

α -SiC (10 $\bar{1}0$) 表面结构的第一性原理计算*

谢长坤^{1)†} 徐彭寿^{1)†} 徐法强²⁾ 潘海斌²⁾

¹⁾ 中国科学技术大学结构分析开放实验室, 合肥 230026

²⁾ 中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 合肥 230029

(2002 年 4 月 14 日收到, 2002 年 5 月 23 日收到修改稿)

用全势缀加平面波方法(FPLAPW)计算了 α -SiC 及其非极性(10 $\bar{1}0$)表面的原子与电子结构. 计算出的 α -SiC 晶体结构参量: 晶格常量和体积弹性模量与实验值符合得很好. 用平板超原胞模型来计算 α -SiC(10 $\bar{1}0$)表面的原子与电子结构. 结果表明表面顶层原子发生键长收缩并扭转的弛豫特性, 表面阳离子 Si, C 向体内方向发生不同程度的位移. 表面重构的机理为 Si, C 原子由原来的 sp^3 杂化方式退化为 sp^2 杂化, 与其三配位异种原子近似以平面构型成键. 另外, 表面弛豫实现表面由半金属性至半导体性的转变.

关键词: 碳化硅, FPLAPW 方法, 电子结构

PACC: 7115A, 7320A

1. 引 言

碳化硅(SiC)由于其独特的物理性质和电子学特性, 它是极具潜力的第三代宽带隙半导体材料. SiC 是由电负性相差较大的两种 IV 族元素组成, 具有较强离子性的共价键, 物理性质非常稳定. 由于具有宽带隙、高临界击穿电场、高热导率、高载流子饱和漂移速度等优点, 在高温、高频、高压、高功率和抗辐射电子器件等方面具有重要应用^[1,2].

随着理论研究的不断深入及实验技术的不断提高, 对 SiC 表面原子和电子结构的理论和实验研究也引起了人们极大的兴趣. 最近对 SiC 体材料的多型体及其极性表面的电子性质研究得比较多^[3-5], 但对非极性表面如 α -SiC(10 $\bar{1}0$)的研究还很少. 由于样品制备的困难, 实验上迄今还没有关于 α -SiC(10 $\bar{1}0$)表面原子结构和电子结构的报道. 在理论上, 最早研究 α -SiC(10 $\bar{1}0$)表面是 Lee 等^[6]和 Mehandru 等^[7]分别用传递矩阵方法(transfer matrix method 缩写为 TMM)和紧束缚(atom superposition and electron delocalization 缩写为 ASED)能带方法进行半经验的理论计算, 认为弛豫后表面键角分别为 2.6°和 1.7°; 1995 年 Pollmann 等^[8]采用可分离形式的平滑正则保守赝势(smooth norm-conserving pseudopoten-

tials)进行了从头计算, 认为表面键角为 3.8°; 但是最近 Rauls 等^[9]采用基于紧束缚方法的电荷密度泛函方法(self-consistent charge density-functional based tight-binding 缩写为 SCC-DFTB)进行计算, 他们认为弛豫后表面键长缩短 8.2%, 而表面键角应为 2.4°. 由此可见, 对 α -SiC(10 $\bar{1}0$)表面原子及电子结构性质, 至今尚未有定论.

众所周知, 半经验方法不是基于第一性原理的计算方法, 只能给出较为粗糙的结果, 而赝势平面波方法也有自己的缺点, 例如对于第一周期原子 C, N 和 O 等原子, 由于缺少芯态 p 电子, 要得到传递性较好的原子赝势一般较为困难. 全势缀加平面波方法(FPLAPW)是基于密度泛函理论的全电子计算方法, 可以对周期表中所有原子有较好的处理. 由于对于势函数没有任何近似, 因而被认为是固体物理中最精确的能带计算方法. 本文通过 FPLAPW 的全电子理论计算方法, 对 α -SiC(10 $\bar{1}0$)表面进行了第一性原理计算. 首先我们计算了 α -SiC 的体材料结构参量, 得到与实验值较为一致的结果, 然后对 α -SiC(10 $\bar{1}0$)理想表面和弛豫表面的原子与电子结构进行了较为详细的研究, 对 α -SiC(10 $\bar{1}0$)表面的原子与电子结构有了更深刻的认识.

* 国家自然科学基金(批准号 50132040)中国科学技术大学“高水平大学建设”研究基地资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: psxu@ustc.edu.cn

2. 理论方法与计算

我们采用基于密度泛函理论(DFT)的 FPLAPW 理论方法^[10]进行第一性原理计算.用 FPLAPW 方法对 Kohn-Sham(缩写为 K-S)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、总能量和能量本征值.在缀加平面波方法中,空间被分隔为

$$\phi_k(r) = \begin{cases} \Omega^{-1/2} e^{iKr} & r \in \text{IR}; \\ \sum_{lm, l \leq l^{\text{pot}}} [a_{lm}^l(K)u_l(\epsilon_{ls}, r_l) + b_{lm}^l(K)\dot{u}_l(\epsilon_{ls}, r_l)]Y_{lm}(\hat{r}_l) & r_l \leq R_l, \end{cases}$$

式中 $K = k + G$, G 为倒格子矢量, 矢量 k 位于第一布里渊区内, 波函数截断(wavefunction cutoff)由倒格矢 K^{cut} 决定, 从而决定了 K 矢量的数目和基矢组的大小; Ω 为原胞体积, R_l 为 MT 球半径, $r_l = r - R_l$ 为位于 MT 球内的第 l 个原子的位置矢量. 径向波函数 $u_l(\epsilon_{ls}, r_l)$ 和 $\dot{u}_l(\epsilon_{ls}, r_l)$ 为径向 Schrödinger 方程的解. 展开能 ϵ_{ls} 在各分波 l 的能带范围内选定; $a_{lm}^l(K)$ 和 $b_{lm}^l(K)$ 根据第 l 个 MT 球表面的基函数及其导数连续的条件来确定. 作用于波函数的势函数表示如下:

$$V(r) = \begin{cases} \sum_{|G| \leq G^{\text{pot}}} V_G e^{iGr} & r \in \text{IR}; \\ \sum_{lm, l \leq l^{\text{pot}}} V_{lm, l}(r_l)Y_{lm}(\hat{r}_l) & r_l \leq R_l, \end{cases}$$

式中势函数没有形状近似(shape approximation). 其中 G^{pot} 为倒格子矢量 G 的截断参数(cutoff parameter), l^{pot} 为 MT 球内势的 (l, m) 表示的最大角动量, 这两个参数决定了全势的质量好坏. 芯电子用原子波函数表述, 利用势函数的球谐部分进行完全相对论(fully relativistically)求解, 价电子进行标量相对论(scalar relativistically)处理.

3. α -SiC 体结构性质

我们用 FPLAPW 方法来计算 α -SiC 材料的晶体物理性质. 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 $l_{ns} = 4$, 波函数的平面波截断由 $R_{\text{min}}, K^{\text{cut}} = 8$ 决定, 这里 R_{min} 为晶胞中最小的 MT 半径, K^{cut} 为平面波展开中

间隙区(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. K-S 方程的电子波函数 $\psi_{k, j}(r)$ 以基函数 $\phi_k(r)$ 展开

$$\psi_{k, j}(r) = \sum_{|K| \leq K^{\text{cut}}} C_i(K)\phi_k(r),$$

式中

最大的倒格子矢量. Si 和 C 的 MT 半径分别取为 0.0952 和 0.0687nm. 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; 交换相关势采用 Perdew, Burke 和 Ernzerhof 提出的含梯度修正的局域密度近似(LDA); 采用 $9 \times 5 \times 5$ Monkhorst-Pack 特殊 k 样点对全布里渊区进行求和, 在不可约布里渊区减少为 36 点. 当系统总能在 1.36×10^{-5} eV 内稳定时, 自洽计算停止并达到很好的收敛.

α -SiC 晶体具有纤锌矿结构(六方相), 构成 SiC 的每个 Si 原子、C 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, 所取原胞为六方格子的固体物理学原胞, 每个原胞内有两个 Si 原子和两个 C 原子. 为确定 α -SiC 体结构性质, 晶体参量 a, c 和内部参量 u 通过体系总能量最小化来确定. 首先内部参量 u 的值弛豫到最佳的位置. 在相同体积下, 在不同的 c/a 比值下计算了晶体总能量; 在固定 c/a 情况下, 计算了晶体体积与系统总能量之间的关系, 并用最小二乘法拟合 Murnaghan^[12] 状态方程, 得到平衡晶格常量 a 和体积弹性模量 B . 我们的计算结果与实验值^[13, 14] 符合得很好, 见表 1. 晶格常量和体积弹性模量的计算值与实验值相差分别仅在 0.4% 和 3.6% 之内. 计算出的带隙为 2.5 eV, 小于实验值约 24%. 半导体的禁带宽度偏小是局域密度泛函的通常结果, 一般认为与局域密度泛函理论中 K-S 方程的本征值不能给出系统的激发态能量有较大关系^[15, 16], 使位于导带的电子态能量值比实验值偏小, 从而带隙偏小. 从多体系统格林函数出发计算各种复杂的多体效应对准粒子能量贡献的自能方法(GW), 在具

体的能带计算中以自能代替密度泛函局域近似中用的交换关联势能. 这种方法虽然较好解决了带隙偏

小问题, 但因其计算极其复杂而未被广泛应用.

表 1 α -SiC 的物理性质^a

	a/nm	c/nm	u	c/a	B/Mbar	B'	E_g/eV
本文结果	0.3087	0.5066	0.3752	1.641	2.15	3.9	2.5
实验结果	0.3076	0.5048	-	1.641	2.23	-	3.33

^a 晶格常量 a, c ; 内部参量 u ; 体积弹性模量 B ; 体积弹性模量的一阶导数 B' ; 带隙 E_g .

4. α -SiC (10 $\bar{1}$ 0) 表面

4.1. 原子结构

垂直于 $10\bar{1}0$ 方向的原子平面包括相同数目的 Si 原子和 C 原子, Si-C 之间以平行的二聚体(dimer)存在(见图 1). 每个表面原子失去了在体态时四配位的一个配位, 成为三配位, 分别与表层的一个原子和次表层的两个原子成键. 与大多数的化合物半导体非极性表面一样, α -SiC (10 $\bar{1}$ 0) 表面弛豫保持对称性不变. 弛豫之后, 表面二聚体发生扭曲(distortion), 见图 2. 通常用两个重要的结构参量来表征其弛豫特性: 表面键长 d_{surf} 和表面键旋转角 ω .

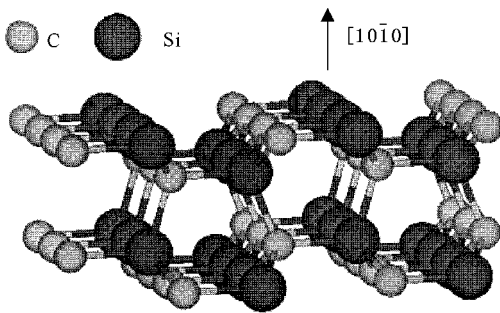


图 1 α -SiC (10 $\bar{1}$ 0) 表面

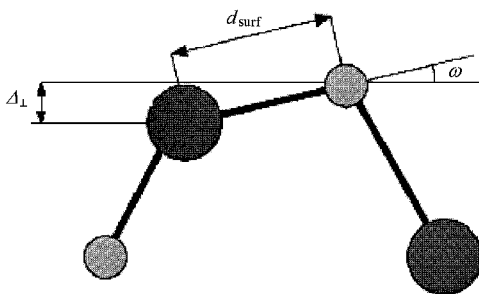


图 2 α -SiC (10 $\bar{1}$ 0) 表面弛豫结构

本文在计算表面电子结构时采用了平板(slab)和超原胞(supercell)模型来近似模拟半无限大晶体, 也就是取一定厚度的晶体原子层和一定厚度的真空层在垂直于二维平面方向上周期重复排列而形成超原胞结构. 我们选取具有两个等同表面的 8 原子层平板模型来模拟 α -SiC (10 $\bar{1}$ 0) 表面, 增加平板的厚度不会显著改变我们的结果. 在平板表面的二维方向保持原有的平移不变性, 在 z 方向形成 SiC 平板和真空区交替存在的超格子; 真空区厚度选取相当于 5 个 SiC 原子层的厚度, 以消除平板两端表面之间的相互作用. 晶格常量取前面用本方法计算出的理论值. 对二维表面布里渊区的求和采用 4×7 的网格 k 点, 波函数平面波截断参数 K^{cut} 取为 4.89, 其他参数与体材料的计算相同. 测试计算表明我们所取的 k 点数和波函数平面波截断可以使体系总能量得到很好的收敛.

我们首先根据以上的计算参数优化了 α -SiC (10 $\bar{1}$ 0) 表面原子结构, 让 slab 模型表层和次表层原子进行弛豫, 以消除加在表面上的原子力, 而其他内层原子仍保持原来体态位置不变, 得到弛豫表面的原子结构. 表 2 给出了 α -SiC (10 $\bar{1}$ 0) 弛豫后表面两层 C, Si 原子相对于理想表面的位移, 并与以前用不同的计算方法得到的结果进行了比较. 可以看到, 表面第一层 Si, C 原子均向体内移动, 从而与其相邻三配位原子趋向于平面构型, Si 原子比 C 原子的移动幅度大, 表面第二层各原子的位移量都很小, 与以前的计算结果基本一致. Sabisch 等^[17]在对非极性 β -SiC (110) 表面进行了从头计算时, 认为异极(heteropolar)共价或离子半导体表面弛豫的物理机理主要有三点: 电子与电子之间的库仑作用, 量子轨道杂化效应, 阴阳离子之间的经典库仑吸引作用. 根据我们的结果, 我们认为 α -SiC (10 $\bar{1}$ 0) 表面的弛豫主要是由量子轨道杂化效应引起的. 表面弛豫后, Si 和 C 原子均不同程度由原来的 sp^3 杂化退化为 sp^2 杂化, 导致分别与三配位原子近似为平面构型. 这是 Si, C 原子

均向体内方向移动的原因. 此外, Lee 等^[6]提出 sp^2 的杂化程度强烈依赖于价带 s 与 p 电子能级之间的间隔. 间隔越大, 杂化效应越小; 反之, 间隔越小, 杂

化效应越大. 由于 Si 的 s, p 能级之差比 C 小, 所以 Si 原子发生杂化的程度比 C 大, Si 原子比 C 原子向体内方向的移动幅度大.

表 2 α -SiC(10 $\bar{1}0$)表面顶部两层原子的位移, 并与以前用不同方法的计算结果进行了比较

	第一层			第二层		
	$\Delta x/\text{nm}$	$\Delta y/\text{nm}$	$\Delta z/\text{nm}$	$\Delta x/\text{nm}$	$\Delta y/\text{nm}$	$\Delta z/\text{nm}$
ASED						
Si	0.00	-0.011	-0.022	0.00	-0.002	0.00
C	0.00	0.009	-0.017	0.00	0.002	0.005
TMM						
Si	0.00	-0.008	-0.022	0.00	-0.002	0.001
C	0.00	0.002	-0.014	0.00	0.001	0.001
SCC-DFTB						
Si	0.00	-0.0101	-0.0157	0.00	0.001	0.0064
C	0.00	0.0055	-0.0084	0.00	0.0029	0.0031
本文结果						
Si	0.00	-0.0103	-0.0226	0.00	0.0023	0.0060
C	0.00	0.0065	-0.0063	0.00	0.0037	0.0033

我们的结果表明, 顶层 Si—C 键长收缩且发生扭转的弛豫特性. 我们计算出的表面顶层原子键长 d_{surf} 为 0.1738nm, 相对理想表面时的键长缩短了 8%, 这与最近 Rauls 等^[9]用 SCC-DFTB 的计算结果一致, 他们发现弛豫后表面键长缩短了 8.2%. 图 3 为理想表面和弛豫表面的总价电子电荷密度图. 由于 C 相对于 Si 具有较强的电负性, 使得电荷密度强烈聚集于 C 原子周围, 导致 Si—C 二聚体电荷的不对称分布. 可以看到表面弛豫对价电子电荷密度最明显的作用是使表层 Si—C 二聚体原子成键区域的电荷密度有明显增加. 这里增加的电荷是由表面区域电子电荷的重新分布引起的. 因为在 α -SiC(10 $\bar{1}0$) 表面, Si 原子和 C 原子由原来的四配位环境变为表面处的三配位环境, 那么悬键电子就会移动到周围相邻原子的键合中重新分布并成键. 在表面弛豫过程中, 由于 Si 的电负性较弱, 使得 Si 原子附近的电荷也会向成键区域附近转移. 这种电荷分布的变化只发生在表层原子, 而内层原子的电荷密度没有明显的变化. 根据分子轨道键级理论^[18](bond order theory), 净成键电子越多, 化学键越强, 键长也就越短. 由于成键电子增加, 增强了表面 Si 原子与 C 原子之间键合的共价特性, 从而导致表面原子键长有所收缩. 另一方面, 弛豫后, Si, C 原子由从 sp^3 向 sp^2 杂化退化, 也是表面键长缩短的原因. 例如, 金刚石中的每个 C 原子都以 sp^3 杂化与近邻原子方式成键, 其键长为 0.154nm. 但石墨中 C 以 sp^2 杂化轨道

与相邻的三个 C 原子以共价键结合, 其中键长为 0.142nm. 这说明在杂化方式由 sp^3 转变 sp^2 后, 原子之间的键长会缩短.

表征表面弛豫特性的另一个重要参量是表面键旋转角 ω . 由于表面二聚体 Si, C 原子在垂直方向上的位移之差 $\Delta_{\perp} = 0.0163\text{nm}$, 对应了表面键旋转角 ω 是 5.37° . 这与 Pollmann 等^[8]的结果一致, 他们发现了稍微小一些的表面键旋转角 ω 为 3.8° . 但是我们的结果与 Lee 和 Mehandru 等^[6,7]结果相差较大, 他们用有三层原子的超元胞模型来模拟 SiC 表面, 用半经验紧束缚方法计算得到的表面键旋转角分别仅为 2.0° 和 1.7° . 这可能与计算中所采用的理论方法有关. 如在 Lee 和 Joannopoulos^[6]的工作中, 采用传递矩阵方法 (transfer matrix method) 来计算表面电子结构, 他们首先通过调节参量 U_1, U_2, U_3 与体材料的晶格常量和体积弹性模量等实验值进行拟合, 然后用这些参量进行表面电子结构的计算, 这就不一定适当了. 这可能是半经验计算方法与本文及其他文献等基于第一性原理的从头计算结果有较大差别的原因. 另外, 我们也采用 FPLAPW 方法对 β -SiC(110) 进行了从头计算^[19], 得到的表面键旋转角为 16.85° , 大大高于 α -SiC(10 $\bar{1}0$) 表面. 这可能与表面原子的环境不同有关. 在 α -SiC(10 $\bar{1}0$) 表面, 每个原子只与另外一个异种表面原子成键, 而在 β -SiC(110) 表面, 每个原子与另外两个异种表面原子成键, 这可能是其较大表面键转角的原因.

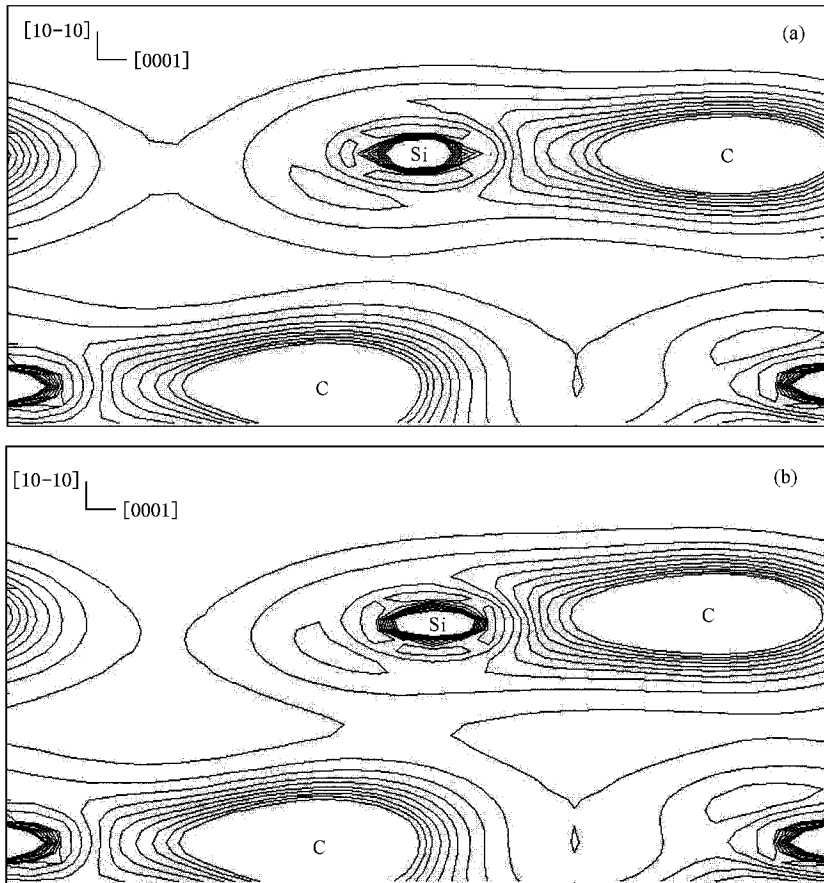


图3 SiC 总价电子电荷密度图 (a)为理想表面 (b)为弛豫表面,图中轮廓线间距为 $100e/\text{nm}^3$

4.2. 电子结构

一般而言,在禁带中出现的电子态密度是由于表面原子周围环境的变化引起的.由于表面的存在一般只能影响 slab 中表面数层原子的局域态密度,越往内部,原子的电子状态受表面的影响越小,态密度中与表面相关的峰也相应减弱,由此判断出表层原子中表面态峰,并且利用分波局域态密度曲线可以区分这些表面态峰轨道特性.图 4(a)为 α -SiC ($10\bar{1}0$)非极性理想表面总态密度和 Si, C 原子态密度,图 5(a)为理想表面顶层原子的分态密度.相对于体层(超元胞中表面下第 4 层)态密度,表面的一个重要特点是在禁带中出现两个明显的成键-反键分裂表面态带.一个表面态带 x 位于体带隙附近 -0.92 至 0.16eV 的范围,主要属于阴离子悬挂键 C sp^3 杂化态,并混合有 Si 表面态的贡献,此态主要位于费密能级以下,故属于成键态;另一个表面态带 y 位于带隙附近 0.44 至 1.8eV 的范围,主要属于阳离子悬挂键 Si sp^3 杂化态,并混合有 C 表面态的贡

献,此态位于费密能级以上,故属于反键态.需要说明的是,由于每个表面原子失去了一个最近邻配位原子,使得悬键态并不是理想的 sp^3 杂化态.因为费密能级位于成键态带中,即成键态带没有填满电子,且表面能带之间的带隙仅有 0.28eV ,所以理想 ($10\bar{1}0$)表面应具有半金属特性.

图 4(b)为弛豫后 SiC ($10\bar{1}0$)表面总体态密度和 Si, C 原子态密度.由于 C, Si 原子均向体内方向发生了不同程度的位移,表面原子位置的变化导致表面层附近的原子电子轨道的重新杂化,使得原有的表面态的大小、位置及其轨道特性都发生了变化.可以看到,禁带隙内靠近导带的反键表面态 y 重心位置向上(体导带区)移动约 0.94eV ,而靠近价带的成键表面态 x 则向下(体价带区)移动 0.16eV ,使成键态带完全位于费密能级以下,同时使表面态带中出现了 1.38eV 的带隙,表面性质实现了从半金属性到半导体性质的转变,从而降低了表面能.根据弛豫表面顶层原子分态密度(图 5(b)),弛豫后 Si 表面态的占有态的 $\text{Si}3\text{p}$ 轨道成分减少很多,非占有态 $\text{Si}3\text{p}$ 轨

道成分有所增加, Si3s 轨道成分减少较多;类似地,弛豫后 C 表面态的占有态的 C2p 成分有较多减少,非占有态 C2p 轨道无明显变化, C2s 轨道成分略有减少. 总而言之,就 p 轨道在弛豫前后表面态中所占的比重而言, Si, C 的 p 成分在成键区减少,而在反

键区增加,说明他们的成键方式均由 sp^3 向 sp^2 杂化方式退化. 这种杂化方式的改变就使得 Si, C 原子均向体内移动,分别与其三配位异型原子近似处于一个平面上.

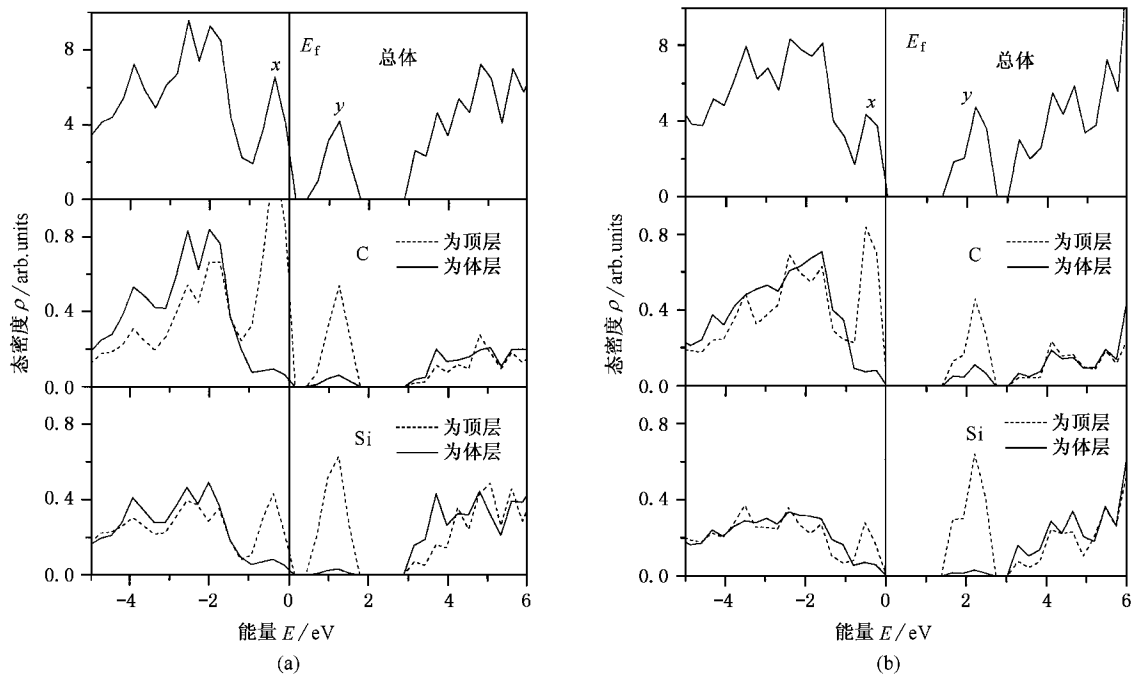


图 4 α -SiC(1010)表面总体和 C, Si 态密度曲线 (a)为理想表面 (b)为弛豫表面

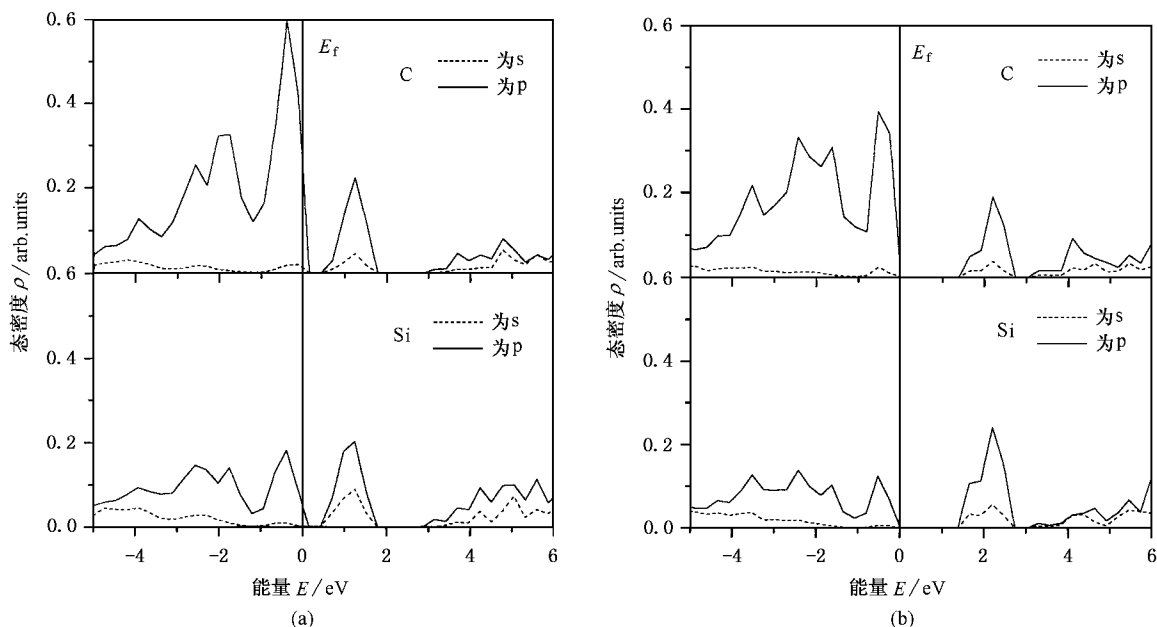


图 5 α -SiC(1010)表面顶层 C, Si 原子分态密度曲线 (a)为理想表面 (b)为弛豫表面

5. 结 论

我们用 FPLAPW 理论方法计算了 α -SiC($10\bar{1}0$) 理想和弛豫表面的原子与电子结构,给出了表面原子结构的弛豫数据,并分析了理想和弛豫表面的电子结构.结果表明,表面弛豫使表面顶层原子 Si—C 键长收缩并扭转.表层 Si, C 原子均不同程度地向

体内方向移动,与其三配位原子成键方式由 sp^3 退化为 sp^2 杂化,构型近似为平面.弛豫后,表面态能带之间的带隙由 0.28 增加为 1.38 eV,而表面性质也由未弛豫时的半金属性转变为弛豫后的半导体性.目前为止,还没有 α -SiC($10\bar{1}0$) 表面的角分辨光电子能谱(ARPES)和低能电子衍射(LEED)的实验研究,希望我们的理论计算能够促使关于 α -SiC($10\bar{1}0$) 表面实验工作的开展.

- [1] Yue H 2000 *The SiC Wide Band-gap Semiconductor Technology*, (Beijing: Science and Technology Press) p1(in Chinese) [郝 跃 2000 碳化硅宽带隙半导体技术(北京,科学技术出版社)第 1 页]
- [2] Carter C H and Tsvetkov V F 1999 *Mater. Sci. Eng. B* **61-62** 1
- [3] Lambrecht W R, Limpijumng S, Rashkeev S N *et al* 1997 *Phys. Stat. Sol. (b)* **202** 5
- [4] Persson C, Lindefelt U and Semelius B E 1999 *J. Appl. Phys.* **86** (4) 197
- [5] Guo Q N, Fan X Q, Zhang D X *et al* 1996 *Acta Phys. Sin.* **45** 1875 (in Chinese) [郭巧能、范希庆、张德萱等 1996 物理学报 **45** 1875]
- [6] Lee D H and Joannopoulos J D 1982 *J. Vac. Sci. Technol.* **21** 351
- [7] Mehandru S P and Anderson A B 1990 *Phys. Rev. B* **42** 9040
- [8] Pollmann J, Kruger P, Rohlfing M *et al* 1996 *Appl. Surf. Sci.* **104/105** 1
- [9] Rauls E, Elsner J, Gutierrez R *et al* 1999 *Sol. Stat. Commun.* **111** 459
- [10] Blaha P, Schwarz K, Sorantin P and Trickey S B 1990 *Comput. Phys. Commun.* **59** 399
- [11] Perdew J P, Burke S and Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 865
- [12] Murnaghan F D 1944 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **30** 244
- [13] Van Camp P E, Van Doren V E and Devreese J T 1986 *Phys. Rev. B* **34** 1314
- [14] Carnahan R D 1968 *J. Am. Ceram. Soc.* **51** 223
- [15] Perdew J P and Levy M 1983 *Phys. Rev. Lett.* **51** 1884
- [16] Sham L J and Schluter M 1983 *Phys. Rev. Lett.* **51** 1888
- [17] Sabisch M, Kruger P and Pollmann J 1995 *Phys. Rev. B* **51** (13) 367
- [18] Li J Q and He T J 1990 *Introduction to Material Structure* (Hefei: Press of University of Science & Technology of China) p163(in Chinese) [李俊清、何天敬 1990 物质结构导论(合肥:中国科学技术大学出版社)第 163 页]
- [19] Xie C K, Xu P S, Xu F Q *et al* 2002 *Chin. Sci. Bull.* **47** 336(in Chinese) [谢长坤、徐彭寿、徐法强等 2002 科学通报 **47** 336]

First-principles study on α -SiC ($10\bar{1}0$) surface structure ^{*}

Xie Chang-Kun^{1,2)} Xu Peng-Shou^{1,2)†} Xu Fa-Qiang²⁾ Pan Hai-Bin²⁾

¹⁾ *Structure Research Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*

²⁾ *National Synchrotron Radiation Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei 230029, China*

(Received 14 April 2002 ; revised manuscript received 23 May 2002)

Abstract

We present a theoretical calculation on the atomic and electronic structure of α -SiC and its non-polar ($10\bar{1}0$) surface using the full-potential-linear-augmented-plane-wave (FPLAPW) approach. The calculated lattice constants and bulk modulus of α -SiC crystal are in excellent agreement with experimental data. The atomic and electronic structure of α -SiC ($10\bar{1}0$) surface have been calculated by employing slab and supercell models. It is found that the surface is characterized by a top-layer bond-length-contracting rotation relaxation in which both Si and C atoms have the tendency to move down toward the bulk to form planar configuration with their neighbours and Si moves further toward the bulk than C does. Furthermore, surface relaxation induces the transformation from semi-metallic to semiconducting characterization.

Keywords : SiC, FPLAPW method, electronic structure

PACC : 7115A, 7320A

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50132040) and by the Research Base of " Construction of High-level College " in the University of Science and Technology of China.

[†] Author to whom correspondence should be addressed. E-mail : psxu@ustc.edu.cn