

$(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$ 系统中的有序结构 及其电子性质

段文晖 王世范^① 倪 军 顾秉林 朱嘉麟

清华大学现代应用物理系, 北京 100084

1992年7月7日收到

从原子位形概率波理论出发得到了 $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$ 系统中可能出现的、稳定的完全有序结构. 以此为基础, 利用从第一性原理出发的自洽 LMTO 方法, 系统地研究了组份 $x=0.5$ 时 5 种典型的有序结构相应的电子性质. 结果表明, 具有不同有序结构的材料的电子特性差别很大. 材料中 Ga-Ge 和 Ge-As 键的比率越高, 材料越有可能呈现金属性.

PACC: 7125T; 6155H; 6865

一、引 言

由于分子束外延、金属有机物化学汽相淀积等新型原子尺度生长技术的发展, 大量新的半导体合金和超晶格材料得以制造. 其中亚稳的 $(\text{III}-\text{V})_{1-x}\text{IV}_{2x}$ 半导体合金系统受到了特别的重视^[1-5]. 与一般的 $\text{III}_x-\text{III}'_{1-x}-\text{V}$ 、 $\text{III}-\text{V}_x-\text{V}'_{1-x}$ 和 $\text{IV}_x\text{IV}'_{1-x}$ 合金系统不一样, $(\text{III}-\text{V})_{1-x}\text{IV}_{2x}$ 合金系统的直接能隙随组份的变化呈现出“V”形变化, 并且变化的范围很大. 例如, 当组份从 $x=0$ 变到 $x=0.3$ 时, $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$ 合金材料的直接能隙从 1.5 eV 变到 0.5 eV^[2]. 这意味着可以通过对 III, IV 和 V 族原子在晶格中不同位置的重新排列得到新的有意义的电子结构. 这种合金系统中, 一般认为在正常的 III-V 族化合物半导体和 IV 族元素半导体中不存在的 III-IV 和 IV-V 键起了重要作用, 导致了电子结构的重大变化. 在这种系统中, 存在着一系列有序化合物, 例如改变晶格周期性而得到的超晶格. 有序结构下材料相应的电子结构新特点在理论上已得到一定研究. Ito 等人^[6] 和 Ohno^[7] 用赝势方法讨论了合金系统中一些完全有序结构相应的电子性质, 发现材料可能呈现金属特性. 他们的工作都是以假想的完全有序结构为出发点, 而没有讨论这些有序相的稳定性, 研究也不够全面.

最近的理论分析和实验比较表明, 原子位形概率波理论^[8,9] 是预言多组元材料晶体基态结构的有力工具, 也是分析复杂实验结果的有用手段^[9,10]. 利用这一理论, 本文首先给出了 $(\text{III}-\text{V})_{1-x}\text{IV}_{2x}$ 系统中可能出现的稳定的完全有序结构. 以此为基础, 利用从第一性原理出发的自洽 LMTO 方法^[11,12], 具体讨论了 $(\text{GaAs})_{0.5}\text{Ge}_{1.0}$ 在 5 种典型的有序结构下的不同电子特性. 类似研究方法可以推广应用到其它组份和其它类型合金系统中电子性质

^① 现在通讯地址: 山东矿业学院物理教研室, 泰安 271019.

的讨论.

二、有序结构的确定

(Ⅲ-V)_{1-x}N_{2x}系统的无序态是金刚石结构. 金刚石结构是两套面心立方格于沿体对角线平移套格得到. 根据原子位形概率波理论^[8,9], 引入原子在格点 $\mathbf{R}$ 处的占据概率 $P_i(\alpha, \mathbf{R})$, 它是第 α 套子格子 $\mathbf{R}$ 格点被 i 原子占据的统计平均值, 可表示为

$$p_i(\alpha, \mathbf{R}) = x_i(\alpha) + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} Q_i(\alpha, \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}, \quad (1)$$

其中 $x_i(\alpha)$ 为第 α 套子格子中 i 原子的浓度; $\mathbf{k}$ 为第一布里渊区内的波矢; $Q_i(\alpha, \mathbf{k})$ 为概率波振幅, 它由系统中离子间相互作用哈密顿量的能量期待值的最小值决定. 能量期待值可表示为^[8]

$$E = U_0 - \frac{x_A(1-x_A)}{2} N \sum_{\alpha, \beta} V_{\alpha\beta}(0) + \frac{N}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \lambda_{\sigma}(\mathbf{k}) |Q_{A\sigma}(\mathbf{k})|^2, \quad (2)$$

其中 x_A 为Ⅲ族原子在体系中的总浓度; N 为体系中原子总数; $V_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ 为 $\mathbf{k}$ 空间的相互作用参数, 它是实空间相互作用参数 $W^{\alpha\beta}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')$ 的 Fourier 变换; $\lambda_{\sigma}(\mathbf{k})$ 为 $V_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ 的本征值; U_0 为特定占据情况下系统的相互作用能之和, 为一常数. 对于系统的基态, E 取极小值, 要求

$$\left. \frac{\partial \lambda_{\sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} = 0, \quad \text{且 } \lambda_{\sigma}(\mathbf{k}_0) \leq 0 \quad (\mathbf{k}_0 \neq 0). \quad (3)$$

处于无序态的晶体的对称性决定了其第一布里渊区存在一些高对称点, 两种以上点群对称元素在这些点交叉, $\lambda_{\sigma}(\mathbf{k})$ 必在这些点取极值^[9]. 面心立方 Bravais 格子第一布里渊区不等价的高对称点有4个, Γ 星 $\{000\}$, X 星 $\{100\}$, L 星 $\left\{\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\}$ 和 W 星 $\left\{\frac{1}{2} 1 0\right\}$. 当 $\mathbf{k}=0$ (Γ 星) 时出现相分离情况, 而 W 星相应的波矢并不满足金刚石晶格 $\lambda_{\sigma}(\mathbf{k})$ 取极小值的条件. 因此, 确定最稳定的有序结构时只需考虑 X 星和 L 星相应的波矢. 这里标记属于同一 $\{\mathbf{k}_s\}$ 星的不同高对称点波矢为 $\mathbf{k}_{j_s}$ ($j_s=1, \dots, n$). $Q_{i\sigma}(\mathbf{k}_{j_s})$ 可表示为

$$Q_{i\sigma}(\mathbf{k}_{j_s}) = \eta_{i\sigma} \gamma_{i\sigma}(j_s) \quad (4)$$

其中 $\eta_{i\sigma}$ 为长程序参数, $\eta_{i\sigma}=0$ 时为无序态, $\eta_{i\sigma}=1$ 时为完全有序态, $\gamma_{i\sigma}(j_s)$ 为对称性系数. 完全有序时, $\eta_{i\sigma}=1$, 此时 $p_i(\alpha, \mathbf{R})$ 可进一步表示为

$$p_i(\alpha, \mathbf{R}) = x_i(\alpha) + \frac{1}{2} \sum_s \sum_{\sigma} \sum_{j_s} [\gamma_{i\sigma}(j_s) v_{\sigma}(\alpha, \mathbf{k}_{j_s}) e^{i\mathbf{k}_{j_s} \cdot \mathbf{R}}] \quad (5)$$

其中 $v_{\sigma}(\alpha, \mathbf{k}_{j_s})$ 为 $V_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ 相应于本征值 $\lambda_{\sigma}(\mathbf{k})$ 的本征函数. 令

$$\sum_{\sigma} \gamma_{i\sigma}(j_s) v_{\sigma}(\alpha, \mathbf{k}_{j_s}) = \gamma_{is}(\alpha, j_s), \quad (6)$$

则(5)式可化为

$$p_i(\alpha, \mathbf{R}) = x_i(\alpha) + \sum_{j_s} \gamma_{is}(\alpha, j_s) e^{i\mathbf{k}_{j_s} \cdot \mathbf{R}} \quad (7)$$

对完全有序结构, $p_i(\alpha, \mathbf{R})=0$ 或 1. 据此可对高对称点导致的有序结构进行分析. 当 $x=$

$\frac{1}{2}$ 时,可以得到13种不同的有序结构. 其中5种最典型也最简单的有序结构(每原胞内4个原子)的原子排列情况如下:

- 1) $\gamma_{\text{I}x}(1,3)=\gamma_{\text{V}x}(1,3)=x_{\text{I}}(1)=x_{\text{V}}(1)=x=\frac{1}{2}$, 3种原子沿 $[001]$ 方向按 $\text{III}=\text{IV}=\text{V}=\text{IV}$ 分层排列.
- 2) $\gamma_{\text{I}x}(1,3)=\gamma_{\text{V}x}(2,3)=x_{\text{I}}(1)=x_{\text{V}}(2)=x=\frac{1}{2}$, 3种原子沿 $[001]$ 方向按 $\text{III}=\text{V}=\text{IV}=\text{IV}$ 分层排列.
- 3) $\gamma_{\text{I}L}(1,1)=\gamma_{\text{V}L}(1,1)=x_{\text{I}}(1)=x_{\text{V}}(1)=x=\frac{1}{2}$, 3种原子沿 $[111]$ 方向按 $\text{III}-\text{IV}=\text{V}-\text{IV}$ 分层排列.
- 4) $\gamma_{\text{I}L}(1,1)=\gamma_{\text{V}L}(2,1)=x_{\text{I}}(1)=x_{\text{V}}(2)=x=\frac{1}{2}$, 3种原子沿 $[111]$ 方向按 $\text{III}-\text{V}=\text{IV}-\text{IV}$ 分层排列.
- 5) $\gamma_{\text{I}L}(1,1)=\gamma_{\text{V}L}(2,1)=x_{\text{I}}(1)=x_{\text{V}}(2)=x=\frac{1}{2}$, 3种原子沿 $[111]$ 方向按 $\text{III}\equiv\text{V}-\text{IV}=\text{IV}$ 分层排列.

在以上5种情形下,凡是未写出的 $\gamma_{is}(\alpha, j_s)$ 和 $x_i(\alpha)$ 均为零,而“—”,“=”和“ $\equiv$ ”分别代表单键、双键和叁键. 这样,1)和2)相应于 $[001]$ 方向超晶格,3),4),5)相应于 $[111]$ 方向超晶格. 具体的晶体结构如图1所示.

三、电子结构计算

本文中采用基于 Kohn-Sham 局域密度泛函理论的自洽 LMTO 方法来计算材料的电子结构^[11,12]. 其中有效单电子方程中的交换-关联势采用了 Vosko 等人^[13]对均匀电子气的多体结果,把交换-关联势写成局域密度的一个泛函. 除了自旋-轨道耦合之外的所有相对论效应得到了考虑. 晶体势的 Muffin-tin 近似用原子球近似代替以简化计算. 在原子球近似中,整个晶体体积用以原子位置为中心的重叠原子球来表示,原子球体积之和等于晶体体积,在原子球内的晶体势采用球对称势来近似. 原子球近似允许晶体势在整个晶胞内都可以有空间上的变化,但同时导致了几何残缺. 为此引入了组合修正项进行一级修正^[11].

本文中考虑的 $[001]$ 方向超晶格的 Bravais 格子是简单四方格子,而 $[111]$ 方向超晶格的 Bravais 格子是三方格子. 相应的空间群分别为 $P\bar{4}2m$ 和 $R\bar{3}m$. 这里不考虑形成超晶格后的晶格弛豫,则 Bravais 格子的基矢 $\mathbf{a}_i$ 为

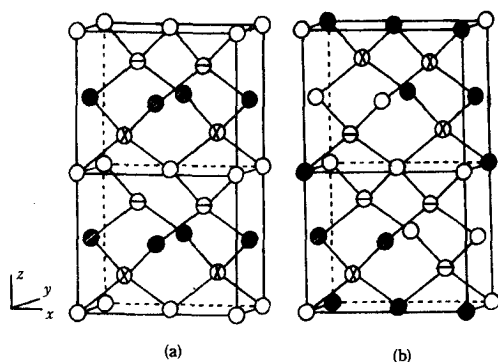


图1 超晶格晶体结构 $[001]$ 方向(a), $[111]$ 方向(b)
4种不同圆圈表示晶体内4种不同的原子位置

$$\begin{array}{cc}
 \text{[001]超晶格} & \text{[111]超晶格} \\
 \left. \begin{array}{l} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_3 \end{array} \right\} = & \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0 \right) \\ \left(\frac{a}{2}, -\frac{a}{2}, 0 \right) \\ (0, 0, a) \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{l} \left(a, \frac{a}{2}, \frac{a}{2} \right) \\ \left(\frac{a}{2}, a, \frac{a}{2} \right) \\ \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, a \right) \end{array} \right\}
 \end{array}$$

相应地,原胞内各原子的位置坐标 $\mathbf{R}_i$ 为

$$\begin{array}{cc}
 \text{[001]超晶格} & \text{[111]超晶格} \\
 \left. \begin{array}{l} \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{R}_2 \\ \mathbf{R}_3 \\ \mathbf{R}_4 \end{array} \right\} = & \left\{ \begin{array}{l} (0, 0, 0) \\ \left(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4} \right) \\ \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2} \right) \\ \left(\frac{a}{4}, -\frac{a}{4}, \frac{3a}{4} \right) \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{l} (0, 0, 0) \\ \left(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4} \right) \\ \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2} \right) \\ \left(\frac{3a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{3a}{4} \right) \end{array} \right\}
 \end{array}$$

本文中用原子球近似代替了 Muffin-tin 近似. 为了消除低对称性结构中所选取的原子球重叠过大而引入的误差, 必须在高对称间隙点上引入空原子球^[14]. 这样可以减小低对称结构下原子球之间的交叠, 使得所选取的原子球势更接近真实的晶体势. 在本文的计算中, 引入4个空原子球, 其位置坐标分别为

$$\begin{array}{cc}
 \text{[001]超晶格} & \text{[111]超晶格} \\
 \left. \begin{array}{l} \mathbf{R}_5 \\ \mathbf{R}_6 \\ \mathbf{R}_7 \\ \mathbf{R}_8 \end{array} \right\} = & \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{3a}{4} \right) \\ \left(\frac{a}{4}, \frac{3a}{4}, \frac{a}{4} \right) \\ \left(0, \frac{a}{2}, 0 \right) \\ \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2} \right) \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{l} \left(0, 0, \frac{a}{2} \right) \\ \left(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{3a}{4} \right) \\ \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2} \right) \\ \left(-\frac{a}{4}, \frac{3a}{4}, -\frac{a}{4} \right) \end{array} \right\}
 \end{array}$$

对本文所讨论的5种典型有序结构, 原胞内具体的原子占据方式如表1所示.

表1 有序结构的原子占据

		$\mathbf{R}_1$	$\mathbf{R}_2$	$\mathbf{R}_3$	$\mathbf{R}_4$
[001]超晶格	1)	■	IV	V	IV
	2)	■	V	IV	IV
[111]超晶格	3)	■	IV	V	IV
	4)	■	V	IV	IV
	5)	■	IV	IV	V

在不同的有序结构中, 由于原子的占据方式不同, 原胞内各种原子键合(即最近邻原子对)的个数是不同的, 这将严重影响材料的电子性质, 在表2中列出不同有序结构原胞内4种原子键合的数目.

表2 有序结构单位原胞内4种原子键合数

		Ⅲ—Ⅴ	Ⅳ—Ⅳ	Ⅲ—Ⅳ	Ⅴ—Ⅳ
〔001〕超晶格	1)	0	0	4	4
	2)	2	2	2	2
〔111〕超晶格	3)	0	0	4	4
	4)	1	1	3	3
	5)	3	3	1	1

本文主要是以 $(\text{GaAs})_{0.5}\text{Ge}_{1.0}$ 为例计算了各种有序结构所对应的电子结构. 计算中取晶格常数 $a=0.565\text{nm}$. K 空间高对称点标记同文献〔15〕.

1. 〔001〕方向 Ⅲ—Ⅳ—Ⅴ—Ⅳ 有序结构(情形1))和〔111〕方向 Ⅲ—Ⅳ—Ⅴ—Ⅳ 有序结构(情形3)).

在图2和图3中分别给出如上所述两种有序结构下材料的能带结构. 考虑到电子的填充情况(原胞内共有16个价电子), 图上只给出能量最低的12条能带(下同).

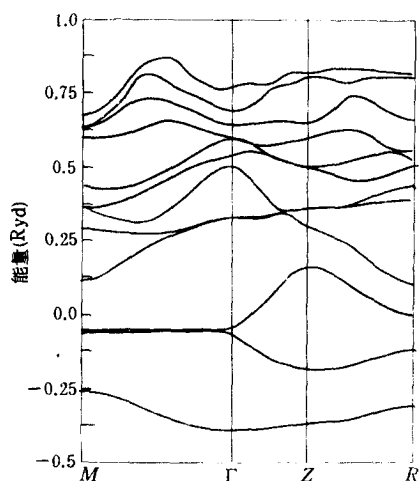


图2 〔001〕方向 $\text{Ga}=\text{Ge}=\text{As}=\text{Ge}$ 有序结构相应的能带结构

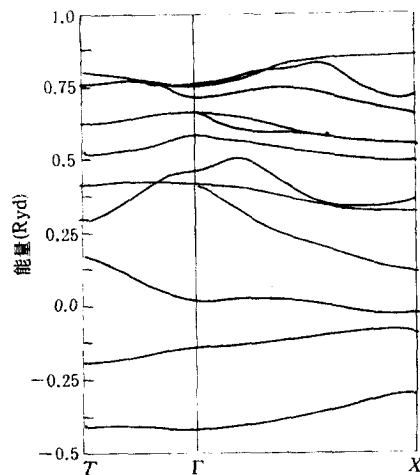


图3 〔111〕方向 $\text{Ge}-\text{Ge}=\text{As}-\text{Ge}$ 有序结构相应的能带结构

从图上可以看出, 以上两种有序结构下, 电子的第七、八和九等3条能带完全交迭, 费密能级处的能态密度将不为零, 材料是金属特性的. 这与 Ito 等人利用自洽赝势方法对〔001〕方向的 $\text{Ga}=\text{Ge}=\text{As}=\text{Ge}$ 有序结构能带计算〔6〕得到的结论一致. 与现有的关于 $(\text{Ⅲ}-\text{Ⅴ})_{1-x}\text{Ⅳ}_{2x}$ 无序半导体合金的电子结构计算及实验结果〔5,16〕相比较可以发现, 以上两种有序结构下材料的电子性质与无序半导体合金和 Ⅲ—Ⅴ 及 Ⅳ 族半导体材料的电子性质截然不同.

2. 〔111〕方向 Ⅲ—Ⅴ—Ⅳ—Ⅳ 有序结构(情形4))

图4给出〔111〕方向 $\text{Ga}-\text{As}=\text{Ge}-\text{Ge}$ 有序结构的能带结构. 可以看到, 能带结构类

似于图3中 $[111]$ 方向 $\text{Ga}-\text{Ge}\equiv\text{As}-\text{Ge}$ 的有序结构的能带结构,材料也是金属特性的.

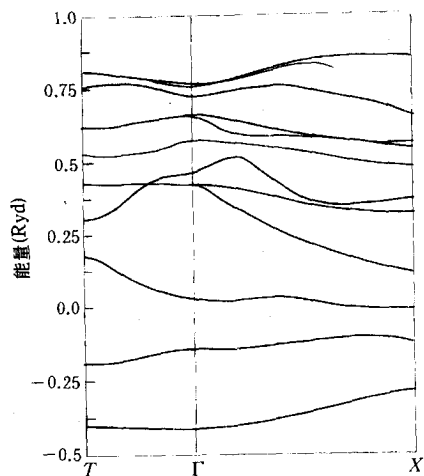


图4 $[111]$ 方向 $\text{Ga}-\text{As}\equiv\text{Ge}-\text{Ge}$ 有序结构相应的能带结构

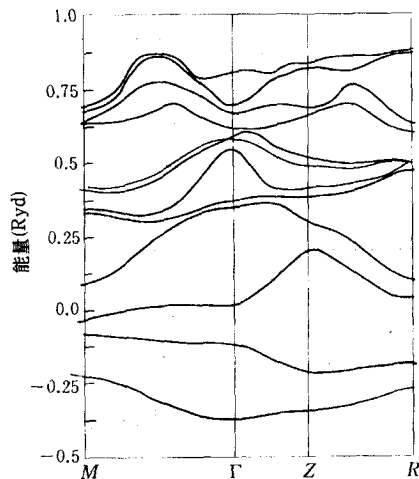


图5 $[001]$ 方向 $\text{Ga}=\text{As}=\text{Ge}=\text{Ge}$ 有序结构的能带结构

3. $[001]$ 方向的 $\text{III}=\text{V}=\text{IV}=\text{IV}$ 有序结构(情形2))

图5给出 $[001]$ 方向的 $\text{Ga}=\text{As}=\text{Ge}=\text{Ge}$ 有序结构的能带结构. 从图5可以看到, 能量最低的8条能带与第9条能带之间存在着一个能隙, 材料是半导体性的. 导带的最低点与价带的最高点均在 k 空间 ΓZ 方向的同一点上, 这表明这种超晶格半导体材料的电子和空穴都是高度各向异性的. 这必然对其输运性质产生特别的影响. 可以看到, 关于这种材料我们的计算结果与 Ohno 的自洽赝势计算结果^[7]有所不同. Ohno 的计算中第8和第9两条能带是交叉的, 没有能隙. 我们知道, 利用局域密度近似下的 LMTO 方法计算材料的电子结构, 都给出了过窄的能隙^[16-18], 而不是过宽的能隙. 因此, 我们给出的结论(材料是半导体性的)应该还是比较准确的. 当然这有待于实验的进一步检验.

4. $[111]$ 方向的 $\text{III}\equiv\text{V}-\text{IV}\equiv\text{IV}$ 有序结构(情形5))

图6给出 $[111]$ 方向的 $\text{Ga}\equiv\text{As}-\text{Ge}\equiv\text{Ge}$ 有序结构的能带结构. 由图5可知, 材料是直接能隙半导体, 价带顶和导带底均在 k 空间的 Γ 点. 这与 GaAs 化合物半导体的能带特性是一致的. 从图5还发现, k 空间 X 点处的导带最低能量相当接近于 Γ 点的导带底能量. 这应该是间接能隙的 Ge 元素半导体性质的一种体现.

四、讨论与结论

本文从原子位形概率波理论出发, 讨论了 $(\text{III}-\text{V})_{1-x}\text{IV}_{2x}$ 系统中可能出现的稳定的完全有序结构. 当组份 $x=0.5$ 时, 共得到了13种不同的完全有序结构. 在此基础上, 利用从第一原理出发的自洽 LMTO 方法, 以 $(\text{GaAs})_{0.5}\text{Ge}_{1.0}$ 为例, 对其中5种最典型分布的电子结构进行了研究. 计算表明, 具有不同原子排列的材料其电子特性可以完全不同. 材料

可能呈金属特性也可能呈半导体特性. 这与同组份 $(\text{GaAs})_{0.5}\text{Ge}_{1.0}$ 无序半导体合金材料的性质差别很大. 在 $(\text{III}-\text{V})_{1-x}\cdot\text{IV}_{2x}$ 无序合金材料中, III—IV 和 IV—V 最近邻原子对的比例较低, 材料是半导体^[5,16]. 在本文所讨论的 $[001]$ 方向 III—IV=V—IV 和 $[111]$ 方向 III—IV=V—IV 有序结构中, 所有的原子键合都是 III—IV 和 IV—V 键, 没有 III—V 和 IV—IV 键存在. 在 $[111]$ 方向 III—V=IV—IV 有序结构中, III—IV 和 IV—V 键占键总数的 75%, 而 III—V 和 IV—IV 键只占 25%. 以上 3 种有序结构下材料均是金属特性的. 在 $[001]$ 方向 III=V=IV=IV 和 $[111]$ 方向 III=V—IV=IV 有序结构中, III—V 和 IV—IV 键所占比率分别为 50% 和 75%. 这两种有序结构下材料都是半导体特性的.

因此, 材料中的 III—IV 和 IV—V 键的比率将在很大程度上影响材料的电子性质. 这意味着, 可以通过改变 $(\text{III}-\text{V})_{1-x}\text{IV}_{2x}$ 系统有序结构的原子层排列次序和有序方向来得到一些具有新的电子结构(如更窄的能隙, 特别的输运性质等)的半导体材料.

必须指出, 原子位形概率波理论给出的有序结构是由布里渊区边界高对称点决定的所有可能的最稳定的有序结构. 其中, 并没有考虑具体材料的具体能量状态(如空间相互作用能的具体数值)^[8]. 因此, 理论上推出的有序结构不一定全能在实验中观察到. 但这些有序结构的导出无疑将给实验观察提供有意义的理论指导, 并将是进一步进行电子结构计算的基础, 使得我们可以避免许多无意义的计算. 本文将原子位形概率波理论和从第一原理出发的 LMTO 方法结合, 还可以应用到其它新的合金系统电子性质研究.

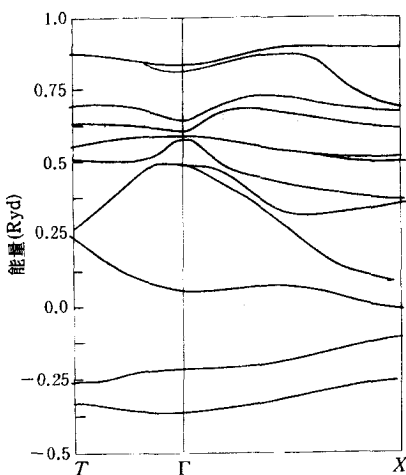


图6 $[111]$ 方向 $\text{Ga}=\text{As}-\text{Ge}=\text{Ge}$ 有序结构相应的能带结构

- [1] J. E. Greene, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B1**(1983), 229.
- [2] K. E. Newman *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1466.
- [3] K. E. Newman and J. D. Dow, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 7495.
- [4] Bing-Lin Gu, K. E. Newman and P. A. Fedders, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 9135.
- [5] Bing-Lin Gu, Jun Ni and Jia-Lin Zhu, *Phys. Rev.*, **B45**(1992), 4071.
- [6] T. Ito, A. Taguchi and T. Ohno, *Solid State Commun.*, **69**(1989), 869.
- [7] T. Ohno, *Solid State Commun.*, **74**(1990), 7.
- [8] 顾秉林、张孝文, 中国科学(A辑), (10)(1990), 1057.
- [9] Bing-Lin Gu, Jun Ni and Xiao-Wen Zhang, *J. Appl. Phys.*, **70**(1991), 4224.
- [10] 桂红、张孝文、顾秉林, 中国科学(A辑), (12)(1991), 1273.
- [11] O. K. Andersen, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 3060.
- [12] H. L. Skriver, *The LMTO Method* (Springer, Berlin, 1984).
- [13] S. H. Vosko, L. Wilk and M. Nusair, *Can. J. Phys.*, **58**(1980), 1200.
- [14] J. Keller, *J. Phys. C*, **4**(1971), L85.
- [15] L. Lax, *Symmetry Principles in Solid State and Molecular Physics* (Wiley, New York 1974).
- [16] 段文晖、顾秉林、朱嘉麟, 半导体学报, **13**(1992), 351.

- [17] A. Svane and E. Antonick, *Phys. Rev.*, **B35**(1987),4611.
[18] A. K. McMahan, *Phys. Rev.*, **B30**(1984),5835.

ORDERED STRUCTURES AND ELECTRONIC PROPERTIES OF $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$ SYSTEM

DUAN WEN-HUI WANG SHI-FAN NI JUN GU BING-LIN ZHU JIA-LIN

Department of Modern Applied Physics, Tsinghua University, Beijing 100084

(Received 7 July 1992)

ABSTRACT

The stable ordered structures of $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$ system have been studied, using the probability wave theory of the atomic configuration (PWAC). Based on the determination of the ordered structures, the electronic structures of five typical stable ordered structures for $x=0.5$ are investigated by the use of first principle self-consistent LMTO method. The calculated results show that the electronic properties of different ordered structures can be quite different. The more Ga—Ge and Ge—As atomic bonds in unit cell of ordered structures are, the more possible the ordered structures are expected to exhibit a metallic character.

PACC: 7125T;6155H;6865