

$(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$ 超晶格与 闪锌矿结构 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 合金虚晶 能带的对应性*

王 仁 智 黄 美 纯

厦门大学物理系, 厦门, 361005

1990年8月28日收到

基于线性丸盒轨道原子球近似(LMTO-ASA)数值计算, 比较 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$ 超晶格与闪锌矿结构 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 合金虚晶能带本征态, 发现它们可以用 III 价和 V 价原子平面的分波态进行统一描述, 用这种方法详细分析超晶格与闪锌矿结构合金在布里渊区 Γ , $M(X)$ 和 $R(L)$ 诸点主要能带本征态之间的对应关系, 讨论了超晶格布里渊区能带折叠对本征态的影响。

PACC: 7125T

一、引 言

目前, 在 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$ 超晶格(简称 $\text{SL}(1, 1)$) 电子结构的第一原理研究中, 多数采用高精度的从头计算赝势法^[1]或 FLAPW 方法^[2], 这两种方法中的基函数都包含着多种波长的平面波, 因此, 本征态的数值结果中有许多的平面波分量, 项数很多, 不能直接从这些数值中了解它们的物理图象, 只有对特殊需要的本征态绘制波函数(模数)图后, 才能进一步分析和理解。与上述两种方法不同, 在 LMTO-ASA 的 $\text{SL}(1, 1)$ 能带计算中, 间隙区添加空原子球(简称空球), 并采用交叠原子球近似(ASA), 本征态由原子球和空球分波态构成, 其数值结果项数少, 主要包含的 s, p 分波态图象清楚, 在电子态研究中可以直接理解和应用。本文根据 LMTO 方法的这一优点, 参照 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$ 为交替的平面结构特点, 将原子球和空球分波态按原子平面简化为原子平面分波态和 III 价, V 价原子平面分波态, 从简化的数值结果中直接分析 $\text{SL}(1, 1)$ 能带本征态的对称性及其与闪锌矿结构 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 虚晶近似能带的对应关系。

二、计算方法与结果

$(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$ 超晶格属四方晶系, 与 GaAs , AlAs 闪锌矿结构材料一样, 在

* 国家自然科学基金资助的课题。

LMTO-ASA 能带计算中,需要在间隙区添加空球. 超晶格原胞基矢取为 $(a/2, a/2, 0)$, $(-a/2, a/2, 0)$ 和 $(0, 0, a)$. 考虑到 GaAs 和 AlAs 的晶格常数很接近,计算中略去了它们之间的差别,取 $a = 5.654 \text{ \AA}$. 原胞中原子球和空球的位置如下:

$$\text{原子球: Ga}(0, 0, 0) \quad \text{As}_1\left(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4}\right) \quad \text{Al}\left(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right) \quad \text{As}_2\left(-\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{3a}{4}\right)$$

$$\text{空球: } E_1\left(0, \frac{a}{2}, 0\right) \quad E_2\left(-\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4}\right) \quad E_3\left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right) \quad E_4\left(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{3a}{4}\right)$$

可以看到,上述原子球和空球 Ga- E_1 , As₁- E_2 , Al- E_3 和 As₂- E_4 分别处于 Ga, As₁, Al 和 As₂ 的原子平面 (z 平面)上,其中 Ga 和 Al 原子平面是 III 价原子平面,As₁ 和 As₂ 为 V 价原子平面.

对于 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 合金能带结构的虚晶近似,采用闪锌矿结构原胞,原胞基矢取为 $(a/2, a/2, 0)$, $(0, a/2, a/2)$ 和 $(a/2, 0, a/2)$,等效原子球 A_{III} 和 A_{V} 及相应的空球位置是

$$\text{等效原子球: } A_{\text{III}}(0, 0, 0) \quad A_{\text{V}}\left(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4}\right)$$

$$\text{空球: } E'\left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right) \quad E''\left(\frac{3a}{4}, \frac{3a}{4}, \frac{3a}{4}\right)$$

如果对闪锌矿结构原胞的原子球和空球也按 z 平面划分,则 $A_{\text{III}}-E'$ 和 $A_{\text{V}}-E''$ 分别构成 III 价和 V 价原子平面.

闪锌矿结构布里渊区 (BZ) 和 $\text{SL}(1, 1)$ 布里渊区 (SBZ) 分别绘于图 1(a) 和图 1(b) 中,因 $\text{SL}(1, 1)$ D_{2d}^2 群^[3]与闪锌矿结构 T_d^2 群的波矢群及其可允许表示采用不同的符号,所以在 BZ 和 SBZ 的对应 k 点上,所用的符号也不同,例如 BZ 的 Γ, X_z, X 和 L 点分别对应 SBZ 中的 Γ, Γ, M 和 R 点,现用 $\Gamma(\Gamma), \Gamma(X_z), M(X)$ 和 $R(L)$ 表示它们的对应性.

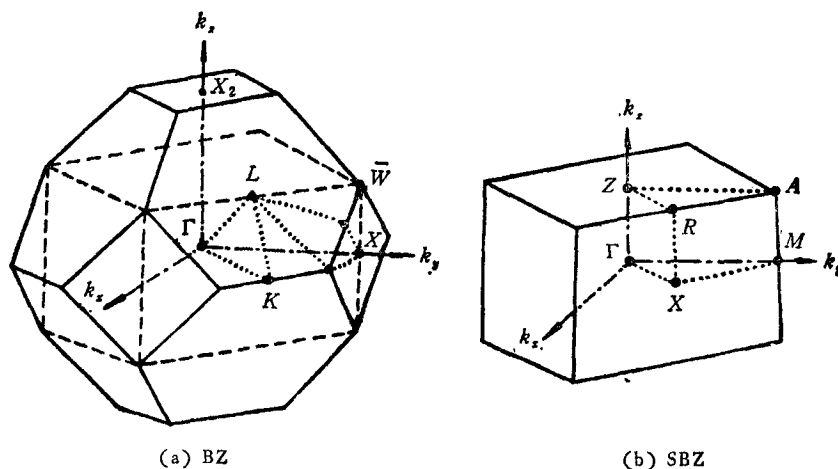
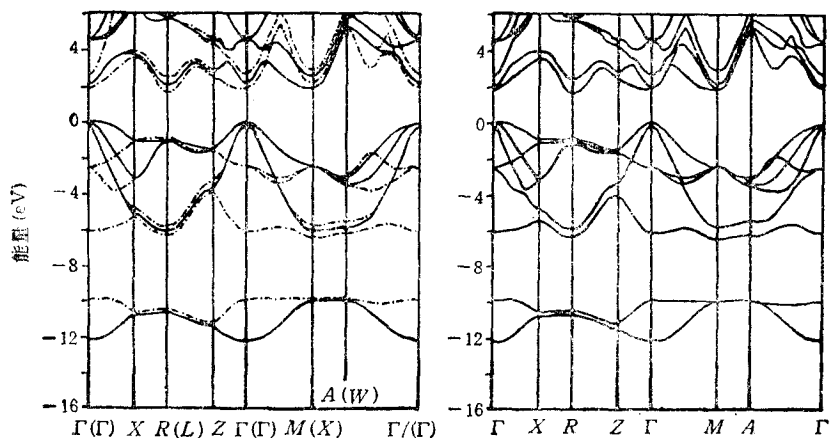


图 1 闪锌矿结构布里渊区 (BZ) 和 $\text{SL}(1, 1)$ 的布里渊区 (SBZ)

采用半相对论性的全电子势的 LMTO-ASA 能带从头计算方法^[4], 对 $(\text{GaAs})_z$

$(\text{AlAs})_1(001)$ 超晶格进行能带自洽计算,在得到自洽能带结构的同时,计算了各主要能带本征态所包含的原子球和空球的分波态(简称能带本征值分波态).然后将 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$ 能带自洽所得原子球和空球电荷密度分成 $(\text{GaAs})_1$ 和 $(\text{AlAs})_1$ 两组,作为计算 LMTO-ASA 合金虚晶能带^[5]的输入电荷密度,直接得出组分 $x=0.5$ 的 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$



(a) $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$ 能带(虚线)与 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 虚晶能带(实线)比较

(b) $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$ 超晶格能带

图 2

表 1 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$ 中原子球和空球(括号内)的 S, P 轨道按 D_{2d}^* 的 Γ, M, R 点波

矢群不可约表示变换的基函数; Γ_i 中 a, b 分别表示由 $\mathbf{k} = 0$ 和它的等价点 $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 1)$

得到的结果

		Ga	Al	As ₁	As ₂
Γ_1	a	s(s)	s(s)	s(s)	s(s)
	b	s(s)	s(s)	z(z)	z(z)
Γ_4	a	x(x)	z(z)	z(z)	z(z)
	b	z(z)	z(z)	s(s)	s(s)
Γ_5	a	x, y(x, y)	x, y(x, y)	x, y(x, y)	x, y(x, y)
	b	x, y(x, y)	x, y(x, y)	x, y(x, y)	x, y(x, y)
M_1		s	(s)	x(x)	x(x)
M_2		(s)	s	x(x)	x(x)
M_3		z	(z)	y(y)	y(y)
M_4		(z)	z	y(y)	y(y)
M_5		x, y(x, y)	x, y(x, y)	s, z(s, z)	s, z(s, z)
R_1		s, z(x + y)	x + y(s, z)	x + y(s, z)	s, z(x + y)
R_2		(x - y)	x - y	x - y	(x - y)
R_3		x - y	(x - y)	(x - y)	x - y
R_4		x + y(s, z)	s, z(x + y)	s, z(x + y)	x + y(s, z)

的虚晶能带和各主要能带本征值的分波态。为了减小计算量,在 LMTO 能带计算中引用了 Löwdin 微扰原理^[6,7]。图 2(b)给出沿 SBZ 某些对称轴的 SL(1,1) 能带,图 2(a)是同样对称轴上的 SL(1,1) 能带(虚线)与闪锌矿结构 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 合金虚晶近似能带(实线)的比较图。

为了从本征值分波态数值结果直接识别 $(\text{GaAs})_i(\text{AlAs})_i(001)$ 在 Γ , M 和 R 点主要本征值的能带(对称性)标记,考虑到 muffin-tin 轨道与原子轨道的布洛赫和基函数有相同的变换性质,分别对 Ga, Al, As_1 和 As_2 原子球和 E_1, E_2, E_3, E_4 空球的 s, p_x, p_y, p_z 态的布洛赫和基函数,用群论方法求出 R, M 和 Γ 点波矢群各不可约表示中包含的对称性基函数,并将 s, p_x, p_y, p_z 原子轨道的布洛赫和基函数简记为 s, x, y, z 列于表

表 2 $(\text{GaAs})_i(\text{AlAs})_i(001)$ 中重要能带本征态中的 Ga, Al 原子平面上的分波态; III 价, V 价原子平面分波态及其相应的 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 虚晶能带的 III, V 价原子平面分波态的计算结果

$(\text{GaAs})_i(\text{AlAs})_i(001)$ LMTO 能带						$\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 虚晶能带			
本 征 值 (eV)	分 波	原子平面分波,分波态				本征值 (eV)	分 波	虚晶分波态	
		Ga	Al	III 价	V 价			III	V
$\Gamma_{5p}(\Gamma_{15p})$ -1.77	s p	0.00 0.07	0.00 0.06	0.00 0.13	0.00 0.70	Γ_{15p} -1.79	s p	0.00 0.14	0.00 0.72
$\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 0.26	s p	0.30 0.01	0.13 0.00	0.43 0.01	0.39 0.13	Γ_{1c} 1.17	s p	0.36 0.01	0.52 0.06
$\Gamma_{4c}(X_{1c})$ 0.46	s p	0.00 0.13	0.00 0.16	0.00 0.29	0.55 0.02	X_{1c} 0.30	s p	0.00 0.29	0.56 0.00
$\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 1.19	s p	0.21 0.00	0.37 0.01	0.58 0.01	0.11 0.13	X_{3c} 0.86	s p	0.65 0.00	0.00 0.16
$M_{5p}(X_{5p})$ -4.10	s p	0.00 0.19	0.00 0.18	0.00 0.37	0.00 0.61	X_{5p} -4.10	s p	0.00 0.38	0.00 0.61
$M_{3p}(X_{3p})$ -4.08	s p	0.00 0.29	0.00 0.09	0.00 0.38	0.00 0.60	同上			
$M_{5c}(X_{1c})$ 0.32	s p	0.00 0.14	0.00 0.15	0.00 0.29	0.57 0.00	X_{1c} 0.30	s p	0.00 0.29	0.56 0.00
$M_{1c}(X_{3c})$ 0.49	s p	0.25 0.00	0.39 0.00	0.64 0.00	0.00 0.18	X_{3c} 0.86	s p	0.65 0.00	0.00 0.16
$R_{4p}(L_{3p})$ -2.66	s p	0.00 0.17	0.00 0.10	0.00 0.27	0.00 0.62	L_{3p} -2.70	s p	0.00 0.26	0.00 0.62
$R_{3p}(L_{3p})$ -2.63	s p	0.00 0.24	0.00 0.03	0.00 0.27	0.00 0.62	同上			
$R_{1c}(L_{1c})$ -0.06	s p	0.33 0.02	0.16 0.06	0.49 0.08	0.22 0.13	L_{1c} 0.35	s p	0.50 0.08	0.21 0.13
$R_{4c}(L_{1c})$ 0.78	s p	0.16 0.05	0.35 0.03	0.51 0.08	0.20 0.12	同上			

1. 表 1 括号内为空球态; Γ 点栏中的 a 和 b 分别表示由 $k=0$ 和它的等价点 $k=\frac{2\pi}{a}(0,0,1)$ 得到的结果。根据 $(\text{GaAs})_i(\text{AlAs})_i(001)$ 的 LMTO 能带本征态中所包含的 s, p 分波态成分的数值结果, 对照表 1, 可以准确地识别本征值所属的能带标记, 由此, 指定了 $\text{SL}(1, 1)$ 的 Γ, M 和 R 点的 8 个价带本征值和 4 个最低导带本征值的能带标记。

为了进一步从本征值分波态的数值结果分析 $\text{SL}(1, 1)$ 能带与闪锌矿结构 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 能带的对应关系, 对于 $\text{SL}(1, 1)$ 的各原子球和空球分波态的计算结果, 进行如下的处理: (1) 将 $\text{Ga}-E_1, \text{Al}-E_3, \text{As}_1-E_2$ 和 As_2-E_4 的原子球-空球分波态, 按 s, p, d 态分别相加, 组成所谓的 $\text{Ga}, \text{Al}, \text{As}_1, \text{As}_2$ 原子平面分波态; (2) 将 Ga, Al 两个原子平面分波态相加, 称之为 III 价原子平面分波态, 将 As_1, As_2 原子平面分波态相加, 称为 V 价原子平面分波态。对于闪锌矿 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 的各原子球和空球分波态, 也将 $A_{\text{III}}-E', A_{\text{V}}-E''$ 的原子球-空球分波态分别相加, 构成 III 价和 V 价原子平面分波态。考虑到 $\text{SL}(1, 1)$ 的主要能带(8 个价带和 4 个最低导带)和闪锌矿结构 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 虚晶近似的主要能带(4 个价带和 2 个最低导带)主要由原子球 s, p 态构成^[6], 在处理分波态数据结果时略去 d 态; 因为在 $(\text{GaAs})_i(\text{AlAs})_i(001)$ 中, As_1 和 As_2 是等价原子平面, 本征态的特征(相互之间的差别)主要由 Ga 和 Al 原子平面分波态决定。因此, 在 $\text{SL}(1, 1)$ 原子平面分波态中, 仅列出 Ga, Al 两个原子平面分波态; 分析实际计算结果发现: $\text{SL}(1, 1)$ 能带与闪锌矿结构虚晶能带之间, 其 III 价, V 价原子平面分波态有明显的对应关系, 可作为识别它们之间相互对应的能带的依据。根据上述考虑, 处理 Γ, M 和 R 点主要能带本征态的数值结果, 表 2 给出部分结果: 列出 $\text{SL}(1, 1)$ 和 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 部分能带本征值的对称性标记和对应关系; 给出 Ga, Al 原子平面分波态及 III 价, V 价原子平面分波态的数值。因为 LMTO 方法中, s 态结构常数在 Γ 点发散, 不能直接计算 Γ 点本征值和本征态, 表 2 以及下面表 3 中 Γ 点的本征值和本征态是 $k=\frac{2\pi}{a}(0.075, 0, 0)$ 点的计算值。

三、讨论与结论

1. 闪锌矿结构到 $\text{SL}(1, 1)$ 的布里渊区折叠

从图 2(a) 的 $\text{SL}(1, 1)$ 能带(虚线)与虚晶能带(实线)计算结果的比较中看到, $\text{SL}(1, 1)$ 能带数目比闪锌矿结构虚晶能带的数目多一倍。对于 $\text{SL}(1, 1)$ 的布里渊区(SBZ)内部的能带, 例如图 2(a) 中的 $\Gamma(\Gamma)-X, Z(X/2)-\Gamma(\Gamma)-M(X)$ 和 $A(W)-\Gamma(\Gamma)$ 等对称轴, $\text{SL}(1, 1)$ 能带分成两组, 其中一组是与闪锌矿结构虚晶能带直接对应的 $\text{SL}(1, 1)$ 能带, 这组能带与虚晶能带极为靠近甚至重合; 另一组是与处于 SBZ 外的闪锌矿结构 $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ 虚晶能带相对应的 $\text{SL}(1, 1)$ 能带, 这组能带可以看成是根据布里渊区折叠原理由 SBZ 外部折叠进入 SBZ 中的 $\text{SL}(1, 1)$ 能带。对于在 SBZ 表面上的 $\text{SL}(1, 1)$ 能带, 例如图 2(a) 中 $X-R(L)-Z(X/2)$ 和 $M(X)-A(W)$ 对称轴上, 与一个虚晶能带相对应的是 2 个 $\text{SL}(1, 1)$ 能带, 如果 $\text{SL}(1, 1)$ 能带属于简并的, 虚晶能带与对应的 $\text{SL}(1, 1)$ 二度简并能带基本上重合在一起。可以把对应于一个虚晶能带的 2 个非简并

的 $SL(1, 1)$ 能带按其 III 价原子平面分波态集中在 Ga 或 Al 原子平面上而划分为类 GaAs 能带或类 AlAs 能带, 例如表 2 中 $M_{3v}(X_{3v})$, $R_{3v}(L_{3v})$ 和 $R_{1c}(L_{1c})$ 是类 GaAs 能带, 而 $R_{4c}(L_{1c})$ 是类 AlAs 能带。

2. 闪锌矿结构虚晶能带与 $SL(1, 1)$ 能带的对应性

根据 $SL(1, 1)$ 的 8 个价带和 4 个最低导带的本征值分波态的数值结果, 参照表 1 对称化基函数的构成, 识别了各个能带本征值的能带标记, 然后又根据 $SL(1, 1)$ 能带与闪锌矿结构虚晶能带在 III 价, V 价原子平面分波态方面的对应关系, 确定 $SL(1, 1)$ 能带与虚晶能带之间的对应性, 所得结果列于表 3。从 III 价原子平面分波态主要集中在 Ga 原子平面或 Al 原子平面可以得出, $SL(1, 1)$ 的表 3 能带中, $R_{1v}, R_{1c}, M_{1v}, M_{3v}$ 和 $\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 是类 GaAs 能带, R_{4v}, R_{4c}, M_{2v} 和 $\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 是类 AlAs 能带。

表 3 $(GaAs)_i(AlAs)_j(001)$ 能带与 $Ga_{0.5}Al_{0.5}As$ 虚晶能带的对应性

$Ga_{0.5}Al_{0.5}As$		$(GaAs)_i(AlAs)_j(001)$					
能 带	本征值(eV)	能 带			本征值 (eV)		
Γ_{1v}	-13.76	Γ_{1v}			-13.87		
Γ_{15v}	-1.91	Γ_{4v}			-1.97		
Γ_{15v}	-1.79	Γ_{5v}			-1.78		
Γ_{1c}	1.17	Γ_{1c}			0.26		
Γ_{15c}	2.86	Γ_{4c}			2.85		
X_{1v}	-11.67	Γ_{4v}	M_{5v}		-11.65	-11.66	
X_{3v}	-7.68	Γ_{1v}	M_{1v}	M_{2v}	-7.67	-8.06	-7.31
X_{5v}	-4.10	Γ_{5v}	M_{4v}		-4.16	-4.13	
			M_{3v}	M_{3v}		-4.10	-4.08
X_{1c}	0.30	Γ_{1c}	M_{5v}		0.46	0.32	
X_{3c}	0.86	Γ_{1c}	M_{1c}	M_{2c}	1.19	0.49	1.26
L_{1v}	-12.30	R_{1v}	R_{4v}		-12.38	-12.22	
L_{1v}	-7.74	R_{1v}	R_{4v}		-7.98	-7.52	
L_{3v}	-2.70	R_{2v}	R_{1v}		-2.75	-2.73	
		R_{4v}	R_{3v}		-2.66	-2.63	
L_{1c}	0.35	R_{1c}	R_{4c}		-0.06	0.78	
L_{3c}	4.20	R_{2c}	R_{1c}		4.19	4.19	

3. 布里渊区折叠对分波态的影响

如表 2 所示, $SL(1, 1)$ 与虚晶的大多数对应能带之间, 其 III 价或 V 价原子平面分波态的数值是一致的。该结果表明, 多数能带本征态在 $SL(1, 1)$ 的布里渊区能带折叠过程中保持不变。但是, $SL(1, 1)$ 中的 $\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 和 $\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 例外, 它们的 III, V 价分波态与虚晶的 Γ_{1c} 和 X_{3c} 的 III, V 价分波态之间的数值差别较大。其原因在于, 闪锌矿结构 X_{3c} 能带折叠进入 Γ 点成为 $\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 能带, 对于 $SL(1, 1)$ 的 D_{2d}^7 群的 Γ 点波矢群而言, $\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 和 $\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 属于相同的不可约表示, 根据对称性原理, 相同不可

约表示的能带,在能量相近情况下存在“相斥作用”,所谓本征值之间的相斥作用,实际上是它们的本征态之间的相互混和的重新组合过程,这就是新近的一些研究中称之为 Γ -X 混和现象^[3]. 根据表 2 的原子平面分波态的计算结果,可以进一步认识 $\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 和 $\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 混和的一些特征:例如,将 $\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 和 $\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 的分波态相加,其 III 价, V 价的 s 分波分别为(1.01 和 0.50),而将闪锌矿结构虚晶 Γ_{1c} 和 X_{3c} 分波态相加,其 III, V 价 s 分波态分别是(1.01 和 0.52),相加之后两组 s 分波几乎相同,对于 p 分波也有类似的结果. 该结果直接引证了 $\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 和 $\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 本征态是由闪锌矿结构 Γ_{1c} 和 X_{3c} 本征态混和重新组合态,而 Γ -X 混和前后两个能带本征态的总和基本上不改变;与布里渊区表面的能带不同,在布里渊区内部,如表 2 SL(1, 1) 栏中那些没有发生 Γ -X 混和的 Γ 能带, III 价原子平面分波态在 Ga 和 Al 两个原子平面上几乎是均分的,不能划分为类 GaAs 或类 AlAs 能带. 但是发生 Γ -X 混和的 $\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 和 $\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 则不同,由于 Γ -X 混和本征态重新组合的结果,使 $\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 的 III 价原子平面分波态较集中于 Ga 原子平面上,成为类 GaAs 能带,与此同时, $\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 也成为类 AlAs 能带;从表 2 还可以看到,由于 Γ -X 混和作用,使不发生 Γ -X 混和时应接近于闪锌矿结构虚晶 Γ_{1c} (为 1.17eV) 的 $\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 本征值降低为 0.26eV,与此同时,使不发生 Γ -X 混和时应接近于闪锌矿结构虚晶 X_{1c} (为 0.86eV) 的 $\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 能带本征值提高到 1.19eV. 为了对这些本征值的数值变化作进一步的理解,将上面提到的作为虚晶能带计算输入的 $(\text{GaAs})_1$ 和 $(\text{AlAs})_1$ 两组原子球和空球电荷密度,分别作为闪锌矿结构 LMTO 能带计算的输入,直接得到 GaAs 和 AlAs 的 Γ 点 $\left(\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a}(0.075, 0, 0)\right)$ 处和 X 点的本征值. 结果表明: GaAs 的 Γ_{1c} 和 X_{3c} 的本征值分别是 0.05eV 和 0.53eV; AlAs 的 Γ_{1c} 和 X_{3c} 的本征值分别是 1.28eV 和 1.27eV. 可以看到, GaAs 的 Γ_{1c} 本征值 (0.05eV) 比 AlAs 的 X_{3c} 本征值 (1.27eV) 低得多. 与此类似,考虑 Γ -X 混和之后所得到的 SL(1, 1) 能带,其 $\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 类 GaAs 本征值 (0.26eV) 也比 $\Gamma_{1c}(X_{3c})$ 类 AlAs 本征值 (1.19eV) 低得多. Γ -X 混和使 $\Gamma_{1c}(\Gamma_{1c})$ 本征值显著降低的现象在决定 GaAs/AlAs 超晶格主要带隙的机制中起着重要的作用.

- [1] S. Ciraci and I. P. Batra, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 1223.
- [2] B. I. Min, S. Massidda and A. J. Freeman, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 1970.
- [3] Yan-Ten Lu and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **B40**(1989), 5567.
- [4] O. K. Andersen, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 3060.
- [5] 王仁智、黄美纯,厦门大学学报(自然科学版),**26**(1987),166.
- [6] 王仁智、黄美纯,计算物理,**7**(1990),85.
- [7] 王仁智、黄美纯,物理学报,**39**(1990),1135.
- [8] 薛肪时,半导体学报,**10**(1989),805.

ON THE CORRESPONDENCE OF BAND EIGENSTATES OF (GaAs)₁(AlAs)₁(001) SUPERLATTICE AND Ga_{0.5}Al_{0.5}As ALLOY

WANG REN-ZHI HUANG MEI-CHUN

Department of Physics, Xiamen University, Xiamen, 361005

(Received 28 August 1990)

ABSTRACT

Based on the LMTO-ASA numerical calculations, we contrast the band eigenstates of the (GaAs)₁(AlAs)₁(001) superlattice with those of the zincblende Ga_{0.5}Al_{0.5}As alloy. We find that they can be described unifiedly by the partial-wave states of the III and V group atomic planes. In this scheme, we analyze in more detail the correspondence relations of the band eigenstates of superlattice and zincblende alloy at Γ , $M(X)$, and $R(L)$ points. The effects of the superlattice zone folding on the eigenstates are also discussed.

PACC: 7125T