

纤锌矿氮化物量子阱中光学声子模的三元混晶效应*

屈 媛 班士良[†]

(内蒙古大学物理科学与技术学院, 内蒙古自治区高等学校半导体光伏技术重点实验室, 呼和浩特 010021)

(2009 年 6 月 20 日收到; 2009 年 10 月 19 日收到修改稿)

本文先比较了几种常用方法(修正的无规元素等位移模型、虚晶近似和简化相干势近似等)对纤锌矿三元混晶体声子频率的拟合结果,再选用与实验数据接近的拟合方法,结合介电连续和单轴晶体模型导出含纤锌矿三元混晶 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单量子阱各类光学声子模的色散关系,进一步分析了声子模随组分的变化. 结果表明,修正的无规元素等位移模型对单模性纤锌矿三元混晶声子频率的拟合更接近实验数据. 由于声子色散的各向异性,量子阱各类光学声子模随组分而发生变化,声子的局域模、界面模、半空间模以及传播模存在于特定组分和频率范围内,且同种声子模色散关系的形态也随组分而改变.

关键词: 纤锌矿, 三元混晶, 量子阱, 光学声子模

PACC: 6322, 7865K, 7800

1. 引 言

Ⅲ-N 二元化合物 AlN, GaN 和 InN 通常具有两种晶体结构,即纤锌矿和闪锌矿. 它们均属直接宽禁带半导体,但前者较后者更加稳定^[1]. 同其他三元混晶(TMC)类似,Ⅲ-N TMC 表现出很多不同于其二元化合物的物性,并且这些物性还可通过调节组分在很大范围内改变. 例如,在室温 300 K 时, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的带隙宽度和截止波长可分别在 GaN 的 3.4 eV 和 365 nm 到 AlN 的 6.1 eV 和 200 nm 之间连续调制^[2]. 纤锌矿 InN 的带隙宽度仅为 0.7—0.8 eV^[3],这使得 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 可形成从紫外到红外波长范围的直接带隙半导体. Ⅲ-N TMC 的应用潜力激发了人们对其在理论和实验方面的研究兴趣^[4—11]. 近二十年来,由于制备工艺的巨大进步, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 已成为紫外光探测器、深紫外发光二极管(LED)^[4] 以及双色光电子器件^[5] 常用的半导体材料. 最近江洋等^[6] 采用 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 插入层改善了 6H-SiC 上金属有机物气相外延生长的 GaN 薄膜质量. 由 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 构成的异质结激光器^[7] 和量子阱 LED^[8—11] 的物性研究也受到人们的重视.

声子对材料的光电性质有较大影响^[12]. 依据 TMC $A_xB_{1-x}C$ 布里渊区中心光学声子随组分变化的特点,可将其按声子行为分为单模性和双模性两类. 对单模情形, $A_xB_{1-x}C$ 声子频率随组分 x 近似线性地由 BC 变化至 AC 的声子频率;在双模情形下,对给定组分 x 则存在两类声子,分别接近 AC 和 BC 的声子频率,称之为类 AC 模和类 BC 模. 拉曼谱分析发现闪锌矿和纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的纵光学(LO)声子表现出单模行为,横光学(TO)声子表现出双模行为^[13—15],而闪锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 LO 和 TO 声子均为单模^[16]. 根据 In 组分在 $0 < x < 0.5$ 内的纤锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的拉曼散射谱, Alexson 等^[17] 推测轴向振动模 A_1 (LO)声子表现出单模行为. 理论上对 TMC 体光学声子频率的拟合通常采用无规元素等位移模型(REI)^[18] 及其修正(MREI)^[19, 20]、有效声子近似(EPMA)^[21] 以及线性拟合虚晶近似(VCA)等理论模型. REI 模型最初由 Chen 等^[18] 在未考虑原子间库仑相互作用近似下提出. 不久, Chang 等^[19] 修正了 REI 模型,以局域电场的形式将原子间长程库仑相互作用引入原子动力学方程,分解了横纵光学声子模,并从组成 TMC 元胞的原子质量出发解释了实验上观测到的单模和双模现象^[22]. Liang 等^[21] 在 MREI 理论框架内提出 EPMA 拟合极性闪锌矿 TMC

* 国家自然科学基金(批准号: 60966001)、内蒙古自治区自然科学基金重点项目(批准号: 20080404Zd02)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20070126001)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: slban@imu.edu.cn

的光学声子频率. Yu 等^[20]在不计统计相关性的前提下将基于闪锌矿的 MREI 推广至纤锌矿 TMC, 计算纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 TO 和 LO 声子, 得到强模和弱模两组频率, 其本质属单模结果. Grille 等^[23]结合 MREI 和刚性离子模型, 采用第一性原理计算声子态密度得出: 纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 LO 及 A_1 (TO) 声子为单模, 平行振动模 E_1 (TO) 声子为双模, 纤锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 LO 和 TO 声子均为单模. Ban 等^[24]曾用简化相干势近似 (SCPA) 计算 II-VI 族 TMC 的禁带宽度 E_g , 得到 E_g 随组分 x 的非线性变化关系, 后又将其推广到 III-V 族 TMC 的计算^[25], 均与实验^[26, 27]符合较好. 由于声子频率可转换为能量量纲, 我们认为可将 SCPA 推广至单模声子频率的近似计算.

因声子色散的各向异性, 纤锌矿量子阱的光学声子较闪锌矿更为复杂. 除了存在同闪锌矿结构类似的界面模 (IF), 局域模 (CO) 和半空间模 (HS) 之外, 还可能存在传播模 (PR)^[28]. Komirenko 等^[29]基于介电连续^[30]和单轴晶体模型^[31], 导出纤锌矿单双异质结体系光学声子的色散关系. 人们常采用转移矩阵法数值求解多界面异质结构光学声子模^[32, 33]. 对含 TMC 的异质结构, 通常先用某种近似方法拟合 TMC 的体声子频率, 由介电连续模型和晶格动力学导出其色散关系, 再求异质结构的光学声子模^[33-36]. 郑瑞生等^[34]已详细讨论含闪锌矿 TMC 量子阱的光学声子模 (包括 CO, IF 和 HS 模), 并用赝元胞 (PUC) 方法拟合闪锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的晶格振动模, 计算了闪锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱的界面声子模^[35]. 危书义等^[36]用 PUC 方法拟合纤锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 声子频率, 并解得纤锌矿 $\text{GaN}/\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱的界面声子. 史俊杰^[33]在讨论纤锌矿 $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ 多界面异质结构时, 首先用 VCA 获得 $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 体声子频率, 再用转移矩阵法在 $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 的低频段 (考虑应变: 67.38—73.22 meV, 不考虑应变: 67.38—69.25 meV) 求解传播模. 值得注意的是, 这里对 $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 的 TO 体声子采用了单模近似, 而实验测得 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 TO 体声子则为双模^[14, 15]. 显然, 对给定组分的 TMC, 不同方法将拟合出不同的体光学声子频率, 从而导致其异质结构声子模的差异, 这将进一步影响到异质结构的诸多光电性质的理论计算.

王新军等^[37]曾讨论 TMC 缺陷层 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 对

AlAs/GaAs 有限超晶格中局域界面光学声子模的影响. 就我们所知, 精细讨论含 TMC 纤锌矿量子阱光学声子模混晶效应的理论工作尚鲜见报道. 需要说明的是, 因 EPMA 用于双模晶体的进一步计算, 而 PUC 又基于 MREI, 本文则先采用 MREI, VCA, SCPA 三种方法拟合纤锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的单模行为体光学声子频率, 同时提出一组线性公式拟合 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的双模 TO 体声子频率, 与不同组分下的实验结果进行对比. 然后采用与实验值符合较好的近似方法, 进一步计算和分析以纤锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 为阱材料 (二元化合物为垒材料) 的 BTB 和垒材料 (二元化合物为阱材料) 的 TBT 两种类型量子阱的光学声子模随组分的变化.

2. 理论与模型

2.1. 纤锌矿三元混晶的光学声子

纤锌矿 III-N 化合物属单轴晶体, 其能带布里渊区 Γ 点的光学声子矢量方程可沿垂直和平行晶轴方向分解为两个独立方程, 从而将光学声子模分为轴向振动模 (A_1 或 Γ_1) 和平行振动模 (E_1 或 Γ_5). MREI 以及 PUC 等模型均只适用于对低频极化有贡献的可被红外谱激发的声子模^[20]. 纤锌矿中可以被红外激发的光学振动模只有 A_1 和 E_1 , A_1 和 E_1 又分为横纵模, 分别记为“t”和“l”. 若选晶轴方向为 z 轴, 记为“z”, 垂直晶轴的平面为 x - y 平面, 记为“ \perp ”, 建立直角坐标系, 则 A_1 (TO), A_1 (LO), E_1 (TO) 和 E_1 (LO) 声子模的特征频率可表示为 $\omega_{\perp t}$, $\omega_{\perp l}$ 和 $\omega_{\perp 1}$.

2.1.1. 无规元素等位移模型 (MREI)

对 TMC $A_xB_{1-x}C$, MREI 的基本假设是组分为 x 的 A 原子和组分为 $1-x$ 的 B 原子共同组成 C 原子的最近邻原子. 仅考虑元胞中最近邻原子的相互作用, 以局域电场的形式引入与其他原子的长程库仑相互作用, 建立元胞的微观动力学方程. 再结合玻恩-黄昆方程的力常数微观量与二元化合物 AC 和 BC 声子频率宏观量之间的定量关系, 在长波极限下可解得 TMC 的光学声子模^[19]. Yu 等^[20]将 MREI 模型推广到纤锌矿 TMC 的计算, 解得其光学声子频率 ω_{ix} 为

$$\omega_{ix}^2 = \frac{\Omega_{ixa}^2 + \Omega_{ixb}^2}{2} \pm \left[\left(\frac{\Omega_{ixa}^2 - \Omega_{ixb}^2}{2} \right)^2 + x(1-x)\Omega_{ixab}^4 \right]^{1/2}, \quad (1)$$

式中, 下标 $i = z, \perp$ 表示声子振动的传播方向, $X = t, l$ 表示声子的横纵模式. 这里

$$\Omega_{iXa}^2 = \omega_{ia}^2 + x\beta_{iX}\omega_{ia}^2, \quad (2)$$

$$\Omega_{iXb}^2 = \omega_{ib}^2 + (1-x)\beta_{iX}\omega_{ib}^2, \quad (3)$$

$$\Omega_{iXab}^4 = \left[\left(\frac{\delta_{ia}}{\delta_{ib}} \right)^{1/2} \beta_{iX}\omega_{ia}\omega_{ib}' + \frac{\bar{\mu}}{m_C}\omega_{iFb}^2 \right] \times \left[\left(\frac{\delta_{ib}}{\delta_{ia}} \right)^{1/2} \beta_{iX}\omega_{ia}\omega_{ib}' + \frac{\bar{\mu}}{m_C}\omega_{iFa}^2 \right], \quad (4)$$

$$\beta_{it} = -\gamma_i, \beta_{il} = (3 - \gamma_i)/\varepsilon_i^\infty, \quad (5)$$

$$\bar{\mu} = \sqrt{\mu_a\mu_b}. \quad (6)$$

上式中, $\gamma_z = 1 - 0.1 \times (3/4\pi)$, $\gamma_\perp = 1 + 0.2 \times (3/4\pi)$ 是利用洛伦兹关系推导局域电场时引入的

参数. $\omega_{iFb}^2 = \frac{F_{ib}}{\mu_b}$, F_{ib} 为最近邻原子的有效力常数. $\mu_a = m_A m_C / (m_A + m_C)$, $\mu_b = m_B m_C / (m_B + m_C)$ 分别为二元化合物 AC 和 BC 的约化质量. m_A, m_B 和 m_C 分别为 A, B 和 C 的原子质量.

$A_x B_{1-x} C$ 的高频介电常数与 AC 和 BC 的高频介电常数 ε_{ia}^∞ 和 ε_{ib}^∞ 的关系为

$$\frac{\varepsilon_i^\infty}{3 + \gamma_i(\varepsilon_i^\infty - 1)} = x \frac{v_a}{v} \frac{\varepsilon_{ia}^\infty - 1}{3 + \gamma_i(\varepsilon_{ia}^\infty - 1)} + (1-x) \frac{v_b}{v} \frac{\varepsilon_{ib}^\infty - 1}{3 + \gamma_i(\varepsilon_{ib}^\infty - 1)}, \quad (7)$$

其中, v 为 $A_x B_{1-x} C$ 的元胞体积, 可写为 AC 元胞体积 v_a 和 BC 元胞体积 v_b 的线性组合 $v = xv_a + (1-x)v_b$. 静态介电常数 ε_i^0 和 高频介电常数 ε_i^∞ 满足 LST (Lyddane-Sachs-Teller) 关系 $\varepsilon_i^0 = \varepsilon_i^\infty \omega_{il}^2 / \omega_{ia}^2$.

以下为(2)–(4)式中的其他参数:

$$\omega_{ia}^2 = \omega_{iFa}^2 \left[1 - (1-x) \frac{\mu_a}{m_C} \right], \quad (8)$$

$$\omega_{ia'}^2 = \delta_{ia} \frac{v_a}{v} \frac{3 + \gamma_i(\varepsilon_{ia}^\infty - 1)}{\gamma_i[3 + \gamma_i(\varepsilon_{ia}^\infty - 1)]} (\omega_{iFa}^2 - \omega_{ia}^2), \quad (9)$$

$$\delta_{ia} = 1 - (1-x) \frac{\mu_a}{m_C} \left(1 - \frac{e_{ib}}{e_{ia}} \right), \quad (10)$$

$$\frac{F_{ia}}{\mu_b} = \omega_{iFa}^2 = \frac{3 + \gamma_i(\varepsilon_{ia}^0 - 1)}{3 + \gamma_i(\varepsilon_{ia}^\infty - 1)} \omega_{ia}^2, \quad (11)$$

(10)式中, e_{ia} 和 e_{ib} 分别是 AC 和 BC 的各向异性有效电荷. 可将(8)–(11)式中的 a 替换为 b , 同时将 $1-x$ 替换为 x , 求得上述诸式中的 ω_{ib} , ω_{ib}' , ω_{iFb} 和 δ_{ib} .

2.1.2. $Al_x Ga_{1-x} N$ 的 TO 声子频率

借鉴 Holtz 等^[15] 提出的拟合方法, 结合 Davydov 等^[14] 用二次拉曼谱测得的频率, 可将 $Al_x Ga_{1-x} N$ 双模行为的 TO 声子频率表示为 $\omega(x) = \omega_0 + \alpha f(x)$. 表 1 给出了 $Al_x Ga_{1-x} N$ 的 TO 声子频率. 表 1 中 $\omega_{zta, AlGaN}$ ($\omega_{\perp ta, AlGaN}$) 指 $Al_x Ga_{1-x} N$ 的类 $AlN A_1$ (TO) (E_1 (TO)) 声子频率, $\omega_{ztb, AlGaN}$ ($\omega_{\perp tb, AlGaN}$) 指 $Al_x Ga_{1-x} N$ 的类 $GaN A_1$ (TO) (E_1 (TO)) 声子频率.

表 1 $Al_x Ga_{1-x} N$ 的 TO 声子频率

$\omega(x)/\text{cm}^{-1}$	ω_0/cm^{-1}	α/cm^{-1}	$f(x)$
$\omega_{zta, AlGaN}$	$\omega_{zt, AlN}$	10	$1-x$
$\omega_{\perp ta, AlGaN}$	$\omega_{\perp t, AlN}$	-58	$1-x$
$\omega_{ztb, AlGaN}$	$\omega_{zt, GaN}$	62	x
$\omega_{\perp tb, AlGaN}$	$\omega_{\perp t, GaN}$	62	x

2.2. 纤锌矿量子阱的光学声子

纤锌矿的介电函数具有各项异性, 将其沿平行和垂直晶轴的方向分解, 并依据 Loudon 模型^[31], III-N 二元化合物依赖频率变化的介电函数则可表示为

$$\varepsilon_z(\omega) = \varepsilon_z^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{z1}^2}{\omega^2 - \omega_{z1}^2},$$

$$\varepsilon_\perp(\omega) = \varepsilon_\perp^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{\perp 1}^2}{\omega^2 - \omega_{\perp 1}^2}. \quad (12)$$

对 LO 和 TO 声子均为单模行为的 $In_x Ga_{1-x} N$, 有

$$\varepsilon_{z, InGaN}(\omega) = \varepsilon_{z, InGaN}^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{z1, InGaN}^2}{\omega^2 - \omega_{z1, InGaN}^2},$$

$$\varepsilon_{\perp, InGaN}(\omega) = \varepsilon_{\perp, InGaN}^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{\perp 1, InGaN}^2}{\omega^2 - \omega_{\perp 1, InGaN}^2}. \quad (13)$$

对 LO 和 TO 声子均为双模行为的材料, 依赖频率的介电函数为^[34]

$$\varepsilon_{z, TMC}(\omega) = \varepsilon_{z, TMC}^\infty \frac{(\omega^2 - \omega_{\perp 1a}^2)(\omega^2 - \omega_{\perp 1b}^2)}{(\omega^2 - \omega_{z1a}^2)(\omega^2 - \omega_{z1b}^2)}, \quad (14a)$$

$$\varepsilon_{\perp, TMC}(\omega) = \varepsilon_{\perp, TMC}^\infty \frac{(\omega^2 - \omega_{\perp 1a}^2)(\omega^2 - \omega_{\perp 1b}^2)}{(\omega^2 - \omega_{\perp 1a}^2)(\omega^2 - \omega_{\perp 1b}^2)}. \quad (14b)$$

$Al_x Ga_{1-x} N$ 的 LO 声子为单模而 TO 声子为双模, 这种光学声子结构 TMC 依赖频率的介电函数未见报道. 依照(14)式, 考虑到量纲的正确性, 将其构造为

$$\varepsilon_{z, AlGaN}(\omega) = \text{sign}(\omega^2 - \omega_{z1, AlGaN}^2) \varepsilon_{z, AlGaN}^\infty \times \frac{(\omega^2 - \omega_{z1, AlGaN}^2)^2}{(\omega^2 - \omega_{z1a}^2)(\omega^2 - \omega_{z1b}^2)}, \quad (15a)$$

$$\varepsilon_{\perp, \text{AlGa}_x\text{N}}(\omega) = \text{sign}(\omega^2 - \omega_{\perp 1, \text{AlGa}_x\text{N}}^2) \varepsilon_{z, \text{AlGa}_x\text{N}}^{\infty} \times \frac{(\omega^2 - \omega_{\perp 1, \text{AlGa}_x\text{N}}^2)^2}{(\omega^2 - \omega_{\perp 1a}^2)(\omega^2 - \omega_{\perp 1b}^2)}, \quad (15b)$$

需要说明的是,含有 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的纤锌矿量子阱应类似于纤锌矿 AlN/GaN 量子阱,光学声子模可能存在高频解和低频解,(15)式中的 sign 函数保证了量子阱声子模不因分子平方项的存在而丢掉高频解.

量子阱属一维受限体系,可将声子势在 z 轴方向的分量 $\phi(z)$ 写为^[32]

$$\phi_n(z) = A_n e^{ik_n z} + B_n e^{-ik_n z}, \quad (16)$$

其中, $A_n e^{ik_n z}$ ($B_n e^{-ik_n z}$) 表示向右(左)传播. 声子在 z 方向的波数 $k_n = \sqrt{-(\varepsilon_{\perp n}/\varepsilon_{zn})}q$, 下标 n 表示第 n 层材料. 当 $\varepsilon_{\perp} \varepsilon_z < 0$ 时得振荡势, 而当 $\varepsilon_{\perp} \varepsilon_z > 0$ 时则得衰减势.

下面以阱宽为 d 的单量子阱为例,并记阱材料为“1”,垒材料为“2”,简述在纤锌矿量子阱中可能存在的光学声子模(包括 IF, CO, HS 和 PR). $\phi(z)$ 满足边界条件^[32]

$$-\varepsilon_{z2}(\omega) \frac{\partial \phi_2(z)}{\partial z} \Big|_{z=\mp d/2} = -\varepsilon_{z1}(\omega) \frac{\partial \phi_1(z)}{\partial z} \Big|_{z=\mp d/2}, \quad (17a)$$

$$\phi_2(z) \Big|_{z=\mp d/2} = \phi_1(z) \Big|_{z=\mp d/2}. \quad (17b)$$

IF 模声子势由界面处向两侧以指数衰减,即要求 $\varepsilon_{z1} \varepsilon_{\perp 1} > 0, \varepsilon_{z2} \varepsilon_{\perp 2} > 0$, 且满足 $\varepsilon_{z1} \varepsilon_{z2} < 0$ ^[28], 由附加边界条件

$$\phi_2(z) \Big|_{z \rightarrow \mp \infty} = 0, \quad (18)$$

可解得 IF 模的色散关系^[29]. 其反对称模满足

$$Q = \frac{1}{2\alpha} \ln \left[\frac{(\xi_1 + \xi_2)}{(\xi_2 - \xi_1)} \right], \quad (19a)$$

对称模满足

$$Q = \frac{1}{2\alpha} \ln [(\xi_1 + \xi_2)/(\xi_1 - \xi_2)], \quad (19b)$$

其中, $Q = qd$, $\xi_1 = \sqrt{|\varepsilon_{z1}(\omega) \varepsilon_{\perp 1}(\omega)|}$, $\xi_2 = \sqrt{|\varepsilon_{z2}(\omega) \varepsilon_{\perp 2}(\omega)|}$, $\alpha = \frac{1}{2} \sqrt{|\varepsilon_{\perp 1}(\omega)/\varepsilon_{z1}(\omega)|}$. 当 $\xi_1 = \xi_2$ 时,将得到 IF 共振模.

不同于闪锌矿量子阱的局域声子势(完全局域在阱内),纤锌矿的各向异性导致其量子阱 CO 模声子势在阱中振荡,垒中指数衰减,即要求 $\varepsilon_{z1} \varepsilon_{\perp 1} < 0, \varepsilon_{z2} \varepsilon_{\perp 2} > 0$. 根据 CO 模声子势也满足的边界条件(17)和(18)式,可得 CO 模的色散关系^[29],其反对称模满足,当 $\lambda = -1$ 时, $m = 1, 2, 3, \dots$ 或 0,

$$Q = [m\pi - \lambda \arctan(\xi_1/\xi_2)]/\alpha, \quad (20a)$$

对称模满足,当 $\lambda = 1$ 时, $m = 1, 2, 3, \dots$ 或 0,

$$Q = [m\pi + \lambda \arctan(\xi_2/\xi_1)]/\alpha, \quad (20b)$$

其中, m 为量子数, $\lambda = \text{sign}(\varepsilon_{z1} \cdot \varepsilon_{z2})$.

同理,不同于闪锌矿量子阱的半空间声子势(完全局域在垒中),纤锌矿量子阱的 HS 声子势在垒中振荡,阱中指数衰减,即要求 $\varepsilon_{z1} \varepsilon_{\perp 1} > 0, \varepsilon_{z2} \varepsilon_{\perp 2} < 0$. 根据边界条件(17)和(18)式,可得纤锌矿量子阱中 HS 模的色散关系^[29],其反对称模满足

$$\beta Q - \lambda \arctan \left[\frac{\xi_2}{\xi_1} \tanh(\alpha Q) \right] - m\pi = 0, \quad (21a)$$

对称模满足

$$\beta Q + \lambda \arctan \left[\frac{\xi_1}{\xi_2} \tanh(\alpha Q) \right] - m\pi = 0, \quad (21b)$$

其中, $\beta = \frac{1}{2} \sqrt{|\varepsilon_{\perp 2}(\omega)/\varepsilon_{z2}(\omega)|}$, $m = 1, 2, 3, \dots$. 当 $Q(\omega) \neq 0$ 时,若使解在任何频率范围内均存在,需满足 $m = 0$.

PR 模是因纤锌矿的各向异性而可能存在于其量子阱中的特殊光学声子模,其声子势在阱和垒中均是振荡的,即要求 $\varepsilon_{z1} \varepsilon_{\perp 1} < 0, \varepsilon_{z2} \varepsilon_{\perp 2} < 0$. 此时,边界条件(18)式不再适用,取而代之的是 $-\mathbf{k} \times \mathbf{E} = 0$ ^[29]. 再依据边界条件(17)式,可得到 PR 满足的色散关系^[29]

$$Q = \frac{m'\pi}{2\alpha}, \quad (22)$$

其中,反对称和对称声子模分别满足 $m' = 1, 3, 5, \dots$, 和 $m' = 2, 4, 6, \dots$.

表2 计算所用参数

	$\omega_{\text{tr}}/\text{cm}^{-1}$	$\omega_{\text{pl}}/\text{cm}^{-1}$	$\omega_{\perp 1}/\text{cm}^{-1}$	$\omega_{\perp 1}/\text{cm}^{-1}$	ε_z^{∞}	$\varepsilon_{\perp}^{\infty}$
AlN	614 ^[38]	888 ^[39]	673 ^[38]	898 ^[38]	5.36 ^[38]	5.17 ^[38]
GaN	532 ^[20]	734 ^[20]	559 ^[20]	741 ^[20]	6.38 ^[38]	6.11 ^[38]
InN	443 ^[38]	586 ^[38]	467 ^[38]	595 ^[38]	7.96 ^[38]	7.61 ^[38]

表3 计算所用参数

	$a/\text{\AA}$ ^[38]	$c/\text{\AA}$ ^[38]	e_z/e_0 ^[38]	e_{\perp}/e_0 ^[38]	m_z/m_0 ^[40]	m_{\perp}/m_0 ^[40]
AlN	3.10	5.01	2.85	2.70	0.28	0.32
GaN	3.20	5.22	2.86	2.69	0.20	0.20
InN	3.48	5.64	2.96	2.78	0.12	0.12

3. 数值计算和讨论

我们用 MREI, VCA 和 SCPA 等方法拟合纤锌矿 TMC 的体声子频率, 并与实验数据进行对比, 再结合 Komirenko 等^[29] 基于介电连续和单轴晶体模型导出的纤锌矿单量子阱光学声子的色散关系, 进一步分析含纤锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单量子阱声子模的混晶效应.

3.1. 纤锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 及含 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的量子阱的光学声子

纤锌矿 InN 和 GaN 的晶格常数相差很大, 这使 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 具有较大的固溶隙和应变, 在 700—800 °C 时生长厚为 0.5 μm 的 TMC 薄膜, 当组分 $x > 0.3$ 时就会发生相分离^[41]. 虽然人们发现这种相分离现象可通过将膜做得很薄而被有效抑制, 且实验上

已成功生长出组分 $x > 0.3$ 的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 薄膜^[42], 但其声子谱数据特别是处于低频段的 ω_{z1} 和 $\omega_{\perp 1}$ 仍非常有限. 对比 Alexson 等^[17] 利用紫外拉曼谱获得的 In 组分 $0 < x < 1$ 时的 ω_{z1} 和 Behr 等^[43] 测得的 In 组分 $x < 0.11$ 时的 $\omega_{\perp 1}$, 发现 MREI 方法对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体声子频率 ω_{z1} 和 $\omega_{\perp 1}$ 的实验拟合较好. 因此, 在以下讨论中, 将通过 MREI 模型获得纤锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体声子包括 LO 和 TO 模频率的理论值.

图 1 给出了用 MREI 模型拟合纤锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 声子频率时, BTB 和 TBT 两种结构量子阱光学声子模式随组分的变化和临界组分. 可以看出, 随着 In 组分的变化, 阱垒的声子频率会出现交点, 以 A, B, C 和 D 分别标注之. 此时, 临界组分分别为 $x_A = 0.056$, $x_B = 0.34$, $x_C = 0.65$ 和 $x_D = 0.95$ (应该指出的是, 采用不同的拟合方法则有不同的交点位置). 依据 2.2 节给出的模式判定条件, 可以以交点为界, 划分出各类光学声子模存在的频率范围, 如表 4 所列.

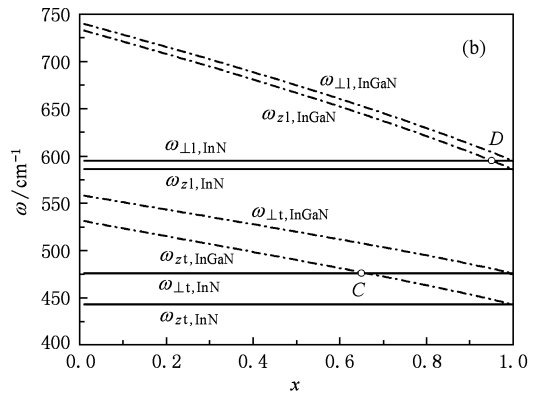
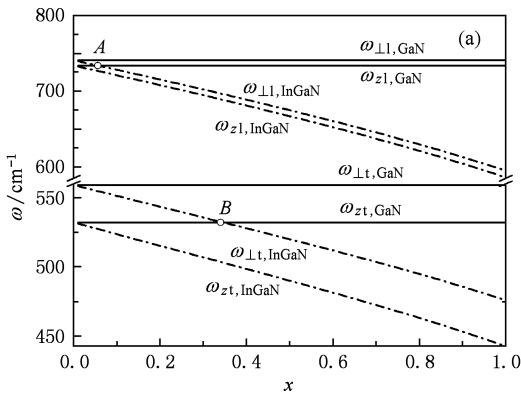


图 1 含 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 纤锌矿量子阱光学声子模随组分的变化关系及临界组分. 图中点虚线为 MREI 模型拟合的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体声子频率. (a) GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ /GaN BTB 量子阱, 临界组分分别为 x_A 和 x_B , 实线表示 GaN 体声子频率; (b) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ /InN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ TBT 量子阱, 临界组分分别为 x_C 和 x_D , 实线表示 InN 体声子频率

表 4 给出了 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱中各类光学声子模存在的组分及频率范围. BTB 指 GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ /GaN 量子阱. TBT 指 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ /InN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱. 表中变量下标“1”表示阱材料, “2”表示垒材料. 以下将频率边界为 TO 声子频率的声子模称为横模, 将边界为 LO 声子频率的称为纵模. 可以看出, 在任意组分下, CO 和 HS 模均存在横纵模. 而 IF 和 PR 模则不同, 在任意组分下只存在以下三种组合之一: 1) 一支 IF 横模, 一支 IF 纵模; 2) 一支 PR 横模, 一支 IF 纵模; 3) 一支 PR 横模, 一支 PR 纵模. 因此, 可以认为随着 In 组分 x 的变化, 会出现 IF 模和 PR 模的相互转化.

表 4 不同组分时 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱各光学声子模存在的频率范围

量子阱	组分	声子模式	存在的频率范围
BTB 或 TBT	$0 < x < x_A$ $x_D \leq x < 1$	CO	$(\omega_{z11}, \omega_{z12})$ $(\omega_{z11}, \omega_{z12})$
		HS	$(\omega_{\perp 11}, \omega_{\perp 12})$ $(\omega_{\perp 11}, \omega_{\perp 12})$
		IF	$(\omega_{z12}, \omega_{\perp 11})$ $(\omega_{z12}, \omega_{\perp 11})$
BTB 或 TBT	$x_A \leq x < x_B$ $x_C \leq x < x_D$	CO	$(\omega_{z11}, \omega_{z12})$ $(\omega_{z11}, \omega_{\perp 11})$
		HS	$(\omega_{\perp 11}, \omega_{\perp 12})$ $(\omega_{z12}, \omega_{\perp 12})$
		IF	$(\omega_{\perp 11}, \omega_{z12})$ $(\omega_{z12}, \omega_{\perp 11})$
BTB 或 TBT	$x_B \leq x < 1$ $0 < x < x_C$	CO	$(\omega_{z11}, \omega_{\perp 11})$ $(\omega_{z11}, \omega_{\perp 11})$
		HS	$(\omega_{z12}, \omega_{\perp 12})$ $(\omega_{z12}, \omega_{\perp 12})$
		IF	$(\omega_{\perp 11}, \omega_{z12})$ $(\omega_{\perp 11}, \omega_{z12})$
		PR	

图 2 和图 3 为依据表 4 所选 In 的特征组分 $x = 0.01, 0.2$ 时, BTB 量子阱光学声子模的色散关系 (图中用 a, s 和 l 分别表示反对称、对称及第 l 支). 当 $x = 0.01$ 时, 无 IF 模, CO 声子的各支纵模以及 HS 和 PR 声子的各支横模的色散关系仅在 $Q > 0$ 且小于某一特定值范围内有解, 并以 $Q \rightarrow 0$ 时的频率为界; CO 声子的各支横模以及 HS 和 PR 声子的各支纵模, 仅当 Q 大于某一特定值时有解, 并以 $Q \rightarrow \infty$ 时的频率为界. 当 $x = 0.2$ 时, 为 IF 纵模和 PR 横模组合. HS 和 CO 声子的纵模色散关系在 $Q \in (0, \infty)$ 有解, 其相应频率 ω 分别以 $Q \rightarrow 0$ 和 $Q \rightarrow \infty$ 时的频率为上下界. HS 和 PR 声子的各支横模色散

关系在 $Q > 0$ 且小于某一特定值范围内有解, 并以 $Q \rightarrow 0$ 时的频率为上界. 对称支 IF 声子纵模的频率在 $Q \in (0, \infty)$ 内随 Q 增加先逐渐减小, 后趋于一常数. 同时, 反对称支 IF 模的频率从 Q 大于某值开始出现并自频率下限随 Q 逐渐增大, 当 $Q \rightarrow \infty$ 时, 与对称支趋近同一渐近值. CO 横模在 Q 大于某值时才出现, 且频率由上界逐渐减小, 并于 $Q \rightarrow \infty$ 时趋近下界.

由以上讨论可知, 声子色散的各向异性导致 BTB 结构纤锌矿 $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱的声子模存在于不同组分及频率范围内, 同种声子模色散关系的形态亦随组分变化, 在理论计算时须具体考虑.

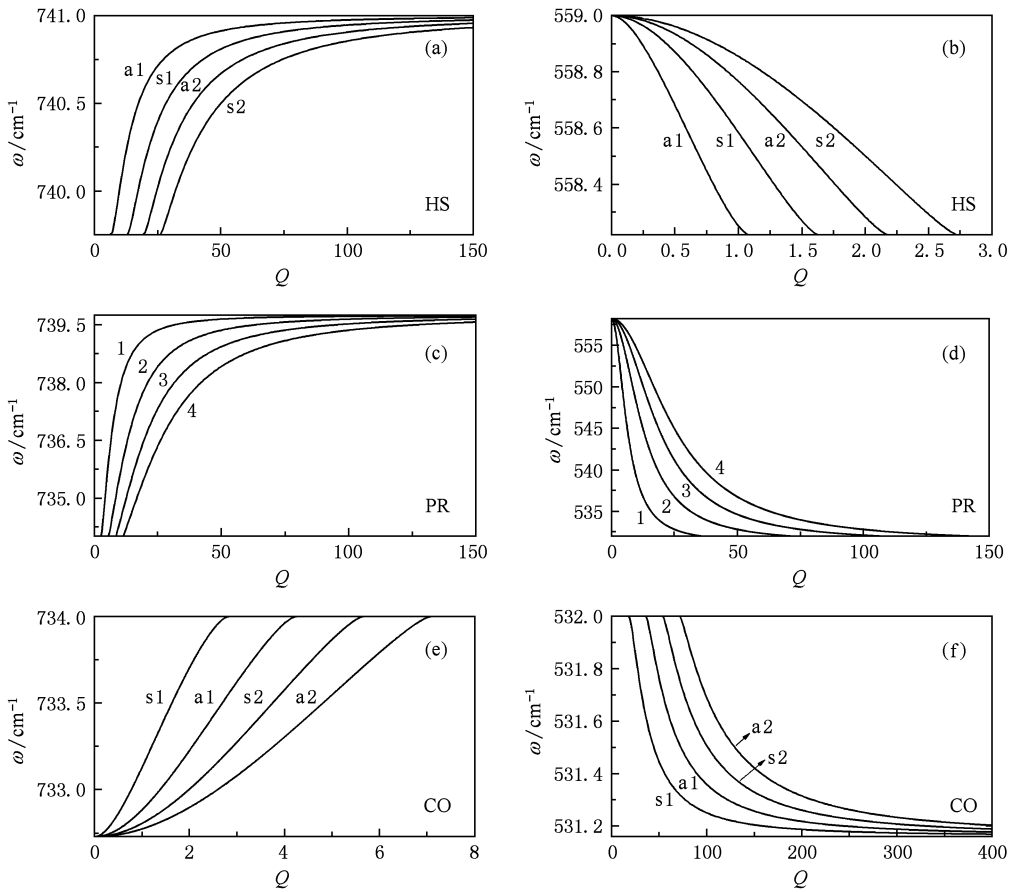


图 2 纤锌矿 $\text{GaN}/\text{In}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱各光学声子模的色散关系 (a) 和 (b) 表示半空间光学声子模, (c) 和 (d) 表示传播光学声子模, (e) 和 (f) 表示局域光学声子模

3.2. 纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 及含 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的量子阱的光学声子

我们的计算表明 MREI 模型对纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单模行为的 LO 声子频率拟合与实验^[39] 符合较好, 且 2.1.2 节的方法可较好地拟合该材料双模行

为 TO 声子的频率^[14]. 以下讨论中, 将采用这两种方法的拟合结果.

含纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 BTB 和 TBT 量子阱声子模式随组分的变化关系及临界组分由图 4 给出. 由于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 LO 声子为单模, TO 声子为双模, 故含 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱的光学声子模式较含

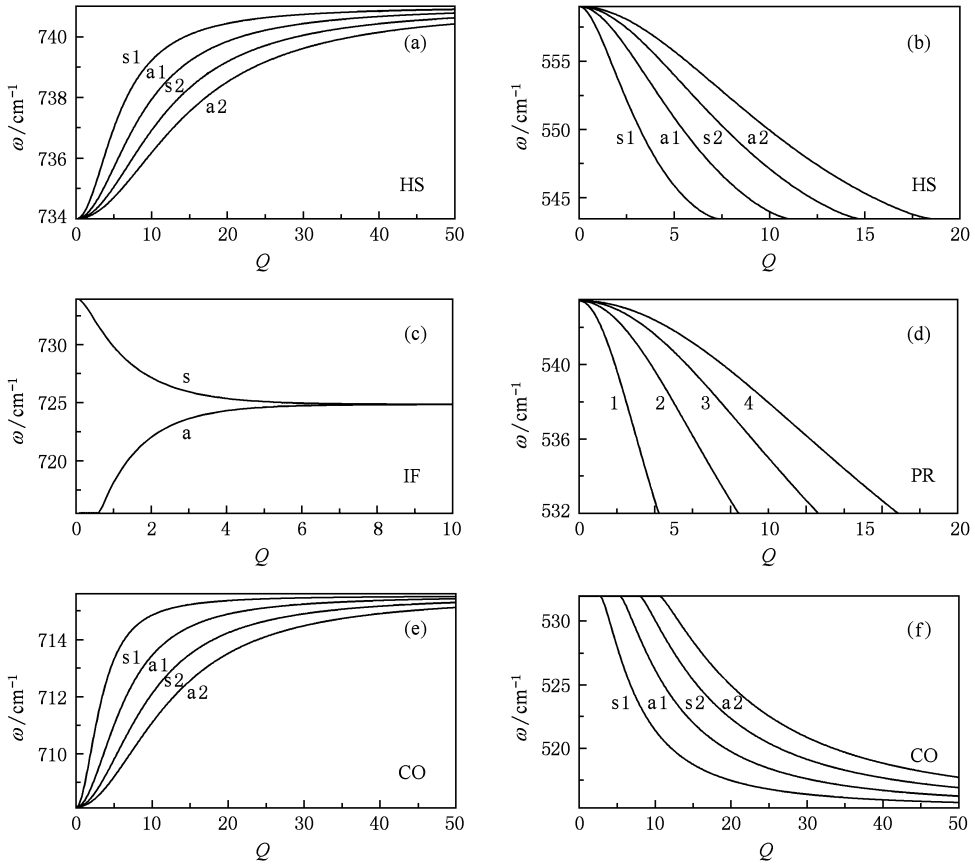


图3 纤锌矿 GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN 量子阱各光学声子模的色散关系 (a)和(b)表示半空间光学声子模,(c)表示界面光学声子模,(d)表示传播光学声子模,(e)和(f)表示局域光学声子模

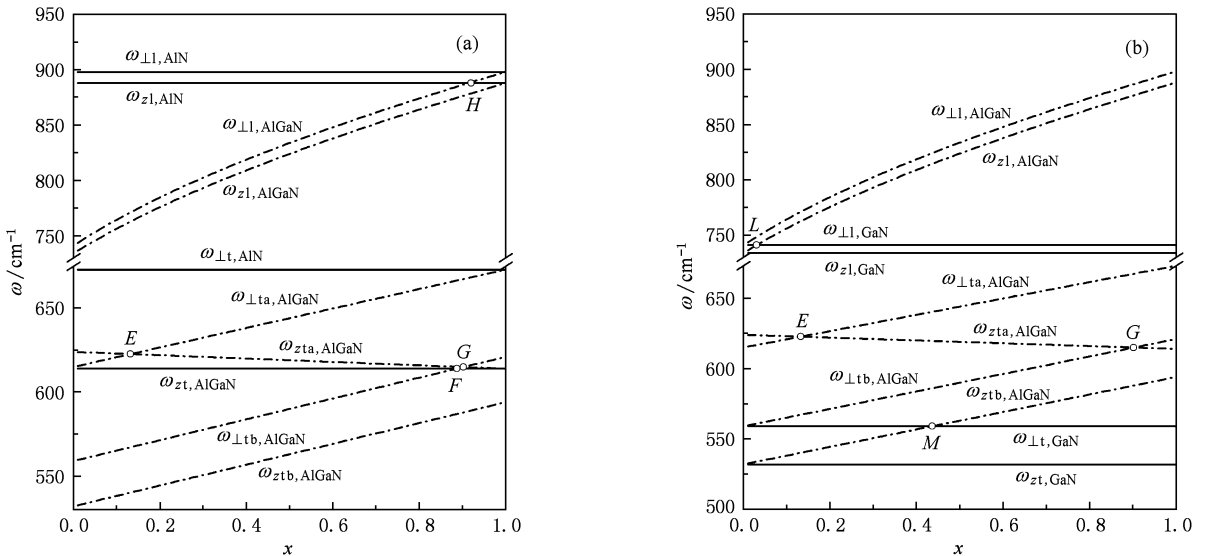


图4 含 Al_xGa_{1-x}N 量子阱光学声子模随组分的变化关系及临界组分 图中点虚线为 MREI 和 2.1.2 节拟合的 Al_xGa_{1-x}N 体声子频率. (a) AIN/Al_xGa_{1-x}N/AIN BTB 量子阱, 临界组分分别为 x_E, x_F, x_C 和 x_H , 实线表示 AIN 体声子频率; (b) Al_xGa_{1-x}N/GaN/Al_xGa_{1-x}N NTBT 量子阱, 临界组分分别为 x_L, x_E, x_M 和 x_C , 实线表示 GaN 体声子频率

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的情形更为复杂. 随着 Al 组分 x 的变化, 阱垒频率会出现更多交点, 如图 4 中 E, F, G, H, L 和 M 点所示, 此时 $x_E = 0.132, x_F = 0.887, x_G = 0.902, x_H = 0.92, x_L = 0.03, x_M = 0.436$. 类似 3.1

节, 依据 2.2 节中声子模式的判别条件, 以交点为界, 在不同组分下只存在几种特定类型的光学声子模, 而同种声子模的频率范围也随组分变化. 同时, 其色散关系形态也有差异, 如图 5 和图 6 所示.

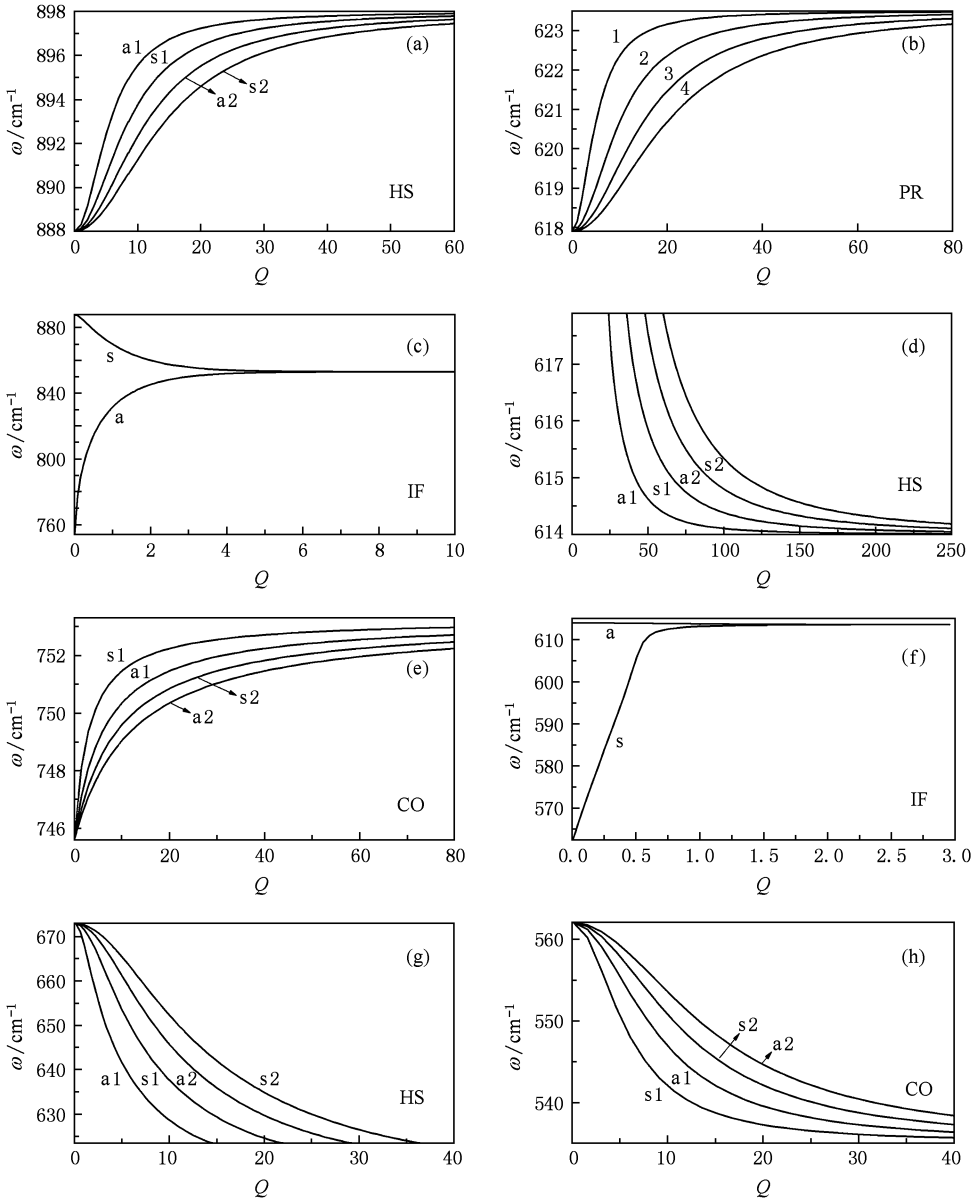


图 5 纤锌矿 $\text{AlN}/\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱各光学声子模的色散关系 (a), (d) 和 (g) 表示半空间光学声子模, (b) 表示传播光学声子模, (c) 和 (f) 表示界面光学声子模, (e) 和 (h) 表示局域光学声子模

我们选取分别处于不同区间的五个 Al 组分特征值 $x = 0.05, 0.5, 0.89, 0.91, 0.97$, 计算 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱的光学声子模的色散关系, 发现存在类似含纤锌矿 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱的混晶效应. 由于篇幅关系, 仅给出 $x = 0.05$ (图 5) 和 $x = 0.97$ (图 6) 时各种声子模的色散关系. 值得注意的是, 当 $x = 0.89, 0.91, 0.97$ 时, 各支 HS 横模

的色散关系仅在非零 Q 的有限区间内有解. 当 $x = 0.91$ 和 $x = 0.97$ 时, 各支 PR 横模不仅在 $Q > 0$, 且小于某有限值时有解, 且有高低频双解. 当 $x = 0.97$ 时, 各支 HS 横模不仅在 Q 大于某有限值到 ∞ 范围内有解, 且在 Q 较小时, 有高低频双解. 其具体形态见图 6 给出的 $x = 0.97$ 时部分 CO, HS 和 PR 横模.

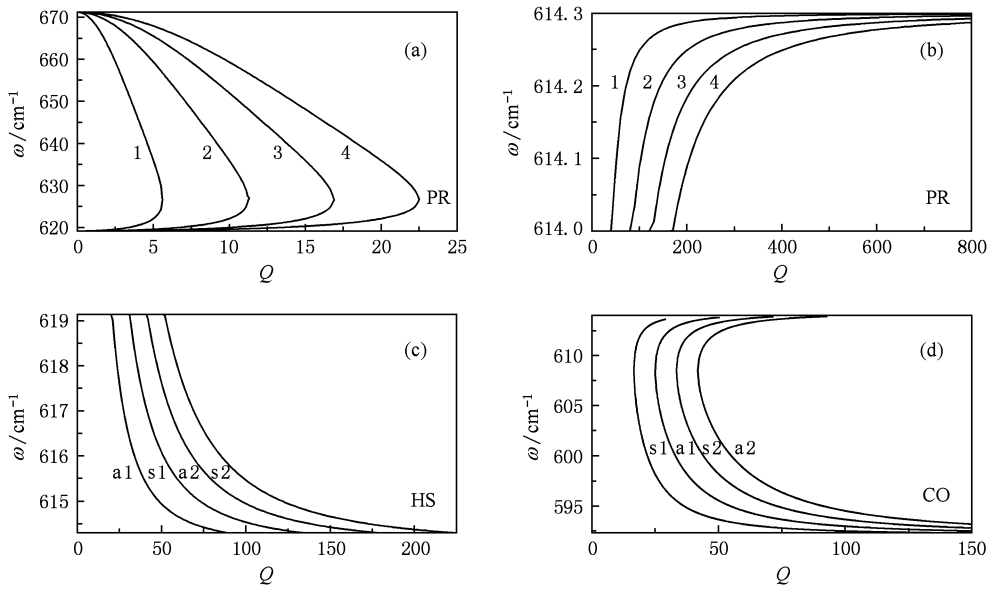


图6 纤锌矿 $\text{AlN}/\text{Al}_{0.97}\text{Ga}_{0.03}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱部分光学声子模的色散关系 (a)和(b)表示传播光学声子模,(c)表示半空间光学声子模,(d)表示局域光学声子模

4. 结 论

MREI 模型对纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单模行为的体声子频率拟合与实验符合较好. 纤锌矿结构的各向异性致使纤锌矿 III-N 化合物声子色散各

向异性,从而导致含纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的量子阱光学声子模表现出复杂的三元混晶效应,即各类声子模式存在于特定的组分和频率范围内,并且同一种声子模色散关系的形态也随组分而变化. 精细考虑含三元混晶的纤锌矿量子阱声子模式对进一步的理论和实验工作均有重要意义.

- [1] Kong Y C, Zheng Y D 2006 *Prog. Phys.* **26** 127 (in Chinese) [孔月婵、郑有焯 2006 物理学进展 **26** 127]
- [2] Reine M B, Hairston A, Lamarre P, Wong K K, Tobin S P, Sood A K, Cooke C, Pophristic M, Guo S, Peres B, Singh R, Eddy Jr C R, Chowdhury U, Wong M M, Dupuis R D, Li T, DenBaars S P 2006 *Proc. SPIE* **6119** 611901
- [3] Wu J, Walukiewicz W, Yu K M, Ager III J W, Haller E E, Lu H, Schaff W J, Saito Y, Nanishi Y 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3967
- [4] Jain S C, Willander M, Narayan J, Overstraeten R V 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 965
- [5] Lei S Y, Shen B, Zhang G Y 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2386 (in Chinese) [雷双瑛、沈波、张国义 2008 物理学报 **57** 2386]
- [6] Jiang Y, Luo Y, Xi G Y, Wang L, Li H T, Zhao W, Han Y J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7282 (in Chinese) [江洋、罗毅、席光义、汪莱、李洪涛、赵维、韩彦军 2009 物理学报 **58** 7282]
- [7] Rigutti L, Castaldini A, Meneghini M, Cavallini A 2008 *Semicond. Sci. Tech.* **23** 025004
- [8] Lochthofen A, Mertin W, Bacher G, Furitsch M, Brüderl G, Strauss U, Härle V 2008 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 135115
- [9] Shen G D, Zhang J M, Zou D S, Xu C, Gu X L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 472 (in Chinese) [沈光地、张剑铭、邹德恕、徐晨、顾晓玲 2008 物理学报 **57** 472]
- [10] Zhang J M, Zou D S, Xu C, Zhu Y X, Liang T, Da X L, Shen G D 2007 *Chin. Phys.* **16** 1135
- [11] Li Z H, Yu T J, Yang Z J, Feng Y C, Zhang G Y, Guo B P, Niu H B 2005 *Chin. Phys.* **14** 830
- [12] Hao G D, Ban S L, Jia X M 2007 *Chin. Phys.* **16** 3766
- [13] Harima H, Inoue T, Nakashima S, Okumura H, Ishida Y, Yoshida S, Koizumi T, Grille H, Bechstedt F 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 191
- [14] Davydov V Y, Goncharuk I N, Smirnov A N, Nikolaev A E, Lundin W V, Usikov A S, Klochikhin A A, Aderhold J, Graul J, Semchinova O, Harima H 2002 *Phys. Rev. B* **65** 125203
- [15] Holtz M, Prokofyeva T, Seon M, Copeland K, Vanbuskirk J, Williams S, Nikishin S A, Tretyakov V, Temkin H 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 7977

- [16] Tabata A, Leite J R, Lima A P, Silveira E, Lemos V, Frey T, As D J, Schikora D, Lischka K 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 1095
- [17] Alexson D, Bergman L, Nemanich R J, Dutta M, Stroschio M A, Parker C A, Bedair S M, El-Masry N A, Adar F 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 798
- [18] Chen Y S, Shockley W, Pearson G L 1966 *Phys. Rev.* **151** 648
- [19] Chang I F, Mitra S S 1968 *Phys. Rev.* **172** 924
- [20] Yu S G, Kim K W, Bergman L, Dutta M, Stroschio M A, Zavada J M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 15283
- [21] Liang X X, Ban S L 2004 *Chin. Phys.* **13** 71
- [22] Martin T P 1975 *Phys. Status Solidi B* **67** 137
- [23] Grille H, Schnittler Ch, Bechstedt F 2000 *Phys. Rev. B* **61** 6091
- [24] Ban S L, Hasbun J E 1999 *Eur. Phys. J. B* **8** 453
- [25] Yu X L, Ban S L 2003 *J. Inner Mongolia University (Sci. Ed.)* **34** 235 (in Chinese) [于晓龙、班士良 2003 内蒙古大学学报(自然科学版) **34** 235]
- [26] Liaci F, Bigenwald P, Briot O, Gil B, Briot N, Cloitre T, Aulombard R L 1995 *Phys. Rev. B* **51** 4699
- [27] Osamura K, Nakajima K, Murakami Y, Shingu P H, Ohtsuki A 1972 *Solid State Commun.* **11** 617
- [28] Lee B C, Kim K W, Stroschio M A, Dutta M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 4860
- [29] Komirenko S M, Kim K W, Stroschio M A, Dutta M 1999 *Phys. Rev. B* **59** 5013
- [30] Wendler L 1985 *Phys. Status Solidi B* **129** 513
- [31] Loudon R 1964 *Adv. Phys.* **13** 423
- [32] Lü J T, Cao J C 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 033502
- [33] Shi J J 2003 *Phys. Rev. B* **68** 165335
- [34] Zheng R S, Matsuura M 1999 *Phys. Rev. B* **60** 4937
- [35] Zheng R S, Taguchi T, Matsuura M 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 2526
- [36] Wei S Y, Zhang F, Huang W D, Li W, Zhao X 2006 *Chinese J. Liq. Cryst. Displays* **21** 336 (in Chinese) [危书义、张芳、黄文登、李伟、赵旭 2006 液晶与显示 **21** 336]
- [37] Wang X J, Wang L L, Huang W Q, Tang L M, Zou B S, Chen K Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 429 (in Chinese) [王新军、王玲玲、黄维清、唐黎明、邹炳锁、陈克求 2007 物理学报 **56** 429]
- [38] Bungaro C, Rapcewicz K, Bernhole J 2000 *Phys. Rev. B* **61** 6720
- [39] Demangeot F, Groenen J, Frandon J, Renucci M A, Briot O, Clur S, Aulombard R L 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 2674
- [40] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 5815
- [41] Harima H 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** R967
- [42] Walukiewicz W, Ager III J W, Yu K M, Liliental-Weber Z, Wu J, Li S X, Jones R E, Denlinger J D 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** R83
- [43] Behr D, Niebuhr R, Wagner J, Bachem K H, Kaufmann U 1997 *Gallium Nitride and Related Materials II* (Pittsburgh: Materials Research Society) p213

Effect of ternary mixed crystals on optical phonon modes in wurtzite nitride quantum well^{*}

Qu Yuan Ban Shi-Liang[†]

(Key Laboratory of Semiconductor Photovoltaic Technology at Universities of Inner Mongolia Autonomous Region, School of Physical Science and Technology, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China)

(Received 20 June 2009; revised manuscript received 19 October 2009)

Abstract

Firstly, some results about the frequencies of phonons in wurtzite ternary mixed crystals (TMCs) fitted by several methods (modified random-element-isodisplacement model (MREI), virtual crystal approximation, and simplified coherent potential approximation, etc.) are compared. Then, combined with the continuous dielectric model and uniaxial crystal model, a fitting method available to experimental data is adopted to derive the dispersion relations of different kinds of optical phonon modes in TMC $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ quantum wells. Furthermore, the variation of phonon modes dependent on the composition is analyzed. The results show that the fitting by the MREI for phonon frequencies of wurtzite TMCs with one-mode property agrees better with the experimental data. It can be also found that the optical phonon modes in quantum wells vary with the composition. The phonon modes, such as localized modes, interface modes, half-space modes, and propagating modes, exist in certain composition regions and frequency regions due to the anisotropy of phonon dispersion of wurtzite nitrides. Moreover, the shape of the same kind of phonon modes also varies with the composition.

Keywords: wurtzite, ternary mixed crystal, quantum well, optical phonon mode

PACC: 6322, 7865K, 7800

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60966001), the Key Program of Natural Science Foundation of Inner Mongolia Autonomous Region, China (Grant No. 20080404Zd02), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20070126001).

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