

砷化镓中 EL2 深能级结构模型的晶格振动态密度

徐文兰

(中国科学院上海技术物理研究所红外物理国家实验室, 上海, 200083)

摘要: 介绍了目前比较流行的两种砷化镓 EL2 深能级结构模型, 即 Bourgoinde 的 $As_{Ga}-As_i$ 对模型和邹元熾的 $As_{Ga}V_{As}V_{Ga}$ 三元络合物模型. 分别计算了这两个模型的晶格振动态密度. 为 EL2 深能级结构的最终确定提供了一些有用的信息.

关键词: 砷化镓, EL2 深能级, 晶格振动态密度.

引言

目前已经知道 GaAs 材料中 EL2 深能级是本征点缺陷, 对 GaAs 的电学、光学性质有很大的影响. 迄今为止, 对于 EL2 深能级的微观结构还没有一个统一公认模型. 这是由于本征点缺陷的识别难度很高, 现在还没有一种测量手段能对 EL2 缺陷结构的确定提供权威性的信息. 由于 EL2 的电子顺磁共振 (EPR) 信号与反位 As 原子 As_{Ga} 的 EPR 信号展现了相同的光致电离和光淬灭行为, EL2 缺陷中包含有 As_{Ga} 似乎是毋庸置疑的. 在目前报道的十余种 EL2 可能构形中, Bourgoind 的 $As_{Ga}-As_i$ 对模型和邹元熾的 $As_{Ga}V_{As}V_{Ga}$ 三元络合物模型是最引人注目的^[1]. 模型的提出者们都采用了一些很有见地的方法来论证自己模型的正确性. 本文则用 Recursion 方法分别计算上述两种模型的晶格振动态密度, 比较它们的相异之处, 从而为用光吸收实验确定 EL2 的结构提供一种可能性.

1 EL2 的两种模型构形和 Recursion 方法简介

图 1(a) 和 (b) 分别给出了 EL2 的 Bourgoind 模型和邹氏模型构型. Bourgoind 模型中填充的 As 原子在 [111] 方向, 对角线的 1/4 位置与反位 As 原子相对. 邹氏模型中, 两个空穴 V_{As} 和 V_{Ga} 相连, 并分别位于反位原子 As_{Ga} 的最近邻和次近邻.

GaAs 是 III-V 族化合物, 离子性很弱, 可以看作闪锌矿结构上的共价晶体, 因此在研究晶格振动时, 仅考虑第一近邻相互作用是一个很好的近似. 如晶体原子总数为 N

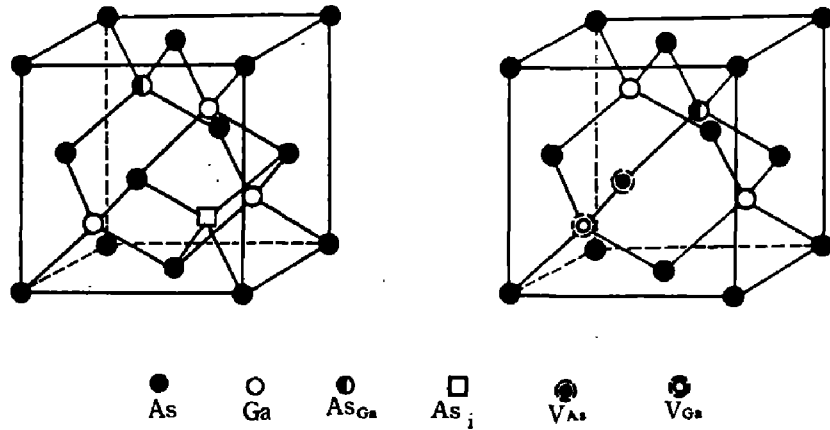


图1 EL2缺陷的两种模型构形。(a) Bourgoin模型; (b) 邹氏模型

Fig. 1 Two model configurations of the EL2 defect. (a) Bourgoin model; (b) Zou Yuanxi model

则晶格振动哈密顿量 H 就是 $3N \times 3N$ 矩阵。求解本征方程，求出频谱分布，就得到了振动态密度。对有平移对称性的理想晶体，如把本征方程转化到倒空间求解，方程的维数便大大下降。但对存在缺陷的晶体，倒空间方法行不通。我们采用实空间的格林函数法，即 Recursion 方法^[2]。在我们的问题中，定义格林函数为

$$G(\omega^2)(I\omega^2 - H) = I, \quad (1)$$

I 是单位矩阵， ω^2 为振动圆频率。

Recursion 方法是在一组新的正交基上把 H 三对角化。相应的格林函数在某个原子(例第 1 号原子)某个方向(例 x 方向)上的投影——局域格林函数为

$$G_{1x1x} = \frac{1}{\omega^2} - a_1 - \frac{b_1^2}{\omega^2} - a_2 - \frac{b_2^2}{\dots}, \quad (2)$$

是连分式形式，式(2)中 a_1 、 a_2 、 \dots 和 b_1 、 b_2 、 \dots 可由一系列递推关系求出，详见文献[2]。晶格振动局域态密度则可表示为

$$g_{1x}(\omega) = -2\omega \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [\text{Im} G_{1x1x}(\omega^2 + i\varepsilon)] / \pi, \quad (3)$$

式中 Im 代表虚部。局域态密度和态密度关系为

$$g_{1x}(\omega) = |u_{1x}|^2 g(\omega). \quad (4)$$

因此从局域态密度还可以反映出原子振幅强度 u_{1x} 。运用 Recursion 方法的关键之一是用计算机内建立晶格原子结构，并按特殊方法分层编号。建立起标号函数 $E(I, J)$ ，即为第 I 个原子的第 J 个近邻， $J=1, 2, 3, 4$ 。这样，由于只有第 I 个原子和第 $E(I, J)$ 个原子才有力常数 α 或 $\pm\beta$ ，以编好号的原子层内原子坐标为基的 H 阵就是三对角分块的，这对 Recursion 方法的实施带来了很大的方便。更详细的介绍可见文献[2]。

2 计算结果和分析

首先，我们用第 2 节的方法在计算机上建立起理想的 GaAs 结构，并取力常数参数

$\alpha = 4.61 \times 10^4 \text{ dyn cm}^{-1}$, $\beta/\alpha = 0.64^{[3]}$. 计算得到的 Ga 原子和 As 原子振动局域态密度分别由图 2(a) 和 (b) 中的虚线表示. 为方便起见, 横坐标 ω 取约化单位, 纵坐标 LDOS 取任意单位. 由于 $m_{\text{Ga}} = 7.0$, $m_{\text{As}} = 75$, 两种原子局域态密度相差并不大. 图中也清晰地显示出 LA、TA、TO、LO 四个峰. TA 和 TO 间并没有明显的禁带区, 这与其它理论计算结果和实验都是一致的.

然后, 我们将两种 EL2 缺陷结构引入理想晶格中. 从第 1 节可知两种缺陷模型实际上包含了 3 种点缺陷, 即反位原子、填隙原子和空位. 反位原子是一种替位原子, 这种结构在计算机上最容易实现, 只要在理想晶体结构中用不同质量的另一种原子去替代即可. 而填隙原子是把原子放在原先理想晶体空隙处的. 如以填隙原子为研究目标, 需要对整个晶体结构进行重新分层编号及建立标号函数. 由于填隙原子的存在还使晶体中某些原子出现了第 5 近邻, 所以对这些原子来说, 标号函数 $E(I, J)$ 中 J 可以等于 5. 表 1 给出了理想晶格和有填隙原子存在时原子的分层情况. 对于空位缺陷, 我们是在空位处将原子与它 4 个近邻间的力常数键斩断来表示这一缺陷的. 由于 (1) 式的 H 矩阵元中, 质量参数是在分母上, 用质量取为零来代表空位显然是不合适的.

表 1 理想晶格和有填隙原子时原子的分层排列比较

Table 1 The comparison of atom arranged between perfect lattice and interstitial atom defect

层号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
理想晶格	1	5	17	41	83	147	239	363	525	729	981	1285
含填隙原子	1	5	15	39	79	143	233	357	517	721	871	1275

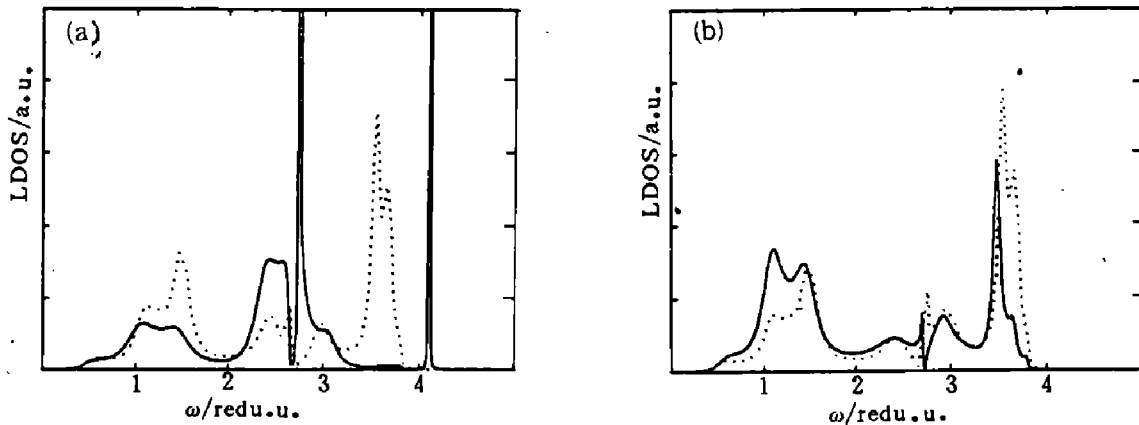


图 2 理想晶格和两种 EL2 缺陷模型的局域态密度

Fig. 2 The local densities of state for perfect lattice and two kinds of EL2 defect model

图 2(a) 中的实线便是 Bourgoin 模型中存在着反位 As 原子时填隙原子 A_{Si} 的振动局域态密度; 而图 2(b) 中的实线则是邹氏模型中存在着两个空位时, 反位 As 原子的振动局域态密度. 这两条曲线显示出很大的差别. 填隙原子在禁带处和主晶带外有两个振幅很大的振动, 即 $\omega_1 = 209 \text{ cm}^{-1}$ 和 $\omega_2 = 313 \text{ cm}^{-1}$. 计算填隙原子周围原子的局域态密度可以表明 ω_1 和 ω_2 都是局域振动. 我们在文献 [4] 中已系统地分析过填隙原子引起的晶格振动变化来源于填隙原子引起的拓扑变化. 由于填隙原子的存在使晶格中出现了第 5 键, 相当

于力常数硬化, 因而把 ω_1 和 ω_2 从主晶带中向高频方向拉出. 空位的情形正好相反, 由于空位的存在, 临近空位的原子出现了悬键, 相当于力常数软化, 因而使整个态密度曲线向低频方向移动. 两种模型的态密度曲线的巨大差异在有关的光学实验上应该可以反映出来. 这是本文工作的期望.

顺便指出, 在我们以上的计算中有两点近似. 一是把缺陷看作孤立的, 这在缺陷浓度不太高、以至可以忽略缺陷间相互作用时是可以的. 再则式 (2) 是个无穷连分式, 实际计算中我们取到第 12 层, 由于采取自洽截断法, 我们的计算从定性乃至半定量是毫无问题的. 还有许多涉及计算的细节问题我们在文献 [5] 中都已作过较详细的讨论.

总之, 本文用 Recursion 方法计算了关于 GaAs 中 EL2 深能级缺陷两种模型的晶格振动局域态密度. 发现了它们之间存在的巨大差异, 为 EL2 结构的最终识别提供一些有用的、可参考的物理信息.

参考文献

- 1 汪光裕. 应用科学学报, 1990,8:95
- 2 郑兆勃, 吴式玉. 物理学报, 1983,32:46
- 3 Sinai JJ, Wu SY. *Phys. Rev.*, 1989,B39:1856
- 4 傅英, 徐文兰. 半导体学报, 1986,7:672
- 5 Fu Ying, Xu Wenlan, Zheng Zhaobo. *Solid State Commun.*, 1987,62:163

THE DENSITIES OF VIBRATIONAL STATE FOR CONFIGURATION MODELS OF DEEP LEVEL NATIVE DEFECT EL2 IN GaAs

Xu Wenlan

(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

Abstract: Two current configuration models of deep level native defect EL2 in GaAs, i.e. pair model $As_{Ga}-As_i$ of Bourgoin and ternary complex $As_{Ga}V_{As}V_{Ga}$ of Zou Yuanxi are introduced. The densities of vibrational state for these two models are calculated. The difference between two kinds of density of state will provide useful information for final identification of the configuration of EL2.

Key words: GaAs, EL2 deep level, density of vibrational state.