
科学家实现Y掺杂氧化钬薄膜的稳定铁电性

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/18968.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！

科学家实现Y掺杂氧化钬薄膜的稳定铁电性。

2022年6月27日，美国内布拉斯加大学林肯分校许晓山团队、Alexei Gruverman团队与Evgeny Y. Tsymbal团队合作在Nature Materials上发表了一篇题为Intrinsic ferroelectricity in Y-doped HfO₂ thin films的新研究。

课题组利用激光脉冲沉积系统制备了高质量氧化钬外延薄膜，观测到了与理论预测接近的铁电极化，揭示了薄膜结晶性和晶粒尺寸与铁电极化的正相关性，表征了薄膜中共存的正交相畸变和菱形相畸变，并探索了菱形相畸变对铁电性能的影响。

论文通讯作者是许晓山、Alexei Gruverman、Evgeny Y. Tsymbal；第一作者为云宇、Pratyush Buragohain?、李明。

随着科技的迅速发展和人类需求的不断提高，器件的小型化、高集成度是电子器件发展的一个必然趋势。铁电材料作为一类具有自发极化并且在外加电场的作用下可以被反转的材料，在数据存储、传感器、驱动器等方面有着广泛的应用前景。然而，传统的钙钛矿铁电材料与现代半导体工艺的低兼容性以及对沉积厚度较高需求，极大限制了铁电材料的应用和发展。近年来，氧化钬基铁电材料因其与现代半导体工艺的兼容性以及低厚度下（小于10纳米）稳定的铁电性吸引了广泛的关注。然而，氧化钬的铁电相（正交相）是亚稳相，这使得如何稳定氧化钬的铁电相成为一个挑战。其中，利用正交相比较低的表面能，通过减小晶粒尺寸来稳定铁电相是一种常用的方法。但是，这种方法引入了更多的缺陷，不但使得氧化钬的铁电极化远低于理论值，也为氧化钬的本征性能蒙上了一层神秘的面纱。

近日，美国内布拉斯加大学林肯分校许晓山团队，Alexei Gruverman团队，Evgeny Y. Tsymbal团队利用激光脉冲沉积方法合成YHO（5%-Y掺杂的HfO₂）外延薄膜，铁电极化数值是目前报道的最大值，并且与理论预测相符合。该研究展示了薄膜结晶性与铁电性能的正相关性，提供了测量和分析正交相和菱形相的方法，并利用密度泛函理论（DFT）计算了菱形相畸变对铁电极化的影响。

。

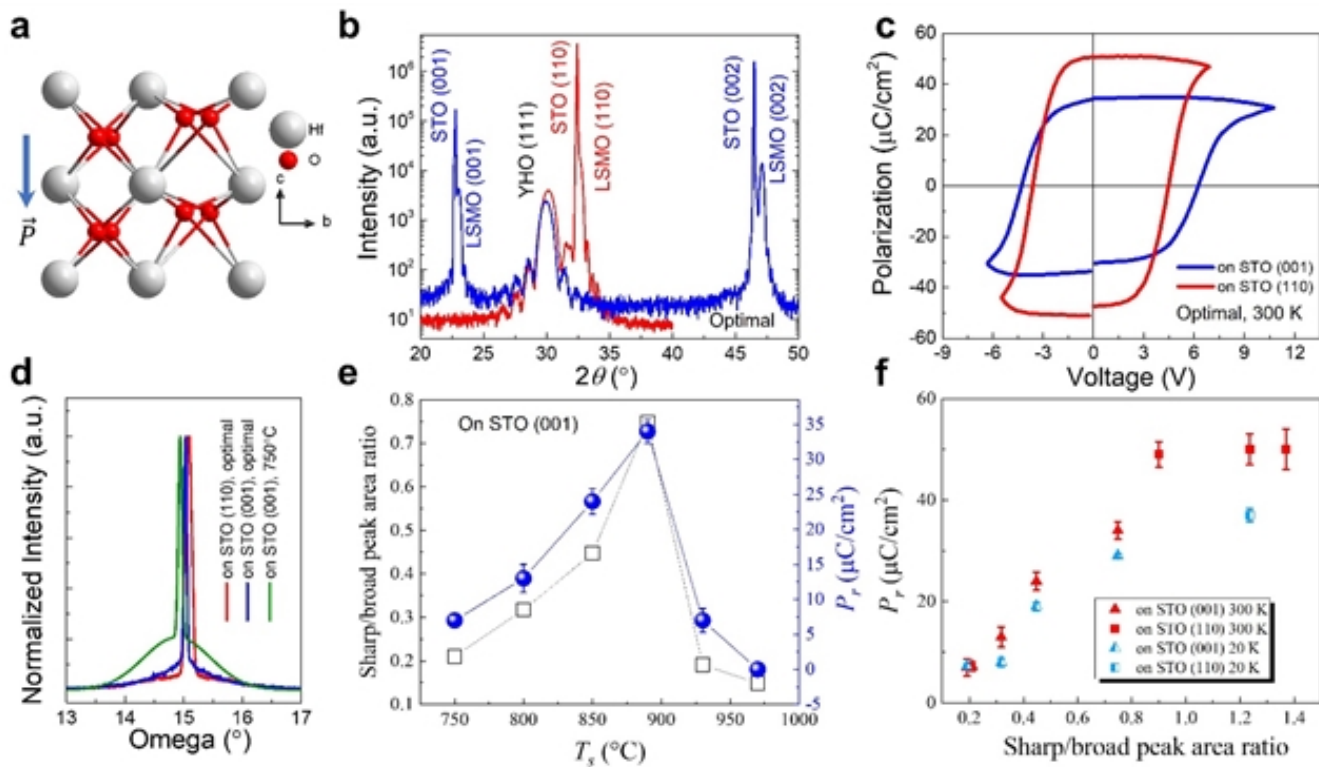


图1：YHO薄膜的结构和铁电性能表征

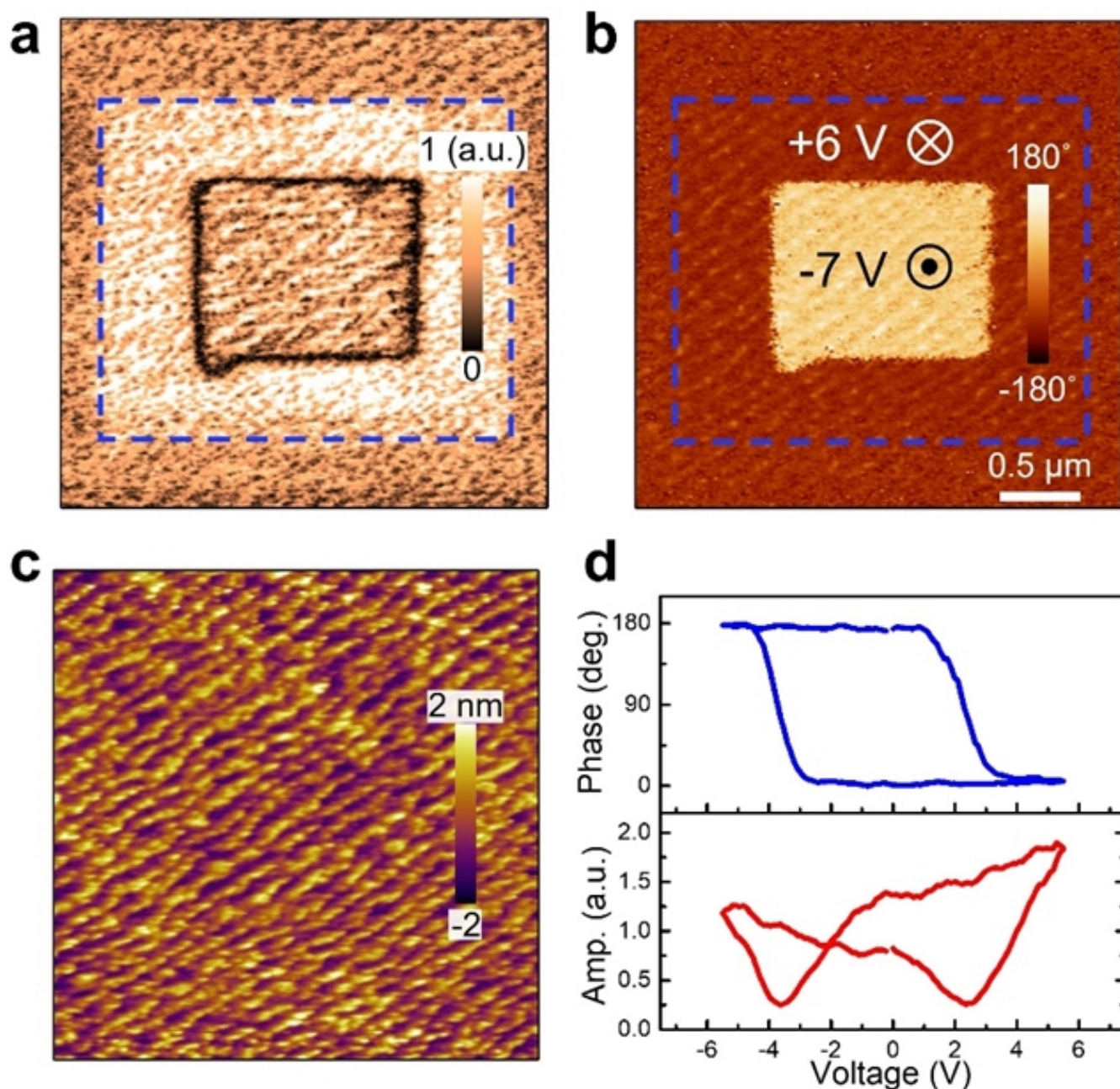


图2：薄膜的表面形貌和PFM表征

铁电极化与薄膜结晶性的正相关性。YHO外延薄膜利用激光脉冲沉积方法生长在STO(001)和STO(110)两种基底上，底电极为 $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 。其中，生长在STO(110)上的YHO薄膜测得的室温铁电极化 ($50 \mu\text{C}/\text{cm}^2$) 是目前报道最高的室温铁电极化值。利用薄膜的摇摆曲线作为薄膜结晶性的衡量指标，通过改变薄膜生长温度，该研究展示了YHO薄膜的结晶性与铁电极化呈现正相关性（低温下也适用），这不同于之前所有的报导。有别于之前报道，氧化镧的铁电极化并没有随温度的下降而大幅降低。温度在20 K时，沿(111)取向的铁电极化仍有 $37 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ ，沿极化轴(001)的估计值为 $64 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ ，这与理论预测相符。

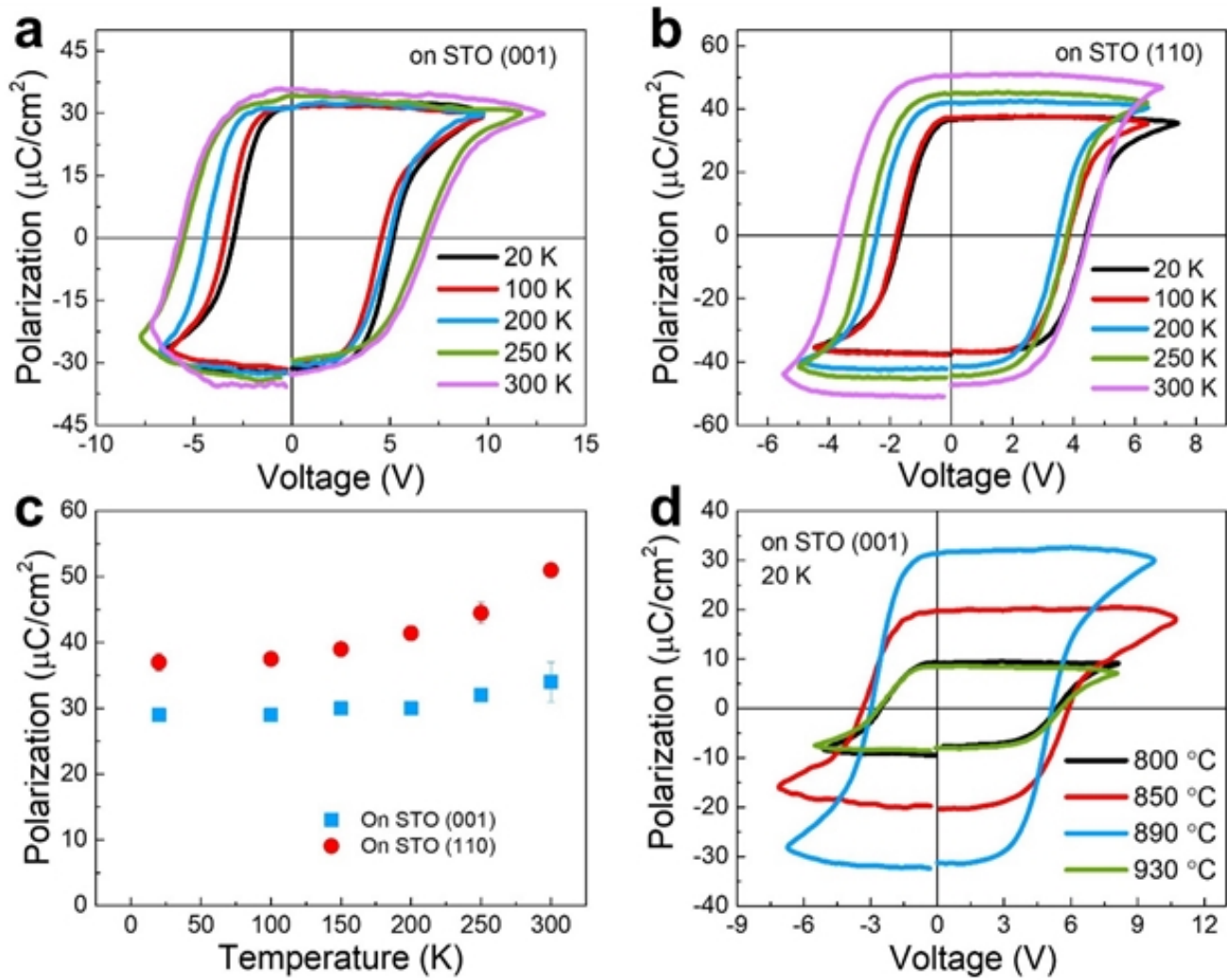


图3：铁电性能与温度依赖关系

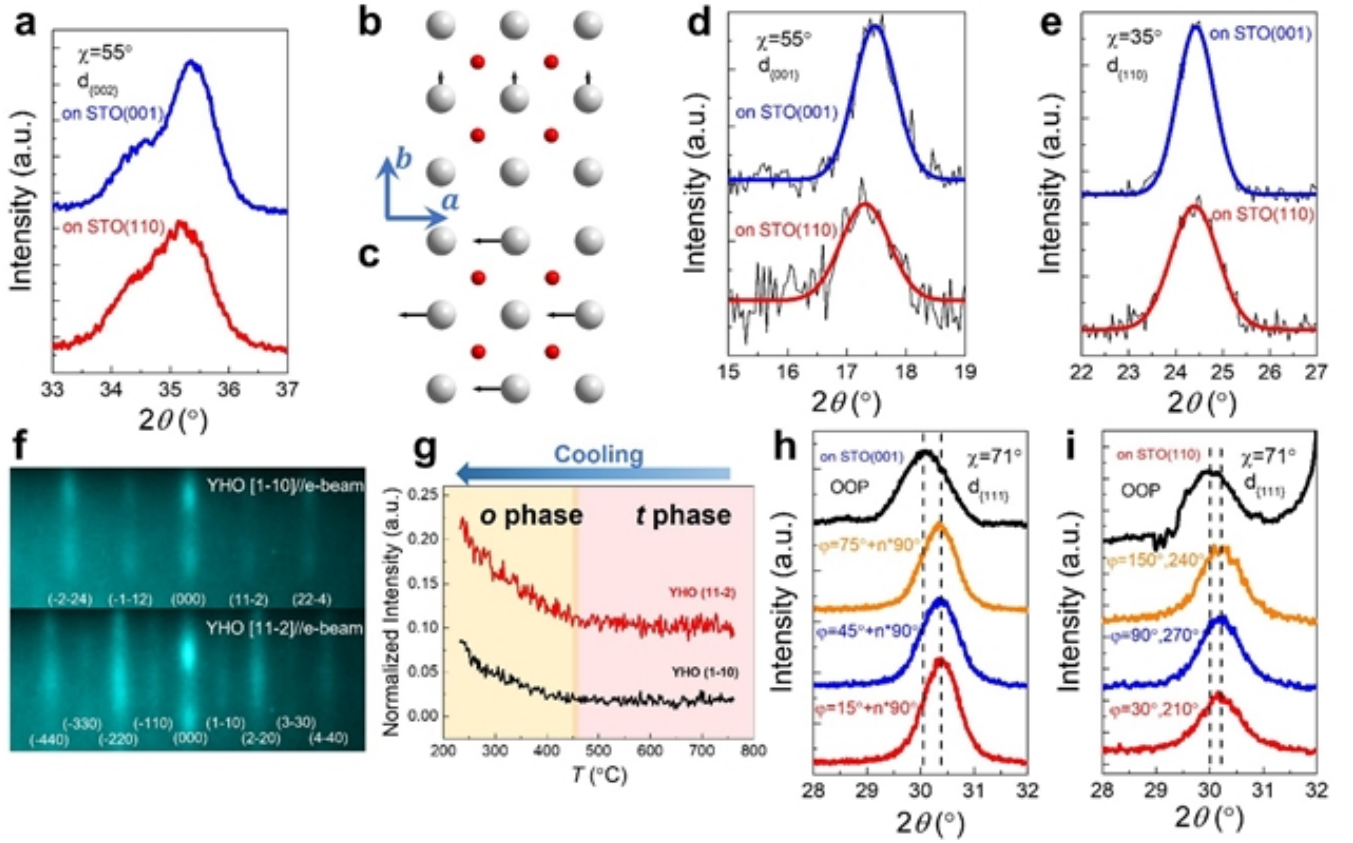


图4：YHO薄膜的结构表征，区分正交相和菱形相

氧化钬的正交相与菱形相畸变。利用X射线衍射对YHO薄膜的 $\{002\}$ ， $\{001\}$ 以及 $\{110\}$ 晶面间距的测量，得到了氧化钬的晶格常数并且确认了正交相特有的晶格畸变。通过对 $\{111\}/\{11-1\}/\{-111\}/\{1-11\}$ 晶面间距测量，证实了YHO薄膜中存在的菱形相晶格畸变，并且计算得到在STO (001)和STO (110)上菱形畸变的角度分别为 0.41° 和 0.25° 。利用RHEED（反射式高能电子衍射）对薄膜表面形貌的实时监测，得到了YHO薄膜从四方相到正交相铁电的转变温度在 450°C 左右。密度泛函理论表明就观测到的菱形畸变大小，铁电性能受到的影响应该十分有限。因此，YHO薄膜铁电极化的主要来源是其正交相，而与其共存的菱形相畸变则是由薄膜在降温过程中沿面外(111)方向的体积膨胀所导致。

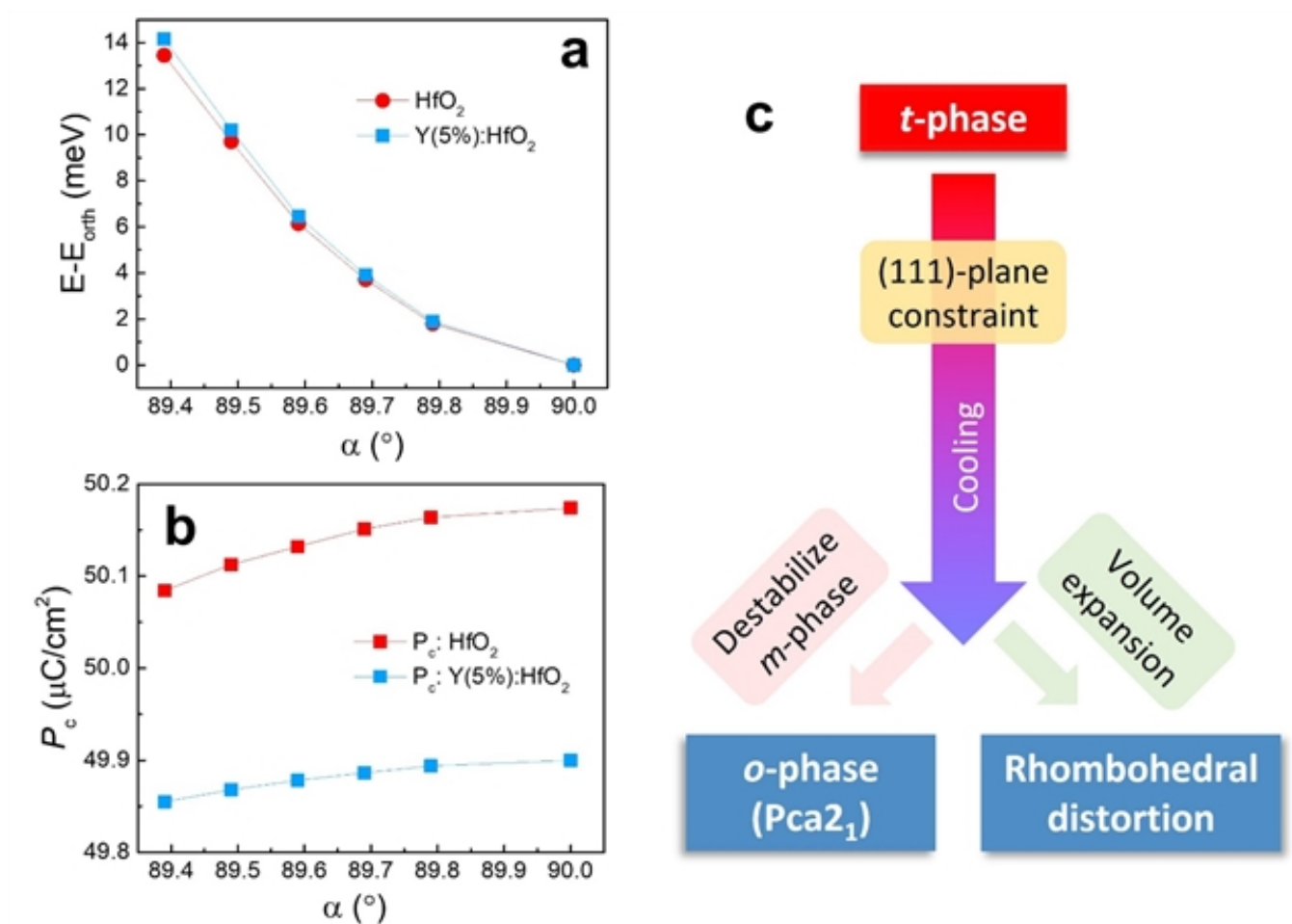


图5：密度泛函理论计算菱形畸变对铁电性能的影响

(来源：科学网)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41563-022-01282-6>

作者：许晓山等 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](https://www.iikx.com)转发