

有限元法计算 GaN/AlN 量子点结构中的电子结构^{*}

梁 双[†] 吕燕伍

(北京交通大学理学院, 北京 100044)

(2006 年 9 月 4 日收到, 2006 年 9 月 20 日收到修改稿)

根据有效质量理论单带模型, 采用有限元方法(FEM)计算了 GaN/AlN 量子点结构中的电子结构, 分析了应变和极化对电子结构的影响, 计算了不同尺寸的量子点的能级, 分析了量子点的大小对电子能级的影响. 结果表明, 形变势和压电势提升了电子能级, 而且使简并能级分裂. 随着量子点尺寸的增大, 量子限制能减小, 而压电势能起到更显著的作用, 使电子的能级降低, 吸收峰发生红移.

关键词: GaN/AlN 量子点结构, 有效质量理论, 电子能级

PACC: 7280E, 7320D, 7115

1. 引 言

近年来, 半导体研究领域有两大热点, 一个是以 GaN 为代表的 III 族氮化物材料及其器件的研究, 另一个是低维半导体^[1,2]尤其是自组装量子点材料及其器件的研究. GaN 及其合金具有显著的物理特性如直接宽带隙、高热导率、大介电常数、强化学稳定性和高电子饱和速度等. 它们的研究不仅能使目前的光电器件^[3-5](红外至绿光)的发光范围扩展到蓝光、紫外光波长, 而且能使电子器件工作在更高的温度和更恶劣的环境. 半导体量子点的生长和性质成为当今研究的另一热点. 成功的自组织生长技术分子束外延(MBE)和金属有机物化学气相沉积(MOCVD)^[6-8]推动了人们对量子级联激光器^[9]等发光器件的研究, 而 GaN/AlN 量子点结构中显著的内建电场, 使它成为人们研究量子信息探测器^[10,11]的热点.

由于量子点生长技术的飞速发展, 理论研究也成为当今的研究热点, 有人用平面波展开的方法^[12]计算了 GaN/AlN 量子点结构中的电子结构, 但他假设量子点和基质材料有相同的弹性常数和介电常数, 而这一条件通常影响计算结果的真实程度, 还有人用第一性原理^[13]、有限差分法^[14], 但有限差分法收敛速度慢, 计算量大, 计算精度低. 格林函数法^[15]

可以计算量子点中的应变分布, 但不能进一步计算量子点的电子结构. 本文统一用有限元方法计算了量子点的应变分布、压电场和电子结构, 不用进行数据格式的转换, 因此具有很高的计算精度. 而且可以方便地改变量子点尺寸进行重复计算.

2. GaN/AlN 量子点的结构模型与计算

GaN/AlN 量子点的结构如图 1 所示, 在本模型中, 计算所采用的量子点是自组装生长的量子点, 它具有被截顶的六边金字塔形状(WZ), 且它的下表面正六边形边长为 7.5 nm, 上表面边长为 1.5 nm, 高为 3 nm. 本文假设量子点之间的距离足够大, 因此仅考虑单个量子点的效应, 忽略量子点之间的耦合效应.

本文采用单带有效质量近似来研究电子的本征状态, 在此框架下, 单个电子的包络波函数满足如下方程:

$$\hat{H}_e \Psi = E \Psi, \quad (1)$$

其中 \hat{H}_e , Ψ 和 E 分别表示电子的哈密顿量, 包络波函数和分立的能级. 并且 \hat{H}_e 具有如下的形式^[3]:

$$\hat{H}_e = \hat{H}_s(\mathbf{r}) + E_c + eV_p(\mathbf{r}) + H^\epsilon(\mathbf{r}), \quad (2)$$

其中 $\hat{H}_s(\mathbf{r})$ 表示电子哈密顿量的运动部分, E_c 是在

^{*} 国家自然科学基金(批准号 60376014)资助的课题.

[†] E-mail: liangshuang-2005@126.com

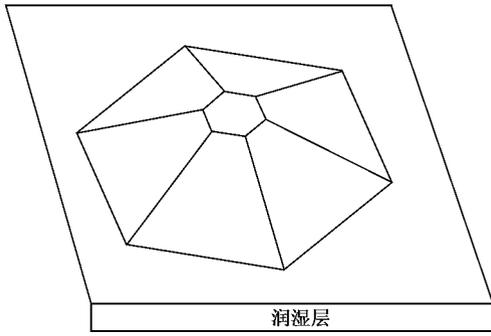


图 1 WZ GaN/AlN 量子点的结构示意图

不考虑应变的情况下带边的能量, V_p 表示压电势, 而 $\hat{H}^{(\epsilon)}$ 是由于应变而产生的电子哈密顿量.

对于 WZ 型量子点 (2) 式右边的第一项具有如下的形式:

$$\hat{H}_s(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_e^\parallel} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m_e^\perp} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{m_e^\perp} \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (3)$$

其中 m_e^\parallel, m_e^\perp 是电子的有效质量张量分量, 它们的单位是 m_0 . 此外, 由于应力而产生的电子哈密顿量具有以下形式:

$$\hat{H}^{(\epsilon)} = a_c^\parallel \epsilon_{zz}(\mathbf{r}) + a_c^\perp (\epsilon_{xx}(\mathbf{r}) + \epsilon_{yy}(\mathbf{r})), \quad (4)$$

其中 a_c^\parallel 和 a_c^\perp 是导带形变势能, 而应变张量分量 $\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}$ 和 ϵ_{zz} 是根据连续介质弹性理论, 采用有限元方法得出的. 压电势 V_p 可以通过解 Poisson 方程得到, 即

$$-\nabla(\hat{\epsilon}_{\text{stat}} \nabla V_p(\mathbf{r})) = -4\pi \nabla \mathbf{P}, \quad (5)$$

极化强度是由两部分组成的, 即

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^{\text{strain}} + \mathbf{P}^{\text{spont}}, \quad (6)$$

$\mathbf{P}^{\text{strain}}$ 为应变引起的压电极化, 而 $\mathbf{P}^{\text{spont}}$ 为 WZ 型氮化物半导体沿生长方向的自发极化, 由于自组织 WZ 型量子点通常是沿着 (0001) 方向生长, 在这种情况下, 自发极化仅有 (0001) 方向的分量不为 0, 并且可设 $P_z^{\text{spont}} = P_{sp}$, 其中 P_{sp} 为一个常数且对于每一种材料都不相同.

3. 结果与讨论

我们根据方程 (1) 组装有限元方程, 从而得到一个广义本征值问题

$$\mathbf{K}\varphi = \mathbf{E}\mathbf{M}\varphi \quad (7)$$

其中 \mathbf{K} 和 \mathbf{M} 为两个大型稀疏巨阵. 计算中所用到的材料参数见表 1.

表 1 计算中所用到的 WZ GaN 和 WZ AlN 的数据(取自文献 [14])

参数	WZ GaN	WZ AlN	参数	WZ GaN	WZ AlN
a/nm	0.3189	0.3112	C_{13}/GPa	106	108
c/nm	0.5185	0.4982	C_{33}/GPa	398	373
m_e^\perp	0.2	0.32	C_{44}/GPa	105	116
m_e^\parallel	0.2	0.28	$e_{15}(\text{C}/\text{m}^2)$	-0.49	-0.60
a_c^\perp	-8.2	-5.4	$e_{31}(\text{C}/\text{m}^2)$	-0.49	-0.60
a_c^\parallel	-9.5	-12.0	$e_{33}(\text{C}/\text{m}^2)$	0.73	1.46
C_{11}/GPa	390	396	$P_{sp}(\text{C}/\text{m}^2)$	-0.029	-0.081
C_{12}/GPa	145	137	$\epsilon_{\text{stat}}^\parallel$	10.01	8.57
			$\epsilon_{\text{stat}}^\perp$	9.28	8.67

在图 2 中给出了在不考虑应变场和压电场时的电子能级和电子概率密度分布, 从图中可以看出 E_1 为电子基态, 且 $E_1 = 0.2053 \text{ eV}$ (以无应变导带带边为能量零点), E_2 和 E_3 为第一激发态, 且为二重简并能级分别为 $E_2 = 0.3044 \text{ eV}$ 和 $E_3 = 0.3047 \text{ eV}$, 三重简并的第三激发态的能级为 $E_4 = 0.4105 \text{ eV}$, $E_5 = 0.4113 \text{ eV}$ 和 $E_6 = 0.4125 \text{ eV}$. 当考虑量子点中的应变场和压电场时, 电子的能级发生了变化, $E_1 = 0.277 \text{ eV}$, $E_2 = 0.446 \text{ eV}$, $E_3 = 0.487 \text{ eV}$, $E_4 = 0.559 \text{ eV}$. 通过比较可以看出, 电子的能级都明显的向上提升了, 基态 E_1 提高了 72 meV , 第一激发态 E_2 提高了 142 meV , 而且简并发生了分裂, 比如 E_3 比 E_2 提高了 41 meV , 对于能级的提升, 主要是由于导带形变势能的增加大于压电势能引起的电子能级的降低, 而简并态的分裂是由于应变场和压电场导致了量子点内场分布对称性的破缺.

图 3 给出了电子能级随量子点大小的变化, 可以看出基态能级和激发态能级都随着量子点的增大而降低, 这是由于量子点尺寸的增大使量子限制效应在减弱, 从而约束能减小. 因为我们没有考虑应变场和压电场. 为了和数据文献 [16] 比较, 取高度为 2.3 nm 的小量子点和高度为 4.5 nm 的大量子点. 在文献 [16] 中, 高度为 2.3 nm 的小量子点的基态能级为 3.8 eV , 即高出导带带边 0.37 eV , 而在我们的结果中为高出导带带边 0.33 eV . 此结果说明在小量子点中, 应变场和压电场的加入并没有使电子能级降低, 反而使吸收峰发生蓝移, 与文献 [7] 的实验结果一致. 然而大量子点却有相反的情况, 在文

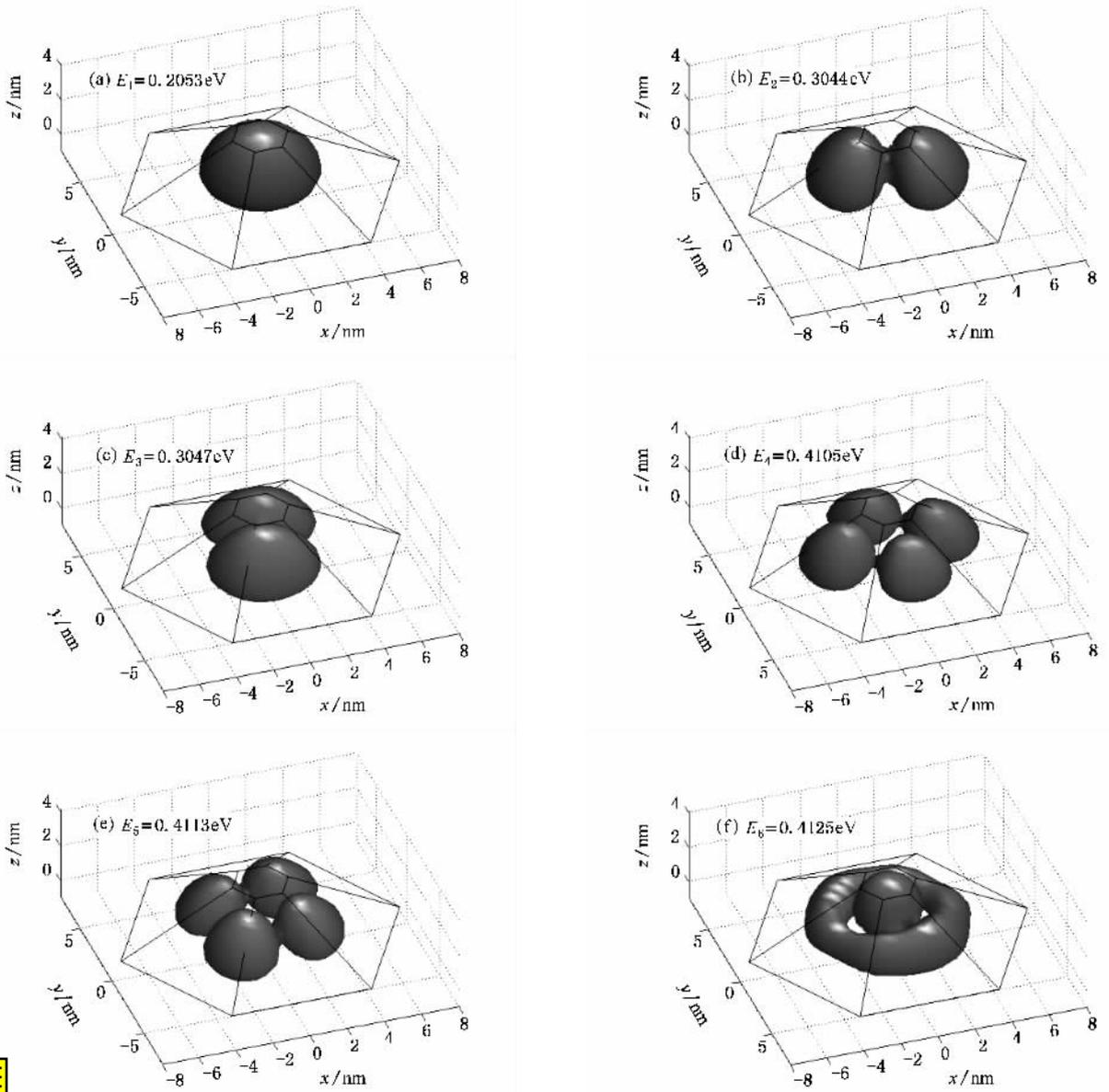


图2 没有考虑应变和压电效应时最低6个能级电子概率密度分布的等位面图(其中满足 $|\psi|^2 = 0.0003$) (a)为电子基态(b),(c)为第一激发态(d),(e),(f)为第二激发态

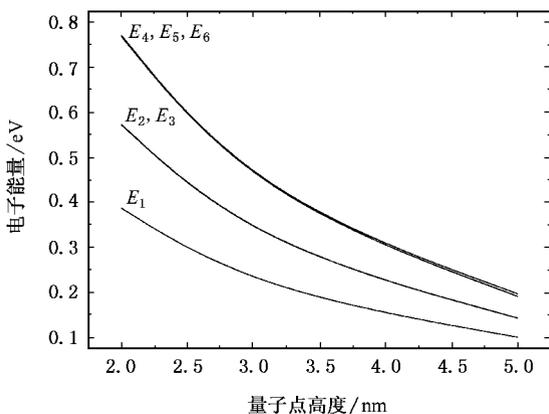


图3 不考虑应变场和压电场时电子能级随量子点高度的变化,无应变时的导带带边为能级零点

觚 16]中,高度为 4.5 nm 的大量子点的基态能级为 2.73 eV,即低于导带带边 0.7 eV,而我们的结果高于导带 0.12 eV,由于没有考虑压电效应,从而使基态能级还在导带以上.这就说明压电场在大量子点中起到了明显的作用,使能级大幅度的降低,从而使吸收峰发生红移^[7].我们还可以比较一下量子限制效应和压电效应在量子点尺寸增大时对能级降低的作用比重,图3是不考虑应变和压电效应即只有量子限制效应时的电子能级,可以看出,以4.5 nm 高度为标志的大量子点的基态能级比以2.3 nm 高度为标志的小量子点的基态能级低 0.21 eV,而实验结果是考虑了压电效应和量子效应的,数值约 1 eV,可见压电效应对大量子点的吸收峰的红移有决定性

作用.

4. 结 论

本文采用有限元方法计算了 GaN/AlN 量子点结构中的电子结构,分析了应变场和极化场对电子结构的影响,计算了不同尺寸的量子点的能级,分析了

量子点的大小对电子能级的影响.结果表明,在小尺寸的量子点结构中形变势和压电势提升了电子能级,而且使简并能级分裂.随着量子点尺寸的增大,压电势的作用变得突出,大大高于量子限制效应的作用,使电子的能级降低,吸收峰发生红移.本文的计算方法和结果将有助于量子点激光器和光电器件的设计.

- [1] Zhang J F , Hao Y 2006 *Chin. Phys.* **15** 2402
- [2] Li L X , Hu Y H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 848 (in Chinese) [李良新、胡勇华 2005 物理学报 **54** 848]
- [3] Park S H , Chuang S L 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 1981
- [4] Gmachl C , Ng H M , S. Chu N G , Cho A Y 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 3224
- [5] Saito H , Nishi K , Sigou S 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 267
- [6] Ramval P , Tanaka S , Nomura S , Riblet P , Aoyagi Y 1998 *J. Appl. Phys. Lett.* **73** 1104
- [7] Widmann F , Simon J , Daudin B , Feuillet G , Rouviere J L , Pelekanos N T , Fishman G 1998 *Phys. Rev. B* **58** 15989
- [8] Miyamura M , Tachibana K , Arakawa Y 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3937
- [9] Lu Y , Sun G 2004 13th International Conference on Semiconducting and Insulating Materials , Beijing , 20-25 September 2004 , p284
- [10] de Rinaldis S , D 'Amico I , Biolatti E , Rinaldi R , Cingolani R , Rossi F 2002 *Phys. Rev. B* **65** 081309
- [11] de Rinaldis S , D 'Amico I , Rossi F 2004 *Phys. Rev. B* **59** 235316
- [12] Andreev A D , O 'Reilly E P 2000 *Phys. Rev. B* **62** 15851
- [13] Chen L J 2006 *Chin. Phys.* **15** 798
- [14] Fonoberov V A , Balandin A A 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 7178
- [15] Guo R H , Shi H Y , Sun X D 2004 *Acta. Phys. Sin.* **53** 3488 (in Chinese) [郭汝海、时红艳、孙秀冬 2004 物理学报 **53** 3488]
- [16] Andreev A D , Downes J R , O 'Reilly E P 2002 *Physica E* **13** 1094

The calculation of electronic structure in GaN/AlN quantum dots with finite element method *

Liang Shuang Li Yan-Wu

(Department of Physics , Beijing Jiaotong University , Beijing 100044 , China)

(Received 4 September 2006 ; revised manuscript received 20 September 2006)

Abstract

We investigate electronic structure theoretically in strained GaN/AlN quantum dots (QDs) with wurtzite (WZ) crystal structure. The QD electron energy levels are calculated using the finite element method (FEM) in the framework of effective mass approximation (EMA). We analyze the influence of strain and polarization to the electron energy levels and calculate electron energy levels with different dot sizes. It is shown that the strain dependent deformation potential and piezoelectric potential increase the electron energy levels and split the degenerate states. The electron energy levels decreases rapidly with increasing QD height , which is partly due to the confinement energy reduction. However , the piezoelectric field makes a more significant contribution.

Keywords : GaN/AlN quantum dot , effective mass approximation , electron energy levels

PACC : 7280E , 7320D , 7115