

# Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As:Si 中 DX 中心的双极化子 机制及统计分析\*

李维峰<sup>1)</sup> 梁迎新<sup>2)</sup> 金 勇<sup>2)</sup> 魏建华<sup>1)†</sup>

1) (中国人民大学物理系, 北京 100872)

2) (法国国家科学研究中心光子学与纳米结构实验室, 马库锡 91460)

(2009 年 10 月 12 日收到; 2010 年 4 月 15 日收到修改稿)

基于极化子和双极化子的物理图像, 采用无拟合参数的巨正则统计方法计算了 Si 掺杂的 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 的导带载流子浓度, 计算得到的理论结果从高温到低温都与实验结果定量一致. 计算证实了 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As:Si 中的 DX 中心的基态 DX<sup>-</sup> 是电子-晶格相互作用产生的负电双极化子. 处于热平衡状态时, 施主 Si 在 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 中除了电离状态, 处于不同晶格构型的单、双极化子态共存, 低温时双极化子态被冻结; 光照下发生持续光电导时, 双极化子态变成单极化子态同时向导带释放一个电子, 此过程伴随着进一步的晶格弛豫. 理论与实验的对照说明单电子局域的 DX<sup>0</sup> 态在热平衡时并不能稳定存在, 这和提出的双极化子机制是完全一致的.

**关键词:** DX 中心, 双极化子, 冻结

**PACC:** 7155, 7138

## 1. 引 言

在 III-V 族三元化合物中, 由于 IV 族元素 (如 Si, Ge 等) 和 VI 族元素 (Se, Te 等) 作为替代性杂质的掺入会使化合物的性质发生明显变化, 人们对此进行了大量的理论研究和实验研究<sup>[1-5]</sup>. 由于对调制掺杂场效应管等物理器件的性能影响比较大, Si 掺杂的 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 合金中的 DX 中心一直是理论研究和实验研究关注的重点之一. 文献[6, 7]指出, 低温下 (大约 120 K 以下) DX 中心存在显著的持续光电导效应, 存在比较大的斯托克斯位移, 光电离能大约为 0.6—1.2 eV 而热电离能只有约 0.1 eV, 同时 DX 中心的热激发和热俘获电子的能量不同 (激发能约为 0.3 eV 而俘获能约为 0.2 eV), 而且 DX 中心在低温下存在非常小的热俘获截面 (小于 10<sup>-30</sup> cm<sup>2</sup>), 这也是持续光电导现象产生的原因. 为解释上述实验现象, Lang 等<sup>[6,7]</sup> 首先指出: 缺陷的光电离能和热电离能之间大的斯托克斯移动和很强的晶格弛豫相联系; 稳态下施主和一个未知的缺陷构成复合

体, 即所谓的 DX 中心. 后来, Chadi 等<sup>[8,9]</sup> 通过自洽赝势总能量计算表明 DX 中心是一个高局域化的带负电的缺陷中心, 并伴随着很大的晶格畸变. 每一施主产生两种与合金的成分无关的电子态: 一种是和正常替代构型相关的、弱局域的浅能级, 另一种为由大的晶格畸变产生的深局域能级, 即 DX 态. 热电离能和光电离能分别对应于浅能级和深能级的电离过程, 这可以定性解释实验观测到的斯托克斯位移. 低温下持续光电导和很小的热俘获截面则可用以下图像来定性解释: 当温度低于某个临界值时, 深能级被冻结. 电子在光照下跃迁到浅能级, 浅能级到深能级转变存在较大的排斥势垒进而形成持续光电导<sup>[10,11]</sup>.

当研究者试图利用理论计算定量解释实验现象的时候却遇到了一些问题. Li 等<sup>[12]</sup> 通过计算发现, 对 Si 掺杂的 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, 若仅考虑深能级, 由文献[8, 9]提出的负 U 中心特性统计分析得到的电子密度和霍尔实验测量结果不一致; 若同时考虑浅施主和深施主时, 理论和实验的差异会得到改进. 但是 Li 等<sup>[12]</sup> 并没有给出改进后的具体结果. 后来,

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10604037) 资助的课题.

† 通讯联系人 E-mail: wjh@ruc.edu.cn

Ouaja 等<sup>[13]</sup>提出了两种统计方法,第一种统计方法假设导带电子全部来自于 DX 中心,用此种统计方法计算得到的结果和实验测量的结果差别较大,第二种统计方法假设除了存在 DX 中心以外还存在浅施主和受主,并且将这些中心的浓度作为拟合参数进行处理,得到了与实验测量较一致的结果. Ouaja 等<sup>[13]</sup>的工作存在两个问题,一是 DX 中心浓度在整个温度考察范围内(77—300 K)作为拟合参数给出,二是 DX 中心浓度一旦给定,在整个温度范围内不变,很难进行低温下 DX 中心的浓度冻结处理.

针对上述实验与理论不一致的问题,我们基于极化子和双极化子的物理思想,利用统计力学巨正则系综的配分函数进行统计分析,通过和已有的  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$  霍尔自由载流子浓度的实验结果进行比较,最终确定施主 Si 在 III-V 族化合物  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  中可能存在的施主状态. 同时根据实验得到的电子浓度与温度的关系以及持续光电导实验<sup>[14—17]</sup>,确定深能级在 120 K 左右会发生冻结,这和文献<sup>[9]</sup>中的热俘获势垒相一致.

## 2. 理论模型

在 Chadi 等<sup>[8,9]</sup>的模型中,非简并掺杂的情况下,由于晶格畸变出现的 DX 中心可以用下列反应方程式来描述:



其中  $d^0$  代表正常状态的中性施主. 在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  中方程式(1a)反应只需要大约 7 meV. 反应方程式(1b)表明一个中性施主俘获一个电子同时释放更大的能量形成  $\text{DX}^-$ . (1)式还能说明在电中性条件下,如果没有其他施主提供电子,施主 Si 最多只有一半转变成  $\text{DX}^-$ ;若存在其他施主,则电离的 Si 施主  $d^+$  可以吸收其他施主上的电子转变成  $\text{DX}^-$ ,直至  $d^+$  全部转变成  $\text{DX}^-$ .

反应方程式(1)并没有给出清晰可靠的物理图像,特别是 DX 中心的物理机制. 我们认为  $\text{DX}^-$  是 DX 中心的基态,其物理机制是由于电子-晶格相互作用使得局域的晶格畸变束缚了两个电子从而形成双极化子<sup>[18—20]</sup>,  $d^0$  则可以被看成是弱局域的单极化子. 根据这一物理思想,将 Si 在 III-V 族化合物中的三种存在情形示于图 1. 情形 I 表示施主未电离,电子被束缚在施主能级上,对应为  $d^0$  单极化子. 很多文献中所称的  $\text{DX}^0$  虽然也对应此组态,我们将通过计算证明  $\text{DX}^0$  在实际体系中并不能稳定存在. 情形 II 表示施主电离,电子从施主能级跃迁到导带成为自由电子,对应为  $d^+$ . 有些文献中也出现对应于此组态的  $\text{DX}^+$ ,但是根据双极化子图像  $\text{DX}^+$  不可能在施主掺杂时出现. 这一点已有可靠的实验证据,比如在 Dobaczewski 等<sup>[21]</sup>的实验中发现了两步光电离现象,说明电子不会从  $\text{DX}^-$  态成对电离,需要经过一个中间态(该中间态应为  $d^0$  状态而非文献<sup>[21]</sup>认为的  $\text{DX}^0$  状态),从而直接否定了  $\text{DX}^+$  存在

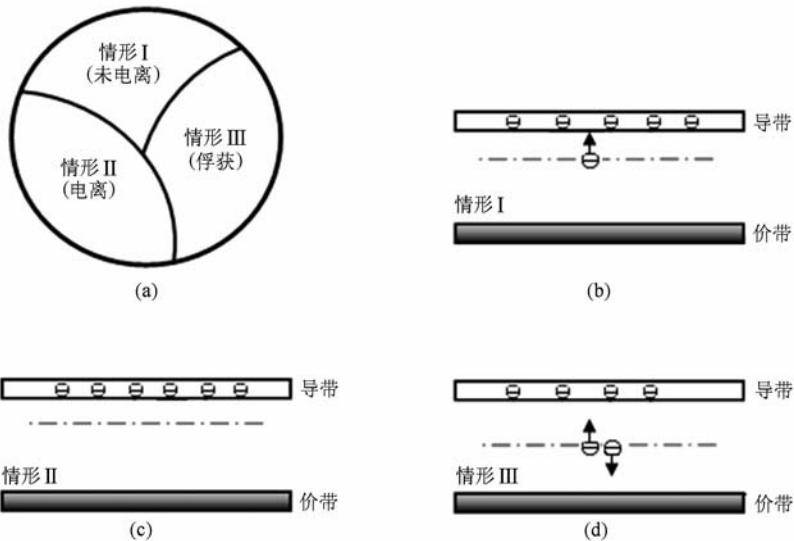


图 1 Si 施主在 III-V 族化合物半导体中的存在情形 虚线为施主能级,箭头为电子自旋方向。(a)三种不同的情形,(b)单极化子能带示意图,(c)电离状态能带示意图,(d)双极化子能带示意图

的可能. 情形 III 表示施主再俘获电子, 中性施主俘获一个电子变成  $\text{DX}^-$ . 关于  $\text{DX}$  中心的完整物理图像如下:  $\text{DX}^-$  态是晶格畸变束缚两个电子的状态, 即负电双极化子; 而  $\text{DX}^0$  是一个不太可能存在的中间态, 因为它会在很短的时间内 (皮秒量级) 弛豫为单极化子态  $\text{d}^0$ .

下面将通过计算结果与实验结果的比较进一步论证  $\text{DX}$  中心的双极化子机制. 考虑施主 Si 具有  $\text{d}^0$ ,  $\text{d}^+$ ,  $\text{DX}^0$ ,  $\text{DX}^-$  四种可能的存在状态, 其中  $\text{d}^0$  和  $\text{d}^+$  为正常替代式的浅能级施主,  $\text{DX}^0$  和  $\text{DX}^-$  为  $\text{DX}$  态. 且认为 Si 形成受主的可能性很小, 因此在计算中忽略, 下面的计算结果也证实了这一点. 由此得到所掺杂的施主 Si 的浓度分配关系为

$$\begin{aligned} N_{\text{Si}} &= N_{\text{SD}} + N_{\text{DX}} \\ &= N_{\text{d}^0} + N_{\text{d}^+} + N_{\text{DX}^0} + N_{\text{DX}^-}, \end{aligned} \quad (2)$$

其中  $N_{\text{Si}}$  是总的掺杂浓度,  $N_{\text{SD}}$  为浅施主能级的浓度,  $N_{\text{DX}}$  为深施主的浓度.

根据文献[13]中提出的公式, 可以得到体系的配分函数为

$$\begin{aligned} Z &= \sum_i g_i \exp\left(\frac{n_i E_{\text{F}} + \varepsilon_i}{k_{\text{B}} T}\right) \\ &= g_{\text{d}^0} \exp\left(\frac{E_{\text{F}} + \varepsilon_{\text{d}^0}}{k_{\text{B}} T}\right) \\ &\quad + 1 + g_{\text{DX}^0} \exp\left(\frac{E_{\text{F}} + \varepsilon_{\text{DX}^0}}{k_{\text{B}} T}\right) \\ &\quad + g_{\text{DX}^-} \exp\left(\frac{2E_{\text{F}} + \varepsilon_{\text{DX}^-}}{k_{\text{B}} T}\right), \end{aligned} \quad (3)$$

其中  $g_i$  为能级  $E_i$  的简并因子, 对应于没有被电子占据的态, 其值为 1, 被一个电子占据时, 其值为 2, 被两个电子占据时, 其值为 1;  $n_i$  为能级  $E_i$  上的电子数;  $E_{\text{F}}$  为费米能级;  $\varepsilon_i$  为能级  $E_i$  上电子的电离能 (即  $\varepsilon_i = E_{\text{C}} - E_i$ ),  $E_{\text{C}}$  为导带底的能量, 此处已将其作为能量参考值并令其为零;  $k_{\text{B}}$  为玻尔兹曼常数;  $T$  为热力学温度. (3) 式等号右边的四项与 (2) 式等号右边的四项一一对应. 下面分为两种情况计算导带自由电子浓度.

### 2.1. 温度高于 120 K, 不考虑 $\text{DX}^-$ 的冻结

考虑施主四种存在状态, 由电中性条件得

$$n + N_{\text{DX}^-} = N_{\text{d}^+}. \quad (4)$$

此处  $n$  为导带自由电子浓度, 在非简并情况下并假设导带底能量为零时, 有

$$n = N_{\text{C}} \exp\left(\frac{E_{\text{F}}}{k_{\text{B}} T}\right), \quad (5)$$

其中  $N_{\text{C}}$  为导带等效态密度. 由于电子分布在三个导带最小值  $\Gamma$ ,  $L$  和  $X$  处, 它们具有不同的有效质量, 分别记为  $m_{\Gamma}^*$ ,  $m_L^*$  和  $m_X^*$ , 对应的能量分别为  $E_{\Gamma}$ ,  $E_L$  和  $E_X$ , 因此导带等效态密度可以表示为如下形式<sup>[14]</sup>:

$$\begin{aligned} N_{\text{C}} &= 2 \left(\frac{m_{\Gamma}^* k_{\text{B}} T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \left[ 1 + \left(\frac{m_X^*}{m_{\Gamma}^*}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_{\Gamma} - E_X}{k_{\text{B}} T}\right) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{m_L^*}{m_{\Gamma}^*}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_{\Gamma} - E_L}{k_{\text{B}} T}\right) \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

由方程(2)–(5)可得到不考虑  $\text{DX}^-$  冻结时的导带自由电子浓度所满足的方程

$$n^3 + \left(\frac{\alpha N_{\text{C}}}{\xi} + \frac{\alpha N_{\text{C}}}{\beta} + N_{\text{Si}}\right)n^2 + \alpha N_{\text{C}}^2 n - \alpha N_{\text{C}}^2 N_{\text{Si}} = 0, \quad (7a)$$

其中

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{g_{\text{DX}^-}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\text{DX}^-}}{k_{\text{B}} T}\right), \\ \beta &= \frac{1}{g_{\text{DX}^0}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\text{DX}^0}}{k_{\text{B}} T}\right), \\ \xi &= \frac{1}{g_{\text{d}^0}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\text{d}^0}}{k_{\text{B}} T}\right). \end{aligned}$$

当忽略  $\text{DX}^0$  时, 方程变为

$$n^3 + \left(\frac{\alpha N_{\text{C}}}{\xi} + N_{\text{Si}}\right)n^2 + \alpha N_{\text{C}}^2 n - \alpha N_{\text{C}}^2 N_{\text{Si}} = 0. \quad (7b)$$

### 2.2. 温度低于 120 K, 考虑 $\text{DX}^-$ 的冻结

理论和实验<sup>[8, 9, 10, 14]</sup>都已经证明, 在温度低于约 120 K 时  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$  能够发生明显的持续光电导现象, 测量得到的深能级电子的俘获截面非常小 (小于  $10^{-30} \text{ cm}^2$ ), 这意味着深能级在此温度以下被冻结. 在此, 考虑  $\text{DX}$  态的基态  $\text{DX}^-$  被冻结. 采用的冻结温度  $T_{\text{f}}$  为 120 K, 即认为温度低于  $T_{\text{f}}$  时  $\text{DX}^-$  的浓度保持为  $T = T_{\text{f}}$  时  $\text{DX}^-$  的浓度. 首先要利用方程(7)分别计算出两种不同情况下  $T = T_{\text{f}}$  时的  $\text{DX}^-$  的浓度, 并将其作为已知量应用到  $T < T_{\text{f}}$  的情况.

对于四种可能的施主状态, 应该满足

$$\begin{aligned} N_{\text{Si}} - N_{\text{DX}^-} &= N_{\text{d}^0} + N_{\text{d}^+} + N_{\text{DX}^0}, \\ n + N_{\text{DX}^-} &= N_{\text{d}^+}. \end{aligned} \quad (8)$$

值得注意的是, 此处的  $N_{\text{DX}^-}$  已经是一个确定的值, 无须通过配分函数得出. 利用上述方法我们可以得到在考虑所有可能施主状态的情况时, 导带电子浓度的方程为

$$n^2 + \left( N_{\text{DX}^-} + \frac{\beta \xi N_c}{\xi + \beta} \right) n - \frac{\beta \xi N_c}{\xi + \beta} (N_{\text{Si}} - 2N_{\text{DX}^-}) = 0. \quad (9a)$$

在不考虑  $\text{DX}^0$  的情况下, 方程变为

$$n^2 + (N_{\text{DX}^-} + \xi N_c) n - \xi N_c (N_{\text{Si}} - 2N_{\text{DX}^-}) = 0. \quad (9b)$$

### 3. 结果及讨论

与前人的工作不同, 在以上的方程计算中并没有引入任何拟合参数. 对所需要的数据, 如施主的掺杂量及各施主态对应的能级都由实验给出. 实际材料中, 浅能级 (d 态) 和深能级 (DX 态) 分别以不同的形式共存. 为此, 我们的理论计算对照了以下两种可能情况: 考虑四种状态和不考虑  $\text{DX}^0$  状态. 下面通过把理论结果与多组实验做定量对比, 看何种情况与实验符合或者符合得更好, 从而进一步验证和阐述我们的物理思想.

首先对比文献 [13] 中测量得到的由分子束外延 (MBE) 方法生长的样品  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}:\text{Si}$  的实验数据, 其中 Si 的掺杂浓度  $N_{\text{Si}} = 8 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ , 该文献中给出的深能级电离能为 80 meV, 浅能级电离能为 6 meV. 将这些数据代入 (7) 和 (9) 式中, 计算得出两种可能情况下随温度变化的导带载流子浓度并和实验值进行了对比, 结果如图 2 所示. 由图 2 可见, 理论计算结果与实验不仅定性一致, 而且在定量上也符合很好.

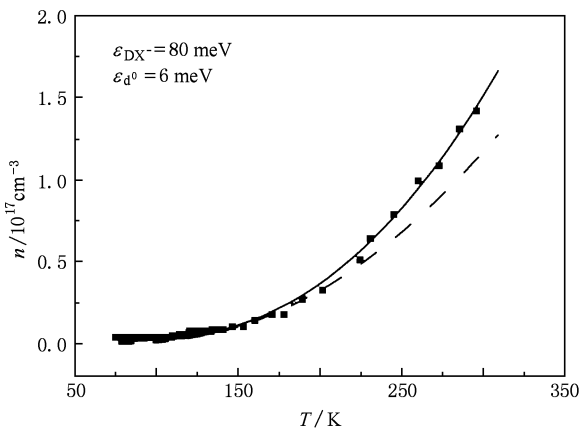


图 2 当  $N_{\text{Si}} = 8 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$  时,  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}:\text{Si}$  中电子浓度  $n$  随温度  $T$  的变化关系. 数据点为实验值, 实线为不包含  $\text{DX}^0$  的情况, 虚线为包含  $\text{DX}^0$  的情况

上述计算虽然得到了和实验较一致的结果, 但

是并没有直观地给出到深能级的冻结情况. 关于冻结的问题, Chand 等 [14] 的实验结果给出了很好的参考, 进一步依此进行计算. 样品为 MBE 方法生长的  $\text{Al}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{As}:\text{Si}$ , Si 的掺杂浓度  $N_{\text{Si}} = 2.5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ . 通过实验测量的  $\log n - 1/T$  曲线斜率可以得到相应施主能级的位置是深能级为 84 meV, 浅能级为 13 meV, 分别适当调整为 102 和 6 meV, 代入 (7) 和 (9) 式计算得到如图 3 所示的结果. 图 3(a) 为普通坐标下导带电子浓度和温度之间的关系. 由于从低温 (77 K) 到室温 (300 K) 导带中的电子浓度变化范围比较大, 采用如图 3(b) 所示的半对数坐标可以更清楚地显示低温下的细小变化, 我们可以清楚地看到, 不包含  $\text{DX}^0$  的计算结果定性上和定量上都与实验结果符合很好.

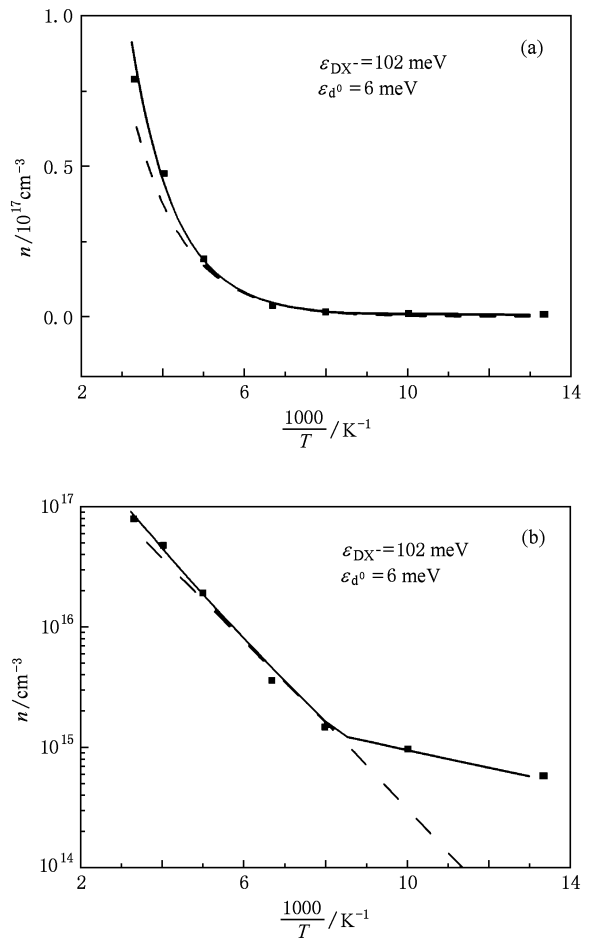


图 3  $\text{Al}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{As}:\text{Si}$  中电子浓度  $n$  随温度  $T$  的变化关系. 数据点为实验值, 实线为不包含  $\text{DX}^0$  的情况, 虚线为包含  $\text{DX}^0$  的情况. (a) 一般坐标, (b) 半对数坐标

在以上两种情况中施主掺杂浓度都不高, 为进一步验证我们的理论, 下面考虑一个掺杂浓度相对

较高的样品<sup>[15]</sup>.  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}:\text{Si}$ , Si 的掺杂浓度  $N_{\text{Si}} = 3.75 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . 随着掺杂浓度的提高, 由于杂质能级的展宽效应, 深、浅能级的深度都会减小. 虽然在文献[15]中没有给出具体的深、浅能级数值, 但我们可以根据文献[14]中的公式  $E_{\text{DX}^-} \cong 707x - 146 \text{ meV}$  对其进行估计, 其中  $x$  为 Al 的含量. 由此得到深能级的电离能为 72 meV, 浅能级的电离能为 0 meV, 即此时浅施主能级与导带底重合. 理论计算与实验结果的比较如图 4 所示, 可以看出理论和实验符合较好. 此外, 图 4 中还给出了在光照下的结

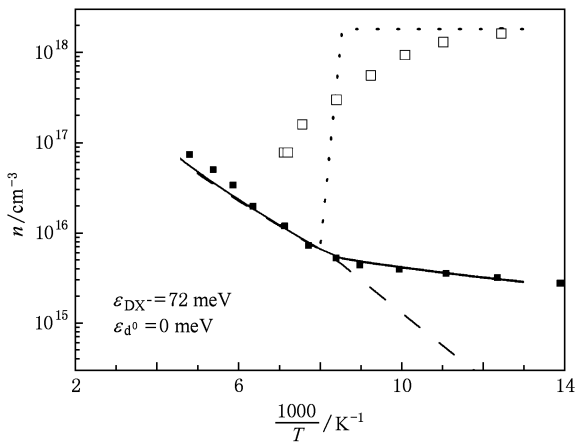


图 4 当  $N_{\text{Si}} = 3.75 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  时,  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}:\text{Si}$  中电子浓度  $n$  随温度  $T$  的变化关系. 实心方块为样品处于黑暗中的实验值, 空心方块为样品在光照下的实验值, 点线为冻结的  $\text{DX}^-$  浓度, 实线为不包含  $\text{DX}^0$  的情况, 短划线为包含  $\text{DX}^0$  的情况

果, 其值与低温下  $\text{DX}^-$  的浓度相等, 实验上观测到光照时电子浓度随温度下降而逐渐上升说明浅能级与深能级之间存在一个势垒<sup>[22]</sup>. 从图 4 可以看出, 本文的理论计算结果相当于实验上的饱和电子浓度.

由以上所述可知: 在 Si 掺杂的  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  体系中双极化子和单极化子状态共存;  $\text{DX}^0$  是一个不稳定的状态, 在热平衡时基本不存在; 发生持续光电导现象时, 饱和电子浓度和冻结的  $\text{DX}^-$  浓度相等说明了光照情况下发生了双极化子态向单极化子态的转变.

## 4. 结 论

本文采用双极化子图像来描述  $\text{DX}$  态, 指出  $\text{DX}^-$  是由于电子-声子相互作用引起晶格畸变产生的负电双极化子, 是  $\text{DX}$  态的基态;  $\text{DX}^0$  只是其中的一个中间态, 在热平衡时非常不稳定. 通过将理论计算结果与实验结果的对比, 进一步验证了双极化子机制的正确性. 在计算过程中, 我们考虑了低温时双极化子态  $\text{DX}^-$  的冻结, 并指出了发生光电导现象时一个双极化子变成一个单极化子并伴随晶格弛豫. 本文的这种算法除了可以得出各状态的施主浓度随温度的变化关系之外, 还可以利用已经得到的导带自由电子浓度求出费米能级随温度的变化关系.

- [1] Lifshitz N, Jayaraman A, Logan R A, Card H C 1980 *Phys. Rev. B* **21** 670
- [2] Yang J J, Moudy L A, Simpson W I 1982 *Appl. Phys. Lett.* **40** 244
- [3] Schubert E F, Ploog K 1984 *Phys. Rev. B* **30** 7021
- [4] Legros R, Mooney P M, Wright S L 1987 *Phys. Rev. B* **35** 7505
- [5] Etienne B, Mieg V T 1988 *Appl. Phys. Lett.* **52** 1237
- [6] Lang D V, Logan R A 1977 *Phys. Rev. Lett.* **39** 635
- [7] Lang D V, Logan R A 1979 *Phys. Rev. B* **19** 1015
- [8] Chadi D J, Chang K J 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 873
- [9] Chadi D J, Chang K J 1989 *Phys. Rev. B* **39** 10063
- [10] Li M F, Yu P Y, Weber E R, Hansen W 1987 *Phys. Rev. B* **36** 4531
- [11] Li M F, Yu P Y, Weber E R, Hansen W 1987 *Appl. Phys. Lett.* **51** 349
- [12] Li M F, Jia Y B, Yu P Y, Zhou J, Gao J L 1989 *Phys. Rev. B* **40** 1430
- [13] Ouaja F R, Mejri H, Triki A, Selmi A, Rebey A 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 2583
- [14] Chand N, Henderson T, Klem J, Masselink W T, Fischer R, Chang Y C, Morkoc H 1984 *Phys. Rev. B* **30** 4481
- [15] Baraldi A, Ghezzi C, Parisini A, Bosacchi A, Franchi S 1991 *Phys. Rev. B* **44** 8713
- [16] Mostefaoul R, Chevallier J, Jalil A, Pesant J C, Tu C W, Kopf R F 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 207
- [17] Schubert E F, Ploog K 1984 *Phys. Rev. B* **30** 7021
- [18] Wei J H, Xie S J, Mei L M 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2264 (in Chinese) [魏建华、解士杰、梅良模 2000 物理学报 **49** 2264]
- [19] Liu D S, Zhao J Q, Wei J H, Xie S J, Mei L M 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 1327 (in Chinese) [刘德胜、赵俊卿、魏建华、解士杰、梅良模 1999 物理学报 **48** 1327]
- [20] Shi J, Gao K, Lei J, Xie S J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 459 (in Chinese) [史晶、高琨、雷杰、解士杰 2009 物理学报 **58** 459]

[21] Dobaczewski L, Kaczor P 1991 *Phys. Rev. B* **44** 8621

[肖细凤、康俊勇 2002 物理学报 **51** 138]

[22] Xiao X F, Kang J Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 138 (in Chinese)

## Bipolaron mechanism of DX center in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}^*$

Li Wei-Feng<sup>1)</sup> Liang Ying-Xin<sup>2)</sup> Jin Yong<sup>2)</sup> Wei Jian-Hua<sup>1)†</sup>

1) (Department of Physics, Renmin University, Beijing 100872, China)

2) (Laboratory for Photonics and Nanostructures, National Center of Science Research, Marcoussis 91460, France)

(Received 12 October 2009; revised manuscript received 15 April 2010)

### Abstract

The free-carrier concentration in Si-doped  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  has been calculated by grand-canonical-ensemble statistics without any fitting parameters. Our results are quantitatively in agreement with various experimental data in the temperature range 77—300 K, which indicates that the physical picture of the ground state of DX center ( $\text{DX}^-$ ) is of an electronic bipolaron due to the interaction between excess electrons and lattice. When exposed to light, one bipolaron can turn into a polaron, meantime release one electron to the conduction band accompanied by lattice relaxations. Our calculations also prove that  $\text{DX}^0$  is unstable at thermal equilibrium, which further confirms our bipolaron mechanism.

**Keywords:** DX center, bipolarons, freezing

**PACC:** 7155, 7138

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10604037).

† Corresponding author. E-mail: wjh@ruc.edu.cn