05

Учет нелинейности сегнетоэлектрического слоя в модели планарного конденсатора

© *О.Г. Вендик, М.А. Никольский*

С.-Петербургский государственный электротехнический университет
E-mail: OGVendik@mail.eltech.ru

Поступило в Редакцию 18 сентября 2002 г.

Приводится метод расчета вольт-фарадной характеристики планарного сегнетоэлектрического конденсатора с учетом нелинейности материала сегнетоэлектрика. Учет нелинейности был произведен с помощью уравнения Гинзбурга–Девоншира при условии минимизации свободной энергии планарного конденсатора. В результате показано, что расчет емкости планарного сегнетоэлектрического конденсатора с учетом нелинейности сегнетоэлектрика может быть осуществлен в элементарной модели с погрешностью, не превышающей 2%.

Постановка задачи. В настоящее время особенно актуальны численные расчеты, позволяющие учитывать свойства сегнетоэлектрических материалов в составе планарных СВЧ-устройств. Это связано с активным освоением возможности применения сегнетоэлектриков в составе единой СВЧ интегральной схемы, когда тонкая пленка сегнетоэлектрика (порядка $1\,\mu$m) нанесена, к примеру, на поверхность подложки устройства [1,2].

Для исследования тонких пленок сегнетоэлектрика применяется простой для расчета и конструктивно удобный планарный конденсатор (рис. 1). В идеализированном случае (рис. $2, a$) на границе зазора конденсатора вводятся условные электрические стенки, тогда поле в зазоре может рассматриваться как однородное, емкость такой структуры может быть рассчитана по простой формуле

$$C(E) = \varepsilon_0\,\varepsilon_f(E)\,\frac{wh_f}{s}, \tag{1}$$

где ε_0 — диэлектрическая проницаемость свободного пространства; $\varepsilon_f(E)$ — диэлектрическая проницаемость сегнетоэлектрика, которая является функцией напряженности поля E и описывается с помощью

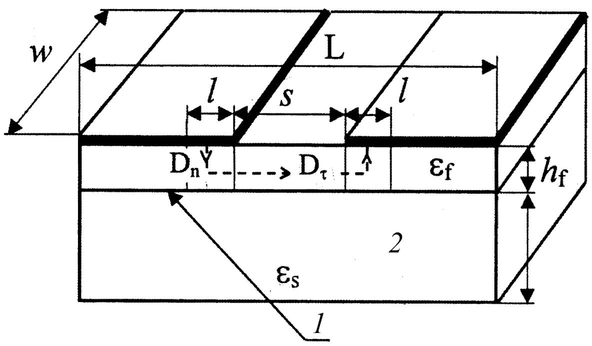

Рис. 1. Структура планарного конденсатора. Расположение силовых линий электрического поля в нелинейном приближении. *1* — магнитная стенка, *2* — подложка.

феноменологической модели, развитой в работах [3,4]; s — зазор конденсатора; w — длина зазора; h_f — толщина пленки сегнетоэлектрика. К электродам конденсатора прикладывается напряжение U, которое связано с напряженностью электрического поля E в этом случае следующим образом:

$$E = \frac{U}{s}, \tag{2}$$

где U — напряжение, прикладываемое к зазору конденсатора.

Благодаря принятой в модели однородности поля, нелинейность емкости $C(E)$ повторяет нелинейность диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика $\varepsilon_f(E)$. На самом же деле в планарном конденсаторе распределение электрического поля неоднородно. Существующие методы расчета позволяют решить эту задачу лишь в случае линейной среды [5,6], поскольку численное решение нелинейной и неоднородной задачи слишком громоздко. Одним из таких методов является метод частичных емкостей [6], в основе которого лежит метод конформных отображений (МКО), позволяющий преобразовать поле в планарной структуре в поле плоского конденсатора с однородным заполнением [6]. Емкость планарного конденсатора, образованного пленкой сегнетоэлектрика и проводящими электродами, принято рассчитывать по следую-

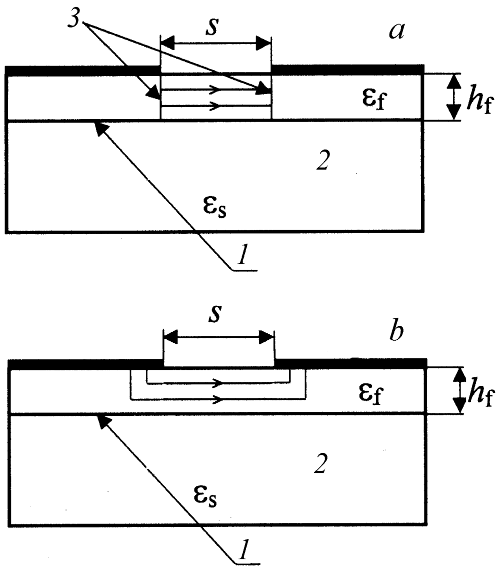

Рис. 2. Расположение силовых линий электрического поля: *a* — для идеализированного конденсатора, *b* — для метода конформных преобразований. *1* — магнитная стенка, *2* — подложка, *3* — электрические стенки.

щей формуле, полученной на основе МКО:

$$C_f(E) = \frac{w\varepsilon_0\varepsilon_f(E)}{s/h_f + (4/\pi)\ln 2}. \tag{3}$$

Распределение силовых линий в планарном конденсаторе в случае расчета по МКО качественно представлено на рис. 2, *b*.

МКО базируется на решении уравнения Лапласа для линейного диэлектрика, и нелинейность материала сегнетоэлектрика в расчет принята быть не может. Однако пересчет напряженности поля, входящего в выражении (3) в описание диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика $\varepsilon_f(E)$ традиционно производится с помощью выражения (2), что необоснованно может приводить к существенным погрешностям в расчетах.

Таким образом, возникает задача найти корректный упрощенный метод расчета вольт-фарадных характеристик сегнетоэлектрического планарного конденсатора с учетом нелинейности сегнетоэлектрического материала.

Метод расчета. Используем модель, условно описывающую форму силовых линий. Предположим, что „электрические стенки", введенные на рис. 2, *a*, на краях зазора отсутствуют. Тогда средняя силовая линия электрического поля, представленная на рис. 1 пунктиром, выходит за пределы зазора конденсатора. Данная силовая линия имеет тангенциальную D_τ и нормальную D_n составляющие электрической индукции:

$$D_n = \frac{Q}{w\ell}, \qquad D_\tau = \frac{Q}{wh_f}, \tag{4}$$

где Q — заряд, ℓ имеет размерность длины и учитывает растекание заряда в приэлектродных областях за пределы зазора.

Нелинейность диэлектрического отклика сегнетоэлектрика можно учесть с помощью уравнения Гинзбурга–Девоншира [7,8]:

$$\varepsilon_0 E = \frac{1}{\varepsilon_f} D + \frac{D^3}{D_N^2}, \tag{5}$$

где $D_N = \varepsilon_0 (3 \cdot \varepsilon_{00})^{1.5}\, 0.5 \cdot E_N$; ε_f — диэлектрическая проницаемость сегнетоэлектрика; D, E — электрическая индукция и напряженность электрического поля в сегнетоэлектрике; ε_{00} — параметр феноменологической модели [3,4], связанный с постоянной Кюри–Вейса сегнетоэлектрика; E_N — нормирующая напряженность поля [3,4].

В предположении однородности электрического поля в планарном конденсаторе вдоль выделенных составляющих поля D_τ и D_n, а также с учетом формул (4), (5) получим выражение для разности потенциалов между электродами планарного конденсатора:

$$U(Q) = \frac{1}{\varepsilon_0 w}\left\{\left[\frac{1}{\varepsilon_f}\,\frac{Q}{h_f} + \frac{Q^3}{h_f^3 w^2 D_N^2}\right]\times(s+\ell) + 2\left[\frac{1}{\varepsilon_f}\,\frac{Q}{\ell} + \frac{Q^3}{\ell^3 w^2 D_N^2}\right]\times k h_f\right\}. \tag{6}$$

Примем обозначения: $p = s/h_f$; $x = \ell/h_f$; $A = \varepsilon_f^{0.5}/h_f w D_N$; $q = Q \cdot A$; k — параметр модели, учитывающий, насколько глубоко силовые линии электрического поля проникают в пленку сегнетоэлектрика; x — нормированный на толщину пленки сегнетоэлектрика h_f параметр, определяющий форму силовых линий в приэлектродных областях планарного конденсатора. Теперь выражение (6) может быть преобразовано к виду

$$U(q)=\frac{1}{A\varepsilon_0\varepsilon_f w}\left[\left(p+x+\frac{2k}{x}\right)q+\left(p+x+\frac{2k}{x^3}\right)q^3\right]. \quad (7)$$

Свободная энергия планарного конденсатора W может быть записана следующим образом [9]:

$$W(Q)=\int_0^Q U(Q)\cdot dQ.$$

После интегрирования выражения (6) получим

$$W(q)=\frac{1}{A^2\varepsilon_0\varepsilon_f w}\left[\frac{1}{2}\left(p+x+\frac{2k}{x}\right)\cdot q^2+\frac{1}{4}\left(p+x+\frac{2k}{x^3}\right)\cdot q^4\right]. \quad (8)$$

Теперь рассмотрим линейный случай, когда $q\ll 1$. Тогда выражения (7) и (8) можно преобразовать к виду

$$U(Q)=\frac{Q}{\varepsilon_0\varepsilon_f w}\cdot\left(p+x_0+\frac{2k}{x_0}\right), \quad (9)$$

$$W(Q)=\frac{Q^2}{2\cdot\varepsilon_0\varepsilon_f w}\cdot\left(p+x_0+\frac{2k}{x_0}\right), \quad (10)$$

где x_0 не зависит от заряда в линейном приближении.

Емкость конденсатора может быть найдена, используя (9): $C_f(Q)=Q/U(Q)$:

$$C_f=\varepsilon_0\varepsilon_f w\cdot\left(p+x_0+\frac{2k}{x_0}\right)^{-1}. \quad (11)$$

Найдем x_0, учитывая, что свободная энергия планарного конденсатора (10) должна быть минимальна [9], чтобы решение было стационарно по отношению к выбранной форме силовой линии, т.е. $dW/dx_0=0$. В нулевом приближении по приложенному заряду получим

$$x_0=\sqrt{2k}. \quad (12)$$

Подставив выражение (12) в выражение (11), получим:

$$C_f = \varepsilon_0 \varepsilon_f w \cdot \left(\frac{s}{h_f} + 2\sqrt{2k} \right)^{-1}. \tag{13}$$

Сравнивая полученное выражение с формулой (3) из МКО, получим выражение для параметра k:

$$k = \frac{\left(\frac{2}{\pi} \cdot \ln 2\right)^2}{2}. \tag{14}$$

Теперь рассмотрим нелинейный случай, когда $q \geqslant 1$. Тогда в результате дифференцирования выражения (8) по искомому параметру x, удовлетворяющему минимуму свободной энергии уже в нелинейном приближении, получим следующее биквадратное уравнение относительно искомого x:

$$x^4 - \frac{4}{3} kx^2 - 2kq^2 = 0.$$

Отбрасывая нефизичные решения, получим следующее выражение для x_1 в первом приближении как функции заряда:

$$x_1(q) = \sqrt{\frac{2}{3} k + \sqrt{\left(\frac{2}{3} k\right)^2 + 2kq^2}}. \tag{15}$$

Теперь выражение (7) можно переписать следующим образом с учетом (15):

$$U(q) = \frac{1}{A\varepsilon_0 \varepsilon_f w} \cdot \left[\left(p + x_1(q) + \frac{2k}{x_1(q)} \right) q + \left(p + x_1(q) + \frac{2k}{x_1^3(q)} \right) q^3 \right]. \tag{16}$$

Динамическая емкость планарного конденсатора с учетом (16) может быть найдена из выражения

$$\frac{1}{C_{din}(Q)} = \frac{dU}{dQ}. \tag{17}$$

Результаты и обсуждение. Таким образом, минимизация свободной энергии планарного конденсатора в сочетании с использованием уравнения Гинзбурга–Девоншира позволяет учесть нелинейность материала сегнетоэлектрика, входящего в состав планарного конденсатора.

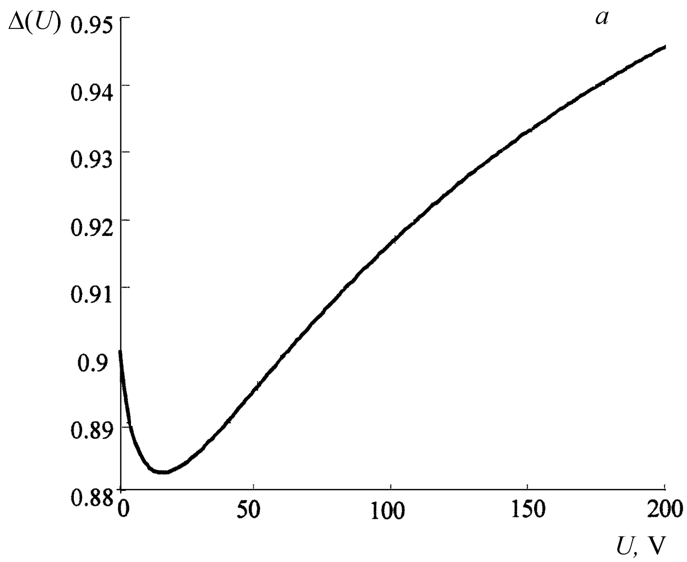

Рис. 3. Зависимость от приложенного напряжения следующих параметров модели: *a* — функции $\Delta(U)$, определяющей удлинение силовой линии за счет нелинейности сегнетоэлектрика; *b* — емкости планарного конденсатора (рис. 1): *1* — традиционный способ расчета: выражение (3) с учетом (2), *2* — развитый в настоящей работе способ расчета: выражения (17) и (16), *3* — усовершенствованный способ расчета: выражение (3) с учетом (19); *c* — относительной ошибки расчета емкости планарного конденсатора с использованием выражений (17) и: *1* — (3) с учетом (2), *2* — (3) с учетом (19). Геометрические размеры планарного конденсатора, взятые для расчета: $s = 5\,\mu$m, $w = 0.6$ mm, $h_f = 1\,\mu$m. Параметры пленки сегнетоэлектрика приведены в таблице.

Если обратиться к формуле (7) (см. также рис. 1), то можно увидеть, что средняя длина силовой линии (обозначим ее L) может быть представлена следующим образом:

$$L = s + h_f \Delta(U), \tag{18}$$

где $\Delta(U) = x_1(q) + 2k/x_1(q)$ — функция напряжения, определяющая удлинение силовой линии за счет нелинейности сегнетоэлектрика, U —

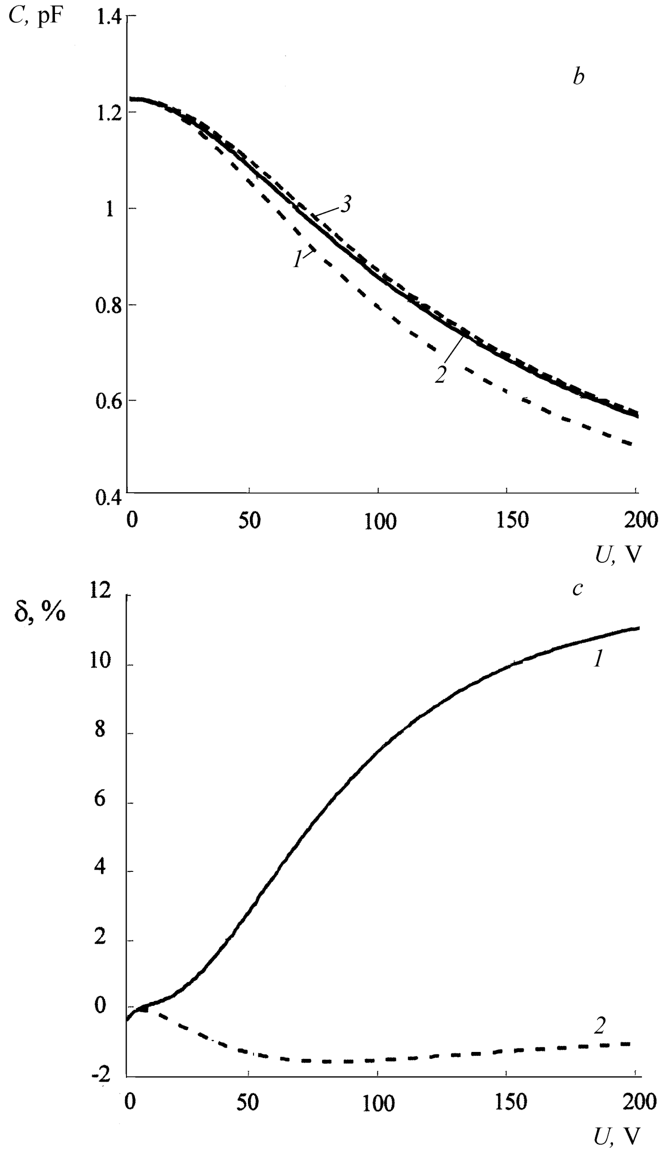

Рис. 3 (*продолжение*).

Параметры пленки сегнетоэлектрика

Параметры пленки сегнетоэлектрика типа $Ba_{0.5}Sr_{0.5}TiO_3$, рассчитанные по модели [3, 4]					
$\varepsilon_f(0)$	$\varepsilon_f(200\,V)$	ξ_S	T_F, K	T_c, K	D_N, C/m^2
1390	210	1	175	238	4.71

напряжение, определяемое выражением (16) и являющееся функцией заряда q.

На рис. 3, a показана функция $\Delta(U)$. Из рисунка видно, что эта функция близка к единице и ее среднее значение для большинства геометрий порядка $\Delta(U) \approx 0.9$, но для удобства и не в ущерб расчету положим $\Delta(U) = 1$. Исходя из сделанных оценок, получим

$$E = \frac{U}{s + h_f}. \tag{19}$$

Очевидно, что форма средней силовой линии электрического поля в планарном конденсаторе (рис. 1) выбрана условно. Однако найденный минимум свободной энергии обосновывает утверждение о том, что полученное решение стационарно по отношению к малой деформации средней силовой линии. Следовательно, найденная форма силовой линии близка к истинной и полученное решение задачи о нелинейности планарного конденсатора с сегнетоэлектрической пленкой достоверно.

На рис. 3, b представлены три зависимости емкости планарного конденсатора (рис. 1) в функции от приложенного напряжения: 1) развитый в настоящей работе способ расчета, в котором учет нелинейности сегнетоэлектрика производился с помощью уравнения Гинзбурга–Девоншира при условии минимизации свободной энергии планарного конденсатора, по формуле (17), причем приложенное напряжение найдено по формуле (16) при заданном заряде q; 2) традиционный способ расчета, когда емкость считается на основе МКО, формула (3), а пересчет напряженности поля в напряжение производится в соответствии с выражением (2); 3) усовершенствованный способ расчета, когда емкость по-прежнему считается на основе МКО, формула (3), а пересчет напряженности поля в напряжение производится в соответствии с выражением (19).

Расхождение результатов расчета емкости по формулам (17) и (3) с учетом (2) было в пределах 10–12%, а по формулам (17) и (3) с учетом (19) — 2% (рис. 3, c). Приведенное выражение (19) оказалось справедливым для большинства практически реализуемых геометрий планарного конденсатора: зазор $s = 5-30\,\mu$m, толщина слоя сегнетоэлектрика $h_f = 0.5-1\,\mu$m, длина зазора $w = 0.1-2$ mm.

Относительная погрешность учета нелинейности сегнетоэлектрика может быть сведена до 2% при расчетах емкости планарного сегнетоэлектрического конденсатора по МКО в предположении, что напряженность электрического поля и напряжение связаны выражением (19), что фактически эквивалентно удлинению силовых линий электрического поля на величину h_f.

Таким образом, применение выражения (19) в расчетах вольтфарадных характеристик планарного сегнетоэлектрического конденсатора по МКО позволяет учесть с более высокой точностью нелинейность материала сегнетоэлектрика.

Список литературы

[1] *Krowne C., Daniel M., Kirchoefer S.* et al. // IEEE Trans. Microwave Theory Tech. 2002. V. 50. N 2. P. 537–548.

[2] *Vendik O., Vendik I., Setter N.* et al. // Microwave and Wireless Comp. Letters. 2001. V. 11. N 10. P. 407–409.

[3] *Vendik O.G., Zubko S.P.* // Journal of Applied Physics. 1997. V. 82. N 9. P. 4475–4483.

[4] *Vendik O.G., Zubko S.P.* // Journal of Applied Physics. 2000. V. 88. N 9. P. 5343–5350.

[5] *Деленив А.Н.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. В. 4. С. 8–14.

[6] *Вендик О.Г., Зубко С.П., Никольский М.А.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. В. 4. С. 1–7.

[7] *Гинзбург В.Л.* // Успехи физических наук. 1949. Т. 38. В. 4. С. 490–525.

[8] *Devonshir A.F.* // Philosophical Magazine. Part 1. 1949. V. 40. P. 1040–1063; Part II. 1951. V. 42. P. 1065–1079.

[9] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика сплошных сред. М., 1957. С. 532.