06.1

Об энергетических уровнях в квантовых ямах, образующихся на контактах кубического и гексагональных политипов карбида кремния

© С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург
E-mail: Sergei.Davydov@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 20 апреля 2005 г.

В рамках модели треугольной квантовой ямы сделаны оценки энергии основного ε_0 и первого возбужденного состояний ε_1. Показано, что эффективно управлять положением уровня ε_0 можно только с помощью легирования широкозонного политипа n-NH-SiC мелкими донорами.

Все возрастающий интерес к гетероструктурам, образованным различными политипами карбида кремния [1], связан с возможностью формирования практически бездефектного контакта. В настоящее время наиболее исследованы гетеропереходы 3C/6H [2,3] и 3C/4H [4]. При этом на контакте со стороны узкозонного компонента 3C–SiC формируется двумерная электронная квантовая яма, содержащая, по крайней мере, одно локализованное состояние. Двумерная квантовая яма характеризуется положением локальных уровней (точнее, двумерных подзон) ε_0, ε_1 и т.д., отсчитываемых от дна ямы. Как правило, уровень ε_0 лежит ниже фермиевского, тогда как ε_1 — выше. В настоящей работе мы оценим величины ε_0 и ε_1 для гетеропереходов, образованных политипами карбида кремния 3C и NH, где $N = 2, 4, 6, 8$.

Рассмотрим задачу об энергии уровня ε_0 в рамках подхода [5]. Запишем уравнение Пуассона для области 3C–SiC в виде

$$\frac{dF}{dx} = \frac{e}{\varepsilon_{st}} n(x), \tag{1}$$

где x — направление, перпендикулярное плоскости контакта (ось квантования), $\varepsilon_{st} = \varepsilon_{st}(3C)$. Концентрацию электронов в квантовой яме

$n(x)$ зададим в виде

$$n(x) = n_s \delta(x), \tag{2}$$

где n_s — двумерная плотность электронного газа в квантовой яме, $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака, координата контакта $x = 0$. Интегрирование уравнения (1) с учетом (2) дает

$$F = \frac{en_s}{\varepsilon_{st}}. \tag{3}$$

В [5] показано, что при очень низких температурах, когда только уровень ε_0 лежит ниже фермиевского:

$$n_s = \overline{D}(\Delta - \varepsilon_0), \tag{4}$$

где $\overline{D} = k(m^*/\pi\hbar^2)$ — плотность состояний, соответствующая одному уровню размерного квантования (k — число эквивалентных долин), Δ — энергия уровня Ферми относительно дна квантовой ямы. При этом случаю очень низких температур отвечает условие $(\Delta - \varepsilon_0) \gg k_B T$.

Для основного состояния ε_0 имеем в бесконечно глубокой треугольной яме [6,7]:

$$\varepsilon_0 \approx 1.856 \left(\frac{e^2 F^2 \hbar^2}{m^*} \right)^{1/3}, \tag{5}$$

где F — напряженность электрического поля на контакте NH/3C со стороны 3C–SiC, m^* — эффективная масса электрона в 3C–SiC, e — величина заряда электрона, $\hbar$ — приведенная постоянная Планка. Подставляя (3) и (4) в (5), найдем

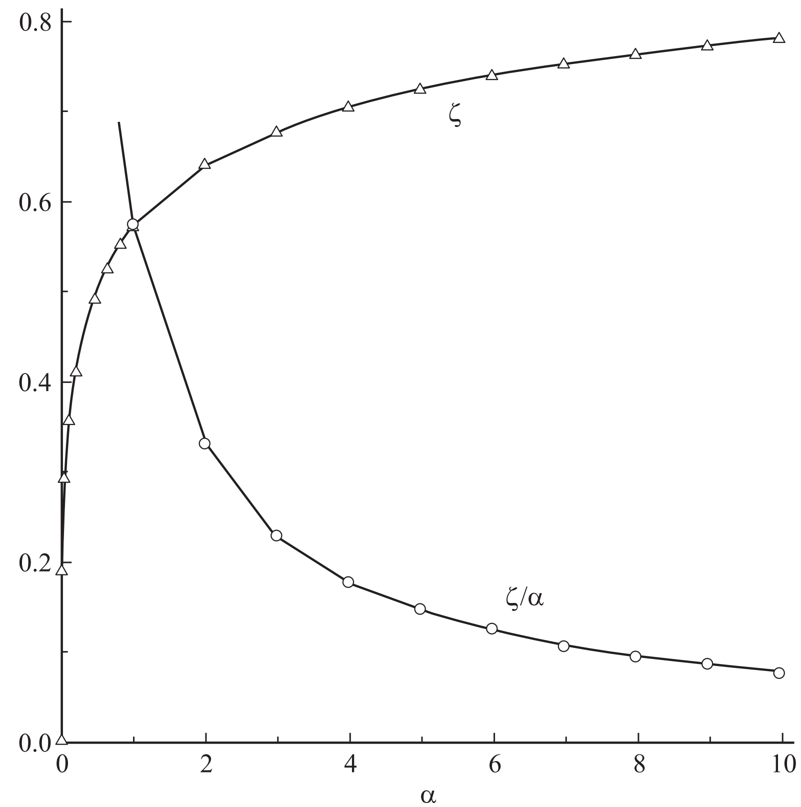
$$\varepsilon_0^3 = A_k (\Delta - \varepsilon_0)^2, \tag{6}$$

$$A_k = (1.856)^3 k^2 (e^2/\pi\varepsilon_{st})^2 (km^*/\hbar^2).$$

Переходя к безразмерным величинами $\xi = \varepsilon_0/\Delta$ и $\alpha = A_k/\Delta$, получим вместо (6) следующее уравнение:

$$\xi^3 = \alpha(1 - \xi)^2. \tag{7}$$

Отметим, что по определению параметр $0 \leqslant \xi < 1$, причем $\xi \to 0$ при $\alpha \to 0$ и $\xi \to 1$ при $\alpha \to \infty$. Зависимости параметра ξ и отношения (ξ/α) от α представлены на рисунке. Резкое увеличение ξ имеет место



Зависимости параметра $\xi = \varepsilon_0/\Delta$ и отношения $(\xi/\alpha) = \varepsilon_0/A$ от параметра $\alpha = A/\Delta$.

только в интервале α от 0 до 2, после чего параметр ξ возрастает достаточно медленно. Зависимость (ξ/α) от α имеет гиперболический характер.

Оценим параметр A_k. Для гетероперехода 3C/6H−SiC количество эквивалентных долин $k = 3$, тогда как для гетеропереходов AlGaN/GaN и AlGaAs/GaAs параметр $k = 1$ [5,8]. Ниже, в иллюстративных целях, мы рассмотрим обазначения k, используя, однако, значения ε_{st} и m^* для 3C−SiC. Так как $\varepsilon_{st}(3C) = 9.72$ [9], получим $A_k = 1.422k^2(m^*/m_0)$, где m_0 — масса свободного электрона. По данным работы [10] в политипе 3C–SiC эффективная масса плотности состояний в одной долине $(m^*/m_0) = 0.35$. Тогда $A_1 \approx 0.50$ и $A_3 \approx 4.48$ eV. Отметим, что в контексте нашей задачи о гетеропереходе 3C/NH–SiC параметр A_k является константой. Следовательно, увеличение параметра α определяется уменьшением Δ, т. е. приближением уровня Ферми к дну квантовой ямы. Но величина Δ не должна становиться меньше энергии ε_0, так как в противном случае уровень ε_0 окажется незаполненным (напомним, что мы рассматриваем очень низкие темпратуры). Следовательно, $\alpha_{k\,\max} = A_k/\varepsilon_0$. Так как по данным [3] величина $\varepsilon_0 \approx 0.06$ eV, то в этом случае $\alpha_{1\,\max} \approx 8.33$ и $\alpha_{3\,\max} \approx 74.65$. Исходя из определения параметров ξ и α, получим

$$\varepsilon_0 = (\xi/\alpha_k)A_k, \tag{8}$$

что в случае $\varepsilon_0 \approx 0.06$ eV дает $(\xi/\alpha_1) \approx 0.12$ и $(\xi/\alpha_3) \approx 0.013$. Таким соотношением отвечают значения $\alpha_1 \approx 6$ и $\alpha_3 \approx 70$, откуда получаем $\Delta_1 \approx 0.083$ и $\Delta_3 \approx 0.064$ eV, что представляется вполне разумным. Отметим, что при увеличении α более чем на порядок, параметр Δ уменьшается лишь на 23%.

Чем ближе уровень Ферми к краю зоны проводимости NH-политипа, тем выше Δ, меньше α и больше отношение $(\xi/\alpha) = \varepsilon_0/A$. Следовательно, в данном случае получаем, что легирование n^+-NH–SiC мелкими донорами увеличивает энергию основного локального состояния в квантовой яме. Воспользовавшись оценкой поля $F \approx 2 \cdot 10^7$ V/m [3] и квазиклассическим выражением для уровней ε_n $(n = 1, 2, \dots)$ в треугольной квантовой яме [7,11]

$$\varepsilon_n = (\hbar^2/2m^*)\left[\frac{3\pi eF}{2}\left(n + \frac{3}{4}\right)\right]^{2/3}, \tag{9}$$

получим $\varepsilon_1 \approx 0.144$ eV. Этот уровень лежит, по-видимому, выше фермиевского и в рассматриваемом нами случае крайне низких температур практически пуст.

Воспользовавшись выражениями для $n_s(T)$, приведенными в [5], для высоких температур, когда $(\Delta - \varepsilon_0) \gg k_BT$ и $(\varepsilon_1 - \Delta) \gg k_BT$, получим

$$n_s = \overline{D}[(\Delta - \varepsilon_0) - (\varepsilon_1 - \Delta)], \tag{10}$$

откуда следует, что заселенность ямы уменьшается. При этом, однако, убывает и напряженность поля F, что приводит к сдвигу вниз по шкале энергий уровней ε_0 и ε_1, в результате чего заселенность ямы увеличивается. Таким образом, будет происходить некоторая температурная стабилизация положения уровней ε_0 и ε_1. Интересно отметить, что выражение (10) справедливо и при очень низких температурах, когда уровень ε_1 лежит ниже фермиевского [5].

Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ–03–02–16 054б, INTAS–01–0603 и NATO SfP N978011.

Список литературы

[1] *Fissel A.* // Physics Reports. 2003. V. 379. N 1. P. 149–255.
[2] *Лебедев А.А., Стрельчук А.М., Давыдов Д.В., Савкина Н.С., Кузнецов А.Н., Сорокин Л.М.* // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. В. 18. С. 89–93.
[3] *Лебедев А.А., Стрельчук А.М., Савкина Н.С., Богданова Е.В., Трегубова А.С., Кузнецов А.Н., Сорокин Л.М.* // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. В. 23. С. 78–86.
[4] *Fissel A., Kaizer U., Schröter B., Richter W., Bechstedt F.* // Appl. Surf. Sci. (2001). V. 184. N 1. P. 37–42.
[5] *Моркоч Х.* // Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры / Под ред. Л. Ченга и К. Плога. М.: Мир, 1989. Гл. 17.
[6] *Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1992.
[7] *Демиховский В.Я., Вугальтер Г.А.* Физика квантовых низкоразмерных систем. М.: Логос, 2000.
[8] *Polyakov V.M., Schwierz F.* // Internationales Kolloquim Wissenschaftliches Technische Universität Ilmenau. 2003. P. 1.
[9] *Гавриленко В.И., Грехов А.М., Корбутяк Д.В., Литовченко В.Г.* Оптические свойства полупроводников. Справочник. Киев: Наук. думка, 1987.
[10] *Son N.T., Chen W.M., Kordina O., Konstantinov A.O., Monemar B., Janzen E., Hofman D.M., Volm D., Drechsler M., Mever R.K.* // Appl. Phys. Lett. 1995. V. 66. N 9. P. 1074–1076.
[11] *Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф.* Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир, 1985.