

Политипизм карбида кремния и барьеры Шоттки

© С.Ю. Давыдов, 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

E-mail: Sergei.Davydov@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 10 июня 2005 г.)

Результаты предыдущей работы (ФТТ 46, 2135 (2004)) пересмотрены с учетом зависимости электронного сродства от политипа SiC. Полученная из данных по барьерам Шоттки зависимость уровня вакансии в политипе от ширины его запрещенной зоны объяснена в рамках простой двухзонной модели.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований (№ 03-02-16 и 04-02016632а).

PACS: 71.55.Ht, 73.30.+y

1. Первая попытка связать величину Φ_b с какой-либо конкретной характеристикой политипа была предпринята только в работе [1], где на примере контакта политипов $4H$, $8H$, $6H$, $10H$, $15R$, $21R$ и $27R$ электронного карбида кремния с Si было показано, что $\Phi_b \propto D$, где степень гексагональности определяется выражением $D = N_h / (N_h + N_k)$ (N_h и N_k — число занятых атомами гексагональных и кубических узлов соответственно). Поскольку гексагональность SiC пропорциональна концентрации вакансий N_{Si} в подрешетке кремния [2,3], можно показать, что $\Phi_b \propto N_{Si}^s \propto D$, где N_{Si}^s — пересчитанная к двумерному случаю концентрация кремниевых вакансий N_{Si} ($N_{Si}^s = (N_{Si})^{2/3}$). Модель, описывающая такую зависимость, предложена в работе [4], где предполагалось, что электронное сродство χ и энергия уровня вакансии E_d для всех политипов одинаковы и равны соответственно 4.4 и 2.1 eV. При этом удалось добиться вполне удовлетворительного согласия с экспериментальными данными для контактов с d -металлами. Однако, по данным [5], для $6H$ и $3C$ политипов имеем соответственно $\chi = 3.3-3.7$ и 4.0 eV, тогда как справочник [6] приводит значения $\chi = 4.8$ eV для $3C$ и $\chi = 4.1$ eV для $2H$. Подобная неопределенность несколько омрачает успех модели [4].

При исследовании гетеропереходов, образованных различными политипами SiC, удалось показать [7], что представление электронного сродства χ политипа NH ($N = 2, 4, 6, 8$) в виде

$$\chi(NH) = \chi(3C) - aD \quad (1)$$

(a — коэффициент) позволяет в рамках модели Шокли–Андерсона [8], хорошо описать величину разрывов зоны проводимости

$$\Delta E_c = aD \quad (2)$$

и валентной зоны

$$\Delta E_v = \Delta E_g - \Delta E_c, \quad (3)$$

где $\Delta E_g = E_g(NH) - E_g(3C)$. Здесь E_g — ширина запрещенной зоны определенного политипа.

Хотя значения ΔE_c и ΔE_v при $a = 1.67$ eV достаточно хорошо совпадают с экспериментальными [7], неопределенность в выборе $\chi(3C)$ остается. В принципе можно рассматривать два варианта значений χ : 4.4 eV (вариант I) и 4.0 eV (вариант II). Оценки значений Φ_b , которые здесь не приводятся, показывают, что вариант I предпочтителен. В дальнейшем ограничимся именно этим вариантом.

Для того чтобы максимально использовать результаты работы [4], достаточно хорошо согласующиеся с данными эксперимента, воспользуемся вычисленным там значением $(E_d - \chi) = -2.3$ eV и положим

$$E_d = \chi(3C) - \Delta E_c - 2.3, \quad (4)$$

где все величины, входящие в (4), измеряются в eV. Результаты расчета энергии вакансий E_d представлены в таблице. Из сопоставления значений E_d и E_g следует, что с ростом E_g уровень E_d смещается к потолку валентной зоны. Такое поведение уровня вакансии требует дополнительного обоснования.

2. Рассмотрим простую одномерную модель. Пусть в направлении z , перпендикулярном плоскости контакта металл–политип SiC, функции Грина бездефектного карбида кремния $G_{11}(\omega, k)$ и $G_{22}(\omega, k)$, отвечающие зоне проводимости и валентной зоне соответственно, имеют вид

$$G_{ii}(\omega, k) = [\omega - \varepsilon_i(k)]^{-1}, \quad i = 1, 2. \quad (5)$$

Здесь ω — энергетическая переменная, k — волновой вектор в z -направлении, $\varepsilon_1(k)$ и $\varepsilon_2(k)$ — законы дисперсии соответственно в зоне проводимости и валентной зоне. Функции Грина $G_{11}(\omega)$ и $G_{22}(\omega)$, зависящие только от энергии, могут быть получены из $G_{11}(\omega, k)$ и $G_{22}(\omega, k)$ интегрированием по k . Будем отсчитывать энергию от потолка валентной зоны и зададим законы дисперсии в виде

$$\varepsilon_1(k) = E_g + \frac{\hbar^2(k - k_0)^2}{2m_c}, \quad \varepsilon_2(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}, \quad (6)$$

где k_0 — волновой вектор, отвечающий минимуму зоны проводимости, m_c и m_v — эффективные массы

Положение уровня вакансии E_d относительно потолка валентной зоны (в eV) для $\chi(3C) = 4.4$ eV

Политип	3C	8H	6H	4H	2H
D	0	0.25	0.33	0.50	1
ΔE_c	0	0.42	0.55	0.83	1.67
E_g	2.40	2.86	3.00	3.23	3.33
E_d	2.10	1.68	1.55	1.27	0.43

Примечание. Значения D брались из [3], ΔE_c — из [7], E_g — из [1,9].

электрона и дырки в направлении z . Тогда

$$G_{11}(\omega) = -\alpha_c / \sqrt{E_g - \omega}, \quad G_{22}(\omega) = \alpha_v / \sqrt{\omega},$$

$$\alpha_{c,v} = c \sqrt{2m_{c,v} / \hbar^2}. \quad (7)$$

Здесь c — постоянная решетки в направлении z .

Предполагается, что $0 \leq \omega \leq E_g$. Отметим, что при получении выражений (7) мы положили для простоты верхний предел интегрирования по k равным бесконечности.

Пусть теперь возмущение V , вносимое вакансией, характеризуется матричными элементами V_{11} , V_{22} , $V_{12} = V_{21}^*$. Тогда функции Грина возмущенного кристалла $D_{ii}(\omega)$, которые могут быть найдены из уравнения Дайсона

$$D = G + GVD, \quad (8)$$

имеют вид

$$D_{11}(\omega) = G_{11}(\omega) \times \left(1 - G_{11}(\omega)V_{11} - \frac{G_{11}(\omega)G_{22}(\omega)|V_{12}|^2}{1 - G_{22}(\omega)V_{22}} \right)^{-1}. \quad (9)$$

Функция $D_{22}(\omega)$ может быть получена из выражения (9) соответствующей заменой индексов.

Положение локального уровня ω^* определяется полюсом функции Грина (9), т. е. уравнением

$$\left(\frac{\sqrt{E_g - \omega}}{\alpha_c} + V_{11} \right) \left(\frac{\sqrt{\omega}}{\alpha_v} - V_{22} \right) + |V_{12}|^2 = 0. \quad (10)$$

Положив для простоты $V_{11} = V_{22} = 0$, получим, в частности,

$$\omega^* = (E_g/2) \left[1 - \sqrt{1 - 4\beta^2/E_g^2} \right],$$

$$\beta = \alpha_c \alpha_v |V_{12}|^2, \quad (11)$$

где мы предположим, что $(2\beta/E_g) < 1$. Если $(2\beta/E_g)^2 \ll 1$,

$$\omega^* \approx \beta^2/E_g. \quad (12)$$

Итак, с ростом ширины запрещенной зоны E_g локальный уровень ω^* смещается к потолку валентной зоны, что и демонстрирует таблица.

Таким образом, именно наведенное вакансией значительное межзонное взаимодействие является причиной зависимости положения уровня E_d в запрещенной зоне от политипа SiC, отмеченной в таблице.

Список литературы

- [1] Р.Г. Веренчикова, В.И. Санкин, Е.И. Радованова. ФТП **17**, 10, 1757 (1983).
- [2] Н.Д. Сорокин, Ю.М. Таиров, В.Ф. Цветков, М.А. Чернов. Кристаллография **28**, 5, 910 (1983).
- [3] А.А. Лебедев. ФТП **33**, 7, 769 (1999).
- [4] С.Ю. Давыдов. ФТТ **46**, 12, 2135 (2004).
- [5] M.J. Vazack. Phys. Stat. Sol. (b) **202**, 3, 549 (1997).
- [6] Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева и Е.З. Мейлихова. Энергоатомиздат, М. (1994).
- [7] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. ФТП **40**, в печати (2006).
- [8] Ф. Бехшгедт, Р. Эндерлейн. Поверхности и границы раздела полупроводников. Мир, М. (1990).
- [9] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. Оптические свойства полупроводников. Справочник. Наук. думка, Киев (1987).