

InSb 晶体的杂质原子局域振动 状态的密度分布函数计算*

刘泽金 陆启生 蒋志平 阎维贤 赵伊君

(国防科技大学应用物理系 长沙 410073)

摘要 用递推方法计算了 InSb 晶体中部分杂质原子的局域振动状态密度分布函数。杂质原子是 Al, Ga, As 和 P。计算中用的力常数是通过实验数据拟合得到的。该计算模型包含了 6209 个原子的相互作用。

关键词 振动状态, 密度分布函数, 递推方法, 声子色散, InSb

分类号 O483

Vibrational Spectra of Impurity Atoms in InSb Crystal

Liu Zejin Lu Qisheng Jiang Zhiping Yan Weixian Zhao Yijun

(Department of Applied Physics, NUDT, Changsha, 410073)

Abstract The vibrational spectra of impurity atoms in InSb crystal has been calculated with the recursion method according to the experimental result of the phonon dispersion relation for InSb. The impurity atoms are Al, Ga, As and P, respectively. In our model, 6209 atoms are taken into account.

Key words Vibrational spectra, Recursion method, Phonon dispersion, InSb

掺杂的闪锌矿结构晶体(如 InSb、ZnS、GaAs、GaP 等)常被用来制作红外探测器,因此对它们的各种性质的研究愈来愈多。振动状态密度分布函数,亦称振动谱或声子谱,作为研究振动光谱的重要参数之一,人们曾作过许多研究,但对掺杂晶体,由于 \vec{k} 不再是好量子数,用倒易空间(Block 态矢空间)的理论研究杂质态相当困难。由 Haydock, Heine 和 Kelly 等人发展的递推方法(Recursion Method, 亦称 HKK 方法),从考虑杂质的局域环境出发,在真实空间中研究其局域格林函数(Local Green's function 简称 LDF),再由 LGF 得到有用的结果。该方法为研究杂质态提供了一条新途径。

* 国家“863”计划资助项目
1995年11月29日修订

Wu 和 Zheng 应用递推方法计算了几种单原子完整晶体的振动状态密度分布函数, 又成功地将该方法用于研究 III-V 族混晶的声子谱。我们曾计算过包括大量原子相互作用在内的 InSb 晶体的声子谱^[1]。本文将报导应用递推方法计算 InSb 晶体中含有孤立杂质时, 杂质原子的局域声子谱。

1 理论背景

1.1 孤立杂质引起的力常数修正

只考虑最近邻粒子间的相互作用时, Grim^[2]等人推导出了仅含 A、B 两种原子闪锌矿结构晶体的力常数张量有两个独立参数:

$$\Phi(A,A) = \Phi(B,B) = \begin{bmatrix} 4a & 0 & 0 \\ 0 & 4a & 0 \\ 0 & 0 & 4a \end{bmatrix}; \quad \Phi(A,B) = - \begin{bmatrix} \alpha & \beta & \beta \\ \beta & \alpha & \beta \\ \beta & \beta & \alpha \end{bmatrix}$$

按 Vandyver^[3]等人的分析, 设杂质原子 C 代替 A 原子, 孤立杂质点 (由杂质原子替代晶格中的某个原子) 引起的力常数变化可表示为

$$\Phi(C,C) = t\Phi(A,A); \quad \Phi(C,B) = t\Phi(A,B)$$

按 Vandyver 等人的结论, InSb 晶体中掺入孤立杂质后, 系数 t 的值如下:

杂质:	InSb: Al	InSb: Ga	InSb: As	InSb: P
t 值:	0.7	0.7	1.18	1.43

1.2 递推方法用于杂质态

若选取杂质原子为原点, 作为 1 号粒子, 仅考虑最近邻相互作用, 则其局格林函数可表示为

$$G_{11}(\omega^2) = \frac{1}{\omega^2 - \alpha_0 - \frac{|b_1|^2}{\omega^2 - \alpha_B - \frac{|b_2|^2}{\omega^2 - \alpha_A - \frac{|b_3|^2}{\omega^2 - \alpha_B - \ddots \frac{|b_4|^2}{\omega^2 - \alpha_A - \Sigma_A}}}}} \quad (1)$$

当仅考虑力常数的局域修正时, α_0 仅与杂质原子的质量, α 和 t 有关, α_A 仅与 A 原子的质量及 α 有关, α_B 与 B 原子的质量及 α 有关。 b_n 有明显的收敛趋势 ($\lim_{n \rightarrow \infty} b_n \rightarrow b_\infty$)。应用截断近似^[4], 有

$$\Sigma_A = \frac{b_\infty}{\omega^2 - \alpha_B - \frac{b_\infty}{\omega^2 - \alpha_A - \Sigma_A}} \quad (2)$$

可以证明, 在含杂质时, 仍有

$$4b_\infty^2 = \alpha_A \cdot \alpha_B \quad (4)$$

式 (1) (2) 中的 ω 表示振动圆频率, 由格林函数的性质知, 平方频率状态密度分布函数为

$$\rho(\omega^2) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} I_m G_{11}(\omega^2 + i\epsilon) \quad (4)$$

振动状态密度分布函数为 $g(\nu) = 4\pi\nu\rho(4\pi^2\nu^2)$ (5)

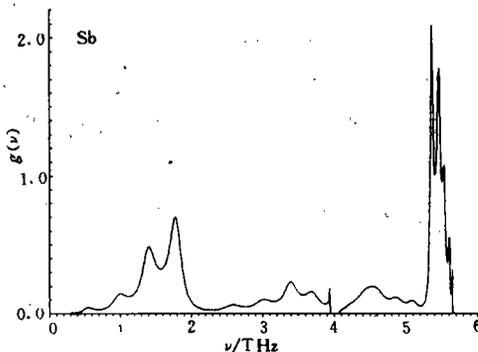
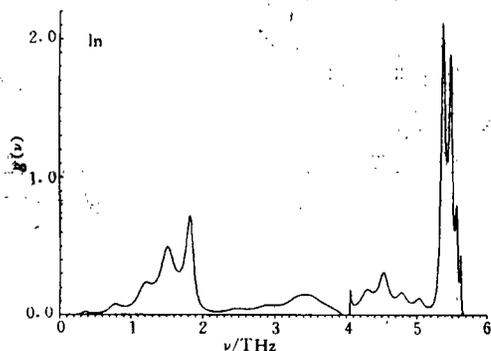
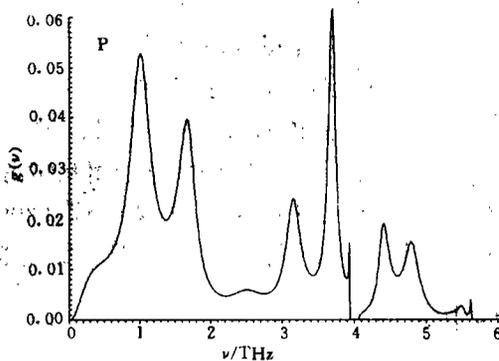
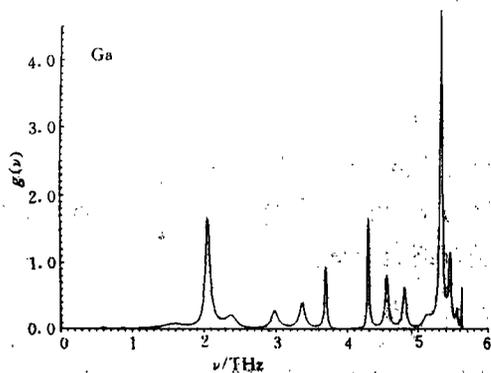
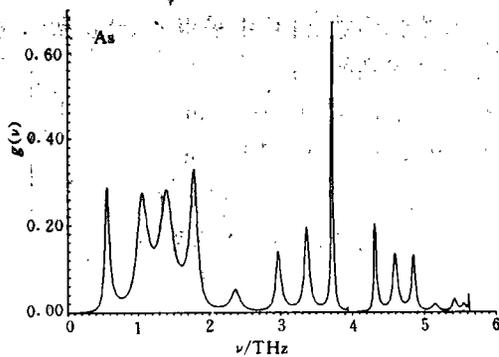
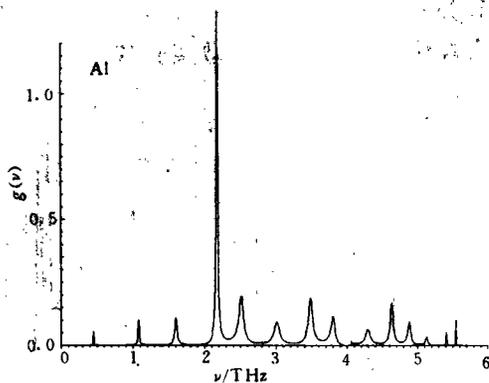


图1 Al、Ga、In 振动频谱

图2 Al、P、Sb 振动频谱

由(1) - (5)式可计算杂质原子的局域振动状态密度分布函数 $g(\nu)$ ，然而，计算的主要工作量不是连分式(1)的计算，而是用递推方法，根据力常数等计算 $\alpha_0, \alpha_A, \alpha_B, b_1, b_2, b_3, \dots, b_n$ 。

2 程序设计与计算结果

在文献[1]中，报导过关于用递推方法计算 InSb 晶体声子谱的过程及程序设计。在

引入杂质原子, 且在原计算程序中修正与杂质有关的力常数和质量后, 即可计算杂质原子的局域格林函数。计算中采用的 InSb 晶体的力常数, 是根据声子色散实验数据、用最小二乘法拟合得到的^[5]:

$$\alpha = 3.1235 \times 10^4 \text{ dyn/cm}$$

$$\beta = 2.4342 \times 10^4 \text{ dyn/cm}$$

图1、图2分别给出了 InSb 中4种杂质原子的局域振动状态密度分布函数。为了比较, 图中画出了完整 InSb 晶体中 In 原子或 Sb 原子的局域态密度。图3示出了选用17层(含4493个原子相互作用在内, 共计算17个 b 值, 即 b_1, b_2, \dots, b_{17}), 18层(含5305个原子相互作用), 19层(含6209个原子的相互作用在内)三种模型计算的 InSb 晶体的归一化振动状态密度分布函数。结果表明, 收敛情况很好。这说明, 我们计算包含19层共6209个粒子相互作用在内的模型, 已满足收敛的要求。对6209个粒子模型, 用递推方法计算 b_n 时, 需处理 $(6209 \times 3) \times (6209 \times 3)$ 的大矩阵, 每增加一层会增加很大的计算量。实际计算时, 总是根据收敛情况终止计算。

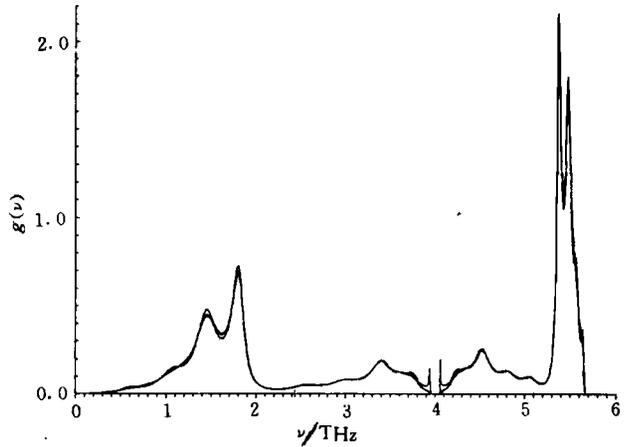


图3 InSb 声谱自由曲线

模型计算的 InSb 晶体的归一化振动状态密度分布函数。结果表明, 收敛情况很好。这说明, 我们计算包含19层共6209个粒子相互作用在内的模型, 已满足收敛的要求。对6209个粒子模型, 用递推方法计算 b_n 时, 需处理 $(6209 \times 3) \times (6209 \times 3)$ 的大矩阵, 每增加一层会增加很大的计算量。实际计算时, 总是根据收敛情况终止计算。

3 结束语

有关 InSb 晶体振动状态密度分布函数的实验尚未见报导。为了验证计算程序的正确性, 用该程序计算了 GaP 晶体的振动态密度, 所得计算结果与 Wu 等人的结果完全一致。

计算中所用的 InSb 晶体的力常数是由实验结果拟合得到的。因此, 该计算是以实验为基础的。从前面的计算可以看出, 由于杂质浓度很低, 杂质带来的影响很小。若提高杂质浓度, 采用加权平均的方法和递推方法, 计算出晶体的振动态密度。但是, 高的杂质浓度破坏了孤立杂质近似模型, 且力常数修正的理论或数据还没有, 故目前无法直接计算。

递推方法为研究掺杂问题提供了一条新的途径, 但要得到好的结果, 还必须结合实验数据。只有以实验数据为初始条件代入计算程序, 才会得到有价值的结果。本文的工作是该方向的一个尝试。

参 考 文 献

- 1 Lin Zejin et al. Calculation of the Frequency distribution Function of vibration states in InSb Crystal. International Workshop of material, shen yang, 1989, 9
- 1 Grim A. et al. J Phys Chem. Solid, 1972, 33: 775
- 3 Vandryver M. et al. phys. Rev. 1978, B(17): 675
- 4 郑兆勃. 非晶固态材料引论. 北京: 科学出版社, 1989: 264
- 5 刘泽金. InSb 晶体力常数的拟合. 见: 第四届全国物理力学学术会议论文集, 合肥, 1990

(责任编辑 潘生)