

# 闪锌矿 GaN 弹性性质、电子结构和光学性质 外压力效应的理论研究\*

焦照勇<sup>†</sup> 杨继飞 张现周 马淑红 郭永亮

(河南师范大学物理与信息工程学院, 新乡 453007)

(2010 年 12 月 28 日收到; 2011 年 2 月 10 日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理平面波赝势方法, 结合广义梯度近似(GGA)下的 RPBE 和局域密度近似(LDA)的 CA-PZ 交换-关联泛函对闪锌矿结构的 GaN 在高压的性质进行了系统研究. 计算结果表明: 弹性常数、体模量、杨氏模量和能隙都具有明显的外压力效应, 计算结果与实验值和理论值很好的符合. 同时利用计算的能带结构和态密度系统分析了 GaN 的介电函数、折射率、反射率、吸收系数和能量损失函数等光学性质及其外压力效应. 分析结果为 GaN 的设计与应用提供了理论依据.

**关键词:** 第一性原理计算, 电子结构, 光学性质, 闪锌矿 GaN

**PACS:** 71.15.Mb, 71.20.-b, 71.20.Nr

## 1. 引言

宽禁带半导体材料近年来发展十分迅速, 成为第三代电子材料, 主要包括 ZnSe, SiC, GaN 等, 其中, 具有直接带隙的氮化镓(GaN)备受关注. GaN 具有禁带宽度大、介电常数小、高热导率、高发光效率、耐高温、抗辐射、耐酸碱、高强度和高硬度等特性, 因此非常适合于制作抗辐射、高频率、大功率和高密度集成的电子器件<sup>[1,2]</sup>. 除此之外, GaN 晶体管可以提供较好的线性功率和效率, 可以应用在广播电视、无线基础设施、高功率雷达、电子对抗等.

目前对 GaN 半导体材料的研究主要集中在关于 GaN 薄膜的表面吸附及掺杂问题<sup>[3-5]</sup>, 而且研究以纤维状 GaN 居多. 对闪锌矿 GaN 的研究以常压或零压下的电子结构和光学性质为主. 据我们所知, 对极限条件下 GaN 的性质, 如高压下闪锌矿 GaN 的弹性性质、电子结构及光学性质的系统研究鲜见报道.

本文中我们采用基于密度泛函理论的平面波赝势方法, 选择广义梯度近似(GGA)下的 RPBE 和局域密度近似(LDA)下的 CA-PZ 交换-关联泛函对

闪锌矿结构的 GaN 在高压下的性质进行了系统研究. 并对其弹性性质、电子结构和光学性质在高压下的变化趋势进行了探讨.

## 2. 理论模型与计算方法

闪锌矿氮化镓(GaN)是 III-V 族半导体化合物, 呈现面心立方(fcc)结构, 空间群为  $F-43m$ , 晶面角  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ , Ga 原子形成边长为  $a$  的面心立方结构, N 原子在其内部形成边长为  $\sqrt{2}a/2$  的四面体结构. 原子在晶胞中的位置坐标为 Ga(0,0,0) 和 N(0.25,0.25,0.25).

本研究计算方法是基于密度泛函理论下的第一性原理平面波赝势从头算量子力学方法<sup>[6,7]</sup>. 采用总能量平面波赝势方法, 电子波函数通过平面波基组展开, 电子与电子之间相互作用的交换-关联泛函分别采用广义梯度近似(GGA)下的 RPBE<sup>[8]</sup> 和局域密度近似(LDA)下的 CA-PZ. 收敛性检验表明, 平面波截止能量选为 1000 eV 和  $14 \times 14 \times 14$  的  $k$  空间取样密度已经能够保证总能的收敛, 优化迭代过程中每个原子能量收敛精度为  $1.0 \times 10^{-6}$  eV, 每个原子的应力不大于 0.3 eV/nm, 内应力不大于

\* 国家自然科学基金(批准号:11047026)和河南省高校青年骨干教师资助计划(批准号:2010GGJS-066)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: zhy\_jiao@htu.cn

0.05 GPa, 公差偏移为 0.0001 nm, Ga 和 N 的价电子组态分别为  $\text{Ga}: 3d^{10}4s^24p^1$  和  $\text{N}: 2s^22p^3$ . 在外加压力 0—100 GPa 范围内研究了闪锌矿 GaN 材料的弹性性质、电子结构和光学性质.

### 3. 计算结果与讨论

#### 3.1. 弹性性质

我们首先对闪锌矿 GaN 晶体进行结构优化, 优化后的晶格常数与实验值 4.51 Å 和 Christensen 等人<sup>[9]</sup>通过 LMTO 方法计算的 4.46 Å 相符合. 为了分析晶体材料的弹性性质, 理论上通过计算以下弹性模量来分析: 体模量( $B$ )、杨氏模量( $E$ )等的理论公式为

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

$$E = \frac{1}{S_{11}},$$

$$G_r = \frac{1}{2(S_{11} - S_{12})}. \quad (2)$$

通过以上理论公式, 我们计算了闪锌矿 GaN 的体模量、杨氏模量等参量(见表 1), 从表 1 的结果可以看出, 结算结果与实验值和其他理论结果符合的很好. 并在 0—100 GPa 的压强范围内研究了弹性劲度常数、体模量、杨氏模量等对压强的依赖性(见图 1 和图 2). 由图可见, 闪锌矿 GaN 晶体的弹性性质具有压力依赖性, 弹性常数  $C_{11}$  和  $C_{12}$  随着外压力的增长而大幅度增大, 而  $C_{44}$  随外压力的增大先小幅增大后又小幅减小, 体模量  $B$  同样随外压力的增长呈明显的线性增长趋势, 而杨氏模量  $E$  却随外压力的增长呈减小趋势.

表 1 根据 GGA 和 LDA 计算闪锌矿 GaN 在零压下的晶格常数  $a$ 、弹性常数  $C_{ij}$ 、体模量  $B$ 、杨氏模量  $E$

	GGA	LDA	实验 参考值	其他参考值
$a/\text{\AA}$	4.611	4.493	4.54 <sup>[12]</sup> , 4.519 <sup>[15]</sup>	4.5 <sup>[10]</sup> , 4.46 <sup>[11]</sup> , 4.52 <sup>[14]</sup>
$C_{11}/\text{GPa}$	242.76	287.01		293 <sup>[13]</sup> , 285 <sup>[16]</sup> , 293 <sup>[17]</sup>
$C_{12}/\text{GPa}$	124.38	158.19		159 <sup>[13]</sup> , 161 <sup>[16]</sup> , 159 <sup>[17]</sup>
$C_{44}/\text{GPa}$	146.64	154.11		155 <sup>[13]</sup> , 149 <sup>[16]</sup> , 155 <sup>[17]</sup>
$B/\text{GPa}$	163.84	201.13		202 <sup>[15]</sup> , 203 <sup>[17]</sup> , 201 <sup>[18]</sup>
$E/\text{GPa}$	156.24	174.60		

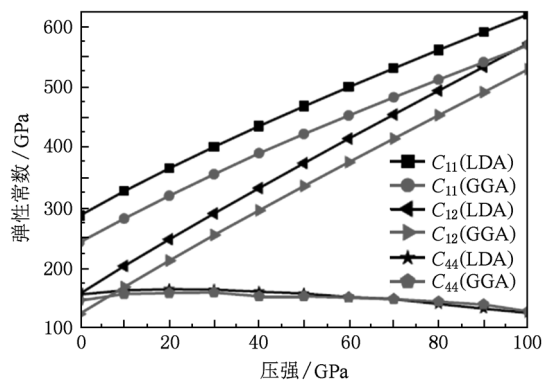


图 1 闪锌矿 GaN 在 0—100 GPa 下的弹性常数  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  和  $C_{44}$

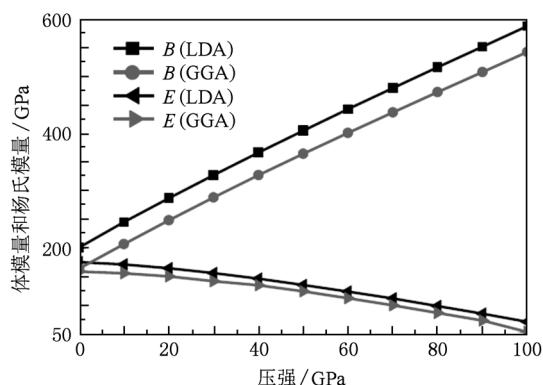


图 2 闪锌矿 GaN 在 0—100 GPa 下的体模量( $B$ )和杨氏模量( $E$ )

#### 3.2. 电子结构

##### 3.2.1. 能带结构

采用优化后的闪锌矿 GaN 晶胞结构计算了它的能带结构(见图 3), 由图 3 可见, 闪锌矿 GaN 为直接带隙半导体, 在零压下, 其价带顶  $G_c$  为 0 eV (LDA 和 GGA), 导带底  $G_v$  分别为 1.706 eV (LDA) 和 1.546 eV (GGA). 因此, 闪锌矿 GaN 的带隙  $E_g$  分别为  $E_g = 1.706$  eV (LDA) 和  $E_g = 1.546$  eV (GGA), 这与吴松等人<sup>[19]</sup>的计算结果  $E_g = 1.75$  符合的较好. 但是与实验值  $E_g = 3.2$  eV<sup>[20]</sup>相比较,  $E_g$  明显偏小, 这主要是因为密度泛函理论不考虑电子与电子之间的交换-关联势的不连续性, 多粒子体系中激发态电子间关联作用被低估, 因此导致计算的带隙比实验值小<sup>[21]</sup>. 表 2 中给出了 0 GPa 和 100 GPa 下的  $G_v-G_c$ ,  $G_v-X_c$  及  $G_v-L_c$  能隙值和其他理论结果. 另外, 我们在 0—100 GPa 范围内研究了带隙对压强的依赖性(见图 4), 由图 4 可知, GaN 带隙随外压力的增大而变宽.

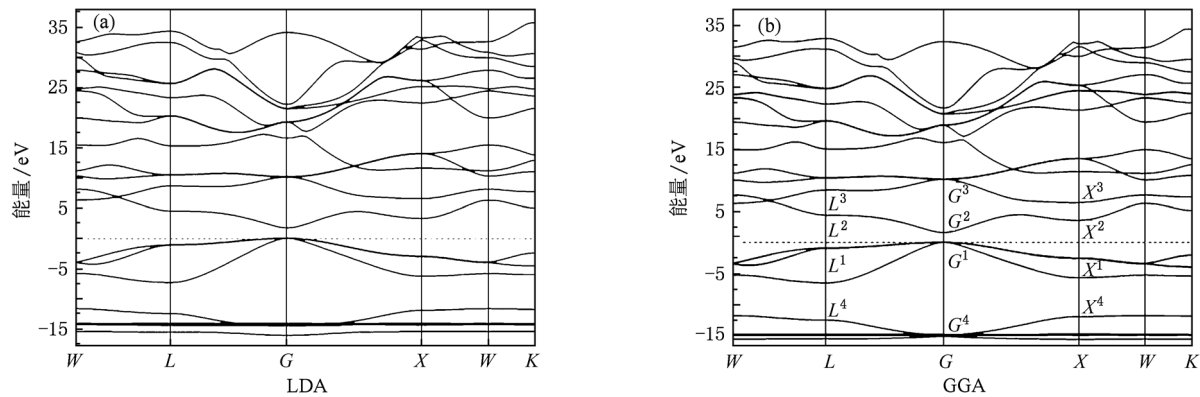


图 3 闪锌矿 GaN 在零压下的 LDA 和 GGA 能带结构

表 2 闪锌矿 GaN 在 0 GPa 和 100 GPa 下的带隙  $G_V-G_C$ ,  $G_V-X_C$  和  $G_V-L_C$

能带带隙	我们的结果(0 GPa)		参考文献计算 结果(0 GPa)	我们的结果(100 GPa)	
	LDA	GGA		LDA	GGA
$G_V-G_C$	1. 71	1. 546	2. 18 <sup>[9]</sup>	3. 40	3. 52
$G_V-X_C$	3. 28	3. 25	3. 36 <sup>[9]</sup>	3. 47	3. 73
$G_V-L_C$	4. 50	4. 34	4. 93 <sup>[9]</sup>	6. 32	6. 58

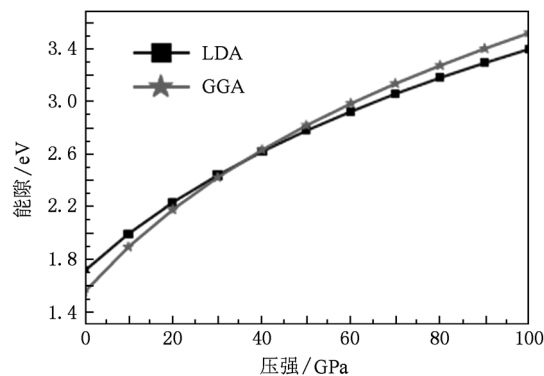


图 4 闪锌矿 GaN 在 0—100 GPa 下的带隙

3. 2. 2. 电子态密度

电子态密度对应于能带结构,它能够用来分析原子中各个轨道能级间的成键情况,并且能够积分出电子的数目而确定在原子轨道上的分布情况.

图 5 为计算得到的 GaN 总态密度图(DOS),图中包括 Ga, N 的各亚层电子的分波态密度图(PDOS). 从图 5 可以看出,在 - 16. 42— - 14. 07 eV 的能量范围, GaN 总态密度主要由电负性较大的 N-2s 轨道和 Ga-3d 轨道构成. 但是在杂化过程中, N-2p 和 Ga-4s 轨道也有较少贡献. 在 - 14. 91 eV 处出现尖峰,这意味着更多的 Ga-3d 电子参与 Ga—N 轨道杂化,且表现出很强的局域性. 在 - 6. 86—

0 eV 的能量范围, GaN 总态密度主要由电负性较大的 N-2p 轨道和电负性较小的 Ga-4p 轨道杂化而成. 其中 N-2p 轨道贡献远大于 Ga-4p 轨道,同时表现出离域性. 在 4. 74—12. 98 eV 能量范围内, N-2p 轨道贡献较大,其中 Ga-4s 和 Ga-4p 轨道也有部分贡献. 从 GaN 的 DOS 图中也可以看出: 费米能级两侧分别存在一个较宽的展宽峰,这说明该体系成键的共价性较强.

在  $P=100$  GPa 下,我们计算了 GaN 总态密度(DOS)和分波态密度(PDOS)(见图 5). 由图示可知,在 3. 82—15. 62 eV 能量范围内的态密度峰与零压下在 3. 01—12. 75 eV 能量范围内的态密度峰相比较,能带曲线明显向高能方向移动了大约 0. 81—2. 87 eV. 尖峰出现在 - 15. 54 eV, 与零压下的 - 14. 95 eV 相比,向低能方向移动了 0. 59 eV. 通过比较零压和 100 GPa 下的 DOS 图,我们得出以下结论: 当外压力增大时,导带部分(高能区域)向高能方向移动,而价带部分(低能区域)有向低能方向移动的趋势. 由此可见, GaN 的能带带隙会随着外压力的增加而增大.

3. 3. 光学性质

根据单晶体光学性,在线性响应范围内其宏观光学性质可以由复介电函数  $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) +$

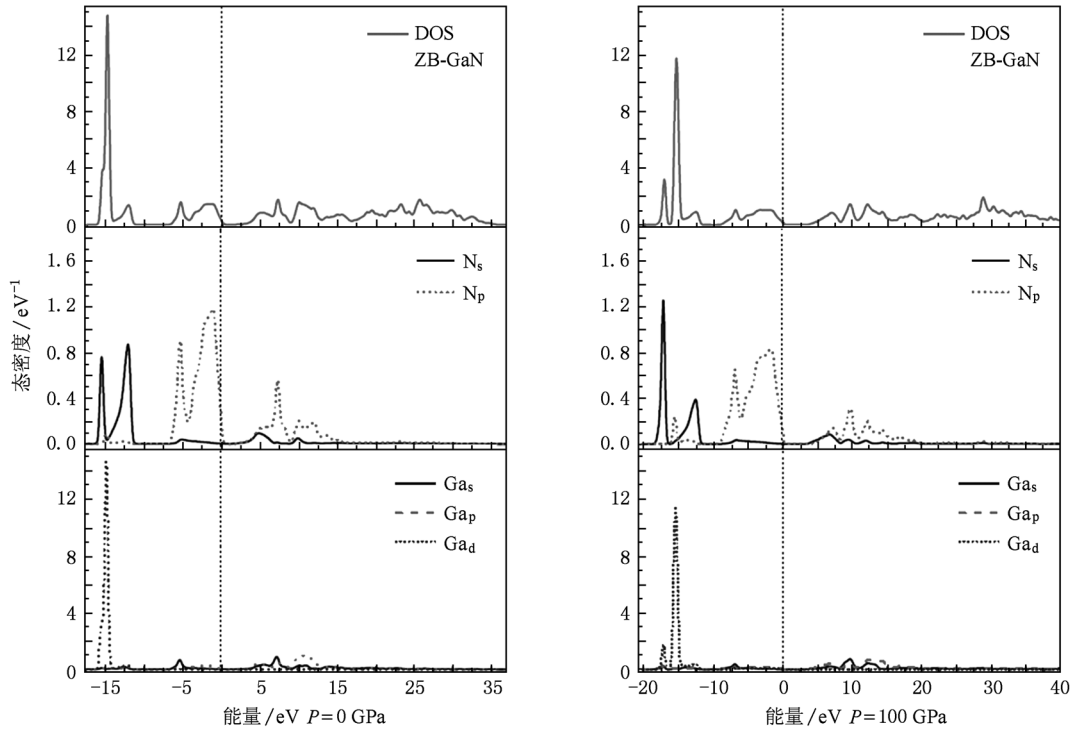


图5 闪锌矿 GaN 在 0 GPa 和 100 GPa 下的总态密度和分波态密度(GGA)

$i\varepsilon_2(\omega)$  来描述,其中  $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$ ,  $\varepsilon_2 = 2nk$ . 根据直接跃迁概率的定义和克拉默斯-克勒尼希(Kramers-Kronig)色散关系可以推导晶体介电函数的实部  $\varepsilon_1$ 、虚部  $\varepsilon_2$ 、折射率  $n(\omega)$ 、消光系数  $k(\omega)$ 、吸收系数  $\alpha(\omega)$ 、反射率  $R(\omega)$  和能量损失谱  $L(\omega)$  [22] 如下:

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{4\pi e^2}{4\pi\varepsilon_0 m} \sum_{V,C} \left[ \sum_K \left( \frac{2}{m\hbar\omega_{CV}} \right) \frac{|P_{CV}|^2}{\omega_{CV} - \omega^2} \right], \quad (3)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \left( \frac{2\pi e}{m\omega} \right)^2 \sum_{V,C} \sum_K |P_{CV}|^2 \times \delta[E_C(k) - E_V(k) - \hbar\omega], \quad (4)$$

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} + \varepsilon_1]^{\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

$$K(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} - \varepsilon_1]^{\frac{1}{2}}, \quad (6)$$

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2}(\omega) [\sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 - \varepsilon_2(\omega)^2} - \varepsilon_1(\omega)]^{\frac{1}{2}}, \quad (7)$$

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}, \quad (8)$$

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}. \quad (9)$$

式中,  $\varepsilon_0$  为真空介电常数,  $n$  为折射率,  $K$  为倒格矢,  $\omega$  为角频率,  $|P_{CV}|^2$  为动量矩阵元; C, V 分别表示

导带和价带,  $E_C$  和  $E_V$  分别为导带和价带上的本征能级.

以上关系是分析晶体能带结构和光学性质的理论依据,它反映了能级间电子跃迁所产生光谱的发光机理. 从某种意义上讲,这些光学常数更能表征材料的物理特性. 根据以上公式,我们系统研究了闪锌矿 GaN 在高压下的光学性质. 为方便与实验数据进行比较,在计算光学性质时统一用剪刀(scissors)算符对带隙进行了修正,闪锌矿 GaN 禁带宽度计算值  $E_g = 1.546$  eV (GGA),而实验值  $E_g = 3.20$  eV,所以剪刀算符的值取 1.654 eV.

### 3.3.1. GaN 的复介电函数

介电函数能够反映能带结构及其他各种光谱信息,其光谱是由价带与导带间电子跃迁所产生的,介电函数的峰值可以通过能带结构和态密度来解释.

我们利用(3)式和(4)式,分别计算了 GaN 复介电函数在零压和 100 GPa 下的实部  $\varepsilon_1$  和虚部  $\varepsilon_2$ . 零压时,计算的  $\varepsilon_0 = 5.03$  与 Christensen 等人[7]通过 LMTO 方法计算的 4.78 符合得较好. 由图 6 可以看出,在低能段介电函数的实部  $\varepsilon_1$  随能量的增加而增大. 在 3.54 eV 处出现第一个峰,随后呈现下降趋势. 在 4.88 eV 处出现微谷,然后  $\varepsilon_1$  随能量的

增加而增大,直到 6.61 eV 时达到最大值. 在 6.61—9.18 eV 能量范围内,谱线随着光子能量的增加而急剧减小,这对应着吸收谱线的急剧增大,此时带间跃迁电子的光吸收明显增强. 介电函数虚部  $\varepsilon_2$  的吸收边位于 3.2 eV 处,它是由 (图 3)  $G^1$  到  $G^2$  的直接跃迁形成的. 随着能量的增大,  $\varepsilon_2$  急剧增大,在 8.58, 10.64 和 12.88 eV 三处的峰分别源于 (图 3)  $X^1 \rightarrow X^2$ ,  $L^1 \rightarrow L^3$  和  $G^1 \rightarrow G^3$  的跃迁,随着能量的继续增加  $\varepsilon_2$  最终趋于零.

当  $P = 100$  GPa 时,实部  $\varepsilon_1$  在 5.02 eV 处平缓,表现出带边吸收特性,在 7.72 eV 处出现最大峰. 由图 6 可见,  $\varepsilon_1$  随着外压力的增大,向高能方向移动,尖峰逐渐增大,这表明反射率增大,光的反射特性增强. 虚部  $\varepsilon_2$  在 8.84 eV, 11.16 eV 和 12.91 eV 等处出现三个峰,对应着吸收谱中的三个吸收峰.

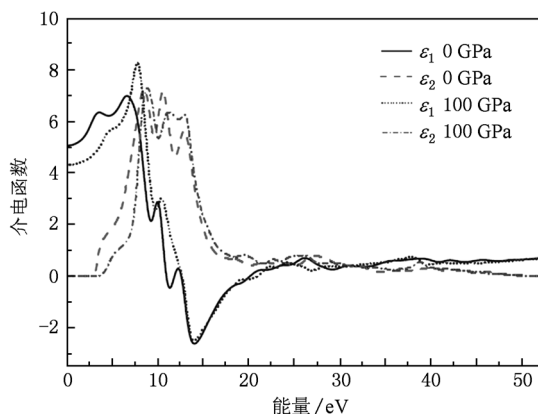


图 6 闪锌矿 GaN 在 0 GPa 和 100 GPa 下介电函数的实部  $\varepsilon_1$  和虚部  $\varepsilon_2$

### 3.3.2. GaN 的复折射率

由复折射率和复介电函数之间的关系式  $n^2 - k^2 = \varepsilon_1$ ,  $2nk = \varepsilon_2$  和 (5) 式, (6) 式, 可以得到 GaN 的折射率  $n$  和消光系数  $k$ . 零压下的计算结果如图 7 所示. 静态折射率  $n_0 = 2.24$ , 与郭建云等人<sup>[23]</sup> 的计算结果  $n_0 = 2.162$  很好地符合.  $n$  的最大峰对应的能量为 7.23 eV, 随后  $n$  随能量的增加逐渐减小, 直到 16.81—19.85 eV 区域出现两低谷, 由图 7 可知: 在这一频域内  $k(\omega) > n(\omega)$ ,  $n$  较小, 此时反射率比较大, GaN 呈现出金属反射特性.

消光系数  $k$  与吸收系数  $\alpha$  一样, 都表示物质对光的吸收, 它们之间的关系为:  $\alpha = \frac{2k\omega}{c} = \frac{4k\pi}{\lambda_0}$ , 其中  $\lambda_0$  为电磁波在真空中的波长. 如图 7 所示, GaN

的消光系数  $k$  在能量低于 2.90 eV 以及大于 52.7 eV 的范围为零, 在 13.64 eV 处  $k$  取得最大值, 这对应于吸收系数谱 (图 8). 在 8.82—13.64 eV 范围内, 出现第一阶段主峰, 它们刚好落在近紫外区, 在这一频域内紫外线的吸收明显增强.

当  $P = 100$  GPa 时, 复折射率  $n$  在 7.98 eV 处出现最大峰, 其明显高于零压下的最大峰. 当能量低于 7.16 eV 时,  $n$  值小于零压下的  $n$  值. 由图 7 可见:  $n$  在 0—16.95 eV 随着外压力的增大向高能方向移动. 消光系数  $k$  在 2.90—3.72 eV 的能量范围内为零, 说明当施加外压力后, 这一频域光吸收变为零. 在 25.36 eV 处,  $k$  谱线出现低峰, 对应于 0 GPa 下的谷, 此处光吸收随着压强的增大而增强, 消光系数在 2.90—13.64 eV 随着压强的增大向高能方向移动.

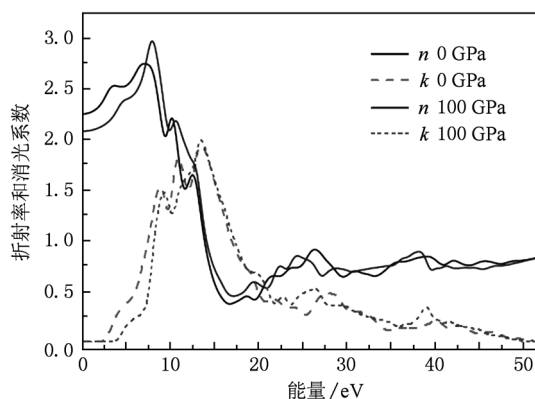


图 7 闪锌矿 GaN 在 0 GPa 和 100 GPa 下的折射率  $n$  和消光系数  $k$

### 3.3.3. GaN 的吸收谱

吸收系数表示光波在介质中单位传播距离光强度衰减的百分比. 由 (7) 式可以得到 GaN 的吸收系数. 在不考虑表面反射的情况下, 吸收光谱也可以通过与透射光谱的关系:  $\alpha(\omega) = -\ln T(\omega)/d$  得到, 即吸收光谱中的吸收峰对应透过率谱中的透过谷<sup>[24]</sup>. 由图 8 可知, 零压时能量小于 2.95 eV 以及大于 53.1 eV 的范围内 GaN 对光的吸收为零, 这表明在波长大于 420.3 nm 和小于 23.4 nm 的范围 GaN 材料是透明的, 其对应于透射光谱中的透射峰, 此时透过率为 1. 在 2.95 eV 以后,  $\alpha(\omega)$  随能量的增加而增大; 在 5.78—13.76 eV 的范围内,  $\alpha(\omega)$  随能量的增加而急剧增长, 且  $\alpha(\omega)$  正处于强吸收区, 在这一频域, 光的吸收过程包括了价带所有可能的被占据态和导带所有可能的空穴态之间

的耦合,因此 GaN 的吸收光谱为宽带谱. 吸收最大峰出现在 13.75 eV 处,整个吸收谱中的吸收峰都落在了紫外区,这表明:此频域紫外线的透过率很低, GaN 材料具有防护紫外线辐射的能力.

当  $P = 100$  GPa 时,吸收谱  $\alpha(\omega)$  有向高能方向移动的趋势,吸收边从 2.95 eV 向高能方向移动到 3.98 eV,这对应于 100 GPa 下的带隙. 吸收率  $\alpha(\omega)$  从 3.98 eV 开始,随着能量的增加而递增,在 13.62 eV 处出现最大峰,并且峰值高于零压下的峰值. 从图 8 中看出整个吸收谱随压强的增大而增强.

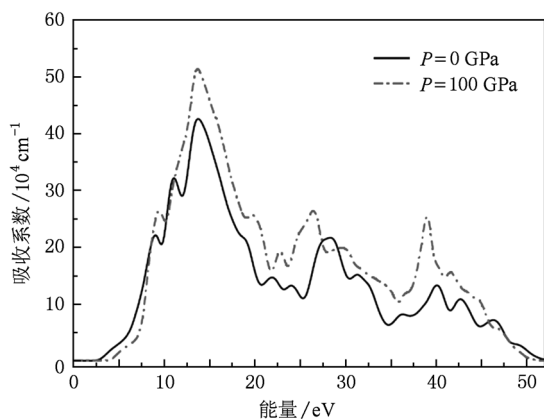


图 8 闪锌矿 GaN 在 0 GPa 和 100 GPa 下的吸收系数  $\alpha(\omega)$

### 3.3.4. GaN 的反射谱

反射谱是能带体系最直接的表现形式,反射谱中的各个峰归属于不同的带间跃迁,与复介电函数的虚部  $\varepsilon_2$  保持一致. 在零压时,如图 9 所示,5 个反射峰对应 5 个介电峰,它们的位置分别为:8.78 eV, 10.95 eV, 15.58 eV, 29.02 eV, 33.06 eV. 在 10.17 eV 处,对应于等离子体频率  $\omega_p$ , 当入射光频率  $\omega$  满足  $0 < \omega < \omega_p$  时,为频率禁带,这一频率区间的光不能传播. 当入射光能量在 0—10.17 eV 时,红外线、可见光、近紫外线及较小部分远紫外线都不能通过,这时晶体表现出金属反射特性. 当入射光能量大于 10.17 eV 时,该材料透明. 在 15.58 eV 处,出现反射率最大值,在可见光区反射率下降,大约为 19%,换句话说,在可见光区会部分地透过 GaN 晶体,根据这种部分透过的特性,可以用 GaN 超薄膜作场致发光器件的透明电极.

当  $P = 100$  GPa 时,在可见光区反射率平均下降了 5% 左右,在近紫外区反射率下降约 2.5%. 在 14.04—16.68 eV 区域内,反射率最大下降约 6%,随着外压力的增加,在低能区  $R(\omega)$  有向高能方向

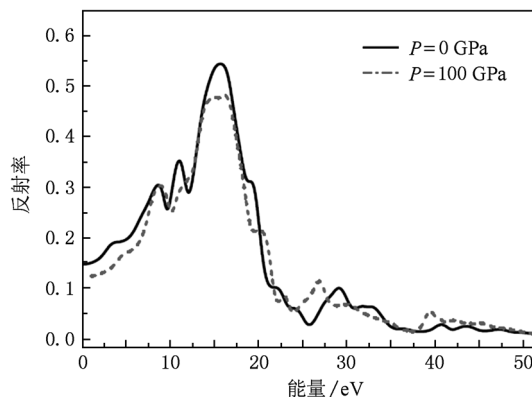


图 9 闪锌矿 GaN 在 0 GPa 和 100 GPa 下的反射谱  $R(\omega)$

移动的趋势,而在高能区  $R(\omega)$  则有向低能方向移动的趋势.

### 3.3.5. GaN 的损失谱

能量损失函数  $L(\omega)$  是描述电子在通过均匀电介质时能量损失情况的物理量,能量损失峰与等离子体振荡相关联. 我们利用(9)式,计算了 GaN 在零压下的能量损失谱. 由图 10 可见:GaN 损失谱最大的峰位于 20.12 eV 处;由态密度图(图 5)和能带结构图(图 3)知,此峰来源于  $G^4$  到导带底的跃迁.

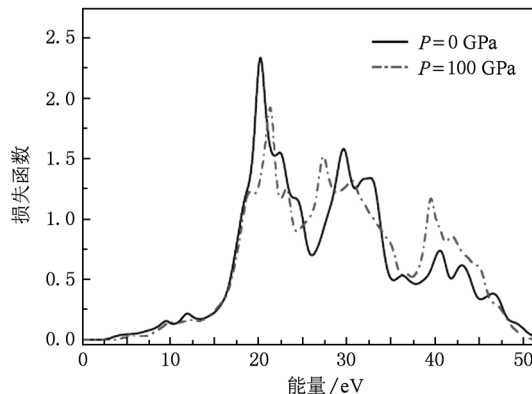


图 10 闪锌矿 GaN 在 0 GPa 和 100 GPa 下的能量损失谱  $L(\omega)$

当  $P = 100$  GPa 时,由图 10 可见几个明显的峰出现在 21.38 eV, 27.4 eV, 30.65 eV, 39.52 eV 处. 在低能区域  $L(\omega)$  谱线明显低于  $P = 0$  GPa 下的谱线. 在能量大于 21.68 eV 后,谱线随外压力的增大而向低能方向移动. 在 39.52 eV 处的尖峰明显高于 0 GPa 下的峰,对应于吸收谱线和消光系数谱的尖峰,这说明此处能量损失随着外压力的增大而加剧.

## 4. 结 论

采用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理平面波赝势方法,结合广义梯度近似下的RPBE和局域密度近似下的CA-PZ交换-关联泛函,计算了高压下闪锌矿 GaN 的弹性性质、电子结构、态密度及光学性质. 我们在两种近似下的结果与实验值和理论值是一致的. 通过对弹性常数、能带结构及态密度的分析,发现弹性常数  $C_{11}$  和  $C_{12}$ 、体模量  $B$  及带隙  $E_g$  对外压力效应非常敏感,都随外压力的增加而增

大,而杨氏模量随外压力的增加而减小. 同时利用计算的能带结构和态密度系统分析了 GaN 的介电函数、折射率、反射率、吸收系数和能量损失函数等光学性质,并给出了在 0 和 100 GPa 的压强下各种光学性质的对比和分析. 由光学性质的分析结果可知:GaN 随着外压力的增大,光吸收在增强、消光系数随着压强的增大向高能方向移动及 GaN 材料可以用来制作防护紫外线辐射的装置,而且此装置防护紫外线辐射的能力会受到外界大气压强高低的影响. 这些分析结果为 GaN 的设计与应用提供了理论依据.

- 
- [1] Mohammad S N, Salvador A A, Morkoc H 1995 *Proceedings of the IEEE*. **83** 1306
  - [2] Strite S, Morkoc H 1992 *J. Vac. Sci. Technol. B* **10** 1237
  - [3] Xing H Y, Fan G H, Zhang Y, Zhao D G 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 450 (in Chinese) [邢海英、范广涵、章勇、赵德刚 2009 物理学报 **58** 450]
  - [4] Rinke P, Scheffler M, Qteish A, Winkelkemper M, Bimberg D, Neugebauer J 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 161919
  - [5] Zhang Y Y, Fan G H, Zhang Y, Zheng S W 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 028503 (in Chinese) [张运炎、范广涵、章勇、郑树文 2011 物理学报 **60** 028503]
  - [6] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J 2002 *J. Phys. Cond. Matt.* **14** 2717
  - [7] Keiji W, Masatoshi S, Hideaki T 2001 *Electrochemistry* **69** 407
  - [8] Hammer B, Hansen L B, Nørskov J K 1999 *Phys. Rev. B* **59** 7413
  - [9] Christensen N E, Gorczyca I 1994 *Phys. Rev. B* **50** 4397
  - [10] Fonoberov V A, Balandin A A 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 7178
  - [11] Li Y H, Xu P S, Pan H B, Xu F Q 2004 *J. Univer. Sci. Technol. China* **34** 637 (in Chinese) [李拥华、徐彭寿、潘海滨、徐法强 2004 中国科学技术大学学报 **34** 637]
  - [12] Paisley M J, Sitar Z, Posthil J B, Davis R F 1989 *J. Vac. Sci. Technol. A* **7** 701
  - [13] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 5815
  - [14] Strite S, Morkoc H 1992 *J. Vac. Technol. B* **10** 1237
  - [15] Stampfl C, Van de Walle C G 1999 *Phys. Rev. B* **59** 5521
  - [16] Shimada K, Sota T, Suzuki K 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 4951
  - [17] Kim K, Lambrecht W R L, Segall B 1996 *Phys. Rev. B* **53** 16310
  - [18] Kim K, Lambrecht W R L, Segall B 1994 *Phys. Rev. B* **50** 1502
  - [19] Wu S, Yang C R, Wu Q, Chen H W, Zhang J H 2009 *Res. & Prog. Solid State Elect.* **29** 615 (in Chinese) [吴松、杨传仁、吴强、陈宏伟、张继华 2009 固体电子学研究进展 **29** 615]
  - [20] Lei T, Moustakas T D, Graham R J, He Y, Berkowitz S J 1992 *J. Appl. Phys.* **71** 4933
  - [21] Anisimov V I, Aryasetiawan F, Lichtenstein A I 1997 *J. Phys. Condens. Matter* **9** 767
  - [22] Peter Y Y, Manuel C 2010 *Fundamentals of Semiconductors*, Fourth Edition (New York: Springer Heidelberg Dordrecht London)
  - [23] Guo J Y, Zheng G, He K H, Chen J Z 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3740 (in Chinese) [郭建云、郑广、何开华、陈敬中 2008 物理学报 **57** 3740]
  - [24] Shen X C 1992 *The Spectrum and Optical Property of Semiconductor* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [沈学础 1992 半导体光谱和光学性质(第二版)(北京:科学出版社)]

# Theoretical investigation of elastic, electronic, and optical properties of zinc-blende structure GaN under high pressure<sup>\*</sup>

Jiao Zhao-Yong<sup>†</sup> Yang Ji-Fei Zhang Xian-Zhou Ma Shu-Hong Guo Yong-Liang

(College of Physics and information Engineering, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China)

(Received 28 December 2010; revised manuscript received 10 February 2011)

## Abstract

The elastic, electronic, and optical properties of zinc-blende structure GaN under high pressure are investigated by using a first-principles ultra-soft pseudo-potential approach of the plane wave based on the density functional theory. The calculated results show the dependences of the elastic constant, the bulk modulus, the young modulus, and the energy gap on the applied pressure, and the results are in good agreement with the experimental and theoretical values. Furthermore, the dielectric function, optical reflectivity, refractive index, absorption coefficient and energy-loss function of GaN are analyzed in terms of the accurately calculated band structure and density of state. The conclusions drawn from the calculations offer theoretical basis for the design and application of GaN.

**Keywords:** first-principles calculations, electronic structure, optical properties, zinc-blende structure GaN

**PACS:** 71.15.Mb, 71.20.-b, 71.20.Nr

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11047026) and the Foundation for University Young Core Instructors of Henan Province, China (Grant No. 2010GGJS-066).

<sup>†</sup> E-mail: zhy\_jiao@htu.cn