

文章编号: 1001-3806(2017)02-0240-07

## 强激光下 4H—SiC 晶体电子特性的第一性原理研究

邓发明<sup>1</sup>, 高涛<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)

**摘要:** 为了研究 4H—SiC 晶体在强激光辐照下电子特性及其变化, 采用基于密度泛函微扰理论的第一性原理赝势的方法, 对纤锌矿 4H—SiC 晶体在强激光照射下的电子特性的变化进行了理论分析和实验验证。结果表明, 电子温度  $T_e$  在 0eV ~ 2.75eV 范围内时, 4H—SiC 仍然是间接带隙的半导体晶体; 当电子温度  $T_e$  升高达到并超过 3.0eV 以上时, 4H—SiC 变为直接带隙的半导体晶体; 电子温度  $T_e$  在 0eV ~ 2.0eV 变化时, 带隙值随电子温度升高而增大; 电子温度  $T_e$  在 2.0eV ~ 3.5eV 变化时, 带隙值随电子温度  $T_e$  的升高而迅速地减小; 当电子温度  $T_e$  高于 3.5eV 以后, 带隙已经消失而呈现出金属特性。该研究对制作 4H—SiC 晶体特殊功能电子元件是有帮助的。

**关键词:** 激光技术; 电子特性; 密度泛函微扰理论; 4H—SiC; 激光照射

中图分类号: O469

文献标志码: A

doi: 10.7510/jgjs.issn.1001-3806.2017.02.019

## First principle study of electronic properties of 4H—SiC under high power laser

DENG Faming<sup>1</sup>, GAO Tao<sup>2</sup>

(1. Department of Mathematics, Sichuan University for Nationalities, Kangding 626001, China; 2. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

**Abstract:** In order to investigate the electronic properties of 4H—SiC crystal under high power laser irradiation, the first principles with pseudo potential method based on density functional perturbation theory was applied to theoretically analyze and experimentally verify the electronic properties of wurtzite 4H—SiC crystal under the strong laser irradiation. The results indicate that 4H—SiC remains semiconductor with indirect band-gap in the range of 0eV ~ 2.75eV. When the electronic temperature reaches above 3.0eV, the crystal turns to be semiconductor with direct band-gap. The forbidden bandwidth increases with the rising of  $T_e$  in the range of 0eV and 2.0eV, and the forbidden bandwidth quickly reduces with the rising of  $T_e$  in the range of 2.0eV ~ 3.5eV. When  $T_e$  is over 3.5eV, the gap has disappeared and metallic properties are presented. The study will be helpful for making special function electronic components of 4H—SiC crystal.

**Key words:** laser technique; electronic property; density functional perturbation theory; 4H—SiC; laser irradiation

## 引言

用强激光辐射金刚石结构的半导体物质时, van VECHTEN 等人<sup>[1]</sup>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, 因电子吸收而存储在半导体物质中的超强激光能量, 会在几十飞秒时间内, 将半导体物质中的电子加热到热力学温度为  $10^4$ K 的高温, 并借助晶体内的电子与电子、电子与空穴的超快碰撞, 晶体在超快时间内升高到其对应的电子温度, 从而使晶体在超快时间内非热熔化。

基金项目: 国家科技支撑计划资助项目(2014GB111001; 2014GB125000); 四川省教育厅自然科学基金重点资助项目(16ZA0363)

作者简介: 邓发明(1966-), 男, 副教授, 现主要从事强激光对凝聚态物理性质影响方面的研究。

E-mail: dfm@scun.edu.cn

收稿日期: 2016-04-12; 收到修改稿日期: 2016-09-13

近年来, 学者们通过理论研究和大量的实验都已证明, 在高强度激光辐照下, 非热熔化引起了晶体物质的物理特性变化。科学家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计算分子动力学方法, 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的电子特性与晶格稳定性进行了模拟研究<sup>[6-9]</sup>。RECOULES 等人用强激光照射金属和半导体物质, 通过研究电子温度对声子谱的影响, 讨论了晶体物质的稳定性<sup>[10]</sup>。ZIJLSTRA 等人采用基于从头计算的方法, 模拟研究了铋化铟晶体在强激光辐照下的超快非热熔化<sup>[11]</sup>。SHEN 等人<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是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。由于强激光照射使晶体非热熔化,晶体物质的物理特性的改变受到了材料科学与物理学的科学家们极大关注。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>,因其特殊的物理和化学特性而在电力电子领域和光电集成方面有着独特的应用,尤其是在短波发光材料使用方面,相比于 Si, GaAs 等传统的半导体材料, SiC 晶体的物理与化学特性就更加优越<sup>[15]</sup>。近年来, SiC 晶体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>。

关于纤锌矿结构材料之一的 4H—SiC 晶体的报道有 4H—SiC TPJBS 二极管器件结构和器件仿真<sup>[18]</sup>、用微波光电导衰减法测量 N 型 4H—SiC 少数载流子寿命研究其电学特性<sup>[19]</sup>、通过对 P 型 4H—SiC 少数载流子寿命的研究来分析其电学特性<sup>[20]</sup>、常温常压下分析 4H—SiC 的能带结构<sup>[21]</sup>等方面,而对于强激光照射该晶体后其电子特性的变化研究较少。因此,研究在强激光辐照下, 4H—SiC 晶体电子特性的变化是有意义的。使用密度泛函微扰理论(density functional perturbation theory, DFPT)和平面波赝势方法,通过计算 4H—SiC 在不同电子温度  $T_e$  下的能带结构、总的电子态密度(density of states, DOS)和分波态密度(partial density of states, PDOS),分析了 4H—SiC 晶体在强激光照射下其电学特性的变化。

首先测试了 4H—SiC 晶体在不同电子温度下的晶格平衡参量  $a$  和  $c$ ,然后利用  $a$  和  $c$  在同一电子温度  $T_e$  下测试了晶体的电子特性,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;只有将参量  $a$  和  $c$  与  $T_e$  设置在同一电子温度下对应的值来检测其电子特性才有意义。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,可以大概从电子温度  $T_e$  估计开尔文温度:因 1eV 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,除以玻尔兹曼常数  $1.381 \times 10^{-23}$  J · K<sup>-1</sup>,便得到所对应的开尔文温度,由此可算得其换算因子是:1eV 等效于热力学温度  $1.16 \times 10^4$  K。

在强激光辐照下,随电子温度  $T_e$  的增加,检测到 4H—SiC 晶体平衡晶格参量  $a$  和  $c$  也在增大。而对于能带结构的变化,一方面,随  $T_e$  的增大,4H—SiC 晶体的导带底从高对称点  $M$  处开始产生移动,但价带顶始终在高对称点  $\Gamma$  点处不动,从而导致 4H—SiC 晶体在强激光辐照下由间接带隙变成了直接带隙晶体;其中,

电子温度在 0eV ~ 2.75eV 范围内,导带底位于高对称点的  $M$  点处,4H—SiC 是间接带隙晶体;当电子温度继续升高达到 3.0eV 及以上时,导带底和价带顶同时处于高对称点  $\Gamma$  点处而导致 4H—SiC 晶体转变成直接带隙的半导体晶体了。

另一方面,检测到 4H—SiC 晶体的导带底能量和价带顶能量随电子温度  $T_e$  升高相对于费米能级能量朝低能量或高能量方向发生了明显的移动。其中,当电子温度在 0eV ~ 1.5eV 范围内时,随电子温度升高,4H—SiC 晶体能带结构的价带顶能量朝费米能级能量的低能量方向移动;当电子温度达到并超过约 1.5eV 以后,随电子温度升高,价带顶能量朝费米能级的高能量方向较快地移动并向上靠近费米能级;当电子温度在 0eV ~ 1.5eV 范围内时,随电子温度的升高,4H—SiC 晶体能带结构的导带底能量朝费米能级的低能量方向移动;当电子温度在 1.5eV ~ 2.5eV 范围内时,随电子温度的升高,导带底的能量朝高能量方向移动;当电子温度在 2.5eV ~ 3.25eV 范围内时,随电子温度的升高,导带底能量快速地降低;当电子温度  $T_e$  升高到 3.5eV 时,导带底的能级能量低于 0eV,费米能级穿越了导带底。

再一方面,检测到 4H—SiC 晶体带隙值随电子温度  $T_e$  升高而发生了变化。其中,4H—SiC 晶体能带结构的带隙值在电子温度 0eV ~ 2eV 范围内是增大的;带隙值在电子温度超过 2.0eV 以后是快速减小的;当  $T_e$  升高到 3.5eV 及以后时,由于导带能量快速降低而穿过费米能级导致带隙消失了,晶体 4H—SiC 因导电能力增强而表现为金属特性。表明了 4H—SiC 晶体在强度超过 3.5eV 的强激光的照射下,晶体的电子特性明显增强,晶体经历了一个熔化过程,过渡到金属状态。最后,对 4H—SiC 晶体的总电子态密度与分波态密度进行了计算分析。分析结果显示:电子温度  $T_e = 0$ eV 时,4H—SiC 晶体带隙值为 2.2eV;电子温度  $T_e = 6.0$ eV 时,因带隙消失而表现出金属的特性。

在利用 4H—SiC 晶体制作特殊功能电子元件时,上述检测到的 4H—SiC 晶体在强激光辐照下所呈现的电子特性,可以为它们提供第一性原理基础数据。

## 1 计算描述

本文中使用了基于密度泛函微扰理论的第一性原理赝势法,模拟研究了 4H—SiC 晶体在强激光照射下的电学特性的变化。在模拟研究中选用广义梯度近似(generalized gradient approximation, GGA)作为赝势<sup>[22]</sup>,采用 ABINIT 程序包<sup>[23-24]</sup>进行计算。为了得到 4H—SiC 晶体在强激光作用下的第一性原理基础数

据,检测分3步进行。第1步是收敛性测试,选取模守恒 GGA 赝势对 4H—SiC 晶体的平面波截止能量和  $k$  点网格进行收敛测试,检测结果表明,当截止能量取 27.2114eV 和  $k$  点网格取  $2 \times 2 \times 1$  时,系统的总能量可以很好地收敛;第2步是对 4H—SiC 晶体平衡晶格常数进行优化测试;第3步是利用优化后得到的截止能量和平衡晶格参量,运用密度泛函微扰理论的线性响应方法对 4H—SiC 晶体的电子态密度和能带结构进行了测试,并选取了沿布里渊区的  $\Gamma$ -A-H-K- $\Gamma$ -M-L-H 高对称点方向进行能带结构的检测。

用 ABINIT 程序包中的变量 tphysel 来设置电子温度  $T_e$  的大小, $T_e$  的大小反映了激光强度的大小,同时也模拟反映了 4H—SiC 晶体在强激光作用下使晶体在超快时间内达到的电子温度。

## 2 结果与讨论

### 2.1 平衡晶格参量的优化

4H—SiC 晶体具有纤锌矿晶体结构特征、空间群属于 P63mc,群号是 186。其中,C 原子的价电子态为  $2s^2 2p^2$ ,Si 原子的价电子态为  $3s^2 3p^2$ 。测试 4H—SiC 晶体的基态结构参量,交换相关的相互作用采用 GGA,利用晶胞体积和总能量的最小化得到了晶体平衡晶格参量。平衡晶格参量  $a$  和  $c$  是由晶胞的体积决定,因为 4H—SiC 晶体的对称性很高,故原子的位置就不必再优化。测试得到的平衡晶格参量  $a$  的值是 0.31112nm, $c$  的值是 1.00500nm,与  $a$  的实验值<sup>[24]</sup> 0.30817nm 和  $c$  的实验值 1.00791nm 非常接近,其中  $a$  值与实验数据比较高估了 0.96%, $c$  值比实验值低估了 0.42%;也与用范数不变赝势法理论计算值<sup>[21]</sup>  $a$  值 0.3051nm 和  $c$  值 0.9984nm 十分接近,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。

### 2.2 晶格参量 $a$ 和 $c$ 随电子温度 $T_e$ 的变化

在高强度的激光辐照下,4H—SiC 晶体内的电子将在超快时间内被加热到很高的温度。检测了电子温度  $T_e$  从 0eV ~ 5.0eV 范围内的 21 组晶格参量  $a$  和  $c$  的数据,如图 1 所示。从图 1 可以看出,在  $T_e = 0$ eV 时,平衡晶格参量  $a = 0.31112$ nm, $c = 1.00500$ nm;电子温度  $T_e$  在 0eV ~ 1.5eV 范围内时, $a$  值稍微增大;电子温度  $T_e$  超过 1.5eV 后, $a$  值增大较为明显;电子温度  $T_e$  在 0eV ~ 0.75eV 范围内时, $c$  值稍微增大;电子温度  $T_e$  在 0.75eV ~ 2.25eV 范围内增大时, $c$  值明显增大;电子温度  $T_e$  增大超过 2.25eV 后, $c$  值增大较为明显。在强激光辐照时,4H—SiC 晶体在超快时间内吸收了能量,引起更多的电子因能量增加而被激发到导带中,原子间的吸引力被削弱,造成原胞内的碳原子和硅原

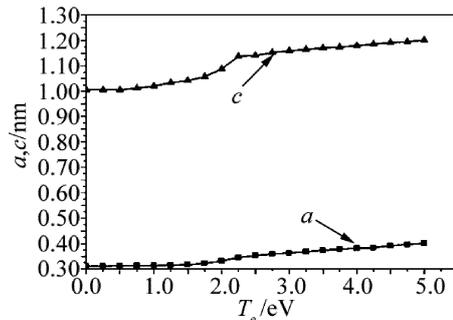


Fig. 1 Relationship between equilibrium lattice parameter  $a$  and  $c$  of crystal 4H—SiC and electron temperatures  $T_e$ .

子各自平衡位置处的非简谐热振动加强,增大了原子与原子间的相互排斥力,打破了原有的晶格的力学平衡,同时晶格参量快速地自我修复到一个新的值,从而使晶胞重新处于新的晶格力学平衡状态;随电子温度  $T_e$  的增大,平衡晶格参量  $a$  和  $c$  也明显增大。在强激光辐照下,检测到的 4H—SiC 晶体平衡晶格常数发生变化的情形与金刚石结构的碳<sup>[25]</sup> 以及硅晶体<sup>[26-27]</sup> 研究的结果非常类似。

### 2.3 电子特性

2.3.1 能带结构随电子温度  $T_e$  改变而变化 随电子温度的升高,晶体的电子特性的变化可由其能带结构的变化来反映。分别选择了电子温度分别为 0eV 与 1.5eV,2eV 与 3eV 的两组能带结构进行对比分析,以便说明 4H—SiC 晶体在强激光照射下随电子温度  $T_e$  的增大其能带结构发生的变化,并由此反映晶体电子特性的变化。

如图 2 所示,其中  $T_e = 0$ eV 的能带结构用实线表示, $T_e = 1.5$ eV 的能带结构用虚线表示,费米能级能量设置为 0eV。由图 2 表明,4H—SiC 晶体第一导带底位于布里渊区中的  $M$  点处,是二重简并的;价带顶位于  $\Gamma$  点,是三重简并的;4H—SiC 晶体的能带结构具有典型的纤锌矿材料能带结构的一般特征。 $T_e = 0$ eV 时的间接带隙值为 2.1972eV,与实验值<sup>[28]</sup> 3.47eV 相比较减少了 37.2%。在运用局域密度泛函理论时,因为没有考虑体系激发态条件而求解 Kohn-Shan 方程,低估了激发态电子间的关联作用,从而使得理论计算结果通常要小于实验值约 30% ~ 50%;但在同一体系中,分析晶体在不同电子温度下电子特性的变化其结果仍然是有意义的。 $T_e = 1.5$ eV 时的间接带隙值为 2.2967eV,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, $T_e = 1.5$ 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,而低能量区中能量在 0eV ~ -8eV 范围内的能带相对于  $T_e = 0$ eV 低能区对应的部分发生了下移,低能量区中能量在 -8eV ~ -17.5eV

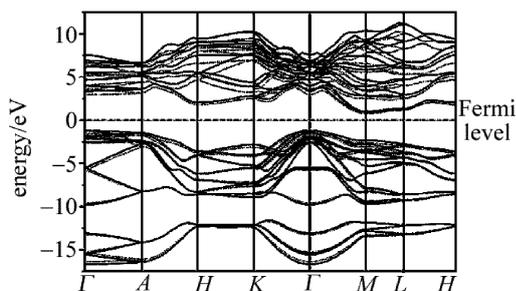


Fig. 2 Energy bands of 4H—SiC at two different electron temperatures:  $T_e = 1.5\text{eV}$  (dashed lines) and  $T_e = 0\text{eV}$  (solid lines)

范围内的能带则相对于  $T_e = 0\text{eV}$  低能区对应的部分几乎上移了;另一方面,价带顶能量值在  $T_e = 1.5\text{eV}$  时是  $-1.5303\text{eV}$ ,与在  $T_e = 0\text{eV}$  时的值  $-1.2178\text{eV}$  相比,朝能量低方向发生了能量为  $0.3125\text{eV}$  的偏移量,而  $T_e = 1.5\text{eV}$  的导带底能量值  $0.7665\text{eV}$  与  $T_e = 0\text{eV}$  的导带底能量值  $0.9795\text{eV}$  相比,朝低能量方向发生了能量为  $0.2130\text{eV}$  的偏移量,两个偏移量相差  $0.0995\text{eV}$ ,表明 4H—SiC 晶体在  $T_e = 1.5\text{eV}$  的间接带隙值相比于  $T_e = 0\text{eV}$  的间接带隙值增大了。

图 3 中,实线是 4H—SiC 晶体在  $T_e = 2\text{eV}$  时的能带结构图,虚线是  $T_e = 3\text{eV}$  时的能带结构图。 $T_e = 3\text{eV}$  时的能带隙值为  $1.0404\text{eV}$ ,相比于  $T_e = 2\text{eV}$  时的能带隙值  $2.3268\text{eV}$  明显减少了。能带结构的变化表现在:一方面导带底能量和位置的变化, $T_e = 2\text{eV}$  的导带底位于高对称点  $M$  点,其能量值为  $0.9554\text{eV}$  点处,晶体仍是间接带隙的半导体; $T_e = 3\text{eV}$  的导带底位置移动到位于高对称点  $\Gamma$  点,其能量值为  $0.2831\text{eV}$  点处,表明电子温度升高后其导带底位置移动了且能量也降低了,因价带顶与导带底同时位于高对称点  $\Gamma$  点导致晶体变为直接带隙的半导体;另一方面, $T_e = 3\text{eV}$  的价带相对于  $T_e = 2\text{eV}$  的价带整体向高能量方向发生了移动,而  $T_e = 3\text{eV}$  的导带相对于  $T_e = 2\text{eV}$  的导带整体向低能量方向发生了移动;其中, $T_e = 3\text{eV}$  的价带顶能量值  $-0.7573\text{eV}$  与  $T_e = 2\text{eV}$  的价带顶能量值  $-1.3714\text{eV}$  相比,朝高能量方向发生了能量为  $0.6141\text{eV}$  的偏移量,而  $T_e = 3\text{eV}$  的导带底能量值  $0.2831\text{eV}$  与  $T_e = 2\text{eV}$  的导带底能量值  $0.9554\text{eV}$  相比,朝低能量方

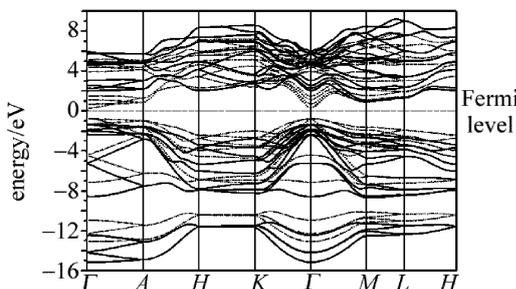


Fig. 3 Energy bands of 4H—SiC at two different electron temperatures:  $T_e = 3\text{eV}$  (dashed lines) and  $T_e = 2\text{eV}$  (solid lines)

向发生了能量为  $0.6723\text{eV}$  的偏移量,由此导致  $T_e = 3\text{eV}$  时相比于  $T_e = 2\text{eV}$  时的导带底与价带顶之间能量间隔总的偏移量为  $1.2864\text{eV}$ ,表明 4H—SiC 晶体在  $T_e = 3\text{eV}$  的间接带隙值  $1.0404\text{eV}$  相比于  $T_e = 2\text{eV}$  的间接带隙值  $2.3268\text{eV}$  减小了  $1.2864\text{eV}$ 。

### 2.3.2 导带底与价带顶位置随电子温度 $T_e$ 的变化

在强激光辐照下,电子温度  $T_e$  在  $0\text{eV} \sim 3.5\text{eV}$  范围时选择了 14 个电子温度,并检测出了这 14 个电子温度对应的 14 组能带结构数据,分析这 14 组能带结构数据,并由此得到了 4H—SiC 晶体随电子温度的升高其导带底和价带顶位置发生的变化关系。

检测到随着电子温度在  $0\text{eV} \sim 3.5\text{eV}$  范围内的升高,4H—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  $0\text{eV} \sim 2.75\text{eV}$  范围内变化,导带底位置在布里渊区的高对称点  $M$  处;当电子温度再升高达到  $3.0\text{eV}$  及以上时,导带底又回到高对称点  $\Gamma$  点处。由此表明,电子温度在  $0\text{eV} \sim 2.75\text{eV}$  范围时,4H—SiC 是间接带隙的半导体晶体,当电子温度达到  $3.0\text{eV}$  及以上后,因导带底和价带顶同时位于高对称点  $\Gamma$  点处,从而使 4H—SiC 变为直接带隙的晶体了。

### 2.3.3 价带顶能量与导带底能量随电子温度 $T_e$ 的变化

在图 2 和图 3 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,计算了价带顶和导带底在电子温度  $T_e$  为  $0\text{eV} \sim 3.5\text{eV}$  范围内的 14 组能量值并作图,如图 4 所示。图 4 中粗实线表示的是价带顶能量随电子温度  $T_e$  的变化,细实线表示的是导带底能量随电子温度  $T_e$  的变化,费米能级设为  $0\text{eV}$ 。由图 4 可以看出:首先,当电子温度在  $0\text{eV} \sim 1.5\text{eV}$  范围内时,随电子温度升高,晶体价带顶能量相对费米能量朝低能量方向移动;当电子温度达到并超过  $1.5\text{eV}$

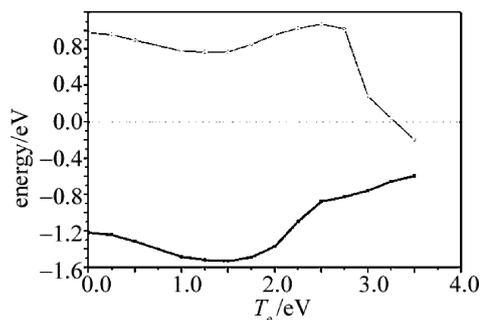


Fig. 4 The bottom of conduction band and the top of value band of 4H—SiC with the change of  $T_e$ .

后,晶体价带顶能量相对于费米能量随电子温度升高朝高能量方向迅速地上移并接近费米能级;其次,当电子温度  $T_e$  在  $0\text{eV} \sim 1.5\text{eV}$  范围内时,随电子温度升高,导带底的能量向低能量方向移动;当电子温度在  $1.5\text{eV} \sim 2.5\text{eV}$  范围内时,随电子温度升高,导带底的能量向高能量方向移动;当电子温度在  $2.5\text{eV} \sim 3.25\text{eV}$  范围内时,随电子温度升高,导带底的能量快速地降低;当电子温度  $T_e$  升高到  $3.5\text{eV}$  时,导带底的能级能量低于  $0\text{eV}$ ,费米能级穿越了导带底。

上述分析表明,当电子温度升高到达到  $3.5\text{eV}$  后,一是导带底的能级能量快速地降低到低于费米能级,二是价带顶的能级能量也较快地接近费米能级,从而使得价带内的电子更容易地激发到较低能量的导带中,导致导带内因有电子的出现使得晶体的导电性能增强而表现为金属特性。表明了  $4\text{H-SiC}$  晶体在强激光的照射下,晶体的电子特性增强,晶体经历了一个熔化过程,过渡到金属状态,这与 WANG 等人<sup>[8]</sup>利用密度泛函从头计算的方法对闪锌矿结构的碲化铜半导体晶体的理论计算结果相似。

### 2.3.4 能带结构的禁带宽度随电子温度 $T_e$ 的变化

在图 4 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,二者之间的带隙值随电子温度  $T_e$  在  $0\text{eV} \sim 3.25\text{eV}$  范围内升高时发生变化。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 13 组带隙值作图,如图 5 所示。从图 5 中可以看出:带隙值随电子温度  $T_e$  在  $0\text{eV} \sim 2\text{eV}$  范围内增大而加大,当电子温度超过  $2.0\text{eV}$  以后,带隙值随电子温度升高而快速减少;并且还测试到当电子温度  $T_e = 3.5\text{eV}$  时,  $4\text{H-SiC}$  晶体由于导电能力增加而呈现出金属特性,带隙失去了意义,故在作图处理中不考虑电子温度超过  $3.25\text{eV}$  的部分。

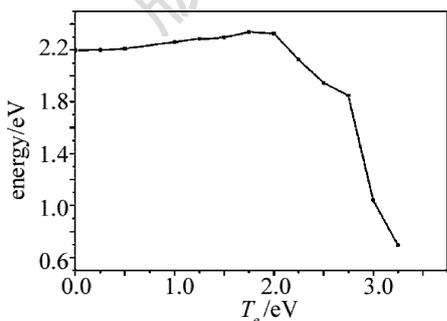


Fig. 5 Band gap of  $4\text{H-SiC}$  with the change of  $T_e$ .

2.3.5 电子态密度随电子温度  $T_e$  的变化 用强度达到电子温度为  $3.5\text{eV}$  的强激光照射  $4\text{H-SiC}$  晶体后,系统经历了一个熔化过程,过渡到金属状态,这种过渡表明,随电子温度  $T_e$  的增加,其总的电子态密度在发

生变化,如图 6 所示。分别给出了  $0\text{eV}$  和  $6.0\text{eV}$  两种电子温度下总的电子态密度图,费米能级设为  $0\text{eV}$ 。在  $T_e = 0\text{eV}$  时,电子态密度图显示  $4\text{H-SiC}$  晶体带隙值为  $2.2\text{eV}$ ;在  $T_e = 6.0\text{eV}$  时,电子态密度图显示  $4\text{H-SiC}$  晶体的费米能因缺少空带呈现出金属特性。这里,还分别计算  $4\text{H-SiC}$  晶体在  $T_e = 0\text{eV}$  和  $T_e = 6.0\text{eV}$  时的分波电子态密度,用以分析  $4\text{H-SiC}$  晶体在强激光辐照下电子态密度的变化。

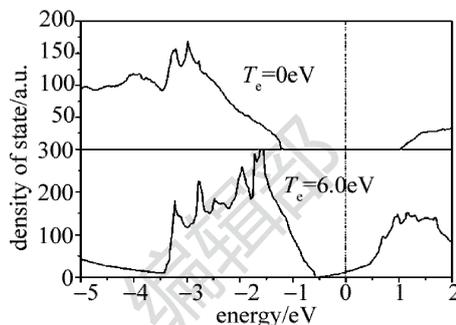


Fig. 6 Electron densities of states of  $4\text{H-SiC}$  crystal at electronic temperatures  $T_e = 0\text{eV}$  and  $T_e = 6.0\text{eV}$

图 7 中显示了晶体  $4\text{H-SiC}$  在  $T_e = 0\text{eV}$  时总的电子态密度和分波电子态密度分布情况。由图 7 可以看出,最高价带在  $-5\text{eV} \sim -1\text{eV}$ ,主要来自于 Si 的  $3\text{p}$  态和 C 的  $2\text{p}$  态的贡献,C 的  $2\text{s}$  态,C、Si 的  $3\text{d}$  态也有少许贡献。最低导带主要由 C 的  $2\text{s}$  态、Si 的  $3\text{d}$  态的贡献,C 的  $2\text{p}$ 、Si 的  $3\text{s}$  态贡献很小。 $4\text{H-SiC}$  晶体的电子总态密度显示带隙在  $T_e = 0\text{eV}$  时约为  $2.2\text{eV}$ 。

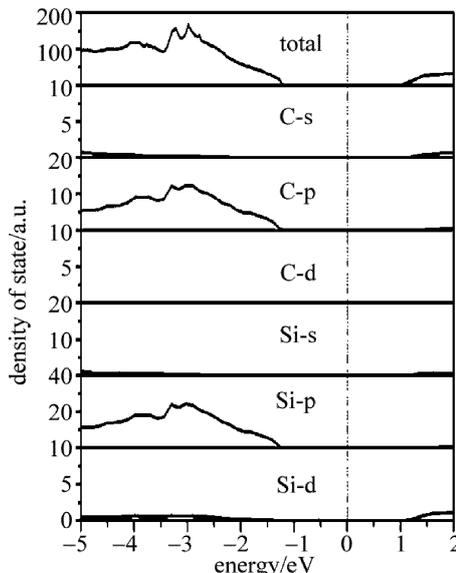


Fig. 7 Partial and total densities of states of  $4\text{H-SiC}$  at  $T_e = 0\text{eV}$

图 8 中显示了  $4\text{H-SiC}$  晶体在  $T_e = 6.0\text{eV}$  时的总电子态密度和分波电子态密度分布情况。由图 8 可以看出,介于  $-5\text{eV} \sim -3.5\text{eV}$  最低价带能量的贡献来源于 Si 的  $3\text{p}$  态和 C 的  $2\text{p}$  态,靠近费米能级的价带能量主要来自于 Si 的  $3\text{p}$  态和 C 的  $2\text{p}$  态的贡献。在  $T_e =$

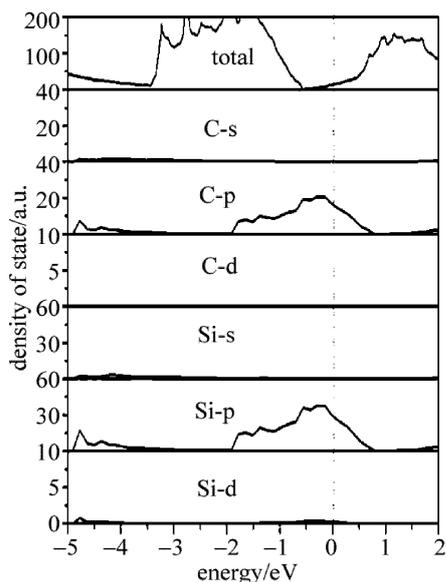


Fig. 8 Partial and total densities of states of 4H—SiC at  $T_e = 6.0\text{eV}$

6.0eV 时,电子态密度显示 4H—SiC 晶体带隙消失了,呈现出金属特性。表明当电子温度  $T_e$  升高到了一定强度时,4H—SiC 晶体因非热熔化过渡到金属状态。计算的结果也与强激光对 InSb<sup>[8,29]</sup>, Si<sup>[6-7]</sup>, GaAs<sup>[30]</sup> 超快作用研究的结果类似。

### 3 强激光作用后 4 种典型碳化硅晶体电学特性的对比

为了便于反映 4H—SiC 晶体在强激光照射下所表现的电子特性变化,将先前对多体型碳化硅晶体中的 3C—SiC 晶体、2H—SiC 晶体和 6H—SiC 晶体在强激光作用下的研究结果<sup>[31-33]</sup>与 4H—SiC 晶体的研究结果进行对比分析。下面主要从平衡晶格参量、价带顶与导带底参量变化、带隙值随电子温度的变化、电子温度为 0eV 时的带隙值大小、晶体结构类型的变化、呈现金属特性时的临界电子温度值等几个方面进行对比。

(1)在强激光作用下,3C—SiC 晶体,随电子温度  $T_e$  升高,平衡晶格参量  $a$  在逐渐增大;2H—SiC 晶体、4H—SiC 晶体和 6H—SiC 晶体随  $T_e$  升高,平衡晶格参量  $a$  和  $c$  分别也在逐渐增大。

(2)在强激光作用下,4 种晶体能带结构的价带顶与导带底能量随电子温度的升高在发生变化。3C—SiC 晶体,随  $T_e$  的升高,价带顶与导带底的能量先向低能量方向移动,后又向高能量方向移动;2H—SiC 晶体随  $T_e$  的升高,价带顶与导带底的能量先向低能量方向移动,后又向高能量方向移动,最后导带底能量朝低能量方向移动,而价带顶能量快速地升高并穿越费米能级能量;4H—SiC 晶体随  $T_e$  的升高,价带顶与导带底的能量先向低能量方向移动,后又向高能量方向

移动,最后导带底能量向低能量方面移动并穿越费米能级能量;6H—SiC 晶体随  $T_e$  的升高,价带顶与导带底的能量先向低能量方向移动,后二者又快速地向高能量方向移动,最后价带顶快速地穿越费米能级能量。

(3)4 种晶体的带隙值随电子温度的升高在发生变化。3C—SiC 晶体随  $T_e$  的升高其带隙值在逐渐增大, $T_e$  超过 5.1eV 后带隙消失;2H—SiC 晶体随  $T_e$  的升高其带隙值先是在逐渐增大,后又快速地降低,当  $T_e$  超过 3.5eV 后,带隙消失;4H—SiC 晶体带隙值随电子温度升高发生变化的情形同 2H—SiC 晶体一样;6H—SiC 晶体随  $T_e$  的升高,其带隙值先是在逐渐增大,后又快速地降低,当  $T_e$  超过 4.25eV 后,带隙消失。

(4)在电子温度为 0eV 时,3C—SiC 晶体带隙值是 1.31eV,2H—SiC 晶体带隙值是 2.298eV,4H—SiC 晶体带隙值是 2.1972eV,6H—SiC 晶体带隙值是 2.0616eV。

(5)随电子温度的升高,4 种晶体结构类型有发生改变。3C—SiC 晶体  $T_e$  在 0eV ~ 5.0eV 范围内升高时,仍是间接带隙的半导体晶体;2H—SiC 晶体当  $T_e$  在 0eV ~ 2.25eV 范围内升高时是间接带隙的半导体晶体,当  $T_e$  达到并超过 2.5eV 后转变为直接带隙的半导体晶体;4H—SiC 晶体当  $T_e$  在 0eV ~ 2.75eV 范围内升高时是间接带隙的半导体晶体,当  $T_e$  达到并超过 3.0eV 后转变为直接带隙的半导体晶体;6H—SiC 晶体当  $T_e$  在 0eV ~ 3.87eV 范围内升高时是间接带隙的半导体晶体,当  $T_e$  达到并超过 3.89eV 后转变为直接带隙的半导体晶体。

(6)3C—SiC 晶体当  $T_e > 5.1\text{eV}$  后,价带顶穿越费米能级,带隙消失而呈金属特性;2H—SiC 晶体当  $T_e > 3.5\text{eV}$  后,价带顶穿越费米能级,带隙消失而呈金属特性;4H—SiC 晶体当  $T_e > 3.5\text{eV}$  后,导带底穿越费米能级,带隙消失而呈金属特性;6H—SiC 晶体当  $T_e > 4.25\text{eV}$  后,价带顶穿越费米能级,带隙消失而呈金属特性。

### 4 结论

在强激光辐照作用下,检测到 4H—SiC 晶体的平衡晶格参量  $a$  和  $c$  被检测到随电子温度  $T_e$  的升高在逐渐增加。检测到 4H—SiC 晶体能带结构中导带底的位置由高对称点  $M$  点随电子温度的升高发生了移动,价带顶位置位于高对称点  $\Gamma$  点处但不随电子温度的升高而发生移动;当电子温度继续升高达到 3.0eV 及以上时,导带底又回到高对称点  $\Gamma$  点处,4H—SiC 晶体则由间接带隙晶体变成了直接带隙晶体。检测到 4H—SiC 晶体的导带底和价带顶能量相比于费米能级

能量随着电子温度的升高朝低能量或高能量方向发生了移动,4H—SiC 晶体的带隙值也发生了相应的变化;4H—SiC 晶体在电子温度超过 3.5eV 的强激光的照射下,晶体的电子特性增强,晶体经历了一个熔化过渡到金属状态。

## 参 考 文 献

- [1] van VECHTEN J A, TSU R, SARIS F W. Nonthermal pulsed laser annealing of Si plasma annealing[J]. *Physics Letters*, 1979, A74(6):422-426.
- [2] SHANK C V, YEN R, HIRLIMANN C. Time-resolved reflectivity measurements of femtosecond optical pulse induced phase transitions in silicon[J]. *Physical Review Letters*, 1983, 50(2):454-457.
- [3] SAETA P, WANG J, SIEGAL Y, *et al.* Ultrafast electronic disordering during femtosecond laser melting of GaAs[J]. *Physical Review Letters*, 1991, 67(8):1023-1026.
- [4] LARSSON J, HEIMANN P A, LINDENBERG A M, *et al.* Ultrafast structural changes measured by time-resolved X-ray diffraction[J]. *Applied Physics*, 1998, A66(6):587-591.
- [5] UTEZA O P, GAMALY E G, RODE A V, *et al.* Gallium transformation under femtosecond laser excitation: phase coexistence and incomplete melting[J]. *Physical Review*, 2004, B70(5):054108.
- [6] SILVESTRELLI P L, ALAVI A, PARRINELLO M, *et al.* Structural, dynamical, electronic, and bonding properties of laser-heated silicon: an ab initio molecular-dynamics study[J]. *Physical Review*, 1997, B56(8):3806-3812.
- [7] SILVESTRELLI P L, ALAVI A, PARRINELLO M, *et al.* Ab initio molecular dynamics simulation of laser melting of silicon[J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77(15):3149-3152.
- [8] WANG M M, GAO T, YU Y, *et al.* Effect of intense laser irradiation on the lattice stability of InSb[J]. *The European Physical Journal Applied Physics*, 2012, 57(1):10104.
- [9] DENG F M, GAO T, SHEN Y H, *et al.* Effect of intense laser irradiation on the structural stability of 3C-SiC[J]. *Acta Physica Sinica*, 2015, 64(4):046301 (in Chinese).
- [10] RECOULES V, CLÉROUIN J, ZÉRAH G, *et al.* Effect of intense laser irradiation on the lattice stability of semiconductors and metals[J]. *Physical Review Letters*, 2006, 96(5):055503.
- [11] ZIJLSTRA E S, WALKENHORST J, GILFERT C, *et al.* Ab initio description of the first stages of laser-induced ultra-fast nonthermal melting of InSb[J]. *Applied Physics*, 2008, B93(4):743-747.
- [12] SHEN Y H, GAO T, WANG M M. Effect of intense laser irradiation on the lattice stability of Cu and Ag[J]. *Computational Materials Science*, 2013, 77(3):372-376.
- [13] SHEN Y H, GAO T, WANG M M. Effect of intense laser irradiation on the lattice stability of Al<sub>2</sub>Au[J]. *Communication in Theoretical Physics*, 2013, 59(5):589-593.
- [14] MATSUNAMI H. Current SiC technology for power electronic devices beyond Si[J]. *Microelectronic Engineering*, 2006, 83(1):2-4.
- [15] WEITSEL C E. Silicon carbide high frequency devices[J]. *Materials Science Forum*, 1998, 264/268:907-912.
- [16] COSTA A K, CAMARGO J R S S. Amorphous SiC coatings for WC cutting tools[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2003, 163/164(2):176-180.
- [17] ROTTNER K, FRISCHHOLZ M, MYRTVEIT T, *et al.* SiC power devices for high voltage applications[J]. *Materials Science & Engineering*, 1999, 61/62(98):330-338.
- [18] ZHANG H P, QI R S, WANG D J, *et al.* Device structure and simulations of 4H—SiC TPJBS diode[J]. *Power Electronics*, 2011, 45(9):35-38 (in Chinese).
- [19] GAO D M, LU Q R, WEI Y B, *et al.* Minority carrier lifetime measurement for N-type 4H—SiC by means of the microwave photoconductivity decay method[J]. *Laser Technology*, 2011, 35(5):610-612 (in Chinese).
- [20] GAO D M, LU Q R, WEI Y B, *et al.* Study on minority carrier lifetime of P type 4H—SiC[J]. *China Measurement & Test*, 2012, 38(1):19-21 (in Chinese).
- [21] JIANG Z Y, XU X H, WU H S, *et al.* Studies on the geometric and electronic structure of SiC polytypes [J]. *Acta Physica Sinica*, 2002, 51(7):1586-1590 (in Chinese).
- [22] TROULLIER N, MARTINS J L. A straightforward method for generating soft transferable pseudopotentials[J]. *Solid State Communications*, 1990, 74(7):613-616.
- [23] GONZE X, BEUKEN J M, CARACAS R, *et al.* First-principles computation of material properties: the ABINIT software project[J]. *Computational Materials Science*, 2002, 25(3):478-492.
- [24] CAMP P E, DOREN V, DEVREESE J T. First principles calculation of the pressure coefficient of the indirect band gap and of the charge density of C and Si[J]. *Physical Review*, 1986, B34(9):1314-1316.
- [25] FENG S Q, ZHAO J L, CHENG X L. A first principles study of the lattice stability of diamond-structure semiconductors under intense laser irradiation[J]. *Applied Physics*, 2013, J113(2):023301.
- [26] THOMPSON M O, GALVIN G J, MAYER J W, *et al.* Melting temperature and explosive crystallization of amorphous silicon during pulsed laser irradiation [J]. *Physical Review Letters*, 1984, 52(26):2360-2363.
- [27] POATE J M, BROWN W L. Laser annealing of silicon[J]. *Physics Today*, 1982, 35(6):24-30.
- [28] LIU Z L. Advantage and development foreground of SiC power semiconductor devices[J]. *Power Electronics*, 2009(6):10-13 (in Chinese).
- [29] GROMOV G G, KAPAEV V V, KOPAEV Y V. Semiconductor-metal phase transition induced in InSb by a strong electromagnetic field[J]. *Zhurnal Eksperimental'noi Teoreticheskoi Fiziki*, 1988, 94(12):101-113.
- [30] SOKOLOWSKI-TINTEN K, BIALKOWSKI J, VON DER LINDE D. Ultrafast laser-induced order-disorder transitions in semiconductors [J]. *Physical Review*, 1995, B51(20):14186.
- [31] DENG F M, GAO T. Effect of intense laser irradiation on the electronic properties of 3C-SiC[J]. *Chemical Research and Application*, 2016, 28(5):681-687 (in Chinese).
- [32] DENG F M. Effect of intense laser irradiation on the electronic properties of 2H-SiC[J]. *Acta Physica Sinica*, 2015, 64(22):227101 (in Chinese).
- [33] DENG F M. Effect of intense laser irradiation on the electronic properties of 6H-SiC[J]. *Acta Physica Sinica*, 2016, 65(10):107101 (in Chinese).