

國立交通大學

電子工程學系電子研究所碩士班

碩士論文

矽鍺磊晶成長於矽之淺受子態之理論研究



Theoretical Studies of Shallow Acceptor States in SiGe Grown on Si

研究生：林宗澤

指導教授：顏順通 博士

中華民國九十五年六月

矽鍺磊晶成長於矽之淺受子態之理論研究

Theoretical Studies of Shallow Acceptor States in SiGe Grown on Si

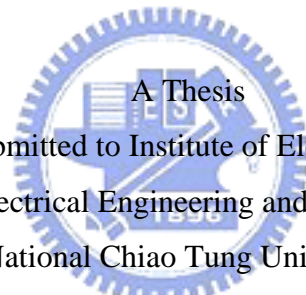
研究生：林宗澤

Student : Tsung-Tse Lin

指導教授：顏順通 博士

Advisor : Dr. Shun-Tung Yen

國立交通大學
電子研究所
碩士論文



A Thesis
Submitted to Institute of Electronics
College of Electrical Engineering and Computer Science
National Chiao Tung University
in partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of
Master
in

Computer and Information Science

June 2006

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國九十五年六月

矽鍺磊晶成長於矽之淺受子能態之理論研究

學生：林宗澤

指導教授：顏順通教授

國立交通大學電子工程學系電子研究所碩士班

摘 要

本論文主要是用一方法計算出矽鍺合金成長在矽基板上的受子能階，再判斷出其適當的束縛態及共振態。而此理論可推廣應用到各種受應力作用的半導體材料。

在此我們使用 Luttinger-Kohn 的等效質量理論以及 Bir-Pikus 的應力理論出發；在受應力的矽鍺合金其點群由原來未受應力的 T_d 群變成 D_{2d} 群，使用 $k \cdot p$ 理論在處理此問題時，我們先對 envelop functions 角度部分以群論的投影算子選取適當的基底作為符合 D_{2d} 群對稱性的波函數，以簡化計算，計算出隨著不同應力時的受子波函數之束縛態及共振態其變化的行為；而其中共振態的部分以各能帶所佔比例來判斷其合適與否。

在 $x=0$ 的時，為此理論的一特殊狀況，經由與此一部分實驗結果的比較，可以確認此計算的可信度，故可預期在一般情形之下也是可信的；在束縛態的部分已可以到的到相當可信的結果，此理論可對之後的相關半導體研究有所幫助。

Theoretical Studies of Shallow Acceptor States in SiGe Grown on Si

student : Tsung-Tse Lin

Advisors : Dr.Shun-Tung Yen

Institute of Electronics
National Chiao Tung University

ABSTRACT

A theoretical method has been developed and used for calculation of shallow acceptor levels of strained SiGe grown on Si substrate, and included the resonant states and bound states.

The theory is based on the Luttinger-Kohn 6-band model including the effect of deformation potential, and with group-theoretical consideration for acceptor states in strained SiGe. For the strained SiGe grown on (100)Si, the crystal symmetry change from T_d to D_{2d} . The angular part of envelope functions can well be found by using the technique of projection operators. We project the states to the band edge. Then we determine the resonant states by the ratio of the probability of heavy hole band, light hole band, and split of hole band.

The calculation for group-III acceptor states in bulk is the special case of strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ with x equal to zero which is the case of zero stress. Comparing to some experiment data in unstrained cases, the calculation of acceptor levels is concluded appropriate in both conditions of strained and unstrained semiconductors.

誌 謝

能夠順利的獲得碩士學位, 首先我要感謝我的指導教授顏順通老師, 在求學期間, 不管在研究或是處世上都讓我獲益良多; 實驗室的學長學弟也在這段期間在各方面給予我很多的幫忙, 特別是德賢學長, 對於我此篇論文的完成, 有十分重要的協助和幫忙。

在這段期間, 身體出了一些狀況, 家人和朋友的關心與幫忙也都是令我十分的感激。如果沒有眾人的幫忙, 就沒有今天的我。



目 錄

中文提要	i
英文提要	ii
誌謝	iii
目錄	iv
表目錄	v
圖目錄	vi
符號說明	viii
一、	緒論.....	1
二、	理論部分.....	3
2.1	基本理論.....	3
2.1.1	受子能階計算.....	3
2.1.2	應力理論.....	7
2.2	波函數.....	10
2.2.1	受子波函數.....	10
2.2.2	投影運算.....	13
2.3	共振態及束縛態.....	16
三、	結果與討論.....	19
3.1	應力對受子能階之影響.....	22
3.2	共振態及束縛態之判斷.....	31
3.3	結果與比較.....	37
四、	結論.....	40
附錄一	41
參考文獻	43

表目錄

表 2.1	材料參數	p. 6
表 2.2	計算參數	p. 10
表 2.3	D_{2d} 群的 character table	p. 14
表 2.4	D_{2d} 群的基底	p. 15
表 2.5	envelope functions 角度部分的基底	p. 16
表 3.1	偶對稱共振態	p. 38
表 3.1	奇對稱共振態	p. 38
表 3.3	實驗結果比較：對應重電洞之上的束縛能階	p. 39
附表 1.1	D_{2d} 群的 character table	p. 42



圖目錄

- 圖 2.1 hh, lh, soh 比例隨著 Ge 的比例 x 增加的變化圖.....p. 9
- 圖 3.1 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ (參雜 B) Γ_6^- 之束縛能對 Ge 含量 x 之變化圖.....p. 20
- 圖 3.2 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ (參雜 B) Γ_6^+ 之束縛能對 Ge 含量 x 之變化圖.....p. 20
- 圖 3.3 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ (參雜 B) Γ_7^- 之束縛能對 Ge 含量 x 之變化圖.....p. 21
- 圖 3.4 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ (參雜 B) Γ_7^+ 之束縛能對 Ge 含量 x 之變化圖.....p. 21
- 圖 3.5 偶對稱態隨 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 中 x 比例之變化圖.....p. 25
- 圖 3.6 奇對稱態隨 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 中 x 比例之變化圖.....p. 26
- 圖 3.7 Γ_6^- 的基態中 hh, lh, soh 機率隨著 x 變化之變化圖.....p. 27
- 圖 3.8 Γ_6^+ 的基態中 hh, lh, soh 機率隨著 x 變化之變化圖.....p. 27
- 圖 3.9 Γ_7^- 的基態中 hh, lh, soh 機率隨著 x 變化之變化圖.....p. 28
- 圖 3.10 Γ_7^+ 的基態中 hh, lh, soh 機率隨著 x 變化之變化圖.....p. 28
- 圖 3.11 Γ_6^+ 的第二激發態中 hh, lh, soh 機率隨著 x 變化之變化圖.....p. 29
- 圖 3.12 Γ_6^+ 的第三激發態中 hh, lh, soh 機率隨著 x 變化之變化圖.....p. 30
- 圖 3.13 Γ_6^+ 的第二激發態及第三激發態的機率相加.....p. 30

圖 3.14 束縛態及共振態隨著 Ge 含量 x 之變化圖.....p. 33

圖 3.15 重電洞能帶之上的束縛態能階.....p. 34

圖 3.16 重電洞能帶之下輕電洞能帶之上的共振態能階.....p. 35

圖 3.17 輕電洞能帶之下分裂電洞能帶之上的共振態能階.....p. 36



符 號 說 明

- \hbar : 蒲朗克常數
 ϵ_0 : 介電係數
 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$: Luttinger 參數
 e : 電子電量
 m : 電子質量
 V : 雜質位能
 Δ : 價帶分裂能
 k_i : 波向量
 a_v, b, d : Bir-Pikus deformation potentials
 a_0, a : lattice constants
 C_{ij} : elastic constants

