

基于锡组分和双轴张应力调控的临界带隙应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 能带特性与迁移率计算

底琳佳 戴显英 宋建军 苗东铭 赵天龙 吴淑静 郝跃

Calculations of energy band structure and mobility in critical bandgap strained $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ based on Sn component and biaxial tensile stress modulation

Di Lin-Jia Dai Xian-Ying Song Jian-Jun Miao Dong-Ming Zhao Tian-Long Wu Shu-Jing Hao Yue

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 027101 (2018) DOI: 10.7498/aps.20171969

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.20171969>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I2>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[Ti 掺杂 \$\text{NbSe}_2\$ 电子结构的第一性原理研究](#)

First-principles study on the electronic structure of Ti-doped NbSe_2

物理学报.2015, 64(20): 207101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.207101>

[Al, Fe, Mg 掺杂 \$\text{Li}_2\text{MnSiO}_4\$ 的电子结构和电化学性能的第一性原理研究](#)

First-principles study of electronic structures and electrochemical properties for Al, Fe and Mg doped $\text{Li}_2\text{MnSiO}_4$

物理学报.2015, 64(8): 087101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.087101>

[\$\(\text{TiO}_2\)_{12}\$ 量子环及过渡金属化合物掺杂对其电子性质影响的密度泛函理论研究](#)

Density functional theory studies of $(\text{TiO}_2)_{12}$ quantum ring and its electronic properties when doped with transition metal compounds

物理学报.2015, 64(7): 077102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.077102>

[Ge 掺杂对 InI 导电性能影响的第一性原理研究](#)

First-principles study on the effect of Ge-doping on the conductivity of InI

物理学报.2014, 63(23): 237101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.237101>

[Ga 掺杂对纤锌矿 \$\text{TM}_{0.125}\text{Zn}_{0.875}\text{O}\$ \(TM=Be, Mg\) 电子结构和光学能隙的影响](#)

Effect on the electronic structures and optical bandgaps of Ga-doped wurtzite $\text{TM}_{0.125}\text{Zn}_{0.875}\text{O}$ (TM=Be, Mg)

物理学报.2014, 63(8): 087101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.087101>

基于锡组分和双轴张应力调控的临界带隙应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 能带特性与迁移率计算*

底琳佳 戴显英[†] 宋建军[‡] 苗东铭^{††} 赵天龙 吴淑静 郝跃

(西安电子科技大学微电子学院, 宽带隙半导体技术国家重点学科实验室, 西安 710071)

(2017年9月5日收到; 2017年10月20日收到修改稿)

能带工程通过改变材料的能带结构可以显著提升其电学和光学性质, 已广泛应用于半导体材料的改性研究. 双轴张应力和 Sn 组分共同作用下的 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金, 不仅可以解决直接带隙转变所需高 Sn 组分带来的工艺难题, 而且载流子迁移率会显著提升, 在单片光电集成领域有很好的应用前景. 根据形势理论, 分析了 (001) 面双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 的带隙转变条件, 并给出了在带隙转变临界点 Sn 组分和双轴张应力的关系; 采用 $8\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法, 得到了临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 在布里渊区中心点附近的能带结构, 进而计算得到电子与空穴有效质量; 基于载流子散射模型, 计算了电子与空穴迁移率. 计算结果表明: 较低 Sn 组分和双轴张应力的组合即可得到直接带隙 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金, 且直接带隙宽度随着应力的增大而减小; 临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 具有极高的电子迁移率, 空穴迁移率在较小应力作用下即可显著提升. 考虑工艺实现难度和材料性能两个方面, 可以选择 4% Sn 组分与 1.2 GPa 双轴张应力或 3% Sn 组分与 1.5 GPa 双轴张应力的组合用于高速器件和光电器件的设计.

关键词: 双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法, 能带结构, 迁移率

PACS: 71.15.-m, 71.22.+i, 71.70.Fk, 72.10.-d

DOI: 10.7498/aps.67.20171969

1 引言

光电集成技术用 CMOS 工艺实现光子器件的集成制备, 具有高集成度、高速率、低功耗的优势. 目前, 已有研究表明, 锗 (Ge) 的锡 (Sn) 合金化可以实现能带结构的调控, 在一定 Sn 组分条件下, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金的直接带隙宽度会小于间接带隙宽度, 实现间接带隙到直接带隙的转变, 使 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金在光电探测、光电导器件、发光二极管、激光器 等光电集成领域有更广泛的应用^[1-5].

此外, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金在金属-氧化物-半导体场效应晶体管 (MOSFET) 器件中也表现出高迁移率特性^[6-8]. 然而, Ge 中 Sn 的固溶度限制以及 Ge 和 Sn 的晶格失配, 使 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金中 Sn 组分难

以任意增大, 并为 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金的制备带来了挑战^[9,10]. 应变技术同样可以调控能带结构使 Ge 由间接带隙转变为直接带隙, 其中以 (001) 面双轴张应变所需的应力最小, 并且载流子迁移率, 特别是空穴迁移率会显著增大^[11-13]. 因此, 考虑合金化和双轴张应力共同作用下的 Ge 材料, 不仅可以有效减小直接带隙转变所需的 Sn 组分和应力, 也可进一步提升 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金的光学、电学性质.

对双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金能带结构的研究是探索其光学、电学性质的理论基础. 本文根据形势理论分析了 (001) 面双轴张应力作用下 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金的带隙转变条件, 给出了带隙转变临界状态下 Sn 组分和双轴张应力的关系; 采用 $8\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法得到了临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 在布里渊区中心点附近的能带结构, 根据得到的能

* 国家部委重点基金 (批准号: 9140A08020115DZ01024) 和中国博士后科学基金 (批准号: 2017M613061) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: xydai@xidian.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: jianjun_79_81@xidian.edu.cn

^{††} 通信作者. E-mail: miaodongmingi@126.com

带图, 由二阶函数拟合的方法得到了电子、空穴有效质量; 基于载流子散射模型计算电子和空穴迁移率. 相关结论可为高性能应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 电子器件和光电子器件的设计提供参考.

2 计算方法

2.1 形变势模型

在 (001) 面双轴张应力作用下, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金的带隙类型和禁带宽度会随着 Sn 组分和应力而变化, 其导带能谷能量可由形变势理论确定^[11], 导带 Δ 能谷因在 (001) 面双轴张应力作用下不会成为带边能级而未被考虑,

$$E_g^\Gamma = E_0^\Gamma + a_{\Gamma_2^-} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (1)$$

$$E_g^L = E_0^L + \left(\Xi_d^L + \frac{1}{3} \Xi_u^L - a_{\Gamma_5^+} \right) \times (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (2)$$

式中 E_0^Γ 和 E_0^L 分别为弛豫状态下 Γ 和 L 能谷能量, $a_{\Gamma_2^-}$ 和 $\Xi_d^L + \frac{1}{3} \Xi_u^L - a_{\Gamma_5^+}$ 为对应能谷的形变势参数, ε_{ij} ($i, j = x, y, z$) 为应变张量. 根据弹性理论, (001) 面双轴应变张量可表示为

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{c_{11}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2} \sigma, \quad (3)$$

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{2c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2} \sigma, \quad (4)$$

式中 c_{11} , c_{12} 为弹性劲度系数; σ 为双轴应力, 当 $\sigma > 0$ 时为双轴张应力, $\sigma < 0$ 时为双轴压应力.

为了能够准确预测 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金能谷能量随 Sn 组分的变化情况, 还需要用弯曲系数 b 对其进行

二次修正^[14],

$$E_{\text{GeSn}}(x) = E_{\text{Sn}}x + E_{\text{Ge}}(1-x) + bx(1-x), \quad (5)$$

式中 x 为 Sn 组分含量, E_{Ge} 和 E_{Sn} 分别为 Ge 和 Sn 某一能谷能量, 对于 Γ , L 能谷, 相应的弯曲系数分别为 -2.15 和 -0.91 eV. 其他参数的取值以线性插值的形式给出, 对于 Ge 和 Sn, 相应参数取值列于表 1 中^[15].

表 1 形变势模型所需参数取值

Table 1. The parameter values of deformation potential model.

Parameter	Ge	Sn
c_{11}/GPa	128.7	69.0
c_{12}/GPa	47.7	29.3
E_0^Γ/eV	0.898	-0.410
E_0^L/eV	0.76	0.12
$a_{\Gamma_2^-}/\text{eV}$	-9.78	-7.65
$\Xi_d^L + \frac{1}{3} \Xi_u^L - a_{\Gamma_5^+}/\text{eV}$	-3.5	-1.0

2.2 $8\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法

应力作用下的金刚石型半导体, 其哈密顿算符可简单表示为

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_k + \mathbf{H}_\varepsilon, \quad (6)$$

式中 $\mathbf{H}_k$ 为 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 哈密顿量, $\mathbf{H}_\varepsilon$ 为应力引起的应变哈密顿量. 对于直接带隙的 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金, 由于导带、价带之间存在明显的耦合作用, 为了得到准确的能带结构, 由微扰理论和空间群对称性, 可将 $\mathbf{H}_k$ 转换为一个 8 阶 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 矩阵, 用来建立包含自旋轨道耦合在内的导带和价带能量色散关系, 矩阵形式为^[16,17]

$$\mathbf{H}_k = \begin{bmatrix} A_c & 0 & V^* & 0 & \sqrt{3}V & -\sqrt{2}U & -U & \sqrt{2}V^* \\ 0 & A_c & -\sqrt{2}U & -\sqrt{3}V^* & 0 & -V & \sqrt{2}V & U \\ V & -\sqrt{2}U & -P_v + Q_v & -S^* & R & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}Q_v \\ 0 & -\sqrt{3}V & -S & -P_v - Q_v & 0 & R & -\sqrt{2}R & \frac{1}{\sqrt{2}}S \\ \sqrt{3}V^* & 0 & R^* & 0 & -P_v - Q_v & S^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}R^* \\ -\sqrt{2}U & -V^* & 0 & R^* & S & -P_v + Q_v & \sqrt{2}Q_v & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* \\ -U & \sqrt{2}V^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & -\sqrt{2}R^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}Q_v & -P_v - \Delta_v & 0 \\ \sqrt{2}V & U & -\sqrt{2}Q_v & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}R & \sqrt{\frac{3}{2}}S & 0 & -P_v - \Delta_v \end{bmatrix}, \quad (7)$$

其中

$$A_c = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (7a)$$

$$P_v = -E_v + \gamma_1 \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (7b)$$

$$Q_v = \gamma_2 \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \quad (7c)$$

$$R = -\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} [\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3 k_x k_y], \quad (7d)$$

$$S = 2\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 k_z (k_x - ik_y), \quad (7e)$$

$$U = \frac{1}{\sqrt{3}} P_0 k_z, \quad (7f)$$

$$V = \frac{1}{\sqrt{6}} P_0 (k_x - ik_y), \quad (7g)$$

式中 Δ_v 为价带自旋轨道分裂能; E_c , E_v 分别为未应变的导带和价带能量; $\hbar$ 为约化普朗克常数; m_0 为电子有效质量; γ_1 , γ_2 , γ_3 为修正的 Luttinger 参数, 它们与 $6\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法中 Luttinger 参数 γ_1^L , γ_2^L , γ_3^L 的关系为 $\gamma_1 = \gamma_1^L - \frac{E_p}{3E_g}$, $\gamma_2 = \gamma_2^L - \frac{E_p}{6E_g}$, $\gamma_3 = \gamma_3^L - \frac{E_p}{6E_g}$, 其中 E_g 为带隙宽度, E_p 为描述导带与价带耦合作用的 Kane 能量, 与动量矩阵参数 P_0 有关, $E_p = 2m_0 P_0^2 / \hbar^2$.

(6) 式中第二项 $\mathbf{H}_\varepsilon$ 具有与 (7) 式类似的形式^[16,17],

$$\mathbf{H}_\varepsilon = \begin{bmatrix} a_{\Gamma_2^-} \varepsilon & 0 & -v^* & 0 & -\sqrt{3}v & \sqrt{2}u & u & -\sqrt{2}v^* \\ 0 & a_{\Gamma_2^-} \varepsilon & \sqrt{2}u & \sqrt{3}v^* & 0 & v & -\sqrt{2}v & -u \\ -v & \sqrt{2}u & -p_v + q_v & -s^* & r & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}s & -\sqrt{2}q_v \\ 0 & \sqrt{3}v & -s & -p_v - q_v & 0 & r & -\sqrt{2}r & \frac{1}{\sqrt{2}}s \\ -\sqrt{3}v^* & 0 & r^* & 0 & -p_v - q_v & s^* & \frac{1}{\sqrt{2}}s^* & \sqrt{2}r^* \\ \sqrt{2}u & v^* & 0 & r^* & s & -p_v + q_v & \sqrt{2}q_v & \sqrt{\frac{3}{2}}s^* \\ u & -\sqrt{2}v^* & \sqrt{\frac{3}{2}}s^* & -\sqrt{2}r^* & \frac{1}{\sqrt{2}}s & \sqrt{2}q_v & -a_v \varepsilon & 0 \\ -\sqrt{2}v & -u & -\sqrt{2}q_v & \frac{1}{\sqrt{2}}s^* & \sqrt{2}r & \sqrt{\frac{3}{2}}s & 0 & -a_v \varepsilon \end{bmatrix}, \quad (8)$$

其中

$$p_v = a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (8a)$$

$$q_v = b_v \left[\varepsilon_{zz} - \frac{1}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \right], \quad (8b)$$

$$r = \frac{\sqrt{3}}{2} b_v (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - i d_v \varepsilon_{xy}, \quad (8c)$$

$$s = -d_v (\varepsilon_{xz} - i \varepsilon_{yz}), \quad (8d)$$

$$u = \frac{1}{\sqrt{3}} P_0 \sum_j \varepsilon_{zj} k_j, \quad (8e)$$

$$v = \frac{1}{\sqrt{6}} P_0 \sum_j (\varepsilon_{xj} - i \varepsilon_{yj}) k_j, \quad (8f)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}, \quad (8g)$$

式中 a_v , b_v , d_v 为价带形变势参数, $j = x, y, z$.

根据 (6)–(8) 式, 通过对角化两个哈密顿矩阵的和可以得到应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 在布里渊区中心 Γ 点

附近的能带结构. 表 2 列出了计算所需参数的具体数值^[18].

表 2 应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 能带结构计算所需参数取值
Table 2. The parameter values of energy band structure calculation for strained $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$.

Parameter	Ge	Sn
Δ_v/eV	0.296	0.800
γ_1^L	13.38	-15.00
γ_2^L	4.24	-11.45
γ_3^L	5.69	-8.55
E_p/eV	26.3	24.0
a_v/eV	1.24	1.55
b_v/eV	-2.9	-2.7
d_v/eV	-4.8	-4.1

2.3 载流子散射模型

载流子从状态 $\mathbf{k}$ 散射到状态 $\mathbf{k}'$ 的跃迁率 $P_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ 可由费米黄金法则给出 [19]:

$$P_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}|^2 \delta(\hbar\omega'_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{k}} \mp \hbar\omega_q), \quad (9)$$

式中 $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$ 与 $\hbar\omega'_{\mathbf{k}}$ 分别为载流子初态和终态能量, $\hbar\omega_q$ 为引起散射的量子能量, $\mp$ 符号中“+”和“-”分别表示吸收或发射一个量子的能量, δ 函数则表明在散射过程中能量守恒. $M_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ 为散射矩阵元, 其形式为

$$M_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \int_{\Omega} \varphi_{\mathbf{k}'}^* V(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{k}} d\mathbf{r}, \quad (10)$$

式中 Ω 为晶格体积, $V(\mathbf{r})$ 为散射势, $\varphi_{\mathbf{k}}$ 为波函数.

任何改变晶格周期性势场的附加势都会引起载流子的散射 [20]. 其中一类散射势, 如晶格振动引起的各种散射势, 表现为随时间 t 简谐变化的波的形式:

$$V(\mathbf{r}, t) = A_+(\mathbf{q}) \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega_q t)] + A_-(\mathbf{q}) \exp[-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega_q t)], \quad (11)$$

式中 $\mathbf{r}$, $\mathbf{q}$ 分别为位矢和格波波矢, ω_q 为振动角频率, $A_+(\mathbf{q})$ 与 $A_-(\mathbf{q})$ 互为复共轭. 另一类散射势, 如电离杂质的库仑势、混合晶体的无序势等, 不随时间变化, 傅里叶展开后具有如下形式:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} A(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \quad (12)$$

式中 $A(\mathbf{q}) = \frac{1}{\Omega} \int V(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}$ (此处假设散射终态的占有概率为零) [19]. 将散射势 (不含时间的部分) 和布洛赫波函数 $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 代入 (10) 式可得

$$M_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{q}} A(\mathbf{q}) I_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}' + \mathbf{k}) = A(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) I_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}, \quad (13)$$

式中 $I_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \int_{\Omega} u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ 为重叠积分, 对于抛物线能带, $I_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \approx 1$. 根据求得的散射矩阵元, 可计算出跃迁率 $P_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$. 由 $P_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ 对所有终态求和, 可得散射概率为

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} \int |A(\mathbf{k}' - \mathbf{k})|^2 I_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^2 \frac{V}{(2\pi)^3} \times \delta(\hbar\omega'_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{k}} \mp \hbar\omega_q) d\mathbf{k}'. \quad (14)$$

应变对载流子迁移率的影响体现在对电导有效质量和动量弛豫时间的调控中, 但并没有改变载

流子的散射机理. 因此, 在应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金中, 导带 Γ 能谷存在离化杂质散射、声学声子散射以及合金无序散射, 价带存在离化杂质散射、声学声子散射、非极性光学声子散射以及合金无序散射 [21].

根据各散射机理的散射势, 由 (14) 式可以分别建立离化杂质散射、声学声子散射、非极性光学声子散射以及合金无序散射的物理模型 (分别用 P_{II} , P_{ac} , P_{op} , P_{alloy} 表示) [19,22,23]:

$$P_{\text{II}} = \frac{N_i e^4}{16\pi(2m^*)^{1/2}(\varepsilon_0 \varepsilon_r)^2 E^{3/2}} \times \ln\left(\frac{12m^* k_B^2 T^2 \varepsilon_0 \varepsilon_r}{e^2 \hbar^2 N_i}\right), \quad (15)$$

$$P_{\text{ac}} = \frac{m^{*3/2} \Xi^2 k_B T (2E)^{1/2}}{\pi \hbar^4 c_l}, \quad (16)$$

$$P_{\text{op}} = \frac{D_0^2 m^{*3/2}}{2^{1/2} \pi \hbar^3 \rho \omega_0} \left(n_{\text{op}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \times (E \pm \hbar\omega_0)^{1/2}, \quad (17)$$

$$P_{\text{alloy}} = \frac{2^{1/2} m^{*3/2} x(1-x) \Delta E^2 (2\pi)^4 E^{1/2}}{\pi \hbar^4 N}, \quad (18)$$

式中 N_i 为离化杂质浓度, 在计算中假设其为 10^{17} cm^{-3} ; m^* 为态密度有效质量, e 为自由电子的电荷量, ε_0 为真空介电常数, ε_r 为相对介电常数, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为温度, Ξ 为声学声子形变势, D_0 为非极性光学形变势, $c_l = \rho v_l^2$ 为纵向弹性常数, $n_{\text{op}} = \{\exp[\hbar\omega_0/(k_B T)] - 1\}^{-1}$ 为平均光学声子数, ΔE 为 Ge 与 Sn 的带隙差, N 为单位体积内的原子数. 由于 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金中 Sn 组分含量较小, 因此 Ξ 和 D_0 近似采用 Ge 的形变势值 [24]. 对于导带 Γ 能谷, Ξ 为 7.5 eV; 对于价带, Ξ 和 D_0 分别为 3.5 eV 和 $2.4 \times 10^8 \text{ eV/cm}$. 其他参数的具体含义和数值见表 3.

表 3 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 载流子散射概率计算所需参数取值
Table 3. The parameter values for $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ carrier scattering rate calculation.

Parameter	Ge	Sn
纵向声子声速 $v_l/10^5 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$	5.31 [25]	5.55 [26]
相对介电常数 ε_r	16.2 [15]	24 [15]
长波光学声子能量 $\hbar\omega_0/\text{meV}$	37.04 [25]	28.5 [27]
材料密度 $\rho/\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	5.32 [25]	5.771 [28]

根据电子和空穴的总散射概率 P_{total} 以及

$$\mu = \frac{e}{m_c} \cdot \frac{1}{P_{\text{total}}} \bigg|_{E=1.5k_B T, T=300 \text{ K}}, \quad (19)$$

可计算得到应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 在 Γ 点处的电子、空穴迁移率, 式中 m_c 为电导有效质量.

3 结果与讨论

根据形势理论, 通过计算导带 Γ 与 L 能谷之间的能量差可以判断双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 的带隙类型. 即当 $E_g^\Gamma - E_g^L > 0$ 时, 为间接带隙; 反之, 为直接带隙. 图 1 所示为 (001) 面双轴张应力作用下, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 与 L 能谷能量差随应力和 Sn 组分的变化情况. 由图可见, 随着双轴张应力从 0 增加至 2.45 GPa, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 带隙特性转变所对应的 Sn 组分含量将由 7.6% 变为 0, 计算结果与文献 [11,29] 一致. 若单独考虑合金化或双轴张应力作用, 带隙类型转变需要较大的 Sn 组分或应力, 这会给工艺实现带来诸多难题, 而在合金化与双轴张应力共同作用的情况下, 低 Sn 组分和应力的组合便可得到直接带隙 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$. 在带隙类型转变的临界状态下, 由 $E_g^\Gamma - E_g^L = 0$ 可以得到 Sn 组分和双轴张应力近似呈线性关系:

$$x = -0.031\sigma + 0.076, \quad (20)$$

式中 $\sigma > 0$, 单位为 GPa. 基于这一临界条件, 计算直接带隙 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ (称为临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$) 的电学性质, 提出具有高载流子迁移率的 Sn 组分与双轴张应力的组合.

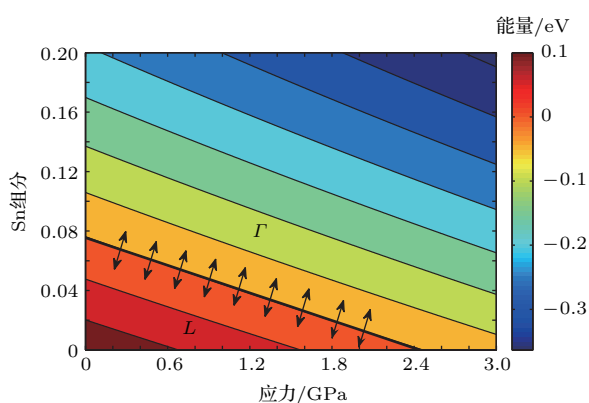


图 1 (001) 面双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 与 L 能谷能量差 $E_g^\Gamma - E_g^L$ 等值线图 (能量单位为 eV)

Fig. 1. Contour plot of $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ bandgap difference between E_g^Γ and E_g^L for biaxial tensile strain on the (001) plane. All energies are in eV.

图 2 所示为 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 点处的各能级偏移和禁带宽度随应力的变化情况, 图中 $E_{c\Gamma}$, E_{V1} , E_{V2} , E_{V3} 分别表示

导带带边能级、价带带边能级、价带亚带边能级和自旋分裂能级. 由图 2 可见, 由于双轴张应力的引入, 价带带边和亚带边能级发生分裂, 且分裂能随着应力的增大而增大, 禁带宽度则随着应力的增大而减小. 价带顶能级的分裂将改变带边和亚带边能级间的耦合作用, 影响能带结构及有效质量. 此外, 空穴也会随着价带顶的分裂而重新排布, 随着分裂能的不断增大, 空穴越来越集中于价带带边能级, 这有利于减小态密度有效质量和散射概率, 提升空穴迁移率.

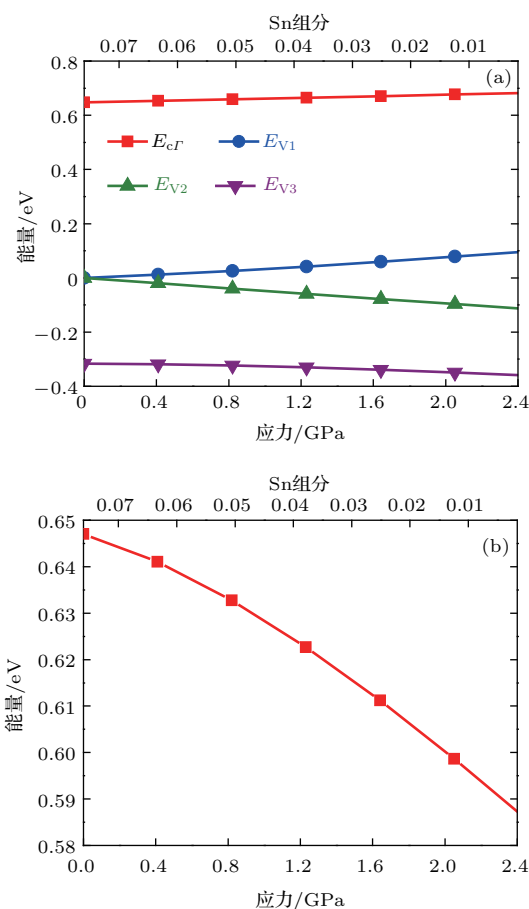


图 2 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 点处各能级偏移和禁带宽度 (a) 能级偏移; (b) 禁带宽度

Fig. 2. Energy level shift and bandgap of critical bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ at Γ for biaxial tensile strain on the (001) plane: (a) Energy level shift; (b) bandgap width.

为了探究双轴张应力对能带结构的影响, 以 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{0.96}\text{Sn}_{0.04}$ 为例 (应力约为 1.16 GPa), 给出其沿不同晶向的能带结构, 如图 3 所示. 从图 3 可以清楚地看到, 双轴张应力引起的 Γ 点处价带简并的消除和晶体对称性的改变.

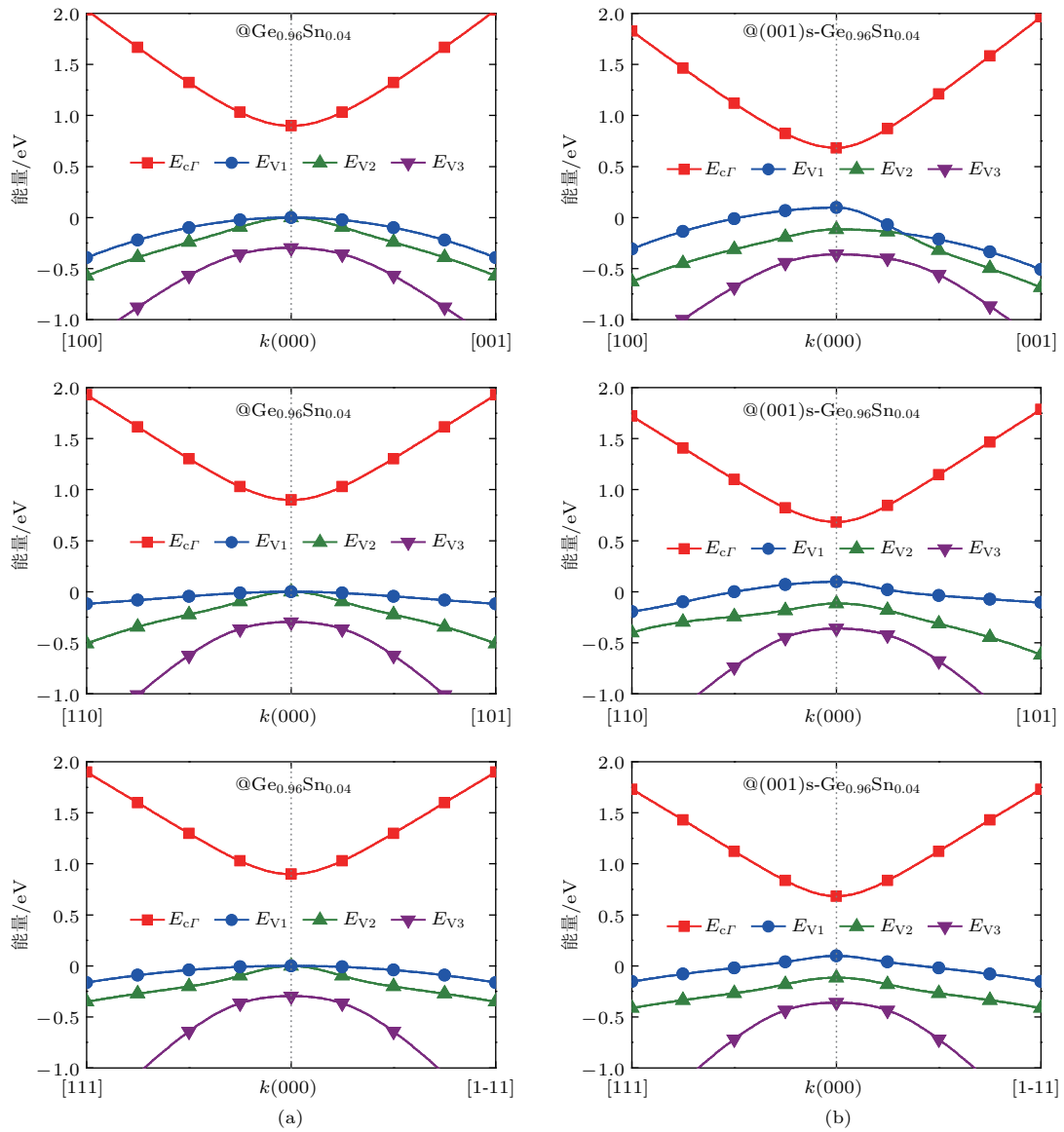

 图3 $\text{Ge}_{0.096}\text{Sn}_{0.04}$ 沿典型晶向的能带结构 (a) 未应变情况; (b) (001) 面双轴张应变情况

 Fig. 3. Energy band structure of critical bandgap $\text{Ge}_{0.096}\text{Sn}_{0.04}$ along typical crystal orientations: (a) Unstrained $\text{Ge}_{0.096}\text{Sn}_{0.04}$; (b) biaxial tensile strained $\text{Ge}_{0.096}\text{Sn}_{0.04}$ on the (001) plane.

图4所示为(001)面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 导带 Γ 能谷、价带带边能级和价带亚带边能级的40 meV三维等能图, 其中Sn组分和双轴张应力的组合分别为7.6%-0 GPa, 5.0%-0.84 GPa, 4.0%-1.16 GPa, 3.0%-1.48 GPa. 等能面的曲率可以直观反映出有效质量的各向异性, 特别是在(001)面双轴张应力作用下, 各向异性更加显著. 因此, 在计算电子与空穴的输运特性时, 为了获得准确的结果, 必须考虑能带的各向异性.

图5所示为(001)面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 能谷沿不同晶向的电子有效质量以

及 Γ 能谷电子态密度有效质量和电导有效质量随应力的变化情况. 由图5(a)可以看出, 未受应力作用时, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 能谷是各向同性的, 而在双轴张应力作用下, 呈现明显的各向异性. 这一点也可从等能图(图4(a))中得到印证: Γ 能谷由原来的球形等能面转变为椭球等能面. 因此, 可采用类似于 Δ 和 L 能谷的计算方法来计算 Γ 能谷电子态密度有效质量和电导有效质量, 如图5(b)所示. 由图5(b)可见, Γ 能谷电子态密度有效质量和电导有效质量随应力的增大而减小, 这有利于增强电子输运特性.

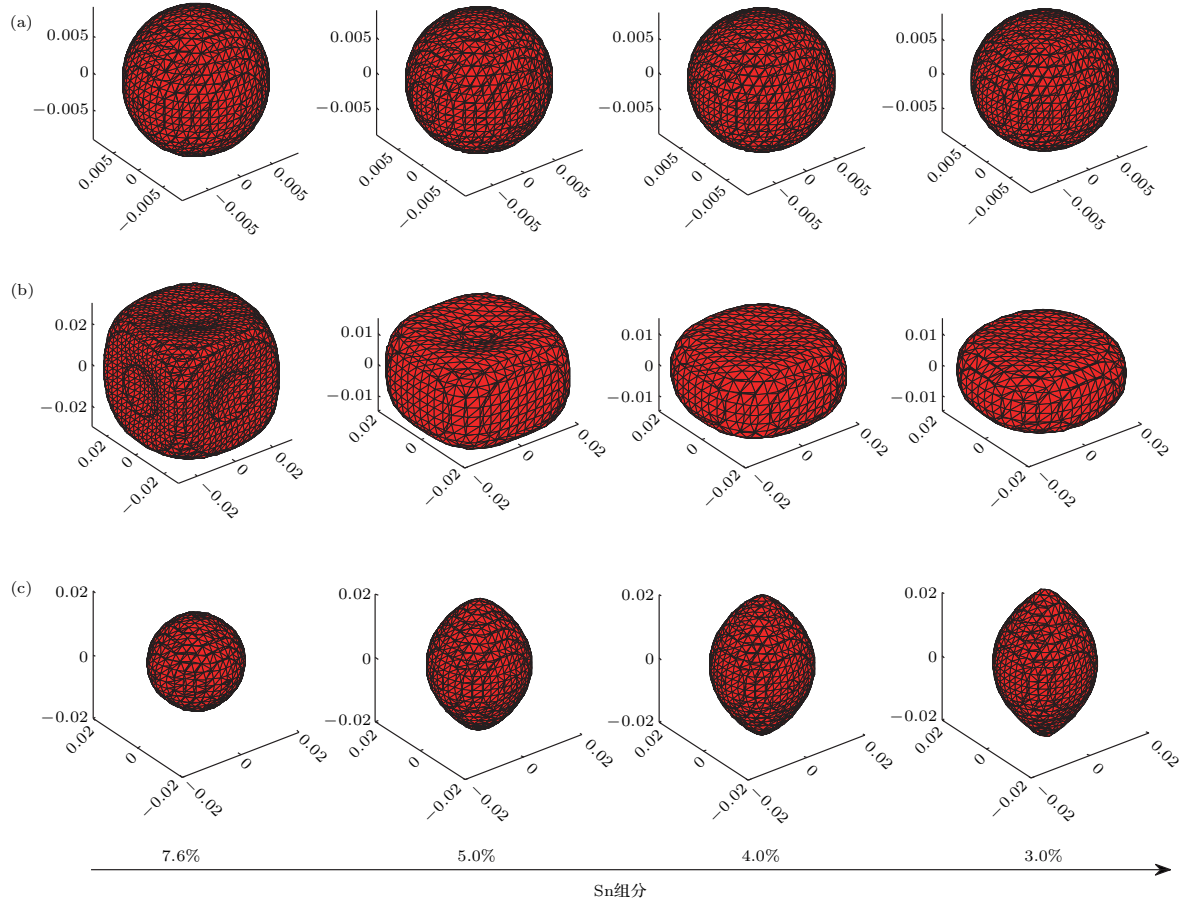


图4 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ (a) 导带 Γ 能谷, (b) 价带带边能级和 (c) 价带亚带边能级 40 meV 三维等能图
Fig. 4. Constant energy surface of critical bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ at 40 meV for biaxial tensile strain on the (001) plane: (a) Γ valley; (b) the first valence band edge level; (c) the second valence band edge level.

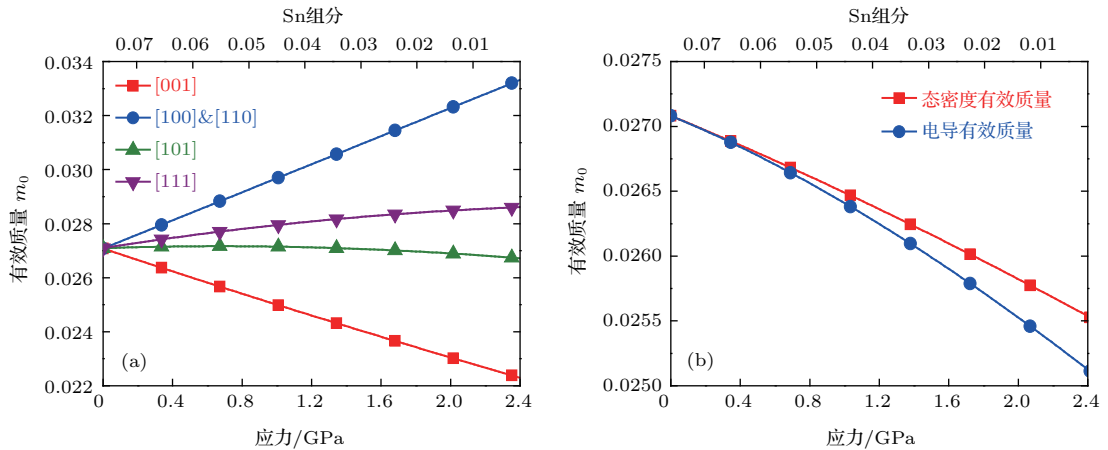


图5 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 能谷电子有效质量 (a) 沿典型晶向的电子有效质量; (b) 电子态密度有效质量和电导有效质量
Fig. 5. Γ valley electron effective mass of critical bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ for biaxial tensile strain on the (001) plane: (a) Electron effective mass along typical crystal orientations; (b) electron density of states and conductance effective masses.

图6所示为(001)面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 点处不同晶向的价带带边能级和亚

带边能级空穴有效质量随应力的变化情况。同样, 双轴张应力也增强了空穴有效质量的各向异性。对

于带边能级, 沿不同晶向的空穴有效质量均显著减小并趋于平缓, 其中以沿 [001] 晶向有效质量最低. 对于亚带边能级, 除 [001] 晶向空穴有效质量在应力作用下明显增大外, 其他晶向空穴有效质量先增大后减小, 但总体变化并不明显. 空穴有效质量的显著减小归功于应力对晶格对称性的破坏, 价带带边能级和亚带边能级的分裂改变了它们之间的耦合作用, 使得能带发生翘曲, 进而影响有效质量.

建立价带顶空穴态密度有效质量和电导有效质量, 需要价带带边能级和亚带边能级的各向同性有效质量. 因此, 采用球形近似的方法^[30], 得到了 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 点处价带带边能级和亚带边能级的各向同性近似有效质

量, 如图 7(a) 所示. 由图 7(a) 可见, 在双轴应力的作用下, 价带带边能级各向同性近似有效质量显著减小, 而亚带边能级各向同性近似有效质量略有增大. 此外, 当双轴张应力增大到一定程度时, 带边能级的各向同性近似有效质量已经小于亚带边能级, 与弛豫状态相比, 传统的重空穴、轻空穴的概念已失去意义. 图 7(b) 所示为 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 价带顶空穴态密度有效质量和电导有效质量, 两种有效质量均随应力增大而显著减小, 最终趋于平缓. 可以看出, 略大于 1 GPa 的双轴张应力足以得到较低的空穴态密度有效质量和电导有效质量, 从而增强空穴输运特性.

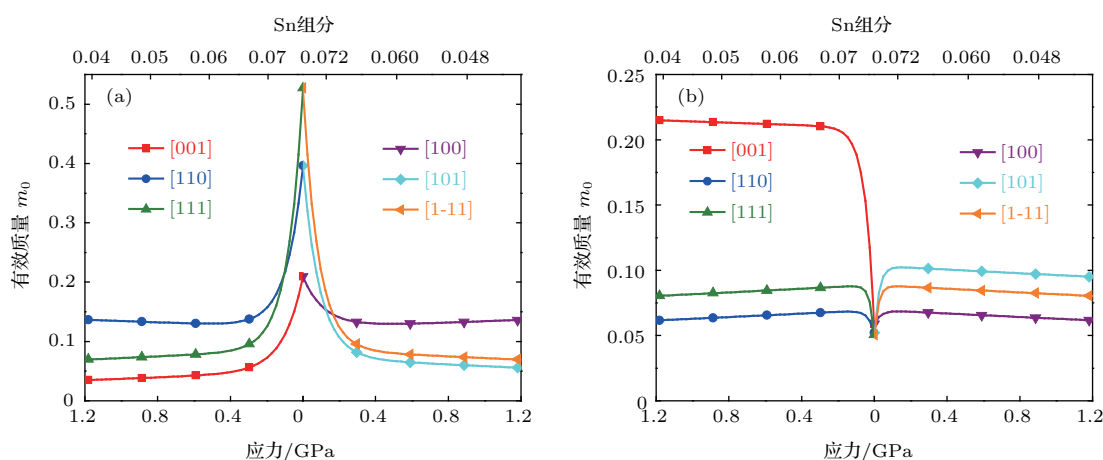


图 6 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 点处价带各向异性空穴有效质量 (a) 价带带边能级空穴有效质量; (b) 价带亚带边能级空穴有效质量

Fig. 6. Hole anisotropic effective mass of critical bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ at Γ for biaxial tensile strain on the (001) plane: (a) Hole effective mass of the first valence band edge level; (b) hole effective mass of the second valence band edge level.

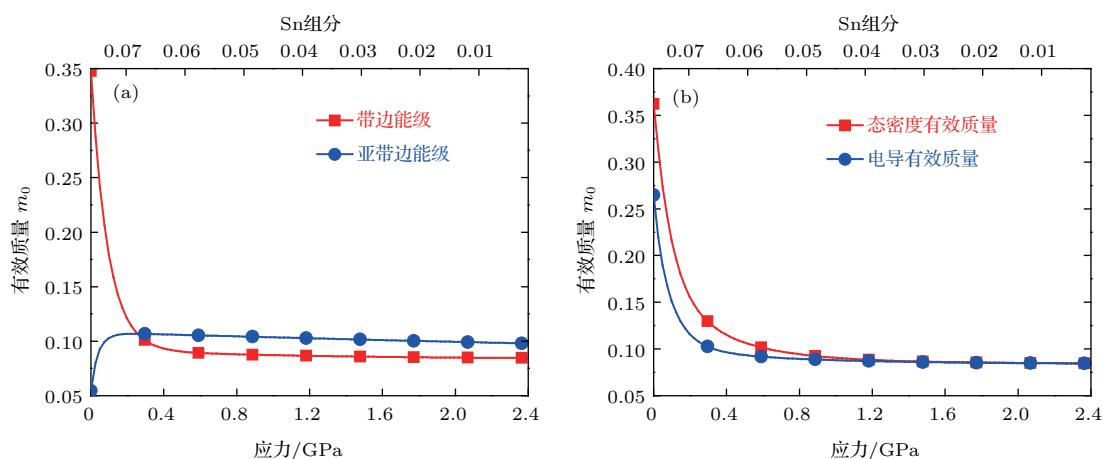


图 7 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 点处空穴各向同性近似有效质量、态密度有效质量和电导有效质量 (a) 价带带边和亚带边能级各向同性近似有效质量; (b) 空穴态密度有效质量和电导有效质量

Fig. 7. Hole isotropic approximate effective mass, density of states effective mass and conductance effective mass of critical bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ at Γ for biaxial tensile strain on the (001) plane: (a) Isotropic approximate effective mass; (b) density of states and conductance effective masses.

图8所示为(001)面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 能谷电子离化杂质散射、声学声子散射、合金无序散射以及总散射概率随应力的变化情况. 由于离化杂质散射处于主导地位, 总的电子散射概率随着双轴张应力增大而增大, 这是由于电子态密度有效质量的减小使得电子受到杂质中心散射的概率增大.

图9所示为(001)面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 点处空穴离化杂质散射、声学声子散射、非极性光学声子散射、合金无序散射以及总散射概率随应力的变化情况, 除离化杂质散射外, 其他散射的散射概率随双轴张应力增大而减小, 显著降低了空穴总散射概率. 相比于未应变情况, 临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 空穴迁移率将有较大幅度的提升.

图10所示为(001)面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 的电子和空穴平均迁移率随应力的变化情况. 导带 Γ 能谷较小的有效质量使直接带隙的 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金具有非常高的电子迁移率, 并且电子迁移率随着双轴张应力的增大而增大. 空穴迁移率在较小的双轴张应力作用下即得到显著提升. 因此, 较小的(001)面双轴张应力不仅可以在低Sn组分下实现 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金由间接带隙到直接带隙

的转变, 而且通过对能带的改性增强了载流子迁移率.

将 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金生长在不同晶格常数的衬底材料上, 可以实现 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金中双轴应力的引入. 当 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金的晶格常数大于衬底材料时, 会对 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 层引入压应力, 当 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金的晶格常数小于衬底材料时, 会对 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 层引入张应力. 如文献[31]将 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ (Sn组分含量 $4.7\% \pm 0.4\%$)通过分子束外延的方法生长在应力弛豫的 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ 缓冲层上, 通过改变In组分的大小, 对 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 层引入了 $-0.2\% - 0.88\%$ 的双轴应变. 根据本文计算结果, 考虑工艺实现难度和材料性能两个方面, 或可以选择4% Sn组分含量与1.2 GPa双轴张应力或3% Sn组分含量与1.5 GPa双轴张应力的组合来得到具有高载流子迁移率的直接带隙 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金.

此外, 为了验证本文所得结果的准确性, 表4对比了不同Sn组分和双轴应变组合下 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 直接带隙宽度的实验值与本文计算值. 其中组合4已使 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 转变为直接带隙, 这与本文计算所得的6% Sn组分和0.516 GPa(0.377%)双轴张应力的组合基本一致, 间接说明了本文所得结果的准确性.

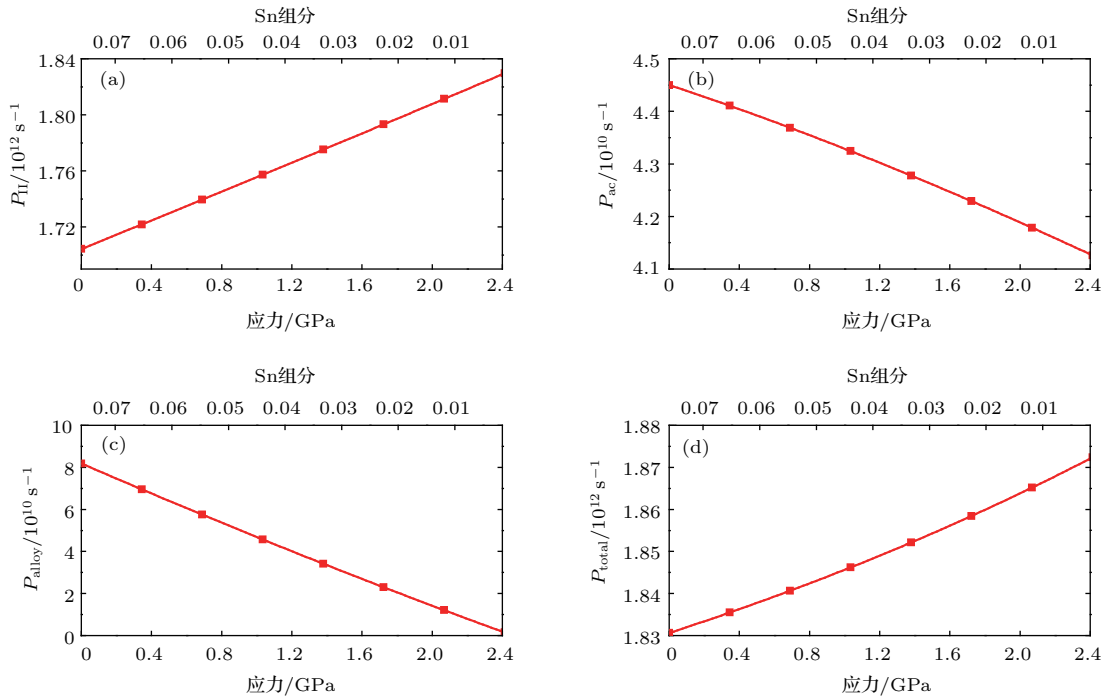


图8 (001)面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 能谷电子散射概率 (a) 离化杂质散射; (b) 声学声子散射; (c) 合金无序散射; (d) 总散射

Fig. 8. Γ valley electron scattering rates of critical bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ for biaxial tensile strain on the (001) plane: (a) Ionized impurity scattering; (b) acoustic phonon scattering; (c) alloy scattering; (d) total scattering.

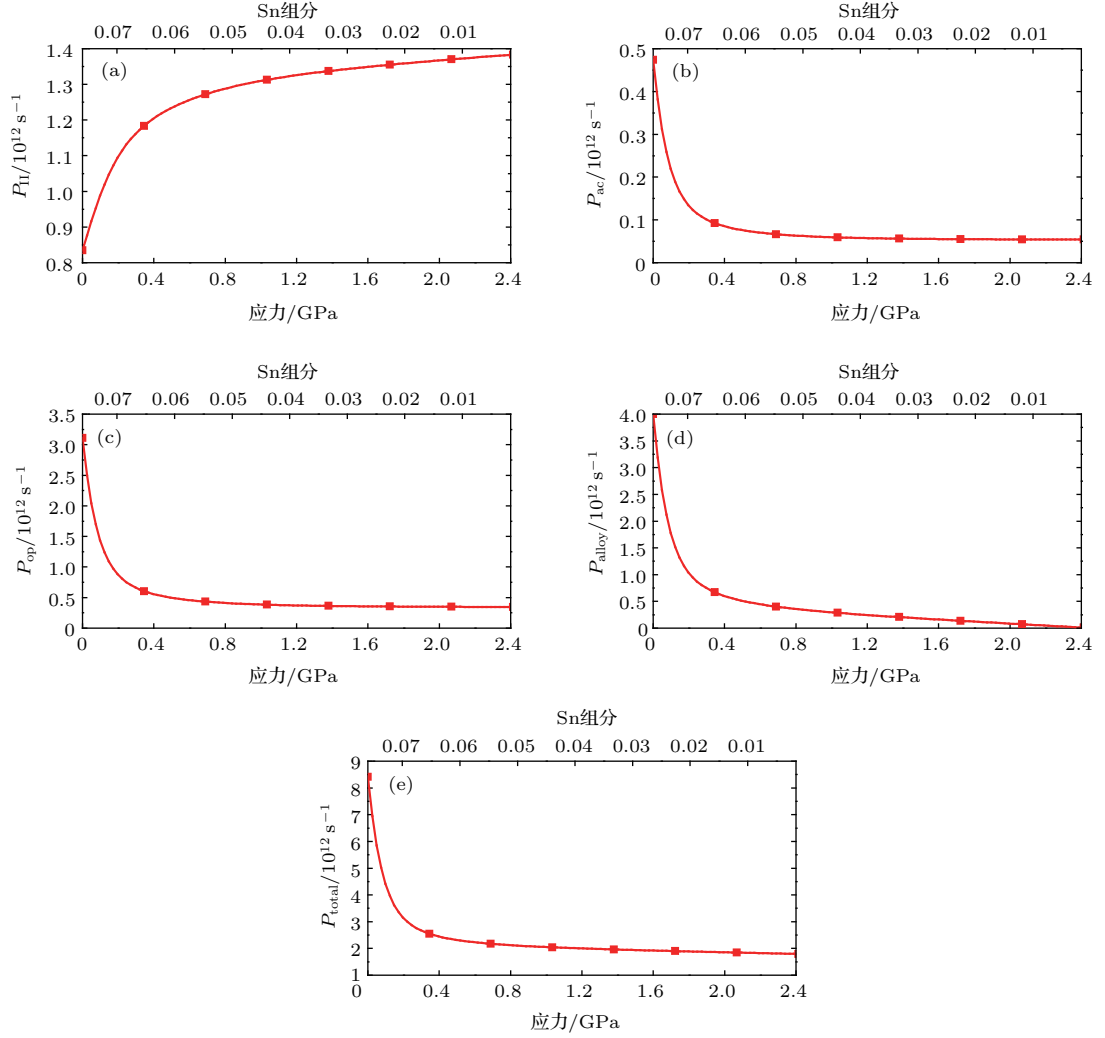


图9 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Γ 点空穴散射概率 (a) 离化杂质散射; (b) 声学声子散射; (c) 非极性光学声子散射; (d) 合金无序散射; (e) 总散射

Fig. 9. Hole scattering rates of critical bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ at Γ for biaxial tensile strain on the (001) plane: (a) Ionized impurity scattering; (b) acoustic phonon scattering; (c) non-polar optical phonon scattering; (d) alloy scattering; (e) total scattering.

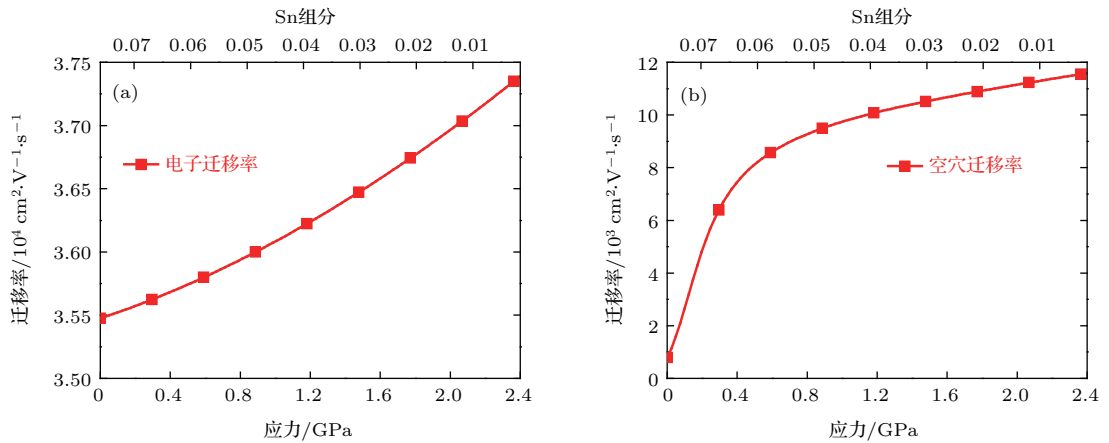


图10 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 载流子平均迁移率 (a) 电子; (b) 空穴

Fig. 10. Carrier mobility of critical bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ for biaxial tensile strain on the (001) plane: (a) Electron; (b) hole.

表4 本文计算值与文献实验值对比结果 (300 K)

Table 4. The comparison between the calculated values in this paper and the experimental values in literatures (at 300 K).

组合	Sn 组分 含量/%	双轴 应变/%	本文 计算值	文献值
组合 1	3.06	-0.513	0.728	0.730 ± 0.005 [32]
组合 2	6.10	-0.760	0.645	0.610 [33]
组合 3	4.20	0.340	0.578	0.520 ± 0.050 [34]
组合 4	6.00	0.400	0.541	0.569 [35]

4 结 论

研究了 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金在 (001) 面双轴张应力作用下带隙特性和迁移率的变化情况. 计算结果表明, 在 (001) 面双轴张应力作用下, 较小的 Sn 组分和双轴张应力的组合便可实现 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 带隙特性的转变, 在临界状态下, Sn 组分和双轴张应力近似呈线性关系 $x = -0.031\sigma + 0.076$. 通过对 (001) 面临界带隙双轴张应变 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 能带结构的计算发现, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金的直接带隙宽度受到双轴张应力的调制, 会随着应力的增大而减小; 直接带隙 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 合金较小的电子有效质量使其具有极高的电子迁移率, 并且双轴张应力的作用有效降低了空穴有效质量和散射概率, 使得空穴迁移率显著提升. 考虑工艺实现难度和材料性能两个方面, 可以选择 4% Sn 组分与 1.2 GPa 双轴张应力或 3% Sn 组分与 1.5 GPa 双轴张应力的组合用于高速器件和光电器件的设计.

参考文献

- [1] Morea M, Brendel C E, Zang K, Suh J, Fenrich C S, Huang Y C, Chung H, Huo Y, Kamins T I, Saraswat K C, Harris J S 2017 *Appl. Phys. Lett.* **110** 091109
- [2] Senaratne C L, Wallace P M, Gallagher J D, Sims P E, Kouvetakis J, Menéndez J 2016 *J. Appl. Phys.* **120** 025701
- [3] Hart J, Adam T, Kim Y, Huang Y C, Reznicek A, Hazbun R, Gupta J, Kolodzey J 2016 *J. Appl. Phys.* **119** 093105
- [4] Zhou Y, Dou W, Du W, Pham T, Ghetmiri S A, Al-Kabi S, Mosleh A, Alher M, Margetis J, Tolle J, Sun G, Soref R, Li B, Mortazavi M, Naseem H, Yu S Q 2016 *J. Appl. Phys.* **120** 023102
- [5] Wirths S, Geiger R, Driesch N V D, Mussler G, Stoica T, Mantl S, Ikonik Z, Luysberg M, Chiussi S, Hartmann

- J M, Sigg H, Faist J, Buca D, Grützmacher D 2015 *Nat. Photonics* **9** 88
- [6] Liu Y, Yan J, Wang H, Cheng B, Han G 2015 *Int. J. Thermophys.* **36** 980
- [7] Taoka N, Capellini G, Schlykow V, Montanari M, Zaumseil P, Nakatsuka O, Zaima S, Schroeder T 2017 *Mater. Sci. Semicond. Process.* **57** 48
- [8] Huang Y S, Tsou Y J, Huang C H, Huang C H, Lan H S, Liu C W, Huang Y C, Chung H, Chang C P, Chu S S, Kuppuraio S 2017 *IEEE Trans. Electron Dev.* **64** 2498
- [9] Margetis J, Mosleh A, Al-Kabi S, Ghetmiri S A, Du W, Dou W, Benamara M, Li B, Mortazavi M, Naseem H A, Yu S Q, Tolle J 2017 *J. Cryst. Growth* **463** 128
- [10] Mosleh A, Alher M A, Cousar L C, Du W, Ghetmiri S A, Pham T, Grant J M, Sun G, Soref R A, Li B, Naseem H A, Yu S Q 2015 *Front. Mater.* **2** 30
- [11] Kurdi M E, Fishman G, Sauvage S, Boucaud P 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 013710
- [12] Liu L, Zhang M, Hu L, Di Z, Zhao S J 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 113105
- [13] Bai M, Xuan R X, Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Shu B 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 038501 (in Chinese) [白敏, 宣荣喜, 宋建军, 张鹤鸣, 胡辉勇, 舒斌 2015 物理学报 **64** 038501]
- [14] D'Costa V R, Cook C S, Birdwell A G, Littler C L, Canonico M, Zollner S, Kouvetakis J, Menéndez J 2006 *Phys. Rev. B* **73** 125207
- [15] Madelung O, Rössler U, Schulz M 2002 *Semiconductors-Group IV Elements, IV-IV and III-V Compounds. Part b- Electronic, Transport, Optical and Other Properties* (Berlin: Springer) p2801, p3106
- [16] Bahder T B 1990 *Phys. Rev. B* **41** 11992
- [17] Pryor C 1998 *Phys. Rev. B* **57** 7190
- [18] Zhu Y H, Xu Q, Fan W J, Wang J W 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 073108
- [19] Ye L X 1997 *Monte Carlo Simulation of the Small-Scale Semiconductor Devices* (Beijing: Science Press) p318, 384 (in Chinese) [叶良修 1997 小尺寸半导体器件的蒙特卡罗模拟 (北京: 科学出版社) 第 318 页, 第 384 页]
- [20] Ye L X 2007 *Semiconductor Physics* (2nd Ed.) Part One (Beijing: Higher Education Press) p203 (in Chinese) [叶良修 2007 半导体物理学 (第二版) 上册 (北京: 高等教育出版社) 第 203 页]
- [21] Sun Y, Thompson S E, Nishida T 2010 *Strain Effect in Semiconductors: Theory and Device Applications* (New York: Springer) pp193-201
- [22] Wang X Y, Zhang H M, Song J J, Ma J L, Wang G Y, An J H 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 077205 (in Chinese) [王晓艳, 张鹤鸣, 宋建军, 马建立, 王冠宇, 安久华 2011 物理学报 **60** 077205]
- [23] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Wang X Y, Wang G Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 057304 (in Chinese) [宋建军, 张鹤鸣, 胡辉勇, 王晓艳, 王冠宇 2012 物理学报 **61** 057304]
- [24] Nguyen P H, Hofmann K R 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 375
- [25] Fischetti M V, Laux S E 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 2234
- [26] Song P, Cai L C, Tao T J, Yuan S, Chen H, Huang J, Zhao X W, Wang X J 2016 *J. Appl. Phys.* **120** 195101

- [27] Myers V W 1967 *J. Phys. Chem. Solids* **28** 2207
- [28] Adachi S 2009 *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors* (Chichester: John Wiley & Sons Ltd.) p18
- [29] Chen R, Lin H, Huo Y, Hitzman C, Kamins T I, Harris J S 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 181125
- [30] Dai X Y, Yang C, Song J J, Zhang H M, Hao Y, Zheng R C 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 237102 (in Chinese) [戴显英, 杨程, 宋建军, 张鹤鸣, 郝跃, 郑若川 2012 物理学报 **61** 237102]
- [31] Lin H, Chen R, Huo Y, Kamins T I, Harris J S 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 261917
- [32] Lin H, Chen R, Lu W, Huo Y, Kamins T I, Harris J S 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 102109
- [33] Gassenq A, Milord L, Aubin J, Guillois K, Tardif S, Pauc N, Rothman J, Chelnokov A, Hartmann J M, Reboud V, Calvo V 2016 *Appl. Phys. Lett.* **109** 242107
- [34] Lieten R R, Seo J W, Decoster S, Vantomme A, Peters S, Bustillo K C, Haller E E, Menghini M, Locquet J P 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 052106
- [35] Wirths S, Stange D, Pampillón M A, Tiedemann A T, Mussler G, Fox A, Breuer U, Baert B, Andrés E S, Nguyen N D, Hartmann J M, Ikonik Z, Mantl S, Buca D 2015 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **7** 62

Calculations of energy band structure and mobility in critical bandgap strained $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ based on Sn component and biaxial tensile stress modulation*

Di Lin-Jia Dai Xian-Ying[†] Song Jian-Jun[‡] Miao Dong-Ming^{††} Zhao Tian-Long
Wu Shu-Jing Hao Yue

(State Key Discipline Laboratory of Wide Bandgap Semiconductor Technologies, School of Microelectronics, Xidian University, Xi'an 710071, China)

(Received 5 September 2017; revised manuscript received 20 October 2017)

Abstract

Optoelectronic integration technology which utilizes CMOS process to achieve the integration of photonic devices has the advantages of high integration, high speed and low power consumption. The $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys have been widely used in photodetectors, light-emitting diodes, lasers and other optoelectronic integration areas because they can be converted into direct bandgap semiconductors as the Sn component increases. However, the solid solubility of Sn in Ge as well as the large lattice mismatch between Ge and Sn resulting from the Sn composition cannot be increased arbitrarily: it is limited, thereby bringing a lot of challenges to the preparation and application of direct bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$.

Strain engineering can also modulate the band structure to convert Ge from an indirect bandgap into a direct bandgap, where the required stress is minimal under biaxial tensile strain on the (001) plane. Moreover, the carrier mobility, especially the hole mobility, is significantly enhanced. Therefore, considering the combined effect of alloying and biaxial strain on Ge, it is possible not only to reduce the required Sn composition or stress for direct bandgap transition, but also to further enhance the optical and electrical properties of $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys.

The energy band structure is the theoretical basis for studying the optical and electrical properties of strained $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys. In this paper, according to the theory of deformation potential, the relationship between Sn component and stress at the critical point of bandgap transition is given by analyzing the bandgap transition condition of biaxial tensile strained $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ on the (001) plane. The energy band structure of strained $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ with direct bandgap at the critical state is obtained through diagonalizing an 8-level $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonian matrix which includes the spin-orbit coupling interaction and strain effect. According to the energy band structure and scattering model, the effective mass and mobility of carriers are quantitatively calculated. The calculation results indicate that the combination of lower Sn component and stress can also obtain the direct bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, and its bandgap width decreases with the increase of stress. The strained $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ with direct bandgap has a very high electron mobility due to the small electron effective mass, and the hole mobility is significantly improved under the effect of stress. Considering both the process realization and the material properties, a combination of 4% Sn component and 1.2 GPa stress or 3% Sn component and 1.5 GPa stress can be selected for designing the high speed devices and optoelectronic devices.

Keywords: biaxial tensile strained $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method, energy band structure, mobility

PACS: 71.15.-m, 71.22.+i, 71.70.Fk, 72.10.-d

DOI: 10.7498/aps.67.20171969

* Project supported by the Advance Research Foundation of China (Grant No. 9140A08020115DZ01024) and the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 2017M613061).

[†] Corresponding author. E-mail: xydai@xidian.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: jianjun_79_81@xidian.edu.cn

^{††} Corresponding author. E-mail: miaodongmingi@126.com