

Al_xGa_{1-x}As 虚晶近似 LMTO 能带的自洽计算^①

王仁智 柯三黄 黄美纯
(物 理 学 系)

摘要 对于包含芯态的全电子势的 LMTO-ASA 能带计算方法,建议用一种虚晶近似的合金能带计算方法(LMTO-ASA-VCA),文中着重研究该方法的能带自洽迭代计算方案,在 Al_xGa_{1-x}As 合金能带计算中获得合理的虚晶近似的能带结构.

关键词 AlGaAs, 虚晶近, 合金能带

中国图书分类号 O 471.5

在 A₂B_{1-x}合金能带的虚晶近似(VCA)计算中,用赝势能带计算方法^[1,2]最方便,因为赝势是一种只考虑价电子行为的“假想”势,它的虚晶赝势可以由 A 材料和 B 材料的赝势按合金组分线性平均.然而,对于线性 Muffin-tin 轨道能带计算方法(LMTO-ASA)^[3],其 ASA 势是计及芯态的全电子势,在虚晶近似中应如何处理涉及芯态的 ASA 势,怎样进行虚晶能带自洽计算,是有待进一步研究的问题.我们曾针对 LMTO-ASA 能带计算方法的特点^[4],建议用一种分别对于势参数和结构常数按合金组分线性平均然后建立 LMTO-ASA-VCA 久期方程的方法,本文进一步研究该方法的虚晶能带结构自洽计算的有关问题.

1 计算方法和计算结果

在 Al_xGa_{1-x}As 合金能带虚晶近似的从头算赝势法(SCP)^[1]计算中,仍然将合金看成具有闪锌矿结构的所谓“虚晶”,虚晶原胞中 III 价和 V 价原子分别为 Al_xGa_{1-x}和 As_xAs_{1-x}赝原子;虚晶的晶格常数 a_v 和虚晶赝势 $V_v(r)$ 由 AlAs 和 GaAs 的晶格常数 a_A 和 a_B , AlAs 和 GaAs 赝势 $V_A(r)$ 和 $V_B(r)$ 按合金组分 x 平均计算

$$a_v = x \cdot a_A + (1 - x) \cdot a_B \quad (1)$$

$$V_v(r) = x \cdot V_A(r) + (1 - x) \cdot V_B(r) \quad (2)$$

我们曾注意到^[4],LMTO-ASA 方法中,ASA 势是包含着芯态的全电子势,它与赝势不同,虚晶近似处理中不能直接引用式(2)计算 ASA 的虚晶势,而需要在 LMTO-ASA 能带计算中将涉及芯态和涉及价电子态的一些物理量区分开来,对于那些涉及价电子态的物理量,才可以引用类似式(2)的关系式按组分 x 平均计算.据此,我们在虚晶近似的 LMTO-ASA-VCA 能带计算中,一方面在“虚晶格”近似下,按式(1)由 AlAs 和 GaAs 的晶格常数 a_A 和 a_B 计算虚晶格常数 a_v ,然后计算虚晶的结构常数 S_v 值;另一方面,对于能带计算过程中,求解全电子 ASA 势得到的

① 本文 1994-05-06 收到; 国家和福建省自然科学基金资助项目

ASA 势参数 Φ (包括 $\phi_{\omega}, \phi'_{\omega}, \phi''_{\omega}$ 和 $\langle \phi_{\omega}^2 \rangle$ 等决定价电子行为的各原子球和空球的势参数^[3]), 按合金组分 x 计算它们的虚晶势参数 Φ_V 值.

$$\Phi_V = x \cdot \Phi_A + (1 - x) \cdot \Phi_B \quad (3)$$

其中 Φ_A, Φ_B 分别表示 AlAs 和 GaAs 的势参数. 由上述得到的虚晶结构常数 S_V 和虚晶势参数 Φ_V 计算 LMTO-ASA-VCA 久期方程矩阵元并求解虚晶近似的能带本征值 $E_n(\vec{k})$ 和本征矢 $\psi_n(r)$.

虚晶能带的自洽迭代过程也是围绕着涉及虚晶价电子态的有关物理量(如虚晶 ASA 势参数 Φ_V 、虚晶价电子电荷密度 $n_V(r)$ 和虚晶能带本征值 $E_n(\vec{k})$ 和本征矢 $\psi_n(r)$) 进行的. 图 1 给出 LMTO-ASA-VCA 虚晶近似合金能带迭代计算过程的示意图, 图中下标 A、B 分别表示属于 AlAs、GaAs 的物理量; $n_c(A, r), n_c(B, r)$ 是 AlAs 和 GaAs 中原子球的芯态电荷密度, 它们取自 AlAs 和 GaAs 晶体的 LMTO-ASA 能带计算结果, 并且在整个虚晶近似能带自洽计算过程中保持不变.

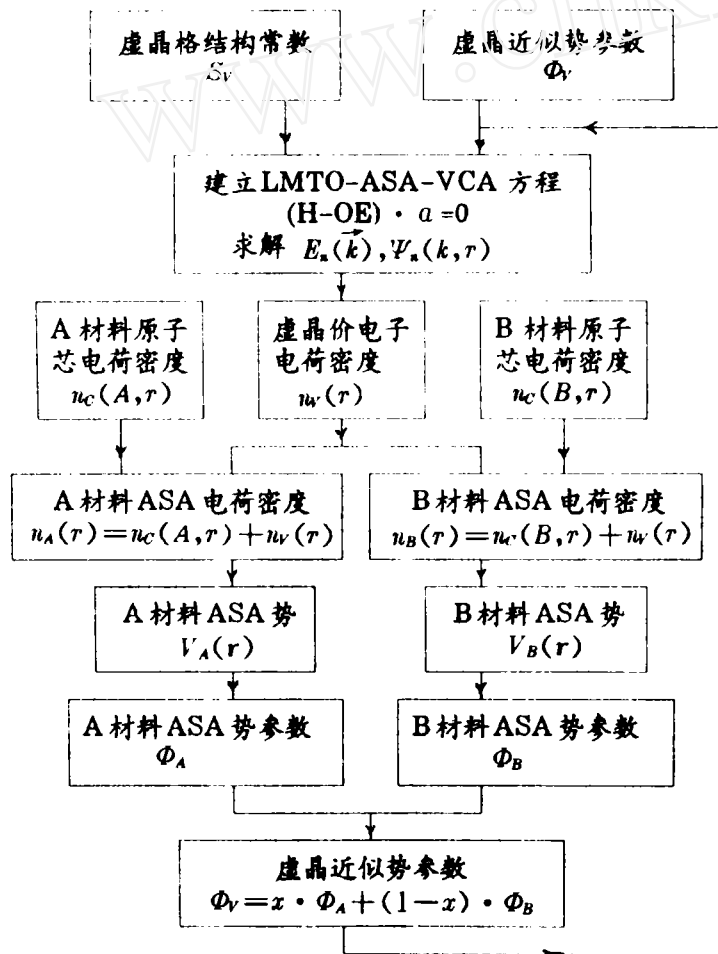


图 1 A_xB_{1-x} 合金 LMTO-ASA-VCA 能带自洽计算迭代过程示意图

Fig. 1 The self-consistent iteration procedure of LMTO-ASA-VCA band structure calculation for A_xB_{1-x} alloy

在 AlAs、GaAs 和 Al_xGa_{1-x}As 的 LMTO 能带计算中,考虑到 AlAs 和 GaAs 和晶格常数很接近,它们的晶格常数 a_A 、 a_B 和 a_V 都取为 0.565 nm;它们的原胞中的两个原子球和两个空球采用相同体积,每个原子球和空球都计及 s 、 p 、 d 态,久期方程 36 阶,能带迭代采用 10 个特殊 \vec{k} 点,能带本征值的自洽精度达到 0.002 eV.

表 1 给出 AlAs、GaAs 晶体的 LMTO-ASA 能带的直接能隙 $E_g(\Gamma_{1c})$ 间接能隙 $E_g(X_{1c})$ 和 $E_g(L_{1c})$ 以及价带宽度的计算结果,表中同时列出从头算赝势法(SCP)^[1]的计算结果,可以看到,本文对于 AlAs、GaAs 的能隙 $E_g(\Gamma_{1c})$ 、 $E_g(X_{1c})$ 和 $E_g(L_{1c})$ 以及价带宽度 E_w 的计算结果与从头算赝势法的计算结果比较接近.

表 1 本文方法和 SCP^[1]对 GaAs 和 AlAs 的能隙 $E_g(\Gamma_{1c})$ 、 $E_g(X_{1c})$ 和 $E_g(L_{1c})$ 以及价带宽度 E_w 的计算结果比较
Tab. 1 The calculated direct energy gap $E_g(\Gamma_{1c})$, indirect energy gap $E_g(X_{1c})$ and $E_g(L_{1c})$ as well the valence-band width E_w of semiconductors GaAs and AlAs, given by present method and *ab initio* pseudopotential method (SCP^[1]) (eV)

	GaAs		AlAs	
	本文 LMTO	(SCP)	本文 LMTO	(SCP)
$E_g(\Gamma_{1c})$	0.63	(0.53)	2.07	(1.92)
$E_g(L_{1c})$	1.11	(0.97)	2.21	(2.02)
$E_g(X_{1c})$	1.45	(1.35)	1.38	(1.28)
E_w	12.26	(12.56)	11.99	(11.85)

表 2 给出本文 LMTO-ASA-VCA 虚晶近似方法对 Al_xGa_{1-x}As 在合金组分 x 为 0、0.2、0.4、0.6、0.8 和 1.0 情况下的 X、 Γ 和 L 点的主要价带和导带本征值的计算结果;图 2 是根据表 2

表 2 虚晶近似 LMTO-SAS-VCA 方法对 Al_xGa_{1-x}As 合金的价带和导带能量本征值的计算结果
Tab. 2 The calculated valence-band and conduction band eigenvalues of Al_xGa_{1-x}As alloy by the LMTO-ASA-VCA method

Al _x Ga _{1-x} As	Γ_{1v}	Γ_{15v}	Γ_{1c}	X_{5v}	X_{1c}	X_{3c}	L_{3v}	L_{1c}
$x=0.00$	-13.980	-1.360	-0.732	-3.964	0.091	0.141	-2.479	-0.249
$x=0.20$	-13.861	-1.402	-0.502	-3.912	0.033	0.207	-2.461	-0.080
$x=0.40$	-13.741	-1.447	-0.259	-3.861	-0.027	0.275	-2.446	0.091
$x=0.60$	-13.621	-1.495	-0.011	-3.809	-0.090	0.349	-2.432	0.263
$x=0.80$	-13.511	-1.545	0.233	-3.757	-0.152	0.426	-2.420	0.437
$x=1.00$	-13.394	-1.598	0.471	-3.706	-0.216	0.509	-2.410	0.612

数据,计算不同组分 x 情况下的 Al_xGa_{1-x}As 合金的直接能隙 $E_g(\Gamma_{1c})$ 、间接能隙 $E_g(X_{1c})$ 和 $E_g(L_{1c})$ 的结果;对图 2 计算点采用一次式拟合的表达式为

$$E_g(\Gamma_{1c}) = 0.628 + 1.441x \tag{4a}$$

$$E_g(X_{1c}) = 1.451 - 0.069x \quad (4b)$$

$$E_g(L_{1c}) = 1.111 + 1.099x \quad (4c)$$

而采用二次多项式对图 2 计算点的拟合结果为

$$E_g(\Gamma_{1c}) = 0.624 + 1.395x + 0.053x^2 \quad (5a)$$

$$E_g(X_{1c}) = 1.451 - 0.086x + 0.016x^2 \quad (5b)$$

$$E_g(L_{1c}) = 1.111 + 1.047x + 0.052x^2 \quad (5c)$$

图 2 示出本文 LMTO-ASA-VCA 方法对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 合金的能隙 $E_g(\Gamma_{1c})$ 、 $E_g(X_{1c})$ 和 $E_g(L_{1c})$ 随合金组分变化关系的计算结果, 从图中可看到, 它们与 SCP^[1] 的计算结果是一致的(见文献 [1] 图 4), 本文与 SCP 方法的 $E_g(\Gamma_{1c}) \sim x$ 曲线与 $E_g(X_{1c}) \sim x$ 曲线的交点都在 $x=0.55$ 处。

能隙随合金组分 x 的变化关系, 即 $E_g \sim x$ 曲线的斜率和弯曲参数 b , 通常用于判别虚晶能带计算结果的合理性. 表 2 列出对图 2 三条 $E_g \sim x$ 曲线的一次式斜率(见式 4a、b、c)和弯曲参数 b (即式 5a、b、c 的二次系数)的计算结果, 表中同时列出 SCP^[1] 对其三条 $E_g \sim x$ 曲线的一次式斜率的计算结果和采用 Gaussian 轨道和赝势虚晶近似 (SVCA)^[2] 的 $E_g \sim x$ 曲线的弯曲参数 b 的平均值的计算结果. 从表 3 看到, 本文的三条 $E_g \sim x$ 曲线斜率的计算结果与从头算赝势法 (SCP) 的计算结果相当一致; 本文 $E_g(\Gamma_{1c}) \sim x$ 、 $E_g(L_{1c}) \sim x$ 和 $E_g(L_{1c}) \sim x$ 三条曲线的弯曲参数 b 都是正号, 其数值都很小, 表明三条曲线都是向下弯曲的, 但弯曲度很小, 这些曲线的弯曲特征和弯曲程度的计算结果都与经验赝势法的虚晶近似 SVCA 的结果符合。

表 3 三种虚晶近似方法对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的能隙 $E_g(\Gamma_{1c})$ 、 $E_g(X_{1c})$ 、 $E_g(L_{1c})$ 随合金组分 x 的变化曲线的斜率和弯曲参数 b 的计算结果

Tab. 3 The bend parameter b and the slop of the alteration curve of energy gap $E_g(\Gamma_{1c})$, $E_g(X_{1c})$, $E_g(L_{1c})$ with the composition x , given by three different virtual crystal approximation methods: present method (LMTO-ASA-VCA), *ab initio* pseudopotential method (SCP^[1]), gassion orbitals and empirical pseudopotential method (SVCA^[2])

	斜 率		弯曲参数 b	
	本文	(SCP)	本文	(SVCA)
$E_g(\Gamma_{1c}) \sim x$	1.441	(1.403)	0.053	(0.04)
$E_g(L_{1c}) \sim x$	-0.069	(-0.068)	0.016	(0.04)
$E_g(X_{1c}) \sim x$	1.099	(1.064)	0.052	(0.02)

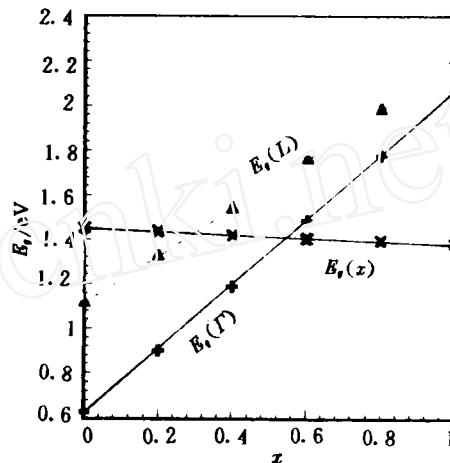


图 2 对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 合金的能隙 $E_g(\Gamma_{1c})$ 、 $E_g(X_{1c})$ 和 $E_g(L_{1c})$ 随合金组分 x 变化的计算结果

Fig. 2 The alteration of energy gap $E_g(\Gamma_{1c})$, $E_g(X_{1c})$ and $E_g(L_{1c})$ of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alloy with the composition x

2 结 语

本文对于包含芯态的全电子势的 LMTO-ASA 方法,在虚晶近似计算中,采用分别对势参数和结构常数按合金组分线性平均然后计算虚晶近似矩阵元的方法,建立了合金能带的 LMTO-ASA-VCA 久期方程,在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 合金能带自洽计算中,对于涉及虚晶价电子态的物理量:势参数、价电子电荷密度以及虚晶能带结构进行迭代计算,所得到的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 虚晶近似自洽的能带结构的主要特征,直接带隙与间接带隙随合金组分变化关系曲线的斜率、曲线的弯曲参数、曲线之间的交点,均与虚晶近似从头算赝势法或经验赝势法的有关计算结果比较符合.结果表明,我们建议的 LMTO-ASA-VCA 虚晶近似计算方法及其自洽计算迭代方案是一种合理的合金能带的虚晶近似计算方法.

参 考 文 献

- 1 Nelson J S et al. First-principles virtual-crystal calculation of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ disordered alloys and heterostructures: Band offsets and absolute alloy energies. *Phys. Rev. B*, 1991, 43:4 908~4 914
- 2 Chen A B, Sher A. Electronic structure of pseudobinary semiconductor alloy $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ and $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$. *Phys. Rev. B*, 1981, 23:5 360~5 374
- 3 Andersen O K. Linear method in band theory. *Phys. Rev. B*, 1975, 12:3 060~3 083
- 4 王仁智,黄美纯.一种半导体合金能带的 LMTO-ASA-VCA 方法.厦门大学学报(自然科学版),1987,26(2): 166~172

Self-consistent Virtual Crystal Calculation of Electronic Structure for $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Alloy

Wang Renzhi Ke Sanhuang Huang Meichun
(Dept. of Phys.)

Abstract A method of virtual crystal approximation calculation is suggested, which is based on the all-electron scalar relativistic LMTO-ASA band structure method. The self-consistent iteration calculation approach in this method is emphasized. The application of this method to $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alloy produces reasonable virtual crystal band structures.

Key words AlGaAs, Virtual crystal approximation, Alloy energy band