

压力下应变异质结中施主杂质态的 Stark 效应*

张 敏¹⁾²⁾ 班士良^{1)†}

1) 内蒙古大学物理科学与技术学院物理系 呼和浩特 010021)

2) 内蒙古师范大学物理与电子信息学院 呼和浩特 010022)

(2007 年 10 月 28 日收到 2008 年 1 月 4 日收到修改稿)

对应变 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 异质结系统, 考虑理想界面突变势垒, 引入简化相干势近似, 采用变分法讨论了流体静压力下外界电场对束缚于界面附近的浅杂质态结合能的影响. 对 GaN 为衬底的闪锌矿应变异质结, 分别计算了 (001) 和 (111) 取向时杂质态的结合能随压力、杂质位置、电场强度以及组分的变化关系. 结果表明, 杂质态结合能随流体静压力呈近线性变化, 电场对杂质态的 Stark 效应则随杂质位置不同而呈现谱线蓝、红移动. 此外, 还讨论了在不同压力情况下, Al 组分对杂质结合能的影响. 当杂质处于 GaN 材料中且距界面较远时, Al 组分的增加使电子的二维特性增强, 从而使结合能增大, 且压力加剧增幅的增加; 当杂质处于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料中, Al 组分的增加削弱了杂质与电子间的库仑相互作用, 故而结合能降低.

关键词: $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 异质结, 杂质态, 压力, Stark 效应

PACC: 7155F, 7340L

1. 引言

近年来, 以 GaN 为代表的 III 族氮化物半导体材料由于具有较大的禁带宽度和优良的光、电特性, 从而在光电器件、大功率和高温电子器件等方面有着极其广泛的应用^[1-3]. 随着晶体生长技术的提高, 人们已经可以制备出有较大晶格失配而不产生位错的材料. 由于外界流体静压力以及异质结材料在界面处存在晶格失配所导致的应变效应会改变半导体的基本行为, 如电学和光学特性, 因而应变异质结构引起人们越来越浓厚的兴趣. 人们不仅可以通过合金组分的变化和量子尺寸效应来调节材料和器件的性能, 而且可以通过晶格失配引入的平面双轴应变来调节材料和器件的性能. 所以, 对应变宽禁带半导体材料的研究对其物性改进和理论发展有着非常重要的实际意义, 并可为半导体器件的设计提供新的思路.

GaN 和 AlN 晶体可以形成六方对称纤锌矿和立方对称闪锌矿两种结构. 长久以来, 由于闪锌矿结构氮化物在生长过程中的不稳定, 使其不具有由晶格结构非理想性所引起的自发极化, 并且在目前普遍

采用的蓝宝石衬底上所生长的 III 族氮化物也为纤锌矿结构. 因此, 人们对氮化物材料的理论和实验研究主要集中在纤锌矿结构的材料特性方面^[4-7]. 虽然闪锌矿结构 GaN 材料的晶体质量劣于六角相, 但却因其较小的能带间隙, 较高的饱和电子迁移率, 高对称性以及易于解理等优于纤锌矿材料的特点而受到人们的广泛关注^[8-11]. 现在的半导体激光器和半导体激光放大器主要是 (001) 衬底取向, 由于难于自然解理的原因, 对其他取向的半导体光电器件研究的较少, 若利用半导体材料的各向异性, 改变衬底取向可能得到性能更好的光电器件.

近年来, 高压、强电场、强磁场等作为一种对低维材料的强有力的探测手段成为人们研究的热点, Goni 等人^[12] 由实验给出了闪锌矿和纤锌矿结构的 GaN 与 AlN 中声子频率的压力效应. Zhao 等人曾计算了闪锌矿 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱中杂质态的压力效应^[13]. 本文作者也曾对磁场下的杂质态和束缚极化子进行了研究^[14,15]. 但尚未见有关于压力以及电场对不同取向的应变闪锌矿实际异质结势中杂质态结合能影响的相关报道.

本文选取 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 异质结系统, 考虑理

* 国家自然科学基金(批准号: 60566002, 10564003)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: slban@imu.edu.cn

想界面突变势垒,引入简化相干势近似,利用变分法分别讨论(001)和(111)取向时,闪锌矿 GaN 基应变异质结中的杂质态的压力和电场效应.结果表明,当考虑压力对双轴及单轴应变的调制及对禁带宽度、有效质量和介电常数等参数的影响时,杂质态结合能随流体静压力的增大而近线性增加.当杂质位于沟道区时,电场的增加使得杂质态结合能随杂质位置出现的极大值向界面方向移动,我们还比较了在不同杂质位置和压力情况下,铝组分的变化对结合能的影响.

2. 模型及理论

将 GaN/Al_xGa_{1-x}N 单异质结系统之界面选为 $x-y$ 平面, $z > 0$ 半空间为衬底 GaN(材料 1), $z < 0$ 半空间为 Al_xGa_{1-x}N(材料 2),且沿着 z 轴正方向加一恒定电场 F . 设一电量为 e 的施主杂质位于 z 轴任意处 z_0 , 则电量为 $-e$ 的传导电子受异质结势和杂质共同作用的哈密顿量可写为

$$H = H_{x-y} + H_z + H_c, \quad (1)$$

这里

$$H_{x-y} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_{//1}} \theta(z) + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_{//2}} \theta(-z), \quad (2)$$

$$H_z = \frac{p_z^2}{2m_{\perp 1}} \theta(z) + \frac{p_z^2}{2m_{\perp 2}} \theta(-z) + V(z) + eFz, \quad (3)$$

$$H_c = -\frac{e^2}{\epsilon(z, z_0) [x^2 + y^2 + (z - z_0)^2]^{1/2}}, \quad (4)$$

其中 H_{x-y} , H_z 分别表示 $x-y$ 平面和 z 方向的哈密顿量, H_c 表示库仑相互作用的哈密顿量. 介电常数 $\epsilon(z, z_0)$ 由位置决定, 即

$$\epsilon(z, z_0) = \begin{cases} \epsilon_{01}, & z_0 > 0, z > 0, \\ \frac{\epsilon_{01} + \epsilon_{02}}{2}, & z_0 < 0, z > 0 \text{ 或 } z_0 > 0, z < 0, \\ \epsilon_{02}, & z_0 < 0, z < 0. \end{cases} \quad (5)$$

在(2)(3)式中, $m_{//\lambda}$ 和 $m_{\perp\lambda}$ 分别为电子在材料 λ ($\lambda = 2$) 中, 在 $x-y$ 平面和 z 方向的有效质量. $\epsilon_{0\lambda}$ 为材料 λ ($\lambda = 1, 2$) 的静态介电常数. $\theta(z)$ 为阶跃函数. (3) 式中的异质结势可写为^[16]

$$V(z) = V_0 \theta(-z) + V_s(z) + V_d(z), \quad (6)$$

式中, V_0 是势垒高度. $V_s(z)$ 和 $V_d(z)$ 分别是电子浓度和掺杂浓度对异质结势的贡献. 为了得到杂质态的基态能量, 我们选择下面的电子变分波函数:

$$\psi(x, y, z) = \varphi(x, y) \xi(z), \quad (7)$$

其中 $\varphi(x, y)$, $\xi(z)$ 分别代表 $x-y$ 平面和 z 方向的电子波函数, 具体表达式如下^[16]:

$$\varphi(x, y) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} e^{-a\rho/2}, \quad (8)$$

$$\xi(z) = \begin{cases} Bb^{1/2}(bz + \beta)e^{-bz/2}, & z > 0, \\ Dd^{1/2}e^{dz/2}, & z < 0, \end{cases} \quad (9)$$

这里, $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ 为电子在 $x-y$ 平面的极坐标, a , b , d 是三个独立的变分参数. 通过 $\xi(z)$ 和 $\xi(z)$ 的一阶导数在 $z=0$ 处的连续性, 可将 β , B , D 表为 a , b , d 的函数, $B = [\beta^2(1 + b/d) + 2\beta + 2]^{-1/2}$, $D = B\beta(b/d)^{1/2}$, $\beta = 2b/(b + d)$. 应该指出, 若在 $-z$ 方向施加电场时, 需数值求解 $\xi(z)$.

通过计算, 可得杂质态的基态能量

$$E = \langle \psi | H_c + H_z + H_c | \psi \rangle = E_c + T + V_0 + V_d + V_s + E_{\text{ext}} + E_c, \quad (10)$$

其中

$$E_c = \frac{\hbar^2 a^2}{8m_{//1}} (2 + 2\beta + \beta^2) B^2 + \frac{\hbar^2 a^2}{8m_{//2}} D^2, \quad (11)$$

$$T = \frac{\hbar^2}{2} [(Bb)(1 + \beta - \beta^2/2)2m_{\perp 1} - (Dd)^2/4m_{\perp 2}], \quad (12)$$

$$V_0 = V_0 C^2, \quad (13)$$

$$V_d = 4\pi e^2 n_d [-D^2/d\epsilon_{02} + B^2(6 + 4\beta + \beta^2)b\epsilon_{01}], \quad (14)$$

$$V_s = 4\pi e^2 n_s [D^2(1 - D^2/2)d\epsilon_{02} + B^4(33 + 50\beta + 34\beta^2 + 12\beta^3 + 2\beta^4)4b\epsilon_{01}], \quad (15)$$

$$E_{\text{exp}} = eF \left[-\frac{D^2}{d} + \frac{1}{b}(6B^2 + 4B^2\beta + B^2\beta^2) \right]. \quad (16)$$

这里 E_{ext} 为外加电场所附加的能量.

$$\begin{aligned} E_c &= \psi | H_c | \psi \\ &= - \psi \left| \sum_Q \frac{4\pi e^2}{\epsilon(z, z_0) Q^2} e^{-iQ \cdot (r-z)} \right| \psi \\ &= - \frac{e^2 a^3}{\epsilon(z, z_0)} \int_0^\infty dQ \frac{1}{(a^2 + Q^2)^{3/2}} \\ &\quad \times \xi(z) | e^{-Q|z-z_0|} | \xi(z). \end{aligned} \quad (17)$$

对 $E(a, b, d) - V_s/2$ 求变分极小, 可得到杂质态的基态能量 E_g , 还可通过上述方法求得自由电子的基态能量 E_f , 但此时(4)式中的 $H_c = 0$, 并且用 $\varphi(\rho) = e^{ik \cdot \rho} / \sqrt{A}$ 代替(8)式.

杂质态的基态结合能为

$$E_B = E_f - E_g. \quad (18)$$

3. 应变及流体静压力对参数的影响

由于两种材料存在一定程度的晶格失配, 会在异质界面处产生应变在压力的作用下, 不仅使体材料的能隙、介电常数、晶格振动频率以及电子的有效质量等参数发生变化, 还会对应变带来调制, 从而使异质结构中的物理参数发生变化. 这里给出 GaN 和 AlN 材料随应变和压力的变化关系, 由简化相干势近似^[17]可得到 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料的相应参数调制.

3.1. 静力学应变和平面双轴应变

对于应变异质结, 除了考虑外部流体静压力造成的应变之外, 还需考虑由于晶格失配造成的内部应变. 流体静压力导致的双轴应变 $\epsilon_{//}$ ($= \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$) 与单轴应变张量 ϵ_{\perp} ($= \epsilon_{zz}$) 的分量相等, 总应变为静力学应变与平面双轴应变之和, 即

$$\bar{\epsilon}_{ij} = \epsilon_{ij}^{(h)} + \epsilon_{ij}^{(b)}, \quad (19)$$

其中 $\epsilon_{ij}^{(h)}$ 为流体静压学应变中的非零分量

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}^{(h)} &= \epsilon_{xx}^{(h)} + \epsilon_{yy}^{(h)} + \epsilon_{zz}^{(h)} \\ &= \frac{\alpha(P) - a_0}{a_0} \\ &= - \frac{P}{3B}, \end{aligned} \quad (20)$$

$\epsilon_{ij}^{(b)}$ 为由于晶格失配所造成的外延层和衬底之间的平面双轴应变

$$\begin{aligned} \epsilon^{(b)}(p) &= \epsilon_{xx}^{(b)} = \epsilon_{yy}^{(b)} = \frac{a_2(P) - a_1(P)}{a_1(P)}, \\ \epsilon_{zz}^{(b)} &= - D_{l_1 l_2 l_3} \epsilon_{xx}^{(b)}, \end{aligned} \quad (21)$$

这里, $a_i(P)$ 为材料 i 随压力变化的晶格常数, $D_{l_1 l_2 l_3}$ 为不同晶向的应变模量, 依赖于弹性常数

$$D_{001}(P) = 2 \frac{C_{12}(P)}{C_{11}(P)}, \quad (22)$$

$$D_{111}(P) = - \frac{C_{11}(P) + 2C_{12}(P) + 4C_{44}(P)}{2C_{11}(P) + 4C_{12}(P) - 4C_{44}(P)}. \quad (23)$$

上式中, $C_{ij}(P)$ 为随压力变化的闪锌矿晶体的独立弹性常数^[18].

体积的相对改变量为

$$\frac{\Delta\Omega}{\Omega} = \text{Tr}(\bar{\epsilon}) = - \frac{P}{B} + 2\epsilon_{xx}^{(b)} + \epsilon_{zz}^{(b)}. \quad (24)$$

3.2. 对晶格常数的影响

晶格常数随压力的变化满足 Muraghan 状态方程^[19]

$$a_i(P) = a_i(0) \left(1 - \frac{P}{3B_{0,i}(P)} \right) \quad (i = 1, 2), \quad (25)$$

其中 $B_{0,i}$ 为材料 i 随压力变化的体弹性模量, 可通过 Vinet 状态方程^[20]表示为

$$B_{0,i} = \frac{1}{3} (C_{11,i} + 2C_{12,i}). \quad (26)$$

3.3. 对禁带宽度的影响

考虑压力和应变时, 材料 i 的禁带宽度

$$\begin{aligned} E_{g,i}(p, \bar{\epsilon}) &= E_{g,i}(p) + (a_c - a_v) \left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right) \\ &\quad + (\delta_c - \delta_v) \left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega} \right)^2 \quad (i = 1, 2) \end{aligned} \quad (27)$$

其中 δ_c, δ_v 分别为表征导带、价带静力学形变势的二次项系数, a_c, a_v 为导带、价带的静力学形变势. 流体静压力对带隙的影响可以表示为^[21]

$$E_{g,i}(p) = E_{g,i}(0) + \alpha_i p + \beta_i p^2 \quad (i = 1, 2). \quad (28)$$

三元混晶化合物 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的禁带宽度可选用简化相干势近似 (SCPA)^[17]

$$E_{\text{TMC}} = \frac{E_A E_B}{x E_A + (1-x) E_B}, \quad (29)$$

其中 E_A, E_B 分别代表 GaN 和 AlN 两种材料的禁带宽度.

3.4. 对有效质量的影响^[22]

压力下, 材料 i 中电子的有效质量满足

$$\frac{m_{0,i}}{m_i(p)} = 1 + \frac{C_i}{E_{g,i}(p)} \quad (i = 1, 2), \quad (30)$$

其中,常数 C_i 则由常压下的 $m_{0,i}, E_{g,i}$ 来确定.

3.5. 对介电常数的影响

材料的介电常数随压力的变化关系随材料而不同,我们选用 Goñi 等人^[23]给出的关系,考虑压力对高频介电常数 κ_∞ 的影响时,则有

$$\frac{\partial \kappa_\infty(p)}{\partial p} = - \frac{\chi(\kappa_\infty - 1)}{3B_0} (0.9 - f_i), \quad (31)$$

其中 f_i 为材料离子性参数.通过 LST 关系可以得到静态介电常数 κ_0 ,

$$\kappa_0 = \kappa_\infty \left(\frac{\omega_{LO}}{\omega_{TO}} \right)^2. \quad (32)$$

这里 ω_{LO}, ω_{TO} 分别表示闪锌矿晶体中 LO 声子和 TO 声子的本征频率.对于二元化合物半导体,声子频率随压力的变化可以由 Grüneisen 参数 γ_j 描述^[24],即

$$\gamma_j = B_0 \frac{1}{\omega_j} \frac{\partial \omega_j(p)}{\partial p} \quad (j = LO, TO). \quad (33)$$

三元混晶的介电常数也采用简化相干势近似 (SCPA)^[17]

$$\kappa_{TMC} = [((1-x)m_B\kappa_A^2 + xm_A\kappa_B^2) \times (x/m_A + (1-x)/m_B)]^{1/2}, \quad (34)$$

其中,下标 A, B 分别代表 GaN 和 AlN 两种材料.

4. 结果与讨论

本文分别对杂质位置为 $z_0 < 0$ 和 $z_0 \geq 0$ 的情形给出数值计算结果.且仅考虑 $x < 0.53$,这时, GaN (阱区)和 $Al_xGa_{1-x}N$ (垒区)均为直接带隙半导体^[25].计算中所选用的主要参数如表 1, 2 所示.

表 1 计算所用参数

材料	$a/\text{\AA}$	E_g/eV	a_c/eV	a_v/eV	C_{11}/GPa	C_{12}/GPa	C_{44}/GPa	κ_∞
GaN	4.50 ^{a)}	3.3 ^{a)}	-2.2 ^{a)}	-5.2 ^{a)}	287 ^{b)}	158 ^{b)}	159 ^{b)}	5.41 ^{c)}
AlN	4.38 ^{a)}	4.9 ^{a)}	-6.0 ^{a)}	-3.4 ^{a)}	301 ^{b)}	166 ^{b)}	190 ^{b)}	4.46 ^{d)}

a)文献 26] b)文献 18] c)文献 28] d)文献 29].

表 2 计算所用参数

材料	$\alpha(\text{meV/GPa})$	$\beta(\text{meV/GPa}^2)$	$\omega_{LO}/\text{cm}^{-1}$	$\omega_{TO}/\text{cm}^{-1}$	γ_{LO}	γ_{TO}
GaN	39 ^{e)}	-0.32 ^{e)}	731 ^{f)}	551 ^{f)}	1.02 ^{g)}	1.19 ^{g)}
AlN	40 ^{e)}	-0.32 ^{e)}	908 ^{f)}	654 ^{f)}	0.89 ^{g)}	1.14 ^{g)}

e)文献 21] f)文献 27] g)文献 24].

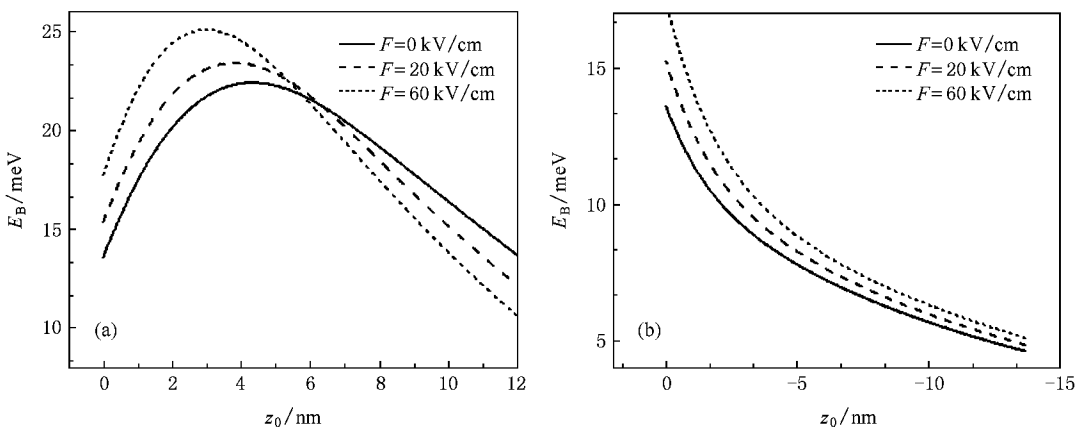


图 1 不同电场情况下,应变闪锌矿(001)取向 GaN/Al_xGa_{1-x}N 异质结中杂质态结合能随杂质位置的变化关系

图 1 给出以 GaN 为衬底的应变闪锌矿(001)取向的 GaN/Al_xGa_{1-x}N 异质结,当电子面密度 $n_s = 4.0 \times 10^{12}/\text{cm}^2$, Al 组分 $x = 0.3$ 时,在不同外电场情况下

杂质态结合能 E_B 随杂质位置 z_0 的变化关系.图 1 (a)为杂质位置在 z 轴正向时的情形.可以看到,随杂质位置的增大,结合能先增大后减小.相关讨论可

见文献 [16]. 需要指出的是 : 此时 , 随着电场的增加 , 结合能的极大值点增高 (谱线蓝移) 且向界面方向移动 . 这是由于当电子波函数的最大值位于杂质左侧 (右侧) 时 , 电场的作用使得杂质与电子间的距离减小 (增大) , 库仑有效吸引作用增强 (减弱) 所致 , 谱线分别显示为蓝移和红移 . 图 1 (b) 为杂质位置在 z 轴负方向时的情形 , 可以看到随着电场的增加 , 结合能呈现单调递增的趋势 (谱线蓝移) , 这是由于杂质位于垒区 , 而电子位于沟道区 , 电场使得电子向界面和杂质位置靠近 , 从而使库仑作用增强 , 结合能增大 (谱线蓝移) .

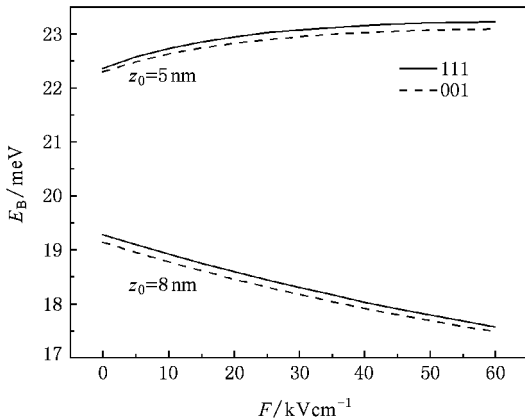


图 2 (001) 和 (111) 取向时 , 对不同杂质位置 , 结合能 E_B 随电场 F 的变化关系

图 2 给出了应变 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 异质结中不同衬底取向时 (这里分别选取 (001) 和 (111) 方向) , 当杂质处于 z 轴正方向不同位置 , 在给定电子面密度 $n_s = 4.0 \times 10^{12}/\text{cm}^2$, Al 组分 $x = 0.3$ 时 , 结合能 E_B 随电场 F 的变化关系 . 当电场的取值范围从 0 kV/cm

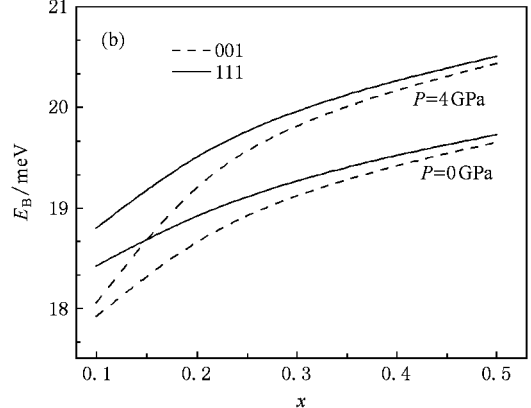
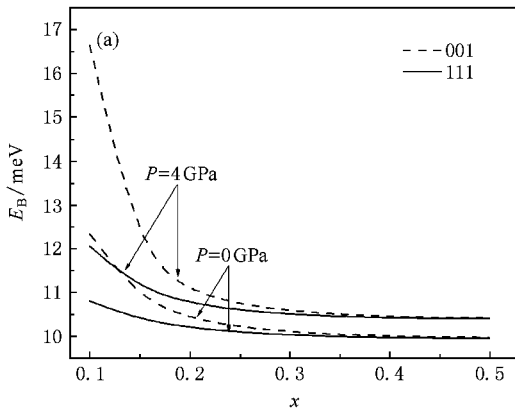


图 4 压力为 0 和 4 GPa 下 , 杂质位置分别为 (a) $z_0 = -2 \text{ nm}$ (b) $z_0 = 8 \text{ nm}$, 在 (001) 和 (111) 取向时 , 结合能 E_B (单位 : meV) 随 Al 组分的变化关系

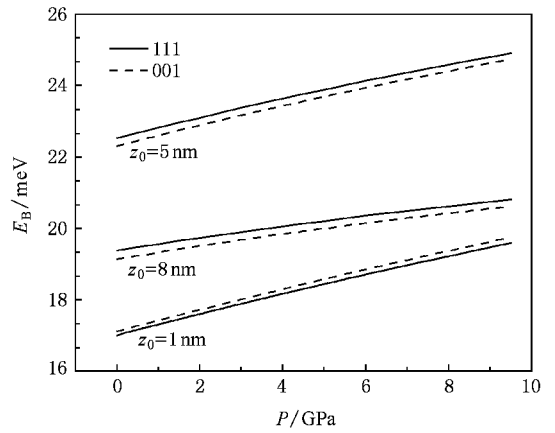


图 3 (001) 和 (111) 取向时 , 对不同杂质位置 , 结合能 E_B 随压力 P 的变化关系

变化到 80 kV/cm , 对于 (111) 和 (001) 不同取向 , 当杂质位置 $z_0 = 5 \text{ nm}$ 时 , 结合能分别增大 3.84% 和 3.57% ; 当杂质位置 $z_0 = 8 \text{ nm}$ 时 , 结合能分别减小 8.85% 和 8.65% .

图 3 给出当杂质处于 z 轴正方向不同位置 , 在给定电子面密度 $n_s = 4.0 \times 10^{12}/\text{cm}^2$, Al 组分 $x = 0.3$ 时 , 结合能 E_B 随流体静压力 P 的变化关系 . 可以看到 , 对不同的衬底取向 , 结合能均随压力近线性增大 , 且变化的幅度基本相同 .

图 4 给出了闪锌矿 (001) 和 (111) 取向时 , 应变 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 异质结中杂质态结合能在电子面密度 $n_s = 4.0 \times 10^{12}/\text{cm}^2$ 和压力分别为 0 和 4 GPa 时随 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料中 Al 组分的变化关系 .

图 4 (a) 为杂质位置 $z_0 = -2 \text{ nm}$ 时的计算结果 , 可以看到 , 随 Al 组分的增加杂质态结合能逐渐下降 . 这是由于 Al 组分的增大将导致异质结势变高 ,

对垒区电子的排斥作用增强,波函数向垒区隧穿减小,垒区杂质与阱区电子间的库仑相互作用被削弱,因而结合能减小.依据文献[23],当 Al 组分大于 0.53 时, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 将转变为间接带隙半导体,因此我们只考虑组分 $x < 0.53$ 的情形.从图中还可以看到,对于以 GaN 为衬底的(001)取向,当 Al 组分由 0.1 增加到 0.5,结合能在 0 和 4 GPa 压力下将分别降低 19.8% 和 37.3%.由此可知,压力的增加加剧了结合能随组分的变化,使之更为显著.在相同的情况下,对于(111)取向而言,结合能则分别下降 7.74% 和 13.6%.

图 4(b)为杂质位置 $z_0 = 8$ nm 时的计算结果,可以看到,随 Al 组分的增加杂质态结合能呈现单调递增的趋势.同样是由于界面势垒的升高,由于电子的平均位置位于杂质左端而靠近势垒,其增高将排斥电子靠近杂质,使得二维特性增强,杂质结合能增大.对 GaN 为衬底的(001)取向,在与图 4(a)相同的变化情况下,结合能在 0 和 4 GPa 压力下将分别增大 9.66% 和 13.2%;而在(111)取向时,结合能则分

别增大 7.09% 和 9.07%.

可见(111)取向时,结合能对于组分的变化不如(001)取向时敏感.

5. 结 论

本文采用简化相干势近似,对应变 GaN/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 异质结系统的(001)和(111)不同取向,用变分法讨论了电场和流体静压力对施主杂质态结合能的影响,研究了结合能随杂质位置、电场强度、压力以及 Al 组分的变化关系.我们发现流体静压力使结合能呈近线性变化趋势,随着压力的增大,结合能明显增大.当杂质处于 GaN 材料中时,随着外加电场的增大,结合能的极大值向界面方向移动;当杂质处于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料中时,随着电场的增加,结合能呈现单调递增的趋势.对于给定杂质位置(001)取向的结合能随 Al 组分的变化要比(111)取向更为明显,而且压力也加剧了这种变化趋势.

- [1] Keller S, Schaake C, Fichtenbaum N A, Neufeld C J, Wu Y, McGroddy K, David A, DenBaars S P, Weisbuch C, Speck J S, Mishra U K 2006 *J. Appl. Phys.* **100** 054314
- [2] Akita K, Kyono T, Yoshizumi Y, Kitabayashi H, Katayama K 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 033104
- [3] Eddy C R, Jr, Holm R T, Henry R L, Twigg M E, Bassim N D, Shirey L M, Glembocki O J, Culbertson J C, Perkins F K 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 162101
- [4] Chen C, Dutta M, Strosio M A 2004 *Phys. Rev. B* **70** 075316
- [5] Zhou S Q, Vantomme A, Zhang B S, Yang H, Wu M F 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 081912
- [6] Kong Y C, Zheng Y D, Zhou C H, Deng Y Z, Gu S L, Shen B, Zhang R, Han P, Jiang R L, Shi Y 2004 *Acta. Phys. Sin.* **53** 2320 (in Chinese) [孔月婵、郑有、周春红、邓永桢、顾书林、沈波、张荣、韩平、江若璉、施毅 2004 物理学报 **53** 2320]
- [7] Kobayashi A, Kawano S, Kawaguchi Y, Ohta J, Fujioka H 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 041908
- [8] Nardelli M B, Rapcewicz K, Bernholc J 1997 *Phys. Rev. B* **55** R7323
- [9] Thompson M P, Auner G W, Zheleva T S, Jones K A, Simko S J, Hilfiker J N 2000 *J. Appl. Phys.* **89** 3331
- [10] Bester G, Wu X, Vanderbilt D, Zunger A 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 187602
- [11] Gil B, Bigenwald P, Leroux M, Paskov P P, Monemar B 2007 *Phys. Rev. B* **75** 085204
- [12] Goñi A R, Siegle H, Syassen K, Thomsen C, Wagner J M 2001 *Phys. Rev. B* **64** 035205
- [13] Zhao G J, Liang X X, Ban S L 2003 *Phys. Lett. A* **319** 191
- [14] Zhang M, Ban S L 2004 *Chinese J. Lumin.* **25** 369 (in Chinese) [张敏、班士良 2004 发光学报 **25** 369]
- [15] Zhang M, Ban S L 2004 *Chinese J. Semicon.* **25** 1618 (in Chinese) [张敏、班士良 2004 半导体学报 **25** 1618]
- [16] Ban S L, Hasbun J E 1999 *Phys. Rev. B* **59** 2276
- [17] Ban S L, Hasbun J E 1999 *Eur. Phys. J. B* **8** 453
- [18] Łepkowski S P 2007 *Phys. Rev. B* **75** 195303
- [19] Perlin P, Mattos L, Shapiro N A, Kruger J, Wong W S, Sands T, Cheung N W, Weber E R 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 2385
- [20] Vinet P, Ferrante J, Smith J R, Rose J H 1986 *J. Phys. C* **19** L467
- [21] Christensen N E, Gorczyca I 1994 *Phys. Rev. B* **50** 4397
- [22] Ting D Z Y, Chang Y C 1987 *Phys. Rev. B* **36** 4359
- [23] Goñi A R, Syassen K, Cardona M 1990 *Phys. Rev. B* **41** 10104
- [24] Wagner J M, Bechstedt F 2000 *Phys. Rev. B* **62** 4526
- [25] Fan W J, Li M F, Chong T C 1996 *J. Appl. Phys.* **79** 188
- [26] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 5815
- [27] Kim K, Lambrecht W R L, Segall B 1996 *Phys. Rev. B* **53** 16310
- [28] Karch K, Bechstedt F, Pletl T 1997 *Phys. Rev. B* **56** 3560
- [29] Karch K, Bechstedt F 1997 *Phys. Rev. B* **56** 7404

Stark effect of donor impurity states in strained heterojunctions under pressure^{*}

Zhang Min^{1,2)†} Ban Shi-Liang^{1)†}

¹ *Department of Physics, School of Science and Technology, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China*

² *College of Physics and Electron Information, Inner Mongolia Normal University, Hohhot 010022, China*

(Received 28 October 2007 ; revised manuscript received 4 January 2008)

Abstract

A modified variational method is adopted to investigate the binding energies of the shallow impurity states near the interface of a strained GaN/Al_xGa_{1-x}N heterojunction by using a simplified coherent potential approximation. The relations between the impurity binding energies and pressure, the impurity position, electric field strength and the Al components are calculated for strained zinc-blende GaN/Al_xGa_{1-x}N heterojunctions with (001) and (111) orientations respectively. The result indicates that the binding energy of impurity state nearly linearly increases with pressure. The Stark effect on the binding energy as a function of electric field shows blue or red shift in the spectra for different impurity positions.

The results corresponding to (001) and (111) orientations are compared. It is found that the effect on the binding energy of Al component is obvious. For an impurity located in the channel side and comparatively far from the interface, a monotonic increase of the binding energies will appear with increasing Al content due to the stronger two-dimensional properties of the electrons, and pressure enhances the increase of amplitude. Whereas for an impurity located in the barrier side, the increase of Al content will weaken the bound between the impurity and the electron to decrease the binding energy.

Keywords : GaN/Al_xGa_{1-x}N heterojunction, impurity state, pressure, Stark effect

PACC : 7155F, 7340L

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60566002 and 10564003).

[†] Corresponding author. E-mail : slban@imu.edu.cn