

具有直接带隙的 $[001]$ Si_m/Ge_n 应变超晶格

马秋鸣¹ 王康隆² 罗晋生¹

(1 西安交通大学电子工程系 西安 710049)

(2 美国加利福尼亚大学洛杉矶分校电气工程系)

摘要 本文用半经验紧束缚法(LCAO)对赝形生长在 $(001)\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ($0 \leq y \leq 1$)衬底上的 Si_m/Ge_n ($2 \leq m+n \leq 40$)应变层超晶格的能带结构进行了系统的计算. 结果表明, 当Si层和Ge层的厚度 m 和 n 的取值分别为 $(1,4), (2,3), (3,2), (4,1), (2,8), (3,7), (4,6), (6,4), (3,6), (6,3), (7,7)$ 时, 对称应变 Si_m/Ge_n 超晶格的能带结构为直接带隙, 其中 $m+n=10$ 的规律已为近两年其它理论计算和部分实验结果所证实. 本文所得的 $m+n=5$ 及其它 $m+n \neq 10$ 的直接带隙结构是目前国内外首次报道的新结果.

PACC: 7125C, 7125R, 7340L

1 引言

半导体超晶格具有在较大范围内可剪裁的光电特性, 其中Si/Ge应变层超晶格尤其引人注目的原因是, 它提供了将Si/Ge超晶格的光电子和电子器件与通常的Si集成电路进行单片集成的可能性. 此外, 通过控制生长周期和应变程度, 它有可能实现由间接带隙向直接带隙结构的转变, 引入Si基光电子器件. 近几年来, 新的生长技术如分子束外延(MBE), 金属有机物化学汽相淀积(MOCVD)等的迅速发展, 使实现上述设想成为可能, 因此人们从理论和实验上齐头并进, 探索实现这一设想的具体方案. 然而, 到目前为止, 人们对于直接带隙Si/Ge超晶格的具体结构仍各持己见, 不能统一. Wong等人^[1]认为 Si_4/Ge_4 超晶格具有直接带隙, 但已被Van de Walle^[2], Froyen等人^[3], Ciraci等人^[4]从各方面加以否定. Satpathy等人^[5]认为 $m:n$ 为 $4:6, 3:7$ 的超晶格应该具有直接带隙结构, 而Gell认为 $2:6, 2:10, 2:14$ 的超晶格具有直接带隙. 本文用半经验紧束缚法对赝形生长在 $(001)\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ($0 \leq y \leq 1$)衬底上的 Si_m/Ge_n ($2 \leq m+n \leq 40$)应变层超晶格的能带结构进行了系统的计算, 得到了一些新的直接带隙结构.

马秋鸣 女, 1962年生, 博士, 现从事微电子技术工作

罗晋生 男, 1924年生, 教授, 博士生导师, 中国电子学会会员, 现从事半导体器件及微电子学方面教学、科研工作
1994年4月17日收到初稿, 1994年7月11日收到修改稿

2 计算方法与结果

本文用半经验紧束缚法对赝形生长在(001) $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ($0 \leq y \leq 1$)衬底上的 Si_m/Ge_n ($2 \leq m+n \leq 40$) 对称应变超晶格在布里渊区各主要对称点和对称线上的能带结构进行了较为系统的分析与计算. 计算中, 对每个原子取 sp^3 轨道, 考虑到近邻和次近邻原子轨道的相互作用、自旋轨道耦合作用及赝形生长时的双轴应变效应.

为了决定异质结的能带衔接, 需要下述两方面知识: (a) 形变层的直接和间接能隙; (b) 考虑到合金和应变时价带的阶跃 ΔE_v . 前者已在我们的另文^[6]中得到. 对于应变层 Si/Ge 界面的能带衔接问题, 我们采用了 Van de Walle 和 Martin^[7]用自洽场赝势法计算的结果, 即将生长在(001) $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ 衬底上的 Si/Ge 异质结的价带阶跃近似为:

$$\Delta E_v(\text{Si/Ge}) = 0.84 - 0.53y \quad (1)$$

用紧束缚法计算 Si_m/Ge_n 应变层超晶格的关键在于正确地分析应变对晶体能带结构的影响, 得到一套合理的随原子间距变化的双中心积分参数. 本文的计算中使用了在我们的另文^[6]中得到的一套参数, 用这套参数计算得的 Si 和 Ge 体材料的能带结构已在文^[6]中给出, 与 J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen 的结果^[8]相当一致, 说明我们所用的这套参数是合理的, 从而为本文计算结果的可靠性奠定了基础.

在赝形生长时, Si/Ge 应变层超晶格在生长平面内的晶格常数与衬底相同, 但在生长方向上的晶格常数则随着应变大小及生长层数 m 和 n 的不同而不同, 每个晶胞内的原子数目和原子排列也与 m 和 n 密切相关. 因此, 计算其能带结构的基函数的数目及所形成的哈密顿矩阵的大小和矩阵元都不是常数. 我们分析了 Si_m/Ge_n 应变层超晶格结构中各种可能的近次邻关系, 将不同原子轨道的相互作用用 14 个不同的 4×4 方阵来表示, 然后根据 m 和 n 的数目确定哈密顿矩阵的具体结构, 从而得到 m 和 n 为任意正整数时 Si_m/Ge_n 应变层超晶格的紧束缚形式哈密顿矩阵. 此外, 为了使超晶格中 Si 和 Ge 层达到对称应变, 我们取衬底中 Ge 成分 y 与超晶格中 Si 和 Ge 的层数 m 和 n 的关系为 $m/n = (1-y)/y$.

我们取 Si_m/Ge_n 生长层数的比率为 $m:n=1:1, 1:2, 1:3, 1:4, 4:1, 3:1, 2:1, 2:3, 3:2$, 将 m 和 n 在 $2 \leq m+n \leq 40$ 的范围内变化, 计算超晶格在布里渊区各主要对称点和对称线上的能带结构, 分析各导带极小值随 m 和 n 的变化情况. 我们也计算了将生长周期固定, 取 $m+n=8, 20, 5, 10$, 反方向改变 m 和 n 的值, 得到各导带极小值的变化规律.

图 1 给出了生长在(001) $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ 衬底上 Si_m/Ge_n ($m=n$) 超晶格在 Γ 点, 沿[001]方向, [100]方向导带极小值随 m 和 n 的变化情况. 沿[111]方向, [110]方向的导带极小值相对较大, 所以没有画出. 作为参考, 超晶格中各构成层的价带衔接情况表示在图 1 的插图中. 从图 1 中可看出, 当 $m=n \geq 10$ 时, Γ 点和生长方向[001]上的导带极小值非常相近, 到 $m=n > 16$ 后, 二者的差别几乎看不出来, 显示了能带折迭的结果. 当 $m=n < 10$ 时, 随着 m 和 n 的增加, Si_m/Ge_n 在 Γ 点和[001]上的导带极小值波动下降, 属于超薄超晶格, 可以看成一种既不同于组分材料, 又不同于厚层超晶格的新材料, 其能带结构, 尤其是导带各极值不能单纯用能带折迭来解释. 对于 Si_4/Ge_4 , 计算得到[001]方向的导带极小值为 0.88eV , 在[100]方向及 Γ 点的导带极小值分别为 0.95eV 及 1.01eV , 因而不是直接带隙结构, 这与其它文献^[2-4]

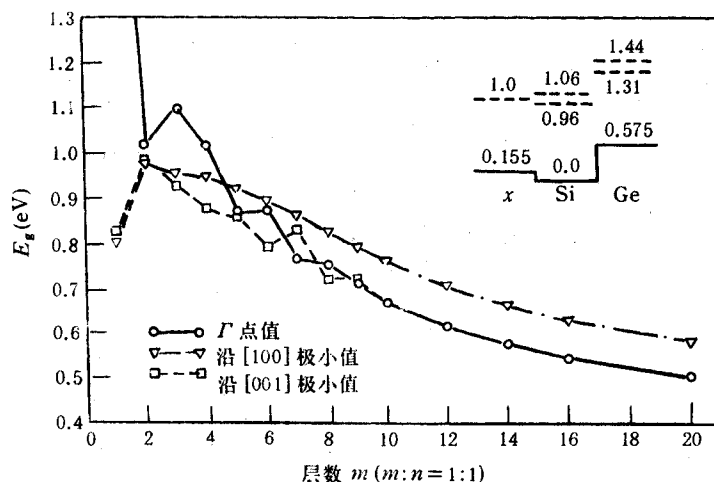


图1 生长在 $(001)\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ 衬底上 Si_m/Ge_n 超晶格的导带极值随 m 变化

所得结果一致. 在 $m=n=5$ 时, Γ 点的 $[001]$ 方向的导带极小值非常接近,分别为0.87eV和0.86eV,不是直接带隙结构,这与Satpathy等人^[5]用赝势法的计算结果相当一致,但与U. Schmid等人的结果^[9]不同. 根据最近Tserbak的计算结果^[10], Si_5/Ge_5 超晶格只在 $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ 衬底中Ge组分 $y>0.6$ 时才是直接带隙,而我们所计算的是 $y=0.5$ 情形,得到非直接带隙的结果与Tserbak的计算结果也是一致. 值得注意的是,在 $m=n=7$ 时, Γ 点的导带极小值为0.77eV,明显地比 $[001]$ 和 $[100]$ 方向的导带极小值0.83eV和0.86eV低,形成直接带隙结构,这与Tserbak等人^[10]的计算结果一致.

对于 $m:n=1:2, 1:3, 1:4, 4:1, 3:1, 2:1, 3:2, 2:3$ 时的计算结果显示,随着 m 和 n 的增大,对称应变 Si_m/Ge_n 超晶格的各导带极小值的变化趋势与 $m=n$ 时类似,即 $m+n \leq 20$ 时各导带极小值波动下降,导带最小值出现的能谷位置与能带折迭没有直接关系,显示了超薄超晶格的特点. 当 $m+n>20$ 以后, Γ 点和生长方向 $[001]$ 上的导带极小值非常相近,而其它导带极值的位置也相对稳定,表明了能带折迭的结果. 此外,当 $m/n<1$ 时,沿 $[111]$ 方向的导带极小值普遍较低,有时成为导带极小值,说明生长层中Ge成分起的作用较大;当 $m/n>1$ 时,沿 $[111]$ 方向的导带极小值普遍较高,说明生长层中Si成分起主导作用. 计算结果得到了下述具有明显直接带隙的 Si_m/Ge_n 对称应变超晶格结构: Si_3/Ge_6 ,其 Γ 点的导带极小值为0.84eV,明显低于沿 $[001]$, $[100]$, $[111]$ 方向的极小值0.88eV,0.92eV,0.883eV; Si_6/Ge_3 ,其 Γ 点和 $[001]$ 方向的导带极小值分别为0.90eV和0.96eV; Si_1/Ge_4 和 Si_2/Ge_8 ,其直接带隙分别为0.76eV和0.81eV,而相应的 $[111]$ 方向导带极小值次低,分别为0.78eV和0.84eV; Si_4/Ge_1 ,其 Γ 点和沿 $[001]$, $[100]$ 方向的导带极小值分别为0.97eV,1.03eV,1.09eV; Si_7/Ge_3 和 Si_4/Ge_6 ,其直接带隙分别为0.88eV和0.83eV; Si_3/Ge_2 和 Si_6/Ge_3 ,其直接带隙分别为0.93eV和0.85eV.

分析上述具有直接带隙结构的 Si_m/Ge_n 超薄超晶格,我们发现超晶格的周期 $m+n$ 对能带的是否成为直接带隙结构影响较大,因此我们将 $m+n$ 取为不同的常数来观察超晶格的能带结构特点. 图3给出当 $m+n=20$ 时对称应变 Si_m/Ge_n 超晶格的导带极值随 m 和 n 的

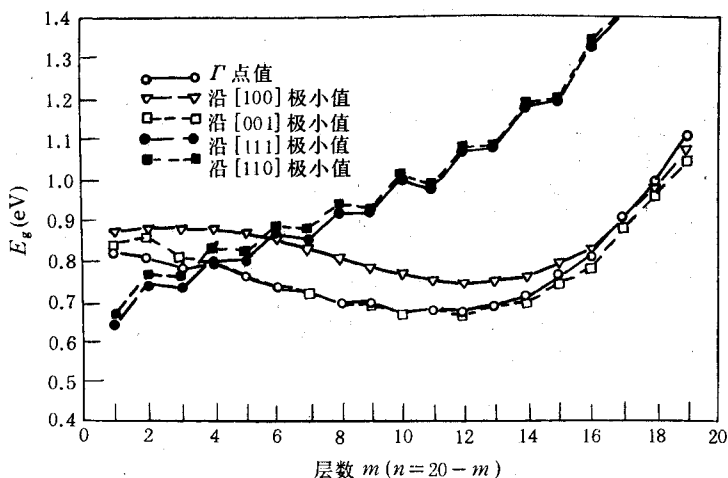


图2 当 $m+n=20$ 时, 对称应变 Si_m/Ge_n 超晶格的导带极值随 m 和 n 的变化

变化情况. 可以看出, 随着 Si 层的增加和 Ge 层的减少, 沿 $[111]$, $[110]$ 的导带极小值逐渐增大, 而 Γ 点和 $[001]$, $[100]$ 方向的导带极小值在变化趋势上很相近, 先是缓缓降低, 然后急剧增大; 当 $m > 17$ 后, Γ 点的导带极值开始高于 $[100]$ 方向的导带极小值, 显示出明显的 Si 的能带结构特征. 在 $4 \leq m \leq 11$, $16 \geq n \geq 9$ 的范围内, Γ 点和 $[001]$ 方向的导带极小值比较相近, 但不是明显的直接带隙结构.

图3给出了当 $m+n=10$ 时, 对称应变 Si_m/Ge_n 超晶格的导带极小值随 m 和 n 的变化情况. 可以看出, Si_2/Ge_8 , Si_3/Ge_7 , Si_4/Ge_6 和 Si_6/Ge_4 是明显的直接带隙结构, 而其它情形不是. Satpathy 等人^[5]认为 $(4, 6)$ 和 $(3, 7)$ 结构是直接带隙, 而在 $(5, 5)$ 情形, Γ 点和 $[001]$ 方向的导带极小值非常相近, 这与我们的计算结果非常吻合. 近两年来, 其它一些理论计算都认

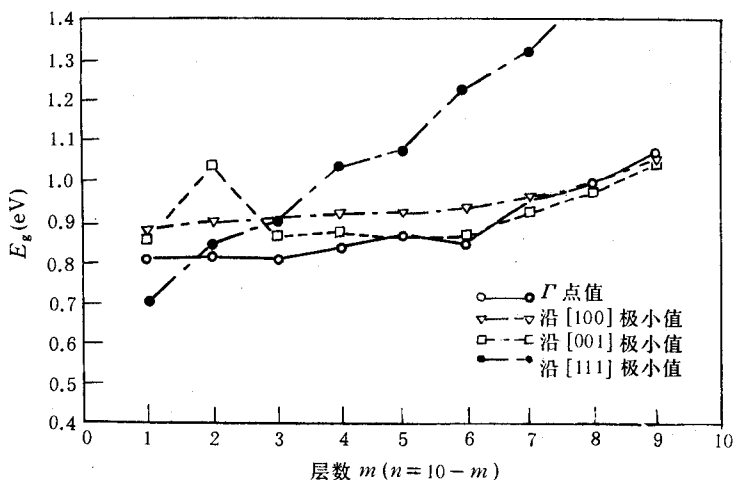


图3 $m+n=10$ 时, 对称应变 Si_m/Ge_n 超晶格的导带极值随 m 和 n 的变化

为^[10,11],在 Si 层的应变较大时, $m+n=10$ 的 Si_m/Ge_n 超晶格可以成为直接带隙结构. 我们计算所得的满足 $m+n=10$ 而又不是直接带隙的情况,有可能是因为 Si 层只受到与 Ge 相当的对称应变之故. 在实验方向,Zachi 等人^[12]发现当 Si 层受到应变时, $m+n=10$ 的 Si_m/Ge_n 应变层超晶格在 0.7 和 0.9eV 之间有很强的光荧光吸收,而我们计算得到对称应变下, Γ 点的直接跃迁能量在 0.8 与 1.0eV 之间,二者较为一致. 极小值随 m 和 n 的变化情况. 可以看出,随着 Si 层数目的增加,各导带极小值都在升高,但 Γ 点始终是导带最小值. 这一结果是目前国内外尚未见报道的. 我们知道,在 $m+n=5$ 和 10 时,虽然超晶格的生长周期不同,但从对称性来看,每个超晶胞的原子层数相同,因此二者具有类似的能带结构是可以理解的.

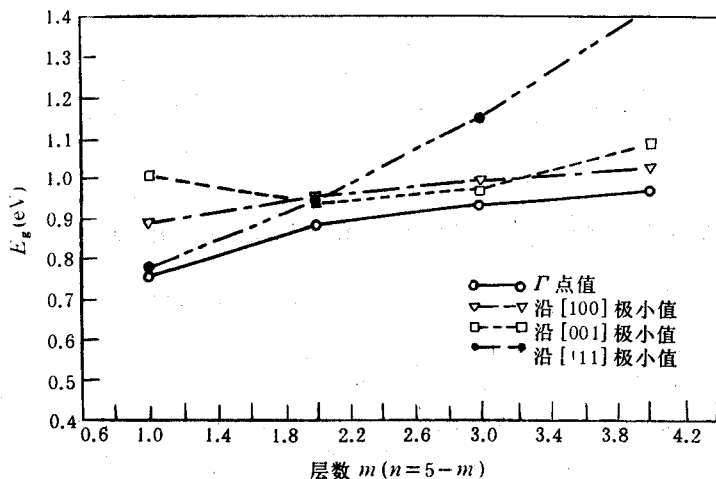


图4 $m+n=5$ 时,对称应变 Si_m/Ge_n 超晶格的导带极值随 m 和 n 的变化

3 结论

本文由导出的 m 和 n 为任意正整数时 Si_m/Ge_n 应变层超晶格的紧束缚矩阵,计算了 $m:n=1:1, 1:2, 1:3, 1:4, 4:1, 3:1, 2:1, 2:3, 3:2$, 及 $m+n=8, 20, 5, 10$ 时对称应变 Si_m/Ge_n 超晶格的能带结构,发现了 (m,n) 取值分别为 $(1,4), (2,3), (3,2), (4,1), (2,8), (3,7), (4,6), (6,4), (3,6), (6,3), (7,7)$ 等多个具有直接带隙的超晶格结构. 其中 $m+n=10$ 的规律已为近两年其它理论计算和部分实验结果所证实. 我们计算中发现了 $m+n=5$ 及 (m,n) 取值分别为 $(3,6), (6,3)$ 等新的直接带隙结构. 计算结果还表明,当 $m+n \leq 20$ 时,超薄超晶格可看成是一种新的材料,其能带结构不能单纯用能带折迭来解释.

参 考 文 献

- [1] K. B. Wong, M. Jaros, I. Morrison and J. P. Hagon, Phys. Rev. Lett., 1988, **60**:2221.
- [2] C. G. Van de Walle, Phys. Rev., 1989, **B39**:1871.
- [3] S. Froyen, D. M. Wood and A. Zunger, Phys. Rev., 1987, **B36**:4547; Phys. Rev. Lett., 1989, **62**:975.
- [4] S. Ciraci and P. I. Batea, Phys. Rev., 1988, **B38**:1835; Phys. Rev., 1990, **B41**:6069.
- [5] S. Satpathy, R. M. Martin and Van de Walle, Phys. Rev., 1988, **B38**:13237.
- [6] Q. Ma(马秋鸣), K. L. Wang and J. N. Schulman, Phys. Rev., 1993, **B47**:1936.
- [7] C. G. Van de Walle and R. M. Martin, Phys. Rev., 1986, **B34**:5621.
- [8] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev., 1976, **B14**:556.
- [9] U. Schmid *et al.*, Phys. Rev., 1991, **B43**:14597.
- [10] C. Tserbak, H. M. Polatoglou and G. Theodorou, Phys. Rev., 1993, **B47**:7104.
- [11] R. J. Turton and M. Jaros, Mater. Sci. Eng., 1990, **B7**:37.
- [12] R. Zachai, K. Eberl, G. Abstreiter, E. Kasper and H. Kibbel, Phys. Rev. Lett., 1990, **64**:1055.

[001] Si_m/Ge_n Strained-Layer Superlattice with Direct Band GapMa Qiuming¹, Wang Kanglong² and Luo Jinsheng¹

(1 Department of Electronics Engineering Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049)

(2 Department of Electrical Engineering, University of California, Los Angeles U. S. A)

Received 17 April 1994, revised manuscript received 11 July 1994

Abstract A semi-empirical tight-binding method(LCAO) was used to calculate the band structures of Si_m/Ge_n ($2 \leq m+n \leq 40$) strained layer superlattices (SLS) pseudomorphically grown on (001) Si_{1-y}Ge_y ($0 \leq y \leq 1$) substrates. The results show that when the thickness of Si and Ge layers are taken as (1,4), (2,3), (3,2), (4,1), (2,8), (3,7), (4,6), (6,4), (3,6), (6,3) and (7,7), respectively, the symmetrically strained Si_m/Ge_n SLS are direct band gap materials. While the $m+n=10$ pattern coincides with a few other theoretical calculations and experimental results reported in the past two years, the $m+n=5$ pattern and the structures with $m+n \neq 10$ presented in this paper have never been reported to our knowledge.

PACC: 7125C, 7125R, 7340L