

ФОКУСИРОВКА ФОНОНОВ И АНИЗОТРОПИЯ СТРИМЕРНОГО ПРОБОЯ В КРИСТАЛЛАХ CdS

© В.В.Зубрицкий

Институт физики Академии наук Белоруссии,

220602 Минск, Белоруссия

(Поступила в Редакцию 16 мая 1994 г.)

В окончательной редакции 12 апреля 1995 г.)

Рассчитан полный набор направлений концентрирования энергии продольных, быстрых и медленных поперечных акустических фононов в гексагональном сульфиде кадмия с учетом пьезоэлектрического эффекта при комнатной температуре. Показано, что из двадцати двух направлений фокусировки четырнадцать являются пьезоэлектрически активными, шестнадцать соответствуют математически инфинитному концентрированию ФТА- и СТА-мод. Обнаружено практически полное совпадение возможных направлений стримерных разрядов с пьезоэлектрически активными направлениями инфинитного концентрирования поперечных акустических фононов. Показана неоднозначность ранее выполненных исследований по стримерному пробояю CdS в рамках модели неполного электрического пробоя кристаллов вдоль фононных струй.

В основу модели неполного электрического пробоя кристаллов [1] положено явление фокусировки неравновесных акустических фононов [2]. Влияние последних существенно только на этапе зарождения разряда и сводится к обеспечению более высоких значений напряженности электрического поля вдоль направлений максимальной фононной фокусировки \mathbf{r}_f , где, согласно [1], наиболее эффективно тормозятся носители заряда. Экспоненциальная зависимость от поля скорости генерации носителей обеспечивает в конечном итоге локализацию треков разрядов вдоль \mathbf{r}_f [1]. В качестве подтверждения данного механизма в [1] приведены результаты сравнения рассчитанных направлений фокусировки фононов с направлениями неполного электрического пробоя для кристаллов NaCl, LiF, KBr и CdS.

Проверка выводов модели для центросимметричных LiF, NaCl, KBr, выполненная в [3,4], показала несоответствие, достигающее порядка 40° , между анизотропией пробоя и концентрированием фононов. Для нецентросимметричного сульфида кадмия в принципе необходим учет влияния на фокусировку фононов электрического поля. Такой учет выполнен в [1], однако методика его реализации, как будет показано в разделе 1, ставит вопрос о необходимости проведения независимых исследований фокусировки фононов в CdS.

1. Возможность учета электрического поля в расчетах [1]

Для реализации учета влияния электрического поля на фокусировку, как известно, необходимо знание нелинейных материальных констант материала. Однако в имеющейся литературе сведения о полном наборе компонент тензора нелинейного пьезоэлектрического эффекта для гексагонального сульфида кадмия отсутствуют. Поэтому определение нелинейных коэффициентов $e_{i\alpha\beta}$ с помощью угловых характеристик разрядов, реализованное в [1], вытекает не из теории, а из постулирования развития пробоя вдоль направлений концентрирования фононов. Это значит, что обратная операция определения ориентации треков разрядов [1] на основе подобным образом найденных $e_{i\alpha\beta}$ эквивалентна исходному постулату.

Кроме того, в вышеуказанных расчетах принято допущение о наличии только составляющей электрического поля вдоль оси Oy (E_2). В условиях, когда возбуждение фононов имеет место в поле источника в виде вкрапленной металлической полусферы [1], оно сводится к исключению из рассмотрения целого набора неизвестных нелинейных коэффициентов $e_{i\alpha\beta}$. При этом требование локализации «прикрепленных» к направлениям фокусировки LA-моды стримеров e ($\Theta \simeq 80$ и 100°) в плоскости $(\bar{1}2\bar{1}0)$ ($\varphi = 30^\circ$) также необходимо считать искусственным и обусловленным использованием некорректных экспериментальных данных по кристаллографической ориентации стримерного пробоя в пластинах CdS (из ссылки [2] в [1]). В [5,6] показано, что в объеме CdS стримерные разряды локализованы в эквивалентных плоскостях $\{10\bar{1}0\}$, т. е. содержащих кристаллофизическую ось Ox ($\varphi = 0^\circ$), и в пластинах иной ориентации они наблюдаются в виде соответствующих проекций.

Анализ, выполненный в настоящей работе, показывает, что при воздействии на CdS электрическим полем E в плоскости локализации стримерных разрядов «должны работать» девять ненулевых нелинейных компонент $e_{i\alpha\beta}$. Принятая же во внимание нелинейная компонента e_{214} в «чистой» комбинации с электрическим полем исключается из рассмотрения как в плоскости yOz , так и в плоскости xOz независимо от точечной группы симметрии кристалла при компланарной ориентации вектора E произвольного направления с любой из данных плоскостей.

Неопределенность нелинейных коэффициентов ограничивает возможность моделирования фокусировки фононов в кристаллах CdS в электрическом поле. С другой стороны, в [1] для CdS получено $E_0 = 3 \cdot 10^6$ В/см. Поэтому для оценки возможного влияния этого поля, изменяющего симметрию CdS до тригональной [1], на фокусировку примем во внимание следующее. В тригональном ниобате лития (для которого коэффициенты $e_{i\alpha\beta}$ изменены) анизотропия концентрирования фононов в таких полях незначительно отличается от распределения фоновых потоков в отсутствие поля [7,8]. Например, расчеты показывают, что отклонения отдельных направлений фокусировки La- и TA-мод от исходных составляют примерно $1-3^\circ$, если $E \leq 3 \cdot 10^6$ В/см. Проводя аналогию между свойствами этих пьезоэлектрических кристаллов, приходим к выводу о том, что для выяснения соответствия между анизотропией стримерного пробоя и концентрированием фононов

в гексагональном CdS при $E \leq E_0$ достаточно рассмотреть исходное распределение фононных потоков. Вносимая погрешность сравнения составит около 3° .

Однако в литературе для CdS имеются лишь сведения о влиянии пьезоэлектрического ужесточения на распределение групповых скоростей фононов в областях коллинеарных осей [9], которых недостаточно для целей сравнения с анизотропией пробоя. Поэтому в настоящей работе рассчитан полный набор направлений фокусировки и коэффициентов концентрирования неравновесных продольных (LA), быстрых (FTA) и медленных (STA) поперечных акустических фононов и проведено их сравнение с анизотропией стримерного пробоя.

2. Методика вычислений

Исходные уравнения и методика вычислений с учетом пьезоэлектрического эффекта аналогичны [7,8]. Учитывались потоки как инфинитного, так и неинфинитного концентрирования. Первые соответствуют направлениям, для которых коэффициент концентрирования в приближении геометрической акустики стремится к бесконечности ($A \rightarrow \infty$), вторые удовлетворяют обычному условию концентрирования ($A > 1$) [10,11]. Используются следующие материальные константы CdS: плотность — 4824 kg/m^3 , упругие постоянные (10^{10} N/m^2) — $c_{11}^E = 8.27$, $c_{12}^E = 4.99$, $c_{13}^E = 4.54$, $c_{33}^E = 9.42$, $c_{44}^E = 1.536$, пьезокоэффициенты Coul/m^2 : $e_{15} = -0.183$, $e_{31} = -0.235$, $e_{33} = -0.422$, компоненты тензора относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon_{11}^S = 8.66$, $\epsilon_{33}^S = 9.40$ (получены из [12,13]).

3. Результаты и их обсуждение

В сечении меридиональной плоскостью у LA-фононной моды обнаружены лишь четыре направления неинфинитного концентрирования. Рассчитанная плотность фононного потока вдоль оси z на 78% превышает плотность фононов по сравнению с изотропным случаем. Для направления \mathbf{r}_f^{LA} ($\Theta = 90^\circ$ (270°)) аналогичное превышение составляет около 11% . С точки зрения методологии [1] это означает, что «ямы электрического потенциала» должны быть глубже вдоль \mathbf{r}_f^{LA} ($\Theta = 0^\circ$ (180°)), соответственно и разряд преимущественно должен развиваться в этом направлении. Стримеры же в CdS вдоль оси c_6 регистрируются, как правило, при наличии в образцах соответствующих микропор и трещин [14].

Значительно более богатая картина фононного концентрирования наблюдается у поперечных мод. FTA- и STA-фононы имеют по восемь симметричных направлений инфинитного концентрирования. Отличие состоит в том, что для FTA-моды сфокусированный поток акустической энергии порождается фононами, распределенными в сравнительно широком угловом растре волновых векторов. В численном расчете это проявляется в «гигантских» коэффициентах концентрирования. У фононного пакета STA-моды, порождающего инфинитное концентрирование, набор волновых векторов заключен в значительно более узком

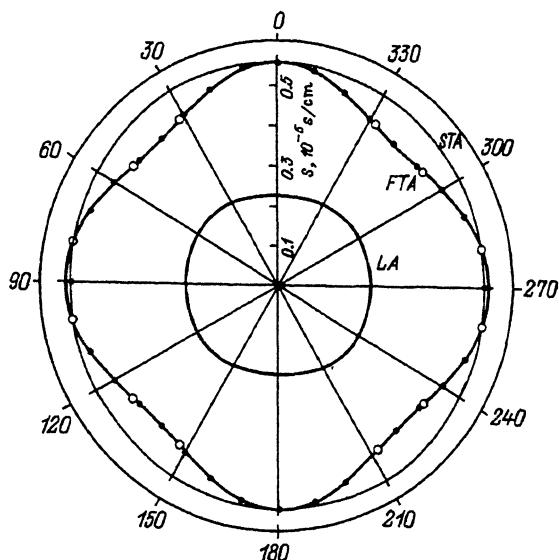


Рис. 1. Сечение поверхностей медленностей продольных (LA), быстрых (FTA) и медленных (STA) поперечных акустических фононов плоскостью, содержащей ось z , с учетом пьезоэлектрического эффекта при комнатной температуре в кристаллах CdS.

угловом интервале, что и отражается на численных величинах A_c^{STA} (табл. 1). Это хорошо видно также из рис. 1, где показаны сечения поверхностей медленностей $s(\mathbf{n})$ всех трех мод. У FTA-моды каждая порождающая инфинитное концентрирование область на поверхности $s^{FTA}(\mathbf{n})$ проявляет выраженную тенденцию к выполаживанию (отмечены темными кружками). У STA-моды аналогичные области распо-

Таблица 1

Направления фокусировки Θ_f , соответствующие областям нулевой кривизны поверхностей медленностей, и коэффициенты концентрирования A_c акустических мод в меридиональной плоскости сульфида кадмия при комнатной температуре

FTA		STA		$\Theta_d, ^\circ$
$\Theta_f, ^\circ$	A_c	$\Theta_f, ^\circ$	A_c	
41.4	$5.62 \cdot 10^2$	69.2	0.52	42.3(+)
318.6		290.8		46.2(-)
46.4	$5.21 \cdot 10^2$	80.4	1.06	85.2(-)
313.6		279.6		97.3(+)
133.6	$5.21 \cdot 10^2$	99.6	1.06	133.0(+)
226.4		260.4		135.8(-)
138.6	$5.62 \cdot 10^2$	110.8	0.52	
222.4		249.2		

Примечание. Ориентация объемных стримерных разрядов при положительной ($\Theta_d^{(+)}$) и отрицательной ($\Theta_d^{(-)}$) полярности возбуждающих импульсов напряжения для полуплоскости $(10\bar{1}0)$.

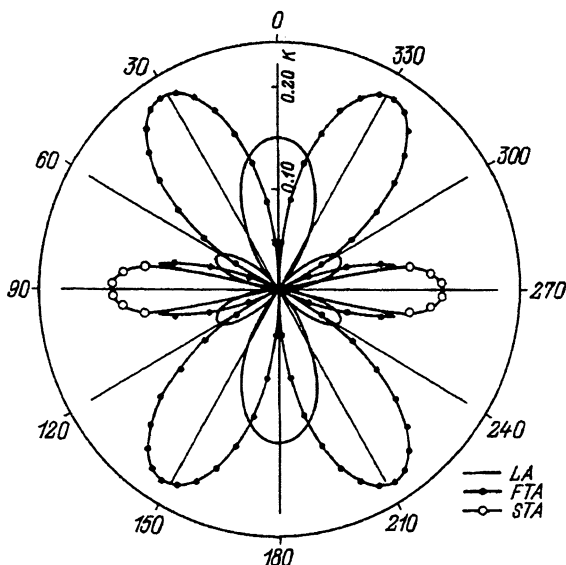


Рис. 2. Анизотропия коэффициента электромеханической связи для продольной (LA), быстрой (FTA) и медленной (STA) поперечных акустических мод в меридиональной плоскости сульфида кадмия при комнатной температуре.

ложены вблизи конических точек, и на рис. 1 при том же масштабе изображения не разрешены. Обнаруженные особенности фокусировки STA-фононов свидетельствуют о наличии заострений на поверхностях групповых скоростей STA-мод, которые ранее [9,15] не отмечались.

Кроме инфинитного FTA-мода обладает также слабым ($\approx 7\%$) неинфинитным концентрированием вдоль оси второго порядка (в табл. 1 не указано).

Таким образом, в меридиональной плоскости сульфида кадмия имеются двадцать два направления концентрирования потока энергии акустических фононов и двенадцать направлений треков разрядов. Для того чтобы в соответствии с [1] выделить пьезоэлектрически активные направления фокусировки, в настоящей работе рассчитана также анизотропия коэффициента электромеханической связи $K(\theta)$ (рис. 2).

Из рис. 2 видно, что $K^{LA}(\theta)$ имеет шестилепестковую структуру с максимумами вдоль $\theta^{LA} = 0, 63.5$ и 116.5° (для полуплоскости). Вдоль оси второго порядка $K^{LA}(\theta = 90^\circ) = 0$. С учетом ранее сказанного это значит, что привлечение LA-моды в рамках приближения [1] требует обоснования.

У медленной поперечной моды распределение $K^{STA}(\theta)$ имеет двухлепестковый гантелеобразный вид с максимумами вдоль направлений, перпендикулярных оси z . Из табл. 2 видно, что $K^{STA}(\theta) = 0$ в угловом интервале, в который попадают направления концентрирования \mathbf{r}_f^{STA} ($\theta = 68.7$ и 111.3°). Следовательно, и эти направления могут быть исключены из рассмотрения.

Максимумы восьмилепестковой структуры распределения $K^{FTA}(\theta)$ расположены вдоль $\theta^{FTA} = 32.0, 78.0, 102.0$ и 148.0° . В интервалы направлений с нулевыми значениями $K^{FTA}(\theta)$ попадают только неинфинитные потоки фононов, концентрирующиеся вдоль оси второго порядка (табл. 2).

Таблица 2

Угловые интервалы направлений ($\Delta\Theta$), в которых коэффициенты электро-механической связи LA-, FTA- и STA-акустических мод с приведенной погрешностью не хуже $10^{-3}\%$ принимают нулевые значения в меридиональной плоскости CdS при 294 K

$\Delta\Theta^{LA}, ^\circ$	$\Delta\Theta^{FTA}, ^\circ$	$\Delta\Theta^{STA}, ^\circ$
90.0	0.0	0.0–78.0
270.0	80.0–100.0	102.0–258.0
	180.0	282.0–360.0
	260.0–280.0	

В результате ограничений, накладываемых анизотропией электро-механического взаимодействия, из двадцати двух мы имеем четырнадцать принадлежащих LA-моду, являются неинфинитными и, как показано выше, могут быть исключены из рассмотрения.

Сравнение оставшихся двенадцати инфинитных направлений r_f^{FTA} и r_f^{STA} с ориентацией двенадцати стримерных треков показывает, что для десяти (в полуплоскости для пяти) треков разрядов расхождение с направлениями фононного концентрирования составляет $0.2-2.8^\circ$. И только лишь для двух (в полуплоскости для одного) треков ($\Theta_d = 85.2^\circ$) несовпадение примерно равно 4.8° .

Реализованная абсолютная погрешность измерения ориентации стримеров равна $\pm 0.15^\circ$ при доверительной вероятности 0.8–0.95 для различных треков [14]. С учетом ожидаемой погрешности сравнения с анизотропией распределения фононов это значит, что обнаруженное совпадение можно считать превосходным. Роль электрического поля может сводиться при этом главным образом к необходимому преобразованию конусов фокусировки в струи за счет понижения симметрии кристалла [1] и нарушению симметрии распределения потоков фононов относительно плоскости базиса.

Имеющее место совпадение набора направлений инфинитного концентрирования фононов с набором возможных направлений стримеров в CdS хотя и обнаружено впервые, тем не менее не может гарантировать истинности модели [1] для данного кристалла ввиду необходимости выполнения и других требований. Например, одним из них является избирательность отдельных треков разрядов к возбуждению конкретных фононных мод [1]. Согласно [4], проанализировать данное свойство можно с помощью экспериментального параметра R_{ex} — отношения скорости роста потенциала на электродах к электрической прочности образца в заданном направлении. Для сульфида кадмия данные об электрической прочности в направлениях распространения стримеров в литературе отсутствуют. Поэтому аналогично [4] допустим ее независимость от направления. При заданной длительности возбуждающего импульса основной вклад в R_{ex} будет вносить изменение амплитудного напряжения. Пороговая амплитуда напряжения для $e(\Theta_{1(3)})$ -стримеров в кристаллах с удельным сопротивлением $< 10^8 \Omega \cdot \text{см}$ заметно меньше, чем

для разрядов $e(\Theta_2)$ [14]. Значит, должно выполняться соотношение $R_{ex}(\Theta_{1(3)}) : R_{ex}(\Theta_2) \sim v_f^{STA} : v_f^{FTA}$, где v_f — скорость сфокусированных фононов, а слабое различие при комнатной температуре между порогами возбуждения $e(\Theta_1)$ - и $e(\Theta_3)$ -стримеров не учитывается. Другими словами, стримерные разряды $e(\Theta_{1(3)}) = 42.3$ и 46.2° (133.0 и 135.8°) должны развиваться вдоль STA-фононных потоков, в то время как разряды $e(\Theta_2 = 85.2$ и $97.3^\circ)$ — вдоль направлений концентрирования FTA-моды. Из табл. 1 видно, что в этом случае несовпадение отдельных направлений достигает порядка 30° .

Любая теоретическая модель, как известно, структурно состоит из физической основы и ее теоретического развития. Анализ результатов [1], выполненный как в настоящей работе, так и в цитированных выше для кристаллов различных точечных групп симметрии кубической, гексагональной и тригональной сингоний, доказывает их противоречивость. Независимо исследованная анизотропия распределения потоков инфинитного концентрирования фононов в тех же кристаллах в развитие модели [1] также существенно отличается от анизотропии неполного электрического пробоя, когда их сравнение проводится в рамках рассматриваемого приближения. С другой стороны, разнообразие фононного концентрирования в различных кристаллах и его модификация в электрическом поле предполагают необходимость изучения адекватности применения к проблеме пробоя физических принципов, заложенных в основу модели. Очевидно, что решение данного вопроса зависит, в частности, от прогресса в изучении анизотропии свойств кристаллов в сильных электрических полях и определении реальных значений напряженностей локальных электрических полей при неполном электрическом пробое кристаллов.

Список литературы

- [1] Чернозатонский Л.А. Письма в ЖЭТФ **38**, 5, 225 (1983).
- [2] Taylor B., Maris H.J., Elbaum C. Phys. Rev. **В 3**, 4, 1462 (1971).
- [3] Зубрицкий В.В. ЖТФ **61**, 10, 82 (1991).
- [4] Зубрицкий В.В. ЖТФ **63**, 5, 61 (1993).
- [5] Козловский В.И., Насибов А.С., Обидин А.З., Печенов А.Н., Попов Ю.М. Тез. докл. I Всесоюз. науч.-техн. конф. «Получение и свойства полупроводниковых соединений типа $A^{II}B^{VI}$ и $A^{IV}B^{VI}$ и твердых растворов на их основе». М. (1977). Ч. II. С. 342–343.
- [6] Зубрицкий В.В., Яблонский Г.П., Грибковский В.П. ФТП **17**, 3, 402 (1983).
- [7] Зубрицкий В.В. Письма в ЖТФ **18**, 16, 72 (1992).
- [8] Zubritskii V.V. Phys. Stat. Sol. (b) **80**, 2, 349 (1993).
- [9] McCurdy A.K. In: Phonon Scattering in Condensed Matter V / Ed. A.C. Anderson and J.P. Wolf. Springer-Verlag. Berlin-Heidelberg-N.Y. London-Paris-Tokyo (1986). P. 296–298.
- [10] Northrop G.A., Wolfe J.P. Phys. Rev. **В 22**, 12, 6196 (1980).
- [11] Lax M., Narayanamurti V. Phys. Rev. **В 22**, 10, 4876 (1980).
- [12] Акустические кристаллы / Под ред. М.П.Шаскольской. М. (1982). 632 с.
- [13] Ланьков И.А., Падо Г.С., Кобяков И.Б., Бердник В.В. ФТТ **21**, 9, 2570 (1979).
- [14] Зубрицкий В.В. Канд. дис. (1986). 182 с.
- [15] McCurdy A.K. Phys. Rev. **В 9**, 2, 466 (1974).