

Учет спонтанной поляризации в задаче о гетероструктуре $NH-SiC/3C-SiC/NH-SiC$, образованной кубическим ($3C$) и гексагональными (NH) поли типами карбида кремния

© С.Ю. Давыдов[¶], А.В. Трошин*

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 8 октября 2007 г. Принята к печати 21 января 2008 г.)

Задача о трехслойной гетероструктуре $NH-SiC/3C-SiC/NH-SiC$ с учетом спонтанной поляризации гексагональных областей рассмотрена в рамках модели, предложенной ранее для описания гетероперехода между поли типами карбида кремния $NH-SiC/3C-SiC$. Потенциал в кубической $3C$ -области аппроксимировался модельной функцией, построенной из физических соображений. Значительное внимание уделено исследованию влияния спонтанной поляризации и толщины $3C$ -области на энергетические характеристики квантовых ям, образующихся у гетеропереходов.

PACS: 73.20.-r, 73.21.Fg, 77.84.-s

1. Введение

В последнее время усилился интерес к изучению влияния спонтанной поляризации P_{sp} на характеристики гетеропереходов (ГП) и гетероструктур (ГС), сформированных на основе кубического ($3C-SiC$) и гексагональных ($NH-SiC$) поли типов карбида кремния [1,2]. Если в кубическом ($3C$) поли типе SiC все четыре тетраэдрические связи эквивалентны, то в гексагональных (NH) поли типах имеется выделенная c -ось, связь вдоль которой отличается от трех остальных. В результате искаженный тетраэдр приобретает дипольный момент, что приводит к возникновению спонтанной поляризации [3,4]. Таким образом, некубические поли типы SiC являются пьезоэлектриками. В трехслойной ГС типа $NH-SiC/3C-SiC/NH-SiC$ ($NH/3C/NH-SiC$, $N = 2, 4, 6, 8$) электрическое поле, наводимое спонтанной поляризацией NH -обкладок, проникает в $3C$ -область, что приводит к необходимости учета P_{sp} в граничных условиях [5,6]. Нужно отметить также следующее обстоятельство. В ГС из-за различия решеток контактирующих полупроводников возникает пьезоэлектрическая поляризация. В поли типах карбида кремния, однако, рассогласование решеток крайне мало: так, например, относительные различия расстояний между ближайшими соседями в чисто кубическом $3C-SiC$ и чисто гексагональном $2H-SiC$ поли типах составляют величину порядка 0.5% [7]. Поэтому для структур на основе поли типов SiC можно учитывать только спонтанную поляризацию, пренебрегая пьезоэффектом [1–6].

В работе [8] мы рассмотрели трехслойную систему вида $NH/3C/NH-SiC$ в режиме полного истощения примесей. В данной работе будет использован подход, развитый в [9] для описания ГП вида $NH/3C-SiC$. Ясно, что для достаточно толстого кубического $3C$ -слоя левый

и правый ГП не ощущают взаимовлияния (см. далее). В этом случае результаты работы [9] могут быть непосредственно применены к описанию системы $NH/3C/NH$. Здесь мы сосредоточим внимание на тонких $3C$ -слоях.

2. Гексагональные области трехслойной системы

Рассмотрим структуру $n_1-NH/p_2-3C/n_3-NH$ (рис. 1). Здесь $n_{1,3}$ — концентрации электронов в областях 1 и 3 ($NH-SiC$), p_2 — концентрация дырок в области 2 ($3C-SiC$). Для описания гексагональных областей системы воспользуемся результатами работы [9]. Приведенные значения потенциальной энергии (потенциала) $\psi_{1,3}(x) = e\varphi_{1,3}(x)/k_B T$ ($\varphi_{1,3}(x)$ — электростатический потенциал, e — величина заряда электрона, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, x — направление, перпендикулярное плоскости контакта), которую в дальнейшем мы будем считать всегда положительной величиной, в областях 1 ($x \leq -L$) и 3 ($x \geq L$) определяются следующими уравнениями:

$$\frac{d\tilde{\psi}_{1,3}}{dx} = \mp L_{n1,3}^{-1} \sqrt{e^{-\Delta} - e^{-\psi_L} + \Delta - \psi_L} - \tilde{P}_{sp}/\epsilon_1. \quad (1)$$

Здесь $\tilde{\psi}_{1,3}(\psi_{1,3})$ — потенциал с учетом (без учета) спонтанной поляризации, верхний знак перед радикалом в соотношении (1) соответствует области 1, нижний — области 3, причем $\psi_{1,3}(\mp\infty) = \Delta$, $\psi_{1,3}(\mp L) = \psi_L$; длина затухания L_n в областях 1 и 3 составляет

$$L_{n1,3} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_1 k_B T}{2e^2 n_{1,3}}}, \quad (2)$$

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

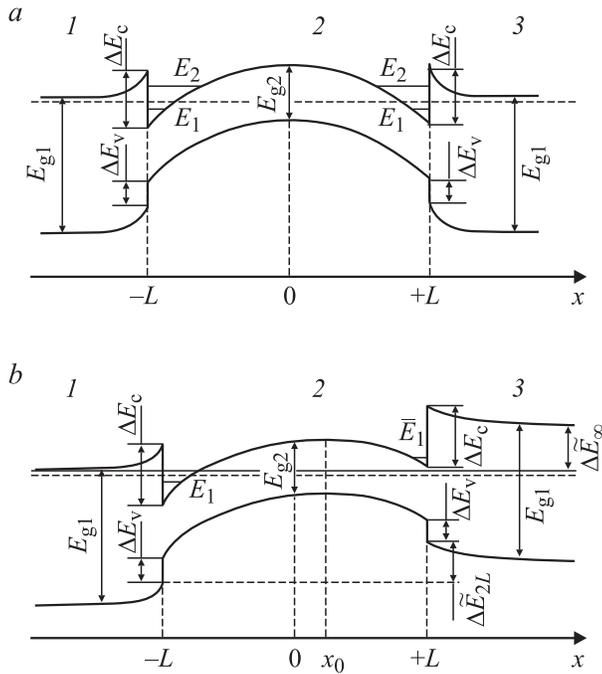


Рис. 1. Стандартная энергетическая диаграмма гетероструктуры $n\text{-NH}/p\text{-3C}/n\text{-NH}$. *a* — симметричная диаграмма без учета спонтанной поляризации, *b* — асимметричная диаграмма с учетом спонтанной поляризации. Области 1, 3 — NH-SiC , область 2 — 3C-SiC .

а приведенная спонтанная поляризация равна

$$\tilde{P}_{\text{sp}}(x) = \frac{eP_{\text{sp}}(x)}{\varepsilon_0 k_B T}, \quad (3)$$

где ε_0 — диэлектрическая постоянная, ε_1 — диэлектрическая проницаемость областей 1 и 3. При выводе выражений (1) мы положили для простоты $P_{\text{sp}}(\mp\infty) = 0$. Отметим, что возможность представления электрических полей F , действующих в левом и правом ГП, в виде суперпозиции контактных

$$(F_c)_{1,3} \propto \pm \sqrt{e^{-\Delta} - e^{-\Psi_L} + \Delta - \Psi_L}$$

и поляризационной

$$F_{\text{sp}} \propto P_{\text{sp}}$$

составляющих подробно обсуждается в работе [9]. В дальнейшем положим $n_1 = n_3$, $L_{n1} = L_{n3}$.

Рассмотрим асимптотику функций $\tilde{\psi}_1(x)$ и $\tilde{\psi}_3(x)$. Воспользовавшись результатами работы [9], легко показать, что в окрестностях левого (l) и правого (r) ГП, т.е. в интервалах $|(x+L)/L_{n1}| \ll 1$ для области 1 и $(x-L)/L_{n1} \ll 1$ для области 3, получим соответственно

$$\tilde{\psi}_{1,3}(x) \approx \tilde{\psi}_{l,r} \mp \frac{(x \pm L)}{L_{n1}} \left(\sqrt{e^{-\Delta} - e^{-\Psi_L} + \Delta - \Psi_L} \pm \nu \Pi_s \right). \quad (4)$$

Здесь верхний знак относится к области 1 ($x \leq -L$), нижний — к области 3 ($x \geq L$), $\nu \equiv L_{n1}/L_{\text{sp}}$, где L_{sp} —

длина затухания поляризации в областях 1 и 3. Логично считать (см. [9]), что $(L_{\text{sp}})_{1,3} \sim L_{n1,3}$. Так как мы положили $n_1 = n_3$, длины затухания спонтанной поляризации в областях 1 и 3 можно считать одинаковыми. При записи выражения (3) мы, как и в работе [9], считали, что

$$P_{\text{sp}}(x) = P_s \exp[\pm(x \pm L)/L_{\text{sp}}], \quad (5)$$

так что безразмерная спонтанная поляризация

$$\Pi_{\text{sp}}(x) = \Pi_s \exp[\pm(x \pm L)/L_{\text{sp}}], \quad (6)$$

где $\Pi_s \equiv L_{\text{sp}} \tilde{P}_s / \varepsilon_1$.

Теперь рассмотрим асимптотику потенциалов $\tilde{\psi}_1$ и $\tilde{\psi}_3$ при $x \rightarrow \mp\infty$. Воспользовавшись результатами работы [9], легко показать, что в общем виде

$$\tilde{\psi}_{1,3}(x) \approx \Delta + \delta_{1,3} - \frac{(x - \bar{x})^2}{4L_{n1}^2}, \quad (7)$$

где $\delta_{1,3}$ — добавки к параметрам Δ , вызванные наличием спонтанной поляризации и связанные с функциями $\chi_{1,3}(x)$ (см. [9] и текст далее). Отметим, что при выводе выражения (7) мы полагали, как и в (9), что внешним границам областей 1 и 3 отвечают координаты $\mp\bar{x}$.

3. Кубическая область трехслойной системы

Перейдем теперь к рассмотрению областей 2 на рис. 1 ($-L \leq x \leq L$). В отсутствие поляризации потенциал $\psi_2(x)$ должен быть четным, а его производная $d\psi_2(x)/dx$ — нечетной функцией x , откуда следует, что $(d\psi_2(x)/dx)_{x=0} = 0$. Легко также положить $\psi_2(0) = 0$, вводя тем самым начало отсчета потенциалов. При наличии поляризации картина становится асимметричной. Введем координату x_0 исходя из условий $\tilde{\psi}_2(x_0) = 0$ и $(d\tilde{\psi}_2(x)/dx)_{x=x_0} = 0$. Отметим, что точка x_0 , определяемая спонтанной поляризацией, может как попадать в интервал $-L \leq x \leq L$, так и лежать вне этого интервала. На основании этих соображений зададим потенциал $\tilde{\psi}_2(x)$ в виде

$$\tilde{\psi}_2(x) = A \left[\text{ch} \left(\frac{x - x_0}{L_{p2}} \right) - 1 \right], \quad (8)$$

где A — безразмерный множитель,

$$L_{p2} = \sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon_2 k_B T / 2e^2 p_2}$$

— дебаевская длина экранирования в области 2. Сразу же отметим, что, задав потенциал области 2 в виде (8), мы исключаем переход к толстой пленке. Следовательно, мы рассматриваем случай $L \leq L_{p2}$. Второй момент, который следует подчеркнуть, состоит в том, что начало отсчета энергии мы связываем с координатой $x = x_0$ (рис. 1, *b*). Потенциал для различных значений L/L_{p2} и x_0/L_{p2} представлен на рис. 2 и 3. Из сравнения

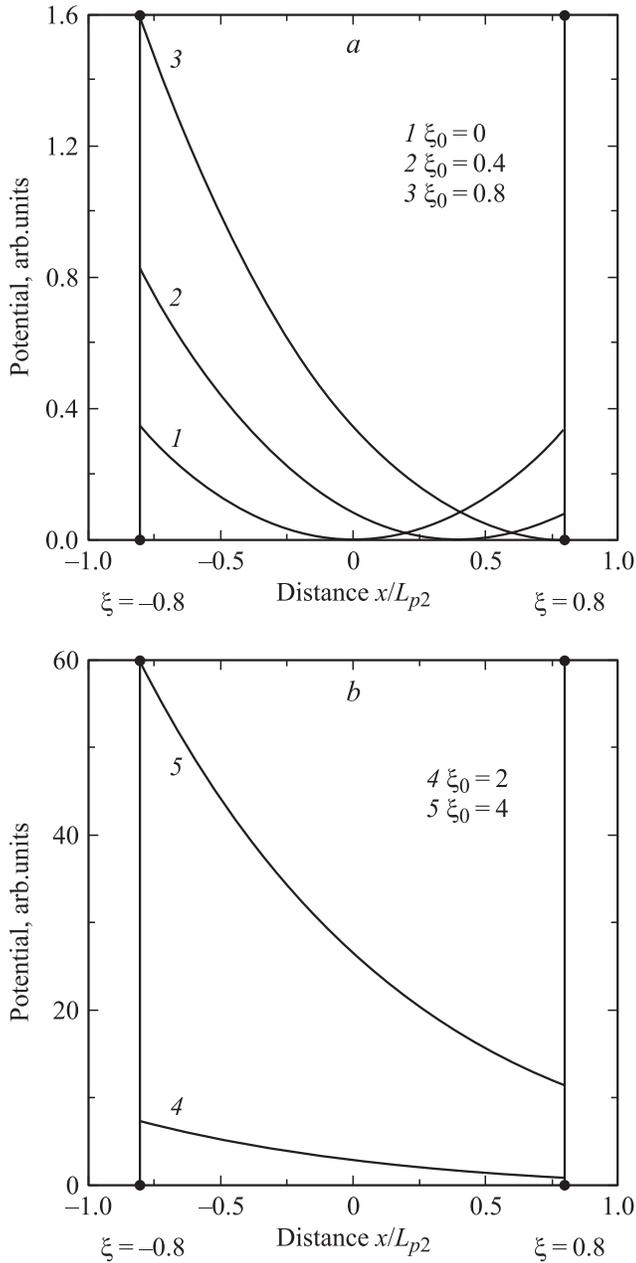


Рис. 2. Приведенная потенциальная энергия $\tilde{\psi}_2(x)/A$ в ЗС-области (область 2 на рис. 1), вычисленная по формуле (8). За единицу длины принята дебаевская длина L_{p2} , $\xi \equiv L/L_{p2} = 0.8$. Значения $\xi_0 = x_0/L_{p2}$ на рис. а: 1 — 0, 2 — 0.4, 3 — 0.8; на рис. б: 4 — 2, 5 — 4.

рисунков следует, что чем уже ЗС-область и чем больше значение x_0/L_{p2} , тем функция $\tilde{\psi}_2(x)$ ближе к прямой линии. Напомним, что энергия краев зоны проводимости и валентной зоны $E_{c,v}(x) = E_{c,v}(0) - e\tilde{\varphi}(x)$, так что рост функции $\tilde{\psi}_2(x) \equiv e\tilde{\varphi}(x)/k_B T$ соответствует убыванию функций $E_{c,v}(x)$.

Исходя из граничных условий для потенциалов

$$\tilde{\psi}_{1,3}(\mp L) = \tilde{\psi}_2(\mp L) \equiv \tilde{\psi}_{l,r}$$

получим

$$\tilde{\psi}_{l,r} = 2A \operatorname{sh}^2\left(\frac{\xi \pm \xi_0}{2}\right), \quad (9)$$

где $\xi \equiv L/L_{p2}$ и $\xi_0 \equiv x_0/L_{p2}$,

$$\left(\frac{d\tilde{\psi}_2}{dx}\right)_{x=\mp L} = \mp \frac{\tilde{\psi}_{l,r}}{L_{sp}} \operatorname{th}\left(\frac{\xi \pm \xi_0}{2}\right). \quad (10)$$

В окрестностях левого и правого ГП, т.е. в интервалах $|x \pm L|/L_{p2} \ll 1$, имеем

$$\tilde{\psi}_2(x) \approx \tilde{\psi}_{l,r} \left[1 \mp \frac{x \pm L}{L_{p2}} \operatorname{th}\left(\frac{\xi \pm \xi_0}{2}\right) \operatorname{ch}(\xi - \xi_0) \right]. \quad (11)$$

Сопоставляя выражения (11) и (4) и удовлетворяя граничным условиям

$$\varepsilon_1 \left(\frac{d\tilde{\psi}_{1,3}}{dx}\right)_{x=\mp L} = \varepsilon_2 \left(\frac{d\tilde{\psi}_2}{dx}\right)_{x=\mp L}, \quad (12)$$

получим

$$\begin{aligned} R_L \pm \nu \Pi_s &\approx \sqrt{\eta} \Lambda_{l,r} \tilde{\psi}_{l,r}, \\ R_L &= \sqrt{e^{-\Delta} - e^{-\psi_L} + \Delta - \psi_L}, \\ \Lambda_{l,r} &\equiv \operatorname{th}\left(\frac{\xi \pm \xi_0}{2}\right) \operatorname{ch}(\xi - \xi_0), \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\sqrt{\eta} \equiv \varepsilon_2 L_{n1} / \varepsilon_1 L_{p2} = (\varepsilon_2 p_2 / \varepsilon_1 n_1)^{1/2}.$$

Положим

$$\tilde{\psi}_{1,3}(x) = \psi_{1,3}(x) + \chi_{1,3}(x),$$

что дает

$$\tilde{\psi}_{l,r} = \psi_L + \chi_{l,r}.$$

Отсюда

$$\begin{aligned} \chi_{l,r} &\approx \pm (\nu \Pi_s / \sqrt{\eta} \Lambda_{l,r}), \\ R_L &= \sqrt{\eta} \Lambda_0 \psi_L, \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\Lambda_0 \equiv \Lambda_{l,r}(x_0 = 0) = \operatorname{th}(\xi/2) \operatorname{ch} \xi.$$

Аналогично тому, как это проделано в работе [9], можно показать, что

$$\chi_{1,3}(x) = \chi_{l,r} \pm \Pi_s \left[1 - \exp\left(\pm \frac{x \pm L}{L_{sp}}\right) \right], \quad (15)$$

$$\delta_{1,3} = \chi_{l,r} \pm \Pi_s,$$

где

$$\delta_{1,3} \equiv \chi_{1,3}(\mp \infty), \quad \chi_{l,r} \equiv \chi_{1,3}(\mp L).$$

Теперь можно записать

$$\tilde{\psi}_{1,3}(\mp \infty) = \Delta + \chi_{l,r} \pm \Pi_s. \quad (16)$$

Следовательно, перепад потенциальной энергии для структуры $NH/ЗС/NH$, т.е. на интервале $(-\infty, +\infty)$, составляет

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{\psi}_\infty &\equiv \tilde{\psi}_1(-\infty) - \tilde{\psi}_3(+\infty) \\ &= \chi_1(-\infty) - \chi_3(+\infty) = \delta_1 - \delta_3, \end{aligned} \quad (17)$$

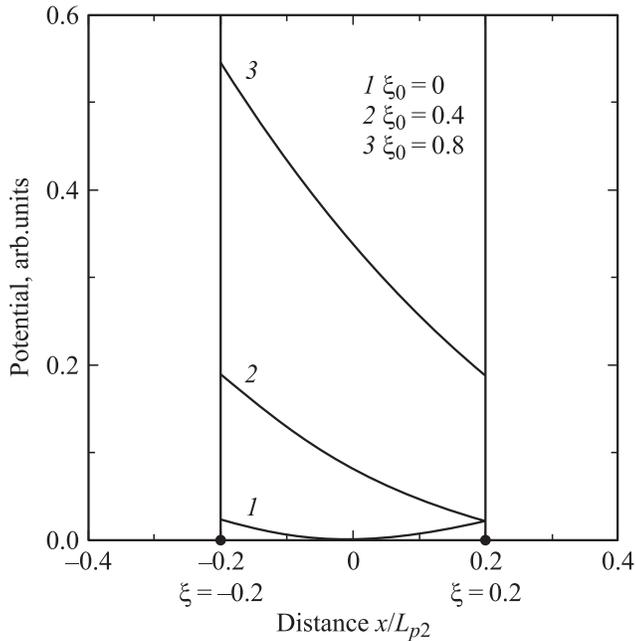


Рис. 3. То же, что на рис. 2, но $\xi \equiv L/L_{p2} = 0.2$. Значения $\xi_0 = x_0/L_{p2}$: 1 — 0, 2 — 0.4, 3 — 0.8

откуда на основании (15) получаем

$$\Delta\tilde{\psi}_\infty = \chi_l - \chi_r + 2\Pi_s. \quad (18)$$

Разность $\chi_l - \chi_r$ представляет собой перепад потенциальной энергии, приходящийся непосредственно на область 2, т.е. на интервал $(-L, L)$. Его можно найти исходя из выражения (8):

$$\Delta\tilde{\psi}_{2L} \equiv \tilde{\psi}_2(-L) - \tilde{\psi}_2(L) = \chi_l - \chi_r = 2A \operatorname{sh} \xi \operatorname{sh} \xi_0. \quad (19)$$

При этом, естественно, должно выполняться условие $A \operatorname{sh} \xi \operatorname{sh} \xi_0 < |\Pi_s|$, накладывающее ограничение на величину ξ_0 . Так, при приведенной ширине 3C-области $\xi \ll 1$ имеем $A\xi|\operatorname{sh} \xi_0| < |\Pi_s|$, где значение ξ_0 отнюдь не предполагается малым. Если точка x_0 выходит из интервала $(-L, L)$, то зоны в области 2 спрямляются (кривые 3 на рис. 2 и 2, 3 на рис. 3). Отметим, что при $\Pi_s > 0$, когда потенциал $\tilde{\psi}_3$ смещен вверх по энергии относительно потенциала $\tilde{\psi}_1$, точка x_0 , отвечающая минимуму потенциала $\tilde{\psi}_2$, сдвинута вправо от нуля (именно этот случай иллюстрируется рис. 2 и 3). При дальнейшем росте величины Π_s точка x_0 продолжает двигаться вправо и при определенном значении поляризации выходит за правую границу 3C-области $x_r = L$ (кривая 2 на рис. 2). При $\Pi_s < 0$ наблюдается обратная ситуация: точка x_0 сдвигается влево, а потенциал $\tilde{\psi}_3$ смещается вниз по отношению к потенциалу $\tilde{\psi}_1$.

Определим связь параметров ψ_L и $\chi_{l,r}$ с отношениями ξ и ξ_0 . Эта связь следует из определения потенциала $\tilde{\psi}_2(x)$ (см. (8)):

$$\tilde{\psi}_{l,r} = A [\operatorname{ch}((\xi \pm \xi_0)) - 1]. \quad (20)$$

При $\xi_0 \ll 1$ получим

$$\begin{aligned} \psi_L &\approx A[\operatorname{ch} \xi - 1], \\ \chi_{l,r} &\approx \pm \xi_0 A \operatorname{sh} \xi. \end{aligned} \quad (21)$$

Рассмотрим случай тонкого 3C-слоя, когда $\xi \ll 1$. Если при этом отношение $\xi_0 \ll 1$, то $|\Lambda_{l,r}| \approx |\xi - \xi_0| \ll 1$. В случае $\psi_L \gg 1$ имеем $R_L \approx \sqrt{\Delta - \psi_L}$, и второе из уравнений (14) может быть переписано в виде

$$\psi_L \approx \frac{1}{\eta\Lambda_0^2} (\sqrt{1 + \eta\Lambda_0^2\Delta} - 1). \quad (22)$$

Если $\eta\Lambda_0^2\Delta \gg 1$, то $\psi_L \approx \sqrt{\Delta/\eta\Lambda_0^2}$. Это решение справедливо при $\Delta \gg \eta\Lambda_0^2$. В противоположном случае, когда $\eta\Lambda_0^2\Delta \ll 1$, получим $\psi_L \approx \Delta/2$. Если теперь предположить, что $\psi_L \ll 1$, то получим $R_L \approx \sqrt{\Delta}$. Тогда решение для малых потенциалов такое же, как и для больших, т.е. $\psi_L \approx \sqrt{\Delta/\eta\Lambda_0^2}$. В данном случае, однако, такое решение возможно только при $\eta\Lambda_0^2 \gg \Delta$, тогда как в предыдущем случае ($\psi_L \gg 1$) знак неравенства должен быть обратным.

Перейдем теперь к численным оценкам. Как и в [9], полагаем, что параметр $\Delta = \delta\phi/k_B T$ лежит при комнатной температуре ($T = 300$ К) в интервале $\sim (10-100)$. Для типичных значений $n_1 = 10^{19}, 10^{18}$ и 10^{17} см $^{-3}$ получим $L_{n1} \approx 8.4, 26.5$ и 84 Å. Полагая $|P_{sp}| \approx 0.53 \cdot 10^{-2}$ Кл/м 2 [10] и $\varepsilon_1 = 9.78, \varepsilon_2 = 9.72$ [6], получим для приведенного выше ряда концентраций $|\Pi_s| \approx 2, 6$ и 20 соответственно. В работе [9] отношение $\eta = \varepsilon_2 p_2 / \varepsilon_1 n_1$, которое с хорошей точностью равно отношению p_2/n_1 , выбиралось из интервала от 10^{-2}

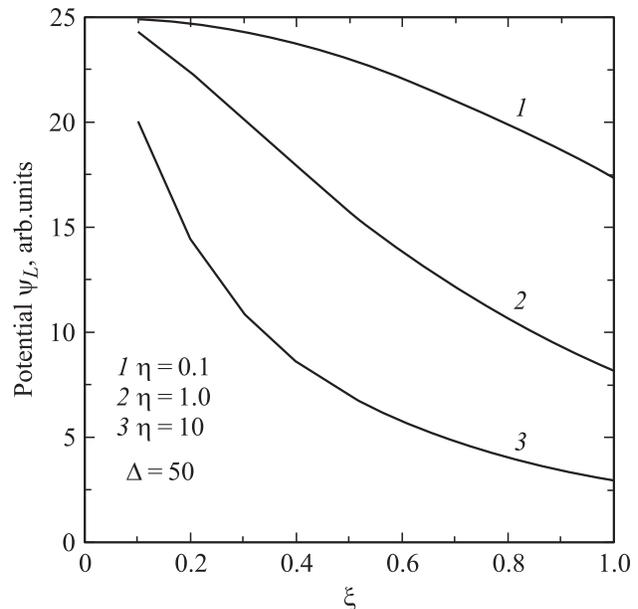


Рис. 4. Зависимости потенциала ψ_L от приведенной толщины 3C-области $\xi \equiv L/L_{p2}$ при $\Delta = 50$. Отношение $\eta = \varepsilon_2 p_2 / \varepsilon_1 n_1$: 1 — 0.1, 2 — 1, 3 — 10.

до 10^2 . Так как $L_{p2} = L_{n1}(\varepsilon_1/\varepsilon_2)/\sqrt{\eta}$, в том же интервале $L_{p2} \approx (0.1 - 10)L_{n1}$. На рис. 4 представлена зависимость ψ_L от ξ при $\Delta = 50$, $\nu = 1$ и $\eta = 0.1$, 1 и 10. Эта зависимость хорошо описывается формулой (22).

Обратимся к зависимости ξ_0 от ξ . Воспользовавшись первым из уравнений (14) в линейном по поляризации приближении, получим

$$\chi_{l,r} \approx \pm(\nu\Pi_s/\sqrt{\eta}\Lambda_0). \quad (23)$$

С другой стороны, из соотношений (21), полученных в пределе $\xi_0 \ll 1$, имеем

$$\chi_{l,r} \approx \pm\xi_0\psi_L \frac{\text{sh } \xi}{\text{ch } \xi - 1}. \quad (24)$$

Приравнявая (24) к (23), с учетом (13) получим

$$\xi_0/\Pi_s \approx \nu/\psi_L\sqrt{\eta} \text{ch } \xi. \quad (25)$$

Теперь рассмотрим зависимости энергетических пеперпадов $\Delta\psi_{2L}$ для области 2 и $\Delta\psi_\infty = \Delta\psi_{2L} + 2\Pi_s$ на всей структуре (см. формулы (17)–(19)). Для малых значений ξ_0 с учетом (25) можно показать, что

$$\frac{\Delta\psi_{2L}}{\Pi_s} = \frac{2}{\sqrt{\eta}} \frac{\text{th } \xi}{\text{ch } \xi - 1}. \quad (26)$$

При $\xi \ll 1$ значение отношения $\Delta\psi_{2L}/\Pi_s \approx 4/\xi\sqrt{\eta}$.

4. Влияние спонтанной поляризации и толщины кубической области на энергетические характеристики квантовых ям

Рассмотрим, как влияют спонтанная поляризация и толщина 3С-области на положение локальных уровней (точнее, двумерных подзон) в квантовых ямах (КЯ), образующихся в кубическом политипе на границах с гексагональными политипами. Будем аппроксимировать реальные КЯ моделью треугольной потенциальной ямы с бесконечными стенками [11,12], в рамках которой энергия основного состояния $\bar{\varepsilon}_0$, отсчитываемая от дна ямы, определяется формулой

$$\bar{\varepsilon}_0 \approx 1.856 \left(\frac{e^2 F^2 \hbar^2}{m^*} \right)^{1/3}, \quad (27)$$

где m^* — эффективная масса электрона в 3С-области. Под напряженностью электрического поля F будем понимать значения полей на контакте F_0 , тем самым оценивая его величину по максимуму. Введем обозначения

$$\xi_\pm = \bar{\varepsilon}_0^\pm / \bar{\varepsilon}_0^0,$$

где

$$\bar{\varepsilon}_0^0 \equiv \bar{\varepsilon}_0(\Pi_s = 0), \quad \bar{\varepsilon}_0^\pm \equiv \bar{\varepsilon}_0(\Pi_s \neq 0),$$

для ям, расположенных соответственно при $x = \pm L$. Будем считать, что $\xi \ll 1$ и $\xi_0 \ll 1$, но соотношение

между величинами ξ и ξ_0 может быть произвольным. Исходя из соотношений (10) в пределе $\xi \rightarrow 0$ и $\xi_0 \rightarrow 0$ получим

$$\frac{eL_{sp}}{k_B T} (F)_{x=\mp L} \equiv f_\mp \approx \pm\psi_L(\xi \pm \xi_0), \quad (28)$$

где параметр ξ_0 связан с приведенной спонтанной поляризацией соотношением (25), которое в принятом пределе переходит в выражение $\xi_0 \approx \nu\Pi_s/\psi_L\sqrt{\eta}$. Тогда

$$\xi_\mp = \left(1 \pm \frac{\xi_0}{\xi} \right)^{2/3}, \quad (29)$$

$$\bar{\varepsilon}_0^0 \approx 1.856 \left(\frac{e^2 F_0^2 \hbar^2}{m^*} \right)^{1/3}, \quad (30)$$

где

$$F_0 \equiv (k_B T / eL_{sp})\psi_L\xi.$$

Знак спонтанной поляризации связан с химической природой грани (1000) гексагонального политипа SiC. Как показано в работе [13], атомы углерода, принадлежащие σ -связи C-Si, заряжаются отрицательно, так как на них переходят электроны с атомов кремния. Так как структурными единицами карбида кремния являются бислои C-Si, то при условии, что на левом ГП структуры NH/3C/NH гексагональный политип оканчивается C-гранью, на правом ГП C-грань кубического политипа будет контактировать с Si-гранью гексагонального политипа. Таким образом, левый и правый интерфейсы пересекают связь C-Si. Если же левый гексагональный компонент структуры NH/3C/NH оканчивается Si-гранью, то оба интерфейса пересекают связь Si-C. Таким образом, поляризационное поле F_{sp} в обоих ГП имеет одно и то же направление. Отсюда следует, что в выражении (29) для левого и правого ГП нужно брать один и тот же знак ξ_0 . Примем, что $\Pi_s > 0$ и, следовательно, $\xi_0 > 0$. При этом предполагается, что поляризационное поле F_{sp} направлено вдоль оси x . Из энергетической диаграммы структуры NH/3C/NH (рис. 1) следует, что на левом ГП результирующее поле F также направлено по оси x , тогда как на правом ГП — в противоположном направлении. Как показано в [9], поле F на левом ГП может быть представлено в виде $F = F_c + F_{sp}$, на правом ГП имеем $F = F_c - F_{sp}$, где F_c — контактное поле.

Зависимости ξ_\mp от отношения ξ_0/ξ представлена на рис. 5. Монотонное возрастание функции ξ_- отражает сдвиг вверх энергетического уровня $\bar{\varepsilon}_0^-$, вызванный ростом поля f_- . При этом с ростом f_- эффективная ширина КЯ на левом ГП сужается. Что же касается функции ξ_+ , то ее спад в области $0 \leq \xi_0/\xi < 1$ отвечает сдвигу уровня $\bar{\varepsilon}_0^+$ вниз. КЯ на правом ГП при этом уширяется. Условие $\xi_0/\xi = 1$ означает, что координата x_0 принимает значение L , т.е. минимум потенциала $\psi_2(x)$ сдвигается на правую границу 3С-области (см. (8)). При этом зоны на правом интерфейсе становятся плоскими, т.е. КЯ в зоне проводимости 3С-области исчезает. Условие $x_0 = L$ отвечает равенству $F_c = F_{sp}$, откуда следует,

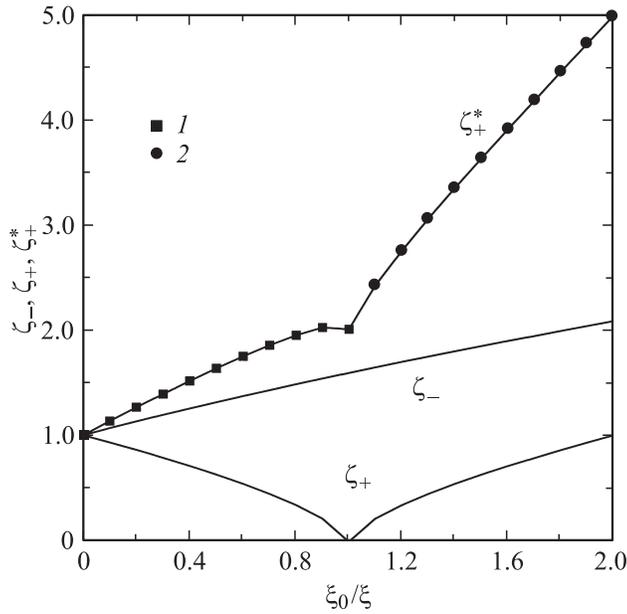


Рис. 5. Зависимость приведенных энергий основного состояния ξ_- , ξ_+ и ξ_+^* от отношения $\xi_0/\xi = x_0/L$. График функции ξ_+^* построен для $k_B T \Delta / \bar{\epsilon}_0^0 = 1$. На графике ξ_+^* символами 1 отмечена энергия основного состояния электрона в правой КЯ, образующейся в зоне проводимости 3С-области, 2 — то же, но для правой КЯ, возникающей в валентной зоне 3С-области при $\xi_0/\xi \geq 1$.

что $F = 0$. При $\xi_0/\xi > 1$ знак результирующего поля на правом ГП изменяется, следствием чего является появление КЯ в валентной зоне. Оценки [14,15], однако, показывают, что для структур $NH/3C/NH-SiC$ разрыв валентных зон ΔE_v на ГП крайне мал (менее 0.1 эВ), вследствие чего применение здесь модели треугольной потенциальной ямы с бесконечными стенками весьма проблематично даже для грубых оценок. Возможным исключением является структура $2H/3C/2H-SiC$, однако соответствующие экспериментальные данные, насколько известно авторам, отсутствуют.

Как показал анализ выражения (22), при $\xi \ll 1$ и $\xi_0 \ll 1$ потенциал $\psi_L \approx \Delta/2$. Тогда

$$\xi_0 \approx (2\nu/\Delta\sqrt{\eta})\Pi_s \quad \text{и} \quad F_0 \approx (k_B T/2e\Delta L_{sp})\xi.$$

Принимая, как и в [9], $L_{sp} = L_{n1}$, получим

$$F_0 \approx (\xi/\Delta)\sqrt{n_1 k_B T/2\epsilon_0 \epsilon_1}.$$

Полученное выражение позволяет рассчитать значения $\bar{\epsilon}_0^0$ и $\bar{\epsilon}_0^\pm$. Напомним, что значения этих энергий отсчитываются от дна своей ямы. Но из-за наличия спонтанной поляризации между левым и правым ГП имеет место энергетический перепад (19), равный в нашем пределе $\Delta\tilde{\psi}_{2L} \approx 2A\xi\xi_0$. Следовательно, дно правой КЯ лежит по оси энергий на $\Delta\tilde{\psi}_{2L}$ выше дна левой КЯ. Из выражения (21) следует, что $A \approx 2\psi_L/\xi^2 \approx \Delta/\xi^2$. Тогда $\Delta\tilde{\psi}_{2L} \approx 2\Delta(\xi_0/\xi)$. Таким образом, отсчитывая энергию от

дна левой КЯ, получим энергии уровней в виде

$$\xi_- = \left(1 + \frac{\xi_0}{\xi}\right)^{2/3}, \quad (31)$$

$$\xi_+^* = 2(k_B T \Delta / \bar{\epsilon}_0^0) \frac{\xi_0}{\xi} + \left(1 - \frac{\xi_0}{\xi}\right)^{2/3}.$$

На рис. 5 функция ξ_+^* в области $0 \leq \xi_0/\xi \leq 1$, где она описывает положение уровня основного состояния правой ямы в зоне проводимости 3С-политипа, изображена символами 1. Отметим, что в чисто иллюстративных целях, мы положили здесь $k_B T \Delta / \bar{\epsilon}_0^0 = 1$. Переходя от относительных единиц к реальным энергетическим единицам, следует записать $\bar{\epsilon}_0^+ = \bar{\epsilon}_0^0 \xi_+^*$. В области $\xi_0/\xi > 1$ (символы 2), где, как уже отмечалось, речь идет о ямах в валентной зоне. Для того чтобы по-прежнему отсчитывать энергию уровней от дна левой ямы, мы должны положить $\bar{\epsilon}_0^+ = \bar{\epsilon}_0^0 \xi_+^* - E_g(3C)$, где $E_g(3C)$ — ширина запрещенной зоны 3С-области. В дальнейшем фигурировать будет только ширина запрещенной области кубического политипа, что позволяет опустить скобки.

Представляет интерес вопрос — может ли уровень $\bar{\epsilon}_0^- = \bar{\epsilon}_0^0 \xi_-$ левой ямы в зоне проводимости войти в резонанс с уровнем $\bar{\epsilon}_0^+ = \bar{\epsilon}_0^0 \xi_+^* - E_g$ правой ямы в валентной зоне. Условию резонанса отвечает уравнение

$$(1+x)^{2/3} = 2(k_B T \Delta / \bar{\epsilon}_0^0)x + (1-x)^{2/3} - \Omega, \quad (32)$$

где $x \equiv \xi_0/\xi$, $\Omega \equiv (E_g/\bar{\epsilon}_0^0)$. Так как по порядку величины $k_B T \Delta / \bar{\epsilon}_0^0 \gg 1$ и $\Omega \gg 1$ [9,14,16], условию резонанса отвечает $x^* \approx E_g/2k_B T \Delta$. По самым грубым оценкам $x^* \approx 1-10$. К сожалению, вследствие мелкости КЯ в валентной зоне 3С-области, для структур $NH/3C/NH-SiC$ подобная ситуация, по-видимому, не реализуется.

Как показано в работах [17–19], в трехслойных структурах с очень тонкой разделительной 3С-пленкой, когда в структуре $NH/3C/NH-SiC$ имеется только одна КЯ, возможны два типа переходов. Это, во-первых, „прямые“ переходы электронов с локального уровня КЯ в 3С-политипе в валентную зону „своего“ NH -политипа. Здесь имеется в виду, что электронный переход осуществляется в области одного и того же интерфейса — левого или правого (в зависимости от того, на правом или левом интерфейсе локализована КЯ). Энергии δE_{dir}^\pm таких переходов для правого или левого интерфейсов определяются выражениями

$$\delta E_{dir}^\pm = E_g + \bar{\epsilon}_0^\pm + \Delta E_v \quad (33)$$

и не зависят, естественно, от толщины разделительной 3С-пленки. Вследствие уже упоминавшейся малости $\bar{\epsilon}_0^+$ и ΔE_v , энергии этих переходов приблизительно равны ширине запрещенной зоны кубического политипа $E_g = 2.39$ эВ.

Во-вторых, для очень тонких прокладок существует отличная от нуля вероятность „непрямого“ перехода с локального уровня, принадлежащего правой (левой) КЯ, в „чужую“ валентную зону левого (правого) NH -потенциала. Энергии таких переходов

$$\delta E_{\text{indir}}^{\pm} = \delta E_{\text{dir}}^{\pm} + e|\Delta\varphi_{2L}|, \quad (34)$$

где $\Delta\varphi_{2L} = \varphi(L) - \varphi(-L)$. По порядку величины энергии переходов $\delta E_{\text{indir}}^{\pm}$ равны сумме ширины запрещенной зоны E_g кубического политаипа и поляризационного сдвига $e|\Delta\varphi_{2L}|$.

Если, однако, в системе $NH/3C/NH$ -SiC имеются две КЯ, то между их локальными состояниями также возможен „непрямой“ переход с энергией

$$\delta E_{\text{indir}} = |\bar{\varepsilon}_0^+ - \bar{\varepsilon}_0^-| + e|\Delta\varphi_{2L}|. \quad (35)$$

Энергия такого перехода $\delta E_{\text{indir}} \approx e|\Delta\varphi_{2L}|$. Отметим, что интенсивность „непрямых“ переходов резко (экспоненциально) падает с ростом толщины $3C$ -области [17,18].

Авторы признательны А.А. Лебедеву за стимулирующую дискуссию.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№ 07-02-00919а) и целевой программы „Развитие научного потенциала высшей школы Российской Федерации“, проект РНП.2.1.2.1716К.

Список литературы

- [1] A. Fissel. Phys. Reports, **379** (1), 149 (2003).
- [2] A.A. Lebedev. Semicond. Sci. Technol., **21**, R17 (2006).
- [3] A. Qteish, V. Heine, R.J. Needs. Phys. Rev. B, **45** (12), 6534 (1992).
- [4] A. Qteish, V. Heine, R.J. Needs. Phys. Rev. B, **45** (12), 6376 (1992).
- [5] A. Fissel, U. Kaizer, B. Schröter, W. Richter, F. Bechstedt. Appl. Surf. Sci., **184** (1), 37 (2001).
- [6] V.M. Polyakov, F. Schwierz. J. Appl. Phys., **98**, 023 709 (2005).
- [7] C. Cheng, V. Heine, R.J. Needs. J. Phys.: Condens. Matter, **2** (23), 5115 (1990).
- [8] С.Ю. Давыдов, А.В. Трошин. ФТП, **42**, (2008) в печати.
- [9] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, А.В. Трошин. ФТП, **41** (3), 307 (2007).
- [10] С.Ю. Давыдов, А.В. Трошин. ФТТ, **49** (4), 723 (2007).
- [11] В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. *Задачи по квантовой механике* (М., Наука, 1992).
- [12] В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. *Физика квантовых низкоразмерных структур* (М., Логос, 2000).
- [13] С.Ю. Давыдов. ФТТ, **48** (8), 1407 (2006).
- [14] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. ФТП, **39** (12), 1440 (2005).
- [15] С.Ю. Давыдов. ФТП, **41** (6), 718 (2007).
- [16] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. Письма ЖТФ, **31** (17), 58 (2005).

- [17] J. Camassel, S. Juillaguet. Mater. Sci. Forum, **483–485**, 331 (2005).
- [18] S. Juillaguet, J. Camassel. Mater. Sci. Forum, **483–485**, 335 (2005).
- [19] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. ФТП, **40** (5), 563 (2006).

Редактор Т.А. Полянская

Account of spontaneous polarization in the problem of NH -SiC/ $3C$ -SiC/ NH -SiC heterostructure formed by the cubic ($3C$) and hexagonal (NH) silicon carbide polytypes

S.Yu. Davydov, A.V. Troshin*

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

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

Abstract The problem of the three-layer heterostructure NH -SiC/ $3C$ -SiC/ NH -SiC with the account of the spontaneous polarization of hexagonal components has been considered within the scope of the model [9], proposed for the description of the NH -SiC/ $3C$ -SiC heterojunction. The potential for the $3C$ -domain is approximated by the model function, constructed on the physical arguments. A considerable attention is given to the effect of the spontaneous polarization and $3C$ -layer thickness on the quantum well energy characteristics.