

## <10-27>

### FEM Analysis of Domain Evolution in Epitaxial PZT Thin Films

Kilho Lee, Kyeong Seok Lee, and Sunggi Baik

Dept. of Materials Science and Engineering, POSTECH

Equilibrium domain structures commonly observed in epitaxial Pb-based ferroelectric thin films are analyzed by finite element method (FEM) using a commercial package, ABAQUS. Evolution of periodic  $90^\circ$ -domain structures in epitaxial  $\text{PbTiO}_3$  thin films on cubic single crystalline substrates is analyzed as a function of decreasing temperature in order to simulate cooling process after the film deposition at elevated temperature ( $T_G$ ). The degree of  $c$ -axis orientation ( $a$ ) is determined as a function of temperature below the Curie temperature and compared to the experimental results. It is then possible to calculate the magnitude of misfit strain during film growth and its relaxation due to dislocation generation. The dependence of domain structures on the selection of cubic substrate and the chemical composition in epitaxial PZT thin films is also analyzed with the assumption that the major driving force for domain structures is thermo-elastic strains arising from the film-substrate interaction and the cubic-tetragonal phase transformation. The FEM analysis also suggests that initial misfit stress at  $T_G$  is not fully relaxed and inversely proportional to  $c$ -domain abundance.

## <10-28>

미세구조 변화에 따른 BST 박막의 누설전류 특성 연구

Effects of Microstructure on the Leakage Current Behavior in  $(\text{Ba,Sr})\text{TiO}_3$  Thin Films

안건호, 백성기

포항공과대학교, 재료·금속공학과

RF 마그네트론 스퍼터링법으로  $(\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5})\text{TiO}_3$  (BST) 박막을 Pt/MgO(100) 기판 위에 증착하였다 미세구조에 대한 누설전류의 영향을 판단하고자, 하부전극과는 동일한 계면 상태를 유지하나 다른 미세구조를 지닌 박막들간에 누설전류를 측정하였다 하부전극은 금속 Pt 박막을 MgO 단결정 기판에서 에피 성장을 하여 사용하였다. BST 박막은  $650^\circ\text{C}$  에서 초기 에피층을 형성한 후, 온도를 유지하며 in-situ 에피 성장시키거나 또는 온도를 내려  $150^\circ\text{C}$ 에서 증착한 후 후열처리과정에서 결정화 하여 서로 다른 미세구조를 가지도록 하였다 금속 Pt 전극을 사용하였을 때 누설전류는 인가전압 2 V에서 에피 박막과 후 열처리 박막 각각에서  $4.6 \times 10^{-6}$ ,  $2.11 \times 10^{-8}$  A/cm<sup>2</sup>를 보였다