

化合物半导体材料的正电子寿命计算^{*}

陈祥磊 张 杰 杜淮江 周先意 叶邦角[†]

(中国科学技术大学近代物理系,合肥 230026)
(2009 年 5 月 5 日收到,2009 年 6 月 1 日收到修改稿)

在局域密度理论(LDA)和广义梯度理论(GGA)的基础上计算了 ZnO, GaN, GaAs, SiC 和 InP 五种化合物半导体材料中的正电子湮没信息,包括化合物半导体材料中的自由态正电子的湮没寿命,还有不同类型空位(单空位,双空位)附近俘获的束缚态正电子密度分布和湮没率分布,以及束缚态正电子的湮没寿命.

关键词:半导体,正电子寿命

PACC: 7850G, 7870B

1. 引 言

化合物半导体材料是除元素半导体材料 Si, Ge 外的另一类重要的半导体材料. 它作为基础材料,在国防和民生的各个领域都有着极为广泛的应用,是现代电子产业,光产业等必不可少的重要材料. 研究化合物半导体材料的电子结构和本征缺陷,对于深入研究化合物半导体的生长机理和导电机理,对于探索已合成化合物半导体的新应用和开发新的化合物半导体都有着重要意义.

正电子技术由于其对材料的结构和缺陷的敏感性以及其无损测量等优点成为材料研究中的重要领域. 实验测量的正电子寿命的大小和浓度可以反映材料的结构,缺陷的类型和缺陷的浓度,从而为我们确定材料的组成和缺陷提供重要的参考信息^[1-3]. 正电子理论计算是正电子研究的主要领域之一,一个好的正电子研究要求正电子实验测量结果与理论计算值的符合,确定结构或者缺陷类型的基础上的正电子计算结果与实验测量值的对比,可以为实验结果提供清晰而准确的物理图像,从而有力地支持和解释正电子实验测量数据^[4-11]. 用正电子理论方法研究化合物半导体材料中的正电子湮没行为,对于化合物半导体材料的加工工艺的改进,半导体技术原理的探索 and 发现都有着一定的积极意义.

本文在局域密度近似(LDA)和广义梯度近似

(GGA)基础上计算了 ZnO, GaN, GaAs, 6H-SiC, InP 五种化合物半导体中的正电子湮没行为.

2. 理论基础

在正电子理论计算的 ATSUP 方法中,正电子在材料中的势能看作正电子的库仑势能和关联势能之和^[4],即

$$V = V_{\text{corr}} + V_c, \quad (1)$$

其中 V_{corr} 表示正电子感受到的关联能, V_c 表示正电子感受到的库仑势能.

材料中的电子密度看作原子的电子密度的空间求和,即

$$n_-(r) = \sum_i n_{\text{latom}}(r - a_i), \quad (2)$$

其中 n_{latom} 是单个原子的电子密度分布,求和号下的 i 表示对所有原子求和, a_i 是原子的坐标.

材料中的库仑势能看作原子库仑势能的空间求和,即

$$V_c(r) = \sum_i V_{\text{latom}}(r - a_i). \quad (3)$$

正电子与电子的关联能采用 Boronski 和 Nieminen 的公式.

求得正电子势能后代入 Schrödinger 方程中迭代求得正电子波函数 $\phi(r)$ 后得到正电子的密度分布 $n_+(r)$, 代入正电子湮没率公式中求得正电子的湮没率和寿命.

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10675114, 10835006)资助的课题.

[†] E-mail: xlchen5@mail.ustc.edu.cn

在局域密度近似(LDA)中,湮没率可简化为^[4]

$$\lambda = \pi r_0^2 c \int dm_+(r) n_-(r) \chi(n_-) \\ = \int dm_+(r) \Gamma(n_-(r)), \quad (4)$$

$\chi(n_-)$ 表示正电子所在位置由于正电子对电子库仑吸引,电子密度增大程度的增强因子. $\Gamma(n_-(r))$ 表示密度为 $n_-(r)$ 的均匀电子气中的正电子湮没率.对于正电子与电子的湮没率 $\Gamma(n_-(r))$ 可用公式表示为^[4]

$$\Gamma(n) = \pi r_0^2 c n (1 + 1.23 r_s + 0.8295 r_s^{3/2} - 1.26 r_s^2 \\ + 0.3286 r_s^{5/2} + \frac{1}{6} (1 - \frac{1}{\epsilon_\infty}) r_s^3), \quad (5)$$

其中 ϵ_∞ 为要计算材料的高频介电常数.对于导体,高频介电常数 $\epsilon_\infty = \infty$.对于半导体和绝缘体,高频介电常数为有限值. r_s 与电子密度 n_- 的关系为 n_-

$$= \frac{3}{4\pi r_s^3}.$$

在广义梯度近似(GGA)中,正电子与电子关联能不仅是密度的函数,还是密度梯度的函数

$$V_{\text{corr}}^{\text{GGA}} = V_{\text{corr}}^{\text{LDA}}(n_-(r)) e^{-\alpha \epsilon / 3}, \quad (6)$$

其中 α 一般取为0.22, $\epsilon = |\nabla n|^2 / (n q_{\text{TF}}) = |\nabla \ln n|^2 / q_{\text{TF}}^2$,在原子制单位下, $q_{\text{TF}} = \sqrt{(4/\pi) p_{\text{F}}}$, p_{F} 是电子的费米动量.

同样的,在广义梯度理论中,湮没率公式中的增强因子不仅是电子密度的函数,也是电子密度梯度的函数

$$r_{\text{GGA}} = (1 - r) e^{-\alpha \epsilon}, \quad (7)$$

其中

$$r(r_s) = 1 + 1.23 r_s - 0.0742 r_s^2 + \frac{1}{6} r_s^3. \quad (8)$$

计算的五种半导体化合物的晶体结构和晶格常数如表1所示.

表1 半导体化合物的晶体结构和晶格常数

半导体类型	晶体结构	晶格常数/ \AA
ZnO	六方密排(hcp)	$a = 3.25, c = 5.21$
GaN	六方密排(hcp)	$a = 3.189, c = 5.185$
GaAs	闪锌矿结构(面心立方fcc)	$a = 5.64$
Si-C(6H)	六方密排(hcp) & acbaab)	$a = 3.08, c = 5.04$
InP	闪锌矿结构(面心立方fcc)	$a = 5.869$

3. 计算结果

计算出的ZnO中Zn单空位附近的(0001)原子

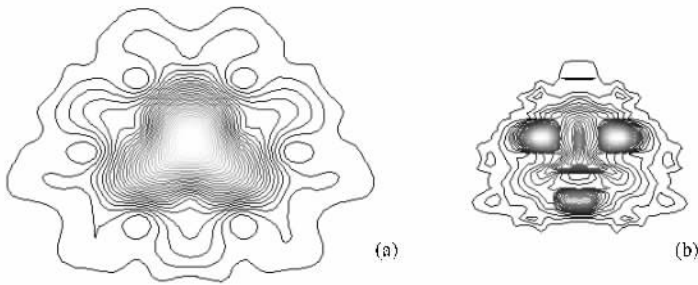


图1 ZnO中Zn单空位附近(0001)原子平面正电子波函数(a)和湮没率分布(b)

InP中P空位附近的(001)原子平面的正电子波函数分布和湮没率分布如图3所示.

作出ZnO中O单空位附近束缚态正电子湮没率随到空位中心距离变化的一维分布,并加上Zn单空位附近的正电子湮没率随到空位中心的一维分布

平面上的束缚态正电子波函数分布和湮没率分布如图1所示.

GaAs中As单空位附近的(001)原子平面上的束缚态正电子波函数分布和湮没率分布如图2所示.

作为比较,如图4所示.从图中可以看出,Zn空位不远处的正电子湮没率的一维分布出现一个极值并迅速衰减到0,显示出一个很强的局域形式,暗示着束缚态正电子的形成,与之相对应的是O空位附近的正电子湮没率一维分布随着到空位中心距离的增大

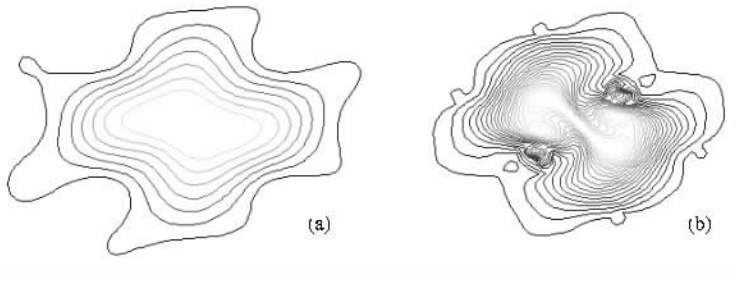


图 2 GaAs 中 As 单空位附近(001)原子平面正电子波函数(a)和湮没率分布(b)

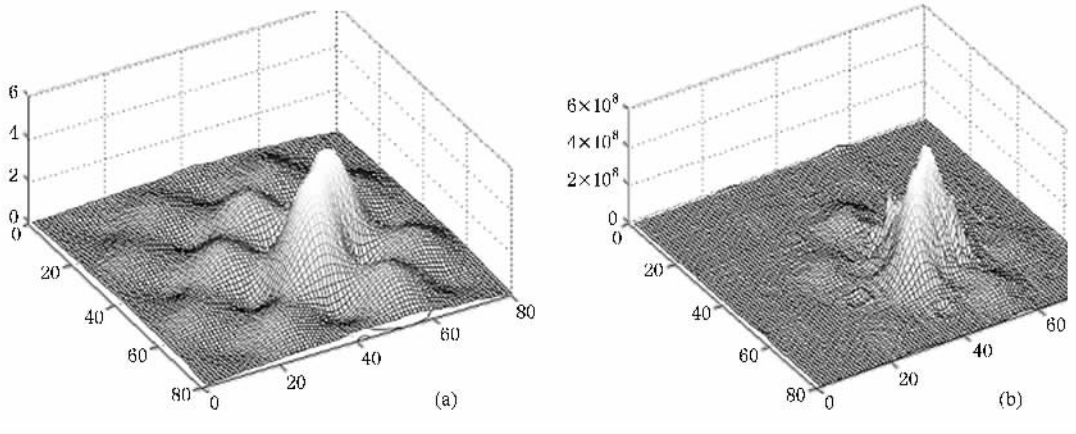


图 3 InP 中单 P 空位附近(001)原子平面的正电子波函数分布(a)和湮没率分布(b)

而增大,这表示空位附近的正电子依然可以运动到晶体的其他区域并与那儿的电子发生湮没,因此 O 空位不能俘获正电子而形成束缚态.与之相同,GaN 单晶中的 N 单空位,6H-SiC 中的 C 单空位都不能俘获正电子而束缚态正电子,因此没有单空位寿命.

计算出的 O 双空位附近的(0001)原子平面上的束缚态正电子波函数分布和湮没率分布如图 5 所示.

计算出的 GaN 单晶中 N 双空位附近(0001)平面的束缚态正电子波函数分布和湮没率分布如图 6 所示.

计算出的 GaAs 中 As 双空位附近(001)原子平

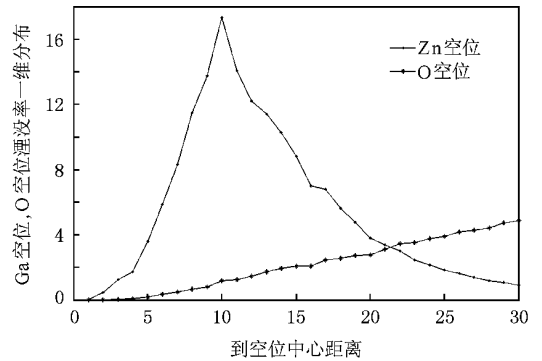


图 4 ZnO 中 O Zn 单空位附近束缚态正电子湮没率随到空位中心距离变化的一维分布

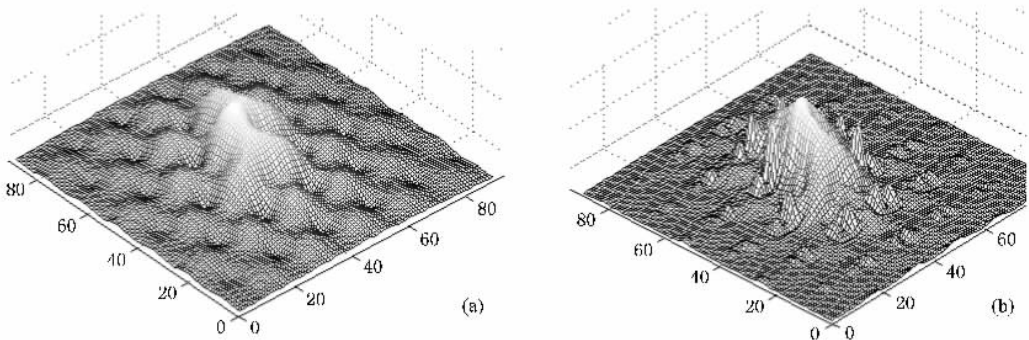


图 5 ZnO 中 O 双空位附近(0001)原子平面正电子波函数(a)和湮没率分布(b)

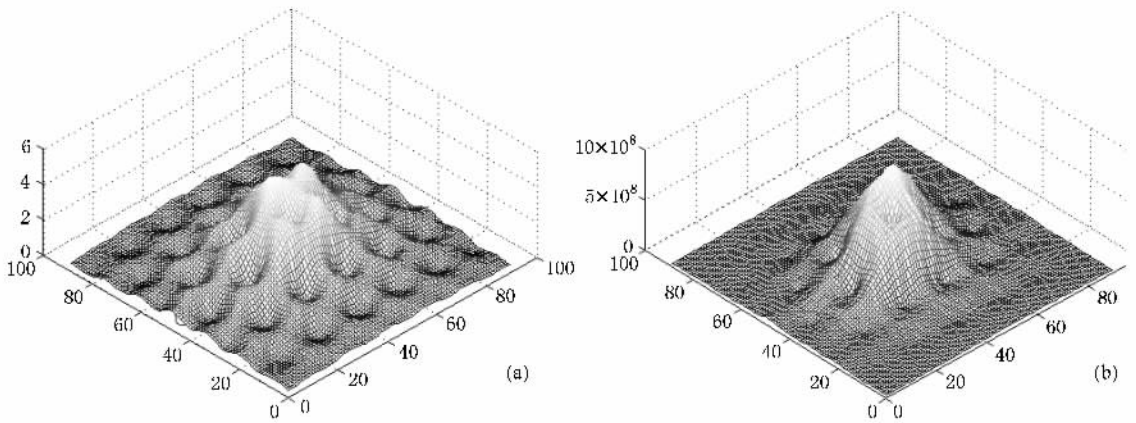


图 6 GaN 中 N 双空位附近(0001)平面的束缚正电子波函数(a)和湮没率分布(b)

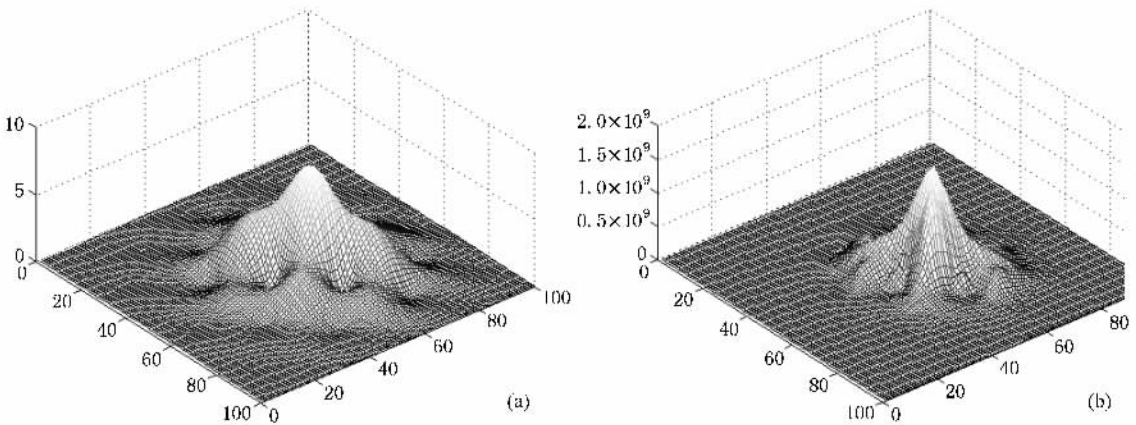


图 7 GaAs 中 As 双空位附近(001)原子平面的正电子波函数(a)和湮没率分布(b)

面上的正电子波函数分布和湮没率分布如图 7 所示.

基于 LDA 和 GGA 的 ATSUP 方法计算的正电子寿命值与文献实验测量值比较,如表 2 所示.

表 2 ZnO, GaN, GaAs, 6H-SiC, InP 中的各种正电子寿命计算值

化合物	类型	LDA 计算值 /ps	GGA 计算值 /ps	文献实验值 /ps
ZnO	体寿命	148	177	170 ^[12]
	Zn 单空位	188	237	230 ^[12]
	O 单空位	无	无	
	Zn 双空位	198	259	
	O 双空位	166	188	
	Zn-O 双空位	212	266	
GaN	体寿命	140	153	160 ^[13] 165 ^[14]
	Ga 单空位	186	214	
	N 单空位	无	无	
	Ga 双空位	193	227	
	N 双空位	144	161	
	Ga-N 双空位	209	238	

续表 2

化合物	类型	LDA 计算值 /ps	GGA 计算值 /ps	文献实验值 /ps
GaAs	体寿命	213	221	229 ^[15]
	Ga 单空位	246	263	262 ^[16] 258 ^[17]
	As 单空位	242	255	257 ^[18]
	Ga 双空位	253	274	
	As 双空位	257	271	
	Ga-As 双空位	288	319	
6H-SiC	体寿命	137	131	136 ^[19] 144 ^[20]
	Si 单空位	167	178	176 ^[21]
	C 单空位	无	无	
	Si 双空位	175	191	210 ^[21]
	C 双空位	142	144	
	Si-C 双空位	190	203	209 ^[22]
InP	体寿命	230	237	234 ~ 241 ^[23, 24]
	In 单空位	276	294	283 ^[25]
	P 单空位	243	255	240 ^[26]
	In 双空位	288	313	
	P 双空位	252	265	
	In-P 双空位	315	345	330 ^[26]

4. 结 论

基于 LDA 和 GGA 的 ATSUP 方法计算出了化合物半导体中的自由正电子和单空位及双空位附近的束缚正电子的寿命值,计算显示 ZnO 中的 O 单空

位, GaN 中的 N 单空位和 SiC 中的 C 空位都不能俘获正电子而形成束缚态正电子,其他类型的单空位和所有的双空位都可以俘获正电子而形成束缚态. GGA 计算出的正电子寿命值与文献中的实验测量值符合. LDA 计算出的正电子寿命值一部分与实验结果符合,一部分有一定的偏差.

- [1] Dannefaer S, Mascher P, Kerr D 1974 *Phys. Rev. Lett.* **56** 2195
- [2] Jean Y C, Sun D C S, Bharathi A, Kyle J, Nakanishi H, Tseng P K 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 1593
- [3] Saarinen K, Laine T, Kuisma S, Nissilä J, Hautajarvi P 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 3030
- [4] Puska M J, Nieminen R M 1994 *Rev. Mod. Phys.* **66** 841
- [5] Puska M J, Nieminen R M 1983 *J. Phys. F:Met. Phys.* **13** 333
- [6] Puska M J 1991 *J. Phys.: Condens. Matter* **3** 3455
- [7] Barbiellini B, Puska M J, Korhonen T, Harju A, Torsti T, Nieminen R M 1996 *Phys. Rev. B* **53** 16201
- [8] Barbiellini B, Puska M J, Torsti T, Nieminen R M 1995 *Phys. Rev. B* **51** 7341
- [9] Chen X L, Kong W, Weng H M, Ye B J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3271 (in Chinese) [陈祥磊、孔 伟、翁惠民、叶邦角 2008 物理学报 **57** 3271]
- [10] Chen X L, Xi C Y, Ye B J, Weng H M 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6695 (in Chinese) [陈祥磊、郝传英、叶邦角、翁惠民 2007 物理学报 **56** 6695]
- [11] Lin D, Wang S J 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 1517 (in Chinese) [林东、王少介 1997 物理学报 **46** 1517]
- [12] Tuomisto F, Ranki V, Saarinen K 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 205512
- [13] Oila J, Kivioja J, Ranki V 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 3433
- [14] Saarinen K, Nissila J, Hautajarvi P 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 2441
- [15] Gebauer J, Lausmann M, Staab T E M 1999 *Phys. Rev. B* **60** 1464
- [16] Gebauer J, Borner F, Krause-Rehberg R 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 8368
- [17] Berre C L, Corbel C, Saarinen K 1995 *Phys. Rev. B* **52** 8112
- [18] Ambigapathy R, Manuel A A, Hautajarvi P 1994 *Phys. Rev. B* **50** 2188
- [19] Kawasuso A, Itoh H, Okada S 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 15
- [20] Dannefaer S 1995 *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process.* **61** 59
- [21] Rempel A A, Sprengel W, Blaurock K *et al* 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 185501
- [22] Polity A, Huth S, Lausmann M 1999 *Phys. Rev. B* **59** 10603
- [23] Bretagnon T, Dannefaer S, Kerr D 1993 *J. Appl. Phys.* **73** 4697
- [24] Chen Z Q, Hu X W, Wang S J 1998 *Appl. Phys. A: Solids Surf.* **66** 435
- [25] Tornqvist M, Corbel C, Liskay L 1994 *Mater. Sci. Eng. B* **28** 125
- [26] Dannefaer S, Bretagnon T, Kerr D 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 3446

Calculation of positron lifetime of compound semiconductors^{*}

Chen Xiang-Lei Zhang Jie Du Huai-Jiang Zhou Xian-Yi Ye Bang-Jiao[†]

(*Department of Modern Physics , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China*)

(Received 5 May 2009 ; revised manuscript received 1 June 2009)

Abstract

On the basis of local density approximation (LDA) and general gradient approximation (GGA) , positron annihilation information has been calculated for five types of compound semiconductors , which are ZnO , GaN , GaAs , SiC and InP. The calculated information includes distribution of positron density , distribution of positron annihilation rate density , positron bulk lifetime , positron monovacancy lifetime and positron divacancy lifetime .

Keywords : semiconductor , positron lifetime

PACC : 7850G , 7870B

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant Nos. 10675114 ,10835006).

[†] E-mail : xlchen5@mail.ustc.edu.cn