

强激光照射对 6H-SiC 晶体电子特性的影响

邓发明

Effect of intense laser irradiation on the electronic properties of 6H-SiC

Deng Fa-Ming

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 107101 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.107101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.107101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I10>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Mg-Y-Zn 合金三元金属间化合物的电子结构及其相稳定性的第一性原理研究

First-principles study of electronic structures and phase stabilities of ternary intermetallic compounds in the Mg-Y-Zn alloys

物理学报.2015, 64(18): 187102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.187102>

Ga<sub>2</sub> 基 Heusler 合金 Ga<sub>2</sub>XCr(X = Mn Fe Co Ni Cu) 的四方畸变、电子结构、磁性及声子谱的第一性原理计算  
First-principles investigations on tetragonal distortion electronic structure magnetism and phonon dispersion of Ga<sub>2</sub>XCr (X = Mn Fe Co Ni Cu) Heusler alloys

物理学报.2015, 64(7): 077104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.077104>

N Fe La 三掺杂锐钛矿型 TiO<sub>2</sub> 能带调节的理论与实验研究

Theoretical and experimental studies on N Fe La co-doped anatase TiO<sub>2</sub> band adjustment

物理学报.2015, 64(1): 017101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.017101>

立方相 Na<sub>1/2</sub>Bi<sub>1/2</sub>TiO<sub>3</sub> 和 K<sub>1/2</sub>Bi<sub>1/2</sub>TiO<sub>3</sub> 的电子结构和结构不稳定性的第一性原理比较研究

Electronic structures and phase instabilities of cubic Na<sub>1/2</sub>Bi<sub>1/2</sub>TiO<sub>3</sub> and K<sub>1/2</sub>Bi<sub>1/2</sub>TiO<sub>3</sub>: a first-principles comparative study

物理学报.2014, 63(16): 167101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.167101>

CuHg<sub>2</sub>Ti 型 Ti<sub>2</sub>Cr 基合金的电子结构、能隙起源和磁性研究

Electronic structures band-gap origins and magnetisms of Ti<sub>2</sub>Cr-based alloys with CuHg<sub>2</sub>Ti-type structure

物理学报.2014, 63(10): 107103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.107103>

## 强激光照射对6H-SiC晶体电子特性的影响\*

邓发明<sup>1)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)

(2016年1月16日收到; 2016年2月15日收到修改稿)

使用基于密度泛函微扰理论的第一性原理赝势法, 模拟研究了纤锌矿6H-SiC晶体在强激光照射下电子特性的变化. 研究表明, 电子温度 $T_e$ 在升高到3.89 eV及以上后, 6H-SiC由间接带隙的晶体变为直接带隙的晶体; 带隙值随电子温度 $T_e$ 升高先是增大后又快速减小, 当电子温度 $T_e$ 大于4.25 eV以后, 带隙已经消失而呈现出金属特性.

**关键词:** 6H-SiC, 电子特性, 激光照射, 密度泛函微扰理论

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

**DOI:** 10.7498/aps.65.107101

## 1 引言

Van Vechten等<sup>[1]</sup>用强激光辐射金刚石结构的半导体物质时观察到晶体结构变得不稳定, 分析认为当超强激光与半导体物质相互作用时, 因电子吸收而存储到半导体物质中的超强激光能量, 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(K代表国际温标单位开尔文), 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 $T_e$ . 导致晶格非热熔化. 近年来, 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. 科学家们对用强激光辐照半导体材料如硅、砷化镓、铋化铟、镓等晶体后发生的非热相变进行了讨论<sup>[2-5]</sup>; 基于密度泛函理论的从头开始分子动力学方法, 对半导体材料硅、铋化铟、闪锌矿结构的碳化硅等在强激光作用下其电子特性与晶格稳定性进行了模拟研究<sup>[6-9]</sup>. 通过分析声子谱对电子温度的演变, Recoules等<sup>[10]</sup>讨论了在高强度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>[11]</sup>研究了铋化铟激光诱导前期的超快非热熔

化. Shen等<sup>[12,13]</sup>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.

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明显地发生变化. 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的科学家们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<sup>[14]</sup>, 因其特殊的物理化学特性而在高频、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特殊的应用. 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等无法比拟的<sup>[15]</sup>. 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<sup>[16,17]</sup>.

据我们所知, 近年来关于纤锌矿结构材料之一的6H-SiC晶体的报道有常温常压下6H-SiC晶体几何结构与电子结构研究<sup>[18]</sup>、用飞秒激光研究

\* 国家科技部支撑计划(批准号: 2014GB111001, 2014GB125000)和四川省教育厅自然科学基金项目(批准号: 16ZA0363)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dfm@scun.edu.cn

6H-SiC 晶体表面制备纳米微结构<sup>[19]</sup>, 6H-SiC 高反压台面 pn 结二极管电学特性研究<sup>[20]</sup>, N 型 6H-SiC MOS 电容的电学特性研究等<sup>[21]</sup>, 而很少有关于不同强度的激光照射后对 6H-SiC 晶体电子特性有何影响的研究. 为了调查 6H-SiC 在不同强度的激光照射下电子特性的变化, 本文采用密度泛函微扰理论 (the density functional perturbation theory, DFPT) 和平面波赝势方法, 计算了 6H-SiC 晶体在不同电子温度  $T_e$  下的能带结构和总的电子态密度 (the total density of states, DOS), 分析 6H-SiC 晶体在不同强度的激光照射下电学特性发生的变化. 可用电子温度  $T_e$  的大小来反映激光强度的强弱, 同时也可反映出激光超快作用于晶体而使晶体达到的热力学温度. 这是因为在等离子体理论中, 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, 可以大概从电子温度  $T_e$  估计开尔文温度: 因 1 eV 所代表的能量  $1.602 \times 10^{-19}$  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  $1.381 \times 10^{-23}$  J·K<sup>-1</sup>, 便得到所对应的开尔文温度 (K), 由此可算得其换算关系是 1 eV 等效于热力学温度  $1.16 \times 10^4$  K.

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  $c$  在同一电子温度  $T_e$  下测试晶体的电子特性, 由此表明在该电子温度  $T_e$  下的强激光照射时晶体所呈现的电子特性; 由于不同强度的激光作用于晶体后, 晶体的晶格参数和电子特性同时发生了变化, 因此只有将同电子温度下的晶格参数  $a$  和  $c$  与同电子温度  $T_e$  下的电子特性 (用能带来反映) 进行测试才有意义, 即将参数  $a$  和  $c$  和  $T_e$  设置在同电子温度下对应的值来测试其电子特性才有意义.

在电子温度为 0—5.0 eV 范围的强激光照射下, 检测到 6H-SiC 晶体平衡晶格参数  $a$  和  $c$  随电子温度的升高在逐渐增大. 研究发现, 随电子温度的升高 6H-SiC 晶体能带结构中的价带顶位置位于高对称点  $\Gamma$  点处且不发生移动, 但导带底位置随电子温度的升高发生了移动; 其中, 电子温度在 0—2.5 eV 范围内升高时, 导带底位于高对称点的  $M$  点与  $L$  点之间的中间点附近处, 6H-SiC 仍是间接带隙的半导体晶体; 当电子温度在 2.5—3.87 eV 范围内继续升高时, 导带底位于高对称点的  $M$  点与  $L$  点的中间偏向  $L$  一侧附近处, 6H-SiC 仍是间接带隙的

半导体晶体; 当电子温度再继续升高到 3.89 eV 及以上后, 导带底则移动到位于高对称点的  $\Gamma$  点处, 6H-SiC 变为直接带隙的晶体了.

研究发现, 导带底和价带顶的能级能量随电子温度的升高而发生了变化. 其中, 电子温度在 0—1.75 eV 范围内时, 导带底的能级能量随电子温度升高向低能量方向移动; 电子温度在 1.75—3.85 eV 范围内时, 导带底的能级能量随电子温度升高向高能量方向移动; 电子温度在 3.85—4.0 eV 范围内时, 导带底的能级能量随电子温度升高向低能量方向移动; 电子温度超过 4.0 eV 以后, 导带底的能级能量随电子温度升高又向高能量方向移动. 电子温度在 0—1.75 eV 范围内时, 价带顶的能量随电子温度升高向低能量方向移动; 电子温度在 1.75—3.85 eV 范围内时, 价带顶的能级能量随电子温度升高向高能量方向移动; 电子温度在 3.85—3.89 eV 范围内时, 价带顶的能级能量随电子温度升高略向低能量方向移动; 电子温度超过约 3.89 eV 以后, 价带顶的能级能量随电子温度升高向高能量方向移动且快速地靠近费米能级; 当电子温度  $T_e$  大于 4.25 eV 以后, 随电子温度升高价带顶的能级能量大于 0 eV, 费米能级穿越了价带顶.

同时, 我们还发现电子温度  $T_e$  在 0—4.25 eV 范围内变化时, 带隙随电子温度升高发生了变化. 其中, 带隙随电子温度  $T_e$  在 0—2.75 eV 范围内升高而增大; 电子温度  $T_e$  在 2.75—3.0 eV 范围内升高时带隙稍有减小; 当电子温度在 3.0—4.25 eV 范围内时, 带隙随电子温度升高而迅速减小; 当电子温度  $T_e$  超过 4.25 eV 以后, 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 6H-SiC 晶体的金属性随电子温度  $T_e$  的继续升高而增强了, 晶体经历了一个熔化过渡到金属状态.

在  $T_e = 0$  和  $T_e = 5$  eV 处, 计算了 6H-SiC 晶体总的电子态密度. 电子结构表明  $T_e = 0$  eV 时 6H-SiC 是一个带隙约为 2.1 eV 的半导体, 在  $T_e = 5$  eV 时带隙已经消失. 6H-SiC 晶体在强激光照射下所表现出的上述电学特性, 可以为制作 6H-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<sup>[22,23]</sup>, 选取了广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 作为赝势<sup>[24]</sup>. 首先我们选取模守恒

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取 18 Hartree (1 Hartree 的能量约等于 27.2114 eV 的能量) 和晶胞中  $k$  点网格取  $3 \times 3 \times 3$  时, 体系的总能量得到很好的收敛. 然后我们再对平衡晶格常数进行优化, 利用优化好的平衡晶格常数再去计算 6H-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.

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 DFPT 的线性响应方法计算 6H-SiC 能带和电子态密度, 能带计算选取了沿布里渊区的  $\Gamma$ -A-H-K- $\Gamma$ -M-L-H 高对称点.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 晶格优化

6H-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  $3s^2 3p^2$ , C 的价电子态是  $2s^2 2p^2$ . 首先, 6H-SiC 的基态结构参数的确定. 通过晶胞体积和总能量的最小化我们得到平衡时晶格参数. 体积直接关系到平衡晶格参数  $a$  和  $c$ , 由于 6H-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. 我们计算的平衡晶格参数  $a$  的值是  $3.0937 \text{ \AA}$ ,  $c$  的值是  $15.1699 \text{ \AA}$ , 与实验值<sup>[25]</sup>  $a = 3.0817 \text{ \AA}$  和  $c = 15.1173 \text{ \AA}$  非常接近, 其中  $a$  的值与实验数据比较高估了 0.39%,  $c$  的值比实验值高估了 0.35%; 也与实验值<sup>[26]</sup>  $a = 3.081 \text{ \AA}$  和  $c = 15.120 \text{ \AA}$  非常接近, 其中  $a$  的值与实验数据<sup>[26]</sup> 比较高估了 0.41%,  $c$  的值比实验值<sup>[26]</sup> 高估了 0.33%; 也与用范数不变赝势法计算值<sup>[25]</sup>  $a = 3.051 \text{ \AA}$  和  $c = 14.976 \text{ \AA}$  结果非常接近, 这在很大程度上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 6H-SiC 的电子将被加热到极高的温度. 分别测试了电子温度  $T_e$  从 0—5.0 eV 范围内的 23 组晶

格参数  $a$  和  $c$  的数据, 如图 1 所示. 从图 1 可以看出, 在  $T_e = 0 \text{ eV}$  时, 平衡晶格参数  $a$  值为  $3.0937 \text{ \AA}$ ,  $c$  值为  $15.1699 \text{ \AA}$ , 电子温度在 0—5.0 eV 范围内时,  $a$  值略有增大;  $c$  值在电子温度在 0—1.0 eV 范围内时稍有增大, 当  $T_e$  大于 1.0 eV 以后,  $c$  值增加较明显. 在强激光照射时, 6H-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; 随着电子温度的增大, 平衡晶格参数  $a$  和  $c$  也就随电子温度  $T_e$  的升高而明显增大. 在强激光辐照下, 得到 6H-SiC 平衡晶格常数随电子温度升高而增大的情况与 Feng 等<sup>[27]</sup> 对金刚石结构的碳计算结果非常类似, 和文献<sup>[28, 29]</sup> 对硅晶体的实验结果也十分类似.

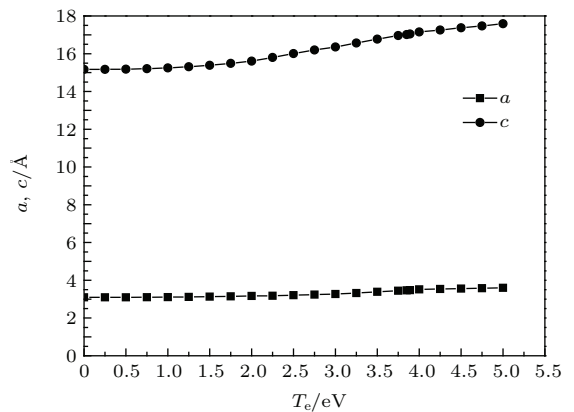


图 1 6H-SiC 平衡晶格参数  $a$  和  $c$  随电子温度  $T_e$  的变化  
Fig. 1. Changes of the equilibrium lattice parameter  $a$  and  $c$  along with the electron temperatures  $T_e$  for 6H-SiC.

#### 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. 我们选择了电子温度分别为 0 与 2.0 eV, 3.0 与 4.0 eV 的两组能带结构图进行对比分析, 以便说明 6H-SiC 晶体在强激光照射下能带结构随电子温度  $T_e$  的增大而发生较大变化.

如图 2 所示, 其中实线是  $T_e = 0 \text{ eV}$  的能带结构图, 虚线是  $T_e = 2.0 \text{ eV}$  的能带结构图, 费米能级



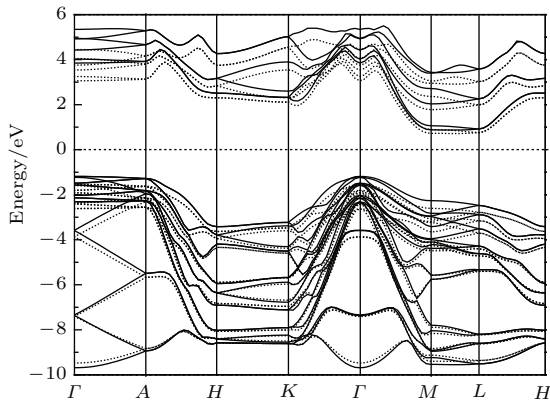


图2 6H-SiC在两个不同电子温度下的能带,其中实线是  $T_e = 0$  eV,虚线是  $T_e = 2.0$  eV,费米能级设在 0 eV

Fig. 2. The energy bands of 6H-SiC at two different electron temperatures (the solid lines,  $T_e = 0$  eV and dashed lines,  $T_e = 2.0$  eV), the Fermi level is set to 0 eV.

设为 0 eV. 为了能清晰地观察能带结构、价带顶、导带底的能量和位置随电子温度变化的情况,图3给出了图2的局部放大图. 从图2和图3可以看出,6H-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 $\Gamma$ 点,是三重简并的;导带底位于布里渊区的M点与L点之间; $T_e = 0$  eV时的间接带隙值为  $E_g = 2.0616$  eV,与实验值<sup>[30,31]</sup> 3.02 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. $T_e = 2.0$  eV时的间接带隙值为  $E_g = 2.2581$  eV,比  $T_e = 0$  eV时带隙值增大了;同时也检测到能带结构发生了变化,一方面,  $T_e = 2.0$  eV的能带结构的高能量区相对于  $T_e = 0$  eV的高能量区发生了整体明显的下移,低能量区中能量在  $-8$ — $0$  eV范围内的能带相对于  $T_e = 0$  eV低能区对应的部分整体发生了下移,而低能量区中能量在  $-10.0$ — $-8$  eV范围内的能带则相对于  $T_e = 0$  eV低能区对应的部分几乎上移了;另一方面,  $T_e = 2.0$  eV的价带顶能量值  $-1.5401$  eV与  $T_e = 0$  eV的价带顶能量值  $-1.1883$  eV相比向能量低方向发生了能量为  $0.3518$  eV的偏移,而  $T_e = 2.0$  eV的导带底能量值  $0.7180$  eV与  $T_e = 0$  eV的导带底能量值  $0.8733$  eV相比向低能量方向发生了能量为  $0.1553$  eV的偏移,发现两偏移量相差为  $0.1965$  eV,表明6H-SiC晶体

在  $T_e = 2.0$  eV的间接带隙值相比于  $T_e = 0$  eV的间接带隙值增大了  $0.1965$  eV.

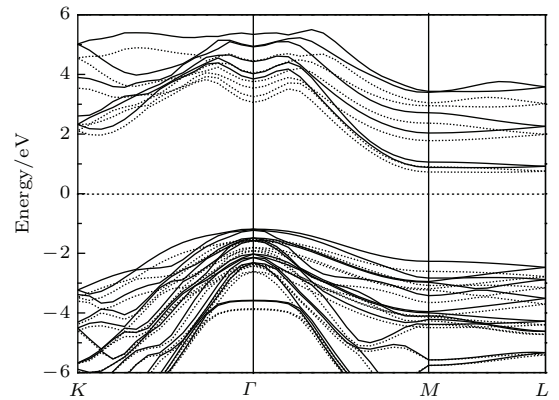


图3 6H-SiC在两个不同电子温度下的能带,其中实线是  $T_e = 0$  eV,虚线是  $T_e = 2.0$  eV,费米能级设在 0 eV

Fig. 3. The energy bands of 6H-SiC at two different electron temperatures (the solid lines,  $T_e = 0$  eV and dashed lines,  $T_e = 2.0$  eV), the Fermi level is set to 0 eV.

图4中实线是  $T_e = 3.0$  eV的能带结构图,虚线是  $T_e = 4.0$  eV的能带结构图. 图5是图4的局部放大图.  $T_e = 4.0$  eV时的能带隙是  $1.9007$  eV,相比于  $T_e = 3.0$  eV时的能带隙值  $2.3117$  eV明显减少了. 能带结构的变化表现在,一方面是导带底能量和位置的变化,  $T_e = 3.0$  eV的导带底位于布里渊区高对称点M点与L点之间,其能量值为  $1.1052$  eV,6H-SiC晶体仍是间接带隙的半导体;  $T_e = 4.0$  eV的导带底位置移动到位于布里渊区高对称点 $\Gamma$ 点,其能量值为  $1.4072$  eV,表明电子温度升高后其导带底位置发生了移动且能量也升高了,因价带顶与导带底同时位于高对称点 $\Gamma$ 点导致6H-SiC晶体变为直接带隙的半导体;另一方面,  $T_e = 4.0$  eV的价带相对于  $T_e = 3.0$  eV的价带整体向高能量方向发生了移动,而  $T_e = 4.0$  eV的导带相对于  $T_e = 3.0$  eV的导带在布里渊区的 $\Gamma$ 点处附近整体向低能量方向发生了移动;其中,  $T_e = 4.0$  eV的价带顶能量值  $-0.4935$  eV与  $T_e = 3.0$  eV的价带顶能量值  $-1.2065$  eV相比向高能量方向发生了能量为  $0.7130$  eV的偏移,而  $T_e = 4.0$  eV的导带底能量值  $1.4072$  eV与  $T_e = 3.0$  eV的导带底能量值  $1.1052$  eV相比向高能量方向发生了能量为  $0.3020$  eV的偏移,由此导致  $T_e = 4.0$  eV时相比于  $T_e = 3.0$  eV时的导带底与价带顶之间能量间隔减少为  $0.4110$  eV,表明6H-SiC晶体在  $T_e = 4.0$  eV的直接带隙值  $1.9007$  eV相比于  $T_e = 3.0$  eV的间接带隙值  $2.3117$  eV减小了  $0.4110$  eV.

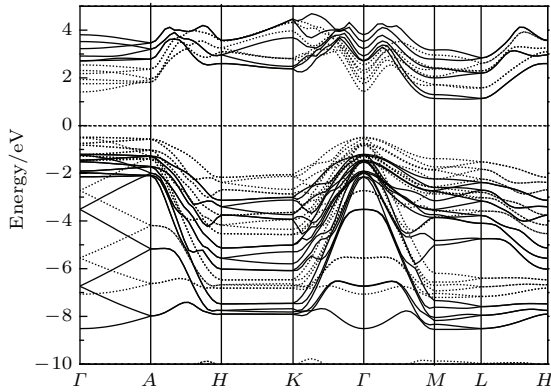


图4 6H-SiC在两个不同电子温度下的能带,其中实线是  $T_e = 3.0$  eV,虚线是  $T_e = 4.0$  eV,费米能级设在 0 eV  
Fig. 4. The energy bands of 6H-SiC at two different electron temperatures (the solid lines,  $T_e = 3.0$  eV and dashed lines,  $T_e = 4.0$  eV), the Fermi level is set to 0 eV.

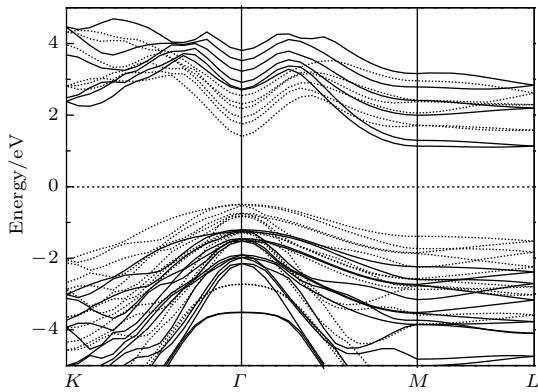


图5 6H-SiC在两个不同电子温度下的能带,其中实线是  $T_e = 3.0$  eV,虚线是  $T_e = 4.0$  eV,费米能级设在 0 eV  
Fig. 5. The energy bands of 6H-SiC at two different electron temperatures (the solid lines,  $T_e = 3.0$  eV and dashed lines,  $T_e = 4.0$  eV), the Fermi level is set to 0 eV.

### 3.3.2 价带顶与导带底位置随电子温度 $T_e$ 的变化

为了研究6H-SiC晶体的价带顶和导带底在强激光照射下的位置变化情况,我们测试了电子温度在0—5.0 eV范围时23组能带结构并分析能带结构的变化,检测到随着电子温度在0—5.0 eV范围内的升高,6H-SiC晶体的价带顶仍位于高对称点的 $\Gamma$ 点处,价带顶的位置不变化,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—2.5 eV范围内升高时,导带底位于高对称点的M点与L点之间的中间点附近处;当电子温度在2.5—3.87 eV范围内继续升高时,导带底位于高对称点的M点与L点的中间偏向L一侧附近处;当

电子温度再继续升高到3.89 eV及以上后,导带底则移动到位于高对称点的 $\Gamma$ 点处.由此表明,电子温度在0—3.87 eV范围时,6H-SiC是间接带隙的半导体晶体,当电子温度升高到3.89 eV及以上后,因导带底和价带顶同时位于高对称点 $\Gamma$ 点处而导致6H-SiC变为直接带隙的晶体.

### 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,能带结构随不同的电子温度  $T_e$  而发生了相对移动,随电子温度的升高能带结构相对移动的方向并不一致,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,我们计算了价带顶和导带底在电子温度  $T_e$  为0—5.0 eV范围内的23组能量值并做图,如图6所示.图6中粗实线表示的是价带顶能量随  $T_e$  的变化,细实线表示的是导带底能量随  $T_e$  的变化,费米能级设为 0 eV.由图6可以看出,电子温度在0—1.75 eV范围内时,导带底的能量随电子温度升高向低能量方向移动;电子温度在1.75—3.85 eV范围内时,导带底的能量随电子温度升高向高能量方向移动;电子温度在3.85—4.0 eV范围内时,导带底的能量随电子温度升高向低能量方向移动;电子温度超过4.0 eV以后,导带底能量随电子升高则又向高能量方向移动;电子温度在0—1.75 eV范围内时,价带顶的能量随电子温度升高向低能量方向移动;电子温度在1.75—3.85 eV范围内时,价带顶的能量随电子温度

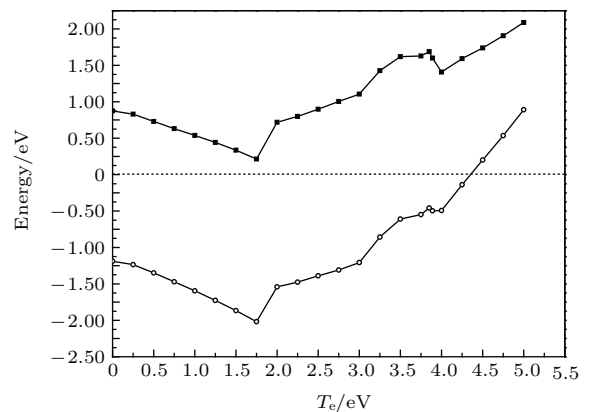


图6 6H-SiC价带顶(粗实线)、导带底(细实线)能量随电子温度  $T_e$  的变化,费米能级设为 0 eV  
Fig. 6. Changes of the energy values along with  $T_e$  at the top of valence band (the solid curves) and bottom of the conduction band (the dashed curves) for 6H-SiC. The Fermi level is set to 0 eV.

升高向高能量方向移动; 电子温度在 3.85—3.89 eV 范围内时, 价带顶的能量随电子温度升高略向低能量方向移动; 电子温度超过约 3.89 eV 以后, 价带顶的能量随电子温度升高向高能量方向移动且快速地靠近费米能级; 当电子温度  $T_e$  大于 4.25 eV 以后, 随电子温度升高价带顶的能级能量大于 0 eV, 费米能级穿越了价带顶.

以上结论表明当电子温度升高到超过 4.25 eV 后, 价带内有大量的电子被激发到高能量的导带中, 导致导带内有大量的电子出现, 晶体的导电性能明显地增强了. 由此表明 6H-SiC 晶体在足够强的强激光的照射下, 晶体的导电性能增强而共价键变弱、金属键增强, 晶体经历了一个熔化过渡到金属状态, 这与 Wang 等 [8] 利用密度泛函从头计算的方法对闪锌矿结构的铋化镉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

在图 6 中, 检测到在同一电子温度  $T_e$  下, 价带顶和导带底能量相对移动量并不是相同的, 二者之间的间隙随电子温度  $T_e$  在 0—4.25 eV 范围内在发生变化; 为了能清晰地反映随电子温度升高带隙值发生的变化, 我们选取了不同电子温度对应的 20 组带隙值做图, 如图 7 所示. 从图 7 中可以看出, 带隙随电子温度  $T_e$  在 0—2.75 eV 范围内增大而加大; 电子温度  $T_e$  在 2.75—3.0 eV 范围内增大时带隙稍有减小; 当电子温度超过 3.0 eV 以后, 带隙随电子温度升高而迅速减小, 这可能是在强激光的辐射作用下, 6H-SiC 晶体的原胞中 C 原子和 Si 原子周围

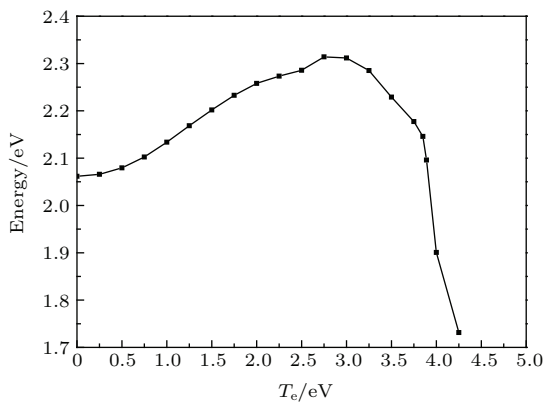


图 7 6H-SiC 带隙随电子温度  $T_e$  在 0—4.25 eV 范围内的变化

Fig. 7. The band gap of 6H-SiC changes with  $T_e$  in 0—4.25 eV.

的价电子数因非热激发而快速减少, 在总价电子数不变的情况下, 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, 电子在高温下空间均匀化加强, 这可能导致其金属性增强, 带隙值也就快速减小. 同时检测到当电子温度  $T_e$  超过 4.25 eV 以后, 6H-SiC 晶体因导电能力增强而表现为金属特性, 带隙失去了意义, 故在作图处理中不考虑电子温度超过 4.25 eV 的部分.

### 3.3.5 电子态密度随电子温度 $T_e$ 的变化

当电子温度超过 4.25 eV 的强激光照射后, 系统经历了一个熔化过渡到金属态, 这种过渡表明随电子温度  $T_e$  的增加其总的电子态密度 (DOS) 在发生变化, 如图 8 所示. 图 8 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. 显然, 电子态密度表明 6H-SiC 在  $T_e = 0$  eV 时带隙值约为 2.1 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.

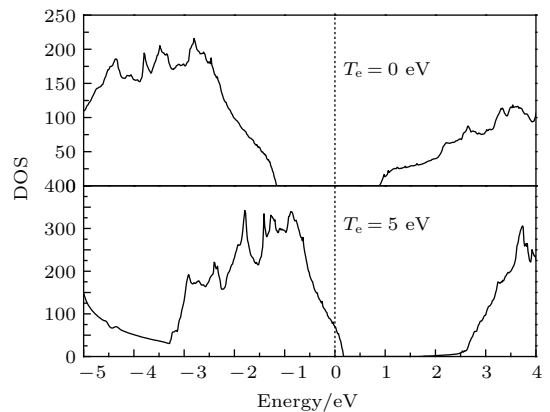


图 8 6H-SiC 晶体在两个不同电子温度  $T_e = 0$  eV 和  $T_e = 5.0$  eV 下的电子态密度. 费米能级设在 0 eV

Fig. 8. The electron density of states for the 6H-SiC crystal at two different electronic temperatures:  $T_e = 0$  eV and  $T_e = 5.0$  eV. The Fermi level is set to be 0 eV.

当电子温度  $T_e$  升高到一定程度时, 晶体 6H-SiC 经历了熔化过渡到金属状态. 这也反映在当 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 [32]; 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激光加热, 发现了高强度的激发使电子的共价键明显减弱, 结果系统经历熔化过渡到金属状态; 在 GaAs, InSb 中也有类似的报道 [8,33], 我们的计算结果与他们研究的结果是类似的.



## 4 结 论

运用赝势的GGA和密度泛函微扰理论DFPT方法,分析了具有纤锌矿晶体结构的6H-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 $a = 3.0937$  Å,  $c = 15.1699$  Å处,它们与实验值及其他方法的计算结果很好地一致,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,电子温度在0—5.0 eV范围时检测到平衡晶格参数 $a$ 和 $c$ 随电子温度升高在逐渐增大.随电子温度的升高,检测到6H-SiC晶体能带结构中的价带顶位置位于高对称点 $\Gamma$ 点处且不发生移动,但导带底位置随电子温度的升高发生了移动.其中,电子温度在0—3.87 eV范围时,因导带底位于布里渊区的高对称点 $M$ 点和 $L$ 点之间,6H-SiC仍是间接带隙的半导体晶体;当电子温度升高到3.89 eV及以上,因导带底位置移动到高对称点 $\Gamma$ 点处而使6H-SiC变为直接带隙的晶体了.

随着电子温度的升高,检测到价带顶和导带底的能量相对于费米能级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;其中,随电子温度 $T_e$ 在0—2.75 eV范围内升高,6H-SiC带隙增大;电子温度 $T_e$ 在2.75—3.0 eV范围内升高,带隙稍有减小;当电子温度在3.0—4.25 eV范围内时,带隙随电子温度升高而迅速减小;同时检测到当电子温度 $T_e$ 超过4.25 eV以后,因价带顶穿越费米能级而带隙消失了,呈现出导体的金属特性,表明6H-SiC晶体在电子温度超过4.25 eV强激光的照射下,晶体的金属特性增强,晶体经历了一个熔化过渡到金属状态.

在 $T_e = 0$  eV和 $T_e = 5.0$  eV处,计算了6H-SiC晶体总的电子态密度;电子结构表明 $T_e = 0$  eV时6H-SiC是一个带有带隙约为2.1 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, Hirlmann 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.* **7** 3149
- [8] Wang M M, Gao T, Yu Y, Zeng X W 2012 *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* **57** 10104
- [9] 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]
- [10] Recoules V, Cléroutin J, Zérah G, Anglade P M, Mazevet S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 055503
- [11] Zijlstra E S, Walkenhorst J, Gilfert C, Sippel C, Töws W, Garcia M E 2008 *Appl. Phys. B* **93** 743
- [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. Sci.* **59** 589
- [14] Matsunami H 2006 *Microelectron. Eng.* **83** 2
- [15] Weitzel C E 1998 *Mater. Sci. Forum.* **907** 264
- [16] Costa A K, Camargo Jr S S 2003 *Surf. Coat. Technol.* **163** 176
- [17] Rottner K, Frischholz M, Myrteit T, Mou D, Nordgren K, Henry A, Hallin C, Gustafsson U, Schoner A 1999 *Mat. Sci. Eng.* **61** 330
- [18] 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]
- [19] Wu X J, Jia T Q, Zhao F L, Huang M, Chen H X, Xu N S, Xu Z Z 2007 *Acta Optica Sinica* **27** 0105 (in Chinese) [吴晓君, 贾天卿, 赵福利, 黄敏, 陈洪新, 许宁生, 徐至展 2007 光学学报 **27** 0105]
- [20] Wang S R, Liu Z L, Li J M, Wang L C, Xu P 2001 *Chinese Journal of Semiconductors* **22** 507 (in Chinese) [王姝睿, 刘忠立, 李晋闽, 王良臣, 徐萍 2001 半导体学报 **22** 507]
- [21] Wang S R, Liu Z L, Liang G R, Liang X Q, Ma H Z 2001 *Chinese Journal of Semiconductors* **22** 0755 (in Chinese) [王姝睿, 刘忠立, 梁桂荣, 梁秀芹, 马红芝 2001 半导体学报 **22** 0755]
- [22] 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
- [23] 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]
- [24] Troullier N, Martins J L 1990 *Solid State Commun.* **74** 613
- [25] Camp P E, Doren V, Devreese J T 1986 *Phys. Rev. B* **34** 1314



- [26] Käckell P, Wenzien B, Bechstedt F 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17037
- [27] Feng S Q, Zhao J L, Cheng X L 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 023301
- [28] 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
- [29] Poate J M, Brown W L 1982 *Phys. Today* **35** 24
- [30] Wessels B W, Gatos H C 1977 *Phys. Solids* **38** 345
- [31] Xie C K, Xu P S, Xu F Q 2003 *Phys. B* **336** 284
- [32] Gromov G G, Kapaev V V, Kopaev Y V, Kopaev Y V, Rudenko K V 1988 *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **94** 101
- [33] 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 6H-SiC\*

Deng Fa-Ming<sup>1)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 16 January 2016; revised manuscript received 15 February 2016 )

### Abstract

By using first-principle with pseudopotential method based on the density functional perturbation theory, in this paper we calculate the electronic properties of wurtzite 6H-SiC crystal under the strong laser irradiation and analyze the band structure and the density of states. Calculations are performed in the ABINIT code with using the generalized gradient approximation for the exchange-correlation energy. And the input variable tphysel is used to set up a physical temperature of electrons  $T_e$ . The value of  $T_e$  is set to simulate the corresponding electron temperature of the crystal when irradiated by intensive laser within an ultrafast time. The highly symmetric points selected in the Brillouin zone are along  $\Gamma$ -A-H-K- $\Gamma$ -M-L-H in the energy band calculations. After testing, we can always obtain a good convergence of the total energy when choosing 18 Hartree cut-off energy and  $3 \times 3 \times 3$   $k$ -point grid. By optimizing the structure and then using the optimized equilibrium lattice constant, the structural parameters and the corresponding electronic properties of 6H-SiC in the different electron-temperature conditions are studied. First of all, when the electron temperature stays in a range between 0 eV and 5.0 eV, we choose 23 groups of different electron temperatures to respectively test the values of equilibrium lattice parameters  $a$  and  $c$  of 6H-SiC. Within a temperature range between 0 eV and 4.25 eV, we continue to test 20 groups of the electrical properties of 6H-SiC under different electron temperatures, calculating the forbidden bandwidths at different electron temperatures and analyzing the changes of the bottom of conduction band and the top of valence band as the electron temperature goes up. Meanwhile, taking for sample two groups of the band structures in ranges of 0–2 eV and 3–4 eV, we comparatively analyze the changes of the energy and position of the bottom of conduction band and the top of valence band with electron temperature. The calculation results indicate that the equilibrium lattice parameters  $a$  and  $c$  of 6H-SiC gradually increase as electron temperature  $T_e$  goes up. With the electron temperature going up, the top of valence band still stays there, while the bottom of conduction band shifts to the location between  $M$  and  $L$  point as electron temperature increases, leading to the fact that 6H-SiC is still an indirect band-gap semiconductor in a range of 0–3.87 eV, and as electron temperature reaches 3.89 eV and even more, the crystal turns into a direct band-gap semiconductor. With  $T_e$  rising constantly, the bottom of the conduction band

\* Project supported by the National Key Technology Research and Development Program of the Ministry of Science and Technology of China (Grant Nos. 2014GB111001, 2014GB125000) and the Natural Science Foundation of the Education Department of Sichuan Province, China (Grant No. 16ZA0363).

† Corresponding author. E-mail: [dfm@scun.edu.cn](mailto:dfm@scun.edu.cn)

and the top of valence band both move in the direction of high energy or low energy. When  $T_e$  is in excess of 4.25 eV, the top of valence band crosses the Fermi level. When  $T_e$  varies in a range of 0–2.75 eV, the forbidden bandwidth increases with temperature rising, and when  $T_e$  varies in a range of 2.75–3 eV, the forbidden bandwidth decreases slowly, and when  $T_e$  varies in a range of 3–4.25 eV, the forbidden bandwidth quickly reduces. This variation shows that the metallic character of 6H-SiC crystal increases with electron temperature  $T_e$  rising. The total densities of states (DOS) are calculated at  $T_e = 0$  eV and 5 eV. The DOS figures indicate that 6H-SiC is a semiconductor and its energy gap equals 2.1 eV. At  $T_e = 5$  eV, the gap disappears, presenting metallic properties. This result shows that the crystal covalent bonds are weakened and metallic bonds are enhanced with temperature increasing and the crystal experiences the process of melting, entering into metallic state.

**Keywords:** 6H-SiC, electronic properties, laser irradiation, density functional perturbation theory

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

**DOI:** [10.7498/aps.65.107101](https://doi.org/10.7498/aps.65.107101)