

І.С. ВОРОТЯГІН, Ю.М. ПОПЛАВКО, Є.М. ФОМІЧОВ

Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут"  
(Просп. Перемоги, 37, Київ, 03056)

УДК 539

**ОСОБЛИВОСТІ ДІЕЛЕКТРИЧНОЇ  
НЕЛІНІЙНОСТІ У ПАРАЕЛЕКТРИКАХ**

*Виконано розрахунки та аналіз формул поляризованості для основних механізмів поляризації діелектриків. Отримані вирази можуть відобразити ефекти, що виникають при проникненні в кристал електричного поля. Проаналізовано діелектричну нелінійність сегнетоелектрика при переході у параелектричну фазу. Аналітично отримано підтвердження результатів попередніх досліджень параелектриків, які допускають можливість застосування тонких параелектричних плівок у НВЧ техніці та в ролі підзатворних діелектриків.*

*Ключові слова:* діелектрична нелінійність, параелектрика, поляризація, поляризованість, фероелектрик, фероелектрична фаза, фазовий зсув.

**1. Механізми діелектричної поляризації**

Нелінійна залежність діелектричної проникності від електричного поля, або діелектрична нелінійність, у околі фазового переходу є важливою властивістю сегнетоелектричних матеріалів, яка може отримати своє застосування у надвисокочастотній електроніці. Із розвитком сучасних технологій, зокрема із появою можливості створювати плівки нанометрових товщин, з'явилася можливість використовувати переваги діелектричної нелінійності, оскільки пробій таких плівок відбувається при дуже високих електричних полях.

Сама по собі діелектрична нелінійність відображає більш елементарні мікроскопічні процеси, які відбуваються в кристалі, де електричне поле  $F$  нелінійно залежить від поляризованості діелектрика  $\alpha$ . Це можна побачити, якщо виразити значення локального електричного поля  $F$  по відношенню до макроскопічного електричного поля  $E$ :  $F = E(\varepsilon+2)/3$ , звідки можна вивести рівняння Клаузіуса–Моссотті–Лоренца:  $\frac{\varepsilon+2}{\varepsilon-1} = \frac{\sum N_k \alpha_k}{3\varepsilon_0}$ . В цьому виразі  $N_k$  – концентрація атомів в об'ємі,  $\alpha_k$  – поляризованість.

Отже, для того, аби виразити залежність діелектричної проникності від електричного поля, необхідно розібратися із більш елементарними механізмами поляризації у параелектрику.

При прикладенні до діелектрика електричного поля, зв'язані електричні заряди зміщуються відносно один одного, унаслідок чого діелектрик стає поляризованим. Зовнішнє електричне поле індукуює у частинках діелектрика елементарні електричні моменти  $p = qx$  (де  $q$  – значення електричних зарядів, що зміщуються,  $x$  – взаємне зміщення зарядів протилежного знака).

В утворенні електричних моментів можуть брати участь електрони (зміщенням відносно ядер), іони (відхиленням від стану рівноваги) та диполі (зміною орієнтації під дією зовнішніх сил). Ці частинки сприяють утворенню поляризованого стану за допомогою різноманітних механізмів.

Поляризованість – це одна з найважливіших величин, яка характеризує механізми поляризації діелектрика. Вона визначає здатність діелектрика поляризуватися, а її величина визначається параметрами поляризованої системи, які для різних механізмів поляризації можуть описуватись у різних формі. Залежність поляризованості від параметрів можна дослідити, розклавши формулу для поляризованості в ряд та оцінивши значення членів цього ряду.

Для спрощення будемо вважати, що електрична провідність у діелектрику відсутня ( $\sigma = 0$ ) [2].

**1.1. Особливості механізмів пружної поляризації**

Якщо частинки у кристалічній структурі зв'язані між собою порівняно жорстко та пружно, то зов-

© І.С. ВОРОТЯГІН, Ю.М. ПОПЛАВКО,  
Є.М. ФОМІЧОВ, 2015

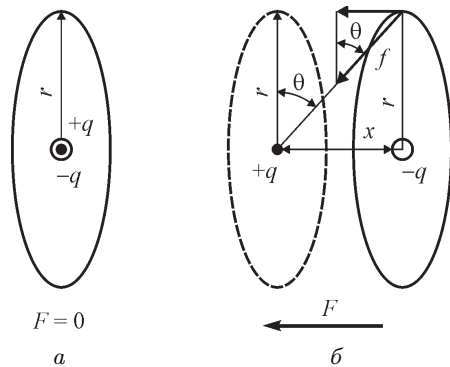


Рис. 1. Спрощена модель електронної поляризації [2]

нішня взаємодія у вигляді електричного поля або іншого впливу призводить до дуже малих зміщень цих частинок. Але оскільки при цьому зміщуються усі частинки діелектрика, то навіть настільки малі зміщення зарядів спричиняють поляризацію. Такий механізм поляризації називають пружним.

### 1.1.1. Електронна пружна поляризація

У неполяризованому стані електронні оболонки розташовані симетрично відносно ядер, тому розташування центра негативного заряду збігається з позитивно зарядженим ядром, а електричний момент відсутній ( $p = qx = 0$ ), бо не відбулося зміщення зарядів:  $x = 0$ .

Якщо прикласти електричне поле, то у структурних частинках відбувається деформація орбіталей, і вони починають зміщуватися відносно ядер. Внаслідок зміщення центра негативного заряду виникає елементарна поляризація:  $p = qx > 0$ . Оскільки маса ядер на 3–5 порядків більша за масу електронів, фактично зміщуються електрони і електронна хмара вцілому. Основний внесок у таку поляризацію дають електрони на зовнішніх оболонках, що слабко пов'язані з ядром атома чи іона.

Механізм електронної поляризації є загальним і відбувається у всіх діелектриках. Зміщені електрони мають ефективну масу набагато меншу за масу атомів і іонів, відносно яких вони зміщуються, тому такий механізм найменш інерційний. Поляризація встановлюється швидко і дозволяє визначити свій внесок у статичну діелектричну проникність ( $\epsilon_{ст} = n^2$ , де  $n$  – низькочастотний коефіцієнт заломлення).

Для максимальної простоти та наочності розглянемо механізм електронної поляризації на прикладі атома водню в моделі Бора. Електричні заряди протона та електрона:  $q = 1,6 \cdot 10^{-19}$ , маса протона:  $m_+ = 1,67 \cdot 10^{-24}$  г, маса електрона:  $m_- = 9,11 \cdot 10^{-28}$  г, відстань від електрона до позитивно зарядженого ядра:  $r_e = 0,53$  Å. Напруження електричного поля між протоном та електроном становить  $E_r = 5 \cdot 10^{11}$  В/м.

За відсутності зовнішнього електричного поля ефективний центр негативного заряду збігається з ядром. В електричному полі  $F$ , яке набагато менше поля  $E_r$ , електронна оболонка атома зміщується, геометричний центр негативного заряду зміщується на відстань  $x$  від ядра, утворюється електричний момент, який пропорційний напруженості прикладеного поля:  $p = \alpha_e F = qx$ , де  $\alpha_e$  – величина електронної поляризованості, яку потрібно знайти.

Рівновага системи протон–електрон, на яку впливає електричне поле, забезпечується рівністю сили збурення та сили повернення у неполярний стан, пропорційної деформації  $x$ :

$$f_{зб} = qF = cx. \tag{1}$$

Коефіцієнт “пружності” ( $c$ ) в цій моделі знаходиться через силу повернення:  $f_{пов} = f \sin \theta$  (див. рис. 1). З попередніх рівностей випливає, що:  $\alpha_e \frac{cx}{q} = qx$ , отже

$$\alpha_e = \frac{q^2}{c}. \tag{2}$$

Оскільки  $f = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\sqrt{r^2+x^2}}$ , а  $\sin \theta = \frac{x}{r^2+x^2}$ , з рівняння (1) можна отримати:

$$cx = f_{пов} = \frac{q^2 x}{4\pi\epsilon_0(r^2+x^2)^{3/2}}. \tag{3}$$

Поле  $F$  дуже мале порівняно з  $E_r$ , тому зсув буде набагато менший за відстань  $r_e$ . Попередній вираз можна спростити до  $c = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r^3}$ , а значення коефіцієнта “пружності” підставити в формулу для поляризованості:  $\alpha_e = 4\pi\epsilon_0 r^3$ .

Коефіцієнт  $4\pi\epsilon_0$  потрібний для запису значення пружної поляризованості у системі СІ, із розмірністю  $\Phi \cdot \text{м}^3$ . Вводимо відносну величину поляризованості  $\alpha_{евід} = r^3$ , щоб позбавитися коефіцієнтів системи СІ. Із формули (2) можна визначити поляризованість як

$$\alpha'_{евід}(F) = \frac{q^2}{c}. \tag{4}$$

Для розрахунку нелінійності поляризованості, враховуючи (1), з виразу (3) знаходиться вираз для величини  $c$ , не хвостуючи при цьому величиною  $x$ . Маючи на увазі, що у загальному випадку нелінійність описується рядом:  $\alpha'_{\text{евід}} = \alpha_0 + \alpha_1 F + \alpha_2 F^2 + \alpha_3 F^3 + \dots$ . Величина  $c$  розкладається у ряд по параметру  $x^2/r^2$ :

$$c \approx \frac{q^2}{r^3} \frac{1}{\left(1 + \frac{3}{2} \frac{x^4}{r^4} + \frac{1}{8} \frac{x^6}{r^6} + \dots\right)}, \quad (5)$$

а потім підставляється у формулу (4):

$$\alpha'_{\text{евід}}(F) = r^3 \left(1 + \frac{3}{2} \frac{x^4}{r^4} + \frac{1}{8} \frac{x^6}{r^6} + \dots\right). \quad (6)$$

Значення коефіцієнтів ряду знаходяться із врахуванням, що він парний:  $\alpha_0 = r^3$ ;  $\alpha_1 = 0$ ;  $\alpha_2 = \frac{3}{2} \frac{r^7}{q^2}$ ;  $\alpha_3 = 0$ ;  $\alpha_4 = \frac{1}{8} \frac{r^9}{q^2}$ .

### 1.1.2. Іонна пружна поляризація

Якщо на іонний кристал не діє зовнішнє електричне поле, катіони й аніони перебувають у вузлах кристалічної ґратки. Ця система зарядів електрично нейтральна і не створює електричних моментів (поляризації). Але в зовнішньому електричному полі катіони й аніони зміщуються під дією кулонівських сил, утворюючи поляризовану ґратку з елементарними електричними моментами  $q^+ - q^-$ . Так виникає в кристалах іонна пружна поляризація, яка має велике значення для електричних властивостей іонних діелектриків [2].

Особливістю іонної пружної поляризації є те, що вона не є універсальною і характерна лише для діелектриків з іонним характером зв'язку в молекулах або кристалічній ґратці. Іонна пружна поляризація відіграє визначальну роль у лужногалоїдних кристалах типу NaCl. Такий механізм поляризації є основним механізмом електричного відгуку на прикладене поле і для активних діелектриків (п'єзоелектриків, піроелектриків, сегнетоелектриків).

Через порівняно велику масу іонів, час встановлення іонної поляризації більший за час встановлення електронної. Але навіть при цьому можна визначити внесок поляризації у діелектричну проникність.

Для розрахунку поляризованості для іонної пружної поляризації  $\alpha_i$  використовується проста мо-

дель цього механізму. Два іони утворюють молекулу, але можуть також відповідати двом підґраткам – катіонної та аніонної – вставлених одна в іншу, що утворюють, таким чином, найпростіший іонний кристал (типу  $\text{Na}^+\text{Cl}^-$ ). У даній моделі враховується тільки кулонівське притягання іонів, а також сили відштовхування, що виникають у разі взаємопроникнення їх електронних оболонок. У моделі вважається, що заряд  $q$  сконцентрований у центрі іона, отже  $r$  – це відстань між центрами іонів.

Із закону Кулона випливає, що енергія взаємного притягання іонів спадає пропорційно відстані між ними і дорівнює  $q^2/4\pi\epsilon_0 r$ . Енергія відштовхування електронних оболонок різко зростає лише у разі сильного зближення іонів, що наближено описується степеневою функцією  $d/r^n$ , де параметр  $n = 8-11$  залежить від властивостей тієї чи іншої пари іонів і особливостей кристалічної ґратки.

Коефіцієнт  $d$  можна визначити з інших параметрів цієї моделі. Сумарна крива потенціальної енергії має мінімум, що характеризує рівноважний стан системи іонів, що являє собою різницю між енергіями притягування та відштовхування:

$$U(r) = \frac{d}{r^n} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (7)$$

У рівноважному стані ( $r = a$ ) сила, що діє на іони,  $F = 0$ :  $\frac{dU}{dr} \Big|_{r=a} = 0$ ; а оскільки  $U'(r) = d - \frac{q^2 r^n}{4\pi r \epsilon_0}$ ,  $d = \frac{q^2 a^n}{4\pi a \epsilon_0} = \frac{q^2 a^{n-1}}{4\pi \epsilon_0}$ , вираз для енергії взаємодії іонів має вигляд:

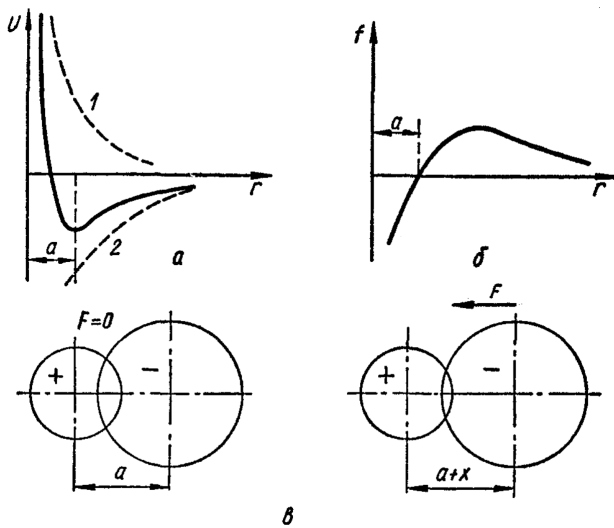
$$U'(r) = \frac{d}{r^n} = \frac{q^2 a^{n-1}}{4\pi \epsilon_0} \frac{1}{r^n}. \quad (8)$$

При взаємному зміщенні іонів під дією поля виникає сила, що повертає систему в незбурений стан, рівна силі, яка діє на іони, але спрямована у протилежному напрямку  $cx = qF$ ;  $\alpha_i F = qx$ .

Беручи до уваги те, що  $F = cx/q$ , визначається вираз для іонної пружної поляризованості:  $\alpha_i = q^2/c$ . Тому, щоб знайти величину поляризованості, потрібно розрахувати квазіпружну сталу  $c$ .

Для цього можна використати вираз залежності пружної енергії від деформації:  $U = cx^2/2$  і отримати вираз для зміни енергії зсуву іонів під дією зовнішнього поля:

$$U_{(a+x)} - U_a = \frac{cx^2}{2}. \quad (9)$$



**Рис. 2.** Іонна пружна поляризація найпростішої молекули, що складається з одного позитивного і одного негативного іона:  $a$  – залежність енергії від відстані між центрами іонів (1 – енергія відштовхування електронних оболонок, 2 – енергія кулонівського притягання),  $b$  – залежність результуючої сили взаємодії від відстані між іонами,  $c$  – зміна відстані між іонами під впливом поля [2]

Знаходиться друга похідна від правої та лівої частин рівняння, а потім підставляємо у функцію  $U(r)$  величину зміщення  $a + x$  замість  $r$ :

$$U''_{(a+x)} = \frac{q^2(n-1) - 2q^3}{4\pi(a+x)^3 \epsilon_0}. \quad (10)$$

У цій формулі  $2q^3$  настільки мале, що їм можна знехтувати. При підстановці цієї функції у формулу для поляризованості маємо:

$$\alpha_i = \frac{q^2}{c} = \frac{q^2 4\pi (a+x)^3 \epsilon_0}{q^2 (n-1)} = \frac{4\pi (a+x)^3 \epsilon_0}{n-1}. \quad (11)$$

Нелінійність розраховується так само, як і для електронної поляризації. Відносна величина поляризованості вводиться для того, щоб позбавитися коефіцієнтів системи СІ, і має вигляд  $\alpha_{i\text{від}} = \frac{(a+x)^3}{(n-1)}$  або  $\alpha_{i\text{від}} = \frac{q^2}{c}$ . Користуючись тим, що  $F = cx/q$ , виходить, що  $c = q^2(n-1)/(a+x)^3$ . Цей вираз розкладається у ряд:  $c = \frac{q^2(n-1)}{a^3} + \frac{q^3(n-1)^2}{a^5(n+4)} + \dots$ . Визначаємо величини коефіцієнтів ряду  $\alpha_i(F) = \alpha + \alpha_1 F + \dots$ , де

$$\alpha_0 = \frac{a^3}{(n-1)}; \quad \alpha_1 = \frac{a^5(n+4)}{q(n-1)^2}.$$

### 1.1.3. Дипольна пружна поляризація

Пружний поворот диполів можливий лише у разі існування у кристалі “внутрішньої полярності”, яка відіграє визначну роль у багатьох активних діелектриках. Диполі у такій “полярній” кристалічній ґратці зв’язані і зорієнтовані під дією внутрішнього кристалічного поля  $F$ , яке вони самі й створюють.

Прикладене зовнішнє електричне поле змінює орієнтацію кожного з диполів і всієї полярної структури в цілому, в результаті чого змінюється й електричний момент діелектрика: відбувається індукована електричним полем зміна поляризації. Таким виглядає спрощений механізм дипольної пружної поляризації [2].

Розглянемо простий приклад пружної орієнтації у полярному кристалі, побудованому з двохатомних несиметричних полярних молекул, наприклад, НСІ. Необхідно зазначити, що пружна дипольна поляризація відбувається лише в кристалічному стані, бо тоді ці молекули утворюють самовпорядковану структуру з орієнтованими паралельно диполями. Зовнішнє електричне поле призводить тут до пружного відхилення диполів від рівноважної орієнтації.

У полярних кристалів напрямок спонтанної поляризації характеризує полярна вісь, тому пружна дипольна поляризація може спостерігатися у кристалах піроелектриків.

На рис. 3 наведено просту модель, що допомагає розрахувати поляризованість за механізмом дипольної пружної поляризації  $\alpha_d$ . Диполь із постійним моментом  $p$  орієнтований спонтанним (внутрішнім) електричним полем  $G$ . Зовнішнє електричне поле  $F$ , що діє на цей диполь, становить кут  $\theta$  із внутрішнім полем  $G$ . Поле  $F$  призводить до повороту диполя на невеликий кут  $x$ . Обертанню диполя у полі  $F$  перешкоджає квазіпружна повертальна сила, зумовлена поворотним моментом, який з’являється через відхилення диполя на кут  $x$ . У лінійному випадку передбачається, що поле  $F \ll G$ . Розрахувати поляризованість для даної моделі можна у припущенні, що зміна електричного моменту системи в зовнішньому електричному полі  $F$  пропорційна напруженості цього поля:  $p = \alpha_d F$ .

Зміна проекції електричного моменту диполя на напрямок  $F$  відбувається у зв’язку з поворотом диполя від кута  $\theta$  (коли  $F = 0$ ) до кута  $(\theta - x)$ , коли

$F > 0$ :

$$\begin{aligned} p &= p_0 \cos(\theta - x) - p_0 \cos \theta = \\ &= p_0 \left( -2 \sin \frac{\theta - x + \theta}{2} \sin \frac{\theta - x - \theta}{2} \right) = \\ &= p_0 \left( 2 \sin \left( \theta - \frac{x}{2} \right) \sin \frac{x}{2} \right), \end{aligned}$$

Після спрощення отримуємо

$$p = p_0 \left( \sin x \sin \theta - 2 \sin^2 \frac{x}{2} \cos \theta \right). \quad (12)$$

Оскільки поле  $F \ll G$ , так само мале, як і кутове зміщення ( $x$ ), значенням  $\sin^2(x/2)$  можна знехтувати в порівнянні з  $\sin x$ :  $p = p_0 \sin x \sin \theta$ . Значення  $\sin x$  можна знайти з умови рівноваги як  $pF \sin(\theta - x) = p_0 G \sin \theta$ . Із співвідношення  $F \ll G$  виходить, що  $\cos x \approx 1$ , а  $\sin x \ll 1$ , тоді:

$$\begin{aligned} \sin(\theta - x) &= \sin \theta \cos x - \cos \theta \sin x = \sin \theta; \\ \sin x &= (F/G) \sin \theta \ll 1. \end{aligned} \quad (13)$$

Вираз для енергії квазіпружного зв'язку у полі  $G$ :

$$U = -pG \cos x. \quad (14)$$

З урахуванням  $F \ll G$  і впливаючого значення  $\cos x \approx 1$ , отримуємо, що  $G = U/p$ . Цей вираз, разом із (13), можна підставити у вираз для моменту повороту, отримавши з нього вираз для моменту, індукованого обертанням диполя  $pF \sin \theta = p_0 G \sin \theta = U \sin \theta$ , а звідси – вираз для  $p$ :

$$p = \frac{p_0^2 \sin^2 \theta}{U_0} F. \quad (15)$$

З виразу (15) знаходимо поляризованість:

$$\alpha_d = \frac{p_0^2 \sin^2 \theta}{U_0}. \quad (16)$$

Нелінійність дипольної поляризованості знаходиться, як і в двох попередніх випадках, розкладанням у ряд по ступенях  $F$  її виразу:

$$\begin{aligned} p &= \frac{p_0^2 \sin^2 \theta}{U_0} F - \frac{3 p_0^3 \sin^2 \theta \cos \theta}{2 U_0^2 F} + \dots, \quad \alpha_0 = \frac{p_0^2 \sin^2 \theta}{U_0}; \\ \alpha_1 &= -\frac{3 p_0^3 \sin^2 \theta \cos \theta}{2 U_0^2} \dots \end{aligned}$$

## 1.2. Механізми релаксаційної (теплової) поляризації

Електрони, іони й диполі, крім пружної поляризації, можуть брати участь також у механізмі релаксаційної поляризації. Тепловий рух частинок у діелектрику може дуже сильно впливати на процеси поляризації, якщо диполі, іони або електрони слабо зв'язані у структурі діелектрика. Залишаючись локалізованими в мікрооб'ємі, ці частинки під дією теплового руху можуть робити теплові стрибки, переміщаючись на відстань атомних розмірів [2].

### 1.2.1. Дипольна тепла поляризація

Коли зовнішнє електричне поле відсутнє ( $E = 0$ ), диполі орієнтовані хаотично і електричний момент одиниці об'єму дорівнює нулю. Якщо ж  $E > 0$ , то у процесі теплового хаотичного руху частина диполів орієнтується по полю, внаслідок чого й виникає новий рівноважний стан – поляризований. Ця рівновага є термодинамічною: за рахунок теплових рухів (коливань, обертань) диполі орієнтуються за напрямком поля, але теплові коливання перешкоджають орієнтації всіх диполів, тому лише деяка частина диполів виявляється орієнтованою. Чим вища напруженість електричного поля, тим більша частка диполів в одиниці об'єму орієнтована за полем і тим вища дипольна тепла поляризованість  $\alpha_{дт}$ . В середньому електричний момент у розрахунку на одну молекулу пропорційний напруженості діючого на диполь електричного поля  $F$  (якщо це поле не надто велике):  $p = \alpha_{дт} F$ .

Розраховуючи поляризованість  $\alpha_{дт}$  дипольного механізму теплової поляризації, необхідно розглядати *статистичні моделі*, оскільки лише деякі

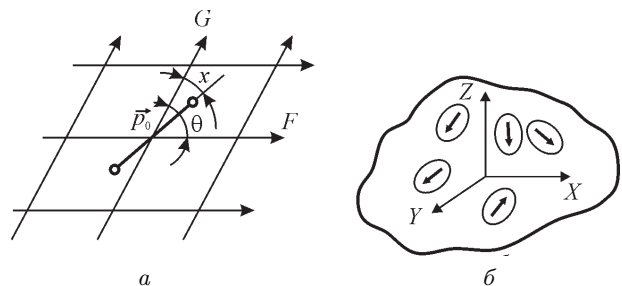


Рис. 3. Модель пружної дипольної поляризації: а – схематичне зображення повороту диполя у електричному полі  $F$ , б – усереднення поляризованості у полікристалічному поліарному діелектрику [2]

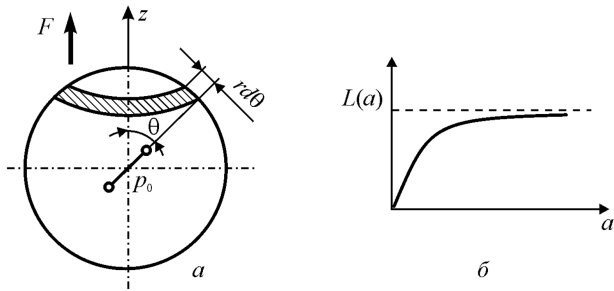


Рис. 4. Дипольна тепла поляризація: а – до розрахунку дипольного моменту, б – графік функції Ланжевена [2]

диполі (дефектні електрони чи іони) фактично змінюють свою орієнтацію (або перерозподіляються в об’ємі твердого діелектрика).

У даній моделі розглядається переорієнтація статистичного ансамблю диполів. Ймовірність орієнтації залежить від температури і від напруженості електричного поля, при цьому визначаються середні величини в ансамблі. У конкретній моделі, для спрощення, розглядається сферичний об’єм діелектрика, що містить  $N$  диполів. Диполі мають власний електричний момент  $p$  і переорієнтуються незалежно один від одного (вільним обертанням) під впливом хаотичного теплового руху.

Діюче електричне поле  $F$  повинно змінювати хаотичну орієнтацію диполів на частково орієнтовану за напрямком прикладеного поля, призводячи до поляризації:  $P = N \langle p \rangle = N \alpha_{\text{дт}} F$ , де середній момент полярної молекули  $\langle p \rangle = J dp / J dN$ ,  $dN$  – число диполів, спрямованих під кутом  $\theta$  до осі  $z$ , вони будуть вважатися орієнтованими у своєрідне кільце від  $\theta$  до  $\theta + d\theta$ ,  $dp$  – електричний момент, створюваний цими диполями. Щоб перевірити метод розрахунку, розрахуємо середній полярний дипольний момент за відсутності поля  $F = 0$ ,  $dN$  пропорційно площі кільця:

$$dN = 2\pi R^2 \sin \theta d\theta = C \sin \theta d\theta;$$

$$dp = p_0 \cos \theta dN = Cp_0 \cos \theta \sin \theta d\theta.$$

Тому

$$\langle p \rangle = \frac{J dp}{J dN} = \frac{JC \sin \theta d\theta \cos \theta p_0}{JC \sin \theta d\theta}, \quad (17)$$

$$0 \leq \theta \leq \pi, \quad \langle p \rangle = 0.$$

У разі відсутності поля поляризації не виникає. При підключенні зовнішнього електричного поля  $F > 0$ ,  $U = -pF \cos \theta$ .

Згідно з законом розподілу Больцмана, ймовірність того, що момент диполя буде орієнтований “в кільце” (від кута  $\theta$  до  $\theta + d\theta$ ), визначається як  $e^{-\frac{p_0 F}{kT} \cos \theta} = e^{-\frac{U}{kT}}$ . Формули для  $dN$  та  $dp$  матимуть інший вигляд:

$$dN = C e^{\frac{p_0 F}{kT} \cos \theta} \sin \theta d\theta;$$

$$dp = C e^{\frac{p_0 F}{kT} \cos \theta} p_0 \cos \theta \sin \theta d\theta;$$

$$\frac{\langle p \rangle}{p_0} = \text{cth} \left( \frac{p_0 F}{kT} \right) - \frac{1}{\left( \frac{p_0 F}{kT} \right)}. \quad (18)$$

Приймемо  $(p_0 F)/(kT)$  за “ $a$ ”. Тоді  $\frac{\langle p \rangle}{p_0} = \text{cth}(a) - \frac{1}{a}$ .

Вираз є функцією Ланжевена –  $L(a)$ . Для розрахунку нелінійності вона розкладається в ряд

$$L(a) = a/3 - a^3/45 - \dots,$$

$$\alpha_{\text{дт}} = \frac{\langle p \rangle / p_0}{F} = \frac{p_0^2}{3kT} - \frac{p_0^4}{45k^3T^3} + \dots,$$

звідси:

$$\alpha_0 = \frac{p_0^2}{3kT}, \quad \alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = -\frac{p_0^4}{45k^3T^3}.$$

### 1.2.2. Іонна тепла поляризація

Іонна поляризація, зумовлена тепловими коливаннями кристалічної ґратки, являє собою перескоки слабозв’язаних (зазвичай – домішкових) іонів у деякому локальному просторі кристалічної ґратки, і тому така поляризація характерна, головним чином, для твердих діелектриків з вираженою дефектністю структури, наприклад, скла, ситалів і кераміки. У цих діелектриках велика концентрація структурних дефектів. Але тепла іонна поляризація спостерігається і в монокристалах – в околі структурних дефектів.

Іони, що знаходяться в міжвузлях, а також іонні вакансії можуть змінювати місце свого розташування під впливом флуктуацій теплових коливань. Під час цих переміщень, зазвичай обмежених структурними дефектами, іони долають потенціальні бар’єри і на деякий час затримуються у нових положеннях, що індукує електричні диполі. У разі відсутності зовнішнього електричного поля локально обмежене переміщення заряджених частинок є неупорядкованим, випадковим і не призводить до макроскопічної поляризації. Зовнішнє

електричне поле вносить зміни у розподіл іонів по дефектних місцях кристалічної ґратки, внаслідок чого виникає індукована електричним полем поляризація.

Час встановлення цього виду поляризації  $\tau$  залежить від температури, від особливостей релаксації структури діелектрика і від типу дефектів.

Для аналізу релаксаційних механізмів поляризації та для розрахунку іонної теплової поляризуємості  $\alpha_{it}$ , необхідно використовувати статистичну модель. Розглядається поляризація такого діелектрика, який містить  $n_0$  слабозв'язаних іонів в одиничному об'ємі. Значення  $n_0$  набагато менше загальної концентрації іонів в діелектрику  $n$ , оскільки далеко не всі, а тільки деякі іони беруть участь у такому виді поляризації.

Термічно активовані локальні перескоки можливі тільки для слабозв'язаних іонів, локалізованих в околі структурних дефектів. Під час теплового хаотичного руху слабозв'язані іони долають деякий середній потенціальний бар'єр  $U$ , що розділяє два (або більше) ймовірних місцеположень іона. Зрозуміло, що тимчасова локалізація таких іонів може зберігатися лише у разі не дуже високих температур – таких, щоб  $U \gg k_B T$ .

Уздовж будь-якого вибраного в діелектрику напрямку в середньому переміщується лише  $n_0/3$  слабозв'язаних іонів. Середня відстань  $\delta$ , що розділяє ймовірні положення локалізації таких іонів, має порядок сталої кристалічної ґратки ( $\delta \approx 10\text{--}9$  м). Величину  $\delta$  можна назвати довжиною “вільного” пробігу. Ймовірність того, що в процесі своїх коливань у рівноважному положенні (у потенціальній ямі 1 або 2) за температури  $T$  іон може набутися енергію, більшу або рівну висоті бар'єра  $U$ , дорівнює  $\exp(-U/k_B T)$ ,  $\nu$  – частота теплових коливань іонів (дебаївська), Гц, 1 і 2 – положення потенціальних ям,  $\times n$  – число іонів, що за секунду долають бар'єр та переходять з положення 1 у положення 2 або навпаки:  $n_{12} = n_{21} = (n/6)\nu \exp(-U/k_B T)$ . При такій рівній ймовірності переходів поляризація не виникає.

Якщо до діелектрика прикласти електричне поле  $F$ , спрямоване вздовж вибраної осі  $x$ , то ймовірність переходів слабозв'язаних іонів з положення 1 у положення 2 збільшиться, у той час як ймовірність зустрічних переходів повинна зменшитися:

$$\Delta U = \frac{qF\delta}{2}. \quad (19)$$

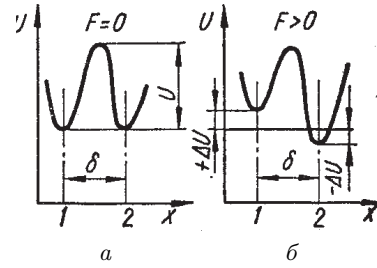


Рис. 5. До розрахунку поляризованості іонної теплової поляризації [2]

Через деякий час після включення електричного поля виявиться, що  $n_2 > n_1$ , а саме:  $n_1 = n/6 - \Delta n$ ;  $n_2 = n/6 + \Delta n$ . У розглянутій моделі теплової поляризації із загальної кількості слабозв'язаних іонів  $n$  у стрибках через бар'єр бере участь лише деяка їх частина  $\Delta n$ . Розрахуємо середню елементарну поляризованість  $\alpha_{it}$ , на один домішковий іон. Індукований полем електричний момент дорівнює  $P = \Delta n q \delta = n p = n \alpha_{it} F$ . З наведених вище виразів можна визначити величину поляризованості:

$$\alpha_{it} = \frac{\Delta n q \delta}{n_0 F}. \quad (20)$$

Таким чином, подальші розрахунки зводяться до знаходження величини  $\Delta n$ , що залежить від температури і від напруженості електричного поля. Щоб визначити час встановлення теплової іонної поляризації, необхідно врахувати і залежність  $\Delta n$  від часу:  $d(\Delta n)/dt = dn_1/dt$

Розглянемо швидкість зміни концентрації надлишкових іонів у першому положенні при включеному електричному полі. При зміні положення цієї частки долають потенціальний бар'єр висотою  $U - \Delta U$  в одному напрямку і  $U + \Delta U$  в протилежному. Одразу ж підставляємо значення  $n_1$  і  $n_2$ :

$$\frac{dn_1}{dt} = \nu e^{-U/k_B T} \left( \frac{n_0}{6} \left( e^{(-\Delta U/k_B T)} - e^{(\Delta U/k_B T)} \right) + \Delta n \left( e^{(-\Delta U/k_B T)} + e^{(\Delta U/k_B T)} \right) \right). \quad (21)$$

Для слабких полів ( $\Delta U \ll k_B T$ ):

$$\exp\left(\frac{\pm \Delta U}{k_B T}\right) = 1 \pm \frac{\Delta U}{k_B T} = 1 \pm \frac{q\delta F}{2k_B T}. \quad (22)$$

Підставляючи (22) у (21) і роблячи перетворення, отримуємо

$$\frac{dn_1}{dt} = -2 \left( \frac{n_0 q F \delta}{12 k_B T} \right) \nu e^{-\frac{U}{k_B T}} + 2 \Delta n \nu e^{-\frac{U}{k_B T}}. \quad (23)$$

Для спрощення виразу необхідно зробити заміни та позначення:  $dn_1/dt = d(\Delta n)/dt$ ;  $\tau = 1/2\nu \times \exp(U/kT)$ ;  $A = nq\delta F/12kT$ ; після чого виходить диференціальне рівняння  $\frac{d(\Delta n)}{dt} = \frac{\Delta n - A}{\tau}$ , яке має такий розв'язок:  $\Delta n = Ce^{-t/\tau} + A$ . За умов, що  $t = 0$ ,  $\Delta n = 0$ :  $C = -A$ . Підстановка значення  $A$  для:

$$\Delta n = \frac{n_0 q \delta F}{12kT} - \frac{n_0 q \delta F}{12kT} e^{-t/\tau} = \frac{n_0 q \delta F}{12kT} (1 - e^{-t/\tau}). \quad (24)$$

Підставивши вираз (24) у (20), можна отримати, що  $\alpha_{it} = \frac{q\delta}{12kT} (1 - e^{-t/\tau})$ . Якщо час дії поля досить тривалий ( $t \rightarrow \infty$ ):

$$\alpha_{it} = \frac{q^2 \delta^2}{12kT}. \quad (25)$$

### 1.2.3. Знаходження нелінійності

У достатньо сильних електричних полях повинні виявлятися нелінійні властивості будь-якого поляризаційного механізму. Іонна поляризація у цьому сенсі не є винятком. Нелінійність повинна виникати у тих випадках, коли сильне електричне поле саме викликає перекидання іонів через потенціальний бар'єр. Повернемося до рівняння (22), зберігши при його спрощенні додаткові члени:

$$\frac{dn_1}{dt} = \nu e^{\left(\frac{-U}{kT}\right)} 2 \left[ \frac{-n_0}{6} \operatorname{sh} \left( \frac{\Delta U}{kT} \right) + \Delta n \operatorname{ch} \left( \frac{\Delta U}{kT} \right) \right]. \quad (26)$$

Позначимо  $2\nu \exp(-U/kT) = 1/\tau$  і вводимо у вираз

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = \frac{1}{\tau_0} \operatorname{ch} \left( \frac{\Delta U}{kT} \right) \left( -\Delta n + \frac{n_0}{6} \operatorname{th} \left( \frac{\Delta U}{kT} \right) \right), \quad (27)$$

$$\Delta n = \left[ 1 - \exp \left( \frac{-t}{\tau_0} \operatorname{ch} \left( \frac{\Delta U}{kT} \right) \right) \right] \left( \frac{n_0}{6} \operatorname{th} \left( \frac{\Delta U}{kT} \right) \right).$$

Підставляємо  $\Delta n$  у формулу для поляризованості

$$\alpha_{it} = \left[ 1 - \exp \left( \frac{-t}{\tau_0} \operatorname{ch} \left( \frac{\Delta U}{kT} \right) \right) \right] \left( \frac{q\delta}{6F} \operatorname{th} \left( \frac{\Delta U}{kT} \right) \right).$$

Якщо поле діє тривалий час ( $t \rightarrow \infty$ ):  $\alpha_{it} = \frac{q\delta}{6F} \operatorname{th} \left( \frac{\Delta U}{kT} \right)$ .

Розкладаємо гіперболічний тангенс у ряд:  $\operatorname{th}(x) = x - x^3/3 + 2x^5/15 + \dots$  і записуємо формулу для поляризованості в формі ряду:

$$\alpha_{it} = \frac{(q\delta)^2}{12kTF} + \frac{(q\delta)^4}{144k^2T^2F^2} + \dots$$

Визначаємо коефіцієнти розкладу:

$$\alpha_0 = \frac{(q\delta)^2}{12kT}; \quad \alpha_1 = 0; \quad \alpha_2 = -\frac{(q\delta)^4}{144(kT)^2}; \quad \alpha_3 = 0.$$

Модель електронної теплової поляризації подібна до моделі іонної. При її розрахунку можна отримати такі самі результати [2].

## 2. Нелінійність у параелектриках

Плівкові сегнетоелектрики раніше досліджувались з метою використання у ролі нелінійних конденсаторів, керованих фільтрів, мікрохвильових фазообертачів. Тонкі шари сегнетоелектриків можуть використовуватися також і в керованих транзисторах у ролі підзатворних діелектриків для пристроїв сегнетоелектричної пам'яті.

Останніми роками інтерес до тонких сегнетоелектричних плівок відновлюється, оскільки в них з'явилась можливість керувати температурою фазових переходів і іншими параметрами [1]. Наприклад, температуру фазового переходу титанату стронцію можна підняти у тонкій плівці з 4 до 400 К.

Значення електричного поля, за яких спостерігається достатньо висока діелектрична нелінійність, як правило, знаходяться вище напруженостей діелектричного пробою, що утруднює їх використання. Відродження інтересу до цього явища пов'язане із появою нових технологій, що уможливають створення нанометрових шарів діелектриків. У таких нанотонких шарах діелектрична нелінійність зростає у 10 разів, а самі шари стають більш керованими. Так, наприклад, шари товщиною у 100 нанометрів можуть бути використані з високими значеннями діелектричної проникності та з дуже малими втратами керованості.

Оскільки використання таких матеріалів, як SrTiO<sub>3</sub>, BaTiO<sub>3</sub>, BST, EuTiO<sub>3</sub> стало перспективним [4, 8], необхідно переглянути теорію діелектричної нелінійності та перевірити зроблені у попередні роки теоретичні розрахунки деяких механізмів, що мають місце у сегнетоелектриках для більш точного визначення умов роботи приладів та пристроїв на тонких сегнетоелектричних плівках.

Параелектрик – це фаза сегнетоелектриків вище точки фазового переходу, що характеризується великими значеннями діелектричної проникності та



залежністю діелектричної проникності від температури за законом Кюрі–Вейсса.

### 2.1. Фазовий перехід у сегнетоелектрику

Сегнетоелектрики аномально змінюють діелектричні властивості при зміні фази. Фазові переходи у сегнетоелектрику мають свої особливості у кожному з кристалів і можуть бути подібними як до ФП першого, так і другого роду. Основні класи, на які поділяють переходи у сегнетоелектриках – тип зміщення та упорядкування-розупорядкування.

При ФП типу зміщення, вище точки Кюрі в кристалі існує нестійкість до одного з типів коливань, що називається м'якою модою. При зниженні температури і наближенні до фазового переходу частота цих коливань знижується і може досягти нуля. Це зумовлює виникнення спонтанного зміщення підґраток кристала і виникнення спонтанної поляризації.

При ФП типу упорядкування-розупорядкування структурні елементи кристала характеризуються диполь-дипольними взаємодіями, що описуються дипольними моментами. У високотемпературній фазі структурні елементи розупорядковані, а енергія такого розупорядкованого теплового руху вища за енергію взаємодії між диполями, тому орієнтація диполів хаотична, а сумарна поляризованість нульова. У низькотемпературній фазі структурні елементи упорядковуються і виникає спонтанна поляризація.

Теорія Ландау допомагає описати фазові переходи у сегнетоелектриках. Для цього використовуємо розклад виразу термодинамічного потенціалу вважаючи параметром порядку поляризованість:

$$\Phi(T, P) = \Phi_0(T) + \frac{1}{2}\alpha P^2 + \frac{1}{4}\beta P^4 + \frac{1}{6}\gamma P^6 + \dots \quad (28)$$

Вибір параметром порядку поляризації цілком закономірний, виходячи з того, що в упорядкованій низькотемпературній фазі виникає спонтанна поляризація ( $P > 0$ ), а у високотемпературній фазі енергія розупорядкованого теплового руху перевищує енергію взаємодії диполів настільки, що орієнтація диполів стає хаотичною, і їх сумарна поляризація  $P = 0$ .

Із теорії Ландау також можна вивести закон Кюрі–Вейсса, який відображає температурну залежність діелектричної проникності  $\varepsilon(T)$ , спонтан-

ної поляризації  $P_c(T)$ , вивести інші нелінійні залежності діелектрика.

Для фазового переходу другого роду вираз напруженості електричного поля можна вивести, продиференціювавши термодинамічний потенціал по параметру порядку:  $E = \partial\Phi/\partial P = \alpha P + \beta P^3$ . Взяти другу похідну, ми можемо знайти обернену діелектричну сприйнятливість:  $1/\chi = \partial E/\partial P = \alpha + 3\beta P^2$ .

Діелектрична сприйнятливість пов'язана з діелектричною проникністю виразом  $\chi = 1 + \varepsilon$ , але оскільки в околі точки фазового переходу значення діелектричної проникності дуже високі, а саме  $\varepsilon \gg 1$ , можна вважати, що  $\varepsilon \sim \chi$ .

Розглянемо неполярну фазу, в якій виконується закон Кюрі–Вейсса. Це температурний інтервал, вищий від критичної температури ( $T > T_c$ ), за якого коефіцієнт  $\alpha$  у розкладанні Ландау додатний ( $\alpha > 0$ ). Сталість фази забезпечується умовами  $\partial\Phi/\partial P = 0$  і  $\partial^2\Phi/\partial P^2 = 0$ .

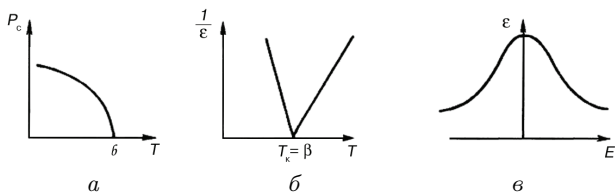
Перша умова зводиться до рівняння  $\alpha P + \beta P^3 = 0$ , що має розв'язки:  $P = 0$  та  $P = \pm(\alpha\beta)^{1/2}$ , які при тому, що  $\alpha > 0$  і  $\beta > 0$  при ФП другого роду, мають бути уявними. Отже, вище точки Кюрі спонтанної поляризації немає.

Розглянемо температурну залежність діелектричної проникності вище від точки Кюрі.  $1/\varepsilon \approx 1/\chi = \alpha + 3\beta P^2$ . Оскільки, як зазначалося вище, критичну залежність від температури має лише коефіцієнт  $\alpha$ , коефіцієнтом  $\beta$  можна знехтувати, а  $\alpha$  розписати таким чином:  $1/\varepsilon = \alpha_0(T - \theta)$ , прийнявши  $1/\alpha_0$  за сталу Кюрі–Вейсса  $C$ , отримуємо:  $\varepsilon = C/(T - \theta)$ .

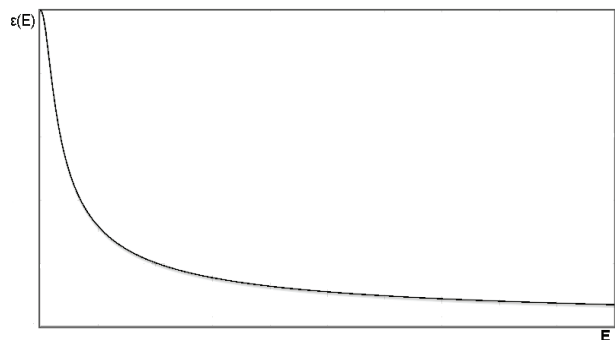
Звідси видно, що фазовий перехід відбувається за температури Кюрі–Вейсса  $\theta$ , коли параметр  $\alpha$  змінює знак. Крім температури, у неполярній фазі величина діелектричної проникності залежить не лише від температури, а й від напруженості електричного поля. З виразів  $E(P)$  та  $\chi^{-1}(P)$  видно, що у неполярній фазі сегнетоелектрики мають дуже значну та помітну діелектричну нелінійність, яку можна описати як  $\varepsilon\partial P/\partial E$ . Загальна формула нелінійності враховує як залежність від температури, так і від електричного поля:

$$\varepsilon(T, E) = \frac{\varepsilon(T)}{\sqrt[3]{1 + 3\beta\varepsilon_0^3\varepsilon^3(T)E^2}}, \quad (29)$$

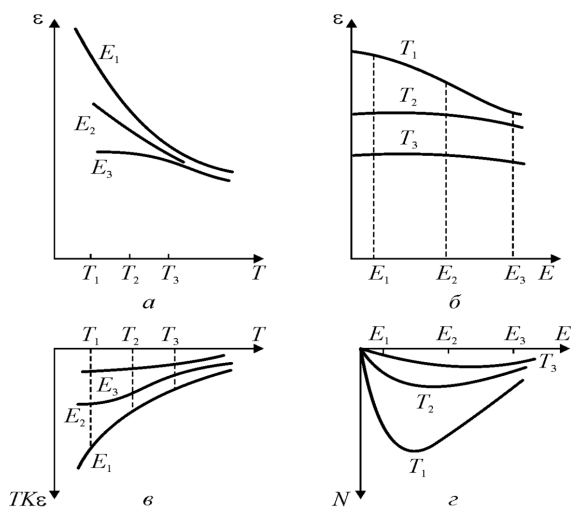
де  $\varepsilon(T) = C/(T) - \theta$ . Дослідимо цей вираз. Для початку, побудуємо графік залежності діелектричної



**Рис. 6.** Температурна залежність спонтанної поляризованості (а), оберненої діелектричної проникності (б), а також діелектрична нелінійність у неполярній фазі (в) [2]



**Рис. 7.** Залежність діелектричної проникності від напруженості електричного поля. Залежність побудовано для формули (29), використовуючи характеристики [4] титанату барію



**Рис. 8.** Основні властивості параелектриків: а, б – залежності діелектричної проникності від температури і напруженості поля; в – залежність ТК  $\epsilon$  від температури; г – залежність нелінійності  $N$  від напруженості поля [2]

проникності від напруженості електричного поля. Матеріал для цього виберемо з такими параметрами: стала Кюрі–Вейсса  $C = 1,2 \cdot 10^5$  К, критична температура  $T = 400$  К, температура Кюрі–Вейсса

$\theta = 388$  К, а коефіцієнт  $K$  буде дорівнювати приблизно  $3 \cdot 10^{-15}$ . Тобто, матеріал за своїми властивостями близький до титанату барію [2, 4].

Тепер знайдемо коефіцієнт нелінійності та температурний коефіцієнт проникності.

Зробимо заміну  $3\beta\epsilon_0^3 = K$  та розкладемо функцію у ряд:

$$\epsilon(T, E) = \frac{C}{T - \theta} - \frac{K}{3} \frac{C^4 E^2}{(T - \theta)^4} + \frac{2K^2}{9} \frac{C^7 E^4}{(T - \theta)^7} - \dots \quad (30)$$

Звідси можна визначити нелінійність та температурний коефіцієнт діелектричної проникності:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial E} = 0 - \frac{2}{3} \frac{KC^4 E}{(T - \theta)^4} + \frac{2}{3} \frac{K^2 C^7 E^3}{(T - \theta)^7}, \quad (31a)$$

$$N = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial E} \approx \frac{-2}{3} \frac{KC^3 E}{(T - \theta)^3} + \frac{2}{3} \frac{K^2 C^6 E^3}{(T - \theta)^6}, \quad (31b)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial T} = \frac{-C}{(T - \theta)^2} + \frac{4}{3} \frac{KC^4 E^2}{(T - \theta)^5} - \frac{14}{3} \frac{K^2 C^7 E^4}{(T - \theta)^8}, \quad (32a)$$

$$TK\epsilon = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial T} \approx \frac{-1}{(T - \theta)} + \frac{4}{3} \frac{KC^3 E^2}{(T - \theta)^4} - \frac{14}{3} \frac{K^2 C^6 E^4}{(T - \theta)^7}. \quad (32b)$$

Найбільший інтерес становить температура, за якої нелінійність стає максимальною. Напруженість електричного поля, за якої нелінійність максимальна, можна визначити з формули нелінійності. Вона становить:

$$\frac{2}{3} \frac{K^2 C^6 E^3}{(T - \theta)^6} = \frac{2}{3} \frac{KC^3 E}{(T - \theta)^3}, \quad E_{\max}^2 = (T - \theta)^3 / (3KC)^3.$$

За цим параметром вибирається робоча електрична напруга. Вона має бути чим нижчою, щоб попередити електричний пробій матеріалу, а також знизити нагрівання матеріалу керуючими потужностями. Для застосування параелектриків на надвисоких частотах потрібні мала величина діелектричної проникності, велика нелінійність та малий температурний коефіцієнт.

## 2.2. Нелінійні параелектричні плівки

Перспективність параелектриків полягає у їх застосуванні у НВЧ технології. Сегнетоелектричні

Компоненти, отримані при розкладі в ряд формул для поляризованості у частинах 1.1 та 1.2

Тип поляризації	$\alpha$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$
		Пружна		
Електронна	$r^3$	0	$\frac{3}{2} \frac{r^7}{q^2}$	0
Іонна	$\frac{a^3}{(n-1)}$	$\frac{a^5(n+4)}{q(n-1)^2}$	$\sim \frac{a^7 n^2}{q^2(n-1)^3}$	$\sim \frac{a^9 n^3}{q^3(n-1)^4}$
Дипольна	$\frac{p_0^2 \sin^2 \theta}{U_0}$	$-\frac{3}{2} \frac{p_0^3 \sin^2 \theta \cos \theta}{U_0^2}$	$\sim \frac{p_0^4 \sin^2 \theta}{U_0^3}$	$\sim -\frac{p_0^5 \sin^2 \theta}{U_0^4}$
		Релаксційна		
Електронна	$\frac{(e\delta)^2}{12kT}$	0	$-\frac{(e\delta)^4}{144(kT)^2}$	0
Іонна	$\frac{(q\delta)^2}{12kT}$	0	$-\frac{(q\delta)^4}{144(kT)^2}$	0
Дипольна	$\frac{p_0^2}{3kT}$	0	$-\frac{p_0^4}{45(kT)^3}$	0

матеріали у параелектричній фазі з переходом типу “зміщення” можуть використовуватися у вигляді тонких плівок, що нанесені на діелектричну підкладку з високою теплопровідністю. Оскільки часто потрібно знижувати діелектричну проникність плівки, підбираються різні коефіцієнти теплового розширення плівки та підкладки для утворення механічних напружень.

Для швидкого та безінерційного керування, плівки повинні мати такі параметри: товщина – 0,1–1 мкм, допомагає знизити  $\varepsilon$  та  $\text{tg } \delta$ , проникність  $\varepsilon = 300\text{--}1000$ ,  $\varepsilon_{\text{під}} = 10$ . Керованість плівки зовнішнім електричним полем:  $\Delta\varepsilon/\varepsilon_m$  росте разом із параметром  $\varepsilon$ . Товщина плівки також має вплив – чим вона більша, тим більша і керованість [2, 5, 6, 9].

### 3. Результати та висновки

Тонкі плівки керованих сегнетоелектриків отримують останнім часом все більше поширення. Проведене дослідження літературних джерел показує, що вони можуть бути застосовані у ролі діелектричного наповнення конденсаторів, ліній затримки та в ролі підзатворних діелектриків у транзисторах. Це дає змогу отримувати керовані електричним полем НВЧ фазообертачі та фільтри, а також новий, перспективний тип енергонезалежної пам'яті FRAM.

Виконані розрахунки механізмів показують, що навіть така найпростіша модель може описати процеси, які відбуваються під час проникнення електричного поля в діелектрик. Розрахунки по-

казують механізм зростання величини поляризованості із відстанню, та яку проникло поле.

Із урахуванням застосування було також проведено аналіз виразу діелектричної нелінійності, що мав на меті підтвердити та уточнити отриману в попередніх розрахунках інформацію. За допомогою теорії Ландау було виведено закон Кюрі–Вейсса для сегнетоелектриків у параелектричній фазі, що показав помітну залежність діелектричної проникності параелектриків від температури навколишнього середовища. З цього ж закону, скориставшись наближенням, виведено й закон нелінійності у вигляді залежності діелектричної проникності сегнетоелектрика від напруженості електричного поля. Саме ця залежність і є головною величиною, що характеризує керованість тонких сегнетоелектричних плівок.

Зважаючи на поступово зростаючий інтерес до тонких сегнетоелектричних плівок та підвищення попиту на прилади та пристрої, що їх містять, можна сказати, що технології, засновані на використанні керованих діелектриків, мають виправдати покладені на них сподівання щодо зменшення розмірів активних елементів та підвищення керованості.

1. А.Г. Белоус, О.И. Вьюнов, Укр. Хим. Журн. **78**, №7, 3 (2012).
2. Ю.М. Поплавко, Л.П. Переверзева, И.П. Раевский, *Фізика активних діелектриків* (Издательство Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, 2009).
3. Michael C. Cross, “Landau theory of second order phase transitions”, (записи лекцій по статистической механике Caltech'a).

4. M.M. Vijatović, J.D. Bobić, B. D. Stojanović, *Science of Sintering* **40**, 235 (2008).
5. А.Б. Устинов, П.И. Колков, А.А. Никитин, Б.А. Калинин, Ю.К. Фетисов, G. Srinivasan, *Журнал технической физики* **81**, вып. 6, 75 (2011).
6. В. Варадан, К. Виной, К. Джозе, *ВЧ МЭМС и их применение*, под ред. Ю.А. Заболотной (Техносфера, Москва, 2004).
7. J. Nath, W.M. Fathelbab, P.G. Lam, D. Ghosh, S. Aygiin, K.G. Gard, J.P. Maria, A.I. Kingon, and M.B. Steer, in *Microwave Symposium Digest* (IEEE MTT-S International, 2006), p. 552.
8. V. Bovtun, V. Pashkov, M. Kempa, S. Kamba, A. Eremenko, V. Molchanov, Y. Poplavko, Y. Yakumenko, J.H. Lee, and D.G. Schlom, *J. Appl. Phys.* **109**, 024106 (2011).
9. О.Г. Вендик, И.М. Бузиш, Н.Н. Антонов и др., *Сегнетоэлектрики в технике СВЧ*, под ред. О.Г. Вендика (Сов. радио, Москва, 1979), С. 101–121. Одержано 01.01.15

*I.S. Vorotiahin, Yu.M. Poplavko, E.M. Fomichov*

#### ОСОБЕННОСТИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ НЕЛИНЕЙНОСТИ В ПАРАЭЛЕКТРИКАХ

#### Резюме

Выполнены расчёты и анализ формул поляризуемости для основных механизмов поляризации диэлектриков. Полу-

ченные выражения адекватно могут отобразить возникающие при проникновении в кристалл электрического поля эффекты. Проанализирована диэлектрическая нелинейность сегнетоэлектрика при переходе в параэлектрическую фазу. Аналитически получено подтверждение результатов предыдущих исследований параэлектриков, допускающих возможность применения тонких параэлектрических плёнок в СВЧ технике и в качестве подзатворных диэлектриков.

*I.S. Vorotiahin, Yu.M. Poplavko, Y.M. Fomichov*

#### FEATURES OF DIELECTRIC NONLINEARITY IN PARAELECTRICS

#### Summary

Analytical expressions describing the polarizability of insulators in the framework of main mechanisms of polarization have been derived and analyzed. The obtained formula can adequately describe the effects that emerge, when the electric field penetrates into a dielectric crystal. A dielectric nonlinearity occurring at the ferroelectric-paraelectric phase transition is analyzed. The results of analytical calculations confirmed the results of previous researches concerning the application of thin paraelectric films in microwave technology and as gate insulators.