

平均键能方法在应变层异质结带阶研究中的应用*

李书平 王仁智 郑永梅 蔡淑惠 何国敏

(厦门大学物理学系 厦门 361005)

(1999 年 9 月 3 日收到)

将平均键能方法推广应用于应变层异质结的带阶研究. 通过流体静压力应变和单轴应变对带阶参量 E_{mv} 作用的仔细研究, 发现平均带阶参量 $E_{mv, av} = E_m - E_v$ 在不同应变状态下基本上保持不变. 因此, 在应变层带阶参量 E_{mv} 的计算中, 只需计算其发生应变前体材料的带阶参量 $E_{mv, 0}$ 值并引用形变势 b 和 SO 裂距 Δ_0 的实验值, 通过简便的代数运算得到应变层的 E_{mv} 值, 从而方便地预言不同应变层异质结的带阶. 该简化计算方案计算量小, 并更直接地引用材料实验参量值以提高计算结果的可信度.

关键词: 异质结, 平均键能方法, 价带偏移

PACC: 3120A, 7115A, 7125

1 引 言

通过改变衬底材料的晶格常量, 使外延生长层处于不同的应变状态, 从而改变应变层的能带结构和调节应变层异质结的带阶, 是目前“能带工程”中用于设计、剪裁应变层异质结的带阶的主要方法. 带阶是设计异质结、超晶格新型材料和器件的电子特性的重要参量, 因而如果能方便准确地预测出不同应变情况下的应变层异质结的带阶, 无疑对新型器件的设计和优化将有重要意义. Van de Walle 等^[1]将异质结带阶的“固体模型”理论计算方法(model solid theory, 简称为 MST)推广应用于应变层异质结的带阶的计算并报道了他们系统的研究结果^[2]; Ohler 等^[3]最近也采用与上述类似的做法, 将 Tersoff^[4]建立的异质结的带阶的“中性能级”理论计算方法(charge neutrality level, 简称为 CNL)应用于应变层异质结带阶的计算. 本文根据我们建议的异质结带阶“平均键能”理论计算方法^[5]的特点, 通过应变状态对其带阶参量影响途径的仔细研究, 提出应变层异质结带阶的简化计算模型, 该模型在确保带阶计算结果准确性的前提下, 大大地减少了计算工作量, 从而可以更方便地应用于应变层异质结带阶的剪裁与设计.

2 异质结带阶理论计算的平均键能方法

平均键能方法^[5]是我们根据平均键能 E_m 在异质结中“对齐”的研究结果而建立的异质结带阶理论计算方法, 该方法已在一系列的半导体异质结带阶的实际计算中获得比较准确的结果^[6]. 在平均键能方法中, 我们采用某种能带计算方法分别计算得到 A、B 两种材料的能带结构 $E_n(k)$ 之后, 把 A 材料(或 B 材料) $E_n(k)$ 的 4 个价带与 4 个较低导带的本征值对整个布里渊区求和取平均值, 并称之为 A 材料(或 B 材料)的平均键能 E_m , 即

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

把价带顶 E_v 到 E_m 的能距 E_{mv} 称为带阶参量,

$$E_{mv} = E_m - E_v. \quad (2)$$

根据平均键能 E_m 在异质结界面两侧相互“对齐”, 就可以由两种材料的带阶参量 E_{mv} 值确定 A/B 异质结的价带带阶:

$$\Delta E_v(A/B) = E_{mv}(A) - E_{mv}(B). \quad (3)$$

(3) 式表示, 如果在异质结中 $E_{mv}(A) = E_{mv}(B)$, 价带带阶就是 $\Delta E_v(A/B) = E_v(B) - E_v(A)$. 这是以材料 A 的价带顶作为带阶的能量参考点给出的 ΔE_v 值. 如果将构成 A/B 异质结的两种材料中禁带宽度比较大的那一种材料指定为 A 材料, 就可以使构成

* 高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 9538409)和福建省自然科学基金(批准号: E990005)资助的课题.

I 型超晶格的异质结价带带阶的 ΔE_v 为正值.

(3) 式表明, 异质结的价带带阶由两种体材料的带阶参量 E_{mv} 决定, 因此, 要了解应变层异质结在不同应变条件下的 ΔE_v 值, 首先要研究带阶参量 E_{mv} 随应变状态的变化规律. 对于应变层异质结, 因其应变层的能带结构随着应变情况改变, 因而价带顶 E_v , 平均键能 E_m 以及带阶参量 E_{mv} 均与应变状态有关.

3 应变状态下的带阶参量 E_{mv} 表达式

如果 A 和 B 是两种晶格常量 a_0 不同的半导体材料, 以 B 为衬底沿 [001] 方向生长 A/B 应变层异质结时, A 材料将发生形变, 由弹性力学得到其形变后的平行和垂直于异质结面的晶格常量 $a_{//}$ 和 a_{\perp} 为^[2]

$$a_{//} = a_{//}^B, \quad (4)$$

$$a_{\perp} = a_0 \left[1 - 2 \frac{C_{12}}{C_{11}} (a_{//} / a_0 - 1) \right], \quad (5)$$

其中 $a_{//}^B$ 为衬底 B 材料平行于异质界面的晶格常量, a_0 , $a_{//}$ 和 a_{\perp} 分别是 A 材料的平衡晶格常量及其发生形变后的平行和垂直于异质结界面的晶格常量, C_{11} 和 C_{12} 是 A 材料的弹性系数. 由(4)(5)式可以看到, C_{11} , C_{12} 和 a_0 都是一些由材料决定的常量, a_{\perp} 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. 上述(4)(5)式表示的应变状态包含着晶体体积和形状两方面的变化, 其应变参量可由应张量元表征, 即

$$\epsilon_{//} = a_{//} / a_0 - 1, \quad \epsilon_{\perp} = a_{\perp} / a_0 - 1,$$

$$T_r(\epsilon) = 2\epsilon_{//} + \epsilon_{\perp} \approx \Omega / \Omega_0 - 1, \quad (6)$$

$$\epsilon_{ax} = \epsilon_{\perp} - \epsilon_{//} = (a_{\perp} - a_{//}) / a_0, \quad (7)$$

其中 Ω_0 和 Ω 分别表示形变前和形变后的原胞体积; $T_r(\epsilon)$ 是晶体因体积改变的流体静压力应变参量, 它只改变晶体体积而不改变晶体对称性, 因此主要引起能带本征值的移动而不会引起简并能带的分裂; ϵ_{ax} 是单轴应变参量, 它使晶体偏离立方结构, 改变了晶体的对称性而不改变晶体体积, 因而引起简并能带的分裂, 而不改变其分裂能带的平均值.

以 B 为衬底沿 [001] 方向生长 A/B 应变层异质结, 衬底材料 B 在异质交界面上的晶格常量 $a_{//}^B$ 保持不变, A 材料平行于异质交界面的晶格常量 $a_{//}$ 将发生变化使异质交界面两侧的平行晶格常量都等于 $a_{//}^B$ 值(见(4)式). 在不计及自旋-轨道(SO)分裂的能带中, 应变层 A 材料形变前价带顶 E_{v0} 是 3 度简并的, 单轴形变使其 3 度简并价带分裂成非简并能带 $E_v(1)$ 和 2 度简并能带 $E_v(2)$, $E_v(1)$ 与 $E_v(2)$ 的平均值 $2E_v(2) + E_v(1) / 3$ 称为平均价带 $E_{v,av}$. 令

$\delta E_{001} = \frac{2}{3} (E_v(1) - E_v(2))$, 则与单轴应变引起价带分裂相应的切形变势 b 定义为

$$\delta E_{001} = 2b\epsilon_{ax}. \quad (8)$$

上述的能带结构没有考虑到自旋-轨道(SO)分裂, 在同时计入(001)单轴形变和 SO 分裂的作用时, 2 度简并能带 $E_v(2)$ 将进一步分裂成非简并能带, 引用文献[2]给出在(001)单轴形变和 SO 分裂的同时作用下, 3 个分裂价带相对于平均价带 $E_{v,av}$ 的能距 ΔE_{vj} 的计算公式,

$$\Delta E_{v2} = \frac{1}{3} \Delta_0 - \frac{1}{2} \delta E_{001}, \quad (9)$$

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

$$\Delta E_{v3} = -\frac{1}{6} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E_{001} - \frac{1}{2} \left[\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_{001} + \frac{9}{4} (\delta E_{001})^2 \right]^{1/2}, \quad (11)$$

其中 Δ_0 是 SO 分裂作用的裂距. 在同时计及形变和 SO 分裂情况下, 价带顶 E_v 为

$$E_v = E_{v,av} + \Delta E_{vj, \max}, \quad (12)$$

其中 $\Delta E_{vj, \max}$ 取自(9)-(11)式中的最大值, 上式代入(2)式得到相应的带阶参量为

$$E_{mv} = E_{mv,av} + \Delta E_{vj, \max}, \quad (13)$$

其中 $E_{mv,av} = E_m - E_{v,av}$ 称为平均带阶参量.

引入 a 与 b 两个形变势分别描述 $T_r(\epsilon)$ (流体静压力应变) 和 ϵ_{ax} (单轴应变) 对平均价带 $E_{v,av}$ 和平均键能 E_m 的作用, 可以将应变层中的 $E_{v,av}$ 和 E_m 值表示为

$$E_{v,av} = E_{v0} + a_{v,av} T_r(\epsilon) + b_{v,av} \epsilon_{ax},$$

$$E_m = E_{m0} + a_m T_r(\epsilon) + b_m \epsilon_{ax},$$

$$E_{mv,av} = E_{mv0} + a_{mv,av} T_r(\epsilon) + b_{mv,av} \epsilon_{ax} \quad (14)$$

其中 $E_{mv\downarrow} = E_{m\downarrow} - E_{v\downarrow}$, $a_{mv\downarrow} = a_m - a_{v\downarrow}$, $b_{mv\downarrow} = b_m - b_{v\downarrow}$, $E_{v\downarrow}$ 和 $E_{m\downarrow}$ 是形变前的价带顶和平均键能. 将 (12) 式代入 (14) 式得到

$$E_{mv} = E_{mv\downarrow} + a_{mv\downarrow} T_r(\epsilon) + b_{mv\downarrow} \epsilon_{ax} - \Delta E_{vj\max}. \quad (15)$$

这就是同时计及晶体应变和 SO 分裂时确定带阶参量的表达式. 在 (15) 式中, $E_{mv\downarrow}$ 是形变前的带阶参量, $a_{mv\downarrow} T_r(\epsilon)$ 是流体静压力应变引起价带带阶参量的改变量, $b_{mv\downarrow} \epsilon_{ax}$ 是垂直于 (001) 界面的单轴应变引起价带带阶参量的改变量.

下面对于一些典型的半导体材料, 研究它们发生弹性应变(即发生(4)(5)式所表示的应变状态)时, 决定带阶参量 E_{mv} 的关键因素.

4 应变层带阶参量的主要决定因素

在应变层异质结中, 应变层的形变同时包含着流体静压力应变和单轴应变, 也就是 $T_r(\epsilon)$ 和 ϵ_{ax} 都不等于零, 应该考虑两者对带阶参量的影响(见(15)式). 为进一步了解这些应变效应对带阶参量 E_{mv} 的作用, 我们对 Si, Ge, InP, InAs, GaAs, AlAs 等 6 种半导体材料, 先计算出它们的带阶参量形变势 $a_{mv\downarrow}$, $b_{mv\downarrow}$ 和切形变势 b , 然后在异质结的实际应变状态下, 计算并比较其 $a_{mv\downarrow} T_r(\epsilon)$, $b_{mv\downarrow} \epsilon_{ax}$ 及 $\Delta E_{vj\max}$ 等作用项的大小. 为便于同 Ohler 等^[3]最新研究结果进行比较, 计算中用到的有关材料参量直接取自他们用于计算的输入数据(见表 1).

表 1 本文理论计算用到的材料参量(晶格常量 a_0 、弹性系数 $C_{11}C_{12}$ 、自旋-轨道分裂裂距 Δ_0 和剪切形变势 b 的实验值, 上述数据均转引自文献[3])

半导体	a_0/nm	$C_{11}/10^{11}\text{Pa}$	$C_{12}/10^{11}\text{Pa}$	Δ_0/eV	$b_{\text{实验值}}/\text{eV}$
Si	0.543	16.75	6.5	0.04	-2.10
Ge	0.565	13.15	4.94	0.30	-2.86
InP	0.590	10.22	5.76	0.11	-1.6
InAs	0.606	8.33	4.53	0.38	-1.80
GaAs	0.565	12.23	5.71	0.34	-1.70
AlAs	0.565	12.50	5.34	0.28	-1.50

表 2 平衡带阶参量 $E_{mv\downarrow}$ 、形变势 $a_{mv\downarrow}$, $b_{mv\downarrow}$ 和 b 的本文计算结果, 以及 CNL 方法^[3]和 MSI^[2]方法中与本文形变势 $a_{mv\downarrow}$ 相对应的 $-a_v$ 值的计算结果

半导体	$E_{mv\downarrow}^{\text{本文}}/\text{eV}$	$a_{mv\downarrow}^{\text{本文}}/\text{eV}$	$b_{mv\downarrow}^{\text{本文}}/\text{eV}$	$b^{\text{本文}}/\text{eV}$	$-a_v/\text{eV}^{[3]}$	$-a_v/\text{eV}^{[2]}$
Si	-0.33	0.38	0.019	-2.36	2.59	-2.46
Ge	-0.70	0.31	0.007	-2.85	4.84	-1.24
InP	0.26	0.15	-0.015	-1.60	1.68	-1.16
InAs	0.03	0.11	-0.006	-1.88	1.29	-1.00
GaAs	-0.14	0.28	0.032	-1.92	2.24	-2.47
AlAs	0.25	-0.22	0.024	-1.67	2.34	-1.27

形变势的具体计算方法如下: 1) 保持晶体面心立方结构不变的情况下(即 $a_{\perp} = a_{\parallel}$, $\epsilon_{ax} = 0$), 在该材料平衡晶格常量 a_0 附近选取 7 个不同值(即 $T_r(\epsilon)$ 在 -0.05 至 $+0.05$ 范围内取值), 采用第一原理赝势能带计算方法分别计算出 7 种不同应变状态下的能带结构, 然后求出它们各自的平均价带带阶参量 $E_{mv\downarrow}$, 并根据这些 $E_{mv\downarrow}$ 的计算结果, 采用 (14) 式线性拟合得到 $a_{mv\downarrow}$ 值; 2) 在保持晶体体积不变($T_r(\epsilon) = 0$) 情况下, 适当改变 a_{\parallel} 和 a_{\perp} 的数值, 即 ϵ_{ax} 在 -0.05 至 $+0.05$ 范围内选取 7 个不同的单轴应变状态, 采用第一原理赝势能带计算方法分别计算出不同单轴应变状态下的能带结构, 计算它们的平均价带带阶参量 $E_{mv\downarrow}$ 值和价带分裂 δE_{001} 值, 然后分别用 (14) 和 (8) 式线性拟合得到 $b_{mv\downarrow}$ 值和 b 值. 表 2 列出 6 种典型半导体材料在平衡情况下的 $E_{mv\downarrow}$ 值及带阶参量形变势 $a_{mv\downarrow}$, $b_{mv\downarrow}$ 和 b 值的计算结果. 将形变势 b 的计算值同表 1 中 b 的实验值比较可以看到, 本文的计算结果接近于实验结果.

为了更简捷地表达应变层异质结中的衬底和应变层, 对异质结符号约定如下: 处于下斜线“\”或上斜线“/”上方为应变层, 下方为衬底. 也就是 A/B 表示以 B 为衬底, A 是应变层, 而 A \ B 表示以 A 为衬底, B 是应变层. 表 3 由标出 Si \ Ge, Si/Ge, GaAs \ InAs, GaAs/InAs, AlAs \ InAs, AlAs/InAs, GaAs \ InP, GaAs/InP 等 8 种应变层异质结的应变层和衬底材料, 应变层的 a_{\parallel} 取值为衬底材料平衡晶格常

表 3 异质结中应变层的 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$, $b_{mv,av} \epsilon_{ax}$ 和 $\Delta E_{vj, max}$ 的计算结果 (eV^{-1})

应变层	衬底	$a_{//}^B$	$T_r(\epsilon)$	ϵ_{ax}	$a_{mv,av} T_r(\epsilon)$	$b_{mv,av} \epsilon_{ax}$	$\Delta E_{vj, max}$
Ge	Si	5.43	-0.0486	0.0682	-0.015	0.001	0.294
Si	Ge	5.65	0.0496	-0.0720	0.019	-0.001	0.304
InAs	GaAs	5.65	-0.0617	0.1412	-0.007	-0.001	0.392
GaAs	InAs	6.06	0.0774	-0.1403	0.022	-0.004	0.566
InAs	AlAs	5.65	-0.0617	0.1412	-0.007	-0.001	0.392
AlAs	InAs	6.06	0.0831	-0.1346	-0.018	0.003	0.472
InP	GaAs	5.65	-0.0327	0.0797	-0.005	-0.001	0.164
GaAs	InP	5.87	0.0415	-0.0753	0.012	-0.002	0.333

量(见(4)式),由(5)式计算出应变层的 a_{\perp} 之后,由(6)(7)式计算其应变变量 $T_r(\epsilon)$ 和 ϵ_{ax} 值,引用表2的 $a_{mv,av}$ 和 $b_{mv,av}$ 计算值最后得到 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$ 和 $b_{mv,av} \epsilon_{ax}$ 的计算结果列于表3中;与此同时,引用表2的 b 计算值和表3的 ϵ_{ax} 值的计算结果,由(8)式得到 δE_{001} 值,再引用表1的SO分裂 Δ_0 值,然后通过(9)–(11)式的计算,求得其中的最大值 $\Delta E_{vj, max}$, 计算结果也列于表3中。

表3的计算结果表明,带阶参量计算(15)式的3个应变作用项 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$, $b_{mv,av} \epsilon_{ax}$ 和 $\Delta E_{vj, max}$ 中 $b_{mv,av} \epsilon_{ax}$ 值最小,完全可以忽略, $\Delta E_{vj, max}$ 值最大,是决定应变层带阶参量 E_{mv} 值的主要项, $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$ 值也比较小. 将(15)式中的 $b_{mv,av} \epsilon_{ax}$ 略去,计算应变层带阶参量 E_{mv} 的表达式简化为

$$E_{mv} = E_{mv,0} + a_{mv,av} T_r(\epsilon) - \Delta E_{vj, max}. \quad (16)$$

将表2的 $E_{mv,0}$ 计算值与表3的 $\Delta E_{vj, max}$ 值进行比较可以看到,它们的量值比较接近,两者都是决定 E_{mv} 值的主要因素,而 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$ 值比它们小得多,这是平均键能方法的一个重要特点,对此,下面将进一步了解 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$ 项对(16)和(3)式计算结果的影响.

5 应变层带阶 ΔE_v 的理论计算与本文方法的特点

目前,“固体模型”(MST)^[1]和“中性能级”(CNL)^[4]是有影响性的两种重要的异质结带阶理论计算方法, Van de Walle^[2]和 Ohler 等^[3]分别于1989年和1998年将它们推广应用于应变层异质结带阶的理论计算. MST和CNL方法与本文的平均键能方法都是采用“某种统一的参考能级确定带阶”的同一类型的理论方法,且在应变层异质结带阶研

究中,其能带的计算都是采用第一原理赝势法,因此,本文采用与上述两种方法类似的途径,将“平均键能方法”推广应用于应变层异质结带阶的理论计算. 本文用于计算带阶参量 E_{mv} 的表达式(16)是借鉴于MST和CNL方法得到的,其中等式右边的 $\Delta E_{vj, max}$ 项直接引用MST中的计算方法,本文带阶参量 $E_{mv} = E_m - E_v$ 和平均带阶参量 $E_{mv,av} = E_m - E_{v,av}$ 就是MST和CNL中以参考能级(model vacuum level 和 charge neutrality level)作为能量原点给出的 E_v 和 $E_{v,av}$ 值,本文的形变势 $a_{mv,av}$ 对应于MST和CNL中的 $-a_v$ 值. 为方便比较起见,表2中同时列出MST^[2]和CNL^[3]方法的 $-a_v$ 值的计算结果.

从表2可以看到,本文的 $a_{mv,av}$ 计算值大约比CNL的 $-a_v$ 值小一个数量级, $a_{mv,av}$ 值也比MST方法的 $-a_v$ 值(绝对值)小得多. 因此,对于平均键能方法,有必要进一步了解计入 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$ 项与否,对应变层异质结的价带带阶 ΔE_v 的计算结果影响如何. 我们对于上述8种应变层异质结的应变层,由(16)式保持 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$ 项(称方法1)和略去 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$ 项(称方法2)计算它们的应变层带阶参量 E_{mv} 和异质结带阶 ΔE_v 值. 在应变层带阶参量 E_{mv} 计算中, $E_{mv,0}$ 和 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$ 的数值分别取自表2和表3,为便于与文献[3]的计算结果进行比较, $\Delta E_{vj, max}$ 计算中用到的 b 值和 Δ_0 均取表1的实验值,计入SO分裂衬底(未形变)的带阶参量 $E_{mv} = E_{mv,0} - \frac{1}{3} \Delta_0$, 计算中 $E_{mv,0}$ 和 Δ_0 的数据分别取自表2和表1;最后根据应变层和衬底 E_{mv} 值的计算结果,采用(3)式得到应变层异质结价带带阶 ΔE_v 值. 计入 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$ 项和略去 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$ 项的两种 ΔE_v 值的计算结果分别列于表4的方法1和方

表 4 本文 E_m (方法 1 和方法 2)与中性能级方法(CNL)模型固体方法(MST)的应变层异质结价带带阶 ΔE_v 值的计算结果和实验值(eV^{-1})

应变层 异质结	晶格常量 a_{ij}	带阶能量参考点	ΔE_v					
			方法 1	方法 2	CNL	MST	实验值	
Si \ Ge	5.43	Si	0.67	0.65	0.61	0.88	0.74 ^{a)}	0.83 ^{a)}
Si/Ge	5.65	Si	0.19	0.17	0.00	0.32	0.17 ^{a)}	0.22 ^{a)}
GaAs \ InAs	5.65	GaAs	0.10	0.10	0.32	0.43	-0.04 ^{a)}	0.17 ^{b)}
GaAs/InAs	6.06	GaAs	-0.53	-0.55	-0.33	-0.30	-0.52 ^{a)}	
AlAs \ InAs	5.65	AlAs	0.50	0.50	0.70	1.02	0.29 ^{a)}	0.5 ^{c)}
AlAs/InAs	6.06	AlAs	-0.10	-0.09	0.23	0.29	-0.10 ^{a)}	
GaAs \ InP	5.65	GaAs	-0.34	-0.35	-0.25	-0.11	-0.17 ^{a)}	
GaAs/InP	5.87	GaAs	-0.65	-0.67	-0.60	-0.46	-0.56 ^{a)}	

a) 转引自文献 [3]; b) 引自文献 [7]; c) 引自文献 [8].

法 2 栏中,表 4 中同时列出 CNL^[3]和 MST^[2]方法的 ΔE_v 值的计算结果和有关的实验值.

从表 4 本文方法 1,方法 2 和 MST,CNL 方法的 ΔE_v 计算结果与有关实验结果比较中看到,本文无论是方法 1 或方法 2 的计算结果与实验结果的符合程度均不比 MST,CNL 方法差,其中前 6 个应变层异质结的 ΔE_v 值,本文的计算结果与实验结果更为符合;从表 4 本文方法 1 和方法 2 的 ΔE_v 值的两种计算结果的比较中看到,在带阶参量计算(16)式中的 $a_{mv,av} T_r(\epsilon)$ 项略去前后,应变层异质结 ΔE_v 值的改变量不超过 0.02 eV,其改变量比目前 ΔE_v 值的实验误差来得小,所以基于平均键能方法的应变层异质结价带带阶 ΔE_v 计算,可以将带阶参量计

算公式进一步简化为

$$E_{mv} = E_{mv,0} - \Delta E_{vj,max}. \quad (17)$$

这样一来,在应变层异质结价带带阶 ΔE_v 的计算中,只要采用能带计算方法计算平衡时(形变前)体材料的带阶参量 $E_{mv,0}$ 值,并在 $\Delta E_{vj,max}$ 值的计算中直接引用 b 和 Δ_0 的实验值(只需通过(9)~(11)式的代数运算),无须计算应变层的能带结构和带阶参量形变势,因而大量地减少计算工作量,使应变层异质结带阶的计算量减小到与通常晶格匹配的异质结带阶的计算量相当.这是平均键能带阶方法的独特优点,因为在 MST 和 CNL 方法中的 a_{ij} (绝对值)都比较大(见表 2),不可能采用类似的简化.

[1] C. G. Van de Walle, R. M. Martin, *Phys. Rev.*, **B35** (1984),8154.

[2] C. G. Van de Walle, *Phys. Rev.*, **B39**(1989),1871.

[3] C. Ohler, C. Daniels, A. Forstr, H. Luth, *Phys. Rev.*, **B58** (1998),7864.

[4] J. Tersoff, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984),465.

[5] R. Z. Wang, M. C. Huang, *Sciences in China (A)*, (10)

(1992),1073 (in Chinese [王仁智、黄美纯,中国科学(A 辑)](10)(1992),1073].

[6] S. H. Ke, R. Z. Wang, M. C. Huang, *Z. Phys.*, **B 102** (1997),61.

[7] S. P. Kowalczyk, W. J. Schaffer, E. A. Kraut, R. W. Grant, *J. Vac. Sci. Technol.*, **20**(1982),705.

[8] J. Arriaga *et al.*, *Phys. Rev.*, **B43**(1991),2050.

APPLICATIONS OF AVERAGE-BOND-ENERGY METHOD IN STRAINED-LAYER HETEROJUNCTION BAND OFFSET*

LI SHU-PING WANG REN-ZHI ZHENG YONG-MEI CAI SHU-HUI HE GUO-MIN

(*Department of Physics, Xiamen University, Xiamen 361005, China*)

(Received 3 September 1999)

ABSTRACT

We have extended the average-bond-energy method to the study of strained-layer heterojunction band offset. Through a careful study of the effect of hydrostatic strain and uniaxial strain on band offset parameter E_{mv} , we find that the average band offset parameter $E_{mv,av}$ ($E_{mv,av} = E_m - E_{v,av}$) is largely kept unchanged under different strain conditions. So, in the calculation of strained-layer band offset parameter E_{mv} , it is only required the unstrained band offset parameter $E_{mv,0}$, a deformation parameter b and the experimental value of spin-orbit splitting Δ_0 to calculate the value of strained-layer E_{mv} by simple algebraic operation. Obviously, it will be very convenient to calculate the valence band offset of heterojunction. The simplified calculation scheme has the characteristic of small calculation amount and the calculation reliability can be improved by using the experimental value.

Keywords : heterojunction, average-bond-energy theory, valence band offset

PACC : 3120A, 7115A, 7125

* Project supported by the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education of China (Grant No. 9538409) and by the Natural Science Foundation of Fujian Province, China (Grant No. E990005).