

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

氮化鋁鎵與氮化鋁銦能帶結構與能帶間隙彎曲係數之研究

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC94-2112-M-164-004-

執行期間：94年08月01日至95年07月31日

執行單位：修平技術學院機械工程系

計畫主持人：劉柏挺

計畫參與人員：陳俊榮、張永政、劉玠汶

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 95 年 10 月 31 日

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫  成果報告  
 期中進度報告

氮化鋁鎳與氮化鋁鈦能帶結構與能帶間隙彎曲係數之研究

計畫類別： 個別型計畫  整合型計畫

計畫編號：NSC 94-2112-M-164-004

執行期間：94年08月01日至95年07月31日

計畫主持人：劉柏挺

共同主持人：

計畫參與人員：陳俊榮、張永政、劉玠汶

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)： 精簡報告  完整報告

本成果報告包括以下應繳交之附件：

- 赴國外出差或研習心得報告一份
- 赴大陸地區出差或研習心得報告一份
- 出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份
- 國際合作研究計畫國外研究報告書一份

處理方式：除產學合作研究計畫、提升產業技術及人才培育研究計畫、列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

涉及專利或其他智慧財產權， 一年 二年後可公開查詢

執行單位：修平技術學院機械系

中 華 民 國 95 年 10 月 31 日

# 行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

## 氮化鋁鎵與氮化鋁銦能帶結構與能帶間隙彎曲係數之研究

### Investigation of band structure and bowing parameter of energy band gap for $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$

計畫編號：NSC 94-2112-M-164-004

執行期限：94 年 08 月 01 日至 95 年 07 月 31 日

主持人：劉柏挺 修平技術學院機械系

E-mail: btlou@mail.hit.edu.tw

#### 一、中文摘要

本研究計畫的數值計算以第一原理為基礎來探討三元氮化物氮化鋁鎵及氮化鋁銦的zincblende結構之相關物理性質。就氮化鋁鎵而言，晶格常數的偏異係數為 $0.002 \pm 0.001 \text{ \AA}$ ，此值表示晶格常數與使用Vegard's law計算所得的值其差異非常的小。直接與間接能隙的彎曲係數分別為 $0.295 \pm 0.034 \text{ eV}$ 及 $-0.125 \pm 0.060 \text{ eV}$ ，而直接與間接能隙的轉換點在 $x = 0.692$ 。就氮化鋁銦而言，晶格常數的偏異係數為 $0.02 \pm 0.003 \text{ \AA}$ 。直接與間接能隙的彎曲係數分別為 $4.731 \pm 0.794 \text{ eV}$ 及 $0.462 \pm 0.285 \text{ eV}$ ，而直接與間接能隙的轉換點在 $x = 0.817$ 。

**關鍵詞：**第一原理、氮化鋁鎵、氮化鋁銦、zincblende結構、偏異係數、能隙、彎曲係數

#### Abstract

Numerical calculations based on first-principles are applied to study the physical properties of zincblende  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  and  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ . For  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , the lattice constant has a deviation parameter of  $0.002 \pm 0.001 \text{ \AA}$ , which is very small deviation from the linear Vegard's law. The direct and indirect bowing parameters of  $0.295 \pm 0.034 \text{ eV}$  and  $-0.125 \pm 0.060 \text{ eV}$  are obtained, respectively, and there is a direct-indirect crossover near  $x = 0.692$ . For  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ , the lattice constant has a deviation parameter of  $0.02 \pm 0.003 \text{ \AA}$ . The direct and indirect bowing parameters of  $4.731 \pm 0.794 \text{ eV}$  and  $0.462 \pm 0.285 \text{ eV}$  are obtained, respectively, and there is a direct-indirect crossover near  $x = 0.817$ .

**Keywords :** first-principles,  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ,  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ , zincblende, deviation parameter,

band gap, bowing parameter

#### 二、緣由與目的

三五族氮化物不但具有高熔點、高硬度、良好的熱傳導性與相當大的容積彈性模數(bulk modulus)等優質的機械性質，而且具有相當低的介電常數、寬範圍的能帶間隙，使得發射波長涵蓋整個可見光區及部分紫外線和紅外線，再加上大部分的氮化物為直接能隙材料，其發光效率當然較高。

在氮化鋁鎵銦發光二極體與半導體雷射中，各磊晶層一般都是以二元或三元化合物的方式呈現。最常被使用的有兩種晶體結構，一種是六方晶系的wurtzite(WZ)結構，另一種是立方晶系的zincblende(ZB)結構。雖然氮化物的WZ結構皆為效率較好的直接能隙材料，然而ZB結構也存在著不同於WZ結構的優點，例如以砷化鎵(GaAs)為基板的ZB結構較容易得到平整鏡面，以及ZB結構具有較小的有效質量，因此能夠提供較大的光學增益，並且降低雷射二極體的臨界電流密度[1]。對於三元氮化物的相關物理性質研究，晶格常數常被假設與組成成分之間成線性比例關係，也就是遵守Vegard's law。計畫主持人最近對WZ結構的三元氮化物有一系列的研究，並且發表在SCI期刊[2-4]，在這些研究中使用最小能量法來計算晶格常數，並探討Vegard's law在計算三元氮化物的晶格常數所產生的偏異(deviation)，進而探討此偏異對物理性質與光學特性的影響，包括：能帶結構、直接能隙、間接能隙、價電帶厚度、直接能隙彎曲係數及間接能隙彎曲係數等。

本研究之理論計算以物理基本原理(*ab initio*)為基礎，使用國家高速網路與計算中心所提供之CASTEP (Cambridge serial total energy package的縮寫)計算軟體，進一

步來探討立方晶系的zincblende氮化鋁鎵銻結構，其中「Vegard's law 的偏異對三元zincblende  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 之能帶間隙彎曲係數的影響」已在期刊發表[5]；另外兩個三元化合物 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 及 $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ 的物理性質與光學特性，則是本研究計畫要完成的工作。ZB結構的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 及 $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ 與ZB結構的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 最主要的不同在於 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 及 $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ 含有AlN的成分，而二元ZB結構的AlN屬於間接能隙材料，因此ZB結構的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 及 $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ 隨著Al濃度的增加，會出現一個由直接能隙變為間接能隙的轉換點。準確的定出這個轉換點對於設計高效率的光學元件是很重要的。

### 三、結果與討論

本研究計畫之ZB結構的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 及 $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ 的相關研究結果已投稿至SCI期刊[6, 7]。本節將部分的結果列於下述：

The equilibrium lattice constant as a function of the aluminum composition  $x$  is plotted in Figs. 1 and 2 for  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  and  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ , respectively. If we best fit the results shown in Figs. 1 and 2 with a quadratic equation of the aluminum composition  $x$ , the coefficient of  $x^2$  is  $0.002 \pm 0.001 \text{ \AA}$  and  $0.02 \pm 0.003 \text{ \AA}$  for  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  and  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ , respectively. It indicates that lattice constant of zincblende  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  and  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$  has a small deviation from the linear Vegard's law.

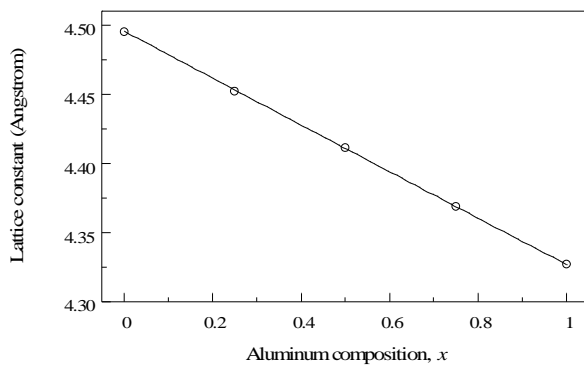


Figure 1: Lattice constant of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  as a function of aluminum composition  $x$ .

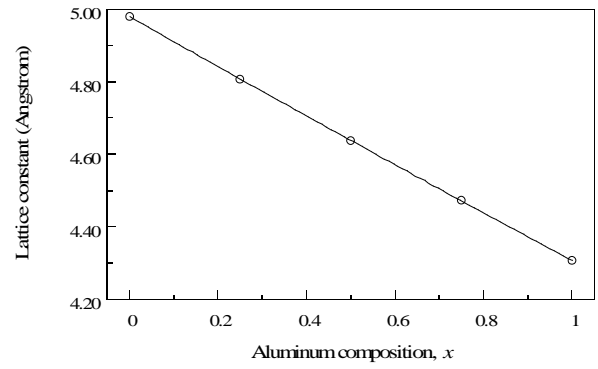


Figure 2: Lattice constant of  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$  as a function of aluminum composition  $x$ .

The band gap energy of the zincblende  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  obtained with the equilibrium lattice constant is plotted in Fig. 3. The band gap energy of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  can be depicted as a function of the aluminum composition  $x$ , and be expressed using the following formula

$$E_g(x) = x \cdot E_{g,\text{AlN}} + (1-x) \cdot E_{g,\text{GaN}} - b \cdot x \cdot (1-x)$$

where  $E_g(x)$  is the band gap energy of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ,  $E_{g,\text{AlN}}$  is the band gap energy of AlN,  $E_{g,\text{GaN}}$  is the band gap energy of GaN, and  $b$  is the band gap bowing parameter of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . If we best fit the results shown in Fig. 3 with above equation, the direct ( $\Gamma$ - $\Gamma$ ) bowing parameter of  $0.295 \pm 0.034 \text{ eV}$  and indirect ( $\Gamma$ -X) bowing parameter of  $0.125 \pm 0.060 \text{ eV}$  are obtained. There is a direct-indirect crossover at  $x = 0.692$  for which the band gap energy is  $4.690 \text{ eV}$ . Similarly, the band gap energy of the zincblende  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$  obtained with the equilibrium lattice constant is plotted in Fig. 4. The direct ( $\Gamma$ - $\Gamma$ ) bowing parameter of  $4.731 \pm 0.794 \text{ eV}$  and indirect ( $\Gamma$ -X) bowing parameter of  $0.462 \pm 0.285 \text{ eV}$  are obtained. There is a direct-indirect crossover at  $x = 0.817$  for which the band gap energy is  $4.972 \text{ eV}$ .

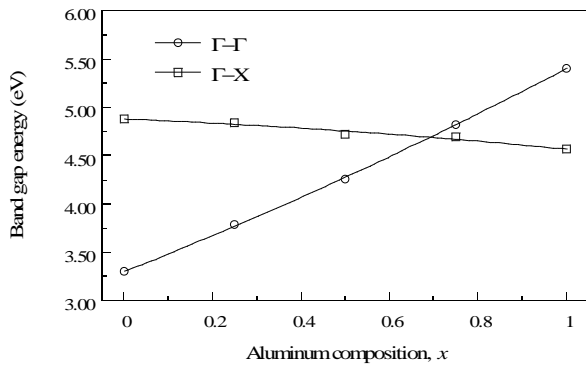


Figure 3: Band gap energy of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  as a function of aluminum composition  $x$ .

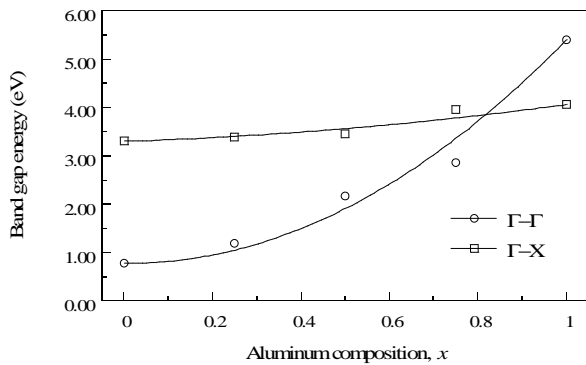


Figure 4: Band gap energy of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  as a function of aluminum composition  $x$ .

#### 四、計畫結果自評

此計畫是我這幾年來研究主題的延續，計完成下列的工作：

- (1) zincblende 氮化鋁鎵能帶結構與能帶間隙彎曲係數之研究。
- (2) zincblende 氮化鋁銦能帶結構與能帶間隙彎曲係數之研究。

這些研究成果已投稿至SCI期刊[6, 7]，由結果與討論可以看出，研究的成果符合計畫預設之目標。

#### 參考文獻

- [1] S. H. Park and S. L. Chuang, *J. Appl. Phys.* **87**, 353 (2000).
- [2] B.-T. Liou, S.-H. Yen, and Y.-K. Kuo, *Appl. Phys. A* **81**, 651 (2005).
- [3] B.-T. Liou, S.-H. Yen, and Y.-K. Kuo, *Appl. Phys. A* **81**, 1459 (2005).
- [4] B.-T. Liou, C.-Y. Lin, S.-H. Yen, and

Y.-K. Kuo, *Opt. Commun.* **249**, 217 (2005).

[5] Y.-K. Kuo, B.-T. Liou, S.-H. Yen, and H.-Y. Chu, *Opt. Commun.* **237**, 363 (2004).

[6] B.-T. Liou, Submitted to *Appl. Phys. A*, (2006).

[7] B.-T. Liou, Submitted to *Opt. Commun.*, (2006)