06

Неравновесный фазовый переход полупроводник–металл, происходящий под действием саморазогрева

© А.В. Мелких, А.А. Повзнер

Уральский государственный технический университет,
620002 Екатеринбург, Россия
e-mail:mav@dpt.ustu.ru

(Поступило в Редакцию 9 ноября 2001 г.)

Рассмотрена модель неравновесного фазового перехода полупроводник–металл, происходящего в переходных металлах с узкими зонами за счет саморазогрева. Показано, что саморазогрев может приводить к уменьшению ширины запрещенной зоны и, как следствие, к увеличению тока. Найдены параметры системы, при которых может иметь место бистабильное поведение.

Существует обширная группа переходных металлов с узкими зонами, претерпевающих обратимый переход диэлектрик–металл под действием температуры без изменения их агрегатного состояния [1,2].

При определенной температуре фазового перехода T_{tr} резко меняется характер температурной зависимости и величина электропроводности. Ниже T_{tr} она меняется по экспоненциальному закону (характерному для диэлектриков и полупроводников), выше T_{tr} наблюдается слабое ее падение, характерное для металлов.

Механизмы электронных переходов все еще остаются предметом дискуссий (см., например, [3,4]). Вместе с тем поскольку изменение температуры образца может произойти в результате его саморазогрева (при этом проводимость будет меняться скачком на порядки величин), то для таких веществ актуальным является описание их теплообмена с окружающей средой и возникающие при этом неустойчивости тока.

В диэлектрике или полупроводнике концентрация носителей тока зависит от температуры по закону

$$n = n_0 \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right). \tag{1}$$

Согласно электронной теории фазового перехода металл–полупроводник (ФПМП) [1], при увеличении температуры ширина запрещенной зоны уменьшается из-за увеличения концентрации носителей тока n. Это уменьшение можно приближенно записать в виде

$$E_g = E_{g0} - Kn, \tag{2}$$

где E_{g0} — ширина запрещенной зоны при $n = 0$, K — константа электронно-фононного взаимодействия.

Тогда для проводимости можно записать выражение

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_{g0} - M\sigma}{2kT}\right) = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_{g0}}{2kT}\right) \exp\left(\frac{M\sigma}{2kT}\right), \tag{3}$$

где $M = n_0/\sigma_0$ — константа.

Рассмотрим диэлектрик в виде провода круглого сечения радиусом R, в котором может реализоваться ФПМП. Найдем его вольт-амперную характеристику. Будем иметь в виду, что тепло, выделяющееся в образце, идет на его нагрев. В стационарных условиях мощность равна потоку тепла, уходящему с поверхности в окружающую среду,

$$j\pi R^2 \Delta\varphi = \alpha 2\pi R(T - T_0), \tag{4}$$

где j — плотность тока в образце, $\Delta\varphi$ — разность потенциалов на его концах.

Будем считать, что основное тепловое сопротивление сосредоточено на поверхности образца и температура его практически одинакова. Эта ситуация соответствует характерному радиусу шнура тока [5], равному радиусу проводника. Тогда, используя (3) и (4), запишем выражение для ВАХ образца

$$j = \sigma_0 \Delta\varphi \exp\left(-\frac{E_{g0} - M\frac{j}{\Delta\varphi}}{2k\left[T_0 + \frac{jR\Delta\varphi}{2\alpha}\right]}\right). \tag{5}$$

Вследствие наличия обратной связи ВАХ является нелинейной.

Для анализа S-образных особенностей ВАХ перейдем к безразмерным переменным

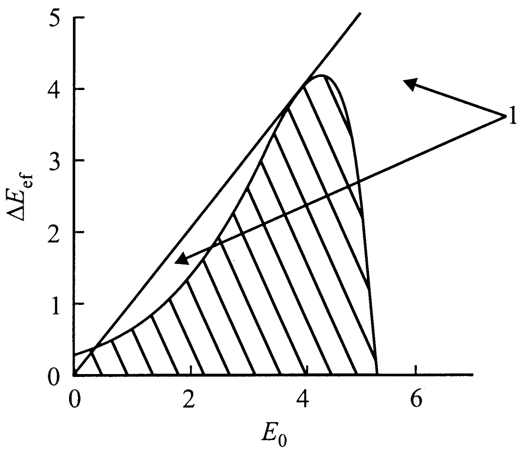
$$\frac{Mj}{2kT_0\Delta\varphi} = Y, \quad \frac{R}{2\alpha T_0} j\Delta\varphi = X, \quad \frac{E_{g0}}{2kT_0} = E_0$$

и найдем ее особые точки

$$\frac{\partial \Delta\varphi}{\partial j} = 0 = \frac{1}{\sigma_0} \exp\left(\frac{E_0 - Y}{1 + X}\right)\left\{1 + \frac{-Y - E_0 X}{[1 + X]^2}\right\}. \tag{6}$$

Вообще говоря, особых точек может быть две, одна или не быть совсем. Переход от S-образной кривой к монотонной соответствует критической ВАХ, т.е. в критической точке должно выполняться условие

$$\frac{\partial^2 \Delta\varphi}{\partial j^2} = 0.$$



Фазовая диаграмма системы: *1* — бистабильность.

Тогда из (6) получим

$$X^2 + (2 - E_0)X - Y + 1 = 0. \qquad (7)$$

Приравниваем нулю вторую производную, находим, что

$$-E_0 X + 4[1 + X] = Y. \qquad (8)$$

Комбинируя далее (7) и (8), получаем квадратное уравнение

$$X^2 - 2X - 3 = 0,$$

откуда $X_c = 3$.

Тогда из равенства нулю первой и второй производной имеем

$$16 - 3E_{0c} - Y_c = 0.$$

Используя (5), получим

$$\frac{kT_0}{M\sigma_0}(16 - 3E_0) = \exp(4 - E_0).$$

Для чистого полупроводника ранее авторами получена оценка критического значения ширины запрещенной зоны [6]: $E_0 = 4$, что составляет примерно 0.2 eV. Обозначая

$$\frac{M\sigma_0}{kT_0} \equiv \Delta E_{\text{ef}},$$

получим фазовую диаграмму системы (см. рисунок)

$$\Delta E_{\text{ef}} = \exp(E_0 - 4)(16 - 3E_0).$$

На рисунке заштрихованная область соответствует отсутствию бистабильности (неравновесных фазовых переходов), прямая линия — нулевой ширине щели. По-видимому, имеют смысл только состояния ниже этой линии.

Например, для VO_2 ширина запрещенной зоны составляет порядка 0.5 eV [1]. Следовательно, это вещество находится в области бистабильности. Формулы, полученные выше, верны для случая, когда горячая или холодная фаза занимает весь проводник. Минимальная температура должна наблюдаться на поверхности образца. Если эта температура будет настолько низкой, что горячая фаза существовать не сможет, то произойдет переход к холодной фазе и образуется двухфазная система. При этом вольт-амперная характеристика изменится, поскольку при изменении разности потенциалов граница между фазами будет двигаться. Эту ситуацию планируется рассмотреть в отдельной работе.

Таким образом, в результате анализа вольт-амперных характеристик переходных металлов с узкими зонами показано, что вследствие саморазогрева в них могут происходить скачкообразные изменения проводимости. Найдены параметры системы, при которых бистабильное поведение может иметь место.

Список литературы

[1] *Бугаев А.А., Захарченя Б.П., Чудновский Ф.А.* Фазовый переход металл–полупровдник и его применение. Л.: Наука, 1979. 182 с.

[2] *Мотт Н.Ф.* Переходы металл-изолятор. М.: Наука, 1979. 342 с.

[3] *Imada Masatoshi, Fujimori Atsushi, Tokura Yoshinori* // Mod. Phys. 1998. Vol. 70. N 4. Pt. 1. P. 1059–1263.

[4] *Кроткус А., Добровольскис З.* Электропроводность узкощелевых полупроводников. Вильнюс: Мокслас, 1988. 172 с.

[5] *Андреев В.Н., Чудновский Ф.А.* // ФТТ. 1975. Т. 17. Вып. 10. С. 2957–2960.

[6] *Мелких А.В., Повзнер А.А., Андреева А.Г., Сачков И.Н.* // ПЖТФ. 2001. Т. 27. В. 6. С. 19–25.