

# 三维 RC 网络仿真异质材料的通用介质响应<sup>\*</sup>

肖 哲<sup>1)</sup> 黄 铭<sup>1)†</sup> 巫跃凤<sup>1)</sup> 彭金辉<sup>2)</sup>

1) 云南大学信息学院, 昆明 650091)

2) 昆明理工大学材料与冶金工程学院, 昆明 650093)

(2007 年 4 月 25 日收到, 2007 年 5 月 23 日收到修改稿)

提出了一种三维 RC 网络模型, 并采用 MATLAB 及 C 语言对该模型进行编码、建模和仿真, 得到了该网络的归一化复介电常数. 分别计算了元件数为 54, 144, 300, 540 和 882 的三维 RC 网络. 结果表明, 元件数为 300 及其以上的网络, 其通用介质响应(UDR)特性趋于稳定. 获得了电容分别为 100 nF, 10 nF, 1 nF 和 100 pF 时, 540 个元件 RC 网络的归一化复介电常数与频率关系的仿真结果. 仿真了 540 个元件的 RC 网络中, 电阻比例分别为 4%, 7%, 10%, 16% 和 33% 时, 归一化复介电常数与角频率  $\omega$  的关系. 结果表明三维 RC 网络模型能仿真异质材料的通用介质响应, 且其 UDR 特性是非 Debye 型的.

关键词: 三维 RC 网络, 异质材料, 介电常数, 通用介质响应

PACC: 5225M, 7740, 7790

## 1. 引 言

通过已有物质的组合/复合来增强材料的性能已是一种常见的方法, 如将导体颗粒弥散在电介质中, 可显著提高异质材料的介电常数. 若导体颗粒直径为  $10 \mu\text{m}$ , 边界层厚度为  $10 \mu\text{m}$ , 则异质材料的介电常数将提高 1000 倍<sup>[1]</sup>. 高介电常数材料可用于制备重要的电容器和存储器, 在微电子器件中扮演着重要角色. 为设计这种异质材料, 必须了解导体颗粒和电介质的性质及其显微结构<sup>[2,3]</sup>, 并研究其复介电常数与频率的关系. 自 19 世纪中期开始, 人们一直致力于异质材料介电性质的理论和实验研究, 并发现了“通用介质响应”(universal dielectric response, UDR)现象<sup>[4-6]</sup>. 这是一种非 Debye 弛豫现象<sup>[6-10]</sup>, 与 Debye 弛豫现象<sup>[11]</sup>比较, 其交流电导率和介电常数与频率的关系具有异常的分数指数关系<sup>[12]</sup>. 近年来, 异质材料介电性质的理论和仿真已成为研究热点. Dyre 等人<sup>[13]</sup>和 Brosseau 等人<sup>[14,15]</sup>撰写的综述分析了异质材料研究的进展.

最近, Almond 等人<sup>[16-21]</sup>提出了用 RC 网络模型

模拟异质材料 UDR 现象的方法, 然而, 已发表的文獻均为二维 RC 网络模型. 本文提出了一种三维 RC 网络模型, 解决了用三维 RC 网络仿真异质材料 UDR 现象的问题. 与二维 RC 网络模型比较, 三维模型能更合理的模拟介质的 UDR 现象. 用这种模型分别仿真了元件数为 54, 144, 300, 540 和 882 的三维 RC 网络. 结果表明, 元件数为 300 及其以上的网络, 其 UDR 响应趋于稳定. 获得了电容分别为 100 nF, 10 nF, 1 nF 和 100 pF 时, 540 个元件三维 RC 网络的归一复介电常数的仿真结果. 仿真了在 540 个元件的三维 RC 网络中, 电阻比例分别为 4%, 7%, 10%, 16% 和 33% 时, 归一化复介电常数与角频率  $\omega$  的关系. 其结果为  $\epsilon''_r \propto \omega^n$  和  $\epsilon'_r \propto \omega^{n-1}$ , 与文獻 [5] 相符.

## 2. 三维 RC 网络模型

图 1 给出了本文讨论的三维 RC 网络模型. 图 1 中阴影部分为平行板电容器的极板, 两极板间为待仿真材料的三维 RC 网络模型. 左极板上复电压为  $U(\omega)$ , 右极板接地. 为了方便对其建模, 对网络中每个小立方网格的边进行了标识, 标识模式为

<sup>\*</sup> 高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20050674009)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: huangming@ynu.edu.cn

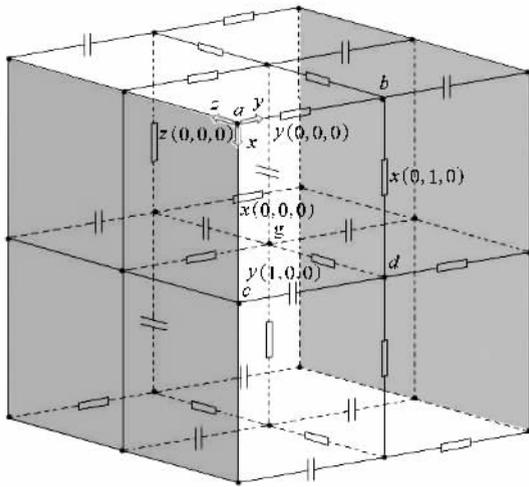


图 1 三维 RC 网络模型

$axis(i, j, k)$  其中  $axis$  用来描述坐标轴  $(i, j, k)$  用来描述位置信息,  $Z_{axis(i, j, k)}$  表示  $axis(i, j, k)$  边上的阻抗, 其复电压和复电流分别为  $V_{axis(i, j, k)}$  和  $I_{axis(i, j, k)}$ , 例如,  $X(0, 0, 0)$  代表平行于  $Y$  轴, 且其靠近原点的端点坐标为  $(0, 0, 0)$  的边, 其上的阻抗、复电压和复电流分别表示为  $Z_{X(0, 0, 0)}$ ,  $V_{X(0, 0, 0)}$  和

$I_{X(0, 0, 0)}$ . 根据 KVL, KCL 和欧姆定理, 节点  $g$ ,  $abcd$  面和  $ab$  边的方程分别为

$$I_{X(0, 1, 1)} - I_{X(1, 1, 1)} + I_{X(1, 0, 1)} - I_{X(1, 1, 0)} + I_{X(1, 1, 0)} - I_{X(1, 1, 1)} = 0, \quad (1)$$

$$V_{X(0, 0, 0)} + V_{X(1, 0, 0)} - V_{X(0, 1, 0)} - V_{X(0, 0, 0)} = 0, \quad (2)$$

$$V_{X(0, 0, 0)} - I_{X(0, 0, 0)} Z_{X(0, 0, 0)} = 0, \quad (3)$$

同理可得类似的方程, 整理这些方程可以得到如下矩阵形式的方程:

$$\begin{bmatrix} V_\alpha & 0_\alpha \\ 0_\beta & I_\alpha \\ E & Z_\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V \\ I \end{bmatrix} = 0, \quad (4)$$

其中,  $V_\alpha$  为由 KVL 电压方程得到的系数矩阵块;  $I_\alpha$  为由 KCL 电流方程得到的系数矩阵块;  $0_\alpha$  为  $6 \times 14$  的零矩阵块;  $0_\beta$  为一个  $8 \times 12$  的零矩阵块;  $E$  为一个  $12 \times 12$  的单位矩阵块;  $Z_\alpha$  为一个  $12 \times 14$  的阻抗矩阵块, 其元素  $Z_{i,n}$  ( $i \leq 12$ ) 的值为相应位置上放置元件的阻抗值, 其余所有元素均为 0;  $V, I$  分别为复电压、复电流向量. 以一个小立方网格(中心为  $g$ ) 构成的三维 RC 网络为例, 各个矩阵块分别为

$$V_\alpha = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$I_\alpha = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix},$$



$$\mathbf{Z}_\alpha = \begin{bmatrix} -1^{-10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1^{-10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1^{-10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1^{-10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -Z_{X(0,0,D)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Z_{X(0,0,d)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Z_{X(1,0,D)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Z_{X(1,0,d)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1^{-10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1^{-10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1^{-10} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1^{-10} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{V} = [V_{X(0,0,D)}, V_{X(0,0,d)}, V_{X(0,1,D)}, V_{X(0,1,d)}, V_{X(0,2,D)}, V_{X(0,2,d)}, V_{X(1,0,D)}, V_{X(1,0,d)}, V_{X(1,1,D)}, V_{X(1,1,d)}, V_{X(1,2,D)}, V_{X(1,2,d)}]^\top,$$

$$\mathbf{I} = [I_{X(0,0,D)}, I_{X(0,0,d)}, I_{X(0,1,D)}, I_{X(0,1,d)}, I_{X(0,2,D)}, I_{X(0,2,d)}, I_{X(1,0,D)}, I_{X(1,0,d)}, I_{X(1,1,D)}, I_{X(1,1,d)}, I_{X(1,2,D)}, I_{X(1,2,d)}, I_i, I_o]^\top,$$

求解矩阵形式的方程(4),计算出复电压向量  $\mathbf{V}$  和复电流向量  $\mathbf{I}$ ,即可求得三维 RC 网络的等效阻抗

$$Z_{eq}(\omega) = \frac{U(\omega)}{I_i} = \frac{U(\omega)}{I_o}, \quad (5)$$

式中

$$I_i = I_{X(0,0,D)} + I_{X(1,0,D)} + I_{X(2,0,D)} + I_{X(0,0,d)} + I_{X(1,0,d)} + I_{X(2,0,d)} + I_{X(0,0,2)} + I_{X(1,0,2)} + I_{X(2,0,2)},$$

$I_i$  和  $I_o$  分别为流出平行板电容器左极板的电流和流入右极板的电流.因而,该网络的相对复介电常数为<sup>[19]</sup>

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon'_r(\omega) + j\epsilon''_r = \frac{1}{j\omega Z_{eq}(\omega)}. \quad (6)$$

对于大型的三维 RC 网络,可以由小立方网格分别向 X 轴、Y 轴和 Z 轴方向扩展得到,例如,图 1 为 8 个小立方网格构成的三维 RC 网络(2<sup>3</sup>),共有 54 个元件,若在 X 轴、Y 轴和 Z 轴方向各拓展一个单位的网格,则网络为(3<sup>3</sup>),共有 144 个元件,依此类推,网络 n<sup>3</sup> 共有 3n(n+1)<sup>2</sup> 个元件.在电容器的极板上,因为实际存在有表面电阻,本文计算时在相应的位置上用一个 10<sup>-10</sup> Ω 的电阻来近似.

在模型的计算方面,先采用 MATLAB 来对网络进行编码与建模,得到方程式(4)的系数矩阵,再采用 MATLAB 的 C 语言接口实现对模型的计算,最后回到 MATLAB 中对数据进行处理.采用这种混合编程的方式结合了 MATLAB 与 C 语言的优点.

### 3. 仿真结果与讨论

采用元件数分别为 54,144,300,540 和 882 的三维 RC 网络模型,仿真了异质材料 UDR 现象,结果见图 2(a)和图 2(b).从图 2 中可以看出,当网络元件

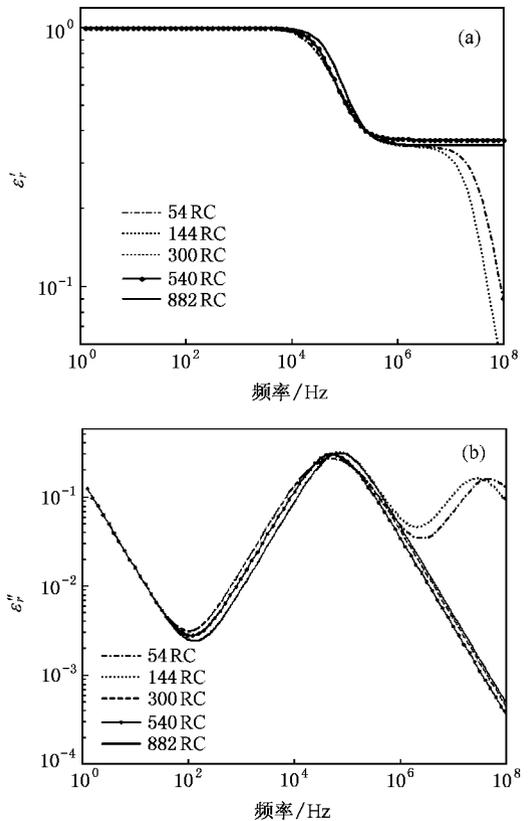


图 2 网络元件个数分别为 54,144,300,540 和 882 时,三维 RC 网络模型归一化介电常数实部(a)和虚部(b)的仿真结果

数达到 300 时,网络归一化介电常数实部  $\epsilon'_r$  和虚部  $\epsilon''_r$  趋于稳定.

本文通过改变三维 RC 网络模型中电容的大小,探讨了电容对 UDR 现象的影响,仿真结果见图 3(a)和(b)所示.从图中可以看出,随着电容的减小,网络模型的弛豫频率增加,谐振峰向高频端移动.

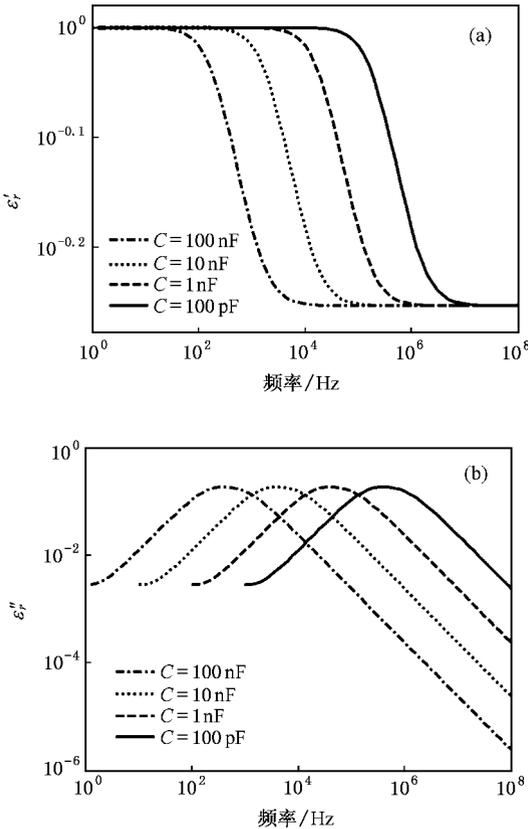


图 3 网络元件个数为 540,当  $C$  分别取 100 nF, 10 nF, 1 nF 和 100 pF 时,三维 RC 网络模型归一化介电常数实部(a)和虚部(b)的仿真结果

当三维 RC 网络模型的元件个数为 540 时,本文通过改变模型中电阻  $R$  和电容  $C$  元件个数的比例,仿真了网络归一化介电常数实部的变化,结果见图 4 所示.从图中可以看出,在频率  $10^4$ — $10^6$  Hz 范围内,随着网络中电容比例的减小, $\epsilon'_r$  的斜率逐渐增大.

为了研究  $\epsilon'_r$  和  $\epsilon''_r$  随频率变化的关系,对具有不同电阻和电容比例、元件数为 540 的三维 RC 网络模型,本文采用最小均方误差法对其在  $10^4$ — $10^6$  Hz 频率范围内的仿真数据进行拟合,并将拟合曲线的斜率与 Debye 型弛豫特性斜率进行比较,结果见表

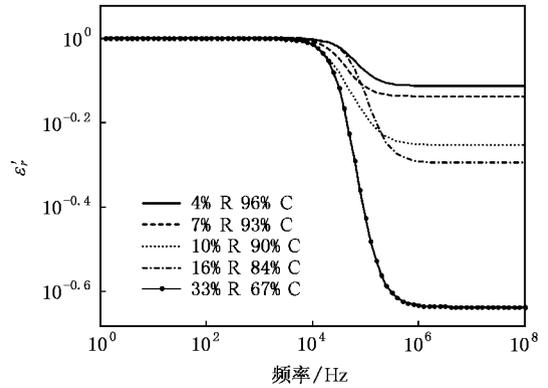


图 4 网络元件个数为 540,当三维 RC 网络模型中 RC 比例不同时,网络归一化介电常数实部的仿真结果

1.表中斜率 1 代表在  $10^4$ — $10^6$  Hz 频率范围内,三维 RC 网络模型 UDR 现象归一化介电常数实部曲线的斜率,斜率 2 代表  $10^5$  Hz 之后,UDR 现象归一化介电常数虚部曲线的斜率.由表 1 可见,对于 540 个元件的三维 RC 网络模型, $\epsilon''_r \propto \omega^{n-1}$  和  $\epsilon'_r \propto \omega^{-n}$ ,其中  $n$  为电阻数占网络元件总数的百分比,这表明三维 RC 网络可仿真异质材料的 UDR 现象<sup>[5]</sup>;与 Debye 型介质响应特性( $\epsilon''_r \propto \omega^{-2}$  和  $\epsilon'_r \propto \omega^{-1}$ )比较,异质材料的 UDR 现象是非 Debye 型的.

表 1 Debye 型介质响应斜率与不同比例三维 RC 网络模型 UDR 现象斜率的比较

分类 \ 斜率	Debye	4% R	7% R	10% R	16% R	33% R
		96% C	93% C	90% C	84% C	67% C
斜率 1	-2	-0.0402	-0.0690	-0.1100	-0.1648	-0.3293
斜率 2	-1	-0.9625	-0.9364	-0.9099	-0.8425	-0.6599

### 4. 结 论

1)元件数为 300 及其以上的三维 RC 网络模型可以仿真异质材料的 UDR 现象.

2)三维 RC 网络模型中,随着电容的减小,网络模型的弛豫频率增加.

3)对于 540 个元件的三维 RC 网络模型,若  $n$  为电阻数占网络元件总数的百分比,则网络归一化介电常数实部  $\epsilon'_r$  和虚部  $\epsilon''_r$  的变化规律为  $\epsilon''_r \propto \omega^{n-1}$  和  $\epsilon'_r \propto \omega^{-n}$ .

(4)异质材料的 UDR 现象是非 Debye 型的.



- [ 1 ] Nan C W 2005 *Heterogeneous Materials Physics :Microstructure and Property Link* ( Beijing :Science Press )( in Chinese )[ 南策文 2005 非均匀材料物理——显微结构-性能关联 ( 北京 :科学出版社 ) ]
- [ 2 ] Chen G Q , Wu Y M , Lu X Z 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1146 ( in Chinese )[ 陈国庆、吴亚敏、陆兴中 2007 物理学报 **56** 1146 ]
- [ 3 ] Beloborodov I S , Lopatin A V , Vinokur V M , Efetov K B 2007 *Rev. Mod. Phys.* **79** 469
- [ 4 ] Jonscher A K 1997 *Nature* **267** 673
- [ 5 ] Jonscher A K 1996 *Universal Relaxation Law* ( London :Chelsea Dielectric Press )
- [ 6 ] Scaife B K P 1998 *Principles of Dielectrics* ( Oxford :Clarendon )
- [ 7 ] Phillips J C 1996 *Rep. Prog. Phys.* **59** 1133
- [ 8 ] Dissado L , Hill R 1979 *Nature* **279** 685
- [ 9 ] Huang M , Peng J H , Yang J J , Wang J Q 2006 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **39** 2255
- [ 10 ] Ding Y , Yu W H 1988 *Acta Phys. Sin.* **37** 1213 ( in Chinese ) [ 丁 屹、俞文海 1988 物理学报 **37** 1213 ]
- [ 11 ] Debye P 1945 *Polar Molecules* ( New York :Dover )
- [ 12 ] Jonscher A K 1999 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **32** R57
- [ 13 ] Dyre J C , Schröder T B 2000 *Rev. Mod. Phys.* **72** 873
- [ 14 ] Brosseau C , Beroual A 2003 *Prog. Mater Sci.* **48** 373
- [ 15 ] Brosseau C 2006 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **39** 1277
- [ 16 ] Almond D P , Bowen C R 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 157601
- [ 17 ] Almond D P , Vainas B 1999 *J. Phys. : Condens. Matter* **11** 9081
- [ 18 ] Vainas B , Almond D P , Lou J , Stevens R 1999 *Solid State Ion* **126** 65
- [ 19 ] Bouamrane R , Almond D P 2003 *J. Phys. : Condens. Matter* **15** 4089
- [ 20 ] Almond D P , Bowen C R , Rees D A 2006 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **39** 1259
- [ 21 ] Bowen C R , Almond D P 2006 *Materials Science and Technology* **22** 719

## Modelling the universal dielectric response in heterogeneous materials using 3-D RC networks \*

Xiao Zhe<sup>1)</sup> Huang Ming<sup>1)†</sup> Wu Yue-Feng<sup>1)</sup> Peng Jin-Hui<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> School of Information Science and Engineering ,Yunnan University ,Kunming 650091 ,China )

<sup>2)</sup> Faculty of Materials and Metallurgical Engineering ,Kunming University of Science and Technology ,Kunming 650093 ,China )

( Received 25 April 2007 ; revised manuscript received 23 May 2007 )

### Abstract

In this paper ,a three-dimensional RC networks model has been developed ,and the RC networks has been coded ,modeled and simulated based on Matlab and C programming language. The complex permittivity of this model has been calculated. The dielectric properties of RC networks containing 54 ,144 ,300 ,540 and 882 components have been computed. It was found that these properties exhibit the anomalous power law dependence on frequency known as the ' universal dielectric response '( UDR). The UDR is stable for RC networks containing 300 or more components. When the capacitor is 100 nF ,10 nF ,1 nF and 100 pF , respectively ,the simulation results of normalized complex permittivity versus angular frequency for RC networks containing 540 components have been obtained. The relation between normalized complex permittivity and angular frequency for the RC networks containing 540 components in the ratios 4% R-96% C ,7% R-93% C ,10% R-90% C ,16% R-84% C ,33% R-67% C have been simulated. The results show that the UDR in heterogeneous materials can be modelled and simulated by 3-D RC networks , and has non-Debye nature.

**Keywords :** 3-D RC networks , heterogeneous materials , permittivity , universal dielectric response

**PACC :** 5225M , 7740 , 7790

\* Project supported by the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China( Grant No. 20050674009 ).

† Corresponding author. E-mail :huangming@ynu.edu.cn