

文章编号: 1004-4353(2020)01-0040-03

# GaAs 在高压下的金属相变

于红艳, 吴宝嘉\*

( 延边大学 理学院, 吉林 延吉 133002 )

**摘要:** 为探究 GaAs 的晶体结构随压力的变化,在高压下对 GaAs 进行了原位电阻率测量,结果显示 GaAs 在 12.0 GPa 左右发生 zb 相到 Cmcm 相的相变. 为探究 Cmcm 相的状态类别,在高压下对 GaAs 的变温电阻率进行了测量,结果显示 GaAs 的 Cmcm 相为金属相. 在 6.0 GPa 和 20.0 GPa 下分别对 GaAs 进行了第一性原理计算,结果显示 Cmcm 相的能带可穿过费米能级,该结果进一步证实了 GaAs 能够发生金属相变.

**关键词:** 高压; GaAs; 结构相变; 金属化

**中图分类号:** O521<sup>+</sup>.2

**文献标志码:** A

## Metal phase transition of GaAs under high pressure

YU Hongyan, WU Baojia\*

( College of Science, Yanbian University, Yanji 133002, China )

**Abstract:** In order to explore the change of GaAs crystal structure with pressures, the in situ electrical resistivity of GaAs measurements were carried out at high pressures. The results show that the phase transition of GaAs from zb phase to Cmcm phase occurs at about 12.0 GPa. To explore the status of Cmcm phase category, the variable temperature resistivity of GaAs was measured at high pressure. The results show GaAs Cmcm is metallic phase. The first principle calculation of GaAs was carried out at 6.0 GPa and 20.0 GPa, respectively. The results show that the energy band of Cmcm phase can pass through Fermi energy level, further confirming that GaAs can occur metal phase transition.

**Keywords:** high pressure; GaAs; structural phase transition; metallization

## 0 引言

GaAs 作为一种重要的半导体材料,因具有较高的光电转换效率和电子迁移率,被广泛地应用于电子工业领域<sup>[1]</sup>,尤其是太阳能电池<sup>[2]</sup>和高速数字电路<sup>[3]</sup>领域. 研究<sup>[4]</sup>表明,高压能诱导材料的晶格结构和电子结构发生突变,进而改变材料的电学性质. 近些年来,学者们在理论和实验上对 GaAs 进行了大量的高压研究. 例如在实验方面,学者们运用电阻<sup>[5]</sup>、同步辐射 X 射线衍射<sup>[6]</sup>、拉曼散射<sup>[7]</sup>、X 射线吸收<sup>[8]</sup>、电子显微镜<sup>[8]</sup>、热波

(Seebeck 效应)<sup>[8]</sup>等对 GaAs 结构进行了压力诱导实验,其结果均显示在 11.2~17.3 GPa 压力范围内 GaAs 会发生从闪锌矿(zb)到 Cmcm 结构的转变;在理论方面, H. Arabi 等<sup>[9]</sup>通过对 GaAs 进行第一性原理计算发现 Cmcm 相的能带能够穿过费米能级,即在理论上表明了 Cmcm 相为金属相. 但目前为止利用实验进一步验证 GaAs 的 Cmcm 相为金属相的研究鲜有报道,为此本文采用高压原位变温电阻率测量方法研究 GaAs 的电阻率随压力和温度变化的关系,以此验证 Cmcm 相是否为金属相.

收稿日期: 2020-01-26

\* 通信作者: 吴宝嘉(1973—),男,教授,研究方向为高压物理.

## 1 实验

GaAs 粉末样品购于 Alfa Aesar 公司,纯度为 99.999%. 样品初始结构为闪锌矿结构,空间群为 F-43m. 压力的产生装置为直径 300  $\mu\text{m}$  的金刚石对顶砧(DAC),起保护金刚石作用的垫片为 T301 不锈钢片,压力校准器为红宝石<sup>[10]</sup>. 为了避免引入额外电阻,本文未引入传压介质. 在考虑金刚石变形的前提下,用电子千分尺测定高压下的样品厚度. 测量探针使用在金刚石砧面上集成的 Mo 薄膜电极,采用范德堡法测量样品的变温电阻率. 范德堡法计算电阻率的公式<sup>[11]</sup>为

$$\exp(-\pi R_1 d / \rho) + \exp(-\pi R_2 d / \rho) = 1.$$

其中  $R_1 = \frac{V_1}{I_1}$ ,  $R_2 = \frac{V_2}{I_2}$ ,  $d$  是样品厚度,  $\rho$  是电阻率. 在变温实验中,用液氮提供低温环境,温度由被固定在金刚石砧侧面上的一个标准 K 型热电偶测量, GaAs 样品的直流电流由 Keithley 2400 提供,电压由 Keithley 2700 提供.

运用基于密度泛函理论的赝势平面波方法对 GaAs 进行第一性原理计算<sup>[12]</sup>,并通过 GGA-PBZ 模型描述交换关联函数. zb 结构和 Cmcm 结构倒易空间的  $k$  点网格分别为  $6 \times 6 \times 6$  和  $7 \times 7 \times 7$ . Ga 和 As 的最外层电子排布分别为  $3d^{10} 4s^2 4p^1$  和  $4s^2 4p^3$ . 计算中选用的平面波截止能量为 528 eV,计算精度为 Ultra-fine.

## 2 结果与讨论

### 2.1 GaAs 结构随压力的相变

运用高压原位电阻率测量方法测量高压下 GaAs 样品的电阻率,结果如图 1 所示. 由图 1 可知,当压力范围在常压到 4.0 GPa 时, GaAs 的电阻率超过了仪器的测量上限,即此时无法测量电阻率. 当压力在 4.0~12.0 GPa 和 13.0~25.0 GPa 范围内时, GaAs 的电阻率随着压力的增加逐渐减小,且减小趋势较缓. 然而压力在从 12.0 GPa 变化到 13.0 GPa 的过程中, GaAs 的电阻率急剧下降(3 个数量级). 结合文献[13]的研究结果(GaAs 可以发生金属化相变),可推断此时 GaAs 发生了相变,即从 zb 相转变为 Cmcm 相.

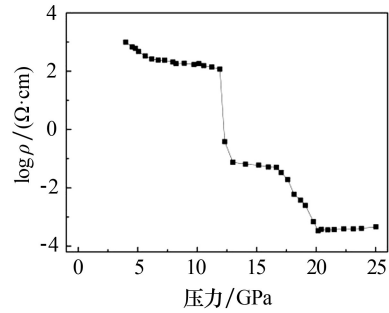


图 1 常温下 GaAs 的电阻率随压力的变化

### 2.2 zb 相和 Cmcm 相的电阻率

为了验证 Cmcm 相的结构是否为金属相,对 GaAs 进行高压变温电阻率测量. 测量选取 10 个压力点,其中 5 个为 zb 相,5 个为 Cmcm 相. 不同压力下 GaAs 的电阻率随温度的变化关系以 Arrhenius 形式给出,结果如图 2 所示. 由图 2 可以看出:当压力低于 12.0 GPa 时, zb 相的电阻率随温度的升高而减小,此变化趋势表明 zb 相的 GaAs 是半导体态;当压力高于 12.0 GPa 时, GaAs 的电阻率随温度升高而增大,且电阻率的数值变化较大(6 个数量级),此变化趋势表明 Cmcm 相的 GaAs 是金属态. 由上述实验结果可知,从 zb 相到 Cmcm 相的变化过程中的确发生了金属化现象.

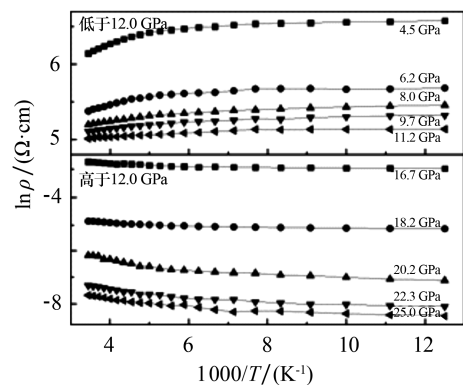


图 2 不同压力下 GaAs 的电阻率随温度的变化

### 2.3 zb 相和 Cmcm 相的能带

为了研究压力诱导下 GaAs 能带结构的变化情况,运用第一性原理对 GaAs 的能带结构进行计算,结果如图 3 所示. 计算选取的压力点为 6.0 GPa(zb 相)和 20.0 GPa(Cmcm 相). 由图 3(a)可以看出,压力为 6.0 GPa 时导带的底部和价带的

顶部位于同一 G 点, zb 结构的带隙约为 0.82 eV, 即 zb 相的 GaAs 为直接带隙半导体. 从图 3(b) 可以看出, 压力为 20.0 GPa 时 GaAs 的能带会跨越费米能级, 且导带和价带交叠, 这表明 Cmcm 相为金属相.

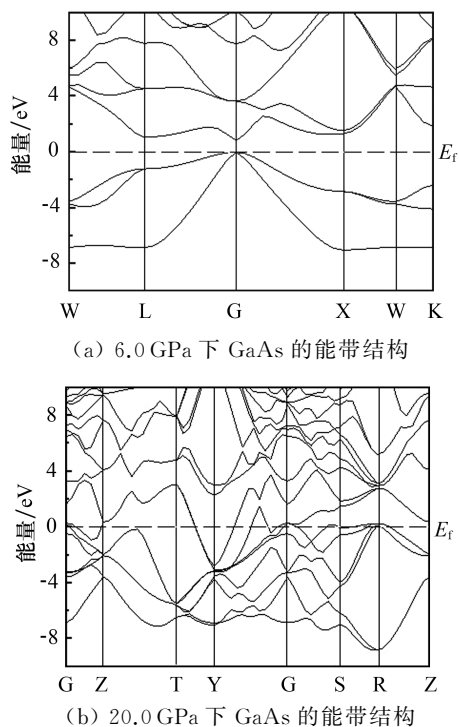


图 3 不同压力下 GaAs 的能带结构

### 3 结论

本文实验研究表明, GaAs 在 12.0 GPa 压力下会发生从 zb 相到 Cmcm 相的结构相变, Cmcm 相 GaAs 的电阻率随温度升高而增加, 且其能带会跨越费米能级. 本文的实验结果证实了 Cmcm 相是金属相的理论预测, 并且对拓宽 GaAs 的应用范围具有很好的参考价值. 另外, 通过本文实验还发现, 高压变温电阻率测量法可作为一种有效地确认固体材料是否为半导体态或金属态的测量方法.

### 参考文献:

- [1] 江滢. 砷化镓: 应用广泛的半导体材料[J]. 中国电子商情: 基础电子, 2004(s1): 52-53.
- [2] 汪舟. III-V 族纳米线的制备及其在太阳能电池中的应用[D]. 北京: 北京化工大学, 2018.
- [3] 张兴超. GaAs HBT 超高速折叠内插 ADC 中的信号反射分析[D]. 西安: 西安电子科技大学, 2015.
- [4] 杨国强. 高压对有机化合物晶体结构和电子结构的作用[J]. 物理, 2006, 35(7): 585-590.
- [5] MINOMURA S, DRICKAMER H G. Pressure induced phase transitions in silicon, germanium and some III-V compounds[J]. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1962, 23(5): 451-456.
- [6] MCMAHON M I, NELMES R J. Observation of a wurtzite form of gallium arsenide[J]. Physical Review Letters, 2005, 95(21): 215505.
- [7] BESSON J M, ITIÉ J P, POLIAN A, et al. High-pressure phase transition and phase diagram of gallium arsenide[J]. Physical Review B, 1991, 44(9): 4214-4234.
- [8] OVSYANNIKOV S V, SHCHENNIKOV V V. Observation of a new high-pressure semimetal phase of GaAs from pressure dependence of the thermopower [J]. Journal of Physics Condensed Matter, 2006, 18(42): L551-L557.
- [9] ARABI H, POURGHAZI A, AHMADIAN F, et al. First-principles study of structural and electronic properties of different phases of GaAs[J]. Physica B, 2006, 373(1): 16-22.
- [10] 谢远亮. 红宝石荧光 R 线的高温高压研究[D]. 长春: 吉林大学, 2004.
- [11] HEMENGER P M. Measurement of high resistivity semiconductors using the Van Der Pauw Method[J]. Review of Scientific Instruments, 1973, 44(6): 698-700.
- [12] SEGALL M D, LINDAN P J D, PROBERT M J, et al. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, 14(11): 2717-2744.
- [13] ARABI H, POURGHAZI A, AHMADIAN F, et al. First-principles study of structural and electronic properties of different phases of GaAs[J]. Physica B: Condensed Matter, 2006, 373(1): 16-22.