

可调能隙的光电器件结构—— (AlAs)_{n_l}/(GaAs)_{m_l} 渐变周期超晶格

王恩哥* 王鼎盛

(中国科学院物理所表面物理实验室, 北京 100080)

1990年6月27日收到

本文提出了一种具有渐变周期的 (AlAs)_{n_l}/(GaAs)_{m_l} (l = 1, 2, ...) 超晶格, 并采用递归方法计算了这种渐变周期超晶格的电子结构. 其特点是带隙 E_g 在空间随 (n_l, m_l) 渐变. 例如, 对 (AlAs)₄/(GaAs)₄/(AlAs)₂/(GaAs)₂/(AlAs)₁/(GaAs)₁/(AlAs)₁/(GaAs)₁ 结构, 带隙由短周期一端的 1.93eV 变到长周期一端的 1.78eV. 同时导、价带边得到不同的调制, 因而提高了电子与空穴电离率比值, 有可能应用到作光电探测材料.

主题词 渐变周期超晶格, 电子结构, 可调带隙

一、引言

近十年的发展表明, 人们对半导体物理性质的研究与应用已从天然存在的材料转向人工设计的材料^[1]. 在早期光电探测器的研制中就有人指出^[2], 为获得低噪声雪崩光电二极管 (APD), 应使材料的电子与空穴电离率比保持较大值. 然而不幸的是, 多数 III-V 族半导体的这个电离率比值 K 都接近于 1. 因此一段时间之内寻求具有人为地改变 K 值的新材料成了一个热门课题.

这方面研究的实质性突破应归功于分子束外延技术 (MBE) 的应用. 这种新的生长技术可以制备出原子尺度上光滑的超薄层, 并且在外延方向上可以任意改变组分及掺杂浓度, 形成半导体超晶格. 利用这种人造材料制备的新一代光电器件在性能上发生了重大改进. 1982年 Capasso^[3] 等人首先在光电探测器的试制中采用了一种渐变成分超晶格材料. 其原理是在距离小于 1μm 的雪崩区范围内使 (Al_xGa_{1-x})As 的成分渐变. 利用能隙 E_g(x) 的函数关系和由此引起的导带与价带边不同的调制变化, 增大电子与空穴电离率比, 从而获得了具有较高增益稳定性的渐变能隙雪崩二极管 (APD).

本文将在讨论短周期 (AlAs)_n/(GaAs)_m (n, m ≤ 10) 超晶格电子结构的基础上, 提出一种渐变周期 (AlAs)_{n_l}/(GaAs)_{m_l} (l = 1, 2, ...) 超晶格, 并利用递归方法计算了它的电子结构. 它与 Capasso 的渐变成分 (Al_xGa_{1-x})As 超晶格具有相似的能隙变化功能, 但在晶格完整性和电子输运方面可以较合金型材料更为优越, 因此有可能为高性能光

* 中国科学院国际材料物理中心, 沈阳 110015.

电器件的设计提供一个新机遇。

二、物理模型与递归方法

这里提出的一种渐变周期 $(AlAs)_{n_l}/(GaAs)_{m_l} (l=1, 2, \dots)$ 超晶格的特点是, 沿 (100) 生长方向两种不同材料的厚度 $d(n_l)$ 和 $d(m_l)$ 在空间上连续变化, 如图 1(a) 所示。因此区别于熟知的周期超晶格 $(AlAs)_n/(GaAs)_m$ [见图 1(b)], 可以根据需要人为地设计 $d(n_l)$ 和 $d(m_l) (l=1, 2, \dots)$, 从而获得满足特殊要求的新的光电器件材料。

然而由于这种渐变周期超晶格 $(AlAs)_{n_l}/(GaAs)_{m_l} (l=1, 2, \dots)$ 结构在空间上失去了平移周期性, 因此使基于 Bloch 理论的能带方法, 在计算它的电子结构时遇到困难。

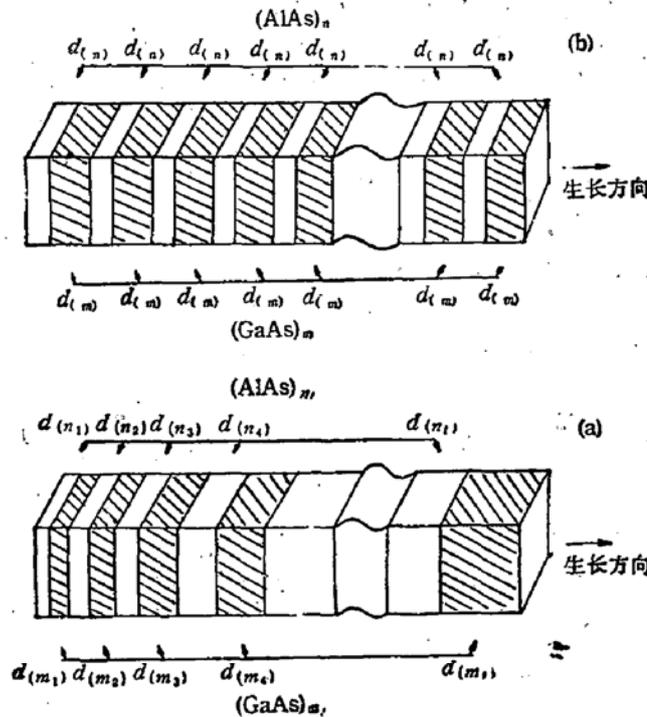


图 1 渐变周期 $(AlAs)_{n_l}/(GaAs)_{m_l}$ 超晶格 (a) 和周期 $(AlAs)_n/(GaAs)_m$ 超晶格 (b) 的物理模型

由于递归方法^[4]对研究的物理系统没加任何对称性的限制, 所以它特别适合于讨论非完整(如含有各种点缺陷、位错、层错等)和非周期性体系的电子结构^[5,6]。递归方法的关键是选择一组完备正交集 $\{u_m\}$, 使系统哈密顿量的作用满足

$$H|u_m\rangle = b_m|u_{m-1}\rangle + a_m|u_m\rangle + b_{m+1}|u_{m+1}\rangle \quad (1)$$

于是在这组特殊基底上可以使 H 三对角化, 即得到

$$H^{tri} = \begin{bmatrix} a_0 & b_1 & & & \\ b_1 & a_1 & b_2 & & \\ & b_2 & a_2 & b_3 & \\ & & & \ddots & \ddots \\ & & & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (2)$$

其中 $\{a_m\}$ 和 $\{b_m\}$ 可利用(1)式由正交关系确定。这样由(2)式能够计算出格林函数

$\langle u_0 | (E - H^{(i)})^{-1} | u_0 \rangle$, 其虚部给出了格点态密度

$$\rho_0 = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle u_0 | (E - H^{(i)})^{-1} | u_0 \rangle \quad (3)$$

而系统的总态密度为各格点态密度之和。

在计算中, 我们选递归链长 $r = 30^{[7]}$, 系统哈密顿矩阵元为 Slater-Koster 积分式, 并且由 Harrison^[8] 给出的普适参数确定。

三、短周期超晶格 (GaAs)_n/(AlAs)_m ($n, m \leq 10$) 的电子结构

为了方便下面的讨论, 本节将首先对短周期超晶格 (GaAs)_n/(AlAs)_m ($n, m \leq 10$) 的电子结构进行详细地计算和分析。图 2 给出了几种模型下, AlAs 层中 As 原子的局部态密度 (LDOS) 和 P_z 分波态密度 (PDOS)。我们发现随 m 的增大, As 原子的态密度分布局域性有所变化。从对总态密度 (TDOS) 的计算可知, 这类半导体超晶格的价带顶主要来自阴离子 As 的贡献。同时图中表示了各种模型相应的费米能级 (E_f)。由此可以发现另一个值得注意的事实, 即随着每个超晶格周期内原子层数的增多, 体系的费米能级将向减小的方向偏移。这表明超晶格中单位体积内的界面越多, 结构的稳定性相对越低。

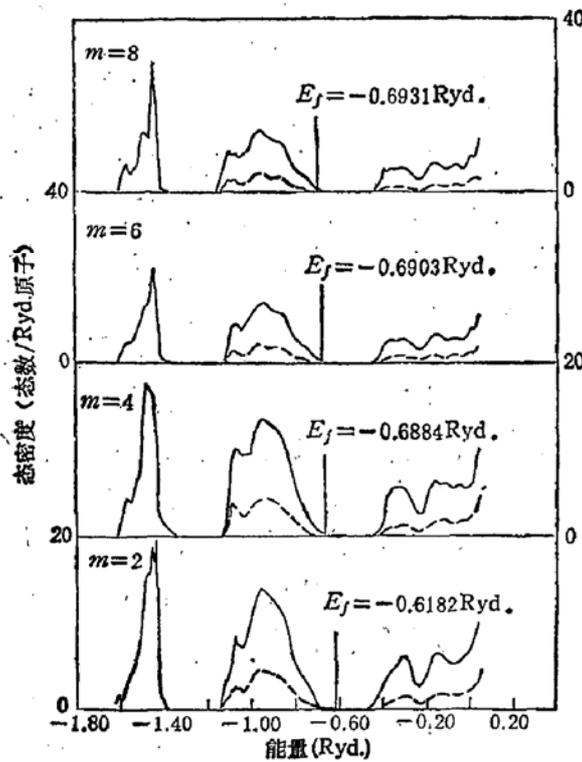


图 2 对应 $n = 2$, m 取不同值时, (GaAs)_n/(AlAs)_m 周期超晶格模型中, AlAs 层中心 As 原子的局部态密度和 P_z 分波态密度(虚线示)

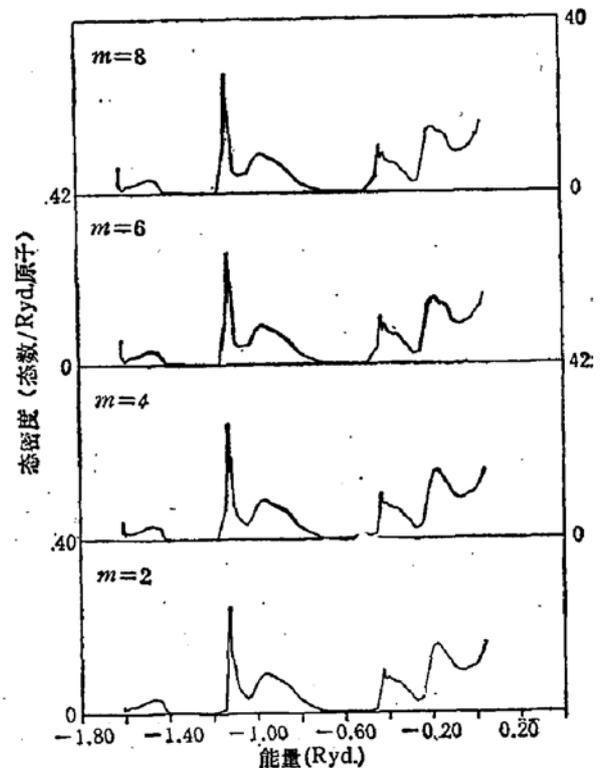


图 3 对应 $n = 2$, m 取不同值时, (GaAs)_n/(AlAs)_m 周期超晶格模型中, GaAs 层 Ga 原子的局部态密度

在图 3 中,本文描绘了各种模型下 GaAs 层内 Ga 格点上的电子局部态密度。从对各元素原子价的计算可以证明,As 原子在与 Al 原子形成共价键结合时所具有的电子布居数比其与 Ga 原子结合的相应值要高。这样将导致界面区电荷向 AlAs 区发生偏移。这种效应对防止界面净电荷的大量堆积而引起的界面不稳定性是很必要的。

类似地本文还计算了 n 和 $m \leq 10$ 的其它情况。对于 $n = m$ 的短周期超晶格带隙与原子层数的关系列在表 1。为了方便比较,表 1 中同时给出了前人的一些理论计算值^[9-11]和实验数据^[12,13]。很清楚,本文的结果与最近的实验数据符合较好。

表 1 短周期 $(AlAs)_n/(GaAs)_m$ 超晶格的带隙值 (eV)

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
本 文	2.02	2.00	1.96	1.90	1.82	1.78	1.77	1.77	1.76	1.76
理论[9]	2.17	2.13	2.07	2.00	1.92	1.86	1.82	1.79	1.76	1.72
理论[10]	2.10	2.09	2.08	2.07	2.06	2.05	2.04	2.03	—	—
理论[11]	—	2.20	2.17	2.10	2.03	1.99	1.92	1.89	1.84	1.81
实验[12]	2.06	2.03	—	1.93	—	1.80	—	1.76	—	1.75
实验[13]	—	—	—	2.03	1.97	1.90	—	1.85	—	—

四、一维渐变周期超晶格 $(AlAs)_{n_l}/(GaAs)_{m_l}$ ($l=1, 2, \dots$) 带隙的调制特点

从上节的计算结果(如表 1)可以发现,短周期超晶格 $(AlAs)_n/(GaAs)_m$ 材料的带隙对不同的 n 和 m 将有不同值。那么我们自然会考虑到当把周期不同的超薄层叠加在一起时,材料的带隙将要发生怎样的变化。这里重点研究了沿空间(100)方向生长的渐变周期超晶格 $(AlAs)_{n_l}/(GaAs)_{m_l}$ ($l=1, 2, \dots$) 的电子结构。应该说明的是,这种材料沿生长方向已不存在周期性,但由于 (n_l, m_l) 值随 l 是渐变的,故这里借用了“渐变周期”一词以区别于短周期超晶格 $(AlAs)_n/(GaAs)_m$ 结构。

对于这种材料,沿生长方向(如 x 轴)虽然已失去平移对称性,但在垂直生长方向的 yz 层内晶格本身仍具有二维周期性。为了确定出对应第 l 区内的总态密度,本文首先在 yz 层内选一个平移单元,并设此单元的基矢为 α_1 和 α_2 。然后沿生长方向取 $\alpha_3(l)$, 且令 $|\alpha_3(l)| = d(n_l, m_l) = d(n_l) + d(m_l)$ 。于是可以得到对应第 l 区内的一个单胞的体积 $V(l) = (\alpha_1 \times \alpha_2) \cdot \alpha_3(l)$ 。由于 $\alpha_3(l)$ 的绝对值在不同区是不一样的, l 取不同值时, $V(l)$ 的大小也发生变化,从而导致 $V(l)$ 包含的原子数目有增或减。例如,对 $n_l = 2$, $m_l = 4$, $V(l)$ 包含 24 个原子;当 $n_l = 2$, $m_l = 8$ 时, $V(l)$ 含 40 个原子。

对应一个特定的 l 值,这里首先利用前节介绍的方法求出 $V(l)$ 内各格点上所有不同原子的局部态密度,然后对它们求和得到该区的总态密度,进而由数值计算定出各区对应的带隙值 $E_g(n_l, m_l)$ 。

作为例子,这里具体计算了模型 [4, 4-7] 的 $(AlAs)_4/(GaAs)_4/(AlAs)_4/(GaAs)_5/(AlAs)_4/(GaAs)_6/(AlAs)_4/(GaAs)_7$ 渐变周期超晶格的电子结构。表 2 给出了这一模型

的参数和最后计算得到的各区相应的带隙值。首先这里证明了我们设想的情况, 即随 (n_l, m_l) 的变化, 材料的带隙 $E_g(n_l, m_l)$ 不再是一个固定的值, 而是一个可变参量, 本文的数值结果表明: 对 $n_l = 4$, 随 m_l 的增大, 带边调制的结果使材料带隙变窄。图 4 给出了各区之间 E_g 的变化情况。为使结果更加清楚, 我们已将各区 $E_g(n_l, m_l)$ 的结果(图中 0 点)用实线连接起来。为进一步表示出材料本身带隙的变化率, 同一图上还绘出了相对变化值 $\alpha = \frac{E_g(1) - E_g(l)}{E_g(1)}$ (用 x 表示), 并用虚线连接起来。对模型 [4, 4-7], l 由 1 取到 4, α 值由 0 变到 7.7%。

表 2 模型 [4, 4-7] 渐变周期超晶格带隙与设计参数。(其中 $d(n_l) = 11.2700 \text{ \AA}$)

l	(n_l, m_l)	$d(m_l) (\text{\AA})$	$d(n_l, m_l) (\text{\AA})$	$E_g(n_l, m_l) (\text{eV})$
1	(4, 4)	11.2700	22.5400	1.93
2	(4, 5)	14.0875	25.3575	1.88
3	(4, 6)	16.9050	28.1750	1.82
4	(4, 7)	19.7225	30.9925	1.78

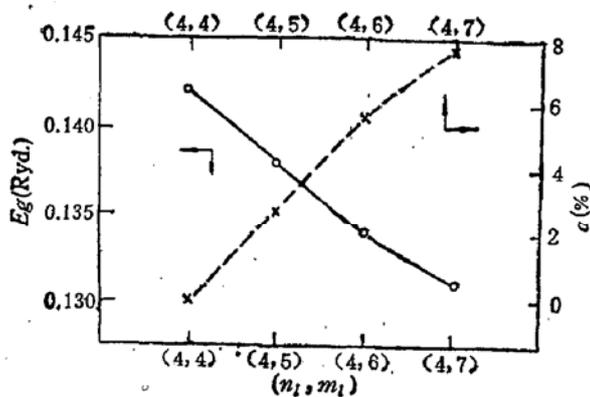


图 4 模型 [4, 4-7] 中带隙 $E_g(n_l, m_l)$ 及其相对变化率 α 与 (n_l, m_l) 的关系

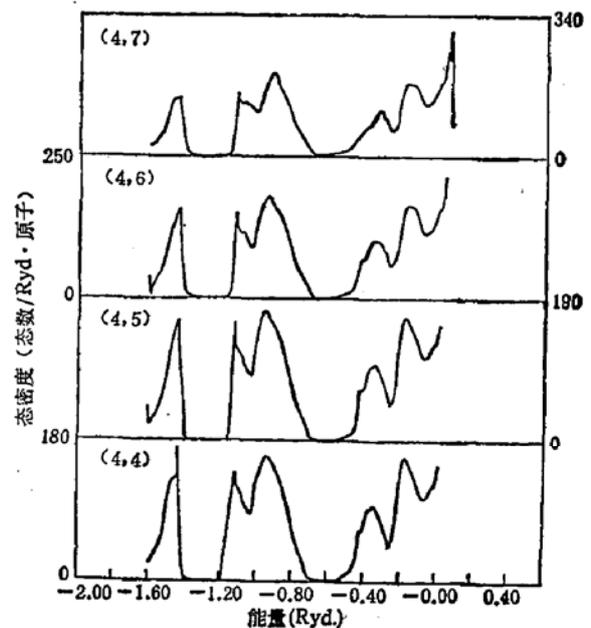


图 5 模型 [4, 4-7] 中各区 (n_l, m_l) 内的总态密度分布情况

这里将模型 [4, 4-7] 代表的一维渐变周期超晶格各层内总态密度的结果绘在图 5。可以看到, 在各区中它的总态密度分布形状都与短周期超晶格 AlAs/GaAs 的结果大致相似。图中的最低价带峰主要来自 As 原子 $4s$ 态的贡献, 中间区域的价带峰来自 Ga 原子的 $4s$ 态和 Al 原子的 $3s$ 态, 而靠近带隙的峰值是由 Ga 和 As 的 $4p$ 态与 Al 的 $3p$ 态组成的。但是由于渐变周期超晶格在生长方向各区内原子层数已经不同, 因此相应的导带边和价带边的调制也是不一样的。这样可以调整材料的电子与空穴电离率, 以获得满意的结果。

五、结 论

探索具有特殊功能的光电器件结构是近十年来在物理学、材料学和电子学领域工作的人们所不断努力的方向。这方面材料基本性质的研究无疑会对新的器件应用创造机遇。本文构思了一种渐变周期的 $(\text{AlAs})_{n_l}/(\text{GaAs})_{m_l} (l=1, 2, \dots)$ 超晶格, 同时进一步利用递归方法具体计算了它的电子结构。结果表明, 这种材料与 Capasso 的渐变成分 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})\text{As}$ 超晶格具有相似的可调带隙功能。其特点是随着 m_l 的增大, $(\text{AlAs})_{n_l}/(\text{GaAs})_{m_l} (l=1, 2, \dots)$ 的带隙 $E_g(n_l, m_l)$ 有逐渐变窄的趋势。因此可以根据需要, 人为地设计各层厚度, 得到满足特殊情况的理想材料结构。另外与合金材料 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 相比, 在晶格完整性和电子输运方面可能占有一定的优势, 这将为高性能光电器件的设计提供一个新的途径。

致谢: 作者之一(王恩哥)对王怀玉博士在计算中给予的热心帮助表示衷心的感谢。

参 考 文 献

- [1] F. Capasso, SPIE's International Conference on Physical Concepts of Materials for Novel Optoelectronic Device Application, 1990 (Preprint)
- [2] R. J. McIntyre, *IEEE Trans. Electron Devices*, **ED-13**, 164 (1966).
- [3] F. Capasso, W. T. Tsang, A. L. Hutchinson, P. W. Foy, 1981 Inst. Phys. Conf. Ser. No. 63, 463 (1982).
- [4] V. Heine, R. Haydock and M. I. Kelly, *Solid State Physics*, **35**, Academic Press, New York, 1980.
- [5] En-Ge Wang, Li-Yuan Zhang and Huai-Yu Wang, *J. Phys.: Condensed Matter*, **1**, 8065 (1989).
- [6] 王恩哥, 章立源, 王怀玉, 半导体学报 **11**, 241 (1990).
- [7] En-Ge Wang, Li-Yuan Zhang and Huai-Yu Wang, *Phys. Sta. Sol. (b)*, **155**, 587 (1989); *ibid.* **158**, 589 (1990).
- [8] W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, W. H. Freeman and Company, San Francisco, 1980.
- [9] J. N. Schulman and T. C. McGill, *Phys. Rev.*, **B19**, 6341 (1979).
- [10] W. Andreoni and R. Car, *Phys. Rev.*, **B21**, 3334 (1980).
- [11] Yan-Ten Lu and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **B40**, 5567 (1989).
- [12] A. Ishibashi, Y. Mori, M. Itabashi and N. Natanabe, *J. Appl. Phys.*, **58**, 2691 (1985).
- [13] K. J. Moore, P. Dawson and C. T. Foxon, *Phys. Rev.*, **B38**, 3368 (1988); K. J. Moore, G. Duggan, P. Dawson and C. T. Foxon, *ibid.*, **38**, 5535 (1988).

Period Gradient Superlattice (AlAs)_{n₁}/(GaAs)_{m₁} — a Possible Optoelectronic Device Structure With Variable Energy Gap

Wang Enge* and Wang Dingsheng

(Laboratory for Surface Physics, Inst. of Physics, Academia Sinica, P. O. Box 603-8, Beijing 100080)

Abstract

A new class of superlattice with gradient periodicity (PGSL) is suggested. Using recursion method, the electronic structures have been calculated. It is found that the energy gap E_g can be changed with different (n_1, m_1) . For example, for a PGSL consisting of (AlAs)₄/(GaAs)₄/(AlAs)₄/(GaAs)₅/(AlAs)₄/(GaAs)₆/(AlAs)₄/(GaAs)₇, the energy gap decreases from 1.93 eV at short period end to 1.78 eV at longer period end. It is a potential material in photodetector applications.

Key words Period gradient superlattice (PGSL), Electronic structure, Variable gap.