





دانشکده فیزیک

گرایش جامد

پایان نامه کارشناسی ارشد

عنوان

# مطالعه خواص الکترونی و اپتیکی GaN و آلیاژهای آن با استفاده از نظریه تابعی چگالی

نگارش

نرگس عرب حجی

استاد راهنما

دکتر طیبه مولاروی

استاد مشاور

دکتر فاطمه بدیعیان باغسیاهی

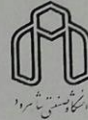
تیر ۱۳۹۶

ب

شماره:

تاریخ:

باسمه تعالی



مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۳) صور تجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و یاد خداوند متعال، ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خانم فرگس عرب حجی  
با شماره دانشجویی ۹۳۱۱۹۷۴ رشته فیزیک گرایش حالت جامد تحت  
عنوان .... مطالعه خواص الکترونی و اپتیکی GaN و آلیاژهای آن با استفاده از نظریه تابعی  
چگالی... که در تاریخ ۱۳۹۶/۴/۲۱ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار  
گردید به شرح ذیل اعلام می گردد:

قبول ( با امتیاز  $\geq 70\%$  درجه عالی )  مردود

نوع تحقیق: نظری  عملی

عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اول	دکتر طیبه مولاروی	استادیار	
۲- استاد راهنمای دوم	-	-	-
۳- استاد مشاور	دکتر فاطمه بدیعیان باغساهی	استادیار	
۴- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر محبتی هاشم زاده	استادیار	
۵- استاد ممتحن اول	دکتر مرتضی ایزدی فرد	دانشیار	
۶- استاد ممتحن دوم	دکتر مهدی انصاری راد	استادیار	

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده: دکتر مهدی مومنی

تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:

تبصره: در صورتی که کسی مردود شود حداکثر یکبار دیگر (در مدت مجاز تحصیل) می تواند از پایان نامه خود دفاع نماید (دفاع مجدد نباید زودتر از ۴ ماه برگزار شود).

تقدیم به مهربان فرشتگانی که:

لحظات ناب باور بودن، لذت و غرور دانستن، جسارت خواستن، عظمت رسیدن و تمام تجربه  
های یکتا و زیبای زندگی، مدیون حضور سبز آنهاست

تقدیم به خانواده عزیزم.

سپاس و ستایش مر خدای را جل و جلاله که آثار قدرت او بر چهره روز روشن، تابان است و انوار حکمت او در دل شب تار، درفشان. آفریدگاری که خویشتن را به ما شناساند و درهای علم را بر ما گشود و عمری و فرصتی عطا فرمود تا بدان، بنده ضعیف خویش را در طریق علم و معرفت بیازماید.

---

از استاد گرامیم سرکار خانم دکتر طیبه مولاروی بسیار سپاسگذارم چرا که بدون راهنماییهای ایشان تامین این پایان نامه بسیار مشکل مینمود.

همچنین از اساتید ارجمند، آقایان، دکتر مرتضی ایزدی فرد و دکتر مهدی انصاری راد که زحمت مطالعه و داوری این کار را متقبل شدند و نیز نماینده محترم تحصیلات تکمیلی، آقای دکتر مجتبی هاشم زاده کمال امتنان و سپاس را دارم. نیز بر خود لازم می دانم، از تمامی اساتید بزرگوار گروه فیزیک و تمام عزیزانی که در طی این دوره‌ی تحصیلی مرا تشویق و یاری نمودند تشکر و قدردانی نمایم.

نرگس عرب حجی - تیر ۱۳۹۶

## تعهد نامه

اینجانب نرگس عرب حجبی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک حالت جامد دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه:

مطالعه خواص الکترونی و اپتیکی GaN و آلیاژهای آن با استفاده از نظریه تابعی چگالی تحت راهنمایی خانم دکتر طیبه مولاروی و خانم دکتر فاطمه بدیعیان باغسیاهی متعهد می‌شوم

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه شاهرود » و یا « Shahrood University » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده ( یا بافتهای آنها ) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

تاریخ ۱۳۹۶/۴/۲۱

امضای دانشجو

### مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است ) متعلق به دانشگاه شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

## چکیده

گالیوم نیتراید (GaN) یکی از ترکیبات نیمرسانای گروه III-V می باشد. این ترکیب به دو شکل ورتسایت و زینک بلند وجود دارد. گاف نواری این ترکیب از نوع مستقیم می باشد. در فاز ورتسایت دارای گافی در حدود  $3/5\text{eV}$  و در فاز زینک بلند دارای گافی در حدود  $3/2\text{eV}$  می باشد. در این پژوهش ساختار الکترونی و خواص اپتیکی گالیوم نیتراید خالص و آرایش یافته با عناصر Al و In در دو فاز ورتسایت و زینک بلند بررسی شده است. محاسبات مربوط به ساختار خالص و آلیئده در هر دو فاز ورتسایت و زینک بلند با استفاده از رهیافت نظریه تابع چگالی (DFT) و تقریب چگالی موضعی (LDA) توسط کد محاسباتی SIESTA انجام شده است. در بررسی ساختار الکترونی نمونه، ساختار نواری و چگالی حالت های کلی و جزئی محاسبه شده است. مطالعه خواص اپتیکی نیز شامل بررسی تابع دی الکتریک، ضرایب شکست و خاموشی، بازتابندگی، ضریب جذب و رسانندگی اپتیکی می باشد. محاسبات مربوط به چگالی حالت ها و ساختار نواری نشان می دهد که آلیاژ  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  نیمرسانایی با گاف نواری مستقیم است. مقدار گاف نواری با افزایش غلظت ناخالصی بطور تقریبی در حال افزایش است. این افزایش در گاف نواری خود را در نمودار تابع دی الکتریک نیز به صورت جابجایی لبه جذب به سمت انرژی های بالاتر نشان می دهد. در نهایت ساختار الکترونی و خواص اپتیکی آلیاژ گالیوم نیتراید با ایندیوم در غلظت های  $0/0625$ ،  $0/125$ ،  $0/25$  و  $\text{InN}$  خالص بررسی شد. محاسبات مربوط به چگالی حالت ها و ساختار نواری نشان دادند که گالیوم نیتراید آرایش یافته با ناخالصی ایندیوم نیمرسانایی با گاف نواری مستقیم است. مقدار گاف نواری با افزایش غلظت ناخالصی ایندیوم کاهش یافته و خاصیت فلزی در ماده تشدید می شود و لذا رسانندگی افزایش می یابد.

کلمات کلیدی: گالیوم نیتراید (GaN)، نظریه تابع چگالی، کد SIESTA، خواص اپتیکی، ایندیوم گالیوم نیتراید، آلومنیوم گالیوم نیتراید.

1. N. Arabhajji, T. Movlaroooy, “**Electronic propertiec of Zinc-blend and Wurtzite structures of Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>N compound**”, Proceedings of 19th Iranian Physical Chemistry Conference 13-15 September 2016, Zibakenar, Iran.
2. N. Arabhajji, T. Movlaroooy, “**Optical properties of Indium doped Gan**”, Proceedings of 19th Iranian Physical Chemistry Conference 13-15 September 2016, Zibakenar, Iran.



# فهرست مطالب

ن	فهرست شکل ها.....
ر	فهرست جداول.....
۱	فصل اول: خواص کلی نیتراید ها.....
۲	۱-۱ مقدمه.....
۲	۲-۱ نیم رساناهای نیتروژندار.....
۴	۳-۱ ساختار کریستالی نیترایدها.....
۷	۴-۱ گالیوم نیتراید.....
۸	۱-۴-۱ ساختار بلوری.....
۱۱	۲-۴-۱ خواص ساختاری.....
۱۱	۵-۱ آلومینیوم نیتراید.....
۱۲	۱-۵-۱ ساختار بلوری.....
۱۳	۲-۵-۱ خواص ساختاری و الکترونی.....
۱۵	۳-۵-۱ خواص فیزیکی و عمومی.....
۱۵	۶-۱ ایندیوم نیتراید.....
۱۶	۱-۶-۱ ساختار بلوری و الکتریکی.....

۱۷	..... ۷-۱ آلیاژهای گالیوم نیتراید.
۱۸	..... ۱-۷-۱ آلیاژ AlGaN
۱۹	..... ۲-۷-۱ آلیاژ InGaN
۲۱	..... فصل دوم: مروری بر کارهای انجام شده.
۲۲	..... ۱-۲ مروری بر کارهای انجام شده بر روی گالیوم نیتراید.
۳۱	..... فصل سوم: خواص اپتیکی.
۳۲	..... ۱-۳ مقدمه.
۳۲	..... ۲-۳ تابع دی الکتریک مختلط $\epsilon(\omega, q)$ .
۳۵	..... ۳-۳ ضریب شکست و ضریب خاموشی.
۳۶	..... ۴-۳ بازتابندگی.
۳۷	..... ۵-۳ ضریب جذب.
۳۸	..... ۶-۳ رسانندگی اپتیکی.
۳۹	..... ۷-۳ رابطه کرامرز- کرونیک.
۴۳	..... فصل چهارم: نظریه تابع چگالی.
۴۴	..... ۱-۴ مقدمه.
۴۴	..... ۲-۴ نظریه تابعی چگالی.

۴۴	.....۱-۲-۴ مسئله بس ذره‌ای
۴۶	.....۲-۲-۴ نظریه هوهنبرگ - کوهن
۴۶	.....۳-۲-۴ معادلات کوهن-شم
۴۷	.....۴-۲-۴ تابعی‌های تبادلی-همبستگی
۴۸	.....۱-۴-۲-۴ تقریب چگالی موضعی (LDA)
۴۸	.....۲-۴-۲-۴ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)
۴۹	.....۵-۲-۴ روش‌های حل معادلات تک ذره‌ای کوهن-شم
۵۰	.....۳-۴ کد SIESTA
۵۰	.....۱-۳-۴ مجموعه پایه جایگزیده اوربیتال اتمی
۵۲	.....۲-۳-۴ شبه پتانسیل
۵۵	.....فصل پنجم: بررسی خواص الکتریکی و اپتیکی Gan و آلیاژهای آن
۵۶	.....۱-۵ مقدمه
۵۶	.....۲-۵ بهینه سازی پارامترها
۵۶	.....۱-۲-۵ انرژی قطع
۵۹	.....۲-۲-۵ بردار شبکه‌بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون
۶۰	.....۳-۲-۵ مجموعه پایه ها
۶۱	.....۳-۵ بهینه سازی ساختار

۴-۵	بررسی خواص الکترونی و اپتیکی گالیوم نیتراید خالص (Wz, Zb)	۶۲
۴-۵-۱	ساختار نواری	۶۲
۴-۵-۲	چگالی حالت های کلی (DOS) و جزئی (PDOS)	۶۴
۵-۵	بررسی کمیت های اپتیکی	۶۸
۵-۵-۱	تابع دی الکتریک	۶۸
۵-۵-۲	ضریب شکست و ضریب خاموشی	۷۰
۵-۵-۳	ضریب جذب	۷۳
۵-۵-۴	بازتابندگی	۷۴
۵-۵-۵	رسانندگی اپتیکی	۷۵
۵-۶	بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی گالیوم نیتراید آلائیده	۷۶
۵-۶-۱	محاسبات مربوط به نمونه های آرایش یافته با Al	۷۸
۵-۶-۱-۱	خواص الکترونی	۷۸
۵-۶-۱-۱-۱	ساختار نواری	۷۸
۵-۶-۱-۱-۲	ثابت های شبکه	۸۰
۵-۶-۱-۱-۳	محاسبه چگالی حالت های کلی و جزئی	۸۱
۵-۶-۱-۲	خواص اپتیکی	۸۶

- ۸۶.....۱-۲-۱-۶-۵ تابع دی الکتریک.....
- ۹۱.....۲-۲-۱-۶-۵ ضریب شکست و ضریب خاموشی.....
- ۹۵.....۳-۲-۱-۶-۵ ضریب جذب.....
- ۹۶.....۴-۲-۱-۶-۵ بازتابندگی.....
- ۹۸.....۵-۲-۱-۶-۵ رسانندگی اپتیکی.....
- ۹۹.....۲-۶-۵ محاسبات مربوط به نمونه های آلایش یافته با In.....
- ۹۹.....۱-۲-۶-۵ ساختار نواری.....
- ۱۰۱.....۲-۲-۶-۵ بررسی ثابت های شبکه.....
- ۱۰۲.....۳-۲-۶-۵ چگالی حالت های کلی و جزئی.....
- ۱۰۷.....۲-۶-۵ محاسبات خواص اپتیکی.....
- ۱۰۷.....۱-۲-۶-۵ تابع دی الکتریک.....
- ۱۱۱.....۲-۲-۶-۵ ضریب شکست و ضریب خاموشی.....
- ۱۱۳.....۳-۲-۶-۵ بازتابندگی.....
- ۱۱۵.....۴-۲-۶-۵ ضریب جذب.....
- ۱۱۶.....۵-۲-۶-۵ رسانندگی اپتیکی.....
- ۱۱۷.....۳-۶-۵ نتیجه گیری.....
- ۱۲۰.....منابع.....

## فهرست شکل ها

- شکل ۱-۱: نمودار گاف نواری برحسب پارامتر شبکه برای نیم رساناهای III-V ..... ۴
- شکل ۱-۲: ساختار بلوری نیم رساناهای نیتروژندار (الف) نمک طعام و (ب) زینک بلند و (ج) ورتسایت ..... ۵
- شکل (۱-۳): ساختار (a) ورتسایت و (b) زینک بلند ..... ۶
- شکل ۱-۴: تغییرات گاف نواری با ثابت شبکه برای ساختارهای ورتسایت و زینک بلند  
AlN, InN, GaN ..... ۷
- شکل ۱-۵: ساختار (الف) ورتسایت (ب) زینک- بلند گالیوم نیتراید ..... ۸
- شکل ۱-۶: (الف) ساختار شش گوشه ورتسایت که از دو زیر شبکه شش گوشه تشکیل شده است. بردارهای  $t_i$  بردار انتقال اولیه و نقاط اولیه و نقاط انتهایی بردارهای پایه ،  $d_i$  در شکل مشخص است. (ب) یک سلول واحد که از دو مولکول تشکیل شده است ..... ۱۳
- شکل (۱-۷): ساختار نواری AlN که با روش محاسباتی هارتری- فوک بدست آمده است ..... ۱۴
- شکل ۱-۸: ساختار شماتیک ایندیوم نیتراید ورتسایت و زینک بلند ..... ۱۶
- شکل ۱-۹: داده های تجربی گاف نواری  $Al_x Ga_{1-x} N$  ..... ۱۸
- شکل ۱-۱۰: نمودار تغییرات ثابت شبکه برحسب X، برای  $In_x Ga_{1-x} N$  ..... ۲۰
- شکل ۱-۲: تغییرات ضریب شکست AlGaN مکعبی و شش ضلعی برحسب تغییرات Al ..... ۲۳

- شکل ۲-۲: تغییرات گاف نواری AlGaN مکعبی به مقدار Al در دمای اتاق..... ۲۳
- شکل ۲-۳: تغییر گاف نواری با افزایش x در  $Al_{1-x}Ga_xN$  ( $0 < x < 1$ )..... ۲۴
- شکل ۲-۴: توابع دی الکتریک  $Al_{1-x}Ga_xN$  ( $0 < x < 1$ ) (رنگ سیاه مربوط به قسمت حقیقی و خط چین قسمت موهومی تابع را نشان می دهد)..... ۲۵
- شکل ۲-۵: تابع دی الکتریک وابسته به گاف نواری  $Al_{1-x}Ga_xN$  ( $0 < x < 1$ )..... ۲۵
- شکل ۲-۶: نمودار ضریب شکست  $Al_{1-x}Ga_xN$  ( $0 < x < 1$ ) (خط چین قسمت موهومی و رنگ سیاه قسمت حقیقی)..... ۲۶
- شکل ۲-۷: رابطه بین ضریب شکست استاتیک و گاف نواری  $Al_{1-x}Ga_xN$  ( $0 < x < 1$ )..... ۲۷
- شکل ۲-۸: مقادیر گاف نواری برای آلیاژهای  $Al_xGa_{1-x}N$  و  $In_xGa_{1-x}N$  ( $0 < x < 1$ )..... ۲۸
- شکل ۲-۹: ساختار نواری گالیوم نیتراید زینک بلند..... ۲۹
- شکل ۲-۱۰: تابع دی الکتریک گالیوم نیتراید..... ۳۰
- شکل ۲-۱۱: نمودار ضریب شکست و ضریب خاموشی گالیوم نیتراید..... ۳۰
- شکل ۳-۱: طرح واره ای از بازتابندگی امواج الکترومغناطیسی در برخورد قائم به فصل مشترک دو محیط..... ۳۷
- شکل ۵-۱: نمودار انرژی قطع برای GaN (خالص الف) ورتسایت و ب) زینک بلند..... ۵۸
- شکل ۵-۲: ساختار الف) ورتسایت ب) زینک- بلند گالیوم نیتراید..... ۵۸
- شکل ۵-۳: نمودار k-point برای GaN (خالص در دو فاز الف) wZ و ب) zb..... ۶۰

شکل ۵-۴: منطقه اول بریلوئن مربوط به ساختارهای بلوری زینک بلند و ورتسایت با نقاط با تقارن بالا.....۶۳

شکل ۵-۵: ساختار های نواری برای گالیوم نیتراید خالص . الف) ورتسایت-ب) زینک بلند.....۶۴

شکل ۵-۶: نمودار چگالی حالت های کلی مربوط به نمونه خالص GaN در فاز الف) ورتسایت و ب) زینک بلند.....۶۶

شکل ۵-۷: نمودار چگالی حالت های جزئی Ga و N در دو فاز خالص الف) ورتسایت ب) زینک بلند.....۶۷

شکل ۵-۸: بخش حقیقی تابع دی الکترونیک محاسبه شده برای گالیوم نیتراید خالص در فاز الف) WZ و ب) zb . در شکل الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد.....۷۰

شکل ۵-۹: بخش موهومی تابع دی الکترونیک گالیوم نیتراید خالص در فاز الف) WZ و ب) zb . در شکل الف) خط پر فاز ورتسایت، در راستای X و خط چین در راستای Z را نشان می دهد.....۷۰

شکل ۵-۱۰: ضریب شکست محاسبه شده برای گالیوم نیتراید خالص. الف) WZ و ب) zb . در شکل الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد.....۷۲

شکل ۵-۱۱: ضریب خاموشی محاسبه شده برای گالیوم نیتراید خالص. الف) WZ و ب) zb . در شکل الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد.....۷۳

شکل ۵-۱۲: نمودار ضریب جذب بر حسب تابعی از انرژی برای گالیوم نیتراید خالص ( الف ) WZ ، ب) zb . در شکل الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد.....۷۴



شکل ۵-۱۳: نمودار بازتابندگی  $R(\omega)$  بر حسب تابعی از انرژی محاسبه شده برای گالیوم نیتراید خالص (الف) WZ (ب) zb. در شکل (الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد..... ۷۵

شکل ۵-۱۴: نمودار رسانندگی اپتیکی محاسبه شده GaN خالص برای ساختارهای (الف) WZ (ب) zb. در شکل (الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد..... ۷۶

شکل ۵-۱۵: ساختار نواری  $Al_x Ga_{1-x} N$  برای ساختارهای (الف) WZ و (ب) zb..... ۷۹

شکل ۵-۱۶: نمودار تغییرات ثابت شبکه a و نسبت c/a در  $Al_x Ga_{1-x} N$ ..... ۸۱

شکل ۵-۱۷: نمودار چگالی حالت های کلی مربوط به نمونه آلیاژ  $Al_x Ga_{1-x} N$  در فاز (الف) ورتسایت و (ب) زینک بلند..... ۸۲

شکل ۵-۱۸: چگالی حالت های جزئی آلیاژ  $Al_x Ga_{1-x} N$  در فاز ورتسایت..... ۸۴

شکل ۵-۱۹: چگالی حالت های جزئی آلیاژ  $Al_x Ga_{1-x} N$  در فاز زینک بلند..... ۸۵

شکل ۵-۲۰: چگالی حالت های جزئی AlN خالص در دو فاز (الف) ورتسایت و (ب) زینک بلند..... ۸۵

شکل ۵-۲۱: قسمت حقیقی نمودار تابع دی الکتریک برای نمونه های  $Al_x Ga_{1-x} N$  برای ساختارهای (الف) WZ در راستای X و (ب) WZ در راستای Z و (ج) zb..... ۸۹

شکل ۵-۲۲: تغییرات ثابت دی الکتریک با گاف نواری نواری  $Al_x Ga_{1-x} N$  ( $0 < x < 1$ ) ساختار Zb..... ۸۹

شکل ۵-۲۳: قسمت موهومی نمودار تابع دی الکتریک برای نمونه های  $Al_x Ga_{1-x} N$  برای ساختارهای (الف) WZ در راستای X و (ب) WZ در راستای Z و (ج) zb..... ۹۰

شکل ۵-۲۴: نمودار ضریب شکست  $Al_x Ga_{1-x} N$  برای ساختارهای (الف) WZ در راستای X و (ب)

راستای Z و (ج) Zb ..... ۹۲

شکل ۵-۲۵: تغییرات ضریب شکست استاتیک با گاف نواری  $Al_x Ga_{1-x} N$  ( $0 < x < 1$ )

ساختار Zb ..... ۹۳

شکل ۵-۲۶: نمودار ضریب خاموشی  $Al_x Ga_{1-x} N$  برای ساختارهای (الف) WZ در راستای X و (ب)

راستای Z و (ج) Zb ..... ۹۴

شکل ۵-۲۷: نمودار جذب برای نمونه های  $Al_x Ga_{1-x} N$  برای ساختارهای (الف) WZ راستای X و

(ب) WZ راستای Z و (ج) Zb ..... ۹۶

شکل ۵-۲۸: نمودار بازتابندگی  $Al_x Ga_{1-x} N$  برای ساختارهای (الف) WZ راستای X و (ب) WZ

راستای Z و (ج) Zb ..... ۹۷

شکل ۵-۲۹: نمودار رسانندگی اپتیکی  $Al_x Ga_{1-x} N$  برای ساختارهای (الف) WZ راستای X و (ب) WZ

راستای Z و (ج) Zb ..... ۹۸

شکل ۵-۳۰: ساختار نواری محاسبه شده برای نمونه های آرایش یافته با In برای (الف) ساختار WZ

(ب) Zb ..... ۱۰۰

شکل ۵-۳۱: نمودار تغییرات ثابت شبکه a در  $In_x Ga_{1-x} N$  ساختار زینک بلند ..... ۱۰۲

شکل ۵-۳۲: چگالی حالت های کلی محاسبه شده برای نمونه های آرایش یافته با In برای ساختارهای

(الف) WZ (ب) Zb ..... ۱۰۳

شکل ۵-۳۳: چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای آلیاژ  $In_x Ga_{1-x} N$  برای ساختار

ورتسایت ..... ۱۰۴

شکل ۵-۳۴: چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای آلیاژ  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$  برای ساختار زینک

بلند..... ۱۰۵

شکل ۵-۳۵: چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای  $\text{InN}$  خالص برای دو فاز (الف) و (ب) ورتسایت (ب)

زینک بلند..... ۱۰۶

شکل ۵-۳۶: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک محاسبه شده برای آلیاژهای  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای

(الف) ساختار  $\text{WZ}$  راستای  $X$  و (ب) ساختار  $\text{WZ}$  راستای  $Z$  و (ج) ساختار  $\text{zb}$ ..... ۱۰۸

شکل ۵-۳۷: قسمت موهومی تابع دی الکتریک محاسبه شده برای آلیاژهای  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای

(الف) ساختار  $\text{WZ}$  راستای  $X$  و (ب) ساختار  $\text{WZ}$  راستای  $Z$  و (ج) ساختار  $\text{zb}$ ..... ۱۰۹

شکل ۵-۳۸: نمودار ضریب شکست نمونه  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای ساختارهای (الف)  $\text{WZ}$  راستای  $X$  (ب)

$\text{WZ}$  راستای  $Z$  (ج)  $\text{zb}$ ..... ۱۱۲

شکل ۵-۳۹: نمودار ضریب خاموشی نمونه  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای ساختارهای (الف)  $\text{WZ}$  راستای  $X$  (ب)

$\text{WZ}$  راستای  $Z$  (ج)  $\text{zb}$ ..... ۱۱۳

شکل ۵-۴۰: نمودار بازتابندگی برای نمونه های  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای ساختار های (الف)  $\text{WZ}$  در راستای

$X$ ، (ب)  $\text{WZ}$  در راستای  $Z$  و (ج)  $\text{zb}$ ..... ۱۱۴

شکل ۵-۴۱: نمودار ضریب جذب برای نمونه های  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  (د)  $0.25$ ، برای ساختارهای (الف)  $\text{WZ}$

در راستای  $X$  و (ب)  $\text{WZ}$  در راستای  $Z$  و (ج)  $\text{zb}$ ..... ۱۱۶

شکل ۵-۴۲: نمودار رسانندگی اپتیکی برای نمونه های  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای ساختارهای (الف)  $\text{WZ}$  در

راستای  $X$  و (ب) در راستای  $Z$  و (ج)  $\text{zb}$ ..... ۱۱۷

## فهرست جداول

- جدول ۱-۱: مقادیر برخی پارامترهای فاز ورتسایت GaN ..... ۱۰
- جدول ۱-۲: برخی پارامترهای اساسی ایندیوم نیتراید..... ۱۷
- جدول ۱-۵: مقادیر بدست آمده برای انرژی کل برحسب انرژی قطع برای GaN خالص در دو فاز ورتسایت و زینک بلند..... ۵۷
- جدول ۲-۵: انرژی کل برحسب تعداد نقاط K، برای GaN خالص در دو فاز ورتسایت و زینک بلند..... ۵۹
- جدول ۳-۵: پارامترهای ورودی محاسبات برای zb و wz ..... ۶۱
- جدول ۴-۵: گاف نواری گالیوم نیتراید در دو فاز ورتسایت و زینک بلند..... ۶۴
- جدول ۵-۵: مقایسه مقادیر ثابت دی الکتریک GaN خالص با دیگر کارها..... ۶۹
- جدول ۶-۵: مقادیر ضریب شکست GaN خالص..... ۷۲
- جدول ۷-۵: مقادیر گاف نواری محاسبه شده برای  $Al_x Ga_{1-x} N$  ..... ۷۹
- جدول ۸-۵: مقادیر ثابت شبکه ساختار ورتسایت  $Al_x Ga_{1-x} N$  ..... ۸۰
- جدول ۹-۵: مقادیر ثابت شبکه ساختار زینک بلند  $Al_x Ga_{1-x} N$  ..... ۸۰
- جدول ۱۰-۵: مقادیر ثابت دی الکتریک استاتیک  $\epsilon_1(\omega=0)$  محاسبه شده برای  $Al_x Ga_{1-x} N$  ..... ۸۸
- جدول ۱۱-۵: مقایسه مقادیر ثابت دی الکتریک استاتیک  $\epsilon_1(\omega=0)$  محاسبه شده برای  $Al_x Ga_{1-x} N$  ..... ۸۸
- جدول ۱۲-۵: گاف اپتیکی و گذارهای اپتیکی قسمت موهومی  $Al_x Ga_{1-x} N$  ورتسایت در راستای X ..... ۹۰
- جدول ۱۳-۵: گاف اپتیکی و گذارهای اپتیکی قسمت موهومی  $Al_x Ga_{1-x} N$  ورتسایت در راستای Z ..... ۹۱

- جدول ۵-۱۴: گاف اپتیکی و گذارهای اپتیکی قسمت موهومی  $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$  زینک بلند..... ۹۱
- جدول ۵-۱۵: مقادیر محاسبه شده ضریب شکست برای نمونه های  $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ ..... ۹۳
- جدول ۵-۱۶: مقدار انرژی ای که به ازای آن بیشینه بازتابندگی را برای آلیاژهای  $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$  داریم..... ۹۷
- جدول ۵-۱۷: مقادیر گاف نواری نمونه های گالیم نیتراید آلاییده با In در دو ساختار WZ و zb..... ۱۰۰
- جدول ۵-۱۸: مقادیر ثابت شبکه ساختار زینک بلند  $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ ..... ۱۰۱
- جدول ۵-۱۹: موقعیت قله های ظاهر شده در نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک آلیاژهای  $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x}$ ..... ۱۱۰
- جدول ۵-۲۰: ضرایب شکست GaN خالص و آلاییده با ایندیوم..... ۱۱۲
- جدول ۵-۲۱: مقدار بازتابندگی در انرژی صفر برای حالت خالص و آلاییده InGaN در ساختارهای مختلف..... ۱۱۵



# فصل اول

خواص کلی نیترایدها

## ۱-۱ مقدمه

نیم رساناها گروهی از مواد هستند که رسانایی الکتریکی آن ها بین فلزات و عایق ها قرار دارد. ویژگی مهم این مواد این است که رسانایی آن ها با تغییر دما و برانگیختگی نوری و میزان ناخالصی به میزان قابل ملاحظه ای تغییر می کند. از سال ۱۹۷۰ نیم رساناهای نیتروژندار به عنوان مواد نیم رسانای بسیار مفید در ساخت قطعات، به وسیله دیودهای نور گسیل معرفی شده اند. تهیه InN, GaN, AlN و ترکیبات آلیاژی سه تایی و چهارتایی از این مواد باعث پیشرفت های زیادی در علم حالت جامد شده است. الکترون گاتیوی بالا و شعاع کم نیتروژن در مقایسه با دیگر عناصر گروه پنجم، همچنین پیوند قوی با عناصر گروه سوم باعث ایجاد خواص جالبی در ترکیب نیتروژن با عناصر گروه سوم شده است [۱]. نیم رساناهای نیتراید III-N نظیر GaN، توجه دانشمندان را در دو بعد نظری و تجربی بخود جلب کرده است. این توجه به دلیل خواص الکترونی منحصر به فردشان مثل گاف نواری پهن و ثابت های دی الکتریک کوچک بوده که کاربردهای آنها را در قطعات اپتیکی، طول موج های آبی و ماورای بنفش و الکترونیک دماهای بالا فراهم کرده است. همچنین خواص مکانیکی جالب و شگفت انگیز آنها از قبیل نقطه ذوب بالا، سختی و مدول حجمی بزرگ، آنها را برای پوشش های محافظ مفید ساخته است. [۲-۶].

## ۱-۲ نیم رساناهای نیتروژندار

همانگونه که قبلا اشاره شد، ترکیب عناصر گروه سوم با نیتروژن، گروه ویژه ای از نیم رساناها را تحت عنوان نیم رساناهای نیتروژندار (III-نیتراید ها) به وجود آورده است. تفاوت اصلی میان III-نیتراید ها و سایر ترکیبات III-V مربوط به دو خاصیت کلی اتم نیتروژن می باشد. این دو ویژگی اندازه اتم N و ماهیت پیوند شیمیایی میان این اتم و اتم های گروه سوم می باشد. شعاع کووالانسی کوچک نیتروژن (در حدود  $0.7 \text{ \AA}$  در مقایسه با  $1.1 \text{ \AA}$  برای P و  $1.81 \text{ \AA}$  برای As و  $1.36 \text{ \AA}$  برای Sb) باعث کاهش چشمگیری در ثابت شبکه نیم رساناهای نیتروژندار نسبت به سایر ترکیبات III-V



(شکل ۱-۱) و در نتیجه، همانگونه که پروسکی<sup>۱</sup> و گرامچگوری<sup>۲</sup> در سال ۱۹۹۴ بیان داشتند، بوجود آمدن انرژی پیوندی بالا (۲/۲۸eV برای AlN، ۲/۲eV برای GaN و مقدار ۱/۹۳ eV برای InN) برای این ترکیبات شده است [۱]. این افزایش انرژی پیوندی باعث بالا رفتن دمای ذوب نیم رساناهای نیتروژندار می شود. گاف نواری در نیم رساناهای نیتروژندار مستقیم است، بنابراین گسیل نوار به نوار بدون هیچ فرایند فونونی صورت می گیرد. گاف نواری آنها بوسیله آلیاژ کردن این مواد با یکدیگر تا ۵/۵ eV تغییر می کند. در آلیاژ سه تایی  $Al_x Ga_{1-x} N$  گاف نواری با تغییر میزان AlN از ۰ تا ۱۰۰ در صد بین ۳/۴ eV تا ۶/۲ eV و گاف نواری  $In_x Ga_{1-x} N$  با تغییر میزان InN از ۰ تا ۱۰۰ در صد بین ۰/۷eV تا ۳/۴ eV تغییر می کند. گاف نواری نیم رساناهای نیتروژندار توسط قانون وگارد<sup>۳</sup> به صورت زیر محاسبه می شود:

$$E_g(AN)(1-x) + E_g(BN)x = E_g(ABN) \quad (1-1)$$

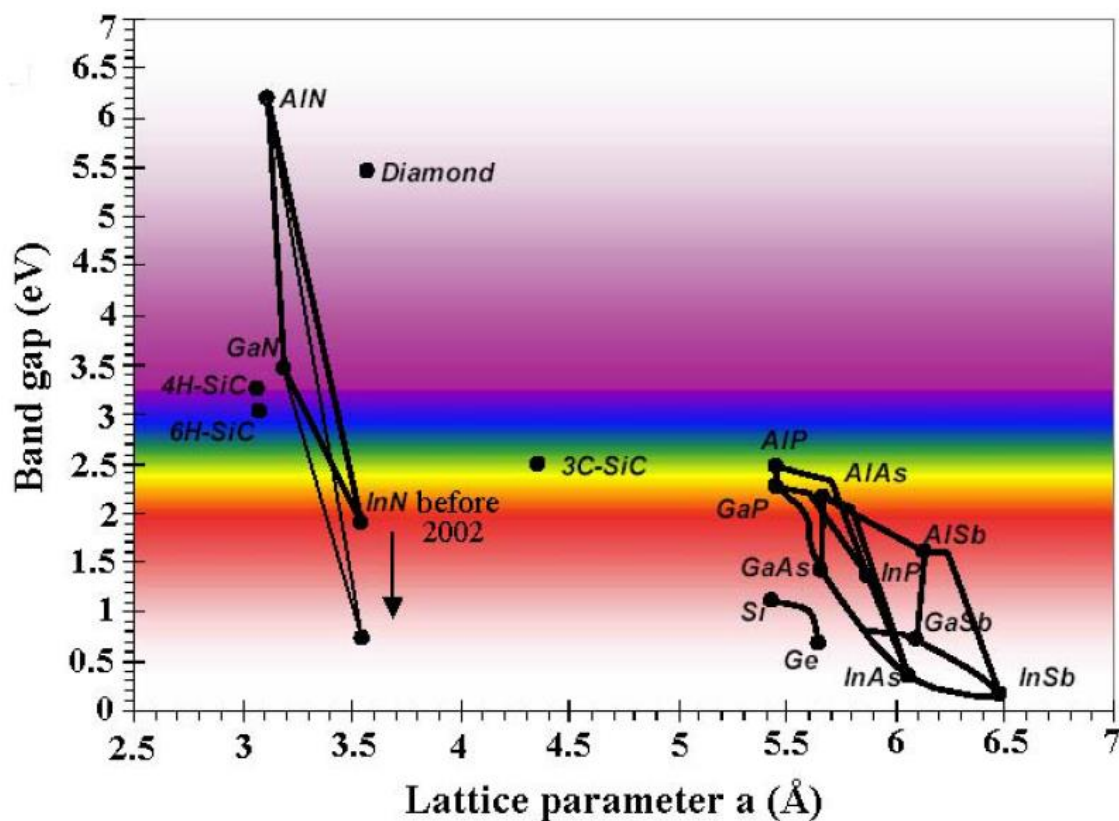
که در آن  $E_g(AN)$ ،  $E_g(BN)$  و  $E_g(ABN)$  به ترتیب نشان دهنده گاف نواری دو جزء سازنده آلیاژ و گاف نواری آلیاژ حاصل است. گاف نواری نیم رساناها به دما نیز وابسته است، که این وابستگی دمایی از رابطه وارشنی<sup>۴</sup> به صورت زیر محاسبه می شود:

$$E_g(T) = E_0 - \frac{\alpha T^2}{(T+\beta)} \quad (2-1)$$

که در آن، T دما بر حسب کلوین، E انرژی در دمای صفر مطلق و  $\alpha$  و  $\beta$  ثابت هستند.

---

<sup>1</sup>. Porowski  
<sup>2</sup>. Grzegory  
<sup>3</sup>. Vegard's Law  
<sup>4</sup>. Varshni

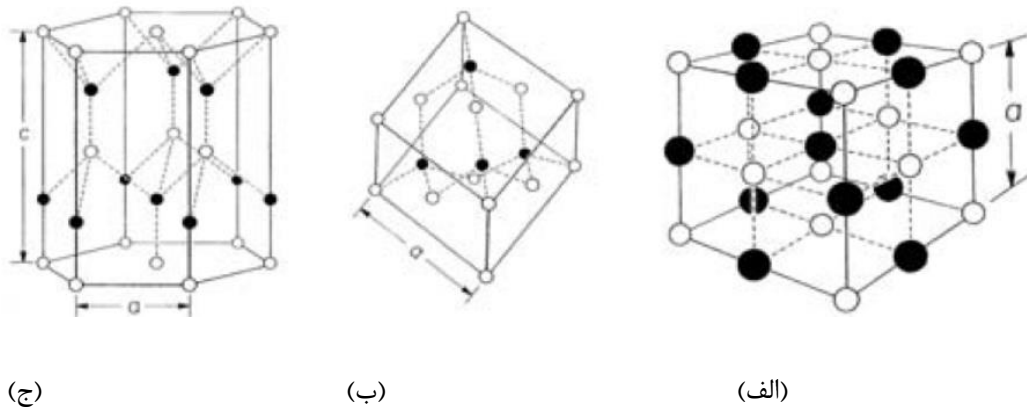


شکل ۱-۱: نمودار گاف نواری برحسب پارامتر شبکه برای نیم رساناهای III-V [۱].

کاربردهای اپتوالکتریکی نیم رساناهای نیتروژندار یکی از مهمترین کاربردهای آنها می باشد. گسیل اپتیکی حاصل از AIN و GaN بدلیل گاف نواری پهن و مستقیم آنها، در ناحیه UV طیف الکترومغناطیسی قرار می گیرد. به دلیل شرایط دشوار رشد InN محاسبه گاف نواری آن مشکل است. اما از سال ۲۰۰۲ به بعد گروه های متفاوتی مقادیر مختلفی از ۰/۷-۱/۸ eV را گزارش نموده اند [۱].

### ۳-۱ ساختار کریستالی نیترایدها

برای گروه III-نیترایدها سه ساختار مشترک وجود دارد: ورتسایت، زینک-بلند و سنگ نمک طعام (راک-سالت) که در شکل (۲-۱) نشان داده شده است. تحت شرایط محیطی، ساختار



شکل ۱-۲: ساختار بلوری نیم رساناهای نیتروژندار (الف) نمک طعام و (ب) زینک بلند و (ج) ورتسایت [۱]

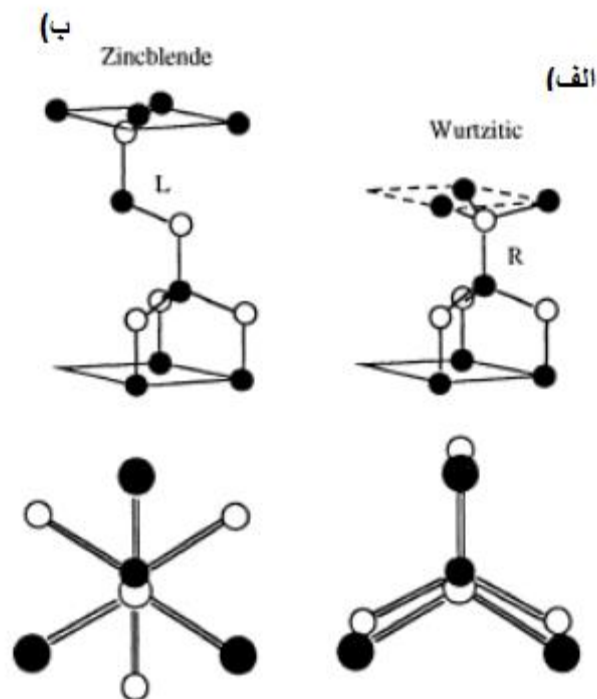
ترمودینامیکی پایدار، برای  $\text{GaN}$ ,  $\text{AlN}$ ,  $\text{InN}$  حجمی<sup>۱</sup>، ورتسایت<sup>۲</sup> می باشد. ساختار زینک بلند<sup>۳</sup> برای  $\text{GaN}$ ,  $\text{InN}$  توسط رشد برآرایی<sup>۴</sup> فیلم های نازک در سطح های کریستال  $\{011\}$  مکعبی مانند  $\text{Si}$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{GaAs}$  به تثبیت رسیده است. در این موارد تمایل ذاتی به شکل ساختار ورتسایت (Wz) بر سازگاری توپولوژیک غلبه می کند. آرایشی مانند ساختار راک-سلت<sup>۵</sup> یا نمک طعام را می توان در  $\text{InN}$  و  $\text{AlN}$ ,  $\text{GaN}$  تحت فشار های خیلی بالا بدست آورد. ساختار ورتسایت یک سلول واحد شش ضلعی با دو ثابت شبکه  $a, c$  است. آن ۶ اتم از هر نوع را شامل می شود. فضای گروه بندی برای ساختار ورتسایت  $P6_3 mc(C_{6v}^4)$  است. ساختار ورتسایت متشکل از دو زیرشبکه شش ضلعی تنگ پکیده (HCP)، هر کدام با یک نوع از اتم ها، در امتداد محور  $c$  توسط  $5/8$  ارتفاع سلول  $(5/8c)$  تنظیم شده است.

ساختار زینک بلند یک سلول واحد مکعبی، شامل چهار عنصر گروه III و چهار عنصر نیتروژن می باشد. فضای گروه بندی برای ساختار زینک بلند  $(T_d^2)F43 m (Zb)$  است. موقعیت اتم ها در سلول واحد مانند ساختار کریستالی الماس یکسان است. هر دو ساختار از دو زیرشبکه تنگ پکیده مکعبی

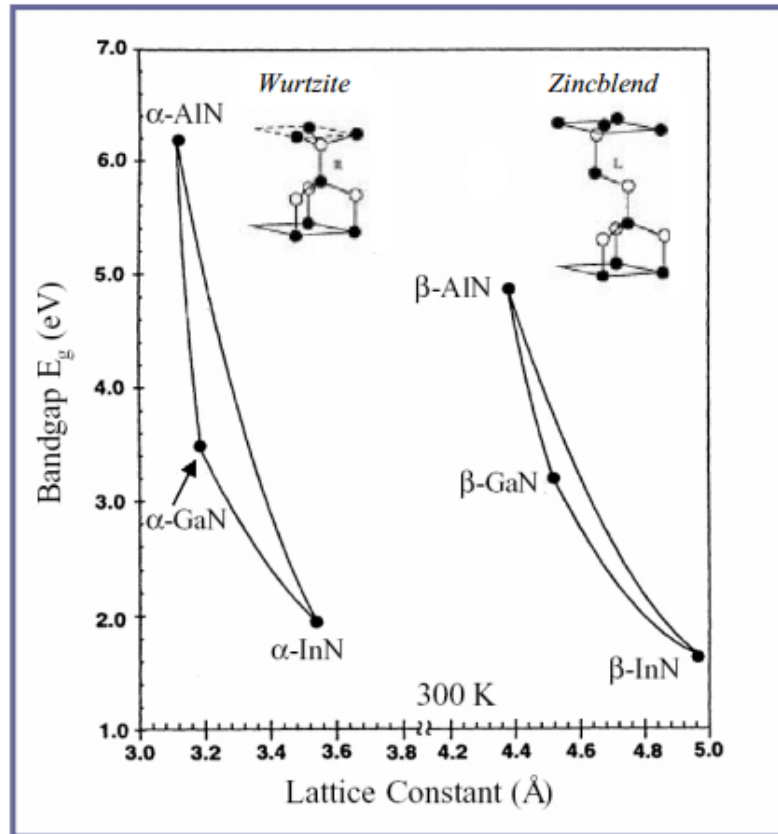
<sup>1</sup>. Bulk  
<sup>2</sup>. Wurtzite  
<sup>3</sup> Zinblend  
<sup>4</sup> Epitaxy  
<sup>5</sup>. Rock Salt

رخ مرکزدار، در امتداد یک بدنه مورب خمیده توسط یک چهارم قطر تشکیل شده است. هر اتم در ساختار ممکن است به عنوان موقعیتی در مرکز یک چهار ضلعی، با چهار همسایه نزدیکش در چهار گوشه یک چهار ضلعی مشاهده شود.

ساختار ورتسایت و زینک بلند مشابه هستند. در هر دو مورد، هر اتم گروه III- توسط چهار اتم نیتروژن هماهنگ شده است. در مقابل هر اتم نیتروژن توسط چهار اتم گروه- III هماهنگ شده است. ساختار های ورتسایت و زینک بلند با دوتا از نزدیکترین همسایه ها در شکل (۱-۳) نشان داده شده اند. ترکیبات ورتسایت  $\text{AlN}$  ,  $\text{GaN}$  و  $\text{InN}$  دارای گاف نواری  $1.9 \text{ eV}$  برای  $\text{InN}$ ،  $3.4 \text{ eV}$  برای  $\text{GaN}$  و  $6.2 \text{ eV}$  برای  $\text{AlN}$  است که در شکل ۱-۴ نشان داده شده اند. بنابراین، نیترایدهای گروه III-V به طور بالقوه می توانند برای دستگاه های نوری که در طول موج های مختلف از قرمز به ماوراء بنفش فعال هستند، بخوبی ساخته شوند [۷].



شکل ۱-۳: ساختار الف) ورتسایت و ب) زینک بلند [۷].



شکل ۴-۱: تغییرات گاف نواری با ثابت شبکه برای ساختارهای ورتسایت و زینک بلند  $\text{AlN}$ ,  $\text{InN}$ ,  $\text{GaN}$  [۸]

#### ۴-۱ گالیوم نیتراید

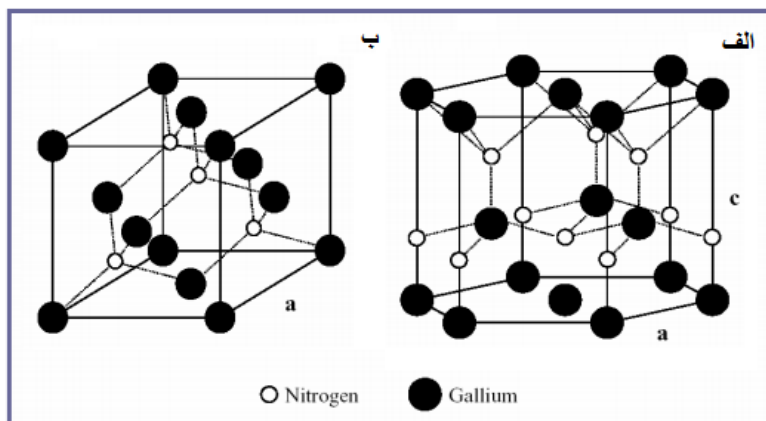
$\text{GaN}$ ، برای نخستین بار در سال ۱۹۳۲ به وسیله عبور گاز آمونیاک از روی  $\text{Ga}$  مذاب در دمای بالا توسط جانسون<sup>۱</sup> تولید شد [۱]. گالیوم نیتراید ماده ای با سختی بسیار بالا و گاف نواری بزرگ (eV)  $3/4$  و مستقیم می باشد. با توجه به حساسیت پایین این ماده در برابر تابش های یونیزه کننده، از آن بعنوان ماده ای مناسب در سلول های خورشیدی برای تولید انرژی در ماهواره ها<sup>۲</sup> استفاده می شود [۹]. گالیوم نیتراید یکی از مهمترین ترکیبات گروه III-N می باشد که در گروه نیم رسانایی با

<sup>1</sup>Johnson  
<sup>2</sup>Satellite

گاف نواری پهن قرار می گیرد. به واسطه گاف نواری پهن از این ماده در صنایع اپتیکی و قطعات توان بالا و فرکانس بالا مثل تولید قطعات لیزر و دیودهای ساطع کننده نور آبی و فرابنفش استفاده می شود. این قطعات بر پایه نیمرسانای GaN، روی زیر لایه هایی از یاقوت کبود (اکسید آلومینیوم) رشد می یابند. این ماده به لحاظ مکانیکی بسیار سخت است و دارای ظرفیت و رسانندگی حرارتی بالایی می باشد [۱۰].

#### ۱-۴-۱ ساختار بلوری

گالیوم نیتراید حداقل در دو فرم ساختاری متفاوت بلوری شش ضلعی (ورتسایت) و مکعبی (زینک بلند) متبلور می شود. در حالت تعادلی به لحاظ ترمودینامیکی فاز پایدار آن (فاز  $\alpha$ ) ورتسایت، و فاز دارای پایداری کمتر (فاز  $\beta$ ) که تحت شرایط برآرایی رشد خاصی بر روی زیر لایه پایدار می گردد، زینک بلند می باشد [۱۱]. این ماده تحت فشارهای زیاد به حالت سومی که به فاز سنگ نمک طعام (راک - سالت) معروف است، تغییر شکل می دهد [۱۲]. دو نوع شبکه ورتسایت و زینک بلند در شکل ۱-۵ نشان داده شده است. در هر دو فاز ساختاری شاهد یک هماهنگی چهارتایی (تتراگونال) می باشیم به این صورت که هر اتم با چهار اتم متفاوت دیگر در اطرافش، پیوند برقرار کرده است.



شکل ۱-۵: ساختار الف) ورتسایت و ب) زینک-بلند گالیوم نیتراید [۱۲]

طبیعت پیوندها اغلب کووالانسی می باشد اما به دلیل اختلاف زیادی که بین الکترون خواهی دو عنصر سازنده ترکیب وجود دارد ، پیوند دو عنصر شامل پیوند یونی نیز می شود. ساختار ورتسایت یک سلول واحد شش گوشه با ثابت های شبکه  $a = 3/189 \text{ \AA}$  و  $c = 5/185 \text{ \AA}$  با نسبت  $c/a = 1/627$  می باشد. برای بهینه سازی پارامترهای شبکه GaN در کد مورد نظر در این تحقیق هم از همین مقادیر استفاده شده است [۱۳]. در این ساختار از دو زیر شبکه تنگ پکیده شش گوشه، که در هم فرو رفته اند، تشکیل شده است. این دو زیر شبکه در امتداد محور C به اندازه  $0/377$  جابجا شده اند [۱۴ و ۱۵]. هر زیر شبکه توسط یک نوع اتم متفاوت اشغال شده است در نتیجه در سلول واحد ۴ اتم وجود خواهد داشت. هر اتم در این ساختار توسط ۴ اتم از نوع دیگر احاطه شده است که هر کدام در لبه های یک چهاروجهی قرار دارند. ساختار زینک - بلند از نظر انرژی به ساختار ورتسایت بسیار نزدیک می باشد و در صورتی که رشد روآراستی آن روی یک زیر شبکه مکعبی انجام شود در ساختار زینک - بلند متبلور می شود [۱۶]. ثابت شبکه برای  $\beta$ -GaN در دمای  $300 \text{ K}$  برابر با  $a = 4/531 \text{ \AA}$  است [۱۷]. در جدول (۱-۱) برخی ویژگی ها و مشخصه های ساختاری GaN در فاز پایدار ورتسایت آورده شده است.

یکی از مشکلات مهم و اساسی در حوزه تحقیقاتی این ماده، فقدان زیر لایه های مناسب به لحاظ تطابق شبکه ای و سازگاری حرارتی می باشد. ثابت شده است که ساختار بلوری GaN روآراسته و رشد داده شده اغلب تحت تاثیر ماده زیر لایه و جهت گیری آن قرار می گیرد. می توان از یاقوت کبود، اکسید آلومینیوم ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ )، سیلیکون کارباید (SiC) و سیلیکون (Si) به عنوان بیشترین زیر لایه های مورد استفاده در رشد GaN نام برد. این ترکیبات به لحاظ تقارن ساختاری نسبت به دیگر ترکیبات، به ساختارهای گروه III-N نزدیکترند. همچنین این ترکیبات به لحاظ پایداری حرارتی و شیمیایی در دماهای بالا، به منظور رشد GaN مناسب می باشند. فرایند رشد ترکیبات گروه III-N از جمله GaN با توجه به نقطه ذوب بالاتر آن ها در مقایسه با دیگر نیمرساناها در دمای بالاتری انجام می پذیرد.

جدول ۱-۱: مقادیر برخی پارامترهای فاز ورتسایت GaN [۸ و ۱۳]

$a = 3/189$ $c = 5/185$	ثابت های شبکه (Å)	۳/۳۹	گاف نواری (eV)
$a = 5/59 \times 10^{-6}$ $c = 3/17 \times 10^{-6}$	ضریب انبساط گرمایی ( $K^{-1}$ )	۱/۳	رسانندگی گرمایی ( $Wcm^{-1}K^{-1}$ )
		۲۷۹۱	نقطه ذوب (K)
$8/9 \times 10^{22}$	تعداداتم ها در $1\text{ cm}^{-3}$	۶/۱۵	چگالی ( $gcm^{-3}$ )

از رایج ترین روش های رشد این ترکیبات می توان به روش های تبخیر حرارتی، از جمله رسوب گذاری تبخیر شیمیایی آلی فلزی (MOCVD)<sup>۱</sup>، برآرایی فاز تبخیر (VPE)<sup>۲</sup>، برآرایی باریکه مولکولی (MBE)<sup>۳</sup>، رشد تحت فشاردگی تصعیدی (SSM)<sup>۴</sup> اشاره کرد. ترکیب گالیوم نیتراید به دلیل ویژگی هایی از قبیل پایداری مکانیکی، حرارتی و شیمیایی، گاف نواری، استفاده در دماهای بالا و سختی آن به عنوان روکش محافظ، مورد توجه محققان قرار گرفت. اولین ساختار نواری ورتسایت GaN به روش نظری توسط بلوم با روش شبه پتانسیل محاسبه و گاف نواری مستقیم حدود  $3/5\text{eV}$  را پیش بینی کرد. بعدها بلوم و همکارانش از رهیافت شبه پتانسیل تجربی که با داده های تجربی منطبق شده بود، به منظور اصلاح و ارتقای ساختار نواری بهره بردند. آن ها همچنین ساختار نواری زینک بلند را محاسبه و گاف نواری  $3/5\text{eV}$  را پیش بینی کردند. بعد از آن مطالعاتی به صورت تجربی و نظری بر روی دیگر خواص این ترکیب از جمله خواص اپتیکی، الکتریکی، مغناطیسی، مکانیکی، حرارتی و ... انجام گرفت. همانطور که گفتیم یکی از مهم ترین مزایای ترکیبات III-N نسبت به نیمرساناهای دیگر گروه ها، سهولت نسبی در اتصال این ترکیبات به یکدیگر به منظور ساخت قطعات

1 . Metal organic chemical vapor deposition  
2 . Vapor phase epitaxy  
3 . Molecular beam epitaxy  
4 . Sublimation sandwich method



الکترونیکی همچون دیودها و ترانزیستورها می باشد. لذا آرایش و کنترل آن در این ترکیبات اهمیت بسیاری دارد. آرایش نوع n در لایه نازک GaN بیشتر به ازای عناصر Si، Se، Ge، و O، با دستیابی به تمرکز حامل هایی تا بیش از  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  مشاهده شده است. آرایش نوع p در لایه نازک GaN با آرایش Mg ایجاد شده است. آرایش نوع n در ترکیبات III-N نسبت به آرایش نوع p بسیار آسان تر است. چرا که این ترکیبات، تمایل بیشتری به رسانندگی نوع n را در هنگام رشد بروز می دهند [۱۸].

#### ۱-۴-۲ خواص ساختاری

نیمرسانای گالیوم نیتراید دارای گاف نواری مستقیم می باشد و با توجه به نوع ساختار و دمای محیط، مقدار آن تغییر می کند. ارتباط گاف نواری این ماده با دما با رابطه (۳-۱) بیان می شود [۱۹].

$$E_g(T) - E_g(0) = -5.08 \times 10^{-4} [T^2 / (996 - T)] \quad \text{eV} \quad (3-1)$$

برای فاز زینک بلند مقدار گاف نواری در دمای اتاق  $3.17 \text{ eV}$  می باشد [۲۰].

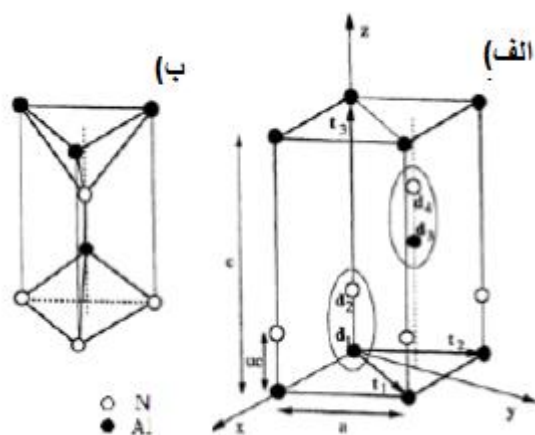
#### ۱-۵ آلومینیوم نیتراید

AIN، یک ساختار سنتزی است که در حالت طبیعی وجود ندارد. این ساختار اولین بار در سال ۱۸۶۲ به وسیله واکنش میان آلومینیوم و گاز نیتروژن تولید شد. بسیاری از خواص مفید مکانیکی و الکترونیکی را ارائه می دهد. مثلا، سختی، رسانندگی حرارتی بالا، مقاومت در برابر درجه حرارت بالا و ترکیب شده با مواد شیمیایی سوزش آور، در شکل غیر کریستالی، یک مقایسه حرارتی معقول نسبت به Si و GaAs، AIN را یک ماده جالب برای کاربرد های الکترونیکی ساخته است. پهن بودن گاف نواری دلیل دیگری برای کاربرد این ماده به عنوان عایق در دستگاه های نیمه هادی است. خواص پیزوالکتریک AIN را برای برنامه های کاربردی دستگاه سطح امواج صوتی مناسب کرده است. با این وجود، بیشترین علاقه به این نیمه هادی ناشی از تولید شکل آلیاژ آن با گالیوم نیتراید (AlGaIn) می باشد که اجازه می دهد این ماده در ساخت پایه دستگاه های الکترونیکی و نوری، که می تواند به خوبی به اشعه ماوراء بنفش از طول موج سبز فعال شود، قابل استفاده شود [۷].

## ۱-۵-۱ ساختار بلوری

در حالت عادی (دمای محیط) AIN در ساختار ورتسایت متبلور می شود. هنگامیکه آلومینیوم در ساختار کریستالی ورتسایت شش ضلعی قرار دارد از دو زیر شبکه تنگ پکیده شش گوشه تشکیل شده که به اندازه  $u = 3/8$  (در حال ایده آل) در امتداد محور c جابجا شده است. بدست آوردن فرم مکعبی برای آن سخت هست بنابراین نادیده گرفته می شود. گروه تقارن فضایی آن  $C_{6v}P6_3mc$  است و گروه تقارن نقطه ای آن  $C_{6v}6mm$  می باشد. پارامترهای شبکه از حدود  $3/110 \text{ \AA}$  تا  $3/113 \text{ \AA}$  برای a و از  $4/978 \text{ \AA}$  تا  $4/982 \text{ \AA}$  برای c است. نسبت c/a بین  $1/000$  و  $1/602$  متغیر است که برای ساختار ورتسایت شاید ناشی از استحکام شبکه و یون ها باشد. برای ساختار زینک بلند AIN مقدار  $a = 4/38 \text{ \AA}$  در دمای اتاق است [۷]. ساختار شش گوشه ورتسایت که از دو زیر شبکه شش گوشه تشکیل شده است به همراه سلول واحد در شکل ۱-۶ نشان داده شده است. مطابق این شکل در شبکه AIN هر اتم Al توسط چهار اتم N احاطه شده است که این آرایش یک تقارن چهاروجهی را به وجود می آورد.

اصولا پیوند های شیمیایی ترکیبات گروه III-N از نوع کووالانسی است اما به دلیل اختلاف زیادی که بین الکترون گاتیوی دو عنصر سازنده ترکیب وجود دارد، پیوند بین دو عنصر شامل پیوند یونی نیز می شود که این موضوع پایداری فاز ساختاری ماده را تعیین می کند. به طور کلی ترکیبات گروه III-N در سه ساختار ورتسایت، زینک بلند و نمک طعام متبلور می شوند [۱۳]. به لحاظ شرایط ترمودینامیکی معمولی، فاز پایدار ترکیبات یاد شده ورتسایت می باشد و معمولاً در اثر



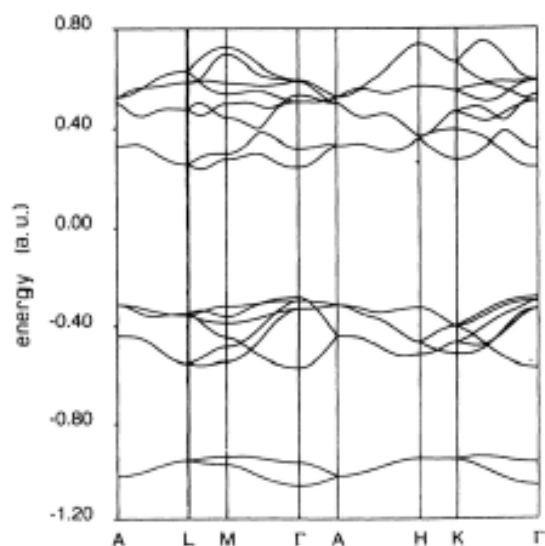
شکل ۱-۶: الف) ساختار شش گوشه ورتسایت که از دو زیر شبکه شش گوشه تشکیل شده است. بردارهای  $t_i$  بردار انتقال اولیه و نقاط اولیه و نقاط انتهایی بردارهای پایه،  $d_i$  در شکل مشخص است. ب) یک سلول واحد که از دو مولکول تشکیل شده است [۲۱].

اعمال فشار به این ترکیبات از ساختار ورتسایت به ساختار نمک طعام تغییر فاز می دهد. در مقایسه با فازهای دیگر، ساختار مکعبی زینک بلند شبه پایدار می باشد اما در صورت رشد نمونه با روش روآراستی ناهمگون بر روی زیر لایه های مناسب، نمونه های یاد شده ممکن است در این ساختار نیز متبلور شوند. با توجه مطالب ذکر شده، در اثر اعمال فشار به ساختار آلومینیوم نیتراید، یک گذار فاز از ساختار ورتسایت به ساختار نمک طعام در فشار ۲۱ Gpa رخ می دهد که این ساختار حداقل تا فشار ۱۳۲ Gpa پایدار می ماند [۲۲]. البته در فشارهای ۲۰ Gpa تا ۳۱ Gpa هر دو فاز ورتسایت و نمک طعام با هم وجود دارند [۲۳].

### ۱-۵-۲ خواص ساختاری و الکترونی

در شکل (۱-۷) ساختار نواری نیمرسانای AlN در جهت های پر تقارن منطقه اول بریلوئن با روش هارتتری- فوک نشان داده شده است. این ماده دارای گاف نواری مستقیم به اندازه ۶/۲eV می

باشد [۲۴]. مقادیر گاف نواری که از بعضی روش های نظری مانند روش شبه پتانسیل بدست آمده اند با مقادیر تجربی اختلاف دارند و گاهی این اختلاف در حدود  $2/5$  eV ازین مقادیر کمتر می باشند. دلیل این موضوع وابستگی گاف انرژی به نوع شبه پتانسیل و تقریب بکار رفته در آن می باشد [۲۵].



شکل ۱-۷: ساختار نواری AlN که با روش محاسباتی هارتری-فوک<sup>۱</sup> بدست آمده است [۲۴].

<sup>۱</sup>. Hartree-Fock method

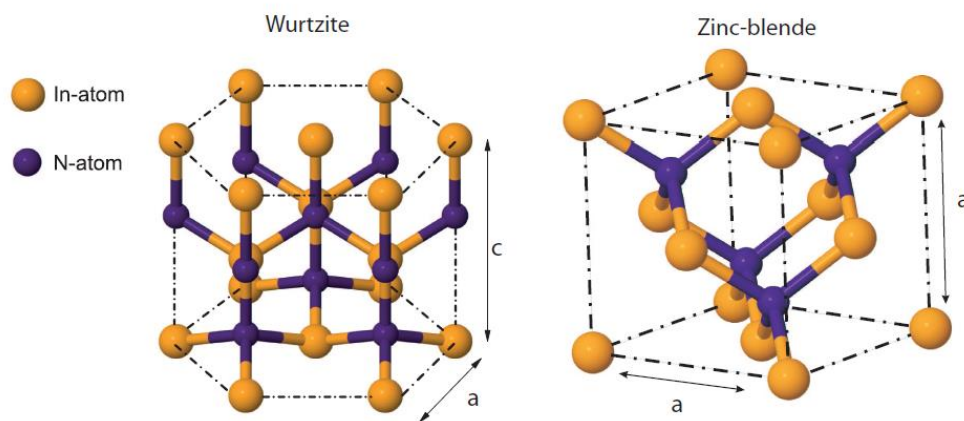
## ۱-۵-۳ خواص فیزیکی و عمومی

نیمرسانای AIN یک سرامیک و ماده ای مقاوم می باشد و دارای خواص فیزیکی جالبی نظیر انبساط گرمایی پایین، هدایت گرمایی زیاد، سختی و نقطه ذوب بالا است. همچنین این ماده به دلیل خواص عایقی که دارد مورد توجه می باشد به طوری که مقاومت ویژه این ماده در حدود  $10^{12} \Omega m$  است.

خصوصیات قابل توجه AIN این ماده را به عنوان نیمرسانای پر کاربرد در کانون توجهات قرار داده است. اما دشوار بودن رشد با کیفیت این ماده نیز از چالش های بکارگیری آن در صنعت می باشد. واکنش پذیری بالای Al با اکسیژن و تشکیل اکسید آلومینیوم که باعث تغییر در ثابت شبکه می شود از موادی است که بایستی کنترل شود [۱۳].

## ۱-۶ ایندیوم نیتراید

ایندیوم نیتراید نسبت به گالیوم نیتراید و آلومینیوم نیتراید کمتر مورد آزمایش قرار گرفته است. ایندیوم نیتراید خالص وجود ندارد [۱]. این احتمالاً به علت رشد نمونه های کریستال با کیفیت بالای ایندیوم نیتراید و وجود نیم رساناهای جایگزین مانند AlGaAs و Zn(Ga,Al)AsP است، که گاف نواری نزدیک به ایندیوم نیتراید ( $1/1.89 eV$ ) دارند. گاف نواری ایندیوم نیتراید مربوط به بخشی از طیف الکترومغناطیسی است که در آن تکنولوژی نیمه هادی جایگزین شده و بخوبی توسعه یافته است. به تبع آن کاربرد های عملی ایندیوم نیتراید به آلیاژهایش با گالیوم نیتراید و آلومینیوم نیتراید محدود شده است. InN از لحاظ فقدان مواد مناسب زیر لایه و به طور ویژه فقدان مرکزیت بالا نسبت به گالیوم نیتراید و آلومینیوم نیتراید متفاوت نیست. این مشکلات مانع پیشرفت تحقیقات بیشتر بر روی آن شده است. علاوه بر آن، با توجه به ثبات گرمایی نسبتاً ناچیز، ایندیوم نیتراید نمی تواند در دماهای بالای مورد نیاز توسط فرایند رشد CVD رشد کند. همان طور که ایندیوم نیتراید در دماهای



شکل ۱-۸: ساختار شماتیک ایندیوم نیتراید ورتسایت و زینک بلند [۲۶]

بالا سریعاً گسسته می شود، حتی در دمای کمتر از  $600^{\circ}C$ ، یک فشار فوق العاده بالای نیتروژن تا حد نقطه ذوب برای ایجاد ثبات در ماده لازم خواهد بود، که عملاً غیر ممکن است. اختلاف زیاد شعاع اتمی ایندیوم و نیتروژن عامل دیگری برای افزایش سختی در بدست آوردن ایندیوم نیتراید با کیفیت خوب خواهد بود. با وجود مشکلات ذاتی در رشد ایندیوم نیتراید، برخی از کارهای بسیار عالی ای گزارش شده است. کار اصلی تنسلی<sup>۱</sup> و فولی<sup>۲</sup> برای اولین بار بسیاری از خواص فیزیکی بنیادی ایندیوم نیتراید را مشخص کرد. با این حال، ایندیوم نیتراید کمترین مقدار درک و بررسی نیترایدها را داشته است [۷].

### ۱-۶-۱ ساختار بلوری و الکتریکی

شکل ۱-۸ ساختار بلوری ایندیوم نیتراید را در دو حالت ورتسایت و زینک بلند نمایش داده است. ایندیوم نیتراید معمولاً در ساختار ورتسایت (شش گوشه) با گروه تقارنی  $C_{6v}^{4}-P6_3mc$  متبلور می شود. شکل زینک بلند (مکعبی) آن در فیلم های حاوی هر دو چند گونه<sup>۳</sup> رخ می دهد. در جدول ۱-۲ پارامتر های اساسی ایندیوم نیتراید آورده شده است. مقدار داده اندازه گیری شده برای حالت

<sup>1</sup> Tansley

<sup>2</sup> Foley

<sup>3</sup> Polytypes

ورتسایت  $c_0/a_0$  تقریبا در حدود  $0.1008 \pm 1/615$  می باشد [۷].

جدول ۱-۲: برخی پارامترهای اساسی ایندیوم نیتراید [۷]

ساختار ورتسایت	
ضریب شکست $n = 2/80 - 3/05$	گاف نواری (eV) $1/89 (300K)$
ثابت دی الکترونیک $\epsilon_r = 15/3$	ثابت شبکه (Å) $a = 3/548$ $c = 5/760$
ساختار زینک بلند	
ثابت شبکه $4/98 (\text{Å})$	گاف نواری (300K) (تئوری) $2/2 \text{ eV}$

## ۱-۷ آلیاژهای گالیوم نیتراید

ترکیب جامد از عناصر نیم رسانا، آلیاژ نیم رسانا نامیده می شود. تشکیل آلیاژ از ساده ترین روش برای اصلاح خواص فیزیکی یک ترکیب است. ترکیبات با خواص فیزیکی متفاوت با هم در جهت به دست آوردن یک ماده جدید با خواص متوسط مخلوط می شوند. این مواد جدید فن آوری شده، به دلیل برنامه های کاربردی گسترده خود در ساخت دستگاه های الکترونیکی و اپتوالکترونیکی، قابل توجه هستند [۲۷]. بسیاری از دستگاه های مبتنی بر GaN به عنوان ابزار اصلی برای دستیابی به بهبود عملکرد شامل ساختارهای ناهمگون<sup>۱</sup> هستند. برای درک عمیق مکانیسم فیزیکی ای که نحوه استفاده از آنها را بیان میکند، نیازمند مطالعه بر روی خواص آلیاژهایشان به طور گسترده هستیم. بسیاری از این خواص مانند گاف نواری انرژی، جرم موثر الکترون ها و حفره ها و ثابت دی الکترونیک وابسته به آلیاژها هستند [۷].

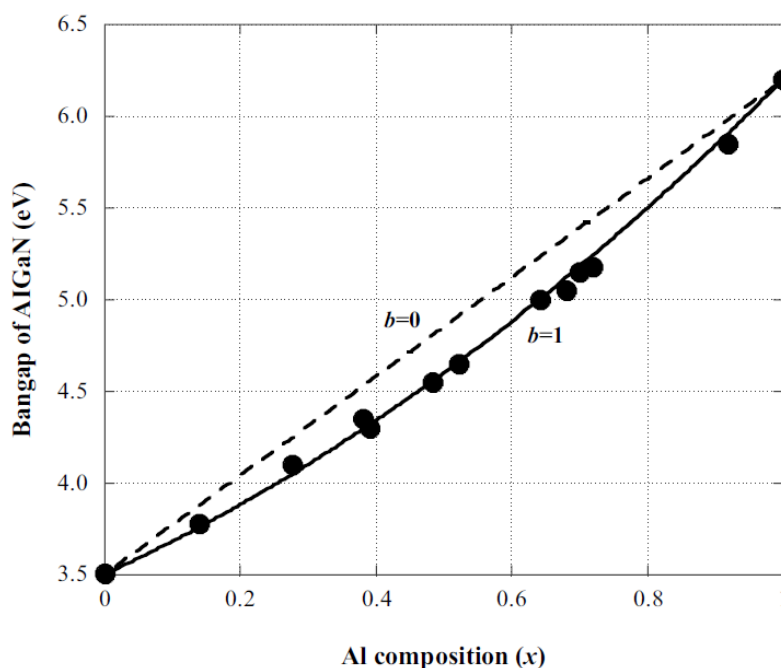
اهمیت فن آوری آلیاژهای نیم رسانا، به علت پهنای گاف نواری قابل تنظیم است. این گاف

<sup>1</sup> Hetrostructures

نواری قابل تنظیم اجازه می دهد تا انتشار و جذب نور در طول موج های مختلف رخ دهد. آلیاژهای نیم رسانای III-V، یعنی AlGaN و InGaN معمولاً در چراغ های LED، دیودهای لیزری (LDs) و در ساختارهای ناهمگون تیره و تار مبتنی بر ترانزیستور استفاده می شود. این آلیاژها غالباً به عنوان لایه سد، لایه روکش فلزی و یا بازتابنده توزیع براگ (DBR) در لیزرهای نیم رسانای دارای چاه کوانتومی، استفاده می شود، چرا که آن را برای تنظیم آنها از محدوده طیفی نزدیک مادون قرمز به بنفش آسان می کند. در گروه III-V نیترایدها InAlN تغییر بزرگی در گاف نواری آرایه می دهد [۲۷].

### ۱-۷-۱ آلیاژ AlGaN

شناخت درست سد وابستگی و ترکیب بندی خوب مواد، لازمه تلاش برای تجزیه و تحلیل ساختارهای ناهمگون، به طور کلی، و چاه های کوانتومی و ابر شبکه ها، به ویژه، است. با سیستم



شکل ۱-۹: داده های تجربی گاف نواری ساختار ورتسایت  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  [۷]



نیتراید مجموعه ای از گزینه هایی برای ساخت چنین ساختارهایی در دسترس است.

گاف نواری  $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$  از معادله (۱-۲) بدست می آید:

$$E_g(x) = xE_g(\text{AlN}) + (1-x) E_g(\text{GaN}) - bx(1-x) \quad (1-2)$$

که  $E_g(\text{GaN}) = 3.4 \text{ eV}$ ,  $E_g(\text{AlN}) = 6.20 \text{ eV}$  و  $x$  کسر مولی  $\text{AlN}$  می باشد [۷] و  $b$

پارامتر خمشی<sup>۱</sup> است که به صورت تجربی اندازه گیری می شود [۲۸]. شکل ۱-۹ داده های تجربی

گاف نواری این آلیاژ را نشان می دهد [۷].

### ۱-۷-۲ آلیاژ $\text{InGaN}$

رشد کیفیت بالای  $\text{InN}$  و شمارش بنیادی خواص فیزیکی آن تا حدودی نسبت به آلیاژ دیگر،

یعنی  $\text{AlGaIn}$  در ابهام است (تا سال ۲۰۰۸) [۷]. با وجود مشکلات زیادی در فن آوری آن، در حال

حاضر بخش جدایی ناپذیری از قطعات اصلی دستگاههای الکتریکی است. اهمیت  $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$  ( $x$ )

کسر مولی  $\text{InN}$  برای ساخت دستگاه های الکتریکی و نوری، مانند ال ای دی (LED) و لیزر، کمتر از

$\text{AlGaIn}$  نیست چون که می تواند نوری در محدوده طول موج بنفش و یا آبی ساطع کند. همچنین

می تواند به عنوان نوید دهنده یک ماده کوانتومی خالص (QW) برای این دستگاه ها باشد، ولی

پیچیدگیهای مضاعف مانند جدایی فاز<sup>۲</sup> و دیگر ناهمگونی ها باعث می شود که تعیین گاف

نواری  $\text{InGaIn}$  نسبت به ترکیبش، کار بسیار سختی شود. همانطور که در مورد  $\text{AlGaIn}$  گفته شد،

گاف نواری  $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$  برای  $0 < x < 1$  میتواند با استفاده از معادله (۱-۳) بدست آید:

$$E_g(x) = xE_g(\text{InN}) + (1-x) E_g(\text{GaN}) - bx(1-x) \quad (1-3)$$

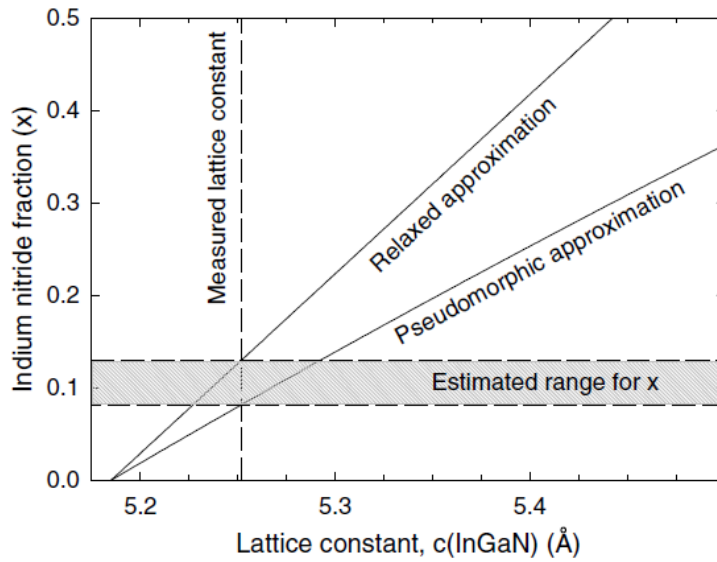
<sup>1</sup>.Bowling

<sup>2</sup> phase separation

همچنین ثابت شبکه آن از معادله (۱-۴) بدست می آید: [۷]

$$c_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = 5.2262 + 0.574x \text{ \AA} \quad \text{و} \quad a_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = 3.1986 + 0.3862x \text{ \AA} \quad (1-4)$$

نمودار تغییرات ثابت شبکه  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  در شکل (۱۰-۱) نشان داده شده است [۲۹].



شکل ۱۰-۱: نمودار تغییرات ثابت شبکه بر حسب x، برای  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  [۲۹]

# فصل دوم

مروری بر کارهای انجام شده

## ۲-۱- مروری بر کارهای انجام شده بر روی گالیوم نیتراید

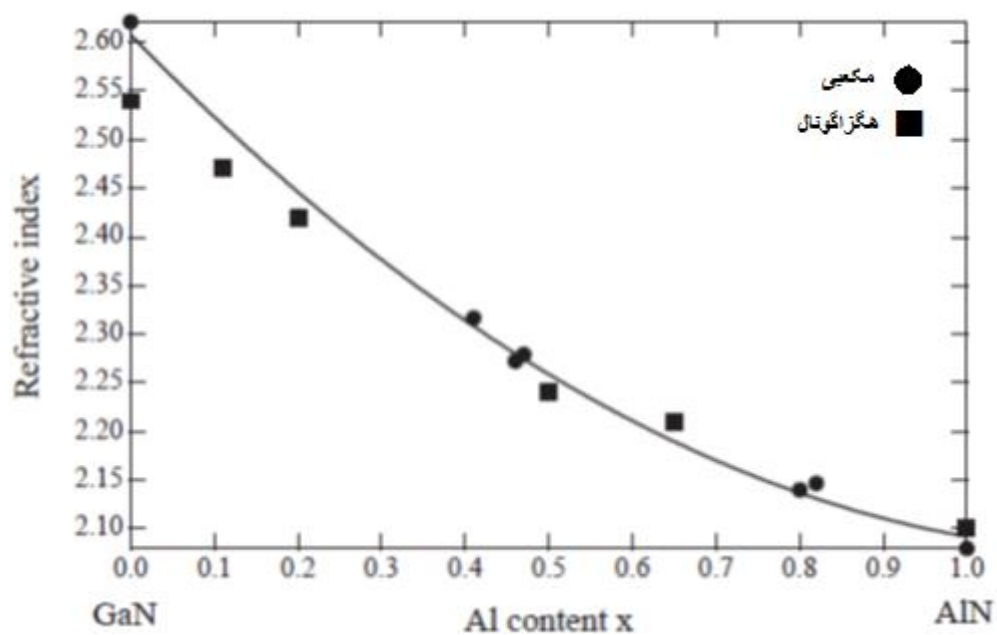
در این قسمت مروری بر روی برخی از مطالعات تئوری و تجربی انجام شده بر روی ساختارهای مختلف گالیوم نیتراید خواهیم داشت. ابتدا به بررسی چند مقاله تجربی می پردازیم و سپس مقالات تئوری را مورد بررسی قرار می دهیم.

آقای تاکانبو سوزوکی و همکارانش بر روی ثابت های اپتیکی گالیوم نیتراید و آلومینیوم نیتراید مکعبی (زینک بلند) و آلیاژهای AlGa<sub>N</sub> و ساختار نواری آنها، با استفاده از طیف سنجی پراکندگی نور<sup>۱</sup> تحقیق و بررسی کرده اند [۳۰]. آنها دریافتند که ضریب شکست آلیاژ AlGa<sub>N</sub> با افزایش مقدار آلومینیوم کاهش می یابد که مورد انتظار مشاهدات تجربی بود. همچنین ضریب شکست، در طول موج های شفاف، برای مقادیر کم آلومینیوم در ساختار مکعبی نسبت به ساختار هگزاگونال (ورتسایت) تا حدودی بزرگتر است. در حالی که با افزایش مقدار آلومینیوم، ضریب شکست AlGa<sub>N</sub>، برای هر دو ساختار مکعبی و ورتسایت تقریباً برابر است. همچنین آنها دریافتند که انرژی گاف نواری مستقیم AlGa<sub>N</sub> به مقدار آلومینیوم افزوده وابسته است و با مقدار آن تغییر می کند. در شکل ۱-۲ تغییرات ضریب شکست برای آلیاژ AlGa<sub>N</sub> نشان داده شده است. این مقدار مربوط به طول موج ۴۰۰ نانومتر می باشد. تغییرات ضریب شکست نیز از معادله (۱-۲) برای این آلیاژ بدست می آید [۳۰].

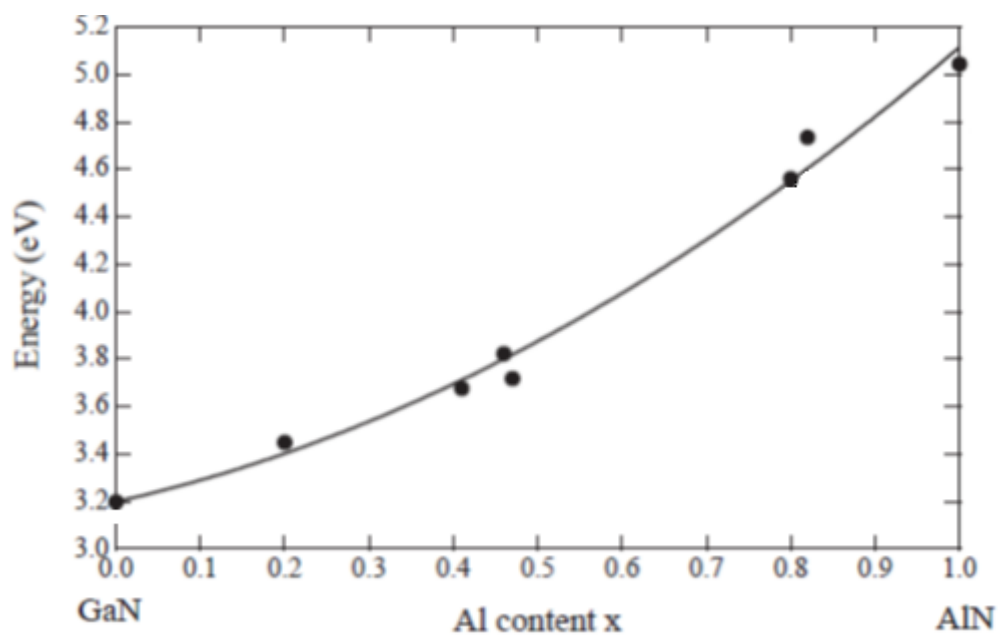
$$n(X) = 2.61 - 0.880x + 0.364x^2 \quad (1-2)$$

انرژی گاف نواری مستقیم با افزایش مقدار Al در شکل ۲-۲ نشان داده شده است [۳۰].

<sup>1</sup> spectroscopic ellipsometry

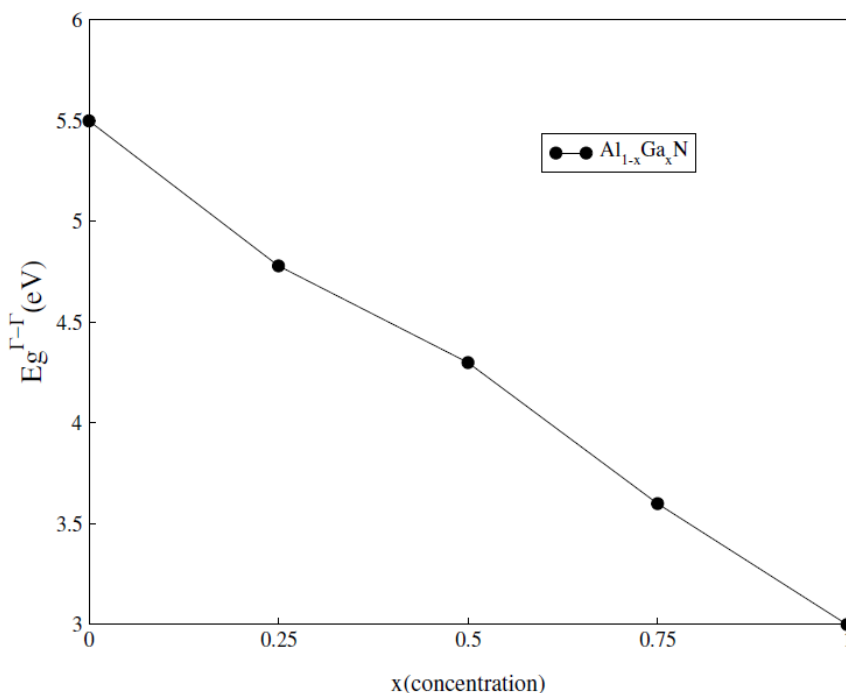


شکل ۱-۲: تغییرات ضریب شکست AlGaInN مکعبی و هگزاگونال بر حسب تغییرات Al [۳۰].



شکل ۲-۲: تغییرات گاف نواری AlGaInN مکعبی به مقدار Al در دمای اتاق [۳۰].

آقای بن امین و همکارانش بر روی خواص اپتوالکتریکی آلایش نیم رساناهای گروه III-V مطالعه داشته اند [۲۷]. در این کار محاسبات خواص فیزیکی ترکیبات، به روش پتانسیل کامل خطی امواج تخت افزوده<sup>۱</sup> (FPLAPW) و تقریب چگالی موضعی<sup>۲</sup> (LDA) در نظریه تابعی چگالی<sup>۳</sup> استفاده شده است [۲۷]. گاف نواری الکترونیکی و پارامترهای نوری مانند ثابت دی الکتریک و ضریب شکست برای  $Al_{1-x}Ga_xN$  در فاز زینک بلند (Zb) محاسبه شده است. شکل ۲-۳ نشان می دهد که گاف نواری محاسبه شده با غلظت Ga بطور خطی تغییر می کند. همچنین گاف نواری برای این آلیاژ مستقیم می باشد. در محاسباتی که بر روی تابع دی الکتریک  $Al_{1-x}Ga_xN$  انجام دادند، نقاط بحرانی بخش موهمی تابع دی الکتریک برای ۰، ۰/۲۵، ۰/۵، ۰/۷۵ و  $x=1$  به ترتیب در مقادیر ۵/۴۳، ۴/۷۰، ۴/۱۹، ۳/۵۳، و ۲/۸۶ الکترون ولت رخ می دهد که در شکل ۲-۴ نشان داده شده اند. شکل ۲-۵ نمودار وابستگی این نقاط بحرانی به گاف نواری را نشان می دهد.

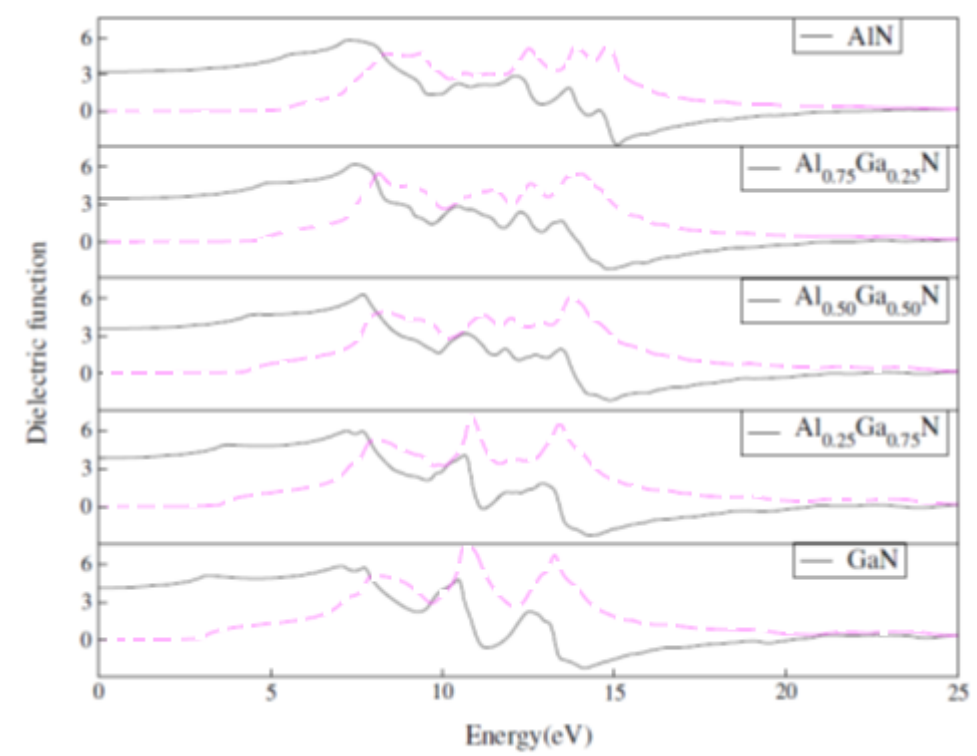


شکل ۲-۳: تغییر گاف نواری با افزایش  $x$  در  $Al_{1-x}Ga_xN$  ( $0 < x < 1$ ) [۲۷].

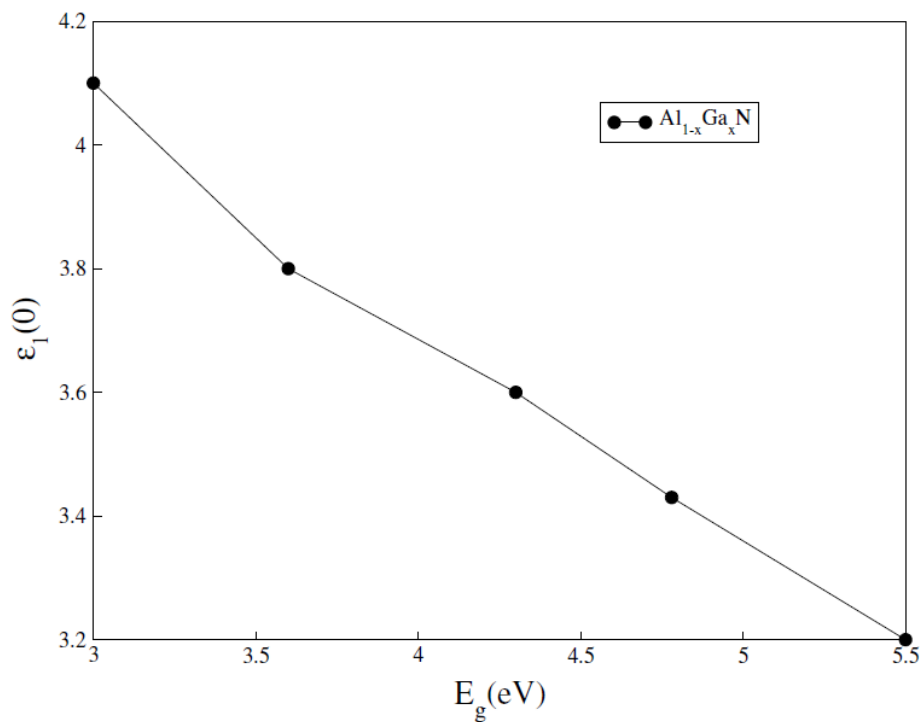
<sup>1</sup> Pseudopotential-Plane Wave

<sup>2</sup> Local Density Approximation

<sup>3</sup> Density Functional Theory

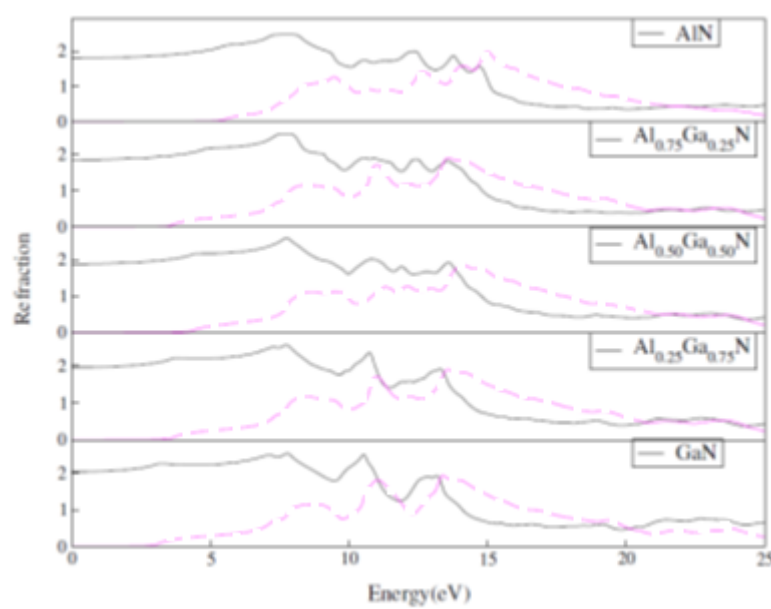


شکل ۲-۴: توابع دی الکتریک  $Al_{1-x}Ga_xN$  ( $0 < x < 1$ ) (رنگ سیاه مربوط به قسمت حقیقی و خط چین قسمت موهومی تابع را نشان می دهد). [۲۷]



شکل ۲-۵: تابع دی الکتریک وابسته به گاف نواری  $Al_{1-x}Ga_xN$  ( $0 < x < 1$ ). [۲۷].

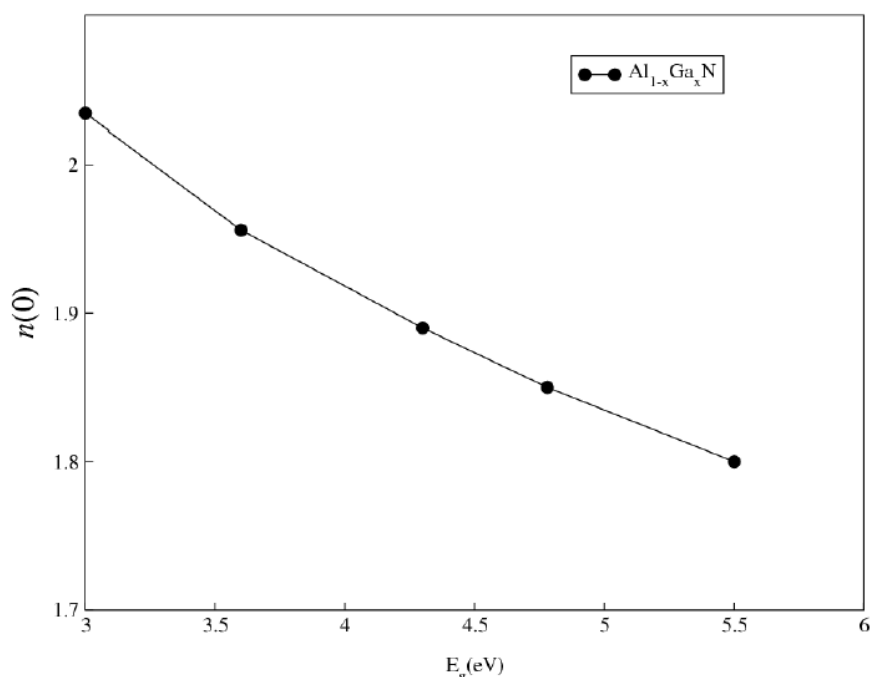
نمودار ضریب شکست  $Al_{1-x}Ga_xN$  در شکل ۲-۶ نشان داده شده است. نتایج نشان می دهد که ضریب شکست استاتیک ماده  $n(0)$  با افزایش مقدار Ga از ۰ تا ۱۰۰٪ در AlN افزایش می یابد. شکل ۲-۷ نمودار بین ضریب شکست  $n(0)$  و گاف نواری را نشان می دهد. این نمودار رابطه معکوس بین ضریب شکست و گاف نواری  $Al_{1-x}Ga_xN$  را نشان می دهد. آنها نتیجه گرفتند که دو ویژگی مختلف ضریب شکست را می توان در این شکلها مشاهده کرد. اول اینکه، در یک انرژی خاص یک ماکزیمم مقداری به صورت برآمدگی در طیف مشاهده می شود، و دوم اینکه، این مقدار ماکزیمم با افزایش غلظت گالیوم به سمت انرژی های کمتر انتقال می یابد. AlN خالص با  $x=0$  دارای وسیعترین طیف ضریب شکست می باشد که مقدار ماکزیمم آن در حدود ۲ در انرژی ۸ الکترون ولت می باشد. چند برآمدگی در انرژی های میانی به نظر می رسد و پس از آن منحنی در انرژیهای بالاتر به سمت صفر می رود. دلیل این واقعیت این است که، در انرژی های بالاتر، مواد دیگر به عنوان ماده شفاف عمل نمی کنند و فوتون های با انرژی بالا را جذب می کنند [۲۷].



شکل ۲-۶: نمودار ضریب شکست  $Al_{1-x}Ga_xN$  ( $0 < x < 1$ ). خط چین قسمت موهومی و رنگ سیاه قسمت

حقیقی [۲۷].

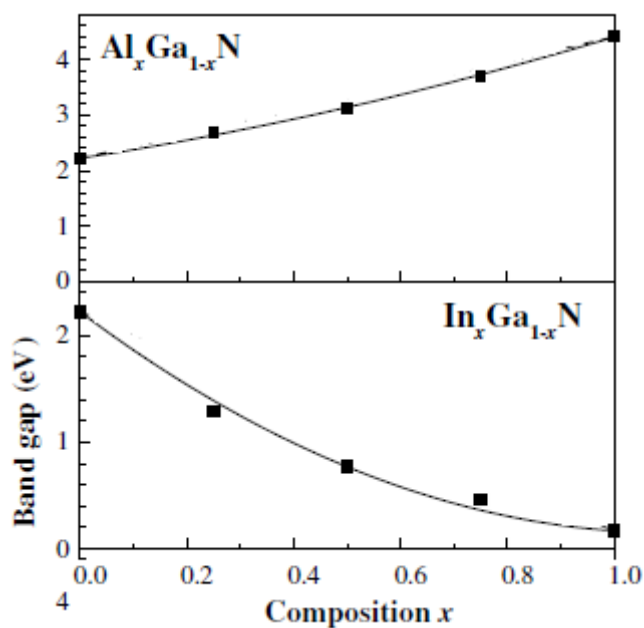




شکل ۲-۷: رابطه بین ضریب شکست استاتیک و گاف نواری  $Al_{1-x}Ga_xN$  ( $0 < x < 1$ ) [۲۷].

زد دریدی<sup>۱</sup> و همکارانش مطالعه ای بر روی ساختار نواری آلیاژهای ورتسایت  $AlGaN$  و  $InGaN$  به صورت تئوری داشته اند. روش محاسباتی آنها بر اساس تقریب چگالی موضعی (LDA) با استفاده از نظریه تابعی چگالی می باشد. در این محاسبات تراز ظرفیت برای عنصر  $Ga$ ،  $d$  و برای عنصر  $In$ ،  $d$  در نظر گرفته شده است. مقادیر گاف نواری برای ساختارهای  $AlN$  و  $GaN$  و  $InN$  به ترتیب  $4/4eV$  و  $2/22eV$  و  $0/17eV$  گزارش شده است. شکل ۲-۸ تغییرات گاف نواری برای آلیاژهای  $Al_xGa_{1-x}N$  و  $In_xGa_{1-x}N$  را برحسب  $x$  نشان می دهد. همانطور که در شکل دیده می شود، با مقدار ناچیز  $In$  در  $GaN$  گاف نواری به شدت کاهش یافته است [۳۱].

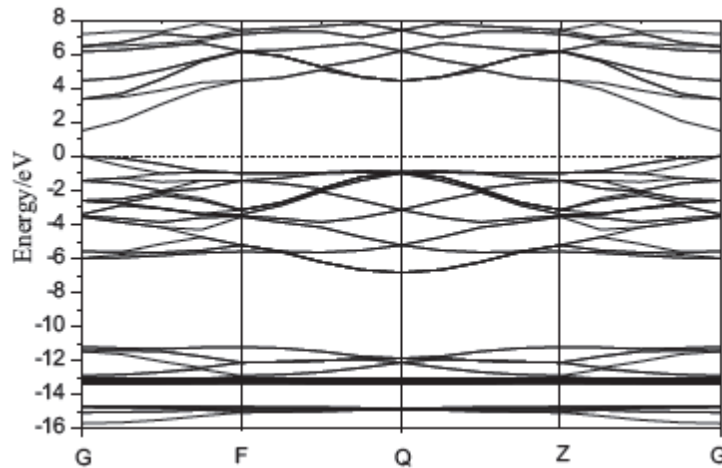
<sup>1</sup> Z.Dridi



شکل ۲-۸: مقادیر گاف نواری برای آلیاژهای  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  و  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $0 < x < 1$ )

در مقاله ای دیگر، یوجی دووب<sup>۱</sup> به کمک همکارانش، خواص اپتیکی و ساختار الکترونی گالیوم نیتراید زینک بلند را با استفاده از روش محاسباتی مکانیک کوانتومی با بسته CASTEP، بر اساس DFT مورد بررسی و مطالعه قرار دادند [۳۲]. ساختار نواری بدست آمده برای گالیوم نیتراید در شکل ۲-۹ رسم شده است. نقطه چین تراز فرمی را نشان می دهد. با توجه به این نمودار گالیوم نیتراید یک نیمرسانای با گاف نواری مستقیم بدست آمده است. گاف نواری بدست آمده برابر  $1.663 \text{ eV}$  است که از مقدار تجربی آن  $1.3 \text{ eV}$ ، کمتر است.

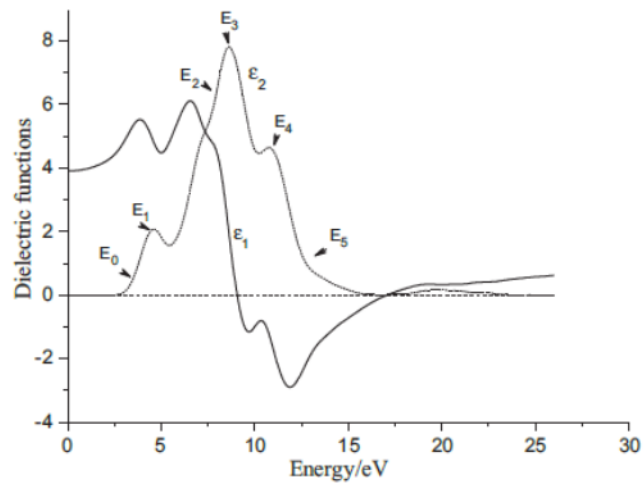
<sup>1</sup> Yujie Dub



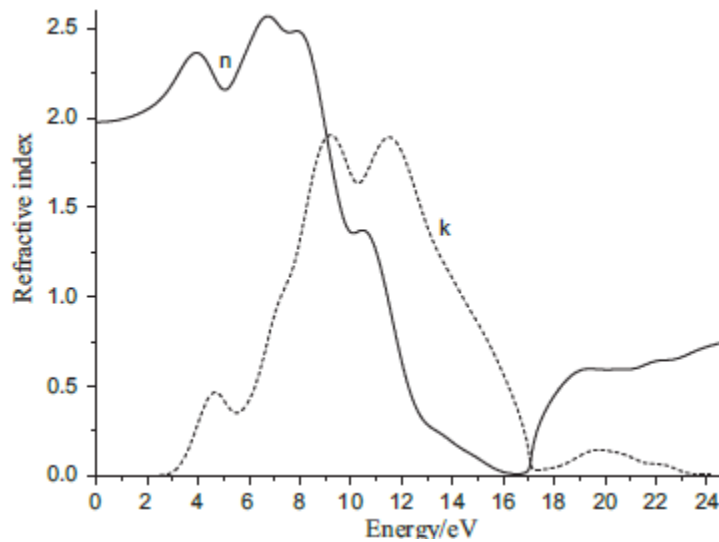
شکل ۲-۹: ساختار نواری گالیوم نیتراید زینک بلند [۳۲].

در محاسبات خواص اپتیکی، شکل ۲-۱۰ تغییرات قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک گالیوم نیتراید را با تغییرات انرژی فوتون ها نشان می دهد. در آن این طور به نظر می رسد که در محدوده انرژی های پایین تر، قسمت حقیقی تابع دی الکتریک با انرژی افزایش می یابد، و اولین قله آن در محدوده انرژی  $3/8689 \text{ eV}$  است. در انرژی  $6/5454 \text{ eV}$  به ماکزیمم مقدار آن می رسد و بعد از آن با افزایش انرژی کاهش می یابد و کاهش شدت، زمانی است که انرژی در طیف وسیعی از  $6/5454 \text{ eV}$  به  $9/5208 \text{ eV}$  الکترون ولت می رسد.

در ادامه این مقاله، ضریب شکست و ضریب خاموشی برای گالیوم نیتراید محاسبه شده است. مقدار ضریب شکست  $1/9765$  بدست آمده است. قله های اصلی در محدوده انرژی  $3/8689 \text{ eV}$  تا  $6/5454 \text{ eV}$  الکترون ولت قرار دارد و ماکزیمم قله ها در انرژی فوتون های  $3/8689 \text{ eV}$  و  $6/5454 \text{ eV}$  است. نمودار ضریب شکست و ضریب خاموشی در شکل ۲-۱۱ نشان داده شده است [۳۲].



شکل ۲-۱۰: قسمت حقیقی ( $\epsilon_1$ ) و موهومی تابع دی الکتریک گالیوم نیتراید. Eها قله های موهومی می باشند. [۳۲]



شکل ۲-۱۱: نمودار ضریب شکست (n) و ضریب خاموشی (k) گالیوم نیتراید [۳۲].

مطالعات تجربی و تئوری بسیاری در مورد ساختارهای مختلف گالیوم نیتراید و آلیاژهای مختلف آن انجام شده است [۳۳-۳۵] که شرح آنها در این مجال نمی گنجد و به ناچار از ذکر آنها در اینجا خودداری

می کنیم.

# فصل سوم

## خواص اپتیکی

با دانستن خصوصیات اپتیکی در جامدات می توان به مطالعه ساختار نواری انرژی ترازهای ناخالصی، اکسیتون ها، نقص های موضعی، ارتعاشات شبکه و تحریک مغناطیسی پرداخت. در این تجربیات بعضی کمیات قابل مشاهده نظیر بازتابندگی، جذب، عبور و پراکندگی نور را اندازه گیری می کنیم. با استفاده از آنها تابع دی الکتریک  $\epsilon(\omega)$ ، رسانندگی اپتیکی  $\sigma(\omega)$ ، یا فرکانس های برانگیختگی بنیادی را به دست می آوریم. تابع دی الکتریک مختلط وابسته به فرکانس  $\epsilon(\omega)$ ، یا رسانندگی مختلط  $\sigma(\omega)$  مستقیماً به ساختار نواری جامدات مرتبط هستند [۳۶].

### ۳-۲ تابع دی الکتریک مختلط $\epsilon(\omega, q)$

تابع دی الکتریک  $\epsilon(\omega, q)$  پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی خارجی است که به ساختار نواری بلور بسیار حساس است. تابع دی الکتریک  $\epsilon(\omega, q)$  گاز الکترون که وابستگی آن به بردار موج  $(q)$  و بسامد  $(\omega)$  قوی است، پیامدهای چشمگیری در مورد ویژگیهای فیزیکی جامدات در بردارد. در یک حد،  $(q=0)$  یعنی  $\epsilon(\omega, 0)$ ، برانگیختگیهای جمعی دریای فرمی، یعنی پلاسمونهای جمعی و سطحی را توصیف می کند. در حد دیگر  $(\omega=0)$  یعنی  $\epsilon(0, q)$  استتار الکتروستاتیکی بر همکنش های الکترون - الکترون، الکترون - شبکه و الکترون - ناخالصی در بلورها را توصیف می نماید [۳۷]. در مبحث الکتروستاتیک  $\epsilon(\omega)$  بر حسب میدان الکتریکی  $E$  و قطبیدگی  $P$  یعنی چگالی گشتاورهای دو قطبی، به صورت زیر تعریف می شود:

$$D(\omega) = \epsilon_0 E(\omega) + P(\omega) = \epsilon(\omega) \epsilon_0 E(\omega) \quad (1-3)$$

از رابطه (۱-۳) داریم:

$$\epsilon(\omega) = \frac{D(\omega)}{\epsilon_0 E(\omega)} = 1 + \frac{P(\omega)}{\epsilon_0 E(\omega)} \quad (2-3)$$

برای مثال پاسخ دی الکتریک به طول موج بلند،  $\epsilon(\omega, q)$  یا  $\epsilon(\omega)$  گاز الکترون، از معادله

حرکت یک الکترون آزاد در میدان الکتریکی به دست می آید.

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -eE \quad (3-3)$$

اگر  $x$  و  $E$  دارای وابستگی زمانی  $e^{-i\omega t}$  باشند، خواهیم داشت:

$$x = \frac{eE}{m\omega^2} \quad (4-3)$$

$$m\omega^2 x = -eE \quad \text{یا}$$

گشتاور دو قطبی یک الکترون برابر است با  $-ex = -e^2 \frac{E}{m\omega^2}$  و قطبیدگی که به صورت

گشتاور دو قطبی در واحد حجم تعریف می شود برابر است با:

$$p = -nex = -\frac{ne^2}{m\omega^2} E \quad (5-3)$$

در این رابطه  $n$  تراکم الکترونهاست. پس تابع دی الکتریک گاز الکترون آزاد چنین خواهد بود:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m \omega^2} \quad (6-3)$$

بسامد پلاسما با رابطه زیر تعریف می شود:

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m} \quad (7-3)$$

پلاسما محیطی است که تراکم بارهای منفی و مثبت آن مساوی است و لاقبل یک نوع از بارها

متحرک است. در یک جامد، بارهای منفی الکترونها را رسانش با یک تراکم مساوی از بارهای مثبت

مغزهای یونی موازنه می شوند. تابع دی الکتریک را به صورت زیر می نویسیم [۳۷].

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (8-3)$$

ثابت دی الکتریک تحت تأثیر ساختار بلوری و تقارنهای موجود در آن تغییر می کند. ثابت دی

الکتریک با توجه به نوع ساختار بلوری و تقارن های آن تغییر می کند و در حالت کلی یک تانسور

مرتبه دوم می باشد، نه یک کمیت اسکالر، که مولفه های مختلف  $D$  و  $E$  را مطابق رابطه (۳-۲) به هم

مربوط می سازد. در نتیجه رابطه (۳-۱) به صورت زیر درمی آید.

$$\begin{bmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} \quad (۳-۹)$$

تابع دی الکتریک  $\varepsilon(\omega, q)$  برای توصیف پاسخ ماده به میدان الکترومغناطیسی به کار برده می شود و به گونه حساسی به ساختار نواری الکترونی ماده بستگی دارد. در حقیقت طیف‌نمایی اپتیکی در دهه اخیر به عنوان مهمترین وسیله تجربی برای تعیین ساختار نواری گسترش یافته است. در ناحیه‌های طیف فرورسرخ، مرئی و فرابنفش بردار موج  $q$  را معمولاً می توان صفر فرض کرد. در نتیجه با بخشهای حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک سر و کار خواهیم داشت. تانسور دی الکتریک مختلط به صورت زیر تعریف شده است [۳۸]:

$$\varepsilon_{ij}(\omega) = \varepsilon'_{ij}(\omega) + i\varepsilon''_{ij}(\omega) \quad (۳-۱۰)$$

روابط کرامرز کرونیگ برای دو مولفه از تابع دی الکتریک مختلط با روابط (۳-۱۱) و (۳-۱۲) بیان می شود:

$$\varepsilon'_{ij}(\omega) = \text{Re } \varepsilon_{ij}(\omega) = \delta_{ij} + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \text{Im } \varepsilon_{ij}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (۳-۱۱)$$

$$\varepsilon''_{ij}(\omega) = \text{Im } \varepsilon_{ij}(\omega) = \frac{4\pi e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{c,v} \int dk \langle c_k | p^i | v_k \rangle \langle v_k | p^j | c_k \rangle \delta(\varepsilon_{ck} - \varepsilon_{vk} - \omega) \quad (۳-۱۲)$$

در این معادله P بخش کوشی انتگرال و  $|v_k\rangle$  و  $|c_k\rangle$  بیانگر حالت الکترون در نوار ظرفیت و نوار رسانش می باشد. برای فلزات با در نظر گرفتن سهم انتقالات درون نواری<sup>۱</sup> قسمتهای حقیقی و موهومی تانسور دی الکتریک از روابط زیر به دست می آید [۳۹]:

<sup>۱</sup>. intraband transitions



$$\operatorname{Re} \varepsilon_{ij}^{[intra]}(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pl,ij}^2}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} \quad (13-3)$$

$$\operatorname{Im} \varepsilon_{ij}^{[intra]}(\omega) = \frac{\Gamma \omega_{pl,ij}^2}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} \quad (14-3)$$

که در آن  $\omega_p$  فرکانس پلاسمون و  $\Gamma$  طول عمر پهن شدگی<sup>۱</sup> می باشد. با دانستن قسمت موهومی تابع دی الکتریک به کمک روابط کرامرز - کرونیگ می توان کلیه ثابتهای اپتیکی دیگر را به دست آورد.

### ۳-۳ ضریب شکست و ضریب خاموشی

بخش حقیقی ضریب شکست، میزان انتشار موج و بخش موهومی آن (ضریب خاموشی)، پاشندگی امواج را نشان می دهد و معیاری از جذب امواج الکترومغناطیس می باشد. با استفاده از تانسور دی الکتریک، ضریب شکست و ضریب خاموشی که قسمت های حقیقی (n) و موهومی (k) ضریب شکست مختلط اند، با رابطه زیر داده می شوند:

$$n_{ii}(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon_{ii}(\omega)| + \operatorname{Re} \varepsilon_{ii}(\omega)}{2}} \quad (15-3)$$

$$k_{ii}(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon_{ii}(\omega)| - \operatorname{Re} \varepsilon_{ii}(\omega)}{2}} \quad (16-3)$$

ضریب خاموشی معیاری از میزان جذب پرتو الکترومغناطیسی توسط آن ماده است. ضریب خاموشی کوچک به معنای عبور آسان امواج الکترومغناطیسی از درون محیط و ضریب خاموشی بزرگ به معنای نفوذ سخت امواج به درون محیط است [۴۰]. مقدار ضریب شکست در انرژی صفر، ضریب شکست استاتیک نامیده می شود. نمودار ضریب شکست بر حسب انرژی فوتون همان نمودار پاشندگی

<sup>۱</sup>. lifetime broadening

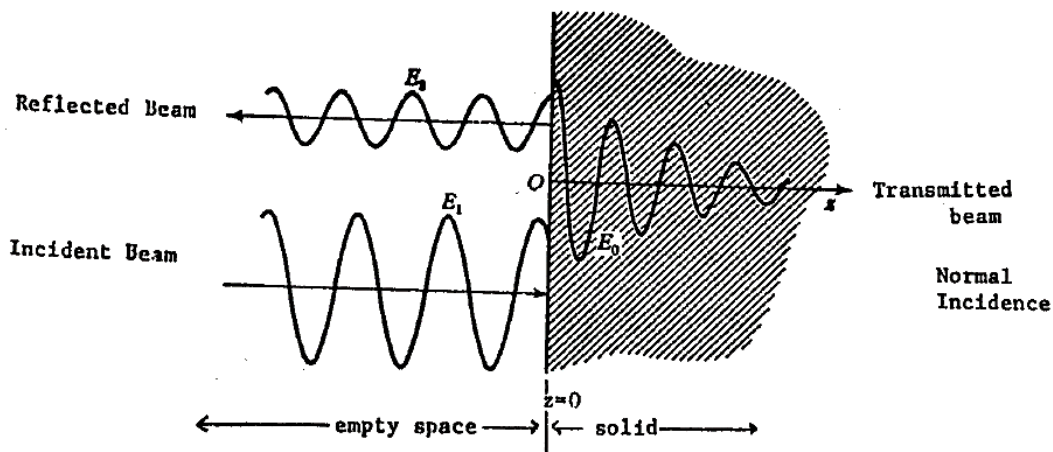
است. در مواردی که ضریب شکست با افزایش انرژی کم می شود، جذب اتفاق افتاده و پاشندگی نابهنجار داریم [۴۱].

### ۳-۴ بازتابندگی

اگر ثابت های اپتیکی را بدانیم می توانیم بازتابندگی را بیابیم. حال این پرسش مطرح است، اگر بازتابندگی را بدانیم، می توانیم ثابت های اپتیکی را بیابیم؟ دو ثابت اپتیکی وجود دارد، در نتیجه دو اندازه گیری مستقل، به گونه ای که بازتابندگی در دو زاویه مختلف داشته باشیم مورد نیاز است. اگر اندازه گیری های بازتابندگی را برای همه فرکانس ها انجام دهیم، در اندازه گیری فرود قائم باز هم می توانیم هر دو ثابت اپتیکی  $n$  و  $k$  را بیابیم. این کار ممکن است، زیرا بخش های حقیقی و موهومی یک تابع فیزیکی مختلط مستقل نیستند.  $n$  و  $k$  از طریق رابطه کرامرز - کرونیک، به هم مربوطند. از آنجاییکه اندازه گیری های فرود عمودی در عمل ساده ترند مطالعه خصوصیات اپتیکی جامدات تنها با اندازه گیری های فرود عمودی و سپس با یک آنالیز کرامرز - کرونیک داده های بازتابندگی، برای بدست آوردن وابستگی به فرکانس توابع دی الکتریک  $\epsilon_2(\omega)$  و  $\epsilon_1(\omega)$  یا وابستگی به فرکانس  $n$  و  $k$  کاملاً ممکن است. بیشتر اندازه گیری خصوصیات اپتیکی جامدات، بازتابندگی برخورد قائم را شامل می شود، که در شکل ۱-۳ نشان داده شده است. درون جامد موج ضعیف می شود، پس فرض می کنیم جامد آنقدر ضخیم هست که بتوان بازتاب ها از سطح پشتی را نادیده گرفت. در نتیجه برای انتشار یک بعدی، می توان موج درون جامد را به صورت زیر نوشت:

$$E_x = E_0 e^{i(kz - \omega t)} \quad (۱۷-۳)$$

که ثابت انتشار نور با  $K = (\omega/c)N_{\text{complex}}$ ، مشخص می شود.



شکل ۳-۱: طرح واره ای از بازتابندگی امواج الکترومغناطیسی در برخورد قائم به فصل مشترک دو محیط [۳۶].

محاسبه ضریب بازتاب نور، تحت تابش عمودی بر روی یک ساختار بلوری می تواند اطلاعات جامعی را در مورد یک سیستم در اختیار ما قرار دهد. ضریب بازتاب،  $R(\omega)$ ، تابعی مختلط است که در سطح بلور به صورت نسبت میدان الکتریکی بازتابنده،  $E(\text{ref})$ ، به میدان الکتریکی فرودی،  $E(\text{inc})$ ، تعریف شده و با رابطه (۳-۱۸) داده می شود:

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)-1}}{\sqrt{\varepsilon(\omega)+1}} \right|^2 \quad (۳-۱۸)$$

ضریب شکست،  $n(\omega)$ ، و ضریب خاموشی،  $k(\omega)$ ، در بلور با رابطه (۳-۱۹) به ضریب بازتاب، تحت تابش عمودی، مربوط می شوند:

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (۳-۱۹)$$

### ۳-۵ ضریب جذب

ضریب جذب یک ماده تعداد فوتون های جذب شده بر واحد طول است. در اثر جذب فوتون،

الکترون های نوار ظرفیت برانگیخته می شوند و به نوار رسانش می روند. به جذب فوتون توسط الکترون ها جذب بین نواری می گویند. ضریب جذب با رابطه (۳-۲۰) به قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکترونیک مربوط می شود.

$$I(\omega) = \sqrt{2} \frac{\omega}{c} [(\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2)^{1/2} - \varepsilon_1(\omega)]^{1/2} \quad (۳-۲۰)$$

### ۳-۶ رسانندگی اپتیکی

رسانندگی اپتیکی مربوط به گذارهای بین نواری است که با معادله (۳-۲۱) داده شده است:

$$\sigma(\omega) = \left(\frac{i\omega}{4\pi}\right)(1 - \varepsilon_2(\omega)) \quad (۳-۲۱)$$

یک فوتون می تواند الکترون را از حالت اشغال شده در نوار ظرفیت به حالت اشغال نشده در نوار رسانش برانگیخته کند، به این گذار بین نواری رسانندگی اپتیکی و به جذب فوتون توسط الکترون ها جذب بین نواری گفته می شود. در نمودار رسانندگی، نقاطی که شاهد حضور قله هستیم، بیشترین میزان جریان رسانشی الکترون ها وجود دارد. قله ها در قسمت حقیقی رسانندگی اپتیکی، قسمت موهومی تابع دی الکترونیک، ضریب خاموشی و در انرژی های مشابه اتفاق می افتد.

برای مشخص کردن تانسور دی الکترونیک، تقارنهای چرخشی بلور مورد نیاز هستند. تانسور دی-

الکترونیک برای سیستم های مختلف به صورت زیر است [۳۹]:

$$\begin{pmatrix} \text{Im } \varepsilon_{xx} & \text{Im } \varepsilon_{xy} & \text{Im } \varepsilon_{xz} \\ \text{Im } \varepsilon_{yx} & \text{Im } \varepsilon_{yy} & \text{Im } \varepsilon_{yz} \\ \text{Im } \varepsilon_{zx} & \text{Im } \varepsilon_{zy} & \text{Im } \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (۳-۲۲) \text{ سه میلی}$$

$$\begin{pmatrix} \text{Im } \varepsilon_{xx} & \text{Im } \varepsilon_{xy} & 0 \\ \text{Im } \varepsilon_{yx} & \text{Im } \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \text{Im } \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (23-3) \text{ تک میلی}$$

$$\begin{pmatrix} \text{Im } \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \text{Im } \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \text{Im } \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (24-3) \text{ راستگوشه (ارتورومبیک)}$$

$$\begin{pmatrix} \text{Im } \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \text{Im } \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \text{Im } \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (25-3) \text{ چهارگوشی و ششگوشی (تتراگونال و هگزاگونال)}$$

$$\begin{pmatrix} \text{Im } \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \text{Im } \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \text{Im } \varepsilon_{xx} \end{pmatrix} \quad (26-4) \text{ مکعبی}$$

### ۳-۷ روابط کرامرز-کرونیگ<sup>۱</sup>

با استفاده از روابط کرامرز-کرونیگ می‌توان بخش حقیقی پاسخ یک دستگاه کنش‌پذیر خطی را به‌دست‌آورد به شرط آنکه بخش موهومی این پاسخ در تمام بسامدها معلوم باشد و بر عکس. این روابط در تحلیل آزمایش‌های اپتیکی بر روی جامدات نقش اصلی را ایفا می‌کند. پاسخ هر دستگاه کنش‌پذیر خطی را می‌توان به صورت برهنه‌ی پاسخ‌های مجموعه‌ای از نوسانگرهای میرا نمایش داد. در اثر اعمال نیروی خارجی  $F_\omega$ ، پاسخ سیستم  $\chi_\omega$  به تحریک خارجی، با تابع پاسخ  $G(\omega)$  داده

<sup>۱</sup> Kramers-Kronig relations

می‌شود. تابع پاسخ  $G(\omega) = G'(\omega) + iG''(\omega)$  این مجموعه از نوسانگرها به گونه زیر تعریف می‌شود:

$$\chi_\omega = G(\omega)F_\omega \quad (27-3)$$

که در آن نیروی اعمال شده  $F \exp(-i\omega t)$  بخش حقیقی و  $F_\omega \exp(-i\omega t)$  و جابجایی کل  $x$  بخش حقیقی

است. به کمک معادله حرکت زیر:

$$\sum_j M_j \left( \frac{d^2}{dt^2} + \rho_j \frac{d}{dt} + \omega_j^2 \right) x = F \quad (28-3)$$

برای تابع مختلط پاسخ این دستگاه از نوسانگرها داریم:

$$G(\omega) = \sum_j \frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\rho_j} = \sum_j f_j \frac{\omega_j^2 - \omega^2 + i\omega\rho_j}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\rho_j^2} \quad (29-3)$$

که در آن ثابتهای  $f_j$  و بسامدهای واهلش  $\rho_j$  همگی برای یک دستگاه کنش پذیر مثبت‌اند.

در یک دستگاه مکانیکی با جرم‌های  $M_j$  داریم  $f_j = \frac{1}{M_j}$  اگر  $G(\omega)$  قطبش پذیری دی‌الکتریکی

اتم‌های با تراکم  $n$  باشد،  $f$  به شکل حاصل ضرب یک قدرت نوسانگری در  $\frac{ne^2}{m}$  خواهد بود، گفته

می‌شود که چنین تابع پاسخ دی‌الکتریکی به شکل کریمرز-هایزنبرگ است. هر تابعی با ویژگیهای

زیر روابط کرامرز - کرونیگ را ارضاء می‌کند:

۱- قطب‌های  $G(\omega)$  همگی زیر محور حقیقی باشند.

۲- انتگرال  $\frac{G(\omega)}{\omega}$  گرد یک نیم‌دایره نامتناهی در نیمه بالای صفحه  $\omega$  مختلط صفر شود. در

این صورت کافی است که برای  $|G(\omega)| \rightarrow \infty$  به‌طور یکنواخت به سوی صفر میل کند.

۳- نسبت به  $\omega$  حقیقی، تابع  $G'(\omega)$  زوج و تابع  $G''(\omega)$  فرد باشد. انتگرال کوشی را به شکل

زیر در نظر بگیرید.

$$G(\omega) = \frac{1}{i\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega} \quad (30-3)$$

که در آن، P بخش اصلی انتگرال است. طرف راست باید به وسیله انتگرالی روی نیم دایره ای در بینهایت در نیم صفحه بالایی کامل شود، ولی در ویژگی ۲ دیدیم که این انتگرال صفر می شود. اکنون اگر  $G(\omega)$  را به ۲ قسمت موهومی و حقیقی تقسیم کنیم داریم:

$$\operatorname{Re} G(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (31-3)$$

$$\operatorname{Im} G(\omega) = \frac{-1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re} G(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (32-3)$$

مشاهده می شود که قسمت های حقیقی و موهومی تابع پاسخ  $G(\omega)$  مستقل نیستند بلکه به

وسیله روابط پراکندگی به هم مربوط می شوند. با توجه به ویژگی ۳ مبنی بر اینکه:  $G(-\omega) = G^*(\omega)$  داریم:  $\frac{1}{\omega' - \omega} + \frac{1}{\omega' + \omega} = \frac{2\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$  و

$$G'(\omega) = \operatorname{Re} G(\omega) = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' G''(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (33-3)$$

$$G''(\omega) = \operatorname{Im} G(\omega) = \frac{-2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{G'(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (34-3)$$

روابط فوق، روابط پراکندگی کرامرز-کرونیگ نام دارند که برای تحلیل داده های باز تابندگی اپتیکی به کار می روند و این مهم ترین کاربرد آنهاست [۴۰]. تحت تبدیلات کرامرز-کرونیگ، بدون در نظر گرفتن جفت شدگی اسپین مدار و میدان مغناطیسی، تانسور دی الکتریک برای یک ساختار مکعبی به صورت زیر است [۳۹].

$$\begin{pmatrix} \text{Im } \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \text{Im } \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \text{Im } \varepsilon_{xx} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{کرامرز-کرونیک}} \begin{pmatrix} \text{Re } \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \text{Re } \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \text{Re } \varepsilon_{xx} \end{pmatrix}$$



# فصل چہارم

نظریہ

تابع چگالی

نظریه‌های مکانیک کلاسیک و کوانتومی دو نظریه اصلی مورد استفاده برای توصیف اکثر قریب به اتفاق سیستم‌های فیزیکی هستند اما محدودیت اصلی‌شان این است که تنها مسائل تک ذره‌ای و دو ذره‌ای در این چارچوب‌ها دارای حل تحلیلی دقیق هستند و برای بررسی سیستم‌هایی با بیش از دو ذره در حالت کلی باید دست به دامان نظریه‌ها و تقریب‌های توسعه یافته و روش‌های محاسباتی شد. راهکارهای متعدد و مختلفی برای توصیف محاسباتی سیستم‌های بس‌ذره‌ای<sup>۱</sup> توسعه پیدا کرده است که هر یک بسته به اهداف مسائل و خواص مورد مطالعه از تقریب‌ها و مدل‌های نظری مختلفی استفاده می‌کنند. یکی از نظریه‌های مهم و پایه برای بسیاری از محاسبات سیستم‌های بس ذره‌ای نظیر مولکول‌ها و بلورها، نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) است. استفاده از این نظریه به همراه رهیافت کوهن-شم<sup>۲</sup> منجر به یک توصیف تک ذره‌ای از سیستم‌های بس‌ذره‌ای می‌شود که تأثیر بسزایی در ساده‌سازی محاسبات آن‌ها دارد و به همین دلیل امروزه مبنای اکثر محاسبات کوانتومی بلورها که جزو مسائل اساسی فیزیک ماده چگال هستند به شمار می‌رود.

#### ۴-۲ نظریه تابعی چگالی

#### ۴-۲-۱ مسئله بس ذره‌ای

بررسی مجموعه‌ای از اتم‌ها، مولکول‌ها، جامدات، گازها، مایعات و غیره را شکل می‌دهند که تشکیل شده از الکترون‌ها و هسته‌ها می‌باشند. توسط مکانیک کوانتومی می‌توان یک سیستم بر هم‌کنشی از الکترون‌ها و هسته‌ها را توسط معادله شرودینگر توصیف کرد:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (1-4)$$

<sup>1</sup> Many body

<sup>2</sup> Kohn-Sham

که  $E$  ویژه مقدار انرژی می باشد و عملگر هامیلتونی بس ذره‌ای به صورت زیر می باشد:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_e} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \nabla_i^2 + \sum_{I=1}^{N_{nuc}} \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\right) \nabla_I^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|r_i - R_I|} + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|R_I - R_J|} \quad (2-4)$$

در معادله (۲-۴) بخش اول و دوم انرژی‌های جنبشی الکترون‌ها و هسته‌ها و سه بخش آخر به ترتیب بر هم کنش‌های بین الکترون الکترون، الکترون هسته، و هسته هسته می باشند.  $\hbar$  ثابت پلانک،  $m$  و  $M$  به ترتیب جرم‌های الکترون و هسته،  $Z_I$  عدد اتمی  $I$  امین اتم،  $e$  بار الکترون،  $r_i$  و  $R_I$ ، موقعیت  $i$  امین الکترون و  $I$  امین هسته می باشند. حل معادله شرودینگر بس ذره‌ای بسیار پیچیده است. برای ساده سازی مسئله از تقریب بورن اوپنهایمر<sup>۱</sup> استفاده شده است، که بیان می کند هسته‌ها بسیار سنگین تر از الکترون‌ها هستند و بسیار کندتر از الکترون‌ها حرکت می کنند. در نتیجه می توان حرکت هسته‌ها و الکترون‌ها را جدا کرد. فرض بر این است که موقعیت اتم‌ها ثابت شده‌اند در حالی که الکترون‌ها در زمینه میدان باری هسته‌ها حرکت می کنند. تابع موج کلی می تواند به دو قسمت تابع موج الکترونی و یونی جدا سازی شود. در نتیجه معادله شرودینگر برای قسمت الکترونی به صورت زیر نوشته می شود:

$$\hat{H}_e(r, R) \Psi_e = E_e \Psi_e(r, R) \quad (3-4)$$

که عملگر هامیلتونی الکترونی، توسط معادله زیر بیان می شود:

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \hat{V}_{ext} \quad (4-4)$$

$\hat{V}_{ext}$  پتانسیلی است که توسط هسته‌ها روی الکترون‌ها عمل می کند. توجه شود که برهم کنش بین هسته‌ها به عنوان یک پارامتر وارد می شود. اگر چه تعداد درجات آزادی سیستم توسط تقریب بورن- اوپنهایمر می تواند کاهش یابد اما حل مسئله بر هم کنشی الکترون-الکترون همچنان مشکل است. بعلاوه تابع موج الکترونی وابسته به مختصات تمام الکترون‌ها است.

<sup>1</sup> Born-Oppenheimer

#### ۴-۲-۲ نظریه هوهنبرگ-کوهن<sup>۱</sup>

هدف اصلی نظریه تابعی چگالی، توصیف یک سیستم برهم‌کنشی براساس چگالی الکترونی بجای توابع موج بس ذره‌ای می‌باشد. نظریه تابعی چگالی بر اساس دو نظریه بنیادی، توسط هوهنبرگ و کوهن پایه ریزی شد [۴۲]. نظریه اول بیان می‌کند که انرژی حالت پایه یک سیستم بر هم‌کنشی از الکترون‌ها، تابعی یکتا<sup>۲</sup> از چگالی بار الکترونی است. نظریه اول هوهنبرگ-کوهن فقط اثباتی است بر وجود تابعی از چگالی الکترونی، اگرچه شکل درست تابعی ناشناخته است. از نظریه دوم هوهنبرگ-کوهن این مطلب اثبات می‌شود که انرژی کل هر سیستم بس الکترونی نسبت به چگالی حالت پایه آن، از یک اصل وردشی<sup>۳</sup> تبعیت می‌کند. بر طبق این نظریه مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی در معادله ۴-۴ می‌تواند به صورت زیر بیان شود:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E[n(\mathbf{r})] \quad (۵-۴)$$

که  $E[n(\mathbf{r})]$  تابعی انرژی کل است و  $n(\mathbf{r})$  چگالی الکترونی است. اگر شکل تابعی انرژی مشخص باشد، می‌توان چگالی الکترونی را تا جایی که تابعی انرژی توسط اصل وردشی کمینه شود تغییر داد:

$$\left. \frac{\delta E[n(\mathbf{r})]}{\delta n} \right|_{n=n_0} = 0 \quad (۶-۴)$$

از معادله (۶-۴) چگالی الکترونی که به کمینه انرژی مربوط می‌شود، چگالی حالت پایه  $n_0(\mathbf{r})$  می‌باشد. بر طبق نظریه اول، انرژی حالت پایه می‌تواند به صورت زیر بیان شود:

$$E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle = E[n_0(\mathbf{r})] \quad (۷-۴)$$

#### ۴-۲-۳ معادلات کوهن-شم<sup>۴</sup>

راه حلی برای کاهش مسئله بس ذره‌ای حقیقی، به یک مسئله‌ی تک الکترونی، توسط کوهن و

<sup>1</sup> Hohenberg-Kohn

<sup>2</sup> Unique functional

<sup>3</sup> Variational principle

<sup>4</sup> Kohn-Sham

شم مطرح شد. الکترون‌های برهم‌کنشی، جایگزین الکترون‌های غیر برهم‌کنشی شد، که تحت یک پتانسیل موثر<sup>۱</sup> حرکت می‌کنند. انرژی تابعی کل در معادله (۴-۵) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$E[n(\mathbf{r})] = T_0[n(\mathbf{r})] + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' + \int V_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} + E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] \quad (۸-۴)$$

در معادله (۸-۴)،  $T_0[n(\mathbf{r})]$  تابعی انرژی جنبشی سیستم الکترونی غیر برهم‌کنشی، بخش دوم انرژی الکترواستاتیکی یا انرژی هارتری<sup>۲</sup> و بخش سوم انرژی خارجی ناشی از هسته‌ها می‌باشند و بخش آخر همه‌ی باقی مانده آنچه که تصحیح کننده انرژی است، که انرژی تبادلی و همبستگی<sup>۳</sup> نامیده می‌شود. با کمینه کردن معادله (۸-۴) نسبت به چگالی، معادلات تک ذره‌ای کوهن شم برابر است با:

$$\left[ -\frac{\nabla_i^2}{2} + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (۹-۴)$$

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V_{\text{ext}} + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{\delta E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} \quad (۱۰-۴)$$

توجه شود که توابع موج کوهن-شم  $\Psi_i(\mathbf{r})$ ، هیچ معنی فیزیکی مستقیمی را نمی‌دهند. آن‌ها فقط توابع کمکی<sup>۴</sup> برای محاسبه چگالی الکترونی هستند. چگالی الکترونی می‌تواند به صورت زیر باشد:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (۱۱-۴)$$

#### ۴-۲-۴ تابعی‌های تبادلی-همبستگی<sup>۵</sup>

رویکرد کوهن-شم نشان داد که چطور مسئله بس‌ذره‌ای را به یک مسئله تک الکترونی موثر تبدیل کنیم. البته نیاز است که تابعی تبادلی همبستگی،  $E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]$  مشخص و تعیین شود. متأسفانه، شکل

<sup>1</sup> Effective potential

<sup>2</sup> Hartree energy

<sup>3</sup> Exchange and correlation energy

<sup>4</sup> Auxiliary functions

<sup>5</sup> Exchange-Correlation Functionals

دقیق تابعی همبستگی-تبادلی به سادگی شناخته شده نیست؛ بنابراین باید از تقریب استفاده نمود.

#### ۱-۴-۲-۴ تقریب چگالی موضعی<sup>۱</sup> (LDA)

ساده‌ترین تقریب، تقریب چگالی موضعی (LDA) نامیده می‌شود. تقریب چگالی موضعی برای پتانسیل تبادلی-همبستگی توسط کوهن-شم در سال ۱۹۶۵ ارائه شد، که از انرژی تبادلی-همبستگی گاز الکترونی همگن بدست می‌آید. تابعی تبادلی-همبستگی LDA به صورت زیر است:

$$E_{xc}^{LDA}[n(\mathbf{r})] \approx \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}^{homo}(n(\mathbf{r})) d\mathbf{r} \quad (۱۲-۴)$$

که  $\varepsilon_{xc}^{homo}$ ، انرژی همبستگی-تبادلی چگالی گاز الکترونی همگن، با چگالی الکترونی  $n(\mathbf{r})$  می‌باشد. بنابراین تنها اطلاعاتی که نیاز می‌باشد، انرژی تبادلی-همبستگی گاز الکترونی است که محاسبه دقیق آن امکان پذیر است. به دلیل آنکه تابعی، از چگالی الکترونی یکنواخت موضعی بدست می‌آید انتظار خطا برای مسائلی می‌رود که چگالی‌های آن‌ها به سرعت تغییر می‌کند [۴۳]. در این پایان نامه از این تقریب با تابعی CA بهره گرفته شده است. اگرچه تقریب LDA برای جامدات کپه‌ای بسیار خوب کار می‌کند، اما در صورت تغییر سریع چگالی الکترونی، همانند داخل اتم و مولکول، بهتر است از تابعی دیگری استفاده شود.

#### ۲-۴-۲-۴ تقریب شیب تعمیم یافته<sup>۲</sup> (GGA)

تقریب پر استفاده دیگری که نسخه تعمیم یافته و بهبود یافته LDA محسوب می‌شود تقریب GGA می‌باشد که فرمول بندی‌های متفاوتی از آن توسعه پیدا کرده است. تلاشهای زیادی برای پیدا کردن تابعی خوب و مناسب از این تقریب انجام گرفته است. دو تا از پر استفاده‌ترین تابعی‌های این تقریب، تابعی پر دو-وونگ (PW91) [۴۴] و پر دو-بورگ-ارنزهوف (PBE) [۴۵] می‌باشد. در تقریب GGA، انرژی تبادلی-همبستگی علاوه بر چگالی الکترونی در هر نقطه، به تغییرات چگالی در

<sup>۱</sup> Local Density Approximation

<sup>۲</sup> Generalized Gradient Approximation

آن نقطه نیز وابسته است، و برابر است با:

$$E_{xc}^{GGA} = \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}(n(\mathbf{r}), |\nabla n(\mathbf{r})|) d\mathbf{r} = \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}^{homo} F_{xc}(n, |\nabla n|) d\mathbf{r} \quad (13-4)$$

که در این رابطه عبارت  $F_{xc}$  یک تابعی بدون بعد است که به صورت زیر نوشته می شود:

$$F_{xc}(n, |\nabla n|) = F_x(n, |\nabla n|) + F_c(n, |\nabla n|) \quad (14-4)$$

محاسبه  $F_c$  مشکل تر از  $F_x$  می باشد اگر چه نقش آن در عبارت بالا کمتر است، سهم انرژی همبستگی در مقایسه با انرژی تبادل بسیار ناچیز است. برای محاسبه  $F_c$  تابعی های مختلفی پیشنهاد شده است. تنها نام تابعی های مربوط به  $F_x$  ذکر می شود که در بالا دو تا از مهم ترین تابعی های این تقریب ذکر شد و این به دلیل اهمیت بیشتر  $F_x$  نسبت به  $F_c$  می باشد [45]. برای سیستم های قطبیده اسپینی، چگالی انرژی تبادل-همبستگی در این تقریب به صورت زیر می باشد:

$$\varepsilon_{xc}^{\pm}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{xc}^{\pm}(n^+(\mathbf{r}), n^-(\mathbf{r}), |\nabla n^+(\mathbf{r})|, |\nabla n^-(\mathbf{r})|) \quad (15-4)$$

#### ۴-۲-۵ روش های حل معادلات تک ذره ای کوهن-شم

تنوع زیادی در کدهای ابتدا به ساکن وجود دارد که از روش DFT برای محاسبه ساختار الکترونی مواد استفاده می کنند [46]. تفاوت اساسی بین کدها و روش های مختلف، عموماً مربوط به مجموعه پایه ای است که توابع موج کوهن-شم بر اساس آن بسط داده می شوند، همچنین تقریب های به کار گرفته شده در آنها که معمولاً یک موازنه بین دقت و سرعت در این کدها وجود دارد. مجموعه پایه هایی که برای بسط تابع موج کوهن-شم  $\psi_i(\mathbf{r})$  بکار می روند، دارای سه گروه عمده می باشند:

۱- روش امواج تخت (PW)<sup>۱</sup>: کدهایی نظیر VASP و QUANTUM ESPRESSO و غیره بر این مبنا می باشند.

<sup>1</sup> Plane wave

۲- روش اوربیتال های جایگزیده: در این روش پایه ها بیشتر رفتار اتمی از خود نشان می دهند. کد SIESTA بر این روش استوار است.

۳- روش کره های اتمی، نظیر موج تخت تقویت شده خطی<sup>۱</sup> (LAPW)، اوربیتال مافین-تین خطی (LMTO)<sup>۲</sup>. در این روش با در نظر گرفتن کره های اتمی فرضی (کره مافین-تین)، همچنین شعاع مافین-تین و انتخاب اوربیتال اتمی به عنوان پایه درون کره ها و امواج تخت در خارج کره ها به حل مسئله می پردازد. این روش تلفیقی از دو روش بالا است که از دو نوع پایه استفاده می کند. کد محاسباتی WIEN2k بر این روش استوار می باشد.

#### ۴-۳ کد SIESTA<sup>۳</sup>

کد سیستا بر مبنای روش دوم، یعنی بسط تابع موج کوهن-شم بر مبنای ترکیب خطی از اوربیتال های جایگزیده ی اتمی (LCAO) به عنوان پایه، و تقریب شبه پتانسیل برای توصیف الکترون های مغزی و هسته می باشد. در این قسمت توصیف مختصری از SIESTA ارائه می شود و توصیفی دقیق تر را می توان در مراجع [۴۶-۴۹] یافت.

#### ۴-۳-۱ مجموعه اوربیتال های اتمی جایگزیده

در کد SIESTA، برای حل معادله ی کوهن-شم، از ترکیب خطی اوربیتال های اتمی عددی جایگزیده به عنوان مجموعه پایه به منظور بسط، استفاده می شود. این اوربیتال های اتمی می توانند به صورت حاصل ضربی از یک تابع شعاعی در یک هماهنگ کروی نوشته شوند:

$$\Phi_{lmn}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (۱۶-۴)$$

که  $R_{n,l}$  یک تابع شعاعی برای اوربیتال  $n, l$  و  $Y_{l,m}$  یک هماهنگ کروی حقیقی برای تکانه زاویه ای

<sup>1</sup> Linearized augmented plane wave

<sup>2</sup> Linearized Muffin-Tin Orbitals

<sup>3</sup> Spanish Initiative for Electronic Simulation with Thousands of Atoms



اوربیتالی  $l$  و عدد کوانتومی مغناطیسی  $m$  می‌باشد. تابع شعاعی فراتر از یک شعاع خاص  $r_c$  صفر می‌شود یعنی  $R_{n,l}(r_c) = 0$ . بر خلاف امواج تخت، دقت نتایج برای یک سیستم داده شده بر مبنای اوربیتال‌های اتمی، وابسته به اندازه و شکل پایه‌هاست. اندازه‌ی تعداد پایه‌ها بر مبنای زتای ( $\xi$ ) چند گانه می‌باشد که می‌توان برای هر  $m$  و  $l$ ، تعداد اختیاری از توابع شعاعی بدون گره استفاده کرد که اوربیتال‌های زتای  $\xi$  مرتبه بالاتر گفته می‌شود [۴۶] هر اوربیتال زتا  $\xi$ ، مربوط به هماهنگ‌های کروی مشابه و مشترک با توابع شعاعی متفاوت می‌باشد. در اینجا به معرفی مجموعه اندازه پایه‌های متفاوت که در SIESTA موجود می‌باشد پرداخته می‌شود:

#### ۱- اوربیتال‌های زتای یگانه <sup>۱</sup> (SZ):

مجموعه پایه‌ی زتای یگانه (SZ)، آرایش الکترون‌های لایه‌ی ظرفیت را پوشش می‌دهد که محتوی همه پوسته‌های باز و در بعضی مواقع پوسته‌های بسته با انرژی بالا می‌باشد. این توابع پایه توسط حل معادله‌ی شعاعی شرودینگر برای اتم، با پتانسیل محدود کننده<sup>۲</sup> بدست می‌آید. پتانسیل محدود کننده توسط پارامترهایی نظیر  $V_0$ ،  $r_{inn}$  و  $r_c$  تعریف می‌شود. در اینجا  $V_0$  میزان نرمی<sup>۳</sup> پتانسیل محدود کننده را تعیین می‌کند. پارامتر  $r_c$  تعیین کننده‌ی شعاع محدودیت برای اوربیتال‌های عددی می‌باشد. شعاع محدود کننده  $r_c$ ، به‌عنوان موقعیت اولین گره‌ی تابع موج با انرژی  $E_{nl} + \Delta E_{nl}$  در نظر گرفته شده است که  $E_{nl}$ ، انرژی مربوط به شبه ویژه حالت اتمی<sup>۴</sup> و  $\Delta E_{nl}$ ، انرژی برانگیختگی اوربیتال شبه اتمی به دلیل محدودیت آن در یک بازه‌ی محدود می‌باشد. مضاف بر آن،  $r_{inn}$ ، شعاع داخلی است که پتانسیل محدود کننده نرم آغاز می‌شود.

#### ۲- اوربیتال‌های زتای دوگانه<sup>۵</sup> (DZ)

اوربیتال‌های زتای دوگانه (DZ) با توجه به ادامه‌ی روند شکافت مجموعه پایه‌ی Gaussian ساخته

<sup>1</sup> Single zeta

<sup>2</sup> Confinement potential

<sup>3</sup> Softness

<sup>4</sup> Pseudo-atomic eigenstate

<sup>5</sup> Double zeta

می‌شود. اوربیتال شکافت، توسط ساختن یک پایه‌ی اوربیتالی تحلیلی<sup>۱</sup> که به آرامی در شعاع  $r_{\text{split}}$  اوربیتال زتای اولیه را منطبق کند، به دست می‌آید. شکل تابع استفاده شده برای اوربیتال شکافت:

$$R_1^{2\xi}(r) = \begin{cases} r^1(a_1 - b_1 r^2) & \text{if } r < r_1^{\text{split}} \\ R_1^{1\xi}(r) & \text{if } r \geq r_1^{\text{split}} \end{cases} \quad (17-4)$$

ثابت های  $a_1$  و  $b_1$  با استفاده از پیوستگی توابع موج و مشتقات آن‌ها در  $r_1^{\text{split}}$  تعیین می‌شوند. تابع شعاعی دومین زتا  $\xi$ ، یعنی  $R_1^{2\xi}(r)$  در  $r \geq r_1^{\text{split}}$  دنباله‌ای مشابه اولین زتا  $\xi$  دارد. شعاع شکافت  $r_1^{\text{split}}$ ، توسط پارامتر نرم شکافت<sup>۲</sup> تعیین می‌شود. این پارامتر، شعاع انطباق ( $r_m$ ) یک اوربیتال تحلیلی که اوربیتال زتای اولی را به پایه‌ی زتای دوگانه می‌شکافد، پیدا می‌کند. شعاع انطباق  $r_m$ ، با مشخص شدن اینکه روند شکافت اوربیتال نسبت به روند اوربیتال زتای اولی باید دارای مقدار split-norm باشد، تعیین می‌شود. مقدار معتبر split-norm در بازه‌ی بین ۰ تا ۱ (به غیر از شامل شدن خود ۰ و ۱) قرار دارد.  $r_c$ ، شعاع محدود کننده‌ی اوربیتال زتای اولی و  $r_m$ ، شعاع محدود کننده‌ی اوربیتال زتای دومی می‌باشد. مقدار  $r_c$ ، توسط انرژی برانگیختگی و مقدار  $r_m$  توسط پارامتر (Split-Norm) کنترل و تعیین می‌شود.

#### ۴-۳-۲ شبه پتانسیل<sup>۳</sup>

پتانسیل کولنی قوی و الکترون‌های مغزی<sup>۴</sup> به شدت مقید در اتم‌ها، باعث تغییراتی بسیار سریع در توابع موج با تعداد زیادی گره می‌شوند. در نتیجه به تعداد زیادی توابع پایه، برای توصیف و ساخت آن‌ها (توابع موج الکترون‌های مغزی) نیاز داریم. رهیافتی برای کاهش تعداد توابع پایه، شبه پتانسیل می‌باشد. برای کاهش تعداد حالت‌ها در محاسبات، می‌توان الکترون‌های یک اتم را به الکترون‌های مغزی و ظرفیت تقسیم نمود. الکترون‌های ظرفیت، الکترون‌هایی هستند که پوسته‌های خارجی اتم را

<sup>1</sup> Analytical orbital

<sup>2</sup> Split norm parameter

<sup>3</sup> Pseudopotential

<sup>4</sup> Core electrons

اشغال می‌کنند و مسئول پیوندهای شیمیایی می‌باشند. بنابراین خواص الکترونی این حالت‌ها به میزان زیادی به محیط شیمیایی آن‌ها بستگی دارد. از طرف دیگر الکترون‌های مغزی الکترون‌هایی هستند که پوسته‌های داخلی اتم و نزدیک به هسته را اشغال می‌کنند. این الکترون‌ها در پیوندهای شیمیایی مشارکت ندارند و خواص الکترونی آن‌ها به میزان جزئی از محیط شیمیایی اطراف تاثیر می‌پذیرد. بنابراین فرض می‌شود پتانسیل حاصل از الکترون‌های مغزی مستقل از محیط است. در نتیجه می‌توان الکترون‌های مغزی را از محاسبات حذف نمود و تنها الکترون‌های ظرفیت را در نظر گرفت. تنها اثری که الکترون‌های مغزی دارند، استتار پتانسیل هسته می‌باشد. پس می‌توان پتانسیل ناشی از الکترون‌های مغزی و هسته را با یک پتانسیل موثر جایگزین کرد. این پتانسیل موثر در محل هسته، تکینه است اما از آنجا که خواص الکترونی مولکول‌ها و جامدات توسط چگالی بار در ناحیه پیوند تعیین می‌شود، نیاز به توصیف دقیق چگالی بار در نزدیکی هسته وجود ندارد. بنابراین می‌توان پتانسیل موثر را با شبه پتانسیل  $V_{PP}$  جایگزین کرد تا از تکینگی در هسته جلوگیری شود و در فواصل دورتر از هسته، پتانسیل صحیح را ایجاد کند. در نتیجه توابع شبه موج با توابع موج اتمی در نزدیک هسته متفاوت‌اند اما در ناحیه پیوندی، در فواصل دور از هسته یکسان می‌باشند. به اتمی که هسته والکترون‌های مغزی آن توسط شبه پتانسیل جایگزین شود، شبه اتم گفته می‌شود. در SIESTA شبه پتانسیل‌های ترولیر-مارتین<sup>1</sup> استفاده می‌شود [۵۰-۵۲]. پتانسیل اتمی تک ذره‌ای موثر که روی الکترون‌های ظرفیت اثر می‌کند، با جمع پتانسیل موثر حاصل از هسته و الکترون‌های مغزی (شبه پتانسیل) به اضافه پتانسیل‌های حاصل از الکترون‌های ظرفیت (پتانسیل هارتری و پتانسیل همبستگی-تبادلی) دیگر برابر است. به دلیل این‌که  $V_{ion,l}^{PP}(\mathbf{r})$  (شبه پتانسیل مربوط به هسته و الکترون‌های مغزی)، شبه موضعی می‌باشد، یعنی این پتانسیل غیر از  $\mathbf{r}$  به عدد کوانتومی  $l$  نیز بستگی دارد، بنابراین می‌توان شبه پتانسیل شبه موضعی را به دو قسمت بلندبرد مستقل از  $l$ ،  $V_{ion}^{local}(\mathbf{r})$  و کوتاه برد وابسته به  $l$ ،  $V_1^{nonlocal}(\mathbf{r})$  تقسیم کرد:

<sup>1</sup> Troullier-Martins pseudopotentials

$$V_{ion,l}^{PP}(\mathbf{r}) = V_{ion}^{local}(\mathbf{r}) + V_l^{nonlocal}(\mathbf{r}) \quad (18-4)$$

عملگر شبه پتانسیل یونی با فرمول بندی ترولیر-مارتین به صورت زیر نوشته می شود [48]:

$$\hat{V}_l^{PP}(\mathbf{r}) = V_{ion}^{local}(\mathbf{r}) + \sum_l V_l^{nonlocal}(\mathbf{r}) \hat{p}_l \quad (19-4)$$

که  $\hat{p}_l$  یک تصویرکننده روی مولفه  $l$  تابع موج است. قسمت وابسته به  $l$ ، به شکل کاملاً غیر موضعی  $\hat{V}^{KB}$  که توسط کلینمن-بای لندر (KB)<sup>1</sup> ارائه شده، تقریب زده می شود [48, 44-50]. نتیجه این است که عملگر شبه پتانسیل برد محدود دارد و به شکل زیر در می آید:

$$\hat{V}_{ion}^{PP}(\mathbf{r}) = V_{ion}^{local}(\mathbf{r}) + \hat{V}^{KB} \quad (20-4)$$

شبه پتانسیل‌ها باید دارای ویژگی‌های زیر باشند: (۱) ویژه مقادیر توابع موج تمام الکترونی برای آرایش مرجع اتمی انتخابی در تطابق با توابع موج شبه اتمی باشد. (۲) تابع موج تمام الکترونی و شبه تابع موج و نیز پتانسیل تمام الکترونی و شبه پتانسیل در خارج از ناحیه مغزی و شعاع مغزی،  $r \geq r_c$  بر هم منطبق باشند. (۳) مقدار بار درون ناحیه مغزی  $r < r_c$ ، که با تابع موج تمام الکترونی و شبه تابع موج محاسبه می شود، یکسان باشد (شرایط پایستگی بار).

$$\int_0^{r_c} r^2 |\psi_1^{ae}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \int_0^{r_c} r^2 |\psi_1^{ps}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \quad (21-4)$$

(۴) پراش امواج در اثر وجود ناحیه مغزی برای پتانسیل کامل و شبه پتانسیل یکسان باشد. برای این منظور باید تغییر فاز امواج ناشی از پتانسیل کامل و شبه پتانسیل یکسان باشد. از آنجا که تغییر فاز در اثر وجود سد پتانسیل به مشتق لگاریتمی تابع موج وابسته است، لذا لازم است مشتق لگاریتمی تابع موج تمام الکترونی و شبه تابع موج در  $r_c$  برابر باشند که  $r_c$  شعاع ناحیه مغزی می باشد.

$$\frac{d}{dr} \ln \psi_1^{ps}(\mathbf{r})|_{r=r_c} = \frac{d}{dr} \ln \psi_1^{ae}(\mathbf{r})|_{r=r_c} \quad (22-4)$$

<sup>1</sup> Kleinman-Bylander

# فصل پنجم

بررسی خواص الکترونی و اپتیکی GaN

و آلیاژهای آن

## ۵-۱ مقدمه

در این فصل نتایج حاصل از مطالعه ساختار الکترونی و اپتیکی گالیوم نیتراید آلیایده با In و Al در دو فاز ورتسایت و زینک بلند، ارائه شده است. برای بررسی ساختار الکترونی، چگالی حالت های کلی و جزئی و ساختار نواری و نیز برای بررسی خواص اپتیکی، قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب جذب و خاموشی، بازتابندگی و رسانندگی GaN محاسبه شدند. محاسبات با استفاده از روش نظریه شبه پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از تقریب چگالی موضعی (LDA) انجام شدند.

## ۵-۲ بهینه سازی پارامترها

در ابتدا و قبل از انجام محاسبات و توضیح درباره آن به منظور افزایش دقت و سرعت همگرایی و همچنین کاهش زمان انجام محاسبات، برخی از پارامترها شامل: انرژی قطع و بردار شبکه بندی ( که تعداد نقاط در فضای وارون را مشخص می کند ) را می بایست بهینه کرد.

## ۵-۲-۱ انرژی قطع

برای محاسبه بسیاری از کمیت های فیزیکی نظیر چگالی بار، پتانسیل و انرژی در ساختارهای متناوب و دوره ای و همچنین تبدیل فوریه کمیت های فیزیکی از فضای وارون به فضای حقیقی و بالعکس نیاز است انتگرال هایی را در این فضاها محاسبه نماییم. برای محاسبه این انتگرال ها در فضاهای مورد نظر این فضاها را شبکه بندی می کنیم. اگر فاصله بین این نقاط را در فضای حقیقی با  $\Delta x$  نمایش دهیم رابطه آن با انرژی قطع به صورت زیر خواهد بود:

$$K_c = \frac{\pi}{\Delta x} \Rightarrow E_{cut} = \frac{\hbar^2 K_c^2}{2m_e} \Rightarrow \text{if } m, \hbar = 1 \Rightarrow \Delta x = \frac{\pi}{\sqrt{2 E_{cut}}} \quad (1-5)$$

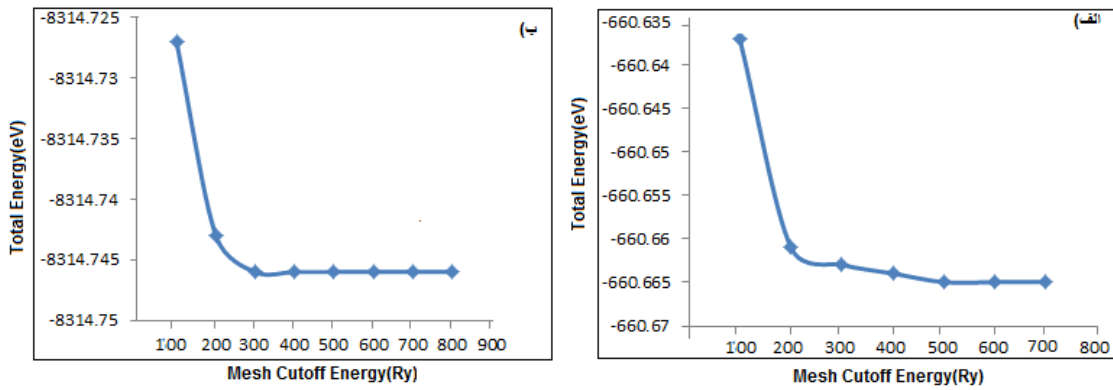
که در آن  $K_c$  بردار موج تخت قطع و  $E_{cut}$  انرژی قطع می باشد. هرچه میزان انرژی قطع بیشتر

شود، در شبکه حقیقی فاصله نقاط کمتر و تعداد آنها بیشتر می شود لذا تعداد بیشتری از آنها در انتگرال گیری مشارکت می کنند که این باعث افزایش دقت انتگرال گیری در فضای حقیقی می شود. انرژی قطع درکد SIESTA بر این اساس تعریف شده است. با توجه به مطالب بیان شده در بالا یکی از پارامترهای مهم در ورودی که انتخاب درست آن باعث افزایش سرعت همگرایی و کاهش زمان محاسبات می شود، انرژی قطع می باشد. به دلیل زیاد بودن تعداد ساختارهای مورد بررسی، تعیین مقدار بهینه شده این پارامتر به ازای هر ساختار امکان پذیر نبود، لذا مقدار انرژی قطع را برای سلول واحد اولیه در ساختارهای کپه ای ورتسایت و زینک بلند بدست آوردیم و مقادیر بدست آمده را برای تمامی محاسبات بعدی استفاده کردیم، که این مقادیر در جدول ۱-۵ و شکل ۱-۵ آمده است. با توجه به جدول و شکل ۱-۵ تغییرات انرژی کل برحسب انرژی قطع به ازای ساختار ورتسایت از  $Ry$  ۵۰۰ و برای ساختار زینک بلند از  $Ry$  ۳۰۰ به بعد روند یکنواختی داشته و تغییرات ناچیز می باشد، بنابراین این مقادیر را برای محاسبات به عنوان پارامتر بهینه برای انرژی قطع انتخاب می کنیم.

جدول ۱-۵: مقادیر بدست آمده برای انرژی کل برحسب انرژی قطع برای GaN خالص در دو فاز ورتسایت و

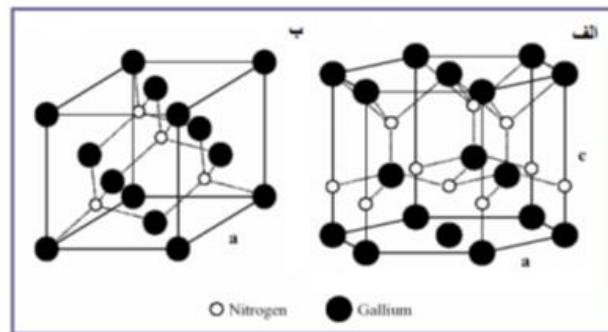
زینک بلند

انرژی قطع ( $Ry$ )	۱۰۰	۲۰۰	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰	۶۰۰
انرژی کل ( $eV$ ) برای ورتسایت	-۶۶۰/۱۶۳۷	-۶۶۰/۱۶۶۱	-۶۶۰/۱۶۶۳	-۶۶۰/۱۶۶۴	-۶۶۰/۱۶۶۵	-۶۶۰/۱۶۶۵
انرژی کل ( $eV$ ) برای زینک بلند	-۸۳۱۴/۷۲۷	-۸۳۱۴/۷۴۳	-۸۳۱۴/۷۴۶	-۸۳۱۴/۷۴۶	-۸۳۱۴/۷۴۶	-۸۳۱۴/۷۴۶



شکل ۵-۱: نمودار انرژی قطع برای GaN خالص الف) ورتسایت و ب) زینک بلند

گالیوم نیتراید در فاز ورتسایت دارای ثابت شبکه تجربی ای برابر  $c=5/185 \text{ \AA}$  و  $a=b=c=4/531 \text{ \AA}$  می باشد [۱۳] و در فاز زینک بلند دارای ثابت شبکه ای برابر  $a=b=c=4/531 \text{ \AA}$  است [۱۷]. گالیوم یک عنصر گروه III با آرایش الکترونی  $[Ar] 3d^{10} 4s^2 4p^1$  و نیتروژن عنصری غیر فلزی از گروه V با آرایش الکترونی  $1s^2 2s^2 2p^3$  می باشد. سلول واحد در نظر گرفته شده در شکل ۵-۲ نشان داده شده است.



شکل ۵-۲: ساختار الف) ورتسایت و ب) زینک- بلند گالیوم نیتراید [۱۲]



## ۵-۲-۲ بردار شبکه بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون

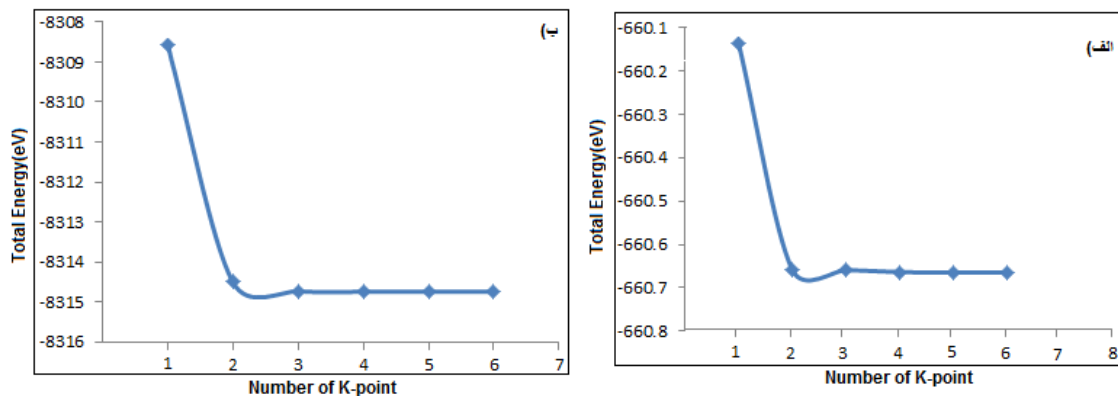
پس از انرژی قطع لازم است تعداد نقاط و بردار مش بندی در فضای وارون  $k$  بهینه شود تا سرعت همگرایی و همچنین دقت نتایج افزایش یابد. در کد محاسباتی SIESTA این مش بندی توسط روش منخارست پک<sup>۱</sup> و در راستای آزادی و دوره ای ساختار انجام می شود [۱۸]. از آنجا که ساختار مورد نظر کپه ای می باشد و ساختارهای کپه ای با سه درجه ی محدودیت در سه راستای  $\vec{c}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{a}$  همراه هستند، به صورت  $N \times M \times K$  انجام می پذیرد. این پارامترها اعداد صحیح ( $N, M, K \neq 0$ ) به منظور شبکه بندی فضای وارون در راستاهای مختلف می باشند که برای ساختار ورتسایت،  $a=b \neq c$  می باشد که از  $N \times N \times M$  استفاده کردیم و برای حالت زینک بلند با راستای  $\vec{a} = \vec{b} = \vec{c}$  از  $N \times N \times N$  استفاده شده است.

برای تعیین تعداد نقاط بهینه، در فایل ورودی مقدار بهینه شده برای انرژی قطع را وارد می کنیم سپس مقدار  $N$  و  $M$  را برای حالت خالص همانطور که در جدول ۵-۲ آمده است تغییر می دهیم و انرژی کل را برای هر انرژی قطع بدست می آوریم. در شکل ۵-۲ این تغییرات رسم شده است.

جدول ۵-۲: انرژی کل برحسب بردار  $K$ ، برای GaN خالص در دو فاز ورتسایت و زینک بلند

بردار $K$ (Wz)	$4 \times 4 \times 1$	$4 \times 4 \times 2$	$4 \times 4 \times 3$	$4 \times 4 \times 4$	$4 \times 4 \times 5$	$4 \times 4 \times 6$
انرژی کل (eV) Wz	-۶۶۰/۱۳۵	-۶۶۰/۶۵۸	-۶۶۰/۶۵۹	-۶۶۰/۶۶۴	-۶۶۰/۶۶۵	-۶۶۰/۶۶۵
بردار $K$ (Zb)	$1 \times 1 \times 1$	$2 \times 2 \times 2$	$3 \times 3 \times 3$	$4 \times 4 \times 4$	$5 \times 5 \times 5$	$6 \times 6 \times 6$
انرژی کل (eV) Zb	-۸۳۰۸/۵۵۷	-۸۳۱۴/۴۹۸	-۸۳۱۴/۷۳۳	-۸۳۱۴/۷۴۶	-۸۳۱۴/۷۴۶	-۸۳۱۴/۷۴۶

<sup>۱</sup>. Monkhorst-pack



شکل ۵-۳: نمودار بردار k-point در راستای Z برای GaN خالص در دو فاز الف (Wz) و ب (Zb)

با توجه به نتایج بدست آمده و همچنین جدول و شکل ۵-۳ می بینیم برای ساختار ورتسایت پس از مقدار  $4 \times 4 \times 5$  و برای ساختار زینک بلند پس از مقدار  $4 \times 4 \times 4$ ، تغییرات انرژی کل ناچیز است، بنابراین این دو مقدار را بعنوان مقدار بهینه برای هر یک از دو ساختار انتخاب نموده و برای تمامی ساختارهای دارای ناخالصی نیز به عنوان مقدار بهینه انتخاب شد.

### ۵-۲-۳ مجموعه پایه ها

یکی دیگر از کمیت هایی که باعث افزایش دقت محاسبات می شود انتخاب یک پایه مناسب به ازای اوربیتال های اتم های تشکیل دهنده ساختار مورد بررسی می باشد. همانطور که در فصل چهارم نیز اشاره شد کد محاسباتی SIESTA توابع موج تک ذره ای کوهن-شم را برحسب ترکیب خطی از پایه های اوربیتال های اتمی بسط می دهد. اوربیتال های اتمی را می توان به صورت حاصلضرب تابع شعاعی در هماهنگ های کروی در نظر گرفت. دقت محاسبات وابسته به شکل و اندازه این پایه ها می باشد. در این پایان نامه جهت بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی از مجموعه پایه DZP استفاده شده است.

### ۳-۵ بهینه سازی ساختار

پس از بهینه سازی پارامترهای مورد نیاز برای انجام محاسبات، و پیش از بررسی خواص الکترونی لازم است ساختار و موقعیت اتم ها بهینه شوند. این کار توسط رهیافت دینامیک مولکولی (MD) انجام می گیرد. این رهیافت به مطالعه دینامیک یونی و نیروهای بین اتمی می پردازد. روش های دینامیک مولکولی متفاوتی وجود دارد، در انجام محاسبات از روش شیب همیوگ (CG) استفاده شده است که توسط آن موقعیت اتم ها دائما تغییر می کند و در وضعیت های متفاوت نیروی بین آنها توسط روش هلمن- فاینمن تا زمانیکه انرژی کل ساختار و سیستم به ازای موقعیت اتم ها و یون ها کمینه شود ادامه می یابد. دقت نیروی بین اتمی و بیشینه تغییرات آن به عنوان پارامتر ورودی تعریف می شوند. در جدول ۳-۵ مهم ترین پارامترهای ورودی برای انجام محاسبات آورده شده اند.

جدول ۳-۵: پارامترهای ورودی محاسبات برای Zb و Wz

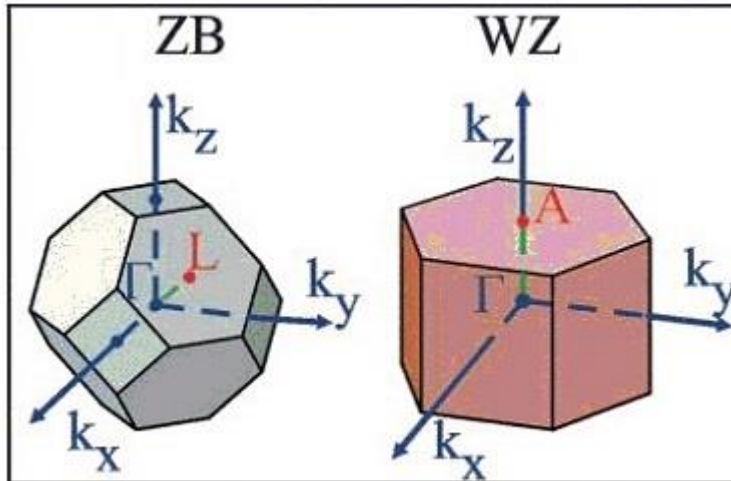
تقریب کد	شبه پتانسیل	روش دینامیک مولکولی (MD) شیب همیوگ (CG)
تابعی همبستگی-تبادلی	LDA(CA)	همگرایی نیرو $\leq 0.04 \frac{eV}{\text{\AA}}$
انرژی قطع wz	۵۰۰ Ry	مجموعه پایه ها دوگانه قطبیده (DZP)
انرژی قطع zb	۳۰۰ Ry	بردار شبکه بندی فضای k (wz) 4x4x5
آرایش لایه ظرفیت گالیوم	$3d^{10}4s^24p^1$	بردار شبکه بندی فضای k (zb) 4x4x4
آرایش لایه ظرفیت نیتروژن	$2s^22p^3$	همگرایی چگالی بار $10^{-5}$

## ۴-۵ بررسی خواص الکترونی و اپتیکی گالیوم نیتراید خالص (Wz و Zb)

برای بررسی خواص الکترونی و اپتیکی گالیوم نیتراید ابتدا ساختار را بهینه می کنیم سپس با بدست آوردن پارامترهای بهینه شده ساختار شامل موقعیت اتمها و ثابت های شبکه به بررسی خواص الکترونی و اپتیکی ساختار می پردازیم. در قسمت خواص الکترونی به بررسی ساختار نواری، چگالی حالت های کلی (DOS) و جزئی (PDOS) می پردازیم و در بخش خواص اپتیکی، قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکترونیک، ضریب جذب، ضریب خاموشی، بازتابندگی و رسانندگی اپتیکی ساختار را بررسی می کنیم.

### ۴-۵-۱ ساختار نواری

با بررسی ساختار نواری می توان اطلاعاتی در مورد مقدار گاف نواری، مستقیم یا غیر مستقیم بودن آن و روند تغییرات آن حاصل کرد. برای محاسبه ساختار نواری ابتدا محاسبات خودسازگار انجام می شود تا انرژی فرمی بدست آید. نکته مهم پس از انجام محاسبات خودسازگار، انتخاب مسیر مناسب انتگرال گیری در فضای وارون در ناحیه کاهش ناپذیر بریلوئن به منظور محاسبه نوارهای انرژی می باشد، این مسیر بیشترین تقارن را دارا می باشد. شکل ۴-۵ مسیر انتگرال گیری در فضای وارون برای محاسبات ساختار نواری ساختار ورتسایت و زینک بلند مشخص شده که از این مسیر در محاسبات صورت گرفته برای رسم ساختار نواری استفاده شده است. نقطه  $\Gamma$  در مرکز منطقه می باشد. در تمام نمودارهای ساختار نواری، سطح انرژی صفر بیانگر موقعیت تراز فرمی می باشد که با خط افقی مستقیم نشان داده شده است. در نیمرساناهای ذاتی چگالی الکترون ها و حفره ها باهم برابرند و تراز فرمی در وسط گاف نواری بین نوار ظرفیت و نوار رسانش قرار دارد. در نیمرسانای نوع n چگالی الکترون ها بیش از چگالی حفره هاست و تراز فرمی به نوار رسانش نزدیکتر می باشد. در نیمرسانای نوع p چگالی حفره ها بیشتر از چگالی الکترون ها بوده پس تراز فرمی به نوار ظرفیت نزدیکتر می شود. بعد از استخراج داده های ضروری، ساختار نواری نمونه های مورد مطالعه توسط کد محاسباتی



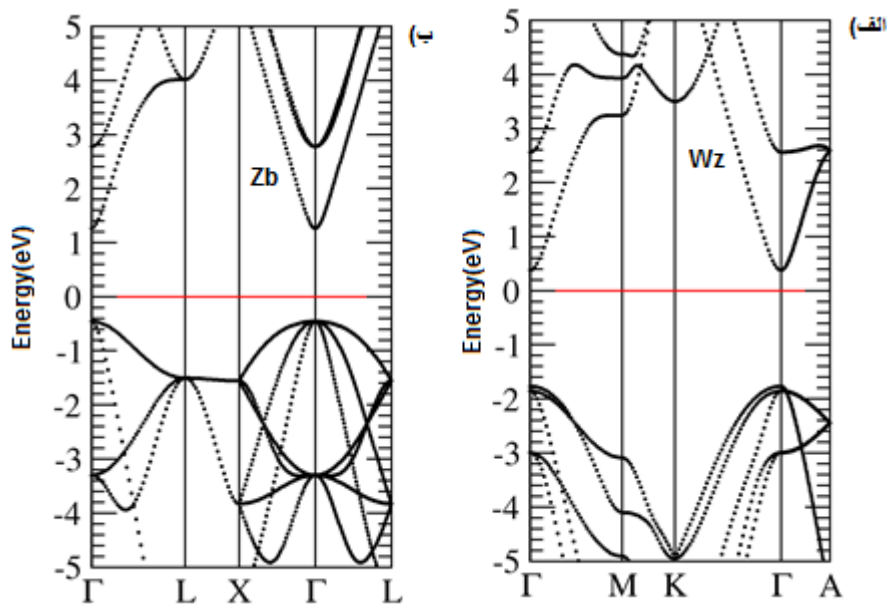
شکل ۵-۴: منطقه اول بریلوئن مربوط به ساختارهای بلوری زینک بلند و ورتسایت با نقاط با تقارن بالا [۵۳].

بدست آمده است. نتیجه محاسبات ساختارهای نواری نیمرسانای گالیوم نیتراید برای حالت ورتسایت و زینک بلند در شکل ۵-۵ نشان داده شده اند.

نیمرسانای مزبور در هر دو حالت ورتسایت و زینک بلند دارای گاف نواری مستقیم در امتداد نقطه  $\Gamma$  می باشد که اندازه آن برای دو حالت ورتسایت و زینک بلند به ترتیب در حدود  $2/15 \text{ eV}$  و  $1/7 \text{ eV}$  بدست آمده است. در جدول ۴-۵ مقایسه ای بین گاف نواری بدست آمده در این پژوهش با کارهای تجربی و نظری انجام داده شده است، دلیل اختلاف زیاد گاف نواری با مقادیر تجربی ( $3/5 \text{ eV}$ ) و  $(3/2 \text{ eV})$  [۵۵]، به نوع تقریب بکار رفته در جمله تبدالی-همبستگی مربوط می شود. اما مقادیر بدست آمده در مقایسه با دیگر مقادیر تئوری که از روش شبه پتانسیل بدست آمده است تقریباً همخوانی دارد.

جدول ۴-۵: گاف نواری گالیوم نیتراید در دو فاز ورتسایت و زینک بلند

گاف نواری	این پژوهش (LDA)	نظری (LDA)	تجربی
GaN(wz)	۲/۱۵	۲/۰۴ [۵۴]	۳/۵ [۵۵]
GaN(zb)	۱/۷۲	۱/۸۹ [۵۴]	۳/۲ [۵۵]



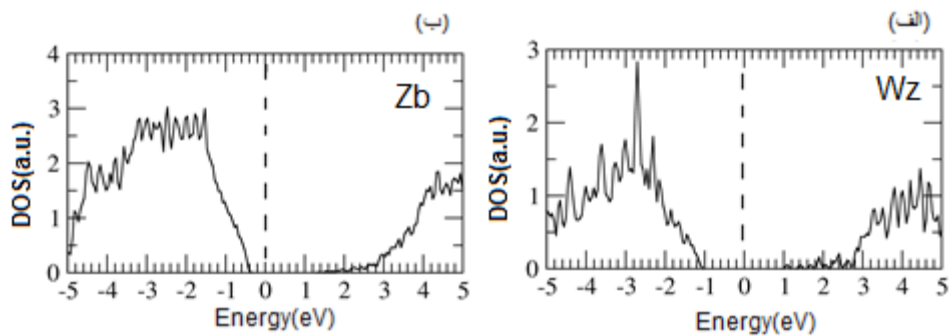
شکل ۴-۵: ساختارهای نواری برای گالیوم نیتراید خالص (الف) ورتسایت (ب) زینک بلند

#### ۴-۴-۵ چگالی حالت های کلی (DOS) و جزئی (PDOS)

یکی دیگر از کمیت های محاسبه شده در این پژوهش چگالی حالات جزئی و کلی برای نیمرسانای مورد نظر در حالت خالص و آرایش یافته در دو فاز ورتسایت و زینک بلند می باشد. منظور از چگالی حالات یک سیستم تعداد حالت های الکترونی قابل دسترس در واحد حجم در واحد انرژی حول یک

انرژی  $E$  می تواند وجود داشته باشد.  $N(E)$  نشانگر چگالی حالت ها بوده ، تعداد حالت ها در واحد حجم که در انرژی  $dE$  قرار دارد و برابر  $N(E) dE$  خواهد بود. یک چگالی حالت بالا در یک تراز انرژی به معنی زیاد بودن تعداد حالت ها برای اشغال شدن است. یک چگالی حالت صفر بدین معناست که هیچ حالتی در تراز انرژی مورد نظر برای اشغال وجود ندارد. چگالی حالت های غیر صفر زیر تراز فرمی کاملا پر و اشغال شده اند و چگالی حالت های غیر صفر بالای تراز فرمی کاملا خالی و اشغال نشده می باشند. چگالی حالت های کلی، مجموعی از چگالی حالت های جزئی اتم های تشکیل دهنده ی آن و چگالی حالت های کلی یک اتم، مجموع چگالی حالت های جزئی اوربیتال های اتمی آن اتم می باشد. آنالیز چگالی حالت های کلی اتم ها و مقایسه آن با چگالی حالت کلی ترکیب نشان می دهد که کدام اتم ها نقش بیشتری در شکل گیری ترازهای انرژی داشته اند و از روی چگالی حالت های جزئی اتم ها حتی می توان سهم اوربیتالی آن ها در شکل گیری ترازهای انرژی را مشخص نمود. چگالی حالت های اطراف تراز فرمی از اهمیت خاصی برخوردار است، چون بسیاری از خواص از جمله رسانش الکتریکی به آن ها وابسته است. نمودار چگالی حالت های کلی گالیوم نیتراید خالص برای دو حالت ورتسایت و زینک بلند در شکل (۵-۶) رسم شده است.

در این نمودارها سطح انرژی صفر، موقعیت تراز فرمی را نشان می دهد که با خط چین عمودی نشان داده شده است. بازه ی انرژی، برای رسم چگالی حالت ها بین  $5\text{ eV}$  تا  $5\text{ eV}$  در نظر گرفته شده است. از نمودارهای شکل ۵-۶ مشخص می شود، روند گاف نواری چگالی حالت های کلی دو گروه شبیه روند گاف نواری در ساختار نواری نمودارهای شکل ۵-۵ می باشد. مطابق شکل در نمونه خالص GaN مقدار گاف ایجاد شده بین نوار ظرفیت و نوار رسانش برای ساختار ورتسایت در حدود  $2.09\text{ eV}$  می باشد و به طور مشابه با توجه به این شکل، مقدار گاف برای ساختار زینک بلند در حدود  $1.72\text{ eV}$  می باشد

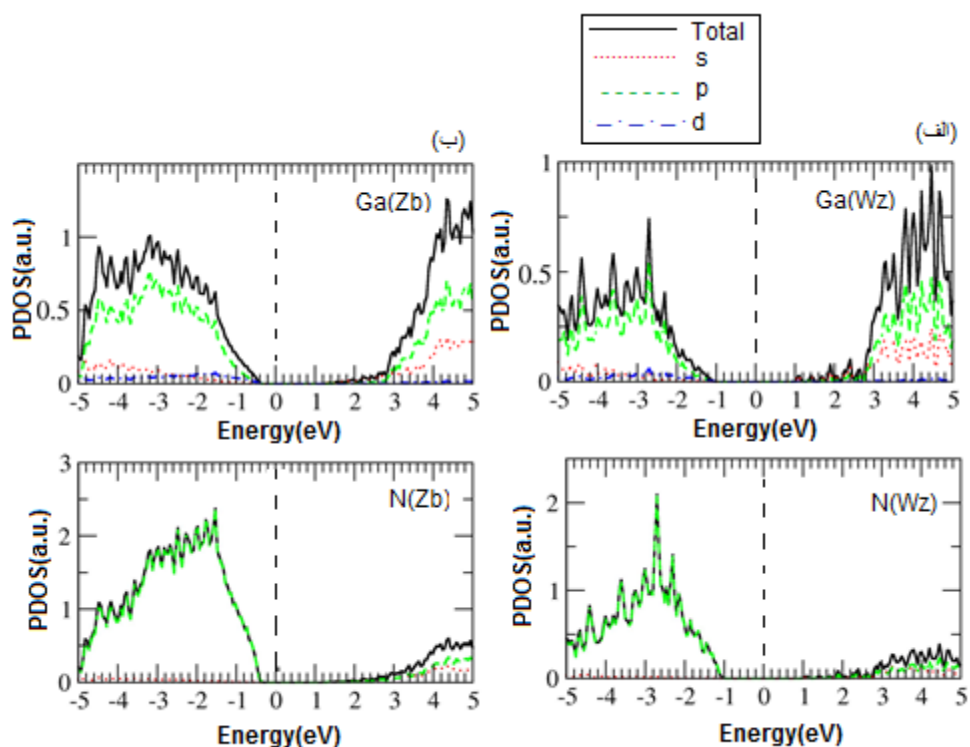


شکل ۵-۶: نمودار چگالی حالت های کلی مربوط به نمونه خالص GaN در فاز الف) ورتسایت و ب) زینک بلند

که با مقادیری که از روی ساختار نواری بدست آوردیم تقریباً هم خوانی دارد. انرژی فرمی به عنوان نقطه مرجع انرژی در نظر گرفته شده است که در شکل به صورت خط چین عمودی بین نوار ظرفیت و نوار رسانش مشخص شده است.

برای مشخص تر شدن سهم اوربیتالی تک تک اتم ها در شکل گیری چگالی حالت های ایجاد شده در نوارها، نیاز به رسم چگالی حالت های جزئی آنها داریم. چگالی حالت کلی از جمع چگالی حالت های جزئی اتم های تشکیل دهنده ترکیب بوجود می آید. نمودار چگالی حالت های جزئی برای دو اتم Ga و N برای GaN خالص در دو فاز ورتسایت و زینک بلند در شکل ۵-۷ رسم شده است. همانطور که در دو نمودار مشاهده می شود، در نوار رسانش بیشترین سهم در چگالی حالت ها، مربوط به اوربیتال های ۴p اتم Ga، بعد از آن ۲p اتم N و مقدار جزئی ۴s اتم Ga و ۲s اتم N و در نوار ظرفیت بیشترین سهم در چگالی حالتها، برای فاز ورتسایت، مربوط به اوربیتال های ۲s اتم N، بعد از آن ۴p اتم Ga و برای حالت زینک بلند، مربوط به اوربیتال ۲p اتم N، و بعد از آن ۴p اتم





شکل ۵-۷: نمودار چگالی حالت های جزئی Ga و N در دو فاز خالص الف) و تسایت ب) زینک بلند.

Ga می باشد. در مورد GaN نوار رسانش مخلوطی از اوربیتال های  $4s$  و  $4p$  و  $3d$  اتم Ga و  $2s$  و  $2p$  اتم N می باشد. به صورت کلی حالت های اطراف تراز فرمی در هر دو نوار ناشی از هیبریداسیون اوربیتالی بین  $4p$ -Ga و  $2p$ -N می باشد.

با توجه به نمودار ها ، نقش چگالی حالت های اوربیتال های  $3d$  و  $4s$  اتم Ga ، در بازه انرژی رسم شده بسیار ناچیز می باشد و می توان نتیجه گرفت که این حالت ها در ناحیه مغزی توزیع شده اند که این موضوع به جایگزیدگی الکترون های این اوربیتال ها اشاره دارد.

## ۵-۵ بررسی کمیت های اپتیکی

### ۵-۵-۱ تابع دی الکتریک

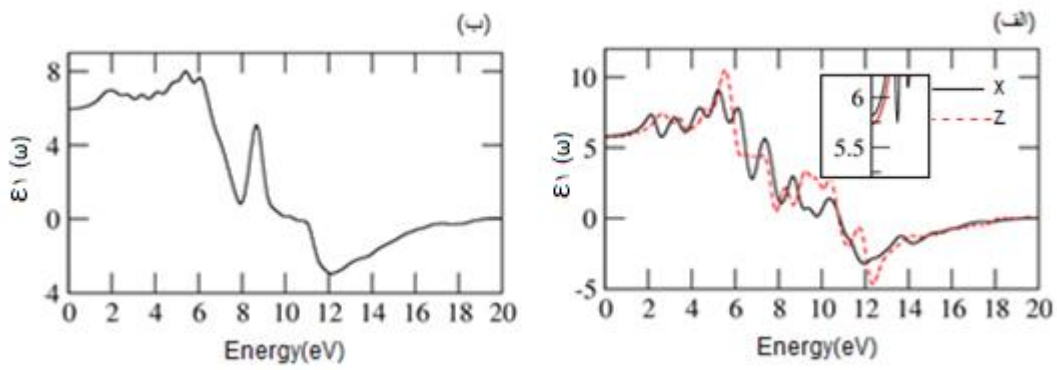
تابع دی الکتریک دارای یک قسمت حقیقی ( $\epsilon_1(\omega)$ ) و یک قسمت موهومی ( $\epsilon_2(\omega)$ ) می باشد. بخش موهومی از عناصر ماتریسی تکانه مرتبط با حالتهای الکترونی اشغال شده و اشغال نشده قابل محاسبه است و بخش حقیقی نیز از تبدیل کرامرز کرونیگ به دست می آید. در شکل ۵-۸ تغییرات تابع محاسبه شده برای قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در بازه ی انرژی  $0-20 \text{ eV}$  نشان داده شده است. نتایج محاسبات انجام شده در راستاهای  $(x)$  و  $(z)$ ، نشان دادند که GaN ورتسایت ناهمسانگرد می باشد. خصوصیات اپتیکی بخش موهومی تابع دی الکتریک با ساختار نواری مواد همبسته است. فرکانسی که قسمت حقیقی تابع دی الکتریک به ازای آن منفی می شود فرکانس پلاسما نامیده می شود که مقدار آن با توجه به نمودار  $\epsilon_1(\omega)$  برای تقریب LDA ساختار ورتسایت در دو راستاهای  $x$  و  $z$  و ساختار زینک بلند به ترتیب در حدود  $10/86$ ،  $10/81$  و  $10/48$  الکترون ولت می باشد. مقدار  $\epsilon_1(\omega)$  (بخش حقیقی) در محدوده فرکانس صفر نشان دهنده پاسخ دی الکتریک به میدان الکتریکی استاتیکی است که با توجه به شکل ۵-۸ برای گالیوم نیتراید خالص ورتسایت در راستاهای  $x$  و  $z$  به ترتیب در حدود  $5/81$  و  $5/72$  و برای  $z$  در حدود  $5/89$  می باشد. در نواحی که قسمت حقیقی تابع دی الکتریک منفی می شود بلور تابش فرودی را جذب می کند در این صورت ماده در این بازه انرژی، رفتار فلزی از خود نشان می دهد. جدول ۵-۵ مقایسه بین مقادیر این پژوهش و دیگر کارهای محاسباتی آورده شده است.

در شکل ۵-۹ بخش موهومی تابع دی الکتریک نشان داده شده است. با مقایسه موقعیت قله ها در بخش موهومی تابع دی الکتریک با اختلاف انرژی بین نوارهای ظرفیت و رسانش در ساختار نواری می توانیم هر قله در نمودار بخش موهومی ( $\epsilon_2(\omega)$ ) را با یک گذار درون نواری از ساختار نواری توصیف کنیم [۱۳].

جدول ۵-۵: مقایسه مقادیر ثابت دی الکتریک استاتیک GaN خالص با دیگر کارها.

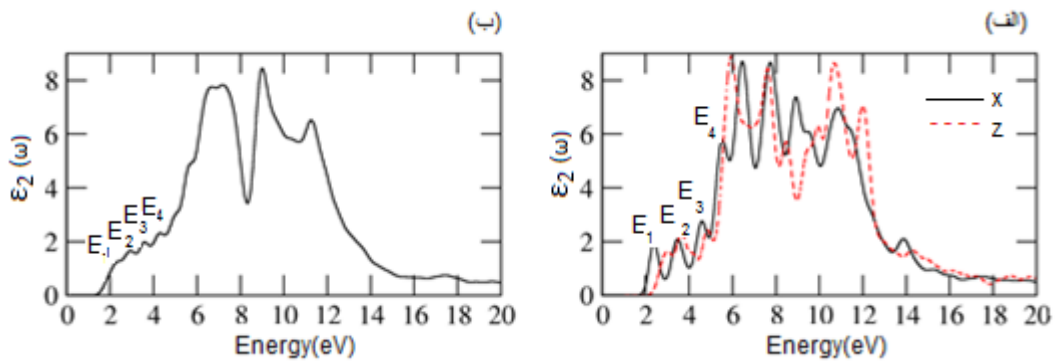
این پژوهش	تئوری	تجربی	
۵/۸۱	-	۱۰/۴[۷]	<b>Wz(x)</b>
۵/۷۲	۳/۰۷[۵۶][GGA]	۹/۵[۷]	<b>Wz(z)</b>
۵/۸۹	۴/۱[۲۷][FPLAPW-LDA]	۹/۷[۷]	<b>Zb</b>

این طیف اپتیکی را می توان شامل دو ناحیه، ناحیه با انرژی پایین ( $0-12 \text{ eV}$ ) و ناحیه با انرژی بالا ( $12-20 \text{ eV}$ ) دانست. میزان تابع جذب در ناحیه انرژی های پایین چندین برابر ناحیه با انرژی های بالاست. بررسی بخش موهومی نشان می دهد که اولین قله در منحنی  $\epsilon_2(\omega)$  برای ورتسایت در انرژی حدود  $2/2 \text{ eV}$  در راستای z و  $1/9 \text{ eV}$  در راستای x و برای زینک بلند در حدود  $1/7 \text{ eV}$  واقع است. این نقطه آستانه گذار اپتیکی مستقیم بین بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش را بدست می دهد که لبه جذب بنیادی (گاف اپتیکی) نامیده می شود. در قسمت موهومی تابع دی الکتریک چندین قله وجود دارد. این قله ها بیانگر گذارهای اپتیکی مجاز بین نوارهای اشغال شده ظرفیت و حالت های خالی نوار رسانش هستند. چهار قله اول که با  $E_4, E_3, E_2, E_1$  نشان داده می شوند، نمایانگر اولین، دومین، سومین و چهارمین گذار اپتیکی در نیمرسانا می باشند که مقادیر این گذارهای اپتیکی برای راستای x به ترتیب در انرژی های  $2/43 \text{ eV}, 3/5 \text{ eV}, 4/63 \text{ eV}, 5/61 \text{ eV}$ ، برای راستای z نیز به ترتیب  $3/11 \text{ eV}, 3/65 \text{ eV}, 4/83 \text{ eV}, 5/96 \text{ eV}$  و برای zb به ترتیب در انرژی های  $2/26 \text{ eV}, 2/98 \text{ eV}, 3/61 \text{ eV}, 4/32 \text{ eV}$  دیده می شود. قله های بعدی مربوط به گذار الکترون از نوارهای ظرفیت پایین تر به اولین نوار رسانش می باشند.



شکل ۵-۸: بخش حقیقی تابع دی الکتریک محاسبه شده برای گالیوم نیتراید خالص در فاز الف (WZ) و ب (zb).

در شکل (الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد.



شکل ۵-۹: بخش موهومی تابع دی الکتریک گالیوم نیتراید خالص در فاز الف (WZ) و ب (zb). در شکل

(الف) خط پر فاز ورتسایت، در راستای X و خط چین در راستای Z را نشان می دهد.

### ۵-۲ ضریب شکست و ضریب خاموشی

ثابت دی الکتریک مختلط یک جامد با رابطه زیر داده می شود:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (۲-۵)$$

که قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک وابسته به ثابت های اپتیکی ضریب شکست

$n(\omega)$  و ضریب خاموشی  $k(\omega)$  اند.

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2(\omega) - k^2(\omega) \quad (3-5)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2n(\omega)k(\omega) \quad (4-5)$$

مقدار ضریب شکست، ضریب خاموشی و بازتاب با استفاده از روابط اپتیکی محاسبه شده است. جذر تابع دی الکتریک در انرژی صفر، ضریب شکست در انرژی صفر را می دهد، بنابراین

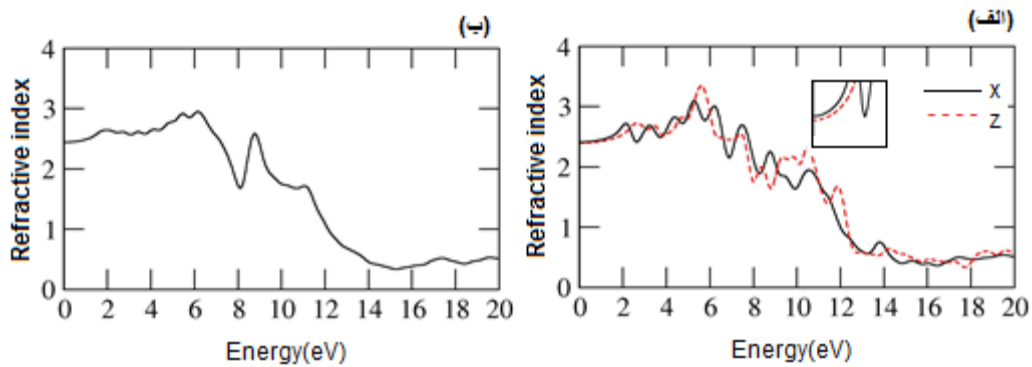
$$n_x(0) = \sqrt{Re\varepsilon_x(0)} \quad (5-5)$$

$$n_z(0) = \sqrt{Re\varepsilon_z(0)} \quad (6-5)$$

دانستن ضریب شکست یک ماده اپتیکی برای کاربرد آن در ساخت قطعات اپتیکی مهم است [۳۵]. نمودار ضریب شکست برحسب انرژی فوتون همان نمودار پاشندگی است. هرگاه ضریب شکست با افزایش انرژی و فرکانس، زیاد شود ماده شفاف خواهد بود و در مواردی که ضریب شکست با افزایش انرژی کم شود جذب اتفاق می افتد [۳۶]. تمامی قله های ایجاد شده در طیف ضریب شکست به قله های قسمت موهومی تابع دی الکتریک مربوط می شوند. ضریب شکست  $n(\omega)$  و ضریب خاموشی  $k(\omega)$  محاسبه شده در حالت های مختلف گالیوم نیتراید خالص در شکل های ۵-۱۰ و ۵-۱۱ نشان داده شده اند. با استفاده از منحنی ضریب شکست مشاهده می شود که در انرژی های بالا کاهش سریعی در ضریب شکست رخ می دهد. همانطور که در جدول ۵-۶ مشاهده می شود مقدار ضریب شکست استاتیک در انرژی صفر برای فاز ورتسایت در دو راستای  $x$  و  $z$  به ترتیب در حدود ۲/۴۱ و ۲/۳۹ و برای فاز زینک بلند ۲/۴۳ به دست آمده است. مقادیر بدست آمده در راستای  $z$  فاز ورتسایت تقریباً مانند نتایج تجربی در این زمینه می باشد، همچنین در فاز زینک بلند نیز تقریباً اختلافی در حدود ۰/۱ دارند اما در راستای  $x$  فاز ورتسایت، اختلاف با نتایج تجربی در حدود ۱ می باشد. در نواحی ای که ضریب شکست به طور سریع کاهش می یابد بیشترین میزان جذب را خواهیم داشت.

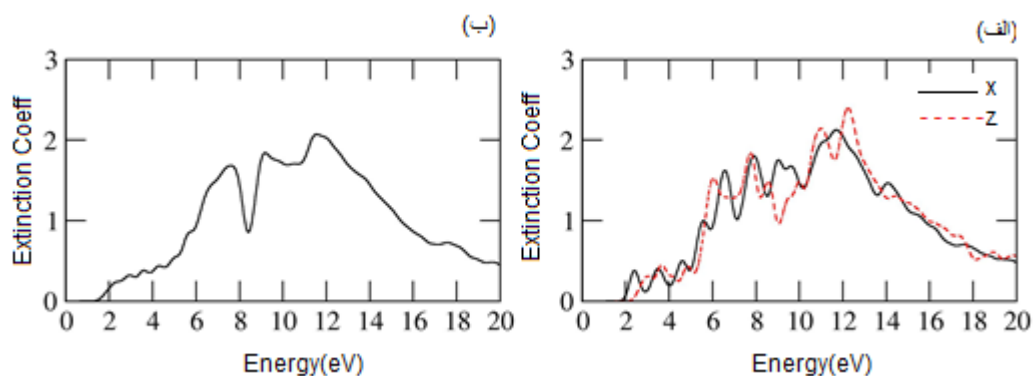
جدول ۵-۶: مقادیر ضریب شکست GaN خالص.

این پژوهش	تئوری	تجربی	
۲/۴۱	۳/۵[۵۷][GGA-VASP]	۲/۳[۷]	<b>Wz(x)</b>
۲/۳۹	۲/۳[۵۷][GGA-VASP]	۲/۳۵[۷]	<b>Wz(z)</b>
۲/۴۳	۲/۰۵[۲۷][LDA]	۲/۹[۷]	<b>Zb</b>



شکل ۵-۱۰: ضریب شکست محاسبه شده برای گالیوم نیتراید خالص. الف) Wz(z) و ب) Zb. در شکل (الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد.

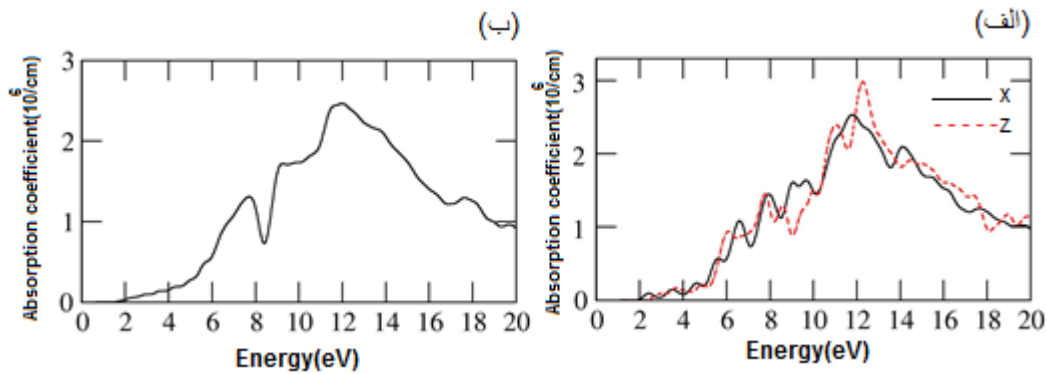
ضریب خاموشی معیاری از میزان جذب فوتون در ماده است [۲۰]. در صورت هر چه کوچکتر بودن ضریب خاموشی عبور امواج الکترومغناطیسی از درون ماده راحتتر انجام شده و برای ضریب خاموشی بزرگتر، نفوذ امواج به درون محیط دشوارتر خواهد بود [۳۷].



شکل ۵-۱۱: ضریب خاموشی محاسبه شده برای گالیوم نیتراید خالص. الف)  $wz$  و ب)  $zb$ . در شکل الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد..

### ۵-۵-۳ ضریب جذب

در شکل ۵-۱۲ منحنی ضریب جذب GaN خالص بر حسب انرژی فوتون فرودی نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می کنیم در طیف جذب GaN، در ناحیه اول نمودار یعنی تا انرژی آستانه که لبه جذب نامیده می شود جذبی صورت نمی گیرد. این رفتار در هر دو ساختار مشاهده می شود. بعد از گذار از لبه جذب، ضریب جذب کم کم افزایش می یابد یعنی فرآیند جذب صورت می گیرد. رفتار منحنی جذب در ناحیه انرژی محاسبه شده مشابه رفتار ضریب خاموشی می باشد. قله های اصلی نمودار نشان دهنده گذارهای الکترونی از تراز اشغال شده نوار ظرفیت به تراز اشغال نشده در نوار رسانش می باشند، این قله ها متناظر با موقعیت انرژی قله های قسمت موهومی تابع دی الکترونیک است. همانطور که مشاهده می کنیم ضریب جذب با قسمت موهومی تابع دی الکترونیک و ضریب خاموشی رابطه مستقیم دارد. بیشینه میزان ضریب جذب در انرژی های حدود  $11/5$  eV و  $12$  eV به ترتیب در راستای X و Z فاز ورتسایت و  $12$  eV در فاز زینک بلند اتفاق می افتد، که در این نقاط کمینه ضریب شکست را داریم.

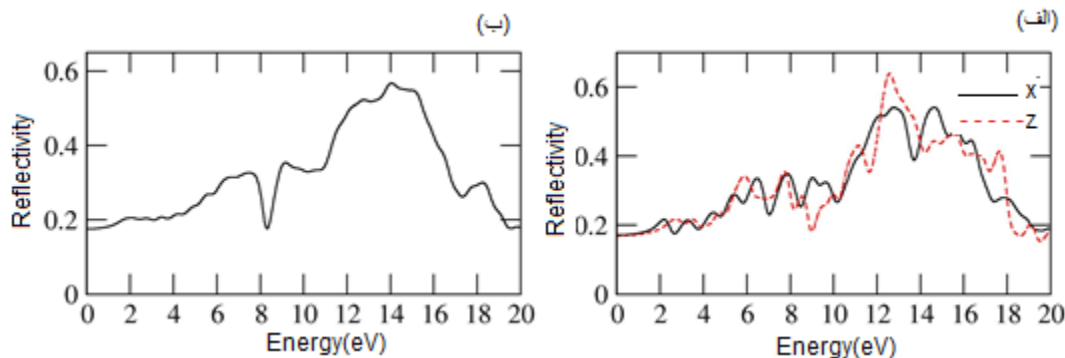


شکل ۵-۱۲: نمودار ضریب جذب بر حسب تابعی از انرژی برای گالیوم نیتراید خالص الف (wz ، ب) zب . در شکل الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد.

### ۴-۵-۵ بازتابندگی

نمودار بازتابندگی اپتیکی  $R(\omega)$  محاسبه شده در محدوده انرژی ۰-۲۰ eV در شکل ۵-۱۳ نشان داده شده است. با توجه به نمودار طیف بازتابندگی، مقدار بازتابندگی در انرژی صفر برای حالت‌های ورتسایت (در راستاهای X و Z) و زینک بلند به ترتیب در حدود ۰/۱۷ و ۰/۱۶۷ و ۰/۱۷۵ می باشد. تا انرژی‌های نزدیک به لبه جذب بازتابندگی روند افزایشی دارد بخاطر اینکه در این انرژی‌ها جذبی رخ نمی دهد. در انرژی‌های ۱۲/۶۳eV، ۱۵/۰۸eV و ۱۴/۰۹eV به ترتیب برای ساختارهای ورتسایت در راستاهای X و Z و ساختار زینک بلند بیشینه تابندگی رخ می دهد. با رسیدن به انرژی‌های نزدیک به فرکانس پلاسما و پیدایش خصلت فلزی بازتابندگی نیز به سرعت افزایش می یابد. از آنجا که خصلت فلزی به مرور کم می شود از میزان بازتابندگی گالیوم نیتراید نیز کاسته خواهد شد.

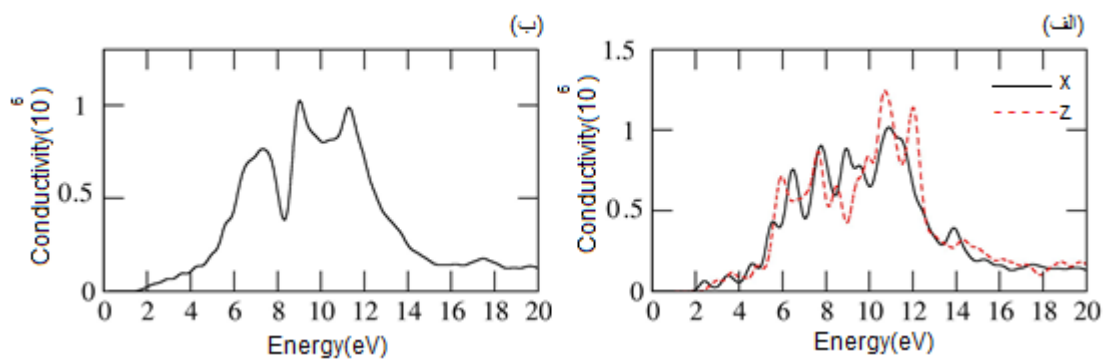




شکل ۵-۱۳: نمودار بازتابندگی  $R(\omega)$  برحسب تابعی از انرژی محاسبه شده برای گالیوم نیتراید خالص الف) WZ (ب) Zb. در شکل (الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد.

### ۵-۵-۵ رسانندگی اپتیکی

الکترون های حالت های اشغال شده، در اثر جذب فوتون، به حالت های اشغال نشده در بالای تراز فرمی برانگیخته می شوند. به این گذار بین نواری (معروف به گذار درود)، رسانندگی اپتیکی و به جذب فوتون توسط الکترونها، جذب بین نواری گفته می شود. نمودار رسانندگی GaN در شکل ۵-۱۴ نشان داده شده است. این نمودار تغییرات قسمت حقیقی رسانندگی اپتیکی نسبت به انرژی فوتون فرودی را برای هر دو راستای X و Z برای فاز ورتسایت و همچنین فاز زینک بلند نشان می دهد. همانطور که قبلا بیان شد، قسمت حقیقی رسانندگی با قسمت موهومی تابع دی الکتریک متناسب است. شروع نمودار رسانندگی اپتیکی از انرژی ای می باشد که به آن گاف اپتیکی (متناظر با گاف نواری) می گویند. رسانندگی اپتیکی از انرژی حدود ۲ eV برای راستای X و ۲/۳ eV در راستای Z برای ساختار ورتسایت شروع شده و برای ساختار زینک بلند از انرژی حدود ۱/۸ eV شروع شده است و با افزایش انرژی فوتون، رسانندگی اپتیکی افزایش پیدا کرده و در گستره انرژی ۹-۱۱ eV به بیشترین مقدار خود می رسد. همانطور که در این شکل مشاهده می شود در نقاطی که شاهد حضور قله هستیم، بیشترین میزان جریان رسانی الکترون ها وجود دارد. بیشترین میزان رسانندگی در ساختار



شکل ۵-۱۴: نمودار رسانندگی اپتیکی محاسبه شده GaN خالص برای ساختارهای الف (wZ) ب (zb) در شکل (الف) خط پر فاز ورتسایت در راستای X و خط چین راستای Z را نشان می دهد.

ورتسایت برای راستاهای X و Z به ترتیب در حدود  $11/5\text{eV}$  و  $10/75\text{eV}$  و برای ساختار zb در حدود  $9\text{eV}$  رخ می دهد. دلیل شروع رسانندگی (هدایت) اپتیکی  $\sigma(\omega)$ ، از انرژی تقریباً حدود  $2\text{eV}$  در هر سه حالت، گاف انرژی اپتیکی می باشد. زیرا در گستره انرژی های پائین تر از این مقدار، انرژی فوتون های فرودی کوچکتر از انرژی گاف است. بنابراین الکترون های برانگیخته شده، انرژی کافی را ندارند تا از گاف انرژی عبور و به نوار رسانش منتقل شوند، یا اصطلاحاً یک گذار بین نواری را انجام دهند. در نتیجه رسانندگی اپتیکی صفر بدست می آید. با توجه به نمودار های ضریب جذب و رسانندگی، مشاهده می شود در انرژی هایی که بیشترین ضریب جذب اتفاق می افتد، بیشینه رسانندگی اپتیکی را داریم.

## ۵-۶ بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی گالیم نیتراید آلاییده

در ادامه نتایج حاصل از مطالعه ساختار الکترونی و خواص اپتیکی گالیم نیتراید آلاییده با Al و In با دو ساختار ورتسایت و زینک بلند ارائه شده است. برای بررسی ساختار الکترونی، چگالی حالت های

کلی و ساختار نواری و برای خواص اپتیکی، قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکترونیک، ضریب جذب، ضریب خاموشی، رسانندگی اپتیکی و بازتابندگی آلیاژهای GaN محاسبه شدند. محاسبات با استفاده از نظریه شبه پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با استفاده از تقریب چگالی موضعی (LDA) انجام شدند.

برای آلیاژ GaN با درصدهای مختلف Al و In ابرسلول های متناسب هر آلیاژ انتخاب شدند. در فاز ورتسایت، برای غلظت ناخالصی ۲۵٪ یک سلول ورتسایت (۱×۱×۲) با ۸ اتم در نظر گرفته شد که حاوی ۴ اتم گالیوم و ۴ اتم نیتروژن می باشد که یک اتم ناخالصی جایگزین یک اتم گالیوم شد. برای غلظت ۱۲/۵٪ یک ابر سلول ورتسایت (۱×۲×۲) با ۱۶ اتم که شامل ۸ اتم گالیوم و ۸ اتم نیتروژن است در نظر گرفته شد که با جایگزین شدن یک اتم ناخالصی به جای یک اتم گالیوم اجرا شد. برای غلظت ناخالصی ۶/۲۵٪ یک ابر سلول (۲×۲×۲) با ۳۲ اتم در نظر گرفته شد که شامل ۱۶ اتم گالیوم و ۱۶ اتم نیتروژن می باشد که یک اتم ناخالصی با یک اتم گالیوم جایگزین شد. همچنین در فاز زینک بلند، برای غلظت ناخالصی ۲۵٪ یک سلول زینک بلند (۲×۲×۲) با ۶۴ اتم در نظر گرفته شد که حاوی ۳۲ اتم گالیوم و ۳۲ اتم نیتروژن می باشد که ۸ اتم ناخالصی جایگزین اتم های گالیوم شدند. برای غلظت ۱۲/۵٪ یک ابر سلول زینک بلند (۲×۲×۲) با ۶۴ اتم که شامل ۳۲ اتم گالیوم و ۳۲ اتم نیتروژن است در نظر گرفته شد و ۴ اتم ناخالصی جایگزین اتم های گالیوم شدند. برای غلظت ناخالصی ۶/۲۵٪ نیز ابر سلول (۲×۲×۲) با ۶۴ اتم در نظر گرفته شد که شامل ۳۲ اتم گالیوم و ۳۲ اتم نیتروژن می باشد که ۲ اتم ناخالصی جایگزین ۲ اتم گالیوم شدند. در این قسمت از نتایج بهینه سازی که برای ساختار های خالص گالیوم بدست آمد، استفاده شد.

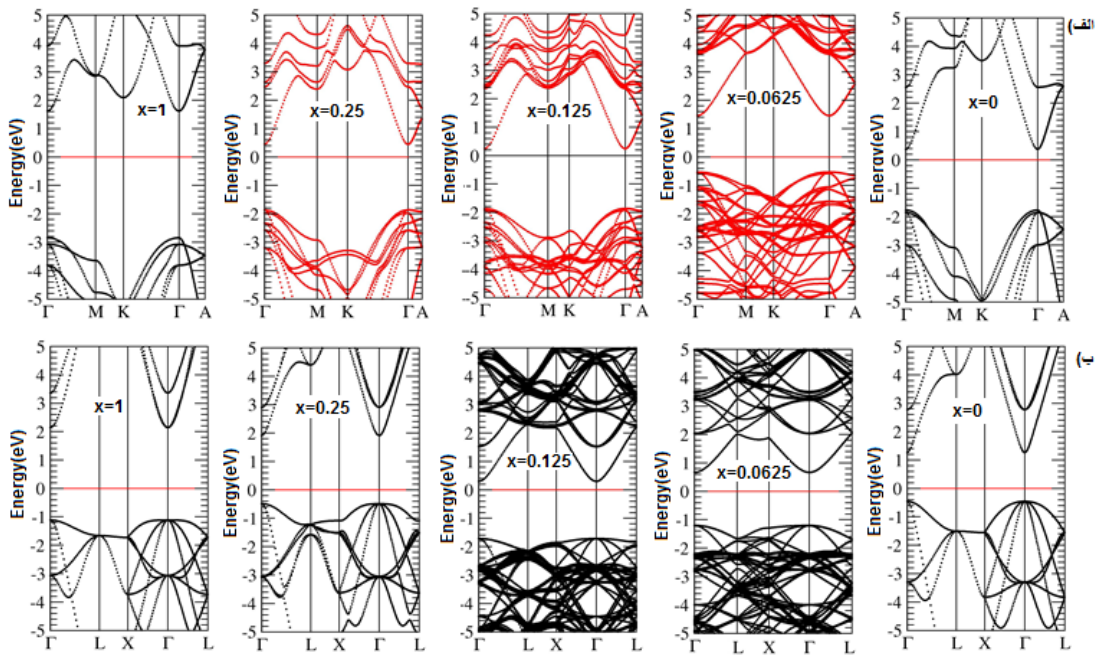
## ۵-۶-۱ محاسبات مربوط به نمونه های آرایش یافته با $(Al_x Ga_{1-x} N)$ Al

### ۵-۶-۱-۱ خواص الکترونی

### ۵-۶-۱-۱-۱ ساختار نواری

پس از انجام محاسبات خودسازگار در مسیر مناسب انتگرال گیری در فضای وارون در ناحیه کاهش ناپذیری بریلوئن، انرژی فرمی به منظور محاسبه نوارهای انرژی به دست می آید. با بررسی ساختار نواری می توان مقدار گاف نواری و روند تغییرات آن را به دست آورد. ساختارهای نواری بررسی شده برای نمونه آرایش یافته  $Al_x Ga_{1-x} N$  در شکل ۵-۱۵ رسم شده اند.

محاسبه ساختار نواری نمونه های مورد بررسی نشان می دهد که هر سه نمونه آلئیده در دو فاز مورد بررسی شده، دارای گاف نواری مستقیم می باشند یعنی بالاترین نقطه نوار ظرفیت و پائین ترین نقطه نوار رسانش در نقطه  $\Gamma$  قرار دارند. حضور و افزایش نوارهای انرژی در تراز فرمی با افزایش درصد اتم های آلومینیوم به دلیل حضور این ناخالصی در ماده میزبان می باشد. مقادیر گاف نواری برای نمونه های رسم شده در این شکل در جدول ۴-۷ آورده شده است. همانطور که مشاهده می شود در درصدهای بالای ناخالصی در ساختار ورتسایت با افزایش ناخالصی گاف نواری نیز افزایش می یابد و برای ساختار زینک بلند از همان ابتدا با افزایش ناخالصی گاف نواری نیز افزایش می یابد که این می تواند حاکی از این واقعیت باشد که با آرایش آلومینیوم در داخل GaN، خاصیت غیر فلزی نمونه افزایش می یابد. از مقایسه گاف نواری در حالت زینک بلند نسبت به ورتسایت این گونه دیده می شود که گاف نواری در ساختار زینک بلند در غلظت های مشابه نسبت به ساختار ورتسایت کمتر می باشد. البته مقادیر بدست آمده برای گاف نواری نمونه های آلئیده طبق جدول ۴-۷ در توافق با مقادیر گزارش شده کارهای تئوری دیگران می باشد.



شکل ۵-۱۵: ساختار نواری  $Al_x Ga_{1-x} N$  برای ساختارهای (الف) Wz و (ب) Zb.

جدول ۵-۷: مقادیر گاف نواری محاسبه شده برای  $Al_x Ga_{1-x} N$  بر حسب eV.

	X	۰	۰/۰۶۲۵	۰/۱۲۵	۰/۲۵	۱
این پژوهش	Wz	۲/۱۵	۲/۰۱	۲/۱۲	۲/۳۱	۴/۴۶
تئوری (LDA)	Wz	۲/۰۴ [۵۴]	۲/۱ [۵۸]	۲/۲۸ [۵۸]	۲/۵ [۵۸]	۴/۴۱ [۵۸]
این پژوهش	Zb	۱/۷۲	۱/۸۶	۲/۰۱	۲/۴	۳/۲۷
تئوری (LDA)	Zb	۱/۸۹ [۵۴]	۳/۳ [۵۹]	۳/۵۵ [۵۹]	۳/۸ [۵۹]	۴/۳ [۵۹]

### ۵-۶-۱-۱-۲ ثابت های شبکه

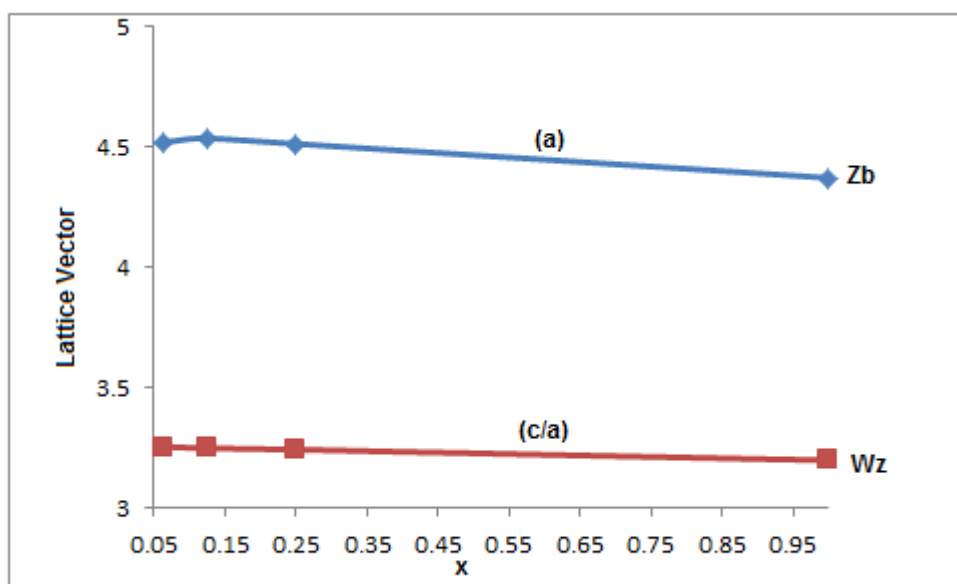
با توجه به داده های ارائه شده در جدول های ۵-۸ و ۵-۹، روند تغییرات ثابت شبکه برای دو ساختار ورتسایت و زینک بلند AlGa<sub>x</sub>N با درصدهای مختلف در شکل ۵-۱۶ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود ثابت های شبکه تقریباً با افزایش آلایش نسبت به حالت خالص کاهش یافته اند.

جدول ۵-۸: مقادیر ثابت شبکه ساختار ورتسایت Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N (برحسب Å)

درصد ناخالصی	۰	۰/۰۶۲۵	۰/۱۲۵	۰/۲۵	۱
a	۱/۵۹	۱/۶۰۹	۱/۶۰۷	۱/۵۹	۱/۵۵۵
c	۵/۱۶۶	۵/۲۳۸	۵/۲۲۲	۵/۱۸۸	۴/۹۷۴
c/a	۳/۲۴۹	۳/۲۵۴	۳/۲۴۸	۳/۲۴۲	۳/۱۹۷

جدول ۵-۹: مقادیر ثابت شبکه ساختار زینک بلند Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N (برحسب Å)

درصد ناخالصی x	۰	۰/۰۶۲۵	۰/۱۲۵	۰/۲۵	۱
A	۴/۵۶۲	۴/۵۲۰	۴/۵۳۷	۴/۵۱۴	۴/۳۷۲

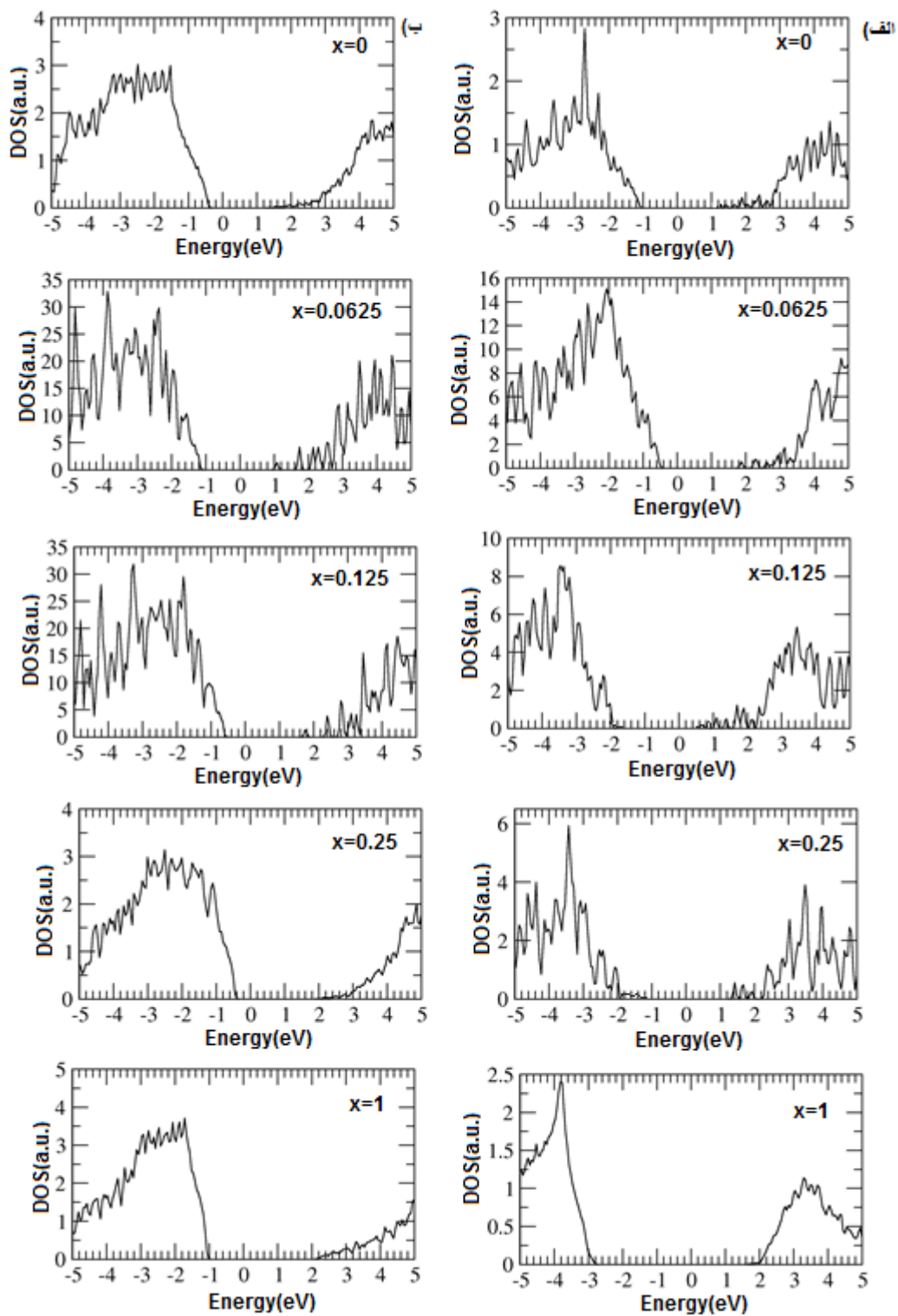


شکل ۵-۱۶: نمودار تغییرات ثابت شبکه a و نسبت c/a در  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

#### ۵-۶-۱-۱-۳ محاسبه چگالی حالت های کلی و جزئی

چگالی حالت های کلی آلیاژهای  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  با غلظت های مختلف در دو فاز ورتسایت و زینک بلند در شکل ۵-۱۷ رسم شده اند. توزیع الکترون در طیف انرژی بوسیله چگالی حالتها توصیف می شود و می تواند در آزمایش های گسیل نور اندازه گیری شود. طیف چگالی حالت های کلی برای  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  در دو فاز ورتسایت و زینک بلند در گستره انرژی  $-5\text{ eV}$  تا  $5\text{ eV}$  مورد بررسی قرار گرفته است. در نمودار چگالی حالت ها مقیاس انرژی صفر نشان دهنده مکان تراز فرمی است. نوار ظرفیت در ناحیه زیر تراز فرمی از نوار رسانش که بالای تراز فرمی است جدا شده است.

در طیف چگالی حالتها نوع گاف (مستقیم یا غیر مستقیم) مشخص نمی شود، بلکه تنها مقدار گاف قابل اندازه گیری است. مقدار گاف نواری از روی نمودار چگالی کلی در تمامی غلظت های هر دو فاز با اختلاف ناچیزی تقریباً مشابه گاف نواری آنها می باشد.



شکل ۵-۱۷: نمودار چگالی حالت های کلی مربوط به نمونه آلیاژ  $Al_x Ga_{1-x} N$  در فاز الف) و رتسایت و ب)

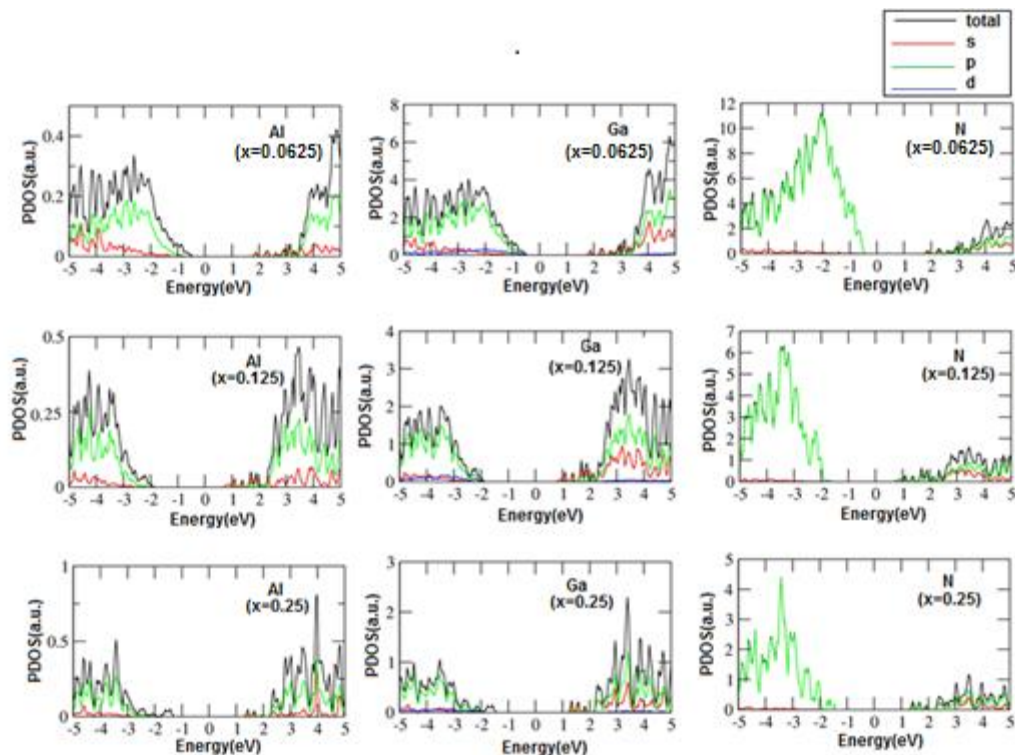
زینک بلند



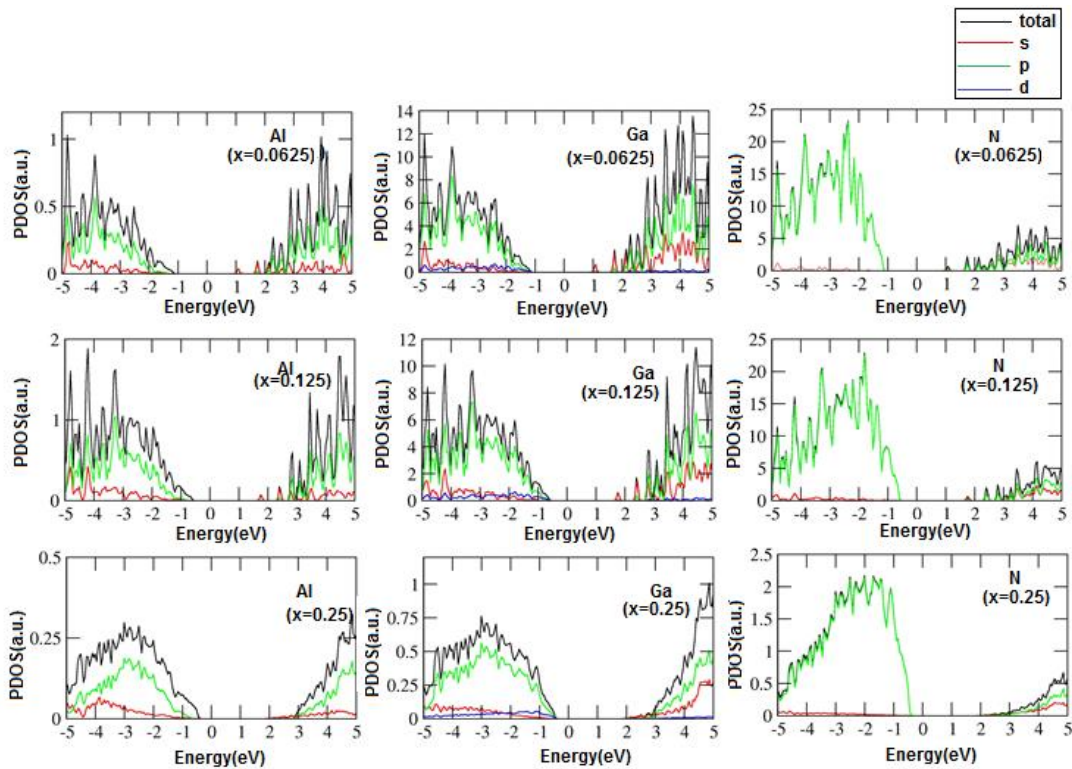
برای بررسی نقش هر یک از اوربیتال های اتم های تشکیل دهنده نمونه های آلاییده، چگالی حالت های جزئی محاسبه شدند. در شکل های ۵-۱۸ و ۵-۱۹ و ۵-۲۰ چگالی حالت های جزئی هر یک از اتم های Al و Ga و N در نوارهای ظرفیت و رسانش برای آلیاژهای  $Al_x Ga_{1-x} N$  و حالت خالص AlN در دو فاز ورتسایت و زینک بلند رسم شده است. در این نمودارها انرژی در بازه  $5eV -$  تا  $5eV +$  در نزدیک تراز فرمی در نظر گرفته شده است. شکل ۵-۱۸ نشان می دهد برای فاز ورتسایت این آلیاژ اتم Ga در غلظت  $0.0625$  بیشترین سهم را در اوربیتال  $3p$  در نوار ظرفیت دارد و بعد از آن اوربیتال های  $3s$  و  $2d$  که سهم ناچیزی دارند. در نوار رسانش نیز به همین ترتیب می باشد. برای غلظت  $0.125$  نیز بیشترین سهم مربوط به تراز  $3p$  است و در غلظت  $0.25$  این بیشترین سهم در نوار رسانش است. برای اتم Al نیز به مانند اتم Ga می ماند اما برای اتم N بیشترین سهم مربوط به اوربیتال  $2p$  که در غلظت  $0.0625$  بیشترین مقدار چگالی را داراست بعد از آن  $0.125$  و سپس  $0.25$  و سهم دو اوربیتال دیگر بسیار اندک است.

در شکل ۵-۱۹ که چگالی حالت های جزئی را در فاز زینک بلند نشان می دهد، برای اتم Ga بیشترین سهم چگالی در غلظت  $0.0625$  مربوط به اوربیتال  $3p$  در هر دو نوار ظرفیت و رسانش است و سپس در نوار رسانش اوربیتال  $3s$  می باشد، سهم اوربیتال های  $3s$  در نوار ظرفیت و  $2d$  در هر دو نوار رسانش و ظرفیت بسیار ناچیز می باشد. در غلظت  $0.125$  در نوار رسانش اوربیتال  $3p$  بیشترین سهم و بعد از آن اوربیتال  $3s$  و سهم اوربیتال  $2d$  ناچیز است. در نوار ظرفیت سهم اوربیتال  $3p$  بیشترین مقدار است و دو اوربیتال دیگر سهم ناچیزی دارند. در غلظت  $0.25$  تقریباً هر دو اوربیتال  $3p$  و  $3s$  در نوار رسانش بیشترین سهم را دارند و در نوار ظرفیت اوربیتال  $3p$  بیشترین است اما سهم اوربیتال  $2d$  در هر دو نوار ناچیز می باشد. در بین این سه اتم بیشترین چگالی مربوط به غلظت  $0.0625$  است. در اتم Al در هر دو نوار ظرفیت بیشترین سهم مربوط به اوربیتال  $2p$  و سهم اوربیتال  $2s$  ناچیز است. در دو غلظت دیگر نیز به همین صورت می باشد. برای اتم N در نوار رسانش هر سه غلظت اوربیتال  $2p$  بیشترین سهم را دارد و بقیه اوربیتال ها در هر دو نوار سهمی ناچیز دارند.

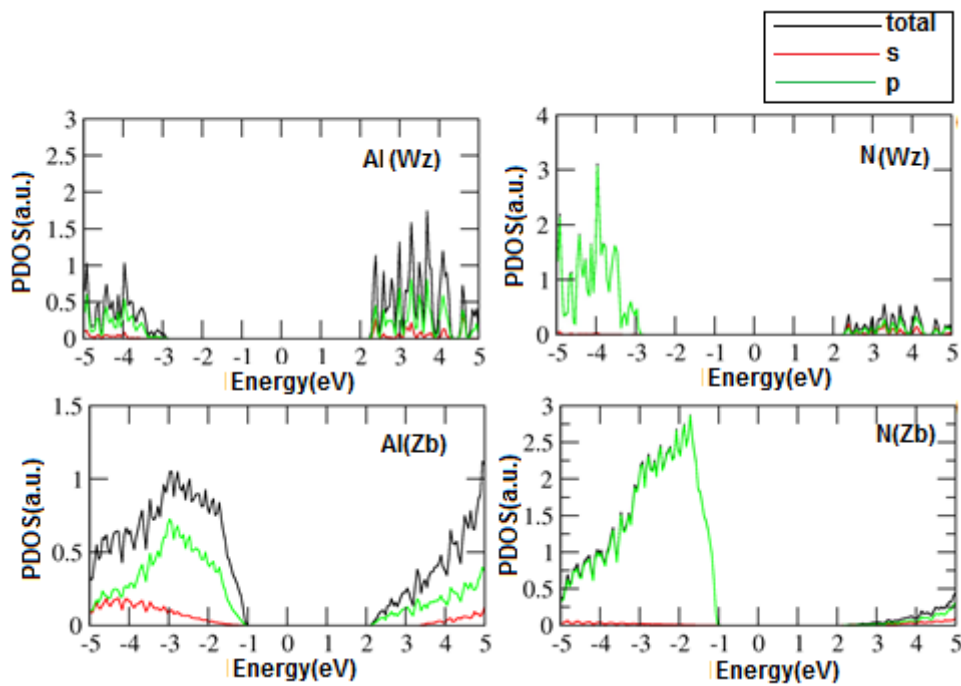
در شکل ۵-۲۰ که چگالی جزئی AIN خالص را نشان می دهد، برای اتم های فاز ورتسایت، در اتم Al در نوارهای رسانش و ظرفیت بیشترین سهم مربوط به اوربیتال ۲p و کمترین مربوط به اوربیتال ۲s می باشد. در اتم N نیز در نوار ظرفیت بیشترین سهم از اوربیتال ۲p است و سهم بقیه اوربیتال ها در هر دو نوار ناچیز است. در فاز زینک بلند همچنین ، برای اتم Al در هر دو نوار اوربیتال ۲p بیشترین سهم را دارد و برای اتم N نیز در نوار ظرفیت اوربیتال ۲p بیشترین سهم را دارد و بقیه اوربیتال ها در هر دو نوار سهم ناچیزی دارند.



شکل ۵-۱۸: چگالی حالت های جزئی آلیاژ  $Al_x Ga_{1-x} N$  در فاز ورتسایت



شکل ۵-۱۹: چگالی حالت های جزئی آلیاژ  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  در فاز زینک بلند



شکل ۵-۲۰: چگالی حالت های جزئی  $\text{AlN}$  خالص در دو فاز (الف) ورتسایت. (ب) زینک بلند

## ۵-۶-۱-۲ خواص اپتیکی

در این بخش به نتایج حاصل از بررسی خواص اپتیکی نمونه های GaN آلاییده با Al و مقایسه آنها با نمونه خالص GaN پرداخته شده است. با توجه به روابط اشاره شده مربوط به کمیت های اپتیکی و نیز نتایج به دست آمده می توان رفتار وابسته به فرکانس یک جامد را توضیح داد.

## ۵-۶-۱-۲-۱ تابع دی الکتریک

همانطور که قبلا اشاره شد، برای بررسی رفتار الکتریکی و اپتیکی هر ماده تابع دی الکتریک آن مورد بررسی قرار می گیرد. تابع دی الکتریک، پاسخ بلور به یک میدان الکترومغناطیسی خارجی با انرژی  $\hbar\omega$  می باشد. بخش حقیقی تابع دی الکتریک در انرژی صفر، معرف ثابت دی الکتریک استاتیک نمونه بوده و فرکانسی که به ازای آن رفتار تابع دی الکتریک از مقدار مثبت به مقدار منفی تغییر وضعیت می دهد، فرکانس پلاسمایی نامیده می شود. به ازای مقادیر مثبت تابع دی الکتریک، ماده رفتار دی الکتریکی و به ازای مقادیر منفی، رفتار فلزی از خود نشان می دهد. نمودار بدست آمده قسمت حقیقی تابع دی الکتریک  $\epsilon_1(\omega)$  بر حسب انرژی برای نمونه های آلاییده GaN با Al در شکل ۵-۲۱ نشان داده شده است. برای مقایسه قسمت حقیقی تابع دی الکتریک نمونه خالص نیز در این شکل آمده است. در جدول ۵-۱۰ مقادیر ثابت دی الکتریک استاتیک  $\epsilon_1(\omega=0)$  برای نمونه های GaN آلاییده با غلظت های ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ گزارش شده است. همانطور که از جدول و نمودارها مشاهده می شود، برای دو راستای X,Z مقادیر ثابت دی الکتریک یکسان نیست. همچنین در هر سه ساختار بین حالت های آلاییده نمونه های با آلایش بیشتر با کاهش ثابت دی الکتریک مواجه می شود. قسمت حقیقی تابع دی الکتریک برای نمونه خالص GaN و آلاییده با غلظت های ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ همچنین نمونه خالص AlN برای ساختار ورتسایت در راستای X به ترتیب در انرژی های ۱۰/۸۶، ۱۰/۹، ۱۱/۰۲ و ۱۱/۸۴ الکترون ولت منفی می شوند. همچنین برای راستای Z نیز به ترتیب در انرژی های ۱۰/۸۶، ۱۰/۸۹، ۱۱/۰۱ و ۷/۶۹ الکترون ولت منفی شده و برای ساختار

زینک بلند در انرژی های ۱۰/۹۲، ۱۱/۰۵، ۹/۴ و ۸/۴۱ الکترون ولت منفی می شود. این نقطه جایی است که گذار الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش اتفاق می افتد و بنابراین ما انتظار داریم در نمودار قسمت موهومی تابع دی الکترونیک، یک قله جذب ظاهر شود. مقدار منفی تابع دی الکترونیک نشان دهنده این است که ماده رفتار فلزی داشته و میدان الکترونی فوتون منجر به گذارهای اپتیکی بین حالت های اشغال شده و حالت های الکترونی اشغال نشده می شود. جدول ۵-۱۱ مقایسه برخی از مقادیر محاسبه شده با کارهای تئوری را نشان می دهد. قبلاً یادآور شدیم که گاف نواری با ثابت دی الکترونیک نسبت وارون دارد پس همانطور که انتظار داشتیم با افزایش  $\text{Al}$  و افزایش گاف نواری در غلظت های بیشتر، ثابت دی الکترونیک کاهش می یابد. نمودار تغییرات ثابت دی الکترونیک با گاف نواری بطور نمونه برای ساختار زینک بلند در شکل ۵-۲۲ رسم شده است که مطابق با انتظار ما می باشد.

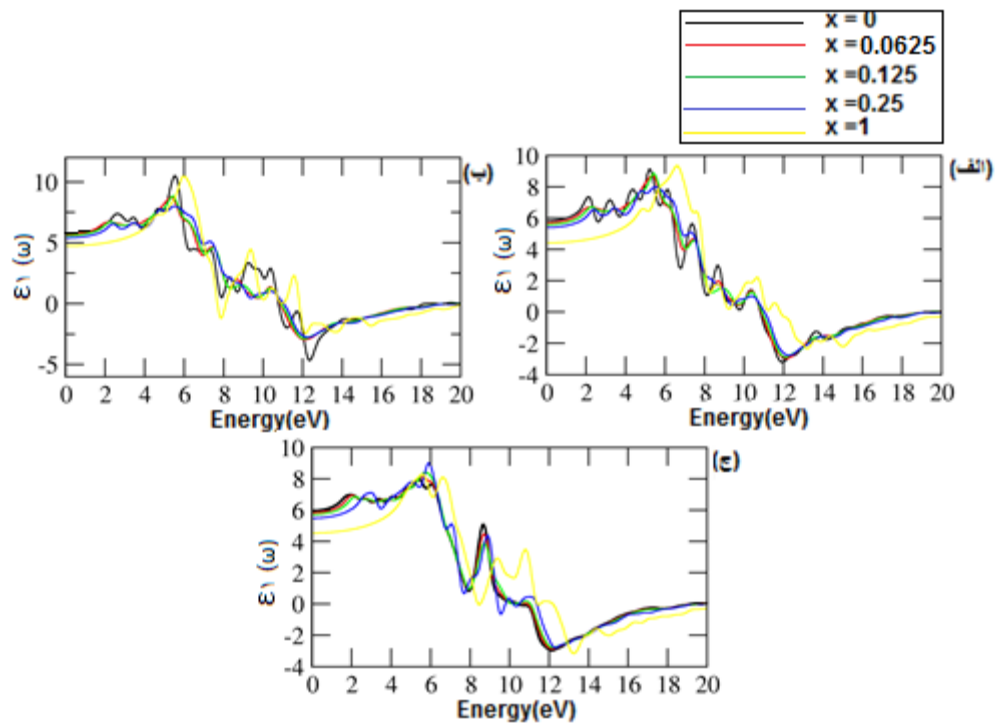
در نمودار قسمت موهومی  $\epsilon_2(\omega)$  تابع دی الکترونیک قله هایی در موقعیت های انرژی مختلف مشاهده می شود. با توجه به ساختار نواری محاسبه شده موقعیت قله ها در انرژی هایی رخ می دهد که تغییرات انرژی جدایی بین دو نوار (نوار ظرفیت و نوار رسانش) در مقادیر مختلف  $k$  زیاد نیست. البته حالت های آغازین و پایانی بسیاری وجود دارند که می توانند با انرژی فوتون یکسان جفت شوند. گذارها به جفت شدگی نوارهای رسانش و ظرفیت بستگی دارند. در شکل ۵-۲۳ نتایج حاصل از محاسبه قسمت موهومی تابع دی الکترونیک برای نمونه  $\text{GaN}$  خالص و آلائیده با  $\text{Al}$  نشان داده شده است. اولین قله، قله های مربوط به نمونه های آلائیده با غلظت های مختلف، که حاکی از گذار الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش می باشد به همراه گاف اپتیکی ساختارهای مختلف در جدول های ۵-۱۲ و ۵-۱۳ و ۵-۱۴ گزارش شده است.

جدول ۵-۱۰: مقادیر ثابت دی الکتریک استاتیکی  $\epsilon_1(\omega=0)$  محاسبه شده برای  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

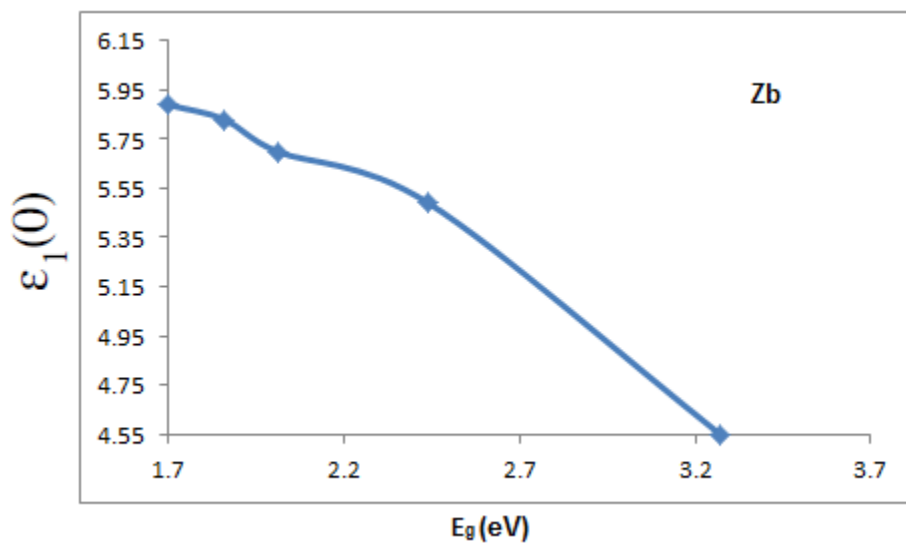
درصد غلظت	X=۰	X=۰/۰۶۲۵	X=۰/۱۲۵	X=۰/۲۵	X=۱
$\epsilon_1(\omega=0)$					
Wz(x)	۵/۸۱	۵/۷	۵/۵۹	۵/۴	۴/۳۸
Wz(z)	۵/۷۲	۵/۷۱	۵/۷۰	۵/۵۲	۴/۷۳
Zb	۵/۸۹	۵/۸۳	۵/۷	۵/۴۹	۴/۵۵

جدول ۵-۱۱: مقایسه مقادیر ثابت دی الکتریک استاتیکی  $\epsilon_1(\omega=0)$  محاسبه شده برای  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

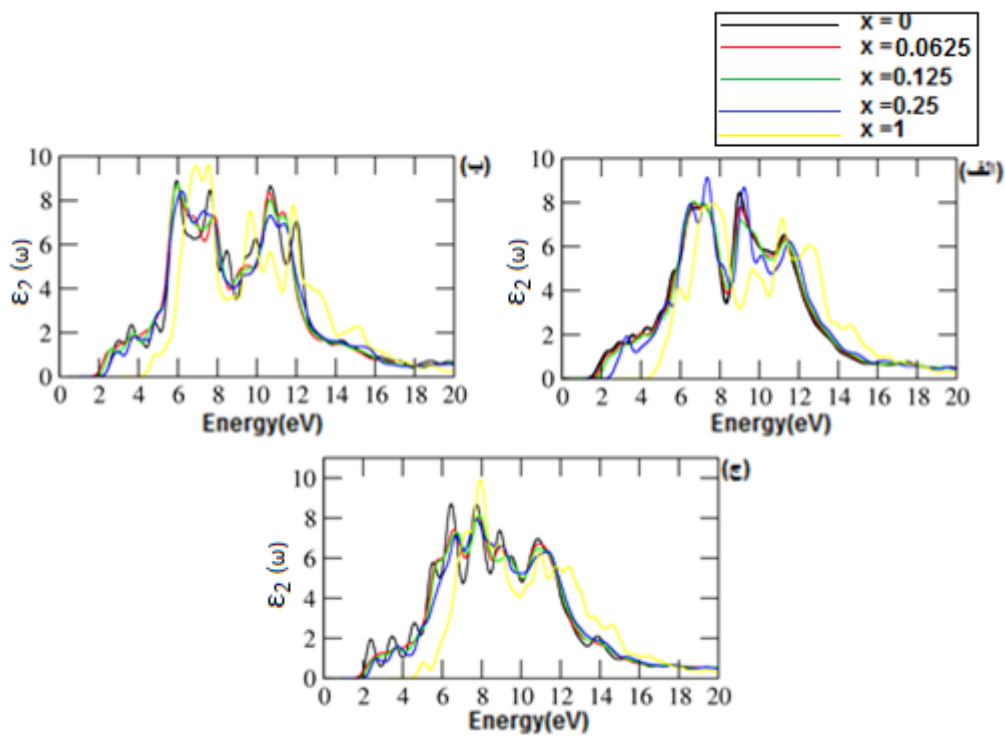
	تئوری	این پژوهش
$\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}(\text{Wz})$	۴/۲[۶۰][GGA]	۵/۴-۵/۵۲
$\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}(\text{Zb})$	۳/۸[۲۷][LDA]	۵/۴۹
$\text{AlN}(\text{Zb})$	۳/۲[۲۷][LDA]	۴/۵۵



شکل ۵-۲۱: قسمت حقیقی نمودار تابع دی الکتریک برای نمونه های  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای ساختارهای (الف) WZ در راستای X و (ب) WZ در راستای Z و (ج) Zb.



شکل ۵-۲۲: تغییرات ثابت دی الکتریک با گاف نواری نواری  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $0 < x < 1$ ) ساختار Zb.



شکل ۵-۲۳: قسمت موهومی نمودار تابع دی الکتریک برای نمونه های  $Al_x Ga_{1-x} N$  برای ساختارهای (الف)

WZ در راستای X و (ب) WZ در راستای Z و (ج) Zb.

جدول ۵-۱۲: گاف اپتیکی و گذارهای اپتیکی قسمت موهومی  $Al_x Ga_{1-x} N$  ورتسایت در راستای X

نوع ساختار	مقدار غلظت	گاف اپتیکی	قله اول	قله دوم	قله سوم	قله چهارم
WZ(x)	$x=0$	۱/۷۲	۲/۴	۳/۴۸	۴/۶۲	۵/۵۴
	$x=0.0625$	۱/۶۴	۲/۸	۳/۵۲	۴/۲۹	۵/۷۹
	$x=0.125$	۱/۸۷	۲/۵۴	۳/۷	۴/۸۴	۵/۸۱
	$x=0.25$	۲/۰۴	۲/۶۴	۳/۷۴	۴/۹۵	۶/۷۲
	$x=1$	۴/۴۶	۵/۰۵	۷/۲۳	۷/۹۷	۸/۹۱



جدول ۵-۱۳: گاف اپتیکی و گذارهای اپتیکی قسمت موهومی  $Al_x Ga_{1-x} N$  ورتسایت در راستای Z

نوع ساختار	مقدار غلظت	گاف اپتیکی	قله اول	قله دوم	قله سوم	قله چهارم
Wz(z)	$x=0$	۲/۱۲	۲/۹۹	۳/۶۵	۴/۸۵	۵/۹۳
	$x=0.0625$	۱/۷۳	۲/۵۶	۳/۱۵	۵/۹۷	۶/۷۲
	$x=0.125$	۱/۹۷	۲/۶۱	۳/۷۴	۴/۹۴	۵/۹۷
	$x=0.25$	۲/۱۲	۲/۹۵	۳/۸۱	۴/۹۴	۶/۲۴
	$x=1$	۴/۲	۴/۸۹	۵/۵۲	۶/۹۲	۷/۵۶

جدول ۵-۱۴: گاف اپتیکی و گذارهای اپتیکی قسمت موهومی  $Al_x Ga_{1-x} N$  زینک بلند

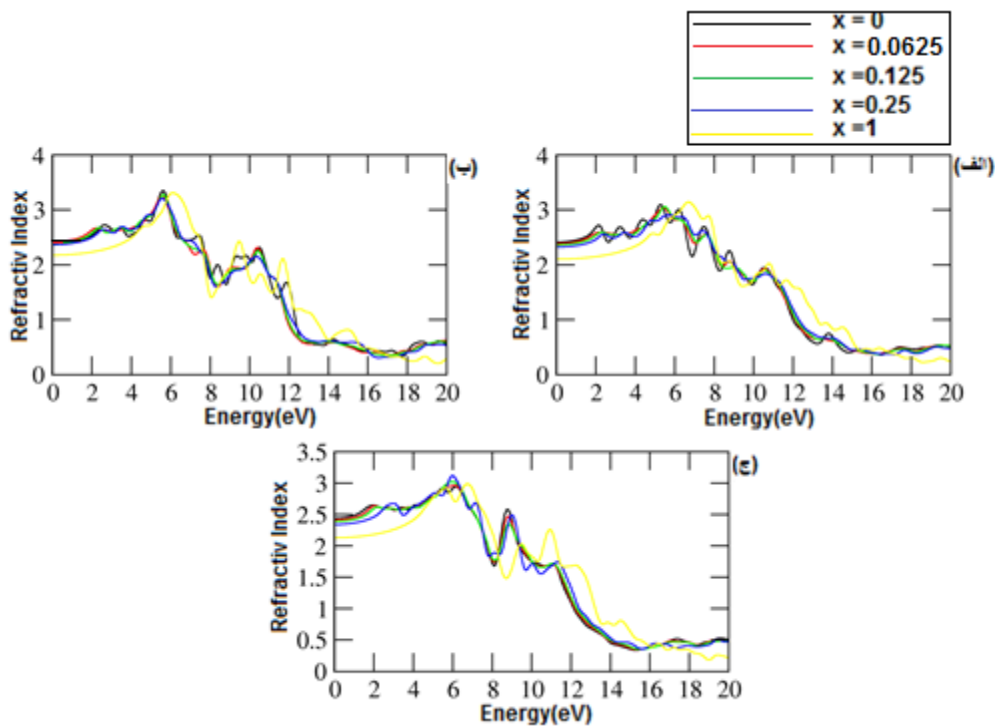
نوع ساختار	مقدار غلظت	گاف اپتیکی	قله اول	قله دوم	قله سوم	قله چهارم
Zb	$x=0$	۱/۳۳	۲/۳۱	۲/۹۸	۳/۶۴	$3/4$
	$x=0.0625$	۱/۵۵	۲/۲۹	۳	۴	۵/۰۶
	$x=0.125$	۱/۷۱	۲/۴۲	۳/۱۳	۴/۰۵	۵/۱
	$x=0.25$	۲/۲۷	۳/۳	۵/۳۵	۶/۵۳	۷/۳۷
	$x=1$	۴/۳۳	۵/۹۳	۷/۲	۷/۷۲	۹/۶۳

#### ۵-۶-۱-۲-۲-ضریب شکست و ضریب خاموشی

نحوه انتشار نور در نمونه ها با استفاده از ضریب شکست مختلط سنجیده می شود. بخش

حقیقی ضریب شکست مختلط ( $n$ ) سرعت نور در محیط را تعیین می کند. نمودار ضریب شکست

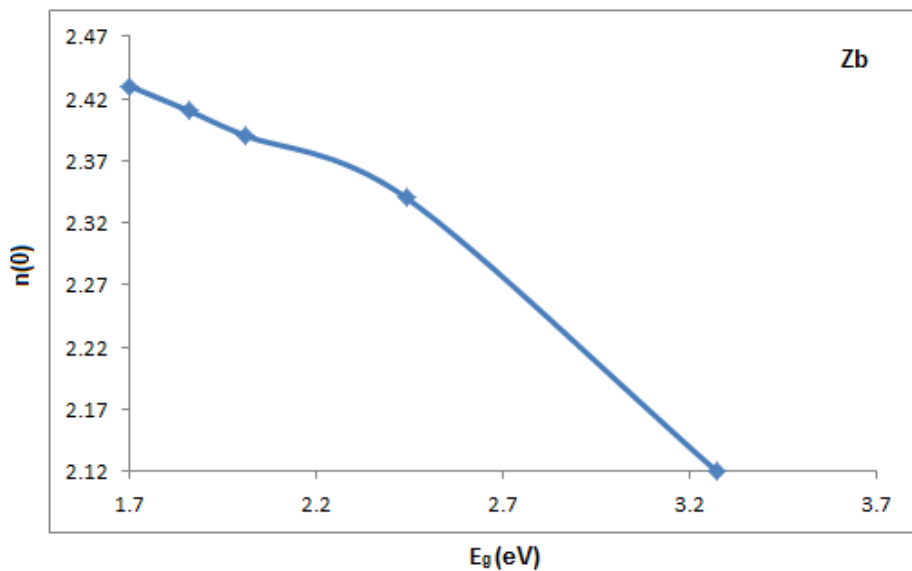
محاسبه شده برای نمونه های خالص و آلائیده با آلومینیوم در شکل ۵-۲۴ نشان داده شده است. محاسبات انجام شده نشان می دهند که مقدار ضریب شکست استاتیک برای نمونه های مختلف در جدول ۵-۱۵ آمده است. محاسبات نشان می دهند که در راستاهای x و z ساختار wZ با وارد کردن ناخالصی ضریب شکست کاهش می یابد همچنین برای ساختار zb نیز با وارد کردن ناخالصی و افزایش آن ضریب شکست کاهش می یابد. همانطور که انتظار داریم ضریب شکست با گاف نواری رابطه عکس دارد که نمودار تغییرات ضریب شکست با گاف نواری ساختار زینک بلند به عنوان نمونه در شکل ۵-۲۵ نشان داده شده است. در انرژی های بزرگتر از لبه جذب شاهد کاهش ضریب شکست به دلیل افزایش میزان جذب نور در نمونه ها هستیم. در محدوده انرژی ۶-۴ eV ضریب شکست برای همه نمونه ها به بیشینه خود می رسد که حاکی از عبور موج الکترومغناطیسی از نمونه هاست.



شکل ۵-۲۴: نمودار ضریب شکست  $Al_xGa_{1-x}N$  برای ساختارهای (الف) wZ در راستای x و (ب) راستای z و (ج) zb.

جدول ۵-۱۵: مقادیر محاسبه شده ضریب شکست برای نمونه های  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .

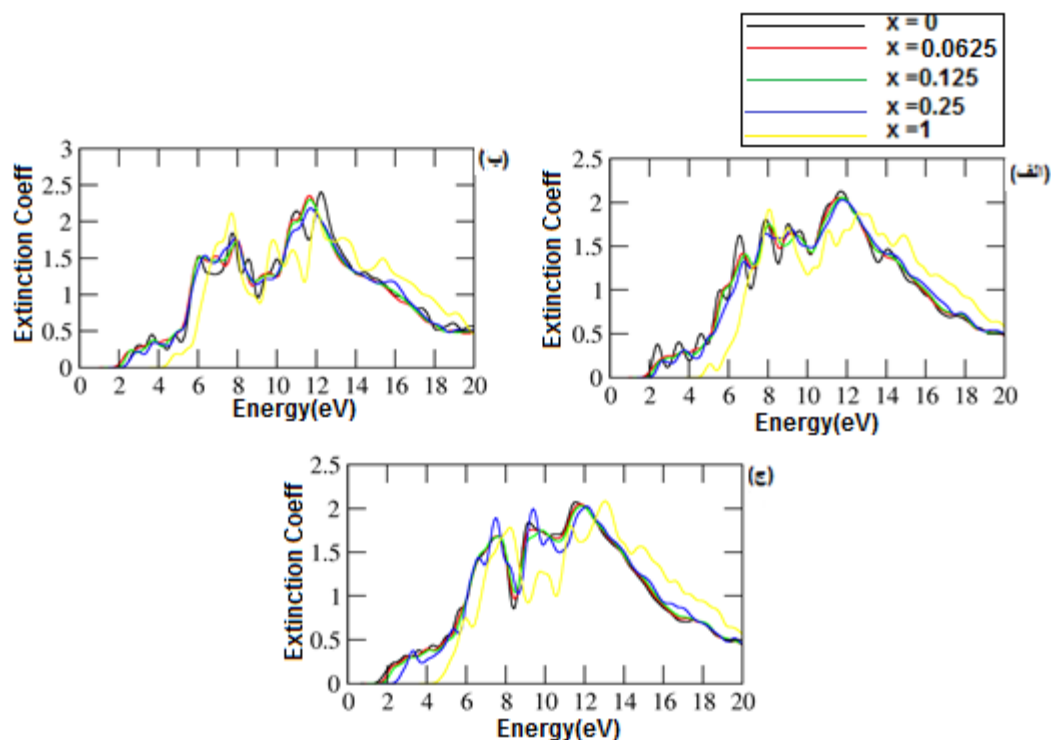
X=	۰	۶,۲۵٪	۱۲,۵٪	۲۵٪	۱۰۰٪
$W_z(x)$	۲/۴۱	۲/۳۸	۲/۳۶	۲/۳۱	۲/۰۹
$W_z(z)$	۲/۳۹	۲/۳۸۸	۲/۳۸	۲/۳۶	۲/۱۷
Zb	۲/۴۳ ۲/۰۵[۲۷][LDA]	۲/۴۱	۲/۳۹	۲/۳۴ ۱/۹۵[۲۷][LDA]	۲/۱۲ ۱/۸[۲۷][LDA]



شکل ۵-۲۵: تغییرات ضریب شکست استاتیک با گاف نواری  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $0 < x < 1$ ) ساختار ZnO.

بخش موهومی ضریب شکست مختلط، ضریب خاموشی  $(k)$ ، که معرف میزان جذب موج الکترومغناطیسی در نمونه ها است را مشخص می کند. اندازه گیری جذب نور یکی از مهمترین شیوه ها برای اندازه گیری های اپتیکی در جامدات می باشد. در اندازه گیری های مربوط به جذب با شدت نور سروکار داریم. نمودار ضریب خاموشی محاسبه شده برای آلیاژهای  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  در شکل ۵-۲۶

نشان داده شده است. در اولین ناحیه انرژی یعنی در ناحیه نزدیک به لبه جذب، شاهد هیچ گونه جذبی برای نمونه‌ها نیستیم. با آرایش افزایش غلظت ناخالصی در نمونه‌ها روند جابجایی لبه جذب، تقریباً به سمت انرژی‌های بیشتر مطابق با گاف نواری مشاهده می‌شود. روند افزایشی جذب تا انرژی‌های حدود  $12\text{eV}$  برای همه نمونه‌ها ادامه می‌یابد و سپس با افزایش بیشتر انرژی شاهد کاهش میزان جذب هستیم. این رفتار متناظر با رفتار ضریب شکست در ناحیه انرژی محاسبه شده می‌باشد. قله‌های ظاهر شده در نمودار قسمت موهومی ضریب شکست (که به ضریب خاموشی نیز مرسوم است) نشان دهنده بیشینه تراگسیل (انتقال) فوتون در آن موقعیت انرژی است. موقعیت قله‌های اصلی که ناشی از گذار بین حالت‌های اشغال شده در زیر تراز فرمی به حالت‌های اشغال نشده در نوار رسانش مربوط می‌باشد، با قله‌های اصلی ظاهر شده در نمودارهای جذب و بخش موهومی تابع دی‌الکتریک تقریباً تطابق دارند.



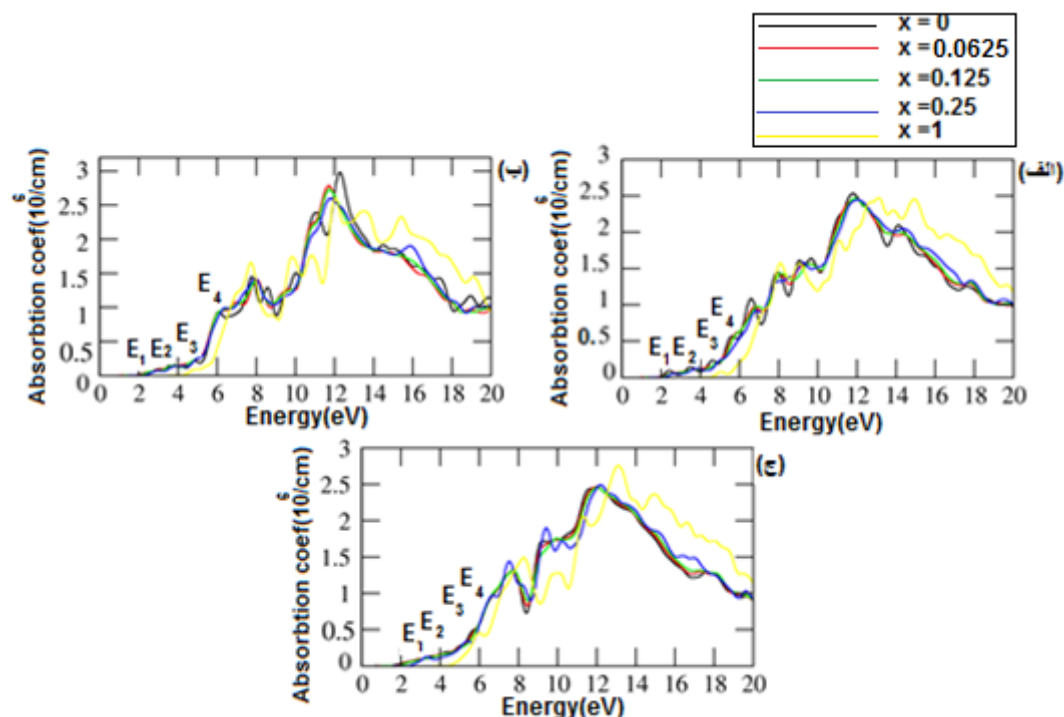
شکل ۵-۲۶: نمودار ضریب خاموشی برای ساختارهای (الف) WZ در راستای X و (ب) راستای Z و (ج) Zb

## ۵-۶-۱-۲-۳ ضریب جذب

در اندازه گیری های جذب با شدت نور  $I(z)$  بعد از پیمایش ضخامت  $z$  از ماده، سروکار خواهیم داشت. اگر شدت نور برخوردی  $I_0$  باشد، مطابق با قانون بیر بعد از طی ضخامت  $z$  از ماده شدت نور مطابق رابطه ( ۷-۵ ) به صورت نمایی کاهش می یابد:

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha(\omega)z} \quad (7-5)$$

که در آن  $\alpha(\omega)$  ضریب جذب محیط جاذب نامیده می شود [۴۵]. ضریب جذب محاسبه شده بر حسب انرژی فوتون فرودی برای آلیاژهای  $Al_xGa_{1-x}N$  و ساختار خالص با استفاده از تقریب LDA در شکل ۲۷-۵ نشان داده شده است. همانگونه که قبلا نیز اشاره شد قله های اصلی که در نمودار بخش موهومی تابع دی الکتتریک ظاهر شدند، نشان از گذار الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش و در نتیجه جذب فوتون می باشد. بررسی طیف نمونه ها نشان می دهد که مکان قله های اصلی در نمودارهای جذب و بخش موهومی تابع دی الکتتریک تقریبا منطبق می باشند. قله بیشینه در انرژی حدود  $12eV$  در منحنی  $\epsilon_2(\omega)$  و منحنی های جذب مربوط به برانگیختگی دسته جمعی پلاسمون های حجمی می باشد.



شکل ۵-۲۷: نمودار جذب برای نمونه های  $Al_xGa_{1-x}N$  برای ساختارهای الف) WZ، راستای X و ب) WZ راستای

z و ج) zb

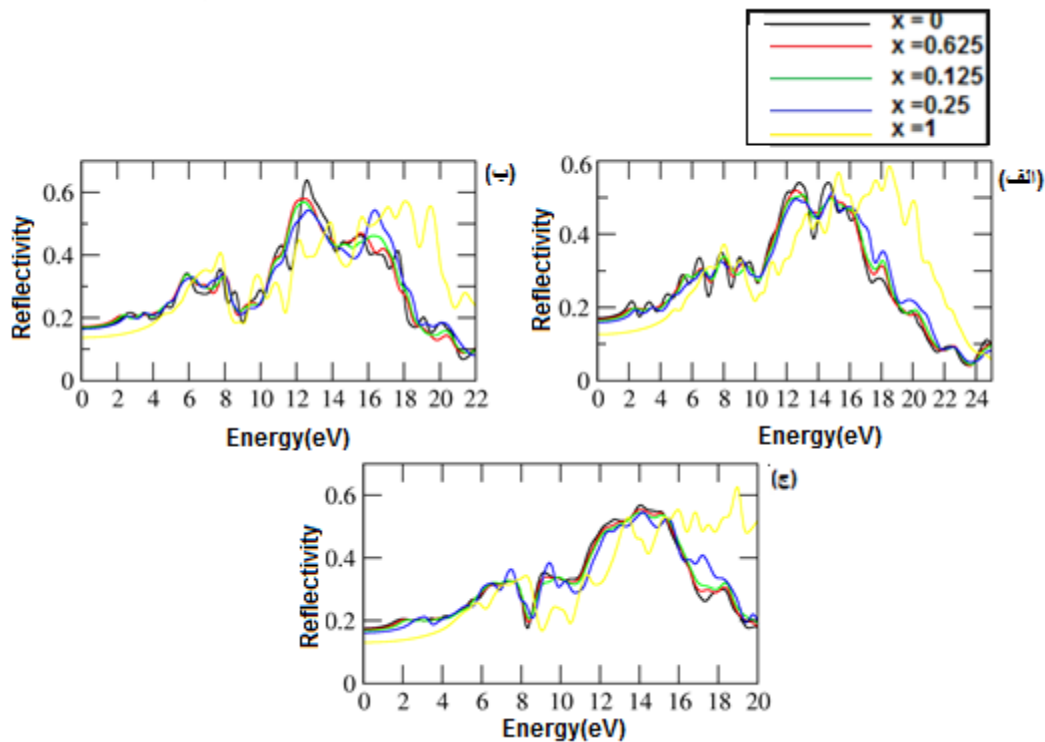
## ۵-۶-۱-۲-۴ بازتابندگی

طیف بازتابندگی  $R(\omega)$  محاسبه شده برای آلیاژ  $Al_xGa_{1-x}N$  با غلظت های ۰/۰۶۲۵، ۰/۱۲۵، ۰/۲۵ و  $AlN$  خالص در دو فاز ورتسایت و زینک بلند در شکل ۵-۲۸ نشان داده شده است. با توجه به طیف بازتابندگی مقدار انرژی ای که به ازای آن بیشینه تابندگی رخ می دهد در جدول ۵-۱۶ خلاصه شده است. در محدوده انرژی ای که ضریب شکست و خاموشی بیشینه می شوند میزان بازتابندگی نیز قابل توجه است. همانگونه که از نمودار بخش حقیقی تابع دی الکتریک مشخص است فرکانس پلاسما در این بازه انرژی قرار دارد. بخش حقیقی تابع دی الکتریک در این محدوده منفی می شود، بنابراین

جدول ۵-۱۶: مقدار انرژی ای که به ازای آن بیشینه بازتابندگی را برای آلیاژهای  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  داریم.

X	۰/۰۶۲۵	۰/۱۲۵	۰/۲۵	۱
Wz(x)(eV)	۱۲/۵۷	۱۲/۹۸	۱۲/۶۶	۱۸/۵
Wz(z)(eV)	۱۲/۳۵	۱۲/۴۱	۱۲/۶۹	۱۷/۹
Zb(eV)	۱۴/۰۸	۱۳/۹۵	۱۴/۱۷	۱۸/۹۷

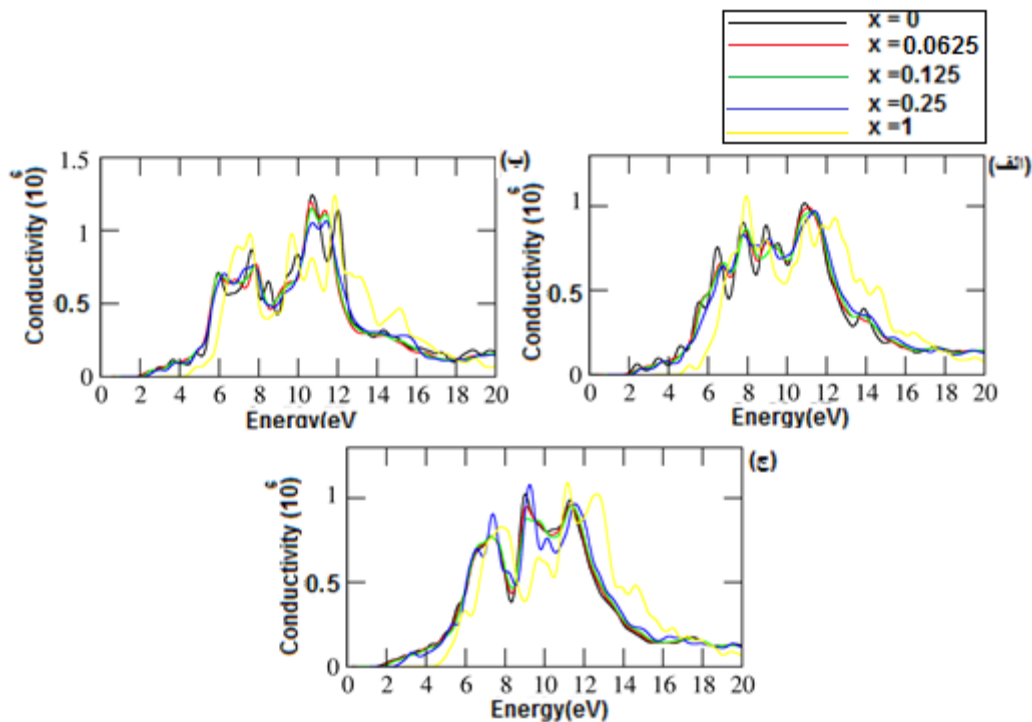
آلیاژ ما در این بازه رفتار فلزی از خود نشان می دهد و بازتابندگی آن بیشینه خواهد بود. در فرکانس های بالاتر از فرکانس پلاسما بازتابندگی به سرعت کاسته شده و میزان عبور افزایش می یابد.



شکل ۵-۲۸: نمودار بازتابندگی  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای ساختارهای الف) Wz راستای x، ب) Wz راستای Z، ج) Zb

## ۵-۶-۱-۲-۵ رسانندگی اپتیکی

رسانندگی اپتیکی  $\sigma(\omega)$  معیاری از رسانش الکتریکی در یک میدان نوسانی است. رسانندگی اپتیکی به تابع دی الکتریک ارتباط نزدیکی دارد. به طور تجربی با اندازه گیری بازتابندگی اپتیکی می توان رسانندگی اپتیکی را به دست آورد. یک ماده در صورتی از نظر اپتیکی رساناست که وقتی نور به سطح آن می تابد از خود رسانندگی نشان دهد. در پژوهش حاضر رسانندگی آلیاژ AlGa<sub>x</sub>N محاسبه شده است. نتایج این محاسبات در شکل ۵-۲۹ نشان داده شده است. از آنجا که رسانندگی به گذار بین نواری مرتبط است، انتظار داریم که در یک گذار اپتیکی مجاز (گاف نواری) آستانه ای را نشان دهد که مطابق شکل این آستانه در محدوده گاف نواری اتفاق می افتد.



شکل ۵-۲۹: نمودار رسانندگی اپتیکی  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای ساختارهای الف) WZ راستای X و ب) WZ راستای z

z و ج) z



با توجه به رابطه مستقیم بین قسمت موهومی تابع دی الکتریک و رسانندگی اپتیکی قله های بعدی در نمودار رسانندگی در موقعیت هایی مشابه با قسمت موهومی تابع دی الکتریک رخ می دهند.

#### ۵-۶-۲ محاسبات مربوط به نمونه های آلیش یافته با $(\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}) \text{In}$

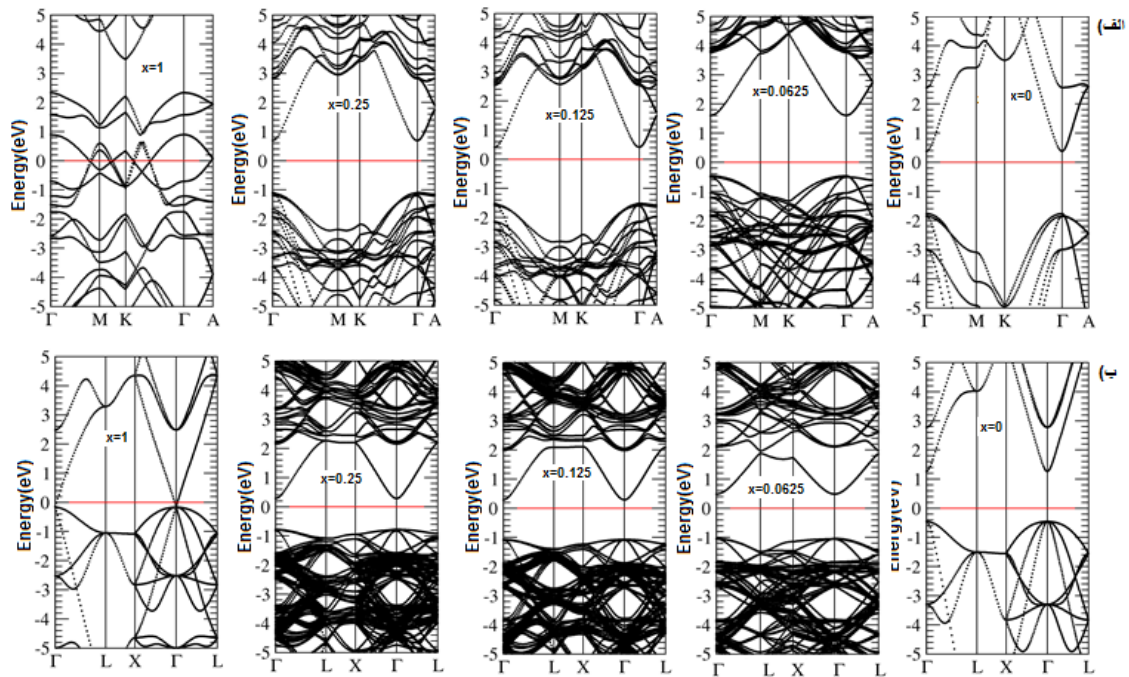
#### ۵-۶-۲-۱ ساختار نواری

برای محاسبه ساختار نواری نمونه های آلیش یافته، ابتدا با انجام محاسبات خودسازگار موقعیت تراز فرمی مشخص شده و سپس با تعیین مسیر انتگرال گیری در منطقه اول بریلوئن و انجام محاسبات مربوطه ساختار نواری محاسبه می گردد. نمودارهای ساختار نواری محاسبه شده برای نمونه های آلییده با غلظت های ۶/۲۵٪ و ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ و مقدار خالص  $\text{InN}$  در شکل ۵-۳۰ نشان داده شده است. تراز فرمی انرژی صفر الکترون ولت اختیار شده است.

با توجه به ساختار نواری محاسبه شده در شکل ۵-۳۰ مشاهده می شود که گالیم نیتراید آلییده با  $\text{In}$  یک نیمرسانای با گاف نواری مستقیم است. حضور و افزایش نوارهای انرژی در تراز فرمی با افزایش درصد اتم های ایندیوم به دلیل حضور این ناخالصی در ماده میزبان می باشد. مقادیر گاف های نواری نمونه ها در جدول ۵-۱۷ گزارش شده است. مقایسه ساختارهای نواری محاسبه شده نشان می دهد با آلیش  $\text{In}$  و افزایش غلظت آن، گاف انرژی به طور قابل توجهی کاهش می یابد که این می تواند حاکی از این واقعیت باشد که با آلیش ایندیوم در داخل  $\text{GaN}$ ، خاصیت فلزی نمونه افزایش یافته است.

جدول ۵-۱۷: مقادیر گاف نواری بر حسب eV نمونه های گالیم نیتراید آلیایده با In در دو ساختار Wz و zb

ساختار \ گاف نواری	تئوری	تجربی	در این پژوهش
Wz-GaN	۲/۰۴[۵۴] [LDA]	۳/۵[۵۵]	۲/۱۵
Wz-InGaN(0.06)	۲/۱[۶۱] [LDA]	۳/۲[۶۰]	۱/۲
Wz-InGaN(0.12)	۱/۷۵[۶۱][LDA]	۲/۹[۶۰]	۲/۰۴
Wz-InGaN(0.25)	۱/۳[۶۱][LDA]	۲/۳[۶۰]	۱/۸
Wz_InN	۰[۶۱][LDA]	۰/۶[۶۰]	۰
Zb_GaN	۱/۸۹[۵۴] [LDA]	۳/۲[۵۵]	۱/۲۲
Zb-InGaN(0.06)	۲/۸[۶۲][LDA]	۳/۸[۶۳]	۱/۵
Zb-InGaN(0.125)	۲/۷[۶۲][LDA]	۲/۹[۶۳]	۱/۲۸
Zb-InGaN(0.25)	۲/۴[۶۲][LDA]	۲/۷[۶۳]	۱/۰۹
Zb_InN	۰[۶۲][LDA]	۰/۶۱[۵۴]	۰



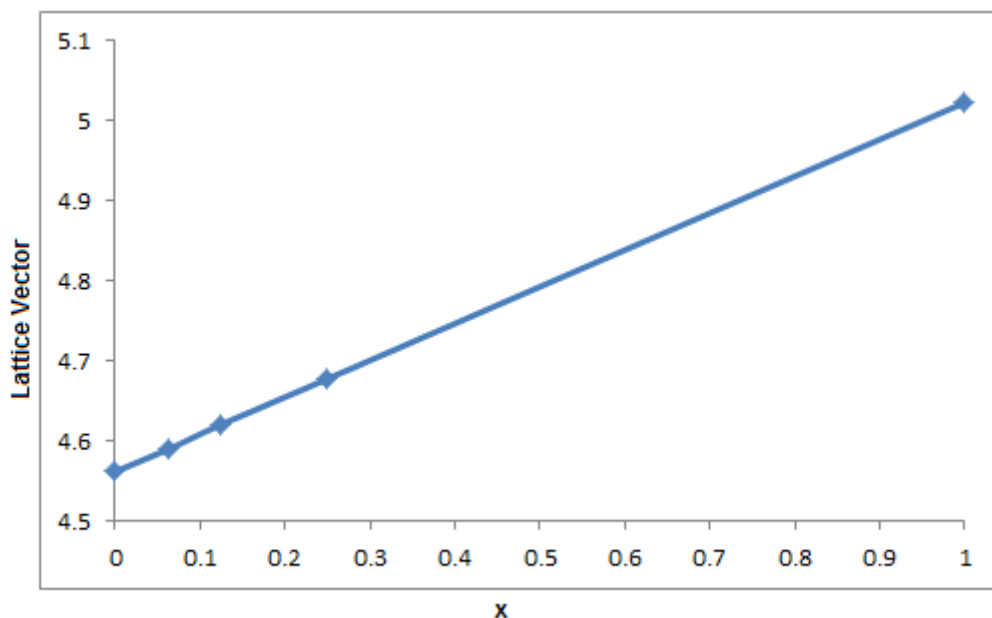
شکل ۵-۳۰: ساختار نواری محاسبه شده برای نمونه های آلیایش یافته با In برای ساختار Wz (ب) و Zb (الف)

## ۵-۶-۲-۲ بررسی ثابت های شبکه

مقادیر ثابت های شبکه برای گالیوم نیتراید خالص و آلییده با ایندیوم در جدول ۵-۱۸ برای ساختار زینک بلند آورده شده است. تغییرات ثابت شبکه نسبت به غلظت آرایش یک روند رو به افزایش دارد که نمودار آن را در شکل ۵-۳۱ مشاهده می کنید. با توجه به مقادیر ، در این ساختار با افزایش غلظت ناخالصی ثابت شبکه دارای افزایش بوده است.

جدول ۵-۱۸: مقادیر ثابت شبکه ساختار زینک بلند  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  (برحسب Å)

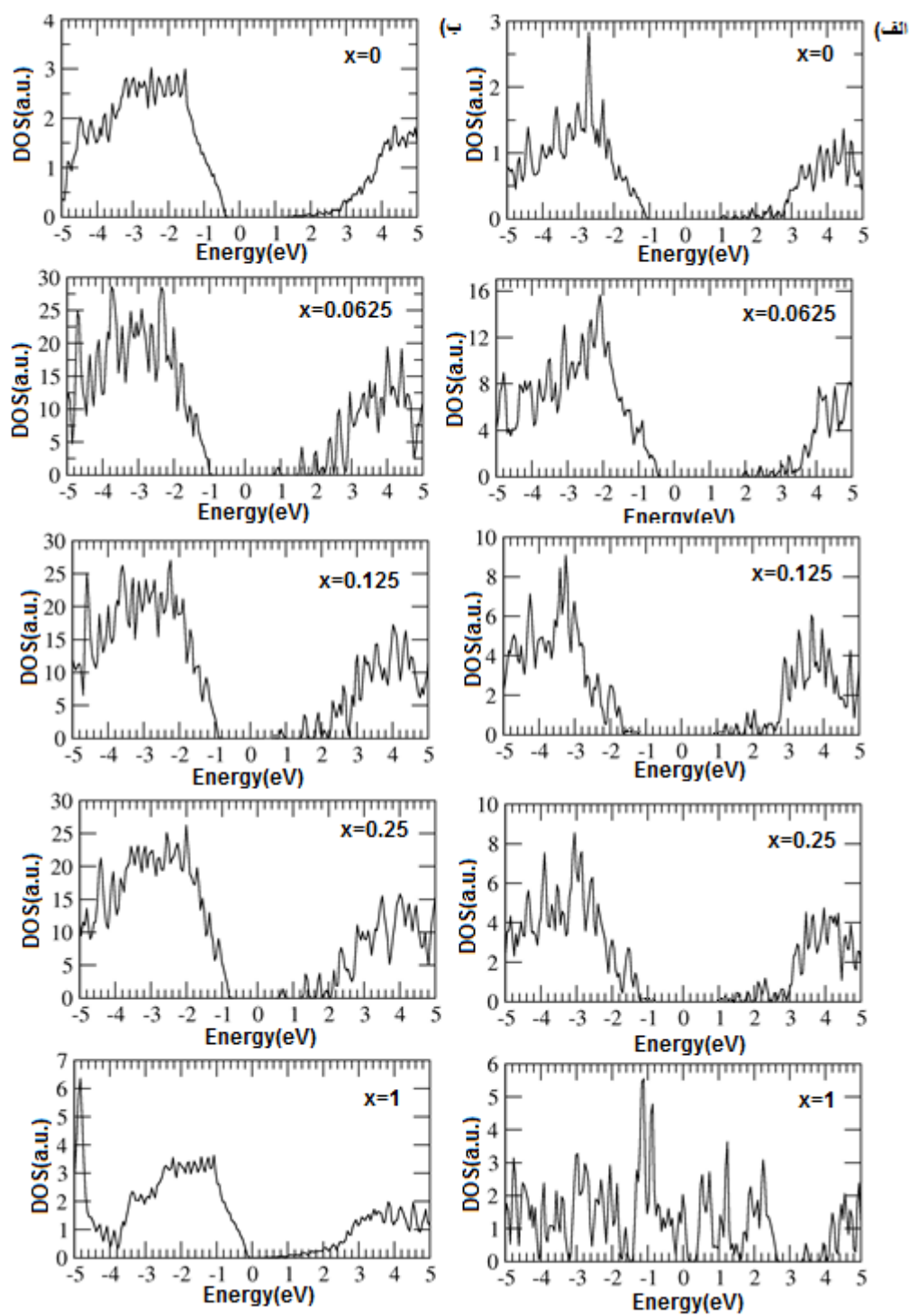
درصد ناخالصی	۰	۰/۰۶۲۵	۰/۱۲۵	۰/۲۵	۱
A	۴/۵۶۲	۴/۵۹۰	۴/۶۲۱	۴/۶۷۸	۵/۰۲۳



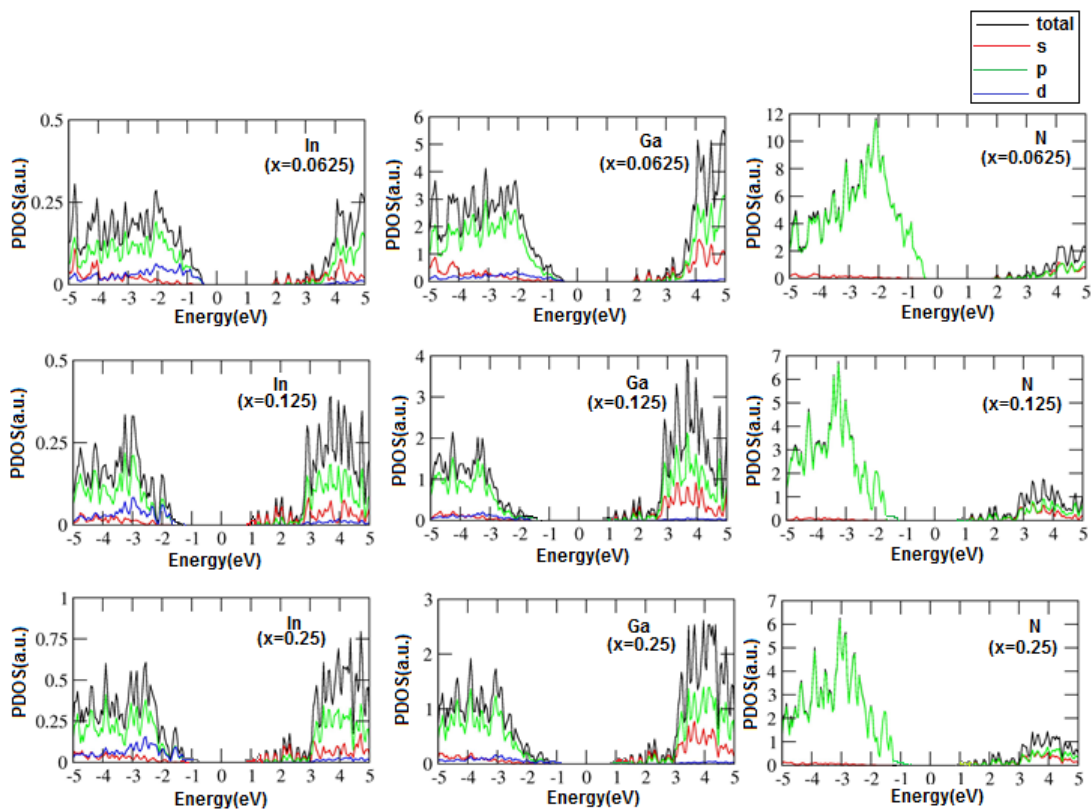
شکل ۵-۳۱: نمودار تغییرات ثابت شبکه a در  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ساختار زینک بلند.

### ۵-۶-۲-۳ چگالی حالت های کلی و جزئی

مفهوم چگالی حالت ها یک پیامد اجتناب ناپذیر وابسته به آرایش نواری در جامدات است. تعداد حالت ها در یک بازه انرژی معین از یک نوار به سادگی برحسب تابع چگالی حالت ها بیان می شود. دانستن تابع چگالی حالت ها برای محاسبه طیف جذب و گسیل ناشی از گذارهای درون نواری ضروری می باشد. در این کار برای مشخص شدن سهم هر اوربیتال در ساختار نواری  $In_xGa_{1-x}N$  چگالی حالت های کلی و جزئی محاسبه شده اند. نمودار چگالی حالت های کلی محاسبه شده برای نمونه های آلئیده با In در دو فاز ورتسایت و زینک بلند در محدوده  $-5eV$  تا  $5eV$  در شکل ۵-۳۲ نشان داده شده است. با مقایسه طیف چگالی حالت های کلی در این دو فاز، مشاهده می شود که با افزایش درصد آلیش، گاف نواری تقریباً کاهش می یابد. همچنین، گاف انرژی در فاز Wz بزرگتر از فاز Zb است. چگالی حالت های جزئی آلیاژهای ایندیوم گالیوم نیتراید نیز با تقریب LDA محاسبه شده است. نتایج این محاسبات در شکل ۵-۳۳ برای فاز ورتسایت و در شکل ۵-۳۴ برای فاز زینک بلند و در شکل ۵-۳۵ برای هر دو فاز برای حالت خالص InN نشان داده شده است.

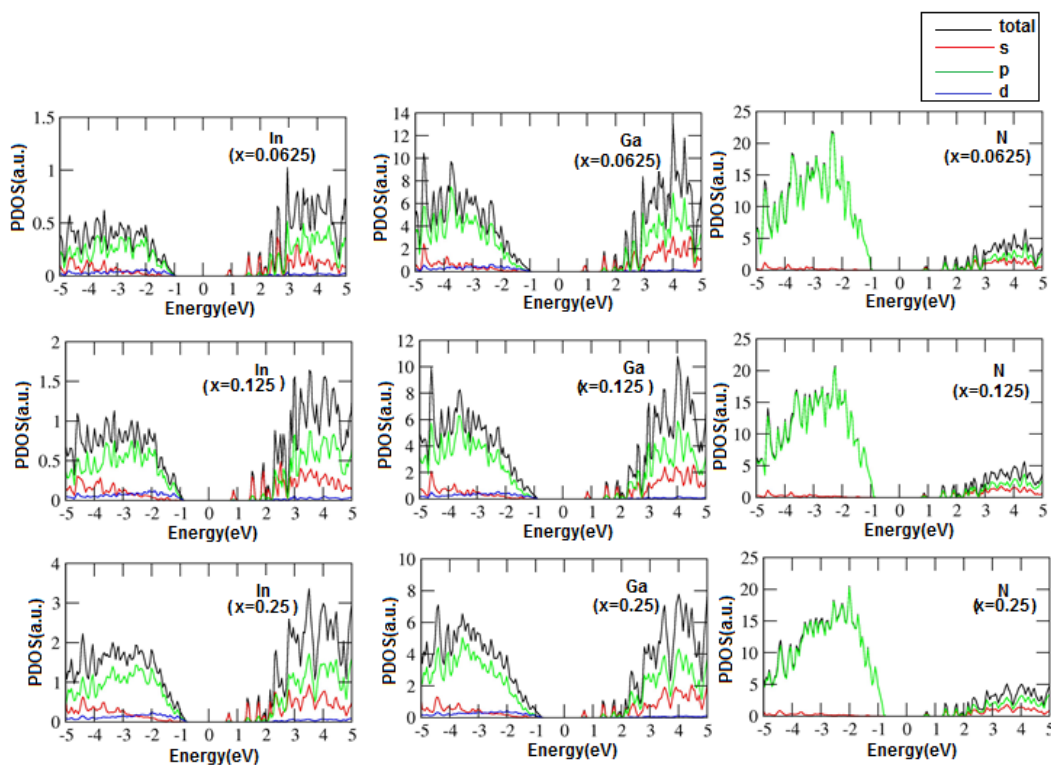


شکل ۵-۳۲: چگالی حالت های کلی برای نمونه های آلیش یافته با In برای ساختارهای الف (Wz) و ب (Zb).



شکل ۳-۵: چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای آلیاژ  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای ساختار ورتسایت

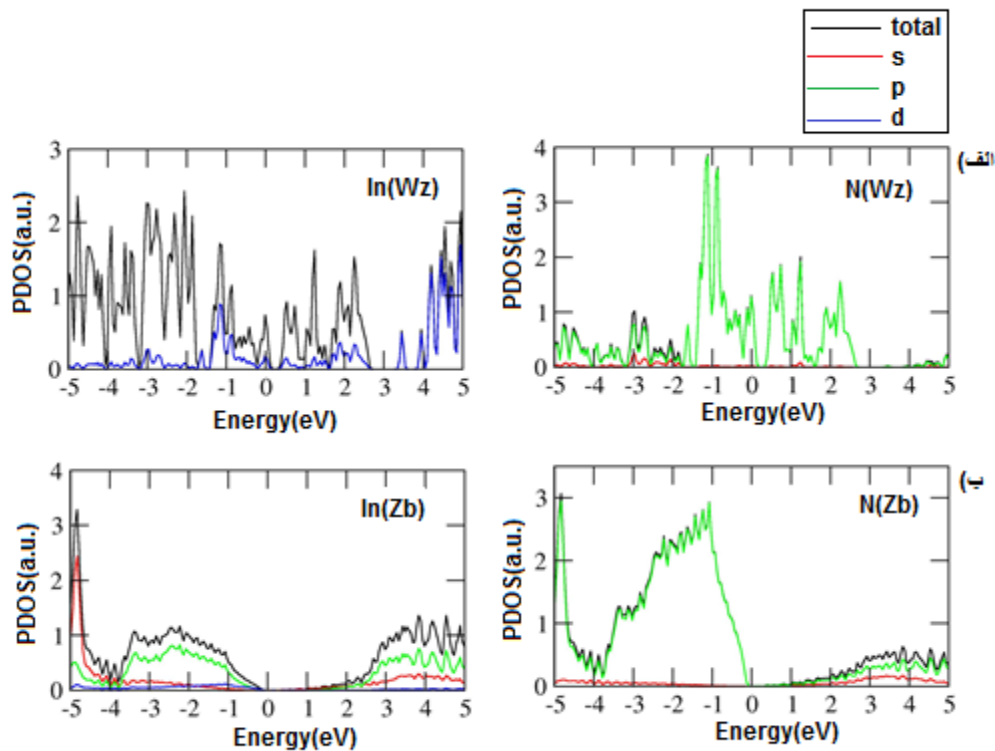
بررسی چگالی حالت های جزئی آلیاژهای  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$  به ازای غلظت های ۰/۰۶۲۵، ۰/۱۲۵ و ۰/۲۵ سهم هر یک از اوربیتال ها را در چگالی حالت های کلی مشخص می کند. چگالی حالت ها در بازه انرژی  $-5\text{ eV}$  تا  $+5\text{ eV}$  حاصل برهم نهی اوربیتال های s و p اتم های N، اوربیتال های s، p و d اتم های In و Ga می باشد. برای فاز ورتسایت با توجه به شکل ۳-۵ در نوار ظرفیت برای اتم Ga در هر سه آلیاژ بیشترین سهم مربوط به تراز ۴p می باشد و بعد از آن اوربیتال های ۴s و ۳d سهم دارند. در نوار رسانش نیز ابتدا ۴p سپس ۴s و نهایتاً ۳d بیشترین سهم را دارا هستند، که البته بیشترین چگالی اوربیتال مربوط به نوار رسانش در آلیاژ با غلظت ۰/۰۶۲۵ بعد از آن ۰/۱۲۵ و کمترین مربوط به آلیاژ با غلظت ۰/۲۵ می باشد. برای اتم In چگالی حالت های جزئی اتم ها در دو مقدار آلیاژ ۰/۰۶۲۵ و ۰/۱۲۵ بسیار کم و برای غلظت ۰/۲۵ در هر دو نوار رسانش و ظرفیت سهم اوربیتال ۵p بیشترین مقدار و دو اوربیتال دیگر ناچیز است.



شکل ۵-۳۴: چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای آلیاژ  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$  برای ساختار زینک بلند

نزدیک به تراز فرمی سهم اوربیتال  $4d$  نسبت به اوربیتال  $5s$  بیشتر و قابل توجه می باشد. این رفتار در هر سه غلظت یکسان بوده و در آلیاژ با غلظت  $0.25$  مقدار چگالی بیشتر است. در اتم  $\text{N}$  بیشترین سهم چگالی مربوط به اوربیتال  $2p$  در نوار ظرفیت می باشد و سهم اوربیتال های دیگر در هر دو نوار ناچیز است. همچنین این رفتار در هر سه غلظت یکسان و در غلظت  $0.0625$  چگالی بیشترین مقدار را داراست.

برای ساختار زینک بلند طبق مشاهدات شکل ۵-۳۴، برای اتم  $\text{Ga}$  سهم چگالی اوربیتال  $4p$  برای هر دو نوار رسانش و ظرفیت بیشترین مقدار و سپس اوربیتال  $4s$  در نوار رسانش است و اوربیتال  $3d$  در نزدیکی تراز فرمی نسبت به اوربیتال  $4s$  سهم بیشتری دارد. همچنین بیشترین مقدار چگالی به



شکل ۵-۳۵: چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای InN خالص برای دو فاز (الف) ورتسایت (ب) زینک بلند.

ترتیب مربوط به غلظت های ۰/۰۶۲۵ و ۰/۱۲۵ و ۰/۲۵ است. برای اتم In نیز بیشترین سهم مربوط به اوربیتال ۵p در هر دو نوار است. در نزدیک به تراز فرمی سهم اوربیتال ۴d از اوربیتال ۵s بیشتر بوده و با دور شدن از تراز فرمی سهم آن کاهش می یابد. همچنین اوربیتال ۲p در نوار ظرفیت اتم N بیشترین سهم چگالی را دارد و اوربیتال های ۲p در نوار رسانش و ۲s آن در هر دو نوار سهم ناچیزی دارد. همچنین چگالی اتم N بیشترین مقدار و بعد از آن Ga می باشد که البته سهم اتم In کم است. چگالی جزئی اتم های InN خالص نیز بدین گونه است که: برای ساختار ورتسایت آن، که فلز بوده و برای ساختار زینک بلند آن در هر دو نوار اتم In بیشترین سهم مربوط به اوربیتال ۵p بوده و سپس در نوار ظرفیت و نزدیک به تراز فرمی سهم اوربیتال ۴d بیشتر از ۵s است و در انرژی های



دورتر از تراز فرمی اوربیتال ۵s سهم بیشتری نسبت به اوربیتال ۴d دارد. برای اتم N نیز بیشترین سهم را اوربیتال ۲p داراست.

### ۵-۶-۲ محاسبات خواص اپتیکی

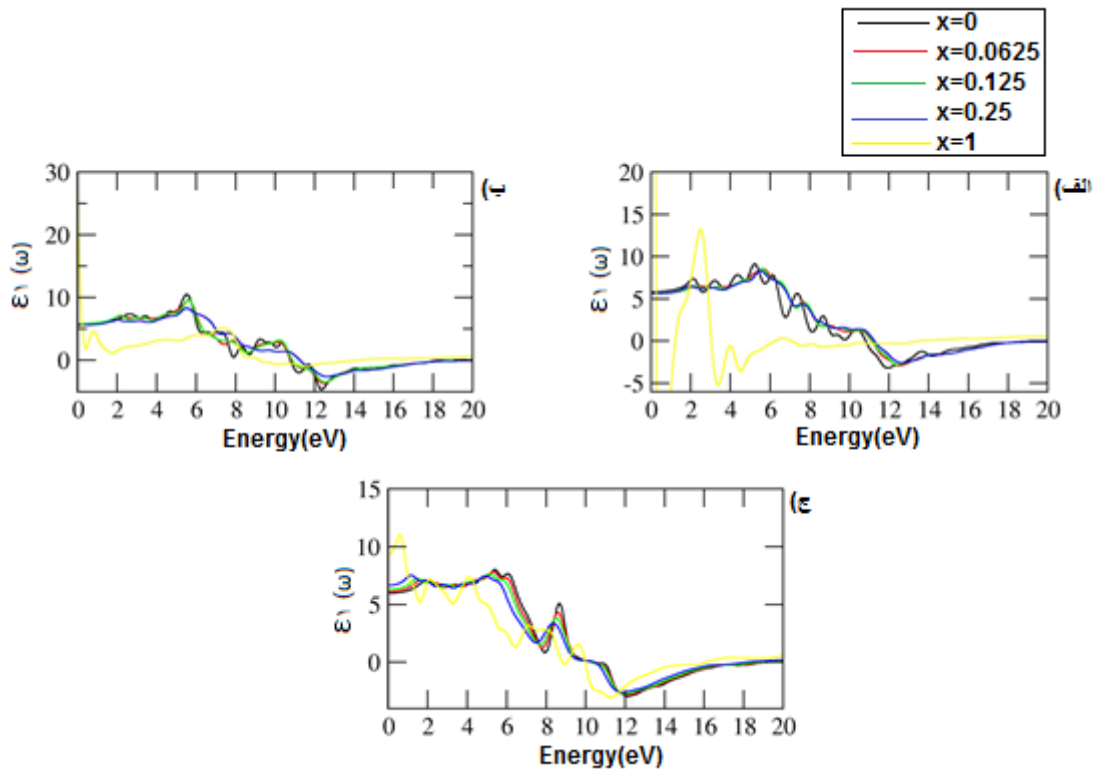
در ادامه پژوهش به نتایج حاصل از بررسی خواص اپتیکی GaN آلاینده با In و مقایسه آن با نتایج بدست آمده برای ترکیب GaN خالص پرداخته شده است.

### ۵-۶-۱ تابع دی الکتریک

قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ( $\epsilon_1(\omega)$ ) محاسبه شده برای  $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$  به ازای  $x = 0$ ،  $x = 0.0625$ ،  $x = 0.125$ ،  $x = 0.25$  و  $x = 1$  با استفاده از تقریب LDA در شکل ۵-۳۶ نشان داده شده است. بررسی نمودار مربوط به بخش حقیقی تابع دی الکتریک مقدار  $\epsilon_1(\omega)$  در فرکانس صفر، که نشان دهنده پاسخ دی الکتریک به میدان الکتریکی استاتیک است.

ثابت دی الکتریک (در انرژی صفر) برای نمونه خالص GaN و آلاینده با غلظت های ۰.۰۶۲۵، ۰.۱۲۵، ۰.۲۵ و خالص InN به ترتیب برای ساختار ورتسایت در راستای X برابر با ۵/۵۵، ۵/۵۴، ۵/۸۱ و ۵/۵۹، و بی نهایت و در راستای Z برابر با ۵/۷۲، ۵/۷۸، ۵/۸۱، ۵/۹ و ۲۷/۵ می باشد. همچنین برای ساختار زینک بلند نیز به ترتیب برابر با ۵/۸۹، ۶/۰۹، ۶/۲۶، ۶/۶۵ و ۹/۲ است. بنابراین می توان گفت پاسخ نمونه خالص به میدان الکتروستاتیک با افزایش غلظت In در ساختار زینک بلند به طور تقریبی افزایش می یابد.

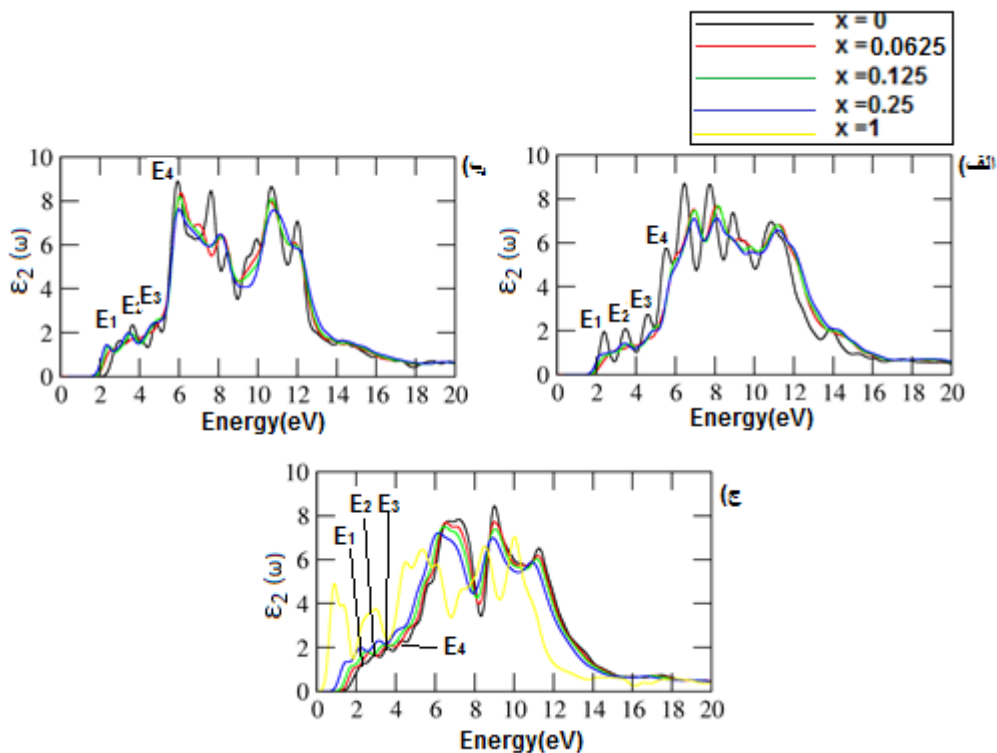
در ساختار ورتسایت در راستای Z نیز به همین صورت با افزایش غلظت، افزایش می یابد اما در راستای X دارای نظم خاصی نیست. تابع دی الکتریک برای نمونه خالص و آلاینده با غلظت های گفته



شکل ۵-۳۶: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک محاسبه شده برای آلیاژهای  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای ساختار wZ در راستای (الف) X و (ب) Z و (ج) ساختار zb.

شده در انرژی ای منفی می شود. این نقطه جایی است که گذار الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش اتفاق می افتد و بنابراین ما انتظار داریم در نمودار قسمت حقیقی تابع دی الکتریک یک قله جذب ظاهر شود که در شکل ۵-۳۶ این انتظار برآورده شده است. مقدار منفی تابع دی الکتریک (فرکانس پلاسما) نشان دهنده این است که این ماده رفتار فلزی داشته و میدان الکتریکی فوتون منجر به گذار های اپتیکی بین حالت های اشغال شده و حالت های الکترونی اشغال نشده می شود. مقادیر فرکانس پلاسما با توجه به نمودار  $\epsilon_1(\omega)$  برای ۰/۲۵، ۰/۱۲۵، ۰/۰۶۲۵ و  $x=0$  به ترتیب برای ساختار ورتسایت در راستای X برابر ۱۰/۸۲، ۱۱/۱۳، ۱۱/۱۶ و ۱۱/۲۵ الکترون ولت و در راستای Z برابر ۱۰/۷۷، ۱۰/۸۳، ۱۰/۸۶ و ۱۱/۲۵ الکترون ولت

همچنین برای ساختار زینک بلند برابر ۱۰/۴۴، ۱۰/۴۲، ۱۰/۲۷ و ۱۰/۴۳ الکترون ولت می باشد. قسمت موهومی تابع دی الکترونیک محاسبه شده برای نمونه های  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  با غلظت های برابر با ۰.۲۵، ۰.۱۲/۵ و ۰.۰۶/۲۵ و نیز ساختار خالص  $\text{InN}$  که با استفاده از تقریب LDA محاسبه شده است در شکل ۵-۳۷ نشان داده شده است. با توجه به نمودار بخش موهومی تابع دی الکترونیک مشاهده می شود که لبه جذب با افزایش غلظت ناخالصی به سمت انرژی های پایین تر جابجا می شود که با روند کاهشی گاف نواری مشاهده شده در ساختار نواری همخوانی دارد. بررسی رفتار قسمت موهومی تابع دی الکترونیک نمونه های آلئیده نشان می دهد با افزایش غلظت ایندیوم، عرض ناحیه جذب افزایش و تیزی و ارتفاع قله ها کاهش می یابد. موقعیت قله های مشاهده شده در نمودار قسمت موهومی تابع دی الکترونیک در جدول ۵-۱۹ گزارش شده است.



شکل ۵-۳۷: قسمت موهومی تابع دی الکترونیک محاسبه شده برای آلیاژهای  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای (الف) ساختار

WZ راستای X و (ب) ساختار WZ راستای Z و (ج) ساختار Zb

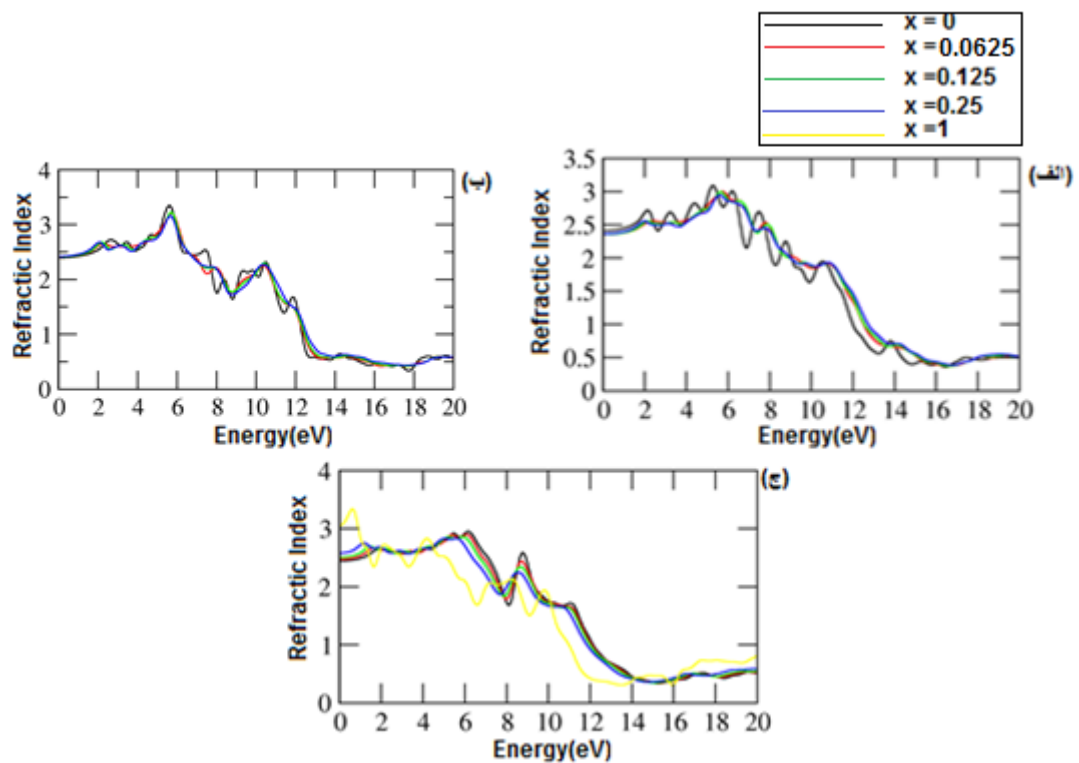
جدول ۵-۱۹: موقعیت قله های ظاهر شده در نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک آلیاژهای  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .

ساختار ورتسایت در راستای X					
درصد ناخالصی	گاف نواری	قله اول (eV)	قله دوم (eV)	قله سوم (eV)	قله چهارم (eV)
$x=0$	۱/۷۲	۲/۴	۳/۴۸	۴/۶۲	۵/۵۴
$x=0.6/25$	۱/۷	۳/۰۵	۳/۷۴	۴/۵۹	۶/۰۶
$x=0.12/5$	۱/۶۳	۲/۴۴	۲/۸۵	۳/۵۹	۵/۰۳
$x=0.25$	۱/۵۵	۲/۲۶	۳/۴۲	۴/۸۶	۵/۸۷
ساختار ورتسایت در راستای Z					
$x=0$	۲/۱۲	۲/۹۹	۳/۶۵	۴/۸۵	۵/۹۳
$x=0.6/25$	۱/۷۶	۲/۵۹	۳/۱۹	۳/۶۴	۶/۱۱
$x=0.12/5$	۱/۷۱	۲/۴۶	۳/۵۹	۴/۹۶	۶/۰۱
$x=0.25$	۱/۵۹	۲/۳۴	۳/۴۹	۴/۷۱	۶/۰۱
ساختار زینک بلند					
$x=0$	۱/۳۳	۲/۳۱	۲/۹۸	۳/۶۴	۳,۴
$x=0.6/25$	۱/۱۱	۱/۹۷	۲/۶۸	۳/۶۶	۴/۷۲
$x=0.12/5$	۰/۸۴	۱/۷۷	۲/۵۱	۳/۳۷	۴/۵
$x=0.25$	۰/۶۷	۱/۴۸	۲/۲۴	۳/۱۲	۴/۱۵
$x=1$	۰	۰/۸۷	۱/۳۶	۳	۴/۵۲

## ۵-۶-۲-۲ ضریب شکست و ضریب خاموشی

نمودار ضریب شکست محاسبه شده برای نمونه های GaN خالص و آلاییده در شکل ۵-۳۸ نشان داده شده است. برای ضریب شکست در نواحی ای که نمودار صعودی باشد بیشترین میزان فوتون عبوری را داریم. با استفاده از این نمودارها ضرایب شکست استاتیک GaN خالص و آلاییده با  $0.6/25$ ،  $0.12/5$  و  $0.25$  ایندیوم در جدول ۵-۲۰ آورده شده اند. برای ساختار زینک بلند با افزایش ناخالصی ضریب شکست افزایش می یابد به این ترتیب نمونه خالص زینک بلند کمترین ضریب شکست و نمونه  $In_{0.25}Ga_{0.75}N$  بیشترین ضریب شکست را دارا است. همچنین برای راستای z ساختار ورتسایت به همین ترتیب با افزایش غلظت ضریب شکست تا حدودی افزایش می یابد بنابراین میزان عبوردهی نور در این محدوده بیشتر و نمونه ها شفاف هستند. بعد از عبور از لبه جذب، روند کاهش ضریب شکست آغاز می گردد که نشان دهنده افزایش میزان جذب در نمونه ها می باشد. در محدوده  $5-7$  eV با بیشینه شدن ضریب شکست برای همه نمونه ها موج الکترومغناطیسی از نمونه ها عبور می کند. ولی در راستای x تغییرات نا منظمی وجود دارد. قله های ظاهر شده در طیف جذب متناظر با قله های ظاهر شده در بخش موهمومی تابع دی الکترونیک است.

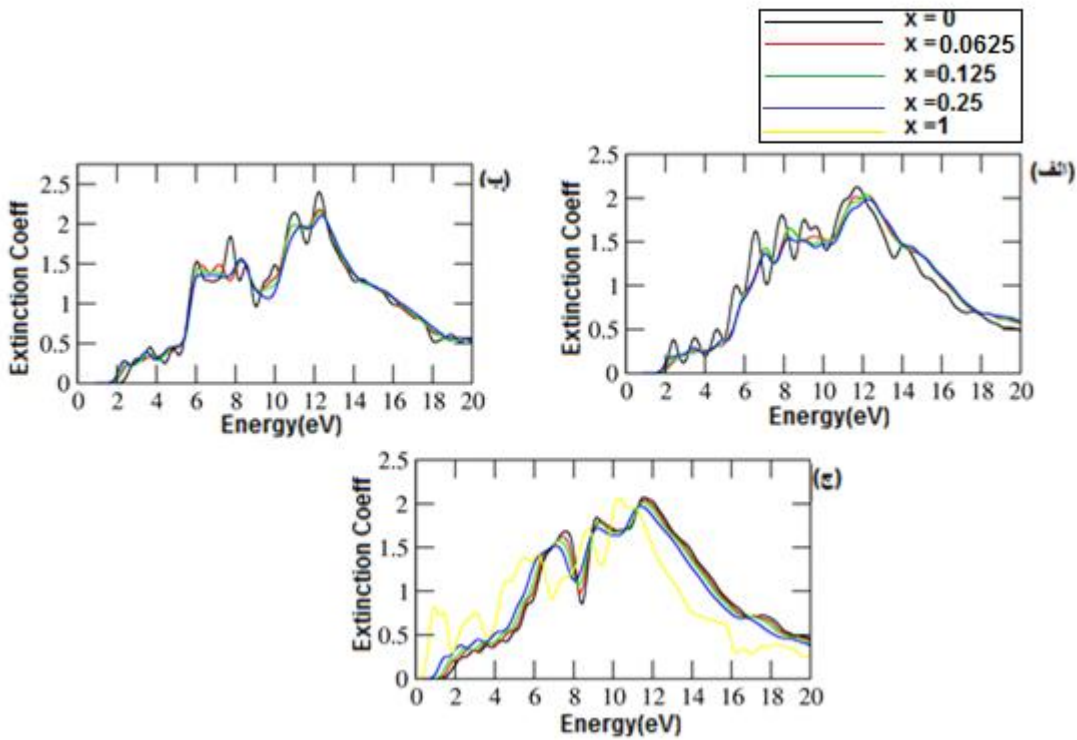
در ادامه ضرایب خاموشی نمونه های GaN خالص و آلاییده محاسبه شده اند. نتایج این محاسبات نیز در شکل ۵-۳۹ نشان داده شده است. در انرژی های کمتر از لبه جذب، هیچگونه جذبی از طرف نمونه ها صورت نمی گیرد. با رسیدن به لبه جذب، جذب در نمونه ها نیز آغاز می شود. با افزایش غلظت ناخالصی جابجایی لبه جذب به سمت انرژی های کمتر، که مطابق با گاف نواری است، کاهش می یابد. جذب تا انرژی های حدود  $12$  eV برای همه نمونه ها رو به افزایش (نشان دهنده جذب بالا در آن ناحیه) و سپس با افزایش بیشتر انرژی میزان جذب کاهش می یابد، که متناظر با رفتار ضریب شکست می باشد. قله های مشاهده شده در طیف ضریب جذب متناظر با قله های ظاهر شده در نمودار بخش موهمومی تابع دی الکترونیک است.



شکل ۵-۳۸: نمودار ضریب شکست نمونه  $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$  برای ساختارهای (الف) WZ راستای X، (ب) WZ راستای Z، (ج) Zb.

جدول ۵-۲۰: ضرایب شکست GaN خالص و آلائیده با ایندیوم

درصد ساختار	۰	۶/۲۵٪	۱۲/۵٪	۲۵٪
Wz(x)	۲/۴۱	۲/۳۵۳	۲/۳۵۵	۲/۳۶
Wz(z)	۲/۳۹ ۰/۰۷[۵۶][GGA]	۲/۴	۲/۴۱ ۰/۱[۵۶][GGA]	۲/۴۲
Zb	۲/۴۳	۲/۴۷	۲/۵	۲/۵۷

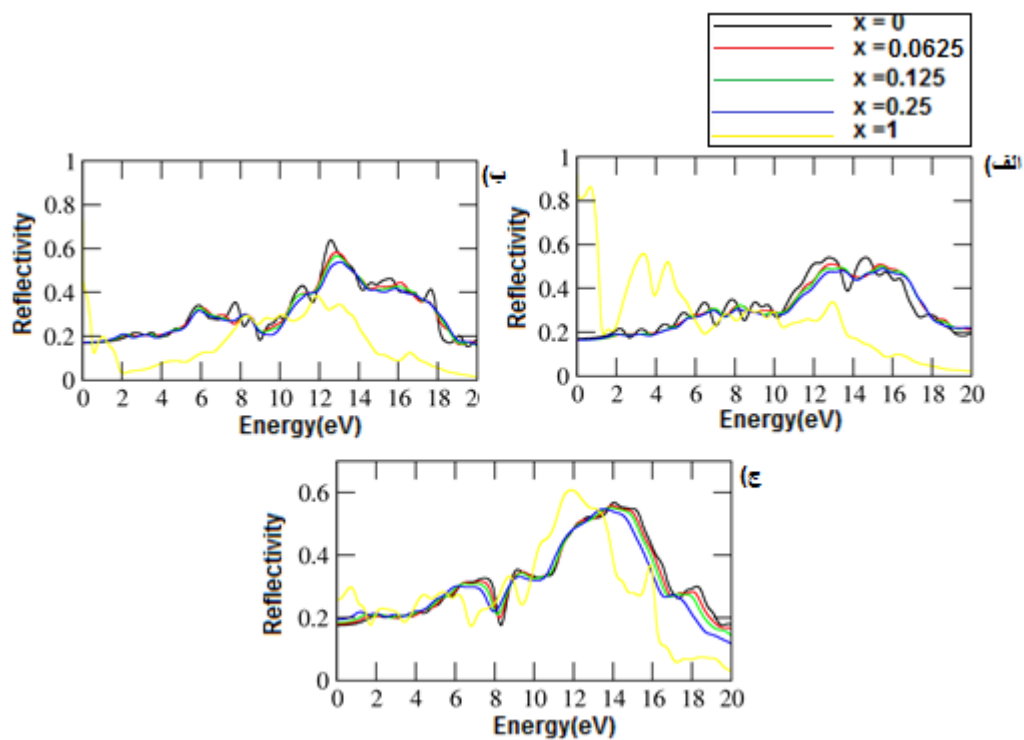


شکل ۵-۳۹: نمودار ضریب خاموشی نمونه  $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$  برای ساختارهای (الف) WZ راستای X، (ب) WZ راستای Z، (ج) Z راستای Zb.

### ۵-۶-۲-۳ بازتابندگی

رفتار بازتابندگی بررسی شده برای نمونه های آلئیده InGaN با استفاده از تقریب LDA در شکل های ۵-۴۰ رسم شده است. در محدوده ای که ضریب شکست تغییرات زیادی دارد بازتابندگی رخ می دهد. نقاط کمینه روی نمودار بازتابندگی معرف فرآیند جذب و نقاط بیشینه معرف بیشترین بازتابندگی می باشند. مقدار بازتابندگی در انرژی صفر برای غلظت ناخالصی ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪، ۲۵٪ و حالت های خالص در جدول ۵-۲۱ آورده شده است. در محدوده انرژی ۱۲ eV، که فرکانس پلاسما برای نمونه های آلایش یافته و نمونه خالص در این محدوده قرار می گیرد، با افزایش خاصیت فلزی نمونه ها، بازتابندگی نیز افزایش می یابد. در محدوده ای که نمونه ها همچنان رفتار فلزی از خود

نشان می دهند یعنی جایکه قسمت حقیقی تابع دی الکتریک همچنان منفی است میزان بازتابندگی قابل توجه است. همانگونه که در شکل مشاهده می شود با افزایش انرژی، بازتابندگی افزایش یافته است. چون در این محدوده مقدار جذب نیز افزایش می یابد در نتیجه میزان عبور کوچک خواهد بود.



شکل ۵-۴: نمودار بازتابندگی برای نمونه های  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای ساختار های (الف) WZ در راستای X، (ب) WZ در راستای Z و (ج) zb.

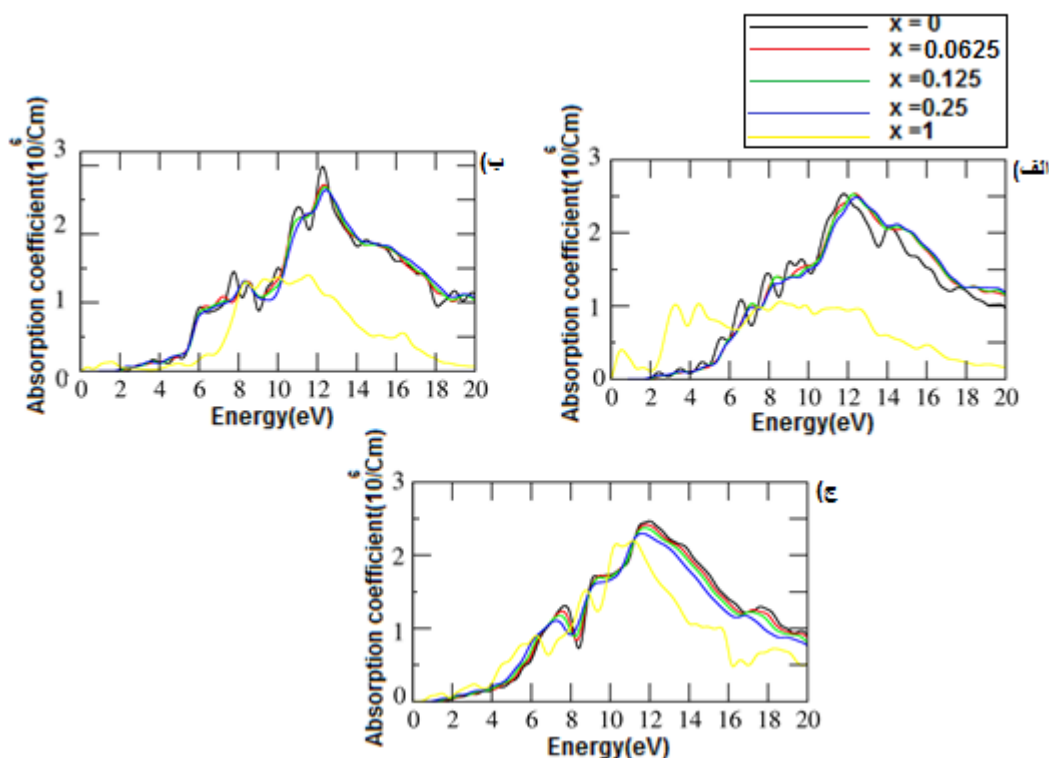


جدول ۵-۲۱: مقدار بازتابندگی در انرژی صفر برای حالت خالص و آلائیده InGaN در ساختارهای مختلف.

درصد غلظت ها	۰	۶/۲۵٪	۱۲/۵٪	۲۵٪	۱
Wz(x)	۰/۱۷	۰/۱۷۱	۰/۱۷۲	۰/۱۷۴	۰/۸
Wz(z)	۰/۱۶ ۰/۰۷[۵۶][GGA]	۰/۱۷	۰/۱۷۱	۰/۱۷۲ ۰/۱[۵۶][GGA]	۰/۷۳
Zb	۰/۱۷۵	۰/۱۷۹	۰/۱۸۳	۰/۱۹۲	۰/۲۵۳

#### ۵-۶-۲-۴ ضریب جذب

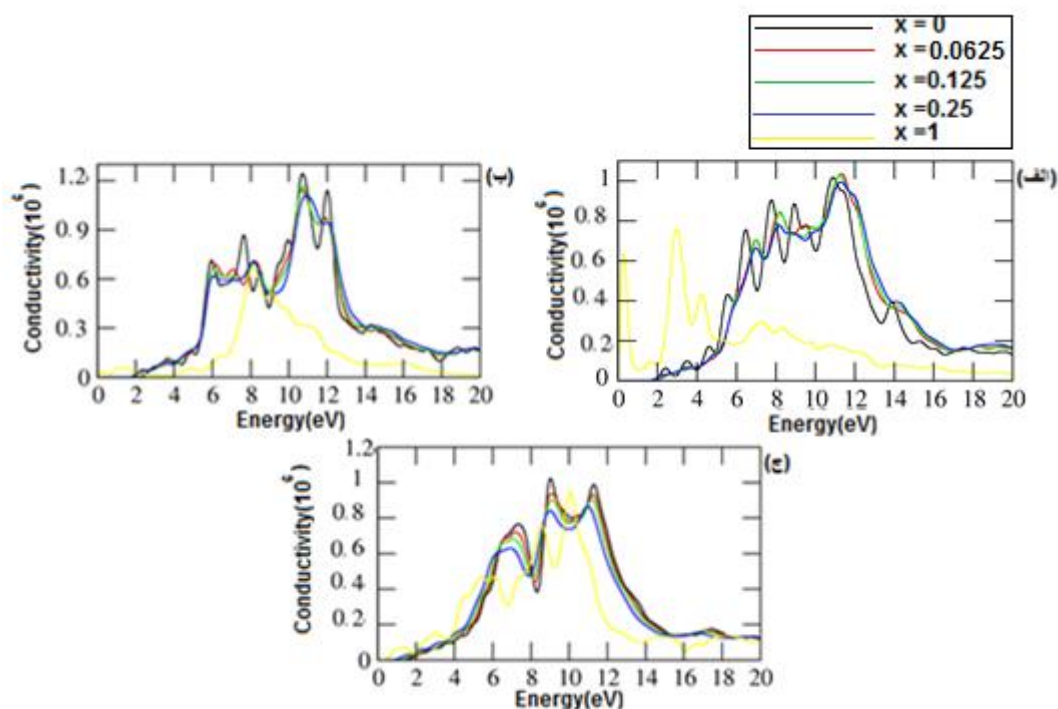
ضریب جذب محاسبه شده برای حالت خالص GaN و آلیاژهای  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  با استفاده از تقریب LDA در شکل ۵-۴۱ نشان داده شده است. از آنجا که ضریب جذب متناسب با ضریب خاموشی است بنابراین منحنی تغییرات آن مشابه رفتار ضریب خاموشی است. در منحنی ضریب جذب انرژی آستانه برای گذار بین نواری مشخص است. از انرژی حدود  $12\text{eV}$  به بعد ضریب جذب همانند ضریب خاموشی یک روند رو به کاهش دارد.



شکل ۵-۴: نمودار ضریب جذب برای نمونه های  $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$  (د) ۰,۲۵، برای ساختارهای الف) WZ در راستای X و ب) WZ در راستای Z و ج) zb.

### ۵-۲-۶-۵ رسانندگی اپتیکی

شکل ۵-۴۲ نتایج مربوط به محاسبه رسانندگی اپتیکی نمونه های GaN خالص و آلاییده را نشان می دهد. با توجه به طیف رسانندگی اپتیکی دیده می شود که نمودار از انرژی آستانه ای که در واقع همان لبه جذب نمونه ها است آغاز می شود. در این نمودار قله ها به معنی بیشترین میزان جریان رسانشی الکترونی هستند. موقعیت قله ها در نمودار رسانندگی اپتیکی با نمودارهای قسمت موهومی تابع دی الکترونیک و ضریب خاموشی تقریباً در انرژی های مشابه مشاهده می شود.



شکل ۵-۴۲: نمودار رسانندگی اپتیکی برای نمونه های  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  برای ساختارهای (الف) WZ در راستای X و (ب) در راستای Z و (ج) zb.

## ۵-۶-۳-۲-۶ نتیجه گیری

در این فصل خواص الکترونی و اپتیکی GaN خالص و آرایش یافته با عناصر Al و In در دو ساختار ورتسایت و زینک بلند با استفاده از نظریه تابع چگالی بررسی شد. در بررسی خواص الکترونی، چگالی حالت های کلی و ساختار نواری محاسبه شدند. خواص اپتیکی نیز شامل محاسبات قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب شکست، ضریب خاموشی، بازتابندگی، ضریب جذب و رسانندگی اپتیکی بود. محاسبات با استفاده از تقریب چگالی موضعی (LDA) و رهیافت شبه پتانسیل انجام شد.

محاسبات مربوط به چگالی حالت ها و ساختار نواری نشان دادند که GaN خالص نیمرسانای با

گاف نواری مستقیم است. مقدار گاف نواری با استفاده از تقریب LDA برای ساختار ورتسایت حدود  $2/15\text{eV}$  و برای ساختار زینک بلند حدود  $1/72\text{eV}$  به دست آمد. مقادیر محاسبه شده کمتر از مقدار تجربی بدست آمده، به این دلیل که DFT مورد استفاده در محاسبه تئوری حالت پایه است، در حالی که گاف انرژی وابسته به حالت برانگیخته می باشد. به تبع آن مقادیر کمتر است، بخصوص با روش DFT گاف نواری نیمرساناها و عایق ها در حدود  $30-50\%$  کوچکتر از مقدار تجربی است. این یک پدیده شایع در چنین محاسبه نظری است، اما این تحلیل نظری روی ساختار الکترونی GaN تاثیر نمی گذارد [۳۲].

مقدار بازتابندگی در انرژی صفر برای ساختارهای ورتسایت (در راستاهای  $x$  و  $z$ ) و زینک بلند به ترتیب در حدود  $1/6$  و  $1/7$  و  $1/8$  به دست آمد.

در ادامه خواص الکترونی و اپتیکی نمونه های آلایش شده  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  بررسی شد. در بررسی خواص الکترونی، چگالی حالت های کلی و جزئی و ساختار نواری محاسبه شد. بررسی خواص اپتیکی نیز شامل محاسبه قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکترونیک، ضریب جذب، ضریب خاموشی، بازتابندگی و رسانندگی اپتیکی می باشد. محاسبه با استفاده از تقریب چگالی موضعی (LDA) و رهیافت شبه پتانسیل انجام شد. محاسبات مربوط به چگالی حالت ها و ساختار نواری نشان دادند که این آلایژ نیمرسانایی با گاف نواری مستقیم است. مقدار گاف نواری با افزایش غلظت ناخالصی بطور تقریبی در حال افزایش است. این افزایش در گاف نواری خود را در نمودار تابع دی الکترونیک نیز به صورت جابجایی لبه جذب به سمت انرژی های بالاتر نشان می دهد و در نهایت خواص الکترونی و خواص اپتیکی آلایژ گالیوم نیتراید آلایش شده با ایندیوم در غلظت های  $0/25$ ،  $0/125$ ،  $0/0625$  و خالص InN بررسی شد. در بررسی خواص الکترونی، چگالی حالت های کلی و جزئی و ساختار نواری محاسبه شد. محاسبات مربوط به چگالی حالت ها و ساختار نواری نشان دادند که گالیوم نیتراید آلایش یافته با ناخالصی ایندیوم نیمرسانایی با گاف نواری مستقیم است. مقدار گاف نواری با افزایش

غلظت ناخالصی ایندیوم کاهش یافته و خاصیت فلزی در ماده شدت می گیرد. بررسی خواص اپتیکی نیز شامل محاسبه قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ، ضریب جذب، ضریب خاموشی، بازتابندگی و رسانندگی اپتیکی می باشد. در محاسبات اپتیکی دیدیم که در ساختار زینک بلند با افزایش ناخالصی رسانندگی افزایش می یابد. همچنین همانطور که انتظار داشتیم ثابت دی الکتریک و ضریب شکست با گاف نواری و گاف اپتیکی رابطه معکوس دارند.

## منابع

- [1] G.Reza Yazdi., (2008),PhD. Thesis, “Growth and Characterization of AlN From Nano Structures to Bulk Material”. Department of Physics, Chemistry and Biology (IFM) Linköping University, S-581 83 Linköping, Sweden.
- [2] H.P. Maruska, J.J. Tietjen, Appl. Phys. Lett. 15 (1969) 327.
- [3] T. Lei, M. Fanciulli, R.J. Molnar, T.D. Moustakas, R.J. Graham, J. Scanlon, Appl. Phys. Lett. 95(1991) 944.
- [4] P.E. Van Camp, V.E. Van Doren, J.T. Deverse, Phys. Rev. B 44(1991) 9056.
- [5] A. Rubio, J.L. Corkill, M.L. Cohen, E.L. Shirley, S.G. Louie, Phys. Rev. B 48 (1993) 11810.
- [6] A.F. Wright, J.S. Nelson, Phys. Rev. B 50 (1994) 2159.
- [7] H. Morkoç ,(2008)”Handbook of Nitride Semiconductors and Devices”,Vol. 1: Materials Properties, Physics and Growth.pp95-100
- [8] J. Khanderi., (2005), PhD. thesis, “Group-III Nitrides: Contribution to precursor chemistry, MOCVD, nanostructures and multiscale simulation studies”, Ruhr-University Bochum, Germany
- [9]S.E.Christensen, I.Gorczyca, (1994),” Ab-Initio computations of electronic and transport properties of wurtzite aluminum nitride (w-AlN) “, Phys. Rev. B 50, 4397
- [10]J.M.Hayes, (May 2002), “Raman Scattering in GaN, AlN and AlGaN: Basic Material Properties, Processing and Devices” H.H. Wills Physics Laboratory University of Bristol.
- [11] R. Quay. (2008), “Gallium Nitride Electronics”, Vol. 96, Springer, Berlin Heidelberg, Germany.
- [12]H. Xia, Q. Xia, A. L. Ruoff, (1993) “High-pressure structure of gallium nitride Wurtzite-to-rocksalt phase transition”, Phys. Rev. B, 47, pp 12925.
- [13]J.I.Pankove and T.Moustakas. (1998) “SEMICONDUCTORS AND SEMIMETALS”.Academic Press, v 50, 173-175.
- [14] A.F.Wright and J.S.Nelson, (1995), Phys. Rev. 51, 7866
- [15] B.Rezaei, A.Asgari, M.Kalafi, (2006), Physica B 371, 107–111
- [16]R.Quay,(2008),“Gallium Nitride Electronics”, Springer, Berlin Heidelberg ,Germany.
- [17]R.C.Powell, N.E.Lee, Y.W.Kim, J.E.Greene, (1993), J. Appl. Phys. 73, 189.

[۱۸] م. شعبانی، (۱۳۹۳). پایان نامه کارشناسی ارشد. "بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله های گالیوم نیتراید آلابیده با عناصر واسطه توسط رهیافت نظریه تابعی چگالی".

[19] B. Monemar, (1974), Phys. Rev. B, 10, 676

[20] B.K.Meyer, D.Volm, A.Graber, H.C.Alt, , T.Detchprohm, H.Amano, I.Akasaki, (1995), Solid State Commun. 95, 597

[21] G.Grosso. (2003) "Solid State Physics" Academic Press, second printing, pp 53

[22] K.Kondo, A.Sawaoka, K.Sato, M.Ando. (1981), AIP Conf.Proc. 78, 325

[23] S.Uehara, T.Masamoto, A.Onodera, O.Shimomura, K.Takemura. (1997), J. Phys. Chem.Solids, 58, 2093

[24] E.Ruiz and S.Alvarez. (1994), Phys. Rev. B. 49, 7515.

[25] R.M.Dreizler., E.K.U.Gross. (1990), "Density functional theory" Springer, Germany, 147-148.

[26] W. M. Linhart.( 2012). PhD. Thesis." Electron accumulation and doping in InN and InGaN alloys".

[27] BIN AMIN.(2011). PhD. Thesis. "STRUCTURAL ELECTRONIC OPTICAL AND AGNETIC PROPERTIES OF METALS DOPED III-V SEMICONDUCTORS".

[28] S.Bütün.(2006). "The growth, fabrication, and characterization of high performance AlGaIn metal semiconductor metal photodiodes".

[29] K.P.O'Donnell, J. F.W. Mosselmanns, R W Martin, S Pereira and M E White.(2001). "Structural analysis of InGaIn epilayers", Condens. Matter **13** (2001) 6977–6991.

[30] T. SUZUKI, H.YAGUCHI, H. OKUMURA. (2000). " Optical Constants of Cubic GaN, AlN, and AlGaIn Alloys ", S0268-1242(03)54515-1.

[31] Z.Dridi, B. Bouhafs and P. Ruterana.(2003). "First-principles investigation of lattice constants and bowing parameters in wurtzite  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ,  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  and  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$  alloys". Semicond. Sci. Technol. **18** (2003) 850–856.

[32] Yujie Dub, Benkang Changa, Xiaoqian Fua(2012). " Electronic structure and optical properties of zinc-blende GaN", Optik 123 (2012) 2208– 2212.

[33] Sh. Zhang, J.Shi, M. Zhang.(2011). "First-principles investigation on optical properties of GaN and InGaIn alloys". J. Phys. D: Appl. Phys. 44 (2011) 495304 (9pp)

- [34] T.Kawashima, H.Yoshikawa, S. Adachi.(1997).” Optical properties of hexagonal GaN “.J. Appl. Phys. 82, 3528
- [35] C. Caetano, L. K. Teles,M. Marques, A. Dal Pino, Jr., and L. G. Ferreira.(2006).” Phase stability, chemical bonds, and gap bowing of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  alloys: Comparison between cubic and wurtzite structures”. Physical Review B 74, 045215.
- [36] Dresselhaus, M. S. (1999). " Solid State Physics Part II Optical Properties of Solids".
- [37] C. Kittel,“Introduction to solid state Physics”. ch .18, P. 608.
- [38] F. Wooten, (1972)."optical properties of solids", Academic press, New York.
- [39] C. Ambrosch-Draxl and J. O. Sofo, Linear optical properties of solids within the fulli-potential linearized augmented planewave method, Computer physics Communications 175, 1-14 (2006).
- [40]Jasprit Singh.(2003).”Semiconductor Optoelectronics Physics and Thecnology”, University of Michigan, Mc Graw-Hill, Inc, chapter2.
- [41]S.M.Hosseini, (2008). “Optical Properties of cadmium telluride in zinc-blende and wurtsite structure”. Physica B 403, 1907-1915.
- [42] P. Hohenberg and W. Kohn, (1964). "Inhomogeneous Electron Gas. ", Phys. Rev. B, 136, pp .864.
- [43] D. S. Sholl and J. A. Steckel., (2009). "Density Functional Theory: A Practical Introduction.", John Wiley & Sons, Inc., USA.
- [44] J. P. Perdew and Y. Wang, (1992). "Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. ", Phys. Rev. B, 45, pp.13244.
- [45] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, (1997). "Generalized Gradient Approximation Made Simple"., Phys. Rev. Lett, 77, pp .3865.
- [46] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. Garcia, J. Junquera, P. Ordejon, and D. Sanchez-Portal, (2002). "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation"., J. Phys : Condens. Matter, 14, pp. 2745.
- [47] P. Ordejon, (1998). "Order-N tight-binding methods for electronic-structure and molecular dynamics"., Comput. Mater. Sci, 12, pp .157.
- [48] P. Ordejon, E. Artacho, and J. Soler, (1996). "Self-consistent order-N density-



functional calculations for very large systems"., Phys. Rev. B, 53, pp .10441.

[49] P. Ordejón, D. A. Drabold, M. P. Grumbach, and R. M. Martin, (1997)., Phys. Rev. B 48, 65,453.

[50] N. Troullier and J. Martins, (1991). "Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations"., Phys. Rev. B, 43, pp .1993.

[51] N. Troullier and J. Martins, (1991). "Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. II. Operators for fast iterative diagonalization"., Phys. Rev. B, 43, pp. 8861.

[52] L. Kleinman and D. Bylander,(1982)."Efficacious Form for Model Pseudopotentials"., Phys. Rev. Lett, 48, pp .1425.

[53] E.G.Gadret,T.Chiamonte.(2013)."Optical phonon modes of wurtzite InP"

[54] A. F. Wright and J. S. Nelson." First-principles calculations for AlN, GaN and InN: bulk and alloy properties".

[55] R.B. Araujo, J. S. de Almeida, and A. Ferreira da Silva.(2013) Journal of Applied Physics 114, 183702.

[56]Yanjun Jia, Yujie Dua,b,Meishan Wang (2014) ."Study of the optical-electrical characteristics of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  alloy with low in doping". Optik 125 (2014) 6909–6913.

[57] S. Li, C. Ouyang , (2005)" First principles study of wurtzite and zinc blende GaN: a comparison of the electronic and optical properties" Physics Letters A 336 145–151.

[58]R. R. Pelá, C. Caetano, M. Marques,(2011)," Accurate band gaps of AlGa<sub>N</sub>, InGa<sub>N</sub>, and AlIn<sub>N</sub> alloys calculations based on LDA-1/2 approach", Appl. Phys. Lett. 98, 151907.

[59] b.T. liou,"Electronic and structural properties of zincblende  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ". Appl. Phys. A 86, 539–543 (2007).

[60]M. Yang ,B. Chang ,G .Hao, (2014)"Optical properties of  $\text{Ga}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{N}$  with interstitial defects"

[61]R. R. Pelá, C. Caetano, M. Marques, L. G. Ferreira, J. Furthmüller et al(2011)Appl. Phys. Lett. 98, 151907.

[62]E. Salmani<sup>2</sup>, A. Marjaouil,<sup>2</sup> , O. Mounkachil,, M. Ben Ali (2014) "Band Gap Engineering of (InGa<sub>N</sub>) for Photovoltaic Application". 978-1-4799-7336-1/14/2014 IEEE

[63] C.Wetzel,T. Takeuchi, S.Yamaguchi,(1998), Applied Physics Letters Volume 73,  
Number 14.

## Abstract

Gallium nitride (GaN) is one of the semiconductor compounds of the III-V group. There are two types of its structure; wurtzite and zinc blende. The band gap of this compound is direct type. In the wurtzite phase, it has a band gap of about 3.5 eV and in the zinc blende phase, has a band gap of about 3.2 eV. In this study, the electron structure and optical properties of pure gallium nitride, and doped with Al and In atoms investigated in both wurtzite and zinc blende structure. The calculations of pure and doped structure in both wurtzite and zinc blende phases were performed using the density functional theory (DFT) and Local Density Approximation (LDA) approach by the SIESTA computational code. In the study of the electron structure of the compound, the electronic band structure and the total and partial density of states were calculated. The study of optical properties also includes the investigation of dielectric function, refractive and extinction coefficients, reflectivity, optical absorption coefficient and conductivity. The calculations of the density of the states and band structure showed that the  $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$  alloy is a direct band gap semiconductor. The band gap increases with increasing impurity concentration. This increase in the band gap also shows itself in the dielectric function diagram as the displacement of the absorption edge towards the higher energies.

Finally, the electron structure and optical properties of gallium nitride alloy with indium were investigated at concentrations of 0.0625, 0.125, 0.25 and pure InN. The calculations relating to the density of states and band structures showed that gallium nitride doped with indium impurity is a semiconductor with a direct band gap. The band gap is reduced by increasing the indium impurity concentration and the metallic property intensifies in the material, and thus the conductivity increases.

Keywords: Gallium Nitride (GaN), Density Functional Theory, SIESTA, Optical properties, InGaN, AlGaN.



Shahrood University of Technology

Faculty of Physics

Solid state physics

Master of Science Thesis

**Density functional theory Study of electronic and optical properties of GaN and its**

By

**Narges Arabhajji**

Supervisor

**Dr. Tayebeh Movlarooy**

Advisor

**Dr.Fatemeh Badieian Baghsiahi**

July 2017