金属所在铁电异质界面发现极化巨大增强现象

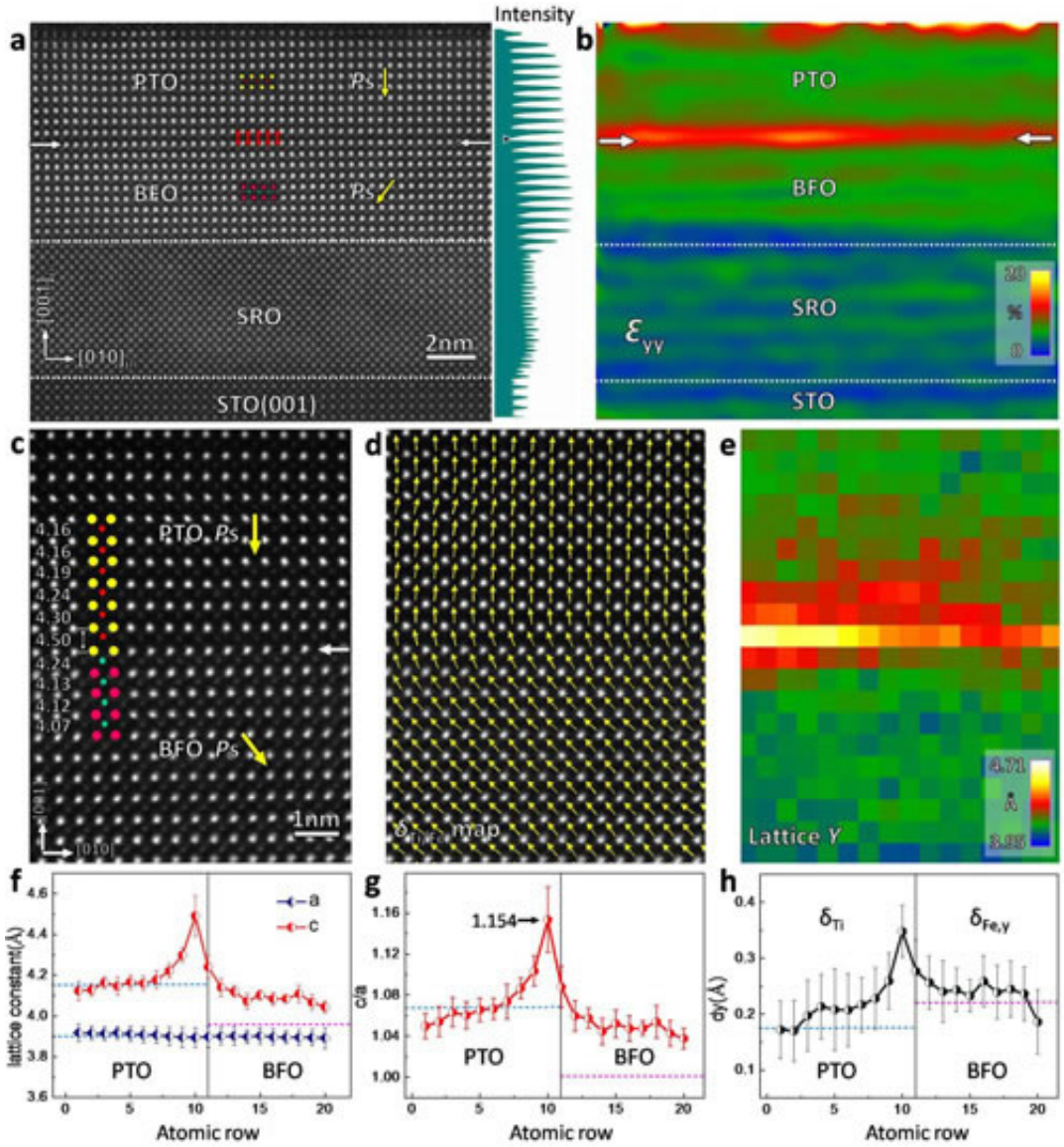

图1.
$BiFeO_3/PbTiO_3$
薄膜界面处的晶格参数，应变和离子位移分析。在$BiFeO_3/PbTiO_3$
界面附近，不仅面外晶格参数（c）显著拉长，Ti和Fe沿面外方向的离子位移（δTi，δFe）也显著增大，预示界面附近$PbTiO_3$中铁电极化显著增大。

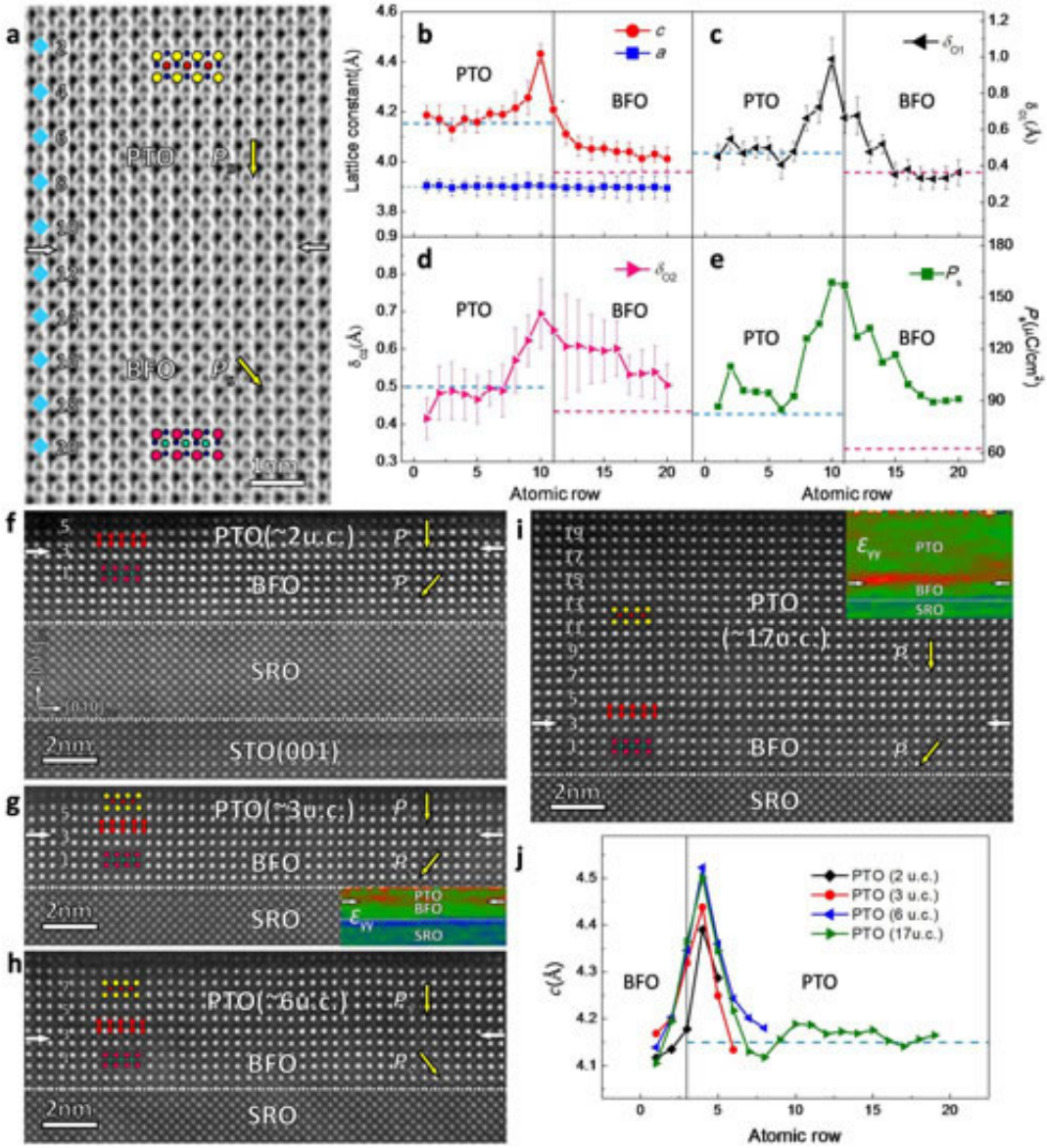

图2.（a-e）ABF-STEM像进一步验证$BiFeO_3/PbTiO_3$界面极化提高。（f-j）$PbTiO_3$层厚度不同时（2、3、6、17单胞），$BiFeO_3/PbTiO_3$界面处都存在面外晶格显著拉长现象，预示$PbTiO_3$厚度减小到2单胞时，极化仍显著增强。

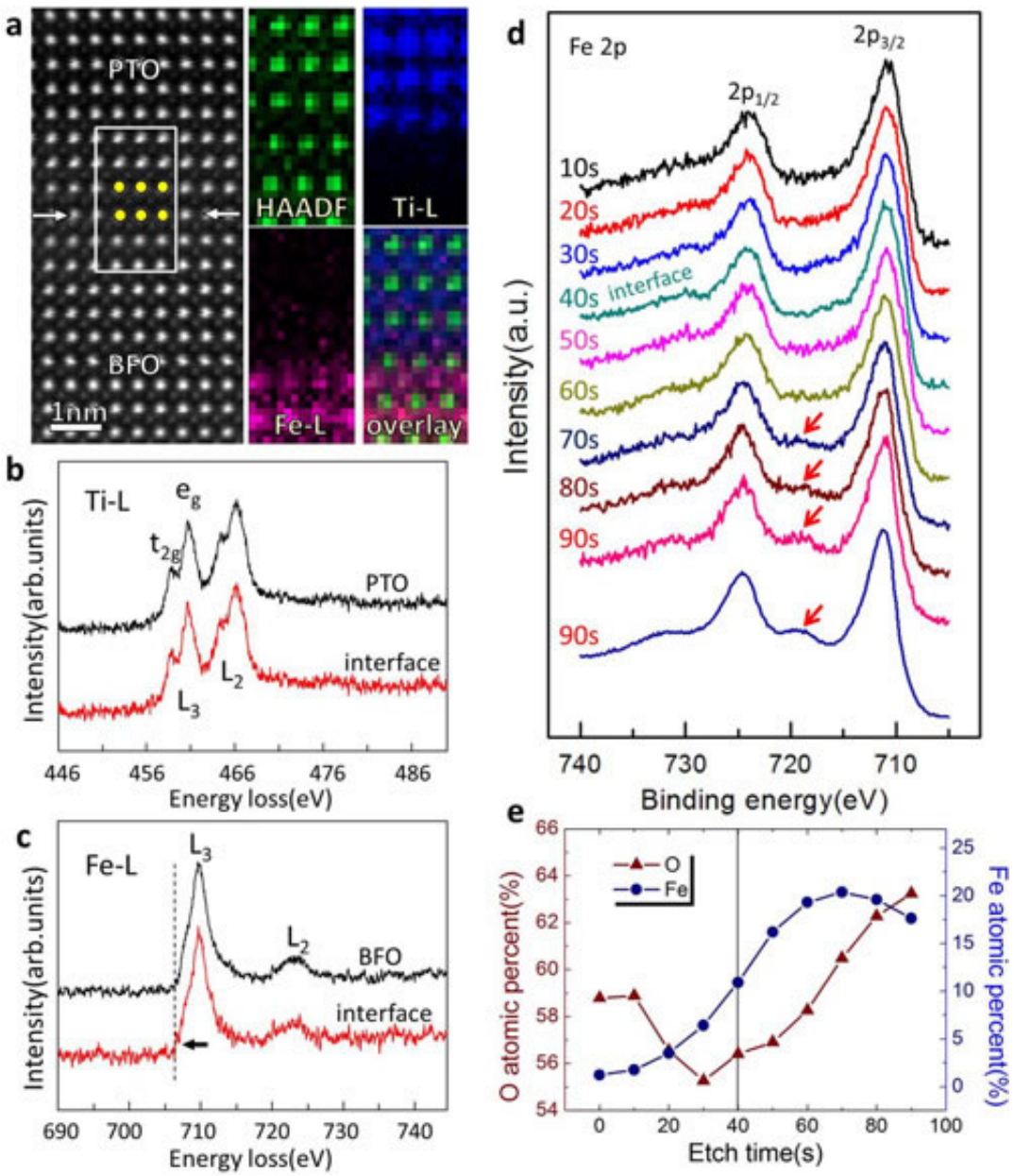

图3.
$BiFeO_3/PbTiO_3$界面的电子能量损失谱(a-c)和X射线光电子谱(d-e)分析表明，在$BiFeO_3/PbTiO_3$界面处存在氧空位聚集以及Fe^{3+}向Fe^{2+}的转化。

铁电材料由于具有铁电、介电、压电、热释电等丰富的物理性能，被广泛应用于非易失性铁电存储器、电容器、制动器、热释电探测器等电子器件中。为满足电子器件小型化的发展需求，铁电体需要以低维薄膜的形式集成到电子器件中。但是，随着薄膜厚度的减小，在异质界面去极化场的作用下，铁电极化会显著降低甚至消失，如何保持甚至增强超薄铁电体的极化是该领域长期以来面临的基础性科学难题。

中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家（联合）实验室固体原子像研究部的界面结构研究团队长期致力于材料基础科学问题的电子显微学研究，经过多年的学术积累，近来他们在解决上述科学难题方面取得新进展。研究员马秀良、朱银莲和博士刘颖等人提出充分利用异质界面两侧不同的自由度，构筑在界面处同时具有化学价态不连续与铁电极化不连续的$PbTiO_3/BiFeO_3$
异质薄膜体系。利用具有原子尺度分辨能力的像差校正电子显微术，发现在具有头对尾极化特征的界面附近，铁电$PbTiO_3$
中存在约~8%的面外晶格拉长现象，并伴随104%，107%以及39%的Ti，O1和O2离子位移（δTi，δO1，δO2）增加。这意味着相比块体材料，薄膜$PbTiO_3$在$PbTiO_3/BiFeO_3$
异质界面处有高达70%的极化增强。同时，$BiFeO_3$

中的极化也比块体值显著增强。基于电子能量损失谱、X射线光电子谱以及第一性原理计算，他们提出异质界面极化巨大增强的电荷传递新机制并证实在上述构筑理念下极化巨大增强现象的普遍性。该研究结果不仅为探索新型铁电界面效应提供了新途径，也为破解铁电超薄薄膜极化降低的科学难题提供了崭新的思路，对纳米铁电器件的发展具有重要意义。

该项研究得到了国家自然科学基金、中科院前沿科学重点研究项目以及科技部“ 973 ”计划等资助。相关成果于5月31日在《纳米快报》上在线发表（Nano Letters，DOI: 10.1021/acs.nanolett.7b00788）。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/109614.html