分極効果で変調される強誘電体 $BaTiO_3$ 薄膜の電子構造

Direct observation of bent band structure on ferroelectric $BaTiO_3$ II

岡山大院自然 [1]，CentraleSupélec[2]，名古屋大 IMaSS[3]，東工大フロンティア材料研 [4]，
熊本大院 [5]，学習院大理 [6]，岡山大基礎研 [7]，JASRI / SPring-8[8]
○押目 典宏 [1]，狩野 旬 [1,2]，池永 英司 [3]，安井 伸太郎 [4]，日隈 聡士 [5]，池田 直 [1]，
濵嵜 容丞 [6]，安原 颯 [4]，横谷 尚睦 [7]，伊藤 満 [4]，藤井 達生 [1]，保井 晃 [8]
Grad. Sch. of Sci. Tech., Okayama Univ.[1], CentraleSupélec[2], IMaSS, Nagoya Univ. [3], MSL, Tokyo Tech. [4],
Grad. Sch. of Sci. Tech., Kumamoto Univ. [5], Gakushuin Univ. [6], RIIS, Okayama Univ.[7], JASRI[8],
○Norihiro Oshime[1], Jun Kano[1,2], Eiji Ikenaga[3], Shintaro Yasui[4], Satoshi Hinokuma[5], Naoshi Ikeda[1],
Yosuke Hamasaki[6], Sou Yasuhara[4], Takayoshi Yokoya[7], Mitsuru Itoh[5], Tatsuo Fujii[1], Akira Yasui[8]
E-mail: sc421235@s.okayama-u.ac.jp

強誘電体のバンド構造は，電気分極が作る電場により結晶深さ方向に対してエネルギーシフトすることが予想される。この電子構造はバンドベンディングと呼ばれ，金属−強誘電体接合系[1]や光起電力デバイス[2]における特異な電子伝導の主要な発現機構だと考えられる。

前回は，$BaTiO_3$ (BTO) 薄膜について角度分解硬 X 線光電子分光 (AR-HAXPES) 実験を行い，スペクトルの深さ依存性から内殻の原子軌道がエネルギーシフトすることを見出した[3]。今回，軌道混成をもつ価電子帯についてもバンドベンディング構造があることを見出したので報告する。

図 1 に BTO の価電子帯の AR-HAXPES スペクトルを示す。BTO の価電子帯は，一部 Ti-3*d* と O-2*p* が混成していることが知られており[4]，我々の結果からも，A が純粋な O-2*p* 軌道，B と C は Ti-3*d* と O-2*p* が混成していることがわかる。試料表面から基板側に向かうに従い，状態 A, B, C の結合エネルギーは高エネルギー側へシフトしている。このエネルギーシフトの方向は電気分極の向きから予想されるバンドベンディングのものと一致する。特に混成状態 (B, C) でのエネルギーシフトが顕著である。このシフト量の違いは，Ti−O 間の共有結合が分極形成を担うことを示唆する。

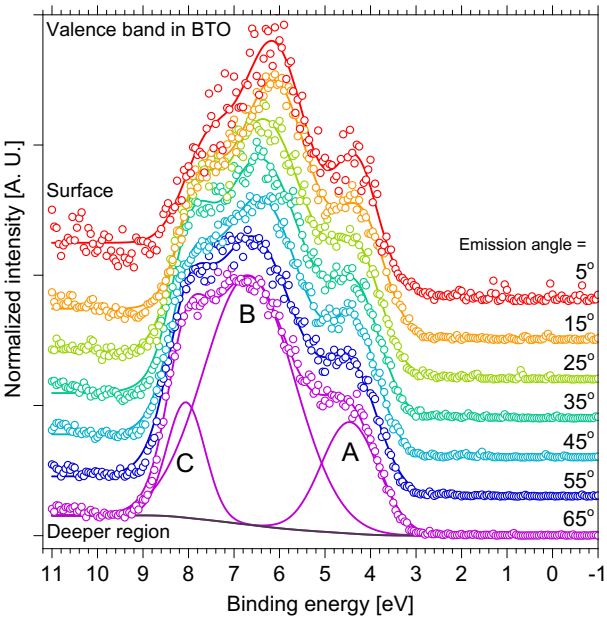

図 1. BTO の価電子帯の AR-HAXPES スペクトル

[1] X. Liu *et. al.*, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 197602 (2016).
[2] H. Matsuo *et. al.*, *Appl. Phys. Lett.* **108**, 032901 (2016).
[3] 押目典宏ほか，「第 78 回応用物理学会秋季学術講演会」7a-PA6-4.
[4] P. Pertosa *et al.*, *Phys. Rev. B* **17,** 2011 (1978).