

外加电场和Al组分对纤锌矿 AlGaN/GaN 量子阱中的电子 g 因子的影响

李明 姚宁 冯志波 韩红培 赵正印

Effects of external electric field and Al content on g factor of wurtzite AlGaN/GaN quantum wells

Li Ming Yao Ning Feng Zhi-Bo Han Hong-Pei Zhao Zheng-Yin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 057101 (2018) DOI: 10.7498/aps.20172213

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.20172213>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I5>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[Gd 掺杂 ZnO 纳米线磁耦合性质的第一性原理研究](#)

Magnetic coupling properties of Gd-doped ZnO nanowires studied by first-principles calculations

物理学报.2015, 64(17): 178103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.178103>

[Eu 掺杂 Si 纳米线的光致发光特性](#)

Photoluminescence properties of Eu doped Si nanowires

物理学报.2015, 64(14): 148103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.148103>

[弯曲 Cu 纳米线相干 X 射线衍射图的计算](#)

Calculation of coherent X-ray diffraction from bent Cu nanowires

物理学报.2015, 64(13): 138102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.138102>

[AuPd 纳米粒子作为催化剂制备硼纳米线及其场发射性质](#)

Preparation of boron nanowires using AuPd nanoparticles as catalyst and their field emission behaviors

物理学报.2014, 63(4): 048102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.048102>

[ZnO 纳米线薄膜的合成参数、表面形貌和接触角关系研究](#)

Relationships between synthesizing parameters, morphology, and contact angles of ZnO nanowire films

物理学报.2013, 62(21): 218102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.218102>

外加电场和Al组分对纤锌矿 AlGa_{1-x}GaN/GaN 量子阱中的电子 g 因子的影响*

李明[†] 姚宁 冯志波 韩红培 赵正印

(许昌学院电气信息工程学院, 许昌 461000)

(2017年10月12日收到; 2017年12月11日收到修改稿)

研究了外加电场和垒层的Al组分对AlGa_{1-x}GaN/GaN量子阱中的横向和纵向 g 因子(g_{\perp} 和 g_{\parallel})及其各向异性(δg)的影响. 纤锌矿体结构的贡献($g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ 和 g_{\perp}^{bulk})是构成 $\Delta g_{\perp} = (g_{\perp} - g_0) = g_{\perp}^{\text{bulk}} + g^{\text{w}}$ 和 $\Delta g_{\parallel} = (g_{\parallel} - g_0) = g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ 的主要部分, 但 $g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ 和 g_{\perp}^{bulk} 的差值很小且几乎不随外加电场和Al组分改变. 当外加电场的方向同极化电场的方向相同(相反)且增加时, $g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ 和 g_{\perp}^{bulk} 的强度同时增加(减小). 当外加电场从 $-1.5 \times 10^8 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1}$ 到 $1.5 \times 10^8 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1}$ 变化时, 异质界面对 Δg_{\perp} 的贡献(Γ_{Inter})大于0且强度缓慢增加, 阱层对 Δg_{\perp} 的贡献(Γ_{W})小于0且强度也缓慢增加. 然而 Γ_{Inter} 的强度比 Γ_{W} 大, 且后者的强度随着外加电场的改变增加较快, 所以 $\delta g > 0$ 且强度随着外加电场的变化而减小. 当垒层的Al组分增加时, 如果不考虑应变效应($S_{1,2} = 0$), $g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ 和 g_{\perp}^{bulk} 的强度同时减小, 然而考虑应变效应后($S_{1,2} \neq 0$), $\langle \beta \rangle_1(g_{\perp}^{\text{bulk}})$ 和 $\langle \gamma \rangle_1(g_{\parallel}^{\text{bulk}})$ 的强度随着Al组分的增加而增加. 随着垒层Al组分的增加, Γ_{Inter} 和 Γ_{W} 的强度都增加, 但 Γ_{Inter} 的强度较大且增加得较快, 所以 δg 的强度缓慢增加. Δg_{\perp} 的强度先随着Al组分的增加而减小, 然后又随着Al组分的增加而增加, 因为 g_{\perp}^{bulk} 小于0且强度随着Al组分增加得很快. 结果表明, AlGa_{1-x}GaN/GaN量子阱结构中的电子 g 因子及其各向异性可以被外加电场、垒层的Al组分、应变效应和量子限制效应共同调制.

关键词: 自旋轨道耦合, Rashba 效应, 塞曼效应, g 因子

PACS: 71.70.Ej, 71.18.+y, 73.21.Fg

DOI: 10.7498/aps.67.20172213

1 引言

处于磁场中的电子, 塞曼自旋劈裂的大小取决于电子的有效 g 因子(g^*). 在自旋电子学中, 利用自旋轨道耦合效应或者量子限制效应来调控 g 因子引起了广泛的研究兴趣^[1-12]. 根据Roth方程^[13], 半导体材料的有效 g 因子很大程度上依赖于带隙和自旋轨道耦合效应. 此外, 这个理论预计到量子限制效应引起闪锌矿结构的异质结中的纵向和横向 g 因子有很明显的不同(g 因子各向异性)^[14]. 因为阱层和垒层区域的体 g 因子有一定的差别, 有时候甚至符号相反, 另外异质界面对有效 g 因子也

有贡献, 所以波函数在垒层或者阱层区域的重新分布将导致有效 g 因子及其各向异性有很明显的变化, 电子 g 因子是易受影响的参数^[9]. 因此, 在半导体异质结中, 有效 g 因子及其各向异性受能带结构的影响, 并且可以由异质结构的束缚势调制^[9].

基于 $8 \times 8 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Kane哈密顿模型和包络函数近似, 文献^[3-6, 8-11]建立了计算 g^* 的通用方法, 可以用于对称或者非对称量子阱结构. Toloza Sandoval等^[15]利用一阶微扰论方法获得了对称的闪锌矿半导体量子阱的 g^* 的表达式, 发现 g^* 的各向异性仅仅由界面处的自旋轨道耦合效应引起, 阱层和垒层区域的自旋轨道耦合效应的贡献为零. 该方法比较简单且比较直观地从物理上解释了 g^* 的

* 国家自然科学基金(批准号: 61306012)、河南省高等学校青年骨干教师(批准号: 2015GGJS-145)、许昌学院杰出青年骨干人才计划、河南省自然科学基金(批准号: 162300410237)和河南省科技发展计划(批准号: 172102210470)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: mingli245@163.com

重整化, 然后被推广应用于非对称的闪锌矿 III-V 族半导体异质结构, 发现调节阱层的厚度和组分等参数, 可以很好地调控 g^* 及其各向异性, 甚至改变它们的正负号 [16]. 另外, 通过在闪锌矿结构的半导体量子阱的生长方向施加电场 (或者栅极电压), 可以调节电子在阱层区域和垒层区域的概率分布, 从而导致量子阱结构中的有效 g 因子随着电场而变化 [9,17,18].

与闪锌矿结构的半导体不同, 纤锌矿结构半导体的体 g 因子是各向异性的. 此外, 纤锌矿晶格结构的半导体异质结构中存在自发极化和压电极化效应, 这将导致异质结构中存在较强的内建电场和高浓度的二维电子气 (费米能级) [19-21], 使该异质结构具有本征结构反演对称性 (SIA). 电场和费米能级对自旋劈裂很重要 [19-27], 因此 AlGaIn/GaN 量子阱中的 Rashba 自旋轨道耦合效应很明显 [19-22,28-30], 这将对 g^* 及其各向异性有重要的影响. 此外, 除了界面自旋轨道耦合效应对有效 g 因子有贡献, 阱层和垒层区域的自旋轨道耦合效应的贡献也不为零, 因为量子阱中的电场不是零 [31]. 在前面的工作中, 我们将文献 [15] 中的解析理论推广到沿着 c 轴 (选作 z 轴) 生长的纤锌矿半导体异质结构, 并考虑极化效应导致的内建电场, 推导出纵向和横向 g 因子的表达式, 研究了 g^* 及其各向异性随阱层厚度的变化关系 [31]. 本文分别考虑与极化电场方向相同 (相反) 的外加电场和垒层的 Al 组分对 Al-GaN/GaN 量子阱中的电子 g 因子及其各向异性的影响. 外加电场在一定程度上加强或者抵消极化电场的效应, 并且将会进一步调节该异质结构的 SIA [32-36]. 此外, 外加电场带来了附加势, 将会影响电子的空间分布和束缚能级、费米能级, 进而影响 Rashba 自旋轨道耦合强度和 g 因子及其各向异性.

通常 III-V 族氮化物异质结构中的极化电场很大 [19,20,37], 普通的半导体量子阱也可能存在极强的界面电场 [38]. 另外, III-V 族氮化物异质结构中的极化电场随着量子阱的宽度迅速减弱 [31,37]. 所以, 相对于较宽的量子阱, 外电场对 Rashba 自旋轨道耦合系数 [25] 和 g 因子及其各向异性的调制将会更明显. 因此假设外加电场从 $-1.5 \times 10^8 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1}$ 到 $1.5 \times 10^8 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1}$ 变化, 量子阱阱层的宽度是 40 \AA .

2 理论模型和方法

把纤锌矿半导体异质结构的 8×8 Kane 哈密顿 [39] 投影到导带子空间中, 量子阱结构中的电子的有效哈密顿可以写成 [19,20,30,40]:

$$H = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_t^2}{2m_t} - \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{2m_z} \frac{d}{dz} + E_c + P_1 P_2 \frac{\partial \beta}{\partial z} (\sigma_x \mathbf{k}_y - \sigma_y \mathbf{k}_x) = H_0 + H_R, \quad (1)$$

$$\beta = \frac{\Delta_3}{(Y_1 + \varepsilon - V)(Y_2 + \varepsilon - V) - 2\Delta_3^2}; \quad (2)$$

$$Y_1 = E_g - \Delta E_c + 2\Delta_2 - S_1 - S_2,$$

$$Y_2 = E_g - \Delta E_c + \Delta_1 + \Delta_2 - S_1,$$

$$Y_3 = E_g - \Delta E_c - S_1 - S_2; \quad (3)$$

$$E_c = E_c^0 + a_c \varepsilon_{zz} + a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}),$$

$$S_1 = D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}),$$

$$S_2 = D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}). \quad (4)$$

H_R 是与自旋有关的 Rashba 项; m_z 是 z 轴方向的有效质量; m_t 和 $\mathbf{k}_{x,y}$ 分别是垂直于 z 轴方向的有效质量 [19,20] 和波矢; σ 是泡利矩阵; ε 代表电子的能量; E_c^0 和 E_v^0 分别是考虑应变前 Γ 点的导带边和最高价带边; ΔE_c 是导带阶跃, a_c (-4.6 eV), D_1 (-1.7 eV), D_2 (6.3 eV), D_3 ($D_2 - D_1$), D_4 ($-D_3/2$) 是形变势 [41]; ε_{ij} 是应变张量; V 代表静电势和外电场引起的势的和; $\Delta_1 = (22 - 80x) \text{ meV}$ 自旋轨道劈裂能 [42], $\Delta_{2,3} = 6.0 \text{ meV}$ 是晶体场劈裂能 [43]; $P_1 = P_2 = \hbar \sqrt{E_i/2m_0}$ ($E_i = 20 \text{ eV}$) 是带间动量矩阵元 [19,20].

考虑磁场 \mathbf{B} 作用下的量子阱, 在有效哈密顿中做替换 $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}$, 可以得到有效的 Zeeman 作用项 ($\mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_0}$ 是玻尔磁子):

$$H_Z = \frac{1}{2} g_i \mu_0 \sigma_i B_i, \quad i = x, y, z. \quad (5)$$

首先分别沿着 x, y 轴方向加磁场, 得到量子阱中的横向 g 因子 ($g_x = g_y = g_\perp$) [31]:

$$g_{x,y} = g_0 - \left\langle \Phi_1 \left| \frac{4m_e}{\hbar^2} P_1 P_2 \frac{\partial}{\partial z} (\beta(z - \langle z \rangle_1)) \Phi_1 \right. \right\rangle = 2 + g_{x,y}^{\text{bulk}} + g_{x,y}^{\text{w}}, \quad (6)$$

$$g_{x,y}^{\text{bulk}} = -\frac{4m_e}{\hbar^2} P_1 P_2 \langle \beta \rangle_1,$$

$$g_{x,y}^w = -\frac{4m_e}{\hbar^2} P_1 P_2 \langle (z - \langle z \rangle_1) \frac{\partial \beta}{\partial z} \rangle_1. \quad (7)$$

这里 $\langle \rangle_1$ 指对第一束缚子带的包络函数 Φ_1 求期待值.

然后, 沿着 z 轴方向加磁场, 得到量子阱中的纵向 g 因子 ($g_z = g_{//}$) [31]:

$$\begin{aligned} g_z &= g_{//} = g_0 - \frac{4m_e}{\hbar^2} P_2^2 \langle \gamma \rangle_1 = 2 + g_{//}^{\text{bulk}}, \\ g_{//}^{\text{bulk}} &= -\frac{4m_e}{\hbar^2} P_2^2 \langle \gamma \rangle_1, \\ \gamma &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{Y_3 + \varepsilon - V} - \frac{Y_2}{(Y_1 + \varepsilon - V)(Y_2 + \varepsilon - V) - 2\Delta_3^2} \right], \end{aligned} \quad (8)$$

$g_0 \approx 2$ 是自由电子的 g 因子. 这里 $g_{x,y, //}^{\text{bulk}}$ 是纤锌矿体结构的贡献, $g_{x,y,z}^w$ 是由量子阱的束缚作用引起的. 因为 γ 与 x 无关, 所以 $g_z^w \propto \left\langle x \frac{\partial \gamma}{\partial x} \right\rangle_1 = 0$, 而参数 β 依赖于 z , 所以 $g_{x,y}^w \neq 0$. 另外, 由于纤锌矿体结构的各向异性, $\beta \neq \gamma$, 导致 $g_{x,y}^{\text{bulk}} \neq g_{//}^{\text{bulk}}$.

方程 (7) 中的 $g_{x,y}^w = \Gamma_{\text{Inter}} + \Gamma_{\text{W}} + \Gamma_{\text{B}}$, 其中 $\Gamma_{\text{Inter}} = \Gamma_{\text{InterL}} + \Gamma_{\text{InterR}}$ 代表左右异质界面的贡献 [31],

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{InterL}} &= -\frac{4m_e}{\hbar^2} P_1 P_2 [(L_1 - \langle z \rangle_1) \Phi_1^2(L_1) (\beta_{\text{W}} - \beta_{\text{L}})], \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{InterR}} &= \frac{4m_e}{\hbar^2} P_1 P_2 [(L_2 - \langle z \rangle_1) \Phi_1^2(L_2) (\beta_{\text{W}} - \beta_{\text{R}})]. \end{aligned} \quad (11)$$

$\Gamma_{\text{W}} = \Gamma_{\text{WZ}} + \Gamma_{\text{WA}}$ 代表阱层的贡献,

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{WZ}} &= -\frac{4m_e}{\hbar^2} P_1 P_2 \left\langle \Phi_1 \left| z \frac{\partial \beta}{\partial z} \right| \Phi_1 \right\rangle_{\text{W}}, \\ \Gamma_{\text{WA}} &= \frac{4m_e}{\hbar^2} P_1 P_2 \left\langle \Phi_1 \left| \langle z \rangle_1 \frac{\partial \beta}{\partial z} \right| \Phi_1 \right\rangle_{\text{W}}. \end{aligned} \quad (12)$$

$\Gamma_{\text{B}} = -\frac{4m_e}{\hbar^2} P_1 P_2 \left\langle \Phi_1 \left| (z - \langle z \rangle_1) \frac{\partial \beta}{\partial z} \right| \Phi_1 \right\rangle_{\text{W,B}}$ 代表垒层的贡献; $L_{1,2}$ 代表左右异质界面的位置. Γ_{InterL} 和 Γ_{InterR} 同左右界面处的包络函数的平方成正比, 且依赖于左右界面的位置; $\Gamma_{\text{B,W}}$ 正比于相应区域的电场.

根据方程 (10)–(12), 对于结构对称的量子阱, 如果没有外加电场, Γ_{Inter} 同量子阱的阱层厚度 ($L_2 - L_1$) 成正比, 而 $\Gamma_{\text{B,W}} = 0$, 所以此时 g 因子与 z 无关 [15].

3 结果与分析

首先关注沿 c 轴生长的 $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ 量子阱, 即使没有外加电场, 由于较强的压电极化和自发极化效应, 导带边形状是非对称的且内部电场不为零. 分别考虑同极化电场方向相同和相反的外加电场对纵向、横向 g 因子及其各向异性的影响, 并定量讨论对它们有影响的各方面因素.

图 1 显示了 $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ 量子阱在不同外加电场 (E) 下的导带边形状以及第一束缚子带的包络函数. 限制势和量子阱中电子的空间分布都是非对称的. 这些是由外加电场和极化电场共同导致的, 且一定会对 g^* 及其各向异性有重要的影响. 第一束缚子带的包络函数在左异质界面处有较高的峰. 当外加电场的方向沿着 z 轴的正方向 (同极化电场的方向相同) 并增加时, 第一子带的包络函数的扩展区域减小, 且它的峰向左界面移动 (图 1). 主要原因是右界面处势垒高度的增加将会增强量子阱束缚电子的能力. 当外加电场的方向沿着 z 轴的负方向 (同极化电场的方向相反) 并增加时, 第一子带的包络函数的扩展区域增加, 且它的峰向右界面移动 (图 1). 主要原因是右界面处势垒高度的降低会减弱量子阱束缚电子的能力.

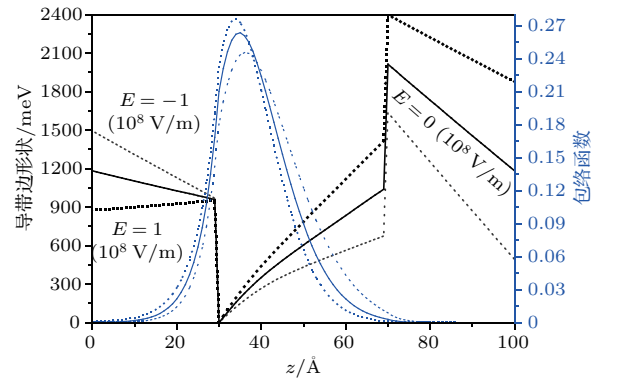


图 1 $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ 量子阱在不同外加电场 (E) 下的导带边形状以及第一束缚子带的包络函数
Fig. 1. Conduction band profile of the $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ quantum well (QW), and the envelope functions for the first confined state in QWs with different external electric field (E).

图 2 显示左界面处的电场强度和第一子带的束缚能级 (ε_1) 随着外加电场的变化关系. 当外加电场的方向同极化电场的方向相同并增加时, 左界

面处的电场强度和 ϵ_1 都增加. 当外加电场的方向同极化电场的方向相反并增加时, 左界面处的电场强度和 ϵ_1 都减小. 因为外加电场的增加, 导致左界面附近的导带边上升得更快, 对电子的束缚能力更强, 包络函数的扩展区域减小, 相当于量子阱的有效阱宽变窄, 因而束缚能级增加.

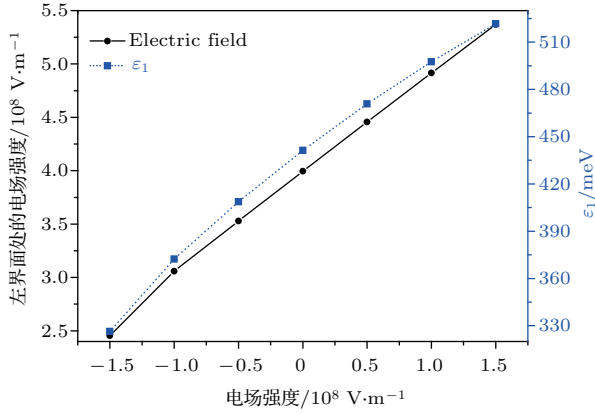


图2 左界面处的电场强度和第一子带的束缚能级 (ϵ_1) 随外加电场的变化关系
Fig. 2. Dependence of the electric field at the left heterointerface and the first confined energy level (ϵ_1) on the external electric field.

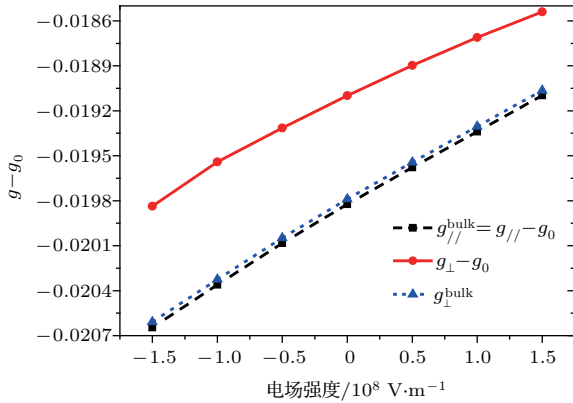


图3 减掉 g_0 后的横向和纵向 g 因子随外加电场的变化
Fig. 3. The transverse and longitudinal g -factor separated from g_0 as a function of the external electric field.

图3显示减掉 g_0 后的横向和纵向 g 因子. 可以看出, 体结构的贡献 ($g_{//,\perp}^{\text{bulk}}$) 构成 $\Delta g_{\perp} = (g_{\perp} - g_0) = g_{\perp}^{\text{bulk}} + g^w$ 和 $\Delta g_{//} = (g_{//} - g_0) = g_{//}^{\text{bulk}}$ 的主要部分. 尽管 $g_{//}^{\text{bulk}}$ (方程(7)) 和 g_{\perp}^{bulk} (方程(8)) 的表达式不同, 但是二者的数值相差不大且差值随着外加电场的改变基本不变, 表明纤锌矿结构的 GaN 半导体中, 由体结构引起的 g 因子各向异性不是很大, 但能够从图3明显地看出. $\Delta g_{\perp} = (g_{\perp} - g_0) = g_{\perp}^{\text{bulk}} + g^w$ 和 g_{\perp}^{bulk} 的差别很

显著, 表明量子阱结构对有效 g 因子及其各向异性的贡献 (g^w) 很重要. 此外, 同自由电子的 g 因子 ($g_0 = 2$) 相比较, Δg_{\perp} 和 $\Delta g_{//} = (g_{//} - g_0) = g_{//}^{\text{bulk}}$ 相对较小, 且比立方结构半导体的相应量小一个数量级. 主要原因是 GaN 的带隙 (3.44 eV) 相对较大. 根据方程(6)和(8), E_g 是最大的能量标度, 且 $\Delta g_{//,\perp}$ 正比于 $E_g^{(-n)}$ ($2 < n < 4$). 当外加电场的方向同极化电场方向相同(相反)时, $g_{//}^{\text{bulk}}$ 和 g_{\perp}^{bulk} 的强度都随着外加电场的增加而减小(增加), 这是因为束缚能级随着外加电场的增加而增加(减小)以及包络函数的扩展区域减小(增加), 自旋轨道耦合参数 $\langle \beta \rangle_1$ 和 $\langle \gamma \rangle_1$ 随着外加电场而减小(增加).

图4显示除掉 g_0 后的横向 g 因子和对其有贡献的各部分. g_{\perp}^{bulk} 对 Δg_{\perp} 的贡献最大, 阱层 (Γ_W)、异质界面 (Γ_{Inter}) 和垒层 (Γ_B) 的贡献相对小得多, 且它们随着外加电场变化得不明显. 这主要是由方程(6)和(7)中的 $z - \langle z \rangle_1$ 导致的. 可以从图4和方程(10)–(12)看出, Γ_{Inter} 的符号是正的 (因为 $L_1 < \langle z \rangle_1 < L_2$, Γ_{InterL} 和 Γ_{InterR} 都大于零), 而 Γ_W 的符号是负的 (因为可以通过数值计算证明 $\langle (z - \langle z \rangle_1) \frac{\partial \beta}{\partial z} \rangle_1 > 0$), 所以 Γ_{Inter} 和 Γ_W 两者的贡献相互抵消一部分.

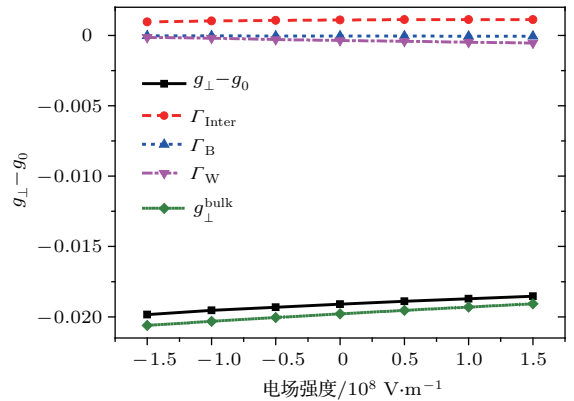


图4 减掉 g_0 后的横向 g 因子 ($\Delta g_{\perp} = g_{\perp} - g_0$) 和对其有贡献的各部分随外加电场的变化关系
Fig. 4. The transverse g -factor separated from g_0 ($\Delta g_{\perp} = g_{\perp} - g_0$) and its individual contributions as a function of the external electric field.

当外加电场从 $-1.5 \times 10^8 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1}$ 到 $1.5 \times 10^8 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1}$ 变化时, 图5显示 g 因子各向异性 ($\delta g = g_{\perp} - g_{//}$) 的强度缓慢减小. 尽管 $g_{//}^{\text{bulk}}$ 和 g_{\perp}^{bulk} 的表达式不同, 它们的大小却很接近. 所以 g 因子各向异性主要由量子阱中的量子限制效应导致的, 主

要来自于量子阱的贡献 ($g_{x,y}^w = \Gamma_{\text{Inter}} + \Gamma_{\text{W}} + \Gamma_{\text{B}}$). 图 6(a) 显示阱层对 Δg_{\perp} 的贡献 (Γ_{W}), 可以分解为依赖于 z 的项 ($\Gamma_{\text{WZ}} < 0$) 和 $\langle z \rangle_1$ 的项 ($\Gamma_{\text{WA}} > 0$); 图 6(b) 显示异质结界面对 Δg_{\perp} 的贡献 (Γ_{Inter}), 可以分解为 Γ_{InterL} 和 Γ_{InterR} .

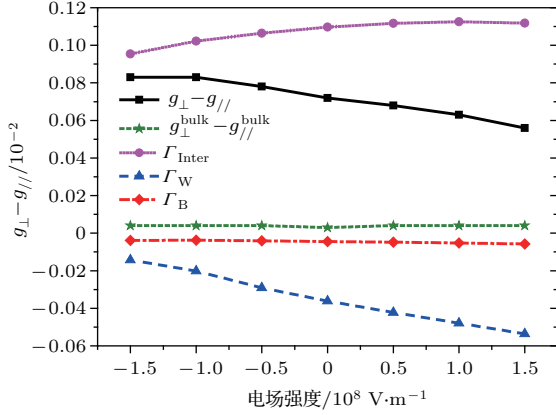


图 5 $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ 量子阱中的 g 因子各向异性 ($\delta g = g_{\perp} - g_{\parallel}$) 随外加电场的变化关系
Fig. 5. The g -factor anisotropy ($\delta g = g_{\perp} - g_{\parallel}$) in the $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ QW as a function of the external electric field.

异质结界面对 Δg_{\perp} 的贡献 (Γ_{Inter}) 依赖于左界面处的包络函数的强度, 也取决于束缚能级 ε_1 . 随着外加的电场强度的改变, 右界面处的包络函数的数值几乎不变, 所以右界面对 Δg_{\perp} 的贡献 Γ_{InterR} 几乎不变 (图 6(b)). 第一子带的束缚能级 ε_1 缓慢增加, 且包络函数的扩展区间随着电场的改变而减小, 也就是包络函数在左界面处的强度增加 (图 1). 所以, 异质结左界面的贡献缓慢增加 (图 5 和图 6(b)).

如上所述, 阱层和垒层对 Δg_{\perp} 的贡献 (Γ_{W} 和 Γ_{B}) 取决于相应的区域的平均电场和第一子带的束缚能级 (ε_1). 随着外加电场强度的改变, 束缚能级 ε_1 快速增加, 所以根据方程 (2), β 和它的一阶导数迅速减小. 可以从图 6(a) 中看出, Γ_{WA} 项和 Γ_{WZ} 的强度都减小, 但前者大于 0 而后者小于 0 且前者的绝对值小于后者, 所以它们的贡献在一定程度上抵消. 然而, Γ_{WA} 的强度随着外加电场的改变减小得更快, 所以阱层对 Δg_{\perp} 的贡献 (Γ_{W}) 小于 0 且强度随着外加电场的改变而缓慢增加 (图 5 和图 6(a)).

由图 5 可以看出 Γ_{Inter} 的符号是正的, Γ_{W} 的符号是负的, 它们对 Δg_{\perp} 的贡献在一定程度上抵消. 然而 Γ_{Inter} 的强度比 Γ_{W} 大, 且后者的强度随着外

加电场的改变增加得更快一些. 所以 g 因子各向异性 $\delta g > 0$ 且强度随着外加电场的改变而减小 (图 5).

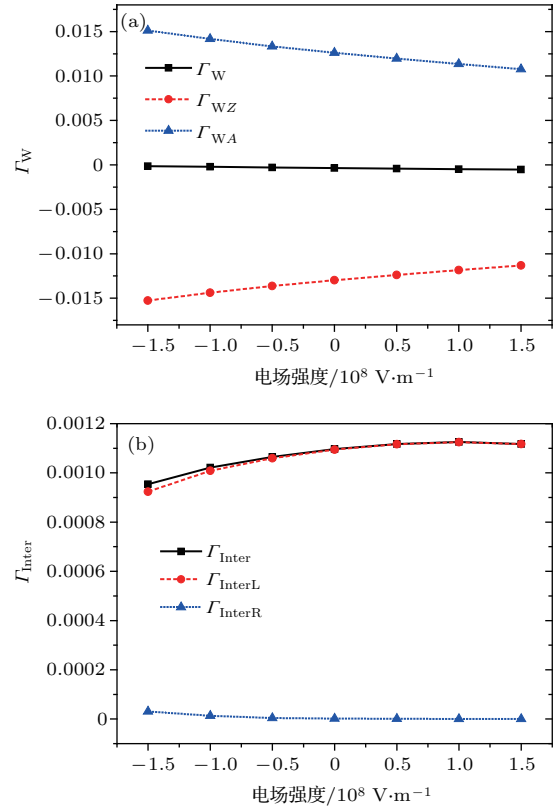


图 6 (a) 阱层对 Δg_{\perp} 的贡献 (Γ_{W}), 可以分解为依赖于 z 的项 (Γ_{WZ}) 和 $\langle z \rangle_1$ 的项 (Γ_{WA}); (b) 异质结界面对 Δg_{\perp} 的贡献 (Γ_{Inter}), 可以分解为 Γ_{InterL} 和 Γ_{InterR}
Fig. 6. (a) Contributions to Δg_{\perp} from the well (Γ_{W}), which can be divided into the z dependent term (Γ_{WZ}) and the $\langle z \rangle_1$ dependent term (Γ_{WA}); (b) contributions to Δg_{\perp} from the heterointerfaces (Γ_{Inter}), which can be separated into Γ_{InterL} and Γ_{InterR} .

接着研究了垒层的 Al 组分对纵向、横向 g 因子及其各向异性的影响. 图 7 显示减掉 g_0 后的纵向和横向 g 因子随着垒层的 Al 组分的变化关系. 当垒层的 Al 组分增加时, 如果不考虑应变效应 ($S_{1,2} = 0$), $g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ 和 g_{\perp}^{bulk} 的强度都减小, 如果考虑应变效应 ($S_{1,2} \neq 0$), $g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ 和 g_{\perp}^{bulk} 的强度都增加. 为了解释这个问题, 图 8 给出了阱层区域的 β 以及 $\varepsilon_1 - V - (S_1 + S_2)$ 随垒层 Al 组分的变化关系, 图 8(a) 考虑了应变效应, 图 8(b) 没有考虑应变效应. 可以看出, 当 $z < z_p(z_{p'})$ 时, β 随着 Al 组分的增加而增加, 当 $z > z_p(z_{p'})$ 以后, β 随着 Al 组分的增加而减小. 如果不考虑应变效应, 因为束缚能级随着 Al 组分的增加而增加以及包络函数的扩展区域减小, 波函数的峰向左界面移动, 左界面附近的

β 减小(图 8(a)), 最终将会导致自旋轨道耦合参数 $\langle\beta\rangle_1$ 随着 Al 组分减小. 如果考虑应变效应, 因为 S_1 和 S_2 对限制势 $V(z)$ 的影响很大, 尤其是当 $z > z_p$ 时, 应变效应使 $\varepsilon_1 - V - (S_1 + S_2)$ 减小得更快, 而 β 增加的更快. 另外, $z_p < z_{p'}$, 包络函数在 z_p 附近的强度很大, 从而引起 $\langle\beta\rangle_1(g_{\perp}^{\text{bulk}})$ 的强度随着 Al 组分增加(图 8(b)). 如果不考虑应变效应, Δg_{\perp} 的强度随着 Al 组分的增加而减小, 而考虑应变效应后, Δg_{\perp} 的强度先随 Al 组分的增加而减小, 后来又随着 Al 组分的增加而增加. $\langle\gamma\rangle_1$ 和 $g_{//}^{\text{bulk}}$ 的情况与此相似. 在下面的讨论中, 都考虑了应变效应.

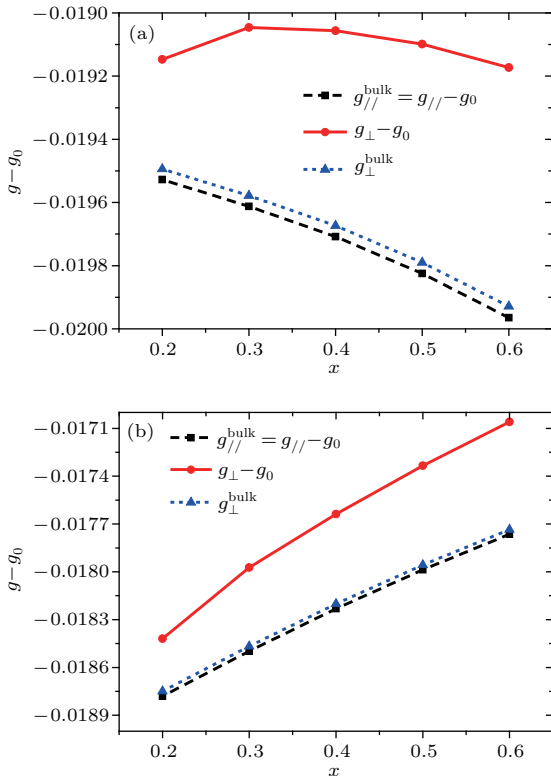


图 7 减掉 g_0 后的纵向和横向 g 因子随垒层 Al 组分 x 的变化关系 (a) 考虑了应变效应 ($S_{1,2} \neq 0$); (b) 没有考虑应变效应 ($S_{1,2} = 0$)

Fig. 7. The transverse and longitudinal g -factor separated from g_0 as a function of Al content x in the barrier with ($S_{1,2} \neq 0$) (a) and without ($S_{1,2} = 0$) (b) considering the strain effects.

图 9 显示减掉 g_0 后的横向 g 因子 (Δg_{\perp}) 和对其有贡献的各部分随垒层的 Al 组分的变化关系. 界面对 Δg_{\perp} 的贡献 Γ_{Inter} 是正的, 阱层的贡献 Γ_{W} 是负的, 它们的强度都随着 Al 组分增加, 但 Γ_{Inter} 的强度较大且增加的较快. 因为随着 Al 组分的增加, 波函数的峰向左界面移动, 左界面处的电场强度也增加. 所以考虑应变效应后, Δg_{\perp} 的强度先随

Al 组分的增加而减小, 但 $g_{\perp}^{\text{bulk}} < 0$ 且强度又增加得很快, 所以 Δg_{\perp} 的强度又随着 Al 组分的增加而增加.

图 10 显示 g 因子各向异性 ($\delta g = g_{\perp} - g_{//}$) 的强度随着垒层 Al 组分缓慢增加. 虽然 $g_{//}^{\text{bulk}}$ 和 g_{\perp}^{bulk}

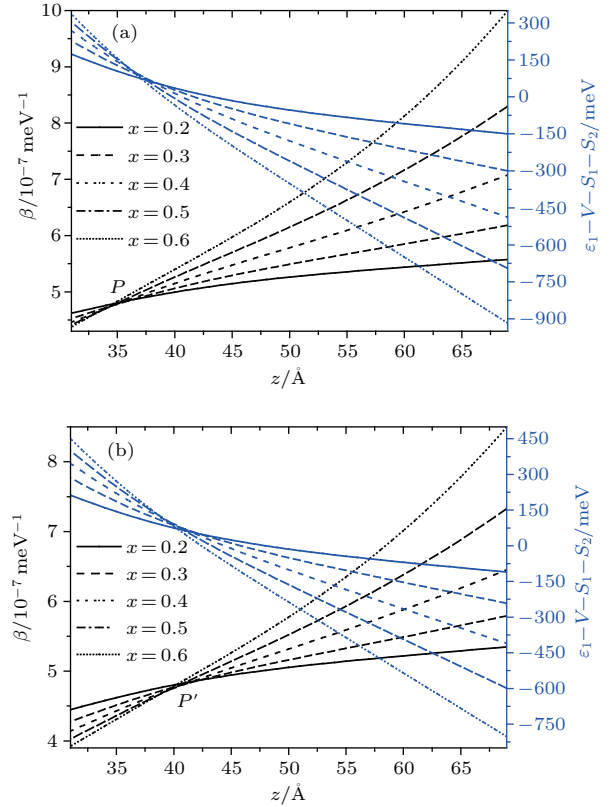


图 8 阱层区域的 β 以及 $\varepsilon_1 - V - (S_1 + S_2)$ 随着垒层 Al 组分的变化关系 (a) 考虑了应变效应 ($S_{1,2} \neq 0$); (b) 没有考虑应变效应 ($S_{1,2} = 0$)

Fig. 8. β and $\varepsilon_1 - V - (S_1 + S_2)$ in the well region with different Al content in the barrier, with ($S_{1,2} \neq 0$) (a) and without ($S_{1,2} = 0$) (b) considering the strain effects.

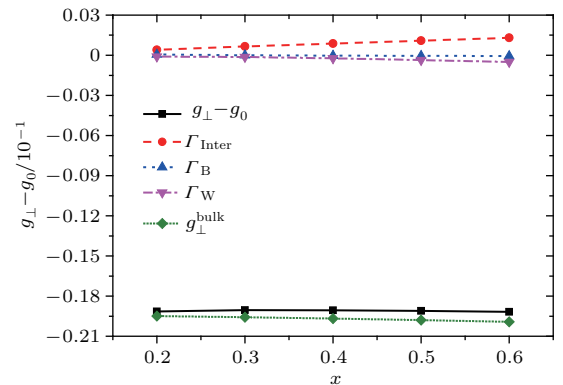


图 9 减掉 g_0 后的横向 g 因子 ($\Delta g_{\perp} = g_{\perp} - g_0$) 和对其有贡献的各部分随着垒层 Al 组分 x 的变化关系

Fig. 9. The transverse g -factor separated from g_0 ($\Delta g_{\perp} = g_{\perp} - g_0$), and its individual contributions as a function of Al content x in the barrier.

的强度都随着Al组分的增加而增加,但它们的差值很小且几乎不随Al组分而改变. 阱层和垒层对 Δg_{\perp} 的贡献(Γ_W 和 Γ_B)相对较小,随着Al组分的增加, Γ_{Inter} 不断增加, Γ_W 也不断增加,但是 Γ_{Inter} 的强度较大且增加的较快,所以 δg 的强度随着垒层的Al组分缓慢增加.

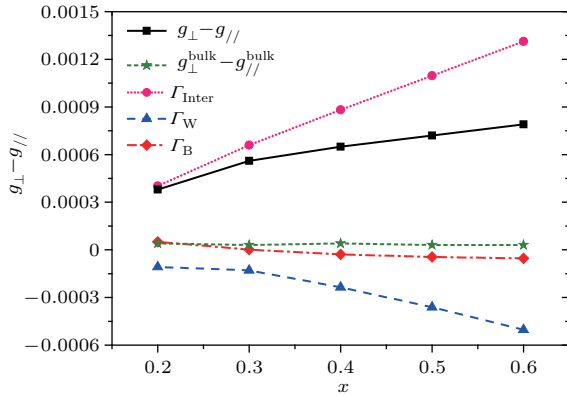


图10 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱中的 g 因子各向异性 ($\delta g = g_{\perp} - g_{\parallel}$) 随着垒层的Al组分 x 的变化关系

Fig. 10. The g -factor anisotropy ($\delta g = g_{\perp} - g_{\parallel}$) in the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ QW as a function of Al content x in the barrier.

4 结 论

本文研究了纤锌矿 $\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ 量子阱中的电子 g 因子及其各向异性如何受外加电场和垒层的Al组分的调制. $\Delta g_{\perp} = (g_{\perp} - g_0) = g_{\perp}^{\text{bulk}} + g^w$, $\Delta g_{\parallel} = (g_{\parallel} - g_0) = g_{\parallel}^{\text{bulk}}$, 其中 g_{\perp}^{bulk} 和 $g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ 的数值远远大于 g^w . 引起 g 因子各向异性的因素主要有两部分, 一是由纤锌矿体结构导致的, 但 $g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ 和 g_{\perp}^{bulk} 的差值很小且几乎不随外加电场和垒层的Al组分改变; 二是由量子阱的量子限制效应 g^w 导致的. 当外加电场的方向同极化电场的方向相同(相反)时, $g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ 和 g_{\perp}^{bulk} 的强度都随着外加电场强度的增加而增加(减小), 主要是波函数和束缚能级随着电场强度的变化引起的. 当外加电场从 $-1.5 \times 10^8 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1}$ 到 $1.5 \times 10^8 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1}$ 变化时, 异质结界面对 Δg_{\perp} 的贡献 Γ_{Inter} 和阱层对 Δg_{\perp} 的贡献 Γ_W 都缓慢增加. 因为 $\Gamma_{\text{Inter}} > 0$, $\Gamma_W < 0$, 但是 Γ_{Inter} 的强度比 Γ_W 大, 且 Γ_W 的强度随着外加电场的改变增加较快. 所以 $\delta g > 0$ 且强度随着外加电场的改变而减小. 当垒层的Al组分增加时, 应变效应 S_1 和 S_2 导致 $\langle \beta \rangle_1(g_{\perp}^{\text{bulk}})$ 和 $\langle \gamma \rangle_1(g_{\parallel}^{\text{bulk}})$ 的强度增加, Γ_{Inter} 和 Γ_W 的强度也同时增加, 但 Γ_{Inter} 的强

度较大且增加得较快, 所以 δg 的强度随着垒层的Al组分缓慢增加. Δg_{\perp} 的强度先随Al组分的增加而减小, 后来又随着Al组分增加. 结果表明, 可以利用外加电场、垒层的Al组分和量子限制效应调制 $\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ 量子阱结构中的电子 g 因子及其各向异性, 且应变效应对电子 g 因子及其各向异性有很重要的影响. 研究结果对自旋电子学器件的设计有重要意义.

参考文献

- [1] Hanson R, Witkamp B, Vandersypen L M K, Willems van Beveren L H, Elzerman J M, Kouwenhoven L P 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 196802
- [2] Snelling M J, Flinn G P, Plaut A S, Harley R T, Tropper A C, Eccleston R, Phillips C C 1991 *Phys. Rev. B* **44** 11345
- [3] Hannak R M, Oestreich M, Heberle A P, Rühle W W, Köhler K 1995 *Solid State Commun.* **93** 313
- [4] Sirenko A A, Ruf T, Cardona M, Yakovlev D R, Ossau W, Waag A, Landwehr G 1997 *Phys. Rev. B* **56** 2114
- [5] Le Jeune P, Robart D, Marie X, Amand T, Brosseau M, Barrau J, Kalevich V 1997 *Semicond. Sci. Technol.* **12** 380
- [6] Tomimoto S, Nozawa S, Terai Y, Kuroda S, Takita K, Masumoto Y 2010 *Phys. Rev. B* **81** 125313
- [7] de Sousa R, Das Sarma S 2003 *Phys. Rev. B* **68** 155330
- [8] Ivchenko E L, Kiselev A A 1992 *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* (S. Petersburg) **26** 1471 [1992 *Sov. Phys. Semicond.* **26** 827]
- [9] Ivchenko E, Kiselev A, Willander M 1997 *Solid State Commun.* **102** 375
- [10] Kiselev A A, Ivchenko E L, Rössler U 1998 *Phys. Rev. B* **58** 16353
- [11] Kiselev A A, Kim K W, Ivchenko E L 1999 *Phys. Status Solidi B* **215** 235
- [12] Pfeffer P, Zawadzki W 2006 *Phys. Rev. B* **74** 233303
- [13] Roth L M, Lax B, Zwerdling S 1959 *Phys. Rev.* **114** 90
- [14] de Dios-Leyva M, Reyes-Gómez E, Perdomo-Leiva C A, Oliveira L E 2006 *Phys. Rev. B* **73** 085316
- [15] Toloza Sandoval M A, Ferreira da Silva A, de Andrada e Silva E A, La Rocca G C 2012 *Phys. Rev. B* **86** 195302
- [16] Toloza Sandoval M A, de Andrada e Silva E A, Ferreira da Silva A, La Rocca G C 2016 *Semicond. Sci. Technol.* **31** 115008
- [17] Jiang H W, Eli Y 2001 *Phys. Rev. B* **64** 041307
- [18] Nitta J, Lin Y, Akazaki T, Koga T 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 4565
- [19] Litvinov V I 2003 *Phys. Rev. B* **68** 155314
- [20] Litvinov V I 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 222108
- [21] Li M, Zhang R, Zhang Z, Yan W S, Liu B, Fu D Y, Zhao C Z, Xie Z L, Xiu X Q, Zheng Y D 2011 *Superlattices Microstruct.* **47** 522
- [22] de Andrada e Silva E A, La Rocca G C, Bassani F 1994 *Phys. Rev. B* **50** 8523

- [23] de Andrada e Silva E A, La Rocca G C, Bassani F 1997 *Phys. Rev. B* **55** 16293
- [24] Bychkov Y A, Rashba E I 1984 *J. Phys. C* **17** 6039
- [25] Yang W, Chang K 2006 *Phys. Rev. B* **73** 113303
- [26] Yang W, Chang K 2006 *Phys. Rev. B* **74** 193314
- [27] Pfeffer P, Zawadzki W 1999 *Phys. Rev. B* **59** R5312
- [28] Koga T, Nitta J, Akazaki T, Takayanagi H 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 046801
- [29] Schmult S, Manfra M J, Punnoose A, Sergent A M, Baldwin K W, Molnar R J 2006 *Phys. Rev. B* **74** 033302
- [30] Li M, Lü Y H, Yang B H, Zhao Z Y, Sun G, Miao D D, Zhao C Z 2011 *Solid State Commun.* **151** 1958
- [31] Li M, Feng Z B, Fan L B, Zhao Y L, Han H P, Feng T H 2016 *J. Magnet. Magnet. Mater.* **403** 81
- [32] Zhao Z Y, Wang H L, Li M 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 097101 (in Chinese) [赵正印, 王红玲, 李明 2016 物理学报 **65** 097101]
- [33] Hao Y F 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 244308
- [34] Hao Y F 2015 *J. Appl. Phys.* **117** 013911
- [35] Hao Y F, Chen Y H, Hao G D, Wang Z G 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 037103
- [36] Hao Y F, Chen Y H, Hao G D, Wang Z G 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 077104
- [37] Miao M S, Yan Q, van de Walle C G, Lou W K, Li L L, Chang K 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 186803
- [38] Zhang D, Lou W K, Miao M S, Zhang S C, Chang K 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 156402
- [39] Chuang S L, Chang C S 1996 *Phys. Rev. B* **54** 2491
- [40] Fabian J, Matos-Abiague A, Ertler C, Stano P, Žutić I 2007 *Acta Phys. Slovaca* **57** 677
- [41] Yu L S, Qiao D J, Xing Q J, Lau S S, Boutros K S, Redwing J M 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 238
- [42] Kumagai M, Chuang S L, Ando H 1998 *Phys. Rev. B* **57** 15303
- [43] Suzuki M, Uenoyama T, Yanase A 1995 *Phys. Rev. B* **52** 8132

Effects of external electric field and Al content on g factor of wurtzite AlGaIn/GaN quantum wells*

Li Ming[†] Yao Ning Feng Zhi-Bo Han Hong-Pei Zhao Zheng-Yin

(College of Electrical and Information Engineering, Xuchang University, Xuchang 461000, China)

(Received 12 October 2017; revised manuscript received 11 December 2017)

Abstract

In this paper, we study the effects of external electric field and Al content on the transverse and longitudinal g -factor (g_{\perp} and g_{\parallel}) and its anisotropy (δg) of wurtzite AlGaIn/GaN quantum wells (QWs). The $\Delta g_{\perp} = (g_{\perp} - g_0) = g_{\perp}^{\text{bulk}} + g^{\text{w}}$ and $\Delta g_{\parallel} = (g_{\parallel} - g_0) = g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ are mainly contributed by the bulk structure ($g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ and g_{\perp}^{bulk}) respectively, but the difference between $g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ and g_{\perp}^{bulk} is small and almost remains unchanged when the external electric field and Al content are varied. So the anisotropy of the g factor in AlGaIn/GaN QWs induced by the bulk wurtzite structure is small, while the anisotropy induced by the quantum confined effect (g^{w}) is considerable. When the direction of the external electric field is the same as (opposite to) the polarization electric field, the magnitudes of $g_{\parallel}^{\text{bulk}}$ and g_{\perp}^{bulk} both increase (decrease) with increasing external electric field. This is induced mainly by the variations of envelope function and confined energy with the electric field. With the external electric field changing from $-1.5 \times 10^8 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1}$ to $1.5 \times 10^8 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1}$, the confined energy ε_1 increases slowly, and the magnitude of the envelope function at the left heterointerface increases. So the contribution to Δg_{\perp} from the heterointerface Γ_{Inter} is positive and increases slowly, and that from the well Γ_{W} is negative and increases slowly in magnitude. The magnitude of Γ_{Inter} is larger than that of Γ_{W} , but the magnitude of the latter increases more rapidly. All the above factors make the g -factor anisotropy $\delta g > 0$ and decrease in magnitude with electric field increasing. With increasing Al content of the barrier, both $\langle \beta \rangle_1$ (g_{\perp}^{bulk}) and $\langle \gamma \rangle_1$ ($g_{\parallel}^{\text{bulk}}$) decrease if the strain effects are ignored ($S_{1,2} = 0$), because the confined energy decreases and the peak of the envelope function shifts towards the left heterointerface. By considering the strain effects ($S_{1,2} \neq 0$), the magnitude of $\langle \beta \rangle_1$ (g_{\perp}^{bulk}) and $\langle \gamma \rangle_1$ ($g_{\parallel}^{\text{bulk}}$) increase with Al content increasing. The strain effect has a great influence on the confined potential $V(z)$, leading to the rapid increase of $\beta(z)$ when $z > z_p$, which the situation for $\gamma(z)$ is similar to. With increasing Al content, the magnitudes of Γ_{Inter} and Γ_{W} both increase, but the magnitude of Γ_{Inter} is larger and increases more rapidly. Therefore δg increases slowly. The magnitude of Δg_{\perp} first decreases with increasing Al content, then it increases with Al content increasing, and since $g_{\perp}^{\text{bulk}} < 0$ it increases more rapidly in magnitude. Results show that the g -factor and its anisotropy in AlGaIn/GaN QWs can be greatly modulated by the external electric field, the Al content in the barrier, the strain effects and the quantum confined effect. Results obtained here are of great importance for designing the spintronic devices.

Keywords: spin-orbit coupling, Rashba effect, Zeeman effect, g factor

PACS: 71.70.Ej, 71.18.+y, 73.21.Fg

DOI: 10.7498/aps.67.20172213

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61306012), the Aid Project for the Leading Young Teachers in Henan Provincial Institutions of Higher Education of China (Grant No. 2015GGJS-145), the Aid Project for the Leading Young Talents of XuChang University, China, the Natural Science Foundation of Henan Province, China (Grant No. 162300410237), and the Development Project for Science & Technology of Henan Province of China (Grant No. 172102210470).

[†] Corresponding author. E-mail: mingli245@163.com