

超晶格的声子态密度计算

傅 英 徐文兰

(中国科学院上海技术物理研究所红外物理开放研究实验室)

摘要——在 Recursion 方法的基础上提出一种实空间计算半导体三维超晶格声子态密度的方法,并用于二元超晶格系统,取得了较理想的结果。

一、前 言

超晶格结构材料的发现引起了人们极大的兴趣,几年的时间内便有了大量的实验和理论工作报告,使这种材料的物性研究发展极快。在晶格振动方面,振动模的区域性行为(Confinement of Modes)、界面模、模随层厚的变化规律等等都已有较为明确的实验和理论结论。但是与实验工作相比,由于计算量极大,这方面的理论工作却受到很大的限制。设想原子层平行于 XY 面,在 Z 方向叠加形成超晶格结构,可以发现这种结构在 Z 方向和 XY 面上分别保持着平移不变性。目前许多理论工作都是基于 Z 方向平移不变性的存在,把超晶格结构体系简化为 Z 方向上的一维线链^[1,2]。但众所周知,三维真实体系中各振动模之间有着十分强烈的相关性。在超晶格结构体系中就是平行于 XY 平面的振动模和垂直于 XY 平面的振动模之间存在相关性。

我们的目的是针对真实三维体系进行理论计算和分析,作为工作的第一步,本文侧重阐述计算模型及方法,并给出运用该模型和方法计算的双原子金刚石结构(1 1 1)方向上超晶格的声子态密度谱线。

二、基本理论及超晶格结构

图 1 所示为金刚石结构。在原点的原子标号为 1,找出其第一近邻 4 个原子,分别标为 2、3、4、5;再找出 2、3、4、5 号原子的第一近邻,这些近邻中可能有 1 号到 5 号原子,也会增加一些未编号的原子,将未编号的原子编为 6、7、...17;如此依次向外对原子进行编号。再根据超晶格原子面的取向,选取参照面。在我们的问题中,参照面为(1 1 1)面,为图 1 中 EFG 面。设 $OG=OE=OF=1$,则 EFG 面的方程为

$$X+Y+Z-1=0 \quad (1)$$

空间某点 (x, y, z) 到该面的距离 $d(x, y, z)$ 为

$$d(x, y, z) = X + Y + Z - 1, \quad (2)$$

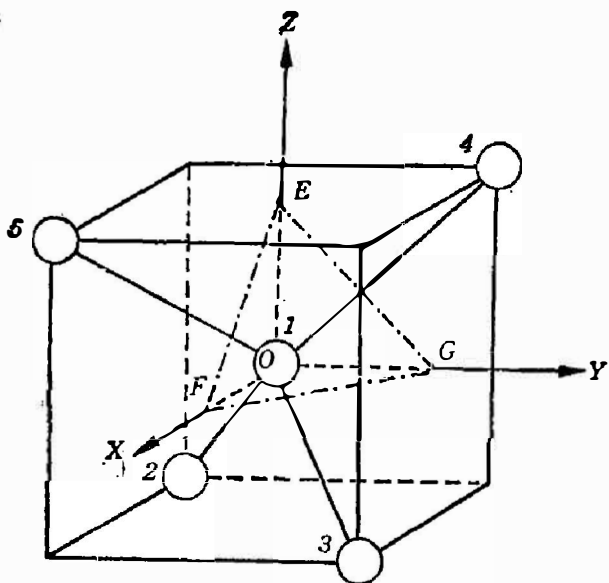


图1 金刚石结构

Fig. 1 Diamond structure.

如 $d(x, y, z) > 0$ 则表明此点在该面上方, $d(x, y, z) < 0$ 则在该面下方。如果在 $d > 0$ 的格点上都放置质量为 m 的原子, 在 $d < 0$ 的格点上都放置任何原子, 则我们得到一个表面。在建立超晶格结构时亦以 d 值决定对应格点上的原子种类: $l_1 \geq d > l_2$ 为 A 原子, $l_2 \geq d > l_3$ 为 B 原子, $l_3 \geq d > l_4$ 为 A 原子……这里我们根据所需各原子层的厚度来决定 $\{l_i\}$ 的值。

建立超晶格结构后, 便可着手进行系统的声子态密度计算。在简谐近似下, 原子的振动方程可以写成

$$m_k \ddot{U}_{k\alpha} = \sum_{k'} \phi_{kk'/\alpha\alpha'} U_{k'\alpha'}, \quad (3)$$

其中 k 为原子序号, α 为坐标标号, $U_{k\alpha}$ 为 k 原子振动在 α 方向上的投影分量, $\phi_{kk'/\alpha\alpha'}$ 为 k 和 k' 原子间作用矩阵的第 $\alpha\alpha'$ 矩阵元。

设

$$U_{k\alpha} = A_{k\alpha} e^{-i\omega t} / \sqrt{m_k}, \quad (4)$$

$$\phi_{kk'/\alpha\alpha'} = H_{kk'/\alpha\alpha'} \sqrt{m_k m_{k'}}, \quad (5)$$

方程(3)可以写成矩阵形式

$$H |A\rangle = \omega^2 |A\rangle. \quad (6)$$

定义格林函数

$$G(\omega^2) (H - I\omega^2) = I, \quad (7)$$

这里 I 为单位矩阵。通过 Recursion 方法^[5]计算格林函数的对角元便可以得到所有原子位置上的声子局域态密度。在超晶格结构中由于平移不变性的存在, 只需计算有限 n 个特殊原子位置上的声子局域态密度便能得到晶格的总体振动行为。

按照波恩模型, 很容易得到金刚石结构中互为最近邻原子间作用矩阵的形式

$$\begin{bmatrix} \alpha & \beta & \beta \\ \beta & \alpha & \beta \\ \beta & \beta & \alpha \end{bmatrix}. \quad (8)$$

计算中所用参数列于表1中, 这组参数也是我们描述 $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ 混晶体系所使用的^[4]。

表1 计算参数(约化单位)

Table 1 Parameters used in calculation (in reduced unit).

m_A	m_B	α_{AA}	β_{AA}	α_{BB}	β_{BB}	α_{AB}	β_{AB}
1.00	2.64	1.13	0.734	1.00	0.720	1.065	0.779

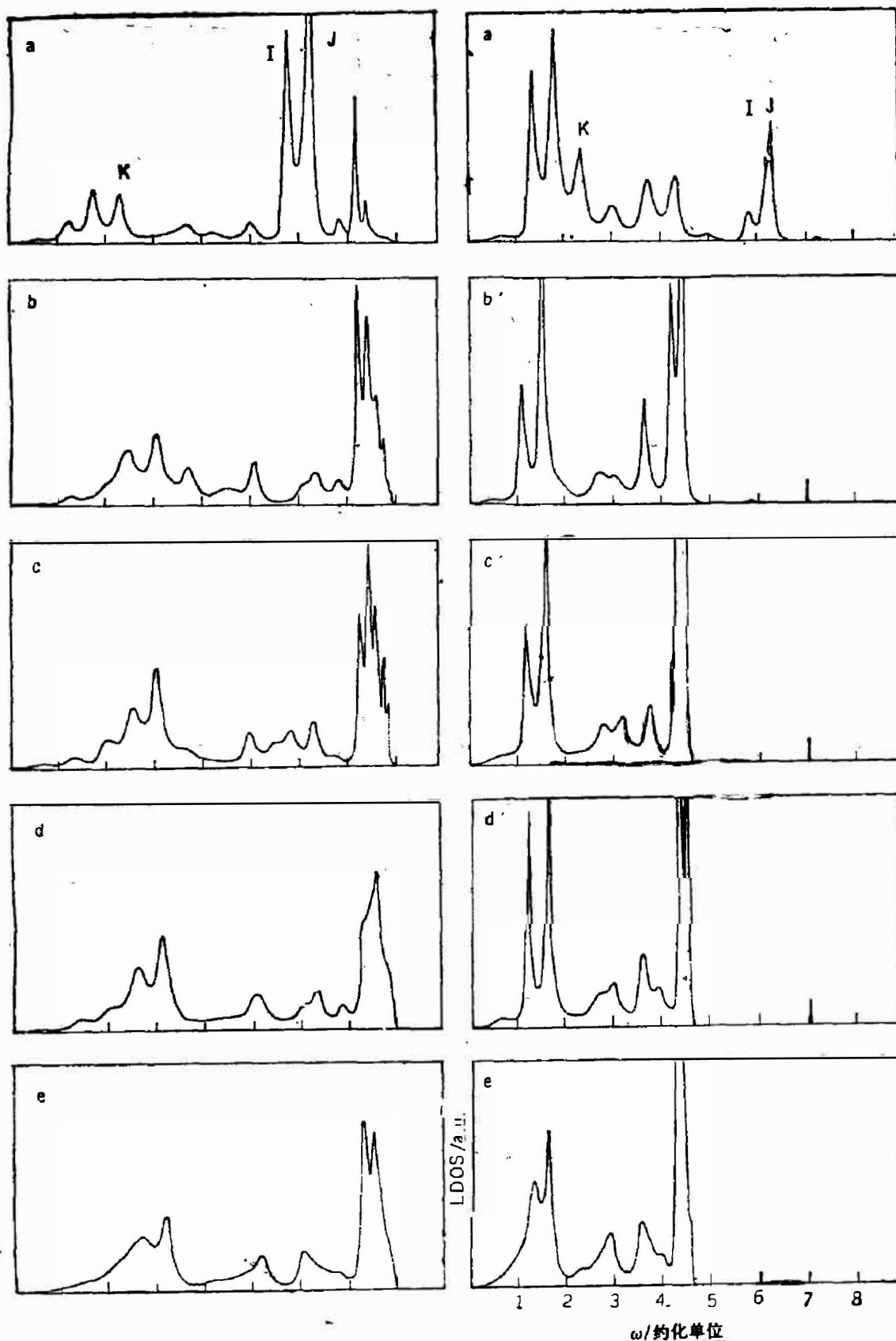


图2 $(A)_8(B)_8$ 超晶格的声子局域态密度

e 和 e' 为 A 晶体和 B 晶体体材料的声子态密度, a, b, c, d 为第一、二、三、四层 A 原子的声子局域态密度, a', b', c', d' 为第一、二、三、四层 B 原子的声子局域态密度

Fig. 2 Phonon LDOSs of $(A)_8(B)_8$ superlattice.

Curves e and e' are the phonon density of states of perfect bulk materials composed of atoms A and B , respectively; curves a, b, c, d are LDOSs of atom A in layers 1, 2, 3 and 4, and curves a', b', c' and d' are LDOSs of atom B in layers 1, 2, 3 and 4, respectively.

三、计算结果及分析

图2为8层A原子和8层B原子组成的超晶格声子局域态密度(LDOS)的计算结果,作为对比,我们还给出了完整的A晶体和B晶体体材料的声子态密度。通过比较可以看到各元素层中间层原子的声子态密度已十分接近相应体材料的声子态密度。我们还计算了(111)面上A原子和B原子形成界面时的情形,结果表明,离界面各为三到四层的A原子和B原子的局域声子态密度也十分接近各自完整晶体体材料的声子态密度。由此我们推论,在共价性极强的材料如Si:Ge、GaAlAs:GaAs体系中,界面的影响仅涉及最靠近界面的几个原子层,计算材料的声子态密度时,只要计算受界面影响较大的几个原子层中原子位置上的声子局域态密度就行。

对比A原子和B原子位置上的声子局域态密度可以发现,A原子上的各带模明确地不在B原子上的声子局域态密度上,B原子上的各带模也不明显出现在A原子上的声子局域态密度上,尤其是TO带模。这就是模的区域性行为:A原子(B原子)的TO带模仅在A原子层(B原子层)中传播,简称区域模行为。但假如完整A晶体和B晶体体材料中的对应带模位置比较接近,则某一原子层的TO带模可以穿越界面在另一原子层中传播,这时的情形可确切说成是共振,称作共振模行为。

在最靠近界面的两个原子层的声子局域态密度完全不同于内层原子的声子局域态密

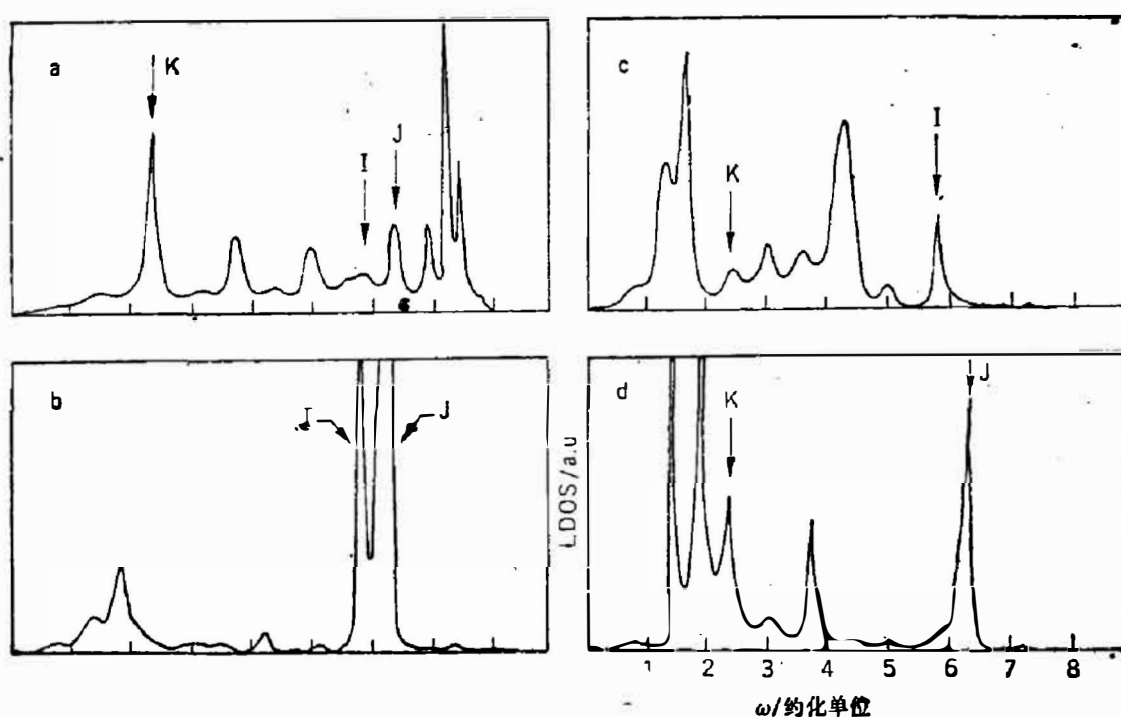


图3 声子局域态密度的分解

a、c为垂直于(111)面方向A原子和B原子的声子局域态密度,b、d为平行于(111)面方向的A原子和B原子的声子局域态密度

Fig. 3 Decomposition figure of LDOSs.

Curves a and c are LDOSs of atom A and atom B perpendicular to plane (111);
curves b and d are LDOSs parallel to plane (111).

度。最明显的是界面原子位局域声子态密度上的两个界面模 I 和 J, 这两个模在第二层原子位的声子局域态密度上已基本衰减消失。把这两个原子上的声子局域态密度分解为平行于(111)面和垂直于(111)面的两部分, 如图 3 所示。由公式^[5]

$$\rho_{k\alpha}(\omega) = |\bar{U}_{k\alpha}(\omega)|^2 D(\omega), \quad (9)$$

$$|\bar{U}_{k\alpha}(\omega)|^2 = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r |U_{k\alpha}^j(\omega)|^2, \quad (10)$$

可以看到声子局域态密度反映的原子振动振幅平均值的大小, 这里 $\rho_{k\alpha}(\omega)$ 是 k 原子 α 方向上的声子局域态密度, $D(\omega)$ 为总体声子态密度。从 B 原子的声子局域态密度可以看出, I 模中 B 原子的振动位移垂直于界面, 而 J 模中 B 原子的振动位移平行于界面, A 原子在 I 模和 J 模中的振动位移都平行于界面。另一个十分明显的模是 K 模, 它在第二层 A 原子上仍有振动, 在第二层 B 原子已衰减消失。分析图 3 可知: K 模中 A 原子的振动位移垂直于界面, B 原子的振动位移则平行于界面。

虽然我们在计算过程中采用的是 Ge:Si 系统参数, 但由于这种系统中存在较大的晶格失配, 系统的结构会有较大的畸变, 特别是在界面处, 因此本文仅提出一种可行的理论计算方法。从我们的计算过程来看, 计算量不大, 只要求计算机的内存能够存贮原子间相互作用矩阵。而且, Recursion 方法中的递推系数 $\{a_i, b_i\}$ 的变化行为十分重要, 在我们的计算中, 它们都有明确的收敛趋势, 在第二十对 a, b 系数左右就十分接近极限值。我们还将发表实际三维体系 GaAs|Ga_{1-x}Al_xAs 超晶格的声子态密度的计算结果和分析。

参 考 文 献

- [1] Barker A. S., et al., *Phys. Rev.*, **B17**(1978), 3181.
- [2] Djafari-Rouhani B. et al., *Superlattice & Microstructures*, **1**(1985), 29.
- [3] 吴式玉、郑兆勃, *物理学报*, **32**(1983), 46.
- [4] 傅英、徐文兰, *物理学报*, 待发表。
- [5] 徐文兰、傅英、郑兆勃, *半导体学报*, **8**(1987), 520.

PHONON DENSITY OF STATES CALCULATION FOR SUPERLATTICE SYSTEMS

FU YING XU WENLAN

(Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

Based on the fundamental Recursion method, a calculational method in real space for the phonon density of states of three-dimensional semiconductor superlattice systems is presented. The application of this method to the diatomic superlattice system is successful.