

ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ  
РОМБОЭДРИЧЕСКИХ МОДИФИКАЦИЙ  
КАРБИДА КРЕМНИЯ

Г. Б. Дубровский, Ф. Г. Пикус

Рассчитаны энергетические спектры электронов зоны проводимости для ромбоэдрических модификаций карбида кремния  $15R$ ,  $21R$  и  $24R$ . Потенциал естественной сверхрешетки, образованной периодически чередующимися участками кубической структуры с прямой и зеркальной последовательностью слоев, аппроксимируется моделью Кронига—Пени с двумя различными ямами на периоде. Рассчитаны пространственная локализация электронов в потенциальных ямах естественной сверхрешетки и вероятности оптических переходов между минизонами. Результаты расчета сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными, определены пределы применимости используемой модели.

Как известно [1], все  $\alpha$ -модификации карбида кремния, кроме  $2H$ , представляют собой естественные сверхрешетки (ЕСР), являющиеся результатом периодического чередования вдоль оси кристалла участков кубической структуры  $\beta$  SiC с прямой (ABC) и зеркальной (CBA) последовательностями укладки слоев. Сдвиг фазы электронной волны на плоских границах этих зеркально-симметричных участков описывается введением потенциальных барьеров. Таким образом, потенциальная энергия вдоль оси ЕСР имеет вид периодически расположенных потенциальных ям, разделенных одинаковыми барьерами (рис. 1, вставка). В работах [2, 3] была предложена модель для расчета электронных спектров кристаллов SiC, аппроксимирующая реальный потенциал барьера ЕСР прямоугольным. Параметры барьеров (высота  $W$ , ширина  $d$  и эффективная масса электронов  $m_\beta$  исходного кристалла  $\beta$  SiC в направлении  $[111]$ , совпадающем с осью  $z$  ЕСР) в этой модели определялись из условия наилучшего согласия результатов расчета с экспериментальными данными по межминизонному оптическому поглощению в гексагональных модификациях SiC. При этом перекрытие реальных потенциалов соседних барьеров, зависящее от расстояния между ними  $b=Nc$  ( $N$  — число двойных Si—C слоев в кубической решетке, составляющих потенциальную яму;  $c$  — толщина одного слоя), учитывалось введением «подставки»  $W_0$ , поднимающей дно потенциальной ямы. При вычислении электронных спектров ромбоэдрических модификаций SiC в работе [3] использовались усредненные по ямам различной ширины значения  $W_0$ .

В данной работе выполнен более точный расчет электронных спектров простейших ромбоэдрических модификаций SiC  $15R$ ,  $21R$ , и  $24R$ , содержащих по две различающихся потенциальных ямы на периоде ЕСР (их обозначения в символах Жданова соответственно  $(23)_3$ ,  $(34)_3$  и  $(35)_3$ ) с учетом зависимости  $W_0$  от ширины ям. Решение уравнения Шредингера и определение собственных функций и собственных значений выполнялись на ЭВМ. При расчете использовались те же, что и в [3], значения параметров:  $m_\beta=1.75m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона,  $W=2.4$  эВ и  $d=0.9$  Å,

но разные для различных потенциальных ям «подставки»:  $W_0(2)=0.6$ ,  $W_0(3)=0.4$ ,  $W_0(4)=0.3$  и  $W_0(5)=0.25$  эВ. Здесь в скобках при  $W_0$  указана ширина потенциальной ямы в единицах числа слоев  $\beta$  SiC.

## 1. Энергетические спектры

На рис. 1 приведены рассчитанные электронные спектры для первых пяти минизон в модификациях  $15R$ ,  $21R$  и  $24R$  SiC. Стрелками на оси ординат рис. 1, а, б указаны энергии переходов для  $15R$  и  $21R$  SiC, наблюдаемых в поглощении [3], которые в основном хорошо согласуются с данными вычислений. Для структуры  $24R$  опубликованных экспериментальных данных нет.

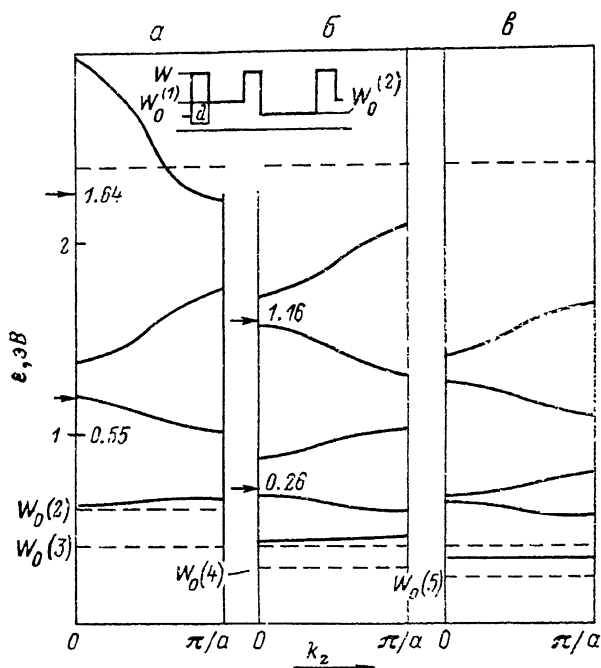


Рис. 1. Энергетические спектры первых пяти минизон для модификаций SiC: а —  $15R$ , б —  $21R$ , в —  $24R$ .

Погрешности при определении энергий переходов в принятой модели связаны в первую очередь с заменой реального сложного потенциала прямоугольным. Для нижних минизон такая замена при удачном подборе параметров может давать результаты, близкие к точным, однако по мере роста энергии модельный потенциал все сильнее отличается от реального, поскольку реальный барьер, очевидно, кверху сужается. При этом вычисленные значения энергий верхних минизон и соответственно энергий переходов оказываются завышенными, особенно в узких ямах, поскольку в этом случае относительное изменение ширины потенциальной ямы при замене реального барьера модельным наибольшее. Действительно, как видно из рис. 1, расхождение расчетных и экспериментальных данных для модификации  $15R$  значительно больше, чем для  $21R$ .

## 2. Вероятности переходов

С использованием описанной модели были рассчитаны вероятности оптических переходов между различными минизонами. На рис. 2 приведены модули матричных элементов электродипольного перехода (в относительных единицах) для модификаций  $21R$  и  $24R$ . Матричные элементы для  $15R$  выглядят аналогично  $21R$  SiC. В рамках одномерной модели, оче-

видно, рассматриваются только переходы под действием света с поляриза-цией  $E \parallel z$ , где  $z$  — ось сверхрешетки. При различных температурах переходы могут происходить из первой минизоны или с уровней мелкого донора (азота), причем, как показано в [4], правила отбора для этих пере-ходов совпадают. Важной особенностью одномерных структур является обращение в бесконечность плотности состояний в точках  $k_z=0$  и  $k_z=\pi/a$  ( $a$  — период сверхрешетки) по закону  $1/\sqrt{\epsilon}$ , где  $\epsilon$  — энергия движения вдоль оси  $z$ , что приводит к резкому росту коэффициента поглощения для переходов в этих точках. Таким образом, наряду с пере-ходами в точке  $k_z=0$  возможны также и переходы в точке  $k_z=\pi/a$ , которые могут про-исходить с донорного уровня или при до-статочно высоких температурах из первой минизоны, что должно приводить к появле-нию дополнительной структуры в спектрах межминизонных переходов.

Сравнение результатов расчета (рис. 2) с экспериментальными данными показы-вает, что расчетные правила отбора для ромбоэдрических модификаций SiC не со-гласуются с экспериментом. В частности, резко противоречит расчету тот факт, что оп-тические переходы в третью минизону не на-

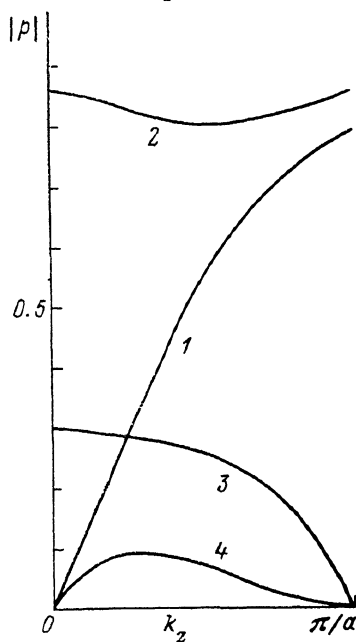


Рис. 2. Матричные элементы электродипольного перехода из первой минизоны в верхние.

1 — во вторую, 2 — в третью, 3 — в четвертую, 4 — в пятую для структуры 21R SiC.

блюдаются, хотя, как видно из рис. 2, они должны быть разрешены. По-видимому, здесь мы сталкиваемся с ограниченной применимостью используемой модели. Такие причины, как сложная структура реального потенциала в барьере или подмешивание состояний других зон (например, валентной зоны) к верхним минизонам, могут изменить вид волновых функций  $\psi$ , следовательно, матричных элементов, в то же время почти не сказываясь на энергетическом спектре минизон. Очевидно, следует с осторожностью подходить к использованию рассчитанных матричных элементов межминизонных переходов и других величин, чувствительных к точным значениям фазы волновых функций.

### 3. Пространственное распределение электронов

В рамках используемой модели можно вычислить вероятность нахождения электрона в данной потенциальной яме в виде

$$\omega = \int |\psi|^2 dz. \quad (1)$$

Здесь  $\psi$  — волновая функция электрона в яме, а интеграл берется по ширине ямы. Отметим, что в данном случае результат не зависит от фазы волновых функций, поэтому его, как и расчетные энергии, можно считать достоверным. Оказывается, что вероятности нахождения электрона в разных ямах резко различаются, особенно для нижних минизон. На рис. 3 приведены минизоны модификаций 21R и 24R SiC и указаны вероятности пребывания электронов в соответствующих ямах. Видно, что локализация электронов очень велика. Это означает, что взаимодействие между различными потенциальными ямами есть малое возмущение и мини-

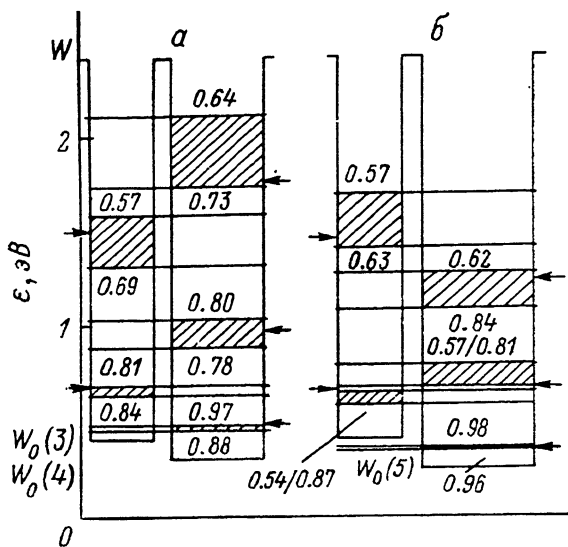


Рис. 3. Пространственное распределение электронов.

Числа указывают вероятности нахождения электронов минизоны в данной яме, верхние — при  $k_z=0$ , нижние — при  $k_z=\pi/a$ . Стрелками обозначены положения уровней энергии в изолированных потенциальных ямах. *a* — 21R, *b* — 24R SiC.

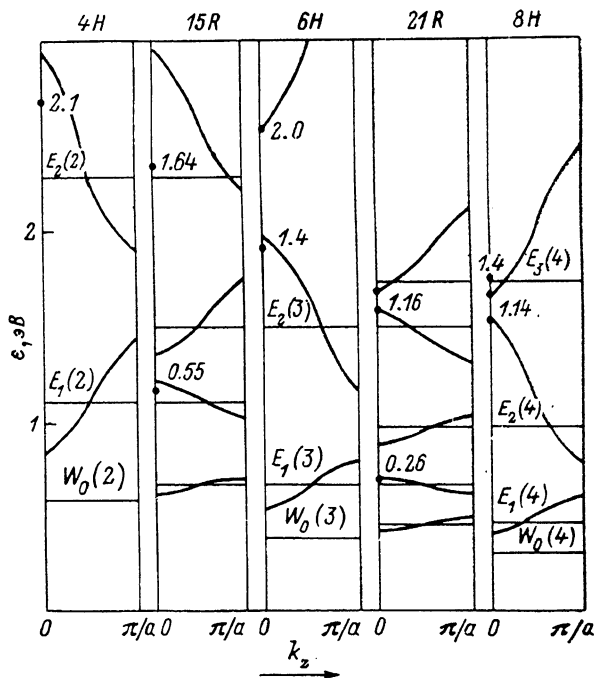


Рис. 4. Сравнение спектров ромбоэдрических структур с гексагональными, содержащими потенциальные ямы такой же ширины.

Черные кружки показывают наблюдаемые переходы, цифры дают их энергии в эВ.  $\epsilon_i(N)$  — энергия уровня *i* в яме шириной в *N* слоев β SiC.

зоны происходят в основном из собственных уровней энергии соответствующих ям. Действительно, из рис. 3 видно, что энергии минизон близки к энергиям уровней в изолированной потенциальной яме соответствующей ширины и глубины, которые даются уравнением

$$\operatorname{tg}(\sqrt{2m\varepsilon} b/\hbar) = -2\sqrt{\varepsilon(U-\varepsilon)/(U-2\varepsilon)}. \quad (2)$$

Здесь  $\varepsilon$  — энергия уровня,  $U = W - W_0$  — глубина ямы,  $b$  — ее ширина.

Столь высокая локализация электронов позволяет делать хорошие оценки для характерных энергий минизон, используя только энергии уровней в изолированных ямах. Так, например, изменение ширины запрещенной зоны различных модификаций по сравнению с невозмущенным кристаллом  $\beta$  SiC, равное энергии первой минизоны, приближенно может быть получено из энергии основного состояния в самой широкой яме.

Из сказанного выше следует, что энергии минизон в ромбоэдрических модификациях SiC должны быть близки к энергиям минизон гексагональных модификаций, имеющих ямы такой же ширины. Это подтверждается рис. 4, на котором показаны спектр ромбоэдрической модификации  $15R$ , у которой одна яма имеет ту же ширину, что и в гексагональной структуре  $4H$ , а другая — ту же, что и в  $6H$ , и ромбоэдрической модификации  $21R$ , у которой различные ямы имеют ту же ширину, что и в структурах  $6H$  и  $8H$ . Видно, что половина минизон модификации  $21R$  SiC располагается близко к минизонам  $6H$ , а другие — к минизонам  $8H$ . То же самое наблюдается и в  $15R$  SiC.

Таким образом, используемая модель хорошо описывает энергетические спектры модификаций SiC и можно попытаться предсказать некоторые явления, связанные с особенностями их минизонных спектров. Например, возможна ситуация, когда уровни двух изолированных потенциальных ям разной ширины с разными номерами совпадают. Как указывалось в [5], при этом минизоны расходятся, образуя аномально узкую щель, и все величины вблизи точки  $k_x = 0$  зависят от  $k_x$  очень резко. Согласно нашим расчетам, такая ситуация имеет место в структуре  $24R$  SiC (рис. 1, *в*; 3, *б*), где близкими оказываются второй уровень в широкой яме и первый уровень в узкой яме.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Дубровский Г. Б. // Проблемы физики и технологии широкозонных полупроводников. Л., 1980. С. 150—164.
- [2] Дубровский Г. Б., Погорельский Ю. В. // ФТП. 1974. Т. 8. № 4. С. 819—822.
- [3] Дубровский Г. Б., Лепнева А. А. // ФТТ. 1977. Т. 19. № 5. С. 1252—1257.
- [4] Dubrovskii G. B., Belyavskii V. J. // Phys. St. Sol. (b). 1981. V. 103. N 1. P. 131—137.
- [5] Пикус Ф. Г. // ФТП. 1988. Т. 22. № 5. С. 940—943.

Физико-технический  
институт им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
19 мая 1988 г.