

Оценки энергетических характеристик гетеропереходов 3C-SiC/2H-, 4H-, 6H- и 8H-SiC

© С.Ю. Давыдов[¶], А.А. Лебедев, О.В. Посредник

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 7 февраля 2005 г. Принята к печати 31 марта 2005 г.)

В предположении линейной зависимости электронного сродства политипов карбида кремния от степени их гексагональности определены разрывы зон проводимости и валентных зон на контакте 3C-SiC с политипами NH-SiC ($N = 2, 4, 6, 8$). В рамках модели треугольной квантовой ямы сделаны оценки энергии основного состояния ϵ_0 . Показано, что эффективно управлять положением уровня ϵ_0 можно только с помощью легирования широкозонного политипа n -NH-SiC мелкими донорами.

1. В последнее время возрос интерес к гетероструктурам и сверхрешеткам, образованным различными политипами карбида кремния [1]. Основное внимание при этом уделяется контактам политипов 3C/6H [2,3] и 3C/4H [4]. При этом на контакте в области узкозонного компонента системы (3C-SiC) формируется двумерная электронная квантовая яма, содержащая по крайней мере одно локализованное состояние. Основными энергетическими характеристиками гетероперехода являются разрывы зон проводимости ΔE_C и валентных зон ΔE_V [5]. Двумерная квантовая яма характеризуется положением локальных уровней ϵ_0, ϵ_1 и т.д., отсчитываемых от дна ямы. (На самом деле, ϵ_0, ϵ_1 и т.д. являются краями соответствующих двумерных подзон; мы, однако, будем для простоты использовать термин „уровень“). Вся система характеризуется уровнем Ферми E_F (точнее, химическим потенциалом). Как правило, уровень ϵ_0 лежит ниже фермиевского, тогда как ϵ_1 — выше. В настоящей работе мы оценим величины $\Delta E_C, \Delta E_V$ и ϵ_0 для гетеропереходов, образованных политипами SiC 3C и 2H, 4H, 6H, 8H.

В рамках модели Шокли–Андерсона [5] величина ΔE_C определяется разностью значений электронного сродства кубического политипа $\chi(3C)$ и соответствующего гексагонального политипа $\chi(NH)$, где $N = 2, 4, 6, 8$. Сложность, однако, заключается в том, что значения электронного сродства не определены достаточно точно. Так, например, в работе [6] используется значение $\chi(6H) = 4.4$ эВ, тогда как по данным [7] величина $\chi(6H) = 3.3-3.7$ эВ и $\chi(3C) = 4.0$ эВ. С другой стороны, в справочнике [8] приводятся значения $\chi(3C) = 4.8$ эВ и $\chi(2H) = 4.1$ эВ. Мы здесь поступим следующим образом. Положим

$$\chi(NH) = \chi(3C) - aD, \quad (1)$$

где $D = n_k / (n_k + n_h)$ — степень гексагональности [9,10] (n_k и n_h — число занятых атомами кубических и гексагональных узлов), a — коэффициент. Для 3C-SiC $D = 0$, для 2H-SiC $D = 1$. Отметим, что масштабирован-

ные характеристик политипов по параметру D не ново (см., например, [9–11]). На рис. 1 (кривая 1) приведена зависимость ширины запрещенной зоны E_g от D для различных политипов. Значения D брались из [10], E_g для политипов 3C (2.40 эВ) и 2H (3.33 эВ) — из [12], для 4H (3.23 эВ) и 6H (3.0 эВ) — из [13], для 8H (2.86 эВ) — из [14]. Из рис. 1 видно, что в интервале от $D = 0$ (3C) до $D = 0.5$ (4H) значения E_g являются линейной функцией степени гексагональности D . Аналогично ведет себя и экситонная запрещенная зона [1].

В соответствии с моделью Шокли–Андерсона [5] и выражением (1) получим

$$\Delta E_C = aD. \quad (2)$$

Воспользуемся значением $\Delta E_C = 0.55$ эВ, определенным в работе [3] для контакта 3C/6H ($D(6H) = 0.33$ [10]). Тогда $a \approx 1.67$ эВ. Результаты расчета по формуле (2) представлены на рис. 1 (кривая 2). Кривая 3 на рис. 1 представляет значения

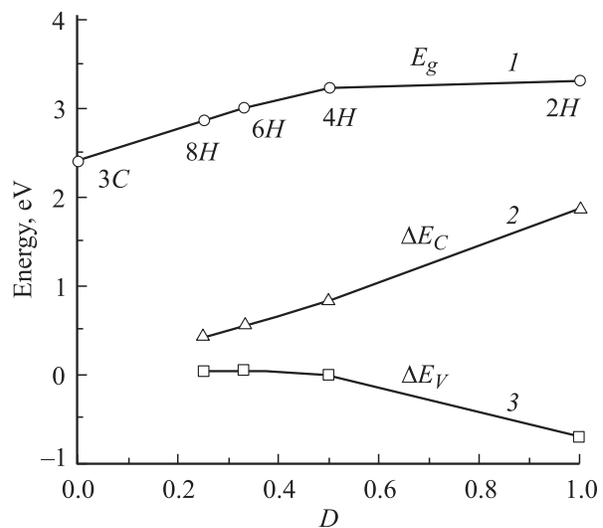


Рис. 1. Зависимости ширины запрещенной зоны E_g (1) разрывов зон проводимости ΔE_C (2) и валентных зон ΔE_V (3) при контакте различных гексагональных политипов SiC с кубическим политипом 3C-SiC от степени гексагональности D .

[¶] E-mail: Sergei.Davydov@mail.ioffe.ru

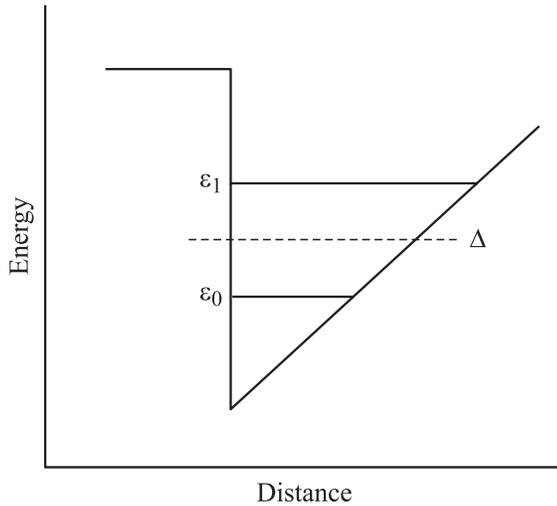


Рис. 2. Двумерная квантовая яма. Значения ε_0 , ε_1 и Δ отвечают соответственно краям основной и первой подзон и положению уровня Ферми относительно дна ямы.

ΔE_V , вычисляемые по формуле

$$\Delta E_V = \Delta E_g - \Delta E_C, \quad (3)$$

где $\Delta E_g = E_g(NH) - E_g(3C)$.

Из рис. 1 (кривая 3) следует, что для всех политипов, кроме 2H, величина ΔE_V не превышает 0.05 эВ. Для 2H-SiC разрыв валентных зон $\Delta E_V = -0.70$ эВ. Отметим, что оценки $\Delta E_C = 0.55$ эВ и $\Delta E_V \leq 0.5$ эВ работ [2,3] для 3C-SiC/6H-SiC достаточно хорошо согласуются со значениями $\Delta E_C = 0.70$ эВ и $\Delta E_V = 0.10$ эВ [1,4]. Для гетероперехода 3C-SiC/4H-SiC наши оценки дают $\Delta E_C = 0.83$ эВ и $\Delta E_V = 0$ эВ, тогда как в [1] приводятся соответственно значения 0.99 и 0.05 эВ. Если в выражение (2) подставить для 3C-SiC/6H-SiC значение $\Delta E_C = 0.70$ эВ из [1,4], то получим $a = 2.12$, что дает в случае гетероперехода 3C-SiC/4H-SiC величину $\Delta E_C = 1.06$ эВ, отлично согласующуюся с приведенным в [1] значением $\Delta E_C = 0.99$ эВ. Таким образом, представление электронного сродства в виде (1) вполне приемлемо.

Таким образом, в гетеропереходах 3C-SiC/4H-, 6H-, 8H-SiC в зоне проводимости со стороны узкозонного политипа 3C на контакте образуется квантовая яма, а разрыв валентных зон крайне мал (для контакта политипов 3C/4H разрыв вообще отсутствует). На контакте 3C/2H ямы образуются как в зоне проводимости 3C-SiC, так и в валентной зоне 2H-SiC. Электроны локализируются в приконтактном слое 3C-SiC, дырки — в слое 2H-SiC.

2. Обратимся теперь к оценке энергии локального уровня ε_0 . При этом обычно рассматривают модель треугольной квантовой ямы [15,16] с бесконечно высокой стенкой (рис. 2). Последнее справедливо в случае $\Delta E_C \gg \varepsilon_0$, который обычно и реализуется. Для основно-

го состояния ε_0 имеем [16,17]

$$\varepsilon_0 \approx 1.856 \left(\frac{e^2 F^2 \hbar^2}{m^*} \right)^{1/3}, \quad (4)$$

где F — напряженность электрического поля на контакте NH/3C со стороны 3C-SiC (мы будем рассматривать яму в зоне проводимости), m^* — эффективная масса электрона в 3C-SiC, e — величина заряда электрона, \hbar — приведенная постоянная Планка.¹ Задача, таким образом, сводится к определению поля F .

Грубую оценку величины F можно сделать по формуле [3,4]

$$F = U/d, \quad (5)$$

где U — контактная разность потенциалов, d — ширина области объемного заряда в 3C-SiC. Рассмотрим, как в [2,3], контакт n-6H-SiC с p-3C-SiC. Тогда максимальное значение контактной разности потенциалов есть

$$U_{\max} = \chi(3C) + E_g(3C) - \chi(NH) = \Delta E_C + E_g(3C), \quad (6)$$

что дает 2.78, 2.90, 3.16 и 3.92 для политипов 8H, 6H, 4H и 2H соответственно. Отметим, что определенные в работах [2,3] контактные разности потенциалов равны 2.65 и 2.43 эВ соответственно.

Далее можно показать [18], что в случае полностью ионизованных мелких доноров и акцепторов

$$F = \sqrt{\frac{2\pi e p_0 U [p_0 \varepsilon_{st}(3C) + n_0 \varepsilon_{st}(NH)]}{\varepsilon_{st}(3C) \varepsilon_{st}(NH) n_0}}, \quad (7)$$

где ε_{st} — статическая диэлектрическая проницаемость соответствующего политипа, n_0 — концентрация электронов в глубине 6H-SiC, p_0 — концентрация дырок в глубине 3C-SiC. По данным [12] $\varepsilon_{st}(3C) = 9.72$, $\varepsilon_{st}(6H) = 10.03$ в направлении, параллельном кристаллографической оси c , и $\varepsilon_{st}(6H) = 9.66$ в направлении, перпендикулярном оси c . Возьмем усредненное значение $\varepsilon_{st}^*(6H) = (10.03 \cdot 9.66^2)^{1/3} = 9.78$. Величину ε_{st} для политипа 4H принимают равной статической диэлектрической проницаемости политипа 6H. Данные о ε_{st} для 2H-SiC, насколько известно авторам, отсутствуют, поэтому для последующих оценок будем считать $\varepsilon_{st}(2H) = 9.78$.

Для сравнения значений ε_0 для различных гетеропереходов нужно, как это следует из формулы (4), сопоставить между собой величины $\eta \equiv F^{2/3}$. Для определенности предположим, что все NH-политипы легированы таким образом, что имеют одинаковые значения концентрации электронов n_0 в объеме образца. Будем также считать, что в контактах участвуют образцы 3C-SiC, имеющие одно и то же значение p_0 . Пренебре-

¹ Очень часто вместо формулы (4) используют приближенное квазиклассическое выражение (см., например, [15]), справедливое для возбужденных состояний ε_1 , ε_2 и т.д. Это может приводить к некоторым недоразумениям. Так, например, в работе [3] при использовании квазиклассической формулы было получено значение $\varepsilon_0 = 0.050$ эВ и для согласования с экспериментальным значением 0.06 эВ пришлось вводить дополнительный член $\delta \sim 0.01$ эВ. Если же пользоваться выражением (4), то получим $\varepsilon_0 = 0.058$ эВ и введение дополнительного члена не требуется.

жем также различием $\varepsilon_{st}(3C) = 9.72$ и $\varepsilon_{st}(NH) = 9.78$. Тогда $\eta \approx U^{1/3}$. Воспользовавшись экспериментальным значением $\varepsilon_0 = 0.060$ эВ [3] и величинами U_{max} , найдем $\varepsilon_0 = 0.059, 0.062$ и 0.066 соответственно для $8H$ -, $4H$ - и $2H$ -SiC. Различия энергий уровней ε_0 в квантовых ямах в $3C$ -SiC при контакте с политипами $8H$ -, $6H$ - и $4H$ -SiC практически отсутствуют. Для $2H$ -SiC отличие заметно. Не следует, однако, забывать, что экспериментальная информация от этого политипа скудна. Все же на основании проведенного анализа можно утверждать, что эффективно регулировать энергию уровня ε_0 можно лишь с помощью легирования.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований № 03-02-16 0546, INTAS № 01-0603 и NATO SFRN 978011.

Список литературы

- [1] A. Fissel. Phys. Reports, **379** (1), 149 (2003).
- [2] А.А. Лебедев, А.М. Стрельчук, Д.В. Давыдов, Н.С. Савкина, А.Н. Кузнецов, Л.М. Сорокин. Письма ЖТФ, **28** (18), 89 (2002).
- [3] А.А. Лебедев, А.М. Стрельчук, Н.С. Савкина, Е.В. Богданова, А.С. Трегубова, А.Н. Кузнецов, Л.М. Сорокин. Письма ЖТФ, **28** (23), 78 (2002).
- [4] A. Fissel, U. Kaizer, V. Schröter, W. Richter, F. Bechstedt. Appl. Surf. Sci., **184** (1), 37 (2001).
- [5] Ф. Бехштедт, Р. Эндерлейн. *Поверхности и границы раздела полупроводников* (М., Мир, 1990).
- [6] А.Н. Андреев, А.С. Трегубова, М.П. Щеглов, В.П. Растегаев, С.И. Дорожкин, В.Е. Челноков. ФТП, **29** (10), 1828 (1995).
- [7] M.J. Bazack. Phys. Status Solidi B, **202** (2), 549 (1997).
- [8] *Физические величины. Справочник*, под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова (М., Энергоатомиздат, 1991).
- [9] Н.Д. Сорокин, Ю.М. Таиров, В.Ф. Цветков, М.А. Чернов. Кристаллография, **28**, 910 (1983).
- [10] А.А. Лебедев. ФТП, **33** (7), 769 (1999).
- [11] Р.Г. Веренчикова, В.И. Санкин, Е.И. Радованова. ФТП, **17** (10), 1757 (1983).
- [12] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. *Оптические свойства полупроводников. Справочник* (Киев, Наук. думка, 1987).
- [13] Yu. Goldberg, M.E. Levinstein, S.L. Rumyantsev. In: *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, BN, SiC, SiGe*, ed. by M.E. Levinstein, S.L. Rumyantsev and M.S. Shur (N.Y., J. Wiley and Sons, 2001).
- [14] G.V. Dubrovskii, A.A. Lepneva, E.I. Radovanova. Phys. Status Solidi B, **57** (1), 423 (1973).
- [15] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985).
- [16] В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. *Физика квантовых низкоразмерных систем* (М., Логос, 2000).
- [17] В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. *Задачи по квантовой механике* (М., Наука, 1992).
- [18] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1977).

Редактор Л.В. Шаронова

Estimations of the energy characteristics of the 3C-SiC/2H-, 4H-, 6H- and 8H-SiC heterojunctions

S.Yu. Davydov, A.A. Lebedev, O.V. Posrednik

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract In assumption of a linear dependence of the silicon carbide polytypes electron affinities on their hexagonality the conduction and valence bands offsets at the contacts of 3C-SiC with the NH -SiC polytypes ($N = 2, 4, 6, 8$) are determined. In the scope of the triangular quantum well model estimations of the ground state energy ε_0 have been made. It is shown that the effective control of the ground level position can be achieved only by doping a n - NH -SiC polytype by shallow donors.