

强激光照射对 2H-SiC 晶体电子特性的影响

邓发明

Effect of intense laser irradiation on the electronic properties of 2H-SiC

Deng Fa-Ming

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 227101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.227101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.227101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I22>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Ti 掺杂 NbSe₂ 电子结构的第一性原理研究

First-principles study on the electronic structure of Ti-doped NbSe₂

物理学报.2015, 64(20): 207101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.207101>

Al Fe Mg 掺杂 Li₂MnSiO₄ 的电子结构和电化学性能的第一性原理研究

First-principles study of electronic structures and electrochemical properties for Al Fe and Mg doped Li₂MnSiO₄

物理学报.2015, 64(8): 087101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.087101>

(TiO₂)₁₂ 量子环及过渡金属化合物掺杂对其电子性质影响的密度泛函理论研究

Density functional theory studies of (TiO₂)₁₂ quantum ring and its electronic properties when doped with transition metal compounds

物理学报.2015, 64(7): 077102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.077102>

CrMoNi 在 α -Fe(C) 中占位、键合性质及合金化效应的第一性原理研究

First principles calculation of occupancy bonding characteristics and alloying effect of Cr Mo Ni in bulk α -Fe?

物理学报.2014, 63(19): 197101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.197101>

V 高掺杂量对 ZnO(GGA+U) 导电性能和吸收光谱影响的研究

Effects of V-heavy-doped ZnO on electric conductivity performance and absorption spectrum

物理学报.2014, 63(19): 197102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.197102>

强激光照射对2H-SiC晶体电子特性的影响*

邓发明†

(四川民族学院数学系, 康定 626001)

(四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2015年5月18日收到; 2015年7月25日收到修改稿)

使用基于密度泛函微扰理论的第一原理赝势法, 计算了纤锌矿结构2H-SiC晶体在强激光照射下的电子特性, 分析了其能带结构和电子态分布. 计算结果表明: 2H-SiC平衡晶格参数 a 和 c 随电子温度 T_e 的升高逐渐增大; 电子温度在0—2.25 eV范围内时, 2H-SiC仍然是间接带隙的半导体晶体, 当 T_e 超过2.25 eV达到2.5 eV以上时, 2H-SiC变为直接带隙的半导体晶体; 随着电子温度升高, 导带底和价带顶向高能量或低能量方向发生了移动, 当电子温度 T_e 大于3.5 eV以后, 价带顶穿越费米能级; 电子温度 T_e 在0—2.0 eV变化时, 带隙随电子温度升高而增大; T_e 在2.0—3.5 eV范围变化时, 带隙随电子温度升高而快速地减少, 表明2H-SiC晶体的金属性随电子温度 T_e 的继续升高而增强. 在 $T_e = 0, 5.0$ eV处, 计算了2H-SiC晶体总的电子态密度和分波态密度. 电子结构表明 $T_e = 0$ eV时, 2H-SiC是一个带隙为2.3 eV的半导体; 在 $T_e = 5.0$ eV时, 带隙已经消失而呈现出金属特性, 表明当电子温度升高时晶体的共价键变弱、金属键增强, 晶体经历了一个熔化过程, 过渡到金属状态.

关键词: 2H-SiC, 电子特性, 激光照射, 密度泛函微扰理论

PACS: 71.15.-m, 71.20.-b, 63.10.+a, 61.72.uj

DOI: 10.7498/aps.64.227101

1 引言

随着激光技术的快速发展, 尤其是近年来超快激光脉冲的发展与应用, 自然界中出现的超快、强场等极端物理现象也可以在实验尺度内得以实现, 极大地推动了激光与物质相互作用的理论与实验研究. van Vechten等^[1]用强激光辐射金刚石结构的半导体物质, 检测到晶体结构变得不稳定, 他们分析认为, 当超强激光与半导体物质相互作用时, 传递到半导体物质中的超强激光的能量因电子吸收而存储到电子系统中, 这种超强激光的能量会在几十飞秒时间内使半导体物质中的电子被加热到热力学温度为 10^4 K的高温, 并通过电子与电子、电子与空穴的急速碰撞, 快速达到其电子温度 T_e . 从而导致晶格非热熔化.

近年来, 随着飞秒激光器大规模发展, 超快现

象和激光诱导相变的研究备受关注. 大量的实验和理论研究已经证实, 在强激光照射下, 半导体物质存在非热能的影响. Shank等^[2]对强激光辐照硅晶体而发生的非热相变进行了讨论; 通过用强激光照射砷化镓晶体后发生的电子相位变换, Saeta等^[3]证实了电子激发直接导致晶格畸变; 采用强激光辐照时的X射线散射晶体的方法, Larsson等^[4]观察到了铋化铟存在一种快速相变; 在强激光脉冲辐照数十皮秒后晶体铋也存在过渡相^[5]. Silvestrelli等^[6,7]使用基于密度泛函理论的从头开始分子动力学方法模拟了硅晶格的不稳定. 通过分析声子谱对电子温度的演变, Recoules等^[8]讨论了在强激光辐照下半导体和金属的晶格稳定性. 基于从头计算方法, Zijlstra等^[9]研究了铋化铟激光诱导前期的超快非热熔化. Wang等^[10]基于密度泛函理论, 模拟研究了闪锌矿结构的铋化铟在强激光辐照下的电子与动力学特性. 邓发明等^[11]使用基

* 国家科技部支撑计划(批准号: 2014GB111001, 2014GB125000)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dfm@scun.edu.cn

于密度泛函理论的从头开始分子动力学方法模拟研究了闪锌矿结构的碳化硅在强激光辐射下的晶格稳定性. Shen等^[12,13]基于密度泛函理论,模拟研究了 Al_2Au , Cu和Ag在强激光辐射下的电子特性、晶格稳定性和热容量等物理特性的变化.理论和实验研究表明,当飞秒激光与半导体材料相互作用时,激光直接激发电子使其热化并迅速达到其电子温度 T_e ,由于电子-声子耦合,能量会从电子转移到离子,从而有可能导致晶格失稳^[14-17].激光诱导半导体超快速物理变化不同于传统的热过渡物理变化,它是一个非热性质的物理变化,电子和空穴的有效质量将发生变化,同时半导体的电子特性也将发生明显变化.

由于非热能的熔化,在电子激发下半导体物理性质的变化已经引起了物理学和材料科学领域科学家的广泛关注和浓厚的兴趣.碳化硅(SiC)是一种重要的结构材料和间接宽带隙的半导体晶体材料^[18],其物理化学特性主要表现在具有宽禁带、高击穿电压、高电子饱和漂移速度、高电子迁移率、高热导率、化学稳定性好等方面,因此在高频、高温、高功率和抗辐射器件、存储器件以及光电集成器件等方面有其特殊的应用.研究发现,在恶劣环境下SiC作为一种较理想的短波发光材料,其优越的性能是传统半导体材料如Si, GaAs等无法比拟的^[19].近年来, SiC在微电子和光电子领域的应用研究也是热点,其研究成果越来越广泛地应用在紫外探测器、薄膜发光二极管及光致发光材料和光电集成器件等方面^[20,21].

据作者所知,近年来关于纤锌矿结构的2H-SiC晶体的报道包括常温常压下不同方法的能带结构计算^[22], SiC多体型几何结构与电子结构研究等^[23]方面,而对于强激光照射后对其晶体电子特性的影响研究很少.为了探究2H-SiC在强激光照射下电子特性的变化,本文采用密度泛函微扰理论和平面波赝势方法,计算了2H-SiC在不同电子温度 T_e 下的能带结构、总的电子态密度和分波态密度,分析2H-SiC在强激光照射下的电学特性.

本文首先测试了不同电子温度下的晶格参数 a 和 c ,然后利用该电子温度 T_e 下的晶格参数 a 和 c 测试了在同一电子温度 T_e 下晶体的电子特性,进而研究强激光照射时晶体所呈现的电子特性.只有将相同电子温度下的晶格参数 a 和 c 与相同电子温度 T_e 下的能带测试相结合才有意义,即将参数 a , c 和 T_e 设置为相同的电子温度下对应的值来测度晶体电子特性才有意义.另外,在等离子体理论

中,电子温度 T_e 通常指的是等离子体中电子运动的动能,常用电子伏特(eV)作为电子温度 T_e 的单位;在高温时,可以从电子温度 T_e 估计开尔文温度:因1 eV所代表的能量为 1.602×10^{-19} J,将电子温度转化为以焦耳为能量单位后,除以玻耳兹曼常数 1.381×10^{-23} J·K⁻¹,便得到所对应的开尔文温度(K),由此可算得其换算因子是1 eV等效于热力学温度 1.16×10^4 K.

在强激光照射下,发现2H-SiC晶体平衡晶格参数 a 和 c 随电子温度的升高逐渐增大;导带底和价带顶的能量随电子温度的升高而改变.其中电子温度在0—1.0 eV范围内时,导带底的能量向低能量方向移动,电子温度在1.0—2.0 eV范围内时,导带底的能量向高能量方向移动,电子温度超过2.0 eV以后,导带底能量随电子升高而降低;电子温度在0—1.25 eV范围内时,价带顶的能量向低能量方向移动,电子温度超过约1.25 eV以后,价带顶的能量向高能量方向移动且逐渐靠近费米能级;当电子温度 T_e 大于约3.5 eV以后,价带顶的能量大于0 eV,费米能级穿越了价带顶.

研究发现,价带顶位于布里渊区高对称点的 Γ 点处,随电子温度的升高价带顶位置不发生移动;但导带底的位置随电子温度的升高发生了移动,在0—1.85 eV范围内时,导带底在布里渊区高对称点的 K 点,2H-SiC是间接带隙的半导体晶体;当电子温度 T_e 超过1.85 eV达到1.95—2.25 eV范围内时,导带底位置由布里渊区高对称点的 K 点转移到了布里渊区高对称点 M 与 L 之间的一点上,2H-SiC仍然是间接带隙的半导体晶体;当 T_e 超过2.25 eV达到2.5 eV以上时,导带底转移到与价带顶同位置的布里渊区高对称点的 Γ 点处,此电子温度范围内2H-SiC变为直接带隙的半导体晶体.

检测到电子温度 T_e 在0—2.0 eV变化时,带隙随电子温度升高而增大; T_e 在2—3.5 eV范围变化时,带隙随电子温度升高而快速地减少;当电子温度 T_e 超过3.5 eV后,因价带顶穿越费米能级而带隙消失,晶体呈现出金属导体的特性,表明2H-SiC晶体的金属性随电子温度 T_e 的继续升高而增强,晶体经历了一个熔化过程,过渡到金属状态.

在 $T_e = 0, 5$ eV处,计算了2H-SiC晶体总的电子态密度和分波态密度;电子结构表明 $T_e = 0$ eV时2H-SiC是一个带隙约为2.3 eV的半导体,在 $T_e = 5$ eV时带隙已经消失.

上述2H-SiC晶体在强激光照射下所表现的电学特性,可以为制作2H-SiC晶体特殊功能的电子

器件提供第一性原理的基础数据.

2 计算描述

本文计算采用ABINIT程序包^[24,25], 选取广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 作为赝势^[26]. 首先选取模守恒GGA赝势对平面波截止能量和晶胞中 k 点网格进行收敛检测, 以确保这两个参数使计算结果有很好的收敛性. 经过测试, 得到在截止能量取20 Hartree (1 Hartree = 27.2114 eV) 和晶胞中 k 点网格取 $4 \times 4 \times 2$ 时, 体系的总能得到很好的收敛. 然后对平衡晶格常数进行优化, 利用优化的平衡晶格常数计算2H-SiC的电子特性. 电子温度 T_e 的大小用ABINIT程序包的变量tphysel设置 (tphysel值的大小反映了激光强度的强弱), 用以模拟强激光对晶体辐照在超快时间内使晶体达到其对应的电子温度. 与传统的热溶解过程能量吸收时间较长不同, 强激光辐照晶体时能量的转移是一个飞秒时间的超快非热熔化过程, 当考察某强度的激光作用于晶体时, 可以认为该激光作用的前一时刻晶体结构是稳定的. 本文旨在研究2H-SiC晶体分别在某一电子温度超快作用时所呈现的电子特性, 以及随电子温度的升高其电子特性的变化情况. 由于超快作用的时间只有几十飞秒的非常短暂的时间, 当电子温度超过一定限度后, 强激光照射晶体其结构可能变得不稳定, 但并不影响在该电子温度下强激光对晶体超快作用时表现出的电子特性.

在下面的计算中, 由体系总能量最小化而优化得到平衡晶格参数, 使用基于密度泛函微扰理论的线性响应方法计算2H-SiC能带和电子态密度, 能带计算选取了沿布里渊区的 Γ -A-H-K- Γ -M-L-H高对称点.

3 结果与讨论

3.1 晶格优化

2H-SiC具有纤锌矿晶体结构, 属于 $P63mc$ 空间群 (群号186). 其中, Si的价电子态是 $3s^23p^2$, C的价电子态是 $2s^22p^2$. 首先, 确定2H-SiC的基态结构参数. 通过晶胞体积和总能量的最小化得到平衡时的晶格参数. 体积直接关系到平衡晶格参数 a 和 c , 由于2H-SiC具有很高的对称性, 因此不必优化原子的位置. 交换相关的相互作用采用GGA. 本

文计算的平衡晶格参数 $a = 3.082 \text{ \AA}$, $c = 5.061 \text{ \AA}$, 与实验值^[27] $a = 3.076 \text{ \AA}$ 和 $c = 5.048 \text{ \AA}$ 非常接近, 其中 a 值与实验数据相比高估了0.195%, c 值比实验值高估了0.258%, 也与Karch等^[28]计算的 $a = 3.069 \text{ \AA}$ 和 $c = 5.034 \text{ \AA}$, Camp等^[29]计算的 $a = 3.076 \text{ \AA}$ 和 $c = 5.048 \text{ \AA}$, Snead等^[30]计算的 $a = 3.081 \text{ \AA}$ 和 $c = 5.031 \text{ \AA}$ 的结果非常接近, 这足以保证对电子特性做进一步研究的正确性.

3.2 晶格参数 a 和 c 随电子温度 T_e 的变化

由于强烈的激光脉冲照射, 在极短的时间内半导体2H-SiC的电子将加热到极高的温度. 分别测试了电子温度 T_e 从0—5.5 eV范围内的19组晶格参数 a 和 c , 见图1所示. 从图1可以看出: 在 $T_e = 0 \text{ eV}$ 时, 平衡晶格参数 $a = 3.082 \text{ \AA}$, $c = 5.061 \text{ \AA}$; 电子温度在0—1 eV范围内时, a 和 c 值稍微增大; 当 $T_e > 1 \text{ eV}$ 后, a 和 c 值增加较明显. 在强激光照射时, 2H-SiC晶体晶格快速吸收了能量, 越来越多的价电子激发进入导带, 削弱了原子间的吸引力, 导致原胞内的硅原子和碳原子在自身平衡位置附近的非简谐热振动加剧, 原子间的相互斥力加大, 晶格的力学平衡被打破, 并伴随着晶格参数修复到一个新的值以保持新的晶格力学平衡; 随电子温度的增大, 平衡晶格参数 a 和 c 也随电子温度 T_e 的升高而明显增大. 在强激光辐照下, 得到2H-SiC平衡晶格常数随电子温度升高而增大的情况与Feng等^[31]对金刚石结构的碳计算结果、文献^[32, 33]对硅晶体的实验结果以及邓发明等^[11]对3C-SiC晶体检测的结果十分类似.

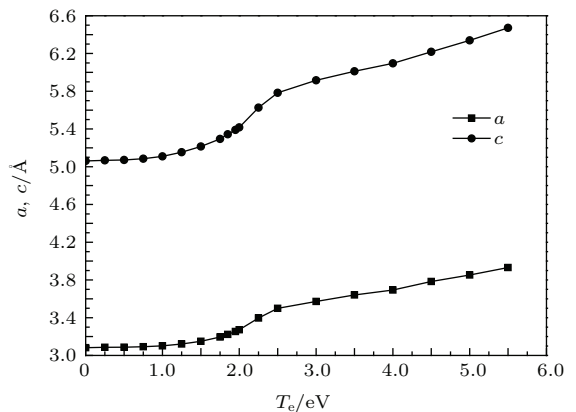


图1 2H-SiC平衡晶格参数 a 和 c 随电子温度 T_e 的变化
Fig. 1. Changes of the equilibrium lattice parameter a and c along with the electron temperatures T_e for 2H-SiC.

3.3 电子特性

3.3.1 能带结构随电子温度 T_e 的改变而变化

晶体的电子特性可由其能带结构来反映. 本文选择了电子温度分别为 0 eV 与 1.5 eV, 2 eV 与 3 eV 的两组能带结构进行对比分析, 以便说明 2H-SiC 晶体在强激光照射下其能带结构随电子温度 T_e 的增大而发生了较大变化.

如图 2 所示, 其中实线是 $T_e = 0$ eV 时晶体的能带结构图, 虚线是 $T_e = 1.5$ eV 时的能带结构图, 费米能级设为 0 eV, 图 3 是图 2 的局部放大图. 从图 2 和图 3 可以看出: 2H-SiC 晶体具有间接带隙纤锌矿材料能带的典型特征, 价带顶位于布里渊区的 Γ 点, 是三重简并的; 第一导带底位于布里渊区的 K 点, 是二重简并, 第二导带底位于布里渊区的 M 点与 L 点之间; $T_e = 0$ eV 时的间接带隙值 $E_g = 2.298$ eV, 与 Gao 和 Zhu^[22] 的计算结果 2.12 eV 非常接近, 与 Patrick 等^[34] 的实验值 3.33 eV 相差较大. 这是由于在局域密度泛函理论中, 求解 Kohn-Shan 方程没有考虑体系激发态的情况, 使得激发态电子间的关联作用被低估, 所以理论计算值一般要小于实验值约 30%—50%; 但对于同一体系而言, 比较在不同电子温度下电子特性变化得到的结果仍是有意义的. $T_e = 1.5$ eV 时的间接带隙值 $E_g = 2.566$ eV, 比 $T_e = 0$ eV 时的带隙值增大了. 同时也检测到能带结构发生了变化, 一方面, $T_e = 1.5$ eV 时的能带结构的高能量区相对于 $T_e = 0$ eV 时的高能量区发生了明显的整体(除第一导带底外)向下移动, 而低能量区(除价带顶外)则相反; 另一方面, $T_e = 1.5$ eV 时的价带顶为 -1.4791 eV, 与 $T_e = 0$ eV 时的价带顶值 -1.3264 eV 相比向能量低的方向移动, 而 $T_e = 1.5$ eV 时的第一导带底为 1.08643 eV, 与 $T_e = 0$ eV 时的第一导带底值 0.9721 eV 相比向能量高的方向移动. 能带结构的这种变化导致了间接带隙值的增大.

图 4 中实线是 $T_e = 2$ eV 时的能带结构图, 虚线是 $T_e = 3$ eV 时的能带结构图. $T_e = 3$ eV 时的带隙值是 1.273 eV, 相比于 $T_e = 2$ eV 时的带隙值 2.727 eV 明显减少. 能带结构的变化表现在: 一方面导带底能量和位置的变化, $T_e = 2$ eV 的导带底位于高对称点 M 点与 L 点之间其能量值为 1.4634 eV 点处(导带底在高对称点 K 点能量是

1.5321 eV, M 点是 1.4847 eV, L 点是 1.7154 eV), 晶体仍是间接带隙半导体, $T_e = 3$ eV 的导带底位置移动到高对称点 Γ 点, 其能量值为 0.9318 eV, 表明电子温度升高后晶体导带底位置移动了且能量也降低了, 而由于价带顶与导带底同时位于高对称点 Γ 点, 导致晶体变为直接带隙半导体; 另一方面, $T_e = 3$ eV 时的价带相对于 $T_e = 2$ eV 时的价带整体向高能量方向移动, 而导带部分除导带底能量在降低外, 其他部分则有能量交替变化的情况. 能带结构的这种变化导致了带隙的减小.

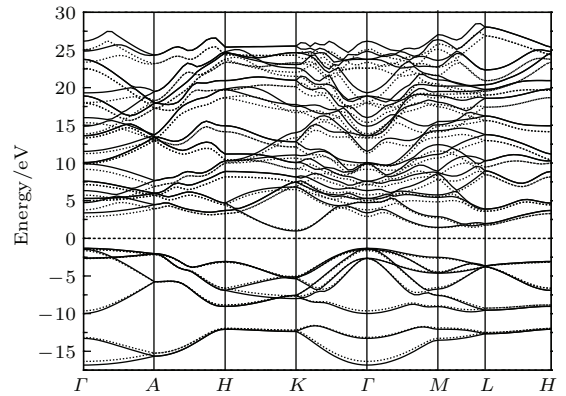


图 2 2H-SiC 在两个不同电子温度下的能带, 其中实线对应于 $T_e = 0$ eV, 虚线对应于 $T_e = 1.5$ eV, 费米能级设在 0 eV

Fig. 2. The energy bands of 2H-SiC at two different electron temperatures. The solid lines correspond to $T_e = 0$ eV. The dashed lines correspond to $T_e = 1.5$ eV. The Fermi level is set to 0 eV.

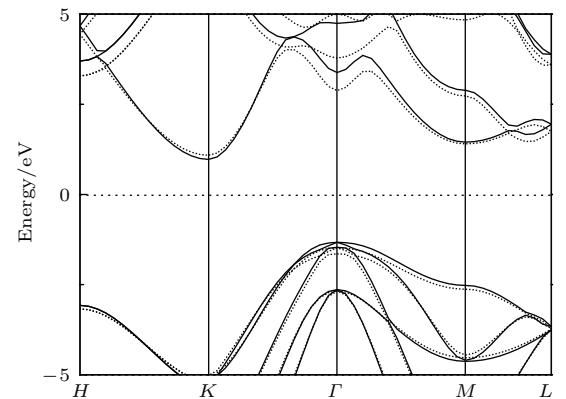


图 3 图 2 的局部放大图: 2H-SiC 在两个不同电子温度下的能带. 实线对应于 $T_e = 0$ eV, 虚线对应于 $T_e = 1.5$ eV, 费米能级设在 0 eV

Fig. 3. The partially enlarged Fig. 2: the energy bands of 2H-SiC at two different electron temperatures. The solid lines correspond to $T_e = 0$ eV. The dashed lines correspond to $T_e = 1.5$ eV. The Fermi level is set to 0 eV.

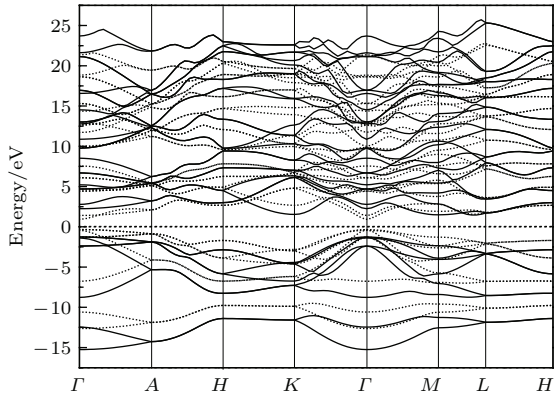


图4 2H-SiC在两个不同电子温度下的能带, 其中实线对应于 $T_e = 2$ eV, 虚线对应于 $T_e = 3$ eV, 费米能级设在 0 eV

Fig. 4. The energy bands of 2H-SiC at two different electron temperatures. The solid lines correspond to $T_e = 2$ eV. The dashed lines correspond to $T_e = 3$ eV. The Fermi level is set to 0 eV.

3.3.2 价带顶与导带底位置随电子温度 T_e 的变化

为了探究2H-SiC晶体的价带顶和导带底在强激光照射下其位置的变化情况, 测试了电子温度在0—3.5 eV范围时15组能带结构并分析能带结构的变化, 发现随着电子温度在0—3.5 eV范围内升高, 2H-SiC晶体的价带顶仍位于高对称点的 Γ 点处, 价带顶的位置没有变化. 但导带底的位置随电子温度的升高却发生了变化, 其中, 电子温度在0—1.85 eV范围内, 导带底位于高对称点的 K 点处; 当电子温度继续升高, 在1.95—2.25 eV范围内变化时, 导带底位于高对称点的 M 点与 L 点之间; 当电子温度再继续升高, 在2.5—3.5 eV范围内变化时, 导带底却位于高对称点的 Γ 点处. 由此表明, 电子温度在0—2.25 eV范围时, 2H-SiC是间接带隙半导体晶体, 当电子温度超过2.5 eV后, 因导带底和价带顶同时位于高对称点 Γ 点处而导致2H-SiC变为直接带隙晶体.

3.3.3 价带顶与导带底能量随电子温度 T_e 的变化

在图2和图4中, 能带结构随电子温度 T_e 而发生了相对移动, 并且随电子温度的升高能带结构相对移动的方向也并不一致, 但价带顶和导带底的移动方向可以近似地反映能带结构随电子温度升高而发生的变化. 为了更清楚地反映这种变化, 本文计算了价带顶和导带底在电子温度 T_e 为0—3.5 eV范围内的15组能量值, 如图5所示. 图5中粗实线表示价带顶能量随 T_e 的变化, 细实线表示导带底

能量随 T_e 的变化, 费米能级设为 0 eV. 由图5可以看出: 电子温度在0—1.0 eV范围内时, 导带底的能量向低能量方向移动; 电子温度在1.0—2.0 eV范围内时, 导带底的能量向高能量方向移动, 电子温度超过2.0 eV后, 导带底能量随电子温度的升高而降低; 电子温度在0—1.25 eV范围内时, 价带顶的能量向低能量方向移动, 电子温度超过约1.25 eV后, 价带顶的能量向高能量方向移动且逐渐靠近费米能级; 当电子温度 T_e 大于约3.5 eV后, 价带顶的能量大于0 eV, 费米能级穿越了价带顶.

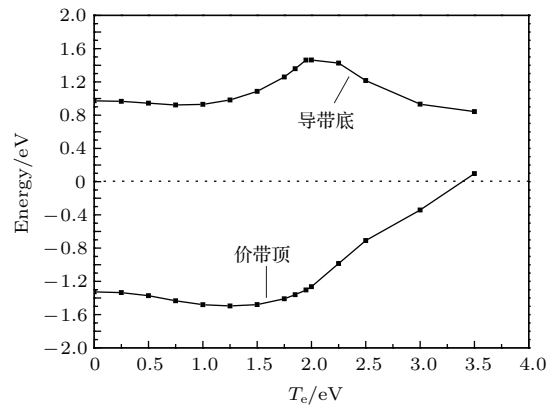


图5 2H-SiC价带顶、导带底能量随电子温度 T_e 的变化, 费米能级设为 0 eV

Fig. 5. Changes of the energy values along with T_e at the top of valence band and bottom of the conduction band for 2H-SiC. The Fermi level is set to 0 eV.

这表明当电子温度超过3.5 eV后, 价带内的电子部分激发到高能级的导带中, 导带内有电子出现. 2H-SiC晶体在强激光的照射下, 晶体的共价键变弱、金属键增强, 晶体经历了一个熔化过程, 过渡到金属状态, 这与Wang等^[10]利用密度泛函从头计算的方法对闪锌矿结构的碲化铟半导体晶体的理论计算结果相似.

3.3.4 能带结构的禁带宽度随电子温度 T_e 的变化

从图5可以看出, 在同一电子温度 T_e 下, 价带顶和导带底能量的相对移动量并不相同, T_e 在0—3.5 eV范围内时二者之间的间隙随电子温度在发生变化. 为了能清晰地反映随电子温度升高带隙值发生的变化, 选取了不同电子温度对应的14组带隙值, 如图6所示. 从图6可以看出, T_e 在0—2 eV范围内时, 带隙随电子温度的升高而加大, 当电子温度超过2.0 eV后, 带隙随电子温度升高而迅速减小. 同时检测到当电子温度 T_e 达到3.5 eV

时, 2H-SiC 晶体因导电能力增强而表现为金属性, 带隙失去了意义, 故在图 6 中未考虑电子温度超过 3.0 eV 的部分.

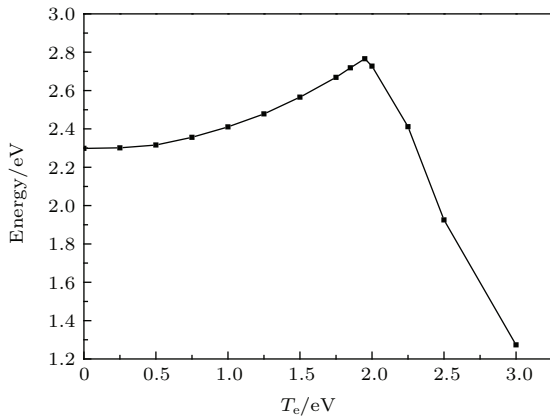


图 6 2H-SiC 带隙随电子温度 T_e 在 0—3 eV 范围内的变化
Fig. 6. The band gap of 2H-SiC changes with T_e in 0—3 eV.

3.3.5 电子态密度随电子温度 T_e 的变化

在强激光照射后当电子温度超过 3.5 eV 时, 系统经历了一个熔化过程, 过渡到金属态. 这种过渡可以表明, 随电子温度 T_e 的增加, 其总的电子态密度在发生变化. 图 7 分别给出了 0 和 5.0 eV 两种电子温度下总的电子态密度图, 费米能级设为 0 eV. 结果表明: 2H-SiC 在 $T_e = 0$ eV 时带隙值约为 2.3 eV; 在 $T_e = 5.0$ eV 时, 电子态密度因其费米能缺少空带而完全显示出金属特性. 为了能更加清楚地描述电子态密度随电子温度的变化, 分别计算了 $T_e = 0, 5.0$ eV 时晶体 2H-SiC 的分波态密度.

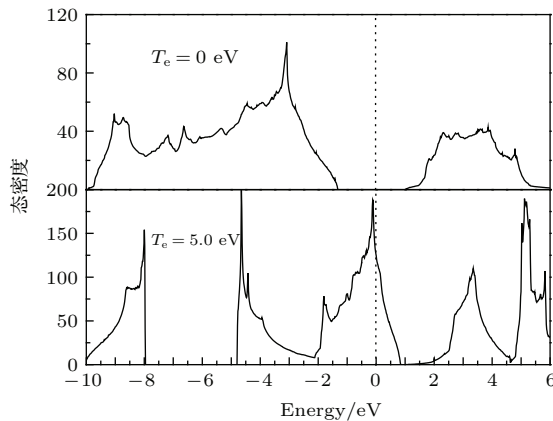


图 7 $T_e = 0, 5.0$ eV 时总 2H-SiC 晶体下的电子态密度, 费米能级设在 0 eV

Fig. 7. Total electron density of states for the 2H-SiC crystal at two different electronic temperatures: $T_e = 0, 5.0$ eV. The Fermi level is set to be 0 eV.

图 8 显示了在 $T_e = 0$ eV 时晶体 2H-SiC 总的电子态密度和分波电子态密度分布情况. 由图 8 可

以看出, 价带大致可以分为两个部分: 最低的价带在 -16—-12 eV, 主要来自于 Si 的 3s 态和 C 的 2s 态的贡献, C 的 2p 态也有少许贡献; 较高的价带 -10—0 eV, 主要来自于 Si 的 3p 态、C 的 2p 态和 C 的 2s 态的贡献, Si 的 3s 态也有少许贡献. 最低导带主要由 Si 的 3p 态、3d 态和 C 的 2s 态、2p 态贡献, Si 的 3s 态、C 的 2d 也有少量的贡献. 总态密度结果显示带隙在 $T_e = 0$ eV 时约为 2.3 eV.

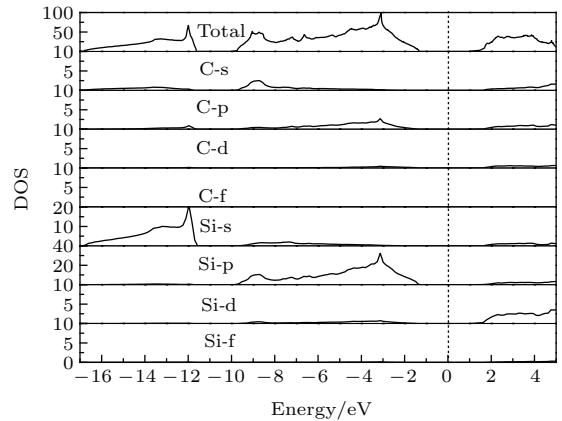


图 8 $T_e = 0$ eV 时 2H-SiC 的总态密度和分波态密度, 费米能级设在 0 eV

Fig. 8. Total and partial densities of states for 2H-SiC at $T_e = 0$ eV. The Fermi level is set to be 0 eV.

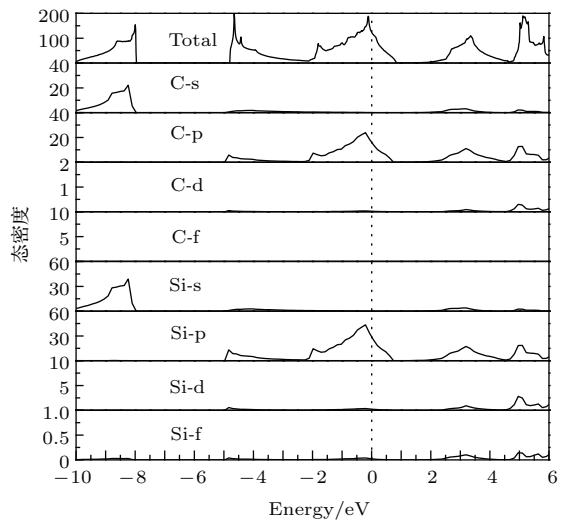


图 9 $T_e = 5.0$ eV 时 2H-SiC 的总态密度和分波态密度, 费米能级设在 0 eV

Fig. 9. Total and partial densities of states for 2H-SiC at $T_e = 5.0$ eV. The Fermi level is set to be 0 eV.

图 9 显示了在 $T_e = 5.0$ eV 时 2H-SiC 晶体的总电子态密度和分波电子态密度分布情况. 由图 9 可以看出, 介于 -10—-8.0 eV 最低价带能量的贡献来源于 Si 的 3s 态和 C 的 2s 态, 靠近费米能级的价带能量主要来自于 Si 的 3p 态和 C 的 2p 态的贡献. 总态密度已经显示了晶体 2H-SiC 在 $T_e = 5.0$ eV

时电学特性为金属特性,与 $T_e = 0$ eV时的总态密度相比,发现价带和导带之间的间隙消失了.

当电子温度 T_e 升高到一定程度时,晶体2H-SiC经历了熔化过程,过渡到金属状态.这也印证了当InSb浸入到液态氮中,用10 ns激光脉冲激发,最终会导致InSb结构相变成亚稳的金属状态的报道^[35]. Silvestrelli等^[6,7]利用一种基于有限温度密度泛函理论的从头计算分子动力学模拟晶体硅的激光加热,发现高强度的激发使电子的共价键明显减弱,系统经历熔化过程,过渡到金属状态;在对GaAs, InSb的研究中也有相同的结果^[10,14,36].因此,本文计算结果与上述研究结果类似.

4 结 论

运用赝势的GGA和密度泛函微扰理论方法,分析了具有纤锌矿晶体结构的2H-SiC在强激光照射下电子特性的变化.在 $T_e = 0$ eV时,优化平衡晶格参数得到最低能量在 $a = 3.082$ Å, $c = 5.061$ Å处,它们与实验值及其他方法的计算有很好的一致性,用这个晶格参数为起点来参与电子特性的计算是可靠的.

在强激光照射下,平衡晶格参数 a 和 c 随电子温度的升高而逐渐增大.随电子温度的升高,检测到能带结构中的价带顶位置位于高对称点的 Γ 点处且不发生移动,但导带底位置由高对称点的 K 点随电子温度的升高发生了移动.在0—1.85 eV范围内时,导带底在布里渊区高对称点的 K 点,2H-SiC是间接带隙半导体晶体;当电子温度 T_e 超过1.85 eV达到1.95—2.25 eV范围内时,导带底位置由 K 点转移到了高对称点 M 与 L 之间的一点上,2H-SiC仍然是间接带隙半导体晶体;当 T_e 超过2.25 eV达到2.5 eV以上时,导带底转移到与价带顶同位置的高对称点的 Γ 点处,在此电子温度范围内2H-SiC变为直接带隙半导体晶体.

随着电子温度的升高,价带顶和导带底的能量随电子温度的升高向高能量或低能量方向发生了移动,从而导致了带隙值的变化;电子温度 T_e 在0—2.0 eV变化时,带隙随电子温度升高而增大; T_e 在2.0—3.5 eV范围变化时,带隙随电子温度升高而快速地减少;当电子温度 T_e 超过3.5 eV后,因价带穿越费米能级而带隙消失,晶体的金属性增强,表明2H-SiC晶体的金属性随电子温度 T_e 的继续升高而增强,晶体经历了一个熔化的过程,过渡到金属状态.

在 $T_e = 0, 5.0$ eV处,计算了2H-SiC晶体总的电子态密度和分波态密度.电子结构表明 $T_e = 0$ eV时2H-SiC是一个带隙约为2.3 eV的半导体,在 $T_e = 5.0$ eV时带隙已经消失而呈现出金属特性.

参考文献

- [1] van Vechten J A, Tsu R, Saris F W 1979 *Phys. Lett. A* **74** 422
- [2] Shank C V, Yen R, Hirlimann C 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 454
- [3] Saeta P, Wang J, Siegal Y, Bloembergen N, Mazur E 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 1023
- [4] Larsson J, Heimann P A, Lindenberg A M, Schuck P J, Bucksbaum P H, Lee R W, Padmore H A, Wark J S, Falcone R W 1998 *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Proc.* **66** 587
- [5] Uteza O P, Gamaly E G, Rode A V, Samoc M, Luther-Davies B 2004 *Phys. Rev. B* **70** 054108
- [6] Silvestrelli P L, Alavi A, Parrinello M, Frenkel D 1997 *Phys. Rev. B* **56** 3806
- [7] Silvestrelli P L, Alavi A, Parrinello M, Frenkel D 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3149
- [8] Recoules V, Clérouin J, Zérah G, Anglade P M, Mazevet S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 055503
- [9] Zijlstra E S, Walkenhorst J, Gilfert C, Sippel C, Töws W, Garcia M E 2008 *Appl. Phys. B* **93** 743
- [10] Wang M M, Gao T, Yu Y, Zeng X W 2012 *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* **57** 10104
- [11] Deng F M, Gao T, Shen Y H, Gong Y R 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 046301 (in Chinese) [邓发明, 高涛, 沈艳红, 龚艳蓉 2015 物理学报 **64** 046301]
- [12] Shen Y H, Gao T, Wang M M 2013 *Comput. Mater. Sci.* **77** 372
- [13] Shen Y H, Gao T, Wang M M 2013 *Commun. Theor. Phys.* **59** 589
- [14] Stampfli P, Bennemann K H 1994 *Phys. Rev. B* **49** 7299
- [15] Stampfli P, Bennemann K H 1995 *Appl. Phys. A* **60** 191
- [16] Dumitrica T, Burzo A, Dou Y, Allen R E 2004 *Phys. Status Solidi B* **241** 2331
- [17] Jeschke H O, Garcia M E, Lenzner M, Bonse J, Krüger J, Kautek W 2002 *Appl. Surf. Sci.* **197** 839
- [18] Matsunami H 2006 *Microelectron. Eng.* **83** 2
- [19] Weitzel C E 1998 *Mater. Sci. Forum* **907** 264
- [20] Costa A K, Camargo Jr S S 2003 *Surf. Coat. Technol.* **163** 176
- [21] Rottner K, Frischholz M, Myrvtveit T, Mou D, Nordgren K, Henry A, Hallin C, Gustafsson U, Schoner A 1999 *Mater. Sci. Eng. B* **61** 330
- [22] Gao S P, Zhu T 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 137103 (in Chinese) [高尚鹏, 祝桐 2012 物理学报 **61** 137103]
- [23] Jiang Z Y, Xu X H, Wu H S, Zhang F Q, Jin Z H 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1586 (in Chinese) [姜振益, 许小红, 武海顺, 张富强, 金志浩 2002 物理学报 **51** 1586]

- [24] Gonze X, Beuken J M, Caracas R, Detraux F, Fuchs M, Rignanese G M, Sindic L, Verstraete M, Zerah G, Jollet F, Torrent M, Roy A, Mikami M, Ghosez P, Raty J Y, Allan D C 2002 *Comput. Mater. Sci.* **25** 478
- [25] The ABINIT code is a common project of the Université Catholique de Louvain, Corning Incorporated, and other contributors <http://www.abinit.org>. [2015-01-25]
- [26] Troullier N, Martins J L 1990 *Solid State Commun.* **74** 613
- [27] van Camp P E, van Doren V E, Devreese J T 1986 *Phys. Rev. B* **34** 1314
- [28] Karch K, Pavone P, Mindi W, Schutt O, Strauch D 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17054
- [29] Camp P E, Doren V, Devreese J T 1986 *Phys. Rev. B* **34** 1314
- [30] Snead L L, Nozawa T, Katoh Y, Byun T S, Kondo S, Petti D A 2007 *J. Nucl. Mater.* **371** 329
- [31] Feng S Q, Zhao J L, Cheng X L 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 023301
- [32] Thompson M O, Galvin G J, Mayer J W, Peercy P S, Poate J M, Jacobson D C, Cullis A G, Chew N G 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 2360
- [33] Poate J M, Brown W L 1982 *Phys. Today* **35** 24
- [34] Patrick L, Hamilton D R, Choyke W J 1966 *Phys. Rev.* **143** 526
- [35] Gromov G G, Kapaev V V, Kopaev Yu V, Rudenko K V 1987 *J. Exp. Theor. Phys. Lett.* **46** 148
- [36] Sokolowski-Tinten K, Bialkowski J, Von der Linde D 1995 *Phys. Rev. B* **51** 14186

Effect of intense laser irradiation on the electronic properties of 2H-SiC*

Deng Fa-Ming[†]

(Mathematics Department, Sichuan University for Nationalities, Kangding 626001, China)

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

(Received 18 May 2015; revised manuscript received 25 July 2015)

Abstract

By using first-principles with pseudopotentials method based on the density functional perturbation theory, in this paper we calculate the electronic properties of wurtzite 2H-SiC crystal under the strong laser irradiation and analyze the band structure and the density of state. Calculations are performed by using the ABINIT code in the generalized gradient approximation for the exchange-correlation energy. And the input variable `tphyssel`, which is a variable in the ABINIT code and relates to the laser intensity, is used to define a physical temperature of electrons T_e . The size of T_e is set to simulate the corresponding electron temperature of the crystal when intensive laser irradiates it in an ultrafast time. The high symmetry points selected in the Brillouin zone are along Γ - A - H - K - Γ - M - L - H in the energy band calculations. After testing, we can always obtain a good convergence of the total energy when choosing a 20 Hartree cut-off energy and a $4 \times 4 \times 2$ k -points grid. Then, optimizing the structure, and the structural parameters and the corresponding electronic properties of 2H-SiC in the different electron-temperature conditions are studied using the optimized equilibrium lattice constant. The calculation results indicate that the equilibrium lattice parameters a and c of 2H-SiC gradually increase as the electronic temperature T_e goes up. With the electronic temperature going up, the top of valence band is still at Γ , while the bottom of conduction band shifts from the K point with increasing electronic temperature, resulting in the fact that 2H-SiC is still an indirect band-gap semiconductor in a range of 0–2.25 eV and when the electronic temperature reaches 2.25 eV and even more than 2.5 eV, the crystal turns into a direct band-gap semiconductor. With T_e rising constantly, the bottom of the conduction band and the top of valence band both move in the direction of high energy or low energy. When T_e exceeds 3.5 eV, the top of valence band crosses the Fermi level. When T_e varies in a range of 0–2.0 eV, the forbidden bandwidth increases with temperature rising, and when T_e varies in a range of 2–3.5 eV, the forbidden bandwidth quickly decreases. This variation shows that the metallic character of 2H-SiC crystals increases with electronic temperature T_e rising. The total density of states (DOS) and partial density of states are calculated at $T_e = 0$ eV and 5 eV. The DOS figures indicate that 2H-SiC is a semiconductors and its energy gap equals 2.3 eV. At $T_e = 5$ eV, the gap disappears, exhibiting metallic properties. This result shows that the crystal covalent bonds weaken and metallic bonds strengthen with temperature rising and the crystal experiences the process of melting, shifting to metallic state.

Keywords: 2H-SiC, electronic properties, laser irradiation, density functional perturbation theory

PACS: 71.15.-m, 71.20.-b, 63.10.+a, 61.72.uj

DOI: 10.7498/aps.64.227101

* Project supported by the National Key Technology Research and Development Program of the Ministry of Science and Technology of China (Grant Nos. 2014GB111001, 2014GB125000).

† Corresponding author. E-mail: dfm@scun.edu.cn