УДК 621.315

В.Н. Давыдов, В.Л. Олейник

Пиро- и пьезоэффекты в светодиодной MQW-гетероструктуре

Проанализированы основные механизмы формирования поля внутренней поляризации в гетероструктурах InGaN/GaN. Методами тензорного исчисления произведен расчет основных составляющих поля поляризации внутри слоев гетероструктуры. Предложено компенсировать внутреннюю поляризацию приложением к боковым граням гетероструктуры упругого напряжения, которое за счет прямого пьезоэффекта создаст электрическое поле равной величины и противоположного направления. Рассчитана величина требуемого упругого напряжения от внешнего источника.

Ключевые слова: пироэффект, гетероструктура InGaN/GaN, прямой и обратный пьезоэффект, внешнее компенсирующее упругое напряжение.

В настоящее время диодные гетероструктуры на основе InGaN/GaN с множественными квантовыми ямами (MQW) и сверхрешетками являются базовыми элементами для создания материалов для фотонных кристаллов, а также высокоэффективных источников оптического излучения. Однако скорость излучательной рекомбинации носителей заряда в квантовых ямах этих структур в значительной степени ослаблена резонансным туннелированием носителей заряда через структурные дефекты в квантовых ямах, а также действием внутреннего электрического поля, созданного, прежде всего, за счет действия пиро- и пьезоэлектрического эффектов [1] и ряда других причин. Устранение этих причин, в частности поля спонтанной поляризации, позволит увеличить эффективность работы светодиода [2].

Цель работы. Целью данной работы является определение величины внешнего упругого напряжения, прикладываемого к светодиодной гетероструктуре, создающего пьезополе, компенсирующее внутреннее электрическое поле в квантовых ямах.

Исходные положения. Используемые для создания гетероструктуры GaN и InN широкозонные кристаллические материалы обладают пиро- и пьезоэффектами примерно одинаковой величины. Близки также их упругие свойства [3]. По этой причине будем рассматривать структуру InGaN/GaN как однородный кристалл с усредненными параметрами образующих его бинарных соединений. Это тем более допустимо, так как оба материала относятся к вюрцитам и имеют одинаковую точечную группу симметрии 6*mm*. Физическая картина возникновения внутренней поляризации в гетероструктуре такова. Протекающий через открытый *p–n*-переход ток приводит к джоулевову нагреву кристалла на температуру ΔT. За счет пироэффекта нагрев вызывает спонтанную поляризацию P_3^{piro}, направленную по оси $X3$ кристаллофизической системы координат вюрцита. Одновременно нагрев также приводит к деформации кристалла за счет его температурного расширения. Созданная этим упругая деформация через обратный пьезоэффект кристалла создает дополнительную поляризацию $P_3^{\Delta\text{T}}$, ориентированную также по оси $X3$.

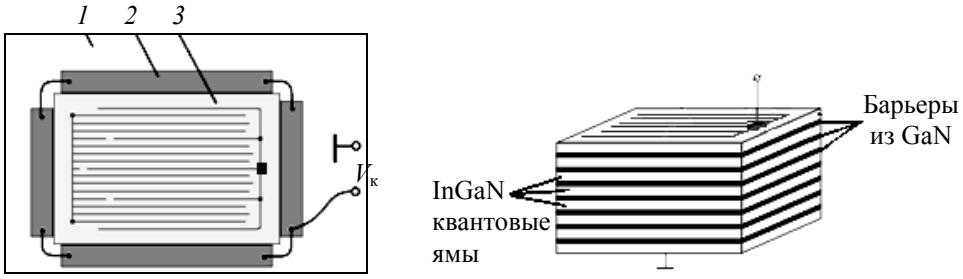

Рис. 1. Топология светодиодной гетероструктуры с внешними пьезоэлементами

Третьей составляющей внутренней поляризации P_3^{piezo} выступает пьезополе, созданное через прямой пьезоэффект упругим напряжением от пироэлектрической поляризации. Образующаяся суммарная поляризация и является тем электрическим полем, которое ухудшает люминесцентные свой-

ства диодной структуры. Предлагается, пользуясь биполярностью пьезополя, суммарную внутреннюю поляризацию компенсировать противоположно направленным пьезополем, созданным приложением к торцам диодной структуры внешнего упругого напряжения требуемой величины. На рис. 1, *а* и *б* показана конструкция анализируемой гетероструктуры (*3*) на подложке (*1*), в которой требуемое упругое напряжение создается пьезоэлементами (*2*), запитываемыми от источника компенсирующего напряжения $V_{\text{к}}$.

Расчет внутренней поляризации. В расчетах использована внутренняя симметрия тензоров первого ($\overline{\gamma}$), второго ($\hat{\alpha}$, $\hat{\chi}$), третьего ($\hat{d}$) и четвертого ($\hat{C}$) рангов для кристаллов симметрии $6mm$ [3, 4]. Выражения для используемых в расчете эффектов тензорной форме таковы:
$\overline{P}^{\text{pyro}} = \overline{\gamma} \cdot \Delta T$ – пироэффект; $\hat{\varepsilon} = \hat{\alpha} \cdot \Delta T$ – эффект теплового расширения кристалла; $\overline{P}^{\text{piezo}} = \left(\hat{d} : \hat{\sigma}\right)$ – прямой пьезоэффект; $\hat{\sigma}^{\text{piezo}} = \left(\hat{d} \cdot \overline{E}\right)$ – обратный пьезоэффект; $\hat{\sigma} = \left(\hat{C} : \hat{\varepsilon}\right)$ – закон Гука.

1. Наиболее просто вычисляется величина поляризации кристалла, вызванная его нагреванием через пироэлектрический эффект. Поскольку вектор пироэлектрических коэффициентов имеет вид: $\overline{\gamma}\left(0 \;\; 0 \;\; \gamma_3\right)$, то пирополяризация будет иметь место только по оси $X3$ и определится выражением

$$P_3^{\text{pyro}} = \gamma_3 \cdot \Delta T\,, \tag{1}$$

где γ_3 – компонента вектора пирокоэффициентов.

2. Другая составляющая суммарной поляризации кристалла – это поляризация, вызванная тепловым расширением кристалла [4]. Она определяется следующим бискалярным произведением тензоров нулевого, второго, третьего и четвертого рангов:

$$\overline{\mathbf{P}}^{\Delta T} = \left(\hat{d} : \hat{\sigma}\right) = \left(\hat{d} : \left(\hat{C} : \hat{\alpha}\right)\right) \cdot \Delta T\,. \tag{2}$$

Здесь использовано выражение для определения тензора упругого напряжения, возникающего при тепловом расширении кристалла через закон Гука. В выражении (2) обозначено: $\hat{\sigma}$ – тензор упругих напряжений; $\hat{\alpha}$ – тензор теплового расширения. Это тензоры второго ранга с внутренней симметрией $[V^2]$. Тензор $\hat{d}$ – тензор пьезомодулей имеет ранг, равный трем, и внутреннюю симметрию $V[V^2]$. В обозначениях Фохта для кристаллов симметрии $6mm$ в стандартной установке кристаллофизической системы координат этот тензор может быть представлен в виде матрицы [3, 4]:

$$\left(d_{i\alpha}\right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

где индексы принимают значения: $i = 1, 2, 3$; $\alpha = 1, 2, \ldots, 6$. Тензор упругих постоянных кристалла $\hat{C}$ – тензор четвертого ранга с внутренней симметрией $[[V^2]]^2$. В стандартной установке кристаллофизической системы координат кристаллов гексагональной сингонии этот тензор может быть представлен в следующей матричной форме [3, 4]:

$$\left(C_{\alpha\beta}\right) = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ C_{14} & -C_{14} & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & C_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{14} & C_{66} \end{pmatrix}.$$

В данной матрице индексы Фохта принимают значения $\alpha = 1, 2, \ldots, 6$; $\beta = 1, 2, \ldots, 6$.

Зная тензоры пьезомодулей и упругих постоянных в кристаллах симметрии $6mm$, запишем в координатной форме выражение (2) для пьезополя, вызванного тепловым расширением кристалла:

$$P_i^{\Delta T} = d_{ijk}\sigma_{jk} = d_{ijk} \cdot C_{jklm} \cdot \alpha_{lm} \cdot \Delta T\,,$$

где d_{ijk} – компоненты тензора пьезмодулей; σ_{jk} – компоненты тензора упругих напряжений; C_{jklm} – компоненты тензора упругих постоянных; α_{lm} – компоненты тензора линейного расширения. Далее найдем компоненты тензора упругих напряжений:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\alpha_{kl} \cdot \Delta T\,.$$

Компоненту σ_{11} определим, приравняв индексы $i = j = 1$, тогда как другие индексы будут пробегать значения от 1 до 3. Тогда получим

$$\sigma_{11} = \left(C_{1111}\alpha_{11} + C_{1122}\alpha_{22} + C_{1133}\alpha_{33}\right)\cdot \Delta T.$$

Другие компоненты получаем аналогичным образом, меняя значения индексов i и j:

$$\sigma_{22} = \left(C_{2211}\alpha_{11} + C_{2222}\alpha_{22} + C_{2233}\alpha_{33}\right)\cdot \Delta T, \qquad \sigma_{33} = \left(C_{3311}\alpha_{11} + C_{3322}\alpha_{22} + C_{3333}\alpha_{33}\right)\cdot \Delta T,$$

$$\sigma_{12} = \left(C_{1211}\alpha_{11} + C_{1222}\alpha_{22} + C_{1233}\alpha_{33}\right)\cdot \Delta T = 0, \qquad \sigma_{13} = \left(C_{1311}\alpha_{11} + C_{1322}\alpha_{22} + C_{1333}\alpha_{33}\right)\cdot \Delta T = 0,$$

$$\sigma_{23} = \left(C_{2311}\alpha_{11} + C_{2322}\alpha_{22} + C_{2333}\alpha_{33}\right)\cdot \Delta T = 0.$$

В обозначениях Фохта тензор упругих напряжений диагонального типа будет иметь компоненты

$$\sigma_1 = \left(C_{11}\alpha_1 + C_{12}\alpha_2 + C_{13}\alpha_3\right)\cdot \Delta T, \qquad \sigma_2 = \left(C_{21}\alpha_1 + C_{22}\alpha_2 + C_{23}\alpha_3\right)\cdot \Delta T,$$

$$\sigma_3 = \left(C_{31}\alpha_1 + C_{32}\alpha_{22} + C_{33}\alpha_3\right)\cdot \Delta T.$$

Теперь найдем поляризацию от теплового расширения кристалла по выражению $P_i^{\Delta T} = d_{i\alpha}\sigma_\alpha$:

$$P_1^{\Delta T} = d_{11}\sigma_1 + d_{12}\sigma_2 + d_{13}\sigma_3 = 0, \qquad P_2^{\Delta T} = d_{21}\sigma_1 + d_{22}\sigma_2 + d_{23}\sigma_3 = 0,$$

$$P_3^{\Delta T} = d_{31}\sigma_1 + d_{32}\sigma_2 + d_{33}\sigma_3 = d_{31}(\sigma_1 + \sigma_2) + d_{33}\sigma_3.$$

Подставляя сюда выражения для упругих напряжений, найдем

$$P_3^{\Delta T} = 2\left\{d_{31}\left[\left(C_{11} + C_{12}\right)\alpha_1 + C_{13}\alpha_3\right] + d_{33}\left[C_{13}\alpha_1 + \frac{C_{33}\alpha_3}{2}\right]\right\}\cdot \Delta T,$$

где использованы по Фохту обозначения компонентов тензора теплового расширения [3, 4].

3. Третье слагаемое полной поляризации кристалла вычисляется по следующему выражению, представленному в тензорной форме [2, 3]:

$$\overline{\mathbf{P}}^{\text{piezo}} = \left(\hat{d} : \hat{\sigma}_{\text{piezo}}\right) = \left(\hat{d} : \left(\hat{e}\cdot \overline{\mathbf{E}}_{\text{sp}}\right)\right) = \left(\hat{d} : \left(\hat{e}\cdot \frac{\overline{\mathbf{P}_{\text{sp}}}}{\hat{\chi}}\right)\right) = \frac{\Delta T}{\hat{\chi}}\left(\hat{d} : \left(\hat{e}\cdot \overline{\gamma}\right)\right).$$

Здесь обозначено: $\hat{e}$ – тензор пьезоконстант; $\hat{\chi}$ – тензор диэлектрической проницаемости кристалла. В координатной форме выражение для $X3$ – компоненты пьезополяризации примет вид:

$$P_3^{\text{piezo}} = d_{33}^2 \cdot \gamma_3 \frac{\Delta Y}{\chi_3}.$$

Другие компоненты этого вектора равны нулю. Окончательно выражение для компоненты по оси $X3$ вектора полной поляризации кристалла, обладающего пиро- и пьезоэффектом, будет иметь вид:

$$P_3^{\text{int}} = \gamma_3 \cdot \Delta T + \gamma_3 \frac{d_{33}^2}{\chi 3}\cdot \Delta T + 2\left\{d_{31}C1 + d_{33}C2\right\}\cdot \Delta T = \left[\gamma_3 + \gamma_3 \frac{d_{33}^2}{\chi 3} + 2\left(d_{31}C1 + d_{33}C2\right)\right]\cdot \Delta T, \qquad (3)$$

где обозначено: $C1 = \left[\left(C_{11} + C_{12}\right)\sigma_1 + C_{13}\sigma_3\right]$, $C2 = \left[C_{13}\sigma_1 + \frac{C_{33}\sigma_3}{2}\right]$.

Выражение (3) показывает, что полная внутренняя поляризация кристалла пропорциональна его нагреву: чем выше температура кристалла, тем больше каждая из трех компонент поляризаций. Из поляризационных свойств кристалла наибольший эффект, вероятно, оказывает пьезоэффект. Роль упругих свойств кристалла оценивается как незначительная ввиду типично малых значений коэффициентов теплового расширения кристаллов.

4. Для компенсации поля внутренней поляризации гетероструктуры необходимо создать внешними устройствами пьезополе величиной

$$P_3^{\text{ext}} = d_{3k} \cdot \sigma_k^{\text{ext}}.$$

Внешнее упругое напряжение σ_k^{ext}, создаваемое внешними пьезоэлементами (2) (см. рис. 1), приложенное по кристаллофизическим направлениям $X1$ и $X2$, описывается тензором

$$\left\|\sigma_k\right\| = \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix} \cdot \sigma_0^{\text{ext}}.$$

Здесь σ_0^{ext} – величина упругого напряжения по каждому направлению. Тогда созданное им в кристалле пьезополе будет равно

$$P_3^{\text{ext}} = d_{31} \cdot \sigma_1 + d_{31} \cdot \sigma_2 = 2d_{31} \cdot \sigma_0^{\text{ext}}.$$

Из условия компенсации внутренней поляризации внешней найдем требуемое для этого упругое напряжение от внешнего источника, приравняв его суммарному полю поляризации (3):

$$\sigma_0^{\text{ext}} = -\frac{\Delta T}{2d_{31}}\left\{\gamma_3\left[1+\frac{d_{33}^2}{\chi_3}\right]+2\left[d_{31}\cdot C1+d_{33}\cdot C2\right]\right\}. \quad (4)$$

Подбирая величину питающего напряжения на внешних пьезоэлементах, можно созданием внешенего упругого напряжения добиться устранения негативного влияния поля внутренней поляризации на люминесцентные свойства гетероструктур InGaN/GaN. Заметим, что внешнее упругое напряжение может быть создано, например, механическим устройством или способом.

Выводы. Произведен физический анализ механизмов формирования внутреннего электрического поля. Установлено, что оно имеет три составляющих, создаваемых: за счет пироэффекта, за счет прямого пьезоэффекта и теплового расширения кристалла, а также обратного и прямого пьезоэффекта и пирополя. Каждая составляющая суммарной поляризации гетероструктуры линейно связана с нагревом кристалла, возникающим при протекании тока через светодиод.

Получены аналитические выражения для каждой составляющей внутреннего поля, а также выражение для полного поля внутренней поляризации. Определена величина упругого напряжения вдоль осей $X1$ и $X2$, необходимого для устранения негативного влияния внутреннего поля на люминесцентные свойства гетероструктуры InGaN/GaN.

Литература

1. 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.

2. Гончарова Ю.С. Ускоренные испытания полупроводниковых светодиодов на долговечность / Ю.С. Гончарова, И.Ф. Гарипов, В.С. Солдаткин // Доклады ТУСУР. – 2013. – № 2. – С. 51–53.

3. Сиротин Ю.И. Основы кристаллофизики / Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. – М.: Наука, 1970. – 654 с.

4. Давыдов В.Н. Материалы и элементы электронной техники. – Ч. 1: Фундаментальные свойства кристаллических материалов: учебное пособие. – Томск: ТУСУР, 2003. – 231 с.

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.

Piro-and piezoeffects in light-emitted MQW heterostructure

The main mechanisms of internal field polarization in InGaN/GaN heterostructures are analized. The basic components of the field polarization within the layers of the heterostructure are calculated by means of tensor calculus methods. We propose to compensate the application of intrinsic polarization to lateral faces of elastic stress heterostructures, which due to the direct piezoelectric effect anisotropy would create an electric field of equal magnitude and opposite direction.
The value of the elastic stress from an external source is calculated.
Keywords: pyroeffect, direct and inverse piezoeffect, InGaN/GaN heterostructure, external compensating elastic stress.