

# Оценки энергии экситонных переходов в гетероструктурах NH/3C/NH ( $N = 2, 4, 6, 8$ ) на основе политипов карбида кремния

© С.Ю. Давыдов<sup>¶</sup>, А.А. Лебедев, О.В. Посредник\*

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

\* Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет (ЛЭТИ),  
197376 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 29 июня 2005 г. Принята к печати 14 октября 2005 г.)

Рассмотрена гетероструктура, образованная включением кубической 3C области между гексагональными „обкладками“. Предполагается, что величина спонтанной поляризации пропорциональна степени гексагональности „обкладок“. В этом предположении вычислены значения электростатических полей в кубической области и определено положение двумерных подзон. Оценена энергия квазипрямых и непрямых экситонных переходов с использованием моделей треугольной и прямоугольной ям. Оценки для системы 4H/3C/4H показывают вполне удовлетворительное согласие с расчетами других авторов и экспериментальными данными.

PACS: 71.35.-y, 77.22.Ej, 73.40.Lq

1. Известно, что твердотельная электролюминесценция была открыта на кристаллах карбида кремния [1] и впервые светодиоды были изготовлены на основе этого материала [2]. Затем, вплоть до 90-х годов прошлого века, SiC рассматривался как перспективный материал для оптоэлектроники, главным образом для создания светодиодов в синей области спектра. Однако после получения высококачественных  $p-n$ -структур на основе нитрида галлия, где вероятность излучательной рекомбинации благодаря прямой структуре зон была на несколько порядков выше, чем в карбиде кремния, работы в области SiC-оптоэлектроники быстро практически прекратились.

Достиженные в последние годы успехи в гетероэпитаксии SiC [3–6] позволяют надеяться на получение в ближайшем будущем структурно-совершенных квантово-размерных структур на основе данного материала. Это вновь позволяет рассматривать карбид кремния как перспективный материал для изготовления светоизлучающих приборов. Задачей настоящей работы является определение спектральных характеристик излучения гетероструктур NH/3C/NH ( $N = 2, 4, 6, 8$ ) на базе политипов карбида кремния. Основы достаточно простого подхода к такой задаче были заложены в работах [6–11]. Им мы и будем следовать.

Квантово-размерные структуры на основе политипов SiC часто называют „чисто структурными“ квантовыми ямами, так как в данном случае нет осложнений, вызываемых различной химической природой компонентов гетероструктуры и геометрией их решеток. Простейший подход к проблеме заключается в рассмотрении прямоугольных квантовых ям в области 3C-SiC, образующихся как в зоне проводимости, так и в валентной зоне. В [12] показано, что ямы в зоне проводимости достаточно глубокие, тогда как глубина ям в валент-

ной зоне не превышает 0.1 эВ (исключение составляет система 2H/3C/2H, где и в валентной зоне образуется глубокая потенциальная яма). При этом могут реализовываться структуры как I, так и II типов [13] (см. далее). Подобная картина, однако, является чрезвычайно упрощенной. Если в кубическом политипе все четыре связи, образованные  $sp^3$  орбиталями Si и C, эквивалентны, то в некубическом, например гексагональном, эта эквивалентность нарушается [6–11]. При этом между связями происходит переход заряда, ведущий к спонтанной поляризации среды  $P$ . Такая поляризация гексагональных „обкладок“ в системе 2H/3C/2H ведет к возникновению некоторой контактной разности потенциалов  $V/e$  ( $e$  — заряд электрона) и соответствующего „встроенного“ (built-in) электростатического поля  $F = V/L$  в области 3C-SiC, где  $L$  — толщина этой области [7]. (Поле в „об-

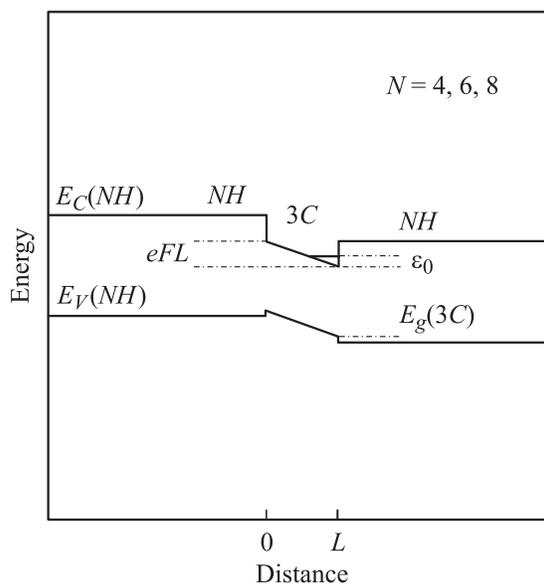
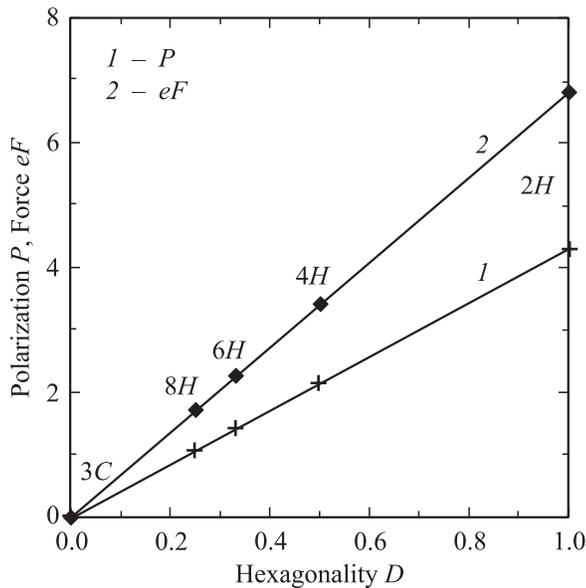


Рис. 1. Энергетическая схема гетероструктуры NH/3C/NH.

<sup>¶</sup> E-mail: Sergei.Davydov@mail.ioffe.ru



**Рис. 2.** Зависимость поляризации  $P$  (в ед.  $10^{-2}$  Кл/м<sup>2</sup>) (кривая 1) в политипах  $NH$  и силы  $eF$  (в ед.  $10^{-2}$  эВ/Å) (кривая 2), действующей на электрон в  $3C$ -области, от степени гексагональности  $D$ .

кладках“ можно пренебречь, так как их толщина много больше  $L$ ). При этом первоначально прямоугольная яма трансформируется в треугольную (рис. 1).

Воспользуемся значением спонтанной поляризации  $P(2H) = 4.32 \cdot 10^{-2}$  Кл/м<sup>2</sup>, рассчитанным в [7] для  $2H$ -SiC с учетом релаксации ионов, и предположим, что

$$P(NH) = P(2H)D, \quad (1)$$

где  $D$  — степень гексагональности, равная 0 для  $3C$  и 1 для  $2H$  политипов (см., например, [12]). Результаты представлены на рис. 2 (кривая 1). Следует отметить, что полученное нами значение спонтанной поляризации для  $4H$ -политипа равно  $2.16 \cdot 10^{-2}$  Кл/м<sup>2</sup>, что отличается от приведенного в [6] значения  $1.86 \cdot 10^{-2}$  Кл/м<sup>2</sup>.<sup>1</sup>

Исходя из соотношения (см. [6])

$$\bar{\epsilon}_0 \epsilon_\infty(3C)F(3C) = \bar{\epsilon}_0 \epsilon_\infty(NH)F(NH) + P(NH), \quad (2)$$

где  $\bar{\epsilon}_0$  — диэлектрическая постоянная,  $\epsilon_\infty$  — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, и пренебрегая полем в гексагональных „обкладках“, получим

$$eF = V/L, \quad (3)$$

где мы положили  $F \equiv F(3C)$ . Принимая, как и в [6],  $\epsilon_\infty = 7.14$ , получим значения  $eF$ , представленные на рис. 2 (кривая 2).

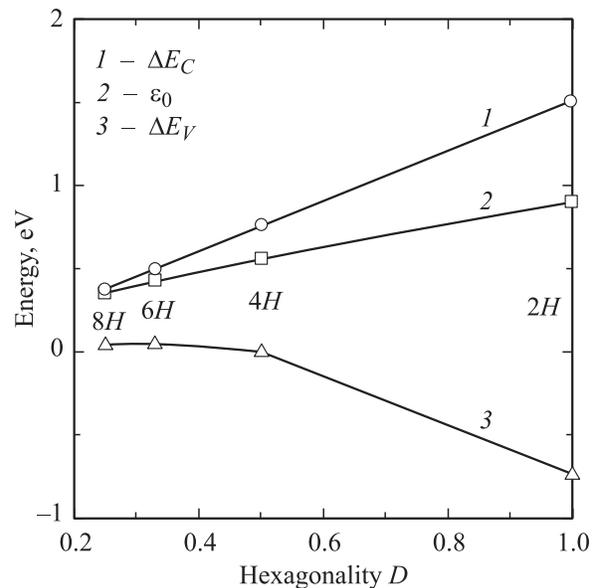
**2.** В целом ряде работ (см. обзор [5]) считалось, что электрон в зоне проводимости  $3C$ -области находится в треугольном потенциале. Поэтому рассчитаем положение локального уровня (точнее, двумерной подзоны)  $\epsilon_0$  в треугольной потенциальной яме с бесконечными стен-

<sup>1</sup> Несмотря на утверждение авторов [6], нам не удалось обнаружить такое значение поляризации в цитированной ими работе [7].

ками, воспользовавшись точной формулой [14,15]

$$\epsilon_0 \approx 1.856 \left( \frac{e^2 F^2 \hbar^2}{m^*} \right)^{1/3}, \quad (4)$$

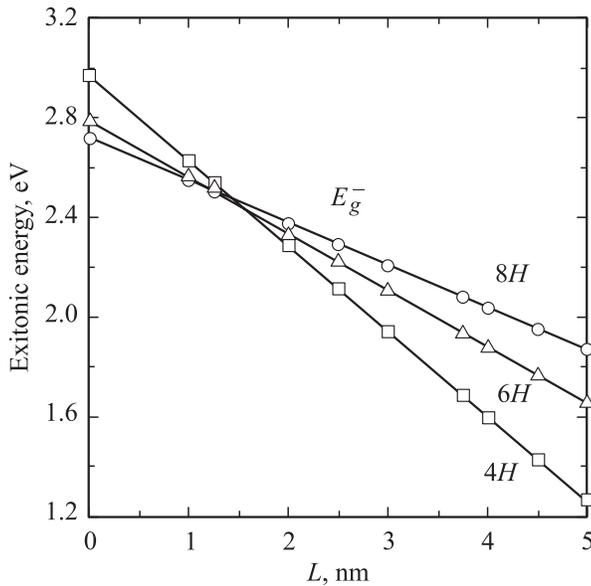
где  $m^* = 0.316m_0$  — эффективная масса электрона в  $3C$ -SiC для движения в направлении  $[111]$  ( $m_0$  — масса свободного электрона). Результаты расчета значений  $\epsilon_0$ , отсчитываемых от дна ямы, совместно с величинами разрывов зон проводимости  $\Delta E_C$  и валентной  $\Delta E_V$  (см. [12]) представлены на рис. 3. Отметим, что значения  $\epsilon_0$ , полученные здесь для треугольной потенциальной ямы, образованной встроенным полем, наведенным спонтанной поляризацией, гораздо выше, чем энергия уровней в яме, образующейся на контакте  $3C/NH$  (см. [12]).



**Рис. 3.** Зависимость энергии разрывов зон проводимости  $\Delta E_C$  (кривая 1) и валентной  $\Delta E_V$  (кривая 3) и положения локального уровня  $\epsilon_0$  в треугольной потенциальной яме от степени гексагональности  $D$ .

В работах [10,11] исследовались квантовые ямы  $4H/3C/4H$ , самопроизвольно образующиеся в уже выращенных структурах при пропускании прямого тока большой плотности, так называемые „stalking faults“. По оценкам авторов, в системе реализовывался II тип расположения зон, когда скачок валентной зоны в области  $3C$  происходит „вниз“, а не „вверх“ как в структурах типа I, изображенных на рис. 1.<sup>2</sup> При этом было экспериментально показано, что в структуре  $4H/3C/4H$  реализуются два экситонных перехода: квазипрямой переход  $E_g^+$  электрона, локализованного на  $3C$ -стороне правого контакта, на дырку, локализованную на  $4H$ -стороне правого контакта, и непрямой переход  $E_g^-$

<sup>2</sup> Так как значения ширины запрещенной зоны для разных политипов  $E_g$ , по данным авторов, имеют вполне определенный разброс, то и мы при ином выборе значений  $E_g$  получили скачок валентной зоны на 0.015 эВ, направленный „вниз“. Мы, однако, оставляем в расчете значение разрыва, равное нулю.



**Рис. 4.** Зависимость энергии экситона  $E_g^-$  от толщины  $L$  области 3C. Значения  $E_g^-$  при  $L = 0$  отвечают значениям  $E_g^+$ .

того же электрона, но уже на дырку, локализованную на 4H-стороне левого контакта. Ясно, что энергии и вероятности этих двух переходов различны. Более того, увеличение ширины 3C-области  $L$  не должно сказываться на значении  $E_g^+$  и вероятности квазипрямого перехода, но сильно влияет на  $E_g^-$  и вероятность непрямого перехода. Мы здесь также рассмотрим переходы  $E_g^+$  и  $E_g^-$ , так как для политипов 4H, 6H и 8H ямы в валентной зоне 3C очень мелкие и не содержат локальных состояний.

Воспользовавшись выражениями для  $E_g^+$  и  $E_g^-$ , приведенными в [11], для нашего случая получим

$$E_g^+ = E_g(3C) + \epsilon_0 + \Delta E_V, \quad (5)$$

$$E_g^- = E_g^+ - eFL. \quad (6)$$

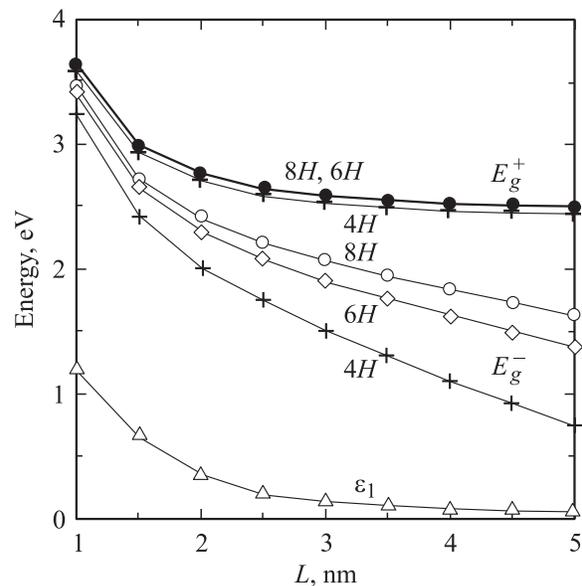
Из (5) и (6) формально следует, что при  $L = 0$  имеем  $E_g^+ = E_g^-$ . Результаты расчетов представлены на рис. 4. Отметим, что малые значения  $L$  рассматриваются нами в чисто иллюстративных целях, так как в соответствии с формулой (4), отвечающей яме с бесконечными стенками, должно выполняться неравенство  $L \gg \epsilon_0/eF$ . При  $L < \epsilon_0/eF$  локализованных состояний в яме нет. Таким образом, в данном случае (в отличие от [12], где на контакте в зоне проводимости имеем  $\epsilon_0 \ll \Delta E_C$ ) формулой (4) следует пользоваться с известной осторожностью.

Рассмотрим теперь структуру 2H/3C/2H. Здесь мы имеем локальное состояние в зоне проводимости  $\epsilon_{0C} = 0.9$  эВ, тогда как  $\epsilon_{0V} \approx 0.6$  эВ. Последняя оценка получена в предположении, что, как и в политипах 4H и 6H, в 2H эффективная масса дырки порядка  $m_0$ . Энергия экситона при этом равна  $E_g^* = E_g(3C) + \epsilon_{0C} + \epsilon_{0V} - eFL$ .

3. В работе [11] предложено вместо уровня  $\epsilon_0$  в треугольной потенциальной яме с бесконечными стенками рассматривать уровень  $\epsilon_1$  для прямоугольной потенциальной ямы. Преимущество данного подхода состоит в том, что можно учесть конечность глубины ямы  $U_0$ , положив ее равной  $\Delta E_C$ . Мы, однако, в чисто иллюстративных целях будем считать  $U_0 \rightarrow \infty$ . Тогда энергия  $\epsilon_1$  может быть вычислена по формуле [16]

$$\epsilon_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L^2}. \quad (7)$$

Для определения значений  $E_g^+$  и  $E_g^-$  используем выражения (5) и (6), заменив в них  $\epsilon_0$  на  $\epsilon_1$ . Результаты расчетов представлены на рис. 5. Сопоставление рис. 5 с рис. 4 показывает, что нелинейность, присутствующая на рис. 5, полностью определяется зависимостью  $\epsilon_1$  от  $L$ . Здесь интересно отметить, что уровень  $\epsilon_0$  (треугольная яма) зависит от поля  $F$  и тем самым от политипизма гексагональных обкладок, но не зависит от толщины кубической области  $L$ . С другой стороны, уровень  $\epsilon_1$  (прямоугольная яма) в пределе  $U_0 \rightarrow \infty$  не зависит от политипизма обкладок, но зависит от  $L$ . Далее, из рис. 5 следует, что при  $L \geq L^* = 2.5$  нм функции  $E_g^+(L)$  превращаются в константу, а функции  $E_g^-(L)$  становятся линейными, что характерно для треугольной ямы (рис. 4). Следовательно, при определенных значениях  $L^*$  обе модели качественно совпадают. Количественное сравнение показывает, что в модели с треугольной ямой значения  $E_g^+$  выше, чем в модели с ямой прямоугольной, тогда как значения  $E_g^-$  в обеих моделях близки. Отметим также, что результаты наших расчетов, представленные на рис. 5, качественно совпадают со значениями  $E_g^+(L)$  и  $E_g^-(L)$ , вычисленными в работе [11] для системы 4H/3C/4H (см. рис. 3 в [11]).



**Рис. 5.** Зависимости экситонных энергий  $E_g^+$  и  $E_g^-$ , а также энергии локального уровня  $\epsilon_1$  от толщины  $L$  области 3C.

Значения энергии (в эВ) локального уровня  $\varepsilon_1$  и экситонных энергий  $E_g^+$  и  $E_g^-$  в функции от толщины  $L$  (в нм) области 3С для системы 4Н/3С/4Н

$L$	$\varepsilon_1$	$E_g^+$	$E_g^-$
0.5	0.55	2.95	2.78
1.0	0.34	2.74	2.39
1.5	0.21	2.61	2.10
2.0	0.15	2.55	1.87
2.5	0.11	2.51	1.65

Вновь подчеркнем, что в области малых значений  $L$  всегда нужно проверять, является ли уровень  $\varepsilon_1$  локальным, т.е. удовлетворяется ли неравенство  $\varepsilon_1 < \Delta E_C$ . Таким образом, для прямоугольной ямы с бесконечными стенками должно выполняться условие

$$L \geq \bar{L} = \frac{\pi \hbar}{\sqrt{2m^* \Delta E_C}}. \quad (8)$$

Для 8Н политипа ( $\Delta E_C = 0.38$  эВ) получим  $\bar{L} = 1.77$  нм, для 6Н ( $\Delta E_C = 0.50$  эВ) — 1.54 нм, для 4Н ( $\Delta E_C = 0.76$  эВ) — 1.25 нм.

Перейдем теперь к количественным оценкам, полагая  $U_0 = \Delta E_C$ . Как показано в [16], значение  $\varepsilon_1$  определяется формулой

$$\varepsilon_1 = \frac{2\xi^2 \hbar^2}{m^* L^2}, \quad (9)$$

где параметр  $\xi$  находится из уравнения

$$\begin{aligned} \cos \xi &= \gamma \xi, \\ \gamma &= (\hbar/L) \sqrt{2/m^* U_0}. \end{aligned} \quad (10)$$

Результаты расчета для системы 4Н/3С/4Н приведены в таблице. Сравнение приведенных в таблице и на рис. 5 значений  $\varepsilon_1$  показывает, что модель ямы с бесконечно высокими стенками сильно завышает величину  $\varepsilon_1$ . Соответственно завышаются и значения экситонных энергий  $E_g^+$  и  $E_g^-$ . Сравнение табличных данных по  $E_g^+$  и  $E_g^-$  с соответствующими экспериментальными данными, приведенными на рис. 3 работы [11], показывает, что значения  $E_g^+$  согласуются очень хорошо, тогда как наши значения  $E_g^-$  занижены. Причина несоответствия лежит в различии использованных значений полей  $F$ . Заметим, что вычисление значения напряженности поля  $F$  является, в рамках рассматриваемой проблемы, наиболее сложной задачей теории. Поэтому в большинстве работ  $F$  рассматривают как подгоночный параметр. Мы же подобной подгонки не проводили.

Проведенный в настоящей работе анализ показывает возможность создания светоизлучающих структур (LED) в синей области спектра на основе гетеропереходов между политипами SiC. В настоящее время основными материалами для создания подобных LED считаются твердые растворы на основе III–N

(GaN–AlGaN). Следует отметить, что квантово-размерные структуры на основе политипов SiC обладают преимуществами „чисто структурных“ гетеропереходов: а — отсутствие взаимной диффузии компонент гетеропар; б — незначительное рассогласование постоянных решетки (квазиаморфный рост); в — возможность создания гетероперехода в уже выращенной структуре (stalking faults). Кроме того, SiC обладает существенно большей температурной стабильностью, теплопроводностью и лучшим структурным совершенством, чем III–N, т.е. более перспективен для создания мощных LED. Однако технология формирования SiC-гетерополитипных структур пока развита гораздо слабее, чем для гетеропереходов на основе III–N. Таким образом, следует ожидать, что после отработки ростовых технологий, LED на основе SiC смогут составить существенную конкуренцию приборам на основе III–N.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ-04-02-16632а.

## Список литературы

- [1] N.J. Round. *Electrical world*, **30**, 309 (1907).
- [2] О.В. Лосев. *ЖТФ*, **1**, 718 (1931).
- [3] А.А. Лебедев, А.М. Стрельчук, Д.В. Давыдов, Н.С. Савкина, А.Н. Кузнецов, Л.М. Сорокин. *Письма ЖТФ*, **28** (18), 89 (2002).
- [4] 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).
- [5] A. Fissel. *Phys. Rep.*, **379** (1), 149 (2003).
- [6] A. Fissel, U. Kaizer, B. Schröter, W. Richter, F. Bechstedt. *Appl. Surf. Sci.*, **184** (1), 37 (2001).
- [7] A. Qteish, V. Heine, R.J. Needs. *Phys. Rev. B*, **45** (12), 6534 (1992).
- [8] H. Iwata, U. Lindefelt, S. Öberg, P.R. Briddon. *J. Appl. Phys.*, **95** (3), 1577 (2003).
- [9] Y. Ding, K.-B. Park, J.P. Pelz, K.C. Palle, M.K. Mikhov, B.J. Skromme, H. Meidia, S. Mahajan. *Phys. Rev. B*, **69**, 141305-1 (2004).
- [10] J. Camasesel, S. Juillaguet. *Mater. Sci. Forum*, **483–485**, 331 (2005).
- [11] S. Juillaguet, J. Camasesel. *Mater. Sci. Forum*, **483–485**, 335 (2005).
- [12] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. *ФТП*, **39** (12), 1440 (2005).
- [13] Ф. Бехштгедт, Р. Эндерлейн. *Поверхности и границы раздела полупроводников* (М., Мир, 1990).
- [14] В.Я. Демиковский, Г.А. Вугальтер. *Физика квантовых низкоразмерных систем* (М., Логос, 2000).
- [15] В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. *Задачи по квантовой механике* (М., Наука, 1992).
- [16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М., Наука, 1974).

Редактор Л.В. Беляков

## Estimations of the excitonic transition energies in heterostructures $NH/3C/NH$ ( $N = 2, 4, 6, 8$ ) based on the silicon carbide polytypes

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

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

\* St. Petersburg State Electrotechnical University (LETI),  
197376 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Heterostructure based on the  $3C$  inclusion between two hexagonal domains is considered. It is assumed that the spontaneous polarization is proportional to hexagonality. Under this assumption the value of the electrostatic field within the  $3C$  inclusion is calculated and the energy of the two dimensional subbands are determined. The estimation of the energy of the quasidirect and indirect transitions in the models of triangular and rectangular wells is fulfilled. The estimations for  $4H/3C/4H$  structure show the satisfactory agreement with the existing calculations and experimental data available.