

3C-SiC 材料 p 型掺杂的第一性原理研究*

张 云¹⁾ 邵晓红^{1)†} 王治强²⁾

1) (北京化工大学理学院, 北京 100029)

2) (中国科学院光电研究院, 北京 100190)

(2009 年 7 月 20 日收到; 2009 年 12 月 17 日收到修改稿)

采用基于第一性原理的密度泛函理论平面波超软赝势法, 研究了 SiC 材料 p 型掺杂的晶体结构和电子结构性质, 得到了优化后体系的结构参数, 掺杂形成能, 能带结构和电子态密度, 计算得到掺杂 B, Al, Ga 在不同浓度下的禁带宽度. 结果表明: 随着掺杂 B 原子浓度的增大, 禁带宽度随之减小; 而随着掺杂 Al, Ga 原子浓度的增大, 禁带宽度随之增大; 在相同浓度下, 掺杂 Ga 的禁带宽度大于掺杂 Al, 掺 Al 禁带宽度大于掺 B.

关键词: SiC, 电子结构, 掺杂, 第一性原理软件

PACC: 7115, 7120, 7125

1. 引 言

碳化硅 (SiC) 作为第三代半导体材料, 具有宽带隙、高热导率及高电子饱和漂移速度等优点, 使其在高温和抗辐射等特殊环境中具有广泛的应用前景^[1-3]. SiC 具有 250 种同型异构体, 最常见的有 3C-SiC, 4H-SiC 和 6H-SiC, 其中 3C-SiC 具有较高的电子迁移率及高电子饱和漂移速度等优点而成为集成电路应用上比较理想的半导体材料^[4,5]. 许多研究者对碳化硅材料进行了系列研究, Bimberg 等^[6]实验测定了 3C-SiC 的禁带宽度为 2.416 eV, Goldberg 等^[7]测量了室温下其导带有效态密度和价带有效态密度. Rurili 等^[8]采用局域密度近似的第一性原理方法计算了 N, P 掺杂 SiC 的晶体结构与能带结构, 分析了在不同掺杂条件下, N, P 原子掺杂 SiC 的最优位置以及晶体的稳定性. Lambrecht 等^[9]采用第一性原理方法研究了 n 型 SiC 的光学性质. Song 等^[10]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, 得出随着掺杂浓度增大, 掺 N 3C-SiC 的禁带宽度将减小.

上述对于 3C-SiC 半导体材料的研究主要集中在本征及 n 型掺杂方面, n 型掺杂主要集中在掺 N 研究上, 对于 p 型掺杂还未见系统的研究报道. 本文采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 系统计

算了 3C-SiC 材料 p 型掺杂 (B, Al, Ga) 对应的费米能级附近的电子结构, 分析了相同浓度不同掺杂物下禁带宽度变化情况, 比较了禁带宽度随掺杂浓度改变的变化规律, 并从电子态密度、电荷密度方面分析了产生这些变化的微观机理.

2. 软件和方法

2.1. 使用软件

本文计算工作采用基于密度泛函理论的第一性原理软件 VASP (vienna ab-initio simulation package)^[11-13], VASP 是进行从头量子力学和分子动力学计算的软件包, 能进行能带结构、电子状态密度、晶格动力学、模拟退火、磁性及光学性质等方面计算, 在材料的结构参数、构型、状态方程、力学性质、电子结构、磁学和光学性质等计算中得到广泛应用^[14].

2.2. 计算模型

3C-SiC 的理想模型如图 1 所示, 每个 Si 原子分别与 4 个 C 原子成键, 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.

计算中, 所使用的赝势为超软赝势 (USPP-GGA), 离子和电子之间的相互关联采用 PW91 方

* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: No. 20736002) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: shaoxh@mail.sina.com

案. 平面波截断能为 300 eV, 电子收敛标准为 1×10^{-6} eV, 离子步收敛标准为 1×10^{-4} eV. 计算电荷密度使用 K 点分割为 $7 \times 7 \times 7$, 能带计算 K 点分割方案为 $9 \times 9 \times 9$.

p 型掺杂中, 掺杂原子一般取代硅原子位置^[15], 所以在计算中分别采用 B, Al, Ga 取代不同大小的 SiC 超晶胞中 Si 原子的位置. 首先计算了 3C-SiC 单晶胞电子结构, 然后分别计算了 $\text{Si}_{1-x}\text{B}_x\text{C}$, $\text{Si}_{1-x}\text{Al}_x\text{C}$, $\text{Si}_{1-x}\text{Ga}_x\text{C}$ ($x = 0.03125, 0.0625, 0.125$) 体系在不同掺杂浓度下的晶体结构: $x = 0.03125$ ($2 \times 2 \times 2$ 超晶胞, 64 个原子), $x = 0.0625$ ($1 \times 2 \times 2$ 超晶胞, 32 个原子), $x = 0.125$ ($1 \times 1 \times 2$ 超晶胞, 16 个原子). 优化了不同掺杂浓度下不同掺杂物 (B, Al, Ga) 的结构, 得到了晶格常数、能带结构、电子态密度和电荷密度.

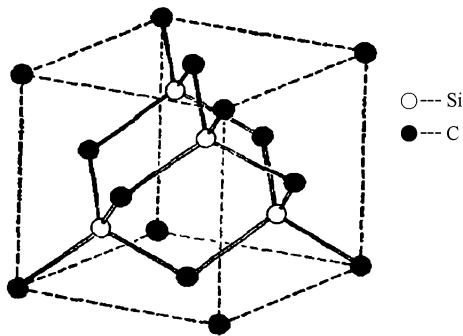


图 1 SiC 单晶胞结构

3. 结果讨论

3.1. 结构优化

通过对超晶胞中各原子位置及晶胞参数的优化得到各体系稳定结构下晶格常数如表 1, 其中晶格常数最小的掺杂浓度为 0.125 的 $\text{Si}_{1-x}\text{B}_x\text{C}$, 其晶格常数 $a = 4.31 \text{ \AA}$, 与 Baumeier 等^[16] 测量的实验值 $a = 4.35 \text{ \AA}$ 相比, 符合较好. 晶格常数最大的掺杂浓度为 0.125 的 $\text{Si}_{1-x}\text{Ga}_x\text{C}$, 其晶格常数 $a = 4.41 \text{ \AA}$, 与实验值相比, 相差 1.15%. 这可以从原子半径大小上解释, B 原子半径为 1.17 \AA , Si 原子半径为 1.46 \AA , 所以 B 原子取代 Si 原子时晶胞体积整体变小, 从而造成晶格常数减小. 随着掺杂 B 原子的浓度减小, 这种影响也会随之变小. 同理, 由于 Al 原子半径 (1.82 \AA), Ga 原子半径 (1.81 \AA) 比 Si 原子半径要大, 所以 Al, Si 掺杂时晶格常数变大.

表 1 $\text{Si}_{1-x}\text{B}_x\text{C}$, $\text{Si}_{1-x}\text{Al}_x\text{C}$, $\text{Si}_{1-x}\text{Ga}_x\text{C}$ ($x = 0.03125, 0.0625, 0.125$) 超晶胞结构优化的晶胞常数 a (单位 \AA)

x	0.03125	0.0625	0.125
$\text{Si}_{1-x}\text{B}_x\text{C}$	4.36	4.34	4.31
$\text{Si}_{1-x}\text{Al}_x\text{C}$	4.38	4.38	4.40
$\text{Si}_{1-x}\text{Ga}_x\text{C}$	4.38	4.38	4.41

3.2. 掺杂形成能

分别计算了 SiC 中掺杂 B, Al, Ga 的掺杂形成能, 其中掺杂形成能 $E_f(X \rightarrow \text{Si})$ ($X = \text{B, Al, Ga}$) 计算方法如下^[17]:

$$E_f(x \rightarrow \text{Si}) = E_{\text{tot}}(\text{Si}_{(1-x)}\text{X}_x\text{C}) + \mu_{\text{Si}} - E_{\text{tot}}(\text{SiC}) - \mu_{\text{X}}$$

在上面公式中, $E_{\text{tot}}(\text{Si}_{(1-x)}\text{X}_x\text{C})$ 是 X (B, Al, Ga) 替位 Si 掺杂后体系的总能, $E_{\text{tot}}(\text{SiC})$ 是纯净 SiC 体系的总能, $\mu_{\text{Si}}, \mu_{\text{X}}$ 为 Si 原子和掺杂原子的化学势, 此处为计算体系中分别放入一个 Si 原子与 X 时原子的能量.

不同掺杂浓度下的形成能见表 2, 可以看出掺杂形成能随着掺杂浓度增大而减小, 在相同掺杂浓度下, B, Al, Ga 掺杂 3C-SiC 的掺杂形成能差别比较大, 掺杂 B 最小, 掺杂 Ga 最大. 掺杂形成能数值越小结构越稳定, 所以 B 掺杂 3C-SiC 能得到最稳定的结构.

表 2 $\text{Si}_{1-x}\text{B}_x\text{C}$, $\text{Si}_{1-x}\text{Al}_x\text{C}$, $\text{Si}_{1-x}\text{Ga}_x\text{C}$ ($x = 0.03125, 0.0625, 0.125$) 的掺杂形成能 (单位 eV)

x	0.03125	0.0625	0.125
$\text{Si}_{1-x}\text{B}_x\text{C}$	1.110	0.702	0.340
$\text{Si}_{1-x}\text{Al}_x\text{C}$	3.338	3.335	3.192
$\text{Si}_{1-x}\text{Ga}_x\text{C}$	4.914	4.862	4.645

3.3. 能带结构分析

计算高对称 K 点的路径为 $W \rightarrow L \rightarrow \Gamma \rightarrow X \rightarrow K \rightarrow \Gamma$ 的能带, 其中 Γ 点为布里渊区中心, 布里渊区高对称点分布见图 2.

通过计算, 得到各掺杂体系下的能带结构. 图 3 是 SiC 单晶胞的能带结构图, 可以看到它的价带顶位于 Γ 点, 导带底位于 X 点, 属于间接带隙, 与实验结果相符^[6]. 同时计算得到 SiC 单晶胞禁带宽度为 1.4261, 和 Ching 等人^[18] 的计算结果 1.6 eV 比较接近, 而 Bimberg 等人^[6] 实验结果 2.6 eV 相比, 相差较大, 约为 45%, 这是由于在局域密度泛函理论中,

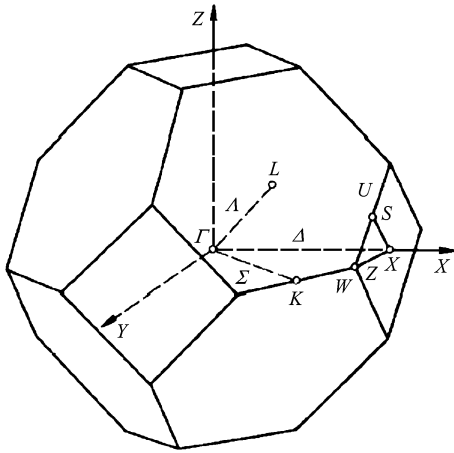


图2 布里渊区高对称点

求解 Kohn-Sham 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%.但对于同一体系比较不同掺杂物不同掺杂浓度下材料性能的变化规律,得到的结果仍然是有意义的.

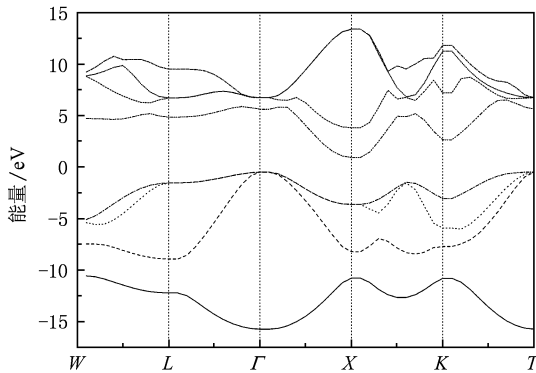


图3 SiC 单晶胞能带结构图

依次比较了上述三种浓度下原子禁带宽度,具体数据见表 3. 可以看到在相同浓度下,掺杂 B, Al, Ga 的禁带宽度依次增大,且浓度越大,变化趋势越明显. 与本征 3C-SiC 比较,可以发现掺杂后 Fermi 能级进入价带区,且不同掺杂物进入深度不一样,在掺杂浓度为 12.5% 时, B 掺杂 3C-SiC 费米能级进入价带约 0.93 eV, Al, Ga 的进入深度分别为 0.15 eV, 0.11 eV. 同时,随着掺杂浓度的增加, B 掺杂 SiC 的禁带宽度逐渐减小,而 Al, Ga 掺杂 SiC 的禁带宽度逐渐增大(解释见 3.4). 相比之下, Ga 作为 SiC 的 p 型掺杂物,应该会得到较大的禁带宽度.

表 3 $\text{Si}_{1-x}\text{B}_x\text{C}$, $\text{Si}_{1-x}\text{Al}_x\text{C}$, $\text{Si}_{1-x}\text{Ga}_x\text{C}$ ($x=0.03125, 0.0625, 0.125$) 对应的禁带宽度 E_g (单位 eV)

x	0.03125	0.0625	0.125
$\text{Si}_{1-x}\text{B}_x\text{C}$	1.4022	1.3804	1.3644
$\text{Si}_{1-x}\text{Al}_x\text{C}$	1.4082	1.4226	1.4261
$\text{Si}_{1-x}\text{Ga}_x\text{C}$	1.4167	1.4504	1.5219

3.4. 电子态密度分析

由前面讨论可知,掺杂 B 后 3C-SiC 禁带宽度随

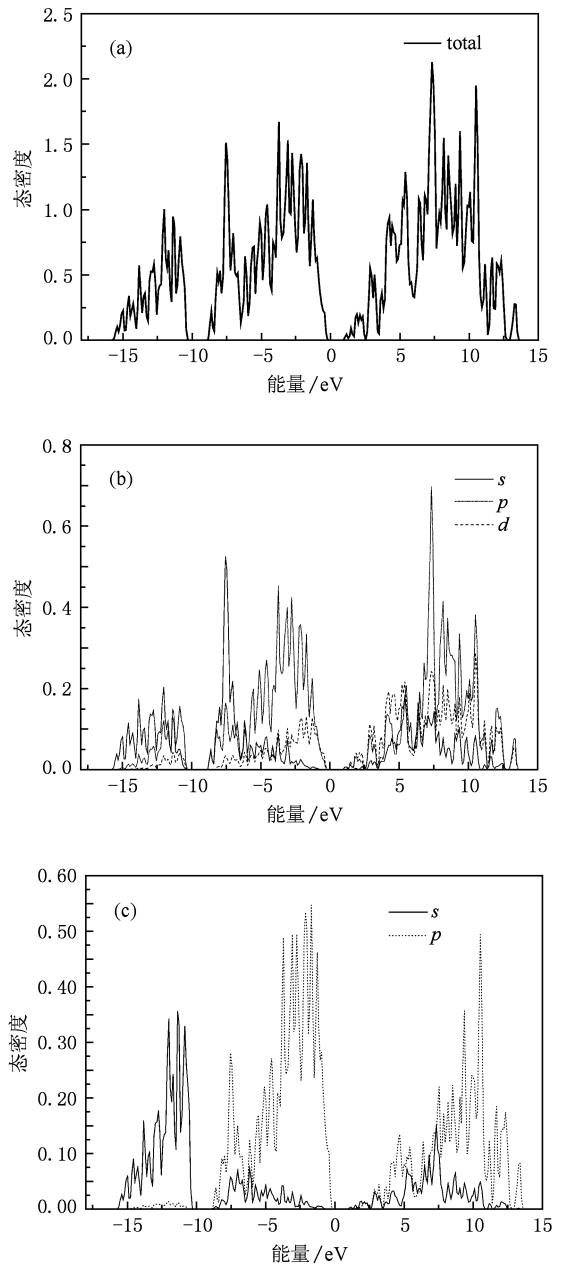


图4 本征 3C-SiC 的态密度 (a) 3C-SiC 的总态密度; (b) Si 原子的分波态密度; (c) C 原子的分波态密度

着掺杂浓度增大而减小,掺杂 Al, Ga 后 3C-SiC 的禁带宽度随着掺杂浓度增大而增大. 由于 SiC 中掺杂 B 结构最稳定,掺杂 Ga 禁带宽度最大,所以我们主要从电子态密度分布来分析 3C-SiC 掺杂 B 和 Ga 后禁带宽度随着掺杂物及掺杂浓度变化规律的内部机理.

3.4.1. SiC 单晶胞的态密度

由本征 3C-SiC 的态密度曲线可以看出,3C-SiC 的价带分为两部分:价带的低能部分 ($-17 \text{ eV} \rightarrow -10 \text{ eV}$) 主要来源于 C 的 2s 以及 Si 的 3s,3p,价带的高能部分 ($-8.7 \rightarrow 0 \text{ eV}$) 主要来源于 C 的 2p 以及

Si 的 3p. 导带主要由 Si 的 3p 态贡献, C 的 2p 以及 Si 的 3d 也有少量贡献.

3.4.2. B 掺杂 3C-SiC 禁带宽度随着掺杂浓度增大而减小的微观机理

由表 3 结果可知:随着 B 掺杂浓度的增加,3C-SiC 的禁带宽度呈现减小的趋势. 通过对比掺杂 B 原子浓度为 0.125 时分波态密度与未掺杂时的 3C-SiC 态密度,来分析掺杂 B 原子使禁带宽度减小的微观机理. 图 5 为掺杂浓度是 12.5% (一个掺杂原子 B 取代一个 16-atom 3C-SiC 超晶胞中 Si 原子格点) 的情况下, Fermi 能 (Fermi 面) 附近分波态密度曲线.

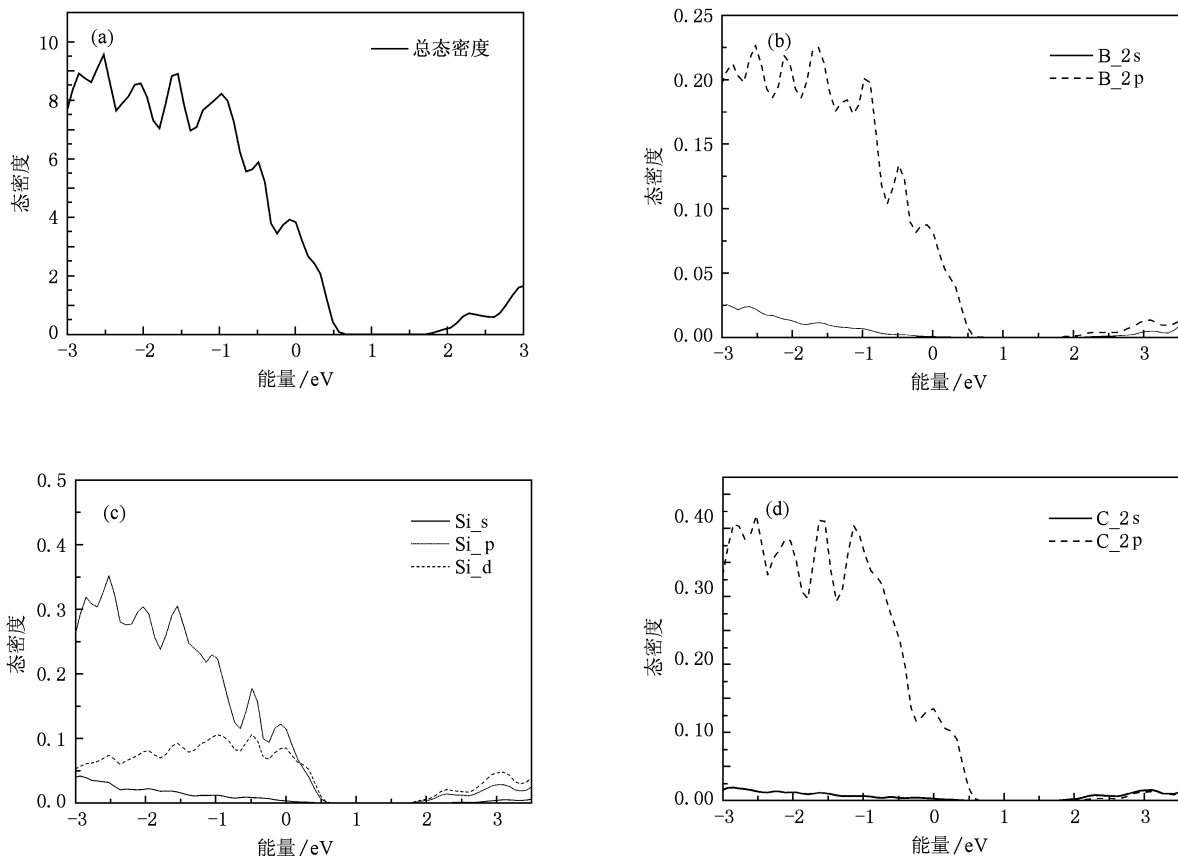


图 5 掺杂 B 原子浓度为 12.5% 时分波态密度 (a) 总态密度; (b) B 原子分波态密度; (c) Si 原子分波态密度; (d) C 原子分波态密度

由上图可以看出,价带顶由原来 C 的 2p 态和 Si 的 3p 态贡献,随着 B 原子取代一个格点的 Si 原子后,价带顶进入了 B 的 2p 态,同时,价带顶向高能区移动了大约 0.5 eV,费米能级进入价带顶. 另外,导带底主要由 Si 原子的 2p 和 3d 态组成,一个硅原子被 B 原子取代后,导带底向高能端移动了约 0.41 eV. 掺杂后价带顶的移动大于导带底的移动,所以最终禁带宽度将减小.

经过前面的计算可知 B 掺杂 3C-SiC 的能带间隙较小的原因是掺杂 B 原子后引起导带和价带的

偏移,而掺杂后 3C-SiC 的价带顶主要由 B 的 2p 态占据,导带底变化很小. 所以,通过对不同掺杂浓度的 3C-SiC 中的 B 原子的分波态密度的分析能够解释 3C-SiC 能带间隙的变化规律. 图 6 是不同掺杂浓度下 3C-SiC 硼原子的分波态密度,对图 6(a) — (c) 比较可以发现:硼原子对导带底的影响很小,可以忽略不计;而价带顶主要由硼的 2p 态组成,随着硼原子掺杂浓度的增加,价带顶向高能端移动更多,在掺杂浓度为 3.125%, 6.25%, 12.5% 的价带顶分别位于 Fermi 能级以上 0.35, 0.48, 0.60 eV 处. 其结

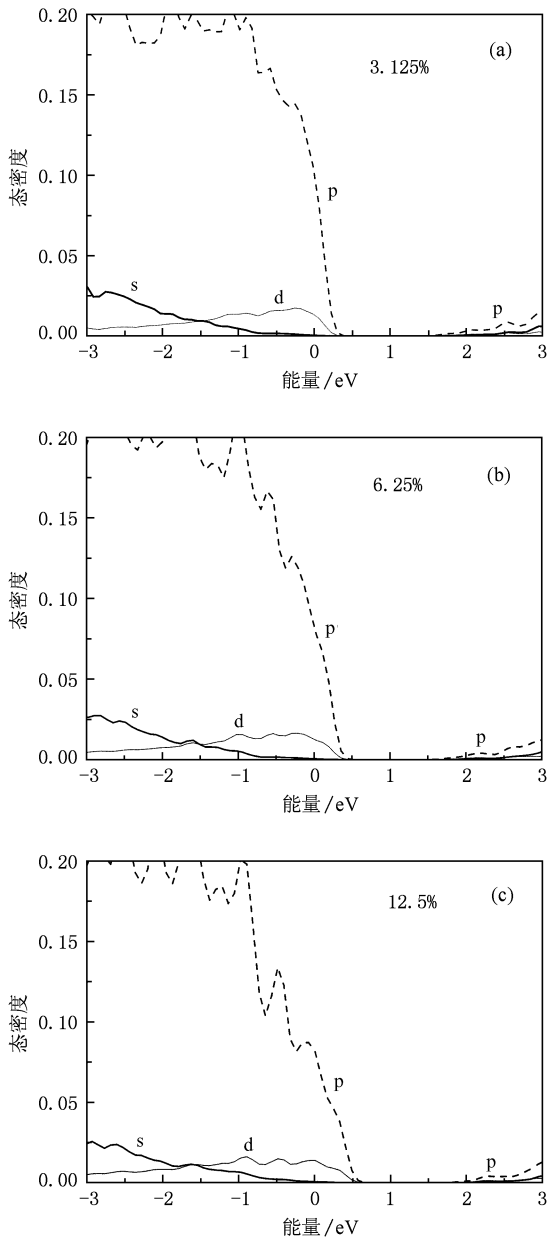


图 6 B 原子掺杂在不同浓度时的分波态密度 (a) 浓度为 3.125% 时 B 原子的分波态密度; (b) 浓度为 6.25% 时 B 原子的分波态密度; (c) 浓度为 12.5% 时 B 原子的分波态密度

果导致了掺杂硼原子时 3C-SiC 的能带间隙随着掺杂浓度的增加而减少. 同时, 由于随着掺杂浓度的增大, 价带顶向高能端移动, 使 Fermi 能级不断深入到价带中, 从而引起价带中的载流子浓度增大, 即空穴浓度增大时, 由于电荷守恒, 对应的导带中电子的浓度也将增大, 即导带载流子浓度增大, 使得导电性增强.

3.4.3. Ga 掺杂 3C-SiC 的禁带宽度随着掺杂浓度增大而增大的微观机理

图 7 是 Ga 掺杂 3C-SiC (浓度为 12.5%) 在

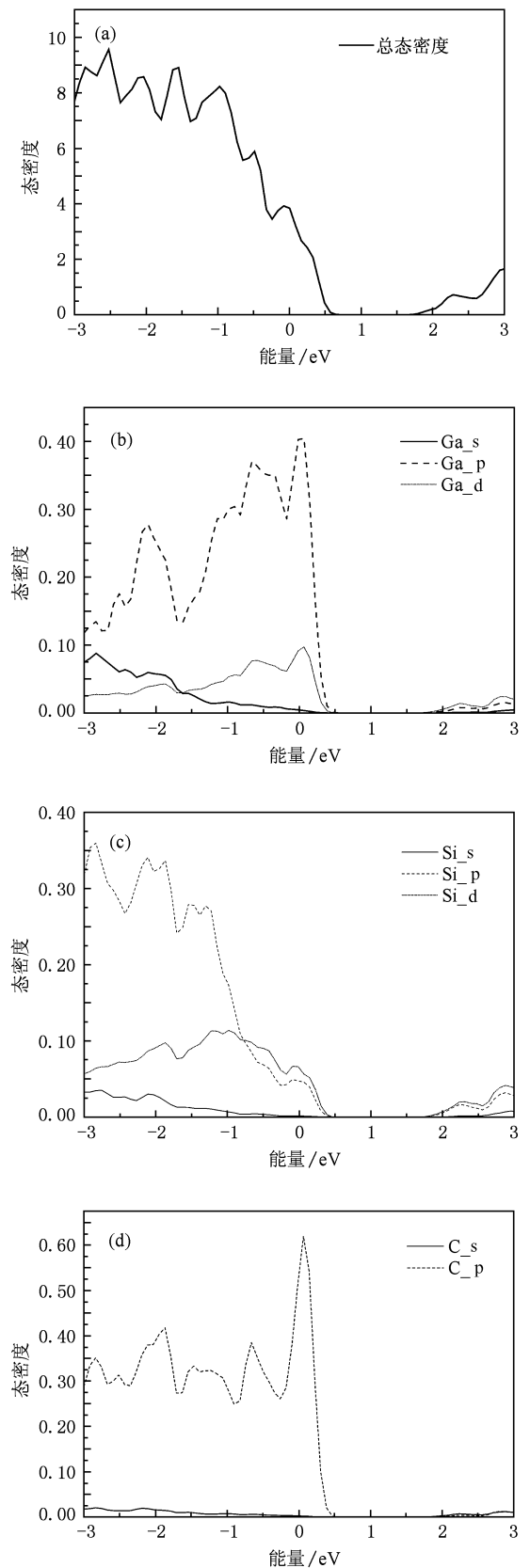


图 7 浓度为 12.5 时 Ga 原子掺杂 3C-SiC 的分波态密度 (a) 总态密度; (b) Ga 原子分波态密度; (c) Si 原子分波态密度; (d) C 原子分波态密度

Fermi 能级附近的分波态密度, Ga 掺杂 3C-SiC 时, 价带顶主要由 Si 的 2p 态和 Ga 的 3p 态组成, 导带底由 Si 的 3d, 3p 态和 Ga 的 3d 态组成. 不同掺杂浓度的 3C-SiC 中的 Ga 原子的分波态密度见图 8, 可以看到: 随着掺杂浓度的增加, 导带中 Ga 的 3p 和 3d 态占的比重也随之增大, 同时向高能端移动; 价带顶随着掺杂浓度增大也向高能端移动, 但是因为导带底的移动相对更大, 结果导致禁带宽度随着掺杂浓度的增大而增大. 此外, 和掺 B 一样, 随着掺杂浓度的增加, Fermi 能级进入价带越深, 从而使价带中载流子浓度增加导电性增强.

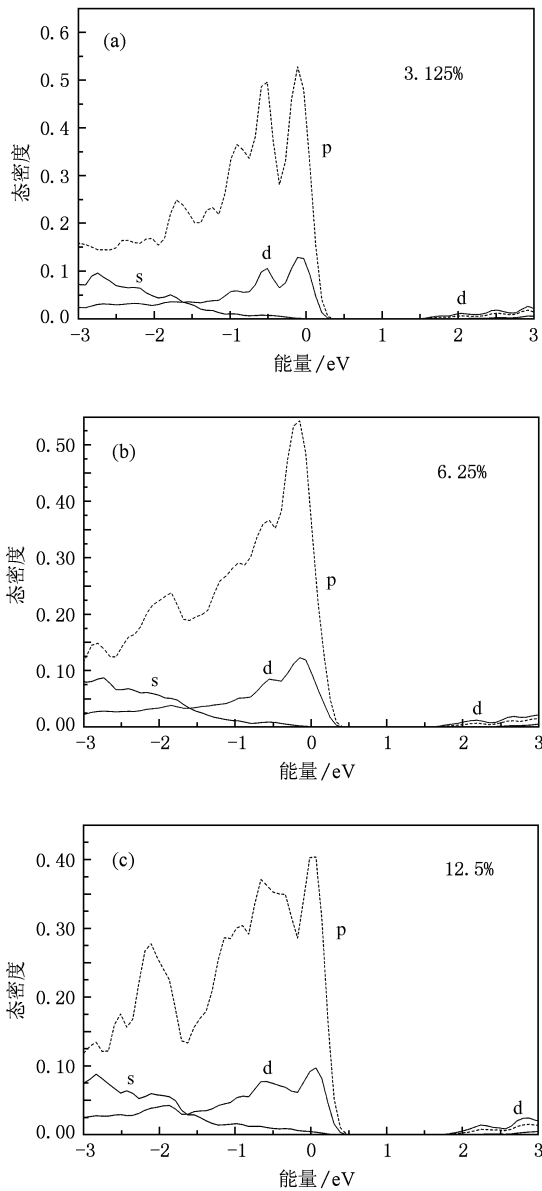


图 8 Ga 原子掺杂在不同浓度时的分波态密度 (a) 浓度为 3.125% 时 Ga 原子的分波态密度; (b) 浓度为 6.25% 时 Ga 原子的分波态密度; (c) 浓度为 12.5% 时 Ga 原子的分波态密度

3.4.4. 同一掺杂浓度下不同掺杂物的电子结构

由表 2 可以看出, 相同浓度下不同的掺杂物掺杂 3C-SiC 得到的禁带宽度也不同, 依次是掺 Ga 大于 Al 大于 B, 且掺杂浓度越大, 相差也越大. 由于掺杂浓度越大, 变化趋势越明显, 为了便于分析我们选择研究了掺杂浓度为 12.5% 时, 3C-SiC 中掺杂 B, Al 和 Ga 后 Fermi 能级处的态密度, 见图 9. 可以看到掺 Al 和 Ga 情况比较相近, 他们的 2p 态在价带顶占有很大比重, B 的 2p 态在价带顶所占比重较小; Al 和 Ga 的 3p 态位于 Fermi 能级以上约 0.4 eV

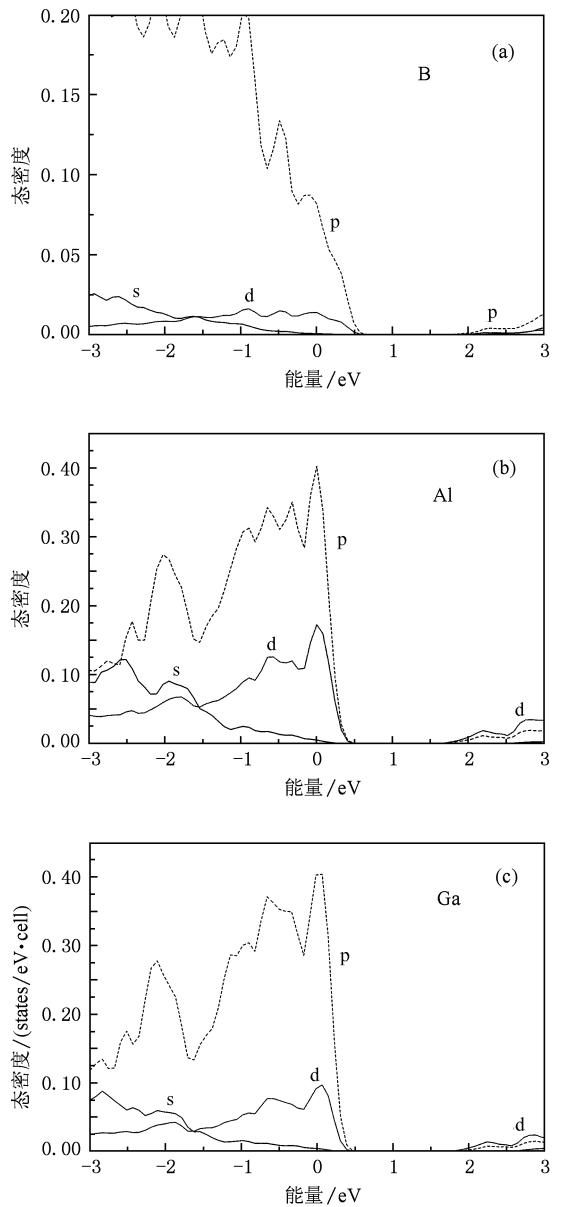


图 9 掺杂浓度为 12.5% 时不同掺杂物的分波态密度 (a) 掺 B 浓度为 12.5% 的分波态密度; (b) 掺 Al 浓度为 12.5% 的分波态密度; (c) 掺 Ga 浓度为 12.5% 的分波态密度

处, B 的 2p 态位于费米能级以上 0.6 eV 处, 这导致掺 Al 和 Ga 的禁带宽度要大于掺 B 的禁带宽度. 同时, 由于在导带中 Al 的 3d 态位于 Fermi 能级以上约 1.8 eV 处, 而 Ga 的 3d 态位于约 1.9 eV 处, 所以掺 Ga 的禁带宽度又要大于掺 Al 的禁带宽度. 另外, 由上图还可以看出, 与 B 掺杂 SiC 相比, Al, Ga 掺杂时, 态密度在 Fermi 能附近变化很陡峭, 形成一个很尖锐的峰, 这说明 Al, Ga 掺杂时在 Fermi 能附近具有较大的载流子有效质量, 对应的迁移率则较小^[19].

以上结论也可以从电荷密度分布图解释, 见图 10. 可以看出, B 原子取代 Si 原子后, B 原子周围电

荷密度明显向 B 原子的方向移动, 这种电子分布的变化必然将导致 B-Si 键的电子云重叠程度降低, 从而导致键能减小, 引起禁带宽度的减小. 随着掺杂浓度的增加, 电荷密度向 B 原子周围移动的变化也越大, 电子云的重叠程度越小, 从而使得掺 B 的能带间隙越小. 与 B 原子相比, 掺 Al 和 Ga 时电荷密度并没有发生明显偏移, 几乎均匀分布在 Al(Ga) 原子与 C 原子之间, 这说明掺杂的 Al(Ga) 原子取代 Si 原子后, Al-C 键电子云重叠程度增加, 而导致键能增加, 使得禁带宽度随之增大. 此时, 随着掺杂浓度的增加, 电子云重叠程度越大, 能带间隙也越大.

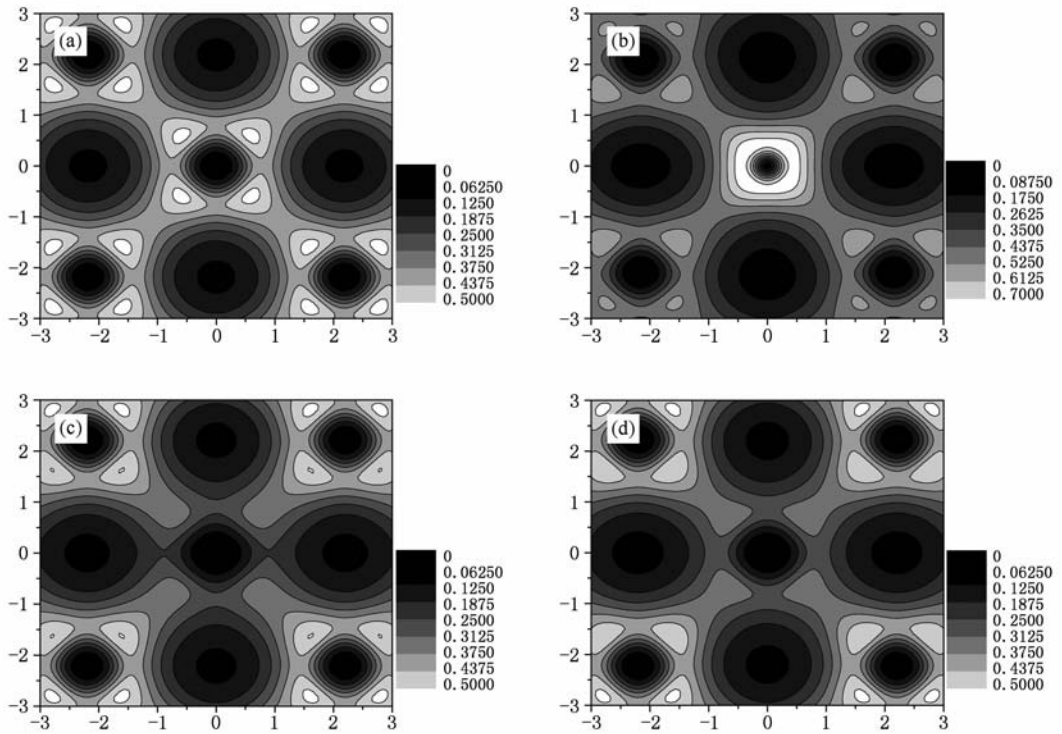


图 10 本征 3C-SiC 与掺杂浓度为 12.5% 时不同掺杂物(B, Al, Ga)的电荷密度 (a)本征 3C-SiC 的电荷密度; (b)掺 B 浓度为 12.5% 的电荷密度; (c)掺 Al 浓度为 12.5% 的电荷密度; (d)掺 Ga 浓度为 12.5% 的电荷密度

4. 结 论

综上所述, 我们使用基于密度泛函的第一性原理计算软件 VASP 优化了 $\text{Si}_{1-x}\text{B}_x\text{C}$, $\text{Si}_{1-x}\text{Al}_x\text{C}$, $\text{Si}_{1-x}\text{Ga}_x\text{C}$ ($x = 0.03125, 0.0625, 0.125$) 的晶体结构, 得到优化后的晶格常数, 结果表明, 掺 Al 的晶格常数最接近本征 SiC, 说明 Al 原子掺杂对 3C-SiC 的晶格影响最小. 对掺杂后的形成能的计算表明: 掺 B 时形成能最小, 掺 Ga 时形成能最大, 表明掺 B 时得到

的掺杂结构最稳定. 对不同掺杂浓度下不同掺杂物的电子结构的计算表明: 对于 B 原子, 由于随着掺杂浓度的增加, 价带顶不断向高能端移动, 而导带底几乎不变, 导致禁带宽度随之减小; 对于 Al, Ga 原子, 随着掺杂浓度增加, 价带顶, 导带底同时向高能端移动, 且导带底移动得更多, 导致禁带宽度随着掺杂浓度增大而增大; 随着掺杂浓度的增加, 费米能不断深入价带中, 从而使价带中载流子浓度增大, 进一步引起导电性增强; 在相同掺杂浓度下, 由于掺 Ga 时导带底主要由 Ga 原子的 3d 态构

成,且所处能级最高,使得 3C-SiC 中掺 Ga 的禁带宽度最大,而掺 B 时价带顶主要由 B 的 2p 态组成,且所处能级最高,导致 3C-SiC 中掺 B 的禁带宽

度最小. 总之,对于 3C-SiC 的 p 型掺杂,掺 B 能够得到最稳定的结构,而掺 Ga 具有最大的禁带宽度.

-
- [1] Lee K K, Ishida Y 2003 *IEEE Electron Dev. Lett.* **24** 466
- [2] Okamoto M, Suzuki S, Kato M 2004 *IEEE Electron Dev. Lett.* **25** 405
- [3] Lv M Y, Chen Z W, Li L X, Liu R P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3576 (in Chinese) [吕梦雅、陈洲文、李立新、刘日平 2008 物理学报 **55** 3576]
- [4] Nelson W E, Halden F A, Rosengreen A 1966 *J Appl. Phys.* **37** 333
- [5] Neudeck P G, Larkin D J, Starr J E, Powell J A, Salupo C, Matus L G 1994 *IEEE Trans. Electron Dev.* **41** 826
- [6] Bimberg D, Altarelli M, Lipari N O 1981 *Solid State Commun.* **40** 437
- [7] Goldberg Yu, Levinshstein M E, Rumyantsev S L 2001 *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, SiC, BN, SiC, SiGe* (New York: John Wiley and Sons) p93
- [8] Ruff M, Mitlehner H, Helbig R 1994 *IEEE Trans. Electron Dev.* **41** 1040
- [9] Lambrecht W R L, Segall B, Suttrop W, Yoganathan M, Devaty R P, Choyke W J, Edmond J A, Powell J A, Alouani M 1993 *Appl. Phys. Lett.* **63** 2747
- [10] Song J X, Yang Y T, Chai C C, Liu H X, Ding R X 2008 *Journal of Xidian University* **35** (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**]
- [11] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
- [12] Kresse G, Furthmuller J 1996 *Comput. Mat. Sci.* **6** 15
- [13] Kresse G, Furthmuller J 1996 *Phys. Rev.* **B54** 11169
- [14] Quyang X F, Shi S Q, Quyang C Y, Jiang D Y, Liu D S 2007 *Chin. Phys.* **16** 3042
- [15] Li X B, Shi E W, Chen Z Z, Xiao B 2008 *Jinorg Mater* **23** 238 (in Chinese) [李祥彪、施尔畏、陈之战、肖兵 2008 无机材料学报 **23** 238]
- [16] Baumeier B, Kruger P, Pollmann J 2006 *Phys. Rev. B* **73** 195205
- [17] Zhang C, Wang C L, Li J C, Yang K, Zhang Y F, Wu Q Z 2008 *Mater. Chem. Phic.* **107** 215
- [18] Ching X Y, Xu Y N, Rulis P, Ouyang L Z 2006 *Mater. Sci. Eng. A* **422** 147
- [19] Ye H G, Chen G D, Zhu Y Z, Zhang J W 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1687 (in Chinese) [耶红刚、陈光德、竹有章、张俊武 2007 物理学报 **56** 1687]

A first principle study on p-type doped 3C-SiC^{*}

Zhang Yun¹⁾ Shao Xiao-Hong^{1)†} Wang Zhi-Qiang²⁾

1) (*College of science, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China*)

2) (*Institute of Optics and Electronics, Chinese Academy of Science, Beijing 100190, China*)

(Received 20 July 2009; revised manuscript received 17 December 2009)

Abstract

The geometrical and electronic structures, the dopant formation energies, lattice constants, band structure and density of states of p-type SiC are calculated by the first principles of plane wave ultra-soft pseudo-potential method based on density functional theory. The band structures of different concentrations of B, Al and Ga are calculated. The results of the electronic structure show that the band gap narrows with the increase of doping concentration of B and the band gap widens with the increase of doping concentration of Al and Ga. At the same concentration the band gap of Ga doped SiC is wider than that of Al doped SiC, the band gap of Al doped SiC is wider than B doped SiC.

Keywords: SiC, electronic structure, doping, VASP

PACC: 7115, 7120, 7125

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 20736002).

† Corresponding author. E-mail: shaoxh@mail.sina.com