

InGaAsSb 四元合金材料禁带宽度的计算方法

刘超 魏志鹏 安宁 何斌太 刘鹏程 刘国军

Calculation methods of InGaAsSb quaternary alloy band gap

Liu Chao Wei Zhi-Peng An Ning He Bin-Tai Liu Peng-Cheng Liu Guo-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, **63**, 248102 (2014) DOI: 10.7498/aps.63.248102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.248102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2014/V63/I24>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

互注入垂直腔表面发射激光器的多次偏振转换特性研究

Multiple polarization switching in mutually coupled vertical-cavity surface emitting lasers

物理学报.2015, 64(2): 024208 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.024208>

基于外光注入互耦合垂直腔面发射激光器的混沌随机特性研究

Chaotic randomness of mutually coupled vertical-cavity surface-emitting laser by optical injection

物理学报.2015, 64(2): 024209 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.024209>

基于次谐波调制光注入半导体激光器获取窄线宽微波信号的实验研究

Acquiring narrow linewidth microwave signals based on an optical injection semiconductor laser under subharmonic microwave modulation

物理学报.2014, 63(24): 244204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.244204>

氢化物气相外延生长高质量 GaN 膜生长参数优化研究

Optimization of the parameters for growth high-quality GaN film by hydride vapor phase epitaxy

物理学报.2013, 62(20): 208101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.208101>

无序双层六角氮化硼量子薄膜的电子性质

Electronic properties of disordered bilayer hexagonal boron nitride quantum films

物理学报.2012, 61(17): 178101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.178101>

InGaAsSb 四元合金材料禁带宽度的计算方法*

刘超 魏志鹏† 安宁 何斌太 刘鹏程 刘国军‡

(长春理工大学, 高功率半导体激光国家重点实验室, 长春 130022)

(2014年6月6日收到; 2014年8月17日收到修改稿)

讨论了计算 InGaAsSb 四元合金材料禁带宽度常用的 Glisson 方法和 Moon 方法, 比较了它们的计算结果. 将两者化成相同形式下的等价公式后发现, 二者都只考虑了 Γ 点带隙弯曲因子对禁带宽度的影响. 通过考虑自旋轨道分裂带对价带的影响, 提出一种将自旋轨道分裂带弯曲因子引入计算 InGaAsSb 禁带宽度的新方法. 研究表明, 该方法计算结果的准确性要优于两种常见的方法.

关键词: InGaAsSb, 禁带宽度, 弯曲因子

PACS: 81.05.Ea, 42.55.Px, 81.15.Hi

DOI: 10.7498/aps.63.248102

1 引言

2—5 μm 波段包括了许多重要的分子特征谱线, 而且随着新型光纤特别是氟化物玻璃光纤的发展, 使得在这一波长范围内传输损耗非常小, 因此工作在该波段的半导体激光器应用领域非常广泛^[1-3]. 与 GaSb 衬底匹配的 InGaAsSb 四元合金材料禁带宽度可以覆盖 1.7—4.4 μm 波段, 是工作在该波段的半导体激光器、探测器的首选材料. 然而, InGaAsSb 四元合金材料体系下的光电子设备由于缺少准确的材料参数而受到限制^[4,5]. 例如同 GaSb 衬底匹配时, 使用 Glisson 方法和 Moon 方法得到的 InGaAsSb 禁带宽度在 In 组分为 0.5 时相差达到 0.185 eV. 由于 InGaAsSb 的禁带宽度易受弯曲因子的影响, 不同的计算方法得到的波长差往往可达数百纳米, 因此确定一种精确的计算方法非常必要.

Glisson 方法和 Moon 方法是计算 InGaAsSb 禁带宽度常用的方法^[6,7]. 前者是将弯曲因子引

入相关的三元材料再用插值法得到四元材料禁带宽度, 后者通过插值法利用二元材料禁带宽度获得四元材料禁带宽度再减去弯曲因子的影响. 本文把 InGaAsSb 四元材料看作一个整体, 将 Γ 点带隙弯曲因子的影响引入 InGaAsSb 导带位置的计算, 同时考虑自旋分裂带对价带的影响, 通过导带和价带的电势差得到禁带宽度. 计算结果显示 In 组分不超过 0.72 时, 新方法明显优于两种常见的计算方法. InGaAsSb 作为激光器有源区材料时, In 组分一般不会超过 0.5^[8-11], 该方法有望在中红外半导体激光器中获得良好应用.

2 InGaAsSb 四元材料禁带宽度的计算方法

插值法是估算多元材料许多物理参数的有效工具. 利用插值法, 三元材料参数可以从二元材料参数推导出来. 与三元材料 $\text{AB}_x\text{C}_{1-x}$ 参数有关的线性插值公式为

$$T_{\text{ABC}} = xT_{\text{AB}} + (1-x)T_{\text{AC}}. \quad (1)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 61076039, 61204065, 61205193, 61307045)、高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20112216120005)、吉林省科技发展计划(批准号: 20121816, 201201116)和高功率半导体激光国家重点实验室基金(批准号: 9140C310101120C031115)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zhipengwei@gmail.com

‡ 通讯作者. E-mail: gjliu626@126.com

这里 T 是指晶格常数、弹性刚度等物理参数. 一些物理参数 (例如晶格常数) 和组分呈线性关系, 可以直接用方程 (1) 计算. 但是实验数据表明禁带宽度与组分的关系是非线性的, 在计算中需要引入弯曲因子. 三元材料 AB_xC_{1-x} 禁带宽度的计算公式为^[4]

$$E_{g_{ABC}} = xE_{g_{AB}} + (1-x)E_{g_{AC}} + x \cdot (1-x)C_{ABC}, \quad (2)$$

三元材料禁带宽度的完整数据集合几乎是不可得到的, 一般三元材料的禁带宽度通过方程 (2) 获得.

四元材料 $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ 也可以看作是由四种二元材料 AC, AD, BC, BD 构成的, 其禁带宽度可以通过相关的二元材料禁带宽度推导出来. 在计算四元合金材料禁带宽度时, Moon 等^[13] 使用下式

$$E_{g_{ABCD}} = xyE_{g_{AC}} + x(1-y)E_{g_{AD}} + (1-x)yE_{g_{BC}} + (1-x)(1-y)E_{g_{BD}} - [x(1-x)[yC_{ABC} + (1-y)C_{ABD}] + y(1-y)[xC_{ACD} + (1-x)C_{BCD}]. \quad (4)$$

对方程 (3) 和方程 (4) 的区别, Williams 等^[12] 指出, 在中心方程 (3) 给出的是四种三元材料对带隙弯曲的平均影响, 方程 (4) 给出的是两种亚点阵对弯曲的平均贡献.

从物理意义上说, 禁带宽度是材料导带最低点和价带最高点的电势差. InGaAsSb 是直接带隙半导体材料, Γ 能谷决定导带位置, 因此 InGaAsSb 导带位置主要受 Γ 点带隙弯曲因子的影响. 方程 (3) 和 (4) 使用的弯曲因子即是指 Γ 点带隙弯曲因子. 我们先来确定 $In_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ 导带电势

$$E_{InGaAsSb}^c = xyE_{InAs}^c + x(1-y)E_{InSb}^c + y(1-x)E_{GaAs}^c + (1-x)(1-y)E_{GaSb}^c - [x(1-x)[yC_{InGaAs}^{\Gamma} + (1-y)C_{InGaSb}^{\Gamma}] + y(1-y)[xC_{InAsSb}^{\Gamma} + (1-x)C_{GaAsSb}^{\Gamma}], \quad (5)$$

其中 E_g 是禁带宽度, C 是弯曲因子, 在 Γ 点带隙、 X 点带隙、 L 点带隙以及自旋轨道分裂带中均存在, 通常是指 Γ 点带隙弯曲因子, 它是经验值, 不同的研究小组给出的弯曲因子略有不同.

四元材料 $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ 包含四种三元材料 $A_xB_{1-x}C$, $A_xB_{1-x}D$, AC_yD_{1-y} , BC_yD_{1-y} . 在计算四元材料的禁带宽度时, 如果四种三元材料的禁带宽度是已知的, Williams 等^[12] 通过插值法得到四元合金材料的禁带宽度:

$$E_{g_{ABCD}} = \frac{x(1-x)[yE_{g_{ABC}} + (1-y)E_{g_{ABD}}] + y(1-y)[xE_{g_{ACD}} + (1-x)E_{g_{BCD}}]}{x(1-x) + y(1-y)}. \quad (3)$$

其中 E^c 是导带电势, C^{Γ} 是 Γ 点带隙弯曲因子. 下一步确定 InGaAsSb 价带电势. 自旋轨道分裂带可以影响价带位置^[14], InGaAsSb 的禁带宽度与自旋轨道分裂能接近, 受自旋轨道分裂带的影响尤其明显. 自旋轨道分裂带中存在弯曲因子, 它对价带的影响应该体现出来. 考虑到自旋轨道分裂带的影响, 将价带电势写成

$$E^v = E^{v,av} + \frac{1}{3}\Delta_0 \quad (6)$$

的形式^[15], 其中 E^v 是价带电势, $E^{v,av}$ 是轻空穴带、重空穴带和自旋轨道分裂带在 Γ 点电势最大值的平均值, Δ_0 是自旋轨道分裂能. 那么 $In_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ 价带电势可以写成如下形式:

$$E_{InGaAsSb}^v = xyE_{InAs}^{v,av} + x(1-y)E_{InSb}^{v,av} + y(1-x)E_{GaAs}^{v,av} + (1-x)(1-y)E_{GaSb}^{v,av} + \frac{1}{3} \left\{ xy\Delta_{0InAs} + x(1-y)\Delta_{0InSb} + y(1-x)\Delta_{0GaAs} + (1-x)(1-y)\Delta_{0GaSb} - [x(1-x)[yC_{InGaAs}^{\Delta} + (1-y)C_{InGaSb}^{\Delta}] + y(1-y)[xC_{InAsSb}^{\Delta} + (1-x)C_{GaAsSb}^{\Delta}] \right\}, \quad (7)$$

其中, C^{Δ} 是自旋轨道分裂带弯曲因子. 此时, 求出 InGaAsSb 导带和价带之间的电势差就得到其禁带宽度,

$$E_{g_{InGaAsSb}} = E_{InGaAsSb}^c - E_{InGaAsSb}^v. \quad (8)$$

为了方便地比较三种计算 InGaAsSb 禁带宽度的方法, 我们将方程 (3) 和 (8) 分别化成和方程 (4) 的形式相同的等价公式 (9), (10) 式:

$$E_{g_{\text{InGaAsSb}}} = xyE_{g_{\text{InAs}}} + x(1-y)E_{g_{\text{InSb}}} + (1-x)yE_{g_{\text{GaAs}}} + (1-x)(1-y)E_{g_{\text{GaSb}}} - \frac{x^2(1-x)^2[yC_{\text{InGaAs}}^{\Gamma} + (1-y)C_{\text{InGaSb}}^{\Gamma}] + y^2(1-y)^2[xC_{\text{InAsSb}}^{\Gamma} + (1-x)C_{\text{GaAsSb}}^{\Gamma}]}{x(1-x) + y(1-y)}, \quad (9)$$

$$E_{g_{\text{InGaAsSb}}} = xyE_{g_{\text{InAs}}} + x(1-y)E_{g_{\text{InSb}}} + (1-x)yE_{g_{\text{GaAs}}} + (1-x)(1-y)E_{g_{\text{GaSb}}} - [x(1-x)[yC_{\text{InGaAs}}^{\Gamma} + (1-y)C_{\text{InGaSb}}^{\Gamma}] + y(1-y)[xC_{\text{InAsSb}}^{\Gamma} + (1-x)C_{\text{GaAsSb}}^{\Gamma}]] + \frac{1}{3}[x(1-x)[yC_{\text{InGaAs}}^{\Delta} + (1-y)C_{\text{InGaSb}}^{\Delta}] + y(1-y)[xC_{\text{InAsSb}}^{\Delta} + (1-x)C_{\text{GaAsSb}}^{\Delta}]]. \quad (10)$$

通过比较方程(4), (9)和(10), 可以清楚地看到三种计算方法的联系和区别. Glisson方法和Moon方法的区别在于两者利用三元材料的弯曲因子得到的四元材料的弯曲因子不同. Glisson方法和Moon方法实际上只考虑了 Γ 点带隙弯曲因子对禁带宽度的影响, 而自旋轨道分裂带会影响价带的位置, 在计算InGaAsSb禁带宽度时应该考虑自旋轨道分裂带弯曲因子对价带的影响. 本文在处理 Γ 点带隙弯曲因子的影响时同Moon等是一致的, 但方程(10)同时将自旋轨道分裂带弯曲因子引入了InGaAsSb禁带宽度的计算中.

3 结果与讨论

首先讨论与GaSb衬底匹配时的情况. 易知当 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ 与GaSb衬底匹配时, In组分和As组分的关系为

$$y = \frac{0.38344x}{0.44263 - 0.02156x}. \quad (11)$$

与GaSb衬底匹配时 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ 禁带宽度的经验公式为^[16]

$$E_{g_{\text{InGaAsSb}}} = 0.725 - 1.035x + 0.6x^2. \quad (12)$$

利用表1中的数据, 联合方程(11)计算与GaSb衬底匹配时InGaAsSb四元合金材料的禁带宽度, 结果如图1所示.

从图1中可以看到, 在与GaSb衬底匹配的情况下, 使用Glisson方法得到的计算值偏大, 而

Moon方法正好相反. 同Glisson方法相比, Moon方法的计算值更接近实验值, 因而更准确. 这些与现有的报道一致^[17]. In组分为0.5左右时两者与经验公式的差距最大, 此时的InGaAsSb处于不互溶隙中, 材料生长困难. 图中实验数据的In组分几乎都集中在0.23以下, 这是由于In组分超过0.23时已进入材料的不互溶隙, 而且InGaAsSb作为激光器有源区材料时In组分一般较小^[18-22]的缘故. In组分超过0.72时, Moon方法最接近经验公式, 但缺乏In组分在0.5以上的实验报道. In组分不超过0.72时, 方程(10)最接近经验公式. 其中In组分在0.23以下时方程(10)的计算值与实验值之间的误差最小, 准确性远远超过Glisson方法和Moon方法.

接下来讨论InGaAsSb材料与衬底不完全匹配时的情况. 图2(a), (b)分别展示了应变完全弛豫和应变无弛豫时InGaAsSb的禁带宽度和In, As组分的关系. 从图2中可以看到, Moon方法得到的计算值最小, 方程(10)的计算值介于Glisson方法和Moon方法之间, 但在In组分较大时超过Glisson方法的计算值, 与图1表现出相同的趋势. 为了进一步比较三种计算方法的有效性, 我们列出了生长在GaSb和GaAs衬底上的一些InGaAsSb材料样品禁带宽度的实验值^[23]以及使用Glisson方法, Moon方法和方程(10)得到的计算值, 如表2所示.

表1 计算中用到的二元、三元合金材料参数

二元合金材料	$E_g/\text{eV}^{[15]}$	$E^c/\text{eV}^{[15]}$	$E^{v,av}/\text{eV}^{[15]}$	$\Delta_0/\text{eV}^{[15]}$	三元合金材料	弯曲因子/ $\text{eV}^{[6]}$			
						C^{Γ}	C^{Δ}	C^X	C^L
InAs	0.359	-6.13	-6.67	0.38	InGaAs	0.477	0.15	1.4	0.33
InSb	0.170	-5.58	-5.29	0.81	InGaSb	0.415	0.1	0.33	0.4
GaAs	1.430	-5.29	-6.92	0.34	InAsSb	0.67	1.2	0.6	0.6
GaSb	0.720	-5.23	-6.25	0.82	GaAsSb	1.43	0.6	1.2	1.2

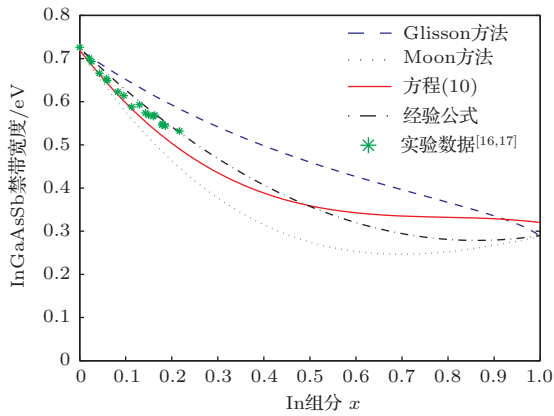


图1 与GaSb衬底匹配的InGaAsSb的禁带宽度和In组分的关系(图中实验数据来自参考文献[16, 17])

从表2中可以看到, 除样品3和样品7外 Glisson方法的计算值比实验值偏大, 而Moon方法的计算值均比实验值小. 从整体上看 Glisson方法不如Moon方法准确. 在表2所列的In组分范围内(0.178—0.259), 方程(10)的计算值与实验值最为相符. 以上结果和图1、图2中所展示的一致. 由于失配应力的影响, 三种计算方法的计算值与实验值之间存在较大偏差. 对于生长在GaSb衬底上的样品, 使用Glisson方法、Moon方法和方程(10)得到的计算值与实验值之间的平均误差率分别为9.26%, 8.82%和4.09%. 随着失配度的增加, 三种计算方法的准确性都在下降. 对于生长在GaAs衬底上的样品, 使用Glisson方法、Moon方法和方程(10)得到的计算值与实验值之间的平均误差率分

别上升到12.42%, 10.92%和4.85%. 这是由于InGaAsSb/GaAs样品的失配度更大. 从中可以看到方程(10)产生的误差远低于Glisson方法和Moon方法, 引入自旋轨道分裂带弯曲因子使得计算结果的准确性有了大幅提升.

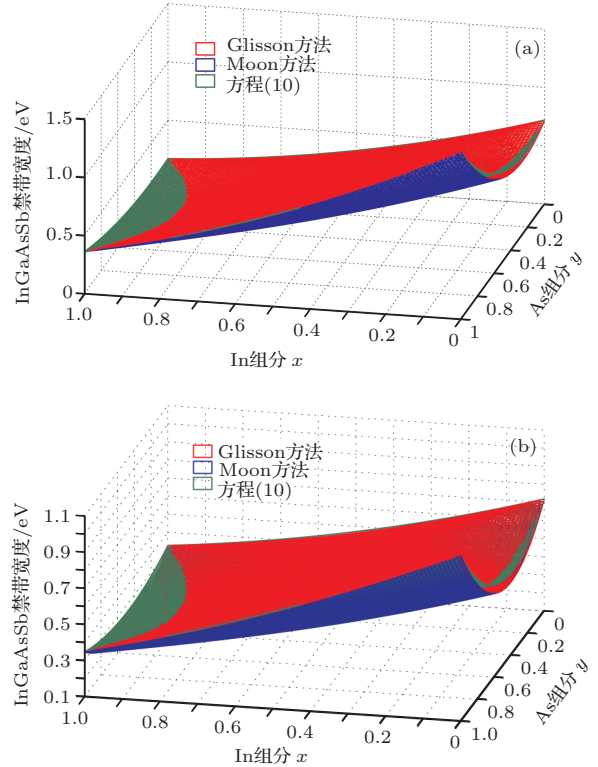


图2 InGaAsSb的禁带宽度和In, As组分的关系 (a)应变完全弛豫时; (b)应变无弛豫时

表2 MBE $In_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ 样品禁带宽度的实验值和三种方法的计算值及误差率

样品	衬底	In组分(x)	As组分(y)	禁带宽度/eV				误差率%		
				实验值 [23]	Glisson方法	Moon方法	方程(10)	Glisson方法	Moon方法	方程(10)
1	GaSb	0.207	0.1	0.528	0.581	0.483	0.510	10.04	-8.52	-3.41
2	GaSb	0.210	0.266	0.527	0.597	0.445	0.498	13.28	-15.56	-5.50
3	GaSb	0.222	0	0.545	0.526	0.526	0.532	-3.49	-3.49	-2.39
4	GaSb	0.24	0.096	0.483	0.557	0.459	0.486	15.32	-4.97	0.62
5	GaSb	0.241	0.119	0.506	0.560	0.449	0.482	10.67	-11.26	-4.74
6	GaSb	0.248	0.057	0.508	0.541	0.472	0.492	6.50	-7.09	-3.15
7	GaSb	0.259	0.02	0.544	0.514	0.485	0.496	-5.51	-10.85	-8.82
GaSb衬底下绝对误差平均误差率								9.26	8.82	4.09
8	GaAs	0.178	0.141	0.54	0.604	0.490	0.524	11.85	-9.26	-2.96
9	GaAs	0.193	0.124	0.55	0.593	0.484	0.516	7.82	-12	-6.18
10	GaAs	0.197	0.327	0.499	0.618	0.460	0.518	23.85	-7.82	3.81
11	GaAs	0.222	0.188	0.496	0.580	0.443	0.487	16.94	-10.69	-1.81
12	GaAs	0.247	0.093	0.509	0.552	0.455	0.483	8.45	-10.61	-5.11
13	GaAs	0.256	0.111	0.52	0.549	0.441	0.472	5.58	-15.19	-9.23
GaAs衬底下绝对误差平均误差率								12.42	10.92	4.85

4 结 论

本文讨论了计算InGaAsSb四元合金材料禁带宽度常用的Glisson方法和Moon方法, 通过将两者化成相同形式下的等价公式分析了二者的联系和区别, 指出上述两种方法都只考虑了 Γ 点带隙弯曲因子对禁带宽度的影响. InGaAsSb的禁带宽度与自旋轨道分裂能接近, 受自旋轨道分裂带的影响明显. 本文考虑了自旋轨道分裂带对价带的影响, 将自旋轨道分裂带弯曲因子引入InGaAsSb价带位置的计算, 提出一种计算InGaAsSb禁带宽度的新方法(方程(10)). 结果显示, 与GaSb衬底匹配的情况下, In组分小于0.23时, 新方法的计算值与实验值符合得非常好; In组分不超过0.72时, 新方法的计算值依然最准确. 与衬底不完全匹配时, 新方法、Glisson方法和Moon方法在GaSb衬底下的平均误差率分别为4.09%, 8.82%和9.26%, 在GaAs衬底下的平均误差率分别为4.85%, 10.92%和12.42% (In组分范围0.178—0.259). 以上结果表明, 在计算InGaAsSb禁带宽度时引入自旋轨道分裂带弯曲因子有效地提升了计算结果的准确性. In组分不超过0.72时, 新方法明显优于两种常见的计算方法. 该方法可为碲化物半导体器件提供良好的理论基础.

参考文献

- [1] Xing J L, Zhang Y, Xu Y Q, Wang G W, Wang J, Xiang W, Ni H Q, Ren Z W, He Z H, Niu Z C 2014 *Chin. Phys. B* **23** 017805
- [2] Yang P L, Dai S X, Yi C S, Zhang P Q, Wang X S, Wu Y H, Xu Y S, Lin C G 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 014210 (in Chinese) [杨佩龙, 戴世勋, 易昌申, 张培晴, 王训四, 吴越豪, 许银生, 林常规 2014 物理学报 **63** 014210]
- [3] Xing W X, Zhang W, Shi L C, Wang W, Zhao H, Li Z G, Huang Y D, Peng J D 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8640 (in Chinese) [邢文鑫, 张巍, 石立超, 王雯, 赵红, 李志广, 黄翊东, 彭江得 2010 物理学报 **59** 8640]
- [4] Sadao A 1987 *J. Appl. Phys.* **61** 4869
- [5] Magri R, Zunger A, Kroemer H 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 043701
- [6] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R 2001 *Appl. Phys. Rev.* **89** 5815
- [7] Guo X 2009 *M. S. Thesis* (Changchun: Jilin University) (in Chinese) [郭欣 2009 硕士学位论文 (长春: 吉林大学)]
- [8] Rodriguez J B, Cerutti L, Tournié E 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 023506
- [9] Zhang Y, Wang Y B, Xu Y Q, Xu Y, Niu Z C, Song G F 2012 *J. Semicond.* **33** 044006
- [10] Barrios P, Gupta J, Lapointe J, Aers G, Storey C 2010 *Rev. Cub. Fisica* **27** 42
- [11] Gupta J A, Barrios P J, Lapointe J, Aers G C, Storey C, Waldron P 2009 *IEEE Photon. Technol. Lett.* **21** 1532
- [12] Williams C K, Glisson T H, Hauser J R, Littlejohn M A 1978 *J. Electron. Mater.* **7** 639
- [13] Moon R L, Antypas G A, James L W 1974 *J. Electron. Mater.* **3** 635
- [14] Qteish A, Needs R J 1992 *Phys. Rev. B* **45** 1317
- [15] Van de Walle C G 1989 *Phys. Rev. B* **39** 1871
- [16] Choi H K, Turner G W 1997 *Phys. Scr.* **T69** 17
- [17] Dewinter J C, Pollack M A, Srivastava A K, Zyskind J L 1985 *J. Electron. Mater.* **14** 729
- [18] Xu G Y, Li A Z 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 218 (in Chinese) [徐刚毅, 李爱珍 2004 物理学报 **53** 218]
- [19] Zhang Y, Wang G W, Tang B, Xu Y Q, Xu Y, Song G F 2011 *J. Semicond.* **32** 103002
- [20] Shterengas L, Belenky G, Kisin M V, Donetsky D 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 011119
- [21] Paaajaste J 2013 *Ph. D. Dissertation* (Tampere: Tampere University of Technology)
- [22] Zhang Y G, Zheng Y L, Lin C, Li A Z, Liu S 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 2262
- [23] Bi W G, Li A Z, Zheng Y L, Wang J X, Li C C 1992 *J. Infrared Millim. Waves* **11** 415 (in Chinese) [毕文刚, 李爱珍, 郑燕兰, 王建新, 李存才 1992 红外与毫米波学报 **11** 415]

Calculation methods of InGaAsSb quaternary alloy band gap*

Liu Chao Wei Zhi-Peng[†] An Ning He Bin-Tai Liu Peng-Cheng Liu Guo-Jun[‡]

(National Key Laboratory of High-Power Semiconductor Lasers, Changchun University of Science and Technology,
Changchun 130022, China)

(Received 6 June 2014; revised manuscript received 17 August 2014)

Abstract

Two popular interpolation formulas of calculating InGaAsSb quaternary alloy band gap energy are discussed, and the calculation results from them are presented and compared. It is found, after the two formulas have been converted into equivalent formulas in the same forms, that in them there is taken into consideration only the influence of bowing parameter in the Γ valley. In this paper, the effect of the spin-orbit splitting on the valence band is considered, and a new method of calculating the InGaAsSb band gap is proposed by introducing the bowing parameter of spin-orbit splitting. The results show that the introduction of the bowing parameter of spin-orbit splitting can improve the accuracy of the calculation results compared with the above two methods. When the fraction of In is less than 0.72, the calculation obtained from our method is most accurate.

Keywords: InGaAsSb, band gap, bowing parameter

PACS: 81.05.Ea, 42.55.Px, 81.15.Hi

DOI: [10.7498/aps.63.248102](https://doi.org/10.7498/aps.63.248102)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61076039, 61204065, 61205193, 61307045), the Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20112216120005), the Developing Project of Science and Technology of Jilin Province, China (Grant Nos. 20121816, 201201116), and the National Key Laboratory of High-Power Semiconductor Lasers Foundation, China (Grant No. 9140C310101120C031115).

[†] Corresponding author. E-mail: zhipengwei@gmail.com

[‡] Corresponding author. E-mail: gjliu626@126.com