

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ УПРУГОЙ АНИЗОТРОПИИ НА КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ОКСИДЕ ЦИНКА

В. В. Зубрицкий

Временный научный коллектив «Фонон», uvz_mshm@hotmail.com

1. ВВЕДЕНИЕ

Широкозонный полупроводниковый оксид цинка является одним из ключевых материалов современной электроники. Его многофункциональные физические свойства исследуются широким фронтом с целью разработки и повышения эффективности светоизлучающих, акустоэлектронных, фотопреобразующих и других устройств и приборов на его основе [1–5]. И независимо от размерной шкалы рабочей среды электронного устройства по-прежнему продолжается поиск технологических условий роста совершенных монокристаллов этого материала [1, 3–7].

Данный факт объективным образом связан с интерфейсной связью нанообъектов и объемной матрицы, с которой они, как правило, сопряжены. Потому углубление знаний о структурных, электрических, оптических свойствах объемного материала обеспечивает углубление понимания функциональных связей между рабочими характеристиками и параметрами матрицы и низкоразмерных электронных устройств.

Указанные функциональные связи являются предметом пристального изучения. Наиболее рельефно они проявляются и обнаруживаются в тех системах, функционирование которых основано на однотипных свойствах, явлениях, эффектах. В частном случае оксида цинка нетрудно видеть, что функционально объединяющей физической основой всех отмеченных приложений этого материала (электрических, акустических, оптических) является наличие переноса энергии в любой из указанных систем. Потому разработка способов управления переносом энергии, выявление новых свойств данного явления потенциально способствует решению вышеотмеченных практических задач. Проблематике фононного переноса энергии в оксиде цинка посвящена настоящая статья.

2. ФОНОННЫЙ ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ

Приобретение либо производство энергии электронным устройством непосредственно связано с изменением колебательного состояния атомов его рабочей среды. Скоррелированные колебательные состояния атомов могут быть описаны в рамках различных моделей. Данное исследование основано на волновом подходе в приближении длинноволнового предела, который соответствует модели упругой среды или модели упругого континуума акустических фононов (см. ссылки в [8]).

2.1. Фокусировка фононов

Если в кристалле по каким-либо причинам появилось локальное возмущение внутренней энергии, то в результате упругого взаимодействия атомов это приведет к излучению по всем направлениям относительно апертуры источника упругих волн. Упругие или акустические волны характеризуют фазовыми и групповыми скоростями. В изотропной среде их векторы совпадают, и потому поток энергии изотропен. В кристаллической среде, в силу направленности химической связи между атомами

элементарной ячейки и наличия трансляционной симметрии, для заданного направления распространения упругой волны в общем случае вектор ее фазовой скорости не совпадает с вектором скорости групповой. Разнонаправленность этих векторов отражает фундаментальную специфику анизотропии свойств среды.

Поскольку направление и скорость переноса энергии связаны с групповой скоростью упругой волны, то поток энергии в такой среде тождественно отклоняется от направления волнового вектора. Это отклонение может быть настолько специфичным, что в пространстве групповых скоростей поток энергии может инфинитно возрастать, при этом лучи стягиваются в предельно малый телесный угол.

В англоязычной литературе такое явление получило название фокусировки фононов (см. [1] в [8]) по аналогии с фокусировкой оптического луча, обеспечивающей возрастание потока, в основном, в фокальной области. По своей же пространственно-энергетической сущности данное явление больше соответствует концентрированию, шнурованию фононного потока – своеобразной форме пинч-эффекта.

Необходимо отметить, что теоретический анализ сноса потока в кристаллах дан в монографии Ф. И. Федорова (см. [15] в [8]), в которой акцент сделан на оптический аналог эффекта внутренней конической рефракции в чисто упругих кристаллических средах. В последующем явление было открыто экспериментально, и началось его интенсивное изучение американскими исследователями, терминология которых и получила распространение.

2.2. Методика расчета

Количественно фокусировка фононов характеризуется коэффициентом концентрирования или, что то же самое, коэффициентом фокусировки $A(n)$. Эта величина представляет собой обратное отношение телесного угла, охватывающего лучи в пространстве групповых скоростей, к порождающему его телесному углу волновых векторов в пространстве фазовых скоростей. Для его нахождения численно решалось волновое уравнение для смещения совместно с уравнениями эластодинамики и уравнением Пуассона в приближении непроводящей среды. Пространственные распределения рассчитывались для каждой фононной моды ($j = 1, 2, 3$) и анализировались в области акустической оси второго порядка.

С точки зрения функциональности указанной методики расчета, необходимо особо подчеркнуть тот важный факт, что модель упругого трехмерного континуума в одномерном приближении описывает квазиодномерную структуру типа проволоки, в том числе полупроводниковой, а в целом корректна для применения, например, к наноструктурам, имеющим размеры до двух атомных слоев (см. [2] в [8]).

2.3. Объект исследования

Монокристаллический оксид цинка относится к кристаллам средней категории гексагональной сингонии с точечной группой симметрии 6 мм. Элементарная ячейка содержит четыре атома. В отсутствие нелинейностей его упругие свойства описываются тензором модулей упругости четвертого ранга $c_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1 \div 6$). Наличие ионной составляющей в химической связи обуславливает его пьезоэлектрические свойства, которые учитывались посредством тензора пьезомодулей третьего ранга $e_{i\alpha}$ ($i = 1, 2, 3; \alpha = 1 \div 6$). Включение в модель пьезоэлектрических свойств диктует необходимость учета и диэлектрической анизотропии, которая в приближении эффектов второго порядка описывается тензором диэлектрической проницаемости второго

ранга ε_α ($\alpha = 1 \div 6$). Принятые обозначения соответствуют примененным в [8]. Используются значения материальных констант для образцов ZnO *n*-типа, выращенных из газовой фазы, в которых спектрохимическим методом следы примесей не обнаруживались.

2.4. Способ воздействия

Из трех видов, указанных в п. 2.3 анизотропии в качестве свободного параметра, принята упругая анизотропия. Для точечной группы симметрии 6 мм она описывается пятью независимыми модулями упругости. Потому изменение указанных модулей упругости тождественно изменению упругой анизотропии исследуемой среды. При этом численное моделирование выполнено с соблюдением принципа малости возмущения. В количественном выражении это означает, что вариация любого из принятых к анализу независимых модулей упругости по абсолютному значению не превышала 8 % от измеренного на образцах (п. 2.3) значения.

Обоснованием выбора такого способа деформации упругой анизотропии служат ранее полученные доказательства зависимости атомных факторов и среднеквадратичных динамических смещений атомов однопольных представителей широкозонных полупроводниковых соединений $A''B''$ – монокристаллов сульфида кадмия от их легирования изотонически чистым литием, проведенного из газовой фазы [9]. Достоверно установленное изменение указанных величин тождественно обуславливает изменение упругих модулей, т. е. приводит к деформации упругой анизотропии.

Преимуществом такого подхода является его независимость от технологии выращивания материала. Вариация же материальных констант образцов ZnO, обусловленная применением различных технологий выращивания, достигает 30 %.

3. АТЛАС МОДИФИКАЦИИ ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ

Результаты численного расчета представлены графически в виде распределений изменения коэффициента концентрирования в зависимости от величины деформации заданного упругого модуля. Если иное не оговорено, начало отсчета полярного угла соответствует направлению акустической оси второго порядка. Продольные, быстрые и медленные поперечные фононы обозначаются также как LA, FTA, STA моды.

3.1. Диагональные матричные элементы и LA мода

Продольные акустические фононы обеспечивают перенос энергии с наиболее высокими скоростями. Преобразование их коэффициента фокусировки в зависимости от деформации диагональных матричных элементов, как это показано на рис. 1, *a* – *в*, носит в основном монотонный характер. Наиболее сильное влияние на фокусировку оказывает деформация c_{11} модуля. По абсолютной величине изменение коэффициента концентрирования достигает примерно 50 %. При этом вдоль оси оно симметрично относительно отрицательных и положительных деформаций.

По мере продвижения в область отрицательных деформаций боковые максимумы потока смещаются от оси в периферическую область. Их амплитуда уменьшается в пределах 5 %, а вдоль оси интенсивность фокусировки уменьшается в пределах 20 %. В результате селективность энергетических потоков или глубина модуляции растет.

Усиление положительных деформаций относительно исходного состояния приводит к обратной зависимости. Боковые максимумы фонной фокусировки стягиваются к оси. Их амплитуда увеличивается. Одновременно возрастает и интенсив-

ность фокусировки вдоль оси. Все это приводит к выраженному уменьшению глубины модуляции при одновременном росте потока.

Зависимость перераспределения энергетических потоков от деформации упругого модуля c_{33} (рис. 1, б) в целом подобна наблюдаемой при деформации упругого модуля c_{11} (рис. 1, а). Различие показанных зависимостей, в основном, состоит в отличии абсолютных величин. Для рассматриваемого случая абсолютное изменение коэффициента фокусировки варьируется в пределах 10 %. Пропорционально менее выражено и изменение глубины модуляции.

Функциональная зависимость, противоположная рассмотренным, имеет место в случае деформации упругой анизотропии ZnO посредством диагонального матричного элемента c_{44} (рис. 1, в). Здесь развитие отрицательных деформаций обуславливает рост коэффициента фокусировки вдоль оси, но его снижение в области боковых лепестков. При этом сами боковые максимумы имеют тенденцию к стягиванию к оси. Соответственно глубина модуляции снижается. И наоборот, с ростом положительных деформаций боковые максимумы отходят от оси, их амплитуда растет, а интенсивность фокусировки вдоль оси падает. Этим обеспечивается рост глубины модуляции. По абсолютной величине коэффициент фокусировки изменяется на 25 %.

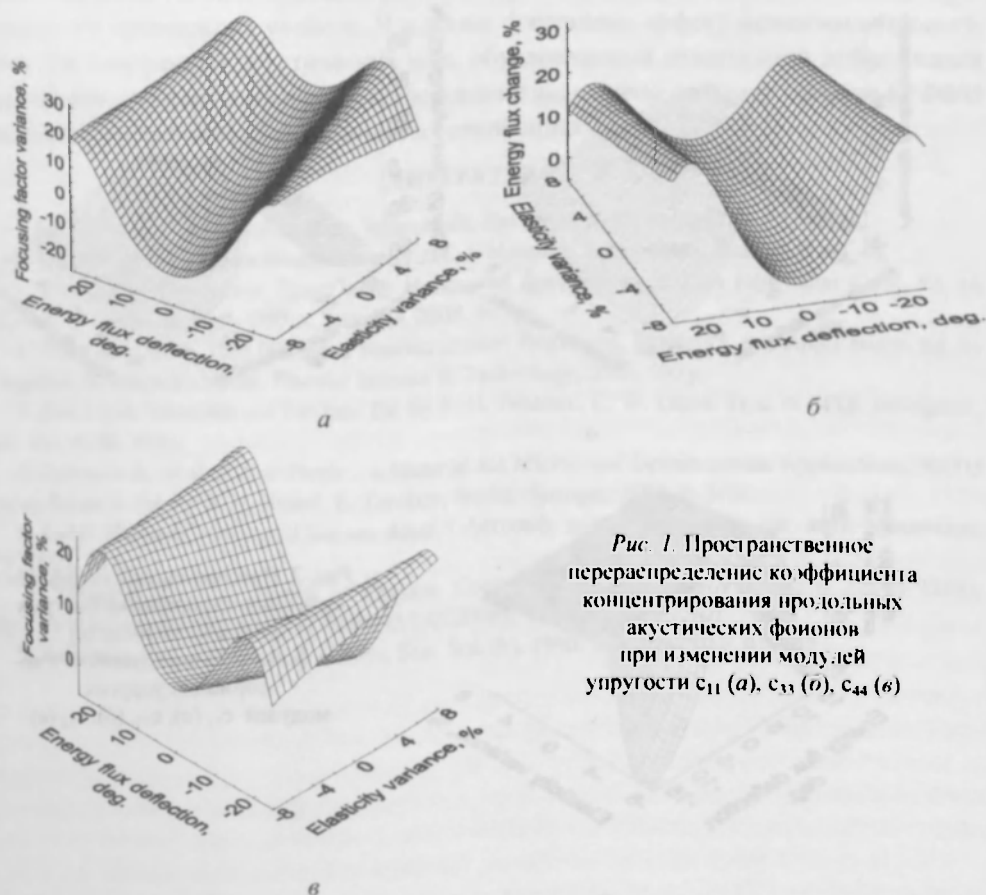


Рис. 1. Пространственное перераспределение коэффициента концентрирования продольных акустических фононов при изменении модулей упругости c_{11} (а), c_{33} (б), c_{44} (в)

3.2. Нелинейность преобразования энергии ТА мод

Наряду с продольной в образцах возбуждаются и поперечные моды, отдельные примеры преобразования коэффициента фокусировки которых показаны на рис. 2. Видно, что в пределах той же пространственной области сканирования коэффициент концентрирования ТА фононов перераспределяется контрастно выраженнее по сравнению с аналогичной величиной в случае LA фононов.

Деформация диагонального матричного элемента c_{11} в область положительных значений приводит к выполаживанию коэффициента фокусировки быстрой ТА моды (рис. 2, а), что означает потенциальную возможность создания широкоапертурных однородных пучков без применения каких-либо внешних элементов. Эта же особенность фокусировки выявляет и способ решения обратной задачи широкоапертурной сенсорики, который отличает отсутствие необходимости в поправочной калибровке на градиентную неоднородность чувствительности рабочей зоны приемника. Другими словами, в данной области деформаций энергетические потоки становятся изотропными, откуда следует вывод и о приобретаемой оксидом цинка изотропности соответствующих упругих свойств.

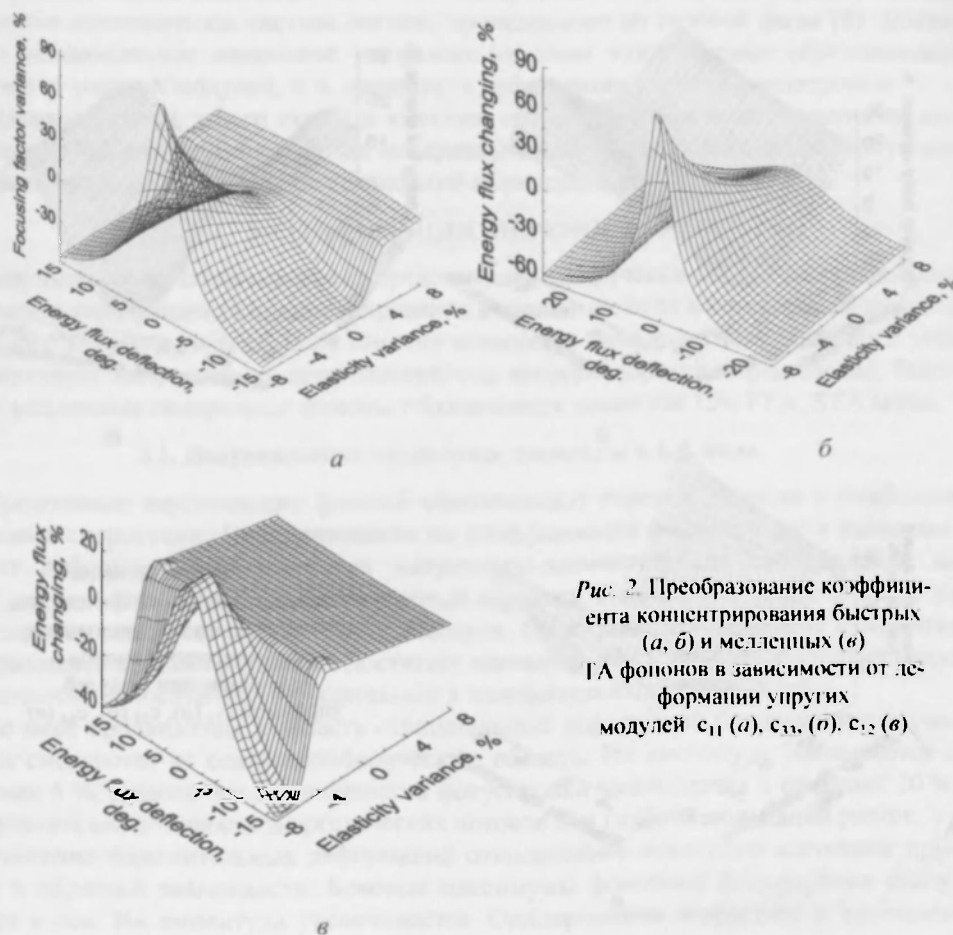


Рис. 2. Преобразование коэффициента концентрирования быстрых (а, б) и медленных (в) ТА фононов в зависимости от деформации упругих модулей c_{11} (а), c_{33} (б), c_{12} (в)

Контрастно иная картина наблюдается при усилении отрицательных деформаций упругого модуля c_{11} (рис. 2, а). В распределении коэффициента концентрирования скачкообразно появляется локальный максимум, свидетельствующий о генерации фононной фокусировки. При этом в приосевых областях наблюдается сброс интенсивности потоков. Это значит, что в силу закона сохранения энергия перекачивается в центральный лепесток. Обнаруженная нелинейность изменения абсолютной величины коэффициента концентрирования в рассмотренной области параметра без проведения оптимизации охватывает 130-ти процентную шкалу.

Сходный эффект обнаружен и у медленной ТА моды. Это видно из рис. 2, в, где показан пример трансформации STA фононных потоков при деформации недиагонального матричного элемента c_{12} . Ранее в литературе (см. [6] в [8]) возможность фононной фокусировки в случае STA моды другими авторами фактически отрицалась.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложены начала инженерии фононной фокусировки в оксиде цинка. Равновесно – на этапе технологического роста материала, модификации (отжигом, легированием) его проводящих свойств. Численно предсказан эффект фононного просветления для поперечных акустических мод, обусловленный селективной деформацией упругой анизотропии материала. Исследование выполнено по плану проекта БРФФИ «Баллистика неравновесных фононов в соединениях I–V(II)–VI».

ЛИТЕРАТУРА

1. Look D. // MRS Symposium Proc. Warrendale, Pa: MRS, 2007. Vol. 957. P. 127–136.
2. Schmidt-Mende L., MacManus-Driscoll J. L. // Materials Today. 2007. Vol. 10. P. 40–48.
3. Transparent Conductive Zinc Oxide: Basics and Applications in Thin Film Solar Cells. Ed. by K. Ellmer, A. Klein, B. Rech. Berlin: Springer, 2008. 443 p.
4. Zinc Oxide Bulk, Thin Films and Nanostructures: Processing, Properties, and Applications. Ed. by C. Jagadish, S. Pearton. Oxford: Elsevier Science & Technology, 2006. 600 p.
5. Zinc Oxide Materials and Devices. Ed. by F. H. Teherani, C. W. Litton. Proc. of SPIE. Bellingham, 2006. Vol. 6122. 130 p.
6. Triboulet R., et al. // Zinc Oxide – a Material for Micro- and Optoelectronic Applications. NATO Science Series II. Ed. by N. H. Nickel, E. Terukov. Berlin: Springer. 2005. P. 3–14.
7. Хадж Исмаиль Мухаммед Басиль Адиб // Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. Махачкала: ДГУ, 2004. 18 с.
8. Zubrytski, U. V. // Journal of Physics: Conference Series. 2007. Vol. 92. P. 12098–12102. (<http://www.iop.org/EJ/abstract/1742-6596/92/1/012098>).
9. Zubritskii, V. V., Purlys, R. P. // Phys. Stat. Sol. (b). 1990. Vol. 158 (1). P. 91–102.