

GaN、AlN 的形变势和应变层 GaN/AlN 异质结带阶的计算*

何国敏 王仁智 吴正云 郑永梅 蔡淑惠

(厦门大学物理系 厦门 361005)

摘要 本文采用混合基矢从头算势能带计算方法研究了(001)界面应变对 GaN、AlN 应变层的能带、平均键能 E_m 和带阶参数 E_{mv} 的影响。借助于带阶参数形变势的计算, 预言了不同生长厚度情况下 GaN/AlN 应变层异质结价带带阶和导带带阶。

PACC: 7125C, 7125T

1 引言

在异质结能带排列的平均键能理论计算方法中^[1], 价带带阶由带阶参数 $E_{mv} = E_m - E_v$ 确定, E_v 为价带顶, 平均键能 E_m 是布里渊区(BZ)中所有允许 k 点的 4 个价带与 4 个较低导带(共 8 个能带)本征值的平均值:

$$E_m = \frac{1}{8N} \sum_{n=1}^8 \sum_k E_n(k) \quad (1)$$

采用能带计算方法分别计算 A、B 两种材料的能带结构和平均键能之后, 就可以根据平均键能在异质结中“对齐”由两种材料的带阶参数确定 A/B 异质结的价带带阶:

$$\Delta E_v(A/B) = E_{mv}(B) - E_{mv}(A) \quad (2)$$

因此, 要了解应变层异质结在不同应变条件下的 ΔE_v 值, 首先要研究带阶参数 E_{mv} 随应变状态变化的规律。

本文采用混合基矢从头算势能带计算方法^[2], 以当前很受重视的宽禁带半导体、蓝光光电器件新材料, 但较缺乏实验数据的应变层 GaN/AlN 应变层异质结为例, 探讨应变状态对带阶参数 E_{mv} 的影响, 预言该应变层异质结能带排列。

2 闪锌矿结构 GaN、AlN 的能带、平均键能 E_m 、带阶参数 E_{mv}

Louie 等人针对包含过渡金属的晶体或晶体中包含着第一、二周期的原子而在赝势法能带计算中遇到收敛性差的问题, 发展了一种混合基矢从头算赝势法^[2], 也就是在基函数

* 国家自然科学基金(19574041)和高校博士点专项科研基金资助项目

何国敏 男, 1969 年出生, 物理系博士生
王仁智 男, 1935 年出生, 教授, 博士生导师
1997-10-15 收到, 1998-05-19 定稿

中同时采用平面波及局域轨道的布洛赫和 实际计算中证实,采用混合基方法比起单纯用平面波展开,显著地减少了所需采用的基函数个数 考虑到 GaN 和 AlN 晶体中, N 原子芯态(为 $1s^2$) 不含 p、d 电子,为改善能带计算的收敛性,我们在 GaN 和 AlN 能带结构 $E_n(k)$ 的计算中采用混合基从头算赝势法 计算中, Ga、Al 和 N 的离子赝势由 Bachelet 等^[3] 给出的系数表格构造;平面波能量截断于 14Ry,只在 N 原子中引用由 s、p 赝波函数构成的局域轨道;GaN 和 AlN 的晶格常数分别取为 0.450nm 与 0.437nm;能带自洽计算和平均键能计算中的布里渊区求和采用 10 个特殊 k 点 Γ 、X 和 L 点的能带本征值和平均键能 E_m ,带阶参数 E_{mv} 的计算结果列于表 1,表中同时列出文献[4]的从头赝势能带计算方法的(LDA) 能带计算结果供比较 可以看到, GaN 是直接带隙材料,导带底位于 Γ 点, AlN 为间接带隙材料,导带底位于 X 点

表 1 闪锌矿结构 GaN、AlN 的 Γ 、X、L 点能带本征值、平均键能和带阶参数 E_{mv} 计算结果和引文[4]的 LDA 能带计算结果(单位: eV)

	GaN		AlN	
	本文	LDA ^[4]	本文	LDA ^[4]
Γ_{1v}	- 15.43	- 16.3	- 14.80	- 15.1
Γ_{15v}	0.00	0.0	0.00	0.0
Γ_{1c}	2.26	2.1	4.33	4.2
Γ_{15c}	10.41	10.6	12.28	12.3
L_{1v}	- 13.18	- 13.8	- 12.65	- 12.9
L_{1v}	- 6.81	- 7.4	- 5.88	- 6.0
L_{3v}	- 0.85	- 1.0	- 0.40	- 0.5
L_{1c}	4.97	5.0	7.31	7.3
L_{3c}	10.16	9.1	9.88	10.0
X_{1v}	- 12.45	- 13.0	- 12.00	- 12.3
X_{3v}	- 6.04	- 6.5	- 4.94	- 5.0
X_{5v}	- 2.46	- 2.8	- 1.72	- 1.8
X_{1c}	3.35	3.2	3.24	3.2
X_{1c}	6.75	6.9	8.37	8.4
$E_{mv,0}$	1.713		2.648	

3 GaN、AlN 应变层的能带、平均键能 E_m 和带阶参数 E_{mv}

GaN 和 AlN 的晶格常数 a_0 不同(分别是 0.450nm 和 0.437nm^[5]),它们沿[001]方向共度生长应变层异质结时,由于晶格常数的失配,在异质界面上存在着双轴应变,平行于界面的晶格常数各自发生改变而趋于相同,即 $a(\text{GaN}) = a(\text{AlN}) = a$,与此同时,垂直于界面的晶格常数 a_i 也发生变化 根据弹性能最小原理,与 a 相对应的 a_i 由下式计算^[6]:

$$a_i = a_{0i} \left[1 - 2 \frac{C_{12i}}{C_{11i}} - (a/a_{0i} - 1) \right] \quad (3)$$

其中 i 代表材料 GaN 或 AlN; C_{11i} 、 C_{12i} 和 a_{0i} 是 i 材料的弹性系数和晶格常数,形变前晶格常数为 a_{0i} 的立方晶体,形变后其晶格常数改变为 a 和 a_i , a 与 a_i 反映晶体在平行和垂直于界面方向上的伸缩情况 然而由式(3)可以看到, C_{11i} 、 C_{12i} 和 a_{0i} 都是一些由材料决定的常数, a_i 的取值决定于 a 值,因此表征应变状态的独立变量只是 a 一个 据此,我们在 GaN 和 AlN 两种晶体的晶格常数范围内,选取 0.450、0.447、0.444、0.440 和 0.437nm 五

个 a 值(见表 2, 3), 研究处于这些应变状态的 GaN 和 AlN 能带、平均键能 E_m 和带阶参数 E_{mv}

对于 GaN, $a_0 = 0.450\text{nm}$, $C_{11} = 296\text{GPa}$, $C_{12} = 154\text{GPa}$ ^[5], 由式(3)得到的 a 列在表 2; 晶体在(001)界面的双轴应变, 可分解成流体静压力应变和垂直于(001)界面的单轴应变两个分量, 应变状态通常用应变张量 ϵ 表征, 其应变张量分量有^[6]:

$$\begin{aligned}\epsilon &= a/a_0 - 1, \quad \epsilon = a/a_0 - 1 \\ \epsilon_{ax} &= \epsilon - \epsilon = (a - a)/a_0\end{aligned}\quad (4a)$$

$$T_r(\epsilon) = 2\epsilon + \epsilon \quad \Omega/\Omega_0 - 1 \quad (4b)$$

其中 Ω_0 和 Ω 分别表示形变前和形变后的原胞体积; $T_r(\epsilon)$ 是应变中的体积改变量, 即流体静压力应变; ϵ_{ax} 反映应变时晶体偏离立方结构的程度, 也称为[001]单轴应变 $T_r(\epsilon)$ 主要引起带宽、带隙的改变, 而 ϵ_{ax} 引起能带简并的解除(分裂). 表 2 给出 GaN 在不同 a 情况下对应的 a 、 ϵ_{ax} 和 $T_r(\epsilon)$ 值的计算结果. 与上节一样, 采用混合基矢从头赝势能带计算方法^[2]计算了不同应变情况下的 GaN 能带结构和平均键能 E_m . 表 2 给出不同应变情况下 Γ 点的价带顶 E_v 、导带底 $E_c(\Gamma)$ 和 X 点的导带底 $E_c(\Delta)$ 的计算结果. 可以看到, [001]单轴应变使 3 度简并价带顶 $E_v(\Gamma_{15})$ 分裂成 1 个非简并价带 $E_v(1)$ 和 2 个相互简并价带 $E_v(2)$, 表中采用的能量原点 $E_{v,av}$ 是 $E_v(2)$ 与 $E_v(1)$ 三个本征值的平均值. 平均价带带阶参数定义为 $E_{mv,av} = E_m - E_{v,av}$; 还可以看到, X 点相互简并的导带底(见表 2 $E_c(\Delta)$ 与 $E_c(\Delta)$ 栏)也在形变时发生分裂(称 X 谷分裂). 通常引用形变势 b 和 Ξ_u^Δ 分别定量表示[001]单轴应变与价带和 X 谷的分裂的关系^[6]:

$$E_v(1) - E_v(2) = 3b\epsilon_{ax} \quad (5)$$

$$E_c(\Delta) - E_c(\Delta) = \Xi_u^\Delta \epsilon_{ax} \quad (6)$$

形变时, 带隙 E_g^Δ 的改变量 δE_g^Δ 需要同时计及带隙改变和价带分裂及 X 谷的影响, 对于 GaN 应变层, 在 a 压缩 a 伸长情况下^[7]:

$$\delta E_g^\Delta = (\Xi_d^\Delta + \Xi_u^\Delta/3 - a)T_r(\epsilon) - (\Xi_u^\Delta/3 - b)\epsilon_{ax} \quad (7a)$$

其中 等式右边第一项是不考虑价带及导带分裂时的带隙改变量, 第二项是简并分裂引起带隙的变化. 对 Γ 点带隙 E_g^Γ , 因导带 $E_c(\Gamma)$ 不存在简并分裂问题, 只需计入带隙改变和价带分裂的影响:

$$\delta E_g^\Gamma = (a_c - a)T_r(\epsilon) + b\epsilon_{ax} \quad (8a)$$

表 2 不同应变情况下 GaN 的价带顶、导带底和带阶参数的计算结果 (长度单位: nm, 能量单位: eV)

a	0.4500	0.4470	0.4440	0.4400	0.4370
a	0.4500	0.4531	0.4562	0.4604	0.4635
ϵ_{ax}	0.0000	0.0136	0.0272	0.0453	0.0589
$T_r(\epsilon)$	0.0000	-0.0064	-0.0128	-0.0213	-0.0277
$E_v(2)$	0.000	0.020	0.042	0.073	0.098
$E_v(1)$	0.000	-0.041	-0.085	-0.147	-0.196
$E_{v,av}$	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
$E_c(\Gamma)$	2.264	2.313	2.366	2.432	2.480
$E_c(\Delta)$	3.351	3.326	3.306	3.275	3.252
$E_c(\Delta)$	3.351	3.414	3.482	3.584	3.666
$E_{mv,av}$	1.713	1.724	1.742	1.760	1.772

表 3 不同应变情况下 AlN 的价带顶、导带底和带阶参数的计算结果 (长度单位: nm, 能量单位: eV)

a	0 4500	0 4470	0 4440	0 4400	0 4370
a	0 4240	0 4270	0 4300	0 4340	0 4370
ϵ_{ax}	- 0 0595	- 0 0458	- 0 0320	- 0 0137	0 0000
$T_r(\hat{\epsilon})$	0 0297	0 0229	0 0160	0 0069	0 0000
$E_v(2)$	- 0 079	- 0 052	- 0 039	- 0 017	0 000
$E_v(1)$	0 160	0 105	0 077	0 035	0 000
$E_{v,av}$	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
$E_c(\Gamma)$	4 045	4 130	4 164	4 260	4 325
$E_c(\Delta)$	3 292	3 293	3 267	3 259	3 237
$E_c(\Delta)$	3 026	3 080	3 113	3 195	3 237
$E_{mv,av}$	2 520	2 570	2 591	2 629	2 648

根据式(5)~(8)以及表 2 不同应变情况下的价带、导带本征值的有关计算结果, 用线性拟合得到的 GaN 形变势 $b = - 1.67 \text{ eV}$, $\Xi_u^\Delta = 7.03 \text{ eV}$, $a_c - a = - 7.94 \text{ eV}$, $\Xi_d^\Delta + \Xi_u^\Delta/3 - a = - 1.46 \text{ eV}$, 结果列于表 4

表 4 GaN 和 AlN 形变势计算结果 (单位: eV)

	GaN		AlN	
	本文	文献[8]	本文	文献[8]
b	- 1.67	- 1.9	- 1.28	- 2.2
Ξ_u^Δ	7.03	7.1	4.51	6.6
$\Xi_d^\Delta + \Xi_u^\Delta/3 - a$	- 1.46		- 1.12	
$a_c - a$	- 7.94	- 7.7	- 9.21	- 9.8
A_{mv}	- 2.22		- 4.16	

本文关心的是 GaN 应变层的价带带阶参数 E_{mv} 随应变的变化关系, 与带隙处理方法类似, 对于形变引起 $E_{mv,av}$ 的改变, 引入平均价带带阶参数的形变势 A_{mv} :

$$E_{mv,av} - E_{mv,0} = A_{mv} T_r(\hat{\epsilon}) \tag{9}$$

其中 $E_{mv,0}$ 是形变前的带阶参数 由表 2 平均价带 $E_{v,av}$ 随 $T_r(\hat{\epsilon})$ 变化关系的计算结果, 线性拟合得到的 GaN 形变势 A_{mv} 值列于表 4 计及价带分裂的影响时:

$$E_{mv} - E_{mv,0} = A_{mv} T_r(\hat{\epsilon}) - b \epsilon_{ax} \tag{9a}$$

对于 AlN, 取 $a_0 = 0.437 \text{ nm}$, $C_{11} = 304 \text{ GPa}$ 和 $C_{12} = 154 \text{ GPa}^{[5]}$, 计算方法与上述 GaN 相同, 对应于上述 5 个不同 a 取值的 a 、 ϵ_{ax} 和 $T_r(\hat{\epsilon})$ 值和价带、导带本征值、平均键能和带阶参数的有关计算结果列于表 3 从表 2 与表 3 的比较可以看到, GaN 应变层 a 压缩而 a 伸张, 形变分裂的价带 $E_v(2)$ 高于 $E_v(1)$ 、导带 $E_c(\Delta)$ 高于 $E_c(\Delta)$; AlN 应变层相反, a 伸张 a 压缩, 其结果是 $E_v(2)$ 低于 $E_v(1)$ 、 $E_c(\Delta)$ 低于 $E_c(\Delta)$ 。因此, 带隙变化关系式(7a)、(8a)应改变为:

$$\delta E_{\Delta}^g = (\Xi_d^\Delta + \Xi_u^\Delta/3 - a) T_r(\hat{\epsilon}) + (2\Xi_u^\Delta/3 - 2b) \epsilon_{ax} \tag{7b}$$

$$\delta E_{\Gamma}^g = (a_c - a) T_r(\hat{\epsilon}) - 2b \epsilon_{ax} \tag{8b}$$

根据表 3 数据结果和式(5)、(6)、(7b)、(8b)和(9)由线性拟合得到的 AlN 有关的形变势列于表 4

考虑价带分裂影响, AlN 应变层的带阶参数 E_{mv} 由下列式子计算:

$$E_{mv} - E_{mv,0} = A_{mv}T_r(\epsilon) + 2b\epsilon_{ax} \quad (9b)$$

在上述关于价带顶的计算和处理中,只考虑形变引起的价带分裂,没有考虑自旋-轨道(SO)分裂作用。通常价带顶的位置是在SO和形变同时作用下确定的,在SO和[001]单轴形变同时作用下,价带顶分裂成三个价带能级,它们相对于平均价带 $E_{v,av}(=0)$ 的位置 ΔE_{vj} 为^[6]:

$$\Delta E_{v2} = \frac{1}{3}\Delta_0 - \frac{1}{2}\delta E_{001} \quad (10a)$$

$$\Delta E_{v1} = -\frac{1}{6}\Delta_0 + \frac{1}{4}\delta E_{001} + \frac{1}{2}[\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E_{001} + \frac{9}{4}(\delta E_{001})^2]^{1/2} \quad (10b)$$

$$\Delta E_{v3} = -\frac{1}{6}\Delta_0 + \frac{1}{4}\delta E_{001} - \frac{1}{2}[\Delta_0^2 + \Delta_0\delta E_{001} + \frac{9}{4}(\delta E_{001})^2]^{1/2} \quad (10c)$$

其中 Δ_0 是自旋-轨道分裂作用的裂距,在不考虑自旋-轨道分裂作用时, $\Delta_0=0$,由上面式子得到, $\Delta E_{v2} = \Delta E_{v3} = -\delta E_{001}/2$,这就是表2、3的 $E_v(2)$; $\Delta E_{v1} = \delta E_{001}$,为表2、3的 $E_v(1)$ 。

在同时考虑SO和单轴形变作用时,因为取 $E_{mv,av}=0$,所以 ΔE_{v1} 、 ΔE_{v2} 和 ΔE_{v3} 中的最大值就是价带顶,表示为 $\Delta E_{vj,max}$,同时考虑SO和单轴形变作用时,式(9a)、(9b)计算价带带阶参数式应改写为:

$$E_{mv} = E_{mv,0} + A_{mv}T_r(\epsilon) - \Delta E_{vj,max} \quad (11)$$

其中等式右边第一项 $E_{mv,0}$ 是形变前立方晶体的带阶参数,第二项 $A_{mv}T_r(\epsilon)$ 是形变引起平均带阶参数的改变量,第三项 $\Delta E_{vj,max}$ 是SO与单轴形变的价带分裂使价带顶(相对于平均价带)提高对带阶参数的贡献。

4 GaN/A IN 异质结的带阶 ΔE_v 、 ΔE_c

GaN和A N的晶格常数失配量为3%,它们沿[001]方向共度生长应变层异质结时,其 a 取值与GaN应变层和A N应变层的厚度 h_1 和 h_2 有关^[6]:

$$a = \frac{a_1G_1h_1 + a_2G_2h_2}{G_1h_1 + G_2h_2} \quad (12)$$

其中切变模量 $G_i = 2(C_{11i} + 2C_{12i})(1 - C_{12i}/C_{11i})$, $i = 1, 2$,指定GaN应变层和A N应变层厚度 h_1 、 h_2 后,由上式计算 a 值,再由式(3)分别确定GaN和A N应变层的 a 值以及相应的 $T_r(\hat{\epsilon})$ 、 ϵ_{ax} 。对于GaN/A N应变层异质结,在应变层厚度比值 h_1/h_2 分别为1/100、1/10、1/3、1/1、3/1和100/1情况下,由式(12)和式(3)计算它们的 a 和 a_i 并确定其 ϵ_{axi} 和 $T_r(\hat{\epsilon})$ 值,然后根据表4形变势的计算结果,采用式(11)分别计算GaN、A N应变层的带阶参数 E_{mv} ,并由下式计算它们的价带带阶 ΔE_v 值:

$$\Delta E_v = E_{mv2} - E_{mv1} \quad (13)$$

计算中,GaN和A N的SO分裂 Δ_0 都取0.011eV^[8], $\delta E_{001} = 2b\epsilon_{ax}$,GaN、A N的形变势 b 、 A_{mv} 取自表4的计算结果, $E_{mv,0}$ 取自表1的结果,最后计算结果列于表5。表中 ΔE_v 为正值表示GaN的价带顶比A N的价带顶高。

表 5 GaN 应变层带阶参数 E_{mv1} 和 AlN 应变层带阶参数 E_{mv2} 以及 GaN/AlN 应变层异质结价带带阶 ΔE_v 随应变层厚度比 h_1/h_2 的变化关系 (长度单位: nm, 能量单位: eV)

h_1/h_2	1/100	1/10	1/3	1/1	3/1	100/1
a	0.4370	0.4388	0.4401	0.4433	0.4466	0.4500
a_1	0.4635	0.4624	0.4603	0.4569	0.4535	0.4500
E_{mv1}	1.673	1.676	1.681	1.690	1.700	1.709
a_2	0.4370	0.4359	0.4339	0.4307	0.4274	0.4240
E_{mv2}	2.642	2.623	2.581	2.513	2.443	2.375
ΔE_v	0.97	0.95	0.90	0.82	0.74	0.67
ΔE_c	0.71	0.71	0.72	0.74	0.76	0.77

根据表 5 中 ΔE_v 值计算结果, 可以由下式计算相应的导带带阶 ΔE_c 值:

$$\Delta E_c = \Delta E_g - \Delta E_v \quad (14)$$

其中 ΔE_g 是所指定的应变状态下, 应变层 AlN 与 GaN 禁带宽度的差值, 即:

$$\Delta E_g = E_{g0}(\text{AlN}) - E_{g0}(\text{GaN}) + \delta E_g(\text{AlN}) - \delta E_g(\text{GaN}) \quad (15)$$

其中 $E_{g0}(\text{AlN})$ 和 $E_{g0}(\text{GaN})$ 是形变前的 AlN 和 GaN 的禁带宽度, 取准粒子能带的计算结果^[4], 分别为 4.9 eV 和 3.1 eV, 利用表 4 形变势的计算结果, 由式(7b)和式(8a)分别计算形变引起的带隙改变量 $\delta E_g(\text{AlN})$ 和 $\delta E_g(\text{GaN})$. 最后由式(14)得到不同应变状态下的 ΔE_c , 计算结果见表 5. 表中 ΔE_c 为正值表示 GaN 的导带底($E_c(\Gamma)$)低于 AlN 的导带底($E_c(\Delta)$).

5 讨论

(1) GaN 和 AlN 的晶格常数 a_0 不同(分别为 0.450nm 和 0.437nm), 在它们生长无位错的 GaN/AlN 应变层异质结时, 异质结两侧的晶格常数各自发生变化而趋于相同, 即 $a(\text{GaN}) = a(\text{AlN}) = a$, 与此同时, 垂直于界面的晶格常数也发生改变, 形变使 GaN 和 AlN 应变层偏离立方结构. 根据弹性能最小原理, 可计算得到 a 值和 GaN 与 AlN 的层厚度比值 h_1/h_2 有关, 从表 5 的 a 值的计算结果看到, h_1/h_2 由 1/100(近似于以 AlN 为衬底生长的 GaN/AlN 应变层异质结, AlN 为立方结构)改变到 100/1(近似于以 GaN 为衬底生长的应变层 GaN/AlN 异质结, GaN 为立方结构), 相应的 a 由 0.437nm 改变到 0.450nm; 表中 AlN 的带阶参数 E_{mv2} 的相应计算结果表明, 当 AlN 层接近立方结构(即 a 接近 0.437nm)时 E_{mv2} 值较大(为 2.642eV), a 伸张形变使带阶参数 E_{mv2} 值减小; 表中 GaN 的带阶参数 E_{mv1} 的计算结果也表明, 当 GaN 层接近立方结构(即 a 接近 0.450nm)时 E_{mv1} 值较大(为 1.709eV), a 压缩形变使带阶参数 E_{mv1} 值减小; 总之, 不管 a 伸张或压缩, 偏离立方结构的形变总是使带阶参数 E_{mv} 值变小.

从表 5 还可以看到, 在 GaN/AlN 应变层异质结中, 随着 GaN 和 AlN 应变层厚度比值 h_1/h_2 的改变, 其价带带阶 ΔE_v 和导带带阶 ΔE_c 都有一定的变化, h_1/h_2 由 1/100 ($a = 0.437\text{nm}$) 改变到 100/1 ($a = 0.450\text{nm}$) 时, ΔE_v 值由 0.97eV 减小到 0.67eV, ΔE_c 值由 0.71eV 增加到 0.77eV, 因此, 价带带阶 ΔE_v 和导带带阶 ΔE_c 可以通过改变应变状态加以适当调整的.

(2) 处于不同应变条件下 GaN/AlN 的 ΔE_v 值, 目前尚未见到可作为直接比较的实验

研究或理论计算的数据结果,只能参考一些忽略应变效应的有关研究结果:文献[9]在非极性界面(110) GaN/A N 超晶格的LM TO 自洽计算中,不考虑应变效应,计算中取A N 与 GaN 晶格常数都采用它们的平均值0.4435nm,所得到的 $\Delta E_v = 0.81\text{eV}$;在高斯轨道从头赝势法的带阶计算中^[10]得到的 $\Delta E_v = 0.738\text{eV}$,该文引用的Albanest等人采用LM TO 方法的理论计算值为0.85eV;如果对表5不同应变状态下的 ΔE_v 值求平均,本文的 ΔE_v 平均值为0.82eV,与上述忽略应变效应的计算结果比较接近;另一方面我们也注意到,本文计算结果中展示的 ΔE_v 随 a 的变化规律与Walle^[6]采用超原胞从头赝势法对Ge/Si应变层异质结 ΔE_v 的研究结果相当一致:文献[6]的结果是,以Si为衬底的Ge/Si($a = 0.543\text{nm}$)的 $\Delta E_v = 0.84\text{eV}$,以Ge为衬底的Ge/Si($a = 0.565\text{nm}$) $\Delta E_v = 0.31\text{eV}$,其变化率是, a 每增加0.01, ΔE_v 值减小0.24eV;而本文对GaN/A N 的计算结果(见表5)是,以A N 为衬底($a = 0.437\text{nm}$)的 $\Delta E_v = 0.97\text{eV}$,以GaN为衬底($a = 0.450\text{nm}$)的 $\Delta E_v = 0.67\text{eV}$,其变化率是 a 每增加0.01nm时, ΔE_v 减小0.23eV,本文与文献[6]的价带带阶 ΔE_v 随 a 的变化率的计算结果相当接近。由于目前尚缺乏有关GaN/A N 应变层异质结带阶的实验数据,本文计算结果的准确性仍有待进一步实验验证;然而,从上述忽略应变效应的有关GaN/A N 的 ΔE_v 值的理论研究结果以及 ΔE_v 随 a 变化率的计算结果上看,本文的计算结果是合理的。

(3) 本文基于能带排列理论计算中的平均键能方法,采用从头赝势能带计算方法研究了(001)界面应变对GaN、A N 能带、平均键能 E_m 和带阶参数 E_{mv} 的影响,并借助于半导体材料的形变势(b , Ξ_{d+}^A , $\Xi_{u-}^A/3$, a , a_c , a 等)的研究结果和带阶参数形变势(A_{mv})的计算结果,进一步预言了不同生长厚度(即不同应变状态)情况下异质结的能带排列。在该异质结能带排列的研究方法中,只要取得体材料的带阶参数 E_{mv} 和带阶参数形变势 A_{mv} 的理论计算结果,用到的其它材料参数如晶格常数、弹性系数、形变势 b 和 Ξ_{d+}^A , $\Xi_{u-}^A/3$, a , a_c , a 等以及SO裂距 Δ_0 等,如果是成熟的半导体材料,均可以取自实验值,以增强研究结果的可靠性和实用性。

参 考 文 献

- [1] 王仁智,黄美纯.中国科学(A辑),1992,(10):1072~1078;S.H.Ke,R.Z.Wang and M.C.Huang,Phys Rev.,1994,**B49**(15):10495~10501.
- [2] Steven L. G.,Ho K. M. and Cohen M. L.,Phys Rev.,1979,**B19**(4):1774~1782.
- [3] Bachelet G. B.,Hamann D. R. and Schluter M.,Phys Rev.,1982,**B26**:4199.
- [4] Rubio A.,Corkill J. L.,Cohen M. L. et al.,Phys Rev.,1993,**B45**:11810.
- [5] Kim K.,Lambrecht W. R. L. and Begall B.,Phys Rev.,1996,**B53**(24):16310~16325.
- [6] Van de Walle C. G.,Martin R. M.,Phys Rev.,1986,**B34**(8):5621~5634.
- [7] Rieger M. M. and Vogl P.,Phys Rev.,1993,**B48**(19):14276~14287.
- [8] Fan W. J.,Li M. F. and Chong T. C.,J. Appl Phys.,1996,**79**(1):188~194.
- [9] Ke S. H.,Zhang K. M. and Xie X. D.,J. Appl Phys.,1996,**80**(5):2918~2921.
- [10] Chen X.,Hua X.,Langlois J. M. et al.,Phys Rev.,1996,**B53**(39):1377~1387.

Deformation Potentials of GaN and AlN, and Band Offsets at GaN/AlN Heterojunction

He Guomin, Wang Renzhi, Wu Zhengyun, Zheng Yongmei, Cai Shuhui

(Department of Physics, Xiamen University, Xiamen 361005)

Received 15 October 1997, revised manuscript received 19 May 1998

Abstract The effect of strain along [001] orientation on band structure of Zinc-blende GaN and AlN, average bond energy E_m , and band offset parameters E_{mv} are investigated by the *ab initio* mixed-basis pseudopotentials. When obtaining the deformation potential of E_{mv} for GaN and AlN, the band offsets of strained-layer heterojunction GaN/AlN under different growth thicknesses can be predicted.

PACC: 7125C, 7125T