

# 应变层超晶格 $(\text{InAs})_n/(\text{GaAs})_n$ 的电子 结构与价带能量不连续性\*

柯三黄 黄美纯 王仁智

(厦门大学物理系, 厦门 361005)

(1994年6月30日收到)

采用内部求和  $d$  轨道处理下的线性丸盒轨道方法, 对在 GaAs 衬底上生长的应变层超晶格  $(\text{InAs})_n/(\text{GaAs})_n(001)$ , ( $n = 1, 2, 3, 4, 5$ ) 的电子结构进行了第一性原理计算, 得出了其能带结构、带隙值和态密度分布. 本文得出的  $(\text{InAs})_1/(\text{GaAs})_1$  在布里渊区中各高对称点的能隙值与从头算势方法的计算结果相一致, 得出的带隙值与光致发光实验结果符合得很好. 为了确定该系统的价带能量不连续值 ( $\Delta E_v$ ), 并全面考虑各因素对其的影响, 本文提出一种基于自洽超原胞计算及其冻结势处理下的形变势方法. 该方法全面考虑了界面电荷转移 (及其引起的偶极子势) 和弹性应变以及自旋-轨道相互作用三方面的因素对  $\Delta E_v$  值的影响. 本文得出的 InAs/GaAs 系统的  $\Delta E_v$  值为  $-0.201\text{eV}$ , 与 X 射线光电子能谱的测量值  $-0.17 \pm 0.07\text{eV}$  相一致.

PACC: 7125C; 7125T; 7320

## 1 引 言

分子束外延技术及其新近的进展(如迁移增强外延, migration-enhanced epitaxy)<sup>[1]</sup>使得对 InAs/GaAs 短周期超晶格这样高度应变的异质结构的实验研究能付诸实现<sup>[2-7]</sup>. 这种晶格失配的超晶格材料正引起人们越来越大的兴趣, 因为它的光电子学性质可以由不同的应变状态进行人工调整. 在理论研究方面, 对特定应变状态下的单层超晶格  $(\text{InAs})_1/(\text{GaAs})_1(001)$  能带结构的第一性原理研究也已见报道<sup>[6-8]</sup>. 本文采用内部求和空  $d$  轨道处理下的全电子势、标量相对论性的 linearized-muffin-tin-orbitals (LMTO) 能带方法(原子球近似下)对在 GaAs 衬底上共度生长的应变层超晶格  $(\text{InAs})_n/(\text{GaAs})_n(001)$ , ( $n = 1, 2, 3, 4, 5$ )进行了自洽超原胞计算, 并提出了一种基于上述自洽超原胞计算及其冻结势处理下的形变势方法(简称自洽形变势方法)来确定该系统的价带能量不连续值 ( $\Delta E_v$ ) 这一关键性参数, 并全面分析了在存在大的应变及其与自旋-轨道分裂相互影响的情况下, 该系统价带顶的复杂结构及其在界面的相对排列.

\* 福建省自然科学基金和国家自然科学基金资助的课题.

## 2 超原胞计算及其结果

InAs 和 GaAs 的晶格常数分别为  $6.058 \text{ \AA}$  和  $5.653 \text{ \AA}$ , 晶格失配量为 7%。当在 GaAs 衬底上共生长 InAs/GaAs 短周期超晶格时, InAs 层将发生弹性形变以达到平面内晶格常数 ( $a_{\parallel}$ ) 与 GaAs 晶格常数相一致。其受到的应力可分解为流体静压和单轴应力两部分, 发生形变后, InAs 层的垂直晶格常数可由其弹性模量给出:

$$a_{\perp}(\text{InAs}) = a(\text{InAs}) - 2(a(\text{GaAs}) - a(\text{InAs})) \frac{C_{12}}{C_{11}}, \quad (1)$$

其中  $C_{12}, C_{11}$  为 InAs 体材料的弹性模量张量元。本文采用  $C_{12}, C_{11}$  的实验值<sup>[9]</sup>  $C_{12} = 4.526 \text{ dyn/cm}^2$ ,  $C_{11} = 8.329 \text{ dyn/cm}^2$ , 相应的  $a_{\perp}(\text{InAs})$  为  $6.498 \text{ \AA}$ 。图 1 给出  $(\text{InAs})_1/(\text{GaAs})_1(001)$  (记为(1+1)SLS)的原胞结构。

上述原胞为  $D_{2d}^5(P\bar{4}m2)$  空间群对称性, 每个原子最邻近只有 4 个原子, 属于开结构。为了使原子球近似能够更合理地使用, 我们在原胞的间隙区加入了空原子球(图 1 中未示出), 以反映间隙区中价电子的行为。本文取各空原子球的体积与相应原子球的体积相等(空原子球的体积填充比为 0.5)。与我们以前的作法<sup>[10]</sup>相同, 在采用 LMTO 方法进行超晶格超原胞自洽计算中, 采用内部求和的方法计入各原子球和空原子球的未占有电子的空  $d$  轨道。此处理方法已在一系列的工作中给出了令人满意的结果<sup>[10-14]</sup>。本文继续采用此处理方法。本文自洽计算的总收敛到  $10^{-4} \text{ Ry}$ 。

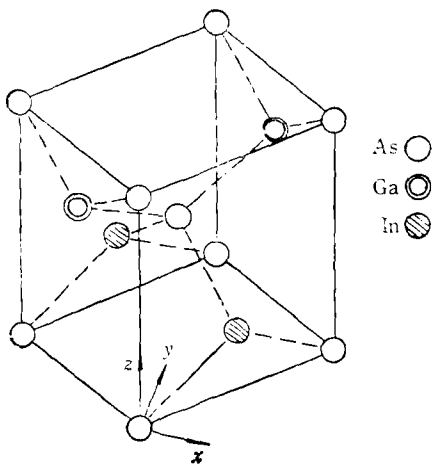


图 1  $(\text{InAs})_1/(\text{GaAs})_1(001)$  的原胞结构

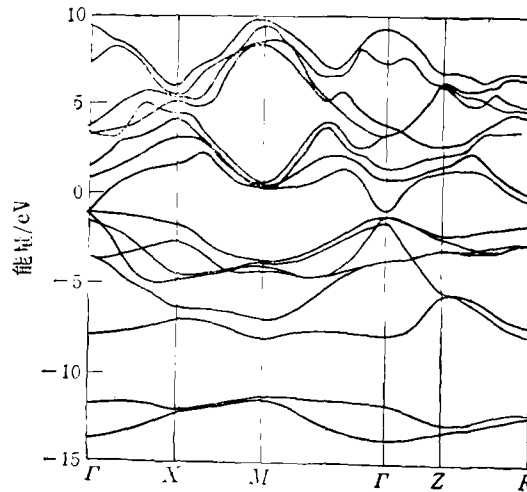


图 2  $(\text{InAs})_1/(\text{GaAs})_1(001)$  的能带结构

图 2 和图 3 分别给出计算得出的  $(\text{InAs})_1/(\text{GaAs})_1(001)$  的能带结构和态密度 (DOS) 分布图。图 3(a) 为 InAs 层和 GaAs 层对总态密度的贡献, 图 3(b) 则给出总态密度和各总分波态密度 (PDOS)。在本文的态密度计算中, 在简约布里渊区中取用了 576 个代表  $k$  点。表 1 列出本文计算得出的五种应变层超晶格在布里渊区中主要高对称

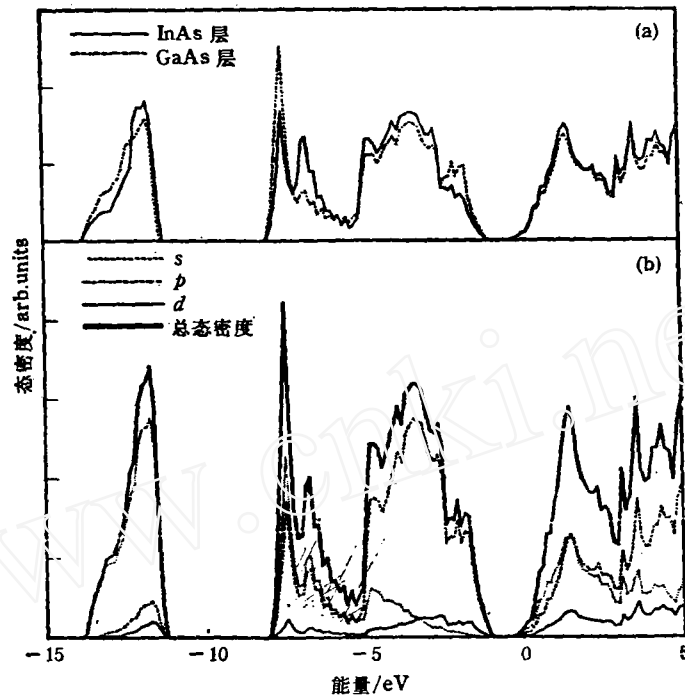


图3  $(\text{InAs})_n/(\text{GaAs})_m(001)$  的态密度分布 (a) 为 InAs 层和 GaAs 层对总态密度的贡献; (b) 为总态密度和  $s, p, d$  总分波态密度

表1 对五种应变层超晶格各能隙值的计算结果和文献[7],[6]采用第一性原理赝势方法 (FPPM) 对  $(\text{InAs})_n/(\text{GaAs})_m$  的计算结果以及有关的实验值(单位: eV)

|                                 | LDA 值               |                |                |                | 修正值  |                |                |                |
|---------------------------------|---------------------|----------------|----------------|----------------|--|----------------|----------------|----------------|
|                                 | $\Gamma^c-\Gamma^v$ | $Z^c-\Gamma^v$ | $R^c-\Gamma^v$ | $M^c-\Gamma^v$ | $\Gamma^c-\Gamma^v$  | $Z^c-\Gamma^v$ | $R^c-\Gamma^v$ | $M^c-\Gamma^v$ |
| 本文                              |                     |                |                |                |  |                |                |                |
| (1+1)SLS                        | 0.525               | 2.520          | 0.853          | 1.465          | 0.781  | 2.776          | 1.109          | 1.721          |
| (2+2)SLS                        | 0.556               | 1.734          | 2.094          | 1.447          | 0.812  | 1.990          | 2.350          | 1.703          |
| (3+3)SLS                        | 0.563               | 1.454          | 0.987          | 1.455          | 0.819  | 1.710          | 1.243          | 1.711          |
| (4+4)SLS                        | 0.564               | 1.135          | 1.429          | 1.437          | 0.820  | 1.391          | 1.685          | 1.693          |
| (5+5)SLS                        | 0.564               | 0.925          | 1.013          | 1.439          | 0.820  | 1.181          | 1.269          | 1.695          |
| FPPM <sup>[7]</sup><br>(1+1)SLS |                     |                |                |                | 0.91   | 2.54           | 1.16           | 1.68           |
| FPPM <sup>[6]</sup><br>(1+1)SLS |                     |                |                |                | 0.84   |                | 1.42           | 1.53           |
| $\Gamma^c-\Gamma^v$ 的<br>实验值    |                     |                |                |                | 0.75 <sup>[1]</sup> , 0.77 <sup>[3]</sup><br>0.76 <sup>[2]</sup> , 0.89 <sup>[5]</sup> |                |                |                |

点的最低导带本征值到价带顶的能量间隔及其修正值。众所周知, 在基于密度泛函理论 (DFT) 和局域密度近似 (LDA) 下的能带从头计算中, 如果不计入准粒子修正, 所得出的带隙值一般都比实验值明显偏小, 并且其具体数值同具体计算的近似有关。在添加空

原子球的 LMTO 方法中,带隙的具体数值还与空原子球半径(或空原子球体积的填充比)的选取有关.在比较不同方法的结果之前,先要对带隙的 LDA 理论值进行修正.根据本文得出的 InAs, GaAs 体材料带隙的 LDA 值与实验值(1.428eV, 0.356eV)<sup>[9]</sup>的比较,可得出对本文超晶格 LDA 带隙的修正值为 0.256eV.修正后的带隙值也列于表 1 中.

从图 2 可看到,  $(\text{InAs})_i/(\text{GaAs})_i(001)$  的价带顶由于应变的作用已发生了分裂,其导带结构在  $\Gamma, M$  和  $R$  点有三个极小值.从表 1 可看到,对于  $(1+1), (2+2), (3+3), (4+4)$  和  $(5+5)$  五种应变层超晶格,其导带底都位于布里渊区中心( $\Gamma$  点),因而都是直接带隙半导体.这与 InAs 和 GaAs 体材料是相同的.表 1 中把本文对五种应变层超晶格在布里渊区中  $\Gamma, Z, R, M$  点的最低导带能量值和价带顶能量值之差的计算结果与其它两种从头赝势方法的计算结果以及有关的实验带隙值进行了比较.可以看到,本文得出的各能隙的大小顺序与其它两种方法得出的结果是完全一致的,具体的数值大小也是相接近的.本文得出的五种应变层超晶格的带隙值分别为 0.78, 0.81, 0.82, 0.82 和 0.82 eV.在实验方面, Gerard 等人<sup>[10]</sup>用光致发光手段对  $(\text{InAs})_i/(\text{GaAs})_i(001)$  的测量结果为 0.75eV, Voisin 等人<sup>[3]</sup>的光致发光谱实验值为 0.77eV (层厚为 10 Å) 和 0.76eV (层厚为 20 Å). McDermott<sup>[5]</sup> 对 Ga-As-In-As 超合金的光致发光测量结果为 0.89eV.本文的理论值与上述实验值还是相当接近的.在 Voisin 等人<sup>[3]</sup>的实验中,带隙值表现出对层厚变化的不敏感,这一点与本文结果正好一致.对于  $(\text{InAs})_i/(\text{GaAs})_i(001)$ , 本文得出的带隙值比从头赝势方法的计算结果偏小.对于  $(2+2), (3+3), (4+4)$  和  $(5+5)$  SLS 在布里渊区其它各对称点的能隙值,我们还没有找到其它的理论结果和实验值供比较.

从图 3 给出的  $(\text{InAs})_i/(\text{GaAs})_i$  的态密度和各分波态密度的分布可看到,位于 -13 eV 左右的两个带来源于 InAs 层和 GaAs 层的  $s$  带,位于 -7eV 左右的两个带则来源于 InAs 层和 GaAs 层的  $s-p$  杂化带,而位于 -5—-1eV 能量范围的价带则主要为  $p$  态特性.与 InAs 和 GaAs 体材料相类似,  $(\text{InAs})_i/(\text{GaAs})_i$  的价带顶主要为阴离子  $p$  态特性,  $d$  态参与小量杂化,不含  $s$  态特性.导带底则以  $s$  态特性为主要,  $p, d$  态参与杂化.

### 3 价带能量不连续性的自洽形变势方法及其结果

在应变层超晶格中,价带能量不连续性除了受到两体材料的性质影响之外,还受到界面电荷转移和弹性应变及其与自旋-轨道相互作用能量( $\Delta_0$ )耦合的影响.其中应变的作用使原来三度简并的价带顶( $\Gamma_{15}$ , 不考虑自旋-轨道相互作用)发生分裂,当计入自旋-轨道相互作用后,价带顶结构进一步复杂化.目前,在对应变层超晶格价带能量不连续性的理论研究中,多数是采用从头赝势计算能带方法.而几乎所有的方法都不是全相对论性的,也就是在自洽计算中没有考虑价电子的自旋-轨道相互作用.对于这一相互作用的影响,一般都是根据构成超晶格的两种体材料自旋-轨道相互作用能量  $\Delta_0$  的实验值之差来对  $\Delta E$  的最后结果进行修正.这种作法实际上忽略了弹性应变和  $\Delta_0$  之间的相互

作用。

为全面考虑影响  $\Delta E_v$  的各种因素, 本文提出一种自洽形变势方法。该方法采用形变势理论来描述切向应变及自旋-轨道相互作用的影响; 采用超原胞自洽计算的方式来计入界面电荷转移和应变的流体静压分量的影响。

我们知道, 对于 InAs 和 GaAs, 当不考虑自旋-轨道相互作用时, 价带顶为三度简并的  $\Gamma_{15}$  态, 考虑自旋-轨道相互作用后变为二度简并的重空穴 ( $v_1$ ) 带、轻空穴 ( $v_2$ ) 带和自旋-轨道分裂带 ( $v_3$ )。当在 GaAs 衬底上生长 InAs/GaAs 应变层超晶格时, 界面电荷转移使得 InAs 层和 GaAs 层的能带结构发生相对移动<sup>[10,13,14]</sup>; 应力的流体静压分量使 InAs 层的  $v_1, v_2, v_3$  发生平移; 应力的单轴分量则使  $v_1, v_2, v_3$  发生相对移动。对于单轴应力分量的作用, 用下述哈密顿量来描述<sup>[15]</sup>:

$$H' = \begin{bmatrix} E_{v,v,v} - \frac{1}{2} \delta E_{001} + \frac{1}{3} \Delta_0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{v,v,v} + \frac{1}{2} \delta E_{001} + \frac{1}{3} \Delta_0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \delta E_{001} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \delta E_{001} & E_{v,v,v} - \frac{2}{3} \Delta_0 \end{bmatrix}. \quad (2)$$

上述矩阵的三列分别对应于重空穴态  $|3/2, 3/2\rangle$ 、轻空穴态  $|3/2, 1/2\rangle$  和自旋-轨道分裂态  $|1/2, 1/2\rangle$ 。  $E_{v,v,v} = \frac{1}{3} (E_{v,v,1} + E_{v,v,2} + E_{v,v,3})$  为三个价带顶的平均值。  $\delta E_{001} = 2b \cdot (\epsilon_{xx} - \epsilon_{zz})$ , 其中  $b$  为四角对称应力的剪切形变势, 对于 InAs, 其值为  $-1.8\text{eV}^{[16]}$ ;  $\epsilon_{xx}, \epsilon_{zz}$  为应变分量。本文中  $\epsilon_{xx} = \frac{\Delta a_{\perp}(\text{InAs})}{a_{\perp}(\text{InAs})} = 0.0726$ ,  $\epsilon_{zz} = \frac{\Delta a_{\parallel}(\text{InAs})}{a_{\parallel}(\text{InAs})} = -0.0669$ 。本文取  $\Delta_0(\text{InAs}) = 0.38\text{eV}^{[9]}$ 。由(2)式可得出由单轴应力引起的 InAs 层的  $v_1, v_2$  和  $v_3$  带相对于  $E_{v,v,v}$  的移动值分别为

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

$$\Delta E_{v,v,2} = \frac{1}{4} \delta E_{001} - \frac{1}{6} \Delta_0 + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \delta E_{001} \Delta_0 + \frac{9}{4} (\delta E_{001})^2} \quad (4)$$

$$\Delta E_{v,v,3} = \frac{1}{4} \delta E_{001} - \frac{1}{6} \Delta_0 - \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \delta E_{001} \Delta_0 + \frac{9}{4} (\delta E_{001})^2}. \quad (5)$$

本文计算得出的 InAs 层的这三个值分别为 0.378, 0.172 和  $-0.550\text{eV}$ 。对于 GaAs 层, 由于不存在应变,  $\delta E_{001} = 0$ , 因而  $\Delta E_{v,v,1} = \Delta E_{v,v,2} = \frac{1}{3} \Delta_0 = 0.113\text{eV}$ ,  $\Delta E_{v,v,3} = -\frac{2}{3} \Delta_0 = -0.227\text{eV}$ 。

要确定 InAs/GaAs 应变层超晶格的价带能量不连续性就是要定出 InAs 层和 GaAs 层的  $E_{v,v,1}, E_{v,v,2}$  和  $E_{v,v,3}$  的相对排列。为此要做到以下三点:

1) InAs 层和 GaAs 层的计算定出相同的能量标度。我们知道, 对单独的无穷大的 InAs 和 GaAs 晶格, 绝对的能量标度是没有定义的, 因而不能用 InAs, GaAs 体材料的计

算结果来直接计算 InAs/GaAs 的价带能量不连续值。

2) 必须考虑到 InAs 和 GaAs 构成 InAs/GaAs 超晶格后界面电荷转移及其偶极子势对 InAs 层的  $E_{v_2}$  和 GaAs 层的  $E_{v_2}$  相对位置的影响。

3) 必须计入 InAs 层中应力的流体静压分量对其  $E_{v_2}$  值的影响。

为了实现上述三点, 我们采用基于自洽超原胞计算的冻结势方法来完成 InAs 层和 GaAs 层的  $E_{v_2}$  值的最后确定。具体的作法如下: 在由前述的自洽超原胞计算得出超晶格自洽电荷密度之后, 输出各原子球和空原子球的势参数, 把它们作为计算与超晶格分子层相对应的应变体材料(四角结构)能带结构的输入, 从而确定其  $E_{v_2}$  值。在上述冻结势方法计算中, 因为 InAs 层和 GaAs 层的势参数是由包含两者的自洽超原胞计算给出, 因而保证了对 InAs 层和对 GaAs 层的计算结果具有完全相同的能量标度。同时又以界面自洽的方式计入了界面电荷转移及其引起的偶极子势<sup>[11]</sup>的作用以及 InAs 层中应力的流体静压分量对其  $E_{v_2}$  值的影响。

表 2 根据(1+1),(2+2),(3+3),(4+4)和(5+5) SLS 的超原胞自洽计算势参数采用冻结势方法得出的  $\Delta E_{v_2}$  值 ( $=E_{v_2}(\text{InAs}) - E_{v_2}(\text{GaAs})$ ) (单位: eV)

|                        | (1+1)SLS | (2+2)SLS | (3+3)SLS | (4+4)SLS | (5+5)SLS |
|------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| $E_{v_2}(\text{InAs})$ | -1.268   | -1.311   | -1.344   | -1.342   | -1.342   |
| $E_{v_2}(\text{GaAs})$ | -1.322   | -1.297   | -1.277   | -1.278   | -1.278   |
| $\Delta E_{v_2}$       | 0.054    | -0.014   | -0.067   | -0.064   | -0.064   |

考虑到冻结势方法计算存在着对层厚的收敛性问题, 我们分别采用(1+1),(2+2),(3+3),(4+4)和(5+5) SLS 的超晶格自洽势参数对  $E_{v_2}$  值进行了确定, 结果列于表 2 中。从表 2 可看到, 用(1+1),(2+2)和(3+3) SLS 的自洽计算结果得出的  $\Delta E_{v_2}$  ( $=E_{v_2}(\text{InAs}) - E_{v_2}(\text{GaAs})$ ) 存在着振荡行为, 而用(4+4)和(5+5) SLS 的自洽计算结果得出的  $\Delta E_{v_2}$  值则收敛于  $-0.064\text{eV}$ 。本文的  $\Delta E_{v_2}$  计算采用此收敛值。这一行为与具有相同阳离子的超晶格 InP/InAs 是不相同的。在 InP/InAs 系统中, 由于相同阳离子的作用使得冻结势方法甚至在(1+1),(2+2) SLS 中就已收敛<sup>[10]</sup>。这样我们就完全确定了 InAs/GaAs 应变层异质界面的能带排列情况(见图 4)。

从图 4 可以看到, 由于单轴应力的引入, InAs 层的重轻空穴带在  $\Gamma$  点发生分裂, 分裂值为  $0.206\text{eV}$ 。文献[7]采用从头势方法对(1+1) SLS 的计算结果为  $0.29\text{eV}$ 。Taguchi 等人<sup>[6]</sup>用从头势方法计算结果则为  $0.14\text{eV}$ 。这两种计算都没有计入自旋-轨道相互作用。图 4 中 InAs 层的重空穴带比 GaAs 层二度简并的重轻空穴带高出  $0.201\text{eV}$ , 但 InAs 层的轻空穴带却比 GaAs 层的价带顶低  $0.005\text{eV}$ 。从  $0.005\text{eV}$  这一很小的量可以看出, 可以通过不同的应变状态来调整两者的相对位置。如果 InAs 层的  $v_2$  带比 GaAs 层的价带顶高, 那么重轻空穴都将集中在 InAs 层, 使得 InAs/GaAs 系统成为 I 型超晶格; 如果 InAs 层的  $v_2$  带比 GaAs 层的价带顶低, 那么重轻空穴将分别处在 InAs 层和 GaAs 层, 结果使得 InAs/GaAs 系统成为 II 型超晶格。这样 InAs/GaAs 系统的光电子学性质对不同的应变状态将会是敏感的。本文的这一结论还有待于实验的检

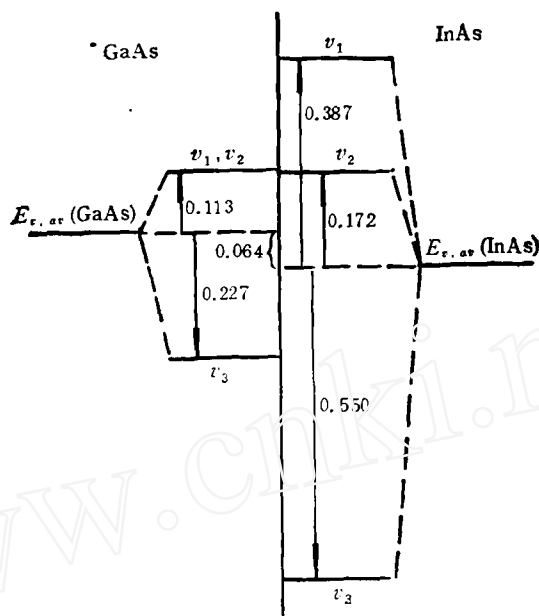


图4 InAs/GaAs 应变层异质界面的能带排列情况(单位: eV)

验。从理论上讲,由于目前对 InAs/GaAs 系统所进行的从头赝势计算都没有计入自旋-轨道相互作用,所以也无法与本文结果进行比较和鉴定。不过从图 4 我们发现,对于 InAs/GaAs 系统的价带能量不连续性来说,单轴应力和自旋-轨道相互作用确实起着决定性的作用,如果不考虑这两者的作用, GaAs 层的价带顶的平均值将比 InAs 层的高 0.064eV。本文得出的在 GaAs 衬底上生长的 InAs/GaAs 系统的价带能量不连续值为 0.201eV,与 Kowalczyk 等人<sup>[17]</sup>采用 X 射线光电子能谱的测量结果  $0.17 \pm 0.07\text{eV}$  非常一致。在其它的理论计算方面,Taguchi 等人<sup>[18]</sup>采用从头赝势方法的计算结果为 0.31eV,此结果没有计入自旋-轨道相互作用。

- [1] J. M. Gerard *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **54**(1989), 30.
- [2] J. Menendez *et al.*, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 8165.
- [3] P. Voisin and M. Voos, *Appl. Phys. Lett.*, **48**(1986), 1476.
- [4] T. Fukui and H. Saito, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **24**(1985), L774.
- [5] B. T. McDermott and N. A. El-Masty, *Appl. Phys. Lett.*, **51**(1987), 1830.
- [6] A. Taguchi and T. Ohno, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 1696.
- [7] Fan Weijun *et al.*, *Chin. Phys. Lett.*, **9**(1992), 305.
- [8] R. Padjen and D. Paquet, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 4915.
- [9] O. Madelung *et al.*, Landolt-Bornstein, New Series (Springer, Berlin, 1982).
- [10] 柯三黄、王仁智、黄美纯, *物理学报*, **42**(1993), 1635.
- [11] 柯三黄、王仁智、黄美纯, *物理学报*, **43**(1994), 103.
- [12] San-huang Ke *et al.*, *Solid State Commun.*, **89**(1994), 105.
- [13] R. Z. Wang, S. H. Ke and M. C. Huang, *J. Phys.* **C4**(1992), 8083.
- [14] S. H. Ke, R. Z. Wang and M. C. Huang, *Phys. Rev.*, to be published.
- [15] F. H. Pollak and M. Catdona, *Phys. Rev.*, **172**(1968), 816.
- [16] O. Madelung *et al.*, Landolt-Bornstein, New Series (Springer-Verlag, Berlin, 1987).

- [17] S. P. Kowalczyk *et al.*, *J. Vac. Sci. Technol.*, **20**(1982), 705.  
[18] A. Taguchi and T. Ohno, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 7803.

## THEORETICAL STUDIES ON ELECTRONIC STRUCTURES AND VALENCE-BAND DISCONTINUITY FOR STRAINED- LAYER SUPERLATTICES $(\text{InAs})_n/(\text{GaAs})_n$

KE SAN-HUANG HUANG MEI-CHUN WANG REN-ZHI

(Department of Physics, Xiamen University, Xiamen 361005)

(Received 30 June 1994)

### ABSTRACT

This paper reports an *ab initio* study on electronic structures of strained-layer superlattices (SLS's)  $(\text{InAs})_n/(\text{GaAs})_n(001)$ , ( $n = 1, 2, 3, 4, 5$ ) grown epitaxially on a GaAs-substrate, by means of the linearized-muffin-tin-orbitals band structure method in an internal summation treatment for  $d$  orbitals. Present results of the energy gap values at high symmetry points in Brillouin zone for  $(\text{InAs})_1(\text{GaAs})_1$  are consistent with those obtained by *ab initio* pseudopotential calculations. The band gaps given by this work are in good agreement with the experimental data of photoluminescence spectra. In order to determine the valence band discontinuity at these SLS's, we suggest a theoretical method which adopts deformation potential theory to treat the effects of elastic strain and spin-orbit splitting on the basis of selfconsistent supercell calculations and a frozen-potential approach. The effects of interface charge transfer, elastic strain and spin-orbit splitting on the valence band discontinuity are all taken into account in our approach. The determined result is 0.201eV, in good agreement with the experimental datum of X-ray photoemission spectroscopy:  $0.17 \pm 0.07\text{eV}$ .

**PACC:** 7125C; 7125T; 7320