた作製した膜では、膜厚の減少に伴って、*c*/*a*比が減少するのが確認され、膜厚2nmではc/a=1.02となった。Fig.2(a)に*c*/*a*比に対する$PbTiO_3$膜の[101]方向の面間隔 $[(a^2+c^2)^{0.5}]$を示した。しかし[101][011]方向の面間隔は*c*/*a*比が変化しても一定の値を維持しその値はバルクの値よりも小さいことが明らかになった。この値は、$KTaO_3$基板の[110]方向の面間隔と一致しており、$PbTiO_3$と$KTaO_3$の格子整合がこの方向には維持されていることが明らかになった。Fig.2(b)には$PbTiO_3$膜の[100]/[010]方向での傾き角(*ω*)を示した。傾き角は膜厚が2nmで最小値を示し、膜厚が増加して$PbTiO_3$膜の*c*/*a*比が増加するに従い、直線的に増加している。これらは幾何学的な式$\{[2\tan^{-1}(c/a)-90^{o}]/2=\omega\}$によく一致していることがわかり、$PbTiO_3$の結晶構造およびドメイン構造が膜厚によって変化していることが確認された。

【参考】(1) K.S.. Lee *et al.*, J. Appl. Phys. **90**, (2001) 4097.　(2) A.Schilling *et al.*, Nano. Lett.. **9,** (2010) 3359.
(3) 碇山他，秋季第67回応用物理学会学術講演会予稿集 31p-V-2, p523 (2006)

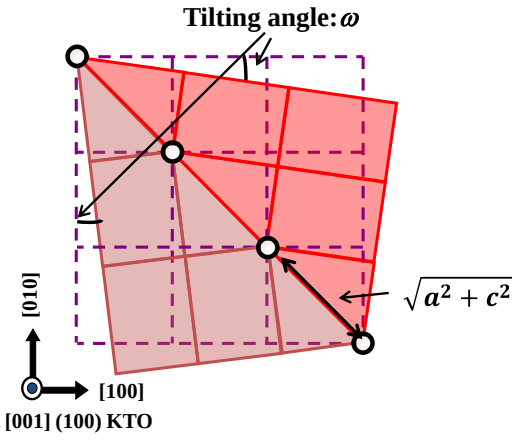

Fig.1 Schematic drawing of the geometrical domain structure for (100) $PbTiO_3$ films on (100)$KTaO_3$ substrate.

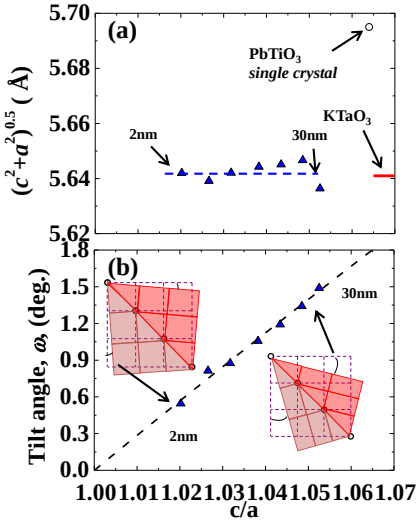

Fig.2 (a) Lattice spacing along [101]/[011] $[(a^2+c^2)^{0.5}]$ and (b) tilting angle(*ω*) as a function of tetragonal distortion (*c*/*a*) of $PbTiO_3$ films.

© 2013 年　応用物理学会