

## О ДЕФОРМАЦИОННОМ ПОТЕНЦИАЛЕ ШИРОКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

© С.Ю.Давыдов, С.К.Тихонов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
(Получена 26 декабря 1995 г. Принята к печати 27 декабря 1995 г.)

В рамках метода связывающих орбиталей Харрисона проведена оценка деформационного потенциала для алмаза, карбида кремния и нитридов бора, алюминия и галлия. Результаты расчета для карбида кремния хорошо согласуются с данными эксперимента.

В последнее время широкозонные полупроводники все чаще используются в микроэлектронике [1]. К сожалению, экспериментальная информация об этих соединениях невелика, что препятствует их эффективному использованию. С этой точки зрения теоретические оценки характеристик широкозонных соединений представляются полезными. В настоящей работе, воспользовавшись методом связывающих орбиталей Харрисона [2-4], мы проведем оценки величины деформационного потенциала  $E_{def}$  для зон проводимости алмаза, карбида кремния и нитридов бора, алюминия, галлия.

Деформационный потенциал  $E_{def}$  есть по определению коэффициент пропорциональности между величиной сдвига соответствующей зоны  $\delta\varepsilon$  и относительного изменения объема  $\Delta$ :

$$\delta\varepsilon = E_{def}\Delta. \quad (1)$$

Для простейшей зонной схемы полупроводников Харрисон показал [2], что деформационный потенциал дна зоны проводимости  $E_{dc}$  определяется выражением

$$E_{dc} = -(2/3)\alpha_c|V_2|, \quad (2)$$

где  $V_2$  — ковалентная энергия,  $\alpha_c$  — ковалентность (все параметры здесь и в дальнейшем приведены в соответствии с работой [3]).

Полупроводник	C	SiC	BN	AlN	GaN
Расчет по формуле (2)	6.90	4.49	6.22	3.71	3.48
Расчет по формуле (5)	6.54	4.56	6.56	4.55	4.36

Если воспользоваться более сложным вариантом зонной структуры, предложенной в работе [4], где дно зоны проводимости  $\varepsilon_c = \varepsilon(X_{1c})$  описывается выражением

$$\varepsilon_c = (\varepsilon_s^c + \varepsilon_p^a) + \left[ (\varepsilon_p^a - \varepsilon_s^c)^2 / 4 + (4E_{sp})^2 \right]^{1/2}, \quad (3)$$

$$E_{sp} = -V_{sp\sigma} / (3)^{1/2}, \quad (4)$$

$\varepsilon_s$  и  $\varepsilon_p$  означают  $s$ - и  $p$ -состояния катиона ( $c$ ) и аниона ( $a$ ), а  $V_{sp\sigma}$  — матричный элемент взаимодействия, то можно показать, что

$$E_{dc} = -(32/3)E_{sp}^2 / \left[ (\varepsilon_p^a - \varepsilon_s^c)^2 / 4 + (4E_{sp})^2 \right]^{1/2}. \quad (5)$$

При этом будем вычислять матричный элемент  $V_{sp\sigma}$  по схеме Харрисона [3], а значения энергии  $s$ - и  $p$ -состояний брать из таблиц Фишер (см. ссылку [2], т. 2, с. 302). Результаты расчетов по формулам (2) и (5) представлены в таблице. Нам, к сожалению, известна только одна работа [5], где для  $\alpha$ -SiC экспериментально (из измерения подвижности) определено следующее значение комбинации параметров:

$$E_{dc}^2 (m^*/m)^{5/2} = 57(\text{эВ})^2, \quad (6)$$

Здесь  $m^*$  — эффективная масса плотности состояний для электронов проводимости,  $m$  — масса свободного электрона. В [5] в предположении, что  $m^* = 0.72m$ , получено значение потенциала деформации  $E_{dc} = -11.5$  (эВ) (знак  $E_{dc}$  в [5] не конкретизируется). Однако если воспользоваться данными [6,7] для эффективной массы электронов в  $\alpha$ -SiC (0.25 —  $\perp$  оси C; 1.5 —  $\parallel$  оси C), то для эффективной массы плотности состояний  $m^*/m$  найдем значение, равное 1.50. Подставляя эту величину в формулу (6), получим  $E_{dc} = -4.55$  эВ, что прекрасно согласуется с оценкой по формуле (5). Отсюда следует, что, по-видимому, формула (5) лучше описывает данные эксперимента, чем выражение (2), хотя для высококовалентных соединений (C, SiC и BN) различие не велико.

Работа выполнена при частичной поддержке Министерства обороны США.

- [1] *Silicon Carbide and Related Materials (Proc. Fifth Int. Conf.)*, ed. by M.G. Spencer et al. [Inst. Phys. Conf. Ser., N 137 (Bristol and Philadelphia, 1993)].
- [2] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел* (М., Мир, 1983).
- [3] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B*, **27**, 3592 (1983).
- [4] D.J. Chadi, M.L. Cohen. *Phys. St. Sol. (b)*, **68**, 405 (1975).
- [5] H.J. Van Daal, W.F. Knippenberg, J.D. Wasscher. *J. Phys. Chem. Sol.*, **24**, 109 (1963).
- [6] *Landolt-Börnstein Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, ed. by O. Madelung (Berlin, Springer Verlag, 1982) v. 17, subvol. a.
- [7] *Физические величины. Справочник*, под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова (М., Энергоатомиздат, 1991).

Редактор Л.В. Шаронова

## About the deformation potential of wide-gap semiconductors

*S. Yu. Davydov, S. K. Tikhonov*

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

---