

研究简报

GaInPAs/InP 晶格匹配超晶格 材料电子态研究

沈 静 志* 徐 至 中

(复旦大学物理系·上海)

1989年2月23日收到

本文研究了 GaInPAs/InP 晶格匹配超晶格材料〈110〉方向的电子结构, 对薄层超晶格和与之具有相同化学组份的混晶的能隙关系作了比较。研究了带边状态密度在超晶格每一层的分布情况, 计算了 GaInPAs/InP 晶格匹配超晶格的能隙随厚度、组份的变化趋势。研究结果表明: 薄层超晶格与具有相同化学组份的混晶的电子结构基本相同, 能隙边状态密度偏重于分布在超晶格的 GaInPAs 原子层内。

主题词 超晶格, 电子态, 能隙, 能带色散关系

GaInPAs/InP 晶格匹配超晶格材料在光纤通讯、激光器、微波器件、集成电路等领域都有着广泛的应用^[1], 这种材料的电子态性质, 诸如: 能隙、能带色散关系、有效质量等等, 是人们最为关心的特性之一。对于 GaInPAs 混晶材料, 已经有了不少报道^[2], 但是就作者所知关于 GaInPAs/InP 晶格匹配超晶格的电子态理论研究还未见报道, 本文研究的目的就在于通过理论计算来讨论关于这些材料的一些基本性质, 并通过与混晶材料的特性进行比较, 使得我们对这种晶格匹配超晶格的电子态性质有所了解。

二

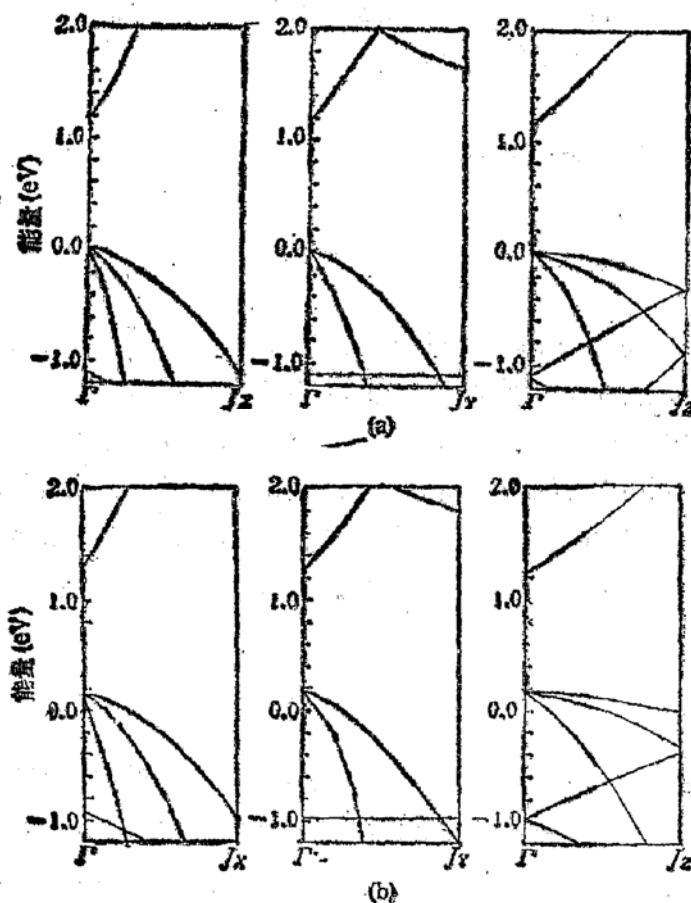
为了研究 GaInPAs/InP 的能隙、能带色散关系, 本文采用半经验的紧束缚方法, 所用的紧束缚参数来源于 Vogl 等人给出的数据^[3]。对于组成超晶格的 GaInPAs 混晶材料, 本文作了虚晶近似, 并且对哈密顿量作了标度修正^[3]。本文采用 Harrison 参数^[4]来处理价带顶能量不连续值, 计算公式也利用[4]文给出的 Γ 点直接跃迁半导体材料价带顶的能量公式, 得到了 InP 与 GaInPAs 价带顶能量差为: GaInPAs 混晶比 InP 材料高 0.28 eV。在与 Lang^[5]等人给出的实验结果比较后, 发现这个数据还是非常合理的。边界处

* 现在地址: 上海市机械学院系统工程系。

的相互作用哈密顿量取为组成超晶格的两种材料的相互作用哈密顿量的平均值。

三

本文中，计算了 $2+2$ 层 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ 超晶格材料的色散关系和与之有相同化学组份的 $\text{Ga}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{P}_{0.5}\text{As}_{0.5}$ 混晶的色散关系作了比较。计算模型中的坐标选取是这样的：取超晶格周期排列的 $\langle 110 \rangle$ 方向为 \hat{z} 方向， $\langle -110 \rangle$ 方向为 \hat{x} 方向， $\langle 001 \rangle$ 方向为 \hat{y} 方向。定义三个倒格基矢与布里渊区边界的交点为 J_x, J_y, J_z 。色散关系如图1。(在计算中，把混晶的原胞取得与 $2+2$ 层 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ 的原胞一样大小)。从图中可知： $2+2$ 层 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ 能隙为1.13电子伏特， $\text{Ga}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{P}_{0.5}\text{As}_{0.5}$ 混晶的能隙为1.15电子伏特，两者相差不大。在 Γ 点上， $\text{Ga}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{P}_{0.5}\text{As}_{0.5}$ 混晶有三重简并态，而 $2+2$ 层 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ 超晶格由于遵循Cs群对称性，在 Γ 点无简并态，但它与混晶对应的那些态只有 10^{-3}eV 数量级的分裂。从图上可以看出，它们对应的在 $\Gamma-J_x, \Gamma-J_y, \Gamma-J_z$ 三个方向上的色散关系非常相似。



(a) $\text{Ga}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{P}_{0.5}\text{As}_{0.5}$ 混晶的色散关系 (b) $2+2$ 层
 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ 超晶格材料的色散关系

我们知道，混晶的电子结构取决于阴、阳离子的平均间距和原子相互作用势的无序排列。由于 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ 混晶和 InP 的晶格是完全匹配的，因此薄层超晶格和混晶电子结

构的差别反映在原子的相互作用非周期性排列的差别上。本文计算出的二者的色散关系的相似性表明, 原子相互作用势的无序程度的大小对电子结构的影响是微小的。

能隙边状态密度是决定半导体材料导电性的一个重要因素。本文中, 我们做了 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ 2 + 2 层超晶格价带顶, 导带底的分层状态密度。在价带顶 0.1458 eV 处, 0.01 eV 的范围内, 导带底 1.2753 eV 处, 0.02 eV 的范围内求带边状态密度。因为能够形成载流子的电子状态主要集中在价带顶与导带底, 所以我们只要计算在 Γ 点附近的邻域内靠近带边的一小段能量范围内的状态密度。其结果如图 2 所示, 其中, 第 1、第 2 层是 InP 材料, 第 3、第 4 层是 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ 混晶材料。纵坐标表示每一层中状态密度(百分比)。由图可见, 价带顶空穴有 47.6% 均匀地分布在 InP 材料中, 有 52.4% 均匀地分布在 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ 混晶材料中。导带底电子有 48.0% 均匀地分布在 InP 材料中, 有 52.0% 均匀地分布在 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ 混晶材料中。价带顶、导带底的空穴、电子态在 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ 混晶中的分布大于在 InP 材料中的分布。从前面的讨论中知道, $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$

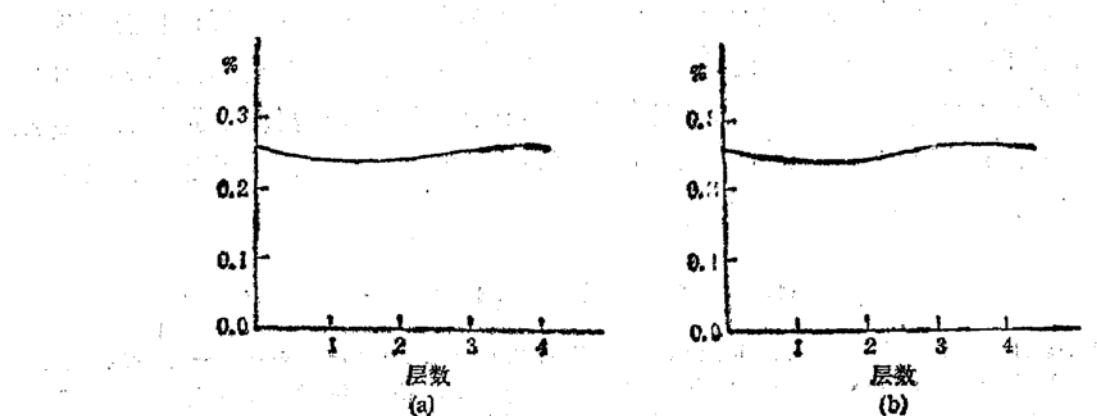


图 2 (a) 2 + 2 层 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ 超晶格材料价带顶状态密度
(b) 2 + 2 层 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ 超晶格材料导带底状态密度

混晶材料的价带顶比 InP 材料的价带顶高 0.28 eV, 而其导带底比 InP 的导带底低 0.24 eV, 所以引起电子、空穴态在超晶格中的分布 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ 混晶中的密度大于在 InP 中的密度。也就是说载流子的分布将主要偏重于分布在 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ 混晶材料中。本文的计算结果表明, 即使是很薄的超晶格 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$, 载流子已有定域在混晶层内的趋向, 这可以看成是形成量子阱的先兆。

本文中, 还计算了 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}/\text{InP}$ 晶格匹配超晶格材料的禁带宽度随超晶格厚度、组份的变化。 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}/\text{InP}$ 晶格匹配超晶格的能隙范围是 0.89—1.41 eV。计算结果如图 3。由于晶格匹配的超晶格, 所以组份 x 、 y 满足一定的约束条件, 其中只有一个独立变量, 满足下列关系式:

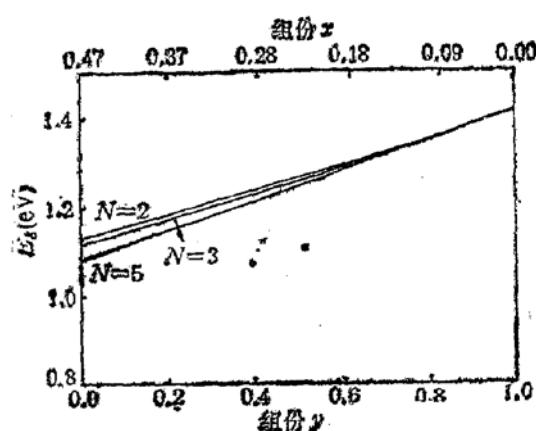


图 3 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}/\text{InP}$ 超晶格的能隙组分的变化曲线

$$xd(\text{GaAs}) + yd(\text{InP}) + (1 - x - y)d(\text{InAs}) = d(\text{InP})$$

从图3中可以看到：禁带宽度随着组份y的增加而增加。当y增加到1.0时， $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ 混晶成为InP材料；这时超晶格的禁带宽度为InP的禁带宽度1.41 eV。超晶格的禁带宽度随着层数的增加而减小。这是因为 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ 混晶的价带顶能量高于InP材料价带顶能量，而其导带底的能量低于InP导带底的能量。随着层数的增加，超晶格价带顶与导带底能量就越接近于 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ 混晶的价带顶、导带底能量。所以超晶格的禁带宽度随着厚度的增加而减小。由此可见，通过控制混晶的组份和厚度，能够得到可调的禁带宽度。显然，随着超晶格厚度的增加，能隙将完全趋于混晶的能隙，量子阱的效应更加明显。

四

综上所述，本文计算了GaInPAs/InP晶格匹配超晶格的色散关系，带边状态密度的分布以及能隙随组份和厚度的变化趋势。结果表明了，尽管薄层超晶格与具有相同化学组份的混晶有着相似的电子结构，但电子态分布却不同，能隙边状态密度偏重于分布在超晶格的混晶层内。由此看出，当GaInPAs/InP晶格匹配超晶格很薄时，虽然还没有完全形成量子阱，但已经出现形成量子阱的先兆。

参 考 文 献

- [1] T. P. Pearsall, *GaInAsP Alloy Semiconductor*, (Vail-Ballon Press Inc., New York, 1982) p. 7.
- [2] P. Vogl, H. P. Hjalmarson and J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solids*, **44**, 365 (1983).
- [3] A. A. Mbaye, C. Verié and F. Aymerich, *Phys. Rev.*, **B29**, 37 (1984).
- [4] W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, (Freeman, New York, 1980) p. 78.
- [5] D. V. Lang, M. B. Panish, F. Capasso, J. Allam, R. A. Hamm, and A. M. Sergent *Bulletin of the American Physical Society*, **32**, 680 (1987).

Studies of Electronic States in GaInPAs/InP Lattice-matched Superlattice

Shen Jingzhi and Xu Zhizhong

(Department of Physics, Fudan University)

Abstract

The electronic structure of GaInPAs/InP (110) lattice-matched superlattice is studied. The band dispersion relation of thin-layer superlattice is compared with that of the alloy with the same chemical composition. The densities of states at band edges and the energy gap versus composition and thickness are analysed. The results show that though the similarity appears in band dispersion relations between thin-layer superlattice and the corresponding alloy with the same composition, the density of states at band edges distributes particularly in the alloy layers of the superlattice, which reveals a precursor state of quantum well formation.

Key words superlattice, electronic states, energy gap, dispersion relation of energy band