

Адсорбция атомов I и VII групп на политипах карбида кремния

© С.Ю. Давыдов¹, О.В. Посредник²

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет (ЛЭТИ),
197376 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Sergei_Davydov@mail.ru

Поступила в Редакцию 20 марта 2020 г.

В окончательной редакции 1 июля 2020 г.

Принята к публикации 13 июля 2020 г.

В рамках модели Халдейна–Андерсона получены оценки перехода заряда и энергии адсорбции атомов щелочных металлов и галогенов на C- и Si-гранях политипов 3C-, 6H- и 4H-SiC. Выявлены вклады зонных и локальных состояний в формирование заряда адатома, металлической и ионной составляющих энергии адсорбции.

Ключевые слова: адатом, подложка, переход заряда, энергия адсорбции.

DOI: 10.21883/FTP.2020.11.50086.9391

1. Введение

Карбид кремния, характеризующийся большим количеством политипов с существенно различающимися ширинами запрещенных зон и высокой стойкостью к агрессивным средам, по-прежнему привлекает пристальное внимание исследователей [1–6]. Однако, несмотря на то, что адсорбционная способность материалов является их важной характеристикой, как с фундаментальной, так и с технологической точек зрения [7–10], адсорбционные свойства карбида кремния остаются малоисследованными. В работах [11–13] мы продемонстрировали возможность описания этих свойств в рамках простых моделей адсорбции, позволяющих получить аналитические выражения, пригодные для дальнейшего использования не только теоретиками. Работы эти были во многом стимулированы экспериментальными результатами [6,14,15]. Настоящей публикацией мы начинаем систематические исследования адсорбционной способности SiC. Мы рассмотрим здесь адсорбцию атомов I и VII групп, т.е. наиболее электроположительных и электроотрицательных элементов, на полярных C- и Si-гранях политипов 3C, 6H и 4H карбида кремния. Основное внимание в работе уделяется оценкам перехода заряда и энергии адсорбции.

2. Модель и численные оценки

Модельный подход к проблеме адсорбции изложен в [16,17]. Плотность состояний $\rho_a(\omega)$ на адатоме может быть представлена в виде контура Лорентца

$$\rho_a(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(\omega)}{[\omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega)]^2 + \Gamma^2(\omega)}, \quad (1)$$

где ω — энергетическая переменная, ε_a — энергия уровня адсорбируемого атома, $\Gamma(\omega) = \pi V^2 \rho_{\text{sub}}(\omega)$ — функция уширения квазиуровня ($\rho_{\text{sub}}(\omega)$ — плот-

ность состояний подложки, V — матричный элемент взаимодействия адатом–подложка), $\Lambda(\omega)$ — функция сдвига квазиуровня (гильбертова трансформанта функции $\Gamma(\omega)$). Для описания плотности состояний карбида кремния воспользуемся моделью Халдейна–Андерсона [16,17]: $\rho_{\text{sub}}(\omega) = \rho_s$ для $|\omega - E_0| \geq E_g/2$ и $\rho_{\text{sub}}(\omega) = 0$ при $|\omega - E_0| < E_g/2$, где $E_0 = \chi + E_g/2$ — энергия центра запрещенной зоны относительно вакуума, E_g и χ — ширина запрещенной зоны и электронное средство политипа карбида кремния. Полагая $E_0 = 0$, получим $\Lambda(\omega) = (\Gamma/\pi) \ln |(\omega - E_g/2)/(\omega + E_g/2)|$, где $\Gamma \equiv \pi V^2 \rho_s = \text{const}$. Для политипов 3C, 6H и 4H карбида кремния соответственно имеем: $E_g = 2.40, 3.00$ и 3.23 эВ, $\chi = 4.00, 3.45$ и 3.17 эВ [18].

Рассмотрим теперь значения ε_a . Согласно [16], энергия одноэлектронного уровня адатома щелочного металла равна $\varepsilon_a = -I + e^2/d + (\chi + E_g/2)$, для однодырочного уровня галогена имеем $\varepsilon_a = -A - e^2/d + (\chi + E_g/2)$, где I — энергия ионизации [19], A — средство атома к электрону [19], d — длина адсорбционной связи, e — величина заряда электрона. Полагаем $d(X - C, Si) = r_a(C, Si) + r_a(X)$, где $r_a(C, Si)$ — атомные радиусы углерода или кремния, $r_a(X)$ — атомный радиус щелочного металла M или галогена H (величины радиусов для M брались из [19], для H (по Полингу) — из [20]). Значения ε_a представлены на рис. 1 для щелочных металлов и на рис. 2 для галогенов.

Для адсорбции атома лития на C-границе положим $\Gamma = 1$ эВ. Значения Γ для адатомов других щелочных металлов определим исходя из того, что матричный элемент $V \propto d^{-2}$ и $\Gamma \propto V^2$. Тогда $\Gamma(M) = \gamma \Gamma(\text{Li})$, где $\gamma = [d(\text{Li} - C, \text{Si})/d(M - C, \text{Si})]^4$. В случае адсорбции галогенов нужно дополнительно учесть, что в соответствии с теорией Харрисона $V_H = (V_{sp\sigma} + \sqrt{3}V_{pp\sigma})/2$, тогда как в случае адсорбции щелочных металлов $V_M = (V_{ss\sigma} + \sqrt{3}V_{sp\sigma})/2$ [21]. Тогда $\Gamma(H) = \gamma' \gamma \Gamma(\text{Li})$, где $\gamma' = 0.97$ (здесь мы считаем все матричные элемен-

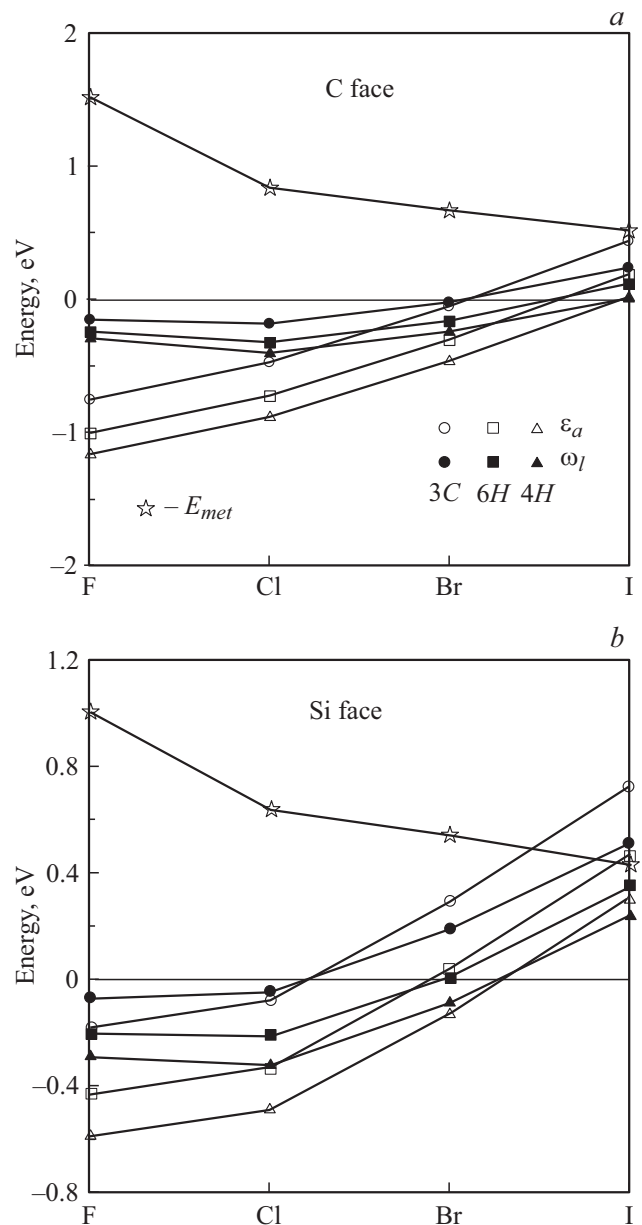
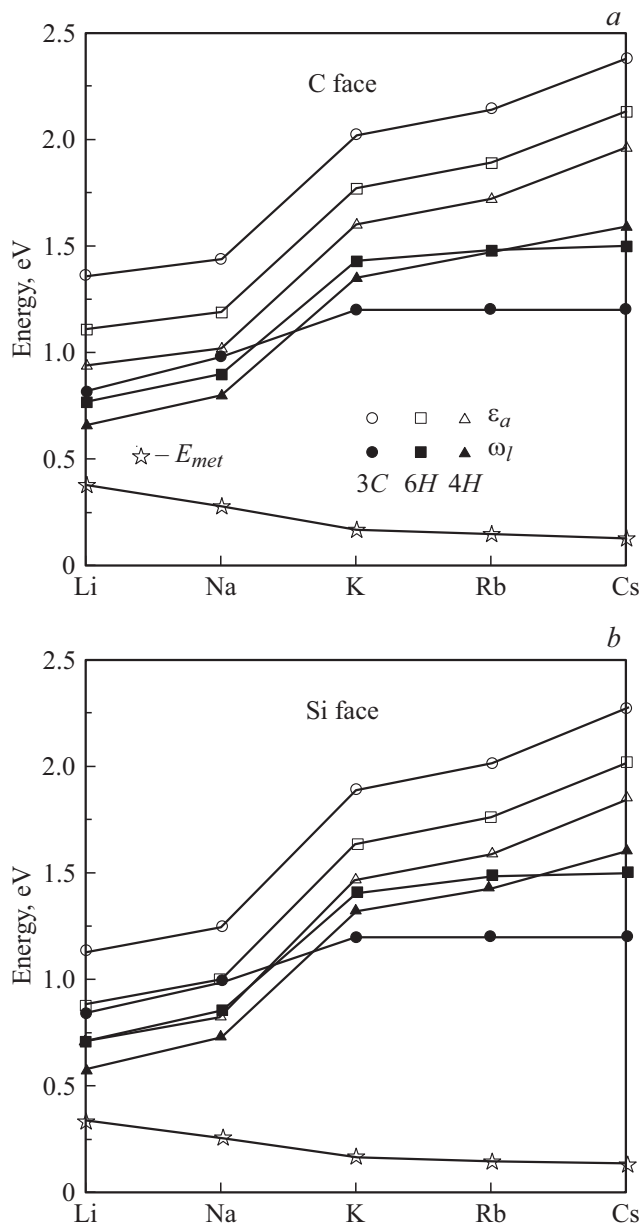


Рис. 1. Энергии уровней ε_a , ω_l и металлическая составляющая энергии адсорбции $-E_{met}$ (в эВ, звездочки) для щелочных металлов, адсорбированных на C- (a) и Si-гранях (b) политипов 3C, 6H и 4H карбида кремния.

Рис. 2. То же, что на рис. 1, но для галогенов.

ты $V_{ll\sigma}$ положительными величинами, см. подробнее [16,21]).

Полагая температуру нулевой, рассчитаем числа заполнения $n = \int_{-\infty}^{E_F} \rho_a(\omega) d\omega$, где E_F — уровень Ферми адсорбционной системы и $\rho_a(\omega)$ дается выражением (1). Положим $n = n_v + n_l$, где n_v и n_l представляют собой соответственно вклады валентной зоны и локального уровня, находящегося в запрещенной зоне. Согласно оценкам [22], вклад валентной зоны есть

$$n_v = \frac{1}{\pi} \operatorname{arccotg} \frac{\varepsilon_a + R}{\Gamma}, \quad R = \frac{E_g}{2} \sqrt{1 + \frac{4\Gamma}{\pi E_g}}. \quad (2)$$

Положение локального уровня ω_l определяется из решения уравнения

$$\omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega) = 0 \quad (3)$$

в области $|\omega| \leq E_g/2$ [16,17,22]. Число заполнения локального состояния равно

$$n_l = \left(1 + \frac{\Gamma}{\pi} \frac{E_g}{(E_g/2)^2 - \omega_l^2} \right)^{-1} \Theta(E_F - \omega_l), \quad (4)$$

где $\Theta(E_F - \omega_l)$ — функция Хэвисайда. Значения ω_l для щелочных металлов и галогенов представлены на рис. 1 и 2.

Таблица 1. Значения перехода заряда $Z^{(>)}$ и энергии адсорбции $-E_{\text{ads}}^{(>)}$ (в эВ) для щелочных металлов, адсорбированных на C- и Si-гранях политипов 3C, 6H и 4H политипов карбида кремния

Адсорбат/3C	Li	Na	K	Rb	Cs
C-грань					
$Z^>$	0.89	0.93	0.97	0.98	0.98
$Z^<$	0.39	0.43	0.97	0.98	0.98
$-E_{\text{ads}}^>$	1.60	1.46	1.25	1.20	1.15
$-E_{\text{ads}}^<$	0.61	0.53	1.25	1.20	1.15
Si-грань					
$Z^>$	0.93	0.96	0.98	0.98	0.98
$Z^<$	0.38	0.33	0.98	0.98	0.98
$-E_{\text{ads}}^>$	1.47	1.35	1.15	1.09	1.06
$-E_{\text{ads}}^<$	0.53	0.39	1.15	1.09	1.05
Адсорбат/6H	Li	Na	K	Rb	Cs
C-грань					
$Z^>$	0.89	0.93	0.97	0.98	0.98
$Z^<$	0.25	0.22	0.34	0.78	0.98
$-E_{\text{ads}}^>$	1.42	1.46	1.25	1.20	1.15
$-E_{\text{ads}}^<$	0.46	0.35	0.51	0.82	1.15
Si-грань					
$Z^>$	0.94	0.96	0.98	0.98	0.99
$Z^<$	0.25	0.14	0.39	0.66	0.99
$-E_{\text{ads}}^>$	1.32	1.35	1.15	1.09	1.07
$-E_{\text{ads}}^<$	0.41	0.28	0.32	0.62	1.07
Адсорбат/4H	Li	Na	K	Rb	Cs
C-грань					
$Z^>$	0.89	0.93	0.97	0.98	0.98
$Z^<$	0.21	0.18	0.26	0.37	0.73
$-E_{\text{ads}}^>$	1.60	1.46	1.25	1.17	1.15
$-E_{\text{ads}}^<$	0.45	0.32	0.25	0.29	0.70
Si-грань					
$Z^>$	0.93	0.96	0.98	0.98	0.98
$Z^<$	0.13	0.11	0.16	0.21	0.74
$-E_{\text{ads}}^>$	1.47	1.35	1.15	1.13	1.05
$-E_{\text{ads}}^<$	0.41	0.27	0.20	0.19	0.66

Таблица 2. То же, что в табл. 1, но для адсорбции галогенов

Адсорбат/3C	F	Cl	Br	I
C-грань				
$Z^>$	0.42	0.36	0.29	0.20
$Z^<$	0.62	0.74	0.75	0.75
$-E_{\text{ads}}^>$	1.97	1.11	0.83	0.59
$-E_{\text{ads}}^<$	2.50	1.96	1.73	1.48
Si-грань				
$Z^>$	-0.32	-0.23	-0.16	-0.10
$Z^<$	-0.74	-0.82	-0.81	-0.78
$-E_{\text{ads}}^>$	1.21	0.73	0.58	0.44
$-E_{\text{ads}}^<$	2.09	1.76	1.56	1.30
Адсорбат/6H	F	Cl	Br	I
C-грань				
$Z^>$	0.41	0.35	0.28	0.20
$Z^<$	0.64	0.78	0.80	0.81
$-E_{\text{ads}}^>$	1.95	1.09	0.82	0.59
$-E_{\text{ads}}^<$	2.57	2.08	1.88	1.64
Si-грань				
$Z^>$	0.31	0.22	0.14	0.10
$Z^<$	0.78	0.86	0.83	0.85
$-E_{\text{ads}}^>$	1.20	0.72	0.57	0.44
$-E_{\text{ads}}^<$	2.21	1.87	1.61	1.47
Адсорбат/4H	F	Cl	Br	I
C-грань				
$Z^>$	0.41	0.35	0.29	0.20
$Z^<$	0.66	0.79	0.81	0.83
$-E_{\text{ads}}^>$	1.95	1.09	0.83	0.59
$-E_{\text{ads}}^<$	2.63	2.12	1.91	1.70
Si-грань				
$Z^>$	0.32	0.23	0.16	0.10
$Z^<$	0.80	0.88	0.87	0.87
$-E_{\text{ads}}^>$	1.21	0.73	0.57	0.44
$-E_{\text{ads}}^<$	2.28	1.92	1.71	1.52

Заряд адатома $Z = 1 - n$ при адсорбции щелочных металлов и $Z = -n$ при адсорбции галогенов. Отметим, что значение Z численно равно переходу заряда между адатомом и подложкой. В случае адсорбции щелочных металлов электрон переходит с адатома на подложку (адатомы являются донорами), для адсорбции галогенов наблюдается обратная картина (адатомы являются акцепторами). При определении величины Z большое значение имеет тип проводимости подложки. Если предположить, что уровень Ферми расположен вблизи дна зоны проводимости (n -тип) и все локальные уровни заполнены, так как $\omega_l < E_F$, то получаем заряд $Z^<$, минимальный для адатомов щелочных металлов и максимальный (по модулю) для адатомов галогенов. Если же уровень Ферми лежит вблизи потолка валентной

зоны (p -тип), так что $\omega_l > E_F$, то заряд $Z^>$ щелочных металлов максимален, а заряд галогенов минимален по модулю. Значения зарядов $Z^<$ и $Z^>$ приведены в табл. 1 и 2.

Перейдем к оценкам энергии адсорбции E_{ads} , которую можно представить в виде суммы металлической E_{met} и ионной E_{ion} составляющих. Металлическую составляющую энергии адсорбции E_{met} оцениваем исходя из соотношения неопределенностей $\Delta x \Delta p \sim \hbar$, где \hbar — приведенная постоянная Планка. Полагая, что в изолированном атоме $\Delta x \sim r_a$, а в адсорбированном состоянии $\Delta x \sim d$, получим выигрыш в кинетической энергии $\Delta E_{\text{kin}} \sim (\hbar^2/2md^2)[1 - (r_a/d)^2]$, где m — масса свободного электрона. Это понижение в кинетической энергии, связанное с делокализацией электрона при адсорбции, принимаем за оценку металлической состав-

ляющей энергии адсорбции:

$$E_{\text{met}} = -\frac{\hbar^2}{2md^2} \left(1 - \frac{r_a^2}{d^2}\right). \quad (5)$$

Значения E_{met} для щелочных металлов и галогенов представлены на рис. 1 и 2.

Ионный вклад в энергию адсорбции можно оценить исходя из электростатической формулы

$$E_{\text{ion}} = -\frac{(Ze)^2}{4d}. \quad (6)$$

Значения энергии адсорбции $E_{\text{ads}}^{<(>) } = E_{\text{met}} + E_{\text{ion}}^{<(>)}$ для щелочных металлов и галогенов представлены в табл. 1 и 2.

3. Обсуждение результатов

Прежде всего отметим, что в рядах $\text{Li} \rightarrow \text{Cs}$ и $\text{F} \rightarrow \text{I}$ во всех рассмотренных случаях имеет место сдвиг значений ε_a в положительном направлении (по энергии) (рис. 1 и 2). В случае щелочных металлов эта тенденция объясняется уменьшением потенциала ионизации при переходе от лития к цезию [19]. Рост ε_a в ряду галогенов связан с убылью отрицательного вклада кулоновского сдвига e^2/d из-за увеличения d . Почти тот же характер изменений имеет место для ω_l (рис. 1 и 2), так как $\omega_l \propto \varepsilon_a$ (см. уравнение (3), а также рис. 8.4 в [17] или рис. 1 в [22]). Когда локальный уровень достигает верхней границы запрещенной зоны $E_g/2$ в случае щелочных металлов (что имеет место для адсорбции на политипах 3С и 6Н, см. рис. 1) и нижней границы запрещенной зоны $-E_g/2$ в случае галогенов (при адсорбции на политипах 3С, 6Н и 4Н, рис. 2), рост ω_l прекращается. Отметим, что во всех случаях различия между адсорбцией на С- и Si-гранях незначительны.

Изменения чисел заполнения носят более сложный характер. Из выражения (2) следует, что n_v уменьшается с ростом ε_a . Это приводит к монотонному уменьшению значений n_v в рядах $\text{Li} \rightarrow \text{Cs}$ и $\text{F} \rightarrow \text{I}$. С другой стороны, из выражения (4) вытекает, что n_l достигает максимума при $\omega_l = 0$ и стремится к нулю при $\omega_l \rightarrow \pm E_g/2$. Так как для щелочных металлов $\varepsilon_a > 0$ и $\omega_l > 0$, значения n_l убывают в ряду $\text{Li} \rightarrow \text{Cs}$. Более того, для адсорбционных систем К, Rb, Cs/3С-SiC и Cs/6Н-SiC получаем $n_l = 0$. Во всех остальных случаях имеем $n_v \ll n_l$. При адсорбции галогенов отношение n_v/n_l в ряду $\text{F} \rightarrow \text{I}$ убывает. Для Cl, Br и I во всех случаях имеем $n_v/n_l < 1$. Для F то же неравенство имеет место при адсорбции на Si-гранях политипов, тогда как для С-граней имеем $n_v/n_l > 1$.

Перейдем к зарядам адатомов. Из табл. 1 легко видеть, что в ряду $\text{Li} \rightarrow \text{Cs}$ во всех рассмотренных случаях заряды положительны и возрастают (некоторые слабо выраженные особенности имеют место для Na). Заряды $Z^< \sim 1$ изменяются сравнительно мало, тогда как заряды $Z^>$ для элементов начала и конца ряда

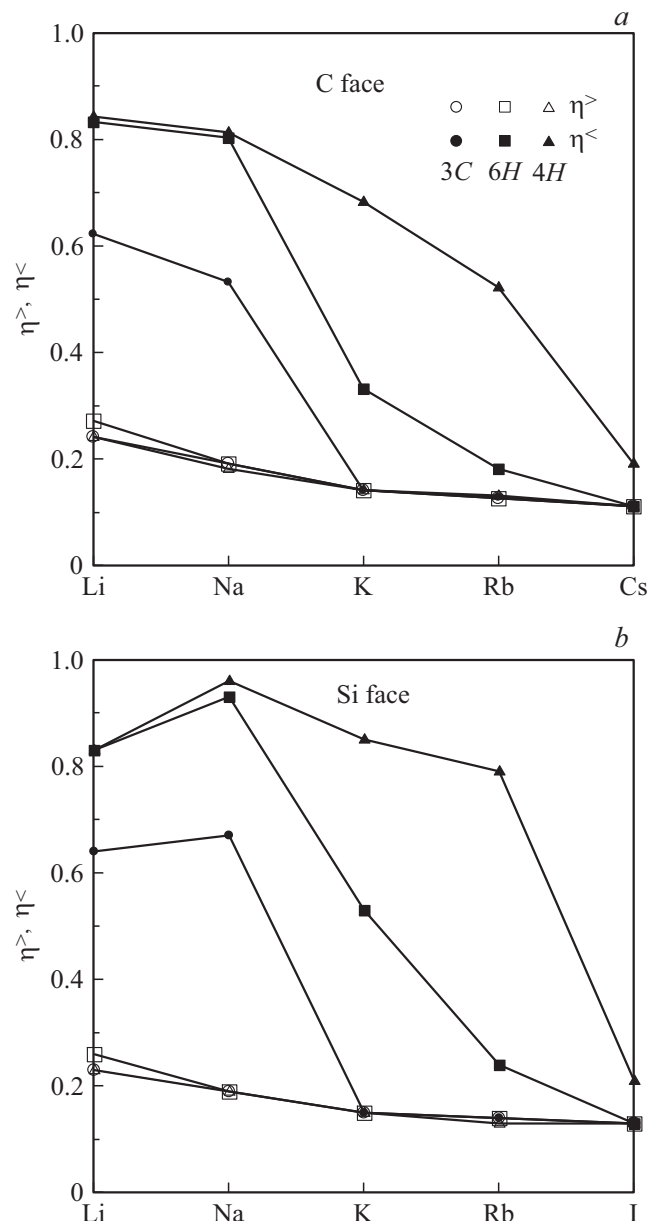


Рис. 3. Значения отношения $\eta^{<(>) } = E_{\text{met}}/E_{\text{ads}}^{<(>) }$ для щелочных металлов, адсорбированных на С- (а) и Si-гранях (b) политипов 3С, 6Н и 4Н карбида кремния p-типа ($\eta^>$) и n-типа проводимости ($\eta^<$).

сильно различаются. В адсорбционных системах К, Rb, Cs/3С-SiC и Cs/6Н-SiC резкий рост $Z^<$ связан с обнулением вклада n_l . Для галогенов ситуация иная: заряды отрицательны, значения $|Z^>|$ в ряду $\text{F} \rightarrow \text{I}$ монотонно убывают, значения $|Z^<|$ изменяются сравнительно мало (табл. 2). Отметим также, что переход заряда достаточно слабо зависит как от политипа карбида кремния, так и от грани, на которой имеет место адсорбция.

Обратимся теперь к оценкам энергии адсорбции $E_{\text{ads}}^{<(>) }$. Из рис. 1, а и 2, а виден спад значений металлического вклада $|E_{\text{met}}|$ в рядах $\text{Li} \rightarrow \text{Cs}$ и $\text{F} \rightarrow \text{I}$. Следует отметить, что для галогенов величины $|E_{\text{met}}|$

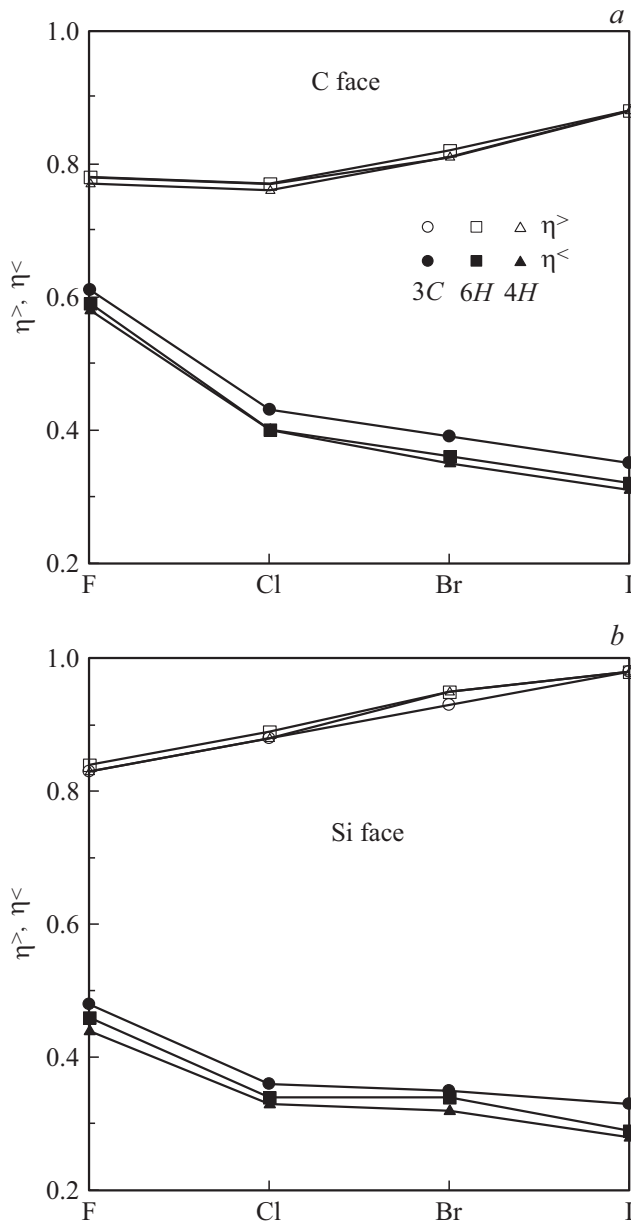


Рис. 4. То же, что на рис. 3, но для галогенов.

значительно выше, чем для щелочных металлов. Все эти особенности связаны главным образом с изменением атомных радиусов r_a и, как следствие, длин адсорбционных связей d , которые растут при переходе от первого элемента ряда к последнему, причем для галогенов значения r_a и d меньше, чем для щелочных металлов. Результаты оценок суммарной энергии адсорбции $E_{ads}^{(>)}$ приведены в табл. 1 и 2. Для щелочных металлов, адсорбированных на С-грани (табл. 1), наблюдается плавный спад значений $|E_{ads}^{>}|$ (за исключением Na/SiC(000 $\bar{1}$)). Для Si-грани изменения $|E_{ads}^{<}|$ в ряду Li \rightarrow Cs заметно меньше, чем изменения $|E_{ads}^{>}|$. Вариации $E_{ads}^{(>)}$ при адсорбции щелочных металлов связаны, главным образом, с вариациями $E_{ion}^{(>)}$. При этом $|E_{ads}^{(>)}|$ для С-грани

больше, чем для Si-грани. Для галогенов значения $|E_{ads}^{(>)}|$ плавно убывают в ряду F \rightarrow I, причем $|E_{ads}^{(>)}|$ для Si-грани больше, чем для С-грани.

На рис. 3 и 4 представлены значения параметров $\eta^{(>)}$ = $E_{met}/E_{ads}^{(>)}$, определяющих относительный вес металлического вклада в полную энергию адсорбции. Для щелочных металлов отношения $\eta^{(>)}$ убывают в ряду Li \rightarrow Cs для обеих граней (снова для адсорбции натрия на Si-грани наблюдаются отклонения). В ряду F \rightarrow I отношение $\eta^{>}$ растет, а $\eta^{<}$ убывает. Для всех адсорбатов $\eta^{<} \leq \eta^{>}$. Из рис. 3 и 4 можно определить также относительный вклад ионной составляющей $E_{ion}^{(>)}/E_{ads}^{(>)}$, равный $1 - \eta^{(>)}$.

К сожалению, полученные нами оценки сравнить практически не с чем. Действительно, мы отыскали только работу [23], где энергии связи Cs и I с SiC (без упоминания о гранях и допировании) для различных адсорбционных позиций лежат соответственно в интервалах 1.66–1.91 и 3.22–3.86 эВ. Эти результаты представляются нам сильно завышенными. Интересно отметить, что в связи с возросшим интересом к двумерному гексагональному карбиду кремния (см. [24] и приведенные там ссылки) адсорбционные характеристики двумерного SiC изучены даже лучше по сравнению с его трехмерным предшественником. Так, например, в работе [25] приводятся следующие значения энергии адсорбции: 0.98 (Li), 0.37 (Na) и 0.59 эВ (K), что достаточно близко к полученным нами результатам.

4. Заключение

В настоящей работе мы рассматривали адсорбцию одиночного атома, т.е. пренебрегали его связью с остальными адатомами. Такой подход справедлив при покрытиях $\theta = N_a/N_{ML} \ll 1$, где N_a и N_{ML} — двумерные концентрации адатомов в слое и монослое. При конечных покрытиях нужно учитывать взаимодействия адатомов, среди которых самыми важными являются диполь-дипольное отталкивание, косвенный обмен через электронные состояния подложки и прямой обмен при высоких покрытиях [16,17]. При описании диполь-дипольного отталкивания следует учесть, что под действием поля, создаваемого заряженными адатомами и их отражениями в подложке, уровень адатома ϵ_a сдвигается и принимает значение

$$\epsilon_a(\theta) = \epsilon_a - \theta^{3/2} Z(\theta) \xi, \tag{7}$$

где $Z(\theta)$ — заряд адатома при покрытии θ , $\xi = 2e^2 d^2 N_{ML}^{3/2} \bar{A}$ — константа диполь-дипольного взаимодействия, $\bar{A} \sim 10$ — безразмерный множитель, слабо зависящий от геометрии адсорбированного слоя. Заменяя в формулах (2)–(4) ϵ_a , n_v и n_l на $\epsilon_a(\theta)$, $n_v(\theta)$ и $n_l(\theta)$, получим два самосогласованных уравнения, которые требуют отдельного рассмотрения. Легко показать, что учет дипольного отталкивания ведет к уменьшению

величины заряда адатомов, т.е. к деполяризации адсорбированного слоя. Действительно, из (7) следует, что при $Z(\theta) > 0$ уровень адатома $\varepsilon_a(\theta)$ сдвигается вниз по шкале энергий. При этом возрастают значения $n_v(\theta)$ и $n_l(\theta)$, а $Z(\theta)$ убывает. Если же $Z(\theta) < 0$, уровень $\varepsilon_a(\theta)$ сдвигается по энергии вверх, вследствие чего значения $n_v(\theta)$, $n_l(\theta)$ и $|Z(\theta)|$ убывают. К аналогичным результатам приводят и обменные взаимодействия (см. [8,16,17]). В дальнейшем мы планируем рассмотреть роль диполь-дипольного отталкивания адатомов подробнее.

Итак, в настоящей работе мы рассмотрели адсорбцию элементов I и VII групп на обеих гранях трех политипов карбида кремния и получили оценки перехода заряда и энергии адсорбции, выявив роли валентной зоны и локальных состояний. Подчеркнем, что использованный нами в настоящей работе модельный подход предназначен именно для такого рода задач, т.е. для задач, в которых выявляется тенденция изменения какой-либо физической характеристики, а не ее численное значение в каких-либо конкретных условиях.

Следует, однако, отметить, что любая модель, по определению, не может быть лишена недостатков. Что касается использованной нами здесь модели, то в ней полностью игнорируется геометрическая структура адсорбционной системы (за исключением длины адсорбционной связи). Это является общим свойством подходов, основанных на гамильтониане Андерсона [16,17,22], хотя, вообще говоря, кристаллография адсорбционной системы (включая релаксацию и реконструкцию приповерхностных слоев) может быть учтена в модельной плотности состояний. Такой учет, однако, ведет к увеличению числа трудно определяемых параметров задачи, что нежелательно.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] *Silicon Carbide: recent major advances*, ed. by W.J. Choyke, H. Matsunami, G. Pensl (Berlin–Heidelberg, Springer, 2004). <http://www.springer.de>
- [2] *Advances in Silicon Carbide. Processing and Applications*, ed. by S.E. Saddow, A. Agarwal (Boston–London, Artech House, 2004). www.artechhouse.com
- [3] A.A. Lebedev. *Semicond. Sci. Technol.*, **21**, R17 (2006).
- [4] G. Liu, B.R. Tuttle, S. Dhar. *Appl. Phys. Rev.*, **2**, 021307 (2015).
- [5] Y.H. Woo, T. Yu, Z.X. Chen. *Appl. Phys. Rev.*, **108**, 071301 (2010).
- [6] Г.В. Бенеманская, П.А. Дементьев, С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, С.Н. Тимошнев. *Письма ЖТФ*, **45**, 17 (2019).
- [7] Л.А. Большов, А.П. Напартович, А.Г. Наумовец, А.Г. Федорус. *УФН*, **122**, 125 (1977).
- [8] О.М. Браун, В.К. Медведев. *УФН*, **157**, 631 (1989).
- [9] A. Dobrowski. *Adv. Colloid Interface Sci.*, **93**, 135 (2001).
- [10] M. Kralik. *Chem. Papers*, **68**, 1625 (2014).
- [11] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. *ФТТ*, **61**, 1538 (2019).
- [12] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. *ФТТ*, **62**, 298 (2020).
- [13] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. *Письма ЖТФ*, **46** (1), 16 (2020).
- [14] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Н.А. Феоктистов. *ФТТ*, **56**, 1457 (2014).
- [15] С.А. Кукушкин, В.И. Николаев, А.В. Осипов, Е.В. Осипова, А.И. Печников, Н.А. Феоктистов. *ФТТ*, **58**, 1812 (2016).
- [16] С.Ю. Давыдов. *Теория адсорбции: метод модельных гамильтонианов* (СПб., Изд-во СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, 2013). twirpx.com/file/1596114/
- [17] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. *Элементарное введение в теорию наносистем* (СПб., Лань, 2014).
- [18] С.Ю. Давыдов. *ФТП*, **53**, 706 (2019).
- [19] *Физические величины. Справочник*, под ред. Е.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова (М., Энергоатомиздат, 1991).
- [20] *Краткий справочник физико-химических величин*, под ред. К.П. Мищенко, А.А. Равделя (Л., Химия, 1974).
- [21] С.Ю. Давыдов, Г.И. Сабирова. *Письма ЖТФ*, **37**, 51 (2011).
- [22] С.Ю. Давыдов, С.В. Трошин. *ФТТ*, **49**, 1508 (2007).
- [23] C. Li, C. Fang. *Progr. Nucl. Energy*, **100**, 164 (2017).
- [24] С.Ю. Давыдов. *ФТП*, **54**, 446 (2020).
- [25] R.J. Baierlea, C.J. Rupp, J. Anversa. *Appl. Surf. Sci.*, **435**, 338 (2018).

Редактор Л.В. Шаронова

Adsorption of I and VII groups atoms on the silicon carbide polytypes

S.Yu. Davydov¹, O.V. Posrednik²

¹ Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia

² St. Petersburg State Electrotechnical University (ETU),
197376 St. Petersburg, Russia

Abstract Within the scope of the Haldane–Anderson model the estimates of charge transfer and adsorption energy for alkali metals and halogens atoms on the C- and Si-faces of 3C-, 6H- and 4H-SiC polytypes are obtained. Band and local states contributions to the formation of adatom's charge and ionic and metallic parts of the adsorption energy are clarified.