

用赝势法计算四元合金 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 的能带*

陆 奋 张开明

(复旦大学现代物理研究所)

提 要

本文的目的是用赝势法研究 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 的能隙与 x 和 y 的函数关系以及它的能带结构。四元合金的赝势参量以二元化合物的赝势参量为边界值由非线性内插公式决定。为了使所得能隙与实验值符合得更好,我们所用的二元化合物的经验的赝势参量与 Cohen 和 Bergstresser 所给的值稍有修正。四元合金的晶格常数由线性内插决定。这样所得的计算结果与实验值符合较好。

近年来诸如 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 类的四元 III-V 族半导体材料,由于其在集成光学的领域里得到应用,因此显著地得到人们的关注。显然随着改变其配比 x 、 y 的数值,可以制备具有各种不同的晶格常数和禁带宽度的材料。T. H. Glisson^[1] 等曾用一些内插方法计算了9种四元 III-V 族合金的晶格常数和禁带宽度。其计算结果与实验比较基本符合。本文的目的是用赝势法^[2]研究 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 的能带结构。

一、计算方法

Phillips 和 Kleinman^[3] 曾提出晶体波函数可写为下述形式:

$$\phi_{n,k}(\mathbf{r}) = \phi_{n,k}(\mathbf{r}) - \sum_i \langle \theta_{i,k}(\mathbf{r}) | \phi_{n,k}(\mathbf{r}) \rangle \theta_{i,k}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

其中 $\theta_{i,k}$ 是心电子波函数, $\phi_{n,k}$ 满足波动方程

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_c + V_R \right) \phi_{n,k} = E_n(\mathbf{k}) \phi_{n,k}. \quad (2)$$

其中 V_c 是晶体势, V_R 具有下列形式:

$$V_R \phi_{n,k} = - \sum_i \langle \theta_{i,k} | V_c \phi_{n,k} \rangle \theta_{i,k}. \quad (3)$$

令

$$V_{eff} \equiv V_c + V_R \quad (4)$$

并且引进赝势 V_p ^[2], 它的福里哀系数

$$V_p^G \approx V_{eff}^G$$

* 1980年4月7日收到。

这里 $\mathbf{G}_i = \frac{a}{2\pi} \mathbf{K}_i$, $\mathbf{K}_i$ 是倒格矢, a 是晶格常数. 对于较大的 $|\mathbf{G}_i|$, 例如 $|\mathbf{G}_i|^2 > 11$, 则设 $V_p^{\mathbf{G}_i} = 0$.

在二元 III-V 族化合物中, 取 III 族与 V 族原子的连线中点为原点, $V_p^{\mathbf{G}_i}$ 可写为⁽⁴⁾

$$V_p^{\mathbf{G}_i} = V_i(G_i) \cos \frac{2\pi}{a} \mathbf{G}_i \cdot \boldsymbol{\tau} + iV_A(G_i) \sin \frac{2\pi}{a} \mathbf{G}_i \cdot \boldsymbol{\tau}. \quad (5)$$

其中

$$\boldsymbol{\tau} = \left(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8} \right) a. \quad (6)$$

$$V_i(G_i) = \frac{1}{2} [V_{\text{III}}(G_i) + V_{\text{V}}(G_i)]. \quad (7)$$

$$V_A(G_i) = \frac{1}{2} [V_{\text{III}}(G_i) - V_{\text{V}}(G_i)]. \quad (8)$$

$$G_i \equiv |\mathbf{G}_i|.$$

以平面波 $\exp\{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m)\mathbf{r}\}$ 展开 $\phi_{n,\mathbf{k}}$, 如 Brust^[2] 所指出的, 可得久期方程

$$|U_p^{n,m} - E\delta_{n,m}| = 0. \quad (9)$$

其中

$$U_p^{n,m} = H_p^{n,m} + \sum_{r=N+1}^{\Gamma} \frac{H_p^{n,r} \cdot H_p^{r,m}}{E - H_p^{r,r}}. \quad (10)$$

$$H_p^{n,m} = \langle \exp\{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_n)\mathbf{r}\} | H_p | \exp\{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m)\mathbf{r}\} \rangle. \quad (11)$$

$$H_p = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p. \quad (12)$$

(10)式中 n, m 和 r 为平面波的标记, 且满足

$$n, m \leq N, N < r \leq \Gamma$$

N, Γ 是正整数. r 标记的是作为微扰处理的平面波. 在我们的计算中当 $\mathbf{k} = 0$ 时平面波总数 Γ 取为 113, 非微扰处理的平面波数目 N 为 27, 也即久期方程的阶数. 这与 Brust^[2] 所取的数目一样. 我们曾对 N 为 51 的 InP 作过计算, 结果与 N 为 27 所得的值接近. 由于受到计算机的限制, 51 阶的计算时间要比 27 阶的计算时间大得多, 所以我们就算到 27 阶.

在(10)式中近似取 $E = H_p^{n,n}$. 当 $n = m$ 时

$$E = \bar{E} \quad \text{当 } n \neq m \text{ 时}$$

$\bar{E}$ 为最低的 8 个能级的平均值, 在我们的计算中近似取 $\bar{E} = 0.6\text{Ry}$. 一般对于任意的波矢 $\mathbf{k}$, 矩阵元为复数, 故需使一复数矩阵对角化以求出能量本征值和本征函数.

二、三元合金的计算

对于三元合金, 例如 $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$, 一般用虚晶格来近似表示真实的晶格. 该虚晶格的晶体势 $\tilde{V}_0$ 和晶格常数 $\tilde{a}$ 看成是 $(\text{GaAs})_x$ 和 $(\text{GaP})_{1-x}$ 的线性平均,

即

$$\tilde{V}_0 = V_{\text{GaAs}} \cdot x + V_{\text{GaP}} \cdot (1 - x). \quad (13)$$

$$\tilde{a} = a_{\text{GaAs}} \cdot x + a_{\text{GaP}} \cdot (1 - x). \quad (14)$$

这个虚晶格仍保持周期性, 它的晶体势的福里哀分量与二元化合物对应的福里哀分量之间同样满足(13)式. 故它们的赝势参量之间也满足该式. 所以可从已知的二元化合物的晶格常数和赝势参量求出三元合金的对应量的值后, 代入久期方程(9), 便可求得三元合金的能带.

如 J. A. Van Vechten^[5] 曾指出的, 三元合金直接能隙随组成 x 变化的线性内插值与实验值有偏离, 实验值相对于内插值是向下弯曲的. 而赝势法所得的直接能隙相对于内插值是向上弯曲. 故与实验值的偏离更大且均比实验值高.

如对三元合金 $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ 的直接能隙 E_g 作线性内插, 则

$$E_g = E_g(\text{GaAs}) \cdot x + E_g(\text{GaP}) \cdot (1 - x). \quad (15)$$

考虑到实验值向下弯曲, 在内插中加入非线性修正项则得

$$E_g = E_g(\text{GaAs}) \cdot x + E_g(\text{GaP}) \cdot (1 - x) - x \cdot (1 - x) \cdot c. \quad (16)$$

c 为由经验确定的常数, 一般称其为弯曲参数. 故选择适当的 c 可得一两次曲线来模拟实验曲线. 该两次函数可写为

$$E_g = a + bx + cx^2 \quad (17)$$

比较(16)与(17)式可求出常数 a 、 b 的值. 可见 a 、 b 为与 $E_g(\text{GaAs})$ 、 $E_g(\text{GaP})$ 和 c 有关的常数.

由于在上述的赝势法中用一线性平均的虚晶势尚有较大误差, 因此可考虑在等效于真实晶体的具有周期性的虚晶格的虚晶势 $\tilde{V}$ 中引入非线性项. 例如取

$$\tilde{V} = \tilde{V}_0 - \Delta\tilde{V}. \quad (18)$$

式中

$$\Delta\tilde{V} = x(1 - x)W. \quad (19)$$

W 为一由经验确定的常数.

由于赝势参量共有 6 个, 为了简单起见, 我们仅取 $V_i(11)$ 包含非线性修正. 这是因为 $V_i(11)$ 的变化引起诸能级相对于价带顶的变化方向都是相同的. 这样如果原来都比实验值偏高, 则现在都能向低的方向移动. 并且它对直接能隙的移动影响最大. 这些特点比较符合实际的偏离情况. 所以在我们的计算中仅对 $V_i(11)$ 作非线性修正, 即

$$V_i(11) = V_i^{\text{GaAs}}(11) \cdot x + V_i^{\text{GaP}}(11) \cdot (1 - x) - x(1 - x)W. \quad (20)$$

其余的赝势参量取线性平均

$$\begin{cases} V_i(G_i) = V_i^{\text{GaAs}}(G_i) \cdot x + V_i^{\text{GaP}}(G_i) \cdot (1 - x) \\ V_d(G_i) = V_d^{\text{GaAs}}(G_i) \cdot x + V_d^{\text{GaP}}(G_i) \cdot (1 - x), \end{cases} \quad (21)$$

我们取 $W = 0.011$, 对 $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ 的计算所得的直接能隙 E_g 与实验值符合得很好, 见表 1. 表中 E_{ex} 为实验值^[6]. 并计算得到在 $x = 0.50$ 处直接能隙 E_g 与间接能隙 E_{ex} 相等. 这也与 M. G. Graford 和 N. Helonyak^[7] 指出的 $x = 0.51$ 以及 T. H. Glisson 等^[1] 得到的 $x = 0.48$ 相近.

计算中二元化合物的赝势参量的选取参照 Cohen 和 Bergstresser^[8] 的数值, 但对 InP

表 1 $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ 的直接能隙 (eV)

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
E_{gx}	2.750	2.603	2.444	2.285	2.160	2.043	1.904	1.822	1.673	1.554	1.427
E_g	2.742	2.590	2.443	2.301	2.164	2.035	1.907	1.784	1.666	1.554	1.447
$E_g - E_{gx}$	-0.008	-0.013	-0.001	0.016	0.004	-0.008	0.003	-0.038	-0.007	0.000	0.020

和 GaP 的值稍作一些修改,以使所得的结果与实验符合得更好. 表 2 给出我们用这两组参数所得结果的比较. 表中 E_{gx} 为实验值^[8], E_I 为用 Cohen 和 Bergstresser 的赝势参量的计算结果, E_{II} 为本文所用赝势参量的计算结果.

表 2 GaP 和 InP 的能带参量 (eV)

		$\Gamma_{25} - \Gamma_2$	$\Gamma_{25} - \Gamma_{15}$	$\Gamma_{25} - L_1$	$\Gamma_{25} - X_1$	$L_3 - L_1$	$L_3 - L_3$	$x_4 - x_1$	$x_1 - x_3$
GaP	E_{gx}	2.8	4.9		2.3	3.6	6.7	5.1	0.3
	E_I	2.663	5.290	2.737	2.295	3.588	6.445	4.591	0.382
	E_{II}	2.742	5.291	2.768	2.292	3.613	6.438	4.590	0.376
InP	E_{gx}	1.4	4.4			3.1	6.6	4.8	0.3
	E_I	1.617	4.617	2.082	2.333	2.803	5.908	4.239	0.200
	E_{II}	1.367	4.606	1.998	2.323	2.720	5.927	4.226	0.295

我们计算中所用的赝势参量列在表 3 中. 我们计算 $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ 所得的间接能隙 E_{gx} 与 T. H. Glisson 等^[1]指出的模拟函数 E_{fx} 也较符合. 见表 IV. 由于 Cohen 和 Bergstresser^[8]计算中所参照的 GaAs、GaP 的实验值与 Glisson 等所模拟的实验值不同,所以相比较有一定误差. 对于 GaAs, $E_{gx} - E_{fx} = -0.086\text{eV}$, 对于 GaP, $E_{gx} - E_{fx} = 0.032\text{eV}$. 若简单地把该误差随 x 的变化作线性内插后,修正我们的计算值得 E'_{gx} , 然后令 $\Delta' = E'_{gx} - E_{fx}$. Δ' 的值也列在表 4 中,可见 Δ' 是较小的.

表 3 二元化合物的赝势参量 (Ry.)

	$V_s(3)$	$V_s(8)$	$V_s(11)$	$V_A(3)$	$V_A(4)$	$V_A(11)$
GaAs	-0.23	0.01	0.06	0.07	0.05	0.01
GaP	-0.218	0.03	0.072	0.12	0.07	0.02
InP	-0.235	0.01	0.06	0.07	0.046	0.02
InAs	-0.22	0.00	0.05	0.08	0.05	0.03

表 4 $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ 的间接能隙 (eV)

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
E_{fx}	2.260	2.212	2.167	2.126	2.090	2.058	2.030	2.007	1.987	1.972	1.961
E_{gx}	2.292	2.227	2.166	2.110	2.058	2.036	1.993	1.955	1.923	1.896	1.875
Δ	0	-0.005	-0.009	-0.013	-0.017	0.005	0.002	-0.001	-0.002	-0.002	0

三、四元合金的计算

对于四元合金的赝势参量, 类似于三元合金的考虑, 基于二元化合物的内插公式, 采用类似于 Glisson 等^[1]指出的 Moon 等所用的公式:

$$V_i(G_i) = V_i^{\text{GaAs}}(G_i) \cdot x \cdot y + V_i^{\text{GaP}}(G_i) \cdot x \cdot (1-y) + V_i^{\text{InP}}(G_i) \cdot (1-x) \cdot (1-y) + V_i^{\text{InAs}}(G_i) \cdot (1-x) \cdot y - \Delta V_i(G_i), \quad (22)$$

$$V_d(G_i) = V_d^{\text{GaAs}}(G_i) \cdot x \cdot y + V_d^{\text{GaP}}(G_i) \cdot x \cdot (1-y) + V_d^{\text{InP}}(G_i) \cdot (1-x) \cdot (1-y) + V_d^{\text{InAs}}(G_i) \cdot (1-x) \cdot y. \quad (23)$$

当 $V_i(G_i) \approx V_i(11)$ 时 $\Delta V_i(G_i) = 0$,

$$\Delta V_i(11) = x(1-x)[y \cdot W_{14} + (1-y)W_{23}] + y(1-y) \cdot [xW_{12} + (1-x)W_{34}]. \quad (24)$$

其中 W_{14} 、 W_{23} 、 W_{12} 、 W_{34} 为由经验确定的常数. 实际上可由三元合金的实验值来确定. 例如当 $x = 1$ 时, 即为 $\text{GaAs}_y\text{P}_{1-y}$ 的情况, 使得

$$\Delta V_i(11) = y(1-y) \cdot W_{12}. \quad (25)$$

此 W_{12} 即为(20)式中的 W , 我们已知 $W_{12} = 0.011$. 类似地可得

$$W_{14} = 0.011, W_{23} = 0.023, W_{34} = 0.004.$$

Nahory 等^[9]的实验证实对于晶格常数用 Vegard 法则是可行的, 即对于 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$, 晶格常数 a 为

$$a = a_{\text{GaAs}} \cdot x \cdot y + a_{\text{GaP}} \cdot x \cdot (1-y) + a_{\text{InP}} \cdot (1-x) \cdot (1-y) + a_{\text{InAs}} \cdot (1-x) \cdot y. \quad (26)$$

这实际上是基于二元化合物的晶格常数的线性内插. 其中

$$a_{\text{GaAs}} = 10.6873 \text{ a.u.}, a_{\text{GaP}} = 10.3047 \text{ a.u.},$$

$$a_{\text{InP}} = 11.0956 \text{ a.u.}, a_{\text{InAs}} = 11.4537 \text{ a.u.},$$

当 $x = 1$, 则得 $\text{GaAs}_y\text{P}_{1-y}$ 的晶格常数. 此时(25)式与(14)式同.

四、结果与讨论

在我们的计算中, 为同 Glisson 等和 Nahory 等的计算比较, 所取的配比 x 、 y 的值与他们的相同. 所得的结果分别列在表 5 和表 6 中. 表中 E_{ex} 为实验值, E_g 为我们的计算值, E'_g 为 Glisson 等的计算值. 由表 5 可见我们的结果 (E_g) 与 Glisson 等的值 (E'_g) 相仿, 均与实验值 (E_{ex}) 接近. Nahory 等研究了晶格常数与 InP 匹配的 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 的禁带宽度, 在表 6 中列出了他们所取的实验值, 与我们的计算结果符合得很好.

图 1 画出了直接能隙 E_g 随 x 、 y 变化的三维表示, 四条边界线对应于四种三元合金. 中间的曲线上 x 、 y 的变化保证其晶格常数与 InP 匹配. 因为其晶格常数等于 InP 的晶格常数, 故 x 、 y 间必满足一定关系, 近似为一线性关系. 所以当 y 确定后, x 的值可由晶格常数的匹配要求唯一地确定. 为了看得清楚起见, 图 2 中的实线画出了 E_g 随 y 的变化. 图中的实点为实验值^[9], 虚线为 Nahory 等用 Moon 的内插公式所得的结果.

表5 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 的直接能隙 $E_g(\text{eV})$

x	y	E_{gx}	E_g	$E_g - E_{gx}$	E'_g	$E'_g - E_{gx}$
0.080	0.190	1.268	1.208	-0.060	1.166	-0.102
0.130	0.130	1.389	1.305	-0.084	1.276	-0.113
0.170	0.100	1.470	1.369	-0.101	1.346	-0.124
0.290	0.060	1.686	1.527	-0.159	1.513	-0.173
0.350	0.060	1.750	1.593	-0.157	1.580	-0.170
0.430	0.060	1.854	1.690	-0.164	1.678	-0.176
0.500	0.040	1.953	1.810	-0.143	1.797	-0.156
0.540	0.040	2.019	1.867	-0.152	1.854	-0.165
0.590	0.170	1.850	1.770	-0.080	1.757	-0.093
0.600	0.030	2.086	1.963	-0.123	1.957	-0.129
0.630	0.120	1.978	1.896	-0.082	1.883	-0.095
0.660	0.090	2.077	1.984	-0.093	1.971	-0.106
0.670	0.800	1.170	1.179	0.009	1.145	-0.025
0.740	0.630	1.388	1.445	0.057	1.430	0.042
0.750	0.140	2.101	2.065	-0.036	2.054	-0.047
0.750	0.240	1.953	1.930	-0.023	1.921	-0.032
0.750	0.310	1.809	1.839	0.030	1.830	0.021
0.770	0.190	2.041	2.031	-0.010	2.021	-0.020
0.810	0.975	1.165	1.200	0.035	1.166	0.001
0.830	0.850	1.236	1.347	0.111	1.326	0.090
0.890	0.650	1.535	1.656	0.121	1.650	0.115
0.890	0.700	1.472	1.598	0.126	1.591	0.119
0.920	0.440	1.869	1.965	0.096	1.963	0.094
0.930	0.340	2.038	2.116	0.078	2.113	0.075
0.940	0.220	2.203	2.295	0.092	2.297	0.094
0.940	0.280	2.135	2.212	0.077	2.214	0.079
0.983	0.910	1.351	1.516	0.165	1.510	0.159
0.985	0.970	1.326	1.455	0.129	1.447	0.121
0.988	0.830	1.475	1.612	0.137	1.609	0.134
0.990	0.710	1.592	1.754	0.162	1.755	0.163
0.991	0.500	1.881	2.018	0.137	2.020	0.139
0.992	0.590	1.738	1.905	0.167	1.907	0.169
0.994	0.340	2.124	2.234	0.110	2.239	0.115
0.994	0.420	1.993	2.126	0.133	2.131	0.138
0.996	0.260	2.222	2.349	0.127	2.353	0.131

表 6 晶格常数与 InP 匹配的 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 的禁带宽度 $E_g(\text{eV})$

x	y	E_{gx}	E_g	$E_g - E_{gx}$	x	y	E_{gx}	E_g	$E_g - E_{gx}$
0	0	1.350	1.367	0.017	0.286	0.635	0.943	0.929	-0.014
0.083	0.155	1.234	1.247	0.013	0.287	0.677	0.912	0.894	-0.018
0.171	0.373	1.102	1.084	-0.018	0.300	0.636	0.955	0.940	-0.015
0.223	0.515	1.020	0.987	-0.033	0.305	0.658	0.923	0.925	0.002
0.226	0.472	1.054	1.029	-0.025	0.318	0.742	0.889	0.865	-0.024
0.247	0.516	1.019	1.005	-0.014	0.346	0.787	0.843	0.852	0.009
0.250	0.531	1.012	0.993	-0.019	0.358	0.790	0.854	0.860	0.006
0.253	0.543	1.015	0.985	-0.030	0.395	0.906	0.802	0.802	0.000
0.257	0.595	0.952	0.941	-0.011	0.406	0.880	0.819	0.831	0.012
0.275	0.585	0.972	0.964	-0.008	0.466	1.000	0.749	0.796	0.047
0.283	0.625	0.946	0.936	-0.010					

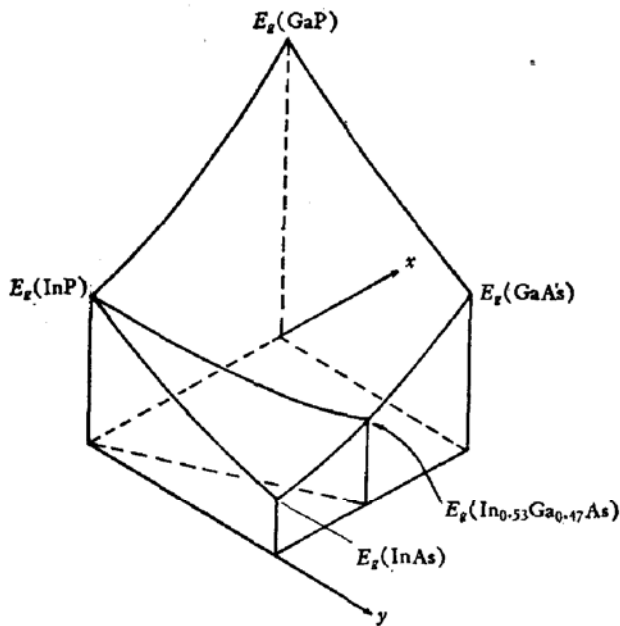
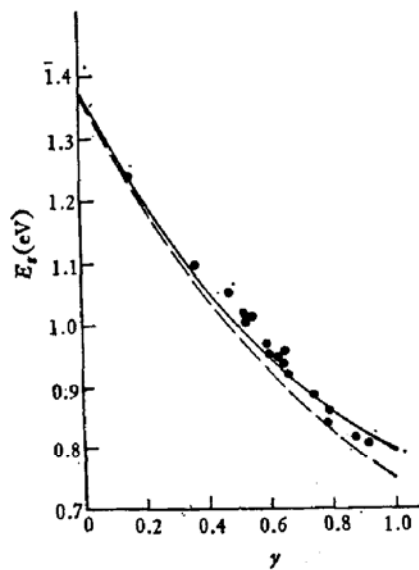
图 1 E_g 随 x, y 变化的三维表示图 2 E_g 随 y 的变化
(晶格常数与 InP 匹配)

图 3 以二维图的形式画出了 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 的禁带宽度的等位线。阴影区域(虚线以内)表示此时的禁带宽度为间接能隙(Γ -X)。该图与 Glisson 等的图略有差别,这是由于对二元化合物的禁带宽度所取实验值的区别所引起的。图中能量单位为 eV。

我们的计算与 Glisson 等的区别在于我们把内插方法引入赝势参量的估计,然后用这些赝势参量计算四元合金的能带结构。而 Glisson 等的内插方法则不能估计四元合金在 k 空间的整个能带。在图 4 和图 5 中分别画出了用本文参量所计算的 InP 和 $\text{In}_{0.695}\text{Ga}_{0.305}\text{As}_{0.698}\text{P}_{0.342}$ 的能带图。InP 的能带与 Cohen 等^[8]的相似。 $x = 0.305$, $y = 0.658$ 时,该材料的禁带宽度实验值^[9]为 0.923 eV (或 $\lambda_g = 1.343 \mu\text{m}$),属于激光通讯中常用的材料之一。

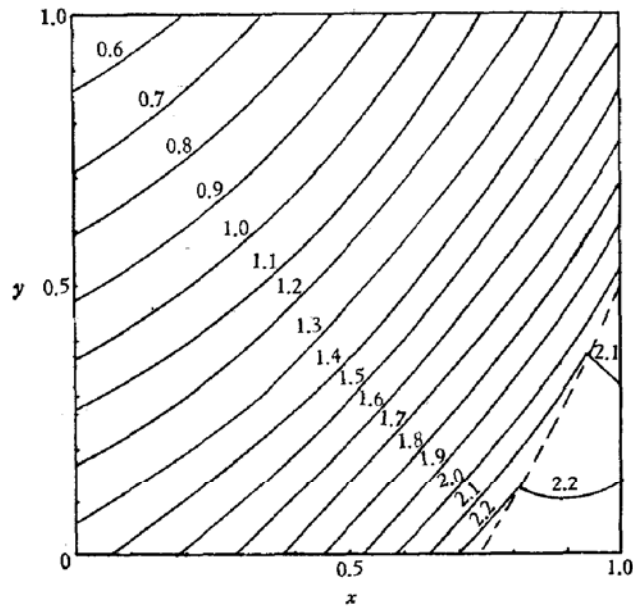
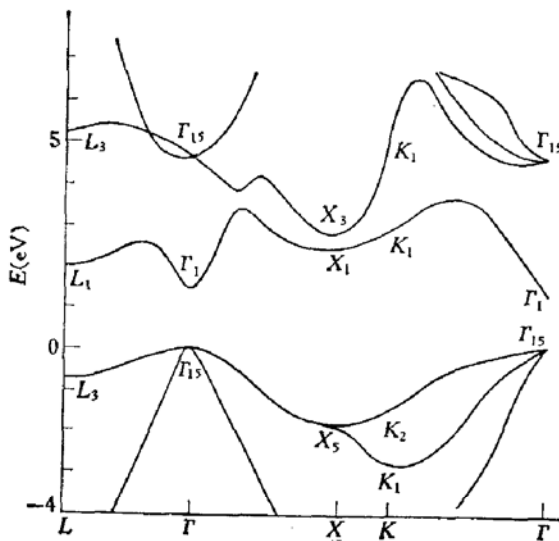
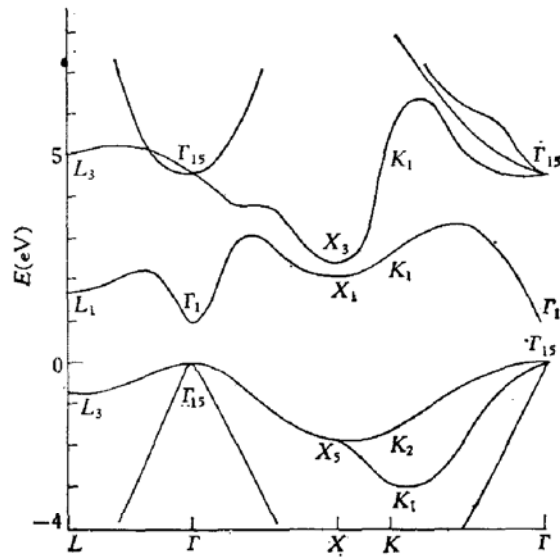
图3 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 禁带宽度随 x, y 的变化 (eV)

图4 InP 能带

图5 $\text{In}_{0.695}\text{Ga}_{0.305}\text{As}_{0.658}\text{P}_{0.342}$ 能带

当然我们对赝势参量的内插估计纯粹是经验的,非线性修正在物理上可理解为合金中的无序效应以及晶格常数的变化对晶体势所产生影响的等效结果。所以我们是利用一等效虚晶势来模拟一个无序的合金。既然是一种依赖经验的方法,为了计算简单起见,我们仅对 $V_s(11)$ 作非线性修正。至于对别的赝势参量作非线性修正的影响,将在进一步的研究中探讨。

D. Richardson^[10] 在对三元合金的计算中,考虑到晶格常数随配比的变化会引起二元化合物赝势参量的变化,故先把二元化合物的赝势参量进行修正后,再取它们的线性平均作为三元合金的赝势参量。这也正说明仅对二元化合物的赝势参量取线性平均是不够的,必须计及它们的非线性修正。在我们的计算中既然要考虑赝势参量的非线性修正,所以未曾直接考虑晶格常数随配比的变化引起二元化合物赝势参量的改变。

我们的计算结果与实验值比较时,象 Glisson 等一样,都列出小数点后第 3 位的值.这只是为了在选取经验参量时,在确定同一计算标准后,获取一模拟实验结果的最佳值的缘故.

Glisson 等也给出了 X 与 L 点处的间接能隙的内插公式. 我们已在表 4 中给出了 $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ 在 X 点处的间接能隙.从我们的计算结果与用 Glisson 等的内插公式所得结果的比较中,发现如考虑到所取二元化合物的实验值的区别进行修正后,两者符合较好.类似地对于 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$, $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}$, $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{P}$ 在 X 点的间接能隙,我们的计算结果与 Glisson 等的内插公式的结果之间也符合较好.因此对于任意配比的四元合金,可以估计到这两者的结果也将符合较好的.表 7 列出对于这三种三元合金,两种计算结果的差别 Δ' 的值. Δ' 的意义与表 4 中的 Δ' 相同.

表 7 在 X 点处我们的计算结果与 Glisson 等内插结果的差 Δ' 的值 (eV)

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$	0	-0.011	-0.019	-0.028	-0.034	-0.038	-0.042	-0.039	-0.007	-0.009	0
$\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}$	0	0.013	0.023	0.031	0.035	0.044	0.036	0.031	0.023	0.013	0
$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{P}$	0	-0.038	-0.061	-0.035	-0.044	-0.036	-0.032	-0.024	-0.038	-0.022	0

我们已计算了 $x = 0.305$, $y = 0.658$ 的 $E(k)$, 用 Glisson 等的内插公式我们也计算了相同配比下在 X 、 L 点的间接能隙数值, 可得我们的计算值与内插值之差 $\Delta'(X) = -0.022\text{eV}$, $\Delta'(L) = 0.027\text{eV}$. 两者相符也是较好的.

所以从我们的计算结果可见, 用赝势法计算四元合金的能带, 适当计及非线性修正, 似乎是可行的. 这样便可通过能带结构的计算进一步计算一些其他有用的物理量, 例如 $\epsilon_2(\omega)$ 等.

本工作是在谢希德老师指导下进行的, 并得到叶令同志的帮助, 谨在此表示感谢.

参 考 文 献

- [1] Glisson, T. H. Hauser, J. R., Littlejohn, M. A. and Williams. C. K. Journal of Electronic Materials, 7, 1(1978).
- [2] David, Brust, Phys. Rev., 134, A1337(1964).
- [3] Phillips, J. C. and Kleinman, L., Phys. Rev., 116 287(1959).
- [4] Cohen, M. L. and Heine, V., Solid State Physics, 24, 121(1970).
- [5] Van Vechten, J. A., Phys. Rev. B, 1, 3351(1970)
- [6] Thompson, A. G. and Woolley, J. C., Phys. Rev. 146, 601(1966).
- [7] Craford, M. G. and Holonyak, N., Optical Properties of Solids: New Developments, North-Holland Publishing Co., Amsterdam. (1976) pp. 187-253.
- [8] Cohen, M. L. and Bergstresser, T. K., Phys. Rev., 141, 781(1966).
- [9] Nahory, R. E., Pallack, M. A. and Johnston, W. D., Appl. Phys. Lett., 33, 659(1978).
- [10] Richardson, D., J. Phys. C, 4, L289(1971).

注: 本文中的 G 与引文 [4] 中的 G 相差一因子 $\frac{2\pi}{a}$.

CALCULATIONS OF THE ENERGY BANDS OF THE QUATERNARY ALLOY $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ BY THE PSEUDOPOTENTIAL METHOD

Lu Fen and Zhang Keiming

(*Modern Physics Institute, Fudan University*)

Abstract

It is the purpose of this paper to study the dependence of energy gaps of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ as a function of x and y in addition to its band structure by the conventional pseudopotential method. The pseudopotential form factors of the quaternary alloys are determined by using a nonlinear interpolation formula with the form factors of the binary compounds as boundary values. The empirical binary form factors used were somewhat modified from those given by Cohen and Bergstresser in order to obtain energy gaps which give better agreement with the experiment results. The quaternary lattice constants are determined by a linear interpolation technique. The results thus obtained agree quite well with current experiment results.