

弹性应变及结构参数对 InAs/GaAs 应变层超晶格能带结构的影响

毕文刚 李爱珍

(中国科学院上海冶金研究所, 上海, 200050)

(半导体超晶格国家重点实验室, 北京, 100083)

1991年4月9日收到, 同年9月12日修改定稿

本文报道弹性应变及结构参数对 InAs/GaAs 应变层超晶格导带、价带不连续性及其子能带结构的影响。通过分析流体静应力和单轴应力对体材料带边能带位置的影响, 确定了 InAs/GaAs 超晶格导带及价带能量不连续性, 并用包络函数法计算了该超晶格的子能带结构。结果表明: 这些量不仅依赖于组成超晶格的两种材料的体性质, 而且还依赖于超晶格的晶格常数, 势阱、势垒宽度以及材料的应变; 通过调节 InAs 层与 GaAs 层的层厚之比, 可以使 InAs/GaAs 超晶格价带轻空穴处于第 II 类超晶格势当中, 从而实现轻空穴与电子、重空穴的空间分离。

PACC: 7125T, 7320, 7360F

一、引言

分子束外延 (MBE) 和金属有机物化学气相沉积 (MOCVD) 等外延生长技术的不断发展和完善为“能带裁剪工程”的发展提供了强有力的技术支撑, 它使得对包括半导体异质结构和半导体超晶格量子阱结构在内的半导体微结构材料的研究从自然界为数不多的晶格匹配体系扩展至大量存在的晶格失配体系。这不仅开拓了应变层半导体微结构材料新领域, 大大增加了器件在选材方面的自由度, 而且由于界面应力的存在导致了一系列新的物理现象的产生, 为探索新型器件开辟了广阔的应用前景。

短周期超晶格、超晶格半导体是很有前途的高速器件材料, 因为这类材料的散射可以通过高电子迁移率来消除, 电子和声子的互作用可通过微结构调整来降低。在众多的应变层超晶格材料体系中, InAs/GaAs 体系是最为引人注目的。因为它不仅具有低的电子有效质量, 而且具有很大的应变, 从而使其具有一系列新的物理特性。目前实验上已对以 InAs/GaAs 为基础的二元系的生长和性质进行了初步的研究^[1-4]。但就我们所知, 对该材料体系应力效应的研究尚未见报道。本文的目的就在于通过理论分析计算来详细探讨应变及结构参数对 InAs/GaAs 超晶格一系列基本性质的影响, 以期对下一步的材料生长提供一些有益信息。

二、计算方法

对于由两种晶格失配材料 A、B 所组成的超晶格来说，每一层在其厚度小于某一临界值的情况下，可以通过弹性地调节其平行于界面方向上的晶格常数 a'' 来达到晶格匹配而不产生失配位错。根据超晶格中所贮存的总的弹性能量最小原理，可以得到超晶格在平行于界面方向的晶格常数 a'' 为^④

$$a'' = (a_1 G_1 + a_2 G_2 h) / (G_1 + G_2 h), \quad (1)$$

$$h = h_2/h_1, \quad (2)$$

$$G_i = (c_{i1}^i + 2c_{i2}^i) \left(1 - \frac{D^i}{2}\right), \quad (3)$$

$$D^i = 2(c_{i2}^i/c_{i1}^i) \quad i = 1, 2, \quad (4)$$

其中 h_i , c_{ij}^i ($j = 1, 2$), G_i 和 a_i 分别为 A、B 层的厚度、弹性常数、切变模量和未形变时的晶格常数。

同时，由于 Poisson 效应，超晶格各层的晶格常数在垂直于界面方向上也将发生形变。对于沿 (100) 方向生长的超晶格来说，其应变张量将退化为对角元 ϵ_{xx}^i , ϵ_{yy}^i 和 ϵ_{zz}^i ，并且有：

$$\epsilon_{xx}^i = \epsilon_{yy}^i = \epsilon_{zz}^i = (a''/a_i - 1), \quad (5)$$

$$\epsilon_{xz}^i \equiv \epsilon_{yz}^i = (a_z^i/a_i - 1) = \left(-\frac{2c_{i2}^i}{c_{i1}^i}\right) \epsilon_{zz}^i \quad i = 1, 2. \quad (6)$$

由于弹性应变的产生必将使超晶格各层材料受到双轴应力的作用，从而使其带边结构发生一系列的变化。图 1 定性地给出了双轴应力对 InAs/GaAs 应变层超晶格 (SLS's) 中 InAs 层及 GaAs 层布里渊区中心 Γ 点能带结构的影响。

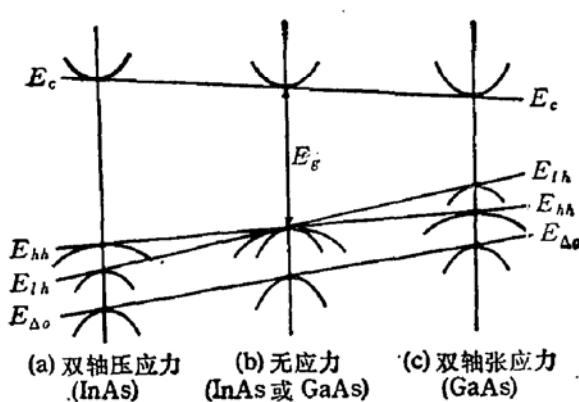


图 1 双轴应力对 InAs/GaAs SLS's 中 InAs 层及 GaAs 层带边能带结构的影响

从图 1 中可以看出，由于 $a_{GaAs} < a_{InAs}$ ，GaAs 层所受应力为双轴张应力，亦即流体静张力和单轴压应力之和。前者的存在使 GaAs 层导带的能量位置降低；后者的存在使 GaAs 轻空穴带上移、重空穴带下移，价带简并度消除。总的效果是使 GaAs 层的有效带隙变小。对于 InAs 层来说，由于其所受应力为双轴压应力，其能带结构的变化与 GaAs 层正相反：导带能量位置上移；价带轻空穴带下移、重空穴带上移，有效带隙增大。由此可见，应力(变)的存在不仅可

以直接改变 SLS's 各层材料的禁带宽度，而且还可以改变其带边能量的不连续性，从而改变其子能带的结构。从(1)–(6)式可以看出 SLS's 中应变的大小是与层厚之比 h 之值密切相关的。 h 改变，SLS's 各层材料中应变随之改变，从而引起 SLS's-系列基本特

性的改变。这说明 h 之值在器件参数设计时是占有非常重要的地位的。当然, 在实际进行 SLS's 的外延生长时, 衬底材料对 SLS's 中应变的影响也是不可忽视的。比如说在 GaAs 衬底上生长 InAs/GaAs SLS's 时, 由于 GaAs 衬底一般很厚, a_{InAs} 将趋于 a_{GaAs} 。此时 SLS's 的 $a'' = a_{GaAs}$, 各层材料中的应变与 h 之值无关, 完全由衬底材料的晶格常数决定。但是, 如果我们在 SLS's 生长之前先在 GaAs 衬底上外延一层组分缓变的 $In_xGa_{1-x}As$ 缓冲层, 就可以消除 GaAs 衬底的影响而使材料的应变主要由 h 之值来控制。也就是说, 先根据所要生长的 InAs/GaAs SLS's 结构及(1)式算出 a'' , 然后根据

$$a'' = (1 - x)a_{GaAs} + x a_{InAs}$$

反推出所需生长的 $In_xGa_{1-x}As$ 缓冲层的组分 x_0 , 这样通过组分缓变的 $In_xGa_{1-x}As$ (x 由 0 变至 x_0) 缓冲层的生长便可以消除 GaAs 衬底的影响, 从而使 a'' 由 h 来控制。这对于象 InAs/GaAs SLS's 这样由两个二元系材料所组成的应变层超晶格来说相当于增加了一个调节自由度, 使得在器件参数设计时既可通过 SLS's 周期 d 的改变, 亦可通过 h 的改变来调整 SLS's 带边不连续性、子能带结构等一系列特性以满足实际应用的需要。

为定量地考察 h 之值对 SLS's 带边能量不连续性的影响, 选 Γ 点处价带“重心”(即轻、重空穴带、自旋-轨道分裂带的权重平均值)作为能量的参考点, 记为 E_V 。则流体静应力所引起的导带边及价带“重心”的能量位移量可以表示为:

$$dE_c = a_c d(\ln V), \quad (7)$$

$$dE_V = a_v d(\ln V), \quad (8)$$

其中 a_c , a_v 分别是导带、价带的流体静压畸变势, V 为晶体体积。

对于(001)衬底,

$$d(\ln V) \approx \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz} = 2 \left(\frac{c_{11} - c_{12}}{c_{11}} \right) \epsilon_{\parallel}, \quad (9)$$

单轴应力的作用是使 Γ 点处价带的简并度消除, 即轻空穴带 $|3/2, 1/2\rangle (E_{v1})$ 、重空穴带 $|3/2, 3/2\rangle (E_{v2})$ 、自旋-轨道分裂带 $|1/2, 1/2\rangle (E_{v3})$ 的能量位置相对 E_V 发生移动^[6,7]:

$$dE_{v1} = -\frac{\Delta_0}{6} + \frac{\delta_{001}}{4} + \frac{1}{2} \left[\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta_{001} + \frac{9}{4} (\delta_{001})^2 \right]^{1/2}, \quad (10)$$

$$dE_{v2} = \frac{\Delta_0}{3} - \frac{\delta_{001}}{2}, \quad (11)$$

$$dE_{v3} = -\frac{\Delta_0}{6} + \frac{\delta_{001}}{4} - \frac{1}{2} \left[\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta_{001} + \frac{9}{4} (\delta_{001})^2 \right]^{1/2}, \quad (12)$$

$$\delta_{001} = 2b(\epsilon_{zz} - \epsilon_{xx}) = -2b \left(\frac{c_{11} + 2c_{12}}{c_{11}} \right) \epsilon_{\parallel}, \quad (13)$$

其中 Δ_0 为无应变时 A 层或 B 层材料的自旋-轨道分裂值, b 为剪切形变势。

将流体静应力和单轴应力二者作用合并后, 可得 SLS's 中 A 或 B 层材料的带边能量位置为:

$$E_{vi} = E_V + a_v d(\ln V) + dE_{vi}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (14)$$

$$E_c = E_V + \Delta_0/3 + E_s + a_c d(\ln V), \quad (15)$$

其中 E_s 为无应变时 A 材料或 B 材料的带隙。

这样便可求得 A、B 应变层的带隙为:

$$E_{g_i} = E_c - E_{v_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (16)$$

SLS's 导带及价带能量不连续性为:

$$\Delta E_c = E_c^B - E_c^A, \quad (17)$$

$$\Delta E_{v_i} = E_{v_i}^A - E_{v_i}^B, \quad i = 1, 2, 3 \quad (18)$$

确定了 ΔE_c 和 ΔE_{v_i} 之后, 便可以根据包络函数法^[8], 亦即下式进行 SLS's 子能带结构计算。

$$\cos(qd) = \cos(k_A l_A) \cos(k_B l_B) - \frac{1}{2} (\eta + \eta^{-1}) \sin(k_A l_A) \sin(k_B l_B), \quad (19)$$

式中

$$\eta = \frac{K_A \left[\frac{2}{E + E_A} + \frac{1}{E + E_A + \Delta_A} \right]}{K_B \left[\frac{2}{E + E_A - V_p} + \frac{1}{E + E_B + \Delta_B - V_s} \right]}, \quad (20)$$

$$E(E + E_A)(E + E_A + \Delta_A) = \hbar^2 k_A^2 P^2 (E + E_A + 2\Delta_A/3), \quad (21)$$

$$(E - V_s)(E - V_s + E_B)(E - V_s + E_B + \Delta_B) \\ = \hbar^2 k_B^2 P^2 (E - V_s + E_B + 2\Delta_B/3). \quad (22)$$

$P = -\frac{i}{m} \langle S | P_z | Z \rangle$ 是 Kane 矩阵元, q 为超晶格波矢, $d = l_A + l_B$ 为超晶格周期,

V_s 、 V_p 分别为导带底和价带顶的能带台阶, $K_A(K_B)$ 为 A(B) 层 Z 方向的波矢, $E_A(E_B)$ 为 A(B) 层的带隙, $\Delta_A(\Delta_B)$ 为 A(B) 层的自旋-轨道分裂值。能量原点取在 A 层 Γ_6 导带底。

三、结果和讨论

图 2(a)、(b) 分别给出了 InAs/GaAs SLS's 中 InAs 层(实线)和 GaAs 层(虚线)带边能量位置随 InAs 与 GaAs 层厚之比 h 、超晶格界面内晶格常数 a'' 的变化关系。计算中所用参数取自参考文献[9—12]。

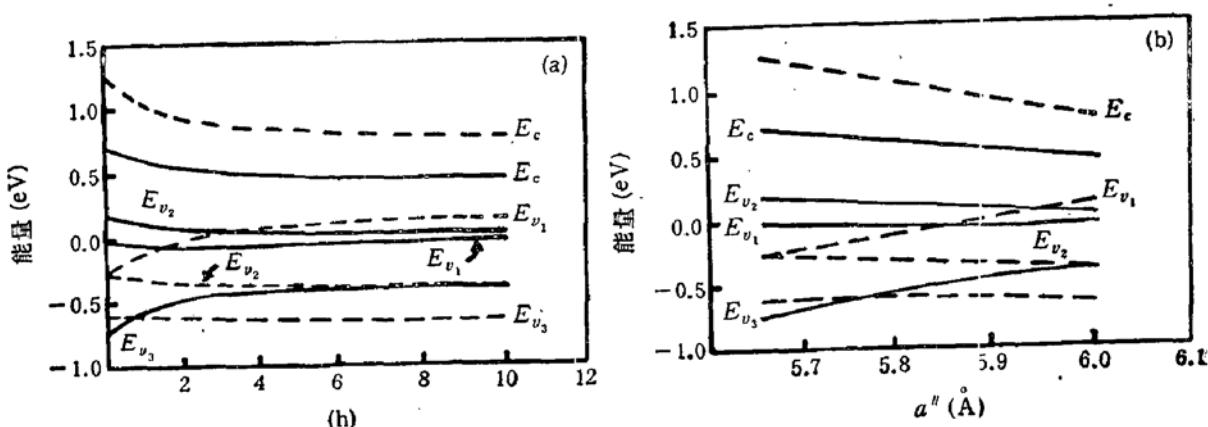


图 2 InAs/GaAs SLS's 中 InAs(实线)、GaAs(虚线)带边能量位置随 InAs 与 GaAs 层厚之比 h (图(a))、超晶格界面内晶格常数 a'' (图(b)) 的变化关系。能量零点取在无应变 InAs 价带顶。

从图中可以看出 InAs 层和 GaAs 层的带边位置强烈地依赖于 h 和 a'' , 且近似与 a'' 呈线性变系变化。对于 GaAs 层来说, 随着 h 或 a'' 的增大, 应变增大, 因而对其带边能量位置的影响也越明显。而对 InAs 层来说, h 增大, 应变减小, 其带边结构趋于无应变 InAs 材料的带边位置。当 h 减小时, InAs 层中应变增大, 由于双轴压应力的作用, 其价带轻空穴带上移, 在 $h \approx 1.5$ 时与 GaAs 层轻空穴带相交, 使得 InAs 层与 GaAs 层的带边相对位置发生本质性的变化: $h < 1.5$ 时 InAs 有效带隙完全位于 GaAs 有效带隙之内, InAs/GaAs SLS's 属于第 I 类超晶格。 $h > 1.5$ 时, InAs 的重空穴带仍位于 GaAs 重空穴带之上, 但其轻空穴带却位于 GaAs 轻空穴带之下。此时 InAs/GaAs SLS's 中的电子和重空穴仍被限制在同一 InAs 层当中, 即电子、重空穴仍然处在第 I 类超晶格势场当中; 然而其价带轻空穴则被限制在 GaAs 层当中, 即轻空穴相当于处在第 II 类超晶格势场当中, 从而实现了轻空穴在空间上不仅与电子分离, 而且与价带重空穴的分离。

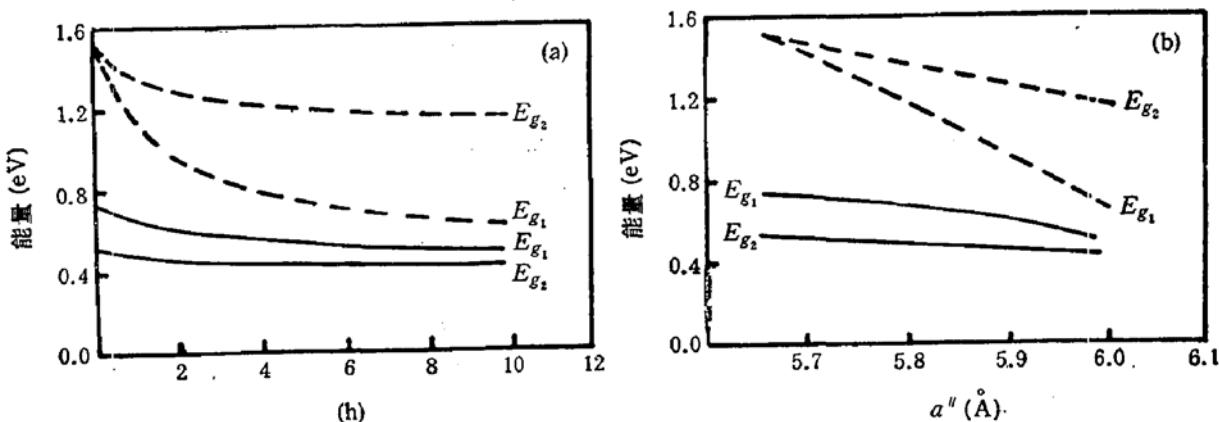


图 3 InAs (实线)和 GaAs (虚线)导带底到价带顶轻、重空穴间带隙 E_{g1} , E_{g2} 随 h (图 (a))、 a'' (图 (b)) 的变化关系

图 3(a)、(b) 分别给出了 InAs (实线)、GaAs (虚线)应变层导带底到轻、重空穴价带顶的带隙 E_{g1} 、 E_{g2} 随 h 、 a'' 的变化关系。可以看出 h 、 a'' 对材料带隙的影响也是十分显著的。增加 h 或 a'' , GaAs 和 InAs 的带隙明显变小, 其变化量与材料带边位置的变化量一样(图 2(b)), 也与 a'' 成正比关系变化。由(14)式我们可以得到应变层材料价带边能量的变化量为:

$$\begin{aligned}\partial E_{\nu_i} = a_c \partial(d(\ln V)) + \partial(dE_{\nu_i}) \\ \propto \partial E_{\nu_i} \propto \partial a''.\end{aligned}\quad (23)$$

同样, 对(15)、(16)式两边取微分可分别得到 $\partial E_{\nu} \propto \partial a''$, $\partial E_{\nu_i} \propto \partial a''$ 。由此可见 E_{ν} 、 E_{ν_i} 、 E_{ν_j} 分别与 a'' 呈线性关系变化可说是双轴应力作用的必然结果。

图 4(a)、(b) 分别为 InAs/GaAs SLS's 导带及价带能量不连续性随 h 、 a'' 的变化关系。正如前文所述, 由于应变的存在, 价带简并度消除, 使得轻、重空穴分别处于不同的势阱 ΔE_{ν_1} 、 ΔE_{ν_2} 之中。可以看出, 随着 h (或 a'') 的增大, ΔE_{ν_0} 、 ΔE_{ν_1} 和 ΔE_{ν_2} 均有减小的趋势, 但以 ΔE_{ν_2} 的变化为最小。由于异质界面处的能量不连续性决定了量子阱和超晶格的所有性质, 是器件设计时的重要参数, 因此可以通过改变 h 之值, 使超晶格中的电子, 空穴处于不同的势阱当中, 从而改变其子带结构、带间跃迁等一系列物理特性。

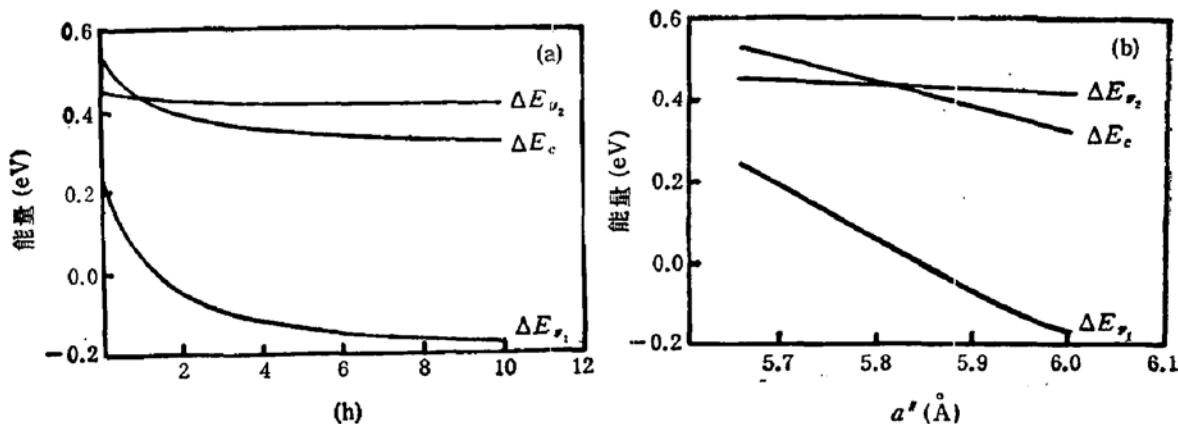


图 4 InAs/GaAs SLS's 导带及价带能量不连续性随
h(图(a))、 d'' (图(b)) 的变化关系

此, 我们以 $h = 0.5, 5$ 时两种 InAs/GaAs 应变超晶格为例采用包络函数法计算了其电子、轻空穴子带随超晶格周期 d 的变化关系。计算中忽略了应变对有效质量及 Kane 矩阵元的影响。

$h = 0.5, 5$ 时 InAs/GaAs SLS's 的带边位置的空间变化分别示于图 5(a)、(b) 之中。 $h = 0.5$ 时, InAs/GaAs SLS's 属于第 I 类超晶格, 电子及轻、重空穴均被限制在 InAs 层当中, 带间跃迁为直接跃迁。 $h = 5$ 时, 由于应变所引起的带边位置的变化, 使得 InAs 轻空穴带位于 GaAs 轻空穴带之下。此时 InAs/GaAs SLS's 轻空穴带带边结构具有第 II 类超晶格特点: 电子被限制在 InAs 层, 而轻空穴则被限制在 GaAs 层, $e-lh$ 带间跃迁在空间上为间接的。同时, 由于 InAs 重空穴带仍然位于 GaAs 重空穴带之上, 重空穴仍被限制在 InAs 层中, $e-hh$ 带间跃迁在实空间上仍为直接跃迁。这样轻空穴便在实空间上与电子、重空穴分离开来, 我们称此类超晶格为准第 II 类超晶格。

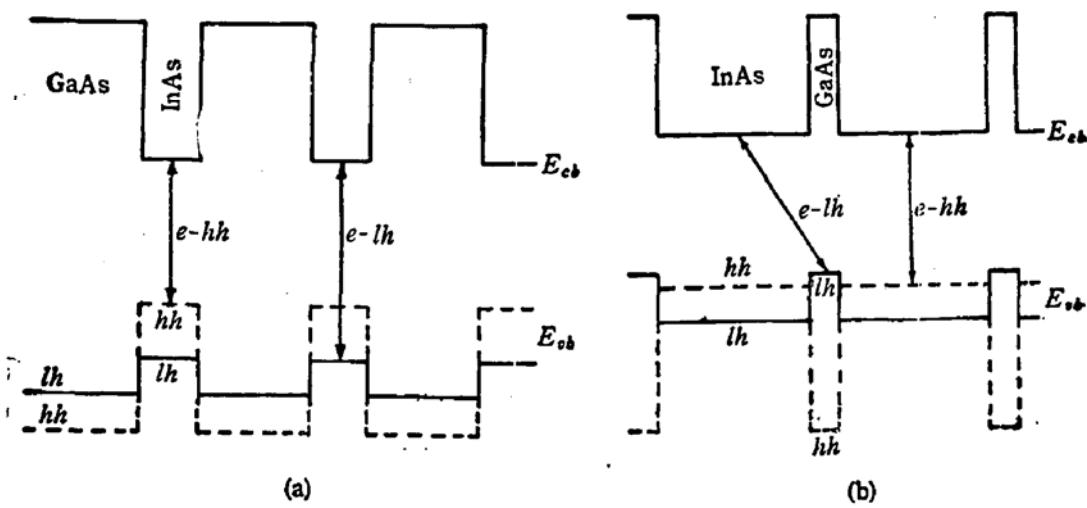
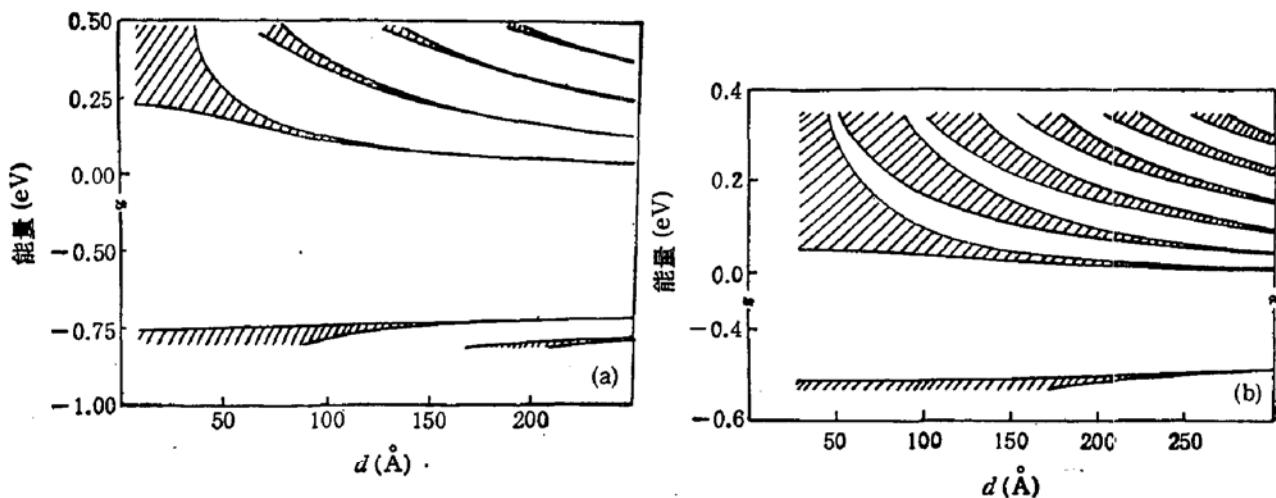


图 5 (a) $h = 0.5$ 时 InAs/GaAs SLS's 带边空间结构
(b) $h = 5$ 时 InAs/GaAs SLS's 带边空间结构

图 6(a)、(b) 分别给出了上述两类超晶格电子及轻空穴子带随超晶格周期 d 的变化关系。从中可以看出, d 较小时, 由于超晶格的势阱宽度很小, 量子尺寸效应比较明显, d 对 SLS's $e-lh$ 带隙的影响很大, 即随着 d 的增大带隙明显减小; 同时, 由于 SLS's 势垒

图 6 InAs/GaAs SLS's 电子、轻空穴子带随超晶格周期 d 的变化关系。(a) 为 $h = 0.5$ 时结果; (b) 为 $h = 5$ 时结果

宽度也很小,因而阱间耦合很强,形成明显的子带。但当 d 很大时,由于 SLS's 势阱宽度很大,量子尺寸效应减弱, d 对 $e-lh$ 跃迁的影响明显减小;并且,由于此时 SLS's 势垒宽度也很大,各阱间耦合减弱,子带宽度也明显变小。另外,从图 6 中可以看出,对于给定的 d 值,准第 II 类超晶格的带间跃迁能量(图 6(b))同第 I 类超晶格(图 6(a))相比明显减小,其相应的激子峰向长波方向移动,这说明 h 的不同对 SLS's 基本特性的影响也是很大的。因此,我们通过在 h 一定的情况下改变 d 值,或者通过在 d 值一定的情况下改变 h 之值可以改变 SLS's 相应的激射波长等性质,从而设计出具有不同结构不同特性的新器件。但这里需要指出的是对于 SLS's 来讲,在实际器件参数设计时必须考虑临界层厚度的限制,也就是说 d, h 应满足下述条件:

$$d/(1+h) < h_{c1}, \quad (24)$$

$$dh/(1+h) < h_{s1}, \quad (25)$$

其中 h_{c1}, h_{s1} 分别 GaAs、InAs 层的临界厚度。

由于 InAs/GaAs 属于高失配材料体系,临界层厚度 h_{c1}, h_{s1} 很薄,因而 d 值一般要求很小。从图 6 中可以看出, d 很小时,器件结构的微小变化便可引起带间跃迁能量等性质较大的变化,因此这一要求对于设计具有不同发射波长的器件来说是有利的。

四、结 论

- (1) 由于弹性应变的产生,使得 InAs/GaAs SLS's 中 InAs 层和 GaAs 层分别处于双轴压应力和双轴张应力作用之下,致使 InAs 层带隙增宽, GaAs 层带隙变窄;
- (2) a'' 、 h 等结构参数的改变可以使得 InAs/GaAs SLS's 导带、价带能量不连续性及子带结构具有一定的可调性;
- (3) 调节 h 或 a'' 的大小,可实现价带轻空穴与电子、重空穴的空间分离。

参 考 文 献

- [1] M. Gerard and J. Y. Marzin, *Appl. Phys. Lett.*, **53**, 568(1988).
- [2] M. A. Tischeler, N. G. Anderson and S. M. Bedair, *Appl. Phys. Lett.*, **49**, 1199(1986).
- [3] K. Taira, H. Kawai, I. Hase, K. Kaneko and N. Watanabe, *Appl. Phys. Lett.*, **53**, 495(1988).
- [4] M. Sato and Y. Horikoshi, *J. Appl. Phys.*, **66**, 851(1989).
- [5] G. C. Osbourn, *J. Appl. Phys.*, **53**, 1586(1982).
- [6] G. E. Pikus and G. L. Bir, *Sov. Phys. Solid State*, **1**, 1502(1960).
- [7] F. H. Pollak and M. Cardona, *Phys. Rev.*, **172**, 816(1968).
- [8] G. Bastard, *Phys. Rev.*, **B25**, 7584(1982).
- [9] Landolt-Börnstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, edited by O. Madelung, Vol. 17a(Springer, New York, 1982).
- [10] S. Adachi, *J. Appl. Phys.*, **53**, 8775(1982).
- [11] C. G. Van De Walle and R. M. Martin, *Phys. Rev.*, **B34**, 5621(1986).
- [12] H. Kroemer, *Surf. Sci.*, **132**, 543(1983).

Influence of Elastic Strain and Structural Parameters on Band Structures of InAs/GaAs Strained-Layer Superlattice

Bi Wengang and Li Aizhen

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica, Shanghai, 200050)

(National Laboratory for Superlattices and Microstructures, Beijing 100083)

Abstract

Results concerning the effects of elastic strain and structural parameters on the band structures for InAs/GaAs strained-layer superlattices(SLS's) are presented. By analyzing the influence of the hydrostatic strain and uniaxial strain on the band edges of the host materials, we have determined the band lineups of InAs/GaAs SLS's, and calculated their corresponding sub-band energies using the envelope-function approximation. It is shown that these quantities are dependent not only on the bulk properties of the host materials, but also on the superlattice lattice constant, layer thickness and strain of individual layer, and a quasi-type-II InAs/GaAs superlattice can be obtained by adjusting the ratio of the thickness of InAs to that of GaAs.

PACC: 7125T, 7320, 7360E