

УДК 621.315.592

DOI: 10.21779/2542-0321-2020-35-3-71-74

М.Ш. Абдулвагабов¹, А.К. Рабазанов^{1,2}

Расчет энергетической зонной структуры 3C–SiC

¹ Дагестанский государственный университет; Россия, 367001, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 43а;

² Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН; Россия, 367015, Республика Дагестан, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94; abdulmsh@mail.ru

Рассчитана зонная структура 3C–SiC по всей зоне Бриллюэна с использованием интерполяционной схемы, основанной на представлении зоны проводимости с помощью ортогонализованных плоских волн и *P*-зоны линейной комбинации атомных орбиталей. Коэффициент Фурье в разложении потенциала *S*-электронов учтены для первых четырех членов волнового вектора *k*, отвечающих первым векторам обратной решетки *K_i* (*i*=1, 2, 3, 4.). Введены факторы симметризации, плавно меняющиеся с изменением волнового вектора, чтобы в точках высокой симметрии и вдоль осей симметрии они давали правильные линейные комбинации плоских волн. Соответствующие матричным элементам двухцентровые интегралы, как интерполяционные параметры, выбирались методом подгонки в точках высокой симметрии из негибридизованных *S*- и *P*-уровней по оптическим переходам.

Ключевые слова: карбид кремния, зонная структура, зоны Бриллюэна.

Введение

К настоящему времени выполнено большое количество экспериментальных и теоретических исследований, посвященных политипизму в SiC [1, 2], однако структура энергетических зон политипов изучено относительно слабо. Прогресс в изучении оптических и электронных свойств, а также применение новых, более точных методов расчета позволяют значительно расширить понимание природы энергетической зонной структуры политипов SiC.

Выбор кубического карбида кремния в качестве объекта исследования зонной структуры был связан с рядом интересных свойств, отличающих его от других политипов, а также с тем, что 3C–SiC является основной структурой SiC, на базе которой происходит образование других политипов.

Расчет энергетической зонной структуры 3C–SiC

В связи с расхождениями между теоретическими расчетами и существующими экспериментальными данными представляется актуальным уточнение зонной структуры 3C–SiC по всей приведенной зоне Бриллюэна.

Для расчета зонной структуры 3C–SiC использовалась интерполяционная схема, предложенная для никеля [3]. Уравнение для собственных значений зонного гамильтониана имеет вид:

$$H\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_n(\vec{k})\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}).$$

Блоховские волновые функции $\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ состоят из суммы линейной комбинации четырех ортогонализованных плоских волн (ЛКОПВ) и линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО)

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{\vec{k}}^4 a_{n\vec{k}}(\vec{k}) b_{\vec{k}\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_{\mu=1}^3 a_{n\mu}(\vec{k}) b_{\vec{k}\mu}(\vec{r}).$$

Коэффициенты Фурье в разложении потенциала s -электронов учтены только для 4-х отдельных значений волнового вектора k , отвечающих первым векторам обратной решетки $K_i (i = 1, 2, 3, 4)$. Для того чтобы в точках высокой симметрии и вдоль осей симметрии, соединяющих эти точки, вклады в матричные элементы зонного гамильтониана давали только правильные линейные комбинации плоских волн, введены факторы симметризации, плавно меняющиеся с изменением волнового вектора.

Суммирование ведется по вектору обратной решетки K и по всем заполненным состояниям:

$$(K_1 = (0,0,0), K_2 = \frac{2\pi}{a}(0,\bar{2},0), K_3 = \frac{2\pi}{a}(\bar{1},\bar{1},\bar{1}) \text{ и } K_4 = \frac{2\pi}{a}(\bar{1},\bar{1},1)).$$

Зонный гамильтониан, имеющий размерность 7×7 , состоял из $S-S$, $P-P$ и $S-P$ гибридизационных блоков. Метрические элементы псевдопотенциала поля ионов берутся из вычисленных Ли Хуаном и др. [4–6] параметров сильной связи Слэтера-Костера зонного гамильтониана кубической решетки с учетом кристаллической структуры (структурой сфалерита). Соответствующие матричным элементам двухцентровые интегралы, как интерполяционные параметры, выбирались методом подгонки в точках высокой симметрии из негибридизованных S - и P -уровней по оптическим переходам [2, 8].

$$\begin{aligned} E(X_{1c} - \Gamma_{15v}) &= 2,4 \text{ эВ}, & E(\Gamma_{15v} - X_{5v}) &= 3,4 \text{ эВ}, & E(\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}) &= 4,1 \text{ эВ} \\ E(L_{1c} - \Gamma_{15v}) &= 3,4 \text{ эВ}, & E(X_{1c} - X_{3v}) &= 10 \text{ эВ}, & E(L_{1c} - L_{3v}) &= 4,6 \text{ эВ}. \end{aligned}$$

Секулярное уравнение решали численным моделированием в 1/48 части зоны Бриллюэна для области $k_y \geq k_x \geq k_z \geq 0$.

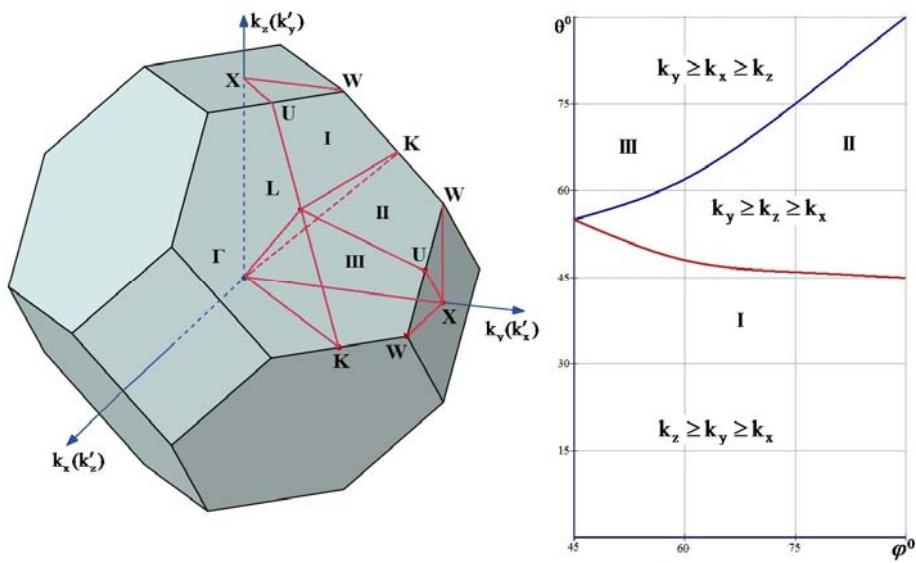


Рис. 1. 1/48 часть зоны Бриллюэна, интервалы изменения сферических углов

Пользуясь свойствами симметрии зоны Бриллюэна, определена связь волнового вектора и других параметров энергетической зонной структуры рассматриваемой 1/48

части с двумя соседними $1/48$ частями зоны Бриллюэна и восстановлена энергетическая зонная структура в интервале изменения сферических углов $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$, $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{4}$ (рис. 1).

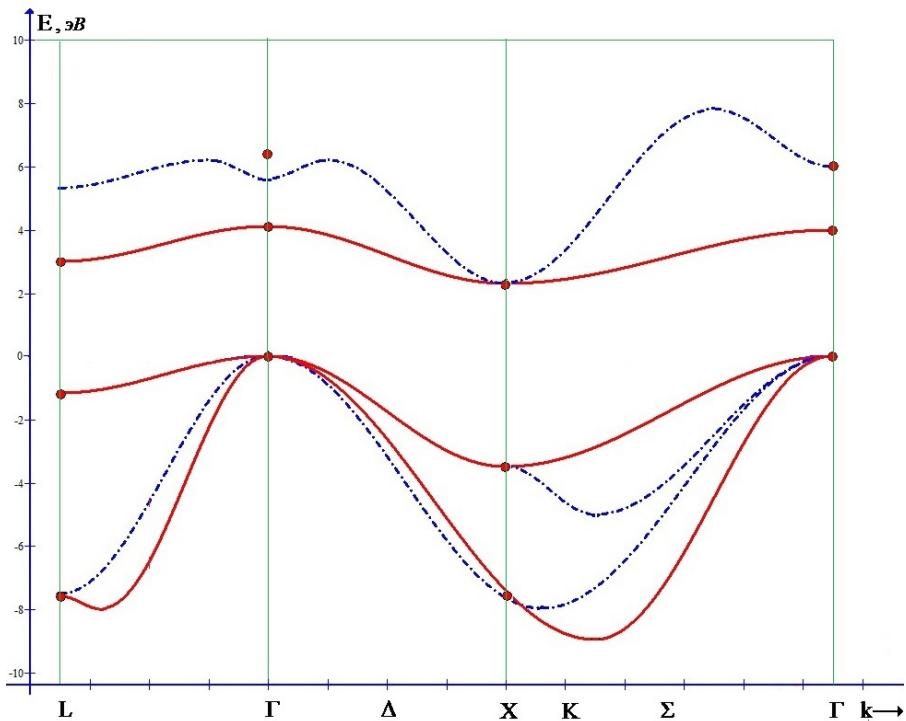


Рис. 2. Зонная структура 3C–SiC (пунктирные кривые из работы [12])

Рассчитанная зонная структура для кубического карбида кремния представлена на рис. 2. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными и теоретическими данными других авторов [6, 9–12].

Литература

1. Backes W.H., Bobbert P.A., and van Haeringen W. Energy-band structure of SiC polytypes by interface matching of electronic wave functions // Phys. Rev. B. – 1994. – Vol. 49. – P. 7564.
2. Соболев В.В. Структура зон карбида кремния // Изв. АН СССР. – 1970. – Т. 6. – С. 2073.
3. Абдурахманов А.А., Гаврилов Э.С., Расулов А.Р. Интерполяционная модель аномального эффекта Нернста–Эттингсгаузена энергетической зонной структуры ферромагнитного никеля // Известия вузов МВ и ССО СССР. Физика. – 1984. – № 6. – С. 78–83.
4. Slater J.C. and Koster G.F. Simplified LCAO method for the periodic potential problem // Phys. Rev. – 1954. – Vol. 94, №. 6. – P. 1498–1524.
5. Didier Ch., Noboru O. Single Crystals of Electronic Materials Growth and Properties // Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials. – 2019. – P. 129–179.
6. Абдулвагабов М.Ш., Загиров М.Ю. Расчет зонной структуры Si, C и 3C–SiC методом псевдопотенциала // Материалы XXVI Межд. научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов–2019». (МГУ, г. Москва. 8–12 апреля 2019 г.) – С. 40–41.

7. Ohfuti M., Ikeda M., Awano Y. and Yokoyama N. First-principles total-energy calculations of atomic and electronic structure in relaxed $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ // Phys. Rev. B. – 1999. – Vol. 60. – P. 13547.
8. Калашников А.В., Тучин А.В., Битюцкая Л.А. Электронная структура мультислойных аллотропов 2D-карбида кремния // Письма о материалах. – 2019. – Т. 9, № 2. – С. 173–178.
9. Poshakinskiy A.V. and Astakhov G.V. Optically detected spin-mechanical resonance in silicon carbide membranes // Phys. Rev. B. – 2019 – Vol. 100. – P.094104.
10. Fischer M., Sperlich A., Kraus H., Ohshima T., Astakhov G. V., and Dyakonov V. Highly Efficient Optical Pumping of Spin Defects in Silicon Carbide for Stimulated Microwave Emission // Phys. Rev. Applied. – 2018. – Vol. 9. – P. 054006.
11. Wang J., Zhou Y., Zhang X., Liu F., Li Y., Li K., Liu Z., Wang G. and Gao W. Efficient Generation of an Array of Single Silicon-Vacancy Defects in Silicon Carbide // Phys. Rev. Applied. – 2017. – Vol. 7. – P. 064021.
12. Г. Херман Ф., ван Дайк Дж.П., Кортум Р.Д. Электронная структура и оптический спектр карбида кремния // Карбид кремния / под ред. Хениша Г. и Роя Р. – М.: Мир, 1972. – С. 153–165.

Поступила в редакцию 24 февраля 2020 г.

UDC 621.315.592

DOI: 10.21779/2542-0321-2020-35-3-71-74

Calculation of the Energy Band Structure 3C–SiC

M.Sh. Abdulvagabov¹, A.K.Rabazanov^{1,2}

¹ Dagestan State University; Russia, 367000, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 43a;

² Institute of Physics of the Dagestan Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences; Russia, 367015, Makhachkala, M. Yaragskiy st., 94; abdulmsh@mail.ru

The band structure 3C–SiC is calculated over the entire Brillouin zone using an interpolation scheme based on the representation of the conduction band using orthogonalized plane waves and p -zone of the linear combination of atomic orbitals. The Fourier coefficient in the expansion of the S -electron potential is taken into account for the first four terms of the wave k vector corresponding to the first reciprocal lattice vectors $K_i (i=1, 2, 3, 4)$. Symmetrization factors have been introduced that smoothly vary with the wave vector, so that at points of high symmetry along the axis of symmetry they give the correct linear combinations of plane waves. Two-center integrals corresponding to the matrix elements, as interpolation parameters, were selected by fitting at high symmetry points from non-hybridized and optical transition S and P levels.

Keywords: *silicon carbide, band structure, Brillouin zones*.

Received 24 February 2020