

11,09

## О сверхрешетке фаз в пленке двуокиси ванадия

© А.Л. Семенов

Ульяновский государственный университет,  
Ульяновск, Россия

E-mail: smnv@mail.ru

(Поступила в Редакцию 22 апреля 2013 г.  
В окончательной редакции 8 июня 2013 г.)

Построена статистическая теория образования гетероструктуры чередующихся металлической и полупроводниковой фаз в монокристаллической пленке  $\text{VO}_2$  на подложке. Найдена функция распределения металлических доменов по размеру в зависимости от температуры. Получена зависимость интенсивности  $I$  проходящего через пленку света от температуры  $T$ . Глубина и ширина провала на кривой  $I(T)$  в области фазового перехода, вычисленные в рамках развитой теории, согласуются с экспериментальными данными.

### 1. Введение

В эксперименте [1] обнаружено, что на температурной зависимости интенсивности  $I(T)$  света, проходящего через монокристаллическую пленку двуокиси ванадия, имеется провал. Этот провал находится вблизи критической точки фазового перехода металл–полупроводник  $T_0 = 340 \text{ K}$ , имеет ширину  $\Delta T \approx 3 \text{ K}$  и относительную глубину  $\Delta I/I \approx 0.21$ . Наблюдения с помощью оптического микроскопа показали [1], что около точки фазового перехода в пленке возникает квазипериодическая квазиодномерная гетероструктура чередующихся металлической и полупроводниковой фаз, пространственный период  $\lambda$  которой уменьшается при уменьшении температуры.

В работе [2] предложен деформационный механизм и на его основе построена теория образования сверхрешетки фаз в пленке двуокиси ванадия на подложке вблизи точки фазового перехода металл–полупроводник [3,4]. Полученная в [2] теоретическая температурная зависимость пространственного периода  $\lambda(T)$  гетероструктуры находится в качественном согласии с экспериментальными данными [1].

В настоящей работе в рамках теории [2] учитывается статистический характер формирования доменов новой фазы. Найдена функция распределения металлических доменов по размеру в зависимости от температуры. С использованием этой функции получена зависимость интенсивности  $I$  проходящего через пленку света от температуры  $T$  в области фазового перехода.

### 2. Функция распределения металлических доменов по размеру

Эксперимент [1] показал, что формирование сверхструктуры в пленке  $\text{VO}_2$  при понижении температуры  $T$  можно разделить на три этапа. На первом этапе в металлической пленке  $\text{VO}_2$  появляются отдельные достаточно удаленные друг от друга участки полупроводниковой фазы. Эти участки имеют вид длинных полосок шириной

$a \approx 1.2 \mu\text{m}$ , перпендикулярных кристаллической оси  $C$  пленки (ось  $C$  параллельна поверхности подложки). Они располагаются в областях, где имеются случайные неоднородности пленки (трещины, царапины и другие дефекты). На втором этапе при дальнейшем уменьшении температуры положение сформировавшихся полупроводниковых доменов и их размеры не меняются, а в областях металлической фазы образуются новые полупроводниковые участки аналогичной формы на некотором удалении от уже имеющихся. На третьем этапе происходит постепенное слияние соседних полупроводниковых доменов.

Можно приближенно считать, что распределение случайных неоднородностей пленки, где на первом этапе формируются полупроводниковые домены, пространственно однородно и статистически независимо. Тогда функция распределения  $f_1(\lambda)$  участков сверхструктуры по пространственному периоду  $\lambda$  имеет вид

$$f_1(\lambda) = \frac{L}{\lambda_1^2} \exp\left(-\frac{\lambda}{\lambda_1}\right), \quad (1)$$

где  $L$  — длина пленки вдоль оси  $C$ ;  $\lambda_1$  — среднее значение пространственного периода сверхструктуры на первом этапе.

На втором этапе формирования сверхструктуры существенна деформация пленки под действием появившихся полупроводниковых доменов [2]. Новые полупроводниковые домены образуются в центре участков металлической фазы, где сжатие вдоль оси  $C$  минимально и, следовательно, температура фазового перехода металл–полупроводник максимальна. Неустойчивыми являются участки сверхструктуры, для которых пространственный период  $\lambda > \lambda_c$ . При  $T < T_0$  критическое значение периода  $\lambda_c$  определяется формулой [2]

$$\lambda_c(T) = \frac{\alpha}{T_0 - T} - \beta, \quad (2)$$

где  $\alpha \approx 5 \mu\text{m} \cdot \text{K}$ ,  $\beta \approx 1 \mu\text{m}$ .

При  $\lambda_c > 2a$  исчезновение участка сверхструктуры с пространственным периодом  $\lambda$  приводит к появлению

двух участков с пространственным периодом  $\lambda/2$ . Отсюда находим функцию распределения  $f_2(\lambda)$  участков сверхструктуры по пространственному периоду  $\lambda$  для второго этапа формирования сверхструктуры

$$f_2(\lambda) = \begin{cases} f_1(\lambda) & \lambda \in [0, \frac{\lambda_c}{2}), \\ \sum_{n=0}^{\infty} 4^n f_1(2^n \lambda), & \lambda \in [\frac{\lambda_c}{2}, \lambda_c), \\ 0, & \lambda \in [\lambda_c, \infty). \end{cases} \quad (3)$$

В случае  $\lambda_c \ll \lambda_1$ , переходя в (3) от суммирования к интегрированию, приближенно получаем

$$f_2(\lambda) = \begin{cases} \frac{L}{\lambda_1^2}, & \lambda \in [0, \frac{\lambda_c}{2}), \\ \frac{L}{\lambda^2 \ln 2}, & \lambda \in [\frac{\lambda_c}{2}, \lambda_c), \\ 0, & \lambda \in [\lambda_c, \infty). \end{cases} \quad (4)$$

На третьем этапе формирования сверхструктуры, когда  $a < \lambda_c < 2a$ , исчезновение участка сверхструктуры с пространственным периодом  $\lambda$  приводит к слиянию двух соседних полупроводниковых доменов. В результате формируется полупроводниковый домен шириной  $\lambda + a$ .

С использованием соотношений (1), (4) находим долю  $z = z_{1,2,3}$  полупроводниковой фазы в пленке VO<sub>2</sub> на первом, втором и третьем этапах формирования сверхструктуры соответственно

$$z_1 = \frac{a}{\lambda_1}, \quad (5)$$

$$z_2 = \frac{a}{\lambda_c(T) \ln 2}, \quad (6)$$

$$z_3 = \frac{1}{\ln 2} \left( \ln \frac{2a}{\lambda_c(T)} - \frac{a}{\lambda_c(T)} + 1 \right). \quad (7)$$

Из (5)–(7) видно, что доля полупроводниковой фазы  $z$  при уменьшении температуры растет от  $z \cong 0$  в начале первого этапа (когда  $\lambda_1 \gg a$ ) до  $z = 1$  в конце третьего (когда  $\lambda_c = a$ ).

### 3. Ослабление проходящего через пленку света

Пусть свет падает на пленку в плоскости, содержащей кристаллическую ось  $C$  и нормаль пленки. Напряженность  $E$  электрического поля световой волны, прошедшей через пленку, в дальней зоне определяется соотношением [5]

$$E(\theta) = A \int_0^L E_0(x) \exp(-ikx \operatorname{tg} \theta) dx, \quad (8)$$

где  $\theta$  — угол между нормалью к пленке и направлением на точку наблюдения;  $A$  — некоторая константа;  $E_0$  — напряженность электрического поля на задней поверхности пленки;  $x$  — координата, отсчитываемая

вдоль оси  $C$ ;  $k$  — волновое число световой волны. Учитывая, что в условиях эксперимента [1] коэффициенты поглощения металлической и полупроводниковой фаз VO<sub>2</sub> приближенно равны, при нормальном падении света имеем

$$E_0(x) = A_0 \exp(i\varphi(x)), \quad (9)$$

где  $A_0$  — амплитуда,

$$\varphi(x) = kh\Delta n \begin{cases} 1, & x \in G, \\ 0, & x \notin G \end{cases} \quad (10)$$

— фаза,  $h$  — толщина пленки,  $\Delta n$  — разность показателей преломления полупроводниковой и металлической фаз VO<sub>2</sub>,  $G$  — область пленки, занятая полупроводниковой фазой. Подставляя (9), (10) в (8), находим интенсивность  $I$  света в точке наблюдения в случае  $\theta = 0$

$$I = I_0 \left( 1 - 4z(1-z) \sin^2 \left( \frac{kh\Delta n}{2} \right) \right), \quad (11)$$

где  $I_0$  — интенсивность света, проходящего через однородную металлическую ( $z = 0$ ) или полупроводниковую ( $z = 1$ ) пленку. Функция  $I(z)$  (11) достигает своего минимального значения

$$I_m = I_0 \cos^2 \left( \frac{kh\Delta n}{2} \right) \quad (12)$$

при  $z = 1/2$ .

### 4. Численные оценки

Соотношения (2), (6), (7), (11) определяют зависимость  $I(T)$ . Из них видно, что сверхструктура существует в области температур  $T \in (T_0 - \Delta T, T_0)$ , где

$$\Delta T = \frac{\alpha}{\beta + a}. \quad (13)$$

. При появлении сверхструктуры интенсивность  $I$  проходящего света уменьшается. Максимальное уменьшение интенсивности достигается при температуре

$$T_m = T_0 - \frac{\alpha \ln 2}{\beta \ln 2 + 2a} \quad (14)$$

и составляет величину

$$\Delta I = I_0 - I_m = I_0 \sin^2 \left( \frac{kh\Delta n}{2} \right). \quad (15)$$

Для проведения численных оценок используем следующие значения параметров [1–3]:  $\alpha \approx 5 \mu\text{m} \cdot \text{K}$ ,  $\beta \approx 1 \mu\text{m}$ ,  $a \approx 1.2 \mu\text{m}$ ,  $T_0 = 340 \text{ K}$ ,  $k \cong 1.6 \mu\text{m}^{-1}$ ,  $h \cong 0.18 \mu\text{m}$ , для  $\hbar\omega \cong 2 \text{ eV}$  диэлектрическая проницаемость в металлической фазе  $\epsilon_m \cong 5.4 + 2.0i$ , диэлектрическая проницаемость в полупроводниковой фазе  $\epsilon_s \cong 8.2 + 2.2i$ . Разность показателей преломления

$$\begin{aligned} \Delta n &= n_s - n_m \\ &= \sqrt{\frac{|\epsilon_s| + \operatorname{Re}(\epsilon_s)}{2}} - \sqrt{\frac{|\epsilon_m| + \operatorname{Re}(\epsilon_m)}{2}} \cong 0.5. \end{aligned} \quad (16)$$

Подставляя в (13)–(15) численные значения параметров, находим  $\Delta T \cong 3 \text{ К}$ ,  $T_0 - T_m \cong 2 \text{ К}$ ,  $\Delta I/I_0 \cong 0.19$ . Полученные теоретические результаты согласуются с экспериментом [1]:  $\Delta T \cong 3 \text{ К}$ ,  $\Delta I/I_0 \cong 0.21$ .

## 5. Заключение

В основе построенной в настоящей работе статистической теории образования гетероструктуры чередующихся металлической и полупроводниковой фаз в пленке  $\text{VO}_2$  на подложке вблизи критической точки фазового перехода металл–полупроводник лежит деформационный механизм неустойчивости участков металлической фазы [2]. Теория позволяет объяснить экспериментальные данные работы [1] по ослаблению света, проходящего через пленку двуокиси ванадия при фазовом переходе.

## Список литературы

- [1] К.А. Валиев, В.Г. Мокеров, В.В. Сарайкин, А.Г. Петрова. ФТТ **19**, 1537 (1977).
- [2] В.И. Емельянов, А.Л. Семенов. ФТТ **32**, 3083 (1990).
- [3] А.А. Бугаев, Б.П. Захарченя, Ф.А. Чудновский. Фазовый переход металл–полупроводник и его применение. Наука, Л. (1979). 183 с.
- [4] А.Л. Семенов, Е.Н. Солодовникова. ФТТ **42**, 170 (2000).
- [5] А.Н. Матвеев. Оптика. Высш. шк., М. (1985). С. 220.