

# 新型三元系 $B_xGa_{1-x}Sb$ 合金能隙及形成焓的 理论研究

于 高<sup>1</sup> 王 琦<sup>1</sup> 任晓敏<sup>1</sup> 黄永清<sup>1</sup> 黄 辉<sup>1</sup> 舒 伟<sup>1</sup> 熊德平<sup>2</sup>

(<sup>1</sup>北京邮电大学光通信与光波技术教育部重点实验室, 北京 100876)  
(<sup>2</sup>广东工业大学物理与光电工程学院, 广东 广州 510006)

**摘要** 基于第一性原理,采用广义梯度近似,理论研究了新型三元系  $B_xGa_{1-x}Sb$  合金的能带结构,分析了硼(B)的含量对  $B_xGa_{1-x}Sb$  合金能带特性的影响。理论计算结果表明,硼相对摩尔含量在 0~18.75% 范围内时,  $B_xGa_{1-x}Sb$  的  $\Gamma_{1c}-\Gamma_{15v}$  带隙宽度值随硼含量单调递增,平均增速为 17.5 meV/%B,其能带弯曲参数为 2.23 eV;其  $X_{1c}-\Gamma_{15v}$  带隙宽度值随硼含量单调递减,平均减速为 12.8 meV/%B;当  $x < 10\%$  时,  $B_xGa_{1-x}Sb$  为直接带隙化合物。同时还计算了硼相对摩尔含量为 6.25%、12.5% 和 18.75% 时  $B_xGa_{1-x}Sb$  的形成焓。通过与  $B_xGa_{1-x}As$  的形成焓对比,预测  $B_xGa_{1-x}Sb$  中硼的并入相对摩尔量可达 7%。

**关键词** 材料; 光电子学; BGaSb; 第一性原理; 能带弯曲参数; 形成焓

**中图分类号** O471.5 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS200929s1.0202

## Theoretical Investigations of the Band-Gap and Formation Enthalpy of New $B_xGa_{1-x}Sb$ Ternary Alloys

Yu Gao<sup>1</sup> Wang Qi<sup>1</sup> Ren Xiaoming<sup>1</sup> Huang Yongqing<sup>1</sup> Huang Hui<sup>1</sup>  
Shu Wei<sup>1</sup> Xiong Deping<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Key Laboratory of Optical Communication and Lightwave Technologies, Ministry of Education, Beijing University of Posts and Telecommunications, Beijing 100876, China  
<sup>2</sup>School of Physics and Optoelectronic Engineering, Guangdong University of Technology, Guangzhou, Guangdong 510006, China

**Abstract** Using first-principles calculations with the generalized gradient approximation (GGA), the band structure of the new  $B_xGa_{1-x}Sb$  ternary alloys is studied theoretically, and the impact of the born incorporation on the band structure of  $B_xGa_{1-x}Sb$  is also investigated. The result shows that, when boron relative mole content is between 0 and 18.75%, the value of  $\Gamma_{1c}-\Gamma_{15v}$  band-gap energy is increasing monotonously by  $\sim 17.5$  meV/%B with a small band-gap bowing parameter (2.23 eV), while the value of  $X_{1c}-\Gamma_{15v}$  band-gap energy is decreasing monotonously by  $\sim 12.8$  meV/%B. When boron content  $x$  is below 10%,  $B_xGa_{1-x}Sb$  is a direct band-gap alloy. In addition, the formation enthalpies of  $B_xGa_{1-x}Sb$  alloys with born relative mole content at 6.25%, 12.5% and 18.75% are also calculated, respectively. The comparison between the calculated formation enthalpies of  $B_xGa_{1-x}As$  and that of  $B_xGa_{1-x}Sb$  indicates that the content of boron in  $B_xGa_{1-x}Sb$  may be able to reach 7% relative mole.

**Key words** materials; optoelectronics; BGaSb; first-principles; band-gap bowing parameter; formation enthalpy

### 1 引 言

室温下,含锑材料的带隙宽度的在 1.43~0.1 eV 的范围内,对应波长范围为 0.9~12  $\mu\text{m}$ ,覆

盖了光通信<sup>[1,2]</sup>和红外探测领域的波长范围<sup>[1~3]</sup>,其应用范围之广,引起了科研工作者们对含锑化合物研究的极大关注。尤其是基于 III-V 族化合物半导

**基金项目:** 国家 973 计划(2003CB314901)、国家 863 计划(2006AA03Z416, 2007AA03Z418)、国际合作(2006DFB11110)和高等学校学科创新引智计划(B07005)资助项目。

**作者简介:** 于 高(1984-),男,硕士生,主要从事通信光电子学方面研究。E-mail: yugao0312@qq.com

**导师简介:** 任晓敏(1958-),男,教授,博士生导师,主要从事通信光电子学方面的研究。E-mail: xmren@bupt.edu.cn

体 GaSb 的三元系、四元系化合物半导体 (例如 GaAsSb、AlGaAsSb、GaInAsSb<sup>[4]</sup> 等), 在异质结晶体管 (HBT)、红外探测器、红外激光器<sup>[5,6]</sup> 等器件的制作中得到了广泛的应用。

在常规 III-V 族化合物半导体中掺入硼, 会引起化合物能带性质 (例如带隙宽度等) 的改变, 从而可能找到新的适合于光通信领域或其他领域的化合物半导体材料, 扩宽相关研究面, 并且新材料对提高我们的器件性能具有积极意义。目前, 对于掺硼化合物的研究大多集中在 BGaAs、BAlAs、BGaInAs 等少数几种化合物中。而对于在 GaSb 这种常见的 III-V 族化合物半导体中掺入硼的研究很少, 这与现阶段实验上合成 BGaSb 比较困难有很大关系。

因此, 本文从理论计算入手, 研究将硼掺入 GaSb 中后形成的新型三元系  $B_xGa_{1-x}Sb$  合金的能带结构, 分析了硼的并入量对  $B_xGa_{1-x}Sb$  合金能带特性的影响, 并通过与  $B_xGa_{1-x}As$  的形成焓对比, 预测了  $B_xGa_{1-x}Sb$  中硼的并入量。这些研究可为后期实验合成 BGaSb 合金做理论基础。

## 2 计算方法

计算采用 CASTEP 软件来进行, CASTEP 软件是基于第一性原理的, 它的理论基础是在局域电荷密度近似 (Local Density Approximation,

LDA)<sup>[7,8]</sup> 或是广义梯度近似 (Generalized Gradient Approximation, GGA)<sup>[9,10]</sup> 下的电荷密度泛函理论。与局域密度电荷近似比较, 广义梯度近似只改进了原子交换关联能的计算, 对价电子的电离能只有很小的变化, 广义梯度近似采用平面波基展开电子波函数时, 仅需较小的截止动能就能达到很好的收敛效果。

计算中, 采用了选用广义梯度近似来处理交换关联能, 在密度泛函的基础上, 采用利用平面波赝势展开方法求解 Kohn-Sham 方程, 来计算 BGaSb 的能带结构和总能量。计算模型采用 32 原子超胞 (supercell) 作为周期性基本单元, 即用  $B_nGa_{16-n}Sb_{16}$  ( $n=0, 1, \dots, 16$ ) 来模拟不同硼含量 (0, 6.25%,  $\dots$ , 100%) 的三元系  $B_xGa_{1-x}Sb$  合金, 采用团簇法模拟合金内部原子的随机排列。

## 3 结果与讨论

### 3.1 GaSb 与 BSb 的能带结构

在研究 GaSb 及 BSb 的能带性质时, 采用 2 原子的原胞作为模型来计算其能带结构。计算中 BSb 和 GaSb 的晶格常数分别采用 0.512 nm<sup>[11]</sup>, 0.60959 nm<sup>[18]</sup>。图 1 为计算得到的 GaSb 和 BSb 的能带结构图。

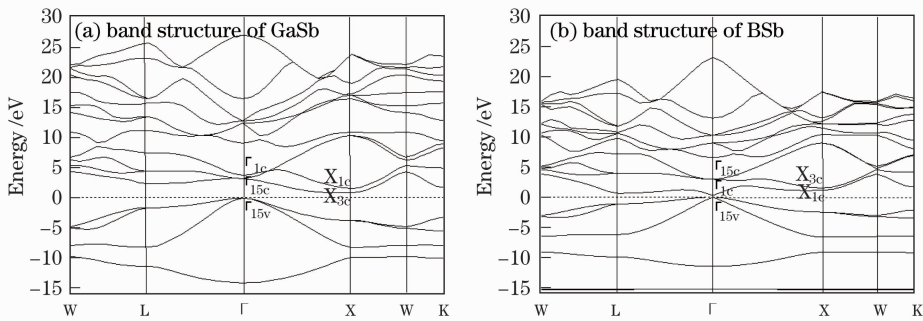


图 1 GaSb (a) 和 BSb (b) 的能带结构图

Fig. 1 Band structures of GaSb (a) and BSb (b)

从图 1 可以看出, GaSb 在布里渊区中心处, 导带最低点依次为  $\Gamma_{1c}$ 、 $\Gamma_{15c}$ ; 而在 X 点导带最低点依次为  $X_{1c}$ 、 $X_{3c}$ , 这些都与常见 III-V 半导体 GaAs、InP 等是一致的。BSb 在  $\Gamma$  点 (对应在布里渊中心) 处, 其导带最低点为具有三重简并特征的 p 态  $\Gamma_{15c}$ , 而非大多数 III-V 族材料那样为  $\Gamma_{1c}$ ; X 点导带的最低点为  $X_{3c}$ , 而非大多数 III-V 族材料那样为  $X_{1c}$ , 且该点为导带最低点, 这一特性和 Si 材料的性质相同<sup>[13]</sup>。

表 1 和表 2 分别是 GaSb 和 BSb 对应的  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  带隙宽度 (直接跃迁) 和  $X_{1c} - \Gamma_{15v}$  带隙宽度 (间接跃迁) 的一系列计算值和实验值。由于 BSb 尚未在实验上得到合成, 因此暂时也没有关于 BSb 的能隙宽度的实验值, 文中选取 BSb 的  $X_{1c} - \Gamma_{15v}$ ,  $\Gamma_{15c} - \Gamma_{15v}$ ,  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  跃迁能隙值为 1.7 eV, 4.0 eV, 4.4 eV<sup>[13]</sup>, 作为修正 BGaSb 的直接跃迁能隙值的实验近似值。

表 1 GaSb 能隙宽度的理论计算值和实验值  
Table 1 GaSb's band gaps (theoretical values and experimental values)

$\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$	$\Gamma_{15c} - \Gamma_{15v}$	$X_{1c} - \Gamma_{15v}$	$X_{3c} - \Gamma_{15v}$	$L_{1c} - \Gamma_{15v}$	
0.28458	2.97647	1.52598	1.13202	0.6364	GGA <sup>[a]</sup>
0.812		1.141		0.875	Exp. <sup>[b]</sup>

表 2 BSb 能隙宽度的理论计算值  
Table 2 BSb's band gaps (theoretical values)

$\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$	$\Gamma_{15c} - \Gamma_{15v}$	$X_{1c} - \Gamma_{15v}$	$X_{3c} - \Gamma_{15v}$	$L_{1c} - \Gamma_{15v}$	
3.79468	3.22406	1.63154	0.84335	2.3557	GGA <sup>[a]</sup>
	3.05	1.32			LDA <sup>[c]</sup>
4.4	4.0	1.7			<sup>[d]</sup>

<sup>[a]</sup> This work, <sup>[b]</sup> Reference 14, <sup>[c]</sup> Reference 12, <sup>[d]</sup> Reference 13.

### 3.2 BGaSb 合金的能带结构

对 BGaSb 的计算是基于三元系合金晶格常数所满足的 Vegard 定理的, 即对  $B_xGa_{1-x}Sb$  合金, 其晶格常数可表示为:

$$a_{BGaSb} = x \cdot a_{BSb} + (1-x) \cdot a_{GaSb}, \quad (1)$$

其中  $a_{BGaSb}$ 、 $a_{BSb}$  和  $a_{GaSb}$  分别表示 BGaSb、BSb 和 GaSb 的晶格常数, 通过(1)式计算出不同硼相对摩尔含量的  $B_xGa_{1-x}Sb$  的晶胞晶格常数, 分别用来建立各种组分的超胞模型, 建立面心立方格子时, 采用准随机结构超胞 SQS-32 近似来模拟原子占位的无规则性, 用  $B_nGa_{16-n}Sb_{16}$  ( $n=0, 1, \dots, 16$ ), 分别代表在硼原子相对摩尔含量分别为  $x=0, 6.25\%, 12.5\%, \dots, 100\%$  的情形。

由于 32 原子超胞所含的原子数目多, 会导致其能带在空间上的折叠<sup>[15]</sup>, 原胞的间接能谷  $X_{1c}$  折叠到超胞能带图中  $\Gamma_{15v}$  价带所在的位置, 因此计算的能带图在硼的所有组分都表现为直接跃迁能隙<sup>[16]</sup>, 它必须通过与二元系原胞能带图的对比来区分直接和间接跃迁能带。因此在分析 BGaSb 的 32 原子超胞的能带结构时, 就需要参考 3.1 节中的 GaSb 和 BSb 的二原子原胞的能带结构, 结合  $\Gamma_{1c}$ 、 $X_{1c}$  等点的走势, 就可以区分  $\Gamma_{1c}$ 、 $X_{1c}$  等点所处的位置。

由 3.1 节可知 BSb 和 GaSb 的能带结构差别很大, 因此他们构成的三元系合金  $B_xGa_{1-x}Sb$  的能带结构会比较复杂。在硼相对摩尔含量  $x$  比较小的时候,  $B_xGa_{1-x}Sb$  的能带结构类似于 GaSb, 此时能带最低点为  $\Gamma$  处的  $\Gamma_{1c}$ , 因此  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  的带隙宽度就对应为直接跃迁的最低能隙; 而 X 点处最低点为  $X_{1c}$ 。计算显示 BGaSb 的导带最低点出现在  $\Gamma$  点或 X 点处, 当  $\Gamma_{1c}$  为导带最低点时, BGaSb 为直接带隙材料, 其带隙宽度值为  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  对应的带隙值; 当  $X_{1c}$  为导带最低点时, BGaSb 为间接带隙材料, 其带

隙宽度值为  $X_{1c} - \Gamma_{15v}$  对应的带隙值。

表 3~表 5 分别是硼相对摩尔含量为 6.25%、12.5%、18.75%, 不同硼替代位置时, 计算得到的直接跃迁  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  能隙值及对应的权重。

表 3 硼相对摩尔含量为 6.25%时( $B_1Ga_{15}Sb_{16}$ ), 超胞的对称性,  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  能隙宽度及其权重

Table 3 Symmetry,  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  band gap value and weight of the super-cell (When the boron content is 6.25%,

$B_1Ga_{15}Sb_{16}$			
B's position	Symmetry	Weight	$E_g$ (eV)
(0,0,0)	P-42M	1	0.40882

表 4 硼相对摩尔含量为 12.5%时( $B_2Ga_{14}Sb_{16}$ ), 超胞的对称性,  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  能隙宽度及其权重

Table 4 Symmetry,  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  band gap values and weights of the super-cell (When the boron content is 12.5%,  $B_2Ga_{14}Sb_{16}$ )

B's position	Symmetry	Weight	$E_g$ (eV)
(0,0,0)(3/4,3/4,1)	CMM2	4	0.52218
(0,0,0)(3/4,1/2,1/2)	P21212	4	0.53185
(0,0,0)(1/2,1/2,0)	P-4M2	1	0.45834
(0,0,0)(1,1/4,1/2)	P2221	4	0.51114
(0,0,0)(0,0,1)	P-42M	2	0.45638

Weighted average of  $E_g$ : 0.5089

表 5 硼相对摩尔含量为 18.75%时( $B_3Ga_{13}Sb_{16}$ ), 超胞的对称性,  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  能隙宽度及其权重

Table 5 Symmetry,  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  band gap values and weights of the super-cell (When the boron content is 18.75%,  $B_3Ga_{13}Sb_{16}$ )

B's position	Symmetry	Weight	$E_g$ (eV)
(0,0,0)(3/4,1/4,0)(1/2,1/4,1/2)	P1	24	0.65269
(0,0,0)(1/2,1/4,1/2)(1/2,3/4,1/2)	P222	13	0.562
(0,0,0)(3/4,1/2,1/2)(1/2,3/4,1/2)	CM	24	0.62914
(0,0,0)(1/4,3/4,1)(1/2,1/2,1)	CMM2	8	0.57664
(0,0,0)(1/4,3/4,1)(3/4,3/4,1)	P2	33	0.57152
(0,0,0)(0,0.5,1)(0.5,0.5,1)	P-42M	3	0.43093

Weighted average of  $E_g$ : 0.598438

能带弯曲参数(Energy-gap bowing parameter)

通过下式来定义：

$$E_g^{BGaSb} = x \cdot E_g^{BSb} + (1-x) \cdot E_g^{GaSb} - b(x) \cdot x \cdot (1-x) \quad (2)$$

其中  $E_g^{BSb}$  和  $E_g^{GaSb}$  分别是 BSb 和 GaSb 的  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  能隙宽度,  $E_g^{BGaSb}$  是化合物  $B_xGa_{1-x}Sb$  带隙宽度。一般采用广义梯度近似的计算值都比实验值小, 这是密度泛函本身的局限性所致, 由于这种偏小对所有组分都具有有一致性, 近似认为不影响通过(2)式计算得到的带隙弯曲参数<sup>[17]</sup>。

表 6 所示的是, 不同硼相对摩尔含量时直接跃迁的能隙值( $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$ )以及能带弯曲参数的计算结果, 在 B 相对摩尔含量为 6.25%、12.5%、18.75% 时, 对应的能带弯曲参数分别为 1.62 eV、1.96 eV、2.26 eV。

表 6  $B_xGa_{1-x}Sb$  的  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  带隙宽度计算值及对应的能带弯曲参数

Table 6 Calculated  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  band gap values and bowing parameters of  $B_xGa_{1-x}Sb$

Composition	X	$E_g(x)(\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v})$	bowing, $b / eV$
$Ga_{16}Sb_{16}$	0%	0.28458	
$B_1Ga_{15}Sb_{16}$	6.25%	0.40882	1.623744
$B_2Ga_{14}Sb_{16}$	12.5%	0.5089	1.960617
$B_3Ga_{13}Sb_{16}$	18.75%	0.598438	2.259927
$B_{16}Sb_{16}$	100%	3.79468	

为了模拟硼相对摩尔含量在 0—18.75% 之间的 BGaSb 的能带的实际情况, 可以采用公式(2), 修正各组分的 BGaSb 的能隙值。其中各组分的  $B_xGa_{1-x}Sb$  能带弯曲参数采用计算值, 如表 6 所示, BSb 和 GaSb 的能隙值采用 3.1 节中的值, 即 BSb 的  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  值用 4.4 eV,  $X_{1c} - \Gamma_{15v}$  值用 1.7 eV, GaSb 的  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  值用 0.812 eV,  $X_{1c} - \Gamma_{15v}$  值用 1.141 eV。修正后硼相对摩尔含量为 6.25%、12.5%、18.75% 的 BGaSb 的直接跃迁能隙值分别为 0.941 eV, 1.046 eV 和 1.140 eV, 增速分别为: 20.64 meV/%B, 16.8 meV/%B, 15.04 meV/%B, 平均增速为 17.5 meV/%B; 修正后的 BGaSb 的间接跃迁能隙值分别为 0.985 eV, 0.9172 eV, 0.9007 eV, 减速分别为: 24.96 meV/%B, 10.848 meV/%B, 2.64 meV/%B, 平均减速为 12.8 meV/%B。

进行上述补偿后, 我们对  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  的带隙宽度值进行了二次拟合, 拟合后得到  $B_xGa_{1-x}Sb$  的直接跃迁能带弯曲参数为:  $b \cdot E_g(\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}) = 2.23 eV$ 。图 2 是修正后的  $B_xGa_{1-x}Sb$  的带隙宽度和硼相对摩尔含量的关系图。

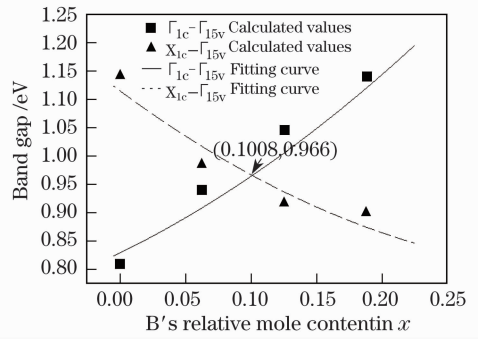


图 2 三元系  $B_xGa_{1-x}Sb$  合金的直接跃迁能隙随硼相对摩尔含量的变化关系图

Fig. 2 Diagram of the relationship between direct band-gap values and B relative mole contents in ternary alloy  $B_xGa_{1-x}Sb$

从图中可以看到, 在硼相对摩尔含量为 0—10.08% 范围内,  $B_xGa_{1-x}Sb$  为直接带隙材料, 且其带隙宽度值小于 1 eV, 具有应用于光通信长波长范围的潜力。另外, 计算表明, 与  $GaAs_xN_{1-x}$  随着 N 的掺入的情况不同, BGaSb 随着硼的并入量的增加, 其直接跃迁能隙值是变大的, 说明硼并入 GaSb 后, 带来的能带弯曲参数还不够大, 不足以使 BGaSb 的带隙宽度随硼的并入量的增加而降低。

### 3.3 BGaSb 的形成焓

构成 BGaSb 的两种二元系化合物 BSb 和 GaSb 之间晶格失配常数较大(15%)。从图 3 中, 对比 BGaAs 和 InGaAs 的形成焓, 可以初步估计, 同等条件下, 晶格失配越大, 形成焓也越大。形成焓越高意味着元素原子掺入化合物形成合金的难度越大, 它反应了合金的内应力。如果在形成合金的过程中, 应变不能被化学反应平衡, 将会使得系统的总能量增加, 使晶体质量变差。因此形成焓可以用来预测高质量材料系统的合金组分的可能范围。

三元系  $B_xGa_{1-x}Sb$  的形成焓表示为:

$$\Delta H(x) = E_{BGaSb} - [xE_{BSb} + (1-x)E_{GaSb}] \quad (3)$$

其中,  $\Delta H(x)$  为形成焓,  $E_{BGaSb}$  为 BGaSb 的总能量,  $E_{BSb}$  为 BSb 的总能量,  $E_{GaSb}$  为 GaSb 的总能量。本文计算了硼相对摩尔含量为 6.25%、12.5% 和 18.75% 的 BGaSb 的形成焓, 其值分别为 57.62 meV/atom, 113.66 meV/atom, 163.66 meV/atom。可以看到, 随着硼含量的增加, BGaSb 的形成焓越来越大, 意味着要想并入的硼的含量越大, 合成 BGaSb 的难度将越来越大。

图 3 是关于 BGaSb、BGaAs 和 InGaAs 的形成焓的对比, 从图中可以看到 BGaSb 的形成焓处于

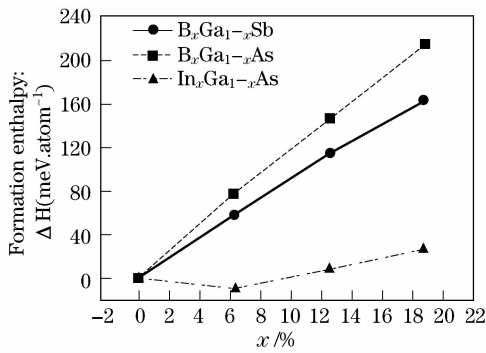


图3 三元系物  $B_xGa_{1-x}Sb$  与  $B_xGa_{1-x}As$ 、 $In_xGa_{1-x}As$  的形成焓比较图

Fig. 3 Comparison chart of the formation enthalpies of  $B_xGa_{1-x}Sb$ ,  $B_xGa_{1-x}As$  and  $In_xGa_{1-x}As$

BGaAs 和 InGaAs 之间。InGaAs 的形成焓很低,其铟含量在 0—100% 之间时,InGaAs 都能存在;而 BGaAs 的形成焓很大,对应的硼的并入量也很有限,目前报道的最高的并入量为 7%<sup>[19]</sup>。由于形成焓反应了化合物形成固溶体合金的难易程度,根据图 3 的对比,可以估计 BGaSb 中硼的并入量应该可以达到 7% 左右。值得注意的是,这种预测的前提是,认为晶格失配产生的应力是导致晶体质量恶化的主要原因。

## 4 结 论

文章采用 32 原子准随机序列模拟了合金内部实际的无规则排序,并在第一性原理的基础上,采用广义梯度近似处理电子之间的交换关联能,采用广义梯度近似,计算了 32 原子结构的  $B_xGa_{1-x}Sb$  中硼相对摩尔含量分别为 0, 6.25%, 12.5%, 18.75%, 100% 时,  $B_xGa_{1-x}Sb$  的  $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$  (直接跃迁) 和  $X_{1c} - \Gamma_{15v}$  (间接跃迁) 能隙宽度值。随着硼的并入量的增加, BGaSb 合金的直接跃迁的能隙宽度是变宽的, 在  $x=0 \sim 6.25\%$ ,  $6.25\% \sim 12.5\%$ ,  $12.5\% \sim 18.75\%$  之间, 其直接跃迁的能量带隙的增速分别为 20.64 meV/%B、16.8 meV/%B、15.04 meV/%B。另外, 计算了  $B_xGa_{1-x}Sb$  的形成焓, 在  $x=6.25\%$ ,  $12.5\%$ ,  $18.75\%$  时, 其形成焓分别为 0.05762 meV/atom、0.11366 meV/atom、0.16366 meV/atom。随着硼的并入量的增加, BGaSb 的形成焓是增加的, 将 BGaSb 的形成焓与 BGaAs 和 InGaAs 的形成焓

进行对比, 预测在 GaSb 中并入硼比较困难, 硼的并入量可达 7% 左右。

## 参 考 文 献

- 1 Ning Yongqiang, Zhou Tianming, Zhang Badin *et al.*. Growth and characterization of InAs-rich GaInAsSb alloys on GaSb substrates by MOCVD[J]. *J. Cryst. Growth*, 1998, **191**: 39~43
- 2 T. Anan, M. Yamada, K. Nish *et al.*. Continuous-wave operation of 1.30  $\mu m$  GaAsSb/GaAs VCSELs[J]. *Electron. Lett.*, 2001, **37**: 566~567
- 3 Werle P. A review of recent advances in semiconductor laser based gas monitor[J]. *Spectrochem Acta A*, 1998, **54**(2):197~236
- 4 R. M. Biefeld, J. G. Cederberg, G. M. Peake *et al.*. The growth and characterization of GaInAsSb and AlGaAsSb on GaSb by metal-organic chemical vapor deposition [J]. *J. Cryst. Growth*, 2001, **225**: 384~390
- 5 H. K. Choi, S. J. Eglash, G. W. Turner *et al.*. Double-heterostructure diode lasers emitting at 3  $\mu m$  with a metastable GaInAsSb active layer and AlGaAsSb cladding layers[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1994, **64**: 2474~2476
- 6 D. Z. Garbuzov, R. U. Martinelli, R. J. Menna *et al.*. 2.7- $\mu m$  InGaAsSb/AlGaAsSb laser diodes with continuous-wave operation up to  $-39^\circ C$ [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1995, **67**: 1346~1348
- 7 Kohn, W. Sham, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects[J]. *Phys. Rev. A*, 1965, **140**: 1133~1167
- 8 Ziegler, T.. Approximate density functional theory as a practical tool in molecular energetics and dynamics[J]. *Chem. Rev.*, 1991, **91**: 651~667
- 9 Juan, Y. M., Kaxiras, E., Gordon, R. G.. Use of the generalized gradient approximation in pseudopotential calculations of solids[J]. *Phys. Rev. B*, 1995, **51**: 9521~9525
- 10 Perdew, J. P.. Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas[J]. *Phys. Rev. B*, 1986, **33**: 8822~8824
- 11 Ferhat M., Bouhafs B., Zaoui A. *et al.*. First-principles study of structural and electronic properties of BSb[J]. *J. Phys. : Condens. Matter*, 1998, **10**: 7995~8006
- 12 Bachir Bouhafs, H Aourag and M Certier, Trends in band-gap pressure coefficients in boron compounds BP, BAs, and BSb[J]. *J. Phys. Condens. Matter*, 2000, **12**: 5655~5668
- 13 熊德平. 通信光电子半导体材料异质兼容的[D]. 北京: 北京邮电大学, 2007. 55~56
- 14 Laurian Escalanti and Gus L. W. Hart. Born alloying in GaN[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, **84**: 705~707
- 15 R. 霍夫曼. 固体与表面[M]. 北京: 化学工业出版社, 1996. 86
- 16 Agrawal B K, Agrawal S, Yadav P S, *et al.*. Ab initio calculation of electronic properties of  $Ga_{1-x}Al_xN$  alloys[J]. *J. Phys. Condens Matter*, 1997, **9**: 1763
- 17 G. L. W. Hart, A. Zunger. Electronic structure of BAs and boride III-V alloys[J]. *Phys. Rev. B*, 2000, **62**: 13522~13537
- 18 Guo Baozeng, Properties, preparation and applications of GaSb [J]. *Semicond. Optoelectron.*, 1999, **20**
- 19 M. E. Groenert, R. Averbeck, W. H. Osler *et al.*. Optimized growth of BGaAs by molecular beam epitaxy[J]. *J. Cryst. Growth*, 2004, **264**: 123~127