

Cu, O 共掺杂 AlN 晶体电子结构与光学性质研究

程丽 王德兴 张杨 苏丽萍 陈淑妍 王晓峰 孙鹏 易重桂

Electronic structure and optical properties of Cu-O co-doped AlN

Cheng Li Wang De-Xing Zhang Yang Su Li-Ping Chen Shu-Yan Wang Xiao-Feng Sun Peng Yi Chong-Gui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 047101 (2018) DOI: 10.7498/aps.20172096

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.20172096>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I4>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于锡组分和双轴张应力调控的临界带隙应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 能带特性与迁移率计算

Calculations of energy band structure and mobility in critical bandgap strained $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ based on Sn component and biaxial tensile stress modulation

物理学报.2018, 67(2): 027101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20171969>

过渡金属掺杂锐钛矿 $\text{TiO}_2(101)$ 表面的改性

Modification of the photocatalytic properties of anatase $\text{TiO}_2(101)$ surface by doping transition metals

物理学报.2017, 66(6): 067101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.067101>

Ti 掺杂 NbSe_2 电子结构的第一性原理研究

First-principles study on the electronic structure of Ti-doped NbSe_2

物理学报.2015, 64(20): 207101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.207101>

Ge 掺杂对 InI 导电性能影响的第一性原理研究

First-principles study on the effect of Ge-doping on the conductivity of InI

物理学报.2014, 63(23): 237101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.237101>

Cr, Mo, Ni 在 $\alpha\text{-Fe}(\text{C})$ 中占位、键合性质及合金化效应的第一性原理研究

First principles calculation of occupancy, bonding characteristics and alloying effect of Cr, Mo, Ni in bulk $\alpha\text{-Fe}$?

物理学报.2014, 63(19): 197101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.197101>

Cu, O共掺杂AlN晶体电子结构与光学性质研究*

程丽 王德兴 张杨[†] 苏丽萍 陈淑妍 王晓峰 孙鹏 易重柱

(哈尔滨工程大学理学院, 纤维集成光学教育部重点实验室, 哈尔滨 150001)

(2017年9月21日收到; 2017年11月30日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的平面波超软赝势方法对纯AlN, Cu单掺杂以及Cu与O共掺杂AlN超胞进行了几何结构优化, 计算了掺杂前后体系的晶格常数、能带结构、态密度与光学性质. 结果表明: 掺杂后晶格体积增大, 系统能量下降; Cu掺入后Cu 3d电子与N 2p电子间有强烈的轨道杂化效应, Cu与O共掺后Cu和O之间的吸引作用克服了Cu原子之间的排斥作用, 能够明显提高掺杂浓度和体系的稳定性. 光学性质分析中, 介电函数计算结果表明Cu与O共掺杂能改善AlN电子在低能区的光学跃迁特性, 增强电子在可见光区的光学跃迁; 复折射率计算结果显示Cu与O掺入后由于电磁波穿过不同的介质, 导致折射率发生变化, 体系对低频电磁波吸收增加.

关键词: Cu与O共掺杂AlN, 电子结构, 光学性质, 第一性原理

PACS: 71.15.-m, 73.20.At, 78.40.Fy

DOI: 10.7498/aps.67.20172096

1 引言

AlN是近年来深受人们关注的一种新型直接带隙宽禁带化合物半导体材料, 其禁带宽度 E_g 约为6.2 eV^[1,2]. 由于AlN具有禁带较宽、介电常数低以及与硅相近的热膨胀系数, 可作为微电子器件的基底材料; AlN良好的压电性质与较高的表面声速使其可作为GHz声表面波装置的压电材料^[3-5]; AlN也是制造紫外发光二极管光源的材料^[6]. 另外, AlN原料充足, 生产成本相对较低, 可应用于多种工业领域.

现在, AlN的制造技术得到了高速发展^[7-9], 但AlN的高效率p型掺杂问题还未解决. 对AlN晶体而言, n型掺杂比较容易实现, p型掺杂效率低主要是由于p型杂质溶解度较低, 离化能过大

及本身缺陷的自补偿效应造成的^[10], 进而影响了AlN基的固态发光器件实用化. 因此, 制备高效的p型层是研究AlN在光电器件领域广泛应用的重点. p型AlN已通过掺入Be, Cu, Mg, Zn, Ag等得以实现^[11-16], 但掺杂效率较低. 为获得高效的p型AlN, 学者们对共掺杂方法进行了探讨, 认为共掺杂方法的优点在于: 1) 施主、受主间的强吸引可克服受主间的互相排斥, 增加受主在AlN晶体中的掺杂数量; 2) 施主、受主间的吸引可形成“受主-施主-受主”复合体, 从而降低受主能级、提高施主能级, 进而提高空穴浓度. Zunger等证实了Be和O两种高活性原子在III族氮化物中的共掺杂反应^[17], 袁娣等通过第一性原理计算表明Be和O共掺杂可提高掺杂浓度和系统的稳定性^[18]; Wu等认为Mg和O共掺杂可提高AlN晶体的空穴浓度^[19]; Korotkov等研究了Mg和O共掺p型GaN的电子

* 国家自然科学基金(批准号: 61377085, 11204048)、中国博士后科学基金(批准号:2013M541348)和中央高校基本科研业务费专项资金资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: zhangyang@hrbeu.edu.cn

特性^[20]. 非磁性元素Cu掺杂AlN具有较好的半金属铁磁性, 且Cu掺杂表现为p型掺杂. 为获得更高浓度的p型Cu掺杂, 本文对Cu和O共掺杂的AlN晶体进行理论计算及分析. 基于密度泛函理论(DFT)的平面波超软赝势法, 利用 $3 \times 3 \times 2$ 模型计算了Cu和O共掺杂AlN的电子结构与光学特性, 详细分析Cu和O共掺杂对AlN晶体p型特性的影响, 为实验研究提供理论参考.

2 理论模型与计算方法

2.1 理论模型

六方纤锌矿结构是AlN最稳定的结构, 对称性为 C_{6v}^4 , 晶格参数 $a = b = 0.3112 \text{ nm}$, $c = 0.4982 \text{ nm}$ ^[21]. 文中计算的Cu和O共掺杂的AlN超晶胞结构模型如图1所示, 超晶胞由72个原子组成, 是在AlN原胞的 a , b , c 基矢方向上分别扩展得到 $3 \times 3 \times 2$ 的超原胞, 同时O原子替代AlN中的一个N原子, Cu原子替代一个Al原子.

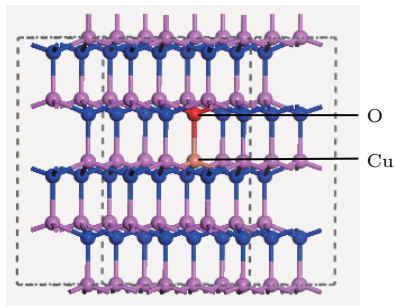


图1 Cu和O共掺杂AlN超晶胞模型

Fig. 1. Supercell of Cu-O co-doped AlN.

2.2 计算方法

本文计算由从头算量子力学程序CASTEP^[22]完成. 对未掺杂、Cu单掺杂与Cu和O共掺杂AlN($3 \times 3 \times 2$)进行几何结构优化, 交换-关联能采用

广义梯度近似GGA-PBE进行校正, 离子实与价电子之间的相互作用势采用超软赝势(ultrasoft pseudopotential, USP)来描述. 平面波截止能取450 eV, 布里渊区积分使用 $4 \times 4 \times 3$ 的 k 点对全Brillouin求和, 迭代时收敛精度设为 $1 \times 10^{-5} \text{ eV/atom}$, 作用到原子上的力小于 0.3 eV/nm , 内应力收敛精度设为 0.05 GPa , 最大位移收敛精度设为 $1 \times 10^{-4} \text{ nm}$. 几何结构优化后上述四参数达到或高于收敛条件.

3 计算结果与讨论

3.1 几何结构优化结果

为了分析掺杂对AlN性质的影响, 本文对Cu和O掺杂前后AlN晶体超胞进行几何结构优化. 计算得到的晶格参数、总能量、截断能与形成能如表1所列. 其中 a , c 为单胞的晶胞参数; V_0 为超晶胞的体积; E 为对体系进行几何优化收敛时对应的体系总能量, 反映了结构的稳定程度; E_g 为禁带宽度; E_f 为形成能. 从表1可以看出, 计算结果与实验结果符合得很好, 表明参数选取与计算方法合理, 可继续进行其他性质的计算. 掺杂后晶格体积比纯AlN晶体稍有增大, 因为Cu的离子半径为 0.077 nm , 比Al的离子半径 0.054 nm 大, 当离子半径大的Cu替代离子半径小的Al时, 一定程度上破坏了晶格周期性, 造成晶格畸变, 晶格体积增大; O的离子半径为 0.14 nm , 比N的离子半径 0.013 nm 大, 所以O掺杂也会使AlN的晶格体积变大. Cu和O共掺杂的整体效果是增大了AlN晶胞的体积. 表1的能量计算结果显示, Cu掺杂后体系能量降低, Cu和O共掺杂体系能量最低. E_g 理论值与实验值相比偏小, 这是由于DFT属于基态理论, 它对多粒子系统的激发态在计算 E_g 时存在误差^[24], 但并不影响对AlN及其掺杂体系电子结构和性质的理论分析.

表1 AlN掺杂前后的晶格常数、总能量、禁带宽度与形成能

Table 1. Lattice constant, total energy, band gap and formation energy of AlN before and after doped.

	a/nm	c/nm	c/a	V_0/nm^3	E/eV	E_g/eV	E_f/eV
AlN(experimental) ^[21,23]	0.3112	0.4982	1.601	—	—	6.2	—
AlN(calculation)	0.3127	0.5002	1.601	0.7624	-11893.84	4.13	—
AlN:Cu(calculation)	0.3130	0.5012	1.601	0.7652	-13308.40	3.24	5.21
AlN:Cu-O(calculation)	0.3125	0.5030	1.610	0.7658	-13475.89	2.74	4.58

掺杂体系的形成能 E_f 是用来判断不同原子掺杂难易的物理量, 同时也可以表明杂质对该体系稳定性造成的影响, Cu 单掺杂与 Cu 和 O 共掺杂 AlN 形成能 E_f 计算公式为:

$$E_{f(\text{AlNCu})} = E_{\text{AlNCu}} - E_{\text{AlN}} - \mu_{\text{Cu}} + \mu_{\text{Al}}, \quad (1)$$

$$E_{f(\text{AlNCuO})} = E_{\text{AlNCuO}} - E_{\text{AlN}} - \mu_{\text{Cu}} - \mu_{\text{O}} + \mu_{\text{Al}} + \mu_{\text{N}}, \quad (2)$$

式中 E_{AlNCu} , E_{AlNCuO} 为 Cu 单掺杂与 Cu 和 O 共掺杂 AlN 超胞系统的总能量; E_{AlN} 为未掺杂 AlN 超胞系统的总能量; μ_{Al} , μ_{Cu} 为 Al 原子与 Cu 原子在基态下对应为金属相时每个分子的能量; μ_{O} , μ_{N} 则为晶体相时 O 与 N 原子对应的能量, 即温度 $T = 0$ 时化学势的大小. 从表 1 形成能计算结果可知, Cu 和 O 共掺杂体系比 Cu 单掺杂体系形成能降低, 稳定性增加, 这与总能量的计算结果符合.

3.2 电子结构分析

3.2.1 纯 AlN 电子结构分析

为分析和比较掺杂对 AlN 电子结构的影响, 先计算了纯 AlN 的电子结构如图 2 所示. 图 2(a) 能

带结构的计算结果表明 AlN 的带隙较大, 导带底和价带顶都位于 Brillouin 区的 G 点处, 且与其他 K 点带隙比较, G 点带隙最小, 表明 AlN 是直接带隙半导体. 导带底的态密度变化较大, 说明导带底电子有效质量大; 价带顶态密度变化较慢, 说明价带中空穴有效质量大. AlN 的价带由 -15.5 — -12.8 的下价带和 -6.3 — -0.3 的上价带组成, 在价带顶附近有简并的重空穴、轻空穴和自旋-轨道耦合所分裂出的劈裂带, 与其他 III-V 族氮化物的能带结构类似. 由图 2 的分波态密度可知, 价带主要是 N 原子 $2s$ 态与 $2p$ 态构成, 价带顶则主要由 N 原子 $2p$ 态组成, 导带主要是 Al 原子 $3p$ 态构成. 从分态密度可知, AlN 的离子键性质比较明显, 这和一些文献中的计算结果一致 [25,26].

3.2.2 Cu 掺杂 AlN 电子结构分析

为讨论 Cu 和 O 共掺杂 AlN 的电子结构, 先优化了 Cu 掺杂 AlN 晶体, 其能带结构及分波态密度如图 3 所示. 从图 3(a) 可知, 价带顶部与导带底部都在布里渊区 G 点处, 表明掺杂 Cu 后 AlN 仍是直接带隙半导体. 对比图 3 与图 2 的分波态密度可知, Cu 掺杂 AlN 的下价带主要由 N 原子的 $2s$ 态组成,

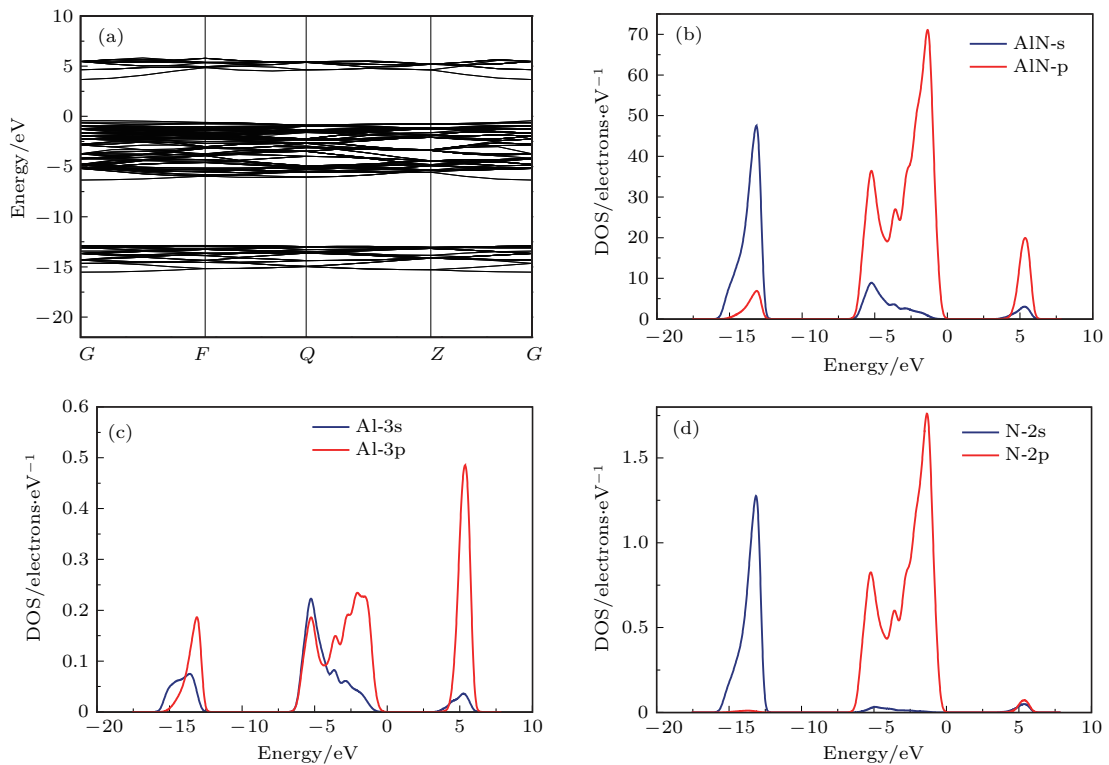


图 2 AlN 的能带结构与分波态密度 (a) 能带结构; (b) 分波态密度; (c) Al 的分波态密度; (d) N 的分波态密度
Fig. 2. Energy band structure and PDOS of AlN: (a) Energy band structure; (b) PDOS of AlN; (c) PDOS of Al; (d) PDOS of N.

导带主要由Al原子的3p态组成,与未掺杂AlN相比无变化.主要变化来自上价带,上价带主要由Cu原子的3d态与N原子的2p态组成,对比图3(d)和图3(e)可知,Cu 3d态有几个峰值与N 2p态相对应,费米能级附近的电子态密度也主要来自Cu 3d和N 2p态,且二者形状相似,说明Cu 3d与N 2p电子间有较强的轨道杂化.Cu掺入后Al的态密度变

弥散,沿高能方向扩展;同时价带顶越过费米能级形成简并态,在价带顶附近存在多余的空穴,说明Cu掺杂可获得p型AlN.但杂质能级中空穴间的相互作用导致其局域在价带顶附近,费米能级附近空穴增加,原子间排斥作用增强,使Cu掺杂浓度低,掺杂系统不稳定,因此单掺杂Cu较难实现理想的p型AlN晶体.

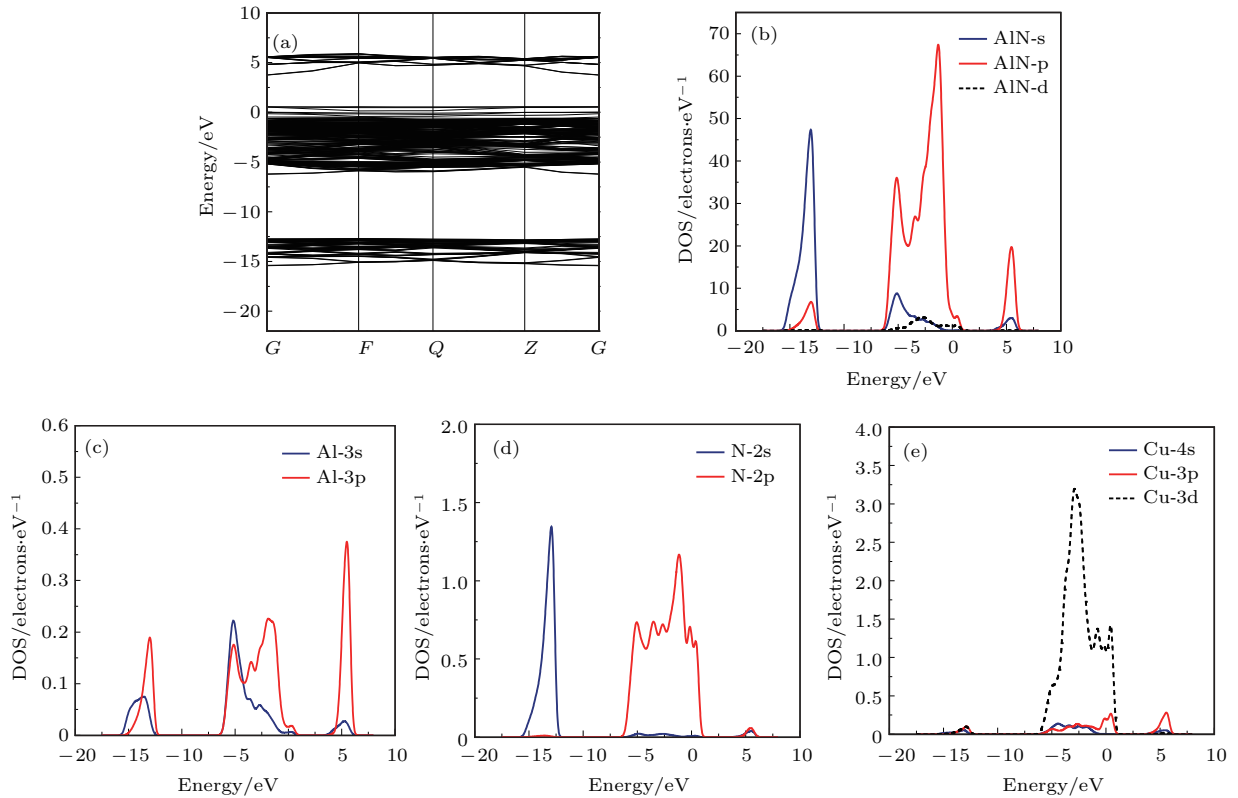


图3 Cu掺杂AlN的能带结构与分态密度 (a)能带结构;(b)分态密度;(c)Al的分态密度;(d)N的分态密度;(e)Cu的分态密度

Fig. 3. Energy band structure and PDOS of Cu doped AlN: (a) Energy band structure; (b) PDOS of Cu doped AlN; (c) PDOS of Al; (d) PDOS of N; (e) PDOS of Cu.

3.2.3 Cu与O共掺杂AlN电子结构分析

图4为Cu与O共掺杂AlN的能带结构与分波态密度.对比图3可知,O原子掺入后,其2s态在-19 eV附近形成一条能带,此能带离价带较远,对价带的电子分布无影响;Al原子分波态密度峰值升高,价带和导带均向低能方向移动;N原子的态密度在价带顶处降低,价带与导带移向低能区;Cu的态密度比单掺杂时有所加宽,费米能级处态密度峰值降低,价带及导带也均向低能方向移动.Cu与O共掺杂AlN的费米能级进入价带顶,使其价带顶附近存在多余的空穴,于价带顶形成杂质能级,且杂质能级具有较强的局域态,这是N和O原子的2p

态与Cu 3d态轨道杂化的结果.因为O原子电负性比N原子强,Cu 3d态电子偏向与O成键,进而Al-N键增强、Cu-N键减弱,N价电荷分布偏向Al而偏离Cu,因此Cu与N间原子轨道交叠区域和费米能级处态密度重叠减小,降低Cu的受主特性,费米能级附近Cu 3d轨道与临近O 2p轨道杂化增强.O原子不是p型材料的有效复合中心,主要起到对Cu原子的激活作用.共掺杂后Cu与O的吸引作用可克服Cu原子间的互相排斥,能有效提高受主掺杂浓度与系统的稳定性,Cu与O共掺杂可实现p型AlN的高浓度掺杂.

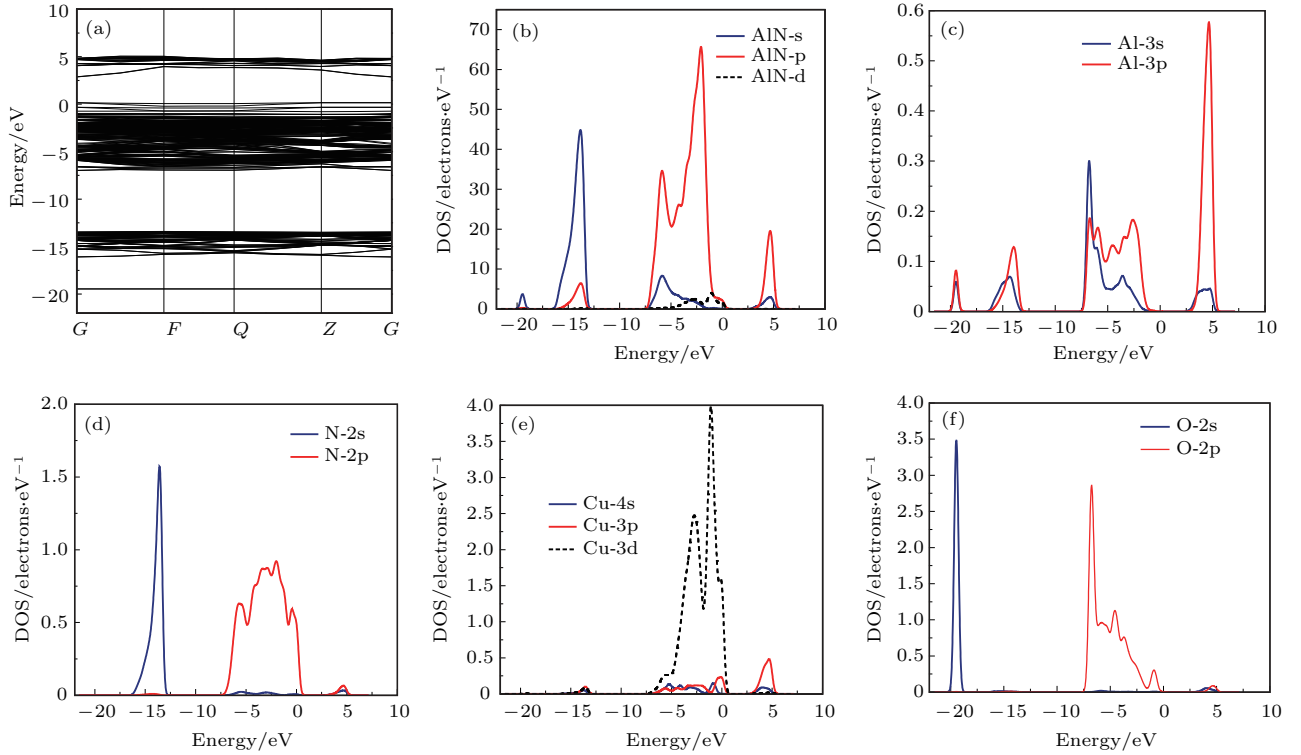


图4 Cu与O共掺杂AlN的能带结构与分态密度 (a)能带结构; (b)分态密度; (c)Al的分态密度; (d)N的分态密度; (e)Cu的分态密度; (f)O的分态密度

Fig. 4. Energy band structure and PDOS of Cu-O co-doped AlN: (a) Energy band structure; (b) PDOS of Cu-O co-doped AlN; (c) PDOS of Al; (d) PDOS of N; (e) PDOS of Cu; (f) PDOS of O.

3.3 Cu与O共掺杂AlN的光学性质分析

为研究Cu与O共掺杂AlN的光学性质,对Cu与O掺杂前后AlN晶体的介电函数、复折射率函数和光吸收谱进行了计算与分析.计算光学性质时,采用剪刀算符对能带带隙进行了修正,剪刀算符的取值由带隙的理论计算值与实验值的差值决定,本文剪刀算符取值为2.07 eV.线性响应范围内半导体光学性质可以用复介电函数 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ 计算得出,其与材料的电子结构关系密切.晶体的介电函数、吸收系数等可根据Kramers-Kronig色散关系及电子跃迁概率的定义导出.介电函数实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 与虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 的计算公式如下^[27]:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{8\pi^2 e^2}{m^2} \sum_{V,C} \int_{BZ} d^3K \frac{2}{(2\pi)} \times \frac{|e \cdot M_{V,C}|^2}{|E_C(K) - E_V(K)|} \frac{\hbar^3}{[|E_C(K) - E_V(K)|^2 - \hbar^2 \omega^2]}, \quad (3)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2}{m^2 \omega^2} \sum_{V,C} \left\{ \int_{BZ} d^3K \frac{2}{(2\pi)} |e \cdot M_{CV}(K)|^2 \right.$$

$$\left. \times \delta[E_C(K) - E_V(K) - \hbar\omega] \right\}, \quad (4)$$

式中C, V代表导带、价带; BZ表示第一布里渊区; \hbar 是狄拉克常量; K 是倒格矢; ω 是角频率; $|e \cdot M_{CV}(K)|^2$ 是动量矩阵元; $E_C(K)$, $E_V(K)$ 代表导带、价带本征能级.

图5(a)为Cu与O共掺杂前后AlN的介电函数虚部 ε_2 , ε_2 是联系带间跃迁微观物理过程与固体电子结构的桥梁,是电子在能级间跃迁的体现,对材料光学性质的研究很重要, ε_2 曲线介电峰的来源可通过能带结构与态密度解释.从图5(a)可以看出,纯AlN的介电函数阈能约为5.4 eV,这是基本吸收边,当光子能量高于5.4 eV时 ε_2 的值迅速上升. AlN的介电函数虚部有两个特征峰,峰1与峰2分别对应能量为8.8 eV与12.7 eV.峰1对应直接跃迁阈,是N 2p电子向Al 3p态跃迁;峰2是AlN态密度图中上价带相对较弱的峰代表的能态与导带能态间电子跃迁所致.掺入Cu原子后,在2.2 eV增加一较高的介电峰3,之前的两个介电峰峰值减弱.峰3是价带电子向杂质带跃迁引起的,主要是N 2p态与Cu 3d态跃迁的结果.掺入Cu原子后峰1、峰2变低是由于引入杂质带后能级间跃迁电子

数目下降; 掺入O原子后峰1、峰2继续降低, 峰3变强主要是O 2p态跃迁的结果. 在低能区, Cu与O共掺杂AlN的光跃迁强度大于未掺杂和Cu单掺杂AlN, 表明Cu与O共掺杂可改善AlN低能区的光学跃迁, 增强电子在可见光区的光学跃迁.

图5(b)为Cu与O共掺杂前后AlN的复折射

率. 未掺杂AlN能量低于5.4 eV与能量高于14.4 eV时复折射率虚部为零、实部接近常数, 表明AlN在低、高频区对电磁波吸收均较弱. Cu与O原子掺入后复折射率在低能区实部和虚部变化明显, 是由于掺杂后电磁波通过不同介质导致折射率发生变化, 增加了体系对低频电磁波的吸收.

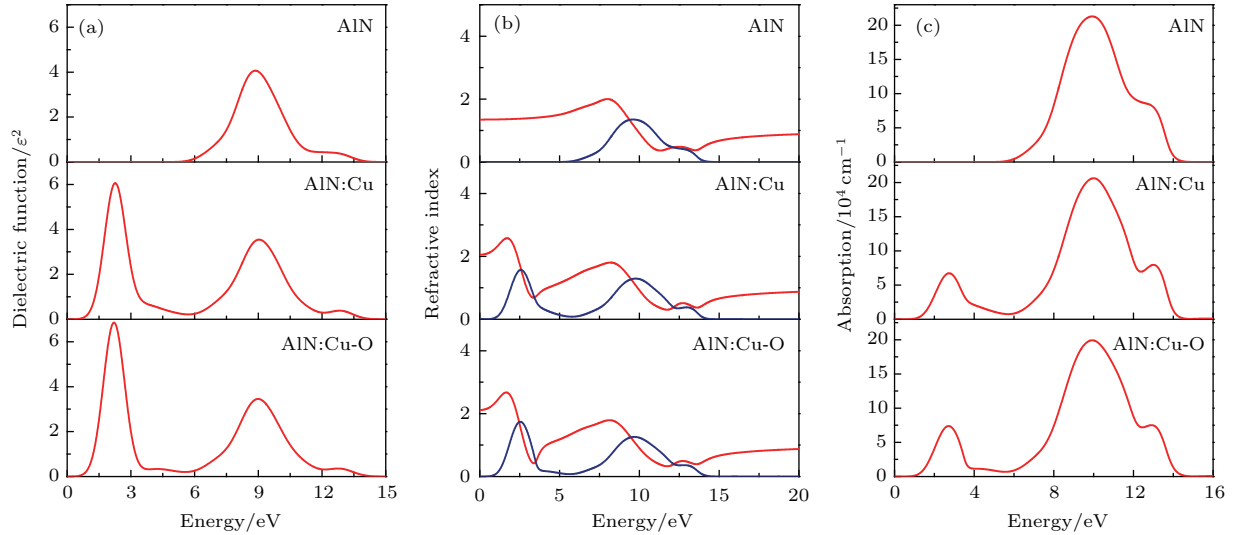


图5 Cu与O共掺杂前、后AlN的介电函数虚部(a)、复折射率(b)与吸收谱(c)

Fig. 5. Imaginary part of the dielectric function (a), refractive index (b) and energy loss spectrum (c) of AlN before and after doped.

图5(c)是掺杂前后AlN的吸收谱, 结果表明, 纯AlN晶体在可见光区无光吸收, 因其禁带宽度大于可见光的光子能量. Cu与O掺入后, 因为禁带中引入了杂质能级, 增强了晶体在可见光区的光吸收. 纯AlN吸收边与复折射率函数符合, 吸收主峰的能量为9.9 eV. Cu与O掺入后于低能区出现一新吸收峰, 与复折射率函数在低能区的变化相对应. 与纯AlN相比, 掺杂Cu后吸收峰减弱, Cu与O共掺后更弱, 因为掺杂后引入受主能级导致能级间跃迁电子数目下降.

4 结 论

基于密度泛函理论对纯AlN, Cu单掺杂以及Cu与O共掺杂AlN电子结构和光学性质进行了计算与分析. 结果表明: 掺杂后晶格体积增大, 系统能量降低; Cu单掺杂及Cu与O共掺杂后AlN仍属于直接带隙半导体; Cu掺入后Cu 3d电子与邻近的N 2p电子之间有强烈的轨道杂化效应, 但Cu单掺杂浓度不高, 掺杂系统不稳定, 较难实现理想的p

型AlN晶体; Cu与O共掺杂后, Cu与O的吸引作用克服了Cu原子间的排斥作用, 可提高掺杂浓度和系统稳定性, Cu与O共掺杂可实现p型AlN的高浓度掺杂. 光学性质分析中, 介电函数计算结果表明Cu与O共掺杂能够改善AlN电子在低能区的光学跃迁特性, 增强电子在可见光区的光学跃迁; 复折射率计算结果显示Cu与O掺入后电磁波通过不同的介质导致折射率发生变化, 对低频电磁波吸收增加.

参考文献

- [1] Li J, Nam K B, Nakarmi M L 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 5163
- [2] Taniyusu Y, Kasu M, Makimoto T 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 4672
- [3] Chen S, You Z J 2016 *Tsinghua Univ.* **56** 1061 (in Chinese) [陈硕, 尤政 2016 清华大学学报 **56** 1061]
- [4] Rodriguez-Madrid J G, Iriarte G F, Araujo D 2012 *Mater. Lett.* **66** 339
- [5] Shen L, Heikman S, Moran B 2001 *IEEE Electron Dev. Lett.* **22** 457

- [6] Ren Z, Sun Q, Kwon S 2007 *Phys. Status Solidi C* **4** 2482
- [7] Shen L H, Zhang X S 2016 *Chin. J. Lumin.* **37** 927 (in Chinese) [沈龙海, 张轩硕 2016 发光学报 **37** 927]
- [8] Mokhov E, Izmaylova I, Kazarova O 2013 *Phys. Status Solidi C* **10** 445
- [9] Yan Z, Wu H L, Zheng R S B 2013 *Chin. Ceram Soc.* **32** 1468 (in Chinese) [闫征, 武红磊, 郑瑞生 2013 硅酸盐通报 **32** 1468]
- [10] Vande Walle C G, Stampfl C, Neugebauer J 1998 *J. Cryst. Growth* **189–190** 505
- [11] Han R L, Jiang S M, Yan Y 2017 *Chin. Phys. B* **26** 027502
- [12] Deng J Q, Wu Z M, Wang A L, Zhao R Y, Hu A Y 2014 *Chin. J. Comput. Phys.* **31** 617 (in Chinese) [邓军权, 毋志民, 王爱玲, 赵若禹, 胡爱元 2014 计算物理 **31** 617]
- [13] Zhang L M, Fan G H, Ding S F 2007 *Acta Phys. -Chim. Sin.* **23** 1498 (in Chinese) [张丽敏, 范广涵, 丁少锋 2007 物理化学学报 **23** 1498]
- [14] Lin Z, Guo Z Y, Bi Y J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1917 (in Chinese) [林竹, 郭志友, 毕艳军 2009 物理学报 **58** 1917]
- [15] Fan Y Q, He A L 2010 *Acta Phys. -Chim. Sin.* **26** 2801 (in Chinese) [樊玉勤, 何阿玲 2010 物理化学学报 **26** 2801]
- [16] Zhang Y 2008 *Ph. D. Dissertation* (Wuhan: Huazhong University of Science & Technology) (in Chinese) [张勇 2008 博士学位论文 (武汉: 华中科技大学)]
- [17] Zunger A 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 57
- [18] Yuan D, Huang D H, Luo H F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 147101 (in Chinese) [袁娣, 黄多辉, 罗华锋 2012 物理学报 **61** 147101]
- [19] Wu R Q, Shen L, Yang M, Sha Z D, Cai Y Q, Feng Y P 2008 *Phys. Rev. B* **77** 073203
- [20] Korotkov R Y, Gregie J M, Wessels B W 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 222
- [21] Ishihara M, Li S J, Yumoto H, Akashi K, Ide Y 1998 *Thin Solid Films* **316** 152
- [22] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J 2002 *J. Phys.* **14** 2717
- [23] Li J, Nam K B, Nakarmi M L 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 5163
- [24] Anisimov V I, Aryasetiawan F, Lichtenstein A I 1997 *J. Phys.: Condens. Matter* **9** 767
- [25] Dong Y C, Guo Z Y, Bi Y J, Lin Z 2009 *Chin. J. Lumin.* **30** 314 (in Chinese) [董玉成, 郭志友, 毕艳军, 林竹 2009 发光学报 **30** 314]
- [26] Gao X Q, Guo Z Y, Cao D X, Zhang Y F 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3418 (in Chinese) [高小奇, 郭志友, 曹东兴, 张宇飞 2010 物理学报 **59** 3418]
- [27] Shen X C 1992 *Optical Property of Semiconductor* (Beijing: Science Press) p24 (in Chinese) [沈学础 1992 半导体光学性质 (北京: 科学出版社) 第 24 页]

Electronic structure and optical properties of Cu-O co-doped AlN*

Cheng Li Wang De-Xing Zhang Yang[†] Su Li-Ping Chen Shu-Yan Wang Xiao-Feng
Sun Peng Yi Chong-Gui

(Key Laboratory of Integrated Fiber Optics, Ministry of Education, Harbin Engineering University, Harbin 150001, China)

(Received 21 September 2017; revised manuscript received 30 November 2017)

Abstract

The geometry parameters, band structure, electronic density of states, and optical properties of AlN before and after being co-doped by Cu and O are investigated by the ultra-soft pseudo-potential plane wave based the density functional theory. The results show that the lattice volume increases and the total energy of the system decreases after doping. The Cu doping system makes Cu 3d electrons hybridize with its nearest neighbor N 2p electrons strongly. In the Cu-O co-doped system, Cu and O attract each other to overcome the repelling of acceptor Cu atoms, thereby increasing the doping concentration of Cu atoms and the stability of the system. Dielectric function calculation results show that Cu-O co-doping can improve the optical transition characteristics in low energy area of AlN electrons, and thus enhancing the optical transition of electrons in visible area. The complex refractive index calculation results indicate that Cu-O co-doped system increases the absorption of low frequency electromagnetic wave.

Keywords: Cu-O co-doped AlN, electronic structure, optical properties, first-principles

PACS: 71.15.-m, 73.20.At, 78.40.Fy

DOI: [10.7498/aps.67.20172096](https://doi.org/10.7498/aps.67.20172096)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61377085, 11204048), the China Post-doctoral Science Foundation (Grant No. 2013M541348), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities of Ministry of Education of China.

[†] Corresponding author. E-mail: zhangyang@hrbeu.edu.cn