

Роль спонтанной поляризации в формировании гетеропереходов на основе политипов карбида кремния

© С.Ю. Давыдов[¶], А.А. Лебедев, 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 23 мая 2006 г. Принята к печати 31 августа 2006 г.)

В рамках модели истощенного контактного слоя рассмотрено решение уравнения Пуассона для гетероперехода, одним из компонентов которого является некубический политип карбида кремния, обладающий спонтанной поляризацией P_{sp} . Показано, что учет P_{sp} приводит к уширению областей объемного заряда. Установлено, что модельным объектом для исследования влияния спонтанной поляризации на свойства гетеропереходов SiC может служить изотипный p - p -переход с квантовой ямой в валентной зоне области 3C-политипа на контакте с H -политипом SiC. В модели треугольной потенциальной ямы продемонстрирована возможность заметного влияния P_{sp} на энергию основного состояния электрона в яме.

PACS: 73.20.At, 73.21.Fg, 77.22.Ej

1. Введение

В последнее время возрастает интерес к исследованию влияния спонтанной поляризации P_{sp} на характеристики гетеропереходов (ГП), сформированных на основе кубического и гексагональных политипов карбида кремния [1]. Если в кубическом (3C) политипе SiC все четыре sp^3 -орбитали эквивалентны, то в гексагональных (H) политипах имеется выделенная c -ось, и sp^3 -орбиталь, вытянутая вдоль этого направления, отличается от трех остальных. В результате элементарный тетраэдр приобретает дипольный момент, что и приводит к возникновению в некубических политипах спонтанной поляризации [2,3]. Таким образом, некубические политипы SiC являются пьезоэлектриками. При создании ГП типа H -SiC/3C-SiC электрическое поле, наводимое спонтанной поляризацией, проникает внутрь 3C-области и изменяет изгиб зон. С другой стороны, и кубический компонент ГП влияет на экранировку P_{sp} . Все это приводит к необходимости учета P_{sp} в граничных условиях [4,5].

Вообще говоря, помимо спонтанной надо учитывать и пьезоэлектрическую поляризацию P_{pz} . Однако в отличие от нитридов $A^{III}B^V$ [6], где P_{pz} играет ведущую роль, в некубических политипах SiC доминирует именно P_{sp} [5]. Поэтому в данной работе мы не будем учитывать пьезоэлектрическую поляризацию.

Здесь мы рассмотрим влияние спонтанной поляризации на анизотипные (p - n) и изотипные (n - n , p - p) ГП и выясним, как учет спонтанной поляризации P_{sp} сказывается на энергии и заполнении основного состояния квантовых ям, которые могут образовываться на контакте.

2. Анизотипный гетеропереход с учетом спонтанной поляризации

Рассмотрим гексагональный политип H (1), обладающий p -типом проводимости, образующий ГП с кубическим 3C-политипом (2) с n -типом проводимости. В общем случае (см., например, [5]) уравнение Пуассона

$$\nabla \mathbf{F} = \rho / \epsilon_0 \epsilon,$$

где \mathbf{F} — напряженность электрического поля, ρ — плотность объемного заряда, ϵ — диэлектрическая проницаемость и ϵ_0 — диэлектрическая постоянная, для ГП может быть представлено в виде

$$\frac{d}{dx} \left[-\epsilon_0 \epsilon(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} + P_{sp}(x) \right] = e [N_d^+(x) - N_a^-(x) + p_0(x) - n_0(x)], \quad (1)$$

где $\varphi(x)$ — электростатический потенциал в направлении x , перпендикулярном плоскости контакта; N_d^+ и N_a^- — концентрации ионизованных доноров и акцепторов; p_0 и n_0 — концентрации свободных дырок и электронов; e — величина заряда электрона. Будем считать степень легирования высокой и положим в дальнейшем $n \approx N_d^+ - N_a^-$ и $p \approx N_a^- - N_d^+$ для n - и p -областей соответственно, считая N_d^+ и N_a^- постоянными в пределах каждой из областей и изменяющимися скачком на контакте $x = 0$ (истощенный контактный слой). Точно так же положим $P_{sp} = \text{const}$ в пределах гексагонального компонента ГП и $P_{sp} = 0$ в 3C-области. Тогда, следуя, например, [7], легко показать, что потенциалы φ_1 и φ_2 имеют вид

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= u_1 + \frac{P_{sp}}{\epsilon_0 \epsilon_1} (x + d_1) + \frac{ep_1}{2\epsilon_0 \epsilon_1} (x + d_1)^2, \\ \varphi_2(x) &= u_2 - \frac{en_2}{2\epsilon_0 \epsilon_2} (x - d_2)^2. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь и в дальнейшем нижние индексы 1 и 2 относятся к параметрам H -политипа и 3C-политипа SiC

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

соответственно; u_1 и u_2 — значения потенциалов при $x = -d_1$ и $x = d_2$, где d_1 и d_2 — ширина обедненных слоев объемного заряда в политипах 1 и 2; p_1 и n_2 — концентрации дырок и электронов в глубине политипов 1 и 2, характеризующихся диэлектрическими проницаемостями ε_1 и ε_2 соответственно. Из граничных условий при $x = 0$ следует, что контактная разность потенциалов u_c может быть представлена в виде

$$u_c = \frac{P_{sp}d_1}{\varepsilon_0\varepsilon_1} + \frac{e}{2\varepsilon_0} \left(\frac{p_1d_1^2}{\varepsilon_1} + \frac{n_2d_2^2}{\varepsilon_2} \right), \quad (3)$$

а величина спонтанной поляризации связана с характеристиками ГП соотношением

$$P_{sp} + ep_1d_1 = en_2d_2. \quad (4)$$

Прделав очевидные алгебраические выкладки, получим окончательно

$$d_1 = -\frac{P_{sp}}{ep_1} + \bar{d}_1 \left[1 + \frac{P_{sp}^2}{2eu_c\varepsilon_0\varepsilon_1p_1} \right]^{1/2},$$

$$d_2 = \bar{d}_2 \left[1 + \frac{P_{sp}^2}{2eu_c\varepsilon_0\varepsilon_1p_1} \right]^{1/2}, \quad (5)$$

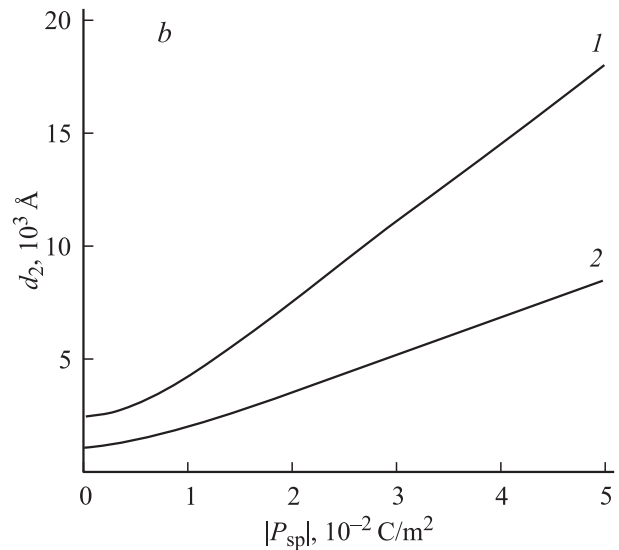
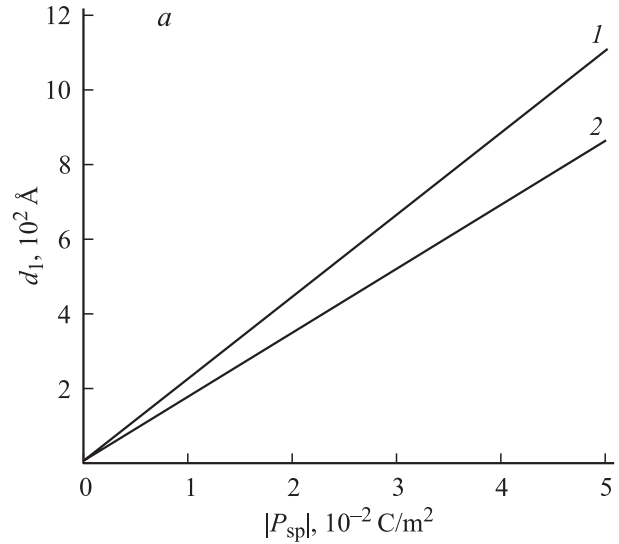
$$\bar{d}_1 = \sqrt{\frac{2u_c\varepsilon_0\varepsilon_1\varepsilon_2n_2}{ep_1(\varepsilon_1p_1 + \varepsilon_2n_2)}},$$

$$\bar{d}_2 = \sqrt{\frac{2u_c\varepsilon_0\varepsilon_1\varepsilon_2p_1}{en_2(\varepsilon_1p_1 + \varepsilon_2n_2)}}. \quad (6)$$

При $P_{sp} = 0$ полученные нами результаты переходят в соответствующие выражения из работы [7]. Если гексагональный политип (1) обладает n -типом проводимости, а кубический (2) — p -типом, то для описания такой ситуации нужно сделать замену p_1 на n_1 и n_2 на p_2 .

В работе [8] исследовалась гетероструктура p^- -3C-SiC/ n^+ -6H-SiC, в которой в 3C-области на ГП образовывается потенциальная яма. Воспользуемся данными [8] для иллюстрации полученных результатов, приняв $n_1 = n^+ = 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $p_2 = 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Положим $\varepsilon_1 = 9.78$, $\varepsilon_2 = 9.72$ [5]. Для порядковой оценки величины контактной разности потенциалов eu_c примем ее равной величине разрыва зон проводимости ΔE_C , которая, по данным [9], равна 0.55 эВ.

Оценки значения спонтанной поляризации, предпринятые в работах [10–12], дают для политипа 6H-SiC значение $|P_{sp}| = 0.53 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2$. При этом использовалась введенная ранее в [10] аппроксимация вида $P_{sp}(NH) = P_{sp}(2H)D$ (D — степень гексагональности политипа: $D = 1$ для 2H-политипа, 0.33 — для 6H- и 0 для 3C-политипа), а за величину поляризации $|P_{sp}(2H)|$ политипа 2H-SiC принималось значение $1.59 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2$ (см. [11], где в качестве подгонного параметра γ было взято значение 1.43 [12]).



Зависимости ширины областей объемного заряда d_1 (а) и d_2 (б) для переходов n^+ -6H/ p -3C (кривые 1) и n^+ -6H/ n -3C (кривые 2) от величины спонтанной поляризации $|P_{sp}|$.

С другой стороны, по данным работ [2,3] величина $|P_{sp}(2H)| = 4.32 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2$, что для 6H-SiC соответствует $|P_{sp}| = 1.44 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2$. Расчет по формулам (5), (6) дает следующие результаты:

$$\bar{d}_1 \approx 8 \text{ Å}, \quad \bar{d}_2 \approx 0.24 \text{ мкм};$$

$$d_1 \approx 125 \text{ Å}, \quad d_2 \approx 0.31 \text{ мкм при } P_{sp} = -0.53 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2;$$

$$d_1 \approx 319 \text{ Å}, \quad d_2 \approx 0.57 \text{ мкм при } P_{sp} = -1.44 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2.$$

Зависимости d_1 и d_2 от $|P_{sp}|$ представлены на рисунке. Из рисунка видно, что зависимость $d_1(P_{sp})$ практически линейна, тогда как для зависимости $d_2(P_{sp})$ при малых значениях $|P_{sp}|$ наблюдается значительная нелинейность.

3. Изотипный гетеропереход с учетом спонтанной поляризации

Вначале рассмотрим переход $n^+(1)-n(2)$, где 1 и 2 — политипы H и $3C$. Так как доноры считаются мелкими и $\chi_1 < \chi_2$, электроны с политипа 1 переходят на политип 2. Можно показать, что при этом выражения (5) и (6) при замене $p_1 \rightarrow n_1 \equiv n^+$ переходят в следующие:

$$d_1 = -\frac{P_{sp}}{en_1} + \bar{d}_1 \left[1 + \frac{P_{sp}^2}{2e u_c \varepsilon_0 \varepsilon_1 n_1} \right]^{1/2},$$

$$d_2 = \bar{d}_2 \left[1 + \frac{P_{sp}^2}{2e u_c \varepsilon_0 \varepsilon_1 n_1} \right]^{1/2}, \quad (7)$$

где

$$\bar{d}_1 = \sqrt{\frac{2u_c \varepsilon_1 \varepsilon_2 n_2}{en_1(\varepsilon_1 n_1 + \varepsilon_2 n_2)}}, \quad \bar{d}_2 = \sqrt{\frac{2u_c \varepsilon_1 \varepsilon_2 n_1}{en_2(\varepsilon_1 n_1 + \varepsilon_2 n_2)}}, \quad (8)$$

причем

$$P_{sp} + en_1 d_1 = en_2 d_2. \quad (9)$$

Для расчета воспользуемся данными работы [12], где исследовались гетероструктура с политипами SiC: $n^+-6H/n-3C/p^+-6H$. Так как потенциальная яма в $3C$ -области образуется на контакте с n^+-6H -SiC, именно этот изотипный ГП представляет наибольший интерес. По данным [12] имеем $n_1 = n^+ = 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и $n_2 = n = 4.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Тогда получим:

$$\bar{d}_1 \approx 13 \text{ \AA}, \quad \bar{d}_2 \approx 0.11 \text{ мкм};$$

$$d_1 \approx 98 \text{ \AA}, \quad d_2 \approx 0.14 \text{ мкм} \text{ при } P_{sp} = -0.53 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2;$$

$$d_1 \approx 252 \text{ \AA}, \quad d_2 \approx 0.24 \text{ мкм} \text{ при } P_{sp} = -1.44 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2.$$

Сравнение с предыдущим случаем показывает полное качественное соответствие полученных результатов.

Мы рассматривали n^+-n -переход в системе из политипов SiC: $n^+-6H/n-3C/p^+-6H$ как изолированный, т.е. без учета второго p^+-n -перехода. Это справедливо только в том случае, если сумма ширин истощенных областей $d = d_2 + d'_2$ меньше ширины $3C$ -области L , которая, по оценкам работы [12], составляет величину порядка 1–2 мкм. Расчет, проведенный для ГП $p^+-6H/n-3C$, где $p_1 = p^+ = 1.5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [12], а для оценки величины $e u_c$ взята ширина запрещенной зоны $6H$ -SiC, равная 3 эВ, дал следующие результаты:

$$\bar{d}_1 \approx 8 \text{ \AA}, \quad \bar{d}'_2 \approx 0.27 \text{ мкм};$$

$$d_1 \approx 30 \text{ \AA}, \quad d'_2 \approx 0.28 \text{ мкм} \text{ при } P_{sp} = -0.53 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2;$$

$$d_1 \approx 69 \text{ \AA}, \quad d'_2 \approx 0.29 \text{ мкм} \text{ при } P_{sp} = -1.44 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2.$$

Таким образом, $d = d_2 + d'_2 \approx 0.59 \text{ мкм}$ при $P_{sp} = -0.53 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2$ и 0.88 мкм при $P_{sp} = -1.44 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2$. В результате раздельное рассмотрение двух ГП системы оправдано.

Характеристики изотипных переходов вида p^+-p можно получить из формул (4)–(6) путем замены n_2 на p_2 . Здесь, однако, возникает одно любопытное обстоятельство. Разрывы валентных зон ΔE_V в ГП, образованных кубическим и гексагональными политипами SiC, очень малы и не превышают нескольких сотых эВ (возможное исключение представляет контакт $3C$ -SiC/ $2H$ -SiC) [10,13]. Если для порядковой оценки величины контактной разности потенциалов $e u_c$ воспользоваться значениями ΔE_V , то второй член в квадратных скобках будет намного превышать 1. С учетом этого получим приближенно

$$d_1 \approx -\frac{P_{sp}}{ep_1} \left[1 - \sqrt{\frac{\varepsilon_2 p_2}{\varepsilon_1 p_1 + \varepsilon_2 p_2}} \right],$$

$$d_2 \approx -\frac{P_{sp}}{ep_1} \sqrt{\frac{\varepsilon_2 p_2}{\varepsilon_1 p_1 + \varepsilon_2 p_2}}, \quad (10)$$

и суммарная ширина истощенного слоя

$$d = d_1 + d_2 = -P_{sp}/ep_1. \quad (11)$$

Таким образом, в случае почти нулевой контактной разности роль спонтанной поляризации является определяющей. Следовательно, роль P_{sp} в формировании характеристик ГП на основе политипов SiC проще всего изучать на объектах, обладающих p^+-p -переходом.

4. Влияние спонтанной поляризации на энергетические характеристики квантовых ям

В ГП, рассмотренных выше, ямы, образующиеся в зоне проводимости $3C$ -области на контакте с $6H$ -SiC, достаточно широки (порядка десятых долей мкм) и поэтому не являются квантовыми ямами. Действительно, простейшие оценки, выполненные в модели прямоугольной потенциальной ямы с бесконечными стенками, показывают, что основное состояние имеет энергию $\bar{\varepsilon}_0$ (относительно дна ямы), не превосходящую 10^{-4} эВ. Если, однако, степень легирования $3C$ -области будет более высокой, а яма соответственно более узкой, то в такой яме возникнут квантованные состояния [14]. Оценим, как спонтанная поляризация влияет на энергию $\bar{\varepsilon}_0$.

Рассмотрим $3C$ -область ГП, параметрам которой по-прежнему будем приписывать индекс 2. Пусть для определенности эта область обладает p -типом проводимости, а $6H$ -область — n -типом. Исходя из уравнений (2) с соответствующей заменой в них p_1 и n_2 на p_2 и n_1 , найдем напряженность электрического поля F_2 в узкозонной $3C$ -области при $x \rightarrow 0$:

$$F_{20} = -\left(\frac{d\varphi_2}{dx} \right)_{x \rightarrow 0} = \frac{ep_2 d_2}{\varepsilon_0 \varepsilon_2}. \quad (12)$$

Тогда, используя выражения (5) и (6), можно показать, что

$$\frac{dF_{20}}{d|P_{sp}|} = \frac{\bar{d}_1}{2u_c \varepsilon_0^2 \varepsilon_1 \varepsilon_2} \frac{|P_{sp}|}{[1 + (P_{sp}^2 / 2e u_c \varepsilon_0 \varepsilon_1 n_1)]^{1/2}}. \quad (13)$$

Здесь было учтено, что $\bar{d}_1 = (p_2/n_1)\bar{d}_2$. Отметим, что в выражение (13) входят только параметры, характеризующие гексагональный компонент ГП.

Для дальнейших оценок воспользуемся моделью треугольной квантовой ямы с бесконечными стенками (см., например, [15]), в рамках которой энергия основного состояния $\bar{\varepsilon}_0$ определяется по формуле

$$\bar{\varepsilon}_0 \approx 1.856 \left(\frac{e^2 F_{20}^2 \hbar^2}{m^*} \right)^{1/3}, \quad (14)$$

где m^* — эффективная масса электрона в 3С-области. Легко показать, что

$$\begin{aligned} \frac{\delta \bar{\varepsilon}_0}{\bar{\varepsilon}_0} &= \frac{1}{3} \frac{(\bar{d}_1/\bar{d}_2)}{[1 + (P_{sp}^2 / 2e u_c \varepsilon_0 \varepsilon_1 n_1)]} \frac{P_{sp}^2}{e u_c \varepsilon_0 \varepsilon_1 p_2} \frac{\delta P_{sp}}{P_{sp}} \\ &\equiv A \frac{\delta P_{sp}}{P_{sp}}. \end{aligned} \quad (15)$$

Оценки показывают, что коэффициент $A \approx 0.25$ при $P_{sp} = -0.53 \cdot 10^{-2}$ Кл/м² и 0.55 при $P_{sp} = -1.44 \cdot 10^{-2}$ Кл/м². Так как в нашем случае $\delta P_{sp} = P_{sp}$, то $\delta \bar{\varepsilon}_0 \approx \bar{\varepsilon}_0$, что демонстрирует заметное влияние спонтанной поляризации на энергетические уровни квантовой ямы.

Отметим следующее обстоятельство. Иллюстративность сделанной оценки связана с тем, что квантовые ямы в рассмотренных выше ГП не образуются. Для образования квантовой ямы нужно повысить концентрацию носителей в 3С-области, т.е. увеличить p_2 в формуле (15). Однако $\bar{d}_1/\bar{d}_2 \propto p_2/n_1$ и, следовательно, коэффициент A от концентрации p_2 явным образом не зависит. Таким образом, нет оснований считать, что при наличии квантовой ямы в зоне проводимости 3С-области ГП приведенная для коэффициента A оценка изменится сколь-либо существенно.

5. Заключение

Итак, в данной работе в рамках модели истощенного контактного слоя мы рассмотрели решения уравнения Пуассона для гетероперехода, одним из компонентов которого является некубический политип карбида кремния, обладающий спонтанной поляризацией P_{sp} . Было показано, что учет P_{sp} приводит к уширению истощенных областей, причем наибольший эффект наблюдается для некубической области гетероперехода. Установлено, что модельным объектом для исследования влияния спонтанной поляризации может служить изотип-

ный p - p -переход с квантовой ямой в валентной зоне 3С-области на контакте с H -SiC. В модели треугольной потенциальной ямы продемонстрирована возможность существенного влияния P_{sp} на энергию основного состояния электрона в яме.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 04-02-16632.

Список литературы

- [1] A. Fissel. Phys. Reports, **379** (1), 149 (2003).
- [2] A. Qteish, V. Heine, R.J. Needs. Phys. Rev. B, **45** (12), 6534 (1992).
- [3] A. Qteish, V. Heine, R.J. Needs. Phys. Rev. B, **45** (12), 6376 (1992).
- [4] A. Fissel, U. Kaizer, B. Schröter, W. Richter, F. Bechstedt. Appl. Surf. Sci., **184** (1), 37 (2001).
- [5] V.M. Polyakov, F. Schwierz. J. Appl. Phys., **98**, 023 709 (2005).
- [6] V. Monemar. J. Mater. Sci. Electron., **10**, 227 (1999).
- [7] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1977).
- [8] А.А. Лебедев, Д.К. Нельсон, В.С. Разбирин, И.И. Сайдашев, А.Н. Кузнецов, А.Е. Черенков. ФТП, **30** (10), 1236 (2005).
- [9] 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).
- [10] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. ФТП, **39** (12), 1440 (2005).
- [11] С.Ю. Давыдов. ФТТ, **48** (8), 1407 (2006).
- [12] А.А. Лебедев, А.М. Стрельчук, С.Ю. Давыдов, А.Е. Черенков, А.Н. Кузнецов, А.С. Трегубова, Л.М. Сорокин, А.В. Садохин, С. Йонедэ, Ш. Нишино. ФТП, **40** (12), 1432 (2006).
- [13] С.Ю. Давыдов. ФТП, **41** (2007) в печати.
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М., Наука, 1974).
- [15] В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. *Физика квантовых низкоразмерных структур* (М., Логос, 2000).

Редактор Т.А. Полянская

The role of spontaneous polarization in a heterojunction formation on the basis of silicon carbide polytypes

S.Yu. Davydov, A.A. Lebedev, 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 Within the completely depleted space-charge model the Poisson equation has been solved for the heterojunctions of cubic polytype with the noncubical polytypes possessing the spontaneous polarization P_{sp} . It is shown that the account of P_{sp} . It is shown that the account of P_{sp} leads to the expansion of the depleted domains. It is found that the model system for the polarization studies is the $p-p$ heterojunction having the valence band quantum well localized within the $3C$ -region on the contact with the H -polytype. In the scope of the triangular potential well model the possibility of the pronounced polarization effect on the ground state energy is demonstrated.