

06.1

О влиянии спонтанной поляризации на энергетические уровни в квантовых ямах, образующихся на контакте кубического и некубического политипов карбида кремния

© С.Ю. Давыдов, А.В. Трошин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
(ЛЭТИ)

E-mail: Sergei.Davydov@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 2 марта 2007 г.

В окончательной редакции 21 мая 2007 г.

Рассмотрено влияние спонтанной поляризации, присущей некубическим политипам SiC, на характеристики квантовых ям, образующихся у интерфейса в кубической области гетероперехода. Используются различные модели квантовых ям (треугольная, параболическая и экспоненциальная). Кратко обсуждаются условия появления слоя двумерного электронного газа.

PACS: 73.21.Eg, 77.22.Ej

1. Последовательное изучение роли спонтанной поляризации P_{sp} в гетеропереходах (ГП), сформированных из кубического и гексагональных политипов карбида кремния, началось сравнительно недавно [1–6]. Такие ГП могут рассматриваться как модельные в том плане, что в данном случае исключается взаимодиффузия компонентов ГП и практически отсутствуют дислокации несоответствия. Поляризацией, естественно, обладают только некубические компоненты ГП. Расчеты показывают [3–5], что в некубических политипах карбида кремния значения $P_{sp} \sim 10^{-2}$ C/m². Наведенное спонтанной поляризацией электростатическое поле $F_{pol} = P_{sp}/\epsilon_0\epsilon$ (ϵ_0 — диэлектрическая постоянная, ϵ — диэлектрическая проницаемость кубического политипа) проникает в кубическую область ГП, где на контакте может существовать квантовая яма (КЯ). Отметим, что по порядку величины F_{pol} соответствует

контактному полю F_c [1,2,6,7], т. е. полю без учета поляризации. Разумеется, поле F_c непосредственно не измеришь, наблюдаемой величиной является лишь результирующее поле

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_{pol}. \quad (1)$$

Если, однако, спонтанная поляризация отсутствует (как это имеет место, например, в ГП между двумя кубическими полупроводниками), то по порядку величины $F_c \approx \Delta\Phi/eb$, где $\Delta\Phi$ — разность работ выхода компонентов ГП, b — эффективная ширина ГП, e — величина заряда электрона. Если подходить более строго, то

$$F_c(x) = -\frac{d\varphi(x)}{dx}. \quad (2)$$

Здесь $\varphi(x)$ — электростатический потенциал, вызывающий изгиб зон $E_b(x) = E_b - e\varphi(x)$, где направление x выбрано перпендикулярно к плоскости контакта, отвечающей $x = 0$. Таким образом, подбирая какой-либо кубический полупроводник, максимально близкий по своим характеристикам к некубическому компоненту рассматриваемого ГП, можно оценить величину $F_c \equiv -(d\varphi(x)/dx)_{x \rightarrow 0}$. Оценки показывают, что поля F_c и F_{pol} одного порядка и составляют величину $\sim 10^6$ V/cm.

Рассмотрим теперь знак $F_{pol} = P_{sp}/\epsilon_0\epsilon$, причем $P_{sp} = \sigma$, где σ — поверхностная плотность заряда на грани (1000) некубического политипа, находящейся в контакте с гранью (100) кубического политипа SiC. В работе [8] было показано, что во всех политипах связь Si—C обладает полярностью, причем атомы кремния заряжаются положительно, а атомы углерода — отрицательно. Следовательно, Si-грани несут положительный заряд $+\sigma$, C-грани — отрицательный заряд $-\sigma$. Таким образом, для разных по своей природе граней некубического политипа SiC величина результирующего поля F будет также различаться, изменяясь от F_{min} до F_{max} .

2. Для оценки влияния спонтанной поляризации на энергетические характеристики КЯ воспользуемся для начала моделью треугольной потенциальной ямы с бесконечными стенками (см., например, [9–11]), в рамках которой энергия основного состояния $\bar{\epsilon}_0$, отсчитываемая от дна ямы, определяется формулой

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

где \hbar — приведенная постоянная Планка, m^* — эффективная масса электрона в 3С-области. Из выражения (3) следует, что уровень (точнее,

центр или дно двумерной подзоны¹⁾ $\bar{\varepsilon}_0 = \bar{\varepsilon}_{\max}$ при $F = F_{\max}$ лежит выше, чем $\bar{\varepsilon}_0 = \bar{\varepsilon}_{\min}$ при $F = F_{\min}$. При этом, естественно, заполнение подзоны $\bar{\varepsilon}_{\min}$ выше, чем заполнение подзоны $\bar{\varepsilon}_{\max}$.

Ширина ямы \bar{x}_0 на уровне $\bar{\varepsilon}_0$ определяется выражением

$$\bar{x}_0 = \frac{\bar{\varepsilon}_0}{eF} = 1.865 \cdot \left(\frac{\hbar^2}{m^* e F} \right)^{1/3}. \quad (4)$$

Отсюда следует, что с ростом поля F яма сужается.

При расчете изгиба зон на границе ГП в режиме полностью истощенной примеси [12] КЯ, образующаяся в зоне проводимости некубического политипа, приобретает параболическую форму:

$$U(x) = -U_0 \left(\frac{d-x}{d} \right)^2 \quad (0 < x \leq d), \quad (5)$$

где d — толщина истощенной области, U_0 — глубина КЯ, энергия U в (5) отсчитывается от уровня вакуума. Считаем, что при $x \leq 0$ потенциал $U(x) = \infty$, при $x > d$ потенциал $U(x) = 0$. Электростатическое поле, соответствующее потенциалу (5), при $x \rightarrow 0$ равно

$$F \equiv (F(x))_{x \rightarrow 0} = -2U_0/ed. \quad (6)$$

Это значение поля можно теперь использовать в формулах (3) и (4). При этом $\bar{\varepsilon}_0 \propto (U_0/d)^{2/3}$. Эта же зависимость справедлива и для возбужденных состояний $\bar{\varepsilon}_n$.

3. Уравнение Шредингера для потенциала (5) может быть сведено к виду

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} + \frac{2m^*d^2U_0}{\hbar^2} (\xi^2 - \omega^2)\Psi(\xi) = 0, \quad (7)$$

где $\xi = (d-x)/d$, $\omega = \sqrt{|E|/U_0}$ ($-U_0 \leq E \leq 0$). Уравнение с таким потенциалом не имеет точного аналитического решения,² поэтому

¹ Уровень $\bar{\varepsilon}_0$ будет отвечать центру двумерной подзоны при описании ее дисперсии методом сильной связи и дну — в приближении квазисвободных электронов.

² Не следует путать уравнение (7) с хорошо известным уравнением для гармонического осциллятора (см., например, [9]). Чисто формально уравнение (7) переходит в уравнение для осциллятора путем замены U_0 на $(-U_0)$. При этом, однако, яма (5) исчезает и превращается в горб.

воспользуемся квазиклассическим приближением [9]. Можно показать, что значения $\omega_n = \sqrt{|E_n|/U_0}$ определяются из уравнения

$$\int_{\omega_n}^1 \sqrt{\xi^2 - \omega_n^2} d\xi = \frac{\pi\hbar}{d\sqrt{2m^*U_0}} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (8)$$

откуда получим

$$\sqrt{1 - \omega_n^2} - \omega_n^2 \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \omega_n^2}}{\omega_n} = \frac{2\pi\hbar}{d\sqrt{2m^*U_0}} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (9)$$

Отметим, что основное состояние в асимметричном потенциале (5) с энергией левой стенки, стремящейся к бесконечности, соответствует значению $n = 1$, а не $n = 0$, так как на бесконечной стенке функция ψ должна обращаться в нуль (см., например, [13]).

В рассматриваемом случае условие квазиклассичности сводится к неравенству

$$\frac{\hbar}{d\sqrt{2m^*U_0}} \ll \sqrt{1 - \omega_n^2}. \quad (10)$$

Пусть $\omega_n^2 \ll 1$. Для того чтобы сравнивать положения локальных уровней в треугольной КЯ с уровнями, отвечающими потенциалу (5), необходимо перейти к началу отсчета энергии от дна потенциальной ямы, т.е. произвести замену значений энергии E_n , определяемых относительно вакуума, на $\bar{\varepsilon}_n = U_0 - |E_n| = U_0(1 - \omega_n^2)$. Следовательно, для выполнения условия квазиклассичности значения $\bar{\varepsilon}_n$ при $\omega_n^2 \ll 1$ должны быть порядка U_0 . Будем называть такой уровень глубоким. Тогда из (10) получим: $\bar{\varepsilon}_n \gg (\hbar^2/2m^*d^2)$ и $(\hbar^2/2m^*d^2U_0) \ll 1$. Воспользовавшись уравнением (9) и пренебрегая логарифмическим слагаемым, легко показать, что

$$\bar{\varepsilon}_n \approx \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m^*d^2} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (11)$$

Таким образом, в данном случае имеем спектр, характерный для прямоугольной потенциальной ямы [9]. В данном случае энергия основного состояния $\bar{\varepsilon}_1$ в 9 раз больше энергии основного состояния прямоугольной потенциальной ямы с бесконечными стенками. Если для порядковой оценки положить $U_0 = \Delta E_C = 0.55 \text{ eV}$ [2], где ΔE_C — величина разрывов зон проводимости входящих в контакт политипов, и приравнять $\bar{\varepsilon}_1$ к U_0 ,

то из формулы (11) получим $d \approx 44 \text{ \AA}$, что вполне достижимо при концентрации электронов 3С-области $n_c \sim 10^{18} - 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ [12]. При этом мы полагаем $m^* = 0.316m$ [1], где m — масса свободного электрона. Как следует из выражений (6) и (11), положение квазиуровней $\bar{\varepsilon}_n \propto d^{-2}$ уже нельзя непосредственно связать с величиной поля $F \propto U_0/d$.

Здесь необходимо подчеркнуть следующее обстоятельство: не только в случае настоящей оценки, но и в рамках более строгого подхода, значения глубины и ширины потенциальной ямы на ГП не являются независимыми величинами. Так, например, в режиме полного истощения примесей [12,14] ширина области объемного заряда $d \propto \sqrt{u_c f}$, где f представляет собой некоторую функцию от концентрации носителей в контактирующих политипах, а контактный потенциал $u_c = \Delta\Phi/e$ может служить мерой величины параметра U_0 . Разность работ выхода $\Delta\Phi$, в свою очередь, определяется как зонной структурой политипов (электронное сродство и ширина запрещенной зоны), так и степенью их легирования (положение уровня Ферми в системе). Таким образом, значения параметров U_0 и d являются самосогласованными, связанными друг с другом довольно сложной зависимостью. Мы, однако, в рамках проводимого качественного анализа будем считать их независимыми величинами.

Пусть теперь $\nu = \sqrt{1 - \omega_n^2} \ll 1$, но неравенство (10) по-прежнему справедливо. Этот случай соответствует мелкому уровню с относительной энергией $\bar{\varepsilon}_n/U_0 = (1 - \omega_n^2) \ll 1$. Из уравнения (9) получим

$$\bar{\varepsilon}_n \approx \frac{4\pi\hbar\sqrt{U_0}}{d\sqrt{2m^*}} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (12)$$

Это спектр осцилляторного типа [9]. Такие состояния могут быть реализованы при концентрациях электронов ниже $n_c \sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ [12]. Согласно (9), и в данном случае значения $\bar{\varepsilon}_n \propto \sqrt{U_0}/d$ нельзя непосредственно сопоставить с величиной поля $F \propto U_0/d$.

4. Рассмотрим теперь потенциальную яму вида

$$\begin{aligned} U(x) &= -U_0 \exp(-x/d), & x \geq 0, \\ &= \infty, & x < 0, \end{aligned} \quad (13)$$

где d — эффективная ширина ямы. Такой потенциал интересен прежде всего тем, что содержит как линейные, так и квадратичные по x члены.

Более того, в режиме неполного истощения примесей изгиб зон носит именно экспоненциальный характер [14].

Будем искать соответствующие собственные значения уравнения Шредингера для приведенной энергии $\Omega_n = -E_n/U_0$ ($-U_0 \leq E \leq 0$) в квазиклассическом приближении. Для этого необходимо решить следующее уравнение:

$$\int_0^{z_0} \sqrt{e^{-z} - \Omega_n} dz = \frac{\pi \hbar}{d \sqrt{2m^* U_0}} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (14)$$

где $z = x/d$, $x_0 = z_0 d$ — точка поворота, отвечающая энергии Ω_n . Вычислив интеграл в (14), получим уравнение для определения энергетических уровней Ω_n :

$$\sqrt{1 - \Omega_n} - \sqrt{\Omega_n} \arctg \sqrt{\frac{1 - \Omega_n}{\Omega_n}} = \frac{\pi \hbar}{2d \sqrt{2m^* U_0}} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (15)$$

Условием применения квазиклассического приближения является справедливость неравенства

$$\frac{\hbar}{d \sqrt{2m^* U_0}} \ll \sqrt{1 - \Omega_n}. \quad (16)$$

Пусть $\Omega_n \ll 1$. Переход к отсчету энергии от дна ямы, т.е. введение энергии $\bar{\epsilon}_n = U_0 - |E_n| = U_0(1 - \Omega_n)$, показывает, что в данном случае мы имеем дело с глубокими уровнями. Из выражений (15) и (16) ясно, что такое решение может иметь место только для больших n , когда правая часть выражения (15) составляет величину порядка 1. Из уравнения (15) найдем

$$\bar{\epsilon}_n \approx U_0 \left[\left(1 - (2/\pi)^2 \right) + \frac{4\hbar}{\pi d \sqrt{2m^* U_0}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (17)$$

Здесь $\bar{\epsilon}_n \propto U_0$, а зависимость $\bar{\epsilon}_n \propto d^{-1}$ проявляется только во втором (малом) слагаемом. Таким образом, как и во всех рассмотренных выше случаях, энергия $\bar{\epsilon}_n$ убывает с ростом d .

Пусть теперь $\sqrt{1 - \Omega_n^2} \ll 1$, т.е. $\Omega_n \sim 1$ (мелкие уровни), но неравенство (16) выполняется:

$$(1 - \Omega_n)^{3/2} \approx \frac{3\pi \hbar}{2d \sqrt{2m^* U_0}} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (18)$$

получим

$$\bar{\varepsilon}_n \approx \left(\frac{3\pi\hbar U_0}{2d\sqrt{2m^*}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right)^{2/3}. \quad (19)$$

Здесь вновь основному состоянию отвечает $n = 1$. Значения энергии $\bar{\varepsilon}_n \propto (U_0/d)^{2/3}$, откуда, с учетом того обстоятельства, что $(F(x))_{x \rightarrow 0} = -U_0/ed$, имеем $\bar{\varepsilon}_n \propto F^{2/3}$. Таким образом, спектр (19) аналогичен спектру треугольной ямы (3).

5. Рассмотрим теперь сдвиг основного состояния КЯ, локализованной в зоне проводимости С-области, при изменении поляризованного поля $\delta F_{pol} = 2F_{pol}$, вызванном „подключением“ к контакту с кубическим политипом сперва Si-границы некубического политипа, а затем С-границы. Положим, что на контакте $F_c > 0$ (см., например, энергетические диаграммы ГП, представленные на рис. 13 и 16 работы [2]).

Пусть $|F_{pol}/F_c| \ll 1$. Тогда $\delta F/F = \delta F_{pol}/F \approx 2F_{pol}/F_c \ll 1$. Тогда для состояний в треугольной КЯ и мелких уровней в экспоненциальной КЯ получим $\delta\bar{\varepsilon}_n/\bar{\varepsilon}_n = (2/3)(\delta F/F) \ll 1$. Следовательно, сдвиг локальных состояний в этом случае мал. В случае Si-границы поляризованное поле $F_{pol} > 0$ и $F = F_c + F_{pol}$, для С-границы $F_{pol} < 0$ и $F = F_c - F_{pol}$. Таким образом, в первом случае яма слегка уже, локальный уровень лежит несколько выше и заполнение его чуть меньше, чем во втором. Вывод о том, что $\delta\bar{\varepsilon}_n/\bar{\varepsilon}_n \propto (\delta F/F) \ll 1$ можно распространить и на другие рассмотренные случаи (состояния в параболической КЯ и глубокие уровни в экспоненциальной КЯ). При этом, однако, под $(\delta F/F)$ следует понимать $(\delta U_0/U_0)$ и $(\delta d/d)$.

Если имеет место обратное соотношение полей, т.е. $|F_{pol}/F_c| \gg 1$, то $F \sim F_{pol}$. При этом смена знака поля приводит к следующему. Если в контакт с кубическим компонентом ГП приводится Si-грань некубического компонента, то КЯ образуется в зоне проводимости 3С-SiC. При замене Si-границы на С-грань поле меняет знак и КЯ образуется уже в валентной зоне. Так как по предположению $F \sim F_{pol}$, положения локальных уровней относительно дна соответствующих ям практически одинаковы. В случае, когда $F_c \sim F_{pol}$ и поля F_c и F_{pol} „включены навстречу“ друг другу (имеют разный знак), результирующее поле F становится малым, уровень основного состояния располагается близко ко дну КЯ и заселенность подзоны, отвечающей этому уровню, максимальна. При этом условия для образования двумерного электронного газа на ГП будут наилучшими.

Выше уже обсуждались сложности оценки величины контактного поля F_c . В настоящее время, однако, трудно оценить и величину F_{pol} , так как не измерены значения спонтанной поляризации в политипах SiC, а теоретические оценки имеют значительный разброс [5]. Поэтому здесь требуются дополнительные экспериментальные исследования. При этом, по нашему мнению, наилучшими объектами для изучения роли спонтанной поляризации в изотипных ГП вида p -NH/ p -3C ($N = 4, 6$), где КЯ образуется в валентной зоне 3C-области, а разрывы валентных зон ΔE_V крайне малы [12,15].

Авторы признательны А.А. Лебедеву за стимулирующую дискуссию.

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

Список литературы

- [1] *Fissel A.* // Phys. Perorts. 2003. V. 379. N 1. P. 149–255.
- [2] *Lebedev A.A.* // Semicond. Sci. Technol. 2006. V. 21. R17–R34.
- [3] *Qteish A., Heine V., Needs R.J.* // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. N 12. P. 6534–6542.
- [4] *Qteish A., Heine V., Needs R.J.* // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. N 12. P. 6376–6382.
- [5] *Давыдов С.Ю., Трошин А.В.* // ФТТ. 2007. Т. 49. В. 4. С. 723–724.
- [6] *Fissel A., Kaizer U., Schröter B., Richter W., Bechstedt F.* // Appl. Surf. Sci. 2001. V. 184. N 1. P. 37–42.
- [7] *Polyakov V.M., Schwierz F.* // J. Appl. Phys. 2005. V. 98. P. 023 709.
- [8] *Давыдов С.Ю.* // ФТТ. 2006. Т. 48. В. 10. С. 1748–1750.
- [9] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
- [10] *Демиховский В.Я., Вугальтер Г.А.* Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос, 2000.
- [11] *Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф.* Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир, 1985.
- [12] *Давыдов С.Ю., Лебедев А.А., Трошин А.В.* // ФТП. 2007. Т. 41. В. 3. С. 307–311.
- [13] *Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1992.
- [14] *Бонч-Бруевич В.Л., Калашиников С.Г.* Физика полупроводников. М.: Наука, 1977.
- [15] *Давыдов С.Ю., Лебедев А.А., Посредник О.В.* // ФТП. 2005. Т. 39. В. 12. С. 1440–1442.