

Моделирование вольт-фарадных характеристик сегнетоэлектрика

© Л.С. Берман

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 15 марта 2005 г. Принята к печати 30 марта 2005 г.)

Выполнено моделирование параметров сегнетоэлектрика при отсутствии начальной поляризации. Сегнетоэлектрик легирован мелкой примесью. Один контакт образует барьер Шоттки, другой контакт — омический. Вычислено изменение электрического поля, потенциала, поляризации и диэлектрической проницаемости по толщине области объемного заряда. Показано, что значение диэлектрической проницаемости в слабом поле $\epsilon_{\text{eff}0}$ может быть определено по параметрам экспериментальной петли гистерезиса. В слабых полях ($E < 10^5$ В/см) значение диэлектрической проницаемости мало зависит от поля, поэтому при $E < 10^5$ В/см значение $\epsilon_{\text{eff}0}$ может быть использовано как среднее значение ϵ_{eff} при обработке результатов измерений. Вычисление зависимости квадрата обратной емкости от высоты потенциального барьера показало, что при малых напряжениях эта зависимость близка к линейной, что позволяет определить по ней концентрацию мелкой примеси. Вычислены зависимости толщины области объемного заряда и поляризации у контакта от высоты потенциального барьера. Результаты моделирования могут быть использованы при обработке результатов эксперимента.

1. Введение

В настоящее время тонкопленочные сегнетоэлектрики (СЭ) широко применяются в ряде схем электроники (см., например, [1–5]). Поэтому актуальна задача моделирования СЭ, позволяющая прогнозировать их параметры и таким образом избежать постановки сложных и дорогостоящих экспериментов. В работах [6–9] моделируется поведение неидеальных СЭ в различных электронных схемах. В работах [9–12] моделируется влияние блокирующего слоя на параметры СЭ.

В настоящей работе выполнено детальное моделирование параметров СЭ, легированного мелкими примесями, при отсутствии начальной поляризации. Такое моделирование позволяет получить дополнительную информацию о параметрах СЭ.

2. Постановка задачи. Расчеты

Примем, что сегнетоэлектрик легирован мелкими донорами в концентрации N_d . Поликристаллическая структура СЭ, его неоднородность и наличие структурных дефектов учитывались путем использования усредненных значений параметров (например, подвижности). На СЭ нанесен с одной стороны металл, образующий барьер Шоттки, а с другой — омический контакт. Тогда для СЭ можно использовать известные соотношения электростатики

$$D = \epsilon_0 E + P, \quad (1)$$

$$\frac{d}{dx} D = \rho = qN_d, \quad (2)$$

где D — индукция, ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, E — электрическое поле, P — поляризация, x — координата, отсчитываемая от границы раздела между областью электрической нейтральности (ОЭН) и областью объемного заряда (ООЗ), ρ — плотность объемного заряда, q — заряд электрона.

Дифференцируя (1) по x , получаем после преобразований

$$\frac{d}{dx} E = \frac{\rho}{\epsilon_{\text{eff}}}, \quad (3)$$

где эффективная диэлектрическая проницаемость СЭ

$$\epsilon_{\text{eff}} = \epsilon_0 + \frac{d}{dE} P. \quad (4)$$

Аппроксимируем зависимость $P(E)$ гиперболическим тангенсом [6]. Примем, что вначале СЭ был полностью деполяризован ($P = 0$), например, путем постепенного уменьшения амплитуды переменного напряжения. Тогда имеем

$$P = P_s \operatorname{th} \left(\frac{E}{2d} \right). \quad (5)$$

Здесь P_s — поляризация насыщения, параметр d определяется из выражения

$$d = E_c \left[\ln \left(\frac{1 + P_r/P_s}{1 - P_r/P_s} \right) \right]^{-1}, \quad (6)$$

где E_c — коэрцитивное поле, P_r — остаточная поляризация. Дифференцируя (5) по E , получаем

$$\frac{d}{dE} P = \frac{P_s}{2d[\operatorname{ch}(E/2d)]^2}. \quad (7)$$

На границе раздела между областью электрической нейтральности и областью объемного заряда выполняются условия для электрического поля, потенциала и поляризации соответственно

$$E = 0, \quad \psi = 0 \quad \text{и} \quad P = 0. \quad (8)$$

На интервале от границы раздела до металла (барьера Шоттки) численно интегрируем уравнение Пуассона с

шагом $\Delta x = w/n$, где w — толщина ООЗ, $n \gg 1$ — целое число. Первый шаг:

$$E_1 = dE_1 = \frac{qN_d w}{\epsilon_{\text{eff}0} n},$$

где $\epsilon_{\text{eff}0} = \epsilon_0 + P_s/2d$ — значение ϵ_{eff} в слабом поле (ср. $\epsilon_{\text{eff}0}$ с (4) и (7)). Значение $\epsilon_{\text{eff}0}$ может быть вычислено по экспериментальным значениям P_s и d . Потенциал, поляризация и диэлектрическая проницаемость, соответствующие E_1 :

$$\psi_1 = -E_1 \cdot \Delta x, \quad P_1 = P_s \operatorname{th}\left(\frac{E_1}{2d}\right),$$

$$\epsilon_{\text{eff}1} = \epsilon_0 + \frac{P_s}{2d[\operatorname{ch}(E_1/2d)]^2}.$$

Далее используем рекуррентный метод: последующие значения параметров вычисляются через их предыдущие значения. Вычисляем значения E_n, ψ_n, P_n, D_n и $\epsilon_{\text{eff}n}$, где индекс n соответствует значениям параметров на границе между СЭ и металлом. Далее определяем напряжение на диоде Шоттки V , заряд на металлическом контакте Q_m и емкость диода Шоттки C из соотношений

$$V + V_{bi} = \psi_n, \quad Q_m = -D_n, \quad C = \left| \frac{d}{dV} Q_m \right|, \quad (9)$$

где V_{bi} — контактная разность потенциалов между металлом и СЭ ($V + V_{bi} < 0$).

Результат интегрирования уравнения Пуассона можно также представить в виде [13]

$$V + V_{bi} = -qN_d \int_0^w [\epsilon_{\text{eff}}(x)]^{-1} x dx. \quad (10)$$

В выражении (10) x отсчитывается от барьера Шоттки (а не от границы между ОЭН и ООЗ). Дифференцируя (10) по w , получаем

$$\frac{d|V|}{dw} = qN_d \int_0^w \frac{d}{dw} [(\epsilon_{\text{eff}})^{-1}] x dx + qN_d w [(\epsilon_{\text{eff}}(w))^{-1}], \quad (11)$$

где $\epsilon_{\text{eff}}(w)$ — значение ϵ_{eff} на границе между ОЭН и ООЗ, т.е. в слабом поле, $\epsilon_{\text{eff}}(w) = \epsilon_{\text{eff}0}$.

С другой стороны, выполняется соотношение

$$dD_n = -dQ_m = qN_d A dw, \quad (12)$$

где A — площадь СЭ.

Отсюда имеем

$$\frac{1}{C} = \left| \frac{dV}{dQ_m} \right| = \left| \frac{dV}{dw} \right| \left| \frac{dw}{dQ_m} \right|.$$

После преобразований получаем

$$\frac{A}{C} = \frac{w}{\epsilon_{\text{eff}0}} + \int_0^w \frac{d}{dw} [(\epsilon_{\text{eff}})^{-1}] x dx. \quad (13)$$

Интеграл, входящий в выражение (13), определяет численным методом с использованием зависимости $\epsilon_{\text{eff}}(x)$, вычисленной ранее (см. выше, а также рис. 1).

3. Результаты расчетов и их анализ

Примем следующие значения параметров: $P_s = 35$ мкКл/см², $P_r = 25$ мкКл/см², $E_c = 2 \cdot 10^5$ В/см, $N_d = 10^{18}$ и 10^{19} см⁻³, $A = 1$ м².

На рис. 1 показано изменение поля, потенциала, поляризации и диэлектрической проницаемости по толщине ООЗ при $V + V_{bi} = -2.8$ В. Поле возрастает по толщине ООЗ и на контакте достигает значения $4 \cdot 10^5$ В/см, близкого к пробойному [1].

Поляризация P возрастает от 0 до 33 мкКл/см², т.е. близка к насыщению. При возрастании поля от 0 до $4 \cdot 10^5$ В/см значение ϵ_{eff} уменьшается в ~ 10 раз, резкое уменьшение ϵ_{eff} вблизи контакта коррелирует с резким увеличением поля; однако в слабых полях ϵ_{eff} изменяется незначительно; так, при $E = 8 \cdot 10^4$ В/см значение ϵ_{eff} уменьшается лишь на 15%. Поэтому при слабых полях можно использовать значение $\epsilon_{\text{eff}0}$ (см. выше) для обработки результатов измерений.

На рис. 2 приведены зависимости $(A/C)^2$ от $V + V_{bi}$ для $N_d = 10^{19}$ и 10^{18} см⁻³ (остальные параметры прежние). Зададим минимальное значение $|V + V_{bi}| = 0.5$ В. Зависимости $(A/C)^2$ от $V + V_{bi}$ близки к линейным в интервале $-1.0 \leq (V + V_{bi}) \leq -0.5$ В при $N_d = 10^{19}$ см⁻³ и в интервале $-5 \leq (V + V_{bi}) \leq -0.5$ В

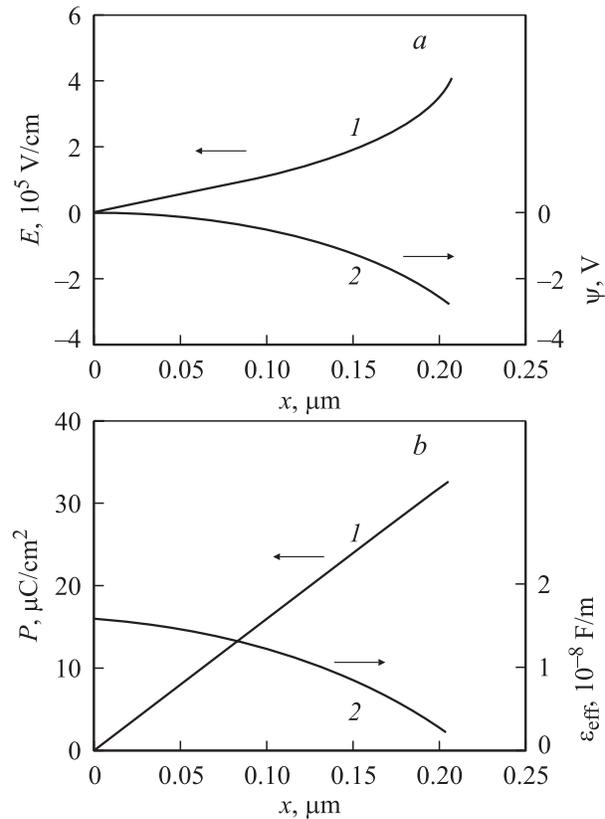


Рис. 1. Изменение параметров сегнетоэлектрика по толщине области объемного заряда при $V + V_{bi} = -2.8$ В. *a*: 1 — поле E , 2 — потенциал ψ . *b*: 1 — поляризация P , 2 — эффективная диэлектрическая проницаемость ϵ_{eff} .

при $N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$. На этом основании используем в указанных интервалах известное соотношение для диода Шоттки с линейным диэлектриком [14]:

$$N = \left[\frac{(A/C_1)^2 - (A/C_2)^2}{|V_2 - V_1|} 0.5 q \varepsilon_{\text{eff}0} \right]^{-1}, \quad (14)$$

где N — концентрация мелкой примеси, V_1 , V_2 , C_1 , C_2 — соответственно значения напряжения и емкости на границах интервала. Сравним значение N , полученное из выражения (14), с исходным значением N_d . Так, для $N_d = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ имеем расчетные значения $V_1 + V_{bi} = -0.51 \text{ В}$, $V_2 + V_{bi} = -1.0 \text{ В}$, $C_1 = 0.15 \text{ Ф/м}^2$ и $C_2 = 0.10 \text{ Ф/м}^2$. Из выражения (14) определяем $N = 7.1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Аналогично для $N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ имеем расчетные значения $V_1 + V_{bi} = -0.52 \text{ В}$, $V_2 + V_{bi} = -1.05 \text{ В}$, $C_1 = 0.05 \text{ Ф/м}^2$ и $C_2 = 0.035 \text{ Ф/м}^2$. Из выражения (14) определяем $N = 9.8 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Таким образом, выражение (14) может быть использовано при обработке результатов эксперимента для определения концентрации мелкой донорной примеси.

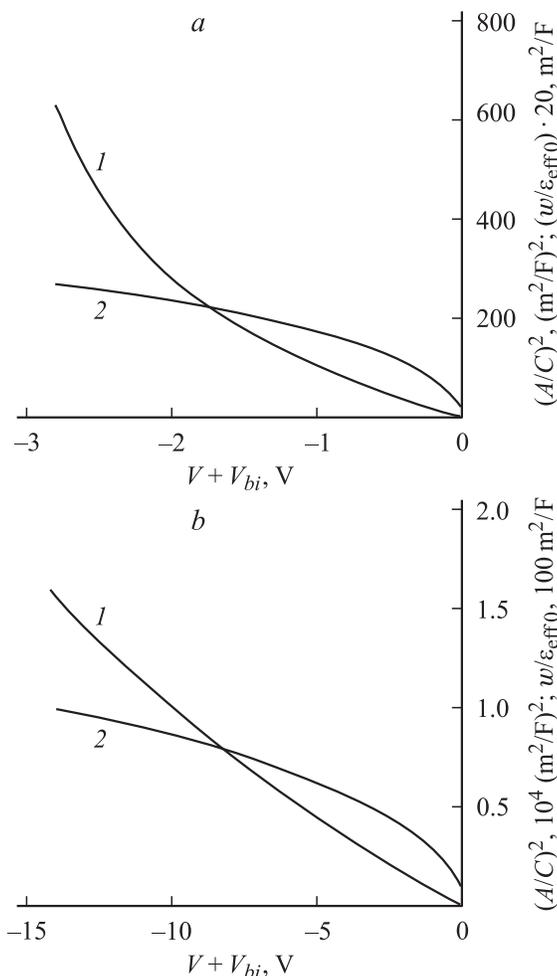


Рис. 2. Зависимости $(A/C)^2$ (1) и $(w/\varepsilon_{\text{eff}0})$ (2) от $V + V_{bi}$. $N_d, \text{ см}^{-3}$: а — 10^{19} , б — 10^{18} .

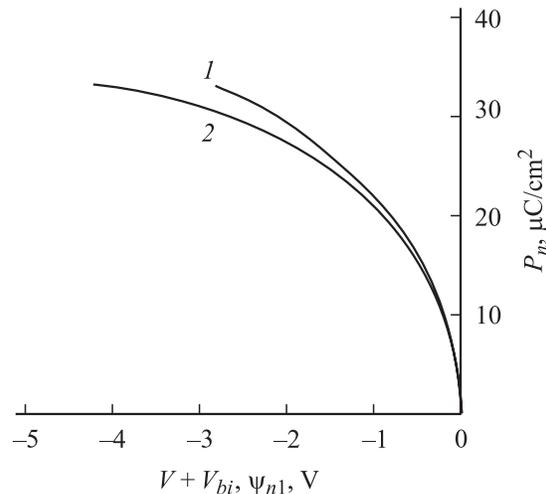


Рис. 3. Зависимости поляризации у контакта P_n от высоты потенциального барьера $V + V_{bi}$ (1) и от потенциала ψ_{n1} (2).

На рис. 2 приведены также зависимости $w/\varepsilon_{\text{eff}0}$ (первое слагаемое в выражении (13)) от $V + V_{bi}$. Зная $\varepsilon_{\text{eff}0}$, можно определить зависимость толщины ООЗ от высоты потенциального барьера.

На рис. 3 приведена расчетная зависимость P_n на границе с металлом от $V + V_{bi}$ для $N_d = 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Там же для сравнения приведена зависимость P_n от ψ_{n1} , где $\psi_{n1} = 0.5E_n w$ — средний потенциал в ООЗ сегнетоэлектрика.

4. Заключение

Выполнено моделирование параметров сегнетоэлектрика при отсутствии начальной поляризации. Сегнетоэлектрик легирован мелкой примесью. Вычислено изменение электрического поля, потенциала, поляризации и диэлектрической проницаемости по толщине области объемного заряда. Показано, что значение диэлектрической проницаемости в слабом поле $\varepsilon_{\text{eff}0}$ может быть определено по параметрам экспериментальной петли гистерезиса. В слабом поле значение диэлектрической проницаемости мало зависит от поля. Поэтому при $E < 10^5 \text{ В/см}$ значение $\varepsilon_{\text{eff}0}$ может быть использовано как среднее значение ε_{eff} при обработке результатов измерений. Вычислена зависимость C^{-2} от высоты потенциального барьера $V + V_{bi}$, при малых напряжениях она близка к линейной. Это позволяет приближенно определить концентрацию мелкой примеси в ООЗ.

Вычислена зависимость толщины области объемного заряда и поляризации у контакта от высоты потенциального барьера.

Результаты моделирования могут быть использованы при обработке экспериментальных данных.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и гранта ОФН РАН.

Список литературы

- [1] J.F. Scott. *Ferroelectric Rev.*, **1**, 2 (1998).
- [2] I. Grekhov, L. Delimova, I. Liniichuk, D. Mashovets, I. Veselovsky. *Integr. Ferroelectr.*, **43**, 175 (2002).
- [3] H. Ishiwara. *J. Semicond. Technol. Sci.*, **1**, 1 (2001).
- [4] J.F. Scott. *Jap. J. Appl. Phys.*, **38**, 2272 (1999).
- [5] P.W. Bloom, R.M. Wolf, J.F.M. Cillessen, M.P.K.M. Krijn. *Phys. Rev.*, **38**, 2107 (1994).
- [6] S.L. Miller, R.D. Nasby, J.R. Schwank, M.S. Rodgers, P.V. Dressendorfer. *J. Appl. Phys.*, **68**, 6463 (1990).
- [7] S.L. Miller, J.R. Schwank, R.D. Nasby, M.S. Rodgers. *J. Appl. Phys.*, **76**, 2489 (1991).
- [8] S.L. Miller, P.J. McWhorter. *J. Appl. Phys.*, **72**, 5999 (1992).
- [9] Л.С. Берман. *ФТП*, **35**, 200 (2001).
- [10] A.K. Tagantsev, M. Landivar, E. Colla, N. Setter. *J. Appl. Phys.*, **78**, 2623 (1995).
- [11] P.K. Larsen, G.T.M. Dormans, D.J. Taylor, P.T. van Veldhoven. *J. Appl. Phys.*, **76**, 2405 (1994).
- [12] Л.С. Берман. *ФТП*, **39**, 332 (2005).
- [13] Л.С. Берман. *Введение в физику варикапов* (Л., Наука, 1968).
- [14] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1981) т. 1.

Редактор Л.В. Шаронова

Modelling the voltage–capacitance dependence of a ferroelectric

L.S. Berman

loffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Modelling ferroelectric parameters in the absence of initial polarisation is fulfilled. Ferroelectric is doped with a shallow-level impurity. Calculated is the change of the electric field, potential, polarisation and permittivity over the space the charge layer.

It is shown that the value of the permittivity in a weak field $\epsilon_{\text{eff}0}$ may be determined by using experimental parameters (of the hysteresis loop). In low fields ($E < 10^5$ V/cm) the value of the permittivity weakly depends on the field. Therefore at $E < 10^5$ V/cm the value of $\epsilon_{\text{eff}0}$ may be used as a mean value of ϵ_{eff} under treatment of the measurements results.