

МОДЕЛЬ КИТИНГА-ХАРРИСОНА ДЛЯ ОПИСАНИЯ УПРУГИХ СВОЙСТВ ШИРОКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

© С.Ю.Давыдов, С.К.Тихонов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
(Получена 19 декабря 1995 г. Принята к печати 26 декабря 1995 г.)

В рамках метода связывающих орбиталей Харрисона получены выражения для силовых констант модели полупроводниковых упругих модулей Китинга-Мартина. Проведен численный расчет упругих постоянных кубической и гексагональной модификаций алмаза, карбида кремния и нитридов бора, алюминия и галлия.

Все возрастающий интерес к широкозонным полупроводникам [1], обусловленный возможностями их использования для прикладных целей, стимулирует создание теоретических моделей, позволяющих не только объяснить существующие экспериментальные данные, но и рассчитать те или иные характеристики еще не исследованных полупроводников. В настоящей работе предлагается модель, удовлетворительно описывающая упругие постоянные C_{ij} кристаллов алмаза и карбида кремния и дающая возможность предсказать значения C_{ij} для нитридов бора, алюминия и галлия.

Хорошо известно (см., например, [2]), что среди традиционных подходов к описанию упругих свойств полупроводниковых кристаллов, использующих метод силовых констант, наилучшие результаты дает модель Китинга [3,4]. В этой модели упругие постоянные кубического кристалла описываются двумя силовыми константами — центрального (α) и нецентрального (β) взаимодействия первых соседей — и имеют вид

$$C_{11} = \frac{\alpha + 3\beta}{4a_0}, \quad C_{12} = \frac{\alpha - \beta}{4a_0}, \quad C_{44} = \frac{\alpha\beta}{a_0(\alpha + \beta)}, \quad (1)$$

где $4a_0$ — постоянная решетки. Из (1), в частности, следует, что величина

$$R = \frac{C_{44}(C_{11} + C_{12})}{C_s(C_{11} + 3C_{12})}, \quad (2)$$

Таблица 1. Упругие постоянные C_{ij} [10^{10} Па] полупроводниковых кристаллов кубической модификации

Метод	Постоянная	C	SiC	BN	AlN	GaN
Модель	C_{11}	96.9	32.7	72.7	18.7	15.6
Харрисона	C_{12}	30.1	10.1	24.5	5.7	4.8
[6]	C_{44}	42.6	14.3	31.8	8.1	6.8
	R	0.87	0.86	0.84	0.85	0.87
Модель	C_{11}	102.7	34.6	78.0	19.8	16.5
Китинга-	C_{12}	35.9	12.0	26.8	6.8	5.7
Харрисона	C_{44}	50.7	17.0	37.8	9.6	8.1
	R	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Эксперимент	C_{11}	107.9	41.1	-	-	-
	C_{12}	12.4	16.4	-	-	-
	C_{44}	57.8	19.4	-	-	-
	R	1.00	1.00	-	-	-

где $C_s = (C_{11} - C_{12})/2$, равна 1. Для алмаза и карбида кремния (см. [2] и ниже) соотношение $R = 1$ выполняется с очень высокой степенью точности (доли процента).

Однако для нахождения силовых констант α и β нужно использовать экспериментальные данные по упругим постоянным для соответствующего кристалла. Предсказать же упругие свойства можно лишь воспользовавшись теорией, построенной на более общих принципах. Простейший квантово-механический подход к этой задаче был предложен Харрисоном [5] в рамках метода связывающих орбиталей. В нашей предыдущей работе [6] мы использовали этот подход для расчета упругих постоянных широкозонных полупроводников. Результаты расчета C_{ij} , представленные в табл. 1, показывают, что для карбида кремния и нитридов бора, алюминия и галлия соотношение $R = 1$ выполняется с точностью лишь порядка 15%. Поэтому возникла идея объединить модель Китинга, дающую $R \simeq 1$, с моделью Харрисона, позволяющей вычислить C_{ij} из первых принципов.

Путем прямого сравнения механизмов деформации в моделях Китинга и Харрисона можно показать, что

$$\alpha = \frac{8}{3} \frac{\alpha_c^3}{d^2} |V_2|, \quad (3)$$

$$\beta = \lambda \frac{\alpha_c^3}{d^2} |V_2|. \quad (4)$$

Здесь α_c — ковалентность кристалла, V_2 — ковалентная энергия, $\lambda = 0.85$ — безразмерная константа, описывающая зависимость V_2 от угла между связывающими $|sp^3\rangle$ -орбиталями, $d = a_0/\sqrt{3}$ — расстояние между ближайшими соседями (использовалось определение параметров из работ [7,8]; численные значения параметров приведе-

Таблица 2. Упругие постоянные C_{ij} [10^{10} Па] для полупроводников гексагональной модификации. Модель Китинга-Харрисона*

Полупроводник	Метод	C_{11}	C_{33}	C_{12}	C_{13}	C_{44}	C_{66}
SiC	Теория	38.8	42.2	11.2	8.2	12.7	14.6
	Эксперимент	50.0	56.4	9.2	-	16.8	-
BN	Теория	89.1	94.3	23.8	18.7	28.7	32.6
	Эксперимент	-	-	-	-	-	-
AlN	Теория	22.6	23.9	6.1	4.7	7.3	8.3
	Эксперимент	34.5	39.5	12.5	12	11.8	-
GaN	Теория	18.9	20.1	5.1	3.9	6.1	6.9
	Эксперимент	-	-	-	-	-	-

Примечание. *Экспериментальные данные по C_{ij} для SiC взяты из [13]; для AlN приведены результаты измерений поликристаллических пленок [14].

ны в [6]). Отметим, что нецентральное взаимодействие в моделях Китинга и Харрисона несколько различается. Если в первой из них β связано с изменением угла между $|sp^3\rangle$ -орбиталями, центрированными на одном атоме, то во второй рассматривается взаимное отклонение $|sp^3\rangle$ -орбиталей соседних атомов от прямой, соединяющей их центры. Сделаем еще одно замечание. В теории Китинга рассматриваются лишь полупроводники IV группы, а обобщение на гетерополярные соединения $A_N B_{8-N}$ приведено в работе [9]. Как и в [9], мы описываем нецентральное взаимодействие орбиталей атомов А и В одной силовой константой β , но в отличие от этой работы пренебрегаем непосредственным учетом межионного кулоновского взаимодействия вследствие весьма высокой степени ковалентности α_c широкозонных полупроводников [6].

Подставляя соотношения (3) и (4) в формулу (1), получим выражения для объемного модуля сжатия $B = (C_{11} + 2C_{12})/3$ и модулей сдвига $C_s = (C_{11} - C_{12})/2$ и C_{44} :

$$\begin{aligned}
 B &= \frac{(8 + \lambda)\sqrt{3}}{12} \frac{\alpha_c^3}{d^3} |V_2|, \\
 C_s &= \frac{\lambda\sqrt{3}}{2} \frac{\alpha_c^3}{d^3} |V_2|, \\
 C_{44} &= \frac{8\lambda\sqrt{3}}{8 + 3\lambda} \frac{\alpha_c^3}{d^3} |V_2|.
 \end{aligned}
 \tag{5}$$

Результаты численных расчетов по модели Китинга-Харрисона для кубической модификации широкозонных полупроводников представлены во втором ряду табл. 1. Сопоставление с экспериментом [2] для алмаза показывает, что модифицированная теория лучше описывает упругие постоянные C_{11} и C_{44} , но хуже C_{12} . Для карбида кремния модель Китинга-Харрисона дает лучшее согласие с экспериментом для всех величин. Можно надеяться, что и для нитридов результаты настоящей работы более достоверны.

В табл. 2 приведены результаты расчета упругих постоянных для широкозонных полупроводников гексагональной (вюрцитной) модификации. При этом использовались результаты работы [10] с поправками [11]. Сравнение полученных здесь значений упругих постоянных и значений, вычисленных в работе [6] на основании теории Харрисона с имеющимися экспериментальными данными вновь показывает, что модифицированная теория лучше описывает экспериментальную ситуацию.

Воспользовавшись результатами [11,12], можно рассчитать упругие постоянные и для любых других структурных политипов широкозонных полупроводников.

Работа выполнена при частичной поддержке Министерства обороны США.

Список литературы

- [1] *Silicon Carbide and Related Materials (Proc. Fith Int. Conf.)*, ed. by M.G. Spencer et al. [Inst. Phys. Conf. Ser., N 137 (Bristol and Philadelphia, 1993)].
- [2] С.П. Никаноров, Б.К. Кардашов. *Упругость и дислокационная неупругость кристаллов* (М., Наука, 1985).
- [3] P.N. Keating. *Phys. Rev.*, **145**, 637 (1966).
- [4] P.N. Keating. *Phys. Rev.*, **149**, 674 (1966).
- [5] У. Харрисон, *Электронная структура и свойства твердых тел* (М., Мир, 1983) т. 1.
- [6] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. *ФТП*, **30** (1996).
- [7] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B*, **24**, 5835 (1981).
- [8] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B*, **27**, 3592 (1983).
- [9] R.M. Martin. *Phys. Rev. B*, **1**, 4005 (1970).
- [10] R.M. Martin. *Phys. Rev. B*, **6**, 4546 (1972).
- [11] А.И. Губанов, С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **17**, 1463 (1975).
- [12] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. *ФТТ*, **37**, 2221 (1995).
- [13] *Физические величины. Справочник*, под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова (М., Энергоатомиздат, 1991).
- [14] А.В. Добрынин, И.П. Казаков, Г.А. Найда. *Зарубежн. электрон. техн.*, **4**, 44 (1989).

Редактор Л.В. Шаронова

Keating–Harrison model for the elastic properties of wide-gap semiconductors

S. Yu. Davydov, S. K. Tikhonov

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