

مطالعه خواص ساختاری و الکترونی GaN آلیاژشده با Al و In در فازهای ورتسایت و زینک‌بلند با استفاده از نظریه تابعی

چگالی

نرگس عرب حجبی^۱، طیبیه مولاروی^{۱*}، و فاطمه بدیعیان باغ سیاهی^۲

۱. دانشکده فیزیک و مهندسی هسته ای، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود

۲. دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه کوثر بجنورد، بجنورد

پست الکترونیکی: web2_tayebbeh.movlaroooy@shahroodut.ac.ir

چکیده

در این پژوهش، خواص ساختاری و الکترونی نیتريد گاليم خالص و آلياژهای آن با آلومينيوم و اينديوم در فازهای ورتسایت و زینک‌بلند با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی شد. نتایج نشان داد GaN خالص در هر دو فاز دارای گاف انرژی مستقیم است و گاف انرژی در فاز ورتسایت بزرگ‌تر از زینک‌بلند است. جایشانی گاليم با آلومينيوم موجب کاهش پارامترهای شبکه و افزایش گاف انرژی، و جایشانی با اينديوم باعث انبساط شبکه و کاهش گاف انرژی شد. تحليل ساختار نواری و چگالی حالت‌ها نشان داد که این تغییرات با بازآرایی حالت‌های الکترونی و تغییر هیبریداسیون اوربیتال‌های N-2p با Al-3p و In-5p همراه است. همچنین، پاسخ الکترونی سیستم به جایشانی گاليم با آلومينيوم و اينديوم، به نوع فاز بلوری وابسته بود. این نتایج نشان می‌دهد جایشانی کنترل‌شده GaN روشی مؤثر برای بهینه‌سازی خواص الکترونی در کاربردهای اپتوالکترونیکی نظیر دیودهای نورگسیل، لیزرهای نیم‌رسانا، آشکارسازهای فرابنفش و ترانزیستورهای توان بالا است. واژه‌های کلیدی: GaN، ورتسایت، زینک بلند، نظریه تابعی چگالی، خواص الکترونی، اينديوم، آلومينيوم

Study of the Structural and Electronic Properties of Al- and In-Alloyed GaN in the Wurtzite and Zinc-Blende Phases Using Density Functional Theory

Narges Arabhajji¹, Tayebah Movlaroooy^{1*}, Fatemeh Badieian Baghsiyahi²

¹ Faculty of Physics, Shahrood University of Technology

² Faculty of Engineering, Kosar University of Bojnord

*Corresponding's email: web2_tayebah.movlaroooy@shahroodut.ac.ir

Abstract

Structural and electronic properties of pristine GaN and its alloys with Al and In were investigated using density functional theory (DFT). The results reveal that pristine GaN exhibits a direct band gap in both crystal phases, with the wurtzite phase possessing wider band gap than zinc-blende. Aluminum alloying reduces lattice parameters and increases band gap, whereas indium leads to lattice expansion and a reduction in band gap. Analysis of band structure and density of states revealed that these variations are accompanied by electronic-state rearrangement and changes in the hybridization between N-2p and Al-3p or In-5p orbitals. Furthermore, the electronic response of system to doping was found to depend strongly on the crystal phase. These findings demonstrate that controlled doping of GaN with Al and In provides an effective approach for tailoring electronic properties of GaN, making it a promising material for advanced optoelectronic applications and high-power devices.

Keywords: Gallium nitride (GaN); Wurtzite and Zinc-Blende, Density functional theory (DFT); Electronic properties; Indium; Aluminum.

مقدمه

نیمرساناهای گروه III-نیتريد شامل نیتريد گاليم (GaN)، نیتريد آلومينيوم (AlN) و نیتريد اينديوم (InN) در دو دهه اخير به دليل ويژگي‌های منحصر به فرد ساختاری، الکترونی و اپتوالکترونی، توجه گسترده‌ای را در تحقیقات بنیادی و کاربردی به خود جلب کرده‌اند [۱-۴]. این مواد به واسطه گاف انرژی مستقیم، پایداری حرارتی بالا، میدان شکست الکتریکی بزرگ، هدایت حرارتی مناسب و مقاومت در برابر تابش، به عنوان مهم‌ترین نیمرساناهای نسل سوم شناخته می‌شوند [۵-۷]. در میان این ترکیبات، GaN جایگاه ویژه‌ای دارد، زیرا مبنای ساخت طیف گسترده‌ای از ادوات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی از جمله دیودهای نورگسیل (LED) آبی و فرابنفش، دیودهای لیزری، آشکارسازهای نوری، ترانزیستورهای توان بالا و تجهیزات مخابرات فرکانس بالا محسوب می‌شود [۸-۱۰].

GaN به طور طبیعی در ساختار بلوری Wurtzite ورتسایت (WZ) پایدار است، در حالی که فاز مکعبی Zinc-blende (ZB) به صورت شبه‌پایدار قابل رشد می‌باشد [۱۱-۱۲]. تفاوت در تقارن بلوری این دو فاز منجر به تغییرات قابل توجهی در ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و نوری ماده می‌شود. ساختار ورتسایت دارای تقارن شش‌گوشه و گروه فضایی

P63mc است، در حالی که ساختار زینک‌بلند دارای تقارن مکعبی و گروه فضایی F-43m می‌باشد [۱۳]. اگرچه هر دو فاز از پیوندهای غالباً کووالانسی Ga-N تشکیل شده‌اند، اما تفاوت در آرایش اتمی و طول پیوندها باعث ایجاد اختلاف در چگالی حالات الکترونی، ساختار نواری و مقدار گاف انرژی می‌شود [۱۴-۱۵].

مطالعات تجربی و نظری متعددی نشان داده‌اند که گاف انرژی مستقیم GaN در فاز ورتسایت در دمای اتاق حدود 3.4(eV) است، در حالی که این مقدار در فاز زینک‌بلند اندکی کوچک‌تر گزارش شده است [۱۶-۱۷]. این اختلاف ناشی از تفاوت در میدان بلوری و برهم‌کنش‌های الکترونی در دو ساختار می‌باشد. علاوه بر این، ساختار ورتسایت به دلیل وجود قطبش خودبه‌خودی و پیزوالکتریسیته ذاتی، رفتارهای الکترونی و انتقال بار متفاوتی نسبت به فاز مکعبی از خود نشان می‌دهد [۱۹-۱۸]. وجود این ویژگی‌ها موجب شده است که بررسی مقایسه‌ای خواص دو فاز بلوری GaN همواره یکی از موضوعات مهم در فیزیک حالت جامد و مهندسی نیم‌رساناها باشد.

در سال‌های اخیر استفاده از روش‌های محاسباتی مبتنی بر نظریه تابعی چگالی نقش بسیار مهمی در مطالعه ویژگی‌های مواد نیم‌رسانا ایفا کرده است [۲۰-۲۱]. این روش‌ها امکان بررسی دقیق پارامترهای ساختاری شامل ثابت شبکه، حجم سلول واحد، مدول حجمی و انرژی پایدارسازی را فراهم می‌کنند. علاوه بر این، ساختار نواری، چگالی حالات کل و جزئی، توزیع بار الکترونی و سایر ویژگی‌های الکترونی نیز با دقت قابل قبولی، قابل محاسبه هستند [۲۲-۲۳]. به دلیل دشواری رشد نمونه‌های کاملاً خالص و کنترل دقیق ناخالصی‌ها در آزمایشگاه، محاسبات اصول اولیه به ابزاری ارزشمند برای پیش‌بینی رفتار مواد تبدیل شده‌اند [۲۴].

یکی از راهکارهای مهم برای بهبود عملکرد GaN در ادوات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی، مهندسی ساختار نواری از طریق آلیاژسازی یا ورود ناخالصی‌های کنترل شده است [۲۵]. در این راستا، عناصر آلومینیوم (Al) و ایندیوم (In) به عنوان مهم‌ترین عناصر جانشینی در شبکه GaN شناخته می‌شوند. جایگزینی بخشی از اتم‌های گالیوم (Ga) با اتم‌های Al منجر به تشکیل آلیاژ نیتريد گالیوم آلومینیوم (AlGaIn) شده و در مقابل جایگزینی آن‌ها با اتم‌های In باعث تشکیل آلیاژ نیتريد گالیوم ایندیوم (InGaIn) می‌شود [۲۶-۲۷]. این آلیاژها امروزه اساس فناوری LEDهای رنگی و لیزرهای نیم‌رسانا را تشکیل می‌دهند. به دلیل کوچک‌تر بودن شعاع کووالانسی Al نسبت به Ga ($Al(1.21 \text{ \AA}) \approx Ga(1.22 \text{ \AA}) > In(1.42 \text{ \AA})$)، ورود اتم‌های Al به شبکه بلوری GaN معمولاً موجب کاهش پارامترهای شبکه و افزایش استحکام پیوندهای شیمیایی می‌شود [۲۸]. این موضوع سبب افزایش گاف انرژی و جابه‌جایی لبه جذب به سمت ناحیه فرابنفش می‌گردد [۲۹]. از سوی دیگر، Al دارای الکترون‌گاتیوی متفاوتی نسبت به Ga است و می‌تواند توزیع بار الکترونی و قطبش پیوندها را نیز تغییر دهد [۳۰]. در نتیجه، بررسی تأثیر ناخالصی Al بر ساختار نواری و چگالی حالات الکترونی GaN برای طراحی ادوات فرابنفش و ترانزیستورهای توان بالا اهمیت فراوانی دارد.

در مقابل، اتم‌های In دارای شعاع اتمی بزرگ‌تر و انرژی پیوندی کمتر نسبت به Ga هستند [۳۱]. جایگزینی In در شبکه GaN موجب افزایش پارامترهای شبکه و کاهش گاف انرژی می‌شود [۳۲]. این ویژگی امکان تنظیم طول موج نشر را در گستره وسیعی از نور مرئی تا فرابنفش فراهم می‌کند [۳۳]. به همین دلیل آلیاژهای InGaN در ساخت LEDهای سبز، آبی و سفید نقش کلیدی ایفا می‌کنند [۳۴]. با این حال، اختلاف قابل توجه اندازه اتمی میان In و Ga منجر به ایجاد تنش شبکه‌ای، تغییرات موضعی در ساختار الکترونی و پیچیدگی‌های متعددی در رفتار الکترونی این مواد می‌شود [۳۵].

مطالعات متعددی نشان داده‌اند که ورود ناخالصی‌های Al و In نه تنها مقدار گاف انرژی را تغییر می‌دهد، بلکه بر چگالی حالات الکترونی، جرم مؤثر حامل‌ها، موقعیت تراز فرمی و توزیع بار الکترونی نیز تأثیرگذار است [۳۶-۳۸]. علاوه بر این، تأثیر این ناخالصی‌ها در دو فاز ورتسایت و زینک‌بلند یکسان نیست و وابستگی شدیدی به تقارن بلوری و محیط شیمیایی اتم‌های مجاور دارد [۳۹]. بنابراین مطالعه همزمان اثر ناخالصی‌ها در هر دو فاز می‌تواند دیدگاه جامع‌تری از سازوکارهای حاکم بر خواص الکترونی این ماده ارائه دهد.

از منظر نظری، بررسی تغییرات ساختاری ناشی از جانشینی اتم‌های Al و In در شبکه GaN می‌تواند اطلاعات ارزشمندی درباره پایداری فازها، تغییرات انرژی کل، انرژی تشکیل و مکانیزم برهم‌کنش‌های اتمی فراهم کند [۴۰]. همچنین تحلیل ساختار نواری و چگالی حالات، امکان شناسایی سهم اوربیتال‌های مختلف در تشکیل نوارهای ظرفیت و رسانش را فراهم می‌آورد [۴۱]. این اطلاعات در طراحی مواد نیم‌رسانای جدید با خواص مهندسی‌شده اهمیت فراوانی دارند.

با وجود مطالعات گسترده انجام شده بر روی GaN و آلیاژهای مبتنی بر آن، هنوز مقایسه سیستماتیک اثر ناخالصی‌های Al و In بر خواص ساختاری و الکترونی GaN در دو فاز ورتسایت و زینک‌بلند به طور کامل روشن نشده است. بسیاری از پژوهش‌های موجود تنها بر یکی از فازها متمرکز بوده یا تأثیر ناخالصی‌ها را در تراکم‌های محدود بررسی کرده‌اند. از این رو انجام مطالعات اصول اولیه با هدف مقایسه مستقیم این دو فاز و تحلیل تغییرات ناشی از ناخالصی‌های Al و In می‌تواند درک عمیق‌تری از رفتار این مواد فراهم نماید.

در پژوهش حاضر، خواص ساختاری و الکترونی GaN خالص در دو ساختار بلوری ورتسایت و زینک‌بلند با استفاده از محاسبات اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین اثر جانشینی اتم‌های Al و In در شبکه بلوری بر پارامترهای ساختاری، ساختار نواری و چگالی حالات الکترونی مورد بررسی و مقایسه قرار می‌گیرد. نتایج حاصل می‌تواند در طراحی و بهینه‌سازی مواد نیم‌رسانای مبتنی بر III-N برای کاربردهای الکترونیکی و اپتوالکترونیکی پیشرفته مورد استفاده قرار گیرد.

روش بررسی

محاسبات ساختاری و الکترونی با استفاده از نظریه تابعی چگالی با کد محاسباتی SIESTA انجام شده است. برای توصیف اثرات تبادلی-همبستگی از تقریب چگالی موضعی (LDA) استفاده شد. برهم کنش میان الکترون‌های ظرفیت و هسته‌های اتمی نیز به کمک شبه‌پتانسیل‌های پایستار نرم در قالب فاکتورگیری ترولیر-مارتینز مدل‌سازی گردید، در این روش الکترون‌های هسته به صورت صریح در بخش والانس وارد نمی‌شوند و اثر آن‌ها از طریق شبه‌پتانسیل مؤثر لحاظ می‌شود. شبه‌پتانسیل‌های مورد استفاده با انتخاب پیکربندی‌های والانس مناسب برای عناصر سازنده تولید/به‌کارگیری شدند و حالت‌های نیمه‌هسته‌ای d در صورت قرارگرفتن در ناحیه والانس در تعریف شبه‌پتانسیل لحاظ می‌شوند. برای توصیف تابع موج از اوربیتال‌های عددی اتمی موضعی با مجموعه پایه دوگانه قطبیده (DZP) استفاده شد؛ DZP شامل دو تابع شعاعی برای هر اوربیتال والانس به علاوه توابع قطبشی است و انعطاف‌پذیری مجموعه پایه را در محیط شیمیایی فراهم می‌کند. سهم اوربیتال‌های مختلف، از جمله $N-2p$ ، $Ga-4s/4p$ ، $Al-3p$ و $In-5s/5p$ و همچنین حالت‌های d نیمه‌هسته‌ای، در تحلیل DOS/PDOS بررسی شد و از نسبت‌دادن تغییرات گاف به یک اوربیتال منفرد اجتناب گردید.

ابتدا ساختارهای بلوری GaN در دو فاز ورتسایت و زینک‌بلند به طور کامل بهینه‌سازی شدند. بهینه‌سازی هندسی با استفاده از الگوریتم گرادیان مزدوج (CG) انجام گرفت و فرآیند محاسبات تا زمانی ادامه یافت که نیروهای وارد بر هر اتم به کمتر از $0.01(eV/\text{\AA})$ و تغییرات انرژی کل به کمتر از $10^{-5}(eV)$ برسد. برای انتگرال‌گیری در ناحیه بریلوئن از شبکه نقاط ویژه مونخورست-پک استفاده شد و بردار نقاط k بهینه برای ساختار زینک‌بلند و ورتسایت به ترتیب $4 \times 4 \times 5$ و $4 \times 4 \times 4$ در نظر گرفته شد. همچنین انرژی قطع شبکه برای ساختار زینک‌بلند و ورتسایت به ترتیب ۳۰۰ و ۵۰۰ ری‌دبرگ در نظر گرفته شد تا دقت کافی در محاسبه چگالی بار الکترونی فراهم گردد. پارامترهای شبکه و مختصات اتمی به طور همزمان بهینه شدند تا ساختار تعادلی هر فاز به دست آید.

برای بررسی اثر جانشینی، ابرسلول‌هایی از ساختارهای بهینه شده ایجاد شد و بخشی از جایگاه‌های کاتیونی Ga یا Al یا In جایگزین گردید. تراکم آلیاژی از رابطه $x = N_x / (N_{Ga} + N_x)$ تعیین شد که در آن N_x اتم‌های Al یا In جایگزین شده و مخرج تعداد کل جایگاه‌های کاتیونی است. تراکم‌های ۰، ۰.۲۵، ۰.۵، ۰.۷۵ و ۱۰۰ درصد با تعداد مناسب جایگاه‌های جانشین در ابرسلول‌های متناظر شبیه‌سازی شدند. در هر تراکم، آرایش اتم‌های جانشین مطابق ساختار ابرسلول استفاده شده در محاسبات انتخاب و سپس تمام مختصات اتمی و پارامترهای شبکه بازبهینه‌سازی شد تا کرنش موضعی، تغییر طول پیوندها و بازآرایی اطراف اتم‌های Al یا In لحاظ شود. از آنجا که یک ابرسلول منفرد نماینده همه آرایش‌های ممکن در یک آلیاژ تصادفی نیست، نتایج هر تراکم به آرایش اتمی مشخص محاسبه شده وابسته است و مقایسه گاف‌ها در این مقاله باید به عنوان مقایسه بین همین پیکربندی‌های محاسباتی تفسیر شود.

خواص ساختاری

سلول واحد GaN در در فاز ورتسایت دارای ۴ اتم که حاوی ۲ اتم گالیوم و ۲ اتم نیتروژن، و در فاز زینک بلند دارای ۸ اتم که حاوی ۴ اتم گالیوم و ۴ اتم نیتروژن می باشد. برای آلیاژسازی جانشینی GaN با درصد های مختلف Al و In ابرسلول های متناسب هر آلیاژسازی انتخاب شدند. در فاز ورتسایت، برای تراکم 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 تراکم 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 تراکم 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، یک ابرسلول زینک بلند (۲×۲×۲) با ۶۴ اتم در نظر گرفته شد که حاوی ۳۲ اتم گالیوم و ۳۲ اتم نیتروژن می باشد. برای تراکم های ۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۶/۲۵٪ به ترتیب ۸، ۴ و ۲ اتم ناخالصی جایگزین اتم های گالیوم شدند.

در نخستین گام، ساختارهای بلوری GaN، $Al_xGa_{1-x}N$ و $In_xGa_{1-x}N$ در دو فاز ورتسایت و زینک بلند به طور کامل بهینه سازی شدند. مقادیر و تغییرات ثابت های شبکه بر حسب تراکم ناخالصی پس از بهینه سازی در جدول ۱ ارائه و در شکل ۱ رسم شده اند. نتایج نشان می دهد که ورود ناخالصی های جانشینی Al و In موجب تغییرات قابل توجهی در ساختار بلوری می شود. در آلیاژهای $Al_xGa_{1-x}N$ با افزایش درصد آلومینیوم، پارامترهای شبکه روندی کاهشی از خود نشان می دهند. این رفتار به کوچک تر بودن شعاع اتمی Al نسبت به Ga مربوط می شود. در نتیجه، جایگزینی تدریجی Al به جای Ga موجب کاهش طول پیوندهای فلز-نیتروژن و انقباض شبکه بلوری می شود. برعکس، در آلیاژهای $In_xGa_{1-x}N$ افزایش تراکم In باعث افزایش پارامترهای شبکه و حجم سلول یک می شود، زیرا شعاع اتمی In به طور قابل توجهی بزرگ تر از شعاع اتمی Ga است.

روند تغییر پارامترهای شبکه با ترکیب شیمیایی در محدوده بررسی شده به رفتار وگارد نزدیک است. قانون وگارد بیان می کند که پارامتر شبکه آلیاژ دوتایی می تواند به صورت ترکیب خطی پارامترهای شبکه دو ترکیب انتهایی نوشته شود. برای یک آلیاژ دوتایی $(Ga_{1-x}X_xN)$ ، که در آن X می تواند Al یا In باشد، رابطه خطی متناظر با قانون وگارد به صورت زیر در نظر گرفته می شود:

$$a(x) = (1-x)a_{GaN} + xa_{XN}$$

که در آن a_{GaN} و a_{XN} پارامترهای شبکه ترکیبات انتهایی و x کسر مولی Al یا In هستند. داده های جدول ۱ روندی نزدیک به این رفتار را نشان می دهند، اما انحراف از خطی بودن می تواند ناشی از کرنش موضعی، تغییر طول پیوندها و بازآرایی ساختاری باشد.

بر اساس داده‌های ارائه شده در جدول ۱، با افزایش مقدار Al پارامتر شبکه روند کاهشی و با افزایش مقدار In روند افزایشی نشان می‌دهد. نکته مهم آن است که تغییرات ساختاری مشاهده شده صرفاً یک ویژگی هندسی نیست، بلکه تأثیر مستقیمی بر ساختار الکترونی سیستم دارد. کاهش فاصله بین اتمی در $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ موجب افزایش همپوشانی اوربیتال‌ها و تقویت برهم‌کنش‌های پیوندی می‌شود، در حالی که افزایش فاصله بین اتمی در $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ باعث کاهش همپوشانی اوربیتالی و تضعیف برهم‌کنش‌های پیوندی خواهد شد. بنابراین انتظار می‌رود که روند تغییرات گاف انرژی با رفتار ساختاری آلیاژها ارتباط مستقیمی داشته باشد.

ساختار نواری و چگالی حالت‌های GaN خالص

منطقه اول بریلوین با نقاط تقارن بالا برای ساختار زینک‌بلند و ورتسایت GaN در شکل ۲ نشان داده شده است. ساختار نواری در راستای این نقاط پرتقارن رسم شده است. ساختار نواری و چگالی حالت‌های محاسبه شده برای GaN خالص در دو فاز ورتسایت و زینک‌بلند در شکل‌های ۳ و ۴ نشان داده شده است. نتایج حاکی از آن است که هر دو فاز دارای گاف انرژی مستقیم هستند و بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش در نقطه Γ قرار دارد. این ویژگی دلیل اصلی استفاده گسترده GaN در دیودهای نشر نور، لیزرهای نیم‌رسانا و آشکارسازهای نوری است. گاف انرژی به دست آمده مطابق جدول ۲ برای فاز ورتسایت برابر 2.15 eV و برای فاز زینک‌بلند برابر 1.72 eV است. اگرچه این مقادیر از داده‌های تجربی کمتر هستند، اما چنین رفتاری یکی از ویژگی‌های شناخته شده تقریب LDA محسوب می‌شود. در واقع تقریب LDA به دلیل توصیف ناکامل برهم‌کنش تبدیلی-همبستگی معمولاً گاف انرژی نیم‌رساناها را کمتر از مقدار واقعی پیش‌بینی می‌کند. با وجود این، روند تغییرات ساختار نواری و جایگاه نسبی نوارها به خوبی با مطالعات نظری پیشین مطابقت دارد. مقایسه دو فاز نشان می‌دهد که فاز ورتسایت دارای گاف انرژی بزرگ‌تری از فاز زینک‌بلند است. این اختلاف را می‌توان به تفاوت تقارن، محیط پیوندی، میدان بلوری و هیبریداسیون اوربیتال‌ها نسبت داد. برای درک منشأ فیزیکی حالت‌های الکترونی، چگالی حالت‌های جزئی نیز مورد بررسی قرار گرفت (شکل ۱ فایل ضمیمه). نتایج نشان می‌دهد که قسمت بالایی نوار ظرفیت عمدتاً از اوربیتال‌های N-2p تشکیل شده است، در حالی که ناحیه پایینی نوار رسانش تحت تأثیر اوربیتال‌های 4s و 4p قرار دارد. حضور همپوشانی قابل توجه میان این اوربیتال‌ها بیانگر هیبریداسیون قوی اوربیتال N-2p و Ga-4p است که نقش اصلی را در تشکیل پیوندهای کووالانسی شبکه ایفا می‌کند.

مقایسه دو فاز نشان می‌دهد که فاز ورتسایت دارای گاف انرژی بزرگ‌تری نسبت به فاز زینک‌بلند است. این تفاوت از اثر میدان بلوری، ناهمسانگردی ساختاری و تفاوت در شدت هیبریداسیون اوربیتال‌ها ناشی می‌شود. در ساختار ورتسایت، تقارن پایین‌تر و میدان بلوری قوی‌تر سبب افزایش جدایی انرژی بین نوار ظرفیت و رسانش شده و در نتیجه گاف انرژی بزرگ‌تری ایجاد می‌کند.

اثر آلیاژ

شکل‌های ۵ و ۶ به ترتیب تغییرات ساختار نواری آلیاژهای $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ و $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ را برای تراکم‌های مختلف نشان

می‌دهند. مقادیر گاف انرژی بر حسب eV برای آلیاژهای $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ و $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ در دو ساختار ورتسایت و زینک‌بلند به ترتیب در جداول ۳ و ۴ خلاصه و با نتایج مقالات مقایسه شده است.

نتایج نشان می‌دهد که با افزایش درصد Al، گاف انرژی در هر دو فاز در مجموع روند افزایشی دارد، اگرچه در تراکم‌های پایین یک کاهش جزئی مشاهده می‌شود، در حالی که ماهیت مستقیم گاف حفظ می‌شود. این رفتار غیریکنواخت اولیه می‌تواند ناشی از بازآرایی موضعی ساختار، کرنش ناشی از جانشینی و تغییرات هیبریداسیون اوربیتال‌ها باشد. در تراکم‌های بالاتر، روند کلی افزایش گاف غالب می‌شود. افزایش گاف انرژی در $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ریشه در دو عامل اساسی دارد. نخست آنکه ترکیب مرجع AlN دارای گاف انرژی بسیار بزرگ‌تری نسبت به GaN است. بنابراین افزایش تراکم Al به تدریج ساختار الکترونی سیستم را به ویژگی‌های AlN نزدیک می‌کند. دوم آنکه کاهش ثابت شبکه و کوتاه‌تر شدن طول پیوندها موجب افزایش همپوشانی اوربیتال‌های شرکت‌کننده در پیوند شده و شکافگی بین حالت‌های پیوندی و ضدپیوندی را افزایش می‌دهد.

رفتار آلیاژهای $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ کاملاً متفاوت از $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ است. نتایج نشان می‌دهد که افزایش تراکم In موجب کاهش پیوسته گاف انرژی در هر دو فاز می‌شود و در $x=1$ ، یعنی InN خالص، مقدار محاسبه شده در جدول ۴ به صفر می‌رسد. این مقدار صفر

برای InN خالص در $x=1$ به معنای آن نیست که InN واقعی الزاماً یک فلز با گاف بنیادی دقیقاً صفر است. این مقدار نشان‌دهنده بسته شدن گاف انرژی کوهن-شم در چارچوب LDA، مجموعه پایه و ساختار محاسباتی حاضر است. با افزایش x ، ساختار الکترونی آلیاژ به سمت InN خالص تغییر می‌کند و هم‌زمان تغییر پارامترهای شبکه، کرنش موضعی و ماهیت اوربیتال‌های In باعث تغییر موقعیت نسبی لبه‌های نوار ظرفیت و رسانش می‌شود. در نتیجه، گاف محاسبه شده با افزایش x کاهش یافته و در $x=1$ در محاسبات حاضر به مقدار صفر می‌رسد. در $x=1$ دیگر توصیف «نیمه‌رسانای دارای گاف مستقیم» مناسب نیست، زیرا بیشینه نوار ظرفیت (VBM) و کمینه نوار رسانش (CBM) در چارچوب محاسبه حاضر به یک گاف غیرصفر جدا نشده‌اند. برای تعیین دقیق‌تر گاف InN استفاده از تابعی‌های هیبریدی یا روش GW مناسب‌تر است.

چگالی حالت‌های (DOS) این آلیاژها نیز به ترتیب در شکل‌های ۷ و ۸ نشان داده شده‌اند. بررسی نمودار چگالی حالت‌ها نشان می‌دهد که با افزایش درصد Al، لبه نوار رسانش به سمت انرژی‌های بالاتر جابه‌جا می‌شود، در حالی که تغییرات نوار ظرفیت نسبتاً محدود باقی می‌ماند. این موضوع نشان می‌دهد که افزایش گاف انرژی عمدتاً ناشی از تغییر موقعیت نوار رسانش است.

با توجه به زیاد بودن منحنی‌های چگالی حالت‌های جزئی، به عنوان نمونه چگالی حالت‌های جزئی محاسبه شده برای آلیاژهای $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ و $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ در ساختار زینک‌بلند در شکل‌های ۹ و ۱۰ آورده شده است و بقیه منحنی‌های چگالی حالت‌های جزئی برای تمام ترکیبات و ساختارهای مختلف در فایل پیوست در شکل‌های ۲ تا ۵ پیوسته ارائه شده است. منحنی‌های چگالی حالت‌های جزئی حاکی از آن است که سهم اوربیتال‌های Al-3p در تشکیل نوار رسانش به تدریج افزایش یافته و نقش غالب‌تری در ساختار الکترونی سیستم پیدا می‌کند.

از دیدگاه کاربردی، افزایش گاف انرژی موجب انتقال آستانه جذب و نشر به سمت طول موج‌های کوتاه‌تر می‌شود. بنابراین

آلیاژهای غنی از Al برای ساخت آشکارسازهای فرابنفش، LEDهای UV و ادوات الکترونیک توان بالا بسیار مناسب هستند. بررسی چگالی حالتها نشان می‌دهد که حالت‌های مشتق شده از اوربیتال‌های In-5s و In-5p به تدریج در نزدیکی کمینه نوار رسانش ظاهر می‌شوند. حضور این حالت‌ها موجب انتقال نوار رسانش به سمت انرژی‌های پایین‌تر و کاهش گاف انرژی می‌شود. در تراکم‌های بالاتر، مشارکت اوربیتال‌های In-4d نیز افزایش می‌یابد که بیانگر نقش فعال In در تعیین ویژگی‌های الکترونی سیستم است.

مقایسه تغییرات ساختار الکترونی در دو فاز

برای مقایسه کمی اثر دو ناخالصی، تغییرات گاف انرژی بر حسب تراکم ناخالصی در شکل ۱۱ ترسیم شده است. نتایج نشان می‌دهد که Al و In اثراتی کاملاً متضاد بر ساختار الکترونی GaN دارند. Al با افزایش انرژی نوار رسانش و کاهش ثابت شبکه موجب افزایش گاف انرژی می‌شود، در حالی که In با افزایش فاصله‌های بین اتمی و ایجاد حالت‌های الکترونی کم‌انرژی در ناحیه رسانش، گاف انرژی را کاهش می‌دهد. در اکثر ترکیبات مورد مطالعه، گاف انرژی فاز ورته‌سایت از فاز زینک‌بلند بزرگ‌تر است. این موضوع نشان می‌دهد که علاوه بر ترکیب شیمیایی، نوع فاز بلوری نیز پارامتر مهمی در مهندسی خواص الکترونی محسوب می‌شود. به بیان دیگر، کنترل همزمان فاز بلوری و تراکم ناخالصی می‌تواند ابزار مؤثری برای تنظیم دقیق ویژگی‌های الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مواد III-N باشد.

بر اساس نتایج به دست آمده می‌توان نتیجه گرفت که آلیاژهای AlGaN برای کاربردهای فرابنفش و ادوات توان بالا مناسب‌تر هستند، در حالی که آلیاژهای InGaN به دلیل گاف انرژی کوچک‌تر، گزینه مطلوبی برای ساخت LED، لیزرهای نیم‌رسانا و سلول‌های خورشیدی به شمار می‌روند. بنابراین، مهندسی ترکیب شیمیایی در این خانواده از نیم‌رساناها، راهکاری مؤثر برای طراحی مواد با خواص هدفمند در کاربردهای نوین اپتوالکترونیکی محسوب می‌شود.

برداشت

در این پژوهش، خواص ساختاری و الکترونی GaN خالص و همچنین اثر ناخالصی‌های Al و In با تراکم‌های ۰، ۶/۲۵، ۱۲/۵، ۲۵ و ۱۰۰ درصد در هر دو فاز ورته‌سایت و زینک‌بلند با استفاده از نظریه تابعی چگالی و در چارچوب تقریب چگالی موضعی به کمک کد محاسباتی SIESTA مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج محاسبات نشان داد که GaN خالص در هر دو فاز ورته‌سایت و زینک‌بلند دارای گاف انرژی مستقیم است و مقدار محاسبه شده در WZ بزرگ‌تر از ZB است، اما هر دو مقدار به‌طور قابل توجهی کمتر از داده‌های تجربی‌اند. بنابراین این گاف‌ها به‌عنوان مقادیر گاف انرژی الکترونی کوهن-شم و نه گاف اپتیکی تجربی تفسیر شدند. بررسی اثر ناخالصی‌ها نشان داد که Al و In اثرات کاملاً متفاوتی بر ساختار الکترونی سیستم

دارند. افزایش تراکم Al موجب کاهش پارامتر شبکه و افزایش تدریجی گاف انرژی می‌شود، در حالی که افزایش In باعث انبساط شبکه و کاهش گاف انرژی می‌گردد. تحلیل DOS و PDOS نشان داد که این رفتار مستقیماً به تغییرات هیبریداسیون میان اوربیتال‌های N-2p با اوربیتال‌های Al-3p و In-5p مربوط است. همچنین در تمام تراکم‌های بررسی‌شده ماهیت مستقیم گاف انرژی حفظ شد که نشان‌دهنده مناسب بودن این آلیاژها برای کاربردهای اپتوالکترونیکی است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که کنترل نوع و تراکم ناخالصی روی مؤثر برای بررسی و کنترل روند تغییرات ساختار الکترونی در خانواده نیمرساناهای III-N و طراحی ادوات نوری در محدوده فرابنفش تا مرئی است. این ویژگی امکان استفاده هدفمند از این مواد را در طراحی و بهینه‌سازی ادوات نیمرسانایی پیشرفته فراهم می‌سازد.

مراجع

- [1] Isik C. Kizilyalli, Jung Han, James S. Speck, Eric P. Carlson, "Gallium Nitride and Related Materials, Device Processing and Materials Characterization for Power Electronics Applications", Springer, 2025.
- [2] Abd Rahman, M.N., Yusuf, Y., Zainal, N. et al. Enhanced stress relaxation of GaN epilayers on silicon (1 1 1) substrates with a unique AlN/GaN multilayer design. J Mater Sci 60, 12519–12528 (2025). <https://doi.org/10.1007/s10853-025-10973-9>
- [3] David, A., Grandjean, N. The physics of GaN-based light-emitting diodes. Nat Rev Phys (2026). <https://doi.org/10.1038/s42254-026-00949-2>
- [4] Ardaravičius, L., Kiprijanovič, O., Šermukšnis, E. et al. Electron transport in 2DEG AlGaIn/GaN, AlGaIn/AlN/GaN and 3D GaN channels under a strong electric field. Appl. Phys. A 130, 725 (2024). <https://doi.org/10.1007/s00339-024-07882-0>
- [5] Van de Walle, C. G. "Band Lineups and Deformation Potentials in the Model-Solid Theory." Physical Review B, Vol. 39, No. 3, pp. 1871–1883, 1989.
- [6] Mishra, U. K., Shen, L., Kazior, T. E., Wu, Y. F. "GaN-Based RF Power Devices and Amplifiers." Proceedings of the IEEE, Vol. 96, No. 2, pp. 287–305, 2008.
- [7] Nakamura, S., Fasol, G. The Blue Laser Diode: GaN Based Light Emitters and Lasers. Springer-Verlag, Berlin, 1997.
- [8] Ponce, F. A., Bour, D. P. "Nitride-Based Semiconductors for Blue and Green Light-Emitting Devices." Nature, Vol. 386, pp. 351–359, 1997.
- [9] Morkoç, H. Handbook of Nitride Semiconductors and Devices. Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2008.
- [10] Johnson, J. W., Chini, A., Ueda, T., et al. "High-Performance AlGaIn/GaN HFETs for Microwave Power Applications." IEEE Electron Device Letters, Vol. 25, No. 7, pp. 459–461, 2004.
- [11] Wright, A. F. "Elastic Properties of Zinc-Blende and Wurtzite AlN, GaN, and InN." Journal of Applied Physics, Vol. 82, No. 6, pp. 2833–2839, 1997.
- [12] Strite, S., Morkoç, H. "GaN, AlN, and InN: A Review." Journal of Vacuum Science & Technology B, Vol. 10, No. 4, pp. 1237–1266, 1992.
- [13] Yeh, C. Y., Lu, Z. W., Froyen, S., Zunger, A. "Zinc-Blende-Wurtzite Polytypism in Semiconductors." Physical Review B, Vol. 46, No. 16, pp. 10086–10097, 1992.
- [14] Li, X. Z., Qian, Y., Wang, C. Y., et al. "First-Principles Investigation of Structural and Electronic Properties of GaN." Physics Letters A, Vol. 337, Issues 4–6, pp. 286–292, 2005.
- [15] Qin, H., Chen, L., Wang, Y., et al. "First-Principles Study of Structural, Electronic and Optical Properties of GaN." Materials, Vol. 10, Article 1392, 2017.
- [16] Rubio, A., Corkill, J. L., Cohen, M. L. "Theory of Wurtzite Structure Semiconductors." Physical Review B, Vol. 49, No. 7, pp. 5081–5084, 1994.
- [17] Diakité, Y. I., Traoré, B., et al. "Structural and Electronic Properties of GaN: A First-Principles Study." Journal of Modern Physics, Vol. 5, pp. 2192–2201, 2014.

- [18] Bernardini, F., Fiorentini, V., Vanderbilt, D. "Spontaneous Polarization and Piezoelectric Constants of III-V Nitrides." *Physical Review B*, Vol. 56, No. 16, pp. R10024–R10027, 1997.
- [19] Fiorentini, V., Bernardini, F., Ambacher, O. "Evidence for Macroscopic Polarization in III-V Nitride Heterostructures." *Physical Review B*, Vol. 60, No. 12, pp. 8849–8858, 1999.
- [20] Hohenberg, P., Kohn, W. "Inhomogeneous Electron Gas." *Physical Review*, Vol. 136, No. 3B, pp. B864–B871, 1964.
- [21] Kohn, W., Sham, L. J. "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects." *Physical Review*, Vol. 140, No. 4A, pp. A1133–A1138, 1965.
- [22] Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M. "Generalized Gradient Approximation Made Simple." *Physical Review Letters*, Vol. 77, No. 18, pp. 3865–3868, 1996.
- [23] Payne, M. C., Teter, M. P., Allan, D. C., Arias, T. A., Joannopoulos, J. D. "Iterative Minimization Techniques for Ab Initio Total-Energy Calculations." *Reviews of Modern Physics*, Vol. 64, No. 4, pp. 1045–1097, 1992.
- [24] Van Camp, P. E., Van Doren, V., Devreese, J. T. "Electronic Structure Calculations of III-V Semiconductors." *Physical Review B*, Vol. 44, No. 17, pp. 9056–9065, 1991.
- [25] Vurgaftman, I., Meyer, J. R. "Band Parameters for Nitrogen-Containing Semiconductors." *Journal of Applied Physics*, Vol. 94, No. 6, pp. 3675–3696, 2003.
- [26] Stringfellow, G. B. "Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice." *Journal of Crystal Growth*, Vol. 68, pp. 111–118, 1999.
- [27] Piprek, J. "Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation." *Reports on Progress in Physics*, Vol. 73, 2010.
- [28] Wei, S. H., Zunger, A. "Valence Band Splittings and Band Offsets of AlN, GaN, and InN." *Applied Physics Letters*, Vol. 69, No. 18, pp. 2719–2721, 1996.
- [29] Yam, F. K., Hassan, Z. "Innovative Advances in Nitride Semiconductor Devices." *Superlattices and Microstructures*, Vol. 43, No. 1, pp. 1–23, 2008.
- [30] Kanoun, M. B., Goumri-Said, S., Merad, A. E. "Electronic Structure of AlGaIn Alloys: First-Principles Study." *Semiconductor Science and Technology*, Vol. 19, No. 10, pp. 1225–1231, 2004.
- [31] Moses, P. G., Van de Walle, C. G. "Band Bowing and Band Alignment in InGaIn Alloys." *Applied Physics Letters*, Vol. 96, 021908, 2010.
- [32] Vurgaftman, I., Meyer, J. R., Ram-Mohan, L. R. "Band Parameters for III–V Compound Semiconductors and Their Alloys." *Journal of Applied Physics*, Vol. 89, No. 11, pp. 5815–5875, 2001.
- [33] Wu, J. "When Group-III Nitrides Go Infrared: New Properties and Perspectives." *Journal of Applied Physics*, Vol. 106, 011101, 2009.
- [34] Nakamura, S. "Nobel Lecture: Background Story of the Invention of Efficient Blue InGaIn Light Emitting Diodes." *Reviews of Modern Physics*, Vol. 87, pp. 1139–1151, 2015.
- [35] Chichibu, S. F., Wada, K., Nakamura, S. "Spatially Resolved Cathodoluminescence Spectra of InGaIn Quantum Wells." *Applied Physics Letters*, Vol. 71, No. 16, pp. 2346–2348, 1997.
- [36] Bellaiche, L., Wei, S. H., Zunger, A. "Localization and Alloy Fluctuations in InGaIn Alloys." *Applied Physics Letters*, Vol. 70, No. 26, pp. 3558–3560, 1997.
- [37] Moses, P. G., Miao, M., Yan, Q., Van de Walle, C. G. "Hybrid Functional Investigations of Band Gaps and Band Alignments for Nitride Semiconductors." *Physical Review B*, Vol. 83, 2011, Article 201201.
- [38] Wright, A. F. "Elastic and Structural Properties of Nitride Semiconductors." *Journal of Applied Physics*, Vol. 82, No. 6, pp. 2833–2839, 1997.
- [39] Jonnard, P., Capron, N., Semon, F., et al. "Electronic Structure of GaIn Investigated by X-ray Spectroscopy." *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 16, No. 16, pp. 2951–2963, 2004.
- [40] Zoroddu, A., Bernardini, F., Ruggerone, P., Fiorentini, V. "First-Principles Prediction of Structural and Electronic Properties of GaIn." *Physical Review B*, Vol. 64, 045208, 2001.
- [41] Stampfl, C., Van de Walle, C. G. "Density-Functional Calculations for III–V Nitrides Using the Local-Density Approximation and the Generalized Gradient Approximation." *Physical Review B*, Vol. 59, No. 8, pp. 5521–5535, 1999.
- [42] A. F. Wright and J. S. Nelson. "First-principles calculations for AlN, GaIn and InN: bulk and alloy properties".

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

[۴۴] R. R. Pelá, C. Caetano, M. Marques,(2011),” Accurate band gaps of AlGa_xN, InGa_xN, and AlInN alloys calculations based on LDA-1/2 approach”, Appl. Phys. Lett. 98, 151907.

[۴۵] b.T. liou,”Electronic and structural properties of zincblende Al_xGa_{1-x}N”. Appl. Phys. A 86, 539–543 (2007).

[۴۶] M. Yang ,B. Chang ,G .Hao, (2014)”Optical properties of Ga_{0.75}Al_{0.25}N with interstitial defects”

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

[۴۸] E. Salmani², A. Marjaoui², O. Mounkachi¹, M. Ben Ali (2014) “Band Gap Engineering of (InGa_xN) for Photovoltaic Application”. 978-1-4799-7336-1/14/2014 IEEE

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

جدول ۱: مقادیر ثابت شبکه ساختار زینک بلند $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ و $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ و ساختار ورتسایت $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (بر حسب Å)

میزان ناخالصی		۰	۰/۰۶۲۵	۰/۱۲۵	۰/۲۵	۱
زینک	a	Al ۴/۵۶۲	۴/۵۳۷	۴/۵۲	۴/۵۱۴	۴/۳۷۲
	In	۴/۵۶۲	۴/۵۹۰	۴/۶۲۱	۴/۶۷۸	۵/۰۲۳
ورتنسایت	a	۱/۵۹	۱/۶۰۹	۱/۶۰۷	۱/۵۹	۱/۵۵۵
	c	Al ۵/۱۶۶	۵/۲۳۸	۵/۲۲۲	۵/۱۸۸	۴/۹۷۴
	c/a	۳/۲۴۹	۳/۲۵۴	۳/۲۴۸	۳/۲۴۲	۳/۱۹۷

جدول ۲: گاف انرژی GaN در دو فاز ورتسایت و زینک بلند

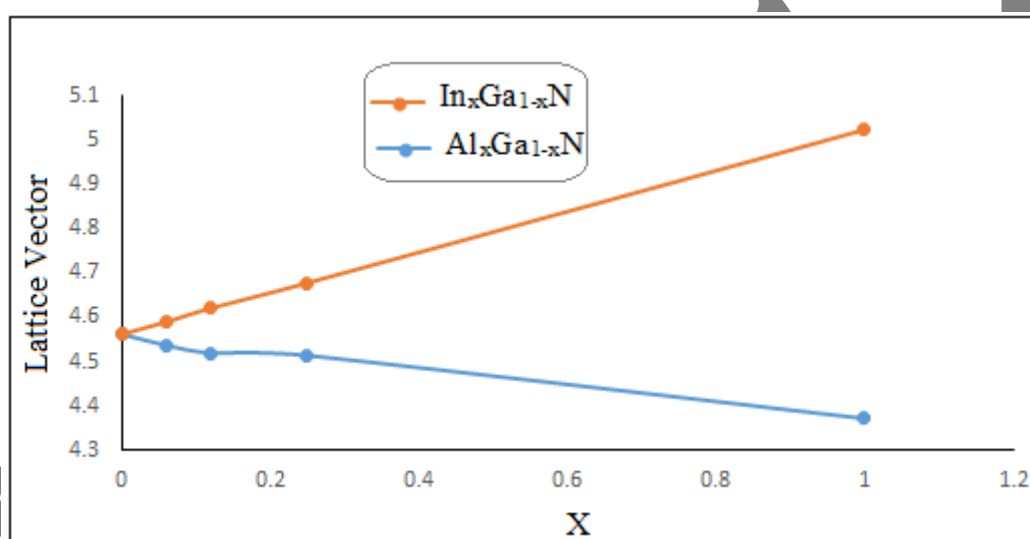
گاف انرژی	این پژوهش (LDA)	نظری (LDA)	تجربی
GaN(wz)	۲/۱۵	۲/۰۴[۴۲]	۳/۵[۴۳]
GaN(zb)	۱/۷۲	۱/۸۹[۴۲]	۳/۲[۴۳]

جدول ۳: مقادیر گاف انرژی محاسبه شده آلیاژ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ بر حسب eV

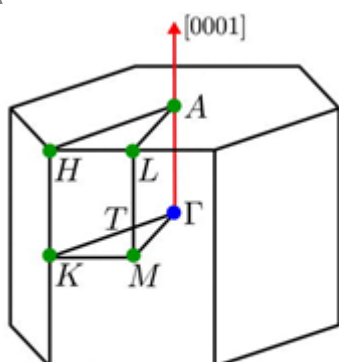
	X	۰	۰/۰۶۲۵	۰/۱۲۵	۰/۲۵	۱
Wz	این پژوهش	۲/۱۵	۲/۱۰	۲/۱۲	۲/۳۱	۴/۴۶
	نظری (LDA)	۲/۰۴[۴۲]	۲/۱[۴۴]	۲/۲۸[۴۴]	۲/۵[۴۴]	۴/۴۱[۴۴]
Zb	این پژوهش	۱/۷۲	۱/۸۶	۲/۰۱	۲/۴	۳/۲۷
	نظری (LDA)	۱/۸۹[۴۲]	۳/۳[۴۵]	۳/۵۵[۴۵]	۳/۸[۴۵]	۴/۳[۴۵]

جدول ۴: مقادیر گاف انرژی محاسبه شده آلیاژ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ برحسب eV.

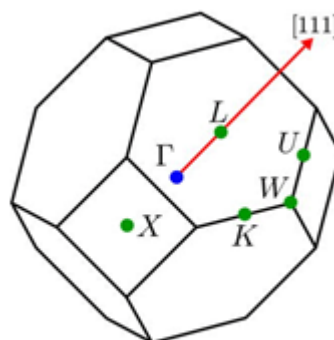
	X	۰	۰/۰۶۲۵	۰/۱۲۵	۰/۲۵	۱
Wz	این پژوهش	۲/۱۵	۲/۱	۲/۰۴	۱/۸	۰
	نظری(LDA)	۲/۰۴[۴۲]	۲/۱[۴۷]	۱/۷۵[۴۷]	۱/۳[۴۷]	۰[۴۷]
	تجربی	۳/۵[۴۳]	۳/۲[۴۶]	۲/۹[۴۶]	۲/۳[۴۶]	۰/۶[۴۶]
Zb	این پژوهش	۱/۷۲	۱/۵	۱/۲۸	۱/۰۹	۰
	نظری(LDA)	۱/۸۹[۴۲]	۲/۸[۴۸]	۲/۷[۴۸]	۲/۴[۴۸]	۰[۴۸]
	تجربی	۳/۲[۴۳]	۳/۸[۴۹]	۲/۹[۴۹]	۲/۷[۴۹]	۰/۶۱[۴۲]



شکل ۱: تغییرات ثابتهای شبکه آلیاژهای $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ و $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ در ساختار زینک بلند برحسب تراکم ناخالصی

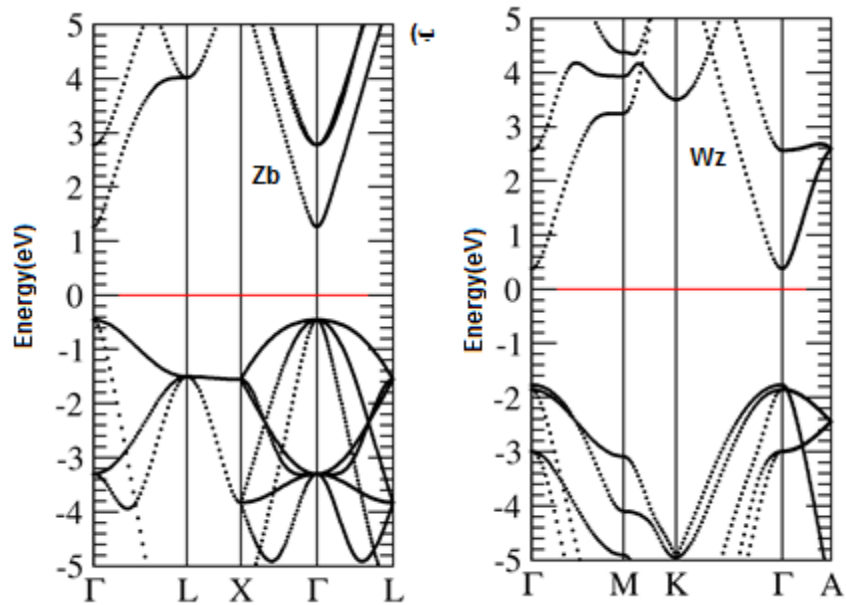


ب

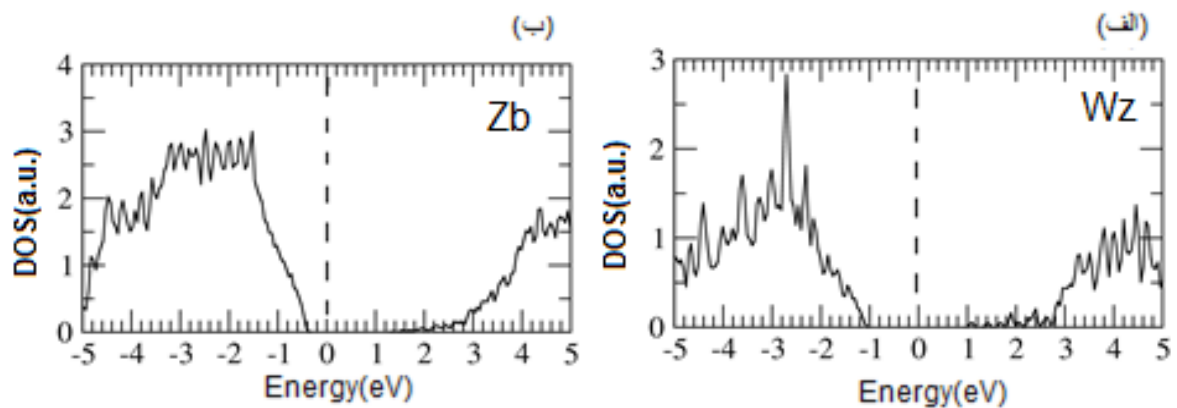


الف

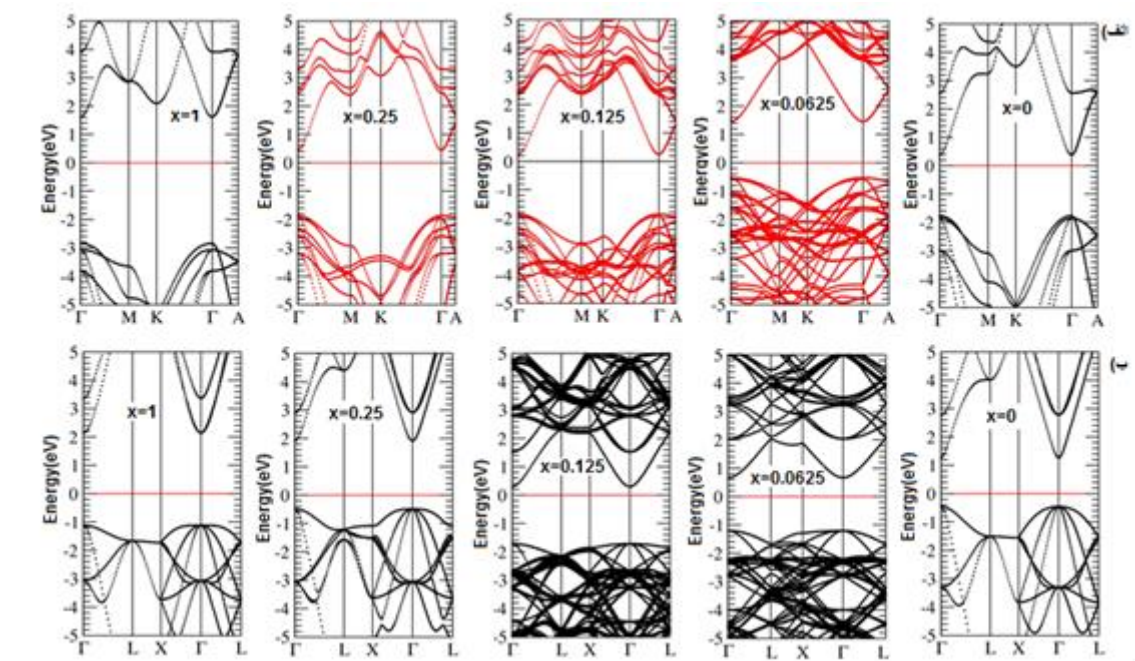
شکل ۲: منطقه اول بریلوین با نقاط تقارن بالا (برای ساختار الف) زینک بلند Γ (0.0 0.0 0.0), X (0.0 1.0 0.0), L (0.5 0.5 0.5) و (ب) ورتسایت GaN Γ (0.0 0.0 0.0), M (0.5 0.0 0.0), K (0.333 0.333 0.000), A(0.0 0.0 0.5)



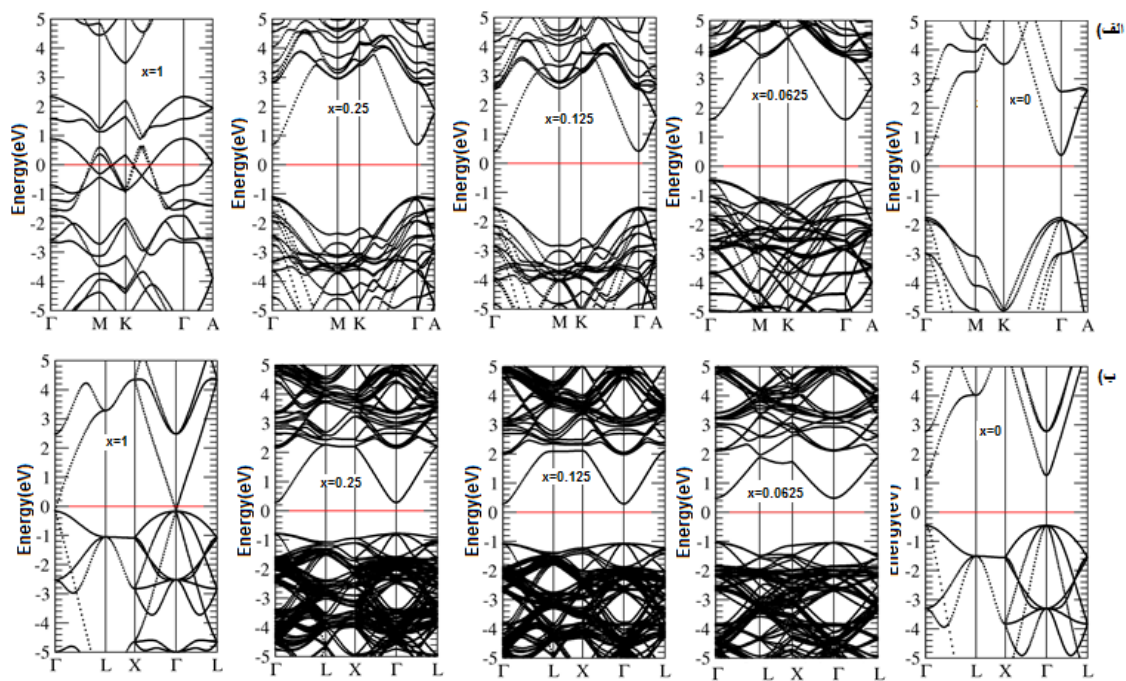
شکل ۳: ساختار نواری GaN خالص در فاز الف) ورتسایت (ب) زینک بلند



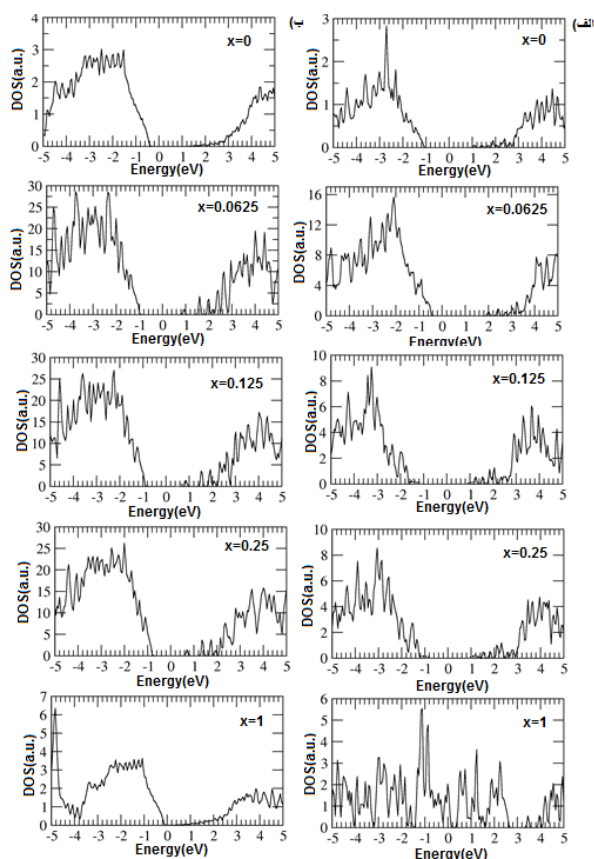
شکل ۴: نمودار چگالی حالت های کلی GaN در فاز الف) ورتسایت و (ب) زینک بلند



شکل ۵: ساختار نواری آلیاژهای $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ برای دو فاز الف) ورتسایت و ب) زینک بلند

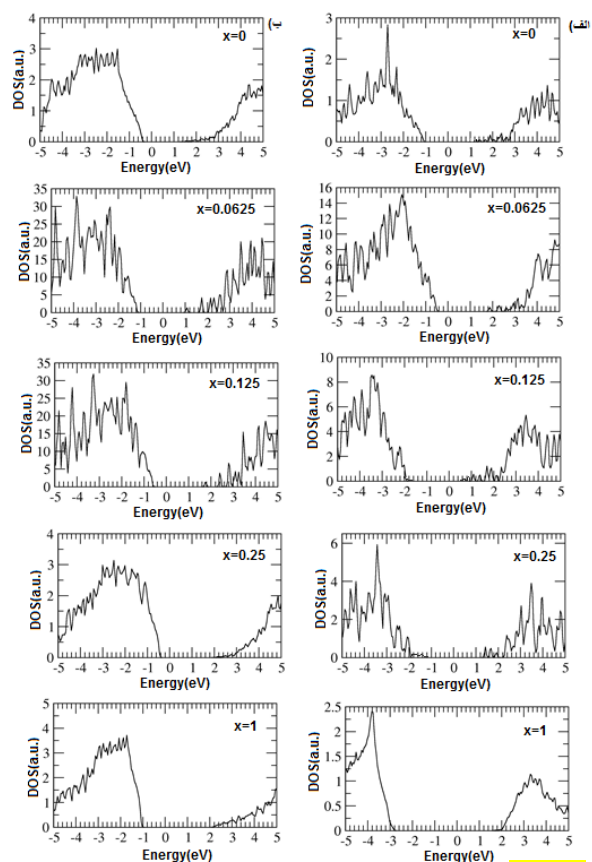


شکل ۶: ساختار نواری آلیاژهای $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ برای دو فاز الف) ورتسایت و ب) زینک بلند



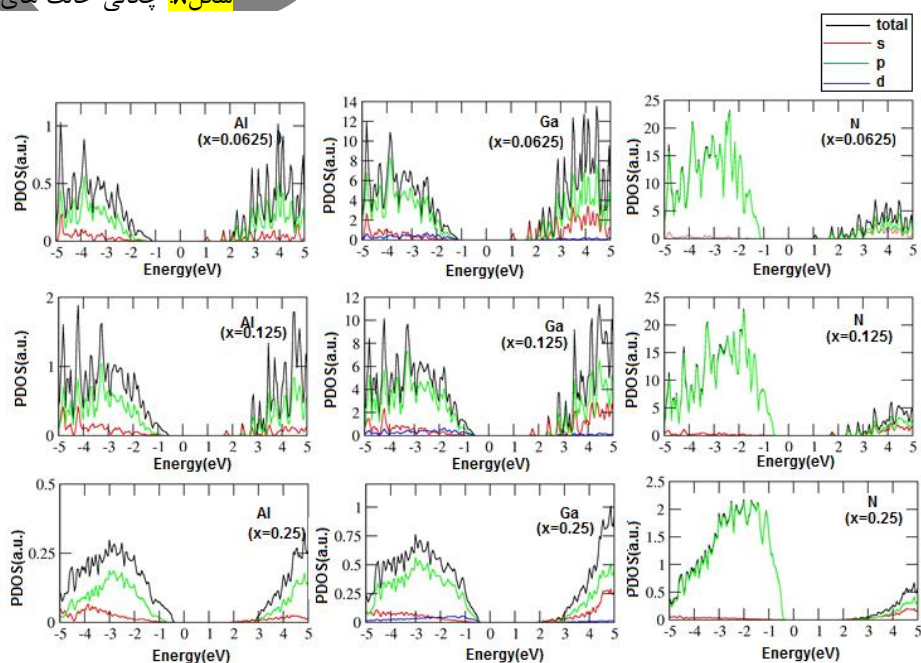
شکل ۸: چگالی حالت های کلی آلیاژهای $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ در

ک بلند

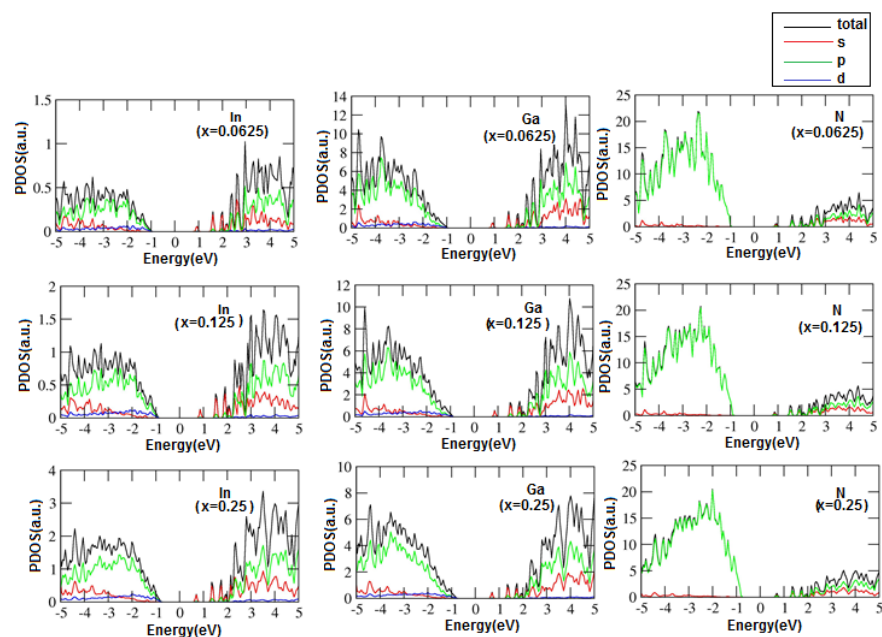


شکل ۹: نمودار چگالی حالت های کلی آلیاژهای $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$

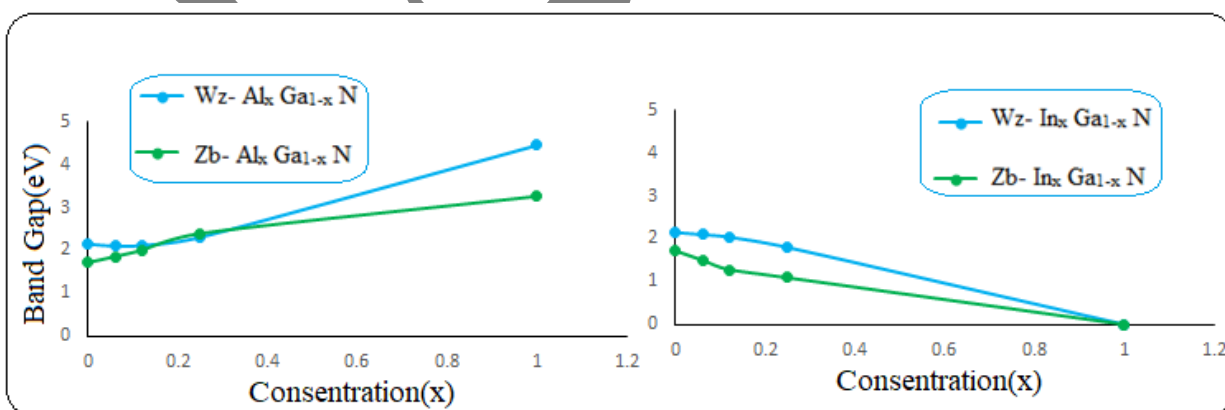
ک بلند



شکل ۱۰: چگالی حالت های جزئی آلیاژ $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ در فاز نازک بلند



شکل ۱۰: چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای آلیاژ $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ برای ساختار زینک بلند



شکل ۱۱: تغییرات گاف انرژی بر حسب تراکم ناخالصی در آلیاژهای GaN