

بررسی قطبش ماکروسکوپیک در نیمه‌هادی‌های آلومینیم نیتريد، گالیم نیتريد و آلومینیم گالیم
نیتريد و تأثیر میزان غلظت آلومینیم بر گاف نواری و قطبش ماکروسکوپیک در نیمه‌هادی

آلومینیم گالیم نیتريد

سید علی هاشمی‌زاده عقدا¹، طاهر شعبانی^{2*}، احمد یزدانی³

1. استادیار، فیزیک، دانشگاه پیام نور

2. کارشناسی ارشد، فیزیک، دانشگاه پیام نور

3. دانشیار، فیزیک، دانشگاه تربیت مدرس

تاریخ دریافت: 1395/01/28 تاریخ پذیرش: 1395/06/20

The Investigation of Macroscopic Polarization in AlN, GaN and AlGaN
Semiconductors and Aluminum Concentration Effect on Band Gap and
Macroscopic Polarization in the Al_xGa_{1-x}N

A. Hashemizadeh Oghada¹, T. Shabani^{2*}, A. Yazdani³

1. Assistant Professor, Physics, Payame Noor University

2. MsC., Physics, Payame Noor University

3. Associate Professor, Physics, Tarbiat Modares University

Received: 2016/04/16 Accepted: 2016/09/10

Abstract

In this research we studied the electronic – crystalline structure in the semiconductor compounds of gallium nitride, aluminum nitride and aluminum gallium nitride, those have spontaneous polarization in 0001 axis and good piezoelectric properties. We used the Wien2k package, which works based on the density functional theory and the Berry's phase approach to investigate Structural parameters, band gap, Operating and intensity of polarization for aluminum nitride, gallium nitride and aluminum gallium nitride semiconductors. Also, we studied their interaction in replacement of aluminum cation in triple semiconductor of aluminum gallium nitride. The results of the calculations showed that the rate of spontaneous and piezoelectric polarization and total macroscopic polarization in nitride semiconductors is high. We used two concentrations of aluminum as 12.5 and 37.5 percent in the ternary compound of Al_xGa_{1-x}N to calculate the polarization. Moreover, our calculations showed, that when the amount of aluminum cations increases, the polarization increases too. We also found that a higher share of the macroscopic polarization is attributed to the spontaneous polarization. In addition to, the spontaneous polarization in this case has a non-linear and quadratic relationship with concentration. Moreover, our calculations for band gap of compounds showed that in all of them the band gap is on Γ axis and straight, when the amount of aluminum cations decreases in Al_xGa_{1-x}N, the band gap energy decreases too.

Keywords

Macroscopic Polarization, Band Gap, Spontaneous Polarization, Piezoelectric Polarization, AlN, GaN, AlGaN.

چکیده

در این مقاله ساختار الکترونی - کریستالی ترکیب‌های نیمه‌هادی گالیم نیتريد، آلومینوم نیتريد و آلومینوم گالیم نیتريد که قطبش‌پذیری خودبه‌خودی در راستای محور 0001 دارند و از خصلت پیزوالکتریک خوبی برخوردار هستند، مورد مطالعه قرار گرفتند. بررسی پارامترهای ساختاری، گاف نواری، عامل قطبش‌پذیری و شدت آن برای نیمه‌هادی‌های دوگانه آلومینوم نیتريد، گالیم نیتريد و تأثیر متقابل آنها در جایگزینی گالیم با آلومینوم در نیمه‌هادی سه‌گانه آلومینوم گالیم نیتريد از طریق نظریه تابعی چگالی در به‌کارگیری نرم‌افزار Win2k و با رویکرد فاز بری انجام پذیرفت. نتایج حاصل از محاسبات نشان‌دهنده میزان بالای قطبش‌پذیری خودبه‌خودی و پیزوالکتریک و در مجموع قطبش ماکروسکوپیک در این نیمه‌هادی‌های نیتريدی بود. محاسبه قطبش برای ترکیب سه‌تایی آلومینوم گالیم نیتريد با غلظت آلومینوم در ترکیب به اندازه 12/5 و 37/5 درصد به منظور بررسی اثر غلظت آلومینوم بر پارامترهای ذکر شده انجام گرفت. نتیجه این محاسبات نیز نشان داد که میزان قطبش در این آلیاژ سه‌تایی نیتريدی (Al_xGa_{1-x}N) با افزایش میزان آلومینوم در ترکیب افزایش می‌یابد. سهم زیادی از قطبش ماکروسکوپیک مربوط به قطبش خودبه‌خودی است، ضمن اینکه مقدار قطبش خودبه‌خودی با میزان غلظت کاتیون آلومینوم در ترکیب، یک وابستگی غیرخطی دارد. همچنین محاسبات ساختار نواری ترکیبات نشان داد که در همگی آنها گاف نواری در راستای Γ و مستقیم است و با کاهش میزان غلظت آلومینوم در ترکیب نیم‌رسانای Al_xGa_{1-x}N، میزان آن کاهش می‌یابد.

واژگان کلیدی

قطبش ماکروسکوپیک، قطبش خودبه‌خودی، قطبش پیزوالکتریک، آلومینیم نیتريد، گالیم نیتريد، آلومینیم گالیم نیتريد.

مقدمه

نیتريدهای III - V و آلیاژهای آنها مواد نیمه‌رسانای مورد پذیرش و کاربردی در الکترونیک مدرن و اپتوالکترونیک از جمله در دستگاه‌های گسیل‌کننده نور با فرکانس بالا و ترانزیستورهای با توان و دمای بالا هستند. این مواد دارای گاف نواری مستقیم و بزرگ (بین 0.7 eV تا 6.2 eV)، سرعت الکترونی بالا و چگالی بالای الکترونی در سطح نامتجانس ترکیبات هستند و به همین لحاظ بهترین انتخاب برای دستگاه‌های تشخیص و همچنین گسیل پرتوها از نور قرمز تا فرابنفش هستند [1].

قطبش ماکروسکوپی به وسیله جمع قطبش خودبه‌خودی و پیزوالکتریک در نبود میدان‌های الکتريکی خارجی تعیین می‌شود و اثر قابل توجهی را بر مشخصه‌های نیمه‌رساناهای ناهمگن اعمال می‌کند. قطبش ماکروسکوپی منجر به ظهور میدان‌های الکتريکی درون ساختاری و تجمع بار در سطوح ناهمگن می‌شود. این عوامل باعث محدود شدن حرکت الکترون‌ها در یک جهت و شکل‌گیری گاز الکترون دو بعدی (2DEG) می‌شود [2].

نیتريدهای III-V با ساختار وورتسایت دارای قطبش خودبه‌خودی و ثابت‌های پیزوالکتریک بزرگ هستند [3] و در نتیجه دارای قطبش ماکروسکوپی بالا خواهند بود؛ بنابراین چگالی بار آنها به مقدارهای بالایی در سطوح تماس نامتجانس نیمه‌رساناهای نیتريد از جمله AlGaIn/GaN می‌رسد. به‌علاوه در کارهای مختلف نشان داده شده که قطبش آلومینیم گالیم نیتريد از قانون ویگارد پیروی نمی‌کند و به شدت به ترکیب آلیاژها به طور غیرخطی وابسته است [4 و 5].

اثر غلظت آلومینیم موجود در ترکیب آلیاژ سه‌تایی آلومینیم گالیم نیتريد، بر میزان قطبش و میزان گاف نواری در ساختار نواری و در سطح نامتجانس این ترکیب از موضوعات مهمی است که مورد توجه بوده و همواره مورد بحث قرار گرفته است؛ چرا که به‌کارگیری بهینه و مناسب‌تر این ترکیب در ساخت ابزارهای الکترونیکی که بر اساس چاه‌های کوانتومی چندگانه ساخته می‌شوند، مستلزم شناخت دقیق‌تر پارامترهای فیزیکی آن، از جمله قطبش ماکروسکوپی است.

در این مقاله ساختار الکترونی - کریستالی ترکیبات نیمه‌هادی‌های نیتريدی با توجه به کاربردهای گسترده

امروزی که ناشی از حوزه تغییرات وسیع گاف انرژی و حوزه قطبش‌پذیری بالا هستند، مورد مطالعه قرار گرفته است. از آنجا که توابع اپتیکی بیان شده در خواص اپتوالکترونیکی نیمه‌هادی‌های گالیم نیتريد، آلومینیم نیتريد و آلومینیم گالیم نیتريد که قطبش‌پذیری خودبه‌خودی در راستای محور 0001 دارند و از خصلت پیزوالکتریک خوبی برخوردار هستند، نیاز به بررسی تأثیر متقابل ساختار الکترونی - اپتیکی - کریستالی دارند، بر آن شدیم تا ضمن بررسی پارامترهای ساختاری علت اختلاف انرژی ساختاری بالا، اثر اندازه و فضای آزاد بین اتمی، عامل قطبش‌پذیری و شدت آن را برای نیمه‌هادی دوگانه آلومینیم نیتريد، گالیم نیتريد و تأثیر متقابل آنها در جایگزینی گالیم با آلومینیم در نیمه‌هادی سه‌گانه آلومینیم گالیم نیتريد از طریق نظریه تابعی چگالی در به‌کارگیری نرم‌افزار Win2k و با رویکرد فاز بری¹ را بررسی کنیم. از آنجا که در بررسی خواص اپتیکی باید سیستم در تعادل باشد، محاسبات را برای سیستم تعریف شده تعادلی در برنامه Win2k از طریق محاسبه میزان ثابت‌های شبکه هم‌زمانی کمینه حجم انجام دادیم و با توجه به شدت و ساختار باند کاتیون - آنیونی و قطبش‌پذیری توزیع بار، از تقریب GGA که به نظر می‌رسد نسبت به LDA و LDA+U تقریب مقبول‌تری است، استفاده کردیم. در این مقاله به صورت تئوری و با به‌کارگیری نرم‌افزار وین توکی که از نظریه تابعی چگالی در محاسبات بهره می‌برد، پارامترهای ساختاری، میزان قطبش خودبه‌خودی، قطبش پیزوالکتریک و ساختار نواری آلومینیم نیتريد، گالیم نیتريد و دو ترکیب با غلظت متفاوت آلومینیم، با درصدهای 12/5 و 37/5 در آلیاژ سه‌تایی آلومینیم گالیم نیتريد با ساختار وورتسایت را گزارش کرده‌ایم.

روش کار

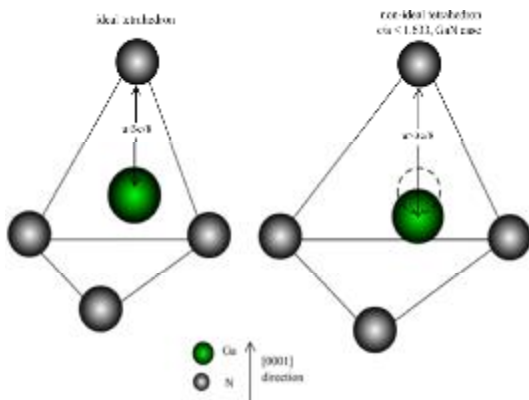
تمامی محاسبات ارائه شده در این مقاله در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از روند فاز بری انجام شده است [7 و 6]. محاسبات تابعی چگالی با استفاده از تقریب تعمیم‌گرایان (GGA) انجام شده است. محاسبات انجام شده با استفاده از نرم‌افزار وین توکی [9 و 8] بر اساس روش پتانسیل کامل و موج تخت پهن‌شونده برای حل معادلات

1. Berry's phase

در بیشتر حجم، تعیین نمی‌شود و فقط تفاوت در قطبش (Δp) در برخی مراحل فیزیکی تشکیل ساختار اتفاق می‌افتد که معنای فیزیکی دارد [11].

مقدارهای در نظر گرفته شده برای ساختار اولیه مربوط است به تعدادی ساختار مینا و ایده‌آل که قطبش آنها صفر فرض شده است. برای این مدل ایده‌آل که به عنوان مینا در نظر گرفته شده است، از یک مدل یونی وورتسایت ایده‌آل استفاده کردیم که اتم‌های Al(Ga) و N به ترتیب به وسیله بارهای نقطه‌ای با مقدارهای $+3e$ و $-3e$ جایگزین شده بودند که در آن پارامتر داخلی $U = \frac{3}{8}U$ برای نوار آنبون - کاتیون در امتداد محور [0001] در هر واحد از c تعریف شده است.

در ساختار طبیعی و واقعی آلیاژ با ساختار وورتسایت طول اتصالی آنبون - کاتیون تغییر کرده و کشیده‌تر شده است و در نتیجه پارامتر داخلی U در مدل غیر ایده‌آل (واقعی) تغییر می‌کند و این موضوع باعث ایجاد قطبش خودبه‌خودی می‌گردد، در شکل 1 این موضوع نشان داده شده است [12 و 3]. به طور خلاصه می‌توان گفت که قطبش خودبه‌خودی یک موضوع طبیعی و ناشی از عدم تقارن طول اتصالات در ساختار واقعی ترکیب است.



شکل 1. چگونگی ایجاد قطبش خودبه‌خودی در ساختار وورتسایت گالیم نیتريد

از کارهای مختلف [5 و 4] به خوبی قابل تشخیص است که قطبش خودبه‌خودی P_{sp} یک وابستگی غیرخطی به ساختار ماکروسکوپیگ آلیاژها دارد. این وابستگی

کوهن - شم با شرایط ساختار نوارهای دوره‌ای شکل گرفته است.

یاخته‌های دوره‌ای با چهار اتم برای آلومینیم نیتريد و گالیم نیتريد، با ساختار وورتسایت و تقارن گروه فضایی $C6v$ و ابریاخته شامل شانزده اتم برای توصیف آلومینیوم گالیم نیتريد در نظر گرفته شد. ابر یاخته اولیه شامل هشت اتم گالیم و هشت اتم نیتروژن است که با جایگزینی یک اتم گالیم به وسیله اتم آلومینیوم نیمه‌رسانای $^{12/5}Ga^{87/5}N$ و با جایگزینی سه اتم گالیم به وسیله اتم آلومینیوم نیمه‌رسانای $^{Al\ 37/5}Ga\ 67/5}N$ ساخته می‌شود. گام اول در انجام محاسبات، بهینه کردن شعاع قطع برای محدود کردن ضرایب بسط امواج الکترونی در داخل و خارج از کره مافین تین است. این کمیت به صورت حاصل ضرب کوچک‌ترین شعاع کره مافین - تین در عدد قطع (k_{max} مجذور انرژی قطع برای بسط تابع موج در فضای بین جایگاهی) تعریف می‌شود و تعداد ماتریس هم‌گرایی را مشخص می‌کند [8]. انرژی جداسازی الکترون‌های مغزه از الکترون‌های ظرفیت 8- ریدبرگ در نظر گرفته شده و همچنین برای هم‌گرایی انرژی کل، توابع پایه تا انرژی قطع (Rk_{max}) برابر 7 ریدبرگ بسط داده شده است و طرح Monkroost-Pack برای نقطه K ساده، بالای قسمت غیرقابل تقلیل زون بریلون استفاده شد [10] و تعداد نقاط k برابر 1000 به برنامه ارائه گردید. میزان انحراف یا تلورانس انرژی به عنوان معیار هم‌گرایی برای انرژی سیستم و چگالی بار در محاسبات خودسازگار برابر با 10^{-5} در نظر گرفته شده است. این محاسبات بدون در نظر گرفتن حالت اسپینی (چون سیستم از لحاظ اسپینی خنثی است و ترکیبات مورد نظر خاصیت مغناطیسی ندارند) انجام گرفته است و بعد از اجرای برنامه انرژی ساختار محاسبه گردید که بعد از انجام هشت چرخه به هم‌گرایی مورد نظر دست یافته است. توجه به این نکته ضروری است که تعداد نقاط k بهینه شده برای درصدهای متفاوت x در نیمه‌رسانای آلومینیم گالیم نیتريد یک پنجم برابر تعداد آن برای دو نیمه‌رسانای بدون آلايش آلومینیم نیتريد و گالیم نیتريد است.

بر طبق تئوری جدیدی که پیشنهاد شده، به وسیله کینگ اسمیت، وندریبلت و رستا¹ پیشنهاد داده‌اند، قطبش خودبه‌خودی به وسیله مقدار مطلق متوسط گشتاور دو قطبی

1. R.D. King-Smith, D. Vanderbilt and R. Resta

ϵ_3 فشار در راستای محور c و

$$\epsilon_1 = \epsilon_2 = (a - a_0) / a_0 \quad (7)$$

ϵ_1 و ϵ_2 فشار در صفحه هستند. در این رابطه ها a و c ثابت های شبکه قبل از اعمال تنش مکانیکی، a_0 و c_0 ثابت های شبکه بعد از اعمال تنش مکانیکی است. ما در این کار فرض کردیم که آلومینیم گالیم نیتريد رشد مشابهی (همگون) را روی گالیم نیتريد داشته است؛ بنابراین برای آن پارامتر ثابت شبکه در صفحه با ثابت شبکه ساختار گالیم نیتريد برابر است ($a(\text{AlGaIn}) = a(\text{GaIn})$).

جدول 1. مقادیر ضرایب الاستیک و ثابت های پیزوالکتریک و عدد پواسون و مدول پیزوالکتریک برای آلیاژهای دوتایی نیتريد در دمای اتاق [5].

خاصیت های کریستال های هگزاگونال	گالیم نیتريد	آلومینیم نیتريد
$C_{11}(\text{Gpa})$	367	396
$C_{12}(\text{Gpa})$	135	137
$C_{13}(\text{Gpa})$	103	108
$C_{33}(\text{Gpa})$	405	373
$C_{44}(\text{Gpa})$	95	116
$v(0001)$	0/52	0/58
$S_{11}(10^{-12}\text{Nm}^{-2})$	3/267	2/993
$S_{12}(10^{-12}\text{Nm}^{-2})$	-1/043	-0/868
$S_{13}(10^{-12}\text{Nm}^{-2})$	-0/566	-0/615
$S_{33}(10^{-12}\text{Nm}^{-2})$	2/757	3/037
$S_{44}(10^{-12}\text{Nm}^{-2})$	10/53	8/621
$e_{31}(\text{cm}^{-2})$	-0/34	-0/53
$e_{33}(\text{cm}^{-2})$	0/67	1/5
$e_{15}(\text{cm}^{-2})$	-0/22	---
$d_{31}(\text{cm}^{-2}\text{pa})$	-1/253	-2/298
$d_{33}(\text{cm}^{-2}\text{pa})$	2/291	5/352
$d_{15}(\text{cm}^{-2}\text{pa})$	-1/579	-2/069

غیرخطی برخلاف قانون ویگارد به وسیله تقریب درجه دوم به صورت زیر قابل تخمین است [4 و 5]:

$$Y(A_x B_{1-x} N) = xY(AN) + (1-x)Y(BN) - b_{AB}x(1-x) \quad (1)$$

که x کسر مولار عنصر A و b_{AB} پارامتر کمان است که به وسیله معادله زیر تعیین می شود:

$$b_{AB} = 2Y(AN) + 2Y(BN) - 4Y(A_{0.5}B_{0.5}N) \quad (2)$$

در اینجا لازم است اشاره کنیم که برای تعیین مقادیر ثابت شبکه اولیه برای آلومینوم نیتريد و گالیم نیتريد از مقادیر تجربی به دست آمده استفاده شد که در جدول 2 آمده است. برای آلیاژهای سه تایی آلومینوم گالیم نیتريد با توجه به کسر مولار آلومینوم در ترکیب، از قانون ویگارد استفاده کردیم [15]. طبق این قانون رابطه ثابت های شبکه a و c به صورت زیر است:

$$a(\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}) = xa(\text{AlN}) + (1-x)a(\text{GaIn}) \quad (3)$$

$$c(\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}) = xc(\text{AlN}) + (1-x)c(\text{GaIn}) \quad (4)$$

قطبش پیزوالکتریک به دلیل نداشتن مطابقت ثابت های شبکه در سطوح ناهمگن رخ می دهد، هنگامی که آلیاژ آلومینیم گالیم نیتريد روی زیر لایه گالیم نیتريد رشد داده می شود، به دلیل اختلاف در ثابت های شبکه دو ساختار، در محل تماس ناهمجنس تنش (فشار) مکانیکی ایجاد شده است و این تنش پارامترهای ساختاری در محل تماس را تغییر داده، ایجاد قطبش پیزوالکتریک می کند. مقدار قطبش پیزوالکتریک به وسیله فرمول زیر تعیین می گردد [14، 13، 3].

$$P_{pz} = e_{33}\epsilon_3 + e_{31}(\epsilon_1 + \epsilon_2) \quad (5)$$

که e_{33} و e_{31} ثابت های پیزوالکتریک هستند که در جدول 1 ارائه شده است،

$$\epsilon_3 = (c - c_0) / c_0 \quad (6)$$

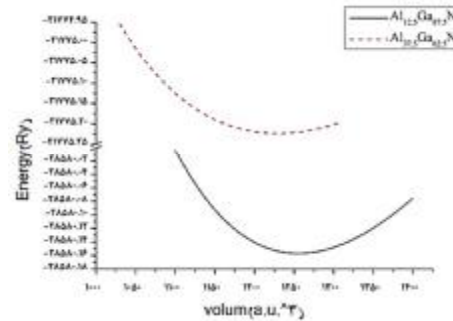
نتایج و بحث‌ها

در ابتدا ما قطبش خودبه‌خودی ترکیبات نیتريد شامل گاليم نيتريد و آلومینیم نيتريد با ساختار وورتسایت را در نظر گرفتیم. وابستگی بسیار زیاد قطبش خودبه‌خودی و قطبش پیزوالکتریک به پارامترهای ساختاری، ضروری است که برای انجام محاسبه بهتر و دقیق‌تر آنها، محاسبه این پارامترها با دقت بالایی انجام شود. برای آنکه مقدار تقریبی مناسب‌تری تعیین شود، پارامترهای ساختاری را با استفاده از تقریب تعمیم‌گرایان (GGA) و با استفاده از نرم‌افزار وین توکی محاسبه کردیم. پس از محاسبات اولیه انرژی ساختار، نسبت به بهینه کردن آن از طریق کمینه کردن، هم‌زمانی حجم اقدام شد که نتایج این محاسبات در شکل‌های 2 و 3 نشان داده شده است.

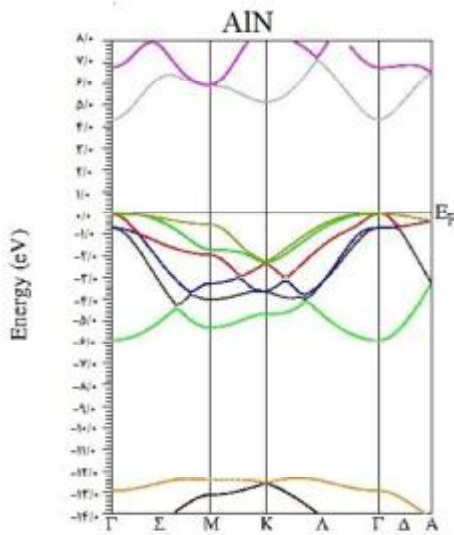
جدول 2. پارامترهای ساختاری آلیاژهای نیتريدی محاسبه شده در این تحقیق با نرم‌افزار وین توکی و محاسبات تئوری دیگر [16] و [17] و نتایج تجربی [18]

آلیاژ	پارامترها ی شبکه	محاسبات این تحقیق	محاسبات تئوری	محاسبات تجربی
AlN	a(Å)	3/112	3/111	3/1106
	c(Å)	4/980	4/980	4/9794
	c/a	1/60025	1/600	1/6008
$_{125}Ga_{875}N$	a(Å)	3/199	-----	-----
	c(Å)	5/214	-----	-----
	c/a	1/6298	-----	-----
Al	a(Å)	3/173	-----	-----
	c(Å)	5/174	-----	-----
	c/a	1/630	-----	-----
$_{375}Ga_{625}N$	a(Å)	3/241	3/188	3/189
	c(Å)	5/236	5/185	5/1862
	c/a	1/6156	1/626	1/6263

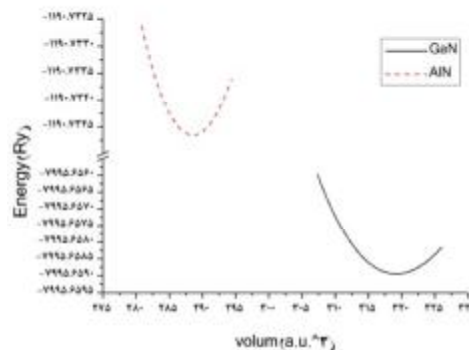
همان‌طور که در شکل 2 مشاهده می‌شود، انرژی ساختار آلومینیم نیتريد در حجم کمینه در مقایسه با گاليم نيتريد بزرگ‌تر است و ساختار ناپایدارتر و دارای طول نوار اتصال کاتیون - آنیون بزرگ‌تری است.



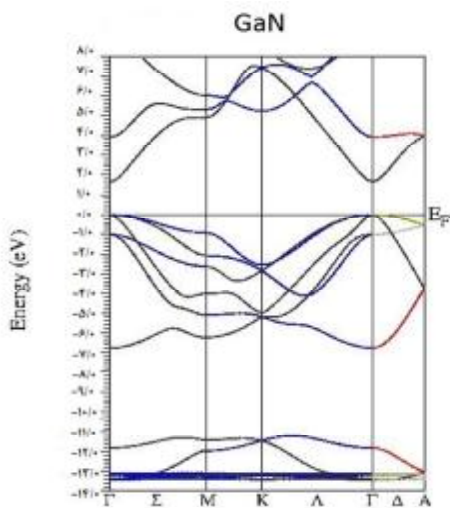
شکل 2. منحنی انرژی ساختار آلومینیم نیتريد و گاليم نيتريد در حجم‌های متفاوت ساختاری



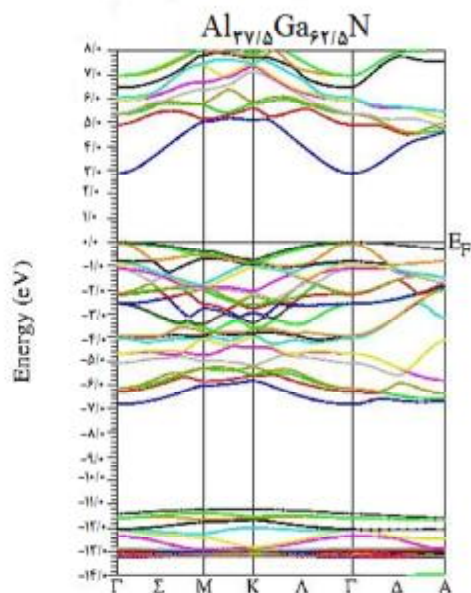
الف



شکل 3. منحنی انرژی ساختار آلیاژ آلومینیم گاليم نيتريد با غلظت متفاوت آلومینیم در ترکیب و در حجم‌های مختلف ساختاری



د



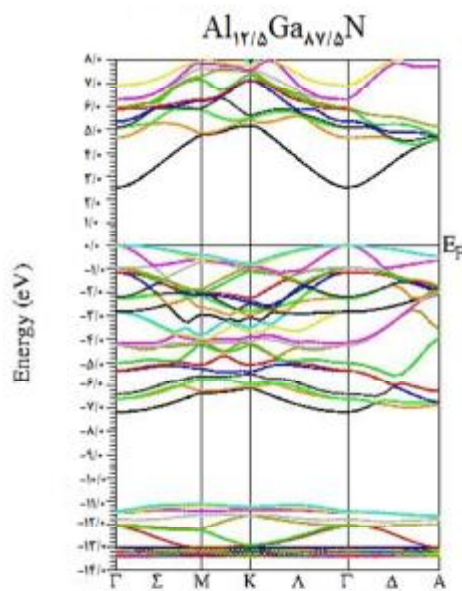
ب

شکل 4. ساختار نواری نیمه‌رسانای $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ برای درصد‌های متفاوت x (الف $x=1$ ب) $x=0/375$ ج) $x=0/125$ د) $x=0$

علت این موضوع اندازه‌ی اتم آلومینیوم در مقایسه با گالیم است که به دلیل کوچک بودن شعاع اتمی آلومینیوم ساختار ضعیف‌تر و شکننده‌تری را در ترکیب با نیتريد خواهد داشت؛ ولی در آلیاژ گالیم نیتريد انرژی ساختار کاهش یافته و ساختار پایدارتری ایجاد می‌شود.

همچنین در شکل 3 می‌بینیم که با کاهش غلظت آلومینیوم در آلیاژ آلومینیوم نیتريد و افزایش غلظت گالیم و ایجاد آلیاژ آلومینیوم گالیم نیتريد انرژی ساختار به ازای حجم کمینه کاهش یافته و ساختار پایدارتر می‌گردد. علت این موضوع شعاع اتمی بیشتر گالیم است که با کاهش آلومینیوم و افزایش گالیم به پایداری ساختار افزوده می‌گردد. نتایج بهینه و نهایی پس از محاسبات برای پارامترهای شبکه ترکیبات نیتريدی مورد نظر در جدول 2 آورده شده است. علاوه بر مقادیر محاسبه شده، دیگر نتایج تئوری [17] و [16] و داده‌های تجربی موجود [18] نیز در جدول 2 نشان داده شده است.

نتایج حاصله برای ثابت شبکه a و نسبت ثابت شبکه در طول محور $[0001]$ (c) به ثابت a در طرح اساسی c/a



ج

اختلاف دارد. دلیل اختلاف زیاد گاف نواری با مقادیر تجربی به نوع تقریب به کار رفته در جمله تبدیلی - همبستگی مربوط می‌شود؛ ولی با توجه به شدت و ساختار نواری کاتیون - آبیونی و قطبش‌پذیری توزیع بار، تقریب GGA نسبت به LDA و LDA+U تقریب مقبول‌تری است. همچنین چون تقریب گرادیان عمومی پارامترهای ساختاری را با دقت بالاتری به دست می‌دهد و این پارامترهای ساختاری اثر قابل توجهی را بر محاسبات ساختار نواری و گاف نواری دارند، لذا از این تقریب استفاده شده است.

موضوع دیگر این است که در ساختار نواری آلیاژهای آلومینیم گالیم نیتريد آشفتگی‌هایی ملاحظه می‌گردد که این موضوع مربوط به پایداری کم و سست ساختار ترکیب است. این آشفتگی در گالیم نیتريد از بین رفته است و حکایت از پایداری خوب ساختار دارد.

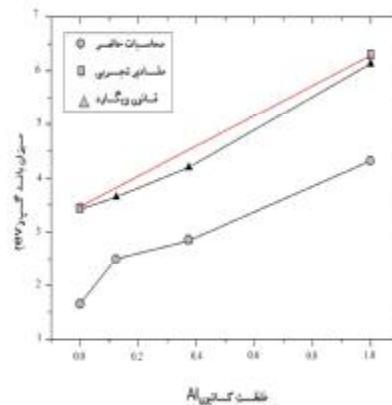
جدول 3. مقادیر گاف نواری (E_g) در آلیاژ AlGa_xN با توجه به

غلظت کاتیون Al در ترکیب			
مقادیر تجربی [19] (ev)	مقادیر محاسبه شده از قانون ویگارد (ev)	مقادیر محاسبه شده در این تحقیق (ev)	Al _x Ga _{1-x} N
6/28	6/13	4/32	x=1
---	4/20	2/838	x=37/5
---	3/649	2/502	12/5x=
3/42	3/42	1/651	x=0

در ادامه به محاسبه میزان قطبش خودبه‌خودی و پیروالکترونیک با استفاده از نرم‌افزار Wien2Wannier پرداخته شد. این نرم‌افزار که به نرم‌افزار Wien2k افزوده شده است با استفاده از ساختار حاصل از این برنامه و با رویکرد فاز بری اقدام به محاسبات لازم برای تعیین شدت قطبش می‌کند. نتیجه حاصل شده برای قطبش خودبه‌خودی و پیروالکترونیک در جدول 4 آورده شده است. با استفاده از معادلات (1)، (2) و در نظر گرفتن قطبش خودبه‌خودی برای آلیاژ $\text{Ga}_{0.5}\text{N}_{0.5}\text{Al}_{10.5}$ برابر (c/m^2) -0.0512 و همچنین با استفاده از مقادیر قطبش خودبه‌خودی در آلومینیم نیتريد و گالیم نیتريد که در جدول 4 آورده شده است [15]، پارامتر منحنی b برابر 0.043 محاسبه گردید. در نتیجه میزان قطبش خودبه‌خودی برای $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ با رابطه زیر به دست می‌آید:

(ratio) بسیار نزدیک به نتایج تجربی است [18]. همان‌طور که انتظار می‌رفت ثابت‌های شبکه با کاهش غلظت آلومینیم افزایش می‌یابد که دلیل آن افزایش شعاع اتمی گالیم است. به‌علاوه مقادیرهای محاسبه شده برای پارامترهای ساختاری در مقایسه با نتایج تئوری دیگر [17] و [16] در حد خوبی قابل قبول هستند. همچنین لازم به ذکر است که برای تعیین اولیه ثابت‌های شبکه در ترکیب آلیاژ سه‌تایی آلومینیم گالیم نیتريد از قانون ویگارد استفاده شد که پس از بهینه‌سازی و محاسبه به وسیله برنامه در جدول 2 گزارش شده است.

در مرحله بعد با استفاده از ساختار به دست آمده برای آلیاژهای مورد نظر به محاسبات ساختار نواری پرداخته شد که نتایج آن در شکل 4 (الف تا دال) آورده شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌گردد، به وضوح مشخص است که گاف نواری برای تمامی ترکیبات در راستای Γ و مستقیم است. با کاهش میزان غلظت Al در نیمه‌رسانای AlGa_xN، گاف نواری از 4/320 ev برای AlN، به اندازه 1/651 ev برای GaN کاهش می‌یابد. اندازه این گاف برای مقادیر مختلف x در جدول 3 و شکل 5 ارائه شده است.



شکل 5. تغییرات گاف نواری AlGa_xN با تغییرات غلظت کاتیون Al

باید توجه شود که روند تغییرات گاف نواری بر اساس قانون ویگارد و همچنین داده‌های تجربی منطقی است و هم‌خوانی بسیار خوبی با آنها دارد (شکل 5)؛ اما همان‌طور که ملاحظه می‌گردد، مقدار دقیق آنها با داده‌های تجربی

ثابت‌های شبکه با افزایش کسر مولار آلومینیوم بیشتر می‌شود.

همچنین مقایسه دقیق مقدارهای قطبش خودبه‌خودی و قطبش پیزوالکتریک این ساختارها به ما اجازه می‌دهد که نتیجه بگیریم که سهم بسیار زیادی از قطبش

$$P_{sp}(Al_xGa_{1-x}N) = -0.090x - 0.034(1-x) + 0.043x(1-x) \quad (8)$$

در غیاب میدان‌های خارجی، قطبش ماکروسکوپی از جمع قطبش خودبه‌خودی و قطبش پیزوالکتریک تعیین

جدول 4. نتایج حاصل از محاسبات قطبش خودبه‌خودی و قطبش پیزوالکتریک در ترکیبات نیمه‌رسانای نیتريدی و محاسبات تئوری دیگر [19] و [20]

آلیاژ	$P^{sp} (c/m^2)$ محاسبات این تحقیق	$P^{sp} (c/m^2)$ محاسبات تئوری دیگر [19]	$P^{pz} (c/m^2)$ محاسبات این تحقیق	$P^{pz} (c/m^2)$ محاسبات تئوری دیگر [20]
AlN	-0/090	-0/081	-----	-0/0508
$Al_{37/5}Ga_{62/5}N/GaN$	-0/045	-0/050	-0/008	-----
$Al_{12/5}Ga_{87/5}N/GaN$	-0/0363	-0/038	-0/0028	-----
GaN	-0/034	-0/029	0	0

ماکروسکوپی که مربوط به قطبش خودبه‌خودی است. از طرف دیگر قطبش پیزوالکتریک اثر مشابهی مانند قطبش خودبه‌خودی دارد. به این معنی که این قطبش‌ها دارای جهت مشابهی هستند (شکل 6): بنابراین قطبش پیزوالکتریک، قطبش ماکروسکوپی را افزایش می‌دهد.

می‌شود، قطبش پیزوالکتریک نیز در اثر تغییر شکل (فشار) مکانیکی در محل تماس آلیاژهای نامتجانس به وجود می‌آید؛ بنابراین برای تعیین قطبش پیزوالکتریک در نظر گرفته شد که نیمه‌هادی‌های آلومینیوم گالیم نیتريد، با کسر متفاوت آلومینیوم، به صورت شبه‌مورفیکال (مشابهی) روی گالیم نیتريد رشد داده شده‌اند و قطبش پیزوالکتریک با استفاده از پارامترهای ساختاری که با استفاده از نرم‌افزار وین توکی حاصل گردیده، محاسبه شد. نتایج حاصل شده در جدول 4 آورده شده است.

همان‌طور که در جدول 4 دیده می‌شود، در ترکیب آلیاژ $Al_xGa_{1-x}N$ با افزایش کسر مولار آلومینیوم (x) میزان قطبش خودبه‌خودی و قطبش پیزوالکتریک افزایش می‌یابد. مقدار قطبش خودبه‌خودی از گالیم نیتريد با مقدار $-0.034(c/m^2)$ تا مقدار $-0.090(c/m^2)$ برای آلومینیوم نیتريد افزایش می‌یابد؛ یعنی هر چقدر میزان کسر مولار آلومینیوم در آلیاژ سه‌تایی آلومینیوم گالیم نیتريد افزایش می‌یابد بر شدت قطبش خودبه‌خودی نیز افزوده می‌شود. علت این موضوع به طول باند کاتیون - آنیونی ترکیب باز می‌گردد و ناشی از این است که با کاهش شعاع اتمی عنصر آلومینیوم کشیدگی طول باند بیشتر می‌شود و بر شدت قطبش می‌افزاید.

در مورد قطبش پیزوالکتریک در ترکیب نامتجانس $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ نیز افزایش میزان آلومینیوم شدت قطبش پیزوالکتریک را افزایش می‌دهد چرا که نبود مطابقت

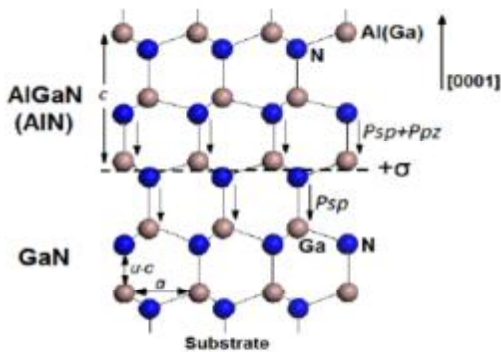


Figure 2 The crystal structure, the spontaneous and the piezoelectric polarizations, the polarization-induced charge density of AlGaIn/GaN (AlN/GaN) heterostructure.

شکل 6. محل تماس نامتجانس نیمه‌هادی آلومینیوم گالیم نیتريد که بر روی گالیم نیتريد به صورت شبه‌مورفیکالی رشد داده شده و جهت قطبش خودبه‌خودی و قطبش پیزوالکتریک در محل تماس

همچنین مقدارهای به دست آمده برای قطبش خودبه‌خودی و قطبش پیزوالکتریک اجازه می‌دهد تا چگالی‌های بار قطبش القایی سطح تماس را در سطوح

(2DEG) به صورت یک لایه حامل محدود شده در محل تماس باند، با چگالی $+σ/e$ می‌تواند شکل بگیرد. ضمن اینکه نیاز نیست تا ساختاری را برای شکل گاز الکترونی پیش‌بینی کرد.

نتیجه‌گیری

قطبش خودبه‌خودی و پیزوالکتریک برای آلومینیم نیتريد، گالیم نیتريد و آلومینیم گالیم نیتريد در چارچوب روش نظریه‌تابعی چگالی محاسبه گردید. محاسبات تأییدی بود بر اینکه یک وابستگی غیرخطی برای قطبش خودبه‌خودی با میزان غلظت آلومینیم در ترکیب آلیاژ $Al_xGa_{1-x}N$ وجود دارد. مقدارهای محاسبه شده از روش تابعی چگالی با تقریب تعمیم‌گرایان و با استفاده از بسته نرم‌افزاری وین توکی در توافق خوبی با مقدارهای به دست آمده با استفاده از روش‌های تئوری دیگر (محاسبات نظری) بود. نتایج حاصل از این تحقیق نشان داد که با افزایش کسر مولار آلومینیم در ترکیب $Al_xGa_{1-x}N$ ، میزان قطبش خودبه‌خودی و همچنین قطبش پیزوالکتریک افزایش یافته و در نتیجه قطبش ماکروسکوپیگ بالا را به همراه دارد که به معنی افزایش میزان چگالی بار در محل تماس نامتجانس ترکیبات $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ است. همچنین محاسبات نشان داد که سهم زیادی از قطبش ماکروسکوپیگ در ترکیبات $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ مربوط به قطبش خودبه‌خودی است. نتایج حاصل از محاسبات ساختار نواری این آلیاژها نیز نشان داد که گاف نواری برای تمامی ترکیبات در راستای Γ و مستقیم است و با کاهش میزان غلظت Al در نیمه‌رسانای $Al_xGa_{1-x}N$ کاهش می‌یابد. توصیف این‌گونه مدل‌ها می‌تواند برای دیگر ساختارهای نیمه‌رسانا به کار گرفته شود.

$AlGaN(0001)$ و $GaN(0001)$ ، $AlN(0001)$ به صورت زیر محاسبه کنیم [5].

$$\sigma = P_{macro} = P_{sp} + P_{pz} \quad (9)$$

که به ترتیب P_{pz} ، P_{sp} ، P_{macro} قطبش ماکروسکوپیگ، قطبش خودبه‌خودی و قطبش پیزوالکتریک ترکیبات نیتريد هستند. مقدار قطبش ماکروسکوپیگ برای ترکیبات نیتриди مورد نظر در این کار در جدول 5 ارائه شده است که همگی حکایت از میزان بالای قطبش ماکروسکوپیگ و در نتیجه چگالی بالای بار ناشی از قطبش دارد؛ همچنین نشان می‌دهد که افزایش کسر مولار آلومینیم در ترکیب باعث افزایش میزان قطبش ماکروسکوپیگ می‌گردد.

جدول 5. مقدار قطبش ماکروسکوپیگ محاسبه شده در ترکیب آلیاژهای نیتриди

آلیاژ	$P_{macro}(c/m^2)$
$Al_{37/5}Ga_{62/5}N/GaN$	0/019
$Al_{12/5}Ga_{87/5}N/GaN$	0/0051

چگالی بار ناشی از قطبش با گرایان قطبش در فضا برابر است. به عنوان یک مورد خاص در سطح لایه $A_xB_{1-x}N$ همانند محل تماس نامتجانس $A_xB_{1-x}N/GaN$ قطبش ماکروسکوپیگ به‌طور ناگهانی تغییر می‌کند و ایجاد یک چگالی بار قطبشی دو بعدی می‌کند [5].

مقدارهای محاسبه شده برای قطبش القایی بارها در محل تماس باند نشان داده است که الکترون‌های آزاد در چاه کوانتومی، در محل تماس به صورت باند لایه‌ای برای خنثی کردن چگالی بار مثبت ($+σ$) جمع خواهند شد. به عنوان یک نتیجه منطقی یک گاز الکترونی دوبعدی

منابع

- [1] O. Ambacher, J. Phys. D 31, (1988), 2653.
- [2] F. Bernardini and V. Fiorentini, Phys. Rev. B 57, (1998), R9427.
- [3] F. Bernardini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B 56, (1997), R10024.
- [4] F. Bernardini and V. Fiorentini, Phys. Rev. B 64, (2001), 085207.
- [5] O. Ambacher, J. Majewski, C. Miskys, A. Link, M. Hermann, M. Eickhoff, M. Stutzmann, F. Bernardini, V. Fiorentini, V. Tilak, B. Schaff, and L.F. Eastman, J. Phys.: Condens. Matter 143399–3434(2002).

- [6] R.D. King-Smith and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* 47,(1993), 1651.
- [7] R. Resta, *Rev. Mod. Phys.* 66, (1994), 899.
- [8] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, "Wien2k," An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties, (2011).
- [9] J. Kuneš, Ph. Wissgott, userguide WIEN2WANNIER: From linearized augmented plane waves to maximally localized Wannier functions, (2013).
- [10] H.J. Monkhorst and J.D. Pack, *Phys. Rev. B* 13,(1976),5188.
- [11] R. Resta, *Ferroelectrics.* (1996). 136, 51.
- [12] A. Malashevich, Abstract of dissertation, New Brunswick, New Jersey, The Graduate School- New Brunswick Rutgers, The State University of New Jersey, (2009).
- [13] O. Ambacher, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 31, (1998), 2653.
- [14] O. Ambacher, J. Smart, J.R. Shealy, N.G. Weimann, K.Chu, M. Murphy, W.J. Schaff, and L.F. Eastman, *J. Appl.Phys.* 85, (1999), 3222.
- [15] F. Bernardini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* 63, (2001), 193201.
- [16] Manuel, J.M. et al. Structural and compositional homogeneity of InAlN epitaxial layers nearly lattice-matched to GaN. *Acta Mater* 58, 4120–4125, 10.1016/j.actamat-.2010.04.001 (2010).
- [17] Morales, F.M. et al. Determination of the composition of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ from strain measurements. *Acta Mater* 57, 5681–5692, 10.1016/j.actamat.2009.07.063 (2009).
- [18] D. Carvalho, K. Müller-Caspary, M. Schowalter, T. Grieb, T. Mehrrens, A. Rosenauer, T. Ben, R. García, A. Redondo-Cubero, K. Lorenz, B. Daudin & F. M. Morales, Direct Measurement of Polarization-Induced Fields in GaN/AlN by Nano-Beam Electron Diffraction, *Scientific Reports* 6,10.1038/srep28459(2016)
- [19] Bernardini F, "Nitride Semiconductor Devices Principles and Simulation", edited by, J. Piprek. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.KGaA, (2007).
- [20] I. Supryadkina, K. Abgaryan, D. Bazhanov, I. Mutigullin "AB initio study of macroscopic polarization of AlN, GaN and AlGaN", *Phys.Status Solidc.* 11. No.2, (2014), 307-311.