Abstract

Project Code : TRG5880193

Project Title : Computational Study of II-IV-N_2 semiconductor and their optical properties

Investigator : Dr. Atchara Punya Jaroenjittichai , Chiang Mai University

E-mail Address : atcharapunya@gmail.com

Project Period : 2 years

In this work, the novel II-IV-N_2 semiconductors which are related to the well-known III-N by replacing the group-III with a group-II and a group-IV were investigated. First, the lattice parameters of the II-IV-N_2 were predicted by a full potential linear muffin-tin orbital (FP-LMTO) approach within the generalized gradient approximation (GGA). The formation energies of the new materials and their competing compounds, such as Zn_3N_2, Mg_3N_2, Cd_3N_2 and Ge_3N_4 etc. were calculated from the constituent elements. The chemical potential diagrams for stability show the allowed ranges of the chemical potentials of elements. Next, the band structures of Mg-IV-N_2 with IV=Si, Ge, Sn were obtained by using the quasiparticle-self-consistent GW (QSGW) approach. Similar to the Zn-IV-N_2 compounds, $MgSiN_2$ is found to have an indirect gap slightly lower than the lowest direct gap, while the other materials have direct gaps. The direct gaps, calculated at the GGA lattice constant, range from 3.43 eV for $MgSnN_2$ to 5.14 eV for $MgGeN_2$ and 6.28 eV for $MgSiN_2$. The symmetry character of the valence-band maximum states and their splittings and effective masses were also determined. The conduction-band minima are found to have slightly higher Mg s- than Si s-like character in $MgSiN_2$ but in $MgGeN_2$ and $MgSnN_2$, the group-IV-s character becomes increasingly dominant. Finally, the phonon frequencies, phonon dispersions, Born effective charges, infrared (IR) absorption, and Raman spectra of $MgSiN_2$ and $MgGeN_2$ were calculated under the framework of a plane wave method implemented in Quantum - Espresso package. The Born effective charge calculation reveals that $MgSiN_2$ and $MgGeN_2$ have the same ionic nature compared with $ZnSiN_2$ and $ZnGeN_2$ semiconductor. The phonon frequencies which are IR and Raman active were firstly predicted.

Keywords : DFT, GW, psudopotential, II-IV-N_2 semiconductors, electronic structure

Abstract

รหัสโครงการ

ชื่อโครงการ: การศึกษาเชิงคณนาของสารกึ่งตัวนำ II-IV-N_2 และสมบัติเชิงแสง

ชื่อนักวิจัย: ดร. อัจฉรา ปัญญา เจริญจิตติชัย

ระยะเวลาโครงการ: 2 ปี

ในงานวิจัยนี้ได้ทำการศึกษาสารกึ่งตัวนำ II-IV-N_2 ชนิดใหม่ซึ่งสัมพันธ์กับสาร III-N ที่เป็นที่รู้จักดี โดยการแทนที่ธาตุหมู่ III ด้วยธาตุหมู่ II และ IV โดยในขั้นแรกพารามิเตอร์แลตทิตของ II-IV-N_2 ได้ถูกทำนายโดยวิธี full potential linear muffin-tin orbital (FP-LMTO) โดยอาศัยการประมาณแบบ generalized gradient (GGA) ในส่วนของการคำนวณหาพลังงานการสร้างของสาร II-IV-N_2 และสารคู่แข่ง ได้ as Zn_3N_2, Mg_3N_2, Cd_3N_2 and Ge_3N_4 นั้น ทำให้ได้มาซึ่งแผนผังศักย์เคมีที่แสดงถึงเสถียรภาพของการเกิดสารในช่วงของศักย์เคมีของธาตุต่างๆ จากนั้นโครงสร้างแถบพลังงานของ Mg-IV-N_2 ที่มี IV=Si, Ge, Sn ได้ถูกคำนวณโดยใช้วิธี quasiparticle-self-consistent GW (QSGW) ซึ่งได้ผลคล้ายคลึงกับสารประกอบ Zn-IV-N_2, $MgSiN_2$ นั้นถูกพบว่ามีช่องว่างแถบพลังงานแบบไม่ตรงมีค่าน้อยกว่าช่องว่างแถบพลังงานแบบตรงเล็กน้อย ในขณะที่สารอื่นมีเพียงแค่ช่องว่างแถบพลังงานแบบตรง ซึ่งช่องว่างแถบพลังงานแบบตรงที่คำนวณได้จากการใช้ค่าคงที่แลตทิต GGA คือ 3.43 eV สำหรับ $MgSnN_2$, 5.14 eV สำหรับ $MgGeN_2$ และ 6.28 eV สำหรับ $MgSiN_2$ นอกจากนี้ยังได้มีการคำนวณหาสมบัติความสมมาตรและการแยกออกจากกันของสถานะที่แถบวาเลนซ์สูงสุดและมวลยังผลของสารดังกล่าว ในส่วนของแถบตัวนำต่ำสุดของ $MgSiN_2$ พบว่ามีสมบัติของออบิทอล Mg-s มากกว่าออบิทอล Si-s เล็กน้อย แต่ใน $MgGeN_2$ และ $MgSnN_2$ ออลิทอล IV-s มีผลเด่นเพิ่มขึ้น ในขั้นตอนสุดท้ายได้มีการคำนวณหาความถี่โฟนอน การกระจายตัวของโฟนอน ประจุยังผลบอร์น สเป็กตรา IR Raman ของ $MgSiN_2$ และ $MgGeN_2$ โดยใช้วิธี plane wave จากซอฟท์แวร์ Quantum - Espresso ค่าประจุยังผลบอร์นเผยให้เห็นว่าความเป็นไอออนของ $MgSiN_2$ และ $MgGeN_2$ สามารถเปรียบเทียบได้กับความเป็นไอออนของ $ZnSiN_2$ และ $ZnGeN_2$ นอกจากนี้ยังได้ทำนายความถี่โฟนอนที่อยู่ในสภาวะกระตุ้น IR และ Raman

Keywords : DFT, GW, psudopotential, II-IV-N_2 semiconductors, electronic structure