

硅中层错带中空位的电子态^{*}

王永良

(中国科学院半导体研究所 表面物理国家重点实验室 北京 100083)

S Marklund

(瑞典 Luleå 大学物理系)

摘要 计算了硅中带状层错中的空位电子态, 所使用的 Recursion 方法是建立在原子轨道线性组合法的基础上, 考虑了 s , p , d 型十个原子轨道. 用 Lanczos 法得到了带隙及带连续态中的电子态, 局域态密度是用连续连分数来表示的. 硅中理想空位的三重简并态分裂为三个能级. 从价带顶算起, 它们的能量分别为 -0.3 , 0.3 , 1.7 eV. 价带顶之上 0.3 eV 的带隙态同纯层错中发现的电子态相似, 但局域态密度要高一些. 价带顶之上 1.7 eV 的在导带中的电子态是一个强共振态. 价带顶之下 0.3 eV 的价带中的电子态则是一个弱共振态.

PACC: 7155

1 引言

随着半导体材料工艺及器件技术的发展, 出现了各种结构复杂的材料及器件. 其中典型的就是用 MBE 技术制造的多层结构的 Si-Ge 及 $\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 超晶格材料. 它们在半导体光电子器件中得到了广泛地应用. 随着半导体材料及器件结构的复杂化, 半导体中起重要作用的杂质及缺陷的结构以及它们所处的环境也变得复杂了. 在通常的体材料中经常出现的是简单的点缺陷, 而在超晶格材料中, 由于层间应力的作用, 常常出现的是位错及层错这样的大型缺陷. 与这些结构缺陷相结合的杂质或空位则处于非常复杂的环境, 表现出许多独特的物理特性.

结构复杂并处于复杂环境中的杂质及缺陷对缺陷物理理论提出了挑战. 以前传统的缺陷物理中的理论方法已不适用于处理这类复杂的问题了. 七十年代出现的 Recursion 方

^{*} 国家自然科学基金资助项目

王永良 男, 1940 年出生, 於 1987 及 1989 年在瑞典林雪平大学分获瑞典大学博士学位及瑞典国家博士学位. 长期从事半导体理论研究, 近十年来集中力量研究半导体中的位错, 层错等大型缺陷.
1997-01-07 收到, 1997-06-25 定稿

法^[1]在处理这种复杂问题上出现了巨大的潜力,并已在近几年中被成功地应用到处理位错及层错这样的大型缺陷中^[2~6].我们应用这种方法第一次成功地处理了位错核中空位所产生的能级^[7],并指出位错样品中出现的束缚态很可能与位错核中的空位有关

本文要处理的问题是:层错中的空位产生的电子态.层错中的空位不仅要受到周围层错的影响,与层错相联系在较远处的位错核看来也应当对它产生影响.对这些影响的分析使我们可以对位错电子态及层错电子态的局域性及扩展性有所认识,位错及层错都是固体中的大型结构性缺陷,它们是相伴的生的,但又有很大的不同.位错核的尺度及层错的线度相比是很小的,从直观上讲它们电子态的影响范围应当是不同的.本文的研究就是试图来回答这样一些问题

下面我们首先讨论我们在层错空位的电子态计算中所使用的计算模型.大元胞的构成及结构.空位的位置及电子态计算中所使用的理论方法.最后给出计算的结果,并讨论这一计算结果的理论意义

2 计算模型

早期对 Si 中层错的研究表明:分位错间层错大都是本征的^[8].也就是对金刚石结构而言的两套面心立方格子的密集层中各抽掉相邻的一层原子而形成的结构

在我们的计算中所使用的 599 个原子的大元胞中,包含两个方向相反的 90° 的分位错核以及它们之间的本征层错带.包含有两个反位错核的原因是为了维持大元胞中的应力平衡

我们在本计算中使用的大元胞与位错核中空位计算^[7]中所使用的大元胞类似

图 1 为我们的计算中使用的大元胞的重垂直于位错线[110]方向的中截面.在

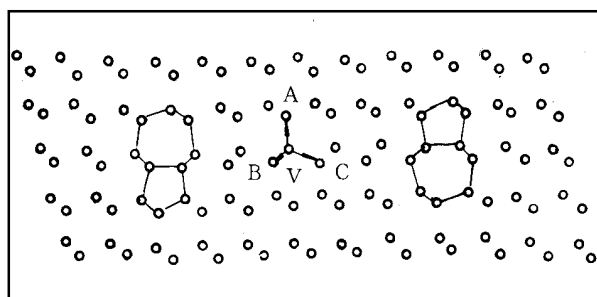


图 1 垂直于位错线方向[110]的大元胞中
截面上的原子点阵投影

这一截面上我们可以看到 119 个原子的投影.图中有连线的原子团为两个方向相反的 90° 分位错核,在它们之间我们可以看到本征层错.层错中的一个原子被取走后形成了空位 V.空位 V 同最近邻的四个原子间形成了悬键.从图中我们可以看到三个近邻原子: A、B、C.另一个近邻原子在这一截面的上方.在这一个中截面的上方及下方还各有两个这样的截面.每个截面包含有一面二十个原

子的投影.五个截面的总原子数就是我们大元胞的原子数,为五面九十九个.每个大元胞中包含的两个反向 90° 分位错的核结构是重构的,也就是位错核的原子在 Keating 价键力的作用下,弛豫到它们的悬键重新组合直至消失为止^[9].这样的结构是能量最低的状态,这是物理上最合理的,实际上存在的状态.另一个方面空位 V 是“理想的.”也就是说一个 Si 原子占据位置 V 时,其周围原子的状态就是一个通常的本征层错结构.我们把 Si 原子从 V 上取走后,其周围原子仍保持不动.也就是 V 的近邻原子在 Si 原子从 V 上取走前后的状态是不变的.可是,在实际上,当 Si 原子从 V 上取走之后,周围的原子是要弛豫而改变平衡位置的.但

是如何移动,这在理论及实验上都是还没有解决的问题 我们也只好将它留待将来去解决了.

在我们的计算中为什么要使用包含这么多原子的大元胞 这其中的主要原因是为了避免近邻元胞中的空位间,以及同一元胞的位错间,还有近邻元胞间的位错间及层错间的相互作用 只有元胞足够大,它们之间的距离才能拉开,它们之间的相互作用才不会影响我们的计算结果 当然,同时这也增加了我们的计算量,使我们的计算变得更加困难

3 计算方法及结果

处理包含有大量原子的大元胞,目前唯一可行的理论方法是 Recursion 法 这种方法是建立在原子轨道线性组合(LCAO)法的基础上的 Recursion 法可以从特定的原子上以特定的原子轨道为种子态,将特定原子附近的局域态密度(LDOS)用一个三对角哈密顿矩阵来表达 这比将一个大普通哈密顿矩阵直接对角化要简便得多 这就是为什么 Recursion 法在处理包含有大量原子的大元胞问题上具有明显优越性的原因

我们使用的原子轨道是高斯型的 每个原子用十个原子轨道来描述: 2 个 s 轨道, 3 个 p 轨道, 5 个 d 轨道 在近邻相互作用上我们一直考虑到四近邻相互作用 用这样精确的原子轨道线性组合法可以十分准确地将 Si 的能带结构的每个细节都描绘出来 使用高斯型原子轨道,再加上原子势也以高斯函数来表达,可以将所有哈密顿矩阵元表达为解析式 这对矩阵元的精确计算是很简便的

我们第一次将这种 Recursion 方法成功地应用到 Si 中非重构 90° 位错的电子态计算中^[2] 关于这种方法的详尽细节,请参看我们的原始论文

图 2 所表示的局域态密度是从原子 A 与空位 V 之间的悬键为种子态计算出来的 横坐标的能量零点是价带顶所在的位置 从图中可以看出,在价带顶之上 0.3 eV 处有一束束缚态 这一束缚态与我们以前计算^[6]的,由纯本征层错产生的束缚态相近 不同的是这里的态密度大大高于纯本征层错在同一区域产生的局域态密度 这一束缚态是空位与本征层错的共同作用下产生的 另外我们从图中还可以看到,在价带顶大约 0.3 eV 之下有一个小尖峰 而在价带面之上 1.7 eV 的导带中,有一个十分尖锐的局域态密度峰 这都是由空位产生的束缚态,在本征层错的环境下,由带隙中的三度简并态分裂成一个带隙束缚态,一个导带中的强共振态和一个价带中的弱共振态 由以前的研究^[10],我们知道:理想空位在价带顶之上 0.87 eV 处产生一三重简并的具有 T_2 对称的束缚态 这一束缚态在层错环境下,由于对称性大大降低,简并完全消除了,能级分裂移动成三个不同的能级

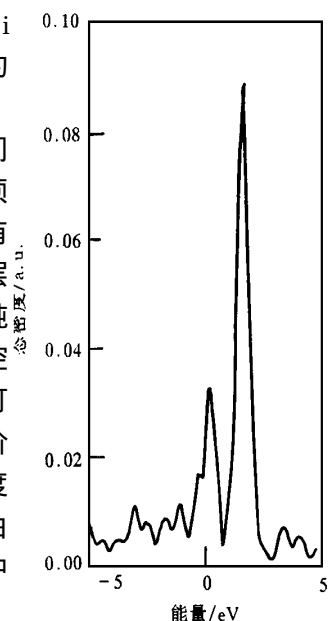


图 2 原子 A 与空位 V 之间的悬键所产生的局域态密度

图 3 为原子 B 及空位 V 处的悬键作为种子态所计算出来的局域态密度 与图 2 相比较, 能级结构基本相似: 一个在价带顶之上 0.3 eV 处的带隙态, 一个在价带顶之下 0.3 eV 处

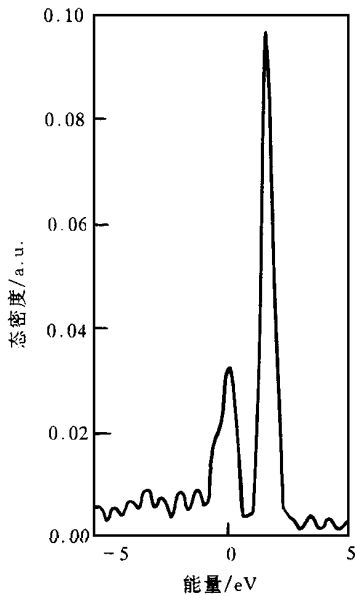


图3 原子B 与空位V 之间的悬键所产生的局域态密度

的弱价带共振态, 一个在价带顶之上 1.7 eV 处的强导带共振态 由这两个局域态密度图我们可以看出, 在较远处的二个反向 90° 分位错核对空位 V 周围的电子态基本上没有多大影响 这是由于位错核的结构同理想晶格的结构相差很大, 它所产生的电子态都局域在位错核周围, 在远处就不会有明显的影响了. 在空位附近, 除了空位产生的局域电子态外, 层错产生的电子态也有很大的影响 本文的计算同以前关于纯本征层错的计算[6]相比较, 我们可以看出, 由于层错是一种二维扩展的缺陷, 它产生的电子态也是二维扩展的 层错中空位的局域电子态与层错的二维扩展电子态相互作用的结果, 使空位附近的层错电子能级的局域态密度加强了, 能级的位置却没有发生变化 我们在离空位稍远处的层错中的局域态密度计算支持了我们的这一观点 在导带中的强共振态以及在价带中的弱共振态都是由空位产生的局域电子态, 层错的电子态对它们没有任何影响

图 4 显示的是在原子 B 的悬键附近, 电子能级随 Recursion 系数对的数目的增加, 所表现出来的收敛行为 图中纵座

标表示以 eV 为单位的能量, 横座标表示 Recursion 系数对的数目 图中的小点表示相应 Recursion 系数下, 哈密顿三对角矩阵对角化后所得到的能级 价带顶的能量为能量的零点 从图中可以很明显地看出, 在导带中, 也就是在价带顶之上约 1.7 eV 处, 有一收敛的强共振态 这是由层错中的空位产生的局域态 在价带顶之上的约 0.3 eV 附近, 我们可以隐约看到一个不那么明显的能级点的相对密集区 这是由层错及其中的空位共同产生的电子态 这一能态是二维扩展的, 我们在层错中离空位较远处进行的局域态密度计算完全证实了这一点 由于空位的作用, 局域态密度比纯层错中相应位置的态密度有所加强 但是, 这一能态不具备强局域态所表现出来的那种明显收敛性 另外, 在价带顶之下 0.3 eV 处的弱共振态在这张收敛图上也没有显现出来

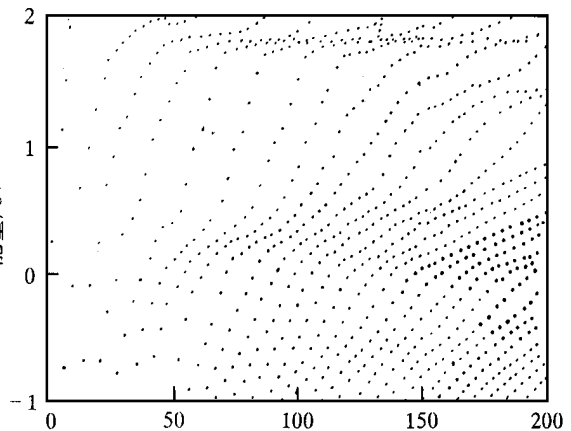


图 4 层错中的空位附近的原子能级随 Recursion 系数对的数目的收敛行为

总结以上讨论的结果, 我们不难看出: 层错中理想空位的出现, 没有根本改变带隙中本征层错电子态的行为 没有移动其在价带顶之上约 0.3 eV 处的二维扩展态的位置, 没有改变其二维扩展态的性能, 只是在空位附近的局域态密度得到了加强 空位的电子态在本征层

错的环境下, 由于对称性的降低, 三重简并消失了, 分裂为三个能级。除了上面我们讨论的带隙态外, 还有二个共振态。在价带顶之上约 1.7 eV 处的导带中为一强共振态, 其局域态密度十分尖锐。在价带顶之下约 0.3 eV 处的价带中有一弱共振态。

致谢 本文的部分计算是在瑞典 Luleå 大学的 Sun 计算机上完成的。

参 考 文 献

- [1] Haydock R., Solid State Physics, 1980 Vol. 35, eds H. Ehrenreich, F. Seitz and D. Turnbull (Academic New York), P215.
- [2] Wang Yong-Liang and H. Teichler, Phys. Status Solidi (B), 1989, **154**: 649.
- [3] Wang Yong-Liang, Phys. Rev., 1989, **B40**: 5669.
- [4] S. Marklund and Wang Yong-Liang, Solid State Commun., 1992, **82**: 137.
- [5] S. Marklund and Wang Yong-Liang, Solid State Commun., 1994, **91**: 301.
- [6] Niklas Lehto, S. Marklund and Wang Yong-Liang, Solid State Commun., 1994, **92**: 987.
- [7] S. Marklund and Wang Yong-Liang, Phys. Status Solidi (B), 1995, **189**: 473.
- [8] K. Wessel and H. Alexander, Phil. Mag., 1977, **35**: 1523.
- [9] S. Marklund, Phys. Status Solidi (B), 1980, **100**: 77.
- [10] Wang Yong-Liang and U. Lindelfelt, Phys. Rev., 1988, **B37**: 1320.

Electronic States of Vacancy in Ribbon of Stacking Faults in Si

Wang Yong-Liang

(Institute of Semiconductors, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083)

Sune Marklund

(Department of Physics, Technical University of Luleå, Sweden)

Received 7 January 1997, revised manuscript received 25 June 1997

Abstract The electronic states of a vacancy in a bounded intrinsic stacking faults in silicon is calculated, the method used is the recursion scheme with a LCAO approach taking ten atomic orbitals of s -, p - and d -type into account. The levels in the band gap and band continuum are extracted using Lanczos' algorithm and a continued fraction representation of the local density of states (LDOS). The three-fold degenerate state of the ideal vacancy is split into three levels with -0.3, 0.3 and 1.7 eV measured from the top of valence band. The gap level at 0.3 eV above the top of valence band is similar to the level found in the pure intrinsic stacking faults with a higher LDOS. The level in the conductive continuum at 1.7 eV above the top of valence band is a strong resonant state and the level in the valence continuum at 0.3 eV below the top of valence band is a weak resonant state.

PACC: 7155