

外电场作用下纤锌矿氮化物抛物量子阱中极化子能级^{*}

赵凤岐[†] 周炳卿

(内蒙古师范大学物理与电子信息学院, 呼和浩特 010022)

(2006 年 12 月 4 日收到, 2007 年 1 月 19 日收到修改稿)

采用改进的 Lee-Low-Pines 中间耦合方法研究纤锌矿氮化物抛物量子阱材料中极化子能级, 给出极化子基态能量、第一激发态到基态的跃迁能量以及不同支长波光学声子模对极化子能量的影响随阱宽 L 和外电场 F 变化的函数关系. 在计算中考虑了纤锌矿氮化物 GaN 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 构成的抛物量子阱材料中准 LO 和准 TO 声子模的各向异性、电子有效带质量、介电常数、声子频率等随空间坐标 z 变化(SD)效应以及外电场作用对极化子能量的影响. 结果表明, 纤锌矿氮化物抛物量子阱材料中电子-声子相互作用、SD 效应和外电场对极化子能量有明显影响, 它们都使极化子能量降低. SD 效应随阱宽 L 增大而减小, 阱宽越大, SD 效应越小, 最后趋近于零. 阱宽较大时, 定域准 LO 声子对极化子能量的影响较大, 而半空间准 LO 声子的影响较小, 阱宽较小时, 则正好相反. 在阱宽 L 变化的整个范围, 氮化物抛物量子阱材料中电子-声子相互作用对极化子基态能量的贡献(约为 28—42 meV)比 $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 抛物量子阱中的相应值(约为 0.5—3.2 meV)大得多, 而准 TO 声子对极化子基态能量的贡献比较小, 要远远小于 LO 声子对极化子基态能量的总贡献. 因此, 讨论氮化物抛物量子阱($\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$)中电子态问题时要考虑电子与准 LO 声子相互作用, 而可以忽略准 TO 声子的作用.

关键词: 氮化物抛物量子阱, 电子-声子相互作用, 极化子

PACC: 6320, 7138, 7320D

1. 引 言

近年来, 一些研究者对氮化物半导体(如 AlN , GaN , InN , AlGa_x , GaIn_x)材料光学声子模以及电子-声子相互作用做了研究, 发现了一些特殊现象^[1-13]. 氮化物半导体具有闪锌矿和纤锌矿两种结构. 纤锌矿材料是直接带隙材料, 它具有单轴异性、宽能带、多支独特的声子(9 个光学模、3 个声学模)、禁带宽度大、击穿电场高、电子饱和速度高、热导率大、物理化学性能稳定等特殊的物理性质. 氮化物半导体已成为第三代半导体材料^[4, 8], 在光电子和光探测器件(蓝光、绿光和紫外光)、高频大功率和激光二极管等电学和光学器件的应用方面具有极大潜力. Lee 等^[6]研究了纤锌矿氮化物晶体中电子与长波光学声子的散射, 导出电子-长波光学声子相互作用哈密顿量. 他们指出, 在纤锌矿结构中没有纯的纵光学声子(准 LO)模和横光学声子(准 TO)模, 并且准 LO 模和准 TO 模均呈现各向异性.

由于纤锌矿氮化物半导体材料的能带结构、光学声子不同于通常半导体(如 GaAs , $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$)材料, 因此纤锌矿氮化物半导体材料构成的量子阱(如 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 或 $\text{InN}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$)与通常半导体材料构成的量子阱(如 $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$)中电子-声子相互作用大不相同. 人们已对 GaAs 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 构成的量子阱(如方量子阱、抛物量子阱)材料的电子行为做了大量的研究工作^[14-28], 给出许多理论和实验结果. 目前国内外一些学者^[29-45]对氮化物半导体(如 AlN , GaN , InN , AlGa_x , GaIn_x)材料构成的量子阱(以方量子阱为主)、超晶格、异质结等材料的发光和吸收光谱、能带、晶格振动、杂质态、激子能量、结合能等问题进行了研究, 获得了一些实验和理论结果. 文献 [30—32] 研究了纤锌矿氮化物量子阱中晶格振动和电子与光学声子的散射, 导出了电子与定域长波光学声子和半空间(half space mode)长波光学声子相互作用哈密顿量. Shi^[36, 37]研究了纤锌矿氮化物量子阱和异质结中晶格振动和电子与界面光学声子的散射, 导出了电子与界面光学声子相互作用

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10364003)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: fqzhao@innu.edu.cn

用哈密顿量.纤锌矿量子阱或异质结中电子与传播光学声子模的相互作用哈密顿量在文献[38]中已有讨论.文献[30—32,36—38]的研究工作给进一步研究纤锌矿量子阱或异质结中电子-声子相互作用问题提供了理论基础.这一方面,对氮化物量子阱材料的研究比对 GaAs, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 等构成的量子阱(包括方量子阱、抛物量子阱)材料的研究少得多,对声子模传播特性和电子-声子相互作用对电子行为影响的认识也比较粗浅,尤其是对氮化物抛物量子阱(PQW)材料的研究.因此,研究氮化物 PQW 材料中与电子-声子相互作用有关物理量有深远的意义和广阔的应用前景.

在我们前期工作^[46,47]中,研究了氮化物 PQW 材料中电子态和杂质态能量等问题.本文采用改进的 Lee-Low-Pines(LLP)中间耦合方法进一步研究纤锌矿氮化物 PQW 材料中电子-声子相互作用对电子态能量的影响.给出极化子基态能量、第一激发态到基态的跃迁能量以及不同支长波光声子模对极化子能量的影响.在计算中考虑了纤锌矿氮化物 GaN 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 构成的 PQW 材料中准 LO(准 TO)声子模的各向异性和 SD 效应以及外电场作用.

2. 理论计算

考虑一个宽度为 $L = 2d$ 的 PQW 结构,阱内材

$$g_s = - \left[\frac{4\pi\hbar e^2 S^{-1}}{(\partial/\partial\omega) \left(\epsilon_{1\perp} q^2 + \epsilon_{1z} k_{1m}^2 \right) d - 2q(\partial/\partial\omega) f_s(\omega) \cos(k_{1m}d)} \right]^{1/2} \cos(k_{1m}z) \quad (|z| \leq d), \quad (4a)$$

$$g_s = - \left[\frac{4\pi\hbar e^2 S^{-1}}{(\partial/\partial\omega) \left(\epsilon_{1\perp} q^2 + \epsilon_{1z} k_{1m}^2 \right) d - 2q(\partial/\partial\omega) f_s(\omega) \cos(k_{1m}d)} \right]^{1/2} \cos(k_{1m}d) \exp(-\kappa_2(|z| - d)) \quad (|z| > d). \quad (4b)$$

这里

$$f_s(\omega) = \text{sgn}(\epsilon_{1z}) \sqrt{-\epsilon_{1\perp}(\omega) \epsilon_{1z}(\omega)} \sin(k_{1m}d) - \text{sgn}(\epsilon_{2z}) \sqrt{\epsilon_{2\perp}(\omega) \epsilon_{2z}(\omega)} \cos(k_{1m}d);$$

k_{1m} 由方程

$$\epsilon_{1z} k_{1m} \sin(k_{1m}d) - \epsilon_{2z} k_2 \cos(k_{1m}d) = 0$$

决定,并且 k_{1m} 的取值范围为

$$m\pi/d < k_{1m} < (m+1)\pi/d \quad (m = 1, 2, 3, \dots);$$

料是充满在区间 $\lambda = 1, |z| \leq d$, 垒材料占据在区间 $\lambda = 2, |z| > d$. 抛物量子阱中阱内材料是由三元混晶 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的组分 x 从阱中心 $x = 0$ 到阱边 $x = 0.32$ 连续变化而产生^[15,16]. 垒材料是 $\text{Al}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{N}$. 一个电子在阱中运动,并与准 LO 和准 TO 声子相互作用,均匀电场 F 沿着 z 轴方向. 利用有效质量近似,系统的哈密顿量可写作

$$H = p_z \left(\frac{p_z}{2m_\lambda(z)} \right) + \frac{p_{\parallel}^2}{2m_{\parallel\lambda}} + V(z) + ezF + \sum_{\mathbf{w}, p} \hbar \omega_{\lambda p}^+ (\mathbf{w}) a_{\lambda p}^+(\mathbf{w}) + H_1, \quad (1)$$

式中 e 是基本电荷, $m_\lambda(z)$ 和 $m_{\parallel\lambda}$ 分别是电子在 z 轴方向和 xy 平面方向的有效带质量, $a_{\lambda p}^+(\mathbf{w})$ 和 $a_{\lambda p}(\mathbf{w})$ 分别是声子频率为 ω 、波矢为 $\mathbf{w} = (\mathbf{q}, k_{\lambda z})$ 宇称为 p 的准 LO(或 TO)声子产生算符和湮没算符. 方程(1)右端第三项是抛物势,可写为

$$V(z) = \begin{cases} V_0 z^2 / d^2 & (|z| \leq d), \\ V_0 & (|z| > d). \end{cases} \quad (2)$$

其中 $V_0 = 0.7\Delta E_g = 470 \text{ meV}$ ^[48-50] 是 PQW 的深度. 方程(1)右端最后一项是电子-声子相互作用哈密顿量,可写为^[30]

$$H_1 = \sum_{\mathbf{w}, p} [g_p \exp(-i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}) a_{\lambda p}^+(\mathbf{w}) + \text{H.C.}], \quad (3)$$

对于对称定域模,方程(3)的耦合函数为

S 是量子阱界面面积;

$$k_2 = \sqrt{\frac{\epsilon_{2\perp}}{\epsilon_{2z}}} q.$$

对于反对称定域模,方程(3)的耦合函数为

$$g_{AS} = - \left[\frac{4\pi\hbar e^2 S^{-1}}{(\partial/\partial\omega) \left(\epsilon_{1\perp} q^2 + \epsilon_{1z} k_{1m}^2 \right) d - 2q(\partial/\partial\omega) f_a(\omega) \sin(k_{1m}d)} \right]^{1/2} \sin(k_{1m}z)$$

$$(|z| \leq d), \quad (5a)$$

$$g_{AS} = - \left[\frac{4\pi\hbar e^2 S^{-1}}{(\partial/\partial\omega) \chi \epsilon_{1\perp} q^2 + \epsilon_{1z} k_{1m}^2} d - 2q(\partial/\partial\omega) f_a(\omega) \sin(k_{1m}d) \right]^{1/2} \operatorname{sgn}(z) \sin(k_{1m}d) \exp(-\kappa_2(|z| - d)) \quad (|z| > d). \quad (5b)$$

这里

$$f_a(\omega) = \operatorname{sgn}(\epsilon_{1z}) \sqrt{-\epsilon_{1\perp}(\omega) \epsilon_{1z}(\omega)} \cos(k_{1m}d) + \operatorname{sgn}(\epsilon_{2z}) \sqrt{\epsilon_{2\perp}(\omega) \epsilon_{2z}(\omega)} \sin(k_{1m}d);$$

k_{1m} 由方程

$$\epsilon_{1z} k_{1m} \cos(k_{1m}d) + \epsilon_{2z} k_2 \sin(k_{1m}d) = 0$$

决定, 并且 k_{1m} 的取值范围为

$$(m - 0.5)\pi/d < k_{1m} < (m + 0.5)\pi/d.$$

对于对称半空间模, 方程(3)的耦合函数为

$$g_s = \left[\frac{4\pi\hbar e^2 V^{-1}}{(\partial/\partial\omega) \chi \epsilon_{2\perp} \sin^2 \theta_2 + \epsilon_{2z} \cos^2 \theta_2} \right]^{1/2} \frac{\sqrt{2} [\epsilon_{1z}^2 k_1^2 \sinh^2(k_1 d) + \epsilon_{2z}^2 k_{2z}^2 \cosh^2(k_1 d)]^{1/2}}{\sqrt{q^2 + k_{2z}^2}} \times \epsilon_{2z} k_{2z} \cosh(k_1 z) \quad (|z| \leq d), \quad (6a)$$

$$g_s = \left[\frac{4\pi\hbar e^2 V^{-1}}{(\partial/\partial\omega) \chi \epsilon_{2\perp} \sin^2 \theta_2 + \epsilon_{2z} \cos^2 \theta_2} \right]^{1/2} \frac{\sqrt{2} [\epsilon_{1z}^2 k_1^2 \sinh^2(k_1 d) + \epsilon_{2z}^2 k_{2z}^2 \cosh^2(k_1 d)]^{1/2}}{\sqrt{q^2 + k_{2z}^2}} \times \epsilon_{1z} k_{1z} \sinh(k_1 d) \sin[k_{2z}(|z| - d)] + \epsilon_{2z} k_{2z} \cosh(k_1 d) \cos[k_{2z}(|z| - d)] \quad (|z| > d). \quad (6b)$$

这里 V 是量子阱体积, θ_2 是波矢 $\mathbf{w} = (q, k_{2z})$ 与 z 轴之间的夹角,

$$k_1 = \sqrt{\epsilon_{1\perp}/\epsilon_{1z} q}.$$

对于反对称半空间模, 方程(3)的耦合函数为

$$g_{AS} = \left[\frac{4\pi\hbar e^2 V^{-1}}{(\partial/\partial\omega) \chi \epsilon_{2\perp} \sin^2 \theta_2 + \epsilon_{2z} \cos^2 \theta_2} \right]^{1/2} \frac{\sqrt{2} [\epsilon_{1z}^2 k_1^2 \cosh^2(k_1 d) + \epsilon_{2z}^2 k_{2z}^2 \sinh^2(k_1 d)]^{1/2}}{\sqrt{q^2 + k_{2z}^2}} \times \epsilon_{2z} k_{2z} \sinh(k_1 z) \quad (|z| \leq d/2), \quad (7a)$$

$$g_{AS} = \left[\frac{4\pi\hbar e^2 V^{-1}}{(\partial/\partial\omega) \chi \epsilon_{2\perp} \sin^2 \theta_2 + \epsilon_{2z} \cos^2 \theta_2} \right]^{1/2} \frac{\sqrt{2} [\epsilon_{1z}^2 k_1^2 \cosh^2(k_1 d) + \epsilon_{2z}^2 k_{2z}^2 \sinh^2(k_1 d)]^{1/2}}{\sqrt{q^2 + k_{2z}^2}} \times \operatorname{sgn}(z) \{ \epsilon_{1z} k_1 \cosh(k_1 d) \sin[k_{2z}(|z| - d)] + \epsilon_{2z} k_{2z} \sinh(k_1 d/2) \cos[k_{2z}(|z| - d)] \} \quad (|z| > d). \quad (7b)$$

介电函数 $\epsilon_{\lambda\perp}(\omega)$ 和 $\epsilon_{\lambda z}(\omega)$ 由以下方程给出:

$$\epsilon_{\lambda\perp}(\omega) = \epsilon_{\lambda\perp}^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{\lambda\perp L}^2}{\omega^2 - \omega_{\lambda\perp}^2}, \quad (8)$$

$$\epsilon_{\lambda z}(\omega) = \epsilon_{\lambda z}^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{\lambda z L}^2}{\omega^2 - \omega_{\lambda z}^2}.$$

这里 $r = (\rho^2 + z^2)^{1/2}$ 是电子坐标, $\omega_{\lambda\perp}(\omega_{\lambda z})$ 是晶格色散频率, $\omega_{\lambda\perp L}(\omega_{\lambda z L})$ 是纵光学声子频率, $\epsilon_{\lambda\perp}^\infty(\epsilon_{\lambda z}^\infty)$ 是垂直(平行)于 z 轴的高频介电常数. 本征频率 ω 由以下方程决定:

$$\epsilon_{\lambda\perp}(\omega) \sin^2 \theta + \epsilon_{\lambda z}(\omega) \cos^2 \theta = 0, \quad (9)$$

式中 θ 是波矢 \mathbf{w} 与 z 轴之间的夹角.

方程(1)比较复杂不能严格求解, 因此, 我们做两次 LLP 么正变换

$$U_1 = \exp\left(-i \sum_{\mathbf{w}\lambda p} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho} a_{\lambda p}^+(\mathbf{w}) a_{\lambda p}(\mathbf{w})\right) \quad (10)$$

$$U_2 = \exp\left(\sum_{\mathbf{w}\lambda p} [h_\lambda a_{\lambda p}^+(\mathbf{w}) - h_\lambda^* a_{\lambda p}(\mathbf{w})]\right) \quad (11)$$

转换的哈密顿量为

$$H^* = U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2. \quad (12)$$

变分参数 h_λ 和 h_λ^* 由极化子能量取最小值而确定. 极化子波函数选为

$$\phi_n = N \phi_n(z) |0\rangle, \quad (13)$$

这里 N 是归一化常数, $\phi_n(z)$ 是 PQW 中电子的波函数, $|0\rangle$ 是声子真空态波函数. 极化子能量为

$$E_n(L) = \langle \phi_n | H^* | \phi_n \rangle. \quad (14)$$

对方程(14)进行数值计算而获得 $\phi_n(z)$ 和 $E_n(L)$.

极化子第一激发态到基态的跃迁能量为

$$\Delta E = E_2 - E_1. \quad (15)$$

式中 E_1 和 E_2 分别是极化子基态能量和第一激发态能量.

3. 数值计算和讨论

为了获得纤锌矿 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 有限 PQW 中自由极化子基态和激发态能量,我们对方程(14)进

行了数值求解.在计算中,我们假定电子有效带质量是各向同性的,即 $m_\lambda(z) = m_{\parallel\lambda}$,对电子能量的参考点选为导带底. PQW 中阱内材料 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的参数选为

$$Q^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = (1-x)Q^{\text{GaN}} + xQ^{\text{AlN}}, \quad (16)$$

纤锌矿半导体 $\text{GaN}^{[51]}$, $\text{AlN}^{[52]}$ 中的相应参数在表 1 中给出,表 1 中电子有效带质量 m 以电子质量 m_e 为单位.对纤锌矿氮化物 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的数值计算结果在图 1—图 4 中给出.

表 1 数值计算中所用参数取值

	m	$\epsilon_{\perp}^{\infty}$	ϵ_z^{∞}	$\omega_{\perp}/\text{meV}$	ω_z/meV	$\omega_{\perp L}/\text{meV}$	ω_{zL}/meV
GaN	0.19	5.29	5.29	69.56	66.08	92.12	91.13
AlN	0.35	4.68	4.68	83.44	81.83	113.57	110.72

给定外电场($F = 30 \text{ kV/cm}$)情况下,纤锌矿 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 有限 PQW 和方量子阱中极化子基态能量 E_0 随阱宽 L 的函数关系和有限 PQW 中第一激发态到基态的跃迁能量 ΔE 随着 L 的变化关系分别在图 1(a)和(b)中给出.结果表明:当 L 较小时,极化子基态能量和跃迁能量随着 L 的增大而急剧减小;当 L 较大时,能量下降变得缓慢.该结果定性上与 $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ PQW 中的相应结果相似^[26,27],但定量上有所不同.电子-声子相互作用和 SD 效应使得极化子能量降低,且这两个作用对极化子能量的贡献都很显著.有 SD 效应的极化子能量

低于无 SD 效应的相应值.这是因为有 SD 效应的电子带质量大于没有 SD 效应的电子带质量,在无限简谐振振荡极限情况下 PQW 中电子的能量正比于 $m(z)^{-1/2}$.从图 1(a)可以看出,SD 效应随着阱宽 L 增大而减小,阱宽 L 越大,SD 效应越小,最后变为零.因为阱宽较大时,SD 梯度降低,使得 SD 效应减小到零.从图 1(a)还可以看出,在 PQW 和方量子阱中极化子基态能量随阱宽 L 的变化关系在定性上一致,而定量上不同,PQW 中极化子基态能量高于方量子阱中的相应值.这是因为在相同的阱宽和阱深情况下,方量子阱比 PQW 的电子能级更低.

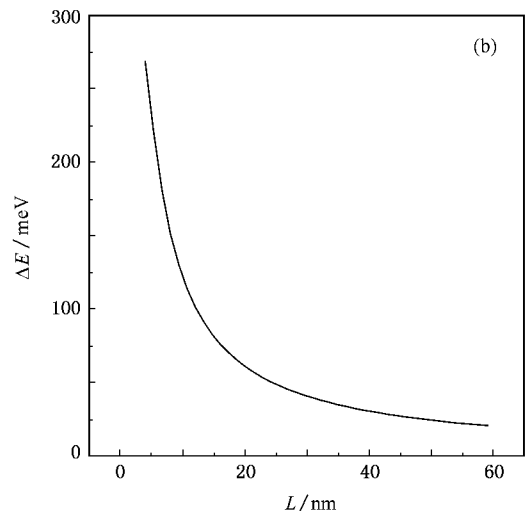
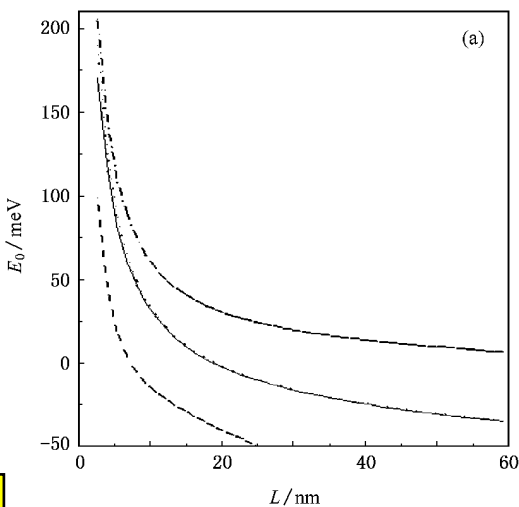


图 1 给定电场($F = 30 \text{ kV/cm}$)条件下,纤锌矿氮化物有限 PQW 中极化子基态能量 E_0 随阱宽 L 的变化关系和第一激发态到基态的跃迁能量 ΔE 有声子影响和有 SD 效应)随阱宽 L 的变化 (a) E_0 随 L 的变化,实线为有声子影响和有 SD 效应,点划线为无声子影响和有 SD 效应,点线为有声子影响和无 SD 效应,短划线为有限方量子阱中有声子影响 (b) ΔE 随 L 的变化

为了更清楚地了解电子-声子相互作用,我们在图2中给出纤锌矿 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 有限 PQW 中定域准 LO 声子、半空间准 LO 声子以及两者之和、准 TO 声子对极化子基态能量的贡献.从图2可以看出,定域准 LO 声子的贡献随着阱宽 L 的增大而增加,最后达到总的贡献;而半空间准 LO 声子的贡献随着阱宽 L 的增大急剧减小,最后接近于零.这一特性是较容易理解的,因为阱宽较小时,局域电子容易穿透到垒材料中去,电子与半空间准 LO 声子波函数重叠范围变大,半空间准 LO 声子贡献起重要作用;当阱宽较大时,电子穿透到垒材料中的概率非常小,几乎在阱内材料中,这时定域准 LO 声子贡献起重要作用.而定域准 LO 声子和半空间准 LO 声子的总贡献首先随着阱宽 L 的增大而减小,大约在 $L = 6 \text{ nm}$ 处达到最小值,然后随着 L 的增大而增大,最后接近于 GaN 体材料的值.该行为与电子在 PQW 中局域性的变化有关.从图2中还可以看出,考虑声子各向异性而不考虑 SD 效应时,定域准 LO 声子和半空间准 LO 声子对极化子基态能量的总贡献比声子各向异性和 SD 效应均包括时的相应值要小.因为 SD 效应使得电子有效带质量、声子频率等参数变大,这就导致电子-声子相互作用增强.从图2还可以看出,准 TO 声子对极化子基态能量的贡献远远小于 LO 声子对极化子基态能量的总贡献,因此可以忽略准 TO 声子的影响.从数值计算结果还可以看出,纤锌矿氮化物 PQW 中电子-声子相互作用对极化子能量的贡献较大,特别是阱宽较大时这一贡献更显著.例如,当 $L = 40 \text{ nm}$ 时,极化子基态能量约为 38 meV ,该值远远大于 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ PQW 中的相应值(约 3 meV).这主要是氮化物 $\text{GaN}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N})$ 材料中电子有效带质量、能隙大小、介电常数、声子频率等参数不同于通常的半导体材料 $\text{GaAs}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ 中的相应参数所导致.因此,讨论纤锌矿 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ PQW 中电子态问题时应当考虑电子-声子相互作用.

在给定的阱宽 $L(5.4, 35 \text{ nm})$ 的纤锌矿氮化物 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 有限 PQW 中,有 SD 效应和无 SD 效应的极化子基态能量和第一激发态能量随外电场的变化关系分别在图3和图4中给出.从图3和图4可以看出,在不同宽度的抛物量子阱中,极化子基态

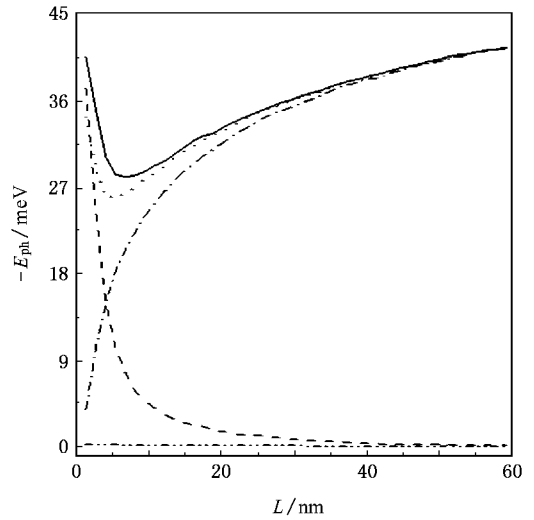


图2 给定电场 $F = 30 \text{ kV/cm}$ 条件下,纤锌矿氮化物有限 PQW 中不同支声子对极化子基态能量的贡献 $-E_{ph}$ 随阱宽 L 的变化.点划线代表定域准 LO 声子的贡献,短划线代表半空间准 LO 声子的贡献,实线代表两者之和的贡献,点线代表无 SD 效应时定域准 LO 和半空间准 LO 声子之和的贡献,双点短划线代表准 TO 声子的贡献.

和第一激发态能量都随着外电场的增大而降低,但降低的程度有所不同.如在窄阱 ($L = 5.4 \text{ nm}$) 中,基态能量和激发态能量随着外电场的增大而缓慢降低,而在宽阱 ($L = 35 \text{ nm}$) 中,降低的程度比较快.因为随着外电场的增强,描述该电子系统的波函数向外扩展,这就导致阱宽增大时能级对外电场的依赖性增大.

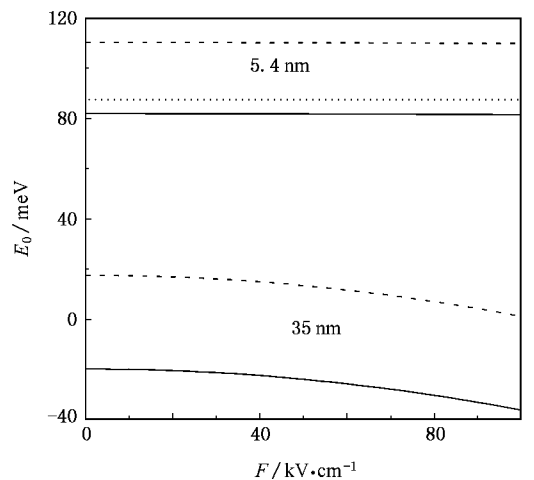


图3 给定阱宽 ($L = 5.4, 35 \text{ nm}$) 条件下,纤锌矿氮化物有限 PQW 中极化子基态能量 E_0 随外电场 F 的变化关系.实线代表有声子影响和有 SD 效应,短划线代表无声子影响和有 SD 效应,点线代表有声子影响和无 SD 效应.

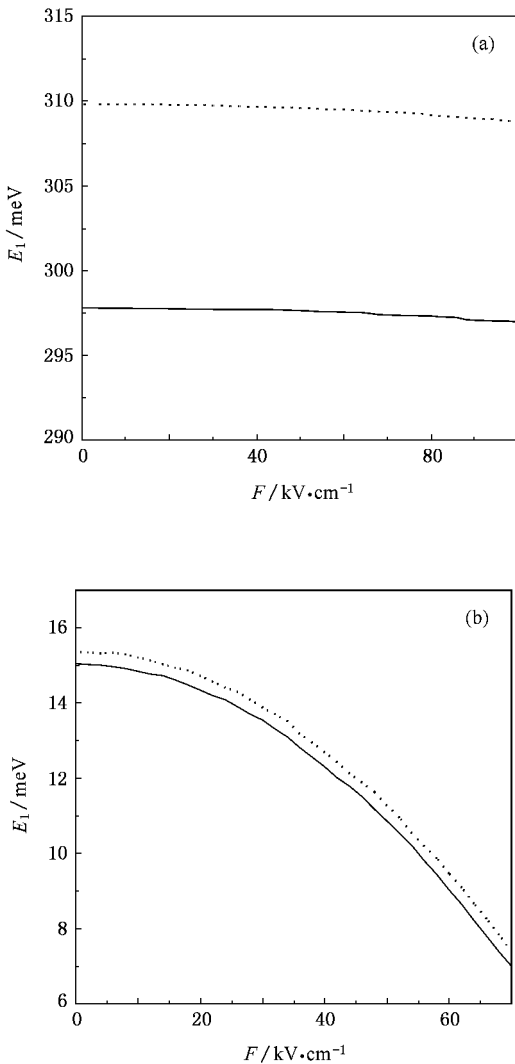


图4 给定阱宽条件下,纤锌矿氮化物有限 PQW 中极化子第一激发态能量 E_1 随阱宽 L 的变化关系. 实线代表有声子影响和有 SD 效应,点线代表有声子影响和无 SD 效应.(a) $L = 5.4 \text{ nm}$, (b) $L = 35 \text{ nm}$

4. 结 论

本文用改进的 LLP 中间耦合方法处理纤锌矿氮化物 PQW 材料中电子-声子相互作用,给出极化子基态能量、第一激发态到基态的跃迁能量以及不同支长波光声子模对极化子能量的影响随阱宽 L 和外电场 F 变化的数值结果.在计算中考虑了纤锌矿氮化物 GaN 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 构成的 PQW 材料中准 LO 和准 TO 声子模的各向异性、电子有效带质量、介电常数、声子频率等随空间坐标 z 变化效应以及外电场作用.数值计算结果表明,氮化物 PQW 材料中电子-声子相互作用、外电场和 SD 效应对极化子能量的影响很明显,它们都使极化子能量降低.阱宽较大时,定域准 LO 声子对极化子能量的贡献起重要作用,而阱宽较小时,半空间准 LO 声子的贡献起重要作用.在阱宽 L 变化的整个范围内,氮化物 PQW 材料中电子-声子相互作用对极化子基态能量的贡献(约为 28—42 meV)比 $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ PQW 中的相应值(约为 0.5—3.2 meV)大得多.而准 TO 声子对极化子基态能量的贡献虽然不等于零,但它远远小于准 LO 声子对极化子基态能量的总贡献.因此,讨论氮化物 PQW($\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$)中电子态问题时,应当考虑电子-准 LO 声子相互作用,而忽略电子与准 TO 声子的作用. SD 效应随着阱宽 L 增大而减小,阱宽越大, SD 效应越小,最后趋近于零.在宽阱中讨论极化子能量时,可以忽略 SD 效应.

[1] Akasaki I, Amano H 1997 *Jpn. J. Appl. Phys. (Part I)* **36** 5393
 [2] Nakamura S 1997 *Solid State Commun.* **102** 237
 [3] Karch K, Wagner J M, Bechstedt F 1998 *Phys. Rev. B* **57** 7043
 [4] Perkins J D, Mascarenhas A, Zhang Y, Geisz J F, Friedman D J, Olson J M, Kurtz S R 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 3312
 [5] Wagner J M, Bechstedt F 2000 *Phys. Rev. B* **62** 4526
 [6] Lee B C, Kim K W, Dutta M, Strosio M A 1997 *Phys. Rev. B* **56** 997
 [7] Xu B, Yu Q X, Wu Q H, Liao Y, Wang G Z, Fang R C 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 204 (in Chinese) [徐波、余庆选、吴气虹、廖源、王冠中、方容川 2004 物理学报 **53** 204]

[8] Wang R M, Chen G D, Zhu Y Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 914 (in Chinese) [王瑞敏、陈光德、竹有章 2006 物理学报 **55** 914]
 [9] Gurusinge M N, Davidsson S K, Andersson T G 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045316
 [10] Kazlauskas K, Tamulaitis G, Pobedinskas P, Ukauskas A, Springis M, Huang C F, Cheng Y C, Yang C C 2005 *Phys. Rev. B* **71** 085306
 [11] Wright A F, Nelson J S 1995 *Appl. Phys. Lett.* **66** 3051
 [12] Tutuncu H M, Miotto R, Srivastava G P, Tse J S 2002 *Phys. Rev. B* **66** 115304
 [13] He Z, Kang Y, Tang Y W, Li X, Fang J X 2006 *Chin. Phys.* **15** 1325

- [14] Ploog K , Dohler G H 1983 *Adv. Phys.* **32** 285
- [15] Miller R C , Gossard A C , Kleinman D A , Munteanu O 1984 *Phys. Rev. B* **29** 3740
- [16] Qi X H , Kong X Y , Lin J Y 1998 *Phys. Rev. B* **58** 10578
- [17] Yuen W P 1993 *Phys. Rev. B* **48** 17316
- [18] Luna-Acosta G A 1985 *Solid State Commun.* **55** 5
- [19] Niculescu E C 1996 *Phys. Lett. A* **213** 85
- [20] Guo K X , Chen C Y 1995 *J. Phys. : Condens. Matter* **7** 6583
- [21] Zang L , Xie H J 2003 *Phys. Rev. B* **68** 235315
- [22] Kasapoglu E , Sari H , Sokmen I 2003 *Physica B* **339** 17
- [23] Kasapoglu E , Sari H , Sokmen I 2004 *Chin. Phys. Lett.* **21** 2500
- [24] Karabulut I , Safak H , Tomak M 2005 *Solid State Commun.* **135** 735
- [25] Zhao F Q , Liang X X , Ban S L 2001 *Int. J. Mod. Phys. B* **15** 527
- [26] Zhao F Q , Liang X X 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 974
- [27] Zhao F Q , Guo Z Z 2004 *Int. J. Modern Phys. B* **18** 2991
- [28] Eerdunchaolu , Li S S , Xiao J L 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4285 (in Chinese) [额尔敦朝鲁、李树深、肖景林 2005 物理学报 **54** 4285]
- [29] Jahn U , Dhar S , Ramsteiner M , Fujiwara K 2004 *Phys. Rev. B* **69** 115323
- [30] Lee B C , Kim K W , Stroschio M A , Dutta M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 4860
- [31] Komirenko S M , Kim K W , Stroschio M A , Dutta M 1999 *Phys. Rev. B* **59** 5013
- [32] Komirenko S M , Kim K W , Stroschio M A , Dutta M 2000 *Phys. Rev. B* **61** 2034
- [33] Gleize J , Renucci M A , Frandon J , Demangeot F 1999 *Phys. Rev. B* **60** 15985
- [34] Wang H , Farias G A , Freire V N 1999 *Phys. Rev. B* **60** 5705
- [35] Xu G Z , Liang H , Bai Y Q , Liu J M , Zhu X 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5344 (in Chinese) [徐耿钊、梁 琥、白永强、刘纪美、朱星 2005 物理学报 **54** 5344]
- [36] Shi J J 2003 *Phys. Rev. B* **68** 165335
- [37] Shi J J 2003 *Solid State Commun.* **127** 51
- [38] Shi J J , Chu X L , Goldys E M 2004 *Phys. Rev. B* **40** 115318
- [39] Lu J T , Cao J C 2005 *Phys. Rev. B* **71** 155304
- [40] Natail F , Byrne D , Leroux M , Damilano B , Semond F , Louarn A L , Veizan S , Grandjean N , Massies J 2005 *Phys. Rev. B* **71** 075311
- [41] Efros A L , Rashba E I 2006 *Phys. Rev. B* **73** 165325
- [42] Kurdak C , Bivikli N , Ozgur U , Morkoc , Litvinov V I 2006 *Phys. Rev. B* **74** 113308
- [43] Ji X L , Chen F , Jiang R L , Zhou J J , Wen B , Han P , Xie Z L , Zhang R , Zheng Y D 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 454
- [44] Chang Y C , Zhang Y M , Zhang Y M 2006 *Chin. Phys.* **15** 636
- [45] Zhang J F , Wang C , Zhang J C , Hao Y 2006 *Chin. Phys.* **15** 1060
- [46] Zhao F Q , Sarula , Wurentuya 2005 *Chin. J. Lumin.* **26** 719 (in Chinese) [赵凤岐、萨茹拉、乌仁图雅 2005 发光学报 **26** 719]
- [47] Zhao F Q , Sarula , Wurentuya 2005 *J. Inner Mongolia Normal Univ.* **34** 426 (in Chinese) [赵凤岐、萨茹拉、乌仁图雅 2005 内蒙古师范大学学报 **34** 426]
- [48] Wang H , Farias G A , Freire V N 1999 *Phys. Rev. B* **60** 5705
- [49] MacMillan M F , Clemen L L , Devaty R P , Choyke W I , Asif Khan M , Kuznia J N , Krishankutty S 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 2378
- [50] Angerer H , Brunner D , Freudenberg F , Ambacher O , Stutzmann M , Hoopler R , Metzger T , Born E , Dollinger G , Bergamier A , Karsch S , Komer H J 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 1504
- [51] Azuhata T , Sota T , Suzuki K , Nakamura S 1995 *J. Phys. : Condens. Matter* **7** L129
- [52] Perlin P , Polian A , Suski T 1993 *Phys. Rev. B* **47** 2874

Energy levels of a polaron in wurtzite nitride parabolic quantum well under external electric field^{*}

Zhao Feng-Qi[†] Zhou Bing-Qing

(College of Physics and Electronics Information , Inner Mongolia Normal University , Hohhot 010022 , China)

(Received 4 December 2006 ; revised manuscript received 19 January 2007)

Abstract

The energy levels of a polaron in a wurtzite nitride finite parabolic quantum well (PQW) are studied by a modified Lee-Low-Pines variational method. The ground state of the polaron , the transition energy from first excited state to the ground state and the contribution from different branches of LO(TO)-like phonon modes on energy levels as functions of the well width L and external electric field F in the wurtzite GaN/Al_xGa_{1-x}N PQW are given. The effects of the anisotropy of confined LO(TO)-like phonon modes , the half-space LO(TO)-like phonon modes , the spatial dependence(SD) of effective mass , dielectric constant , phonon frequency , and external electric field on energy levels are considered in the calculation. The results show that the electron-phonon interaction , SD effects and external electric field strongly affect energy levels of a polaron in wurtzite nitride PQW , all of them tend to lower the polaron energy levels. The SD effect decreases with increasing well width L , and finally approaches to zero. The influence of confined LO-like phonon modes on polaron energy levels is greater at large well width , whereas the influence of half-space LO-like phonon modes is smaller , and the situation is reversed at a small well width. The contributions of the electron-phonon interaction to ground state energy of the polaron in wurtzite GaN/Al_xGa_{1-x}N PQW (roughly from 28 to 42 meV) are greater than that in GaAs/Al_xGa_{1-x}As PQW(roughly from 0.5 to 3.2 meV). In addition , the contribution of the TO-like phonon modes to polaron energy levels is very small and far smaller than that of the LO-like phonon modes. Therefore , the electron-LO-like phonon interaction should be considered while the electron-TO-like phonon interaction can be neglected in studying the electron states in GaN/Al_xGa_{1-x}N PQW.

Keywords : nitride parabolic quantum well , electron-phonon interaction , polaron

PACC : 6320 , 7138 , 7320D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10364003).

[†] Corresponding author. E-mail : fqzhao@imnu.edu.cn