萤石铁电体晶界稳定机制研究取得新进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/39153.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

萤石铁电体晶界稳定机制研究取得新进展。铁电材料因具备本征自发极化与极化可翻转的特性，在非易失性存储、智能传感、存算一体芯片等领域具有重要应用前景。萤石结构铁电材料与主流硅基半导体工艺完全兼容好，是当前半导体产业的研究热点。这类材料的铁电特性源于极性正交相，而该相在室温下呈亚稳态，在器件服役过程中，极易受温度、电场循环等因素影响发生相变，最终彻底丧失铁电特性、导致器件失效。

针对铁电亚稳相稳定这一长期未解决的科学难题，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心研究团队通过深入结构研究发现，铁电薄膜中大量存在的晶界，潜藏着调控物相稳定性的巨大潜力。他们采用借助脉冲激光沉积技术、先进透射电子显微技术等综合手段，系统研究了晶界的原子结构及其对铁电相稳定的调控机制，最终揭示出缓冲层中的La、Sr、Mn元素会向ZrO2薄膜内扩散，且仅选择性富集于晶界区域，晶粒内部无明显扩散，进而在晶界处形成了原子级锐利、化学高度有序的La(Sr)-Mn-O异质结构。

团队进一步解析仅局域于ZrO2晶界处的有序结构基元，明确了晶界处Mn原子分别占据6配位和5配位两种不同晶格位点，并沿晶界呈+3、+4价态周期性交替排列，其3d电子轨道同步形成了周期性的eg/t2g轨道有序排布。这种独特的轨道有序晶界，可直接调控相邻Mn-O键的共价性，进而周期性削弱晶界附近Zr-O键的轨道杂化与重叠程度，最终系统性降低亚稳正交相的能量，在5nm ZrO2薄膜中实现了高含量铁电相的稳定。该研究提出的晶界调控策略，证实晶界可作为独立功能单元，直接调控并稳定纳米材料的物相结构，为萤石铁电材料的亚稳相稳定提供了全新的调控维度，为解决萤石铁电器件的疲劳失效难题提供了科学基础。

相关研究成果以Grain boundary stabilization of fluorite ferroelectrics为题发表于Nature Materials。物理所博士生王诗雨、鲁东大学副教授钟海、华中师范大学宋思逸为论文共同第一作者，物理所张庆华副研究员、葛琛研究员、清华大学谷林教授为共同通讯作者，合作者还包括物理所金奎娟研究员、苏东研究员等。该工作得到了国家重点研发计划、国家自然科学基金、中国科学院青年创新促进会等项目的资助。（来源：中国科学院物理研究所）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41563-026-02533-6

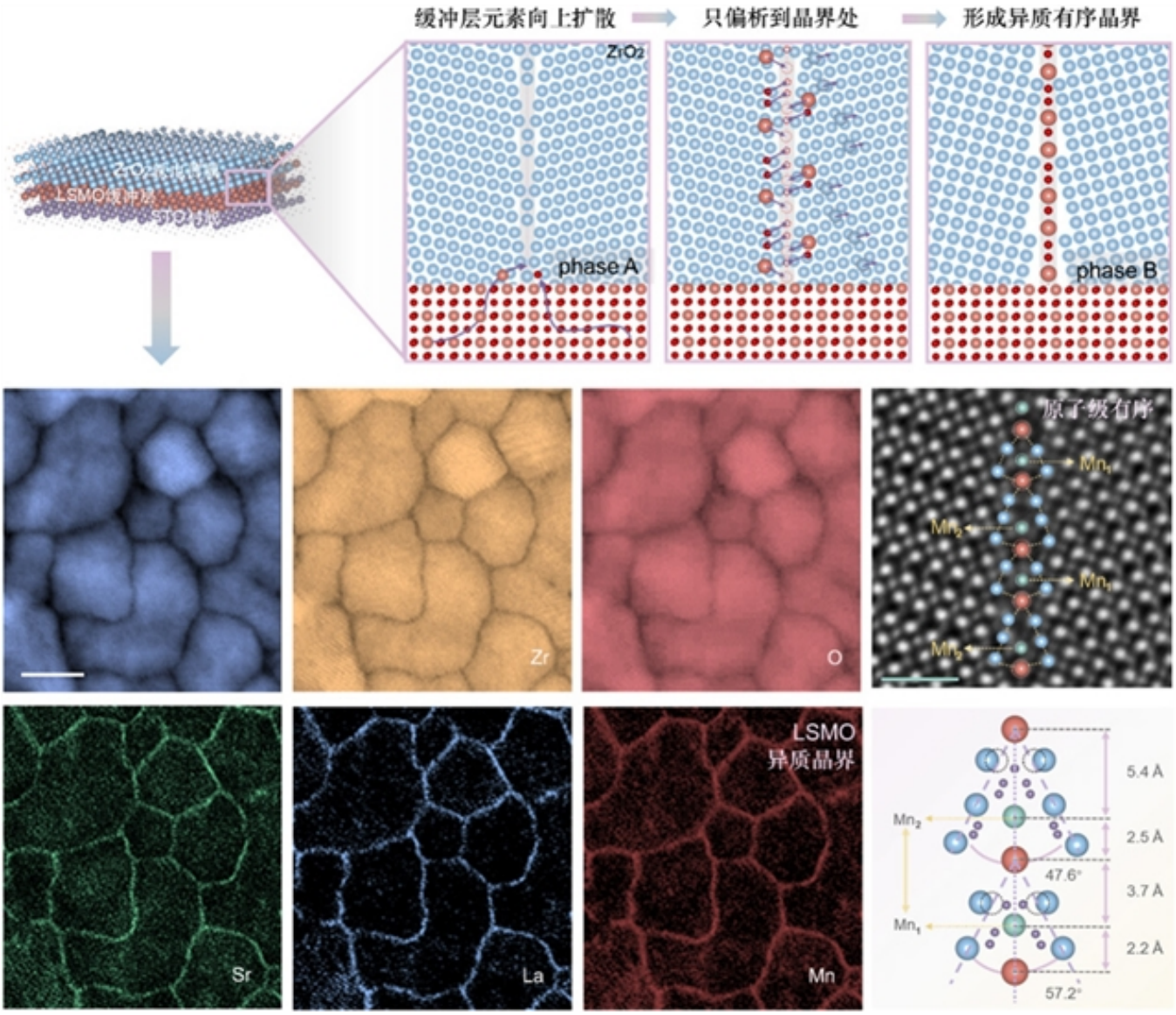

图. 异质晶界形成示意图、实验验证及其有序原子结构。

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费等事宜，请与我们接洽。
作者：张庆华等 来源：《自然—材料》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发