

01;05

К расчету электрострикционного эффекта в тонкослойных структурах металл–сегнетоэлектрик–металл

© В.М. Богомольный

Государственная академия сферы быта и услуг,
141220 ст. Тарасовская, Московская обл., Россия

(Поступило в Редакцию 4 марта 1998 г.)

Рассматривается влияние инжекции электронов из катода на электропроводность и неравномерное распределение пьезоэлектрических свойств по толщине структур металл–диэлектрик–металл (МДМ) на основе электрострикционной, оптически прозрачной сегнетокерамики типа ЦТСЛ. Тонкослойные диэлектрики в контакте с металлическими электродами проявляют полупроводниковые свойства, поэтому для расчета электрических полей и токов используется теория, сформулированная Моттом и Герни для диэлектрических диодов. В результате асимптотического решения определено распределение поляризации по толщине пьезоэлектрического слоя и сформулированы соотношения электроупругости для сегнетокерамических пластин и оболочек. Подробно рассмотрен электромеханический изгибный эффект в однородных пьезоэлектрических пластинах, используемых в качестве модуляторов оптического излучения. Показаны возможности применения полученных формул для расчетно-экспериментального определения распределения поляризации по толщине тонкослойных пьезоэлектрических структур.

Введение

На основе экспериментальных и теоретических данных показано, что изгиб однородных тонких пьезоэлектрических пластин может быть вызван электронной подсистемой, определяющей неравномерную поляризацию сегнетоэлектрика (СЭ). Распределение напряженности электрического поля, тока и поляризации по толщине структур металл–диэлектрик–металл (МДМ) на основе электрострикционной лантансодержащей сегнетокерамики на основе титаната–цирканата–свинца (ЦТСЛ), определено с учетом инжекции электронов из катода. Так как частота взаимодействующих с кристаллическим СЭ электромагнитных волн много больше частоты колебаний кристаллической решетки, то со светом взаимодействуют только электроны. Поэтому влияние электронной подсистемы на оптические свойства СЭ имеет существенное значение [1,2].

Изменение внешнего электрического поля наиболее простым образом контролирует электрооптические и пьезоэлектрические свойства сегнетоэлектриков–полупроводников и может быть использовано в различных устройствах пьезо- и оптоэлектроники, в которых одновременно реализуется пьезо- и уругооптические эффекты [3–5]. Возможность создания на основе СЭ нетрадиционной управляемой отражающей поверхности антенн систем связи с космическим аппаратом рассмотрена в [6].

Обладая удачным сочетанием физических свойств (высокой фоточувствительностью, наличием электрооптического и пьезоэлектрического эффектов, электрической и механической прочностью, технологичностью изготовления) сегнетокерамика типа ЦТСЛ применяется в различных устройствах: пространственно-временных модуляторах света, оптической записи информации, сенсорах и актуаторах [2,7–9].

Исследование пространственного распределения электрического поля, тока термоэлектронной эмиссии и поляризации позволяет понять механизмы переноса зарядов и СЭ под влиянием электрических, температурных и механических полей. В электрострикционной сегнетокерамике сильное постоянное поле создает поляризацию, а дополнительное (значительно меньшее) переменное поле используется для управления функциональными параметрами пьезоэлектрических преобразователей. В упорядоченной полярной фазе в СЭ возникают нелинейные эффекты, которые определяются не только направлением внешних электрических полей, а также направлением вектора поляризации. При этом возникают полярная термоэдс и "четная" по полю электропроводность (эффект униполярности [8]).

Наведенная внешними полями оптическая неоднородность (фоторефракция) объясняется токами, ограниченными пространственным зарядом [9]. В этом случае в настоящей работе получена верхняя граничная оценка вольт-амперной характеристики структуры МДМ. Анализ таких различных характеристик СЭ как металлический тип проводимости и конечная поляризация могут быть использованы для объяснения физической сущности и математического моделирования высокотемпературной сверхпроводимости допированных лантаном металлооксидных соединений [10].

Необходимость расчета электропроводности тонкослойных структур МДМ обусловлена следующими причинами. Она проявляется в сравнительно слабых электрических полях, исследование зависимости электропроводности от внешнего электрического поля может дать информацию о важнейших физических свойствах СЭ, в частности о локализации волновых функций и плотности распределения центров захвата и рекомбинации носителей заряда.

Изучение энергетического спектра кристаллических СЭ является одной из основных задач физики твердого тела. В формировании энергетического спектра существенное значение имеет механическая деформация кристаллической решетки, которая вносит свой вклад (до 40%) в изменение ширины запрещенной зоны [11]. Сформулированные в этой работе трехмерные соотношения электроупругости определяют механические напряжения и деформации СЭ в зависимости от электрического поля и электронной подсистемы.

В результате математического моделирования можно решить обратную задачу, сравнивая результаты расчета с экспериментом. Экспериментальное определение распределения поляризации в тонкослойных структурах МДМ представляет достаточно сложную техническую задачу. В этой работе дано обоснование такого полуобратного метода определения распределения поляризации по толщине тонкослойных пьезоэлектрических структур (сравнимой с длиной пробега электронов).

Экспериментальные исследования фотоэлектрических свойств электрического заряда в кристаллах CdS показали возможность возникновения в структурах МДМ эмиссионных токов [1,2]. В работах [2,8] экспериментально изучено влияние эмиссионных токов на фотоэлектрические процессы в оптически прозрачной керамике типа ЦТСЛ, которая используется в оптических затворах, элементах голографической памяти и других устройствах записи и обработки оптической информации. Для случая термоэлектронной эмиссии из катода в настоящей работе определяются в явном виде электрические поля, токи и распределение поляризации по толщине структур МДМ.

Теория эмиссионных токов в структурах МДМ

В тонкослойных структурах МДМ при сравнительно небольших электрических полях возникает инжекция электронов из катода, концентрация которых резко уменьшается по мере удаления от него. В этом случае диффузионная составляющая тока может быть сравнима с дрейфовой. В известных аналитических решениях учитывается только дрейфовая компонента тока, которая в ряде работ принята постоянной по толщине диэлектрика [12,13].

Электрические поля и токи монополярной инжекции в структурах МДМ определяются из решения уравнения Бесселя, постоянные интегрирования которого зависят от величины тока и толщины диэлектрика. Вычисление постоянных интегрирований приводит к сложным трансцендентным уравнениям [13]. Поэтому, несмотря на указанные ранее упрощения, наиболее полные результаты расчета эмиссионных токов и электрических полей были получены только с применением ЭВМ. В настоящей работе асимптотическое решение поставленной задачи получено с учетом дрейфа и диффузии электронов.

Плотность тока термоэлектронной эмиссии из катода $j(x)$ (x — координата, отсчитываемая от катода), напряженность электрического поля $E(x)$ и концентрация инжектированных в диэлектрик электронов $n(x)$ определяются из следующей системы уравнений, записанных в безразмерной форме [12]:

$$\frac{dE}{dx} = -n, \quad \frac{dn}{dx} + nE = j(x). \quad (1)$$

Единицы величин текущей координаты \bar{x} (расстояние от катода), плотности тока \bar{j} , напряженности электрического поля \bar{E} и концентрации инжектированных электронов \bar{n} вычисляются по формулам

$$\bar{x} = \left(\frac{\varepsilon_{33}^T \varepsilon_0 k T}{4\pi e^2 n} \right)^{1/2}, \quad \bar{j} = \frac{edn}{\bar{x}}, \quad \bar{E} = \frac{kT}{e\bar{x}},$$

$$\bar{n} = N_c e^\psi, \quad \psi = \frac{eU}{kT}, \quad (2)$$

где k — постоянная Больцмана; ε_{33}^T — относительная диэлектрическая проницаемость диэлектрика; ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума; T — абсолютная температура; U — разность потенциалов на электродах структуры МДМ; $d = \mu kT$ (μ — подвижность свободных зарядов), \bar{x} — радиус экранирования Дебая; N_c — эффективная плотность квантовых состояний в зоне проводимости, которая определяется следующим выражением:

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2},$$

где h — постоянная Планка, m — эффективная масса электрона.

Основная система уравнений приводится к одному уравнению

$$\frac{d^2 E}{dx^2} + E \frac{dE}{dx} + j(x) = 0. \quad (3)$$

Аналитическим выражением свойств инжектируемого катода является следующее краевое условие:

$$E(0) = 0 \quad (\text{при } x = 0). \quad (4)$$

Для решения уравнения (3) также используем следующее условие:

$$\int_0^h E(x) dx = -U, \quad (5)$$

где h — толщина диэлектрика; U — напряжение между электродами, расположенными на поверхности диэлектрического слоя с координатами $z = \pm h/2$.

В соответствии с системой уравнений (1) и краевым условием (4) принимаем распределения $E(x)$ и $j(x)$ по толщине диэлектрического слоя в следующем виде:

$$E(x) = B_1 x^{1/2}, \quad j(x) = A_1 + A_2 x^{-3/2}, \quad (6), (7)$$

где A_i ($i = 1, 2$) — неизвестные постоянные.

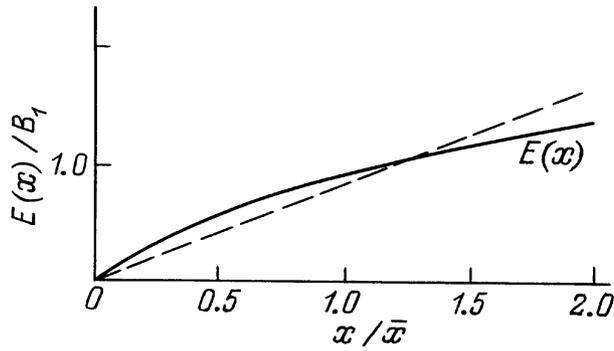


Рис. 1. Функция $E(x)$. Координата $x = 0$ расположена вблизи катода.

Используя (5) и (6), вычислим B_1 , а затем функцию $E(x)$

$$B_1 = -\frac{3}{2}Uh^{-3/2}, \quad E(x) = -\frac{3}{2}Ux^{1/2}h^{-3/2}. \quad (8)$$

Подставляя (6), (7) в уравнение (3), получаем

$$-\frac{B_1}{4}x^{-3/2} + \frac{B_1^2}{2} + A_1 + A_2x^{-3/2} = 0.$$

Приравнивая в этом равенстве нулю сумму коэффициентов при одинаковых степенях x , находим A_1 и A_2 , а затем из (7) функцию $j(x)$

$$j(x) = -\frac{9}{8}\frac{U^2}{h^3} - \frac{3}{8}\frac{U}{(hx)^{3/2}}. \quad (9)$$

Первое слагаемое в формуле (9) — известное выражение вольт-амперной характеристики, которое было получено без учета тока диффузии инжектированных в диэлектрик электронов [12].

Для сегнетокерамики типа ЦТСЛ функция $E(x)$, вычисленная по формуле (8), приведена на рис. 1. С достаточной для практических приложений точностью ее можно аппроксимировать линейной зависимостью от x (штриховая кривая).

Соотношения электроупругости для неравномерно поляризованных по толщине пьезоэлектрических преобразователей

В наиболее общем случае геометрической формы пьезоэлектрических преобразователей рассмотрим оболочку вращения из электрострикционной керамики в неполярной фазе (обратный квадратичный пьезоэффект), в которой сильное постоянное поле индуцирует поляризацию, а дополнительное, намного меньшее переменное электрическое поле создает рабочие деформации пьезоэлемента. При поляризации в направлении толщины обо-

лочки уравнения электрострикционного эффекта относительно постоянных по времени механических напряжений σ_i , деформаций ε_i и напряженности электрического поля E_3 имеют вид [14]

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= s_{11}^E \sigma_1 + s_{12}^E \sigma_2 + Q_{12} E_3^2, \\ \varepsilon_2 &= s_{11}^E \sigma_2 + s_{12}^E \sigma_1 + Q_{12} E_3^2, \end{aligned} \quad (10)$$

где ε_i ($i = 1, 2$) — деформации оболочки в направлении единичных векторов; τ_1 и τ_2 (рис. 2); σ_i — механические напряжения; s_{1i}^E — упругие податливости керамики; Q_{12} — электрострикционная константа; E_3 — напряженность электрического поля.

При выводе соотношений электроупругости принимаем следующие предположения.

1) Поляризация P_3 , напряженность поля E_3 и постоянная Q_{12} линейно зависят от координаты z , которая отсчитывается от срединной поверхности оболочки ($-h/2 \leq z \leq h/2$; рис. 2),

$$\begin{aligned} P_3 &= P_3^0 \alpha, \quad E_3 = E_3^0 \alpha, \\ Q_{12} &= Q_{12}^0 \alpha, \quad \alpha = (1/2 + z/h), \end{aligned} \quad (11)$$

где P_3^0 и Q_{12}^0 — величины, которые соответствуют координате $z = h/2$ (рис. 2); $E_3^0 = -2V_0/h$ (h — толщина оболочки).

2) В соответствии с гипотезами Кирхгоффа–Лява [15] и распределением поляризации (11) принимаем деформации оболочки в следующем виде:

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 \left(1 + \frac{2z}{h}\right) + z \varkappa_i, \quad (12)$$

где ε_i^0 и \varkappa_i ($i = 1, 2$) — относительные деформации и изменения главных кривизн срединной поверхности оболочки.

3) На основе экспериментальных данных диэлектрическую проницаемость сегнетокерамики принимаем усредненной постоянной по толщине оболочки. Из основной

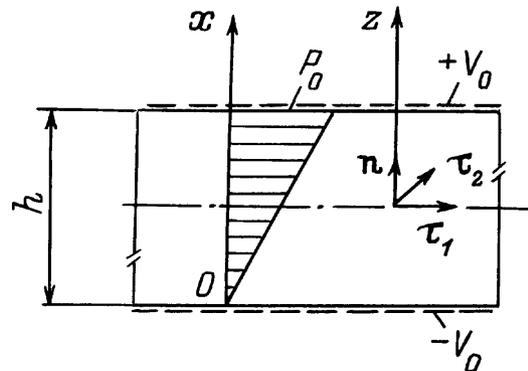


Рис. 2. Распределение поляризации в структуре МДМ. Координата $z = 0$ расположена в срединной поверхности пьезоэлектрического слоя.

системы уравнений (10) имеем

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= \frac{1}{s_{11}^E(1-\mu^2)}(\varepsilon_1 + \mu\varepsilon_2 - \hat{E}_3), \\ \sigma_2 &= \frac{1}{s_{11}^E(1-\mu^2)}(\varepsilon_2 + \mu\varepsilon_1 - \hat{E}_3), \\ \hat{E}_3 &= (1+\mu)Q_{12}(E_3^0)^2, \quad \mu = -\frac{s_{12}^E}{s_{11}^E},\end{aligned}\quad (13)$$

μ — коэффициент Пуассона.

Выражая внутренние механические усилия в оболочке T_1 и T_2 и изгибающие моменты M_1 и M_2 через интегралы от напряжений σ_1 и σ_2 (15), получим следующие соотношения электроупругости:

$$\begin{aligned}T_1 &= D_T \left[\varepsilon_1^0 + \mu\varepsilon_2^0 - \frac{(1+\mu)}{4}Q_{12}^0(E_3^0)^2 \right], \\ T_2 &= D_T \left[\varepsilon_2^0 + \mu\varepsilon_1^0 - \frac{(1+\mu)}{4}Q_{12}^0(E_3^0)^2 \right], \\ M_1 &= D_M[(2/h)(\varepsilon_2^0 + \mu\varepsilon_1^0) + \varkappa_1 + \mu\varkappa_2 - E_{3M}], \\ M_2 &= D_M[(2/h)(\varepsilon_1^0 + \mu\varepsilon_2^0) + \varkappa_2 + \mu\varkappa_1 - E_{3M}], \\ D_T &= \frac{h}{s_{11}^E(1-\mu^2)}, \quad D_M = \frac{h^3}{12s_{11}^E(1-\mu^2)}, \\ E_{3M} &= \frac{3}{4} \frac{(1+\mu)}{h} Q_{12}^0(E_3^0)^2.\end{aligned}\quad (14)$$

Рассмотрим консольно закрепленную однородную пьезоэлектрическую пластину, неравномерно поляризованную по толщине (рис. 1). Определим прогиб свободного конца при следующих условиях, которые выполняются по всей ее длине,

$$\begin{aligned}T_1 = M_1 = 0, \quad \varkappa_1 = \text{const} \\ (T_2 = M_2 = \varepsilon_2 = \varkappa_2 = \mu = 0).\end{aligned}\quad (15)$$

Из первого и третьего уравнений (14) и (15) имеем

$$\varepsilon_1^0 = Q_{12}^0(E_3^0)^2/4, \quad (2/h)\varepsilon_1^0 + \varkappa_1 - E_{3M} = 0. \quad (16)$$

Из системы уравнений (16) определяем изменение кривизны \varkappa_1

$$\varkappa_1 = Q_{12}^0(E_3^0)^2/2h.$$

С учетом последнего равенства и (12) прогиб свободного конца пластины вычислим по следующей формуле:

$$f = \frac{l^2 \Delta \varkappa_1}{2} = \frac{l^2 Q_{12}^0(E_3^0)^2}{2h},$$

$$\Delta \varkappa_1 = [\varepsilon_1(h/2) - \varepsilon_1(-h/2)]/h = Q_{12}^0(E_3^0)^2/h, \quad (17)$$

где l — длина пластины, $\varepsilon_1(\pm h/2)$ — относительные деформации на поверхностях оболочки с координатами $z = \pm h/2$.

При напряженности поля $E_3^0 = 6000$ В/см и параметрах $l = 30$ мм, $h = 0.15$ мм, $Q_{12}^0 = -1.45 \cdot 10^{-10}$ мм²/В

и $\mu = 0.34$ прогиб свободного конца пластины равен $f = 0.14$ мм.

Формула (17) может быть использована для получения интегральной оценки изменения поляризации по толщине тонких пьезоэлектрических слоев (10–200 мкм). Задаваясь распределением поляризации по формуле (17), можно вычислить прогиб свободного конца консольно закрепленного образца. Сравнение результата расчета с экспериментом позволяет определить этим расчетно-экспериментальным методом реальное распределение поляризации по толщине пьезоэлектрического элемента. Результаты числового расчета, приведенные в этой работе (рис. 1), подтверждаются результатами, полученными численным [16,17] и аналитическим [18] методами, а также данными эксперимента [19].

Заключение

1. В результате асимптотического решения определены в явном виде распределения электрических полей и токов по толщине структур МДМ.

2. Формула (9) уточняет вольт-амперную характеристику диэлектрического диода, полученную Моттом и Герни. Первый член в этой формуле совпадает с известным выражением [12], а второй ее член учитывает дрейф носителей заряда.

3. Как следует из эксперимента [19] и теоретических оценок [13,16–18], инжекция электронов из электродов реализуется при электрических полях $E_3 = 250–500$ В/мм. Приведенные экспериментальные и теоретические данные позволяют сделать предположение о том, что электрооптические и пьезоэлектрические свойства сегнетоэлектриков существенно зависят от их электронной подсистемы. Формулы (6)–(9) можно, в частности, использовать для количественной оценки влияния термоэлектронной эмиссии на фото- и электрооптические эффекты в сегнетоэлектриках-полупроводниках.

Список литературы

- [1] *Fan H.Y.* // Semiconductors and Semimetals. Vol. 3. Optical Properties of III–IV Compounds / Ed. K. Willardson, A.C. Beer. New York; London; Academic Press. P. 405–419.
- [2] *Krumins A.E., Fritzberg V.Y.* // Ferroelectrics. 1981. Vol. 34. N 1/4. P. 149–154.
- [3] *Kern K.* // J. Phys. Chem. Solids. 1962. Vol. 23. N 4. P. 249–253.
- [4] *Harbeke G.* // J. Phys. Chem. Solids. 1963. Vol. 24. P. 957–963.
- [5] *Камзина Л.С., Крайник Н.Н.* // ФТТ. 1987. Т. 29. Вып. 6. С. 1868–1870.
- [6] *Бедарева И.С., Кошечкина С.В.* // ПриЭ. 1995. Т. 40. № 6. С. 1118–1122.
- [7] *Wegner A., Bruck S.R., Wu A.Y.* // Ferroelectrics. 1995. Vol. 116. P. 195–200.
- [8] *Khalilov A., Dimza A. et al.* // Ferroelectrics. 1986. Vol. 69. N 1/2. P. 59–65.

- [9] Крылов Б.В., Лепарский В.Е. // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 10. С. 51–54.
- [10] Щербakov А.С., Кацнельсон М.Н., Трефилов А.В. и др. Сегнетоэлектрические аномалии и сверхпроводимость в металлооксидных соединениях. Сыктывкар, 1988. Вып. 6. 22 с.
- [11] Захаров А.Ю. // ФТТ. 1975. Т. 17. Вып. 5. С. 1274–1279.
- [12] Lampert M.A., Mark P. Current Injection in Solids. New York; London: Academic Press, 1970. 351 p.
- [13] Адирович Э.И. // ФТТ. 1960. Т. 2. Вып. 7. С. 1410–1422.
- [14] Mason W.P. Piezoelectric Crystals and Their Applications in Ultrasonics. Princeton (New Jersey): Van Nostrand, 1950.
- [15] Timoshenko S.P., Lessels J.M., Mech A.M. Applied Elasticity. East Pittsburg: Westinghouse Techn. Night School. 1925. 544 p.
- [16] Lindmayer J., Reynolds J., Wrigley C. // J. Appl. Phys. 1963. Vol. 34. N 4. Pt 1. P. 809–812.
- [17] Schnitler Ch. // Phys. St. Sol. (A). 1978. Vol. A45. N 2. P. 179–182.
- [18] Esener S., Lee S.H. // J. Appl. Phys. 1985. Vol. 58. N 3. P. 1380–1387.
- [19] Богданович А.С., Некрасов М.М., Сикорский Ю.А. и др. // Изв. вузов. Физика. 1962. № 6. С. 72–76.