

GaN의 전자상태 계산

Electronic Structure of GaN Cluster by DV-X α
Calculation

장명철

군산대학교 공과대학 재료공학과

GaN은 상온 에너지 밴드갭이 3.39eV 로서 청색파장을 내는 단파장 발광소자로 각광을 받고 있다. 최근, 국내에서도 사파이어 및 스피넬 위에 GaN 막을 성장시켜 발광소자를 제조하는 연구가 이루어지고 있다. GaN은 안정한 상의 경우 육방정의 우르짜이트(Wurtzite)구조(P6₃mc)를 가지며 (0001)면에서의 N-N간의 결합길이는 3.16 Å 이고 GaN₄ 4면체 클러스터에서의 Ga-N간 결합거리는 1.94Å 이다. 우르짜이트 구조는 Ga와 N이 각각 육방최밀구조를 하고 c축상에서 3/8 만큼 벗어나 있는 구조를 한다. 한편, GaN이 준안정 상태에서는 입방정구조를 취하는 것으로 알려져 있다. 어느 경우에도 GaN의 클러스터 구조는 GaN₄ 혹은 Ga₄N의 조합으로 이루어지게 되어 있다. 본 연구에서는 분자동력학적으로 분자궤도의 전자에너지를 계산해내는 DV-X α 법을 이용하여 밴드갭 에너지를 구하고자 하였다. 물질의 물리, 화학적 성질은 그 계에 존재하는 원자 핵 N과 전자 n의 운동으로부터 이해될 수 있다. 이들 전체 입자의 에너지는 슈레딩거 방정식으로 표현된다.

$$(K^T + V^T)\psi^T(R^1, \dots, R^N, r^1, \dots, r^n) = E^T \psi^T(R^1, \dots, R^N, r^1, \dots, r^n) \quad (1)$$

K^T 는 운동에너지이고 V^T 는 포텐셜에너지이다.

이방정식을 풀기 위해 제1원리 DV-X α 법에서는 단열근사, 일전자근사, 하트리.포크 근사, 하트리.포크.슬레이터 근사(X α 근사), LCAO근사 등의 근사를 적용하여 $(H - \epsilon S)C = 0$ (2)

의 영년방정식을 얻는다. H, S, C는 각각 공명적분 H_{ij} , 중첩적분 S_{ij} , 고유벡터 C_{ij} 를 요소로 하는 행렬이며 ϵ 은 고유벡터이다.

$$H_{ij} = \langle X_i^*(r_1) | h(r_1) | X_j(R_1) \rangle$$

$$S_{ij} = \langle X_i^*(r_1) | X_j(r_1) \rangle$$

여기서 h 는 하밀토니안이다. (2)의 행렬방정식은 H 및 S가 계산 가능하여 풀리게 된다. 즉, 일전자 슈레딩거 방정식(미분방정식)을 직접 푸는 것이 아니고 대수방정식을 풀어 분자궤도를 구한다. H_{ij} , S_{ij} 의 원자적분시 3차원공간상에 무게함수 $\omega(r_k)$ 를 주어 $10^3 \sim 10^5$ 개의 샘플점에 대해 수치계산을 하게 되는 데 이점이 본 DV-X α 법의 특징이다.

한편, GaN은 결정격자결합에 따라 발광특성이 달라지게 되는 데 Ga₁₀N₁₇, Ga₂₁N₁₃ 등의 육방정 클러스터 및 Ga₁₂N₁₀ 등의 입방정 클러스터에 사용하여 밴드갭 에너지를 구하고 내부에 결정격자 결합을 두어 결합에 따른 전자에너지 계산을 행하게 된다.