

# 第一性原理研究应变 Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 能带结构\*

宋建军<sup>†</sup> 张鹤鸣 戴显英 胡辉勇 宣荣喜

(西安电子科技大学微电子学院, 宽禁带半导体材料与器件教育部重点实验室, 西安 710071)

(2007 年 11 月 14 日收到, 2008 年 1 月 27 日收到修改稿)

基于密度泛函理论框架的第一性原理平面波赝势方法对双轴应变 Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> ( $x = 0.1-0.4$ ) 的能带结构进行了研究, 结果表明, 导带带边六度简并没有消除, 应变部分消除了价带带边的简并度, 导带带边能量极值  $k$  位置和极值附近可由电子有效质量描述的能带形状在应变条件下几乎不变, 价带极大值附近可由空穴有效质量描述的能带形状随着  $x$  有规律地变化. 此外, 给出的禁带宽度与  $x$  的拟合关系同 KP 理论计算的结果一致, 该量化数据对器件研究设计可提供有价值的参考.

关键词: 应变硅, 能带结构, 第一性原理

PACC: 7360F, 7125C, 7115M

## 1. 引 言

利用应变 Si 提高载流子迁移率是当前 Si CMOS 技术发展的重点, 已经成为研究设计高速/高性能小尺寸 CMOS 器件与电路的首选方案<sup>[1-3]</sup>. 而其能带结构是深入研究应变 Si 材料基本属性, 设计高速/高性能 CMOS 器件与电路的重要理论依据, 意义重大<sup>[4]</sup>.

目前, 国内外有关应变 Si 器件与电路的研究报道较多, 但对能带结构的研究相对较少<sup>[5,6]</sup>. 研究方法多采用 KP 法, 该方法针对性强, 操作复杂, 不利于推广应用到其他应变材料的研究上来. 而且, 文献报道多是(001)面外延生长张应变 Si 材料的结果, 不能满足器件设计需求.

CASTEP(CAMbridge Serial Total Energy Package)软件包是基于密度泛函理论的从头计算量子力学程序, 也是目前较准确的电子结构计算程序<sup>[7]</sup>. 结合形变理论, 本文首先建立了用于 CASTEP 计算的应变结构模型, 然后采用 CASTEP 对(111)面弛豫 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 衬底上生长的张应变 Si 材料的能带结构进行了计算. 该方法操作方便、结果准确, 也可推广应用到其他应变材料的能带结构研究上来. 从应变 Si/(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 能带结构图上提取的数据进行拟和,

建立了相应的能带结构模型, 其结果与 KP 理论计算结果一致. 并获得了有实用价值的相关结论, 可为张应变 Si CMOS 器件与电路的研究与设计提供理论参考. 应变 Si 的能带结构与弛豫 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 的 Ge 组分相关, 因此只要将其转换成相应的应变强度, 文中所建立的模型即可适用于其他应力引入方法产生的应变.

## 2. 模型构建与计算方法

### 2.1. 模型构建

CASTEP 只能够进行 3D 周期性结构的能带计算<sup>[8]</sup>. 对于外延生长获得的应变材料来说, 一方面, 由于被迫采用衬底的晶体结构, 应变层结构具有周期性; 另一方面, 由于受到应力作用, 其晶格常数与未应变材料的不同. 因此, CASTEP 可以用于外延生长应变材料的能带计算. 而其晶格常数的确定是 CASTEP 计算模型构建的关键.

为了构建用于 CASTEP 计算的应变 Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 结构模型, 我们先从软件的结构文件中输入 Si 的惯用原胞结构, 然后创建了应变 Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 的超原胞(见图 1), 其晶格常数( $a, b, c; \alpha, \beta, \gamma$ )由(1)(2)式计算获得

\* 国家部委项目(批准号: 51308040203, 9140A08060407DZ0103)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: wsmshhsong@tom.com

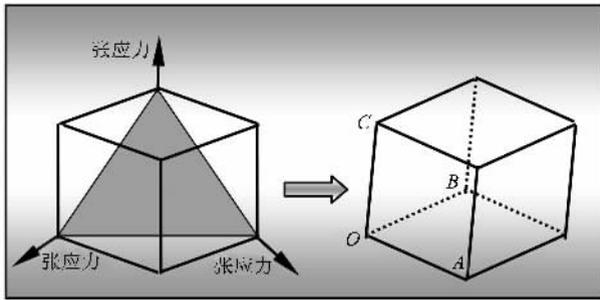


图1 应变 Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 超原胞结构示意图(OA 为  $a$ , OB 为  $b$ , OC 为  $c$ ;  $\angle AOB = \gamma$ ,  $\angle AOC = \beta$ ,  $\angle BOC = \alpha$ )

$$\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_0 \\ a_0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_0 \\ a_0 \\ a_0 \end{bmatrix}, \quad (1)$$

$$\arccos(\epsilon_{yz}) = \alpha, \arccos(\epsilon_{xz}) = \beta,$$

$$\arccos(\epsilon_{xy}) = \gamma. \quad (2)$$

式中,符号  $a_0$  是未应变 Si 的晶格常数;应变张量 ( $\epsilon_{ij}$ ,  $i, j = x, y, z$ ) 由 Vegard 规则和 Hooke 定律确定 (见(3)–(5)式)<sup>9]</sup>,其中, Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 晶格常数由 Si 和 Ge 的晶格常数线性插值获得. 计算所需参数值见表 1, 所得晶格常数结果见表 2.

$$\epsilon = (a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} - a_{\text{Si}}) / a_{\text{Si}}, \quad (3)$$

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = \frac{1}{3} [2 - 1/\sigma^{(111)}] \epsilon_{//}, \quad (4)$$

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = -\frac{1}{3} [1 + 1/\sigma^{(111)}] \epsilon_{//}. \quad (5)$$

表 1 计算所需参数值<sup>[10]</sup>

Si 晶格常数 $a_{\text{Si}}/\text{\AA}$	5.4309
Ge 晶格常数 $a_{\text{Ge}}/\text{\AA}$	5.6579
泊松比 $\sigma^{(111)}$	2.275

表 2 应变 Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 晶格常数

$x$	$a = b = c/\text{\AA}$	$\alpha = \beta = \gamma/(\text{^\circ})$
0.1	5.4210	90.115
0.2	5.4111	90.230
0.3	5.4011	90.344
0.4	5.3911	90.458

## 2.2. 计算方法

CASTEP 软件包是基于密度泛函方法的从头算量子力学程序, Kohn-Sham 方程组是基于密度泛函理论的第一性原理计算的理论基础<sup>[11]</sup>:

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N \phi_i^*(r) \phi_i(r), \quad (6)$$

$$V_{\text{KS}}[\rho(r)] = v(r) + \text{dr}' \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} + \frac{\delta E_{\text{xc}}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)}, \quad (7)$$

$$\{-\nabla^2 + V_{\text{KS}}[\rho(r)]\} \phi_i(r) = E_i \phi_i(r), \quad (8)$$

式中,  $\rho(r)$  粒子数密度函数,  $\phi_i(r)$  为单粒子波函数,  $E_{\text{xc}}[\rho]$  为交换关联能量泛函.  $E_{\text{xc}}[\rho]$  可以采取局域密度近似(local density approximation, LDA)和广义梯度近似(generalized gradient approximation, GGA), 其具体的构造方法为

$$E_{\text{XC}}^{\text{LDA}}[\rho(r)] = \text{dr} \int \rho(r) \epsilon_{\text{XC}}[\rho(r)], \quad (9)$$

$$E_{\text{XC}}^{\text{GGA}}[\rho(r)] = \text{dr} \int \rho(r) \epsilon_{\text{XC}}[\rho(r), \nabla \rho(r)] \quad (10)$$

其中,  $\epsilon_{\text{XC}}(\rho)$  是密度为  $\rho$  的均匀电子气的交换关联能.

本文的计算是基于密度泛函理论的 CASTEP 软件包实现的. 计算过程中电子与电子间相互作用的交换相关效应采取局域密度近似方案来处理, 电子波函数通过一组平面波基矢展开, 采用超软赝势(ultrasoft pseudopotentials)来实现离子实和价电子之间的相互作用势, 以减少平面波基矢的个数. 在  $k$  空间中, 通过平面波的截断能量的选择来改变平面波基矢的多少从而控制计算的精度. 布里渊区  $k$  矢的选取为  $5 \times 5 \times 5$ , 平面波的截断能为 180 eV.

## 3. 结果与讨论

图 2 至图 6 是 CASTEP 计算所得未应变 Si, (111)面弛豫 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 衬底外延生长应变 Si(Ge 组分  $x$  变化 0.1—0.4) 的能带结构图.

对图 2—6 的分析可以得到

1) 导带底附近六个能谷的能量值是一致的, 但不同于未应变时的能量. 说明在(111)面弛豫 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 衬底上外延生长对 Si 产生的应力没有消除导带带边的六度简并, 只是改变了其能量值. 图 7 可以定性解释该结果.

2) 图 3 至图 6 清楚地显示出, 应变部分消除了价带带边的简并度, 使得价带带边产生了劈裂. 由上节晶格常数的计算结果可知 (111)面弛豫 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 衬底外延生长产生的应力使得 Si 由立方晶系转变为三角晶系, 对称性的降低导致了简并度的降低.  $\Gamma$  点处价带带边和亚带边之间劈裂能与 Ge 组分的

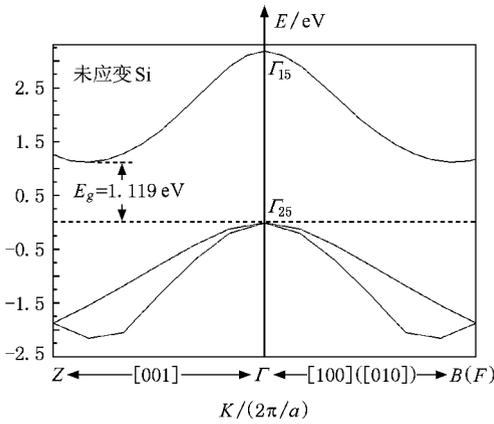


图 2 未应变 Si 能带结构

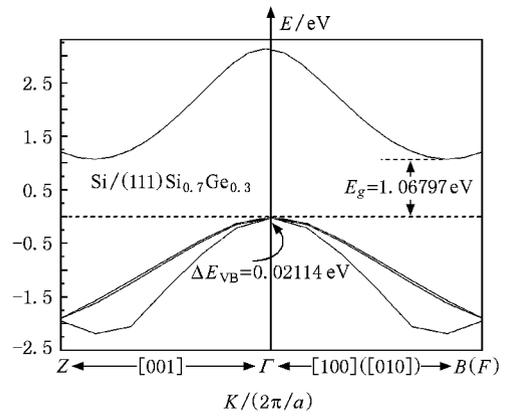


图 5 应变 Si(111)Si\_{0.7}Ge\_{0.3} 能带结构

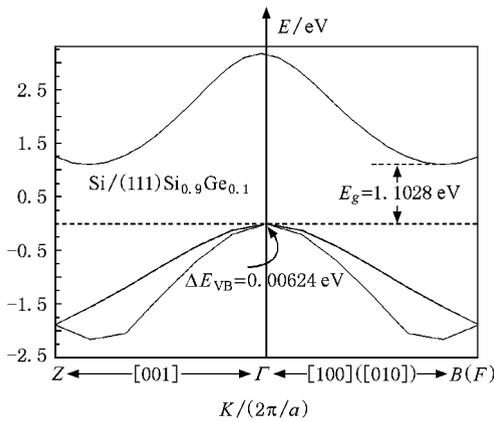


图 3 应变 Si(111)Si\_{0.9}Ge\_{0.1} 能带结构 ( $E_g$  为禁带宽度;  $\Delta E_{VB}$  为价带带边与亚带边之间的劈裂能)

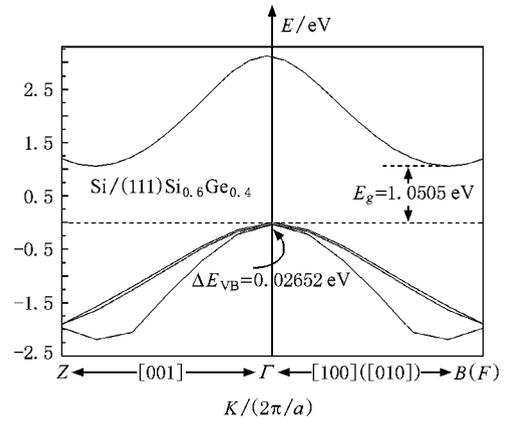


图 6 应变 Si(111)Si\_{0.6}Ge\_{0.4} 能带结构

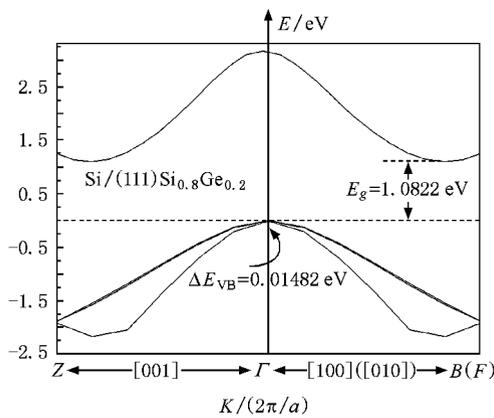


图 4 应变 Si(111)Si\_{0.8}Ge\_{0.2} 能带结构

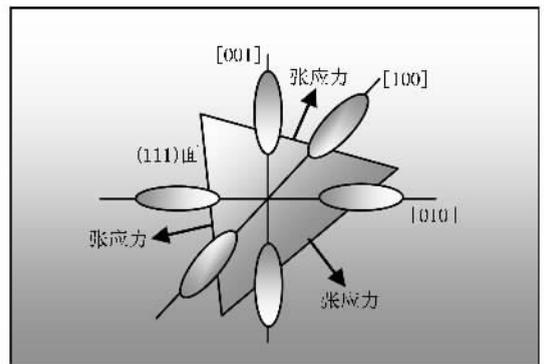


图 7 应变 Si(111)Si\_{1-x}Ge\_x 中六个旋转椭球面的受力示意图

3)从图 9 可以看到,应变 Si(111)Si\_{1-x}Ge\_x 的禁带宽度与 Ge 组分之间呈线性反比函数关系.该拟合的结果与 KP 理论计算的结果一致.

考虑到器件设计的需要,下面我们将讨论应变对有效质量的影响.图 10 和图 11 分别是应变 Si(111)Si\_{1-x}Ge\_x 不同 Ge 组分下导带带边和价带带边

拟合函数关系见图 8.值得注意的是,该拟合关系只能作为半定量的公式.这是由于 CASTEP 计算无法将自旋轨道耦合作用考虑进来的缘故.

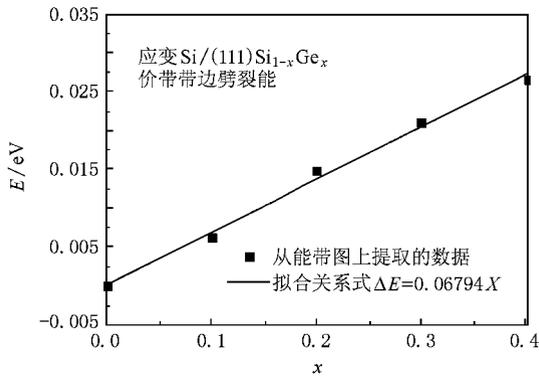


图 8 应变 Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 在  $\Gamma$  点处价带带边和亚带边之间劈裂能与 Ge 组分的拟合函数关系

变了空穴有效质量的大小。

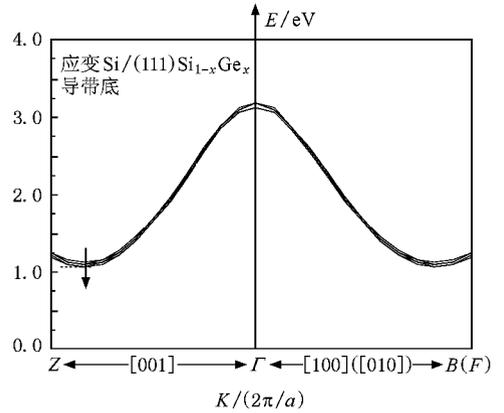


图 10 应变 Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> ( $0 \leq x \leq 0.4$ ) 导带底能带图 (箭头指向从 0 到 0.4, 步长 0.1)

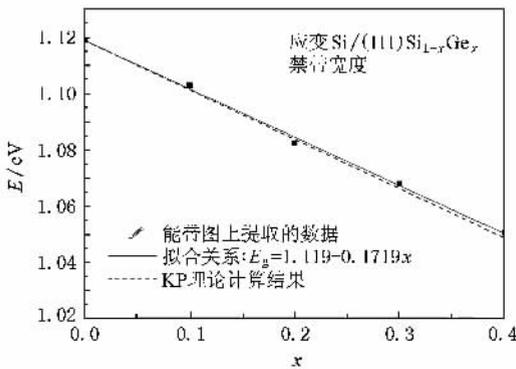


图 9 应变 Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 禁带宽度随 Ge 组分的变化关系

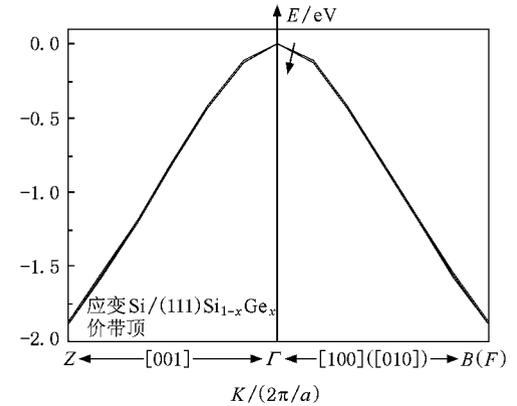


图 11 应变 Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> ( $0 \leq x \leq 0.4$ ) 价带顶能带图 (箭头指向从 0 到 0.4, 步长 0.1)

比较图。由图可见,导带带边能量极值  $k$  矢位置和极值附近可由电子有效质量描述的能带形状在应变条件下的曲率几乎一致;价带极大值附近可由空穴有效质量描述的能带形状斜率随着  $x$  有规律地变化,但变化不大。因此,应变几乎没有改变电子有效质量的大小;沿  $[100]$  方向空穴有效质量随着 Ge 组分的增加而变小,但变化不大。这主要是由于 Ge 组分不大时,外延层应变较小。导带底能谷对应  $k$  矢的邻域内,形变势场可以看作常数,不随  $k$  矢变化。因此,应力作用下,能谷附件各点位移是一样的。此外,导带底的简并是  $k$  矢的简并,不是  $k$  矢的简并。因此,对于每个  $k$  矢极值态,由于不存在能量很靠近的其他态,所以耦合不显著,可以忽略。这就解释了导带底能谷附近能带形状在应力作用下能够保持的物理现象。相对于导带底的情况,虽然在布里渊区中心附近的形变势场也可以看作不随  $k$  矢变化的常量,但是价带顶存在的  $k$  矢简并态之间的耦合作用显著,导致价带顶能带形状发生了变化,进而改

### 4. 结 论

本文基于 Vegard 规则和 Hooke 定律,先构建了用于 CASTEP 能带计算的应变材料晶胞模型,然后采用密度泛函理论框架的第一性原理平面波赝势方法对双轴应变 Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> ( $x = 0.1-0.4$ ) 的能带结构进行了研究,并对能带结构图上提取的数据进行了拟和,建立了相应的能带结构模型。图 2 至图 9 列出了本文的主要结论。其结果与 KP 理论计算的一致,该量化数据对器件研究设计可提供有价值的参考。此外,本文还讨论了应变对有效质量的影响。结果表明,应变几乎没有改变电子有效质量的大小;沿  $[100]$  方向空穴有效质量随着 Ge 组分的增加而变小,但变化不大。

- [ 1 ] Hu H Y , Zhang H M , Jia X Zh , Dai X Y , Xuan R X 2007 *Chinese Journal of Semiconductors* **28** 36
- [ 2 ] Shu Zh Y , Yang H D 2006 *Chin. Phys.* **15** 1374
- [ 3 ] Chakraborty S , Bera M K , Bhattacharya S , Bose P K , Maiti C K 2006 *Thin Solid Films* **504** 73
- [ 4 ] Guillaume T , Mouis M 2006 *Solid-State Electronics* **50** 701
- [ 5 ] Hu H Y , Zhang H M , Dai X Y , L Y 2004 *Chin. Phys.* **13** 295
- [ 6 ] Shu B , Dai X Y , Zhang H M 2004 *Chin. Phys.* **13** 235
- [ 7 ] Chen Z W , Lv M Y , Liu R P 2005 *Journal of Applied Physics* **98** 1
- [ 8 ] Li Y , Liu Y , Chen N , Cao G H , Feng Z S 2005 *Physics Letters A* **345** 398
- [ 9 ] Smirnov S , Kosina H 2004 *Solid-State Electronics* **48** 1325
- [ 10 ] Fischetti M V , Laux S E 1996 *J. Appl. Phys* **80** 2234
- [ 11 ] He H D , Wang X Q , Luo Q 2006 *Journal of Synthetic Crystals* **35** 556 ( in Chinese ) [ 何焕典、王新强、罗 强 2006 人工晶体学报 **35** 556 ]

## Band structure of strained Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>: a first principles investigation<sup>\*</sup>

Song Jian-Jun<sup>†</sup> Zhang He-Ming Dai Xian-Ying Hu Hui-Yong Xuan Rong-Xi

( Key Laboratory of Ministry of Education for Wide Band-Gap Semiconductor Materials and Devices , School of Microelectronics , Xidian University , Xi 'an 710071 , China )

( Received 14 November 2007 ; revised manuscript received 27 January 2008 )

### Abstract

There has been a great interest in the strained Si CMOS technology lately , especially the modification of band structures which provides a theoretical basis for the design of the high-speed and high-performance devices and circuits. Calculations were performed on the band structures in strained Si(111)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> ( 0 ≤ x ≤ 0.4 ) by the first-principle pseudopotential approach of the plane wave based upon the density functional theory. It was found that the conduction band( CB ) edge is characterized by the six valleys all the same , that valence band( VB ) edge degeneracies are partially removed and that the electron mass in CB is unaltered under strain while the hole mass decreases along the [ 100 ] direction with increasing x. In addition , the fitted dependence of bandgap on x are in good agreement with KP theoretical calculation , from which the quantitative data supply valuable references to the devices design.

**Keywords** : strained Si , band structure , first principles

**PACC** : 7360F , 7125C , 7115M

<sup>\*</sup> Project supported by the National Ministries and Commissions ( Grant Nos. 51308040203 , 9140A08060407DZ0103 ).

<sup>†</sup> E-mail : wmsjhsong@tom.com