

05

Модифицированные соотношения для расчета диэлектрической проницаемости наноразмерных пленок титаната бария—стронция

© Ю.В. Есипов, В.М. Мухортов, С.В. Бирюков, А.А. Маматов, С.И. Масычев

Южный научный центр РАН,
344006 Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: yu-yesipov5@yandex.ru

(Поступило в Редакцию 21 июля 2015 г.)

По результатам измерения емкости сегнетоэлектрических планарных конденсаторов проведен расчет величины диэлектрической проницаемости наноразмерных пленок титаната бария—стронция. Приведено выражение для подгоночного коэффициента, позволяющего получить адекватные значения величины диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрических пленок толщиной 20 nm. Указаны пределы применимости полученного подгоночного коэффициента.

Введение

Важным элементом в решении задачи мониторинга структурной целостности и напряженно-деформированного состояния конструкций с целью своевременного обнаружения дефектов и принятия мер по их устранению является разработка чувствительных датчиков. К наиболее перспективным датчикам такого применения следует отнести датчики на основе тонких сегнетоэлектрических пленок [1]. Это обстоятельство стимулирует исследование свойств сегнетоэлектрических емкостных элементов, на основе которых могут быть реализованы указанные датчики.

Перестраиваемые конденсаторы в планарном исполнении имеют преимущество перед конденсаторами других типов, поскольку у планарных конденсаторов оба проводника расположены на верхней стороне подложки, т.е. у них используется только один металлизированный слой. Это существенно упрощает технологический цикл их изготовления и снижает стоимость их производства. Наиболее распространенным типом планарного конденсатора является встречно-штыревой конденсатор, изображенный на рис. 1. На рис. 1 использованы следующие обозначения: s — ширина зазора между встречными штырями, d — ширина штыря, L — апертура (длина перекрытия штырей), h — толщина сегнетоэлектрической тонкой пленки, n — количество штырей, t — толщина слоя металлизации.

Расчет диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрических пленок, на базе которых реализуются перестраиваемые конденсаторы, является одной из важнейших задач, возникающих при разработке сегнетоэлектрических датчиков. Как правило, расчет диэлектрической проницаемости ϵ_f ведется по результатам измерения емкости планарного конденсатора. Методика такого расчета предложена в [2], в которой использованы достаточно простые аналитические соотношения, не требующие большого объема вычислений. В [3] рассмотрена более точная модель, которая позволяет рассчитать емкость планарной структуры, образованной

тонким слоем сегнетоэлектрического материала с диэлектрической проницаемостью ϵ_f , нанесенного на диэлектрическую подложку с проницаемостью ϵ_s , и двумя металлическими планарными электродами. Полученные в [3] соотношения могут быть использованы для расчета емкости и встречно-штыревого конденсатора.

В основу расчета емкости в [3] положен метод частичных емкостей и конформных отображений. Метод частичных емкостей основан на введении „магнитных стенок“ между слоями, т.е. на предположении, что силовые линии поля параллельны границам раздела сред и не выходят за них. Применимость метода частичных емкостей обеспечивается выполнением соответствующих соотношений геометрических размеров структуры, а именно, если при соотношении проницаемостей сегнетоэлектрической пленки и диэлектрической подложки $\epsilon_f/\epsilon_s > 10^2$ выполняется неравенство $s \leq 10h$ [3]. Для наноразмерных пленок, когда, например, $s = 1 \mu\text{m}$ и $h = 20\text{--}50 \text{ nm}$, последнее неравенство не выполняется. Экспериментальные результаты, подтверждающие эффективность метода частичных емкостей при незначительном отклонении от требования $s \leq 10h$, приведены в [4]. В этой работе ширина щели s между планарными электродами варьировала в пределах от 2 до $10 \mu\text{m}$, а толщина h использованных пленок менялась от 250 до 500 nm. При этом для расчета применялись упрощенные по сравнению с использованными в [3] соотношения для емкостей составных частей планарного конденсатора, полученные О.Г. Вендиком. Для применения изложенного в [3] метода при расчетах диэлектрической проницаемости наноразмерных пленок с толщиной h не более 50 nm необходимо было провести оценку его точности, и в случае необходимости провести соответствующую корректировку.

В [2] адекватные значения ϵ_f получены при расчете диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрических пленок с толщинами h , равными 0.4–0.7 μm , и шириной зазора s между встречными штырями, равной 12 и 24 μm , т.е. для случая, когда $s > 10h$. Однако указанная методика использовалась для пленок с относительно

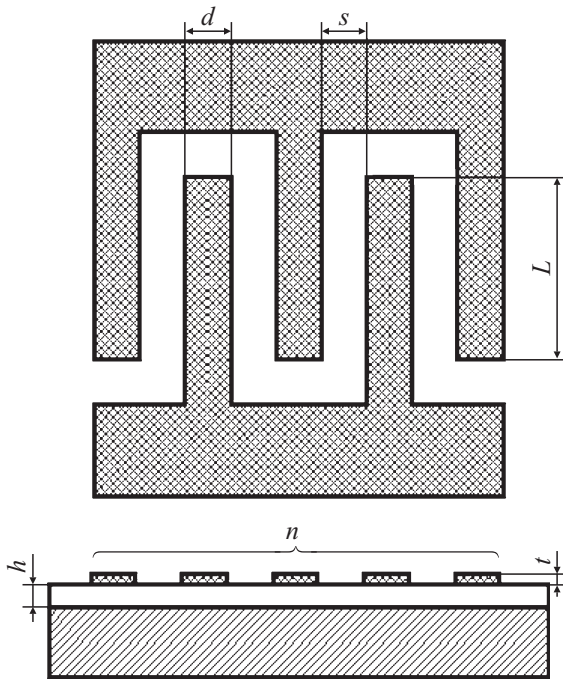


Рис. 1. Планарный конденсатор встречно-штыревого типа.

большой толщиной, порядка 500 nm, и пределы применимости использованных в [2] соотношений не указаны.

В этой связи возникает необходимость проверки известных аналитических соотношений, позволяющих рассчитать величину диэлектрической проницаемости без большого количества вычислений и промежуточных математических операций, на предмет их пригодности в случае определения диэлектрической проницаемости наноразмерных сегнетоэлектрических пленок [5–7].

Как известно, диэлектрическая проницаемость является макроскопической характеристикой, корректное использование которой возможно только применительно к областям с размерами, превышающими несколько постоянных кристаллической решетки. Постоянная решетки титаната бария–стронция приблизительно равна 0.4 nm. Согласно [8,9], критический размер в наноструктурах перовскитовых сегнетоэлектриков не превышает 5 nm. Поэтому использование в настоящей работе при исследовании пленок $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3$ с толщиной 20 nm понятия диэлектрической постоянной как макроскопической характеристики сегнетоэлектрика [7,10] является вполне допустимым.

Экспериментальная часть

В качестве тестовых планарных конденсаторов использовалась встречно-штыревая конфигурация на основе тонких пленок $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3$ толщиной 20 nm. Пленки напылялись на подложки MgO ($\epsilon_s = 9.8$) толщиной 500 μm методом высокочастотного реактивного распыления на установке „ПЛАЗМА-50 СЭ“. На поверх-

ности пленки методами обратной (взрывной) фотолитографии формировалась топология встречно-штыревых электродов из алюминия толщиной $t = 0.3 \mu m$. При заданной композиции пленки титаната бария–стронция и ее толщине повлиять на емкость и управляемость встречно-штыревого конденсатора можно только путем изменения его геометрических размеров, среди которых наиболее критичными являются: количество штырей, ширина штыря и зазор между соседними штырями. Особый интерес представляют последние два параметра, поскольку от них сильно зависит величина электрического поля, определяющая управляемость встречно-штыревого конденсатора.

Тестовые конденсаторы изготавливались с различным количеством штырей и с различным отношением ширины штыря к ширине зазора d/s . У всех конденсаторов длина штырей $L = 100 \mu m$. После окончания литографического процесса реальные геометрические размеры планарного конденсатора определялись с помощью микроскопа „Leitz Latimet“. Емкость тестовых конденсаторов измерялась на измерителе параметров полупроводниковых приборов Keithley 4200 SCS на частоте 1 MHz при помощи зондовой станции PM-5 MicroTec.

На рис. 2 приведена зависимость управляемости реализованных тестовых конденсаторов от геометрических размеров встречно-штыревой конфигурации. Расчет управляемости проводился по формуле: $T = \frac{C_{max} - C_{min}}{C_{max}} 100\%$, где T — управляемость, C_{max} — емкость конденсатора при напряжении смещения, равном нулю, C_{min} — емкость конденсатора при максимальном напряжении смещения (в нашем случае — 25 V).

Как следует из приведенных на рис. 2 данных, при определенном соотношении геометрических параметров имеет место максимум управляемости. В частности, оптимальное соотношение d/s равно 2.

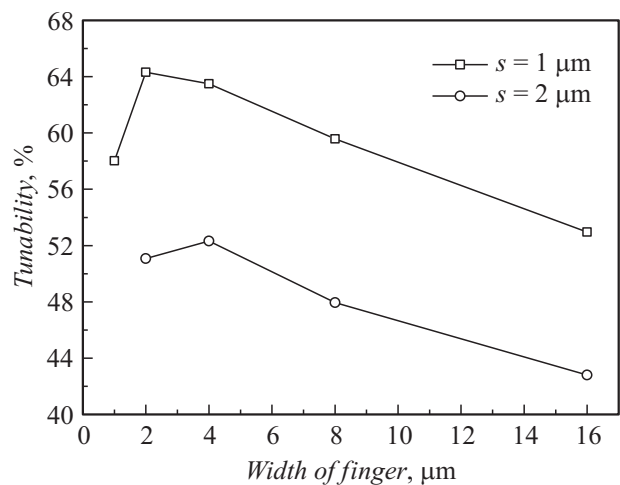


Рис. 2. Зависимость управляемости сегнетоэлектрического конденсатора от геометрических размеров встречно-штыревой конфигурации.

Таблица 1. Емкость встречно-штыревых конденсаторов с разным количеством электродных секций N

Количество электродных секций N	Ширина зазора $s, \mu\text{m}$	Ширина штыря $d, \mu\text{m}$	Емкость встречно-штыревого конденсатора C_m, pF
2	1.10	0.83	0.093
5	0.91	1.05	0.180
10	0.87	1.09	0.337
25	0.87	1.07	0.703
50	1.00	0.97	1.463
100	1.00	0.97	2.990

Таблица 2. Зависимость емкости конденсатора от геометрических размеров встречно-штыревой конфигурации

Ширина зазора $s, \mu\text{m}$	Ширина штыря $d, \mu\text{m}$	Емкость встречно-штыревого конденсатора C_m, pF
1.17	0.78	0.243
0.78	2.08	0.443
0.70	4.05	0.497
0.77	7.8	0.491
1.04	154	0.472

В табл. 1 представлены значения емкости C_m , измеренные для конденсаторов с разным количеством электродных секций. Там же приведены геометрические размеры штырей и зазоров между ними для каждого встречно-штыревого конденсатора.

В табл. 2 приведены измеренные значения емкости C_m встречно-штыревых конденсаторов с одним и тем же количеством электродных секций $N = 10$, но с разными геометрическими размерами штырей и зазоров между ними.

Результаты и их обсуждение

Расчет ϵ_f для встречно-штыревого конденсатора, изображенного на рис. 1, велся с помощью соотношения [2]

$$\epsilon_f = \epsilon_s + \left\{ \frac{C - [K(1 + \epsilon_s)]}{K [1 - \exp(-\frac{4.6h}{d+s})]} \right\}, \quad (1)$$

где C — измеренная емкость, приходящаяся на единицу длины штыря L , т.е.

$$C = \frac{C_m}{LN},$$

C_m — экспериментально измеренная емкость встречно-штыревого конденсатора, N — число электродных секций.

В формуле (1) K — так называемый подгоночный коэффициент, имеющий размерность емкости в pF [2]. Подгоночный коэффициент K — некоторая функция геометрических размеров планарного конденсатора. Подгоночные коэффициенты обычно вводят, чтобы согласовать полученные экспериментальным и расчетным путем значения емкости планарного конденсатора [6]. В работе [2] использовано аналитическое выражение для подгоночного коэффициента K , которое имеет следующий вид:

$$K = 6.5 \left(\frac{d}{d+s} \right)^2 + 1.08 \left(\frac{d}{d+s} \right) + 2.37, \quad (2)$$

где d и s указаны на рис. 1.

Одновременно с расчетом по формулам (1), (2) диэлектрическая проницаемость ϵ_f сегнетоэлектрической пленки встречно-штыревого конденсатора определялась с помощью хорошо известных соотношений, приведенных в [3,4]. При этом емкость встречно-штыревого конденсатора полагалась равной емкости рассматриваемой в [3,4] планарной структуры, умноженной на число электродных секций N встречно-штыревого конденсатора.

В табл. 3 приведена рассчитанная по формулам (1), (2) величина диэлектрической проницаемости тонкой пленки $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3$ толщиной 20 nm, на основе которой реализованы встречно-штыревые конденсаторы с разным количеством электродных секций N . Для расчета использовались данные, приведенные в табл. 1.

Расчетные значения диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрической тонкой пленки $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3$ толщиной 20 nm, полученные для встречно-штыревых конденсаторов с различной шириной штыря, приведены на рис. 3. Кривая 1 соответствует расчету, проведенному с помощью соотношений (1) и (2), т.е. по методике, изложенной в [2]. Кривые 2 и 3 рассчитывались по методике, приведенной в [2,3] соответственно.

Представленные в табл. 3 и на рис. 3 результаты свидетельствуют, что выражение для подгоночного коэффициента (2), использовавшееся в работе [2] для расчета диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрических пленок с толщиной от 0.4 до 0.7 μm , в случае наноразмерных пленок приводит к неадекватным оценкам величины ϵ_f .

Подгоночный коэффициент в таком случае может быть найден путем сравнения с достоверным численным расчетом [6]. Графики на рис. 3 показывают, что

Таблица 3. Диэлектрическая проницаемость ϵ_f , рассчитанная для конденсаторов с разным количеством электродных секций N

Количество электродных секций N	2	5	10	25	50	100
Диэлектрическая проницаемость ϵ_f	1460	645	545	397	485	500

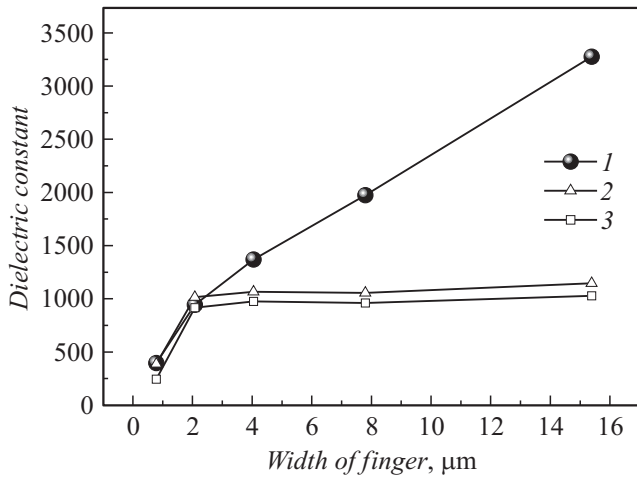


Рис. 3. Значения диэлектрической проницаемости, рассчитанные по результатам измерения емкости встречно-штыревых конденсаторов с разной шириной штырей.

поскольку все тестовые конденсаторы были реализованы на одной и той же сегнетоэлектрической пленке, то можно полагать достоверным численным результатом значение ϵ_f , приблизительно равное 1000. Подгоночный коэффициент полагался имеющим следующий вид:

$$K = A \left(\frac{d}{d+s} \right)^2 + B \left(\frac{d}{d+s} \right) + G. \quad (3)$$

В выражении (3) A, B и G — неизвестные числа, подлежащие определению. Поскольку имеет место $\epsilon_s \gg 1$ и $\epsilon_f \gg \epsilon_s$, то соотношение (1) может быть переписано в виде

$$\epsilon_f = \frac{C - K \epsilon_s}{K \left(1 - \exp \left(- \left(\frac{4.6h}{d+s} \right) \right) \right)}. \quad (4)$$

Для определения трех неизвестных величин A, B и G использовались экспериментальные результаты, приведенные в табл. 2. С помощью соотношений (3) и (4) была составлена система трех уравнений, в которой ϵ_f полагалась равной 1000, ширина зазора s принималась равной соответственно 1.17, 0.78 и 0.7 μm , а ширина штыря d принимала значения 0.78, 2.08 и 4.05 μm , для первого, второго и третьего уравнений соответственно. После решения полученной системы уравнений были найдены искомые значения входящих в подгоночный коэффициент постоянных A, B и G , величина которых составила

$$A \approx 20, \quad B \approx -2, \quad G \approx -1.5.$$

Таким образом, полученное выражение для подгоночного коэффициента имеет вид

$$K = 20 \left(\frac{d}{d+s} \right)^2 - 2 \left(\frac{d}{d+s} \right) - 1.5. \quad (5)$$

Определим границы применимости полученного выражения для подгоночного коэффициента. По своему физическому смыслу K должно быть положительным, т.е. необходимо потребовать, чтобы имело место неравенство

$$20 \left(\frac{d}{d+s} \right)^2 - 2 \left(\frac{d}{d+s} \right) - 1.5 > 0. \quad (6)$$

Введя обозначение $x = d/(d+s)$ и разложив квадратный трехчлен, стоящий в левой части неравенства (6) на линейные множители, можно переписать (7) в виде

$$20(x - 0.325)(x + 0.225) > 0. \quad (7)$$

Неравенство (7) выполняется, если $x > 0.325$.

Тогда условие выполнения неравенства (6) сводится к требованию $d > 0.325(d+s)$. Отсюда получаем пределы применимости полученного выражения для подгоночного коэффициента. Соотношение (5) принимает положительные значения, а следовательно, имеет физический смысл только для встречно-штыревых конденсаторов, у которых ширина зазора между встречными штырями s и ширина встречных штырей d подчиняется соотношению $d > 0.5s$.

С помощью полученного подгоночного коэффициента K проведен контрольный расчет величины диэлектрической проницаемости наноразмерной пленки $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3$ для разных значений ширины штырей встречно-штыревых конденсаторов. Для этого соотношение (5) подставлялось в выражение (1) и величина ϵ_f рассчитывалась для значений ширины штырей d и зазоров s , указанных в табл. 2.

Результаты проведенных расчетов, кривая 1, представлены на рис. 4. Там же для сравнения приведены изображенные штрихами кривые 2 и 3, рассчитанные по формулам, приведенным в [3,4] соответственно. Как следует

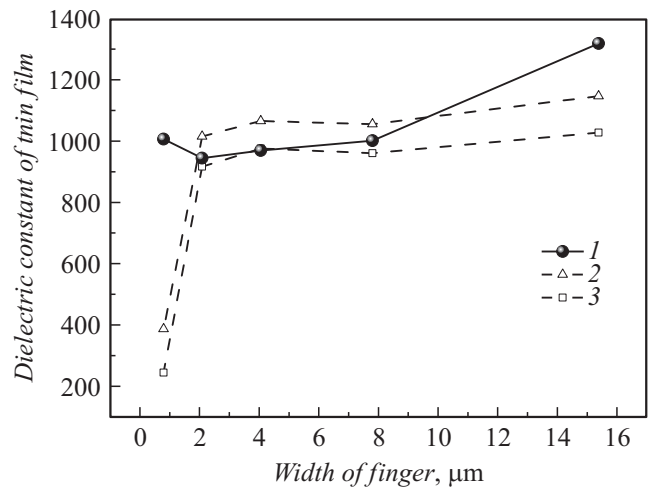


Рис. 4. Диэлектрическая проницаемость наноразмерной тонкой пленки титаната бария–стронция, рассчитанная по результатам измерения емкости конденсаторов с разной шириной штырей.

из анализа кривых, представленных на рис. 4, полученный подгоночный коэффициент, описываемый соотношением (6), позволяет совместно с выражением (1) вести расчет диэлектрической проницаемости наноразмерных сегнетоэлектрических пленок в диапазоне малых значений ширины штырей ($d = 1-2 \mu\text{m}$) встречно-штыревого конденсатора, где другие методы расчета дают заведомо неадекватные результаты. В диапазоне больших значений ширины штырей встречно-штыревых конденсаторов ($d > 10 \mu\text{m}$) расчет диэлектрической проницаемости целесообразно вести по методикам, изложенным в [3,4].

Заключение

Измерена емкость сегнетоэлектрических планарных конденсаторов встречноштыревого типа, что позволило рассчитать величину диэлектрической проницаемости пленок $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3$ толщиной 20 nm. Расчет проведен с помощью известных аналитических соотношений, ранее применявшихся для определения диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрических пленок, имеющих существенно большую толщину. Для расчета использовано полученное выражение для подгоночного коэффициента. При ширине зазора между встречными штырями s и ширине встречных штырей d , подчиняющихся соотношению $d > 0.5s$, полученный подгоночный коэффициент позволяет вести адекватный расчет диэлектрической проницаемости наноразмерных сегнетоэлектрических пленок. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-08-00546.

Список литературы

- [1] Есипов Ю.В., Мухортов В.М. // ЖТФ. 2009. Т. 79. Вып. 1. С. 78–81.
- [2] Al-Shareef H.N., Dimos D., Raymond M.V. et. al. // J. Electroceram. 1997. Vol. 1. N 2. P. 145–149.
- [3] Вендик О.Г., Зубко С.П., Никольский М.А. // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 4. С. 1–14.
- [4] Ott R., Wordenweber R. // Appl. Phys. Lett. 2002. Vol. 80. N 12. P. 2150–2156.
- [5] Фридкин В.М. // УФН. 2006. Т. 176. N 2. С. 203–208.
- [6] Вендик О.Г., Никольский М.А. // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 1. С. 117–119.
- [7] Мухортов В.М., Масычев С.И., Головки Ю.И. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 10. С. 106–109.
- [8] Мигунов С.Н., Волков А.А., Командин Г.А., Лобанов А.Н., Горцунов Г.Н., Мухортов В.М., Головки Ю.И., Юзюк Ю.И. // ЖТФ. 2008. Т. 78. Вып. 11. С. 99–105.
- [9] Анохин А.С., Мухортов В.М., Головки Ю.И., Широков В.Б., Юзюк Ю.И. // Вестник Южного научного центра. 2012. Т. 8. № 3. С. 22–31.
- [10] Бочарова О.В., Анджилович И.Е., Ворович Е.И. // Вестник Южного научного центра. 2015. Т. 11. № 1. С. 30–35.