

硅基超晶格 $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}$ 的能带结构

吕铁羽[†] 陈捷 黄美纯

(厦门大学物理系, 厦门 361005)

(2009 年 10 月 23 日收到)

由于 Si 基发光材料能与现有的 Si 微电子工艺兼容, 其应用前景被广泛看好. 设计具有直接带隙的 Si 基材料, 备受实验和理论研究者的关注. 本文根据芯态效应、电负性差效应和对称性效应设计了 Si 基超晶格 $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}$. 其中 $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 为直接带隙材料. 在密度泛函框架内, 采用平面波赝势法计算表明, $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 为直接带隙超晶格, 最小带隙在 Γ 点. 进一步采用准粒子近似方法计算, 我们预测该材料的带隙值为 0.96 eV.

关键词: 密度泛函, 准粒子近似, Si 基超晶格

PACC: 6185, 7115H

1. 引 言

众所周知, Si 是一种间接带隙半导体材料, 它的禁带宽度约为 1.17 eV, 价带顶在 Γ 点, 导带底在 Γ -X 方向上的 X 点附近 (约 85% 处). 由于动量守恒的要求, 电子的间接跃迁必须借助于其他准粒子过程, 如声子的参与, 其跃迁概率远小于直接跃迁. 因此, 体 Si 不是一种合适的发光材料, 直接在 Si 材料上实现全 Si 光电子集成是一件几乎不可能的事情. 于是, 多年来世界上许多科学家把注意力集中到 III-V 及 II-VI 族化合物这些直接带隙材料上, 将其作为一种重要的光电子材料和器件, 研究它们与 Si 芯片的兼容性问题. 虽然已经获得某些进展, 但是由于化合物材料的极性晶面, 在 Si 上生长及长期稳定性都是一个严峻的挑战. 此外, 由于 Si 的资源丰富、价格低廉、纯度高, 加上 Si 平面工艺成熟精细, 它将是目前相当长时间内不可替代的微电子材料. 因此, Si 基发光材料的研究具有重要的意义.

近年来对 Si 基材料的研究表明, Si 不发光的性质有可能被改变^[1-7]. 然而, 在这些方案中, Si 基材料或器件的发光过程多数与界面有关, 这使光响应速度不能满足超高速信息技术的要求. 于是直接把 Si 的间接带隙改造成为直接带隙的 Si 基新材料研究便成为一项非常具有挑战性的工作.

能带理论告诉我们, 如果能够人工设计出具有直接带隙特征的 Si 基新材料, 发光效率及光响应速度的问题将有可能同时得到很好的解决. 最近, 由黄美纯教授等^[8-10] 总结出的对称性降低原则将可能成为设计直接带隙半导体的重要原则之一.

由于局域密度近似 (LDA) 是基于基态的理论, 对材料激发态性质的预测总是不令人满意. 而准粒子近似 (GWA) 方法^[11,12] 是适用于激发态性质的计算, 大量的报道显示, 对于 sp 系统, 该方法预测的带隙值与实验值之间的误差在 0.1 eV 之内^[13,14]. 我们希望通过 GWA 方法准确预测 $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}$ 超晶格的带隙值. 但是 GWA 方法的计算量很大, 要求的计算时间和资源 (如内存) 随着系统的增大呈指数阶增长. 所以, 在本文中我们只针对 $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 超晶格做 GWA 计算.

2. 理论和方法

鉴于实际半导体材料的多体复杂性, 不仅其电子结构没有解析解, 决定其带隙类型的因素也不可能严格可靠的解析理论. 黄美纯教授综合分析了 50 多种最常见的半导体材料的能带结构参数, 包括元素半导体、化合物半导体以及一些新的半导体材料, 提出决定带隙类型的主要因素有三个, 即芯态效应、原子的电负性差效应和晶体对称性效应^[15].

[†] E-mail: mailoliver@126.com

实际上这三个效应都是作用在价电子上的晶体有效势的重要组成部分.

2.1. 芯态效应

材料的能带结构与晶格常数存在密切的关系. 即便是同一种材料, 晶格常数增大最敏感的效应是 Γ 导带底能量的迅速降低. 而实现在常温常压下增大晶格常数的有效方法是选择芯态较大的原子来替代.

2.2. 电负性差效应

对于化合物半导体, 组成晶体的两种原子之间存在所谓极性键, 它与原子间的电负性差直接相关. 在赝势理论中, 它表现为势的反对称部分. 观察 GaSb, GaAs, GaP, InSb 和 AlSb 的能带结构, 发现 Γ 导带底的能量随电负性的减小而迅速向 Γ 价带顶靠近, 使 GaSb, GaAs 和 InSb 成为直接带隙半导体, 而电负性较大的 GaP 和 AlSb 为间接带隙材料. 虽然目前还没有理论能够定量说明这个变化规律, 而且我们注意到用别的(如 Phillips)电负性标度, 其变化规律就不如此明显. 但是, 半导体导带底能量在 Pauling 电负性标度下的这一变化趋势仍然可以作为设计直接带隙材料的借鉴.

2.3. 对称性效应

AlN 与 AlSb, GaN 与 GaP 比较, AlN 和 GaN 的电负性差较大, 芯态较小. 但是 AlN 和 GaN 是直接带隙半导体. 造成这种现象的一个重要原因是它们的晶体对称性. 降低晶体对称性, 即减少对称点群的操作数, 有利于设计和合成具有直接带隙的半导体材料. 事实上布里渊区折叠效应也可以视为降低晶体对称性的重要效果之一. 当然, 直接带隙的物理来源还有其他因素, 如导带底与价带顶波函数的对称性. 作为晶体几何特征的结构对称性, 通过晶体势或电荷密度分布而在电子结构性质上反映为带隙类型的转变是可以理解的.

2.4. 准粒子近似

根据格林函数理论建立起来的准粒子计算是通过求解方程(1)得到准粒子能量和准粒子波函数^[16],

$$E^{\text{qp}}\psi^{\text{qp}}(\mathbf{r}) = [\hat{T} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + V_{\text{c}}(\mathbf{r})]\psi^{\text{qp}}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Sigma(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E^{\text{qp}})\psi^{\text{qp}}(\mathbf{r}'), \quad (1)$$

其中 \hat{T} 为动能算符; $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ 是离子势; $V_{\text{c}}(\mathbf{r})$ 为库仑势; Σ 是自能算符, 包括有效的交换关联势; 本征能量 E^{qp} 是复数, 其实部为准粒子能量, 虚部为准粒子生存时间. 在 GWA 中, Σ 通过能量相关的单粒子格林函数 G 和动力学屏蔽库仑相互作用 W 计算得到^[16],

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) = i \int \frac{dE'}{2\pi} e^{-\delta E'} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E - E') W(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E), \quad (2)$$

方程(2)在该近似方法中不包括顶点修正^[17].

在 GWA 中, 假设准粒子生存时间为无限长, 且 LDA 的波函数与准粒子的波函数重合^[12,18] (经过计算, 准粒子的波函数与 LDA 的波函数重合率超过 99%, 因此这样假设是合理的). 则单粒子格林函数可以写成

$$G(E) = \sum_{\mathbf{nk}} \frac{|\mathbf{nk}\rangle \langle \mathbf{nk}|}{E - E_{\mathbf{nk}}^{\text{input}} - i\eta}, \quad (3)$$

其中 $|\mathbf{nk}\rangle$ 为 LDA 的本征函数; $E_{\mathbf{nk}}^{\text{input}}$ 为准粒子能量; 当 $E_{\mathbf{nk}}^{\text{input}} > E_{\text{F}}$ 时, $\eta = 0^-$; 当 $E_{\mathbf{nk}}^{\text{input}} < E_{\text{F}}$ 时, $\eta = 0^+$ (E_{F} 是费米能). 屏蔽库仑相互作用为

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \omega) = \int d\mathbf{r}_3 \boldsymbol{\epsilon}^{-1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3; \omega) v(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2), \quad (4)$$

其中 v 为裸的库仑相互作用; 介电矩阵 $\boldsymbol{\epsilon}$ 由随机相近似(RPA)计算. 当用 LDA 的波函数替代准粒子的波函数时, 激发态的能量可以用简单的方法计算,

$$E_{\mathbf{nk}}^{\text{qp}} = E_{\mathbf{nk}}^{\text{LDA}} + \langle \mathbf{nk} | \Sigma(E_{\mathbf{nk}}^{\text{qp}}) | \mathbf{nk} \rangle - \langle \mathbf{nk} | V_{\text{xc}}^{\text{LDA}} | \mathbf{nk} \rangle, \quad (5)$$

其中 $V_{\text{xc}}^{\text{LDA}}$ 为 LDA 交换关联势. LDA 本征能量中的交换关联作用部分用能量相关的自能算符贡献替代. 这种近似方法得到的结果非常理想.

3. Si 基材料模型

前面阐述的降低对称性原理为我们提供了计算设计的方向, 使人们在执行能带结构计算之前确定晶体结构模型有章可循. 对于 Si 基材料而言, 可用两个基本方法降低晶体的对称性.

方法 I: 在 Si 中进行原子替换或制作合金, 使其对称性从 O_h 点群降为闪锌 T_d 或体心四角(BCT)或对称性更低的结构.

方法 II: 在 Si 中进行非 Si 原子的周期性原子插层, 形成低对称性的材料.

在本文中,我们采用方法 I 在 Si(100) 面上设计新的 Si 基超晶格 $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}(100)$. 由于我们选择方法 I 设计新 Si 基超晶格,所以必须选择 IV 族元素作为 Si 的替代材料,否则不能保证新材料结构的稳定性. IV 族元素有 C, Si, Ge, Sn 和 Pb, 根据芯态效应,我们应该选择芯态比 Si 大的元素,即 Ge, Sn 或 Pb. 显然 Sn 和 Pb 的芯态比 Ge 大. 根据电负

性差效应,选择 Ge 与 Si 的电负性最小,Sn 次之,Pb 与 Si 的电负性最大. 至于对称性,无论选择 Ge, Sn 还是 Pb 作为 Si 的替代材料,新 Si 基超晶格的对称性都会降低. 同时,我们注意到 Pb 的原子半径比 Si 大很多,选用 Pb 将可能导致材料稳定性差. 综合考虑,我们选择 Sn 作为替代元素. 计算所用的超晶格原胞见图 1.

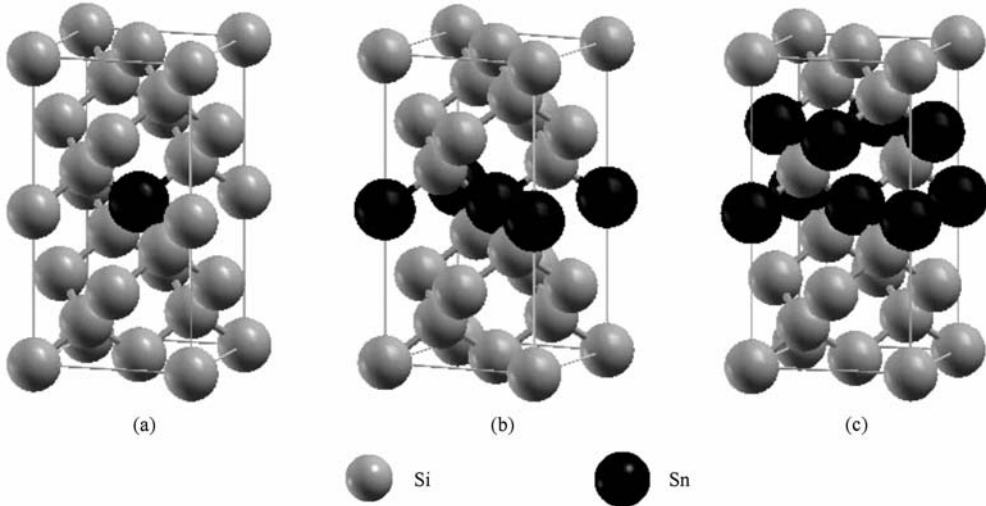


图 1 $\text{Si}_x\text{Sn}_{1-x}/\text{Si}$ 的超晶格原胞 (a) $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$, (b) $\text{Si}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}/\text{Si}$, (c) $\text{Si}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}/\text{Si}$

4. 结果与讨论

在 LDA 计算中,我们选择平面波赝势法. 模守恒赝势由 Troullier-Martins(TM) 方法构造得到^[19], 采用 Ceperley-Alder(CA) 交换关联势^[20]. 布里渊区中 k 点通过 $6 \times 6 \times 3$ 的 Monkhorst-Pack 方式^[21] 分割得到. 截断动能为 45 Ry (1 Ry = 13.606 eV), 使总能收敛到 0.001 eV. 经过弛豫得到的 $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}$ 超晶格的晶格常数见表 1. 由于设计的超晶格材料还没有实验数据,所以在 GWA 计算中,我们采用 LDA 弛豫后的晶格常数. 极化函数用平面波展开的截断动能为 15 Ry,使自能收敛于 0.05 eV.

表 1 Si 及 $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}$ 的晶格常数和带隙值

	晶格常数 $a_0/a. u.$		带隙值 E_g/eV
	$a = b$	c	
Si	10.17	20.35	0.46
$\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$	10.29	20.57	0.35
$\text{Si}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}/\text{Si}$	10.39	20.88	0.21
$\text{Si}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}/\text{Si}$	10.63	21.37	0.03

LDA 计算得到的 $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}$ 超晶格能带图见图 2. 为了比较,我们计算了 16 个 Si 原子组成的简

单四角结构超原胞. 可以观察到, Si 是间接带隙材料,价带顶在 Γ 处,导带底在 Γ -X 和 Γ -Z 方向. $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 是直接带隙材料,带隙最小值点在 Γ 处. 而 $\text{Si}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}/\text{Si}$ 和 $\text{Si}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}/\text{Si}$ 为间接带隙材料,价带顶在 Γ 点,导带底在 Z 点. 由原胞的结构可知, $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 的对称性比 $\text{Si}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}/\text{Si}$ 和 $\text{Si}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}/\text{Si}$ 要低. 根据对称性效应, $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 比 $\text{Si}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}/\text{Si}$ 和 $\text{Si}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}/\text{Si}$ 更有可能成为直接带隙材料. 反过来,我们计算的例子也证明晶体材料对称性效应的正确性,即随着材料对称性的降低,其成为直接带隙材料的可能性增加. 从图 2 可以看到,三种超晶格价带顶都在 Γ . 与 Si 相比,超晶格 Z 到 Γ 的导带底很平. 这是因为我们所取的原胞中包含的原子数目增加,导致布里渊区发生折叠引起的.

在 Si(100) 面上构造的超晶格原胞是简单四角结构,在这个结构中,除了替代的 Sn 原子外,其他 Si 原子均在其正常位置附近. 构造原胞时,在 Si(100) 表面上有序排列 Si 和 Sn 单层,然后加上七层 Si,重复上述步骤得到 $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$. 对应的布里渊区发生折叠,将 Si(金刚石结构)中 X 点折叠到 Γ 点. 我们知道, Si 的导带底在 X 点附近,因为没有将导带底直接折叠到 Γ 点,所以 $\text{Si}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}/\text{Si}$ 和 $\text{Si}_{0.5}$

$\text{Sn}_{0.5}/\text{Si}$ 是间接带隙材料. 但 $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 是直接带隙, 这可能是由于 Sn 替代了 Si 原子, 结构发生变

化导致超晶格势扰动, 从而分裂了折叠的能带和简并态. 这种分裂会降低导带底的能量.

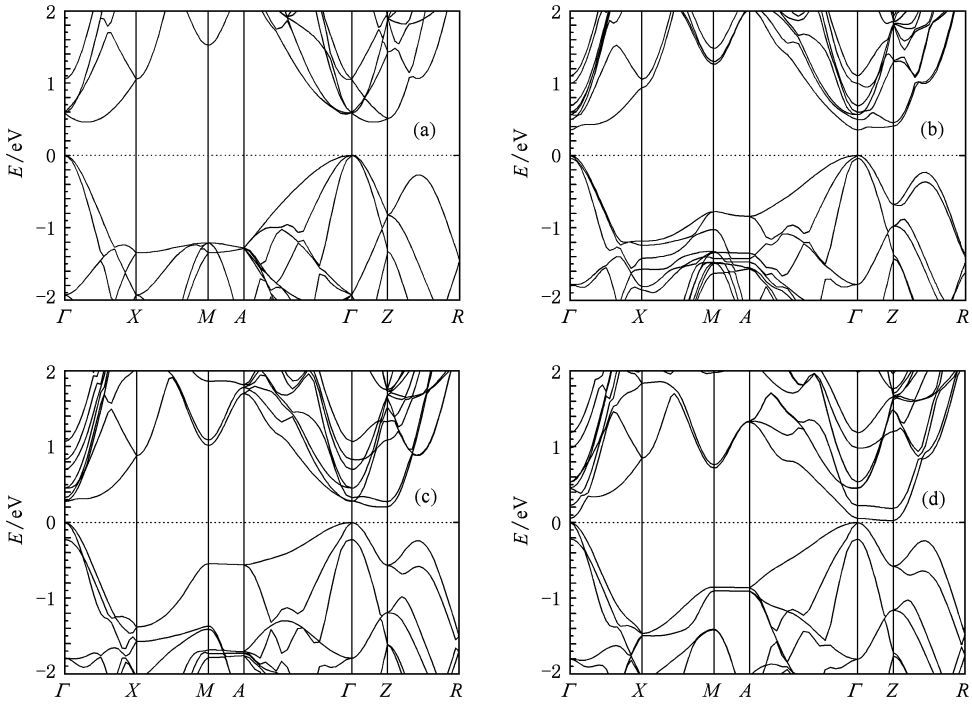


图 2 LDA 能带图 (a) Si, (b) $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$, (c) $\text{Si}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}/\text{Si}$, (d) $\text{Si}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}/\text{Si}$

Si 和 SiSn/Si 超晶格的价带顶都在 Γ 点, 而导带底在 Γ -Z 方向上. 所以四种材料在 Γ -Z 方向导带底部的情况决定材料的性质. 由于 Si 在 Γ 点导带底有多个能级简并, 所以我们考察 Γ 和 Z 点的底部导带能级.

SiSn/Si 超晶格中, Sn 的芯态效应使导带底整体下移, 随着 Sn 原子数目增加能带整体下移加剧. 与 Si 导带底比较, $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$, $\text{Si}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}/\text{Si}$ 和 $\text{Si}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}/\text{Si}$ 在 Γ 点分别下移 0.24, 0.31 和 0.53 eV; 在 Z 点分别下移 0.10, 0.30 和 0.48 eV. 可以看到在 Γ 点下移的幅度比 Z 点大, 这是因为 Sn 原子的加入, SiSn/Si 超晶格的晶格常数发生变化. 而 Γ 点的能量对晶格常数的变化比较敏感.

从图 2 可以看到, Si 不论是价带还是导带都存在大量的简并态. Si 中部分原子被 Sn 替换后, 部分简并态分裂. 随着 Sn 原子的加入, Γ 点上 Si 导带底的六度简并能级分裂成五个能级. 分裂后, 这五个能级宽度为 0.24, 0.42 和 0.48 eV, 分别对应 $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$, $\text{Si}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}/\text{Si}$ 和 $\text{Si}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}/\text{Si}$. 在 Z 点导带底部的六个能级宽度分别为 1.22, 1.43 和 1.59 eV, 而 Si 对应的带宽为 1.39 eV.

$\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 在 Γ 点能级下移的幅度和分裂

的程度都比 Z 点大, 而且与 Si 比较, Z 点的底部导带能级宽度缩小, 最终导致 $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 成为直接带隙材料. 而 $\text{Si}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}/\text{Si}$ 和 $\text{Si}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}/\text{Si}$ 虽然在 Γ 点下移的幅度比 Z 点大 (0.01 和 0.05 eV), Γ 点的能带分裂也比 Z 点明显, 但是 Si 中 Z 点导带底比 Γ 点低 0.08 eV. 最终 $\text{Si}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}/\text{Si}$ 和 $\text{Si}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}/\text{Si}$ Γ 点导带底与 Z 点导带底很接近, 但是导带的最小值在 Z 点.

SiSn/Si 超晶格最小带隙值见表 1. 众所周知, LDA 计算得到的带隙值与实验值之间存在很大的误差. 大量研究表明, 对于 sp 系统的半导体材料, GWA 方法计算得到的带隙值与实验值之间的误差在 0.1 eV 内. 由于直接带隙半导体材料 $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 有光电器件方面的潜在应用, 所以准确预测直接带隙超晶格 $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 的带隙值对进一步研究该材料有重要的意义.

图 3 为 $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 的准粒子能带图. 与 $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 的 LDA 能带图 (见图 2(b)) 相比, 准粒子能带色散关系与 LDA 的整体相似. 准粒子的计算结果表明, $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 是直接带隙半导体, 最小带隙值在 Γ 点. 但是, 其带隙值明显变大, E_g^{LDA}

$= 0.35 \text{ eV}$, $E_g^{\text{qp}} = 0.96 \text{ eV}$. 这种变化是由于 GWA 中用自能算符 Σ 取代了 LDA 中的交换关联势 $V_{\text{xc}}^{\text{LDA}}$ 引起的.

5. 结 论

综上所述, 我们利用原子芯态效应、电负性差效应对称性效应, 设计了 SiSn/Si 超晶格材料. 由 Si 材料的结构和对称性效应设计了 SiSn/Si 超晶格材料的基本几何结构, 然后通过原子芯态效应和电负性差效应选择适当的元素替代 Si, 本文我们选择 Sn. 在 Si 的 (001) 面上用 Sn 替代部分 Si 原子, 得到一个四角结构的原胞. 第一性原理和准粒子计算发现, $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 是直接带隙超晶格, 其最小带隙在 Γ 点. LDA 的带隙值为 0.35 eV , 准粒子带隙值为 0.96 eV , 这为 Si 基材料生长实验提供了方向和理论依据.

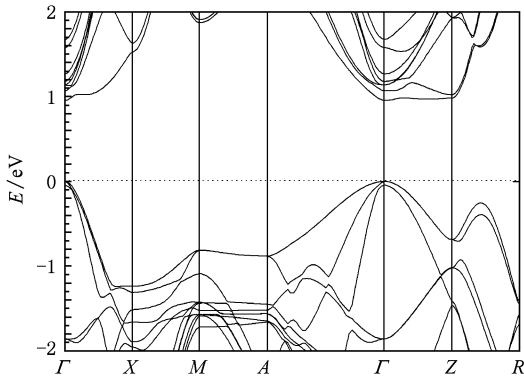


图3 $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ 的准粒子能带图

- [1] Gnutzman U, Clavsecker K 1974 *Appl. Phys.* **3** 9
- [2] Schäfer H C, Rösen B, Moritz H, Rizzi A, Lengeler B, Lüth H, Gerthsen D 1993 *Appl. Phys. Lett.* **62** 2271
- [3] Canham L T 1990 *Appl. Phys. Lett.* **57** 1045
- [4] Cullis A G, Canham L T 1991 *Nature* **353** 335
- [5] Hirschman K D, Tsybeskov L, Duttagupta S P, Fauchet P M 1996 *Nature* **384** 338
- [6] Walson W L, Szajowski P F, Brus L E 1993 *Science* **263** 1242
- [7] Pavese L, Dal Negro L, Mazzoleni C, Franzo G, Priolo F 2000 *Nature* **408** 440
- [8] Huang M C, Zhang J L, Li H P, Zhu Z Z 2002 *Chin. J. Lumin.* **23** 419 (in Chinese) [黄美纯、张建立、李惠萍、朱梓忠 2002 发光学报 **23** 419]
- [9] Huang M C 2003 *Theoretical Physics and a Number of Interdisciplinary Frontier Major Research Projects and Academic Exchanges Collection* Beijing, China, January 15—17, 2003 pp197—208 (in Chinese) [黄美纯 2003 “理论物理学及其交叉科学若干前沿问题”重大研究计划 2002 年度学术交流会, 北京 2003 年 1 月 15 日—17 日, 第 197—208 页]
- [10] Huang M C, Zhang J L, Li H P, Zhu Z Z 2002 *Int. J. Mod. Phys. B* **16** 4279
- [11] Hedin L 1965 *Phys. Rev. A* **139** 796
- [12] Hybertsen M S, Louie S G 1986 *Phys. Rev. B* **34** 5390
- [13] Shishkin M, Kresse G 2007 *Phys. Rev. B* **75** 235102
- [14] Fleszar A, Hanke W 2005 *Phys. Rev. B* **71** 045207
- [15] Huang M C 2005 *Journal of Xiamen University (Natural Science)* **44** 874 (in Chinese) [黄美纯 2005 厦门大学学报(自然科学版) **44** 874]
- [16] Hedin L, Lundqvist S 1969 *Solid State Physics* (Vol. 23) (New York: Academic)
- [17] Sole R D, Reining L, Godby R W 1994 *Phys. Rev. B* **49** 8024
- [18] Hybertsen M S, Louie S G 1985 *Phys. Rev. Lett.* **55** 1418
- [19] Troullier N, Martins J L 1993 *Phys. Rev. B* **43** 1993
- [20] Ceperley D M, Alder B J 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 566
- [21] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188

Band structure of Si-based superlattices $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}$

Lü Tie-Yu[†] Chen Jie Huang Mei-Chun

(*Department of Physics, Xiamen University, Xiamen 361005, China*)

(Received 23 October 2009)

Abstract

The prospects of Si-based optical emitting materials are optimistic because the materials are compatible with silicon microelectronics technology. Therefore, many experimental and theoretical studies are directed to the design of direct band-gap Si-based materials. Based on the core state effect, the electronegativity differences effect of component atoms and the symmetry effect, Si-based superlattices $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}$ were designed. We found that $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ is a direct band-gap material. In the density functional theory frame, the results of plane pesupotential method show that $\text{Si}_{0.875}\text{Sn}_{0.125}/\text{Si}$ is a direct band-gap superlattice with minimum band-gap at Γ point. We predict that the band gap of the material is 0.96 eV with the help of GW approximation method.

Keywords: density functional theory, GW approximation, Si-based superlattice

PACC: 6185, 7115H

[†] E-mail: mailoliver@126.com