

# Роль спонтанной поляризации в формировании структур $NH-SiC/3C-SiC/NH-SiC$ на основе политипов карбида кремния

© С.Ю. Давыдов<sup>¶</sup>, 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 11 февраля 2008 г. Принята к печати 13 февраля 2008 г.)

Рассмотрено влияние электростатического поля, возникающего вследствие наличия спонтанной поляризации в гексагональных обкладках гетероструктуры на основе политипов карбида кремния  $NH-SiC/3C-SiC/NH-SiC$ , на взаиморасположение энергетических зон. Показано, что возникающая в системе асимметрия связана с суперпозицией поляризационного и контактного полей.

PACS: 73.20.At, 73.21.Fg, 77.84.Bw

1. В последнее время усилился интерес к изучению влияния спонтанной поляризации  $P_{sp}$  на характеристики гетероструктур (ГС), сформированных на основе кубического и гексагональных политипов карбида кремния [1]. Если в кубическом политипе  $3C-SiC$  все четыре  $sp^3$ -орбитали эквивалентны, то в гексагональных политипах  $NH-SiC$  имеются выделенная ось  $c$ , и  $sp^3$ -орбиталь, вытянутая вдоль этой оси, которая отличается от трех остальных. В результате элементарный тетраэдр приобретает дипольный момент, что приводит к возникновению в некубических политипах спонтанной поляризации [2,3]. Таким образом, некубические политипы  $SiC$  являются пирозлектриками. 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 внутрь  $3C$ -области и изменяет взаиморасположение зон. С другой стороны, и кубический компонент ГС влияет на экранировку  $P_{sp}$ . Все это приводит к необходимости учета  $P_{sp}$  в граничных условиях при расчете энергетической диаграммы этой системы [4,5]. Соответствующие расчеты для гетеропереходов (ГП) вида  $NH-SiC/3C-SiC$  представлены в работе [6].

Необходимо отметить также следующее обстоятельство. В ГС из-за рассогласования решеток контактирующих полупроводников возникает пьезоэлектрическая поляризация. В политипах карбида кремния, однако, рассогласование решеток крайне мало: так, например, расстояния между ближайшими соседями в чисто кубическом  $3C$ -политипе отличаются от таковых в чисто гексагональном  $2H$ -политипе на величину порядка 0.5% [7]. Поэтому для структур на основе политипов  $SiC$  можно учитывать только роль спонтанной поляризации, пренебрегая пьезополяризацией [1–5].

Задача данной работы состоит в том, чтобы построить простую модель трехслойной ГС на основе политипов  $SiC$  с гексагональными обкладками и кубической прослойкой и рассмотреть, как учет спонтанной поляризации влияет на энергетическую диаграмму этой системы.

2. В трехслойной системе левый и правый ГП неэквивалентны. Во-первых, контактные поля  $F_c$  гетеропереходов имеют разный знак. Под контактным полем здесь понимается величина, определяемая соотношением

$$F_c = - \left( \frac{d\varphi(x)}{dx} \right)_{x=\mp L}, \quad (1)$$

где  $\varphi(x)$  — электростатический потенциал (ось  $x$  перпендикулярна плоскости ГП) без учета спонтанной поляризации,  $\mp L$  — левая и правая границы  $3C$ -области (или левый и правый ГП). Так как изгибы зон определяются выражениями

$$E_{C,V}(x) = E_{C,V} - e\varphi(x), \quad (2)$$

где  $E_{C,V}$  — энергии краев зоны проводимости и валентной зоны в глубине полупроводника, то

$$eF_c = \left( \frac{dE_{C,V}(x)}{dx} \right)_{x=\mp L}, \quad (3)$$

т. е. знак  $F_c$  совпадает со знаком изгиба зон на контактах. Будем считать, что  $F_c > 0$  на левой границе  $x = -L$  и  $F_c < 0$  на правой границе  $x = L$ .

Во-вторых, все политипы карбида кремния состоят из двойных слоев  $Si-C$  (бислоев — BL). Если левая гексагональная обкладка ограничена плоскостью, содержащей атомы кремния, несущие положительный заряд [8,9] с плотностью  $+\sigma$ , то правая обкладка будет начинаться с грани, образованной отрицательно заряженными атомами углерода с поверхностной плотностью заряда  $-\sigma$ . Следовательно, поле спонтанной поляризации

$$F_{sp} = \frac{\sigma}{\epsilon_0 \epsilon_2} = P_{sp} \quad (4)$$

направлено слева направо и имеет положительный знак ( $\epsilon_2$  — диэлектрическая проницаемость  $3C$ -области).<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Если толщина  $3C$ -прослойки  $2L$  много меньше характерной дебаевской длины экранирования, то наведенное спонтанной поляризацией электрическое поле  $F_{sp}$  можно считать постоянным и равным полю в конденсаторе, заполненном диэлектриком с проницаемостью  $\epsilon_2$ , толщиной  $2L$  и плотностью заряда на обкладках  $\pm\sigma$ .

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

Тогда на левой границе 3C-области контактное  $F_c$  и поляризационное  $F_{sp}$  поля складываются, а на правой — вычитаются.

Интересно отметить, что в модели треугольной ямы с бесконечными стенками положение двумерных подзон относительно дна ямы пропорционально  $F^{2/3}$ , где  $F$  — результирующее поле [10,11]. Следовательно, за счет поля поляризации на левом контакте, где  $F = F_c + F_{sp}$ , квантовая яма (КЯ) в зоне проводимости 3C-области эффективно сужается, а локальные уровни  $\varepsilon_n$  (вернее, двумерные подзоны) смещаются вверх. На правом контакте, где  $F = -F_c + F_{sp}$ , КЯ, наоборот, уширяется, а уровни  $\varepsilon_n$  (подзоны) смещаются вниз. Действительно, если предположить, что

$$\eta \equiv \left| \frac{F_{sp}}{F_c} \right| \ll 1,$$

то легко показать, что

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n^0 \frac{1 \pm 2\eta}{3},$$

где  $\varepsilon_n^0$  — энергия локальных уровней (подзон) без учета спонтанной поляризации.

Вследствие наличия спонтанной поляризации перепад потенциала в 3C-области равен

$$\Delta\varphi = 2F_{sp}L, \quad (5)$$

а смещение зон равно  $-e\Delta\varphi$ . Такая, на первый взгляд сильно упрощенная картина, подтверждается численными расчетами [1–4,12,13], показывающими, что потенциал в рассматриваемых ГС имеет пилообразный характер.

**3.** Рассмотрим задачу о 3C-прослойке для системы типа NH/3C/NH-SiC более подробно. Будем считать, что концентрация электронов в областях H-SiC 1 и 3 равна  $n_1$ , а концентрация дырок в области 2 (3C-SiC) равна  $p_2$ . Представим потенциал в 3C-области в виде

$$\varphi_2(x) = u_2 + \frac{ep_2}{2\varepsilon_0\varepsilon_2} (x - x_0)^2, \quad -L \leq x \leq L, \quad (6)$$

где  $x_0$  — параметр. Тогда

$$\Delta\varphi = \varphi(-L) - \varphi(L) = 2Lx_0 \frac{ep_2}{\varepsilon_0\varepsilon_2}. \quad (7)$$

Поле, действующее в 3C-области, равно

$$F(x) = -\frac{ep_2}{\varepsilon_0\varepsilon_2} (x - x_0). \quad (8)$$

Для очень тонкой 3C-прослойки, когда  $|x_0| \gg L$ , поле практически постоянно и равно

$$F \approx \frac{ep_2}{\varepsilon_0\varepsilon_2} x_0. \quad (9)$$

Так как при этом  $F \approx F_{sp}$ , то с учетом (4) 3C-область можно считать тонкой, если

$$\frac{|P_{sp}|}{ep_2} \gg L. \quad (10)$$

С другой стороны, пленка может считаться толстой,<sup>2</sup> если  $x_0 \ll L$ . Переход от режима тонкой к режиму толстой пленки осуществляется при  $x_0 = L$ .

Аналогично тому, как это делалось в работе [6] в приближении полностью истощенного слоя, в гексагональных областях 1 и 3 электростатические потенциалы могут быть представлены в виде

$$\varphi_1(x) = u_1 - \frac{P_{sp}(x + L + d_1)}{\varepsilon_0\varepsilon_1}, \quad x < -L - d_1; \quad (11)$$

$$\varphi_1(x) = u_1 - \frac{P_{sp}(x + L + d_1)}{\varepsilon_0\varepsilon_1} - \frac{en_1}{2\varepsilon_0\varepsilon_1} (x + L + d_1)^2, \quad -L - d_1 \leq x < -L; \quad (12)$$

$$\varphi_3(x) = u_1 - \frac{P_{sp}(x - L - d_3)}{\varepsilon_0\varepsilon_1} - \frac{en_1}{2\varepsilon_0\varepsilon_1} (x - L - d_3)^2, \quad L + d_3 \geq x > L; \quad (13)$$

$$\varphi_1(x) = u_3 - \frac{P_{sp}(x + L + d_3)}{\varepsilon_0\varepsilon_1}, \quad x > L + d_3. \quad (14)$$

Здесь  $\varepsilon_1$  — диэлектрическая проницаемость гексагональных областей 1 и 3,  $d_{1,3}$  — толщины областей пространственного заряда.

Из условия равенства потенциалов и электрических смещений на границах получим

$$d_{1,3} = \frac{p_2}{n_1} L \mp \frac{\varepsilon_1 P_{sp}}{e(\varepsilon_1 n_1 + \varepsilon_2 p_2)} \quad (15)$$

и

$$x_0 = \frac{\varepsilon_2 P_{sp}}{e(\varepsilon_1 n_1 + \varepsilon_2 p_2)}. \quad (16)$$

Выше мы полагали для определенности, что  $P_{sp} > 0$ , т.е. поляризация направлена вдоль оси  $x$ . Тогда, для того чтобы  $d_1$  было величиной положительной, должно выполняться неравенство

$$L > \frac{\varepsilon_1 n_1 P_{sp}}{ep_2(\varepsilon_1 n_1 + \varepsilon_2 p_2)}. \quad (17)$$

Если же это неравенство не выполняется, следует принять  $d_1 = 0$ .

**4.** Сделаем некоторые численные оценки, полагая  $\varepsilon_1 \approx \varepsilon_2 = \varepsilon$ , что выполняется с точностью до 0.6% (см., например, [14]). Положим также  $P_{sp} = 10^{-2}$  Кл/м<sup>2</sup> [9]. Примем  $n_1 = 3 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup> и  $p_2 = 10^{16}$  см<sup>-3</sup> [15]. Тогда для  $x_0$  получаем значение, равное приблизительно 20 нм. Условие (17) выполняется, когда толщина 3C-прослойки  $2L$  превышает 0.4 мкм. В результате величина перепада потенциала с учетом спонтанной поляризации составляет  $\Delta\varphi \approx L \cdot 10^6$  В/м.

**5.** Таким образом, наличие спонтанной поляризации в гексагональных обкладках превращает симметричную (по природе компонентов и характеру легирования)

<sup>2</sup> В толстой пленке левый и правый ГП не связаны между собой.

трехслойную систему в асимметричную: толщины областей объемного заряда и ширины квантовых ям на левом и правом контактах становятся различными, а энергетические зоны в 3С-области испытывают сдвиг  $e\Delta\phi$ .

Авторы признательны А.А. Лебедеву за стимулирующую дискуссию.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№ 07-02-000919а) и целевой программы „Развитие научного потенциала высшей школы Российской Федерации“, проект РНП 2.1.2. 1716К.

## Список литературы

- [1] A. Fissel. Phys. Rep., **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] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, А.В. Трошин. ФТП, **41** (3), 307 (2007).
- [7] C. Cheng, V. Heine, R.J. Needs. J. Phys.: Condens. Matter, **2** (23), 5115 (1990).
- [8] С.Ю. Давыдов. ФТТ, **48** (8), 1407 (2006).
- [9] С.Ю. Давыдов, А.В. Трошин. ФТТ, **49** (4), 723 (2007).
- [10] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М., Наука, 1974).
- [11] В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. *Физика квантовых низкоразмерных структур* (М., Логос, 2000).
- [12] H. Iwata, U. Lindefelt, S. Öberg, P.R. Briddon. J. Appl. Phys., **93** (3), 1577 (2003).
- [13] S. Juillaguet, J. Camassel. Mater. Sci. Forum, **483–485**, 335 (2005).
- [14] С.Ю. Давыдов. ФТТ, **48** (10), 1748 (2006).
- [15] 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).

Редактор Т.А. Полянская

## Role of spontaneous polarization on the formation of the *NH-SiC/3C-SiC/NH-SiC* structures based on the silicon carbide polytypes

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

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

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

**Abstract** Effect of the electrostatic field induced by the spontaneous polarization of the hexagonal components of the *NH-SiC/3C-SiC/NH-SiC* heterostructures on the energy bands has been considered. It is shown that the system asymmetry arises from the superposition of the contact and polarization fields.