

GaP 和 $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 中 N 束缚激子压力行为的理论计算*

张 勇 郑健生 吴伯僖

厦门大学物理系, 厦门, 361005

1990 年 9 月 12 日收到; 1990 年 12 月 25 日收到修改稿

本文在 Koster-Slater 单带位势近似下对 GaP 和 $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 中 N 等电子中心束缚激子的压力行为与能带结构的关系进行讨论与分析, 得到杂质态压力系数的一个近似的解析表达式, 并对 N 和 NN_i 中心能级的压力关系进行计算。同时, 给出 NN_i 中心配位的一组新的指认。

PACC: 7135; 6250; 7855; 7155

一、引 言

人们对 GaP 和 $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 中等电子中心束缚激子的行为已进行了 20 余年的研究。仍然有一些基本问题未能很好地解决。例如, 束缚激子的束缚机制问题和对 NN_i 中心配位的指认。关于束缚机制问题, 激发谱实验^[1]表明, 大多数 NN_i 中心符合 HTL 模型^[2]。对于孤立 N 中心及较浅的 NN_i 中心, 至今仍未有直接可靠的证据表明电子束缚态的存在。有些研究认为, 孤立 N 中心的电子束缚态是不稳定的, 它的束缚能近于零^[3-5]。但是, Gil 等人^[6]的压力实验表明孤立 N 中心的电子束缚能应为一个有限的数值。Allen 模型^[7]所预期的 NN 对能级的压力系数与实验结果完全不符。关于 NN_i 中心配位的指认, 在 Thomas 和 Hopfield^[8] 给出的传统指认中, NN_i 依次对应于不同近邻的 NN 对。但是, Brand 和 Jaros^[9] 与 Faulkner^[10] 的理论计算所得到的能级次序则与此有很大的差别。Gil 等人^[11]的单轴应力实验表明 NN_i 中心的对称性与传统指认的对称性不符。Gil 等人^[12]给出一套新的指认, 并对能级及其压力系数进行了计算。但是, 所得的能级次序及压力系数与实验结果偏差较大。

近年来, 人们对 GaP 和 $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 中 N 等电子中心在压力下的行为进行了不少实验^[6, 13, 20]和理论^[12, 21, 22]方面的研究。在理论计算方面, Yang^[21] 和 Wang^[22] 认为束缚激子能级的压力效应是能带结构变化的结果, 而能带的变化可等效为 Γ , X , L 三个能谷带边的线性移动及相应有效质量的变化。他们的计算中认为杂质势是不变的, 对 NN_i 中心的配

* 国家自然科学基金资助的课题。

位采用了传统的指认。Gil 等人^[12]则考虑势场在压力下的变化,而能带的变化等效为三个能谷刚性地随压力线性移动。他们得到的 NN_i 中心的压力系数与实验结果的符合程度并不比文献[21,22]的结果好。此外,他们选取孤立 N 中心的电子束缚能为 1meV ,所以难以对孤立 N 中心的压力行为进行计算。

本文中研究在 Koster-Slater 单带在位势近似下各种 NN 对配位所产生的束缚态,通过对各种配位的束缚态及其压力系数的计算,得到 NN_i 中心配位的一组新的指认,这组指认不但在能级次序上,而且在压力系数上与实验结果很好地符合。对杂质态的压力行为与能带结构的关系进行了讨论与分析,得到杂质态压力系数的一个近似解析表达式,并且对 GaP 和 $\text{GaAs}_{0.17}\text{P}_{0.83}$ 中孤立 N 和 NN_i 中心束缚态的压力关系进行了计算。

二、关于 Koster-Slater 单带在位势近似

在 Koster-Slater 单带在位势近似下^[9],电子束缚态为

$$\phi = \sum_{BZ} a_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}, \quad (1)$$

$$a_{\mathbf{k}} = N/[E - E(\mathbf{k})], \quad (2)$$

式中 E 为电子束缚态能级, N 为归一化常数。这时可得到如下格林函数关系:

$$JG(E) = 1, \quad (3)$$

$$G(E) = \frac{Q}{(2\pi)^3} \int_{BZ} \frac{d\mathbf{k}}{E - E(\mathbf{k})}, \quad (4)$$

式中 J 为 Koster-Slater 势, $G(E)$ 为电子束缚态的格林函数。对 NN_i 中心,相应地有

$$J[G(0, E) \pm G(\mathbf{R}_m, E)] = 1, \quad (5)$$

$$G(\mathbf{R}_m, E) = \frac{Q}{(2\pi)^3} \int_{BZ} \frac{\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m)}{E - E(\mathbf{k})} d\mathbf{k}, \quad (6)$$

\mathbf{R}_m 为两个 N 原子之间的距离。这时,(1)式中的 $a_{\mathbf{k}}$ 为

$$a_{\mathbf{k}} = N \frac{1 \pm \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m)}{E - E(\mathbf{k})}. \quad (7)$$

(5)和(7)式中的“+”号对应于 $a_{\mathbf{r}} \approx 0$ 的允许跃迁态,“—”号对应于 $a_{\mathbf{r}} = 0$ 的禁戒跃迁态。

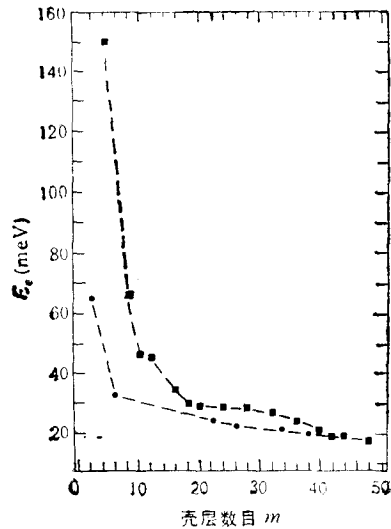
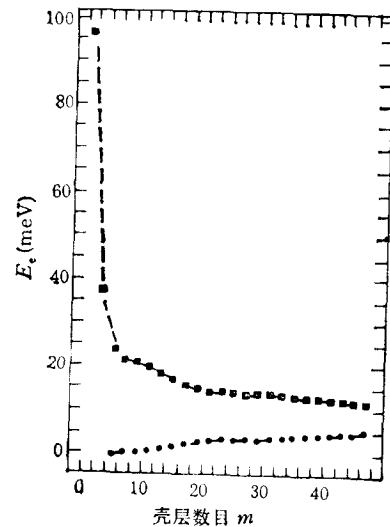
由于对孤立 N 中心电子束缚能选取的不同,所采用的能带结构参数不同或具体计算方法上的差异,所得到的各个 NN 对组态的束缚能差别较大,且能级次序也不尽相同^[9,10,12]。在 GaP 中,可能存在的不同 NN 对配位的情况与第一类 $D-A$ 对一致^[23]。以往的计算工作都未曾给出一个系统的计算结果,因此,我们对文献[23]表 2 所给出的第一类 $D-A$ 对各种配位情况下 NN 对中心电子束缚态及压力系数进行了计算。

在计算中,选取孤立 N 中心的电子束缚能为 9meV 。其根据是,从文献[6]的实验结果估计,在 8kbar 下,激子束缚能的变化约为 -8.4meV 。考虑到 HTL 模型中空穴束缚态是一种类受主束缚态^[4],其束缚能在压力下不会有明显的变化。因此,可以近似地认为压力下束缚能的变化基本上是电子束缚能的变化。由此推知电子束缚能 $E_0 > 0.84\text{meV}$ 。另

一方面,束缚激子相对于自由激子能级的束缚能为 11meV , 考虑到由于束缚激子的局域性,电子-空穴相互作用或多或少地要比自由激子大,因此,应有 $E_b < 11\text{meV}$. 这样, 9meV 可以认为是一个合理的选取. 相应的空穴束缚能则为 24meV (自由激子束缚能为 $22\text{meV}^{[24]}$).

表 1 GaP, GaAs_{0.17}P_{0.83} 能带参数

	$E_T(\text{eV})$	$E_X(\text{eV})$	$E_L(\text{eV})$	$m_r(m_0)$	$m_x(m_0)$	$m_L(m_0)$	$a(\text{\AA})$
GaP	2.884	2.350	2.745	0.12	0.365	0.299	5.45
GaAsP	2.622	2.261	2.569	0.11	0.362	0.299	5.48
	dE_T/dP	dE_X/dP	dE_L/dP	$1/m_r dm_r/dP$	$1/m_x dm_x/dP$	$1/m_L dm_L/dP$	$1/ada/dP$
		(meV/kbar)			(1/kbar)		
GaP	10.7	-1.43	5.5	0.007		0	-3.646×10^{-4}
GaAsP	10.7	-1.41	5.5	0.007		0	-3.744×10^{-4}

图 1 $m = 2k$ 的 NN 对电子束缚能允许跃迁 (■) 为 (i) 组; (●) 为 (ii) 组图 2 $m = 2k + 1$ 的 NN 对电子束缚能禁戒跃迁 (■); 允许跃迁 (●)

计算中对布里渊区求和采用 Kleiman^[25] 的方法. 计算所用的参数见表 1. 得到 Koster Slater 势 $J = -1.817\text{eV}$. 对 $R_m = (m/2)^{1/2}a^{[23]}$, $m < 50$ 的所有配位的束缚态的计算结果在图 1 和图 2 中给出, 分别对应于 m 为偶数或奇数的配位. 计算结果有如下几个特点: 1) 所有 m 为偶数的对所产生的束缚态均为允许跃迁的; 所有 m 为奇数的对所产生的束缚态均为禁戒跃迁的. 对 m 为奇数时, 实际上还产生一个很浅的束缚态, 其束缚能比孤立 N 中心还小, 但却是允许跃迁的. 这样的浅束缚态在实验上未曾观察到, 但文献 [11] 已指出它们可能存在. 这种浅束缚态即使存在, 由于其跃迁概率随束缚能减小而迅速减小, 且 NN 对浓度较低, 实验上也难以观察到. 对 m 为偶数时, 当 m 较大时, 也能产生一个非常浅的禁戒跃迁的束缚态, 其束缚能非常小以致不可能是一个稳定态. 2) 不论 m 为奇数还是偶数, 束缚能只与 R_m 的长度有关, 与 R_m 的具体取向无关. 而且, 压力系数

也有同样性质。3)当 m 为奇数时,束缚能为 R_m 的单调函数;对 m 为偶数则不是。但是,若将 m 为偶数的对分为两组:(i) $m = 4, 8, 10, 12, 16, 18, 20, 24, 28, 32, 36, 40, 42, 44, 48, \dots$; (ii) $m = 2, 6, 22, 26, 34, 38, \dots$, 则这两组内束缚能都为 R_m 的单调函数。并且,(ii)组中出现的位置 m 关于所谓“empty shell”^[23] 是对称的,例如, $m = 14, 30, 46$ 是“empty shell”。这两组的压力系数有很大不同,这将在第三节讨论。表 2 给出 m 为偶数时各种配位的结果。

本文计算结果中所有 NN 对的束缚能都落在 $E_c < 150\text{meV}$ 的范围内,这与实验结果相符。但是,与所有其它计算一样,能级次序与传统指认无法相符。实际上,较为复杂的计算^[10,12]在总体上并未能得到比简单的单带在位势近似更好的结果。

表 2 允许跃迁对的电子束缚能与压力系数的计算结果

(i)				(ii)			
m	$(\alpha\beta\gamma)$	$E_c(\text{meV})$	dE_c/dP (meV/kbar)	m	$(\alpha\beta\gamma)$	$E_c(\text{meV})$	dE_c/dP (meV/kbar)
4	220	150.2	1.92	2	200	64.7	0.47
8	400	65.6	0.97	6	222	32.6	-0.05
10	420	46.3	0.41	22	622	24.5	-0.00
12	422	45.7	0.62	26	640	22.7	-0.03
16	440	34.0	0.32	34	820	21.3	-0.03
18	442	30.1	0.14		&644		
	&600			38	662	20.4	-0.04
20	620	29.2	0.20				
24	444	28.5	0.20				
28	642	28.3	0.22				
32	800	26.8	0.19				
36	822	24.0	0.11				
	&660						
40	840	21.0	0.01				
42	842	19.5	-0.06				
44	664	18.7	-0.07				
48	844	17.4	-0.11				
∞		9	-0.09				

三、束缚激子能级的压力行为

对应于(1),(2)式,束缚态能级可表示为

$$E = \sum_{BZ} |a_k|^2 E(k) + \langle \Phi | V | \Phi \rangle. \quad (8)$$

压力对杂质态的影响可从二方面考虑:第一,压力下能带结构的变化可导致杂质态的变化;第二,压力下杂质势的变化引起杂质态的变化。

在压力不太高的情况下,对 GaP 和 GaAs^[26,27], $P < 50\text{kbar}$,各能谷的带边有线性的压力关系。但是, N 束缚激子能级的压力关系却在低得多的压力下就出现非线性^[6,13,18]。在

不太高的压力下, 压力可视为对体系的一个微扰. 在一级近似下, 可认为能带波函数不变, 而能带随压力线性地移动. 由于各能谷的压力系数不同, 为保持能带的连续性, 必然要求各能谷曲率作相应变化. 对于束缚态, 当压力较低时, 可认为 $a_{\mathbf{k}}$ 不变, 即使考虑杂质势的变化, 只要这一变化是线性的, 则可得到线性的压力关系.

$$dE/dP = \sum_{BZ} |a_{\mathbf{k}}^0|^2 \frac{dE(\mathbf{k})}{dP} + \epsilon \bar{V}_0 \quad (9)$$

式中

$$\bar{V}_0 = \langle \Phi | V_0 | \Phi \rangle, \quad \epsilon = \frac{1}{V_0} \frac{dV}{dP} = \frac{1}{J_0} \frac{dJ}{dP}.$$

当压力较高时, $a_{\mathbf{k}}$ 随压力变化, 导致非线性的压力关系^[18].

对孤立 N 中心, (9) 式具有如下形式:

$$\frac{dE}{dP} = N^2 \sum_{i=\Gamma, X, L} n_i \left[w_1(i) \frac{dE_i}{dP} - w_3(i) \left(\frac{1}{m_i} \frac{dm_i}{dP} \right) \right] + \epsilon \bar{V}_0, \quad (10)$$

$$N^2 = \left[\sum_i n_i w_1(i) \right]^{-1}.$$

对 NN 对中心, 可得

$$\frac{dE}{dP} = 2N^2 \sum_{i=\Gamma, X, L} \left\{ [n_i w_1(i) \pm f_i u_1(i)] \frac{dE_i}{dP} - [n_i w_3(i) \pm f_i u_3(i)] \left(\frac{1}{m_i} \frac{dm_i}{dP} \right) \right\} + \epsilon \bar{V}_0, \quad (11)$$

$$2N^2 = \left\{ \sum_i [n_i w_1(i) \pm f_i u_1(i)] \right\}^{-1},$$

式中 $\frac{1}{m_i} \frac{dm_i}{dP}$ 为第 i 个能谷有效质量的相对变化率, $\frac{dE_i}{dP}$ 为第 i 个能谷导带底的压力系数,

n_i 和 f_i 分别为各能谷等价点的数目和干涉因数^[12]. $w_1(i)$ 和 $u_1(i)$ 分别为以下积分:

$$w_1(i) = \int_i dk_i / [E^0 - E^0(\mathbf{k}_i)]^2, \quad w_2(i) = \int_i dk_i / [E^0 - E^0(\mathbf{k}_i)],$$

$$w_3(i) = -(E_i^0 - E^0) w_1(i) - w_2(i); \quad (12)$$

$$u_1(i) = \int_i \cos(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}) dk_i / [E^0 - E^0(\mathbf{k}_i)]^2,$$

$$u_2(i) = \int_i \cos(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}) dk_i / [E^0 - E^0(\mathbf{k}_i)],$$

$$u_3(i) = -(E_i^0 - E^0) u_1(i) - u_2(i). \quad (13)$$

以上得到了束缚态压力系数的近似解析表达式(10)和(11). 所用的有关参数值已在表 1 中给出, 其中各能谷的压力系数来自文献[13]和[19], Γ 谷有效质量的变化率来自文献[28], 晶格常数的变化由 $a = a_0[1 + (S_{11} + 2S_{12})P]$ 得到, S_{ij} 由文献[29]得到. 由(10)或(11)式可见, 有效质量负的变化率对压力系数的贡献为正的. 这正是我们要解释大部分 NN 对中心正的压力系数所需要的. 另一方面, 势场负的相对变化率同样也对压力系数产生正的贡献.

Gil 等人^[6]的实验得到 A 线的压力关系是非线性的, 我们用(3)式通过两种方法去拟合实验结果. 第一, 假设 $dJ/dP = 0$, 以 $\frac{1}{m_x} \frac{dm_x}{dP}$ 为拟合参数, 得到其值为 $-3.19 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$; 第二, 假设所有 $\frac{dm_i}{dP} = 0$, 以 $\frac{1}{J} \frac{dJ}{dP}$ 为拟合参数, 得到其值为 $-2.28 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$.

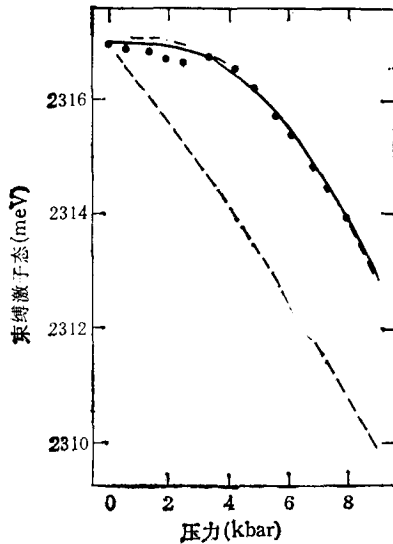


图3 GaP:N 中 A 线压力关系的计算结果与实验结果^[6]的比较 ● 为实验值; — 为 $\frac{dJ}{dP} = 0$; --- 为 $\frac{dm}{dP} = 0$; ... 为

$$\frac{dJ}{dP} = \frac{dm}{dP} = 0$$

图3给出两种拟合结果与实验结果的比较. 两种方法的结果相差不多, 难以由此判断哪种模型较好. 这两种结果都预计 $P > 9 \text{ kbar}$ 时电子束缚态进入导带, 这与实验结果^[13]相符. 如果考虑势场是原子势的差异所引起的而不是应力场的结果, 则在压力下势场参数 J 不应有明显的变化, 因为势场具有很强的局域性. 这样, 能带结构的变化可能对束缚激子的压力行为起主要作用. 图3中还给出令 $\frac{dm_i}{dP} = \frac{dJ}{dP} = 0$ 的计算结果, 显然与实验结果偏差很大.

以下讨论 NN 对的压力行为. 根据第二节得到的各种 NN 对组态的束缚能, 由(11)式可计算出它们的压力系数, 结果见表2. 第(ii)组的压力系数比第(i)组要小得多, 而实验结果^[6,13]都落在第(i)组的范围内. 若在第(i)组之外再加上禁戒跃迁的对(110), 则可以得到一组不仅在能级次序上与实验结果一致, 而且压力系数也与实验结果符合得相当好的序列, 见表3. 其中(420)和(422)的束缚能非常相近, 它们的差别与 NN 对在晶场中的分裂相当, 在实验上将难以区别. 有可能 NN_4 包括了这两种对的贡献, 我们在实验上确实发现 NN_4 的谱线宽度较其它 NN 对大, 对于第(ii)组的 NN 对, 也许由于某种尚不清楚的原因, 例如晶格弛豫, 在实验中无法观察到. 表4给出本文计算结果与实验结果及其它计算结果的比较, 本文结果与实验结果符合得最好.

现对(10)和(11)式的近似性作些讨论. 假设在压力下波函数中各个 k 分量的相对比例不变; 忽略晶格常数随压力的变化, 这一变化引起 k 空间态密度及布里渊区大小的变化. 严格地说, 应从(3)或(5)式求解束缚能级的压力关系. 这样所得的结果实际上是非线性的, 只有在很小的压力下近似满足线性关系. 实际计算表明, 这样得到的压力系数要比由(10)或(11)式得到的略大一些.

以下讨论 Allen 模型中 NN 对的压力系数. 由 NN 对能级与孤立 N 能级的关系^[7]

$$E_{NN} = E_N - \beta R^{-3}, \quad (14)$$

可得

$$dE_{NN}/dP = dE_N/dP + 3(E_N^0 - E_{NN}^0) \left(\frac{1}{a} \frac{da}{dP} \right), \quad (15)$$

式中 E_N^0 , E_{NN}^0 代表常压下的能级, 并认为 β 为不随压力变化的常数。这一关系意味着所有 NN 对的压力系数都比孤立 N 能级小。由于 $\frac{dE_N}{dP} \leq 0^{[6,13]}$, 所以 $\frac{dE_{NN}}{dP} < 0$, 这与实验结果完全相反。表 4 中还给出(15)式得到的结果, 显然这一模型难以解释束缚激子的压力行为。

表 3 一种可能的 NN 对配位

NN_i	NN_1	NN_2	NN_3	NN_4	NN_5	NN_6	NN_7
$(\alpha\beta\gamma)$	(220)	(110)	(400)	(420)	(440)	(442)	(620)
$E_e(\text{meV})$	150.2	96.6	65.6	46.1	34.0	30.1	29.2

表 4 束缚激子能级压力系数的理论计算与实验结果的比较

	NN_1	NN_2	NN_3	NN_4	NN_5	NN_6	NN_7	N
文献[21]	2.33	1.50	1.12	0.55	0.35	-0.35	-0.17	0
文献[22]	2.0)	2.6	1.4	0.1	0.0	0.6	0.6	0
文献[12]	4.44	2.24	0.44	0.74	1.34	0.84	0.16	
本工作	1.92	1.71	0.97	0.48	0.32	0.14	0.20	-0.09
实验 ^[6]	1.67	2.06	1.26	0.66	0.45	0.19	0.35	-0.09
Allen 模型	-0.23	-0.23	-0.15	-0.12	-0.11	-0.105	-0.10	

四、GaAs_{0.17}P_{0.83} 中 N 束缚激子的压力关系

在适当的压力下, 在 $x = 0.83$ 的样品中观察到常压下无法看到的 NN_1 束缚激子的发光^[18]。在 GaAs_{1-x}P_x 中, 与 GaP 中相似, N 束缚激子能级表现出深中心的特征。例如, 显著的非线性压力效应。尤其对于孤立 N 中心, 由于束缚能随组分减小而迅速增大, 其束缚激子能级可在相当高的压力下仍处于禁带中。对于 $x = 0.83$ 的样品, 直到 32kbar, 仍可观察到 N_x 的发光^[18]。以下, 将计算 $x = 0.83$ 这一组分下 N_x 和 NN_1 能级的压力关系。

Kash 等人^[30]得到 $x = 0.39$ 时孤立 N 中心的空穴束缚能为 30meV。若对 $x = 1$ 情形认为空穴束缚能为 24meV, 表明空穴束缚能随组分的变化并不太大。这与我们假设空穴束缚能随压力变化很小是一致的, 因为压力在某种程度上可等效为组分的变化。不妨认为对我们所考虑的组分, 空穴束缚能与 GaP 中基本一样, 即对 N_x 中心, $E_b = 24\text{meV}$, 对 NN_1 中心, $E_b = 40\text{meV}$ 。由 Kleiman 等人^[31], Hsu 等人^[32]所给的能带参数与组分的关系, 考虑 Wolford 等人^[39]对 GaAs 的 X, L 谷带隙的修正, 得到如下关系:

$$E_r = 1.519 + 1.155x + 0.210x^2,$$

$$E_x = 2.010 + 0.119x + 0.221x^2,$$

$$E_L = 1.840 + 0.745x + 0.160x^2$$

及 $m_r = 0.068 + 0.052x$, $m_x = 0.35 + 0.015x$, $m_L = 0.299$ 。对 $x = 0.83$ 的结果已在表 1 中给出。常压下 N_x 和 NN_1 能级位置取实验值^[18]: $E(N_x) = 2.176\text{eV}$, $E(NN_1) =$

2.033eV. 相应的电子束缚能分别为 $E_c(N_x) = 65\text{meV}$, $E_c(NN_1) = 188\text{meV}$. 带边的压力系数及晶格常数的压力关系由 GaP 和 GaAs 的结果线性内插得到.

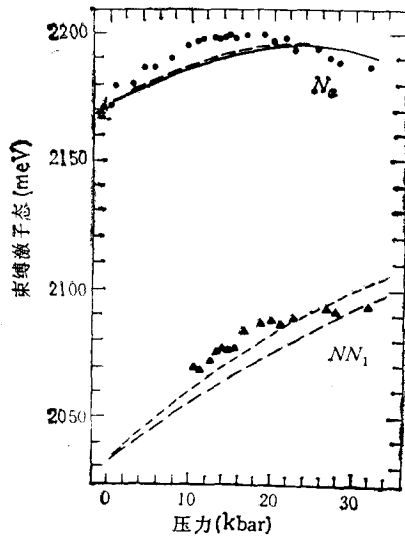


图4 GaAs_{0.17}P_{0.83} 中 N_x 束缚激子压力关系的计算结果与实验结果^[18]的比较

▲, ● 为实验值; —, --- 为 $\frac{dJ}{dP} = 0$;

... 为 $\frac{dm}{dP} = 0$

图4给出理论计算结果与实验结果的比较. 通过拟合 N_x 的实验结果, 得到

$$\frac{1}{m_x} \frac{dm_x}{dP} = -2.40 \times 10^{-3} \text{kbar}^{-1},$$

$$J = -1.973\text{eV}.$$

由近似方程(10), (11)和解方程(3), (5), 得到 N_x 和 NN_1 的压力系数 (见表5). 若不考虑有效质量的变化而考虑势场的变化, 形式上也可以符合实验结果, 只要取

$$\frac{1}{J} \frac{dJ}{dP} = -1.73 \times 10^{-3} \text{kbar}^{-1}.$$

在 GaAs_{1-x}P_x 中, 除了电负性差异引起的短程势外, 还存在混晶无序或应力场引起的长程势^[25,31], 这一长程势对压力行为必然有一定影响. 尤其对于组分较低的情况. 例如, 在直接带和间接带转变点附近, 我们这种简单的模型可能失败. 在 GaAs 情况下, 由于常压下 N_x 处于导带中, 这与较高压力下 GaP 中 A 线与自由激子能级共振^[13]可能有相似之处, 本文的方法无法处理这类情况.

五、结 论

Koster Slater 单带在位势近似可以较好地描述 GaP 和较高组分的 GaAs_{1-x}P_x 中 N 束缚激子的压力行为. 考虑能带有效质量的变化或杂质势的变化都可能给出深中心束缚

表5 N_x 和 NN_1 能级压力系数的计算与实验结果 (meV/kbar)

	近似公式	数值计算	实验结果
N_x	1.35	1.85	2.22
NN_1	1.93	2.49	—

态合理的压力系数及非线性压力行为. 现有的各种计算工作本身并不能确定哪种因素更重要. 要可靠地分析两种因素的作用, 有待于对能带结构的压力关系获得更可靠. 全面的了解. 通过对 HTL 模型和 Allen 模型所预期的 NN 对压力行为的分析表明, 后者难以解释压力实验的结果. 通过对各种可能出现的 NN 对配位的束缚态, 压力系数的计算、分析, 我们给出一套在能量次序上和压力系数上都与实验结果相符的 NN 对序列.

感谢王炳燊博士许多有益的讨论与建议。

- [1] E. Cohen, M. D. Sturge, *Phys. Rev.*, **B15**(1977), 1039.
[2] J. J. Hopfield, D. G. Thomas, R. T. Lynch, *Phys. Rev. Lett.*, **17**(1966), 312.
[3] M. Sternhein, E. Cohen, *Phys. Rev.*, **B22**(1980), 1875.
[4] W. T. Masselink, Ya-Chung Chang, *Phys. Rev. Lett.*, **51**(1983), 509.
[5] C. Benoit à la Guillaume, *Physica*, **117—118B** (1983), 105.
[6] B. Gil, M. Baj, J. Camassel, H. Mathieu, C. Benoit à la Guillaume, N. Mestress, J. Pascnal, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 3398.
[7] J. W. Allen, *J. Phys. C*, **1**(1968), 1136; *ibid.*, **4**(1971), 1936.
[8] D. G. Thomas, J. J. Hopfield, *Phys. Rev.*, **150**(1960), 680.
[9] S. Brand, M. Jaros, *J. Phys. C*, **12**(1979), 2789.
[10] R. A. Faulkner, *Phys. Rev.*, **175**(1968), 991.
[11] B. Gil, J. Camassel, J. P. Albert, H. Mathieu, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 2690.
[12] B. Gil, J. P. Albert, J. Camassel, H. Mathieu, C. Benoit a la Guillaume, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 2701.
[13] 赵学恕等,物理学报,**33**,(1984),583.
[14] G. A. Herrmannsfeldt, Y. C. Chang, H. G. Drickamer, *Phys. Rev.*, **B34**(1980), 5373.
[15] R. J. Nelson, N. Holonyak, Jr., J. J. Coleman, D. Lazarus, W. O. Groves, D. L. Keune, M. G. Craford, D. J. Wolford, B. G. Streetman, *Phys. Rev.*, **B14**(1976), 685.
[16] R. J. Nelson, N. Holonyak, Jr., J. J. Coleman, D. Lazarus, D. L. Keune, W. O. Groves, M. G. Craford, *Phys. Rev.*, **B14**(1976), 3511.
[17] R. J. Nelson, N. Holonyak, Jr., J. J. Coleman, D. Lazarus, D. L. Keune, A. H. Herzog, W. O. Groves, G. G. Kleiman, *Appl. Phys. Lett.*, **29**(1976), 615.
[18] Y. Zhang, Q. Yu, J. J. Zheng, B. Z. Yan, B. X. Wu, G. H. Li, Z. P. Wang, H. X. Han, *Chinese Phys. Lett.*, **5**(1988), 353.
张勇等,物理学报,**31**,(1988),1925.
[19] D. J. Wolford, J. A. Bradely, *Solid State Commun.*, **53**(1985), 1069.
[20] 赵学恕等,物理学报,**33**,(1984),588.
[21] G. L. Yang, *Chinese Phys. Lett.*, **2**(1985), 197.
[22] B. S. Wang, *Chinese Phys. Lett.*, **3**(1986), 277.
[23] P. J. Dean, Inter-impurity Recombinations in Semiconductors, in *Progress in Solid State Chemistry*, Vol. **8**, Ed. J. O. McCaldin, G. Somorjai Pergamon Press, Oxford & New York, (1973). p. 17.
[24] M. D. Sturge, A. T. Vink, F. P. J. Kuijpers, *Appl. Phys. Lett.*, **32**(1978), 49.
[25] G. G. Kleiman, *Phys. Rev.*, **B19**(1979), 3198.
[26] S. Ves, K. Strossner, C. K. Kim, M. Cardona, *Solid State Commun.*, **55**(1985), 327.
[27] A. R. Goni, K. Strossner, K. Syassen, M. Cardona, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 1581.
[28] G. D. Pitt, J. Lees, R. A. Hoult, R. A. Stradling, *J. Phys. C*, **6**(1973), 3282.
[29] W. F. Boyle, R. J. Sladek, *Phys. Rev.*, **B11**(1975), 2933.
[30] R. A. Kash, J. H. Collet, D. J. Wolford, J. Thompson, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 2294.
[31] G. G. Kleiman, M. Fracastovo-Decker, *Phys. Rev.*, **B21**(1980), 3478.
[32] W. Y. Hsu, J. D. Dow, D. J. Wolford, B. G. Streetman, *Phys. Rev.*, **B16**(1977), 1597.

THEORETICAL INVESTIGATION ON THE PRESSURE BEHAVIOR OF NITROGEN BOUND EXCITONS IN GaP AND $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$

ZHANG YONG ZHENG JIAN-SHENG WU BO-XI

Department of Physics, Xiamen University, Xiamen, 361005

(Received 12 September 1990; revised manuscript received 25 December 1990)

ABSTRACT

Using a Koster-Slater one band-one-side approximation, the relationship between the pressure behavior of nitrogen bound excitons and the band structure is investigated in GaP and $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$. An analytical expression is found to be a good approximation for the pressure coefficient of the deep impurity state. The pressure coefficients of N and NN_i bound exciton states are calculated in GaP and $\text{GaAs}_{0.17}\text{P}_{0.83}$. A tentative new assignment which agrees with experiments in both ordering of levels and pressure coefficients is given for nitrogen pair configurations.

PACC: 7135; 6250; 7855; 7155