

生长在 Si(001) 衬底上的超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4$ 的电子能带结构及光学性质*

徐 至 中

(复旦大学物理系, 上海 200433)

(1994 年 7 月 13 日收到)

按照 Peressi 等的第一性原理赝势计算得到的原子几何构形及能带边不连续值, 采用紧束缚方法计算了生长在 Si(001) 衬底上的超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4$ 的电子能带结构及光跃迁振子强度。相应于两种不同的原子几何构形: X 端界面及 Y 端界面情况, 超晶格具有不同的基本带隙。但是不管哪种情况, 它们都存在能量近乎简并的两类导带底能谷—— Γ 能谷及 Δ 能谷, 它们的价带顶都处在 Γ 点。X 端界面超晶格的价带顶附近的状态主要由 GaAs 层的价态波函数组成。对于 Y 端界面超晶格的价带顶附近的状态, Si 层和 GaAs 层的价态波函数有较大的混和。两类超晶格的导带 Γ 能谷的状态主要由 Si 层的原来体导带 X 能谷经布里渊区折叠而组成。价带顶和导带底附近的带间跃迁振子强度大部分都近乎为零; 价带顶附近能级至价带顶能级间的光跃迁沿 [001] 方向的振子强度有较大的值; 导带底至导带底附近能级的光跃迁, 只有 Y 端界面超晶格具有比较大的振子强度。

PACC: 7340L; 7890

1 引 言

Si 和 GaAs 是目前半导体工业中最常用的两种半导体材料。Si 是半导体集成电路的基础; 而 GaAs 在许多电学及光学性能上都优于 Si, 是制作高速电子器件及光电子器件的重要材料。因此由该两种半导体结合起来的超晶格, 有可能在电子及光电子器件的研制中找到它们的实际应用。从理论上来说, 以前只对由同价半导体结合成的超晶格 (如 Ge/Si, GaAs/GaAlAs, CdTe/CdMnTe 等) 研究得比较多, 由不同价半导体结合成的超晶格研究得比较少。而由不同价半导体间组成的界面具有许多与同价半导体组成的界面不相同的性质, 特别是由于界面间的元素混和而影响界面的能带边不连续值 (band-offset)^[1]。最近 Peressi 等^[2]采用自洽的第一性原理的规范保持赝势 (norm-conserving pseudopotential) 方法研究了 GaAs/Si 异质结界面的能带边不连续值。他们先根据能量最小的原理决定了界面附近的原子构形 (原子层的间距), 然后计算了在各个原子构形下的能带边不连续值。按照 Baroni 等^[3]提出的中性界面比较稳定的观点, 他们讨论了两种最简单的界面情况, 即在界面处各自存在一层混和原子层: $X = (\text{Si}_{0.5}\text{As}_{0.5})$ 及 $Y = (\text{Si}_{0.5}$

* 国家自然科学基金资助的课题。

$\text{Ga}_{0.5}$). 前者这里称之为 X 端界面, 后者称之为 Y 端界面. 我们根据 Peressi 等计算得到的平衡原子构形(原子层间距)及能带边不连续值, 采用半经验的紧束缚方法对 X 端界面及 Y 端界面两种情况计算了生长在 Si(001) 衬底上的超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4$ 的电子能带结构. 计算结果表明, Y 端界面超晶格具有直接能隙结构, 价带顶及导带底都在 Γ 点; 但在 Δ 轴上同时存在有能量近乎简并的另一个导带能谷—— Δ 导带能谷, 它仅比 Γ 导带所谷高出约 5meV. X 端界面超晶格具有间接能隙结构, 最低的导带底处在 Δ 轴上, 但 Γ 点的导带能谷仅比 Δ 导带能谷高出约 35meV. 最后也计算了 Γ 点各能级间光跃迁的振子强度 (oscillator strength).

2 计算方法

由于 Si 与 GaAs 的晶格常数不相匹配, 因此生长在 Si(001) 衬底上的超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4$ 中, GaAs 层会受到沿 [001] 方向的单轴应变. 由于应变使 GaAs 层中的键长及键角均发生变化. 在紧束缚方法中, 键角的变化一方面引起几何结构因子的变化, 另一方面也通过键角方向余弦的变化而使原子间相互作用紧束缚参数发生变化^[1]. 键长的变化常通过经验的标度定则使原子间相互作用紧束缚参数发生变化^[4],

$$V_{\alpha\beta} = V_{\alpha\beta}^0 (d/d_0)^{-n_{\alpha\beta}},$$

式中 $V_{\alpha\beta}^0$ 及 $V_{\alpha\beta}$ 分别表示应变前后的 α 原子轨道与最近邻的 β 原子轨道间的相互作用紧束缚参数, d_0 及 d 分别表示应变前后的原子间距(键长), $n_{\alpha\beta}$ 是标度指数. 为了能正确地反映应变对电子能带结构的影响, 我们首先根据 GaAs 的 Γ 点直接能隙及 X, L 点间接能隙的体畸变势常数 $a(\Gamma)$, $E_1(X)$ 及 $E_1(L)$ 的实验值决定标度指数 $n_{\alpha\beta}$. 由于 $n_{\alpha\beta}$ 只与体畸变势常数有关, 而与单轴畸变势常数无关, 但不正确的单轴畸变势常数常使应变后被分裂的 X 点导带底 X_1 及 $X_2(X_2)$ 能谷值的高低次序发生颠倒. 为了正确计及单轴应变引起的能带结构的变化, 按 Muñoz 和 Armelles^[5] 提出的方法, 引进新的标度指数 F , 并根据 GaAs 的 X 点导带底单轴畸变势常数 $E_2(X)$ 的实验值决定标度指数 F . 表 1 列出计算得到标度指数 $n_{\alpha\beta}$ 及 F , 表 2 列出根据此标度指数计算得到的体畸变势常数及单轴畸变势常数, 其中 b 表示 Γ 点价带顶的单轴畸变势常数. 表 2 中也列出相应的实验值.

表 1 GaAs 的标度指数 $n_{\alpha\beta}$ 及 F

$\alpha\beta$	s,s	s α ,p σ	s α ,p π	p α ,s σ	p α ,s π	pp σ	pp π	F
$n_{\alpha\beta}$	3.7	2.1	3.0	3.8	2.0	2.0	2.0	-1.06

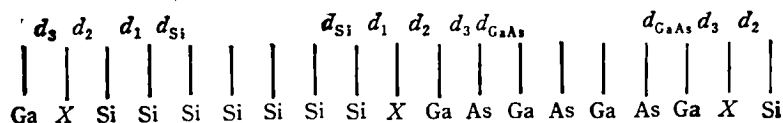
表 2 GaAs 的畸变势常数(单位为 eV)

	$a(\Gamma)$	$E_1(X)$	$E_1(L)$	$E_1(X)$	b
计 算 值	-8.37	1.34	-4.05	6.47	-2.81
实 验 值	-6.7~-9.77	1.35	-4.10	6.5	-2.0

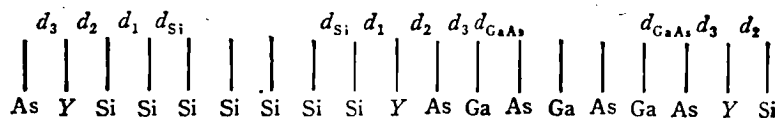
计算中所采用的紧束缚参数, 对于 Si 采用 Newman 和 Dow^[6] 给出的参数, 对于 GaAs 采用 Priester 等^[7] 的参数. Newman 和 Dow 的参数同时考虑了最近邻及次近邻

原子间的相互作用,对基本带隙附近的能级值都能与实验很好地相符。但对 Priester 等的参数,因只计及最近邻原子间的相互作用,所以尽管 Γ 点及 X 点的导带底能级都能与实验很好地相符,但 L 点导带底却不能与实验值相符。为此,我们在 Priester 等参数的基础上,引进了二个次近邻相互作用参数 $\epsilon(\text{spa})$ 及 $\epsilon(\text{spc})$, [它们分别表示阴原子的 s 态与次近邻的阴原子的 p 态以及阳原子的 s 态与次近邻的阳原子 p 态间的相互作用。] 使 GaAs 的 L 点能隙也能与实验值相符^[9]。计算时,也同时考虑了自旋-轨道相互作用。

如前所述, Si/GaAs 间界面的原子构形采用 Peressi 等^[10]的第一性原理计算结果。图 1(a) 和 (b) 分别示出 X 端界面及 Y 端界面超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4$ 沿 $[001]$ 方向的原子层排列情况,其中 X 代表混合原子层 $(\text{Si}_{0.5}\text{As}_{0.5})$, Y 代表混合原子层 $(\text{Si}_{0.5}\text{Ga}_{0.5})$ 。各原子层间的间距如表 3 所列。在 (001) 平面内原子间距与衬底 Si 的原子间距 (0.235nm) 相同。根据 Peressi 等的计算, GaAs/Si 界面的价带边不连续值对 X 端界面及 Y 端界面分别为 +0.54 及 -0.15eV, 这里“+”、“-”号分别表示 GaAs 的价带顶高于或低于 Si 的价带顶。



(a) X 端界面情况, $X = (\text{Si}_{0.5}\text{As}_{0.5})$



(b) Y 端界面情况, $Y = (\text{Si}_{0.5}\text{Ga}_{0.5})$

图 1 超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4$ 沿超晶格方向 $[001]$ 的原子排列情况

表 3 在 $[001]$ 方向上的各原子层的间距(单位为 nm)

	d_{Si}	d_{GaAs}	d_1	d_2	d_3
X 端界面	0.1357	0.1467	0.1351	0.1385	0.1434
Y 端界面	0.1357	0.1467	0.1351	0.1346	0.1489

混合原子层的紧束缚参数均采用虚晶近似。对于 Si-Ga 及 Si-As 间的最近邻相互作用参数根据 Harrison 的通用紧束缚参数^[4]按下式进行估算:

$$V(\text{Si-Ga}) = \frac{V(\text{GaAs}) + V(\text{Si})}{V^H(\text{GaAs}) + V^H(\text{Si})} V^H(\text{SiGa}),$$

$$V(\text{Si-As}) = \frac{V(\text{GaAs}) + V(\text{Si})}{V^H(\text{GaAs}) + V^H(\text{Si})} V^H(\text{SiAs}),$$

式中 V^H 表示 Harrison 的通用紧束缚参数。

光跃迁的振子强度由下式进行计算^[9]:

$$f_{i,n}^j(\mathbf{k}) = \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{1}{E_{n,h} - E_{m,h}} |\langle n\mathbf{k} | \frac{\partial H}{\partial k_i} | m\mathbf{k} \rangle|^2,$$

式中 $f_{i,n}^j(\mathbf{k})$ 表示在沿 i 方向偏振的入射光的作用下, $|n\mathbf{k}\rangle$ 态 [n 为能带指数, $\mathbf{k}$ 为波矢, 其相应的本征能量为 $E_{n,h}$] 与 $|m\mathbf{k}\rangle$ 态间跃迁时的振子强度. m_0 为电子的质量. $\partial H/\partial k_i$ 表示紧束缚哈密顿量对沿 i 方向的波矢 $\mathbf{k}$ 分量的偏导数.

3 计算结果

超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4(001)$ 的简约布里渊区如图 2 所示. 图 3(a) 和 (b) 分别给出 X 端界面超晶格沿 $X_z-\Gamma-X_z$ 及 $P-\Gamma-R$ 的能带色散关系. 图 4(a) 和 (b) 给出 Y 端界面超晶格沿 $X_z-\Gamma-X_z$ 及 $P-\Gamma-R$ 的能带色散关系. 从图 3 和 4 中可以看到, 由于布里渊区的折叠, 沿 $\Gamma-X_z$ 方向的能带比较平直, 而沿其它方向都有较大的色散, 通常价带比导带具有更大的色散. 从图 3(a) 及图 4(a) 可以看到, 无论是 X 端界面或 Y 端界面, 价带顶均处在 Γ 点, 而导带均存在有两个能量近乎简并的 Γ 能谷和 Δ 能跃. 对于 X 端界面超晶格, Δ 谷导带底低于 Γ 谷导带底[前者为 0.746eV, 而后者为 0.781eV]; 对于 Y 端界面超晶格, Γ 谷导带底低于 Δ 谷导带底[前者为 1.209eV, 后者为 1.214eV], 两者仅相差 0.005eV. 由于能带边不连续值的不同, 两种不同界面超晶格的带隙大小有较大的差别.

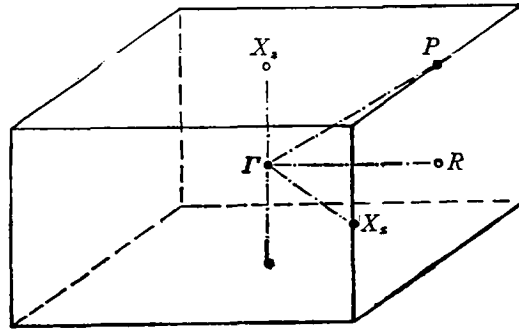
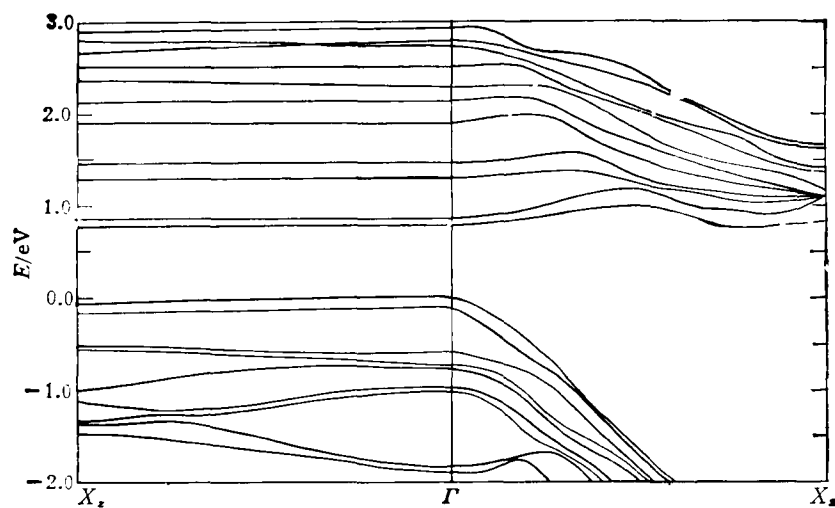


图 2 超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4(001)$ 的简约布里渊区

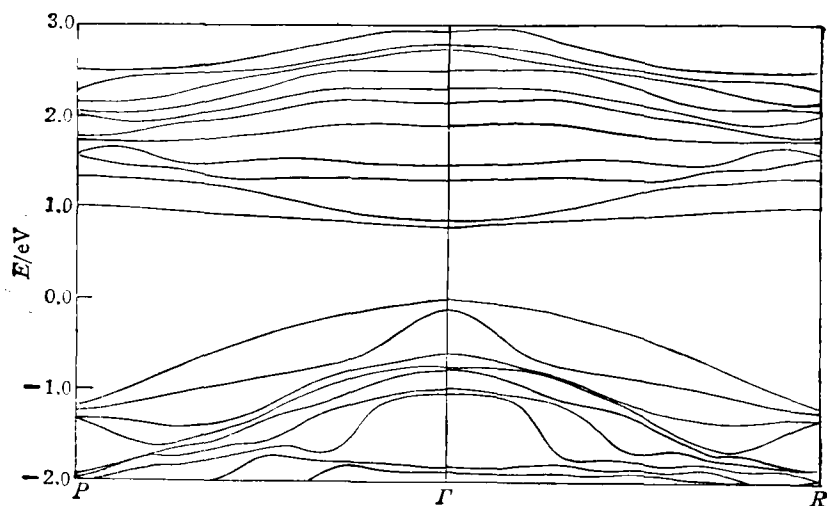
也是由于能带边不连续值的不同, 不同界面情况下的导带及价带的状态混和情况也有很大的不同. 图 5(a) 和 (b) 示出 X 端界面超晶格的各原子双层处的三个最高价带及三个最低导带态的电子波函数的绝对值平方 $\Phi^*\Phi$ [即电子在该原子双层处的出现概率]. 图 6(a) 和 (b) 示出 Y 端界面超晶格的各原子双层处的三个最高价带及三个最低导带态电子波函数的绝对值平方. 对于 X 端界面, 由于 GaAs 的价带顶比 Si 高 0.54eV, 因此 X 端界面超晶格的第一、第二两个价带态主要都由 GaAs 的价带态组成, 它们都主要出现在 GaAs 层内. 直至第三个价带态(能级值为 -0.60eV), GaAs 与 Si 的价带波函数才有较大的混和, $\Phi^*\Phi$ 在 GaAs 层及 Si 层处均有差不多大小的值. 对于 Y 端界面, 由于 GaAs 的价带顶仅比 Si 低 0.15eV, 因此 GaAs 和 Si 的价带态波函数都有比较大的混和.

如图 6(a) 所示, $\Phi^*\Phi$ 在 GaAs 层及 Si 层处都有比较大的值. 无论是 X 端界面还是 Y 端界面, 它们的导带底附近的状态主要都由原来体 Si 的 X 能谷经布里渊区折叠而来的状态所组成, 所以如图 5(b) 及图 6(b) 所示, 导带底附近的三个状态波函数 $\Phi^*\Phi$ 在 Si 层有比较大的值, 只有 X 端界面的第 3 个导带能级 ($E = 1.29\text{eV}$) 及 Y 端界面的第 2 个导带能级 ($E = 1.27\text{eV}$), 波函数有比较大的混和.

表 4 及表 5 列出 X 端界面及 Y 端界面超晶格的五个最高价带能级与五个最低导带能



(a)



(b)

图 3 X 端界面超晶格沿(a) X_z - Γ - X_z ; (b) P - Γ - R 方向的能带色散关系

级间光跃迁的振子强度。从表 4 和 5 中可以看到, 大部分跃迁的振子强度都只有很小的值。这是与上面的讨论相一致的。对于 X 端界面, 价带顶主要由 GaAs 层的价带态所组成, 而导带底主要由 Si 层的导带态 (体 Si 的 X 能谷) 所组成。这两者间的跃迁, 振子强度当然只有很小的值。对于 Y 端界面, 尽管价带顶状态波函数存在很大的混和, [主要是 GaAs 层和 Si 层的 Γ 价带态波函数的混和], 但是由于导带底波函数仍主要由原来体 Si 的 X 导带能谷所组成, 因此振子强度仍只有很小的值。具有稍大值的振子强度的跃迁只有下面几个: X 端界面超晶格有 $f_{31}^{[001]} = 1.56 (E_{31} = 1.891\text{eV})$; $f_{32}^{[001]} = 1.32 (E_{32} = 2.008\text{eV})$, Y 端超晶格有 $f_{31}^{[001]} = 1.31 (E_{31} = 1.913\text{eV})$; $f_{32}^{[001]} = 0.99 (E_{32} = 2.003\text{eV})$; $f_{33}^{[001]} = 2.58$

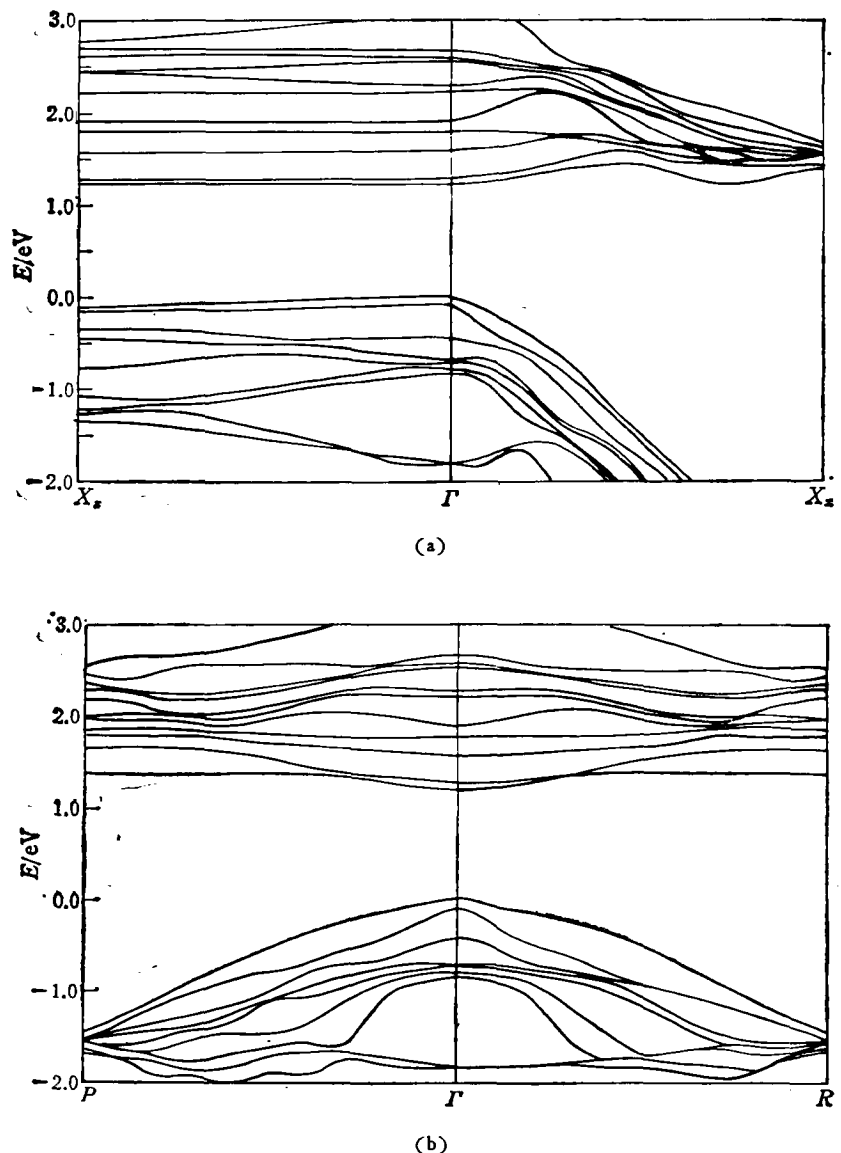


图 4 Y 端界面超晶格沿 (a) $X_s - \Gamma - X_s$; (b) $P - \Gamma - R$ 方向的能带色散关系

$E_{43} = 2.219\text{eV}$; $f_{53}^{[001]} = 1.13(E_{53} = 2.348\text{eV})$.

表 6 及表 7 给出两种界面超晶格的价带顶附近能级至价带顶能级间光跃迁振子强度及导带底附近能级至导带底能级间光跃迁的振子强度。从表 6 和 7 中可以看到, 只有对 $[001]$ 偏振的光跃迁, 它们的振子强度才有比较大的值。价带能级间跃迁的振子强度具有比较大值的有: X 端界面超晶格, $f_{\dots}^{[001]} = 2.45(E_{\dots} = 0.735\text{eV})$; $f_{\dots}^{[001]} = 6.94(E_{\dots} = 0.767\text{eV})$; Y 端界面超晶格, $f_{\dots}^{[001]} = 4.15(E_{\dots} = 0.695\text{eV})$; $f_{\dots}^{[001]} = 1.88(E_{\dots} = 0.713\text{eV})$ 。导带能级间跃迁的振子强度只有 Y 端界面超晶格才有比较大的值: $f_{\dots}^{[001]} = 4.74(E_{\dots} = 0.370\text{eV})$; $f_{\dots}^{[001]} = 2.85(E_{\dots} = 0.572\text{eV})$; $f_{\dots}^{[001]} = 3.52(E_{\dots} = 0.701\text{eV})$ 。

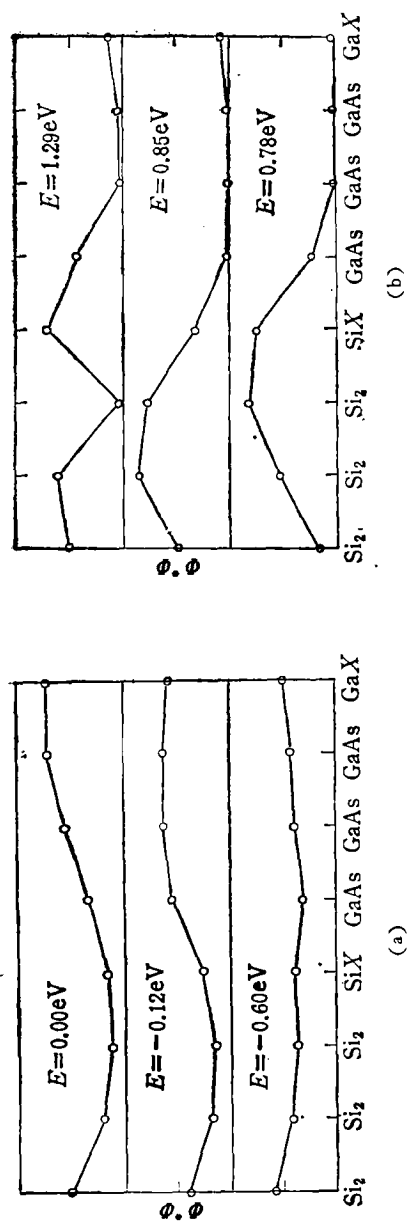


图 5 X 端界面超晶格的三个最高价带态(a)及三个最低导带态(b)电子波函数的绝对值平方 $\Phi^*\Phi$ 在各原子双层处的分布

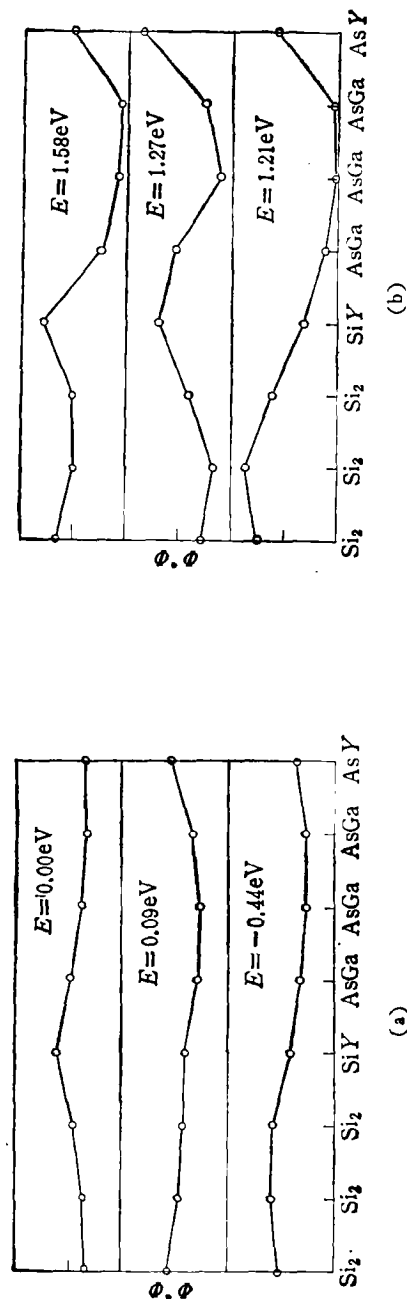


图 6 Y 端界面超晶格的三个最高价带态(a)及三个最低导带态(b)电子波函数的绝对值平方 $\Phi^*\Phi$ 在各原子双层处的分布

表 4 X 端界面超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4(001)$ 的最高五个价带能级与最低五个导带能级间的光跃迁振子强度 f_{nm}^i

价带能级 m \ 导带能级 n	1	2	3	4	5
1	0.781 0.0; 0.06	0.849 0.0; 0.01	1.288 0.0; 0.11	1.461 0.0; 0.08	1.891 0.0; 1.56
2	0.898 0.0; 0.04	0.965 0.0; 0.01	1.404 0.01; 0.06	1.577 0.01; 0.09	2.008 0.01; 1.32
3	1.379 0.01; 0.0	1.446 0.01; 0.0	1.885 0.48; 0.02	2.058 0.24; 0.01	2.489 0.18; 0.02
4	1.517 0.0; 0.0	1.584 0.0; 0.01	2.023 0.0; 0.05	2.196 0.0; 0.09	2.627 0.0; 0.31
5	1.548 0.0; 0.01	1.615 0.0; 0.01	2.054 0.03; 0.30	2.227 0.02; 0.16	2.658 0.02; 0.31

表格中所列的上面数字表示该两个能级之间的距离 $E_{nm} = E_n - E_m$, 也即跃迁的光子能量(单位为 eV)。表格中所列左下角的数字为沿[001]偏振光的振子强度 $f_{nm}^{[001]}$, 而右下角的数字表示沿[100]偏振光的振子强度 $f_{nm}^{[100]}$ 。

表 5 Y 端界面超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4(001)$ 的最高五个价带能级与最低五个导带能级间的光跃迁振子强度 f_{nm}^i

价带能级 m \ 导带能级 n	1	2	3	4	5
1	1.211 0.0; 0.37	1.275 0.0; 0.06	1.581 0.0; 0.01	1.784 0.0; 0.67	1.913 0.0; 1.31
2	1.301 0.02; 0.32	1.365 0.0; 0.03	1.671 0.0; 0.01	1.874 0.10; 0.54	2.003 0.06; 0.99
3	1.647 0.35; 0.0	1.710 0.10; 0.0	2.016 0.08; 0.01	2.219 2.58; 0.01	2.348 1.13; 0.0
4	1.906 0.0; 0.02	1.970 0.0; 0.0	2.276 0.0; 0.09	2.478 0.0; 0.03	2.607 0.0; 0.66
5	1.924 0.0; 0.0	1.987 0.0; 0.01	2.294 0.0; 0.04	2.496 0.0; 0.03	2.625 0.0; 0.42

表注同表 4。

表 6 超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4(001)$ 价带顶附近能级至价带顶能级间光跃迁的振子强度

X 端 界 面	跃迁能量 E_{nm}/eV	0.116	0.597	0.735	0.767	0.984
	$f_{nm}^{[001]}$	0.20	0.43	2.45	6.94	0.161
	$f_{nm}^{[100]}$	0.03	0.11	0.0	0.0	0.0
Y 端 界 面	跃迁能量 E_{nm}/eV	0.09	0.435	0.695	0.713	0.789
	$f_{nm}^{[001]}$	0.0	0.0	4.15	1.88	0.37
	$f_{nm}^{[100]}$	0.04	0.08	0.0	0.0	0.0

表7 超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4(001)$ 导带底能级至导带底附近能级间的光跃迁的振子强度

X 端 界 面	跃迁能量 E_{nm}/eV	0.067	0.506	0.679	1.11	1.353
	$f_{nm}^{[001]}$	0.0	0.04	0.0	0.44	0.23
	$f_{nm}^{[100]}$	0.0	9.0	0.0	0.0	0.0
Y 端 界 面	跃迁能量 E_{nm}/eV	0.064	0.370	0.572	0.701	1.005
	$f_{nm}^{[001]}$	0.0	4.74	2.85	3.52	0.12
	$f_{nm}^{[100]}$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

4 结 论

按 Peressi 等的第一性原理赝势计算所得的界面原子几何构形及能带边不连续值, 采用半经验紧束缚方法计算了生长在 $\text{Si}(001)$ 衬底上的超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4$ 的电子能带结构及光跃迁振子强度, 得到下面主要结果:

1. 无论是 X 端界面还是 Y 端界面, 导带底均存在几乎简并的 Γ 能谷及 Δ 能谷. 它们的价带顶均处在 Γ 点.

2. 对于不同界面, 由于价带边不连续值不相等, 因此不同界面超晶格的能隙也有很大的不同. X 端界面的间接能隙约为 0.746 eV [直接能隙约为 0.781 eV]. Y 端界面的直接能隙约为 1.209 eV [间接能隙约为 1.214 eV].

3. X 端界面超晶格价带顶附近的状态波函数主要局域在 GaAs 层内; Y 端界面超晶格的价带顶附近状态电子波函数在 Si 层及 GaAs 层都有比较大的值.

4. 无论是 X 端界面还是 Y 端界面, 超晶格导带底附近的状态电子波函数大部分都主要局域在 Si 层内, 它们主要来源于原来体 Si 的 $\times$ 导带能谷波函数.

5. 价带顶附近能级与导带底附近能级间的带间光跃迁振子强度大部分都很小, 只有少数几个能级间才有较大的值.

6. 价带顶附近能级至价带顶能级之间的光跃迁与带间跃迁相比有比较大的振子强度; 导带底能级至导带底附近能级间的光跃迁, 只有对 Y 端界面超晶格才有较大的振子强度.

7. 无论是价带顶附近能级至价带顶或导带底至导带底附近能级的光跃迁, 只有在 $[001]$ 偏振情况下, 才有较大的振子强度.

8. 根据上面的计算结果, 或许可以利用价带内或导带内的光跃迁, 超晶格 $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4(001)$ 可被利用来制作红外光电子器件.

感谢希德教授、张开明教授、陆栋教授及王迅教授对本工作的关心和鼓励.

- [1] S. Baroni, M. Peressi, R. Resta and A. Baldereschi, Proceedings of The Twenty-First International Conference on The Physics of Semiconductions, edited by P. Jiang and H. Zheng (1992), p. 689.
- [2] M. Peressi, L. Colomo, R. Resta, S. Baroni and A. Baldereschi, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 12047.
- [3] Zhi-Zhong Xu, *Phys. Rev.*, **B47**(1993), 3642.

- [4] W. A. Harrison, *Electronic Structure And The Properties of Solids* (Freeman, San Francisco, 1980).
- [5] M. C. Muñoz and G. Armelles, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 2839.
- [6] K. E. Newman and J. D. Dow, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 1929.
- [7] C. Priester, G. Allen and M. Lannoo, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 8519.
- [8] 徐至中, 物理学报, **44**(1995), 第7期页码待查.
- [9] L. C. Lew Yan Voon and L. R. Ram-Mohan, *Phys. Rev.*, **B47**(1993), 15500.

ELECTRONIC STRUCTURES AND OPTICAL PROPERTIES OF SUPERLATTICES $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4$ GROWN ON Si(001)

XU ZHI-ZHONG

(Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433)

(Received 13 July 1994)

ABSTRACT

With using the atomic geometrical structures and band-offset extracted from the results of computations by Peressi et al with first principle pseudopotential method, the electronic band structures and the optical oscillator strengths for the superlattices $(\text{Si}_2)_4/(\text{GaAs})_4$ grown on the Si(001) substrates were calculated in tight-binding frame. The fundamental gap of superlattices is different for two geometrical structures: X-termination interface and Y-termination interface. And there are two conduction band energy valleys— Γ valley and Δ valley, which are almost degenerative, and a valence band energy valley on Γ point for both X-termination and Y-termination superlattices. The states near the valence band top mainly originate from the valence states of GaAs layers for X-termination superlattice and are constituted by mixture of the valence states of Si and GaAs layers for Y-termination superlattice. The conduction band states near the Γ valley mainly originate from the X valley of bulk Si conduction band which is formed from Brillouin zone folding in superlattices. Most optical oscillator strengths for the transitions between valence band and conduction band are nearly equal to zero. The optical oscillator strengths for the transitions from the lower valence band levels to the valence band top level with [001] polarity have larger values for both two termination superlattices. Those for the transition from the conduction band bottom level to the higher levels have substantial values only for the Y-termination superlattice.

PACC: 7340L; 7890