

УДК 546.289.18

ЭФФЕКТЫ ЛОКАЛИЗАЦИИ И ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ GaPN И GaAsN

© 2005 И.И. Парфенова

Санкт-Петербургский Государственный Горный Институт
(Технический Университет)

Поступила в редакцию 11.10.05

Рассмотрены различные конфигурации атомов азота в твердых растворах GaPN и GaAsN в приближении сильной связи: одиночные атомы, NN пары, тройки и т.д.. Показано, что кластерные состояния, произошедшие из состояний атомов N, не зависят от содержания азота. Их энергетическое положение определяется количеством атомов азота в кластере и способностью кластера снять напряжения. Это приводит к энергетическому порядку следования NN пар, отличному от общепринятого. Сильное взаимодействие L_{1c} -, X_{1c} - и Γ_{1c} -минимумов, обусловленное азотом, понижает дно зоны проводимости СВМ, что приводит к формированию СВМ как делокализованными зонными состояниями, так и локализованными кластерными состояниями. Это позволяет объяснить ряд экспериментально наблюдаемых аномалий в нитридных III-V растворах.

ВВЕДЕНИЕ

Полупроводники A_3B_5-N , в которых атомы V группы частично замещены азотом, стали объектом усиленного внимания из-за их необычных свойств. Например, добавка только 1% азота в GaAs приводит к изменению ширины запрещенной зоны на 0.2 эВ, открывая огромный потенциал для применения этих материалов в длинноволновых оптоэлектронных устройствах. Управление свойствами таких материалов невозможно без понимания причин, обуславливающих эти свойства.

Случайное распределение атомов примеси в узлах кристалла матрицы создает статистическое распределение изолированных атомов, пар, троек и т.д. атомов. Это распределение кластеров разных размеров отражает флуктуации, внутренне присущие неупорядоченным системам. В обычных изоэлектронных полупроводниковых твердых растворах (Ge-Si, GaAs-GaP, GaP-InP) такие кластеры примесей не создают связанных электронных состояний в запрещенной зоне: кластерные состояния появляются как слабые резонансы внутри валентной зоны или зоны проводимости, где они гибриди-

зируются с состояниями матрицы. Возмущенные состояния матрицы остаются делокализованными и сохраняют приближительную трансляционную симметрию. При увеличении концентрации примеси наблюдается плавное небольшое изменение ширины запрещенной зоны (оптический «прогиб»), эффективных масс, деформационных потенциалов и энергий межзонных переходов. Такие твердые растворы теоретически описываются моделями, игнорирующими случайные флуктуации и соответствующие кластерные состояния (например, приближение виртуального кристалла, приближение когерентного потенциала [1], модель антикроссинга [2], кр модели твердого раствора [3]).

В отличие от этих растворов существуют растворы, в которых даже одиночная примесь создает связанные состояния внутри или вблизи запрещенной зоны [4]. В таких системах (ZnS:Te, GaP:N, GaAs:N, GaN:As) кластерные состояния появляются внутри запрещенной зоны, эволюционируя из узких энергетических состояний одиночных атомов, пар, троек и т.д. атомов, тогда как возмущенные состояния матрицы появляются

в виде острых резонансов внутри зон. Такая система теряет блоховскую симметрию. Сильное возмущение приводит к появлению новых энергетических уровней, а не к модификации собственных, поэтому свойства такого раствора не проявляют постепенного и плавного изменения с составом. Так, в GaAs:N и GaP:N при малых концентрациях азота наблюдаются узкие линии люминесценции [4-8], непривычно большие эффективные массы на краях зон [9], и малые деформационные потенциалы [6, 10, 11]. При увеличении концентрации азота, энергии этих узких линий остаются неизменными, а затем линии мистически исчезают одна за другой [8, 12, 13] по мере достижения максимума в эффективной массе [9]. При дальнейшем увеличении состава наблюдается широкая полоса, которая быстро сдвигается к меньшим энергиям (прогиб ширины запрещенной зоны ~ 20 эВ в GaAsN) [14], аномально низкий температурный коэффициент запрещенной зоны [7]. Такие растворы уже не могут быть описаны моделями, пренебрегающими флуктуациями [1] или межзонным взаимодействием [2, 3]. В настоящей работе сделана попытка учесть микроструктуру кристалла вблизи примесного атома и оценить вклад структурных искажений в электронную структуру этих материалов.

МЕТОД РАСЧЕТА

Рассматривался кластер ЗахЗахЗа, где а – постоянная решетки сфалерита, погруженный в матрицу (GaAs или GaP). Исследуемая конфигурация атомов азота помещалась в центральную ячейку, в остальной части кластера азот распределялся случайным образом по анионной подрешетке в соответствии с составом твердого раствора. С целью минимизации энергии напряжений для каждой конфигурации проводилась релаксация атомных позиций в соответствии с моделью валентного силового поля. В качестве констант растяжения и изгиба в модели валентного силового поля использовались данные [15]. После определения равновесных позиций атомов рассчитывалась энергетическая структура кластера в приближении сильной связи. Использовался sp^3s^* базис с учетом

взаимодействия первых и вторых соседей. Входными данными служили энергии атомных термов из таблиц Херман-Скилман [16] и известные зонные структуры арсенида и фосфида галлия. Матричные элементы определялись с помощью параметров Харрисона [16]. В расчете учитывались неортогональность состояний на различных атомах и изменение потенциала атома за счет дополнительной электронной плотности на нем самом. Для учета перераспределения зарядовой плотности на соседних атомах предполагалась электронейтральность сверхячейки. Это позволило провести само согласованное решение задачи.

Примесь замещения нарушает трансляционную симметрию матрицы, но в случае изовалентности примеси сохраняется симметрия узла, т.е. нет смещений Яна-Теллера. Примесь в узле решетки сфалерита с симметрией T_d снимает трансляционное вырождение различных долин в зонах. Четырехкратно вырожденные L_{1c} долины разделяются на $a_1(L_{1c})+t_2(L_{1c})$ состояния, шестикратно вырожденные долины X_{1c} (при начале координат на анионном узле) распадаются на $a_1(X_{1c})+e(X_{1c})$ состояния, X_{3c} долина дает $t_2(X_{3c})$ представление, тогда как однократно вырожденная Γ_{1c} -долина сохраняет свою симметрию $a_1(\Gamma_{1c})$. Более высоколежащие долины матрицы также испытывают возмущение, порождая другие a_1 состояния.

Все состояния с одинаковой симметрией взаимодействуют между собой под действием потенциала возмущения, который складывается из двух составляющих: разницы в экранированных потенциалах атома матрицы и примеси (так называемый химический вклад) и возмущения, вызванного смещениями атомов (так называемый структурный вклад). Суммарное возмущение смешивает отдельно все a_1 состояния (т.е. смешивает $a_1(\Gamma_{1c})+a_1(X_{1c})+a_1(L_{1c})$ и т.д. состояния), отдельно смешивает все t_2 состояния и т.д.. Гибридизация состояний определяется величиной возмущения с одной стороны и собственными состояниями Γ_{1c} , X_{1c} , L_{1c} в кристалле матрицы с другой стороны. Отметим, что в GaAs порядок уровней в зоне проводимости суть $\Gamma_{1c} - L_{1c} - X_{1c}$, тогда как для GaP этот

порядок иной $X_{1c} - L_{1c} - \Gamma_{1c}$. Для оценки вклада различных зон полученные собственные функции Ψ_i проецировались на электронные состояния $\Phi_{v,k}$ матрицы (GaAs или GaP):

$$P_{i,v,k} = \left| \langle \Psi_i | \Phi_{v,k} \rangle \right|^2 \quad (8)$$

где v и k это зонный индекс и волновой вектор в первой зоне Бриллюэна матрицы, соответственно.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Исследовались различные конфигурации атомов азота: одиночные атомы азота, тетраэдры $Ga+nN+(4-n)As(P)$ ($n=1..4$), центрированные на Ga и содержащие n атомов азота, пары атомов азота NN_i (i показывает, сколько координационных сфер разделяет атомы в паре, $i=1,2,3,..$) и цепочки из атомов азота вдоль направлений $[110]$. Поскольку энергии p - и s -электронов

в атоме азота значительно ниже, чем у других атомов рассматриваемой системы, то присутствие атома азота приводит к наличию связывающего уровня глубоко в валентной зоне и антисвязывающего уровня в окрестностях запрещенной зоны.

На рис. 1 представлены наиболее важные энергетические уровни, рассчитанные для атомов азота в GaAs и GaP. Кластерные уровни оказываются фиксированными по энергии, как для фосфида галлия, так и для арсенида галлия, т.е. их положение не зависит от материала. Поскольку зонная структура этих материалов разная, то у GaAs часть этих уровней попадает в зону проводимости, а у GaP - в запрещенную зону. Так, уровень одиночного атома азота $a_1(N)$ в GaAs находится выше дна зоны проводимости, а в GaP оказывается ниже. Кластерные состояния сильно локализованы вблизи атомов азота и практически не

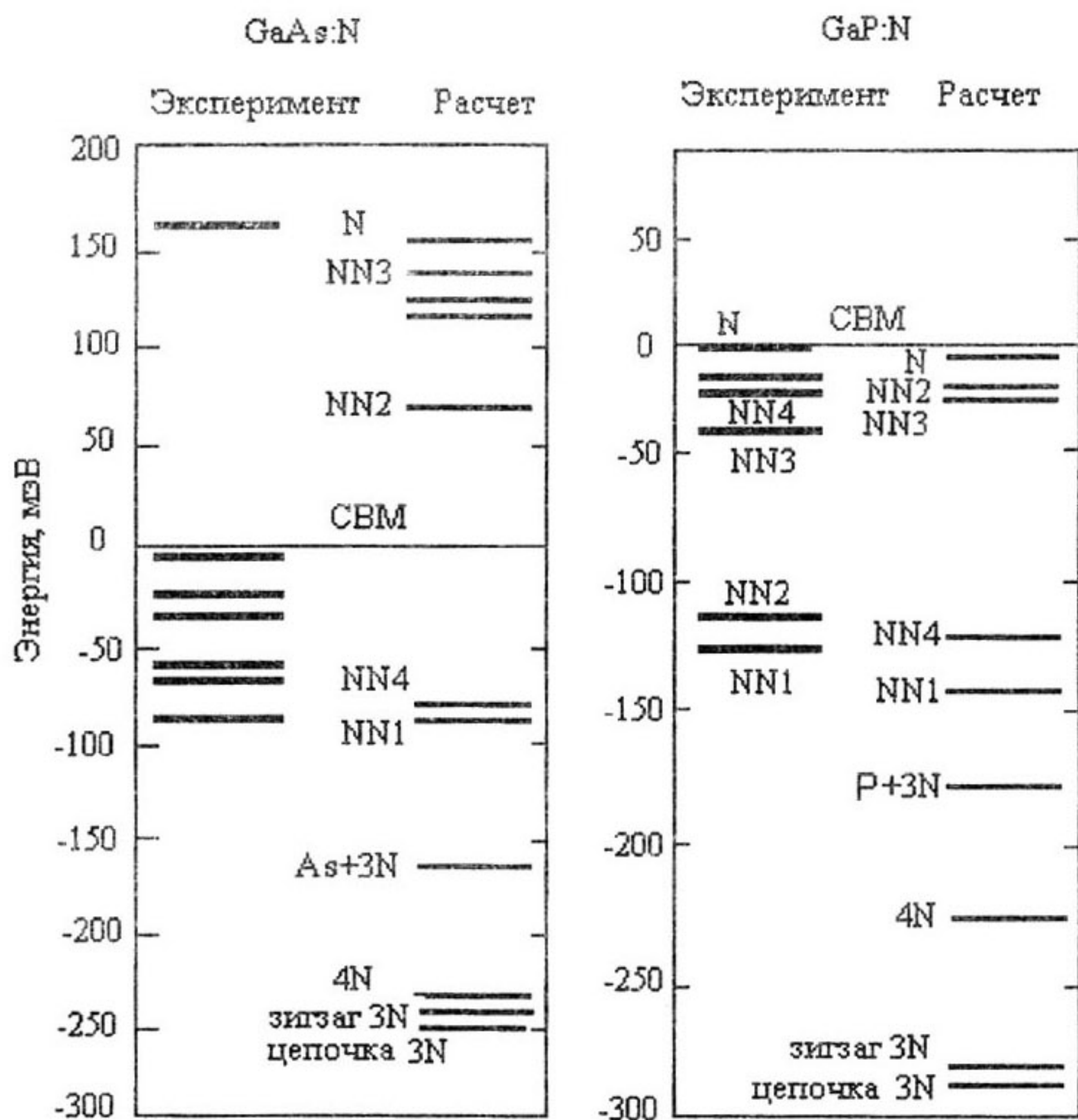


Рис. 1. Сравнение экспериментальных и расчетных энергий кластерных состояний азота в GaAs:N и GaP:N. Эксперимент для GaAs - [10], для GaP - [22].

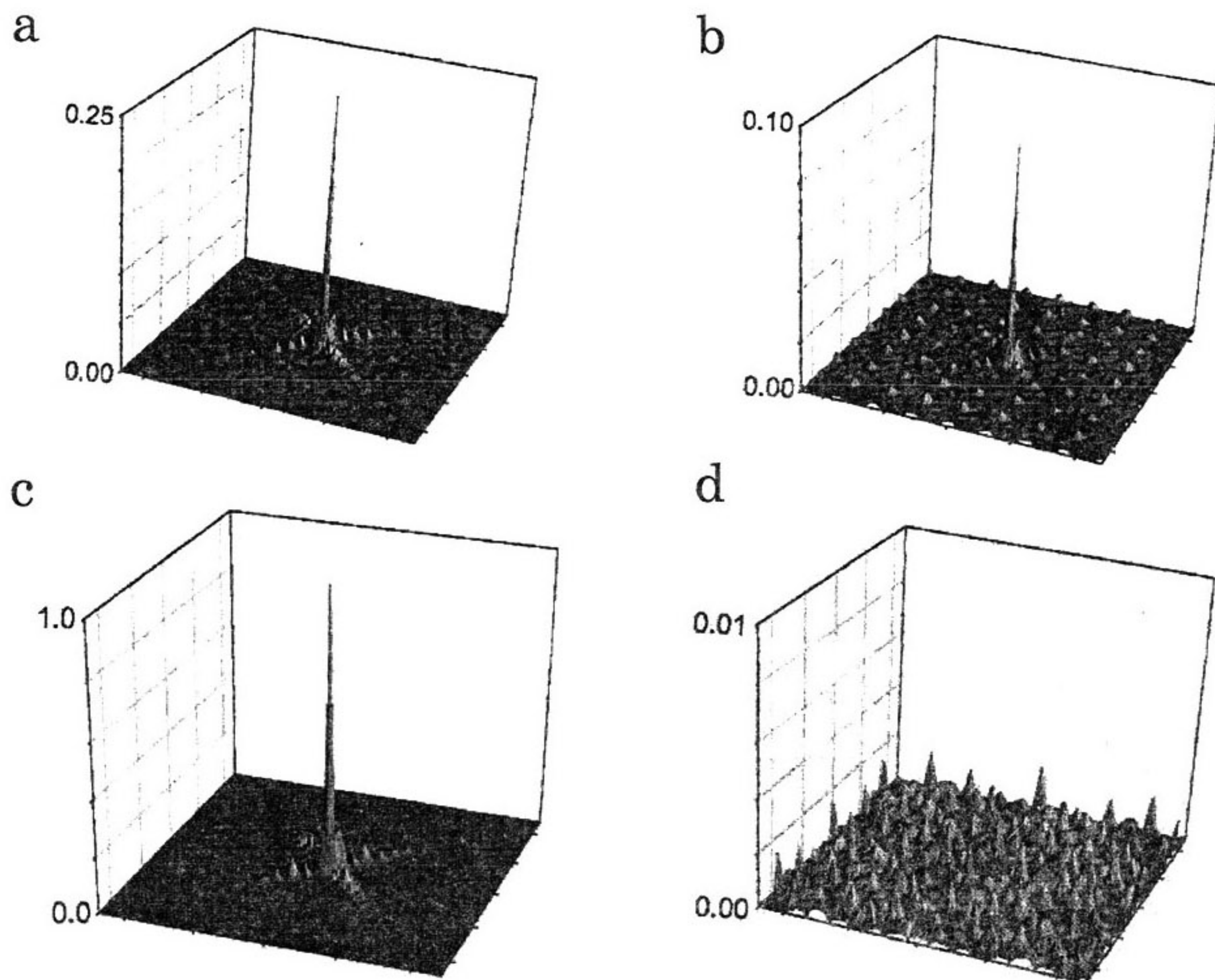


Рис. 2. Плотность электронных состояний одиночного атома азота в кластере GaAs:N. Для сравнения тут же приведены состояния, образованные Γ_{1c} , L_{1c} и X_{1c} минимумов - указан процентный вклад основных минимумов зоны проводимости $\Gamma_{1c}/L_{1c}/X_{1c}$ в эти состояния.

зависят от концентрации азота. Электронная плотность состояний и процентный вклад различных долин в для случая одиночного атома азота в GaAs представлены на рис. 2. Как видно, наибольший вклад дает взаимодействие Γ_{1c} - и L_{1c} -минимумов зоны проводимости, приводящее к появлению конечной электронной плотности на достаточно больших расстояниях от атома азота.

Такая большая протяженность волновой функции электрона приводит к тому, что второй атом азота, попавший в пределы волновой функции первого атома, вступает с ним во взаимодействие – образуются так называемые NN пары. Все NN пары содержат по два атома азота, но на разном расстоянии друг от друга. Если первый атом азота расположен в узле (0,0,0), то NN_1 паре соответствует пози-

ция второго атома азота (1/2,1/2,0), NN_2 паре - (1,0,0), NN_3 паре - (1,1/2,1/2) и NN_4 паре - (1,1,0). Электронная плотность оказывается локализованной в пределах центральной ячейки сфалерита. В случае тетраэдров $Ga+nN+(4-n)As(P)$ локализация волновой функции оказывается еще больше.

Три и более атомов азота могут образовывать цепочки атомов азота вдоль направлений [110]. При этом электронная плотность оказывается локализованной в плоскости [110]. Это приводит к сильному взаимодействию L- и Γ -минимумов. Плоскости [110] пересекаются и цепочки могут переходить из одной плоскости в другую. Крайним случаем изгибов цепочки является зигзаг. В случае зигзагов плотность локализуется вдоль направления [100] в слое толщиной $a/2$.

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНОЙ РЕЛАКСАЦИИ

Длины связей в твердых растворах полупроводников стремятся сохранить свои значения [17]. Необходимость аккомодации кристаллической решетки к этим длинам связей приводит к возникновению сильных напряжений в кристаллической решетке. Способность снять возникшие напряжения за счет структурной релаксации определяет окончательное энергетическое положение кластерных состояний. Поскольку кластерные состояния вблизи запрещенной зоны по происхождению являются антисвязывающими, то при релаксации они смещаются вверх по энергиям. Таким образом, вторым важнейшим фактором, определяющим энергетическое положение кластерных уровней, является степень структурной релаксации кристаллической решетки, которая неодинакова для разных конфигураций атомов азота.

В случае одиночного атома азота помимо сокращения длины связи N-Ga также происходит искажение прилегающего тетраэдра Ga+As+3Ga (рис. 3). Верхний атом Ga смещается к атому азота на величину u . Тогда атом As также стремится сместиться вверх. Смещение As на u' изменяет угол θ для нижних связей и длины нижних связей. Это так называемая графитовая релаксация. Отметим, что атомы свободно релаксируют во все стороны, охватывая 5-6 координационных сфер, обуславливая сильное междолинное взаимодействие.

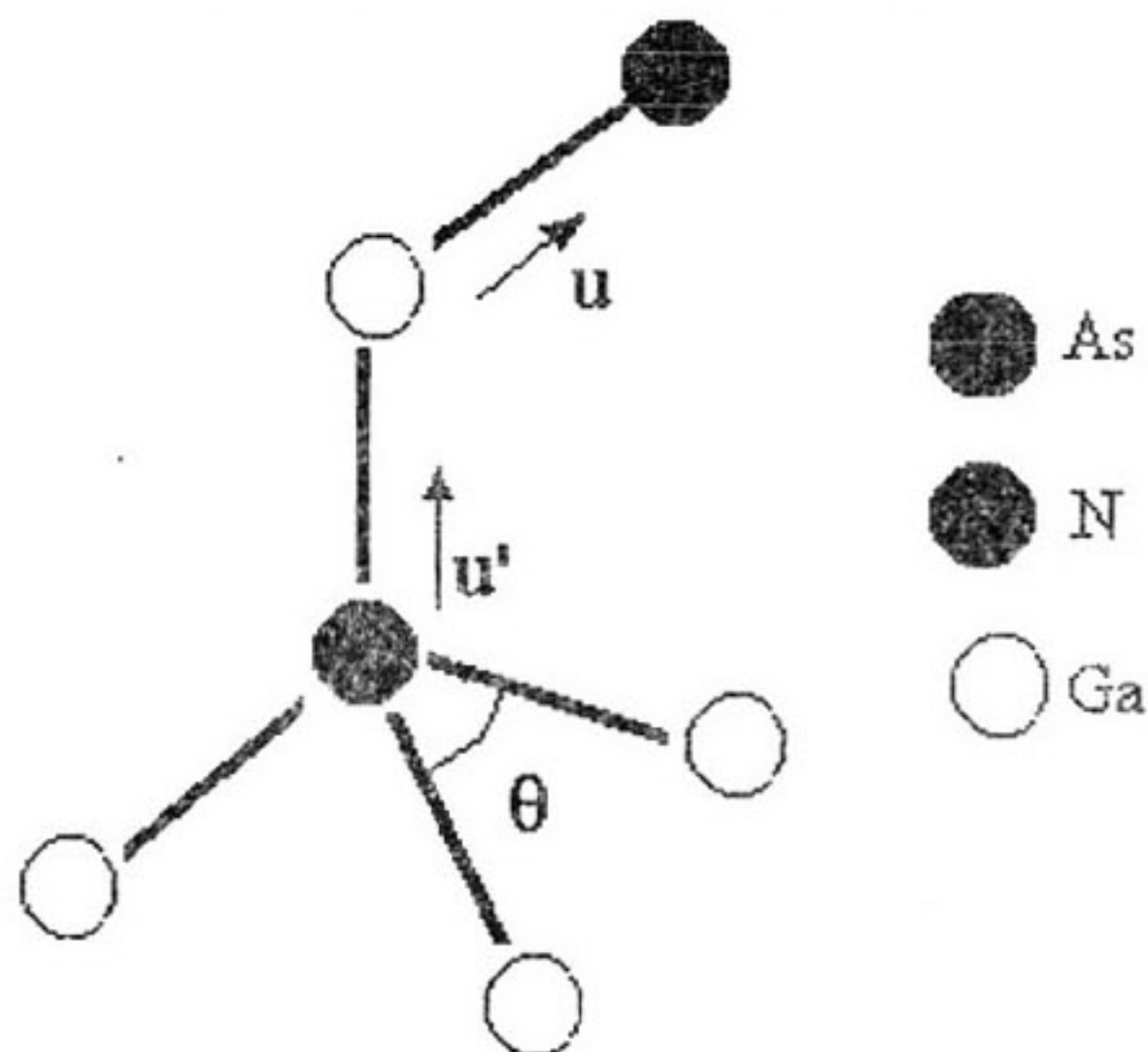


Рис. 3. Схема локальной графитовой деформации вокруг одиночного атома азота в матрице.

Таблица 1

Энергия деформации E_{def} , обусловленная NN парой, в расчете на один атом в кластере.

Пара	Координаты атомов азота	E_{def} , мэВ/атом
NN_1	$(0,0,0)a/2$ $(1,1,0)a/2$	7,13
NN_2	$(0,0,0)a/2$ $(2,0,0)a/2$	6,20
NN_3	$(0,0,0)a/2$ $(2,1,1)a/2$	6,40
NN_4	$(0,0,0)a/2$ $(2,2,0)a/2$	6,65

В случае NN пар энергия напряжений для различных конфигураций атомов азота оказывается разной и приведена в табл.1. В NN_1 паре оба атома азота имеют общий атом Ga (атом O на рис. 4). Силы, действующие на этот атом Ga со стороны атомов азота (A и C), лежат в одной плоскости (AOC) и уравнивают друг друга, приводя лишь к смещению атома Ga вверх. При этом увеличивается длина нижних связей и изменяется угол между ними.

Различие в релаксации остальных NN пар обусловлено в основном возможностью релаксации атома As (атом O на рис. 4), являющегося вторым соседом обоих атомов азота.

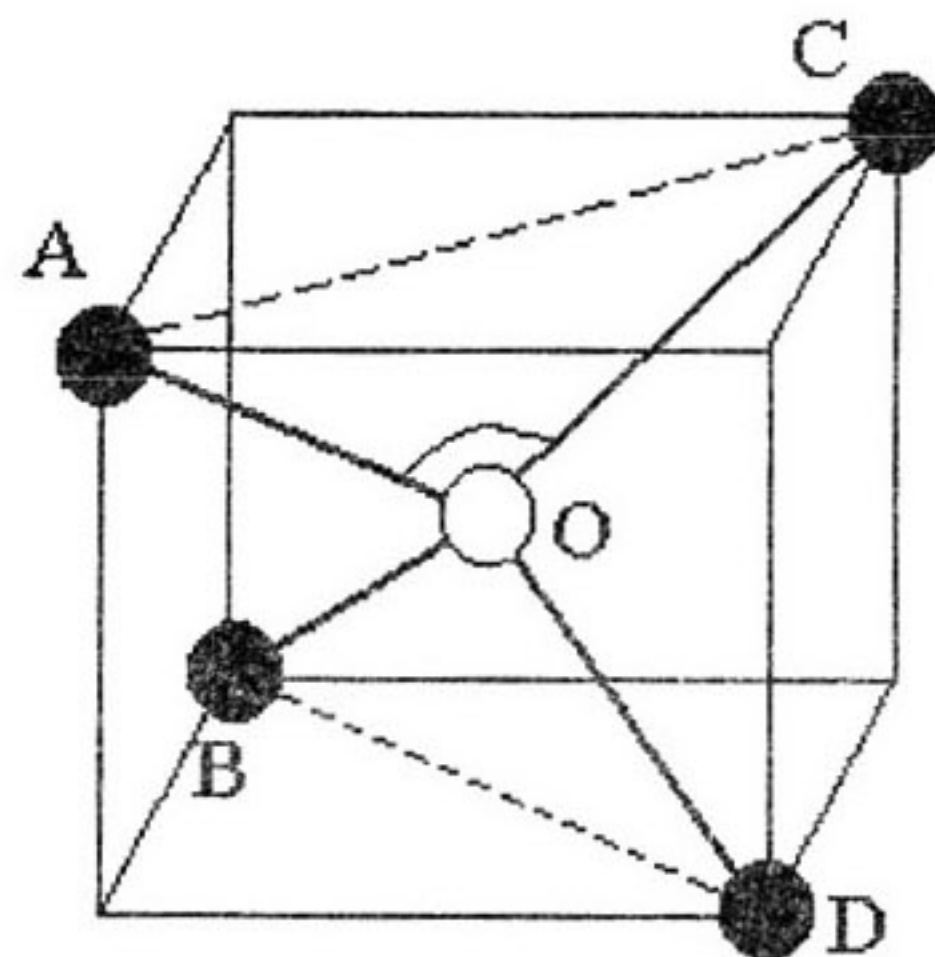


Рис. 4. Центральный тетраэдр в NN парах, центрированный на атоме As и испытывающий различные виды деформаций при различных конфигурациях атомов азота в парах.

та. В NN_2 паре имеет место деформация кручения, которая стремится расположить все связи в тетраэдре в одной плоскости, то есть плоскость АОС стремится развернуться и стать параллельной плоскости ВOD. При этом происходит разориентация гибридных sp^3 - орбиталей без изменения состава самих орбиталей. В NN_3 парах напряжения частично компенсируются за счет наклона плоскости угла AOD относительно угла ВOD. В NN_4 парах имеет место другой вид сдвиговой деформации, приводящий к тому, что компоненты смещений, не параллельные осям связей, стремятся увеличить угол между связями АО и ОС, и, наоборот, уменьшить угол между связями ВО и OD. Такие смещения приводят к сдвигу атома As в направлении [001] и вызывают изменение доли $|p_z\rangle$ орбиталей в связях АО и ОС и увеличение этой доли в связях ВО и OD. Для сохранения ортогональности волновых функций происходит дегибридизация орбиталей.

Энергия деформаций оказывается больше для NN_1 пары, затем идет NN_4 пара, далее NN_3 и NN_2 пара. Соответственно, уровень NN_2 пары оказывается выше уровней энергии других NN пар, а уровень NN_1 пары оказывается самым глубоким. Отметим, что порядок следования энергетических уровней отличен от общепринятой трактовки экспериментальных данных. Экспериментальное исследование симметрии этих линий [18] показало, что общепринятый порядок ошибочен и соответствует простой нумерации в порядке появления спектральных линий.

Деформация в тетраэдрах $Ga+nN+(4-n)As(P)$ в первую очередь связана с поведением центрального атома Ga. Атомы галлия на периферии легко релаксируют, подобно случаю одиночного атома азота. Поэтому отличия в поведении тетраэдров связаны, во-первых, с количеством Ga-N связей, а во-вторых, с искажениями внутреннего тетраэдра. Тетраэдр с $n=2$ соответствует NN_1 паре. В тетраэдре с $n=3$ атом Ga сильно смещается к трем атомам азота, испытывая графитовую релаксацию, приводящую к удлинению связи Ga-As. В случае тетраэдра с $n=4$ центральный атом Ga вообще не имеет возможности релаксации.

Атомы азота могут также выстраиваться в цепочки вдоль направлений [110] и [100], причем последняя цепочка является более мягкой. Эти цепочки пересекаются под прямыми углами. Энергия цепочки вдоль [110] будет ниже, чем у NN-пар, т.к. в цепочке атомы Ga практически лишены возможности релаксации. Состояния цепочек также расположены ниже состояний тетраэдров с таким же количеством атомов азота, т.к. в цепочке присутствуют большие одноосные напряжения. Эти напряжения можно частично снять за счет изгибов цепочки, поэтому состояния зигзагов лежат выше состояний цепочек с соответствующим количеством атомов азота.

Отметим, что добавление каждого атома азота понижает уровень энергии кластера, делая его более глубоким, соответственно энергия состояний тетраэдра с $n=4$ будет ниже, чем у тетраэдра с $n=1$, тоже относится и к цепочкам из атомов азота. При одинаковом количестве атомов азота в кластере их взаимное расположение оказывается решающим для глубины залегания уровня энергии.

ОБСУЖДЕНИЕ

Сильное Г-L-X межзонное взаимодействие собственных функций матрицы имеет несколько последствий. Во-первых, взаимодействие вносит большую долю Γ_{1c} -состояний в состояния непрямого края зоны проводимости GaP, превращая его практически в прямой край, что соответствует экспериментам [13]. Во-вторых, имеет место значительный вклад L_{1c} -минимума в возмущенные собственные состояния матрицы, что проявляется в резонансном рамановском рассеянии в GaAsN [19]. Расщепление между a_1 -состоянием Г-минимума зоны проводимости и a_1 -состоянием, сформированным L- и Г-минимумами составляет около 0.5 эВ при $x=1\%$, что хорошо соответствует данным баллистической электронной спектроскопии [20]. В-третьих, высокоэнергетичный край возмущенных собственных состояний матрицы проявляет $t_2(L_{1c})$ состояние при $-E_c+0.43$ эВ, которое слабо изменяется с составом, так как мало примесных состояний с этой симметрией.

При увеличении концентрации азота дно зоны проводимости СВМ сдвигается вниз по энергиям, благодаря антикроссингу состояний матрицы, возмущенных структурной релаксацией, а кластерные уровни остаются фиксированными. При этом не происходит образования примесной зоны, так как электронная плотность сильно локализована вблизи атомов азота и кластерные уровни не взаимодействуют между собой. Состав, при котором СВМ переходит через последнее кластерное состояние, определяет критический состав x_c .

В пределе разбавленного раствора, $x \ll x_c$, край зоны проводимости сформирован делокализованными собственными состояниями и быстро сдвигается вглубь запрещенной зоны с увеличением содержания азота. В то же время энергии кластерных состояний в запрещенной зоне нечувствительны к глобальному содержанию азота.

При увеличении содержания азота понижающиеся возмущенные собственные состояния матрицы проходят кластерные состояния в запрещенной зоне одно за другим. Самыми глубокими являются цепочки и зигзаги из атомов азота Ga-N-Ga-N-, затем тетраэдры с $n=4$ и $n=3$ атомами азота. Критический состав x_c для перехода от локализации к делокализации зависит от ближнего порядка в растворе: в чисто случайном растворе переход происходит при $x_c=0.6\%$ для GaAsN и $x_c=2\%$ для GaPN. Большее значение x_c в GaPN отражает тот факт, что в этом материале кластерные состояния расположены глубже по энергии, т.к. в единой шкале энергий край зоны проводимости GaP находится выше, чем в GaAs. Кроме того, в GaP более слабое междолинное взаимодействие вблизи минимума зоны проводимости по сравнению с GaAs.

Когда все кластерные состояния пройдены, т.е. при $x \approx x_c$, край зоны проводимости формируется одновременно как делокализованными состояниями, так и локализованными состояниями. Низкоэнергетичный край формируется из статистического распределения кластерных состояний с различной степенью локализации, а высокоэнергетичный край формируется делока-

лизованными возмущенными собственными состояниями матрицы. Эта двойственность также приводит к ряду аномальных явлений в нитридных растворах. Во-первых, при составах, близких к переходному, эффективная масса возрастает, так как край зоны состоит из многих локализованных состояний с большой эффективной массой. Во-вторых, экситонная рекомбинация при низких температурах контролируется кластерными состояниями, что приводит к большим временам релаксации и соответствует экспериментальным данным [21]. Также имеют место голубой сдвиг фотолюминесценции с увеличением мощности накачки [21] (из-за заполнения локализованных кластерных состояний), быстрое уменьшение температурного коэффициента ширины запрещенной зоны [7] (из-за термического опустошения кластерных состояний) и Стоксов сдвиг между поглощением (в делокализованные состояния) и излучением (с локализованных состояний).

После того как все кластерные состояния пройдены и находятся достаточно высоко в зоне проводимости, $x_c \ll x$, начинает преобладать поведение обычного твердого раствора, имеющего делокализованный край зоны проводимости. В этой области составов температурная зависимость ширины запрещенной зоны становится постоянной, так как не надо термически опустошать локализованные состояния.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, нитридные растворы A_3B_5N отличаются от других изовалентных A_3B_5 растворов тем, что при низких концентрациях азота существует иерархическое распределение различных кластерных состояний в запрещенной зоне и возмущенных собственных состояний матрицы. Обусловлены эти состояния большими структурными искажениями, вызванными атомами азота, и соответствующим сильным Г-Х-Г взаимодействием в континууме состояний проводимости. При увеличении содержания азота, энергии сильно локализованных кластерных состояний остаются фиксированными, а возмущенные собственные состоя-

ния матрицы сдвигаются вниз по энергиям из-за взаимного отталкивания, переводя по очереди кластерные состояния в зону проводимости. Вблизи критического состава это приводит к формированию края зоны проводимости, с одной стороны, из локализованных состояний, происшедших из кластерных состояний, и, с другой стороны, делокализованных состояний, происшедших из возмущенных собственных состояний матрицы. Такая локализовано-делокализованная двойственность края зоны является причиной экситонной локализации, Стоксова сдвига, голубого сдвига фотолюминесценции с температурой (при низких температурах), и повышенной энергии накачки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A.B. Chen. Semiconductor Alloys. Plenum. N.Y. 1995.
2. W. Shan, W. Walukiewicz, J.W. Ager, III, E.E. Haller, J.F. Geisz, D.J. Friedman, J.M. Olson, S.R. Kurtz. Band anticrossing in GaInNAs alloys // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82. P. 1221.
3. A. Lindsay, E. P. O'Reilly. Theory of enhanced bandgap non-parabolicity in $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ and related alloys // Solid State Commun. 1999. V. 112. P. 443.
4. J. J. Hopfield, D. G. Thomas, R. T. Lynch. Isoelectronic Donors and Acceptors // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 17. P. 312.
5. T. Mattila, S.-H. Wei, A. Zunger. Localization and anticrossing of electron levels in $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ alloys // Phys. Rev. 1999. B 60. P. R11245.
6. B. Gil, M. Baj, J. Camassel, H. Mathieu, C.B. a la Guillaume, N. Mestres, J. Pascual. Hydrostatic pressure dependence of bound excitons in GaP // Phys. Rev. 1984. B 29. P. 3398.
7. H. Yaguchi, G. Biwa, S. Miyoshi, D. Aoki, K. Arimoto, K. Onabe, R. Ito, Y. Shiraki. Temperature dependence of $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ alloys // J. Cryst. Growth. 1998. V. 189/190. P. 496.
8. T. Makimoto, H. Saito, T. Nishida, N. Kobayashi. Excitonic luminescence and absorption in dilute $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ alloys ($x < 0.3\%$) // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 70. P. 2984.
9. Y. Zhang, A. Mascarenhas, H.P. Xin, C.W. Tu. Formation of an impurity band and its quantum confinement in heavily doped GaAs:N // Phys. Rev. 2000. B 61. P. 7479.
10. X. Liu, M.-E. Pistol, L. Samuelson. Excitons bound to nitrogen pairs in GaAs // Phys. Rev. 1990. B 42. P. 7504.
11. W. Shan, W. Walukiewicz, K.M. Yu, J.W. Ager, III, E.E. Haller, J.F. Geisz, D.J. Friedman, J.M. Olson, S.R. Kurtz, C. Nauka. Effect of nitrogen in the electronic band structure of group III-N-V alloys // Phys. Rev. 2000. B 62. P. 4211.
12. P.J. Klar, H. Gruning, W. Heinbrodt, J. Koch, F. Huhnsdorf, W. Stolz, P.M.A. Wicente, J. Carnassel. From N isoelectronic impurities to N-induced bands in the $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ alloys // Appl. Phys. Lett. 2000. V. 76. P. 3439.
13. H. J. Xin, C. W. Tu, Y. Zhang, A. Mascarenhas. Effects of nitrogen on the band structure of $\text{GaN}_x\text{P}_{1-x}$ alloys // Appl. Phys. Lett. 2000. V. 76. P. 1267.
14. S.-H. Wei, A. Zunger. Giant and Composition dependent Optical Bowing Coefficient in GaAsN Alloys // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 76. P. 664.
15. R. M. Martin. Elastic properties of ZnS structure semiconductors // Phys. Rev. 1970. B 1. P. 4005.
16. W. A. Harrison. Elementary electronic structure // World Scientific. Singapore. 1999.
17. J.C. Mikkelsen, J.B. Boyce. Atomic scale structure of random solid solution – extended X-ray absorption fine structure study of $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ // Phys. Rev. Lett. 1982. V. 49. P. 1412.
18. B. Gil, J. Camassel, J.P. Albert, H. Mathieu. Local symmetry of nitrogen pairs in GaP // Phys. Rev. 1986. B 33. P. 2690.
19. H. M. Cheong, Y. Zhang, A. Mascarenhas, J.F. Geisz. Nitrogen induced levels in $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ studied with resonant Raman scattering // Phys. Rev. 2000. B 61. P. 13687.
20. M. Kozhevnikov, V. Narayanamurti, C.V. Reddy, H.P. Xin, C.W. Tu, A. Mascarenhas, Y. Zhang. Evolution of $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ conduction states and giant Au/ $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ Schottky barrier reduction studied by ballistic

electron emission spectroscopy // Phys. Rev. 2000. B 61. P. R7861.

21. *I. Buyanova, M. Izadifard, W.M. Chen, H.P. Xin, C.W. Tu.* Experimental evidence for N-induced strong coupling of host conduction band states in $\text{GaN}_x\text{P}_{1-x}$: Insight

into the dominant mechanism for giant band-gap bowing // Phys. Rev. 2004. B 69. P. 201303(R).

22. *E. Cohen, M.D. Sturge.* Excited states of excitons bound to nitrogen pairs in GaP // Phys. Rev. 1977. B 15. P.1039.