

与 InP 晶格相匹配的 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ 半导体的光学常数计算

徐 至 中

(复旦大学表面物理研究室, 上海)

1987年9月28日收到

采用半经验的紧束缚方法计算了与 InP 晶格相匹配的 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ 半导体的电子联合状态密度及介电常数虚部, 并根据 Kramers-Kronig 关系式求得了光透明区的折射率常数。

主题词: 异质结, 超晶格, 紧束缚法, 联合状态密度, 带间跃迁, 极性声子

一

$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}/\text{InP}$ 是一种在光电子学中非常有前途的异质结及超晶格材料。为了给光电子器件设计者提供必要的理论依据, 我们计算了与 InP 晶格相匹配的 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ 半导体合金的介电常数虚部(由此可给出光吸收系数)及频率在光吸收阈值以下(也即在光透明区内)的折射率常数。

如果忽略极性声子对介电常数的贡献, 则晶体的介电常数主要由电子所引起。而由电子所产生的介电常数通常可以分成两部分, 即带内跃迁所产生的贡献(自由载流子吸收所引起的贡献)及带间跃迁所产生的贡献。前者决定于半导体内自由载流子浓度的大小, 因而与半导体材料的纯度及测试的温度有关。在纯净材料及较低温度下, 这部分贡献常可以被忽略。所以这里我们只计算由带间电子跃迁所引起的介电常数虚部及相应的折射率常数。

二

采用含时间微扰理论, 由电子带间跃迁所产生的介电常数虚部可表示成^[1]

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{3} (m^2 \omega^2)^{-1} \sum_{l,n} \int_{BZ} \frac{2}{(2\pi)^3} d^3 k |P_{nl}|^2 \delta[E_l(k) - E_n(k) - \hbar\omega] \quad (1)$$

式中 m 、 e 分别是电子的质量及电荷, P_{nl} 是 l 带与 n 带间的动量矩阵元, $\sum_{l,n}$ 表示对所有导带 l 及价带 n 进行求和。如果近似地把动量矩阵元 P_{nl} 看成是与波矢 k 无关的常数, 则上式可表示成

$$\epsilon_2(\omega) \propto \frac{1}{\omega^2} g(\omega) \quad (2)$$

其中

$$g(\omega) = \sum_{k \in BZ} \int_{BZ} \frac{2}{(2\pi)^3} d^3 k \delta [E_i(\mathbf{k}) - E_s(\mathbf{k}) - \hbar\omega] \quad (3)$$

是电子的联合状态密度。根据 Kramers-Kronig 关系式

$$\epsilon_2(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (4)$$

可以由介电常数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 求出介电常数实部 $\epsilon_1(\omega)$ 。这里(4)式中的 P 表示取反常积分的主值。在光透明区(频率小于光吸收阈值的区域), $\epsilon_2(\omega) = 0$ 。因此在光透明区内, (4)式可改写成

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow +0} \int_{\omega_i + \eta}^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (\omega \leq \omega_i) \quad (5)$$

这里, ω_i 表示光吸收阈值处的角频率。在通常情况下, 半导体的消光系数比折射率常数小得多, 因此下面关系式可以近似成立:

$$n(\omega) \approx \sqrt{\epsilon_1(\omega)} \quad (6)$$

根据(5)及(6)式, 可以由介电常数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 直接计算得光透明区的折射率常数 $n(\omega)$ 。

三

我们先在半经验的紧束缚方法的基础上, 计算了 $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$ 的电子联合状态密度 $g(\omega)$, 而后根据(2)、(5)及(6)式分别求出介电常数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 及折射率常数 $n(\omega)$ 。在计算电子联合状态密度时, 我们采用了 G. Gilat 及 L. J. Raubenheimer 的方法^[2], 即采用微扰理论方法计算 \mathbf{k} 空间中的等能面梯度, 而且还特别考虑了简并点的情况。对于简并点, 我们采用了一级简并微扰理论; 对于非简并点, 我们同时考虑了二级微扰修正。在(3)式的 \sum 求和中, 我们分别计及了六个价带及二个导带。为了使 $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$ 能与

InP 晶格相匹配, 我们用 Vegard 定则决定 x 及 y 值。在计算 $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$ 的电子能带时, 作了非线性的虚晶近似, 并且采用了 Vogl 及 Dow 等的紧束缚参数^[3]。

四

图 1 示出了根据(2)及(3)式计算得到的介电常数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 与 ω 间的变化关系。对于 $y = 1, x = 0$ (即 InP) 的情况, 图中也示出了实验测量结果, 如虚线所示 (见图 1(f))。其中 $\hbar\omega \geq 1.5\text{eV}$ 部分的数据选自 D. E. Aspnes 及 A. A. Studna 的测量结果^[4]; 而 $\hbar\omega < 1.5\text{eV}$ 部分的数据来自 B. O. Seraphin 及 H. E. Bennett 所发表的结果^[5]。从图 1(f)的情况可以看到, 我们的计算结果基本上能与实验测量结果相一致, 其中两个主要峰值 (3.3 eV 及 4.8 eV) 的位置均能相互重合。3.3 eV 峰值的计算值明显低于实验测量值, 这主要可能是由于我们在计算中近似地把动量矩阵元 $P_{\mathbf{kl}}$ 看成是与波矢 \mathbf{k} 无关的常数所引起。

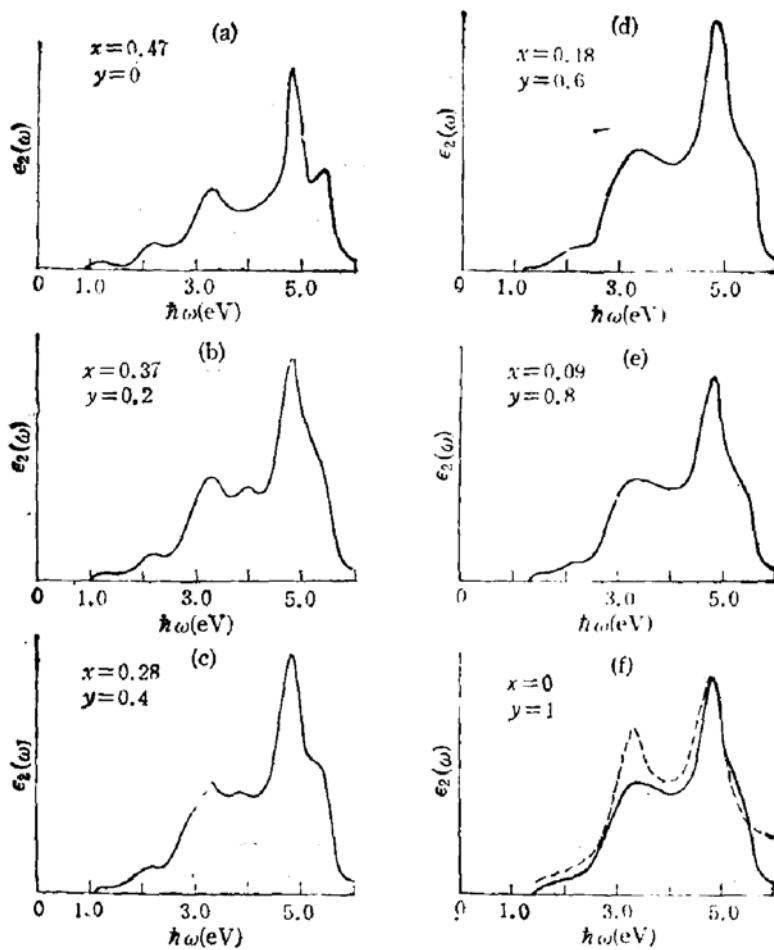


图1 由联合状态密度计算得到的 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ 的介电常数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 与频率 ω 间的关系

根据(5)及(6)式计算得到的光透明区折射率 $n(\omega)$ 如表1所示。由于根据(2)式计算得到的 $\epsilon_2(\omega)$ 仅是一个相对数值, 所以根据(5)及(6)式计算得到的 $n(\omega)$ 也是一个相对数值。为了能得到确定的绝对数值, 我们选取光吸收阈值处的折射率常数实验值^[6]作为标准, 对其它频率处的折射率常数进行归一化。假设光吸收阈值处的折射率常数实验测量值为 $n_{ex}(\omega_t)$, 而由(5)及(6)式计算得到的折射率常数为 $n_{th}(\omega)$, 则归一化后的折射率常数由下式给出:

$$n(\omega) = \frac{n_{ex}(\omega_t)}{n_{th}(\omega_t)} \cdot n_{th}(\omega) \quad (7)$$

因为迄今为止, 我们还没有找到 $y = 0.2$, $x = 0.37$; $y = 0.6$, $x = 0.18$ 及 $y = 0.8$, $x = 0.09$ 三种情况下的有关实验值, 所以对于这三种情况, 我们选用其邻近组分的实验值, 近似地进行线性插值得到。这些实验测量值以及由线性插值得到的数据在表1中均由括号内的数字给出。由(5)式所示的反常积分的数值计算所引进的折射率常数的相对误差约为 0.05。

本工作得到国家自然科学基金委员会的资助。

表 1 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ 的光透明区折射率

$\hbar\omega(\text{eV})$	组分 $y = 0$ $x = 0.47$	组分 $y = 0.2$ $x = 0.37$	组分 $y = 0.4$ $x = 0.28$	组分 $y = 0.6$ $x = 0.18$	组分 $y = 0.8$ $x = 0.09$	组分 $y = 1$ $x = 0$
0.1	3.33	3.25	3.16	3.08	3.01	2.96
0.2	3.34	3.26	3.17	3.09	3.01	2.96
0.3	3.35	3.27	3.18	3.10	3.02	2.97
0.4	3.36	3.28	3.19	3.11	3.03	2.98
0.5	3.38	3.29	3.20	3.12	3.04	2.99
0.6	3.41	3.31	3.22	3.14	3.06	3.00
0.7	3.44	3.34	3.24	3.16	3.08	3.02
0.8	3.49	3.37	3.27	3.18	3.10	3.04
(0.87)	(3.56)					
0.9		3.43	3.31	3.22	3.14	3.07
(0.97)		(3.54)				
1.0			3.36	3.26	3.17	3.10
(1.08)			(3.52)			
1.1				3.31	3.21	3.14
(1.19)				(3.48)		
1.2					3.27	3.19
(1.3)					(3.46)	3.24
(1.41)						(3.45)

* 括号内的数据均为各组分合金的光吸收阈值处的折射率的实验测量值，并近似地认为它们不随温度发生变化。

参 考 文 献

- [1] H. Ehrenreich and H. R. Philips, *Phys. Rev.* 128 1622 (1962).
- [2] G. Gilat and L. J. Raubenheimer, *Phys. Rev.* 144 390 (1965).
- [3] P. Vogl, H. P. Hjalmarson, J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solids.*, 44 365 (1983).
- [4] D. E. Aspnes and A. A. Studna, *Phys. Rev. B* 27 985 (1983).
- [5] B. O. Seraphin and H. E. Bennet, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by R. K. Willardson and A. C. Beer, Academic, New York, (1967), 3, p. 499.
- [6] *GaInAsP Alloy Semiconductors*, edited by T. P. Pearsall John Wiley & Sons, New York, (1982) p. 456.

Calculations of Optical Constants for $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ Alloys Lattice-Matched to InP

Xu Zhizhong

(Surface Physics Laboratory, Fudan University)

Abstract

With semi-empirical tight-binding method, the electronic joint state densities and the imaginary parts of dielectric functions of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ lattice-matched to InP have been calculated. And the refractive indices in the optical transparent zone have also been obtained by use of Kramers-Kronig relation.

Key words: Heterojunction, Superlattice, Tight-binding method, Joint state density, Interband transition, Polar phonon