

代位式碳在硅单晶中的局域模与红外吸收

陈畅生 张哲华 叶亦英

(武汉大学物理系)

1981年12月26日收到

提 要

本文探讨了代位式碳杂质在硅单晶中的振动行为。由于碳杂质周围的晶格畸变和电子电荷密度重新分布感生有效电荷,提出 C-Si_i 局域有效电荷模型;计算了由此产生的局域模频率和红外吸收系数。理论计算的结果与 R. C. Newman 等人的实验结果^[1]的一致性,说明局域有效电荷模型适用于处理一些代位式杂质在金刚石结构晶体中的晶格动力学问题。

一、导 言

杂质在晶体中的晶格动力学问题,近廿多年来,引起人们极大的兴趣,各种杂质在晶体中的性质的实验和理论探讨,有了很大的发展^[1]。

实验上,人们利用红外谱仪、中子谱仪和穆斯堡尔谱仪等仪器对多种杂质在晶体中产生的局域模(间隙模、共振模)频率和红外吸收特性进行了一系列精确的测量。其中,碳在硅单晶中的特性令人注目。R. C. Newman 等人多次精细实验的结果^[2]发现:当硅单晶中含有微量(10^{18}cm^{-3} 以下)代位式碳原子时,晶体出现一个局域模频率。表1列出了三种同位素碳、二种同位素硼代位式掺入硅单晶中产生的局域模频率的实验值。

表1 代位硼^[3]、碳在硅单晶中的局域模频率(80K)

元 素	B ¹⁰	B ¹¹	C ¹²	C ¹³	C ¹⁴
局域模频率(cm^{-1})	646	622	608	589	573

碳在硅中产生的总红外吸收系数约为硼在硅单晶中的红外吸收强度的六倍。

碳在硅单晶中的红外吸收主要是局域模吸收。和其它杂质在硅中的特性相比,中性碳原子在硅单晶中产生的红外吸收“令人惊奇”地强。这个“惊奇的结果”至今尚无完善的理论解释。

近年来, Vandevyver^[4]、Sangster^[5] 等人在理论上对半导体内杂质与主晶格原子间力的变化进行了探讨,计算了它们的力常数。然而,迄今尚没看到直接从杂质与主晶格原子的相互作用的物理模型出发,导出杂质在晶体中的局域模频率和红外吸收强度的有关文章。

本文在谐振近似、最近邻近条件下,从碳、硅原子的质量、原子尺度和负电性的差异出发,讨论杂质碳代位式掺入硅晶体后,在碳原子及其最近邻四个硅原子组成的 C-Si₄ 局域内出现的晶格畸变、电子电荷密度的重新分布对晶格动力学性质的影响,提出 C-Si₄ 局域有效电荷模型;计算了由此产生的局域模频率和红外吸收系数;最后,就理论计算的结果与实验结果的比较进行了讨论.

二、模 型

微量碳代位式掺入硅单晶时,由于碳、硅原子的质量、原子尺度和负电性的差异,在碳原子及其最近邻四个硅原子组成的 C-Si₄ 局域内,有二个区别于纯硅晶体的特征:

1. C-Si₄ 局域的晶格畸变

由于碳、硅原子的价电子杂化轨道的差异,在局域范围内,碳-硅价键中电子电荷密度的重新分布不同于纯硅晶体中硅-硅价键中的电荷分布,使得碳、硅原子间的距离不再保持为纯硅晶体中的硅原子间的距离: $R_{\text{Si}} = 2.35 \text{ \AA}$, 而是畸变为碳、硅原子间距 R ^[6].

从晶格的弹性理论及经典静电理论出发,可以求出碳、硅原子间距为: $R = 1.98 \text{ \AA}$.

2. C-Si₄ 局域内电荷的重新分布

我们把 C-Si₄ 局域看作是一个晶格常数 $a = \frac{R}{\sqrt{3}}$ 的赝 SiC 晶体中切下的一个包含一个碳原子和四个硅原子的正四面体结构(如图示).

由于碳、硅原子负电性的差异, C-Si₄ 局域内,每根 C-Si_n ($n = 1, 2, 3, 4$) 键上成键电荷密度重新分布的结果,使得一些负电荷从硅原子处往碳原子处迁移,碳、硅原子处出现了“有效电荷”^[7]. 对于这些“有效电荷”的位置及其数值,我们作如下假设:

a. 在 C-Si_n 键上距碳原子中心为碳原子的有效原子半径 r_c^* ($r_c^* = 0.81 \text{ \AA}$) 处,出现一个属于碳原子的有效负电荷: $e_{i,n} = -e^*$; 相应的第 n 个硅原子则因失去负电荷而带有效正电荷: $e_n = e^*$. 整个局域保持电中性状态.

b. 有效电荷的数值可从局域的离子性 f_i 与有效电荷 e^* 间的近似关系^[8,9]:

$$e^* = 1.28 f_i e \quad (1)$$

给出($e^* = 0.33e$). 其中 e 为单位电荷. 局域的离子性 f_i 可由其定义^[10]

$$f_i = \frac{E_i^2}{E_k^2 + E_i^2} \quad (2)$$

给出 ($f_i = 0.26$). 其中: E_k 是局域的平均共价能级间隙, E_i 是局域离子性能级间隙, 它由局域内碳、硅原子的负电性 X'_c 、 X'_{Si} 决定:

$$E_i = b \cdot (X'_c - X'_{\text{Si}}).$$

另一方面,考虑到碳原子只是硅晶体中的孤立杂质原子,我们又假设: C-Si₄ 局域不影响纯硅晶体的一些主要性质(如共价性、介电性等).

三、碳在硅单晶中的晶格动力学问题

1. 碳在硅单晶中的局域模频率

我们仅考虑代位式碳在硅单晶中,由于碳、硅原子间质量的差异及 C-Si₄ 局域内有效电荷附加静电场二个因素对局域模频率的影响。

C-Si₄ 局域内,引起原子间能量改变的因素主要有二个^[1]:

- (1) 杂化能态的改变;
- (2) 电荷重新分布产生的有效电荷 e_{in} 、 e_n 的附加静电场。

这里,我们仅考虑静电场部分的贡献。

注意到有效电荷 e_{in} 、 e_n 间库仑作用及极化作用的形式,局域内附加能量 ΔU_c 具有表示式:

$$\Delta U_c = \sum_{n=1}^4 U_{in} \tag{3}$$

其中:

$$U_{in} = \frac{C_1}{r_{nn}(i)} + \frac{C_2}{r_{nn}^4(i)} + \sum_{n'} \left(\frac{C'_1}{r_{nn'}(i)} + \frac{C'_1}{r_{n'n}(i)} - \frac{C'_1}{r_i(nn')} \right) + \frac{C'_n}{r_{nn}^2(i)r_{nn'}^2(i)} + \frac{C'_i}{r_{nn}^2(i)r_{n'n}^2(i)} + \frac{C''_i}{r_{nn}^2(i)r_i^2(nn')}$$

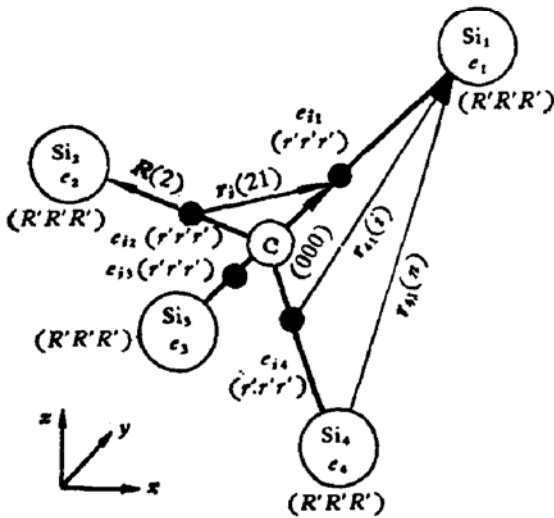
杂质处对应的力常数的改变量 $\Delta\phi(0, 0)$ 为:

$$\Delta\phi(0, 0) = \Delta\phi_{xx}(0, 0) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

其中:

$$\begin{aligned} \Delta\phi_{xx}(0, 0) &= 4\Delta\phi_{xx}(0, 1) \\ &= \frac{16C_2}{\Delta R^6(i)} + \frac{8C'_2}{\Delta R^4(i)\Delta R^2(n)} \\ &+ \frac{8C''_i}{\Delta R^4(i)r_i^2} + \frac{8C'_i}{\Delta R^2(i)\Delta R^4(n)} \\ &+ \frac{32(R' - r')(3R' + r')}{\Delta R^4(i)\Delta R^4(n)} C'_i \end{aligned}$$

(3)–(4)式中: $r_{nn}(i) = |\mathbf{R}(n) - \mathbf{r}_i(n)|$ 为有效电荷 e_n 、 e_{in} 间的距离, $\Delta R(i) = [r_{nn}(i)]_0$ 为它们处于平衡位置时的距离; $r_{nn'}(i) = |\mathbf{R}(n) - \mathbf{r}_i(n')|$ 为有效电荷 e_n 、 $e_{in'}$ 的距离, $r_{n'n}(i) = |\mathbf{R}(n') - \mathbf{r}_i(n)|$ 为有效电荷 $e_{n'}$ 、 e_{in} 的距离, $\Delta R(n) = [r_{n'n}(i)]_0 = [r_{nn'}(i)]_0$ 为 e_n 、 $e_{in'}$ 间处于平衡位置时的距离; $r_i(nn') = |\mathbf{r}_i(n) - \mathbf{r}_i(n')|$ 为 e_{in} 、 $e_{in'}$ 间的距离(参见图示)。



有效电荷 e_{in} 、 e_n 的分布

$r_i(n)$ 为有效电荷 $e_{n'}$ 、 e_{in} 的距离, $\Delta R(n) = [r_{n'n}(i)]_0 = [r_{nn'}(i)]_0$ 为 e_n 、 $e_{in'}$ 间处于平衡位置时的距离; $r_i(nn')$ 为 e_{in} 、 $e_{in'}$ 间的距离(参见图示)。

$$C_1 = \frac{e_{in}e_n}{\epsilon_0} = -\frac{e^{*2}}{\epsilon_0}, \quad C'_1 = \frac{C_1}{2}, \quad C_2 = -\frac{(\alpha'_C + \alpha'_{Si})}{2\epsilon_0} e^{*2},$$

$$C'_2 = 2(C'_1 + C'_n) = -\frac{(\alpha'_C + \alpha'_{Si})}{\epsilon_0^2} e^{*2} \cos \alpha_1, \quad C''_i = -\frac{\alpha'_C \cdot e^{*2}}{\epsilon_0^2} \cos \alpha_3$$

α_1, α_3 分别是 $r_{nn}(i), r_{nn'}(i), r_{nn}(i), r_i(nn')$ 间的夹角; ϵ_0 是晶体的介电常数; α'_C, α'_{Si} 分别为局域内碳、硅原子的极化率, 其数值由附录给出。

求和号 Σ 上面的“ n' ”表示对 n' 求和时略去 $n' = n$ 这一项。

纯硅晶体的力常数 $\phi_{xx}(0, 0)$ 可由矩函数

$$\mu(+2) = \int_0^\infty \omega^2 g(\omega) d\omega \quad (5)$$

与 $\phi_{xx}(0, 0)$ 的关系式:

$$\phi_{xx}(0, 0) = m_{Si} \cdot \mu(+2) \quad (6)$$

给出。其中: $g(\omega)$ 是纯硅晶体振动模的态密度函数。

由 (4)、(6) 式可得到描述杂质处力常数改变的参量 $\lambda (\approx 0.03)$:

$$\lambda = -\frac{\Delta\phi_{xx}(0, 0)}{\phi_{xx}(0, 0)}$$

$$= -\frac{1}{m_{Si}\mu(+2)} \left[\frac{16C_2}{\Delta R^6(i)} + \frac{8C'_2}{\Delta R^4(i)\Delta R^2(n)} + \frac{8C''_i}{\Delta R^4(i)r_i^2} \right. \\ \left. + \frac{8C'_2}{\Delta R^2(i)\Delta R^4(n)} + \frac{32(R' - r')(3R' + r')C'_2}{\Delta R^4(i)\Delta R^4(n)} \right] \quad (7)$$

由 J. W. Petersen 等人从金刚石结构晶体中导出的求局域模频率的条件^[12]:

$$1 - \rho(\omega)S(\omega) = 0. \quad (8)$$

其中:

$$\rho(\omega) = \frac{\epsilon}{1 - \epsilon} - \frac{\omega^2}{\mu(+2)} \cdot \frac{\lambda}{1 - \lambda}$$

$$\epsilon = 1 - \frac{m_C}{m_{Si}}$$

$$S(\omega) = \int_0^\infty \frac{\omega'^2 g(\omega)}{\omega^2 - \omega'^2} d\omega$$

以及 A. A. Maradudin 由 Dr. G. Dolling 测得的硅单晶的声子色散关系得到的硅单晶的振动模的态密度曲线^[13]。我们用图解法求出了碳在硅单晶中的局域模频率。

2. 碳在硅单晶中的红外吸收系数

碳原子代位式掺入硅单晶后, 在 C-Si₄ 局域内, 由于有效电荷 e_{in}, e_n 的运动、极化及电荷徙动, 产生了能与外来红外光耦合的电偶极矩, 晶体因此具有单声子红外吸收的特性。

设外来红外电场在 x 方向偏振, 则晶体内能与这些红外光耦合产生单声子红外吸收的偶极矩主要有以下四类:

(1) 有效电荷的运动产生的偶极矩 $\mu_x^{(1)}$:

$$\mu_X^{(i)} = \sum_{n=1}^4 (e_{in}X + e_n x_n) = -4e^*X + 2e^*\rho_4. \quad (9)$$

其中: X 为碳原子在 x 方向的位移, x_n 为第 n 个最近邻硅原子在 x 方向的位移分量.

$$\rho_4 = \frac{1}{2} (x_1 + x_2 + x_3 + x_4).$$

(2) 感生偶极矩与有效电荷间的极化产生的能与红外光耦合产生单声子红外吸收的偶极矩 $\mu_X^{(e)}$:^[14]

$$\mu_X^{(e)} = -2\sqrt{2} \left[\frac{C_6}{\Delta R^3(i)} + \frac{(9R'^2 + 6R'r' - 3r'^2)C_6}{\Delta R^3(n)} \right] \rho_7 \quad (10)$$

其中:

$$\rho_7 = \frac{1}{2\sqrt{2}} (y_1 + y_2 - y_3 - y_4 + z_1 - z_2 - z_3 + z_4)$$

(3) 感生偶极矩间的极化产生的能与红外光耦合产生单声子红外吸收的偶极矩 $\mu_X^{(p)}$:

$$\begin{aligned} \mu_X^{(p)} = & 4C_6 \left[\frac{2}{\Delta R^6(i)} + \frac{3}{\Delta R^3(i)\Delta R^3(n)} + \frac{3(R' - r')}{4\sqrt{2}r'^2\Delta R^5(i)} \right. \\ & + \frac{12(R'^2 - r'^2)}{\Delta R^3(i)\Delta R^3(n)} + \frac{12R'r' + 36r'^2}{r_i^3\Delta R^5(n)} \\ & - \frac{9}{\Delta R^6(n)} + \frac{12(R'^2 - r'^2) - 4(R' + r')^2 - 5(R' - r')^2 - 4R'r'}{\Delta R^3(i)\Delta R^5(n)} \\ & \left. + \frac{30(R' + r')^2 + 12(R' - r')^2 - 12(R'^2 - r'^2)}{\Delta R^8(n)} \right] X \\ & - 2C_6 \left[\frac{2}{\Delta R^6(i)} + \frac{3}{\Delta R^3(i)\Delta R^3(n)} + \frac{3(R' - r')}{4\sqrt{2}r'^2\Delta R^5(i)} \right. \\ & + \frac{12(R'^2 - r'^2)}{\Delta R^3(i)\Delta R^3(n)} + \frac{12R'r' + 36r'^2}{r_i^3\Delta R^5(n)} - \frac{9}{\Delta R^6(n)} \\ & + \frac{12(R'^2 - r'^2) - 4(R' + r')^2 - 5(R' - r')^2 - 4R'r'}{\Delta R^3(i)\Delta R^5(n)} \\ & \left. + \frac{30(R' + r')^2 + 12(R' - r')^2 - 12(R'^2 - r'^2)}{\Delta R^8(n)} \right] \rho_4 \\ & - 2\sqrt{2}C_6 \left[\frac{4}{\Delta R^6(i)} + \frac{4}{\Delta R^3(i)\Delta R^3(n)} + \frac{3(R' - r')}{4\sqrt{2}r'^2\Delta R^5(n)} \right. \\ & + \frac{12r'(R' - r')}{r_i^3\Delta R^5(n)} + \frac{21(R'^2 - r'^2) + 3(R' - r')^2}{\Delta R^3(i)\Delta R^5(n)} \\ & + \frac{9(R'^2 - r'^2) + 3(R' - r')^2}{\Delta R^5(i)\Delta R^3(n)} \\ & \left. + \frac{5(R' + r')^2 + 3(R'^2 - r'^2)}{\Delta R^8(n)} \right] \rho_7. \quad (11) \end{aligned}$$

其中:

$$C_6 = -\frac{2\alpha'_c\alpha'_{si}e^*}{\epsilon_0^2}$$

(4) 有效电荷的徙动产生的偶极矩 $\mu_X^{(k)}$:

$$\begin{aligned} \mu_X^{(k)} &= \sum_{n=1}^4 \delta e_n r_{Xnn}(i) \\ &= -\frac{4}{3} K \Delta R(i) X + \frac{2}{3} K \Delta R(i) \rho_4 + \frac{2\sqrt{2}}{3} K \Delta R(i) \rho_7. \end{aligned} \quad (12)$$

其中:

$$\begin{aligned} K &= \left(\frac{\partial e^*}{\partial r_{in}} \right)_0 = 2.56 [b E_{\text{h}r_{\text{si}}}]^2 \frac{(\beta R - \alpha)(\alpha - \beta r_{\text{si}})(R - r_{\text{si}})}{\epsilon_0 [(E_{\text{h}r_{\text{si}}})^2 (R - r_{\text{si}})^2 + b^2 (\beta R - \alpha)^2]} e. \\ \alpha &= 0.18 [(E_{\text{ic}} + E_{\text{ac}}) r_{\text{c}} + (E_{\text{isi}} + E_{\text{asi}}) r_{\text{si}}] \\ \beta &= 0.18 (E_{\text{isi}} + E_{\text{asi}}) r_{\text{si}} \end{aligned}$$

$E_{\text{ic}}, E_{\text{ac}}, E_{\text{isi}}, E_{\text{asi}}$ 分别为碳、硅原子的电离能、亲合能.

由(9)、(10)、(11)、(12)可得到 C-Si₄ 局域内能与红外光耦合产生单声子红外吸收的总偶极矩:

$$\mu_X = d_1 X + d_2 \rho_4 + d_3 \rho_7. \quad (13)$$

其中:

$$\begin{aligned} d_1 &= -4e^* + 4C_6 \left[\frac{2}{\Delta R^6(i)} + \frac{3}{\Delta R^3(i)\Delta R^3(n)} \right. \\ &\quad + \frac{3(R' - r')}{4\sqrt{2} r'^2 \Delta R^5(i)} + \frac{12(R'^2 - r'^2)}{\Delta R^5(i)\Delta R^3(n)} + \frac{12R'r' + 36r'^2}{r_i^3 \Delta R^5(n)} \\ &\quad - \frac{9}{\Delta R^6(n)} + \frac{12(R'^2 - r'^2) - 4(R' + r')^2 - 5(R' - r')^2 - 4R'r'}{\Delta R^3(i)\Delta R^5(n)} \\ &\quad \left. + \frac{30(R' + r')^2 + 12(R' - r')^2 - 12(R'^2 - r'^2)}{\Delta R^8(n)} \right] \\ &= -\frac{4}{3} K \Delta R(i) \end{aligned} \quad (14)$$

$$(\approx -1.94e)$$

$$d_2 = \frac{d_1}{2} (\approx 0.97e) \quad (15)$$

$$\begin{aligned} d_3 &= -2\sqrt{2} \left[\frac{C_3}{\Delta R^3(i)} + \frac{9(R'^2 + 6R'r' - 3r'^2)C_3}{\Delta R^5(n)} \right. \\ &\quad + C_6 \left(-\frac{4}{\Delta R^6(i)} + \frac{4}{\Delta R^3(i)\Delta R^3(n)} + \frac{3(R' - r')}{4\sqrt{2} r'^2 \Delta R^5(i)} \right. \\ &\quad + \frac{12r'(R' - r')}{r_i^3 \Delta R^5(n)} + \frac{21(R'^2 - r'^2) + 3(R' - r')^2}{\Delta R^3(i)\Delta R^5(n)} \\ &\quad + \frac{9(R'^2 - r'^2) + 3(R' - r')^2}{\Delta R^5(i)\Delta R^3(n)} + \frac{5(R' + r')^2 - 3(R'^2 - r'^2)}{\Delta R^8(n)} \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{3} K \Delta R(i) \right) \right] (\approx 0.64 \sqrt{2} e). \end{aligned} \quad (16)$$

由 Leigh-Szigeti 关于不带电荷的杂质原子的红外吸收公式^[19], 可以求出 C-Si₄ 局域的总红外吸收系数:

$$\int \alpha(\omega) d\omega = \frac{2\pi^2 D}{\eta c} \left\{ \frac{(d_1)^2}{m_c} + \frac{4}{m_{Si}} \left[\left(\frac{d_2}{2} \right)^2 + 2 \left(\frac{d_3}{2\sqrt{2}} \right)^2 \right] \right\} \quad (17)$$

其中: D 为杂质的浓度, η 为硅单晶的折射率, c 为光速, m_c 、 m_{Si} 分别为碳、硅原子的质量.

四、讨 论

利用(8)、(17), 我们计算了碳在硅单晶中的局域模频率和红外吸收系数, 其结果与“质量缺陷”模型的结果^[13]及实验结果的对比由表 2 给出.

表 2 二种模型的理论值与实验值之比较

	局 域 模 频 率 (cm^{-1})			红外吸收系数 $\left(\frac{2\pi^2 D}{\eta c m c} \right)$
	C ¹²	C ¹³	C ¹⁴	
质量缺陷模型	633	620	610	不能计算
C-Si ₄ 局域有效电荷模型	624	611	600	4.6e ²
实 验 结 果	605	586	570	~6e ²

可以看出: (1) 杂质原子与主晶格原子间质量的差异是影响局域模频率的主要因素, C-Si₄ 局域内有效电荷的静电场对局域模频率的贡献是很弱的. (2) C-Si₄ 局域内有效电荷的存在及其分布情况对晶体的红外吸收则起着决定性的作用. 这些结果与 R. C. Newman 等人的实验结果基本上是一致的; 同时也与 J. F. Angress 等人关于在解释代位式杂质在共价晶体中的局域模频率和红外吸收强度时, “要解决: a. 杂质与它近邻主原子的动力学性质; b. 杂质和最近邻原子的电荷分布这两个问题”^[16]. 这个论点相吻合.

利用“局域有效电荷模型”, 可以说明质量与碳相近, 同是代位式杂质且带有一 e 电荷的硼离子 (B^-) 在硅单晶中的局域模频率的变化与碳的相似, 而红外吸收的强度却只为碳的六分之一的实验结果.

由于 B^- 的质量、原子尺度都与 C 很相近, 因此, 在硅单晶中, B^- 杂质附近的 B^- -Si₄ 局域内的晶格畸变与 C-Si₄ 局域的情况也很相似; 又因为电荷所产生的附加静电场对局域模频率的贡献很小, 因此, 可认为影响 B^- 的局域模频率的因素与 C 的基本一致, 从而它们的局域模频率的变化也相似. 另一方面, 由于 B 与 Si 原子的负电性相差很小, 且 B^- 带一 e 电荷, 更不允许最近邻硅原子处的负电荷往 B^- 处迁移. 这样, 在 B^- -Si₄ 局域内, 不可能有类似 C-Si₄ 局域的有效电荷及其分布情况, 整个局域对红外吸收的贡献, 只是 B^- 处一 e 电荷的运动所产生的偶极矩与红外光耦合的结果, 其强度为:

$$\int \alpha(\omega) d\omega = \frac{2\pi^2 D}{\eta c m_B} e^2$$

结论: C-Si₄ 局域有效电荷模型是用经典弹性理论和静电理论代替多粒子量子理论来处理代位式杂质在硅单晶中的晶格动力学问题. 理论计算值与实验结果基本一致, 说

明这个模型适用于处理一些孤立代位杂质在共价晶体中的晶格动力学问题。

本文承熊吟涛、胡海若同志指导并参加了全部的讨论; 陆栋、许振嘉同志审阅了本文的初稿, 提出了许多宝贵的意见; 丹麦 Aarhus 大学 O. H. Nielsen 教授提供了许多资料和有益的建议。在此, 仅向他们表示衷心的感谢。

附录: C-Si₄ 局域内碳、硅原子极化率 α'_C 、 α'_{Si} 的确定

我们把 C-Si₄ 局域看作是一个具有晶格常数 $a = \frac{R}{\sqrt{3}}$ 且与纯硅有相同能带结构的赝 SiC 晶体中一部分。则这晶体内硅原子的极化率与纯硅晶体的应一致, 只是由于现在硅原子带有效正电荷 e^* , 减小了其极化率^[11]。因此, 局域内硅原子的极化率 α'_{Si} 为:

$$\alpha'_{Si} = \alpha_{Si} \frac{4e - e^*}{4e} = 3.42 \times 10^{-24} \text{cm}^3$$

碳原子的极化率, 可由这个赝 SiC 晶体的电子浓度: $n = \frac{32}{a^3}$, 得到其光谱介电常数 ϵ_0 :

$$\epsilon_0 = 1 + \left(\frac{\hbar\omega_p}{E_g} \right)^2 \left(1 - \frac{E_g}{4E_F} \right) \quad (1-1)$$

又由 Mossatti-Clausices 公式:

$$\epsilon_0 = \frac{4\pi N(\alpha'_C + \alpha'_{Si})}{1 - \frac{4}{3}\pi N(\alpha'_C + \alpha'_{Si})} \quad (1-2)$$

及注意到在这个赝 SiC 晶体内, α'_{Si} 有表示式:

$$\alpha'_{Si} = \alpha_{Si} \left(1 - \frac{e^*}{e} \right) \quad (1-3)$$

联立求解(1-1)、(1-2)、(1-3), 得碳原子的极化率 α'_C : $\alpha'_C = 2.21 \times 10^{-24} \text{cm}^3$ 。

上面各式中, ω_p 为等离子体频率: $\omega_p = \left(\frac{4\pi n e^2}{m} \right)^{1/2}$; E_F 为费米能级: $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$; E_g

为晶体的平均能级间隙: $E_g = (E_c^2 + E_v^2)^{1/2}$, N 为单位体积内的原胞数: $N = \frac{4}{a^3}$, m 为电子的质量。

参 考 文 献

- [1] A. S. Baker and A. J. Sivers, *Rev. Mod. Phys.*, 47 Suppl., 2 (1975).
- [2] R. C. Newman and J. B. Wills, *J. Phys. Chem. Solids*, 26 373 (1965).
R. C. Newman and R. S. Smith, *J. Phys. Chem. Solids*, 30 1493 (1969).
D. G. Mead and S. R. Lowry, *Appl. Spectra.*, 34, 167, 171 (1980).
- [3] J. F. Angress, A. R. Good and S. D. Smith, *Proc. Roy. Soc.*, A287, 64 (1965).
- [4] M. vandeuyver, D. N. Talwar, P. Plumelle, K. Kunc and M. Zigone, *Phys. Stat. Sol. (b)*, 99, 727 (1980).
- [5] M. J. L. Sangster, D. K. Rowell and A. S. Ashman *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 14, 2899 (1981).
- [6] 方俊鑫、陆栋, “固体物理学”上册, 171 (上海科技出版社 1980)。肖纪美, “固溶体理论”, 45 (北京钢铁学院 1961)。
- [7] B. Szigeti, *J. Phys. Chem. Solids*, 24, 225 (1963).
- [8] O. Madelung, “Introduction to Solid State Theory” Chap. 8 (Spring Varlay Berlin 1978).
- [9] J. P. Walter and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, B4, 1877 (1971).

- [10] J. C. Phillips, "Bonds and Bands in Semiconductors", Chap. 2, 4, 6. (Academic Press 1973).
[11] L. Bellomonte, *J. Phys. Chem. Solids*, **38**, 59 (1977).
[12] J. W. Petersen, O. H. Nielsen, G. Weyer, E. Antoncik and S. D. Magard, *Phys. Rev.*, **B21**, 4292 (1980).
[13] A. A. Maradudin in "Solid State Physics", Vol. 18 271, Seitz and Turnbull Press (1966).
[14] M. Born and K. Huang, "Dynamical Theory of Crystal Lattice" (Oxford Press 1954).
[15] R. S. Leigh and B. Szigeti, *Proc. Roy. Soc.*, **A 301**, 211 (1967).
[16] J. F. Angress, A. R. Goodwin and S. D. Smith, *Proc. Roy. Soc.*, **A 308**, 111 (1968).

Local Mode and the Infrared Absorption of Substitutional Carbon in Silicon Crystal

Chen Changsheng, Zhang Zhehua and Ye Yiying

(Department of Physics, Wuhan University)

Abstract

The vibrational behavior of the substitutional carbon in silicon has been examined. Considering the distortion in the crystal lattice and the redistribution of the electronic charge densities around the impurity C sites, a C-Si₄ Local Effective Charge Model (LECM) is suggested, and the local mode frequency and the coefficient of total infrared absorptions are calculated by LECM. The theoretical calculations are consistent with the experimental results obtained by R. C. Newman et al. in 1969.^[1] It is shown that the LECM is suitable for the crystal dynamics of various substitutional impurities in crystals with diamond structure.