

## О возможностях экспериментального определения величины спонтанной поляризации политипов карбида кремния

© С.Ю. Давыдов<sup>¶</sup>, А.А. Лебедев, О.В. Посредник\*

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 19 октября 2011 г. Принята к печати 26 декабря 2011 г.)

Рассматриваются гетеропереход вида  $NH-SiC/3C-SiC$  и гетероструктура типа  $NH-SiC/3C-SiC/NH-SiC$  ( $N = 2, 4, 6, 8$ ), сфабрикованные на основе политипов карбида кремния. Для гетеропереходов рассматриваются две возможности: контактной плоскостью политипа  $NH$  является Si-, либо C-плоскость. При этом энергии квазилокальных уровней, возникающих в квантовых ямах на интерфейсе, будут отличаться. Измерив различие этих энергий, можно определить величину спонтанной поляризации  $P_{sp}$ , присущей политипу  $NH$ . При наличии поля спонтанной поляризации квазилокальные уровни в левой и правой квантовых ямах гетероструктуры имеют различные энергии. Показано, что если поместить гетероструктуру во внешнее электрическое поле, то можно, вычислив разность энергий этих уровней, определить величину спонтанной поляризации. Обсуждаются экспериментальные возможности определения  $P_{sp}$  по предложенному теоретическому сценарию.

**1.** В то время как в тетраэдрических кристаллах с кубической симметрией все четыре  $\sigma$ -связи, построенные на  $sp^3$ -орбиталях, эквивалентны, в случае некубических структур это правило не выполняется. В гексагональных и ромбоэдрических кристаллах появляется выделенное направление (ось  $c$ ), вдоль которого  $\sigma$ -связи удлиняются (продольные  $L$ -связи), тогда как другие  $\sigma$ -связи (поперечные  $T$ -связи) почти не меняются [1,2]. Такое искажение тетраэдра приводит к появлению электрического дипольного момента элементарной ячейки, или спонтанной поляризации  $P_{sp}$ . Таким образом, все политипы карбида кремния, за исключением  $3C$ , должны обладать спонтанной поляризацией (СП). К сожалению, различные методики расчета значений  $P_{sp}$  для политипов  $NH-SiC$  ( $N = 2, 4, 6, 8$ ) приводят к большому разбросу результатов (см. [3,4] и ссылки, приведенные там). Что же касается экспериментального определения величин  $P_{sp}$ , то авторам такие работы неизвестны. Между тем сведения о СП различных политипов SiC важны не только сами по себе, как важная физическая характеристика соединения, но и при создании гетеропереходов (ГП) [5,6]: величина и знак  $P_{sp}$  влияют на изгиб зон в приконтактной области и положение квазилокальных уровней, образующихся на интерфейсе. Теория таких эффектов была развита в работах [7–11]. В данной работе, основываясь на этой теории, мы покажем, каким образом можно получить экспериментальную оценку значений  $P_{sp}$  для различных политипов карбида кремния.

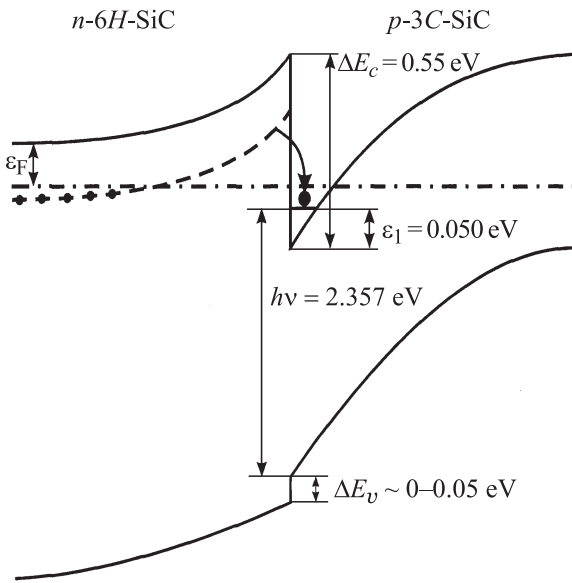
**2.** Рассмотрим две структуры типа  $NH/3C-SiC$  (см., например, рис. 1) с одним и тем же уровнем легирования, в первой из которых политип  $NH$  имеет на контакте C-плоскость, а  $3C$ -политип соответственно Si-плоскость (ГП-1). Во второй, наоборот,  $NH$ -политип содержит Si-плоскость,  $3C$ -политип — C-плоскость (ГП-2). В чем заключается различие этих двух структур?

Как известно, величина вектора спонтанной поляризации, перпендикулярного грани образца, равна плотности поверхностного заряда на этой грани, т.е.  $P_{sp} = \sigma$ . Рассмотрим энергии  $sp^3$ -орбиталей ( $\epsilon_h$ ) атомов углерода и кремния. Так как  $\epsilon_h = (\epsilon_s + 3\epsilon_p)/4$ , где  $\epsilon_s$  и  $\epsilon_p$  — энергии  $s$ - и  $p$ -состояний, то, воспользовавшись таблицами атомных термов Фишер (см. [12]), получим  $\epsilon_h(C) = -13.15$  эВ и  $\epsilon_h(Si) = -9.38$  эВ (отсчет энергий ведется от вакуума). Отсюда следует, что электроны переходят с атомов кремния на атомы углерода, так что для плотностей поверхностных зарядов на C- и Si-гранях можно записать соответственно:  $\sigma(C) < 0$ ,  $\sigma(Si) > 0$ . Напряженность наведенного спонтанной поляризацией поля в области  $3C$ -политипа есть  $F_{cp} = \sigma/\epsilon\epsilon_0$ , где  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость  $3C-SiC$ ,  $\epsilon_0$  — диэлектрическая постоянная.

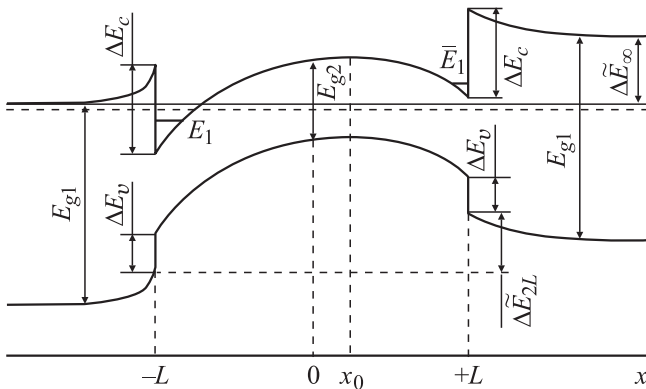
Как показано в работе [9], полную (суммарную) напряженность поля на контакте  $F$  можно представить в виде векторной суммы контактного поля  $F_c$  и поляризационного поля  $F_{sp}$  (общие выражения для поля  $F_c$  приведены в [9,11]). Так как изгиб зон описывается выражением  $E_{c,v}(x) = E_{c,v} - e\varphi(x)$ , где  $E_{c,v}$  — положения краев зон проводимости и валентной в объеме;  $\varphi$  — электрический потенциал;  $e$  — величина заряда электрона;  $x$  — координата, перпендикулярная плоскости интерфейса; знак (направление) поля  $F = -d\varphi(x)/dx$  совпадает со знаком производной  $dE_{c,v}(x)/dx$ . Так, например, для ситуации, изображенной на рис. 1,  $dE_{c,v}(x)/dx > 0$ .

Пусть  $F_c > 0$  и  $F_c > F_{sp}$  (величину  $F_{sp}$  будем всегда считать положительной). Тогда для случая ГП-1 суммарное поле  $F_1 = F_c - F_{sp} > 0$ , для ГП-2 —  $F_2 = F_c + F_{sp} > 0$ . Если же  $F_c < F_{sp}$ , то для ГП-1 получим  $F_1 < 0$ . В обоих случаях, однако,  $F_2 > F_1$ . Пусть теперь  $F_c < 0$  и  $|F_c| > F_{sp}$ . Тогда для ГП-1 получаем  $F_1' = -F_c - F_{sp} < 0$ , для ГП-2 —  $F_2' = -F_c + F_{sp} < 0$ . При  $|F_c| < F_{sp}$  для ГП-2 имеем  $F_2' > 0$ . Для обоих случаев получаем  $|F_1'| > |F_2'|$ . Суммируя, получаем, естествен-

<sup>¶</sup> E-mail: Sergei\_Davydov@mail.ru



**Рис. 1.** Пример энергетической диаграммы гетероперехода типа *NH/3C-SiC*.  $\Delta E_{c(v)}$  — разрыв зон проводимости (валентных зон) на интерфейсе,  $\varepsilon_1$  — положение квазилокального уровня в квантовой яме (основное состояние) относительно дна ямы,  $\varepsilon_F$  — уровень Ферми системы (химический потенциал),  $h\nu$  — квант возбуждения электрона из валентной зоны 3C-SiC на квазилокальный уровень  $\varepsilon_1$ .



**Рис. 2.** Пример энергетической диаграммы гетероперехода типа *NH/3C/NH-SiC*.  $\Delta E_{c(v)}$  — разрыв зон проводимости (валентных зон) на интерфейсе;  $E_1$  и  $\bar{E}_1$  — положение квазилокальных уровней в квантовых ямах (основные состояния) относительно дна ямы для левой и правой ям соответственно;  $E_{g1}$  и  $E_{g2}$  — ширины запрещенных зон политипов 3C и NH соответственно;  $\Delta \tilde{E}_{2L}$  — сдвиг энергетической структуры системы на длине 3C-области  $2L$ , вызванный полем спонтанной поляризации;  $\Delta \tilde{E}_{\infty}$  — тот же сдвиг, но на длине всей структуры; уровень Ферми (химический потенциал) обозначен штрихпунктирной линией.

но, что если на одном из ГП поле равно  $F_+ = |F_c| + F_{sp}$ , то на другом имеем  $F_- = ||F_c| - F_{sp}|$ .

Рассмотрим теперь, как наличие СП в некубической составляющей ГП влияет на положение квазилокального уровня  $\varepsilon_1$  (рис. 1). Аппроксимируя квантовую яму (КЯ), образующуюся на контакте, треугольной потенциальной

ямой с бесконечными стенками [13,14], получим

$$\varepsilon_1 \approx 1.86 \left( \frac{e^2 F^2 \hbar^2}{m^*} \right)^{1/3}, \quad (1)$$

где  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка,  $m^*$  — эффективная масса электрона в 3C-SiC (энергия уровня отсчитывается от дна КЯ). Тогда при  $F = F_+$  имеем энергию  $\varepsilon_{1+}$ , при  $F = F_-$  — энергию  $\varepsilon_{1-}$ . Энергетическую разность  $\Delta \varepsilon_1 = \varepsilon_{1+} - \varepsilon_{1-}$  можно определить по разности частот (см. рис. 1):

$$\Delta \nu = \nu_+ - \nu_-, \quad (2)$$

где

$$\nu_{\pm} = \frac{\varepsilon_{1\pm} - E_v(C)}{h}. \quad (3)$$

Определим значения  $F_+$  и  $F_-$  из выражения (1). Получим

$$F_{\pm} \approx \left( \frac{\varepsilon_{1\pm}}{1.86} \right)^{3/2} \frac{m^*}{e\hbar}. \quad (4)$$

Тогда

$$|P_{sp}| \approx 0.20 \frac{\varepsilon_0 m_0^{1/2}}{e\hbar} \varepsilon \left( \frac{m^*}{m_0} \right)^{1/2} |\varepsilon_{1+}^{3/2} - \varepsilon_{1-}^{3/2}|, \quad (5)$$

где  $m_0$  — масса свободного электрона. Перепишем (5) в виде

$$|P_{sp}| \approx 6.36 \cdot 10^{-3} \varepsilon \left( \frac{m^*}{m_0} \right)^{1/2} |\varepsilon_{1+}^{3/2} - \varepsilon_{1-}^{3/2}|, \quad (6)$$

где энергия  $\varepsilon_{1\pm}$  задается в эВ, а значения СП получаются в Кл/м<sup>2</sup>. Так как в 3C-политипе статическая диэлектрическая проницаемость есть  $\varepsilon = 9.72$  [15], а  $m^*/m_0 = 0.32$  [16], получим  $|P_{sp}| \approx 3.5 \cdot 10^{-2} |\varepsilon_{1+}^{3/2} - \varepsilon_{1-}^{3/2}|$ . Для случая, изображенного на рис. 1, в предположении, что  $|\varepsilon_{1+}^{3/2} - \varepsilon_{1-}^{3/2}| \approx \varepsilon_1^{3/2}$ , получим  $|P_{sp}| \approx 0.4 \cdot 10^{-3}$  Кл/м<sup>2</sup>. Эта величина весьма близка к значению  $0.36 \cdot 10^{-3}$  Кл/м<sup>2</sup>, приведенному в [4], но в 2–3 раза меньше вычисленных другими способами значений, приведенных там же (речь вновь идет о разбросе результатов различных расчетов СП).

Таким образом, измеряя в эксперименте два значения частот  $\varepsilon_{1+}$  и  $\varepsilon_{1-}$ , найдем значение  $|P_{sp}|$ .

**3.** Перейдем теперь к рассмотрению гетероструктур (ГС) вида *NH/3C/NH* (рис. 2). Эта ГС асимметрична благодаря действию поля СП, создаваемого в 3C-области *NH*-обкладками. Это поле направлено в положительном направлении оси  $x$ , что реализуется в том случае, когда левая *NH*-обкладка оканчивается Si-гранью, а правая *NH*-обкладка контактирует с 3C-областью своей С-гранью. Тогда в соответствии с рис. 2 результирующее поле на левом ГП (ГП- $l$ ) есть  $F_l = F_c + F_{sp}$ , тогда как на правом (ГП- $r$ ) имеем  $F_r = -F_c + F_{sp}$ . Отсюда  $F_l > |F_r|$ , и в соответствии с формулой (1) энергии основных состояний в КЯ подчиняются неравенству  $E_1 > \bar{E}_1$ .

В соответствии с рис. 2 состояние  $E_1$  является занятым, а  $\bar{E}_1$  свободным. Если 3С-область достаточно тонкая (см. соответствующие оценки в работе [17]), можно перевести электрон из левой КЯ в правую, для чего требуется энергия

$$\delta E = \Delta \tilde{E}_{2L} - (E_1 - \bar{E}_1), \quad (7)$$

где  $\Delta \tilde{E}_{2L}$  — поляризационный сдвиг энергетической диаграммы ГС на длине 3С-области  $2L$  (см. рис. 2). Величину  $\Delta \tilde{E}_{2L}$  легко оценить:  $\Delta \tilde{E}_{2L} = 2eF_{sp}L$  (см. подробнее в [10]). Разность  $E_1 - \bar{E}_1$  легко определить по формуле (1), подставляя в нее последовательно значения  $F_l$  и  $F_r$ .

Если поместить ГС, изображенную на рис. 2, во внешнее электрическое поле  $F_{ext}$ , то энергия перехода (7) принимает вид  $\delta E' = \delta E + 2eF_{ext}L$ . Измеряя в эксперименте два значения энергий переходов  $\delta E'$  для двух значений  $F_{ext}$ , из уравнения (7) найдем две неизвестные величины —  $F_c$  и  $F_{sp}$ .

4. Другим возможным способом оценки величины поля СП может служить сравнение контактной разности потенциалов  $U_d$  в  $p$ - $n$ -переходах, сформированных на ГП типа  $NH/3C$ -SiC, где в качестве контактирующих с 3С-политипом граней берутся C- и Si-плоскостей. Ранее было показано, что резкий  $p$ - $n$ -ГП можно получить выращиванием методом сублимации  $p$ -3С-SiC слоя на основе подложки 6Н-SiC [18]. Известно, что для резкого  $p$ - $n$ -перехода зависимость барьерной емкости  $C$  от приложенного напряжения  $U$  будет линейна в координатах  $(1/C^2, U)$  [19]. Величину  $U_d$  можно найти экстраполяцией зависимости  $1/C^2$  к нулю. Напряженность среднего электрического поля  $\bar{F}$  в слое объемного заряда на ГП можно определить как

$$F = \frac{U_d}{L_0}, \quad (8)$$

где  $L_0$  — толщина слоя объемного заряда при нулевом внешнем напряжении. Величину  $L_0$  можно определить, воспользовавшись формулой для плоского конденсатора:  $L_0 = \epsilon \epsilon_0 S / C$ , где  $S$  — площадь  $p$ - $n$ -перехода. Тогда для ГП, изображенного на рис. 1, в случае контакта C-границ  $NH$ -политипа с Si-гранью 3С-политипа имеем  $F_- = F_c - F_{sp}$ , а в случае контакта Si-границ  $NH$ -политипа с C-гранью 3С-политипа получим  $F_+ = F_c + F_{sp}$ . Тогда

$$F_{sp} = \frac{U_{d+} - U_{d-}}{2L_0}, \quad (9)$$

откуда

$$P_{sp} = \frac{C(U_{d+} - U_{d-})}{2S}. \quad (10)$$

Это, по-видимому, простейший способ оценки величины спонтанной поляризации.

Работа выполнена в рамках программы президиума РАН „Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов“, целевой программы „Развитие научного потенциала высшей школы 2009–2011 гг.“, Министерства образования и науки РФ № 2.1.1/10269 и поддержана грантом РФФИ (проект № 11-02-0662-а).

## Список литературы

- [1] A. Qteich, V. Heine, R.J. Needs. Phys. Rev. B, **45**, 6376 (1992).
- [2] A. Qteich, V. Heine, R.J. Needs. Phys. Rev. B, **45**, 6534 (1992).
- [3] С.Ю. Давыдов. ФТТ, **48**, 1407 (2006).
- [4] С.Ю. Давыдов, А.В. Трошин. ФТТ, **49**, 723 (2007).
- [5] A. Fissel. Phys. Rep., **379**, 149 (2003).
- [6] A.A. Lebedev. Semicond. Sci. Technol., **21**, R17 (2006).
- [7] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. ФТТ, **39**, 1440 (2005).
- [8] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. ФТТ, **40**, 563 (2006).
- [9] С.Ю. Давыдов, А.В. Трошин. ФТП, **41**, 307 (2007).
- [10] С.Ю. Давыдов, А.В. Трошин. ФТП, **42**, 1318 (2008).
- [11] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. ФТТ, **53**, 814 (2011).
- [12] W.A. Harrison. Phys. Rev. B, **24**, 5835 (1981).
- [13] В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. *Задачи по квантовой механике* (М., Наука, 1992).
- [14] В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. *Физика квантовых низкоразмерных структур* (М., Логос, 2000).
- [15] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. *Оптические свойства полупроводников. Справочник* (Киев, Наук. думка, 1987).
- [16] A. Fissel, U. Kaizer, B. Schröter, W. Richter, F. Bechstedt. Appl. Surf. Sci., **184**, 37 (2001).
- [17] J. Cammasel, S. Juillaguet. Mater. Sci. Forum, **483–485**, 331 (2005).
- [18] А.А. Лебедев, Г.Н. Мосина, И.П. Никитина, Н.С. Савкина, Л.М. Сорокин, А.С. Трегубова. Письма ЖТФ, **27**, 57 (2001).
- [19] С.М. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Энергия, 1973).

Редактор Т.А. Полянская

## On the experimental possibility of the spontaneous polarization determination for the silicon carbide polytypes

S.Yu. Davydov, A.A. Lebedev, O.V. Posrednik\*

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

\* St. Petersburg State Electrotechnical University „LETI“,  
197376 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Heterojunction (HJ) of the  $NH/3C$  type and the heterostructure (HS) of the  $NH/3C/NH$  ( $N = 2, 4, 6, 8$ ) type, fabricated on the silicon carbide polytypes is considered. For the HJ one has two possible compositions: the contact surface of the  $NH$  polytype are Si- or C-face. This leads to the two different energies of the quasi-local states, arising in the quantum wells on the interface. Measuring experimentally this energy difference, one can estimate the value of spontaneous polarization  $P_{sp}$  of the  $NH$  polytype. The spontaneous polarization field in HS manifests itself by the energy difference of the quasi-local states for the left and right interface quantum wells. It is shown that putting HS in the external electric field it is possible to estimate  $P_{sp}$  by the calculation of the quasilevels energy difference. The experimental possibilities to fulfil this theoretical scenario are discussed.