

强激光辐照对3C-SiC晶体结构稳定性的影响

邓发明 高涛 沈艳红 龚艳蓉

Effect of intense laser irradiation on the structural stability of 3C-SiC

Deng Fa-Ming Gao Tao Shen Yan-Hong Gong Yan-Rong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 046301 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.046301

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.046301>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I4>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

N/Cu 共掺杂锐钛矿型 TiO<sub>2</sub> 第一性原理研究

First-principles study of N/Cu co-doped anatase TiO<sub>2</sub>

物理学报.2015, 64(4): 047101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.047101>

MoSi<sub>2</sub> 薄膜电子性质的第一性原理研究

Firstprinciples study of electronic properties of MoSi<sub>2</sub> thin films

物理学报.2015, 64(4): 047102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.047102>

金属 Fe 与间隙 H 原子相互作用的密度泛函研究

First principles investigation of interaction between interstitial hydrogen atom and Fe metal

物理学报.2014, 63(22): 227101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.227101>

应力对硅烯上锂吸附的影响

Effect of strain on Li adsorption on silicene

物理学报.2014, 63(21): 217101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.217101>

Ti 掺杂 W<sub>18</sub>O<sub>49</sub> 纳米线的电子结构与 NO<sub>2</sub> 敏感性能的第一性原理研究

First-principles study of the electronic structure and NO<sub>2</sub>-sensing properties of Ti-doped W<sub>18</sub>O<sub>49</sub> nanowire

物理学报.2014, 63(20): 207101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.207101>

## 强激光辐照对3C-SiC晶体结构稳定性的影响\*

邓发明<sup>1)2)†</sup> 高涛<sup>2)‡</sup> 沈艳红<sup>2)</sup> 龚艳蓉<sup>2)</sup>

1)(四川民族学院数学系, 康定 626001)

2)(四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2014年7月7日收到; 2014年9月17日收到修改稿)

使用基于密度泛函微扰理论的线性响应方法, 模拟研究了强激光辐照对闪锌矿结构的碳化硅晶体结构稳定性的影响. 通过计算在不同电子温度下3C-SiC晶体的声子色散曲线, 发现3C-SiC的横声学声子频率随电子温度的升高会出现虚频, 其临界电子温度是3.395 eV. 结果表明, 在强激光辐照下3C-SiC晶体变得不稳定, 这与以前对金刚石结构的碳、硅和闪锌矿结构的砷化镓、铋化铟的研究结果非常类似. 电子温度在0—4.50 eV范围内时, 3C-SiC晶体在 $\Gamma$ 点的LO-TO分裂度随电子温度的升高而增大, 超过4.50 eV后随电子温度的升高而减小. 这表明只有在足够强的激光辐照下, 电子激发才会削弱晶体的离子性强度.

关键词: 3C-SiC, 晶格稳定性, 激光辐照, 密度泛函微扰理论

PACS: 63.10.+a, 71.15.mb, 61.72.uj, 81.10.Aj

DOI: 10.7498/aps.64.046301

## 1 引言

自然界中的超快、强场等极端物理现象一般只出现在恒星内部、黑体边缘和核爆炸中心. 随着激光技术的快速发展, 特别是近十年超快激光脉冲的发展与应用, 促使这种超快、强场等极端物理条件可以在实验尺度内得以实现, 进而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<sup>[1]</sup>认为, 当一个超短脉冲激光与半导体相互作用时, 转移到半导体的超短激光的能量因电子吸收首先存储在电子系统中, 在很短的几十飞秒内, 材料中的电子被加热到很高温度 $10^4$  K, 通过电子与电子、电子与空穴的极速碰撞, 并迅速达到其电子温度 $T_e$ , 导致晶格非热熔化.

自从van Vechten等<sup>[1]</sup>提出了非热熔化观点以后, 大量的实验和理论研究已经证实半导体中存在非热能的影响. Shank等<sup>[2]</sup>用飞秒激光器输出的激光辐照硅原子, 对其发生的非热相变进行

了讨论. Larsson等<sup>[3]</sup>在激光辐照时使用X射线散射晶体的方法观察到了铋化铟存在一种快速相变. 晶体铋已经被证明在强激光脉冲辐照数时皮秒后出现过渡相<sup>[4]</sup>. Saeta等<sup>[5]</sup>观察到砷化镓被强烈的飞秒激光辐照后发生的突然电子相位变换, 并证实电子激发直接导致晶格畸变. 由于非热能的熔化, 在电子激发下晶格稳定性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. 在van Vechten等<sup>[1]</sup>的研究中指出, 由于电子系统的激发使金刚石结构的半导体材料变得不稳定. Silvestrelli等<sup>[6,7]</sup>使用基于密度泛函理论的从头开始分子动力学方法来模拟硅晶格的不稳定. 通过分析声子谱对电子温度的演变, Recoules等<sup>[8]</sup>讨论了在强大的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<sup>[9]</sup>研究了铋化铟激光诱导前期的超快非热熔化.

碳化硅(SiC)作为新型的间接带隙半导体晶体材料, 其与硅相比具有更宽的禁带、更高的击穿电压、更高的电子饱和漂移速度、更高的电子迁移

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

† 通信作者. E-mail: dfm@scun.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: gaotao@scu.edu.cn

率、更高的热导率、化学稳定性好等优越性能<sup>[10,11]</sup>, 故在高频、高温、高功率和抗辐射器件, 存储器件以及光电集成器件等设备制备方面有其特殊的应用<sup>[12,13]</sup>. 研究也发现, 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 等所无法比拟的<sup>[14]</sup>. 据我们所知, 近年来关于闪锌矿结构的 SiC (即 3C-SiC) 的报道有常温常压下不同方法的能带结构计算<sup>[15]</sup>、高压相变下几何结构重构后的能带结构计算<sup>[16]</sup>、掺杂后第一性原理研究<sup>[17]</sup>等方面, 而强激光辐照诱导下的非热相变研究很少. 为了调查 3C-SiC 在强激光辐照下晶体结构的变化, 本文采用密度泛函微扰理论的线性响应方法, 计算了 3C-SiC 在不同电子温度  $T_e$  下的声子谱, 分析 3C-SiC 晶体在强激光辐照下的晶格结构稳定性. 检测到强激光辐照下使 3C-SiC 晶体的横声学模 (TA) 的模频率完整地变为虚频的临界电子温度  $T_e = 3.395$  eV, 晶体结构变得不稳定. 我们认为随着电子温度的升高, 3C-SiC 晶体的电子可能快速地热激发, 以及电子-声子耦合使得其系统能量增加, 进而导致晶格不稳定性. 同时也检测到当电子温度升高到 3.2 eV 后, 3C-SiC 晶体在高对称点  $L$  点和  $X$  点的两支 TA 不再是简并的, 且差距随电子温度的继续升高而增大; 在  $\Gamma$  点纵光学模 (longitudinal optical, LO) 和横光学模 (transverse optical, TO) 的 LO-TO 分裂度  $\delta\omega$  在 0—4.5 eV 范围内随电子温度的升高而增大, 晶体的离子性增强, 而超过 4.5 eV 后分裂度  $\delta\omega$  随电子温度的升高而减小, 这时晶体的离子性逐渐减弱, 而其金属性逐渐增加. 3C-SiC 晶体在强激光照射下所表现的这些物理性质, 可以为制作 3C-SiC 晶体特殊功能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<sup>[18,19]</sup>, 选取广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 作为赝势<sup>[20]</sup>. 首先我们选取模守恒 GGA 赝势对截止能量和  $k$  点网格进行收敛研究, 以确保这两个参数的选取能使计算结果有很好的收敛性. 经过测试, 我们得到在截止能量为 30 Hartree 和  $k$  点网格为  $6 \times 6 \times 6$  时, 体系的总能得到很好的收敛. 然后我们再对晶格常数进行优化, 利用优化好的晶格常数计算 3C-SiC 的声子谱. 用 ABINIT 程序包

的变量 `tphysel` 设置电子温度  $T_e$  的大小 (`tphysel` 值的大小反映了激光的强弱), 用于模拟强激光对晶体辐照在超快时间内使晶体达到电子温度. 电子温度是指激光照射到物体上, 电子运动时会产生动能同时温度也会发生改变. 激光能量密度是指激光照射到物体上时, 单位体积内物质储存能量的大小. 电子温度和激光能量密度量纲是不同的, 电子温度的单位是 eV, 其量纲是  $ML^2T^{-2}$ , 激光能量密度的单位是  $J/m^3$ , 量纲是  $ML^{-1}T^{-2}$ .

在下面的计算中, 由体系总能量最小化而优化得到晶格参数, 使用基于密度泛函微扰理论的线性响应方法计算声子色散曲线. 声子色散曲线的计算选取了沿布里渊区的  $W-L-\Gamma-X-W-K$  高对称点. 与直接比较方法或冻结声子法对比, 线性响应方法避免了超晶胞的使用和任意  $Q$  矢量的动力学矩阵, 而是采用计算动态矩阵之后, 用插值法得到在倒格矢空间任意点的声子色散关系.

## 3 结果与讨论

### 3.1 晶格优化

3C-SiC 是一种具有闪锌矿晶体结构的间接带隙半导体, 属于  $F\bar{4}3M$  空间群 (群号 216). 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 3C-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. 体积直接关系到晶格参数  $a$ , 由于 3C-SiC 具有很高的对称性, 因此不必优化原子的位置. 交换关联相互作用采用 GGA 赝势. 计算得到的平衡晶格参数  $a = 4.332$  Å, 与实验值 4.35 Å<sup>[21]</sup> 非常接近, 与实验数据相比计算值仅低估了 0.414%, 也与文献<sup>[22, 23]</sup> 计算的平衡晶格参数值 4.34 Å 和 4.331 Å 具有很好的一致性. 这在很大程度上可以保证对晶格动力学属性做进一步研究的正确性. 另外, 由于与传统的热熔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, 该激光作用晶体前一刻可以认为晶体结构是稳定的, 在该强激光的超快作用后晶体才可能变得不稳定. 正因为这样的处理, 因此可以认为不同强度激光辐照晶体前其晶体结构是稳定的, 可以不再重新进行晶体结构优化.

### 3.2 晶格参数 $a$ 随电子温度 $T_e$ 的变化

由强烈的激光脉冲辐照, 在极短的时间内半导体  $3C$ -SiC 的电子加热到非常高的温度. 我们分别测试了电子温度  $T_e$  在  $0-8$  eV 范围内的 24 组数据, 如图 1 所示. 从图 1 可以看出: 在  $T_e = 0$  eV 时, 晶格参数  $a = 4.332$  Å, 电子温度在  $0-1$  eV 范围内时,  $a$  值稍微增大; 当  $T_e$  大于 1 eV 后,  $a$  值增加较明显. 在强激光辐照时,  $3C$ -SiC 晶体晶格快速吸收能量, 越来越多的价电子激发进入导带, 削弱了原子间的吸引力, 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, 晶格参数修复到一个新的值以保持新的晶格力学平衡. 在强激光辐照

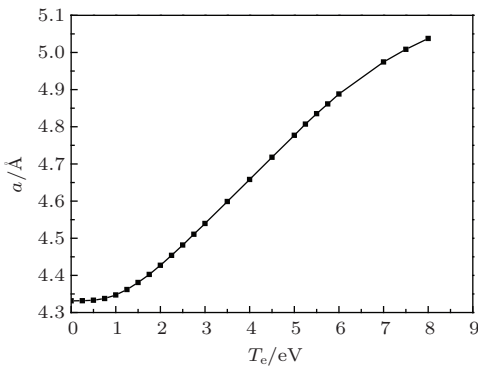


图 1  $3C$ -SiC 晶格参数  $a$  随电子温度  $T_e$  的变化

下, 我们得到  $3C$ -SiC 晶格常数随电子温度升高而增大的情况与 Feng 等 [24] 对金刚石结构的碳计算结果非常类似, 以及和文献 [25, 26] 对硅晶体的实验结果也十分类似.

### 3.3 强激光辐照下的晶格动力学属性

#### 3.3.1 两个不同电子温度下的声子色散曲线

为考察  $3C$ -SiC 晶体电子激发对其稳定性的影响, 在  $T_e = 0$  eV 和高电子温度下计算了  $3C$ -SiC 的声子色散曲线. 表 1 列出了  $T_e = 0$  eV 时计算得到的  $3C$ -SiC 在布里渊区的一些高对称点的声子频率  $\omega$  值, 并与其他研究工作的理论计算值和实验值进行比较. 在  $\Gamma$  点, 本文计算得到的 TO 和 LO 声子频率值分别为  $791.68$   $\text{cm}^{-1}$  和  $914.02$   $\text{cm}^{-1}$ , 其中 TO 声子频率与实验值  $795$   $\text{cm}^{-1}$  [27] 和  $796.2$   $\text{cm}^{-1}$  [28,29] 有很好的 consistency, 而 LO 声子频率稍低于实验值  $972$   $\text{cm}^{-1}$  [27] 和  $972.7$   $\text{cm}^{-1}$  [28,29]; 对于  $X$  点, 本文计算的 LA 声子频率稍微低于实验值 [27-29], 而 TA, TO 和 LO 的声子频率与实验值 [27-29] 有很好的 consistency; 在  $L$  点, 本文计算的 TA, LA, TO 和 LO 的声子频率与实验值 [27-29] 符合得很好. 因此, 在  $T_e = 0$  eV 时本文计算的声子频率在高对称点 ( $\Gamma$ ,  $X$  和  $L$  点) 与使用不同方法获得的实验值 [27-29] 与理论计算值 [30,31] 均具有很好的 consistency.

表 1  $T_e = 0$  eV 时本文计算的  $3C$ -SiC 的声子频率  $\omega$  与其他实验值和理论计算值的比较

位置	声子模式	$\omega/\text{cm}^{-1}$				
		本文计算值	实验值 [27]	Raman 实验值 [28,29]	计算值 [30]	计算值 [31]
$\Gamma$	TO	791.68	795	796.2	783	793.1
	LO	914.02	972	972.7	956	974.8
$X$	TA	363.26	372	373	366	370.2
	LA	616.57	639	640	629	635.1
	TO	771.01	760	761	755	763.8
	LO	829.32	829	829	829	834.4
$L$	TA	258.65	261	266	261	263.6
	LA	603.66	610	610	610	615.9
	TO	772.77	765	766	766	767.1
	LO	837.30	837	838	838	845.6

图 2 显示了计算得到的  $3C$ -SiC 晶体在电子温度  $T_e = 0, 3.395$  eV 下的声子色散曲线. 首先, 我们发现当电子温度升高到  $T_e = 3.395$  eV 时声子谱发生了明显的变化, 除两个低频的 TA 外  $3C$ -SiC 所

有的模频率  $\omega$  随电子温度的升高一致性地朝下移动. 在  $T_e = 3.395$  eV 时整个晶格不稳定, 因为晶格内各点的两支 TA 频率  $\omega$  完整地变为虚频 (图 2 中显示为负数). 随着电子温度的升高,  $3C$ -SiC 晶体



的电子快速地热激发, 而电子-声子耦合使得系统能量增加, 进而导致整个晶格的不稳定性. 这与 Recoules 等<sup>[8]</sup> 利用线性响应方法对硅的理论计算结果相似, 也与 Feng 等<sup>[24]</sup> 利用线性响应方法对具有闪锌矿结构的 GaAs 和 InSb 半导体晶体的理论计算结果相似.

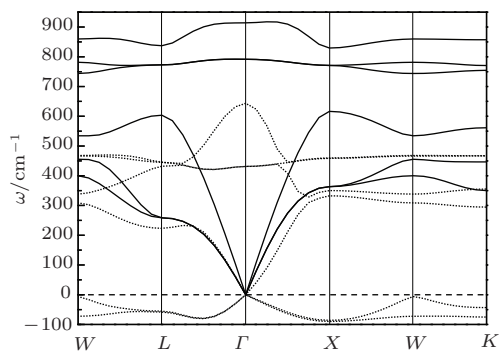


图2 在不同的电子温度下计算得到的3C-SiC的声子色散曲线(实线是  $T_e = 0$  eV 时的光谱, 虚线是  $T_e = 3.395$  eV 时的光谱)

### 3.3.2 晶格内 L 点和 X 点的 TA 频率 $\omega$ 随电子温度的变化

图3和图4分别给出了3C-SiC的TA在高对称点L点和X点的频率 $\omega$ 随电子温度的变化. 由图3和图4可以看出: 随电子温度的升高, 在高对称的L点和X点TA的频率 $\omega$ 都在减小; 当电子温度超过3.20 eV时, L点和X点的TA的频率 $\omega$ 全变为虚频(图中为负数), 表明随电子温度的升高, 晶格内的高对称L点和X点逐渐变得不稳定. 作为二重简并的TA, 当电子温度在0—3.20 eV范围内时, L点的两支TA频率是相等的, 电子温度的升高对其几乎没有影响, 但当电子温度超过3.2 eV后, 发现L点两支TA的虚频率并不相等, 且随电子温度的升高其差距在增大; 对于X点的两支TA, 其频率 $\omega$ 随电子温度的变化也有类似的情况. 这表明随电子温度的升高激发了更多价电子进入导带, 通过电子-声子耦合将能量快速传递给晶格导致晶格软化, 使得L点和X点的TA频率 $\omega$ 都在减小; 当电子温度超过3.20 eV后, 晶格也逐渐变得不稳定, 导致L点和X点的TA频率变为虚频, 进而简并的两支TA虚频率值差距也逐渐加大.

完整的横波声学支变为虚频是由热电子激发诱导的晶格不稳定性的一个明显标志. 本文研究显示3C-SiC整个晶体各点的完整TA支变为虚频的临界电子温度是3.395 eV, 它是介于Feng等<sup>[24]</sup> 计

算金刚石结构的碳的临界温度5.5 eV和Recoules等<sup>[8]</sup> 研究硅晶体临界温度2.15 eV之间的, 而比Feng等<sup>[24]</sup> 研究的闪锌矿结构的GaAs和InSb半导体晶体的临界电子温度1.75 eV和1.25 eV要大, 这是由于3C-SiC晶体的离子性强于GaAs和InSb晶体的离子性, 从而导致稳定性更高的缘故.

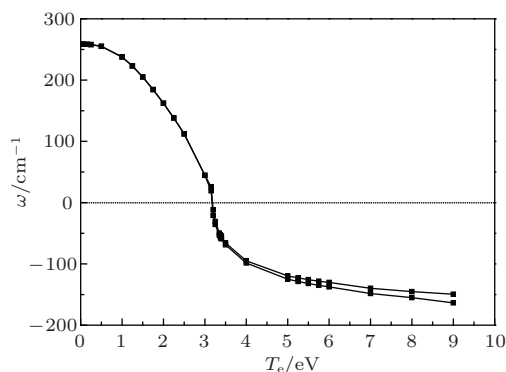


图3 3C-SiC在L点的TA频率随电子温度的变化

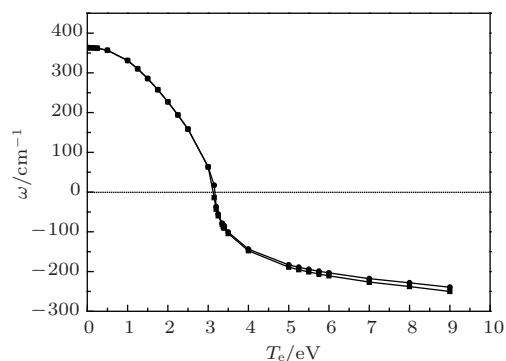


图4 3C-SiC在X点的TA频率随电子温度的变化

### 3.3.3 LO-TO分裂度随电子温度的变化

对于闪锌矿结构的半导体, TO和LO的声子频率分别为 $\omega_{TO}$ 和 $\omega_{LO}$ , 表示成Lyddano-Sachs-Teller关系为<sup>[32]</sup>

$$\frac{\omega_{LO}}{\omega_{TO}} = \left( \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} \right)^{1/2}, \quad (1)$$

这里,  $\epsilon_0$ 和 $\epsilon_\infty$ 分别是静电介电常数和高频介电常数. 在离子晶体中因长光学波产生了极化电场, 导致纵波恢复力增大进而提高了纵波的频率. 因此, 在 $q = 0$ 纵光学波的声子频率被极化电场调高, 这将导致在布里渊区的中心 $\Gamma$ 点处的LO与TO的简并退化, 形成LO-TO分裂. 极化电场的大小是与正、负离子的有效电荷量有关, 有效电荷量越大,  $\omega_{LO}$ 与 $\omega_{TO}$ 之差就越大, 因此, LO-TO分裂大小 $\delta\omega$  (即分裂度) 可以作为评估晶体的离子性强度

的一个重要参数。

3C-SiC作为共价晶体,具有一定的离子性,因此3C-SiC在 $\Gamma$ 点的光学模存在LO-TO分裂.图5显示了3C-SiC晶体的LO-TO分裂度 $\delta\omega$ 随电子温度 $T_e$ 的变化.

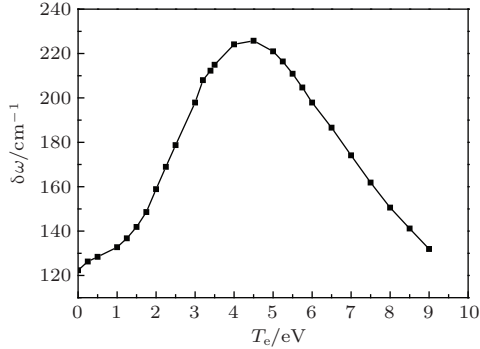


图5 3C-SiC在 $\Gamma$ 点的LO-TO分裂度 $\delta\omega$ 随电子温度 $T_e$ 的变化

对于闪锌矿结构的砷化镓和铋化锑晶体, Wang等<sup>[33]</sup>研究指出,当 $T_e > 0$  eV时,因随电子温度的升高,晶体显金属特性,进而导致LO-TO分裂消失;而Zijlstra等<sup>[9]</sup>则认为,当 $T_e > 0$  eV时,LO-TO分裂一直存在,且随电子温度的升高其分裂度是不规则的;Feng等<sup>[24]</sup>研究认为,LO-TO分裂度随电子温度的升高而减小.

对于具有闪锌矿结构的3C-SiC晶体,由图5可见:一方面,3C-SiC晶体LO-TO分裂度值要大于Feng等<sup>[24]</sup>得到的砷化镓和铋化锑晶体的LO-TO分裂度值,这与3C-SiC晶体的有效电荷量0.41 e分别大于砷化镓和铋化锑晶体的有效电荷量0.15 e与0.21 e是一致的<sup>[32]</sup>;另一方面,在0—4.50 eV电子温度范围内,其LO-TO分裂度随电子温度的升高而增大,超过4.50 eV后随电子温度的升高而减小.这可以从图6所示的差分电荷密度和图7所示的电荷密度来分析.其中横坐标轴沿3C-SiC晶胞在(110)面上的[110]方向,纵坐标轴沿(110)面上的[001]方向.在图6(a), (b)和(c)中,比较差分电荷密度 $\delta(x)$ 大于0.02725  $e/a_0^3$ 等值线围成的区域面积(图中带斜线部分),发现随电子温度的升高该区域面积减小,表明转移的电荷随温度的升高而减少,其Si—C共价性减弱,在电子温度不高的情况下,从共价区域脱离出来的电子仍然围绕在C原子周围,因此导致3C-SiC晶体离子性增强,随电子温度的升高LO-TO分裂度 $\delta\omega$ 增大.当电子温度 $T_e > 4.5$  eV后,从

图7可以看出:图7(a)中C原子最高电荷密度区域的电荷密度 $\rho(x) = 0.2255 e/a_0^3$ ,大于图7(b)中C原子最高电荷密度区域的 $\rho(x)$  (0.213  $e/a_0^3$ ),且C原子周围其他区域也有类似的情况,表明随电子温度的升高,C原子周围的电子数量进一步减少,而Si原子周围的电子数量变化也有类似的情况.由此可知,原胞中C原子和Si原子周围的价电子数减少,在总价电子数不变的情况下,

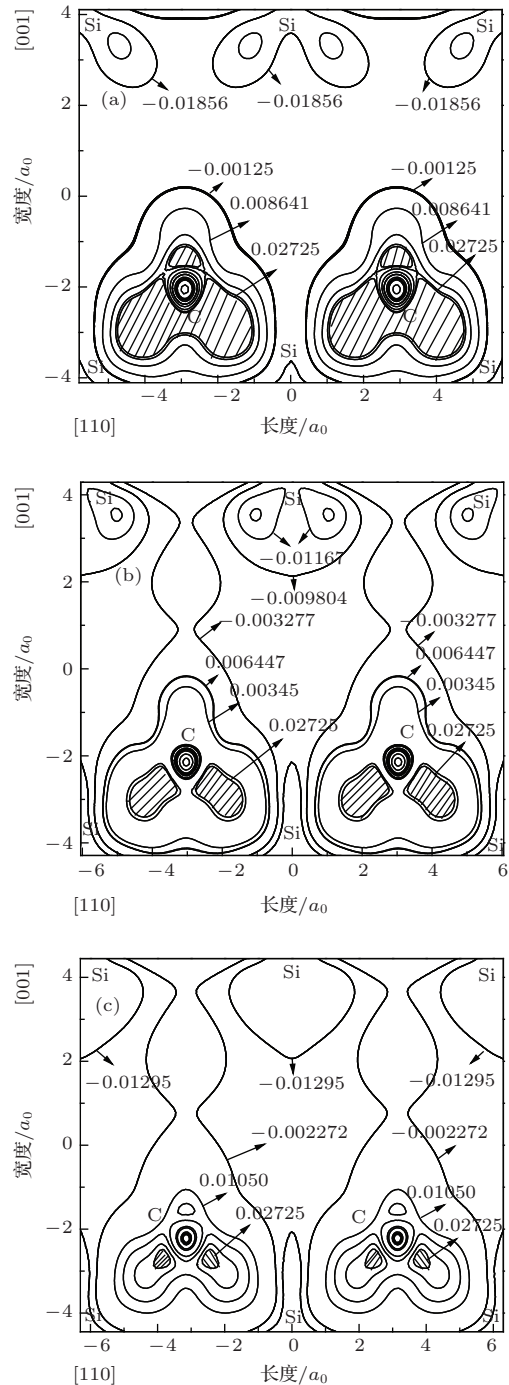


图6  $T_e$ 不同时3C-SiC晶体位于(110)面上的差分电荷密度 $\delta(x)$ (单位为 $a_0^3$ ) (a)  $T_e = 0$  eV; (b)  $T_e = 3$  eV; (c)  $T_e = 4.5$  eV

就会有部分价电子从C原子和Si原子周围转移到原胞体积空间内成为游离状态的自由价电子, 导致空隙区域游离状态的电子数量增多, 即电子在高温下空间均匀化加强, 这可能导致其金属性增强和3C-SiC晶体离子性减弱, 表现出LO-TO分裂度 $\delta\omega$ 随电子温度的增大而减小. 这表明3C-SiC晶体在 $\Gamma$ 点的LO-TO分裂度 $\delta\omega$ 并不随电子温度的升高而消失, 而是呈现一定的规律性变化.

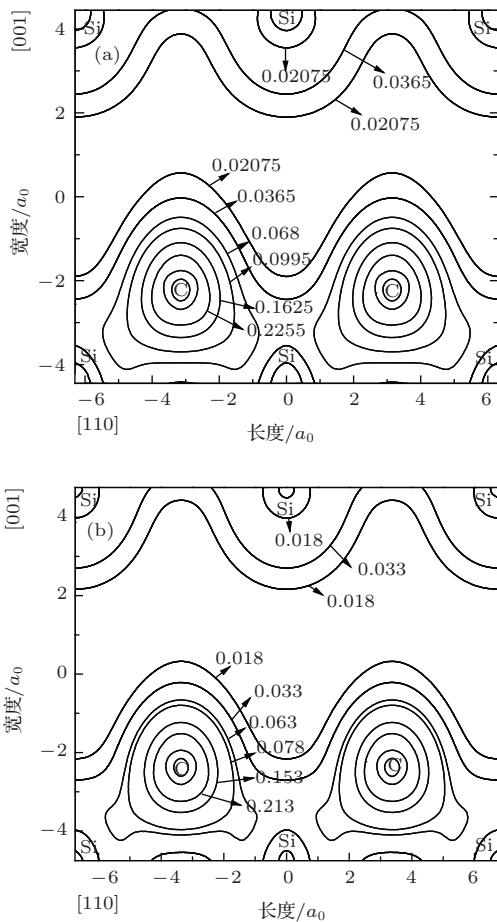


图7  $T_e$  不同时3C-SiC晶体位于(110)面上的电荷密度 $\rho(x)$ (单位为 $a_0^3$ ) (a)  $T_e = 4.5$  eV; (b)  $T_e = 8$  eV

## 4 结 论

在不同电子温度下, 本文对闪锌矿结构的3C-SiC半导体晶格参数 $a$ 进行了计算. 结果表明, 3C-SiC晶格随电子温度的升高而膨胀, 这与金刚石结构的碳<sup>[24]</sup>和硅<sup>[25,26]</sup>的理论和实验结果非常类似.

此外, 我们使用基于密度泛函微扰理论的线性响应方法, 计算了闪锌矿结构的3C-SiC半导体在不同电子温度下的声子谱, 发现TA在足够高的电子温度下软化, 这一现象表明在强的激光辐照下3C-SiC晶体变得不稳定. 3C-SiC晶体TA全变

为虚频的临界电子温度是3.395 eV, 它是介于Feng等<sup>[24]</sup>计算金刚石结构的碳和硅的临界电子温度5.5 eV和2.15 eV之间, 比Feng等<sup>[24]</sup>计算闪锌矿结构的砷化镓和铟化铟的临界电子温度1.75 eV和1.25 eV要大. 当电子温度升高到3.2 eV后, 3C-SiC晶体在高对称点L点和X点的两支TA不再是简并的, 且差距随电子温度的继续升高而加大; 作为具有一定离子性的共价晶体3C-SiC, 在高对称点 $\Gamma$ 处存在LO-TO分裂度且有一定的规律性; 在0—4.50 eV电子温度范围内, 发现LO-TO分裂度随电子温度的升高而增大, 晶体的离子性增强, 超过4.50 eV后又逐渐减小. 表明只有在足够强的激光辐照下, 电子激发才能削弱3C-SiC晶体的离子性强度.

## 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] 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* **66** 587
- [4] Uteza O P, Gamaly E G, Rode A V, Samoc M, Luther-Davies B 2004 *Phys. Rev. B* **70** 054108
- [5] Saeta P, Wang J, Siegal Y, Bloembergen N, Mazur E 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 1023
- [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.* **7** 3149
- [8] Recoules V, Cl erouin J, Z erah G, Anglade P M, Mazevet S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 055503
- [9] Zijlstra E S, Walkenhorst J, Gilfert C, Sippel C, T ows W, Garcia M E 2008 *Appl. Phys. B* **93** 743
- [10] Deng X C, Sun H, Rao C Y, Zhang B 2013 *Chin. Phys. B* **22** 017302
- [11] Song Q W, Zhang Y M, Han J, Tanner S P, Dimitrijevi S, Zhang Y M, Tang X Y, Guo H 2013 *Chin. Phys. B* **22** 027302
- [12] Liu L, Yang Y T, Ma X H 2011 *Chin. Phys. B* **20** 127204
- [13] 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
- [14] Liu Z L 2009 *Power Electron.* **6** 10 (in Chinese) [刘忠立 2009 电力电子 **6** 10]
- [15] 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]
- [16] L u M Y, Chen Z W, Li L X, Liu R P, Wang W K 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3576 (in Chinese) [吕梦雅, 陈洲文, 李立新, 刘日平, 王文魁 2006 物理学报 **55** 3576]

- [17] Zhou P L, Zheng S K, Tian Y, Zhang S M, Shi R Q, He J F, Yan X B 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 053102 (in Chinese) [周鹏力, 郑树凯, 田言, 张朔铭, 史茹倩, 何静芳, 闫小兵 2014 物理学报 **63** 053102]
- [18] 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
- [19] The ABINIT code is a common project of the Université Catholique de Louvain, Corning Incorporated, and other contributors <http://www.abinit.org> [2013-11-23]
- [20] Troullier N, Martins J L 1990 *Solid State Commun.* **74** 613
- [21] Ashcroft N W, Mermin N D 1976 *Solid State Physics* (Independence Ky: Thomson Learning Inc) p81
- [22] Käckell P, Wenzien B, Bechstedt F 1994 *Phys. Rev. B* **50** 10761
- [23] Choyke W J, Hamilton D R, Patrick L 1964 *Phys. Rev.* **133** A1163
- [24] Feng S Q, Zhao J L, Cheng X L 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 023301
- [25] 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
- [26] Poate J M, Brown W L 1982 *Phys. Today* **35** 24
- [27] Feldman D W, Parker J H, Choyke W J, Patrick L 1968 *Phys. Rev.* **173** 787
- [28] Olego D, Cardona M 1982 *Phys. Rev. B* **25** 1151
- [29] Olego D, Cardona M, Vogl P 1982 *Phys. Rev. B* **25** 3878
- [30] Karch K, Pavone P, Windl W, Schütt O, Strauch D 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17054
- [31] Serrano J, Stempffer J, Cardona M, Schwoerer-Böhning M, Requardt H, Lorenzen M, Stojetz B, Pavone P, Choyke W J 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 4360
- [32] Huang K, Han R Q 1988 *Solid State Physics* (1st Ed.) (Beijing: Higher Education Press) pp63–107 (in Chinese) [黄昆, 韩汝琦 1988 固体物理学 (第一版) (北京: 高等教育出版社) 第 63—107 页]
- [33] Wang M M, Gao T, Yu Y, Zeng X W 2012 *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* **57** 10104

## Effect of intense laser irradiation on the structural stability of 3C-SiC\*

Deng Fa-Ming<sup>1)2)†</sup> Gao Tao<sup>2)‡</sup> Shen Yan-Hong<sup>2)</sup> Gong Yan-Rong<sup>2)</sup>

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

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

( Received 7 July 2014; revised manuscript received 17 September 2014 )

### Abstract

Using the linear response method based on the density functional perturbation theory, we simulate the effect of intense laser irradiation on the zinc-blende structural stability of silicon carbide crystal. By calculating the phonon dispersion curves for the 3C-SiC crystal of the zinc-blende structure at different electronic temperatures, we find that the transverse acoustic phonon frequencies of 3C-SiC become imaginary as the electron temperature increases. The critical electronic temperature is 3.395 eV. This means that the lattices of 3C-SiC become unstable under the intense laser irradiation. These results are very similar to the previous results for the diamond structure(C and Si) and the zinc-blende structure (GaAs and InSb). In an electron temperature range of 0–4.50 eV, the LO-TO splitting at  $\Gamma$  gradually increases with the increase of electronic temperature. When the electron temperature is beyond 4.50 eV, the splitting decreases. The results indicate that only under the intense enough laser irradiation, the ionic strength can be weakened by the electronic excitation.

**Keywords:** 3C-SiC, lattice stability, laser irradiation, density functional perturbation theory

**PACS:** 63.10.+a, 71.15.mb, 61.72.uj, 81.10.Aj

**DOI:** 10.7498/aps.64.046301

\* 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](mailto:dfm@scun.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [gaotao@scu.edu.cn](mailto:gaotao@scu.edu.cn)