

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ 2H-SiC

Синельник А.В., Семенов А.В.

*Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт»,
г. Харьков*

Карбид кремния (SiC) является одним из наиболее перспективных материалов для высокотемпературной, радиационно-стойкой, силовой и быстродействующей электроники, так как обладает уникальными физическими и электронными свойствами. SiC имеет множество структурных форм (известно более 260 политипов, теоретически неограниченно), среди которых наиболее распространенными и изученными являются 3C-SiC, 4H-SiC, 6H-SiC, 15R-SiC. Получение других политипов SiC, например, таких как 2H-SiC, затруднено, что связано с трудностью обеспечения устойчивых условий роста, исключающих рост более энергетически выгодных политипов (например, 3C-SiC, 4H-SiC, 6H-SiC). В связи с этим, в литературе практически отсутствуют данные экспериментальных исследований этого политипа SiC. Кроме того, существует довольно большой разброс в результатах теоретических исследований. Целью данной работы является теоретическое исследование энергетической структуры электронов в 2H-SiC. Расчеты энергетической структуры электронов производилось в рамках теории функционала плотности (DFT), используя программный пакет *exciting* [1]. В качестве волновых функций электронов используется приближение линейаризованных присоединенных плоских волн (LAPW) и локализованных орбиталей (LO) в качестве базисных функций. Обменно-корреляционная составляющая потенциала была выбрана в виде аппроксимации обобщенного градиента (GGA), используя функционал Perdew, Burke и Ernzerhof [2]. Так как в рамках LDA- и GGA- DFT не удается получить значения ширины запрещенной зоны, близкие к экспериментальным, был проведен расчет зонной структуры с использованием GW-аппроксимации собственной энергии электронов [3].

Расчет энергетической структуры электронов 2H-SiC производился самосогласованным образом, пока не было достигнуто условие сходимости: абсолютное изменение полной энергии и эффективного потенциала меньше 10^{-4} эВ на ячейку. Параметры решетки были взяты из результатов экспериментальных исследований [4]: $a = 3.07 \text{ \AA}$, $c = 5.05 \text{ \AA}$. Сравнение с результатами других исследований показывает хорошее сходство формы самих зон, но имеется смещение их вдоль оси энергии, которое больше в приближении GGA. Значение ширины запрещенной зоны по результатам наших расчетов равно $E_{gGGA} = 2.32 \text{ эВ}$, $E_{gGW} = 3.17 \text{ эВ}$. Сравнение с экспериментальным значением $E_g = 3.33 \text{ эВ}$ [4] позволяет говорить, что расширение метода DFT с использованием GW-аппроксимации дает хорошее сходство положения зон.

Литература:

1. A. Gulans, et al, *exciting* — a full-potential all-electron package implementing density-functional theory and many-body perturbation theory, J. Phys.: Condens. Matter 26, 363202 (2014).
2. K. Burke, et al, Atomic correlation energies and the generalized gradient approximation, arXiv:1409.4834v1 (2014).
3. L. Hedin, Phys. Rev. 139 (1965) A796.
4. Properties of Silicon Carbide, edited by G. L. Harris INSPEC, London, 1995.).