

(Si)_{2n}/(Si_{1-x}Ge_x)_{2n} (100) 形变层 超晶格的电子结构

沈 丁 立 张 开 明

(复旦大学物理系, 上海)

1987年7月9日收到

本文采用经验 LCAO 紧束缚方法, 对晶格失配的 Si 和 Ge 所形成 (Si)_{2n}/(Si_{1-x}Ge_x)_{2n} (100) ($n = 1 \sim 10$) 形变层超晶格进行了电子结构的计算。在计入晶格常数的变化对第一近邻相互作用的影响后, 给出了超晶格能隙和导带底位置随层数的变化, 讨论了能带折迭和能带边不连续对 Si/Ge 能隙直接间接性的影响。根据形变引起的 Si 和 Ge 导带底的反转, 说明了 Si 层中二维电子气的现象。形变后的能带, 与可得到的实验和其它理论的结果比较符合。本文还计算讨论了有效质量和界面态的问题。

主题词: 硅/硅锗, 形变层超晶格, 电子结构, 晶格失配, 能带折迭, 能带不连续, 有效质量, 界面态, 二维电子气, 光学跃迁

一、引言

半导体技术的迅速发展导致了低维半导体材料的巨大进步, 随着分子束外延 (MBE) 和金属有机物化学气相沉积 (MOCVD) 技术的发展, 半导体超晶格提供了“随意”裁剪能带以期满足人们需要的可能性, 从而给材料科学注入了新的活力^[1]。

在过去十多年的半导体超晶格研究中, 因受实验的限制, 超晶格的组元材料往往从相近晶格常数的半导体中寻找, 如 { $a \sim 5.65 \text{ \AA}$; Ge, GaAs, AlAs, ZnSe}^[2]。尽管由此发现了许多具有良好光电子性质的超晶格并在实际上得到了部分应用, 但晶格匹配的严格要求大大限制了半导体超晶格可能组合的种类。

人们同时观察到, 即使是晶格失配超过 0.1% 的两种半导体, 只要它们在形成超晶格时生长厚度足够地薄, 依然可以经过弹性形变达到无缺陷的公度界面匹配^[3]。当然, 这种超晶格中两个组元材料都可能产生应力。正是这种形变层超晶格 (strained layer superlattice) 的出现, 使超晶格的可能组合大大增加。于是, 研究形变引起的电子结构的变化, 也就成为人们感兴趣的课题。

在已获一定研究的形变层超晶格 GaP/GaAsP, GaSb/AlSb, GaAs/InAlAs 和 Si/SiGe 等体系中, 目前最受重视的莫过于 Si/SiGe^[4]。这不仅是因为 Si 和 Ge 本身已被研究得很多, 还在于 Si/SiGe 在大规模集成电路中存在着单块集成的可能^[5], 甚至它还可被用来制造阶梯形雪崩光电探测器^[6]。G. Abstreiter^[5,7] 等首先报道了在选择掺杂的 Si/Si_x,

$\text{Ge}_{0.5}$ 超晶格中出现了形变引起的二维电子气 (2DEG), J. A. Moriarty^[8] 等在不考虑 Ge 引起的晶格扩张的前提下, 曾用紧束缚方法计算过 $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的电子结构和迁移率的增强, I. Morrison^[9] 等则在计入应变下用赝势计算了 $\text{Si}/\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ 超晶格, 得出了形变导致的局域电子态。最近, T. P. Pearsall^[10] 等用电场调制反射光谱测到了 $(\text{Si})_4/(\text{Ge})_4$ 新的光学跃迁。人们的主要目标是希望能够制成由间接半导体合成的高迁移率直接隙超晶格半导体^[11]。

本文通过考察 $(\text{Si})_{2n}/(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_{2n}$ (100) ($n = 1 \sim 10$) 形变层半导体超晶格的电子结构, 分析形变产生的电子状态, 计算超晶格能隙随层数的变化, 讨论能隙直接间接性受能带折迭和 Si 与 Ge 能带边不连续值的影响, 并与其它理论和实验比较。

二、方 法

1. 晶体结构与形变

采用原子轨道线性组合 (LCAO) 方法, 构造 $(\text{Si})_{2n}/(\text{Ge})_{2n}$ (100) 三维超原胞如图 1 所示。沿 [100] 方向, 原胞内共有 $2n$ 个 Si 原子和 $2n$ 个 Ge 原子, 晶体具有 C_{2v} 点群对称。对于 $(\text{Si})_{2n}/(\text{Ge})_{2n}$ (100) 超晶格, 它每 4 个原子构成一个基本块造 (图 1 中粗线标出), 其中的原子坐标是

$$(0, 0, 0); \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \right) a; \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right) a; \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4} \right) a$$

(a 是晶格常数, 取法在下面给出)

当 $n = 1$ 时此块造即是原胞, 当 $n > 1$ 时原胞由 n 个这样的块造在 [100] 方向上堆积而成。

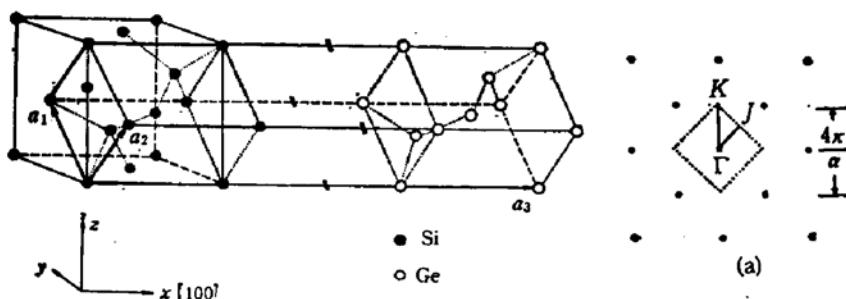


图 1 超晶格 $(\text{Si})_{2n}/(\text{Ge})_{2n}$ (100) 原胞

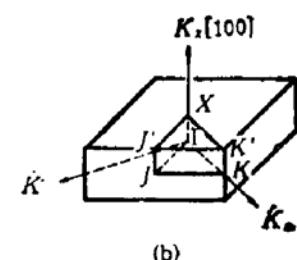


图 2 布里渊区 (a : 晶格常数)

(a) 2D BZ (b) 3D BZ

原胞的基矢是

$$\alpha_1 = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) a$$

$$\alpha_2 = \left(0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) a$$

能带的变化,这是形变物理学的重要内容,本文对 Si 的紧束缚第一近邻参数作如下的修正:

$$E_{pq}^{\text{Si},t}(1/2 \ 1/2 \ 1/2) = \left(\frac{a_{\text{Si}}}{a}\right)^2 \cdot E_{pq}^{\text{Si}}(1/2 \ 1/2 \ 1/2) \quad (6)$$

其中 $pq = ss, sx, xx, xy$, 对 Ge 有类似表达式,只需在(6)式中将 Si 的有关物理量换成 Ge 的即可,由虚晶近似所得合金第一近邻参数 $E_{pq}^{\text{alloy}}(1/2 \ 1/2 \ 1/2)$ 所满足的关系式同 K. E. Newman^[17] 一文完全一致

$$a^2 \cdot E_{pq}^{\text{alloy}}(1/2 \ 1/2 \ 1/2) = (1-x) \cdot a_{\text{Si}}^2 \cdot E_{pq}^{\text{Si}}(1/2 \ 1/2 \ 1/2) + x \cdot a_{\text{Ge}}^2 \cdot E_{pq}^{\text{Ge}}(1/2 \ 1/2 \ 1/2) \quad (7)$$

由于 a 本身已是组分 x 的函数, $E_{pq}^{\text{alloy}}(1/2 \ 1/2 \ 1/2)$ 将不再仅仅是 x 的线性函数,也就是说,形变后合金的一近邻参数中事实上已计人了比 VCA 高阶的非线性修正。

3. 价带边不连续 ΔE_V

和其它超晶格一样^[18], Si/Ge 能带边不连续性长期来没有得到完全确定。早期实验结果指出, Ge 的价带顶高于 Si 的价带顶,而且 $\Delta E_V \gg \Delta E_C$ ^[19] (估计 $\Delta E_C \sim 0.3\text{eV}$), Ge 的能隙嵌于 Si 能隙之中, Si/Ge 呈第一类超晶格性质,然而,实验样品可能含有缺陷。最近, R. S. Bauer 等^[20,21]的同步辐射光电发射实验得出 $\Delta E_V = 0.16\text{eV}$,可见,能带边差值 (band offset) 尚未有定论。就作者所知,迄今未见有 Si/Ge 在形变后 ΔE_V 的实验上明确的报道^[22]。理论上在计入形变应力后,仅有 C. G. Van de Walle 和 R. M. Martin^[24,25]曾用自治赝势计算了几种 Si/Ge 界面在不同形变分布时的 ΔE_V 值,得出 Si/Ge (100) 超晶格在 $a'' = 5.52\text{\AA}$ 时 $\Delta E_V = 0.51\text{eV}$ 的结果,而且在应变后,Ge 导带底高于 Si 导带底,应变 Si/Ge 呈第二类超晶格性质。目前, Si/SiGe 形变层超晶格属于第二类已由实验^[5,7]和理论^[9,14,23]基本肯定,本文的计算就是在此基础上进行。

本文的计算主要参考了 Martin 的结果,取

$$\Delta E_V = E_V^{\text{Ge},t} - E_V^{\text{Si},t} = 0.51\text{eV} \quad (8)$$

并对 Si/Si_{1-x}Ge_x, 取

$$\Delta E_V = E_V^{\text{alloy}} - E_V^{\text{Si},t} = 0.51 \cdot (1-x)\text{eV} \quad (9)$$

同时,我们变动 ΔE_V , 考察价带边不连续的变化对能隙等的影响。 ΔE_V 变动范围在 0.21—0.51eV 内。

在计算中还考虑了形变对 Si 和 Ge 体能带价带位置细微移动的影响。

三、结果和讨论

1. (Si)_x/(Si_{1-x}Ge_x)_z (100) 能隙的准直接性质

首先介绍超晶格物理中所特有的能带折迭 (band folding) 现象。众所周知,半导体 Si 和 Ge 都是金刚石结构 (DM) 的间接隙材料,从实验知道 Si 的导带底在 Δ 轴上并靠近 X 点 $(1, 0, 0) \frac{2\pi}{a_{\text{Si}}}$,而 Ge 导带底在 L 点 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi}{a_{\text{Ge}}}$ 。在 Si 与 Ge 形成 (Si)_x/(Ge)_z (100) 超晶格 (SL) 后, Si 和 Ge 的体能带就按如下规律发生折迭:

$$\Gamma(\text{DM}) \rightarrow \Gamma(\text{SL}); X(\text{DM}) \rightarrow \Gamma(\text{SL}) \text{ 和 } K(\text{SL}); L(\text{DM}) \rightarrow J/J'(\text{SL}) \quad (10)$$

• 取偶/奇

在本文所取紧束缚参数下, Si 导带底出现于 $(0.79, 0, 0) \frac{2\pi}{a_{Si}}$ 。在 $(Si)_{2n}/(Si)_{2n}$ (100)

超晶格对称下, Si 体能带沿 [100] 方向发生折迭, 导带底随层数 n 变化而被折迭到不同位置(见表 2 第二行)。

在 $\Delta E_V = 0.51\text{eV}$ 时, 图 4 给出 $(Si)_{2n}/(Ge)_{2n}$ (100) 的能隙随层数的关系。从 $n = 1$ 时 $E_g = 0.96\text{eV}$ 下降到 $n = 10$ 时(原胞含 40 个原子) $E_g = 0.60\text{eV}$, 曲线的单调变化符合量子尺寸效应。特别要指出的是当 $n = 5, 6, 8$ 时, 超晶格成为直接能隙的半导体。

用折迭的观点看待这个问题, 可见当 $n = 5, 10$ 时, 折迭后的 Si 导带底在 $(0.008, 0, 0) \frac{2\pi}{a}$, 相当接近 Γ 。计算发现, 尽管超晶格 $(Si)_{2n}/(Ge)_{2n}$ (100) 的价带顶保持在 Γ 点, 而导带底位置却主要由经折迭的 Si 导带底位置所决定, Ge 的作用仅在于使超晶格的导带底从经折迭的 Si 导带底位置出发发生一定偏移, 或愈加偏离 Γ 点, 或偏移至 Γ 点(象 $n = 5, 6, 8$ 的情形)。

表 2 $(Si)_{2n}/(Ge)_{2n}$ (100) 导带底波矢与体 Si 经相应折迭后的波矢
(沿 [100] 方向, 单位: $\frac{2\pi}{a}$)

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$(Si)_{2n}/(Si)_{2n}$ (100)	0.21	0.21	0.13	0.04	0.008	0.04	0.07	0.04	0.01	0.008
$(Si)_{2n}/(Ge)_{2n}$ (100)	0.21	0.25	0.17	0.13	0.00	0.00	0.07	0.00	0.06	0.05

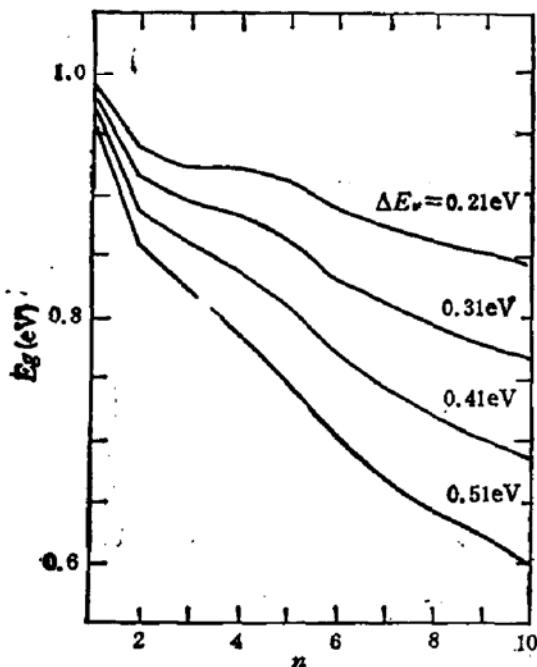


图 4 超晶格 $(Si)_{2n}/(Ge)_{2n}$ (100) 能隙随层数的变化
(ΔE_V 分别取 0.21, 0.31, 0.41 和 0.51 eV)

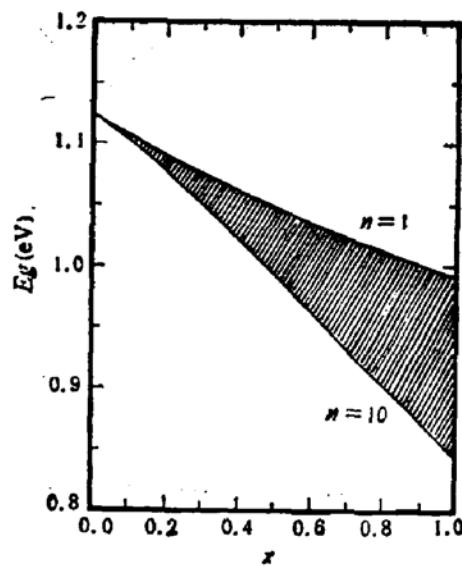


图 5 超晶格 $(Si)_{2n}/(Si_{1-x}Ge_x)_{2n}$ (100) 能隙
随组分及层数的变化范围

表2列出折迭后Si的导带底位置和计算所得Si/Ge超晶格的导带底位置(都是在[100]方向上).可见,即使是对间接隙超晶格,只要 $n > 5$ 后,导带底波矢离 Γ 就不超过 $0.1 \cdot \frac{2\pi}{a}$,这样的材料就可被视作准直隙的.

根据Si的 T_a 对称性,在考虑(Si)_z/(Si)_z(100)的折迭时,不仅在[100]方向上导带底折迭至新的位置,同时,在 ΓK 轴离 Γ 79%轴长处另有一个简并的Si导带底(参见式(10)).对于超晶格Si/Ge,这两个极小值位置参与竞争都有可能成为导带底,本文算得导带底出现在 ΓX 轴上,保证了准直隙的实现. J. A. Moriarty^[8]一文认为当 $\Delta E_V < 1.2\text{eV}$ 时,(Si)_z/(Ge)_z(100)超晶格导带底出现在 ΓK 上,我们认为此差别可能来自该文忽略了晶体中Ge的形变.

当 ΔE_V 变动时(图4),从整体上看随 ΔE_V 的增加,能隙曲线向下移动,这表明对每个确定的超晶格体系,量子阱的加深加强了电子基态的束缚,从而能隙减小.在 $\Delta E_V = 0.21\text{eV}$ 时,我们另外给出(Si)_z/(Si_{1-x}Ge_x)_z(100)能隙随组分x和层数n的变化范围(图5), $x = 0$ 对应于体Si能隙 $E_g = 1.12\text{eV}$,对于固定的n,随着Ge成分的增加,其能隙总是趋于减小.

我们注意到, ΔE_V 的变化不仅能引起体系能量色散的变化,甚至可使个别系统的导带底波矢发生移动.例如,当 ΔE_V 从 0.51eV 降至 0.21eV 过程中,(Si)₁₂/(Ge)₁₂(n=6)的直隙特性保持不变,但(Si)₁₀/(Ge)₁₀(n=10)的导带底却逐渐从 $0.05 \cdot \frac{2\pi}{a}$ 移至 Γ

从而成为直隙,同时(Si)₁₀/(Ge)₁₀(n=5)及(Si)₁₆/(Ge)₁₆(n=8)则由 Γ 点稍稍偏开.所有这些变化趋势都可被用来与适当的光谱比较以确定 ΔE_V ,另一方面,我们仍可以得出结论, $n > 5$ 时超晶格的准直隙性质不随 ΔE_V 变动而发生影响.

2. Si层中2DEG的证实

在取 $\Delta E_V = 0.51\text{eV}$ 后,相应于本文的紧束缚参数,我们有 $\Delta E_c = 0.44\text{eV}$,图6的插图中示意地显示了Si/Ge量子阱结构.在形变时,Si晶格常数的增大使得其能隙从 1.12eV 缩小到 0.95eV ,Ge晶格常数的减小使其能隙从 0.62eV 增大到 0.88eV .再考虑到Si/Ge之间能带边的不连续性,Ge的导带底能量位置就将高出Si的导带边能级.形变引起的Si和Ge导带边相互位置的反转,使得超晶格由形变前的第一类($\Delta E_V \cdot \Delta E_c < 0$)转变为形变后的第二类($\Delta E_V \cdot \Delta E_c > 0$),随之在Si层中产生了导带量子阱,为定域于Si的二维电子气准备了势阱.计算中发现,n=1~10过程中超晶格的价带和导带边电子态都落入各自的量子阱内.随着n的增大,量子阱在增宽,价带边电子能级 E_V 上升,而导带边电子能级 E_c 下降,都和量子阱模型的原理一致.

为明确了解实验^[5,7]中得出的Si中二维电子气的现象,我们考察了(Si)_z/(Ge)_z(n=1~10)导带底电子态的分布,发现这些波函数都严格地定域于Si的阱内,随n的增大,这种定域性愈加突出,这充分说明了形变引起Si与Ge导带边位置反转进而Si量子阱内产生局域的束缚电子空态;一旦经调制掺杂,这些态就容易被杂质电子占据从而在Si层引起2DEG.计算中如果不考虑Si与Ge的晶格形变,则不能明确得出此结论.图6画出n=10时,(Si)_z/(Ge)_z(100)的导带底电子态的电荷分布,可以看出,

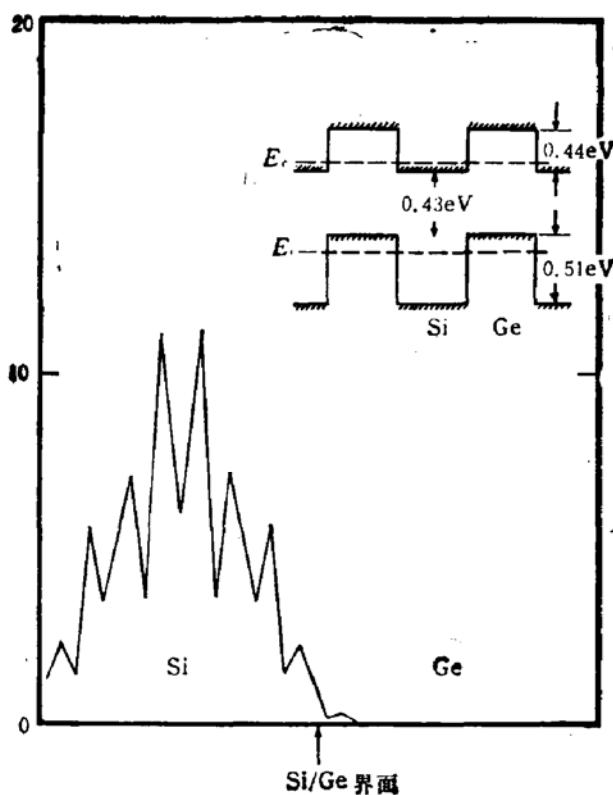


图 6 超晶格 $(\text{Si})_{2n}/(\text{Ge})_{2n}$ (100) 导带底电子态的空间分布
(右上图是相应的量子阱结构。 E_c 和 E_v 是超晶格的导带底和价带顶)

这个态在 Si 中呈双主峰对称结构, 其对称性来源于 Si/Ge 晶体的点群对称。

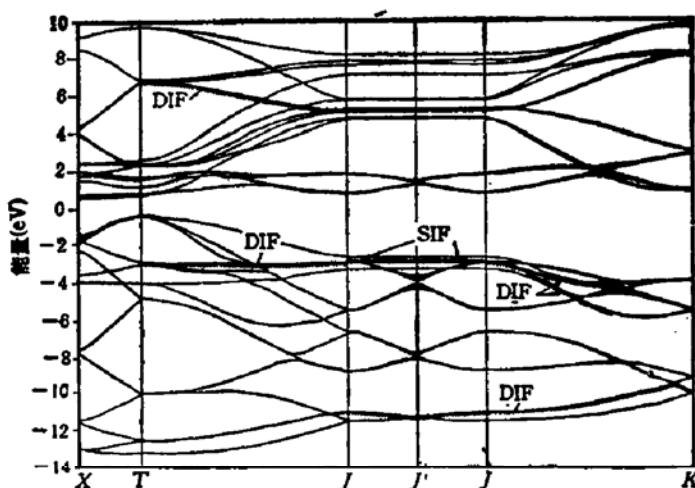
在 ΔE_v 取得较小时, 量子阱比较浅, 层数较少的超晶格导带底能级 E_c 不一定受量子阱的束缚。如 $\Delta E_v = 0.21 \text{ eV}$ 时直到 $n \geq 2$, E_c 能级才开始落入量子阱内, 并有对应的 Si 层定域电子态。考虑到实验^[7]样品 Si 和 Ge 的重复厚度 $\sim 6 \text{ nm}$ 都较大, 计算中即使取 ΔE_v 较小也同样可以看到 Si 中的局域态。

计算还表明, $(\text{Si})_{2n}/(\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5})_{2n}$ (100) 二维电子气的情况与 $(\text{Si})_{2n}/(\text{Ge})_{2n}$ (100) 的相似。

3. 能带及与光跃迁实验的比较

当 $a'' = a_{\text{Si}} = 5.43 \text{ \AA}$ 时, 超晶格中 (100) 平面上 Si 保持原有点阵, 应力仅仅发生在 Ge 内。最近, T. P. Pearsall^[10] 等的电场反射调制光谱实验确定了 $a'' = a_{\text{Si}}$ 时 $(\text{Si})_4/(\text{Ge})_4$ (100) 有三种新的光学跃迁: 0.76, 1.25 和 2.31 eV。R. People^[24] 等人取 Kronig-Penney 模型对此进行计算, 得出跃迁发生的位置, 认为接近于 2.2 eV 的直接跃迁联系于 Γ' 点。在取 Martin 的 $\Delta E_v = 0.74 \text{ eV}$ ^[23] 情况下, 根据本文所得出的紧束缚能带(图 7), Γ 点的直接跃迁为 1.09 eV, X 点的直接跃迁为 2.01 eV, 而且导带底发生在 X 点上。S. Froyen^[25] 等用自治赝势还计算出 $a'' = a_{\text{Si}}$ 时 $(\text{Si})_6/(\text{Ge})_6$ 的导带底位置在 $0.3 \cdot \frac{\pi}{a_{\text{Si}}}$, 本文则得出导带底在 $0.17 \cdot \frac{2\pi}{a_{\text{Si}}}$, 两者较接近。

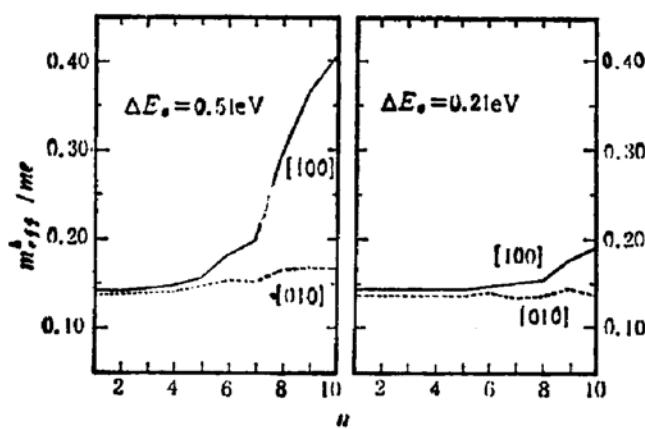
通过电子态分析可以得知 Ge 层应力引起的 Si/Ge 界面态, Si/Ge 超晶格具有两个不完全等价的界面, 界面态亦分别分为两类。计算发现, 沿 [100] 方向的 JJ' 轴上在价

图7 $(\text{Si})_{2n}/(\text{Ge})_{2n}$ (100) 能带图 ($a'' = a_{\text{Si}}$)

带边以下具有两度简并的界面态, 分别各自定域在两个不相同的界面上, 我们称之为单界面态 (SIF)。除此以外, 在价带底部 ($K - J - J'$; $-11 \sim -9$ eV) 和导带内 ($\Gamma - J$; $5 \sim 7$ eV) 都发现了双界面态 (DIF), 这些态同时局域在两个界面上, 在 $-5 \sim -3$ eV 范围内, 可以看到, 双界面态沿 ΓJ 逐渐发展, 进入 $J J'$ 轴转变为简并单界面电子态, 在由 J 点进入 [011] 方向后, 双界面态分裂为两支, 但每一支都各自保留了 DIF 的性质。

4. $(\text{Si})_{2n}/(\text{Ge})_{2n}$ (100) 的有效质量

图8给出 $\Delta E_v = 0.21$ eV 和 0.51 eV 时平行与垂直界面两个方向上, 空穴 Γ 点有效质量随 n 的变化。沿 [100] 方向上有效质量随层数增大而增大, 但在平行界面的 [010] 方向上变化很小, 垂直界面的 [100] 方向上变化则较大, 反映出势垒造成的阻碍作用, 势垒越厚则有效质量越大, 亦即超晶格的重复周期越小, 载流子的迁移率就越大。

图8 超晶格 $(\text{Si})_{2n}/(\text{Ge})_{2n}$ (100) 空穴的有效质量
(实线: 垂直界面方向, 虚线: 平行界面方向).

最后我们指出两点。第一, 受紧束缚参数的限制, 本文计算采用了近似 $a^\perp = a''$, 确实比较粗糙。此近似的妥当与否, 只能看计算结果与实验和其它理论的比较。通过比较, 我们认为 $a^\perp = a''$ 作为一个初步的近似还是合理的。第二, 实验得出的 Si 导带底位置应在

$0.85 \cdot \frac{2\pi}{a_{Si}}$, 与本文计算也略有差别, 尽管如此, 本文计算结果与有关实验仍符合较好。此

外, 本文还考虑了不同 ΔE_V 值对结果的影响, 可以为今后进一步的实验研究提供参考。

作者感谢同陆奋、张翔九老师及 R. M. Martin 教授的有益讨论, 并感谢谢希德教授对本工作的热情关心和指导。

参 考 文 献

- [1] L. Esaki, *IEEE Journal of Quantum Electronics*, **QE-22**, 1611(1986); Proc. Sym. Recent Topics in Semicon. Phys., ed. H. Kamimura and Y. Toyozawa, World Sci. Pub. Co. Pte. Ltd., pl (1983).
- [2] M. L. Cohen, *Adv. Electron. Electron Phys.*, **51**, 1(1980).
- [3] G. C. Osbourn, *J. Appl. Phys.*, **53**, 1586(1982).
- [4] G. C. Osbourn, *IEEE Journal of Quantum Electronics*, **QE-22**, 1677(1986); R. People, *ibid.*, 1696(1986).
- [5] E. Kasper, H. J. Herzog, H. Jorke and G. Abstreiter, personal commu.
- [6] R. People, *Phys. Rev.*, **B32**, 1405(1985).
- [7] G. Abstreiter, H. Brugger, T. Wolf, H. Jorke and H. J. Herzog, *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 2441(1985); *Surf. Sci.*, **174**, 640(1986).
- [8] J. A. Moriarty and S. Krishnamurthy, *J. Appl. Phys.*, **54**, 1892(1983).
- [9] I. Morrison, M. Jaros and K. B. Wong, *J. Phys. C*, **19**, L239(1986).
- [10] T. P. Pearsall, J. Bevk, L. C. Feldman, J. M. Bonar, J. P. Mannaerts and A. Ourmazd, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 729(1987); *Bull. Am. Phys. Soc.*, **32**, 773(1987).
- [11] U. Gnatzmann and K. Clausecker, *Appl. Phys.*, **3**, 9(1974).
- [12] E. Kasper, *Surf. Sci.*, **174**, 630(1986).
- [13] J. W. Matthews and A. E. Blakeslee, *J. Vac. Sci. Technol.*, **14**, 989(1977).
- [14] C. G. Van de Walle and R. M. Martin, *Phys. Rev.*, **B34**, 5621(1986).
- [15] Landolt-Börnstein Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, New Series, Group III, 17(a), ed. O. Madelung, Springer-Verlag Berlin, Berlin, Heidelberg, New York, (1982).
- [16] Y. Li and P. J. Lin-chung, *Phys. Rev.*, **B27**, 3465(1983).
- [17] K. E. Newman and J. D. Dow, *Phys. Rev.*, **B30**, 1929(1984).
- [18] D. L. Shen and K. M. Zhang, Proc. Sino-Japan Bilateral Workshop on Stat. Phys. and Condensed Matter Theory, ed. Xie Xide, World Sci. Pub. Co. Pte. Ltd., p40(1986).
- [19] R. People, J. C. Bean, D. V. Lang, A. M. Sergent, H. L. Störmer, K. W. Wecht, R. T. Lynch and K. Baldwin, *Appl. Phys. Lett.*, **45**, 1231(1984).
- [20] R. S. Bauer and G. Margaritondo, *Phys. Today*, Jan., 27(1987).
- [21] G. Margaritondo, N. G. Stoffel, A. D. Katnani and F. Patella, *Solid State Commu.*, **36**, 215(1980).
- [22] R. People and J. C. Bean, *Appl. Phys. Lett.*, **48**, 538(1986).
- [23] C. G. Van de Walle and R. M. Martin, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B3**, 1256(1985); *ibid.*, **B4**, 1055(1986).
- [24] R. People and S. A. Jackson, *Bull. Am. Phys. Soc.*, **32**, 906(1987).
- [25] S. Froyen, D. M. Wood and A. Zunger, *Bull. Am. Phys. Soc.*, **32**, 906(1987).

Electronic Structures of Strained Layer Superlattices $(\text{Si})_{2n}/(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_{2n}$ (100) with $n=1 \sim 10$

Shen Dingli and Zhang Kaiming

(Physics Department, Fudan University, Shanghai)

Abstract

The empirical LCAO tight-binding method is used to calculate the electronic structures of type-II strained layer semiconductor superlattices $(\text{Si})_{2n}/(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_{2n}$ with $n=1 \sim 10$ formed by lattice mismatched constituents Si and Ge. The energy gaps and positions of the minimum of conduction bands are obtained for various layer number n. The effects of lattice-constant variation on nearest neighbour interactions are taken into account. The effects of band folding and band discontinuity on the gap of Si/Ge are also analyzed. The 2DEG localized in Si layers can be explained in the formalism based on the change of conduction band offset from $\Delta E_c < 0$ to $\Delta E_c > 0$ which is induced by structural strain. The strained band agrees well with the photoemission experiment and other calculations. Finally hole effective mass and interface states are discussed.

KEY WORDS : Si/SiGe, Strained layer superlattice, Electronic structure, Lattice misfit, Band folding, Band offset, Effective mass, Interface state, 2DEG, Optical transition