

应变层超晶格 GaN-AIN 的电子结构^{*}

何国敏 王仁智 郑永梅

(厦门大学物理系, 361005)

19971124 收稿, 19980313 收改稿

摘要 采用有效质量理论 6 带模型, 计算了应变层超晶格 GaN-AIN(001) 的电子结构, 具体计算不同应变状态的价带子能带色散曲线、光吸收曲线。分析了应变状态以及重轻空穴和自旋轨道分裂带相互作用对子带结构的影响。

关键词: 有效质量理论 空穴子带 应变层超晶格

中图分类号: O471.5

Electronic Structure of Strained-layer Superlattice GaN-AIN

He Guomin Wang Renzhi Zheng Yongmei

(Dept. of Phys. Xiamen University, 361005, CHN)

Abstract: The electronic structure of strained-layer superlattice GaN-AIN (001) has been studied within framework of the 6-band Luttinger model in the effective-mass theory. The valence band structure and the absorption spectra for different strain conditions are calculated. The effects of strain and coupling among heavy hole, light hole, and spin-split-off bands on valence band structure are discussed.

Key Words: Effective-mass Theory Hole Subband Strained-layer Superlattice

PACC: 6855

1 引言

宽带隙半导体 GaN 和 AlN 在实验和理论上得到普遍的重视, 因为它们具有独特的性质, 如高的电子迁移率和宽的能隙。这些性质使它们在工作于蓝紫色波段的激光器、发光二极管以及高温光电器件的研制中, 有潜在的应用前景。在一定的生长条件下, GaN 和 AlN 兼有闪锌矿和纤锌矿两种结构。虽然前几年, 对 GaN 和 AlN 的实验研究集中在纤锌矿结构, 因为以六角结构石墨为衬底生长的 GaN 和 AlN 晶体一般形成纤锌矿结构的 GaN 和 AlN 晶体。目前, 闪

* 福建省自然科学基金资助课题, 得到厦门光电子工业部资助

锌矿结构的 GaN 和 AlN 材料也引起了重视^[1-6], 如 Mizuta et al^[1] 首先报导了在 GaAs(001) 衬底上生长出 GaN 晶体, Rubio et al^[2,3] 用准粒子能带计算方法, 计算了 GaN, AlN 以及短周期超晶格 GaN-AlN 的能带结构。

本文采用 Burt 和 Foreman 的有效质量方程^[7,8], 用平面波展开法^[9] 计算了应变层超晶格 GaN-AlN (001) 的电子结构。还采用 Li S S 建立的方法^[10], 处理不同材料中电子和空穴的有效质量不同对子带的影响, 以及重轻空穴之间的耦合效应; 具体计算了不同应变状态下 GaN-AlN (001) 的价带子带色散曲线、光吸收曲线; 分析了应变效应对子带的影响。由于采用 6×6 有效质量方程, 计算中也考虑了自旋轨道分裂带(SO)与重轻空穴的耦合作用。本工作有可能为 GaN-AlN 超晶格光电器件的设计及实验研制提供理论参考。

2 计算方法

根据 Burt 和 foreman 的有效质量理论, 一级近似下, 电子哈密顿量为

$$H_e = \vec{P} \frac{1}{2m_e^*} \vec{P} + V_e(z) \quad (1)$$

式中

$$V_e(z) = \begin{cases} 0 & -W/2 + nL \leq z \leq W/2 + nL \\ V_{e0} & W/2 + nL < z < W/2 + nL + B \end{cases} \quad (2)$$

$$m_e^*(z) = \begin{cases} m_1^* & -W/2 + nL \leq z \leq W/2 + nL \\ m_2^* & W/2 + nL < z < W/2 + nL + B \end{cases} \quad (3)$$

W 为阱宽, B 为垒宽。 $L = W + B$ 为超晶格的周期。 m_1^* , m_2^* 为 GaN 和 AlN 的电子有效质量。

电子的薛定谔方程为

$$H_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (4)$$

假定电子的波函数如下式, $n=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

$$\Psi_e(z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(k_x x + k_y y)} \sum_n e_n e^{i(k_z + n\frac{2\pi}{L})z} \quad (5)$$

空穴的哈密顿量为

$$H_h = H_0 + H_\epsilon + V_h(z) \quad (6)$$

H_0 为 Foreman 的 6×6 有效质量方程^[8] (参见附录)。 H_ϵ 为应变能, 对于 (001) 的应变

$$H_\epsilon = a(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + 3b \left\{ \left[L_x^2 - \frac{1}{3} J^2 \right] \epsilon_{xx} + \left[J_y^2 - \frac{1}{3} J^2 \right] \epsilon_{yy} + \left[J_z^2 - \frac{1}{3} J^2 \right] \epsilon_{zz} \right\} \quad (7)$$

(7) 式中 ϵ_{xx} , ϵ_{yy} , ϵ_{zz} 为应变张量分量

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a // - a_0}{a_0} \quad (8)$$

(8) 式中 $a //$ 为应变层的平面内晶格常数, a_0 为体材料的晶格常数。

对于 (001) 的应变, 可得

$$\epsilon_{zz} = -2(C_{11}/C_{12}) \epsilon_{xx} \quad (9)$$

其中 C_{11} , C_{12} 为弹性模量, V_h 为超晶格的周期势

$$V_h(z) = \begin{cases} 0 & -W/2 + nL \leq z \leq W/2 + nL \\ V_{h0} & W/2 + nL < z < W/2 + nL + B \end{cases} \quad (10)$$

空穴的波函数设为(11)式, $n=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

$$\Psi_h(z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(k_x x + k_y y)} \sum_n \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \\ c_n \\ d_n \\ f_n \\ g_n \end{pmatrix} e^{i\left(k_z + n\frac{2\pi}{L}\right)z} \quad (11)$$

把(11)代入(12), 就可求出空穴的本征值。

$$H_h \Psi_h = E_h \Psi_h \quad (12)$$

一级近似下, 光吸收系数为^[11]

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{C}{\omega} \sum_n |\epsilon^{\circ} P_{n,n'}|^2 \delta(E_{n'} - E_n - \hbar\omega) \quad (13)$$

其中 C 为常数, $|\epsilon^{\circ} P_{n,n'}|$ 为光跃迁矩阵元。为得到光滑的吸收曲线, 计算中 δ 函数用 Lorentzian 函数代替。

3 计算结果

在应变层超晶格 GaN-AlN 的计算中, 考虑了两种应变状态: (1) 以 GaN 为衬底, 应变只发生在 AlN 层, 用 GaN \ AlN 表示; (2) 以 AlN 为衬底, 应变只发生在 GaN 层, 用 GaN/AlN 表示, 计算所用的参数如表 1 所示。其中电子有效质量 m_e^* , Luttinger 有效质量 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$, 形变势 a 和 b , 自旋轨道分裂值 Δ , 均采用经验势法的计算结果^[4]。目前, 关于 GaN-AlN 超晶格的能带偏移 V_{h0} 的实验值和理论值不尽相同, 报导的结果在 $0.5 \sim 0.85 \text{ eV}$ ^[13, 14]。在本计算中固定 V_{h0} 为 0.70 eV , 这值与最近的理论值 0.738 eV ^[14] 接近。

图 1 给出了阱宽 $W=8 \text{ nm}$, 垒宽 $B=15 \text{ nm}$ 时(如无说明, 都是对这种结构)的电子导带结构。图 2 和 3 分别给出了 GaN \ AlN 和 GaN/AlN 的价带子能带色散曲线。其中 (a) 为不考虑 SO 带的结果, 即 4×4 有效质量方程, (b) 为考虑 SO 带的结果。从图中可见, 由于考虑不同材料中有效质量不同, 以及重轻空穴 LH, HH 和 SO 之间的耦合, 价带能级在 $k \neq 0$ 处, 简并解除。图 2, AlN 应变的情况, 有使 SO 和 LH 能级下降的作用(往禁带方向), 从波函数的分析还发现 SO 和 LH 有一定的混合, 如果 SO 带成分占主要, 图中则只标 SO, 反之, LH 占主要, 则标记 LH。

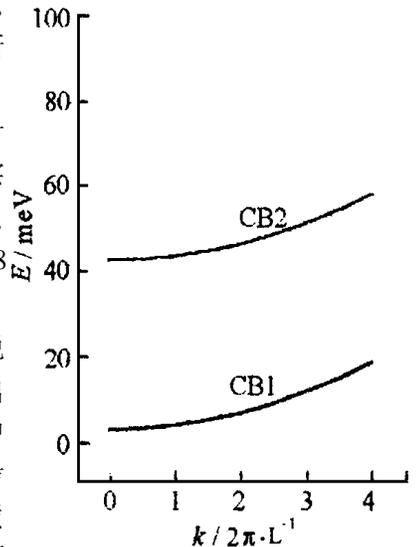


图 1 导带能级色散曲线

Fig. 1 The conduction bands structure

表 1 计算所用的参数, 包括晶格常数 a_0 , 应变和无应变的带隙 E_G , 弹性模量 C_{11} 和 C_{12} 形变势 a 和 b , 有效质量 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ 和 m_e^* , 自旋轨道分裂值 Δ

Tab. 1 The parameters used in the calculation, including lattice constants a_0 , band gaps of strain and unstrain E_G , elastic moduli C_{11} and C_{12} , deform potential a and b , effective masses $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ and m_e^* , spin-orbit splitting energies Δ

Parameter	GaN	AlN	Reference
a_0/nm	0.450	0.435	.2
$E_G(\text{unstrain})/\text{eV}$	3.10	6.0	2
$E_G(\text{AlN strain})/\text{eV}$	3.10	5.745	*
$E_G(\text{GaN strain})/\text{eV}$	3.346	6.0	*
$C_{11}/10^{-6}\text{N}\cdot\text{cm}^{-2}$	2.96	3.45	6, 12
$C_{12}/10^{-6}\text{N}\cdot\text{cm}^{-2}$	1.54	12.5	6, 12
a/eV	-7.7	-5.8	.4
b/eV	-1.9	-2.2	4
γ_1	3.07	1.92	4
γ_2	0.86	0.47	4
γ_3	1.26	0.75	4
m_e^*/m_0	0.13	0.21	4
Δ/eV	0.011	0.011	4

* 本文计算结果: $E_G(\text{strain}) = E_G(\text{unstrain}) + 2a(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}})\epsilon_{xx}$

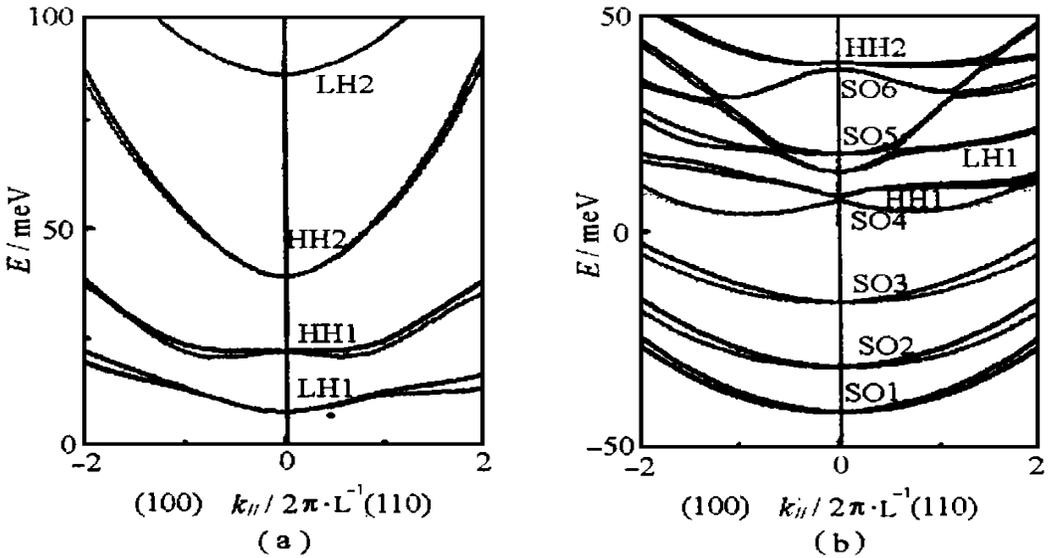


图 2 GaN \ AlN 的价带能级色散曲线: (a) 不考虑 SO 带的结果; (b) 考虑 SO 带的结果
Fig. 2 The valence subband structure of GaN \ AlN superlattice;
(a) Ignoring the SO band; (b) Including the SO band

前几个能级为 SO1 ~ SO4, HH1, LH1, SO5, SO6, HH2。图 3 GaN 应变的情况, 有使 LH 和 SO 上升的作用, 前几个能级为 HH1, SO1, SO2, HH2。从图中还可见, 当 SO 能级接近 LH 和 HH 时, LH, HH 和 SO 之间发生强烈的相互作用。如图 2 能级范围 (SO4 ~ HH2) 和图 3 能级范围 (HH1 ~ HH2) 的情况。

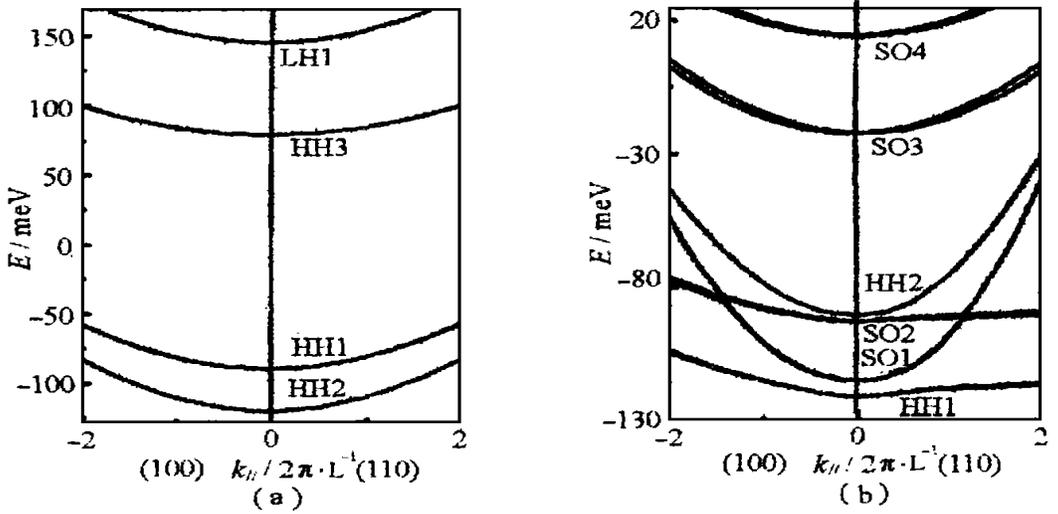


图3 GaN/AlN 的价带能级色散曲线: (a)不考虑SO带的结果; (b)考虑SO带的结果

Fig. 3 The valence subband structure of GaN/AlN superlattice;

(a) Ignoring the SO band; (b) Including the SO band

图4给出了GaN/AlN光吸收的理论谱线。从图4可见,主要吸收峰由HH和LH到导带的跃迁形成,SO带的光吸收谱线强度弱。图5给出了GaN/AlN的光吸收的理论谱线。从图5中可见,主要的吸收谱线由SO和HH到导带的跃迁形成。从图4,5可见光吸收近似满足 $\Delta n = 0$ 。不同的应变状态下,使LH,HH和SO带之间的相互作用发生变化,可产生强的SO吸收谱线。

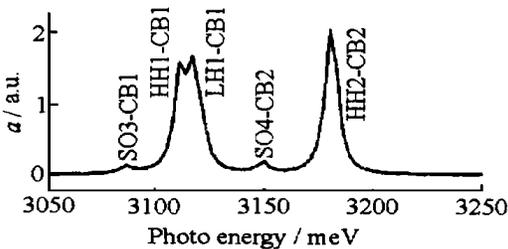


图4 GaN/AlN 的理论吸收谱线

Fig. 4 Theoretical absorption spectra for GaN/AlN

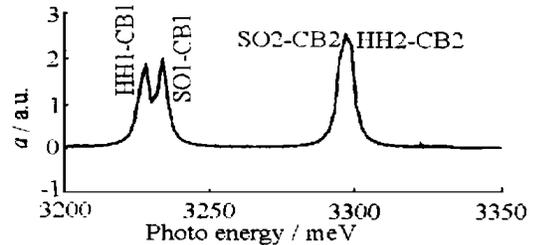


图5 GaN/AlN 的理论吸收谱线

Fig. 5 Theoretical absorption spectra for GaN/AlN

4 结 论

在有效质量理论的基础上,计算了应变层超晶格 GaN/AlN(001)的价带子能级色散曲线和光吸收谱线。有以下的结论:AlN 的应变有使SO 和 LH 下降的作用,GaN 应变有使HH 下降的作用。当SO 带能级接近 HH 或 LH 能级时,LH,HH 和 SO 带之间的相互作用增强。不同的应

变状态使 LH, HH 和 SO 带之间的相互作用发生变化,可产生强的 SO 吸收谱线。

参 考 文 献

1 Mizuta M, Fujieda S, Matsumoto Y, *et al.* *Jpn J Appl Phys*, 1986; **25**: 1945

2 Rubio A, Corkill J L, Cohen M L, *et al.* *Phys Rev B*, 1994; **48**: 11 810

3 Rubio A, Corkill J L, Choen M L. *Phys Rev B*, 1994; **49**: 1 952

4 Fan W J, Li M F, Chong Y C, *et al.* *J Appl Phys* 1996; **79**: 188

5 Miwa K, Fukumoto A. *Phys Rev B*, 1993; **48**: 7 897

6 Kim K, Lambrecht W B L, Segall B. *Phys Rev B*, 1994; **50**(3): 1 502

7 Butt M G. *J Phys Condens Matter*, 1992; **4**: 6 651

8 Foreman B A. *Phys Rev B*, 1995; **52**: 12 241

9 汤 惠, 黄 昆. 半导体学报, 1987; **8**: 1

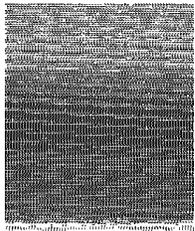
10 Li S S, Xia J B, Yuan Z L, *et al.* *Phys Rev B*, 1996; **54**: 11 575

11 Chang Y C, Schulman J N. *Phys Rev B*, 1985; **31**: 2 069

12 Tsubouck K, Sugai K, Mikoshiha N. *In 1981 Ultra-sonics Symposia Proceedings*, edited by McAvoy B R IEEE, New York; 1981; 375

13 Bauer J. *Appl Phys Lett*, 1994; **65**: 2 211

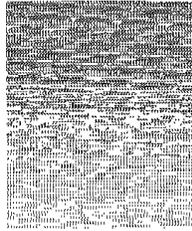
14 Chen X J, Hua X L, Hu J S, *et al.* *Phys Rev B*, 1996; **53**: 1 377



何国敏(He Guomin) 厦门大学物理系研究生,主要研究半导体物理与器件物理。



王仁智(Wang Renzhi) 1935 年 10 月生,1960 年厦门大学物理系毕业,教授,博士生导师,从事固体电子态理论与人构材料电子结构研究,发表论文 80 多篇,是 CCAST 协联成员。



郑永梅(Zheng Yongmei) 男,福建省仙游县人,1941 年 1 月生,1964 年厦门大学物理系物理学专业半导体专门化(五年制)毕业,1996 年晋升为教授,主要从事凝聚态物理、半导体物理与半导体器件物理,固体电子态理论计算研究,为美国 ASSS 成员,中国高等科学技术中心协联成员(1997. 1. 1—1999. 12. 31),已在国内外科技刊物上正式发表论文 30 多篇。

附 录

H_0 为包括自旋轨道分裂带的 Foreman 有效质量方程^[8]:

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{vmatrix} P+Q & -S & R & 0 & \sqrt{\frac{1}{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^\dagger & P-Q & C & -R & \sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}G \\ R^+ & C^+ & P-Q & -S^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}G^+ & \sqrt{2}Q \\ 0 & -R^+ & -S_+ & P+Q & -\sqrt{2}R^+ & \sqrt{\frac{1}{2}}S_+ \\ \sqrt{\frac{1}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q & -\sqrt{\frac{3}{2}}G^\dagger & -\sqrt{2}R & P+\Delta & -C \\ \sqrt{2}R^+ & \sqrt{\frac{3}{2}}G^\dagger & \sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{1}{2}}S^\dagger & -C^+ & P+\Delta \end{vmatrix} \quad (A1)$$

上式中,空穴能量取为正能量 Δ 为自旋轨道分裂值,而

$$\begin{aligned}
P &= P_X \gamma_1 P_X + P_Y \gamma_1 P_Y + P_Z \gamma_1 P_Z \\
Q &= P_X \gamma_2 P_X + P_Y \gamma_2 P_Y - 2 P_Z \gamma_2 P_Z \\
R &= \sqrt{3} (P_+ \mu P_+ - P_- \bar{\gamma} P_-) \\
S_{\pm} &= 2\sqrt{3} [P_{\pm} (\sigma - \delta) P_Z + P_Z \pi P_{\pm}] \\
G_{\pm} &= 2\sqrt{3} \left[P_{\pm} \left\{ \frac{1}{3} (\sigma - \delta) + \frac{2}{3} \pi \right\} P_Z + P_Z \left\{ \frac{2}{3} (\sigma - \delta) + \frac{1}{3} \pi \right\} P_{\pm} \right] \\
C &= 2 \{ P_Z (\sigma - \delta - \pi) P_- - P_- (\sigma - \delta - \pi) P_Z \} \\
P_{\pm} &= P_X \pm iP_Y \\
\sigma - \delta &= \frac{1}{6} (-1 - \gamma_1 + 2\gamma_2 + 6\gamma_3) \\
\pi &= \frac{1}{6} (1 + \gamma_1 - 2\gamma_2) \\
\gamma &= \frac{1}{2} (\gamma_2 + \gamma_3) \\
\mu &= -\frac{1}{2} (\gamma_2 - \gamma_3)
\end{aligned} \tag{A2}$$

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ 为 Luttinger 有效质量参数, 它们是 z 的函数

$$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3(z) = \begin{cases} \gamma_{11}, \gamma_{12}, \gamma_{13} & -\frac{W}{2} + nL \leq z \leq \frac{W}{2} + nL \\ \gamma_{21}, \gamma_{22}, \gamma_{23} & \frac{W}{2} + nL < z < \frac{W}{2} + nL + B \end{cases} \tag{A3}$$

(A3) 式中, $\gamma_{11}, \gamma_{12}, \gamma_{13}$ 和 $\gamma_{21}, \gamma_{22}, \gamma_{23}$ 分别为 GaN 和 AlN 的 Luttinger parameters.

☆Back Cover☆

WKD0809 Multi-gate GaAs MMIC DPDT Switches

The GaAs MMIC DPDT RF switch has two RF inputs, two RF outputs, two control inputs, and two grounds. The switch is provided in a SSOP-8 package. Typical performances of multi-gate GaAs MMIC DPDT switches are shown in Tab. 1

Tab. 1 WKD0809 typical performance of multi-gate GaAs MMIC DPDT switches

Operating frequency/MHz	870~970
Insertion loss/dB	0.60
Isolation/dB	17
VSWR (I/O)	< 1.3
0.1 dB compression $P_{0.1dB}$ /dBm	31
Reverse third order intercept P_{TOI} /dBm	70
Control voltage/V	(0, -4)
Gate leakage current/ μ A	< 10
T_{rise}/T_{fall} (10% RF to 90% RF)/ns	< 50