

خواص الکترونی، فونونی و مکانیکی GaN

عاطفه نجاتی^{۱*}، حسن تشکری^۱، فرامرز کنجوری^۲

آزمایشگاه فیزیک محاسباتی، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد قم، قم، ایران

^۲گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه خوارزمی، کرج، ایران

چکیده

در این مقاله خواص الکترونی، فونونی و مکانیکی بلور GaN در حالت انبوه، برای دو فاز مکعبی بلندروی و شش‌گوشی ورتسایت با استفاده از نظریه تابعی چگالی، تقریب شیب تعمیم‌یافته و استفاده از شبه‌پتانسیل مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج بررسی خواص الکترونی نشان داد که این بلور در فازهای بلندروی و ورتسایت نیم‌رسانا، با گاف انرژی ۲ و ۲٫۲ الکترون-ولت است. با منطبق نمودن نمودار انرژی برحسب پارامترهای شبکه بهینه شده با معادله حالت مورناگون، مدول حجمی محاسبه شد. نمودار پراکندگی فونونی برای هر دو فاز در راستای بیشترین تقارن رسم شد. مقادیر ثابت‌های کشسانی با توجه به شیب شاخه‌های آکوستیکی در راستاهای مورد نظر در نمودار پراکندگی فونونی برای فاز بلندروی $C_{11}=272$ ، $C_{44}=122$ ، $C_{12}=127$ گیگا پاسکال و برای فاز ورتسایت $C_{11}=301$ ، $C_{33}=380$ ، $C_{44}=85$ ، $C_{66}=88$ ، $C_{12}=125$ و $C_{13}=153$ گیگا پاسکال به دست آمد. نتایج به دست آمده از محاسبات تطابق خوبی با نتایج دیگران داشت. همچنین مدول یانگ در حالت‌های کششی و تراکمی برای فاز ورتسایت و مدول یانگ برای فاز بلندروی محاسبه شد. مقایسه مقاومت این بلور در راستای Z، مقاومت بیشتر فاز ورتسایت را نشان داد.

کلیدواژگان: GaN، خواص الکترونی، طیف فونونی، ثابت کشسانی، خواص مکانیکی

مقدمه

خواص مکانیکی منحصربه‌فرد این مواد مانند سختی، نقطه ذوب بالا، رسانایی گرمایی بالا و مدول حجمی بزرگ، این مواد را به پوشش‌های حفاظتی مناسبی تبدیل کرده است.

GaN در دو فاز ورتسایت^۱ و بلندروی^۲ متبلور می‌شود. در هنگام رشد GaN روی زیرلایه‌هایی از جنس یاقوت کبود به دلیل تقارن‌های شش ضلعی موجود، فاز ورتسایت ایجاد می‌شود، از این‌رو اکثر مطالعات برای این فاز انجام شده است. با این وجود،

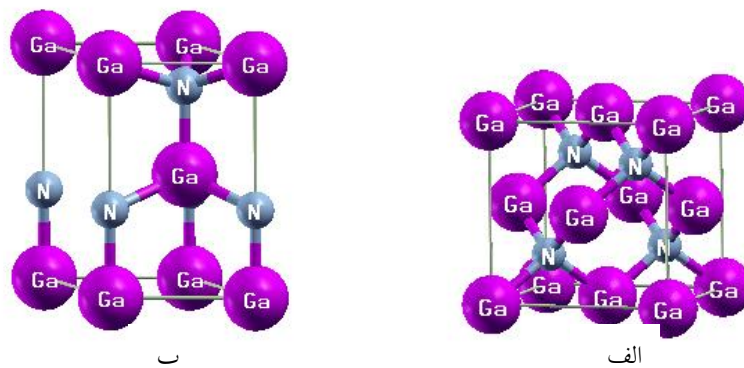
ترکیبات III-V به دلیل داشتن گاف انرژی، نیم‌رسانا بوده و به طور تجربی [۲۰، ۱] و نظری [۶-۳] مورد توجه قرار گرفته است. GaN یک نیم‌رسانای این گروه است. خواص الکترونی این نیم‌رسانا از جمله گاف الکترونی نسبتاً پهن و ثابت دی‌الک تریک کوچک باعث شده است، این مواد در دستگاه‌هایی با طول‌موج آبی، فرابنفش و دستگاه‌های الکترونیکی در دمای بالا کاربرد گسترده‌ای داشته باشند [۹-۷].

* ایمیل نویسنده مسئول: angelati29@gmail.com

^۱Wurtzite

^۲Zinc-Blende

رشد این ماده در فاز بلندروی نیز با موفقیت انجام شده است [۲].



شکل ۱. سلول واحد قراردادی بلور GaN در دو فاز بلندروی (الف) و ورتسایت (ب).

[۱۴]. در سال ۲۰۰۶ با استفاده از نرم افزار CASTEP^۳ خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی GaN و وابستگی آن به فشار بررسی شد. مطالعات نشان می‌دهد، در فشار ۱۰/۸۷ گیگا پاسکال فازهای ورتسایت و بلندروی به یکدیگر تبدیل می‌شوند [۲۰]. داویدف و همکارانش به صورت تجربی و نظری طیف فونونی را در فاز ورتسایت بررسی کردند [۱۹]. محاسبات به روش بسط امواج تخت، نظریه تابعی چگالی، نظریه تابعی چگالی اختلالی و استفاده از شبه پتانسیل انجام شده است. در ادامه، نتایج به دست آمده از محاسبات را با نتایج دیگران و داده‌های تجربی مقایسه می‌کنیم. همچنین مدول یانگ را برای فاز ورتسایت، در حالت کششی و تراکمی به دست می‌آوریم و با مدول یانگ فاز بلندروی مقایسه می‌کنیم.

روش محاسباتی

مطالعه ابتدا به ساکن با استفاده از بسته نرم‌افزاری ESPRESSO انجام می‌شود [۲۱]. محاسبات دینامیک شبکه با کمک کدهای شبیه‌سازی PWscf و Phono انجام می‌شود. با استفاده از کد PWscf محاسبات خودسازگار انجام و با کمینه کردن نیروها و استرس‌ها،

همچنین ساخت دیوهای نوری GaN از رشد فاز بلندروی روی زیرلایه GaAs گزارش شده است [۱۰]. به منظور طراحی و ساخت مناسب دستگاه‌ها، بررسی‌های اولیه پیرامون خواص فیزیکی مانند خواص الکترونی و مکانیکی لازم و ضروری است. یکی از روش‌های به دست آوردن خواص مکانیکی و ثابت‌های کشسانی، استفاده از شیب نمودار پراکندگی فونونی است. برای به دست آوردن نمودار تجربی طیف فونونی با مشکلاتی روبه‌رو هستیم، به این علت از روش‌های محاسباتی استفاده می‌کنیم. روش‌های محاسباتی مکمل آزمایش‌های تجربی هستند و با هزینه‌های کمتری انجام می‌شوند.

با روش‌ها و تقریب‌های متفاوت، خواص الکترونی و مکانیکی این بلور بررسی شده‌اند [۱۹-۱۱]. در سال ۱۹۶۹ این بلور به صورت تجربی ساخته و اندازه گاف الکترونی آن ۳/۳۹ الکترون‌ولت گزارش شد [۱۳]. ثابت‌های کشسانی فاز بلندروی با روش‌های تجربی در سال ۱۹۷۸ محاسبه شدند [۱۶]. کیم و همکارانش با استفاده از محاسبات نظری و پتانسیل کامل، ثابت‌های کشسانی فاز بلندروی را محاسبه کردند

^۳Cambridge Serial Total Energy Package

بهینه‌سازی پارامترهای ساختاری انجام می‌شوند. کد Phonon نیز معادلات مربوط به نظریه تابعی چگالی یکسری بردارهای موج یکنواخت به دست می‌آورد. اختلالی را حل کرده و ماتریس ثابت‌های نیرو را برای

جدول ۱. پارامترهای شبکه بهینه‌شده و مقایسه با نتایج تجربی و دیگران.

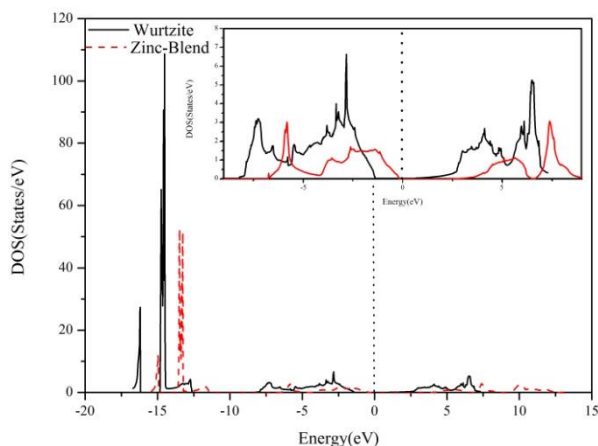
فاز	کار	روش تقریب	$a(A^\circ)$	$c(A^\circ)$
ورتسایت	حاضر	PWPP-GGA	۳٫۲۰	۵٫۲۴
	دیگران	FP-LMTO-LDA[۲۲]	۳٫۱۶	۵٫۱۷
		PWPP-LDA[۲۳]	۳٫۱۴	۵٫۱۱
		PWPP-GGA[۱۲]	۳٫۲۰	۵٫۲۲
	تجربی[۲۴]	-	۳٫۱۹	۵٫۱۹
	درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	-	۰٫۳	۰٫۹
بلندروی	حاضر	PWPP-GGA	۴٫۵۴	-
	دیگران[۲۲]	FP-LMTO-LDA	۴٫۴۷	-
	تجربی[۲۵]	-	۴٫۵۰	-
	درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	-	۰٫۸	-

را حول پارامتر شبکه تجربی وردش و پارامتری که در آن انرژی کل سیستم کمینه است را به دست می‌آوریم. با توجه به اینکه فاز ورتسایت دارای دو پارامتر شبکه است، ابتدا به‌ازای یک $\frac{c}{a}$ ثابت (مقدار تجربی)، a را بهینه می‌کنیم. سپس با حجم بهینه‌شده، نمودار انرژی برحسب $\frac{c}{a}$ های مختلف را رسم می‌کنیم. سپس به‌ازای $\frac{c}{a}$ بهینه که مقدار کمینه انرژی را به خود اختصاص می‌دهد مجدداً ثابت شبکه a را بهینه می‌کنیم. پارامترهای شبکه تعادلی به دست آمده از روش امواج تخت و شبه‌پتانسیل (PWPP) با نتایج تجربی و دیگران در جدول ۱ مقایسه شده‌اند. نتایج به دست آمده با استفاده از شبه‌پتانسیل حاصل از تقریب GGA نسبت به تقریب LDA^۵، به داده‌های تجربی نزدیک‌تر است. درحالی‌که نتایج به دست آمده با استفاده از روش

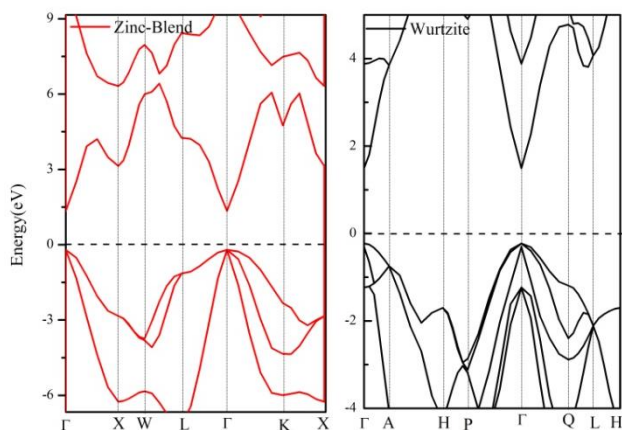
محاسبات با استفاده از شبه‌پتانسیل‌های فوق نرم انجام شده است که این شبه‌پتانسیل‌ها (N.pbe- van_ak.UPF,Ga.pbe-nspvan.UPF) با تقریب شیب تعمیم‌یافته^۴ (GGA) به دست آمده‌اند. در شبه‌پتانسیل اتم Ga، اربیتال‌های 3d 4s 4p و در شبه‌پتانسیل اتم N، اربیتال‌های 2s 2p مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۲۱]. همگرایی بر مبنای انرژی در نظر گرفته شده است. انرژی قطع بهینه برای فاز بلندروی ۳۰ ریدبرگ و برای فاز ورتسایت ۴۰ ریدبرگ به دست آمد. در فاز بلندروی با ۹ چرخه و دقت $10^{-11} \times 3/5$ ریدبرگ و ۴۳۲ موج تخت و برای فاز ورتسایت با ۸ چرخه و دقت 10^{-6} ریدبرگ و ۴۴۵ موج تخت به همگرایی رسیدیم. تقسیم‌بندی منطقه‌ای بریلوئن با استفاده از روش مونخورست-پک انجام شده است، که مقادیر بهینه‌شده برای فاز بلندروی $4 \times 4 \times 4$ و برای فاز ورتسایت $6 \times 6 \times 4$ است. پس از انجام بهینه‌سازی‌های اولیه، برای بهینه‌سازی پارامترهای شبکه، پارامتر شبکه

^۵Localized Density Approximation

^۴Generalized Gradient Approximation



شکل ۲. نمودار چگالی حالات مربوط به فازهای بلندروی و ورتسایت. (نمودار ضمیمه شده، بزرگ شده نمودار چگالی حالات در اطراف تراز فرمی است).



شکل ۳. نمودار ساختار نواری مربوط به فازهای بلندروی و ورتسایت در راستای تقارن‌ها.

نمودار ساختار نواری (شکل ۳) نیم‌رسانا بودن این بلور در هر دو فاز را تأیید می‌کند. با توجه به نمودار مشاهده می‌شود که بالاترین نقطه در نوار رسانش و پایین‌ترین نقطه در نوار ظرفیت در یک راستا هستند و گاف مستقیم در نقطه تقارنی Γ را ایجاد می‌کند. با رسم نمودار چگالی ابر الکترونی، نوع پیوندها در صفحات متفاوت مشخص می‌شود. هرچه تراکم الکترون‌ها متقارن‌تر و به دایره نزدیک‌تر باشد، پیوند بین اتم‌ها از نوع یونی می‌شود. از این رو بیشتر پیوندها در فاز بلندروی از این نوع پیوند هستند.

16 FP-LMTO و تقریب LDA نسبت به تقریب GGA دقیق‌تر است.

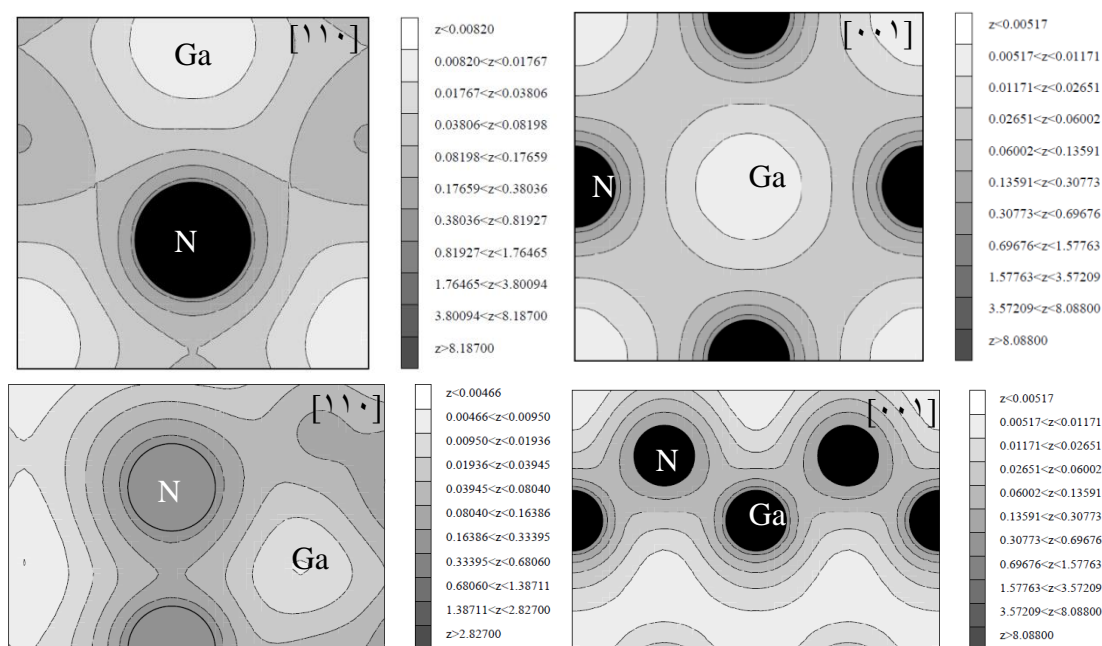
به منظور محاسبه کامل طیف فونونی، به ترتیب برای فازهای ورتسایت و بلندروی، ۸ و ۶ ماتریس دینامیکی ایجاد شد. برای تقسیم‌بندی برداری q ، مقادیر $2 \times 3 \times 3$ و $4 \times 4 \times 4$ در نظر گرفته شدند. سپس این ماتریسها با استفاده از تبدیل فوریه به ثابت‌های نیرو تبدیل شده و طیف فونونی محاسبه شد.

خواص الکترونی

برای بررسی خواص الکترونی، از نمودارهای ساختار نواری و چگالی حالات (DOS) استفاده می‌شود. در نمودارهای رسم شده، تراز فرمی به نقطه صفر منتقل شده است. با توجه به نمودار چگالی حالات (شکل ۲)، بلور در هر دو فاز نیم‌رسانا است. اندازه گاف انرژی که فاصله بین لبه‌های نوار رسانش و نوار ظرفیت است، با کار نظری سایرین در تطابق است (جدول ۲). تفاوت اندازه گاف محاسبه شده با مقدار تجربی، به علت اثرات تقریب GGA است که در محاسبات استفاده شده است [۲۶]. با در نظر گرفتن این تقریب، تنها حالت‌های پایه در نظر گرفته می‌شوند و حالت‌های برانگیخته که در اندازه گاف مؤثر هستند در نظر گرفته نمی‌شوند. فاز ورتسایت از فاز بلندروی پله‌ای‌تر و دارای قله‌های بلندتری است.

جدول ۲. مقدار گاف انرژی به دست آمده از نمودار چگالی حالات و مقایسه با نتایج دیگران.

کار	E_{gap} (eV)		
	ورتسایت	روش تقریب	بلندروی
حاضر	۲٫۲	DFT-GGA	۲
دیگران	۲٫۸ [۱۲]	DFT-GGA	۱٫۶۶۳ [۱۱]
تجربی	۳٫۳۹ [۱۳]	-	۳٫۰۳ [۱۱]



شکل ۴. چگالی ابر الکترونی در صفحات $[001]$ و $[110]$ مربوط به هر دو فاز (ستون سمت راست، فاز بلندروی و ستون سمت چپ فاز ورتسایت).

$$E(V) = E_0 + \left(\frac{BV}{B'} \right) \left(\frac{\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'}}{B' - 1} + 1 \right) - \frac{BV_0}{B' - 1} \quad (1)$$

مدول حجمی مقاومت بلور در برابر فشارهای وارد شده از هر سه راستا را نشان می‌دهد. نتایج به‌دست آمده در جدول ۵ آورده شده‌است. با توجه به مقادیر به‌دست آمده، این بلور در فاز ورتسایت از فاز بلندروی در مقابل فشارهای وارد شده در سه راستا، مقاوم‌تر است. با توجه به مقدار به‌دست آمده برای مدول حجمی، تراکم پذیری $(K = \frac{1}{B})$ نیز محاسبه و در جدول ۵ آورده شده‌است. هرچه این کمیت کوچکتر باشد، اتم‌ها در فاصله دورتری از هم قرار می‌گیرند و بلور کمتر متراکم می‌شود. همچنین با توجه به شکل ۵، بلور GaN در فاز ورتسایت از فاز بلندروی به‌دلیل داشتن انرژی کمتر، پایدارتر است.

درحالی‌که در فاز ورتسایت، به‌دلیل عدم تقارن دایره‌ای چگالی ابر الکترونی، بین اتم‌ها پیوند کووالانسی مشاهده می‌شود، که اتم‌های N و Ga الکترون‌هایشان را به اشتراک می‌گذارند (شکل ۴). به دلیل وجود همین پیوندهای کووالانسی و یونی است که این بلور بسیار مقاوم بوده و به‌عنوان پوشش استفاده می‌شود.

خواص مکانیکی

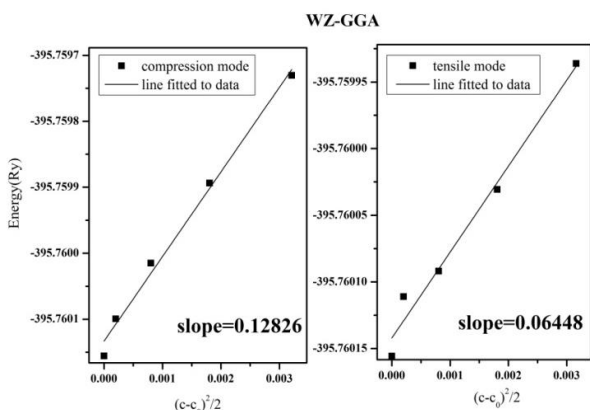
مدول حجمی

با رسم نمودار انرژی برحسب حجم (شکل ۵) و تطابق پارامترهای شبکه تعادلی بر معادله حالت مورناگون می‌توان مدول حجمی (B) را به‌دست آورد [۲۶]:

با رسم نمودار انرژی کل برحسب مقادیر مختلف $\frac{1}{2}(c-c_0)^2$ و برازش خطی داده‌ها، شیب به دست آمده و مقدار k را می‌دهد (شکل ۶). سپس با استفاده از رابطه ۳ مقدار مدول یانگ را محاسبه می‌کنیم.

$$E = \frac{1}{2}k(x-x_0)^2 \xrightarrow{x=c} E = \frac{1}{2}k(c-c_0)^2 \quad ۴$$

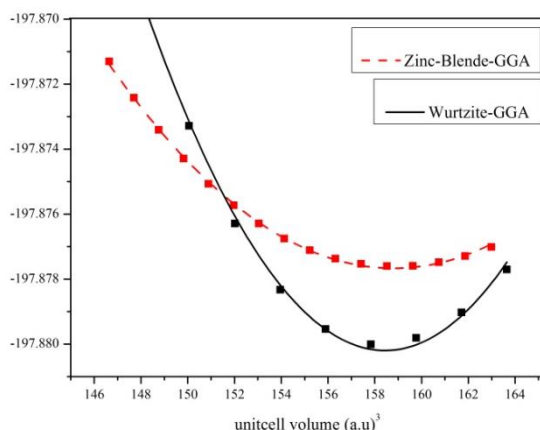
درحالی‌که برای فاز بلندروی، محور تقارنی بلور در راستای Z نیست، پس نمی‌توانیم با استفاده از نرم‌افزار بلور را در راستای Z دچار تغییر کنیم. از این رو مدول یانگ فاز بلندروی با استفاده از ثابت‌های کشسانی و رابطه زیر به دست می‌آید [۲۹]:



شکل ۶. نمودار انرژی برحسب $(c-c_0)^2/2$ ، در حالت‌های کششی و تراکمی برای فاز بلندروی.

$$Y = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{C_{11} + C_{12}} \quad ۵$$

با توجه به نتایج به دست آمده مدول یانگ مربوط به فاز ورتسایت در حالت تراکمی از حالت کششی بزرگ‌تر بوده و از پتانسیل ندارد چونز تبعیت می‌کند. در این پتانسیل شیب نمودار، با کاهش فاصله تعادلی بین اتم‌ها و تداخل ابر الکترونی اتم‌ها، نسبت به حالتی که فاصله تعادلی افزایش می‌یابد بیشتر تغییر می‌کند. مقایسه مدول یانگ میانگین دو فاز بیانگر مقاوم‌تر بودن فاز ورتسایت است.



شکل ۵. نمودار تغییرات انرژی کل برحسب حجم یاخته (دو اتم در سلول واحد) به‌ازای پارامتر شبکه‌های مختلف برای فازهای بلندروی و ورتسایت.

مدول یانگ

مدول یانگ تمایل تغییر شکل ماده در یک راستای خاص، هنگامی‌که نیرویی در جهت مخالف با راستای مورد نظر به ماده وارد می‌شود را نشان می‌دهد. برای به دست آوردن مدول یانگ بلور را در راستای محور Z تحت کشش و تراکم قرار می‌دهیم، بلور در مقابل این تغییرات مقاومت می‌کند. مدول یانگ نسبت تنش (σ) به کرنش (ϵ) است که به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۸]:

$$Y = \frac{\sigma}{\epsilon} = \frac{F/A_0}{\Delta L/L_0} = \frac{FL_0}{A_0\Delta L} \quad ۲$$

$$\rightarrow F = \frac{YA_0\Delta L}{L_0} = \left(\frac{YA_0}{L_0}\right)\Delta L = k\Delta L = k(x-x_0)$$

که در رابطه بالا F نیرو، L_0 دوره تناوب تعادلی و ΔL تغییرات دوره تناوب در راستای Z است که آن را با نشان $(C-C_0)$ می‌دهیم. با در نظر گرفتن بلور به صورت فنر و محاسبه k که معرف ثابت سختی فنر است، می‌توان سختی سیستم در برابر تنش را محاسبه کرد. در نهایت مقدار مدول یانگ با استفاده از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$k = \frac{YA_0}{L_0} \rightarrow Y = \frac{L_0}{A_0}k \quad ۳$$

$$\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{TA1[100]} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}$$

$$\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{LA[001]} = \sqrt{\frac{C_{33}}{\rho}} \quad ۶$$

که در رابطه بالا $\left(\frac{d\omega}{dk}\right)$ شیب نمودار پراکندگی فونونی در محدوده کشسانی (جایی که ω برحسب k خطی است)، ρ چگالی بلور $\left(6.15 \frac{\text{gr}}{\text{cm}^3}\right)$ و C ثابت کشسانی است. اندیس TA و LA بیانگر مدهای آکوستیکی عرضی و طولی هستند و $[100]$ و $[001]$ راستا را مشخص می‌کنند.

فاز بلندروی دارای دو مدول مستقل (C_{11}, C_{44}) و فاز ورتسایت دارای پنج مدول مستقل $(C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{44}, C_{66})$ است. به منظور محاسبه شیب نمودار پراکندگی فونونی و به دست آوردن ثابت‌های کشسانی، نمودار پراکندگی فونونی (شکل ۷) در راستای بیشترین تقارن رسم شده است. انتظار می‌رود که تعداد شاخه‌های نمودار پراکندگی GaN در فاز ورتسایت به دلیل داشتن چهار اتم در پایه، برابر ۱۲ و برای فاز بلندروی که دو اتم در پایه دارد، برابر ۶ باشد. با توجه به نمودار، این تعداد شاخه مشاهده می‌گردد. اما تعداد این شاخه‌ها در راستای بعضی از مسیرها مانند $A \rightarrow \Gamma$ ، در فاز بلندروی به ۴ شاخه (۲ مد طولی و ۲ مد عرضی دوگانه) و در فاز ورتسایت به ۸ شاخه (۴ مد طولی و ۴ مد عرضی دوگانه) تقلیل می‌یابد. شاخه‌های آکوستیکی و اپتیکی در هر دو فاز از هم جدا شده‌اند. با توجه به نمودار پراکندگی فونونی (شکل ۷) فاز ورتسایت دارای یک گاف فونونی در محدوده $325-516 \text{ cm}^{-1}$ و فاز بلندروی دو گاف در محدوده $323-521 \text{ cm}^{-1}$ و $601-645 \text{ cm}^{-1}$ است. از این رو می‌توان از این بلور در صافی‌های مکانیکی استفاده نمود.

با توجه به جدول ۳ مقدار مدول یانگ به دست آمده از محاسبات حاضر نسبت به روشی که در محاسبات از پتانسیل کامل استفاده شده است، به مقدار تجربی نزدیک‌تر است. یکی از دلایل اختلاف نتایج به دست آمده با نتایج تجربی این است که در انجام محاسبات، بلور را کاملاً خالص و شرایط را ایده‌آل در نظر گرفتیم. در حالی که ممکن است بلور ساخته شده در آزمایشگاه کاملاً خالص و شرایط آزمایشگاه ایده‌آل نباشد. همچنین تقریب در نظر گرفته شده در محاسبات می‌تواند در این اختلاف سهم باشد.

جدول ۳. مدول یانگ برای فازهای ورتسایت و بلندروی در حالت‌های کششی و تراکمی.

میانگین	کششی	تراکمی	تقریب- روش	کار	Y(GPa)
۴۴۰	۲۹۴	۵۸۶	PWPP-GGA	حاضر	
۴۶[۳۰]	-	-	FP-LMTO-LDA	دیگران	ورتسایت
۱	-	-	x-ray	تجربی	
۳۶[۳۱]	-	-			۲
۲۶۹	-	-	PWPP-GGA	حاضر	بلندروی

ثابت‌های کشسانی

خواص کشسانی به خاصیتی از مواد گفته می‌شود که تحت تنش تغییر شکل پیدا کرده و هنگامی که تنش متوقف می‌شود، به شکل اصلی خودشان بازمی‌گردند. ثابت‌های کشسانی برای بلورها با استفاده از روابط زیر به دست می‌آید [۳۲]:

$$\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{LA[100]} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}$$

$$\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{TA2[100]} = \sqrt{\frac{C_{66}}{\rho}}$$

راستای $[100]$ را نشان می‌دهد. سایر ثابت‌های کشسانی فاز ورتسایت، با استفاده از روابط زیر به دست می‌آیند [۳۳]:

$$C_{44} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \quad ۷$$

مدول یانگ در ساختار هگزاگونال از رابطه زیر تبعیت می‌کند [۱۶]:

$$\frac{1}{Y} = S_{33}, S_{33} = \frac{C_{11} + C_{12}}{C_{11}C_{33} - 2C_{13}^2 + C_{12}C_{33}} \quad ۸$$

که در این رابطه S_{33} وارون ماتریس C_{33} است که با وارون نمودن ماتریس C_{33} عناصر ماتریس S_{33} برحسب ضرایب کشسانی به دست می‌آید. در فاز بلندروی نیز با در دست داشتن مدول حجمی و استفاده از رابطه زیر می‌توان C_{12} را محاسبه نمود [۲۸]:

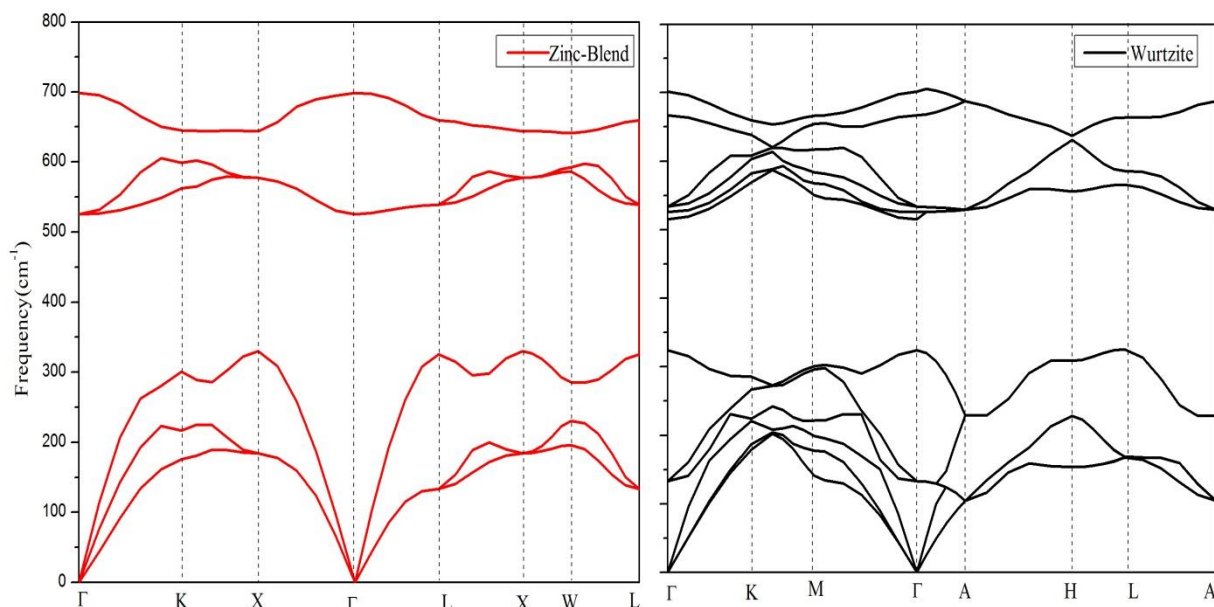
$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad ۹$$

فرکانس‌های محاسبه شده برای مدهای اپتیکی در نقطه Γ برای بلور GaN به تفکیک تقارنی و مدهای فعال رامان و فعال فروسرخ در جدول ۴ گزارش و با نتایج دیگران مقایسه شده است. در بین فرکانس‌های به دست آمده، فرکانس منفی که نشان دهنده ناپایداری سیستم است مشاهده نمی‌شود.

تعدادی از ثابت‌های کشسانی با استفاده از شیب نمودار پراکندگی فونونی و جایگذاری در روابط ۶ به دست می‌آیند. با توجه به شکل منطقه اول بریلون در فضای وارون برای فاز ورتسایت، راستای $[100]$ ، $\Gamma \rightarrow K$ و راستای $[001]$ ، $\Gamma \rightarrow A$ است. چون در راستای $\Gamma \rightarrow K$ دو مد آکوستیکی عرضی داریم، با اندیس‌های ۱ و ۲ نمادگذاری می‌شوند. در فاز بلندروی نیز با توجه به شکل منطقه اول بریلون، $\Gamma \rightarrow X$

جدول ۴. فرکانس (cm^{-1}) مدهای اپتیکی نقطه گاما در فازهای بلندروی و ورتسایت.

محدوده بسامد (فروسرخ (I) - رامان (R))	درصد خطای نسبی نسبت به کار تجربی	فرکانس (cm^{-1})			نمایش کاهش ناپذیر	مد فونونی (ω)	فاز
		تجربی [۳۴]	دیگران [۱۸]	کار حاضر			
I+R	۷٫۶	۱۴۵	۱۳۸	۱۳۴	E-2	۴-۵	ورتسایت
I+R	-	-	۳۳۴	۳۲۲	B-1	۶	
I+R	۴٫۹	۵۳۳	۵۵۰	۵۰۷	A-1	۷	
I+R	۵٫۹	۵۶۱	۵۷۲	۵۲۸	E-1	۸	
I+R	۵٫۸	۵۷۰	۵۷۴	۵۳۷	E-2	۹-۱۰	
I+R	-	-	۶۹۰	۶۶۱	B-1	۱۱	
I+R	۴٫۲	۷۳۵	۷۳۳	۷۰۴	A-1	۱۲	
I+R	-	-	-	۵۲۵	T-2G-15P-4	۴-۶	بلندروی



شکل ۷. نمودار پراکندگی فونونی در راستای بیشترین تقارن، برای فازهای بلندروی و ورتسایت.

جدول ۵. تراکم‌پذیری (1/GPa)، مدول حجمی (GPa) و ثابت‌های کشسانی (GPa) مربوط به بلور GaN.

فاز	کار	روش-تقریب	C_{11}	C_{33}	C_{44}	C_{66}	C_{12}	C_{13}	B	K
ورتسایت	حاضر	PWPP-GGA	۳۰۱	۳۸۰	۸۵	۸۸	۱۲۵	۱۵۳	۲۰۵	۰٫۰۰۵
	دیگران	FP-LMTO-LDA[۱۱]	۳۹۶	۳۹۲	۹۱	-	۱۴۴	۱۰۰	۲۰۱	-
		PWPP-LDA[۱۵]	۳۵۰	۳۷۶	۱۰۱	۱۱۵	۱۴۰	۱۰۴	۱۹۷	-
	تجربی	mean square displacement x-ray[۱۶]	۲۹۶	۲۶۷	۲۴۱	-	۱۳۰	۱۵۸	۱۹۵	-
		Ultrasonic crystal x-ray[۱۷]	۳۷۷	۲۰۹	۸۱/۴	۱۶۰	۱۱۴	۱۷۳	-	-
		Raman scattering[۱۹]	۳۱۵	۳۲۴	۸۸	۹۹	۱۱۸	۹۶	-	-
بلندروی	حاضر	PWPP-GGA	۲۷۲	-	۱۲۲	-	۱۲۷	-	۱۷۵	۰٫۰۰۶
	دیگران	PWPP-LDA[۱۵]	۲۸۵	-	۱۴۹	-	۱۶۱	-	۲۰۲	-

ثابت‌های کشسانی به‌دست آمده با نتایج به‌دست آمده از روش پتانسیل کامل در تطابق بیشتری نسبت به کار دیگری است که در محاسبات از تقریب LDA استفاده کرده است. C_{11} و C_{12} نمایش برهم‌کنش

نتایج به‌دست آمده برای هر دو فاز در جدول ۵ آورده شده است. نتایج به‌دست آمده از محاسبات حاضر با نتایج تجربی به‌دست آمده از پراکندگی رامان در توافق بیشتری نسبت به سایر روش‌های تجربی دیگر است.

nitridewurtzite phase materials system. Part I. Binary compounds GaN, AlN, and InN, *Applied Physics* 88 (2000) 6467-6475.

[4] S. Berrah, H. Abid, A. Boukourt, M. Sehil, Band Gap of Cubic AlN, GaN and InN Compounds Under Pressure, *Turkish Journal of Physics* 30 (2006) 513-518.

[5] M. Suzuki, T. Uenoyama, First principles calculation of effective mass parameters of GaN, *Solid-State Electronics* 41 (1997) 271-274.

[6] H. Morkoç, Light-Emitting Diodes, *Springer Series in Materials Science* 32 (1999) 340-378.

[7] X.Y. Li, J.T. Xu, Y.W. Tang, GaN based ultraviolet detectors and its recent development, *Infrared and Laser Engineering*, 35 (2006) 276-280.

[8] M. Benaissa, L. Gu, M. Korytov, T. Huault, P. A. van Aken, J. Brault, P. Vennéguès, Phase separation in GaN/AlGaIn quantum dots, *Applied Physics Letters* 95 (2009) 141901-1-141901-4.

[9] P. Rinke, M. Winkelkemper, A. Qteish, D. Bimberg, J. Neugebauer, M. Scheffler, Consistent set of band parameters for the group-III nitrides AlN, GaN, and InN, *Physical Review B* 77 (2008) 075202-1-075202-15.

[10] Z. Qin, M. Kobayashi, A. Yoshikawa, X-ray diffraction reciprocal space and pole figure characterization of cubic GaN epitaxial layers grown on (0 0 1) GaAs by molecular beam epitaxy, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 10 (1999) 199-202.

[11] Y. Du, B. Changa, Xi. Fua, Xi. Wanga, M. Wangc, Electronic structure and optical properties of zinc-blende GaN, *Optik* 123 (2012) 2208-2212.

[12] G.Y. Gaoa, K.L. Yao, Z.L. Liu, Y.L. Li, Y.C. Li, Q.M. Liu, Ab initio pseudopotential studies of the pressure dependences of structural, electronic and optical properties for GaN, *Solid State Communications* 138 (2006) 494-497.

[13] H.P. Maruska, J.J. Tietje, the preparation and properties of vapdeposited single crystalline GaN, *Applied Physics Letters* 15 (1969) 327-329.

[14] K. Kim, W.L. Lambrecht, Benjamin Segall, Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN, *Physical Review B* 53 (1996) 16310-16326.

پیوندی اتم‌ها در لایه‌ها را نشان می‌دهند و C_{13} و C_{33} برهم‌کنش اتم‌ها بین لایه‌های مختلف را نشان می‌دهند.

نتیجه‌گیری

با توجه به محاسبات انجام شده بلور GaN در هر دو فاز ورتسایت و بلندروی، نیم‌رسانا با گاف مستقیم است. با توجه به نمودار انرژی برحسب حجم، فاز ورتسایت پایدار است و به دلیل داشتن مدول حجمی بزرگ‌تر مقاوم‌تر است. مدول یانگ در فاز ورتسایت در حالت تراکمی از حالت کششی بزرگ‌تر بوده و از پتانسیل لنارد جونز تبعیت می‌کند. مقایسه مدول یانگ دو فاز بیانگر مقاوم‌تر بودن فاز ورتسایت است. مقایسه ثابت‌های کشسانی در راستاهای متفاوت این دو فاز نشان می‌دهد، که در برخی از راستاها فاز بلندروی و در برخی راستاها فاز ورتسایت سخت‌تر است. بررسی نمودار پراکندگی فونونی نشان می‌دهد که فاز ورتسایت دارای یک گاف فونونی در محدوده cm^{-1} ۳۲۵-۵۱۶ و فاز بلندروی دارای دو گاف در محدوده cm^{-1} ۳۲۳-۵۲۱ و cm^{-1} ۶۰۱-۶۴۵ است. از این رو می‌توان از این بلور در صافی‌های مکانیکی استفاده نمود.

مراجع

[1] R.C. Powell, N.E. Lee, Y.W. Kim, J.E. Greene, Heteroepitaxialwurtzite and zinc-blende structure GaN grown by reactive-ion molecular-beam epitaxy, Growth kinetics, microstructure, and properties, *Applied Physics* 73 (1993) 189-204.

[2] T. Lei, M. Fanciulli, R.J. Molnar, T.D. Moustakas, R.J. Graham, J. Scanlon, Epitaxial growth of zinc blende and wurtzitic gallium nitride thin filmson (001) silicon, *Applied Physics Letters* 95 (1991) 944-946.

[3] M. Goano, E. Bellotti, E. Ghillino, G. Ghione, K. Brennan, Band structure nonlocal pseudopotential calculation of the III-

- [25] M.D. Segal, P.J.D. Lindan, M.J. Probert, C.J. Pickard, P.J. Hasnip, S.J. Clark, M.C. Payne, First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code, *Journal of Physics: Condensed Matter* 14 (2002) 2717-2744.
- [26] W.E. Pickett, Pseudopotential methods in condensed matter applications, *Computer Physics Report* 9 (1989) 115-198.
- [27] F.D. Murnaghan, the compressibility of media under extreme pressures, *proceeding of the national academy of sciences* 30 (1944) 244-247.
- [28] C. Kittel, Introduction to solid state physics, Wiley and Sons, New York (1995).
- [29] J.H. Edgar, properties, processing and applications of Gallium Nitride and related semiconductors, INSPEC, the institution of electrical engineers, London (1999).
- [30] K. Kim, W.R.L. Lambrecht, B. Segall, Electronic structure of GaN with strain and phonon distortions, *Physical Review B* 50 (1994) 1502-1510.
- [31] T. Deguchi, D. Ichiryu, K. Toshikawa, K. Sekiguchi, T. Sota, R. Matsuo, T. Azuhata, M. Yamaguchi, T. Yagi, S. Chichibu, S. Nakamura, Structural and vibrational properties of GaN, *Applied Physics* 86 (1999) 18601-18606.
- [32] A. Authier, International Tables for Crystallography, Physical Properties of Crystals, Wiley, New York (2004).
- [33] A.N. Cleland, Foundations of Nano Mechanics from Solid State Theory to Device Application, Springer, New York, (2003).
- [34] L. Filippidis, H. Siegle, A. Hoffmann, C. Thomse, K. Karch, F. Bechstedt, Raman Frequencies and Angular Dispersion of Polar Modes in Aluminum Nitride and Gallium Nitride, *Physica Status Solidi B* 198 (1996) 621-627.
- [15] K. Shimada, T. Sota, K. Suzuki, First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN, *Applied Physics* 84 (1998) 4951-4958.
- [16] A.U. Sheleg, V.A. Savastenko, Study of the Elastic Properties of Gallium Nitride, *Physica Status Solidi A* 43 (1978) k135-k139.
- [17] R.B. Schwarz, K. Khachatryan, E.R. Weber, Elastic moduli of gallium nitride, *Applied Physics Letters* 70 (1997) 1122-1126.
- [18] C. Bungaro, K. Rapcewicz, J. Bernholc, Ab initio phonon dispersions of wurtzite AlN, GaN, and InN, *Physical Review B* 61 (2000) 6720-6725.
- [19] V.Yu. Davydov, Yu.E. Kitaev, I.N. Goncharuk, A.N. Smirnov, J. Graul, O. Semchinova, D. Uffmann, M.B. Smirnov, A.P. Mirgorodsky, R.A. Evarestov, Phonon dispersion and Raman scattering in hexagonal GaN and AlN, *Physical Review* 58 (1998) 12899-12907.
- [20] F. Saad Saoud, J.C. Plenet, L. Louail, D. Maouche, Mechanism of the phase transition in GaN under pressure up to 100 GPa, *Computational and Theoretical Chemistry* 964 (2011) 65-71.
- [21] www.quantum ESPRESSO.org.
- [22] N. Benayad, M. Dine El Hanani, M. Djermouni, First-principle study on electronic structure property of GaN/AlN, *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering* 28 (2012) 1-11.
- [23] K. Karch, J.M. Wagner, F. Bechstedt, Ab initio study of structural, dielectric, and dynamical properties of GaN, *Physical Review B* 57 (1998) 7043-7049.
- [24] A.F. Wright and J.S. Nelson, Consistent structural properties for AlN, GaN, and InN, *Physical Review B* 51 (1995) 7866-7869.