

掺杂、无序和混晶半导体的晶格振动行为¹⁾

陆卫 沈学础

(中国科学院上海技术物理研究所)

一、研究的意义和目的

杂质诱发的半导体晶格振动问题和无序和混晶半导体的晶格振动问题的研究,在过去 20 多年中一直是比较活跃的。

过去的研究表明,在杂质诱发晶格振动情况下,由于杂质原子量和掺杂的不同而引起的力常数的变化,可以诱发与杂质有关的、不同程度局域化的振动模(尤其是位于声子带上方的局域模),并可使原来光学不激活的声子带模变得部分地光学可激活。然而对与低频的声学声子带有关的杂质诱发振动行为,国内外却研究得很少,实验方面尤其如此。

关于无序半导体的晶格振动行为,已有的研究成果表明,无序可以使理想晶体情况下光学不激活的声子带模变得光学可激活。而掺杂,尤其是原子量小于主网络原子的掺杂,可以导致与有关化学键特征对应的振动状态。

关于混晶半导体的晶格振动行为,人们主要研究其光学声子的模式行为(单模、双模或多模),但对其声学声子行为,在我们之前在实验上也几乎无人研究过。

这些情况和实验技术上的困难是有关的。我们应用了在远红外波段特别优越的远红外傅里叶变换光谱技术,尤其是我们研制成功的双光路傅里叶变换光谱仪,为取得这一方面的研究成果奠定了基础。

本研究工作是在上述无人或很少有人研究过的方面取得若干发现或新结果,从而使人们对掺杂、无序和混晶半导体的晶格振动行为有较全面的认识。由于晶格振动行为不但反映着材料结构,而且影响着电子态特性,所以从应用观点来看,也为这类材料的使用,尤其是在远红外波段的使用方面(作为器件、元件、光学材料等)提供了必要的科学基础与数据。

二、研究成果的主要内容

自 1978 年以来,我们较系统地研究了掺杂、无序和混晶半导体的晶格振动行为,尤其是低频、声学声子波段的晶格振动行为。

1. 研究对象

(1) 掺杂半导体: 包括掺硼单晶硅(锂补偿)、掺硒硫化镉。

(2) 无序半导体: 包括 a-Si, a-Si:H, 掺 B 的 a-Si:H, 掺 P 的 a-Si:H, 掺 F 的 a-Si:H, 掺 D 的 a-Si:H, a-Ge 和 a-Ge:H。

(3) 混晶半导体: 包括 $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, $\text{CdTe}_{1-x}\text{Se}_x$ 和 $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 。

2. 研究手段

主要的研究手段为远红外吸收光谱和反射光谱,并配合必要的理论计算和其他辅助实验技术。

3. 主要的新发现和新研究结果

(1) 掺杂、无序和混晶化效应都可诱发原来光学不激活的声子模的光学活性,其中诱发的横声学声子带(TA)的光学行为,过去还很少被人研究过。我们是国际上这种诱发 TA 声子带光学活性所导致的远红外吸收带的首批实验发现者和理论研究者之一。

(2) 对金刚石和闪锌矿结构半导体,不论它们是处于无序或有序结晶状态,较基质元素轻的杂质都可以在 TA 声子带(对无序系统是类 TA 声子带)上方态密度陡峭下降的位置上诱发局域化的振动模式。在实验上,我们是首先观察到这一类现象的学者之一,并首先研究和判定了它们的物理属性。

一系列的研究和发现证明,这种声学局域

(下转第 192 页)

¹⁾ 本文介绍的研究成果获国家自然科学基金四等奖。本基金项目参加人员有沈学础、叶红娟、褚君浩、陆卫、方容 III。