

11,01,03

Фотоиндуцированный фазовый переход полупроводник–металл и волна переключения в пленке двуокиси ванадия

© А.Л. Семенов

Ульяновский государственный университет,
Ульяновск, Россия

E-mail: smnv@mail.ru

(Поступила в Редакцию 13 апреля 2010 г.
В окончательной редакции 15 июня 2010 г.)

Исследуется волна переключения в пленке VO_2 при фотоиндуцированном фазовом переходе полупроводник–металл. В рамках тепловой модели получены зависимости критических интенсивностей облучения, соответствующих прямому и обратному фазовым переходам, от температуры окружающей среды. Рассчитаны профиль и скорость волны переключения. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

1. Введение

Изучение фазового перехода полупроводник–металл в двуокиси ванадия на протяжении длительного времени вызывает неослабевающий интерес [1–6]. Вопрос о механизме фазового перехода (мотт-хэббардовский или пайерлсовский), поставленный в ранних работах [1] и активно обсуждавшийся в [2–4], до сих пор дискутируется [5]. Эксперименты показывают важную роль в VO_2 как электрон–электронных корреляций [1,5,6], так и электрон–фононного взаимодействия [1,7].

Фотоиндуцированный фазовый переход полупроводник–металл в двуокиси ванадия может быть вызван двумя причинами: 1) возбуждением электронной подсистемы без существенного изменения температуры образца [7–9] (электронная модель фазового перехода), 2) нагреванием VO_2 облучением [8–12] (тепловая модель фазового перехода). Экспериментально установлено, что электронный и „тепловой“ фотоиндуцированные фазовые переходы значительно различаются по времени протекания и параметрам облучения [8]. В [13,14] в рамках электронной модели теоретически исследовано влияние параметров светового поля (энергии, длительности импульса, частоты фотонов) на основные характеристики фотоиндуцированного фазового перехода (длительность, скорость волны переключения, толщину образующегося металлического слоя).

В настоящей работе в рамках тепловой модели исследуется волна переключения в пленке VO_2 на прозрачной подложке при фотоиндуцированном фазовом переходе полупроводник–металл. Благодаря различию поглощательной способности пленки в полупроводниковой и металлической фазах фазовые переходы полупроводник–металл и металл–полупроводник происходят при разных критических значениях интенсивности облучения. Это ведет к термооптической бистабильности. Переход между полупроводниковой и металлической фазами может осуществляться посредством волны переключения. Механизм фазового перехода в VO_2 (мотт–хэббардовский

или пайерлсовский) не влияет на полученные в настоящей работе результаты и выводы.

2. Основные уравнения

Рассмотрим пленку двуокиси ванадия на прозрачной подложке, которая облучается равномерно по площади постоянным во времени электромагнитным излучением. Покажем, что в данных условиях в пленке возможно распространение волны переключения полупроводник–металл (существует решение, зависящее от координаты и времени). Предполагая, что температура T пленки может меняться только вдоль оси x , параллельной поверхности пленки, уравнение теплопроводности запишем в следующем виде [15]:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} - k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = f(T), \quad (1)$$

где

$$f(T) = \frac{1}{h} (AI - b(T - T_0)), \quad (2)$$

ρ, c, k — соответственно плотность, удельная теплоемкость и коэффициент теплопроводности VO_2 , h — толщина пленки, b — коэффициент теплоотдачи, T_0 — температура окружающей среды,

$$A = 1 - R - D \quad (3)$$

— поглощательная способность пленки, R, D — соответственно коэффициенты отражения и прохождения излучения. Первое слагаемое в правой части (2) описывает поглощаемую в пленке энергию, а второе — уход тепловой энергии из пленки в окружающую среду (в воздух и подложку).

Учитывая, что пленка двуокиси ванадия при критической температуре T_c испытывает фазовый переход полупроводник–металл [1], ее поглощательную способ-

ность запишем в форме

$$A = \begin{cases} A_1, & T < T_c, \\ A_2, & T > T_c, \end{cases} \quad (4)$$

где A_1 и A_2 — соответственно поглощательные способности пленки в полупроводниковой и металлической фазах.

3. Стационарное пространственно однородное решение

Получим вначале решение уравнения (1) в случае, когда температура T пленки не зависит от времени и координат. Из соотношений (1), (2), (4) находим зависимость температуры T пленки от интенсивности облучения I

$$T = \begin{cases} T_1, & I < I_2, \\ T_2, & I > I_1, \end{cases} \quad (5)$$

где

$$T_{1,2} = T_0 + \frac{A_{1,2}I}{b}, \quad (6)$$

$$I_{1,2} = \frac{b}{A_{2,1}}(T_c - T_0). \quad (7)$$

Схематический график зависимости $T(I)$ (5) в случае $A_1 < A_2$, когда выполняются соотношения $T_1 < T_2$, $I_1 < I_2$, показан на рис. 1. Из него видно, что скачкообразный переход из низкотемпературной полупроводниковой фазы в высокотемпературную металлическую происходит при интенсивности облучения $I = I_2$. Обратный переход имеет место при интенсивности $I = I_1$. В области $I_1 < I < I_2$ система может находиться в двух устойчивых состояниях равновесия. Вычисленные по формуле (7) зависимости критических интенсивностей $I_1(T_0)$, $I_2(T_0)$ показаны на рис. 2. При расчете использовались известные из эксперимента значения параметров $A_1 = 0.1$, $A_2 = 0.23$ [10], $T_c = 337$ К [1], $b = 25$ мВт/см² · К. Кружками и квадратами на рис. 2

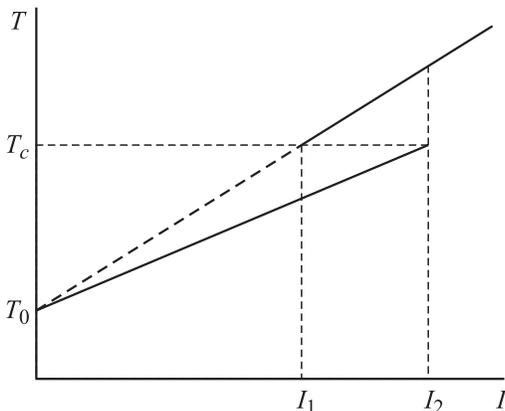


Рис. 1. Зависимость температуры T пленки от интенсивности I облучения.

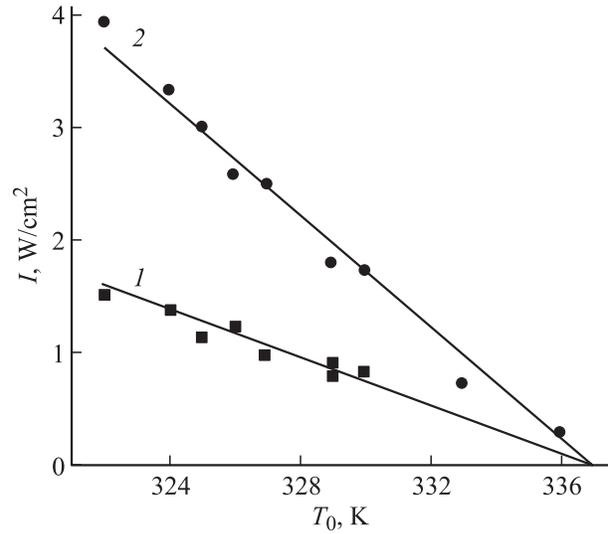


Рис. 2. Зависимости критических интенсивностей I_1 (1) и I_2 (2) от температуры T_0 окружающей среды. Прямые линии — расчет по формуле (7), точки — эксперимент [3].

отмечены экспериментальные данные [10] для прямого и обратного фотоиндуцированного фазового перехода полупроводник–металл соответственно. Видно, что имеется достаточно хорошее согласие расчетных и экспериментальных результатов.

4. Волна переключения

Найдем теперь в бистабильной области $I_1 < I < I_2$ решение уравнения (1) с граничными условиями

$$T(x \rightarrow \pm\infty) = T_{2,1}, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0. \quad (8)$$

С учетом выражений (4)–(7) соотношение (2) запишем в форме

$$f(T) = \frac{b}{h} \begin{cases} T_1 - T, & T < T_c, \\ T_2 - T, & T > T_c. \end{cases} \quad (9)$$

Решение уравнения (1) будем искать в автомодельном виде

$$T(x, t) = T(x - vt), \quad (10)$$

где v — скорость движения волны переключения.

Подставляя соотношение (10) в уравнение (1), получаем

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\rho c v}{k} \frac{\partial T}{\partial x} = -\frac{f(T)}{k}. \quad (11)$$

В уравнении (11) удельная теплоемкость имеет вид

$$c = c_0 + q\delta(T - T_c), \quad (12)$$

где q — скрытая теплота фазового перехода полупроводник–металл, c_0 — регулярная часть удельной теплоемкости c .

Выберем начало отсчета времени и координаты так, что $T(0) = T_c$. Тогда решение уравнения (11) с граничными условиями (8) записывается в форме

$$T(x) = \begin{cases} T_1 + (T_c - T_1) \exp(\lambda_1 x), & x < 0, \\ T_2 + (T_c - T_2) \exp(\lambda_2 x), & x > 0, \end{cases} \quad (13)$$

где

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left(-\frac{\rho c_0 v}{k} \pm \sqrt{\left(\frac{\rho c_0 v}{k}\right)^2 + \frac{4b}{hk}} \right). \quad (14)$$

Интегрируя уравнение (11) по dx от $-\varepsilon$ до ε , при $\varepsilon \rightarrow 0$ получаем

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow +0} - \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow -0} = -\frac{\rho v q}{k}. \quad (15)$$

Подставив выражение (13) в уравнение (15), находим скорость волны переключения

$$v = \frac{2}{\rho c_0} \sqrt{\frac{bk}{h}} \times \frac{2(T_c - T_0) - (A_1 + A_2)I/b}{\sqrt{(2q/c_0 + (A_2 - A_1)I/b)^2 - (2(T_c - T_0) - (A_1 + A_2)I/b)^2}}. \quad (16)$$

Из соотношения (16) видно, что при интенсивности облучения

$$I = I_0 = \frac{2b(T_c - T_0)}{A_1 + A_2} \quad (17)$$

скорость волны переключения $v = 0$. При значениях интенсивности облучения $I = I_{1,2}$ скорость волны переключения достигает максимального и минимального значений соответственно

$$v_1 = v(I_1) = \frac{1}{\rho c_0} \sqrt{\frac{bk}{h}} \times \frac{(T_c - T_0)(1 - A_1/A_2)}{\sqrt{(q/c_0 + (T_c - T_0)(1 - A_1/A_2))q/c_0}}, \quad (18)$$

$$v_2 = v(I_2) = \frac{1}{\rho c_0} \sqrt{\frac{bk}{h}} \times \frac{(T_c - T_0)(1 - A_2/A_1)}{\sqrt{(q/c_0 - (T_c - T_0)(1 - A_2/A_1))q/c_0}}. \quad (19)$$

Характерный размер области, занимаемой волной переключения, вдоль оси x равен

$$\Delta x = \frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{|\lambda_2|} = \sqrt{\frac{hk}{b} \left(\frac{h(\rho c_0 v)^2}{bk} + 1 \right)}. \quad (20)$$

Численные оценки проведем для следующих значений параметров: $\rho = 4.34 \text{ g/cm}^3$, $c_0 = 690 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ [16], $k = 50 \text{ mW/cm} \cdot \text{K}$, $q = 51 \text{ J/g}$ [1], $b = 25 \text{ mW/cm}^2 \cdot \text{K}$,

$h = 0.2 \mu\text{m}$ [11], $T_c - T_0 = 50 \text{ K}$. Подставляя эти значения в соотношения (7), (17)–(20), получаем: $I_1 \cong 5.4 \text{ W/cm}^2$, $I_2 \cong 12.5 \text{ W/cm}^2$, $I_0 \cong 7.5 \text{ W/cm}^2$, $v_1 \cong 0.8 \text{ cm/s}$, $v_2 \cong -1/7 \text{ cm/s}$, $\Delta x(v = 0) \cong 60 \mu\text{m}$, $\Delta x(v = v_1) \cong 70 \mu\text{m}$. Полученное расчетное значение скорости волны переключения согласуется с экспериментальным значением $v \sim 1 \text{ cm/s}$ [11].

5. Заключение

В настоящей работе в рамках одномерной тепловой модели фотоиндуцированного фазового перехода полупроводник–металл проведено теоретическое исследование волны переключения в пленке двуокиси ванадия на прозрачной подложке. Рассчитанные зависимости $I_1(T_0)$, $I_2(T_0)$ критических интенсивностей светового поля от температуры окружающей среды, а также значение скорости волны переключения между полупроводниковой и металлической фазами согласуются с экспериментальными данными [10,11].

Список литературы

- [1] А.А. Бугаев, Б.П. Захарченя, Ф.А. Чудновской. Фазовый переход металл–полупроводник и его применение. Наука, Л. (1979). 183 с.
- [2] R.M. Wentzcovitch, W.W. Schulz, P.B. Allen. Phys. Rev. Lett. **72**, 21, 3389 (1994).
- [3] T.M. Rice, H. Launois, J.P. Pouget. Phys. Rev. Lett. **73**, 22, 3042 (1994).
- [4] R.M. Wentzcovitch, W.W. Schulz, P.B. Allen. Phys. Rev. Lett. **73**, 22, 3043 (1994).
- [5] B. Lazarovits, K. Kim, K. Haule, G. Kotkiar. Phys. Rev. B **81**, 115 117 (2010).
- [6] M.M. Qazilbash, M. Brehm, G.O. Andreev, A. Frenzel, P.C. Ho, B. Chae, B. Kim, S.J. Yun, H. Kim, A.V. Balatsky, O.G. Shpyrko, M.B. Maple, F. Keilmann, D.N. Basov. Phys. Rev. B **79**, 075 107 (2009).
- [7] 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, 161 102(R) (2004).
- [8] A. Cavalleri, Sc. Toth, C.W. Siders, J.A. Squier, F. Raksi, P. Forget, J.C. Kieffer. Phys. Rev. Lett. **87**, 23, 237 401 (2001).
- [9] C. Kubler, H. Ehrke, R. Huber, R. Lopez, A. Halabica, R.F. Haglund, jr., A. Leitenstorfer. Phys. Rev. Lett. **99**, 116 401 (2007).
- [10] Д.И. Биленко, В.А. Лодгауз, Е.И. Хасина. ЖТФ **59**, 9, 140 (1989).
- [11] Д.И. Биленко, В.А. Лодгауз. Квантовая электрон. **12**, 1, 177 (1985).
- [12] D.J. Hilton, R.P. Prasankumar, S. Fourmaux, A. Cavalleri, D. Brassard, M.A. El Khakani, J.C. Kieffer, A.J. Taylor, R.D. Averitt. Phys. Rev. Lett. **99**, 226 401 (2007)
- [13] А.Л. Семенов. ЖЭТФ **131**, 1, 77 (2007).
- [14] А.Л. Семенов. ЖЭТФ **49**, 12, 2196 (2007).
- [15] Н.В. Карлов, Н.А. Кириченко, Б.С. Лукьянчук. Лазерная термохимия. Наука, М. (1992).
- [16] G. Stefanovich, A. Pergament, D. Stefanovich. J. Phys.: Cond. Matter **12**, 8837 (2000).