

参数修改对铁电薄膜相变性质的影响*

卢兆信†

(临沂大学机械工程学院, 临沂 276005)

(2012年12月20日收到; 2013年2月1日收到修改稿)

在关联有效场理论的框架内, 利用微分算子技术, 详细地计算了基于横场伊辛模型描述的对称铁电薄膜系统的相变性质. 根据薄膜各层自旋平均值构成的一系列耦合方程, 推导出可以用来计算任意层的具有不同表面层的薄膜相图的解析通式方程, 讨论了参数修改对薄膜相互作用参数从 FPD (铁电相占主导地位的相图) 到 PPD (顺电相占主导地位的相图) 过渡值和参数空间中各相变区域的影响. 在与平均场近似进行比较的结果显示, 关联有效场理论所得到的铁电薄膜的铁电性在某种程度上比平均场近似下的结果减弱.

关键词: 铁电薄膜, 横场伊辛模型, 相图, 居里温度

PACS: 68.65.Ac, 77.80.B-, 75.10.Hk, 77.90.+k

DOI: 10.7498/aps.62.116802

1 引言

近年来, 由于薄膜制备技术日益发展成熟及其在各种领域中的广泛应用, 一直以来铁电薄膜都是实验制备和理论研究的热点之一^[1-3]. 迄今为止, 对铁电薄膜的理论研究主要有两种方法: 一种是采用朗道-德文希尔的唯象理论^[4-9], 另一种是采用微观理论的横场伊辛模型^[10-13]. 横场伊辛模型通常被用来描述有序—无序型铁电体的相变, 现在已被成功地应用于对铁电薄膜相变性质的研究, 比如 BaTiO₃ 和 SrTiO₃ 薄膜^[2,3]. 薄膜中存在的尺寸效应和表面效应都会显著地影响它的相变性质. 因为横场伊辛模型不能被精确地求解, 导致许多近似方法被用来计算薄膜的相变性质, 比如平均场近似^[10-24]、格林函数方法^[25,26]和关联有效场理论^[27-31]. 关联有效场理论是一种基于自旋关联和微分算子技术并且相当于泽尔尼克近似的方法, Kaneyoshi^[27] 对其进行改进和推广, 使其成功地用来研究横场伊辛薄膜的各种相变性质. 同时, Kaneyoshi^[28] 进一步将平均场近似、关联有效场理论和退耦合近似三种理论方法进行了比较, 结果表明关联有效场理论是一种优于平均场近似的方法,

利用它计算时可以得到比平均场近似更为精确的结果. 最近 Arhchoui 等^[30] 和我们研究小组^[31] 分别利用关联有效场理论对双表面铁电薄膜的相变性质进行了讨论. 但据我们所知, 利用关联有效场理论针对多表面层的铁电薄膜 ($N_s > 2$) 的相变性质的研究还没有开展过.

本文将针对任意层 (N) 的具有不同表面层 (N_s) 的铁电薄膜系统, 利用微分算子技术来研究表面横场、表面层数和薄膜层数对薄膜各相互作用参数从 FPD 到 PPD 过渡值和参数空间中各相变区域的影响. 同时也将把本文的计算结果与平均场近似进行比较.

2 模型和公式

2.1 理论模型

本文所要研究的铁电薄膜系统是由任意 N 层的简立方结构沿 z 方向构成, 每一层被定义在 x - y 平面内, 自旋处于平面中的正方晶格内, 如图 1 所示. 薄膜各层被标记以 $1, 2, 3, \dots, N$, 将第 $1, 2, 3, \dots, N_s$ 层和第 $N - (N_s - 1), \dots, N - 1, N$ 层定义为薄膜系统的 $2N_s$ 个表面层, 而剩下的 $N - 2N_s$ 层则

* 国家自然科学基金 (批准号: 11247208 和 11205079) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: phylzx@gmail.com

被定义为体内层. 对于一个只发生二级铁电相变的薄膜系统其哈密顿量为^[31]

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z - \Omega_b \sum_{i \in b} S_i^x - \Omega_s \sum_{i \in s} S_i^x, \quad (1)$$

其中, S_i^x (或 S_i^z) 表示第 i 个格点上赝自旋 ($s = 1/2$) 在 x (或 z) 方向上的分量, J_{ij} 表示最近邻的两个格点上赝自旋之间的交换相互作用, Ω_s (或 Ω_b) 则表示表面层 (或体内层) 中的横场.

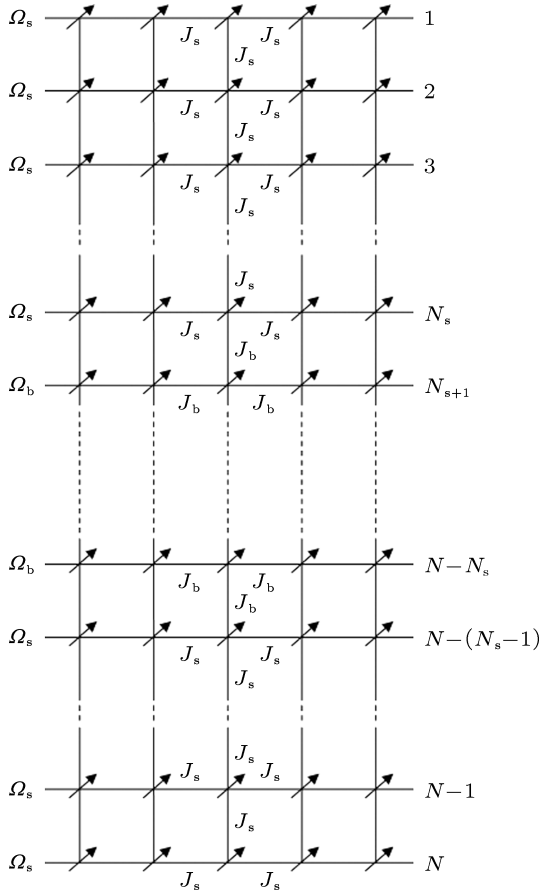


图1 任意 N 层的铁电薄膜系统的结构示意图

2.2 公式

根据关联有效场理论可知, 薄膜第 i 层中赝自旋的平均值为^[31]

$$R_i = \langle S_i^z \rangle = \left\langle \prod_{\delta} \left[\cosh (D J_{i, j+\delta}) + R_{j+\delta} \sinh (D J_{i, j+\delta}) \right] \right\rangle f_i(x)|_{x=0}, \quad (2)$$

其中, \prod 表示对格点 i 取其所有最近邻格点的乘积, $D = \partial/\partial x$ 表示微分算子, 满足关系式

$\exp(\alpha D)f(x) = f(x + \alpha)$. 在表面层中, 函数 $f_i(x)$ 被定义为

$$f_i(x) = f_s(x) = \frac{x}{\sqrt{(2\Omega_s)^2 + x^2}} \tanh \left[\frac{\beta}{4} \sqrt{(2\Omega_s)^2 + x^2} \right]. \quad (3)$$

在体内层中, 函数 $f_i(x)$ 被定义为

$$f_i(x) = f_b(x) = \frac{x}{\sqrt{(2\Omega_b)^2 + x^2}} \tanh \left[\frac{\beta}{4} \sqrt{(2\Omega_b)^2 + x^2} \right], \quad (4)$$

其中 $\beta = 1/(k_B T)$, T 表示绝对温度.

根据方程 (2), 可以得到任意层 (N) 的具有不同表面层 (N_s) 的铁电薄膜系统的各层极化的平均值, 对上面的第 $1, 2, 3, \dots, N_s$ 层共 N_s 个表面层有

$$R_1 = [\cosh (D J_s) + R_1 \sinh (D J_s)]^4 \times [\cosh (D J_s) + R_2 \sinh (D J_s)] f_s(x)|_{x=0}, \quad (5)$$

$$R_2 = [\cosh (D J_s) + R_1 \sinh (D J_s)] \times [\cosh (D J_s) + R_2 \sinh (D J_s)]^4 \times [\cosh (D J_s) + R_3 \sinh (D J_s)] f_s(x)|_{x=0}, \quad (6)$$

⋮

$$R_{N_s} = [\cosh (D J_s) + R_{N_s-1} \sinh (D J_s)] \times [\cosh (D J_s) + R_{N_s} \sinh (D J_s)]^4 \times [\cosh (D J_b) + R_{N_s+1} \sinh (D J_b)] \times f_s(x)|_{x=0}. \quad (7)$$

对中间的 $N - 2N_s$ 个体内层有

$$R_i = [\cosh (D J_b) + R_{i-1} \sinh (D J_b)] \times [\cosh (D J_b) + R_i \sinh (D J_b)]^4 \times [\cosh (D J_b) + R_{i+1} \sinh (D J_b)] \times f_b(x)|_{x=0}. \quad (8)$$

对下面的第 $N - (N_s - 1), \dots, N - 1, N$ 层共 N_s 个表面层有

$$R_{N-(N_s-1)} = [\cosh (D J_b) + R_{N-N_s} \sinh (D J_b)] \times [\cosh (D J_s) + R_{N-(N_s-1)} \sinh (D J_s)]^4 \times [\cosh (D J_s) + R_{N-(N_s-2)} \sinh (D J_s)] \times f_s(x)|_{x=0}, \quad (9)$$

⋮

$$R_{N-1} = [\cosh (D J_s) + R_{N-2} \sinh (D J_s)]$$

$$\begin{aligned} & \times [\cosh(DJ_s) + R_{N-1} \sinh(DJ_s)]^4 \\ & \times [\cosh(DJ_s) + R_N \sinh(DJ_s)] \\ & \times f_s(x)|_{x=0}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} R_N = & [\cosh(DJ_s) + R_{N-1} \sinh(DJ_s)] \\ & \times [\cosh(DJ_s) + R_N \sinh(DJ_s)]^4 \\ & \times f_s(x)|_{x=0}. \end{aligned} \quad (11)$$

当温度无限趋近于居里温度时, 可以将上面的 N 个方程展开, 只保留 R_i 的线性项, 而 R_i 的非线性项则忽略不计. 最终可以推导得到计算任意层 (N) 的具有不同表面层 (N_s) 铁电薄膜系统相图的解析通式方程

$$C_{N_s 1} B_{M-N_s} - C_{N_s 2} B_{M-(N_s+1)} = 0. \quad (12)$$

当薄膜层数 N 为偶数时, $M = N/2$, 且

$$B_M = \frac{\sinh[(M+1)\phi] - \sinh(M\phi)}{\sinh(\phi)}, \quad (13)$$

当薄膜层数 N 为奇数时, $M = (N+1)/2$, 且

$$B_M = 2 \cosh(M\phi), \quad (14)$$

其中

$$\cosh(\phi) = (1/k - 4)/2, \quad \text{且 } (1/k - 4) \geq 2. \quad (15)$$

3 数值计算结果和讨论

通常情况下, 铁电薄膜相图的描述有两种方法: 一种是用 J_s - T_c 关系曲线表示的相图, 另一种是用 Ω_s - T_c 关系曲线表示的相图. 选择合理的体内交换相互作用、表面横场、体内横场、表面层数和薄膜层数, 就可以利用方程 (12) 计算任意层 (N) 的具有不同对称表面层 (N_s) 的薄膜的相图, 下面本文将选择利用 J_s - T_c 关系曲线来描述的相图进行研究.

3.1 表面层数对各相互作用参数过渡值的影响

对于一个用 J_{rms} - T_c 关系曲线来描述的薄膜相图来说, 主要由体内相互作用 J_b 、表面横场 Ω_s 、体内横场 Ω_b 、表面层数 N_s 和薄膜层数 N 来决定. 在相图中 J_s - T_c 关系曲线将其分成两个相变区域, 左侧为铁电相区域, 右侧为顺电相区域. 根据 Teng 等的定义 [20,25], 可以薄膜各相互作用参数 (J_b , Ω_s 和 Ω_b) 中的任意一个为自变量, 而其他两个相互作用

参数的数值保持不变, 适当地调整自变量的数值, 当相图由铁电相占主导地位的相图 (ferroelectric-dominant phase diagram, FPD) 转变为顺电相占主导地位的相图 (paraelectric-dominant phase diagram, PPD) 时, 有可能存在表面相互作用 J_s 和居里温度 T_c 同时趋向于零的一个临界状态, 将此刻该自变量的值称之为使其相图由 FPD 到 PPD 的过渡值.

图 2 展示的是当铁电薄膜的体内层数 N_b 一定时, 表面层数 N_s 对其各相互作用参数过渡值的影响. 从图 2(a) 中可以看到, 以体内相互作用 J_b 为自变量而保持表面横场 Ω_s 和体内横场 Ω_b 固定不变时, 当从 FPD 到 PPD 时, 存在 J_s 和 T_c 同时趋向于零的临界状态, 同时可以发现图 2(a) 中存在一个显著的特性, 即表面层数 N_s 的改变对体内相互作用 J_b 的过渡值是没有影响的, 也就是说体内相互作用的过渡值 J_{bc} 不依赖于表面层数 N_s 的, 这与平均场近似的结果是完全一致的 [23]. 另外从图 2(a) 中可以看到, 当表面层数 $N_s \geq 2$ 时, 随着 N_s 的增加, 相图中的铁电相区域减小, 顺电相区域增加, 最终趋向于 $N_s = 1$ 时的结果. 所以当 $N_s \geq 2$ 时, 表面层数 N_s 的增加可以在某种程度上消减铁电薄膜的铁电性, 并且趋向于 $N_s = 1$ 时的情况, 这与平均场近似的结果是完全不同的 [23]. 而图 2(b), (c) 分别展示的是当薄膜的体内层数 N_b 一定时, 表面层数 N_s 对表面横场 Ω_s 和体内横场 Ω_b 的过渡值的影响, 显然与对体内相互作用 J_b 过渡值的影响完全类似.

3.2 表面横场、表面层数和薄膜层数对参数空间中各相变区域的影响

为了获取描述铁电薄膜相变性质的概图, 根据 Wang 等所采取的 ST 方法 [11], 以表面横场 Ω_s/J_b 和薄膜层数 N 作为参数将薄膜系统的相变性质用 (J_s/J_b , Ω_b/J_b) 平面内的相图来描述. 采用 ST 方法可以非常方便地将参数空间 (J_s/J_b , Ω_b/J_b) 平面内的相图分为三个相变区域: 表面极化增加的区域 $E(T_c(\text{film}) > T_c(\text{bulk}))$ 、表面极化降低的区域 $R(T_c(\text{film}) < T_c(\text{bulk}))$ 和顺电相区域 P . 事实上, 利用 ST 方法来描述的相图实质上展示的是在不同的相互作用参数下的 J_s - T_c 关系曲线. 为了方便与平均场近似的结果进行比较 [11], 下面的计算中选取的表面横场 Ω_s/J_b 和薄膜层数 N 与文献 [11] 中完全相同.

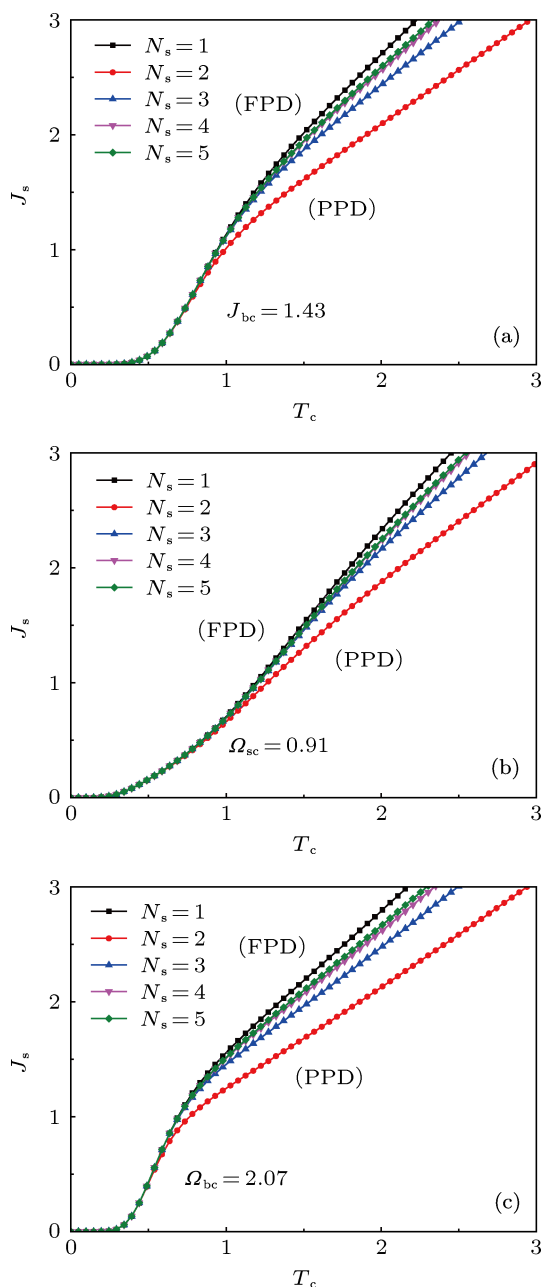


图2 表面层数对铁电薄膜各相互作用参数过渡值的影响 ($N_b = 3$) (a) $\Omega_s = 2.0$, $\Omega_b = 3.0$; (b) $J_b = 2.0$, $\Omega_b = 4.5$; (c) $J_b = 1.0$, $\Omega_s = 2.0$

图3展示的是当表面层数为单表面 ($N_s = 1$) 时, 表面横场 Ω_s/J_b 和薄膜层数 N 对参数空间 (J_s/J_b , Ω_b/J_b) 中各相变区域的影响. 从图3(a)中可以看到, 对于一个表面横场 Ω_s/J_b 和薄膜层数 N 确定的薄膜系统来说, 当体内横场 Ω_b/J_b 比较小时, 从参数空间中的左侧下方开始系统处于 R 区域. 随着体内横场 Ω_b/J_b 的增加并到达某一临界值时, 系统将处于 P 区域. 随着表面交换相互作用 J_s/J_b 的增加, R/P 区域的分界线是逐渐上升的. 与此相类似, 在参数空间中的左侧下方, 随着表面交换相互

作用 J_s/J_b 的增加, 当它变得足够大在 1 和 2 之间时, 系统会处于 E 区域. 随着体内横场 Ω_b/J_b 的增加, R/E 区域的分界线逐渐下降至比较小的表面交换相互作用 J_s/J_b , 最终与 R/P 区域的分界线相交, 这在一定程度上反映了表面横场 Ω_s/J_b 是固定的事实. 从图3(b)中可以看到, 当体内横场 Ω_b/J_b 比较小时, 在 R/E 区域分界线上的表面交换相互作用 J_s/J_b 随着表面横场 Ω_s/J_b 的增加而增加. 显然, 对比图3(a), (b)可以发现, 随着表面横场 Ω_s/J_b 的增加, 整个 R/E 区域的分界线移动到比较大的表面交换相互作用 J_s/J_b 处. 同时, 在图3中存在着一个显著的特性, 即 R/E 区域的分界线是不依赖于薄膜层数 N 的, 而 R/P 区域的分界线则是依赖于薄膜层数 N 的, 随着薄膜层数 N 的增加, P 区域反而减小. 上述性质与平均场近似是完全类似的 [11], 但是数值大小则是完全不同的.

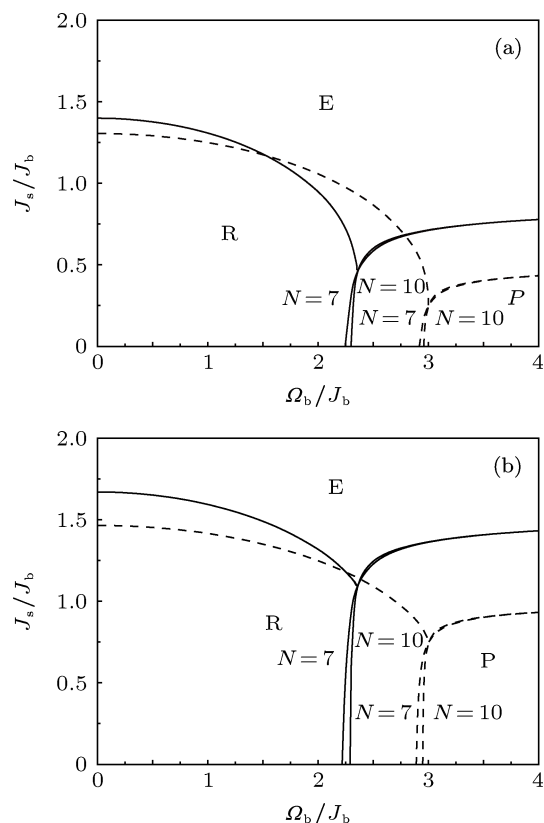


图3 在参数空间 (J_s/J_b , Ω_b/J_b) 平面内的单表面 ($N_s = 1$) 铁电薄膜系统相图 (虚线为平均场近似的结果) (a) $\Omega_s/J_b = 1$; (b) $\Omega_s/J_b = 2$

同时, 在图3中可以清晰地看到关联有效场理论与平均场近似的区别, 显然利用关联有效场理论计算得到的顺电相区域 P 要大于平均场近似, 而铁电相区域则小于平均场近似, 这表明参数空间中的铁电相区域在某种程度上被平均场近似过分的估

计了,也就是说关联有效场理论可以在一定程度上消减铁电薄膜被平均场近似所夸大的铁电性.

图 4 展示的是当表面层数为双表面 ($N_s = 2$) 时,表面横场 Ω_s/J_b 和薄膜层数 N 对其参数空间 ($J_s/J_b, \Omega_b/J_b$) 中各相变区域的影响. 与图 3 比较可以发现, 对一个相同体内横场 Ω_b/J_b 来说, 参数空间中各相变区域之间的分界线下落到一个比较低的表面交换相互作用 J_s/J_b 处. 另外, 对表面层数 N_s 分别为 3 和 4 的薄膜在参数空间 ($J_s/J_b, \Omega_b/J_b$) 中的各相变区域也进行了计算, 结果表明这些相变区域仍然存在, 这也都与平均场近似完全类似 [11].

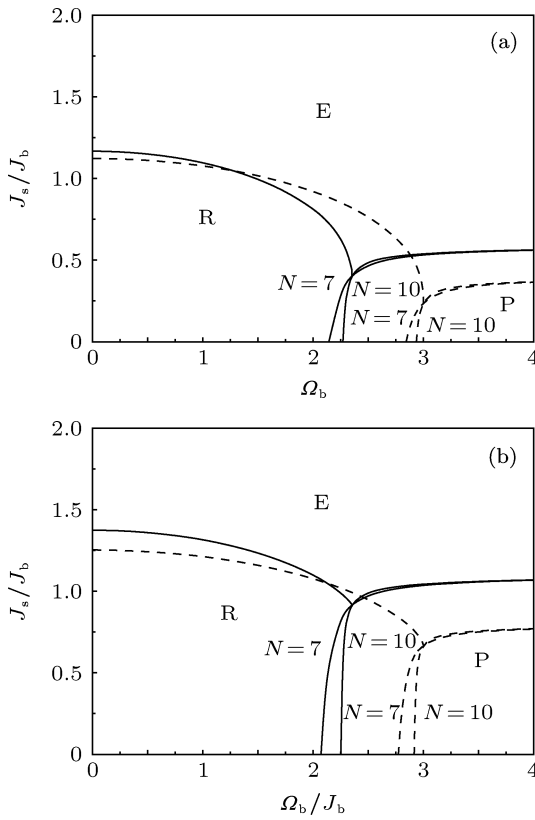


图 4 在参数空间 ($J_s/J_b, \Omega_b/J_b$) 平面内的双表面 ($N_s = 2$) 铁电薄膜系统相图 (虚线为平均场近似的结果) (a) $\Omega_s/J_b = 1$; (b) $\Omega_s/J_b = 2$

4 结论

综上所述, 在关联有效场理论的框架内, 利用微分算子技术, 系统地分析和讨论了表面横场、表面层数和薄膜层数对多表面铁电薄膜各相互作用参数过渡值和参数空间中各相变区域的影响. 结果表明, 薄膜各相互作用参数由 FPD 到 PPD 的过渡值是不依赖于表面层数的, 而参数空间中的各相变

区域却紧密的依赖于表面横场、表面层数和薄膜层数. 与平均场近似进行比较的结果显示, 关联有效场理论可以在某种程度上削减平均场近似对铁电薄膜铁电性的夸大. 希望本工作可以为相应的实验研究提供一些理论依据或指导.

感谢山东大学物理学院王春雷教授对本论文的指导.

附录 A

$$C_{11} = 1 - 4k_1, \quad (\text{A1})$$

$$C_{12} = k_2, \quad (\text{A2})$$

$$C_{21} = 15k_3^*k_4 - 4k_4 - 4k_3 + 1, \quad (\text{A3})$$

$$C_{22} = 4k_3k_5 - k_5, \quad (\text{A4})$$

$$C_{31} = 16k_3k_4 - 4k_4 - 4k_6 - 4k_3 + 15k_3k_6 + 15k_4k_6 - 56k_3k_4k_6 + 1, \quad (\text{A5})$$

$$C_{32} = 4k_3k_5 - k_5 + 4k_5k_6 - 15k_3k_5k_6, \quad (\text{A6})$$

$$C_{41} = 15k_6^2 - 4k_4 - 8k_6 - 56k_3k_6^2 - 56k_4k_6^2 - 4k_3 + 16k_3k_4 + 31k_3k_6 + 31k_4k_6 - 120k_3k_4k_6 + 209k_3k_4k_6^2 + 1 \quad (\text{A7})$$

$$C_{42} = 4k_3k_5 - 15k_5k_6^2 - k_5 + 8k_5k_6 - 31k_3k_5k_6 + 56k_3k_5k_6^2, \quad (\text{A8})$$

$$C_{51} = 209k_3k_6^3 - 4k_4 - 12k_6 - 176k_3k_6^2 - 4k_3 - 176k_4k_6^2 + 209k_4k_6^2 + 46k_6^2 - 56k_6^3 + 16k_3k_4 + 47k_3k_6 + 47k_4k_6 - 184k_3k_4k_6 + 673k_3k_4k_6^2 - 780k_3k_4k_6^3 + 1 \quad (\text{A9})$$

$$C_{52} = 56k_5k_6^3 - 46k_5k_6^2 - k_5 + 4k_3k_5 + 12k_5k_6 - 47k_3k_5k_6 + 176k_3k_5k_6^2 - 209k_3k_5k_6^3 \quad (\text{A10})$$

附录 B

$$k_1 = \cosh(DJ_b) \cosh^3(DJ_s) \times \sinh(DJ_s) f_s(x)|_{x=0}, \quad (\text{B1})$$

$$k_2 = \cosh^4(DJ_s) \sinh(DJ_b) f_s(x)|_{x=0}, \quad (\text{B2})$$

$$k_3 = \cosh^4(DJ_s) \sinh(DJ_s) f_s(x)|_{x=0}, \quad (\text{B3})$$

$$k_4 = \cosh(DJ_b) \cosh^4(DJ_s) \times \sinh(DJ_s) f_s(x)|_{x=0}, \quad (\text{B4})$$

$$k_5 = \cosh^5(DJ_s) \sinh(DJ_b) f_s(x)|_{x=0}, \quad (\text{B5})$$

$$k_6 = \cosh^5(DJ_s) \sinh(DJ_s) f_s(x)|_{x=0}, \quad (\text{B6})$$

$$k = \cosh^5(DJ_b) \sinh(DJ_b) f_b(x)|_{x=0}. \quad (\text{B7})$$

- [1] Scott J F 2007 *Science* **315** 954
 [2] Damjanovic D 1998 *Rep. Prog. Phys.* **61** 1267
 [3] Dawber M, Rabe K M, Scott J F 2005 *Rev. Mod. Phys.* **77** 1083
 [4] Zhong W L, Wang Y G, Zhang P L, Qu B D 1994 *Phys. Rev. B* **50** 698
 [5] Lu T Q, Cao W W 2002 *Phys. Rev. B* **66** 24102
 [6] Lin S, Lu T Q, Cao W W 2006 *Phys. Stat. Sol. (b)* **243** 2952
 [7] Sun P N, Cui L, Lu T Q 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1658
 [8] Zhou Z D, Zhang C Z, Zhang Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6620 (in Chinese) [周志东, 张春祖, 张颖 2010 物理学报 **59** 6620]
 [9] Lü Y G, Liang X L, Gong Y Q, Zheng X J, Liu Z Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8167 (in Chinese) [吕业刚, 梁晓琳, 龚跃球, 郑学军, 刘志壮 2010 物理学报 **59** 8167]
 [10] Wang C L, Zhong W L, Zhang P L 1992 *J. Phys.: Condens. Matter* **4** 4743
 [11] Wang C L, Smith S R P, Tilley D R 1994 *J. Phys.: Condens. Matter* **6** 9633
 [12] Sy H K 1993 *J. Phys.: Condens. Matter* **5** 1213
 [13] Wang X G, Pan S H, Yang G Z 1999 *J. Phys.: Condens. Matter* **11** 6581
 [14] Tao Y M, Jiang Q, Cao H X 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 0274 (in Chinese) [陶永梅, 蒋青, 曹海霞 2005 物理学报 **54** 0274]
 [15] Sun P N, Lu T Q, Chen H, Cao W W 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 3422
 [16] Chen H, Lu T Q, Cui L, Cao W W 2008 *Physica A* **387** 1963
 [17] Zhou J, Lu T Q, Xie W G, Cao W W 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3054
 [18] Cui L, Lu T Q, Sun P N, Xue H J 2010 *Chin. Phys. B* **19** 077701
 [19] Cui L, Xu Q, Han Z Y, Xu X 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 037701
 [20] Teng B H, Sy H K 2004 *Physica B* **348** 485
 [21] Lu Z X, Teng B H, Lu X H, Zhang X J, Wang C D 2009 *Solid State Commun.* **149** 1176
 [22] Lu Z X 2013 *Phys. Scr.* **87** 025002
 [23] Lu Z X 2012 *Physica A* (submitted)
 [24] Wei G Z, Liu J, Miao H L, Du A 2007 *Phys. Rev. B* **76** 054402
 [25] Teng B H, Sy H K 2004 *Phys. Rev. B* **70** 104115
 [26] Lu Z X, Teng B H, Yang X, Rong Y H, Zhang H W 2010 *Chin. Phys. B* **19** 127701
 [27] Kaneyoshi T 1993 *Acta Phys. Pol. A* **83** 703
 [28] Kaneyoshi T 2003 *Physica A* **319** 355
 [29] Jiang W, Lo V C 2008 *Physica A* **387** 6778
 [30] Arhchoui H, El Amraoui Y, Mezzane D, Luk'yanchuk I 2009 *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* **48** 10503
 [31] Lu Z X, Teng B H, Rong Y H, Lu X H, Yang X 2010 *Phys. Scr.* **81** 035004

Effects of parameter modifications on phase transition properties of ferroelectric thin films*

Lu Zhao-Xin[†]

(College of Mechanical Engineering, Linyi University, Linyi 276005, China)

(Received 20 December 2012; revised manuscript received 1 February 2013)

Abstract

Within the framework of effective-field theory with correlations, phase transition properties of ferroelectric thin films with different symmetrical surfaces described by the spin-1/2 transverse field Ising model are studied systematically by the differential operator technique. According to the coupling equations with the layer polarization average, the analytical general equations for phase diagrams of multiple-surface ferroelectric thin films with different surface layers have been derived. Then, effects of various parameter modifications on the crossover values from the FPD (ferroelectric-dominant phase diagram) to the PPD (paraelectric-dominant phase diagram) and phase transition regions in the parameter space are discussed in detail. In comparison with the mean-field approximation, the results indicate that the effective-field theory with correlations may reduce the ferroelectricity of the ferroelectric thin films more exaggeratedly than the mean-field approximation to some extent.

Keywords: ferroelectric thin film, transverse Ising model, phase diagram, Curie temperature

PACS: 68.65.Ac, 77.80.B-, 75.10.Hk, 77.90.+k

DOI: 10.7498/aps.62.116802

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11247208, 11205079).

† Corresponding author. E-mail: phylzx@gmail.com