



TÍNH CHẤT ĐIỆN TỬ CỦA CẤU TRÚC SIÊU MẠNG DỰA TRÊN DÂY DỊ CHẤT ZnO/GaN KIỂU ARMCHAIR

Nguyễn Thành Tiên, Lại Thị Hồng Yến, Võ Khương Điền và Huỳnh Thị Mỹ Duyên

Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ

Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 19/04/2017

Ngày nhận bài sửa: 15/06/2017

Ngày duyệt đăng: 30/10/2017

Title:

Electronic properties of the
superlattice based on armchair
ZnO/GaN nanoribbons

Từ khóa:

Cấu trúc vùng, lý thuyết phiếm
hàm mật độ, mật độ trạng thái,
giam cầm lượng tử, dây nano,
siêu mạng

Keywords:

Band structure, density
functional theory, density of
state, quantum confinement
effect, nanoribbons,
superlattice

ABSTRACT

ZnO and GaN are the typical semiconductor materials. These materials were used in application for optoelectronic devices. Both ZnO and GaN have crystal structure wurtzite-like and they have many similar physical properties. Therefore, their combination into superlattice is expected to create a new material system with new physical properties. In this study, we investigate the electronic properties of the superlattice based on ZnO/GaN armchair nanoribbons by the density functional theory (DFT) method. We have used the PBE functional for GGA and a plane-wave basis set with the projector augmented wave method as implemented in the Vienna ab initio simulation package (VASP). In results, it is shown that the electronic structures of some crystal structures exist the strong quantum confinement effect.

TÓM TẮT

ZnO và GaN là những vật liệu bán dẫn tiêu biểu và được ứng dụng nhiều trong các thiết bị quang điện tử. ZnO và GaN có cùng cấu trúc tinh thể wurtzite và có nhiều tính chất vật lý tương tự nhau. Do đó, khi kết hợp hai vật liệu này thành cấu trúc siêu mạng tạo ra một hệ vật liệu hứa hẹn có nhiều tính chất vật lý mới. Nghiên cứu này nghiên cứu tính chất điện tử của siêu mạng dựa trên ZnO/GaN biên armchair bằng phương pháp phiếm hàm mật độ (DFT) phân cực spin. Gần đúng gradient suy rộng (GGA) cho thể tương quan trao đổi với phiếm hàm Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) và một tập cơ sở sóng phẳng đã được thiết lập trong VASP. Kết quả nghiên cứu thể hiện rằng cấu trúc điện tử của một số cấu trúc tinh thể nghiên cứu có tồn tại hiệu ứng giam cầm lượng tử mạnh.

Trích dẫn: Nguyễn Thành Tiên, Lại Thị Hồng Yến, Võ Khương Điền và Huỳnh Thị Mỹ Duyên, 2017. Tính chất điện tử của cấu trúc siêu mạng dựa trên dây dị chất ZnO/GaN kiểu armchair. Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ. 52a: 22-28.

1 GIỚI THIỆU

Gần đây, GaN được quan tâm nhiều trong nghiên cứu chất bán dẫn (Hiroshi, 2002) và được sử dụng để chế tạo các thiết bị quang điện tử (Qing, 2003). Bên cạnh đó, ZnO cũng được quan tâm nghiên cứu vì những ứng dụng của vật liệu này (Aleksandra, 2012), với vùng cấm rộng (3.37 eV) có khả năng phát ra ánh sáng xanh và cực tím

(Hiroshi, 2002). ZnO có khả năng ứng dụng cho việc phát triển các linh kiện hồng ngoại (Kohjiro, 2000). Hai vật liệu này có nhiều tính chất vật lý tương tự (Ya, 2003; Muhammad, 2008), như có cùng cấu trúc tinh thể wurtzite và độ rộng vùng cấm tương đương nhau (Kazuhiko, 2005; Hui, 2012). Ghép hai vật liệu này thành siêu mạng một lớp nguyên tử dạng nanoribbon với biên armchair có thể hình thành siêu mạng dị chất với liên kết

hoàn hảo. Được biết, các cấu trúc dị chất của tổ hợp bán dẫn tạo ra một khí điện tử hai chiều (2D) và các thiết bị được sản xuất từ đó trở thành lĩnh vực nghiên cứu về vật lý thiết bị trong các thập kỷ qua. Cấu trúc dị chất biên armchair của ZnO và GaN được kì vọng tạo thành một hệ vật liệu một chiều (1D) tương tự nhưng có kích thước bé hơn.

Từ 1980 đến nay, cùng với sự phát triển của máy tính điện tử, lý thuyết phiếm hàm mật độ được sử dụng rộng rãi và hiệu quả, những ứng dụng của lý thuyết phiếm hàm mật độ đang nhanh chóng trở thành công cụ cho nhiều lĩnh vực (Jones, 1989; Jorgen, 2006; Jorgen, 2008). Phần lớn các tính toán thực hiện bằng phương pháp DFT trên mô hình

$$\left\{ \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{ext}(\vec{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right\} \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (1)$$

Giải phương trình trên sẽ thu được năng lượng điện tử của hệ. Mỗi phương trình đơn điện tử có nhiều hàm riêng, trong đó định nghĩa một tập hợp các quỹ đạo spin $\psi_i(\vec{r}_i)$ ($i = 1, 2, \dots$) là một vector của các tọa độ xác định vị trí electron thứ i và trạng thái spin của nó.

Ý tưởng chính của lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) là mô tả một hệ gồm N điện tử tương tác thông qua mật độ điện tử thay vì hàm sóng nhiều điện tử như định thức Slater (John, 1950) sử dụng trong gần đúng Hartree-Fock. Nghĩa là biến cơ bản của hệ chỉ phụ thuộc vào 3 tọa độ không gian (x, y, z) thay vì $3N$ bậc tự do như trong gần đúng Hartree-Fock (John, 1950). Ngoài ra, các tính toán được dùng tương đối thấp so với các phương pháp dựa trên các hàm sóng nhiều điện tử phức tạp như lý thuyết Hartree-Fock và các phương pháp sau đó. Năm 1927, Thomas và Fermi lần đầu đề xuất một mô hình thể hiện năng lượng điện tử như một phiếm hàm của mật độ điện tử. Trong ý tưởng ban đầu này, họ thu được một phương trình vi phân cho mật độ điện tử không chứa các quỹ đạo điện tử. Hàm năng lượng điện tử toàn phần trở thành:

$$E[n] = T_s[n] + J[n] + E_{xc}[n] + \int v(\vec{r})n(\vec{r})d(\vec{r}) \quad (2)$$

trong đó, $T_s[n]$ là động năng của hệ; $J[n]$ là lực đẩy Coulomb của điện tử; $E_{xc}[n]$ là năng lượng tương quan trao đổi và thành phần cuối cùng là tương tác giữa điện tử-hạt nhân. Hiện nay, các tính toán dựa trên DFT vẫn liên tục được phát triển. Trọng tâm của các tính toán này là làm sao mô tả đúng thành phần năng lượng tương quan trao đổi $E_{xc}[n]$.

tính thể lý tưởng chứa một lượng nhỏ các nguyên tử (Jorgen, 2006). Mục đích của phương pháp này là tính toán mật độ điện tử, không phải hàm sóng điện tử (Jorgen, 2006). Bài báo này tập trung nghiên cứu tìm cấu trúc tinh thể tối ưu; tính chất điện tử của vật liệu bao gồm mật độ trạng thái và giản đồ vùng với việc dùng chương trình máy tính để mô phỏng cấu trúc.

1.1 Sơ lược về lý thuyết phiếm hàm mật độ

Được biết, trạng thái của hệ bao gồm N điện tử và M hạt nhân có thể thu được từ việc giải phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian cho hệ nhiều hạt:

$$E_{XC}[n(r)] = \int n(r) \varepsilon_{XC}(r) dr \quad (3)$$

Tuy nhiên, việc xác định $E_{XC}[n(r)]$ rất khó khăn. Trong khi DFT là một lý thuyết chính xác về tính chất của trạng thái cơ bản, các ứng dụng thực tế của DFT phải dựa trên các phép gần đúng cho thể năng tương quan trao đổi. Nếu có được thể năng tương quan trao đổi chính xác, bài toán hệ nhiều hạt có thể được giải chính xác. Trong DFT, các hàm tương quan trao đổi có thể gần đúng ở các mức độ khác nhau theo số lượng và dạng thành phần địa phương của chúng (John, 2005). Phiếm hàm mật độ địa phương (LDA), là một phiếm hàm đơn giản, trong đó chỉ xem xét mật độ điện tử địa phương. Ở mức độ gần đúng cao hơn là phiếm hàm gradient suy rộng (GGA), bao gồm mật độ điện tử $n(r)$.

Phương pháp gần đúng mật độ địa phương đối với phiếm hàm tương quan và trao đổi dùng để tính toán năng lượng tương quan trao đổi trên từng hạt của khí điện tử đồng nhất như một phiếm hàm của mật độ, $E_X[n(r)]$ và $E_C[n(r)]$. Những hàm này sau đó được sử dụng như hàm định lượng của năng lượng trao đổi trên một hạt của hệ không đồng nhất tương ứng (Jones, 1989).

$$E_{xc}^{LDA}[n] = \int n(r) (\varepsilon_x(n) + \varepsilon_c(n)) dr \quad (4)$$

Phương pháp gần đúng gradient suy rộng là dạng mở rộng của phiếm hàm LDA có tính đến gradient của mật độ điện tử. Gọi $n = n \uparrow + n \downarrow$ là mật độ điện tử có tính đến spin (John, 1996), phiếm hàm của năng lượng tương quan trao đổi có dạng (John, 1996; John, 1999; Jorgen, 2008)

$$E_{XC}^{GGA} [n \uparrow, n \downarrow] = \int d^3r f(n \uparrow, n \downarrow, \Delta n \uparrow, \Delta n \downarrow) \quad (5)$$

Phiếm hàm GGA phổ biến nhất hiện nay là PBE. Phiếm hàm PBE bao gồm hai phần: PBE trao đổi (E_X^{PBE}) và PBE tương quan (E_C^{PBE}).

Phiếm hàm PBE trao đổi được viết dưới dạng:

$$E_X^{PBE} [n(r)] = \int d^3r n(r) \varepsilon_X(n) F_X(s) \quad (6)$$

và phiếm hàm PBE tương quan được cho bởi:

$$E_C^{PBE} [n \uparrow, n \downarrow] = \int d^3r n(r) \left[\varepsilon_C(r_s, \zeta) + H(r_s, \zeta, t) \right] \quad (7)$$

Những lý thuyết trên là cơ sở cho việc mô phỏng cấu trúc điện tử của vật liệu ZnO/GaN kiểu armchair. Nội dung cụ thể sẽ được trình bày ở các mục tiếp theo dưới đây.

1.2 Cấu trúc siêu mạng ZnO/GaN

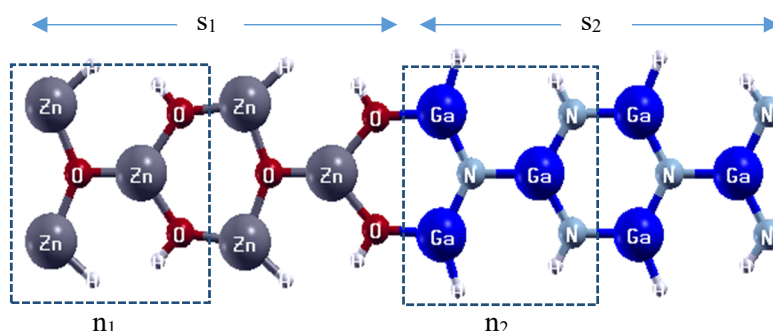
Hệ các vật liệu có cấu trúc wurtzite có năng

Bảng 1: Các thông số cấu trúc của ZnO và GaN

Vật liệu	Cấu trúc tinh thể	Hằng số mạng	Năng lượng vùng cấm	Năng lượng liên kết
ZnO	Wurtzite	a = b = 3,249 c = 5,206	3,3	60
GaN	Wurtzite	a = b = 3,186 c = 5,178	3,4	28

Bảng 1 trình bày các thông số về cấu trúc, hằng số mạng và năng lượng vùng cấm của ZnO và GaN.

Từ Bảng 1 cho thấy hằng số mạng và năng lượng vùng cấm của ZnO và GaN gần bằng nhau. Sự kết hợp chặt chẽ giữa ZnO và GaN dẫn đến giảm độ rộng vùng cấm (Qing, 2003).



Hình 1: Cấu trúc siêu mạng ZnO/GaN(n_1 - s_1 , n_2 - s_2)

Bên cạnh, cấu trúc với biên armchair của ZnO/GaN có thể hình thành cấu trúc dị chất với liên kết hoàn hảo (Hasan, 2009). Nó cho thấy có thể tồn tại một cấu trúc dị chất 1 chiều tương ứng. Do dịch chuyển điện tích các dải được hình thành ở liên kết, các dải này được thay đổi và cuối cùng được sắp xếp. Cấu trúc này tạo thành một hệ vật

lượng vùng cấm từ 1,9 eV đến 6,2 eV (Vispute, 1998). Gần đây, các vật liệu này được khai thác để chế tạo các thiết bị quang điện tử mới. Hai vật liệu được quan tâm nhiều là ZnO và GaN.

ZnO có ba dạng cấu trúc: wurtzite lục giác, zinc blende và rocksalt; trong đó cấu trúc wurtzite lục giác là cấu trúc phổ biến nhất. Cấu trúc này dựa trên liên kết đồng hóa trị của một nguyên tử với 4 nguyên tử lân cận; gồm hai mạng lục giác xếp chặt lồng vào nhau của Zn^{2+} và O^{2-} . Bên cạnh đó, ZnO là một hợp chất bán dẫn loại n có độ rộng vùng cấm lớn ($E_g = 3,37$ eV). Nó là thành phần chủ yếu trong hầu hết các linh kiện bán dẫn và là vật liệu thích hợp để kết hợp với nhiều vật liệu bán dẫn khác, đặc biệt là GaN. GaN cũng có cấu trúc wurtzite lục giác, các ô lục giác có hai cặp nguyên tử Ga-N (Vispute, 1998), một nguyên tử Ga được bao quanh bởi 4 nguyên tử N. Trong cấu trúc lục giác, thứ tự xếp chồng các nguyên tử là ABAB (Vispute, 1998), trong đó A, B biểu thị các vị trí cho phép của cặp Ga – N trong lớp xếp chặt của mặt cầu.

liệu 1D ổn định khi đóng biên bằng H. Khi được lặp lại tuần hoàn, cấu trúc dị chất này có thể hình thành siêu mạng như hệ các chấm lượng tử. Các hiệu ứng tương tự đã được nghiên cứu cho cấu trúc graphene với độ rộng giếng-rào khác nhau. Một siêu mạng ZnO/GaN có thể được biểu diễn theo bề rộng và chu kỳ lặp lại của các mảng cấu thành

(Hasan, 2009). Nó được kí hiệu $\text{ZnO}/\text{GaN}(n_1-s_1, n_2-s_2)$ với n_1, n_2 lần lượt là số nguyên tử trong một ô cơ sở của ZnO và GaN tương ứng theo chiều dọc; s_1, s_2 lần lượt là số mảng cấu thành ZnO và GaN theo phương ngang.

2 PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Trong nghiên cứu này, các tính toán lý thuyết được thực hiện bằng cách sử dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ có kết hợp các thể tương quan trao đổi (Kohn, 1965) trong gần đúng gradient suy rộng (GGA). Chúng tôi đã sử dụng phiếm hàm PBE cho GGA và một tập sóng phẳng cơ sở được thiết lập khi thực hiện trong VASP (Vienna Ab initio Simulation Package). VASP là một gói phần mềm mạnh để thực hiện mô phỏng ab-initio sử dụng phương pháp sóng tăng cường và một bộ sóng phẳng cơ sở. VASP sử dụng một lượng lớn các tệp đầu vào và đầu ra. Các tệp đầu vào quan trọng nhất là: INCAR, POTCAR, POSCAR, KPOINTS. Bốn tệp này phải tồn tại trong danh mục làm việc trước khi VASP được chạy. Trong nghiên cứu này, chạy VASP nhờ vào sức máy của trung tâm siêu máy tính ở Thụy Điển thu được các tệp kết quả như CONTCAR, DOSCAR, EIGENVAL... và sử dụng phần mềm hiển thị cấu trúc Xcrysden để hiển thị cấu trúc tinh thể tối ưu của hệ được chọn. Bên cạnh đó, phần mềm p4vasp được sử dụng để xác lập mật

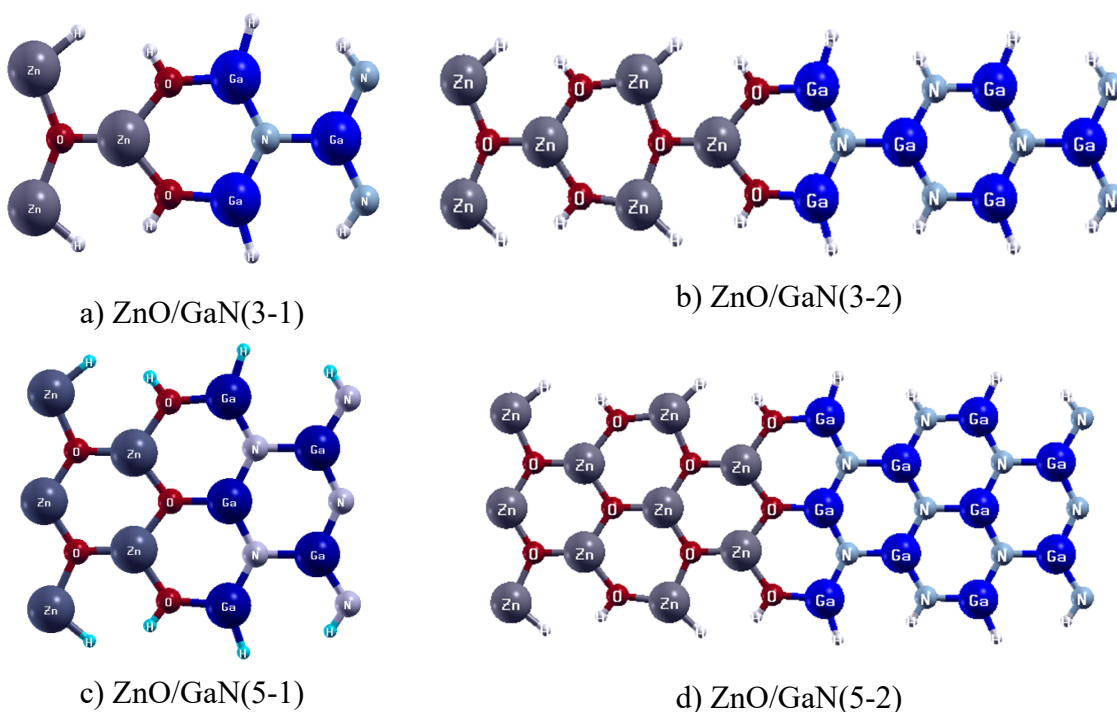
độ trạng thái và giản đồ vùng, sau đó dùng phần mềm XMGrace để xử lí các đồ thị này.

3 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

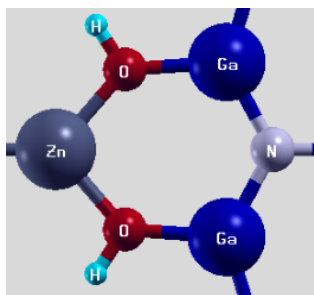
3.1 Cấu trúc tinh thể tối ưu

Các nguyên tử trong từng ô cơ sở được sắp xếp sao cho trong số 4 nguyên tử lân cận nhất của Ga có 3 nguyên tử N và một nguyên tử O và trong 4 nguyên tử lân cận nhất với Zn có 3 nguyên tử O và một nguyên tử N (Hui, 2012). Sự sắp xếp này tạo nên hai bề mặt trong liên kết, đó là bề mặt Ga-O và bề mặt Zn-N. Mặc dù liên kết trong ZnO dài hơn trong GaN , nhưng trong dãy dị chất sự chênh lệch này thể hiện khác, các liên kết ZnO co lại và GaN mở rộng ra. Sự thay đổi liên kết này tạo thành một cấu trúc lục giác với các cạnh không đều nhau như Hình 2. Bên cạnh đó, số nguyên tử Zn, Ga, O và N và số mảng được chọn trong cấu trúc này là như nhau, nghĩa là $n_1 = n_2 = n$ và $s_1 = s_2 = s$ nên có thể kí hiệu là $\text{ZnO}/\text{GaN}(n-s)$.

Hệ vật liệu này được đóng biên bằng nguyên tử H theo kiểu armchair. Tùy vào cách hình thành siêu mạng từ các ô cơ sở, biên armchair được chia thành hai loại: đối xứng và chéo nhau. Trong cấu trúc này, biên armchair có kiểu đối xứng, nghĩa là trong mỗi ô cơ sở của ZnO có N nguyên tử Zn, N nguyên tử O cùng với 4 nguyên tử H và tương tự đối với GaN .



Hình 2: Cấu trúc tinh thể kiểu armchair của (a) $\text{ZnO}/\text{GaN}(3-1)$, (b) $\text{ZnO}/\text{GaN}(3-2)$, (c) $\text{ZnO}/\text{GaN}(5-1)$ và (d) $\text{ZnO}/\text{GaN}(5-2)$



Hình 3: Một ô lục giác của siêu mạng ZnO/GaN

Hình 2 mô tả cấu trúc của ZnO/GaN(n-s) với (n-s) lần lượt là (3-1), (3-2), (5-1) và (5-2). Vật liệu ZnO/GaN được ghép từ hai chất nên các cạnh của

lục giác không đều nhau được trình bày trong Bảng 2. Bảng này cho thấy chiều dài liên kết giữa các nguyên tử tạo nên lục giác không giống nhau. Khi thay đổi số nguyên tử trong một ô cơ sở, chiều dài các liên kết này có thay đổi nhưng không đáng kể. Do đó, góc liên kết giữa các nguyên tử cũng thay đổi và được thể hiện trong Bảng 3.

Bảng 2: Chiều dài liên kết giữa các nguyên tử cho các cấu trúc ZnO/GaN(n-s) (Å)

(n-s)	Zn-O	Ga-O	Ga-N
(3-1)	1.97063	1.90885	1.84086
(5-1)	1.96223	1.89882	1.83670
(3-2)	1.96630	1.90100	1.83627
(5-2)	1.96311	1.90357	1.83901

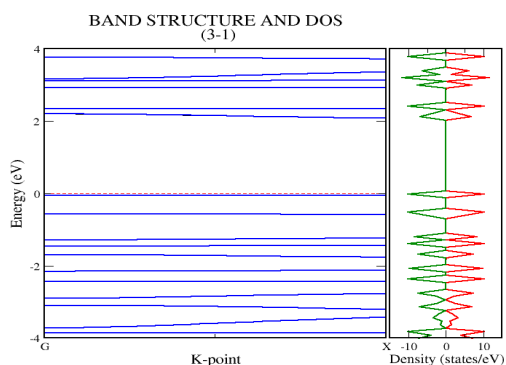
Bảng 3: Góc liên kết giữa các nguyên tử trong cấu trúc

(n-s)	O-Zn-O	Zn-O-Ga	O-Ga-N	Ga-N-Ga	N-Ga-O	Ga-O-Zn
(3-1)	98.1096	135.1068	113.6814	124.3122	113.6574	135.1325
(5-1)	108.4521	128.9669	113.1168	125.9858	116.2324	127.2460
(3-2)	108.6598	129.9053	112.5607	124.6545	118.5372	125.6825
(5-2)	108.3690	129.8741	112.1704	125.7106	117.6343	126.2418

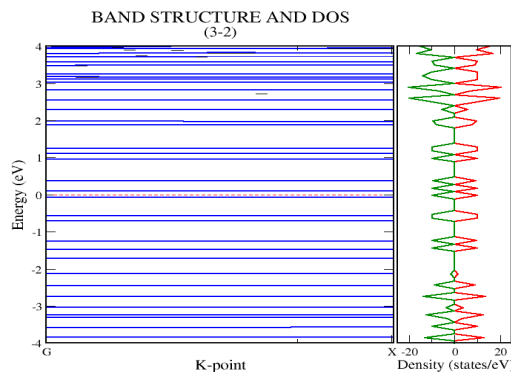
3.2 Cấu trúc vùng và mật độ trạng thái

Cấu trúc vùng và mật độ trạng thái là hai đặc trưng để mô tả tính chất điện tử của vật liệu, cho

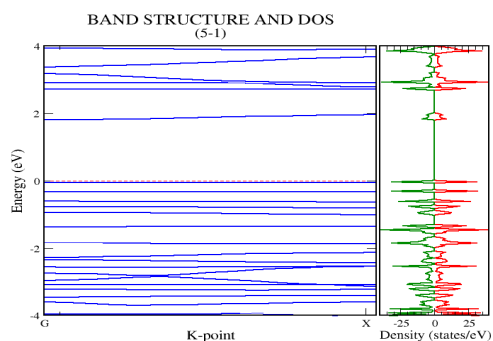
biết tính chất, đặc điểm cũng như tiềm năng ứng dụng của vật liệu.



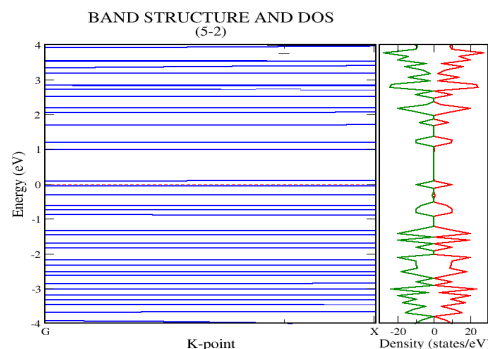
a) ZnO/GaN(3-1)



b) ZnO/GaN(3-2)



c) ZnO/GaN(5-1)



d) ZnO/GaN(5-2)

Hình 4: Cấu trúc vùng và mật độ trạng thái của (a) ZnO/GaN(3-1), (b) ZnO/GaN(3-2), (c) ZnO/GaN(5-1) và (d) ZnO/GaN(5-2)

Đường màu đỏ biểu diễn trạng thái spin up, đường màu lục biểu diễn trạng thái spin down và đường đứt nét màu đỏ biểu diễn mức Fermi

Cấu trúc nghiên cứu là siêu mạng một chiều dây nano được đóng biên H theo kiểu armchair với kích thước ngang nhỏ. Do đó, cấu trúc này được xem tương đương cấu trúc chấm lượng tử. Hình 4 biểu diễn cấu trúc vùng và mật độ trạng thái của siêu mạng dây nano ZnO/GaN với (n-s) lần lượt là (3-1), (3-2), (5-1) và (5-2). Ở đây, mức Fermi được đưa về 0 cho tất cả các cấu trúc có kích thước khác nhau. DOS cho thấy sự phân bố gần đều trong khoảng năng lượng từ -4 đến 4 eV, các trạng thái spin up và spin down đối xứng thể hiện đây là một cấu trúc có dạng đồng nhất. Khi tăng số mảng cấu thành, trạng thái điện tử càng được phân bố gần đều.

Cấu trúc điện tử cho thấy sự ổn định ở dạng tuần hoàn vô hạn. Trong các cấu trúc lục giác, năng lượng điện tử vùng cấm có liên quan xung quanh mức Fermi. Đối với cấu trúc tổ ong cơ bản như graphene, vùng này có các giao tuyến tại hai điểm K của vùng Brillouin thứ nhất. Trong các cấu trúc này, ta thấy có hình thành các trạng thái giam cầm theo hướng đối xứng GX.

Trong các cấu trúc, độ rộng vùng cấm (E_g) đặc trưng cho từng loại vật liệu, E_g khoảng cách giữa đỉnh vùng hóa trị và đáy vùng dẫn. Hình 4a và 4b đều chọn $n = 3$, s tương ứng là 1 và 2, cho thấy độ rộng vùng cấm rộng hơn ở hình 4a (2.2287 eV) và khó xác định ở hình 4b (0.1743 eV). Tương tự, hình 4c có độ rộng vùng cấm (1.8396 eV) cao hơn hình 4d (0.1397 eV) khi chọn $n = 5$ và s lần lượt là 1, 2. Do đó, khi tăng s đồng thời tăng n, E_g càng nhỏ và khó xác định. Từ đó, chúng tôi thấy rằng hiệu ứng lượng tử thể hiện rõ rệt hơn. Trong cấu trúc ZnO/GaN thì sự lượng tử hóa năng lượng càng rõ rệt là cấu trúc (3-2) và (5-2), chúng giam cầm đối xứng theo cả hai hướng. Đặc biệt cấu trúc (5-2) hiệu ứng giam cầm điện tử thể hiện rõ nét nhất.

Như vậy, vật liệu kích thước nano thể hiện những tính chất đặc biệt, chủ yếu do có hiệu ứng giam cầm lượng tử. Khi kích thước của vật liệu giảm xuống cỡ nano, một trong những hiện tượng đặc biệt là cấu trúc tinh thể và hiệu ứng lượng tử của các trạng thái điện tử bị ảnh hưởng số mảng cấu thành hệ, dẫn đến vật liệu này có nhiều tính chất mới và hứa hẹn mang lại những ứng dụng quan trọng. Bên cạnh đó, các trạng thái bị lượng tử hóa sẽ quyết định tính chất vật lý hay của vật liệu đặc biệt là các tính chất truyền dẫn trong vật liệu hay trong linh kiện cấu thành từ vật liệu.

4 KẾT LUẬN

Bằng phương pháp DFT kết hợp với gói phần mềm mô phỏng VASP, cấu trúc siêu mạng kiểu armchair của ZnO/GaN(3-1), ZnO/GaN(3-2), ZnO/GaN(5-1) và ZnO/GaN(5-2) đã được mô

phỏng, phân tích số liệu và vẽ đồ thị cấu trúc vùng, mật độ trạng thái. Từ kết quả mô phỏng nhận thấy sự lượng tử hóa thể hiện rõ ở gián đoạn vùng. Sự lượng tử hóa này phụ thuộc trực tiếp vào số mảng cấu thành trong mỗi cấu trúc, tính đối xứng của cấu trúc, nó quyết định các tính chất của vật liệu. Kết quả này cho thấy khả năng thu nhỏ kích thước các linh kiện được chế tạo bởi siêu mạng dựa trên dây ZnO/GaN một chiều sử dụng hiệu ứng giam cầm lượng tử.

LỜI CẢM ƠN

Nhóm tác giả xin gửi lời cảm ơn đến Trung tâm siêu máy tính Thụy Điển đã cho phép sử dụng sức máy để thực hiện những tính toán trong nghiên cứu này. Trường Đại học Cần Thơ đã hỗ trợ một phần kinh phí nghiên cứu.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Alivov, Y. I., Van-Nostrand, J. E., Look, D. C. and Ataev, B. M., 2003. Observation of 430 nm electroluminescence from ZnO/GaN heterojunction light-emitting diodes. *Application Physics Letter*, 83(14): 2943-2945.
- Djurisic, A. B., Chen, X., Leung, Y. H. and Ching, A. M., 2012. ZnO nanostructures: growth, properties and applications. *Journal of Materials Chemistry*, 22(14): 6526-6535.
- Jones, R. O. and Gunnarsson, O., 1989. The density functional formalism, its applications and prospects. *Reviews of Modern Physics*. 61: 689-746.
- Hafner, J., 2008. Ab-Initio Simulations of Materials Using VASP: Density-Functional Theory and Beyond. *Journal of Computational Chemistry*, 29: 2044-2078.
- Hafner, J., Wolverton, J. and Ceder, G., 2006. Toward Computational Materials Design: The Impact of Density Functional Theory on Materials Research. *MRS Bulletin*. 31: 659-665.
- Harima, H., 2002. Properties of GaN and related compounds studied by means of Raman scattering. *Journal Physics Condensed Matter*, 14: 967-993
- Huda, M. N., Yan, Y., Wei, S. H. and Al-Jassim, M. M., 2008. Electronic structure of ZnO/GaN compounds: Asymmetric bandgap engineering. *Physics Review B*, 78(4): 195204.
- Kohn, W. and Sham, L. J., 1965. Self – consistent equations concluding exchange and correlation effects. *Physical Review*. 140: 1140-1154.
- Maeda, K., Takata, T., Hara, M., Saito, N., Inoue, Y. and Kobayashi, H., 2005. GaN:ZnO Solid Solution as a Photocatalyst for Visible-Light-Driven Overall Water Splitting. *American Chemical Society*. 127: 8286-8287.
- Pan, H. and Zhang, Y. W., 2012. GaN/ZnO superlattice nanowires as photocatalyst for hydrogen generation: A first-principles study on electronic and magnetic properties. *Elsevier*. 1: 488-493.

- Perdew, J. P., Burke, K., and Ernzerhof, M., 1996. Generalized Gradient Approximation made simple. *Physical Review Letters*. 77: 18-28.
- Perdew, J. P., Kurth, S., Zupan, A. and Blaha, P., 1999. Accurate Density Functional with Correct Formal Properties: A Step Beyond the Generalized Gradient Approximation. *Physical Review Letters*. 82(12): 2544-2547.
- Perdew, J. P., Ruzsinszky, A., Tao, J., Staroverov. and Scuseria, G. E., 2005. Prescription for the design and selection of density functional approximations: More constraint satisfaction with fewer fits. *Journal Chemical Physics*, 123(9): 062201.
- Sahin, H., Cahangirov., Topsakal, M., Bekaroglu, E., Akturk, E., Senger, R. T. and Ciraci, S., 2009. Monolayer honeycomb structures of group IV elements and III-V binary compounds. *Physics Review B*. 80: 155853-155864.
- Slater, J. C., 1950. A simplification of the Hartree-Fock Method. *Physical Review*. 81: 385-390.
- Yu, Q., Xu, B., Wu, Q. H., Liao, Y., Wang, G. Z., Fang, R. C., Lee, H. Y. and Lee, C. T., 2003. Optical properties of ZnO/GaN heterostructure and its near-ultraviolet light-emitting diode. *Application Physics Letter*. 83: 4713-4715.
- Vispute, R. D., Talyansky, V., Choopun, S., Sharma, R. P., Venkatesan, T., He, M., Tang, X., Halpem, J. B., Spencer, M. J., Li, Y. X., Salamanca-Riba., Iliadis. and Jones, K. A., 1998. Heteroepitaxy of ZnO on GaN and its implications for fabrication of hybrid optoelectronic devices. *Application Physics Letter*. 73: 348-350.