

# $(\text{Si})_n/(\text{Ge})_n$ 超晶格几何结构

资 剑 张 开 明

复旦大学物理系, 上海, 200433

1989 年 10 月 19 日收到

本文用 Keating 模型计算了  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x = 0-1$ ) 作衬底、沿 (100) 方向生长的  $(\text{Si})_n/(\text{Ge})_n$  ( $n = 1-6$ ) 应力超晶格的几何结构, 并讨论了衬底对超晶格生长的影响. 计算结果发现对于  $(\text{Si})_n/(\text{Ge})_n$  超晶格, 用适当的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  作衬底有利于超晶格的生长.

PACC: 6865

## 一、引 言

随着实验技术的发展, 超薄层超晶格的生长已成为可能. 尽管 Si 和 Ge 的晶格失配达 4%, 超薄层 Si/Ge 超晶格也由分子束外延 (MBE) 生长出来. Si/Ge 超晶格的晶格失配由弹性能来补偿, 因此, Si/Ge 超晶格是一种应力超晶格. 理论和实验上对 Si/Ge 超晶格进行了大量的工作. 人们希望了解 Si/Ge 超晶格电子结构和晶格动力学等方面的性质.

电子态和晶格动力学计算需要知道超晶格的几何结构. 但令人遗憾的是, 许多计算都建立在对 Si/Ge 超晶格层间距作假设的基础上. 显然, 这种假设是值得推敲的. 为了更精确地了解 Si/Ge 超晶格电子结构和晶格动力学等方面的性质, 深入地研究超晶格的几何结构是非常有意义的. 这也是本工作的主要目的.

最近, Froyen 等人<sup>[1]</sup>用赝势方法计算了原子间的力常数, 然后根据这些力常数来决定  $(\text{Si})_n/(\text{Ge})_n$  ( $n = 2, 4, 6$ ) 超晶格的最小能量构形, 从而求得超晶格的几何构形. 需要指出的是, 用他们求得的力常数来计算体 Si 和体 Ge 的声子色散曲线, 发现在“长波”(即  $q$  较小) 情况下计算值与实验值符合较好, 但在“短波”(即  $q$  有限) 情况下却不令人满意. 许多人<sup>[2-4]</sup>指出用这种“长波”力常数来讨论几何构形是不合适的.

本文采用 Keating 模型<sup>[5]</sup>来描述超晶格的弹性能, 计算了用  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x = 0-1$ ) 作衬底、沿(100)方向生长的  $(\text{Si})_n/(\text{Ge})_n$  ( $n = 1-6$ ) 超晶格的几何构形, 并讨论了衬底对超晶格生长的影响.

## 二、Keating 模 型

早在 1966 年, 为了讨论共价晶体的弹性性质, Keating<sup>[5]</sup> 对闪锌矿结构的晶体提出了一个唯像模型. Keating 模型描述的弹性能由下式给出<sup>[5]</sup>:

$$E = \alpha \sum [\mathbf{x}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij} - (b_i + b_j)^2]^2 + \beta \sum \left[ \mathbf{x}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ik} + \frac{1}{3} (b_i + b_j)(b_i + b_k) \right]^2, \quad (1)$$

这里  $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$  代表  $i$  原子与  $j$  原子间的位置矢量;  $b_i$  是  $i$  原子的共价半径;  $\alpha$  和  $\beta$  是相互作用参数, 分别描述成键原子间的拉伸和弯曲作用. 本文所采用的 Keating 参数取自文献[6]与[7], 由表 1 给出.

表 1 计算中采用的 Keating 参数  $\alpha, \beta$  (单位: eV/Å<sup>2</sup>)

	$\alpha$	$\beta$	文献
Si	0.1851	0.0488	[7]
Ge	0.1508	0.0433	[6]

### 三、(Si)<sub>n</sub>/(Ge)<sub>n</sub> 超晶格的几何结构

本文计算的 (Si)<sub>n</sub>/(Ge)<sub>n</sub> ( $n = 1-6$ ) 超晶格是沿(100)方向生长的. 考虑不同的衬底 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> ( $x = 0-1$ ) 及没有衬底时, 超晶格的几何结构. 当  $x = 0$  时, 衬底为 Si; 当  $x = 1$  时, 衬底为 Ge. 在垂直于生长方向, Si/Ge 超晶格的晶格常数  $a_{\parallel}$  认为同衬底的晶格常数一样, 即

$$a_{\parallel} = (1-x)a_{\text{Si}} + xa_{\text{Ge}}, \quad (2)$$

这里  $a_{\text{Si}} = 5.431 \text{ \AA}$ ,  $a_{\text{Ge}} = 5.658 \text{ \AA}$  分别表示 Si 和 Ge 的晶格常数.

超晶格中的 Keating 参数  $\alpha$  和  $\beta$  由下式给出:

$$\begin{aligned} \alpha(\text{SiGe}) &= \frac{1}{2} [\alpha(\text{SiSi}) + \alpha(\text{GeGe})], \\ \beta(\text{SiGeSi}) &= \beta(\text{GeSiGe}) = \frac{1}{2} [\beta(\text{SiSiSi}) + \beta(\text{GeGeGe})], \\ \beta(\text{SiSiGe}) &= \frac{1}{3} [2\beta(\text{SiSiSi}) + \beta(\text{GeGeGe})], \\ \beta(\text{SiGeGe}) &= \frac{1}{3} [\beta(\text{SiSiSi}) + 2\beta(\text{GeGeGe})]. \end{aligned} \quad (3)$$

我们用(3)式给出的 Keating 参数来讨论 SiGe 混晶的晶格动力学, 发现计算值与实验值符合较好. 这也说明以上参数的选取是合理的.

由(3)式给出的 Keating 参数, 可以构造超晶格的弹性能, 求弹性能极小就能确定超晶格的几何结构. 对于不同的衬底, 超晶格垂直于生长方向的晶格常数  $a_{\parallel}$  由(2)式给出.

#### 1. (Si)<sub>1</sub>/(Ge)<sub>1</sub>

(Si)<sub>1</sub>/(Ge)<sub>1</sub> 实际上是 SiGe 合金. 每个原子平均弹性能随  $x$  的变化由图 1 给出. 可以看出, 当  $x = 0.5$  时, 弹性能几乎为零. 即用 Si<sub>0.5</sub>Ge<sub>0.5</sub> 作衬底时, (Si)<sub>1</sub>/(Ge)<sub>1</sub> 超

晶格中几乎没有应力存在,此时也相当于没有衬底的情况。表 2 给出了  $x = 0, 0.5, 1$  时 Si-Ge 之间的层间距。平行于界面的晶格常数  $a_{\parallel}$  由(2)式给出。

表 2  $(\text{Si})_1/(\text{Ge})_1$  超晶格的层间距(单位:  $\text{\AA}$ )

$x$	0	0.5	1
$R(\text{Si-Ge})$	1.408	1.386	1.364

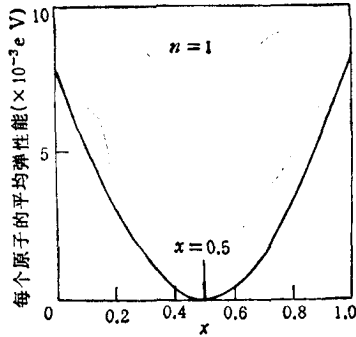


图 1  $(\text{Si})_1/(\text{Ge})_1$  中每个原子平均弹性能随  $x$  的变化 弹性能极小处用箭头标记

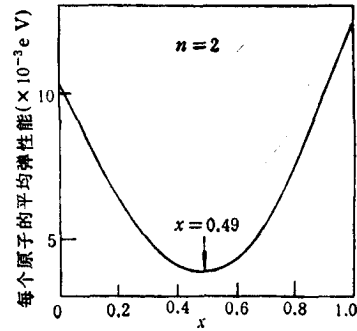


图 2  $(\text{Si})_2/(\text{Ge})_2$  中每个原子平均弹性能随  $x$  的变化

## 2. $(\text{Si})_2/(\text{Ge})_2$

$(\text{Si})_2/(\text{Ge})_2$  超晶格的每个 Si 和 Ge 原子都处在界面上。图 2 给出了每个原子平均弹性能随  $x$  的变化关系。平均弹性能的极小约出现在  $x = 0.47$ 。表 3 给出了  $x = 0, 0.5, 1$  时,  $(\text{Si})_2/(\text{Ge})_2$  超晶格的层间距。

表 3  $(\text{Si})_2/(\text{Ge})_2$  超晶格的层间距(单位:  $\text{\AA}$ )

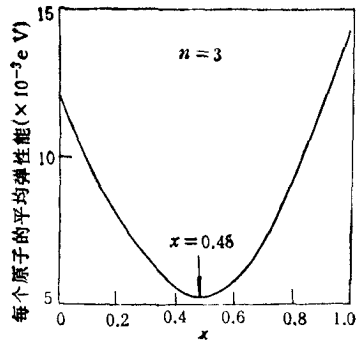
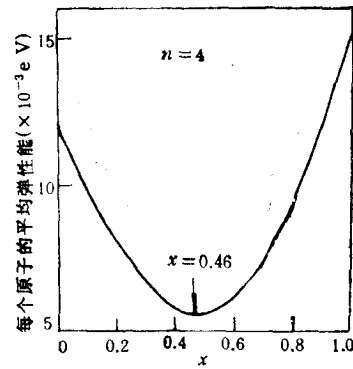
$x$	$R(\text{Si-Si})$	$R(\text{Si-Ge})$	$R(\text{Ge-Ge})$
0	1.354	1.407	1.459
0.5	1.330	1.386	1.439
1	1.306	1.364	1.419

## 3. $(\text{Si})_3/(\text{Ge})_3$

$(\text{Si})_3/(\text{Ge})_3$  超晶格中每个周期内两层 Si 和两层 Ge 原子处在界面上, 其余的一层 Si 和一层 Ge 不在界面上。图 3 给出了  $(\text{Si})_3/(\text{Ge})_3$  超晶格中每个原子的平均弹性能随  $x$  的变化。表 4 给出了  $x = 0, 0.5, 1$  时  $(\text{Si})_3/(\text{Ge})_3$  超晶格的层间距。

## 4. $(\text{Si})_4/(\text{Ge})_4$

$(\text{Si})_4/(\text{Ge})_4$  超晶格中每个周期内两层 Si 和两层 Ge 原子不在界面上。图 4 给出了每个原子平均弹性能随  $x$  的变化。从图 4 中可以看出, 弹性能极小出现在  $x = 0.42$  处。

图 3  $(\text{Si})_3/(\text{Ge})_3$  中每个原子平均弹性性能随  $x$  的变化图 4  $(\text{Si})_4/(\text{Ge})_4$  中每个原子平均弹性性能随  $x$  的变化表 4  $(\text{Si})_3/(\text{Ge})_3$  超晶格的层间距(单位:  $\text{\AA}$ )

$x$	$R(\text{Si}-\text{Si})$	$R(\text{Si}-\text{Ge})$	$R(\text{Ge}-\text{Ge})$
0	1.357*	1.409	1.457*
0.5	1.333*	1.387	1.437*
1	1.308*	1.364	1.415*

\* 表示此种间距出现两次。

表 5 给出了  $x = 0, 0.4, 0.5, 1$  时  $(\text{Si})_4/(\text{Ge})_4$  超晶格的层间距。表 5  $(\text{Si})_4/(\text{Ge})_4$  超晶格的层间距(单位:  $\text{\AA}$ )

$x$	$R(\text{Si}-\text{Si})$	$R(\text{Si}-\text{Ge})$	$R(\text{Ge}-\text{Ge})$
0	1.356*	1.408	1.467*
	1.358		1.458
0.4	1.337*	1.390	1.447*
	1.340		1.441
0.5	1.332*	1.386	1.442*
	1.335		1.436
1	1.308*	1.364	1.418*
	1.310		1.414

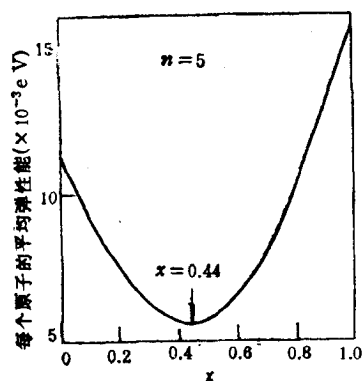
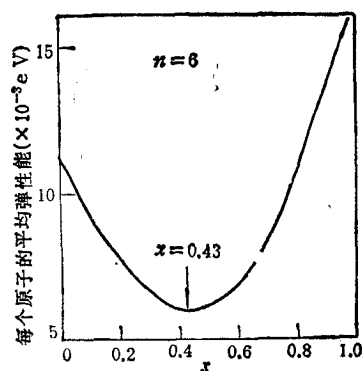
\* 表示此种间距出现两次。

### 5. $(\text{Si})_5/(\text{Ge})_5$

$(\text{Si})_5/(\text{Ge})_5$  超晶格中三层 Si 和三层 Ge 原子不在界面上。图 5 给出了每个原子的平均弹性性能随  $x$  的变化。弹性性能极小出现在  $x = 0.4$ 。表 6 给出了  $x = 0, 0.4, 0.5, 1$  时  $(\text{Si})_5/(\text{Ge})_5$  超晶格的层间距。

### 6. $(\text{Si})_6/(\text{Ge})_6$

$(\text{Si})_6/(\text{Ge})_6$  超晶格中每个周期内四层 Si 和四层 Ge 不在界面上。图 6 给出了每个原子平均弹性性能随  $x$  的变化。从图 6 中可以看出,弹性性能极小出现在  $x = 0.39$ 。表 7 给

图5  $(\text{Si})_s/(\text{Ge})_s$  中每个原子平均弹性  
能随  $x$  的变化图6  $(\text{Si})_s/(\text{Ge})_6$  中每个原子平均弹  
性能随  $x$  的变化表6  $(\text{Si})_s/(\text{Ge})_s$  超晶格的层间距(单位:  $\text{\AA}$ )

$x$	$R(\text{Si}-\text{Si})$	$R(\text{Si}-\text{Ge})$	$R(\text{Ge}-\text{Ge})$
0	1.355*	1.408	1.458*
	1.358*		1.477*
0.4	1.337*	1.391	1.442*
	1.339*		1.453*
0.5	1.332*	1.387	1.438*
	1.335*		1.446*
1	1.307*	1.364	1.417*
	1*310*		1.414*

\* 表示此种间距出现两次.

表7  $(\text{Si})_s/(\text{Ge})_6$  超晶格的层间距(单位:  $\text{\AA}$ )

$x$	$R(\text{Si}-\text{Si})$	$R(\text{Si}-\text{Ge})$	$R(\text{Ge}-\text{Ge})$
0	1.356*	1.409	1.466*
	1.358*		1.468*
	1.358*		1.480
0.4	1.337*	1.391	1.447*
	1.339*		1.447*
	1.339		1.455
0.5	1.332*	1.386	1.442*
	1.335*		1.442*
	1.334		1.448
1	1.308*	1.364	1.417*
	1.310*		1.414*
	1.310		1.415

\* 表示此种间距出现两次.

出了  $x = 0, 0.4, 0.5, 1$   $(\text{Si})_s/(\text{Ge})_6$  超晶格的层间距.

从表2至表7可以看出,当  $x = 0$ , 即 Si 作衬底时,超晶格中 Si 与 Si 之间的层间距  $R(\text{Si}-\text{Si})$  非常接近体 Si 中的层间距  $a_{\text{Si}}/4 = 1.358 \text{\AA}$ , 而 Ge 与 Ge 之间的层间距  $R(\text{Ge}-\text{Ge})$  却比体 Ge 中的层间距  $a_{\text{Ge}}/4 = 1.415 \text{\AA}$  来得大, 此时 Ge 层被拉伸了. 由此可见,用 Si 作衬底, 应力主要分布于 Ge 层中. 当  $x = 1$ , 即 Ge 作衬底时, Ge 与 Ge

之间的层间距  $R(\text{Ge}-\text{Ge})$  非常接近体 Ge 中的层间距  $1.415 \text{ \AA}$ , 此时, Ge 层中应力非常小, 而此时  $R(\text{Si}-\text{Si})$  比体 Si 的层间距  $1.358 \text{ \AA}$  小, Si 层被压缩了, 应力主要集中在 Si 层. 当  $x$  固定时, Si 与 Ge 之间的层间距  $R(\text{Si}-\text{Ge})$  随  $n$  的变化几乎没有改变, 即 Si-Ge 键几乎不随  $n$  的变化而受到影响.

从图 1 至图 6 可以看出, 当  $x$  从 0 变到 1, 弹性能从大变到小, 然后又变大. 当  $x=0$  时, 应力主要集中在 Ge 层; 当  $x=1$  时, 应力主要分布在 Si 层上. 随  $x$  从 0 到 1, 应力的分布从 Ge 层逐渐转移到 Si 层. 分析各层原子的应力, 当  $x$  使弹性能为极小时, 应力的分布是比较对称的, 即比较均匀地分布在各层原子上. 因此, 用  $x$  使弹性能为极小时的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  作衬底有利于超晶格的生长. 若用  $x$  在 0 或 1 附近所对应的衬底, 则应力的分布是不对称的; 应力或者分布在 Ge 层, 或者分布在 Si 层, 这不利于超晶格的生长.

这里讨论不存在衬底时, 超晶格的几何结构. 在没有衬底约束的情况下, 弹性能应该比有衬底存在时的弹性能小. 换句话讲, 若在  $x$  使弹性能极小所对应的衬底  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  上生长超晶格, 此时也就相当于无应力情况. 因此, 实验上要模拟无应力生长, 可以采用这种衬底. 表 8 列出了  $(\text{Si})_n/(\text{Ge})_n$  超晶格在不存衬底条件下的几何构形及相对应的  $x$  值.

表 8 无应力条件下  $(\text{Si})_n/(\text{Ge})_n$  ( $n=1-6$ ) 的几何结构(单位:  $\text{Å}$ )

$n$	$a_{\parallel}$	$x$	$R(\text{Si}-\text{Si})$	$R(\text{Si}-\text{Ge})$	$R(\text{Ge}-\text{Ge})$
1	5.545	0.5		1.386	
2	5.542	0.49	1.331	1.387	1.440
3	5.541	0.48	1.333*	1.387	1.438*
4	5.535	0.46	1.334*	1.388	1.445*
			1.337		1.438
5	5.531	0.44	1.335*	1.389	1.441*
			1.337*		1.450*
6	5.529	0.43	1.356*	1.409	1.466*
			1.358*		1.468*
			1.358		1.480

\* 表示此种间距出现两次.

从表 8 可以看出, 当  $n=1-6$ , 用适当的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x$  值由表 8 给出), 此时超晶格的应力分布比较均匀, 而且最小, 对超晶格的生长是有利的. Kasper 等人<sup>[8]</sup>指出, 超晶格的厚度与应力分布有关, 不对称的应力分布限制了超晶格生长的厚度, 而对称的应力分布却有利于超晶格的生长. 所以实验上为了获得更厚的 Si/Ge 超晶格, 可采用适当比例的合金  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  作衬底.

#### 四、结 论

本文用 Keating 模型计算了用  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  作衬底、沿 (100) 方向生长的  $(\text{Si})_n/(\text{Ge})_n$  ( $n=1-6$ ) 超晶格的几何构形. 若用 Si 作衬底, Si 层几乎不受影响, 而 Ge 层被拉伸了; 若用 Ge 作衬底, Si 层被压缩了, Ge 层几乎不受影响. 用  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  作衬底, 随  $x$  从 0 变化到 1, 应力的分布逐渐由 Ge 层向 Si 层转移. 实验上为了模拟无应力生长, 可

以采用当  $x$  使弹性能极小所对应的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  作衬底, 而且这样的衬底使  $\text{Si}/\text{Ge}$  超晶格的应力分布几乎是均匀的, 有利于获得更多重复层的超晶格。

- [ 1 ] S. Froyen, D. M. Wood and A. Zunger, *Phys. Rev.*, **B37** (1988), 6893.
- [ 2 ] G. A. Baraff, E. O. Kane and M. Schlutter, *Phys. Rev.*, **B21** (1980), 5662.
- [ 3 ] J. S. Pederson, *Surf. Sci.*, **210** (1989), 238.
- [ 4 ] S. Tiersten, S. C. Ying and T. L. Reinecke, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 4062.
- [ 5 ] P. N. Keating, *Phys. Rev.*, **145** (1966), 637.
- [ 6 ] R. M. Martin, *Phys. Rev.*, **B1**(1970), 4005.
- [ 7 ] M. I. Alonso, M. Cardona, and G. Kanellis, *Solid state Commun.*, **69** (1989), 479.
- [ 8 ] E. Kasper, H. -J. Herzog, H. Dambkes and G. Abstreiter, in *Layered Structures and Epitaxy*, edited by M. Gibson, G. C. Osbourne, and R. M. Tromp, Materials Research Society Proceedings, Vol. 56 (MRS, Pittsburgh, 1986), p. 317.

## GEOMETRICAL CONFIGURATIONS OF $(\text{Si})_n/(\text{Ge})_n$ SUPERLATTICES

ZI JIAN    ZHANG KAI-MING

*Department of Physics, Fudan University, Shanghai, 200433*

(Received 19 October 1989)

### ABSTRACT

The geometrical configurations of (100)-oriented  $(\text{Si})_n/(\text{Ge})_n$  ( $n=1-6$ ) strained superlattices on  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x=0-1$ ) substrates are calculated by using Keating model. The influence of substrate on the growth of the superlattices is discussed. The calculations indicate that proper choice of substrate  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  is beneficial to the growth of  $(\text{Si})_n/(\text{Ge})_n$  superlattices.

**PACC:** 6865