

Квантовые ямы на гетеропереходах 3C-SiC/NH-SiC. Расчет спонтанной поляризации и напряженности поля в экспериментах

© И.С. Сбруев, С.Б. Сбруев[†]

Московский авиационный институт (Государственный технический университет),
125993 Москва, Россия

(Получена 23 марта 2010 г. Принята к печати 7 апреля 2010 г.)

Пересмотрены результаты экспериментов с квантовыми ямами на гетеропереходах 3C-SiC/4H-SiC и 3C-SiC/6H-SiC, полученных различными способами. В рамках единой модели получены значения спонтанной поляризации, напряженности поля и энергий локальных уровней в квантовых ямах на гетеропереходах 3C-SiC/NH-SiC, согласующиеся с результатами всех рассмотренных экспериментов. Определены типы гетеропереходов. Представлены аппроксимация для разрывов валентных зон на гетеропереходах между политипами карбида кремния и выражение для вычисления локальных уровней в квантовых ямах на гетеропереходе 3C-SiC/NH-SiC. Вычислены значения спонтанной поляризации для 3C-SiC/4H-SiC — 0.71 Кл/м², для 3C-SiC/6H-SiC — 0.47 Кл/м² и напряженности поля, создаваемого спонтанной поляризацией на гетеропереходе 3C-SiC/4H-SiC и 3C-SiC/6H-SiC — 0.825 и 0.55 МВ/см соответственно.

1. Введение

На протяжении нескольких лет как за рубежом, так и в ФТИ им. Иоффе ведутся работы по получению гетеропереходов на политипах карбида кремния, обладающего выраженным политипизмом и уникальными свойствами. В работах [1–6,14] рассматривались результаты экспериментов, в которых были получены квантовые ямы (QW) на гетеропереходах 3C-SiC/NH-SiC. В рамках применявшихся моделей были получены дополнительные данные, позволившие вычислить предполагаемые значения спонтанной поляризации и напряженности поля на гетеропереходах между различными политипами карбида кремния. Тем не менее значения спонтанной поляризации и напряженности поля, полученные в результате обработки результатов экспериментов и представленные в табл. 1, в различных работах значительно отличаются. При этом практически во всех работах используется одна и та же модель прямоугольной квантовой ямы. Понятно, что в рамках одной модели для одних и тех же условий должны быть получены одинаковые результаты. Для получения достоверных значений, пригодных для дальнейшего использования в расчетах, необходимо найти истинные значения и модель, корректно работающую во всех случаях.

2. Особые условия

Рассмотрим наиболее часто обсуждаемые эксперименты [1–5], в которых гетеропереходы были получены различными способами — на прослойках SF 3C-SiC в 4H-SiC (SF — Stacking Faults, участки с нарушенной по отношению к основному политипу последовательностью), гетеропереход 3C-SiC/6H-SiC на SF [14] и эксперимент [6] по получению гетеропереходов 3C-SiC/6H-SiC с помощью высокотемпературной

вакуумной эпитаксии. В табл. 1 приведены данные из указанных источников.

Ранее часть тех же самых результатов уже рассматривались, например, в [7,8], тем не менее вернемся к некоторым особенностям еще раз. Во-первых, в расчетах по результатам измерений, проведенных в рамках экспериментов, несмотря на единую модель, использовавшуюся в них, были вычислены различные значения спонтанной поляризации и напряженности поля на гетеропереходах. Во-вторых, как можно видеть из предложенных к рассмотрению материалов, в [1,2,14] энергия кванта меньше ширины запрещенной зоны узкозонного материала (3C-SiC), а в [3–6] она превышает ширину запрещенной зоны 3C-SiC. Кроме того, в работах [1–5,14] предполагалось, что образуется гетеропереход II рода, а в [6] — гетеропереход I рода.

В экспериментах для исследования структур применялись различные методы. В [1,2,4,5,14] — низкотемпературная фотолюминесценция (LTPL), в [3] — низкоэнергетическая нанолюминесценция, возбуждаемая электронами (LEEN). В экспериментах с гетероструктурами 6H-SiC/3C-SiC, полученными сублимационной эпитаксией в вакууме [6], — инжекционная электролюминесценция (IEL). Соответственно и энергия свободного экситона при расчетах должна соответствовать условиям измерений. Кроме того, следует применять различные формулы, соответствующие излучательной рекомбинации свободного экситона при различных типах гетеропереходов [7]. На рис. 1 представлена схема, на которой изображены потенциальные ямы и возможные варианты излучательной рекомбинации, соответствующие различным энергетическим уровням и типам гетеропереходов. Таким образом, учитывая, что в экспериментах, описанных в [6], был предположительно получен гетеропереход I рода, энергию кванта для всех возможных вариантов излучательной рекомбинации будем вычислять по формулам:

$$h\nu = E_{gx}(3C) - V_0 + \varepsilon_0 + \Delta E_v, \quad (1)$$

[†] E-mail: science@yandex.ru

Таблица 1. Значения величин, полученных экспериментальным и расчетным путем в различной литературе

Вид	Тип	bl	m^*	dE_C , эВ	dE_V , эВ	V_0 , эВ	ϵ_0 , эВ	E_{GXQW} , эВ	F , МВ/см	$P_{SP}^* 10^{-2}$, Кл/м ²	ϵ_{3C}	Литература
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
3C-SiC/4H-SiC	II	13	0.313 m_0	0.925	0.05	—	0.11	2.177	1.3	1.1	9.72	[1]
3C-SiC/4H-SiC	II	9	0.316 m_0	0.99	0.05	0.667	0.507	2.26	2.9	1.67	7.14	[2]
3C-SiC/4H-SiC	II	7	0.66 m_0	0.84	0.07	—	0.11	2.5	—	—	—	[3]
3C-SiC/4H-SiC	II	6	—	0.919	0.05	—	—	2.51	—	1.08	—	[4,5]
3C-SiC/6H-SiC	I	—	0.316 m_0	0.55	0.05	—	0.061	2.357	0.2	—	—	[6]
3C-SiC/6H-SiC	II	6-21	0.320 m_0	—	0.02	—	0.22	—	0.84	—	—	[14]

Примечание. Колонка: 1 — вид гетероперехода, 2 — тип гетероперехода, 3 — количество двухатомных слоев в SF (bl), 4 — эффективная масса электрона в 3C-SiC (m^*), 5 — величина разрыва зон проводимости (dE_C), 6 — величина разрыва валентных зон (dE_V), 7 — глубина потенциальной ямы (V_0), 8 — значение первого локального уровня в квантовой яме (ϵ_0), 9 — энергия экситона в квантовой яме (E_{GXQW}), 10 — напряженность поля спонтанной поляризации (F), 11 — значение спонтанной поляризации для 3C-SiC/NH-SiC (P_{SP}), 12 — относительная диэлектрическая проницаемость 3C-SiC (ϵ_{3C}), 13 — литература.

$$h\nu = E_{gx}(3C) + \epsilon_0, \quad (2)$$

$$h\nu = E_{gx}(3C) + \epsilon_0 + \Delta E_v \quad (3)$$

(для гетеропереходов I рода) и

$$h\nu = E_{gx}(3C) - V_0 + \epsilon_0 - \Delta E_v, \quad (4)$$

$$h\nu = E_{gx}(3C) + \epsilon_0, \quad (5)$$

$$h\nu = E_{gx}(3C) + \epsilon_0 - \Delta E_v \quad (6)$$

для гетеропереходов II рода. Здесь $E_{gx}(3C)$ — энергия свободного экситона в 3C-SiC, $h\nu$ — энергии квантов в экспериментах, V_0 — глубина потенциальной ямы на гетеропереходе, ϵ_0 — значение первого локального уровня в квантовой яме.

Выражения (1,2,4,5) относятся к непрямым переходам, а выражения (3,6) к квазипрямым переходам.

В данной работе мы использовали аппроксимацию значений ΔE_v на гетеропереходе 3C-SiC/NH-SiC. Данная аппроксимация предполагает, что величина разрыва валентных зон на гетеропереходах 3C-SiC/NH-SiC и 3C-SiC/NR-SiC обратно пропорциональна количеству двухатомных слоев ячейки гексагональных политипов,

а для ромбоэдрических политипов — ячейки, приведенной к гексагональной, и численно равно

$$\Delta E_v(NH) = \frac{1}{4 \cdot bl}, \quad (7)$$

где значение ΔE_v выражено в электронвольтах, bl — количество двухатомных слоев в элементарной ячейке политипа NH-SiC или в приведенной к гексагональной ячейке политипа NR-SiC. Таким образом, в первом приближении значение ΔE_v для политипа 4H-SiC принято равным 0.063 эВ, а для политипа 6H-SiC 0.042 эВ.

3. Гетеропереходы на SF

Для дальнейшего решения системы уравнений в рамках модели прямоугольной квантовой ямы следует геометрические размеры элементарных ячеек в SF привести к единообразию. Учитывая толщину двухатомного слоя 3C-SiC, равную ~ 0.252 нм, во всех экспериментах мы принимаем толщину SF равной $0.252 \cdot bl$, где bl — количество слоев в SF.

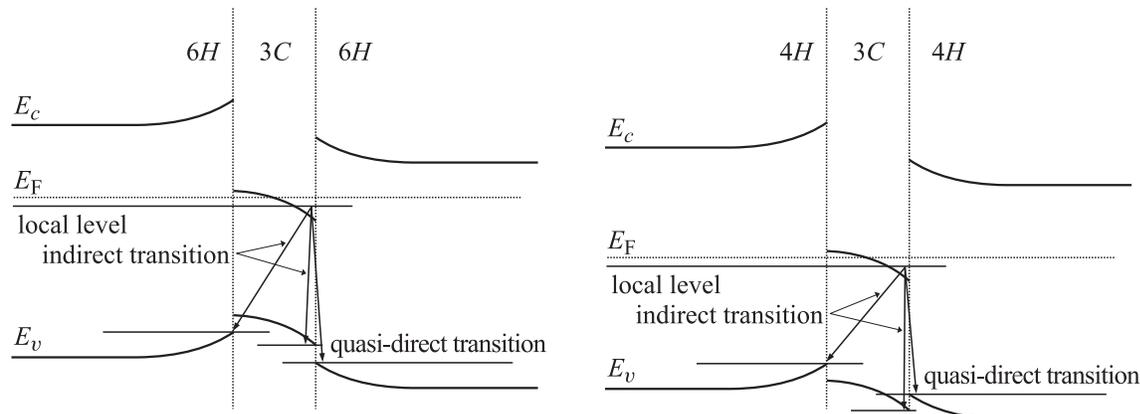


Рис. 1. Схемы возможных вариантов излучательной рекомбинации на гетеропереходах 3C-SiC/NH-SiC, образованных SF. Для системы 6H-SiC/3C-SiC/6H-SiC — гетеропереход I рода, для 4H-SiC/3C-SiC/4H-SiC — II рода.

Рассмотрим результаты экспериментов [1,2], в которых энергия кванта меньше ширины запрещенной зоны. Широко используемая модель прямоугольной квантовой ямы позволяла получить значение глубины потенциальной ямы и напряженность поля на границе гетероперехода, образованного SF. Учитывая, что в данной модели расчетная глубина потенциальной ямы пропорциональна толщине SF, мы можем составить следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} V_{01} = E_{gx}(3C) - hv_1 + \epsilon_0 - \Delta E_v, \\ V_{02} = E_{gx}(3C) - hv_2 + \epsilon_0 - \Delta E_v, \\ V_{01} = V_{02} \left(\frac{L_{QW1}}{L_{QW2}} \right), \end{cases} \quad (8)$$

где $E_{gx}(3C)$ — энергия свободного экситона в 3C-SiC (при температуре 2 К эта энергия $E_{gx}(3C) = 2.388$ эВ), hv_1 и hv_2 — энергии квантов в экспериментах [1 и 2] соответственно, V_{01} и V_{02} — глубина потенциальной ямы в экспериментах [1] и [2] соответственно, L_{QW1} и L_{QW2} — толщина SF в экспериментах [1 и 2] соответственно, ϵ_0 — значение первого локального уровня в квантовой яме.

Решение данной системы уравнений дает однозначный ответ $V_{02} = 0.270$, $V_{01} = 0.187$ и $\epsilon_0 = 0.121$ эВ для гетероперехода 3C-SiC/4H-SiC.

Выбор выражений для включения в данную систему уравнений продиктован тем, что в случаях с гетеропереходами, образованными SF, трудно ожидать наличия значительного количества „дырок“ в валентной зоне прослойки 3C-SiC, и переход наиболее вероятно осуществляется в валентную зону противоположащего слоя широкозонного материала.

Отметим, что в [3–5] энергия локального уровня может быть прямо вычислена как разность между энергией свободного экситона и энергией кванта, создаваемого излучательной рекомбинацией в квантовой яме. Значения первого локального уровня для гетероперехода 3C-SiC/4H-SiC, сформированного SF, составляют $\sim 0.11–0.12$ эВ, что соответствует вариантам излучательной рекомбинации, указанным на рис. 1 для экспериментов, в которых энергия кванта больше ширины запрещенной зоны узкозонного материала.

Полагая, что зависимость спонтанной поляризации от коэффициента гексагональности D носит линейный характер [1,9] и для потенциальной ямы справедливо соотношение

$$V_0 = \frac{P_{sp}(2H)D}{\epsilon_0 \epsilon_{3C} \left(\frac{1}{L_{QW}} \right)}, \quad (9)$$

то, используя ранее вычисленные значения для потенциальных ям, мы можем рассчитать значение спонтанной поляризации. Для гетероперехода 3C-SiC/2H-SiC полученную величину примем округленно $1.42 \cdot 10^{-2}$ Кл/м². В работе [10] достаточно близкие значения были получены теоретически. Используя соотношение

$$F = \frac{V_0}{L_{QW}} \quad (10)$$

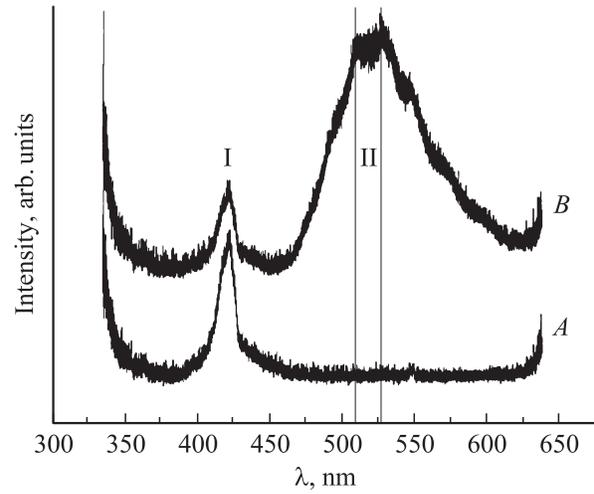


Рис. 2. Спектры PL [14], полученные на образце 6H-SiC (A) и после образования SF 3C-SiC (B). Вертикальными линиями обозначены первый и второй максимумы, значения которых использованы в расчетах в данной работе.

и уже известные данные, вычислим напряженность поля, создаваемого спонтанной поляризацией. Для всех гетеропереходов 3C-SiC/4H-SiC, полученных на SF в рассмотренных экспериментах, она будет одинаковой и равна $8.25 \cdot 10^7$ В/м. Напряженность поля, создаваемого спонтанной поляризацией, в рамках используемой модели может быть вычислена и как

$$F = \frac{P_{sp}(2H)D}{\epsilon_0 \epsilon_{3C}}. \quad (11)$$

Таким образом, значение напряженности поля для гетероперехода 3C-SiC/6H-SiC, вызванное спонтанной поляризацией, равно $5.5 \cdot 10^7$ В/м.

В [14] рассматриваются результаты эксперимента, в котором SF 3C-SiC были получены в слое 6H-SiC. На гетеропереходе 3C-SiC/NH-SiC при равном количестве двухатомных слоев глубина потенциальной ямы, определяемая выражением (9) и создаваемая спонтанной поляризацией, зависит только от коэффициента гексагональности широкозонного политипа. Используем значение $V_0 = 0.146$ эВ, полученное с помощью выражения (9) для гетероперехода 3C-SiC/4H-SiC/3C-SiC [3], где количество двухатомных слоев точно определено. Теперь мы можем вычислить значение глубины потенциальной ямы для гетероперехода 3C-SiC/6H-SiC, используя отношение коэффициентов гексагональности для политипов 4H и 6H, равное 1.5. Глубина потенциальной ямы для 3C-SiC/6H-SiC/3C-SiC при толщине SF, состоящей из 7 двухатомных слоев, будет равна 0.097 эВ. Это позволит нам идентифицировать пики на приведенном в работе [14] спектре фотолуминесценции, изображенном на рис. 2. Однако следует иметь в виду, что в данном случае мы скорее имеем дело с гетеропереходом I рода [6], и в дальнейшем формула для расчета энергии кванта должна соответствовать выражению (1).

Энергию первого локального уровня, зависящую в данном случае только от напряженности поля, мы также предварительно определим из значения ранее полученного решением системы уравнений для $3C\text{-SiC}/4H\text{-SiC}/3C\text{-SiC}$. Значение локальных уровней в квантовых ямах зависит только от напряженности поля. Как в модели треугольной квантовой ямы, использованной в [2,14], так и в рассматриваемой авторами модели V -образной квантовой ямы отношение значений первого локального уровня в квантовой яме для политипов $4H$ и $6H$ одинаково и равно ~ 1.31 . Таким образом, мы можем предварительно определить значение первого локального уровня в квантовой яме $6H\text{-SiC}/3C\text{-SiC}$ как 0.092 эВ, опираясь на ранее полученное расчетное значение для $4H\text{-SiC}/3C\text{-SiC}$, равное 0.121 эВ.

Подставив полученные значения в уравнение (1), мы получим, что энергия кванта на гетеропереходе $3C\text{-SiC}/6H\text{-SiC}/3C\text{-SiC}$, сформированном SF с 7 двухатомными слоями, будет равна 2.425 эВ. Теперь мы получили возможность, обратившись к спектру из [14], изображенному на рис. 2, расширив систему уравнений еще раз, уточнить ранее использовавшиеся нами параметры. Первому максимуму с длиной волны ~ 512.4 нм и энергией 2.420 эВ на рис. 2 [14], согласно предварительным расчетам, скорее всего, соответствует SF из 7 двухатомных слоев. Это позволяет использовавшуюся нами ранее систему уравнений (8) дополнить еще одним. Используя ранее предложенную аппроксимацию для ΔE_v , введем для расчета ΔE_v безразмерный коэффициент x . Как было показано выше, отношение первых локальных уровней в квантовых ямах на гетеропереходах $4H\text{-SiC}/3C\text{-SiC}$ и $6H\text{-SiC}/3C\text{-SiC}$ приблизительно равно 1.31 . Учитывая, что в [14] энергия кванта меньше ширины запрещенной зоны $3C\text{-SiC}$ и мы имеем дело с гетеропереходом I рода [6], получим следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} V_{01} = E_{gx}(3C) - hv_1 + \varepsilon_0 - \frac{x}{4 \cdot bl(4H)}, \\ V_{02} = E_{gx}(3C) - hv_2 + \varepsilon_0 - \frac{x}{4 \cdot bl(4H)}, \\ V_{01} = V_{02} \left(\frac{L_{QW1}}{L_{QW2}} \right), \\ V_{03} = E_{gx}(3C) - hv_3 + \frac{\varepsilon_0}{1.31} + \frac{x}{4 \cdot bl(6H)}, \end{cases} \quad (12)$$

где $E_{gx}(3C)$ — энергия свободного экситона политипа $3C\text{-SiC}$ при температуре $2-6$ К; hv_1 , hv_2 и hv_3 — энергии квантов в экспериментах [1,2 и 14] соответственно; V_{01} , V_{02} , V_{03} — глубина потенциальной ямы в экспериментах [1,2 и 14]; L_{QW1} и L_{QW2} — толщина SF в экспериментах [1,2]; ε_0 — значение первого локального уровня в квантовой яме на гетеропереходе $3C\text{-SiC}/4H\text{-SiC}$; x — безразмерный коэффициент, bl — количество двухатомных слоев в элементарной кристаллической ячейке политипа (4 и 6 для $4H$ - и $6H\text{-SiC}$ соответственно).

Подставив уже известные величины и решив данную систему уравнений, мы получим $V_{01} = 0.27$, $V_{02} = 0.187$ и $\varepsilon_0 = 0.118$ эВ, $x = 0.942$, что после вычислений окончательных значений дает для $3C\text{-SiC}/4H\text{-SiC}$ $\varepsilon_0 = 0.118$ эВ и $\Delta E_v = 0.059$ эВ, для $3C\text{-SiC}/6H\text{-SiC}$ $\varepsilon_0 = 0.09$ эВ и $\Delta E_v = 0.039$ эВ. В [15] на спектрограмме отчетливо видны отклики фононов, как находящихся в области, где отсутствует квантовая яма, и по уровню энергий характерных для объемного $3C\text{-SiC}$ [16], так и в квантовой яме, сформировавшейся в другой области. Сдвиг энергетических уровней составляет ~ 0.122 эВ. Значения ΔE_v также очень близки как к экспериментальным, так и к расчетным значениям [17,18]. Тип гетероперехода для системы $3C\text{-SiC}/6H\text{-SiC}$ определяем как I, так как при использовании выражений (5), (6), решение отсутствует или некорректно. В [6], как уже указывалось ранее, тип гетероперехода также был определен как первый.

Значение длины волны во втором максимуме на рис. 2 [14] ~ 530.5 нм, что соответствует энергии 2.337 эВ. Теперь мы можем составить новую систему уравнений для определения глубины потенциальной ямы в этой точке. Таким образом, мы приходим к системе уравнений:

$$\begin{cases} V_{01} = E_{gx}(3C) - hv_1 + \varepsilon_0 - \frac{x}{4 \cdot bl(4H)}, \\ V_{02} = E_{gx}(3C) - hv_2 + \varepsilon_0 - \frac{x}{4 \cdot bl(4H)}, \\ V_{01} = V_{02} \left(\frac{L_{QW1}}{L_{QW2}} \right), \\ V_{03} = E_{gx}(3C) - hv_3 + \frac{\varepsilon_0}{1.31} + \frac{x}{4 \cdot bl(6H)}, \\ hv_4 = E_{gx}(3C) - V_{04} + \frac{\varepsilon_0}{1.31} + \frac{x}{4 \cdot bl(6H)}, \end{cases} \quad (13)$$

где $E_{gx}(3C)$ — энергия свободного экситона политипа $3C\text{-SiC}$ при температуре 6 К; hv_1 , hv_2 — энергии квантов в экспериментах [1,2]; hv_3 — энергия кванта в эксперименте [14] для первого максимума; hv_4 — энергия кванта в эксперименте [14] для второго максимума; V_{01} , V_{02} — глубина потенциальной ямы в экспериментах [1,2]; V_{03} — глубина потенциальной ямы в эксперименте [14] для первого максимума; V_{04} — глубина потенциальной ямы в эксперименте [14] для второго максимума; L_{QW1} и L_{QW2} — толщина SF в экспериментах [1,2]; ε_0 — значение первого локального уровня в квантовой яме на гетеропереходе $3C\text{-SiC}/4H\text{-SiC}$; x — безразмерный коэффициент; bl — количество двухатомных слоев в элементарной кристаллической ячейке политипа (4 и 6 для $4H$ - и $6H\text{-SiC}$ соответственно).

После подстановки известных значений и решения системы уравнений получим глубину потенциальной ямы во втором максимуме $V_{04} = 0.18$ эВ, что позволяет нам определить толщину слоя SF для этого максимума в $13bl$. Значение V_0 , полученное после подстановки в выражение (9) толщины SF, в точности равно 0.18 эВ, поэтому следующей корректировки не потребуются.

4. Модель для расчета локальных квантовых уровней в QW

Следует отметить, что при полученных нами значениях спонтанной поляризации и напряженности поля на гетеропереходе в рамках модели прямоугольной квантовой ямы, например, в эксперименте, описанном в [2], при указанных в работе значениях в ней не будет локализованных состояний.

В рамках квазиклассического приближения ВКБ для n -го локального уровня в V -образной квантовой яме при данной напряженности поля энергия находится из выражения

$$\varepsilon_{0vs} = \left[\frac{3\pi}{4} \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{\frac{2}{3}} \left(\frac{e^2 \eta^2 F^2}{2m_{ef}} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (14)$$

где F — эффективное электрическое поле, η — приведенная постоянная Планка, m_{ef} — эффективная масса электрона в 3C-SiC, e — заряд электрона.

В этом случае значение первого локального уровня для гетероперехода 4H-SiC/3C-SiC будет равно ~ 0.105 эВ. Значение в приближении треугольной квантовой ямы, примененное в [2], находится из выражения

$$\varepsilon_{0tr} = \left[\frac{\hbar^2}{2m_{ef} 4\pi^2} \cdot \left[\frac{3\pi e F}{2} \left(n + \frac{3}{4} \right) \right]^2 \right]^{\frac{1}{3}}. \quad (15)$$

Для сравнения приведем это выражение к форме выражения (14)

$$\varepsilon_{0tr} = \left[\frac{3\pi}{2} \left(n + \frac{3}{4} \right) \right]^{\frac{2}{3}} \left(\frac{e^2 \eta^2 F^2}{2m_{ef}} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (16)$$

Расчет дает значение первого локального уровня 0.218 эВ, что значительно превосходит значение 0.118 эВ, предварительно полученное решением системы уравнений. На основании вышеизложенных расчетов предпочтительнее предварительное использование модели V -образной квантовой ямы.

В [2,6,14] энергия первого локального уровня в квантовой яме рассчитывается на основе модели треугольной квантовой ямы. При рассмотрении квантовых ям, полученных в SF, мы, скорее, имеем дело с достаточно глубокой потенциальной ямой прямоугольной формы, но квантовой ямой — треугольной формы (рис. 1). Это утверждение, в зависимости от глубины потенциальной квантовой ямы, справедливо по крайней мере для первых квантовых уровней. Поскольку уровень Ферми обычно расположен между первым и вторым квантовыми уровнями, в этих случаях квантовая яма является треугольной.

Как видно из выражений (14), (16), значение энергии первого локального квантового уровня в модели V -образной квантовой ямы в 2 раза меньше, чем в квантовой яме треугольной формы. Расчет для модели

V -образной квантовой ямы дает гораздо более близкие к экспериментальным данным величины, однако авторы считают необходимым уточнить следующее. Модель V -образной квантовой ямы — в данном случае всего лишь способ получить предварительно более адекватные значения первых локальных уровней в реальной квантовой яме. В зависимости от реального положения первого локального квантового уровня в потенциальной яме, образованной SF, как видно из рис. 1, лучшее приближение могут давать:

— в случае, если локальный квантовый уровень расположен близко от дна потенциальной „субъямы“, образованной изгибом зон в SF, — модель треугольной квантовой ямы;

— в случае, если локальный квантовый уровень расположен ближе к середине потенциальной „субъямы“, образованной изгибом зон в SF, или квантовой ямы на „истинном“ гетеропереходе, полученном ростовой технологией, — модель V -образной квантовой ямы;

— в случае, если локальный квантовый уровень расположен выше потенциальной „субъямы“, образованной изгибом зон в SF, — модель прямоугольной квантовой ямы;

— в случае с гетеропереходами, полученными с помощью ростовых технологий и состоящими только из двух слоев узкозонного и широкозонного материала, могут быть использованы модели треугольной формы или V -образной квантовой ямы.

В рамках широко используемых аналитических моделей как прямоугольной, так и треугольной квантовой ямы подход на основе одной модели квантовой ямы вряд ли можно считать корректным. С учетом условий, описанных выше, в гетеропереходах на политипах SiC, образующихся с помощью SF, и в широко используемых гетероструктурах на основе GaAs, где чаще всего используется тонкая прослойка узкозонного материала между слоями более широкозонного материала (см., например, [19]), может быть справедлива как модель прямоугольной, так и треугольной квантовой ямы.

В рассмотренных нами случаях мы можем с уверенностью утверждать, что треугольная потенциальная яма имеет угол при основании, больший чем 45° . Поэтому приближение V -образной квантовой ямы и дает более близкий к экспериментальным значениям результат. Учитывая, что распределение потенциала U_0 в V -образной квантовой яме определяется по формуле $U_0 = \pm kx$, и, опираясь на результаты экспериментов и расчетов, мы можем допустить, что наша модель V -образной квантовой ямы имеет угол при основании, меньший чем 90° , и соответственно энергии локальных уровней расположены несколько выше.

Результат, полученный при расчете по формуле (14), как было показано выше, дает значение 0.105 эВ. Расчет по результатам экспериментов с использованием численных методов дает значение 0.118 эВ. Так как исходной для нас пока является модель V -образной квантовой ямы, уменьшение угла при ее основании

Таблица 2. Значения величин, полученных экспериментальным и расчетным путем в данной работе

Вид	Тип	bl	m^*	dE_C , эВ	dE_V , эВ	V_0 , эВ	ϵ_0 , эВ	E_{GXQW} , эВ	F , МВ/см	$P_{SP}^* 10^{-2}$, Кл/м ²	ϵ_{3C}	Литература
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
3C-SiC/4H-SiC	II	13	0.313 m_0	0.89	0.06	0.118	0.11	2.177	0.825	0.71	9.72	[1]
3C-SiC/4H-SiC	II	9	0.313 m_0	0.89	0.06	0.118	0.507	2.26	0.825	0.71	9.72	[2]
3C-SiC/4H-SiC	II	7	0.313 m_0	0.89	0.06	0.118	0.11	2.506	0.825	0.71	9.72	[3]
3C-SiC/4H-SiC	II	6	0.313 m_0	0.89	0.06	0.118	—	2.506	0.825	0.71	9.72	[4,5]
3C-SiC/6H-SiC	I	—	0.313 m_0	0.60	0.04	0.044	0.061	2.354	0.19	0.47	9.72	[6]
3C-SiC/6H-SiC	I	7	0.313 m_0	0.60	0.04	0.09	0.22	2.420	0.55	0.47	9.72	[14]
3C-SiC/6H-SiC	I	13	0.313 m_0	0.60	0.04	0.09	0.22	2.337	0.55	0.47	9.72	[14]

Примечание. Колонка: 1 — вид гетероперехода, 2 — тип гетероперехода, 3 — количество двухатомных слоев в SF (bl), 4 — эффективная масса электрона в 3C-SiC (m^*), 5 — величина разрыва зон проводимости (dE_C), 6 — величина разрыва валентных зон (dE_V), 7 — глубина потенциальной ямы (V_0), 8 — значение первого локального уровня в квантовой яме (ϵ_0), 9 — энергия экситона в квантовой яме (E_{GXQW}), 10 — напряженность поля спонтанной поляризации (F), 11 — значение спонтанной поляризации для 3C-SiC/NH-SiC (P_{SP}), 12 — относительная диэлектрическая проницаемость 3C-SiC (ϵ_{3C}), 13 — литература.

включает за собой изменение углового коэффициента в формуле, описывающей распределение потенциала в квантовой яме. Учитывая то, что во всех случаях мы пока рассматриваем только первый локальный квантовый уровень, мы можем внести поправку. Для этого сначала вместо используемого аналитического выражения (14) используем упрощенное выражение, как было сделано в [6,14], вынеся все числовые коэффициенты за скобки и приняв значение n равным нулю, что соответствует первому квантовому уровню:

$$\epsilon_{0vs} = 0.855 \left(\frac{e^2 \eta^2 F^2}{m_{ef}} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (17)$$

Учитывая отличия значений первого квантового уровня, полученного численным методом и в рамках модели V -образной квантовой ямы, введем поправочный коэффициент и получим следующее выражение для первого

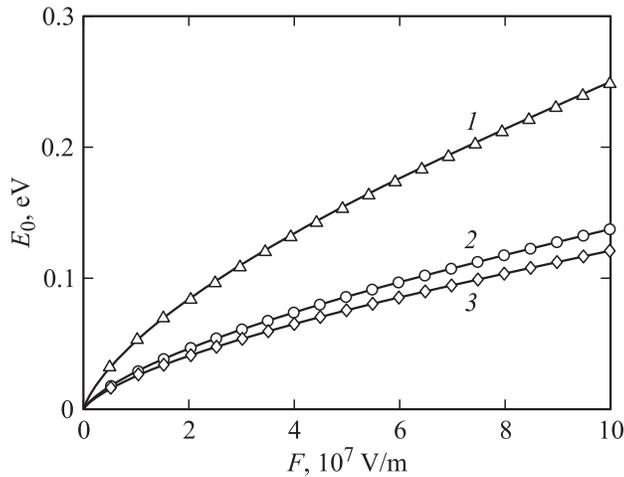


Рис. 3. Значения 1-го локального уровня в квантовой яме на гетеропереходе 3C-SiC/6H-SiC при различной напряженности поля в рамках описанных моделей. 1 — треугольная QW, 2 — расчет по формуле (18), 3 — V -образная QW.

локального уровня в квантовой яме, сформированной на гетеропереходе 3C-SiC/NH-SiC:

$$\epsilon_0 = \left(\frac{e^2 \eta^2 F^2}{m_{ef}} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (18)$$

Еще раз обращаем внимание на то, что формула (18) для расчета локальных энергетических уровней рассматривается только применительно к гетеропереходам 3C-SiC/NH-SiC и не может быть распространена на полупроводники других типов без внесения соответствующих корректив.

Значения, полученные с использованием выражения (18) и ранее полученных значений напряженности поля, представлены в табл. 2. Формула (18) позволяет вычислить энергию первого локального уровня в треугольной квантовой яме, но с углом при основании, равным $\sim 60.7^\circ$. Угол при основании определяется длиной волны де-Бройля и значением энергии первого локального уровня, полученным ранее для V -образной квантовой ямы. На рис. 3 показаны значения первого локального уровня в квантовой яме на гетеропереходе 3C-SiC/6H-SiC при различной напряженности поля в рамках описанных моделей.

5. Гетеропереход, полученный с помощью ростовых технологий

В случае с гетеропереходами, полученными с помощью ростовых технологий, все обстоит несколько сложнее. Учитывая то, что в этом случае взаимодействуют поля гетероперехода, создаваемые как встроенным потенциалом гетероперехода, так и спонтанной поляризацией, довольно трудно вычислить истинное значение напряженности поля на гетеропереходе. Осложняет ситуацию и наличие донорно-акцепторных уровней [20]. Тем не менее попробуем на основании уже известных нам данных рассмотреть и этот случай.

Для расчетов по эксперименту [6] используем значения, указанные в работах [6,13,21]. Концентрация носителей в слабо легированном слое на границе гетероперехода 3C-SiC/6H-SiC составляла $N_A - N_D \approx 4-5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Концентрация в подложке 6H-SiC $N_D - N_A \approx 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Для расчетов примем концентрацию в 3C-SiC $N_A - N_D = 4.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Измеренная контактная разность потенциалов $U_d = 2.43 \text{ В}$. Значение энергии экситона в слое 3C-SiC, измеренное при $T = 300 \text{ К}$ методом IEL, также выбираем как среднее между указанными в источниках [13,21] значениями 2.3 и 2.32 эВ, т.е. $\sim 2.31 \text{ эВ}$. Заметим, что указанные значения получены в основном методом IEL.

Теоретически напряженность поля F на гетеропереходе 3C-SiC/NH-SiC в случае полностью ионизированных мелких доноров и акцепторов, как было показано в [11], равна:

$$F = \sqrt{\frac{2\pi e N_A U_d (N_A \epsilon_{3C} \epsilon_0 + N_D \epsilon_{6H} \epsilon_0)}{(\epsilon_{6H} \epsilon_0)(\epsilon_{3C} \epsilon_0) N_D}}, \quad (19)$$

где ϵ_{3C} — статическая диэлектрическая проницаемость 3C-SiC, ϵ_{6H} — статическая диэлектрическая проницаемость 6H-SiC, n_0 — концентрация электронов в глубине 6H-SiC, p_0 — концентрация дырок в глубине 3C-SiC, U_d — контактная разность потенциалов, N_A — концентрация основных носителей в 3C-SiC, N_D — концентрация основных носителей в 6H-SiC.

По данным [1] $\epsilon_{3C} = 9.72$ и [12] $\epsilon_{6H} = 10.03$ в направлении, параллельном кристаллографической оси c .

В результате получим значение напряженности поля $\sim 3.6 \cdot 10^7 \text{ В/м}$. Как было показано в [22], поля, образуемые спонтанной поляризацией и встроенным потенциалом, могут быть направлены встречно, в этом случае результирующее поле будет равно их разности, в нашем случае $5.5 \cdot 10^7 - 3.6 \cdot 10^7 = 1.9 \cdot 10^7 \text{ В/м}$, что близко к указанному в [6], полученному в результате измерений значению $\sim 2 \cdot 10^7 \text{ В/м}$. Значение первого локального уровня в квантовой яме на гетеропереходе, вычисленное в соответствии с выражением (18), в этом случае будет равно 0.044 эВ, а энергия кванта, полученная по формуле (2), будет равна 2.354 эВ, что также незначительно отличается от указанного в [6] и полученного экспериментально значения 2.357 эВ.

Все полученные экспериментальным и расчетным путем значения представлены в табл. 2.

6. Заключение

Авторами получены значения спонтанной поляризации, напряженности поля, энергий локальных уровней в квантовых ямах и значений разрывов валентных зон на гетеропереходах 3C-SiC/NH-SiC в рамках единой модели. Вычисленное в данной работе значение спонтанной поляризации для 4H-SiC и 6H-SiC равно $0.71 \cdot 10^{-2}$ и $0.47 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2$ соответственно. Напряженность поля, создаваемого спонтанной поляризаци-

ей на гетеропереходах 3C-SiC/4H-SiC и 3C-SiC/6H-SiC, равна $8.25 \cdot 10^7$ и $5.5 \cdot 10^7 \text{ В/м}$ соответственно. Тип гетероперехода для 3C-SiC/6H-SiC определен как гетеропереход I типа. Полученные значения удовлетворяют всем рассмотренным экспериментальным данным. Авторы выражают признательность А.А. Лебедеву (ФТИ им. Иоффе) за помощь в работе и предоставленные материалы.

Список литературы

- [1] S. Bai, R.P. Devaty, W.J. Choyke, U. Kaiser, G. Wagner, M.F. MacMillan. APL, **83** (15), 3171 ().
- [2] A. Fissel. Phys. Reports, **379**, 149 (2003).
- [3] R.S. Okojie, M. Xhang, P. Pirouz, S. Tumakha, G. Jessen, L.J. Brillson. Mater. Sci. Forum, **389–393**, 451 (2002).
- [4] G. Samson, L. Chen, B.J. Skromme, R. Wang, C. Li, I. Bhat. 27th Intern. Conf. Physics of Semiconductors — ICPS-27. AIP Conf. Proc., **772**, 989 (2005).
- [5] B.J. Skromme, K. Palle, C.D. Poweleit, L.R. Bryant, W.M. Vetter, M. Dudley, K. Moore, T. Gehoski. Mater. Sci. Forum, **389–393**, 455 (2002).
- [6] 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).
- [7] S. Juillaguet, J. Camasesel. Mater. Sci. Forum, **483–485**, 335 (2005).
- [8] А.А. Лебедев. Semicond. Sci. Technol., **21**, R17 (2006).
- [9] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. ФТП, **39** (12), 1440 (2005).
- [10] С.Ю. Давыдов, А.В. Трошин. ФТТ, **49** (4), 723 (2007).
- [11] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. Физика полупроводников. (М., Наука, 1977).
- [12] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. Оптические свойства полупроводников. Справочник (Киев, Наук. думка, 1987).
- [13] А.А. Лебедев, А.М. Стрельчук, Д.В. Давыдов, Н.С. Савкина, А.С. Трегубова, А.Н. Кузнецов, В.А. Соловьев, Н.К. Полетаев. ФТП, **37** (4), 499 (2003).
- [14] Liu Jin-Feng, Liu Zhong-Liang, Ren Peng, Xu Peng-Shou, Chen Xiu-Fang, Xu Xian-Gang. Acta Phys.-Chim., **24** (4), 571 (2008).
- [15] А.А. Лебедев, В.В. Зеленин, П.Л. Абрамов, С.П. Лебедев, А.Н. Смирнов, Л.М. Сорокин, М.П. Щеглов, R. Yakimova. Письма ЖТФ, **33** (12), 61 (2007).
- [16] J.A. Freitas, jr., W.J. Moore. Brazilian J. Phys., **28** (1), 12 (1998).
- [17] K.-B. Park, Y. Ding, J.P. Pelz, P.G. Neudeck, A.J. Trunek. Appl. Phys. Lett., **89**, 042 103 (7/2006).
- [18] U. Lindefelt, H. Iwata. In: Silicon Carbide: Recent Major Advances, eds W.J. Choyke, H. Matsunami, G. Pensl () p. 89.
- [19] Ж.И. Алфёров. ФТП, **32** (1), 3 (1992).
- [20] А.А. Лебедев, П.Л. Абрамов, Е.В. Богданова, С.П. Лебедев, Д.К. Нельсон, Б.С. Разбирин, А.С. Трегубов. Письма ЖТФ, **36** (11), 32 (2010).
- [21] А.М. Стрельчук, А.А. Лебедев, Н.С. Савкина, А.Н. Кузнецов. Mater. Sci. Forum, **556–557**, 427 (2007).
- [22] С.Ю. Давыдов, А.В. Трошин. ФТП, **42** (10), 1206 (2008).

Редактор Л.В. Беляков

Quantum wells on 3C-SiC/NH-SiC heterojunctions. Calculated values of spontaneous polarization and internal electric field in experiments

I.S. Sbruev, S.B. Sbruev

Moscow Aviation Institute
(State University of Aerospace Technologies),
125993 Moscow, Russia

Abstract In this work we've surveyed results of experiments with quantum wells on 3C-SiC/4H-SiC and 3C-SiC/6H-SiC heterojunctions produced by different methods. In the context of common model we calculate values of the spontaneous polarization, internal electric field and localized electronic states in quantum wells for 3C-SiC/4H-SiC and 3C-SiC/6H-SiC heterojunctions which conform to all results of experiments. There were determined types of heterojunctions and presented approximation for valence band offset to heterojunctions between silicon carbide polytypes. There were proposed expression for computation localized electronic states in quantum wells for 3C-SiC/NH-SiC. There were computed values of spontaneous polarization for 3C-SiC/4H-SiC — 0.71 Q/m^2 , 3C-SiC/6H-SiC — 0.47 Q/m^2 , internal electric fields for originating spontaneous polarization in 3C-SiC/4H-SiC and 3C-SiC/6H-SiC — 0.825 and 0.55 MV/m accordingly.