

# 紧束缚法计算 GaAs-GaP 超晶格的能带结构及电子的有关性质

刘文明 李甲

(吉林大学半导体系)

1982年2月16日收到

## 提 要

本文使用紧束缚法研究了 GaAs-GaP 超晶格的能带结构和电子的有关性质。久期方程的矩阵元中包括了一直到次近邻的原子轨道间的相互作用积分。本文计算了超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$  布里渊区中三条主要对称线上的能带; 计算了超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$  在  $\Gamma$  点、 $X$  点和  $M$  点的能带值, 这里  $m+n \leq 10$ ; 讨论了  $m=n$  时禁带宽度随周期长度的变化、周期长度不变时组分变化对禁带宽度的影响以及在几个典型的单电子状态中电子处于各个原子上的几率。

## 一、引 言

两种不同材料的半导体薄层交替地重复排列起来, 就可以构成一种新的异质结构——超晶格。在 Esaki 和 Tsu 提出这种概念<sup>[1]</sup>之后不到一年的时间里, 沿 [001] 方向交替重复排列的 GaAs-GaAs<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> 超晶格就制备出来了<sup>[2]</sup>。用汽相外延方法生长的这种超晶格, 最小周期为 110 Å, 样品中最多包含了 150 个周期。随后, GaAs-Ga<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>As 超晶格和 In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-GaSb<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub> 超晶格也用分子束外延方法得到了。每个周期中只包含一层 GaAs 和一层 AlAs 的短周期超晶格已能够用分子束外延方法获得<sup>[3]</sup>。研究超晶格性质的实验工作也有了一些报道。譬如, 对 GaAs-Ga<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>As 超晶格进行了光电流的测量<sup>[4]</sup>, 观测到了 GaAs-Ga<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>As 超晶格的 Raman 散射<sup>[5,6]</sup>, 等等。

Esaki 等一些作者从有效质量近似出发, 利用 Krönig-Penney 模型, 定性地讨论了 GaAs-AlAs、GaAs-GaP 和 In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-GaSb<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub> 超晶格的能带结构<sup>[1,7,8]</sup>。对于周期长度很短的超晶格, 有效质量近似不再适用。因此, 后来又有些作者利用计算完整晶体能带的赝势法和紧束缚法研究了超晶格的能带结构及电子的有关性质<sup>[9,10]</sup>。本文作者在另一篇文章中用价键轨道线性组合法研究了 GaAs-GaP 超晶格和 GaAs-AlAs 超晶格的价带结构。

本文的目的是使用紧束缚法研究 GaAs 和 GaP 沿 [001] 方向交替重复排列构成的超晶格的能带结构及电子的其他有关性质。我们计算了超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$  布里渊区中三条主要对称线上的能带, 其中的价带与用价键轨道线性组合法计算的结果基本相

同; 计算了在超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$  布里渊区的  $\Gamma$  点、 $X$  点和  $M$  点的能带值, 这里  $m+n \leq 10$ ; 讨论了  $m=n$  时禁带宽度随周期长度的变化以及在周期长度不变的条件下组分变化对禁带宽度的影响; 计算了在几个具有代表性的单电子态中电子处于各原子上的几率。

## 二、用于超晶格的紧束缚法

在晶面为 (001) 的 GaAs 衬底上, 重复地交替生长  $n$  个原子层的 GaP 和  $m$  个原子层的 GaAs, 就可得到超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$ 。本文只计算了  $m+n$  为偶数的超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$  的能带, 后边的讨论都是对  $m+n$  为偶数的情况进行的。本文忽略构成超晶格的两种材料晶格常数的差异, 假定两种材料的界面处没有缺陷, 讨论具有统一的晶格常数  $a$  的理想超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$ 。这种超晶格的原胞如图 1 所示。原基矢量为

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} (\mathbf{i} + \mathbf{j}), \\ \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (-\mathbf{i} + \mathbf{j}), \\ \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2} (m+n)\mathbf{k}. \end{cases} \quad (1)$$

它们的线性组合

$$\mathbf{R}_i = t_1 \mathbf{a}_1 + t_2 \mathbf{a}_2 + t_3 \mathbf{a}_3 \quad (2)$$

给出了超晶格的格点位置, 这里  $t_1, t_2, t_3$  为任意整数。反映这种超晶格结构周期性的布拉伐格子是简单四方格子, 其格点密度是 GaAs 的布拉伐格子格点密度的  $1/(m+n)$ , 其原胞体积为 GaAs 原胞体积的  $m+n$  倍。超晶格  $(\text{GaAs})_1-(\text{GaP})_1$  的布里渊区体积是 GaAs 布里渊区的  $1/2$ , 两者的相对方位和大小如图 2 所示。

在超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$  的每个原胞中, 有  $2 \times (m+n)$  个原子(或者说, 这种超晶格为复式格子, 由  $2 \times (m+n)$  套分格子套在一起而成)。每个原子最外层的一个  $s$

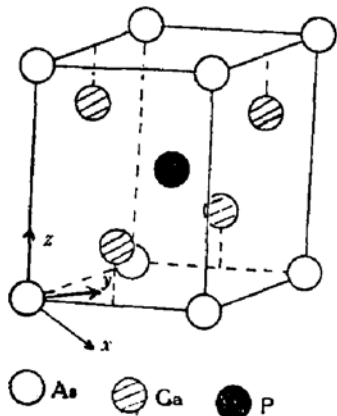


图 1  $(\text{GaAs})_1-(\text{GaP})_1$  的原胞

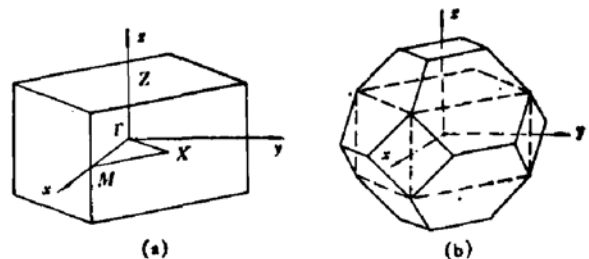


图 2 布里渊区

(a)  $(\text{GaAs})_1-(\text{GaP})_1$  的布里渊区

(b)  $(\text{GaAs})_1-(\text{GaP})_1$  布里渊区与 GaAs 布里渊区的相对方位和大小

轨道和三个  $p$  轨道参与布洛赫函数的组成。分别将各分格子原子上的相应轨道线性组合起来可构成下述  $8 \times (m+n)$  个布洛赫函数

$$\theta_{\alpha i}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i + \boldsymbol{\tau}_\alpha)} \varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i - \boldsymbol{\tau}_\alpha), \quad (3)$$

上式中,  $\alpha$  是分格子的标志,  $\varphi_i$  代表 Löwdin 提出的正交化原子轨道<sup>[11]</sup>,  $\mathbf{R}_i + \boldsymbol{\tau}_\alpha$  是第  $\alpha$  套分格子的格点位置。以这些布洛赫函数为基求解超晶格的单电子薛定谔方程, 则导致求解下述久期方程

$$\sum_{j=1}^4 \sum_{\beta=1}^{2 \times (m+n)} (H_{\alpha i \beta j} - E \delta_{\alpha \beta} \delta_{ij}) C_{\beta j} = 0, \quad (4)$$

这里, 哈密顿矩阵元  $H_{\alpha i \beta j}$  可表示为正交化原子轨道之间的相互作用积分的线性函数。我们采用 Slater 和 Koster<sup>[12]</sup> 的符号来表示正交化原子轨道间的相互作用积分

$$\begin{cases} E_{ij}(\xi_1 \xi_2 \xi_3)_{\alpha\beta} = (\varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i - \boldsymbol{\tau}_\alpha), H \varphi_j(\mathbf{r} - \boldsymbol{\tau}_\beta)), \\ \xi_1 \mathbf{i} + \xi_2 \mathbf{j} + \xi_3 \mathbf{k} = \frac{2}{a} (\mathbf{R}_i + \boldsymbol{\tau}_\alpha - \boldsymbol{\tau}_\beta), \end{cases} \quad (5)$$

当脚标  $\alpha$  和  $\beta$  相同时就只写一个, 没有必要标明时就完全省写。对于这些相互作用积分, 我们假定: 如果轨道  $\varphi_i$  和  $\varphi_j$  都在 GaAs 层中或者都在 GaP 层中,  $E_{ij}(\xi_1 \xi_2 \xi_3)_{\alpha\beta}$  就与 GaAs 或 GaP 晶体的相应积分有相同的数值; 如果  $\varphi_i$  和  $\varphi_j$  处于 GaAs 层和 GaP 层界面的两侧,  $E_{ij}(\xi_1 \xi_2 \xi_3)_{\alpha\beta}$  就取 GaAs 和 GaP 晶体相应积分的平均值; 如果  $\varphi_i$  和  $\varphi_j$  所属的原子都是 Ga, 这两个 (也可能是一个) 原子处于与超晶格主轴垂直的同一个平面上, 且该平面一边是 P 原子平面, 另一边是 As 原子平面, 则  $E_{ij}(\xi_1 \xi_2 \xi_3)_{\alpha\beta}$  也取 GaAs 和 GaP 晶体中相应积分的平均值。

于是, 只要分别确定了 GaAs 晶体和 GaP 晶体的正交化原子轨道间的相互作用积分, 超晶格的原子轨道间的相互作用积分也就确定了。

### 三、紧束缚参数的确定

下边以 GaAs 晶体为例, 讨论原子轨道之间的相互作用积分的确定。在本文的处理中, 忽略了第三近邻以远的原子轨道间的相互作用, 忽略了互为次近邻的  $s$  轨道之间、互为次近邻的  $s$  轨道和  $p$  轨道之间的相互作用。对于具有闪锌矿结构的晶体, 余下的相互作用积分可从对称性的考虑用十五个相互作用积分来表示。对于这些相互作用积分, 我们不是从定义式计算出它们的数值, 而是先把这些相互作用积分当作待定参数 (称为紧束缚参数), 用紧束缚法求解 GaAs 的能带, 再选择这些参数使得在 GaAs 布里渊区的高对称点上用紧束缚法算得的能带值与已经用赝势法算得的能带值相符合。这样选择参数之后, 再把它们用到超晶格能带的计算中去。

对于 GaAs 晶体, 用原子最外层的正交化轨道构成八个布洛赫函数。以这八个布洛赫函数为基求解单电子薛定谔方程, 在 GaAs 布里渊区的  $\Gamma$  点、 $X$  点和  $L$  点, 得到三个  $8 \times 8$  的紧束缚矩阵。根据晶体的对称性, 可把这三个  $8 \times 8$  矩阵约化成一些较小的矩阵。

$\Gamma_1$  对称:

$$\begin{pmatrix} E_{ss}(000)_0 & 4E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) \\ 4E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) & E_{ss}(000)_1 \end{pmatrix}.$$

$\Gamma_{15}$  对称(三重简并):

$$\begin{pmatrix} E_{xx}(000)_0 + 4E_{xx}(011)_0 + 8E_{xx}(110)_0 & 4E_{xx}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) \\ 4E_{xx}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) & E_{xx}(000)_1 + 4E_{xx}(011)_1 + 8E_{xx}(110)_1 \end{pmatrix}.$$

$X_1$  对称:

$$\begin{pmatrix} E_{ss}(000)_0 & 4E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)_{01} \\ 4E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)_{01} & E_{ss}(000)_1 + 4E_{ss}(011)_1 - 8E_{ss}(110)_1 \end{pmatrix}.$$

$X_3$  对称:

$$\begin{pmatrix} E_{ss}(000)_1 & 4E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)_{10} \\ 4E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)_{10} & E_{ss}(000)_0 + 4E_{ss}(011)_0 - 8E_{ss}(110)_0 \end{pmatrix}.$$

$X_2$  对称(二重简并):

$$\begin{pmatrix} E_{xx}(000)_0 - 4E_{xx}(011)_0 & 4E_{xy}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) \\ 4E_{xy}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) & E_{xx}(000)_1 - 4E_{xx}(011)_1 \end{pmatrix}.$$

$L_3$  对称(二重简并):

$$\begin{pmatrix} E_{xx}(000)_0 + 4E_{xy}(110)_0 & 2E_{xx}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) + 2E_{xy}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) \\ 2E_{xx}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) + 2E_{xy}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) & E_{xx}(000)_1 + 4E_{xy}(110)_1 \end{pmatrix}.$$

$L_1$  对称:

$$\begin{pmatrix} E_{ss}(000)_0 & 2E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) & 0 & 2\sqrt{3}E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)_{01} \\ 2E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) & E_{ss}(000)_1 & -2\sqrt{3}E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)_{10} & 0 \\ 0 & -2\sqrt{3}E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)_{10} & E_{xx}(000)_0 - 8E_{xy}(110)_0 & 2E_{xx}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) - 4E_{xy}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) \\ 2\sqrt{3}E_{ss}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)_{01} & 0 & 2E_{xx}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) - 4E_{xy}\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right) & E_{xx}(000)_1 - 8E_{xy}(110)_1 \end{pmatrix}.$$

由这七个矩阵, 可以求得能带在  $\Gamma$  点、 $X$  点和  $L$  点的十六个值  $E_i$  与十五个紧束缚参数之间的关系式

$$E_i = f_i(\mathbf{x}), \quad i = 1, 2, \dots, 16, \quad (6)$$

这里,  $\mathbf{x}$  表示以十五个紧束缚参数为分量的向量. 令(6)式中的  $E_i$  与用赝势法计算的能带值相等, 这些关系式就成了确定紧束缚参数的方程组. 适当选择初始近似解  $\mathbf{x}_0$ , 再

用迭代法求解方程组(6),可得到一套紧束缚参数.

本文用这种方法求得的 GaAs 和 GaP 的紧束缚参数见表 1.

表 1 GaAs 和 GaP 的紧束缚参数

|      | $E_{zz}(000)_0$  | $E_{zz}(000)_1$  | $E_{xx}(000)_0$   | $E_{xx}(000)_1$   | $E_{zz}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$ |
|------|--|--|---|---|--|
| GaAs | -9.233   | -1.528   | -1.351  | 5.761   | -1.429   |
| GaP  | -9.322   | -0.760   | -1.704  | 5.713   | -1.666   |
|      | $E_{xx}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$ | $E_{xy}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$ | $E_{zx}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)_{01}$ | $E_{zx}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)_{10}$ | $E_{xx}(011)_0$  |
| GaAs | 0.204  | 0.948  | 0.854   | 1.123   | 0.047  |
| GaP  | 0.117  | 0.750  | 0.697   | 1.208   | 0.072  |
|      | $E_{xx}(011)_1$  | $E_{xy}(110)_0$  | $E_{xy}(110)_1$   | $E_{xx}(110)_0$   | $E_{xx}(110)_1$  |
| GaAs | -0.735   | 0.245  | -0.198  | 0.163   | 0.228  |
| GaP  | -0.549   | 0.253  | -0.192  | 0.182   | 0.254  |

方程组(6)是非线性矛盾方程组,不能严格地被满足.表1所列参数使方程组(6)满足的近似程度可从表2看出.图3是用表1所列参数算出的 GaAs 和 GaP 的能带结构.图中所示能带的变化形式基本上是正确的.表2和图3能够说明,表1所列的参数是选择得比较好的.

表 2 用表 1 的参数计算的 GaAs 和 GaP 的能带在  $\Gamma$  点、 $X$  点和  $L$  点的值及赝势法算得的相应值 (eV)

| 对称性           | GaAs    |        | GaP     |        |
|---------------|---------|--------|---------|--------|
|               | 赝势法[13] | 紧束缚法   | 赝势法[13] | 紧束缚法   |
| $\Gamma_1$    | -12.55  | -12.27 | -12.99  | -12.96 |
| $\Gamma_1$    | 1.51    | 1.51   | 2.88    | 2.88   |
| $\Gamma_{15}$ | 0       | 0.00   | 0       | 0.00   |
| $\Gamma_{15}$ | 4.71    | 4.79   | 5.24    | 5.59   |
| $X_1$         | -9.83   | -10.27 | -9.46   | -10.00 |
| $X_1$         | 2.03    | 2.03   | 2.16    | 2.16   |
| $X_3$         | -6.88   | -6.51  | -7.07   | -6.76  |
| $X_3$         | 2.38    | 2.52   | 2.71    | 3.13   |
| $X_5$         | -2.89   | -2.79  | -2.73   | -2.83  |
| $L_1$         | -10.60  | -10.69 | -10.60  | -10.80 |
| $L_1$         | -6.83   | -6.65  | -6.84   | -6.67  |
| $L_1$         | 1.82    | 1.79   | 2.79    | 2.69   |
| $L_3$         | -1.20   | -1.23  | -1.10   | -1.18  |
| $L_3$         | 5.52    | 5.83   | 5.74    | 5.44   |

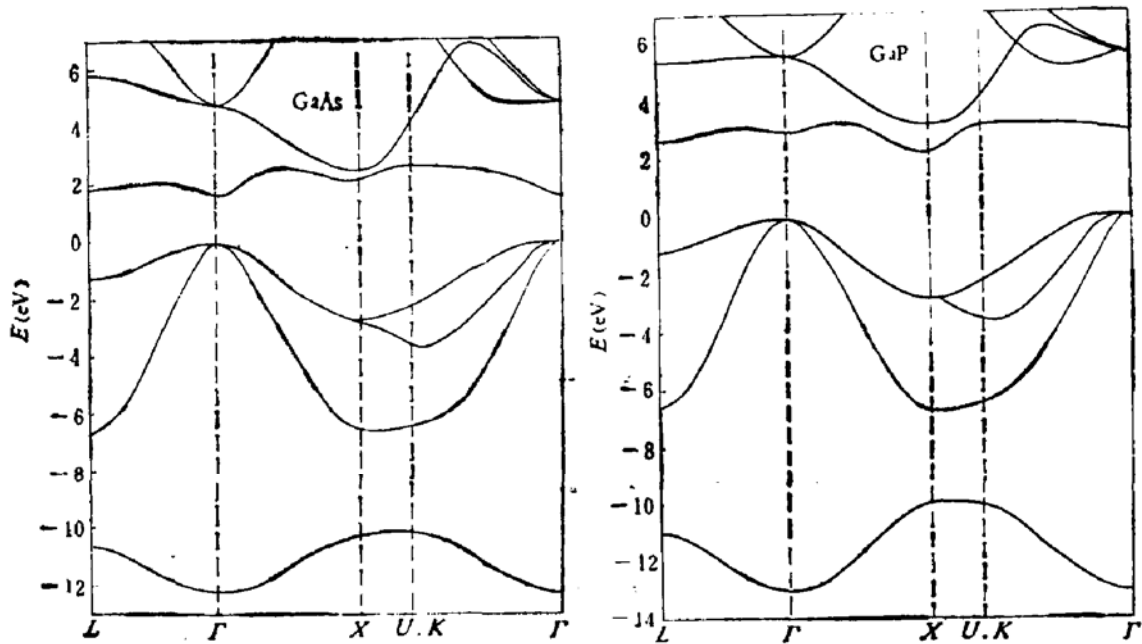


图3 用表1所列参数计算的 GaAs 和 GaP 的能带结构

表1所列参数都是以价带顶为能量零点计算出来的. 在将这些参数用于超晶格能带的计算时, 还须从 GaP 的参数  $E_{ss}(000)_0$ 、 $E_{ss}(000)_1$ 、 $E_{xx}(000)_0$  和  $E_{xx}(000)_1$  中减掉 GaAs 和 GaP 价带顶之差.

GaAs 和 GaP 形成异质结构后两种材料的价带顶之差可表示为

$$\Delta E_V = E_V(\text{GaAs}) - E_V(\text{GaP}) + V_D, \quad (7)$$

其中  $V_D$  表示由于电荷重新分布而引起的偶极势 (dipole potential). 由光电阈值决定的 GaAs 的价带顶为  $-5.5\text{eV}^{[14]}$ , 由电子亲和势决定的 GaP 的价带顶为  $-3.45 - 2.16 = -5.61\text{eV}^{[15]}$ . 我们在计算中采用的  $\Delta E_V$  的数值是  $0.1\text{eV}$ . 这相当于假定了形成异质结构没有引起很大的电荷重新分布. 由于 GaAs 和 GaP 的光电阈值和电子亲和势的实验数据比较分散, 因而 GaAs 和 GaP 价带顶之差还不能精确地决定. 这种情况对结果的影响将在后边讨论.

#### 四、结果和讨论

参数确定之后, 可以数值求解久期方程得到超晶格的能带. 超晶格  $(\text{GaAs})_m - (\text{GaP})_n$  的久期方程是  $8 \times (m + n)$  阶的, 本文求解的最大的久期方程是 80 阶的.

超晶格  $(\text{GaAs})_1 - (\text{GaP})_1$  布里渊区中三条主要对称线上的能带的计算结果如图4所示. 从图4可以看出, 导带在  $M$  点  $(2\pi/a, 0, 0)$  的极小值比  $\Gamma$  点  $(0, 0, 0)$  的极小值要小, 这说明超晶格  $(\text{GaAs})_1 - (\text{GaP})_1$  是间接带隙材料.

图5是超晶格  $(\text{GaAs})_m - (\text{GaP})_m$  的导带在  $\Gamma$  点、 $X$  点和  $M$  点的极小值与价带顶之差随周期长度变化的情形. 从图中可以看到的最明显的规律性是  $\Gamma$  点带隙随着周期长度的增加而单调地下降. 这是由于 GaAs 的带隙显著地小于 GaP 的带隙, 而当周期长度继续

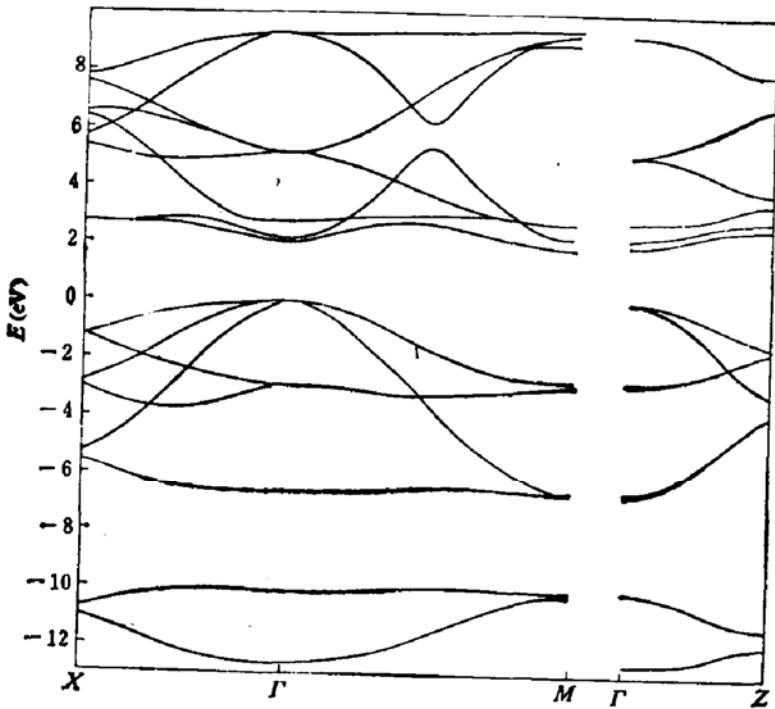


图4 超晶格 (GaAs)<sub>1</sub>-(GaP)<sub>1</sub> 的能带结构

增大时，超晶格  $\Gamma$  点的带隙将趋于 GaAs 的  $\Gamma$  点带隙。由于 GaAs 和 GaP 在 X 点  $(2\pi/a, 0, 0)$  的导带极小值没有明显的差异，所以超晶格的 M 点  $(2\pi/a, 0, 0)$  的导带极小值不会有明显的变化趋势。根据和  $\Gamma$  点类似的理由，图 5 中所示超晶格 X 点  $(\pi/a, \pi/a, 0)$  的导带极小值随周期长度的增加而下降也是可以预料到的。

超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_m$  在  $m$  由小变大时，由间接带隙材料变成直接带隙材料。

这和超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{AlAs})_m$

的情形有点类似。超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{AlAs})_m$  在  $m = 2$  时为间接带隙材料，在  $m \geq 3$  时，就是直接带隙材料了<sup>[10]</sup>。由于具有较大的、可调整的直接带隙，超晶格成了很有希望的半导体激光器有源区材料。

图 6 给出了  $m + n = 10, 8, 6$  时，超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$  在  $\Gamma$  点、X 点和 M 点的导带极小值与价带顶之差随 GaAs 层和 GaP 层的比例  $m/n$  的变化。对于一个固定的周期长度，GaAs 的比例越大， $\Gamma$  点和 X 点的导带极小值就越低。周期长度固定时 GaAs 比例的增加和  $m = n$  时周期长度的增大几乎有相同的效应。这是因为，在这两种情况下，一个周期中的 GaAs 层的厚度都增加了，而 GaAs 的导带极小值要比 GaP 的低。

如果 GaAs 和 GaP 的价带顶之差显著地大于 0.1eV，则可能对上述结果产生一些影响。如果  $\Delta E_v$  的数值较大，超晶格的导带在 M 点的极小值与价带顶之差就要随 GaP 层厚度的增加而下降，最终趋于 GaP 的 X 点导带极小值与 GaAs 的  $\Gamma$  点价带极大值之差。只要  $\Delta E_v$  的数值不很大，超晶格  $\Gamma$  点和 X 点导带极小值与价带顶之差的变化规律就不会改变。

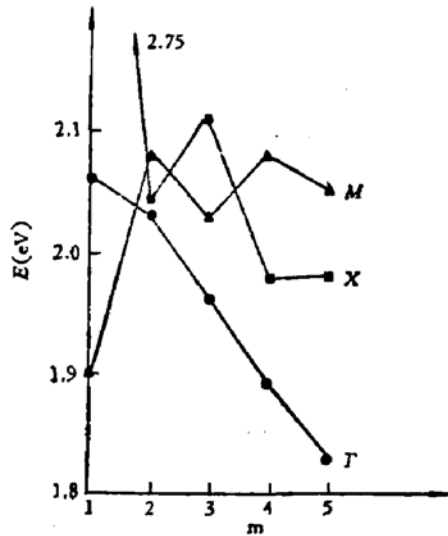


图5  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_m$  带隙随周期长度的变化

图 7 给出了在超晶格  $(\text{GaAs})_4-(\text{GaP})_4$  导带底和价带顶的单电子状态中，电子处于各原子上的几率。在价带顶的单电子状态中，电子处于 As 原子和 P 原子上的几率较大，处于 Ga 原子上的几率较小。在导带底的单电子状态中则刚好相反。和 GaAs 等 III-V 族化合物半导体的价带顶状态一样，超晶格价带顶的

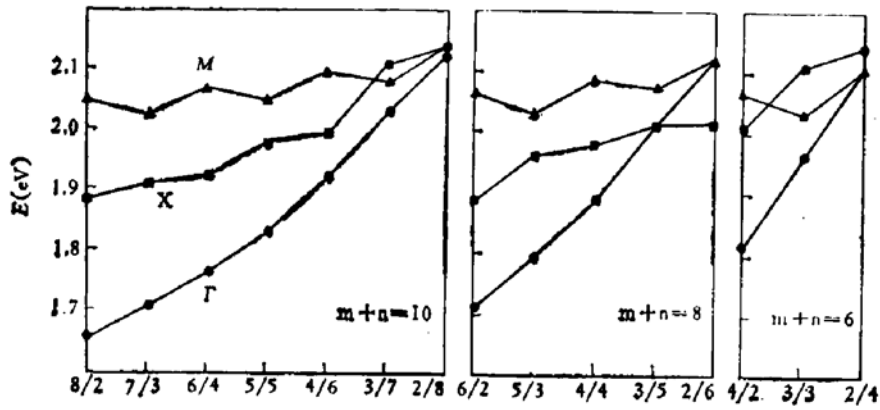


图 6 超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$  带隙随  $m/n$  的变化

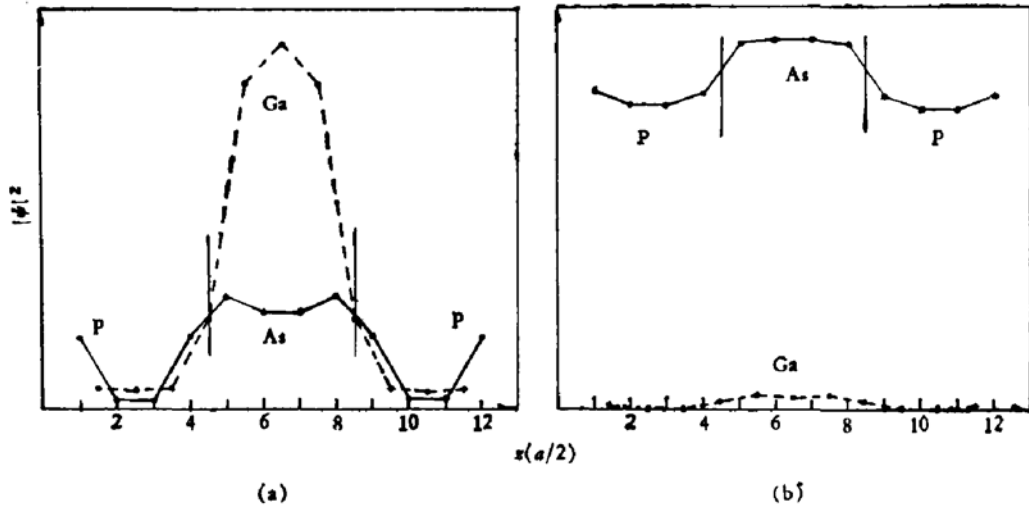


图 7  $(\text{GaAs})_4-(\text{GaP})_4$  导带底 (a) 和价带顶 (b) 状态中电子的分布几率

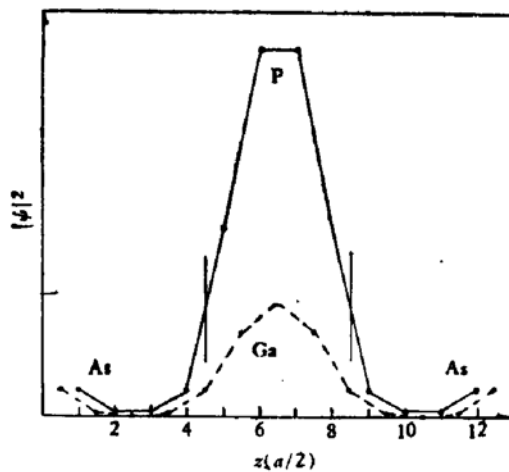


图 8  $(\text{GaAs})_4-(\text{GaP})_4$   $\Gamma$  点能量最低的价带底状态中电子的分布几率

状态也具有  $p$  轨道的特征。在价带顶和导带底的单电子状态中, 电子主要地是分布在 GaAs 层中, 这也是由 GaAs 带隙较小引起的。特别是  $(\text{GaAs})_4-(\text{GaP})_4$  导带底的状态, 主要是反映了 GaAs 导带底的情况。



图 8 是在超晶格  $(\text{GaAs})_4-(\text{GaP})_4$  能量最低的价带底状态中电子在各原子上分布的情况。这个状态与图 7 中所示的两个状态有一个显著的区别：电子主要分布在 GaP 层中。这是因为，GaP 最下边的价带在  $\Gamma$  点的值比 GaAs 的相应值要低。

通过这些结果可以看出，超晶格  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$  具有一些与固溶体  $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$  不同的性质。可以期望，计算完整晶体能带结构的方法对于超晶格的进一步应用和工艺与实验技术的日益提高，将导致作为一种新材料的超晶格在技术上有更多的应用。

### 参 考 文 献

- [1] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.*, **14**, 61 (1970).
- [2] A. E. Blakeslee and C. F. Aliotta, *IBM J. Res. Dev.*, **14**, 686 (1970).
- [3] A. C. Gossard, P. M. Petroff, W. Wiegmann, R. Dingle and A. Savage, *Appl. Phys. Lett.*, **29**, 323 (1976).
- [4] R. Tsu, L. L. Chang, G. A. Sai-Halasz and L. Esaki, *Phys. Rev. Lett.*, **34**, 1509 (1975).
- [5] P. Maruel, G. A. Sai-Halasz, L. L. Chang, Chin-An Chang and L. Esaki, *Phys. Rev. Lett.*, **37**, 1701 (1976).
- [6] J. L. Merz, A. S. Barker, Jr. and A. C. Gossard, *Appl. Phys. Lett.*, **31**, 117 (1977).
- [7] D. Mukherj and B. R. Nag, *Phys. Rev.*, **B12**, 4338 (1975).
- [8] G. A. Sai-Halasz, R. Tsu and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.*, **30**, 651 (1977).
- [9] Ed Caruthers and P. J. Lin-Chung, *Phys. Rev. Lett.*, **38**, 1543 (1977).
- [10] J. N. Schulman and T. C. McGill, *Phys. Rev. Lett.*, **39**, 1680 (1977).
- [11] P. O. Löwdin, *J. Chem. Phys.*, **18**, 365 (1950).
- [12] J. C. Slater and G. F. Koster, *Phys. Rev.*, **94**, 1498 (1954).
- [13] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **B14**, 556 (1976).
- [14] N. J. Shevchik, J. Tejeda and M. Cardona, *Phys. Rev.*, **B9**, 2627 (1974).
- [15] A. M. Cowley, *J. Appl. Phys.*, **37**, 3024 (1966).

## Tight Binding Calculations for Band Structures and Other Electronic Properties of GaAs-GaP Superlattices

Liu Wenming and Li Jia

(Department of Semiconductors, Jilin University)

### Abstract

The tight binding method is used to study the band structures and other related electronic properties of GaAs-GaP superlattices. Second nearest neighbor interactions are included in the elements of secular matrices. The bands of superlattice  $(\text{GaAs})_4-(\text{GaP})_4$  along three main symmetry lines in the Brillouin zone are presented. The energy values at  $\Gamma$ ,  $X$  and  $M$  points are calculated for superlattices  $(\text{GaAs})_m-(\text{GaP})_n$ , where  $m+n \leq 10$ . Discussions are given for the variations of energy gap as a function of periodic length under the condition  $m = n$ , for the effect of fraction on the gap with an unchanged periodic length, and for the distributions of electrons in several typical one-electron states.