

# AlN/InN 和 AlN/GaN 超晶格能带结构研究\*

芦伟徐明<sup>†</sup>魏屹何林

(四川师范大学固体物理研究所,成都 610101)

(2010年10月20日收到;2011年1月6日收到修改稿)

利用 Krönig-Penney 模型和形变势理论,从理论上探讨了纤锌矿型 AlN/InN 和 AlN/GaN 超晶格系统的能带结构及不同应变模式对能带结构的影响,计算得到了能带结构随各亚层参量变化的一般性规律、超晶格的能量色散关系、应变造成的影响以及不同亚层厚度的系统禁带宽度和导带第一子禁带宽度。研究发现,通过改变亚层厚度可以从不同形式设计能带结构,应变会改变系统禁带宽度,使带阶和子能带明显窄化,价带结构趋于复杂甚至生成准能带结构。与实验结果对比后发现,该模型适于模拟窄势阱结构超晶格,而对于宽势阱则必须考虑内建电场的作用。

**关键词:** AlN/InN 和 AlN/GaN 超晶格, Krönig-Penney 模型, 应变, 子能带

**PACS:** 78.67.Pt, 73.21.Cd, 73.20.At, 73.40.Kp

## 1. 引言

以Ⅲ族氮化物(Ⅲ-N)为代表的第三代半导体材料和以超晶格(SL)为代表的低维结构是近20年来半导体材料研究发展最快的两大领域。Ⅲ-N具有宽直接带隙,优良的光电性能和稳定性使其在光电器件以及高频、高压、高温、大功率器件领域有着广阔的应用前景。SL结构利用介观尺度下明显的量子效应,通过将不同特性材料交替生长,可以人工制造出具有特殊物性的材料,从而开拓了如能带工程等一系列新的研究领域。近年来对于Ⅲ-N SL的研究逐步升温,AlN/GaN 因其具有较大的带阶、SL 系统性能优异等特点引起了广泛关注,利用 AlN/GaN SL 子带间跃迁特性研制近红外通信窗口( $1.3\text{--}1.55\text{ }\mu\text{m}$ )波段超高速光电器件是当前最主要的应用研究之一,但其对制备条件要求较高<sup>[1-6]</sup>。AlN/InN 具有Ⅲ-N 最大的带阶(导带为 3.62 eV, 价带为 1.81 eV),约是 AlN/GaN 带阶(导带为 1.97 eV, 价带为 0.8 eV)的两倍<sup>[7]</sup>,对能带的调制作用强,子带隙能够轻易覆盖  $1.3\text{--}1.55\text{ }\mu\text{m}$  波段,是能带工程的最佳研究对象之一。此外有研究表明,能够通过二元Ⅲ-N SL 结构来制备准三元Ⅲ-N,这种

准三元Ⅲ-N 与真正的Ⅲ-N 相比在某些方面具有更加优异的性质,因此可以利用该结构提高器件性能<sup>[8]</sup>。所以,AlN/InN SL 系统在光电器件领域具有潜在的巨大应用价值。

Krönig-Penney(K-P)模型是近似计算 SL 和量子点能带结构的有效模型<sup>[9-12]</sup>,本文利用该模型研究了纤锌矿型 AlN/InN 和 AlN/GaN 第一类 SL 能带结构及能带随亚层参量变化的关系,利用形变势理论研究了不同应变情况对应变层和能带结构的影响,计算出 SL 系统禁带宽度和导带第一子禁带宽度,并与当前的实验结果进行对比以讨论模型的有效性。最后对 SL 模拟三元合金进行了初步的探讨。

## 2. 计算方法

本文所讨论的 SL 系统能带结构采用 K-P 模型结合有效质量理论和能带近似法计算,忽略横向量子限制效应、应变效应、晶体场劈裂和内建电场等因素,其结构如图 1 所示,其中  $a$  为阱层厚度,  $b$  为垒层厚度,周期长度  $l = a + b$ ,  $z$  轴垂直于界面且为载流子传播方向,纵轴表示势垒高度。SL 系统的势场为周期势,一个周期长度内的势场可表示为

\* 教育部留学回国人员科研启动基金(批准号:20071108)资助的课题。

† 通讯联系人。E-mail: hsuming\_2001@yahoo.com.cn

$$V(z) = \begin{cases} 0 & (0 \leq z \leq a), \\ V_0 & (-b \leq z \leq 0), \end{cases} \quad (1)$$

其他区域  $V(z) = V(z + n'l)$ , 其中  $n' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, V_0$  为势垒高度, 它等于材料的带阶.

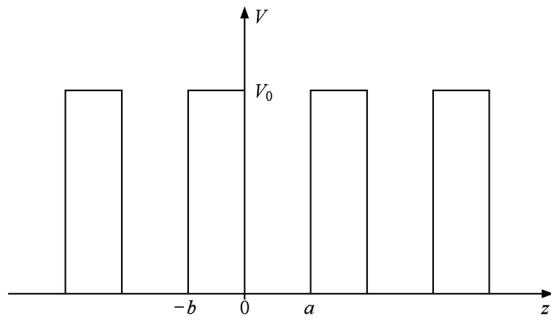


图 1 SL 结构示意图

通过求解系统哈密顿方程

$$H = \left[ -\frac{\hbar^2}{m_i^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \psi(z), \quad (2)$$

可得到特征方程

$$f_{ab} = \cos(kl) = \begin{cases} \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) - \frac{1}{2} \left( \frac{\beta}{\alpha} - \frac{\alpha}{\beta} \right) \\ \times \sinh(\beta b) \sin(\alpha a) & (E \leq V_0), \\ \cos(\beta' b) \cos(\alpha a) - \frac{1}{2} \left( \frac{\beta'}{\alpha} + \frac{\alpha}{\beta'} \right) \\ \times \sin(\beta' b) \sin(\alpha a) & (E \geq V_0), \end{cases} \quad (3)$$

式中

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\sqrt{2m_1^* E}}{\hbar}, \\ \beta &= \frac{\sqrt{2m_2^* (V_0 - E)}}{\hbar}, \\ \beta' &= \frac{\sqrt{2m_2^* (E - V_0)}}{\hbar}. \end{aligned}$$

这里  $E$  为载流子能量,  $m_1^*$  和  $m_2^*$  分别为阱层和垒层的载流子有效质量,  $k$  为 SL 波矢, 它的方向与  $z$  轴平行. 考虑到实际生长过程中 III-N 通常沿  $c$  轴方向生长, 因此选取两种晶体沿  $c$  轴的单分子层为基本生长单位, 亚层厚度即为

$$a = \frac{m}{2} c_i,$$

$$b = \frac{n}{2} c_i,$$

其中  $c_i$  为  $c$  轴晶格常数,  $i$  表示阱层或者垒层材料,  $m$  和  $n$  分别为阱层和垒层单分子层数. 下面均用  $m$

和  $n$  表示各亚层厚度.

### 3. 能带结构讨论

#### 3.1. 无应变情形

对于 AlN/InN SL 的导带, 选取 InN 导带底为势能参考零点, 相关参量采用文献[7, 13] 中的值, 通过求解  $f_{ab}$  得到能量色散关系如图 2 所示, 其中纵坐标为能量  $E$ , 横坐标为  $k$  与  $l$  的乘积. 价带因为包含重空穴 (hh) 带、轻空穴 (lh) 带和自旋-轨道 (so) 带三个分裂能带, 相当于嵌套了数个周期势结构, 所以情况较为复杂. 对价带加以变换, 以 InN 价带顶为势能零点, 并认为亚层内 hh 带、lh 带和 so 带相互独立且 hh 带与 lh 带在  $\Gamma$  点简并, 将各个周期势系统单独处理, 可得到价带的色散关系如图 3 所示, 图中给出了与 InN 的 hh 带、lh 带和 so 带有关的子带系图.

通过对 AlN/InN SL 导带和价带的研究可以发现一些 K-P 模型的一般规律. 微布里渊区能带分布与普通能带结构类似, 能量越高允带和禁带越宽. 能带系统以  $V_0$  为参考点分为 I 区和 F 区两个区域, 阵层参量的改变主要影响 I 区, 垒层的改变主要影响 F 区. F 区底部若干电子伏范围内能带受多种因素影响, 易出现能带合并及宽窄能带不规则相间的情况.

对于亚层厚度和载流子有效质量与能带结构的关系, 就总体而言, 周期长度和有效质量越大, 子能带越多、能带位置越低、允带和禁带宽度越小. 但对具体范围进行考察, 却与上述规律有所出入. 势阱厚度和载流子有效质量单独改变时, I 区和 F 区的能带变化均与上述规律相符,  $m$  和  $m_1^*$  增大有使 F 区能带变密集的趋势, 但远不如垒层参量的改变有效; 对于垒层,  $n$  和  $m_2^*$  单独改变时只有在 F 区才大致符合上述规律, 对 I 区的影响仅限于明显地减小子允带宽度, 增大带隙并将能带上移, 但对于该区能带数量不起作用. 一般情况下, 垒层与阱层的厚度或有效质量之比越大, I 区能带越少、位置越高、允带越窄、禁带越宽. 当  $m, n$  和有效质量足够大时, 较低位置的允带宽度变得相当小, 甚至可以小于  $10^{-13}$  eV, 可视为单能级; 基态与势阱底部的能量差也能达到 meV 量级以下, 几乎可忽略不计; 微能带在 I 区和 F 区底部附近形成准连续的带状结构.  $c$  轴

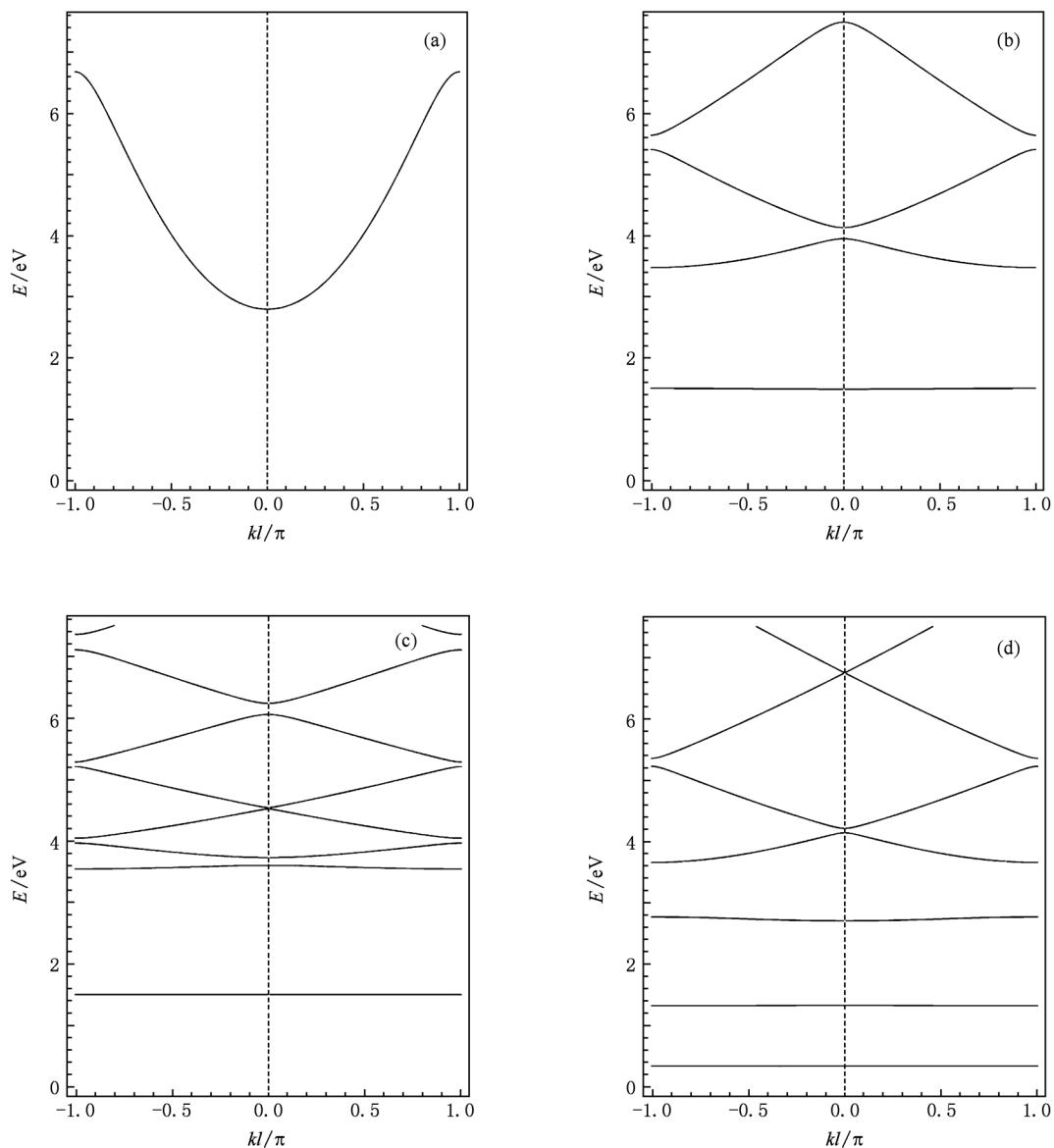


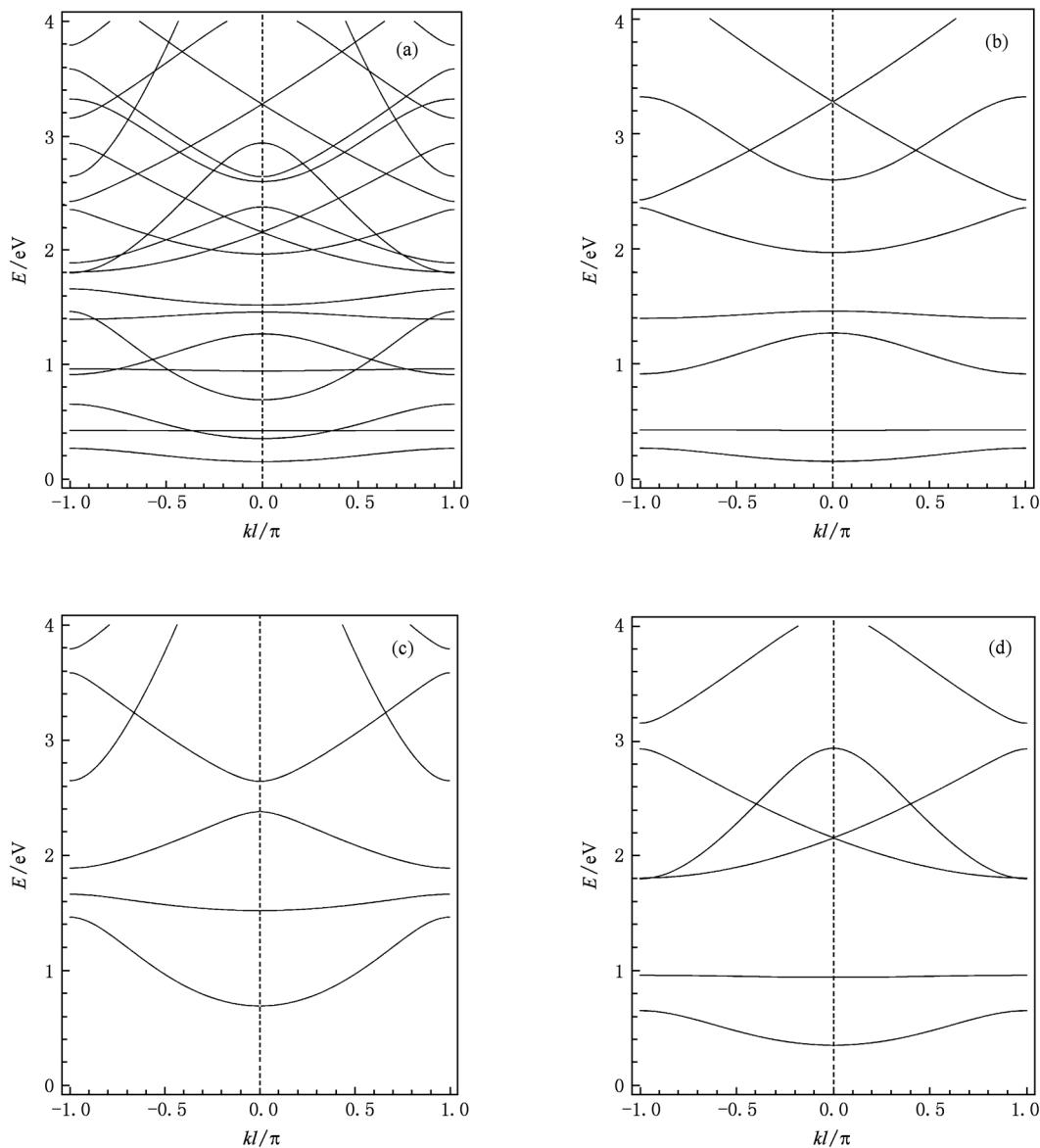
图2 AlN/InN SL系统在不同亚层厚度的导带能量色散关系 (a)  $m=1, n=1$ ; (b)  $m=4, n=4$ ; (c)  $m=4, n=10$ ; (d)  $m=10, n=4$

晶格常数的改变在不涉及应变对能带结构产生影响的情况下相当于亚层厚度发生微小变化。

当势垒高度降低, I 区能带受“挤压”下降, 禁带变窄而允带增宽, F 区能带略有增宽的趋势, 部分属于 I 区的能带可能会进入 F 区成为跨区能带或者 F 区底部能带, 势垒过低时 I 区能带变窄。当势垒升高时, 能带变化与之相反, 但势垒高度在一定范围内部分跨区能带的 F 区部分会随势垒升高而增宽。

对于具体的 AlN/InN SL, 导带的情况很简单, 通过上面得到的一般规律即可说明。对于价带, hh 带、lh 带和 so 带三个分裂能带系统各自符合上述一

般规律, 其第一子带是各带受到 AlN so 带作用的结果, 第二子带是受 hh 和 lh 带作用的结果。因为 AlN 的 hh 和 lh 有效质量大, 所以其 I 区形成能带较窄、位置较高, 并随着  $n$  的增大快速稳定下来。由于 InN 的 hh 有效质量最大而 lh 最小, 所以在 I 区 hh 能带最多、位置最低、宽度最窄, 而 lh 带恰与之相反。对于整个价带, 由于三个分裂带的子带相互交叠(特别是子带较宽的情况下), 子禁带部分甚至全部消失。只有当  $n$  足够大使子带充分“压缩”和提升, 才能使部分子带的简并解除, 独立能带增加。由于 AlN 的 hh 和 lh 有效质量相差很小, 若视其完全相同, 则

图 3 AlN/InN SL 系统在  $m = n = 2$  时的价带及其子带系能量色散关系 (a) 价带,(b) hh 带,(c) lh 带,(d) so 带

部分子带会完全简并, 只有引入其他条件才能部分或全部解除简并。如果在能量较低位置子带组成出现, 则当  $m$  较大时该组内各子带间距很小, 一些情况下有的子带甚至会相互交叠在一起, 从而形成准能带结构。

图 4 给出了 AlN/InN SL 系统禁带宽度  $E_g$  与导带第一子禁带宽度  $E_g^1$  随亚层厚度的变化关系。AlN/InN SL 导带基态子能带底与价带顶成为新的带边, 由于它们与本征的 InN 带边有偏差, 从而使系统禁带宽度宽化。 $E_g$  最大值约为 4.64 eV, 随  $m$  的增大  $E_g$  趋近于 InN 的禁带宽度(0.77 eV), 同时  $E_g$

随  $n$  的变化趋于平缓。对于  $E_g^1$ , 其在  $m = 1, 2, 3$  时的反常行为主要是由于这时 I 区仅有一个能带, 第一子禁带跨越了 I 区与 F 区; 当  $m \geq 4$  时, I 区有更多能带出现, 第一子禁带成为区内禁带, 其随亚层厚度的变化回归一般规律。 $E_g^1$  在  $m = 1, n = 1$  时取得最大值 2.69 eV, 但由于此时能带过于深入 F 区, 因此该值可能失真, 在此之外,  $E_g^1$  的最大值在  $m = 5$  时取得, 约为 2.16 eV。

### 3.2. 有应变情形

由于 AlN 与 InN 之间具有很大的晶格失配(晶

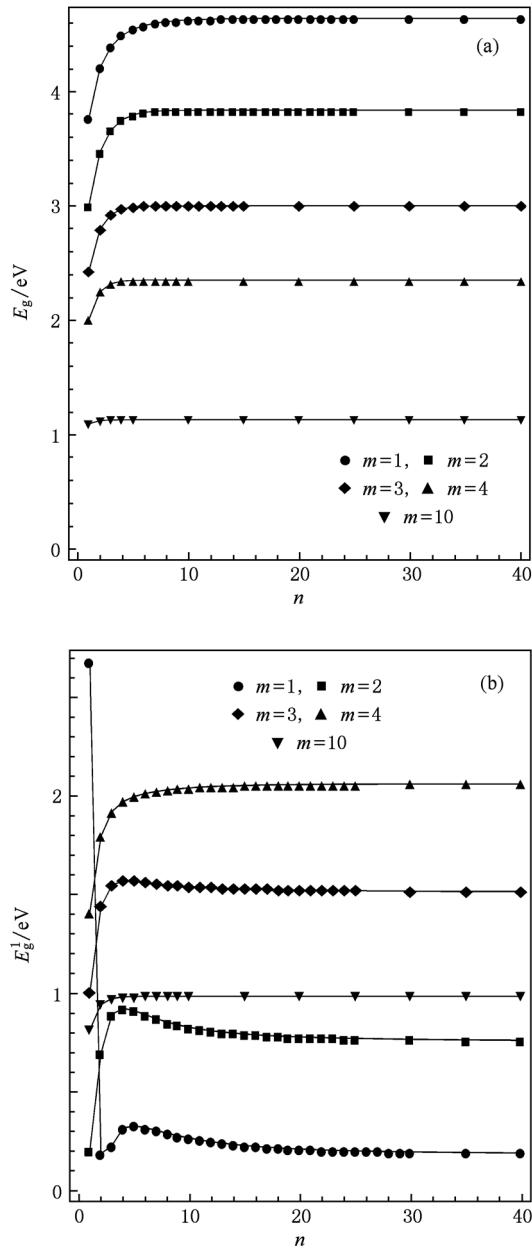


图4 AlN/InN SL系统禁带宽度和导带第一子禁带宽度随亚层厚度的变化关系 (a)禁带宽度,(b)导带第一子禁带宽度

格失配度 \$f \approx 12\% - 14\%\$), 因此在真实的 SL 中必须考虑应变. SL 应变大体分为以下两种情形: 情形 I, 平面晶格常数受到各亚层相互间的应力作用而趋同; 情形 II, 各亚层受到衬底或缓冲层调制, 平面

晶格常数与之相同. 考虑到高质量 InN 的生长尚需更加深入的研究, 而 AlN 是 III-N 生长常用的成熟缓冲层材料, 在实际制备中会倾向于使用 AlN 作为该 SL 结构的模板层, 所以对于情形 II 只计算以 AlN 为模板的情况. 因为 AlN/InN 临界厚度 \$d\_c \approx a\_0/(2|f|) = 1.274\$ nm (\$a\_0\$ 为模板层晶格常数), 大约相当于 \$c\$ 轴晶格常数的 2—2.5 倍, 所以可认为在 InN 层较薄 (\$m \leq 4\$) 时系统应变主要为情形 II, 当 \$m\$ 较大 (\$m \geq 5\$) 时为情形 I.

在情形 I 时, 各亚层具有共同的平面晶格常数 \$a\_p\$, 根据形变势理论<sup>[14]</sup>可知

$$a_p = \frac{a_0^{\text{InN}} G_{\text{InN}} a + a_0^{\text{AlN}} G_{\text{AlN}} b}{G_{\text{InN}} a + G_{\text{AlN}} b}. \quad (4)$$

这里 \$G\_i\$ 为切变模量,

$$G_i = 2[C_{11,i} + C_{12,i} - 2C_{13,i}^2/C_{33,i}]$$

其中 \$C\_{11,i}, C\_{12,i}, C\_{13,i}, C\_{33,i}\$ 为弹性系数, \$a\_0^i\$ 为亚层本征 \$a\$ 轴晶格常数. 各亚层的应变张量<sup>[14,15]</sup>可分别表示为

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx}^i &= \frac{a_{\parallel i} - a_0^i}{a_0^i} = \varepsilon_{yy}^i, \\ \varepsilon_{zz}^i &= -\frac{2C_{13}^i}{C_{33}^i} \varepsilon_{xx}^i, \\ \varepsilon_{xy}^i &= \varepsilon_{yz}^i = \varepsilon_{zx}^i = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

由此可以得到各亚层 \$c\$ 轴晶格常数

$$c_i = c_0^i (1 + \varepsilon_{zz}^i). \quad (6)$$

情形 II 相对较为简单, AlN 无应变而 InN 存在压缩应变. SL 平面晶格常数 \$a\_p = a\_0^{\text{AlN}}\$, InN 层应变张量和 \$c\$ 轴晶格常数可表示为

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx}^{\text{InN}} &= \frac{a_0^{\text{AlN}} - a_0^{\text{InN}}}{a_0^{\text{InN}}} = \varepsilon_{yy}^{\text{InN}}, \\ \varepsilon_{zz}^{\text{InN}} &= -\frac{2C_{13}^{\text{InN}}}{C_{33}^{\text{InN}}} \varepsilon_{xx}^{\text{InN}}, \\ \varepsilon_{xy}^{\text{InN}} &= \varepsilon_{yz}^{\text{InN}} = \varepsilon_{zx}^{\text{InN}} = 0; \\ c_{\text{InN}} &= c_0^{\text{InN}} (1 + \varepsilon_{zz}^{\text{InN}}). \end{aligned} \quad (7)$$

应变所导致的导带和价带带边能量的哈密顿量 \$H\_e^i\$ 和 \$H\_v^i\$ 的变化可分别通过下列公式求出<sup>[15]</sup>:

$$\delta H_e^i = A_1^i \varepsilon_{zz}^i + 2A_2^i \varepsilon_{xx}^i, \quad (9)$$

$$\delta H_v^i = \begin{pmatrix} 2(D_2^i + D_4^i) \varepsilon_{xx}^i + (D_1^i + D_3^i) \varepsilon_{zz}^i & 0 & 0 \\ 0 & 2(D_2^i + D_4^i) \varepsilon_{xx}^i + (D_1^i + D_3^i) \varepsilon_{zz}^i & 0 \\ 0 & 0 & 2D_2^i \varepsilon_{xx}^i + D_1^i \varepsilon_{zz}^i \end{pmatrix}, \quad (10)$$

其中  $A_j^i$  ( $j=1,2$ ) 和  $D_j^i$  ( $j=1,2,3,4$ ) 为应变层形变势。计算所需常数采用文献[7,13]中的数据,忽略 so 带的作用、体参量的改变和极化对周期势的影响。

对于情形 I,由于  $a = \frac{m}{2}c_i$ ,  $b = \frac{n}{2}c_i$ , 因此通过迭代法求出应变层晶格常数和带边能量变化,并选取亚层厚度在情形 I、情形 II 的适用范围及临界厚度附近的情形进行比较,各参量列于表 1。从表 1 可以发现:情形 I 各参量均是  $m, n$  的函数,同样的  $m/n$  值对应同一组参量;情形 II 为情形 I 在  $n \rightarrow \infty$  时的状况,各参量与亚层厚度无关。应变将 hh 带与 lh 带的简并解除,使带边能量改变从而影响禁带宽度,并使价带的情况更加复杂。因为忽略了 so 带,在薄亚层结构中带边能量的改变较为显著,对于亚层较厚的情况则影响不大,若计算涉及 so 带,价带结构

将更趋复杂。情形 I 中, lh 带成为 AlN 层新的价带顶,随着  $m/n$  值的减小,  $c$  轴晶格常数增大而带边能量改变量和 lh 带带阶逆转趋势减小; InN 带边能量改变量、带阶和禁带宽度增大。这主要是因为随  $m/n$  值的减小,系统受阱层调制作用逐渐减弱,而受到垒层的调制作用逐渐增强。当  $m/n$  值较大时,由于 AlN lh 带变化较大使势垒势阱带边倒转,这在某种程度上使 AlN/InN 超晶格转变成第二类 SL 结构。在能带计算中不考虑 SL 类型转变带来的影响。

图 5 和图 6 是计算得到的两种情形下的能带结构。从图 5 和图 6 可以发现,由于势垒较高,在情形 II 下能带位置较情形 I 的高。对于情形 II,在其适用区和临界厚度附近的子能带宽度较大是阱层与垒层  $c$  轴晶格常数之比较大和势垒抬高造成的。同时,从图 5 和图 6 还可以观察到情形 I 的价带结构比情形 II 更复杂。

表 1 AlN/InN SL 应变层晶格常数、各子带边能量变化  $\delta E_i$ 、带阶  $\Delta E_i$  和阱层在应变下的禁带宽度  $E'_g$  以及 SL 禁带宽度  $E_g$   
与导带第一子禁带宽度  $E_g^1$

$m, n$	情形 I			情形 II		
	2, 1	4, 4	8, 16	2, 1	4, 4	8, 16
$a_p$ (AlN)/nm	0.3361	0.3287	0.3222	0.3112	0.3112	0.3112
$a_p$ (InN)/nm	0.3361	0.3287	0.3222	0.3112	0.3112	0.3112
$c_{\text{AlN}}$ /nm	0.4751	0.4820	0.4870	0.4982	0.4982	0.4982
$c_{\text{InN}}$ /nm	0.5977	0.6087	0.6183	0.6346	0.6346	0.6346
$\delta E_e$ (AlN)/eV	-1.732	-1.218	-0.766	0	0	0
$\delta E_e$ (InN)/eV	0.196	0.275	0.344	0.462	0.462	0.462
$\delta E_v^{hh}$ (AlN)/eV	1.025	0.721	0.453	0	0	0
$\delta E_v^{hh}$ (InN)/eV	0.173	0.243	0.304	0.408	0.408	0.408
$\delta E_v^{lh}$ (AlN)/eV	2.058	1.448	0.910	0	0	0
$\delta E_v^{lh}$ (InN)/eV	-0.643	-0.902	-1.130	-1.515	-1.515	-1.515
$\Delta E_e$ /eV	1.692	2.127	2.510	3.158	3.158	3.158
$\Delta E_v$ /eV	-0.075	0.605	1.204	2.218	2.218	2.218
$E'_g$ /eV	0.793	0.802	0.810	0.824	0.824	0.824
$E_g$ /eV	1.876	2.002	1.261	2.970	2.176	1.270
$E_g^1$ /eV	1.434	0.987	1.114	0.148	1.742	1.151

AlN/InN 应变 SL 的  $E_g$  和  $E_g^1$  的计算结果也列于表 1。对于窄势阱结构,当亚层厚度增大时情形 I 中  $E_g$  和  $E_g^1$  趋近于情形 II。 $E_g$  和  $E_g^1$  总体上服从无应变情形下的值大于情形 II 的值,而情形 II 的值又大于

情形 I 的规律。在情形 II 中,  $E_g$  最大值约为 4.79 eV。如果考虑 so 带的影响,应变系统禁带宽度可能将会有所减小。当  $m=1, n=1, 2$  和  $m=2, n=1$  时,情形 I 下  $E_g^1$  大于无应变的值,且当  $m=2$  时  $E_g^1$  随  $n$

的变化也出现类似于  $m=1$  时的规律;对于情形 II,当  $m=1, n=2$  时,  $E_g^1$  大于无应变情况。在情形 II 中,  $E_g^1$  变化的反常范围扩大至  $m=5$ , 此时  $E_g^1$  可取得最大值约为 1.86 eV, 而当  $m=n=1$  时在情形 I 下  $E_g^1$  约为 3.41 eV, 在情形 II 下  $E_g^1$  约为 2.74 eV。

考虑到二维电子气使能带弯曲从而有助于电子透穿, 因此  $E_g$  和  $E_g^1$  会进一步减小, 在窄势垒结构中尤其显著, 此时内建电场甚至可以成为影响

能带结构的主要因素, 而宽势阱结构  $E_g^1$  则会增大<sup>[1,2,4]</sup>。此外, 计算发现, 如果在界面形成混晶过渡层, 则原势垒被截断, 阵内能带受到的“挤压”效应可能会比以上所讨论的应变作用对能带结构的影响更明显,  $E_g^1$  会变得更窄, 这与文献[2,16]的结论相一致。以上因素虽然对 SL 一些方面的性质有不利影响, 但作为一种调制手段可以更加灵活地设计能带结构。

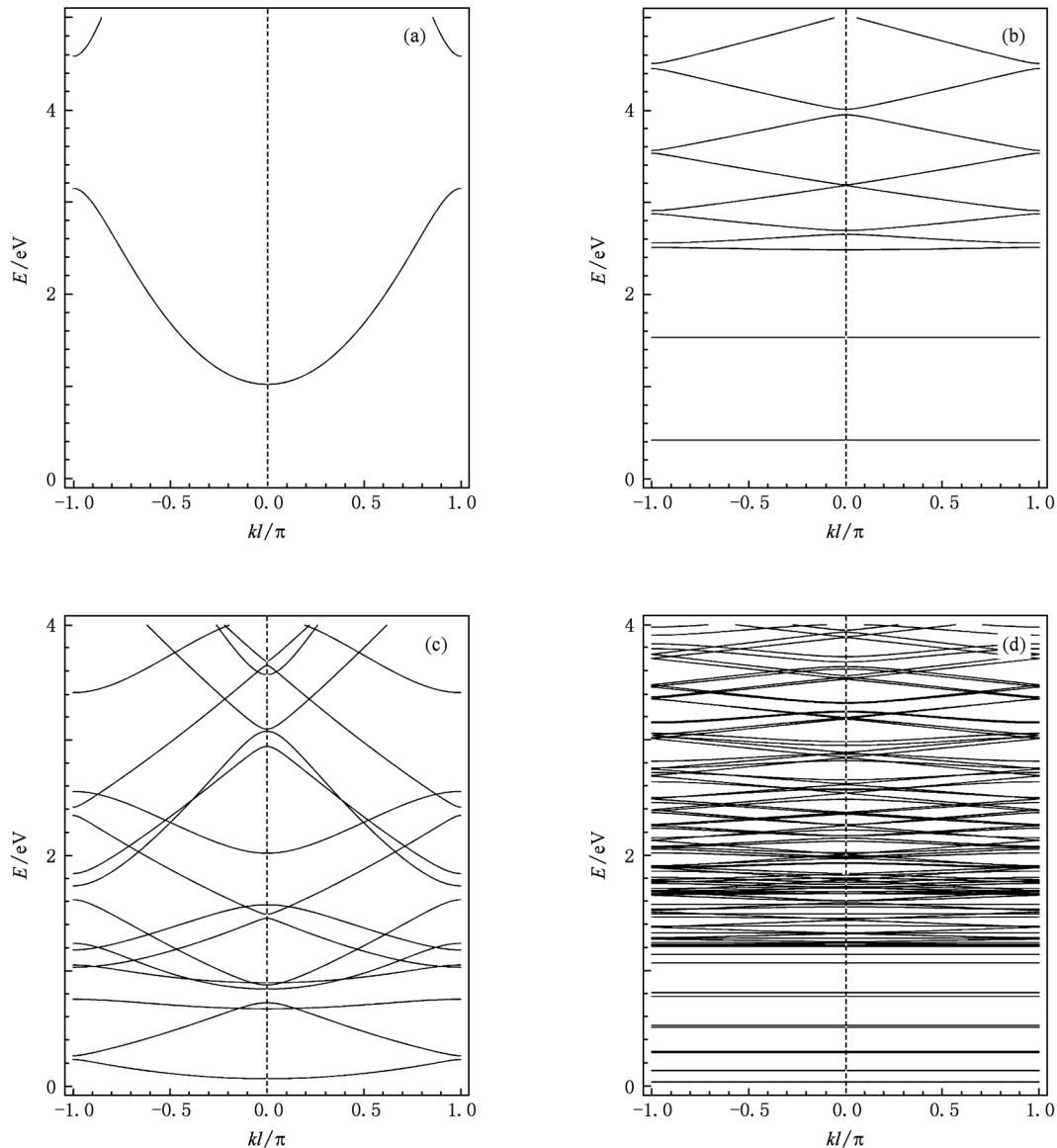


图 5 AlN/InN SL 系统在情形 I 应变下不同亚层厚度的能量色散关系 (a) 导带  $m=2, n=1$ ; (b) 导带  $m=8, n=16$ ; (c) 价带  $m=2, n=1$ ; (d) 价带  $m=8, n=16$

参照上述方法, 本文对 AlN/GaN SL 也进行了计算, 并将部分结果列于表 2 和表 3。对于应变情形, AlN/GaN 晶格失配较小( $f \approx 2.4\% - 2.5\%$ ), 临界厚度约为  $m=n=25$ , 在计算情形 II 时使用 GaN

和 AlN 两种调制模板, 它们是情形 I 的两种极限状况, 情形 I 各参数都介于情形 II 两种应变模板调制下的参数之间。SL 在无应变和以 GaN, AlN 为模板应变情形下,  $E_g$  的最大值分别约为 5.72, 4.95,

5.96 eV; 在应变情形下,  $E_g^1$  在  $m=5$  且  $n \geq 2$  时能得到最大值(约为 1.20 eV), 以 GaN 和 AlN 为模板时, 分别在  $m=6$  和  $m=5$  时能取得最大值 0.87 和 0.90 eV.

因为晶格失配较小, 所以应变下 AlN/GaN SL 导带带阶的变化很小,  $E_g^1$  差别不显著(特别是在阱层较厚时), 这将有利于器件的制造. 与之相比,

AlN/InN SL 具有更高的带阶, 亚层厚度的调制作用更显著, 因此其可应用范围更广. 例如,  $E_g^1$  即使在应变情况下亦可以完全覆盖近红外波段, 无应变时甚至能够达到黄光下限, 这是 AlN/GaN SL 所难以达到的. 所以, 要使 AlN/GaN SL 结构的  $E_g^1$  达到 1.3—1.55 μm 波段通常需要先进的设备和生长工艺<sup>[4]</sup>, 而 AlN/InN SL 对此要求可能低得多.

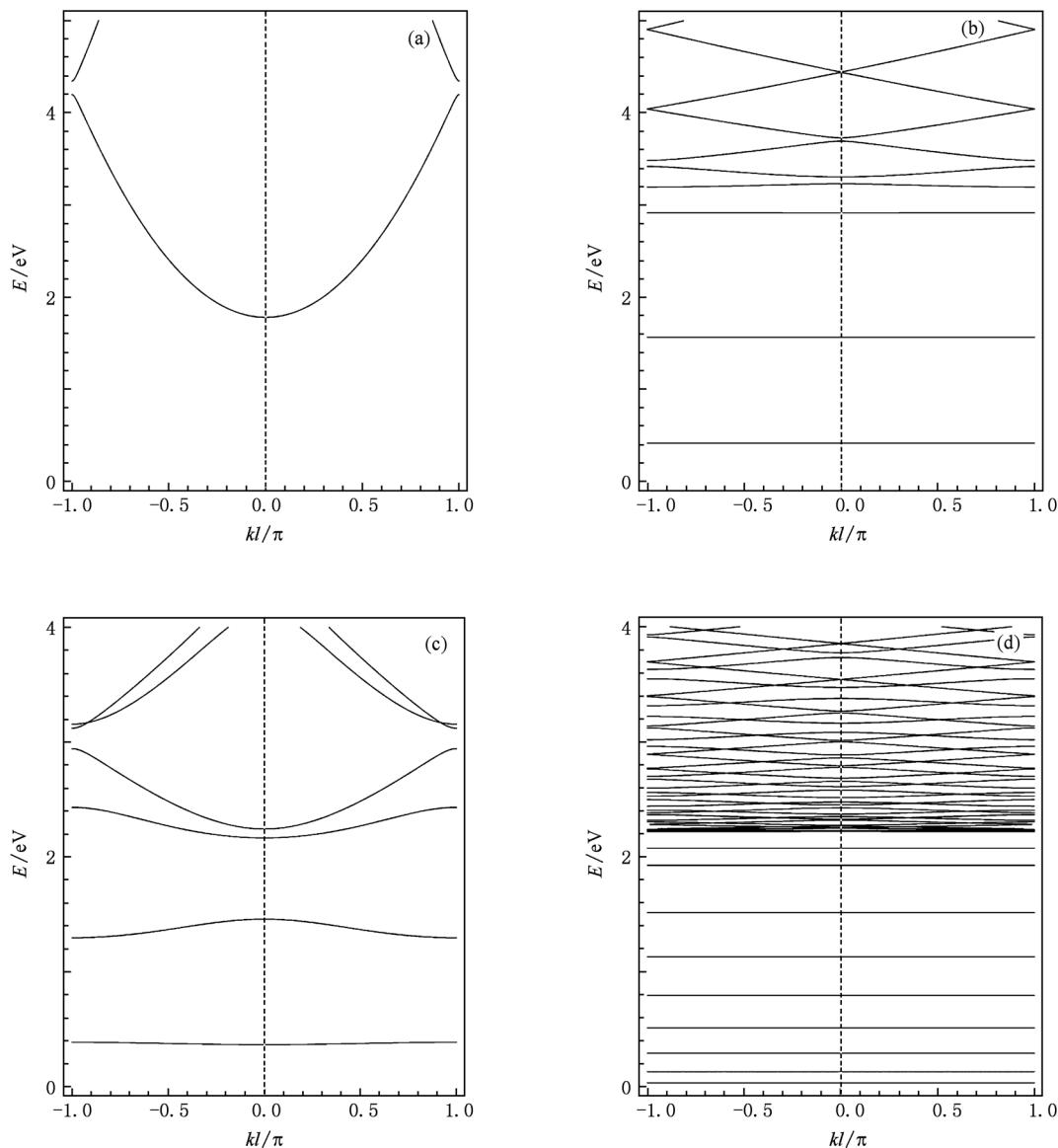


图 6 AlN/InN SL 系统在情形 II 应变下不同亚层厚度的能量色散关系 (a) 导带  $m=2, n=1$ ; (b) 导带  $m=8, n=16$ ; (c) 价带  $m=2, n=1$ ; (d) 价带  $m=8, n=16$

表 2 AlN/GaN SL 分别以 AlN 和 GaN 为模板时相应应变层的参数

应变层	$a_{\parallel}/\text{nm}$	$c/\text{nm}$	$\Delta E_c/\text{eV}$	$\Delta E_v^{\text{hh}}/\text{eV}$	$\Delta E_v^{\text{lh}}/\text{eV}$	$\Delta E_c/\text{eV}$	$\Delta E_v/\text{eV}$	$E_g^1/\text{eV}$
GaN	0.3112	0.5252	0.483	0.039	-0.265	1.487	0.839	3.874
AlN	0.3189	0.4911	-0.535	0.317	0.636	1.435	0.164	3.430

表 3 AlN/GaN SL 在情形 II 两种模板应变下的部分  $E_g$  与  $E_g^1$  值

$m, n$	AlN 模板		GaN 模板	
	$E_g$ /eV	$E_g^1$ /eV	$E_g$ /eV	$E_g^1$ /eV
2, 30	5.475	0.307	4.734	0.283
2, 1	4.951	0.225	4.230	0.366
4, 4	4.718	0.779	4.194	0.739
8, 16	4.202	0.715	3.750	0.713
25, 25	3.918	0.113	3.474	0.116
30, 2	3.904	0.077	3.460	0.078
30, 30	3.905	0.081	3.462	0.083

为了检验上述计算方法的有效性,本文将 AlN/GaN SL 的计算结果与实验报道进行了对比. 比较后发现,本文的计算数据与文献[1—3,5]的结论符合较好,特别是在  $m \leq 7$  的范围内, $m$  较大时计算结果均小于实验数据. 这可能是因为随着势阱厚度增加内建电场作用逐渐增强所致,这也符合文献[1]的结论. 此外,薄膜质量、结构、掺杂、生长状况以及计算参数的选取和测量误差都对结果有明显的影响. 在  $m \leq 7$  范围内考虑到测量误差,文献[2]无论采用哪种生长方式  $E_g^1$  都与以 AlN 为应变模板的计算结果相一致,  $E_g$  的变化趋势也相同,其值的差异可能是盖层引入应变造成的. 非应变情况的计算值与文献[1,5]符合较好. 文献[4]指出,在整个范围内  $E_g^1$  随  $m$  的变化趋势都与 AlN 模板情况相符但平缓很多,而且在 AlN 与 GaN 模板情况下  $E_g^1$  的差值较计算结果大一个数量级,这可能是由于混晶层的存在所造成. 如果将 AlN/GaN 导带带阶改为<sup>[1,2]</sup>1.75 eV,则计算结果与文献[1,3,4]的结果符合非常好,在  $m$  不是很大时  $E_g^1$  的偏差小于 50 meV,通常在 20 meV 左右,但  $m$  较大时  $E_g^1$  仍然偏低,若进一步调整体参量将能够使模拟计算与文献数据近乎完美地符合,细微的偏差主要是内建电场作用的结果. 由此可知,该模型适用于模拟窄势阱 SL,而这正是当前 III-N SL 的发展方向.

如果以 AlN/InN SL 来模拟 AlInN 三元合金,通过以上方法和相关理论<sup>[7,17]</sup>计算可知,无应变 AlN/InN SL 的禁带结构能够模拟 Al 组分在 0.8 以下的 AlInN,而且所需要的 In 能够比三元合金更少,这有利于降低成本. 考虑应变的影响后,能够模拟的组分范围变小,但所需的 In 比无应变的情况更少,且晶格常数也能够通过改变亚层厚度来调整,从而可以和诸多材料达到晶格匹配,这对于制备高质量的器件有着很重要的影响. AlN/GaN 模拟 AlGaN 也具有同样的规律,但由于 AlN/GaN 晶格失配较弱,因此可模拟的组分范围更宽.

## 4. 结 论

利用 K-P 模型结合形变势理论研究了纤锌矿型 AlN/InN 和 AlN/GaN SL 系统的能带结构. 给出了 SL 的能量色散关系和应变对带边能量以及晶格常数的影响,分析了能带结构随体材料参量和亚层厚度变化的一般性规律: $m$  增大会使子带增多并窄化;而  $n$  增大则使子带位置升高,禁带展宽而允带明显窄化. 应变会明显窄化带阶和子能带,使价带结构趋于复杂甚至生成准能带结构,不同的应变可使系统禁带宽度增大或减小. 通过改变亚层厚度和应变模式可以从不同形式设计能带结构. 计算得到了 SL 系统不同亚层厚度情形下的  $E_g$  和  $E_g^1$  的值,在无应变和有应变的情形下,AlN/InN SL 的  $E_g$  最大值分别约为 4.64 和 4.79 eV,除去可能失真的值,  $E_g^1$  最大值分别约为 2.16 和 1.86 eV; AlN/GaN SL 在无应变及以 GaN 和 AlN 为模板应变时  $E_g$  最大值分别约为 5.72, 4.95 和 5.96 eV,  $E_g^1$  最大值分别约为 1.20, 0.87 和 0.90 eV,具体的值会依所选参量值的不同而有所不同. 与报道的实验结果对比发现,该模型适于模拟窄势阱结构 SL,对于宽势阱结构 SL 必须考虑内建电场的作用. 本文结果可为光电器件设计提供理论依据.

- [1] Kishino K, Kikuchi A, Kanazawa H, Tachibana T 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 1234
- [2] Tchernycheva M, Nevou L, Doyennette L, Julien F H, Warde E, Guillot F, Monroy E, Bellet-Amalric E, Remmeli T, Albrecht M 2006 *Phys. Rev. B* **73** 125347
- [3] Hofstetter D, Baumann E, Giorgetta F R, Graf M, Maier M,

- Guillot F, Bellet-Amalric E, Monroy E 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 121112
- [4] Nicolay S, Felton E, Carlin J F, Grandjean N, Nevou L, Julien F H, Schmidbauer M, Remmeli T, Albrecht M 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 061927
- [5] Bayram C, Fain B, Péré-Laperne N, McClintock R, Razeghi M

- 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 121902
- [6] Cen L B, Shen B, Qin Z X, Zhang G Y 2009 *Chin. Phys.* **18** 3905
- [7] Quay R 2008 *Gallium Nitride Electronics* ( Berlin: Springer ) pp3—90
- [8] Ding G J, Guo L W, Xing Z G, Chen Y, Xu P Q, Jia H Q, Zhou J M, Chen H 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 5724 ( in Chinese ) [ 丁国建、郭丽伟、邢志刚、陈 耀、徐培强、贾海强、周均铭、陈 弘 2010 物理学报 **59** 5724 ]
- [9] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X 2007 *Chin. Phys.* **16** 3827
- [10] Sakly A, Safta H, Mejri H, Lamine A B 2009 *J. Alloys Compd.* **476** 648
- [11] Xu M, Wang H T, Feng L H, Zhou X M, Cai Y P, Xu N 2001 *Chin. J. Semicond.* **22** 436 ( in Chinese ) [ 徐 明、王洪涛、冯 良桓、周心明、蔡亚平、徐 宁 2001 半导体学报 **22** 436 ]
- [12] Wei Y, Dong C J, Xu M 2010 *Sci. China G* **40** 55 ( in Chinese ) [ 魏 岿、董成军、徐 明 2010 中国科学 G **40** 55 ]
- [13] Vurgaftman I, Meyer J R 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 3675
- [14] Lepkowski S P, Majewski J A, Jurczak G 2005 *Acta Phys. Pol. A* **108** 749
- [15] Fonoberov V A, Balandin A A 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 7178
- [16] Bogusławski P, Rapcewicz K, Bernholc J J 2000 *Phys. Rev. B* **61** 10820
- [17] Guo B Z, Gong N, Yu F Q 2008 *Chin. Phys.* **17** 290

## Investigation on the band structures of AlN/InN and AlN/GaN superlattices<sup>\*</sup>

Lu Wei Xu Ming<sup>†</sup> Wei Yi He Lin

( Institute of Solid State Physics, Sichuan Normal University, Chengdu 610101, China )

( Received 20 October 2010; revised manuscript received 6 January 2011 )

### Abstract

The band structures of wurtzite-AlN/InN and AlN/GaN superlattices are calculated by the Krönig-Penney model and the deformation potential theory under considering the lattice strain. Our calculations include the variation of band structure with the parameters for the sublayers, and the energy dispersion relations. It is found that by varying the sublayer thickness, the band structures can be well designed in different ways. The strain will change the bandgaps, reduce the band offsets and the sub-bands obviously, and make the valence band more complex. In comparison with the experimental results, our model is rather suited for simulating the narrow-quantum-well structures, while for the wide-quantum-well structures, the build-in field should be considered.

**Keywords:** AlN/InN and AlN/GaN superlattices, Krönig-Penney model, strain, subband

**PACS:** 78.67. Pt, 73.21. Cd, 73.20. At, 73.40. Kp

\* Project supported by the Scientific Research Foundation for the Returned Overseas Chinese Scholars of Ministry of Education, China ( Grant No. 20071108 ).

† Corresponding author. E-mail: hsuming\_2001@yahoo.com.cn