

(©1994 г.

НИЗКОЧАСТОТНАЯ ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В ПЬЕЗОПОЛУПРОВОДНИКАХ

B.B. Свиридов, Н.П. Ярославцев

Воронежский государственный педагогический институт,
394611, Воронеж, Россия

(Получена 7 октября 1993 г. Принята к печати 13 декабря 1993 г.)

Представлены результаты компьютерного моделирования затухания упругих колебаний килогерцевого диапазона в высокоомных пьезополупроводниках, обусловленного свободными носителями заряда. Показано, что характеристики затухания зависят от соотношения дебаевской длины экранирования и размеров образца. Изменение проводимости образца приводит к сдвигу максимума затухания по температуре с сохранением его высоты.

Делается вывод, что максвелловский механизм релаксации недостаточен для объяснения экспериментально установленных ранее особенностей электромеханической релаксации в материалах $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$, компенсированных введением глубоких центров.

1. Введение

Электромеханическая релаксация представляет собой механизм затухания упругих колебаний в материалах, обладающих одновременно заметной проводимостью и пьезоэлектрическими свойствами. Качественно она сводится к перераспределению носителей заряда в пьезоэлектрическом поле, возникающем при деформации [1]. Энергия колебаний расходуется в конечном счете на выделение джоулева тепла при протекании релаксационных токов. Для волны, распространяющейся в бесконечной среде, спектр времен релаксации состоит практически из единственной дискретной компоненты $\tau = \tau_M$, где τ_M — максвелловское время релаксации в коллективе свободных носителей заряда [2,3].

В свое время электромеханическая релаксация в пьезополупроводниках широко обсуждалась в связи с эффектом электронного усиления звука в этих материалах [2]. Недавно обнаружен еще один перспективный для практического использования ее аспект [4–6] — в высокоомных полупроводниках $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$ характеристики электромеханической релаксации в диапазоне частот $10^3 \div 10^4$ Гц тесно связаны

с характеристиками глубоких центров (ГЦ), компенсирующих материал. Именно энергия активации релаксационного процесса, определяемая из температурной зависимости затухания упругих колебаний, совпадает с энергией ионизации ГЦ; высота максимумов затухания логарифмически растет с уменьшением проводимости образца и весьма чувствительна к освещению. Далее это явление будет кратко обозначаться как ЭМРГУ (электромеханическая релаксация, связанная с глубокими уровнями).

Ранее было предложено качественное объяснение ЭМРГУ [5,7], основанное на предположении, что основной вклад в релаксацию электрического поля, возникающего в колеблющемся высокоомном пьезополупроводнике, дают носители, термически выбрасываемые с ГЦ в соответствующую зону. Однако количественная интерпретация ЭМРГУ до сих пор отсутствует [8]. Основной причиной является то, что при низких частотах, на которых наблюдается ЭМРГУ, длина упругой волны оказывается порядка размеров образца. Вследствие этого кинетические уравнения, описывающие релаксационный процесс, не могут быть упрощены путем принятия специальной зависимости переменных от координат (например, синусоидальной, как для волн в бесконечном полупроводнике [2], или иной, как в модели [7]) и вследствие этого не поддаются аналитическим методам решения.

Нами поставлена задача создания модели ЭМРГУ, основанной на численном решении кинетических уравнений с реалистическими граничными условиями. В настоящей работе представлены результаты, полученные в предположении, что обмен носителями между ГЦ и зоной очень медленный, так что роль ГЦ сводится к фиксированию равновесной концентрации свободных носителей при заданной температуре. Кинетика релаксационного процесса при этом определяется исключительно свободными носителями. И хотя качественные соображения [5,8] говорят скорее против такого предположения, его следует проверить на принятом уровне строгости как простейший вариант интерпретации ЭМРГУ. Помимо этого, полученные результаты представляют интерес сами по себе, так как до сих пор не исследовались эффекты конечных размеров образца на электромеханическую релаксацию, связанную со свободными носителями. Учет обмена носителями между ГЦ и зоной в ходе релаксационного процесса является предметом нашей последующей работы.

2. Постановка задачи

Рассматривается основная гармоника собственных изгибных колебаний пьезополупроводниковой пластинки, длина которой значительно больше ширины, а та в свою очередь — толщины. При этих условиях, характерных для экспериментов [4,5], тензор деформации имеет единственную существенную компоненту (сжатие—растяжение вдоль длиной оси пластины), которая может быть аппроксимирована выражением [5]

$$u(x, t) = u_0(x/h) \sin \omega t, \quad (1)$$

где u_0 — амплитуда деформации; x — координата, отсчитываемая от нейтральной плоскости изгиба; h — полутолщина пластины; ω — частота колебаний. Возникающее при этом пьезоэлектрическое поле,

если пренебречь граничными эффектами у узких граней, также имеет единственную компоненту, нормальную к плоскости пластины [5]:

$$E_p = eu/\varepsilon\varepsilon_0 = (eu_0/\varepsilon\varepsilon_0)(x/h) \sin \omega t, \quad (2)$$

где e — соответствующий пьезокоэффициент, $\varepsilon\varepsilon_0$ — диэлектрическая проницаемость полупроводника. Полное электрическое поле в образце, E , складывается из пьезоэлектрического E_p и поля E_c , возникающего вследствие перераспределения носителей и ориентированного также нормально плоскости образца

$$E = E_p + E_c; \quad E_c = (\varepsilon\varepsilon_0)^{-1} \int_0^x \Delta\rho(\xi, t) d\xi, \quad (3)$$

где $\Delta\rho$ — отклонение плотности заряда носителей (как свободных, так и связанных на ГЦ) от равновесной, и учтено, что в силу симметрии относительно нейтральной плоскости изгиба ($x = 0$)

$$E(x = 0, t) = 0. \quad (4)$$

В эксперименте измеряется внутреннее трение (ВТ) ϕ , которое можно определить как [1]

$$\phi = (2\pi)^{-1} \Delta W/W, \quad (5)$$

где W — полная энергия колебаний, ΔW — ее уменьшение за период, которое равно работе, совершаемой внутренними напряжениями

$$\Delta W = - \int dV \oint \gamma du, \quad (6)$$

где [3]

$$\gamma = Cu - eE \quad (7)$$

— тензор механических напряжений, приложенных к элементу объема dV , C — упругие модули. Благодаря рассмотренной выше ориентационной зависимости деформаций u и поля E соотношение (7) можно рассматривать как скалярное. Подставляя (1)–(3), (7) и (6) в (5), получаем основную формулу, связывающую затухание изгибных колебаний образца с кинетикой релаксации заряда в нем:

$$\phi = (K^2/2)(3/\pi) \oint d(\omega t) \cos \omega t \int_0^1 d(x/h)(1 - x^2/h^2) \Delta\rho(x, t) / qn_{p0}, \quad (8)$$

где $K = (e^2/C\varepsilon\varepsilon_0)^{1/2}$ — коэффициент электромеханической связи для данной кристаллографической ориентации образца, $K^2/2$ — максимально возможное значение ВТ, $q = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл, $n_{p0} = eu_0/qh$ имеет смысл концентрации носителей (электронов или дырок), необходимой для полной компенсации объемных пьезозарядов [5] при амплитудном значении деформации образца.

Как указано выше, в данной работе рассматривается случай, когда обмен носителями между ГЦ и соответствующей зоной происходит столь медленно, что можно пренебречь изменением заряда связанных на ГЦ носителей. Тогда $\Delta\rho$ определяется только поведением свободных носителей. Предполагая для простоты монополярную дырочную проводимость, для $\Delta\rho$ имеем

$$\Delta\rho = q(n - n_0); \quad \frac{\partial n}{\partial t} + q(\partial j / \partial x) = 0; \quad j = q\mu En - qD(\partial n / \partial x), \quad (9)$$

где n_0 — равновесная, а $n(x, t)$ — текущая концентрация свободных носителей (здесь — дырок), μ и D — их подвижность и коэффициент диффузии, j — плотность тока, включающего как дрейфовую, так и диффузионную компоненту.

Таким образом, с математической точки зрения задача сводится к отысканию периодического во времени решения уравнений (3), (9) с граничным условием (4), дополненным условием отсутствия тока сквозь поверхность: $j(x = h, t) = 0$.

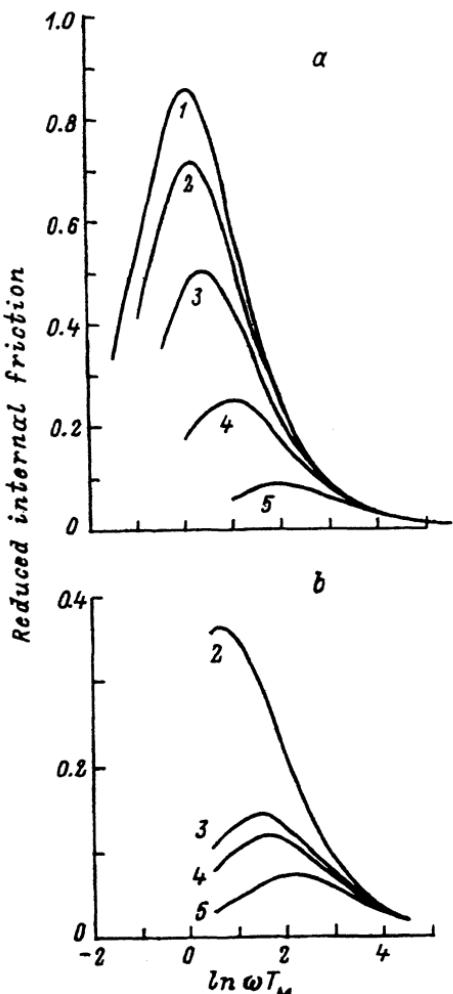


Рис. 1. Частотная зависимость ВТ:
a — в амплитудонезависимой области ($z \ll 1$); b — в амплитудозависимой области ($z = 2.5$). Отношение l_D/h равно:
1 — 0.05, 2 — 0.1, 3 — 0.2, 4 — 0.4, 5 — 0.8.

3. Организация компьютерных экспериментов

Уравнения (3), (9) интегрировались численно вперед по времени с шагом, достаточно мелким для устойчивости и точности счета. Результаты отслеживались визуально путем вывода на монитор текущих профилей распределения носителей, электрического поля и локальных потерь энергии (плотности мощности джоулева тепловыделения). По достижении периодического режима вычислялось ВТ по формуле (8) в единицах $K^2/2$. В дальнейшем отношение $\phi/(K^2/2)$ называется «приведенным ВТ».

Было выполнено 2 серии компьютерных экспериментов. В 1-й входными параметрами служили безразмерная амплитуда колебаний $z = n_{p0}/n_0$, т.е. отношение амплитудной концентрации пьезозарядов к равновесной концентрации свободных носителей, и отношение l_D/h , где $l_D = (\varepsilon \varepsilon_0 kT/q^2 n_0)^{1/2}$ — дебаевская длина экранирования. При фиксированных z и l_D , что соответствует постоянной температуре, вычислялась частотная зависимость ВТ (рис. 1).

Во 2-й серии входными параметрами служили концентрация мелких, полностью ионизированных акцепторов, N_a , глубоких центров, N_c , энергия ионизации ГЦ, ε_i (принималась равной 0.7 эВ), и справочные

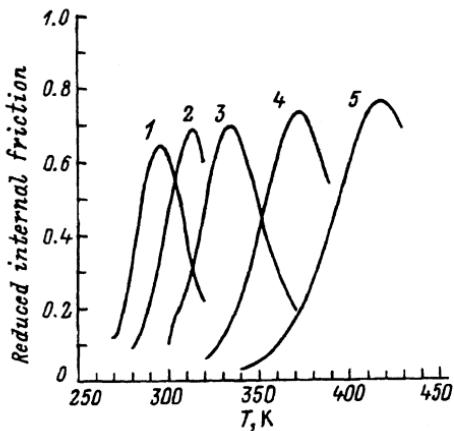


Рис. 2. Температурная зависимость ВТ для материала с параметрами p -GaAs. Частота 150 Гц. $N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Отношение N_c/N_a :

- 1 — $1 \cdot 10^{-4}$ ($\rho_r = 2.1 \cdot 10^5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$),
- 2 — $1 \cdot 10^{-3}$ ($\rho_r = 1.2 \cdot 10^6 \text{ Ом}\cdot\text{см}$),
- 3 — 1.01 ($\rho_r = 1.2 \cdot 10^7 \text{ Ом}\cdot\text{см}$),
- 4 — 1.10 ($\rho_r = 1.1 \cdot 10^8 \text{ Ом}\cdot\text{см}$),
- 5 — 10^2 ($\rho_r = 1.2 \cdot 10^9 \text{ Ом}\cdot\text{см}$).

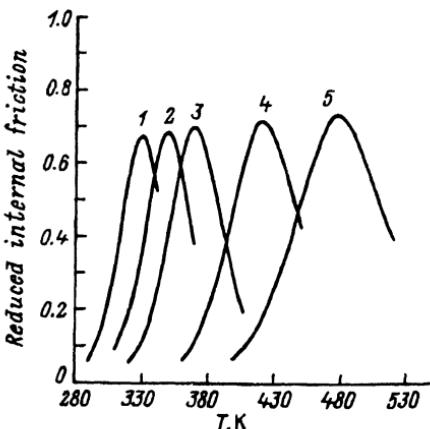


Рис. 3. То же, что на рис. 2, для материала с параметрами n -GaAs. Частота 3000 Гц. $N_c = 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Концентрация мелких доноров, N_d , равна:

- 1 — $0.9995 N_c$ ($\rho_r = 4.4 \cdot 10^5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$),
- 2 — $0.998 N_c$ ($\rho_r = 1.8 \cdot 10^6 \text{ Ом}\cdot\text{см}$),
- 3 — $0.993 N_c$ ($\rho_r = 6.2 \cdot 10^6 \text{ Ом}\cdot\text{см}$),
- 4 — $0.900 N_c$ ($\rho_r = 8.9 \cdot 10^7 \text{ Ом}\cdot\text{см}$),
- 5 — $0.100 N_c$ ($\rho_r = 8.0 \cdot 10^8 \text{ Ом}\cdot\text{см}$).

величины — плотность состояний в зоне, подвижность носителей и ее температурная зависимость и т.п. (брались значения для GaAs). Затем вычислялись температурные зависимости ВТ при фиксированной частоте (рис. 2). Концентрация свободных носителей при каждой температуре вычислялась по обычной формуле для полупроводника с одним типом мелких и одним типом глубоких примесей [9]. Для каждой температуры определялось также положение уровня Ферми. Аналогичные расчеты выполнены также для GaAs *n*-типа (рис. 3).

Результаты 2-й серии допускают непосредственное сравнение с экспериментом [4-6]. Результаты 1-й серии воспроизвести в эксперименте сложно, так как реально частота колебаний есть собственная частота образца и жестко зависит от его формы и размеров. Однако расчеты 1-й серии оказались полезнее для понимания особенностей релаксации в электронной подсистеме образца.

4. Результаты

Как частотные, так и температурные зависимости приведенного ВТ имеют хорошо выраженный максимум высотой несколько менее 1. Максимумы оказываются уширенными по сравнению с дебаевскими, для которых $\phi \sim \omega\tau/(1 + \omega^2\tau^2)$, τ — единственное время релаксации. Положение максимума на частотной зависимости, ω_m , совпадает с обратным максвелловским временем $\tau_M^{-1} = 1\mu n_0/\varepsilon\varepsilon_0$ лишь в достаточно низкоомном материале, когда $l_D/h \ll 1$. С ростом отношения l_D/h максимум затухания смещается к более высоким частотам, уменьшаясь при этом по высоте. Амплитудной зависимости ВТ не наблюдается, пока $z \ll 1$. При $z \sim 1$ или больше происходит дополнительное уменьшение пика ВТ и сдвиг к высоким частотам (рис. 1, б).

Температура T_m максимума температурной зависимости ВТ тем выше, чем сильнее компенсирован образец и чем больше его удельное

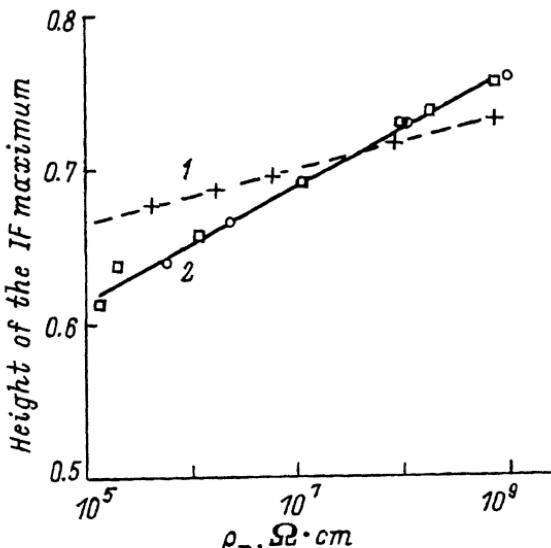


Рис. 4. Высота максимума ВТ как функция удельного сопротивления образца. 1 — *n*-GaAs, 3000 Гц; $N_c = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, N_d меняется; 2 — *p*-GaAs, 150 Гц; квадраты — $N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, N_c меняется; кружки — $N_c = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, N_a меняется

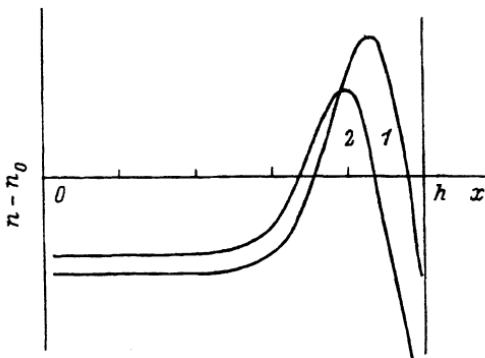


Рис. 5. Распределение концентрации носителей по сечению образца.
1 — для одного из моментов времени,
2 — спустя 0.03 периода колебаний.

сопротивление при комнатной температуре, ρ_r . В этом принципиальное отличие от данных ЭМРГУ, где T_m остается практически одной и той же для образцов с проводимостью, различающейся на несколько порядков [5]. Высота максимума ВТ с увеличением ρ_r росла по логарифмическому закону (рис. 4), причем оказалось несущественным, каким путем достигается данное значение ρ_r — изменением концентрации легирующих мелких или компенсирующих глубоких центров.

Отслеживание динамики профилей распределения носителей, электрического поля и локальных потерь в ходе компьютерных экспериментов показало, что при $\omega > \omega_m$ (или $T > T_m$, есть речь о температурной зависимости ВТ) существенное перераспределение носителей происходит лишь в тонком приповерхностном слое. Соответственно малы джоулевы потери, отнесенные к упругой энергии всего объема образца. С понижением частоты (повышением температуры) формирующиеся у поверхности области повышенной и пониженной концентрации носителей (зарядовые солитоны) пробегают все дальше по направлению к нейтральной ($x = 0$) плоскости образца (рис. 5). Максимум ВТ имеет место, когда солитон пробегает полутолщину образца примерно за полпериода.

Наиболее интенсивное выделение джоулева тепла наблюдается на расстоянии $\sim l_D$ от поверхности, где электрическое поле почти максимально, а на величине тока носителей еще не сказывается ограничение непроницаемой для них поверхностью. Это делает явным недостаточность модели [7], основное предположение которой об однородности распределения носителей в каждый момент времени серьезно нарушается именно в ключевой приповерхностной области.

5. Обсуждение

Затухание плоской волны в бесконечном пьезополупроводнике описывается формулой [2]:

$$\phi/(K^2/2) = \omega\tau_M/(\beta^2 + \omega^2\tau_M^2), \quad (10)$$

где $\beta = 1 + (2nl_D/\lambda)^2$, λ — длина волны. Формула предсказывает сдвиг максимума затухания к более высоким частотам и уменьшение его высоты с ростом l_D , т.е. тот же и, очевидно, вызванный теми же причинами эффект, что и в наших компьютерных экспериментах. Разница лишь

в том, что в нашем случае отношение l_d/λ заменяется на l_D/h , и более сложной (в частности, содержащей линейные по l_D члены) становится функция $\beta(l_D)$.

Обнаруженное уширение пиков ВТ по сравнению с дебаевским говорит о наличии более или менее широкого спектра времен релаксации у исследованных процессов. Мы оценивали основные параметры спектра релаксации $y(\xi)$, определяемого соотношением [1]

$$\phi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} Y(\ln \tau) \frac{\omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} d(\ln \tau), \quad (11)$$

следующим образом. Вначале вычислялся приближенный спектр $\tilde{Y}(\xi)$ по методу Шварца 2-го порядка [1]:

$$\tilde{Y}(\ln \tau) \approx \frac{2}{\pi} \left[1 - \frac{d^2}{d(\ln \omega)^2} \right] \phi(\omega)|_{\omega=\tau^{-1}}. \quad (12)$$

Поскольку (12) дает ненулевую ширину спектра релаксации даже для дебаевского пика $\phi(\omega)$, в качестве оценки действительной ширины спектра, $\Delta \ln \tau$, бралась ширина приближенного спектра (12) для зависимостей $\phi(\omega)$, представленных на рис. 1, а, за вычетом ширины приближенного спектра (12) для идеального дебаевского пика. Определялись также положение, τ_m и высота максимума приближенного спектра, а также положение его центра тяжести.

Оказалось, что ширина спектра релаксации $\Delta \ln \tau$ растет примерно пропорционально l_D вплоть до $l_D \sim 0.3h$, после чего стабилизируется на уровне $\Delta \ln \tau \sim 0.1$. Другими словами, характерные времена основных компонент релаксационного процесса отличаются от τ_m не более чем на 10%. Далее, при всех l_D/h выполнялось соотношение $\omega_m \tau_m \approx 1$ между положениями максимума частотной зависимости ВТ и соответствующего спектра релаксации. Центр тяжести спектра располагается, как правило, при меньшем τ , чем его максимум, что свидетельствует о наличии у спектра релаксации «хвоста» в области малых τ .

Температурные зависимости ВТ намеренно вычислялись при заниженном значении частоты колебаний (0.15 кГц для p - и 3 кГц для n -материала при том, что в натурных экспериментах частота, как правило, превышала 10 кГц) с тем, чтобы уловить возможные эффекты конечных размеров образца. Для всех образцов при $T = T_m$ отношение l_D/h было в пределах 0.1 ± 0.02 . Единственный обнаруженный эффект отличия l_D/h от нуля заключается в слабом росте высоты максимума ВТ, ϕ_m , с ростом удельного сопротивления ρ_r , что можно пояснить следующим образом. Как видно из рис. 1, а, условие максимума ВТ есть $\omega \tau_M = f(l_D/h)$, где f — некоторая возрастающая функция. Учитывая, что $\tau_M = l_D^2 D$, это условие можно переписать в виде

$$l_D^2 = D f(l_D/h) \omega, \quad (13)$$

из которого следует, что если коэффициент диффузии носителей D зависит от температуры, то и l_D в максимуме ВТ будет зависеть от

его температуры: в нашем конкретном случае l_D уменьшается с ростом T_m , что в соответствии с рис. 1 и приводит к росту высоты максимума. Поскольку коэффициент диффузии для дырок в GaAs сильнее (чем для электронов) зависит от температур, то и зависимость $\phi_m(\rho_r)$ для p -GaAs более крутая, чем для n -GaAs (рис. 4). Из (13) следует, что с ростом частоты этот эффект будет ослабевать. Заметим, что он не может служить объяснением экспериментально наблюдавшейся зависимости $\phi_m(\rho_r)$ [5], так как оказывается слишком слабым, особенно если экстраполировать его к частотам реального эксперимента.

Энергия активации релаксационного процесса в описанных условиях определялись температурной зависимостью максвелловского времени $\tau_M \sim n_0^{-1} \sim \exp(\varepsilon_F/kT)$, где ε_F — уровень Ферми, отсчитанный от края соответствующей зоны. Температурная зависимость ε_F во всех температурных интервалах, на которых вычислялись зависимости $\phi(T)$, имела вид $\varepsilon_F = \varepsilon_F^0 + \text{const} \cdot T$. Очевидно, ε_F^0 есть наблюдаемая энергия активации. Как и следовало ожидать, оказалось, что она совпадает с энергией ионизации ГЦ для всех образцов, в которых концентрации ГЦ хотя бы на 1% превышает концентрацию мелких примесей.

Таким образом, представленные результаты подтверждают вывод, что максвелловская релаксация в высокоомных пьезополупроводниках в условиях эксперимента, описанных в [4,5], должна давать максимумы затухания, положение которых на температурной шкале зависит, а высота не зависит от проводимости материала. Поскольку натурный эксперимент [4,5] дает прямо противоположные результаты, следует окончательно признать недостаточность объяснения ЭМРГУ в рамках чисто максвелловского процесса.

Список литературы

- [1] А. Новик, Б. Берри. *Релаксационные явления в кристаллах* (М., Атомиздат, 1975).
- [2] В.Л. Гуревич. ФТП, **2**, 1557 (1968).
- [3] Р. Труэлл, Ч. Эльбаум, Б. Чик. *Ультразвуковые методы в физике твердого тела* (М., Мир, 1972).
- [4] В.И. Митрохин, С.И. Рембеза, Н.П. Ярославцев. ФТТ, **26**, 2228 (1984).
- [5] В.И. Митрохин, С.И. Рембеза, В.В. Свиридов, Н.П. Ярославцев. ФТТ, **27**, 2081 (1985).
- [6] D. Laszig, P. Haasen. Phys. St. Sol. (a), **104**, K 105 (1987).
- [7] В.В. Свиридов. ФТП, **21**, 2172 (1987).
- [8] V.I. Mitrokhin, S.I. Rembeza, V.V. Sviridov, N.P. Yaroslavtsev. Phys. St. Sol. (a), **119**, 535 (1990).
- [9] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1977).

Редактор В.В. Чалдышев.