

УДК 539.215 : 539.211+621.315.592.3

© 1992

## АНИЗОТРОПИЯ ЭФФЕКТИВНЫХ МАСС ЭЛЕКТРОНОВ В КАРБИДЕ КРЕМНИЯ

А. В. Мельничук, Ю. А. Пасечник

Методом дисперсионного анализа спектров инфракрасного отражения света монокристаллов карбида кремния  $6H$ , легированных азотом, получены величины эффективных масс  $m_1^* = 0.25 m_e$  и  $m_2^* = 1.7 m_e$  при ориентации электрического вектора излучения  $E \perp C$  и  $E \parallel C$  соответственно. Показано, что коэффициент затухания  $\Gamma_\phi$  поперечного оптического фонона  $\gamma_{\perp 1} = 797 \text{ см}^{-1}$  при увеличении концентрации электронов от  $10^{15}$  до  $10^{20} \text{ см}^{-3}$  увеличивается от 3 до  $20 \text{ см}^{-1}$ . Изучены зависимости коэффициентов затухания плазмонов от частоты плазмонов и их анизотропии, которая имеет величину  $\gamma_{\perp 1} / \gamma_{\parallel 1} = 1.9$ .

Карбид кремния  $6H$  (политип  $\text{SiC } 6H$ ) является наиболее распространенным и используемым в технике, однако энергетическая структура зон его изучена недостаточно. Монокристаллы  $\text{SiC } 6H$  относят к кристаллическому классу  $C_{6v}$ , они имеют 12 атомов в элементарной ячейке и многодолинную зону проводимости ( $c$ -зону) [1]. Минимумы  $c$ -зоны расположены вдоль  $ML$  линии в зоне Бриллюэна [2], наблюдаются три (или шесть) группы электронов. Эллипсоиды изоэнергетических поверхностей  $c$ -зоны имеют одно и то же значение эффективной массы электронов  $m_1^*$  вдоль оптической оси  $C$  ( $z$ -направление), которая в разных работах имеет величины от 0.96 до  $2m_e$ , а значение  $m_1^*$  — от 0.2 до  $0.5m_e$ , где  $m_1^*$  — эффективная масса электронов перпендикулярно оси  $C$ , а  $m_e$  — масса свободного электрона [2–8].

В работе [8] для определения эффективной массы электронов в  $\text{SiC } 6H$  использованы экспериментальные инфракрасные (ИК) спектры отражения сильно легированных монокристаллов, ось  $C$  которых перпендикулярна естественной поверхности пластин. Поэтому детально исследована величина эффективной массы электронов в области концентраций  $1.4 \cdot 10^{18} - 1.4 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , которая оказалась равной  $m_1^* = (0.23 \pm 0.03) m_e$ . Показано, что при ориентации электрического вектора  $E \perp C$  существенного отличия между спектрами отражения естественного и линейно-поляризованного света не замечено, что свидетельствует об изотропности оптических свойств кристаллов при  $E \perp C$ . Данные об эффективной массе электронов  $m_1^*$ , полученные из анализа оптических спектров отражения, отсутствуют.

Проведенное нами сравнение теоретических и экспериментальных спектров ИК отражения в области остаточных лучей показало, что на максимум отражательной способности существенно влияет значение коэффициента затухания поперечных оптических фононов  $\Gamma_\phi$  [9]. В работе [10] при помощи метода комбинационного рассеяния света (КР) показано, что в сильно легированном кубическом карбиде кремния  $3C$  коэффициент затухания продольного оптического фонона  $\gamma_L$  увеличивается от  $4 \text{ см}^{-1}$  для концентрации электронов  $n_0 = 6.9 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$  до  $7.5 \text{ см}^{-1}$  при  $n_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , что согласуется с [9] для  $\text{SiC } 6H$ . Однако в [8] на рис. 1 максимальное значение отражательной способности при

высоких концентрациях электронов одно и то же, что не согласуется с нашими экспериментальными данными.

В связи с вышесказанным в данной работе решалась задача: выяснить причины указанных расхождений и методом дисперсионного анализа спектров ИК отражения SiC 6H при  $E \perp C$  и  $E \parallel C$  в области плазмон-фононного взаимодействия изучить анизотропию эффективных масс электронов и коэффициентов затухания плазмонов. Для расчетов использованы данные для статической и высокочастотной диэлектрических проницаемостей  $\epsilon_{0\perp, \parallel}$  и  $\epsilon_{\infty\perp, \parallel}$ , частот поперечных и продольных оптических фононов  $\nu_{T\perp, \parallel}$  и  $\nu_{L\perp, \parallel}$  (в  $\text{см}^{-1}$ ) SiC 6H при  $E \perp C$  и  $E \parallel C$ , использованные в [9]. При этом  $\Gamma_{\phi\perp} = \Gamma_{\phi\parallel} = \Gamma_{\phi}$ . Зависимость величины диэлектрической проницаемости от частоты  $\epsilon(\nu)$  в области плазмон-фононного взаимодействия представлена в виде известной формулы Гельмгольца—Кеттлера (см. выражение (1) работы [8]), однако в отличие от нее при сравнении на ЭВМ теоретических и экспериментальных спектров для лучшего и более однозначного их совпадения варьировались лишь три параметра: частота плазменного резонанса  $\nu_{p\perp}$ , коэффициенты затухания фононов  $\Gamma_{\phi\perp}$  и плазмонов  $\gamma_{p\perp}$ , что позволило с более высокой точностью моделировать плазмон-фононную систему.

Спектры ИК отражения  $R(\nu)$  в области частот (в  $\text{см}^{-1}$ ) 300—1500  $\text{см}^{-1}$  измерены при помощи спектрометров SPECORD M-80 и ИКС-31. Используются монокристаллы с естественной и полированной поверхностями, обработанными 15 мин в плавиковой кислоте HF. Для измерений  $R(\nu)$  при  $E \parallel C$  использованы сильно легированные SiC 6H, вырезанные и полированные так, что поверхность пластин параллельна оси  $C$ . Измерения проведены в линейно-поляризованном свете. Концентрация электронов в  $c$ -зоне определялась при помощи измерения пропускания образцов при  $E \perp C$  на длине волны  $\lambda = 0.628$  мкм, для ряда образцов использован электронный парамагнитный резонанс. Полученные данные хорошо согласуются с результатами измерений эффекта Холла.

Расчеты ИК спектров отражения при  $E \perp C$  и  $E \parallel C$  проведены при помощи уравнений, учитывающих вклад в отражение объемных фононов и плазмонов [8, 9]. Сравнение теоретических и экспериментальных спектров проведено на ПЭВМ «Электроника-0585 МС» методом наименьших квадратов при регистрации среднего по всем точкам квадратичного отклонения  $\delta$  расчетного значения  $RT(\nu)$  к экспериментальным значениям  $RE(\nu)$ ,

$$\delta = \left\{ \sum_{i=1}^n [RT_i(\nu) - RE_i(\nu)]^2 \right\}^{1/2} n,$$

$n$  — количество точек. Используя значение частоты плазменного резонанса, полученное в результате сравнения экспериментальных и расчетных спектров отражения при  $E \perp C$ , и полученную независимо по пропусканию концентрацию электронов  $n_0$  в SiC 6H, мы определяли для сильно легированных образцов значение эффективной массы  $m_{\perp}^*$ .

При расчете эффективной массы  $m_{\parallel}^*$  использовано выражение

$$m_{\parallel}^* = \frac{\tilde{m}_{\perp}^* \nu_{p\perp}^2 \epsilon_{\infty\perp}}{\nu_{p\parallel}^2 \epsilon_{\infty\parallel}}, \quad (1)$$

$$\nu_{p\perp, \parallel}^2 = \frac{n_0^2 q^2}{4\pi^2 \epsilon_0 \epsilon_{\infty\perp, \parallel} m_{\perp, \parallel}^*}, \quad (2)$$

$q$  — заряд электрона,  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная.

На рис. 1, 1 представлен спектр отражения  $R(\nu)$  SiC 6H при  $E \perp C$  и  $n_0 = 8.7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ . Расчет  $R(\nu)$  (линия) хорошо согласуется с экспериментальными данными (точки). При точности согласования  $\delta = 0.0052$ ,  $\nu_{p\perp} = 2190 \text{ см}^{-1}$ ,  $\Gamma_{\phi} = 20 \text{ см}^{-1}$  и  $\gamma_{p\perp} = 700 \text{ см}^{-1}$ . Кривая 2 соответствует кристаллу SiC 6H с  $n_0 =$

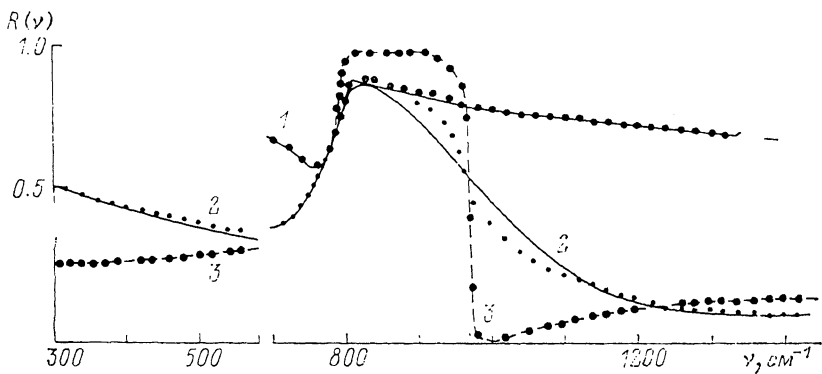


Рис. 1. Зависимость коэффициента отражения ИК излучения  $R(\nu)$  легированных азотом монокристаллов SiC 6H от частоты.

Е  $\perp$  С. Точки — эксперимент, линии — расчет. 1 —  $n_0 = 8.7 \cdot 10^{19}$ , 2 —  $1.8 \cdot 10^{19}$ , 3 —  $1 \cdot 10^{15}$  см $^{-3}$ .

$= 1.8 \cdot 10^{19}$  см $^{-3}$  при  $\delta = 0.0046$ ,  $\nu_{p\perp} = 1000$  см $^{-1}$ ,  $\Gamma_\phi = 20$  см $^{-1}$  и  $\gamma_{p\perp} = 920$  см $^{-1}$ . Усредненное значение  $m_\perp^*$  для измеренных нами образцов (см., например, кривые 1, 2 на рис. 1) оказалось равным  $0.25m_0$ .

При концентрации электронов  $n_0 = 1 \cdot 10^{15}$  см $^{-3}$  коэффициент отражения  $R(\nu)$  на частотах 830—930 см $^{-1}$  имеет значение 0.98 при  $\Gamma_\phi = 3$  см $^{-1}$  (кривая 3), зависимость существенно отличается от подобной для сильно легированных кристаллов.

Сравнение экспериментальных и расчетных  $R(\nu)$  показывает наибольшую расходимость в диапазоне частот 800—1000 см $^{-1}$  для слабо легированных кристаллов [9]. Эксперимент показал, что на отражательную способность карбида кремния в этой области частот ( $\nu_T < \nu < \nu_L$ ) влияет обработка поверхности. Поэтому важно было выбрать образец с низкой концентрацией электронов ( $n_0 \leq 10^{15}$  см $^{-3}$ ) и достаточно совершенной обработкой поверхности, чтобы проверить используемые в расчетах основные (указанные выше) параметры модели монокристалла SiC 6H. Кривая 3 (рис. 1) соответствует экспериментальным данным  $RE(\nu)$  при Е  $\perp$  С образца 03—56 с естественной поверхностью, протравленной в плавиковой кислоте 15 мин. Расчетная зависимость  $RT(\nu)$  с точностью согласования  $\delta = 0.0024$  совпала с экспериментальной  $RE(\nu)$  при  $n_0 = 1.5 \cdot 10^{15}$  см $^{-3}$ , что доказало правильность выбранных исходных данных для SiC 6H (кривая 3).

Следует отметить, что субмикронная обработка поверхности SiC 6H уменьшает отражательную способность в области 800—840 см $^{-1}$  для слабо [9] и сильно легированных кристаллов.

На рис. 2 представлены экспериментальные и теоретические зависимости  $R_\perp(\nu)$  и  $R_\parallel(\nu)$  сильно легированного монокристалла SiC 6H при Е  $\parallel$  С (1) и Е  $\perp$  С (2). Кривая 3 получена в результате деления спектра  $R_\perp(\nu)$  (2) на спектр  $R_\parallel(\nu)$  (1). Кривые 1 и 2 получены при помощи расчетных данных на основе указанных выше постоянных при Е  $\perp$  С и Е  $\parallel$  С (используемых также ранее в работе [9]) и вариации  $\nu_{p\perp}$ ,  $\parallel$  и  $\gamma_{p\perp}$ ,  $\parallel$  при сравнении спектров на ПЭВМ по методу наименьших квадратов. Расчет не согласуется с экспериментальными точками на частотах 800—940 см $^{-1}$ . Причиной рассогласования  $RE(\nu)$  и  $RT(\nu)$  на частотах 800—940 см $^{-1}$ , как показал анализ, является проявление тонкого нарушенного слоя толщиной  $d \leq 0.1$  мкм, вызванного обработкой алмазной пастой с диаметром частиц абразива  $d \leq 0.5$  мкм. Он проявляется только на частотах 800—940 см $^{-1}$  вследствие того, что в этой области ИК излучение взаимодействует наиболее активно с приповерхностным слоем, поскольку пока-

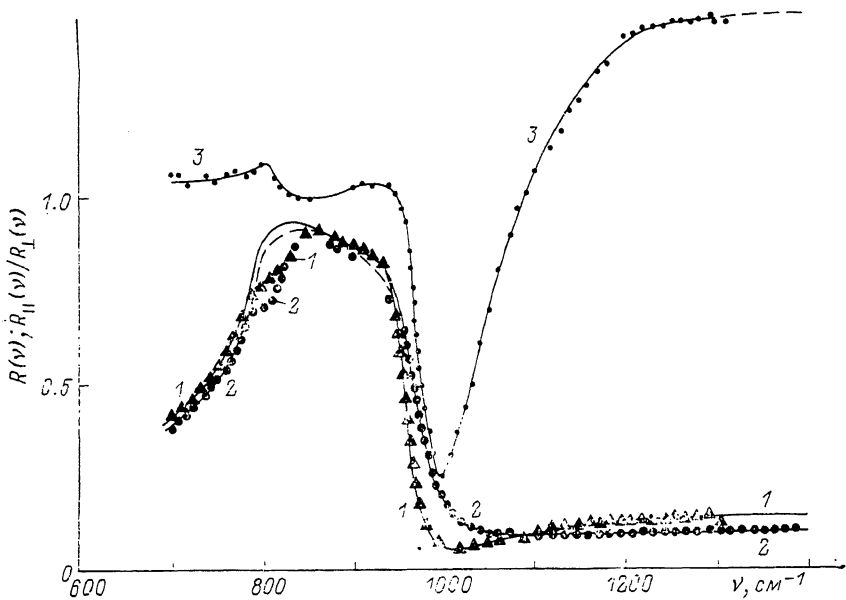


Рис. 2. Зависимость  $R_{\parallel}(\nu)$ ,  $R_{\perp}(\nu)$  и  $R_{\perp}(\nu)/R_{\parallel}(\nu)$  легированного азотом SiC 6H при  $E \perp C$  и  $E \parallel C$ .

1 —  $E \parallel C$ ,  $n_0 = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ; 2 —  $E \perp C$ ; 3 — отношение экспериментальных  $R_{\perp}(\nu)/R_{\parallel}(\nu)$ . Точки — эксперимент, линии — расчет.

затель преломления и показатель поглощения соответственно порядка  $n \approx 4 \div 13$  и  $\chi \approx 1 \div 18$ , что определяет глубину взаимодействия при отражении  $\leq 1 \text{ мкм}$ . В иных диапазонах частот глубина проникновения SiC 6H значительно больше (примерно 4—8 мкм) и нарушенные слои практически не проявляются, что доказывает совпадение  $RE(\nu)$  и  $RT(\nu)$  в иных от указанной области частот при  $E \parallel C$  и  $E \perp C$ . Логичным является исключение этой области (800—940  $\text{см}^{-1}$ ) при сравнении спектров на ПЭВМ, что увеличивает точность использования параметров «полубесконечной» модели SiC 6H. Анизотропия эффективных масс электронов однозначно проявляется в широкой области 980—1300  $\text{см}^{-1}$ , что и было использовано в данной работе.

Для образца С-5 при  $E \perp C$   $\Gamma_{\phi} = 12 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu_{p\perp} = 550 \text{ см}^{-1}$  и  $\gamma_{p\perp} = 620 \text{ см}^{-1}$  при  $\delta = 0.0047$ , а  $n_0 = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Сравнение расчетных спектров с экспериментальными при  $E \parallel C$  позволило определить  $\nu_{p\parallel} = 200 \text{ см}^{-1}$ , а  $\gamma_{p\parallel} = 340 \text{ см}^{-1}$  при  $\delta = 0.0033$ . Используя выражения (1), (2), при  $m_{\perp}^* = 0.25m_e$  определяем (для С-5)  $m_{\parallel}^* = 1.78m_e$ . Нами получено среднее значение  $m_{\parallel}^* = (1.7 \pm 0.2)m_e$ .

На рис. 3, а представлена зависимость величины коэффициента затухания поперечного оптического фонона  $\nu_{\perp}$  от частоты плазменного резонанса  $\nu_{p\perp}$  при  $E \perp C$ . Значение  $\Gamma_{\phi}$  получено при сравнении экспериментальных и расчетных спектров  $R(\nu)$ , оно изменяется от 2.7 до 20  $\text{см}^{-1}$  в диапазоне  $\nu_{p\perp}$  от 50 до  $2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ . Увеличение концентрации азота в SiC 6H от  $10^{16}$  до  $10^{21} \text{ см}^{-3}$  приводит к увеличению ангармонизма и коэффициента затухания поперечных оптических фононов.

На рис. 3, б показана зависимость коэффициента затухания плазмонов в указанном выше диапазоне концентраций электронов в SiC 6H при  $E \perp C$ . Величина  $\gamma_{p\perp}$  изменяется от 20 до  $2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$  для сильно легированных SiC 6H. Следует отметить, что при одной и той же частоте (например,  $\nu_{p\perp} = 1000 \text{ см}^{-1}$ ) наблюдаются разные величины  $\gamma_{p\perp}$  (от 900 до 1500  $\text{см}^{-1}$ ).

Взаимодействие продольных оптических фононов с плазмонами в SiC 6H исследовалось в работе [2] методом комбинационного рассеяния света. Плазмон-

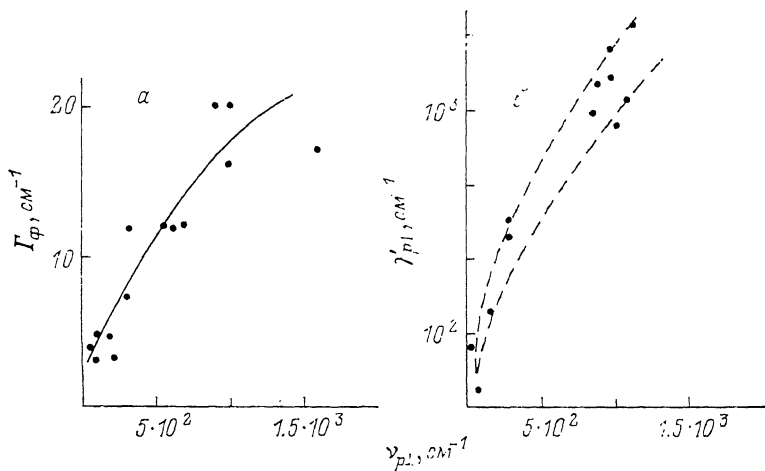


Рис. 3. Зависимость коэффициента затухания поперечных оптических фононов  $\Gamma_{\phi}$  от плазменной частоты при  $E \perp C$ ,  $\nu_{i\perp} = 797 \text{ см}^{-1}$  (а). Зависимость коэффициента затухания плазмонов в сильно легированных SiC 6H от плазменной частоты при  $E \perp C$  (б).

фононные колебания наблюдались, когда, согласно правилам отбора, в КР разрешены колебания  $A_1$  и  $E_2$ . Авторы [2] исследовали асимметричной формы спектр КР с максимумом вблизи  $980 \text{ см}^{-1}$ , который они связывают с  $A_1$  колебаниями, когда электроны смещаются вдоль оси  $C$ . Показано, что при  $300 \text{ К}$  и  $n_0 = 1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$   $\nu_{L\parallel} = 965 \text{ см}^{-1}$  при  $\gamma_{L\parallel} = 4 \text{ см}^{-1}$ . Теоретическое описание широкого спектра КР асимметричной формы потребовало применения подгоночного параметра  $\omega_0'$  и эффективной массы электронов  $m_{\text{эфф}}^* = 0.5m_e$  [2].

Изучение зоны проводимости в SiC 6H методами эффекта Фарадея и поглощения излучения свободными носителями зарядов позволило оценить величины эффективных масс электронов  $m_{\perp}^* = 0.25m_e$ ,  $m_{\parallel}^* = (1.5 \pm 0.2)m_e$  и фактор анизотропии времен релаксации электронов  $\tau_{\parallel}/\tau_{\perp} = \gamma_{i\parallel}/\gamma_{i\perp} = 2.5$  [3]. Значение  $m_{\parallel}^* = (1.75 \pm 0.02)m_e$  дает наилучшее согласие с экспериментальными данными по оптическому поглощению в модели для сверхрешетки SiC 6H в работе [5].

При исследовании ИК отражения SiC 6H правилами отбора разрешено проявление поперечных и продольных колебаний типа  $A_1$  и  $E_1$ , поэтому при  $E \perp C$  излучение взаимодействует со смешанными плазмон-фононными колебаниями симметрии  $E_1$  и экспериментально хорошо подтверждается принятая модель зоны проводимости с эффективной массой электронов  $m_{\perp}^* = (0.25 \pm \pm 0.01)m_e$ .

При  $E \parallel C$  проявляются плазмон-фононные колебания типа  $A_1$ . Сравнение экспериментальных и расчетных спектров  $R(\nu)$  позволило оценить оптическую эффективную массу электронов  $m_{\parallel}^* = (1.7 \pm 0.2)m_e$ , которая по величине практически совпала со значением работы [5]. Полученные нами данные дают возможность оценить величину анизотропии времен релаксации электронов  $\tau_{\parallel}/\tau_{\perp} = \gamma_{i\perp}/\gamma_{i\parallel} = 620 \text{ см}^{-1}/320 \text{ см}^{-1} = 1.9$ . Значение  $\tau_{\parallel}/\tau_{\perp}$  качественно согласуется с данными работы [3], хотя их величина 2.5 кажется большой. Механизм рассеяния электронов в карбиде кремния, который легирован азотом, требует дальнейших исследований; данные указывают на различные коэффициенты затухания электронов при их одной и той же концентрации.

Таким образом, в работе методом ИК спектроскопии отражения для SiC 6H получено значение эффективной массы электронов  $m_{\perp}^* = 0.25m_e$ . Впервые этим же методом определено значение  $m_{\parallel}^* = 1.7m_e$ , которое согласуется с данными [3, 4], полученными иными методами. Экспериментально показано, что

увеличение степени легирования азотом карбида кремния  $6H$  приводит к увеличению затухания поперечного оптического фонона  $\Gamma_{\phi}$  ( $\nu_{\perp} = 797 \text{ см}^{-1}$ ) от 3 до  $20 \text{ см}^{-1}$ , что вызвано увеличением ангармонических эффектов при повышении концентрации донорной примеси.

### Список литературы

- [1] Карбид кремния / Под ред. Г. Хениша и Р. Роя. М.: Мир, 1972. 386 с.
- [2] Colwell P. J., Klein M. Y. // Phys. Rev. B. 1972. V. 6. N 6. P. 498—515.
- [3] Ellis B., Moss J. S. // Proc. Roy. Soc. 1967. V. A299. N 145. P. 383—404.
- [4] Ломакина Г. А., Водаков Ю. А. // ФТТ. 1973. Т. 15. № 1. С. 123—127.
- [5] Дубровский Г. Б., Лешева А. А. // ФТТ. 1977. Т. 19. № 5. С. 1252—1257.
- [6] Гейдур С. А., Прокопенко В. Т., Яськов А. Д. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 9. С. 2858—2860.
- [7] Вакуленко О. В., Гусева О. В. // ФТП. 1981. Т. 15. № 8. С. 1528—1530.
- [8] Ильин М. А., Кухарский А. А., Рашевская Е. П., Субашиев В. К. // ФТТ. 1971. Т. 13. № 8. С. 2478—2480.
- [9] Пасечник Ю. А., Снитко О. В. // УФЖ. 1975. Т. 20. № 4. С. 674—678.
- [10] Yuqami H., Nakashima S., Matsuishi A. et al. // J. Appl. Phys. 1987. V. 61. N 1. P. 354—358.

Киевский государственный педагогический институт им. А. М. Горького

Поступило в Редакцию  
23 января 1991 г.  
В окончательной редакции  
15 июля 1991 г.