

# 闪锌矿 GaN/AlGaN 量子点中激子态 及光学性质的研究\*

王艳文<sup>1)†</sup> 吴花蕊<sup>2)</sup>

1) (新乡医学院生命科学技术系, 新乡 453003)

2) (新乡学院物理系, 新乡 453003)

(2011年7月16日收到; 2011年10月17日收到修改稿)

在有效质量近似的框架下, 运用变分方法研究闪锌矿 GaN/AlGaN 量子点中的激子态及相关光学性质, 探讨电子与空穴在量子点中的三维空间受限和有限势效应. 数值计算结果显示, 当量子点的尺寸增加时, 量子尺寸效应对电子和空穴的影响减弱, 基态激子结合能和带间光跃迁能也都降低; 而当该量子点中垒层 AlGaN 中 Al 含量增加时, 提高了量子点对电子和空穴的束缚作用, 同时基态激子结合能和带间光跃迁能都增加. 数值的理论结果与相关实验测量结果一致.

**关键词:** 激子, 量子点, GaN

**PACS:** 61.72.uj, 71.35.-y, 73.61.Ey, 78.67.Hc

## 1 引言

近年来, 由于 III—V 族 GaN 基量子结构在电子学和光电子学方面表现的优越性能而备受人们的广泛关注<sup>[1,2]</sup>. 而且 III—V 族氮化物半导体以稳定的纤锌矿结构和亚稳态的闪锌矿结构两种形式存在. 实验和理论计算表明, 在 III—V 族 GaN 基量子点内, 电子和空穴被限定在三维空间内, 电子和空穴之间的交叠增加, 提高了其复合发光效率<sup>[3]</sup>. 研究也表明, 在纤锌矿 GaN/AlGaN 量子点中, 存在由自发极化和压电极化而形成的强内建电场, 且内建电场的数量级约为 MV/cm<sup>[4,5]</sup>, 这样强的内建电场使电子与空穴发生空间分离<sup>[6]</sup>, 从而减小了电子与空穴之间的复合发光效率. 因此在纤锌矿 GaN/AlGaN 量子点中的三维空间受限和内建电场对电子和空穴的空间分离, 对纤锌矿 GaN 基光电子器件的发光性能来说是相互矛盾的因素. 因此, 纤锌矿 GaN/AlGaN 量子点中强内建电场对纤锌矿 GaN/AlGaN 量子点的激子态和光学性质有很大的影响<sup>[6,7]</sup>. 然而, 近来的研究表明, 在闪锌

矿 GaN/AlGaN 量子结构中, 由于晶体的高对称性, 由自发极化和压电极化引起的内建电场可以被忽略, 而且闪锌矿 GaN/AlGaN 量子点的生长过程也得到了较大的改善<sup>[8,9]</sup>. 所以, 闪锌矿 GaN/AlGaN 量子结构有望更广泛地应用在光电子学器件中, 引起了人们对其性质研究的浓厚兴趣<sup>[8-15]</sup>.

因此, 为了理解闪锌矿 GaN/AlGaN 量子点中激子态和光学性能的影响, 我们将在有效质量近似下, 运用变分方法计算闪锌矿 GaN/AlGaN 量子点中激子态和光学性质与该量子点中结构参数之间的关系, 如量子尺寸和 Al 含量. 本文结构如下: 在第 2 部分, 我们将给出计算闪锌矿 GaN/AlGaN 量子点中激子态和光学性质的理论模型; 相关的数值结果和讨论在第 3 部分给出; 第 4 部分给出本文得出的重要结论.

## 2 理论模型

根据对闪锌矿 GaN/AlGaN 量子点的实验和理论研究<sup>[12,16]</sup>, 本文采用柱形量子点形状. 在有效质

\* 河南省教育厅 2011 年度自然科学研究计划项目 (批准号: 2011C140001) 资助的课题.

† E-mail: wangyanwen@xxmu.edu.cn

量近似的框架下, 激子的 Hamilton 量可写为

$$\hat{H}_{ex} = \hat{H}_e + \hat{H}_h - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\bar{\epsilon}|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}, \quad (1)$$

其中  $\hat{H}_e$  ( $\hat{H}_h$ ) 是电子 (空穴) 的 Hamilton 量,  $\mathbf{r}_e$  ( $\mathbf{r}_h$ ) 是电子 (空穴) 的位矢,  $e$  是电子电荷的绝对值,  $\epsilon_0$  是真空介电常数,  $\bar{\epsilon}$  是量子点材料内的介电常数.

电子 (空穴) 的 Hamilton 量在柱坐标下的表示为

$$\hat{H}_j = -\frac{\hbar^2}{2m_j^*} \left[ \frac{1}{\rho_j} \frac{\partial}{\partial \rho_j} \left( \rho_j \frac{\partial}{\partial \rho_j} \right) + \frac{1}{\rho_j^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} \right] + V(\rho_j, z_j), \quad (2)$$

此处下标  $j = e$  或  $h$  表示电子或空穴,  $V(\rho_j, z_j)$  是由于闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点带阶引起的电子 (空穴) 的束缚势, 由下式给出:

$$V(\rho_j, z_j) = \begin{cases} V(\rho_j), & -\frac{H}{2} \leq z_j \leq \frac{H}{2}, \\ V_{\text{II}j}, & |z_j| > \frac{H}{2}, \end{cases} \quad (3)$$

$$V(\rho_j) = \begin{cases} 0, & \rho_j \leq R, \\ v_{\text{I}j}, & \rho_j > R. \end{cases} \quad (4)$$

考虑到电子与空穴的相对运动之间的关系, 我们将采用下面的试探波函数<sup>[17,18]</sup>

$$\phi_{\text{ex}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = f(\rho_e)h(z_e)f(\rho_h)h(z_h) e^{-\alpha\rho_{\text{eh}}^2 - \beta z_{\text{eh}}^2}, \quad (5)$$

其中波函数  $f(\rho_j)$  和  $h(z_j)$  分别描述电子 (空穴) 在平面和  $z$  方向的运动, 电子 (空穴) 的基态波函数可通过 Bessel 函数  $J_0$  和修正的 Bessel 函数  $K_0$  得到,  $Z$  轴波函数  $h(z_j)$  可通过解析函数  $\sin(\xi)\cos(\xi)$ (阱) 或  $\exp(\xi)$ (垒) 的线性组合建立,  $\rho_{\text{eh}}^2 = (x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2$  和  $z_{\text{eh}} = z_e - z_h$ ,  $\alpha$  是与平面运动相关联的变量,  $\beta$  是与  $z$  方向运动相联系的变量. 因此, 方程 (5) 完整地描述了电子空穴之间相对运动的关系.

闪锌矿 GaN/AlIn 量子点激子的基态能由下式得到:

$$E_{\text{ex}} = \min \frac{\langle \phi_{\text{ex}} | \hat{H}_{\text{ex}} | \phi_{\text{ex}} \rangle}{\langle \phi_{\text{ex}} | \phi_{\text{ex}} \rangle}. \quad (6)$$

激子结合能  $E_b$  和与激子态有关的带间光跃迁能量  $E_{\text{ph}}$  定义如下:

$$E_b \equiv E_e + E_h - E_{\text{ex}},$$

$$E_{\text{ph}} \equiv E_e + E_h + E_g - E_b, \quad (7)$$

其中  $E_e$  ( $E_h$ ) 是电子 (空穴) 在闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点中的束缚能,  $E_g$  是闪锌矿 GaN 材料的带隙能.

### 3 数值结果及讨论

本文计算需用的材料参数<sup>[19]</sup>: 闪锌矿 GaN 和 AlN 材料的带隙能分别为  $E_g = 3.3$  和  $6.0$  eV; 对于 GaN, 电子的有效质量为  $m_e^\perp$  ( $m_e^{\parallel}$ ) =  $0.19m_0$  ( $0.19m_0$ ), 空穴的有效质量为  $m_h^\perp$  ( $m_h^{\parallel}$ ) =  $0.86m_0$  ( $2.0m_0$ ); AlN 电子的有效质量  $m_e^\perp$  ( $m_e^{\parallel}$ ) =  $0.33m_0$  ( $0.33m_0$ ), 空穴的有效质量为  $m_h^\perp$  ( $m_h^{\parallel}$ ) =  $1.43m_0$  ( $4.55m_0$ ).  $m_0$  是真空中电子的质量, 带阶是 75 : 25.

图 1 描述了闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点中基态激子结合能  $E_b$  和带间光跃迁能  $E_{\text{ph}}$  与量子点高度  $H$  的变化关系. 图 1(a) 显示, 当量子点高度  $H$  增加时, 基态激子结合能  $E_b$  随之减小. 这是因为当量子点  $H$  增大时, 束缚在该量子点中的电子和空穴之间的相对距离将会增加, 电子和空穴之间的 Coulomb 相互作用减小. 众所周知, 激子的结合能的大小和 Coulomb 相互作用的强弱呈现出正比的关系, 因此当闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点的高度增加时, 束缚在该量子点中的基态激子结合能  $E_b$  减小. 另外, 我们也可以从图 1(b) 中看到, 当量子点高度  $H$  增加时, 带间跃迁能  $E_{\text{ph}}$  减小. 这是因为当量子点高度  $H$  增加时, 电子和空穴的束缚能减小, 因此该量子点的有效带隙降低, 带间光跃迁能也会减小. 同时图 1(b) 也显示出激子效应对带间跃迁能有明显的作用, 它降低了闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点的带间光跃迁能. 总之, 从图 1 可以看出, 半导体量子点的尺寸大小能明显地影响电子和空穴波函数的分布及闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点的带间光跃迁能和发光波长. 因此对闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点中光电子性质的研究和相关光电子器件设计的时候, 应该考虑闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点的量子尺寸效应对其光学性质和器件性能的影响.

为了进一步研究闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点材料中 Al 含量对其光学性质的影响, 我们在图 2 进行了闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点中的基态激子结合能  $E_b$  和带间光跃迁能  $E_{\text{ph}}$  随 Al 含量变化关系的详细计算. 从图 2(a) 可以看出, 随着闪锌

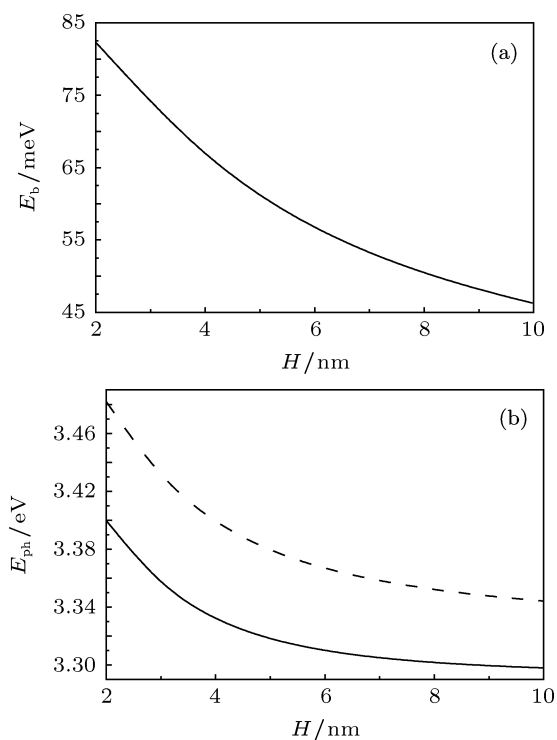


图1 闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点半径  $R = 6 \text{ nm}$  时, 基态激子结合能  $E_b$  和带间光跃迁能  $E_{ph}$  与量子点高度  $H$  之间的函数关系 虚线是不受激子作用时, 带间光跃迁能  $E_{ph}$  与量子点高度  $H$  之间的函数关系

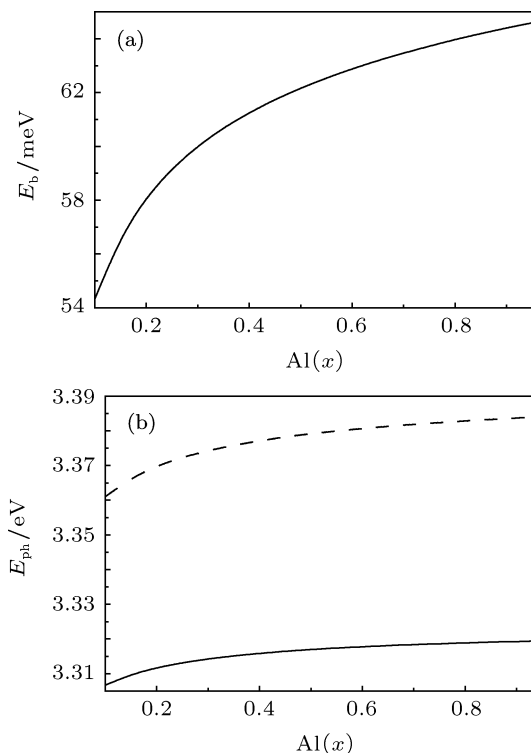


图2 Al 含量变化对闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点中的基态激子结合能  $E_b$  和带间光跃迁能  $E_{ph}$  的影响 虚线表示不考虑激子影响时, Al 含量变化对带间光跃迁能  $E_{ph}$  的影响; 量子点高度为  $H = 6 \text{ nm}$ , 半径为  $R = 6 \text{ nm}$

矿 GaN/AlGaIn 量子点材料中 Al 含量的增加, 基态激子结合能  $E_b$  增加. 这是因为当 Al 含量增加时, 垒高增加, 量子点对束缚在其中的电子和空穴受限增加, 进而增强了电子和空穴之间的相互作用, 因此激子结合能会随着 Al 含量的增加而增加. 另外图 2(b) 也显示, 当 Al 含量增加时, 带间光跃迁能  $E_{ph}$  单调递增. 这是因为当 Al 含量增加时, 电子和空穴的束缚势增加, 则带间光跃迁增加. 而且图 2 也显示, 激子效应也降低了闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点中带间光跃迁能  $E_{ph}$ . 总之, 从图 2 可以看出, AlGaIn 材料中 Al 含量的增加也能明显地影响闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点中电子和空穴波函数的分布、激子性质及带间光跃迁能和发光波长. 因此在对闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点中光电子性质的研究和相关光电子器件设计的时候, 垒层 AlGaIn 材料中 Al 含量是必须要考虑的一个重要因素.

## 4 结论

在有效质量近似下, 我们运用变分法对闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点中激子态和带间光跃迁能随量子点尺寸和垒层中 Al 含量大小的变化关系进行了详细的理论研究. 数值结果显示, 量子尺寸效应和势垒高度对闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点中的激子态和带间光跃迁有明显的影 响. 当柱型量子点高度增加时, 基态激子结合能和带间光跃迁能均减小; 而当 Al 含量增加时, 基态激子结合能和带间光跃迁能增加. 同时结果也显示出激子效应对闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点中的激子态和带间光跃迁能也有明显的影 响. 本文的理论计算结果将对以闪锌矿 GaN/AlGaIn 量子点结构为基础的相关物理实验和光电子器件的设计具有一定的指导意义.

[1] Sakr S, Warde E, Tchernycheva M, Rigutti L, Isac N, Julien F H 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 142103  
 [2] Yoshida S, Yokogawa T, Imai Y, Kimura S, Sakata O 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 131909

[3] Holmes M, Park Y, Wang X, Chan C, Reid B, Kim H, Taylor R, Warner J, Luo J 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 251908  
 [4] Widmann F, Simon J, Daudin B, Feuillet G, Rouvière J L, Pelekanos N T, Fishman G 1998 *Phys. Rev. B* **58** R15989

- [5] Simon J, Pelekanos N T, Adelman C, Martinez-Guerrero E, André R, Daudin B, Dang L S, Mariette H 2003 *Phys. Rev. B* **68** 035312
- [6] Schulz S, Schumacher S, Czycoll G 2006 *Phys. Rev. B* **73** 245327
- [7] 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]
- [8] Novikov S V, Stanton N M, Campion R P, Morris R D, Geen H L, Foxon C T, Kent A J 2008 *Semiconductor Sci. Technol.* **23** 015018
- [9] Chichibu S F, Onuma T, Sota T, DenBaars S P, Nakamura S, Kitamura T, Ishida Y, Okumura H 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 2051
- [10] Garayt J P, Gérard J M, Enjalbert F, Ferlazzo L, Founta S, Martinez-Guerrero E, Rol F, Araujo D, Cox R, Daudin B, Gayral B, Dang L S, Mariette H 2005 *Physica E* **26** 203
- [11] Lee J, Spector H N, Chou W C 2005 *Phys. Status Solidi B* **242** 2846
- [12] Schulz S, Mourad D, Czycoll G 2009 *Phys. Rev. B* **80** 165405
- [13] Chu X L, Zhang Y 2010 *J. At. Mol. Phys.* **27** 173 (in Chinese) [楚兴丽, 张莹 2010 原子与分子物理学报 **27** 173]
- [14] Wei S Y, Zhao X, Wu H R 2006 *Chin. J. Liquid Cryst. Displ.* **21** 139 (in Chinese) [危书义, 赵旭, 吴花蕊 2006 液晶与显示 **21** 139]
- [15] Wu H T, Wang H L, Jiang L M 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 465 (in Chinese) [吴慧婷, 王海龙, 姜黎明 2009 物理学报 **58** 465]
- [16] Marquardt O, Mourad D, Schulz S, Hickel T, Czycoll G, Neugebauer J 2008 *Phys. Rev. B* **78** 235302
- [17] Shi J, Xia C, Wei S, Liu Z 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 083705
- [18] Shi J, Gan Z 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 407
- [19] Wang H, Farias G A, Freire V N 1999 *Phys. Rev. B* **60** 5705

# Exciton states and optical properties in zinc-blende GaN/AlGaN quantum dot\*

Wang Yan-Wen<sup>1)†</sup> Wu Hua-Rui<sup>2)</sup>

1) (*Department of Life Science and Technology, Xinxiang Medical University, Xinxiang 453003, China*)

2) (*Department of Physics, Xinxiang University, Xinxiang 453003, China*)

(Received 16 July 2011; revised manuscript received 17 October 2011)

## Abstract

Within the framework of effective-mass approximation, exciton states confined in zinc-blende GaN/AlGaN quantum dot (QD) are investigated by a variational approach, including the three-dimensional confinement of electron and hole in the QD and the finite band offset. Numerical results show that both the exciton binding energy and the interband emission energy decrease when QD height (or radius) increases. Our theoretical results are in agreement with the experimental measurements.

**Keywords:** exciton, quantum dot, GaN

**PACS:** 61.72.uj, 71.35.-y, 73.61.Ey, 78.67.Hc

---

\* Project supported by the Natural Science Foundation of Education Bureau of Henan Province, China (Grant No. 2011C140001).

† E-mail: wangyanwen@xxmu.edu.cn