

EL2 能级和光电离截面的计算

王传奎* 徐婉棠

(北京师范大学物理系, 北京)

1989年12月25日收到

我们采用 EHT 法计算了 EL2 缺陷模型的电子能级及其波函数, 集团包含 41 个原子, 用群论方法约化久期行列式。同时计算了该缺陷能级的光电离截面, 计算结果与实验结果相符。

主题词 EL2, 砷化镓, 原子集团, 推广的休克尔方法, 光电离截面

一、引言

早在 1961 年, 在半绝缘 GaAs 材料中, 发现有一位于禁带中部的深能级。进一步的光谱实验^[1]证实了这一发现。自此, 人们从理论和实验上对这个深能级的特性及其形成原因, 进行了广泛的研究。但是, 对于形成这个深能级的缺陷结构一直没有得到一个统一的结论。这个能级被称作 EL2。

在六十年代初期, 用水平 Bridgman 法在氧气氛下生长半绝缘 GaAs 晶体, 晶体中氧含量非常高, 故认为 EL2 与氧有关^[2]。后来, 改进了生长 GaAs 晶体的工艺, 在一般的半绝缘 GaAs 晶体中, 氧含量为 1×10^{15} 到 $4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, 而采用深能级瞬态电容技术测量到 EL2 浓度在体材料中约为 10^{16} cm^{-3} ^[3]。且晶片中氧含量分布均匀, 而 EL2 浓度分布却有一较大的梯度, 故得出结论: EL2 与氧无关, 后来, 人们发现^[4-6], EL2 的浓度依赖于生长方式, 并且随着生长熔体中的 As/Ga 比的增大而增大, 从而认为, EL2 为一本征点缺陷。电子辐射实验^[7,8]证实 EL2 不可能为简单的填隙和空位。Bois 和 Vincent^[9]发现当退火温度为 10K 时, 在 1.0—1.3eV 光激发下, 这个缺陷结构转变成一个新结构。当退火温度为 140K 时, 它又回到原来的结构。这个新结构对应于 EL2 的亚稳态。

电子顺磁共振 (EPR) 实验结果^[10,11]表明 As_{Ga} 存在于掺杂或不掺杂的高阻 GaAs 材料中, As_{Ga} 的浓度与 EL2 的浓度具有相同数量级。且两者的光电性质有很多相似处。这样, 有些人^[12,13]认为, EL2 的缺陷结构为孤立的 As_{Ga} 。但 EL2 缺陷和 As_{Ga} 的光性质与退火性质也有不同之处。如 EL2 存在亚稳态, 而 As_{Ga} 无此性质。Levinson^[14]研究了单轴应力对 GaAs 中与 EL2 有关的光电离猝灭现象的影响, 发现 EL2 缺陷结构是一个具有 C_{3v} 对称性的复合物。

* 通讯地址: 山东聊城师范学院物理系, 252000。

邹元爔^[15]通过分析 MOVPE GaAs 晶体中 EL2 浓度与 As/Ga 比的正比关系认为, 由于在 GaAs 晶体中存在着镓的双空位 (V_{Ga})₂, 在生成温度和冷却过程中, 它都可能与中性砷原子 As_{As} 发生反应, 而生成络合物 $V_{Ga}As_{Ga}V_{As}$ (即 EL2)。Wager^[16] 具体指出 EL2 的稳态为: $V_{As}^+V_{Ga}^-As_{Ga}^+$; 亚稳态为: $V_{As}^+As_{Ga}^+V_{Ga}^-$ 。并且指出, EL2 缺陷结构对应多种以 As_{Ga} 为核心的复合物。其中, As_{Ga} 加双空位占主导地位。这一模型能解释一些现象^[17]。但在实验中没有观察到 (V_{Ga})₂ 的存在。

Bardeleben^[18] 经过仔细分析指出, EL2 的缺陷结构为 $As_{Ga} + As_i$, 其中稳态为 $As_{Ga}^0 + A_{Si}^+$ 。Meyel 等^[19]在电子-原子核双共振实验和电子顺磁共振实验中观察到了这个缺陷复合物。Levinson^[14] 所作的实验工作支持了这个模型。并且, 利用这个模型可以解释较多的实验结果^[20], 如深能级瞬变谱, 电子顺磁共振谱等。

我们认为, 前人的大量工作已证实了 EL2 缺陷是以 As_{Ga} 为核心的复合物。Bardeleben 提出的 EL2 稳态的 $As_{Ga}^0 + A_{Si}^+$ 的结构模型又有许多实验基础, 本文将通过对这一缺陷模型的能级及光电离截面的计算, 从理论上对这一模型进行研究。

二、理论方法

1. 原子集团——推广的 Hückel 方法 (EHT)

推广的 Hückel 方法是 Hoffmann, 1963 年提出的一种半经验方法。用这个方法来计算缺陷能级时, 先从无限大的晶体中取出一个原子集团, 以赝原子的单键来饱和这个原子集团边缘上出现的悬挂键。以这个原子集团的单电子波函数及能谱来模拟无限大晶体的单电子波函数及能谱。分别计算出不含缺陷及含缺陷的原子集团的能谱, 加以对比, 即可确定缺陷能级的位置。在计算原子集团的单电子能谱时, 需解久期方程

$$|H_{ij} - ES_{ij}| = 0 \quad (1)$$

我们采用推广的 Hückel 方法来确定哈密顿矩阵元 H_{ij} , 即假设

$$H_{ij} = -\frac{1}{2} K_{ij}(I_i + I_j)S_{ij} \quad (2)$$

$$K_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ K & i \neq j \end{cases}$$

I_i 为原予第 i 个轨道的电离能, 由实验测定。 K 为可调的耦合参数。

S_{ij} 是孤立原子的第 i 个与第 j 个轨道之间的交迭积分。对于同一原子,

$$S_{ii} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

对不同原子, S_{ij} 是个双中心积分。

2. 约化矩阵

由于(1)式的左边是个高阶的行列式, 故求解(1)式是非常困难的。而本文要计算的三个原子集团都具有一定的对称性, 所以, 可利用群论方法来简化久期方程。具体做法是: 以原子的轨道波函数 $\{\varphi_i\}$ 作为基, 得到原子集团对称性群的一个可约表示, 其特征标为 $\{\chi_{(R)}\}$ 。这个可约表示可约化为不可约表示的直和, 其中, 约化系数 n^p 为,

$$n^P = \frac{1}{g} \sum_R \chi_{(R)}^P \chi_{(R)}$$

R 是对称性群的群元, $\chi_{(R)}^P$ 是不可约表示 $D_{(R)}^P$ 的特征标。 g 是群的阶。

利用投影算符,

$$P_{\mu\nu}^i = \frac{l_i}{g} \sum_R D_{\mu\nu(R)}^{i*} P_R \quad (3)$$

可求出对称性群的各不可约表示的基函数,

$$\begin{aligned} \psi_{\mu\nu} &= P_{\mu\nu}^i \varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \frac{l_i}{g} \sum_R D_{\mu\nu(R)}^{i*} P_R \varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \\ &= \frac{l_i}{g} \sum_R D_{\mu\nu(R)}^{i*} \varphi_i(R^{-1}\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (4)$$

其中, $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - R\mathbf{R}_i$

由于各不可约表示的基函数是正交的,因此,以对称化波函数组成原子集团的单电子波函数时,久期行列式就会分裂成阶数较低的若干个子行列式,从而大大简化了久期方程。

下面介绍 $\chi_{(R)}$ 的求法。

根据,

$$P_R \varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \sum_p D_{P(R)} \varphi_p(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (5)$$

及

$$\begin{aligned} P_R \varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) &= \varphi_i(R^{-1}\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \varphi_i[R^{-1}(\mathbf{r} - R\mathbf{R}_i)] \\ &= \varphi_i(R^{-1}\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (6)$$

若 $R\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_i$, 则此原子的波函数对特征标可能有贡献, 当 $P_R \varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \pm \varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, 则对特征标贡献为 1 或 -1; 否则, 贡献为零。将 P_R 作用于所有的原子波函数上, 将其贡献加起来, 就可得到可约表示的特征标 $\chi_{(R)}$ 。

3. 半导体中深能级的光电离截面

光子和半导体中电子的互相作用, 可以提供半导体的一些重要信息。在吸收光子过程中, 已知能量的光子把电子从低的能态 ψ_i 激发到高的能态 ψ_f 。其跃迁几率为:

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f | \frac{\hbar e}{2imc} \mathbf{A}_0 \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \nabla | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - h\nu) \quad (7)$$

式中, \mathbf{A}_0 为电磁场的矢势的振幅,

$h\nu$ 为光子能量。

$$\text{光子通量}^{[21]} \quad \Phi = \frac{A_0^2 \omega}{8\pi\hbar c} \quad (8)$$

式中, ω 为电磁场的频率。

光截面定义为跃迁几率和光子通量之比, 即

$$\sigma_{(b)} = W / \Phi \quad (9)$$

利用偶极近似,(9)式为,

$$\sigma_{(k\omega)} = \frac{\beta}{h\nu} \left| \langle \phi_f | -i\hbar \frac{\partial}{\partial Z} |\phi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - h\nu) \quad (10)$$

其中

$$\beta = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar}{m^2 c}$$

考虑到电子在缺陷能级和能带之间的跃迁,

$$\sigma_{n(k\omega)}^0 \propto \frac{1}{h\nu} \left| \langle \phi_{b,k} | -i\hbar \frac{\partial}{\partial Z} |\phi_T \rangle \right|^2 \rho_{b(E_k)} \quad (11)$$

$\phi_{b,k}$ 是在 b 带, 波矢为 k 的态, $\rho_{b(E_k)}$ 是相应的态密度。

其中, $h\nu = E_b - E_T$.

ϕ_T 和 E_T 是局域态的波函数和能量。

ϕ_T 由原子集团——推广休克尔方法得出。完整晶体的能带及相应的波函数则采用近自由电子近似求得, 具体做法是,

选 14 个平面波, $\phi_{k+G_h} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(G_h+k)\cdot r}$, G_h 为倒格矢, 其中, 八个 $\langle G_h \rangle: \frac{2\pi}{a}(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$, 六个 $\langle G_h \rangle: \frac{2\pi}{a}(\pm 2, 0, 0), \frac{2\pi}{a}(0, 0, \pm 2), \frac{2\pi}{a}(0, \pm 2, 0)$ 。哈密顿算符 $H = T + V$

而

$$V(r) = V_1(r) + V_2(r - \tau)$$

$$\tau = \frac{a}{4}(1, 1, 1) \text{ (坐标原点选在一个原子上)}$$

故

$$\begin{aligned} \langle G_h | V | G_h \rangle &= \frac{1}{V_0} \left[\int_{V_0} e^{i(G_h-G_h)\cdot r} V_1(r) d\mathbf{r} \right. \\ &\quad \left. + e^{i(G_h-G_{h'})\cdot r} \int_{V_0} e^{i(G_h-G_{h'})\cdot r} V_2(r) d\mathbf{r} \right] \\ &= \frac{1}{2} [V_1(|G_h - G_{h'}|) + e^{i(G_h-G_{h'})\cdot \tau} V_2(|G_h - G_{h'}|)] \end{aligned} \quad (12)$$

令

$$V^s(|G_h - G_{h'}|) = [V_1(|G_h - G_{h'}|) + V_2(|G_h - G_{h'}|)]/2$$

$$V^A(|G_h - G_{h'}|) = [V_1(|G_h - G_{h'}|) - V_2(|G_h - G_{h'}|)]/2$$

V^s, V^A 称为形状因子, Cohen^[22] 已给出形状因子的数值, 利用这些数值, 即可求得晶体势能的矩阵元, 以此代入久期方程 $|H_{k'k} - E_{\delta k'k}| = 0$; 求解后, 即可得到完整晶体的能带和波函数。

三、计 算

1. 缺陷能级及缺陷波函数的计算

在 GaAs 中, 以 Ga 原子为中心, 取出 Ga-As-Ga 三层原子的原子集团, 连同质 As 原

子, 原子集团共包含 41 个原子。

本文对三个原子集团进行了计算。

(a) 完整晶体的原子集团, 其原子坐标在表 1 给出。显然该原子集团具有群 T_d 的对称性。

(b) 含有 As_{G} , 非完整晶体的原子集团, 其原子坐标亦由表 1 给出, 只是中心的 Ga 原子被 As 原子替代, 显然它仍具有群 T_d 的对称性。

(c) 含有 $\text{As}_{\text{Ga}} + \text{As}_i$ 非完整晶体的原子集团, 其原子坐标由表 2 给出。由于 As_i 位于(111)方向上的填隙位置, 故该集团具有群 C_{3v} 的对称性。

表 1 完整晶体原子集团的原子坐标

原子种类	层次	位置坐标(以 $\frac{a}{4}$ 为单位)
Ga	1	(0,0,0)
As	2	(1,1,-1),(1,-1,1),(-1,-1,-1),(-1,1,1)
Ga	3	(0,2,-2),(2,2,0),(2,0,-2),(2,0,2) (2,-2,0),(0,-2,2),(0,-2,-2),(-2,-2,0) (-2,0,-2),(-2,0,2),(-2,2,0),(0,2,2)
赝 As	4	(-1,1,-3),(-1,3,-1),(3,1,1),(3,-1,-1) (1,3,1),(1,-1,-3),(1,1,3),(1,-3,-1) (-1,-3,1),(-1,-1,3),(-3,-1,1),(-3,1,-1) (1,3,-3),(3,3,-1),(3,1,-3),(3,-1,3) (3,-3,1),(1,-3,3),(-1,-3,-3),(-3,-3,-1) (-3,-1,-3),(-3,3,1),(-1,3,3),(-3,1,3)

表 2 含 $\text{As}_{\text{Ga}} + \text{As}_i$ 非完整晶体原子集团的原子坐标

原子种类	层次	位置坐标(以 $\frac{a}{4}$ 为单位)
As	1	(0,0,0)
As	2	(1,1,-1),(1,-1,1),(-1,-1,-1),(-1,1,1)
Ga	3	(0,2,-2),(2,2,0),(2,0,-2),(2,0,2) (2,-2,0),(0,-2,2),(0,-2,-2),(-2,-2,0) (-2,0,-2),(-2,0,2),(-2,2,0),(0,2,2)
赝 As	4	(-1,1,-3),(-1,3,-1),(3,1,1),(3,-1,-1) (1,3,1),(1,-1,-3),(1,1,3),(1,-3,-1) (-1,-3,1),(-1,-1,3),(-3,-1,1),(-3,1,-1) (1,3,-3),(3,3,-1),(3,1,-3),(3,-1,3) (3,-3,1),(1,-3,3),(-1,-3,-3),(-3,-3,-1) (-3,-1,-3),(-3,3,1),(-1,3,3),(-3,1,3)
As_i	5	(2,-2,2)
赝 As	6	(3,-3,3)

取原子集团中各原子的 S.P 态波函数的线性组合作为原子集团的(也就是晶体的)

单电子波函数

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_i C_i \varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$$

其中, $\varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 是位于格点 \mathbf{R}_i 上的原子波函数, 它由径向波函数 $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 和球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 相乘得到, 我们采用 Slater 轨道作为径向波函数 $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, 位于原点处的 $\varphi(\mathbf{r})$ 为:

$$\varphi_i(\mathbf{r}) = \left(\frac{2\xi_a}{\sqrt{2n!}} \right)^{n+\frac{1}{2}} r^{n-\frac{1}{2}} e^{-\xi_a r} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

ξ_a 为轨道指数

以不含缺陷的原子集团的原子波函数组成的群 T_d 的可约表示 Γ 是 92 维, Γ 可约化为不可约表示的直和, 具体计算得到:

$$\Gamma = 8\Gamma_1 \oplus \Gamma_2 \oplus 7\Gamma_{12} \oplus 15\Gamma_{15} \oplus 8\Gamma_{25}$$

这样久期行列式分裂为一个 8 维, 一个 1 维, 两个 7 维, 三个 15 维及三个 8 维子行列式。

含 As_{Ga} 缺陷的原子集团的情况同上。

含 $As_{Ga} + As_i$ 缺陷的原子集团的原子波函数组成的群 C_{3v} 的可约表示 Γ' 是 97 维, Γ' 可约化为不可约表示的直和, 即

$$\Gamma' = 26\Gamma_1 \oplus 9\Gamma_2 \oplus 31\Gamma_{12}$$

这样, 久期行列式分裂为一个 26 维, 一个 9 维及两个 31 维子行列式。

计算过程所选用的参数由表 3 给出。

表 3 参数^[13, 24]

k	K_1	K_2	ξ_{sAs}	ξ_{pAs}	ξ_{sGa}	ξ_{pGa}	$a(\text{\AA})$	$I_{1s}^{\text{as}}(\text{eV})$	$I_{1s}^{\text{ap}}(\text{eV})$	$I_{1s}^{\Delta}(\text{eV})$	$I_{1s}^{\Sigma}(\text{eV})$
2.42	1.05	0.55	2.695	1.662	2.000	1.355	5.654	12.646	5.951	17.605	9.050

K : $As-Ga$ 之间的耦合参数

K_1 : $As-As$ 之间的耦合参数

K_2 : As_i-As 之间的耦合参数

2. 光电离截面的计算

① 完整晶体导带波函数及能带计算

对 Γ 点: $k = 0$ $\psi_{G_h} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iG_h \cdot r}$

对 Δ 轴: $k_x = \frac{2\pi\eta}{a}$ $\psi_{k_x+G_h} = e^{ik_x x} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iG_h \cdot r}$

对 Σ 轴: $k_x = k_y = k_z = \frac{2\pi\eta}{a}$

$$\psi_{k+G_h} = e^{ik \cdot r} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iG_h \cdot r}$$

这样可求出与 Γ 点, Δ 轴, Σ 轴对应的能带和波函数, 计算中所选用的形状因子由表 4 给出。

表 4 形状因子(以里德伯为单位)

$V_{(\sqrt{3})}^2$	$V_{(\sqrt{3})}^2$	$V_{\sqrt{11}}^2$	$V_{(\sqrt{3})}^4$	$V_{\sqrt{2}}^4$	$V_{\sqrt{11}}^4$
-0.23	-0.029	0.06	0.07	0.05	0.01

② 光电离截面计算

为与实验结果相比较,本文只对 Γ 点, x 点, L 点附近进行了计算(因这些点是能谷),在这三点附近的能量与 k 的关系近似为抛物线型

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$$\rho(E_k) \propto m^{* \frac{1}{2}} E_k^{\frac{1}{2}}$$

其中 m^* 由表 5 给出

表 5 有效质量

	Γ	L	x
m^*	0.057m ₁	0.22m ₁	0.41m ₁

四、结果和讨论

我们计算了不含缺陷的 GaAs 晶体的电子能级,结果示于图 1(a),以原子集团中的 104 个电子从最低能级开始填充,一直填到位于 -7.459 eV 的能级为止,这就是价带顶的位置,它具有 Γ_{15} 的对称性。与价带顶距离最近的能级是 -5.951 eV,这个能级具有 Γ_1 对称性,是导带底的位置。它们之间的距离为 $\Delta E = 1.508 \text{ eV}$ 与 GaAs 的禁带 E_g 相符合。同时,与 GaAs 的导带底和价带顶的对称性也是符合的^[26]。

我们首先计算了孤立的 As_{Ga} 缺陷的能级,结果示于图 1(b),然后计算了含 As_{Ga} + As_{Si} 非完整 GaAs 晶体的电子能级,示于图 1(c)。得到的 EL2 能级及波函数由表 6,表 7 给出。

表 6 EL2 能级

	实验值 (eV)	本文给出的值 (eV)
EL2	$E_c - 0.80^{[27]}$ $E_c - 0.78^{[28]}$	$E_c - 0.763$

$$\phi_T = a_1 \varphi_1 + a_2 \varphi_2 + \cdots + a_{31} \varphi_{31}$$

其中 $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{31}$ 为对称化波函数。

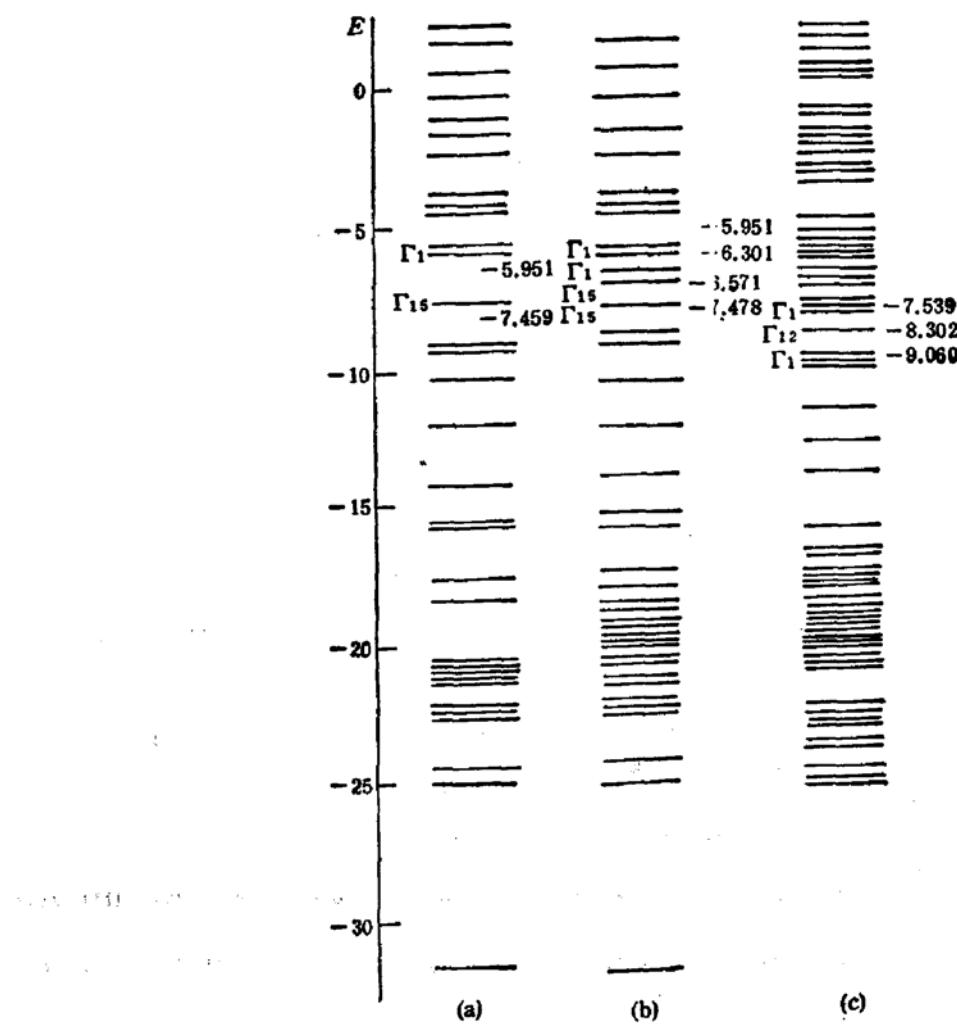
从图 1(a) 中看出,能隙中没有出现能级,说明赝 As 挂在集团表面不会在能隙中产生定域的表面态能级,这意味着原子集团挂赝 As 相当于一个较合理的边界条件。

表7 缺陷能级的波函数

a_1	-0.2773	a_7	-0.0522	a_{13}	-0.2077	a_{19}	0.2978	a_{25}	0.2120	a_{31}	0.0262
a_2	0.0102	a_8	-0.1890	a_{14}	-0.3012	a_{20}	-0.1137	a_{26}	-0.0066		
a_3	-0.1285	a_9	-0.1327	a_{15}	0.1231	a_{21}	-0.2302	a_{27}	0.0581		
a_4	-0.0784	a_{10}	0.1090	a_{16}	-0.0144	a_{22}	-0.1347	a_{28}	-0.0234		
a_5	0.1735	a_{11}	0.2383	a_{17}	0.1351	a_{23}	0.0477	a_{29}	0.1980		
a_6	-0.0728	a_{12}	-0.5186	a_{18}	-0.0528	a_{24}	-0.1522	a_{30}	-0.1186		

从图1(b)中看出, $\text{As}_{\text{G}a}$ 缺陷在禁带中产生的两个能级 $E_c = 0.620\text{eV}$ 和 $E_v = 0.350\text{eV}$, 这与 Backet 等^[29]的结果相符。说明 k 值选取的合理性。

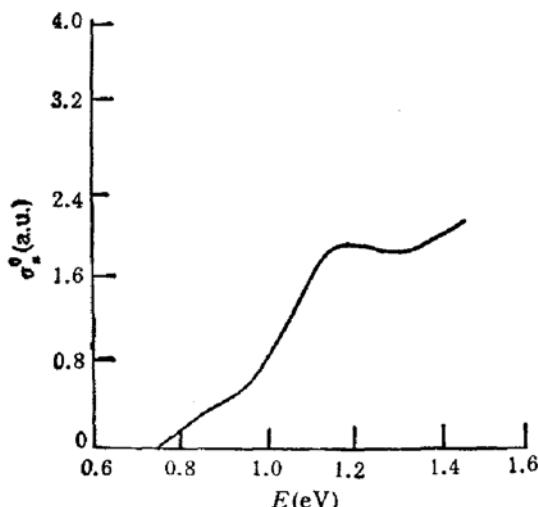
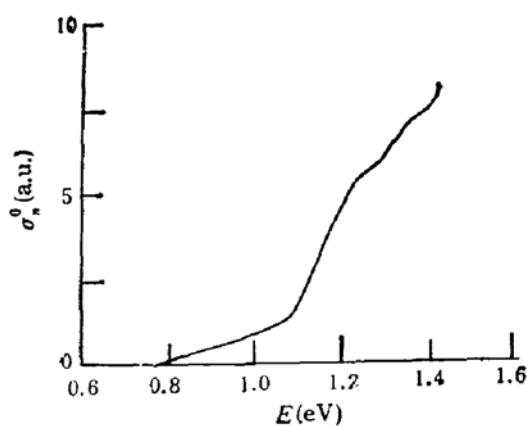
从图1(c)中看出, 价带顶的对称性为 Γ_1 , EL2 能级的对称性为 Γ_{12} . 由于缺陷的存在, 引起晶体对称性下降, 导致一些能级分裂。利用群论方法, 我们知道, T_d 群的不可约表示 Γ_{15} 与 C_{3v} 群的不可约表示 Γ_1 是相容的。

图1 原子集团的电子能级 (a) 完整晶本 (b) $\text{As}_{\text{G}a}$ (c) $\text{As}_{\text{G}a}^0 + \text{As}^+$

我们计算的光电离截面由图2给出, 实验结果^[30]由图3给出。

从图2, 图3看出, 在 $1.1\text{--}1.3\text{eV}$ 能量范围内 σ_a^* 有一峰, 这是由 EL2 的光性质所决

定的,即在这样能量范围内的光激发引起 EL2 缺陷结构由稳态转变成亚稳态,导致稳态的 σ_s^0 的下降。

图 2 $\sigma_s^0 \sim h\nu$ 曲线图 3 实验给出的 $\sigma_s^0 \sim h\nu$ 曲线

经过上面的理论计算,支持了 Baredeleben 提出的 EL2 稳态的 $As_{Ga}^0 + As_{Si}^+$ 结构模型。但 EL2 缺陷结构是否对应多种以 As_{Ga} 为核心的复合物以及 EL2 亚稳态的缺陷结构仍需进一步的研究。

参 考 文 献

- [1] R. Williams, *J. Appl. Phys.*, **37**, 3411(1966).
- [2] J. M. Wodall, *Solid State Commun.*, **6**, 597(1963).
- [3] G. M. Martin, Proceedings of the Semi-conducting III-V materials conference, Nottingham 1980, P13
- [4] T. R. Jervis, D. W. Woodward, L. F. Eastman, *Electron. Lett.*, **20**, 620(1979).
- [5] L. Samuelson, P. Omling, H. Titze, and H. G. Grimmeis, *J. Cryst. Growth*, **55**, 164(1981).
- [6] M. D. Miller, G. H. Olsen, and M. Ettenberg, *Appl. Phys. Lett.*, **31**, 538(1977).
- [7] A. Mircea, D. Bois, *East. Phys. Cont. Ser.*, **46**, 82(1979).
- [8] D. Pons, P. M. Mooney, J. Bourgoin, *J. Appl. Phys.*, **51**, 2038(1980).
- [9] D. Bois and G. Vincent, *J. Phys. Lett.*, **38**, 351(1977).
- [10] R. J. Wagner, J. J. Krebs, G. H. Strauss, and A. M. White, *Solid State Commun.*, **36**, 15(1980).
- [11] M. Baeumler, U. Kaufmann, and J. Windscheif, *Appl. Phys. Lett.*, **46**, 781(1985).
- [12] M. Kaminska, M. Skowronskii, and W. Kuszko, *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 2204(1985).
- [13] E. J. Johnson, J. Kafalas, R. N. Davies, and W. A. Dyes, *Appl. Phys. Lett.*, **40**, 913(1982).
- [14] M. Levinson and J. A. Kafalas, *Phys. Rev.*, **B35**, 9383(1987).
- [15] Y. X. Zou, Int. Symp. GaAs and Related Compounds, 1981.
- [16] J. F. Wager and J. A. Van vechten, *Phys. Rev.*, **B35**, 2330(1987).
- [17] 邹元耀,应用科学学报,1(1),5(1983).
- [18] H. J. von Bardeleben, D. Stevenard, D. Deremes, A. Huber and J. C. Bourgoin, *Phys. Rev.*, **B34**, 7192 (1986).
- [19] B. K. Meyer, D. M. Hofmann, J. M. Spaeth, in *Defects in Semiconductors*, edited by H. J. Von Bardeleben (Trans Tech Publications, Switzerland, 1986), 311.
- [20] H. J. Von Bardeleben, *Appl. Phys. Lett.*, **47**(9), 970(1985).
- [21] A. M. Stoneham: *Theory of Defects in Solids*, 272, Clarendon Press, Oxford (1975).
- [22] M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **141**, 789(1966).
- [23] E. Clementi and D. L. Raimondi, *J. Che. Phys.*, **38**, 2686(1961).
- [24] J. A. 波普尔, D. L. 贝弗里奇, 江元生译, 分子轨道近似方法理论, 科学出版社, 121, (1976).
- [25] D. E. Aspnes, *Phys. Rev.*, **B14**, 5331(1976).

-
- [26] J. P. Water and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **183**, 763(1969).
 - [27] G. M. Martin, A. Mitonneau, D. Pons, A. Mircea, and D. W. Woodward, *J. Phys.*, **C13**, 3855(1980).
 - [28] M. Kaminska, M. Skowronski and W. Kuszko, *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 2204(1985).
 - [29] G. B. Backelet, *Phys. Rev.*, **B27**, 2545(1983).
 - [30] D. Bois and A. Chantre, *Rev. Phys. Appl.*, **15**, 631(1980).

Calculation of EL2 Energy Level and Optical Cross Section

Wang Chuankui and Xu Wantang

(Department of Physics, Beijing Normal University)

Abstract

The energy level and wave function of EL2 defect model have been calculated by using the EHT. The cluster contains 41 atoms. The secular equation is reduced by using group theory. The optical cross section associated with EL2 has also been calculated. The theoretical results are in agreement the experimental results.

Key words EL2, GaAs, cluster, EHT, optical cross section