

# Be 基 II - VI 族宽带四元合金的 晶格参数与带隙参数\*

王善忠 何 力 沈学础

(中国科学院上海技术物理研究所半导体薄膜材料研究中心及红外物理国家重点实验室 上海 200083)

**摘要** 分析了三元合金 bowing 参数的计算公式, 指出  $Z$  值应当为替换原子的价电子数; 通过与实验值的比较, 将三元合金分为共阳离子型和共阴离子型两类; 对共阳离子体系忽略库仑屏蔽作用, 库仑屏蔽参数  $S_{cr}$  取零, 对共阴离子体系具有较强的屏蔽作用,  $S_{cr}$  取 0.30. 用二元化合物的晶格常数、带隙参数插值计算获得了三元合金的晶格常数、带隙参数. 用三元合金的晶格常数、带隙参数插值获得了四元合金的晶格常数、带隙参数, 直观地给出了带隙、晶格常数与组分的关系. 本文同时修正了  $A_{1-x}B_xC_yD$  型四元合金带隙的计算公式

PACC: 6855; EEACC: 2520D, 2530C, 4320J

## 1 引言

1991 年夏美国 3M 公司<sup>[1]</sup>和普渡-布朗大学联合研究组<sup>[2]</sup>首次成功地演示了 ZnSe 基蓝/绿色半导体激光二极管, 在世界范围内引起了极大的关注. 在高密度光存储器、全色显示及海洋水下通讯等技术需求的驱使下, 实现蓝绿激光器的实用化一直是问题的焦点. 1992 年, 日本 Sony 公司<sup>[3]</sup>报道了以 ZnMgSSe 为电、光限制层的器件以后, 由于该材料具有合适的能带结构、晶格常数、掺杂浓度及折射率而被广泛用作光限制层, 器件寿命提高到了 101.5 小时<sup>[4]</sup>, 给器件的实用化带来了新的希望.

在取得进步的同时, 人们发现 ZnSe 基材料在器件的实用化进程中仍然举步唯艰. 困难主要源于 ZnSe 基材料易于产生堆垛层错, 大量实验表明, 这是导致器件快速退化的重要原因之一<sup>[5]</sup>. 尽管形成缺陷的机理十分复杂, 但人们相信 ZnSe 基材料的强离子性是产生退化缺陷的主要原因.

考察 ZnSe 以外的其它 II-VI 族化合物, 发现含 Be 化合物均为闪锌矿结构<sup>[6]</sup>, 且它们的离子性不但远比 ZnSe 低(表 1), 而且低于 GaAs, 可望用来抑制退化缺陷的产生. 理论表明, 随着离子性的减弱, 堆垛层错的形成能增加, 有利于抑制堆垛层错的产生; 实验上已经获得了无堆垛层错的 BeTe/Si 界面<sup>[6]</sup>. 从带隙与晶格匹配来看, BeTe 的带隙为 2.7eV, 晶格也基

\* 国家杰出青年基金和上海市应用物理中心资助项目

王善忠 男, 1966 年出生, 博士生, 目前从事半导体材料与器件研究

何 力 男, 1957 年出生, 研究员, 博士生导师, 目前从事半导体材料与器件研究

沈学础 男, 1938 年出生, 研究员, 博士生导师, 中国科学院院士, 目前从事半导体材料与器件研究

1997-03-09 收到, 1997-06-16 定稿

本与 GaAs 匹配, 适合充当蓝/绿色有源层(见图 1); BeSe、BeS 的带隙远大于 BeTe, 与其他化合物组成的合金可以充当载流子限制层<sup>[7]</sup>。此外, BeTe 容易实现 P 型重掺杂( $\sim 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ )<sup>[8]</sup>, 容易实现 P 型低阻欧姆接触 Waga 等<sup>[9]</sup>用 Be 基合金充当电、光限制层及发光有源层制备的激光二极管已经获得激光输出

表 1 Be 基化合物的共价能  $E_b$ 、离子势能  $C$  及离子性  $f_i$  比较<sup>[10]</sup>

材料	$E_b/\text{eV}$	$C/\text{eV}$	$f_i$
BeS	6.31	3.99	0.286
BeSe	5.65	3.36	0.261
BeTe	4.54	2.05	0.169
GaAs	4.32	2.90	0.310
ZnSe	4.29	5.60	0.630
GaN	7.64	7.64	0.500

由于对 Be 基合金的物理性能知之有限, 所以从理论上对它们进行系统的研究, 寻找适合研制蓝/绿色发光器件的新材料具有现实的指导意义。由于 GaAs 具有廉价、易于获得、易于处理等特点, 是目前生长蓝/绿色激光二极管的主要衬底材料, 所以我们主要针对 GaAs 匹配体系进行讨论。本文以已知的二元化合物参数作为基本参数, 采用插值算法对可能与 GaAs 匹配的形式如  $A_{1-x}B_xC_{1-y}D_y$  及  $A_{1-x-y}B_xC_yD$  的两类共 16 种 Be 基四元合金的能隙、晶格常数随组分的变化关系进行了计算, 给出了晶格常数与 GaAs 衬底匹配的组分变化范围, 寻找到 9 种可适用于蓝/绿色发光器件的材料

## 2 基本模型

合理的四元合金带隙、晶格常数的计算必须满足以下要求, 即: 四元合金的物理量在二元化合物位置上等于二元化合物的物理量; 在两个二元化合物的连线上, 四元化合物的物理量等于相应的三元合金的物理量

对  $A_{1-x}B_xC_{1-y}D_y$  型合金, 晶格常数的计算公式<sup>[11]</sup>为

$$Q(x, y) = B_1 + (B_2 - B_1)x + (B_4 - B_1)y + (B_1 - B_2 + B_3 - B_4)xy \quad (1)$$

带隙参数的计算公式<sup>[11]</sup>为

$$Q(x, y) = (1-x)T_{14}(y) + xT_{23}(y) - x(1-x)[(1-y)C_{12} + yC_{43}] - y(1-y)[(1-x)C_{14} + C_{23}] \quad (2)$$

对  $A_{1-x-y}B_xC_yD$  型合金, 晶格常数的计算公式<sup>[11]</sup>为

$$Q(x, y) = (1-x-y)B_1 + xB_2 + yB_3 \quad (3)$$

带隙参数的计算公式为\*

$$Q(x, y) = \frac{x(1-x-y)T_{12}(x) + y(1-x-y)T_{13}(y) + xyT_{23}\left(\frac{y-x+1}{2}\right)}{x(1-x-y) + y(1-x-y) + xy} \quad (4)$$

这里  $T_{AB}(x) = xB_B + (1-x)B_A - C_{AB}x(1-x)$ ,  $B$ 、 $T$ 、 $Q$  分别为二元化合物、三元合金、四元合金的相应物理量,  $C_{AB}$  为由 A 和 B 两种化合物构成的三元合金的 bowing 参数, 其余符号与 Glisson 等<sup>[12]</sup>所采用的表示方法一致。值得指出的是文献[11]中公式(8)的四元合金的

\* 作者推导修正的公式

带隙不等于相应的二元化合物和三元合金的值,即不能满足边界条件。为此,本文重新推导了  $A_{1-x}B_xC_yD$  型四元合金的能隙公式,即公式(4)。

通常,四元合金的带隙由三元合金的带隙计算而得。在缺乏三元合金带隙的实验参数时,三元合金的带隙从相应的二元化合物的带隙经插值计算获得。三元合金的带隙与二元合金的带隙不符合线性关系,包含有非线性的“能带弯曲(bow ing)项”,即<sup>[11]</sup>

$$E_{gAB} = xE_{gB} + (1-x)E_{gA} - C_{AB}x(1-x) \quad (5)$$

其中  $E_{gA}$  为二元化合物 A 的带隙;  $E_{gB}$  为二元化合物 B 的带隙;  $E_{gAB}$  为由二元化合物 A、B 组成的三元合金带隙;  $x$  为合金中化合物 B 的等效含量,  $C_{AB}$  为能带弯曲系数, 写为<sup>[13]</sup>

$$C_{AB} = \frac{ZeR_{av}}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{R_f} - \frac{1}{R_g} \right)^2 \exp\left(-\frac{1}{2}S_{cr} \frac{a\sqrt{3}}{4}\right) \quad (6)$$

其中  $R_f, R_g$  分别是替换原子 f 和 g 的泡令(Pauling)共价半径;  $R_{av}$  是  $R_f, R_g$  的平均值;  $e$  是电荷的基本单位;  $\epsilon_0$  是真空的介电常数;  $a$  是 f 原子数与 g 原子数之比为 1:1 时的晶格参数;  $S_{cr}$  为库仑屏蔽参数  $Z$  的涵义则有分歧,有人认为是 f 离子与 g 离子的价数<sup>[13]</sup>,也有人认为是 f 原子与 g 原子的价电子数<sup>[14]</sup>。

事实上,根据闪锌矿结构的二元化合物的带隙公式<sup>[13]</sup>

$$E_g = 2V(220) + \frac{a^2}{2\pi^2}V^2(111) \quad (7)$$

$V(220)$  和  $V(111)$  分别为 (220) 面和 (111) 面的晶格势。根据公式(5)可推得由 A、B 两种化合物混合组成的三元化合物的能带弯曲系数  $C_{AB}$  为

$$C_{AB} = \frac{a^2}{2\pi^2} [V_A(111) - V_B(111)]^2 \quad (8)$$

即  $C_{AB}$  为化合物 A 和化合物 B 的 (111) 面上晶格势差的平方。考虑价带与导带间的带隙时,略去原子实的影响,因此  $C_{AB}$  反映的是 A、B 的价电子在 (111) 面上产生的晶格势的差异,所以公式(6)中的  $Z$  应当为价电子数。这一点通过与实验值的比较得到进一步证实。

将计算结果与可查到的实验值比较(表 2),只有将  $Z$  理解为价电子数,计算结果才能与实验值吻合较好(表 2)。表 2 中,  $S_{cr}=0$  栏对应于共阴离子合金能带弯曲系数  $C_{AB}$  的理论值,可以看到与实验值惊人地吻合;  $S_{cr}=0.30$  栏对应于共阳离子合金能带弯曲系数  $C_{AB}$  的理论值,由于早期的实验值的离散性,理论值与实验值吻合稍差。

表 2 能带弯曲系数  $C_{AB}$  的理论值与实验值的比较\*

三元合金	理论值/eV			实验值/eV
	$S_{cr}=0.30$	$S_{cr}=0.25$	$S_{cr}=0$	
Zn(SeS)	0.47	0.50		0.63 [20]
Zn(SeTe)	1.04	1.10		1.23 [21]
Zn(TeS)	2.91	3.10		2.8 [22]
(ZnCd)S		0.23	0.31	0.3 [13]
(ZnCd)Se		0.22	0.31	0.31 [23]
(ZnCd)Te		0.22	0.31	0.33 [24]
Cd(TeS)	2.84	3.04		1.74 [25]
Cd(SeS)	0.46	0.49		0.54 [13]
Cd(SeTe)	1.01	1.08		0.87 [13]

\* 对价电子数为 2 的共阳离子合金,  $S_{cr}$  取作 0; 对价电子数为 6 的共阴离子合金,  $S_{cr}$  取作 0.30

将三元合金分为共阴离子和共阳离子两类, 调节  $S_{cr}$  值进行计算, 发现通常所取的  $0.25^{[13]}$  并非最好(表 2 所示). 实际上, 对共阴离子体系, 令  $S_{cr}=0$ , 即忽略库仑屏蔽作用, 计算结果与实测值惊人地吻合. 对共阳离子体系, 注意到当其他合金的计算值与实验值符合都较好时, 唯有 Cd(TeS) 的能带弯曲系数  $C_{AB}$  的理论值与实验值符合很差(表 2). 有理由认为这是早期实验值的错误, 例如 (ZnCd)Se 的实验值曾是  $0.75^{[15]}$ , 与理论值误差颇大, 最新的实验值  $0.31$ (表 2) 则与理论值十分吻合. 所以可认为 Cd(TeS) 的能带弯曲系数  $C_{AB}$  的实验值是例外参数而不予考虑, 让计算值与其余五种共阳离子三元合金的实验值的方差最小,  $S_{cr}$  优化为  $0.30$ . 共阳离子合金与共阴离子合金在  $S_{cr}$  上的差异是可以理解的, 根据公式(8), 对共阴离子合金, 由于决定能带弯曲系数  $C_{AB}$  的(111)面上晶格势差的价电子数仅仅为 2, 两个价电子之间的库仑屏蔽作用相对较小甚至可以忽略, 即系数  $S_{cr}$  可以取为 0; 而对共阳离子合金, 产生(111)面上晶格势差的价电子数为 6, 6 个电子之间的库仑屏蔽作用不但不能忽略

甚至可能较大. 实际上, 共阴离子合金和共阳离子合金在库仑屏蔽系数上的差异恰反映了它们物理本质的不同.

### 3 结果与讨论

图 1 是 II-VI 族化合物的带隙-晶格常数图, 图中还列出了常用衬底材料如 Si, Ge, GaAs, InP, GaSb 的参数. GaAs 等晶格线及蓝色发光区域(阴影部分). II-VI 族化合物的带隙、晶格常数列于表 3. 满足蓝绿色发光器件应用的四元合金的带隙应当在阴影部分以上(包括阴影部分)而晶格常数须横跨 GaAs 等晶格线的两侧.

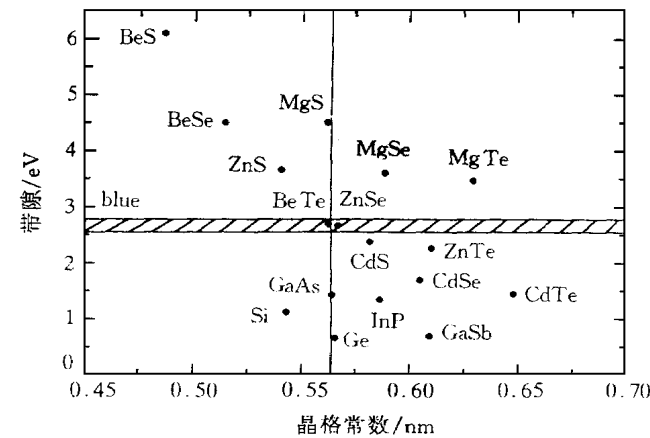


图 1 II-VI 族化合物的带隙-晶格常数图

我们总共计算了 16 种与 GaAs 匹配的四元合金, 发现其中 12 种可能用于蓝/绿色发光器件, 我们在 12 种可能材料中选出 9 种最有希望的四元合金材料, 其计

表 3 II-VI 族化合物的带隙、晶格常数

化合物	晶格常数/nm	参考文献	带隙/eV	参考文献
BeS	0.4863	6	6.1	6
BeSe	0.51477	6	4.5	6
BeTe	0.56269	6	2.7	6
MgS	0.562	26	4.5	26
MgSe	0.589	26	3.6	26
MgTe	0.6298	27	3.47	28
ZnS	0.5409	30	3.66	29
ZnSe	0.5671	30	2.67	29
ZnTe	0.6102	30	2.26	29
CdS	0.582	30	2.38	29
CdSe	0.605	30	1.70	30
CdTe	0.6481	30	1.45	30

算结果由图 2、图 3 给出。图 2 是五种计算所得的较好的  $A_{1-x}B_xC_{1-y}D_y$  型四元合金的带隙、晶格参数与组分变化的关系曲线; 图 3 则是四种较好的  $A_{1-x-y}B_xC_zD$  型四元合金的带隙、晶

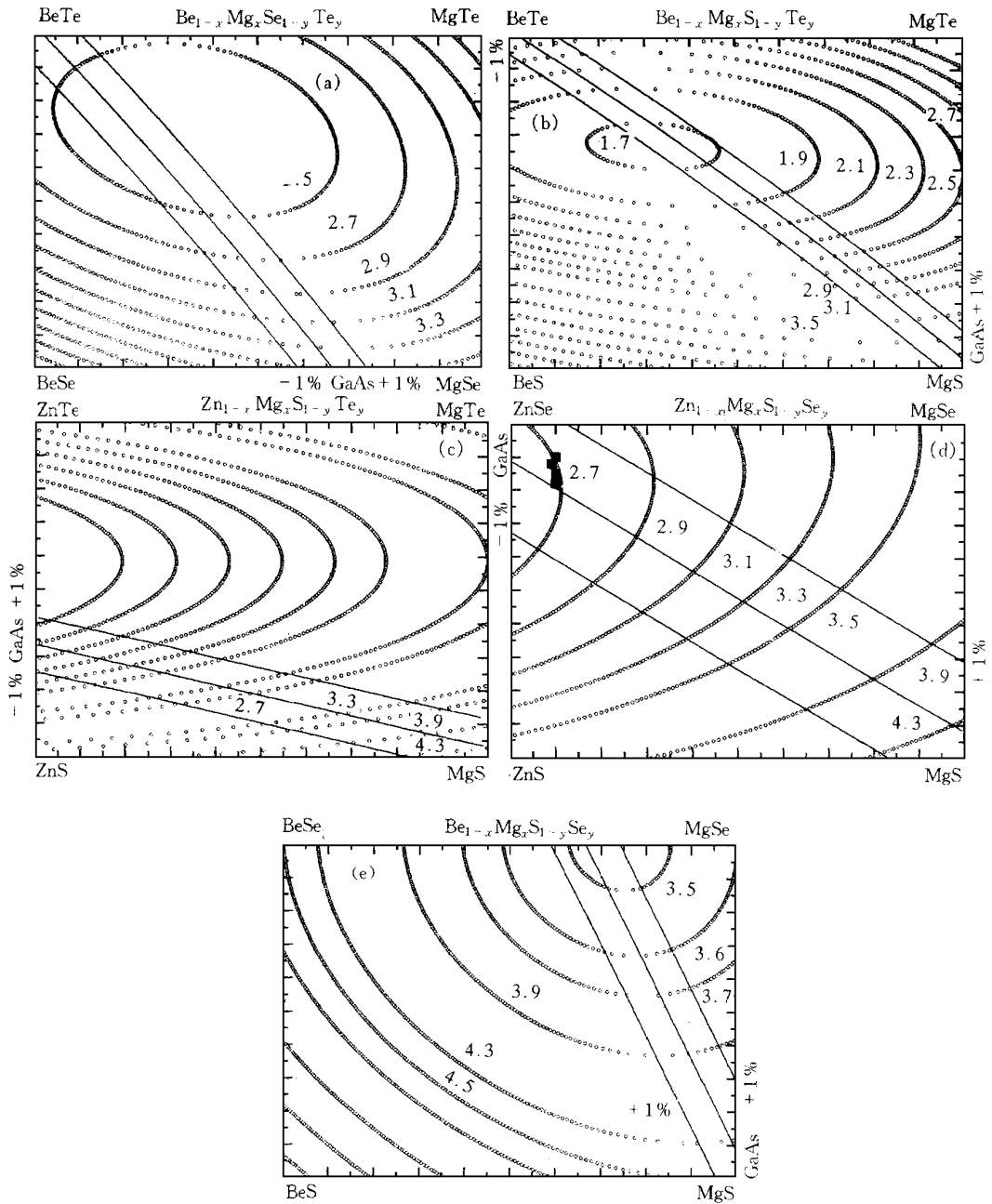


图 2  $A_{1-x}B_xC_{1-y}D_y$  型四元合金带隙、晶格参数随组分变化的理论曲线  
 图中标有 GaAs 的直线表示与 GaAs 衬底匹配的等晶格线, 标有 1% 的直线表示  
 与 GaAs 衬底失配为 1% 的等晶格线, 标有数字的曲线为等能量线;  
 (a)  $Be_{1-x}Mg_xSe_{1-y}Te_y$ ; (b)  $Be_{1-x}Mg_xSi_{1-y}Te_y$ ; (c)  $Zn_{1-x}Mg_xSi_{1-y}Te_y$ ;  
 (d)  $Zn_{1-x}Mg_xSi_{1-y}Se_y$ ; (e)  $Be_{1-x}Mg_xSi_{1-y}Se_y$ .

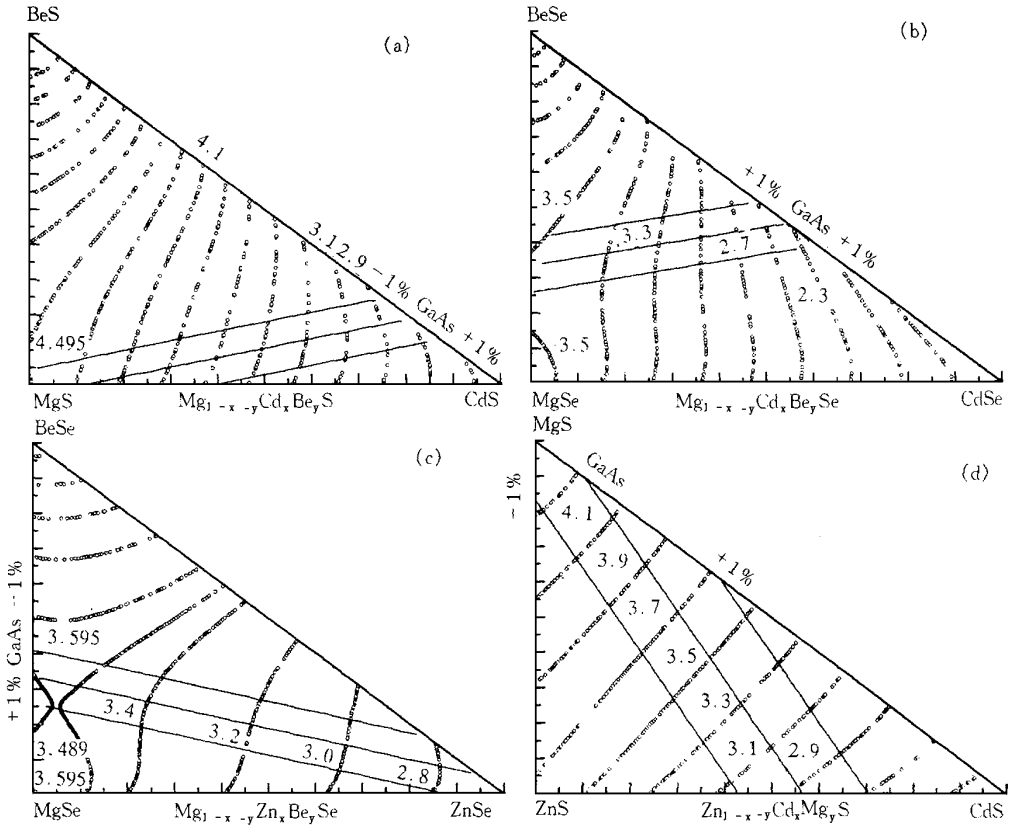


图 3  $A_{1-x-y}B_xC_yD$  型四元合金带隙、晶格参数随组分变化的理论曲线

图中标有 GaAs 的直线表示与 GaAs 衬底匹配的等晶格线, 标有 1% 的直线表示与 GaAs 衬底失配为 1% 的等晶格线, 标有数字的曲线为等能量线;

(a)  $Mg_{1-x-y}Cd_xBe_yS$ ; (b)  $Mg_{1-x-y}Cd_xBe_ySe$ ; (c)  $Mg_{1-x-y}Zn_xBe_ySe$ ; (d)  $Zn_{1-x-y}Cd_xMg_yS$

格参数与组分变化的关系曲线 可以看到, 这些材料都是含 Be、Mg 的合金, 当晶格参数保持与 GaAs 匹配的同时, 可以在宽阔的范围内进行组分调节, 且带隙可以覆盖发光区和载流子约束区的整个区域

从材料生长的角度出发, 为了寻找易于生长控制的材料, 我们以组分  $x$ 、 $y$  可调范围(在保持与 GaAs 匹配的条件下)的大小、合金带隙  $E_g$  变化范围的大小为判别依据, 同时定义晶格常数、带隙对组分的敏感系数  $\Delta a/\Delta x$ 、 $\Delta a/\Delta y$ 、 $\Delta E_g/\Delta x$ 、 $\Delta E_g/\Delta y$  用作判据 显然, 组分变化范围越大, 可进行能带剪裁的余地也越大;  $\Delta a/\Delta x$ 、 $\Delta a/\Delta y$ 、 $\Delta E_g/\Delta x$ 、 $\Delta E_g/\Delta y$  等越小, 材料性能的生长可控性也越好. 对共格生长的外延膜, 微小的失配可导致膜中可观的应力, 可在界面产生大量的失配位错, 影响薄膜的质量和能带, 所以  $\Delta a/\Delta x$ 、 $\Delta a/\Delta y$  是选择材料的两个重要参数. 在量子阱发光器件中, 阱垒界面处能带不连续值的微小差异会导致器件性能的重大变化, 所以希望每一层膜的带隙能得到精确控制, 即  $\Delta E_g/\Delta x$ 、 $\Delta E_g/\Delta y$  越小越好.

就晶格匹配而言, 图 2 中 BeMgSTe(图 2b)和 ZnMgSSe(图 2d)较好, 它们几乎覆盖了  $x$ 、 $y$  组分的全部范围(表 4); ZnMgSSe(图 2d)的  $\Delta a/\Delta x$ 、 $\Delta a/\Delta y$  比 BeMgSTe(图 2b)小, 所

以  $ZnMgSSe$  (图 2d) 易于晶格的控制, 这就是通常用作光电限制层的材料。作为与实验的比较, 图 2d 中标出了几个实际激光器中采用的  $ZnMgSSe$  的合金组分 (图中黑方块<sup>[3, 16~19]</sup>), 发现实验点基本散落在  $GaAs$  等晶格线边缘, 与薄膜生长的条件相吻合。  $BeMgSeTe$  (图 2a)、  $ZnMgSTe$  (图 2c)、  $BeMgSSe$  (图 2e) 组分的可调范围比依次变小。考虑到碲化物的 P 型掺杂相对容易 ( $ZnTe$  的掺杂浓度可达  $\sim 10^{19} \text{cm}^{-3}$ ,  $BeTe$  的掺杂浓度更是高达  $\sim 10^{20} \text{cm}^{-3}$ ), 则  $BeMgSeTe$  (图 2a)、  $BeMgSTe$  (图 2b)、  $ZnMgSTe$  (图 2c) 的 P 型掺杂可以比  $ZnMgSSe$  (图 2d)、  $BeMgSSe$  (图 2e) 更容易些。尽管对载流子的限制能力有所不同, 有的带隙高达 4.3 eV, 而有的仅为 3.5 eV, 但图 2 中诸合金的带隙均覆盖了蓝色发光区或载流子约束区。就带隙的生长可控性而言,  $BeMgSeTe$  (图 2a)、  $ZnMgSSe$  (图 2d) 和  $BeMgSSe$  (图 2e) 的带隙随组分变化的敏感性  $\Delta E_g/\Delta x$  和  $\Delta E_g/\Delta y$  较小 (表 4), 表明即使生长时材料的纵横均匀性稍差一些也仍可具有较好的带隙可控性。例如,  $BeMgSSe$  (图 2e) 的  $\Delta E_g/\Delta y$  仅为 0.98, 对分子束外延 (MBE) 生长技术的控制精度  $\Delta y \sim 0.01$ ,  $\Delta E_g$  仅为  $\sim 10 \text{meV}$ , 小于室温情况下热运动能量  $kT_B \sim 26 \text{meV}$ , 所以可以较容易实现材料的能带剪裁。  $BeMgSTe$  (图 2b) 的带隙可控性要差一些。  $ZnMgSTe$  (图 2c) 的带隙可控性最差, 其  $\Delta E_g/\Delta y$  高达 9.33, 在 MBE 生长的控制精度下,  $\Delta E_g$  高达  $\sim 100 \text{meV}$ , 给实际的带隙控制带来困难。

表 4  $GaAs$  匹配四元合金的带隙范围、组分范围及带隙-组分敏感系数

四元合金材料	带隙范围/eV		组分范围 $x$		组分范围 $y$		$\Delta E_g/\Delta x$	$\Delta E_g/\Delta y$
	最小值	最大值	最小值	最大值	最小值	最大值		
$BeMgSeTe$	2.3	3.5	0.025	0.74	0	1.00	2.22	1.62
$BeMgSTe$	1.65	3.9	0.025	1.0	0.03	1.0	4.34	4.21
$ZnMgSTe$	1.5	4.3	0.0	1.0	0.03	0.33	2.80	9.33
$ZnMgSSe$	2.6	4.35	0.0	1.0	0.07	0.89	1.75	2.13
$BeMgSSe$	3.45	4.35	0.59	1.0	0.08	1.0	2.20	0.98
$MgCdBeS$	2.7	4.27	0.12	0.82	0.0	0.18	2.24	8.72
$MgCdBeSe$	2.3	3.45	0.0	0.55	0.33	0.45	2.09	9.58
$MgZnBeSe$	2.7	3.48	0.0	0.95	0.05	0.33	0.82	2.79
$ZnCdMgS$	2.88	4.27	0.12	0.57	0.0	0.90	3.09	1.54

对  $A_{1-x-y}B_xC_yD$  型四元合金, 通过计算发现了 4 种与  $GaAs$  匹配的可能用于蓝/绿色发光器的合金体系 (图 3)。在这四种合金中, 发现  $ZnCdMgS$  (图 3d) 与  $GaAs$  匹配的组分范围最大,  $\Delta a/\Delta x$  与  $\Delta a/\Delta y$  最小 (表 4), 所以  $ZnCdMgS$  (图 3d) 最容易实现晶格常数控制;  $MgZnBeSe$  (图 3c) 的组分范围稍小一些,  $\Delta a/\Delta x$  与  $ZnCdMgS$  (图 3d) 相差无几, 但  $\Delta a/\Delta y$  却大得多, 所以晶格常数的可控性变差;  $MgCdBeS$  (图 3a) 和  $MgCdBeSe$  (图 3b) 的组分变化范围最小。可以看到, 图 3 中各四元合金的带隙均较好地覆盖蓝色发光区和载流子约束区。值得指出,  $MgZnBeSe$  (图 3c) 具有最小的  $\Delta E_g/\Delta x$ 、 $\Delta E_g/\Delta y$ , 即带隙的生长可控性最好。最近, Wagg 等人<sup>[9]</sup>利用  $MgZnBeSe$  做电光约束层, 在实验上取得了较好的结果。  $ZnCdMgS$  (图 3d) 带隙的生长可控性与  $MgZnBeSe$  (图 3c) 相差无几。  $MgCdBeS$  (图 3a) 和  $MgCdBeSe$  (图 3b) 的  $\Delta E_g/\Delta y$  大得多, 带隙可控性变差。

## 4 结 论

本文从二元化合物参数出发, 计算了Be基四元合金的晶格参数和带隙参数, 讨论了三元合金 bowing 参数的计算方法和库仑屏蔽系数  $S_{cr}$  的取值原则. 针对 GaAs 匹配体系, 以带隙、组分可调范围的大小及带隙、组分敏感系数的大小为判别依据, 计算分析了 16 种新型的 II-VI 族四元合金, 寻找到 9 种较合适的材料, 绝大部分为 Be 基合金, 其中 ZnMgSSe 是目前常用的电光限制层, BeMgZnSe 也已经被 Waag 等<sup>[9]</sup>用于蓝/绿色发光器件的研制并获得稳定的激光输出, 说明含 Be 基合金是一类很有前途的新型光电材料.

## 参 考 文 献

- [ 1 ] M. A. Haase, J. Qiu, J. M. DePuydt and H. Cheng, *Appl Phys Lett*, 1991, **59**: 1272
- [ 2 ] H. Jeon, J. Ding, W. Patterson *et al*, *Appl Phys Lett*, 1991, **59**: 3619
- [ 3 ] H. Okuyama, T. Miyajima, Y. Morinaga *et al*, *Electronics Letters*, 1992, **28**: 1798
- [ 4 ] A. Ishibashi, private communication (1996).
- [ 5 ] A. Ishibashi *et al*, 7th IEEE Laser and Electro-Optics Society Annual Meeting, PD. 1, Boston, Oct., 1994
- [ 6 ] Xiaochuan Zhou, Shan Jiang and Wiley P. Kirk, Private Communication (Aug. 1996).
- [ 7 ] 王善忠, 何力, 沈学础, 半导体学报, 待发表
- [ 8 ] H.-J. Lugauer, Th. Litz, F. Fischer *et al*, Private Communication (Jan. 1997).
- [ 9 ] A. Waag, F. Fischer, K. Schuell *et al*, *Appl Phys Lett*, 1997, **70**(3): 280
- [ 10 ] J. C. Phillips, in: *Bonds and Bands in Semiconductors*, Academic Press, New York and London, 1973, 42
- [ 11 ] Toshiyuki Ito, *Journal of Electronic Materials*, 1980, **9**: 869
- [ 12 ] T. H. Glisson, J. R. Hauser, M. A. Littlejohn and C. K. Williams, *J. Electron. Mater.*, 1978, **7**: 1
- [ 13 ] R. Hill, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 1974, **7**: 521
- [ 14 ] J. A. Van Vechten and T. K. Bergstresser, *Phys. Rev.*, 1970, **B1**: 3351
- [ 15 ] H. Tai and S. Hori, *Nippon Kinzoku Gakkaishi*, 1977, **41**: 33
- [ 16 ] J. M. Gaines, R. R. Drenten, K. W. Haberern *et al*, *Appl Phys Lett*, 1993, **62**: 2462
- [ 17 ] A. Salokatve, H. Jeon, J. Ding *et al*, *Electronics Letters*, 1993, **29**: 2192
- [ 18 ] M. A. Haase, P. F. Baude, M. S. Hagedorn *et al*, *Appl Phys Lett*, 1993, **63**: 2315
- [ 19 ] D. C. Grillo, Y. Fan, J. Han *et al*, *Appl Phys Lett*, 1993, **63**: 2723
- [ 20 ] A. Ebina, E. Fukunaga and T. Takahashi, *Phys. Rev.*, 1974, **B10**: 2495
- [ 21 ] A. Ebina, M. Yamamoto and T. Takahashi, *Phys. Rev.*, 1972, **B6**: 3786
- [ 22 ] R. Hill and A. H. Lettington, *Solid State Commun.*, 1976, **18**: 335
- [ 23 ] H. J. Lozykowski and V. K. Shastri, *J. Appl Phys.*, 1991, **69**: 3235
- [ 24 ] K. Saito, Doctoral Thesis (Tohoku Univ. 1973).
- [ 25 ] K. Ohta, J. Saraie and T. Tanaka, *Jpn. J. Appl Phys.*, 1973, **12**: 1641
- [ 26 ] H. Okuyama, K. Nakano, T. Miyajima and K. Akimoto, *J. Cryst. Growth*, 1992, **117**: 139; *Jpn. J. Appl Phys.*, 1991, **30**: L1620
- [ 27 ] J. Marine, T. Ternisien D Ouville, B. Schaub *et al*, *J. Electronic Materials*, 1978, **7**: 17
- [ 28 ] M. C. Phillips, M. W. Wang, J. F. Swenberg *et al*, *Appl Phys Lett*, 1992, **61**: 1962
- [ 29 ] Y. S. Park and B. K. Shin, *Electroluminescence*, Ed. J. I. Pankove (Springer-Verlag, Berlin 1977), 135
- [ 30 ] H. Yanai (Ed.), *Semiconductors Handbook (Revised ed.)* (Ohm-sha, Tokyo 1977), p. 9 and p. 157.



## Lattice Constant and Energy Gap of Beryllium Based II-VI Widegap Quaternaries

Wang Shanzhong, He Li and Shen Xuechu

(Research Center for Advanced Materials and National Laboratory for Infrared Physics,  
Shanghai Institute of Technical Physics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083)

Received 9 March 1997, revised manuscript received 16 June 1997

**Abstract** By analysing the calculation formula for the bowing parameters of ternary alloys, it is found that the quantity  $Z$  in the formula should be the number of the valence electrons of the substituted atoms in a ternary alloy. Ternaries can be classified into two types, that is, the common cation type and the common anion type. For the common cation system, the Coulombic screening effect is neglectable, *e.g.*, the quantity of  $S_{cr}$  equals to zero. For the common anion system, the Coulombic screening effect is a bit stronger and can not be omitted, the quantity of  $S_{cr}$  is set to be 0.30. Based on the parameters of lattice and energy gap of binaries, the relevant quantities of the ternaries are obtained in an interpolation scheme, and based on the ternary parameters, the relevant quantities of the quaternary are also achieved. The calculation formula for the energy gap of quaternary with the type of  $A_{1-x-y}B_xC_yD$  is corrected in this paper.

**PACC:** 6855; **EEACC:** 2520D, 2530C, 4320J