

Cálculo de la estructura electrónica de la superred (GaN)₄(RuN)₄

Calculation of the Electronic Structure of (GaN)₄(RuN)₄ Superlattice

M. J. Espitia R.^{a,*}
G. Casiano Jiménez^b
C. Ortega López^b

Recepción: 09-oct-14
Aceptación: 15-dic-14

Resumen

Se investigaron las propiedades estructurales y electrónicas de la superred de periodo corto (GaN)₄(RuN)₄ calculadas en estructura wurtzita con orientación (0001), usando un cálculo de primeros principios dentro de la DFT (Density Functional Theory). Se utilizó el método FP-LAPW (Full Potential Linearized Augmented Plane Waves), como fue implementado en el código WIEN2k. Los efectos correlación e intercambio fueron tratados usando la GGA (Generalized Gradient Approximation) de Perdew, Burke y Ernzerhof. Para determinar los mejores parámetros en estructura wurtzita se optimizó la energía total como una función: i) el volumen de la celda unitaria, ii) la razón c/a y iii) la coordenada z de los átomos de Ga y Ru. Se hace un estudio detallado de la densidad de estados y estructura de bandas; se encontró que la superred (GaN)₄(RuN)₄ presenta un comportamiento metálico. En el nivel de Fermi, la contribución a la densidad de estados se debe principalmente a los orbitales atómicos d de Ru.

Palabras clave: DFT, FP-LAPW, Superredes.

Abstract

In this work, we investigate the structural and electronic properties of short-period (GaN)₄(RuN)₄ superlattice, calculated in wurtzite structure with (0001) orientation, using a first-principles calculations within Density Functional Theory (DFT). We employed the Full Potential Linearized Augmented Plane Waves (FP-LAPW) method, as implemented in the WIEN2k code. The exchange and correlation effects were treated using the Generalized Gradient Approximation (GGA) of Perdew, Burke y Ernzerhof. In order to determine the best parameters in the wurtzite structure, we have optimized the total energy as a function of: i) the unit cell volume, ii) the c/a ratio and iii) z-coordinate of Ga and Ru atoms. A detailed study of the states density and the bands structure is carried out. It was found that (GaN)₄(RuN)₄ superlattice, presents a metallic behavior. At Fermi level, the states density contribution is due to d-like atomic orbitals of Ru.

Key words: DFT, FP-LAPW, Superlattices.

^aGrupo GEFEM, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá, Colombia.

*Autor de correspondencia: davidave16@gmail.com

^bGrupo de Estudio de Materiales y Sistemas Complejos GAMASCO. Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

1. Introducción

La formación de contactos óhmicos confiables para GaN es crucial para la fabricación de dispositivos ópticos y electrónicos basados en GaN, tales como diodos emisores de luz visible, dispositivos en microonda de alto poder y transistores de efecto de campo metal-semiconductor [1, 6]. Para obtener dispositivos de desempeño óptimo, la formación de contactos óhmicos de baja resistencia para GaN es de gran importancia práctica. En un experimento reciente [6] los efectos en las propiedades estructurales y electrónicas de los contactos Schottky Ru y Ru/Au para GaN tipo-n indican que los contactos Ru y Ru/Au podrían ser sistemas muy útiles para la realización de aplicaciones en dispositivos a altas temperaturas. Por consiguiente, se hace necesario estudiar teóricamente la estructura electrónica de Ru/GaN y Au/GaN. El objetivo de este artículo es reportar cálculos de primeros principios de las propiedades estructurales y electrónicas de la superred $(\text{GaN})_4(\text{RuN})_4$ en estructura wurtzita como un posible compuesto con otra propiedad física interesante y una posible aplicación en la fabricación de contactos óhmicos o contactos Schottky.

2. Metodología

Los cálculos fueron ejecutados con el método FP-LAPW (Full Potential Linearized Augmented Plane Waves) implementado en el código WIEN2k [6]. En el método LAPW la celda es dividida en dos tipos de regiones: las esferas atómicas centradas en los sitios nucleares y la región intersticial entre las esferas no superpuestas. Dentro de las esferas atómicas, las funciones de onda son reemplazadas por funciones atómicas, mientras que en la región intersticial la función de estado de Bloch se expande en ondas planas. La densidad de carga y los potenciales son expandidos en armónicos esféricos hasta $l_{\text{máx}}=10$ dentro de las esferas y en la región intersticial ondas planas. El conjunto base es controlado por un parámetro de corte $R_{\text{mt}}k_{\text{máx}} = 8$, donde R_{mt} es el radio más pequeño de la esfera atómica en la celda unitaria, y $k_{\text{máx}}$ es la magnitud del vector k más grande. Para asegurar convergencia en la integración de la primera zona de Brillouin se usaron 54 puntos k en la parte irreducible. La autoconsistencia se logra exigiendo que la convergencia de la energía total fuera menor a 10^{-4} Ryd. Los radios seleccionados de las esferas para

Ru, Ga y N fueron 1.86, 1.76 y 1.65 Bohr, respectivamente. Para el potencial de correlación e intercambio se empleó aproximación GGA en la parametrización de Perdew, Burke y Ernzerhof (PBE) [7].

Para describir una configuración supercelda construimos la superred $(\text{GaN})_4(\text{RuN})_4$, usando la aproximación supercelda y empleando las posiciones atómicas de Kitaev y otros [8], como se muestra en la figura 1. Sin embargo, se ha optimizado la coordenada z por la minimización de las posiciones atómicas, encontrando los parámetros internos u_i , donde $d = u_i c$ es la distancia entre el catión y el anión en la superred a lo largo de la dirección z . Las simetrías de las superredes wurzitas $(\text{GaN})_m(\text{RuN})_n$, crecidas a lo largo del eje de simetría, dependen del número de monocapas m y n . En nuestro caso, el grupo apropiado es el C^13v , que corresponde a un valor par de $m + n$ [9]. Además, se optimizaron la razón c/a y se calcularon las constantes de red, la energía de cohesión y el módulo de volumen, ajustando la energía total versus volumen, de acuerdo con la ecuación de estado de Murnaghan [10].

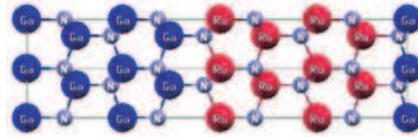


Figura 1. Superred $(\text{GaN})_4(\text{RuN})_4$.

3. Resultados

Para obtener las propiedades estructurales en el estado base, tales como la constante de red (a_0), el valor c/a , el módulo de volumen (B_0), la energía total (E_0) y las distancias $d_{\text{Ga-N}_4}$ y $d_{\text{Ru-N}}$ de la superred $(\text{GaN})_4(\text{RuN})_4$ en estructura wurtzita, se calculó la energía total como una función del volumen, y los resultados se ajustaron a la ecuación de estado de Murnaghan. Nuestros resultados se presentan en la tabla 1.

En cuanto a la parte electrónica, en las figuras 2a y 2b se muestran las bandas de energía y la densidad de estados parcial y total (DOS) para la superred $(\text{GaN})_4(\text{RuN})_4$ en sus parámetros de equilibrio. Los cálculos se realizaron teniendo en cuenta ambas polarizaciones de espín, debido a la presencia del Ru, cuya ubicación en la Tabla Periódica es justo debajo del Fe, por lo que existe la posibilidad de que el átomo de Ru introduzca alguna perturbación

Tabla 1. Parámetros estructurales de la Superred (GaN)₄(RuN)₄.

a (Å)	3,97
V (Å) ³	23,77
c/a	1,68
B_0 (GPa)	212,3
E_0 (eV)	-10,36
d_{Ga-N} (Å)	1,996 - 1,988
	1,986 - 1,980
d_{Ru-N} (Å)	1,973 - 1,990
	1,980 - 2,112

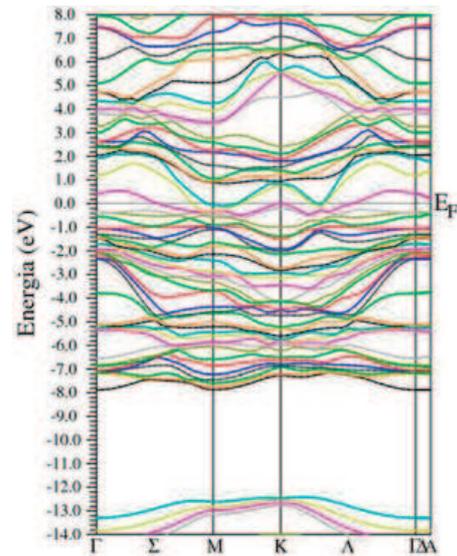
magnética. Se encontró que las DOS para las dos polarizaciones de espín son idénticas. Por tanto, se concluye que el material no presenta momento magnético espontáneo a 0 K, que es la temperatura a la cual se realizaron los cálculos. También es claro que la superred presenta comportamiento metálico, en oposición al GaN wurtzita, que tiene un comportamiento de aislante a 0 K (gap experimental ~ 3.4 eV).

La DOS presenta una región profunda por debajo de ~ -12.5 eV, constituida principalmente por estados d-Ga y s-N. El carácter metálico de la superred lo determinan principalmente los electrones d-Ru y, en menor proporción, los estados p-N. Por debajo de nivel de Fermi, la región comprendida entre -8.0 eV y -3.0 eV está gobernada por los electrones p-N. Entre -3.0 eV y el nivel de Fermi se observa mayor localización de los estados, indicada por los picos cercanos al nivel de Fermi y constituidos básicamente por los estados d-Ru.

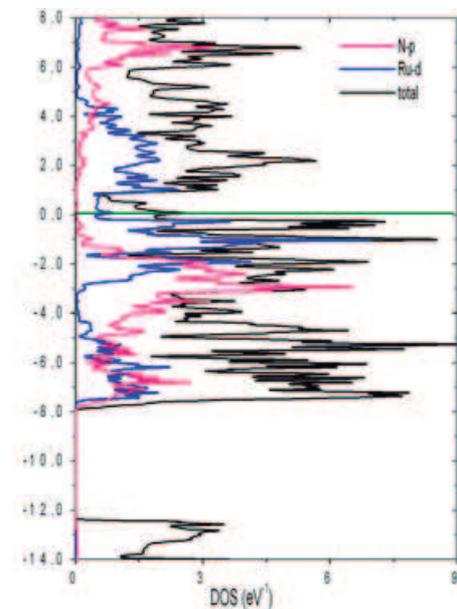
Ya que la superred presenta características metálicas, y como sus propiedades estructurales son muy similares a las del GaN, proponemos que una de sus aplicaciones podría ser el uso como contacto al GaN wurtzita en la fabricación de un diodo Schottky RuN/GaN similar los diodos Ru/GaN y al Au/GaN ya construidos [6].

4. Conclusiones

Se determinaron las propiedades estructurales y electrónicas de la superred (GaN)₄(RuN)₄, usando cálculos de primeros principios. Se encontró que la superred es estructuralmente muy parecida al GaN wurtzita, pero difiere del GaN en sus propiedades electrónicas. Se encontró que la superred tiene un comportamiento metálico debido a la contribución de los electrones d-Ru al nivel de Fermi. La



(a)



(b)

Figura 2. (a) Estructura de bandas de energía para la superred. (b) DOS total y parcial para la superred (GaN)₄(RuN)₄. Las energías se han referido al nivel de Fermi.

superred puede ser útil como componente en un posible dispositivo semiconductor-metal-semiconductor o semiconductor-metal.

Agradecimientos

Al Centro de Investigaciones de la Universidad de Córdoba, CIUC, por la financiación de esta investigación.

Referencias

- [1] S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S-I. Nagahama, "High-power InGaN single-quantum-well-structure blue and violet light-emitting diodes", *Appl. Phys. Lett*, vol. 67, pp. 1868-1673, 1995.
- [2] M. A. Borysiewicz, M. Mysliwiec, K. Golaszewska, R. Jakiela, E. Dynowska, E. Kaminska, A. Piotrowska, "Thermal stability of multilayer Ti₂AlN-based ohmic contacts to n-GaN in ambient air", *Solid-State Electronics*, vol. 94, pp. 15-19, 2014.
- [3] A. Redondo-Cubero, M.D. Ynsa, M.F. Romero, L.C. Alves, E. Muñoz, "Effect of rapid thermal annealing on the composition of Au/Ti/Al/Ti ohmic contacts for GaN-based microdevices", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, vol. 306, pp. 212-217, 2013.
- [4] J. W. Jeon, S. Youl Lee, J. O. Song, T.-Y. Seong, "Low-resistance Cr/Al ohmic contact to N-polar n-type GaN for high-performance vertical light-emitting diodes", *Current Applied Physics*, vol. 12, pp. 225-227, 2012.
- [5] Q. Feng, L.-M. Li, Y. Hao, J.-Y. Ni, J.-C. Zhang, "The improvement of ohmic contact of Ti/Al/Ni/Au to AlGaIn/GaN HEMT by multi-step annealing method", *Solid-State Electronics*, vol. 53, pp. 955-958, 2009.
- [6] M. Piazza, C. Dua, M. Oualli, E. Morvan, D. Carisetti, F. Wyczisk, "Degradation of TiAlNiAu as ohmic contact metal for GaN HEMTs", *Microelectronics Reliability*, vol. 49, pp. 1222-1225, 2009.
- [7] C. K. Ramesh, V. Rajagopal Reddy, K. S. R. and Kotteswara Rao. J., *Matter Sci: Matter electron*, vol. 17, pp. 999-1004, 2006.
- [8] P. Blaha, K. Schwarz, and S. B. Trickey, "Electronic structure of solid with WIEN2k", *Molecular Physics*, vol. 108, no. 21, pp. 3147-3166, 2010.
- [9] J. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple", *Physical Review Letter*, vol. 77, no. 18, pp. 3865-3868, 1996.
- [10] Y. E. Kitaev, M. F. Limonov, P. Tronc, G. N. Yushin, "Raman-active modes in wurtzite (GaIn)_m (AlN)_n superlattices", *Phys. Rev. B*, vol. 57, 14209, 1998.
- [11] F. D. Murnaghan, Proceedings of the National Academy Science 30, 1944.