

مقاله نامه

هفتمین کنفرانس ماده چگال

انجمن فیزیک ایران



دانشگاه علم و صنعت ایران

تهران - ۶ و ۷ بهمن ۱۳۸۳

انجمن فیزیک ایران



محاسبه شبه پتانسیل ساختار نواری و پارامترهای جرم موثر GaN در فاز ورتسایت

رضائی، بهروز؛ کلافی، منوچهر

پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی، دانشگاه تبریز، تبریز

چکیده

ساختار نواری GaN در فاز ورتسایت به روش شبه پتانسیل تجربی (EPM) با در نظر گرفتن تفکیک اسپین - مدار محاسبه می شود. پاشندگی لبه نوار در نقطه Γ (مرکز ناحیه بریلوئن) که با استفاده از روش $k \cdot p$ بدست می آید، با تنظیم کردن پارامترهای جرم موثر به نتایج حاصل از روش EPM برازش می شود. بنابراین، با پارامترهای مهم ساختار نواری را بدست آوردیم که در مطالعه ساختار الکترونیکی و خواص فیزیکی آلیاژها و چاههای کوانتومی ساختارهای نامتجانس و مدل پدی ابزارهای نوری و الکترونیکی نیریدها مفید خواهند بود. محاسبات ما در توافق بسیار خوب با محاسبات دیگران است.

Band-structure pseudopotential calculation and effective-mass parameters of wurtzite GaN

Rezaei, Behrooz; Kalafi, Manoochehr

Research Institute for Applied physics and Astronomy, Tabriz Univ., Tabriz, Iran

Abstract

The band structure of wurtzite GaN is calculated by the empirical pseudopotential method (EPM) with spin - orbit splitting. Band edge dispersion at the Γ point (Center of Brillouin zone) obtained using the $k \cdot p$ method, is fitted to the results of EPM by adjusting the effective - mass parameters. Thus, we obtained important band structure parameters which will be useful for the study of the electronic structure and physical properties of alloys and quantum well heterostructures and the modeling of optical and electrical devices based on the nitrides. Our calculations are in excellent agreement with other calculations.

PACS : 71

نمونه

روش محاسبات

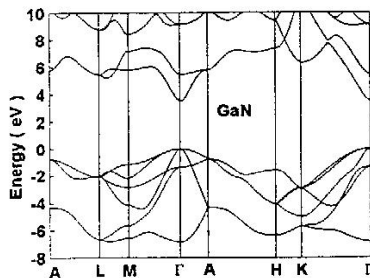
ساختار نواری بلور GaN در فاز ورتسایت^۵ به روش شبه پتانسیل تجربی محاسبه می شود و شکل زیر را برای عناصر ماتریسی هامیلتونین شبه پتانسیل در نظر می گیریم [۷]:

$$H_{GG}(k) = |k+G|^2 \delta_{GG} + V(G-G') \delta_{GG'} + H_{GG}^{so}(k) \quad (1)$$

در رابطه فوق جمله اول انرژی جنبشی، جمله دوم شبه پتانسیل و جمله سوم هامیلتونین اسپین - مدار است. G' و G بردارهای انتقال شبکه وارون و بردار k در ناحیه اول بریلوئن^۶ قرار می گیرد. این ماتریس باید بازای بردار معین k قطری گردد تا مقادیر ویژه مربوط به آن حاصل شود و چون روش ما یک روش حل عددی است، بایستی محدودیتهایی بر تعداد بردارهای G و k

در سالهای اخیر نیتريد های^۱ گروه-III (GaN, InN و AlN) به دلیل داشتن گاف نوار بزرگ، از پیشرفتهای ویژه GaN و AlN به دلیل داشتن گاف نوار بزرگ، از پیشرفتهای قابل ملاحظه ای در توسعه ابزارهای نوری و الکترونیکی مانند رانزیستورهای اثر میدان^۲، دیودهای گسیل نوری^۳ و دیودهای یزری^۴ که در محدوده طیفی ماوراء بنفش، آبی و سبز کار می کنند، برخوردار بوده اند [۱]. فعالیتهای تجربی الزام میدارد که مطالعات نظری بیشتری روی ساختار الکترونیکی این مواد با روشهای گوناگون صورت گیرد. لذا هدف از انجام این تحقیق محاسبه ساختار نواری GaN و پارامترهای جرم موثر آن می باشد. این پارامترها از جمله پارامترهای مهم ساختار نواری هستند که در طراحی و مدل بندی ابزارهای الکترونیکی و نوری نقش عمده ای دارند.

ساختار نواری GaN با استفاده از این ضرایب شکل بدون در نظر گرفتن اندرکنش اسپین - مدار در شکل (۱) نشان داده شده است



شکل ۱: ساختار نواری GaN بدون اندرکنش اسپین - مدار

برای عناصر ماتریسی هامیلتونین اسپین - مدار از شکل زیر استفاده شده است:

$$H_{GG'}^{ss}(\mathbf{k}) = (\mathbf{K} \times \mathbf{K}') \cdot \sigma_{ss} \{ -i\lambda^s S^s + \lambda^A S^A \} \quad (5)$$

که در آن $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ ، $\mathbf{K}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}'$ و σ_{ss} نیز حالت‌های اسپین پائولی هستند. λ^s و λ^A سهم‌های متقارن و پادمقارن اسپین - مدار بوده و بعنوان پارامترهای قابل تنظیم تفکیک اسپین - مدار هستند. ساختار نوار ظرفیت GaN مجاورت نقطه Γ با در نظر گرفتن اندرکنش اسپین - مدار به روش شبه پتانسیل محاسبه می شود. از طرفی می توان این ساختار نواری را با استفاده از روش $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [۳] که شامل یک ماتریس 8×8 با پارامترهای قابل تنظیم می باشد، نیز بدست آورد. پارامترهای موجود در ماتریس مزبور معروف به پارامترهای جرم موثر یا پارامترهای شبه لایتینگر^۹ هستند و با جفت کردن ساختار نواری حاصل از دو روش فوق این پارامترها معین شده و در جدول (۲) نشان داده شده اند.

با استفاده از پارامترهای جرم موثر، ساختار نوارهای ظرفیت همراه با ساختار نواری محاسبه شده به روش شبه پتانسیل در شکل (۲) نشان داده شده است.

جدول ۲: پارامترهای جرم موثر GaN و مقایسه آن با نتایج مرجع [۴]

در داخل پرانتز						
A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7
-۷/۲۲	-۵/۱	۶/۵۳	-۲/۸	-۲/۶۵	-۳/۵۴	۰
(-۷/۲۴)	(-۴/۹)	(۶/۶)	(-۲/۸۵)	(-۲/۷)	(-۳/۵۸)	(۰)

اعمال کرد. بدین صورت که یک انرژی قطع مانند E_1 تعریف کرده و شرط زیر را در نظر می گیریم:

$$|\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \leq E_1 \quad (2)$$

بدین ترتیب فقط بردارهای $\mathbf{G}$ درون کره ای به شعاع E_1 وارد محاسبات می شوند. برای عناصر ماتریس شبه پتانسیل از شکل زیر استفاده شده است:

$$V(\mathbf{G} - \mathbf{G}') = V^S S^S(\mathbf{G} - \mathbf{G}') + iV^A S^A(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \quad (3)$$

S^S و S^A به ترتیب ضرایب ساختاری^۷ متقارن و پادمقارن بوده و به شکل زیر تعریف می شوند:

$$S^S(\mathbf{G}) = \cos \left[\mathbf{G} \cdot \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \right] \cos \left[\mathbf{G} \cdot \left(\frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{2} \right) \right]$$

$$S^A(\mathbf{G}) = \cos \left[\mathbf{G} \cdot \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \right] \sin \left[\mathbf{G} \cdot \left(\frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{2} \right) \right] \quad (4)$$

که در آن $\mathbf{r}_1$ و $\mathbf{r}_2$ مشخص کننده موقعیت اتمها در پایه می باشند. V^S و V^A به ترتیب ضرایب شکل^۸ متقارن و پادمقارن بوده و بعنوان پارامترهای قابل تنظیم هستند. مقادیر عددی این پارامترها در حالت بدون اندرکنش اسپین - مدار طوری تنظیم شده اند که نتایج درستی از مشخصات بلور مثل گاف نوار و غیره را در نقاط متقارن میدهند و در جدول (۱) نشان داده شده اند.

جدول ۱: ضرایب شکل GaN (در واحد ریدبرگ) و مقایسه آن با نتایج

مرجع [۴] در داخل پرانتز

$(\frac{a}{\pi})^2 \mathbf{G}^2$	V^S	V^A
۰	۰ (۰)	۰ (۰)
۳/۸	۰ (۰)	۰ (۰)
۱ ۱/۳	-۳۳۶۳ (-۳۴۸)	۰ (۰)
۱ ۱/۲	-۳۰۶ (-۳۷۱)	۲۵۰۱ (۲۷۶)
۱ ۱۷/۲۴	-۲۷۲۱ (-۲۸)	۲۴۱۳ (۲۲۵)
۲ ۵/۶	-۱۰۸۲۱ (-۱۰۵۳)	۱۹۳۹ (۱۱)
۳ ۳/۸	۰ (۰)	۰ (۰)
۴	۱۰۸۴ (۱۰۵۹)	۰ (۰)
۴ ۳/۸	۰ (۰)	۰ (۰)
۴ ۱۷/۲۴	۱۴۵۸ (۱۰۸۳)	۱۳۰۴ (۱۰۵۱)
۵ ۱/۳	۱۵۷۲ (۱۰۵۶)	۰ (۰)
۵ ۱/۲	۱۵۴۲ (۱۰۶۶)	۱۱۰۱ (۱۰۳۶)
۵ ۱۷/۲۴	۱۴۷۹ (۱۰۶۷)	۱۰۵۴ (۱۰۳۳)
۶	۱۳۳۴ (۰)	۱۰۹۷۸ (۱۰۶۵)
۶ ۵/۶	۱۰۸۶۵ (۱۰۲۱)	۱۰۸۱۹ (۱۰۰۵)
۷ ۱/۳	۱۰۵۹۴ (۰)	۱۰۷۲۶ (۰)

جدول ۳: جرمهای موثر الکترونها و حفره ها (برحسب جرم الکترون آزاد) و

مقایسه آن با نتایج مرجع [۴] در داخل پرانتز

$m_{hh}^{\parallel}$	$m_{lh}^{\parallel}$	$m_{so}^{\parallel}$	$m_c^{\parallel}$
۱/۴۵	۱/۴۵	۱/۴	۱/۶
(۱/۵۷)	(۱/۵۷)	(۱/۴)	(۱/۴)
$m_{hh}^{\perp}$	$m_{lh}^{\perp}$	$m_{so}^{\perp}$	$m_c^{\perp}$
۱/۵۲	۱/۱۷	۱/۹۶	۱/۱۵
(۱/۵۶)	(۱/۱۷)	(۲/۰۳)	(۱/۱۵)

(پارامتر ساختار $u=0.377$, $c=0.189 \text{ \AA}$, $a=3.19 \text{ \AA}$, $E_g=1.9 \text{ Ryd}$

داخلی)، $\lambda^s = 0.0002 \text{ Ryd}$ و $\lambda^a = 0.00019 \text{ Ryd}$

از پارامترهای زیر به روش شبه پتانسیل انجام شد: نتایج محاسبات نشان میدهد که GaN دارای گاف مستقیم $E_g=3.25 \text{ eV}$ است. روش شبه پتانسیل اطلاعاتی در مورد نوار رسانش فراهم می آورد. همچنین جرمهای موثر و پارامترهای $k.p$ از نتایج این روش بدست می آیند و توافق خوبی را در مقایسه با نتایج محاسبات دیگران نشان می دهند.

از نتایج محاسبات ملاحظه می شود که پائین ترین نوار رسانش دارای خاصیت ناهمسانگردی^{۱۱} کمی نسبت به جهتهای k است $(m_c^{\parallel} \cong m_c^{\perp})$. اما وابستگی به جهت جرمهای موثر حفره ها که در طراحی ابزارهایی مانند دیودهای لیزری مهم هستند، غیرقابل صرف نظر است.

مرجع ها

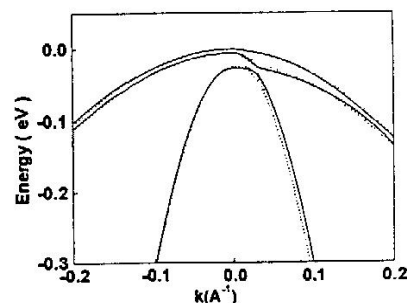
- [1] Nakamura, S.; "The blue laser Diod - GaN based light emitters and lasers"; Springer, Berlin (1997).
- [2] Chelikowsky, J. R., and Cohen, M.L.; "Non - local pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blend semiconductors"; *Phys. Rev. B* **14**, No. 2, (1976), 556-582.
- [3] Yeo, Y.C., Chong, T.C., and Li, M.F.; "Electronic band structures and effective - mass parameters of wurtzite GaN and InN"; *J. Appl. Phys.* **83**, (1998), 1429-1436.
- [4] Pugh, S.K., Dugdal, D.J., Brand, S., Abram, R.A.; " Electronic structure calculation on nitride semiconductors"; *Semicond. Sci. Tech.* **14**, (1999), 23-31
- [5] Fritsch, D., Schmidt, H., Grundmann, M.; "Band- Structure calculation of zinc - blen and wurtzite AlN, GaN, and InN"; *Phys. Rev.B* **67**, (2003), 235205-235217.

^۱ - Nitride ^۲ - Field effect transistor ^۳ - Light - emitting diods

^۴ - Laser diods ^۵ - Wurtzite ^۶ - Brillouin ^۷ - Structure factor

^۸ - Form factor ^۹ - Luttinger - Like ^{۱۰} - Parabolic fit

^{۱۱} - Anisotropy



شکل ۲: ساختار نوارهای ظرفیت بلور GaN در مجاورت نقطه Γ به روش

(...) EPM و (—) k.p

در روش $k.p$ برای ساختارهای ورتسایت، جرمهای موثر حفره ها طبق روابط زیر به پارامترهای جرم موثر A_i مربوط می شوند[۵]

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_{lh}^{\parallel}} &= -(A_1 + A_3) \\ \frac{1}{m_{lh}^{\perp}} &= -(A_1 + A_3) \\ \frac{1}{m_{so}^{\perp}} &= -A_1 \\ \frac{1}{m_{lh}^{\perp}} &= -(A_2 + A_4 - A_3) \\ \frac{1}{m_{lh}^{\perp}} &= -(A_2 + A_4 + A_3) - \frac{2A_7^2}{|\Delta_{cr}|} \\ \frac{1}{m_{so}^{\perp}} &= -A_2 + \frac{2A_7^2}{|\Delta_{cr}|} \end{aligned} \quad (6)$$

علازتهای $\perp$ ، $\parallel$ به ترتیب نمایانگر جهتهای عمود بر محور c بلور و موازی با آن است. Δ_{cr} شکافت میدان بلوری بوده و مقدار آن برابر 0.21 eV است. $m_{hh}^{\parallel}$ ، $m_{lh}^{\parallel}$ و $m_{so}^{\parallel}$ به ترتیب جرمهای حفره سنگین، سبک و تفکیک اسپین - مدار هستند. جرمهای موثر حفره ها با توجه به روابط فوق محاسبه شده و در جدول (۳) نشان داده شده اند. جرمهای موثر الکترونها نیز مستقیماً با استفاده از برازش سهوی^۱ به پاشندگی لبه نوار رسانش حاصل از روش شبه پتانسیل محاسبه شده و در جدول (۴) با m_c نشان داده شده است.

جه گیری

ساختار نواری بلور GaN در فاز ورتسایت با انتخاب مناسب