第13卷 第6期 半导体学报 Vol. 13. No. 6
1992年6月 CHINESE JOURNAL OF SEMICONDUCTORS June, 1992

$(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 半导体合金材料的电子结构及其基态性质

段文晖 顾秉林 朱嘉麟
(清华大学物理系，北京，100084)

1991年3月22日收到，同年9月2日修改定稿

本文根据闪锌矿-金刚石结构的有序-无序相变模型，引入序参量 M，在改进的赝晶格近似下，利用从第一性原理出发的自洽 LMTO-ASA 方法，研究了 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 半导体合金的电子结构和基态性质. 计算结果与现有的非自洽计算结果和实验结果进行了比较. 计算表明，合金材料中轻、重空穴有效质量依赖于合金的有序度. 计算也表明合金材料的晶格常数和体弹性模量将随组份 x 变化而呈现类似"V"形变化. 这都说明，在有序和无序的组份区域，合金性质随组份的变化规律是不同的，应分区描述.

PACC: 7125, 6150K, 7280E

一、引言

在制造新的专用半导体器件时，人们往往希望半导体材料具有某种特别的电子结构. 分子束外延、二次离子轰击、化学气相沉积等新技术的产生和成熟，使得生长不同类型的半导体合金成为可能. $(III\text{-}V)_{1-x}IV_{2x}$、$II\text{-}VI^A_{1-x}VI^B_x$ 就是其中两种重要类型[1-4]. 半导体合金往往反映了两种或多种类型半导体的"混合"特性，其工业用途不容忽略. 生长技术的进一步发展，甚至使得我们可以控制得到任何组份的合金. Greene[1] 成功地对所有的组份 $x(0 \leqslant x \leqslant 1)$ 生长了闪锌矿-金刚石结构的 $(III\text{-}V)_{1-x}IV_{2x}$ 合金：$(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$、$(GaSb)_{1-x}Ge_{2x}$. 对闪锌矿-黄铜矿材料的生长也有报道[4,5]. 这些半导体合金材料性质如何随组份变化是一个普遍关心的问题. 实验中发现，半导体合金 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 的禁带宽度随组份 x 的变化呈现出不寻常的V形变化，在 $x_c \doteq 0.3$—0.4 处禁带宽度取极小[6]. Newman[7] 和 Gu[8] 等人认为随着组份 x 的变化，$(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 半导体合金在组份 $x=x_c$ 处发生了从闪锌矿结构-金刚石结构的有序-无序相变. 由此而建立的有序-无序相变模型目前广泛用于各种半导体合金的研究，并取得了相当的成功. Newman[7] 在此理论基础上，利用平均场理论和紧束缚方法（LCAO）计算给出了与实验相符合的能隙曲线. LCAO 方法作为一种简单而物理意义上又比较清楚的能带计算方法，广泛应用于这个领域.

LCAO 方法作为一种经验方法，也有相应的局限性. 它依赖于经验地确定哈密顿量

矩阵元，且矩阵元是根据 k 空间高对称点的少数几个实验能量值而给出的，在描述整个能带的性质时就不够精确了，因而难以用于对合金性质的讨论．作为从第一性原理出发的能带计算方法，线性 Muffin-tin 势方法（LMTO）[9,10] 广泛应用于研究各种材料的电子结构和基态性质(如总能、结合能、体模等)[11-13]，能够很好地描述整个能带的性质．本文利用 LMTO 方法，在改进的虚晶格近似下，引入序参量 M，研究了 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 半导体合金性质随组份的变化．考虑到材料晶体结构的低对称性，能带计算中在高对称间隙点引入了"空球"[14]，并考虑了晶体势的 $l=3$ 阶非球对称分量的影响[15]．计算结果与现有的理论计算和实验结果进行了比较和讨论．计算表明，合金材料的重要参量(空穴有效质量、晶格常数、体模等)不能从纯材料参量线性插值得到．

二、理 论 方 法

1. 序参量的引入

闪锌矿结构和金刚石结构都是基元由两个原子组成的面心立方格子．基元中的两个原子分别位于（0，0，0）和 $\frac{a}{4}(1,1,1)$ 处（a 是材料的晶格常数）．我们分别称这两个位置为"Ga"位和"As"位．GaAs 是闪锌矿结构，"Ga" 位和 "As" 位分别由 Ga 原子和 As 原子占据． 而 Ge 是金刚石结构，"Ga" 位和 "As" 位都由 Ge 原子占据． 形成合金 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 时，原子可能以两种不同方式排列，形成两种不同的相：

1）富 GaAs 有序闪锌矿相． Ga 原子以不同几率占据"Ga"位和"As"位，As 原子以不同几率占据"As"位和"Ga"位，而 Ge 原子在两个位置上无规排列． 此时可以区分"Ga"位和"As"位．

2）富 Ge 无序金刚石相．Ga、As、Ge 原子都在"Ga"位和"As"位上无规排列，此时无法区分"Ga"位和"As"位．

为了清楚地描述发生在以上两种相之间的有序-无序相变，我们引入原子在不同位置上的占据几率．定义：

$\langle P_{Ga}\rangle_{\text{“Ga”}}$ "Ga" 位被 Ga 原子占据的几率，

$\langle P_{As}\rangle_{\text{“Ga”}}$ "Ga" 位被 As 原子占据的几率，

类似定义 $\langle P_{Ga}\rangle_{\text{“As”}}$、$\langle P_{As}\rangle_{\text{“As”}}$．

由此可以定义序参量 M：

$$M=[(\langle P_{Ga}\rangle_{\text{“Ga”}}-\langle P_{Ga}\rangle_{\text{“As”}})+(\langle P_{As}\rangle_{\text{“As”}}-\langle P_{As}\rangle_{\text{“Ga”}})]/2. \tag{1}$$

序参量M反映了原子在"Ga"位和 "As" 位的有选择性占据．$|M|\neq 0$，"Ga" 位和 "As"位可以区分，系统处于有序相．$|M|$随组份 x 增大而减少，在某个 $x=x_c$ 处，$M=0$．"Ga"位和"As"位不再可以区分，系统处于无序相，此时发生有序-无序相变．

原子在不同位置上的占据几率如表 1 所示．

Newman 用三分量自旋模型计算给出了序参量与组份的关系曲线[7]，我们在后面的计算中直接引用了他们的结果．必须注意，在 $x=0$ 时，序参量 $|M|\neq 1$．这是由于生长出的 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 合金中有大量错键（Wrong bond）存在[6,7]，即使在组份 $x=0$

时也会出现 Ga 原子占据“As”位和 As 原子占据“Ga”位的情形。

表 1　原子在“Ga”位和“As”位的占据几率

	“Ga” 位	“As” 位
$\langle P_{Ga}\rangle$	$(1-x+M)/2$	$(1-x-M)/2$
$\langle P_{As}\rangle$	$(1-x-M)/2$	$(1-x+M)/2$
$\langle P_{Ge}\rangle$	x	x

2. 改进的虚晶格近似

Myles 等[16]、Onodera 等[17]和 Newman 等[7]都认为，虚晶格近似可以满意地用于 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 系统。这种合金材料的态密度谱将反映单个“平均”的半导体合金特性，而不是同时呈现 GaAs 式和 Ge 式能谱特点。我们因而采用了改进的虚晶格近似来处理问题。认为此时 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 仍是闪锌矿结构，只不过相应在“Ga”位和“As”位的原子分别是由 Ga 原子、As 原子和 Ge 原子按表 1 给出几率混合而成的“新”原子。这种“新”原子的特点反映在其原子的电子电荷分布上。

单原子势 V 和原子的电荷密度 ρ 满足泊松方程 $\nabla^2 V=-8\pi\rho(\boldsymbol{r})$，“新”原子的势 $V_{\text{“Ga”}}$ 和 $V_{\text{“As”}}$ 应是 Ga、As 和 Ge 原子势按几率叠加，由此可以给出它的电荷密度：

$$\begin{aligned}\rho_{\text{“Ga”}}(\boldsymbol{r})=&\rho_{Ga}(\boldsymbol{r})\langle P_{Ga}\rangle_{\text{“Ga”}}+\rho_{As}(\boldsymbol{r})\langle P_{As}\rangle_{\text{“Ga”}}\\&+\rho_{Ge}(\boldsymbol{r})\langle P_{Ge}\rangle_{\text{“Ga”}},\end{aligned}\tag{2}$$

$$\begin{aligned}\rho_{\text{“As”}}(\boldsymbol{r})=&\rho_{Ga}(\boldsymbol{r})\langle P_{Ga}\rangle_{\text{“As”}}+\rho_{As}(\boldsymbol{r})\langle P_{As}\rangle_{\text{“As”}}\\&+\rho_{Ge}(\boldsymbol{r})\langle P_{Ge}\rangle_{\text{“As”}}.\end{aligned}\tag{3}$$

这样，我们就完全确定了虚晶格上的“新”原子的物理状态，从而为电子结构的计算作好了准备。

3. 能带计算方法

本文采用了基于 Kohn-Sham 局域密度泛函理论的自洽 LMTO[9,10] 方法来计算材料的电子结构。其中有效单电子方程中的交换-关联势采用了 Vosko 对均匀电子气的多体结果，把交换-关联势写成定域密度的一个泛函[18]。除了自旋-轨道耦合之外的所有相对论效应得到了考虑。晶体势的 Muffin-tin 近似用原子球近似（ASA）代替以简化计算。在原子球近似中，整个晶体体积用以原子位置为中心的重叠原子球来表示，重叠的原子球体积之和等于晶体体积，在原子球内的晶体势采用球对称势来近似。ASA 近似允许晶体势在整个晶胞内都可以有空间上的变化，但同时导致了几何残缺。我们应用了 Andersen 为消除这项误差而作的一级修正（组合修正项）[9]。

本文中所考虑的材料 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 的晶体结构属于对称性较低的闪锌矿结构。我们应用了 Keller 提出的在高对称间隙点引入“空原子球”的方法[14]，这样可以减少低对称结构下原子球之间的交叠，使得所选取的 ASA 势更接近于真实的晶体势。这种引入“空原子球”的方法在开放性结构材料的电子结构计算中业已证明是非常有效的[13,15]。这样，闪锌矿结构的 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 可用基元由四个原子球组成的面心立方格子来描述。基元中“Ga”原子球、“As”原子球分别位于 $(0,0,0)$ 和 $\frac{a}{4}(1,1,1)$，而两个“空原子球”分别位

于 $\frac{a}{2}(1,1,1)$和 $\frac{3a}{4}(1,1,1)$. "空原子球"相当于具有核电荷 $Z=0$ 的原子球.

以上的处理是用适当选择范围的球对称势来描述晶体势. 但真实的晶体势并不是球对称的，它可用球谐函数展开来表示. 对具有反演对称性的面心立方或体心立方结构晶体，晶体势的最小阶非球对称分量是 $l=4$ 阶分量 (l 为角量子数)，我们一般不考虑其非球对称分量的影响. 闪锌矿结构并不具有反演对称性，真实晶体势的最小阶非球对称分量是 $l=3$ 阶分量，这项分量在其非球对称分量中起主要作用，是相当重要的. 我们在计算中通过微扰处理考虑了这项非球对称分量的影响[15,19].

三、计算结果及其讨论

我们给出了八种组分($x=0.0,0.1,0.2,0.28,0.3,0.5,0.75,1.0$)下 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 的电子结构. 其中 $x=x_c=0.3$ 是 Newman[7] 计算给出的有序-无序相变发生的临界组分，此时序参量 $M=0$. 在 $x<x_c$ 时，$|M|>0$ (我们可以方便地取 $M>0$，这与 $M<0$ 的情形完全对称，只是改变"Ga"位和"As"位的标记而已). 在 $x>x_c$ 时，$M=0$. 由于除了 $x=1.0$ 的情形之外，其余组分没有相应的实验晶格常数，我们的电子结构计算中同时包括了确定材料的平衡点阵晶格常数的一个循环，即要求电子结构在电子气压强 $P=0$ 时自洽循环稳定. Ge 和 GaAs 的实验晶格常数分别是 5.652 Å[20] 和 5.653 Å[21]，相当接近，组成合金时其晶格常数的变化也是不大的. 为了研究这种变化，就要求计算上的高精度. 计算中我们选定能量变化 $\Delta E<0.0002$Ryd 为自洽收敛标准，这样能够保证我们计算的参量(空穴有效质量、平衡点阵晶格常数、体模等)的精确度.

1. 电子结构

在图 1 中，我们有选择地给出了三种典型组分 $x=0.1$ (相应于富 GaAs 有序相)、$x=0.3$ (临界组分) 和 $x=0.75$ (富 Ge 无序相)下的 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 的总能态密度 (TDOS). 一般认为，对于半导体材料，局域密度近似下给出的交换-关联势并不能很好地描述其激发态的真实情况，导带能量和禁带宽度的计算不很准确[22,23]. 我们主要注意观察计算得到的价带能谱. 后面所进行的研究都是以价带能谱为基础的.

从计算和图 1 中可以看到，在 $x<x_c=0.3$ 时，最低价带与能量较高的价带之间存在一个能隙，能隙的中心大约在 -8.0eV 附近. 能隙随着组分 x 的增大而减小；在 $x=x_c=0.3$ 处，能隙宽度降为零，能隙消失；x 继续增大，这个能隙不再出现. 这与 Newman[7] 用 LCAO 方法得出的结论是一致的. 现有的理论计算与实验[15]表明，典型的 III-V 族半导体 (GaAs、GaSb 等)中都有这个能隙存在，而典型的 IV 族元素半导体 (C、Si、Ge 等)中是不存在这个能隙的. 因此我们的计算从电子结构方面表明了，在 $x=x_c$ 处，合金材料开始失去了富 GaAs 有序相的特点而具有了富 Ge 无序相的特点，即此时发生了有序-无序相变.

对半导体材料而言，空穴的有效质量是最重要和最基本的物理参量之一. 我们希望了解形成半导体合金后空穴有效质量随组分的变化关系. $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 合金材料的价带顶在 $\boldsymbol{k}$ 空间的 Γ 点 ($\boldsymbol{k}=0$ 处)，能带边附近的空穴以两个有效质量(轻空穴和重空穴)为

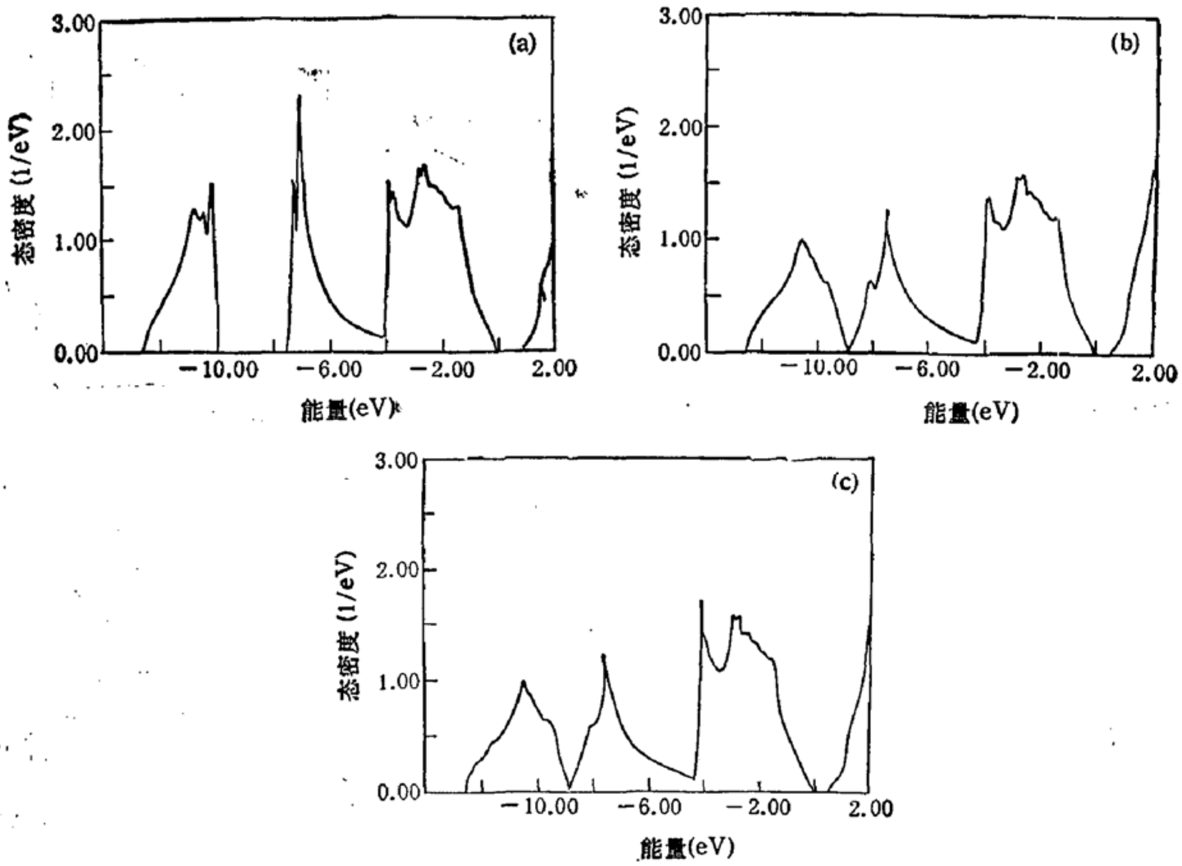

图 1　$(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 的 TDOS

(a) $x=0.1$　(b) $x=0.3$　(c) $x=0.75$

表征. 轻、重空穴带在 $\boldsymbol{k}=0$ 处都是各向异性的. 由于在 $\boldsymbol{k}=0$ 处结构矩阵的发散性, LMTO 方法不能直接准确给出 $\boldsymbol{k}=0$ 处的能量本征值[10]. 我们采用外推法给出. 即在接近 $\boldsymbol{k}=0$ 处, 选定 30—40 个 $\boldsymbol{k}$ 点计算出能量本征值, 再用多项式最小二乘拟合, 同时保证每点能量拟合的相对误差均小于 10^{-2}. 由多项式的二次项可给出有效质量参数. 在图 2 和图 3 中, 我们给出了沿 $\boldsymbol{k}$ 空间两个特殊方向((001)和(111)方向)的轻、重空穴有效质量随组分的变化关系, 其中空穴的有效质量是以自由电子质量 (m_e) 为单位.

由于计算上的困难, 自旋-轨道相互作用没有得到考虑, 而此项作用对空穴有效质量有一定影响. 因此, 我们的兴趣主要在于空穴有效质量随组分的相对变化. 可以看出, $x<x_c=0.3$ 时, 轻、重空穴有效质量随组分有较大变化. 而当 $x\geqslant x_c=0.3$ (完全无序) 后, 有效质量变化相当平缓. 这表明合金中轻空穴和重空穴的有效质量将主要依赖于合金的有序度. 以往在对半导体合金系统的研究中, 合金的各种参数一般用组成合金的纯材料参数线性插值代替[24]. 我们的计算表明, 这种插值对 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 类的半导体合金会带来相当大的误差. 对这类半导体合金材料的输运性质的研究必须以研究类"Ga"位和类"As"位原子的占据情况(用序参量加以描述)为基础。

2. 基态性质

我们试图了解 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 合金基态性质随组分 x 的变化. 一般说来, 系统的总能量是最根本的量, 它反映整个系统的性质. 但由于总能量计算牵涉到较大的核芯能量

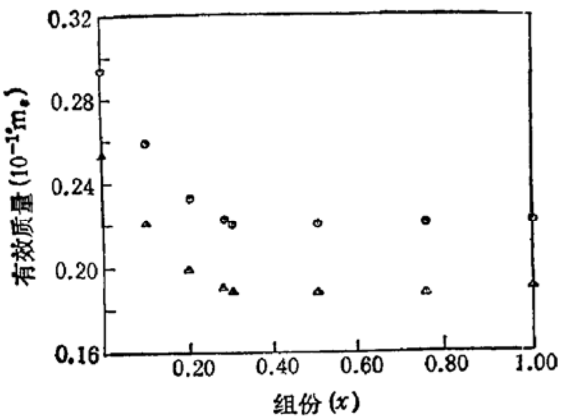

图 2 轻空穴有效质量 m_{lh}

其中△：沿(111)方向 ⊙：沿(001)方向

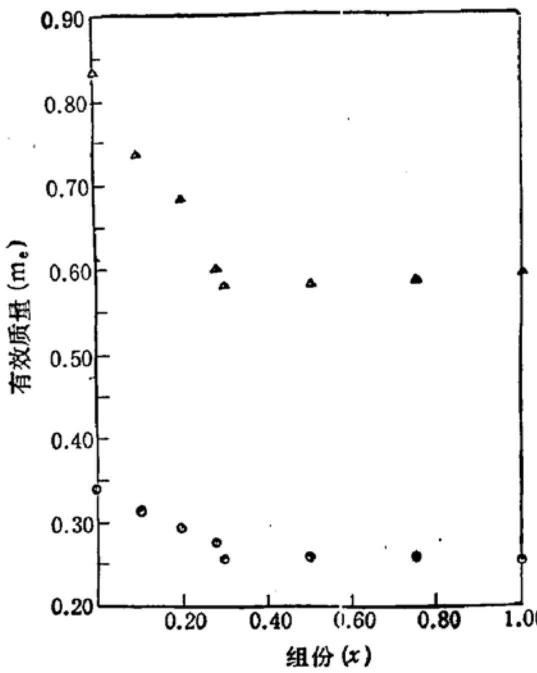

图 3 重空穴有效质量 m_{hh}

其中 △：沿(111)方向 ⊙：沿(001)方向

和所谓的双重计算项[10]，我们转而计算总能量的一阶导数，即电子气压强 P。

$$P = -\frac{dE_{总}}{dV},$$

其中 $E_{总}$ 是晶胞内的电子总能量，V 是晶胞体积. 对平衡点阵晶格常数 $a = a_0$，有 $P(a_0) = 0$，由此可以确定 a_0。而系统的体弹性模量 B 为 $-\left(V\frac{dP}{dV}\right)\Big|_{a=a_0}$ 也就可以得到.

在表 3 中，我们给出了合金的平衡点阵晶格常数和体弹性模量随组分的变化，同时也给出了从"Ga"位向"As"位的有效电荷转移 Q 与组分的关系.

表 3 平衡点阵晶格常数 a、体弹性模量 B 和有效电荷转移 Q

组份 x	a(Å)		B(kbar)		Q(电子电荷)
	本文计算	实 验	本文计算	实验	
0.0	5.651		931		0.092
0.1	5.647		928		0.083
0.2	5.642		921		0.062
0.28	5.638		914		0.03
0.3	5.636		913		0.0
0.5	5.639		918		0.0
0.75	5.644		928		0.0
1.0	5.652	5.652[19],5.657[25]	942	772[26]	0.0

从表 3 可以看到 $x < x_c = 0.3$ 时，"Ga"位失去电子而"As"位得到电子. 在 $x \geqslant x_c$ 后，有效电荷转移为零。在所有组分 x 下的有效电荷转移均小于 0.1 个电子，这表明材料基本上是共价键性的.

在 $x=1.0$ 时，我们计算的平衡点阵晶格常数与实验符合得非常好，相差 $<0.1\%$. 计算是相当准确的. 在 $x=0.0$ 时，由于合金材料 $(GaAs)_{1.0}$ 中"错键"的存在，其晶格常数与纯 GaAs 半导体材料应有小的差异. 实验给出纯 GaAs 的晶格常数为 5.653 Å[21]，与本文计算 $(GaAs)_{1.0}$ 的平衡点阵晶格常数(5.651 Å) 相差不大. 计算给出晶格常数随组分 x 的变化趋势类似于本文作者之一(顾秉林)用 LCAO 方法对 $(GaSb)_{1-x}Ge_{2x}$ 合金材料计算的结果[8]，与实验[27]也是一致的.

计算给出的 $x=1.0$ 时的体弹性模量 B 与文献[26]给出的实验值有一定的偏差. McMaham[13] 用 LMTO 方法计算过 C、Si 的体弹性模量，与实验符合得很好；而 Svane 用同样的方法计算了 Sn 的体弹性模量[12]，与文献[26]给出的结果也相差很大(550kbar 对 1.11Mbar)，但却与其它人的计算结果[28-30]一致，也与较新的实验结果相符合. 考虑到现在的体弹性模量 B 的数据比较粗糙，而 LMTO 方法业已被证明是适合于此类材料的，我们认为我们的计算是比较准确的. 我们更关心的是体弹性模量 B 随组分 x 的变化. 可以看出体弹性模量随组分变化而呈现类似"V"形变化，在 $x=x_c=0.3$ 处取极小，$B_{极小}=913kbar$. 体弹性模量的相对变化值并不大，我们希望精确的声学实验能验证这个变化.

四、结　　论

本文根据有序-无序相变模型来处理 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 半导体合金系统. 我们引入了序参量 M，在改进的虚晶格近似下，利用从第一原理出发的 LMTO-ASA 方法，首次自洽计算了系统的电子结构，并由此而计算了系统的部分基态性质. 计算从电子结构方面表明，随着组分 x 的增大，在 $x=x_c=0.3$ 处，系统失去了富 GaAs 有序相特点而具有富 Ge 无序相特点. 计算与 Newman[7] 等人用 LCAO 方法给出的结果是一致的. 计算表明，合金材料中轻空穴和重空穴有效质量在很大程度上依赖于合金材料的有序度 M. 对 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 类型的合金材料，广泛使用的利用线性插值给出合金参数(能隙、有效质量等等)的方法，至少在变化趋势上是不很准确的. 计算表明平衡点阵晶格常数和体弹性模量随组分变化呈现类似"V"形的变化. 计算结果与现有实验进行了比较，总体上符合还是比较好的. 这表明修正的虚晶格近似可以满意地用于 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ 半导体合金系统. 我们的计算未能给出满意的导带能量和禁带宽度，这个问题是交换-关联势的局域密度近似引起的[21,22]，这也是以局域密度泛函理论为基础的各种能带计算方法在半导体能带计算中有待改进的重要方面. 我们的计算也不是完全自洽的. 在有序-无序相变模型中，相变临界组分 $x=x_c$ 是根据实验确定的. 这给探讨全新系统、进行材料设计带来困难，但在处理 $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$、$(GaSb)_{1-x}Ge_{2x}$ 等已有一定研究的半导体合金系统时是相当有效的. 此外，如果我们希望更准确给出空穴有效质量而不仅仅是观察其随组分的变化，自旋-轨道相互作用对能带结构的影响也必须计及.

参　考　文　献

[1] J. E. Greene, *J. Vac. Sci. Technol.*, B, 1, 229(1983).
[2] K. Gohata, J. Saraie, T. Tanaka, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 12 1198(1973).
[3] K. Gohata, J. Saraie, T. Tanaka, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 12, 1641(1973).

[4] R. Hill and D. Richardson, *Thin Solid Films*, 18. 25(1973).
[5] J. L. Shay and J. H. Wernick, Ternary Chalcopyrite Semiconductors: Growth, Electronic Properties and Application, Pergamon, Oxford, 1975.
[6] K. E. Newman, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, 50, 1466(1983).
[7] K. E. Newman and J. D. Dow. *Phys. Rev.*, *B*, 27, 7495(1983).
[8] B. L. Gu and K. E. Newman, *Phys. Rev.*, *B*, 35, 9135(1987).
[9] O. K. Andersen, *Phys. Rev.*, *B*, 12, 3060(1975).
[10] H. L. Skriver, The LMTO Method, Springer, Berlin, 1984.
[11] V. P. Zhukov, V. A. Gubanov, T. Jarlborg, *J. Phys. Chem. Solids*, 46, 3060(1975).
[12] A. Svane and E. Antonick, *Phys. Rev.*, *B*, 35, 4611(1987).
[13] A. K. McMahan, *Phys. Rev.*, *B*, 30, 5835(1984).
[14] J. Keller, *J. Phys.*, *C*, 4, L85(1971).
[15] A. Svane, Mössbauer Isomer Shifts and the Electronic Structure of Solids, Doctor Thesis (1985), Univ. of Aarhus, Denmark.
[16] O. W. Myles, J. D. Dow, *Phys Rev.*, *B*, 19, 4939(1979).
[17] Y. Onodera, Y. Toyozawa, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 24, 341(1968).
[18] S. H. Vosko, L. Wilk and M. Nusaie, *Can. Phys.*, 58, 1200(1980).
[19] 段文晖,顾秉林,朱嘉麟,物理学报,39,437(1990).
[20] J. Donahue, The Structures of the Elements, Wiley, New York, (1974).
[21] J. S. Blakemore, *J. Appl. Phys.*, 53, R123(1982).
[22] L. J. Sham, *Phys. Rev. Lett.*, 51, 1888(1983).
[23] J. P. Perden, *Phys. Rev. Lett.*, 51, 1884(1983).
[24] S. Adachi, *J. Appl. Phys.*, 58, R1(1985).
[25] T. S. Moss, Handbook on semiconductors, North-Holland, Amsterdam, V1, P43(1982).
[26] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 5th edition, John Wiley and Sons, New York, (1976).
[27] M. E. Raikh, V. E. Umanskii, *Fiz. Tekh. Poluprovodn.*, 16, 2011(1982).
[28] C. P. Srivastava, *J. Phys.*, *C*, 16, 1649(1983).
[29] J. Ihm, M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, *B*, 23, 1576(1981).
[30] C. O. Rodriguez, et al., *Phys. Rev.*, *B*, 31, 5327(1985).

Electronic Structure and Ground-State Properties of Semiconducting Alloy $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$

Duan Wenhui, Gu Binglin and Zhu Jialin

(*Department of Physics, Tsinghua University, Beijing*, 100084)

Abstract

Electronic structure and ground-state properties of semiconducting alloy $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ are inverstigated by the self-consistent LMTO-ASA method in the modified virtual crystal approximation. The order parameter M is introduced according to the model of zincblende-diamond order-disorder phase transition in the alloy system. The results are in good agreement with the experiments and non-self-consistent calculations. It is shown that the effective masses of light and heavy holes are predominantly dependent on order parameter M. The V-shape dependence of bulk modula and equilibrium lattice constant on the composition x is predicted.

PACC: 7125, 6150K, 7280E