

Роль вакансий кремния в формировании барьеров Шоттки на контактах Ag и Au с 3С- и 6Н-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 13 ноября 2001 г. Принята к печати 2 декабря 2001 г.)

Модифицированная модель Людеке, предполагающая, что за формирование барьера Шоттки ответственны дефектные состояния на границе, применена к расчету высоты барьеров Φ_b^n в системах Ag, Au/3С-, 6Н-SiC. Получено отличное согласие с данными эксперимента. Расчет показал также, что концентрация кремниевых вакансий, которые и определяют величину Φ_b^n , слабо зависит от природы металлического компонента контакта.

Влияние политипизма SiC на формирование барьера Шоттки было убедительно продемонстрировано в ряде экспериментов [1–5]. В работе [6] в рамках модифицированной модели Людеке [7–9] зависимость высоты барьера Шоттки Φ_b^n на контакте Cr-SiC от политипа карбида кремния была объяснена влиянием вакансий в кремниевой подрешетке. Действительно, хорошо известно, что концентрация кремниевых вакансий N_{Si} плавно убывает в ряду политипов 4Н–3С [10], т.е. с увеличением доли кубической структуры. В этом же ряду наблюдается рост Φ_b^n [1]. Эти два факта удалось связать между собой, предположив, что уровень Ферми E_F на контакте Cr-SiC совпадает с уровнем дефекта E_d , являющегося ключевым параметром модели Людеке, и вычислив на основании этого предположения (и экспериментальных значений Φ_b^n) поверхностную концентрацию этих дефектов N_d [6]. Оказалось, что отношения N_{Si}^S/N_d (где N_{Si}^S — пересчитанная к двумерному случаю концентрация кремниевых вакансий N_{Si}) и Φ_b^n/N_d приблизительно постоянны в ряду 8Н, 6Н, 15R, 27R и 4Н. Это и позволило сделать утверждение о доминирующем влиянии кремниевых вакансий на величину Φ_b^n на контакте различных политипов SiC с одним и тем же металлом.

Условие $E_F = E_d$, сильно упрощающее оценки, является довольно произвольным. В настоящей работе, не прибегая к такому упрощению, мы рассчитаем в рамках модели [9] барьеры, возникающие на границе серебра и золота с политипами 3С- и 6Н-SiC, обладающими проводимостью n -типа. Эти четыре системы были выбраны, во-первых, на том основании, что экспериментальные значения Φ_b^n для них были получены одной и той же группой исследователей с помощью ряда экспериментальных методик [2,3]. Во-вторых, высоты барьеров на контактах Ag и Au с 3С-SiC отличаются более чем в 2 раза, тогда как на границе с 6Н-SiC очень близки (см. [2,3] и таблицу).

Будем считать, что уровень E_d отвечает незаполненному состоянию кремниевой вакансии. Такое состояние действительно было обнаружено в 3С-SiC [11]. Если, как и в [6], предположить, что сродство к электрону χ

для всех политипов равно 4.4 эВ, то для кубического политипа уровень вакансии E_d , отсчитываемый от потолка валентной зоны (в дальнейшем всегда $E_V = 0$), равен приблизительно 1.5 эВ (см. Приложение). Будем полагать, что и в 6Н-SiC уровень $E_d = 1.5$ эВ. В соответствии с [9] величина Φ_b^n определяется следующими самосогласованными уравнениями:

$$\Phi_b^n = \phi_m - \chi + 4\pi e^2 \lambda N_d n_d,$$

$$n_d = \frac{1}{\pi} \operatorname{arccotg} [(E_d - E_g + \Phi_b^n)/\Gamma]. \quad (1)$$

Здесь ϕ_m — работа выхода металла, равная 4.26 и 5.1 эВ для Ag и Au соответственно [2]; E_g — ширина запрещенной зоны, составляющая соответственно 2.4 [12] и 3.02 эВ [1] для политипов 3С и 6Н; 2λ — толщина двойного слоя на контакте, которую мы принимаем равной 4 \AA ; e — заряд позитрона; Γ — полуширина квазиуровня вакансии (уширение происходит вследствие взаимодействия с металлом); n_d — число заполнения вакансионного квазиуровня. В (1) учтено, что до взаимодействия с металлом уровень вакансии пуст [6,9].

Концентрацию N_d для кубического политипа 3С-SiC определим путем пересчета N_{Si} в N_{Si}^S с использованием среднего значения отношения $N_{Si}^S/N_d \approx 1.71$, получив таким образом $N_d \approx 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$. Для 6Н-SiC положим $N_d \approx 4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$, округляя результат, полученный в работе [6] для политипов контакта карбида кремния с хромом. Как известно, в теории адсорбции Андерсона–Ньюнса [14], на которой и основана модель контакта Людеке [7–9], наиболее трудно поддается оценке ширина квазиуровня 2Γ . Далее для всех случаев мы принимаем значение $\Gamma = 0.5$ эВ.²

¹ Величину 2λ считаем порядка постоянной решетки кристаллов серебра (4.09 Å) и золота (4.08 Å) [13].

² К счастью, вариация параметра Γ не слишком сильно влияет на результаты наших расчетов. Так, например, если в задаче о контакте Au/3С-SiC положить $\Gamma = 0.1$ эВ, получим $n_d = 0.35$ и $\Phi_b^n = 0.95$ эВ, что мало отличается от данных, приведенных в таблице.

Исходные параметры и результаты расчета

Полупроводник	3C-SiC		6H-SiC	
	$N_d = 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$, $E_d = 1.5 \text{ эВ}$, $\Gamma = 0.5 \text{ эВ}$		$N_d = 4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$, $E_d = 1.5 \text{ эВ}$, $\Gamma = 0.5 \text{ эВ}$	
Металл	Ag	Au	Ag	Au
n_d	0.43	0.35	0.77	0.31
Теория	0.40	0.95	0.97	1.15
Φ_b^n , эВ				
Эксперимент	0.40 (XPS)	0.87 (C-V)	0.97 (C-V)	1.14 (XPS)

Примечание. Экспериментальные данные взяты из работ [2,3]; в нижней строке в скобках указана экспериментальная методика, с помощью которой эти данные были получены.

Значения параметров задачи, результаты расчетов и экспериментальные данные³ представлены в таблице. Согласно теории с опытом следует признать отличным, хотя никаких подгоночных процедур не проводилось и все параметры определялись (с той или иной степенью достоверности) из экспериментальных данных, либо принимались равными своим наиболее вероятным значениям. Из сравнения результатов настоящей работы с результатами работы [6] можно сделать вывод о том, что N_d есть концентрация собственных дефектов карбида кремния, которая слабо зависит от природы металлического контакта.

Таким образом, еще раз установлено, что вакансионная дефектность карбида кремния не только диктует его политип, но и определяет высоту барьера Шоттки на границе металл-SiC.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 0002 16 688 и МО 1-3.9 К-63.

Приложение

Известно, что в моделях формирования барьера Шоттки, считающих роль пограничных дефектов определяющей (см., напримр, [15]), начиная с работ Бардина и Шокли принято помещать „дефектную зону“ более или менее в центр энергетической щели полупроводника. Справедливость подобной аппроксимации можно продемонстрировать следующим простым способом, не пребегая к трудоемким расчетам.

Пусть E_d^0 есть „затравочное“ положение уровня вакансии кремния, которое можно принять равным энергии оборванных $|sp^3\rangle$ орбиталей углерода [16]. Используя метод связывающих орбиталей Харрисона [17-19], получим $E_d^0 = -13.15 \text{ эВ}$ относительно вакуума. Учтем

³ Подчеркнем, что из ряда экспериментальных данных, полученных в [2,3] с помощью различных экспериментальных методик, в таблице представлены величины Φ_b^n , максимально близко соответствующие нашим теоретическим результатам.

взаимодействие оборванных орбиталей с остальным кристаллом, упрощенно представляя состояния зоны проводимости и валентной зоны двумя локальными уровнями E_C и E_V . Тогда можно записать следующие уравнения Дайсона:

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd}(V_{dc}G_{cd} + V_{dv}G_{vd}),$$

$$G_{cd} = g_{cc}V_{cd}G_{dd}, \quad G_{vd} = g_{vv}V_{vd}G_{dd}. \quad (\text{П.1})$$

Здесь $g_{dd}^{-1} = \omega - E_d^0$, $g_{cc}^{-1} = \omega - E_C$, $g_{vv}^{-1} = \omega - E_V$ — затравочные функции Грина дефекта, проводящей и валентной „зон“ соответственно, V_{di} ($i = c, v$) — матричные элементы взаимодействия уровня дефекта с „зонами“, ω — энергетическая переменная. Полагая для простоты $|V_{cd}|^2 \approx |V_{vd}|^2 \equiv V^2$, получим уравнение, из которого можно найти положение уровня вакансии E_d :

$$(\omega - E_d^0)(\omega - E_C)(\omega - E_V) - (2\omega - E_C - E_V)V^2 = 0. \quad (\text{П.2})$$

Положим в дальнейшем $E_V = 0$, тогда $E_C = E_g$. Из уравнения (П.2) сразу же следует, что разность $(E_d - E_d^0)$, т.е. сдвиг уровня дефекта за счет взаимодействия с „зонами“, будет малой, если $E_d \approx E_g/2$. Более того, легко показать, что взаимодействие V „подтягивает“ уровень E_d^0 к центру запрещенной зоны, где бы этот уровень изначально не находился. Пусть, например, $E_d^0 < 0$ и $|E_d^0| \gg E_g$, что как раз соответствует случаю кремниевой вакансии. Полагая $V \gg E_g$, получим $E_d \approx (E_g/2)(1 + E_g^2/4V^2)$ ⁴. Конечно, полученный здесь вывод о сдвиге затравочного уровня E_d^0 к центру щели во многом обусловлен предположением о равенстве затравочных элементов его взаимодействия с зонными состояниями, но, с другой стороны, нет особых оснований подвергать равенство $|V_{cd}|^2 \approx |V_{vd}|^2 \equiv V^2$ сомнению.

Существует и другой аспект настоящей проблемы. Дело в том, что в рамках гамильтониана Андерсона-Ньюнса [14] в модели бесконечно широкой металлической зоны уровень вакансии E_d не испытывает сдвига вследствие гибридизации с состояниями металла, что, конечно же, является лишь приближением. Это приближение, однако, вполне удовлетворительно, если E_d лежит вблизи середины щели [20].

Список литературы

- [1] Р.Г. Веренчикова, В.И. Санкин, Е.И. Радованова. ФТП, **17**, 1757 (1983).
- [2] J.R. Waldrop, R.W. Grant. Appl. Phys. Lett., **56**, 557 (1990).
- [3] J.R. Waldrop, R.W. Grant, Y.C. Wang, R.F. Davis. J. Appl. Phys., **72**, 4757 (1992).
- [4] J.R. Waldrop, R.W. Grant. Appl. Phys. Lett., **62**, 2685 (1993).
- [5] J.R. Waldrop. J. Appl. Phys., **75**, 4548 (1994).
- [6] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник, Ю.М. Таиров. ФТП, **35**, 1437 (2001).

⁴ Есть еще два решения уравнения (2), отвечающие уровням в проводящей и валентной зонах, что для настоящей задачи интереса не представляет.

- [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] А.А. Лебедев. ФТП, **33**, 769 (1999).
- [11] P. Deak, A. Gali, J. Miro, R. Guiterrez, A. Sieck, Th. Frauenheim. Mater. Sci. Forum, **264–268**, 279 (1998). Trans. Tech. Publications, Switzerland.
- [12] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. *Оптические свойства полупроводников*. Справочник (Киев, Наук. думка, 1987).
- [13] Ч. Киттель. *Введение в физику твердого тела* (М., Наука, 1978).
- [14] D.M. Newns. Phys. Rev., **178** 1123 (1969).
- [15] W. Mönch. Rep. Prog. Phys., **53**, 221 (1990).
- [16] М. Ланно, Ж. Бургуэн. *Точечные дефекты в полупроводниках. Теория* (М., Мир, 1984) .
- [17] W.A. Harrison. Phys. Rev. B, **27**, 3592 (1983).
- [18] W. Mönch. Europhys. Lett., **7**, 275 (1988).
- [19] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. ФТТ, **37**, 2749 (1995).
- [20] С.Ю. Давыдов. ЖТФ, **68**, 361 (1998).

Редактор Л.В. Беляков

A contribution made by silicon vacancies in building Schottky barriers at Ag and Au contacts containing 3C and 6H-SiC

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 (LETI),
197376 St. Petersburg, Russia