

Ge 掺杂 SiC 电学和光学特性的理论研究

臧源¹ 曹琳¹ 李连碧¹ 林涛¹ 杨霏²

¹西安理工大学电子工程系, 陕西 西安 710048

²国网智能电网研究院电工新材料及微电子研究所, 北京 102211

摘要 基于第一性原理的密度泛函理论(DFT)赝势平面波方法,对 Ge 掺杂($\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{C}$)的 6H-SiC 电学、光学特性进行了理论计算和分析。杂质形成能的计算结果表明,Ge 原子占据 Si 位后能量更低,更加稳定。通过对电子结构、态密度和光学性质的比较发现,6H-SiC 的价带顶主要由 C 的 2p 态占据,而导带底由 Si 的 3p 态占据。随着更多的 Ge 掺入,导带底位置逐渐由 Si 的 3p 态电子决定转变为 Ge 的 4p 态电子决定,同时导带底向低能方向移动,带隙变窄。比较介电常数发现,对 Ge 掺入最多的 $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$,其电子跃迁机理比 6H-SiC 简单,吸收边及最大吸收峰分别向低能方向红移了 0.9 eV 及 3.5 eV。

关键词 材料; 6H-SiC; Ge 掺杂; 第一性原理; 密度泛函理论

中图分类号 TN304.01

文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP52.061607

Theoretical Study of Electrical and Optical Properties of Ge-Doped 6H-SiC

Zang Yuan¹ Cao Lin¹ Li Lianbi¹ Lin Tao¹ Yang Fei²

¹Department of Electronic Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an, Shaanxi 710048, china

²Department of New Electrical Materials & Microelectronics, State Grid Smart Grid Research Institute, Beijing 102211, China

Abstract Electronic structure and optical properties of Ge-doped 6H-SiC ($\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{C}$) are calculated by ultra-soft pseudopotential technology of total energy-plane wave based on the density functional theory. The formation energy of impurities illustrates that Ge dopants prefer to occupy the substitutional Si sites for lower energy and more stable state. Analysis band structures, density of states and optoelectronic characteristics of 6H-SiC shows that the valence band maximum is determined by C-2p states and the conduction band minimum is occupied by the Si-3p orbital. With more Ge content is incorporated within the structure, the conduction band minimum of $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{C}$ has moved to lower energy and changes to be determined by Ge-4p states. Dielectric function illustrates that the electronic transition in $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$ which has a maximum Ge content is more simple than in 6H-SiC, and its absorption edge and peaks are red-shifted to lower energy by 0.9 eV and 3.5 eV, respectively.

Key words materials; 6H-SiC; Ge-doped; first principle; density functional theory

OCIS codes 000.3860; 160.4760; 230.4000

1 引言

SiC 作为一种宽禁带、高热导率半导体材料,其特有的性质使其非常适合制造耐高温的电力电子器件,可应用在硅器件难以胜任的特殊场合^[1-5]。随着 SiC 电力电子器件制作工艺的不断进步和材料成本的逐步降低,在突破其可靠性和性价比的瓶颈问题后, SiC 器件将会大量应用于军事和民用的各个领域。SiC 电力电子器件具有功率大、耐压高、抗辐照能力强、工作温度高等特性优势,不仅会显著改善舰艇、飞机、火箭及智

收稿日期: 2014-12-24; 收到修改稿日期: 2014-02-05; 网络出版日期: 2015-04-06

基金项目: 国家自然科学基金(51402230), 陕西省教育厅自然科学基金(14JK1302), 国家电网公司科技项目(5455DW140003, 5455DW130008), 北京市科技计划项目(D13110300190000)

作者简介: 臧源(1982—),男,硕士,讲师,主要从事新型半导体材料的制备和光控半导体器件的研制。

E-mail: zangyuan@xaut.edu.cn

能武器电磁炮等众多军用系统的性能,也将使民用混合动力车辆、列车牵引设备以及高压直流输电设备等受益匪浅,成为电力电子器件开发和应用的新的增长极。

但是 SiC 材料对大部分可见光及部分红外光不敏感,因此很难使用通用的光源实现对普通 SiC 功率器件的触发。1999 起, Katulka 等^[6]及 K.J.Roe 等^[7]报道了 Ge 离子注入 4H-SiC 形成 SiCGe 三元合金的电学和光学性质,由此获得的 SiC:Ge 材料相对于 SiC 材料在的禁带宽度上有了 100-400 meV 的窄化。2003 年,本课题组报道了以 4H-SiC 或 6H-SiC 为衬底, SiH₄、C₃H₈ 和 GeH₄ 分别作为 Si、C 和 Ge 原子的源气体,采用热壁 CVD 技术生长了 Ge_xSi_{1-x}C^[8-10]。不同于 Si 衬底上生长 Ge_xSi_{1-x}C,通过引入 C 组分来调节 SiGe 的晶格常数及能带结构^[11]。以 6H-SiC 为衬底生长 GeSiC 目的在于在保持主体材料 SiC 的晶体结构的前提下,通过掺入适当比例的 Ge 来调节 SiC 的禁带宽度以使其能够吸收可见光或近红外光,以此来开发抗电磁干扰能力很强的光控 SiC 电力电子器件。但是,锗掺杂碳化硅的相关理论研究较少, Morbec 等^[12]研究了 Ge 掺杂 SiC 后晶格结构的变化,但对掺杂后态密度的变化及杂质的形成能并没有涉及。

为了进一步研究锗掺入 6H-SiC 的能带、电子结构及介电常数的变化情况,并对 Ge_xSi_{1-x}C 外延层进行分析,本文利用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法,分析了锗(Ge)掺入 6H-SiC 的态密度和电子结构的关系,研究了掺杂浓度对其电子结构及光学性质的影响。

2 计算方法及模型

使用 Materials Studio 软件中的 cambridge sequential total energy package(CASTEP)模块^[13],其利用基于总能量的平面波赝势理论^[14-15],运用原子数目和种类来预测包括晶格参数、分子对称性、结构性质、能带结构、固态密度、电荷密度和波函数、光学性质。

计算使用的晶体结构由文献[16]给出,6H-SiC 为纤锌矿六方结构晶体,计算使用的晶格常数为: $a = 0.3079 \text{ nm}$, $c = 1.5109 \text{ nm}$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$ 。电子-电子相互作用的交换关联势由计入某处附近电荷密度对交换关联能影响的广义梯度近似(GGA)的 Perdow-Burke-Emzerhof(PBE)方法来处理^[17]。采用超软赝势来实现离子实和价电子之间的相互作用势,以减少平面波基矢的个数^[18]。设置平面波截断能量为 $E_{\text{cut}} = 280 \text{ eV}$,迭代过程中的收敛精度为 $1 \times 10^{-5} \text{ eV}$, k 网格点设置为 $9 \times 9 \times 2$,原子间的相互作用力最大为 0.03 eV/\AA ,晶体内应力收敛标准为 0.05 GPa ,原子的最大位移收敛标准为 0.001 \AA ,不考虑自旋耦合,选取的电子组态为 $\text{Si}3s^23p^2$ 、 $\text{C}2s^2p^2$ 、 $\text{Ge}4s^24p^2$ 。6H-SiC 晶体的超晶胞由 48 个原子组成,如图 1 所示,即在 6H-SiC 晶胞的 a, b 基矢量方向上分别扩展两个单位得到 $(2 \times 2 \times 1)$ 的 6H-SiC 超晶胞。

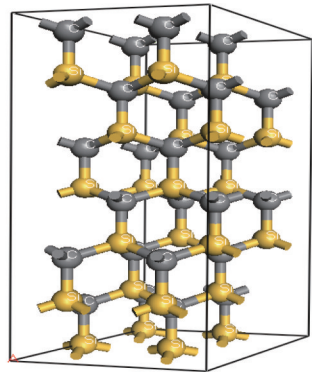


图 1 6H-SiC (2×2×1) 超晶胞
Fig.1 6H-SiC (2×2×1) super cell

3 结果与讨论

3.1 6H-SiC 的能带及电子结构

图 2 为根据图 1 的晶体结构计算出的 6H-SiC 能带结构图。由第一布里渊区能带分布图中高对称 K 点在价带顶 E_v 和导带底 E_c 的特征能量可以看出,6H-SiC 的能带在价带的 G 点得到最大值 0 eV ,导带的最小值为 2.052 eV ,出现在 M 点偏 L 点之间的位置,该结果与文献[19]的报道相同,6H-SiC 在价带的 G 点到导带的 M 点附近表现出间接带隙半导体的性质。计算的带隙宽度 $E_g = 2.052 \text{ eV}$ 低于实验得到的 3.0 eV ,由于理论模

型中激发态电子间的关联作用被低估,在广义梯度近似(GGA)与局域密度近似(LDA)的计算中均不同程度存在 E_g 计算值较实验值偏低^[20]。

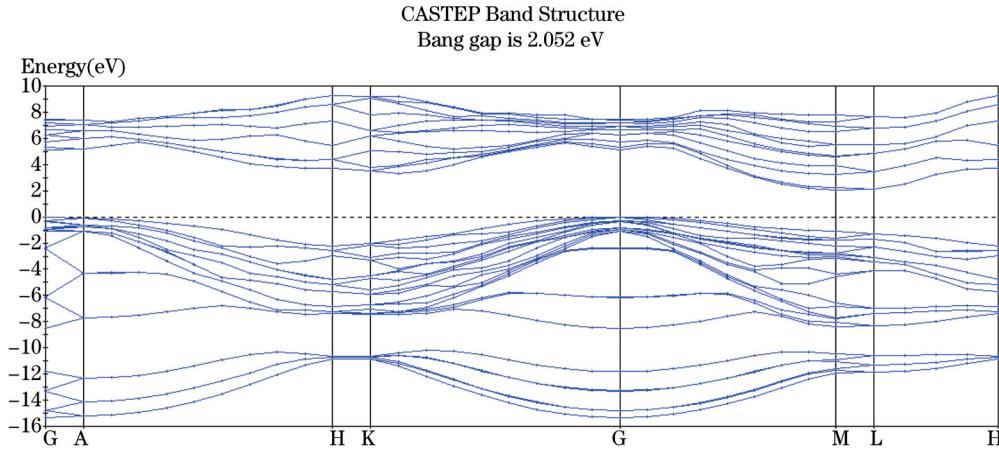


图2 6H-SiC 能带结构图

Fig.2 6H-SiC energy band structure

图3为在结构优化的基础上计算得到的6H-SiC总态密度(DOS)及分态密度(PDOS)与能量间的关系图。从中可以看出,价带部分由两部分组成,在电子能量较小的下价带范围(-16~-9.5 eV)内,6H-SiC的态密度主要由Si的3s态电子和C的2s态电子构成,其Si的3p及C的2p态电子也有较小的贡献;在-8~0 eV的能量较大的上价带范围内,态密度主要由Si的3p态电子和C的2p态电子构成,特别在-8~-6 eV的能量范围内,由Si的3s态电子及C的2p态电子构成了一个定域化很强的峰。对于导带部分,在2~10 eV的能量范围内,6H-SiC的态密度主要由Si的3s和3p态电子构成,C的2s和2p态也有较小的贡献。对于费米能级附近的态密度分布,可知6H-SiC的价带顶主要由C的2p态占据,而导带底由Si的3p态占据。

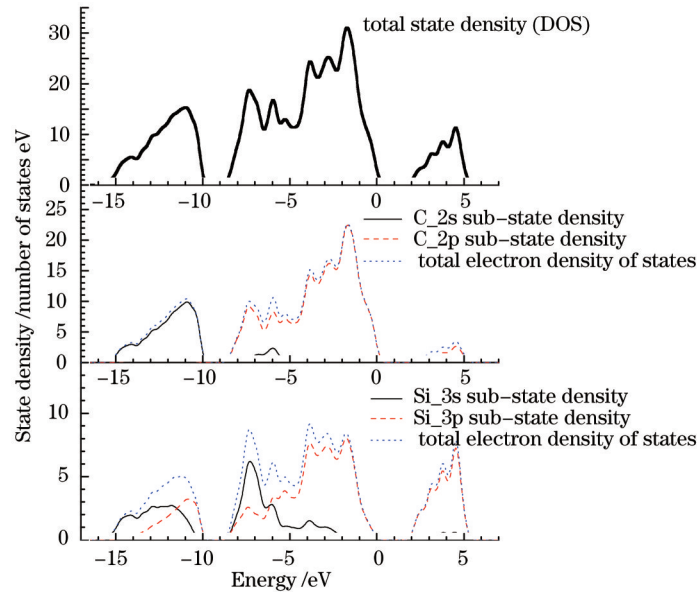


图3 6H-SiC的总态密度及分密度与能量间的关系图

Fig.3 Relationship between total-state density, sub-state density and energy in 6H-SiC

3.2 晶格常数及杂质形成能

根据第一性原理计算方法可知,6H-SiC中Ge杂质缺陷的形成能可用来计算分析Ge组分在半导体中的浓度及掺入位置。其相互关系满足:

$$c = N_{\text{sites}} \exp\left(-\frac{E^f}{KT}\right), \quad (1)$$

式中 c 为 Ge 在 6H-SiC 中的浓度, K 是 Boltzmann 常数, T 是温度, E^f 表示缺陷的形成能, N_{sites} 表示可能形成缺陷的数目。此外, E^f 满足:

$$nE_f^j = E^{\text{tot}}(\text{Ge}) - E^{\text{tot}}(0) + n\mu_{\text{C,Si}} - n\mu_{\text{Ge}} + qE_f, \quad (2)$$

式中 $E^{\text{tot}}(\text{Ge})$ 是 Ge 掺杂超晶胞计算得出的体系能量, $E^{\text{tot}}(0)$ 是不包括缺陷态的超晶胞能量, μ_{Ge} 与 $\mu_{\text{C,Si}}$ 是 Ge 及 C 或 Si 原子的化学势, n 是掺入 Ge 原子的数目, E_f 表示费米能级, 以价带顶作为参考点, q 表示电荷状态, 带正电荷 $q > 0$, 带负电荷 $q < 0$ ^[21]。

通过对体系结构优化及基态总能的计算结果表明, Ge 占据 Si 位时的形成能为 2.15 eV, 远远小于 Ge 占据 C 位时的形成能 9.36 eV。因此, Ge 掺入 SiC 时, 在不考虑间隙位的情况下, Ge 出现在 Si 位时的概率大, 能量低, 体系稳定。因此以下的计算都是按照 Ge 占据 Si 位来进行。

表 1 6H-SiC 及不同 Ge 组分 6H-SiC 的常用参数

Table 1 6H-SiC and different components of Ge commonly used parameters

	$a/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	$V/\text{\AA}^3$	E_g/eV	E^f/eV
6H-SiC	3.0901	15.1919	251.1346	2.052	0
Ge _{0.042} Si _{0.958} C	3.0969	15.2297	252.9669	2.005	2.15
Ge _{0.083} Si _{0.919} C	3.1036	15.2647	254.5688	1.923	2.17
Ge _{0.166} Si _{0.834} C	3.1176	15.3310	257.9009	1.862	2.15
Ge _{0.249} Si _{0.751} C	3.1304	15.3933	261.1873	1.797	2.14
Ge _{0.333} Si _{0.667} C	3.1432	15.4646	264.5989	1.774	2.13

表 1 为计算得到的 6H-SiC 及不同 Ge 组分 6H-SiC 的常用参数, 主要包括晶格常数 a 和 c 、体积、禁带宽度及杂质缺陷的形成能。由表 1 可以看出, 超晶胞结构优化后, 晶格常数 a 和 c 与实验数据^[19]相比分别增加 0.27% 及 0.50%, 这说明选取的参数及计算方法是可靠的。通常采用 GGA 方法计算得到的晶格常数和分子键长均稍有增加。同时, Ge 的掺杂使得超晶胞晶格常数及体积都有所增大, 成线性关系, 与使用 Vegard 定律计算结果基本相同。晶格常数的增大主要是由于 Ge(0.152 nm) 的原子半径要大于 Si(0.146 nm) 的晶格常数, 从而增大了晶格常数, 另一方面, 由于 Ge 的电负性相对 Si 较弱, 在置换 Si 原子后与 C 形成共价键时大部分电子局域在 C 原子上, 使得晶格常数增大。禁带宽度随掺杂浓度的升高而降低, 且计算结果与 Orner 等^[22]理论计算结果相似。此外, 从计算结果来看, 不同 Ge 掺入的 Ge_xSi_{1-x}C 的杂质缺陷形成能基本相同。

3.3 Ge 掺杂 6H-SiC 的电子结构

图 4 为 Ge_{0.333}Si_{0.667}C 的总态密度及分态密度与能量间的关系图。超晶胞在 Ge_{0.249}Si_{0.751}C 情况下, 其总态密度及分态密度与未掺杂的 6H-SiC 态密度分布情况基本相同, 对于 Ge 占据 Si 位的替位式掺杂, Ge(4s²4p²) 的价电子数与 Si(3s²3p²) 的价电子数目相同, 但由于 Ge 的电负性较 Si 小, 导致 Ge 替代 Si 位时导带底向低能方向移动, 价带顶位置不变, 禁带宽度变小。可以看出, 当 Ge 替代 Si 原子的数目增加时, 导带底位置逐渐由 Si 的 3p 态电子决定转变为 Ge 的 4p 态电子决定, 替代的数目越多, 变化越明显, 禁带宽度越小。

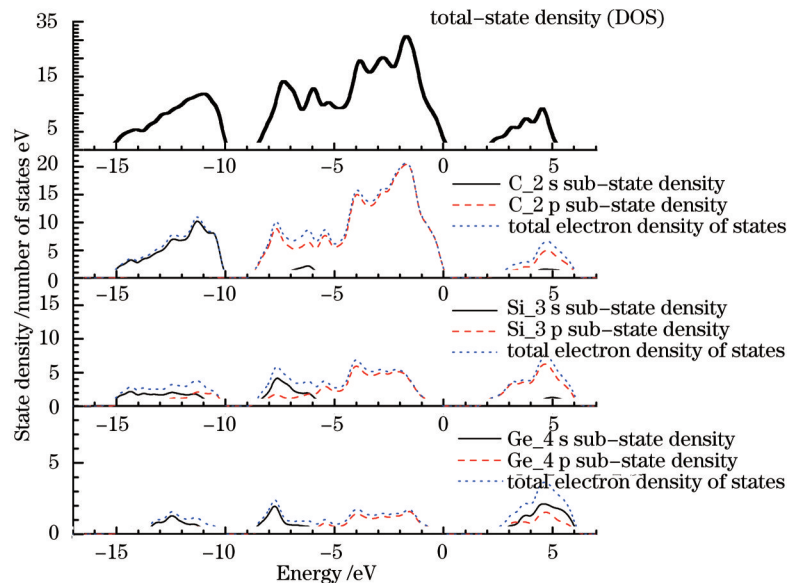


图 4 Ge_{0.333}Si_{0.667}C 的总态密度及分态密度与能量间的关系

Fig.4 Relationship between total-state density, sub-state density and energy in Ge_{0.333}Si_{0.667}C

3.4 6H-SiC 掺杂前后的光学特性

介电常数反映出固体能带结构及其它各种光谱信息。复介电常数满足：

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega), \quad (3)$$

式中实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 可以利用克拉默斯克勒尼希色散关系(K-K关系)求出^[10],其表达式满足：

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{8e^2\pi^2}{m^2} \sum_{\text{v,c}} \int_{\text{BZ}} d^3k \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{|e \cdot M_{\text{c,v}}(k)|^2}{[E_{\text{c}}(k) - E_{\text{v}}(k)]} \times \frac{h^3}{[E_{\text{c}}(k) - E_{\text{v}}(k)]^2 - \hbar^2\omega^2}, \quad (4)$$

由于使用的是单电子近似法,电子结构计算中无论是带间还是带内跃迁的频率都远大于声子频率,从量子力学的观点看,带间跃迁光吸收过程是电子在辐射电磁场微扰作用下从低能态跃迁到高能态的过程。从直接跃迁几率的定义可推导出固体介电常数虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 满足：

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{e^2\pi^2}{\varepsilon_0 m^2 (\omega - \Delta c/h)^2} \sum_{\text{v,c}} \left\{ \int_{\text{BZ}} \frac{2dk}{(2\pi)^3} |e \cdot M_{\text{c,v}}(k)|^2 \delta[E_{\text{c}}(k) + \Delta c/h - E_{\text{v}}(k) - \hbar\omega] \right\}, \quad (5)$$

式中C V分别表示导带和价带,BZ为第一布里渊区, k 为波矢, $|e \cdot M_{\text{c,v}}(k)|$ 为动量跃迁矩阵元, ω 为角频率, $E_{\text{c}}(k), E_{\text{v}}(k)$ 分别为导带和价带上的本征能级, Δc 为剪刀算符的偏移量。根据计算出的晶体的禁带宽度 E_{g} ,便可通过以上公式得到晶体的诸多光学参数,其中吸收系数满足：

$$I(\omega) = \sqrt{2}(\omega) \left[\sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 - \varepsilon_2(\omega)^2} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2}, \quad (6)$$

为了使光学性质的计算结果更符合实际情况,根据带隙的测量值与计算结果之差,计算中使用剪刀算符修正了 1 eV ^[23]。

图5为6H-SiC和 $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$ 的介电常数的实部与虚部。由介电常数的实部 ε_1 随光子能量变化的分布规律可知,6H-SiC和 $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$ 的静态介电常数分别为 $\varepsilon_0=5.79$ 及 $\varepsilon_0=4.58$ 。当光子能量等于 7.81 eV 或者 20.64 eV 时,6H-SiC的 $\varepsilon_1=0$;当光子能量等于 7.31 eV 或者 16.93 eV 时, $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$ 的 $\varepsilon_1=0$,此时介电常数 ε 完全由虚部 ε_2 决定 $\varepsilon(\varepsilon)=i\varepsilon_2(\varepsilon)$ 。6H-SiC及 $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$ 介电常数实部的最小值 -6.3 及 -8.9 分别出现在光子能量为 11.1 eV 及 7.9 eV 时。由于介电常数峰是固体电子在光电磁波场微扰作用下发生带间跃迁的宏观表现,对于介电常数虚部,可根据6H-SiC的能带结构、总态密度及各分态密度对图中标示的8个主要吸收峰进行解释,说明其跃迁机理。其中 $E_0 \sim E_5$ 为6H-SiC的介电常数的虚部 ε_2 随光子能量变化的分布规律,可以看出, E_0 峰 (4.59 eV) 吸收较弱,为价带顶到导带底的直接跃迁,来源于价带顶 $\text{C}_{2\text{p}}$ 与导带底 $\text{Si}_{3\text{p}}$ 两个轨道能级之间的跃迁;相邻的 E_1 峰 (6.94 eV) 吸收峰可以从C的分波态密度来分析,对应于 $\text{C}_{2\text{p}}$ 从上价带到导带的跃迁; E_2 峰 (7.75 eV) 是由上价带部分的 $\text{C}_{2\text{p}}$ 态和 $\text{Si}_{3\text{p}}$ 态向导带的跃迁导致; E_3 峰 (8.61 eV) 几乎全部来源于上价带 $\text{Si}_{3\text{s}}$ 态向导带的跃迁; E_4 峰 (10.07 eV) 及 E_5 峰 (10.75 eV) 对应的吸收峰来源于下价带 $\text{C}_{2\text{s}}$ 与 $\text{Si}_{3\text{p}}$ 轨道向导带的跃迁。对掺Ge后的 $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$,吸收峰值只出现了 E_6 峰 (4.78 eV) 及 E_7 峰 (7.25 eV) 两个峰,分别对应电子从价带顶向导带底的跃迁及价电子向导带的跃迁,介电常数虚部最大值向低能方向移动了 0.50 eV ,吸收边发生了红移,这和上面掺杂后禁带宽度变窄分析一致。以上结果与 Lindquist 等^[24]实验结果基本吻合。

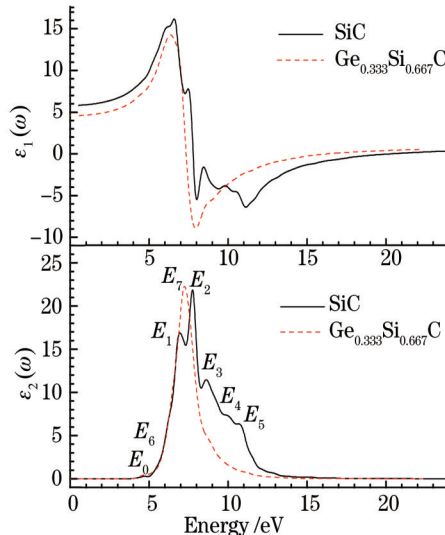


图5 6H-SiC和 $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$ 的介电常数的实部与虚部

图6为6H-SiC和 $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$ 的吸收光谱。对6H-SiC计算得出其吸收边的能量约为3.2 eV,大于剪刀算符修正后的禁带宽度3.027 eV,这是由于电子与光子的耦合会引起占据态和未占据态之间的跃迁,所以本征光学响应的起始点能量应大于或至少等于材料的禁带宽度。对照介电常数虚部曲线,其最大介电峰位于7.75 eV处,而最大吸收峰位于11.16 eV处,吸收峰向高能端发生了3.4 eV的偏移。对Ge掺入的 $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$,计算结果表明其吸收边向低能方向移动0.9 eV,且相比于6H-SiC,其最大吸收峰值为7.67 eV,向低能方向红移3.5 eV。

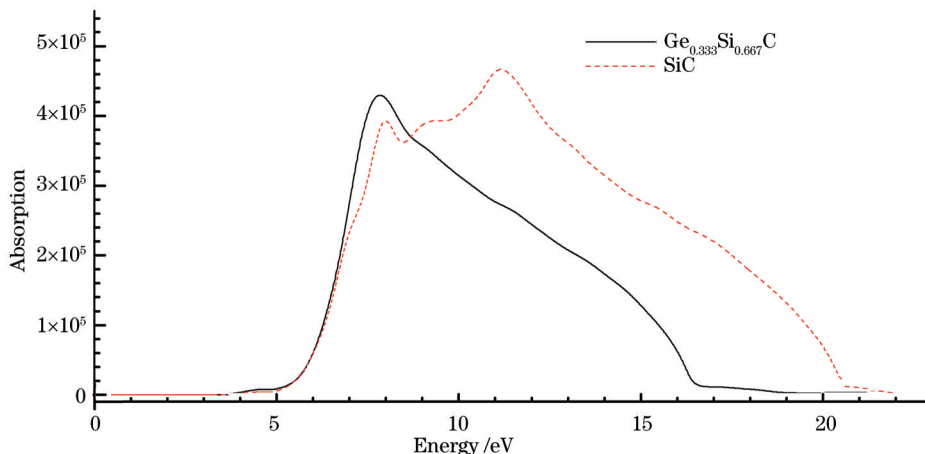


图6 6H-SiC和 $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$ 的吸收谱

Fig.6 Absorption spectrum in 6H-SiC and $\text{Ge}_{0.333}\text{Si}_{0.667}\text{C}$

4 结 论

采用了密度泛函理论GGA的超软赝势能带计算方法,研究了6H-SiC及Ge掺入6H-SiC的能带、电子结构及介电常数。计算结果表明,在Ge取代Si位的掺杂情况下, $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}\text{C}$ 的晶格常数,禁带宽度及吸收系数有明显的变化。掺杂使得原子半径的增加及电负性的减少使得Ge掺杂晶格常数增加,导带底由Si的3p态电子决定转变为Ge的4p态电子决定使得带隙变小,介电常数虚部的计算表明吸收边及吸收峰向低能方向移动,发生红移。

参 考 文 献

- 1 Liqiang Zhang, Zhuang Zhuo, Rusheng Wei, *et al.*. Wavelength tunable passively Q-switched Yb-doped double-clad fiber laser with graphene grown on SiC[J]. *Chin Opt Lett*, 2014, 12(2): 021405.
- 2 Zhou Guanggang, Lu Guiwu, Yu Yinghui, *et al.*. Calculation for linear and nonlinear optical properties of LBO crystals[J]. *Chinese J Lasers*, 2010, 37(5): 1342-1346.
周广刚, 卢贵武, 于迎辉, 等. LBO晶体线性和非线性光学性质的计算[J]. *中国激光*, 2010, 37(5): 1342-1346.
- 3 Zhang Feng. Combined type polishing of silicon modification layer on silicon carbide mirror for space camera[J]. *Chinese J Lasers*, 2013, 40(7): 0716001.
张 峰. 空间相机碳化硅反射镜表面硅改性层的组合式抛光[J]. *中国激光*, 2013, 40(7): 0716001.
- 4 Fan Di. Optimization of SiC mirror surface roughness[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2014, 51(9): 092206.
范 颖. 碳化硅反射镜表面粗糙度的优化[J]. *激光与光电子学进展*, 2014, 51(2): 092206.
- 5 Huang Huolin, Zhang Feng, Wu Zhengyun, *et al.*. Design and fabrication of $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ double-layer antireflection coatings on 4H-SiC substrate[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, 28(12): 2431-2435.
黄火林, 张 峰, 吴正云, 等. 4H-SiC基底 $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 双层减反射膜的设计和制备[J]. *光学学报*, 2008, 28(12): 2431-2435.
- 6 G Katulka, K Roe, J Kolodzey, *et al.*. The electrical characteristics of silicon carbide alloyed with germanium[J]. *Applied Surface Science*, 2001, 175-176(1): 505-511.
- 7 K J Roe, M W Dashiell, G Xuan, *et al.*. Ge incorporation in SiC and the effects on device performance[J]. *Proceedings of IEEE Lester Eastman Conference on High Performance Devices*, 2002, 6(8): 201-206.
- 8 Z Chen, H Pu, L Wo, *et al.*. Hetero-epitaxial growth of SiCGe on SiC[J]. *Microelectronic Engineering*, 2006, 1(83): 170-175.

- 9 L Li, Z Chen, J Li, *et al.*. Photoluminescence in SiCGe thin films grown on 6H-SiC[J]. *J Lumin*, 2010, 130(4): 587-590.
- 10 Zang Yuan, Li Lianbi, Lin Shenghuang, *et al.*. Ferromagnetism in etched aluminum-doped 6H-SiC[J]. *Research & Progress of SSE*, 2013, 33(5): 410-414.
臧源, 李连碧, 林生晃, 等. Al掺杂6H-SiC的铁磁性研究[J]. *固体电子学研究与进展*, 2013, 33(5): 411-414.
- 11 F Y Huang, K Sakamoto, K L Wang, *et al.*. Epitaxial SiGeC waveguide photodetector grown on Si substrate with response in the 1.3-1.55- μm wavelength range[J]. *IEEE Photonics Tech L*, 1997, 9(2): 229-231.
- 12 J M Morbec, R H Miwa. Ge adsorption on SiC(0001): an ab initio study[J]. *Surface Science*, 2006, 600(5): 1107-1112.
- 13 M D Segall, P J D Lindan, M J Probert, *et al.*. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code[J]. *J Phys: Condens Matter*, 2002, 14(11): 2717-2744.
- 14 N Troullier, J L Martins. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations[J]. *Physical Review B*, 1991, 43(3): 1993-2006.
- 15 G Kresse, J Furthmuller. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set [J]. *Physical Review B*, 1996, 54(16): 11169-11186.
- 16 A Taylor, D S Laidler. The formation and crystal structure of silicon carbide[J]. *British Journal of Applied Physics*, 1950, 1(7): 174-181.
- 17 M Maria. Electronic structure of several poly types of SiC: a study of band dispersion from a semi empirical approach [J]. *Physica B: Condensed Matter*, 2002, 324(1): 15-33.
- 18 D Vanderbilt. Soft self-consistent pseudopotentials in generalized eigenvalue formalism[J]. *Phys Rev B*, 1990, 41(1): 7892-7895.
- 19 W Y Ching, Y N Xu, P Rulis, *et al.*. The electronic structure and spectroscopic properties of 3C, 2H, 4H, 6H, 15R and 21R polymorphs of SiC[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2006, 422(1-2): 147-156.
- 20 Bi Yanjun, Guo Zhiyou, Sun Huiqing, *et al.*. The electronic structure and optical properties of Co and Mn codoped ZnO from first-principle study[J]. *Acta Physica sinica*, 2008, 57(12): 7800-7805.
毕艳军, 郭志友, 孙慧卿, 等. Co和Mn共掺杂ZnO电子结构和光学性质的第一性原理研究[J]. *物理学报*, 2008, 57(12): 7800-7805.
- 21 C G Van de Walle, J Neugebauer. First-principles calculations for defects and impurities: applications to III-nitrides[J]. *J Appl Phys*, 2004, 95(8): 3851-3879.
- 22 B A Orner, J Kolodzey. Si_{1-x}Ge_xC_y alloy band structures by linear combination of atomic orbital[J]. *J App Phys*, 1997, 81(10): 6773-6780.
- 23 O P A Lindquist, M Schubert, H Arwin, *et al.*. Infrared to vacuum ultraviolet optical properties of 3C, 4H and 6H silicon carbide measured by spectroscopic ellipsometry[J]. *Thin Solid Films*, 2004, 455(1): 235-238.
- 24 Chen Kun, Fan Guanghan, Zhang Yong, *et al.*. First principles study of In-N codoped ZnO[J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, 57(5): 3138-3147.
陈琨, 范广涵, 章勇, 等. In-N共掺杂ZnO第一性原理计算[J]. *物理学报*, 2008, 57(5): 3138-3147.

栏目编辑: 刘丰瑞