

На правах рукописи

Медведева Наталья Юрьевна

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ
КОМПОЗИТОВ В СВЧ ДИАПАЗОНЕ

Специальность: 01.04.03 – Радиофизика

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2009

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном электротехническом университете «ЛЭТИ» имени В.И.Ульянова (Ленина)

Научный руководитель –
доктор технических наук, профессор Вендик Орест Генрихович

Официальные оппоненты:
доктор технических наук, профессор Валентин Петрович Афанасьев
кандидат физико-математических наук Игорь Анатольевич Колмаков

Ведущая организация: Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе
Российской академии наук

Защита состоится «23» декабря 2009 г. в 15.30 часов на заседании совета по защите докторских и кандидатских диссертаций Д 212.238.08 Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» имени В.И. Ульянова (Ленина) по адресу: 197376, Санкт-Петербург, ул. Проф. Попова, 5.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке университета.

Автореферат разослан «20» ноября 2009 г.

Ученый секретарь совета по защите
докторских и кандидатских диссертаций,
к.т.н., доцент

Е.А. Смирнов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Исследование возможности применения сегнетоэлектрических материалов в технике сверхвысоких частот (СВЧ) началось в середине 60-х годов прошлого века. Интерес к проблеме не исчезает в течение многих десятилетий, вплоть до настоящего времени.

Сегнетоэлектрические материалы представляют интерес для техники СВЧ, потому что их основным свойством является нелинейная зависимость величины диэлектрической проницаемости от электрического поля и температуры. Эта особенность материала позволяет создавать устройства с электрически управляемыми характеристиками [1]. Сегнетоэлектрические материалы могут применяться в таких традиционных СВЧ устройствах, как планарные конденсаторы с электрически управляемой емкостью, линии передачи с электрически управляемой фазовой скоростью, перестраиваемые фильтры и резонаторы (в том числе высокочастотные, выполненные на монокристаллических образцах сегнетоэлектрика), параметрические усилители и фазовращатели. Кроме того, состояние вещества, при котором в сегнетоэлектрическом материале наблюдается спонтанная поляризация, используется в модулях оперативной компьютерной памяти - так называемых FeRAM (Ferroelectric Access Random Memory).

Достижения в нанoeлектронике значительно усилили интерес к размерным эффектам в сегнетоэлектрических материалах (спонтанная поляризация, диэлектрическая проницаемость, пьезо- и пироэффекты). Большой интерес вызывают исследования физических свойств систем пониженной размерности: тонких пленок, нитей, малых частиц, а также материалов, введенных в пористые матрицы с порами нанометрового масштаба.

СВЧ устройства на основе сегнетоэлектриков могут работать на разных уровнях мощности, обеспечивая высокое быстродействие при малом энергопотреблении в цепях управления. Сегнетоэлектрики обладают большей электрической и радиационной стойкостью по сравнению с полупроводниками и значительно более энергоэкономичны, чем ферриты. Немаловажными факторами также являются простота технологии изготовления и относительно невысокая стоимость производства сегнетоэлектрических компонентов СВЧ устройств.

Однако применение сегнетоэлектриков ограничено рядом известных факторов, таких как сравнительно высокие диэлектрические потери на сверхвысоких частотах, трудности согласования с СВЧ цепями из-за большой диэлектрической проницаемости, которой обладают сегнетоэлектрики, и отсутствие отлаженного технологического процесса получения наноразмерных структур на основе сегнетоэлектриков.

Кроме того, необходимо учитывать и нарастающую тенденцию к миниатюризации СВЧ устройств, которая ставит задачу повышения качества уже существующих сегнетоэлектрических материалов и получения материалов с новыми свойствами. Одним из перспективных путей решения этих проблем является разработка и дальнейшее использование наногранулированных плёнок и наноструктурированных сегнетоэлектрических композитов.

Цель диссертационной работы - исследование и моделирование диэлектрических свойств сегнетоэлектрических наногранулированных плёнок и наноструктурированных композитов с включениями сферической/эллипсоидальной/дисковой формы, применяемых в СВЧ диапазоне

Достижение поставленной цели было реализовано путём решения следующих задач:

1. Исследование влияния формы и размера сегнетоэлектрических гранул на диэлектрические свойства наногранулированных плёнок (размерный эффект) при учете эффекта «замораживания» динамической поляризации на границе раздела между сегнетоэлектрическими гранулами.
2. Моделирование и расчет диэлектрических свойств нанокompозита с эллипсоидальными сегнетоэлектрическими включениями при учёте влияния размерного эффекта.
3. Исследование нелинейных свойств наноструктурированных композитов с включениями сферической/эллипсоидальной/дисковой формы.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. На основе модели «мёртвого слоя» установлена связь толщины и диэлектрической проницаемости этого слоя с параметрами корреляционной модели.
2. Определена зависимость эффективной диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрической наногранулированной плёнки, содержащей гранулы сферической или эллипсоидальной формы, от размеров гранул и толщины «мёртвого слоя».
3. Определена зависимость эффективной диэлектрической проницаемости наноструктурированного композита с эллипсоидальными сегнетоэлектрическими включениями от размеров включений, толщины «мёртвого слоя» и обратного фактора заполнения.
4. Рассчитаны эффективная диэлектрическая проницаемость, управляемость, тангенс угла диэлектрических потерь и фактор коммутационного качества наноструктурированных композитов с эллипсоидальными, сферическими и дисковыми включениями.
5. Предложен вариант применения нанокompозита с дисковыми включениями в составе сегнетоэлектрического планарного конденсатора, показывающий перспективность использования наноструктурированных компо-

зитов при разработке СВЧ устройств со сниженными диэлектрическими потерями.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. «Мёртвый слой», введённый на границе раздела между сегнетоэлектрическими гранулами, учитывает эффект «замораживания» динамической поляризации.
2. Эффективная диэлектрическая проницаемость наноструктурированных плёнки и композита, содержащих сегнетоэлектрические гранулы эллипсоидальной формы, падает с уменьшением отношения длин большой и малой полуосей эллипсоида.
3. Наноструктурированные композиты с сегнетоэлектрическими (типа перовскита) включениями сферической или дисковой формы проявляют нелинейные свойства только при напряжённости внешнего электрического поля более 40 В/мкм, когда диэлектрическая проницаемость сегнетоэлектрика становится равной или меньше проницаемости матрицы.

Практическая значимость результатов работы:

1. Разработаны оригинальные модели, описывающие диэлектрические свойства наноструктурированных сегнетоэлектрических композитов и плёнок, которые применимы при разработке и конструировании приборов, обладающих нелинейными свойствами.
2. Полученные зависимости эффективной диэлектрической проницаемости наногранулированной плёнки/нанокомпозита от размера гранулы полезны при анализе различных способов получения тонких плёнок/композитов, для оценки и оптимизации параметров технологических процессов с целью получения материалов с заданными характеристиками.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях:

На международных конференциях: международный студенческий семинар «Microwave and Optical applications of novel physical phenomena» в 2007, 2008, 2009г; 1st International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Micro-waves and Optics (Rome, 22-26 October 2007), Women in Photonics (WiP) School on Photonic Metamaterials (April 13-18 2008, Paris, France), международная конференция “Диэлектрики - 2008”(3-7 июня 2008, Санкт-Петербург), EuroCon2009 (May 2009, Saint-Petersburg, Russia).

На конференциях: XVIII Всероссийская конференция по физике сегнето-электриков (ВКС – XVIII) 2008г; семинары профессорско-преподавательского состава СПб ГЭТУ «ЛЭТИ» 2006, 2007, 2008, 2009г, научно-технические семинары «Современные проблемы техники и электроники СВЧ» 2006, 2007, 2008, 2009г.

Настоящая работа выполнена при поддержке международных проектов «Метаморфоза» и «Наностар» 6-й рамочной программы Европейского Союза.

Публикации. Основные теоретические и практические результаты диссертации опубликованы в 19 статьях и докладах, среди которых 5 публикаций в ведущих рецензируемых изданиях, рекомендованных в действующем перечне ВАК. Доклады доложены и получили одобрение на 14 международных, всероссийских и межвузовских научно-практических конференциях, перечисленных в конце автореферата.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав с выводами, заключения. Она изложена на 123 страницах машинописного текста, включает 64 рисунка, 1 таблицу и список литературы из 73 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во Введении обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цели и задачи работы, научная новизна и практическая ценность полученных результатов, а также сформулированы научные положения, выносимые на защиту.

Глава 1 «Модельное представление диэлектрических свойств сегнетоэлектрических материалов» посвящена обзору литературы по теме работы.

В первом параграфе данной главы рассмотрены предпосылки использования объёмных, тонкоплёночных сегнетоэлектриков и наноструктурированных композитов на их основе в СВЧ технике и электронике.

Во втором параграфе приведено феноменологическое описание диэлектрического отклика сегнетоэлектрика и механизмов диэлектрических потерь в сегнетоэлектрике, которые используются в работе при моделировании нелинейных свойств наноструктурированных композитов.

В третьем и четвёртом параграфах приведены формулы для расчёта управляемости, тангенса угла диэлектрических потерь, фактора коммутационного качества и ёмкости слоистого планарного конденсатора, содержащего тонкий сегнетоэлектрический слой.

Пятый параграф посвящен описанию явления размерного эффекта в сегнетоэлектриках. В нём подробно рассматривается роль граничных условий для динамической сегнетоэлектрической поляризации. Здесь также определено понятие «мёртвого слоя».

В шестом параграфе рассматриваются известные модели описания композитов и наногранулированных плёнок.

В заключение обзора литературы сформулированы основные задачи диссертационного исследования.

Глава 2 «Размерный эффект в наноструктурированных сегнетоэлектрических плёнках» посвящена определению зависимости эффективной диэлектрической проницаемости наноструктурированной сегнетоэлектрической плёнки от формы и размеров гранул, а также от толщины «мёртвого слоя».

В первом параграфе главы показано, что модель «мёртвого слоя» является приближением модели корреляции сегнетоэлектрической динамической поляризации. Здесь также определена связь между корреляционным параметром и основными характеристиками «мёртвого слоя».

Модель «мёртвого слоя» основана на предположении существования несегнетоэлектрического слоя вблизи электродов плоскопараллельного конденсатора. В этом приближении считается, что диэлектрическая плёнка состоит из трёх слоёв: центрального сегнетоэлектрического слоя с диэлектрической проницаемостью ε_f и толщиной h и двух несегнетоэлектрических слоёв с диэлектрической проницаемостью ε_d и толщиной h_d , граничащих с электродами. Эти несегнетоэлектрические слои называются «мёртвыми слоями». В случае плоскопараллельного конденсатора с двумя такими слоями, эффективная диэлектрическая проницаемость всей структуры определяется из уравнения:

$$\frac{1}{\varepsilon_{\text{eff}}(T)} = \frac{1}{\varepsilon_f(T)} + \frac{2h_d}{\varepsilon_d h} \quad (1)$$

В модели «мёртвого слоя» зависимость динамической поляризации в образце от координаты x описывается уравнением:

$$P(x) = \begin{cases} P_{\text{max}} & \text{при } |x| \leq (h/2 - h_d) \\ 0 & \text{при } (h/2 - h_d) < |x| \leq h/2 \end{cases} \quad (2)$$

В «мёртвом слое» динамическая сегнетоэлектрическая поляризация полагается равной нулю. В то же время считается, что в «мёртвом слое» имеет место несегнетоэлектрическая поляризация.

Корреляционная модель основывается на понятии пространственной корреляции динамической поляризации внутри сегнетоэлектрического образца, которая возникает из-за нелокальной связи между электрическим полем и сегнетоэлектрической поляризацией. Принципиальную роль при таком рассмотрении играют граничные условия для динамической сегнетоэлектрической поляризации. Нулевые граничные условия можно рассматривать как блокировку (или «замораживание») динамической сегнетоэлектрической поляризации на границе «сегнетоэлектрический слой - электрод».

Эффективная диэлектрическая проницаемость плоскопараллельного конденсатора в случае нулевых граничных условий будет определяться из следующего уравнения:

$$\frac{1}{\varepsilon_{\text{eff}}} = \frac{1}{\varepsilon_f(T)} + \frac{2}{\alpha h}, \quad (3)$$

где α - корреляционный параметр материала.

Решение уравнения Гинзбурга-Девоншира для случая $\text{div} \vec{D} = 0$ и нулевых граничных условий для динамической сегнетоэлектрической поляризации $P(x)$ позволяет получить дифференциальное распределение поляризации в сегнетоэлектрическом слое [2]:

$$P(x) = P_{\text{max}} \left(1 - \frac{\text{ch}(\alpha x)}{\text{ch}(\alpha x/2)} \right). \quad (4)$$

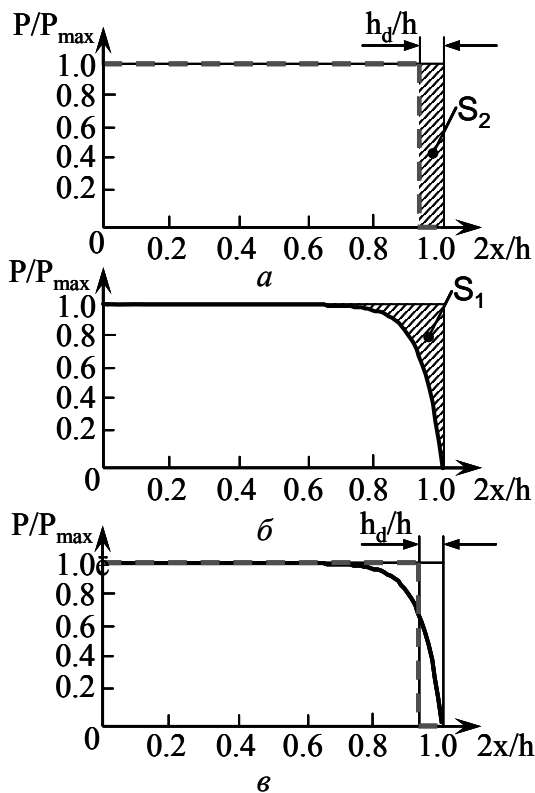


Рис. 1.

Рис. 1а,б является иллюстрацией того, как ведёт себя диэлектрическая поляризация в плоскопараллельном конденсаторе в случае каждой из двух рассматриваемых моделей размерного эффекта: корреляционной модели (сплошная линия на рис.1б) и модели «мёртвого слоя» (пунктирная линия на рис.1а).

Приравняв площади S_1 и S_2 (см. рис.1) или сопоставляя уравнения (1) и (3), можно сделать вывод о связи корреляционного параметра и основных характеристик «мёртвого слоя» (толщины h_d и диэлектрической проницаемости ε_d):

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{h_d}{\varepsilon_d}. \quad (5)$$

На основании приведённых сопоставлений можно сделать вывод, что при феноменологическом описании структур, имеющих границы вида сегнетоэлектрик-другая среда «замораживание» динамической поляризации может быть учтено введением тонкого «мёртвого слоя», в котором отсутствует сегнетоэлектрическая поляризация.

Во втором параграфе определяется зависимость эффективной диэлектрической проницаемости наноструктурированной пленки с сегнетоэлектрическими гранулами сферической формы от размера гранул и толщины «мёртвого слоя», который вводится для учёта размерного эффекта в гранулах.

Рассмотрим шарообразную гранулу сегнетоэлектрика, окружённую тонким «мёртвым» слоем, в однородной диэлектрической среде. Далее a – радиус гранулы, d – толщина «мёртвого слоя».

Для того чтобы найти распределение электрического поля в такой структуре, необходимо решить уравнение Лапласа в сферических координатах.

Распределение электрического поля для каждой из трёх рассматриваемых областей в соответствии с решением уравнения Лапласа в сферических координатах (1 – сегнетоэлектрик, 2 – «мёртвый» слой, 3 – однородная диэлектрическая среда) будет определяться следующими выражениями ($\partial/\partial\varphi = 0$):

$$E_{i\theta}(r, \theta) = -(A_i + B_i r^{-3}) \sin \theta, \quad (6)$$

$$E_{ir}(r, \theta) = (A_i - 2B_i r^{-3}) \cos \theta, \quad (7)$$

где A_i, B_i – постоянные, характеризующие поле в рассматриваемой области, $i = 1, 2, 3$.

Заметим, что в уравнениях для области внутри гранулы будет только одна постоянная A_1 , а вторая B_1 приравнивается к нулю.

Далее можно определить постоянную A_3 . Так как при $r \rightarrow \infty$ $E_{3z}(r, \theta) = E_{\text{ext}} = \text{const}$ (E_{ext} – внешнее однородное электрическое поле), то $A_3 = E_{\text{ext}}$.

Для того, чтобы определить остальные постоянные, воспользуемся стандартными граничными условиями на границе раздела двух сред:

$$E_{1\theta}(a, \theta) = E_{2\theta}(a, \theta), \quad (8)$$

$$E_{2\theta}(b, \theta) = E_{3\theta}(b, \theta), \quad (9)$$

$$\varepsilon_1 E_{1r}(a, \theta) = \varepsilon_2 E_{2r}(a, \theta), \quad (10)$$

$$\varepsilon_2 E_{2r}(b, \theta) = \varepsilon_3 E_{3r}(b, \theta), \quad (11)$$

где $b = a + d$, ε_1 – диэлектрическая проницаемость сегнетоэлектрика, ε_2 – диэлектрическая проницаемость «мёртвого» слоя, ε_3 – диэлектрическая проницаемость окружающей гранулу среды, причём $\varepsilon_2 < \varepsilon_3 \ll \varepsilon_1$.

Подставляя решения (6) и (7) для каждой из сред в (8)-(11), получаем

$$A_1 = \frac{9\varepsilon_2\varepsilon_3 b^3}{\varepsilon_1\varepsilon_2(2a^3 + b^3) + 2(\varepsilon_1\varepsilon_3 + \varepsilon_2^2)(b^3 - a^3) + 2\varepsilon_2\varepsilon_3(a^3 + 2b^3)} E_{\text{ext}}, \quad (12)$$

$$A_2 = \frac{3\varepsilon_3(\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2)b^3}{\varepsilon_1\varepsilon_2(2a^3 + b^3) + 2(\varepsilon_1\varepsilon_3 + \varepsilon_2^2)(b^3 - a^3) + 2\varepsilon_2\varepsilon_3(a^3 + 2b^3)} E_{\text{ext}}, \quad (13)$$

$$B_2 = \frac{3\varepsilon_3(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)a^3 b^3}{\varepsilon_1\varepsilon_2(2a^3 + b^3) + 2(\varepsilon_1\varepsilon_3 + \varepsilon_2^2)(b^3 - a^3) + 2\varepsilon_2\varepsilon_3(a^3 + 2b^3)} E_{\text{ext}}, \quad (14)$$

$$B_3 = \frac{[\varepsilon_2 \varepsilon_3 (a^3 + 2b^3) + (\varepsilon_1 \varepsilon_3 - 2\varepsilon_2^2)(b^3 - a^3) - \varepsilon_1 \varepsilon_2 (2a^3 + b^3)]b^3}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 (2a^3 + b^3) + 2(\varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2^2)(b^3 - a^3) + 2\varepsilon_2 \varepsilon_3 (a^3 + 2b^3)} E_{\text{ext}}. \quad (15)$$

Теперь предположим, что рассматриваемая одиночная шарообразная гранула находится не в однородной среде с ε_3 , а в некоторой эффективной среде с ε_{eff} , представляющей собой всю совокупность окружающих плотно упакованных гранул (рис 2).

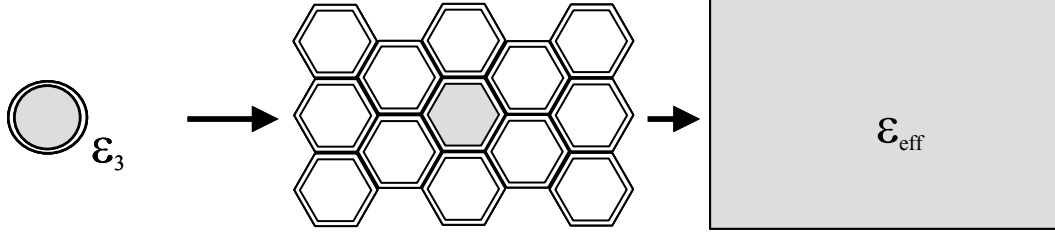


Рис. 2

Полагая $\varepsilon_3 = \varepsilon_{\text{eff}}$, т.е. заменяя однородную диэлектрическую среду с ε_3 некоторой эффективной однородной средой с ε_{eff} , получаем следующее интегральное уравнение для определения эффективной диэлектрической проницаемости наногранулированной плёнки:

$$\varepsilon_{\text{eff}} E_{\text{ext}} = \frac{1}{V_0} \left[\int_{V_1} \varepsilon_1 E_{1z}(\varepsilon_3 = \varepsilon_{\text{eff}}) dV_1 + \int_{V_2} \varepsilon_2 E_{2z}(\varepsilon_3 = \varepsilon_{\text{eff}}) dV_2 \right]. \quad (16)$$

Здесь E_{1z} - распределение электрического поля внутри гранулы, E_{2z} - распределение электрического поля внутри «мёртвого слоя», $V_1 = (4/3)\pi a^3$ - объём гранулы без учёта объёма «мёртвого» слоя, $V_2 = (4/3)\pi(b^3 - a^3)$ - объём «мёртвого» слоя, $V_0 = (4/3)\pi b^3$ - полный объём гранулы,

Данное уравнение является общим для определения эффективной проницаемости гранулированной среды вне зависимости от формы гранулы.

Для наногранулированной плёнки, содержащей гранулы сферической формы ($E_{1z}(r, \theta) = E_{1r} \cos \theta - E_{1\theta} \sin \theta$, $E_{2z}(r, \theta) = E_{2r} \cos \theta - E_{2\theta} \sin \theta$), уравнение (16) было решено аналитически. Эффективная диэлектрическая проницаемость наногранулированной плёнки будет определяться следующим образом:

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \frac{\varepsilon_1 (2a^3 + b^3) + 2\varepsilon_2 (b^3 - a^3)}{(\varepsilon_1 / \varepsilon_2)(b^3 - a^3) + (2b^3 + a^3)}. \quad (17)$$

Пренебрегая слагаемыми, содержащими высшие степени малой величины d , получим $b^3 \cong a^3 + 3a^2 d$. Тогда выражение для эффективной проницаемости (17) можно существенно упростить.

В третьем параграфе была решена задача определения эффективной диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрической поликристаллической плёнки, содержащей гранулы эллипсоидальной формы (см. рис. 3).

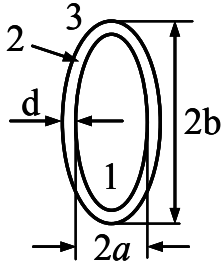


Рис. 3

Схема решения была выбрана такая же, как и в предыдущей задаче. Использовалось решение уравнения Лапласа в эллипсоидальных координатах. Уравнение (16) было решено численно (в отличие от задачи со сферическими включениями получить аналитическое выражение оказалось невозможным). В результате была получена зависимость эффективной диэлектрической проницаемости от размера большой полуоси эллипсоида (жирная точечная линия на рис.4). Далее для полученной зависимости эффективной диэлектрической проницаемости пленки от размеров гранул эллиптической формы была предложена следующая аппроксимационная формула:

$$\varepsilon_{\text{eff}} \cong \varepsilon_1 \cdot \begin{cases} \frac{1}{1 + (\varepsilon_1/\varepsilon_2)(2d/b)(1+b/a)^{-1}} & \text{при } b < b_0 \text{ (кривая 1 на рис.4),} \\ \frac{1}{1 + 2(d/a)} & \text{при } b > b_0 \text{ (кривая 2 на рис.4),} \end{cases} \quad (18)$$

где $b_0 = (a/2)(1 + \sqrt{1 + 4(\varepsilon_1/\varepsilon_2)})$ - точка пересечения кривых 1 и 2 на рис.4.

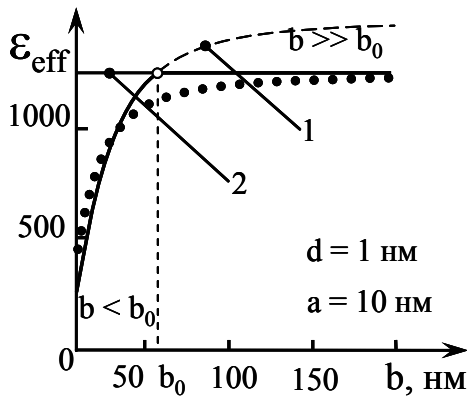


Рис. 4

В четвёртом параграфе было оценено влияние формы и размеров гранул и толщины «мёртвого слоя» на диэлектрические свойства сегнетоэлектрической наноструктурированной плёнки. Были построены графики зависимости эффективной диэлектрической проницаемости плёнки от указанных величин. Оказалось, что влияние размерного эффекта приводит к значительному уменьшению диэлектрической проницаемости пленки. Но когда гранула по форме приближается к столбцу, свойства наногранулированной пленки почти не отличаются от свойств однородной пленки.

В пятом параграфе полученная модель зависимости диэлектрической проницаемости наноструктурированной плёнки от размеров гранул в совокупности с экспериментальными данными, предоставленными коллегами из Чалмерского технологического университета [3], была использована для определения зависимости между формой и размерами

гранул и температурой роста плёнки (рис. 5). Было показано, что чем выше температура роста плёнки, тем больше вытянута гранула вдоль своей вертикальной оси.

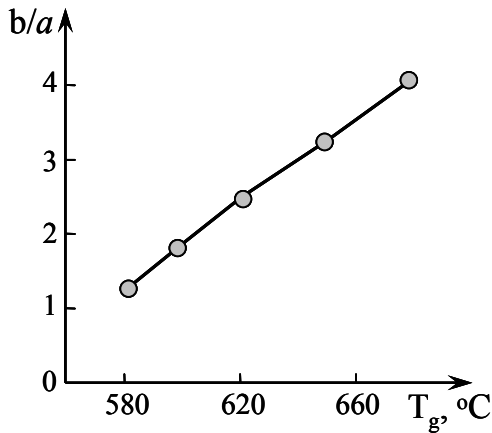


Рис. 5

Для такой среды расчёт эффективной диэлектрической производилась в соответствии со следующим уравнением

$$\varepsilon_{\text{eff}} E_{\text{ext}} = \frac{1}{V_0} \left[\int_{V_1} \varepsilon_1 E_{1z}(\varepsilon_3) dV_1 + \int_{V_2} \varepsilon_2 E_{2z}(\varepsilon_3) dV_2 + \int_{V_3} \varepsilon_3 E_{3z}(\varepsilon_3) dV_3 \right], \quad (19)$$

где E_{1z} , E_{2z} и E_{3z} - распределение электрического поля внутри эллипсоида, «мёртвого слоя» и диэлектрической матрицы, найденные в предыдущей главе для наноструктурированной плёнки, содержащей гранулы эллипсоидальной формы.

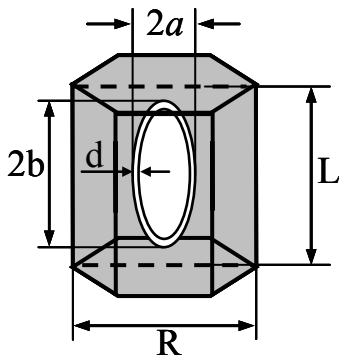


Рис. 6

В результате были построены зависимости эффективной диэлектрической проницаемости композита с эллипсоидальными сегнетоэлектрическими включениями от расстояния между центрами включений вдоль малой полуоси эллипсоида и вдоль большой полуоси эллипсоида при разных значениях диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика и толщины «мёртвого слоя», а также от обратного фактора заполнения, который определялся как $\gamma = V_{\text{яч}}/V_{\text{вкл}}$, где $V_{\text{яч}}/V_{\text{вкл}}$ - объём элементарной ячейки, $V_{\text{яч}}/V_{\text{вкл}}$ - объём

включения.

Далее была определена зависимость эффективной диэлектрической проницаемости композита от напряжённости внешнего электрического поля при разных значениях малой полуоси эллипсоида (рис. 7).

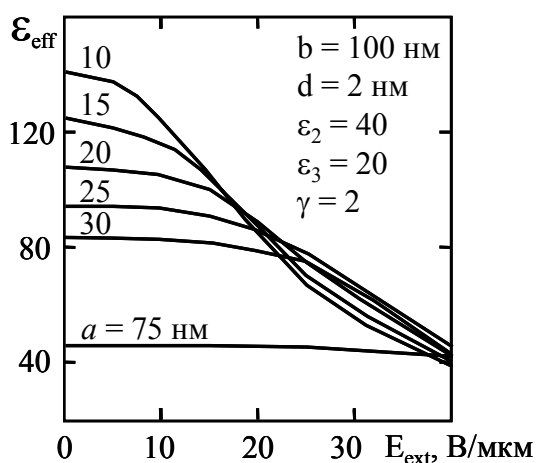


Рис. 7

Чем меньше размер малой полуоси эллипсоида, тем выше управляемость и больше эффективная диэлектрическая проницаемость рассматриваемой диэлектрической среды с эллипсоидальными включениями.

Далее были оценены тангенс угла диэлектрических потерь и фактор коммутационного качества композита. Было показано, что при $a \ll b$ (в расчёте было принято $b/a = 10$) фактор коммутационного качества композита с сегнетоэлектрическими включениями по своему значению не уступает фактору коммутационного качества объёмного сегнетоэлектрика.

В главе 4 «Учёт нелинейности сегнетоэлектрического материала при моделировании свойств наноструктурированных композитов» были рассмотрены композиты с сегнетоэлектрическими дисковыми и сферическими включениями.

Наибольшее число работ по теме нелинейных композитов посвящено изучению нелинейных сред с вытянутыми вдоль оси приложения электрического поля включениями (цилиндрами, проволоками, эллипсоидами и т.д.). Внимание к таким композитам вызвано тем, что в данном случае электрическое поле будет наиболее эффективно проникать во включения, и, следовательно, нелинейные свойства таких сред будут проявляться наиболее ярко. В литературе неоднократно упоминалось, что композиты со сферическими включениями практически не обладают нелинейными свойствами.

В данной главе проанализированы свойства композитов со сферическими или дисковыми сегнетоэлектрическими включениями с учётом их собственной нелинейности. «Мёртвым слоем» в данной модели можно пренебречь, так как проницаемость диэлектрической матрицы по своему значению принималась близкой к проницаемости «мёртвого слоя». Для того чтобы произвести необходимые расчёты, дисковые включения рассмат-

Исходя из полученных данных, была найдена управляемость моделируемой среды как функция от размера малой полуоси эллипсоида. Под управляемостью понималось следующее отношение:

$$n_{\text{eff}} = \frac{\varepsilon_{\text{eff}}(0)}{\varepsilon_{\text{eff}}(E_{\text{ext}}^{\text{max}})}, \quad (20)$$

где $\varepsilon_{\text{eff}}(0)$ - значение эффективной диэлектрической проницаемости при $E_{\text{ext}} = 0$, $\varepsilon_{\text{eff}}(E_{\text{ext}}^{\text{max}})$ - значение эффективной диэлектрической проницаемости при $E_{\text{ext}} = E_{\text{ext}}^{\text{max}} = 40$ В/мкм.

ривались в форме сплюснутых сфероидов, периодически расположенных в диэлектрической матрице. Для всех последующих расчётов принималось $\gamma = 3$.

В соответствии с решением уравнения Лапласа распределение электрического поля внутри сферического включения имеет вид [4]:

$$E_{\text{int}} = E_{\text{ext}} \frac{3\epsilon_{\text{ext}}}{2\epsilon_{\text{ext}} + \epsilon_{\text{int}}}, \quad (21)$$

где ϵ_{int} - диэлектрическая проницаемость сегнетоэлектрического включения, ϵ_{ext} - диэлектрическая проницаемость матрицы.

Для того чтобы учесть нелинейность сегнетоэлектрического материала гранулы, использовалась известная феноменологическая зависимость диэлектрического отклика сегнетоэлектрика от напряжённости электрического поля $\epsilon_f(T, E, \xi)$ [1], где ξ - параметр, являющийся мерой дефектности образца, T - температура.

Путём подстановки $\epsilon_f(T, E, \xi)$ в (21), было получено нелинейное уравнение относительно электрического поля внутри сегнетоэлектрической гранулы

$$\left(2 + \frac{\epsilon_f(T, E_{\text{in}}, \xi)}{\epsilon_{\text{ext}}} \right) E_{\text{in}} - 3E_{\text{ext}} = 0 \quad (22)$$

и найдено его численное решение.

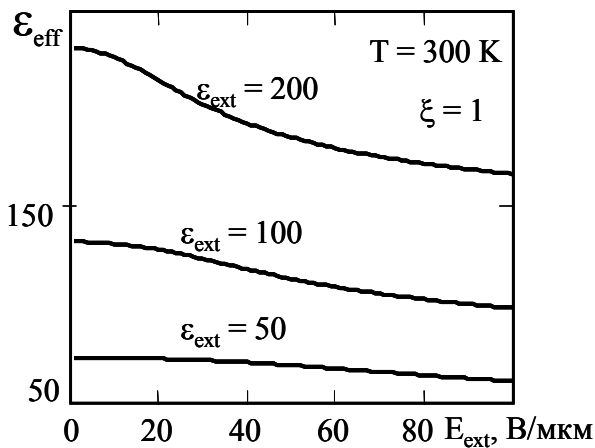


Рис. 8

Далее была определена зависимость эффективной диэлектрической проницаемости плёнки от напряжённости внешнего электрического поля при разных значениях проницаемости диэлектрической матрицы (рис. 8). Представленная схема решения была применена и для оценки нелинейных свойств композита с дисковыми включениями, для которого также была получена зависимость эффективной диэлектрической проницаемости

плёнки от напряжённости внешнего электрического поля при разных значениях проницаемости диэлектрической матрицы (рис. 9).

Далее были рассчитаны зависимости управляемости, тангенса угла диэлектрических потерь и фактора коммутационного качества от напря-

жённости внешнего электрического поля при разных значениях проницаемости диэлектрической матрицы композита.

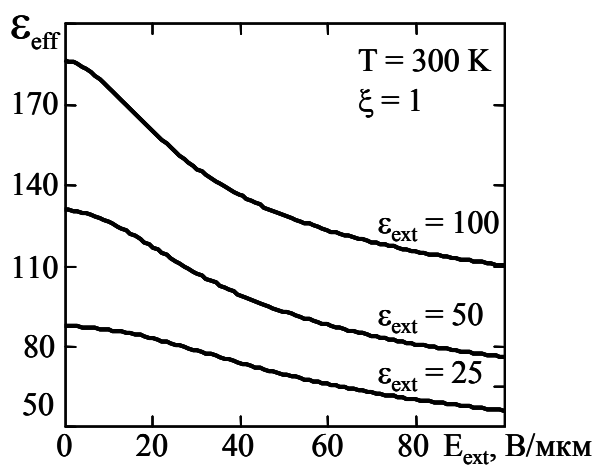


Рис. 9

Как можно видеть из рис. 8 и рис.9, рассматриваемые композиты могут эффективно управляться только при значениях напряженности внешнего электрического поля более 40 В/мкм, когда диэлектрическая проницаемость сегнетоэлектрика становится равной или меньше проницаемости матрицы. В сильных управляющих электрических полях и коммутационный параметр качества композита сопоставим с коммутационным параметром качества объёмного сегнетоэлектрического материала.

В последнем параграфе четвёртой главы предлагается вариант применения нанокompозита с дисковыми включениями в составе сегнетоэлектрического планарного конденсатора (см. рис. 10).

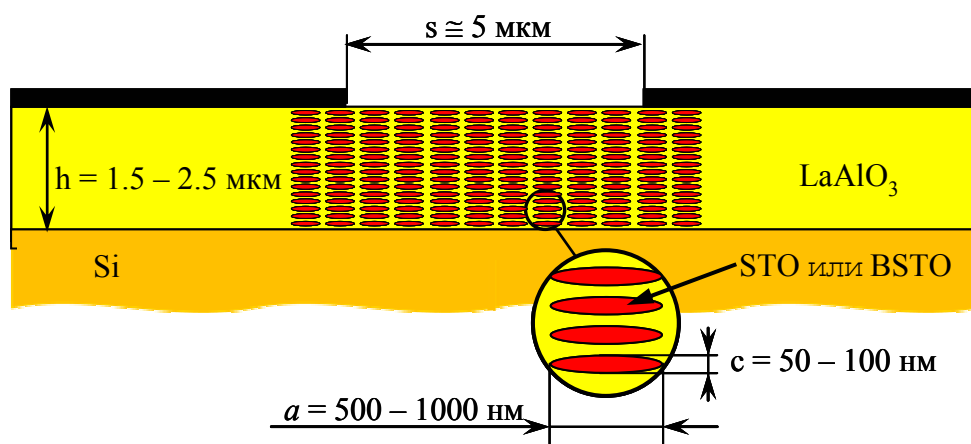


Рис. 10

Для представленного на рис. 10 планарного конденсатора были найдены зависимости ёмкости (C_{eff} на рис. 11), диэлектрической проницаемости, управляемости, тангенса угла диэлектрических потерь ($\text{tg}\delta_{eff}$ на рис. 11) и фактора коммутационного качества от напряжённости внешнего электрического поля.

Для сопоставления на рис. 11 и рис.12 приведены рассчитанные зависимости емкости и тангенса угла диэлектрических потерь от напряжённости внешнего электрического поля для обычного планарного конденсатора (C , $\text{tg}\delta$), содержащего тонкий сегнетоэлектрический слой толщиной h .

Можно предположить, что, если сегнетоэлектрические включения имеют наноразмеры, то их собственная частота акустических колебаний будет много выше, чем рабочие частоты СВЧ диапазона. Следовательно, при расчёте можно исключить механизм потерь, связанных с электрострикционным преобразованием колебаний СВЧ поля в акустические колебания в присутствии постоянного поля заряженных дефектов. Для описанного случая также был произведён расчёт характеристик планарного конденсатора на основе нанокompозита (C'_{eff} , $\text{tg}'\delta_{eff}$). Фактор коммутационного качества предложенного конденсатора будет значительно превышать фактор коммутационного качества обычного планарного конденсатора. Данный факт подтверждён расчётами, приведёнными в работе.

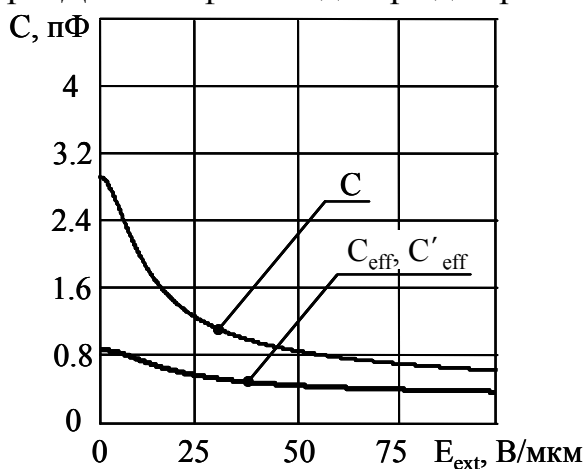


Рис. 11

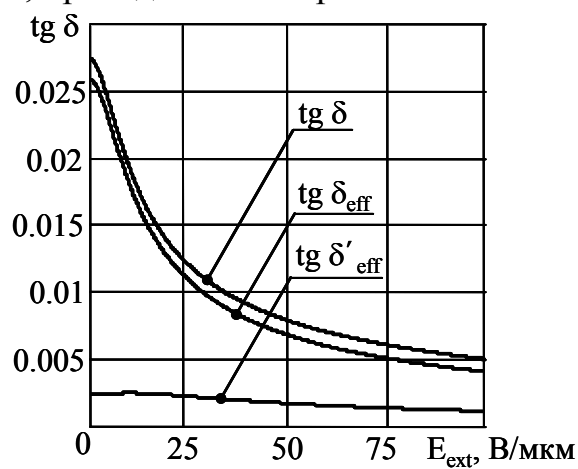


Рис. 12

В Заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы.

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. О.Г. Вендик, С.П. Зубко. Феноменологическое описание зависимости диэлектрической проницаемости титаната стронция от приложенного электрического поля и температуры [текст] / О.Г. Вендик, С.П. Зубко // Журнал Технической Физики. –1997. – Том 67. – Вып. 3. – С. 29 - 33.
2. O.G. Vendik, S.P. Zubko, and L.T. Ter-Martirosyan. Experimental evidence of the size effect in thin ferroelectric films [текст] / O.G. Vendik, S.P. Zubko, and L.T. Ter-Martirosyan // Applied Physics Letters №1, Vol. 73. –1998. –pp. 37 – 39.
3. J. Berge, A. Vorobiev, S. Gevorgian. The effect of growth temperature on the nanostructure and dielectric response of BaTiO₃ ferroelectric films [текст] / J. Berge, A. Vorobiev, S. Gevorgian // Thin Solid Films. –Vol. 515. – 2007. -pp. 6302 - 6308.
4. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред [текст] / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц // Теоретическая физика. –Том 8. Из-во «Наука», Москва, 1982. –С. 64.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

В изданиях, рекомендованных ВАК России:

- [1] Медведева Н.Ю. Размерный эффект в наноструктурированных сегнетоэлектрических пленках [текст] / О.Г. Вендик, Н.Ю. Медведева, С.П. Зубко // Письма в Журнал Технической Физики. – 2007. – Т. 33. – Вып. 6. – С. 8 – 14.
- [2] Медведева Н.Ю. Размерный эффект в наногранулированных сегнетоэлектрических пленках [текст] / О.Г. Вендик, Н.Ю. Медведева, С.П. Зубко // Известия Высших Учебных Заведений, Радиоэлектроника. – 2007. – № 6. – С. 61 – 64.
- [3] Медведева Н.Ю. Эффективная диэлектрическая проницаемость наноструктурированной плёнки, содержащей сегнетоэлектрические гранулы эллиптической формы [текст] / О.Г. Вендик, Н.Ю. Медведева, С.П. Зубко // Письма в Журнал Технической Физики. – 2008. – Т. 34. – Вып. 8. – С. 13 – 20.
- [4] Medvedeva N.Yu. “Dead layer” characteristics based on a correlation of the ferroelectric polarization under relevant boundary conditions in a parallel plate capacitor (Характеристики «мёртвого слоя» с точки зрения корреляции сегнетоэлектрической поляризации при соответствующих граничных условиях в плоскопараллельном конденсаторе) [текст] / O.G. Vendik, N.Yu. Medvedeva, and S.P.Zubko // Journal of Applied Physics. – 2009. – No 105. – P. 0535151 – 0535154.
- [5] Медведева Н.Ю. Нелинейные свойства среды с эллипсоидальными сегнетоэлектрическими нановключениями [текст] / О.Г. Вендик, Н.Ю. Медведева, С.П. Зубко // Физика твёрдого тела. – 2009. – Т. 51. – Вып. 10. – С. 1405 – 1406.

Другие статьи и материалы конференций:

- [6] Медведева Н.Ю., Размерный эффект в наноструктурированных сегнетоэлектрических плёнках [текст] / Н.Ю. Медведева, О.Г. Вендик, С.П. Зубко // Материалы научно-технического семинара “Современные проблемы техники и электроники СВЧ”, 18 апреля 2006 г. – Санкт-Петербург, – С. 9.
- [7] Медведева Н.Ю., Размерный эффект в наногранулированных сегнетоэлектрических плёнках [текст] / О.Г. Вендик, Н.Ю. Медведева, С.П. Зубко // Материалы научно-технического семинара “Современные проблемы техники и электроники СВЧ”, 26 января 2007г. – Санкт-Петербург. – С. 5.
- [8] Медведева Н.Ю., Размерный эффект в наноструктурированных сегнетоэлектрических плёнках [текст] / Н.Ю. Медведева, О.Г. Вендик, С.П. Зубко // Материалы 60-й научно-технической конференции профессорско-преподавательского состава. 30 января-7 февраля 2007 г. – Санкт-Петербург. – С. 11.
- [9] Medvedeva N.Yu., Size effect in nanostructured films containing ferroelectric spherical or ellipsoidal grains (Размерный эффект в наноструктурированных плёнках, содержащих сегнетоэлектрические сферические или эллипсоидальные гранулы) [текст] / N.Yu. Medvedeva, O.G. Vendik, and S.P.Zubko // 14th International Student Seminar on Microwave and Optical Applications of Novel Physical Phenomena, Seminar Proceedings Book, 23-24 August 2007. – Belfast, Northern Ireland, United Kingdom. – P. 45 – 47.
- [10] Medvedeva N.Yu., Modeling and characterization of structures containing spherical or ellipsoidal ferroelectric inclusions (Моделирование и получение характеристик структур, содержащих сегнетоэлектрические сферические или эллипсоидальные включения) [текст] / N.Yu. Medvedeva, O.G. Vendik, and S.P. Zubko //

Proceedings of Metamaterials Congress 2007, 22-24 October 2007. – Rome. – P. 448 – 450.

[11] Medvedeva N.Yu., Nonlinear Effective Dielectric Permittivity of the Composite Material with Spheroidal Ferroelectric Inclusions (Нелинейная диэлектрическая проницаемость композитного материала с сегнетоэлектрическими сферическими включениями) [текст] / N.Yu. Medvedeva // 15th International Student Seminar on Microwave and Optical Applications of Novel Physical Phenomena, Seminar Proceedings Book, 19-21 May 2008, – Saint-Petersburg, Russia, – P. 40 – 42.

[12] Медведева Н.Ю., Свойства диэлектрической среды с эллипсоидальными сегнетоэлектрическими нановключениями [текст] / О.Г. Вендик, Н.Ю. Медведева, С.П. Зубко // Материалы международной конференции “Диэлектрики - 2008”, 3-7 июня 2008. – Санкт-Петербург.

[13] Медведева Н.Ю., Нелинейные свойства среды с эллипсоидальными сегнетоэлектрическими нановключениями” [текст] / О.Г. Вендик, Н.Ю. Медведева, С.П. Зубко // Материалы XVIII всероссийской конференции по физике сегнетоэлектриков, 9 – 14 июня 2008г. – Санкт-Петербург. – С. 117 – 118.

[14] Медведева Н.Ю., Влияние формы и размеров гранул на диэлектрические свойства сегнетоэлектрической наноструктурированной плёнки [текст] / Н.Ю. Медведева, О.Г. Вендик, С.П. Зубко // Материалы научно-технического семинара “Инновационные разработки в СВЧ технике и электронике”, 5 февраля 2008 г. – Санкт-Петербург, – С. 6.

[15] Medvedeva N.Yu., Nonlinear properties of the composite material with ferroelectric inclusions (Нелинейные свойства композитного материала с сегнетоэлектрическими включениями) [текст] / N.Yu. Medvedeva, O.G. Vendik, and S. P.Zubko // Women in Photonics (WiP) School on Photonic Metamaterials, 13 – 18 April 2008. – Paris, France. –P . 17.

[16] Medvedeva N.Yu., Nonlinear Composite with Ferroelectric Nanoparticles (Нелинейные композиты с сегнетоэлектрическими нановключениями) [текст] / N.Yu. Medvedeva // 16th International Student Seminar on Microwave and Optical Applications of Novel Physical Phenomena, Seminar Proceedings Book, 8-9 June 2009, Oulu, Finland. – P. 40 – 45.

[17] Медведева Н.Ю., Нелинейные свойства нанокompозитов со сферическими включениями [текст] / Н.Ю. Медведева, О.Г. Вендик // Материалы научно-технического семинара “Инновационные разработки в технике и электронике СВЧ”, 28 января 2009 г. – Санкт-Петербург. – С. 8.

[18] Медведева Н.Ю. Нелинейные свойства нанокompозита с сегнетоэлектрическими сферическими включениями [текст] / Н.Ю. Медведева // 62-я научно-техническая конференция профессорско-преподавательского состава университета, Сборник докладов студентов, аспирантов и молодых учёных, 27 января – 8 февраля 2009 г. – Санкт-Петербург: Из-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2009. – С. 35 – 39.

[19] Medvedeva N.Yu. Nonlinear Properties of Nanostructured Composite with Spherical or Ellipsoidal Ferroelectric Inclusions (Нелинейные свойства наноструктурированного композита с сегнетоэлектрическими сферическими или эллипсоидальными включениями) [текст] / N.Yu. Medvedeva // EuroCon2009, Conference Proceedings Book. – May 2009. – Saint-Petersburg, Russia, –P. 103 – 107.