

УДК 621.315

В.Н. Давыдов, В.Л. Олейник

Применение принципов кристаллофизики к решению задач оптоэлектроники

Предлагается при решении задач оптоэлектроники использовать подход к оценке наблюдаемости заданного физического свойства кристалла, основанный на использовании принципов кристаллофизики. Данный подход продемонстрирован на примере задачи повышения эффективности светодиодных гетероструктур с множественными квантовыми ямами (MQW), достигаемого за счет переориентации вектора спонтанной поляризации в кристаллах точечной симметрии $6mm$ типа InGaN/GaN. Показано, что приложение к кристаллу упругого напряжения различной точечной симметрии или постоянного магнитного поля в определенных кристаллографических направлениях открепляет вектор спонтанной поляризации от главной оси симметрии кристалла, тем самым допуская его произвольную ориентацию в кристаллографической системе координат, что в итоге должно уменьшить негативное влияние спонтанной поляризации на излучающие свойства кристалла.

Ключевые слова: точечная группа симметрии, принцип Неймана, принцип Кюри, светодиодная гетероструктура, магнитное поле, спонтанная поляризация, пьезоэлектрический эффект, пьезоэлектрический эффект.

Развитие светодиодных технологий в последние годы привело к повышению коэффициента полезного действия современных светодиодов на основе гетероструктур с квантовыми ямами до 90%. Он может быть дополнительно увеличен, если устранить ограничивающие его факторы, к которым относят снижение эффективности свечения светодиодной гетероструктуры с ростом тока, наличие внутреннего поля спонтанной поляризации в слоях квантовых ям и др. [1, 2]. Так, встроенные электрические поля приводят к пространственному разделению свободных носителей заряда в квантовых ямах, что затрудняет их излучательную рекомбинацию. По этой причине устранение спонтанной поляризации или изменение его ориентации по относительно направления роста гетероструктуры должно привести к увеличению ее эмиссионных свойств [1].

Диэлектрические кристаллы GaN, InN, InGaN относятся к кристаллам средней категории гексагональной сингонии. Наличие главной оси симметрии шестого порядка предопределяет направление вектора спонтанной поляризации вдоль кристаллографического направления [001]. Вектор спонтанной поляризации имеет двойственную природу: одна составляющая поля возникает за счет пьезоэлектрического эффекта при нагреве кристалла джоулевым теплом, а вторая – за счет прямого пьезоэффекта. Как отмечалось в работе [3], поляризация нитридов металлов III группы (AlN, GaN, InN) до сих пор изучена недостаточно, что мешает целенаправленному снижению влияния данного свойства кристаллов нитридов на излучающие свойства гетероструктур.

Для выяснения возможности и условий существования заданного физического свойства в кристаллах используют фундаментальные принципы кристаллофизики, которые на основе теории групп сопоставляют точечную группу симметрии интересующего свойства, с одной стороны, и точечные группы симметрии кристалла и внешнего воздействия на него – с другой [4, 5]. Поскольку нам неизвестны работы, в которых данные принципы использовались бы при решении задач твердотельной электроники, в том числе задач оптоэлектроники, целесообразно, воспользовавшись принципами кристаллофизики, рассмотреть возможные способы управления поляризацией в кристаллах GaN, InN и InGaN как фундаментальным физическим свойством. Такой подход позволит определить условия, при которых спонтанная поляризация может быть устранена или изменена ее ориентация относительно элементов симметрии элементарной ячейки кристалла. Эффект управления достигается приложением к кристаллу внешнего воздействия определенной точечной симметрии, ориентированного в заданном кристаллографическом направлении.

Цель работы. Целью данной работы является проверка возможностей использования принципов кристаллофизики при решении задачи устранения (ослабления) влияния поля спонтанной поля-

ризации в светоизлучающих гетероструктурах с квантовыми ямами из InGaN/GaN подбором симметрии внешнего воздействия и кристаллографического направления его приложения.

Исходные положения. Согласно принципу Неймана, наблюдение интересующего физического свойства в кристалле заданной точечной симметрии $G_{кр}^0$ возможно, если точечная группа симметрии кристалла является подгруппой точечной группы симметрии физического свойства $G_{фс}$: $G_{фс} \subseteq G_{кр}^0$. Однако если кристалл находится под внешним воздействием, характеризуемым точечной группой симметрии $G_{воз}$, то, согласно принципу Кюри, его точечная группа симметрии становится другой – $G_{кр}^*$ (полная симметрия) и может быть найдена как произведение точечных групп симметрии кристалла и воздействия $G_{кр}^* = G_{кр}^0 \cap G_{воз}$. Тогда принцип Неймана, разрешающий наблюдение физического свойства с симметрией $G_{фс}$, запишется в виде

$$G_{фс} \subseteq G_{кр}^0 \cap G_{воз}. \quad (1)$$

Из этого условия следует алгоритм изменения симметрии кристалла, а значит, и набора его физических свойств: наложением внешнего воздействия изменить точечную группу симметрии кристалла так, чтобы она не являлась подгруппой точечной группы нежелательного физического свойства либо допускала изменение ориентации указательной поверхности данного свойства.

Определение полной симметрии. В применении к рассматриваемой проблеме устранения (уменьшения) негативного влияния поля спонтанной поляризации \bar{P} в качестве нежелательного физического свойства кристалла выступает поле поляризации, характеризуемое группой симметрии Кюри ∞m . Точечная группа симметрии кристаллов InGaN, GaN отображается символом $6mm$.

Пироэффект в кристаллах симметрии $6mm$. Поляризация в кристалле за счет пироэффекта возникает при изменении его температуры T [6,7]. Температура кристалла как внешнее воздействие, вызывающее поляризацию \bar{P} , имеет точечную группу симметрии Кюри, описываемую международным символом ∞m – симметрия шара. Значит, поляризация кристаллов должна иметь место в кристаллах 10 групп симметрии, определяемым условием [3]

$$\infty m \subseteq 1, 2, 3, 4, 6, m, mm2, 3m, 4mm, 6mm. \quad (2)$$

В рассматриваемом случае произведение точечных групп кристалла и воздействия будет

$$G_{кр}^* = G_{кр}^0 \cap G_{воз} = 6mm \cap \infty m = 6mm.$$

Это означает, что однородный нагрев кристалла не изменяет его точечную симметрию. Группа $G_{кр}^* = 6mm$ является подгруппой точечной группы симметрии полярного вектора \bar{P} . Значит, возникающая при нагреве поляризация будет направлена по оси симметрии шестого порядка и совпадет с направлением роста светодиодной MQW-гетероструктуры.

В качестве внешнего воздействия, изменяющего симметрию кристалла, выберем бесконтактное воздействие, например однородное постоянное магнитное поле. Его группа симметрии Кюри есть ∞/m , где ось симметрии бесконечного порядка совпадает с направлением аксиального вектора \vec{H} , а плоскость симметрии перпендикулярна этой оси.

В зависимости от направления магнитного поля относительно оси симметрии 6-го порядка возможны три случая: они параллельны, они взаимно перпендикулярны и когда они ориентированы под произвольным углом относительно друг друга, не равным 0 или $\pi/2$.

1. В первом случае произведение оси симметрии ∞ -го порядка на ось 6-го порядка даст ось 6-го порядка. Тогда из принципа Неймана (1) получим

$$\infty m \subseteq 6mm \cap_{\Pi 6} \infty/m = 6. \quad (3)$$

Это означает, что при ориентации магнитного поля по кристаллографическому направлению [001] симметрия кристалла понизится до точечной группы 6, которая по (2) удов-

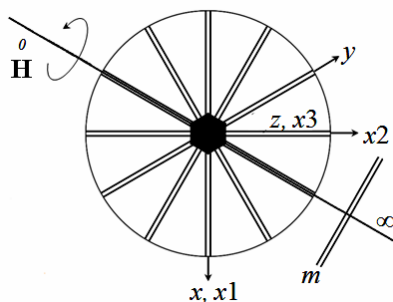


Рис. 1. Стереографическая проекция кристалла точечной группы $6mm$ в магнитном поле (случай 2)

летворяет принципу Неймана. Значит, поляризация кристалла сохранит свое направление и величину, и, следовательно, влияния магнитного поля на излучающие свойства гетероструктуры не будет.

2. При перпендикулярном расположении магнитного поля относительно главной оси симметрии кристалла, например при ориентации магнитного поля по оси x или y кристаллографической системы координат или под углами 30° , 60° к любой из этих осей, выражение (1) примет вид

$$\infty m \subseteq 6mm \cap_{\perp 6} \infty / m = m. \quad (4)$$

На рис. 1 показаны стереографическая проекция точечной группы $6mm$ и направление магнитного поля относительно элементов симметрии кристалла. Как следует из выражения (4), взаимно перпендикулярная ориентация магнитного поля и главной оси симметрии кристалла приводит к снижению симметрии последнего до точечной группы m , в которой лежит ось симметрии 6-го порядка. Хотя группа m является подгруппой группы Кюри ∞m , ее отличие от группы 6 заключается в том, что в ней ориентация вектора \bar{P} привязана не к оси симметрии, а к плоскости симметрии. Этим допускается изменение направления вектора поляризации относительно исходной ориентации, но в пределах плоскости m . В таком случае направление \bar{P} определяется параметрами кристалла и внешними параметрами. Поэтому при отступлении вектора \bar{P} от оси симметрии 6-го порядка – направления роста гетероструктуры его проекция на направление роста уменьшится. Поэтому отрицательное влияние поляризации на излучающие свойства окажется меньше исходного, и излучение гетероструктуры возрастет.

3. В случае произвольной ориентации магнитного поля относительно элементов симметрии точечной группы $6mm$ выражение (1) примет вид

$$\infty m \subseteq 6mm \cap \infty / m = 1. \quad (5)$$

Это означает, что при произвольном направлении магнитного поля вектор спонтанной поляризации пьезоэлектрического эффекта может быть направлен в любом кристаллографическом направлении и ничем не ограничен. Его положение в пространстве не будет определяться симметрией кристалла. Значит, в этом случае проекция вектора \bar{P} на направление роста гетероструктуры с большей вероятностью может уменьшиться по сравнению со случаем отсутствия магнитного поля.

Пьезоэффект в кристаллах симметрии $6mm$. Поляризация кристалла при действии на него упругого напряжения вызвана наличием в кристалле пьезоэлектрического эффекта. Внешнее упругое напряжение может быть односторонним сжатием или растяжением (точечная группа симметрии воздействия ∞ / mmm), направленным вдоль оси симметрии 6-го порядка, перпендикулярно ему или в произвольном направлении. Возможно также более сложное механическое воздействие в виде чистого сдвига (точечная группа симметрии mmm).

1. Если одноосное напряжение растяжения-сжатия направлено вдоль оси симметрии 6-го порядка, то согласно принципу Неймана получим

$$\infty m \subseteq 6mm \cap_{\parallel 6} \infty / mmm = 6mm, \quad (6)$$

что указывает на сохранение точечной симметрии, а значит, и проекции вектора поляризации на направление роста гетероструктуры (оси 6-го порядка).

2. Если одноосное напряжение растяжения-сжатия направлено перпендикулярно оси симметрии 6-го порядка, то симметрия кристалла понизится до точечной группы

$$\infty m \subseteq 6mm \cap_{\perp 6} \infty / mmm = m. \quad (7)$$

Аналогичный результат получится при деформации чистого сдвига кристалла

$$\infty m \subseteq 6mm \cap mmm = m. \quad (8)$$

Получающийся при таком воздействии вывод аналогичен сформулированному при действии магнитного поля, перпендикулярного главной оси симметрии.

3. При произвольном направлении одноосного растяжения-сжатия кристалла получим

$$\infty m \subseteq 6mm \cap \infty / mmm = 1. \quad (9)$$

Выводы. Таким образом, применение принципов кристаллофизики к решению задачи оптоэлектроники по снижению влияния поля спонтанной поляризации на излучающие свойства гетероструктуры с квантовыми ямами показывает возможность уменьшения поля поляризации за счет снижения точечной симметрии кристалла гетероструктуры внешним воздействием. Для этого независимо от природы внешнего воздействия его необходимо сориентировать относительно элементов точечной симметрии кристалла так, чтобы суммарная симметрия кристалла при воздействии

понижилась до точечной группы m или 1. Для рассмотренных внешних воздействий магнитное поле или упругое напряжение его необходимо сориентировать перпендикулярно направлению роста гетероструктуры InGaN/GaN. Понижение симметрии означает снятие симметричного ограничения на ориентацию вектора поляризации строго по оси симметрии 6-го порядка, т.е. потенциальную возможность ориентации вектора поляризации в отличном от оси симметрии 6-го порядка направлении. Следовательно, проекция вектора поляризации на направление роста может только уменьшиться, что означает уменьшение негативного влияния спонтанной поляризации на излучающие свойства гетероструктуры.

Авторы выражают благодарность директору Института светодиодных технологий профессору В.И. Туеву за предоставленные гетероструктуры InGaN/GaN и интерес к работе.

Литература

1. Мездрогина М.М. Метастабильные состояния в структурах с квантовыми ямами на основе InGaN/GaN, легированных Sm, Eu, Eu+Sm. / М.М. Мездрогина, Ю.В. Кожанова // Физика и техника полупроводников. – 2013. – Т. 47, вып.4. – С. 480–489.
2. Shubert E. Fred. Light-emitting diodes. – Second Edition. – Cambridge: University Press, 2006. – 436 p.
3. Давыдов С.Ю. Оценка значений спонтанной поляризации и диэлектрических проницаемостей кристаллов AlN, GaN, InN, SiN // Физика твердого тела. – 2009. – Т. 51, № 6. – С. 1161–1164.
4. Сиротин Ю.И. Основы кристаллофизики / Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. – М.: Наука, 1970. – 654 с.
5. Давыдов В.Н. Материалы и элементы электронной техники. – Ч. 1: Фундаментальные свойства кристаллических материалов: учеб. пособие. – Томск: ТУСУР, 2003. – 231 с.
6. Смирнов С.В. Температурная зависимость спектров излучения светодиодов белого свечения на основе нитрида галлия и его растворов / С.В. Смирнов, Е.В. Саврук, Ю.С. Гончаров // Доклады ТУСУР. – 2011. – Вып. 2 (24), ч. 2. – С. 55–58.
7. Романовский М.Н. Методика расчета теплопереноса в светоизлучающих диодах на основе GaN / М.Н. Романовский, С.Г. Еханин // Доклады ТУСУР. – 2011. – Вып. 2 (24), ч. 2. – С. 47–51.

Давыдов Валерий Николаевич

Д-р физ.-мат. наук, профессор каф. электронных приборов ТУСУРа
Тел.: (382-2) 41-35-07
Эл. почта: dvn@fet.tusur.ru

Олейник Владимир Леонидович

Студент 5 курса каф. электронных приборов ТУСУРа
Тел. (8-382) 41-35-07
Эл. почта: dvn@fet.tusur.ru

Davydov V.N., Oleynik V.L.

Appication of crystallophysic principles to optoelectronic problems

In the article we considered the problem of the efficiency of luminescence LED heterostructures with multiple quantum well (MQW) by eliminating (reorientation) of the vector of spontaneous polarization in InGaN/GaN crystals of 6mm point symmetry, which are used in optoelectronics for creating LEDs. We propose to use the principles of crystal physics, which are based on symmetry laws of crystalline solids and allow to predict the observability of physical properties at a given point symmetry. In theory we show that the application of constant magnetic field in certain crystallographic directions detaches vector of the spontaneous polarization from the main axis of symmetry, allowing an arbitrary orientation in the crystallophysical coordinates. Experimentally we detected the increase of emission power in LEDs to a few percent by means of the magnetic field action of a certain configuration and size on the crystal.

Key words: point symmetry group, Neumann principle, Curie principle, LED heterostructure, magnetic field, spontaneous polarization, piroelectric effect, piezoelectric effect.