

## B-Al 共掺杂 3C-SiC 的第一性原理研究\*

周鹏力<sup>1)</sup> 史茹倩<sup>1)</sup> 何静芳<sup>1)</sup> 郑树凯<sup>1)2)†</sup>

1) (河北大学电子信息工程学院, 保定 071002)

2) (河北大学计算材料研究中心, 保定 071002)

(2013年8月28日收到; 2013年9月11日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波超软赝势法, 计算了未掺杂, B, Al 单掺杂和 B-Al 共掺杂的 3C-SiC 的晶格参数、能带结构、态密度、有效质量、载流子浓度和电阻率. 计算结果表明: 掺杂后导带和价带都向高能端移动, 价带移动速度更快一些, 使得禁带宽度都有一定程度的减小, 其中 B-Al 共掺杂的禁带宽度最窄, 纯净 3C-SiC 的禁带宽度最宽; B 掺杂会减小价带顶空穴的有效质量, Al 掺杂则反之, B-Al 共掺杂补偿了二者的差异, 和未掺杂的 3C-SiC 价带顶空穴的有效质量很接近. B 和 Al 作为受主杂质, 会极大地提高价带顶空穴载流子的浓度, 而且 B-Al 共掺杂的 3C-SiC 的价带空穴浓度是 B, Al 单掺杂时的 3 倍. 4 种体系中, B-Al 共掺杂得到的电阻率是最低的, 同单掺杂相比具有明显的性能优势.

关键词: 3C-SiC, B-Al 共掺杂, 电阻率, 第一性原理

PACS: 31.15.A-, 71.15.Dx, 71.20.-b

DOI: 10.7498/aps.62.233101

## 1 引言

碳化硅 (SiC) 作为第三代半导体材料, 同 Si 相比, 具有强 10 倍的电场强度, 高 3 倍的热导率, 宽 3 倍的禁带宽度, 高 1 倍的饱和漂移速率和更好的热稳定性等优点<sup>[1,2]</sup>. 因此 SiC 材料制备的器件可以长时间工作在高温、高频、强腐蚀等极端条件下<sup>[3,4]</sup>. 此外 SiC 材料正在大举进入功率半导体领域, 市场前景颇为看好<sup>[5]</sup>. SiC 具有多种同质异构体, 其中 3C-SiC (又称  $\beta$ -SiC) 相比于其他结构, 具有更高的电子迁移率, 和电子饱和漂移速率, 适宜制备高功率、高频率、耐高温、抗辐射的电子器件, 被认为是理想的制作集成电路的半导体材料<sup>[6]</sup>.

目前如何调节掺杂以控制 3C-SiC 的电学性质成为研发 SiC 型器件亟待解决的问题, 同时也是近年来半导体材料领域研究的热点<sup>[7-11]</sup>. Song 等<sup>[12]</sup> 使用第一性原理计算软件 CASTEP 计算了掺 N 的 3C-SiC 的电子结构, 发现伴随着掺杂浓度的提高, 材料能带间隙会逐渐减小. Suzuki 等<sup>[13]</sup> 使

用化学气相沉积 (CVD) 的方法对比研究了纯净的单晶 3C-SiC 和 N 掺杂的 3C-SiC 的电学性质, 发现纯净的和掺杂 N 的 3C-SiC 的载流子迁移率在高温下主要由晶格散射决定, 低温下则取决于杂质散射, 而杂质散射主要受施主杂质 N 的影响, 故可以通过 N 掺杂来提高载流子的迁移率. Kim 等<sup>[14]</sup> 实验测定室温下高浓度 N 掺杂 3C-SiC 可使其电阻率降到 300  $\Omega\cdot\text{cm}$ , 对应的载流子浓度为  $3.6 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$ .

既然 N 掺杂可以大幅度降低 SiC 的电阻率, 是否其他的轻型元素 (比如 Al 和 B) 掺杂也可以改变 3C-SiC 材料的结构和电学性质, 而获得同样或者更好的效果呢? 对此研究者们进行了一系列的探索. Zhao 等<sup>[15]</sup> 利用激光诱导气相反应法成功制备了掺杂 N 的纳米 SiC 粉体吸收剂, 在 8.2—18 GHz 范围内表现出较好的微波介电损耗性能. 之后 Li 等<sup>[16]</sup> 尝试采用燃烧合成法制备了立方结构的 Al 掺杂 SiC 吸收剂, 证实了 Al 掺杂同样可以提高 SiC 的微波介电性能. Zhang 等<sup>[17]</sup> 使用第一性原理计算软件 VASP 计算了 p 型掺杂 (B, Al, Ga 单掺杂) 的 3C-SiC 的能带结构和电子态密度, 发现掺杂 B

\* 国家自然科学基金 (批准号: 61204079, 61306098) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zhshk@126.com

得到的掺杂结构最稳定, 掺杂 Al 对晶格影响最小, 掺杂 Ga 可以获得最大的禁带宽度; 并解释了 B 掺杂 3C-SiC 的禁带宽度随着掺杂浓度的增大而减小的微观机理. Sheng 等<sup>[18]</sup> 使用 VASP 计算了 B、Al、Ga、V、Cr、Mn 多种元素掺杂 3C-SiC 的能带结构和态密度, 进而解释了 B、Al 掺杂 3C-SiC 电导率变化的机理: 掺杂原子 (B、Al) 替代 Si 原子后, 费米能级深入价带, 使得价带载流子剧增, 故而电导率增加.

Yamamoto 等<sup>[19,20]</sup> 在研究单极性宽禁带半导体材料时提出了共掺杂理论, 理论预测通过两种及两种以上元素共掺杂可进一步提高材料的光电性质, 共掺杂 3C-SiC 逐渐引起人们的注意. Kim 等<sup>[21]</sup> 在  $N_2$  环境下采用烧结工艺向 SiC 中掺杂 AlN 和  $Y_2O_3$ , 发现掺杂 AlN 会增大 SiC 的电阻率, 而掺杂  $Y_2O_3$  则相反, 最终通过调节掺杂比例将 SiC 的电阻率人为控制在  $10^4$ — $10^{-3} \Omega \cdot cm$  范围内. Su 等<sup>[22]</sup> 采用燃烧合成法制备了立方结构的 B-N 共掺杂的 SiC 粉末, 在 8.2—12.4 GHz 范围内测定其介电损失相比于未掺杂时明显减小, 而且随着掺杂浓度的增加, 在  $N_2$  环境下比在 Ar 环境下减小的幅度更大.

近来, Kim 等<sup>[6]</sup> 做了两组对比试验, 分别在纯净和掺杂 N 的 3C-SiC 衬底上掺杂 B 和 Al, 然后在 4—300 K 范围内测量其电阻率, 发现后者的电阻率比前者高出 4 个数量级, 推断是由于掺杂造成载流子补偿并导致了电阻率的上升. 然该文作者并未对共掺杂做进一步的研究, 也未对其电子能带结构进行研究, 那么 B-Al 共掺杂如何影响电阻率? 其效果相比于单掺杂又如何呢? 这些从上述文章中均未得到体现, 因此本文对 B-Al 共掺杂这种情况进行了第一性原理计算, 预测了相关性质, 并和单掺杂做了比较.

## 2 计算模型

3C-SiC 晶胞是具有立方相的闪锌矿结构, 每个 Si 原子与周围的 4 个 C 原子构成正四面体, Si 原子位于四面体中心, 4 个 C 原子位于四面体的顶角, 每个 3C-SiC 单晶胞包含 8 个原子.

本文将 3C-SiC ( $1 \times 1 \times 1$ ) 晶胞沿  $x, y, z$  轴方向各平移一个单位, 构建成 ( $2 \times 2 \times 2$ ) 立方晶胞, 如图 1 所示, 在做单掺杂计算时, B 原子和 Al 原子依次替代超晶胞中心位置 O 点处的 Si 原子, 做共掺

杂计算时, Al 原子和 B 原子分别替代 P 点和 Q 点的 Si 原子, 建立了  $Si_{32}C_{32}$ ,  $Si_{31}Al_1C_{32}$ ,  $Si_{31}B_1C_{32}$ ,  $Si_{30}B_1Al_1C_{32}$  超晶胞.

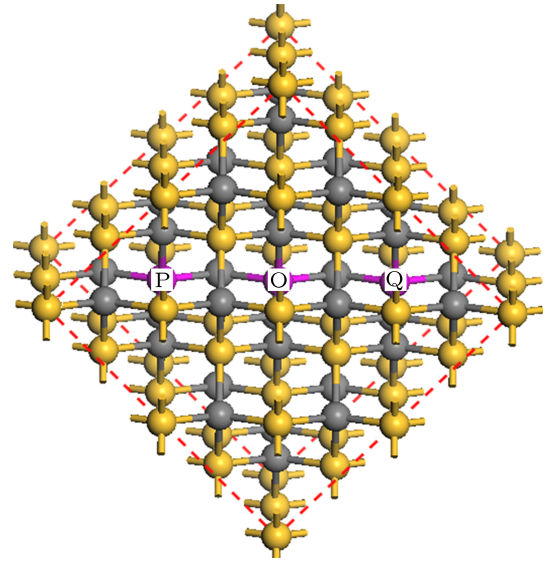


图 1 3C-SiC ( $2 \times 2 \times 2$ ) 超晶胞及替代位置

本文计算使用 CASTEP 软件包, 采用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 下的 PW91 方案处理电子和电子之间的交换关联能, 采用平面波超软赝势 (ultrasoft pseudopotential) 来描述价电子和离子实之间的相互作用, 电子波函数则通过平面波基矢组展开, 平面波截断能选取 280 eV, 布里渊区  $k$  矢的选取为  $3 \times 3 \times 3$ , 收敛精度和  $k$  点精度均设置为 fine. 参与计算的价电子为 C:  $2s^2 2p^2$ , Al:  $3s^2 3p^1$ , Si:  $3s^2 3p^2$ , B:  $2s^2 2p^1$ , 所有计算都在倒易空间中进行.

## 3 计算过程

### 3.1 几何优化

表 1 给出了 4 种不同掺杂情况下的 3C-SiC 几何优化后的晶格常数和晶胞体积. 未掺杂的 3C-SiC 晶格常数  $a$  为 4.368 Å, 和 Lin 等<sup>[23]</sup> 测量的实验值 4.362 Å 符合得很好, 误差仅为 0.14%. 相比于未掺杂的 3C-SiC, Al 单掺杂的 SiC 晶格常数和晶胞体积都变大了, 而 B 单掺杂和 B-Al 共掺杂的 SiC 晶格常数和晶胞体积都发生了不同程度的减小. 这可以从原子半径上解释, 当掺入原子半径相对较大的铝原子时, Al-C 四面体膨胀并挤压邻近的 SiC 晶格, 晶格常数增大, 造成晶胞体积整体增大. 当原子

半径相对较小的 B 替代 Si 原子时, B-C 四面体收缩并拉伸邻近的 SiC 晶格, 晶格常数减小, 使得晶胞体积随之减小. 由于后者收缩程度大于前者膨胀程度, 故而相同浓度的 B-Al 共掺杂时, 晶胞整体是变小的.

### 3.2 能带结构和态密度

图 2(a)—(d) 分别是未掺杂, B 单掺杂, Al 单掺杂和 B-Al 共掺杂的 3C-SiC 沿第一布里渊区高对称

点  $G \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow Z \rightarrow G$  方向的能带结构图,  $G$  点为布里渊区中心, 为了方便计算, 设定费米能级  $E_F$  为能量零点. CBM 表示导带底 (conduction band minimum), VBM 表示价带顶 (valence band maximum).  $E_C, E_V$  分别表示导带底和价带顶的能量. 因为费米能级附近的电子结构是影响固体物理性质的主要因素, 所以图 2 研究的能带和态密度, 能量范围是从  $-6$  eV 到  $6$  eV. 表 2 为能带结构的参数, 包括禁带宽度  $E_g$  和 VBM, CBM 的位置的变化情况 (以未掺杂的 3C-SiC 为参照).

表 1 4 种体系晶格参数比较

参数 \ 体系	未掺杂 $\text{Si}_{32}\text{C}_{32}$	B 单掺杂 $\text{Si}_{31}\text{B}_1\text{C}_{32}$	Al 单掺杂 $\text{Si}_{31}\text{Al}_1\text{C}_{32}$	B-Al 共掺杂 $\text{Si}_{30}\text{B}_1\text{Al}_1\text{C}_{32}$
$a/\text{\AA}$	4.368	4.353	4.376	4.363
$b/\text{\AA}$	4.368	4.353	4.376	4.359
$c/\text{\AA}$	4.368	4.353	4.376	4.359
晶胞体积/ $\text{\AA}^3$	83.339	82.483	83.798	82.901

表 2 能带结构参数

参数	$E_C/\text{eV}$	导带上移/eV	$E_V/\text{eV}$	价带上移/eV	禁带宽度 $E_g/\text{eV}$
(a) 未掺杂	1.42432	—	0	—	1.424
(b) B 单掺杂	1.52761	0.10329	0.12280	0.12280	1.405
(c) Al 单掺杂	1.51726	0.09294	0.10365	0.10365	1.414
(d) B-Al 共掺杂	1.64299	0.21867	0.24681	0.24681	1.396

如图 2(a) 所示, 纯 3C-SiC 的价带顶位于布里渊区的  $G$  点, 具有 2 重简并; 导带底位于布里渊区的  $G$  点, 具有 3 重简并; 表现为直接带隙, 禁带宽度为  $1.424$  eV, 远小于实验值  $2.416$  eV, 这是由于 GGA 自身算法造成的影响, 但作为一种有效的近似方法, 计算结果的相对值还是非常准确的 [24]. 导带底主要由 Si 的 3p 态贡献, 价带顶主要来源于 C 的 2p 态, 还有部分来自 Si 的 3p 态.

由图 2(b) 可知, B 掺杂后, 价带顶上移了  $0.123$  eV, 导致费米能级进入价带, 这是由于掺入的 B 原子提供了可接受电子的受主能级, 在价带顶附近产生了空穴, 使得费米能级进入了价带, 表明此时的 SiC 已成为 p 型掺杂的半导体材料. 此外, 能带图上与 B 原子态密度的高峰相对应的能量范围约  $-1$  至  $-3$  eV 处, 能级分布明显变得密集了, 这是 B 原子的 2p 态贡献的结果, 由此, 价带顶主要由 C 2p 和 B 2p 轨道上的电子共同贡献. 然而 B 原子对导带的影响甚小.

从图 2(c) 中的态密度图可以看出, Al 掺杂后主要是 3p 态在起作用, 同纯净的 3C-SiC 相比, 价带顶价带顶向高能端移动了  $0.104$  eV, 主要被 C 的 2p 态和 Al 的 3p 态占据. Al 的 3p 态对导带底的贡献

亦不容忽视, 导带底主要由 Si 的 3p 态和 Al 的 3p 态共同占据, 向高能端移动了  $0.093$  eV, 所以禁带宽度略微减小, 但是 Al 掺杂显然增加了价带中的能级数, 这一点从能带图中线条的密集程度可以直观的看出. 相比于 B 掺杂, Al 掺杂的带隙要略宽一些.

结合表 2 和图 2 发现, 相比于未掺杂的 3C-SiC, 无论是单掺杂还是 B-Al 共掺杂, 材料的能隙宽度都有一定程度的减小. 此外, 图 2(d) 显示, B-Al 共掺杂的费米能级进入价带的深度最大, 约为  $0.247$  eV. 从态密度方面, 导带底由原先主要被 Si 的 3p 态占据变为由 Si 的 3p 态和 Al 的 3p 态共同占据, 价带顶主要由 C 的 2p 态, Al 的 3p 态和 B 的 2p 态占据, Si 的 3p 态影响力减弱.

通过对能带结构和态密度的分析, 得出结论: 受掺杂影响最大的是价带, 掺杂后价带顶位置和占据的能级相对于未掺杂时都发生了较大的改变. 掺杂后的 3C-SiC 导带底和价带顶都向高能端移动, 并且价带顶移动的更快一些, 导致禁带宽度都有一定程度的减小. 利用此特性, 可以通过控制掺杂元素的种类和掺杂比例来剪裁 3C-SiC 的能带结构, 人为控制其能带位置和带隙宽度, 这对新型器件的研发有着重要的意义.

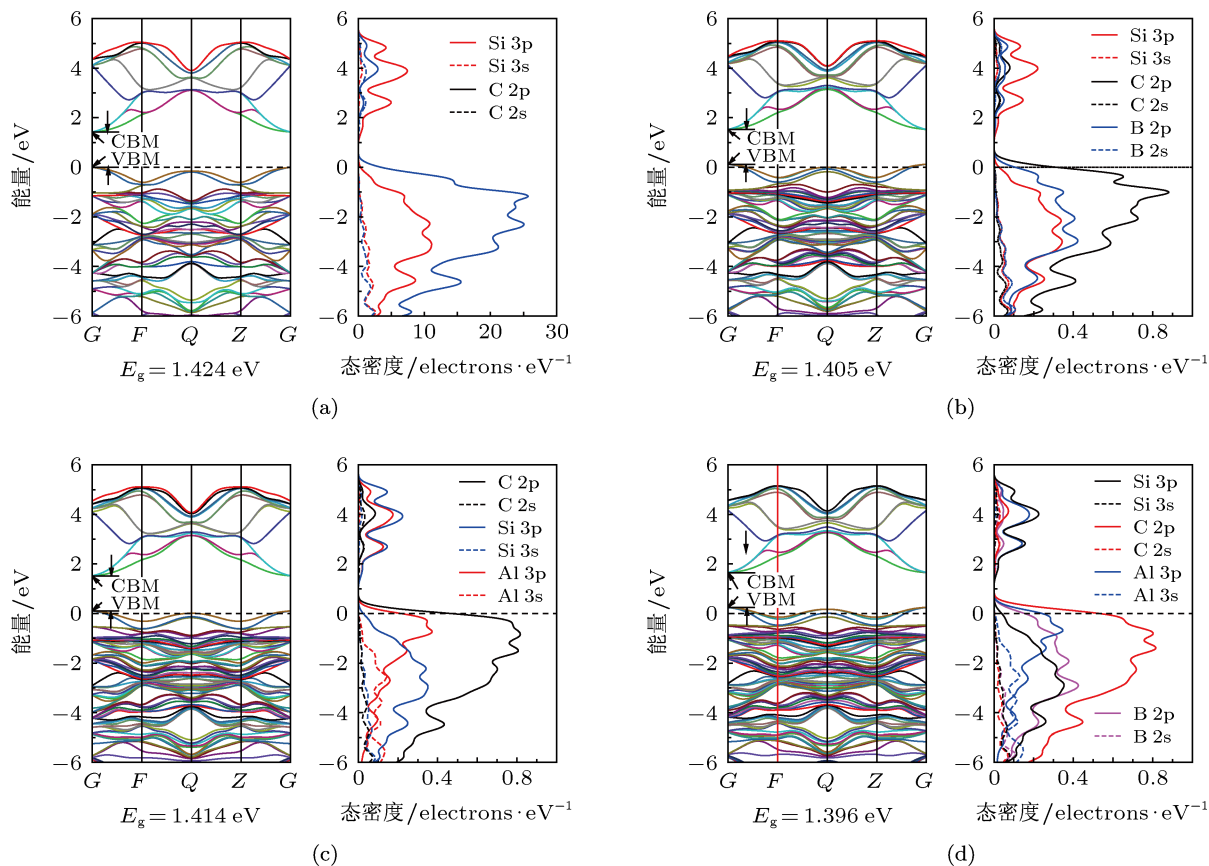


图2 (a) 未掺杂、(b) B 单掺杂、(c) Al 单掺杂、(d) B-Al 共掺杂 3C-SiC 的能带结构及态密度

### 3.3 电阻率

半导体电阻率的表达式为

$$\rho = \frac{1}{nq\mu_n + pq\mu_p}, \quad (1)$$

其中  $n$  和  $p$  分别为电子和空穴的浓度,  $q$  是电子电量,  $\mu_n, \mu_p$  分别表示电子和空穴的迁移率. 材料的电阻率  $\rho$  决定于载流子的浓度和迁移率. 载流子的浓度需通过有效质量来获得.

电子的有效质量  $m_n^*$  由下式定义:

$$m_n^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}}, \quad (2)$$

其中,  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  是普朗克 (Planck) 常量. 其中  $d^2E/dk^2$  的单位是  $eV/(2\pi/a)^2$ ,  $a$  是晶格常数. 由表 1 晶格常数的对比可知, 3C-SiC,  $x, y, z$  3 个方向上晶格常数近似相等, 具有立方对称性, 故可以认为 3C-SiC 各向同性, 将有效质量做标量处理. 同位置处与之相对应的空穴有效质量  $m_p^*$  的值为  $-m_n^*$ . 计算结果见表 3,  $m_0$  表示电子惯性质量.

从表中可以看出掺杂对导带底电子的有效质量影响很小, 但对价带顶空穴的有效质量却影响很

大. B 掺杂使得价带顶空穴有效质量减小, Al 掺杂使之增大, B-Al 共掺杂得到的空穴有效质量介于二者之间.

表 3 4 种体系的电子和空穴有效质量

体系	导带底电子有效质量 $m_n^*/m_0$	价带顶空穴有效质量 $m_p^*/m_0$
(a) 未掺杂	1.34	1.43
(b) B 单掺杂	1.36	1.22
(c) Al 单掺杂	1.35	1.65
(d) B-Al 共掺杂	1.35	1.45

由计算的能带结构可知, B、Al 单掺杂和 B-Al 共掺杂的 3C-SiC 的费米能级全部进入价带,  $E_F - E_V < 0$  满足简并化的条件, 载流子服从费米函数分布. 利用表 3 数据, 计算得到的载流子浓度见表 4.

掺杂的 3C-SiC 计算得出的电子浓度数量级均在  $10^{-8} - 10^{-10}$ , 故近似为 0. 数据显示, B 单掺杂极大地提高了 3C-SiC 材料价带中空穴载流子的浓度, Al 单掺杂后的空穴浓度还要更大一些. B-Al 共掺杂得到的空穴浓度最大, 是单掺杂时的 3 倍左右, 笔者认为这是 B 的 2p 态和 Al 的 3p 态相互影响,

共同作用的结果.

表 4 载流子浓度

体系	导带电子浓度 $n_0/\text{cm}^{-3}$	价带空穴浓度 $p_0/\text{cm}^{-3}$
(a) 未掺杂	$5.14 \times 10^7$	$5.14 \times 10^7$
(b) B 单掺杂	$\approx 0$	$3.05 \times 10^{20}$
(c) Al 单掺杂	$\approx 0$	$3.46 \times 10^{20}$
(d) B-Al 共掺杂	$\approx 0$	$9.62 \times 10^{20}$

对不同的散射机构, 迁移率与温度的关系为 [25]

电离杂质散射:

$$\mu_i \propto N_i^{-1} T^{3/2}; \quad (3)$$

声学波散射:

$$\mu_s \propto T^{-3/2}; \quad (4)$$

光学波散射:

$$\mu_o \propto \left[ \exp\left(\frac{\hbar\omega_1}{k_0T}\right) - 1 \right]. \quad (5)$$

其中  $\mu_i, \mu_s, \mu_o$  分别为电离杂质散射、声学波和光学波散射的迁移率.  $N_i$  表示电离杂质的浓度. 本文  $N_i$  数量级在  $10^{20}/\text{cm}^3$  左右, 故电离杂质散射的影响可忽略不计.  $\omega_1$  是纵光学波振动的角频率. 从 (3) 至 (5) 式可以看出, 迁移率主要受温度的影响. 在常温 300 K 下, 掺杂的 3C-SiC 和纯净的 3C-SiC 迁移率大致相同, 电子和空穴的迁移率分别取  $510 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ,  $20 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ .

由此计算得到的各体系的电阻率结果如表 5 所示.

相比于未掺杂的 3C-SiC, 掺入杂质后材料的电阻率下降了 12 个数量级左右, 这主要是由于掺杂引入了大量的载流子. B-Al 共掺杂的电阻率是 B、Al 单掺杂时的 1/3, 可认为是由于共掺杂的载流子浓度是单掺杂的 3 倍造成的.

表 5 4 种体系的电阻率

体系	电阻率/ $\Omega\cdot\text{cm}$
(a) 未掺杂	$2.3 \times 10^8$
(b) B 单掺杂	$10.25 \times 10^{-4}$
(c) Al 单掺杂	$9.03 \times 10^{-4}$
(d) B-Al 共掺杂	$3.25 \times 10^{-4}$

## 4 结论

采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波超软赝势法, 对比研究了未掺杂, B、Al 单掺杂和 B-Al 共掺杂 3C-SiC 的能带结构和电阻率. 结果表明, 掺杂会引起晶格的畸变, B-Al 共掺杂可以中和单掺杂带来的影响, 减弱畸变程度. B、Al 单掺杂和 B-Al 共掺杂均会使费米能级进入价带, 使 3C-SiC 成为 p 型半导体, 能隙宽度略微减小. 相比于未掺杂的 3C-SiC, 掺杂会大大增加载流子浓度, 因此 B、Al 单掺杂均会降低其电阻率, 而 B-Al 共掺杂的电阻率由于受 B-2p 和 Al-3p 的共同影响, 在单掺杂的基础上又下降了 33% 左右, 同未掺杂和 B、Al 单掺杂相比, B-Al 共掺杂具有非常明显的性能优势.

本文研究人员均为河北大学刘保亭教授课题组成员, 非常感谢刘保亭教授为本文提供 CASTEP 计算软件并参与计算结果的讨论.

[1] Deng X C, Sun H, Rao C Y, Zhang B 2013 *Chin. Phys. B* **22** 017302  
 [2] Song Q W, Zhang Y M, Han J, Tanner S P, Dimitrijević S, Zhang Y M, Tang X Y, Guo H 2013 *Chin. Phys. B* **22** 027302  
 [3] Liu L, Yang Y T, Ma X H 2011 *Chin. Phys. B* **20** 127204  
 [4] Zheng L, Zhang F, Liu S B, Dong L, Liu X F, Fan Z C, Liu B, Yan G G, Wang L, Zhao W S, Sun G S, He Z, Yang F H 2013 *Chin. Phys. B* **22** 097302  
 [5] Li X Y 2013 *Electronic Products* **01** 23 (in Chinese) [李晓延 2013 今日电子 **01** 23]  
 [6] Kim K J, Lim K Y, Kim Y W, Kim H C 2013 *J. Am. Ceram. Soc.* **96** 2525  
 [7] Wang H, Yan C F, Kong H K, Chen J J, Xin J, Shi E W 2013 *Chin. Phys. B* **22** 027505  
 [8] Zheng H W, Wang Z Q, Liu X Y, Diao C L, Zhang H R, Gu Y Z 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 222512  
 [9] Zhou J, Li H, Zhang L, Cheng J, Zhao H, Chu W, Yang J, Luo Y, Wu Z 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 253  
 [10] Wang Y Y, Shen H J, Bai Y, Tang Y D, Liu K A, Li C Z, Liu X Y 2013 *Chin. Phys. B* **22** 078102  
 [11] Dou Y K, Qi X, Jin H B, Cao M S, Usman Z, Hou Z L 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 077701  
 [12] Song J X, Yang Y T, Chai C C, Liu H X, Ding R X 2008 *Journal of Xidian University* **35** 01 (in Chinese) [宋久旭, 杨银堂, 柴长春, 刘红霞, 丁瑞雪 2008 西安电子科技大学学报 **35** 01]  
 [13] Suzuki, Akira 2009 *Appl. Phys. Lett.* **49** 450  
 [14] Kim Y W, Kim K J, Kim H C, Cho N H, Lim K Y 2011 *J. Am. Ceram. Soc.* **94** 991  
 [15] Zhao D, Zhao H, Zhou W 2001 *Physica E* **9** 679  
 [16] Li Z M, Shi J Z, Wei X H, Li P X, Huang Y X, Li G F, Hao Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 237103 (in Chinese) [李智敏, 施建章, 卫晓黑, 李培成, 黄云霞, 李桂芳, 郝跃 2012 物理学报 **61** 237103]  
 [17] Zhang Y, Shao X H, Wang Z Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 5652 (in

- Chinese) [张云, 邵晓红, 王治强 2010 物理学报 **59** 5652]
- [18] Sheng B C, Niu M, Shao X H 2011 *Conductivity and magnetic properties study on doped semiconductor material of 3C-SiC: A first-principle investigation* Wuhan, April 15–17, 2011 p5758–5761
- [19] Yamamoto T, Yoshida H K 1999 *Jpn. J. Appl. Phys. Part2* **38** 166
- [20] Yamamoto T, Katayama Y H 2001 *Physics B* **302** 155
- [21] Kim K J, Lim K Y, Kim Y W 2013 *J. Am. Ceram. Soc.* doi: 10.1111/jace. 12498
- [22] Su X L, Zhou W C, Xu J, Wang J B, He X H, Fu C 2013 *J. Alloys Compd.* **551** 343
- [23] Lin T, Li Q M, Li L B, Yang Y, Chen Y M 2008 *Journal of Semiconductors* **29** 936 (in Chinese) [林海, 李青民, 李连碧, 杨莺, 陈治明 2008 半导体学报 **29** 936]
- [24] Wu G H, Zheng S K, Liu L, Jia C J 2010 *Acta Phys. Sin.* **61** 223101 (in Chinese) [吴国浩, 郑树凯, 刘磊, 贾长江 2012 物理学报 **61** 223101]
- [25] Liu E K, Zhu B S, Luo J S 2008 *The Physics of Semiconductors 7th Edition* (Beijing: Publishing House of Electronics Industry) p119 (in Chinese) [刘恩科, 朱秉升, 罗晋生 2008 半导体物理学第 7 版 (北京: 电子工业出版社) 第 119 页]

# First principle study on B-Al co-doped 3C-SiC\*

Zhou Peng-Li<sup>1)</sup> Shi Ru-Qian<sup>1)</sup> He Jing-Fang<sup>1)</sup> Zheng Shu-Kai<sup>1)2)†</sup>

1) (College of Electronic and Information Engineering, Hebei University, Baoding 071002, China)

2) (Research Center for Computational Materials, Hebei University, Baoding 071002, China)

( Received 28 August 2013; revised manuscript received 11 September 2013 )

## Abstract

The lattice parameters, band structure, density of states, effective mass, carrier concentration and electrical resistivity of 3C-SiC in different doped forms (undoped, B-doped, Al-doped and B-Al co-doped) are calculated using the plane wave ultrasoft pseudopotential based on density functional theory. Calculations indicate that as the B or Al replaces Si atoms, both the conduction band and valence band shift to higher energy level. The top of valence band shifts quicker, resulting in the decrease of the band gap. B-Al co-doped 3C-SiC shows the narrowest bandgap while the pure one has the widest. Effective mass of B-doped 3C-SiC decreases but that of Al-doped 3C-SiC increases; while B-Al co-doped 3C-SiC effective mass, whose value approaches to the undoped, can be understood in terms of different compensation. As the acceptor impurities, B and Al will greatly increase the carrier density of valence band top, and the carrier density of the co-doped is three times as Large as the B-doped or Al-doped 3C-SiC. In addition, B-Al co-doping has the lowest resistivity among the four doping forms displaying its significant advantages in electrical property.

**Keywords:** 3C-SiC, B-Al codoping, electrical resistivity, first principles

**PACS:** 31.15.A–, 71.15.Dx, 71.20.–b

**DOI:** 10.7498/aps.62.233101

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61204079, 61306098).

† Corresponding author. E-mail: zhshk@126.com