

09,11,13

## О фотоиндуцированной гетероструктуре в пленке двуокиси ванадия

© А.Л. Семенов

Ульяновский государственный университет,  
Ульяновск, Россия

E-mail: smnv@mail.ru

Поступила в Редакцию 18 июня 2019 г.

В окончательной редакции 18 июня 2019 г.

Принята к публикации 1 августа 2019 г.

Теоретически исследован нетепловой фотоиндуцированный фазовый переход полупроводник–металл, протекающий за время  $\Delta t < 1$  ps в пленке двуокиси ванадия на алюминиевой подложке. Показано, что под действием короткого лазерного импульса в пленке  $\text{VO}_2$  образуется структура из металлических и полупроводниковых слоев, параллельных подложке. Получена зависимость толщины слоев от плотности энергии  $W$  лазерного импульса. Построена диаграмма, определяющая число слоев в зависимости от плотности энергии  $W$  лазерного импульса и толщины  $a$  пленки. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** Фотоиндуцированный фазовый переход, фазовый переход полупроводник–металл, пленка двуокиси ванадия, гетероструктура полупроводник–металл.

DOI: 10.21883/FTT.2020.01.48751.519

### 1. Введение

В работе [1] построена теория гетероструктуры, образующейся в пленке  $\text{VO}_2$  на алюминиевой подложке под действием короткого лазерного импульса. В основе теории лежит учет интерференции падающего и отраженного от подложки возбуждающего светового импульса. Это ведет к неоднородному возбуждению электронной подсистемы полупроводниковой пленки и, как следствие, формированию в ней металлических слоев. В предельном случае толстых пленок теория согласуется с экспериментом [2].

В настоящей работе в рамках теории [1] теоретически исследовано влияние толщины  $a$  пленки  $\text{VO}_2$  на алюминиевой подложке и плотности энергии  $W$  короткого лазерного импульса на толщину образующихся металлических и полупроводниковых слоев. В переменных  $a$  и  $W$  построена диаграмма, показывающая, из какого количества слоев состоит гетероструктура.

### 2. Основные уравнения

Введем систему координат так, что ось  $z$  направлена в глубь среды перпендикулярно поверхности пленки. На границе пленка–воздух  $z = 0$ , на границе пленка–подложка  $z = a$ . Короткий лазерный импульс, распространяющийся вдоль оси  $z$ , возбуждает в пленке двуокиси ванадия на подложке неравновесные дырки с концентрацией [1]

$$p_0 = \frac{4|n_2|W}{\hbar\omega|1+n_2+\chi(1-n_2)^2|} \left( \alpha \cos(\varphi)(e^{-\alpha z} + |\chi|^2 e^{\alpha z}) + 4\beta|\chi| \sin(\varphi) \cos(2\beta z - \varphi_1) \right), \quad (1)$$

где  $W$  — плотность энергии лазерного импульса,  $n_2$  — комплексный показатель преломления пленки,  $\hbar\omega$  — энергия фотонов,

$$\chi = \frac{k_2 - k_3}{k_2 + k_3} \exp(2ik_2\alpha), \quad (2)$$

$k_2, k_3$  — волновое число в пленке и подложке соответственно,  $a$  — толщина пленки,  $\alpha = 2 \text{Im}(k_2)$  — коэффициент оптического поглощения пленки,  $\beta = \text{Re}(k_2)$ ,  $\varphi = \arg(k_2)$ ,  $\varphi_1 = \arg(\chi)$ . При записи выражения (1) предполагается, что показатель преломления воздуха  $n_1 \approx 1$ . Первое слагаемое в правой части уравнения (1) обусловлено волной, бегущей вдоль оси  $z$ , второе — против оси  $z$ , третье — интерференцией этих волн.

Нетепловой фотоиндуцированный фазовый переход полупроводник–металл в двуокиси ванадия происходит при условии [1]:

$$p_0 \geq p_c, \quad (3)$$

где

$$p_c = \frac{\xi_0 N}{2\pi} \quad (4)$$

— критическая концентрация фотовозбужденных дырок,  $\xi_0$  — параметр порядка фазового перехода металл–полупроводник в низкотемпературной полупроводниковой фазе,  $N$  — концентрация атомов ванадия в  $\text{VO}_2$ .

Используя соотношения (1), (3), находим критическую плотность энергии лазерного импульса:

$$W_c = \frac{p_c \hbar\omega |1+n_2+\chi(1-n_2)|^2}{4|n_2| \left( \alpha \cos(\varphi)(e^{-\alpha a} + |\chi|^2 e^{\alpha a}) + 4\beta|\chi| \sin(\varphi) \cos(2\beta a - \varphi_1) \right)}. \quad (5)$$

Нетепловой фотоиндуцированный фазовый переход полупроводник–металл в точке  $z$  пленки двуокиси ванадия происходит при условии

$$W \geq W_c. \quad (6)$$

Соотношение

$$W = W_c(z) \quad (7)$$

с учетом уравнения (5) определяет зависимость координаты  $z$  границы между металлической и полупроводниковой фазами от плотности энергии  $W$  лазерного импульса.

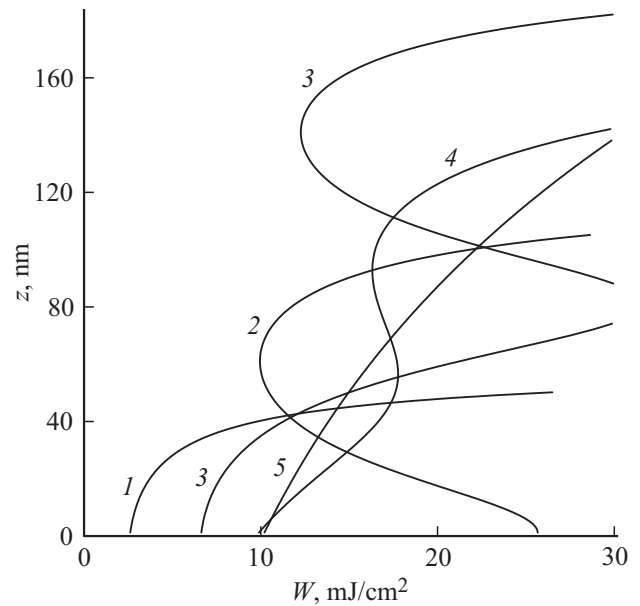
### 3. Численные расчеты, обсуждение полученных результатов и сравнение с экспериментом

При выполнении численных расчетов используем следующие значения параметров двуокиси ванадия [3–5]: концентрация атомов ванадия  $N \approx 3 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ , параметр порядка фазового перехода металл–полупроводник в низкотемпературной полупроводниковой фазе  $\xi_0 \approx 0.5$ , энергия фотонов  $\hbar\omega \approx 1.55 \text{ eV}$  (длина волны в вакууме  $\lambda \approx 800 \text{ nm}$ ), комплексный показатель преломления пленки  $n_2 \approx 2.9 + 0.5i$  [2,6]. Рассмотрим пленку  $\text{VO}_2$  на алюминиевой подложке. Такие пленки использовались в эксперименте [7] по нетепловому фотоиндуцированному фазовому переходу полупроводник–металл. Комплексный показатель преломления алюминиевой подложки  $n_3 \approx 2.7 + 8.3i$  [8].

Из формулы (4) получаем критическую концентрацию фотовозбужденных дырок  $p_c \approx 2.4 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . На рис. 1 показан график вычисленной по формулам (5), (7) зависимости координаты  $z$  границы между металлической и полупроводниковой фазами от плотности энергии  $W$  лазерного импульса для различных значений толщины  $a$  пленки.

На рис. 1 видно, что при  $W > 2.6 \text{ mJ/cm}^2$  на поверхности пленки толщины  $a = 50 \text{ nm}$  образуется металлический слой с толщиной  $z$ . Граничащий с подложкой полупроводниковый слой имеет толщину  $a - z$ . В пленке с толщиной  $a = 120 \text{ nm}$  металлический слой образуется в середине пленки при  $W > 10 \text{ mJ/cm}^2$ . Металлический слой имеет толщину  $z_2 - z_1$ ; где  $z_1, z_2$  — нижняя и верхняя ветви зависимости  $z(W)$ . Толщины полупроводниковых слоев, граничащих с воздухом и подложкой, равны соответственно  $z_1$  и  $a - z_2$ . При  $W \approx 26 \text{ mJ/cm}^2$  полупроводниковый слой, граничащий с воздухом, исчезает. Для всех толщин  $a$  пленки при увеличении  $W$  толщина металлических слоев возрастает, а полупроводниковых — уменьшается. Слой, граничащий с подложкой, всегда полупроводниковый.

С увеличением толщины пленки влияние подложки снижается, поскольку из-за затухания уменьшается амплитуда отраженной от подложки волны. Для пленок с толщиной  $a > 500 \text{ nm}$  зависимость  $z(W)$  почти не



**Рис. 1.** Зависимость координаты  $z$  границы между металлической и полупроводниковой фазами в пленке  $\text{VO}_2$  от плотности энергии  $W$  лазерного импульса для значений толщины пленки  $a = 50, 120, 200, 300, 1000 \text{ nm}$  (кривые 1–5 соответственно.)

отличается от кривой 5 на рис. 1. В этом случае металлический слой на поверхности пленки формируется при  $W > W_c \approx 10 \text{ mJ/cm}^2$ , а при  $W \approx 15 \text{ mJ/cm}^2$  образуется металлический слой толщины  $d \approx 50 \text{ nm}$ . Эти расчетные значения согласуются с экспериментальными данными  $W_c \approx 12 \text{ mJ/cm}^2$  и  $d \approx 50 \text{ nm}$ , измеренными для монокристаллов  $\text{VO}_2$  [2].

На рис. 1 видно, что при увеличении  $W$  образование новых металлических слоев или исчезновение полупроводниковых слоев происходит либо на поверхности пленки двуокиси ванадия, где

$$z = 0, \quad (8)$$

либо в точках  $z$ , где

$$dW/dz = 0. \quad (9)$$

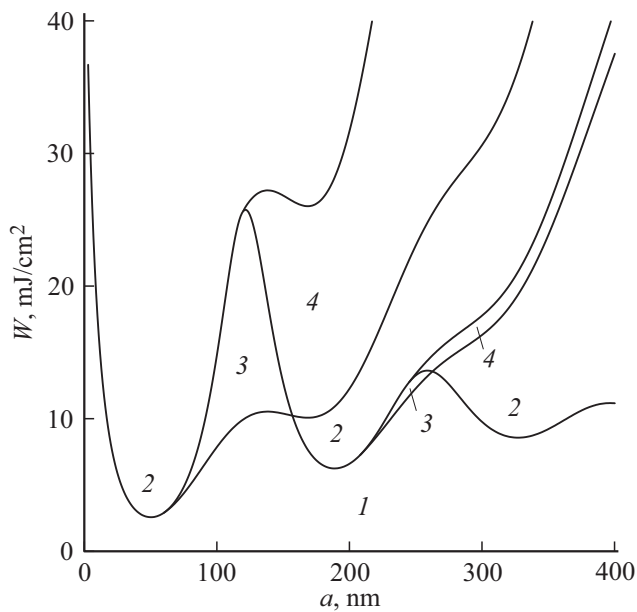
Из уравнений (5), (7), (8) получаем

$$W = \frac{p_c \hbar\omega |1 + n_2 + \chi(1 - n_2)|^2}{4|n_2| (\alpha \cos(\varphi)(1 + |\chi|^2) + 4\beta|\chi| \sin(\varphi) \cos(\varphi_1))}. \quad (10)$$

Из уравнений (5), (7), (9) находим

$$\alpha^2 \cos(\varphi) (|\chi|^2 e^{\alpha z} - e^{-\alpha z}) - 8\beta^2 |\chi| \sin(\varphi) \sin(2\beta z - \varphi_1) = 0. \quad (11)$$

Кривые, описываемые уравнением (10) и системой уравнений (5), (7), (11), показаны на рис. 2. Эти кривые в переменных  $(a, W)$  разделяют области, соответствующие гетероструктурам с различным количеством слоев.



**Рис. 2.** Диаграмма фотоиндуцированной гетероструктуры в переменных толщина пленки  $a$  — плотность энергии лазерного импульса  $W$ . Цифры на диаграмме показывают число слоев в гетероструктуре при данных  $a$  и  $W$ .

Цифры на диаграмме обозначают число слоев в структуре при данных  $a$  и  $W$ . На рис. 2 видно, что в зависимости от  $a$  и  $W$  образуется одна из четырех структур: 1) полупроводник, 2) металл–полупроводник, 3) полупроводник–металл–полупроводник, 4) металл–полупроводник–металл–полупроводник.

#### 4. Заключение

В настоящей работе показано, что под действием короткого лазерного импульса в пленке двуокиси ванадия на алюминиевой подложке образуется структура, содержащая металлические и полупроводниковые слои. Число слоев и их толщина зависят от плотности энергии лазерного импульса и толщины пленки (см. рис. 1, 2). Наименьшая критическая плотность  $2.6 \text{ mJ/cm}^2$ , при превышении которой происходит нетепловой фотоиндуцированный фазовый переход полупроводник–металл, достигается на поверхности пленки толщины  $50 \text{ nm}$  (см. рис. 2).

#### Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] А.Л. Семенов. ФТТ **59**, 2, 341 (2017).
- [2] A. Cavalleri, Cs. Toth, C.W. Siders, J.A. Squier, F. Raksi, P. Forget, J.C. Kieffer. Phys. Rev. Lett. **87**, 23, 237401 (2001).

- [3] А.А. Бугаев, Б.П. Захарченя, Ф.А. Чудновский. Фазовый переход металл–полупроводник и его применение. Наука, Л. (1979).
- [4] А.Л. Семенов. ЖЭТФ **117**, 6, 1175 (2000).
- [5] А.Л. Семенов. ФТТ **42**, 10, 1842 (2000).
- [6] A. Cavalleri, Th. Dekorsy, H.H. Chong, J.C. Kieffer, R.W. Schoenlein. <http://www.arxiv.org/cond-mat/0403214>; Phys. Rev. B **70**, 12, 161102(R) (2004).
- [7] А.А. Бугаев, В.В. Гудялис, Б.П. Захарченя, Ф.А. Чудновский. Письма в ЖЭТФ **34**, 8, 452 (1981).
- [8] В.М. Золотарев, В.Н. Морозов, Е.В. Смирнова. Оптические постоянные природных и технических сред. Химия, Л. (1984). С. 182.

Редактор Т.Н. Василевская