

22. [PbSe/SnSe] エピタキシャル人工格子の圧力誘起構造相転移

新垣紀子

種々の物質を交互に積層した人工格子ではバルクとは異なる新し物性の発現が期待されている。本研究では異常な圧力応答探索の一環として [PbSe/SnSe] 半導体人工格子の高圧 X 線回折実験を行った。

以前の研究によると、IV-VI 属化合物である PbSe は常圧では B1 (NaCl, $0\bar{1}Fm\bar{3}m$) 型構造をとるが、加圧により $P=4.3\text{ GPa}$ で B1 が歪んで c 軸方向に 2 倍の周期を持つ B16 (GeS, D_{2d}^6-Pnma) 型構造に相転移する。一方、SnSe は常圧で B16 型が安定であり $P=34\text{ GPa}$ まで相転移しない。このようなバルクの構造を持つエピタキシャル人工格子 [PbSe_n/SnSe_m] は、(100)_{cubic} 格子面の積層枚数 n, m により常圧で、(I) [B16/B16] $0 < n < 6$, (II) [B1/B1] $0 < m < 4$, (III) [B16'/B16] $6 < n < 12$, $4 < m$, (IV) [B1/B16] $12 < n$, $4 < m$, の 4 種の構造をとることが知られている。B16' 構造は B16 型と同じ周期をもつが、積層方向の面間隔は B1 に近い値をとるものである。

このような [PbSe/SnSe] に対する圧力誘起構造相転移の研究を行うため、高輝度 X 線源であるシンクロトロン放射光 (フォトンファクトリー) とダイヤモンドアンビル型高圧セルを用いた X 回折実験を行い次の結果を得た。

- 1) II, III, IV 型の人工格子では、加圧により最終的にすべて [B16/B16] 構造が安定化する。
- 2) SnSe 層がバルクで実現しない B1 構造をとっている II 型の人工格子では、昇圧により [B1/B1] → [B1/B16] → [B16/B16] という逐次相転移が起こる。[PbSe₁₂/SnSe₄] の場合、 $P=2.1\text{ GPa}$ で [B1/B1] → [B1/B16] が、 $P=4.1\text{ GPa}$ で [B1/B16] → [B16/B16] の相転移が観測された。
- 3) PbSe 層の B1 → B16 相転移圧は PbSe 層の積層枚数 n に対して系統的に変化し $n < 14$ では単調に増加するが、 $n > 14$ では急激にバルクの値 (5.3 GPa) に漸近する。

このような転移圧の系統的な変化は界面に存在する大きな歪によるものである。このため、この界面の歪を考慮したステップモデルを用いて、観測した IV 型の人工格子の X 線回折プロファイルの圧力変化を解析した。