

# 外延 $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$ 薄膜厚度 对其铁电性能的影响\*

王英龙 魏同茹 刘保亭 邓泽超

(河北大学物理科学与技术学院,保定 071002)

(2006 年 9 月 7 日收到,2006 年 10 月 9 日收到修改稿)

从 Landau-Devonshire 唯象理论出发,考虑到晶格失配导致的位错应力场与极化场的耦合,研究了在  $\text{SrTiO}_3$  衬底上外延生长的  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  薄膜厚度对其自发极化强度、电滞回线的影响. 结果表明,产生位错的  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  薄膜临界厚度为  $\sim 1.27$  nm,当薄膜厚度大于临界厚度时,在所形成的位错附近,极化强度出现急剧变化,形成自发极化强度明显减弱的“死层”. 随着薄膜厚度的减小,位错间距增大,“死层”厚度与薄膜总厚度之比增加. 由薄膜电滞回线的变化情况可知,其剩余极化强度随着薄膜厚度的减小而逐渐减小.

关键词:铁电薄膜,自发极化强度,电滞回线,位错

PACC: 7780, 6740K, 6860, 7780B

## 1. 引言

铁电薄膜材料由于具有铁电性、压电性、热电效应、电光效应、弹光效应、光折变效应和非线性光学性质等多种不同的性能,引起人们广泛的关注<sup>[1-4]</sup>. 人们应用铁电薄膜材料的不同性能可以制作不同功能的器件,其中  $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$  (PZT) 薄膜因具有低工作电压、高介电常数、相对大的剩余极化强度和压电常数等特点,成为铁电非易失存储器<sup>[5,6]</sup>、场效应管<sup>[7]</sup>、微电机系统<sup>[8]</sup>和热电传感器<sup>[9]</sup>的首选材料之一.  $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$  是  $\text{PbTiO}_3$  和  $\text{PbZrO}_3$  的二元连续固溶体,呈钙钛矿结构, $x < 0.53$  时,为四方铁电相, $0.53 < x < 0.95$  为三角铁电相. 对应不同  $x$  的 PZT 薄膜,由于结构和组分不同,应用范围也有所区别,例如,本文作者最近以铁电存储器的制备为目的,研究了含 Ni-Al 导电阻挡层的硅基  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  电容器的铁电性能,获得了较好的结果<sup>[10]</sup>. PZT 与  $\text{SrTiO}_3$  等材料的晶格常数相近,因此,高质量外延的 PZT 薄膜通常可以在  $\text{SrTiO}_3$ 、 $\text{MgO}$  等衬底上获得. 最近,Chu 等人发现在  $\text{SrTiO}_3$  衬底上生长的  $\text{PbZr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48}\text{O}_3$  超薄膜的铁电性受到抑制,指出它与衬底引

起的失配位错所施加的压应力场有关<sup>[11]</sup>. 显然,从理论上研究失配位错对薄膜铁电性能的影响,将对 PZT 薄膜的实际应用具有重要指导意义.

Mattews 等人关于多层外延膜中失配位错形成和应力释放机理的研究<sup>[12]</sup>,成为后来计算  $\text{PbTiO}_3/\text{LaAlO}_3$ <sup>[13]</sup>、 $\text{BaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ <sup>[14]</sup>、 $\text{BiFeO}_3/\text{SrRuO}_3$ <sup>[15]</sup> 外延铁电薄膜位错临界厚度的依据. 另外, Landau-Devonshire 唯象模型常被用来分析应力对铁电薄膜性质的影响<sup>[13,14,16]</sup>,Roytburd 等人借助这一模型,结合极化强度的测量,间接得到了  $\text{PbZr}_{0.2}\text{Ti}_{0.8}\text{O}_3/\text{LaAlO}_3$  的内应力<sup>[17]</sup>;Kanno 等人对  $c$  轴取向的  $\text{PbZr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48}\text{O}_3/\text{MgO}$  薄膜的热力学特征量进行了研究<sup>[18]</sup>. 然而,考虑失配位错应力场的影响,从理论上研究外延  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  薄膜厚度对其铁电性能的影响还少见报道. 最近的工作<sup>[19,20]</sup>给出了铁电  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  材料的热力学特征参量,使这一问题有了定量研究的前提.

本文基于 Landau-Devonshire 公式,考虑位错应力场和极化场之间的耦合,建立了基本热力学模型. 研究在  $\text{SrTiO}_3$  衬底上外延生长的  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  薄膜的自发极化强度、电滞回线对其厚度的依赖关系.

\* 国家自然科学基金(批准号 50572021)、河北省自然科学基金(批准号 E2005000130)、国家人事部留学人员择优资助(批准号:G05-06)、教育部留学回国人员科研启动基金(批准号 2005-546)资助的课题.

## 2. 理论基础

### 2.1. Landau-Devonshire 相变自由能

立方结构的 PZT 为顺电相,而四方结构的 PZT 为铁电相. 考虑 (001) 取向外延 PZT 薄膜, 定义直角坐标系:  $x/[100]$ ,  $y/[010]$ ,  $z/[001]$ , 薄膜平面为  $(x, y)$  平面, 极化方向平行于  $z$  轴. 当不存在内应力时, 由立方结构经冷却相变到四方结构, 其 Landau-Devonshire 相变自由能<sup>[16]</sup>为

$$\begin{aligned} G_{\text{LD}}(T, P, \sigma_{ij}) &= G_0 + a_1 P^2 + a_{11} P^4 + a_{111} P^6 \\ &- \frac{1}{2} S_{11}(\sigma_{11}^2 + \sigma_{22}^2 + \sigma_{33}^2) \\ &- S_{12}(\sigma_{11}\sigma_{22} + \sigma_{11}\sigma_{33} + \sigma_{22}\sigma_{33}) \\ &- \frac{1}{2} S_{44}(\sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2) \\ &- Q_{11}\sigma_{33}P^2 - Q_{12}P^2(\sigma_{11} + \sigma_{22}) - EP, \quad (1) \end{aligned}$$

其中  $G_0$  为顺电相能量,  $a_1$ ,  $a_{11}$  和  $a_{111}$  是铁电材料的刚性系数,  $a_1$  由 Curie-Weiss 定律给出,  $a_1 = (T - T_C)2\varepsilon_0 C$ , 式中  $T_C$  和  $C$  分别是块体材料的 Curie-Weiss 温度和 Curie-Weiss 常数,  $\varepsilon_0$  是真空介电常数;  $\sigma_{ij}$  为外应力,  $Q_{ij}$  和  $S_{ij}$  分别为铁电材料的电致伸缩常数和弹性顺度系数;  $E$  为外加  $z$  方向电场强度;  $P$  为极化强度.

当仅存在内应力时 (1) 式变为

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\text{LD}}(P, T, \sigma_{ij}, u_{ij}) &= G_{\text{LD}} + u_{11}\sigma_{11} + u_{22}\sigma_{22} + u_{33}\sigma_{33} \\ &+ u_{12}\sigma_{12} + u_{13}\sigma_{13} + u_{23}\sigma_{23}, \quad (2) \end{aligned}$$

这里  $\sigma_{ij}$  为内应力,  $u_{ij}$  表示对应的应变. 由于 (2) 式中内应力与应变不独立, 需根据具体情况予以整理.

### 2.2. 薄膜厚度对自发极化强度的影响

如果在  $xz$  平面上存在一个具有 Burgers 矢量  $b = a_0[100]$  的位错,  $a_0$  为铁电材料的晶格常数, 那么在连续性极限下, 它的应力场作为与位错中心距离的函数可以描述<sup>[21]</sup>为

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= -Bz \frac{3x^2 + z^2}{(z^2 + x^2)^2}, \\ \sigma_{22} &= -2B \frac{S_{12}}{S_{11}} \frac{z}{z^2 + x^2}, \end{aligned}$$

$$\sigma_{33} = Bz \frac{x^2 - z^2}{(z^2 + x^2)^2},$$

$$\sigma_{13} = \sigma_{31} = -Bx \frac{x^2 - z^2}{(z^2 + x^2)^2},$$

$$\sigma_{12} = \sigma_{21} = \sigma_{23} = \sigma_{32} = 0, \quad (3)$$

其中  $B = b[2\pi S_{44}(1 + S_{12}/S_{11})]$ ,  $b = |\mathbf{b}|$  为位错的 Burgers 矢量的强度.

$$\text{考虑到 } \frac{\partial G_{\text{LD}}}{\partial \sigma_{11}} = -u_{11} - Q_{12}P^2, \quad \frac{\partial G_{\text{LD}}}{\partial \sigma_{22}} = -u_{22}$$

$$-Q_{12}P^2 \frac{\partial G_{\text{LD}}}{\partial \sigma_{33}} = -u_{33} - Q_{11}P^2, \quad \frac{\partial G_{\text{LD}}}{\partial \sigma_{ij}} = -u_{ij} (i \neq j),$$

(2) 式变为

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\text{LD}}(T, P, \sigma_{ij}) &= G_0 + a_1^* P^2 + a_{11} P^4 + a_{111} P^6 \\ &+ \frac{1}{2} S_{11}(\sigma_{11}^2 + \sigma_{22}^2 + \sigma_{33}^2) \\ &+ S_{12}(\sigma_{11}\sigma_{22} + \sigma_{11}\sigma_{33} + \sigma_{22}\sigma_{33}) \\ &+ \frac{1}{2} S_{44}(\sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2) - EP, \quad (4) \end{aligned}$$

这里

$$\begin{aligned} a_1^*[T, \sigma_{ij}(x, z)] &= a_1 - [Q_{11}\sigma_{33} + Q_{12}(\sigma_{11} + \sigma_{22})]. \quad (5) \end{aligned}$$

当  $E = 0$  时 (4) 式对极化强度的极小值 ( $\partial \tilde{G}_{\text{LD}} / \partial P = 0$ ) 给出自发极化强度的平方值

$$\begin{aligned} P^2[T, \sigma_{ij}(x, z)] &= \frac{-a_{11} \pm \{a_{11}^2 - 3a_1^*[T, \sigma_{ij}(x, z)]a_{111}\}^{1/2}}{3a_{111}}. \quad (6) \end{aligned}$$

由 (3) (5) (6) 式可以计算单个位错存在时薄膜自发极化强度场的分布.

考虑 PZT/SrTiO<sub>3</sub> 结构, 晶格常数分别为  $a_0, a_s$ , 晶格失配度为  $f = \frac{a_0 - a_s}{a_s}$ , 一种应变释放机理是失

配位错的形成, 由弹性应变和位错共同分担失配<sup>[12]</sup>. 使用 Matthews-Blakeslee 对多层外延膜的分析<sup>[12]</sup>, 决定位错形成的条件是最大弹性应变对应的应力等于位错线的张力, 由此可以得到形成位错的临界厚度<sup>[15]</sup>

$$h_p = \frac{b}{8\pi\epsilon} \left( \ln \frac{h_p}{b} + 1 \right), \quad (7)$$

这里  $\nu = |S_{12}/S_{11}|$  为 Poisson 比.

当薄膜厚度  $h > h_p$  时, 所形成位错的间距为

$$\begin{aligned} d &= \frac{b/f}{1 - \frac{h_p}{h} \frac{1 + \ln \frac{h_p}{b}}{1 + \ln \frac{h}{b}}}. \quad (8) \end{aligned}$$

由(3)(5)(6)(7)(8)式可以计算沉积于 SrTiO<sub>3</sub> 衬底上不同厚度的 PZT 薄膜中自发极化强度随位置的变化。

对应失配度为  $f$  的失配,由弹性应变分担

$$\varepsilon = \frac{b}{8\pi h(1+\nu)} \left( \ln \frac{h}{b} + 1 \right), \quad (9)$$

而由位错分担

$$\delta = f - \varepsilon. \quad (10)$$

### 2.3. 薄膜厚度对电滞回线的影响

如 2.2 节所述,当存在外电场  $E$  时,将(4)式代入  $\partial \tilde{G}_{LD} / \partial P = 0$  得到

$$6a_{111}P^5 + 4a_{11}P^3 + 2a_1^*P - E = 0. \quad (11)$$

由于薄膜中不同位置处的  $a_1^*$  不同,所以,由(11)式可以得到极化强度随位置变化关系. 如果改变薄膜厚度和外加电场强度,并将极化强度对面积平均,可以得到平均极化强度以及电滞回线随薄膜厚度的变化关系. 但这一方法复杂且不直观. Alpay 等人通过引入等效衬底晶格常数的模型,研究了 BaTiO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> 的结构特性随薄膜厚度的关系<sup>[14]</sup>. 本文利用这一方法,研究 PZT/SrTiO<sub>3</sub> 的电滞回线随薄膜厚度的变化.

当薄膜厚度小于临界厚度时,  $\sigma_{11} = \sigma_{22}$ ,  $\sigma_{12} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0$ ,  $\sigma_{33} = 0$ , 并且应变  $u_{11} = u_{22} = x_m = -f$ . 应用  $\frac{\partial G_{LD}}{\partial \sigma_{11}} = \frac{\partial G_{LD}}{\partial \sigma_{22}} = -x_m$ , 将(2)式表达为  $P, T, x_m$  的函数

$$\tilde{G}_{LD}(T, P, x_m) = G_0 + a_1^*P^2 + a_{11}^*P^4 + a_{111}P^6 + \frac{x_m^2}{S_{11} + S_{12}} - EP, \quad (12)$$

其中

$$a_1^* = a_1 - x_m \frac{2Q_{12}}{S_{11} + S_{12}}, \quad (13)$$

$$a_{11}^* = a_{11} + \frac{Q_{12}^2}{S_{11} + S_{12}}. \quad (14)$$

当存在外电场  $E$  时, (12)式对极化强度的极小值

( $\partial \tilde{G}_{LD} / \partial P = 0$ ) 给出计算极化强度的计算式

$$6a_{111}P^5 + 4a_{11}^*P^3 + 2a_1^*P - E = 0. \quad (15)$$

当薄膜厚度大于临界厚度时,产生的位错密度为

$$\rho = \frac{f}{a_0} \left( 1 - \frac{h_p}{h} \right). \quad (16)$$

定义衬底的等效晶格常数

$$\tilde{a}_s = \frac{a_s}{\rho a_s + 1}, \quad (17)$$

计算等效失配应变  $\tilde{x}_m = \frac{\tilde{a}_s - a_0}{\tilde{a}_s}$  用以代替(13)式中的  $x_m$ , 采用(15)式求出给定电场下的极化强度,从而建立电滞回线与薄膜厚度的关系.

### 3. 数值模拟结果及分析

PbZr<sub>0.4</sub>Ti<sub>0.6</sub>O<sub>3</sub> 薄膜中在具有 Burgers 矢量  $b = a_0[100]$  位错的周围自发极化强度分布如图 1 所示,其中  $a_0 = 3.984 \text{ \AA}$ . 由图 1 可见,由于  $\pi$  型位错的存在,与无缺陷体材料 ( $67.6 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ ) 相比,出现了极化强度增大或降低的区域,在位错中心处极化强度分布存在剧烈变化. 计算时采用的参数如表 1 所示<sup>[19,20]</sup>.

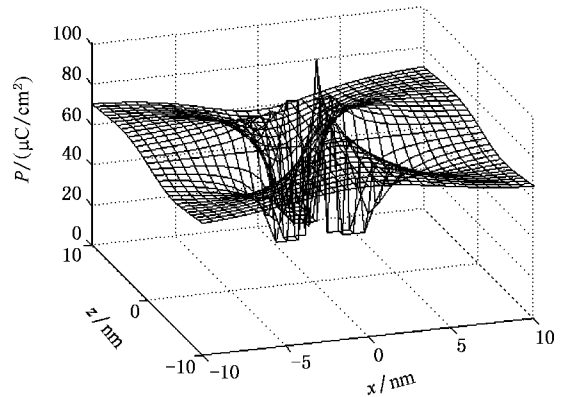


图 1 PZT 中  $\pi$  型位错在  $xz$  平面的极化强度

表 1 PZT 典型参数

物理量	数值
$a_1$ (m/F)	$-8.34 \times 10^7$
$a_{11}$ (m <sup>5</sup> /C <sup>2</sup> F)	$-3.614 \times 10^7$
$a_{111}$ (m <sup>9</sup> /C <sup>4</sup> F)	$1.859 \times 10^8$
$Q_{11}$ (m <sup>4</sup> /C <sup>2</sup> )	$8.116 \times 10^{-2}$
$Q_{12}$ (m <sup>4</sup> /C <sup>2</sup> )	$-2.95 \times 10^{-2}$
$S_{11}$ (m <sup>2</sup> /N)	$1.5 \times 10^{-11}$
$S_{12}$ (m <sup>2</sup> /N)	$-5 \times 10^{-12}$
$S_{44}$ (m <sup>2</sup> /N)	$1.45 \times 10^{-11}$
$a_0$ / $\text{\AA}$	3.984
$T$ / $^\circ\text{C}$	25

考虑沉积在(001)SrTiO<sub>3</sub> 衬底上的外延(001)

PbZr<sub>0.4</sub>Ti<sub>0.6</sub>O<sub>3</sub> 铁电薄膜 其 Poisson 比  $\nu = -S_{12}/S_{11} =$

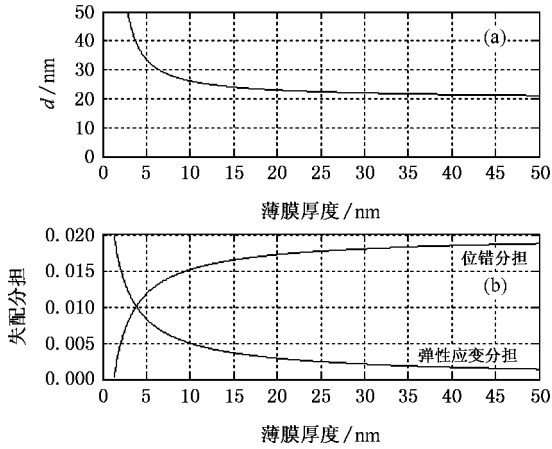


图 2 位错间距 (a) 失配分担 (b) 与 PZT 薄膜厚度的关系

0.33 而 SrTiO<sub>3</sub> 衬底晶格常数为  $a_s = 3.905 \text{ \AA}$  ,两种材料的失配度为  $\sim 2\%$  ,经数值模拟 ,得到产生  $\pi$  型位错的 PZT 薄膜的临界厚度为  $\sim 1.27 \text{ nm}$  .当 PZT 薄膜厚度大于此值时 ,失配位错在铁电薄膜和衬底的分界面上形成 ,应变和位错以相应比例承担晶格的失配 .图 2 给出位错间距和失配分担与 PZT 薄膜厚度的关系曲线 .由图可见 ,随着 PZT 薄膜厚度的增

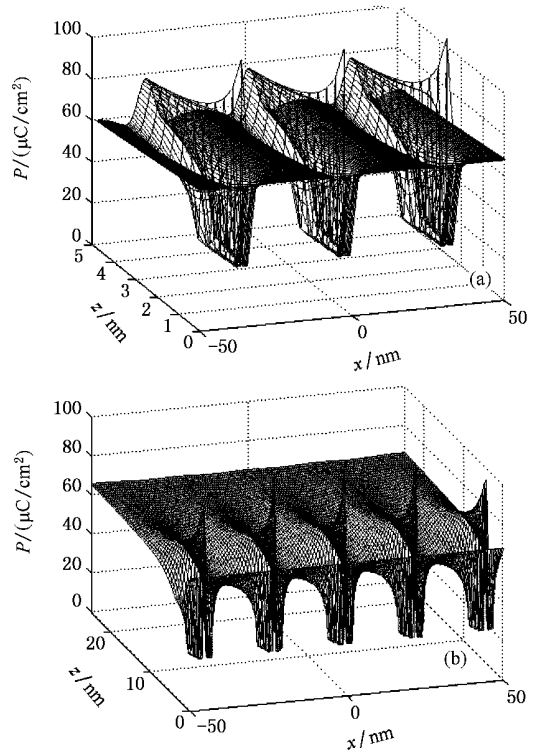


图 3 (001)SrTiO<sub>3</sub> 衬底上膜厚分别为 5 nm (a) 和 25 nm (b) 的 PZT 薄膜中  $\pi$  型位错在  $xz$  平面的极化强度分布

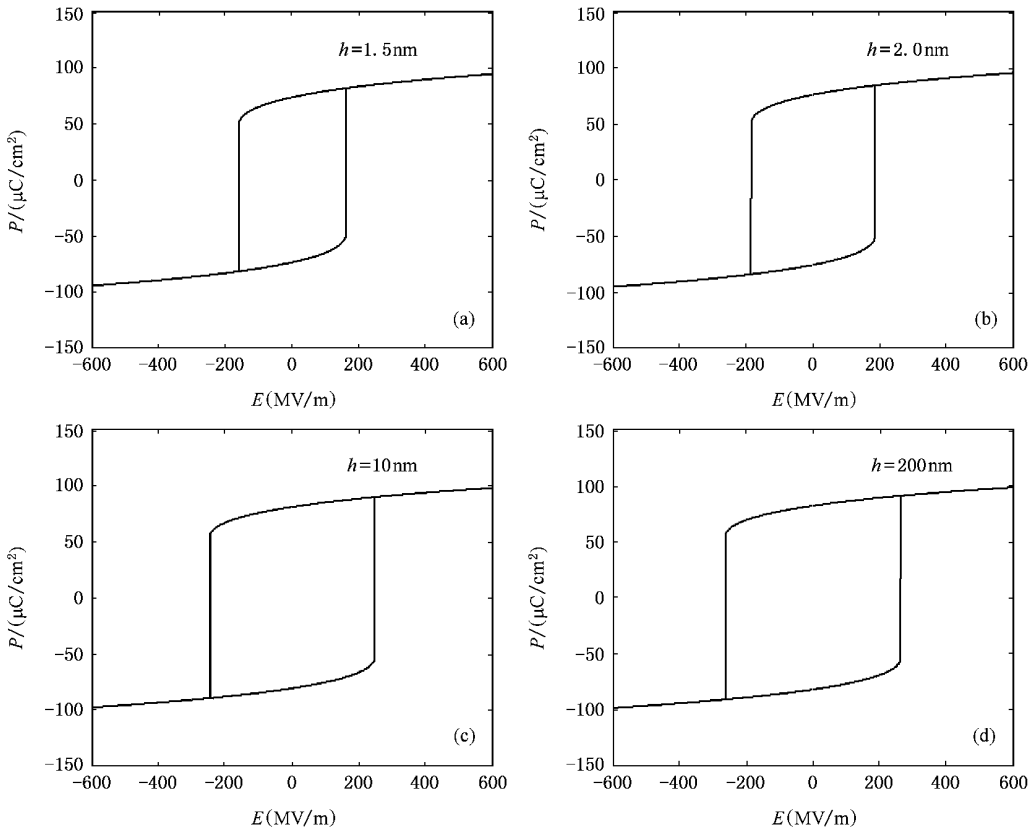


图 4 不同厚度薄膜的电滞回线

加,所形成位错的间距变小,位错变密集,也就是说,由位错分担失配的比例增大.结合(8)式,当薄膜厚度趋向于无穷大时,位错间距趋向于  $b/f = 19.7 \text{ nm}$ .

对厚度分别为 5 nm 和 25 nm 的  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  薄膜,由图 2 知其平均位错间距分别为 33.6 nm 和 22.4 nm,对应的极化强度分布分别如图 3(a)和(b)所示.由图 3 可以看出,在薄膜-衬底交界面附近的极化强度出现剧烈变化,对 5 nm 和 25 nm 厚的薄膜,均导致  $\sim 3 \text{ nm}$  的“死层”出现.这种“死层”与文献[13]在  $\text{PbTiO}_3/\text{LaAlO}_3$  界面附近出现的“dead layer”相似,会严重降低薄膜的铁电性.进一步表明随着膜厚的增加,“死层”与薄膜厚度之比减小,薄膜的电学性质显著提高.

图 4 给出不同厚度薄膜的电滞回线,其中(a),(b)(c)和(d)对应的薄膜厚度分别为 1.5 nm, 2 nm, 10 nm 和 200 nm.剩余极化强度  $P_r$  依次为 73.7, 76, 81, 82  $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ .

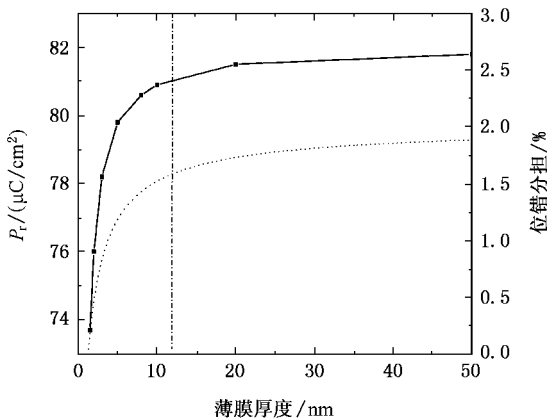


图 5 不同厚度薄膜的矫顽电场

81, 82  $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ .图 5 给出剩余极化强度对薄膜厚度的

依赖曲线(实线所示).可以看出,剩余极化强度开始时随着薄膜厚度的增加快速增加,当薄膜厚度为  $\sim 12 \text{ nm}$ 时(点划线所示),剩余极化强度开始饱和,之后,随着厚度的增加,PZT 薄膜的剩余极化强度不再发生明显变化,这与位错分担具有非常相似的变化趋势(点虚线所示).应当指出,当厚度小于 12 nm 时,正如图 2 所示,弹性应变和位错分担均强烈依赖于薄膜的厚度.因此,不同厚度下外延  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  薄膜铁电性能是该厚度下位错和弹性应变共同作用的结果.

最近, Kim 等人<sup>[22]</sup>实验研究了沉积于  $\text{SrTiO}_3$  衬底上的外延 PZT 薄膜厚度对其剩余极化强度的影响,我们的理论结果与之相符.

## 4. 结 论

我们应用 Landau-Devonshire 公式,考虑到晶格失配导致的位错应力场与极化强度的耦合,研究了在(001)  $\text{SrTiO}_3$  衬底上外延生长的(001)  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  薄膜厚度对其自发极化强度、电滞回线的影响.结果显示,在所形成的位错附近,极化强度出现急剧变化,形成自发极化强度明显减弱的“死层”,对于较厚的薄膜而言,“死层”厚度占总厚度的比值较小.  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  的剩余极化强度强烈依赖于薄膜的厚度,当薄膜厚度为  $\sim 12 \text{ nm}$  时,剩余极化强度开始饱和,这种铁电性能对厚度的依赖性由该厚度下位错和弹性应变共同作用的结果来决定.

在此基础上,考虑底电极和顶电极对  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  薄膜铁电性能的影响,并与实验结果进行比较,将是我们的下一步工作.

[1] Zheng F G, Chen J P, Li X W 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3067 (in Chinese) [郑分刚、陈建平、李新碗 2006 物理学报 **55** 3067]

[2] Zeng H R, Yu H F, Chu R Q, Li G R, Yin Q R, Tang X G 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1437 (in Chinese) [曾华荣、余寒峰、初瑞清、李国荣、殷庆瑞、唐新桂 2005 物理学报 **54** 1437]

[3] Tao Y M, Jiang Q 2004 *Chin. Phys.* **13** 1149

[4] Ai S T 2006 *Chin. Phys.* **15** 1364

[5] Chang C Y, Juan T P, Lee J Y 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 072917

[6] Liu B T, Maki K, Agganval S, Nagaraj B, Nagarajan V, Salamanca-Riba L, Ramesh R, Dhote A M, Auciello O 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3599

[7] Liu B T, Zhao Z, Chen Y F, Xu B, Chen H, Wu F, Zhao B R, Kisilinskiy I, Stepantsov E 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 2044

[8] Kang G Y, Bae S W, Park H H, Kim T S 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 042904

[9] Es-Souni M, Kuhnke M, Iakovlev S, Solterbeck C H, Piorra A 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 022907

[10] Liu B T, Cheng C S, Li F, Ma L, Zhao Q X, Yan Z, Wu D Q, Li C R, Wang Y, Li X H, Zhang X Y 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 252903

[11] Chu M W, Szafraniak I, Scholz R, Harnagea C, Hesse D, Alexe M, Gosele U 2004 *Nat. Mater.* **3** 87

- [ 12 ] Mattews J W , Blakeslee A E 1974 *J. Cryst. Growth* **27** 118
- [ 13 ] Alpay S P , Misirliglu , Nagarajan V , Ramesh R 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 2044
- [ 14 ] Alpay S P , Misirliglu I B , Sharma A , Ban Z G 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 8118
- [ 15 ] Qi X D , We M , Lin Y , Jia Q X , Zhi D , Dho J , Blamire M G , Driscoll L M 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 071913
- [ 16 ] Jiang Q , Qiu J H 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 103901
- [ 17 ] Roytburd A L , Alpay S P , Nagarajan V , Ganpule C S , Aggarwal S 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 190
- [ 18 ] Kanno I , Yokoyama Y , Kotera H , Wasa K 2004 *Phys. Rev. B* **69** 064103
- [ 19 ] Chu M W , Szafraniak I , Hesse D , Alexe M , Gosele U 2005 *Phys. Rev. B* **72** 174112
- [ 20 ] Huang H T , Sun C Q , Hing P 2000 *J. Phys. : Condens. Matter.* **12** L127
- [ 21 ] Hirth J P , Lothe J 1982 *Theory of Dislocation* 2nd ed. ( New York : Wiley )
- [ 22 ] Kim D M , Eom C B , Nagarajan V , Ouyang J , Ramesh R , Vaithyanathan V , Schlom D G 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 142904

## Effect of thickness of epitaxial $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$ film on the physical properties<sup>\*</sup>

Wang Ying-Long Wei Tong-Ru Liu Bao-Ting Deng Ze-Chao  
( College of Physics Science and Technology ,Hebei University ,Baoding 071002 ,China )  
( Received 7 September 2006 ; revised manuscript received 9 October 2006 )

### Abstract

The thickness dependence of the spontaneous polarization and the hysteresis loop of epitaxial  $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$  thin films deposited on (001)  $\text{SrTiO}_3$  substrate was investigated via the Landau-Devonshire's phenomenological theory considering the coupling of the stress field of the edge dislocation and the polarization. The results show that the critical thickness for the formation of misfit dislocation is  $\sim 1.27$  nm , and there is a drastic variation in the polarization near the dislocation in films with thickness greater than the critical value , which results in the formation of the dead layer that severely degrades ferroelectric properties. With decreasing the film thickness , both the dislocation spacing and the ratio of the dead layer to film total thickness increase. The thickness dependence of the hysteresis loop indicates that the remnant polarization decreases as the thickness decreases.

**Keywords** : ferroelectric thin film , spontaneous polarization , hysteresis loop , dislocation

**PACC** : 7780 , 6740K , 6860 , 7780B

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 50572021 ) , the Natural Science Foundation of Hebei Province , China ( Grant No. E2005000130 ) , the Scientific Research Starting Foundation for Returned Overseas Chinese Scholars from Ministry of Personnel ( Grant No. G05-06 ) , Ministry of Education , China ( Grant No. 2005-546 ) .