



学术专著 · 材料科学与工程

Yadianbomo Cailiao Yu Qijian Zhibei Jishu



# 压电薄膜材料与 器件制备技术

张涛 著

西北工业大学出版社

013024142

TM22  
08

学术专著·材料科学与工程

# 压电薄膜材料与器件制备技术

张涛 著

图跋(印)自藏图书馆



西北工业大学出版社

TM22  
08



北航

C1630876

013034145

**【内容简介】** 本书主要讲述了压电薄膜与压电微型器件制备技术,主要内容分为引言、上篇、下篇和后记。在引言部分,对全书内容做了总体介绍。在上篇中,介绍了薄膜材料基础知识和基本制备方法,对当前国内压电薄膜的研究进展做了简单陈述,主要阐述高压电性 PZT 基三元系铁电薄膜 PMnN - PZT 的制备与表征。在下篇中,介绍了压电器件的分类和声学器件的基础知识与进展,主要阐述了薄膜体声波谐振器(FBAR)的理论仿真、模拟与性能优化方法。在后记部分,对全书内容进行了总结。

本书可作为声学、材料学、微电子学等相关专业研究生的教学参考用书,也可供声学、压电学、薄膜材料和微型机电器件研究领域的科研工作人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

压电薄膜材料与器件制备技术/张涛著. —西安:西北工业大学出版社,2012.9  
ISBN 978 - 7 - 5612 - 3480 - 8

I. ①压… II. ①张… III. ①压电薄膜—压电材料—制备 ②压电薄膜—压电  
器件—制备 IV. ①TM22

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 226225 号

出版发行:西北工业大学出版社

通信地址:西安市友谊西路 127 号 邮编:710072

电 话:(029)88493844 88491757

网 址:[www.nwpup.com](http://www.nwpup.com)

印 刷 者:陕西向阳印务有限公司

开 本:727 mm×960 mm 1/16

印 张:12.5

字 数:208 千字

版 次:2012 年 9 月第 1 版 2012 年 9 月第 1 次印刷

定 价:28.00 元

# 声学器件压电薄膜与基础研究

## 前言

本书是笔者近年来在声学器件及其制备材料方面的研究积累,结合目前微型机电器件发展对高性能压电薄膜的迫切需求,以及微型声波器件理论仿真与性能优化需要,适当补充薄膜与器件制备基础知识和国内相关研究进展编著而成的。

本书主要内容分为引言、上篇、下篇和后记四个部分。在引言部分,对全书内容做了总体介绍。在上篇中,介绍了薄膜材料基础知识和基本制备方法,对当前国内压电薄膜的研究进展做了简单陈述,主要阐述高压电性 PZT 基三元系铁电薄膜 PMnN-PZT 的制备与表征。在下篇中,介绍了压电器件的分类和声学器件的基础知识与进展,主要阐述了薄膜体声波谐振器(FBAR)的理论仿真、模拟与性能优化方法。在后记部分,对全书内容进行了总结。

本书的独创性内容主要源于笔者的博士导师张淑仪院士、副导师 Kiyotaka Wasa 教授的指导。在压电薄膜与压电器件基础理论方面,参考了王春雷、符春林、宁兆元、许小红、何鹏举、潘峰、张亚飞等人在相关领域方面的著作。本书属于研究型著作,涉及的知识领域方向性较强,适合从事声学、材料学、薄膜技术和微电子等相关领域研究生选用。此外,也适合声学器件、功能材料、薄膜技术和微型机电器件技术研究领域的科研人员参考。

感谢笔者的父母、妻女和朋友对笔者工作的理解和支持,感谢西安科技大学各位领导在工作和生活中给予笔者的大力支持,感谢笔者的硕士研究生孙斌、陈丹、姚顺奇和古澳等人在本书素材整理部分所做的工作,感谢西北工业大学出版社有关编辑为本书出版所做的工作。

同时,本书的内容研究与顺利出版得到了西安市科技局工业应用技术研发项目(No. CXY1125(8)),西安市产业技术创新计划项目(No. CXY1253①, No. CXY1253②),国家自然科学基金项目(No. 61201088),教育部博士点新教师基金(No. 20106121120001),中国博士后科学基金面上资助(No. 20100471624),陕西省科技统筹计划项目(No. 2012KTCL01-12),陕西省自然科学基金(No. 2010JK673, No. 2009JQ1005)和陕西省教育厅产业化项目(No. 2011JG10)的

支持，在此一并表示感谢。

限于笔者的学识和水平,书中的错误与不妥之处在所难免,希望读者批评指正。

## 著者

2012年6月

# 目 录

引言 ..... 1

## 上篇 压电薄膜制备技术

第一章 压电薄膜基础理论 ..... 7

    1.1 薄膜生长与薄膜结构 ..... 7

    1.2 压电原理与铁电效应 ..... 10

    参考文献 ..... 17

第二章 压电薄膜制备技术与进展 ..... 21

    2.1 压电薄膜的制备方法 ..... 21

    2.2 压电薄膜研究进展 ..... 32

    2.3 压电薄膜性能表征 ..... 68

    参考文献 ..... 73

第三章 三元系 PMnN - PZT 铁电薄膜的研究 ..... 78

    3.1 铁电材料发展简介 ..... 78

    3.2 三元系 PMnN - PZT 铁电材料特性 ..... 82

    3.3 三元系 PMnN - PZT 铁电薄膜制备与性能表征 ..... 84

    参考文献 ..... 118

## 下篇 薄膜压电器件制备技术

第四章 声学器件原理与应用 ..... 127

    4.1 压电器件的分类 ..... 127

4.2 声学器件原理与应用 .....	158
参考文献.....	162
<b>第五章 薄膜体声波谐振器理论研究.....</b>	<b>165</b>
5.1 薄膜体声波谐振器的研究进展与热点 .....	165
5.2 传输矩阵法理论 .....	170
5.3 薄膜体声波谐振器理论仿真与模拟 .....	172
参考文献.....	187
<b>后记.....</b>	<b>190</b>

1.1 压电薄膜材料概述 .....	1
1.2 压电薄膜的制备方法 .....	1
1.3 压电薄膜的物理性质 .....	1
1.4 压电薄膜的应用 .....	1
1.5 压电薄膜的未来发展趋势 .....	1
<b>第二章 压电薄膜基底材料</b> .....	<b>2</b>
2.1 硅基材料 .....	2
2.2 氧化铝基材料 .....	2
2.3 钛酸锶基材料 .....	2
2.4 其他基底材料 .....	2
<b>第三章 压电薄膜制备技术</b> .....	<b>3</b>
3.1 化学气相沉积 .....	3
3.2 离子束刻蚀 .....	3
3.3 热蒸发 .....	3
3.4 光刻技术 .....	3
3.5 其他制备方法 .....	3
<b>第四章 压电薄膜器件</b> .....	<b>4</b>
4.1 压电薄膜压电器件 .....	4
4.2 声学器件 .....	4
4.3 其他压电薄膜器件 .....	4

# 引言

本书主要内容分为上、下两篇。上篇主要阐述与研究压电薄膜制备技术，下篇主要研究与压电薄膜直接相关的压电器件制备技术。

在上篇中,第一章首先介绍了薄膜生长与薄膜结构,对于薄膜基本生长原理及薄膜结构分类做了介绍;其次引入了压电效应,解释了压电效应和逆压电效应的原理;最后,介绍了压电薄膜在实际中的应用。

第二章系统介绍了压电薄膜的几种制备方法,例如溶胶-凝胶(Sol-Gel)法、真  
空蒸发法、溅射法(射频磁控溅射、直流磁控溅射)、化学气相沉积法和脉冲激光沉  
积(PLD)制备方法等。

第三章中,介绍了铁电效应与铁电材料,对于铁电材料的发展做了综述;引入了三元系  $\text{PMnN}-\text{PZT}$  体材料,阐述了材料的配比对性能的影响规律。在第一节中,主要介绍根据三元系体材料陶瓷( $\text{PMnN}-\text{PZ}-\text{PT}$ )的晶相、机电耦合系数和机械品质因数随组分比例的变化规律,将铌锰酸铅( $\text{Pb}(\text{Mn}_{1/3}, \text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ ,  $\text{PMnN}$ )、锆酸铅( $\text{PbZrO}_3$ ,  $\text{PZ}$ )和钛酸铅( $\text{PbTiO}_3$ ,  $\text{PT}$ )按一定配比混合,用磁控溅射的方法在单晶  $\text{MgO}$  基异质结构  $\text{SRO}(110)/\text{Pt}(002)/\text{MgO}(001)$  基底上制备了三元系  $0.06 \text{ PMnN}-0.94 \text{ PZT}(45/55)$  薄膜,给出了该三元系薄膜的磁控溅射制备条件,同时介绍和引入了快速淬火的后期热处理方法。

在薄膜的表征中,利用高精度台阶仪测量薄膜的厚度,利用 X 射线衍射(XRD)表征薄膜的生长方向、晶体结构和晶格常数。结果表明,在异质结构氧化镁基底上制备的三元系  $0.06\text{PMnN} + 0.94\text{PZT}(45/55)$  薄膜是高 c 轴取向的单晶薄膜,且该三元系铁电薄膜为四方晶构钙钛矿相。利用扫描电子显微镜(SEM)观察了薄膜表面形态和截面结构,表面观测图显示,实验制备的单晶  $0.06\text{PMnN} + 0.94\text{PZT}(45/55)$  薄膜表面平整、颗粒均匀。其截面图显示薄膜质地均匀、致密,无多晶的柱状结构出现,该结果也佐证了薄膜的单晶结构。利用悬臂梁方法和高精度激光测振系统定征了薄膜的横向压电应力系数,薄膜的横向压电应力系数为  $-11.2 \text{ C/m}^2$ ,横向压电应变系数约为  $-121 \times 10^{-12} \text{ C/N}$ ,该压电系数可与二元系近 MPB 处 PZT 体陶瓷的压电系数相当。利用 Sawyer Tower 电路测量了该三元系铁电薄膜的铁电特性,该三元系铁电薄膜的铁电滞回曲线显示薄膜呈现典型的硬铁电响应,高达  $P_s = 60 \mu\text{C/cm}^2$  的剩余极化强度显示该薄膜具有优异的铁电性。

并利用 LCR 数字电桥测量了薄膜的介电系数和介电损耗因子。良好的单晶取向使得该铁电薄膜具有低的介电性,其相对介电系数仅为 260,该值远小于相应二元系 PZT(45/55)体陶瓷的相对介电系数,且其介电损耗因子仅为 1%。

良好的薄膜质量,优异的铁电性、压电性和介电性以及其潜在的高机械品质因数,使得 0.06PMnN - 0.94PZT(45/55)单晶三元系铁电薄膜有望应用于压电器件、声学器件、MEMS 和铁电器件的制备中。

考虑到硅半导体器件集成化发展的要求,我们在 Si 基异质结构 SrRuO<sub>3</sub>(SRO)/Pt(111)/Ti/SiO<sub>2</sub>/Si(100)基底上制备并研究了 PMnN - PZT 三元系薄膜。第三章介绍的研究内容重点在 3.2,3.3 两节。在 3.2 节中,介绍了我们利用 3.1 节得出的 6% 摩尔为最佳添加比例的结论,在异质结构 Si 基底上成功制备出了具有出色压电性和良好铁电性的 PMnN - PZT 三元系多晶铁电薄膜,即 0.06PMnN - 0.94PZT(50/50)。该薄膜具有出色的压电性,其横向压电应力系数为  $-14.9 \text{ C/m}^2$ ,横向压电应变系数为  $-184 \times 10^{-12} \text{ C/N}$ ,横向机电耦合系数为 65.3%。其压电性能不仅高于第二章所述在 MgO 基底上制备的 0.06PMnN - 0.94PZT(45/55)薄膜,而且其压电系数接近于同等条件下制备的二元系 PZT(50/50)薄膜压电系数的两倍,由该薄膜制备的硅基悬臂梁也呈现出很高的位移和力灵敏度。该薄膜也具有明显优于非掺杂二元系 PZT(50/50)薄膜的铁电性、较大的介电系数、略大的介电损耗因子和略低的居里温度,这些结论与 3.1 节中得到的 PMnN 添加对 PZT 的改性规律相符。硅基底上高压电性、良好铁电性和潜在的高机械品质因数的三元系 PMnN - PZT 薄膜的成功制备,克服了 MgO 基底不可集成、耐腐蚀性差和高成本的缺点,使得该三元系铁电薄膜的实际应用成为可能。

在 3.3 节中,介绍了研究 PMnN 添加对 PZT 的改性规律。我们在异质结构硅基底上制备了不同摩尔比例 PMnN 添加的 PZT(52/48)薄膜,并对薄膜的性质做了定征与比较。实验结果表明,适当比例 PMnN 的添加能改变薄膜晶格常数,但却不改变 PZT 的晶相,并且明显改善了 PZT 的铁电性;而过量 PMnN 的添加会导致焦绿石结构出现,且使得薄膜呈现病态铁电性。同时,PMnN 的添加会导致 PZT 薄膜的介电系数和介电损耗因子增大,并且降低 PZT 的居里温度。比较不同比例 PMnN 添加对 PZT 的影响结果发现,PMnN 的添加应不超过 10% 摩尔比例,因而给出 6% 摩尔比例为薄膜综合性能最佳的添加比例。该摩尔比例 PMnN 添加的 PZT(52/48)薄膜呈现出出色的铁电性、适中的介电系数、介电损耗因子和较高的居里温度,并且具有潜在的高机械品质因数。

在下篇中,第四章介绍了压电器件及其研究进展,阐述了声学器件工作原理及

## 引　　言

---

其应用。第五章从理论上研究了薄膜体声波谐振器,主要介绍了薄膜体声波谐振器的基本结构、原理及应用。

第五章引入了传输矩阵法理论,对薄膜体声波谐振器进行了理论仿真与模拟。在仿真和模拟中,我们利用传递矩阵和传输线路法推导了薄膜体声波谐振器(FBAR)的输入阻抗公式,并使用 IEEE 1976 – 1987 有损压电振子的谐振频率的定义计算了 PZT、ZnO 和 AlN 压电薄膜与不同电极材料组合的 FBAR 的谐振频率、有效机电耦合系数和谐振品质因数等参量,纠正了 Chen 等人有关 FBAR 的有效机电耦合系数随压电薄膜的机械品质因数增加而减小的错误结论(发表于 APL),指出该结论错误的原因在于用无损的定义来研究损耗对 FBAR 性能的影响,并且利用 IEEE 有损谐振频率定义重新研究了该内容,给出了压电薄膜机械品质因数并不影响 FBAR 有效机电耦合系数的结论。除此之外,该章还介绍了研究材料弹性(电极与压电薄膜的面密度比率)对 FBAR 有效机电耦合系数的影响。由结果可知,电极与压电薄膜的阻抗比率决定了该影响曲线的变化规律,对于相近阻抗比率的 FBAR,其有效机电耦合系数随面密度比率变化的最大增加比率和该极值所对应的面密度比率相近,该结论适用于不同压电薄膜和电极材料。同时,举例说明如何利用该结论结合特定的谐振频率要求来优化 FBAR 的有效机电耦合系数。此外,还研究了 FBAR 材料的机械品质因数对 FBAR 谐振品质因数的影响,结论表明,压电薄膜和电极的机械品质因数直接影响 FBAR 的谐振品质因数,FBAR 的谐振品质因数随材料机械品质因数的增加而增大,而电极的厚度越薄,电极材料中的声速越大,则越有利于提高 FBAR 的谐振品质因数。并且,当电极厚度非常薄时,FBAR 的谐振品质因数恒等于压电薄膜的机械品质因数。电极弹性常量(面密度)对谐振品质因数也存在影响,该影响规律取决于电极与压电薄膜的阻抗比率,阻抗比率越大越有利于提高 FBAR 的谐振品质因数。以上结论可应用于实际 FBAR 器件的理论模拟与性能优化中。

在后记中,对全书的内容进行了总结,目的是将本书的理论能充分应用于实际生产,通过实际应用不断促进理论研究,从而进一步扩大压电薄膜的应用领域。



# **上篇 压电薄膜制备技术**



压电薄膜是利用压电效应制备的薄膜，其厚度一般在微米量级以下。压电薄膜具有压电性，即在外加电场作用下产生机械形变，或在外加机械形变时产生电荷，从而实现电能与机械能的相互转换。

# 第一章 压电薄膜基础理论

## 1.1 薄膜生长与薄膜结构

薄膜是一种二维材料，它在厚度方向上的尺寸很小，往往为纳米至微米量级。最古老的薄膜可上溯至3 000 多年前的中国商代，那时我们的祖先就已经会给陶瓷上“釉”了，汉代又发明了用铅做助溶剂的低温铅釉。涂层不仅是漂亮的装饰层，而且增加了陶瓷的机械强度，不易污染还便于清洗。近代，对薄膜的认识始于19世纪初，人们在混光放电过程中沉积出了固体薄膜。20世纪后，电解法、化学反应法、溶胶-凝胶法(以下称 Sol-Gel 法)、真空蒸镀法、磁控溅射法和激光脉冲沉积等当代制备薄膜的方法问世，薄膜技术获得了迅速的发展，无论是在理论上还是在实际应用中都取得了丰硕的成果。光学薄膜首先得到研究，各种增透膜、高反膜、滤光膜、分光膜等被精确地制备、检测和分析，并在光学仪器、太阳能电池、建筑玻璃等领域得到广泛的应用。20世纪50年代以后，微电子器件的发展极大地推动了压电薄膜技术的发展。薄膜工艺，包括薄膜的沉积和刻蚀已是集成电路制作的基础<sup>[1]</sup>。

薄膜的结构可以分为两种类型：组织结构和表面结构。

### 1. 薄膜的组织结构

薄膜的组织结构是指它的结晶形态，包括非晶、多晶和单晶结构。由这三种结构形成的薄膜分别为非晶薄膜、多晶薄膜以及单晶薄膜。

(1) 非晶薄膜。非晶结构有时也称作无定形态或玻璃态结构。从原子排列情况来看，它是一种无序结构。例如，在基片温度较低时形成的硫化物和卤化物薄膜往往是无定形结构。一些氧化物薄膜(如  $TiO_2$ 、 $Al_2O_3$  等)在室温基片上就可能形成非晶薄膜。室温下采用等离子体化学气相沉积法制备的氟化类金刚石薄膜也是无定形薄膜。

(2) 多晶薄膜。在薄膜形成过程中会生成许多岛状的小晶粒，由这些小晶粒聚结形成的薄膜就是多晶薄膜。多晶薄膜是由若干大小不等的晶粒所组成的，晶粒之间的交界地区(面)称为晶粒间界。

(3) 单晶薄膜。在适当的单晶基片温度、沉积速率等条件下，薄膜可以沿着单

晶基片的结晶轴方向呈单晶生长,称为外延(epitaxis)。外延生长是半导体器件和集成电路生产中一种常用的工艺技术。实现外延生长必须满足三个基本条件:第一,吸附原子有较高的表面扩散速率,所以基片温度和沉积速度就相当重要。第二,基片与薄膜材料相容。假设基片材料的晶格常数为 $d_a$ ,薄膜材料的晶格常数为 $d_b$ ,在基片上外延生长薄膜的晶格失配数 $m=(d_b-d_a)/d_a$ 。 $m$ 值越小,表明外延生长的薄膜晶格结构与基片越相似,外延生长就越容易实现。第三,整体表面必须清洁、光滑和化学稳定性好。

## 2. 薄膜的表面结构

从热力学理论分析,为了使总能量达到最低值,薄膜应该有最小的表面积,即应该成为理想的平面状态。实际上这种薄膜是无法得到的,在薄膜形成的过程中,入射到基片表面上的气相原子沉积到基片表面上之后,会在表面上做横向扩散,占据表面上的一些空位,导致薄膜面积缩小,表面能逐渐被降低。另外,前期到达表面的原子在表面的吸附、堆积,会影响到达的原子在基片上的扩散,容易形成“阴影”。吸附原子在表面上横向扩散运动的能量的大小与基片的温度密切相关。一般来说,基片温度较高时吸附原子的表面迁移率增加,凝结优先发生在表面凹处,或沿某些晶面优先生长。因为各向异性和表面粗糙度将增加表面能,结果薄膜在制备生长过程中倾向于使表面光滑。基片温度较低时,因原子迁移率很小,表面比较粗糙,而且面积大容易形成多孔结构。

## 3. 薄膜的生长模式

薄膜的生长模式是指薄膜形成的宏观形式,主要有三种:岛状生长形式、层状生长形式和层岛结合形式。

薄膜的形成过程可分为以下四个主要阶段:

(1)岛状阶段。在核进一步长大变成小岛的过程中,平行于基体表面方向的生长速度大于垂直方向的生长速度。这是因为核的长大主要是依赖于基体表面上吸附原子的扩散迁移碰撞结合的,而不是入射蒸发气相原子碰撞结合决定的。这些不断捕获吸附原子生长的核逐渐从球帽形、圆形变成多面体小岛。

(2)联并阶段。随着岛不断长大,岛间距离逐渐减小,最后相邻小岛可互相联结合并为一个大岛,这就是岛的联并。

(3)沟道阶段。在岛联并之后新岛进一步生长的过程中,它的形状变为圆形的倾向减少,只是在新岛进一步联并的地方才继续发生较大的变形,当岛的分布达到临界状态时互相聚结形成一种网状结构。在这种结构中,不规则地分布着宽度为520 nm的沟渠。随着沉积的继续进行在沟渠中会发生二次或三次成核,当核长大

到与沟渠边缘接触时就联并到网状结构的薄膜上。

(4) 连续膜阶段。沟渠和孔洞消除之后,再入射的气相原子直接吸附在薄膜上,通过联并作用而形成不同结构的薄膜。

#### 4. 薄膜和基片

薄膜大都是附着在各种基片上的,薄膜和基片构成一个复合体系,它们之间存在着相互作用。在各种应用领域中,薄膜的附着力与内应力是首先要研究的课题。只有薄膜和基片之间有了良好的附着特性,研究薄膜的其他性质才有可能。另外,薄膜在制造的过程中,其结构受工艺条件影响很大,在薄膜内部产生一定的应力;基片材料和薄膜材料之间的生长系数不同,也会使薄膜产生应力。附着、扩散和内应力是薄膜的固有特征。

5. 薄膜的缺陷

薄膜中原子的不完善排列就形成缺陷。如薄膜在生长过程中会产生空位、位错,吸附杂质还会产生点缺陷、线缺陷、台阶、晶界等。一般来讲,薄膜中的缺陷密度往往高于相应的体材料,薄膜中的缺陷在外力作用下会产生运动,重新排列。可以通过退火、气氛处理等多种方式对薄膜进行再加工,以改变和控制薄膜的结构,改善缺陷的状况。

(1) 点缺陷。晶体中晶格排列出现的缺陷。如果是只涉及列单个晶格节点则称为点缺陷。当沉积速率很高、基片湿度较低时,到达基片表面的原子来不及完整地排列就被后来的原子层所覆盖,这样就可能在薄膜中产生高浓度的空位缺陷。

点缺陷的典型构型是窄位和填隙原子。位于晶格节点处的原子总是在它的平衡位置附近不停地做热振动。在一定的温度下,它们的能量虽然有一定值,但出于存在能量起伏,个别原子在某一时刻所具备的能量完全有可能达到足以克服周围原子对它的束缚而逃离原来位置,于是在原来的地方就出现一个空位形成空位缺陷。逃离原位的原子或跃迁到晶体表面的正常位置,形成 Schottky 缺陷,或跳进晶格原子之间的间隙里形成 Frenkel 缺陷。这两种缺陷均为本征点缺陷。

(2) 线缺陷。当缺陷发生在晶体内部一条线的周围时,称为线缺陷。线缺陷主要是位错,包括刃位错、螺位错和混合位错。在晶体中某个原子面(一般是密排面)的某个区域使其两侧发生相对位移,就会形成位错。

在薄膜中,位错往往能贯穿至薄膜的表面,位错穿过表面的部分在表面上产生运动所需要的能量很高,从而处于钉扎状态。与体材料的位错相比,薄膜中的位错相对来说更难于运动,在力学和热力学上是较为稳定的,也难以通过退火来消除。

(3) 面缺陷。单晶薄膜中的面缺陷主要是孪晶界和堆垛层错。孪晶界两侧的

晶体正好形成镜像关系,而堆垛层错实际上可以近似看成相邻的两个孪晶界面。在薄膜沉积生长的过程中,孪晶和堆垛层错都可以看成是薄膜原子面的堆垛顺序发生错乱而引起的。

对多晶薄膜而言,内部则还存在一类重要的面缺陷——晶(粒间)界。连接两个不同取向晶粒的晶界处的原子不可避免地会出现严重错排。在两晶粒的取向差较小时,晶界上的原子会通过局部构成位错的方式来弛豫这种畸变,这就是小角度晶界的位错模型,而晶粒夹角大于 $10^{\circ}$ 的晶界称为大角度晶界。晶(粒间)界和一般物体的界面一样具有一定的自由能。一般的多晶体在较高的温度下,晶粒的大小都会发生变化,大的晶粒逐渐侵蚀小的晶粒,具体表现为晶界的运动。在这个过程中,晶界存在一定的张力作用。在固态的相变过程中,晶界也起着重要的作用,新产生的固相,在许多情况下是在晶界处形成晶核而开始生长的。原子可以比较容易地沿着晶界扩散,所以外来的原子可以渗入并分布在晶界处,内部的杂质原子或夹杂物也往往容易集中在晶界处。这些都可以使晶界具有复杂的性质,并产生各种影响<sup>[1]</sup>。

## 1.2 压电原理与铁电效应

### 1.2.1 压电原理

压电体具有压电效应,压电系数是表征压电体的弹性效应和极化效应相互耦合关系的宏观物理量<sup>[2]</sup>。

早在 1880 年, P. Curie 和 J. Curie 兄弟就发现, 在某些晶体的特定方向上施加压力或拉力, 晶体的一些对应表面上分别出现正、负束缚电荷, 其电荷密度与施力大小成比例, 这种现象称为“压电效应”。次年, Lippmann 依据热力学方法, 应用能量守恒和电量守恒这两个定律, 预先推知逆压电效应的存在。之后, Curie 兄弟用实验验证了逆压电效应, 并给出了数值相等的石英晶体正、逆压电效应的压电常数。

**压电效应:**某些电介质在沿一定方向上受到外力的作用而变形时,其内部会产生极化现象,同时在它的两个相对表面上出现正负相反的电荷。外力去掉后,它又会恢复到不带电的状态,这种现象称为正压电效应。当作用力的方向改变时,电荷的极性也随之改变。相反,当在电介质的极化方向上施加电场时,这些电介质也会发生变形,电场去掉后,电介质的变形随之消失,这种现象称为逆压电效应,或称为