

Контакт металл–карбид кремния: зависимость высоты барьера Шоттки от политипа SiC

© С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник*, Ю.М. Таиров*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет,
197376 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 12 апреля 2001 г. Принята к печати 20 апреля 2001 г.)

В рамках простой модели проанализированы результаты измерений высоты барьера Шоттки Φ_b^n на контакте хрома с политипами карбида кремния 8H-, 6H-, 15R-, 27R- и 4H-SiC-*n*-типа проводимости. Показано, что величина Φ_b^n пропорциональна концентрации кремниевых вакансий в политипах. Обсуждаются результаты измерений Φ_b^n на контактах палладия и платины с политипами карбида кремния.

1. Вопрос о том, как вычислить высоту барьера Шоттки Φ_b на контакте металл–полупроводник, является, несмотря на многолетние исследования, актуальной задачей теории полупроводников [1]. В данном контексте несомненный интерес представляют поверхностно-барьерные структуры на основе карбида кремния (см., например, [2]). Кристаллы SiC интересны прежде всего тем, что образуют большое количество политипов, отличающихся друг от друга лишь соотношением гексагональных и кубических узлов, которое может быть охарактеризовано степенью гексагональности D [3]. При этом величина Φ_b при контакте различных политипов SiC с одним и тем же металлом различна, что было убедительно показано в работе [4], где исследовалась система Cr–SiC.

В принципе чисто кубическая модификация SiC (3C) отличается от чисто гексагональной (2H) лишь расположением третьих соседей. Так как большинство свойств твердого тела определяется взаимодействием с ближайшими (максимум, вторыми) соседями, то, казалось бы, политипизм карбида кремния должен сказаться на его свойствах лишь с точки зрения кристаллографии, т.е. определять количество неприводимых элементов тензора, характеризующих данную физическую величину. В работе [4] было показано, однако, что высота барьера Шоттки Φ_b на границе Cr–SiC прямо пропорциональна степени гексагональности D . Поскольку кристаллография к этому вопросу отношения не имеет, для объяснения зависимости Φ_b от D приходится прибегать к тому давно замеченному факту, что концентрация углеродных (V_C) и кремниевых (V_{Si}) вакансий в карбиде кремния существенно, если не определяющим образом, влияет на его политипизм [3–6].

В настоящей работе для объяснения обнаруженных в [4] закономерностей используется модель, первоначально предложенная в работах [7,8] и модифицированная в [9].

2. В рамках модели [7–9] полупроводник, находящийся в контакте с металлом, характеризуется поверхностным дефектным состоянием $|d\rangle$, энергия которого E_d лежит в запрещенной зоне. Взаимодействие уровня $|d\rangle$ с метал-

лом может быть описано гамильтонианом

$$H = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + E_d d_i^\dagger d_i + V \sum_k (c_k^\dagger d + \text{h. c.}). \quad (1)$$

Здесь ε_k — энергия электронов в металле, V — матричный элемент гибридизации металлического $|k\rangle$ и дефектного $|d\rangle$ состояний, c_k^\dagger — оператор рождения электрона в состоянии $|k\rangle$, d^\dagger — оператор рождения электрона в состоянии $|d\rangle$. В предположении, что уровень локализованного дефектного состояния $|d\rangle$ перекрывается с широкой зоной проводимости металла, легко найти его число заполнения n_d :

$$n_d = \pi^{-1} \text{arcctg}^{-1}[(E_d - E_F)/\Gamma], \quad (2)$$

где Γ — полуширина квазиуровня дефекта, E_F — уровень Ферми. Вследствие туннелирования электронов между металлом и дефектами на контакте возникает потенциальный барьер

$$\Delta\Phi = -4\pi e^2 \lambda N_d q_d, \quad (3)$$

где 2λ — толщина дипольного слоя на контакте, N_d — поверхностная концентрация дефектных состояний, q_d — заряд, локализованный на состоянии $|d\rangle$: $q_d = -n_d$, если до контакта состояние $|d\rangle$ было не заполнено, $q_d = 1 - n_d$, если состояние $|d\rangle$ было занято (в первом случае электроны переходят из металла на пустой уровень дефекта, во втором, наоборот, уходят с дефекта на металл).

Положение уровня Ферми относительно потолка валентной зоны полупроводника определяется соотношением

$$E_F = \chi + E_g - \phi_m - \Delta\Phi, \quad (4)$$

где χ — сродство к электрону, E_g — ширина запрещенной зоны, ϕ_m — работа выхода из металла. Высота барьера Шоттки для полупроводников *p*-типа равна E_F , для *n*-типа — $(E_g - E_F)$.

3. Для анализа результатов работы [4] используем следующий сценарий. Будем полагать, что уровень Ферми E_F ”прикреплен” к уровню дефекта E_d (пиннинг).

Исходные данные и результаты расчета

Политип SiC	8H	6H	15R	27R	4H
$\Phi_b^n, \text{эВ}$	0.85	1.15	1.15	1.25	1.50
$N_{\text{Si}}^s, 10^{13} \text{ см}^{-2}$	4.48	5.43	6.30	7.11	8.11
$N_d, 10^{13} \text{ см}^{-2}$	2.46	3.58	3.57	3.94	4.86
N_{Si}^s/N_d	1.82	1.52	1.76	1.80	1.67
$\Phi_b^n/N_d, \text{эВ} \cdot \text{см}^2$	0.35	0.32	0.32	0.32	0.31
E_F/E_g	0.70	0.62	0.62	0.57	0.54

Примечание. Значения E_g для всех политипов, кроме 27R, взяты из работы [4]; для политипа 27R значение E_g взято из [14], Φ_b^n из [4]; значения поверхностной концентрации вакансий кремния N_{Si}^s рассчитаны из данных, приведенных в [6] для объема.

Тогда из (2) следует, что $n_d = 0.5$ и что состояние $|d\rangle$ первоначально (до контакта с металлом) было не занято. Наличие такого уровня, отвечающего вакансии в кремнии, подтверждается результатами расчета [10]. Таким образом, в выражении (3) $q_d = -0.5$. Теперь из работы [4] берем измеренное значение Φ_b^n , которое в рамках используемой модели есть

$$\Phi_b^n = \phi_m - \chi + \Delta\Phi \quad (5)$$

(верхний индекс отражает тип проводимости SiC). Из экспериментального значения вычитаем $(\phi_m - \chi)$. Значения электронного сродства для политипов SiC нам, к сожалению, неизвестны. Разные авторы используют различные значения χ , лежащие между 4 и 4.4 эВ (см., например, [11,12]). В дальнейшем для всех политипов мы полагаем $\chi = 4.4$ эВ (конечно, это является определенным, внесенным нами, произволом, вызванным отсутствием соответствующих экспериментальных данных). Работа выхода для хрома $\phi_m = 4.58$ эВ [13] (здесь и далее мы берем значения работы выхода для поликристаллов). Воспользовавшись вышеприведенными формулами, найдем значения N_d (см. таблицу). Результаты расчета представляются вполне разумными. Во-первых, оказывается, что уровень Ферми лежит выше середины запрещенной зоны, что и предполагалось в [4]. Во-вторых, отношение N_{Si}^s/N_d остается приблизительно постоянным для всех рассмотренных политипов. Приходится, таким образом, признать, что в данной задаче модельные d -дефекты соответствуют вакансиям Si в карбиде кремния. (То обстоятельство, что $N_{\text{Si}}^s/N_d < 1$, неудивительно: как отмечается в [4], наличие на контакте тонкого слоя SiO_2 понижает плотность поверхностных состояний). Отсюда следует, что именно кремниевые вакансии играют определяющую роль в различии высоты барьера Шоттки для разных политипов SiC. Более того, из расчета вытекает, что $\Phi_b^n \propto N_d$ и, следовательно, $\Phi_b^n \propto N_{\text{Si}}^s$. В рамках нашего подхода, к сожалению, невозможно связать величину барьера Шоттки со степенью гексагональности D и тем самым теоретически подтвердить обнаруженную в [4] линейную зависимость Φ_b^n от D . Следует, однако, отметить, что величина D пропорциональна N_{Si}^s [3,6].

С целью проверки полученных выше результатов проанализируем данные работы [15], где исследовались контакты 4H- 6H- и 15R-SiC с палладием и платиной. Так как работы выхода Pd и Pt равны соответственно 4.80 и 5.32 эВ, то, взяв значения N_d из таблицы, получим следующие результаты. Для контактов 6H-, 15R- и 4H-SiC с палладием получим соответственно $\Phi_b^n = 1.37, 1.37$ и 1.72 эВ. По данным измерений вольт-амперных характеристик получено соответственно 1.27, 1.22 и 1.56 эВ; практически те же величины дает баллистическая электронно-эмиссионная спектроскопия [15]. Для контактов 6H- и 4H-SiC с платиной расчет дает $\Phi_b^n = 1.89$ и 2.24 эВ, тогда как измерения вольт-амперных характеристик — 1.26 и 1.48 эВ, а баллистика — 1.34 и 1.58 эВ [15]. Согласие для палладия следует признать вполне удовлетворительным, тогда как в случае платины наши результаты в 1.5 раза превышают данные эксперимента. Причины расхождения могут лежать как в различной (для платины и хрома) концентрации дефектных состояний N_d , так и, возможно, пониженной (за счет каких-либо примесей) эффективной работы выхода платины.

Таким образом, с помощью простой модели удалось связать величину барьера Шоттки Φ_b^n на границе металл-политип карбида кремния с концентрацией кремниевых вакансий и в результате достаточно удовлетворительно рассчитать величину Φ_b^n для контакта Pd-SiC.

В заключение отметим, что альтернативный подход к проблеме контакта политипов кремния с различными металлами, основанный на адсорбционных представлениях, был сформулирован в работах [16,17], где высоту барьера удалось связать с электроотрицательностью. Найденная зависимость представляется весьма интересной, так как еще в работе [3] была эмпирически установлена прямая пропорциональность между величиной эффективного заряда атомов кремния и степенью гексагональности D . С другой стороны, из расчетов [18], выполненных для бездефектного кристалла, следует, что ионность различных политипов SiC отличается менее чем на 0.1%. Следовательно, электроотрицательность, эффективный заряд и ионность связаны, по-видимому, именно с дефектностью политипов. Мы в дальнейшем предполагаем исследовать этот вопрос, используя подход, развитый в [1,16,17,19].

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 00-02-16688 и научных программ РМ/М65 и ЛНЭ 66.

Список литературы

- [1] W. Mönch. Rep. Progr. Phys., **53**, 221 (1990).
- [2] *Silicon Carbide and Related Materials, ECSCRM-2000 [Proc. 3rd European Conf. Silicon Carbide and Related Materials, (Kloster Banz, Germany), ed. by G. Pensl, D. Stephani, M. Hundhausen. (Trans. Tech. Publications, Switzerland, 2001)].*

- [3] Н.Д. Сорокин, Ю.М. Таиров, В.Ф. Цветков, М.А. Чернов. Кристаллография, **28**, 910 (1983).
- [4] Р.Г. Веренченко, В.И. Санкин, Е.И. Радованова. ФТП, **17**, 1757 (1983).
- [5] Ю.А. Водаков, Г.А. Ломакина, Е.Н. Мохов. ФТТ, **24**, 1377 (1982).
- [6] А.А. Лебедев. ФТП, **33**, 769 (1999).
- [7] R. Ludeke, G. Jezequel, A. Tabel-Ibrahimi. Phys. Rev. Lett., **61**, 601 (1989).
- [8] R. Ludeke. Phys. Rev. B, **40**, 1947 (1989).
- [9] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, С.К. Тихонов. ФТП, **31**, 597 (1997).
- [10] P. Deak, A. Gali, J. Miro, R. Guiterrez, A. Sieck, Th. Frauenheim. Mater. Sci. Forum (Trans. Tech. Publications, Switzerland), **264–268**, 279 (1998).
- [11] J.R. Waldrop. J. Appl. Phys., **75**, 4558 (1994).
- [12] А.Н. Андреев, А.А. Лебедев, М.Г. Растегаева, Ф.М. Снегов, А.Л. Сыркин, В.Е. Челноков, Л.Н. Шестопапов. ФТП, **29**, 1828 (1995).
- [13] *Физические величины*. Справочник, под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова (М., Энергоатомиздат, 1991).
- [14] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. *Оптические свойства полупроводников*. Справочник (Киев, Наук. думка, 1987).
- [15] H.-J. Im, B. Kaczer, J.P. Pelz, J. Chen, W.J. Choyke. Mater. Sci. Forum (Trans. Tech. Publications, Switzerland), **264–268**, 813 (1998).
- [16] W. Mönch. In: *Control of Semiconductor Interfaces*, ed. by I. Ohdomari, M. Oshima and A. Hiraki (Elsevier, Amsterdam, 1994) p. 169.
- [17] V. van Elsbergen, T.U. Kampen, W. Mönch. J. Appl. Phys., **79**, 316 (1996).
- [18] G. Wellenhofer, K. Karch, P. Pavonet, U. Rössler, D. Strauch. *Conf. Silicon Carbide and Related Materials* [Inst. Phys. Conf. Ser., **142**, Ch. 2, 301 (1996)].
- [19] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. ФТТ **37**, 2749 (1995).

Редактор Л.В. Шаронова

The metal–silicon carbide contact: the Schottky barrier height as a function of SiC polytype

S.Yu. Davydov, A.A. Lebedev, O.V. Posrednik*,
Yu.M. Tairov*

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

* St. Petersburg State Electrotechnical University,
197376 St. Petersburg, Russia