

# 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  $\text{VO}_2$ , 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  $\text{VO}_2$  расширяется вдоль оси  $C$  с относительным коэффициентом расширения

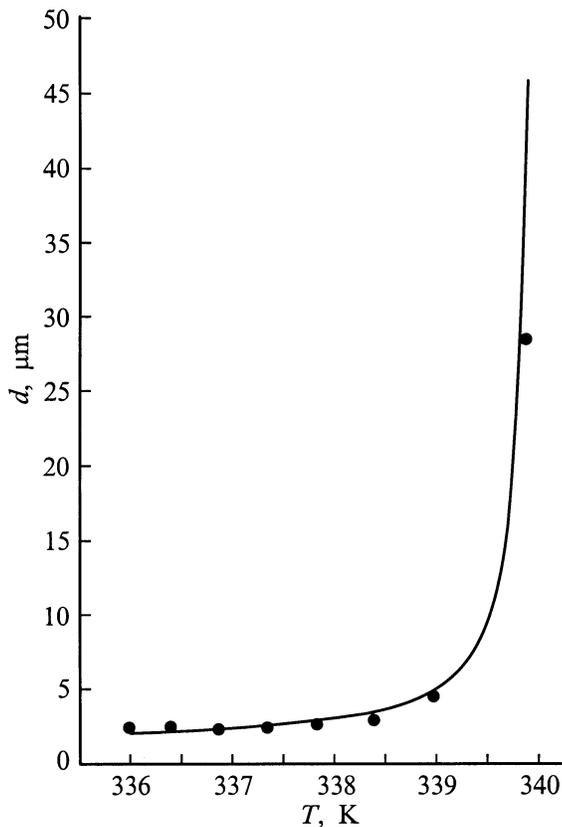
$$\alpha = \frac{l_s - l_m}{l_s} \sim 10^{-3}, \quad (1)$$

где  $l_s, l_m$  — длина образца  $\text{VO}_2$  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  $\sigma$ , которое приближенно можно вычислить по следующей формуле [2]:

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

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  $\text{VO}_2$  [1].

Из (2), (3) видно, что механическое напряжение  $\sigma$  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  $\text{VO}_2$  при  $\sigma = 0$ ,  $\gamma = \partial T_c / \partial \sigma \cong -1.2 \cdot 10^{-9}$  К · см<sup>2</sup>/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  $\sigma$  (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).