



Estudio de la Estabilidad de las Propiedades Estructurales y Electrónicas YGa_3N_4

Gladys Patricia Abdel Rahim Garzón^{1,2}, Jairo Arbey Rodríguez M.²

¹ Universidad Distrital Fco. José de Caldas, Universidad Militar Nueva Granada

² GEMA - Grupo de Estudio de Materiales, Depto de Física, Universidad Nacional

Recibido 22 de Oct. 2007; Aceptado 3 de Mar. 2008; Publicado en línea 15 de Abr. 2008

Resumen

Investigamos las propiedades estructurales y electrónicas del YGa_3N_4 en la fase NaCl, usando la teoría densidad funcional (DFT) y el método de ondas planas aumentadas y linealizadas (FP-LAPW) y los efectos de intercambio correlación se trataron usando la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA) con la parametrización de Perdew – Burke – Ernzerhof. Empleando la ecuación de estado de Murnaghan se ajustaron los datos de energía en función del volumen para obtener el valor óptimo de la constante de red y el módulo de volumen. Con este parámetro de red obtuvimos la densidad de estados y la estructura de bandas. Se observa que el material exhibe un comportamiento metálico debido a que no presenta una brecha de separación.

Palabras claves: YGa_3N_4 energía total, DOS, bandas, DFT, FP-LAPW, GGA

Abstract

We have investigated the structural and electronic properties of the YGa_3N_4 in the NaCl phase, using the Theory Functional Density (DFT), the Full Potential Linearized Augmented Plane Waves Method (FP-LAPW) and the exchange and correlation effects were treated using the Generalized Gradient Approximation (GGA) with the Perdew – Burke – Ernzerhof approximation. Using the Murnaghan state equation, we have fit the energy data in function of volume to obtain the optimal lattice constant and the bulk modulus. With this lattice constant, we calculated the density of states and the structure of bands. It is observed that the material exhibits a metallic behavior because it doesn't present a gap energy.

Key Words: YGa_3N_4 , total energy, DOS, bands, DFT, FP-LAPW, GGA.

© 2008 Revista Colombiana de Física. Todos los derechos reservados.

1. Introducción

En el grupo de nitruros del grupo III-V encontramos que el GaN, ha mostrado ser un semiconductor caracterizado por presentar una brecha de energía ancha y directa de $\sim 3.507\text{eV}$ que crece a medida que aumenta la presión [1]. Mientras que YN aparece como un semiconductor con una brecha de energía indirecta de $\sim 0,3\text{eV}$, que por el contrario, tiende a disminuir ante el aumento de presión y a hibridar las bandas produciendo un comportamiento metálico [2].

El estado base de cristalización para YN es de tipo NaCl con parámetro de red $a = 4,93\text{Å}$ y un módulo de volumen de 157GPa [2]. La constante de red experimental es $a = 4,877\text{Å}$ [3]. Mientras que para el GaN su estado base de cristalización es wurtzita con parámetros de red: $a = 3,25\text{Å}$ y $c/a = 1,625$ y un módulo de volumen de 169GPa [2], con valores experimentales de: $a = 3,192\text{Å}$ y $c/a = 1,6278$ [4] y un módulo de volumen entre $195\text{-}245\text{GPa}$ [5]. Existe una transición de fase de wurtzita a NaCl para GaN con una presión de transición de PT $\sim 44,2\text{GPa}$. Experimentalmente esta transición se ha observado a presiones que varían entre

37GPa y 53GPa con reducción en el volumen de aproximadamente 16% [5,7].

El GaN es un material muy atractivo para la industria, ya que por sus propiedades anteriormente enunciadas se ha utilizado en la construcción de diodos emisores de azul, verde, y en láser de emisión azul y ultravioleta (que pueden ser usados en tecnología de almacenaje y lectura de información) y en dispositivos electrónicos con capacidad de resistir altas temperaturas y distintos tipos de radiación [2]. Mientras que el YN por poseer propiedades refractarias, lo hace un buen candidato para la elaboración de varios dispositivos, ya sea como compuesto puro, en heteroestructuras o en aleaciones como: $Ga_{1-x}V_xN$ [6], $Al_{1-x}Ga_xN$, $In_{1-x}Ga_xN$ [8] y $Y_{1-x}In_xN$ [9] entre otros, cuyo propósito sea de trabajar en condiciones extremas de temperatura. Por todo lo anterior es de interés estudiar la heteroestructura YGa_3N_4 explorado las condiciones necesarias para la existencia de la fase NaCl.

2. Método de Cálculo

Los cálculos se realizaron empleando el código wien [10]. Los efectos de intercambio y correlación se trataron usando la aproximación del gradiente generalizado (GGA) [11]. Los radios muffin-tin fueron: $R_Y = 1.8$, $R_{Ga} = 1.92$ y $R_N = 1.6$ Bohr para los átomos de Y, Ga y N respectivamente, además se usaron: 58 puntos k en zona irreducible de Brillouin, el momento angular máximo dentro de la esfera muffin-tin $l_{MÁX} = 10$ y $R_{MT} * K_{MÁX} = 8.0$ con un valor de la convergencia de la energía de 0.0001Ry.

3. Propiedades Estructurales

De acuerdo a lo anterior, presentamos en detalle el estudio de la estabilidad estructural en la fase NaCl en la concentración del 75% de GaN. La Figura 1 muestra la energía total en función del volumen a $T = 0^0K$, y de allí se obtuvieron los parámetros como: el módulo de volumen $B_0 = 162$ GPa, su derivada respecto a la presión $B' = 4.72$, y la constante de red $a_{min} = 3.1842 \text{ \AA}$ y el volumen de equilibrio $V_0 = 22.83 \text{ \AA}^3$.

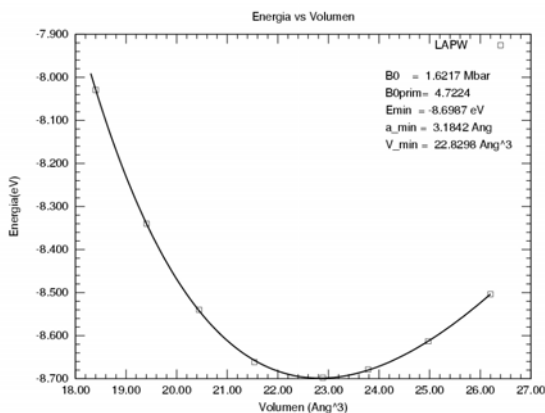


Fig.1. Energía total vs. Volumen para YGa_3N_4 .

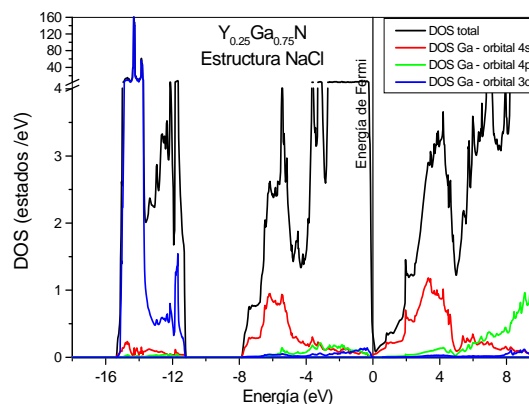


Fig.2. DOS de Ga orbitales 4s, 4p y 3d

4. Propiedades Electrónicas

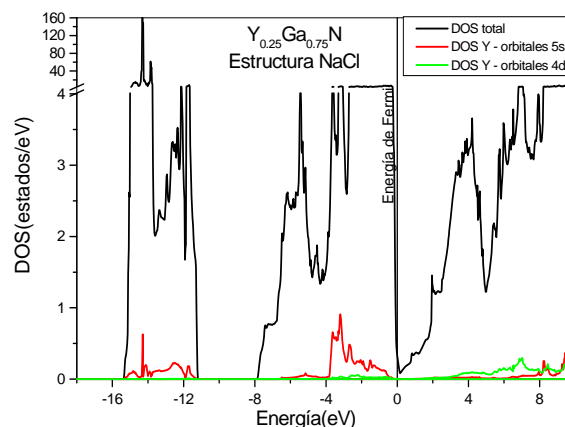


Fig. 3. DOS del Y de los orbitales 5s y 4d

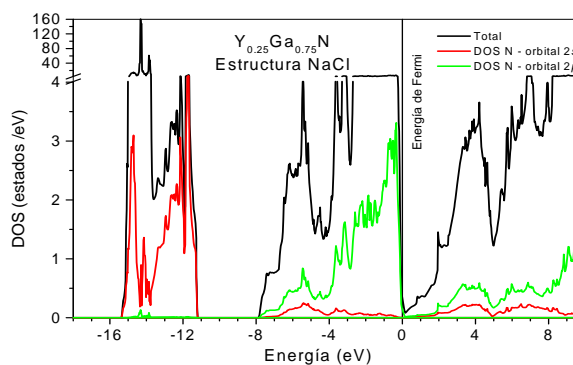


Fig. 4 DOS del N de los orbitales 2s y 2p para YGa_3N_4 .

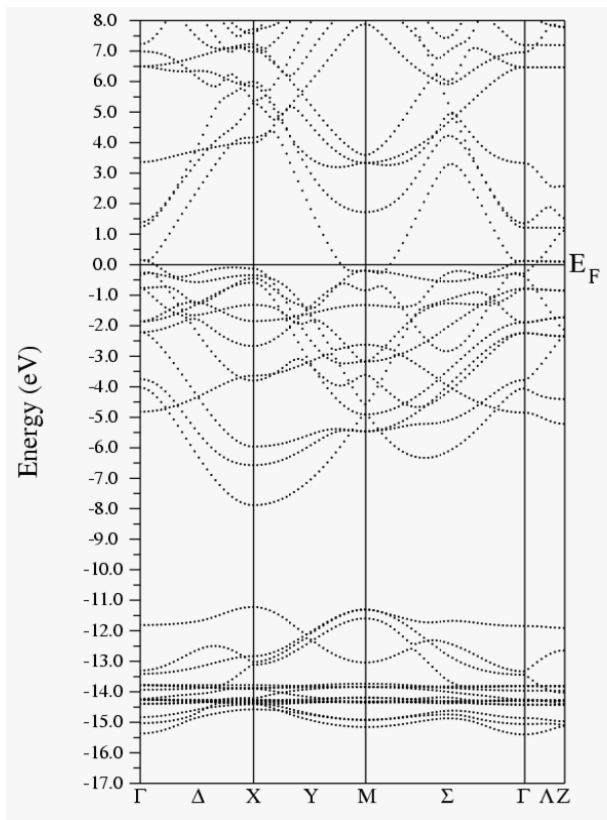


Fig. 5. Estructura de bandas para YGa_3N_4 en la fase NaCl en condiciones de mínima energía.

Las Figuras 2 á 4 muestran la Densidad de estados y la Fig. 5 la estructura de bandas de la aleación del YGa_3N_4 en NaCl. La energía se ha referenciado al nivel de Fermi. En estas figuras se observa que existen tres regiones principales: la primera se localiza debajo de ~ -11 eV, formada por electrones 3d-Galio y por los electrones 2s-Nitrógeno. Una segunda región entre ~ -8 eV y el nivel de Fermi formada principalmente por electrones 2p-N y pequeñas contribuciones de 5s-Y, 2s-N y 4s-Ga y una tercera región arriba del nivel de Fermi formada principalmente por electrones 4s-Ga, 2p-N y 2s-N y 4d-Y y pequeñas contribuciones 5s-Y y 4d-Y. De estas figuras se concluye que el compuesto YGa_3N_4 tiene comportamiento metálico.

5. Recapitulación y Conclusiones

Usando primeros principios se han obtenido las propiedades estructurales y electrónicas del YGa_3N_4 en la fases NaCl. Se obtuvieron los parámetros estructurales como: el módulo de volumen $B_{min} = 162$ GPa, su derivada respecto a la presión $B'_{min} = 4.72$, la energía total $E_{min} = -8.69$ eV , la constante de red $a_{min} = 3.18$ Å y el volumen de equilibrio $V_{min} = 22.83$ Å³. En la DOS y en la estructura de bandas se observó que a $P = 0$ en la fase NaCl el compuesto se comporta como metal, donde en la estructura de bandas se observa que la mayor contribución alrededor del nivel de Fermi correspon-

de a los electrones N-2s y pequeñas contribuciones de Ga-4s.

Reconocimientos

La financiación del proyecto se debió a DIB y Depto. de Física Universidad Nacional y al apoyo del Dr. Peter Blaha coordinador del proyecto wien2k

REFERENCIAS

- [1] I. Vurgaftman, J.R. Meyer and L.R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys, **89** (11), 5815-5875 (2001).
- [2] L. A. Mancera, Estudio mediante FP-LAPW de las propiedades estructurales y electrónicas de los compuestos YN, GaN e InN, Tesis de Maestría, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, (2003).
- [3] P. Villars y L. D. Calvert. *Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases*. American Society for Metals, Metals Park, Ohio, (1985).
- [4] Ch. Yeh, W. Lu, S. Froyen, A. Zunger. *Zinc-blende – wurtzite polytypism in semiconductors*. Phys. Rev. B **46**, 10086 (1992).
- [5] N. E. Christensen, I. Gorczyca. Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure. Phys. Rev. B **50**, 4397 (1994)
- [6] R. J. Gonzalez, GaN: V Estabilidad estructural y propiedades electrónicas. Estudio mediante DFT, Tesis de Maestría, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, (2006).
- [7] A. Muñoz and K. Kunc. Physical Review B, **44** (18): 10372-10373, (1991).
- [8] L. Mancera, J. Rodríguez, and N. Takeuchi. *Physica Status Solidi* (b), **241**(10): 2424-2428, 2004. DOI: 10.1002/pssb..200404910.
- [9] Z Dridi, B Bouhafs and Ruterana. First-principles investigation of lattice constants and browing parameters in wurtzita $Al_{1-x}Ga_xN$, $In_{1-x}Ga_xN$ and $In_{1-x}Al_xN$. New Journal of Physics (2003).
- [10] G. Patricia Abdel Rahim, Tesis de Maestría, Estudio *ab-initio* de la estabilidad del compuesto YInN. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, (2006).
- [11] P. Blaha, K. Schwarz, and J. Luitz, WIEN97, A Full Potential Linearized Augmented Plane Wave Package for Calculating Crystal Properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria), (1999). ISBN 3-9501031-0-4.
- [12] John P. Perdew, Kieron Burke, Matthias Ernzerhof, Phys. Rev. Lett, **77**, 3865-3868, 1996.