

含 B 闪锌矿三元系半导体 $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 和 $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 带隙理论预测*

熊德平^{1,†} 任晓敏¹ 王琦² 舒伟¹ 周静¹ 吕吉贺¹ 黄辉¹ 黄永清¹

(1 北京邮电大学光通信与光波技术教育部重点实验室, 北京 100876)

(2 北京邮电大学继续教育学院, 北京 100876)

摘要: 利用第一性原理计算方法, 用广义梯度近似 (GGA) 处理电子之间的交换关联能, 计算了 $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 的带隙结构. $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 的带隙弯曲参数 $b_{-E_g}(\Gamma) = 4.32\text{eV}$, $b_{-E_g}(X) = 1.8\text{eV}$, 它从直接带隙转变为间接带隙时 B 的含量为 0.47; 在小量 B 的掺入下, 可使 $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 的带隙变小, 在 $x = 0.15$ 时带隙达到最小值 1.33eV . $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 的带隙弯曲参数 $b_{-E_g}(\Gamma) = 1.37\text{eV}$, $b_{-E_g}(X) = 2.46\text{eV}$, 在整个组分内是间接带隙. $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 有较大的带隙弯曲参数, 是由于组成它们的二元系之间存在较大的晶格失配.

关键词: 含 B 化合物; 带隙弯曲参数; 带隙; 广义梯度近似

PACC: 7115M; 7125T

中图分类号: O471.5

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)06-0860-05

1 引言

随着外延生长技术的日益进步, 过去很多在 GaAs, Si 等常用衬底上难以合成的化合物, 如今合成它们已成为可能, 其中含 B 三元、四元系化合物尤其引人瞩目^[1~3]. B 的引入为人们的能带剪裁工程提供了一个更广阔的空间, 而其所产生的新材料所具有的很多新性质还有待人们去探索. 含 B 化合物一般都具有较大的带隙弯曲参数, 少量 B 的掺入就能较大地改变相应化合物的带隙宽度. 2006 年任晓敏等人^[4]系统地预测了 4 种含 B 四元系化合物, 发现在 B 具有一定的掺入比例情况下, 它们在与 GaAs 或 Si 晶格匹配时, 发光波长均能达到 1550nm 波段, 这为人们探索含 B 化合物的性质带来了新的动力.

目前理论上对含 B 化合物半导体的研究主要集中在 $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $B_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ ^[5,6] 等材料上, 以实验方法在 GaAs 衬底上合成 $B_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}$ 也有报道^[3,7]. 理论分析以及实验结果表明, B 的掺入会使 GaAs 和 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ 带隙升高, $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的带隙弯曲参数在 $1.6\sim 3.6\text{eV}$ 左右^[3,5], 没有 $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ 那样高达 $16\sim 20\text{eV}$ 的带隙弯曲参数^[8~10], 与 N 的掺入能使 GaAs 带隙变窄也不同^[11,12]. 因此本文将

利用第一性原理计算方法, 对另外两种含 B 三元系化合物 $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 和 $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$, 就它们的能带结构, 带隙弯曲参数进行计算, 并通过 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 的计算带隙值与实验值的比较, 检验计算的准确性. 目前有关 $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 和 $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 的带隙结构报道非常少, 因此对它们带隙的理论计算将为其实验上的合成提供指导, 并为预测由其组成的四元系 $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{In}_{1-x-y}\text{P}$ 的带隙提供理论依据.

2 计算方法

计算含 B 三元系 $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 以及 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 的带隙结构, 使用由剑桥大学卡文迪西实验室发展出来的一个量子力学程序 CASTEP (Cambridge serial total energy package) 模块, 它是基于密度泛函理论编写, 采用赝势平面波展开法求解 Kohn Sham 方程^[13]. 计算中选用广义梯度近似 (GGA) 来处理交换关联能, 它是对局域密度近似 (LDA) 的改进^[14], 用超软赝势 (ultrasoft-pseudopotential)^[15] 方法来计算电子与离子之间相互作用产生的库仑势能, 超软赝势的优点是, 采用平面波基矢展开电子波函数时, 仅需较小的截止动能就能达到很好的收敛效果^[16,17], 它对 In, Ga, N 的电子轨道仅考虑其价电子的影响, 即 $\text{In}(4d^{10} 5s^2 5p^1)$,

* 国家重点基础研究发展规划(批准号:2003CB314901), 教育部“新世纪人才支持计划”(批准号:NCET-05-0111) 和国家自然科学基金(批准号:60576018) 资助项目

† 通信作者. Email: deping_x@sohu.com

2006-11-02 收到, 2007-01-26 定稿

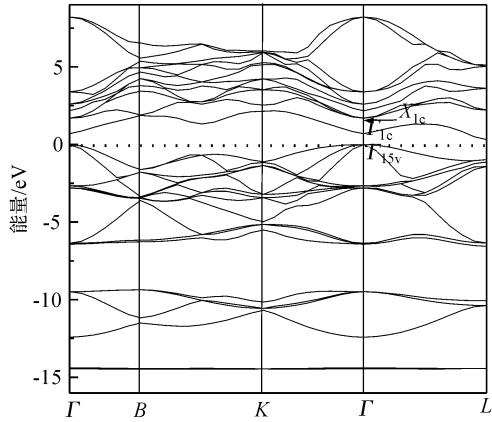


图1 用8原子超胞计算的闪锌矿结构 $B_{0.25}\text{In}_{0.75}\text{P}$ 能带结构图

Fig. 1 Calculated band structure of cubic $B_{0.25}\text{In}_{0.75}\text{P}$ by eight atoms supercell

$\text{Ga}(3d^{10}4s^24p^1)$, $\text{B}(2s^22p^1)$ 和 $\text{P}(3s^23p^3)$ 。

计算过程中,采用对称性为 P1 的 8 原子超胞 (supercell) 作为周期性基本单元,即用 $A_nB_{4-n}C_4$ 来模拟三元系化合物 $A_xB_{1-x}C$, $n = 0, 1, 2, 3$ 和 4, 分别代表 $x = 0, 25\%, 50\%, 75\%$ 和 100%。由于广义梯度近似处理交换关联能,计算的带隙会全部低于实验值,因此在计算带隙弯曲参数 (bowing parameter) b_{ABC} 时,通过把 AC, BC 的计算值与实验值进行比较,对 $A_nB_{4-n}C_4$ 进行线性补偿^[18,19]。

3 结果与讨论

计算是基于三元系化合物晶格常数满足 Vegard 定理,即认为对具有 $A_xB_{1-x}C$ (或 AB_xC_{1-x}) 形式的化合物,其晶格常数为

$$a_{ABC} = xa_{AC} + (1-x)a_{BC} \quad (1)$$

通过(1)式计算出各组分的晶胞晶格常数,分别用来建立各种组分的超胞模型,建立面心立方格子时,采用 F43-M 对称性,在相对坐标中,Ⅲ族原子在(0,0,0)位置,Ⅴ族原子在(0.25,0.25,0.25)位置.用建立的超胞作为计算能带的初始条件,而不经过程结构优化^[19]。

图1是用GGA近似计算出的 $B_1\text{In}_3\text{P}_4$ 能带图,它表示 $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 在 B 的含量 $x = 0.25$ 的情形.由于能带折叠,原胞的间接能谷 X_{1c} 折叠到超胞能带图中 Γ_{15v} 价带顶正上方,成为直接能谷^[20],因此计算的能带图在 B 的所有组分都表现为直接跃迁带隙,它必须通过与二元系原胞能带图的对比如来区分直接和间接能带.由能带图1就可以计算出 $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 在 B 的含量 $x = 0.25$ 时直接带隙 $E_g(\Gamma_{1c}-\Gamma_{15v})$ 和间接带隙 $E_g(X_{1c}-\Gamma_{15v})$ 。类似 $B_1\text{In}_3\text{P}_4$, 对于

表1 二元系化合物 BP, InP, GaP 的直接带隙和间接带隙计算值和实验值(表中未标明温度则是指 0K)

Table 1 Calculated, experimental direct and indirect band-gaps of BP, InP, GaP (The temperature is 0K)

	BP		InP		GaP	
	本次计算值	其他值 实验值	本次计算值	实验值	本次计算值	实验值
$\Gamma_{15}^C - \Gamma_{15}^V$	3.445	3.3 ^a 4.4 ^b	0.775	1.424 ^c	1.795	2.35 ^c
$X_{1c}^C - \Gamma_{15}^V$	1.509	2.0 ^b	1.930	2.384 ^c	1.921	2.886 ^c

a: LDA 计算结果^[21], b: GW 计算结果^[21,22], c: Ref. [23]

三元系 $A_xB_{1-x}C$ 通过计算其分别在 0, 25%, 50%, 75% 和 100% 的能带图,可分别得到在这些组分的直接跃迁和间接跃迁带隙,带隙弯曲参数则由下式来确定

$$E_g(A_xB_{1-x}C) = xE_g(AC) + (1-x)E_g(BC) - x(1-x)b_{ABC} \quad (2)$$

其中 b_{ABC} 即是三元系 $A_xB_{1-x}C$ 的带隙弯曲参数。

表1是用GGA计算出的相应二元系 GaP, InP, BP 的带隙值,并把它们与实验值作了比较.从表1可以看到,采用GGA的计算值都比实验值小,这是密度泛函本身的局限性所致,由于这种偏小对所有组分都具有一致性,近似认为不影响通过(2)式来计算带隙弯曲参数.在我们的计算中,通过已知的二元系实验值,分别对其组成的三元系各计算组分进行补偿,然后采用二次最小拟合,从而预测出此三元系材料在整个组分范围的带隙情况,二次项系数即是所求带隙弯曲参数.由于BP目前还没有较一致的实验值,而采用GW方法计算值与实验值较一致,这里用它作为计算时的实验参考值^[22]。

图2是 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 各组分补偿后并二次拟合的直接跃迁 $\Gamma_{1c}-\Gamma_{15v}$ 和间接跃迁 $X_{1c}-\Gamma_{15v}$ 带隙图,其带隙弯曲参数分别是 $b_{-E_g}(\Gamma) = 0.703\text{eV}$, $b_{-E_g}(X) = 0.087\text{eV}$, 当 $x = 0.72$ 时, $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 从直接带隙过渡到间接带隙,在 $x = 0.51$ 时,其晶格常数与 GaAs 衬底匹配,此时是直接带隙,带宽为 1.97eV. 表2是有关 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 的带隙计算值与实验值的比较.从表2可以看到,对于 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, 采用广义梯度计算的带隙值,经补偿并二次拟合后得到的带隙曲线与实验值吻合得非常好。

图3是计算得到的 $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 的直接跃迁和间接跃迁带隙图.在这次理论计算中,没有考虑 B 元素的并入比例,而是认为它可从 0~100% 变化.其带隙弯曲参数为 $b_{-E_g}(\Gamma) = 4.32\text{eV}$, $b_{-E_g}(X) = 1.8\text{eV}$. 从图3可以看到,当 $x = 0.47$ 时, $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 开始从直接带隙过渡到间接带隙,在小量 B 的掺入情况下,直接跃迁带隙随 B 的增加而变小,在 $x = 0.15$ 时带隙达到最小 1.33eV,但没有出现小于 1eV 的带隙,这是由于其带隙弯曲参数还不足够大

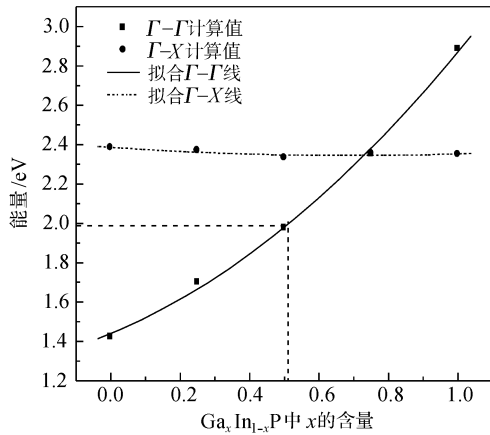


图 2 计算的随 Ga 的含量 x 变化的 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 的直接跃迁和间接跃迁带隙图 在 $x = 0.72$ 时, $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 从间接带隙过渡到直接带隙.

Fig.2 Variation of band gap with the concentration x in the $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ (The crossover composition x is 0.72)

表 2 有关 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 的带隙计算值与实验值^[23]的比较(表中未标明温度则是指 0K)

Table 2 Comparison of the calculated and experimental^[23] band-gaps of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ (The temperature is 0K)

	带隙弯曲参数 b/eV		直接带隙变成间接带隙时 Ga 的含量	与 GaAs 晶格匹配时带隙/eV
	$\Gamma_1^c-\Gamma_{15}^v$	$X_1^c-\Gamma_{15}^v$		
计算值	0.703	0.087	0.72	1.97
实验值	0.65	0.20	0.7	1.90(300K)
	(范围 0.39 (范围 0~0.76) 0.35)			1.969~2.018 (低温)

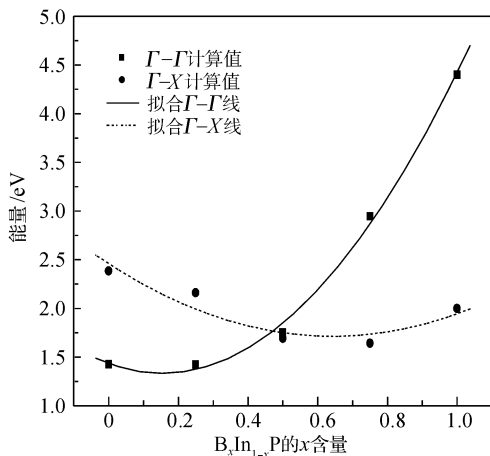


图 3 计算的随 B 含量 x 变化的 $\text{B}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 的直接跃迁和间接跃迁带隙图 在 $x = 0.47$ 时, $\text{B}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 从间接带隙过渡到直接带隙.

Fig.3 Calculated variation of band gap with the B concentration x in the $\text{B}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ (The crossover composition x is 0.47)

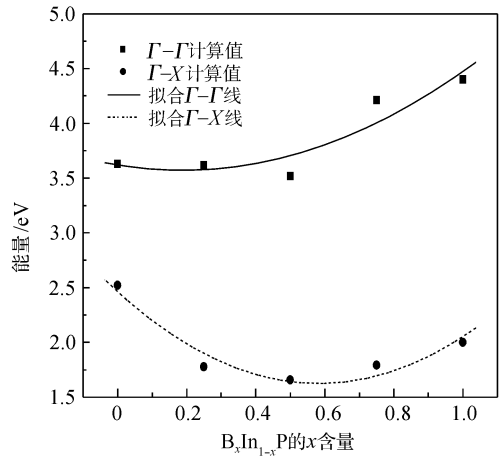


图 4 计算的随 B 含量 x 变化的 $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 的直接跃迁和间接跃迁带隙图 在 x 从 0 变化到 1 时, $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 为间接带隙.

Fig. 4 Calculated variation of band gap with the B concentration x in the $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$

的原因. 这与目前理论分析比较多的 $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 也不同, 它是随着 B 的掺入, 带隙一直变大. 从图 4 可看到, $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 在整个 x 变化范围内是间接带隙, 这是因为组成它的二元系 BP, GaP 都是间接带隙, 其带隙弯曲参数为 $b_{-E_g}(\Gamma) = 1.37\text{eV}$, $b_{-E_g}(X) = 2.46\text{eV}$.

从上面的计算可以看出, $\text{B}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 这两种含 B 化合物的带隙弯曲参数都较常规材料大, 但都没有出现类似于 $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ 那样高达 16~20eV 的带隙弯曲参数. 目前有关三元系化合物有大的带隙弯曲参数的解释原因是, 组成它的两种二元系晶格常数之间存在较大的失配度^[24], 而 BP 与 InP, BP 与 GaP 之间, 晶格失配度分别为 22.7% 和 16.7%. 表 3 是计算的带隙弯曲参数与失配度的关系, 从中可以看出, 我们计算的带隙弯曲参数与其他的计算值具有一致性, 而较大的带隙弯曲参数也是 B 具有较快改变半导体材料带隙宽度的优点, 这也是含 B 半导体材料正逐步被人们重视的原因.

表 3 三元系闪锌矿 III-V 族半导体化合物带系弯曲参数与组成它的二元系失配度之间的存在简单比例关系

Table 3 Comparison of bowing parameters for zincblende III-V semiconductor alloys indicates a rough proportionality between bowing and lattice misfit

三元化合物	带隙弯曲参数	晶格失配度/%
$\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	4.30 ^a	24
$\text{B}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$	4.32 ^b	22.7
$\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$	2.46 ^b	16.7
$\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	2.3~3.5 ^c	15
$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$	0.70 ^b	7
$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$	0.48 ^d	7
$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	0.00 ^d	3

a: Ref. [24], b: 本次计算值, c: Ref. [3,5], d: Ref. [23]

4 结论

基于第一性原理计算方法,用GGA处理电子之间的交换关联能,对 $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 进行了带隙计算.通过分别计算它们在0,25%,50%,75%和100%组分时的带隙,并用它们的二元系实验值进行补偿,二次拟合后分别得到了它们的直接跃迁 $\Gamma_{1c}-\Gamma_{15v}$ 和间接跃迁 $X_{1c}-\Gamma_{15v}$ 带隙弯曲参数.另外还计算了已有较一致实验结果的 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, 计算的直接带隙弯曲参数 $b_{-E_g}(\Gamma)$, 间接带隙弯曲参数 $b_{-E_g}(X)$ 以及直接带隙转变为间接带隙时Ga的含量,它们都与实验值吻合得很好,表明此计算的准确性较高.对于 $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, 计算得到的直接带隙弯曲参数 $b_{-E_g}(\Gamma) = 4.32\text{eV}$, 间接带隙弯曲参数 $b_{-E_g}(X) = 1.8\text{eV}$, $x = 0.47$ 时, $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 开始从直接带隙过渡到间接带隙,从计算得到的带隙图可以看出, $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 随着B的掺入,类似 $\text{GaAs}_x\text{N}_{1-x}$, 其带隙会变小,在 $x = 0.15$ 时带隙达到最小 1.33eV , 但没有出现小于 1eV 的带隙.对于 $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$, 则在整个 x 变化范围内是间接带隙,其带隙弯曲参数为 $b_{-E_g}(\Gamma) = 1.37\text{eV}$, $b_{-E_g}(X) = 2.46\text{eV}$. $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ 和 $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ 比普通三元系有更大的带隙弯曲参数,是由于组成它们的二元系晶格失配度较大的原因.

参考文献

- [1] Shan W, Walukiewicz W, Wu J, et al. Band-gap bowing effects in $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alloys. *J Appl Phys*, 2003, 93: 2696
- [2] Dumont H, Rutzinger D, Vincent C, et al. Surface segregation of boron in $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ epilayers studied by X-ray photoelectron spectroscopy and atomic force microscopy. *Appl Phys Lett*, 2003, 82: 1830
- [3] Geisz J F, Friedman D J, Olson J M, et al. BGaInAs alloys lattice matched to GaAs . *Appl Phys Lett*, 2000, 76: 1443
- [4] Ren Xiaomin, Wang Qi, Huang Hui, et al. New III-V group materials and novel structures for photonic and optoelectronic integration. Fourth Joint Symposium on Opto- and Microelectronic Devices and Circuits, Session 2: Materials and Technology, September, 2006
- [5] Hart G L W, Zunger A. Electronic structure of BAs and boride III-V alloys. *Phys Rev B*, 2000, 62: 13522
- [6] Chimot N, Even J, Folliot H, et al. Structural and electronic properties of BAs and $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $B_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ alloys. *Physica B*, 2005, 364: 263
- [7] Geisz J F, Friedman D J, Kurtz S, et al. Epitaxial growth of BGaAs and BGaInAs by MOCVD. *J Cryst Growth*, 2001, 225: 372
- [8] Weyers M, Sato M, Ando H. Red shift of photoluminescence and absorption in dilute GaAsN alloy layers. *Jpn J Appl Phys*, 1992, 31: L853
- [9] Kondow M, Uomi K, Hosomi K, et al. Gas-source molecular beam epitaxy of $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ using a N radical as the N source. *Jpn J Appl Phys*, 1992, 33: L1056
- [10] Wei S H, Zunger A. Giant and composition-dependent optical bowing coefficient in GaAsN alloys. *Phys Rev Lett*, 1996, 76: 664
- [11] Agrawal B K, Yadav P S, Srivastava R, et al. ab initio study of anomalous band-gap bowing in $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ alloys. *J Phys: Condens Matter*, 1998, 10: 4597
- [12] Leibiger G, Gottschalch V, Riede V, et al. Interband transitions and phonon modes in $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($0 \leq x \leq 0.03$) and $\text{GaN}_y\text{As}_{1-y}$ ($0 \leq y \leq 0.037$): a comparison. *Phys Rev B*, 2003, 67: 195205
- [13] Kohn W, Sham L J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys Rev*, 1965, 140: A1133
- [14] Zaoui A, Hassan F El Haj. Full potential linearized augmented plane wave calculations of structural and electronic properties of BN, BP, BAs, and BSb. *J Phys: Condens Matter*, 2001, 13: 253
- [15] Furthmüller J, Kachel P, Bechstedt F. Extreme softening of Vanderbilt pseudopotentials; general rules and case studies of first-row and d-electron elements. *Phys Rev B*, 2000, 61: 4576
- [16] Kresse G, Hafner J. Norm-conserving and ultrasoft pseudopotentials for first-row and transition-element. *J Phys: Condens Matter*, 1994, 6: 8245
- [17] Dacostat P G, Nielsentf O H, Kunc K. Stress theorem in the determination of static equilibrium by the density functional method. *J Phys C: Solid State Phys*, 1986, 19: 3163
- [18] Kuo Y K, Liou B T, Yen S H, et al. Vegard's law deviation in lattice constant and band gap bowing parameter of zincblende $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. *Optics Communications*, 2004, 237: 363
- [19] Kuo Y K, Lin W W. Band-gap bowing parameter of $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ derived from theoretical simulation. *Jpn J Appl Phys*, 2002, 41: 5557
- [20] Agrawal B K, Agrawal S, Yadav P S, et al. ab initio calculation of electronic properties of $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{N}$ alloys. *J Phys: Condens Matter*, 1997, 9: 1763
- [21] Bouhafs B, Aourag H, Certier M. Trends in band-gap pressure coefficients in boron compounds BP, BAs, and BSb. *J Phys: Condens Matter*, 2000, 12: 5655
- [22] Surh M P, Louie S G, Cohen M L. Quasiparticle energies for cubic BN, BP, and BAs. *Phys Rev B*, 1991, 43: 9126
- [23] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R. Band parameters for compound semiconductors and their alloys. *J Appl Phys*, 2001, 89: 5815
- [24] Escalanti L, Hart G L W. Boron alloying in GaN . *Appl Phys Lett*, 2004, 84: 705

Theoretical Analysis of Band-Gap Properties of $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ and $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ Alloys*

Xiong Deping^{1,†}, Ren Xiaomin¹, Wang Qi², Shu Wei¹, Zhou Jing¹, Lü Jihe¹,
Huang Hui¹, and Huang Yongqing¹

(1 *Key Laboratory of Optical Communication and Lightwave Technologies of the Ministry of Education*,
Beijing 100876, China)

(2 *Institute of Continuing Education, Beijing University of Posts and Telecommunications*,
Beijing 100876, China)

Abstract: The band gaps of ternary zinc blende $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ and $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ alloys are calculated using first principles in the generalized gradient approximation (GGA), and their bowing parameters are obtained. For $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, the bowing parameters are $b_{E_g}(T) = 4.32\text{eV}$ and $b_{E_g}(X) = 1.8\text{eV}$, the crossover composition from direct to indirect gap is 0.47, the direct gap varies from 1.33 to 1.47eV, and the addition of a small amount of B will reduce the alloy gap. For $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$, the whole x range is indirect gap, and the bowing parameters are $b_{E_g}(T) = 1.37\text{eV}$ and $b_{E_g}(X) = 2.46\text{eV}$. The reason that $B_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ and $B_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ have relatively large bowing parameters is the large lattice mismatch between their binary alloys.

Key words: boride alloy; bowing parameter; band-gap; GGA

PACC: 7115M; 7125T

Article ID: 0253-4177(2007)06-0860-05

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (No. 2003CB314901), the Program for New Century Excellent Talents in University (No. NCET-05-0111), and the National Natural Science Foundation of China (No. 60576018)

† Corresponding author. Email: deping_x@sohu.com

Received 2 November 2006, revised manuscript received 26 January 2007

©2007 Chinese Institute of Electronics