

**Зіновчук А.В.**

кандидат фіз.-мат. наук, доцент,

**Корнійчук П.П.**

кандидат фіз.-мат. наук, доцент,

**Грищук А.М.**

кандидат фіз.-мат. наук, доцент,

Житомирський державний університет імені Івана Франка

## **МОДЕЛЬ ВАЛЕНТНИХ СИЛОВИХ ПОЛІВ ДЛЯ АІІВУ НІТРИДІВ З ГЕКСАГОНАЛЬНОЮ КРИСТАЛІЧНОЮ ГРАТКОЮ**

Чисельна модель для розрахунку властивостей кристалічної ґратки є необхідною складовою багатьох глобальних мультифізичних моделей, що мають на меті реалістичне передбачення та проектування роботи електронних та оптоелектронних приладів на основі АІІВУ нітридів. Високоточні *ab initio* методи моделювання кристалічної ґратки дуже часто не можуть бути використані внаслідок своїх екстраординарних вимог щодо розрахункових потужностей. Наприклад, точний розрахунок електронного транспорту чи рекомбінації носіїв заряду вимагає визначення фононної структури в більш ніж тисячі точок зони Бріллюєна. Розрахунок властивостей потрібних InGaN сполук вимагає використання надкомірок, що містять декілька сотень атомів. В обох наведених прикладах, *ab initio* методи призводять до неприйнятних часових затрат. Саме тому останнім часом у дослідженнях почали використовувати емпіричний підхід, що називається метод валентних силових полів (ВСП). Декілька модифікацій найбільш відомої ВСП моделі Кітінга [1] було запропоновано для нітридів з ґраткою типу вюрциту (ґратка з гексагональною симетрією) [2,3,4,5]. Ці моделі досить адекватно описують статичні властивості ґратки гексагональних InN та GaN. Однак застосування їх до розрахунку динаміки ґратки (фононної структури) призводить до значних відхилень від відомих експериментальних даних. В цій роботі ми оптимізували ВСП метод для гексагональних InN та GaN, в рамках якого можливо адекватно передбачати як статичні, так і динамічні властивості ґратки.

У рамках раніше запропонованих моделей пружна енергія кристалічної ґратки є сума близькодійючих потенціалів стиску-розтягу та згину міжатомного зв'язку сусідніх атомів. Як вже зазначалося вище, такий підхід не може адекватно описати навіть найпростіші особливості динаміки гексагональної ґратки типу вюрциту. Для подолання цієї розбіжності, ми виконали наступні модифікації стандартної ВСП моделі. Перше, ми врахували потенціали стиску-розтягу з другими наступними сусідніми атомами та ввели в розгляд перехресні потенціали типу розтягу-згину та потенціали компланарної взаємодії. Друге, була врахована анізотропія гексагональної структури шляхом введення двох типів силових констант: перший тип описує пружні взаємодії в

полярному (або як його ще називають  $c$ -напрямку), а другий – в перпендикулярному напрямку до полярної осі. Числові значення для силових констант необхідно оптимізувати так, щоб результати розрахунку співпадали з наперед заданими цільовими значеннями. Ми використовували два набори цільових значень. Перший набір включає в себе відомі з експерименту енергії акустичних та оптичних фононів в точках високої симетрії зони Бріллюена. Другий цільовий набір містить експериментальні значення п'яти незалежних пружних констант. Двохцільова оптимізаційна функція визначалася як середньоквадратичне відхилення між результатами розрахунку та цільовими значеннями. Ця функція за своєю математичною сутністю є функціоналом від двадцяти незалежних змінних, що фізично являють собою двадцять силових констант, що описують потенціали міжатомних взаємодій. Значення цих констант знаходилися як результат багатовимірної мінімізації цільової функції. Пошук глобального мінімуму в цьому випадку є далеко не тривіальною задачею внаслідок сильної нелінійності цільової функції та високої розмірності задачі. Саме тому стандартні мінімізаційні алгоритми на основі спряжених градієнтів не справляються з даною задачею. В цій роботі ми використали модифікований нелінійний алгоритм симплексного рипу [6]. Він вимагає обчислення лише самої функції, а не її градієнту, що значно пришвидшує процес мінімізації в нашому випадку.

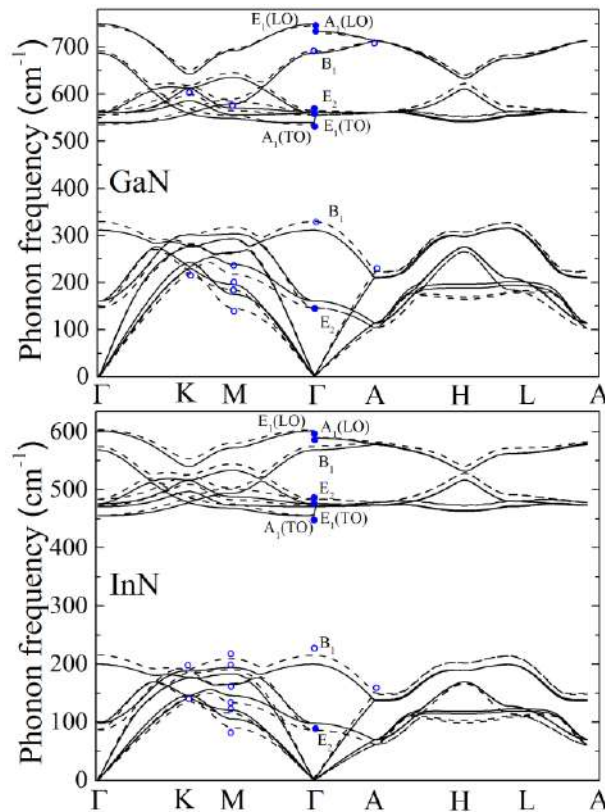


Рис.1. Фононна структура для GaN та InN. Штриховані лінії – одноцільова оптимізація лише за енергіями фононів; суцільні лінії – двохцільова оптимізація за набором енергій фононів, так і за набором пружних констант. Точки на рисунку відображають експериментальні дані із робіт [8,9,10].

Результати розрахунку статичних властивостей ґратки бінарних GaN та InN за запропонованою моделлю показують досить адекватне співпадання з

експериментальними даними. Наша модель здатна правильно відтворювати величини сталих гексагональної кристалічної ґратки, пружні константи, незалежні внутрішні пружні параметри, неідеальне  $c/a$  відношення та нееквівалентні довжини міжатомних зв'язків. **Рисунок 1** демонструє розраховану фононну структуру для GaN та InN. Як видно із рисунка, модель досить точно передбачає енергії фононів як в центрі ( $\Gamma$ -точка), та і на краях зони Бріллюена ( $A$ -точка). Найбільші відхилення від експериментальних даних (порядку  $10\div 12\%$ ) спостерігаються для енергій  $E_2$  and  $B_1$  фононів.

#### Список використаних джерел

1. P. N. Keating, *Phys. Rev.* v.145, p.637 (1966).
2. T. Mattila, A. Zunger, *J. Appl. Phys.* v.85, p.160 (1999).
3. F. Grosse, J. Neugebauer, *Phys. Rev. B.* v.63, p.085207 (2001).
4. M. Łopuszynski, J. A. Majewski, *J. Appl. Phys.* v.111, p. 033502 (2012).
5. D. Camacho, Y. M. Niquet, *Physica E.* v.42, p.1361 (2010).
6. Ph. E. Gill, W. Murray, M. H. Wright, *Practical optimization* (Academic press, London, 1981)
7. J. Serrano, A. Bosak, M. Krisch, F. J. Manjon, A. H. Romero, N. Garro, X. Wang, A. Yoshikawa, M. Kuball, *Phys. Rev. Lett.* v.106, p.205501 (2011).
8. T. Ruf, J. Serrano, M. Cardona, P. Pavone, M. Pabst, M. Krisch, M. D'Astuto, T. Suski, I. Grzegory, M. Leszczynski, *Phys. Rev. Lett.* v.86, p.906 (2001).
9. V.Yu. Davydov, A.A. Klochikhin, M.B. Smirnov, V.V. Emtsev, V.D. Petrikov, I.A. Abroyan, A.I. Titov, I.N. Goncharuk, A.N. Smirnov, V.V. Mamutin, S.V. Ivanov, T. Inushima, *Phys. Status Solidi B.* v.216, p.779 (1999).