

3C-SiC 的能带结构和光学函数的第一性原理计算*

徐彭寿, 谢长坤, 潘海斌, 徐法强

(中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 安徽合肥 230029)

摘要: 利用从头计算的全势缀加平面波理论方法研究了 3C-SiC 的能带结构和基本的光学函数, 得到了 Si、C 分波态密度和能带结构. 介电函数的虚部由能带结构的计算直接得到. 经带隙校正后, 由 Kramers-Kronig (K-K) 色散关系计算了介电函数的实部. 由得到的介电函数计算了折射率、消光系数和反射率. 经比较, 计算的结果与已有的实验数据基本相符.

关键词: 3C-SiC; 全势缀加平面波; 能带结构; 光学函数

中图分类号: O472⁺.3; O481.1 **文献标识码:** A

First-principal calculations of band structure and optical functions of 3C-SiC

XU Peng-shou, XIE Chang-kun, PAN Hai-bin, XU Fa-qiang

(National Synchrotron Radiation Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei 230029, China)

Abstract: The band structure and optical functions of 3C-SiC were studied by a full potential linearized augmented plane waves (FPLAPW) method. The partial density of states (DOS) of Si and C atoms as well as the band structure of 3C-SiC were presented. The imaginary part of the dielectric function was obtained directly from the band structure calculation. With band gap correction, the real part of the dielectric function was derived from the imaginary part by Kramers-Kronig (K-K) dispersion relationship. The refractive index, extinction coefficient and reflectivity were calculated from the obtained dielectric function. The calculated results are in agreement with the experiments.

Key words: 3C-SiC; full potential linearized augmented plane waves (FPLAPW); band structure; optical function

0 引言

SiC 具有许多优良的性质, 如带隙宽、抗电压击穿能力强、热导率高、饱和电子迁移率大等, 适合制备高功率、高频率、耐高温以及抗辐照的电子器件, 因此, 对于 SiC 的研究一直为人们所重视^[1]. 半导体的光学性质及其基本的光学函数在半导体材料和器件的应用中具有重要作用. 而对于各种多型体的

SiC 的光学性质及其基本的光学函数的理论和实验研究, 尽管在国外已有一些报道, 但研究的并不充分. 而在国内, 这方面的工作几乎还未开展. 在本文中, 我们利用全势缀加平面波 (full potential linearized augmented plane waves, FPLAPW) 理论计算方法研究了 3C-SiC 的能带结构和光学性质, 并将理论计算的结果和实验测量的数据进行了比较.

* 收稿日期: 2004-07-02; 修回日期: 2005-09-05

基金项目: 国家自然科学基金(50572100)和中国科学院知识创新工程资助.

作者简介: 徐彭寿(通讯作者), 男, 1947年生, 研究员. 研究方向: 宽带隙半导体材料和同步辐射应用. E-mail: psxu@ustc.edu.cn

1 理论方法和计算

我们采用基于密度泛函理论(density function theory, DFT)的 FPLAPW 理论方法^[2]进行第一性原理计算. 用 FPLAPW 方法对 Kohn-Sham 方程和能量泛函进行了自洽求解, 可以得到多电子体系的基态密度、总能和能量本征值. 在缀加平面波方法中, 空间被分隔为间隙区(intertitial region, IR)和以原子位置为中心的非重叠 Muffin-Tin(MT)球, 这种分隔描述了波函数、势和电子密度在近核处的类原子特性和原子之间的平滑特性. 每个 MT 球内波函数球谐基矢的角动量截断取为 $l=10$, 非球谐部分的角动量截断取为 $l=4$. 波函数的平面波截断由 $R_{MT} K_{MAX}=8$ 决定. 这里 R_{MT} 是晶胞中最小的 MT 半径, K_{MAX} 是平面波展开中最大的倒格子矢量. 交换相关势采用 Perdew^[3]等提出的含梯度修正的局域密度近似(local density approximation, LDA). Si 和 C 的 MT 半径分别取为 1.7 Bohr 和 1.6 Bohr. 这里要指出的是只要自洽计算最终收敛得很好, 全势计算中 MT 半径的选取就不会影响最终的结果; 采用 Monkhorst-Pack^[4]特殊 k 样点对不可约布里渊区进行求和.

半导体的光学性质通常用复介电函数 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 表示. 虚部可以由电子结构计算直接得到, 然后利用 Kramers-Kronig 色散关系由虚部得到介电函数实部.

2 结果和讨论

3C-SiC 又称为 β -SiC, 其晶体具有闪锌矿结构(立方相), 构成 SiC 的每个原子被四个异种原子所包围, 通过定向的强四面体 sp^3 键结合在一起. 在体态电子结构计算中, 所取原胞是 fcc 格子的固体物理学原胞, 每个原胞内有一个 Si 原子和一个 C 原子. 为确定 3C-SiC 体结构性质, 我们计算了晶体体积与系统总能之间的关系, 并用最小二乘法拟合 Murnaghan 状态方程^[5], 得到平衡晶格常数 a_0 和体积弹性模量 B . 我们的计算结果与实验值^[6]符合得很好, 晶格常数 $a_0=4.34$ nm, 略小于实验值(4.36 nm)约 0.46%, 体积弹性模量 $B=2.26$ Mbar, 略大于实验值(2.24 Mbar)约 0.9%, 说明我们所采用的计算方法完全可以给出合理的结果.

图 1 是 3C-SiC 的 Si 和 C 原子的分态密度. 在价带由两个子带组成. 低能量子带部分主要由

Si 3s, Si 3p 和 C 2s 组成; 高能量子带部分主要由 Si 3s, Si 3p, Si 3d 和 C 2s, C 2p 组成. 在高能量子带部分, 其低能区主要由 Si 3s 和 C 2p 组成, 高能区主要由 Si 3p 和 C 2p 组成.

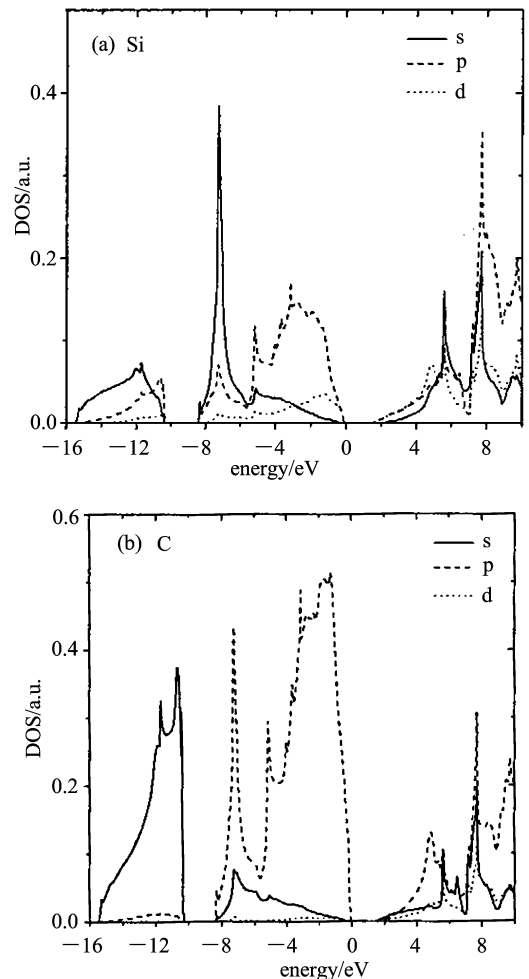


图 1 3C-SiC 的 Si 和 C 原子的分态密度

Fig. 1 Partial DOS of Si and C atoms of 3C-SiC

图 2 是计算出的 3C-SiC 晶体的能带结构, 显示了具有间接带隙闪锌矿材料能带的典型特征. 从图中可以看出, 价带顶位于布里渊区的 Γ 点, 具有 3 重简并; 导带底位于布里渊区的 X 点, 具有 2 重简并. 间接带隙 $E_g=1.30$ eV, 小于实验值(2.417 eV). 在局域密度泛函理论中, 求解 Kohn-Sham 方程没有考虑体系激发态情况, 使得价带以上的能级位置偏低, 而价带以下的能级位置与实验一致, 这就导致基本带隙宽度理论值比实验值一般小 30%~50%.

在光学函数的计算中, 我们采用实验得到的带隙, 即让计算的禁带宽度增加 $\Delta_g=0.9$ eV, 使光学介电函数虚部吸收边向高能方向移动了 Δ_g , 然后利

用 K-K 关系得到介电函数的实部与光子能量的关系。

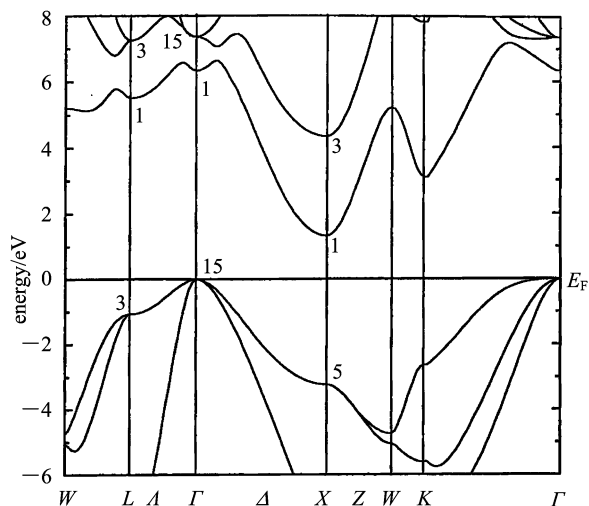
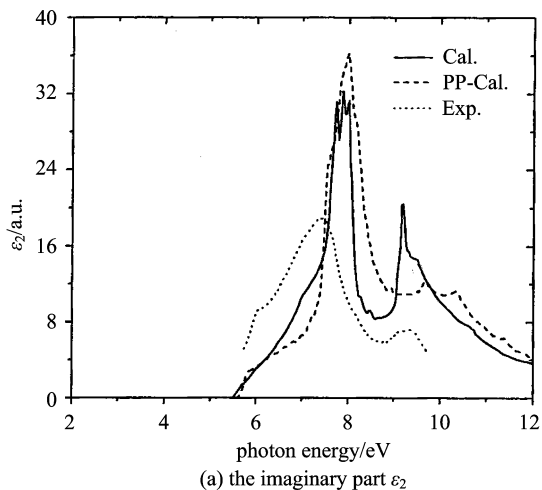


图 2 3C-SiC 的能带结构

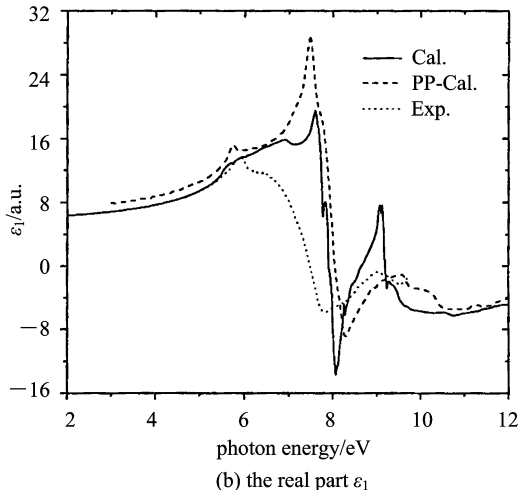
Fig. 2 Band structure of 3C-SiC

图 3 是闪锌矿 3C-SiC 光学介电函数虚部及实部随光子能量的变化。图中实线是我们利用 FPLAPW 方法计算得到的结果,虚线是 Theodorou 等^[7]采用赝势 (pseudo-potential, PP) 方法计算得到的结果,点线是 Petal 等^[8]在柏林 BESSY 同步辐射实验室利用椭圆偏振光谱测得的介电函数,光子能量范围在 5~10 eV。由图 3(a)可以看到,我们的结果与 Theodorou 的赝势结果基本一致。从虚部图中明显可以看出在 5 至 10 eV 之间有较多临界点峰位。光谱吸收起始于 5.5 eV,这对应于 X 点的最小直接带隙,即 X_5-X_1 的跃迁。从 7.7 eV 起始有 3 个明显的临界点位于 7.70, 7.84 和 8.02 eV。它们分别对应于 Γ 点的 $\Gamma_{15}-\Gamma_1$ 的跃迁、L 点的 L_3-L_1 的跃迁、 Γ 点的 $\Gamma_{15}-\Gamma_{15}$ 的跃迁。而在再高的能量区域,则存在位于约 9.15 eV 和 9.52 eV 的两个临界点。它们分别对应于 X 点的 X_5-X_3 的跃迁和 L 点的 L_3-L_3 的跃迁。Petalas 等^[8]的实验结果。与我们的计算结果的临界点对应如下:实验值 5.96 对应于计算值 5.5,实验值 7.43 对应于计算值 7.7,实验值 7.73 对应于计算值 7.8,实验值 8.4 对应于计算值 8.02,实验值 9.03 对应于计算值 9.15,实验值 9.49 对应于计算值 9.52,单位为 eV。理论与实验值总体符合较好,但某些数据有一定差别,这也许是由于样品晶体表面质量的好坏会影响实验结果,如表面粗糙度使入射光散射,表面氧化物也影响反射光的强度。此外样品还可能包含其他 SiC 多型体,寿命展宽

会平滑临界点峰位结构,所有这些效应对实验结果都有一定的影响。此外,我们还计算了高频介电常数 $\epsilon_1(\infty)$ 为 6.04,略小于实验值 6.52。



(a) the imaginary part ϵ_2



(b) the real part ϵ_1

图 3 3C-SiC 光学介电函数随光子能量的变化

Fig. 3 The dielectric function ϵ of 3C-SiC as a function of photon energy

其他重要的光谱光学参数如复折射率 $n^*(E) = n(E) + i\kappa(E)$ 和反射率 $R(E)$ 可以根据复介电函数推导出。图 4 是折射率 $n(E)$ 和消光系数 $\kappa(E)$ 与光子能量的关系,可以看到几个明显临界点位于 5.6, 7.0, 7.63, 8.06 和 9.1 eV 处,与前面的计算结果基本一致。图中实线是理论计算的折射率实部,虚线是理论计算的折射率虚部,点线是 Logothetidis^[9]等采用普通和同步辐射椭圆偏振光谱测得的折射率实部的实验结果,尽管实验测量的能量范围较小,但理论与实验总体符合得较好。图 5 是反射率 R 与光子能量的关系。实线是理论计算的结果,虚线是 Logothetidis^[9]等测量的位于

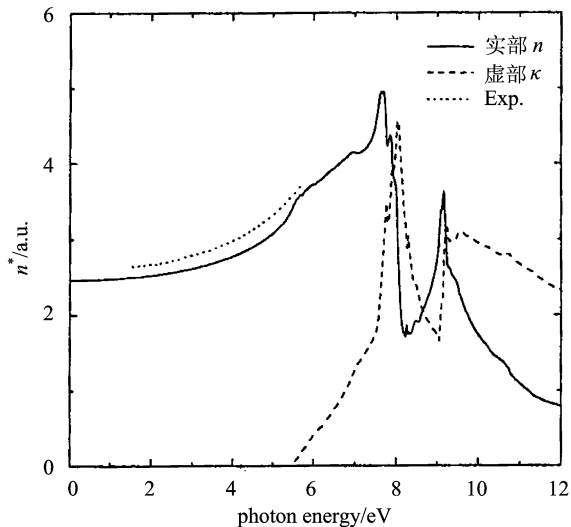


图 4 3C-SiC 的折射率 n 和消光系数 κ 与光子能量的关系

Fig. 4 The refractivity n and extinction coefficient κ of 3C-SiC as a function of photon energy

1.5~9.5 eV 之间的实验曲线. 点线是 Lambrecht^[10] 等利用真空紫外反射率计实验得到的曲线. 反射谱在 5.7 eV 有明显的峰位临界点, 来自 X 点附近的价带顶和导带底之间的直接跃迁, 与实验结果基本一致. 实验结果表明反射率最高点位于 7.8 eV 处, 我们的理论结果表明在 7.8 eV 处表现为一肩峰, 而反射率最高点位于 8.1 eV. 理论与实验都表明在 8.98 eV 附近表现为最小值. 在 7.8 eV 以下, 理论值位于两个文献的实验值之间; 9.0 eV 以上时, 理论值大大高于实验值, 这可能是由于在高能量范围内, 表面粗糙度引起的漫散射大大增强, 影响了表面反射率的测量, 从而引起误差较大.

3 结论

我们利用第一性原理的 FPLAPW 方法计算了 3C-SiC 的能带结构和基本光学函数. 计算的带隙比实验值小, 这是由于局域密度近似所引起. 经带隙校正后, 计算了介电函数的虚部和实部. 研究了介电函数中的临界点结构, 并分析了相应的光跃迁. 根据得到的介电函数, 计算了折射率、消光系数及反射率与光子能量的关系. 理论计算的结果与实验进行比较基本相符.

参考文献 (References)

[1] 郝跃, 彭军, 杨银堂, 等. 碳化硅宽带隙技术[M]. 北京: 科学出版社, 2000: 1-6.

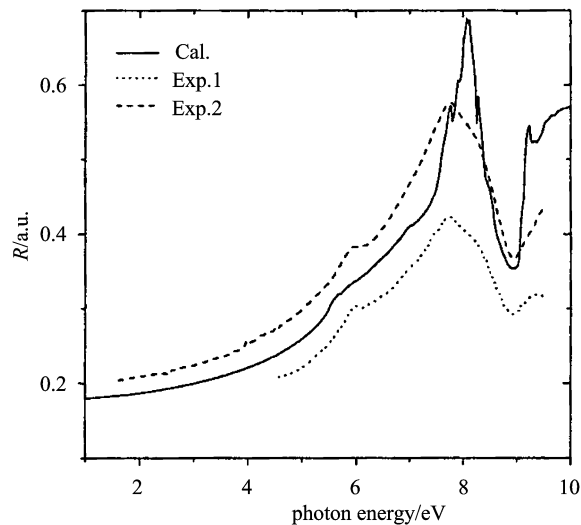


图 5 3C-SiC 的反射率与光子能量的关系

Fig. 5 The reflectivity of 3C-SiC as a function of photon energy

- [2] 谢长坤, 徐彭寿, 徐法强, 等. β -SiC(110) 表面原子与电子结构的理论研究[J]. 科学通报, 2002, 47(5): 336-341.
- [3] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple[J]. Phys. Rev. Lett., 1996, 77(18): 3 865-3 868.
- [4] Monkhorst H J, Pack J D. Special points for Brillouin-zone integrations[J]. Phys. Rev. B, 1976, 13(12): 5 188-5 192.
- [5] Murnaghan F D. The compressibility of media under extreme pressures [C] // Proc. Natl. Acad. Sci. USA; National Academy of Sciences, 1944, 30: 244-247.
- [6] Madelung O. Semiconductors; Group IV Elements and III-V Compounds [M]. Berlin; Springer, 1991: 47-57.
- [7] Theodorou G, Tsegas G, Kaxiras E. Theory of electronic and optical properties[J]. J. Appl. Phys., 1999, 85: 2 179-2 184.
- [8] Petalas J, Logothetidis S, Gioti M, et al. Optical properties and temperature dependence of the interband transitions of 3C- and 6H-SiC in the energy range 5 to 10 eV[J]. Phys. Stat. Sol. B, 1998, 209: 499-521.
- [9] Logothetidis S, Petalas J. Dielectric function and reflectivity of 3C-silicon carbide and the component perpendicular to the c axis of 6H-silicon carbide in the energy range 1.5-9.5 eV[J]. J. Appl. Phys., 1996, 80: 1 768-1 772.
- [10] Lambrecht W R L, Segall B, Yoganathan M, et al. Calculated and measured UV reflectivity of SiC polytypes[J]. Phys. Rev. B, 1994, 50: 10 722-10 726.