

# GaAs 中碳局域模振动红外吸收的温度依赖关系

江德生 宋春英 郑捷飞 许振嘉

(中国科学院半导体研究所)

1985年10月8日收到

砷化镓中  $C_{As}$  在  $582\text{cm}^{-1}$  处的局域振动模 (LVM) 吸收带于低温下存在精细结构, 利用其中同位素效应产生的分裂谱线很锐 ( $25\text{K}$  时半高宽小于  $0.1\text{cm}^{-1}$ ) 的特点, 研究了吸收谱线的频率和半高宽以及整个吸收带的积分吸收随温度的变化关系。在 GaAs 中,  $C_{As}$  LVM 与晶格带模振动之间的非简谐耦合虽然比离子性较强的晶体中要弱, 但在温度变化引起谱线发生频移和半高宽变化时, 非简谐效应起了重要的作用。在一些 P 型和高阻样品中,  $C_{As}$  LVM 吸收带的积分吸收在低温下随温度降低而反常减小, 可用带负电荷的  $C_{As}$  受主中心浓度随温度降低而减少来解释, 由此获得  $C_{As}$  受主消电离情况的信息。

## 一、引言

GaAs 中的杂质碳原子在  $77\text{K}$  下于  $582\text{cm}^{-1}$  处产生特征的红外吸收, 这种吸收是代位碳原子的局域模振动 (LVM) 所引起的<sup>[1]</sup>。碳原子的质量比镓、砷原子的质量小, 其局域模振动频率比 GaAs 长波 LO 声子的频率高一倍。这种振动与红外光之间的耦合很强, 吸收截面很大, 因此纯高阻 GaAs 中含量低于百万分之一的杂质碳 ( $\sim 5 \times 10^{14}/\text{cm}^3$ ) 可用红外吸收法测出来。1982年, Theis 等对 GaAs 中 C 的 LVM 吸收带的精细结构进行了研究<sup>[2]</sup>, 证明 C 主要占据 As 位, 其最近邻的 Ga 原子的同位素效应使 LVM 吸收带产生分裂, 此精细结构中存在分别相应于碳原子周围有四个  $^{63}\text{Ga}$  和四个  $^{65}\text{Ga}$  原子时的 LVM 频率的锐谱线。

我们在  $25\text{K}$  到  $300\text{K}$  的温度范围内, 用高分辨红外光谱研究了液封直拉法 (LEC) 拉制的高阻 GaAs 中  $C_{As}$  的 LVM 吸收, 测量了吸收带位置及其中锐谱线的频率、半宽度之值和积分吸收强度随温度变化的依赖关系。

过去对卤碱化合物晶体中轻元素原子的 LVM 吸收的温度依赖关系已有过较多研究, 但对于半导体晶体则研究得很少(仅在离子性较强的 CdTe 中观测到 LVM 的非简谐效应<sup>[3]</sup>), 对 III-V 族化合物则还没有见到过报道。高阻 LEC-GaAs 是非常适合于研究晶体中与杂质有关的振动性质的 III-V 族半导体材料, 因为自由载流子浓度很低, 引起的红外吸收本底很小, 同时, 主要残留杂质之一的碳浓度约为  $10^{13}$ — $10^{14}/\text{cm}^3$  数量级, 在进行红外高分辨测量时, 碳的 LVM 吸收精细结构中的分裂谱线很锐(低温下小于  $0.1\text{cm}^{-1}$ ), 这是在 GaAs 中观察到的最锐的振动吸收谱线, 其频率位置可准确测定, 对研究

频率随温度的细致变化十分有利。我们分析了 GaAs 中碳的 LVM 吸收谱线的温度展宽和频率位置随温度增高而向低频方向漂移的物理机制，着重对局域模振动和晶格带模振动之间的非简谐耦合效应进行了讨论。

## 二、实 验

本实验中所测量的 GaAs 单晶主要是在高压单晶炉中生长的液封直拉法(LEC) GaAs 材料，液封材料是  $B_2O_3$ ，主要残留杂质是碳、硼以及少量的硅等，其中样品 1 是石英坩埚中生长的、未有意掺杂的高阻 GaAs 样品，深施主 EL2 中心浓度约为  $1.2 \times 10^{16}/cm^3$ ，碳浓度为  $1.89 \times 10^{15}/cm^3$ ；样品 2 是掺 Cr 的直拉 GaAs 高阻样品，碳浓度为  $3 \times 10^{15}/cm^3$ ；样品 3 是碳沾污量较大的未掺杂高阻样品。高分辨光谱是在 IFS115 傅里叶光谱仪上测量的，最高分辨率可达  $0.06\text{cm}^{-1}$ 。为了提高光谱测量的信噪比，在获取干涉图时进行了多次重复扫描以便进行信号平均，低温测量时扫描次数一般达 300 次。在进行液氮温度以上的变温测量时，采用 Oxford 204 低温恒温器；在进行低于液氮温度的变温测量时，采用了小型致冷机。除了样品架上原有的薄膜电阻温度计外，还在样品附近固定了金铁-镍铬热偶以便监测样品的温度。

## 三、实验结果和讨论

在 25K 到 300K 的温度范围内，GaAs 中碳所引起的局域模振动吸收的频率从  $582\text{cm}^{-1}$  变化到  $579\text{cm}^{-1}$ 。与 GaAs 晶格的 LO 和 TO 声子频率(在布里渊区中心处分别为  $291\text{cm}^{-1}$  和  $269\text{cm}^{-1}$ )相比，此 LVM 频率是很高的。图 1 示出了 GaAs 的声子色散曲线及  $C_{As}$ LVM 频率。图 2 是从液氮温度到室温碳含量较高的样品 3 的  $C_{As}$ LVM 红外吸收光谱。在 80K 吸收带存在精细结构，可分解为几个劳伦兹线形函数的迭加。此带主要由三个峰组成，其中高频端和低频端两条谱线(频率标为  $\omega_2$  和  $\omega_1$ )很锐，半高宽约为  $0.1\text{cm}^{-1}$ 。Theis 等认为精细结构是由于  $C_{As}$  原子周围四个最近邻的 Ga 原子对  $C_{As}$  LVM 振动产生微扰而引起的，并且两种同位素 Ga 原子 ( $^{69}\text{Ga}$  和  $^{71}\text{Ga}$ ) 可形成不同的最近邻组态。 $\omega_2$  和  $\omega_1$  分别相当于原子周围的四个最近邻 Ga 原子全是  $^{69}\text{Ga}$  和  $^{71}\text{Ga}$ (天然丰度分别为 60.1% 和 39.9%) 时的 LVM 频率<sup>[2]</sup>。按照一维线性链模型，并只计入最近邻之间的互作用，计算得

$$\omega_2/\omega_1 = 1.0013. \quad (1)$$

我们测得  $\omega_2/\omega_1 = 1.0009$ ，与上述模型的估计值基本一致，此值不随样品或测量温度改变而改变，进一步证明精细结构的出现是由于同位素效应引起的。

图 3 是样品 1 从 25K 到 91K 的  $C_{As}$  LVM 红外吸收谱曲线。随着样品温度升高，可以观察到  $C_{As}$  吸收的频率位置逐渐向低频方向发生漂移。在 100K 以下频率漂移很慢，在温度较高时漂移得较快。当温度升高时，各谱线的半宽度也明显变宽。从图 2 看到， $T = 300\text{K}$  时， $C_{As}$ LVM 吸收的精细结构已由于温度展宽效应而消失，吸收峰的半宽达  $\sim 1\text{cm}^{-1}$ ，峰值位置位于  $579.8\text{cm}^{-1}$  处<sup>[4]</sup>。图 4(b) 中曲线 1 是  $\omega_2$  的频率位置与温度的依

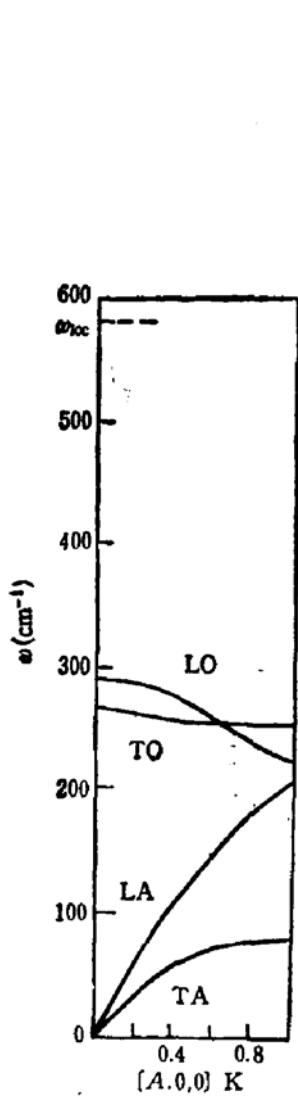


图1 GaAs 的声子色散曲线和 C<sub>As</sub>LVM 频率

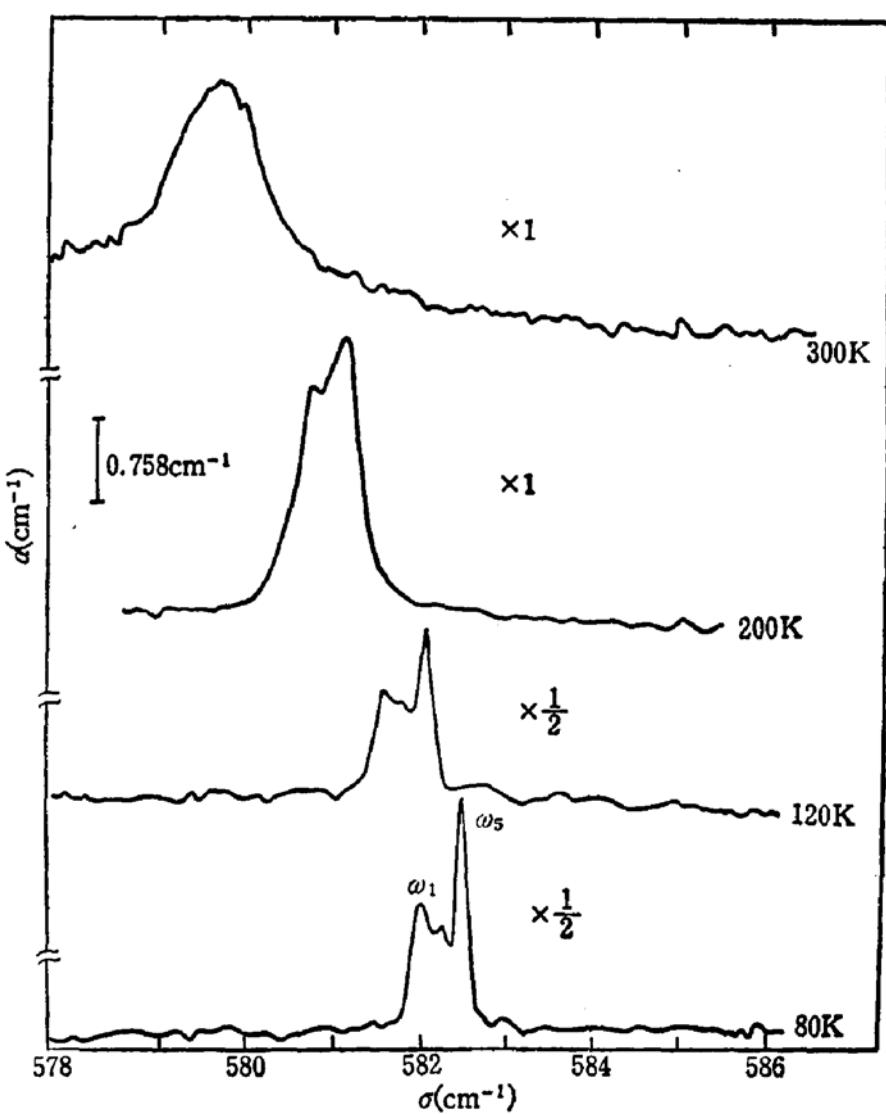


图2 样品 3 从液氮温度到室温的 C<sub>As</sub>LVM 红外吸收谱

赖关系。在低温下此频率能精确测定,但由于谱线半宽随温度升高而增大,精细结构中各锐谱线逐渐合并在一起,因此在室温附近  $\omega_1$  的频率位置已无法准确测定。图5是  $\omega_1$  谱线的半高宽  $\Delta\omega_1$  与温度的依赖关系,由于同样的原因,在较高温度下无法测出  $\omega_1$  的半高宽值。该图中个别实验点的半高宽值偏大,估计是在吸收谱线附近的噪音峰干扰引起的(高分辨谱中噪音背景较大)。

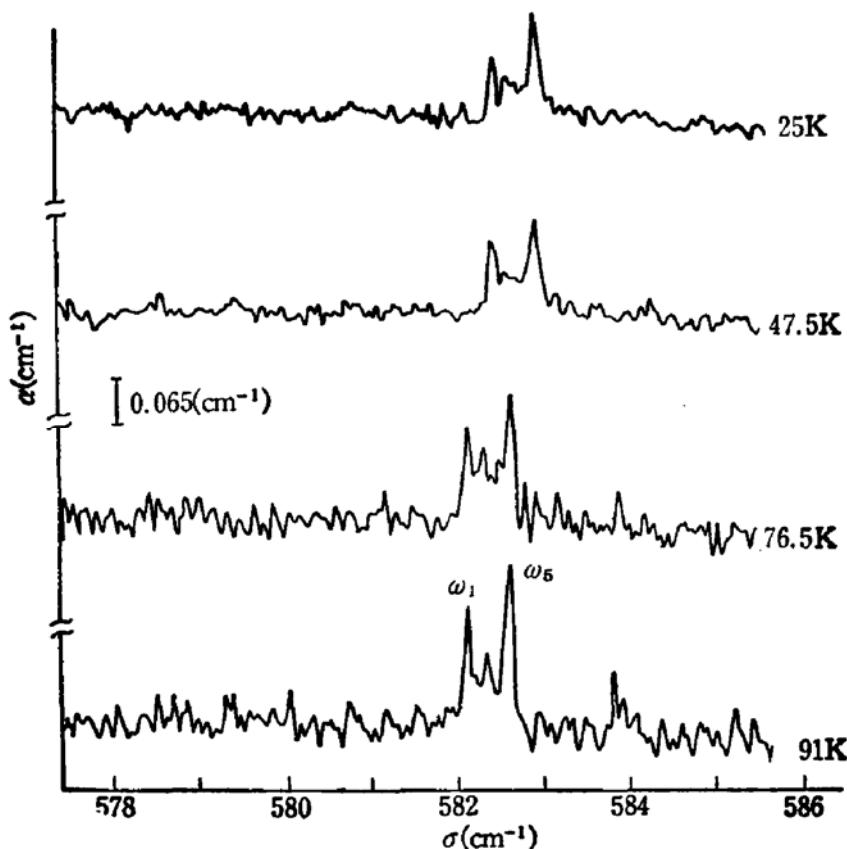
下面讨论 GaAs 中 C<sub>As</sub> 的 LVM 红外吸收谱线的频率、半高宽和积分吸收强度随温度变化的依赖关系。

### (1) 振动频率随温度的变化

使  $\omega_{loc}$  随温度发生漂移的贡献可能来自两部份:

$$\left(\frac{\partial\omega_{loc}}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial\omega_{loc}}{\partial T}\right)_V + \left(\frac{\partial\omega_{loc}}{\partial V}\right)\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P \quad (2)$$

上式右侧第一项表示温度变化时非简谐效应产生频移;第二项表示随温度升高、晶体发生

图 3 样品 1 在 25K 到 91K 的  $\text{Ca}_3\text{LVM}$  吸收光谱

热膨胀而引起频移, 其中  $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$  表示体膨胀系数。热膨胀现象本身虽然也是晶体原子非简谐振动的结果, 但当晶体体积(和原子间距)发生改变时, 局域模振动的力常数将发生变化。因此, 即使简谐振动的 LVM 其频率在温度变化时也将发生漂移。这表明, 第二项的性质和第一项存在重要的差别。

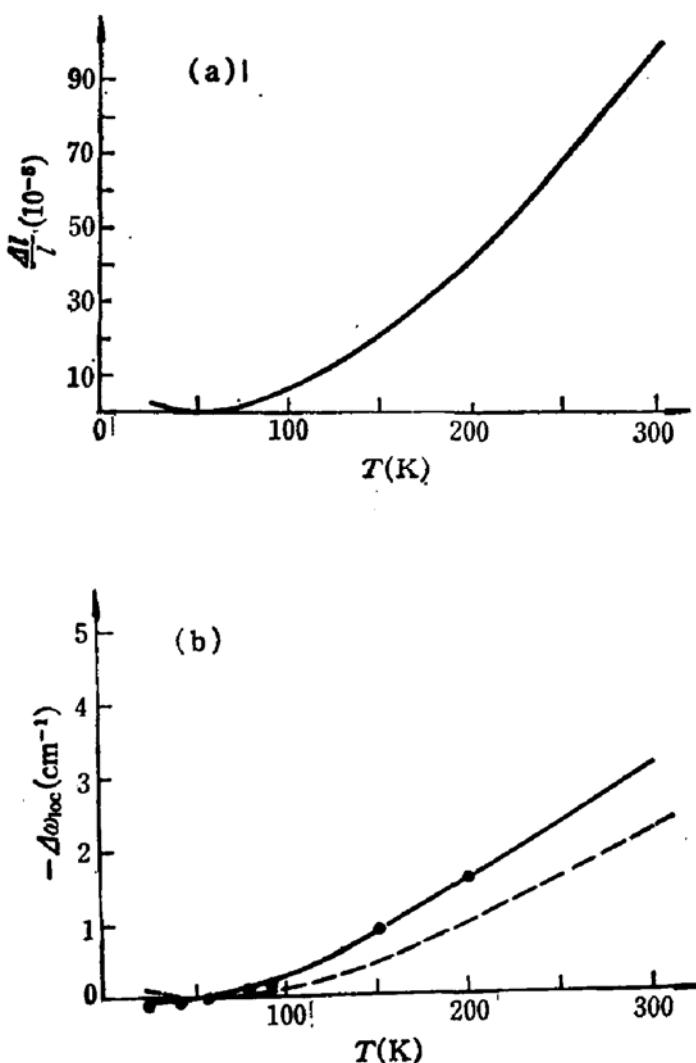
局域模振动频率随体积膨胀的变化可用格吕内森 (Grüneisen) 参量  $\gamma_{loc}$  表示:

$$\gamma_{loc} = - \frac{d \log \omega_{loc}}{d \log V} = - \frac{V}{\omega_{loc}} \frac{d \omega_{loc}}{d V} \quad (3)$$

在准简谐范围内, 某一给定模式的格吕内森参量应该是常数<sup>[3]</sup>。假定杂质附近的局部体积变化  $\left(\frac{\Delta V}{V}\right)_{loc}$  可用晶格的体积变化  $\frac{\Delta V}{V}$  表示, 则 (3) 式可改写为:

$$-\Delta \omega_{loc} = \omega_{loc} \cdot \gamma_{loc} \cdot \left(\frac{\Delta V}{V}\right) \quad (4)$$

即 LVM 频率的变化与晶格的体积变化成正比。值得注意的是, 对于 GaAs 和许多金刚石和闪锌矿结构的半导体来说, 由于低温下 TA 模声子对热膨胀起主要贡献, 而在高温下是光学模和 LA 模声子对热膨胀起主要贡献, 热胀系数  $\alpha(T)$  在低温下变号。如 GaAs 在 55K 密度最大, 温度高于 55K 时热胀系数为正, 而当  $T < 55K$  时热胀系数为负, 即体积随温度升高而反常缩小。图 4(a) 是 GaAs 中相对膨胀  $\frac{\Delta l}{l_0} = \frac{l(T) - l_0}{l_0}$  随温度变化



上: 图 4(a) GaAs 的线膨胀曲线

下: 图 4(b) GaAs 中  $C_{As}LVM$  吸收频率  $\omega$ , 随温度的变化

实线: 实验曲线

虚线: 计算曲线(只考虑热膨胀项的贡献, 见正文)

的曲线 ( $l_0$  是 55K 时参比长度), 由图可看出曲线在 55K 时取极小值<sup>[9]</sup>. 由于 GaAs 中碳 LVM 的格吕内森常数尚未精确测定, 我们近似地把  $\gamma_{loc}$  取为布里渊区中心 LO 声子的  $\gamma$  值 1.39, 按 (4) 计算出:

$$\begin{aligned}\Delta\omega_{loc} &= - \left[ \omega_{loc} \cdot 3 \cdot \frac{\Delta l}{l} \right] \cdot \gamma_{loc} \\ &\approx - 2.43 \cdot 10^3 \cdot \left[ \frac{\Delta l}{l} \right]\end{aligned}\quad (5)$$

取 55K 时的  $\Delta l/l$  为零, (5) 式算出  $\Delta\omega_{loc}$  在 55K 时为零, 当温度降低和升高时,  $|\Delta\omega_{loc}|$  增大. 由于体膨胀而引起  $\omega_{loc}$  的频移量随温度变化的曲线(图 4(b) 中的虚线)在 55K 时应取极小值. 但实验所观测到的频移曲线(图 4b 中的实线)并非如此. 实际上,  $\omega$  之值在 55K 附近随温度升高而单调地向低频方向移动. 图 4(b) 中实验曲线和计

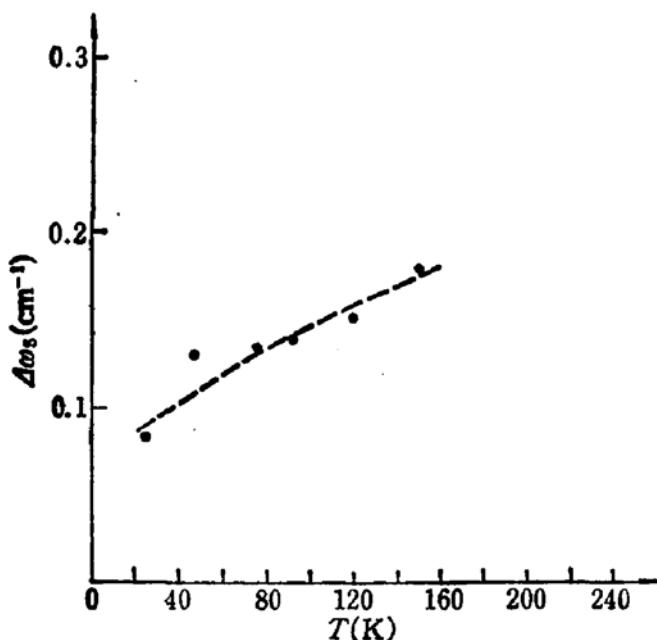


图 5  $\omega$ , 谱线的半高宽  $\Delta\omega$ , 随温度的变化

算曲线的差别表明,  $\left(\frac{\partial\omega_{loc}}{\partial T}\right)_v$  项, 即非简谐效应对频移的贡献是不可忽略的。

在 Mitra 等对晶格带模声子频率随温度变化所作的分析的基础上<sup>[6]</sup>, 对局域模声子非简谐频移的物理本质可作如下讨论:

包含晶格带模振动和局域模振动的系统的振动势能可写成为:

$$V = V_0 + V' \quad (6)$$

式中  $V_0$  是势能中的简谐项, 是正则坐标的二次项,  $V'$  表示势能中的非简谐项。上述势能的简谐部分可精确求解, 非简谐项可作为微扰处理。简谐近似下系统的能量本征值可表示为各振动模式能量之和,

$$E_0 = \sum_{i,q} \left( n_i^q + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_i(q) + \left( n_{loc} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_{loc}$$

式中  $n_i^q$  表示声子的占据数,  $i$  和  $q$  表示波矢和支,  $\omega_i(q)$  和  $\omega_{loc}$  表示带模和局域模振动频率。当微扰很小时, 微扰态的本征值仍可很好地表示为振子能量之和的形式, 但振动频率将改变为  $\omega'_i(q)$  和  $\omega'_{loc}$ , 此时,

$$E' = \sum_{i,q} \left( n_i^q + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega'_i(q) + \left( n_{loc} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega'_{loc},$$

$$\Delta\omega_{loc} = \omega'_{loc} - \omega_{loc},$$

其值与非简谐势的大小和各模式的声子的占据数  $n$  有关, 而

$$n = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \quad (7)$$

与温度  $T$  有关, 因而  $\omega'_{loc}$  也与温度有关。因此产生了  $\left(\frac{\partial\omega_{loc}}{\partial T}\right)_v$  项。在 GaAs 中, 碳 LVM 的频率在 25K 到 300K 范围内总的变化不大(约  $3\text{cm}^{-1}$  左右), 非简谐效应的贡献较

小。这表明,与卤碱化合物相比, GaAs 中碳的 LVM 振动晶格带模振动之间的非简谐耦合是比较弱的。

## (2) 吸收谱线半高宽随温度的变化

晶体中杂质的 LVM 吸收谱线的展宽可分为均匀展宽和非均匀展宽两类。产生均匀展宽的原因是由于振动的激发态只具有有限的寿命  $\tau$ , 谱线的半高宽相应地为  $\Delta\omega \propto \frac{1}{\tau}$ , 其温度依赖关系取决于  $\tau$  的温度依赖关系。非均匀展宽(晶格中存在的弹性应变、高密度位错及杂质团或同位素效应引起的展宽等)则一般不随温度而变。我们所研究的 LEC-GaAs 未故意掺杂, 具有较高的晶体完整性, 除少数碳浓度很高的样品中发现  $C_{As}$ LVM 谱线随碳浓度增大而轻微展宽外, 大多数样品中测到的锐谱线半高宽估计是由均匀展宽所决定的。在 77K 样品 1 和 2 中  $C_{As}$  吸收带精细结构中的  $\omega_s$  谱线的半高宽小于  $0.1\text{cm}^{-1}$ ,  $\frac{\Delta\omega_s}{\omega_{loc}} < \frac{0.1\text{cm}^{-1}}{582\text{cm}^{-1}} \approx 1.7 \times 10^4$ , 此半高宽的相对值比一些卤碱化合物中杂质 LVM 吸收谱线(如 NaF 中氘的 LVM 谱线)在 77K 的相对半高宽<sup>[7]</sup>低一个数量级。这表明在相同温度下 GaAs 中  $C_{As}$  局域模振动的激发态具有较长的寿命。

晶体中的 LVM 振动主要通过与晶格声子耦合而发生衰减。激发态的寿命  $\tau$  的大小决定于局域模振动和晶格带模声子之间的非简谐互作用及高次电矩耦合的大小。通过局域模振动与带模声子耦合而发生弛豫的具体过程, 可分为分解过程和散射过程两类, 前者表示局域模振动衰变成两个以上的带模声子, 后者表示局域模振动受到两个以上带模声子的散射。

对于分解过程来说, 由于 GaAs 中最高频率的带模声子是布里渊区中心的纵光学声子,  $\omega_{LO} = 291\text{cm}^{-1}$ , 而  $C_{As}$  局域模振动频率为  $582\text{cm}^{-1}$ , 这就意味着  $C_{As}$ LVM 至少要分解成两个以上的带模声子才能满足能量守恒的要求。

已经证明, 二声子和三声子分解过程, 即下述过程:

$$\begin{aligned} |1\rangle |\dots\dots, n_q, n_{q'}, \dots\dots\rangle &\rightarrow |0\rangle |\dots\dots, n_q + 1, n_{q'} + 1, \dots\dots\rangle \\ |1\rangle |\dots\dots, n_q, n_{q'}, n_{q''}, \dots\dots\rangle &\rightarrow |0\rangle |\dots\dots, n_q + 1, n_{q'} + 1, \\ &\quad n_{q''} + 1, \dots\dots\rangle \end{aligned} \quad (8)$$

(8) 式中  $|1\rangle$  和  $|0\rangle$  分别表示 LVM 的激发态和基态,  $n_q, n_{q'}, n_{q''}$  分别表示带模声子的占据数。在温度很低 ( $kT \ll \frac{1}{4}\hbar\omega_{loc}$ , 对于  $C_{As}$ , 相当于  $T \ll 200\text{K}$ ) 时, 这类分解过程所决定的半高宽  $\Delta\omega$  应与  $T$  无关; 在高温时,  $\Delta\omega$  在二声子和三声子分解过程中则分别与  $T$  和  $T^2$  成正比<sup>[3,7]</sup>。

对于散射过程, 如两个带模声子参与的散射过程:

$$|1\rangle |\dots\dots, n_q, n_{q'}, \dots\dots\rangle \rightarrow |1\rangle |\dots\dots, n_q \pm 1, n_{q'} \pm 1, \dots\dots\rangle \quad (9)$$

LVM 谱线的半高宽在低温 ( $T \ll \theta$ ) 和高温 ( $T \gg \theta$ ) 下应分别正比于  $T'$  和  $T^{[3]}$ ,  $\frac{k\theta}{\hbar}$  是声学声子的有效截止频率。通常低频的声学声子对散射的贡献较大, 温度  $\theta$  比晶体的德拜温度  $\theta_D$  之值低。

在图 5 中示出 GaAs 中  $C_{As}$ LVM 吸收带中  $\omega_s$  谱线的半高宽随温度变化的测量曲

线。由图可看出，低温下 ( $\text{GaAs}$  用比热法测出的  $\theta_D$  值为 374K) 温度  $T$  改变数倍时， $\Delta\omega$  值变化很小。在  $T > 160\text{K}$  后，由于谱线发生重叠，以致不能再分辨  $\omega$ ，谱线的半高宽。显然，谱线的低温展宽没有象散射过程所预期的那样按  $T^2$  规律随温度升高急剧变化，这说明在低温下  $\text{C}_{\text{A}}\text{LVM}$  谱线的展宽主要不决定于散射过程，分解过程是更重要的衰减过程。在卤碱化合物局域模振动吸收的研究中发现<sup>[7]</sup>，当双声子分解过程在能量上是允许的(如  $\text{NaF:D}$ ,  $\text{LiF:H}$ ,  $\text{LiF:D}$  的情况)，低温下 LVM 谱线的半高宽主要决定于双声子分解过程而不是双声子散射过程。 $\text{GaAs:C}$  的情况与此一致。在温度从低温区向高温区接近的过渡范围内，半高宽的变化逐渐加大，此时分解过程和散射过程有可能同时产生贡献<sup>[7]</sup>。

### (3) 吸收强度随温度的变化

低温下，n型高阻  $\text{GaAs}$  样品的红外测量结果表明， $\text{C}_{\text{A}}$  在  $582\text{cm}^{-1}$  处红外吸收带的积分面积基本上不随温度而变，但在温度高于液氮温度时，观察到积分吸收强度随温度而减少。在室温下，吸收截面略低于液氮温度下的吸收截面。根据室温下的  $\text{C}_{\text{A}}$  吸收截面可以计算出  $\text{GaAs}$  中碳的浓度，其灵敏度相对来说比液氮温度测量略低<sup>[4]</sup>。一般性的理论计算表明，晶体中 LVM 引起的红外积分吸收不随温度而变<sup>[3]</sup>。但在卤碱化合物和离子性强的半导体如  $\text{CdTe}$  中，当温度升高时，不仅存在 LVM 的零晶格声子 (ZLP) 吸收带，也还存在较弱的与带模声子耦合的次带吸收或倍频吸收。在这种情况下，尽管局域模振动引起的总积分吸收不随温度而变，而零晶格声子吸收带的积分吸收却可能随温度升高而减小。在  $\text{GaAs}$  中， $582\text{cm}^{-1}$  处吸收带随温度升高而略有减小也可能与存在次带吸收有关。

值得指出的是，在某些不均匀高阻的样品和在 P型样品中，低温下观察到  $582\text{cm}^{-1}$  处  $\text{C}_{\text{A}}$  吸收带面积随温度下降而减小的现象。(但当温度高于 90K 后，吸收又随温度升高而减小。)例如，样品 1 在  $582\text{cm}^{-1}$  处吸收带的积分面积如表 1 所示：

表 1 样品 1 的  $\text{C}_{\text{A}}\text{LVM}$  吸收带的面积(相对值)

温度	25K	47.5K	76.5K	91.5K
吸收强度	219	241	301	378

当样品温度高于 90K 时，吸收截面减小的原因已在上面讨论过。我们认为，某些样品在  $582\text{cm}^{-1}$  处吸收带面积在低温下随温度下降而反常减小的原因，是由于费米能级随温度降低向价带顶方向移动，使部分荷电  $\text{C}_{\text{A}}$  受主中心发生消电离所致。

$\text{C}_{\text{A}}$  在  $582\text{cm}^{-1}$  处的吸收带的积分吸收可表示为<sup>[8]</sup>：

$$\int_{\text{吸收带}} \alpha(\omega) d\omega = \frac{2\pi D \cdot \eta^2}{n \cdot c} |\chi(0)|^2 \quad (10)$$

式中  $\frac{2\pi}{nc}$  为常数， $n$  为样品的折射率， $c$  为光速， $D$  为参与 LVM 吸收的  $\text{C}_{\text{A}}$  原子浓度， $\eta$  为杂质原子的静电荷。 $(10)$  式中  $|\chi(0)|^2$  是一修正因子，它是由于在局域模振动时杂质原子周围的最近邻原子的振幅不全为零而引起的。用  $(10)$  式计算的积分吸收，不是温

度的显函数,但与代位杂质原子浓度  $D$  成正比,温度改变如引起  $D$  改变,也能使积分吸收改变。GaAs 中  $582\text{cm}^{-1}$  处的吸收是由电离的碳受主杂质  $\text{C}_{\text{A}}^-$  的 LVM 所引起的。消电离的  $\text{C}_{\text{A}}$  在  $582\text{cm}^{-1}$  处不贡献 LVM 吸收,也就是说,当  $\text{C}_{\text{A}}$  的荷电状态发生改变时,由于键电荷的影响,杂质原子和相邻原子之间的力常数将发生改变,局域模振动频率将发生移动。一般来说,当杂质原子与最近邻原子的键合更趋向于离子性时,局域模振动的频率将变低<sup>[9]</sup>。因此,当  $\text{C}_{\text{A}}^-$  消电离变为  $\text{C}_{\text{A}}^0$  时,由于键合更趋于离子性,代位杂质碳原子引起的 LVM 振动频率将降低,落在离  $582\text{cm}^{-1}$  较远的低频区,而在  $582\text{cm}^{-1}$  处测到的积分吸收面积将随  $\text{C}_{\text{A}}$  消电离程度的增大而减小。在 P 型 GaAs 样品(和不均匀高阻的样品 1)中,费米能级在温度降低时,向价带顶方向移动,部分碳受主将发生消电离,从带负电荷的状态改变为电中性状态。因此  $582\text{cm}^{-1}$  处红外吸收的减小反映了  $\text{C}_{\text{A}}^-$  的消电离过程。我们对某些 P 型样品进行的变温霍尔效应测量表明,在低温下费米能级随温度降低而向价带顶方向发生明显的移动,其位置在很低温下受到  $E_{\text{V}} + 26\text{meV}$  处的碳受主能级的控制<sup>[10]</sup>。在此过程中,碳受主发生明显消电离。从红外吸收的变化所得到的关于  $\text{C}_{\text{A}}$  发生消电离的分析与此测量结果是一致的。

#### 四、结 论

精确测定 GaAs 中  $\text{C}_{\text{A}}$ -LVM 红外吸收锐谱线的频率位置、半高宽以及积分吸收强度随温度而变化的依赖关系,提供了研究 III-V 族化合物中  $\text{C}_{\text{A}}$ -LVM 振动有关的物理过程的重要信息。实验结果进一步证实了同位素效应是引起  $\text{C}_{\text{A}}$  吸收带精细结构的原因,并显示了  $\text{C}_{\text{A}}$ -LVM 振动与晶格带模声子之间非简谐耦合所产生的效应。总的来说, GaAs 中代位碳的局域模振动的非简谐效应要比离子性强的晶体小得多,但在解释观察到的红外吸收实验结果时却是不可忽略的。此外,在低温下,某些样品的  $\text{C}_{\text{A}}$ -LVM 带吸收面积随温度下降而减小,此现象不能用非简谐效应解释。我们认为,这种反常减小与  $\text{C}_{\text{A}}^-$  受主中心浓度减小有关,是低温下  $\text{C}_{\text{A}}^-$  受主发生部分消电离的结果。

有色金属研究总院和中国科学院半导体所 GaAs 单晶组提供了 LEC GaAs 单晶样品,谨致谢意。

#### 参 考 文 献

- [1] R. C. Newman and E. Thompson, *Solid State Commun.*, 10, 505(1972).
- [2] W. M. Theis, K. K. Bajaj, C. W. Litton and W. G. Spitzer, *Physica*, 117B & 118B, 116(1983).
- [3] A. S. Barker and A. J. Sievers, *Review of Modern Physics*, 47, suppl. 2, S1(1975).
- [4] 江德生, 宋春英、许振嘉, 郑捷飞, *半导体学报*, 7, 59(1986).
- [5] T. Soma, J. Satoh, H. Matsuo, *Solid State Commun.*, 42, 889(1982).
- [6] S. S. Mitra and N. E. Massa, *Handbook on Semiconductors*, Vol. 1, p. 81, North Holland Publication Company (1982).
- [7] H. Doetsch, *Phys. Stat. Solidi*, 31, 649(1969).
- [8] R. C. Newman in "IR Studies of Crystal Defects", Taylor & Francis (1974).
- [9] J. Woodhead, R. C. Newman, I. Grant, D. Runsby, and R. M. Ware, *J. Phys. C: Solid State Physics*, 16, 5523(1983).
- [10] 江德生, 宋春英、何宏家, 许振嘉, 待发表。

## Temperature Dependence of LVM Absorption Induced by Carbon in GaAs

Jiang Desheng, Song Chunyin, Zheng Jiefei and Xu Zhenjia

(Institute of Semiconductors, Academia Sinica)

### Abstract

Substitutional carbon atom on As site in GaAs lattice induces LVM absorption near  $582\text{ cm}^{-1}$  at low temperatures. Due to the extreme sharpness of split absorption lines caused by isotope effect of nearest-neighbor Ga atoms ( $\sim 0.1\text{cm}^{-1}$  at 25K), the temperature dependences of frequency and half width of particular spectral line are accurately determined. It is shown that the anharmonic coupling between LVM and lattice phonons plays a significant role in frequency shift and line broadening, though such effect is relatively weak compared to the similar one in alkali halides or other strongly ionic crystals.

In P-type and semi-insulating GaAs samples, the integrated absorption near  $582\text{cm}^{-1}$  induced by C<sub>As</sub> LVM is observed to decrease with reduced temperature. This phenomenon can be explained by the variation of concentration of negatively charged C<sub>As</sub> with temperature, indicating the deionization process of carbon acceptor centers occurring at low temperature.