

Мікросистеми та фізична електроніка

УДК 621.389+537.2

Вплив пасивного шару на розподіл електричного поля в сегнетоелектричних тонких плівках

Шевлякова^f Г. В., ORCID [0000-0001-5380-8394](https://orcid.org/0000-0001-5380-8394)e-mail shevliakova.hv@gmail.comСвечніков^s Г. С., к.т.н. с.н.с., ORCID [0000-0001-7164-2148](https://orcid.org/0000-0001-7164-2148)e-mail svgeorge13@gmail.com

Кафедра мікроелектроніки

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Київ, Україна

Морозовська^s Г. М., д.ф.-м.н. с.н.с., ORCID [0000-0002-8505-458X](https://orcid.org/0000-0002-8505-458X)e-mail anna.n.morozovska@gmail.com

Інститут фізики

Національної академії наук України

Київ, Україна

Реферат—Досліджено аналітично вплив пасивного шару на розподіл електричного поля в сегнетоелектричних тонких плівках. Дослідження проводилося для сегнетоелектричних тонких плівок з неоднорідним розподілом спонтанної поляризації вздовж полярного напрямку. У відповідності до переважної більшості експериментів, вважається, що на поверхнях сегнетоелектричної плівки є пасивні шари фіксованої товщини, в яких відсутня спонтанна поляризація, а їх діелектрична сприйнятливості відрізняється від сприйнятливості плівки. Виведено аналітичну залежність розподілу електричного потенціалу в сегнетоелектричних тонких плівках від товщини пасивного шару.

Розрахунки проводилися для діелектричного та напівпровідникового пасивних шарів. Також розглядався випадок наявності поверхневого заряду на межі розділу сегнетоелектрична плівка - пасивний шар. Показано що всі розглянуті випадки мають однаковий характер залежності електричного потенціалу від товщини пасивного шару.

Ключові слова — сегнетоелектричні тонкі плівки, пасивний шар, електричне поле, електричний потенціал.

1. Вступ

Фізичним походженням природного неполярного "пасивного" шару на поверхні є неминуче забруднення електрично відкритої (тобто неелектродної) сегнетоелектричної поверхні, яка стає параелектричною з метою забезпечення максимально ефективного екранування об'ємної поляризації [1,2]. Існують різні типи пасивних шарів [1-2], більшість з яких є надтонкими дифузними підповерхневими шарами товщиною менше декількох нанометрів, розташованими під поверхнею, де спонтанна поляризація відсутня (або нехтовно мала) через реконструкцію поверхні, забруднення, довжину нульової екстраполяції та/або сильне поле деполіризації. Матеріал у природному мертвому шарі має майже той же хімічний склад, що й у основній частині

сегнетоелектричної підкладки, але він знаходиться в параелектричній фазі, індукованій ефектом утримання поверхні, і тому відносна діелектрична проникність пасивного шару зазвичай досить висока $\sim (30 - 300)$ (як і для параелектриків при кімнатній температурі [3]).

Розглянемо сегнетоелектричну тонку плівку з "фоновою" діелектричною проникністю ϵ_b [1] та товщиною h , яка має неоднорідний розподілом спонтанної поляризації $\vec{P} = (0, 0, P(z))$ вздовж полярного напрямку z , перпендикулярного до поверхонь плівки $z = 0$ та $z = h$. Відомо, що на поверхні такої плівки є пасивний шар з діелектричною проникністю ϵ_e та товщиною d (див. рис. 1). Проведемо розрахунок розподілу електричного потенціалу за



умови, що потенціал на поверхнях описаної структури дорівнює нулю $\varphi_e(-d) = \varphi_i(h) = 0$.

Розглянемо поставлену задачу в загальному вигляді.

Як відомо електрична індукція всередині сегнетоелектричної плівки дорівнює:

$$\vec{D}_i = \varepsilon_0 \varepsilon_b \vec{E}_i + \vec{P}, \quad (1)$$

а всередині пасивного шару:

$$\vec{D}_e = \varepsilon_0 \varepsilon_e \vec{E}_e, \quad (2)$$

де ε_0 – діелектрична проникність вакууму; \vec{E}_i та \vec{E}_e – електричні поля всередині сегнетоелектричної плівки та пасивного шару, відповідно.

Дивергенція електричної індукції, в свою чергу, дорівнює густині електричного заряду ρ :

$$\text{div } \vec{D} = \rho, \quad (3)$$

яка для сегнетоелектричної плівки дорівнює нулю $\rho = 0$.

З урахуванням рівнянь (1-3), та беручи до уваги той факт, що розподіл поляризації та потенціалу залежить тільки від координати z , отримаємо відповідно для сегнетоелектричного та пасивного шарів наступні рівняння:

$$\varepsilon_0 \varepsilon_b \frac{\partial E_i(z)}{\partial z} + \frac{\partial P(z)}{\partial z} = 0, \quad (4)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_e \frac{\partial E_e(z)}{\partial z} = \rho. \quad (5)$$

Враховуючи співвідношення між електричними полем та потенціалом:

$$\vec{E} = -\nabla \varphi, \quad (6)$$

отримаємо рівняння (4-5) в наступному вигляді:

$$\varepsilon_0 \varepsilon_b \frac{\partial^2 \varphi_i(z)}{\partial z^2} = \frac{\partial P(z)}{\partial z}, \quad (7)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_e \left(\frac{\partial^2 \varphi_e(z)}{\partial z^2} - \rho \right) = 0. \quad (8)$$

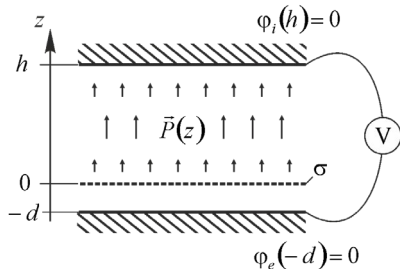


Рис. 1. Схематичне зображення сегнетоелектричної тонкої плівки з пасивним шаром та закороченими зовнішніми електродами

Як відомо на межі розділу двох середовищ тангенціальна складова електричного поля є неперервною, а нормальні складові електричної індукції

відрізняються на величину поверхневого заряду σ на цій межі. Зважаючи на сказане маємо наступні граничні умови:

$$\varphi_e(0) - \varphi_i(0) = 0, \quad (9)$$

$$D_{ne}(0) - D_{ni}(0) + \sigma = 0, \quad (10)$$

$$\varphi_e(-d) = \varphi_i(h) = 0. \quad (11)$$

Розв'яжемо поставлену задачу в деяких частинних випадках, важливих для досліджень та застосувань сегнетоелектричних плівок.

II. ВИПАДОК ДІЕЛЕКТРИЧНОГО ПАСИВНОГО ШАРУ ЗА ВІДСУТНОСТІ ПОВЕРХНЕВОГО ЗАРЯДУ

Запишемо рівняння (7-8) за відсутності поверхневого заряду ($\sigma = 0$), для випадку діелектричного пасивного шару ($\rho = 0$):

$$\varepsilon_0 \varepsilon_b \frac{\partial^2 \varphi_i(z)}{\partial z^2} = \frac{\partial P(z)}{\partial z}, \quad (12)$$

$$\varepsilon_0 \varepsilon_e \frac{\partial^2 \varphi_e(z)}{\partial z^2} = 0. \quad (13)$$

Запишемо граничні умови з урахуванням вказаних обмежень:

$$\varphi_e(0) - \varphi_i(0) = 0, \quad (14)$$

$$D_{ne}(0) - D_{ni}(0) = 0, \quad (15)$$

$$\varphi_e(-d) = \varphi_i(h) = 0. \quad (16)$$

Загальний розв'язок системи рівнянь (12-13):

$$\varphi_i(z) = -\frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_b} \int_z^h P(\tilde{z}) d\tilde{z} - \frac{h-z}{\varepsilon_0 \varepsilon_b} \chi_1, \quad (17)$$

$$\varphi_e(z) = \frac{\chi_2 z}{\varepsilon_0 \varepsilon_e} + \frac{\chi_3}{\varepsilon_0 \varepsilon_e}, \quad (18)$$

де χ_1, χ_2, χ_3 – сталі інтегрування.

Знайшовши з граничних умов сталі інтегрування легко отримати остаточний розв'язок задачі (12-16):

$$\varphi_i(z) = \frac{\bar{P}}{\varepsilon_0 \varepsilon_b} \cdot \frac{(h-z) \left(\frac{h}{\varepsilon_b} \right)}{\left(\frac{d}{\varepsilon_e} \right) + \left(\frac{h}{\varepsilon_b} \right)} - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_b} \int_z^h P(\tilde{z}) d\tilde{z}, \quad (19)$$

$$\varphi_e(z) = -\frac{\bar{P}}{\varepsilon_e \varepsilon_0} \cdot \frac{(z+d) \left(\frac{h}{\varepsilon_b} \right)}{\left(\frac{d}{\varepsilon_e} \right) + \left(\frac{h}{\varepsilon_b} \right)}, \quad (20)$$

де $\bar{P} = \frac{1}{h} \int_0^h P(\tilde{z}) d\tilde{z}$ – середнє по товщині значення поляризації сегнетоелектричної плівки.

III. ВИПАДОК НАПІВПРОВІДНИКОВОГО ПАСИВНОГО ШАРУ НЕСКІНЧЕННОЇ ТОВЩИНИ ЗА ВІДСУТНОСТІ ПОВЕРХНЕВОГО ЗАРЯДУ.

За теорією Дебая-Хюккеля щільність електричного заряду в напівпровіднику дорівнює:



$$\rho = -\frac{\Phi_e \epsilon_0}{R_d^2}, \quad (21)$$

де R_d – радіус екранування Дебая.

Запишемо рівняння (7-8) за відсутності поверхневого заряду ($\sigma = 0$), для випадку напівпровідникового пасивного шару нескінченної товщини ($d \rightarrow \infty$) враховуючи (21):

$$\epsilon_0 \epsilon_b \frac{\partial^2 \varphi_i(z)}{\partial z^2} = \frac{\partial P(z)}{\partial z}, \quad (22)$$

$$\epsilon_0 \epsilon_e \left(\frac{\partial^2 \varphi_e(z)}{\partial z^2} - \frac{\varphi_e(z)}{R_d^2} \right) = 0. \quad (23)$$

Граничні умови за вказаних обмежень:

$$\varphi_e(0) - \varphi_i(0) = 0, \quad (24)$$

$$D_{ne}(0) - D_{ni}(0) = 0, \quad (25)$$

$$\varphi_e(-d) = \varphi_i(h) = 0. \quad (26)$$

Загальний розв'язок системи рівнянь (22-23):

$$\varphi_i(z) = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_b} \int_z^h P(\bar{z}) d\bar{z} - \frac{h-z}{\epsilon_0 \epsilon_b} \chi_1, \quad (27)$$

$$\varphi_e(z) = \frac{\chi_2}{\epsilon_0 \epsilon_e} \exp\left(\frac{z}{R_d}\right) + \frac{\chi_3}{\epsilon_0 \epsilon_e} \exp\left(-\frac{z}{R_d}\right). \quad (28)$$

Скориставшись граничними умовами знайдено сталі інтегрування та отримано розв'язок крайової задачі (22-26):

$$\varphi_i(z) = \frac{\bar{P}}{\epsilon_0 \epsilon_b} \cdot \frac{(h-z)\left(\frac{h}{\epsilon_b}\right)}{\left(\frac{R_d}{\epsilon_e}\right) + \left(\frac{h}{\epsilon_b}\right)} - \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_b} \int_z^h P(\bar{z}) d\bar{z}, \quad (29)$$

$$\varphi_e(z) = -\frac{R_d \frac{h}{\epsilon_b}}{\frac{R_d}{\epsilon_e} + \frac{h}{\epsilon_b}} \cdot \frac{\bar{P}}{\epsilon_0 \epsilon_e} \exp\left(\frac{z}{R_d}\right). \quad (30)$$

IV. ВПАДОК ДІЕЛЕКТРИЧНОГО ПАСИВНОГО ШАРУ ЗА НАЯВНОСТІ ПОВЕРХНЕВОГО ЗАРЯДУ

Розглянемо вплив поверхневого заряду:

$$\sigma = -\epsilon_0 \frac{\varphi_e(0)}{\Lambda},$$

де Λ – так звана, ефективна довжина екранування [4-7]. Для цього запишемо рівняння (7-8) з урахуванням поверхневого заряду для випадку діелектричного пасивного шару ($\rho = 0$) товщиною $d \gg \Lambda$:

$$\epsilon_0 \epsilon_b \frac{\partial^2 \varphi_i(z)}{\partial z^2} = \frac{\partial P(z)}{\partial z}, \quad (31)$$

$$\epsilon_0 \epsilon_e \frac{\partial^2 \varphi_e(z)}{\partial z^2} = 0. \quad (32)$$

Граничні умови, при цьому, мають вигляд:

$$\varphi_e(0) - \varphi_i(0) = 0, \quad (33)$$

$$D_{ne}(0) - D_{ni}(0) - \epsilon_0 \frac{\Phi_e}{\Lambda} = 0, \quad (34)$$

$$\varphi_e(-d) = \varphi_i(h) = 0. \quad (35)$$

Загальний розв'язок, рівнянь (31-32):

$$\varphi_i(z) = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_b} \int_z^h P(\bar{z}) d\bar{z} - \frac{h-z}{\epsilon_0 \epsilon_b} \chi_1, \quad (36)$$

$$\varphi_e(z) = \frac{z \chi_2 + \chi_3}{\epsilon_0 \epsilon_e}, \quad (37)$$

Для визначення констант було використано граничні умови, в результаті чого отримано розв'язок задачі (31-35):

$$\varphi_i(z) = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_b} \int_z^h P(\bar{z}) d\bar{z} + \frac{\bar{P}}{\epsilon_0 \epsilon_b} \cdot \frac{(h-z)(h/\epsilon_b)}{(\Lambda) + (h/\epsilon_b)}, \quad (38)$$

$$\varphi_e(z) = \frac{\bar{P}}{\epsilon_0 \epsilon_e} \cdot \frac{\Lambda(h/\epsilon_b)}{(\Lambda) + (h/\epsilon_b)}. \quad (39)$$

V. РОЗПОДІЛ ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ

Виходячи з отриманих розподілів електричного поля і середині сегнетоелектричної плівки для трьох крайніх випадків (19, 29, 38) можна отримати узагальнений розв'язок виду:

$$\varphi_i(z) = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_b} \int_z^h P(\bar{z}) d\bar{z} + \frac{\bar{P}}{\epsilon_0 \epsilon_b} \cdot \frac{(h-z)(h/\epsilon_b)}{\zeta + (h/\epsilon_b)}, \quad (40)$$

де

$$\zeta = \frac{d}{\epsilon_e} \Leftrightarrow \frac{R_d}{\epsilon_e} \Leftrightarrow \Lambda. \quad (41)$$

Запишемо розподіл електричного поля в сегнетоелектрику скориставшись співвідношенням (6):

$$E_i(z) = -\frac{P(z)}{\epsilon_0 \epsilon_b} + \frac{\bar{P}}{\epsilon_0 \epsilon_b} \cdot \frac{(h/\epsilon_b)}{\zeta + (h/\epsilon_b)}. \quad (42)$$

VI. ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

В ході дослідження було отримано аналітичну залежність розподілу електричного поля в тонкій сегнетоелектричній плівці від товщини пасивного шару. Зі збільшенням товщини сегнетоелектричного шару, величина електричного поля збільшується.

Одержані аналітичні вирази для розподілу електричного потенціалу дозволяють розробляти рекомендації для керування полярними властивостями тонких сегнетоелектричних плівок з пасивними шарами, та оптимально підбирати товщину цих шарів.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

- [1] A. K. Tagantsev and G. Gerra, "Interface-induced phenomena in polarization response of ferroelectric thin films," *Journal of Applied Physics*, vol. 100, no. 5, p. 051607, 2006. DOI: [10.1063/1.2337009](https://doi.org/10.1063/1.2337009)
- [2] A. K. Tagantsev, M. Landivar, E. Colla, and N. Setter, "Identification of passive layer in ferroelectric thin films from their switching parameters," *Journal of Applied Physics*, vol. 78, no. 4, pp. 2623–2630, 1995. DOI: [10.1063/1.360122](https://doi.org/10.1063/1.360122)



- [3] G. Rupprecht and R. O. Bell, "Dielectric Constant in Paraelectric Perovskites," *Physical Review*, vol. 135, no. 3A, 1964. DOI: [10.1103/physrev.135.a748](https://doi.org/10.1103/physrev.135.a748)
- [4] I. S. Vorotiahin, E. A. Eliseev, Q. Li, S. V. Kalinin, Y. A. Genenko, and A. N. Morozovska, "Tuning the polar states of ferroelectric films via surface charges and flexoelectricity," *Acta Materialia*, vol. 137, pp. 85–92, 2017. DOI: [10.1016/j.actamat.2017.07.033](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.07.033)
- [5] E. A. Eliseev, A. V. Semchenko, Y. M. Fomichov, M. D. Glinchuk, V. V. Sidsky, V. V. Kolos, Y. M. Pleskachevsky, M. V. Silibin, N. V. Morozovsky, and A. N. Morozovska, "Surface and finite size effects impact on the phase diagrams, polar, and dielectric properties of (Sr,Bi)Ta2O9 ferroelectric nanoparticles," *Journal of Applied Physics*, vol. 119, no. 20, p. 204104, 2016. DOI: [10.1063/1.4952707](https://doi.org/10.1063/1.4952707)
- [6] E. A. Eliseev, A. V. Semchenko, Y. M. Fomichov, M. D. Glinchuk, V. V. Sidsky, V. V. Kolos, Y. M. Pleskachevsky, M. V. Silibin, N. V. Morozovsky, and A. N. Morozovska, "Surface and finite size effects impact on the phase diagrams, polar, and dielectric properties of (Sr,Bi)Ta2O9 ferroelectric nanoparticles," *Journal of Applied Physics*, vol. 119, no. 20, p. 204104, 2016. DOI: [10.1103/physrevb.98.054101](https://doi.org/10.1103/physrevb.98.054101)
- [7] A. N. Morozovska, Y. M. Fomichov, P. Maksymovych, Y. M. Vysochanskii, and E. A. Eliseev, "Analytical description of domain morphology and phase diagrams of ferroelectric nanoparticles," *Acta Materialia*, vol. 160, pp. 109–120, 2018. DOI: [10.1016/j.actamat.2018.08.051](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.08.051)

УДК 621.389+537.2

Влияние пассивного слоя на распределение электрического поля в сегнетоэлектрических тонких пленках

Шевлякова^f А. В., ORCID [0000-0001-5380-8394](https://orcid.org/0000-0001-5380-8394)

e-mail shevliakova.hv@gmail.com

Свечников^s Г. С., к.т.н. с.н.с., ORCID [0000-0001-7164-2148](https://orcid.org/0000-0001-7164-2148)

e-mail svgeorge13@gmail.com

Кафедра микроэлектроники

Национальный технический университет Украины

«Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского»

Киев, Украина

Морозовская^s А.Н., д.ф.-м.н. с.н.с., ORCID [0000-0002-8505-458X](https://orcid.org/0000-0002-8505-458X)

e-mail anna.n.morozovska@gmail.com

Институт физики

Национальной академии наук Украины

Киев, Украина

Реферат—Исследовано аналитически влияние пассивного слоя на распределение электрического поля в сегнетоэлектрических тонких пленках. Исследование проводилось для сегнетоэлектрических тонких пленок с неоднородным распределением спонтанной поляризации вдоль полярного направления. В соответствии с подавляющим большинством экспериментов, считается, что на поверхностях сегнетоэлектрических пленок есть пассивные слои фиксированной толщины, в которых отсутствует спонтанная поляризация, а их диэлектрическая восприимчивость отличается от восприимчивости пленки. Выведена аналитическая зависимость распределения электрического потенциала в сегнетоэлектрических тонких пленках от толщины пассивного слоя.

Расчеты проводились для диэлектрического и полупроводникового пассивных слоев. Также рассматривался случай наличия поверхностного заряда на границе раздела сегнетоэлектрическая пленка - пассивный слой. Показано что все рассмотренные случаи имеют одинаковый характер зависимости электрического потенциала от толщины пассивного слоя.

Ключевые слова — сегнетоэлектрические тонкие пленки, пассивный слой, электрическое поле, электрический потенциал.



The influence of the passive layer on the electric field distribution in ferroelectric thin films

Hanna Shevliakova^f, ORCID [0000-0001-5380-8394](https://orcid.org/0000-0001-5380-8394)

e-mail shevliakova.hv@gmail.com

G.S. Svechnikov^s, Ph.D., Senior Research Fellow, ORCID [0000-0001-7164-2148](https://orcid.org/0000-0001-7164-2148)

e-mail svgeorge13@gmail.com

Department of Microelectronics

National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”

Kyiv, Ukraine

A.N. Morozovska^s, Doctor of Sciences, Senior Research Fellow, ORCID [0000-0002-8505-458X](https://orcid.org/0000-0002-8505-458X)

e-mail anna.n.morozovska@gmail.com

Department of Microelectronics

National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”

Kyiv, Ukraine

Abstract—The influence of the passive layer on the electric field distribution in ferroelectric thin films is analyzed analytically. The study was carried out for ferroelectric thin films with a nonuniform spontaneous polarization distribution along the polar direction.

During the study it was assumed that on the ferroelectric film surfaces there are passive layers of fixed thickness, in which there is no spontaneous polarization. This corresponds to an overwhelming majority of experiments. The dielectric susceptibility of these films differs from the susceptibility of ferroelectric film.

The analytical dependence of the electric potential distribution in ferroelectric thin films on the passive layer thickness is derived. Calculations were made for dielectric and semiconductor passive layers. Also, the case of the presence of a surface charge at the interface of the ferroelectric film - a passive layer was considered. It is shown that all considered cases have the same kind of the dependence of the electric potential distribution on the passive layer thickness.

Keywords — *ferroelectric thin films, passive layer, electric field, electric potential*

