

基于谷间光学声子驱动的锗锡 谷间电子转移效应*

黄诗浩[†] 李佳鹏 李海林 卢旭星 孙钦钦 谢灯

(福建理工大学电子电气与物理学院, 福州 350118)

(2024 年 7 月 14 日收到; 2024 年 11 月 18 日收到修改稿)

谷间电子散射机制对锗锡材料的电子输运及光电性能的影响至关重要. 本文构建了锗锡材料 Γ 和 L 能谷之间的谷间光学声子散射模型, 研究其谷间电子转移效应. 结果表明: 散射率 $R_{\Gamma L}$ 高于 $R_{L\Gamma}$ 约一个数量级, 同时 $R_{\Gamma L}$ 随 Sn 组分的增加而减小, 并在 Sn 组分大于 0.1 时趋于饱和; 而 $R_{L\Gamma}$ 几乎与 Sn 组分无关. 谷间电子转移模型表明, Γ 能谷电子填充率随 Sn 组分的增大呈现先增大后趋于饱和的规律, 且与注入电子浓度关系不大. 不考虑散射模型时, 间接带 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料 Γ 能谷电子填充率与注入电子浓度关系不大; 直接带 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料 Γ 能谷电子填充率与注入电子浓度相关, 且电子浓度越低, Γ 能谷电子填充率越大. 研究成果有助于理解锗锡材料的电子迁移率、电输运和光电转换等微观机制, 可为锗锡材料在微电子和光电子等领域提供理论参考价值.

关键词: 锗锡合金, 电子-声子相互作用, 散射模型

PACS: 61.66.Dk, 63.20.kd, 05.45.Mt

DOI: 10.7498/aps.74.20240980

CSTR: 32037.14.aps.74.20240980

1 引言

$\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料不仅具有独特的电子和光学性能, 而且与 Si 基 CMOS 工艺相兼容, 是 Si 基微电子和光电子的研究热点材料之一^[1,2]. 一方面, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 具有较高的载流子迁移率, 是 Si 基高迁移率器件的理想材料^[3,4]. 另一方面, 其响应波段覆盖近红外至中红外波段, 是制备 Si 基高性能红外探测器的候选材料之一^[5,6]. 同时, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 具有能带结构可调的特点, 当 Sn 组分达到约 0.07 时, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 可调制为直接带隙材料, 被认为是实现 Si 基激光器最有希望的材料^[7-9]. 因此 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 在电子学、探测和发光等领域具有广泛的应用前景^[10-13].

载流子动力学对半导体光电器件性能的影响

至关重要. 文献^[14]理论分析了 Γ 和 L 能谷电子由于动量 k 空间的分离对 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 光电探测器性能的影响. 然而 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 直接带与间接带能谷差距较小, 电子在两个能谷之间的散射问题报道较少. 文献^[15,16]对 Ge 材料的谷间散射工作表明, 在谷间声子的散射作用下, 应变和 N 型掺杂均能有效提高导带直接带 Γ 能谷电子填充率, 进而提高 Ge 的直接带发光效率.

在实验方面, 材料中电子-声子相互作用的微观行为可以通过时间分辨的角分辨光电子能谱、时间分辨 X 射线散射自由电子激光以及时间分辨电子衍射谱仪等实验手段进行观测^[17-19]. 例如, 文献^[17]通过 X 射线自由电子激光实验, 直接观测 Ge 材料的谷间散射行为, 结果发现 Ge 材料的谷间散射时间在皮秒 (ps) 量级. 然而由于缺乏适合于窄带隙

* 福建省自然科学基金 (批准号: 2022J01950) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: haoshihuang@fjnt.edu.cn

材料的时间分辨光谱仪, 关于直接观测 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 谷间散射效应的文献报道较少, 文献中常常通过光致发光谱和光电导测试等方法测量载流子的寿命, 再根据物理模型间接推断 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 的谷间散射行为^[20,21]. 例如, 文献^[21]联合时间分辨反射光谱技术和光致发光光谱测量在 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 中估计得到皮秒量级 Γ 到 L 能谷的谷间散射时间. 虽然这些研究有助于理解载流子的动力学行为, 对 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 光电器件的设计提供了理性的思考, 但 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 载流子谷间转移的微观机制还远未阐明清楚.

本文从能带结构特征、载流子分布模拟、谷间光学声子散射建模、谷间电子转移模型等角度系统地讨论了 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 在谷间声子驱动下的载流子动力学问题. 相关量化结果可为 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 在电子学和光电子学领域的应用提供理论参考.

2 谷间电子转移效应建模

电子在周期性晶格势场的作用下运动, 进而形成了电子能带结构. 由于晶格的振动形成了声子, 因此电子在运动过程中会受到声子散射. 能带结构的色散关系对电子-声子相互作用的能量守恒起到重要的作用, 而电子-声子耦合作用的强弱影响着 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 谷间电子的散射率, 因此材料的能带结构与载流子的散射息息相关. 本文采用基于微扰理论的 30-带 $k \cdot p$ 模型计算 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 电子结构的色散特征^[22,23], 并从能带结构中提取相关参数, 主要包括导带直接带 Γ 和间接带 L 能谷的电子状态密度有效质量、禁带宽度等.

在能带参数的基础上, 电子在 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料导带 Γ 和 L 能谷的分布可以用 (1) 式表示:

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left\{ \int_0^\infty \frac{m_n^L x^{1/2} dx}{1 + \exp(x - \xi)} + \int_0^\infty \frac{m_n^\Gamma x^{1/2} dx}{1 + \exp \left[x - \xi + \left(\frac{\Delta E_{\Gamma L}}{k_B T} \right) \right]} \right\}, \quad (1)$$

式中, k_B 是玻尔兹曼常数; T 取室温 300 K; $\hbar$ 是约化普朗克常数; m_n^L 和 m_n^Γ 分别为 L 能谷和 Γ 能谷的状态密度有效质量; $\xi = \frac{E_F - E_C}{k_B T}$, E_F 是费米能级, E_C 是间接带导带底; $\Delta E_{\Gamma L}$ 是 Γ 能谷与 L 能谷的能量差值.

$\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料谷间散射模型如 (2) 式所示^[15]:

$$W_o(E_k) = \frac{\pi D_{\Gamma L}^2 N_{\text{val}}}{\rho \omega_{\Gamma L}} \{ n(\omega_{\Gamma L}) N(E) + [n(\omega_{\Gamma L}) + 1] N(E) \}, \quad (2)$$

式中:

$$N(E) = \frac{(2m_d^*)^{3/2} E^{1/2}}{4\pi^2 \hbar^3}, \quad (3)$$

$$E = E_k \pm \Delta E_{\Gamma L} \pm \hbar \omega_{\Gamma L}, \quad (4)$$

$$m_d^* = \left(m_{\parallel}^* m_{\perp}^{*2} \right)^{1/3}, \quad (5)$$

$$n(\omega_{\Gamma L}) = \left[\exp \left(\frac{\omega_{\Gamma L}}{k_B T} \right) - 1 \right]^{-1}. \quad (6)$$

(2) 式中等号后第 1 项表示吸收谷间光学声子的跃迁过程, 第 2 项表示发射谷间光学声子的跃迁过程, $N(E)$ 为跃迁终态能谷的能量状态密度, $n(\omega_{\Gamma L})$ 为平均声子数. 其中 N_{val} 是等能谷数量; ρ 是 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料体密度, 取的是 Ge 和 Sn 两种材料的线性差值; $m_{\parallel}^*, m_{\perp}^*$ 分别表示导带 L 能谷横向、纵向有效质量; 由于 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 谷间光学声子形变参数和光学声子角频率报道较少, 同时本文计算的 Sn 组分 $x < 0.2$, 组分较低且接近 Ge 材料, 因此本文在计算的过程中采用了 Ge 的相关参数进行近似处理, 即谷间光学声子形变参数和谷间光学声子角频率分别为 $D_{\Gamma L} = 4 \times 10^8 \text{ eV/cm}$, $\omega_{\Gamma L} = 4.11 \times 10^{13} \text{ rad/s}$ ^[24].

散射率反映了单位时间内载流子发生散射的次数, 其表达式如 (7) 式所示:

$$P = \frac{\int_0^\infty f(E) E^{3/2} dE}{\int_0^\infty \frac{f(E)}{W_o(E)} E^{3/2} dE}, \quad (7)$$

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp \left(\frac{E - E_F}{k_B T} \right)}, \quad (8)$$

式中 $f(E)$ 为费米-狄拉克分布函数.

在谷间光学声子的作用下, 电子在 L 能谷和 Γ 能谷间的分布情况如 (9) 式和 (10) 式所示:

$$\frac{dn_\Gamma}{dt} = -R_{\Gamma L} \cdot n_\Gamma + R_{L\Gamma} \cdot n_L, \quad (9)$$

$$\frac{dn_L}{dt} = R_{\Gamma L} \cdot n_\Gamma - R_{L\Gamma} \cdot n_L, \quad (10)$$

其中, $R_{L\Gamma}$ 和 $R_{\Gamma L}$ 分别是 L 能谷到 Γ 能谷和 Γ 能谷到 L 能谷的谷间光学声子散射率, n_Γ 和 n_L 分别

是 Γ 能谷和 L 能谷的谷内载流子浓度.

3 结果与讨论

$\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 的能带参数如图 1 所示. 从图 1(a) 可知, 随着 Sn 组分的增大, Γ 能谷和 L 能谷的能量差值呈现线性减小的趋势; 当 Sn 组分 $x = 0.07$ 时, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 从间接带材料转变为直接带材料, 该结果与实验观察现象一致 [25].

图 1(b) 显示了导带电子状态密度与 Sn 组分之间的关系. 导带 Γ 能谷电子状态密度有效质量随着 Sn 组分的增大线性减小. 但是导带 L 能谷电子状态密度有效质量随着 Sn 组分的增大呈现二次函数的变化, 当 $x = 0.15$ 时, L 能谷电子状态密度有效质量达到极小值 ($m_d = 0.220m_0$). 不同于传统的 $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ 材料, 理论与实验研究表明在 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 系统中, 有效质量参数的非线性外推已被证明是可

靠的 [23].

值得一提的是, L 能谷电子状态密度有效质量始终比 Γ 能谷电子状态密度有效质量高约一个数量级. 这表明在准直接带隙的 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料中, 注入的电子更倾向于填充到间接带 L 能谷中.

$\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 的谷间散射率计算结果如图 2 所示. 图 2(a) 表明, 由于低 Sn 组分 ($x < 0.07$) 的 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料是间接带材料, 处于 Γ 能谷的电子能量高于间接带 L 能谷能量, 因此直接带 Γ 能谷的电子很容易通过发射谷间光学声子散射到间接带 L 能谷. 然而, 由于高 Sn 组分 ($x > 0.07$) 的 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 是直接带材料, 因此直接带 Γ 能谷的电子只有获得足够高的能量才能通过吸收或者发出谷间光学声子, 并且在一定的动量供给下跃迁到间接带 L 能谷.

对于间接带 L 能谷的电子散射到直接带 Γ 能谷的情况与此相反, 如图 2(b) 所示. 模拟结果

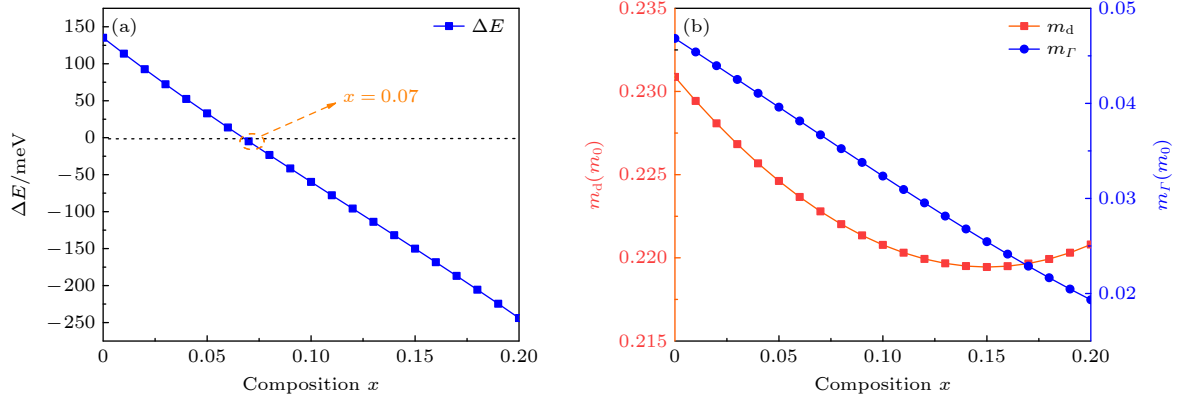


图 1 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料的能带参数 (a) Γ 能谷与 L 能谷的能量差值与 Sn 组分之间的关系; (b) 导带电子状态密度与 Sn 组分之间的关系

Fig. 1. Parameters of $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$: (a) The energy difference of Γ and L valley as a function of composition x ; (b) the electron density of states (DOS) effective masses at Γ and L valley as a function of composition x .

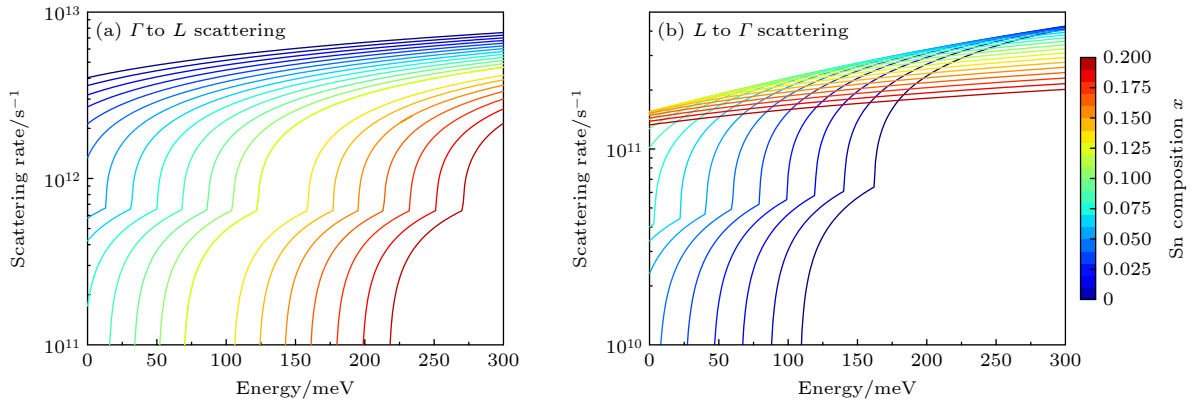


图 2 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料的谷间散射率 (a) Γ 能谷到 L 能谷的散射率与能量的关系; (b) L 能谷到 Γ 能谷的散射率与能量的关系

Fig. 2. Inter-valley scattering rate (a) from Γ to L valleys and (b) from L to Γ valley with different Sn compositions.

表明, 低 Sn 组分的间接带 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料, 处于 L 能谷的电子只有获得足够高的能量才能通过吸收或者发出谷间光学声子散射到 Γ 能谷. 而高 Sn 组分的 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料, 处于 L 能谷的电子能量高于直接带 Γ 能谷, 因此 L 能谷的电子很容易通过发射谷间光学声子跃迁到直接带 Γ 能谷.

值得一提的是, 高 Sn 组分的直接带 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料, 组分越高处于 Γ 能谷的电子越不容易发生谷间散射. 然而, 低 Sn 组分的间接带 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料, 虽然大部分载流子处于 L 能谷, 但是室温下只需要克服 $1kT$ — $3kT$ 的能量, 就能散射到直接带 Γ 能谷. 从定性可知, 低 Sn 组分的 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料, 电子更容易发生从 L 能谷到 Γ 能谷的谷间光学声子散射.

为了进一步定量地揭示影响谷间散射的因素, 本文计算了注入载流子与谷间散射率之间的关系, 如图 3 所示. 一方面, 高注入载流子浓度能够提高 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 的散射率, 该结论与文献报道的 n 型重掺杂 Ge-on-Si 材料具有很强的从间接带到直接带的谷间散射现象这一实验观察结果一致 [26]. 另一方面, 本文计算得到的 Ge 材料的载流子平均散射时间为 216 fs, 与实验测量得到的体材料 Ge 的平均散射时间 (230 ± 25) fs 以及 Ge/SiGe 量子阱系统测量得到的平均散射时间 185 fs 吻合得较好 [27–29], 进一步说明了本文计算结果的正确性.

谷间光学声子的散射率与 Sn 组分之间的关系如图 4 所示. 电子从 Γ 能谷散射到 L 能谷的散射率随着 Sn 组分的增加而减小, 且 Sn 组分大于 0.1 时趋于饱和. 这是因为 L 能谷具有较大的电子状态密度有效质量, 并且对于 Sn 组分小于 0.1 时的直接带 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料, 其直接带与间接带的能谷差值较小, 处于 Γ 能谷的电子仍然可以通过谷间散射过程快速散射至 L 能谷. 电子从 L 能谷散射到 Γ 能谷的散射率几乎不随 Sn 组分的改变而改变. 同时, 电子从 Γ 能谷散射到 L 能谷的散射率高于电子从 L 能谷散射到 Γ 能谷的散射率约一个数量级. 这主要是因为 L 能谷电子状态密度有效质量始终比 Γ 能谷电子状态密度有效质量高约一个数量级.

$\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料导带 Γ , L 能谷电子浓度与谷间电子转移时间的关系如图 5 所示, 插图为线性坐标. 结果表明, 对于低 Sn 组分的间接带 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料, 由于 L 能谷的状态密度有效质量大于直接

带, 因此初始注入的电子大部分分布于 L 能谷. 但是, 在声子的参与作用下, 平均经过约 0.3 ps, Γ 能谷的电子浓度迅速升高, 而 L 能谷电子浓度减小不明显. 说明谷间电子转移效应有利于低 Sn 组分的间接带 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料提高 Γ 能谷的电子浓度.

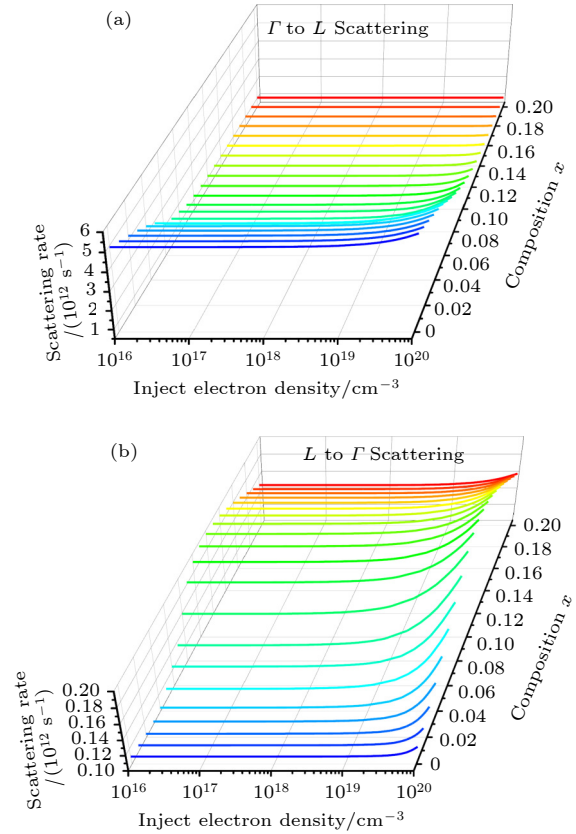


图 3 谷间散射率与注入电子之间的关系 (a) Γ 能谷到 L 能谷的谷间散射率; (b) L 能谷到 Γ 能谷的散射率

Fig. 3. Relationship between inter-valley scattering rate and inject electron density under the condition of different Sn compositions: (a) From Γ to L valleys scattering; (b) from L to Γ valley scattering.

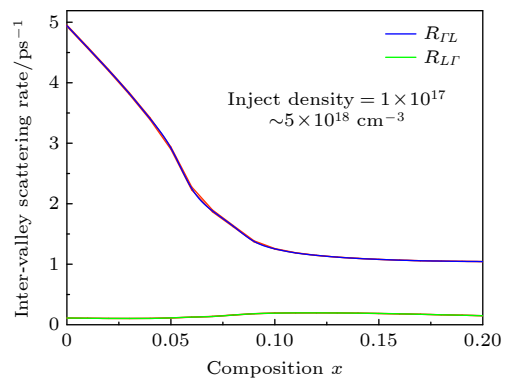


图 4 谷间光学声子散射率与 Sn 组分之间的关系

Fig. 4. Inter-valley scattering rate from Γ to L valleys scattering and from L to Γ valley scattering under different Sn compositions.

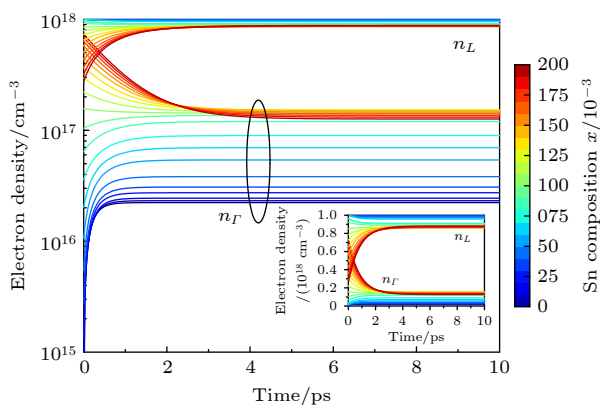


图5 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料注入电子浓度与电子转移时间的关系 (对数坐标), 插图为线性坐标

Fig. 5. Relationship between electron transmission time and electron density in Γ , L valleys with various Sn compositions, the inset shows as a linear scale.

对于高 Sn 组分的直接带 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料, 由于 Γ 能谷的能量低于 L 能谷, 因此初始注入的电子大部分分布于 Γ 能谷. 但是, 在声子的参与作用下, Γ 能谷的电子浓度会缓慢减小, 而 L 能谷的电子浓度缓慢增大. 这一现象的主要原因是 L 能谷电子状态密度有效质量较大.

散射时间常数与 Sn 组分的关系如图 6 所示. 结果表明, 随着 Sn 组分的增加, 散射时间常数有所延长. 也就是说, 组分越低, 电子-声子相互作用越有利于谷间电子的重新分布. 从发光的角度来说, 谷间散射的作用更有利于低 Sn 组分的 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料迅速从 L 能谷补充电子到 Γ 能谷, 进而提高直接带发光效率.

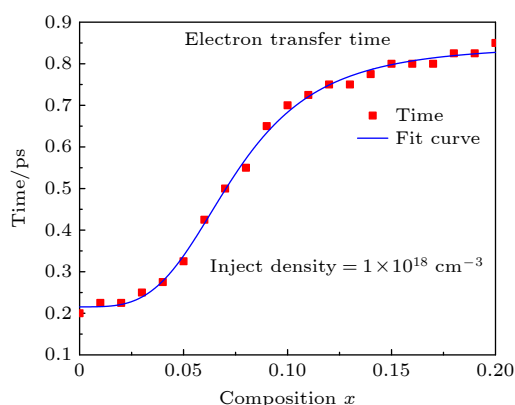


图6 散射时间常数与 Sn 组分的关系

Fig. 6. Relationship between composition and time-delay.

为了进一步揭示注入电子浓度在 Γ 和 L 能谷的分布规律, 本文计算了不同注入电子浓度情况下 Γ 能谷与 L 能谷电子填充率与 Sn 组分的关系,

如图 7 所示. 计算结果表明, 当 Sn 组分 $x < 0.7$ 时, 相比于不考虑散射模型的情况, 组分越低, 电子-声子相互作用对提高直接带 Γ 能谷的电子填充率更显著, 并且散射作用对电子分布的影响与注入载流子浓度关系不大. 当 $0.7 < x < 0.1$ 时, 在考虑散射模型的情况下, Sn 组分增大, 直接带 Γ 能谷电子填充率也增大; 但在不考虑散射模型的情况下, 载流子浓度越高, 直接带 Γ 能谷电子填充率越低, 这是因为随着费米能级的提高, 大部分电子更倾向于分布在有效质量更大的 L 能谷. 当 $x > 0.10$ 时, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 为直接带材料, 在考虑散射模型的情况下, Sn 组分增大, 直接带 Γ 能谷电子填充率趋于饱和. 但在不考虑散射模型的情况下, 直接带 Γ 能谷电子填充率与注入载流子的浓度相关. 具体表现为: 同一组分下, 注入电子浓度越小, 直接带 Γ 能谷电子填充率越高, 这是因为低注入电子浓度情况下, 费米能级远离导带低, 电子优先占据能级较低的 Γ 能谷; 高注入电子浓度时, 费米能级接近 L 能谷, 而 L 能谷的有效质量大于 Γ 能谷的有效质量, 所以大部分电子将分布于 L 能谷, 从而导致直接带 Γ 能谷电子填充率下降.

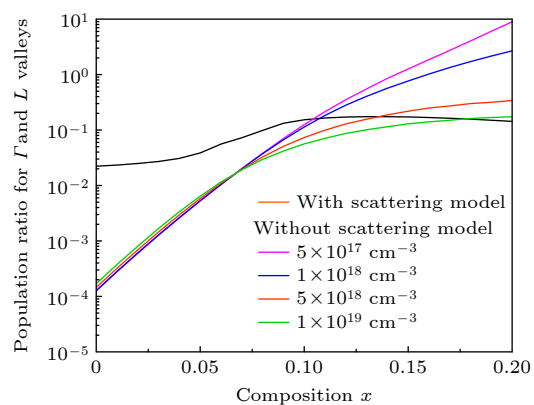


图7 考虑与不考虑散射模型的情况下, Γ 能谷、 L 能谷电子填充率与 Sn 组分的关系

Fig. 7. Simulated electron population ratio for Γ and L valleys as a function of Sn compositions, with and without the scattering model.

4 结 论

本文模拟并分析了 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料导带直接带 Γ 和间接带 L 能谷之间的谷间光学声子散射机制. 数值结果表明, 由于 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料 L 能谷电子状态密度有效质量始终比 Γ 能谷电子状态密度有效

质量高约一个数量级, 导致了电子从 Γ 能谷散射到 L 能谷的散射率高于电子从 L 能谷散射到 Γ 能谷的散射率. 同时, 电子从 Γ 能谷散射到 L 能谷的散射率随着 Sn 组分的增加而减小, 且 Sn 组分大于 0.1 时趋于饱和. 电子从 L 能谷散射到 Γ 能谷的散射率几乎不随 Sn 组分的改变而改变. 此外, 谷间电子转移模型表明, 直接带 Γ 能谷电子填充率与注入电子浓度关系不大, 并且随着 Sn 组分的增大呈现先增大后趋于饱和的规律. 在不考虑散射模型的情况下, 间接带 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料, 组分越高, 越有利于提高直接带 Γ 能谷的电子填充率, 且与注入载流子浓度关系不大; 直接带 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 材料, Γ 能谷的电子填充率与注入电子浓度相关, 且电子浓度越低, 由于费米能级远离导带底, Γ 能谷的电子填充率越大. 量化数据有助于理解锗锡材料的载流子散射微观机制, 可为相关材料与器件的设计提供理论参考价值.

参考文献

- [1] Miao Y H, Wang G L, Kong Z Z, Xu B Q, Zhao X W, Luo X, Lin H X, Dong Y, Lu B, Dong L P, Zhou J R, Liu J B, Radamson H H 2021 *Nanomaterials* **11** 2556
- [2] Oka H, Mizubayashi W, Ishikawa Y, Uchida N, Mori T, Endo K 2021 *Appl. Phys. Express* **14** 096501
- [3] Zhang D, Song J J, Xue X X, Zhang S Q 2022 *Chin. Phys. B* **31** 068401
- [4] Wang H J, Han G Q, Jiang X W, Liu Y, Zhang J C, Hao Y 2019 *IEEE Trans. Electron Devices* **66** 1985
- [5] Wang P C, Huang P R, Ghosh S, Bansal R, Jheng Y T, Lee K C, Cheng H H, Chang G E 2024 *ACS Photonics* **11** 2659
- [6] Reboud V, Concepción O, Du W, El Kurdi M, Hartmann J M, Ikonik Z, Assali S, Pauc N, Calvo V, Cardoux C, Kroemer E, Coudurier N, Rodriguez P, Yu S Q, Buca D, Chelnokov A 2024 *Photon. Nanostruc. Fundam. Appl.* **58** 101233
- [7] Zheng J, Liu Z, Xue C L, Li C B, Zuo Y H, Cheng B W, Wang Q M 2018 *J. Semicond.* **39** 061006
- [8] Zhou Y 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
- [9] Ghetmiri S A, Du W, Margetis J, Mosleh A, Cousar L, Conley B R, Domulevich L, Nazzal A, Sun G, Soref R A, Tolle J, Li B, Naseem H A, Yu S Q 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 151109
- [10] Wirths S, Geiger R, von den Driesch N, 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
- [11] Arakawa Y, Nakamura T, Urino Y, Fujita T 2013 *IEEE Commun. Mag.* **51** 72
- [12] Wu S T, Zhang L, Wan R Q, Zhou H, Lee K H, Chen Q M, Huang Y C, Gong X, Tan C S 2023 *Photonics Res.* **11** 1606
- [13] Liu X Q, Zhang J, Niu C Q, Liu T R, Huang Q X, Li M M, Zhang D D, Pang Y Q, Liu Z, Zuo Y H, Cheng B W 2022 *Photonics Res.* **10** 1567
- [14] Ghosh S, Sun G, Yu S Q, Chang G E 2025 *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **31** 1
- [15] Huang S H, Xie W M, Wang H C, Lin G Y, Wang J Q, Huang W, Li C 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 040501 (in Chinese) [黄诗浩, 谢文明, 汪涵聪, 林光杨, 王佳琪, 黄巍, 李成 2018 *物理学报* **67** 040501]
- [16] Huang S H, Zheng Q Q, Xie W M, Lin J Y, Huang W, Li C, Qi D F 2018 *J. Phys. Condens. Matter* **30** 465701
- [17] Murphy-Armando F, Murray É D, Savić I, Trigo M, Reis D A, Fahy S 2023 *Appl. Phys. Lett.* **122** 012202
- [18] Wang C, Wang H, Chen W, Xie X, Zong J, Liu L, Jin S, Zhang Y, Yu F, Meng Q, Tian Q, Wang L, Ren W, Li F, Zhang H, Zhang Y 2021 *Nano Lett.* **21** 8258
- [19] Stern M J, René de Cotret L P, Otto M R, Chatelain R P, Boisvert J P, Sutton M, Siwick B J 2018 *Phys. Rev. B* **97** 165416
- [20] Huang P, Zhang Y, Hu K, Qi J, Zhang D, Cheng L 2024 *Chin. Phys. B* **33** 017201
- [21] Rogowicz E, Kopaczek J, Kutrowska-Girzycka J, Myronov M, Kudrawiec R, Syperek M 2021 *ACS Appl. Electron. Mater.* **3** 344
- [22] Rideau D, Feraille M, Ciampolini L, Minondo M, Tavernier C, Jaouen H, Ghetti A 2006 *Phys. Rev. B* **74** 195208
- [23] Song Z, Fan W, Tan C S, Wang Q, Nam D, Zhang D H, Sun G 2019 *New J. Phys.* **21** 073037
- [24] Lever L, Ikonik Z, Valavanis A, Kelsall R W, Myronov M, Leadley D R, Hu Y, Owens N, Gardes F Y, Reed G T 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 123105
- [25] Liu S Q, Yen S T 2019 *J. Appl. Phys.* **125** 245701
- [26] Wang X, Li H, Camacho-Aguilera R, Cai Y, Kimerling L C, Michel J, Liu J 2013 *Opt. Lett.* **38** 652
- [27] Claussen S A, Tasyurek E, Roth J E, Miller D A B 2010 *Opt. Express* **18** 25596
- [28] Zhou X Q, van Driel H M, Mak G 1994 *Phys. Rev. B* **50** 5226
- [29] Mak G, van Driel H M 1994 *Phys. Rev. B* **49** 16817

Electron transmission dynamics of $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys based on inter-valley electrons transferring effect^{*}

HUANG Shihao[†] LI Jiapeng LI Hailin
LU Xuxing SUN Qinqin XIE Deng

(School of Electronic, Electrical Engineering and Physics, Fujian University of Technology, Fuzhou 350118, China)

(Received 14 July 2024; revised manuscript received 18 November 2024)

Abstract

$\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys have aroused great interest in silicon photonics because of their compatibility with complementary metal-oxide-semiconductor (CMOS) technology. As a result, they are considered potential candidate materials. Owing to the significant differences in effective mass within the valleys, the unique dual-valley structure of Γ valley and L valley in energy can improve the optoelectronic properties of $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys. Therefore, inter-valley scattering mechanisms between the Γ and L valley in $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys are crucial for understanding the electronic transports and optical properties of $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ materials. This work focuses on the theoretical analysis of inter-valley scattering mechanisms between Γ and L valley, and hence on the electron transmission dynamics in $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys based on the phenomenological theory model.

Firstly, the 30th-order $k \cdot p$ perturbation theory is introduced to reproduce the band structure of $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$. The results show that the effective mass of L valley is always about an order of magnitude higher than that of Γ valley, which will significantly influence the electron distributions between Γ and L valley.

Secondly, the scattering mechanism is modeled in $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys. The results indicate that scattering rate $R_{\Gamma L}$ is about an order of magnitude higher than $R_{L\Gamma}$, while $R_{\Gamma L}$ decreases with the increase of Sn composition and tends to saturate when Sn component is greater than 0.1. And $R_{L\Gamma}$ is almost independent of the Sn component.

Thirdly, kinetic processes of carriers between Γ and L valley are proposed to analyze the electron transmission dynamics in $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys. Numerical results indicate that the electron population ratio for Γ -valley increases and then tends to saturation with the increase of Sn composition, and is independent of the injected electron concentration. The model without the scattering mechanism indicates that the electron population ratio for Γ -valley in indirect- $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys is independent of the injected electron concentration, while the electron population ratio for Γ -valley in direct- $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys is dependent on the injected electron concentration, and the lower the electron concentration, the greater the electron population ratio for Γ -valley is.

The results open a new way of understanding the mechanisms of electron mobility, electrical transport, and photoelectric conversion in $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys, and can provide theoretical value for designing $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys in the fields of microelectronics and optoelectronics.

Keywords: $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys, electron-phonon interaction, inter-valley scattering model

PACS: 61.66.Dk, 63.20.kd, 05.45.Mt

DOI: [10.7498/aps.74.20240980](https://doi.org/10.7498/aps.74.20240980)

CSTR: [32037.14.aps.74.20240980](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20240980)

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Fujian Province, China (Grant No. 2022J01950).

[†] Corresponding author. E-mail: haoshihuang@fjut.edu.cn

基于谷间光学声子驱动的锗锡谷间电子转移效应

黄诗浩 李佳鹏 李海林 卢旭星 孙钦钦 谢灯

Electron transmission dynamics of $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys based on inter-valley electrons transferring effect

HUANG Shihao LI Jiapeng LI Hailin LU Xuxing SUN Qinqin XIE Deng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 036101 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20240980

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20240980>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

微波退火和快速热退火下钛调制镍与锗锡反应

Reaction of titanium-modulated nickel with germanium-tin under microwave and rapid thermal annealing

物理学报. 2021, 70(11): 116801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202118>

双表面周期性弹性声子晶体板中的谷拓扑态

Valley topological states in double-surface periodic elastic phonon crystal plates

物理学报. 2022, 71(24): 244302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221292>

等离子体对电子间相互作用的屏蔽效应研究

Plasma screening effect on electron-electron interactions

物理学报. 2023, 72(7): 073102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222339>

相互作用费米子的量子模拟

Quantum simulation of interacting fermions

物理学报. 2022, 71(22): 226701 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221756>

二维电介质光子晶体中量子自旋与谷霍尔效应共存的研究

Coexistence of quantum spin and valley hall effect in two-dimensional dielectric photonic crystals

物理学报. 2023, 72(7): 074205 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221814>

高能粒子测地声模与Dimits区漂移波相互作用

Nonlinear interaction of EGAM with DW turbulence in the Dimits shift region

物理学报. 2022, 71(1): 015201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211430>