

# 高温高压下闪锌矿相 GaN 结构和热力学特性的分子动力学研究\*

孙小伟<sup>1)†</sup> 褚衍东<sup>1)</sup> 刘子江<sup>2)</sup> 刘玉孝<sup>3)</sup> 王成伟<sup>3)</sup> 刘维民<sup>4)</sup>

1) 兰州交通大学数理学院, 兰州 730070)

2) 兰州师范高等专科学校物理系, 兰州 730070)

3) 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

4) 中国科学院兰州化学物理研究所固体润滑国家重点实验室, 兰州 730070)

(2005 年 3 月 24 日收到, 2005 年 9 月 9 日收到修改稿)

利用分子动力学方法和 Buckingham 经验势模型对重要半导体材料 GaN 立方闪锌矿相的晶格常数、相变压力(从闪锌矿到岩盐结构)、热膨胀、等温体模量、定压热容等结构和热力学特性在 300—3000 K 的温度范围和 0—65 GPa 的压力范围内进行了研究. 研究表明, 闪锌矿相 GaN 常态下的结构和热力学参数的模拟结果与实验数据及其他理论结果相符. 同时, 在所选作用势模型可靠性检验的基础上, 对等温体模量、定压热容等非谐性参量在高温高压下的热力学行为进行了预测. 所得结果在材料科学等领域的研究中具有一定的应用背景和参考价值.

关键词: GaN, Buckingham 势, 分子动力学模拟, 高温高压

PACC: 7115Q, 6250, 6540, 6400

## 1. 引 言

宽禁带 III-V 族化合物半导体 GaN 具有热导率大、电子饱和速度高、击穿场强大及物理化学性质稳定等优异特性. 在发展短波光电器件(如蓝色、紫色发光二极管和近紫外短波激光器)、微波半导体器件和大功率、耐高温器件中, 具有潜在的应用前景, 成为目前受到普遍重视的第三代半导体材料<sup>[1-3]</sup>. GaN 兼有六角纤锌矿和立方闪锌矿两种结构<sup>[4]</sup>, 高质量的 GaN 材料是具有纤锌矿结构的六角相外延薄膜材料, 在蓝宝石衬底上获得, 但这种外延体系存在难以解理等问题<sup>[5,6]</sup>. 而对于较早时期曾被寄予厚望的具有闪锌矿型结构的立方相 GaN, 其晶体质量虽劣于六角相, 但其较小的能带间隙、较高的结晶对称型和低温生长的特点, 既有利于光电器件中 InGaN 合金的设计与生长, 又使 p 型掺杂更易于实现, 从而再一次引起研究人员的极大兴趣<sup>[7]</sup>.

与其他化合物半导体相比, 人们对闪锌矿相

GaN 结构、电学、光学及热弹性特性的了解还远远不够. 某些物理参数值尚存在着短缺和不一致的现象. 闪锌矿结构的 GaN 热力学参数(如热膨胀系数、等温体模量、质量热容等)在极端温度和压力条件下的行为研究结果少有文献报道, 而热膨胀系数、体积弹性模量等固体非谐性参量在物理学、材料科学等研究中有着重要的意义和作用, 尤其对物质系统的物态方程研究有着不可忽视的地位. 例如: 为了解决固体材料在高温物理方面的应用, 就需要掌握固体从室温到熔化温度的热膨胀数据, 这也正是研究地球内部一定深度处的温度、组成物质密度等地球物理、地球化学理论的基础知识和必要条件, 要计算矿物质的热力学函数, 就必须对热膨胀系数、体积弹性模量和比体积在整个感兴趣的压强和温度范围内都有准确的认识. 较之光电特性的研究, 闪锌矿结构的 GaN 高温高压下热力学特性的理论研究是个明显的薄弱环节.

围绕着增补和统一 GaN 材料的物理参数, 国内外正进行着许多实验和理论计算工作, 一些不同的

\* 中国工程物理研究院冲击波物理与爆轰物理实验室基金(批准号: 51478030203ZW0902)、甘肃省自然科学基金(批准号: 3ZS051-A25-027)和甘肃省教育厅科研基金(批准号: 0410-01)资助的课题.

† E-mail: sunxww@163.com

能带从头计算方法都被用于 GaN 各种基本性质的研究. Serrano 等<sup>[8]</sup>对 GaN 纤锌矿和闪锌矿结构到立方岩盐结构的高压相变进行了研究. Boucher 等<sup>[9]</sup>用经验紧束缚模型研究了 GaN 的体积特性. Kioseoglou 等<sup>[10]</sup>利用 Stillinger-Weber (SW) 经验势研究了稳定纤锌矿结构的 GaN 不同平面缺陷和它们之间的相互作用. 所有这些研究主要是用第一性原理方法进行的. 在这些第一性原理方法中, 全势能线性糕模轨道组合方法 (FP-LMTO)<sup>[11,12]</sup>的精度高, 但是计算复杂. 从头算赝势法<sup>[13,14]</sup>计算结果的可靠性是公认的, 但是计算量非常大, 一般要用上千个平面波. 本文采用分子动力学方法, 结合 Buckingham 经验对势模型研究了 GaN 材料立方闪锌矿相的结构和热力学性质. 这些性质包括闪锌矿到岩盐结构的相变压力  $P$ 、晶格常数  $a$ 、热膨胀系数  $\alpha_p$ 、定压热容  $C_p$ 、等温体模量  $K_T$  及其对压力的一阶偏导数  $K'_T$ . 同时, 在对所选作用势模型可靠性分析的基础上, 对等温体模量和定压热容在高温高压下的行为进行了预测, 预测温度和压力范围分别为 300—3000 K, 0—45 GPa.

## 2. 分子动力学模拟方法

分子动力学计算机模拟是研究复杂的凝聚态系统的有力工具. 这一技术不仅能得到原子的运动细节, 还能像做实验一样进行各种观察. 对于平衡系统, 可以用分子动力学模拟作适当的时间平均来计算一个物理量的统计平均值. 对于非平衡系统, 发生在一个分子动力学观察时间内 (一般为 1—100 ps) 的物理现象也可以用分子动力学计算进行直接模拟. 特别是许多在实验中无法获得的微观细节, 而在分子动力学计算机模拟中可以方便地得到. 这种优点使分子动力学在物理、化学、材料科学等领域研究中显得非常有吸引力<sup>[15,16]</sup>. 许多人们感兴趣的领域, 如晶格生长、外延生长、离子移植、缺陷运动、无定型结构、表面与界面的重构等问题, 原则上都可以进行计算机模拟研究. 尤其是在实验室难以达到的温度、压力范围, 分子动力学模拟更能显示出它的优越性<sup>[17—22]</sup>.

### 2.1. 作用势模型介绍

分子动力学模拟的首要条件就是要知道分子间的相互作用势. 分子间作用势函数确定后, 通过势函数对  $r_{ij}$  求导即可得到分子间的作用力. 在本文分子

动力学模拟中, 相互作用势能由长程库仑能和短程非库仑能组成,

$$V_{ij}(r_{ij}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}} + V_j(r_{ij}), \quad (1)$$

式中,  $Z_i$  或  $Z_j$  是有效电荷,  $e$  是电子单位电荷,  $r_{ij}$  是原子  $i$  和  $j$  之间的相互作用距离. 对许多离子材料而言, 短程相互作用取 Buckingham 势是一个十分传统而有效的模型<sup>[19—24]</sup>. 我们最近用 Buckingham 经验对势模型对岩盐结构的 ZnO 在高温高压下的熔化和体积弹性模量等热力学特性进行了分子动力学研究<sup>[21]</sup>, 得到的常态下岩盐结构的 ZnO 体积特性与其他理论及实验结果相符. 同时通过修正得到了 ZnO 岩盐结构 0—50 GPa 的高压熔化相图并对其等温体模量在 300—3000 K 的温度范围内的热力学行为作了较为可靠的预测. ZnO 和 GaN 是重要的宽禁带半导体材料, 两种材料在常温下的稳定相均为纤锌矿结构. 纤锌矿结构的 ZnO 和 GaN 在能带结构上有许多相似之处, 其高压相变产物分别为岩盐结构的 ZnO 和闪锌矿结构的 GaN. 两种材料结构上的相似性是我们考虑采用 Buckingham 经验对势模型对闪锌矿相 GaN 在高温高压下的结构和热力学特性进行模拟的一个主要原因. Buckingham 势的数学表达式如下:

$$V_{ij}(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-r_{ij}/B_{ij}) - C_{ij} r_{ij}^{-6}. \quad (2)$$

(2) 式等号右端各项分别表示排斥能和范德瓦耳斯力 (偶极-偶极项). 这里  $A_{ij}$  和  $B_{ij}$  是排斥相互作用参数,  $C_{ij}$  是范德瓦耳斯常数. 相应的 GaN 势参数由表 1 给出. 这些优化势参数通过拟合产生纤锌矿结构的 GaN 的一系列特性得到. 这些特性包括晶格常数、弹性常数和介电常数. Zapol, Aouas 等的分子动力学结果表明, 这些势参数能够成功描述纤锌矿、闪锌矿和岩盐相 GaN 的结构、弹性和介电特性<sup>[25,26]</sup>.

表 1 GaN 材料特性模拟的短程势参数

	$A/\text{eV}$	$B/\text{nm}$	$C/10^{-6} \text{eVnm}^6$
Ga-Ga	6068.14	0.031846	250.0
Ga-N	872.42	0.031318	0.0
N-N	4115.42	0.031949	280.0

### 2.2. 模拟原理及技术

分子动力学方法就是通过假定粒子的初始坐标和速度以及它们之间的相互作用模型, 利用数值积分求解模拟系统内粒子的经典运动方程, 给出粒子

的瞬时速率、位置变化,通过经典统计方法进行处理,获得粒子在任意时刻的结构组态、能量变化、热力学性质等信息。

本模拟在 512 个离子(256 个 Ga 离子,256 个 N 离子)的立方盒子中进行.在使用有限的粒子数来模拟实际体系中粒子的运动时,就必须考虑表面对体系中粒子运动的影响.为避免这种影响,加上周期性边界条件,即令基本原胞完全等同地重复无穷多次.这个条件在计算机上是这样实现的:如果有一粒子穿过基本原胞的一个表面,那么这个粒子就穿过对面的壁重新进入原胞,速度不变.有了周期性边界条件,就消除了表面,并且建造出一个准无穷大的体积,以便更准确地代表宏观系统.模拟中长程静电力的处理采用 Ewald 求和和技术,在实空间和倒空间中分别进行计算<sup>[27]</sup>.

模拟选用等温等压系综,即  $NPT$  系综.也就是系统的粒子数  $N$ 、压力  $P$  和温度  $T$  都保持不变.对闪锌矿结构的 GaN 的模拟,分子动力学时间步长取 1 fs,平衡和测量段各走 5000 步,每段平均为 5 ps.线性热膨胀系数  $\alpha_p$ 、等温体模量  $K_T$  和定压热容  $C_p$  分别由以下的定义计算得到:

$$\alpha_p = \frac{1}{a} \left( \frac{\partial a}{\partial T} \right)_p, \quad (3)$$

$$K_T = -V \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T, \quad (4)$$

$$C_p = \left( \frac{\partial H}{\partial T} \right)_p, \quad (5)$$

式中,  $a$  为晶格常数,  $V$  为体积,  $H$  为焓,  $T$  和  $P$  分别为热力学温度和压力。

### 3. 结果和讨论

固体的结构相变是一个多学科和工程技术领域所关心的问题,包括固体物理、固体化学、金属物理、材料工程、传感技术和机械工程等. GaN 的高压结构相变受到了越来越多的理论和实验工作者的关注<sup>[8, 25, 26]</sup>. 就 GaN 而言,利用 Buckingham 经验势模拟得到的最稳定的结构是纤锌矿结构. 闪锌矿和岩盐结构是高压相,较之岩盐相,闪锌矿结构要稳定一些<sup>[26]</sup>. 当压力增加时,将会发生从闪锌矿到岩盐结构的相变。

为了研究闪锌矿到岩盐结构的相变过程,本文给出了温度为 0 K 时两种结构的焓与压力之间的关系,如图 1 所示,结构相图压力范围为 0—65 GPa. 从

图 1 可以看出,闪锌矿结构在低于相变压力时有低焓,而岩盐结构在高于相变压力时焓值较闪锌矿结构低,这表明在某一特定的压力下有从闪锌矿结构到岩盐结构的相变发生. 本文理论结果正确地预测了两种结构的高压相变发生在 48 GPa,该结果和 Serrano 用第一性原理方法得到的值 42.1 GPa 能够符合<sup>[8]</sup>. 另一方面, GaN 闪锌矿到岩盐结构的相变研究证实了所选作用势模型在高压条件下的适用性,即这套拟合势参数可用于研究闪锌矿结构的 GaN 高压热力学行为和特性。

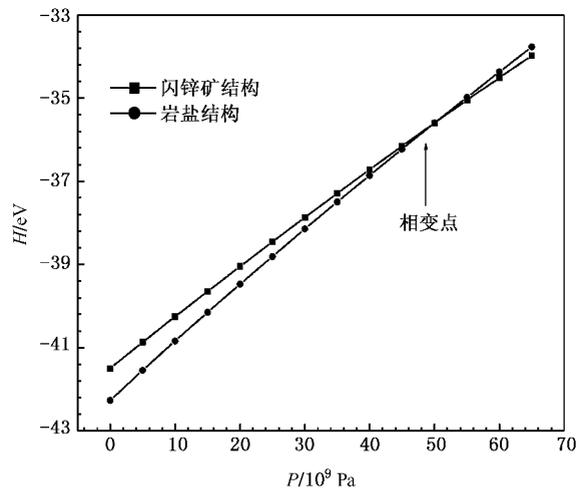


图 1 闪锌矿和岩盐结构的 GaN 焓  $H$  与压力  $P$  的关系

图 2 是本文计算得到的晶格常数与文献 [28] 利用 Tersoff 经验势模拟得到的结果在 300—2000 K 之间的比较. 计算表明,温度为 300 K 时本文所得晶格常数值(0.4538 nm)与文献 [28] 的三体势结果(0.4528 nm)之间的偏差不超过 0.2%,温度逐渐升高到 2000 K 的过程中,两种结果的偏差均小于 0.2%,可见用该经验势模型及拟合势参数来描述 GaN 材料

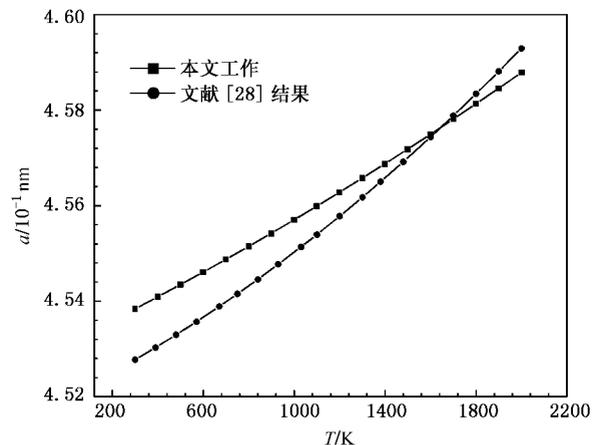


图 2 分子动力学模拟的晶格常数  $a$  随温度  $T$  的变化

闪锌矿结构的高温热力学性质亦是合适的.此外,我们就常态下的晶格常数值和诸多第一性原理计算方法(如密度泛函理论-局域密度近似(DFT-LDA)<sup>[29,30]</sup>、密度泛函理论-广义梯度近似(DFT-GGA)<sup>[30]</sup>、全势能线性缀加平面波方法(FP-LAPW)<sup>[31-33]</sup>)得到的结果以

及文献 34—37 的实验结果作了比较,分析表明偏差在 0.04%—1.5% 范围之内.闪锌矿结构的 GaN 晶格常数  $a$  连同线性热膨胀系数  $\alpha_p$ 、等温体模量  $K_T$ 、等温体模量对压力的一阶导数  $K'_T$  和定压热容  $C_p$  在常态下的模拟值一并由表 2 给出.

表 2 闪锌矿结构的 GaN 的  $a$ 、 $\alpha_p$ 、 $K_T$ 、 $K'_T$  和  $C_p$  模拟结果与实验和其他理论结果的比较

参 量	本文工作	其他理论方法	实验结果
$a/\text{nm}$	0.4538	0.4528 <sup>[28]</sup> , 0.4524 <sup>[29]</sup> , 0.4518 <sup>[30]</sup> , 0.4590 <sup>[30]</sup> , 0.4468 <sup>[31,32]</sup> , 0.4558 <sup>[31,33]</sup>	0.449 <sup>[34]</sup> , 0.450 <sup>[35]</sup> , 0.452 <sup>[36]</sup> , 0.454 <sup>[37]</sup>
$\alpha_p/10^{-6}\text{K}^{-1}$	5.497	5.613 <sup>[28]</sup> , 45.9 <sup>[38]</sup>	
$K_T/\text{GPa}$	220.7	186 <sup>[28]</sup> , 206 <sup>[29]</sup> , 191 <sup>[30]</sup> , 156 <sup>[30]</sup> , 201 <sup>[39]</sup>	190 <sup>[40]</sup> , 188 <sup>[41]</sup>
$K'_T$	4.445	3.87 <sup>[28]</sup> , 3.70 <sup>[29]</sup> , 4.14 <sup>[30]</sup> , 4.25 <sup>[30]</sup> , 4.57 <sup>[38]</sup>	3.20 <sup>[41]</sup> , 4.30 <sup>[42]</sup>
$C_p/\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\text{K}^{-1}$	50.30		

线性热膨胀系数在高温高压时的数值很难通过实验方法来测量,对于物质热膨胀特性的研究而言,分子动力学模拟是一个有力的补充.300 K 时计算得到的线性热膨胀系数为  $5.497 \times 10^{-6}/\text{K}$ ,此值与 Moon 等<sup>[28]</sup>用 Tersoff 三体势模拟得到的结果( $5.613 \times 10^{-6}/\text{K}$ )十分接近,与 Benkabou 用相同三体势得到的模拟值  $4.59 \times 10^{-5}/\text{K}$  相比, Benkabou 的分子动力学结果高出了近一个数量级<sup>[38]</sup>(见表 2). Moon 就他们的结果与文献 38 的结果之间存在的差异进行了分析,认为文献 38 在给出 Tersoff 势参数的过程中忽略了 Ga-N 相互作用对整个 GaN 模拟体系的影响,而是简单地考虑 GaN 为单组分体系并对 Ga-Ga 和 N-N 离子对使用了相同的作用势参数.本文结果与 Benkabou 等关于闪锌矿结构的 GaN 线性热膨胀系数之间的差别,当然也与两体 Buckingham 经验势模型的选择有关系.本文计算得到的线性热膨胀系数与文献 28 分子动力学结果在高温下(2000 K)的比较如图 3 所示.由图 3 可以看出,温度高于 300 K 时,两种结果之间的偏差随温度的增加有逐渐增大的趋势,当  $T = 2000 \text{ K}$  时达到 12%;同时,随着温度的增加热膨胀系数也逐渐增加.

图 4 所示为利用分子动力学计算得到的 GaN 闪锌矿结构常温下的物态方程以及相应体弹性模量与压缩比率的关系.等温体弹性模量通过拟合  $P$ - $V$  数据得到,常压下为 220.7 GPa,该值与其他实验数据及理论结果的比较见表 2.分析发现,本文模拟值大于其他理论和实验结果,与文献 29、30 的 DFT 计算结果、文献[30]的 DFT-LDA 结果、文献[28]的 Tersoff 势分子动力学模拟结果、文献 40、41 的实验结果比较,偏差依次为 0.7%、0.9%、13.5%,

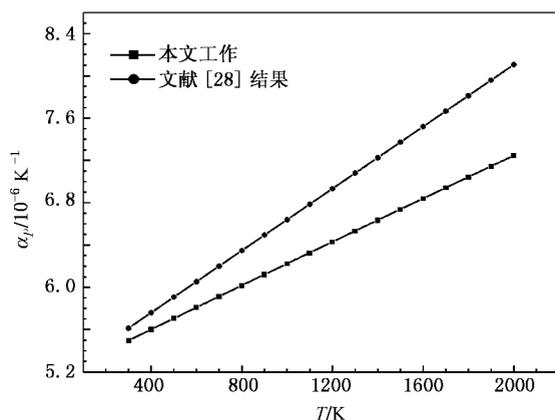
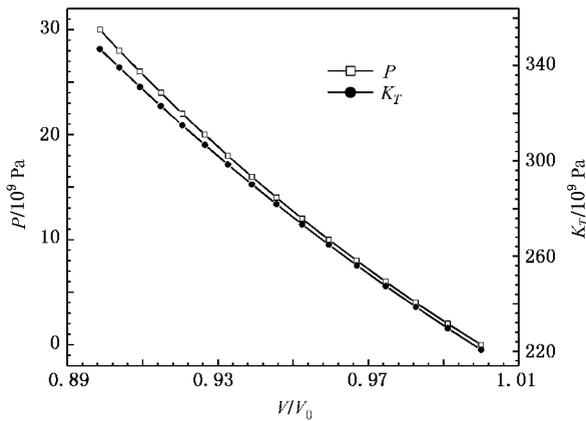
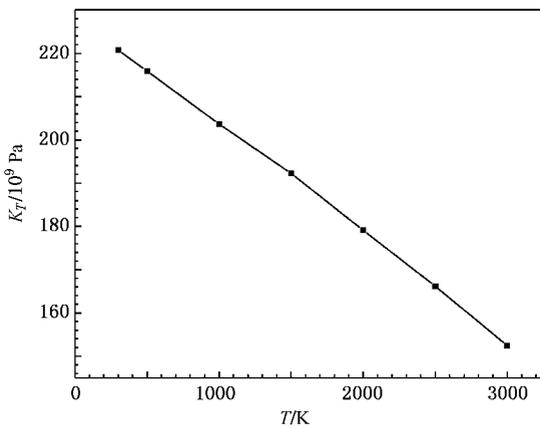
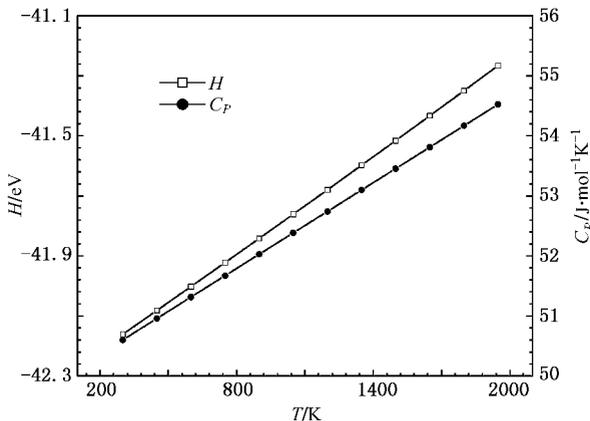


图 3 常态下闪锌矿结构的 GaN 线性热膨胀系数  $\alpha_p$  随温度  $T$  的变化

15.8%、14%、14.8%,文献[30]的 DFT-GGA 理论结果(156 GPa)明显偏低,低估等温体模量 29.3%.由图 4 可以看出,随着压缩比率的增加等温体模量逐渐增加,对等温体模量在常压下随温度变化的行为预测发现,随着温度的升高等温体模量逐渐减小(见图 5).等温体模量对压力的一阶偏导数  $K'_T$  在常态下的值通过拟合三阶 Birch-Murnaghan 物态方程得到,为 4.445.此值与其他第一性原理计算方法得到的结果<sup>[28-30,38]</sup>以及实验结果<sup>[41,42]</sup>的比较也列于表 2.

最后,我们对闪锌矿结构的 GaN 定压热容在 300—2000 K 的温度范围内进行了计算,常压下热容量  $C_p$  由模拟体系的焓对温度的导数求得,如图 6 所示.图 7 给出了不同温度和压力下 GaN 闪锌矿结构定压热容的分子动力学预测结果,预测压力不超过相变压力 48 GPa,预测温度为 300—3000 K.从图 6

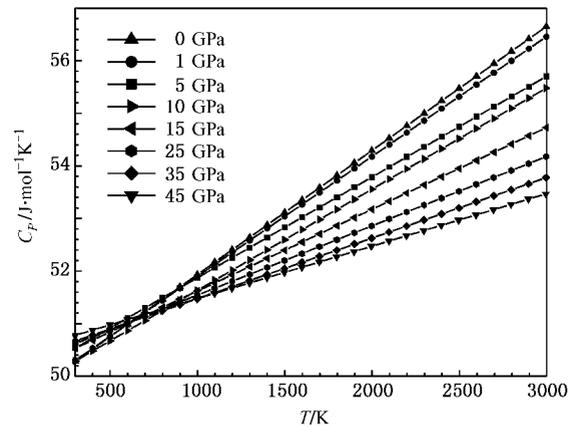
图4 闪锌矿结构的 GaN 300 K 等温压缩线和等温体模量  $K_T$ 图5 常压下闪锌矿结构的 GaN 等温体模量  $K_T$  与温度  $T$  的关系图6 常压下闪锌矿结构的 GaN 焓  $H$  和定压热容  $C_p$  随温度的变化关系

和图7可以看出,  $C_p$  随温度的增加而增加, 随压力的增加逐渐减小, 高压时温度对其的影响较之低压要平缓的多. 本文计算得到的闪锌矿结构的 GaN 在常压下的定压热容与温度之间的关系通过拟合相应

的模拟数据得到,

$C_p = 49.59 + 2.38 \times 10^{-3} T$  ( $300 \text{ K} < T < 2000 \text{ K}$ ). 常态下的热容值为  $50.30 \text{ J/molK}$ , 此值和纤锌矿结构的 GaN 的热容值比较接近. 纤锌矿结构的 GaN 常态下的定压热容值为  $40.79 \text{ J/molK}$ , 由如下的表达式<sup>[43]</sup>得到:

$C_p = 38.1 + 8.96 \times 10^{-3} T$  ( $298 \text{ K} < T < 1773 \text{ K}$ ). 对于闪锌矿结构的 GaN 而言, 还没有可以与之比较的实验数据, 模拟结果有待其他理论和实验的进一步检验.

图7 不同压力下闪锌矿结构的 GaN 定压热容  $C_p$  随温度  $T$  变化的预测

## 4. 结 论

本文利用分子动力学计算机模拟和 Buckingham 经验对势模型对闪锌矿结构的 GaN 材料高温高压下的结构和热力学特性进行了研究. 研究发现: 闪锌矿到岩盐结构的相变压力(48 GPa) 和 Serrano 利用第一性原理得到的 42.1 GPa 的结果相符, 所得晶格常数与实验及其他理论结果之间的偏差在 0.04%—1.5% 之间, 高温情况下计算结果和 Moon 等利用 Tersoff 经验势模拟得到的结果比较符合. 这有理由使得我们相信所选用的作用势模型和相应的经验拟合势参数可以用来对闪锌矿结构的 GaN 高温高压下的热力学行为进行预测, 本文可靠预测温度范围为 300—3000 K, 压力范围为 0—45 GPa. 预测发现: 等温弹性模量随压缩比率的增加而增加, 随温度的增加而减小; 定压热容随压力的增加而减小, 随温度的增加而增加, 高压时温度对定压热容的影响与低压时相比要小一些.

- [ 1 ] Nakamura S , Senoh M , Mukai T 1993 *Appl. Phys. Lett.* **62** 2390
- [ 2 ] Strite S , Morkoc H 1992 *J. Vac. Sci. Technol. B* **10** 1237
- [ 3 ] Pankove J I 1990 *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **162** 515
- [ 4 ] Gorczyca I , Christensen N E 1991 *Solid State Commun.* **80** 335
- [ 5 ] Nakamura S 1999 *Phys. Stat. Sol. A* **176** 15
- [ 6 ] Duboz J Y 1999 *Phys. Stat. Sol. A* **176** 5
- [ 7 ] Mizuta M 1986 *Jpn. J. Appl. Phys.* **25** 945
- [ 8 ] Serrano J , Rubio A , Hernández E *et al* 2000 *Phys. Rev. B* **62** 16612
- [ 9 ] Boucher D E , DeLeo G G , Fowler W B 1999 *Phys. Rev. B* **59** 10064
- [ 10 ] Kioseoglou J , Komninou P , Dimitrakopoulos G P *et al* 2003 *Solid State Electron.* **47** 553
- [ 11 ] Kwison K , Lambrecht W R L , Benjamin S 1994 *Phys. Rev. B* **50** 1502
- [ 12 ] Li Y H , Xu P S , Pan H B *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 317 ( in Chinese ) 李拥华、徐彭寿、潘海滨等 2005 物理学报 **54** 317 ]
- [ 13 ] Miwa K , Fukumoto A 1993 *Phys. Rev. B* **48** 7897
- [ 14 ] Camp P E V , Doren V E V , Devreese J T 1992 *Solid State Commun.* **81** 23
- [ 15 ] Schiotz J , Tolla F D D , Jacobsen W 1998 *Nature* **391** 561
- [ 16 ] Phillpot S R , Wolf D , Gleiter H 1995 *J. Appl. Phys.* **78** 847
- [ 17 ] Chen Q F , Cai L C , Duan S Q *et al* 2004 *J. Phys. Chem. Solids* **65** 1077
- [ 18 ] Chen Q F , Cai L C , Duan S Q *et al* 2004 *Chin. Phys.* **13** 1091
- [ 19 ] Liu Z J , Cheng X L , Zhang H *et al* 2004 *Chin. Phys.* **13** 384
- [ 20 ] Liu Z J , Cheng X L , Chen X R *et al* 2004 *Chin. Phys.* **13** 1096
- [ 21 ] Sun X W , Chen Q F , Wang C W *et al* 2005 *Physica B* **355** 126
- [ 22 ] Cheng X L , Liu Z J , Cai L C *et al* 2003 *Chin. Phys. Lett.* **20** 2078
- [ 23 ] Belonoshko A B 1994 *Geochim. Cosmochim. Acta* **58** 4039
- [ 24 ] Matsui M 1996 *Phys. Chem. Miner.* **23** 345
- [ 25 ] Zapol P , Pandey R , Gale J D 1997 *J. Phys. : Condens. Matter* **9** 9517
- [ 26 ] Aouas M R , Sekkal W , Zaoui A 2001 *Solid State Commun.* **120** 413
- [ 27 ] Fincham D 1992 *Mol. Simul.* **8** 165
- [ 28 ] Moon W H , Hwang H J 2003 *Phys. Lett. A* **315** 319
- [ 29 ] Fiorentini V , Satta A , Vanderbilt D *et al* 1995 *The Physics of Semiconductors* ( Singapore : World Scientific ) p137
- [ 30 ] Stampfl C , Van de Walle C G 1999 *Phys. Rev. B* **59** 5521
- [ 31 ] Persson C , Ferreira da Silva A , Ahuja R *et al* 2001 *J. Cryst. Growth* **231** 397
- [ 32 ] Perdew J P , Wang Y 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13244
- [ 33 ] Perdew J P , Burke K , Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [ 34 ] Lei T , Fanciulli M , Molnar R J *et al* 1991 *Appl. Phys. Lett.* **59** 944
- [ 35 ] Lei T , Moustakas T D , Graham R J *et al* 1992 *J. Appl. Phys.* **71** 4933
- [ 36 ] Trampert A , Brandt O , Ploog K H 1998 *Crystal Structure of Group III Nitrides* ( San Diego : Academic Press ) Vol 50
- [ 37 ] Paisley M J , Sitar Z , Posthill J B *et al* 1989 *J. Vac. Sci. Technol. A* **7** 701
- [ 38 ] Benkabou F , Becker P , Certier M *et al* 1998 *Phys. Stat. Sol. B* **209** 223
- [ 39 ] Kim K , Lambrecht W R L , Segall B 1996 *Phys. Rev. B* **53** 16310
- [ 40 ] Sherwin M E , Drummond T J 1991 *J. Appl. Phys.* **69** 8423
- [ 41 ] Xia H , Xia Q , Ruoff A L 1993 *Phys. Rev. B* **47** 12925
- [ 42 ] Ueno M , Yoshida M , Onodera A *et al* 1994 *Phys. Rev. B* **49** 14
- [ 43 ] Barin I , Knacke O , Kubaschewski O 1977 *Thermochemical Properties of Inorganic Substances* ( Berlin : Springer-Verlag )

# Molecular dynamics study on the structural and thermodynamic properties of the zinc-blende phase of GaN at high pressures and high temperatures<sup>\*</sup>

Sun Xiao-Wei<sup>1)†</sup> Chu Yan-Dong<sup>1)</sup> Liu Zi-Jiang<sup>2)</sup> Liu Yu-Xiao<sup>3)</sup> Wang Cheng-Wei<sup>3)</sup> Liu Wei-Min<sup>4)</sup>

<sup>1)</sup> School of Mathematics and Physics, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou 730070, China)

<sup>2)</sup> Department of Physics, Lanzhou Teachers College, Lanzhou 730070, China)

<sup>3)</sup> College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

<sup>4)</sup> State Key Laboratory of Solid Lubrication, Lanzhou Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730070, China)

( Received 24 March 2005 ; revised manuscript received 9 September 2005 )

## Abstract

The structural and thermodynamic properties of zinc-blende phase of GaN have been investigated systematically using the molecular dynamics method with Buckingham potential model. These properties including lattice constant, phase transition pressure (from the zinc-blende to the rock-salt structure), thermal expansion, isothermal bulk modulus, and heat capacity at constant pressure were calculated in a wide range of temperatures (300—3000 K) and pressures (0—65 GPa). The structural and thermodynamic parameters obtained under normal state are found to be in good agreement with the existing experimental and theoretical results. Meanwhile, some thermodynamic parameters such as isothermal bulk modulus and heat capacity at constant pressure have been predicted at elevated temperatures and high pressures based on the reliable potential model. The simulated results are of fundamental importance in material science.

**Keywords :** GaN, Buckingham potential, molecular dynamics simulation, high pressures and high temperatures

**PACC :** 7115Q, 6250, 6540, 6400

<sup>\*</sup> Project supported by the Foundation of Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research of China Academy of Engineering Physics ( Grant No. 51478030203ZW0902 ), the Natural Science Foundation of Gansu Province, China ( Grant No. 3ZS051-A25-027 ), and the Scientific Research Foundation of Education Bureau of Gansu Province, China ( Grant No. 0410-01 ).

<sup>†</sup> E-mail : sunxww@163.com