

半导体中轻杂质局域振动模的局域性效应

陆 卫 徐文兰 沈学础

(中国科学院上海技术物理研究所红外物理国家重点实验室 上海 200083)

摘要 通过对半导体中轻杂质及其周围原子的局域声子态密度求解,获得了轻杂质引起的局域模的局域性与质量亏损因子之间的关系,并证明,计入模式的局域度的质量亏损模型可以获得与实验结果吻合的局域模频率。

PACC: 6320P, 7830

1 引言

近二十年来半导体中杂质的晶格振动行为在理论和实验方面有了很多的研究^[1],最近的理论和实验研究表明杂质在半导体中能诱发具有一定程度局域性的振动模^[2],如局域模、禁带模和准局域模^[1~3].近年来用局域模的特性诊断材料中杂质状态方法也有了很大的发展^[4].但至今对这些具有局域性并与杂质相联系的振动模式的局域度及其对相应振动模的其它特性影响的深入讨论似还较少,而对这一问题的深入研究会有助于我们更好地了解局域模的物理特性和更好地在实际中应用这种特性.本文试图讨论局域模局域性规律并进而考察它对局域模频率的影响.

2 原理与模型

2.1 局域模的频率特性

当主晶原子被轻杂质取代后,为描述杂质特性我们可以定义质量亏损参数:

$$\epsilon = 1 - \frac{m_i}{m} \quad (1)$$

其中 m_i, m 分别是被取代的主晶原子和杂质原子质量.在晶体中轻杂质可以以一种比主晶原子振动更快的频率 $\omega_{i,\infty}$ 振动,这种振动模式在振动形式上的一大特征是振动主要局域在杂质上,且 ϵ 愈趋近于 1,局域度越高,在 $\epsilon=1$ 的极端情况下,若采用质量亏损-等力常数模型,则局域模频率可写为:

陆 卫 男,1962 年生,研究员,主要从事半导体材料与凝聚态物理研究
1995 年 3 月 10 日收到初稿,1995 年 11 月 16 日收到修改稿

$$\omega_{\text{Loc}} = \omega_{\text{TO}} \sqrt{\frac{\mu}{m_i}} \quad (2)$$

式中 ω_{TO} 和 μ 分别是主晶原子的横光学声子频率和约化质量. Allen^[5] 在考虑了最近邻原子相互作用后将(2)式修正为:

$$\omega_{\text{Loc}}^2 = A \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{\beta m_{nn}} \right) \quad (3)$$

式中 m_{nn} 为杂质最近邻原子的质量, 它反映了被取代原子种类差异的影响, A 与 β 为模型调节参量. 下面的讨论将明确地给出 Allen 模型中参量 A 和 β 的物理意义及在 $\epsilon < 1$ 的一般情况下对式(2)与(3)的修正.

2.2 局域模的局域性描述

我们应用 Recursion 方法^[3,6] 已经可以分析局域模在三维实空间的振动模式. 因此从理论上考察杂质引起的局域模振幅在实空间的衰减规律, 亦即局域模的局域特性已经成为可能, 通过计算具有各种质量亏损参量的杂质原子和周围原子上的局域声子态密度, 我们得到了一个与质量亏损因子成指数关系的局域模振幅在实空间的衰变规律, 具体形式为:

$$\frac{u_n}{u_0} = e^{-2\epsilon n} \quad (4)$$

式中 n 表示离开杂质第 n 近邻的序号; u_0 和 u_n 表示杂质原子和第 n 近邻原子上的振动振幅, 因此表征局域的因子 $e^{2\epsilon}$ 随质量亏损的增加而上升, 作为比较, 表 1 给出了由经验公式(4)算得的 u_n/u_0 与直接从 LDOS 获得的 u_n/n_0 值. 由于到 $n=2$ 时, 振幅已几乎衰减到零, 因此表 1 中只给出了 u_1/u_0 . 经验公式尚能较好地反映较严格理论计算的结果, 具这一规律似乎还具有与主晶种类无关的普适性.

表 1 (u_1/u_0) 的计算值

计算对象	质量亏损因子	(U/U_0)(LDOS)	(u_1/u_0)(经验公式(4)式)
Cd ¹¹⁴ Te ¹³⁰ : Zn ⁶⁴	0.44	0.33	0.41
Cd ¹¹¹ Te ¹³⁰ : Fe ⁵⁶	0.51	0.30	0.36
Si ²⁸ : C ¹³	0.54	0.30	0.34
Si ²⁸ : C ¹²	0.57	0.29	0.32
Si ²⁸ : B ¹¹	0.61	0.27	0.30
Si ²⁸ : B ¹⁰	0.64	0.26	0.28

3 局域模的局域性对模式频率的影响

本文将主要考虑元素半导体如 Si 和 Ge. 根据主晶和杂质原子在局域模中的振动特性, 可以认为局域模的振动形式相当于主晶原子作无损耗的振幅受限的振动, 而杂质原子则在

真空中作振动. 可以将这种振动行为等效为在杂质周围主晶原子拥有各自的异于本身质量的有效质量. 振幅的衰减归到了这一有效质量的上升. 根据式(4)可将第 n 近邻的主晶原子有效质量写为:

$$n_n^* = me^{-2\epsilon n}, \quad (n = 1, 2, 3) \quad (5)$$

在三维晶格中由横光学模演化而来的局域模的频率仍与振动格点的约化质量成根号反比关系, 由上一节局域性计算可知, 我们可以忽略非最近邻原子的振动, 所以局域模频率可写为:

$$\omega_{Loc} = \sqrt{k \left(\frac{1}{m^* |_{n=1}} + \frac{1}{m_i} \right)}$$

式中 k 为比例常数. 在 $m_i = m$ 时, $\omega_{Loc} = \omega_{TO}$, 所以

$$\omega_{Loc} = \omega_{TO} \sqrt{\frac{m}{2} \left(\frac{1}{m^* |_{n=1}} + \frac{1}{m_i} \right)}$$

上式可改写为:

$$\omega_{Loc}^2 = \frac{1}{2} \omega_{TO}^2 m \left(\frac{1}{me^{2\epsilon}} + \frac{1}{m_i} \right) \quad (6)$$

比较式(6)和式(3)可知, 式(3)中 A 表征着杂质原子与其最近邻原子间的相互作用力常数, $\beta = e^{2\epsilon}$ 反映了该局域模的局域度.

将这一计入模式局域性特性后推导出的式(6)用于估计 N 族元素半导体中的杂质局域模时获得了与实验结果相符较好的结果. 如表 2 所裂. 计算中对 Si 取 $\omega_{TO} = 520 \text{cm}^{-1}$, 对 Ge 取 $\omega_{TO} = 301 \text{cm}^{-1}$. 作为比较, 表中还给出了参考文献[1]中用 Green 函数方法采用质量亏损模型算得的结果. 表中的实验值也是引用参考文献[1]的结果. 表中所示的结果表明, 局域度对局域模频率有较大的影响, 这一效应能使质量亏损模型给出更接近实验值的理论值, 所以这一效应在许多情况下是不可忽略的.

表 2 元素半导体中杂质的局域模频率

主晶材料	杂质原子	$\omega_{Loc}/\text{cm}^{-1}$	$\omega_{Loc}/\text{cm}^{-1}$	$\omega_{Loc}/\text{cm}^{-1}$
		(实验值) ^a	(Green 函数方法) ^a	(本文方法: 式(6))
Si	¹⁰ B	644	714	645
Si	¹¹ B	620	683	620
Si	¹² C	605	633	599
Si	¹³ C	586	620	581
Si	¹⁴ C	570	610	566
Si	H	1950	—	1951
Ge	Si	389(394)	*384, 414	362
Ge	¹⁰ B	571	625	580
Ge	¹¹ B	547	600	554
Ge	³¹ P	343	370	347

^a 取自参考文献[1]

另外值得提出的是由式(6)还可知当轻杂质取代二元化合物半导体中主晶原子的重原子和轻原子时, 将会引起不同的 $\omega_{Loc} \sim \epsilon$ 规律. 在取代轻原子时, $\left(\frac{1}{me^{2\epsilon}} + \frac{1}{m_i} \right)$ 受 ϵ 影响明显较

取代重原子时大,这正是参考文献[7]中所算的 $\omega_{\text{loc}} \sim \epsilon$ 曲线对不同主晶原子分裂的主要原因.

4 结 论

通过杂质最近邻的主晶原子有效质量的引入,计入了局域模的局域振动特性,定量地给出了对于元素半导体 Si 和 Ge 中局域模频率和理论值. 获得了比由 Green 函数计算得到的理论值更接近实验值的结果.

参 考 文 献

- [1] 沈学础,物理学进展,1984年 4452.
- [2] Lu Wei, Ye Hongjuan, Yu Zhiyi *et al.*, Solid State Communication, 1987, **64**:1167.
- [3] D. J. Olego, P. M. Racciah, J. P. Faurie, Phys. Rev., 1986, **B33**:3816.
- [4] W. M. Theis, Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng., 1985, **524**:1066.
- [5] J. W. Allen, J. Phys., 1970, **C3**:L48.
- [6] W. Lu, H. J. Ye, Z. Y. Yu, *et al.*, Solidi Statu Physica(b), 1988, **147**:767.
- [7] S. P. Gaur, J. F. Vetelino, S. S. Mitra, J. Phys. Chem. Solids, 1971, **32**:2737.

Localization Effect of Frequency of Impurity Local Modes in Semiconductor

Lu Wei, Xu Wenlan and Shen Xuechu

(National Lab for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,
The Chinese Academy of Sciences shanghai 200083)

Received 10 March 1995, revised manuscript received 16 November 1995

Abstract The relation between the localization of impurity local mode and the mass defect factor is obtained by calculating the local density of states (LDOS_s) of the impurity and its surrounding atoms in semiconductor. Based on this results, the calculation of the frequency of local mode by a linear chain model including the localization shows a good agreement between the theoretical results and the experimental ones.

PACC: 6920P, 7830