第 14 卷 第 2 期
1993 年 2 月

半 导 体 学 报
CHINESE JOURNAL OF SEMICONDUCTORS

Vol. 14. No. 2
Feb., 1993

# 短周期 $(Ge)_n(Si)_n$ 应变超晶格电子结构的自洽赝势计算*

范卫军　　顾宗权†

半导体超晶格国家重点实验室

†中国科学院半导体研究所，北京 100083

(1992 年 6 月23日收到)

在局域密度近似下，用第一原理自洽赝势的方法计算了短周期超晶格 $(Ge)_1(Si)_1$ 和 $(Ge)_2(Si)_2$ 的能带结构．结果表明 $(Ge)_1(Si)_1$ 是间接带，导带最低点在布里渊区的 $\bar{X}$ 点．$(Ge)_2(Si)_2$ 也是间接带，导带最低点在布里渊区 $\bar{M}$ 点附近．给出了禁带宽度及自旋轨道分裂值，并与有关的理论和实验做了比较．

**PACC**: 7110,7125C,7340L.

## 1. 引言

最近以 Si 和 $Ge_xSi_{1-x}$ 为衬底生长的短周期 $(Ge)_n(Si)_m$ 超晶格引起了人们的广泛注意[1-8]．由于 Ge 和 Si 的晶格常数不相等，$(Ge)_n(Si)_m$ 超晶格层中产生应变．在不同的衬底上生长，可以获得不同应变分布的 $(Ge)_n(Si)_m$ 超晶格．Gnutzmann 等人[9]推测了由间接带的 Ge 和 Si 构成具有准直接带的 $(Ge)_n(Si)_m$ 超晶格的可能性．Pearsall 等人[4]对 $(Ge)_n(Si)_n$ $(n=1,2,4)$ 进行了电反射率测量．Zachai 等人[5]对 $(Ge)_n(Si)_m$ $(m+n=10)$ 超晶格进行了光致发光测量．在理论上，Schmid 等人[6-7]用 LMTO 方法计算了 $(Ge)_n(Si)_m$ 的能带结构．Froyen 等人[8]对 $(Ge)_n(Si)_n$ $(n=1,2,4,6)$ 做了第一原理自洽赝势计算，没有考虑自旋轨道分裂．本文在 LDA 近似下用第一原理自洽赝势方法计算了在 Si 衬底上生长的 $(Ge)_n(Si)_n$ $(n=1,2)$ 超晶格的能带结构，考虑了自旋轨道相互作用，并与有关的理论和实验做了比较．

## 2. 计算方法及结果

取 Si 的晶格常数 $a_{Si}=5.431$ Å，Ge 的晶格常数 $a_{Ge}=5.657$ Å，则晶格失配为 4.1%．计算中假设以 Si 材料为衬底，应变只存在 Ge 层中．垂直于生长方向的平面内晶格常数 $a_{\parallel}=a_{Si}$．沿生长方向的晶格常数 $a_{\perp}=\frac{1}{2}(a_{Si}+a_{Ge})(1+\delta)$，通过总能极小求出 $a_{\perp}$．$(Ge)_1(Si)_1$ 具有 $D_{2d}$ 点群对称操作．原胞基矢取为 $a_1=\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)a_{\parallel}$，

* 本工作得到中国科学院 LWTZ-1298 经费的资助．得到国家自然科学基金的资助．

$a_2=\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)a_{/\!/}$，$a_3=\left(0,\frac{a_{/\!/}}{2},\frac{a_\perp}{2}\right)$。$a_\perp=5.522$ Å。单位原胞中有两个原子，在 $a_1a_2a_3$ 坐标系中两原子的位置为：Ge(0,0,0)；Si(0.25,0.75, 0.5)。其布里渊区的特殊点和体材料的对应关系是：$\bar{X}(X_{X,Y})$，$\bar{\Gamma}(\Gamma,X'_Z)$，$X'_Z$ 为距离布里渊区中心 $\frac{2}{3}\frac{2\pi}{a_\perp}$ 处的点。$(Ge)_2(Si)_2$ 具有 $D_{2h}$ 点群对称操作，其原胞基矢为 $a_1=\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)a_{/\!/}$，$a_2=\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)a_{/\!/}$，$a_3=(0,0,1)a_\perp$，$a_\perp=5.533$ Å。单位原胞中有四个原子，在 $a_1a_2a_3$ 坐标系中其位置为：Si(0,0,0),(0.5,0,0.2454)；Ge(0.5,0.5,0.4954)，(0,0.5,0.75)。其布里渊区的特殊点与体材料的对应关系是：$\bar{M}(X_{X,Y})$,$\bar{R}(L)$,$\Gamma(\Gamma,X_Z)$。

计算中采用自洽赝势在动量空间的表示式[10]，对交换相关势作局域密度近似(LDA)[11]。离子赝势根据 Hamann[12] 的方法产生，并包括了 Kleinman[13] 的相对论修正。采用Ceperly-Alder 交换相关势[14]。能带的本征函数通过平面波展开得到。对 $(Ge)_1(Si)_1$ 超晶格平面波展开的动能截断为 $e_{max}=14.0$Ry，例格矢的截断为 $G_{max}=7.0$au.；对 $(Ge)_2(Si)_2$ 超晶格 $e_{max}=10.4$Ry，$G_{max}=6.4$au.。对布里渊区 $K$ 点积分是根据 Chadi[15] 特殊点方法完成的。对 $(Ge)_1(Si)_1$ 采用了 15 个特殊点；对 $(Ge)_2(Si)_2$ 采用了 8 个特殊点。自洽迭代总能收敛到 $10^{-4}$Ry。

由于局域密度近似造成能隙宽度比实验值小许多，为此我们对计算的能隙加上一个修正项 $\Delta Eg$。$\Delta Eg=(\Delta Eg_{Ge}+\Delta Eg_{Si})/2$，$\Delta Eg_{Ge}$ 和 $\Delta Eg_{Si}$ 分别是 Ge 和 Si 的 $\Gamma$ 点能隙的实验值与计算值之差。计算 $e_{max}=15$Ry，$G_{max}=8.0$ au. 时 Si$\Gamma$ 点能隙为

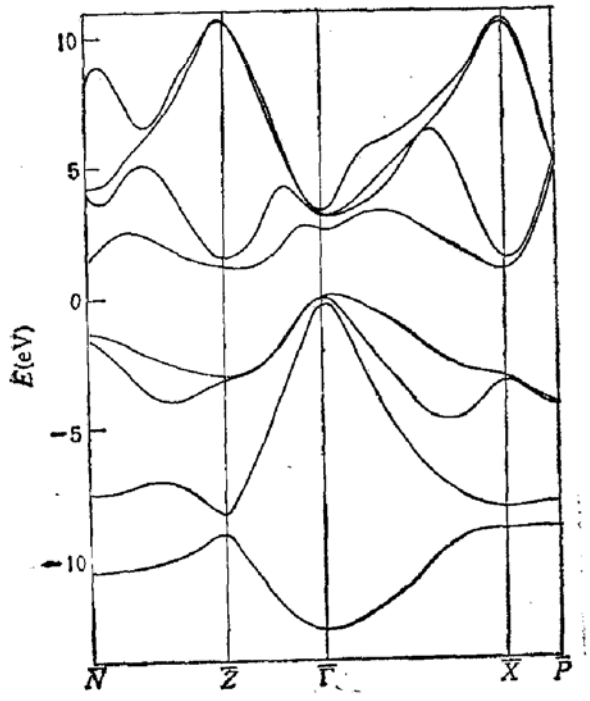


图 1　$(Ge)_1(Si)_1$ 应变超晶格的能带结构

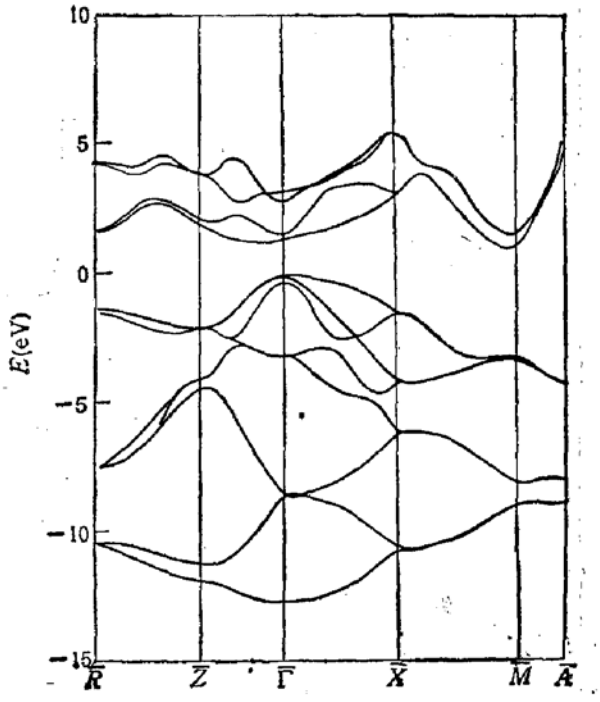


图 2　$(Ge)_2(Si)_2$ 应变超晶格的能带结构

2.495eV，$e_{max}=12$Ry，$G_{max}=7.0$au. 时 Ge$\Gamma$ 点能隙为 0.226eV。取 Si和 Ge$\Gamma$ 点能隙的实验值分别为 3.37eV 和 0.797eV。则 $\Delta Eg=0.72$eV。

图 1 和图 2 给出了 $(Ge)_1(Si)_1$ 和 $(Ge)_2(Si)_2$ 应变超晶格的能带结构图。表 1 给出了应变和没有考虑应变（此时晶格常数取 Ge 和 Si 晶格常数的平均值）的能隙值和自旋轨道分裂值，并列出了有关理论和实验结果。括号中是没有经过修正的能隙宽度。

表 1 $(Ge)_1(Si)_1$ 和 $(Ge)_2(Si)_2$ 的能隙宽度和自旋轨道分裂的理论值和实验值(单位 eV)

| n | | $Eg_\Gamma$ | $Eg$ | 导带最低点位置 | $\Delta_0$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 考虑应变 | 2.64(1.92) | 1.13(0.41) | $\bar{X}$ | 0.13 |
| | 没考虑应变 | 2.23(1.51) | 1.20(0.48) | $0.88\bar{X}$ | 0.18 |
| | 文献[6]结果 | 2.407 | 1.22 | $0.87\bar{X}$ | 0.186 |
| | 实验结果 | 2.60 | 0.68 | | |
| 2 | 考虑应变 | 1.38(0.66) | 1.03(0.35) | $0.95\bar{M}$ | 0.11 |
| | 没考虑应变 | 1.39(0.67) | 1.26(0.54) | $0.36\bar{Z}$ | 0.17 |
| | 文献[7]结果 | 1.36 | 0.90 | $0.95\bar{M}$ | |
| | 实验结果 | 2.21 | 0.85 | | |

从计算结果看出 $(Ge)_1(Si)_1$ 和 $(Ge)_2(Si)_2$ 都是间接带。$(Ge)_1(Si)_1$ 的导带最低点在 $\bar{X}$ 处。$(Ge)_2(Si)_2$ 的导带最低点在 $\bar{\Gamma}$ 点到 $\bar{M}$ 点距离的 0.95 处，记作 $0.95\bar{M}$。表 1 中所列文献[6]的计算结果没有考虑应变。我们也计算了没有考虑应变的情况。从表 1 可以看出 $n=1$ 时不考虑应变我们的结果同文献[6]的结果符合很好。表 1 中文献[7]的结果考虑了应变，与我们的计算结果相比符合很好。但计算结果和文献[4]的实验结果符合不好。以 $n=1$ 的 $Eg$ 为例，实验值与理论值相比小了将近一半。我们认为造成这样的原因是实验中测得的很可能是 GeSi 合金而不是超晶格的 $Eg$。Pearsall[4] 在分析其实验结果时指出了这一点。不考虑应变时，由 Ge 和 Si 构成的闪锌矿结构的体材料（即 $(Ge)_1(Si)_1$ 的情况），布里渊区的三个 $X$ 点（$X_X, X_Y, X_Z$）是等价的。计算得到导带最低点在 $0.88X$ 处。当 Ge 和 Si 构成 $(Ge)_2(Si)_2$ 超晶格时，布里渊区在生长方向（$z$ 方向）发生折叠。原体材料 $X_Z$ 附近的导带最低点折叠到 $\Gamma$ 点附近，即在超晶格布里渊区的 $0.36\bar{Z}$ 处，其能级相对价带顶的值为 1.26eV，而计算的 $\bar{M}(X_X, X_Y)$ 附近的导带极小值点相对价带顶的值为 1.33eV，二者数值相近。应变后，$(Ge)_2(Si)_2$ 的 $\bar{M}(X_X, X_Y)$ 附近的导带极小值点的能级位置下降较大，成为导带的最低点，位于 $0.95\bar{M}$。

### 3. 结论

从本文对生长在 Si 衬底上的 $(Ge)_n(Si)_n$ ($n=1,2$) 超晶格的电子结构的自洽赝势计算中可以得出以下结论：

$(Ge)_n(Si)_n$ ($n=1,2$) 超晶格具有间接带；$(Ge)_1(Si)_1$ 的导带最低点在 $\bar{X}$ 处，禁带宽度为 1.13eV；$(Ge)_2(Si)_2$ 的导带最低点在 $0.95\bar{M}$ 处，禁带宽度为 1.03eV；两者的自旋轨道分裂值分别为 0.13eV 和 0.11eV。

## 参 考 文 献

[1] T. P. Pearsall, J. Bevk, L. C. Feldman, J. M. Bonar, J. P. Mannaerts and A. Ourmazd, *Phys. Rev. Lett.*,

58, 729(1987).
[2] M. S. Hybertsen, M. Schlüter, R. People, S. A. Jackson, D. V. Lang, T. P. Pearsall, J. C. Bean, J. M. Vandenberg and J. Bevk, *Phys. Rev.*, **B37**, 10195(1988).
[3] E. Kasper, H. Kibbel, H. Jorke, H. Brugger, E. Friess and G. Abstreiter, *Phys. Rev.*, **B38**, 3599(1988).
[4] T. P. Pearsall, J. Bevk, J. C. Bean, J. Bonar, J. P. Mannaerta and A. Ourmazd, *Phys. Rev.*, **B39**, 3741 (1989).
[5] R. Zachai, K. Eberl, G. Absteriter, E. Kasper and H. Kibbel, *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 1055(1990).
[6] U. Schmid, N. E. Christensen and M. Cardona, *Phys. Rev.*, **B41**, 5919(1990).
[7] U. Schmid, N. E. Christensen, M. Alouani And M. Cardona, *Phys. Rev.*, **B43**, 14597(1991).
[8] S. Froyen, D. M. Wood and A. Zunger, *Phys. Rev.*, **B37**, 6893(1988).
[9] U. Gnutzmann and K. Clausecker, *Appl. Phys.*, **3**, 9(1974).
[10] J. Ihm, A. Zunger and M. L. Cohen, *J. Phys.*, **C12**, 4409(1979).
[11] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.*, **B136**, 1864(1964); W. Kohn and L. J. Sham, *ibid.* **140**, A1133 (1965).
[12] D. R. Hamann, M. Schlüter and C. Chiang, *Phys. Rev. Lett.*, **43**, 1494(1979).
[13] L. K. Kleinman, *Phys. Rev.*, **B21**, 2630(1982); G. B. Bachelet and M. Schlüter, *ibid.* **25**, 2103(1982).
[14] D. M. Ceperley and B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 566(1980).
[15] D. J. Chadi, M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **B8**, 5747(1973).

# Self-consistent Pseudopotential Calculation of the Electronic Structures of Short-period $(Ge)_n$ $(Si)_n$ Strained Superlattices

Fan Weijun　Gu Zongquan †

*National Laboratory for Superlattice and Microstructure*

†*Institute of Semiconductors, Academia Sinica, Beijing* 100083

(*Received* 23 *June* 1992)

## Abstract

With the local density approximation, the band structures of the short-period $(Ge)_1(Si)_1$ and $(Ge)_2(Si)_2$ superlattices are calculated by using the first-principle self-consistent pseudopotential method. The results show that the $(Ge)_1(Si)_1$ superlattice is an indirect semiconductor, and the lowest conduction band state is at point $\bar{X}$ in the Brillouin zone; the $(Ge)_2(Si)_2$ superlattice is indirect and the lowest conduction band state is near point $\bar{M}$. The energy gaps and the spin-orbit splitting values are calculated and compared with the theoretical and experimental results.

**PACC:** 7110, 7125C, 7340L.