

## AFM팁/강유전박막/전극 시스템에서의 스위칭 영역의 형성

김상주<sup>†</sup> · 신준호\* · 김윤재\*\*  
(2001년 12월 19일 접수, 2003년 4월 9일 심사완료)

### Formation of Switching Zones in an AFM Tip/Ferroelectric Thin Film/BE System

Sang-Joo Kim, Joonho Shin and Yun-Jae Kim

**Key Words:** Ferroelectric Films(강유전박막), Polarization Switching(분극역전), Finite Element Method(유한요소법), AFM Tip(원자력현미경팁)

#### Abstract

A three-dimensional constitutive model for polarization switching in ferroelectric materials is used to predict the formation of switching zones in an atomic force microscopy(AFM) tip/ferroelectric thin film/bottom electrode system via finite element simulation. Initially the ferroelectric film is poled upward and the bottom electrode is grounded. A strong dc field is imposed on a fixed point of the top surface of the film through the AFM tip. A small switching zone with downward polarization is nucleated and grows with time. It is found that initially the shape of the switched zone is that of a bulgy dagger, but later turns to the shape of a reversed cup with the lower part wider than the upper part. It can also be concluded that the size of switching zones increases with the period of applied electric potential. The present results are qualitatively consistent with experimental observations.

#### 1. 서론

강유전 세라믹은 상온에서 정방형의 격자구조를 가지며 외부로부터 기계적 또는 전기적인 자극이 작용하지 않는 경우에도 분극을 가진다. 이를 자발분극이라 하는데 정방형 격자의 경우 서로간에 직각으로 위치하는 6개의 분극을 가질 수 있다. 강유전체는 기계-전기적으로 연성되어 있는 점 이외에 외부에서 기계 또는 전기적 하중이 작용할 때 분극의 방향이 바뀐다는 특징을 가지고 있다. 주어진 하중에 따라 격자가 가질 수 있는 6개의 분극방향 중에서 가장 안정한 방향으로

분극의 방향이 바뀌는데 이를 분극역전(polarization switching)이라고 한다.

강유전체의 응용분야는 다양하다. 먼저 강유전체의 기계-전기적 연성거동 특성을 이용하여 여러 가지 유형의 작동기나 감지기가 개발되고 있으며 다양한 전기-기계 마이크로 시스템 또는 지능구조물의 개발에 응용되고 있다. 한편 강유전체의 분극역전 특성을 이용하여 고용량의 기억소자를 개발하려는 연구도 이루어지고 있다. 그 한가지 예로 AFM 팁/강유전박막/전극으로 이루어진 기억소자에서 정보를 저장할 때 강유전 박막이 전계가 인가될 때 분극이 역전되는 특성을 이용하고 있다. 즉 초기에 강유전 박막에 상방향으로 분극이 형성되어 있다고 할 때, AFM 팁에서 강한 직류전계가 하방향으로 작용하면 팁 근처에서의 분극들이 역전되어 하방향의 분극을 가지는 영역이 생성된다. 하방향 또는 상방향의 분

<sup>†</sup> 책임저자, 회원, 서울시립대학교 기계정보공학과

E-mail : sjk@uos.ac.kr

TEL : (02)2210-2757 FAX : (02)2248-5110

\* 서울시립대학교 기계정보공학과

\*\* 성균관대학교 기계공학부

극을 가지는 영역은 각각 "0" 또는 "1"에 대응되며 AFM 톱에서 약한 교류전계를 발생시켜 구분할 수 있다.

본 연구에서는 Kim and Jiang,<sup>(1)</sup> Kim<sup>(2)</sup>에 의해서 개발된 구성방정식과 수치해석 알고리즘을 AFM 톱/강유전박막/전극 시스템에 적용하여 하방향의 분극을 가지는 영역이 생성되며 정보가 저장되는 과정을 규명하기로 한다. 제시된 구성방정식은 열역학에 기반을 두고 있으며 자유에너지 함수와 분극역전 조건식, 그리고 분극역전 속도식으로 이뤄져 있다. AFM 톱에 강한 직류전계가 인가될 때 하방향분극을 가지는 영역이 시간에 따라 성장하는 과정을 모사하고 인가되는 직류전계의 크기가 메모리 비트의 크기에 미치는 영향도 조사하기로 한다. 이러한 모사결과들은 Woo et al.<sup>(3)</sup>의 실험결과와 정성적으로 비교되며 실험결과와의 유사점과 차이점에 대하여 논한다.

## 2. 기본방정식

### 2.1. 자유에너지함수

$BaTiO_3$ ,  $PZT$ ,  $PLZT$  등 최근 많이 이용되고 있는 압전체는 상온에서 정방형의 격자구조를 가진다. 정방형 격자의 경우 서로 다른 분극 방향을 가지는 6개의 배리언트가 존재하며 따라서 임의의 결정립 내부는 그들 배리언트들로 이루어진 복잡한 분역구조로 이루어져 있다. 각 배리언트는 자유에너지 함수에 따라 그 거동 특성이 결정되는데  $i$ 번째 배리언트의 자유에너지 함수는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \rho\psi_i(\mathbf{d}_i, \mathbf{S}_i) = & \\ & \frac{1}{2} x_i^S (\mathbf{d}_i - \mathbf{d}_i^S) \cdot (\mathbf{d}_i - \mathbf{d}_i^S) \\ & + \frac{1}{2} \varepsilon_i^P (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_i^S) \cdot (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_i^S) \\ & + \mathbf{H}_i^T (\mathbf{d}_i - \mathbf{d}_i^S) \cdot (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_i^S) \quad (1) \end{aligned}$$

여기서  $x_i^S$ ,  $\varepsilon_i^P$ ,  $\mathbf{H}_i$ 는  $i$ 번째 배리언트의 일변형률에서의 역유전감수율, 일정분극밀도에서의 탄성강성텐서, 분극밀도와 변형률사이의 압전텐서를 나타내며,  $\mathbf{d}_i^S$ ,  $\mathbf{S}_i^S$ ,  $\rho$ 는 자발분극벡터, 자발변형률 텐서, 밀도를, 그리고 상첨자  $T$ 는 전

치텐서를 나타낸다. 전계강도  $\mathbf{E}_i$ 와 응력  $\mathbf{T}_i$ 를  $\mathbf{E}_i = \rho(\partial\psi_i/\partial\mathbf{d}_i)$ ,  $\mathbf{T}_i = \rho(\partial\psi_i/\partial\mathbf{S}_i)$ 로 구한 후 다시 정리하면 전기변위벡터  $\mathbf{D}_i$ 와 응력 텐서  $\mathbf{T}_i$ 를 구할 수 있다.

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_i &= \varepsilon_i^S \mathbf{E}_i + \varepsilon_i (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_i^S) + \mathbf{d}_i^S \\ \mathbf{T}_i &= \varepsilon_i^E (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_i^S) - \varepsilon_i^T \mathbf{E} \quad (2) \end{aligned}$$

여기서  $\varepsilon_i^S$ ,  $\varepsilon_i^E$ ,  $\varepsilon_i$ 는  $i$ 번째 배리언트의 일정 변형률에서의 유전율텐서, 일정전계에서의 탄성강성 텐서, 변형률과 전계사이의 압전텐서를 나타낸다.

분극역전과정은 배리언트가 높은 에너지 상태에서 낮은 에너지 상태로의 전환하는 과정으로 이해할 수 있으며 따라서 각 배리언트에 대한 깃스자유에너지를 다음과 같이 유도할 수 있다.

$$\begin{aligned} g_i(\mathbf{E}_i, \mathbf{T}_i) = & -\frac{1}{2} \mathbf{y}_i^T \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{E}_i \\ & -\frac{1}{2} \mathbf{s}_i^E \mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_i - \mathbf{d}_i^T \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{T}_i \\ & - \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{d}_i^S - \mathbf{T}_i \cdot \mathbf{S}_i^S \quad (3) \end{aligned}$$

여기서  $\mathbf{y}_i^T$ ,  $\mathbf{s}_i^E$ ,  $\mathbf{d}_i$ 는  $i$ 번째 배리언트의 일정 응력에서의 유전감수율텐서, 일정전계에서의 탄성 유연성텐서, 전계와 응력사이의 압전텐서이다.

### 2.2. 평균화

복잡한 분역구조로 이루어진 결정립의 거동에 대한 연속체 모델을 개발하기 위하여 개개의 분역보다는 크지만 결정립보다는 작은 연속체 질점(continuum particle)을 도입한다. 이 질점의 특성은 질점을 구성하는 배리언트들의 질량비  $m_i$ 로 결정되는데 각 배리언트의 질량비는 인가되는 전계나 응력에 따라 항상 다음 부등식을 만족하며 변하게 된다.

$$\begin{aligned} 0 \leq m_i \leq 1 \\ \sum_{i=1}^6 m_i = 1 \quad (4) \end{aligned}$$

각 질점에 작용하는 전계  $\mathbf{E}$ 와 응력  $\mathbf{T}$ 가 그 질점을 구성하는 배리언트들에 동일하게 작용한다고 가정하면 평균전기밀도벡터  $\mathbf{D}$ , 응력텐서

$\underline{T}$ , 평균변형률텐서  $\underline{S}$ , 전계벡터  $\underline{E}$  사이에 다음과 같은 식을 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} \underline{D} &= \underline{\epsilon}^S \underline{E} + \underline{e}(\underline{S} - \underline{S}^s) + \underline{d}^s \\ \underline{T} &= \underline{c}^E (\underline{S}_i - \underline{S}^s) - \underline{e}^T \underline{E} \end{aligned} \quad (5)$$

여기서  $\underline{\epsilon}^S$ ,  $\underline{c}^E$ ,  $\underline{e}$ 는 각각 일정평균변형률에서의 평균유전율텐서, 일정전계에서의 평균탄성강성텐서, 전계와 평균변형률사이의 평균압전텐서를 뜻한다.

연속체 질점에서의 지배방정식은 쿨롱의 법칙 (Coulomb's law)과 기계적 힘의 평형으로 나타나며 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{aligned} \text{div } \underline{D} &= 0 \\ \text{div } \underline{T} &= \underline{0} \end{aligned} \quad (6)$$

결정립 경계에서 평균전기변위와 응력은 다음 연속조건을 만족하여야만 한다.

$$\begin{aligned} (\underline{D}^+ - \underline{D}^-) \cdot \underline{n} &= 0 \\ (\underline{T}^+ - \underline{T}^-) \underline{n} &= \underline{0} \end{aligned} \quad (7)$$

전계강도  $\underline{E}$ 는 전위함수  $\phi$ 로부터 다음과 같이 구한다.

$$\underline{E} = -\text{grad } \phi \quad (8)$$

전위함수 역시 결정립의 경계면에서 연속적이어야 한다

$$\phi^+ - \phi^- = 0 \quad (9)$$

### 2.3 분극역전 조건식과 속도식

질점의 전기-기계적 특성은 그 질점을 구성하는 배리언트들의 질량비에 의존한다. 따라서 질점에 인가되는 전기적 또는 기계적 하중의 변화에 따른 질점내부의 질량비의 변화를 결정하는 구성방정식이 필요하다. 질점 내부의 두 배리언트 사이의 분극역전은 각 배리언트들의 열역학적 안정성의 차이에 기인하며 따라서 두 배리언트 사이에서 발생하는 분극역전 속도는 두 배리언트간 열역학적 안정성의 차이인 드라이빙력에 의해서 결정된다. 본 연구에서는  $i$ 번째 배리언트의 깃스에너지  $g_i$ 와  $j$ 번째 배리언트의 깃스에너지  $g_j$ 의 차이를 드라

이빙력  $f_{ij}$ 라고 했을 때 드라이빙력  $f_{ij}$  이  $i \rightarrow j$  분극역전의 속도  $\dot{m}_{ij}$ 와 다음과 같은 간단한 선형 관계를 가진다고 가정한다.<sup>(1,2)</sup>

$$\dot{m}_{ij} = \begin{cases} R_{ij}(f_{ij} + f_{cr}) & \text{for } f_{ij} = -f_{cr} \\ 0 & \text{for } -f_{cr} \leq f_{ij} \leq f_{cr} \\ R_{ij}(f_{ij} - f_{cr}) & \text{for } f_{ij} \geq f_{cr} \end{cases} \quad (10)$$

여기서  $R_{ij} (>0)$ 는  $i \rightarrow j$  분극역전의 유연성을 나타내는 재료상수이며,  $f_{cr} (>0)$ 는 분극역전이 시작하는 임계 드라이빙력을 나타낸다.  $j \rightarrow i$  분극역전의 속도  $\dot{m}_{ji}$ 는  $\dot{m}_{ji} = -\dot{m}_{ij}$ 이므로  $j$ 번째 영역의 증가율  $\dot{m}_j$ 은 다음과 같다.

$$\dot{m}_j = \sum_{i=1, i \neq j}^n \dot{m}_{ij} \quad (11)$$

### 2.4 유한요소 정식화

이제 계산에 이용될 유한요소 방정식을 유도하기로 한다. 요소내의 변위  $\{u\}$ 와 전기 퍼텐셜  $\phi$ 는 다음과 같이 표현되며 요소 질점변위  $\{u_N\}$ , 요소 질점 퍼텐셜  $\{\phi_N\}$ , 각각 변위와 퍼텐셜의 형성함수  $[N_u]$ 와  $[N_\phi]$ 에 의해서 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{aligned} \{u\} &= [N_u]\{u_N\} \\ \phi &= [N_\phi]^T \{\phi_N\} \end{aligned} \quad (12)$$

요소에서의 변형률  $\{S\}$ 과 전계강도  $\{E\}$ 는 변위와 퍼텐셜의 미분으로 구해진다.

$$\begin{aligned} \{S\} &= [B_u]\{u_N\} \\ \{E\} &= -[B_\phi]\{\phi_N\} \end{aligned} \quad (13)$$

가상일의 원리로부터 구해진 유한요소 방정식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} [K_{uu}]\{u_N\} + [K_{u\phi}]\{\phi_N\} &= \{F\} + \{F_s\} \\ [K_{\phi u}]\{u_N\} + [K_{\phi\phi}]\{\phi_N\} &= \{Q\} + \{Q_s\} \\ &+ \{C\} \end{aligned} \quad (14)$$

여기서 좌변의  $[K_{uu}]$ 와  $[K_{\phi\phi}]$ 는 각각 탄성강

성 행렬과 유전강성 행렬을,  $[K_{uu}]$ 와  $[K_{\phi u}]$ 는 압전강성 행렬을 나타내며 표현식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} [K_{uu}] &= \int_V [B_u]^T [c^E] [B_u] dV \\ [K_{u\phi}] &= \int_V [B_u]^T [e]^T [B_\phi] dV \\ [K_{\phi u}] &= \int_V [B_\phi]^T [e] [B_u] dV \\ [K_{\phi\phi}] &= - \int_V [B_\phi]^T [\epsilon^S] [B_\phi] dV \end{aligned} \quad (15)$$

또한 우변의 벡터 행렬들은 기계적, 전기적 하중 벡터들을 나타내며 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{aligned} \{F\} &= \int_S [N_u]^T \{t\} dS \\ \{F_s\} &= \int_V [B_u]^T [c^E] \{S^s\} dV \\ \{Q\} &= - \int_S [N_\phi] q dS \\ \{Q_s\} &= - \int_V [B_\phi]^T \{p^s\} dV \\ \{C\} &= \int_V [B_\phi]^T [e] \{S^s\} dV \end{aligned} \quad (16)$$

유도된 유한요소 방정식을 이용하여 모델의 응답을 결정하는 구체적인 수치해석과정은 Kim and Jiang<sup>(1)</sup> Kim<sup>(2)</sup>에 소개되어 있으며 여기서는 서술을 생략하기로 한다

### 3. 계산 및 결과

계산에 이용될 AFM팁/강유전박막/전극 시스템에 대한 도식적인 그림이 Fig. 1(a)에 보여져 있다. AFM 팁은 점 A에 위치하며 박막의  $x_1$ ,  $x_2$  축 방향으로의 길이는 각각  $L_1 = 8 \mu m$ ,  $L_2 = 4 \mu m$ 이고 박막은  $BaTiO_3$  강유전체로 이루어져 있다고 가정한다. 본 연구에서 사용된 재료는  $BaTiO_3$ 이며, 관련된 재료상수는 Jaffe et al.<sup>(4)</sup>에서 구하였다. 대부분의 재료상수들은 Kim and Jiang<sup>(1)</sup>에서의 식 (40)과 동일한 값을 가지지만 분극역전 과정에서 부피가 보존된다는 점을 고려하여 자발변형률을  $S_1^s = 3.2427 \times 10^{-3}$ ,  $S_2^s = -1.4966 \times 10^{-3}$ 으로 결정하였다. 또, 분극역전 속도식에서의 비례상수  $R_{ij}$ 는 임의로 선

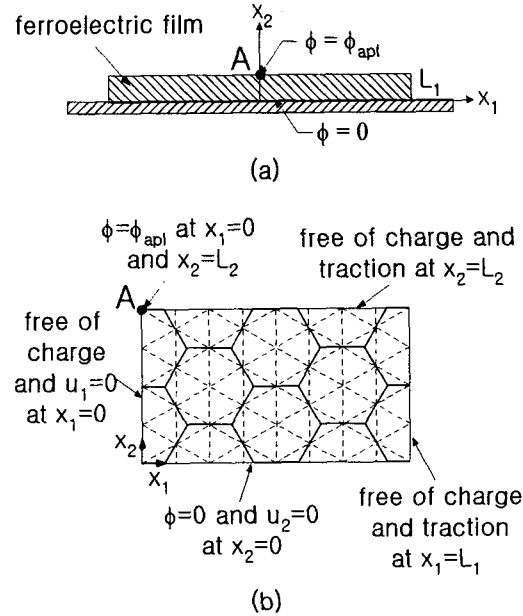


Fig. 1 Ferroelectric film/bottom electrode system(a) and finite element meshes(b)

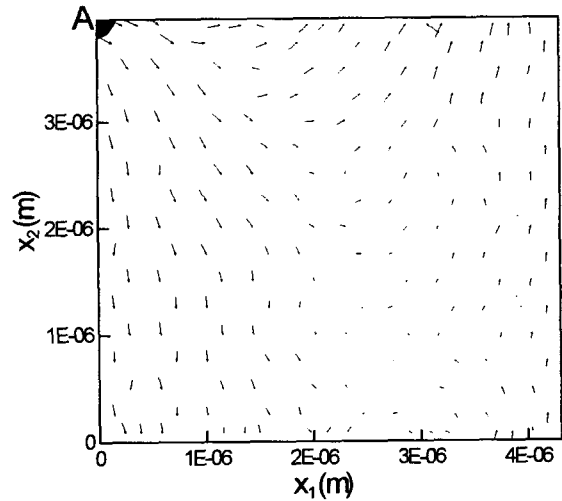


Fig. 2 A distribution of polarization at 0.1 sec

택하였으며, 임계 드라이빙력  $f_{cr}$ 은 작은 수의 유한요소로도 분극역전 영역의 성장과정을 잘 보여 주도록 선택되었다. 즉,  $R_{ij} = 5 \times 10^{-5} m^2/N \cdot sec$ ,  $f_{cr} = 5.0 \times 10^6 J/m^3$  다. Fig. 1(b)는 계

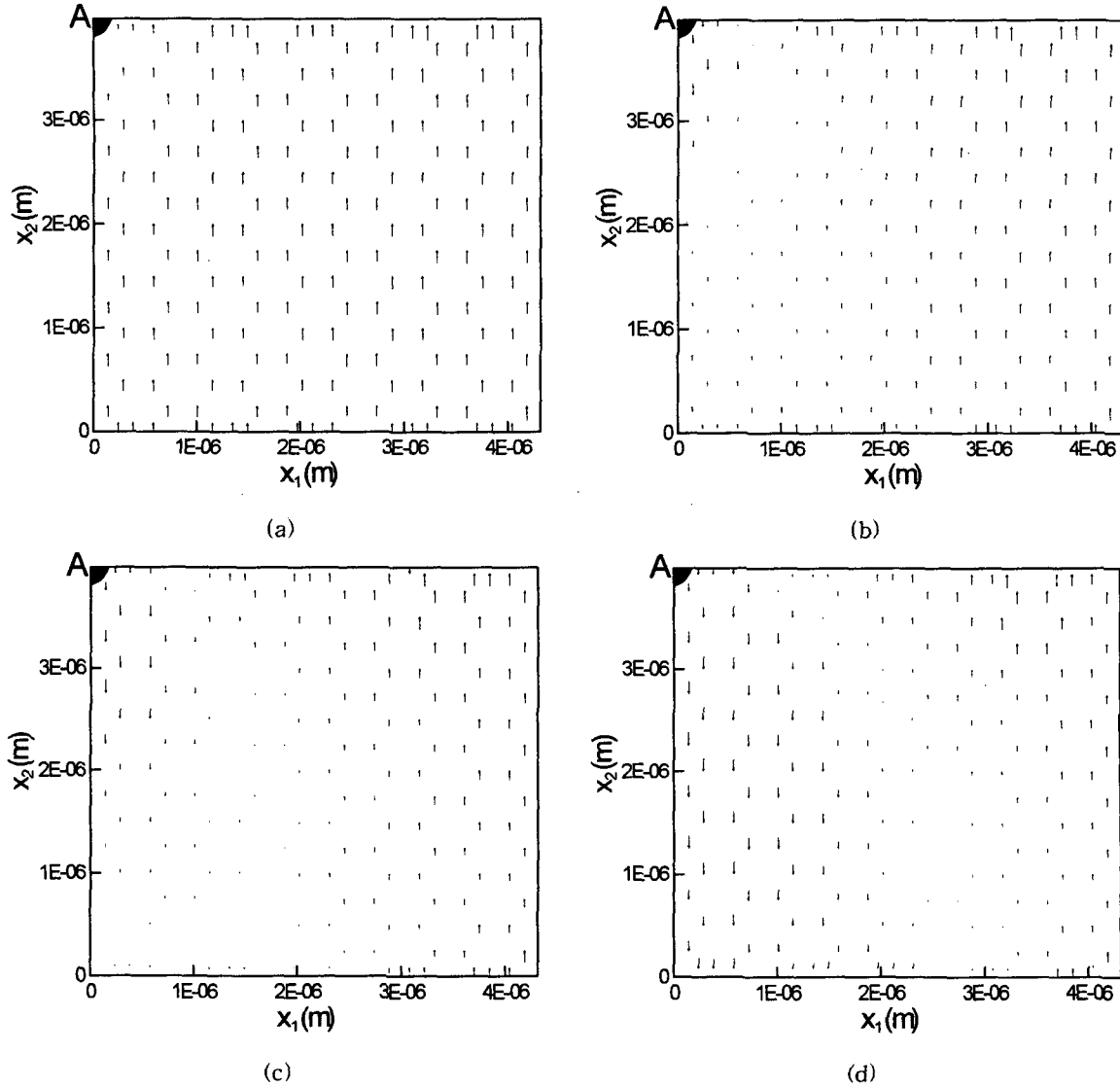


Fig. 3 The distributions of vertical polarization at (a) 0.002 sec, (b) 0.02 sec, (c) 0.04 sec and (d) 0.1 sec

산을 수행하기 위해 생성된 유한요소들을 보여준다. 대칭성을 이용하여 박막의 우측부분만을 모델링 하였으며 계산용량의 부족으로 박막이 정육각형 형상을 한 49개의 결정립만으로 이루어져 있다고 가정하였다. 결정립의 크기는 그 높이가  $1\mu\text{m}$ 이며 12 개의 3 결정 삼각형 요소로 분할되었다. 기계적 및 전기적 경계조건은 Fig. 1b에 보인 바와 같다. 즉, 전기적으로는 AFM 팁이 위치한 점 A에 있는 결정에서의 전위는 항상  $\phi$

$= \phi_{apl}$ 로, 밀면  $x_2=0$ 에 위치한 결정에서의 전위는 항상 0으로 유지된다. 그 외의 결정에서는 전하가 소멸된다. 기계적으로는  $x_1=0$ 에 위치한 결정들의  $x_1$ 축 방향으로의 변위가, 그리고  $x_2=0$ 에 있는 결정들의  $x_2$ 축 방향으로의 변위가 구속된다. 그 외의 결정에서는 응력이 소멸된다. 지금부터 초기에 강유전 박막이 상방향으로

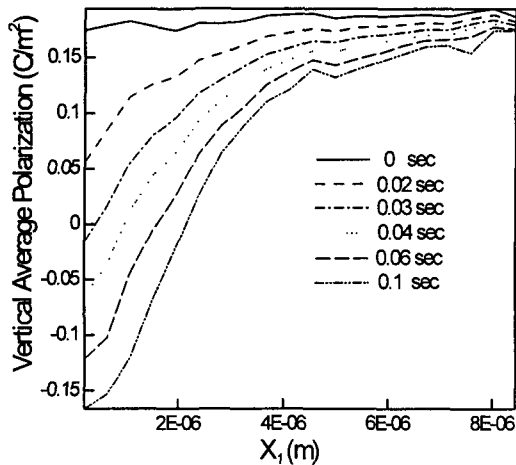
완전히 분극화되어 있을 때 점  $A$ 에 전위가  $\phi_{abl} = 15 V$ 으로 일정한 시간  $T_{abl} = 0.1 sec$  동안 작용될 때 박막 내부에서의 분극밀도의 분포가 변화하는 모습을 계산하기로 한다. 여기서 인가된 전위는  $3.75 \times 10^6 V/m$ 의 전계에 해당하며 Jaffe et al.<sup>(6)</sup>의 Fig. 5.14에서 보인  $BaTiO_3$ 의 항전계(coercive field)의 값  $3 \times 10^5 V/m$ 보다 큰 값이다.

Fig. 2는 점  $A$ 에 인가전위  $\phi_{abl} = 15 V$ 가  $T_{abl} = 0.1 sec$  동안 인가된 후의 박막내의 분극밀도 벡터의 분포를 보여준다. 박막의 우측부분은 초기상태와 동일하게 분극이 상방향, 즉  $+x_2$  축 방향을 향하고 있지만 좌측부분은 인가전계에 의하여 분극이 역전되어 하방향, 즉  $-x_2$  축 방향을 향하고 있음을 확인할 수 있다. 그림에서 분극이 역전된 부분의 형상은 윗부분이 좁고 아랫부분이 넓은 거꾸로 된 컵 모양이라는 것을 알 수 있다. 박막 내부에서 시간이 흐름에 따라 분극이 역전되는 과정을 명확하게 관찰하기 위하여 분극벡터의 수직방향 성분의 크기가 변화하는 과정을 조사하기로 하자.

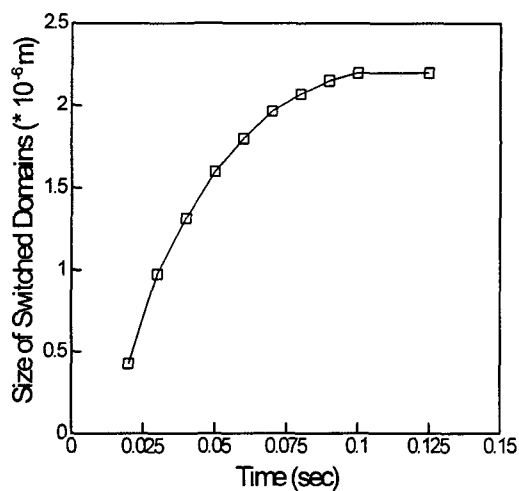
Fig. 3(a), (b), (c), (d)는 각각  $t = 0.002 sec$ ,  $0.02 sec$ ,  $0.04 sec$ ,  $0.1 sec$  때의 분극밀도의 수직방향 성분의 분포를 보여 준다. Fig. 3(a)는 전계를 인가한 초기의 분극밀도의 변화를 보여 준다. 전위가 인가되는 점  $A$  근처에서의 분극만이 작아지며 먼 곳에서는 전혀 변화가 없는 것을 볼 수 있다. 이후 시간이 지남에 따라 분극이 역전되는 영역이 점점 커지게 되며  $t = 0.02 sec$  일 때에는 Fig. 3(b)에 보인 바와 같이  $x_1$  축 방향으로 약  $1 \mu m$ 까지,  $x_2$  축 방향으로 약  $2 \mu m$  부근까지 미치는 영역까지 분극역전이 발생하게 된다. 분극이 역전된 부분의 형상은 단도(dagger)모양을 하고 있으며 이는 실험적 관찰과 정성적으로 일치한다.<sup>(4)</sup> 이후 하방향의 분극을 가지는 영역은 계속 성장하여 마침내 박막을 두께 방향으로 관통하게 된다. Fig. 3(c)는  $t = 0.04 sec$  때에 박막이 관통될 때 분극밀도의 수직성분 분포를 보여 준다. 이 때 분극 역전된 영역은 가운데가 블록한 펜촉의 형상

을 하고 있으며 상부에서의 폭은 거의  $1 \mu m$ , 중간부분에서는 최대  $2 \mu m$ 에 이르게 된다. 박막이 관통된 후에는 분극 역전된 영역의 상부의 폭은 시간에 따라 거의 증가하지 않는 반면, 중간부분 또는 특히 하부에서의 폭은 상당히 증가하게 된다. 따라서 관통 전까지의 단도나 펜촉형상을 한 분극역전 영역이 관통된 이후에는 중간부분 이하에서의 폭이 빠른 속도로 증가하면서 점점 거꾸로 된 컵의 형상으로 변하게 되는 것을 관찰할 수 있다. 마침내  $t = 0.1 sec$  때에는 Fig. 3(d)에 보인 바와 같이 분극 역전된 영역의 폭이 상부에서는 약  $1 \mu m$ , 중간부분에서는 약  $2.5 \mu m$ , 그리고 하부에서는 약  $3 \mu m$ 에 이르게 성장하게 된다. Fig. 3(d)에 보인 영역은 더 이상 시간과 함께 성장하지 않게 되며 따라서 분극 역전된 영역의 최종 형상은 쌍일차(bilinear)의 경계를 가지는 거꾸로 놓인 컵 모양을 하게 된다. 결론적으로 본 모델로부터 분극이 역전된 부분의 형상이 초기의 단도형상으로부터 펜촉형상으로, 그리고 박막을 관통한 이후에는 하단부분이 집중적으로 성장하여 거꾸로 놓인 컵의 형상으로 성장한다는 것을 알 수 있다. 이 결과는 Woo et al.<sup>(6)</sup>의 실험결과와 다소의 차이가 있어 보인다. Woo et al.<sup>(6)</sup>은 초기에 썩기 모양으로 성장하다가 최종적으로는 바로 선 컵의 모양을 할 것이라고 예측하였다. 그러나 점  $A$ 부근에서의 전위가 일정한 양의 값으로 그리고 하단부의 전위가 0으로 유지된다는 점, 그리고 바로 선 컵형상이나 거꾸로 놓인 컵의 형상 모두 Woo et al.<sup>(6)</sup>의 분극 역전된 영역의 크기에 관한 수치적인 실험적 결과와 모순이 아니라는 점을 고려하면 이론적인 모델로부터 계산된 본 논문의 예측이 합리적이라고 판단된다.

분극 역전된 영역의 크기가 시간에 따라 어떻게 성장하는가에 대한 고찰을 하기 위하여 Fig. 3에서 분극의 수직성분의 두께방향으로의 평균값을  $x_1$  방향으로  $0.433 \mu m$  단위마다 구하여 Fig. 4(a)에 보인 바와 같이 시간에 따른 평균수직분극의 분포의 변화를 그렸다. 그림에서 평균수직분극이 양의 값일 때는 그 지점에서 평균수직분극이 상방향을 향한다는 것을, 음의 값일 때는 하방향을 향한다는 것을 나타낸다. 그림으로부터



(a)



(b)

Fig. 4 Evolutions of (a) the vertical average polarization and (b) the size of switched domains at zero polarization

대부분의 분극역전이 초기에 집중적으로 이루어진다는 것을 알 수 있다.  $t=0.1$  sec 때에는 포화상태에 도달하여 더 이상 분극역전이 발생하지 않게 된다. 평균수직분극의 크기가 0 일 때 분극역전된 영역의  $x_1$  축 방향으로의 크기를 분극역전된 영역의 크기라고 생각할 수 있는데 그 크기의 시간에 따른 변화가 Fig. 4(b)에 보여져 있다.

분극 역전된 영역은 대부분 초기에 급격하게 성장하고 시간이 지남에 따라 그 크기가 천천히 일정한 값에 수렴하는 것을 알 수 있다. 즉, Fig. 4(b)에서 보인 바와 유사한 실험결과가 Woo et al.<sup>(3)</sup>에 의하여 실험적으로 관찰된 바 있다.

#### 4. 결론

본 연구에서는 Kim and Jiang<sup>(1)</sup>와 Kim<sup>(2)</sup>에서 제안된 구성방정식과 유한요소 알고리즘을 이용하여 원자력현미경팁(또는 AFM팁)/강유전박막/전극 시스템에서의 분극역전 과정에 대한 해석을 수행하였다. 박막의 하단부에 있는 전극에서의 전위는 항상 0으로 유지되고 AFM 팁을 통하여 양의 값을 가지는 일정한 크기의 전위가 일정한 시간 동안 인가될 때 초기에 상방향의 분극을 가졌던 박막에서 분극이 역전되는 과정을 모델을 이용하여 예측하였다. 계산 결과 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

(1) 분극이 역전된 부분은 분극역전 초기에 단도형상으로 시작하지만 점점 가운데가 볼록해져서 팬촉형상으로 성장하게 된다. 마침내 분극역전된 부분이 박막을 관통한 이후에는 상부에서의 성장은 지연되는 반면 하부에서만 성장이 이루어져 최후에는 쌍일차(bilinear) 경계를 가지는 거꾸로 선 컵 형상으로 변하게 된다.

(2) 분극 역전된 부분은 주로 초기에 대부분의 성장이 이루어지며 시간이 지남에 따라 그 성장속도가 점점 늦어진다. 예를 들어 분극밀도 벡터의 수직성분의 크기가 0 일 때 분극 역전된 부분의 크기는 초기에는 급격하게 증가하였지만 점점 그 성장속도가 느려지면서 최종적으로는 일정한 크기로 수렴하였다.

#### 후 기

본 연구는 2002년도 서울시립대학교 교내학술연구비의 지원을 받았습니다.

#### 참고문헌

- (1) Kim, S.-J. and Jiang, Q., 2001, "A Finite

- Element Model for Rate-Dependent Behavior of Ferroelectric Ceramics," *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 39, pp. 1015~1030.
- (2) Kim, S.-J., 2001, "Finite Element Modeling of Polarization Switching in Electro-Mechanically Coupled Materials," *Transactions of the KSME A*, Vol. 25, No. 11, pp. 1687~1704.
- (3) Woo, J., Hong, S., Setter, N., Shin, H., Jeon, J.-U., Pak, Y. E., and No, K., 2001, "Quantitative Analysis of the Bit Size Dependence on the Pulse Width and Pulse Voltage in Ferroelectric Memory Devices Using Atomic Force Microscopy," *Journal of Vacuum Science and Technology*, Vol. B19, pp. 818~824.
- (4) Jaffe, B., Cook, W. R., and Jaffe, W. R., 1971, *Piezoelectric Ceramics*, Academic Press, London and New York.