

Об электронном средстве политипов карбида кремния

© С.Ю. Давыдов[¶]

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

(Получена 26 октября 2006 г. Принята к печати 1 ноября 2006 г.)

Значения электронного средства рассчитаны двумя различными способами с помощью представления разрывов зон в гетеропереходах, образованных контактом 3C-SiC с некубическим политипом, в виде линейных функций от степени гексагональности.

PACS: 73.20.At, 73.30.+y

Для того чтобы построить энергетическую схему барьера Шоттки (БШ) или гетероперехода (ГП), необходимо знать значения электронного средства χ входящих в контакт полупроводников [1]. Несмотря на интенсивные исследования карбида кремния и сформированных на его основе БШ и ГП [2], данные о величине χ для различных политипов SiC достаточно противоречивы. В работе [3] на основании анализа экспериментальных данных была предпринята попытка представить электронное средство гексагональных политипов NH-SiC в виде

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

где $\chi(3C)$ — электронное средство для кубического политипа, $D = n_h/(n_k + n_h)$ — степень гексагональности (n_k и n_h — числа занятых атомами кубических и гексагональных узлов), a — коэффициент. В рамках модели Шокли-Андерсона для ГП [1] в [3] было показано, что

$$\Delta E_C = aD, \quad (2)$$

где ΔE_C — величина разрыва зон проводимости на контакте политипов 3C/NH. Значение $\Delta E_C = 0.55$ эВ, определенное в работе [4] для контакта 3C/6H, дает $a = 1.67$ эВ. Разрывы валентных зон ΔE_V вычислялись как

$$\Delta E_V = \Delta E_g - \Delta E_C, \quad (3)$$

где разность ширин запрещенных зон $\Delta E_g = E_g(NH) - E_g(3C)$. Аппроксимацию электронного средства в виде (1), основанную на соотношении (2), будем в дальнейшем обозначать аббревиатурой СВОА (conduction band offset approximation). В настоящей работе мы дополним такой подход аппроксимацией, основанной на разрыве валентных зон (VBOA — valence band offset approximation), включив в рассмотрение также ромбоэдрические политипы (R).

В табл. 1 представлены значения степени гексагональности [5] и ширины запрещенной зоны E_g для ряда политипов SiC (для всех политипов, кроме 27R, данные брались из [6], для 27R — из [7]). Следует отметить, что

E_g является практически линейной функцией D вплоть до значения $D = 0.5$, отвечающего политипу 4H-SiC. Для разрывов зон в рамках СВОА получим результаты, представленные на рис. 1. Ясно видно, что при $D \leq 0.5$ разрывы валентных зон крайне малы ($\Delta E_V \leq 0.08$ эВ) и положительны. Таким образом, при контакте 3C-SiC с некубическими политипами реализуется ГП первого рода, или охватывающий. Для контакта 3C/2H значение $\Delta E_V = -0.74$ эВ, т.е. имеем ГП второго рода, или смещенный. Хотя какие-либо экспериментальные данные по такому контакту, насколько известно автору, отсутствуют, подобная „аномалия“ настораживает и требует дополнительного рассмотрения.

По данным теоретической работы [8], для ГП между политипами 3C и 2H максимальное значение $\Delta E_V = 0.13$ эВ, т.е. имеет место ГП первого типа. Положим

$$\Delta E_V = bD, \quad (4)$$

где $b = 0.13$ эВ. Тогда для разрывов зон в рамках VBOA получим результаты, представленные на рис. 2. Обращают на себя внимание близкий к линейному рост ΔE_C вплоть до $D = 0.5$ и резко выпадающее из этой зависимости значение $\Delta E_C = 0.80$ эВ для контакта 3C/2H.

Сопоставим численные значения ΔE_C и ΔE_V , полученные методами СВОА и VBOA, введя отношения

$$\eta_{c,v} = \Delta E_{c,v}(СВОА)/\Delta E_{c,v}(VBOA), \quad (5)$$

где в числителе (знаменателе) стоит величина, полученная в рамках СВОА (VBOA). Результаты расчета приведены в табл. 2. Из табл. 2 следует, что, за исключением контакта 3C/2H, расхождения значений ΔE_C , полученных различными методами, т.е. η_c , не превосходят 10%. Для ΔE_V значения η_v для контактов 3C-SiC

Таблица 1. Степень гексагональности D и ширина запрещенной зоны E_g политипов SiC.

Политип	3C	8H	21R	6H	15R	27R	4H	2H
D	0	0.25	0.29	0.33	0.40	0.44	0.50	1
E_g , эВ	2.40	2.86	2.96	3.00	3.06	3.13	3.23	3.33

[¶] E-mail: Sergei.Davydov@mail.ioffe.ru

некубическими политипами, обладающими степенями гексагональности $D \leq 0.4$ (не говоря уже о $3C/2H$), значительно выше. Необходимо, однако, учесть, что и СВОА, и VBOA дают малые по абсолютной величине разрывы ΔE_V . Сопоставление полученных нами в рамках СВОА абсолютных значений ΔE_C и ΔE_V с данными расчетов других авторов, проведенное в работе [3], показывает вполне удовлетворительное согласие (вновь за исключением контакта $3C/2H$).

Перейдем теперь к оценкам электронного средства. В рамках СВОА величина χ определяется выражением (1). В модели Шокли–Андерсона можно показать, что при использовании VBOA выражение для электронного

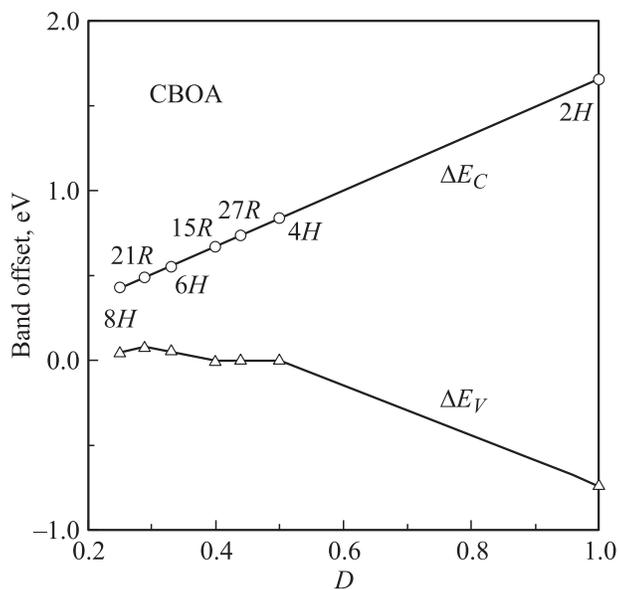


Рис. 1. Зависимость разрывов зон ΔE_C и ΔE_V на контактах $3C/(NH, R)$ в рамках СВОА от степени гексагональности D .

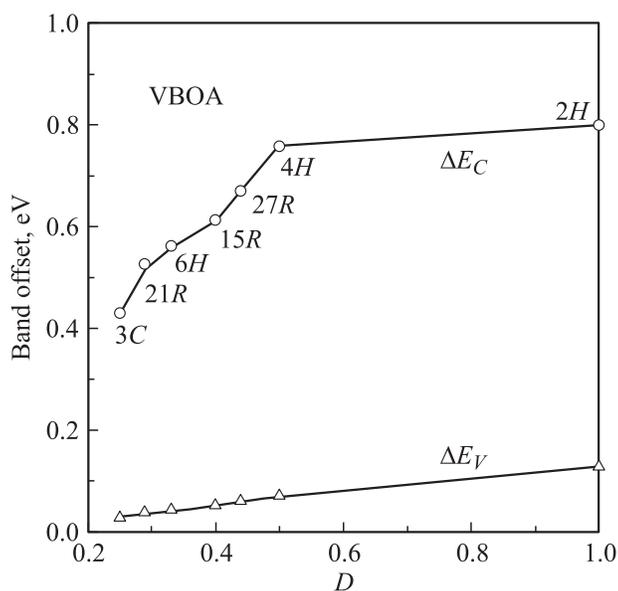


Рис. 2. То же, что на рис. 1, но в рамках VBOA.

Таблица 2. Отношения $\eta_{c,v} = \Delta E_{c,v}(СВОА)/\Delta E_{c,v}(VBOA)$ для контактов $3C/(NH, R)$

Политип	8H	21R	6H	15R	27R	4H	2H
η_c	0.98	0.92	0.98	1.10	1.09	1.09	2.09
η_v	1.33	2.00	1.25	-0.2	0	0	-5.69

Таблица 3. Значения электронного средства χ политипов SiC в аппроксимациях СВОА и VBOA

Политип	8H	21R	6H	15R	27R	4H	2H
СВОА	3.58	3.52	3.45	3.33	3.27	3.17	2.33
VBOA	3.57	3.48	3.44	3.39	3.33	3.24	3.20

Примечание. $\chi(3C) = 4$ эВ. Все значения электронного средства приведены в эВ.

средства некубических политипов SiC имеет вид

$$\chi(NH, R) = \chi(3C) + bD - \Delta E_g. \quad (6)$$

Из (1) и (6) следует, что для расчета $\chi(NH, R)$ необходимо знать величину средства для кубического политипа. К сожалению, и в этом случае экспериментальные данные противоречивы (см. обсуждение в [3]). Значения χ при $\chi(3C) = 4$ эВ [9], полученные с помощью СВОА и VBOA, представлены в табл. 3. Во всех случаях (кроме контакта $3C/2H$) наблюдается очень хорошее соответствие значений электронного средства, полученных обоими методами.

Проведенные расчеты показывают, таким образом, что разрывы зон для политипов, обладающих степенью гексагональности $D \leq 0.5$, одинаково хорошо описываются линейными аппроксимациями вида (2) и (4). Этот результат позволяет надеяться, что значения электронного средства χ , представленные в табл. 3 для таких политипов, по-видимому, достаточно достоверны. Что же касается политипа $2H$ -SiC, то здесь требуются дополнительные экспериментальные исследования.

Автор признателен В.С. Сорокину, обратившему его внимание на вопросы, изложенные в настоящей публикации.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 03-02-16054 и 04-02-16632.

Список литературы

- [1] Ф. Бехштедт, Р. Эндерлейн. *Поверхности и границы раздела полупроводников* (М., Мир, 1990).
- [2] А. Fissel. *Phys. Reports*, **379** (1), 149 (2003).
- [3] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. *ФТП*, **39** (12), 1440 (2005).
- [4] А.А. Лебедев, А.М. Стрельчук, Н.С. Савкина, Е.В. Богданова, А.С. Трегубова, А.Н. Кузнецов, Л.М. Сорокин. *Письма ЖТФ*, **28** (23), 78 (2002).

- [5] Н.Д. Сорокин, Ю.М. Таиров, В.Ф. Цветков, М.А. Чернов. Кристаллография, **28**, 910 (1983).
- [6] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. *Оптические свойства полупроводников*. Справочник (Киев, Наук. думка, 1987).
- [7] W.R.L. Lambrecht, S. Limpijumnog, B. Segall. *Inst. Phys. Conf. Ser.*, № 142, chap. 2 (*Silicon Carbide and Related Materials*) (1996) p. 263.
- [8] A. Qteich, V. Heine, R.J. Needs. *Phys. Rev. B*, **45** (12), 6534 (1992).
- [9] M.J. Vazack. *Phys. Status. Solidi B*, **202** (2), 549 (1997).

Редактор Л.В. Шаронова

On the electron affinity of silicon carbide polytypes

S.Yu. Davydov

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

Abstract Electron affinity values are calculated by two different methods using the description of the band offsets at the heterojunctions of 3C-SiC with a noncubic polytype as linear functions of the degree of hexagonality.