

石墨烯过渡层对金属/SiC接触肖特基势垒调控的第一性原理研究

邓旭良 冀先飞 王德君 黄玲琴

First principle study on modulating of Schottky barrier at metal/4H-SiC interface by graphene intercalation

Deng Xu-Liang Ji Xian-Fei Wang De-Jun Huang Ling-Qin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 058102 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211796

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211796>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

变形及电场作用对石墨烯电学特性影响的第一性原理计算

First-principles calculation of effects of deformation and electric field action on electrical properties of Graphene

物理学报. 2018, 67(7): 076301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172491>

非对称氧掺杂对石墨烯/二硒化钼异质结肖特基势垒的调控

Regulation and control of Schottky barrier in graphene/MoSe₂ heterojunction by asymmetric oxygen doping

物理学报. 2022, 71(1): 017104 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20210238>

Si_n 团簇/石墨烯($n \leq 6$)结构稳定性和储锂性能的第一性原理计算

First-principles study of structural stability and lithium storage property of Si_n clusters ($n \leq 6$) adsorbed on graphene

物理学报. 2021, 70(19): 198101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210521>

硅石墨烯g-SiC₇的Si分布和结构的第一性原理研究

First principles study of distributions of Si atoms and structures of siligraphene g-SiC₇

物理学报. 2021, 70(19): 196101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210621>

镍层间掺杂多层石墨烯的电子结构及光吸收特性研究

First-principles study of electronic structure and optical properties of nickel-doped multilayer graphene

物理学报. 2019, 68(18): 187301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190523>

石墨烯纳米片大自旋特性第一性原理研究

First-principles study of graphene nanoflakes with large spin property

物理学报. 2018, 67(18): 187102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180867>

石墨烯过渡层对金属/SiC 接触肖特基势垒调控的第一性原理研究*

邓旭良¹⁾ 冀先飞²⁾ 王德君^{2)†} 黄玲琴^{1)‡}

1) (江苏师范大学电气工程及自动化学院, 徐州 221000)

2) (大连理工大学电子信息与电气工程学部, 控制科学与工程学院, 工业装备智能控制与优化教育部重点实验室, 大连 116024)

(2021年9月27日收到; 2021年11月6日收到修改稿)

由于 SiC 禁带宽度大, 在金属/SiC 接触界面难以形成较低的势垒, 制备良好的欧姆接触是目前 SiC 器件研制中的关键技术难题, 因此, 研究如何降低金属/SiC 接触界面的肖特基势垒高度 (SBH) 非常重要. 本文基于密度泛函理论的第一性原理赝平面波方法, 结合平均静电势和局域态密度计算方法, 研究了石墨烯作为过渡层对不同金属 (Ag, Ti, Cu, Pd, Ni, Pt)/SiC 接触的 SBH 的影响. 计算结果表明, 单层石墨烯可使金属/SiC 接触的 SBH 降低; 当石墨烯为 2 层时, SBH 进一步降低且 Ni, Ti 接触体系的 SBH 呈现负值, 说明接触界面形成了良好的欧姆接触; 当石墨烯层数继续增加, SBH 不再有明显变化. 通过分析接触界面的差分电荷密度以及局域态密度, SBH 降低的机理可能主要是石墨烯 C 原子饱和了 SiC 表面的悬挂键并降低了金属诱生能隙态对界面的影响, 并且接触界面的石墨烯及其与金属相互作用形成的混合相具有较低的功函数. 此外, SiC/石墨烯界面形成的电偶极层也可能有助于势垒降低.

关键词: SiC, 石墨烯, 肖特基势垒, 第一性原理计算

PACS: 81.05.ue, 73.30.+y, 31.15.es, 73.20.-r

DOI: 10.7498/aps.71.20211796

1 引言

作为第三代半导体材料, SiC 具有宽禁带、高临界击穿电场、高热导率等优异的性质, 在高温、高频、大功率器件领域具有极大的应用潜力^[1]. 在 SiC 器件研制中, 制备低电阻率、高稳定性的 SiC 欧姆接触是目前亟需攻克的关键技术难题, 欧姆接触性能的好坏直接影响到器件的效率、增益、开关速度等性能指标. 理论上, 金属/SiC 接触的肖特基势垒越低, 越有利于形成欧姆接触. 然而, 由于 SiC 的禁带宽度大, 金属与 SiC 接触难以直接形成较低

的势垒以获得欧姆特性. 目前, SiC 欧姆接触主要结合重掺杂和高温退火工艺获得, 金属沉积在重掺杂的 SiC 表面, 然后经过高温退火 (>800 °C) 制备欧姆接触, 但实验结果可重复性不高^[2,3], 并且经高温退火获得的 SiC 欧姆接触稳定性差, 形成欧姆接触的机理及物理模型尚不明晰. 因此, 研究可有效降低金属/SiC 接触界面肖特基势垒的方法, 对提高 SiC 欧姆接触性能非常重要^[4].

研究表明, 在金属/SiC 接触界面插入中间过渡层对肖特基势垒高度 (SBH) 具有重要的调节作用^[5-12]. Seyller 等^[8] 研究发现高载流子浓度、窄带隙石墨过渡层可使金属/n 型 6H-SiC 接触的 SBH 显

* 国家自然科学基金 (批准号: 62074071, 61874017)、徐州市科技计划 (批准号: KC21008)、2021 江苏高校“青蓝工程”和江苏师范大学研究生科研与实践创新计划 (批准号: 2021XKT0183) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dwang121@dlut.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: lqhuang@jsnu.edu.cn

著降低至 0.3 eV, 以此解释了 Lundberg 与 Östling^[9] 在实验中得到的钴与 SiC 形成的欧姆接触. 类似地, Reshanov 等^[10] 研究也发现中间石墨层可使金属/n 型 6H-SiC 接触的 SBH 降至 0.3—0.55 eV 形成欧姆接触, 但金属/石墨/n 型 4H-SiC 仍然呈整流特性.

零带隙的二维材料——石墨烯具有高导电性和高载流子迁移率等优异性能^[13], 目前在 SiC 表面可以通过多种方式获得高质量的石墨烯^[14]. 石墨烯作为过渡层同样可以对金属/SiC 接触电学特性进行调控^[15], Wu 等^[16] 对 Cu/n 型 6H-SiC 接触界面进行 KrF 准分子激光辐照后, 发现无需退火就形成了欧姆接触, 分析其机理可能是激光辐射使界面形成了石墨烯过渡层. 最近, Jia 等^[17] 采用石墨烯插层优化了 SiC 的欧姆特性, 提高了 SiC 辐射探测器的性能, 分析原因可能是石墨烯可促进界面碳化物的形成, 从而降低欧姆接触电阻. 可见, 石墨烯作为中间过渡层可能有利于降低金属/SiC 界面 SBH 改善欧姆特性, 但目前相关研究较少, 其机理尚不明确, 且缺乏相应的理论依据.

本文基于第一性原理, 采用平均静电势及局域态密度计算方法, 理论研究了石墨烯作为中间过渡层对不同金属 (Ag, Ti, Cu, Pd, Ni, Pt)/4 H-SiC(0001) 接触界面 SBH 的影响, 并通过差分电荷密度图与局域态密度图分析了界面化学键的形成和电荷转移等情况, 对其中的机理进行了深入研究.

2 计算方法

采用 Materials studio 软件进行建模, 使用其中的 CASTEP (Cambridge sequential total energy package) 模块^[18], 交换关联能采用了 PBE 形式的广义梯度近似 GGA 以及 HSE06 泛函进行计算^[19,20], 利用平面波超软赝势描述了离子实和价电子之间的相互作用, 采用 Grimme (DFT-D3) 的方法来修正弱范德瓦耳斯力^[21]. 对晶体结构和界面结构优化时, 采用更高效的 LBFGS 结构优化方法, 选取 Monkhorst-Pack K 点取样密度为 $5 \times 5 \times 1$, 平面波截断能 (encut) 设置为 450 eV, 自洽场收敛标准为 1×10^{-6} eV/atom, 自洽场迭代最大步数为 1000; 原子间的相互作用力小于 0.003 eV/Å, 最大应力偏差为 0.1 GPa; 各原子最大位移变化不超过 0.002 Å^[22].

3 建模与计算

3.1 界面结构搭建

搭建了一种高对称、上下分布的长方体结构模型, 其中金属和 SiC 碳硅原子均为 5 层, 晶格失配度合理, 结构稳定. 为了消除底面悬挂键的影响, SiC (000 $\bar{1}$) 面的 C 原子用 H 原子钝化, 晶胞之间用 20 Å 的真空层隔离以消除因周期性引起的相互作用.

图 1 所示为含单层石墨烯与 SiC 接触经优化后的界面结构图, 由图 1(a) 侧视图可见, 与 SiC 接触的石墨烯层并非一个标准的二维平面, 优化后发生了一定的形变, 表明石墨烯 C 原子与 Si 原子之间可能存在一定的相互作用. 图 1(b) 为其俯视图, 红色未成键的 Si 原子组成了 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R$ 30° 的结构单元, 根据 Mattausch 等^[23] 的报道, 石墨烯在 1×1 的 4H-SiC (0001) 面会形成 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R$ 30° 界面结构, 这种电子结构原型适用于描述实际的 $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}R$ 30° 界面结构. 因此, 本文优化后的界面结构可以合理模拟实际在 SiC 上生长石墨烯的结构.

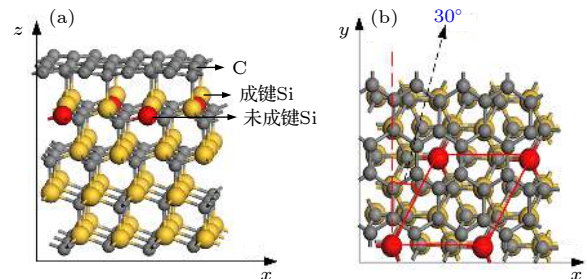


图 1 单层石墨烯/SiC (0001) 的接触界面 (a) 侧视图; (b) 俯视图

Fig. 1. Side view (a) and top view (b) of single-layer graphene on SiC(0001) surface.

3.2 黏合能的计算

为了获取稳定的界面结构, 通过计算比较了金属不同切面与 4 H-SiC (0001) 面接触体系的黏合能, 选取具有最大黏合能的金属切面, 以获得最稳定的界面结构^[24,25] 优化过程中固定了 SiC 下面两层碳硅双原子位置以及金属上三层原子位置, 计算黏合能 (W_{ad}) 的公式为^[24]

$$W_{ad} = (E_M + E_{SiC} - E_{M/SiC})/NA, \quad (1)$$

其中 $E_{M/SiC}$ 为界面系统提供的总能量; E_M 和 E_{SiC}

表 1 Cu 不同切面与 4H-SiC(0001) 接触体系的 $E_{M/SiC}$, E_M , E_{SiC} 和 W_{ad}
 Table 1. $E_{M/SiC}$, E_M , E_{SiC} and W_{ad} values for the different Cu planes contact to 4H-SiC(0001).

界面体系	$E_{M/SiC}/eV$	E_M/eV	E_{SiC}/eV	$W_{ad}/(J\cdot cm^{-2})$
Cu(111)/4H-SiC(0001)	-154329.42	-134459.95	-19851.12	0.0562
Cu(110)/4H-SiC(0001)	-164264.27	-134455.87	-29790.06	0.0279
Cu(001)/4H-SiC(0001)	-154340.26	-134456.34	-19865.27	0.0515

分别为相同超胞中独立的金属和 SiC 表面的能量; N 表示界面处所包含原子的总个数; A 表示界面的表面积.

Cu 接触体系的计算结果如表 1 所列. 从表 1 可见, Cu(111)/4H-SiC(0001) 界面体系黏合能最大, 说明该结构最为稳定. 运用同样的方法选出了最稳定的 Ni(001)/4H-SiC(0001), Ag(110)/4H-SiC(0001), Ti(001)/4H-SiC(0001), Pd(111)/4H-SiC(0001) 和 Pt(001)/4H-SiC(0001) 结构.

为了测试因晶格失配引起的应力对计算的影响, 在 0.04 \AA^{-1} 的网格密度下对晶格失配后金属超胞的功函数 (W_m) 进行了计算, 结果如表 2 所列. 可见, Ag, Ti, Cu, Pd, Ni 的 W_m 与理论值和文献中的实验值相差均为 0.3 eV 左右, 说明这些金属的 W_m 受界面应力的影响较小. 然而, 算出来 Pt 的 W_m 受到应力的影响相对较大.

 表 2 晶格失配后各金属超胞的 W_m 与理论值和文献 [26] 中实验值对比

 Table 2. The calculated W_m values of the metal supercells after lattice mismatching, compared with the theoretical and the experimental values in reference [26].

Metal	W_m/eV	理论值/eV	实验值[26]/eV
Ag	4.52	4.19	4.26
Ti	4.43	4.38	4.33
Cu	4.68	4.51	4.65
Pd	5.16	4.89	5.12
Ni	5.12	4.92	5.15
Pt	5.76	5.31	5.65

3.3 肖特基势垒的计算

3.3.1 平均静电势计算方法

金属/半导体接触的 SBH (ϕ_{Bn}) 为导带底 (E_C) 与费米能级 (E_F) 之间的能量差. 图 2 所示为金属/SiC 接触界面能带图, 利用平均静电势计算 ϕ_{Bn} 的标准方法如下 [27]:

$$\phi_{Bn} = \Delta V + (E_C - \bar{V}_{SiC}) - (E_F - \bar{V}_M), \quad (2)$$

其中 \bar{V}_{SiC} 为 SiC-bulk 的平均静电势; \bar{V}_M 为金属-

bulk 的平均静电势; $(E_C - \bar{V}_{SiC})$ 为相对 \bar{V}_{SiC} 的 E_C , $(E_F - \bar{V}_M)$ 为相对 \bar{V}_M 的 E_F ; 平均静电势差 $\Delta V = \bar{V}_{SiC} - \bar{V}_M$.

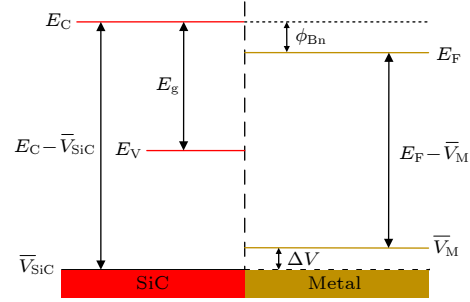


图 2 金属/SiC 接触界面 SBH 与平均静电势关系的能带结构

Fig. 2. Schematic band diagram shows the relationship between SBH and planar-averaged local potentials for metal/SiC contact.

为了避免由于 GGA-PBE 泛函低估 SiC 带隙所带来的误差, (2) 式中的 E_C 和 E_F 均采用 HSE06 杂化泛函计算获得, 如图 3 所示为 Ti/单层石墨烯/SiC (Ti/1GR/SiC) 结构沿 z 轴的平均静电势图, 与图 2 中的各量对应. 经计算, ϕ_{Bn} 为 0.5 eV.

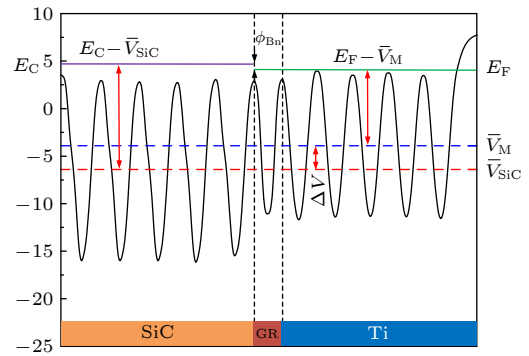

 图 3 Ti/1GR/SiC 沿 z 轴的平均静电势

 Fig. 3. The planar-averaged local potential for Ti/1GR/SiC along the z -axis.

用同样的方法, 计算了不同层数石墨烯作为中间过渡层的其他各接触体系的 ϕ_{Bn} , 如图 4 所示, 石墨烯过渡层有利于降低金属/SiC 接触的 SBH, 与实验现象相吻合 [16,17]. 具体数值列于表 3 中,

金属/SiC 接触体系的 ϕ_{Bn} 在 1—2 eV 范围内; 当石墨烯过渡层为单层时, Ag, Ti, Pd, Ni 体系的 ϕ_{Bn} 明显降低, 然而, Cu 和 Pt 接触势垒降低不明显; 当石墨烯为 2 层后, ϕ_{Bn} 进一步降低, 其中 Ni, Ti 体系 ϕ_{Bn} 均为负值, 说明接触界面形成了反阻挡层, 呈良好的欧姆特性; 当石墨烯增加到 3 层时 ϕ_{Bn} 不再有明显的变化。

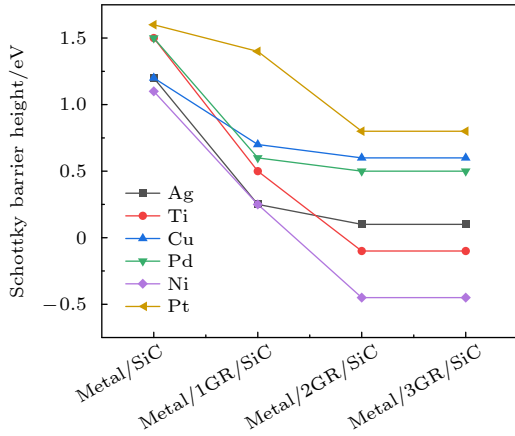


图 4 不同层数石墨烯过渡层对金属/SiC 接触 SBH 的影响
Fig. 4. The effects of graphene intercalation on the SBH of metal/SiC contacts.

3.3.2 局域态密度计算方法

本文同时采用了局域态密度方法计算了石墨烯过渡层对各接触体系肖特基势垒的影响, 尽管利用 GGA-PBE 泛函会低估 SiC 带隙, 导致分析局域态密度图中 E_C 与 E_F 的差值只能得出 ϕ_{Bn} 的近似值, 但是利用该方法可以准确获得因插入石墨烯过渡层引起的势垒变化量 ($\Delta\phi_{Bn}$)^[28], Tanaka 与 Hoekstra 等^[29] 和 Profeta 等^[30] 用同样方法计算了不同金属与 6H-SiC 的 (0001) 面和 (000 $\bar{1}$) 接触的

p 型 SBH 值, 获得的势垒变化规律与实验值相吻合。

如图 5 所示以石墨烯过渡层为 0—3 层时 Cu(111)/SiC 体系在 SiC 区域的局域态密度图为例, 由图 5 可见, 黑色和蓝色虚线分别表示 E_F 和 E_C 所在位置, 插入石墨烯过渡层后, E_C 向 E_F 产生位移, 说明 ϕ_{Bn} 下降^[28]. 通过计算, Cu/SiC 接触的 ϕ_{Bn} 约为 1 eV, 当插入单层石墨烯后, ϕ_{Bn} 约为 0.5 eV, 势垒降低量 $\Delta\phi_{Bn}$ 约为 0.5 eV; 石墨烯为 2 层及以上时, ϕ_{Bn} 约为 0.4 eV, $\Delta\phi_{Bn}$ 约为 0.1 eV. 运用同样的方法分别获得 Ag, Ti, Pd, Ni, Pt 接触体系的 $\Delta\phi_{Bn}$ 值, 其结果也列于表 3 中. 由表 3 可见 $\Delta\phi_{Bn}$ 与上述平均静电势计算方法获得的 $\Delta\phi_{Bn}$ 基本一致,

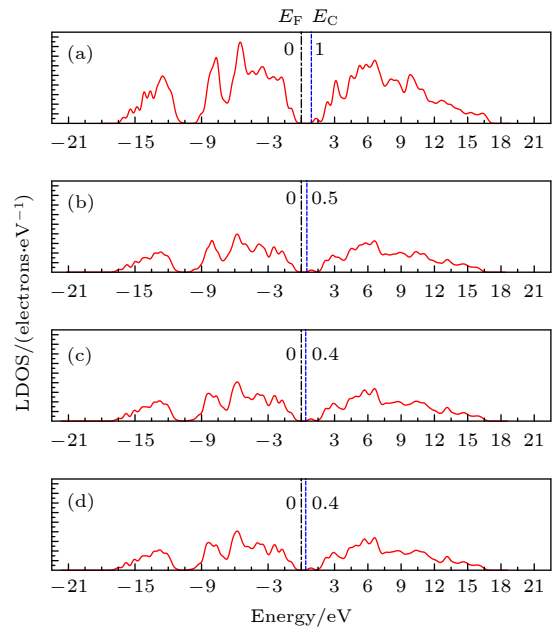


图 5 Cu(111)/SiC 体系在 SiC 区域的局域态密度图 (a) Cu/SiC; (b) Cu/1GR/SiC; (c) Cu/2GR/SiC; (d) Cu/3GR/SiC
Fig. 5. Local density of states of SiC region for (a) Cu/SiC, (b) Cu/1GR/SiC, (c) Cu/2GR/SiC, and (d) Cu/3GR/SiC systems.

表 3 平均静电势与局域态密度计算方法计算的各接触体系 ϕ_{Bn} 值 (单位: eV)

Table 3. ϕ_{Bn} values for the contacts obtained from planar averaged electrostatic potential and local density of states calculation methods (in eV).

计算方法	GR layers	Ag	Ti	Cu	Pd	Ni	Pt
平均静电势法	0	1.2	1.5	1.2	1.5	1.1	1.6
	1	0.25	0.5	0.7	0.6	0.25	1.4
	2	0.1	-0.1	0.6	0.5	-0.45	0.8
	3	0.1	-0.1	0.6	0.5	-0.45	0.8
局域态密度法	0	1	1.2	1	1.3	1	1.3
	1	0.2	0.3	0.5	0.4	0.2	1
	2	0.1	-0.15	0.4	0.3	-0.5	0.9
	3	0.1	-0.15	0.4	0.3	-0.5	0.9

同样地, Ti/4H-SiC 和 Ni/4H-SiC 接触界面在插入 2 至 3 层石墨烯后, ϕ_{Bn} 均为负值, 说明获得了欧姆接触.

3.4 机理分析

进一步通过计算差分电荷密度以及局域态密度图对石墨烯过渡层促使金属/4H-SiC 界面 SBH 降低的机理进行了分析. 通过计算 (Ti, Ni, Pd, Pt, Cu, Ag)/1GR/4H-SiC 体系的差分电荷密度图, 发现石墨烯 C 原子与 SiC 的 Si 原子之间均彼此成键^[31,32], 形成的共价键饱和了 SiC 表面悬挂键, 说明一定程度上降低了 SiC 本征界面态, 有利于降低 SBH^[33]. 同时, 如图 6 所示 Ni/1GR/4H-SiC 和 Cu/1GR/4H-SiC 为代表的差分电荷密度图可见, 电子从 SiC 表面 Si 原子转移到石墨烯 C 原子, 在 Si 表面形成的电荷耗尽区与 C 表面形成的电荷积累区共同构成了界面电场, 导致电子波函数极化, 即界面电偶极子的形成, 该电场的存在也可能一定程度上降低了 SBH^[34], 其相应的能带图如图 7 所示.

此外, 发现石墨烯 C 原子与 Ti, Ni, Pt, Pd, Ag 原子之间彼此成键形成了混合相^[31,32], 如图 6(a) 所示的 Ni/1GR/4H-SiC 差分电荷密度图, Ni 原子与石墨烯 C 原子之间出现了呈红色的电子堆积现象. 在界面态密度较低的情况下, 接触界面 SBH 很大程度受控于接触金属的功函数, SBH 随金属功函数的减小而降低, 由于石墨烯具有较小的功函数, 低功函的石墨烯及其与金属形成的混合相促进了 SBH 的进一步降低^[33-36]. 然而, 图 6(b) 所示 Cu/1GR/4H-SiC 接触体系的差分电荷密度图中, Cu 原子与石墨烯 C 原子之间没有明显的电子堆积现象, 说明石墨烯 C 与 Cu 原子之间可能没有彼此成键, 这可能是该体系 SBH 降低量相对较小的原因 (见表 3).

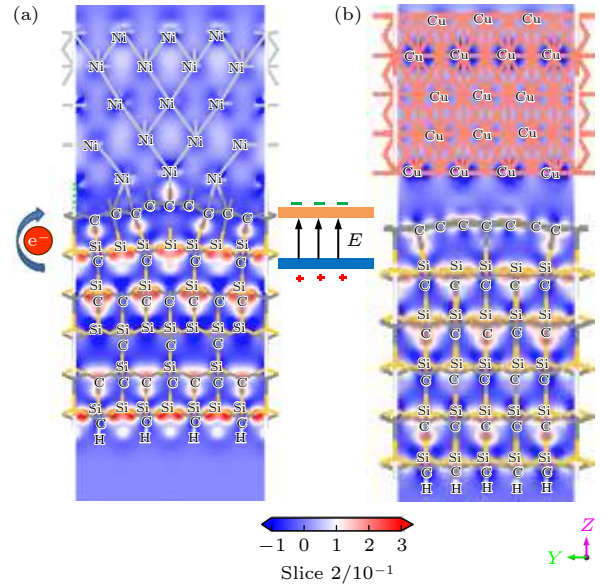


图 6 (a) Ni/1GR/4H-SiC(0001)和(b) Cu/1GR/4H-SiC(0001) 的差分电荷密度图, 蓝色区域代表失去电子, 红色区域代表得到电子

Fig. 6. The difference of charge density for (a) the Ni/1GR/4H-SiC (0001) and (b) the Cu/1GR/4H-SiC (0001). The blue regions represent losing electrons. The red regions represent gaining electrons.

另一方面, 根据以 Ti/(0-3)GR/SiC 体系顶层碳硅层局域态密度图为例, 如图 8(a)—(d) 所示, 费米能级处的态密度主要由 s 轨道和 p 轨道的态密度贡献, 其中 p 轨道对总的态密度贡献相对更大. 图 8(a) 所示的 Ti/SiC 结构在 SiC 费米能级附近的态密度较高, 出现较高态密度的原因可能是 SiC 表面的悬挂键及金属的电子波函数部分渗透到 SiC 内, 诱导出 SiC 禁带中的局域态即金属诱生能隙态 (MIGS) 所致^[37]; 当 Ti/SiC 界面插入单层石墨烯过渡层时, 费米能级处的态密度明显降低, 其原因可能是 SiC 表面的悬挂键被石墨烯饱和, 并且金属远离 SiC 表面, SiC 受 MIGS 的影响变小; 随着石墨烯层数增加, 态密度进一步降低,

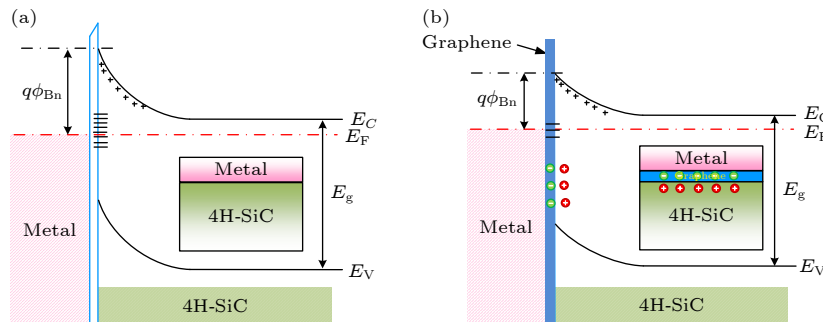


图 7 (a) 金属/4H-SiC 和 (b) 金属/GR/4H-SiC 接触界面能带图

Fig. 7. Schematic band diagrams of (a) metal/4H-SiC and (b) metal/GR/4H-SiC.

但降低量不再明显. 研究表明^[33,38], 表面悬挂键和 MIGS 均可能引起一定程度的费米能级钉扎现象, 随着石墨烯的插入, SiC 表面的悬挂键被石墨烯饱和, 同时 MIGS 对界面的影响变小. 因此, 接触界面费米能级钉扎程度降低, SiC 的 E_C 向 E_F 移动, 促使势垒降低. 而当石墨烯层数超过 2 层后, SiC 几乎不再受悬挂键和 MIGS 的影响, 势垒降低量不再发生变化.

另外, 发现 Pt/SiC 接触体系在费米能级附近的态密度最高, 说明受到 MIGS 的影响最大, 可能有严重的费米能级钉扎现象. 当掺入单层石墨烯后, 其 SiC 顶层碳硅层局域态密度计算如图 8(e) 所示, 相比 Ti/1GR/4H-SiC 体系, 费米能级附近态密度明显更高, 可能费米能级钉扎效应没有得到良好的改善, 另外, 如上述表 2 所列, Pt 的 W_m 受张力的影响相对较大, 推断这些可能是插入单层石墨烯后 Pt/SiC 接触界面 SBH 降低量不太明显的原因.

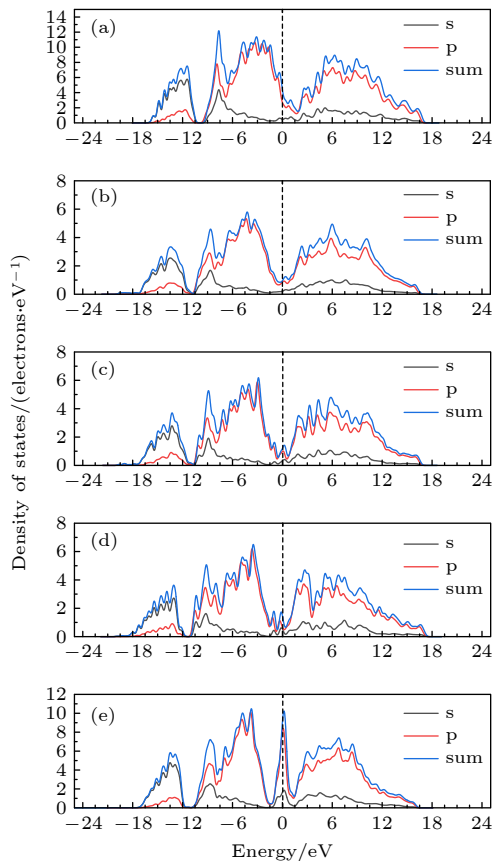


图 8 (a) Ti/4H-SiC, (b) Ti/1GR/4H-SiC, (c) Ti/2GR/4H-SiC, (d) Ti/3GR/4H-SiC 以及 (e) Pt/1GR/4H-SiC SiC 顶层碳硅层的局域态密度图

Fig. 8. Local density of states of the first carbon silicon layer for (a) Ti/4H-SiC, (b) Ti/1GR/4H-SiC, (c) Ti/2GR/4H-SiC, (d) Ti/3GR/4H-SiC and (e) Pt/1GR/4H-SiC.

4 结 论

本文基于第一性原理研究了石墨烯作为中间过渡层对 (Ag, Ti, Cu, Pd, Ni, Pt)/4H-SiC 接触肖特基势垒的影响. 计算结果表明石墨烯过渡层有利于降低金属/SiC 接触的 SBH. 当石墨烯为单层时, Ag, Ti, Pd 和 Ni 接触体系的 SBH 降低量均超过 0.5 eV, 但 Cu 和 Pt 接触的 SBH 降低不明显; 石墨烯为 2 层时, SBH 继续降低, 且 Ni, Ti 接触体系 SBH 呈现负值, 可形成良好的欧姆接触; 但石墨烯层数继续增加, SBH 不再有明显降低.

差分电荷密度以及局域态密度计算结果表明, 各金属接触体系插入单层石墨烯后石墨烯 C 原子饱和了 SiC 表面悬挂键使表面态密度降低, 并在接触界面处形成了电偶极层, 有利于 SBH 的降低. 其中 Ag, Ti, Pd 和 Ni 接触体系的 SBH 降低量相对更明显, 其机理可能是金属原子与石墨烯 C 原子彼此成键形成了低功函的混合相, 同时, 费米能级附近因 MIGS 引起的态密度明显降低, 缓解了费米能级钉扎效应. 然而, Cu 和 Pt 接触体系 SBH 降低量较少, 可能是由于 Cu 接触体系石墨烯 C 原子与 Cu 原子未出现成键现象, 而 Pt 接触体系中 Pt 的 W_m 受应力影响比较大, 且在费米能级附近态密度较高. 当石墨烯层数为 2 时, SiC 表面悬挂键和 MIGS 对界面的影响继续减小, 各金属接触体系 SBH 进一步降低. 而当石墨烯层数超过 2 后, SiC 几乎不再受悬挂键和 MIGS 的影响, 势垒降低量不再呈明显变化.

参考文献

- [1] Tian R, Ma C, Wu J, Guo Z, Yang X, Fan Z 2021 *J. Semicond.* **42** 061801
- [2] Wang Z T, Liu W, Wang C Q 2016 *J. Electron. Mater.* **45** 267
- [3] Huang L Q, Xia M L, Gu X G 2020 *J. Cryst. Growth.* **531** 125353
- [4] Kuchuk A V, Borowicz P, Wzorek M, Borysiewicz M, Ratajczak R, Golaszewska K, Kaminska E, Kladko V, Piotrowska A 2016 *Adv. Cond. Matter. Phys.* **2016** 9273702
- [5] Al-Ahmadi N A 2020 *Mater. Res. Express* **7** 032001
- [6] Nikitina I P, Vassilevski K V, Wright N G, Horsfall A B, O' Neill A G, Johnson C M 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 083709
- [7] Liu F, Hsia B, Carraro C, Pisano A P, Maboudian R 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 262107
- [8] Seyller T, Emtsev K V, Speck F, Gao K Y, Ley L 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 242103
- [9] Lundberg N, Östling M 1993 *Appl. Phys. Lett.* **63** 3069

- [10] Reshanov S A, Emtsev K V, Speck F, Gao K Y, Seyller T K, Pensl G, Ley L 2008 *Phys. Status Solidi B* **245** 1369
- [11] Huang L Q, Zhu J, Ma Y, Liang T, Lei C, Li Y W, Gu X G 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 207302 (in Chinese) [黄玲琴, 朱靖, 马跃, 梁庭, 雷程, 李永伟, 谷晓钢 2021 物理学报 **70** 207302]
- [12] Huang L Q, Xia M L, Ma Y, Gu X G 2020 *J. Appl. Phys.* **127** 25301
- [13] Nagashio K, Nishimura T, Kita K, Toriumi A 2009 *International Electron Devices Meeting (IEDM)* Baltimore, MD December 7–9, 2009 p527
- [14] Røst H I, Chellappan R K, Strand F S, Grubišić-Čabo A, Reed B P, Prieto M J, Tănase L C, Caldas L D S, Wongpinij T, Euaruksakul C, Schmidt T, Tadich A, Cowie B C C, Li Z, Cooil S P, Wells J W 2021 *J. Phys. Chem. C* **125** 4243
- [15] Yoon H H, Song W, Jung S, Kim J, Mo K, Choi G, Jeong H Y, Lee J H, Park K 2019 *ACS Appl. Mater. Inter.* **11** 47182
- [16] Wu Y, Ji L, Lin Z, Hong M, Wang S, Zhang Y 2019 *Curr. Appl. Phys.* **19** 521
- [17] Jia Y, Sun X, Shi Z, Jiang K, Wu T, Liang H, Cui X, Lü W, Li D 2021 *Diamond. Relat. Mater.* **115** 108355
- [18] Segall M D, Lindan P J, Probert M A, Pickard C J, Hasnip P J, Clark S J, Payne M C 2002 *J. Phys. Condens. Matter* **14** 2717
- [19] Perdew J P, Kieron B, Matthias E 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [20] Ceperley D M, Berni J A 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 566
- [21] Grimme S, Antony J, Ehrlich S, Krieg H 2010 *J. Chem. Phys.* **132** 154104
- [22] Wang Q, Tang F W, Hou C, Lv H, Song X Y 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 077101 (in Chinese) [王奇, 唐法威, 侯超, 吕皓, 宋晓艳 2019 物理学报 **68** 077101]
- [23] Mattausch A, Pankratov O 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 076802
- [24] Xu B, Zhu C, He X, Zang Y, Lin S, Li L, Feng S, Lei Q 2018 *Adv. Condens. Matter Phys.* **2018** 8010351
- [25] Li L, Jin W, Yang H, Gao K, Guo P, Pang X, Volinsky A A. 2018 *Microelectron. Reliab.* **83** 119
- [26] Michaelson H B 1977 *J. Appl. Phys.* **48** 4729
- [27] Oh Y J, Lee A T, Noh H K, Chang K J 2013 *Phys. Rev. B* **87** 075325
- [28] Kohyama M, Hoekstra J 2000 *Phys. Rev. B* **61** 2672
- [29] Tanaka S, Tamura T, Okazaki K, Ishibashi S, Kohyama M 2006 *Mater. Trans.* **47** 2690
- [30] Profeta G, Blasetti A, Picozzi S, Continenza A, Freeman A. J 2001 *Phys. Rev. B* **64** 235312
- [31] Kozlov S M, Vines F, Görling A 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 7360
- [32] Cicek A, Bülent U L U Ğ 2021 *Balkan J. Electr. Comput. Eng.* **9** 171
- [33] Wang J, Li M C 2000 *Semicond. Opt.* **21** 261 (in Chinese) [王菁, 李美成 2000 半导体光电 **21** 261]
- [34] Chen Y, Xu X, Liu P 2019 *J. Phys. Chem. C* **124** 1362
- [35] Li J B, Wang X H, Wang W J 2020 *J. Infrared Millimeter Waves* **39** 401
- [36] Song S M, Park J K, Sul O J, Cho B J 2012 *Nano Lett.* **12** 3887
- [37] Heine V 1965 *Phys. Rev.* **138** A1689
- [38] Sajjad M, Yang X, Altermatt P, Singh N, Schwingschlögl U, Wolf D S 2019 *Appl. Phys. Lett.* **114** 071601

First principle study on modulating of Schottky barrier at metal/4H-SiC interface by graphene intercalation*

Deng Xu-Liang¹⁾ Ji Xian-Fei²⁾ Wang De-Jun^{2)†} Huang Ling-Qin^{1)‡}

1) (*College of Electrical Engineering and Automation, Jiangsu Normal University, Xuzhou 221000, China*)

2) (*Key Laboratory of Intelligent Control and Optimization for Industrial Equipment, Ministry of Education, School of Control Science and Engineering, Faculty of Electronic Information and Electrical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China*)

(Received 27 September 2021; revised manuscript received 6 November 2021)

Abstract

In the production of SiC electronic devices, one of the main challenges is the fabrication of good Ohmic contacts due to the difficulty in finding the metals with low Schottky barriers of wide band gap SiC. Therefore, reducing the Schottky barrier height (SBH) at the metal/SiC interface is of great importance. In this paper, the effects of graphene intercalation on the SBH in different metals (Ag, Ti, Cu, Pd, Ni, Pt)/4H-SiC interfaces are studied by combining the average electrostatic potential and local density of states calculation methods based on first-principles plane wave pseudopotential density functional theory. The calculation results show that single-layer graphene intercalation can reduce the SBH of metal/4H-SiC contact. When the two layers of graphene are inserted, the SBH are further reduced. Especially, the contact between Ni and Ti exhibits negative SBH values, inferring that good Ohmic contacts are formed. When layers of graphene continue to increase, the SBH no longer changes obviously. By analyzing the differential charge density and the local density of states of the interface, the mechanism of SBH reduction may be that the dangling bonds on the SiC surface are saturated by the graphene C atoms and the influence of the metal-induced energy gap state at the interface is reduced, thereby reducing the interface state density. In addition, graphene and the corresponding new phases at the interface have low work functions. Moreover, an interfacial electric dipole layer may be formed at the SiC/graphene interface which also contributes to barrier reduction.

Keywords: SiC, graphene, Schottky barrier heights, first principle study

PACS: 81.05.ue, 73.30.+y, 31.15.es, 73.20.-r

DOI: 10.7498/aps.71.20211796

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62074071, 61874017), the Xuzhou Science and Technology Project, China (Grant No. KC21008), the 2021 “Qinglan” Project of Jiangsu Higher Education Institutions, China, and the Jiangsu Normal University Postgraduate Scientific Research and Practice Innovation Project, China (Grant No. 2021XKT0183).

† Corresponding author. E-mail: dwang121@dlut.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: lqhuang@jsnu.edu.cn