



## Estudio de la Superred 1x1-(0001)GaN/RuN, Usando el Método Ondas Planas Aumentadas y Linealizadas con la Teoría del Funcional de la Densidad.

César Ortega López<sup>1,3</sup>, William López Pérez<sup>2</sup>, Jairo Arbey Rodríguez Martínez<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

<sup>2</sup>Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia

<sup>3</sup>GEMA: Grupo de Estudio de Materiales  
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Recibido 22 de Oct. 2007; Aceptado 15 de Oct. 2008; Publicado en línea 5 de Ene. 2009

### Resumen

Reportamos un estudio de las propiedades estructurales y electrónicas de la superred de período corto 1x1-(0001)GaN/RuN en la fase wurtzita usando FP-LAPW (Full-Potential Linearized Augmented Plane Waves) con DFT (Density Functional Theory). Hemos encontrado que la superred tiene un comportamiento metálico, así este material podría ser útil como un posible contacto para el GaN. Un posible dispositivo semiconductor-metal-semiconductor o semiconductor-metal podría ser diseñado con esta geometría

**Palabras claves:** Superred GaN/RuN, FP-LAPW, DFT

### Abstract

We report a study of the structural and electronic properties of short-period wurtzite 1x1-(0001)GaN/RuN superlattice using the Full-Potential Linearized Augmented Plane Waves within Density Functional Theory. We have found that the superlattice has a metallic behavior, thus this material is useful as possible contact to GaN. A possible semiconductor-metal-semiconductor or semiconductor-metal device can be designed with this geometry.

**Keywords:** GaN/RuN superlattice, DFT, FP-LAPW.

© 2009 Revista Colombiana de Física. Todos los derechos reservados.

### 1. Introducción

Recientes estudios de las superredes de período corto AlN/GaN, InN/GaN y InN/AlN, han concluido que no sólo el ordenamiento sino también el efecto de los electrones  $d$  de Ga y de In son responsables de la reducción del gap en estas nuevas estructuras [1]. En el presente trabajo, hemos estudiado la superred de período corto 1x1-(0001)GaN/RuN usando LAPW con DFT [2,3], tal como fue implementado en el código WIEN2K [4], el término de intercambio y correlación fue determinado dentro de la aproximación GGA parametrizada por Perdew, Burke y Ernzerhof [5]. La superred (1x1) se modeló en la fase wurtzita puesto que esa

es la estructura de estado base de GaN, mediante la intercalación de una capa de GaN con una capa de RuN. El nuevo volumen de la celda se tomó como aquel que minimiza la energía. Para este volumen se calcularon las bandas electrónicas y las densidades de estados.

### 2. Consideraciones computacionales

La superred considerada pertenece al grupo de espacio hexagonal # 156 (P3m1), cuyas seis operaciones de simetría son:  $(+x,+y,+z)$ ,  $(-y,+x-y,+z)$ ,  $(+y-x,-x,+z)$ ,  $(-y,-x,+z)$ ,  $(+x,+x-y,+z)$  y  $(+y-x,+y,+z)$ . La estructura usada se muestra en las figuras 1a y 1b. En la figura 1a, se observa la celda

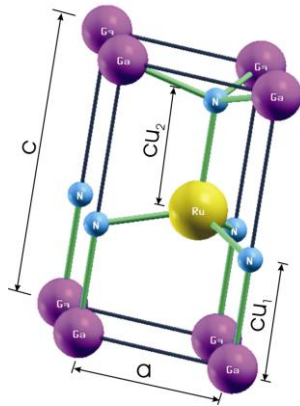


Fig. 1a Celda unitaria.

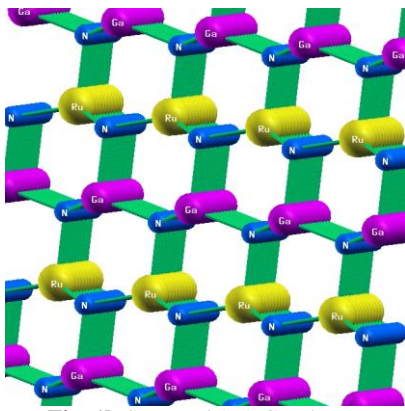


Fig. 1b Superred 1x1-GaN/RuN.

unitaria y algunas de sus dimensiones que se optimizaron. También se muestra la coordinación cuasi-tetragonal de cualquiera de los átomos. En la figura 1b se observa un modelo de la superred 1x1.

Las posiciones de los átomos fueron: Ga (0, 0, 0), N (0,0,  $u_1$ ), ( $2/3, 1/3, 1/2 + u_2$ ) y Ru ( $2/3, 1/3, 1/2$ ). Los radios muffin-tin usados para Ga, N y Ru fueron en bohr: 1.92, 1.50 y 1.70, respectivamente. La energía de corte para las ondas planas usadas fue  $\sim 44.4$  Ry y se usó un momento angular máximo de 10 para el desarrollo en armónicos esféricos de la base dentro de la esfera de muffin-tin. Para el desarrollo del potencial en serie de Fourier se usó  $14.0 \text{ bohr}^{-1}$  como máximo valor para los vectores del espacio recíproco. Para efecto de las integraciones se usaron 576 puntos en la parte irreducible de la primera zona de Brillouin. Los parámetros que se optimizaron fueron: el No. de puntos K en la parte irreducible de la primera zona de Brillouin; esto se realizó mediante un gráfico de la energía con ese No. de puntos y se escogió aquel No. de puntos K que mantuviera la energía sin cambios dentro de una tolerancia de 0.0001 Ry. Algo similar se realizó con el corte de energía de ondas planas. Las demás optimizaciones que se realizaron fueron: el volumen de la celda, el cociente  $c/a$ , los parámetros internos  $u_1$  y  $u_2$ . Estas optimizaciones consistieron en tomar el valor que minimiza la energía de la celda primitiva. De la optimi-

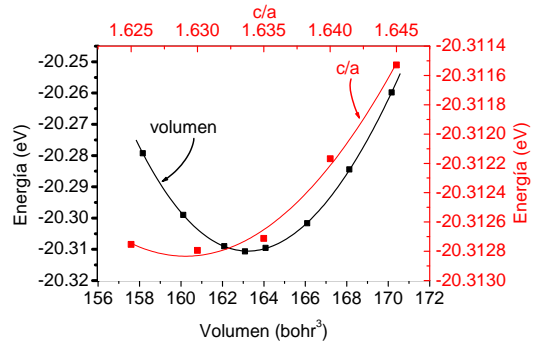


Fig. 2a Variación de la energía con los parámetros de red: volumen y  $c/a$ .

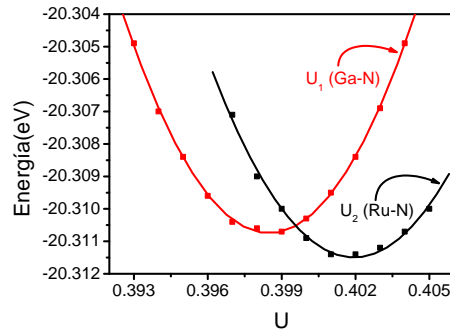


Fig. 2b Variación de la energía con los parámetros internos  $u_1$  y  $u_2$

zación de la energía con el volumen de la celda primitiva se obtuvieron los parámetros estructurales con el ajuste a la ecuación de Murnaghan [6].

### 3. Resultados

En las figuras 2a y 2b se muestran las optimizaciones realizadas. Los parámetros estructurales obtenidos fueron:  $a = 6.139 \text{ bohr} = 3.249 \text{ \AA}$ ,  $c/a = 1.6291$ ,  $u_1 = 0.3985$ ,  $u_2 = 0.4019$ , módulo de volumen  $\sim 403 \text{ GPa}$ . La longitud de enlace Ga-N fue de  $2.109 \text{ \AA}$  mientras que la longitud de enlace Ru-N fue  $2.128 \text{ \AA}$ , que corresponde a  $\sim 1.009$  veces la longitud del enlace Ga-N en la misma superred. Experimentalmente el GaN en wurtzita presenta  $a = 3.189 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.185 \text{ \AA}$ ,  $c/a = 1.626$  [7] la longitud de enlace (para caso ideal  $u = 3/8$ ) GaN es de  $\sim 1.944 \text{ \AA}$ . La diferencia en los valores de las constantes de red de la superred 1x1 con respecto al GaN wurtzita es de tan sólo 1.88%. La diferencia para  $c/a$  es de 0.19%. Por tanto, vemos que la presencia de RuN en una superred 1x1 cambia en muy poco las características estructurales respecto al material GaN wurtzita, pero altera profundamente las características electrónicas, como se verá más adelante.

En la figura 3a y 3b se han dibujado las bandas y las densidades de estados (DOS) para la superred wurtzita de corto período GaN/RuN. Los cálculos se realizaron teniendo en cuenta la polarización de spin, debido a la presencia del Ru,

cuya ubicación en la Tabla Periódica es justo debajo del Fe. El estado base del Ru atómico aislado es  $[\text{Kr}]4d^75s^1$ , mientras que el del Fe es  $[\text{Ar}]4d^65s^2$ . Como se ve existe la posibilidad de que el Ru introduzca alguna perturbación magnética. En la figura 3b se nota que las DOS para las dos polarizaciones de spin son idénticas. Por tanto, se concluye que el material no presenta momento magnético espontáneo a 0K 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 0K (gap experimental  $\sim 3.4$  eV [7]). Ya que esta superred presenta características metálicas y como sus propiedades geométricas son muy parecidas, proponemos que una de sus aplicaciones es el ser usado como contacto al GaN wurtzita. Recientemente, se fabricó un diodo Schottky GaN/Ru [8]. Es claro que la superred presentada en este trabajo es un material nuevo que presenta características electrónicas muy diferentes a las del contacto del Ru metálico sobre el GaN.

#### 4. Recapitulación y Conclusiones

Se han determinado las propiedades estructurales de una superred 1x1 GaN/RuN. Se halló que esta superred es muy parecida estructuralmente al GaN wurtzita, pero difiere notablemente de este último en sus características electrónicas. También hemos encontrado que la superred tiene un comportamiento metálico, y es útil como participante en un posible dispositivo semiconductor-metal-semiconductor o semiconductor-metal.

#### Agradecimientos

El presente trabajo tuvo el apoyo económico de la DIB Universidad Nacional y de la Universidad de Córdoba. El grupo GEMA desea agradecer al Dr. Peter Blaha de la Universidad de Viena por su apoyo con la licencia del programa Wien2k.

#### Referencias

[1] A. Lakdja, B. Bouhafs, P. Ruterana, Computational Materials Science **33**, 157-162, 2005  
 [2] P. Hohenberg, W. Khon, Phys. Rev. **136**, B864, 1964  
 [3] W. Khon, L. S. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133, 1965  
 [4] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2K, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, ISBN 3-9501031-1-2, 2001  
 [5] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. **77**, 3865, 1996  
 [6] F. D. Murnaghan, Proc. Nat. Acad. Sci. **30**, 244, 1994  
 [7] S. Strite, H. Morkoc, J. Vac. Sci. Technol. **B10**, 1992.  
 [8] C. Ramesh, V. Reddy, K. Koteswara Rao, J. Mater. Sci.: Mater. Electron **17**, 999-1004, 2006

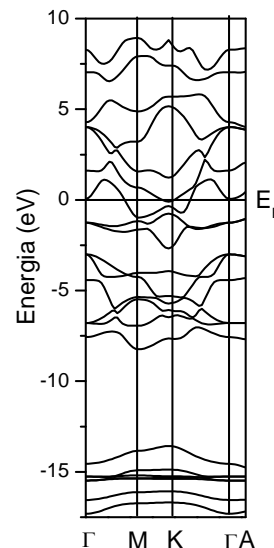


Fig.3a Estructura de bandas para la superred GaN/RuN.

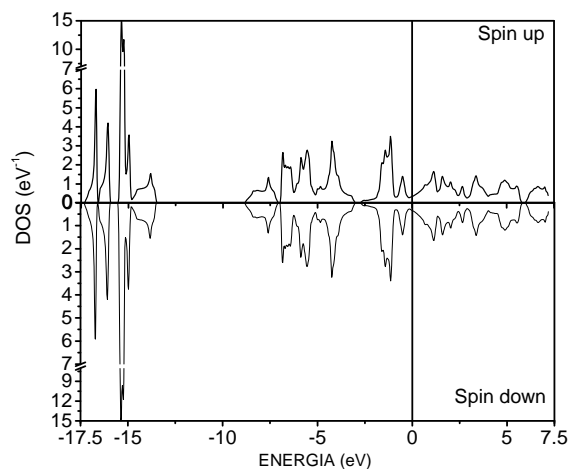


Fig.3b DOS total para la superred GaN/RuN para cada polarización de spin. Las energías se han referido al nivel de Fermi.