

УДК 537.226.2
PACS number(s): 77.22.-d; 77.22.Ej

РОЗРАХУНОК ПЕРЕХІДНОЇ ХАРАКТЕРИСТИКИ НИЗЬКООМНИХ ШАРУВАТИХ КРИСТАЛІВ GaSe

О. Флюнт

*Львівський національний університет ім. І.Франка
вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів, Україна
e-mail: flunt@electronics.wups.lviv.ua*

Запропоновано чисельний метод розрахунку перехідної характеристики матеріалів на основі експериментального низькочастотного діелектричного спектра. Метод застосовано для низькоомних кристалів GaSe, які характеризуються низькочастотною дисперсією в області температур, близьких до температури рідкого азоту. В основу методу покладено апроксимацію експериментальних даних з допомогою кубічних сплайнів з подальшим аналітичним розрахунком інтегралів. Оцінено внески в інтеграл Фур'є, зумовлений невідомими низькочастотними та високочастотними ділянками спектра, які є поза межами експерименту. Визначено часовий інтервал, на якому перехідна характеристика є достовірною з певною точністю.

Ключові слова: діелектричний спектр, перехідна характеристика, шаруватий кристал, селенід галію.

Кінетику релаксації поляризації у середовищах можна описати у вигляді перехідної характеристики або з допомогою частотного спектра [1, 2]. Перехідна характеристика переважно описує залежну від часу поляризацію матеріалу після миттєвого прикладання або миттєвого зняття постійного електричного поля. Альтернативним до часового методу є частотний метод, під час якого до зразка прикладають електричне поле, напруження якого змінюється з часом за синусоїдальним законом з кутовою частотою ω . У матеріалах, які є лінійними відносно амплітуди прикладеного сигналу, часова перехідна характеристика $f(t)$ та комплексний частотний спектр $\chi_1(\omega) - j\chi_2(\omega)$, де $\chi_1(\omega)$ та $\chi_2(\omega)$ дійсна та уявна частини комплексної діелектричної сприйнятливості, відповідно, взаємно пов'язані між собою з допомогою перетворення Фур'є

$$\chi_1(\omega) = \int_0^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt, \quad \chi_2(\omega) = \int_0^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt; \quad (1)$$

$$f(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \chi_1(\omega) \cos(\omega t) dt = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \chi_2(\omega) \sin(\omega t) dt. \quad (2)$$

Оскільки часові вимірювання описують зміну струму з часом, то перехідна характеристика є функцією дійсної змінної $f(t)$ від дійсної змінної часу t . Частотний метод дослідження передбачає наявність двох амплітуд - синфазної $\chi_1(\omega)$ та зміщеної по фазі на $\pi/2$ відносно прикладеного гармонічного збудження $\chi_2(\omega)$ від змінної частоти ω , яка є величиною дійсною. Дві компоненти $\chi_1(\omega)$ та $\chi_2(\omega)$ частотного спектру не є незалежними і пов'язані між собою з допомогою співвідношення Крамерса-Кроніга. З допомогою рівнянь (1) та (2) можна зробити висновок, що, як зарядний струм $i_c(t)$ викликаний миттєво прикладеною зовнішньою напругою, так і розрядний струм $i_d(t)$, отриманий в результаті наступного закорочення зразка, підлягають однаковій часовій залежності $f(t)$, за винятком компоненти, зумовленої провідністю матеріалу на постійному струмі, яка спостерігається лише при процесі заряджання. Та сама функція $f(t)$, яка описує часову залежність струму заряджання $i_c(t)$ під дією прикладеного електричного поля у вигляді сходинок, також описує часову залежність поляризації речовини $P(t)$ під дією дельта-функції заряджання. Тому перехідна характеристика по струму $f(t)$ є одночасно імпульсною характеристикою по поляризації $P(t)$.

Експериментальні дослідження процесів релаксації частотним методом порівняно з часовим переважно дають точніші результати насамперед тому, що при проведенні вимірювань на змінному струмі відсутня постійна складова, яка суттєво обмежує точність вимірювань. Це особливо проявляється тоді коли доводиться вимірювати сигнал зміна якого дуже мала відносно постійної складової - провідності на постійному струмі, що часто спостерігається при проведенні вимірювань у часовому просторі. Крім того, зміна порядків зміни амплітуди на частотному спектрі при зміні частоти переважно є значно меншою, ніж зміна порядків струму з часом на часовій перехідній характеристиці. Хоча в певних випадках, а саме при дослідженні довготривалих перехідних процесів дослідження релаксації у вигляді часової залежності має певні переваги тому, що потребує значно менше часу для проведення вимірювань, перехідна характеристика отримана з частотного діелектричного спектру з допомогою перетворення Фур'є в області звукових та радіо частот переважно буде точнішою та відомою на ширшому часовому інтервалі.

У фізиці напівпровідників та напівпровідниковій електроніці часто постають задачі пов'язані з імпульсними та перехідними вимірюваннями (наприклад, процеси під час яких формуються об'ємні заряди), на які накладаються в певній мірі явища поляризації, які дисперсні у відповідному часовому або частотному інтервалі. Крім того багато напівпровідникових приладів працюють в імпульсному режимі і при розрахунку перехідних процесів важливо знати форму та вклад перехідної характеристики, яка зумовлена реполяризацією матеріалу. Тому в даній роботі проведено розрахунок перехідної характеристики з допомогою перетворення Фур'є експериментальних низькочастотних діелектричних спектрів низькоомних кристалів GaSe, які характеризуються низькочастотною дисперсією в області температур близьких до температури рідкого азоту [3].

Нормований до температури 106 К спектр низькоомних кристалів GaSe показано на рис. 1 у формі комплексної ємності, яка пропорційна до комплексної діелектричної проникності через множник S/d , де S - площа контактів зразка у вигляді плоскопаралельної пластини, d - товщина зразка. Доцільність подання результатів у формі комплексної ємності пояснюється наявністю ділянок спектру, де відгук зумовлений приконттактними областями. Низькочастотний діелектричний спектр низькоомних кристалів GaSe можна розділити на дві ділянки - область низькочастотної

дисперсії [1, 2] пропорційної до $\omega^{-0,81}$, яка домінує на частотах вище $\sim 2,5$ кГц та область слабкої дисперсії, пропорційної до $\omega^{-0,1}$, яка домінує на частотах нижче $\sim 2,5$ кГц. Зростання діелектричних втрат за умови зниження частоти пропорційно до $1/\omega$ на частотах нижче $\sim 1,3$ кГц зумовлено бездисперсною провідністю зразка на постійному струмі. Спектр, показаний на рис. 1, отримано унаслідок процедури нормування, суть якої полягає у зміщенні спектрів, які відповідають різним температурам, вздовж осі частот з метою отримання єдиної узагальненої залежності, яка описує діелектричний спектр. Процедура нормування можлива, якщо форма спектра з температурою не змінюється. Тому отримано діелектричний спектр на ширшому частотному діапазоні від $0,25$ до $3,18 \cdot 10^6$ Гц.

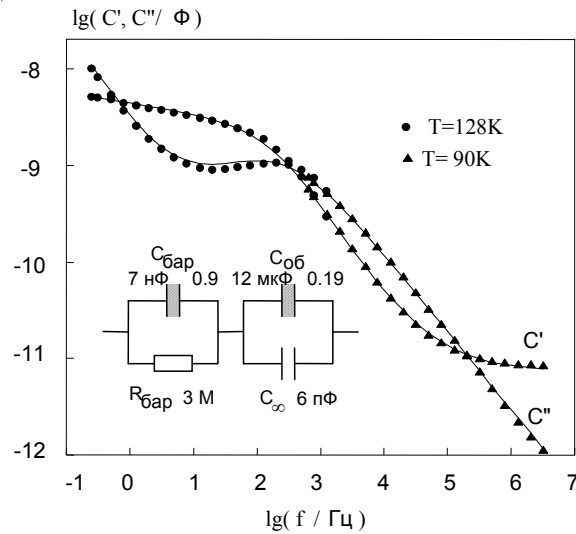


Рис. 1. Нормований до температури 106 К низькочастотний діелектричний спектр низькоомних кристалів GaSe та його еквівалентна схема

Розрахунок перехідної характеристики $f(t)$ проведемо з допомогою перетворення Фур'є (2) для дійсної складової діелектричного спектра. Оскільки діелектричний спектр відомий тільки у певному частотному інтервалі від ω_{\min} до ω_{\max} , то інтеграл розділимо на три частини

$$f(t) = \int_0^{\omega_{\min}} C_1(\omega) \cos(\omega t) d\omega + \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} C_1(\omega) \cos(\omega t) d\omega + \int_{\omega_{\max}}^{\infty} C_1(\omega) \cos(\omega t) d\omega. \quad (3)$$

На проміжку від ω_{\min} до ω_{\max} значення функції $C_1(\omega)$ відоме в окремих точках з певним майже постійним кроком у логарифмічних координатах. Тому для обчислення інтегралу на цьому частотному проміжку проведемо апроксимацію експериментальних даних кубічним сплайном так, що

$$C'(\omega) = a_{0,j} + a_{1,j}\omega + a_{2,j}\omega^2 + a_{3,j}\omega^3, \quad (4)$$

де j – номер інтервалу від частоти ω_{j-1} до ω_j . Після цього кожний з інтегралів на проміжку від ω_{j-1} до ω_j типу

$$a_i \int_{\omega_{j-1}}^{\omega_j} \omega^i \cos(\omega t) d\omega \quad (5)$$

одержимо аналітично. Оскільки підінтегральна функція осцилює навколо нуля, то верхню межу інтегрування для другого інтегралу у виразі (3) варто брати дещо меншою ніж $\omega_{\text{макс}}$ так, щоб забезпечити ціле число періодів на верхній частоті. Це особливо важливо для тих значень часу t , для яких другий інтеграл у виразі (2) містить невелику кількість періодів.

Під час розрахунку перехідної характеристики з експериментально отриманого частотного спектра за допомогою перетворення Фур'є важливо оцінити часовий інтервал, на якому перехідна характеристика буде достовірною з певною точністю. Таке завдання постає тому, що експериментальний частотний спектр відомий лише на обмеженому частотному діапазоні. З цією метою варто оцінити можливі внески до загальної суми у виразі (3) двох інтегралів на частотах від 0 до $\omega_{\text{мін}}$ та від $\omega_{\text{макс}}$ до ∞ , тобто для тих частотних інтервалів, для яких частотний спектр залишається невідомим.

Для оцінки можливого вкладу високочастотного інтегралу (від $\omega_{\text{макс}}$ до ∞) діелектричний спектр в області частот від $\omega_{\text{макс}}$ до ∞ замінимо функцією $\sim b_2/\omega$, де константа b_2 визначається з умови рівності спектрів у точці дотику $\omega_{\text{макс}}$. Вибір такої функції пояснюють тим, що високочастотна ділянка діелектричного спектра низькоомного кристала GaSe пропорційна до закону $1/\omega^{0,81}$ в області найсильнішої дисперсії спадає повільніше, ніж b_2/ω .

$$b_2 \int_{\omega_2}^{\infty} \frac{\cos \omega t}{\omega} d\omega. \quad (6)$$

Тому значення інтеграла (6) буде дещо більшим порівняно з третім доданком виразу (3) внаслідок накладання осцилюючої компоненти на спектр з сильнішою дисперсією, і його можна використати з метою оцінки межі значення високочастотного інтеграла у виразі (3). Чисельні розрахунки з допомогою протабульованих значень інтегрального косинуса засвідчують, що похибку, яка не перевищує 10%, можна гарантувати для часу, який на порядок менший від $2\pi/\omega_{\text{макс}}$.

Оцінку вкладу низькочастотного інтеграла (від 0 до $\omega_{\text{мін}}$) можна значно спростити, якщо обмежитися областю $\omega_{\text{мін}}t < 0,1$, для якої можна вважати, що $\cos(\omega t) \approx 1$. Попередня умова, окрім того, може бути використана як верхня межа для часового інтервала отриманої перехідної характеристики. Тоді інтеграл на проміжку від 0 до $\omega_{\text{мін}}$ запишемо у вигляді

$$\int_0^{\omega_{\text{мін}}} C_1(\omega) d\omega. \quad (7)$$

У цьому випадку низькочастотний інтеграл (7) даватиме внесок у вигляді постійної складової, значення якої значно залежить від форми спектра на частотах від 0 до $\omega_{\text{мін}}$. Наприклад, припустивши, що значення функції $C_1(\omega)$ в області від 0 до $\omega_{\text{мін}}$ залишається без змін і дорівнює значенню на частоті $\omega_{\text{мін}}$, значення інтегралу (7) дорівнюватиме $8 \cdot 10^{-9}$. Якщо припустити, що дисперсія в низькочастотній ділянці спектра залишається незмінною аж до нульової частоти, тобто пропорційною $b_1/\omega^{0,1}$, де константа b_1 визначається з умови $b_1/\omega^{0,1} = C_1(\omega_{\text{мін}})$, значення інтеграла (8) буде незначно більшим і дорівнюватиме $8,84 \cdot 10^{-9}$. Тобто внесок інтегралу (7) майже не залежить від поведінки спектра на частотах від 0 до $\omega_{\text{мін}}$, якщо розглядати перехідну характеристику на часах, для яких виконується умова $\omega_{\text{мін}}t < 0,1$.

Перехідна характеристика щодо поляризації низькоомних кристалів GaSe, отримана з допомогою перетворення Фур'є частотної залежності дійсної частини

ємності показана на рис. 1. Відповідно до діелектричного спектра, на перехідній характеристиці можна виділити дві ділянки: область домінування низькочастотної дисперсії при часах менших $\sim 5 \cdot 10^{-4}$ с, та область домінування слабкої дисперсії, пропорційної до $\omega^{-0,1}$ при часах, більших $\sim 5 \cdot 10^{-4}$ с. Области розділені вертикальною лінією.

Горизонтальною лінією позначено значення струму провідності через зразок на постійному струмі, яке отримане з низькочастотної ділянки діелектричних втрат, пропорційної до $1/\omega$. Точка перетину лінії з перехідною характеристикою розділяє її на дві частини, де релаксуюча частина струму більша за постійну складову, (сторона малих часів) та область, де релаксуюча складова менша за постійну складову (область великих часів).

Інтегрування перехідної характеристики за часом дає підстави отримати залежність від часу накопиченого у зразку електричного заряду тобто, перехідну характеристику кристала GaSe за зарядом, яку показано на рис. 2 праворуч.

Перехідна характеристика, отримана з допомогою косинус-перетворення Фур'є дійсної частини діелектричного спектра та синус-перетворення Фур'є уявної частини діелектричного спектра показані на рис. 3. Дві залежності збігаються одна з одною майже на всій ділянці часів, що підтверджує коректність запропонованого методу розрахунку та відповідність діелектричного спектра до співвідношення Крамерса–Кроніна. Відмінність у поведінці діелектричних спектрів, отриманих з допомогою косинус- та синус-перетворення Фур'є за $t > 7 \cdot 10^{-3}$ с пояснюють внесок провідності на постійному струмі у перехідну характеристику, отриману з уявної частини комплексної ємності.

Один з механізмів дисперсного перенесення зарядів у твердих тілах, який названо естафетним, запропоновано у роботі [4]. Для того, щоб проаналізувати перехідну характеристику в межах естафетного механізму перенесення заряду за локалізованими рівнями, на рис. 4 побудовано залежність заряду, накопиченого у зразку від кореня квадратного зі струму, який у відповідний момент часу протікає через зразок. Відповідно до естафетної моделі, частина експериментальної залежності може бути апроксимована прямою, яка перетинає вісь ординат у точці, що вважається максимальним значенням заряду, накопиченого у зразку. Для цього випадку $Q_{\max} = 2 \cdot 10^{-9}$ Кл, що відповідає поверхневій густині заряду $3,6 \cdot 10^{-5}$ Кл/м² при прикладеній до зразка постійній напрузі – один Вольт.

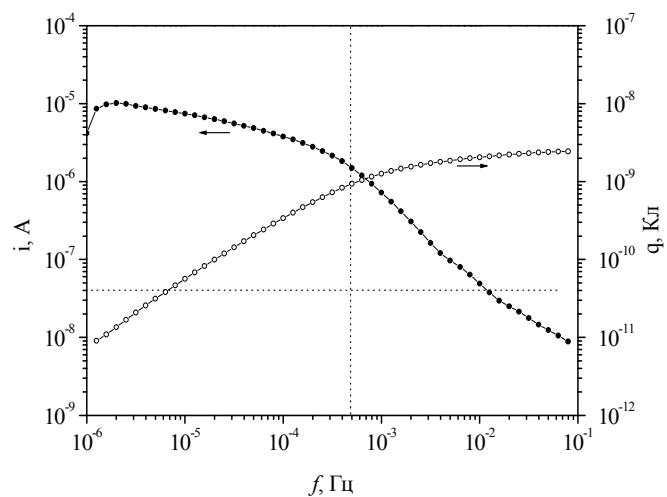


Рис. 2. Перехідна характеристика низькоомних кристалів GaSe за температури 106 К, отримана з допомогою перетворення Фур'є дійсної частини діелектричного спектра (зліва). Часова залежність заряду накопиченого у зразку (перехідна характеристика по заряду), отримана в результаті інтегрування перехідної характеристики по струму (справа)

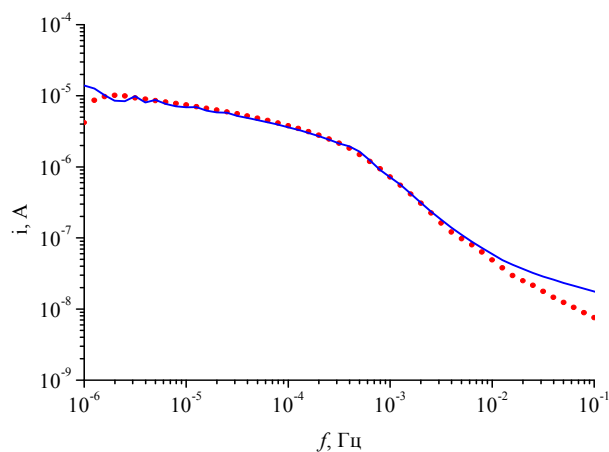


Рис. 3. Порівняння перехідної характеристики низькоомних кристалів GaSe, отриманої з дійсної (●) та уявної (—) складових діелектричного спектра з допомогою косинус- та синус-перетворення Фур'є, відповідно

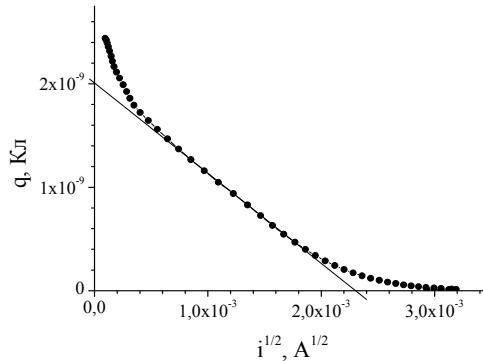


Рис. 4. Залежність заряду, накопиченого у зразку від кореня квадратного струму, який протікає через зразок у певний момент часу. Суцільна лінія – апроксимація з допомогою прямої

Отже, апроксимація діелектричних спектрів кубічними сплайнами дає змогу обчислити перехідну характеристику за струмом із допомогою перетворення Фур'є у низькоомних кристалах GaSe, які характеризуються низькочастотною дисперсією. Збіг перехідної характеристики, отриманої цим методом на основі дійсної та уявної частин комплексної діелектричної сприйнятливості, може бути критерієм відповідності діелектричного спектра співвідношенню Крамерса–Кроніга. Перехідна характеристика кристалів GaSe може бути використана у дослідженні перехідних процесів у даних матеріалах та приладах на їхній основі.

1. *Jonscher A.* Universal Relaxation Law. London: Chelsea Dielectrics Press, 1996. 415 p.
2. *Jonscher A.K.* Dielectric relaxation in solids // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1999. Vol. 32. N 14. R57–R70.
3. *Стахіра Й., Флюнт О., Фіяла Я.* Низькочастотний діелектричний спектр низькоомних кристалів GaSe // *Журн. фіз. досліджень.* 1998. Т. 2. № 1. С. 136–138.
4. *Тиман Б.Л.* Экспериментальное изучение эстафетного механизма протекания тока в системе металл-диэлектрик-металл // *Физ. и техн. полупроводн.* 1973. Т. 7. № 2. С. 230–235.

**TRANSITION CHARACTERISTIC CALCULATION
OF LOW-RESISTIVITY GaSe LAYERED CRYSTALS****O. Flunt**

*Ivan Franko Lviv National University, Faculty of Radiophysic
Dragomanov Str., 50, UA-79005 Lviv, Ukraine
e-mail: flunt@electronics.wups.lviv.ua*

Numerical calculation method of transition characteristic of the materials using Furrier transform from the low-frequency dielectric spectra has been proposed. The method has been applied for low-resistance GaSe layered crystals characterized by strong dispersive dielectric spectra (low-frequency dispersion) at liquid nitrogen temperature region. Cubic-spline approximation with follow analytical calculation of integrals lies in the basic of the method. Contribution estimation to Furier integral of unknown regions of the spectra at lower and higher frequencies beyond the measured region has been conducted. The temporal region where the transition characteristic is relevant with certain accuracy has been determined.

Key words: dielectric spectra, transition characteristic, layered crystal, gallium selenide.

**РАСЧЕТ ПЕРЕХОДНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ НИЗКООМНЫХ
СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛОВ GaSe****О. Флюнт**

*Львовский национальный университет им. И. Франко
ул. Драгоманова, 50, 79005 Львов, Украина
e-mail: flunt@electronics.wups.lviv.ua*

Предложен числовой метод расчета переходной характеристики материалов на основе экспериментального низкочастотного диэлектрического спектра. Метод использован для низкоомных кристаллов GaSe, характеризующихся низкочастотной дисперсией в области температур, близких к температуре жидкого азота. В основе метода лежит аппроксимация экспериментальных данных с помощью кубических сплайнов с последующим аналитическим расчетом интегралов. Проведена оценка вкладов в интеграл Фурье, обусловленных неизвестными низкочастотными и высокочастотными областями спектра, находящимися вне области экспериментальных данных. Определен временной интервал, для которого переходная характеристика достоверна с заданной точностью.

Ключевые слова: диэлектрический спектр, переходная характеристика, слоистый кристалл, селенид галлия.

Стаття надійшла до редколегії 18.12.2008
Прийнята до друку 20.07.2009