

纤锌矿 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中光学声子和内建电场对束缚极化子结合能的影响*

赵凤岐[†] 张敏 李志强 姬延明

(内蒙古师范大学物理与电子信息学院, 功能材料物理与化学内蒙古自治区重点实验室, 呼和浩特 010022)

(2014年3月10日收到; 2014年5月14日收到修改稿)

用改进的 Lee-Low-Pines 变分方法研究纤锌矿 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱结构中束缚极化子能量和结合能等问题, 给出基态结合能、不同支长波光学声子对能量和结合能的贡献随阱宽和杂质中心位置变化的数值结果. 在数值计算中包括了该体系中声子频率的各向异性和内建电场对能量和结合能的影响、以及电子和杂质中心与长波光学声子的相互作用. 研究表明, $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱材料中光学声子和内建电场对束缚极化子能量和结合能的贡献很大, 它们都引起能量和结合能降低. 结合能随着阱宽的增大而单调减小, 窄阱中减小的速度快, 而宽阱中减小的速度慢. 不同支声子对能量和结合能的贡献随着阱宽的变化规律不同. 没有内建电场时, 窄阱中, 定域声子贡献小于界面和半空间声子贡献, 而宽阱中, 定域声子贡献大于界面和半空间声子贡献. 有内建电场时, 定域声子贡献变小, 而界面和半空间声子贡献变大, 声子总贡献也有明显变化. 在 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中, 光学声子对束缚极化子能量和结合能的贡献比 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}$ 量子阱中的相应贡献 (约 3.2—1.8 和 1.6—0.3 meV) 约大一个数量级. 阱宽 ($d = 8$ nm) 不变时, 在 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中结合能随着杂质中心位置 Z_0 的变大而减小, 并减小的速度变快. 随着 Z_0 的增大, 界面和半空间光学声子对结合能的贡献缓慢减小, 而定域光学声子的贡献缓慢增大.

关键词: 束缚极化子, 结合能, 量子阱, 内建电场

PACS: 71.38.-k, 73.21.Fg, 63.20.kd

DOI: 10.7498/aps.63.177101

1 引言

氮化物半导体材料 (如 GaN, InN, AlN, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$) 具有奇特的性质 [1–3], 这些材料在制备光探测器件 (绿光和蓝光)、激光二极管和高频大功率等器件中得到广泛应用 [4,5]. 氮化物材料有两种稳定的结构, 即闪锌矿和纤锌矿晶体结构. 宽能带、单轴各向异性、多支奇特的声子模是纤锌矿材料的重要特性. 研究发现, 在纤锌矿材料中光学声子模以混合模的形式存在, 不存在纯的纵光学 (LO) 声子模和模光学 (TO) 声子模 [6]. 由于纤锌矿氮化物材料构成的量子阱

(如 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 或 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$) 材料展现出一些独特的性质, 在激光二极管、光电器、远红外光电探测器和光发射二极管等器件中得到应用 [7–15].

有些研究小组 [16–31] 对氮化物材料构成的低维体系 (异质结、超晶格、量子阱等) 的晶格振动、能带结构、发光和吸收光谱、杂质态和激子结合能、内建电场等问题进行了研究, 得到了一些理论和实验结果. 纤锌矿异质结和量子阱结构中电子-声子相互作用 Frohlich 哈密顿量被 Lee 研究组 [32,33] 用连续介质模型和伦敦单轴晶体模型导出的. 他们的研究发现, 在纤锌矿单量子阱结构中电子相互作用的长波光学声子模有四支, 即定域 (CF)

* 国家自然科学基金 (批准号: 10964007, 11264027)、内蒙古“草原英才”工程和内蒙古师范大学“十百千”人才培养工程基金 (批准号: RCPY-2-2012-K-039) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: zhaofengqi@126.com

声子模、界面 (IF) 声子模、半空间 (HS) 声子模和传播 (PR) 声子模. Shi 研究组 [34-36] 用转移矩阵方法获得了纤锌矿异质结构中电子-声子相互作用 Frohlich 哈密顿量. 由于纤锌矿结构的单轴各向异性, 纤锌矿量子阱材料中电子-声子相互作用 Frohlich 哈密顿量比闪锌矿量子阱材料中相应哈密顿量复杂, 并且纤锌矿量子阱结构中存在较强的内建电场 [37-39], 这就导致在纤锌矿量子阱结构中电子-声子相互作用有关问题的研究比闪锌矿量子阱结构中相应研究难的多. 作者在前些工作中 [40,41] 从 Lee 研究组导出的 Frohlich 哈密顿量出发, 讨论了纤锌矿 GaN/Al_{0.3}Ga_{0.7}N 抛物量子阱材料中自由极化子能量和跃迁能量以及电子-声子相互作用导致的能移等问题. 纤锌矿 In_xGa_{1-x}N/GaN 量子阱材料中不同支声子引起的极化子效应、内建电场对自由极化子和磁极化子能量和跃迁能量的影响分别在文献 [42] 和 [43] 中讨论. Shi 研究组 [44-47] 利用他们导出的电子-声子相互作用 Frohlich 哈密顿量, 研究纤锌矿 GaN/Al_xGa_{1-x}N 量子阱材料中不同支声子引起的极化子能移等问题. 据了解, In_xGa_{1-x}N/GaN 量子阱材料 (纤锌矿) 中不同支声子模和内建电场对束缚极化子能级和结合能的影响的报到较少. 因为氮化物量子阱材料 (纤锌矿) 中内建电场对电子态能量和不同支声子对极化子能移的影响较大, 并且电子与声子耦合很强 ($\alpha \approx 0.40$), 因此有必要进一步讨论这方面的问题.

本文用改进的 Lee-Low-Pines (LLP) 变分方法讨论了 In_xGa_{1-x}N/GaN 量子阱材料 (纤锌矿) 中束缚极化子结合能、内建电场和不同支光学声子对束缚极化子能量和结合能的影响等问题. 计算中考虑了该结构中内建电场和不同支 (包括 CF, HS, IF) 声子模影响, 并且考虑电子和杂质中心均与光学声子相互作用.

2 模型和理论推导

考虑一个纤锌矿 In_xGa_{1-x}N/GaN 量子阱结构, 阱材料 In_xGa_{1-x}N 位于 $|z| < d$ 范围 ($\lambda = 1$), 垒材料 GaN 位于 $|z| > d$ 区间 ($\lambda = 2$). 坐标系 Z 轴选为垂直于量子阱界面, X-Y 平面平行于量子阱界面. 杂质中心位于 (0, 0, Z₀) 处, 利用有效质量近似和考虑纤锌矿结构的各向异性, 束缚极化子体系哈密顿量写为

$$H = p_z \left(\frac{p_z}{2m_{z\lambda}} \right) + \frac{p_{\perp}^2}{2m_{\perp\lambda}} + V(z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{\lambda}^{\infty}r} + \sum_{\mathbf{w}n} \hbar\omega_n^+ (\mathbf{w}) a_n(\mathbf{w}) + H_I, \quad (1)$$

其中, $m_{\perp\lambda}$ 和 $m_{z\lambda}$ 是材料 ($\lambda = 1, 2$) 中电子带有效质量, $\epsilon_{\lambda}^{\infty}$ 是材料中高频介电常数, $a_n(\mathbf{w})$ 和 $a_n^+(\mathbf{w})$ 是波矢为 \mathbf{w} (对 CF 和 HS 声子模, $\mathbf{w} = (\mathbf{q}, k_{\lambda z})$, 对 IF 声子模, $\mathbf{w} = \mathbf{q}$) 的类 LO 和类 TO 声子消灭算符和产生算符. $n = \{p, b\}$, p 代表对称和反对称模, b 代表 CF, IF 和 HS 模 (包括类 LO 和类 TO 声子). $V(z)$ 是势函数, 把它写为

$$V(z) = \begin{cases} V_0 + eFd, & z < -d/2, \\ -eFz, & |z| \leq d/2, \\ V_0 - eFd, & z > d/2, \end{cases} \quad (2)$$

其中, $V_0 = 0.7\Delta E_g$, $\Delta E_g = x[E_g(\text{GaN}) - E_g(\text{InN})] - bx(1-x)$, 调节参数 b 取为 1.4 eV [48], e 是基本电荷, F 是该结构中的内建电场, 它的正方向选为坐标轴 Z 轴相反方向. 当 $x = 0.19$ 时, F 的大小值取为 1.56 MV/cm [49]. 光学声子与电子和杂质中心的相互作用哈密顿量可表为

$$H_I = \sum_{\mathbf{w}n} [g_n(z) \exp(i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}) - g_n(z_0)] \times [a_n(\mathbf{w}) + \text{h.c.}]. \quad (3)$$

这里 $\boldsymbol{\rho}$ 和 \mathbf{q} 分别是 x - y 平面上的电子位置矢量和声子波矢量. 对于对称 CF 声子, 耦合函数可写为 [32]

$$g_{S,CF} = -i \{ 4\pi\hbar e^2 L^{-2} \}^{1/2} \times \{ (\partial/\partial\omega)(\epsilon_{1\perp} q^2 + \epsilon_{1z} k_{1m}^2) d/2 - 2q(\partial/\partial\omega) f_s(\omega) \cos(k_{1m} d/2) \}^{-1/2} \times \chi_{S,CF}, \quad (4)$$

其中,

$$\chi_{S,CF} = \begin{cases} \cos(k_{1m} z), & (|z| < d/2), \\ \cos(k_{1m} d/2) \exp(-\kappa_2(|z| - d/2)), & (|z| \geq d/2). \end{cases} \quad (5)$$

方程 (4) 中,

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

k_{1m} 由方程 $\varepsilon_{1z}k_{1m} \sin(k_{1m}d) - \varepsilon_{2z}k_2 \cos(k_{1m}d) = 0$ 决定, 并满足 $2m\pi/d < k_{1m} < 2(m+1)\pi/d$, m 对一系列的定域模求和. L^2 是量子阱界面面积.

类似于对称CF声子, 反对称CF声子、HS和IF声子的耦合函数参看文献[32]. CF和HS声子频率 ω 用相关材料($\lambda = 1, 2$)参数由方程 $\varepsilon_{\lambda\perp} \sin^2 \theta_\lambda + \varepsilon_{\lambda z} \cos^2 \theta_\lambda = 0$ 决定. θ_λ 是波矢 \mathbf{w} 和 z 轴之间夹角, 介电函数 $\varepsilon_{\lambda\perp}$ 和 $\varepsilon_{\lambda z}$ 是频率 ω 的函数, 它们的关系参看文献[32]. 对称IF声子频率 ω 由方程 $\sqrt{\varepsilon_{1\perp}\varepsilon_{1z}} \tanh(\sqrt{\varepsilon_{1\perp}/\varepsilon_{1z}}qd/2) - \sqrt{\varepsilon_{2\perp}\varepsilon_{2z}} = 0$ 决定, 且 $\varepsilon_{1z}\varepsilon_{2z} < 0$ ($\varepsilon_{1\perp}\varepsilon_{1z} > 0$ 和 $\varepsilon_{2\perp}\varepsilon_{2z} > 0$), 而反对称IF声子频率 ω 由方程 $\sqrt{\varepsilon_{1\perp}\varepsilon_{1z}} \coth(\sqrt{\varepsilon_{1\perp}/\varepsilon_{1z}}qd/2) - \sqrt{\varepsilon_{2\perp}\varepsilon_{2z}} = 0$ 决定, $\varepsilon_{1z}\varepsilon_{2z} < 0$.

通过对系统哈密顿算符做两次么正变换, 可以简化求解过程. 么正变换形式取为

$$U_1 = \exp \left[-i \sum_{\mathbf{w}n} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho} a_n^+(\mathbf{w}) a_n(\mathbf{w}) \right], \quad (6)$$

和

$$U_2 = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{w}n} [f_n \chi_n a_n^+(\mathbf{w}) - f_n^* \chi_n a_n(\mathbf{w})] \right\}. \quad (7)$$

其中, f_n 和 f_n^* 是变分参数, 对体系能量求最小值而确定. 变换后的哈密顿量为

$$H^* = U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2. \quad (8)$$

系统的基态波函数选为

$$\psi = C \varphi(z) \phi(\rho) |0\rangle, \quad (9)$$

其中,

$$\phi(\rho) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{1/2} \beta e^{-\beta\rho/2}, \quad (10)$$

$|0\rangle$ 是声子真空态, C 是归一化常数, β 是变分参数, 电子 Z 方向运动的波函数 $\varphi(z)$ 通过数值求解薛定谔方程而确定. 束缚极化子基态能量为

$$E_{1s} = \langle \psi | H^* | \psi \rangle, \quad (11)$$

结合能为

$$E_b = E_f - E_{1s}. \quad (12)$$

E_f 是量子阱中自由极化子能量

闪锌矿结构中极化子哈密顿量参看自文献[50], 处理方法与纤锌矿结构中的处理方法相同.

3 数值计算结果和讨论

束缚极化子能量和结合能, 以及不同声子模对结合能的贡献通过对方程(11)和(12)进行数值计算而获得, 得出的结果分别在图1至图5中给出. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料的相关参数利用有效声子模近似方法[51]获得. 数值计算中所用的参数在表1和表2中给出.

表1 纤锌矿结构中用到的参数

materials	$m_\perp = m_z$	ε_\perp^∞	ε_z^∞	ω_\perp	ω_z	$\omega_{\perp L}$	ω_{zL}	E_g
GaN	0.20 [52]	5.70 [53]	5.70 [53]	69.56 [54]	66.08 [54]	92.12 [54]	91.13 [54]	3.51 [52]
InN	0.12 [52]	8.40 [55]	8.40 [55]	59.02 [56]	55.43 [56]	73.53 [56]	72.64 [56]	1.99 [52]

表2 闪锌矿结构中用到的参数

materials	m	ε^∞	ω_{LO}	ω_{TO}	E_g
GaN	0.15 [52]	5.70 [53]	90.63 [57]	68.32 [57]	3.30 [52]
InN	0.10 [58]	8.40 [55]	72.66 [56]	58.52 [56]	1.94 [52]

不同支声子对束缚极化子基态能量的贡献(ΔE_{ph}^n)由电子与声子相互作用引起的贡献 $A_n (< 0)$ 和杂质中心与声子相互作用引起的贡献 $B_n (> 0)$ 两个部分构成, 即 $\Delta E_{\text{ph}}^n = A_n + B_n$. 由于电子与声子耦合比杂质中心与声子耦合强, 因此 A_n 的绝对值大于 B_n 的值. 不同支声子对结合能的

贡献 $\Delta E_b^n = C_n - A_n - B_n$, $C_n (< 0)$ 是没有杂质中心时电子与声子相互作用对自由极化子能量的贡献.

图1中给出纤锌矿(闪锌矿) $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱结构中束缚极化子基态结合能(E_b)随 d 变化的函数规律. 从图1中看出, 在不同情况下, E_b 均随着 d 的增大而单调减小, 最后趋近于 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}$ 体材料中的值. 因为, d 增大过程中, 量子阱材料对电子的受限程度减弱, 使得电子远离杂质中心向外移动, 这就引起结合能降低. 有声子作用时的结合能明显小于没有声子作用时的结合

能, 声子作用使得结合能减小, 并且减小程度较大. 这主要是杂质与声子相互作用引起的, 如果忽略杂质与声子相互作用, 声子作用对结合能的贡献非常小. 内建电场破坏了体系的对称性, 迫使电子偏离杂质中心, 导致有内建电场时的结合能明显小于没有内建电场时的结合能. 从图1中还可以看出, 由于两种结构中相关参数不同, 纤锌矿结构(无内建电场)中的结合能大于闪锌矿结构中的结合能.

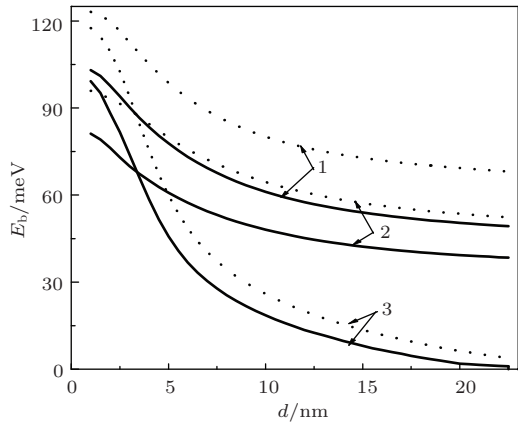


图1 In_{0.19}Ga_{0.81}N/GaN量子阱材料中束缚极化子基态结合能随阱宽 d 变化的函数关系(线1代表纤锌矿(没有内建电场)中结果, 线2代表闪锌矿中结果, 线3代表纤锌矿(有内建电场)结果. 点线和实线分别表示没有声子和有声子结果)

不同声子模(包括CF, IF, HS)对结合能的贡献随 d 的变化规律在图2中绘出. 从图2看出, 不同声子对结合能的贡献大小和随 d 的变化规律有所不同, 并且它们均使得结合能降低. 有内建电场时, CF声子贡献缓慢增大, 而没有内建电场时, CF声子贡献随阱宽 d 的增大而明显增大. 因为没有内建电场时, 随着 d 的增大, 波函数居域性增强, 因此CF声子与电子和杂质中心耦合变强, 这时 A_{CF} , B_{CF} 和 C_{CF} 数值变大, 使得 $\Delta E_b^{CF} = C_{CF} - A_{CF} - B_{CF}$ 数值明显增大. 而有内建电场时, 电子受内建电场的作用接近于量子阱左界面, 这时电子与CF声子的耦合变弱, 这就引起CF声子贡献变小. 在 d 的增大的过程中, 电子和杂质中心与CF声子的耦合增强, A_{CF} , B_{CF} 和 C_{CF} 数值缓慢变大, 因而 $\Delta E_b^{CF} = C_{CF} - A_{CF} - B_{CF}$ 数值缓慢增大. IF声子贡献随 d 变化的函数关系图有一个最大值. 因为, d 非常小时, 电子随穿到垒材料中的概率大, 这时IF声子与电子的耦合变得不那么强. 当 d 增大时, 电子随穿到垒材料中的概率减小, 到了某一 d 值, IF声子与电子的

耦合变得最强, 这时IF声子贡献达到最大值. 之后, 在 d 的继续增大过程中, IF声子与电子和杂质中心的耦合变弱, A_{IF} , B_{IF} 和 C_{IF} 数值变小, 因而导致 $\Delta E_b^{IF} = C_{IF} - A_{IF} - B_{IF}$ 数值变小. HS声子贡献随着 d 的增大而单调减小. 由于量子阱结构和杂质中心对电子的共同束缚, 电子随穿到垒材料的概率随 d 的增大而迅速减小, 使得HS声子与电子和杂质中心的耦合变弱, 这就引起 $\Delta E_b^{HS} = C_{HS} - A_{HS} - B_{HS}$ 数值变小. 声子总贡献, 即 $\Delta E_b^{CF} + \Delta E_b^{IF} + \Delta E_b^{HS}$ 随 d 的增大而先增大, 在某一阱宽处达到极大值, 然后减小. 有内建电场时, 声子总贡献明显小于没有内建电场时的相应值. 这些规律的产生与电子和杂质中心在量子阱中受量子限制有关. 从图2中还能看出, 纤锌矿 In_{0.19}Ga_{0.81}N/GaN量子阱结构(没有内建电场)中声子总贡献大于闪锌矿结构中的声子总贡献.

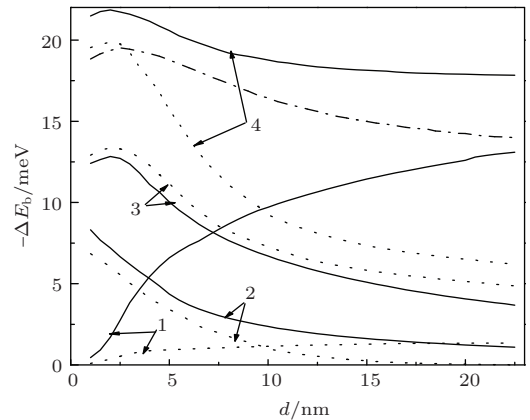


图2 In_{0.19}Ga_{0.81}N/GaN量子阱材料中光学声子对结合能的贡献随阱宽 d 变化的函数关系(纤锌矿中有内建电场和没有内建电场的结果分别用点线和实线表示, CF, HS, IF声子贡献以及它们的和分别用线1, 线2, 线3和线4表示. 而用虚点线表示闪锌矿结构中声子总贡献)

图3中绘出了 In_{0.19}Ga_{0.81}N/GaN量子阱材料中CF, IF和HS光学声子对束缚极化子基态能量的贡献随 d 变化规律. 从图3看出, 不同支声子对基态能量的贡献大小和随 d 变化的规律完全不同. 有内建电场时, HS(IF)声子模的贡献随着 d 的增大先急剧(缓慢)减小, 到某一阱宽处达到极小值, 之后非常缓慢(明显)增加. 因为内建电场迫使电子接近于左界面, 电子与HS(IF)声子模的耦合变强, 这时 A_{HS} (A_{IF}) 数值变大, 而杂质中心始终在量子阱中心处, 它与HS(IF)声子模的耦合没有明显变化. 随着阱宽的增大, A_{HS} (A_{IF}) 和 B_{HS} (B_{IF}) 数值均变小, 但这些量的数值变小程度不一样, 因此,

$\Delta E_{\text{ph}}^{\text{HS}}$ 和 $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{IF}}$ 曲线出现上述情况. 而没有内建电场时, 随着阱宽的增大, 电子和杂质中心与 HS(IF) 声子的耦合变弱, 并且 A_{HS} (A_{IF}) 和 B_{HS} (B_{IF}) 数值均匀减小, 则 $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{HS}}$ 和 $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{IF}}$ 单调下降. 有内建电场时的 HS(IF) 声子模式的贡献均大于没有内建电场时的相应值. 对 CF 声子模, 有内建电场时的声子模贡献均小于没有内建电场时的相应值, 而且这两个贡献均随着 d 的增大而先明显增加, 之后非常缓慢增加. 因为内建电场作用, 电子与 CF 声子耦合变弱, 这时 A_{CF} 数值小于没有内建电场的 A_{CF} 数值, 而 B_{CF} 数值变化不大, 因此 $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{CF}}$ 数值小于没有内建电场时的相应值, 并且两者随 d 变化规律也不一样. 在 d 增大过程中, 电子和杂质中心与 CF 声子耦合变强, 这时 A_{CF} 和 B_{CF} 数值均变大, 而 A_{CF} 数值变大程度比 B_{CF} 数值快, 这就引起 $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{CF}}$ 数值随着 d 的增大而增大. 声子总贡献 ($\Delta E_{\text{ph}}^{\text{CF}} + \Delta E_{\text{ph}}^{\text{IF}} + \Delta E_{\text{ph}}^{\text{HS}}$) 均随 d 的增大而先减小, 在某一阱宽处达到极小值, 然后缓慢增大. 纤锌矿结构中内建电场使得声子对能量的贡献变大, 并且这贡献大于闪锌矿结构中的声子总贡献. 上述这些规律仍是电子和杂质中心在量子阱结构中受量子限制引起的.

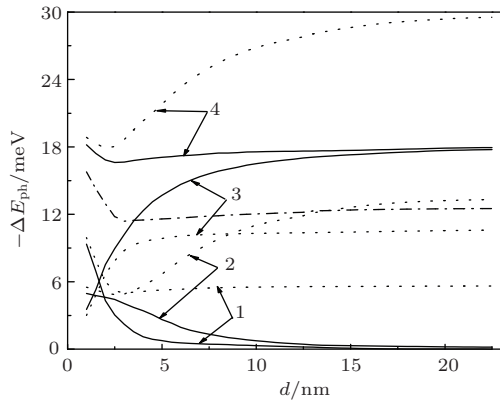


图3 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱材料中不同支长波光声子模对束缚极化子基态能量的贡献随 d 变化函数曲线 (纤锌矿结构中有和没有内建电场的结果分别用点线和实线表示, HS, IF, CF 声子贡献以及它们的和分别用线 1, 线 2, 线 3 和线 4 表示. 而用虚点线表示闪锌矿中声子总贡献)

在阱宽 ($d = 8 \text{ nm}$) 不变条件下, $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中束缚极化子基态 E_b 随 Z_0 变化的函数关系在图 4 中给出. 这三种情况中, E_b 随着 Z_0 变化的函数规律基本相同, 均随着 Z_0 的增大而 E_b 单调减小. 因为电子受量子体系的受限, 随杂质中心位置 Z_0 的增大, 使得电子与杂质中心的距离

变大, 这就引起结合能降低.

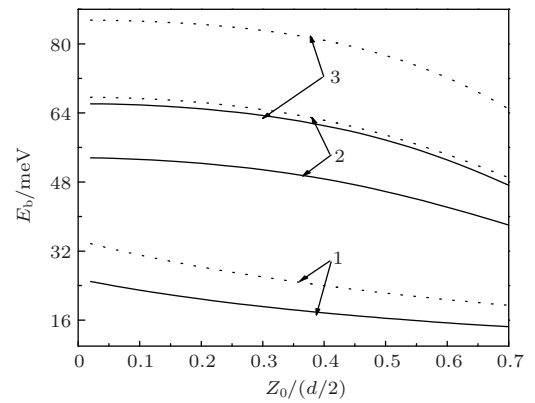


图4 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中束缚极化子基态结合能随杂质中心位置 Z_0 变化的函数关系 (线 1 代表纤锌矿 (有内建电场) 中结果, 线 2 代表闪锌矿中结果, 线 3 代表纤锌矿 (没有内建电场) 中结果. 有声子和没有声子情况分别用实线和点线表示)

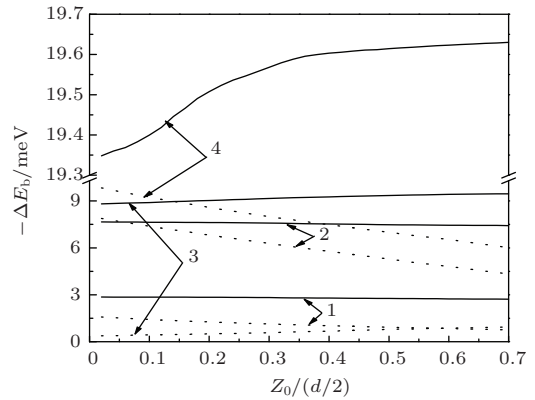


图5 纤锌矿 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱 (给定阱宽 $d = 8 \text{ nm}$) 中不同支声子对束缚极化子基态结合能的贡献随 Z_0 变化的函数关系 (点线和实线分别代表有和没有内建电场的结果, 线 1, 线 2 和线 3 分别代表 HS, IF 和 CF 声子模贡献, 而线 4 是声子总贡献)

图 5 中给出 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱 (给定阱宽 $d = 8 \text{ nm}$) 中不同支声子对束缚极化子基态结合能的贡献随 Z_0 变化的函数规律. 从图 5 中看到, IF 和 HS 声子模贡献随着 Z_0 的增大而缓慢减小, 有内建电场时的贡献变小速度大于没有内建电场时的贡献变小速度. 因为, 随着 Z_0 的增大, 没有内建电场时, 电子 (杂质中心) 与 IF 和 HS 声子模耦合增强, 使得 A_{IF} 和 A_{HS} (B_{IF} 和 B_{HS}) 数值变大, 但 A_{IF} 和 A_{HS} 数值变大程度大于 B_{IF} 和 B_{HS} 数值变大程度, 即 $\Delta E_{\text{ph}}^n = A_n + B_n$ 数值变大, 阱宽 d 不变时, C_{IF} 和 C_{HS} 是常数, 这就引起 ΔE_b^{IF} 和 ΔE_b^{HS} 数值随着 Z_0 的增大而减小. 有内建电场时, 杂质中心向 Z 轴正方向移动过程中, 由于内建电场迫使电子接近

于量子阱左界面, 电子始终在左界面附近. 因此电子与 IF 和 HS 声子模的耦合随着 Z_0 的增大而变化不大, 即 A_{IF} 和 A_{HS} 数值变化较小, 这时 $C_{IF} - A_{IF}$ 和 $C_{HS} - A_{HS}$ 变化较小, 但 B_{IF} 和 B_{HS} 变化与没有内建电场时的情况相同, 这就出现图 5 的变化规律. 对 CF 声子模, 没有内建电场时, 随着 Z_0 的增大, 电子和杂质中心与 CF 声子模耦合减弱, 但杂质中心与 CF 声子耦合减弱程度比电子与 CF 声子耦合减弱程度慢, 即 $\Delta E_{ph}^{CF} = A_{CF} + B_{CF}$ 数值变小, 而 $\Delta E_b^{CF} = C_{CF} - \Delta E_{ph}^{CF}$ 数值变大, 这就引起 CF 声子贡献随着 Z_0 的增大而缓慢增大. 有内建电场时, 由于内建电场迫使电子始终在左界面附近, 电子与 CF 声子耦合随着 Z_0 的增大而不引起较大的变化, 即 A_{CF} 数值变化较小, 而杂质中心与 CF 声子耦合减弱, B_{CF} 明显变小, 则 $\Delta E_b^{CF} = C_{CF} - A_{CF} - B_{CF}$ 随着 Z_0 的增大而缓慢增大. 由于量子阱结构和内建电场对体系的作用, 有内建电场时, 声子总贡献随着 Z_0 的增大而减小, 而没有内建电场时, 声子总贡献随着 Z_0 的增大而增大.

计算结果表明, 声子的贡献主要来自于类 LO 声子模, 它的贡献比类 TO 声子的贡献约大两个数量级, 因此计算中可以不考虑类 TO 声子的贡献. 由于 $\varepsilon_{11}\varepsilon_{1z} < 0^{32}$ 条件的约束, $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱 (纤锌矿) 结构中不存在类 LO 传播声子模. $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱材料中声子贡献比 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}$ 中声子贡献大一个数量级, 因此在 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱体系中讨论与电子-声子相互作用有关问题时有必要计入声子作用.

4 结 论

采用改进的 LLP 中间耦合方法讨论了 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱结构 (纤锌矿) 中束缚极化子结合能 E_b 和不同支长波光学声子对能量和结合能的贡献随阱宽和杂质中心变化的函数关系. 在数值计算中计入了纤锌矿 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱材料中 CF, IF 和 HS (类 LO 和类 TO) 声子频率的各向异性和内建电场的影响, 同时计入杂质中心和电子与长波光学声子的耦合作用. 结果表明, 结合能随着阱宽的增大而单调减小, 窄阱中减小的快, 而宽阱中减小的较慢, 最后趋近于 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}$ 体材料中的值. $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱材料中声子对束缚极化子能量和结合能的贡献较大, 并明

显降低能量和结合能. 不同支声子对能量和结合能的贡献随阱宽的变化趋势不同. 没有内建电场时, 窄阱中, CF 声子贡献比 HS 和 IF 声子贡献小, 而宽阱中, CF 声子贡献比 HS 和 IF 声子贡献大. 有内建电场时, CF 声子贡献变小, 而 HS 和 IF 声子贡献变大. 这说明内建电场强烈影响着不同声子模以及它们的和对能量和结合能的贡献. 在 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中阱宽的变化范围内, 声子对束缚极化子能量和结合能的贡献比 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}$ 量子阱中的相应值 (约 3.2—1.8 和 1.6—0.3 meV) 大得多.

在阱宽固定 ($d = 8$ nm) 的 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中, 随着杂质中心位置的增大, 电子受量子阱和杂质中心的束缚程度减弱, 结合能随着杂质中心位置的变大而减小. IF 和 HS 声子对结合能的贡献随着杂质中心位置的增大而缓慢减小, 而 CF 声子的贡献随着杂质中心位置的增大而缓慢增大. 没有内建电场时, 声子总贡献随 Z_0 的增大而非常缓慢增大, 而有内建电场时, 声子总贡献随着 Z_0 的增大而缓慢减小. 纤锌矿 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱材料 (没有内建电场) 中极化子效应明显大于闪锌矿 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱材料中的极化子效应. 由于在 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱材料 (纤锌矿) 中极化子效应和内建电场作用较大, 因此在该体系中讨论电子态能级问题时应该考虑这些因素. 我们的此项研究工作对进一步研究纤锌矿半导体低维结构中电子-声子系统会有帮助的.

参考文献

- [1] 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
- [2] Shan W, Walukiewicz W, Yu K M, Ager J W, Haller E E, Geisz J F, Friedman D J, Olson J M, Kurtz S R, Nauka C 2000 *Phys. Rev. B* **62** 4211
- [3] Karch K, Wagner J M, Bechstedt F 1998 *Phys. Rev. B* **57** 7043
- [4] Akasaki I, Amano H 1997 *Jan. J. Appl. Phys. Part I* **36** (9A) 5393
- [5] Nakamura S 1997 *Solid. State. Commun.* **102** 237
- [6] Lee B C, Kim K V, Strosio M A, Dutta M 1997 *Phys. Rev. B* **56** 997
- [7] Malyutenko V K, Bolgov S S, Podolsrv A D 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 251110
- [8] Lee W, Kim M H, Zhu D 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 063102

- [9] Nykanen H, Mattila P, Suihkonen S, Riikonen J, Quillet E, Honeyer E, Bellessa J, Sopanen M 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 08310
- [10] Liu Z Q 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 261106
- [11] Belabbes A, de Carvalho L C, Schleife A, Bechstedt F 2011 *Phys. Rev. B* **84** 125108
- [12] Lee C W, Peter A J 2011 *Chin. Phys. B* **20** 077104
- [13] Wang F, Ji Z W, Wang Q, Wang, X S, Qu S, Xu X G, Lv Y J, Feng Z H 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 163525
- [14] Ryu H Y, Choi W J 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 173101
- [15] Cai J X, Sun H Q, Zheng H, Zhang P J, Guo Z Y 2014 *Chin. Phys. B* **23** 058502
- [16] Wang H, Farias G A, Freire V N 1999 *Phys. Rev. B* **60** 5705
- [17] Zhang J F, Wang C, Zhang J C 2006 *Chin. Phys.* **15** 1060
- [18] Hylton N P, Dawson P, Kappers M J, Aleese C M, Humphreys C J 2007 *Phys. Rev. B* **76** 205403
- [19] Zhang L 2006 *Superlattice. Microst.* **40** 144
- [20] Graham D M, Dawson P, Godfrey M J 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 211901
- [21] Chen D, Guo Y, Wang L 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 053712
- [22] Zhu L H, Cai J F, Li X Y, Deng B, Liu B L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4996 (in Chinese) [朱丽虹, 蔡加法, 李晓莹, 邓彪, 刘宝林 2010 物理学报 **59** 4996]
- [23] Huang W D, Chen J D, Ren Y J 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 053704
- [24] Funato M, Matsuda K, Banal R G, Ishii R, Kawakami Y 2013 *Phys. Rev. B* **87** 041306
- [25] Xia H, Feng Y, Patterson R, Jia X, Shrestha S, Conibeer G 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 164304
- [26] Chen S J, Wang G H 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 023515
- [27] Pozina G, Hemmingsson C, Amano H, Monear B 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 082110
- [28] Dong L, Mantese J V, Avrutin V, Özgür U, Morkoç H, Alpay S P 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 043715
- [29] Li T, Wei Q Y, Fischer A M, Huang J Y, Huang Y U, Ponce F A, Liu J P, Lochner Z, Ryou J H, Dupuis R D 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 041115
- [30] Park S H, Moon Y T 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 083107
- [31] Liang M M, Weng G E, Zhang J Y, Cai X M, Lü X Q, Ying L Y, Zhang B P 2014 *Chin. Phys. B* **23** 054211
- [32] Lee B C, Kim K W, Stroschio M A, Dutta M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 4860
- [33] Komirenko S M, Kim K W, Stroschio M A, Dutta M 1999 *Phys. Rev. B* **59** 5013
- [34] Shi J J 2003 *Phys. Rev. B* **68** 165335
- [35] Shi J J, Chu X L, Goldys E M 2004 *Phys. Rev. B* **70** 115318
- [36] Li L, Liu D, Shi J J 2005 *Eur. Phys. J. B* **44** 401
- [37] Bernardini F, Fiorentini V 1999 *Phys. Stat. Sol. B* **216** 391
- [38] Cingolani R, Botchkarev A, Tang H, Morkoc H, Traetta G, Coli G, Lomascolo M, Di Carlo A, Sala F D, Lugli P 2000 *Phys. Rev. B* **61** 2711
- [39] Shi J J, Gan Z Z 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 407
- [40] Zhao F Q, Gong J 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 1327
- [41] Zhao F Q, Zhou B Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4856 (in Chinese) [赵凤岐, 周炳卿 2007 物理学报 **56** 4856]
- [42] Zhao F Q, Zhang M, Wurentuya 2011 *J. Phys. Soc. Japan* **80** 94713
- [43] Zhao F Q, Yong M 2012 *Chin. Phys. B* **21** 107103
- [44] Liu D, Shi J J, Butcher K S A 2006 *Superlattices and Microstructures* **40** 180
- [45] Zhang L, Shi J J 2007 *Commun. Theor. Phys.* **47** 349
- [46] Cai J, Shi J J 2008 *Solid State Commun.* **145** 235
- [47] Zhu Y H, Shi J J 2009 *Physica E* **41** 746
- [48] Vurgaftman I, Melyer J R 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 3675
- [49] Graham D M, Soltani-Vala A, Dawsos P, Godfrey M J, Smeeton T M, Barnard J S, Kappers M J, Humphreys C J, Thrush E J 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 103508
- [50] Liang X X, Wang X 1991 *Phys. Rev. B* **43** 5155
- [51] Liang X X, Yang J S 1996 *Solid State Commun.* **100** 629
- [52] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 5815
- [53] Perlin P, Gorczyca I, Christensen N E, Grzegorz I, Teisseyre H, Suski T 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13307
- [54] Azuhata T, Sota T, Suzuki K, Nakamura S 1995 *J. Phys.: Condens. Matter* **7** L129
- [55] Misek J, Srobar F 1979 *Electrotech. Cas.* **30** 690
- [56] Harima H 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** R967
- [57] Kim K, Lambrecht W R L, Segall B 1996 *Phys. Rev. B* **53** 16310
- [58] Mora-Ramos M E 2001 *Phys. Stat. Sol.* **223** 843

Effects of optical phonon and built-in electric field on the binding energy of bound polarons in a wurtzite $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ quantum well*

Zhao Feng-Qi[†] Zhang Min Li Zhi-Qiang Ji Yan-Ming

(College of Physics and Electronic Information, Inner Mongolia Normal University, Inner Mongolia Key Laboratory for Physics and Chemistry of Functional Materials, Hohhot 010022, China)

(Received 10 March 2014; revised manuscript received 14 May 2014)

Abstract

The energies and binding energies of the bound polarons in a wurtzite $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ quantum well are investigated by means of a modified Lee-Low-Pines variational method. Contributions of ground state binding energies and different branches of a longwave optical phonon mode to the energies and binding energies of the bound polarons as a function of the well width and impurity center position are given. Effects of the anisotropy of phonon frequency and built-in electric field in the system on the energies and binding energies, and the electron and impurity center-optical phonon interaction, are included in the calculations. Results show that the contributions of optical phonons and built-in electric field to the ground state energy and binding energy of the bound polarons in a wurtzite $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ quantum well are very large, and result in the reduction of energy and binding energy. The binding energy decreases monotonically with increasing well width, and the speed of decrease is fast in the narrower well while the speed of decrease is slow in the wider well. Contributions of different branches of phonons to the energies and binding energies as a function of well width are different. In the narrower well, contributions of the confined phonon (without built-in electric field) are smaller than those of the interface and half-space phonons, while in the wider well, contributions of the confined phonons are larger than those of the interface and half-space phonons. Contributions of the confined phonon (with built-in electric field) become larger, whereas those of the interface and half-space phonons become smaller, and the total contribution of phonons also have obvious change. Contributions of these optical phonons to the ground state energies and binding energies of the bound polarons in $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ quantum wells are larger than the corresponding values (about 3.1–1.6 meV and 1.5–0.3 meV) of those in $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}$ quantum wells. The binding energies in $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{N}/\text{GaN}$ quantum wells decrease monotonically with increasing location Z_0 of the impurity center for a constant well width $d = 8$ nm, and the decrease of speed becomes faster. As the position of the impurity center is increasing, the contributions of the the interface and half-space phonons decrease slowly, and those of the confined phonons increase slowly as well.

Keywords: bound polaron, binding energy, quantum well, built-in electric field

PACS: 71.38.-k, 73.21.Fg, 63.20.kd

DOI: 10.7498/aps.63.177101

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10964007, 11264027), the Project of Prairie Excellent Specialist of Inner Mongolia, and the “Thousand, Hundred and Ten” Talent Cultivation Project Fund of Inner Mongolia Normal University, China (Grant No. RCPY-2-2012-K-039).

[†] Corresponding author. E-mail: zhaofengqi@126.com