

# 稀土元素 (Ce, Pr) 掺杂 GaN 的电子结构和光学性质的理论研究\*

李倩倩 郝秋艳 李英<sup>†</sup> 刘国栋

(河北工业大学材料学院, 天津 300130)

(2012年6月16日收到; 2012年7月31日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波赝势法计算了稀土元素 Ce, Pr 掺杂 GaN 的晶格参数、能带、电子态密度和光学性质, 使用 LSDA + $U$  的方法处理具有强关联作用的稀土 4f 态, 并分析比较计算结果. 计算表明: 掺入 Ce 和 Pr 后的体系相比未掺杂的 GaN 晶格常数增大, 带隙变窄, 并分别在禁带中和价带顶附近引入了局域的杂质能级, 该能级主要由 Ce 和 Pr 的 4f 电子提供; 掺杂后都发生了磁有序化并产生磁矩; 最后定性分析了掺杂前后介电函数和光吸收系数的变化, 掺 Ce 的体系在介电函数和吸收系数的低能区出现了峰值, 该峰的出现和禁带中的杂质能级到导带底的跃迁有关, 而掺 Pr 的体系由于带隙变窄使介电峰和吸收边发生红移.

**关键词:** GaN, 稀土掺杂, 电子结构, 光学性质

**PACS:** 71.20.-b, 71.55.-i, 78.20.Ci

**DOI:** 10.7498/aps.62.017103

## 1 引言

氮化镓 (GaN) 是一种宽禁带直接带隙半导体 (室温下为 3.39 eV), 具有电子漂移饱和速度高、介电常数小、导电性能好、击穿电压高和高温化学稳定性好等特点<sup>[1-4]</sup>. GaN 中的缺陷和杂质对材料的电子输运性质和光学性质有很大的影响, 近年来, 由于稀土具有独特的光学性能, 在实验上和理论上对稀土掺杂 GaN 的光学性质的研究引起了人们广泛的兴趣<sup>[5-9]</sup>. 目前, Eu, Er 和 Tm 掺杂的 GaN 材料已经被用于平板电视等显示设备<sup>[10]</sup>. 另外, 实验证明稀土掺杂半导体的温度猝灭现象会随着基体材料带隙的增加而减小, 因此宽禁带半导体例如 GaN 受到人们的青睐<sup>[11]</sup>.

实验发现将 Ce<sup>3+</sup>, Tb<sup>3+</sup> 和 Eu<sup>3+</sup> 掺杂到 GaN 中出现了很强的红光、绿光和蓝光<sup>[12]</sup>, 将 Tm 注入

GaN 中在 477 nm 处发现了蓝光, 且在 804 nm 处发现了近红外光<sup>[13]</sup>, 在 Pr 掺杂 GaN 的光致发光和电致发光谱中发现了红光 (650 nm)<sup>[14]</sup>. 理论上, Sanna 等<sup>[15]</sup> 用局域密度近似交换关联能 + $U$  (LDA + $U$ ) 的方法研究了稀土 Eu, Er 和 Tm 掺杂 GaN 的相关缺陷, 发现稀土原子会占据 Ga 位, 并且很容易与本征缺陷结合形成复合体. Svane 等<sup>[16]</sup> 用 SIC-LSDA 计算了稀土替代掺杂 GaAs 和 GaN 的缺陷的电子结构. 但是, 理论上对于 Ce 和 Pr 掺杂 GaN 的电子结构和光学性质的研究较少.

本文使用基于密度泛函的第一性原理方法计算了稀土 Ce 和 Pr 掺杂 GaN 的电子结构和光学性质. 通过计算发现 Ce 和 Pr 掺杂 GaN 后都使禁带变窄, 并且分别在禁带中和价带顶附近引入一个局域的杂质能级; 掺入 Ce 后在介电函数虚部和吸收系数谱的低能区出现新的峰, 而掺 Pr 后使介电峰和吸收边发生红移.

\* 河北省自然科学基金 (批准号: A2010000013)、天津市自然科学基金 (批准号: 10JCYBJC03000) 和国家自然科学基金 (批准号: 50901027) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: liyingphy@126.com

## 2 计算模型和方法

### 2.1 计算模型

理想 GaN 是六方纤锌矿结构 (如图 1(a)), 所属空间群为  $P63mc$ , 所用晶格常数为实验值  $a = b = 0.3189$  nm,  $c = 0.5185$  nm,  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 120^\circ$ , 其中  $c/a$  为 1.626, 比理想六角柱密堆积结构的 1.633 稍小,  $c$  轴方向 Ga—N 的键长为 0.1969 nm, 其他方向为 0.1965 nm. 本文计算中采用 GaN 的  $2 \times 2 \times 2$  超晶胞, 包括 32 个原子, 稀土元素 (Ce, Pr) 掺杂 GaN 时替代 Ga 的位置, 因为理论计算和实验都表明稀土元素掺杂替代 Ga 位是最稳定的 [17,18], 掺杂浓度为 6.25% (如图 1(b)).

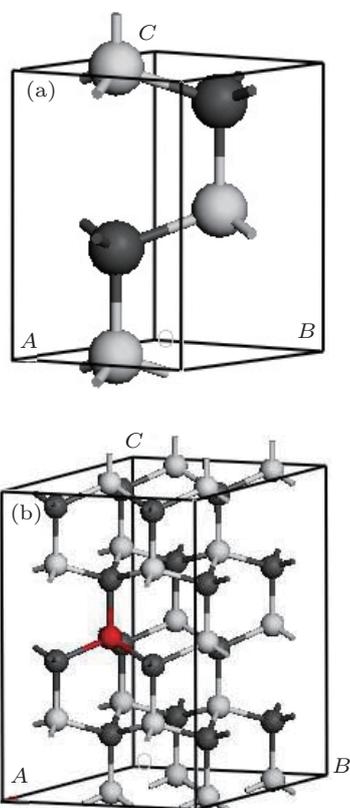


图 1 (a) 纤锌矿 GaN 的原胞; (b)  $2 \times 2 \times 2$  的 GaN 超胞掺杂一个稀土原子, 其中灰白色为 Ga 原子, 黑色为 N 原子, 红色为掺杂的稀土原子

### 2.2 计算方法

本文的计算工作都是在 VASP 软件下完成的, 利用总能量平面波赝势方法, 将离子势用赝势替代, 电子波函数通过平面波基组展开, 电子-电子相互作用的交换和相关势采用投影缀加波赝势中的 PBE 近似, 截断能为 500 eV,  $K$  点设置为  $5 \times 5 \times 3$ , 总能收敛标准为  $10^{-5}$  eV, 原子间的相互作用力不

大于 0.003 eV/nm. 将 Ga  $3d^{10}4s^24p^1$ , N  $2s^22p^3$ , Ce  $4f^15s^25p^65d^16s^2$ , Pr  $4f^25s^25p^65d^16s^2$  作为价电子考虑, 由于稀土元素属于强关联体系, 所以对稀土的 4f 轨道使用 LSDA +  $U$  的方法计算, 计算所使用的  $U$  和  $J$  从其他文献上获得 [19], Ce 的  $U = 7.47$  eV,  $J = 0.99$  eV, Pr 的  $U = 7.28$  eV,  $J = 0.94$  eV.

## 3 结果与分析

### 3.1 晶体参数

计算中对 GaN 的超胞进行结构优化, 所得晶格常数稍微大于实验值, 优化后的  $c/a$  为 1.631, 与实验值 1.626 符合得很好, 偏差为 0.31%, 和他人的计算结果 [20,21] 比较相差不大. 由于  $Ce^{3+}$  (0.103 nm) 和  $Pr^{3+}$  (0.101 nm) 的离子半径大于  $Ga^{3+}$  (0.062 nm) 的离子半径, 所以 Ce, Pr 替代 Ga 掺杂后晶格常数都有所增大, 如表 1 所示. 而 Ce 的离子半径要比 Pr 的离子半径大, 使得掺入 Ce 后 GaN (GaN:Ce) 的晶格常数比掺入 Pr 后 GaN (GaN:Pr) 的晶格常数大. 三个相等的 Ce—N (Pr—N) 的键长和沿  $c$  轴方向的 Ce—N (Pr—N) 的键长为 0.2216 nm (0.2211 nm) 和 0.2269 nm (0.2271 nm), 比相应的 Ga—N 的键长 0.1964 nm 和 0.1971 nm 分别增大了 13% (12.6%) 和 15% (15.2%).

表 1 几何优化后的晶格参数

	$a$ /nm	$c$ /nm	键长/nm
GaN	0.3211	0.5238	0.1964, 0.1971
他人计算结果	0.3203 <sup>[20]</sup>	0.5217	—
	0.322 <sup>[21]</sup>	0.523	—
GaN:Ce	0.3261	0.5320	0.2216, 0.2269
GaN:Pr	0.3258	0.5316	0.2211, 0.2271

### 3.2 能带结构

为了与其他理论研究进行比较, 我们首先计算了理想的纤锌矿 GaN 的能带结构, 如图 2(a) 所示. 可以看到, 价带顶和导带底都位于  $\Gamma$  点, 是直接带隙半导体, 带隙宽度为 1.75 eV, 略低于邢海英等 [22] 1.98 eV 的计算结果, 但均小于实验值 3.39 eV. 这是由于在计算中采用的密度泛函理论 (DFT) 是基态理论, 而能隙属于激发态, 得到的结果偏低是采用该理论时普遍存在的现象, 但这并不影响对其他计算结果的定性分析 [23–25].

图 2(b) 和 2(c) 分别为掺杂 Ce, Pr 后 GaN 的能带结构图. 与图 2(a) 相比, 我们发现掺杂稀土元素后晶体的价带和导带数明显增多、变密, 同时价带顶偏离  $\Gamma$  点, 变成间接带隙半导体. GaN:Ce 的带隙为 1.26 eV, 与实验上发现的带隙变窄的结果一致 [26,27], 并且在禁带中引入了强局域的杂质能级

级, 该能级位于价带顶上方约 0.67 eV 处. Ce 的掺入使能带向低能方向移动, 费米能级位于导带底附近, 说明 Ce 杂质具有施主的性质. GaN:Pr 的带隙为 1.25 eV, 在自旋向上的能带中的价带顶附近出现一局域的杂质能级. 掺杂后带隙变窄有利于光学跃迁从而改善 GaN 的光学性能.

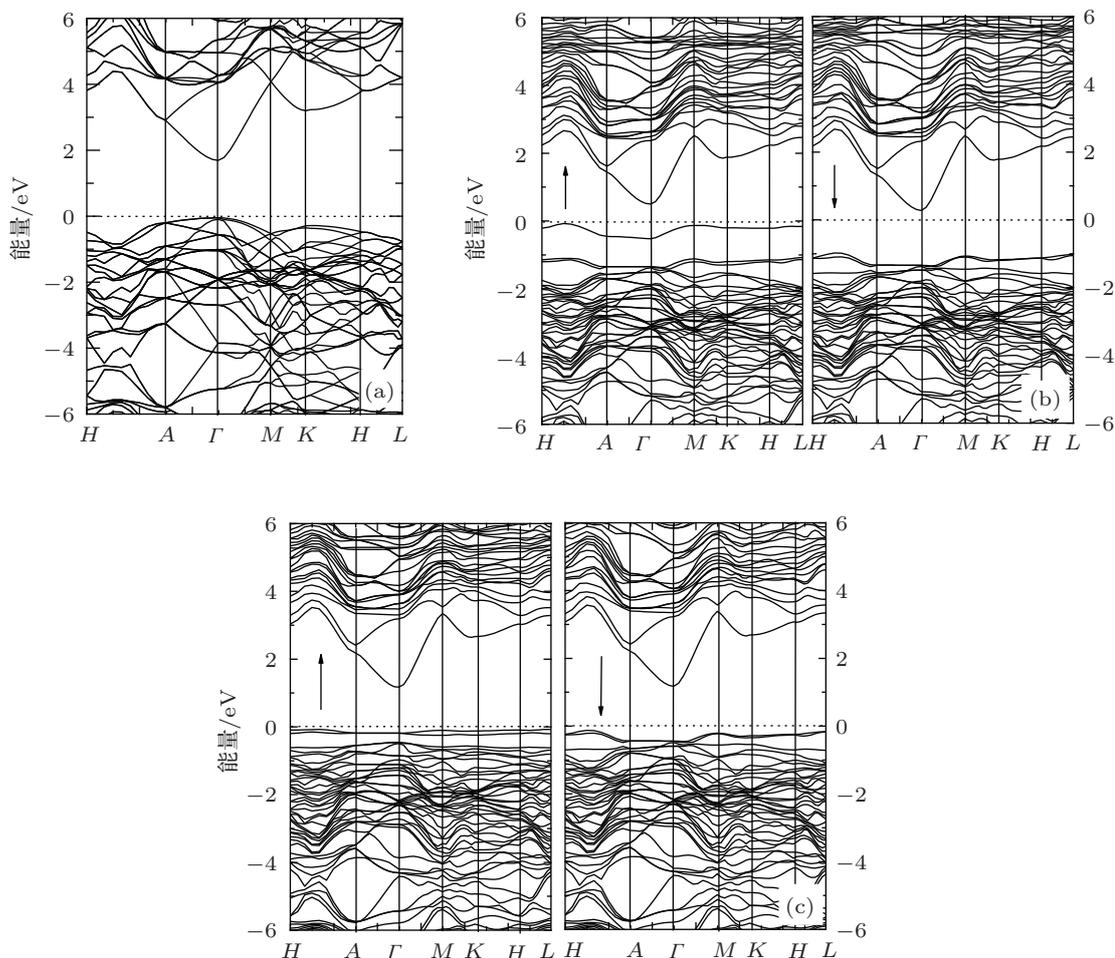


图 2 理想 GaN (a), GaN:Ce (b), GaN:Pr (c) 的能带结构图

### 3.3 电子态密度分析

图 3 给出了掺杂 Ce, 掺 Pr 的 GaN 的总态密度和分波态密度图. 从图 3(a) 可以看出, 对于 GaN:Ce,  $-17.7$ — $-12.2$  eV 的下价带主要由 Ga-3d 态和 N-2s 态提供,  $-7.8$ — $-0.9$  eV 的上价带主要由 Ga-2s, Ga-2p 和 N-2p 态决定, 禁带中引入的能级由 Ce-4f 和 N-2p 提供. 导带中的 5.3 eV (自旋向上) 和 5.45 eV (自旋向下) 的尖峰来自 Ce-4f 态, 这体现了 Ce-4f 态的强局域性质. Ce 的 5d 电子对价带顶附近和导带都有贡献, 并且使价带顶偏离了  $\Gamma$  点. Ce 杂质的掺入导致了磁有序性, 计算所得自旋磁矩为  $1.00 \mu_B$ ,

大部分磁矩来自 Ce-4f 轨道, 小部分来自被极化的 N-2p 轨道.

对于 GaN:Pr, 从图 3(b) Pr 的分波态密度图可看出, Pr 的 4f 电子对价带和导带都有贡献, 价带顶的局域能级来自 Pr-4f 态, 价带中在  $-0.6$  eV (自旋向上) 和  $-0.2$  eV (自旋向下) 以及导带中在 5.3 eV (自旋向上) 和 6.5 eV (自旋向下) 由于 Pr-4f 态的强局域性而出现尖峰, Pr 的 5d 电子主要贡献于价带顶和导带, 计算所得的自旋磁矩是  $2.00 \mu_B$ .

我们还计算了不同  $U$ - $J$  的值对掺杂元素的 4f 电子的影响, 图 4 给出了 Ce ( $U$ - $J = 0$ — $7.56$  eV) 和

Pr ( $U-J = 0-6.34$  eV) 的 4f 电子的自旋极化的态密度图. 对于体系 GaN:Ce, 当不加  $U$  时 ( $U-J = 0$ ), 局域的由 4f 态贡献的能级位于费米能级以上附近, 随着  $U-J$  值的增加, 自旋向上的被电子填充的 4f 态向低能方向移动, 而未被电子填充的自旋向上和自旋向下的 4f 态向高能方向移动. 被电子填充的 4f 态和空的 4f 态的移动都和  $U-J$  的值成线性关系. 对于体系 GaN:Pr, 当不加  $U$  时 ( $U-J = 0$ ), 费米能级穿过局域的 4f 态能级, 随着  $U-J$  值的增加, 未被填充的自旋向上和自旋向下的 4f 态向高能

方向移动, 被电子填充的自旋向上的 4f 态向低能方向移动.

通过态密度图可以看到, 掺杂元素 Ce, Pr 的价电子对 GaN 的总态密度影响不大, 但都产生了一定的影响, 纯净 GaN 的费米能级位于价带顶; GaN:Ce 体系的能带向低能方向移动使费米能级位于导带底附近, 并且由于稀土原子 Ce 和 Pr 未满足的 4f 轨道, 使掺杂后的体系产生磁有序性, GaN:Pr 体系的自旋磁矩大于 GaN:Ce 体系的自旋磁矩.

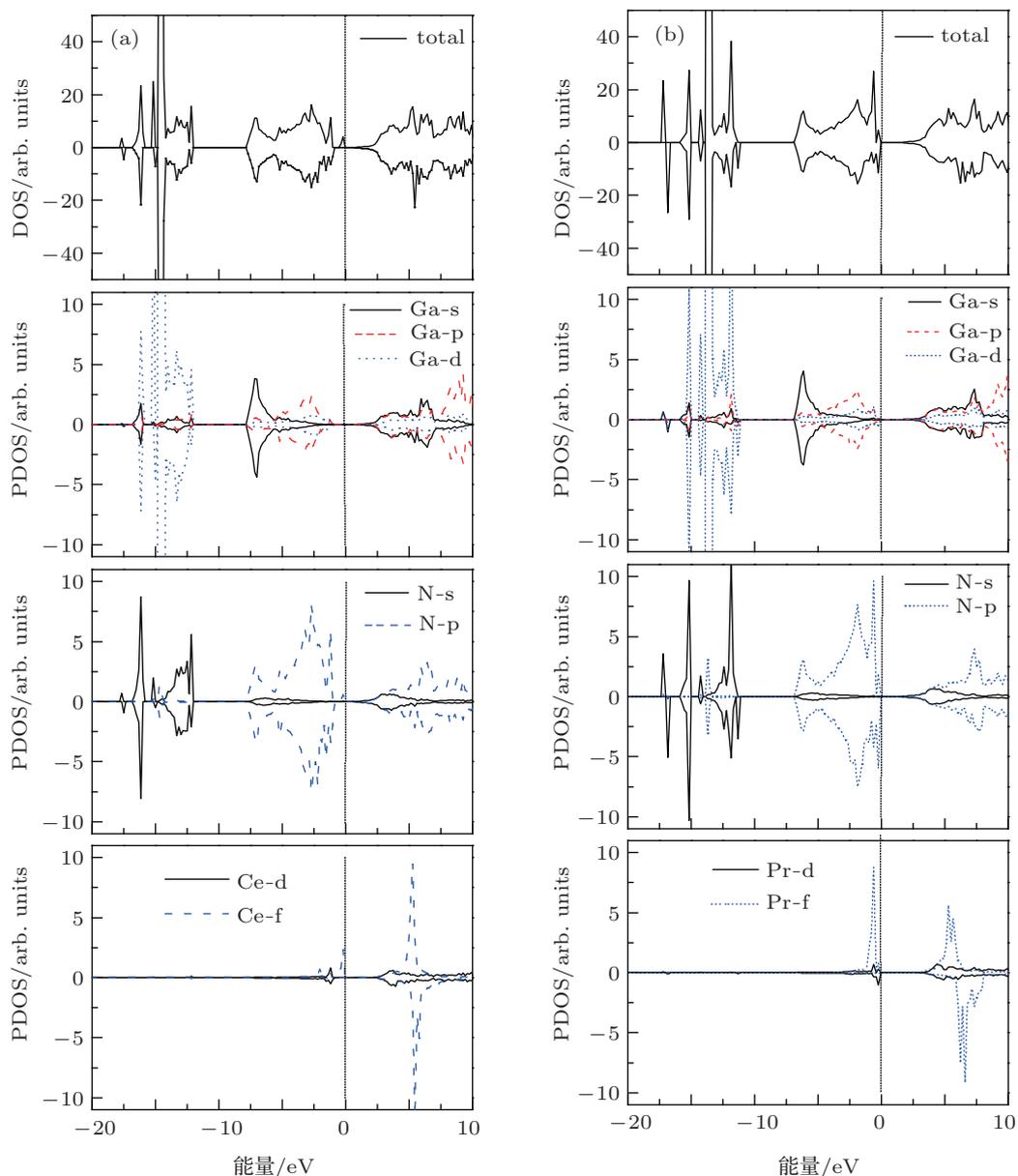


图3 GaN:Ce (a), GaN:Pr (b) 体系的总带密度和分波态密度图

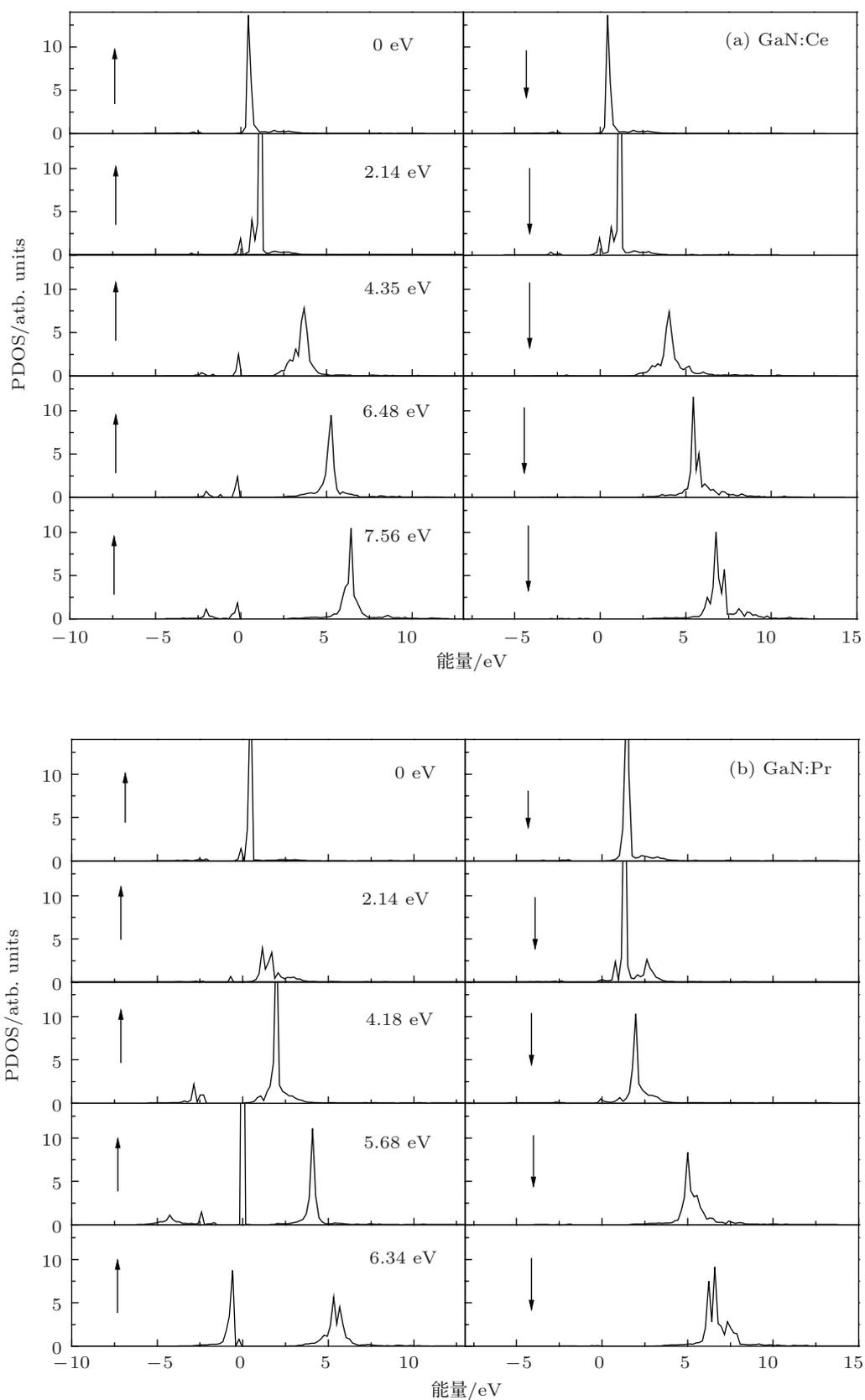


图4 不同的  $U-J$  值下  $4f$  的自旋极化的分波态密度 (a) GaN:Ce 体系的 Ce- $4f$  的分波态密度 ( $U-J = 0-7.56$  eV); (b) GaN:Pr 体系的 Pr- $4f$  的分波态密度 ( $U-J = 0-6.34$  eV)

### 3.4 光学性质

在线性响应范围内, 固体宏观光学响应函数通常可以由光的复介电函数  $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$  来描述, 其中  $\epsilon_1(\omega) = n_2^2 - k_2^2$ ,  $\epsilon_2(\omega) = 2nk$ , 根据直接跃迁概率定义和 Kramers-Kronig 色散关系可以推导出介电函数的虚部和实部为 [28,29]

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{C}{\omega^2} \sum_{C,V} \int_{BZ} \frac{2}{(2\pi)^3} |M_{CV}(\mathbf{K})|^2 \times \delta(E_C^K - E_V^K - h\omega) d^3\mathbf{K}, \quad (1)$$

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \rho_0 \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega', \quad (2)$$

吸收系数  $\alpha(\omega)$  可以通过下列公式得出:

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2\omega} \left[ \sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} - \epsilon_1(\omega) \right]^{1/2}, \quad (3)$$

其中, 下标 C, V 分别表示导带和价带, BZ 表示第一布里渊区,  $\mathbf{K}$  为倒格矢,  $|M_{CV}(\mathbf{K})|^2$  为动量矩阵元, C 为常数,  $\omega$  为圆周频率,  $E_C^K$  和  $E_V^K$  分别为导带和价带的本征能级.

由于晶格对称性, 入射光有沿 [100] 和 [001] 方向的线性偏振, 而沿 [100] 和 [010] 方向的介电函数是相同的. 图 5 和图 6 为理想 GaN 和 GaN:Ce, GaN:Pr 的介电函数与能量的关系图. 从图 5 可以看出, 未掺杂的 GaN, 在 0—1.75 eV 区域内没有介电峰, 在 2.62 eV 附近, 出现一个肩峰, 对应于价带顶到导带底的跃迁, 对于  $\epsilon_2^{xx}$ , 在 6.34, 7.84, 8.89 和 10.94 eV 处出现了介电峰, 对于  $\epsilon_2^{zz}$ , 在 5.76, 7.84, 9.43, 10.56 和 11.22 eV 处出现峰值, 主要来自上价带中的 Ga-2p 或 N-2p 到导带中的跃迁, 或者是下价带中的 Ga-3d 或 N-2s 到价带的跃迁, 计算的介电常数  $\epsilon_0^{xx}$  和  $\epsilon_0^{zz}$  分别为 5.93 和 6.08 eV, 该计算结果和其他人的计算结果一致 [30].

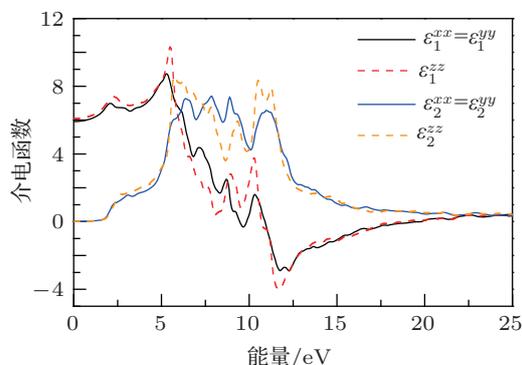


图 5 理想 GaN 的介电函数

对于掺 Ce 的体系,  $\epsilon_2^{xx}$  和  $\epsilon_2^{zz}$  分别在 0.32 和

0.61 eV 处出现了很强的介电峰, 这是由禁带中的 Ce 的 4f 电子到导带底之间的跃迁引起的, 其他的  $\epsilon_2^{xx}$  和  $\epsilon_2^{zz}$  峰分别位于 6.82, 8.82, 10.79 eV 和 6.28, 8.69, 10.64 eV, 相对于未掺杂的 GaN, 位于 7.84 和 11.22 eV 的峰消失, 而其他的峰发生了轻微的偏移, 这是 Ce 掺入后的晶格弛豫造成的, GaN:Ce 的介电常数  $\epsilon_0^{xx}$  和  $\epsilon_0^{zz}$  分别为 63.90 和 10.98. 对于掺 Pr 的体系, 在低能区没有出现新的介电峰, 位于未掺杂 GaN 2.62 eV 附近的肩峰消失, 并且分别在  $\epsilon_2^{xx}$  和  $\epsilon_2^{zz}$  的 2.13 和 2.24 eV 处出现一个尖峰, 这是由价带顶附近被占据的 4f 电子到导带底之间的跃迁引起的. 此外, 由于带隙变窄, 使第一个介电峰发生了红移, 其他的  $\epsilon_2^{xx}$  和  $\epsilon_2^{zz}$  峰分别位于 6.76, 8.94, 10.72 eV 和 6.22, 9.01, 10.77 eV, GaN:Pr 的介电常数  $\epsilon_0^{xx}$  和  $\epsilon_0^{zz}$  分别为 6.32 和 6.34 eV.

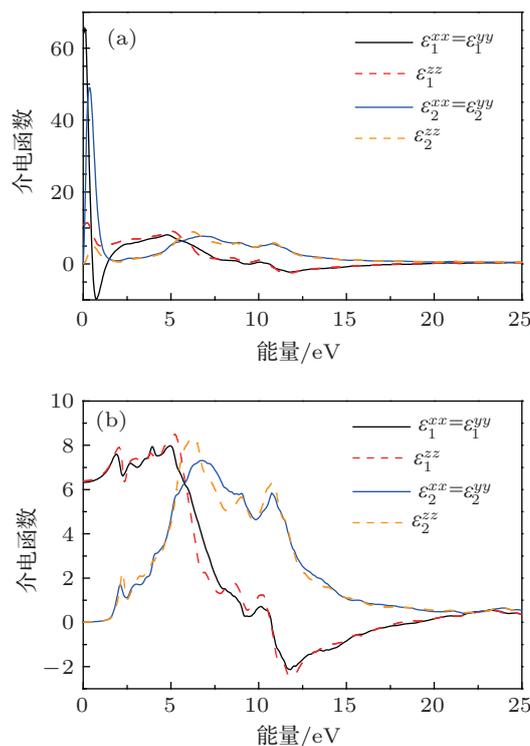


图 6 GaN:Ce (a) 和 GaN:Pr (b) 的介电函数

图 7 为理想 GaN 和 GaN:Ce, GaN:Pr 沿 [100] 方向的吸收系数, 理想 GaN 的光吸收边为 1.78 eV, 对应于计算的带隙, 即价带顶到导带底的跃迁能量. Ce 替位掺杂 Ga 后, 在 0.81 eV 处出现一个新的吸收峰, 该峰来自 Ce 的 4f 电子到导带底的跃迁. Pr 替位掺杂 Ga 后, 没有出现新的吸收峰, 但是光吸收边稍微向低能方向移动, 发生了红移现象, 这是由于掺杂后带隙变窄引起的. 理想 GaN 的主吸收峰

位于 11.71 eV, 而 GaN:Ce 和 GaN:Pr 的主吸收峰位置都不变但强度减小, 这是由于掺杂后的晶格弛豫引起的.

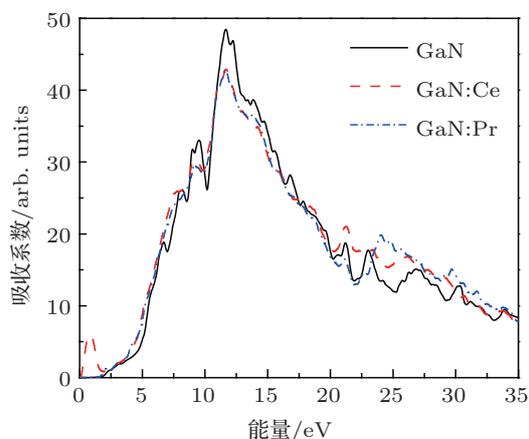


图7 理想 GaN, GaN:Ce 和 GaN:Pr 的吸收系数

## 4 结论

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波赝势法中的 LSDA + $U$  方法计算了理想 GaN 和 GaN:Ce, GaN:Pr 的电子结构和光学性质. 电子结构的计算表明, Ce 的掺入在禁带中引入了一个局部的能级, 该能级主要来自于 Ce 的 4f 态; Pr 的掺入在价带顶引入了主要由 Pr 的 4f 态贡献的能级; 掺入 Ce 和 Pr 后都使体系变成间接带隙半导体并且带隙变窄. 稀土元素掺杂后 GaN 的光学性质发生了变化, GaN:Ce 在低能区出现了新的介电峰和吸收峰, 该峰来自带隙中的杂质能级到导带底的跃迁, GaN:Pr 由于带隙变窄使第一个介电峰和光吸收边发生了红移. 该研究发现, 掺杂稀土元素 Ce 和 Pr 后 GaN 体系的静态介电常数都增大了, 这对开发新的介电材料提供了理论依据.

- [1] Morkoc H 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 1363
- [2] Davies S, Huang T S, Gass M H, Papworth A J, Joyce T B, Chalker P R 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 2556
- [3] Wang T X, Li Y, Liu Y M 2011 *Phys. Stat. Sol. B* **248** 1671
- [4] Kang B S, Kim S, Ren F, Johnson J W, Therrien R J, Rajagopal P, Roberts J C, Piner E L, Linticum K J, Chu S N G, Baik K, Gila B P, Abernathy C R, Pearton S J 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 2962
- [5] Dridi Z, Lazreg A, Rozale H, Bouhafs B 2010 *Comp. Mater. Sci.* **48** 743
- [6] Jones R 2006 *Opt. Mater.* **28** 718
- [7] Sanna S, Schmidt W G, Frauenheim T, Gerstmann U 2009 *Phys. Rev. B* **80** 104120
- [8] Chen S, Dierre B, Lee W, Sekiguchi T, Tomita S, Kudo H, Akimoto K 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 181901
- [9] Jiang L J, Wang X L, Xiao H L, Wang Z G, Yang C B, Zhang M L 2011 *Appl. Phys. A* **104** 429
- [10] Steckl A J, Heikenfeld J C, Lee D S, Garter M J, Baker C C, Wang Y Q, Jones R 2002 *Select. Top. Quantum Electron.* **8** 749
- [11] Favennec P N, L'Haridon H, Salvi M, Moutonnet D, Le Guillou Y 1989 *Electron. Lett.* **25** 718
- [12] Aldabergenova S B, Osvet A, Frank G, Strunk H P, Taylor P C, Andreev A A 2002 *J. Non-Cryst. Solids* **299–302** 709
- [13] Lorenz K, Alves E, Wahl U, Monteir T, Dalmasso S, Martin R W, O'Donnell K P, Vianden R 2003 *Mater. Sci. Eng. B* **105** 97
- [14] Birkhahn R, Garter M, Steckl A J 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 2161
- [15] Sanna S, Hourahine B, Frauenheim Th, Gerstmann U 2008 *Phys. Stat. Sol. C* **5** 2358
- [16] Svane A, Christensen N E, Petit L, Szotek Z, Temmerman W M 2006 *Phys. Rev. B* **74** 165204
- [17] Filhol J S, Jones R, Shaw M J, Briddon P R 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 2841
- [18] Davies R, Abernathy C R, Pearton S J, Norton D P, Ivill M P, Ren F 2009 *Chem. Eng. Commun.* **196** 1030
- [19] Larson P, Lambrecht W R L 2007 *Phys. Rev. B* **75** 045114
- [20] Gao G Y, Yao K L, Liu Z L, Li Y L, Li Y C, Liu Q M 2006 *Solid State Commun.* **138** 494
- [21] Xiong Z, Luo L, Peng J, Liu G 2009 *J. Phys. Chem. Solids* **70** 1223
- [22] 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]
- [23] Sun J, Wang H T, He J L, Tian Y J 2005 *Phys. Rev. B* **71** 125132
- [24] Ding S F, Fan G H, Li S T, Xiao B 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4062 (in Chinese) [丁少锋, 范广涵, 李述体, 肖冰 2007 物理学报 **56** 4062]
- [25] Yang Y T, Wu J, Cai Y R, Ding R X, Song J X, Shi L C 2008 *Acta Phys. Sin.* (in Chinese) **57** 7151 [杨银堂, 武军, 蔡玉荣, 丁瑞雪, 宋久旭, 石立春 2008 物理学报 **57** 7151]
- [26] Majid A, Iqbal J, Ali A 2011 *J. Supercond. Nov. Magn.* **24** 585
- [27] Majid A, Ali A 2009 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** 045412
- [28] 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]
- [29] Sheng X C 2003 *The Spectrum and Optical Property of Semiconductor* (Beijing: Science Press) p76 (in Chinese) [沈学基 2003 半导体光谱和光学性质 (第 2 版) (北京: 科学出版社) 第 76 页]
- [30] Zhang S, Shi J, Zhang M, Yang M, Li J 2011 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **44** 495304

# Theory study of rare earth (Ce, Pr) doped GaN in electronic structure and optical property\*

Li Qian-Qian Hao Qiu-Yan Li Ying<sup>†</sup> Liu Guo-Dong

(School of Material Science and Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China)

(Received 16 June 2012; revised manuscript received 31 July 2012)

## Abstract

Using the pseudopotential plane-wave method within the density functional theory as implemented in the Vienna *ab-initio* simulation package, we investigate the crystal parameters, electronic structures and optical properties of rare earth Ce and Pr doped GaN. The local spin density approximation with Hubbard-*U* corrections method is used to treat the correlation effect of strongly localized rare-earth 4f electron states. The results show that the crystal parameters increase after doping Ce and Pr in GaN. The Ce impurity introduces defect level in the gap while for Pr the level lies near the valence band maximum, and the defect levels are contributed by Ce and Pr 4f electron states. In addition, the dopings of Ce and Pr give rise to spin polarization and magnetic-order. For GaN:Ce, there appear two new peaks, one is in the low energy region of imaginary dielectric function and the other is in the low energy region of absorption coefficient. These new peaks are probably related to the defect level in the gap. For GaN:Pr, red shifts of the dielectric peak and absorption edge duo to bandgap narrowing are observed.

**Keywords:** GaN, rare earth-doped, electronic structure, optical properties

**PACS:** 71.20.-b, 71.55.-i, 78.20.Ci

**DOI:** 10.7498/aps.62.017103

---

\* Project supported by the Nature Science Foundation of Hebei Province, China (Grant No. A2010000013), the Nature Science Foundation of Tianjin City, China (Grant No. 10JCYBJC03000), and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50901027).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: liyingphy@126.com