

혼합물반도체에서 단위격자 크기 설정에 따른 비극성 Optical 포논산란에 대한 연구

천대명¹, 김태현¹, 전상국^{1,a}

¹ 인하대학교 전자공학부

Study of the Non-polar Optical Phonon Scattering According to the Size of Unit Cell in an Alloy Semiconductor

Daemyung Chun¹, Tae Hyun Kim¹, and Sang Kook Chun^{1,a}

¹ School of Electronic Engineering, Inha University, Incheon 402-751, Korea

(Received July 29, 2011; Revised September 21, 2011; Accepted September 22, 2011)

Abstract: A linear spring model, where the interactions among atoms are assumed to be isotropic and elastic, is employed for the study of non-polar optical phonon scattering in the valence band of alloy semiconductors. The force equations of n atoms are used in the spring model for the consideration of the random distribution of constituent atoms in an alloy semiconductor. When the number of atoms in a unit cell is assumed to be two based on the experimental result, the optical deformation potential is valid for compound semiconductors as well as alloy semiconductors.

Keywords: Alloy semiconductor, Phonon scattering, Random distribution, Unit cell

1. 서 론

기존의 반도체와 다른 물리적 특성을 가질 수 있는 혼합물반도체는 새로운 소자개발에 이용할 수 있다는 점에서 매우 흥미를 끈다. 밴드 공학 (band engineering)을 통해 원하는 파장의 광소자를 제작할 수 있고 다양한 응력변형을 통해 특정 방향으로의 이동도를 증가시켜 전자소자의 특성을 향상시킬 수 있다. 혼합물반도체를 이용한 소자를 제작하기 위해서는 산란현상에 대한 이해가 선결되어야 한다. 기존에 알려진 산란 현상에 혼합비율에 따라 선형내삽법 (linear interpolation)으로 구해진 입력상수를 적용하여 혼합물반도체의 산란 현상을 이해할 수 있다.

다만 NOP (non-polar optical phonon)에 의한 산란

처럼 원자들의 혼합비율 및 혼합형태에 의존하는 현상은 추가로 고려하여야 한다 [1,2].

단위격자 (unit cell) 내에 있는 원자들의 상대적인 변이 (optical displacement)에 의해 발생하는 NOP 산란은 원자들의 혼합비율과 혼합형태에 의존한다. 혼합비율이 1/2이며 혼합형태가 주기적인 화합물반도체의 경우, Wiley [1]는 NOP 산란을 계량화하는데 필요한 ODP (optical deformation potential) 상수에 원자 질량들의 함수인 Q 를 첨가하였다. Chun과 Wang [2]은 혼합물반도체에서 원자들의 혼합비율까지 고려한 Q 를 제안하였다. Na와 Chun [3]은 앞서 언급된 논문 [1,2]들에서 제안된 Q 를 이론적으로 설명하려고 하였다. 스프링 모델을 이용하여 ODP 상수의 원자질량과 혼합비율에 대한 의존도를 연구하였지만, 단위격자

내의 동일 원자들이 혼합형태에 따라 다른 환경을 가질 수 있다는 사실을 간과하였다. Park와 Chun [4]은 단위격자 내의 동일 원자들도 다른 환경을 가질 수 있다고 보고 단위격자 내의 원자 수를 나열된 원자의 수로 가정하였다. Park와 Chun [4]은 Wiley가 화합물 반도체에 적용한 Q 는 설명하였으나 Chun과 Wang [2]이 혼합물반도체에 적용한 Q 와는 상이한 결과를 보여 주었다.

기존에 알려진 NOP 산란현상을 혼합물반도체에 적용하려면 원자들의 혼합비율 및 혼합형태에 따른 변화를 추가하여야 한다. NOP 산란을 계량화하는데 필요한 ODP 상수에 대한 연구가 중요함에도 지금까지 보고된 이론적인 연구결과는 화합물반도체 및 혼합물반도체에서 제안된 Q 를 모두 설명하지 못하였다. 따라서 이 논문에서는 원자들의 혼합비율 및 혼합형태에 의존하는 ODP 상수를 연구하고자 한다.

2. 실험 방법

2.1 이론

단위격자 내에 있는 원자들의 상대적 변이는 정공과 에너지 및 운동량 교환을 통해 정공의 이동을 감소시킨다. 이와 같이 이동을 감소시키는 현상은 원자들의 변이 형태에 따라 AP (acoustic phonon)과 NOP (non-polar optical phonon)에 의한 산란으로 구별한다. 기존에 이론적으로 잘 알려진 AP 산란은 선형내삽법으로 구한 입력변수들을 이용하여 혼합물반도체의 경우에도 적용할 수 있는 반면, NOP 산란은 원자들의 혼합비율 및 혼합형태를 고려하여야 혼합물반도체에 적용할 수 있다 [3,4].

Si 또는 Ge 경우, 변형포텐셜과 원자의 상대적 변이를 이용하여 전이율 (transition rate)이나 완화시간 (relaxation time)을 계산함으로써 NOP 산란을 이해할 수 있다. 혼합물반도체의 경우, 원자의 상대적 변이가 단위격자 내 원자들의 무게뿐만 아니라 혼합비율 및 혼합형태에 영향을 받는다는 사실을 고려한 해밀토니안은 아래와 같이 쓸 수 있다 [4].

$$H_{ep} = \left(\frac{\bar{M}}{M_{tot}} \right)^{1/2} \left(Q_{NOP} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{d_o}{a_o} \right) \cdot \vec{u} \quad (1)$$

d_o 는 가전자대에서의 변형포텐셜이며 [5], a_o 는 격자상수이며, \vec{u} 는 단위격자 안에 있는 두 원자의 상대적 변이이다. \bar{M} 와 M_{tot} 는 단위격자 안에 있는 두 원자의 reduced mass와 총 mass로써, 원자의 상대적 변이와 원자변이의 관계를 고려하기 위해 첨가되었다 [6]. 원자들의 혼합비율과 혼합형태를 대변하는 함수인 Q_{NOP} 는 NOP 각주파수(ω_{NOP})와 AP 각주파수(ω_{AP})의 비에 비례하는 함수이다 [6].

ω_{AP} 와 ω_{NOP} 는 원자 간의 상호작용을 탄성운동으로 가정한 선형스프링 모델을 이용하여 얻을 수 있다 [7]. 다이아몬드 구조나 zinc-blende 구조를 갖는 반도체의 Γ 지점에서는 longitudinal 모드와 transverse 모드는 차이가 없으므로 대부분의 포논 산란이 발생하는 Γ 지점 근처에선 단일주파수 가정법(single-frequency approximation)이 유효하다 [6]. 따라서 ω_{AP} 와 ω_{NOP} 를 구하려고 선형스프링 모델을 이용할 때 원자의 1차원 배열만 고려해도 무방하다.

1차원 원자배열을 고려한 선형스프링 모델에서 단위격자 내 p 번째 원자의 진동함수는 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$u_p = A_p e^{j(\omega t - q r_p)} \quad (2)$$

A_p 와 r_p 는 p 번째 원자의 진동크기와 위치이며, q 는 파동함수이다. p 번째 원자와 가장 가까운 원자 간의 상호작용만 고려한 힘의 방정식은 아래와 같다.

$$M_p \frac{d^2 u_p}{dt^2} = \beta_{p-1} (u_{p-1} - u_p) + \beta_p (u_{p+1} - u_p) \quad (3)$$

M_p 는 원자의 무게이고 β_p 는 스프링 상수로써 원자 간의 거리에 주로 의존한다.

원자배열이 규칙적으로 반복되는 단위 내의 원자 수만큼 식 (3)의 운동방정식이 필요하다. Si 이나 Ge 은 2개의 fcc 구조가 겹쳐있는 다이아몬드 구조를 가지므로 원자배열이 반복되는 단위는 단위격자와 동일하며 필요한 운동방정식의 수는 2가 된다. $GaAs$ 화합물 반도체는 Ga 원자만으로 구성된 fcc 구조와 As 원자만으로 구성된 fcc 구조가 겹쳐있는 zinc-blende 구조를 갖는다. 이 경우 또한 반복되는 단위는 Ga 와 As 가 1개씩 포함된 단위격자이다. 반면, $SiGe$ 와 같은 혼합물반도체 내의 원자들은 불규칙적으로 배열되

어 있어 동일한 S_i 원자들도 더 이상 동일한 환경을 갖지 않는다. 즉, 혼합물반도체에서 원자들의 불규칙한 배열을 고려하려면 나열되어 있는 원자 수만큼의 방정식이 필요하다.

나열된 원자의 수인 n 개의 운동방정식을 행렬방정식으로 변환하여 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{bmatrix}
 y_1 & \beta_1 e^{-jqb_1} & 0 & 0 & \dots & 0 & \beta_n e^{jqb_n} \\
 \beta_1 e^{jqb_1} & y_2 & \beta_2 e^{-jqb_2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 0 & \beta_2 e^{jqb_2} & y_3 & \beta_3 e^{-jqb_3} & \dots & 0 & 0 \\
 \cdot & \cdot & & & & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & & & & \cdot & \cdot \\
 0 & 0 & \dots & \dots & \beta_{n-2} e^{jqb_{n-2}} & y_{n-1} & \beta_{n-1} e^{-jqb_{n-1}} \\
 \beta_n e^{-jqb_n} & 0 & \dots & \dots & 0 & \beta_{n-1} e^{jqb_{n-1}} & y_n
 \end{bmatrix}
 \times
 \begin{bmatrix}
 A_1 \\
 A_2 \\
 A_3 \\
 \cdot \\
 \cdot \\
 A_{n-1} \\
 A_n
 \end{bmatrix}
 = 0 \tag{4}$$

y_p 는 $M_p \omega^2 - 2(\beta_{p-1} + \beta_p)$ 이다. 원자 간의 거리에 주로 의존하는 스프링 상수 β_i 는 원자 질량과 상관없다고 가정하였다. 다이아몬드 또는 zinc-blende 구조의 반도체에서 원자 간의 거리 b_i 는 짧은 거리 (a)와 긴 거리(b)가 반복된다. 이 같은 상황을 고려하기 위하여 식 (4)에서 n 은 짝수 값으로 선택하였다. 식 (4)가 해를 갖기 위해서는 $n \times n$ 행렬의 행렬식이 '0'이어야 하며, 행렬식을 내림차수 별로 정리하면 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$C_n (\omega^2)^n + C_{n-1} (\omega^2)^{n-1} + C_{n-2} (\omega^2)^{n-2} + \dots + C_1 (\omega^2)^1 + C_0 = 0 \tag{5}$$

식 (5)의 계수들 중에서 ω_{AP} 와 ω_{NOP} 를 계산하기 위하여 필요한 계수들은 다음과 같다.

$$C_0 = 2 \left(\prod_{p=1}^n \beta_p \right) \left\{ 1 - \cos \frac{nq(a+b)}{2} \right\} \tag{6a}$$

$$C_1 = -n^2 \left(\prod_{p=1}^n \beta_p \right) \left(\frac{1}{n} \sum_{p=1}^n \beta_p^{-1} \right) \left(\frac{1}{n} \sum_{p=1}^n M_p \right) \tag{6b}$$

$$C_n = \prod_{p=1}^n M_p \tag{6c}$$

1) 단위격자 내의 원자 수를 나열된 원자 수로 볼 경우 [4], 혼합물반도체를 구성하고 있는 두 종류 이상의 원자들은 불규칙적으로 배열되어 있어 동일 원자라도 다른 환경을 갖게 된다. 이 경우, 반복되는 단위를 설정할 수 없게 되며, 단위격자 내의 원자 수는 나열된 원자 수라고 볼 수밖에 없다. 이 때 단위격자는 반복되지 않는다는 사실을 주지할 필요가 있다.

단위격자 내에 n 개의 원자가 있는 경우, 식 (5)의 해는 1개의 AP 모드와 $n-1$ 개의 NOP 모드로 구성된다. 대부분의 산란이 발생하는 장파장 영역에서 ω_{AP} 가 ω_{NOP} 에 비하여 매우 작다는 사실을 감안하면, 식 (5)의 왼쪽 항에서 $\omega^2 = 0$ 지점의 기울기는 수직 절편인 C_0 와 가장 작은 수평 절편인 ω_{AP}^2 를 지나는 직선의 기울기인 $-C_0/\omega_{AP}^2$ 에 근접하다고 볼 수 있다. 따라서 가장 작은 해인 ω_{AP}^2 는 아래와 같다.

$$\omega_{AP}^2 \cong -\frac{C_0}{C_1} \tag{7}$$

한편, ω_{NOP}^2 값들이 장파장 영역에서 대부분 같다고 가정하여 식 (5)은 아래와 같이 표현하면

$$C_n (\omega^2 - \omega_{AP}^2) (\omega^2 - \omega_{NOP}^2)^{n-1} \cong 0 \tag{8}$$

이 되고, 식 (5)과 (8)의 계수들을 비교하여 ω_{NOP}^2 를 아래와 같이 구할 수 있다.

$$\omega_{NOP}^2 \cong \left(\frac{|C_1|}{C_n} \right)^{\frac{1}{n-1}} \tag{9}$$

따라서 ω_{NOP}/ω_{AP} 에 비례하는 Q_{NOP} 는 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$Q_{NOP} \sim \frac{\omega_{NOP}}{\omega_{AP}} \cong \left(-\frac{C_1}{C_o}\right)^{1/2} \left(\frac{|C_1|}{C_n}\right)^{1/2(n-1)} \quad (10)$$

원자들의 혼합비율과 혼합형태와 관련이 없는 Si 또는 Ge과 같은 IV족 반도체의 경우라면 Q_{NOP} 는 1이 되어야 한다. 즉, $n=2$ 이며 단위격자 내의 두 원자 질량이 같을 때 Q_{NOP} 가 1이 되는 조건을 고려하여 Q_{NOP} 를 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$Q_{NOP} = \left[\frac{\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n M_i\right)^{n/(n-1)}}{\left(\prod_{i=1}^n M_i\right)^{1/(n-1)}} \right]^{1/2} \quad (11)$$

*GaAs*와 같은 화합물반도체의 경우, $n=2$ 가 되며 식 (11)는 아래와 같이 간략화 된다.

$$Q_{NOP} = \frac{M_{Ga} + M_{As}}{2 \sqrt{M_{Ga} M_{As}}} \quad (12)$$

식(12)는 Wiley [1]가 제안한 형태와 일치한다. *SiGe*와 같은 혼합물반도체의 경우, 나열되어 있는 원자의 수인 n 에 비해 1은 무시할 정도로 작으므로 식 (11)는 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$Q_{NOP} = \left[\frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n M_i}{\left(\prod_{i=1}^n M_i\right)^{1/n}} \right]^{1/2} = \left[\frac{\sum_{j=1}^m x_j M_j}{\prod_{j=1}^m M_j^{x_j}} \right]^{1/2} \quad (13)$$

m 은 혼합물반도체를 구성하고 있는 원자 종류이고, x_i 와 M_i 는 혼합물반도체를 구성하고 있는 원자의 구성비와 그 질량이다. 식 (11)로 부터 화합물반도체에 적용하는 식 (12)와 혼합물반도체에 적용하는 식 (13)은 다르게 파생되었으며, 식 (13)으로부터 식 (12)을 얻을 수 없다는 사실을 인지할 필요가 있다.

2) 단위격자 내에 원자 수를 2개라고 볼 경우, 앞선 내용에서 혼합물반도체에서 원자들의 불규칙한 배열로 인해 단위격자의 원자 수를 나열된 원자의 수로 가정하였다. 하지만 단위격자는 반복되지는 않으므로 식 (5)의 해가 1개의 AP와 $(n-1)$ 개의 OP 모드라는

추론은 오류일 수 있다. Morgan과 공동저자에 따르면 [8], *SiGe* 혼합물반도체에서는 1개씩의 AP 및 OP 모드만 검출되었다. 60년대 측정 장비의 정확도는 근접한 여러 개의 OP 모드를 측정하기에 충분하지 못할 수도 있다. 그러나 현재까지 알려진 실험 결과를 볼 때, 혼합물반도체에서 단위격자 안에 있는 원자 수는 2개로 보는 것이 타당하다.

불규칙적인 원자 배열을 감안하기 위해서 나열된 원자 수만큼의 운동방정식이 필요하지만 식 (5)에서 얻을 수 있는 해는 AP와 OP 모드 1개씩이다. 따라서 식 (5)는 아래와 같이 변형 된다.

$$C_n (\omega^2 - \omega_{AP}^2)^{n/2} (\omega^2 - \omega_{NOP}^2)^{n/2} \cong 0 \quad (14)$$

식 (5)와 (14)의 계수를 비교하여 ω_{AP}^2 와 ω_{NOP}^2 을 아래와 같이 구할 수 있다.

$$\omega_{AP}^2 \cong \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{n} \frac{C_1}{C_o}\right)^{-1} \quad (15a)$$

$$\omega_{NOP}^2 \cong 2 \left(-\frac{1}{n} \frac{C_1}{C_o}\right) \left(\frac{C_o}{C_n}\right)^{2/n} \quad (15b)$$

이 때, 각 주파수의 비(ω_{NOP}/ω_{AP})에 비례하는 함수인 Q_{NOP} 를 아래와 같다.

$$Q_{NOP} \sim \frac{\omega_{NOP}}{\omega_{AP}} \cong \frac{2}{n} \left(-\frac{C_1}{C_o}\right) \left(\frac{C_o}{C_n}\right)^{1/n} \quad (16)$$

앞서 밝혔듯이, 한 가지 원자로 구성되어 있는 Si과 같은 반도체의 경우, Q_{NOP} 는 1이 되어야 한다. 즉, $n=2$ 이며 두 원자의 무게가 같을 경우에 Q_{NOP} 가 1이 되는 조건을 만족시키는 Q_{NOP} 는 다음과 같다.

$$Q_{NOP} = \frac{\frac{1}{n} \sum_{p=1}^n M_p}{\left(\prod_{p=1}^n M_p\right)^{1/n}} = \frac{\sum_i x_i M_i}{\prod_i M_i^{x_i}} \quad (17)$$

식 (17)은 Chun과 Wang[2]이 $Si_{1-x}Ge_x$ 혼합물 반도체에서 제안한 Q 와 동일하며, *GaAs* 화합물반

도체의 경우처럼 두 원자의 x_i 가 모두 1/2인 경우엔 Wiley [1]가 제안한 Q 가 된다. 이와 같이, 혼합물반도체에 적용하기 위하여 구한 식 (17)은 화합물반도체에서도 유효하다.

3. 결과 및 고찰

그림 1은 혼합물반도체에서 혼합비율에 따른 Q_{NOP} 를 보여준다. 두 종류의 원자로 구성된 $Si_{1-x}Ge_x$ 의 경우 (a)와 세 종류의 원자로 구성된 $Al_{1-x}Ga_xAs$ 의 경우 (b)가 비교되었다. 점선 (dotted line)은 원자들의 혼합비율과 혼합형태를 고려하지 않은 경우의 Q_{NOP} 로써 혼합비율에 상관없이 1이다. 방법 A (dashed line)는 단위격자 안에 원자의 수가 나열된 원자의 수라고 가정하여 얻은 식 (13)을 이용하여 얻은 결과이다. 한편, 방법 B (solid line)는 단위격자 안에 원자의 수를 2개로 보고 얻은 식 (17)을 이용한 결과이다.

그림 1(a)에서 혼합비율에 따른 방법 A와 B의 결과는 크기만 다를 뿐 매우 유사한 변화를 보인다. 이 같은 결과는 방법 A를 얻기 위해 사용한 식 (13)이 방법 B를 얻기 위한 식 (17)의 제곱근 형태인 것을 감안하면 쉽게 이해될 수 있다. Si 에서 Q_{NOP} 는 1이고, 혼합비율이 증가할수록 Q_{NOP} 도 따라 커지다가 $x = 0.42$ 지점에서 Q_{NOP} 는 최대값이 된다. 최대값이 중간지점에서 발생하지 않는 이유는 Si 와 Ge 의 원자질량이 상이하기 때문이다. 혼합비율과 혼합형태를 고려하지 않은 경우와 비교해 볼 때, 방법 A의 결과는 6% 크고 방법 B의 결과는 12% 크다. 따라서 Q_{NOP} 를 고려하지 않는다면 NOP 산란을 과소평가하게 되는 셈이다. x 값이 더 증가할수록 Q_{NOP} 는 오히려 감소하며, 결국 Ge 에서 다시 1이 된다.

그림 1(b)는 세 종류의 원자로 구성된 $Al_{1-x}Ga_xAs$ 혼합물반도체에서 혼합비율에 따른 Q_{NOP} 를 보여준다. 그림 1(a)와는 달리, 혼합비율이 증가할수록 Q_{NOP} 는 지속적으로 감소한다. $AlAs$ 의 경우에 방법 A의 결과는 1.06이고 방법 B의 결과는 1.13이다. $GaAs$ 의 경우엔 두 방법의 결과는 모두 1에 근접한다. 이와 같은 변화는 두 원자의 질량 차이가 클수록 Q_{NOP} 가 커진다는 사실에 기인한다.

단위격자 안에 원자의 수가 나열된 원자의 수라고

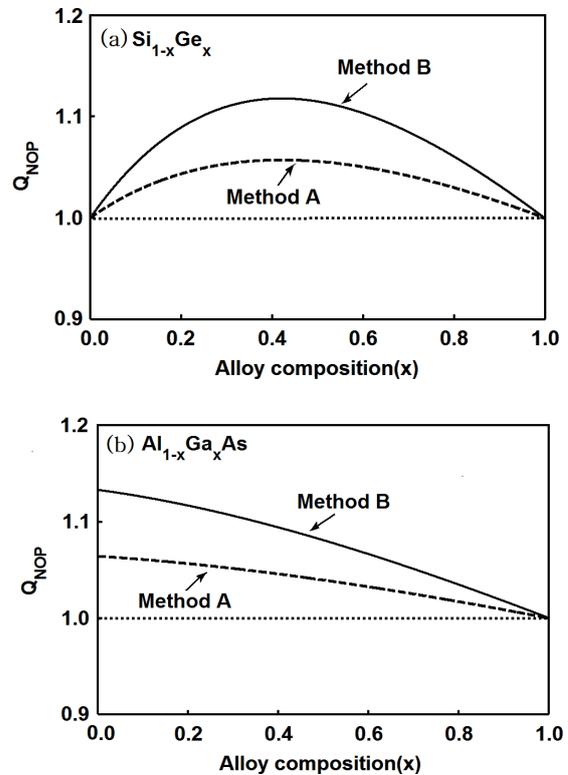


Fig. 1. Q_{NOP} as a function of composition ratios in (a) $Si_{1-x}Ge_x$ and (b) $Al_{1-x}Ga_xAs$ alloy semiconductor.

가정한 방법 A는 $AlAs$ 와 $GaAs$ 경우에 Wiley [1]가 제안한 식 (12)의 형태를 사용하지 않는 반면, 원자들의 불규칙적인 분포를 고려하면서도 단위격자 안에 원자의 수를 2개라고 가정한 방법 B는 Wiley [1]의 제안 식을 사용한다. 즉, 방법 B는 전 혼합영역에서 일관성을 보인다. 더구나 방법 B는 혼합물반도체에서 1개씩의 AP 및 OP 모드만 있다는 실험결과를 근거로 한다는 점을 주지할 필요가 있다. 방법 A가 보여주는 모순점이 그림 1(a)에 없는 이유는 $Al_{1-x}Ga_xAs$ 과 달리 $Si_{1-x}Ge_x$ 의 혼합영역의 양끝에서는 단일원자로 구성되어있기 때문이다.

4. 결론

가전자대에서 NOP 산란을 계량화하는데 필요한 ODP 상수를 혼합물반도체에서 사용하기 위하여 원자의 혼합비율 및 혼합형태를 고려한 함수 Q_{NOP} 를 기

존의 ODP 상수에 첨가하였다. 혼합물반도체에서 불규칙한 원자 분포를 고려하려고 나열된 원자 수의 운동방정식을 사용하였으며, 이로부터 Q_{NOP} 를 계산하기 위한 각 주파수를 구하였다. $Al_{1-x}Ga_xAs$ 와 같이 세 종류 이상의 원자로 구성되어 있는 경우, 단위격자는 반복되는 최소단위라는 정의를 바탕으로 단위격자 내의 원자의 수를 나열된 원자의 수라고 가정한 방법은 $AlAs$ 또는 $GaAs$ 지점에서 Wiley [1]가 제안한 식과 상이한 결과를 보여주었다. 반면, 실험결과를 근거로 단위격자 내의 원자의 수를 2개라고 가정한 방법은 앞선 방법의 모순점을 보여주지 않았다. 여러 방법으로 구한 Q_{NOP} 의 값을 비교해 볼 때, 혼합비율과 혼합형태를 고려하지 않는 ODP 상수의 이용은 NOP 산란의 해석에 큰 오류를 초래할 수 있다.

감사의 글

“이 논문은 2011학년도 인하대학교의 지원에 의하여 연구되었음.”

REFERENCES

- [1] J. D. Wiley, *Solid State Commun.*, **8**, 1865 (1970).
- [2] S. K. Chun and K. L. Wang, *IEEE Trans. Electron Dev.*, **39**, 2153 (1992).
- [3] D. H. Na and S. K. Chun, *J. KIEEME*, **12**, 994 (1999).
- [4] I. S. Park and S. K. Chun, *J. KIEEME*, **14**, 611 (2001).
- [5] G. L. Bir and G. E. Pikus, *Soviet Phys. Solid State*, **2**, 2039 (1960).
- [6] B. K. Ridley, “*Quantum processes in semiconductors*”, 3rd ed. (Oxford University Press, Oxford, 1993)
- [7] J. Bardeen and W. Shockley, *Phys. Rev.*, **80**, 72 (1950).
- [8] R. A. Morgan, J. M. Rowell, and F. A. Trumbore, *Phys. Rev.*, **136**, 1751 (1964).