

# Si/GaAs 异质结界面态及其价带不连续性

黄 春 娜

(复旦大学表面物理实验室, 上海)

1989年7月18日收到

本文报道用自洽 EHT 方法研究 Si/GaAs 异质结界面态分布和价带不连续性。用准共度晶格模型处理晶格失配问题, 并对晶格常数作了修正。通过对 Si/GaAs(111)、Si/GaAs(111) 和 Si/GaAs(110) 异质结中 Si 应变和 GaAs 应变的情况, 分别进行计算, 得到界面态分布和价带不连续值等物理量, 结果表明: 它们不仅依赖于组成异质结的两种材料的体性质, 而且还依赖于界面晶向和材料应变。文中给出了这些计算结果, 并作了初步的讨论。

主题词 应变异质结、界面态、价带不连续

## 一、引言

半导体异质结的能带排列是决定异质结、量子阱和超晶格特性的重要参数之一, 是设计异质结和量子阱器件的出发点, 也是半导体能带工程的基础。为了从理论上确定异质结的能带偏移, 人们已经提出过许多的方法。大体上它们可分为两类: 一类是模型理论, 即认为能带偏移值只取决于组成异质结的两种半导体的体性质。这类理论往往给出某一个参考能级, 两种半导体结合时能带以这一参考能级相对齐而排列, 只要算出各种半导体中这一参考能级的值, 就可以知道任意一个异质结系统的能带偏移值。但是, 究竟以什么能级作为参考能级, 许多人提出了不同的看法。最早是以真空能级为参考(即电子亲和势规则), 以后有 Tersoff 的隙间能级模型<sup>[1]</sup>和深能级模型<sup>[2]</sup>。模型理论完全不考虑界面微观结构的影响, 它可以对某些异质结体系给出与实验相符的结果, 但并不是对所有体系都如此, 而且也不能解释能带偏移值与晶向间的关系。另一类是自洽界面势理论。它从具体的异质结界面结构和晶体势出发, 用赝势或从头计算的方法给出能带偏移值。对每一种异质结体系进行分别的计算, 并根据参数的调节可得到与实验相符的结果。它的精度较高, 但计算的工作量很大。

我们曾经用经验的推广的休克尔理论(EHT)和薄片模型, 计算了 Si/GaP 异质结的价带偏移值<sup>[3]</sup>, 与实验的符合程度比以往的理论计算结果都好。这种方法基本上也属于后一类理论的范畴, 但计算工作量要小得多, 并能获得异质结界面电子态的特性。

在本文中，我们将这种方法拓展应用于实验上已经实现共度生长的 Si/GaAs 系统<sup>[4-7]</sup>，这是一种失配体系。计算了它们共度生长界面的能带偏移，得出在不同晶向的情况下，Si 应变和 GaAs 应变时的价带偏移值及界面电子态。通过同以前的计算和实验结果相比较，说明无论对晶格匹配还是晶格失配体系，用这种方法计算能带偏移值都是有效的。

## 二、共度晶格及其晶格常数的修正

Si/GaAs 是失配异质结体系，要了解其界面特性，首先需要确定界面原子结构。Osbaurn 等人<sup>[8,9]</sup> 在实验中发现晶严重失配的两种半导体材料可以共度生长出界面完整性很好的应变异质结，条件是每层生长厚度需小于临界值。对对 Si 衬底上生长 GaAs 情况，此临界厚度是 35 Å 左右<sup>[10]</sup>。

在失配异质结中，应变层等效于受到流体静压力和单轴应力的作用，对于 Si/GaAs 体系，如果 Si 和 GaAs 厚度分别为  $h_1$  和  $h_2$ ，则应变层的晶格常数为：

$$a_{11} = (a_1 G_1 h_1 + a_2 G_2 h_2) / (G_1 h_1 + G_2 h_2) \quad (1)$$

$$a_{i\perp} = a_i [1 - D^i (a_{11}/a_i - 1)] \quad (2)$$

即生长的应变层沿平行于界面方向的晶格常数保持与衬底相同，而垂直于界面方向  $a_{\perp}$  将发生拉伸或受压缩。式中  $i = 1, 2$  分别代表 Si 和 GaAs， $a_i$  代表未形变时的晶格常数， $G_i$  是切变模量；

$$a_i = 2(c_{11}^i + 2c_{12}^i)(1 - D^i/2) \quad (3)$$

常数  $D^i$  依赖于具体材料的弹性系数  $c_{11}$ 、 $c_{12}$  和  $c_{44}$ ，以及界面晶向。即：

$$D_{001} = 2 \frac{c_{12}}{c_{11}} \quad (4a)$$

$$D_{110} = (c_{11} + 3c_{12} - 2c_{44}) / (c_{11} + c_{12} + 2c_{44}) \quad (4b)$$

$$D_{111} = 2(c_{11} + 2c_{12} - 2c_{44}) / (c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}) \quad (4c)$$

对于 Si:  $c_{11} = 16.57 \times 10^{11}$ ,  $c_{12} = 6.39 \times 10^{11}$ ,  $c_{44} = 7.951 \times 10^{11}$ ; 对于 GaAs:  $c_{11} = 11.81 \times 10^{11}$ ,  $c_{12} = 5.32 \times 10^{11}$ ,  $c_{44} = 5.94 \times 10^{11}$ <sup>[11]</sup>，单位均为 [dyn/cm<sup>2</sup>]。

在以下的计算中，假定衬底一边的晶格常数  $a_i$  不变 ( $h \rightarrow \infty$ )，而应变一边平行于界面的晶格常数  $a_{11} = a_i$ ，垂直界面的晶格常数  $a_{\perp}$  则由公式(2)来计算确定。界面处的原子层间距取两边原子间距  $d_1$  和  $d_2$  的平均值  $d_{\perp} = \frac{1}{2}(d_1 + d_2)$ 。表 I 给出 Si/GaAs(111) 和(110)晶向的晶格常数。

## 三、计算方法

### 1. EHT 计算

采用如图 1 所示的薄片模型，来模拟 Si/GaAs 异质结界面。其中图 1(a) 用于模拟(111)或(111)界面；图 1(b) 用于模拟(110)界面。Si/GaAs 是失配异质结，晶格常数的变

化,使应变层的键长分成两类:一类是键长产生伸长,另一类是键长出现缩短。把这两类键长也列于表 I 中。图 1 所示的结构模型是根据表 I 中的晶格常数、键长等数据,在适当的坐标系里构成的。

表 I Si/GaAs 异质结系统中,应变层的晶格常数  $a_{11} \cdot a_{\perp}$  和两类原子键长(Å)

	<111>或<III>		<110>	
	Si 应变	GaAs 应变	Si 应变	GaAs 应变
$a_{11}$	5.653	5.431	5.653	5.431
$a_{\perp}$	5.333	5.755	5.317	5.774
$b_1$	2.433	2.368	2.448	2.352
$b_2$	2.309	2.501	2.352	2.452
$d_{12}[a_{11}^{-1}]$	0.424	0.447	0.343	0.365

与文献[3]一样,为了减少计算量,先用适当的集团模型来模拟 Si/GaAs(III), Si/GaAs(111) 和 Si/GaAs(110) 界面,进行电荷自洽的 EHT 计算。同样,集团模型也是根据具体情况,采用表 I 的数据来构造的。

对不同晶体应变和晶向的情况所作的计算结果,表明界面原子的  $s$ 、 $p$  电子的电离能和价电子占有数都与体的情况有所不同,并依赖于具体的界面情况。但它们的变化表现出一定的规律。首先,无论是 Si 应变还是 GaAs 应变, Si-Ga 键中 Si 原子电离能都比体 Si 原子的电离能小;而 Si-As 原子电离能则几乎与体 Si 相同。同时界面上 As 原子电离能比 GaAs 体内 As 原子电离能大。而界面 Ga 原子的电离能则比体内小。第二,在 Si-Ga 键中,每个 Si 原子从 Ga 原子上获得电荷  $0.4e^-$ ,而在 Si-As 键中, Si 转移  $0.05e^-$  电荷给 As 原子。但在 GaAs 中,每个 Ga 原子转移  $0.4e^-$  电荷给 As。这种不同键上,原子间的电荷转移规律,是与 Si、Ga 和 As 的电负性:  $I_{As} > I_{Si} > I_{Ga}$  密切相关的,  $I_{As}$ 、 $I_{Si}$  和  $I_{Ga}$  分别为: 2.0, 1.8 和 1.5<sup>[12]</sup>。在(110)界面上的 Si-As 键和 Si-Ga 键分别与(III)界面上的 Si-As 键和(111)界面上的 Si-Ga 键性质十分一致,尤其是电荷转移几乎完全相同。说明界面原子键是相当局部的。这些结果表明: Si-As 键比 Si-Ga 键强且稳定,这与实验结果相符。

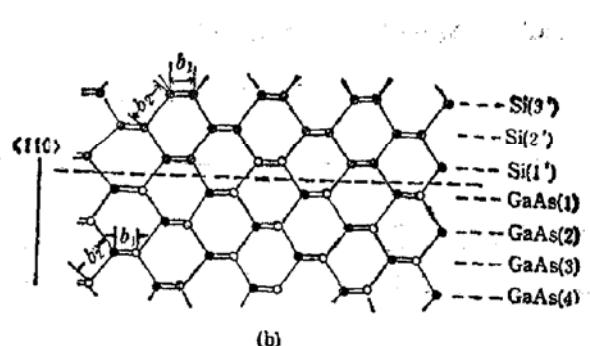
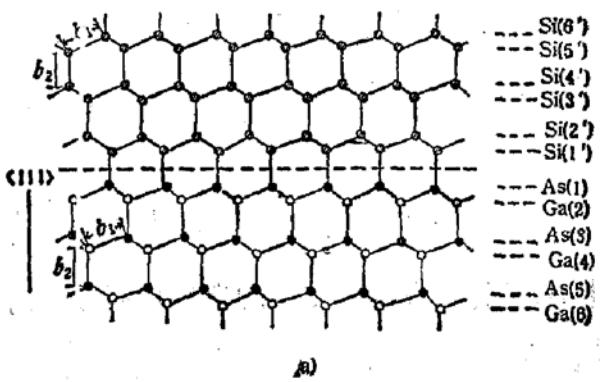


图 1 Si/GaAs 异质结体系的结构模型

(a) Si/GaAs(III) 异质结的结构模型, 其中 ● 代表 Si 原子, ○ 代表 Ga 原子, ● 代表 As 原子。对(111)情况, Ga 和 As 原子位置互易。

(b) Si/GaAs(110) 异质结的结构模型

在(110)界面上的 Si-As 键和 Si-Ga 键分别与(III)界面上的 Si-As 键和(111)界面上的 Si-Ga 键性质十分一致, 尤其是电荷转移几乎完全相同。说明界面原子键是相当局部的。这些结果表明: Si-As 键比 Si-Ga 键强且稳定, 这与实验结果相符。

把集团自治计算得到的相互作用参数和电离能等用于如图 1 所示的薄片模型，进行 EHT 方法下的能带结构和局域态分布计算，并根据 Si 和 GaAs 的价带顶都处于  $\Gamma(\vec{k} = 0)$  点这一事实，逐一分析各层原子的波函数对价带顶附近各本征值的贡献，来确定 Si 和 GaAs 价带顶，把两个价带顶  $E_V^{\text{Si}}$  和  $E_V^{\text{GaAs}}$  相减，就得到价带不连续值  $\Delta E_V$ ，列于表 II 中。

## 2. 自旋-轨道分裂对价带不连续值的影响

在上面 EHT 的计算中，没有考虑自旋-轨道分裂的影响。但是，Si/GaAs 是晶格失配的异质结体系，晶格形变破坏了原来晶体的对称性。形变势与自旋轨道相互作用，导致能带对称性和简并度发生变化，产生带边移动。而直接影响能带不连续值。

由半导体性质研究表明<sup>[13,14]</sup>：对于价带，由于形变势和自旋轨道分裂的相互作用，沿(111)方向的单轴压力使价带顶处三条价带能级发生移动，它们可以由下列公式计算：

$$\Delta E_{V_2} = \frac{1}{3} \Delta_0 - \frac{1}{2} \delta E_{\text{III}} \quad (5a)$$

$$\Delta E_{V_1} = -\frac{1}{6} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E_{\text{III}} + \frac{1}{2} \left[ \Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_{\text{III}} + \frac{9}{4} (\delta E_{\text{III}})^2 \right]^{1/2} \quad (5b)$$

$$\Delta E_{V_3} = -\frac{1}{6} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E_{\text{III}} - \frac{1}{2} \left[ \Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_{\text{III}} + \frac{9}{4} (\delta E_{\text{III}})^2 \right]^{1/2} \quad (5c)$$

式中  $\Delta_0$  是材料没有形变时的自旋轨道分裂。 $\delta E_{\text{III}}$  是形变引起的多重线性分裂。 $V_2$  是  $|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$  态， $V_1$  和  $V_3$  分别是  $|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$  和  $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$  态。对于 Si： $\Delta_0 = 0.04\text{eV}$ ；对于 GaAs： $\Delta_0 = 0.34\text{eV}$ <sup>[13]</sup>。 $\delta E_{\text{III}}$  是由形变量和形变势确定的，即：

$$\delta E_{\text{III}} = 2\sqrt{3} d e_{xy} \quad (6)$$

其中  $e_{xy} = \frac{1}{3} [(\sigma_x - \sigma_z)/\sigma_i - (\sigma_{yy} - \sigma_z)/\sigma_i]$ （对  $i$  材料应变）， $d$  是菱形形变势。对于 Si 和 GaAs 分别为：-5.32 和 -6.0<sup>[13,14]</sup>。由表 I 晶格常数，按公式(5)计算得知，当 GaAs 应变时， $V_2$  处于  $E_V^{\text{GaAs}}$  位置。因此，考虑自旋-轨道分裂后，GaAs 价带顶上升

表 II Si/GaAs 异质结价带不连续值，包括理论和实验结果[eV]

线性方法	EAR <sup>[22]</sup>	AN <sup>[23]</sup>	Von Ross <sup>[24]</sup>	Harrison <sup>[20]</sup>	Tersoff <sup>[11]</sup>	F. K. <sup>[25]</sup>	Jaros <sup>[26]</sup>
$\Delta E_V$	0.27	0.15	0.30	0.03	0.34	0.8	0.01
非线性方法				本工作		实验	
				晶向	$\Delta E_V$	$\Delta E_V$ (考虑 $s-p$ )	$\Delta E_V$
$\Delta E_V$ (Si 应变)	0.22	0.14	0.14	$\langle 111 \rangle$	0.36	0.36	0.05 <sup>[17,18]</sup>
				$\langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle$	0.46	0.46	0.23 <sup>[10]</sup>
				$\langle 110 \rangle$	0.72	0.72	0.70 <sup>[19]</sup>
$\Delta E_V$ (GaAs 应变)	0.21	0.12	0.14	$\langle 111 \rangle$	0.21	0.10	
				$\langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle$	0.37	0.26	
				$\langle 110 \rangle$	0.58	0.49	

$\frac{1}{3} \Delta_0$  约 0.11eV。对于 Si 形变,  $\Delta_0$  很小, 可忽略。

同样, 对于(110)晶向, 自旋-轨道分裂也将影响价带顶位置。对于 GaAs 应变,  $E_V^{\text{GaAs}}$  上升约 0.09eV。注意这是通过计算哈密顿矩阵<sup>[13]</sup>得到的。把考虑自旋-轨道分裂后, Si/GaAs 异质结价带不连续值列于表 II。

#### 四、结果与讨论

图(2)给出 Si/GaAs(111) 体系各原子层的局域态分布 (LDOS)。曲线上标出了原子符号及其位置。图 3 是反映界面态分布的局域态之差谱, 其中图 3(a)和 3(c) 分别对应于<111>, <111> 和<110>界面的情况。由图 3(a) 关于 Si/GaAs(111) 异质结情况, 可以看到在 Si-Ga 界面上, Ga 原子和 Si 原子的局域态都往上移动。而由图 3(b) 可以看到界

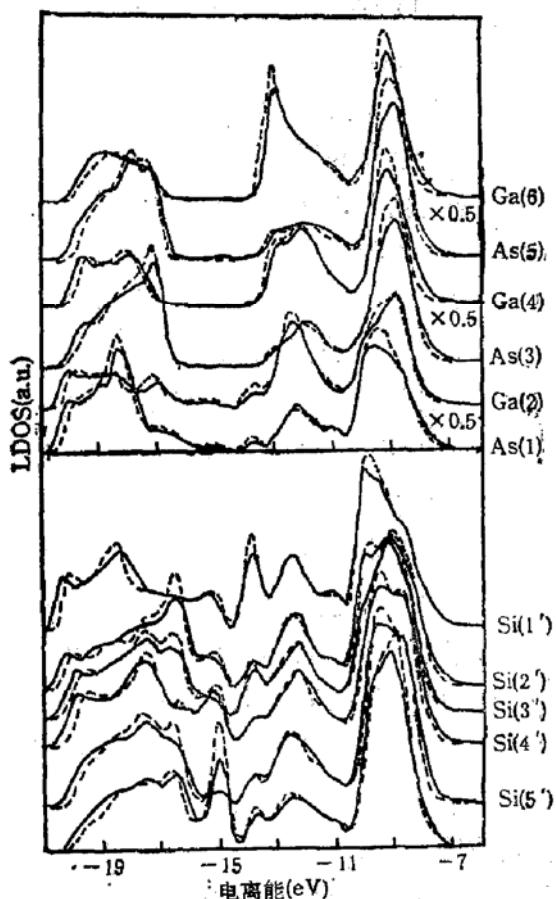


图 2 Si/GaAs(111) 异质结各原子层的局域态分布, 其中实线代表 GaAs 应变情况, 节线代表 Si 应变情况。 $i$  和  $i'$  是原子层位置的标号, 从界面往两边排列

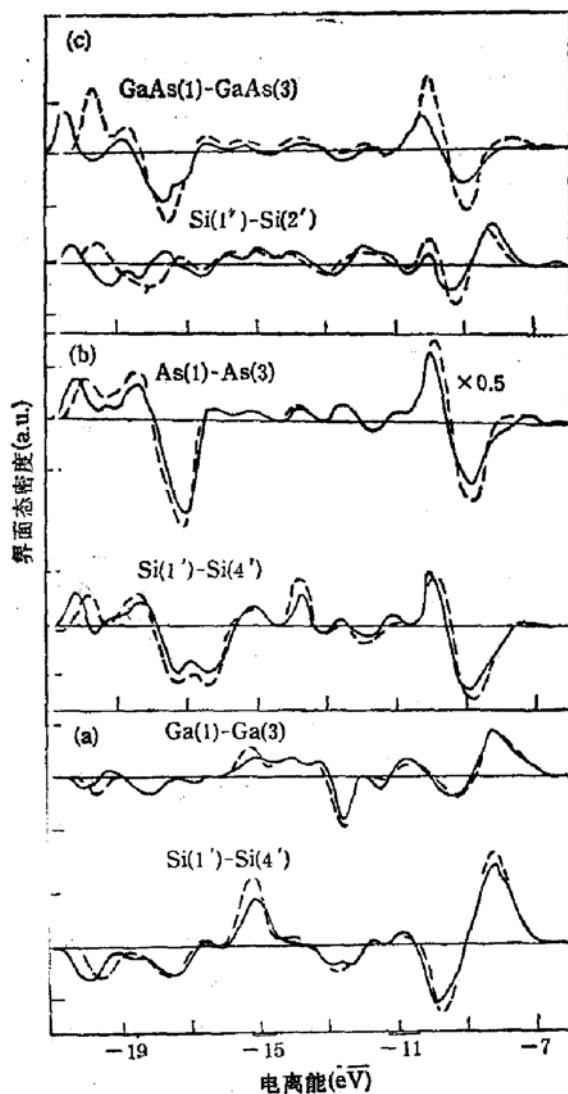


图 3 反映界面态分布的差谱。各界面态分布是由所标志原子层间的局域态相减确定的。(a)、(b)、(c) 分别代表<111>、<111> 和<110>情况。同样, 实线代表 GaAs 应变, 节线为 Si 应变

面As原子和Si原子的局域态都往下移动。图3(c)关于(110)界面态分布是介于(111)和(111)之间的。这些界面态可分成三部分：p电子、sp电子和s电子贡献的界面态。两种应变的差异是：Si应变时，s电子态减少，sp和p电子态增加。同时，s电子态往上移动，而sp和p电子态几乎不动。另外，界面态总是沿界面两边以振荡形式衰减。

集团模型计算结果表明：在(111)界面上，Ga原子的部分电子转移给Si原子，但Ga原子和Si原子所占有的电子都比相应体内原子多。这就使界面Si和Ga原子能级往上移动，形成的界面态和局域态也往上移动。但这种作用很局域化，体内态基本不受影响，而在(111)界面上，As原子和Si原子占有电子均比体内少，结果界面As-Si原子能级都往下移动。这种作用较强，使 $E_V^{GaAs}$ 和 $E_V^{Si}$ 产生移动。对于(110)界面，既有Si-As影响，又有Si-Ga键作用，情况更为复杂。由此可见，界面原子间的电荷转移和界面态分布是有内在联系、相互作用的。这种作用有时将直接影响带边位置，导致价带不连续值发生变化。

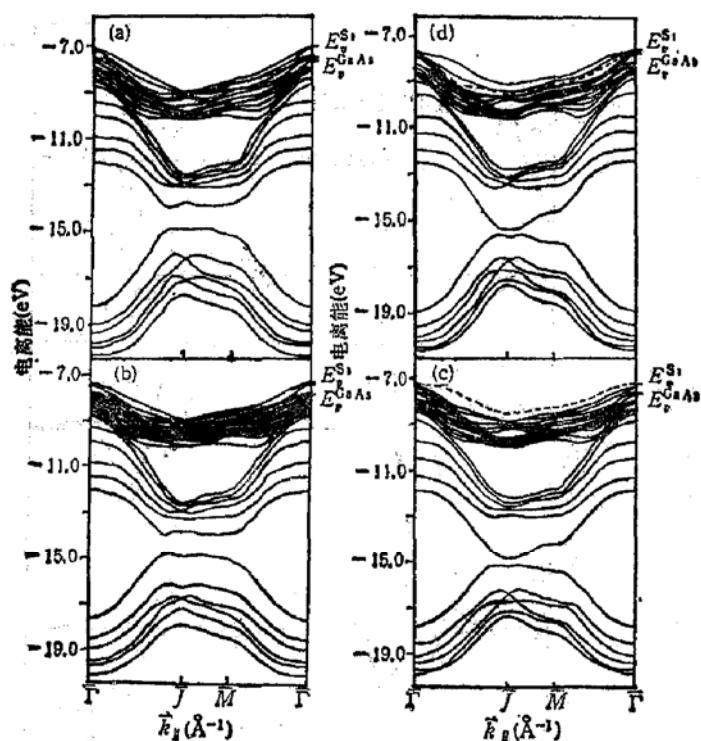


图4 Si/GaAs  $\langle 111 \rangle$  和  $\langle 111 \rangle$  能带色散图

(a)、(b) 分别代表 Si 应变和 GaAs 应变时  $\langle 111 \rangle$  异质结情况  
(c)、(d) 分别代表 Si 应变和 GaAs 应变时  $\langle 111 \rangle$  异质结情况

在价带顶附近有明显差别。这些差别将改变材料空穴有效质量、带间跃迁等，影响器件的性能。这是实际应用中需要考虑的因素。

由表II可以清楚地看到Si应变时的价带不连续值比GaAs应变时大。同时，价带不连续值与界面晶向有关。另外，GaAs应变对界面形成的影响比Si应变要厉害。表现在Si和GaAs价带顶有明显上移。这种复杂情况，显然与Si/GaP异质结<sup>[3]</sup>和Ge/GaAs异质结<sup>[4]</sup>有所不同。

上面的结果与讨论表明：Si/GaAs异质结的价带不连续值、界面态分布和能带结构

图4给出 $\langle 111 \rangle$ 和 $\langle 111 \rangle$ 异质结能带色散图，其中图4(a)、4(b)分别对应于 $\langle 111 \rangle$ 界面，Si应变和GaAs应变；图4(c)、4(d)分别对应于 $\langle 111 \rangle$ 界面Si应变和GaAs应变。分析各原子层对每个本征能级的贡献时发现， $\langle 111 \rangle$ 界面的Si-As相互作用形成的界面态色散在较大的能量区域内，而 $\langle 111 \rangle$ 界面上Si-Ga界面态色散则较小。同时，对于 $\langle 111 \rangle$ 界面，存在一条单重简并的界面态能带，在 $\Gamma$ 点处位于-7.33eV。对于Si应变，此界面态能级与 $E_V^{Si}$ 重叠；对于GaAs应变，其位于 $E_V^{Si}$ 和 $E_V^{GaAs}$ 之间。

在图4中，GaAs应变比Si应变时能带色散大，而且是s、sp和p三部分都有这种现象。另外， $\langle 111 \rangle$ 异质结和 $\langle 111 \rangle$ 异质结的能带

等,都不是简单地由 Si 和 GaAs 的体性质决定的,还依赖于材料的应变,晶向等因素,是很复杂的体系。因此,用通常的参考能级方法是不能确定能带不连续性的,而需要用自治界面势理论来研究。

Harrison 等人<sup>[16]</sup>认为,象 Si/GaAs 这样的界面,容易产生界面原子的互混,使界面电荷和偶极矩都变得最小。原则上讲,只要晶向指数  $[h, k, l]$  满足下述关系:

$$[h, k, l] \cdot \langle 111 \rangle = \pm h \pm k \pm l = 0 \quad (7)$$

就能获得电中性的异质界面。但在实际生长过程中,并不能使界面达到非常完美的地步,而是很难控制。因此,真正的界面是一个非理想界面。Si/GaAs 界面的这种性质,使人们很难得到可靠的实验数据。

最早, Margritondo 等人<sup>[17,18]</sup>曾用光电发射方法测量 Si/GaAs(110) 界面, 得到  $\Delta E_V = 0.05\text{eV}$ , 最近, List 等人<sup>[19,20]</sup>用光电能谱方法测量 Si/GaAs(110) 界面, 得到  $\Delta E_V = 0.23\text{eV} \pm 0.1$ <sup>[20]</sup> 和  $\Delta E_V = 0.70\text{eV}$ <sup>[19]</sup>。对于后者,经退火后,变成  $0.05\text{eV}$ 。这些实验结果差别较大,其原因是界面不是理想界面,淀积的 Si 都呈无序状,而不是共度生长。

理论上,虽然按 Tersoff<sup>[21]</sup> 的量子偶极规则, Harrison<sup>[20]</sup> 的 LCAO 方法, Jaros<sup>[21]</sup> 的光学极化系数方法,以及其他一些线性方法<sup>[22-25]</sup>都能预测 Si/GaAs 异质结的价带不连续值。但这些方法可以认为是不适合于用来预测 Si/GaAs 的价带不连续值。Harrison 等人<sup>[26]</sup>曾用紧束缚近似下的 SCIC 方法计算 Si/GaAs 异质结,得到  $\Delta E_V = 0.14\text{eV}$ 。Cardona 等人<sup>[27]</sup>用 DME 方法得到 Si 应变时和 GaAs 应变时, Si/GaAs 的平均  $\Delta E_{V_{av}}$ , 分别为:  $0.22\text{eV}$  和  $0.21\text{eV}$ 。而 Van de Walle<sup>[27]</sup>用自治赝势方法计算 Si 应变和 GaAs 应变时的  $\Delta E_{V_{av}}$ , 分别为:  $0.14$  和  $0.12\text{eV}$ 。这几种自治方法考虑了界面的影响,有的还考虑了晶格失配的影响。但它们仍然忽略晶向间的差别。最后两种方法给出的  $\Delta E_V$  值是整个价带边缘上价带不连续性的平均值。这些都与本文的计算研究有本质区别。本文把界面、晶向及应变等因素一起考虑,加以研究,这无疑是比较全面、可信的。为比较方便,把实验上和理论上及本文得到的有关 Si/GaAs 异质结的价带不连续值均列于表 II 中。

## 五、总 结

通过对 Si/GaAs  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle$  和  $\langle 110 \rangle$  三个不同晶向的异质结进行计算,可以得到以下结论:

1. 界面态的分布。原子间的电荷转移和原子能级移动等都不是简单地依赖于异质结材料的体性质,而是还与构成界面的晶向、晶格形变等具体情况有关。导致价带不连续值也依赖于这两个因素。因此,用线性方法或不考虑晶向间差别来确定  $\Delta E_V$  都是不合适的。

2. Si/GaAs 中的晶格应变,产生应变势与自旋-轨道分裂相互作用,改变了能带对称性,使价带顶发生移动:对于 Si 应变,自旋-轨道分裂可以忽略。但对于 GaAs 应变,自旋-轨道分裂将使  $E_V^{\text{GaAs}}$  上升约  $0.1\text{eV}$ ,从而使  $\Delta E_V$  减小  $0.1\text{eV}$ 。

3. 理论和实验的研究结果表明: Si/GaAs 界面是一个很复杂的界面。实验上还没有得到可靠的  $\Delta E_V$  值;理论上的预言值存在很大差别。本文第一次全面地考虑了晶格应变和界面态对 Si/GaAs 异质结价带不连续性的影响。这些结果为实验研究提供理论依据。

作者认为,更深入地研究是十分需要的。

在本文完成之际,作者衷心感谢王迅教授和叶令副教授的指导和有益的讨论。他们还审阅了全文。

### 参 考 文 献

- [1] J. Tersoff, *Phys. Rev.*, **B30**, 4874 (1984).
- [2] M. J. Caldas, A. Fazzio, and A. Zunger, *Appl. Phys. Lett.*, **45**, 671 (1984).
- [3] Chunhui Huang, Ling Ye, and Xun Wang, *J. Phys. C: Condens. Matter.*, **1**, 907 (1989).
- [4] J. Varrio, H. Asonen, A. Salokatire, M. Pessa, E. Rauhala, and J. Keinonen, *Appl. Phys. Lett.*, **51**, 180 (1977).
- [5] S. L. Wright, M. Inada, and H. Kroemer, *J. Vac. Sci. Technol.*, **21**, 334 (1982).
- [6] J. W. Lee, H. Shichijo, H. L. Matyi, *Appl. Phys. Lett.*, **50**, 31 (1987).
- [7] T. Ueda, S. Nishi, Y. Kawarda, M. Akijama, and K. Kaminishi, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **25**, L789 (1986).
- [8] G. C. Osbourn, *J. Appl. Phys.*, **53**, 1586 (1982).
- [9] G. C. Osbourn, R. M. Biefeld, and P. L. Gourley, *Appl. Phys. Lett.*, **41**, 172 (1982).
- [10] R. S. List, J. C. Woick, I. Lindau and W. E. Spicer, *J. Vac. Sci.*, **B5**, 1279 (1987).
- [11] W. Paul, *Handbook on Semiconductors*, Vol. 1, Band Theory and Transport Properties, Reprint, New York (1983).
- [12] W. Gordy, and W. J. O. Thomas, *J. Chem. Phys.*, **24**(2), 439 (1956).
- [13] Fred. H. Pollak and Manuel Cardona, *Phys. Rev.*, **172**, 816 (1968).
- [14] Chris, G. Van De Walle, and Richard M. Martin, *Phys. Rev.*, **B34**, 5621 (1986).
- [15] J. R. Waldrop, E. A. Kraut, S. P. Kowalzyk, and R. W. Grant, *Phys. Rev.*, **B18**, 4402 (1978).
- [16] W. A. Harrison, E. A. Kraut, J. R. Waldrop, and R. W. Grant, *Phys. Rev.*, **B18**, 4402 (1978).
- [17] A. D. Katianani and G. Margritondo, *Phys. Rev.*, **B28**, 1944 (1983).
- [18] G. Margritondo, *Phys. Rev.*, **B31**, 2526 (1985).
- [19] R. S. List and W. E. Spicer, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B6**(4), 1228 (1988).
- [20] W. Harrison, *J. Vac. Sci. Technol.*, **14**, 1016 (1977).
- [21] M. Jaros, *Phys. Rev.*, **B37**, 7112 (1988).
- [22] R. L. Anderson, *Solid State Electron.*, **5**, 341 (1962).
- [23] M. J. Adam, and Aellen Nussbaum, *Solid State Electron.*, **22**, 783 (1979).
- [24] Oldwig Von Ross, *Solid State Electron.*, **23**, 1059 (1980).
- [25] W. R. Frenley and H. Kroemer, *Phys. Rev.*, **B16**, 2642 (1977).
- [26] W. A. Harrison and J. Tersoff, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B4**, 1068 (1986).
- [27] Manual Cardona and Niels E. Christensen, *Phys. Rev.*, **B35**, 6182 (1987).

### Interface States and Valence Band Offsets of Si/GaAs Heterojunction

Huang Chunhui

(Surface Physics Laboratory, Fudan University, Shanghai)

#### Abstract

The interface states and valence band offsets of Si/GaAs heterojunction have been studied by the self-consistent EHT method. The lattice mismatch between Si and GaAs is treated by a pseudomorphic lattice model; meanwhile the lattice constants are corrected. The Si/GaAs(111), Si/GaAs(111) and Si/GaAs(110) interfaces are calculated for Si strained and GaAs strained condition, respectively. It is shown that the interface states and valence band discontinuities are dependent not only on the two materials, but also on the strain and orientations of heterojunction. The results are given and discussed.

**Key words** heterojunction, interface states, valence band offset, strain.