

高效能運算服務帳號申請表

研究工作詳述

1. 簡介：

InAs 為常見的半導體材料，因為它的高電子遷移率與窄能隙，所以經常應用在在高速電子元件與光學元件中，我們經常利用摻雜 Si 使 InAs 變成 n-型半導體；利用 GSMBE (gas-source molecular beam epitaxy) 在 n 型 InAs (001) 面上成長 InAs 摻雜 Si。在生長前，先將基板加熱至 500°C 十分鐘，去除氧化層。接著將基板溫度降至 490°C 成長摻雜 Si 的 InAs 層，成長厚度為 1 μm。再將樣本帶到國家同步輻射中心，對 Si 進行 K-edge 的 XANES 實驗，測得其短距離結構與實驗數據。

因為 XANES 所包含的資訊很多，無法直接藉由分析譜形來獲得晶體結構，所以我們藉由 VASP 軟體模擬實驗的結果，找出最接近實驗數據的晶體結構，並瞭解 Si 對 InAs 的影響。

2. 問題描述：

我們想調查 Si 在 InAs 中的短距離結構（例如：鍵長，佔據位置，取代哪種元素，電性...），上述的性質可以經由分析 XANES 頻譜後得知。實驗的 XANES 頻譜（InAs 摻雜 Si 後的 XANES 頻譜）已在同步輻射中心測量，並嘗試利用 FEFF9 程式模擬理論中的晶體結構與 XANES 頻譜，但無法獲得與實驗數據吻合，我們猜測與實驗數據不符的原因為 FEFF9 使用過度簡化的 muffin-tin 近似做位能計算，我們認為 VASP 的 PAW 的近似方式可以得到較好的分析結果，所以改用 VASP 進行理論計算分析。

X-ray 的吸收係數 (μ) 與電子密度 (ρ) 的關係可以藉由費米黃金定律得知：

$$\mu(E) \propto |\langle \phi_f | \varepsilon \cdot \mathbf{r} | \phi_i \rangle|^2 \rho(\hbar\omega + E_i - E_f)$$

其中的 ϕ_f 與 ϕ_i 為電子的終狀態與初狀態的波函數， ρ 為終狀態的電子狀態密度， E_i 為 core-level 能量， E_f 為終狀態的能量；由方程式可以得知，在吸收譜中的各個峰值與不同能量的狀態密度有關，我們想藉由 VASP 模擬晶體在基態能量下各個能階的狀態密度 (DOS, density of state)，藉由晶體在基態能量下的不同能階的狀態密度分佈，模擬 K-edge 的 XANES 吸收譜。

3. 擬採用方法：

為了瞭解 InAs 摻雜 Si 後的變化，我們利用第一原理進行模擬，Si 在 InAs 中的 XANES：

1. 結構分析：InAs 為閃鋅結構，將 Si 摻入後，InAs 會變成 n 型半導體，所以 Si 有較大的可能性會取代 In 的位置；建立一個以 Si 為中心共 381 個

原子的晶胞，並定出晶胞內各個原子的座標，並輸入 POSCAR 中，利用 projector-augmented waves (PAW) 與 Perdew-Wang-91 近似方式，截止能量 (cutoff energy) 為 500 eV，優化的晶格參數，找出能量最低的狀態，結果將會輸出在文件 “XDATCAR” 中。

2. 能階分析：利用結構分析後的優化晶格參數，並在 KPOINT 中設定波函數取 $4 \times 4 \times 4$ 點做計算的數量，計算電子狀態密度 (DOS)，結果將會輸出在輸出文件 “DOSCAR” 中，費米能階會在輸出文件 “OUTCAR” 中

3. 吸收係數：利用費米黃金定律 $[\mu(E) \propto \langle \phi_f | \epsilon \cdot r | \phi_i \rangle]^2 * \rho(\hbar\omega + E_i - E_f)]$ 中，吸收係數與狀態密度成正比的關係，將能階分析得到的狀態密度 (DOS) 與實驗數據作正歸化，並比較其圖形，驗證結果是否一致。

4. 預期成果：

1. 實驗數據：實驗結果如下圖一，我們可以觀察到吸收係數對強度的圖形中有三個峰值，其中最強的峰值 (white line) 位於 1840.8 eV，其他兩個較小的峰值分別位於 1844 eV 與 1847.4 eV。

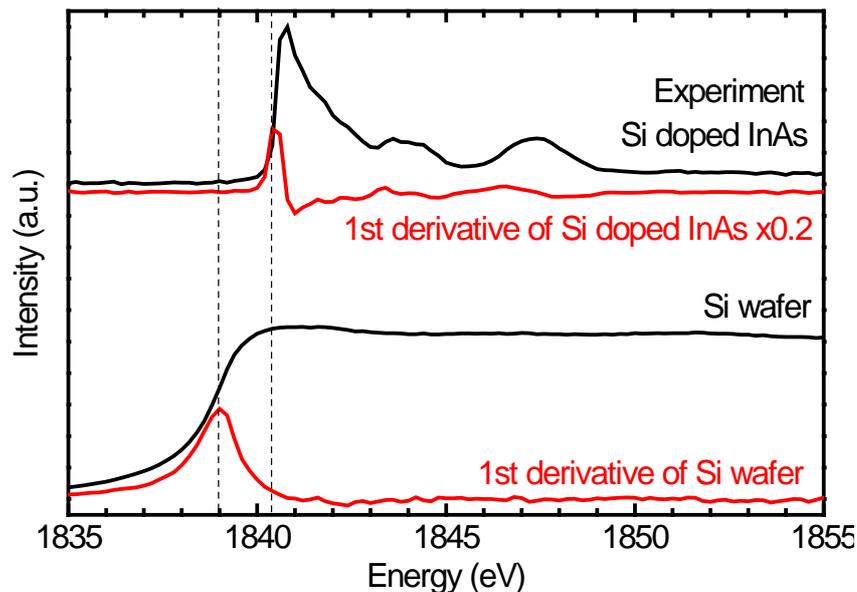


Fig.1 Si K-edge 的 XANES 與一次微分後的圖形

2. 模擬結果：目前已經利用 FEFF9 模擬晶體結構解釋 XANES 譜；利用將 Si 取代不同原子的位置 (In)，並改變以 Si 為中心，各層原子對 Si 的距離；或改變晶體內部各種參數 (ex:離子性...)，試著找出與實驗數據最相似的圖形。目前我們覺得最像的結果為第一層原子到中心的距離不變，第二層與第三層原子到中心的距離縮短至 3.855Å 與 4.822Å，但此結果會使晶體整體能量上升，並不是一個穩定的結構，其結構所對應的圖形也與實驗數據不符合，所以我們改用 VASP 進行模擬。

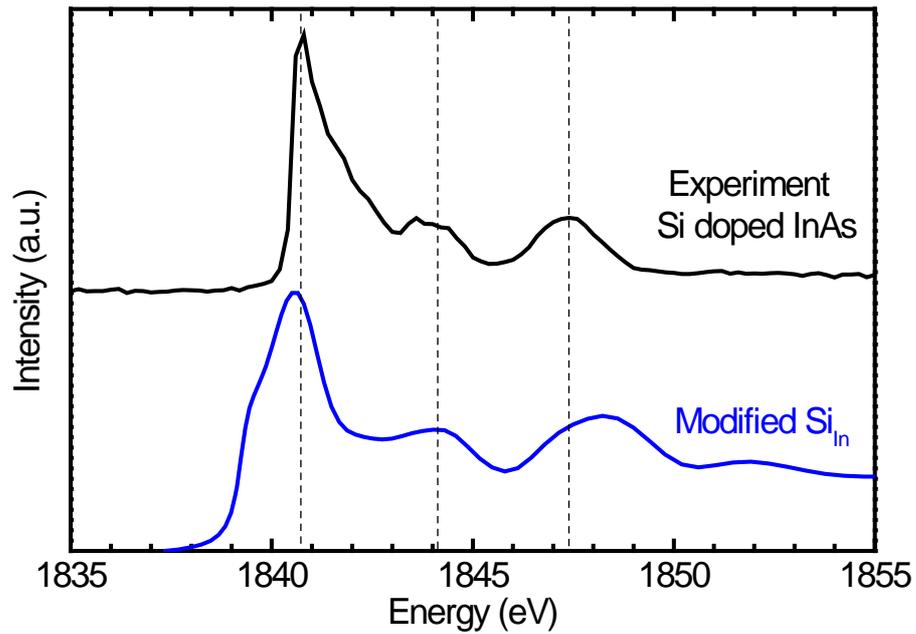


Fig. 2 Si 摻雜在 InAs 中的 XANES ；

上方為實驗數據，下方為 FEFF9 模擬的圖形

3. VASP 模擬結果：

1. 結構分析：藉由程式模擬找出總能量最低的晶體結構，並觀察其第一、二和三層的原子距離，預計得到的結果為各層距離都縮短，較符合我們的猜想。
2. 能階分析：藉由模擬能帶結構（band structure），找出 Fermi level 與各個能階所對應的能量。
3. 吸收係數分析：藉由能階分析的結果，模擬 XANES 譜；找出模擬 XANES 中的 K-edge 與其他 peak 的位置與強度，能與實驗數據相符。

5. 未來研究方向：