

Al_xSi_{1-x} 的电子结构

陆 奋 尹 琦 张开明

(复旦大学现代物理研究所, 上海)

1986年10月10日收到

本文用 VCA 和 CPA 方法计算了 Al_xSi_{1-x} 合金的电子态密度。能带计算采用经验 LCAO 方法。所得结果与 Verges 用非晶的 Bethe 晶格模型的计算结果相符。据我们所知, 这是首次尝试用 VCA 和 CPA 方法研究非晶体系的电子结构。

主题词: 虚晶近似, 相干势近似, 原子轨道线性组合, 非晶合金, Bethe 晶格, 电子态密度

金属-半导体合金材料中, 金属与半导体特性间的转变问题, 近年来正得到越来越广泛的研究。Verges^[1] 对非晶 Si_{0.8}Al_{0.2} 采用 Bethe 晶格模型作了计算。计算比较复杂。本文首次尝试用一晶格模型, 仅考虑原子在格位上的无序分布, 简称为无序晶格模型, 来处理非晶体系。具体采用 VCA 和 CPA 方法计算了 Al_xSi_{1-x} 的电子态密度。能带计算采用经验紧束缚方法或称经验 LCAO 方法。这些计算方法类似于引文[2]中所述, 故这里不再介绍了。

对于 Si 采用 Lin^[3] 的参数, 对于 Al 则采用 Harrison^[4] 的经验参数。为了使两套参数能相匹配, 我们将 Harrison 参数中的原子能量项 E_s^{Al} 和 E_p^{Al} 同时平移 ΔE , 使 Al 的费米能级与 Si 的价带顶对齐。表 1 列出了移动前后的 Al 原子能量项。

表 1 Al 原子能量项

	移 动 前	移 动 后
$E_s^{\text{Al}}(\text{eV})$	-10.11	-3.56
$E_p^{\text{Al}}(\text{eV})$	-4.86	1.69

由于合金 Al_xSi_{1-x} 的两种边界材料 Al 和 Si 的晶格不同, Al 为面心立方晶格, Si 为金刚石结构。为使这两种边界材料能在同一晶格中相互过渡, 我们假设 Al_xSi_{1-x} 为一金刚石结构。每个原胞有两个原子位置, 它们或者被两个 Si 原子占有, 即原胞 (SiSi); 或者被一个 Al 原子占有, 另一个为空位, 即原胞 (AlV), 这里用 V 表示空位。此合金可表示为 (AlV)_y(SiSi)_{1-y}, y 为出现原胞 (AlV) 的几率, 也可说是在某个原子位置出现 Al 原子或空位的几率。考虑到合金组分浓度仍保持 x, 可得 y 与 x 间具有关系 $y = \frac{2x}{1+x}$ 。值得注意的是, 在此情况中, 合金中 Al 的组分浓度 x 与出现原胞 (AlV) 的几率 y 是不同的。在对 A_xB_{1-x} 型合金的 VCA 计算中, A ⇌ AlV, B ⇌ SiSi。

由于 Al 的浓度很小时就会使合金出现金属特性, 所以仅对 $x = 0, 0.1, 0.2$ 时用 VCA 方法计算了 $\text{Al}_x\text{Si}_{1-x}$ 的态密度曲线。图 1 列出了这些曲线。当 $x = 0.1$ 时, 费米能级 E_F 已进入价带, 且 E_F 附近的态密度很高, 禁带已消失, 说明合金已完全金属化了。图 2 为 J. A. Verges^[1] 用 Bethe 晶格模拟 $\alpha\text{-Si}_{0.8}\text{Al}_{0.2}$ 合金得到的, 当 Al 和 Si 均为四度配位情况下的定域态密度。比较图 1 和图 2, 可见 $x = 0.1$ 即 $y = 0.18$ 时的态密度与 Verges 的结果较接近。

为了更精确地与 Verges 的结果比较, 我们用 CPA 方法计算了 $x = 0.1$ 的态密度, 并为使 Al 和 Si 均为四度配位, 假设此合金的晶格结构为: 原胞中的一个原子位置始终被 Si 占有, 而另一个原子位置可能为 Si 或 Al 占有。可表示为 $\text{Si}(\text{Al}, \text{Si}_{1-x})$ 或写为 $(\text{SiAl})_x (\text{SiSi})_{1-y}$ 。此时 $y = 2x$, 即 $x = 0.1$ 时, $y = 0.2$ 。该模型与 Verges 计算四度配位的

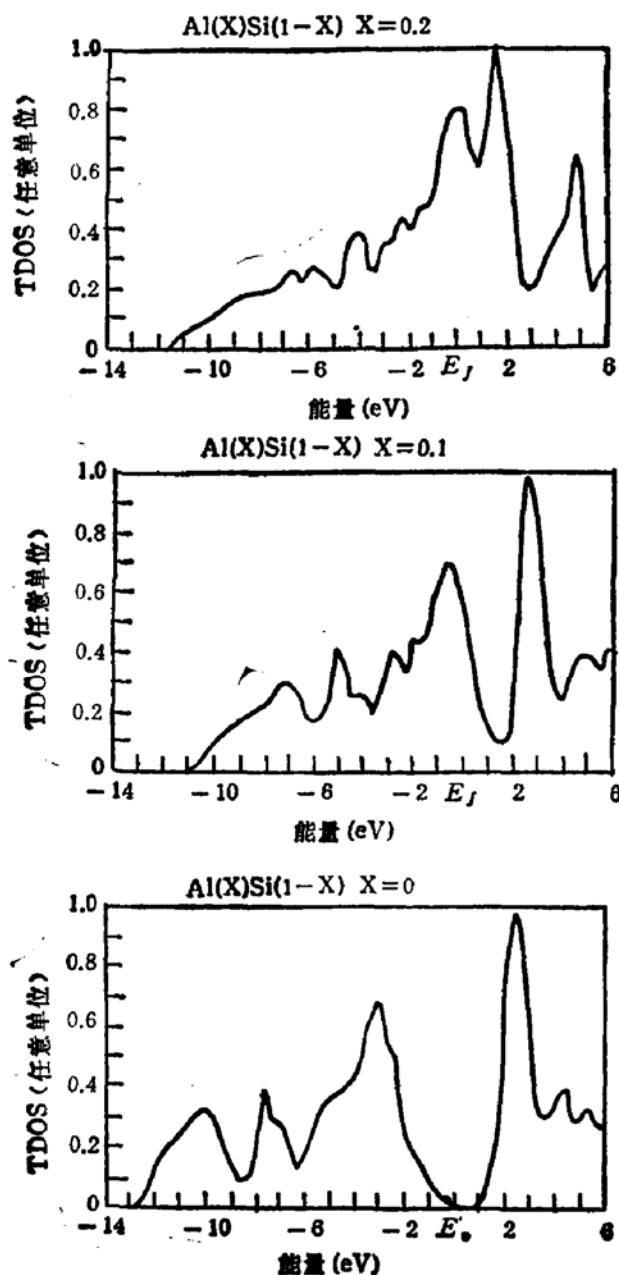


图 1 VCA 计算曲线

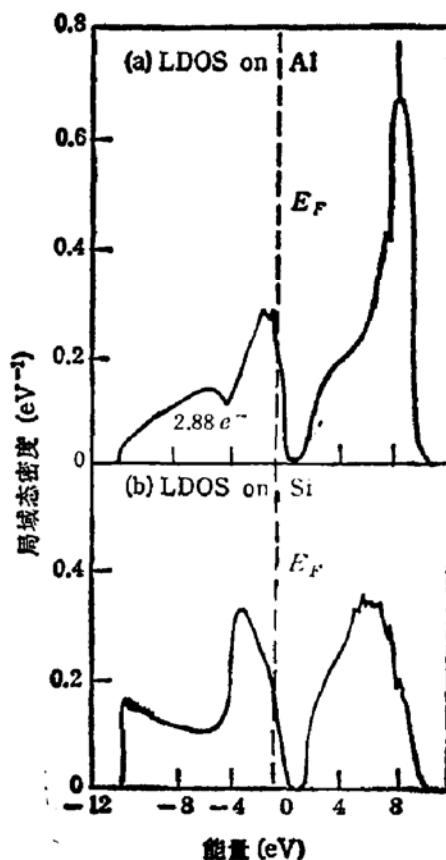


图 2 Verges 的计算曲线

$\alpha\text{-Si}_{0.8}\text{Al}_{0.2}$ 中 Si 原子处的定域态密度时所用的模型相一致。

由于 x 较小, 故在我们的 CPA 计算中取纯 Si ($x = y = 0$) 的分态密度作为零级分态密度。此时所用的计算自能的自治方程与引文 [2] 的略有不同, 应为

$$\sigma_a(x) = (1 - y)(\epsilon_a^{\text{Si}} - \epsilon_a^{\text{Al}}) + \sigma_a(x)F_a(x)[\epsilon_a^{\text{Si}} - \epsilon_a^{\text{Al}} - \sigma_a(x)]$$

$$F_a(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_a^*(E')dE'}{Z - \sigma_a(x) - E'}$$

其中 σ_a 与 ρ_a^* 分别为与原子轨道 a 相关的自能和零级分态密度。所得态密度曲线见图 3,

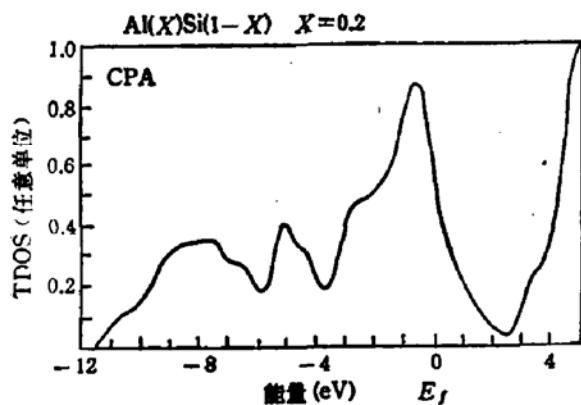


图 3 CPA 计算曲线

可见它与 Verges 的在 Si 处的定域态密度曲线图 2 (b) 符合较好。这与实验上 $x = 0.2$ 附近为金属与半导体的转变点的结论大致吻合。或者可以说在某个原子位置上出现 Al 的几率为 0.2 时是金属与半导体的转变点。由于晶格模型的不同, 在原子位置上出现某种原子的几率 y 与合金组分 x 的值可能不同。就我们的计算来看, 只要在原子位置上出现某种原子的几率相同的话, 则我们的无序晶格模型与 Verges 的非晶集团 (Cluster) 模型或称 Bethe 晶格模型的结果是十分相似的。

以上结果说明, 在合适的晶格模型下, VCA 和 CPA 方法也可用来研究非晶体系的电子结构。因其计算比通常的 Bethe 晶格方法更为简单, 所以不失为一种可推广应用和进一步研究的方法。

参 考 文 献

- [1] J. A. Vergés, *Phys. Rev.*, B32, 3662 (1985).
- [2] 陆奋, 半导体学报, 7, 380(1986).
- [3] P. J. Lin-Chung and Yuan Li, *Phys. Rev.*, B27, 3465 (1983).
- [4] W. A. Harrison, «Electronic Structure and Properties of Solids», W. H. Freeman and Company, San Francisco, USA (1980).

Electronic Structure of $\text{Al}_x\text{Si}_{1-x}$

Lu Fen, Yin Qi and Zhang Kaiming

(*Modern Physics Institute, Fudan University, Shanghai*)

Abstract

The densities of electronic states for alloy $\text{Al}_x\text{Si}_{1-x}$ are calculated by the VCA and CPA methods. The empirical LCAO method is used to calculate the energy band. The results obtained agree well with those given by Verges using random Bethe lattice model. It is believed that this is the first attempt to investigate electronic structures of amorphous systems by the VCA and CPA methods.

KEYWORDS VCA, CPA, LCAO, Amorphous alloy, Bethe lattice, Density of electronic states