

# 超快时间尺度下多相共存氧化钨基铁电薄膜畴及畴壁动力学行为

蒋丽梅<sup>1</sup>, 赖彬<sup>2</sup>

- 1.材料科学与工程学院, 湘潭大学, 湘潭, 湖南, 中国
- 2.材料科学与工程学院, 湘潭大学, 湘潭, 湖南, 中国

**简介:** 使用COMSOL Multiphysics®建立超快时间尺度多相共存氧化钨基铁电薄膜模型, 探究铁电薄膜内部铁电畴与畴壁的动态响应规律, 推得到具有质量分数和阻尼系数的畴壁运动解析模型。

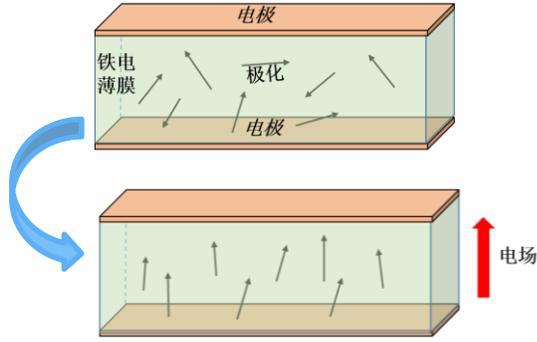


图 1. 电场作用下的极化翻转

**计算方法:** 建立适用于超快时间尺度的力场、极化场。

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = f_{vi} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} + \tau \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t})$$

$$L_1 \frac{\partial^2 \eta_i}{\partial t^2} + L_2 \frac{\partial \eta_i}{\partial t} + \frac{\delta F}{\delta \eta_i} = 0 (i=1,2,3)$$

其中  $\rho$ 、 $\tau$  和  $f_{vi}$  分别为材料密度、阻尼系数和外体力,  $L_1$  和  $L_2$  分别动力学系数。式中  $\sigma_{ij} = \partial f / \partial \varepsilon_{ij}$ ,  $\varepsilon_{ij} = 1/2(u_{i,j} + u_{j,i})$ ,  $u_i$  为位移分量。  $F = \int_V f dV$ , 其中总自由能  $f$  包含快体能、梯度能、弹性能、静电能, 即  $f = f_{bulk} + f_{gradient} + f_{elastic} + f_{electric}$

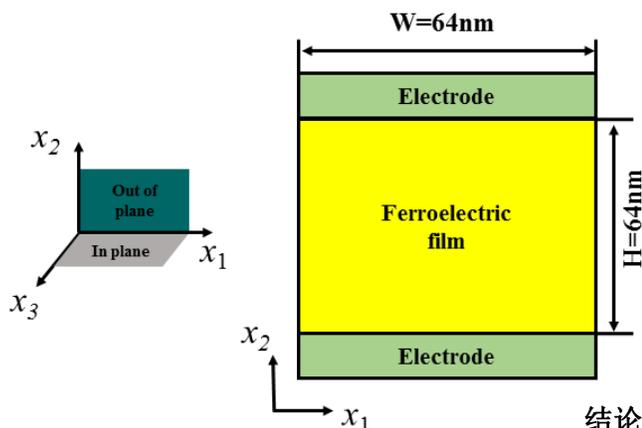


图 2. HfO<sub>2</sub>几何模型示意图

**结果:** 根据模型模拟出多相共存氧化钨基铁电薄膜的畴结构, 并对其铁电畴与畴壁动态响应规律进行探究。

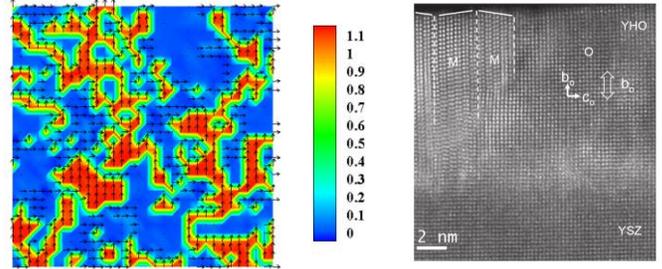


图 3. 畴结构 (a) HfO<sub>2</sub>铁电相与非铁电相共存畴结构 (b) YHO薄膜STEM横截面扫描图<sup>[1]</sup>

超快时间尺度下的动力学相场模型考虑了畴与畴壁的惯性和动量, 畴与畴壁移动速度具有延迟响应的效果。

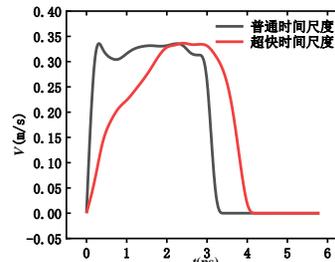


图 4. 超快时间尺度下和普通时间尺度下畴壁速度对比

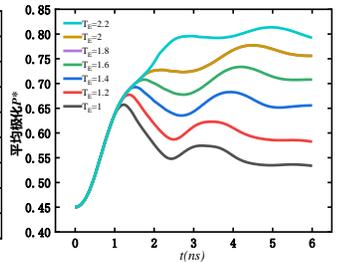


图 5. 超快时间尺度不同电场脉冲持续时间下c畴的平均极化

超快时间尺度下c畴极化响应, 短脉冲持续时间下, 撤去电场脉冲后, 已翻转的c畴往回转a畴, 长脉冲持续时间下, 撤去电场后, a畴继续转变为c畴

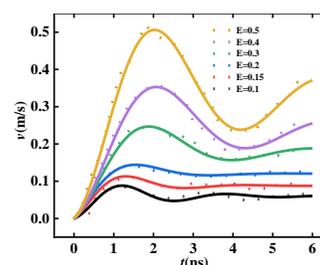


图 6. 超快时间尺度不同电场脉冲

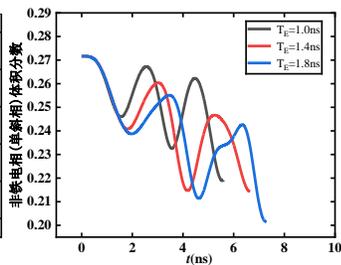


图 7. 超快时间尺度不同循环脉冲强度下的畴壁移动速度与解析曲线

从模拟结果中计算出各个时刻下a-c畴壁移动速度, 其各个描点如图6, 将点连线成曲线, 根据曲线推导得到解析模型。  $M$  和  $\beta$  分别为有效质量和阻尼系数,  $\gamma$  为参数。

$$M \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \beta \frac{\partial u}{\partial t} + \gamma \cdot e^{-\frac{\beta}{M} t} \sin\left(-\frac{\gamma \beta}{MP_s E} t\right) = P_s E$$

**结论:** 分析得到超快电脉冲幅值及持续时间与氧化钨基铁电薄膜保持性能、氧化钨基铁电薄膜wake up效应之间的关联, 为氧化钨基铁电薄膜宏观性能优化提供指导。

## 参考文献:

1. Choudhury S, Li Y L, Krill Iii C, et al. Phase-field simulation of polarization switching and domain evolution in ferroelectric polycrystals [J]. Acta Materialia, 2005, 53(20): 5313-5321