

GaAsP 混晶中 Fe 杂质能级的无序分裂*

黄启圣

(厦门大学物理系, 厦门市)

1988年1月25日收到

GaAsP 混晶中 Fe 杂质基态与激发态的光离化截面的幅度比 $S(x)$ 随组分 x 有规律地变化, 本文提出一种理论估算, 认为它是 Fe 能级无序分裂的结果.

关键词: 深杂质中心, 混晶半导体, 混晶无序

我们用光电容瞬态方法, 测得不同组分 x 下 GaAsP 混晶中 Fe 受主杂质的空穴光离化截面谱^[1], 其谱形与在化合物 GaAs 中的相类似, 它们都可以分离为两支, 即基态谱 σ_{gr}^0 及激发态谱 σ_{ex}^0 . 图 1 示出 GaAs ($x=0$) 及 $x=0.39$ 的 GaAsP 混晶的典型谱. 由拟合得到空穴光离化阈值与平均组分 x 的关系, 此外, 我们仔细考查两支离化谱在激发光能量很大于离化阈值的能量区的幅度比, $S(x) = \sigma_{ex}^0 / \sigma_{gr}^0$, 发现它随 x 有规律地变化, 在 $x < 0.5$, $S(x)$ 随 x 增大, 但在 $x > 0.5$, 随 x 的增加而下降, 以 $x=0.5$ 为中心具有近似对称的分布, 如图 2 所示. 本文将对此进行讨论, 提出一种能级的无序分裂图象, 用以理解实验的 $S(x)$ 关系.

已知在化合物 GaAs 及 GaP 中, Fe 作为替位杂质占据 Ga 位, 成为深受主中心, 具有 T_d 对称性. 用晶体场一般理论也可较好地理解电子顺磁共振、光吸收、光致发光及

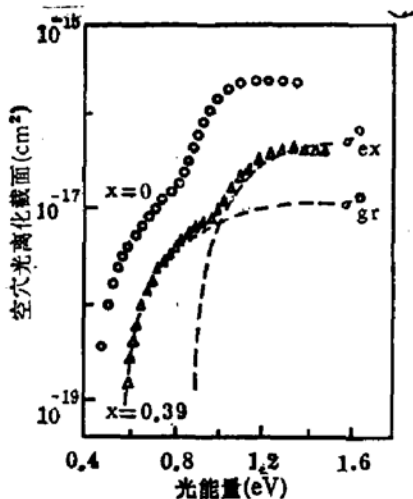


图 1 GaAs:Fe 和 $x=0.39$ 的 GaAsP:Fe 的空穴光离化截面

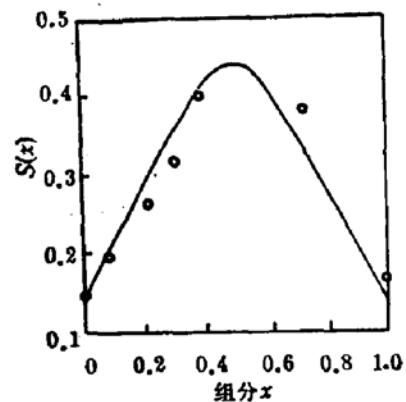


图 2 $S(x)$ 与组分 x 的关系

* 国家自然科学基金资助项目.

光电容瞬态等实验结果,即 Fe^{2+} 离子的 5D 能级在 T_d 晶场下分裂成 5E 及 5T_2 能级,相应于光学测量中的基态及激发态. 两态光离化截面幅度的显著差别,可归因于不同的态密度: 5E 为两重态, 5T_2 为三重态;而主要是由于两态的空穴跃迁矩阵元的很大差异:由 5T_2 到价带的空穴跃迁是允许的,但由 5E 到价带的空穴跃迁,只有当激发光能量较高,跃迁发生在 $k > 0$ 时,由于价带混有 d 电子的性质,才具有不为零的较小值^[2,3]. 对 GaAs , 由实测 $S(0) = 0.14$ ($h\nu \sim 1.5\text{eV}$ 时),可算出两态跃迁矩阵元之比,即 $|H_{T_2V}|^2:|H_{EV}|^2$ 约为 5:1.

GaAsP 混晶中, Fe 中心周围存在着 As 和 P 两种不同晶体原子的无序分布,按照晶体场理论,每一种分布可能造成不同的晶场对称性,从而使 Fe 能级及其空穴的跃迁几

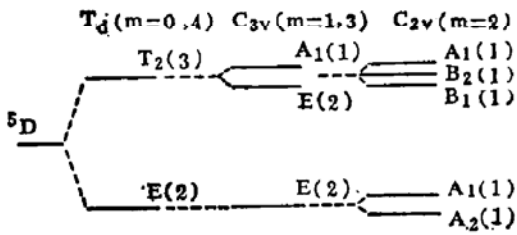


图 3 不同晶场对称性下 Fe 能级的示意图

率发生变化. Fe 中心形成的杂质势在 GaAsP 中是相当局域的,可以根据 Fe 能级随组分的变化率^[1]和能级的无序展宽^[4]的数据,近似算出^[5] Fe 杂质波函数的有效半径约为 4.5\AA (对 $x = 0.5$),这与混晶中 Ga 原子与其最近邻的 As 或 P 原子的间距 ($\sim 2.4\text{\AA}$) 已较接近. 因此作为近似,可只计及最近邻的、位于

四面体顶角的 As 及 P 原子对 Fe 中心的有效影响.

假设 As 、 P 原子的无序分布服从二项式关系,则 Fe 的最近邻 4 个顶角被 m 个 P 原子占据的几率 $P(m, x)$ 可表为

$$P(m, x) = C_n^m x^m (1-x)^{4-m} \quad (1)$$

对 $0 < x < 1$ 混晶,总共可有 $m = 0, 1, 2, 3, 4$ 即有 $4\text{As}, 3\text{As}-1\text{P}, 2\text{As}-2\text{P}, 1\text{As}-3\text{P}$ 及 4P 5 种可能分布,因此对 Fe 中心来说,相应有 3 种不同的晶场对称性,即 $T_d(m = 0, 4)$, $C_{3v}(m = 1, 3)$, $C_{2v}(m = 2)$. 根据群论,容易证明对称性由 $T_d \rightarrow C_{3v} \rightarrow C_{2v}$ 的降低,将使 5E 、 5T_2 能级进一步分裂,结果示意于图 3. 分裂的能距主要取决于 As 、 P 原子的差异.

进一步由此定量计算上述混晶无序作用下两支空穴光离化截面的数值,可能并不容易. 这里提出一种简化计算,目的在于估算 $S(x)$, 并与实验结果比较. 我们假设: 各个独态上空穴至价带的跃迁是允许的,其跃迁矩阵元与 T_2 能级的 H_{T_2V} 相近;而能级进一步分裂的能距不大,在本文作者所用光电容谱仪中尚不足以出现光离化截面谱形的再分裂,但混晶中基态及激发态两支离化谱是已分裂能级的空穴跃迁率的总和. 因此可把 $S(x)$ 写为:

$$S(x) = \frac{\sum_m \sum_i P(m, x) (g_i)_m (H_{iV}^2)_m}{\sum_m \sum_i P(m, x) (g_i)_m (H_{iV}^2)_m} \quad (2)$$

上式中, i, j 各为基态及激发态分裂的各能级, g 为各能级简并度. 由于假设各独态的跃迁近似以 H_{T_2V} 表示,而 H_{T_2V} 与 H_{EV} 之比可由 GaAs 的实验值决定,因此可近似算出 $S(x)$, 其结果以实线表示于图 2 中. 可以看到,理论值与实验值是基本吻合的.

已有作者^[6]在研究掺 Cu 的 GaAsP 的光致发光谱时观察到 Cu 能级的分裂, 认为分裂能级是由杂质对 (如 Cu-P) 形成的, 与这里讨论的能级分裂图象有所不同。目前尚未见到 GaAsP:Fe 的光致发光谱研究, 但仅就空穴光离化截面谱比较, GaAsP 混晶中掺 Fe 与掺 Cu^[7] 的谱形是十分不同的。

参 考 文 献

- [1] Q. S. Huang, H. G. Grimmeiss and L. Samuelson, *J. Phys. C.*, **18**, 5445(1985).
- [2] M. Kleverman, P. Omling, L.-Å. Ledebø and H. G. Grimmeiss, *J. Appl. Phys.* **54**, 814(1983).
- [3] X. Z. Yang, H. G. Grimmeiss and L. Samuelson, *Solid State Commun.*, **48**, 427(1983).
- [4] 洪苹, 黄启圣, 发光学报, **8**, 182(1987).
- [5] L. Samuelson, *J. Electron. Mater.*, **14A**, 101(1985).
- [6] L. Samuelson, S. Nilsson, Z. G. Wang and H. G. Grimmeiss, *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 1504(1984).
- [7] M. Z. Iqbal, H. G. Grimmeiss and L. Samuelson, *J. Phys. C.*, **18**, 1047(1985).

Alloy Disordered Splitting of Fe-Levels in GaAsP

Huang Qisheng

(Department of Physics, Xiamen University, Xiamen)

Abstract

A simplified theoretical calculation is described for the regular change of the $S(x)$, the ratio of the hole photoionization cross sections between ground states and excited states of Fe-centers in GaAsP. It is believed that it is due to the alloy disordered splitting of Fe-levels.

KEY WORDS: Deep impurity center, Alloy semiconductor, Alloy disorder