

사파이어면상의 GaN막의 전자상태 계산
 Electronic Structure of GaN Thin Layers On a
 Sapphire Surface by DV-X α Calculation

장명철

군산대학교 공과대학 재료공학과

청색 발광소자로 각광을 받고 있는 GaN을 사파이어 및 스피넬 위에 GaN 막을 성장시켜 발광소자를 제조하는 연구가 이루어지고 있다. 육방정의 우르자이트(Wurtzite)구조(P6₃mc)를 가지는 GaN을 알루미늄의 (0001)면이나 스피넬(MgAl₂O₄)의 (111)면에 성장시킬 때 격자 부정합으로 인한 결함이 GaN 격자내에 형성되는 것으로 알려져 있다. 이같은 GaN-Al₂O₃, GaN-MgAl₂O₄ 계면에서의 원자의 결합형태는 완전한 결정이기 보다는 클러스터의 특성을 갖게 된다. 이같은 계면에서의 클러스터 상태에 대한 전자에너지 변화는 측정이 그리 간단치 않다. 본 연구에서는 분자동력학적으로 분자궤도의 전자에너지를 계산해내는 DV-X α 법을 이용하여 접합계면에서의 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 단일근사, 일전자근사, 하트리.포크 근사, 하트리.포크.슬레이터 근사(X α 근사), LCAO근사 등의 근사를 적용하여 $(H - \epsilon S)C = 0$ (2)

의 행렬방정식을 얻는다. H, S, C는 각각 공명적분 Hij, 중첩적분 Sij, 고유벡터 Cij를 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 h는 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. Hij, Sij의 원자적분시 3차원공간상에 무계함수 $\omega(r_k)$ 를 주어 $10^3 \sim 10^5$ 개의 샘플점에 대해 수치계산을 하게 되는 데 이점이 본 DV-X α 법의 특징이다.

격자부정합에 따른 완충층의 전자에너지 상태를 DV-X α 법으로 구한다.