

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК КАРБИДА КРЕМНИЯ

Елисеева Н.С.

Научный руководитель канд. физ.-мат. наук Кузубов А.А.

Сибирский федеральный университет

Карбид кремния представляет собой перспективный материал, широко применяемый в полупроводниковой технике, на его основе изготавливают электролюминесцентные приборы, детекторы видимого и ультрафиолетового излучения, а также детекторы ядерного излучения. Карбид кремния обладает высокой критической напряженностью поля пробоя, превышающей $2 \cdot 10^6$ В/см, температурой Дебая ~ 1200 К, механической прочностью, устойчивостью к температурным, химическим и радиационным воздействиям. Уникальность свойств SiC позволяет улучшить практически все характеристики приборов силовой и цифровой электроники: быстродействие, предельные коммутирующие токи и напряжения, статические и динамические потери. Приборы из карбида кремния могут работать при повышенном уровне радиации и высокой температуре, и в ряде случаев их потенциальные параметры значительно превышают аналоги на традиционных материалах. Основные направления использования: атомная энергетика (радиационно- и термостойкость), автомобилестроение (термостойкость), химическая и газовая промышленность (химическая стойкость), а также силовая электроника (малые потери мощности, большие прямые токи и высокое обратное напряжение).

Развитию полупроводниковой SiC-электроники препятствует низкое качество выращиваемых монокристаллов карбида кремния. Структурные дефекты подложки, проникающие при последующем гомоэпитаксиальном росте в эпитаксиальный слой, способны значительно ухудшить характеристики приборов. Получение качественных малодефектных кристаллов SiC определенного политипа сопряжено с рядом трудностей, и одна из них – эффективная система управления процессом роста кристалла.

Карбид кремния известен в двух модификациях – α и β . α -карбид кремния имеет слоистую структуру с гексагональной кристаллической решеткой, образуя большое число политипов. β -карбид кремния имеет гранецентрированную кубическую решетку. Данный материал также существует в виде тонких пленок. Подобно углероду, карбид кремния с гексагональной кристаллической решеткой способен существовать в виде отдельных плоскостей, образуя так называемый двумерный карбид кремния (2D SiC). Этот политип был предсказан при изучении однослойных нанотрубок SiC, получающихся путем свертывания монослоя, и на данный момент не синтезирован. Тем не менее, в теоретической работе представлен расчет фононных частот, свидетельствующий о стабильности монослоя SiC. Образование карбида кремния той или иной модификации напрямую зависит от параметров синтеза.

Цель работы являлось теоретическое изучение термодинамической стабильности и электронной структуры тонких пленок на основе политипов 3C, 2H и 2D SiC в зависимости от числа слоев, а также исследование систем 2D SiC/Mg (0001) и 2D SiC/Zr (0001) и влияние дефектов на физические свойства 2D SiC, в частности, изучалось влияние расстояния между вакансиями на переход ферромагнетик-антиферромагнетик.

Расчеты были выполнены с помощью квантово-химического пакета VASP в рамках формализма функционала плотности (DFT), основанного на приближении локальной

плотности (LDA), с использованием базиса плоских волн и ультрамягких псевдопотенциалов Вандербилта.

В ходе работы проводилась оптимизация элементарных ячеек политипов 3С (объемного, тонкой пленки, с реконструкцией (2x2) обеих поверхностей (001)), 2Н и 2D SiC, в которых постепенно наращивалось число слоев. Для сравнения термодинамической стабильности структур рассчитывалась энергия, приходящаяся на одну формульную единицу SiC (рисунок 1) по формуле:

$$E = E_{\text{SiC}} / n_{\text{SiC}}, \quad (1)$$

где E_{SiC} – полная энергия системы; n_{SiC} – число формульных единиц SiC, приходящихся на ячейку.

До 5 слоев наиболее стабилен 2D SiC, в который при данном числе слоев переходит 2Н. Начиная с 5 слоев реконструированный 3С-SiC стабильнее. Политип 2Н близок к нему по энергии ($\Delta E \sim 0.33$ эВ), и с точки зрения термодинамики они могут образовываться равновероятно, что объясняет присутствие в синтезируемых образцах как кубической модификации SiC, так и гексагональной (2Н, 4Н, 6Н). При изучение электронной структуры тонких пленок установлено, что электронные свойства зависят не только от политипа SiC, но и числа слоев. При переходе от объемного кристалла (полупроводника) к тонким пленкам 3С-SiC, 2Н-SiC становятся проводниками. 2D SiC не зависимо от числа слоев – полупроводник.

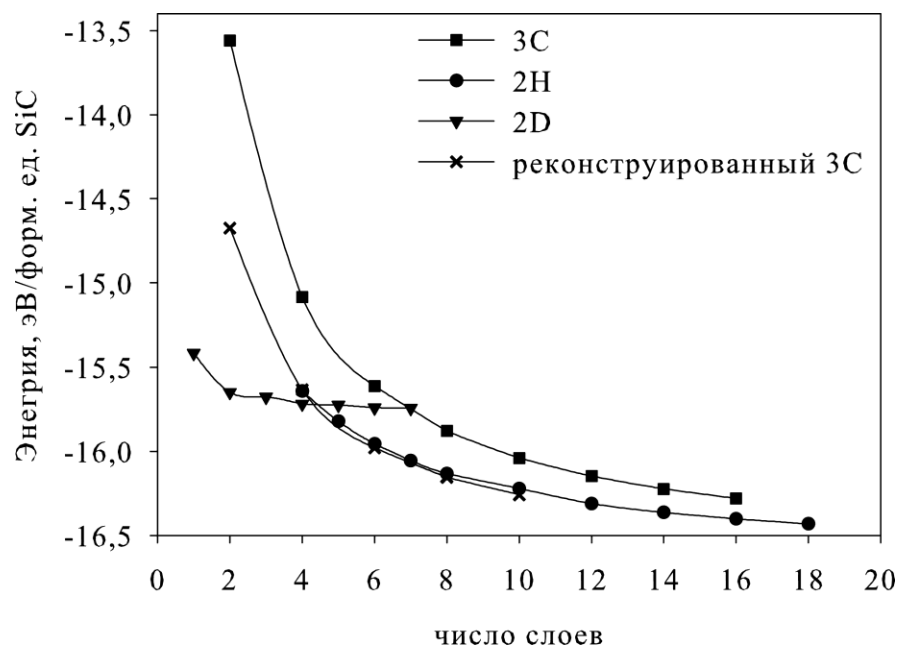


Рисунок 1 - Зависимость энергии, приходящейся на одну формульную единицу SiC, от числа слоев

Исходя из результатов первой части работы о стабильности структуры 2D SiC, можно говорить о возможности его экспериментального получения. Наиболее привлекательным методом является эпитаксия, которая особенно легко осуществляется, если различие постоянных решеток не превышает 10 %. При больших расхождениях сопрягаются наиболее плотноупакованные плоскости и направления. В качестве потенциального материала подложки для выращивания монослоя 2D SiC были исследованы металлические пластинки Mg (0001) и Zr (0001), поскольку различие между постоянными решеток менее чем 0,03 % (рисунок 2).

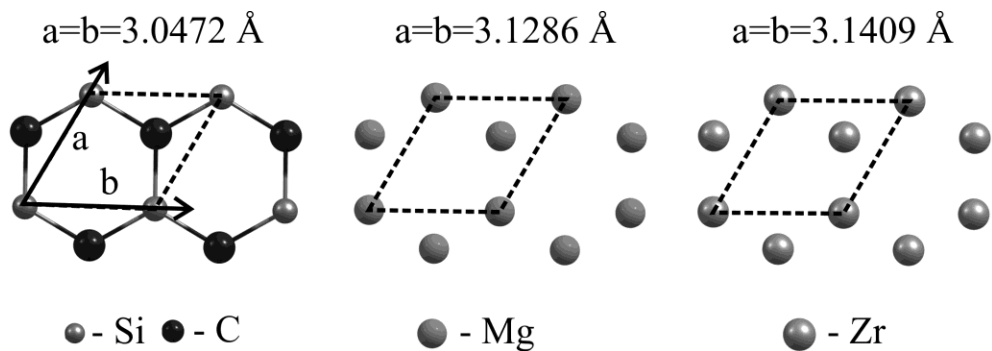


Рисунок 2 – Элементарные ячейки 2D SiC, Mg и Zr

Согласно результатам исследования систем 2D SiC/Mg (0001) и 2D SiC/Zr (0001), для первой наиболее выгодна конфигурации 2D SiC (C-top, Si-hcp) и (Si-top, C-fcc), для второй – (C-top, Si-hcp) (рисунок 3). Величина выхода атома углерода из плоскости монослоя SiC незначительна в системе с Mg (0001) по сравнению с Zr (0001) и составляет 0,08 Å. Следовательно, в качестве материала подложки для выращивания 2D SiC можно рекомендовать Mg (0001). К тому же с помощью метода вакуумной лазерной абляции получают тонкие пленки SiC, при этом температура подложки составляет 250–500°C, что удовлетворяет температурным условиям, при которых образование силицидов и карбидов магния маловероятно.

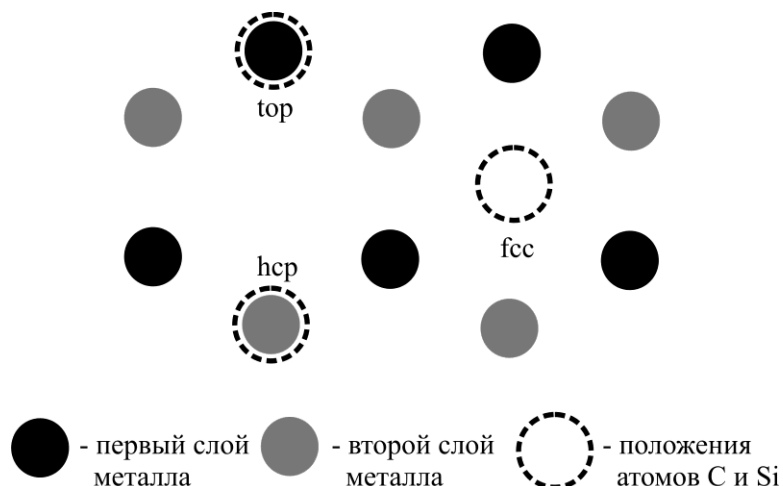


Рисунок 3 – Различные положения атомов C и Si на металлических подложках Mg (0001) и Zr (0001)

В результате проведенных исследований установлено, что до четырех слоев наиболее стабильной структурой является 2D политип. При увеличении числа слоев энергетически выгоднее становятся 3С-политип с учетом реконструкции поверхностей и 2Н-политип. Данный факт объясняет совместное присутствие гексагональной и кубической фаз в синтезируемых образцах тонких пленок SiC. Электронные свойства рассматриваемых объектов зависят не только от качественного состава политипа, но и от числа слоев в структуре. При переходе от объемных кристаллов 2Н и 3С политипов к их тонким пленкам наблюдается изменение свойств электронной проводимости – полупроводники становятся проводниками. В случае 2D-политипа подобный факт не наблюдается, и он остается полупроводником. Показано, что величина выхода атома углерода из плоскости монослоя SiC. Следовательно, существует возможность использования магния в качестве подложки для выращивания двумерного карбида кремния.