

有效质量差异和电场对 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 球形量子点电子结构的影响^{*}

吴慧婷 王海龙[†] 姜黎明

(曲阜师范大学物理工程学院, 曲阜 273165)

(2008 年 5 月 20 日收到, 2008 年 7 月 23 日收到修改稿)

用平面波展开法对 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 球形量子点中类氢杂质态能级随量子点半径、Al 组分以及结合能随 Al 组分的变化规律进行了详细讨论. 计算了量子点内外有效质量差异对杂质态能级和结合能的修正. 结果表明对于 Al 组分较高的 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 球形量子点, 电子有效质量差异对杂质能级和结合能的修正不能忽略. 考虑电子有效质量差异后, 进一步具体计算了杂质结合能随量子点半径、杂质位置以及外电场的变化规律.

关键词: 球形量子点, 平面波展开法, 有效质量

PACC: 7125, 7115, 7320D

1. 引 言

半导体低维结构由于量子局域效应而表现出独特的光电性质, 在光电子、微电子领域有着广泛的应用前景. 近年来一直是人们研究的热点. 随着分子束外延 (MBE) 及金属有机化学汽相沉淀 (MOCVD) 等纳米技术的发展, 人们可以制造出各种半导体低维结构, 如量子阱、量子线、量子点等, 极大地推动了半导体低维结构的研究. 量子点的三维尺寸都与该方向电子的波长或平均自由程可比拟甚至更小, 因此载流子在三个方向的能量都是量子化的, 运动受到了约束. 它的性质与体材料有显著不同, 包括量子尺寸效应、量子干涉效应、非线性光学效应、表面效应、量子隧穿与库仑阻塞效应等, 因此在器件制造方面有广阔的应用前景. 利用不同的生长方法、生长条件和材料可以制造出各种有规则几何形状的量子点如球形^[1]、椭圆形^[2]、圆柱形^[3]、金字塔形^[4]、透镜形^[5]等, 可以用不同的束缚势来代替不同形状量子点对电子的束缚. 杂质在半导体器件中起着非常重要的作用, 对半导体低维结构中杂质态的计算是一个非常重要的问题. 目前人们已经对量子阱^[6-8]、量子线^[9-13]、量子点^[14-18]中的类氢杂质态进行了大量的

研究, 取得了许多重要结果. 另外, 许多应用半导体低维结构的新型器件需要工作在一定的外电场下, 外电场可以使载流子分布极化和量子态能级移动, 对光电子器件的性质有重要影响, 计算外电场对低维半导体中能级的影响非常重要. 为此人们开展了相关的多方面研究, 包括外电场对矩形砷化镓量子阱线中杂质态的影响^[19], 外电场下方形砷化物低维系统中的类氢杂质态的理论研究^[20, 21], InAs/GaAs 量子点中的量子斯塔克效应^[22]以及量子尺寸、杂质位置和电场对球形砷化镓量子点能级的影响等^[23]. 最近, Li 和 Xia 又计算了量子限制和斯塔克效应对长方体量子点中杂质结合能的影响^[24]. 当前对量子点中杂质结合能的计算很少考虑量子点内外有效质量的差异, 这一忽略往往影响计算结果的精度. 由于 GaN 及其合金具有独特的物理性质, 如直接宽带隙、高热导率、大介电常数、强化学稳定性和高电子饱和速度等, 在光电子器件方面有广阔的应用价值. 本文在有效质量近似下, 用平面波展开法计算了 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 球形量子点中杂质态能级随量子点尺寸、Al 组分以及结合能随着 Al 组分的变化, 并计算了量子点内外电子有效质量差异对杂质态能级和结合能的修正. 考虑电子有效质量差异后, 进一步具体计算了杂质结合能随量子点半径、杂质位置以及外

^{*} 教育部留学回国人员科研启动基金资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: hlwang@mail.qfnu.edu.cn

电场的变化规律.

2. 理论模型和计算方法

设类氢杂质位于 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 球形量子点的 $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ 处, 沿 z 方向加一电场 F , 根据有效质量近似和包络函数理论, 球形量子点中的哈密顿量可以写为

$$H_e = \mathbf{p} \frac{1}{2m^*(\mathbf{r})} \mathbf{p} - \frac{e^2\gamma}{\epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} + V(\mathbf{r}) + eFz, \quad (1)$$

其中 \mathbf{p} 是电子的动量算符, $\gamma = 0$ 代表量子点中没有杂质, $\gamma = 1$ 代表量子点中存在杂质,

$|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}$, ϵ 是 GaN 材料的介电常数. 量子点的中心对称球形势和电子的有效质量如下:

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & r < R, \\ V_0, & r > R, \end{cases} \quad (2)$$

$$m^*(\mathbf{r}) = \begin{cases} m_1^*, & r < R, \\ m_2^*, & r > R, \end{cases}$$

其中 R 是球形量子点的半径, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, V_0 是材料的带阶, m_1^* , m_2^* 分别是 GaN 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料中电子的有效质量.

若能量和长度单位分别以 GaN 的有效里德伯常数 $R^* = \hbar^2/2m_1^* a^{*2}$ 和有效玻尔半径 $a^* = \hbar^2\epsilon/m_1^* e^2$ 为单位, 电场的单位为 $F^* = e/2\epsilon a^{*2}$, 则(1)式给出的类氢杂质哈密顿量可以表示为

$$H_e = \begin{cases} \Delta - \frac{2\gamma}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} + Fz, & r < R, \\ \alpha\Delta - \frac{2\gamma}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} + \frac{V_0}{R^*} + Fz, & r > R, \end{cases} \quad (3)$$

这里

$$\Delta = -\frac{d^2}{dx^2} - \frac{d^2}{dy^2} - \frac{d^2}{dz^2},$$

$$\alpha = m_1^*/m_2^*.$$

此时电子的包络函数方程可以写为

$$H_e \psi_n(\mathbf{r}) = E_n^* \psi_n(\mathbf{r}), \quad (4)$$

下标 $n = 0, 1, 2, \dots$ 分别对应于基态, 第一激发态, 第二激发态... 类氢施主杂质的 n 级结合能可以从下式算出:

$$E_b = E_0^0 - E_n^1. \quad (5)$$

根据文献[24], 我们用平面波基矢把波函数展开成如下的形式:

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{L_x} \sqrt{L_y} \sqrt{L_z}} \times \sum_{n_x, n_y, n_z} C_{n_x, n_y, n_z} \times e^{i[(k_x + n_x K_x)x + (k_y + n_y K_y)y + (k_z + n_z K_z)z]} \quad (6)$$

其中 L_x, L_y, L_z 是立方原胞的长度, $K_x = \frac{2\pi}{L_x}, K_y = \frac{2\pi}{L_y}, K_z = \frac{2\pi}{L_z}, n_x \in \{-m_x, \dots, m_x\}, n_y \in \{-m_y, \dots, m_y\}, n_z \in \{-m_z, \dots, m_z\}$, 所用平面波的数目是 $N_{xyz} = N_x N_y N_z = (2m_x + 1)(2m_y + 1)(2m_z + 1)$, 其中 m_x, m_y, m_z 是正整数. 在计算中我们取 $L_x = L_y = L_z = L, K_x = K_y = K_z = K = \frac{2\pi}{L}, N_x = N_y = N_z = 15$.

将方程(3)和(6)代入方程(4), 再从左边乘以 $\psi(x, y, z)^*$, 并对空间积分, 就得到一组关于电子能级的矩阵元. 这个矩阵分成四个部分, 第一部分是动能项

$$\begin{aligned} & [(k_x + n_x K_x)(k_x + n'_x K_x) \\ & + (k_y + n_y K_y)(k_y + n'_y K_y) \\ & + (k_z + n_z K_z)(k_z + n'_z K_z)] \\ & \times \left\{ \left[\alpha + (1 - \alpha) \frac{4\pi R^3}{3L^3} \right] \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z} \right. \\ & \left. + (1 - \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z}) \frac{4\pi(\alpha - 1)}{(L\Lambda)^3} \right. \\ & \left. \times [\Lambda R \cos(\Lambda R) - \sin(\Lambda R)] \right\}. \quad (7) \end{aligned}$$

当不考虑有效质量差异时, 动能项的矩阵元为

$$[(k_x + n_x K)^2 + (k_y + n_y K)^2 + (k_z + n_z K)^2] \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z}. \quad (8)$$

矩阵元的第二部分是施主势能项

$$-\frac{2\gamma}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} = -\frac{2\gamma}{L^3} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dy \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \frac{\exp\{iK[(n_x - n'_x)(x - x_0) + (n_y - n'_y)(y - y_0) + (n_z - n'_z)(z - z_0)]\}}{\sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}}.$$

利用球坐标变换

$$\int_0^{R_0} r^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{4\pi R_0^3}{3} = L^3,$$

施主势能项可以写成

$$-\frac{3\gamma}{R_0} \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z} + \frac{6\gamma[\cos(\Delta R_0) - 1]}{R_0^3 \Delta^2} \{1 - \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z}\} \\ \times \exp\{iK[(n_x - n'_x)x_0 + (n_y - n'_y)y_0 + (n_z - n'_z)z_0]\}, \quad (9)$$

其中

$$\Delta = K \sqrt{(n_x - n'_x)^2 + (n_y - n'_y)^2 + (n_z - n'_z)^2}, \quad \delta_{n_\mu n'_\mu} = \begin{cases} 1, & n_\mu = n'_\mu \\ 0, & n_\mu \neq n'_\mu \end{cases}, \quad \mu \text{ 代表 } x, y, z.$$

矩阵元的第三部分是量子束缚势能项 $V(r)$

$$\left(1 - \frac{4\pi R^3}{3L^3}\right) V_0 \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z} + \frac{4\pi V_0}{(L\Delta)^3} [\Delta R \cos(\Delta R) - \sin(\Delta R)] (1 - \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z}). \quad (10)$$

第四部分是电场能 F_z 项

$$F_{n_z n'_z} = \begin{cases} 0, & n_z = n'_z \\ -iF \frac{(-1)^{n_z - n'_z} L_z}{2\pi(n_z - n'_z)}, & n_z \neq n'_z \end{cases}. \quad (11)$$

考虑有效质量差异时, GaN/Al_xGa_{1-x}N 球形量子点的类氢杂质电子态可由方程(7)(9)(10)和(11)计算得出. 不考虑有效质量差异时, GaN/Al_xGa_{1-x}N 球形量子点的类氢杂质电子态可由方程(8)(9)(10)和(11)计算得出.

3. 结果与讨论

在计算中我们采用文献[25—28]中的参数, GaN 和 Al_xGa_{1-x}N 材料的带隙分别为 $E_g = 3.5$ eV 和 $E_g = [3.5(1-x) + 6.28x - 1.3x(1-x)]$ eV, V_0 主要由 Al_xGa_{1-x}N 与 GaN 的导带带阶引起, 取 $\Delta E_c = 0.75\Delta E_g$, 在 GaN 材料中电子的有效质量 $m_1^* =$

$0.2m_0$. 在 Al_xGa_{1-x}N 材料中, 电子的有效质量与 Al 组分 x 的关系为 $m_2^* = [0.2(1-x) + 0.48x]m_0$, 其中 m_0 是自由电子质量.

图 1 给出了无外电场且杂质在球形量子点的中心时的杂质态能级. 图 1(a) Al 组分为 0.2 和 0.3 时杂质基态能级随量子点半径的变化, 随着量子点半径的增加, 杂质态能级下降. 这是由于随着量子点半径的增大, 量子限制效应减弱. 另外考虑量子点内外电子有效质量差异后, 对应能级下降, 这是因为 Al_xGa_{1-x}N 材料中的有效质量比在 GaN 材料中的大. 同时, 由于量子点半径的增大, 电子波函数在量子点外部的部分减少, 所以电子在 Al_xGa_{1-x}N 和 GaN 材料中有效质量的差异对计算结果影响也减

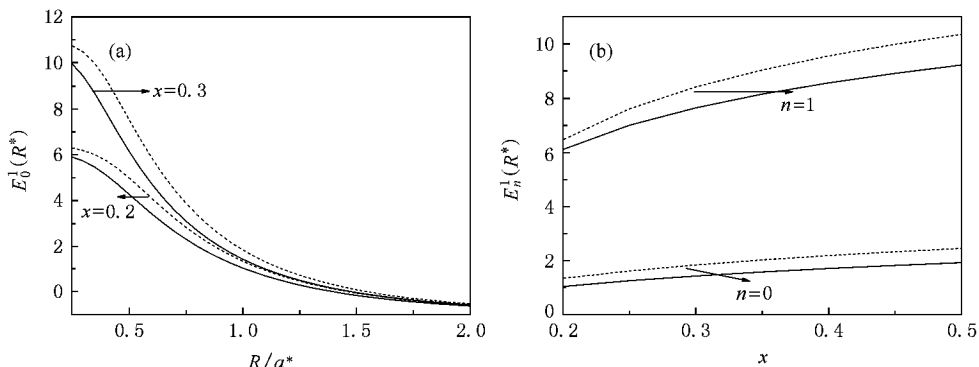


图 1 平面波方法计算了无外电场且杂质在球形量子点的中心时杂质态能级(实线和虚线分别代表 $m_1^* \neq m_2^*$ 和 $m_1^* = m_2^*$ 的情况)(a) Al 组分为 0.2 和 0.3 时杂质基态能级随量子点半径的变化 (b) 量子点的半径 $R = a^*$ 时杂质态能级随 Al 组分的变化(其中 $n=0$ 和 $n=1$ 分别代表基态和第一激发态能级)

小,这样随着量子点半径的增大,有效质量差异引起的对杂质态能级的修正减小.图 1(b)给出了 $R = a^*$ 的量子点中的杂质态能级随着 Al 组分的变化.从图中可以看出,随着 Al 组分的增加,杂质态能级升高,这是由于势垒高度与组分 x 成正比,随着 Al 组分的增加,势垒高度增加,量子限制效应增强的缘故.另外,随着 Al 组分的增加,电子在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中的有效质量也增大,从而有效质量差异引起的对杂质态能级的修正也越大.这一结论说明当 Al 组分较大时,有效质量差异引起的对杂质态能级的修正不能忽略.

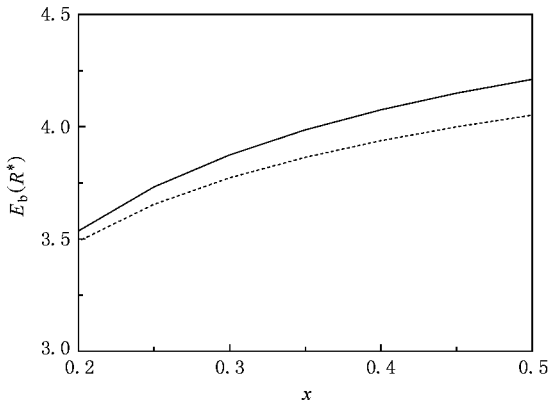


图 2 无电场时基态结合能随组分 x 的变化(量子点半径 $R = a^*$, 实线和虚线分别代表 $m_1^* \neq m_2^*$ 和 $m_1^* = m_2^*$ 的情况)

图 2 给出了无电场时基态结合能随组分 x 的变化.从图中可知,结合能随着 Al 组分 x 的增大而增大,这是由于组分 x 越大,势垒高度越高,量子限制增强,电子与杂质离子之间的库仑势增加,从而结合能增大.另外考虑量子点内外电子有效质量差异后,对应结合能增大,并且随着 Al 组分 x 的增大,有效质量的差异对杂质结合能的修正也越大,因而 Al 组分较大时,有效质量差异对杂质态结合能的修正不能忽略.以下计算均考虑了有效质量差异的影响.

图 3 是杂质结合能随量子点半径的变化曲线,由图可知,杂质结合能随量子点半径的增加先增大后减小,当中出现一个最大值.这是由于当量子点半径比较小时,电子波函数的分布延伸到量子点外,杂质结合能较小.当量子点的半径增加到一定值时,电子的波函数完全被局限在量子点内,杂质结合能取得最大值,此时电子被最有效的约束在量子点内.当量子点半径再进一步增加时,杂质离子与电子的空间分离增大,它们之间的库仑势减小,所以使杂质的结合能减小.此外,量子点的最大值出现在大组分、

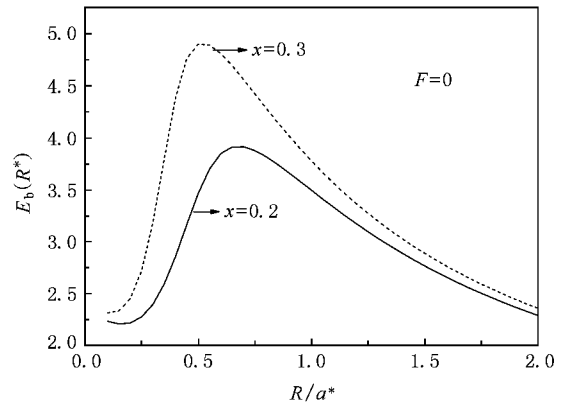


图 3 无外电场且杂质在球形量子点的中心时杂质基态结合能随量子点半径的变化(实线和虚线分别代表 Al 组分 $x = 0.2$ 和 $x = 0.3$ 的情况)

小量子点尺寸处.

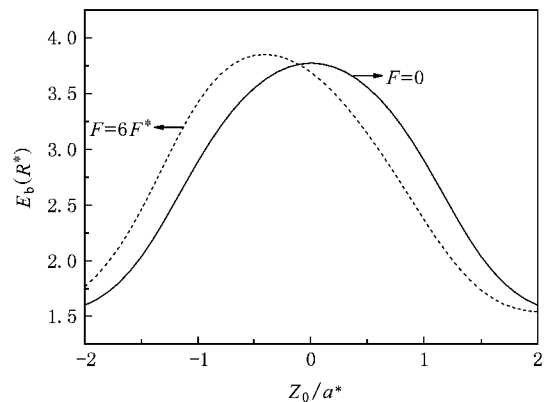


图 4 基态结合能随杂质位置的变化(Al 组分 $x = 0.3$, 量子点半径 $R = a^*$, 实线和虚线分别代表 $F = 0$ 和 $F = 6F^*$ 的情况)

图 4 给出了组分 $x = 0.3$ 和量子点半径 $R = a^*$ 时,量子点的基态结合能随杂质位置的变化.从图中可以看出,无外电场时结合能是中心对称的,且杂质在中心处结合能最大.这是由于电子波函数是中心对称的,且在球形量子点的中心位置电子波函数分布是最密的.在外电场存在时,结合能不再关于中心对称而是沿着 z 轴负向发生能移,最大值在 $Z_0 = -0.4a^*$ 处.这是因为在外电场方向上使波函数分布的中心对称性被破坏,电子波函数分布沿着 z 轴负向移动.

图 5 给出了杂质处于球形量子点特殊对称位置时的基态结合能随外电场的变化,Al 组分 $x = 0.3$, 量子点半径 $R = a^*$. o 点在 $(0, 0, 0)$, a 点在 $(0, 0, a^*)$, a' 点在 $(0, 0, -a^*)$, b 点在 $(0, 0, 0.5a^*)$, b'

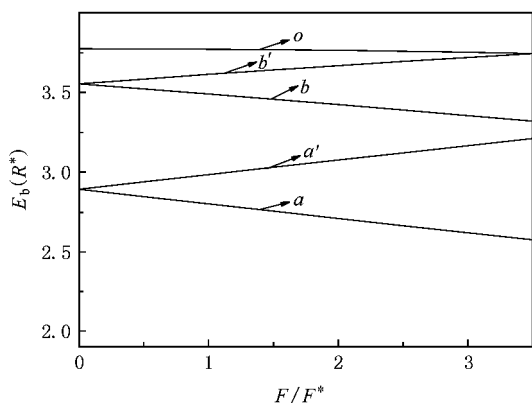


图5 杂质处于球形量子点特殊对称位置时,计算了基态结合能随外电场的变化(AI 组分 $x = 0.3$, 量子点半径 $R = a^*$, o 点在 $(0, 0, 0)$, a 点在 $(0, 0, a^*)$, a' 点在 $(0, 0, -a^*)$, b 点在 $(0, 0, 0.5a^*)$, b' 点在 $(0, 0, -0.5a^*)$)

点在 $(0, 0, -0.5a^*)$ 。结果表明,无电场时,杂质在对称位置(a 和 a' 或者 b 和 b') 处的基态结合能是简并的,加上外电场之后,这种简并被消除,能级开始分裂,并且随着电场的增加分裂逐渐增大。这是由于加上外电场后,电子概率密度沿着电场的反方向发生移动,从而使 a' , b' (a, b) 处的杂质靠近(远离)电子,因而杂质结合能增大(减小)。并且这种杂质与电子之间的靠近(远离)随着电场的增大而更加显著。另外,从图中都可以看出,此时仍然是杂质位于中心时,杂质结合能最大。

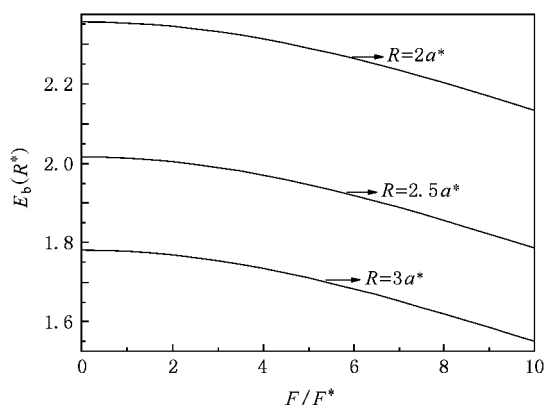


图6 AI 组分 $x = 0.3$ 且杂质位于量子点的中心时,基态杂质结合能随电场的变化关系

图6 给出了 AI 组分 $x = 0.3$ 且杂质位于量子点的中心时,不同量子点半径下基态结合能随着外电场的变化关系。结果表明杂质结合能随电场的增大单调降低,且电场越强杂质结合能降低的幅度越大,这是由于外电场引入附加势的缘故。外电场使电子波函数分布向远离杂质的方向移动,减弱了施主杂质电子之间的库仑势,因而结合能降低,且外加电场越强,杂质和电子被拉开的距离越大,杂质结合能降低得越大。从图中还可以看出大量子点的杂质结合能更易受到电场的影响,且随着量子点半径的增加,结合能降低的幅度增大,这是因为随量子点半径的增加,量子局域效应减弱,使得电场更易将杂质和电子的距离拉开。

4. 结 论

本文用平面波展开法计算了 GaN/Al_xGa_{1-x}N 球形量子点中类氢杂质态能级随量子点半径、AI 组分以及结合能随着 AI 组分的变化。结果表明球形量子点内的杂质能级随量子点半径的增大而下降,杂质态能级和结合能都随 AI 组分的增加而上升。考虑 GaN 和 Al_xGa_{1-x}N 材料有效质量差异后,相应的杂质态能级有所下降,结合能有所提高。对于 AI 组分较大的 GaN/Al_xGa_{1-x}N 球形量子点,电子有效质量差异引起的修正不能忽略。考虑有效质量差异后,进一步具体计算了杂质结合能随量子点半径、杂质位置以及外电场的变化规律。当杂质位于球形量子点的中心时,杂质结合能随量子点半径的增大先增大后减小,结合能的最大值出现在大组分和小量子点处。另外,在无电场情况下,杂质位于量子点的中心时结合能最大,在外电场作用下结合能最大值沿着电场负向移动。外电场的存在使杂质结合能单调减小,且随着量子点半径的增加,电场对杂质结合能的影响越来越明显。此外,电场使对称位置处的能级分裂,而且这种分裂随外电场的增大而增加。我们的计算结果可以为量子点在光电子器件的设计方面提供有益的指导。

[1] Wang C D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1091 (in Chinese) [王传道 2008 物理学报 **57** 1091]

[2] Dvovyan K G, Kazaryan E M 2001 *Phys. Stat. Sol.* B **228** 695

[3] Sugawara M 1995 *Phys. Rev.* B **51** 10743

[4] Liang S, Lü Y W 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1617 (in Chinese)

[梁 双、吕燕伍 2007 物理学报 **56** 1617]

- [5] Chang J F , Zeng X H , Zhou P X , Bi Q 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 978
(in Chinese) [常加峰、曾祥华、周 朋、毕 桥 2004 物理学报 **53** 978]
- [6] Bastard G 1981 *Phys. Rev. B* **24** 4714
- [7] Mailhiot C , Chang Y C , McGill T C 1982 *Phys. Rev. B* **26** 4449
Mailhiot C , Chang Y C , McGill T C 1982 *Surf. Sci.* **113** 161
- [8] Greene R L , Bajaj K K 1983 *Solid State Commun.* **45** 825
Greene R L , Bajaj K K 1985 *Phys. Rev. B* **31** 913
- [9] Bryant G W 1985 *Phys. Rev. B* **31** 7812
- [10] Weber G , Schulz P A , Oliveira L E 1988 *Phys. Rev. B* **38** 2179
- [11] Porras-Montenegro N , Lopez-Gondar J , Oliveira L E 1991 *Phys. Rev. B* **43** 1824
- [12] Latge A , Porras-Montenegro N , Oliveira L E 1992 *Phys. Rev. B* **45** 6742
- [13] Brownand J W , Spector H N 1986 *J. Appl. Phys.* **59** 1179
- [14] Li S S , Xia J B 2007 *Phys. Lett. A* **366** 120
- [15] Porras-Montenegro N , Perez-Merchancano S T 1992 *Phys. Rev. B* **46** 9780
- [16] Porras-Montenegro N , Perez-Merchancano S T , Latge A 1993 *J. Appl. Phys.* **74** 7624
- [17] Bose C 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 3089
- [18] Bose C , Sarkar K 1998 *Phys. B* **253** 238
- [19] Montes A , Duque C A , Porras-Montenegro N 1998 *J. Appl. Phys. Lett.* **84** 1421
- [20] Lozano-Cetina J C , Porras-Montenegro N 1998 *Phys. Stat. Sol. B* **210** 717
- [21] Mendoza C I , Vazquez G J , del Castillo-Mussot M , Spector H 2005 *Phys. Rev. B* **71** 075330
- [22] Li S S , Xia J B 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 7171
- [23] Assaid E , Frffo E , Khaidar M , Dujardin F , Stebe B 2001 *Phys. Scr.* **63** 329
- [24] Li S S , Xia J B 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 093716
- [25] Wang H , Farias G A , Freire V N 1999 *Phys. Rev. B* **60** 5705
- [26] Angerer H , Brun D , Freudenberg F , Ambacher O , Stutzmann M 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 1504
- [27] Yu L S 2006 *Physics of Semiconductor Heterojunction* (Beijing : Science Press) p277 [虞丽生 2006 半导体异质结物理(北京 科学出版社)第 277 页]
- [28] Martin G , Botchkarev A 1996 *J. Appl. Phys.* **68** 2541

Effect of different effective mass and electric field on the electronic structure in $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ spherical quantum dot^{*}

Wu Hui-Ting Wang Hai-Long[†] Jiang Li-Ming

(College of Physics and Engineering , Qufu Normal University , Qufu 273165 , China)

(Received 20 May 2008 ; revised manuscript received 23 July 2008)

Abstract

In this paper , we have calculated the impurity electronic states and the binding energy with the variation of the quantum dot radius and Al content in $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ spherical quantum dot (QD) using the plane wave method . The modification of the energy states is discussed when the difference in effective electron mass in GaN and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ is taken into account . The results show that the difference in effective mass can not be neglected when Al content is large . In addition , with the consideration of the difference in effective mass , we investigate the binding energy as function of quantum dot radius , impurity position and external electric field . The results are meaningful and can be widely applied in the design of optoelectronic devices .

Keywords : spherical quantum dot , plane wave method , effective mass

PACC : 7125 , 7115 , 7320D

^{*} Project supported by the Scientific Research Foundation for the Returned Overseas Chinese Scholars , State Education Ministry .

[†] Corresponding Author . E-mail : hlwang@mail. qfnu. edu. cn