

杂质和空位对 AlAs/GaAs 超晶格 电学性质的影响*

王恩哥¹⁾ 章立源²⁾ 王怀玉

(北京大学物理系)

1989年3月19日收到

在紧束缚近似基础上,本文采用 Recursion 方法首次计算了含有杂质和空位的短周期 AlAs/GaAs 超晶格电子结构。局域态密度和分波态密度的计算结果清楚地反映了少量无序杂质和空位在 AlAs/GaAs 中的局部细节以及对材料本身电学性质的影响。在具有点缺陷(杂质或空位)的 AlAs/GaAs 材料能隙中将出现新能级,本文计算了它们的位置。同时利用对原子价的讨论发现体内点缺陷周围存在一个电中心,而界面点缺陷产生一个局域电场,它将导致电荷分布的转移。比较了杂质和空位的影响,并进一步证明在所有情况下它们的作用是高度局域的。

主题词 AlAs/GaAs 超晶格,电子结构,杂质及空位的局域场和电中心

一、引言

长期以来探讨理想半导体超晶格 AlAs/GaAs 电子结构的工作已经成为人们所关注的课题之一。基于不同的理论模型(如有效质量方法^[1,2]、紧束缚方法^[3-5]、经验赝势方法^[6,7]和重叠波函数方法^[8,9]等),这方面研究不但解释和证明了一系列实验结果,同时也进一步预示了可能发生的物理现象。

正如大家所知,半导体中的极微量点缺陷(本文所指的点缺陷包括杂质和空位),能够对半导体材料的物理性质和化学性质产生决定性的影响。当然,这对用半导体超晶格材料研制器件的工作更是至关重要的。1981年以来,Bastard^[10] 和 Chaudhuri^[11] 两个小组分别对无限深孤立阱内和有限深相互作用阱内的浅施主能级进行了计算。1985年 Masselink^[12] 等人利用改进的变分方法首次讨论了处⁻²外场下的 AlAs/GaAs 多量子阱中受主杂质束缚能随各种参量的变化。最近有人^[13]计算了有序重掺杂 AlAs/GaAs 超晶格中施主 Si 的态密度分布,但是这篇文章并没有讨论 P 型掺杂情况。

到目前为止我们尚未见到有关轻掺杂 AlAs/GaAs 超晶格中杂质电荷分布的报道,更没有发现有关空位对 AlAs/GaAs 材料电学性质影响的讨论。实际上在具体应用的半

* 国家教委博士点基金资助课题。

1)、2) 中国高等科学技术中心(世界实验室)理论物理分中心

导体超晶格材料中, 总是存在着偏离理想情况的各种复杂现象。最近的实验表明^[14]在用能量为 14 MeV 的快中子照射后, AlAs/GaAs 结构中存在着空位, 并且二维电子气的某些性质随点缺陷浓度的增高而变化。因此单从实际应用的目的来考虑, 在理论上深入研究一下任意分布的杂质和空位对 AlAs/GaAs 超晶格物理性质的影响无疑是十分必要和有意义的。

一般讲, 对材料中电荷分布的讨论往往是从能带计算得出的^[15-17], 而这些计算方法严格地依赖结构的周期性。对我们所关心的相对少量的任意分布点缺陷(包括杂质和空位), 用通常的能带理论求解会使问题变得相当繁杂, 以致无法计算。

本文从第一性原理出发, 用 Recursion 方法^[18]首次计算了含有杂质和空位的 AlAs/GaAs 超晶格电子结构。我们同时得到了 n-型和 p-型杂质 Si 的局部态密度和分波态密度, 讨论了体内和界面的杂质与空位对近邻原子电荷分布的影响。在体内点缺陷周围我们发现存在一个电中心, 由成键理论出发本文深入分析了这一现象, 解释了它的内在实质。对于界面情况我们证明了局域电场是导致电荷分布偏移的根本原因。本文着重比较了杂质和空位的作用, 发现空位对材料电子结构的影响比杂质大。另外我们再次指出了短周期 AlAs/GaAs 超晶格的价带顶来源于阴离子 As 的 P 态, 而导带底来源于 Ga 和 Al 原子。利用原子局部态密度和分波态密度积分, 我们给出带有点缺陷的 $(AlAs)_n/(GaAs)_n$ 中所有原子上电荷转移数及各轨道上电子占有数。

二、物理模型与计算方法

作者曾在前一篇文章 [5] 中详细研究了理想 $(AlAs)_n/(GaAs)_n$ 超晶格的电子结构。本文中我们仍可以由这个模型出发, 考虑 $(AlAs)_n/(GaAs)_n$ 中带有点缺陷的情况。注意我们采用这样一个表达式 $(AC)_{n-1}^{Si \rightarrow A}/(BC)_n$, 表示在 AC 区用一个杂质 Si 取代了 A 原子, 以讨论在理想 $(AC)_n/(BC)_n$ 材料中引入掺杂后的结果。而用 $(AC)_n/(BC)_n^B$ 表示在 BC 区的 B 原子格点处出现一个空位, 以讨论 $(AC)_n/(BC)_n$ 中带有空位的情况。这里我们所讨论的原子团共含有 1 3 8 7 个格点, 相对杂质问题总轨道数为 5 5 4 8 个, 而对空位情况为 5 5 4 4 个。

这里所用的 Recursion 方法^[18]是从解薛定谔方程的第一性原理方法。它的主要特点是把系统哈密顿量做一次么正变换, 从而使量子力学问题转换为正交轨道集 $\{u_m\}$ 和实参数集 $\{a_m\}$ 与 $\{b_m\}$ 表达的链模型。由这个模型出发可证在正交归一基表象中, 哈密顿矩阵可化简为三对角形式

$$H = \begin{bmatrix} a_0 & b_0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 \\ & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \quad (1)$$

而与此相关的实空间局部格林函数

$$G(E) = (E - H)^{-1}$$

$$= \frac{1}{E - a_0 - \frac{b_1^2}{E - a_1 - \frac{b_2^2}{E - a_2 - \dots - \frac{b_{N-1}^2}{E - a_N - \dots}}}} \quad (2)$$

表现为简单的连分数形式。于是我们并不需要直接求解系统的本征值，利用态密度与格林函数虚部的关系

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G(E) \quad (3)$$

就可以求出系统的电子谱。这种方法最大的好处是它不要求长程有序条件，所以特别适合于讨论非周期性体系的局部细节。

在紧束缚模型下，我们选用 Slater-Koster 积分做为哈密顿矩阵元，格点之间相互作用跃迁积分取 Harrison^[19] 的结果。对于这里所讨论的局域性很强的半导体材料，在格点表象中可以用类原子轨道组成完备集，因此我们的结果能够给出原子的局域态密度和分波态密度，这样对杂质和空位作用的讨论是非常直接的。本文将 Recursion 链长取为 $L = 30$ 。我们曾用 $L = 50$ 做过比较计算，发现两种情况的结果在计算精度内完全一致^[20]。

三、替位杂质 Si 的电荷分布及其对 AlAs/GaAs 能带结构的影响

首先我们讨论替位式杂质在超晶格中的电子分布状态。为了方便比较，图 1(a) ~ (d) 给出在纯 $(\text{AlAs})_3/(\text{GaAs})_3$ 超晶格中处于 AlAs 层内的 As 原子局部态密度和分波态密度；(e) ~ (h) 给出该原子 As 被杂质取代后，Si 杂质在 $(\text{AlAs})_3^{(\text{Si}\rightarrow\text{As})}/(\text{GaAs})_3$ 掺杂超晶格中的局部态密度和分波态密度。由图可以看出，相对未掺杂时 As 原子的情况，在低于费米能的区域内电子分布明显向 E_f 偏移；而在高于费米能的区域内 Si 的电子分布与 As(PC) 的结果无显著差别。这表明在 P 型掺杂情况下，杂质主要对材料的价带结构有影响。对于这里讨论的轻掺杂过程，我们的计算结果证明孤立杂质 Si 在高于价带顶大约 0.03 eV 的地方形成杂质能级。同样我们还讨论了 $(\text{AlAs})_3/(\text{GaAs})_3^{(\text{Si}\rightarrow\text{As})}$ 结构，得到了十分类似的情况。

在图 2 中我们给出了纯超晶格中 Ga 原子的态密度，以及在 GaAs 层内当 Ga 原子被代替后杂质 Si 在 $(\text{AlAs})_3/(\text{GaAs})_3^{(\text{Si}\rightarrow\text{Ga})}$ 中的态密度分布。与前面的情况相反，这里 Ga(PC) 和 Si 相对价带部分的电子分布没有明显差别，而高于费米能区域内 Si 的态密度峰值向 E_f 移动了 4 eV。由此可以看出，施主杂质主要影响导带结构。Nelson 等人^[21]指出对于 n 型有序重掺杂 AlAs/GaAs 材料，杂质带出现在导带底 0.1 eV 处。对于这里所讨论的轻掺杂情况，计算结果表明施主杂质能级在导带底 0.01 eV 附近。同时我们也计算了 $(\text{AlAs})_3^{(\text{Si}\rightarrow\text{Al})}/(\text{GaAs})_3$ 的结果。通过上面的讨论，本文进一步证明了超薄层 $(\text{AlAs})_n/(\text{GaAs})_n$ 材料的价带顶主要来源于阴离子 As 的 P 态，而导带底主要来源于 Ga

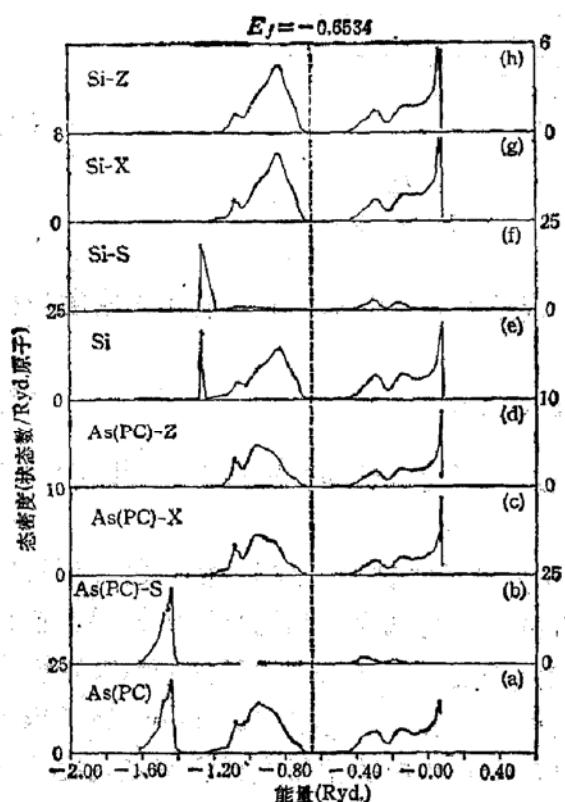


图 1 纯 $(\text{AlAs})_3/(\text{GaAs})_3$ 超晶格体内的 $\text{As}(\text{PC})$ 原子与掺杂 $(\text{AlAs})_3^{\text{Si} \rightarrow \text{As}}/(\text{GaAs})_3$ 超晶格体内的杂质 Si 的局域态密度和分波态密度比较

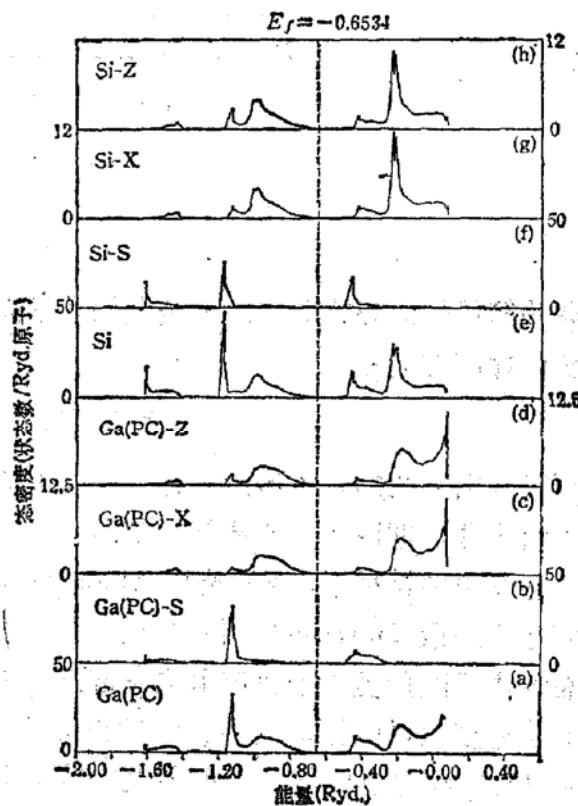


图 2 纯 $(\text{AlAs})_3/(\text{GaAs})_3$ 超晶格体内的 $\text{Ga}(\text{PC})$ 原子与掺杂 $(\text{AlAs})_3/(\text{GaAs})_3^{\text{Si} \rightarrow \text{Ga}}$ 超晶格体内的杂质 Si 的局域态密度和分波态密度比较

和 Al 原子的贡献。

仔细比较图 1 和图 2 我们发现, 在 AlAs/GaAs 材料中当 Si 代替一个三族原子 Al 或 Ga 时, 它对价带和导带的贡献十分类似于替换前原子的情况。例如, $\text{Ga}(\text{PC})$ 对应价带部分的态密度总宽为 13.3 eV, 而 Si 为 13.1 eV。当 Si 代替一个五族原子 As 时差别就比较明显了。这时 $\text{As}(\text{PC})$ 和 Si 对应价带部分的态密度总宽分别为 13.4 eV 和 8.4 eV。这是由于 Si 的 s 态峰值向费米能大约偏移 3 eV 所导致的。这样将加强 Si 的 s 态与 Al 原子的 s 和 p 态相互作用。由此我们可以想像当在 AlAs/GaAs 中引入替位式杂质 Si 时, 其失去一个电子而取代某个三族原子成为施主杂质的可能性, 比其取代一个五族原子成为受主杂质的可能性要大。

为了进一步讨论杂质对超晶格电学性质的影响, 这里对 $(\text{AlAs})_3/(\text{GaAs})_3^{\text{Si} \rightarrow \text{As}}$ 结构中靠近杂质的 $\text{Ga}(n)$ 原子和远离杂质的 $\text{Ga}(f)$ 原子进行了计算, 结果见图 3。我们发现 Si 对其第五近邻 Ga 原子上电子分布几乎没有影响。图 3 中 $\text{Ga}(f)$ 态密度与纯 $(\text{AlAs})_3/(\text{GaAs})_3$ 材料中的 Ga 原子情况完全类似。这点是很重要的, 它表明替位杂质 Si 的影响范围是高度局域的。同时我们可以看到, 由于 Si 杂质的出现, 其近邻 Ga 原子在纯材料中对应价带部分的能隙 ($-1.15 \text{ Ryd.} \sim -1.40 \text{ Ryd.}$) 消失。这主要是由于 $\text{Ga}(n)$ 的 s 态局域性下降所导致的。同样我们讨论了 $(\text{AlAs})_3^{\text{Si} \rightarrow \text{Al}}/(\text{GaAs})_3$ 模型中靠近和远离杂质的 As 原子情况。二者分布状态很相似, 这再次证明当 Si 代替三族原子后, 它对材料能带结构的影响不大。

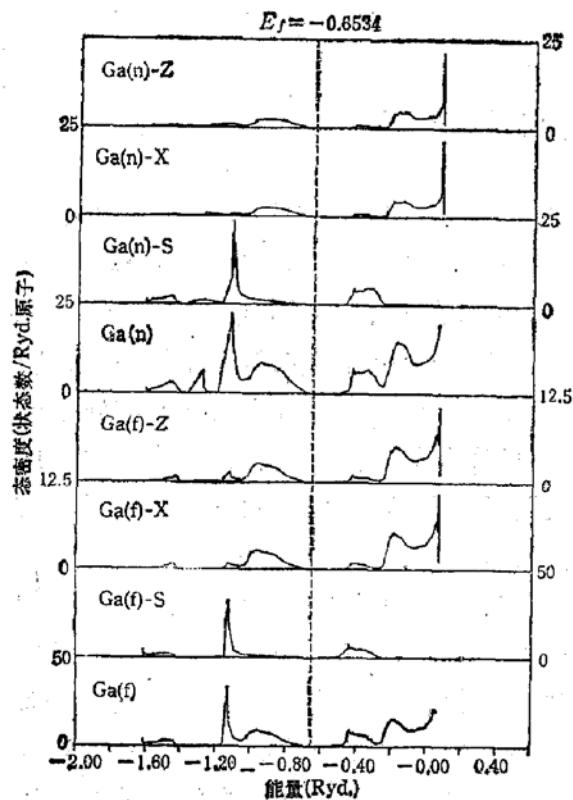


图3 $(AlAs)_3/(GaAs)_3^{Si \rightarrow Al}$ 结构中远离(*f*)和靠近(*n*)杂质 Si 的 Ga 原子上电子分布

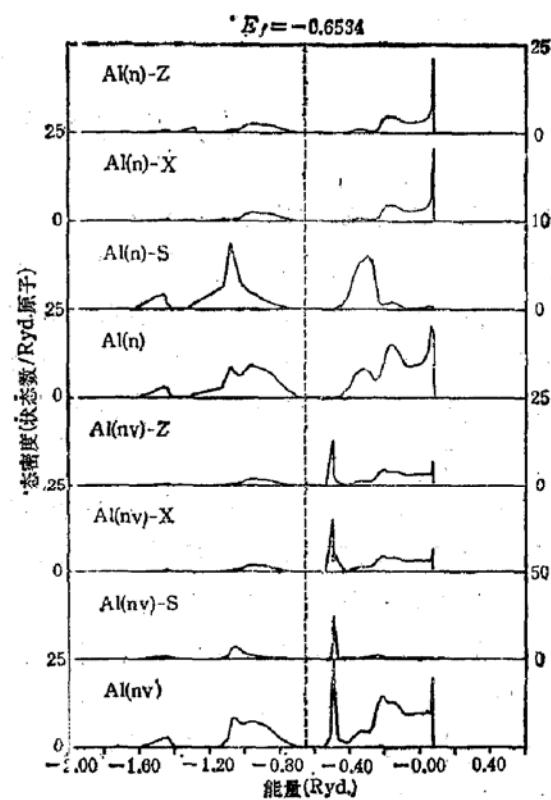


图4 $(AlAs)_3^{Al}/(GaAs)_3$ 材料中靠近空位的 Al(*nv*) 原子和 $(AlAs)_3^{Si \rightarrow As}/(GaAs)_3$ 材料中靠近杂质的 Al(*n*) 原子上电子分布

表 I 杂质与其近邻原子的价数和分波轨道上电子占有数

原子位置	替代关系	原 子	原子价	分波上电子数			
				s	p _x	p _y	p _z
在 AlAs 层	$Si \rightarrow As$	Si311	-0.5684	1.5301	1.0129	1.0128	1.0126
		Al(<i>n</i>)	0.0127	1.0943	0.6310	0.6310	0.6310
	$Si \rightarrow Al$	Si322	0.4190	1.3671	0.7380	0.7380	0.7379
		As(<i>n</i>)	0.0224	1.6834	1.0982	1.0981	1.0979
	$Si \rightarrow As$	Si965	-0.4340	1.5156	0.9728	0.9727	0.9729
		Ga(<i>n</i>)	-0.1027	1.2101	0.6308	0.6308	0.6310
在 GaAs 层	$Si \rightarrow Ga$	Si978	0.4310	1.3660	0.7343	0.7343	0.7344
		As(<i>n</i>)	0.1044	1.6786	1.0723	1.0722	1.0725
	$Si \rightarrow As$	Si966	-0.5007	1.5230	0.9927	0.9927	0.9923
		Al(<i>n</i>)	0.0169	1.0936	0.6297	0.6297	0.6301
		Ga(<i>n</i>)	-0.1059	1.2109	0.6316	0.6316	0.6318
	$Si \rightarrow Al$	Si323	0.4229	1.3668	0.7368	0.7368	0.7367
		As*(<i>n</i>)	0.0781	1.6802	1.0799	1.0799	1.0819
		As ⁺ (<i>n</i>)	0.0225	1.6834	1.0982	1.0981	1.0978
	$Si \rightarrow Ga$	Si976	0.4273	1.3662	0.7355	0.7355	0.7355
		As*(<i>n</i>)	0.0514	1.6818	1.0896	1.0896	1.0876
		As ⁺⁺ (<i>n</i>)	0.1044	1.6786	1.0723	1.0722	1.0725

* 在界面； + 在 AlAs 层； ++ 在 GaAs 层。

四、空位与杂质作用的比较

假设在 AlAs 层内出现一个 As 空位(即 $(AlAs)_3^{As}/(GaAs)_3$ 的情况), 我们讨论了它对近邻 $Al(nv)$ 原子的影响(见图 4)。为了说明问题, 这里对掺杂材料 $(AlAs)_3^{Si \rightarrow As}/(GaAs)_3$ 也进行了计算, 得到与杂质近邻的 $Al(n)$ 原子情况。与纯 $(AlAs)_3/(GaAs)_3$ 超晶格^[1]中的相应原子比较, 我们发现空位对其近邻原子上电子分布的影响比 Si 杂质大。这是由于在共价键晶体中, 空位将使其近邻原子产生一个悬挂键, 该悬挂键与处于同一原子上的另外三个杂化键强烈地相互作用, 因而导致电荷的再分布。对于杂质 Si 取代 As 的情况, 由于它们同属于共价性结合的近族元素, Si 只使其与近邻 Al 原子组成的 sp^3 杂化键凸起部分向其偏移, 而没有根本改变成键方式。

同样我们讨论了 $(AlAs)_3/(GaAs)_3^{Ga}$ 和 $(AlAs)_3/(GaAs)_3^{Si \rightarrow Ga}$ 结构中靠近点缺陷的近邻 As 原子的局部态密度和分波态密度。我们发现在 AlAs/GaAs 超晶格中出现三族原子点缺陷时(如空位或被 Si 杂质取代), 主要影响到材料的价带结构。特别是在 Ga(或 Al) 格点出现空位时, 近邻原子上电子分布峰值已移到费米能附近。进一步计算表明, Al 和 Ga 空位使价带顶分别上升大约 0.11 eV 和 0.12 eV; 而 As 空位使导带底下降 0.10 eV 左右。

五、体内点缺陷附近的电中心

在文献 [5] 我们曾研究了计算超晶格材料中原子价数的方法。一般可以利用对格点态密度到费米能的积分定出材料中一个原子上的电子占有数, 而根据自由状态下该原子具有的电子数来判断它在超晶格中的电荷转移, 从而给出该原子价^[21]。我们已将计算的掺杂超晶格中杂质 Si 和其近邻原子的价数及各分波轨道上电子占有数列在表 I。由这个表可以清楚地看到, 当 Si 取代五族原子 As 时, 在其附近形成一个负电中心; 而当 Si 取代三族原子 Ga 或 Al 时, 在其周围形成一个正电中心。我们可以从成键的角度来说明这一现象。大家知道, 在 AlAs/GaAs 中阳离子格点的原子组态为 ns^2np^1 (其中对 Al 原子 $n = 3$, 对 Ga 原子 $n = 4$), 这样它才能与近邻的 As 原子组成 sp^3 杂化键。当一个具有 $3s^2 3p^2$ 原子组态的 Si 取代一个三族原子时, 该阳离子格点多出一个 p 电子。与 Si 原子相连的 As 原子还将与另外三个三族原子组成 sp^3 键, 于是这个已经具有三个 sp^3 键的 As 原子在同 Si 以相同键结合时会感到电子过剩, 从而可能使 Si 上的这个多余电子占据到 p 非键态, 结果在杂质格点上呈现出正电性。利用同样的分析, 我们可以得到当 Si 取代 As 时, 在杂质格点附近将出现负电中心。

通过对体内空位附近原子的原子价计算(见表 II), 我们发现对三族原子空位有一个负电中心, 其净电荷对 Al 空位为 $-1.35e$, 对 Ga 空位为 $-1.37e$ 。这样我们可以通过在材料中引入一个负电中心的想法, 来讨论三族原子空位对 AlAs/GaAs 电学性质的影响。进一步计算本文得到一个 As 空位的净正电荷为 $2.24e$ (在 AlAs 区) 和 $2.15e$ (在 GaAs 区)。

表 II 空位附近原子的价数和分波轨道上电子占有数

原子位置	空位格点	原 子	原子价	分波上电子数			
				s	p _x	p _y	p _z
在 AlAs 层	Al	As(<i>nv</i>)	-0.4622	1.8090	1.1984	1.1984	1.2564
	As	Al(<i>nv</i>)	0.6955	0.9342	0.4401	0.4401	0.4401
在 GaAs 层	Ga	As(<i>nv</i>)	-0.3559	1.8196	1.1943	1.1943	1.1477
	As	Ga(<i>nv</i>)	0.5494	1.1374	0.4382	0.4385	0.4366
在界面区	As	Al(<i>nv</i>)	0.6969	0.9342	0.4395	0.4395	0.4398
		Ga(<i>nv</i>)	0.5538	1.1361	0.4370	0.4370	0.4361
	Al	As*(<i>nv</i>)	-0.2651	1.8196	1.1218	1.1218	1.2019
		As ⁺ (<i>nv</i>)	-0.4877	1.8090	1.1873	1.2354	1.2560
	Ga	As*(<i>nv</i>)	-0.4456	1.8058	1.2004	1.2004	1.2390
		As ⁺⁺ (<i>nv</i>)	-0.3814	1.8196	1.1943	1.2198	1.1477

* 在界面; + 在 AlAs 层; ++ 在 GaAs 层。

综合上面的结果我们证明, 在 AlAs/GaAs 超晶格中 Si 杂质与空位产生的电中心反号。

六、界面局域电场

最近 Nelson^[13] 等人曾报道在有序重掺杂 AlAs/GaAs 超晶格界面施主杂质 Si 会产生一个局域电场, 正是这个电场导致了界面电荷密度向 GaAs 区的偏移。我们自然会问: 对轻掺杂情况这个场是否还存在? 以及当 Si 代替界面 As 原子而做为受主杂质时这电场将发生怎样的变化? 本文的计算对这些问题给出了定量的回答。

首先我们证明在轻掺杂情况下这个电场仍然是存在的。由表 I 可见, 当 Si 代替 Ga 或 Al 而占据一个三族原子格点时, 在杂质周围的界面区产生一个方向指向 AlAs 层的局域电场, 这是由于 Al-As 和 Ga-As 之间的电离化程度不同所导致的。尽管这个场很弱, 它仍可以使界面杂质电荷分布向 GaAs 区发生轻微偏移。这样我们定量地解释了文献 [13] 中图 9 的结果。本文类似地讨论了当 Si 取代界面原子 As 的情况。值得注意的是这时局域电场方向变号, 即指向 GaAs 层。由此我们可以得出这样的结论: 界面受主杂质 Si 所引起的局域电场将导致杂质电荷分布向 AlAs 区偏移。图 5 绘出了界面区内杂质 Si 的局域态密度和分波态密度分布。其中 Si 表示取代界面 As 原子的情况; Si₁ 表示在 AlAs 层内取代靠近界面的 Al 原子时的情况; Si₂ 表示在 GaAs 层内取代靠近界面的 Ga 原子时的情况。

利用对原子价的讨论 (见表 II), 我们同样可以分析空位在界面对 AlAs/GaAs 材料电学性质的影响。例如, 当界面 As 原子失去在该格点留下一个空位时, 跨过界面有一个方向指向 GaAs 层的局域电场; 而当界面附近出现一个三族原子空位时, 这里会产生一个方向相反的电场。这一结果是十分有意义的, 因为我们至少可以得出同族原子点缺陷 (杂质和空位) 对超晶格界面电学性质的影响在定性上是一致的。

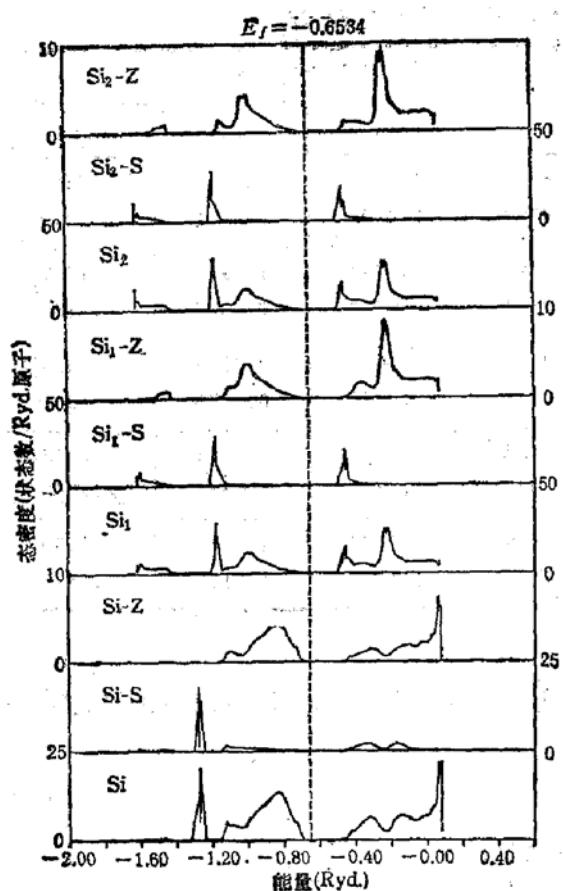


图 5 界面区内杂质 Si 的局部态密度
和分波态密度

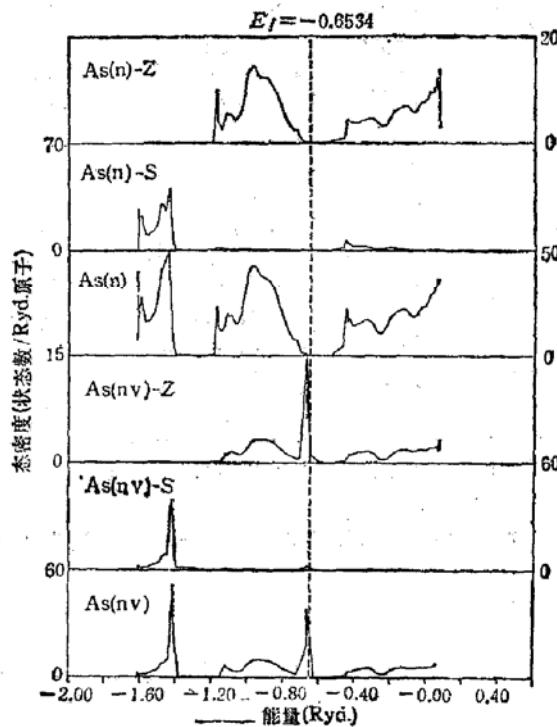


图 6 邻近界面的 Al 原子层上某格点出现一个 Si 杂质或空位时对界面 As 原子的影响。As(n) 表示有杂质时的情况；As(nv) 表示有空位时的情况

图 6 给出了在邻近界面的 AlAs 层带有一个杂质或空位时，界面上 As 原子电荷分布的变化。

七、结 论

在紧束缚模型下，本文首次对具有施主和受主杂质及各类空位情况的 AlAs/GaAs 短周期超晶格的电学性质进行了系统讨论。由第一性原理出发，我们得到了体内和界面处杂质的态密度分布，并对杂质和空位在材料中的影响做了分析比较。这些结果清楚地展现了点缺陷（杂质或空位）周围的局部环境，反映了它们在 AlAs/GaAs 超晶格中的本质。同时我们进一步得到了杂质本身，以及杂质和空位附近原子每个分波上的电子占有数和原子价，由此讨论了许多重要性质。主要结论如下：

- (1) 替位式杂质 Si 的电子结构比较类似于一个三族原子的情况。这反映了当在 AlAs/GaAs 中引入杂质 Si 后，它将尽可能失去 p 电子而成为施主杂质。
- (2) 空位使对应导带底或价带顶的电子态密度分布移动大约 0.1 eV 左右。
- (3) 对轻掺杂情况，施主杂质能级在导带底 0.01 eV 附近，受主杂质能级在价带顶 0.03 eV 处。

(4) 空位与 Si 杂质在体内产生的电中心反号。

(5) 界面处三族原子点缺陷带来的局域电场将导致电荷分布向 GaAs 区偏移; 五族原子点缺陷将使电荷分布向 AlAs 区偏移。

(6) 在所有情况下, 点缺陷的作用是高度局域的。由于空位将引起新的成键方式, 它对 AlAs/GaAs 超晶格电学性质的影响比杂质 Si 大。

作者王恩哥和王怀玉在计算方法上曾得到刘福绥教授及王崇愚教授的热心指导。在计算过程中北京大学计算中心的童建昌教授给予了许多帮助, 再此一并致谢。本工作得到了北京大学计算中心的部分资助。

参 考 文 献

- [1] G. A. Sai-Halasz, R. Tsu and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.*, **30**, 651 (1977).
- [2] G. Bastard, *Phys. Rev.*, **B24**, 5693 (1981); *Ibid.* **B25**, 7584 (1982).
- [3] J. N. Schulman and Y. C. Chang, *Phys. Rev.*, **B24**, 4445 (1981).
- [4] H. Rucker, M. Hanke, F. Bechstedt and R. Enderlein, *Superlattices and Microstructures*, **2**, 477 (1986).
- [5] 王恩哥、章立源、王怀玉, 物理学报(待发表).
- [6] W. Andreoni and R. Car, *Phys. Rev.*, **B21**, 3334 (1980).
- [7] M. Jaros and K. B. Wong, *J. Phys.*, **C17**, 4755 (1984).
- [8] M. Altarelli, *Phys. Rev.*, **B28**, 842 (1983).
- [9] M. F. H. Schuurmans and C. W. 't Hooft, *Phys. Rev.*, **B31**, 8041 (1985).
- [10] G. Bastard, *Phys. Rev.*, **B24**, 4714 (1981).
- [11] S. Chaudhuri, *Phys. Rev.*, **B28**, 4480 (1983).
- [12] W. T. Masselink, Y. C. Chang and H. Morkoc, *Phys. Rev.*, **B32**, 5190 (1985).
- [13] J. S. Nelson, C. Y. Fong, Inder P. Batra, W. E. Pickett and B. M. Klein, *Phys. Rev.*, **B37**, 10203 (1988).
- [14] Weimin Jin, Junming Zhou, Yi Huang and Lihong Cai, *Phys. Rev.*, **B**(待发表); and Workshop on the Physics of Superlattices and Quantum Wells (Shanghai) 1988, p. 32.
- [15] N. E. Christensen, *Phys. Rev.*, **B32**, 6490 (1985).
- [16] E. Caruthers and P. J. Lin-Chung, *Phys. Rev.*, **B17**, 2705 (1978).
- [17] S. Massidda, J. Yu, A. J. Freeman and D. D. Koelling, *Phys. Lett.*, **A122**, 198 (1987).
- [18] R. Haydock, *Solid State Physics*, New York; Academic Press, **35**, 216 (1980).
- [19] W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, W. H. Freeman and Company, San Francisco, 1980.
- [20] Huaiyu Wang, Fusui Liu and Congyu Wang, *J. Phys. Condensed Matter* (待发表).
- [21] B. A. Richert and R. E. Allen, *Phys. Rev.*, **B37**, 7496 (1988).

Influence of Impurities and Vacancies on Electronic Properties of AlAs/GaAs Superlattices

Wang Enge, Zhang Liyuan and Wang Huaiyu

(Department of Physics, Peking University, Beijing 100871)

Abstract

Based on the tight-binding approximation (TBA), the electronic structures of short-period AlAs/GaAs superlattices with impurities and vacancies are calculated by Recursion method for the first time. The calculated results of local- and partial-density of states clearly show the local environment of the relatively small amounts of disordered impurities and vacancies in AlAs/GaAs and their influence on the electronic properties of these materials. The positions of new states appeared in the band gap of AlAs/GaAs structures with different point defects are calculated. By the aid of the discussion of atom valence, the authors find that there are an electronic center around a point defect in the bulk and a local field across the interface with an impurity or a vacancy which will induce a slight shift of the charge density. Comparison of the influence between impurity and vacancy on the pure superlattices is given. Furthermore, the authors confirm that the affect of a disordered point defect is highly localized in all cases.

Key words AlAs/GaAs Superlattice, Electron structure, Local field and Electronic center around an impurity or a vacancy