

О температурной зависимости периода гетероструктуры вблизи точки фазового перехода металл–полупроводник в пленке двуокиси ванадия

© А.Л. Семенов, Е.Н. Солодовникова

Ульяновский государственный университет,
432700 Ульяновск, Россия

E-mail: Semenov@quant.univ.simbirsk.su

(Поступила в Редакцию 15 декабря 1998 г.
В окончательной редакции 24 мая 1999 г.)

В рамках деформационной теории образования сверхструктуры чередующихся металлической и полупроводниковой фаз в окрестности критической точки термодинамически равновесного фазового перехода металл–полупроводник в монокристаллических пленках двуокиси ванадия на подложке проведен учет эффекта нелокальности неустойчивости металлического состояния при формировании полупроводниковых доменов. Показано, что данный эффект приводит к стабилизации гетероструктуры в области, где размеры полупроводниковых и металлических доменов приближенно равны. Полученная теоретическая зависимость периода гетероструктуры d от температуры T сравнивается с экспериментальными данными работы.

1. Экспериментальные исследования [1] монокристаллических пленок двуокиси ванадия толщиной $h = 0.18 \mu\text{m}$ на подложке с кристаллической осью C пленки, параллельной поверхности подложки, показали, что при понижении температуры вблизи критической точки $T_c = 340 \text{ K}$ сначала появляются отдельные достаточно удаленные друг от друга участки полупроводниковой фазы, имеющие вид перпендикулярных оси C длинных полосок шириной $a \approx 1.2 \mu\text{m}$. При дальнейшем уменьшении температуры положение сформировавшихся полупроводниковых доменов и их размеры не меняются, а в областях металлической фазы образуются новые полупроводниковые участки аналогичной формы так, что общая картина имеет вид квазипериодической квазиодномерной гетероструктуры чередующихся металлической и полупроводниковой фаз.

Развитая на основе деформационного механизма теории образования сверхрешетки фаз [2] предполагает, что достаточным условием формирования полупроводникового домена является существование в металлической фазе хотя бы одной точки с пайерлсовской [3–5] неустойчивостью по отношению к переходу в полупроводниковое состояние. Теоретическая температурная зависимость пространственного периода $d(T)$ гетероструктуры [2] находится в качественном согласии с экспериментальными данными работы [1], однако имеющееся на экспериментальной кривой плато (см. рисунок), где период практически не зависит от температуры, авторами [2] объяснен не был.

В настоящей статье в рамках теории [2] учитывается тот факт, что для образования полупроводникового домена размера a в металлической фазе должен появиться участок с пайерлсовской неустойчивостью, размер которого близок к размеру формирующегося полупроводникового домена (эффект нелокальности неустойчивости металлической фазы). Это накладывает более жесткие условия (по сравнению с рассмотренным в [2]

случаем точечной неустойчивости металлической фазы) на возможность образования новых полупроводниковых доменов и стабилизирует гетероструктуру. В результате оказывается возможным более адекватное описание имеющихся экспериментальных данных. В частности удается объяснить имеющийся на экспериментальной кривой $d(T)$ почти горизонтальный участок, на котором размеры металлических b и полупроводниковых a доменов приближенно равны ($b \approx a$).

2. Рассмотрим пленку VO_2 , в которой при некоторой температуре T образовалось несколько удаленных друг от друга полупроводниковых полосок ширины a . Введем координатную ось X параллельно поверхности пленки вдоль кристаллической оси C с началом координат в центре участка металлической фазы. Известно [6], что при переходе в полупроводниковую фазу VO_2 расширяется вдоль оси C с относительным коэффициентом расширения

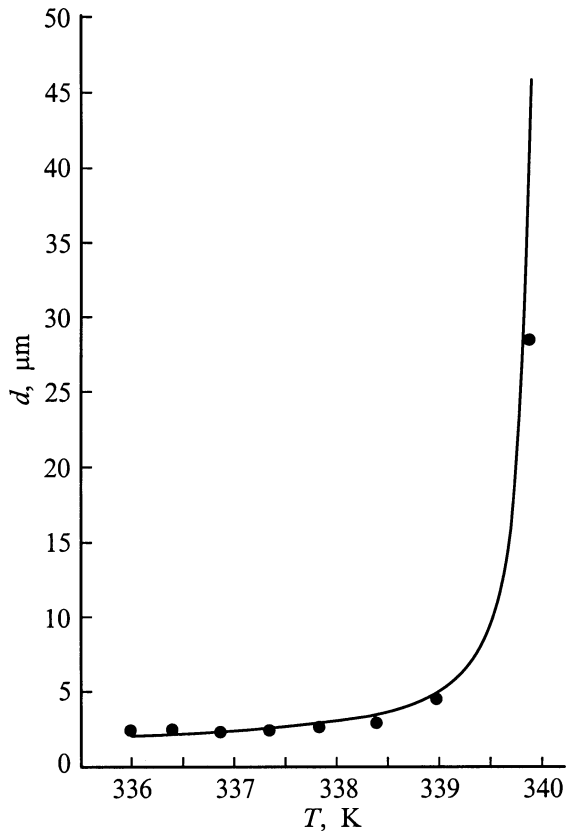
$$\alpha = \frac{l_s - l_m}{l_s} \sim 10^{-3}, \quad (1)$$

где l_s, l_m — длина образца VO_2 вдоль кристаллической оси C соответственно в полупроводниковом и металлическом состояниях. Благодаря такому расширению в металлической области пленки ($|x| < b/2$) возникает направленное вдоль кристаллической оси C механическое напряжение σ , которое приближенно можно вычислить по следующей формуле [2]:

$$\sigma = \sigma(x) = \frac{4\alpha E}{5} \left[J \left(\frac{4E_0}{5Eh} \left(\frac{b}{2} + x \right) \right) + J \left(\frac{4E_0}{5Eh} \left(\frac{b}{2} - x \right) \right) \right]. \quad (2)$$

Здесь E, E_0 — соответственно модуль Юнга пленки и подложки;

$$J(x) = \cos(x) \left[\frac{\pi}{2} - \text{Si}(|x|) \right] + \sin(x) \text{Ci}(|x|). \quad (3)$$



Экспериментальная и расчетная зависимости периода d гетероструктуры от температуры T . Сплошная линия — численный расчет по формулам (2), (5); кружки — результаты, полученные путем обработки экспериментальных данных по дифракции света на квазипериодической сверхрешетке фаз в пленке VO_2 [1].

Из (2), (3) видно, что механическое напряжение σ наиболее велико вблизи границы с полупроводниковыми доменами ($x = \pm b/2$) и уменьшается к центру металлического участка ($x = 0$) с характерным пространственным масштабом уменьшения $l \approx Eh/E_0 \approx a/2$.

Имея в виду, что температура T_c неустойчивости металлической фазы по отношению к переходу в полупроводниковое состояние в широком интервале изменения хорошо описывается формулой [3,7]

$$T_c = T_0 + \gamma\sigma, \quad (3)$$

где $T_0 = T_c(\sigma = 0) \cong 340$ К — температура пайерлсовской неустойчивости VO_2 при $\sigma = 0$, $\gamma = \partial T_c / \partial \sigma \cong -1.2 \cdot 10^{-9}$ К · см²/дин, находим условие образования при температуре T нового полупроводникового домена размера a в центре участка металлической фазы

$$T = T_0 + \gamma\sigma \left(\frac{a}{2} \right). \quad (5)$$

Результаты численного анализа уравнений (2), (5), образующих замкнутую систему для определения зависимости среднего пространственного периода гетеро-

структуры $d = a + b$ от температуры T , представлены на рисунке.

В области температур $336 < T < 339$ К полученные теоретические результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными работы [1]. При температурах $339 < T < 340$ К, когда $b \gg a$, в области $|x| < (b-a)/2$ создаваемое полупроводниковыми доменами механическое напряжение σ (2) мало по сравнению со случайным механическим напряжением пленки, возникшем при ее изготовлении (трещины, царапины и другие дефекты). Поэтому процесс образования новых доменов полупроводниковой фазы на начальном этапе (при $b \gg a$) в основном определяется исходными врожденными пространственными флуктуациями деформаций пленки и в рамках предлагаемой теории не описывается.

Список литературы

- [1] К.А. Валиев, В.Г. Мокеров, В.В. Сарайкин, А.Г. Петрова. ФТТ **19**, 9, 1537 (1977).
- [2] В.И. Емельянов, А.Л. Семенов. ФТТ **32**, 10, 3083 (1990).
- [3] В.И. Емельянов, Н.Л. Левшин, А.Л. Семенов. Вестн. МГУ. Сер. 3, Физика, астрономия **30**, 5, 52 (1989).
- [4] А.Л. Семенов. ФТТ **39**, 5, 925 (1997).
- [5] А.Л. Семенов. ЖЭТФ **111**, 4, 1398 (1997).
- [6] T. Kawakudo, T. Nakagawa. J. Phys. Soc. Jap. **19**, 4, 517 (1964).
- [7] L.A. Ladd, W. Paul. Solid. Stat. Commun. **7**, 2, 425 (1969).