

В.В. БУНИАТЯН, Л.Э. ХАЧИКЯН

## О ВОЗМОЖНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ПРИЧИНАХ ЗАВИСИМОСТИ $C \sim f$ В СТРУКТУРАХ ТИПА СВЕРХПРОВОДНИК/ФЕРРОЭЛЕКТРИК

Представлены результаты теоретических исследований контакта сверхпроводник/ферроэлектрик. Анализируется общая физическая модель контакта с учетом диэлектрического зазора между ферроэлектриком и сверхпроводником при наличии поверхностных состояний в контакте.

**Ключевые слова:** поверхностные уровни, контакт сверхпроводник/ферроэлектрик, ловушки захвата.

В последние десятилетия ферроэлектрические материалы оказались наиболее востребованными в микроэлектронной промышленности. Фундаментальное свойство ферроэлектриков (зависимость диэлектрической постоянной от электрического поля и температуры) позволяет их использовать в качестве управляемых компонентов сверхвысокочастотных (СВЧ) схем [1]. В силу структурной совместимости с ферроэлектриками в качестве компонентов схем в поле зрения разработчиков оказались сверхпроводники. Грамотное сочетание фундаментальных характеристик сегнетоэлектриков и сверхпроводников (малые микроволновые потери) привело к созданию приборов с электрически управляемыми характеристиками. Уже сообщалось о создании конденсаторов на основе структуры сверхпроводник/ ферроэлектрик (СП/Ф), резонаторов, фильтров и других криоэлектронных устройств СВЧ диапазона [2-3,5,7,8]. Наиболее перспективными среди ферроэлектриков в качестве компонентов СВЧ схем являются  $\text{SrTiO}_3$  (СТО), а также  $\text{KTaO}_3$  (КТО). Возросший интерес к сверхпроводникам прежде всего связан с  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  (YBCO), который имеет структурную совместимость с  $\text{SiTiO}_3$  (СТО) и  $\text{KTaO}_3$  (КТО).

Массовое внедрение и производство схем на базе структуры типа СП/Ф должно предшествовать изучению физических и электрических характеристик этих схем. Для практического использования таких структур и устройств, построенных на их основе, необходимо более детальное изучение как условий образования потенциального барьера на границе раздела этих материалов, так и электрических характеристик, получаемых при этом переходе. Возросший интерес к структурам типа СП/Ф был отмечен рядом публикаций об экспериментально полученных результатах исследований таких структур. Так, экспериментально получены зависимости  $C$ - $f$  и  $\tan\delta$ - $f$  для конденсаторов СТО с YBCO в качестве буферного слоя при комнатной температуре [6]. При этом для  $\sim 3,0 \text{ ГГц} < f < (30,0 \text{ ГГц})$  характерны зависимости типа:  $C \sim 0,4031f^{0.17}$  и  $\tan\delta \sim 0,01666f^{0.536}$ . Похожие зависимости наблюдались с  $\text{BaTiO}_3$  (ВТО) [6].

Целью данной работы является теоретическая трактовка физической природы вышеуказанной зависимости, которая базируется на допущении о возможности существования ловушечных уровней на границе раздела двух сред. Эти ловушки надо рассматривать как центры захвата и рассеяния энергии. Их присутствие порождает дополнительную ловушечную емкость ( $C_t$ ). В пользу этой версии склоняются и сами авторы эксперимента [3-4, 6]. Отмечается, что в структурах типа СП/Ф часть инжектированных носителей захватывается ловушками, создавая неподвижный поверхностный заряд [1,6]. Последнее может привести к изменению соотношений между приложенным к структуре напряжением и высотой потенциального барьера, что, в свою очередь, влияет на текущее значение емкости и напряженности, а это адекватно сказывается на характеристиках приборов.

На рис.1 представлена энергетическая диаграмма предполагаемой теоретической модели.

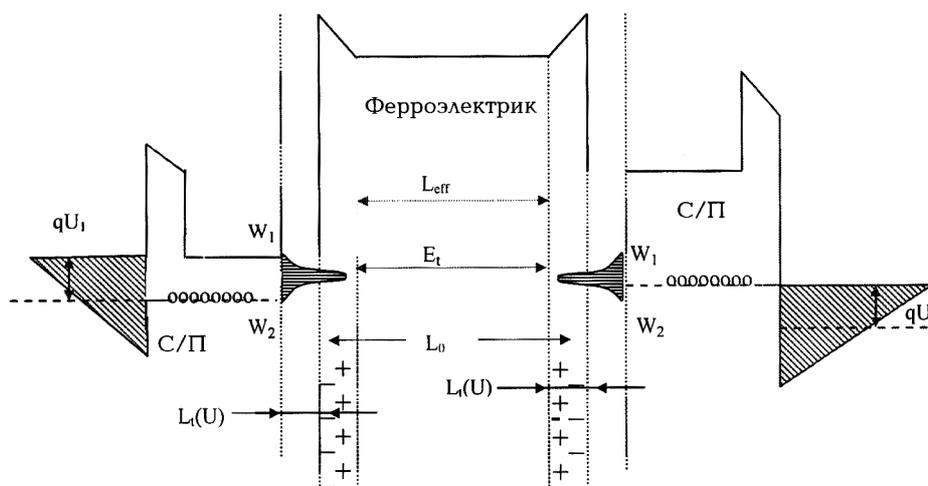


Рис.1. Энергетическая диаграмма модели

В основе модели лежит предположение, что на границе раздела СП/Ф присутствуют ловушечные уровни и их спектр описывается экспоненциальным распределением типа

$$N(W) = N_0 \cdot \exp\left(\frac{W - E_c}{kT_t}\right) = N_n \cdot \exp\left(\frac{W - F_0}{kT_t}\right), \quad (1)$$

где  $T_t$  - температурный параметр, характеризующий распределение захваченных электронов на границе раздела СП/Ф;  $E_c$  - энергия, соответствующая дну зоны проводимости;  $W$  - энергия уровней захвата;  $F_0$  - энергия Ферми при тепловом равновесии;  $k$  - постоянная Больцмана;  $N_0$  - некая постоянная, имеющая размерность  $см^{-3}$ . Нижнюю и верхнюю границы энергетического спектра ловушек обозначим  $W_1$  и  $W_2$  соответственно (рис.1).

Захват носителей ловушками описывается кинетическим уравнением вида

$$\frac{\partial}{\partial t} dn_t = \alpha(dN_t(W) - dn_t)n - P_t dn_t, \quad (2)$$

где  $t$  – время;  $dn_t$  – концентрация захваченных электронов, соответствующая интервалу энергий  $dW$ ;  $n$  – концентрация свободных электронов;  $\alpha = \langle \sigma v_t \rangle$  – усредненное по свободной зоне произведение скорости электронов  $v_t$  на эффективное сечение ловушек при данной энергии  $W$ ;  $P_t$  – вероятность термической ионизации ловушек.

Обычно временные параметры всех величин в линейном приближении представляются в виде суммы двух составляющих: постоянной (индекс 0) и переменной (индекс 1). Исходя из этого выражение для концентрации захваченных электронов будет выглядеть следующим образом:

$$n_t(x, t) = n_{t_0}(x) + n_t \exp(i\omega t), \quad (3)$$

где  $\omega$  – угловая частота малого сигнала.

Для постоянной составляющей концентрации захваченных носителей на границе раздела двух сред выражение (2) на случай равновесия примет вид

$$\alpha \cdot (N_t - dn_{t_0}) \cdot n_0 - P_t \cdot dn_{t_0} = 0. \quad (4)$$

Пользуясь соотношением типа  $P_t = \alpha \cdot \gamma(W)$ , где  $\gamma(W) = \frac{N_c}{g} \exp\left(\frac{W - E_c}{kT_t}\right)$ , из (4) для  $n_{t_0}$

получим

$$dn_{t_0} = \frac{dN_t}{1 + \frac{\gamma(W)}{n_0}}, \quad (5)$$

где  $g$  – статистический фактор захвата ловушек;  $N_c$  – эффективное число состояний в свободной зоне.

Дифференцирование уравнения для плотности полного тока

$$j = q \cdot n(x) \cdot \mu(x) + q \cdot D \cdot \frac{\partial n(x)}{\partial x}, \quad (6)$$

где  $j$ ,  $E$ ,  $\mu$ ,  $D$  – соответственно плотность протекающего тока, напряженность электрического поля, подвижность и коэффициент диффузии электронов, при допущении, что  $\frac{\partial j}{\partial x} = 0$  и  $D=0$ , позволяет

получить следующее выражение:

$$E \cdot \frac{\partial n(x)}{\partial x} = -n \cdot \frac{\partial E}{\partial x}. \quad (7)$$

С другой стороны, уравнение Пуассона для одномерного случая записывается в виде

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{q}{\xi_s} \cdot (n + n_t), \quad (8)$$

где  $n$  и  $n_t$  - соответственно концентрации свободных и захваченных электронов;  $\xi_s$  - диэлектрическая проницаемость среды.

Сопоставляя (7) и (8), получим

$$\frac{\partial n}{\partial x} = -\frac{q}{\xi_s} \cdot n \cdot (n + n_t), \quad (9)$$

где  $n + n_t = n_j$  - концентрация инжектированных электронов.

Интегрирование (1) и (3) с учетом вышеуказанных равенств приведет к следующим соотношениям для  $n$  и  $n_t$  [3]:

$$n = \Gamma \cdot n_0 \cdot \left\{ \frac{1 - U^{\frac{1}{l}}}{U^{\frac{1}{l}}} - g \cdot \left( \Gamma \cdot \frac{n_0}{N_n} \right)^{l-1} \cdot \ln \left[ \frac{gx_1 + \exp y_2}{gx_1 + \exp y_1} \right] \right\},$$

$$n_t = g \cdot \frac{\Gamma^l}{U} \cdot \left( \frac{n_0}{N_n} \right)^{\frac{1}{l}} \cdot N_n \cdot \ln \left[ \frac{gx_1 + \exp y_2}{gx_1 + \exp y_1} \right], \quad (10)$$

где  $W_1$  и  $W_2$  - соответственно нижняя и верхняя границы энергетического спектра ловушек,

$$\Gamma = \frac{N_n}{n_0} \cdot \left( \frac{n_0}{N_c} \right)^{\frac{1}{l}}, \quad l = \frac{T_t}{T}, \quad U = \frac{n_0}{n} = \frac{q \cdot n_0 \cdot \mu \cdot E}{j}, \quad y_1 = \frac{W_1 - E_c}{kT_t}, \quad y_2 = \frac{W_2 - E_c}{kT_t}, \quad x_1 = \frac{n_0}{N_c}.$$

Аналогичный математический подход для переменной составляющей концентрации захваченных электронов выявляет следующее соотношение для  $n_{t1}$ :

$$dn_t = \frac{\alpha n_1 \gamma(W) dN_t(W)}{[\gamma(W) + n_0][\alpha(\gamma(W) + n_0) + i\omega]}. \quad (11)$$

Интегрирование (11) в энергетическом интервале ( $W_2 - W_1$ ), принимая, что  $\alpha = \text{const}$ , приведет к соотношению типа

$$n_{t1} = \alpha n_1 (B_0 - i\omega B_1), \quad (12)$$

$$\text{где } n_{t1} = \int_{W_1}^{W_2} dn_t, \quad B_1 = \frac{Z}{\alpha} \int_{W_1}^{W_2} \frac{\exp\left(\frac{2W}{kT_t}\right) \partial W}{[n_0 + \gamma(W)] \cdot [\omega^2 + \alpha^2 (n_0 + \gamma(W))^2]},$$

$$B_0 = Z \int_{w_1}^{w_2} \frac{\exp\left(\frac{2W}{kT_t}\right) \partial W}{\omega^2 + \alpha^2 [n_0 + \gamma(W)]^2}, \quad Z = \frac{\alpha N_c N_n \exp\left[\frac{-(E_c + F_0)}{kT_t}\right]}{gkT_t},$$

$$n_0 = N_c \exp\left(\frac{F_0 - E_c}{kT_t}\right).$$

Для переменной составляющей полного тока без учета диффузионного будет справедливо соотношение

$$j_1 = S \left( \xi_s \frac{\partial E_1}{\partial t} + q\mu_n E_0 n_1 + q\mu_n E_1 n_0 \right), \quad (13)$$

где  $E = E_0(x) + E_1(x, t)$ . В рассматриваемой области частот  $E_1 = V_1 \frac{\partial E_0}{V_0}$ . Из (11) и (12), а также

принимая во внимание, что  $Y = \frac{j_1}{U_1}$ , получим следующее выражение:

$$Y = S \left\{ \begin{array}{l} q\mu_n n_0 \frac{\partial E_0}{\partial V_0} + \frac{q\mu_n E_0 A (1 + \alpha B_0)}{(1 + \alpha B_0)^2 + (\alpha \omega B_1)^2} \\ + i\omega \left[ \xi_s \frac{\partial E_0}{\partial V} + \frac{q\mu_n E_0 A \alpha B_1}{(1 + \alpha B_0)^2 + (\alpha \omega B_1)^2} \right] \end{array} \right\}. \quad (14)$$

Для теоретического обоснования экспериментальных данных предлагается представить исследуемую структуру в виде последовательного соединения следующих емкостей:

$$C(U) = \frac{C_1(U) \cdot C_t(U)}{2C_1(U) + C_t(U)} \Leftrightarrow C(U) = \frac{C_1(U)}{1 + \frac{2C_1(U)}{C_t}}, \quad (15)$$

где  $C_1(U)$  – геометрическая емкость длиной  $L_{\text{эф}}$ ;  $C_t(U)$  - ловушечная емкость длиной  $L$ .

С другой стороны, выражение (15) путем последовательной подстановки соответствующих выражений [3] можно привести к виду

$$Y = G_0 + G_t + i\omega(C_0 + C_t), \quad (16)$$

где  $C_0$  - электростатическая емкость;  $C_t$  - ловушечная емкость, которая имеет вид

$$C_t = \frac{2\xi_s S \mu U_0}{d^3} \cdot \frac{\alpha B_1}{(1 + \alpha B_0)^2 + (\alpha \omega B_1)^2}. \quad (17)$$

С учетом вышепредставленных формул выражение (17) можно переписать в виде

$$C_t = \frac{2\mu_n U_0 g^2 C_0 N_n}{\alpha l^2 N_c n_0} \cdot \frac{\left\{ e^{\frac{3W_2+2W_1}{kT_i}} - e^{\frac{3W_1+2W_2}{kT_i}} \right\}}{e^{\frac{(W_1+W_2)}{kT_i}} \left\{ (1+\beta x)^2 + (\beta\beta_1)^2 \left[ e^{\frac{W_2}{kT_i}} - e^{\frac{W_1}{kT_i}} \right] \right\}}, \quad (18)$$

$$\text{где } \beta = \frac{gN_n}{n_0}, \quad \beta_1 = \frac{g\omega}{\alpha N_c} - \text{безразмерная частота} \left( f = \frac{\omega}{\alpha N_n} \right).$$

В результате получим

$$\frac{C_t}{C_0} = \frac{2\mu_n U_0 \beta \beta_1}{l^2 \omega} \cdot \frac{\left\{ e^{\frac{3W_2+2W_1}{kT_i}} - e^{\frac{3W_1+2W_2}{kT_i}} \right\}}{e^{\frac{(W_1+W_2)}{kT_i}} \left\{ (1+\beta x)^2 + (\beta\beta_1)^2 \left[ e^{\frac{W_2}{kT_i}} - e^{\frac{W_1}{kT_i}} \right] \right\}}. \quad (19)$$

Математическое решение выражения (19) путем подстановки соответствующих значений выявляет зависимость  $C \sim f$  в виде

$$\frac{C_t}{C_0} = 4 \cdot 10^n \cdot f^{-2} \Rightarrow C_t = 4 \cdot 10^n \cdot C_0 \cdot f^{-2}, \quad (20)$$

где  $n$  принимает различные значения в зависимости от  $N_n$ .

В результате выражение (16) можно представить в виде

$$C(U) = \frac{C_1(U) \cdot C_t(U)}{2C_1(U) + C_t(U)} \Leftrightarrow C(U) = \frac{C_1(U)}{1 + \frac{2C_1(U)}{C_t}} = \frac{\xi \xi_0 S / d}{1 + 2 \cdot f^2 / 4 \cdot 10^n}. \quad (21)$$

На основании (21) построена диаграмма зависимости  $C/f$  для теоретической модели при различных значениях  $\xi$  и  $N_n$  (рис.2).

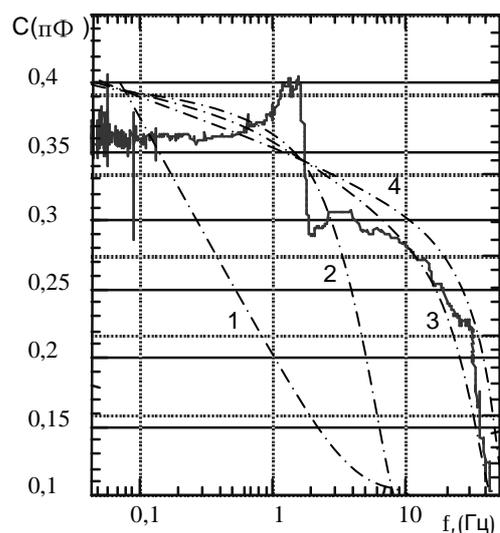


Рис.2. Диаграмма зависимости частоты от емкости  
(пунктиром обозначены диаграммы зависимости, полученные на основе теоретической модели):

$$1 - \xi = 1800, N_n = 10^{22}; \quad 2 - \xi = 720; N_n = 10^{20};$$

$$3 - \xi = 720; N_n = 10^{18}; \quad 4 - (\xi = 720; N_n = 10^{15})$$

Анализ двух диаграмм зависимости (теоретической и экспериментальной) обнаруживает следующую закономерность. По мере уменьшения  $\xi$  и  $N_n$  диаграмма, построенная на основе теоретической модели, все больше и больше приобретает очертания экспериментально полученной диаграммы, что говорит о физической состоятельности теоретической модели. Таким образом, схожесть экспериментальной и теоретической зависимостей указывает на то, что допущение о существовании ловушечных уровней переходит из экспериментального предположения в теоретическое обоснование. Это, в свою очередь, говорит о физической актуальности предлагаемой модели в плане объяснения экспериментальных данных. Такой подход открывает большие возможности для теоретических исследований в этой области, направленных на усовершенствование качественных характеристик приборов на основе СП/Ф.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бузин И.М., Иванов И.В., Моисеев Н.Н., Чупраков В.Ф. Нелинейность и диэлектрические потери танталата калия // Физика твердого тела. - 1980. - С. 2057-2061.
2. Буниатян В. В., Хачикян Л. Э. О диэлектрических потерях в структурах типа сверхпроводник/сегнетоэлектрик // Моделирование, оптимизация, управление. - Ереван, 2003. - С.47-52.

3. **Aroutiounian V., Gasparyan F., Buniatyan V., Travadjan M., Soukiassian P.** Static and dynamic characteristics of monopolar current injection in SiC with non-uniform distribution of traps//Proceedings of the 2<sup>nd</sup> International Conference “Mass and Charge Transport in Inorganic Materials”.-Italy, July 14-18, 2002.- P.89-95.
4. **Chakalov R.A., Ivanov Z.G., Boikov Yu.A., Larsson P.** Fabrication and investigation of YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-x</sub>/ Ba<sub>0.05</sub>Sr<sub>0.95</sub>TiO<sub>3</sub> thin film structures for voltage tunable devices //Physical C.- 1998.-P.279-288.
5. **Boikov Yu., Ivanov Z.G., Vasiliev A.L., Pronin I.** Epitaxial heterostructures YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-x</sub>/KtaO<sub>3</sub> for microwave applications//Applied Physics Letters.-1991.- P.2708-2710.
6. **Gevorgian S., Carlsson E., Wikborg E., Kollberc E.** Tunable microwave devices based on bulk and thin film ferroelectrics//Integrated Ferroelectrics.-1998.- P.245-257.
7. **Gevorgian S., Petrov P.K., Avadel S., Ivanov Z.** Strain induced ferroelectrosity in epitaxial SrTiO<sub>3</sub> films//Chalmers University of Technology, 41296, Gothenburg Sweden, Erisson Microwave Systems, 43184 Moendal, Sweden, 2000.
8. **Vendik O.G., Ter-Martirosyan L.T., Dedyk A.I., Karmanenko S.F., Chakalov R.A.** Nich-T<sub>c</sub> Superconductivity: New applications of ferroelectrics at mikrowave ferquencies// Ferroelectrics.-1993.-P.33-43.

ГИУА. Материал поступил в редакцию 17.07.2007.

### Վ.Վ. ԲՈՒՆԻԱԹՅԱՆ, Լ.Է. ԽԱՉԻԿՅԱՆ

#### ԳԵՐՀԱՂՈՐԴԻՉ - ՖԵՌՈՒԷԼԵԿՏՐԻԿ ԿՈՆՏԱԿՏԻ C ~ f ԿԱԽՎԱԾՈՒԹՅԱՆ ՀԱՎԱՆԱԿԱՆ ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ՊԱՏՃԱՌՆԵՐԻ ՄԱՍԻՆ

Ներկայացվում են գերհաղորդիչ - ֆեռոէլեկտրիկ կոնտակտի տեսական հետազոտությունների արդյունքները: Վերլուծվել է կոնտակտի ընդհանուր ֆիզիկական մոդելը մակերեսային վիճակների և գերհաղորդչի ու ֆեռոէլեկտրիկի միջև դիէլեկտրիկական առանցքի առկայությամբ:

**Առանցքային բառեր.** մակերեսային վիճակներ, գերհաղորդիչ - ֆեռոէլեկտրիկ կոնտակտ, գրաված թակարդներ:

V.V. BUNIATYAN, L.E. KHACHIKYAN

#### ON POSSIBLE PHYSICAL REASONS FOR C ~ f DEPENDENCE IN STRUCTURES OF SUPERCONDUCTOR/FERROELECTRIC TYPE

The results of theoretical studies of superconductor/ferroelectric are given. A general physical model of the contact with a dielectric gap between the ferroelectric and superconductor in the presence of surface states in the contact is given.

**Keywords:** superficial levels, superconductor/ferroelectric contact, catch trap.