

Rezumat pentru raport anual Program Nucleu (maxim 2 pagini format A4, Times New Roman 12, la un rand)

**Titlu Faza:** Termodinamica proceselor de comutare a polarizării feroelectrice: aplicarea modelului Landau-Ginzburg-Devonshire pentru structuri multistrat cu aplicații în memorii cu stări multiple

**Obiective:** Studiarea structurilor de tip feroelectric-izolator-feroelectric (FIF) pentru determinarea proceselor de comutare a polarizării feroelectrice folosind modelul termodinamic Landau-Ginzburg-Devonshire (LDG). Rezultatele teoretice obținute vor fi comparate cu date experimentale măsurate pe structuri metal-feroelectric-metal.

**Rezultate estimate inițial:** Explicarea procesului de comutare a polarizării în structurile de tip FIF ce prezintă stări de polarizare multiple. Dependentă apariției stărilor multiple de polarizare în funcție de constanta dielectrică a stratului izolator, de grosimea straturilor de feroelectric și a parametrilor modelului LGD.

**Rezultate obținute** (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care susțin rezultatele):

În cadrul acestei faze s-au studiat proprietățile structurilor FIF și condițiile în care apar stările multiple de polarizare. În acest scop s-a folosit modelul termodinamic LGD care descrie densitatea volumică a potențialului Gibbs al unui strat component astfel:

$$g(T, \vec{E}, \rho) = -\frac{1}{2} \varepsilon E^2 - PE + \frac{1}{2} \alpha P^2 + \frac{1}{4} \beta P^4 + \dots \quad (1)$$

Unde  $P$  este polarizarea stratului,  $E$  este câmpul electric din stratul respectiv iar  $\alpha$  și  $\beta$  sunt parametri de fit legați de proprietățile materialelor studiate. Pentru stratul izolator intermediar, polarizarea este zero iar Ec. (1) se reduce doar la primul termen. Potențialul Gibbs pentru structura FIF se scrie ca o sumă a celor trei componente:

$$G(T, V_a) = v_1 g(T, E_1) + v_i g(T, E_i) + v_2 g(T, E_2), \quad (2)$$

unde,  $v_1$ ,  $v_i$  și  $v_2$  sunt volumele părților constituente, iar  $E_1$ ,  $E_i$  și  $E_2$  sunt câmpurile electrice corespunzătoare atunci când pe structura FIF este aplicată o tensiune  $V_a$ . Câmpurile electrice în fiecare strat pot fi obținute rezolvând o problemă electrostatică iar polarizările din cele două straturi feroelectrice rezulta din impunerea simultană a condiției de minim în Ec. (2).

În Figura 1 este prezentată evoluția polarizării totale și evoluția polarizărilor straturilor constituente pe parcursul switching-ului, în cazul unei structuri FIF ce prezintă 4 stări stabile de polarizare. De asemenea, polarizarea totală a structurii poate descrie și două cicluri de histerezis intermediare ce se pot obține astfel: din starea de reversare totală a polarizării în cele două straturi feroelectrice, obținută prin aplicarea unei tensiuni maxime, se variază câmpul aplicat până ce se obține reversarea polarizării doar într-unul dintre straturile feroelectrice. Continuarea creșterii câmpului aplicat în același sens va determina comutarea polarizării și în celălalt strat feroelectric, determinând astfel un ciclu complet de histerezis. Dacă după prima reversare a polarizării, câmpul aplicat se reduce la zero, starea aceasta intermediară rămâne stabilă. Săzând în continuare câmpul aplicat, are loc back-switchingul polarizării la o tensiune mult mai mică, în comparație cu tensiunea coercitivă din histerezisul complet. Rezultă astfel un histerezis intermediar puternic deplasat pe axa tensiunii. Similar, un al doilea ciclu de histerezis

intermediar se obtine plecand de la o starea initiala cu polarizarea orientata in sens invers în ambele straturi feroelectrice. Dar acest al doilea ciclu de histerzis intermediar va avea o deplasare inversa pe axa tensiunii in comparatie cu primul. Aceste caracteristici sunt specifice pentru aceste structuri FIF ce prezinta un switching in trepte si se datoreaza cuplajului electrostatic dat de prezenta stratului izolator intermediar. Un rezultat asemanator se obtine și experimental, masurand o structura de tip  $Pb(Zr_{20},Ti_{80})O_3 - BaTiO_3 - Pb(Zr_{20},Ti_{80})O_3$ . In Figura 1 este evidentiat ciclul complet de switching al polarizarii, precum si cele doua cicluri intermediare ce prezinta un imprint cu orientare opusa.

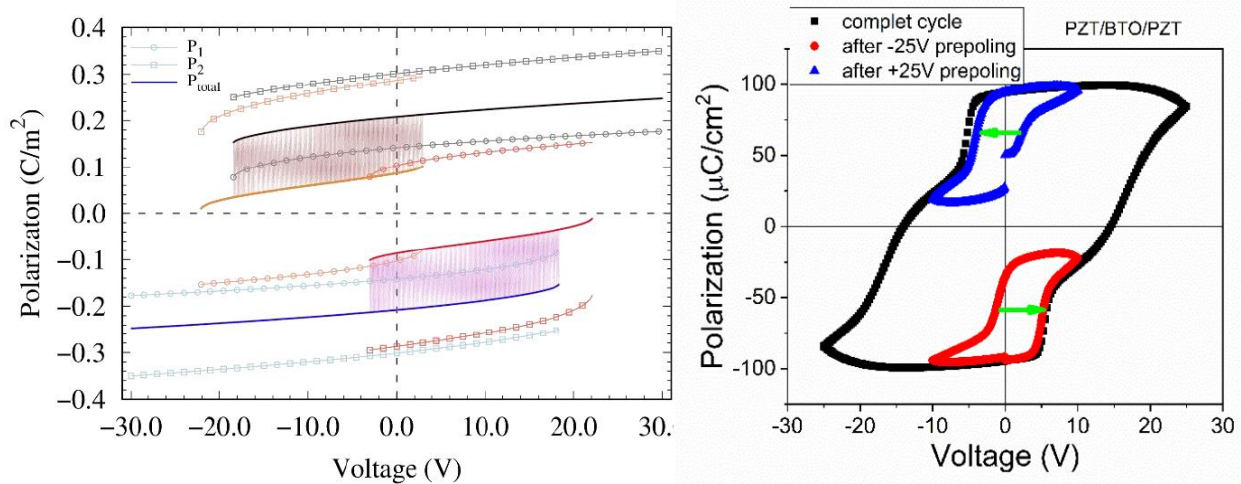


Figure 1: Evolutia polarizarii totale si a polarizarilor din straturile feroelectriceconstituente in functie de tensiunea aplicata modelata teoretic (figura din stanga); Curbele de histerzis total si partial in functie de starea de pre-polare, masurate pe o structura  $Pb(Zr_{20},Ti_{80})O_3-BaTiO_3-Pb(Zr_{20},Ti_{80})O_3$

### **Concluzii si perspective:**

Rezultatele obtinute in aceasta faza de proiect nucleu se inscriu, ca o continuare a eforturilor teoretice si experimentale de studiere a structurilor de tip feroelectric-izolator-feroelectric cu scopul de a obtinza obtinerea de stari multiple de polarizare stabile. Obiectivele fazei au avut ca scop intelegerea mecanismelor de reversare a polarizarii si de aparitie a starilor multiple în structuri feroelectric-izolator-feroelectric. Toate obiectivele au fost indeplinite, rezultatele studiului teoretic fiind coroborate de masuratori experimentale. Avand in vedere ca realizarea unor aplicatii avansate, cum sunt memoriile feroelectrice cu stari multiple si o larga gama de jonctiuni tunel feroelectrice implica utilizarea unor structuri de tip condensator feroelectric, apreciem ca rezultatele raportate in aceasta faza pregatesc atat teoretic cat si experimental posibilitatea fabricarii in viitor a unor prototipuri de memorii cu stari multiple. Propunem astfel continuarea temei privind studiul polarizarii in sisteme pentru dispozitive nanometrice prin evaluarea acestei marimi fizice in heterostructuri si super-retele cu moduri feroice cuplate. Un manuscris este in lucru pentru publicarea rezultatelor obtinute in aceasta faza de nucleu și intentionam sa il trimitem spre publicare in Applied Physics Letters.