亮点

无辐射多声子跃迁: 经典理论的现代计算

夏建白^{*}

中国科学院半导体研究所, 北京 100083

^{*}联系人, E-mail: xiajb@semi.ac.cn

收稿日期: 2020-03-24; 接受日期: 2020-04-16; 网络出版日期: 2020-04-30

摘要 黄昆先生在20世纪40–50年代发展了多声子跃迁的系统理论, 在半导体材料的光学性质和相关的器件研究中得到了广泛的应用. 随着计算能力的提高, 这些经典理论又得到了进一步的发展, 最近的理论研究结合第一性原理计算, 提出无辐射多声子跃迁理论的非谐修正, 计算了半导体深能级缺陷的无辐射衰减, 得到了与实验相符的结果.

关键词 无辐射多声子跃迁, 晶格弛豫, 第一性原理, 非谐修正

PACS: 63.20.Kr, 63.20.Mt, 63.20.Ry, 71.55.Eq

多声子跃迁和无辐射多声子跃迁是黄昆先生于20世纪40年代在英国发展的系统理论^[1], 它研究离子晶体(有强的电子-声子相互作用)中电子从高能级跃迁到低能级的发光过程中, 由于位形坐标不同, 电子同时还发射出多个声子的过程. 从实验光谱来看, 不是一条窄光谱线, 而是一条宽的带, 这是多声子跃迁过程. 另一种过程, 不发射光, 电子从晶格的一种位形弛豫到另一种位形时也会发射出多个声子, 这称为无辐射多声子跃迁过程. 这种跃迁过程与晶体中的缺陷, 如F-心有关系, 因为在缺陷附近, 晶格发生弛豫畸变, 不同弛豫有不同位形, 而不同位形就有它的稳定点. 由于热运动, 电子会在不同位形的稳定点之间运动, 同时吸收或发射多个声子, 但不发光.

这两种过程都涉及多个声子的吸收或发射. 从理论上来说, 不能用微扰理论处理(微扰理论只能处理一

个声子的吸收或发射), 而是一种非线性过程. 当时20世纪40年代还没有计算机, 所有的理论问题都只能用解析方法解决. 黄昆先生提出了一个一维抛物线形状模型, 电子在抛物线模型中的运动就是简谐运动, 因此就代表了一种声子. 用两个原点不在一处的抛物线模型来模拟不同晶格位形下的声子. 电子从一个位形跃迁到另一个位形, 它的跃迁概率就等于不同位形下电子波函数的重迭积分. 尽管模型简单, 但是要计算这个重迭积分还是很难的. 当时的物理学家, 如王竹溪、黄昆、杨振宁等数学基础都是一流的, 熟读数学经典. 黄昆先生就采用了“最陡下降法”漂亮地解决了这个问题, 解析地给出了过程中发射或吸收声子数公式, 现在称为黄-李公式(李是黄昆先生的夫人李爱扶)^[1,2].

近年来, 随着电子计算机计算能力的提升, 第一性

引用格式: 夏建白. 无辐射多声子跃迁: 经典理论的现代计算. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50: 067331

Xia J B. Nonradiative multi-phonon transition: state-of-the-art calculations of the classic theory (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2020, 50: 067331, doi: 10.1360/SSPMA-2020-0087

原理方法得到发展, 并用于无辐射多声子跃迁的研究, 具体的发展和应用包括半导体深能级缺陷的无辐射衰减^[3]、半导体氧化层界面缺陷的电荷俘获^[4]等. 总体而言, 无辐射多声子跃迁的定量计算是比较困难的, 第一性原理方法得到的结果往往与实验有较大的出入. 最近, 研究人员用第一性原理数值方法发展了黄昆先生的无辐射多声子跃迁理论^[5], 证实了黄昆理论中的一些结论, 提出一种非谐修正模型, 并应用到具体的半导体材料, 得出的主要结果有: (1) 将无辐射多声子跃迁理论应用到半导体GaN和SiC, 并与实验的无辐射衰

减率相比较; (2) 利用结合的动力学矩阵方法, 具体计算了声子模、本征频率和声子态密度, 利用GGA和HSE波函数, 计算了电-声子耦合常数; (3) 计算了缺陷跃迁能量, 对GaN:C_N+O_N体系, 得到缺陷跃迁能量高于价带顶0.77 eV, 与实验值0.85 eV相符; (4) 提出无辐射多声子跃迁计算方法的非谐修正, 证明了整个非谐修正能够增加跃迁率2–9的因子, 得到了与实验相近的结果.

总之, 这个工作说明随着计算机的发展, 一些经典理论又重新焕发出青春.

参考文献

- 1 Huang K, Rhys A. Theory of light absorption and non-radiative transitions in *F*-centres. *Proc R Soc Lond A*, 1950, 204: 406–423
- 2 Huang K. Lattice relaxation and theory of multiphonon transitions (in Chinese). *Prog Phys*, 1981, 1: 31–84 [黄昆. 晶格弛豫和多声子跃迁理论. 物理学进展, 1981, 1: 31–84]
- 3 Shi L, Wang L W. *Ab initio* calculations of deep-level carrier nonradiative recombination rates in bulk semiconductors. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 245501
- 4 Liu Y Y, Zheng F, Jiang X, et al. *Ab initio* investigation of charge trapping across the crystalline-Si–amorphous-SiO₂ interface. *Phys Rev Appl*, 2019, 11: 044058
- 5 Xiao Y, Wang Z, Shi L, et al. Anharmonic multi-phonon nonradiative transition: An *ab initio* calculation approach. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2020, 63: 277312

Nonradiative multi-phonon transition: state-of-the-art calculations of the classic theory

XIA JianBai^{*}

Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China

The classic theory of multi-phonon transition was first developed by *K. Huang* in 1940s, which has been widely used since then to study many fundamental properties of semiconductors. Recently, *Huang's* classic theory was revisited and further developed with *ab initio* calculations. The previously ignored anharmonic effects have been considered and the calculated nonradiative decay rates for defects in GaN and SiC agree well with experiments.

nonradiative multi-phonon transition, lattice relaxation, first-principle, anharmonic correction

PACS: 63.20.Kr, 63.20.Mt, 63.20.Ry, 71.55.Eq

doi: 10.1360/SSPMA-2020-0087