

超晶格 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 的光学性质*

李开航 黄美纯 张志鹏 朱梓忠

(厦门大学物理系 厦门 361005)

摘要 采用 Linearized-Muffin-Tin-Orbital(LMTO) 能带方法对应变超晶格 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 进行自洽计算. 在得到较准确能带结构和本征波函数的基础上, 计算该超晶格的光学介电函数虚部 $\epsilon''(\omega)$ 、折射率和吸收系数. 结果表明, 该超晶格表现出的光学性质和 GaAs 体材料不相同, 在 1.5~2.5eV 能量范围的吸收系数增大, 且该超晶格在较宽的能量范围内有较好的光谱响应.

PACC: 7865, 7360, 7125T

1 引言

近年来人们对嵌入 InAs 单分子层的超晶格 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1$ 的研究兴趣日趋浓厚, 并且随着各种外延生长技术的不断发展, 生长具有突变界面的高质量超晶格 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 成为可能^[1-3]. 嵌入的 InAs 单分子层能够有效地限制量子阱中电子和空穴的运动. 从实验上能够观察到 2K 温度下超晶格产生很强且尖锐的光致发光(PL)谱峰, PL 谱峰能量位置比 GaAs 体材料低 40meV, 并且谱峰的强度比 GaAs 体材料的谱峰强度高^[1-3]. 超晶格 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 属于 I 型异质结系统, 有利于其在高速和光电器件中的开发应用. 因此从理论和实验上探索该超晶格的各种物理特性具有实际意义, 特别是了解和掌握半导体材料的折射率和吸收系数对于设计和分析异质结量子阱激光器及光波导器件来说是十分重要的. 因此, 本文从第一原理出发, 用 LMTO-ASA 能带方法^[4] 计算超晶格 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 的能带结构, 在得到能量本征值和本征波函数的基础上计算该超晶格的光学介电函数 $\epsilon(\omega)$ 、折射率 n 和吸收系数, 为该超晶格的开发应用提供理论参数.

2 计算方法

在计算超晶格 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 能带结构之前, 我们先要确定其原胞结构. 在 GaAs 衬底上外延生长 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 短周期超晶格时, 由于 InAs 和 GaAs 的晶格

* 国家高技术(863)新材料领域(863-715-10)课题资助

李开航 男, 1967 年出生, 博士, 现任讲师, 目前主要从事半导体超晶格材料的光学性质研究工作

黄美纯 男, 1937 年出生, 教授, 博士生导师, 目前主要从事低维半导体材料和半导体光电子器件的教学与研究

1998-05-03 收到, 1998-11-24 定稿

常数分别为 0.6058nm 和 0.5653nm, 失配率达 7.2%, 超晶格中的 InAs 分子层将发生弹性形变, 应变后 InAs 的晶格常数仍然可以用宏观弹性应变原理确定出, 即使在生长单分子层的极限下也照样成立^[5,6]. 根据弹性应变原理, InAs 层在平行界面方向上的晶格常数与 GaAs 的晶格常数相同, 而在垂直界面上的晶格常数由弹性模量给出:

$$a(\text{InAs}) = a(\text{InAs}) - 2(a(\text{InAs}) - a(\text{GaAs})) \frac{C_{12}}{C_{11}} \quad (1)$$

其中 C_{12}, C_{11} 为 InAs 体材料弹性模量张量元, 这里采用 C_{12}, C_{11} 实验值^[7] $C_{12} = 4.53 \times 10^6 \text{N/cm}^2, C_{11} = 8.33 \times 10^6 \text{N/cm}^2$, 相应的 $a(\text{InAs}) = 0.6498 \text{nm}$. 图 1 给出 $(\text{GaAs})_1/(\text{InAs})_1(001)$ 的原胞结构 上述原胞具有空间四角对称, 每个原子最近邻只有 4 个原子, 属于开结构 本文采用 LM TO-A SA 能带方法对超晶格 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 进行自治计算

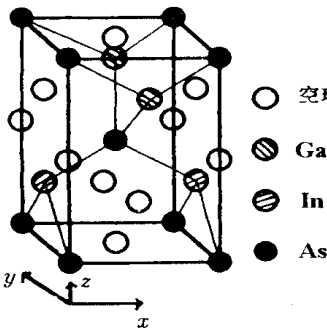


图 1 $(\text{GaAs})_1/(\text{InAs})_1(001)$ 的原胞结构

为了减小原子球近似带来的误差, 需要在间隙区添加空原子球, 空原子球的位置也在原胞中示意出 在计算中, 首先要根据原胞结构确定各原子球和空球的半径, 算好结构常数, 并通过原子程序造好各个原子球的电荷密度作为输入准备, 初步确定出 LM TO 方法的势参数, 然后进行自治计算, 达到体系的总能自治 该方法中, 合适的势参数是自治的关键

我们知道, 用在局域密度泛函近似 (LDA) 框架下的能带方法来计算半导体的能带结构时, 得到的带隙值往往偏小, 需要作带隙修正, 才能得到较准确的能带结构 本文采用添加调整势的方法进行带隙修正^[8], 从而得到较准确的能带结构

介电函数 $\epsilon(E) = \epsilon(E) + i\epsilon(E)$ 能够描述均匀介质中声子能量 $E = \hbar\omega$ 的光谱响应 在得到较准确的能量本征值和本征波函数的基础上, 计算该超晶格系统的光学介电函数虚部 $\epsilon(\omega)$. 半导体的光学介电函数虚部 $\epsilon(\omega)$ 理论计算公式为^[7]

$$\epsilon(\omega) = \frac{4\pi e^2}{m^2 \omega_{n,n}^2} \frac{2dk}{(2\pi)^3} |\bar{e} \cdot \bar{p}_{mn}(\bar{k})|^2 \delta(E_n(\bar{k}) - E_n(\bar{k}) - \hbar\omega) \quad (2)$$

其中

$$\bar{e} \bar{p}_{mn}(\bar{k}) = \Psi_n^k | \bar{e} \cdot \bar{p} | \Psi_n^k \quad (3)$$

为偶极子跃迁矩阵元, 与波函数和能量本征值有关 在 LM TO-A SA 能带方法中计算偶极子跃迁矩阵元的具体公式可参见文献[9, 10] 在 $\epsilon(\omega)$ 的计算过程中还涉及到动量空间的求和, 这里采用四面体方法^[11]进行求和, 即通过在简约布里渊区中取均匀网格点, 知道了每个小四面体的贡献, 所有小四面体的贡献相加即为所求 每个小四面体中的偶极子跃迁矩阵元取小四面体四个顶点的平均值

有了 $\epsilon(\omega)$ 之后, 介电函数实部 $\epsilon(\omega)$ 可以通过 Kramers-Kronig 变换得到 实折射率 $n(E)$ 和消光系数 $k(E)$ 可以通过下列关系得到

$$n(E) = \left(\frac{[\epsilon(E)^2 + \epsilon(E)^2]^{1/2} + \epsilon(E)}{2} \right)^{1/2} \quad (4)$$

和

$$k(E) = \left(\frac{[\epsilon(E)^2 + \epsilon(E)^2]^{1/2} - \epsilon(E)}{2} \right)^{1/2} \quad (5)$$

于是吸收系数 $a(E)$ 可写为

$$a(E) = \frac{4\pi}{\lambda} k(E) \quad (6)$$

3 结果和讨论

图 2 给出体材料 GaAs 的 LM TO 能带结构, 其中实线是添加调整势的结果, 虚线是未加添加调整势的结果, 从图 2 中可以看出, 添加调整势自洽之后, 对最高三个价带的影 响很小, 但对导带有明显的影响, 调整势能够改善导带结构, 使 Γ 、 X 和 L 点上的带隙值和实验基本一致, 并且保持加入调整势前后 Γ 、 X 和 L 点上的导带底的能量本征值高低次序不变 用 LM TO 方法得到的 $(\text{GaAs})_5/(\text{InAs})_1(001)$ 的能带结构如图 3 所示, 这是经过带隙修正 并且自洽的结果 从图 3 中可以看出, 该超晶格的价带顶和导带底都在 Γ 点, 是直接带隙材 料, 带隙值为 1.30eV. 对于 $(\text{GaAs})_7/(\text{InAs})_1(001)$ 超晶格, 我们得到它的带隙值为 1.35eV, 并且观察到带隙值随层厚的增加而增加, 即发生蓝移.

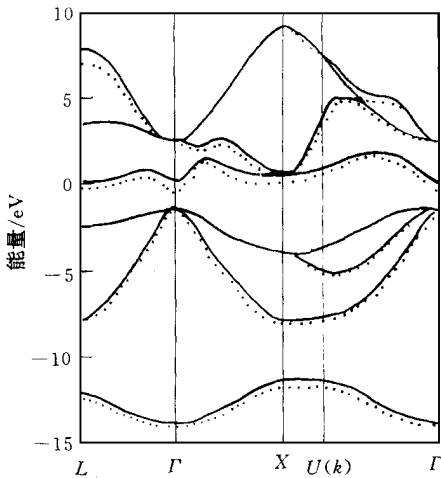


图 2 GaAs 的 LM TO 能带结构

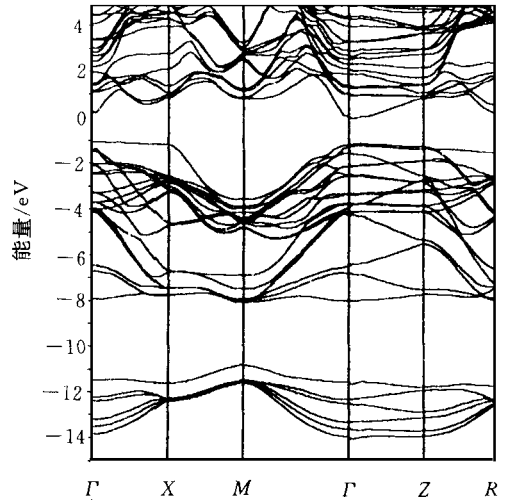


图 3 $(\text{GaAs})_5/(\text{InAs})_1(001)$ 的能带结构

有了能带结构和本征函数之后, 根据(2)式, 就可以计算该超晶格的 $\epsilon(\omega)$. 为了能和两种体材料的光学性能相比较, 我们还计算了 GaAs 和 InAs 的光学介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$. 图 4 和图 5 分别给出 GaAs 和 InAs 的光学介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$, 图中实线是理论计算结果, 虚部 是实验结果^[12]. 从图中可以看出, 理论计算得到的 GaAs 的 E_1 和 E_2 的能量位置分别为 3.06eV 和 4.78eV, 与实验值的 3.10eV 和 4.80eV 基本一致, 峰的形状和大小也基本一致. 对于 InAs 体材料来说, 理论计算得到的 InAs 的 E_1 和 E_2 的能量位置分别为 2.65eV 和 4.44eV, 与实验值的 2.50eV 和 4.40eV 基本一致, 峰的形状和大小也基本一致. 这说明用 LM TO 方法得到的能带结构和波函数来计算 $\epsilon(\omega)$, 结果还是可靠的. 图 6 和图 7 分别给出 GaAs 的折射率 $n(E)$ 和吸收系数 $\alpha(E)$, 从图中可以看出 GaAs 在 3.01eV 和 4.75eV 能量 处存在明显的吸收峰, 其中 3.01eV 处的吸收峰主要来源于 Λ 轴上的电子从最高价带到最 低导带的竖直跃迁的贡献, 而 4.75eV 处的吸收峰主要来源于 X 点的电子从最高价带到最

低导带的竖直跃迁的贡献

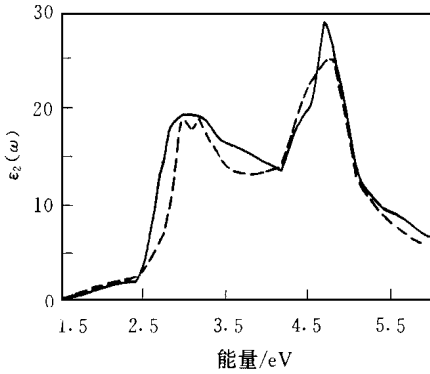


图 4 GaAs 的光学介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$

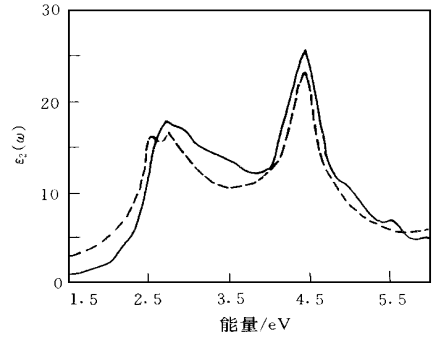


图 5 InAs 的光学介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$

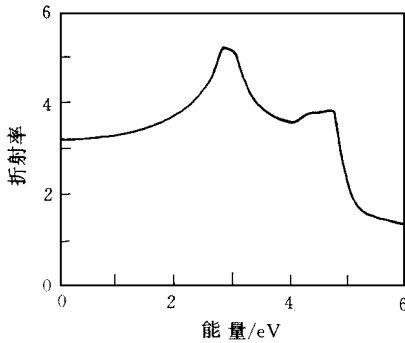


图 6 GaAs 的折射率 $n(E)$

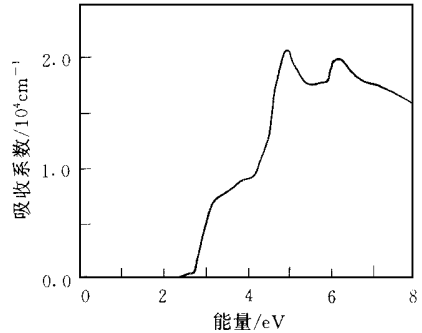


图 7 GaAs 的吸收系数 $\alpha(E)$

图 8 和图 9 分别给出超晶格 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 沿 Z 方向偏振的光学介电函数虚部 $\epsilon_2^z(\omega)$ 和吸收系数 $\alpha(E)$, 其中实线是 n 等于 5 的结果, 虚线是 n 等于 7 的结果. 从图中可以看出, $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 超晶格在 2.29、3.43、4.58 和 4.90 eV 存在主要吸收峰, 吸

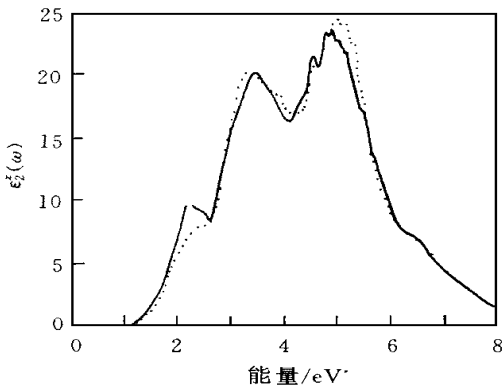


图 8 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 的光学介电函数虚部 $\epsilon_2^z(\omega)$

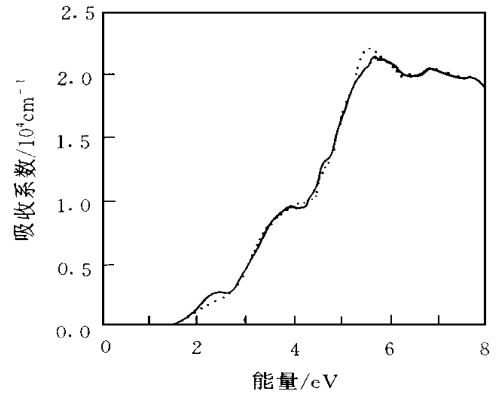


图 9 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 的吸收系数 $\alpha(E)$

收峰的形状不同于 GaAs 和 InAs 体材料吸收峰的形状, 而是结合了两种体材料吸收峰的特点, 超晶格的 2.29eV 和 4.58eV 峰和 InAs 的 E_1 和 E_2 峰相对应, 超晶格的 3.43eV 和 4.90eV 峰和 GaAs 的 E_1 和 E_2 峰相对应。随着超晶格层数的增加, 在 2.29eV 处的峰值强度减弱, 而在 4.9eV 处的峰值强度增强。图 9 给出超晶格 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 的吸收系数, 其中实线是 n 等于 5 的结果, 虚线是 n 等于 7 的结果。从图中可以看出, 在声子能量 2.20、4.50 和 5.0eV 处存在三个明显的吸收峰, 第一和第二明显吸收峰主要来源于 Γ -Z 轴上的电子从价带到导带的跃迁, 而第三明显吸收峰主要来源于 M 点的电子从价带到导带的跃迁结果。 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 超晶格的吸收峰跟体材料 GaAs 的吸收峰相比较还可以发现, 超晶格在 1.5~2.5eV 能量范围内的吸收系数明显大得多, 这可以从图 7 和图 9 的比较中看出。图 10 给出超晶格 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 的折射率 $n(E)$, 其中实线代表 $n=5$ 的情况, 虚线代表 $n=7$ 的情况, 从图中可以看出, 折射率 $n(E)$ 随层数 n 的变化不明显。

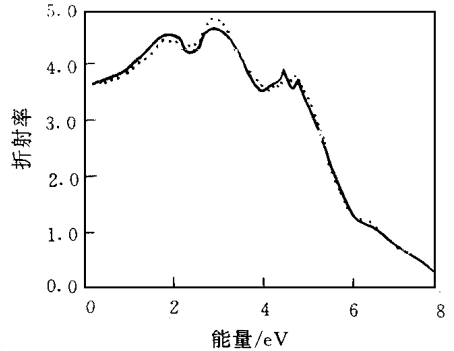


图 10 $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 的折射率 $n(E)$

以上计算结果表明, $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ 超晶格在较宽的能量范围有较好的光谱响应, 结合体材料 GaAs 和 InAs 光学性质的特点, 将会有很大的应用潜力。

参 考 文 献

- [1] M. Sato and Y. Horikoshi, J. Appl Phys , 1989, **66**: 851.
- [2] M. Sato and Y. Horikoshi, J. Appl Phys , 1991, **69**: 7697.
- [3] M. Sato and Y. Horikoshi, Surf Sci , 1992, **267**: 195.
- [4] O. K Andersen, Phys Rev , 1975, **B12**: 3060.
- [5] J. E Bernard and A. Zunger, Appl Phys Lett , 1994, **65**: 165~ 167.
- [6] J. G Woicik *et al* , Phys Rev , 1995, **B52**: R2281.
- [7] Madelung O. *et al* , Landolt-Bornstein New Series, Berling: Springer, 1982.
- [8] 李开航, 黄美纯, 物理学报, 1997, **46**: 2065.
- [9] M. A buani *et al* , J. Phys E , 1986, **16**: 473.
- [10] C. Konig and M. A. Khan, Phys Rev , 1983, **B27**: 6192.
- [11] O. Jepsen and O. K Andersen, Solid State Commun , 1971, **9**: 1763.
- [12] D. E A spnes and A. A. Studna, Phys Rev , 1983, **B27**: 985.

Optical Properties of $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ Superlattices

Li Kaihang, Huang Meichun, Zhang Zhipeng, Zhu Zizhong

(Physics Department Xiamen University, Xiamen 361005)

Received 3 May 1998, revised manuscript received 24 November 1998

Abstract We perform self-consistent band calculation of $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ superlattices (SL's) by means of Linearized-Muffin-Tin-Orbital (LMTO) method. The imaginary part of the dielectric functions, the refractive index and the absorption coefficient for the $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ SL's have been calculated on the basis of the available results of relatively accurate eigenvalue and eigenfunction for SL's. The calculated results show that the optical properties of $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ SL's are different from the of bulk GaAs. The absorption coefficient for the $(\text{GaAs})_n/(\text{InAs})_1(001)$ superlattices is higher than that of bulk GaAs in the energy range from 1.5eV to 2.5eV. The superlattices also have rather good spectra response over a wide range of energy.

PACC: 7865, 7360, 7125T