

# Al, Mg 掺杂 GaN 电子结构及光学性质的第一性原理研究\*

郭建云<sup>1)</sup> 郑 广<sup>2)†</sup> 何开华<sup>2)‡</sup> 陈敬中<sup>1)</sup>

1) 中国地质大学材料科学与化学工程学院, 武汉 430074)

2) 中国地质大学数学与物理学院, 武汉 430074)

3) 中国地质大学材料模拟与计算物理研究所, 武汉 430074)

(2007 年 10 月 13 日收到, 2007 年 12 月 4 日收到修改稿)

基于密度泛函理论, 采用广义梯度近似方法, 计算了 Al, Mg 掺杂的闪锌矿型 GaN 的电子结构和光学性质, 分析了其电子态分布与结构的关系, 给出了掺杂前后 GaN 体系的介电函数和复折射率函数. 计算结果表明掺有 Mg 的 GaN 晶体空穴浓度增大, 会明显提高材料的电导率, 而 Al 掺杂 GaN 晶体的载流子浓度不变, 只是光学带隙变宽. 通过分析掺杂前后 GaN 晶体的介电函数和复折射率函数, 解释了体系的发光机理, 为 GaN 材料光电性能的进一步开发与应用提供了理论依据. 通过比较可知, 所得出的计算结果与现有文献符合得很好.

关键词: GaN 晶体, 电子结构, 光学性质, 掺杂

PACC: 7115, 7120, 7125, 7865K

## 1. 引 言

作为第三代半导体材料的代表, 氮化镓基半导体材料是新兴半导体光电产业的核心材料和基础器件, 不仅带来了 IT 行业数字化存储技术的革命, 也将推动通讯技术发展, 并彻底改变人类传统照明的历史<sup>[1]</sup>. 氮化镓基半导体材料具有宽的直接带隙、高的击穿场强、高的热导率和非常好的物理与化学稳定性等特点, 在短波长光电器件、高温器件和高频大功率器件等方面有广泛的应用前景, 其物理性质引起了人们的重视, 成为半导体材料和光电子器件的研究热点<sup>[2]</sup>. 对理想半导体掺杂可以使其性能得到更好的应用, 比如 Al 掺杂到 GaN 晶体中可使得光学带隙在 3.42—6.20 eV (300 K 时) 范围变化, 使得其发射波长覆盖整个可见光区及部分紫外线区; Mg 掺杂到 GaN 晶体中可得到 p 型 GaN, p 型 GaN 的实现, 解决了制造 GaN 发光器件的一个难题. 实际上, Al, Mg 掺杂 GaN, 不论在实验上还是在理论上都有大量的研究. 由于 AlGaIn 能带结构中能带间隙与对应之弯曲系数 (bowing parameter) 与发光波长有直接关系, 尤其弯曲系数在设计发光组件的发射波长上扮

演着绝对重要的角色, 所以国内外有不少研究者以实验或理论计算的方法进行研究<sup>[3-6]</sup>; GaN 高浓度的 p 型掺杂一直是个难题, Amano 等人<sup>[7]</sup>利用低能电子束辐射 (LEEBI) 处理掺 Mg 的 GaN, 得到了低阻的 p 型 GaN, 取得了 p 型掺杂的重大突破. 但是 LEEBI 工艺在制造不少器件的时候存在着很多的限制, 因为只有 GaN 薄膜表面很薄的一层 p 型掺杂浓度很高. Nakamura 等人<sup>[8]</sup>发明了快速热退火法 (rapid thermal annealing), 他们将掺 Mg 的 GaN 在 N<sub>2</sub> 气氛中、700—800°C 下退火, 得到了 p 型 GaN, 发现空穴浓度和迁移率都大大提高了. 至今, 如何获得高掺杂浓度以及高质量的 p 型 GaN 仍是热点问题, 国内外对此有大量的报道<sup>[9-11]</sup>. 但对于 Al, Mg 掺杂闪锌矿结构 GaN 晶体的电子结构和光学性质理论研究目前报道得比较少, 而运用平面波赝势方法 (PWP) 理论研究的目前还未见报道.

本文用平面波赝势方法对闪锌矿结构的 GaN 晶体中掺入杂质  $M$  ( $M = \text{Al}, \text{Mg}$ ) 进行超胞处理, 计算了两种掺杂情况下 GaN 材料的电子结构和光学性能, 分析了其电子态分布与结构的关系, 并深入研究了掺杂对体系导电性能的影响; 研究了掺杂前后 GaN 晶体的光学性质, 解释了体系的发光机理. 所得

\* 湖北省杰出青年科学基金 (批准号 2006ABB031) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: gzhen25@yahoo.com

到的结果与有关文献一致。

## 2. 理论模型和计算方法

### 2.1. 理论模型

GaN 通常有纤锌矿和闪锌矿两种结构<sup>[12]</sup>, 本文采用的是闪锌矿结构, 它属于  $F-43m(216)$  空间群, 晶格常数  $a = b = c = 0.450 \text{ nm}^{[13]}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ , 在体对角线的  $1/4$  处为 N 原子, 八个角和六个面心为 Ga 原子, 每个晶胞内含有 4 个 Ga 原子和 4 个 N 原子. 计算时超晶胞为最低对称 ( $P1$ ), 并取  $2 \times 1 \times 1$  的超晶胞 (见图 1), 每个超晶胞内包含 8 个 Ga 原子和 8 个 N 原子. 掺杂时,  $M$  ( $M = \text{Al}, \text{Mg}$ ) 原子直接取代处于  $0.5 \ 0.5 \ 0.5$  的 Ga 原子.

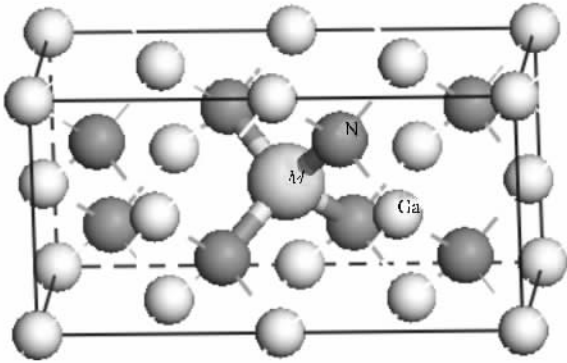


图 1 闪锌矿 GaN 掺  $M$  ( $M = \text{Al}, \text{Mg}$ ) 的  $2 \times 1 \times 1$  超晶胞结构图

### 2.2. 计算方法

本文的计算工作是由基于密度泛函理论的头算量子力学程序 Castep 完成的<sup>[14]</sup>. 采用平面波基赝势法, 对理想和掺杂后的 GaN 超原胞 ( $2 \times 1 \times 1$ ) 进行几何优化, 交换-关联能用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, 简称为 GGA)<sup>[15]</sup> 来描述, 为确保计算速度并能满足足够的精度, 在计算时平面波截止能量 (cut off energy) 都取  $350 \text{ eV}$ , 迭代过程中的收敛精度为  $2 \times 10^{-5} \text{ eV/原子}$ , 也即作用在每个原子上的力不大于  $0.5 \text{ eV/nm}$ , 内应力不大于  $0.1 \text{ GPa}$ ,  $K$  网格 ( $K$ ) 的大小都为  $2 \times 4 \times 4$ , 保证了体系能量和构型在准完备平面波基水平上的收敛.

### 2.3. 光学性质的理论描述

体系在较小波矢下对光电场的线性响应由复介电常数  $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$  或者用复折射率函

数  $N = n + ik$  来描述, 其中  $\epsilon_1 = n^2 - k^2$ ,  $\epsilon_2 = 2nk$ .

由于计算电子结构中无论是带间还是带内跃迁频率都远超过声子频率<sup>[16]</sup>, 而且使用的方法是单电子近似方法, 故仅考虑电子激发. 从量子力学的观点看, 带间跃迁光吸收过程是电子在辐射电磁场微扰作用下从低能态跃迁到高能态过程. 从直接跃迁概率的定义和色散关系可推导出晶体介电常数虚部为<sup>[17]</sup>

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

其中, 下标  $C, V$  分别表示导带和价带,  $\text{BZ}$  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.

## 3. 计算结果与讨论

### 3.1. Al, Mg 掺杂 GaN 电子结构

#### 3.1.1. 结构性质

对理想 GaN 晶体以及两种掺杂情况进行结构优化, 优化后的晶胞参数如表 1 所示.

表 1 理想 GaN 以及 Al, Mg 掺杂 GaN 的晶胞参数值 (单位: nm)

| 名称     | 本文     | 理论结果   | 实验值                             |
|--------|--------|--|---------------------------------|
| GaN    | 0.4525 | $0.4497^{[18]}$ $0.4538^{[19]}$<br>$0.4528^{[20]}$ $0.4590^{[21]}$ | $0.4500^{[13]}$ $0.4510^{[22]}$ |
| GaN:Al | 0.4497 | $0.4506^*$   | —                               |
| GaN:Mg | 0.4529 | —  | —                               |

\* 根据 Vegard's 定律计算出来的, 其中  $x$  取  $0.875$ ,  $a_{\text{GaN}}$  取  $0.4525 \text{ nm}$ ,  $a_{\text{AlN}}$  取  $0.437 \text{ nm}^{[23]}$ .

从表 1 中可以看出, 本工作中的晶胞参数计算结果与其他计算结果以及实验值吻合得比较好. 从优化后的数据可以看出 Al 掺杂后晶胞参数略有减少, 这是因为  $\text{Al}^{3+}$  的离子半径较  $\text{Ga}^{3+}$  的离子半径小, 用离子半径小的去取代离子半径大的, 它的体积应该是减小的, 这一点从它们形成的键长也可看出 ( $\text{Ga-N}$  键为  $0.196 \text{ nm}$ ,  $\text{Al-N}$  键为  $0.187 \text{ nm}$ ). 但是这里有个反常现象, 本来  $\text{Mg}^{2+}$  的离子半径比  $\text{Ga}^{3+}$  的离子半径小, 得出的参数也应是减小的, 而本文中得出的结果反而略有增大. 我们认为出现这一反常现象主要是因为形成的  $\text{Mg-N}$  键键长 ( $0.206 \text{ nm}$ ) 以及

远离 Mg 的 Ga—N 键键长(0.198 nm)都比 Ga—N 键的平均值(0.196 nm)长,而且 Mg<sup>2+</sup>对 Ga<sup>3+</sup>的替代造成了晶格畸变,在结晶过程中产生了残余应力,使得能量升高,体积增大,所以它的晶胞参数稍微有些增大.这一现象与文献 [24] 中所论述的类似.

### 3.1.2. 体系的分波态密度

图 2(a)–(c)给出了理想 GaN 晶体以及两种掺杂情况的总体态密度.

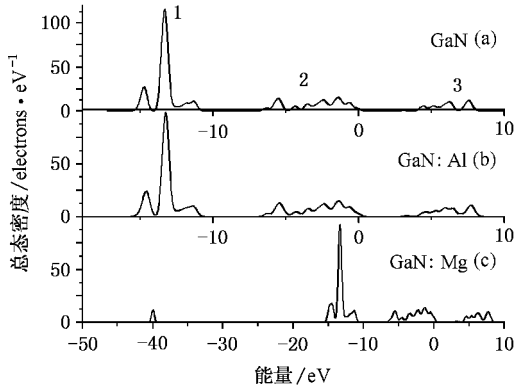


图 2 理想 GaN 晶体以及两种掺杂情况的 DOS 图

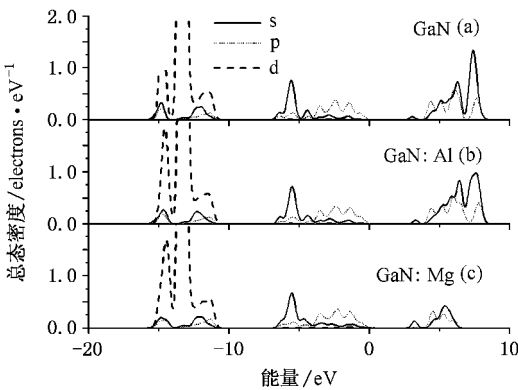


图 3 理想 GaN 晶体以及两种掺杂情况 Ga 原子的 PDOS 图

由图 2(a)可知,理想的 GaN 晶体的电子所处能级为 3 组,即带 1、带 2 和带 3(见图 2(a)中标注的 1, 2, 3). Ga 原子的 3d 态电子分布在约 -13.36 eV(即带 1)处,可看出它的峰值很尖锐,显示出较强的局域性,与其他价带之间无明显的相互作用.带 2 宽度大约 6.28 eV,这个区域主要分布 N2p 态和 Ga4s 态电子,且 N2p 态电子决定了价带顶的位置.带 3(即导带)宽度大约 4.22 eV,主要分布 Ga 原子的 4s 态电子,还有少量 N 和 Ga 原子的 p 态电子也分布在这个区域.比较图 2(a)和(b)可以发现两者非常相似,图 2(b)电子所处能级也为 3 组,只是图 2(b)中导带位置向高能区移动约 0.3 eV,导致光学带隙宽

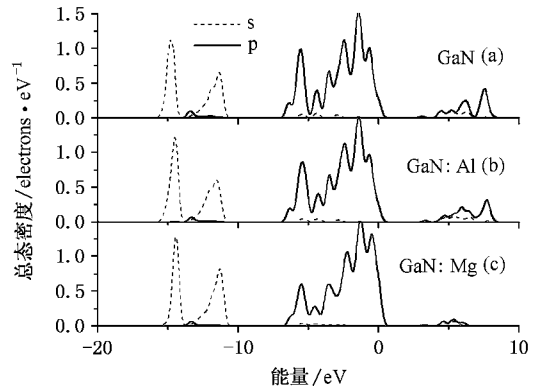


图 4 理想 GaN 晶体以及两种掺杂情况 N 原子的 PDOS 图

度变大.根据分波态密度图 3 和图 4,导带底的位置主要是由 Ga4s 态电子决定的,而价带顶主要由 N2p 态电子决定的.当 Al 掺杂到 GaN 晶体中,价带顶的位置还是由 N2p 态电子决定,且位置基本保持不变,导带底的位置也仍然由 Ga4s 态电子决定,但它向高能方向微偏移,从而引起光学带隙宽度变大. Mg 掺杂的 GaN 晶体电子所处能级在价带部分(约 -40 eV 处)比前两者多了一组能带(见图 2(c)).根据分态密度图分析这应该是掺杂原子 Mg 的 2p 态电子所处能级,整个价带部分向高能方向移动,在价带顶附近存在着一定量的空穴,由于 Al 和 Mg 掺杂是两种不同性质的掺杂,Al 是等价掺杂它不可提供施主或受主能级,而 Mg 是异价掺杂, Mg 掺杂提供了可接受电子的受主能级,所以它的价带顶附近存在空穴.为了定量分析态密度,我们对整个价带部分做了积分, GaN 为 144, GaN:Al 为 134, GaN:Mg 为 140.这些数值分别代表了各体系中外层电子可填充的能级的电子态数目.在计算中我们所选用的超软赝势考虑的各元素的亚电子层分别是 Ga 的 3d4s4p, Mg 的 2p3s 层, Al 的 3s3p 层, N 的 2s2p 层,这样各元素对电子结构的贡献就分别考虑了 13, 8, 3, 5 个外层电子.因此每个体系的超晶格结构单元中含有的价电子总数分别为 Ga<sub>8</sub>N<sub>8</sub> 包含 144 个, AlGa<sub>7</sub>N<sub>8</sub> 包含 134 个, MgGa<sub>7</sub>N<sub>8</sub> 包含 139 个.通过比较可填充能级电子态数目和价电子的数目,我们知道 Ga<sub>8</sub>N<sub>8</sub> 和 AlGa<sub>7</sub>N<sub>8</sub> 价带处于满填充状态,费米面恰好位于价带顶,而 MgGa<sub>7</sub>N<sub>8</sub> 的可填充能级电子态数目比价电子数目多 1,这样,处于费米面附近的第一个有电子填充的能带,即价带的填充情况是不满的,有一个电子的空穴态出现,费米面降低到价带中. Mg 掺杂前后的能带结构变化可归结为图 5,其中黑色部分是

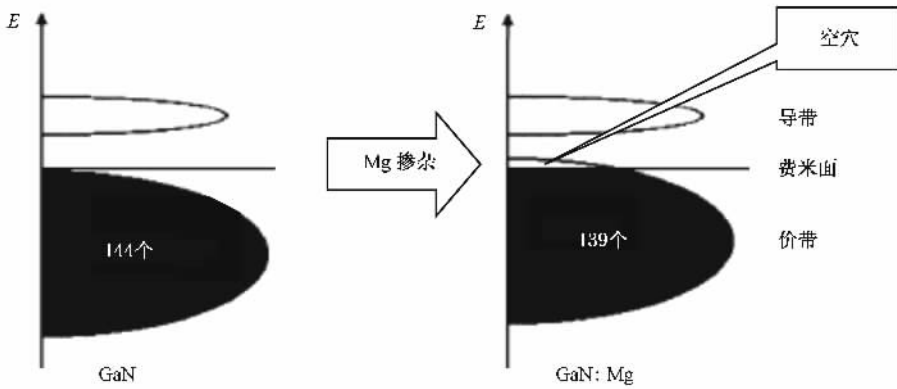


图5 GaN 和 GaN:Mg 的能带结构图

价带中电子填充的区域。

根据半导体导电机理<sup>[25]</sup>,具有类似 GaN:Mg 这种能带结构的掺杂体系的电导率和发光性能可以大大提高。当然,也可从电荷守恒的角度考虑,在掺杂前后电荷应守恒的,  $2\text{Ga}^{3+} \rightarrow \text{Mg}^{2+} + \text{Ga}^{4+}$  这样  $\text{Ga}^{4+}$  的空穴密度增加。本文得到的结果与有关实验结果是一致的,掺 Mg 后空穴浓度增加,而 Al 掺杂载流子浓度并没有提高,只是光学带隙宽度加宽了。

### 3.2. Al, Mg 掺杂 GaN 光学性质

#### 3.2.1. 理想 GaN 晶体以及两种掺杂情况的光学带隙

理想 GaN 晶体以及两种掺杂情况的光学带隙值如表 2 所示。

表 2 理想 GaN 以及 Al, Mg 掺杂 GaN 的光学带隙值(单位: eV)

| 名称     | 本文    | 理论结果                | 实验值  |
|--------|-------|---------------------|--|
| GaN    | 1.802 | 2.0 <sup>[26]</sup> | 3.4 <sup>[27]</sup> , 3.29 <sup>[28]</sup> |
| GaN:Al | 2.129 | 3.743*              | —  |
| GaN:Mg | 1.992 | —                   | —  |

\* 根据 Vegard's 定律计算出来的,其中  $E_{\text{gGa}} = 3.4 \text{ eV}$ <sup>[27]</sup>,  $E_{\text{gAlN}} = 6.2 \text{ eV}$ <sup>[29]</sup>, 弯曲系数  $b = 0.06$ <sup>[26]</sup>。

从表 2 可得,我们计算的理想 GaN 晶体的光学带隙与其他理论结果基本符合,但与实验值相差比较大,这是因为我们使用 GGA 近似本身具有局限性所造成的,利用这种近似计算的光学带隙值普遍偏低。本文未能找到两种掺杂情况的实验值和 Mg 掺杂情况的理论值,对于 Al 掺杂情况的理论值是根据 Vegard's 定律计算出来的,由于在公式中 GaN 和 AlN 的带隙值都取实验值,因此得出的结果比本次计算的结果要大。比较本文计算结果可以发现,掺杂后的光学带隙值都变宽。

#### 3.2.2. 理想 GaN 晶体以及两种掺杂情况的复介电函数虚部

介电函数作为沟通带间跃迁微观物理过程与固体电子结构的桥梁,反映了固体能带结构及其各种光谱信息<sup>[17]</sup>。Ga<sub>3</sub>N<sub>8</sub>, AlGa<sub>7</sub>N<sub>8</sub> 和 MgGa<sub>7</sub>N<sub>8</sub> 都为直接带隙半导体,其光谱是由能级间电子跃迁所产生的,各个介电峰可以通过能带结构和态密度来解释。

图 6 给出了理想及 Al, Mg 掺杂 GaN 的介电函数虚部。从图 6(a)中可以看到主要有  $D_1, D_2, D_3, D_4, D_5$  共 5 个峰,它们对应的光子能量为 3.10, 5.38, 6.85, 9.13, 18.81 eV。根据态密度图分析(见图 2—4),在  $D_1 = 3.10 \text{ eV}$  处对应于直接跃迁阈,与价带顶到导带底跃迁有关,但它的值比较小,我们认为这是由于导带底附近被能级占据的每单位能量间隔所对应的  $K$  空间体积不大而引起的,发生跃迁的主要来源于 N2p 轨道电子;在  $D_2 = 5.38 \text{ eV}, D_3 = 6.85 \text{ eV}, D_4 = 9.13 \text{ eV}$  处分别对应着一介电峰,对应的跃迁能级可能在带 1 和带 2 之间,也可能在带 2 和带 3 之间,跃迁的电子可能是处在带 1 的 Ga3d 或 N2s 轨道的电子,也可能是处在带 2 的 N 和 Ga 原子的 p 轨道电子或 Ga 原子的 4s 轨道电子;  $D_5 = 18.81 \text{ eV}$  处有个微弱的峰,对应着带 1 和带 3 之间的跃迁,跃迁电子主要来源于带 1 的 Ga3d 态电子,因处在带 1 的电子直接跃迁到带 3 的数目很少,大多数是先跃迁到带 2,再由带 2 跃迁到带 3,所以它的峰值很小。图 6(b)与图 6(a)图形形态基本相同,但图 6(b)相对于图 6(a)来说各个峰值都有稍微向高能方向偏移,与文献<sup>[30]</sup>相一致的,这是由于掺入杂质后光学带隙增大而引起的。再看图 6(c),在约 0.79 eV 处有个尖峰是由上价带内部的电子跃迁引起的。原来的  $D_1$  峰不见了,这是因为在理想 GaN 中  $D_1$  峰对

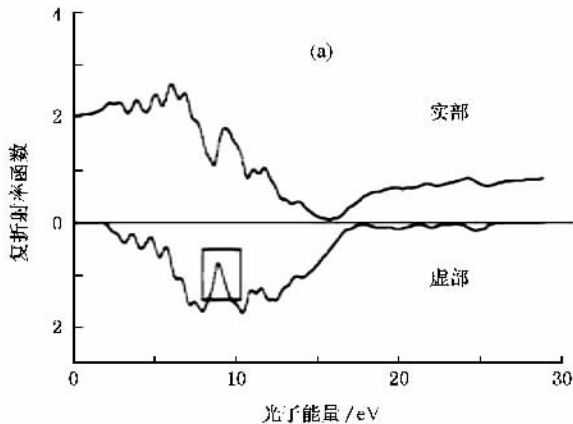
应的是价带顶  $N_{2p}$  电子向导带底的直接跃迁;当掺入 Mg 后,在价带顶出现空穴,费米能级降到价带中,由于价带顶是空着的,未参与跃迁过程,所以价带顶没有电子跃迁到导带底,导致  $D_1$  峰几乎消失.在 40—50 eV 之间还有一尖峰对应 Mg 原子  $2p$  态电子的跃迁;其他尖峰基本与理想 GaN 相同,但峰值略有减少.

### 3.2.3. GaN 本体及 Al, Mg 掺杂 GaN 的复折射率函数

在本次工作中还计算了理想 GaN 及 Al, Mg 掺杂 GaN 的复折射率函数,在分析时采用了极化法,极化方向为 (100).

图 7 为本次计算理想 GaN 及 Al, Mg 掺杂 GaN 的复折射率函数以及其他理论计算的理想 GaN<sup>[31]</sup>.其中图 7(a) 为文献值,图 7(b)–(d) 为本次计算值.

从图 7(b) 可知  $n_0 = 2.162$ , 与其他理论值  $2.005^{[31]}$  以及实验值  $2.500^{[32]}$  比较符合,得到的图形与图 7(a)<sup>[31]</sup> 符合得很好,在低能区(光子能量小于 2 eV)虚部几乎为 0,而实部为常数;在能区(光子能量大于 15 eV)虚部的值接近 0,实部的值变化比较小.这表明 GaN 体系对高频率的电磁波吸收较弱,



在高频区它们的折射率几乎为常数;比较图 7(b) 和 (c) 图形状基本一样,只是图 7(c) 各个峰值略微向高能方向偏移,这是由于能带的偏移而引起的.图 7(d) 与图 7(b) 中在能区(光子能量大于 15 eV)基本与理想 GaN 相同,但在低能区实部和虚部都有所不同,主要是由于掺入 Mg 杂质后,电磁波通过的介质不同,引起折射率函数的变化.

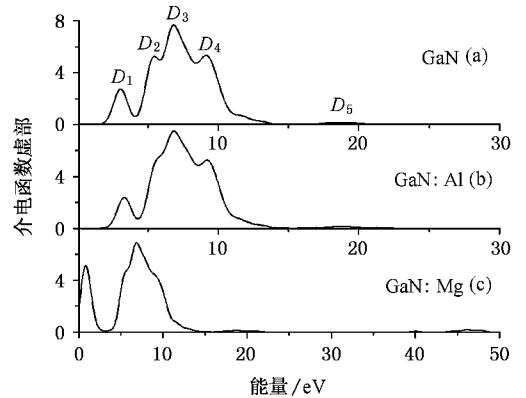


图 6 理想 GaN 以及 Al, Mg 掺杂 GaN 的介电函数虚部

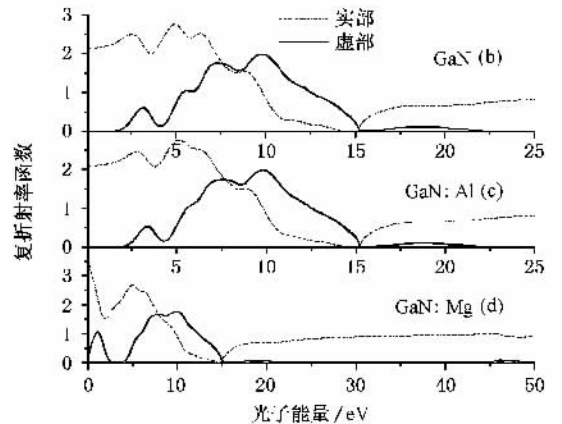


图 7 理想 GaN 以及 Al, Mg 掺杂 GaN 的复折射率函数

## 4. 结 论

本文采用密度泛函理论平面波赝势方法和广义梯度近似,对理想 GaN 以及 Al, Mg 掺杂的 GaN 的超胞结构进行几何优化;计算了它们的电子结构和光学性质.计算结果表明掺有 Mg 的 GaN 晶体的载流子浓度增大,明显提高了材料的电导率,改善了 GaN

晶体的电学性能,Al 掺杂 GaN 晶体的载流子浓度不变,但光学带隙变宽,改变 Al 的组分可以得到不同颜色的光.精确的分析了掺杂前后 GaN 晶体的介电函数和复折射率函数,并解释了体系的发光机理,得出的计算结果与现有的理论和实验符合得很好,为 GaN 材料在分子原子尺度上进一步设计与应用提供了理论依据.

- [ 1 ] Zhao Y J 2006 *Adv. Mater. Industry* **11** 44 ( in Chinese ) [ 赵亚娟 2006 先进材料工业 **11** 44 ]
- [ 2 ] Xie C K , Xu F Q , Deng R , Xu P S , Liu F Q 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2606 ( in Chinese ) [ 谢长坤、徐法强、邓 锐、徐彭寿、刘凤琴 2002 物理学报 **51** 2606 ]
- [ 3 ] Lee R , Wright A F , Crawford M H , Petersen G A , Han J , Biefeld R M 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 3344
- [ 4 ] Dridi Z , Bouhafs B , Ruterana P 2003 *Semicond. Sci. Technol.* **18** 850
- [ 5 ] Yun F , Reshchikov M A , He L , King T , Morkoc H 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 4837
- [ 6 ] Kuo Y K , Lin W W 2002 *Jpn. J. Appl. Phys.* **41** 73
- [ 7 ] Amano H , Kito M , Hiramatsu K , Akasaki I 1989 *Jpn. J. Appl. Phys.* **28** L2112
- [ 8 ] Nakamura S , Mukai T , Senoh M , Iwasa N 1992 *Jpn. J. Appl. Phys.* **31** L139
- [ 9 ] Jin R Q , Zhu J J , Zhao D G , Liu J P , Zhang J C , Yang H 2005 *Chin. J. Semicond.* **26** 508 ( in Chinese ) [ 金瑞琴、朱建军、赵德刚、刘建平、张纪才、杨 辉 2005 半导体学报 **26** 508 ]
- [ 10 ] Yamamoto T , Katayama-Yoshida H 1998 *J. Cryst. Growth.* **190** 532
- [ 11 ] Li T , Wang H B , Liu J P , Niu N H , Zhang N G , Xing Y H , Han J , Liu Y , Gao G , Shen G D 2007 *Acta Phys Sin.* **56** 1036 ( in Chinese ) [ 李 彤、王怀兵、刘建平、牛南辉、张念国、邢艳辉、韩 军、刘 莹、高 国、沈光地 2007 物理学报 **56** 1036 ]
- [ 12 ] Gorczyca I , Christensen N E 1991 *Solid State Commun.* **80** 33
- [ 13 ] Lei T , Moustakas T D , Graham R. J , He Y , Berkowitz S J 1992 *J. Appl. Phys.* **71** 4933
- [ 14 ] Payne M C , Teter M P , Allan D C , Arias T A 1992 *Rev. Mod. Phys.* **64** 1045
- [ 15 ] Perdew J P , Burke K , Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [ 16 ] Zhang Y , Tang C Q , Dai J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 869 ( in Chinese ) [ 张 勇、唐超群、戴 君 2005 物理学报 **54** 869 ]
- [ 17 ] Sheng X C 2003 *The Spectrum and Optical Property of Semiconductor* ( Beijing Science Press ) p76 ( in Chinese ) [ 沈学础 2003 半导体光谱和光学性质( 第 2 版 ) ( 北京 : 科学出版社 ) 第 76 页 ]
- [ 18 ] Serrano J , Rubio A , Hernandez E , Munoz A , Mujica A 2000 *Phys. Rev. B* **62** 16612
- [ 19 ] Sun X W , Chu Y D , Liu Z J , Liu Y X , Wang C W , Liu W M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5830 ( in Chinese ) [ 孙小伟、褚衍东、刘子江、刘玉孝、王成伟、刘维民 2005 物理学报 **54** 5830 ]
- [ 20 ] Moon W H , Hwang H J 2003 *Phys. Lett. A* **315** 319
- [ 21 ] Stampfl C , Van de Walle C G 1999 *Phys. Rev. B* **59** 5521
- [ 22 ] Leszczynski M , Teisseyre H , Suski T , Grzegory I , Bockowski M , Jun J , Porowski S , Pakula K , Baranowski J M , Foxon C T , Cheng T S 1996 *Appl. Phys. Lett.* **69** 73
- [ 23 ] Vogel D , Krüger P , Pollmann J 1997 *Phys. Rev. B* **55** 12836
- [ 24 ] Xiong Z H , Jiang F Y , Wan Q X , Rao J P 2006 *Trans. Nonferrous Met. Soc. China.* **16** s854
- [ 25 ] Huang K , Han R Q 1988 *Solid State Physics* ( Beijing : Higher Education Press ) p325 ( in Chinese ) [ 黄 昆、韩汝琦 1988 固体物理学( 北京 : 高等教育出版社 ) 第 325 页 ]
- [ 26 ] Dridi Z , Bouhafs B , Ruterana P 2005 *Comput. Mater. Sci.* **33** 136
- [ 27 ] Caetano E W S , Freire V N 2004 *Appl. Surf. Sci.* **234** 50
- [ 28 ] Rodríguez-Coppola H , Tutor J , Velasco V R 2006 *Microelectronics Journal* **37** 12
- [ 29 ] Huang K , Fan G H , Tan C H , Li S T , Wu W G , Li H B , Lei Y 2005 *Semiconductor Optoelectronic* **26** 320 ( in Chinese ) [ 黄 昆、范广涵、谭春华、李述体、吴文光、李华兵、雷 勇 2005 半导体光电 **26** 320 ]
- [ 30 ] He G M , Wang R Z , Zheng Y M 1998 *Journal of Xiamen University ( Natural Science )* **37** 300 ( in Chinese ) [ 何国敏、王仁智、郑永梅 1998 厦门大学学报( 自然科学版 ) **37** 300 ]
- [ 31 ] Li S , Ouyang C 2005 *Phys. Lett. A* **336** 145
- [ 32 ] Strite S , Morkoc H 1992 *J. Vac. Sci. Technol. B* **10** 1237

# First-principles study on electronic structure and optical properties of Al and Mg doped GaN<sup>\*</sup>

Guo Jian-Yun<sup>1)</sup> Zheng Guang<sup>2)†</sup> He Kai-Hua<sup>2)‡</sup> Chen Jing-Zhong<sup>1)</sup>

1) *School of Material Science and Chemical Engineering, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China*

2) *School of Maths and Physics, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China*

3) *Institute of Molecular Modeling and Computational Physics, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China*

( Received 13 October 2007 ; revised manuscript received 4 December 2007 )

## Abstract

The electronic structure and optical properties of pure and Al- and Mg-doped cubic-blende GaN have been studied based on the density functional theory and the generalized gradient approximation method. The relationship between the distribution of the electronic states and their structures has been analyzed. The dielectric function and the complex refractive index function on the doping GaN system have been obtained. The calculation results indicate that the hole concentration of Mg-doped GaN is increased and the Mg-doping markedly enhanced the conductivity of the material. But the carrier concentration of Al-doped GaN is not changed and optical bandgap is broadened. The mechanism of luminescence has been explained in terms of an analysis of the dielectric function and the complex refractive index function. It offers theoretical data for the design and application of GaN optoelectronic materials. By comparison, our results are in good agreement with that published in the literatures.

**Keywords :** GaN crystal, electronic structure, optical properties, doping

**PACC :** 7115, 7120, 7125, 7865K

<sup>\*</sup> Project supported by the National Science Foundation for Distinguished Young Scholars of Hubei Province, China ( Grant No. 2006ABB031 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : gzheng25@yahoo.com