

Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs 量子阱中电子 -LO 声子的 散射率*

陈茜¹⁾ 王海龙^{1)†} 汪辉²⁾ 龚谦³⁾ 宋志棠³⁾

1) (山东省激光偏光与信息技术重点实验室, 曲阜师范大学物理系, 曲阜 273165)

2) (中国科学院上海高等研究院, 上海 201203)

3) (中国科学院上海微系统与信息技术研究所, 信息功能材料国家重点实验室, 上海 200050)

(2013年8月9日收到; 2013年8月19日收到修改稿)

在有效质量近似下利用打靶法求出 Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs 量子阱中的本征能级 E_n , 并通过费米黄金规则计算电子 -LO 声子由第一激发态到基态的散射率和平均散射率随温度、阱宽以及氮 (N) 和铟 (In) 组分变化的规律. 计算结果表明: 在 In 组分恒定的情况下, 随着 N 组分的增加, 散射率和平均散射率增加; 在 N 组分恒定的情况下, 随着 In 组分的增加, 散射率和平均散射率减小; 随着温度的增加, 在温度较低时散射率和平均散射率随温度的增加变化不大, 在温度较高时随温度的增加而增加; 随着阱宽的增加, 散射率和平均散射率都是先增加到一个最大值, 然后再减小, 最大值出现在阱宽 200 Å 附近. 计算结果对 Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs 量子阱在光电子器件应用方面有一定的指导意义.

关键词: 费米黄金规则, Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs 量子阱, LO 声子, 散射率

PACS: 63.20.Kd, 72.10.-d, 73.61.Ey, 73.21.Fg **DOI:** 10.7498/aps.62.226301

1 引言

低维半导体材料在光电子器件中应用广泛, 从理论上研究低维半导体材料的特性对新型半导体器件设计具有重要的理论价值和指导意义^[1-4]. 20 世纪 90 年代 Kondow 等^[5] 提出了 GaInNAs 材料, 此后相关研究和应用迅速发展, 并成功研制出各种光电器件, 如边发射激光器、垂直腔面发射激光器和半导体光放大器等^[6-8]. GaInNAs 材料应用在光电器件上有很多优点: 第一, 较大的价带偏移率^[9], 温度特性较好; 第二, 具有随 N 组分增加能带间隙减小的特性, 发射波长范围宽, 目前已研制出发射波长为 1.3 和 1.5 μm 的量子阱激光器^[10-12]; 第三, 晶格常数与 GaAs 匹配^[13], 生长在 GaAs 材料上, 不会出现晶格失配的现象. 尽管在制作 GaInNAs 材

料低维光电器件上已获得一些成功, 但是对 GaInNAs 材料物理性能还需要进一步研究, 尤其是对于 Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs 量子阱中电子 -LO 声子散射率的研究, 目前还很少报道.

1986 年日本 Sawaki^[14] 研究了半导体超晶格中的电子 -LO 声子散射率. 1991 年 Weber 等^[15] 研究了有限深 AlGaAs/GaAs 量子阱中电子 -LO 声子散射率. 2002 年 Xie 和 Zhu^[16] 研究了量子点中电子 -LO 声子散射率. 2012 年杨福军和班士良^[17] 研究了 AlGaIn/AlN/GaN 异质结构中光学声子散射影响的电子迁移率. 另外还有研究人员利用不同的方法研究了一些低维半导体材料及器件中不同因素对电子 -LO 声子散射率的影响^[18-23].

本文以费米黄金规则为基础计算了 N 和 In 组分、温度, 以及阱宽对 Ga_{1-x}In_xN_yAs_{1-y}/GaAs 量子阱中电子 -LO 声子散射率的影响. 计算结果对

* 国家自然科学基金 (批准号: 60976015, 61176065)、山东省自然科学基金 (批准号: ZR2010FM023) 和信息功能材料国家重点实验开放基金资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: hlwang@mail.qfnu.edu.cn

GaInNAs 材料的光电器件设计具有一定指导意义.

2 理论模型

2.1 本征能级的计算

对于 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ 单量子阱, 薛定谔方程可写为

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z), \quad (1)$$

其中 $\psi(z)$ 是在有效质量和包络函数近似下电子的波函数. 利用打靶法可以得到:

$$\begin{aligned} \psi(z + \delta z) &= \left[\frac{2m^2}{\hbar^2} (\delta z)^2 (V(z) - E) + 2 \right] \psi(z) \\ &\quad - \psi(z - \delta z), \end{aligned} \quad (2)$$

并且当 $z \rightarrow \pm\infty$ 满足:

$$\psi(z) \rightarrow 0, \quad (3a)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \psi(z) \rightarrow 0, \quad (3b)$$

从而可以求出基态和第一激发态的能量 E_1 和 E_2 以及相应的波函数.

2.2 散射率的计算

根据费米黄金规则可知: 如果一个电子处于能量为 E_i 的态 $|i\rangle$, 经历一个含时的微扰 \tilde{H} , 那么电子将会散射到能量为 E_f 的态 $|f\rangle$, 并且载流子在态 $|i\rangle$ 的寿命为

$$\frac{1}{\tau_i} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |\langle f | \tilde{H} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (4)$$

单个无色散的声子的归一化波函数为

$$\phi = \left(\frac{\hbar\omega P}{2V|\mathbf{K}|^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}}{V^{\frac{1}{2}}}. \quad (5)$$

因此总的电子与声子的相互作用为

$$\tilde{H} = e \sum_{\mathbf{K}} \phi. \quad (6)$$

对于二维的量子阱结构:

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= e \sum_{\mathbf{K}_{xy}} \sum_{K_z} \left(\frac{\hbar\omega P}{2(|\mathbf{K}_{xy}|^2 + |K_z|^2)} \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \times \frac{e^{-i\mathbf{K}_{xy}\cdot\mathbf{r}_{xy}}}{A^{\frac{1}{2}}} \frac{e^{-iK_z z}}{L^{\frac{1}{2}}}. \end{aligned} \quad (7)$$

量子阱中电子的波函数为

$$\psi = \Psi(z) \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{xy}}}{A^{\frac{1}{2}}}. \quad (8)$$

将声子间的相互作用 (7) 式和电子的波函数 (8) 式代入 (4) 式可得:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_i} &= \frac{\pi e^2 \omega P'}{A} \sum_{\mathbf{k}_f} \left| \sum_{K_z} \frac{1}{L^{\frac{1}{2}}} \int \Psi_f^*(z) e^{-iK_z z} \Psi_i(z) dz \right. \\ &\quad \times \sum_{\mathbf{K}_{xy}} \frac{1}{(|\mathbf{K}_{xy}|^2 + |K_z|^2)^{\frac{1}{2}}} \\ &\quad \times \frac{1}{A} \int e^{-i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f + \mathbf{K}_{xy})\cdot\mathbf{r}_{xy}} d\mathbf{r}_{xy} \\ &\quad \times \sum_{\mathbf{K}_{xy}} \frac{1}{(|\mathbf{K}_{xy}|^2 + |K_z|^2)^{\frac{1}{2}}} \\ &\quad \times \left. \frac{1}{A} \int e^{-i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f + \mathbf{K}_{xy})\cdot\mathbf{r}_{xy}} d\mathbf{r}_{xy} \right|^2 \\ &\quad \times \delta(E_f^i - E_i^i). \end{aligned} \quad (9)$$

令 $G_{if}(K_z) = \int \Psi_f^*(z) e^{-iK_z z} \Psi_i(z) dz$, 得出:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_i} &= \frac{\pi e^2 \omega P'}{(2\pi)^3} \iint \frac{|G_{if}(K_z)|^2}{K_{xy}^2 + K_z^2} dK_z d\mathbf{K}_{xy} \\ &\quad \times \delta(E_f^i - E_i^i), \end{aligned} \quad (10)$$

其中,

$$E_i^{\pm} = E_i + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_i^2}{2m^*} \pm \hbar\omega, \quad (11)$$

$$E_f^{\pm} = E_f + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_f^2}{2m^*}, \quad (12)$$

其中 \pm 表示散射的过程: $+$ 表示吸收的过程, $-$ 表示发射的过程.

2.3 平均散射率的计算

由于声子为玻色子, 因此单位体积中声子的分布服从费米狄拉克分布:

$$N_0 = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}. \quad (13)$$

所以得出电子 -LO 声子的从初态到末态平均散射率为

$$\left(\frac{1}{\tau_{if}} \right) = \frac{\int \frac{1}{\tau_i} f_i^{\text{FD}}(E) f_f^{\text{FD}}(E - \hbar\omega) dE}{\int f_i^{\text{FD}}(E) dE}. \quad (14)$$

本文给出的是电子 -LO 声子由第一激发态到基态的散射率所以这里 i 为 2, f 为 1.

3 结果与讨论

图 1 给出的是不同 N 和 In 组分下第一激发态到基态的电子 -LO 声子散射率, 其中温度 $T = 300\text{ K}$, 阱宽 $W = 100\text{ \AA}$. 图 1(a) 中 In 组分为 $x = 0.1$, N 组分 y 分别取 0.005, 0.01, 0.02. 由图 1(a) 可以看出, 电子 -LO 声子的散射率随着 N 组分的增加而增加. 由表 1 可以看出 y 取 0.005, 0.01, 0.02 三个组分时的能级差分别为 79.62, 82.76, 85.31 meV. 当能级差大于声子能量时, 随着能级差的增大散射率减小, 但是随着 N 组分的增加会出现介电常数减小的现象, 并且从数据上也可以看出三个组分间的能级差变化只有 2—3 meV, 所以电子 -LO 声子的

散射率随着 N 组分的增加而增加. 图 1(b) 中 N 组分 $y = 0.01$, In 组分 x 分别取 0.1, 0.2, 0.3. 从图中可以看出, 随着 In 组分的增加散射率减小. 这是由于随着 In 组分的增加, 尽管介电常数也减小, 但当 In 的组分 x 取 0.1, 0.2, 0.3 三个组分时能级差分别为 82.76, 97.26, 110.61 meV, 随着 In 浓度的增加能级差变化达到十几个毫电子伏, 所以随着 In 组分的增加散射率减小.

图 2 中 In 组分为 $x = 0.2$, N 组分 $y = 0.005$. 图 2(a) 为阱宽 $W = 100\text{ \AA}$ 时不同温度下电子 -LO 声子的散射率. 由图 2(a) 可以看出, 随着温度的升高, 电子 -LO 声子的散射率升高. 这是因为随着温度的升高, 电子的动能增加. 图 2(b) 为温度 $T = 300\text{ K}$ 时

表 1 不同 N 和 In 组分下的能级差

组分	In(x)	0.1			0.2			0.3		
	N(y)	0.005	0.01	0.02	0.005	0.01	0.02	0.005	0.01	0.02
E_1/meV		28.68	29.11	29.43	33.83	33.60	33.33	38.32	37.82	37.24
E_2/meV		108.30	111.87	114.74	130.93	130.86	130.75	150.04	148.43	146.67
$\Delta E = E_2 - E_1/\text{meV}$		79.62	82.76	85.31	97.1	97.26	97.42	111.72	110.61	109.43

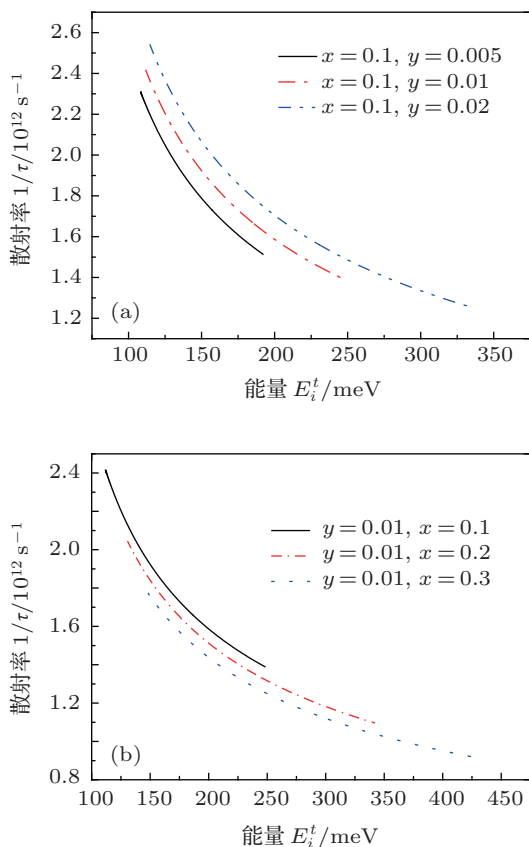


图 1 第一激发态到基态的电子 -LO 声子发射的散射率 (a) 不同 N 组分; (b) 不同 In 组分

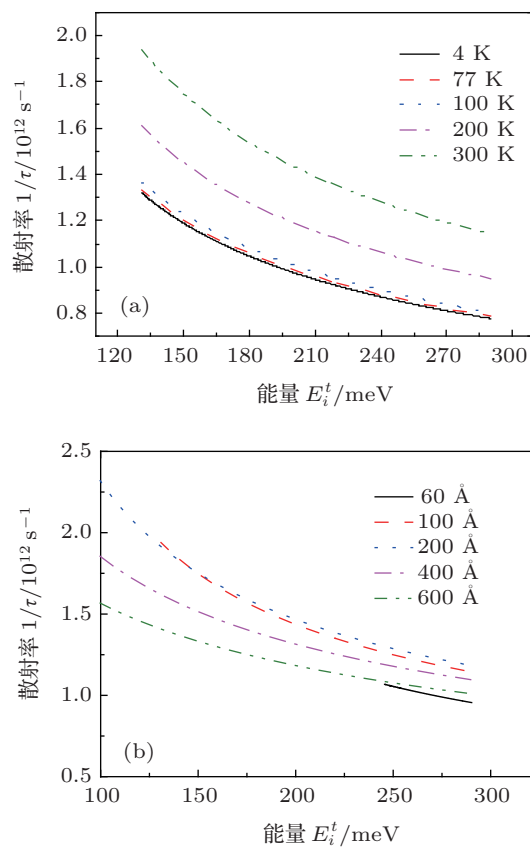


图 2 第一激发态到基态的电子 -LO 声子发射的散射率 (a) 不同温度; (b) 不同阱宽

不同阱宽下电子 -LO 声子的散射率. 由图 2(b) 可以看出, 阱宽 60—200 Å 时, 随着阱宽的增加电子 -LO 声子的散射率升高; 阱宽 200—600 Å 时, 随着阱宽的增加, 电子 -LO 声子的散射率减小. 这是由于随着阱宽的增加, 能级差逐渐减小, 当能级差与声子的能量接近时会产生共振现象, 这时的散射率最大. 计算中我们取声子的能量为 29.7 meV^[24], 由图 3 可以看出阱宽为 200 Å 左右时能级差与其最接近.

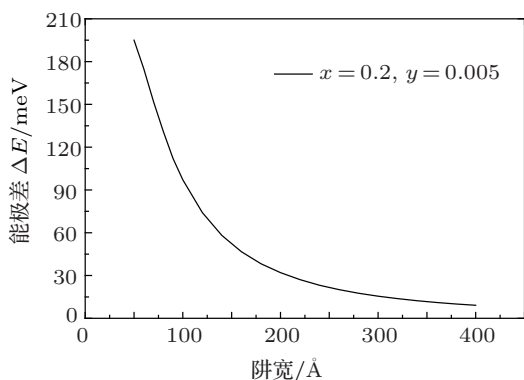


图 3 能级差随阱宽的变化规律

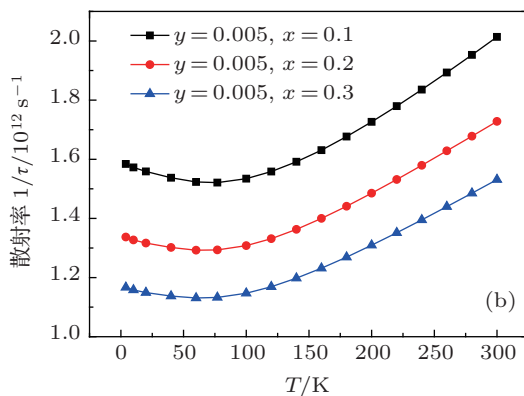
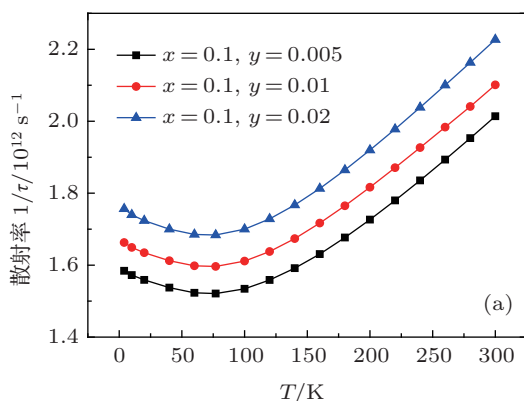


图 4 第一激发态到基态的电子 -LO 声子发射的平均散射率随温度变化的规律 (a) 不同 N 组分; (b) 不同 In 组分

图 4 给出电子 -LO 声子的平均散射率随温度变化的规律. 由图 4(a) 可以看出, 电子 -LO 声子的

平均散射率随 N 组分的增加而增加; 由图 4(b) 可以看出电子 -LO 声子的平均散射率随着 In 组分的增加而减小. 这与散射率随 N 和 In 组分的变化规律是一致的. 由图 4 还可以看出, 在温度较低时, 平均散射率随温度的增加变化不明显, 这是由于在温度较低时电子的动能很小. 随着温度的升高, 电子的动能增加, 温度对于散射的影响变大, 这时随着温度的增加平均散射率增加.

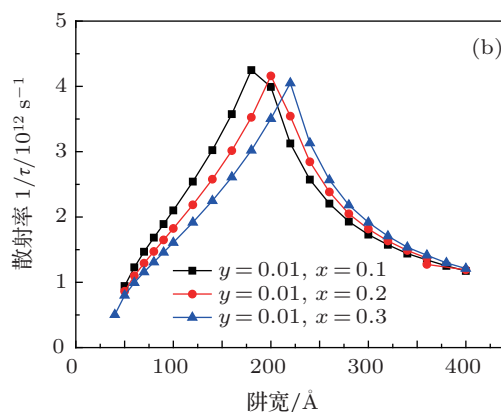
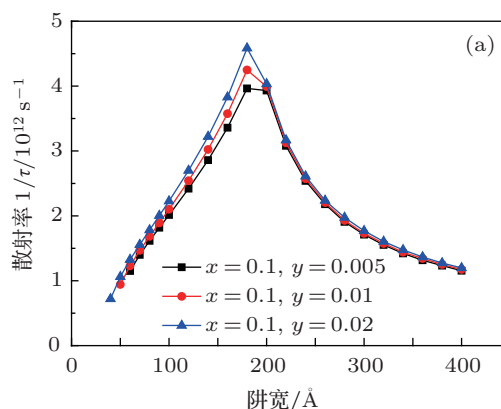


图 5 电子 -LO 声子的平均散射率随阱宽变化的规律 (a) 不同 N 组分; (b) 不同 In 组分

图 5 给出的是电子 -LO 声子的平均散射率随阱宽变化的规律. 由图 5(a) 可以看出, 在 In 组分恒定的条件下, 电子 -LO 声子的平均散射率随着 N 组分的增加而增加, 与电子 -LO 声子的散射率随 N 组分变化规律是一致的. 由图 5(b) 可以看出, 在 N 组分恒定的条件下, 电子 -LO 声子的平均散射率随着 In 组分变化规律为: 在阱宽小于 200 Å 时, 随着 In 组分的增加而减小, 与电子 -LO 声子的散射率随着 In 组分变化规律一致; 在阱宽大于 200 Å 时, 随着 In 组分的增加而增加, 这与电子 -LO 声子的散射率随着 In 组分变化规律相反. 由图 5 可以看出, 平均散射率同散射率一样, 也是随着阱宽的增加到一个最大值然后再减小, 最大值在阱宽为 200 Å 附近.

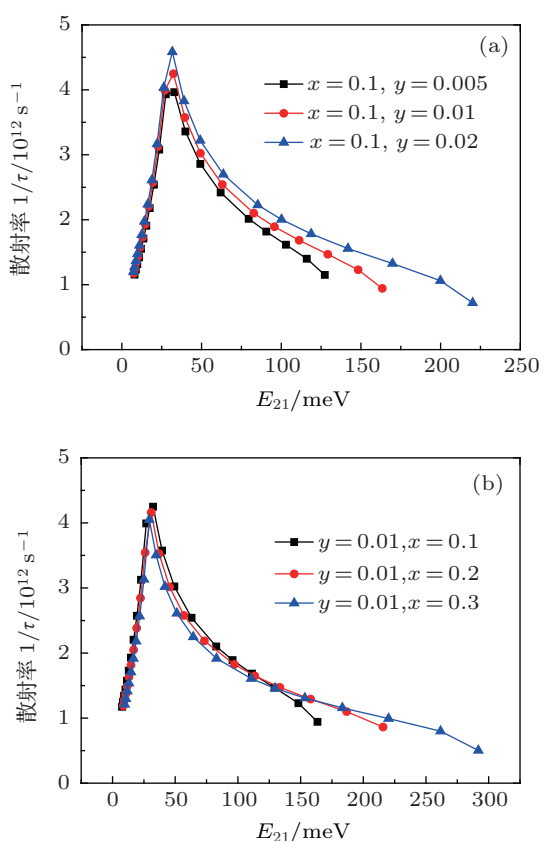


图6 电子 -LO 声子的平均散射率随着第一激发态与基态的能级差变化的规律 (a) 不同 N 组分; (b) 不同 In 组分

图6是平均散射率随第一激发态与基态间的能级差 E_{21} 变化的规律. 由图6(a)可以看出, 在 In 组分恒定的情况下, 随着 N 组分的增加, 平均散射率增加; 由图6(b)可以看出, 在 N 组分恒定的情况

下, 随着 In 组分的增加, 平均散射率减小. 这与图1和图5给出的结论是一致的. 由图6还可以看出, 任意 N 和 In 组分下, 随着能级差的增加, 平均散射率先增加到一个最大值然后再减小, 且最大值在 30 meV 附近. 这与图2(b)中发生共振现象的能级差 29.7 meV 是一致的.

4 结论

在有效质量近似下利用打靶法计算 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ 量子阱中的本征能级 E_n , 并利用费米黄金规则研究电子 -LO 声子由第一激发态到基态的散射率和平均散射率. 计算结果表明: 在 In 组分恒定的情况下, 随着 N 组分增加, 材料的介电常数减小, 使得电子 -LO 声子散射率和平均散射率增加; 在 N 组分恒定的情况下, 随着 In 组分增加, 能级差增加, 电子 -LO 声子散射率和平均散射率减小; 在温度较低时, 电子的动能小, 电子 -LO 声子散射率和平均散射率随温度的增加变化不明显, 在温度较高时, 电子的动能增大, 散射率和平均散射率随着温度的升高而增大; 随着阱宽的增加, 电子 -LO 声子的散射率和其平均散射率都是先增加到一个最大值然后减小, 最大值出现在能级差与材料中声子的能量 29.7 meV 接近的 200 Å 阱宽附近. 本文的计算结果对 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ 量子阱的光电子器件的设计制作有一定的指导意义.

- [1] Lin G J, Lai H K, Li C, Chen S Y, Yu J Z 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3479
- [2] Wu Y F, Liang X X, Baja K K 2005 *Chin. Phys. B* **14** 2314
- [3] Zheng Y J, Ji Z W, Xu X G 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 047805 (in Chinese) [郑雨军, 冀子武, 徐现刚 2011 物理学报 **60** 047805]
- [4] Wang H L, Jiang L M, Gong Q, Feng S L 2010 *Physica B* **405** 3818
- [5] Kondow M, Uomi K, Niwa A, Watahiki S, Yazawa Y 1996 *Jpn. J. Appl. Phys.* **35** 1273
- [6] Spuhler G J, Krainer L, Liverini V, Grange R, Haiml M, Pawlik S, Schmidt B, Schön S, Keller U 2005 *Phot. Technol. Lett.* **17** 1319
- [7] Rutz A, Liverini V, Maas D J H C, Rudin B, Bellancourt A R, Schön S, Keller U 2006 *Elec. Lett.* **42** 926
- [8] Zhan L, Chan K S, Pun E Y B, Ho H P 2003 *Opt. Commun.* **228** 167
- [9] Kondow M, Nakatsuka S, Kitatani T, Yazawa Y, Okai M 1996 *Jpn. J. Appl. Phys.* **35** 5711
- [10] Kondow M, Kitatani T 2002 *Semicond. Sci. Technol.* **17** 746
- [11] Zhang S Y, Niu Z C, Ni H Q, Wu D H, He Z H, Sun Z, Han Q, Wu R H 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 161911
- [12] Niu Z C, Zhang S Y, Ni H Q, Han Q, Yang X H, Wu D H, Zhao H, Peng H L, Xu Y Q, Du Y, Li S Y, He Z H, Ren Z W, Zhou Z Q, Xiong Y H, Wang H L, Wu R H 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 231121
- [13] Niu Z C, Ni H Q, Xu X H, Zhang W, Xu Y Q, Wu R H 2003 *Phys. Rev. B* **68** 235326
- [14] Sawaki N 1986 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **19** 4965
- [15] Weber G, Paula A M D, Ryan J F 1991 *Semicond. Sci. Technol.* **6** 397
- [16] Xie W F, Zhu W 2012 *Commun. Theor. Phys.* **38** 375
- [17] Yang F J, Ban S L 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 087201 (in Chinese) [杨福军, 班士良 2012 物理学报 **61** 087201]
- [18] Xia Z L, Fang Z X, Shao J D 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3007 (in Chinese) [夏志林, 方正修, 邵建达 2006 物理学报 **55** 3007]
- [19] Murdin B N, Hollingworth A R, Kamal-Saadi M, Kotitschke R T 1999 *Phys. Rev. B* **59** R7817
- [20] Wetzel C, Walukiewicz W, Ager III J W 1997 *Proc. Mat. Res. Soc. Symp.* **449** 567
- [21] Zheng Y S, Lu T Q 1997 *Semicond. Sci. Technol.* **12** 296
- [22] Blom P W M, Haverkort J E M, Hail P J, Wolter J H 1993 *Appl. Phys. Lett.* **62** 1490
- [23] Rudin S 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7713
- [24] Potter R J, Balkan N 2004 *J. Phys.: Condens. Matter* **16** S3387

Electron-LO phonon scattering in $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ / GaAs quantum well*

Chen Qian¹⁾ Wang Hai-Long^{1)†} Wang Hui²⁾ Gong Qian³⁾ Song Zhi-Tang³⁾

1) (Shandong Provincial Key Laboratory of Laser Polarization and Information Technology, Department of Physics, Qufu Normal University,

Qufu 273165, China)

2) (Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201203, China)

3) (State Key Laboratory of Functional Materials for Informatics, Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology, Chinese Academy of

Sciences, Shanghai 200050, China)

(Received 9 August 2013; revised manuscript received 19 August 2013)

Abstract

Within the framework of effective mass approximation, the values of energy eigenvalue E_n in $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ /GaAs quantum well are theoretically calculated using shooting method. In addition, we calculate the electron-LO phonon scattering and mean scattering rate at different temperatures, well width, N concentrations and In concentrations for an electron initially in the second subband and finally in the ground state using Fermi's golden rule. It is shown that the electron-LO phonon scattering and mean scattering rate increase with the increase of N concentration under the In concentration constant. The electron-LO phonon scattering and mean scattering rate decrease with the increase of In concentration under the In concentration constant. The electron-LO phonon scattering increases monotonically with the increase of temperature. When the temperature is relatively low, the variation of mean scattering rate is not obvious with the increase of temperature. When the temperature is relatively high, mean scattering rate increases with the increase of temperature. The scattering and mean scattering rate increase up to their maxima and then begin to decrease as the well width increases. The maximum value is reached when the well width is about 200 Å. Our calculated results are meaningful and can be used for designing the optoelectronic devices based on $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ /GaAs quantum well.

Keywords: Fermi's golden rule, $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ /GaAs quantum well, LO phonon, scattering

PACS: 63.20.Kd, 72.10.-d, 73.61.Ey, 73.21.Fg

DOI: 10.7498/aps.62.226301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60976015, 61176065), the Natural Science Foundation of Shandong (Grant No. ZR2010FM023), and the Open Project of State Key Laboratory of Functional Materials for Informatics, China.

† Corresponding author. E-mail: hlwang@mail.qfnu.edu.cn