

文章编号: 1000-7032(2009)04-0529-06

压力下 GaN/Ga_{1-x}Al_xN 量子点中杂质态的界面效应

张 敏^{1,2}, 闫祖威³

(1. 内蒙古大学 物理科学与技术学院, 内蒙古 呼和浩特 010021;

2. 内蒙古师范大学 物理与电子信息学院, 内蒙古 呼和浩特 010022; 3. 内蒙古农业大学 理学院, 内蒙古 呼和浩特 010018)

摘要: 考虑界面处导带弯曲, 流体静压力以及有效质量随量子点位置的依赖性, 采用变分法以及简化相干势近似, 研究了无限高势垒 GaN/Ga_{1-x}Al_xN 球形量子点中杂质态的界面效应, 计算了杂质态结合能随量子点尺寸、电子面密度以及压力的变化关系。结果表明, 结合能随压力的增大呈线性增加的趋势, 有效质量位置的依赖性以及导带弯曲对结合能有不容忽视的影响。

关键词: 量子点; 结合能; 电子面密度; 压力

中图分类号: O471.3

PACS: 72.80.Ey; 73.20.Hb

PACC: 7320C; 7280E

文献标识码: A

1 引 言

量子点材料由于三维的量子约束, 使量子点中电子的局域性和相干性增强, 从而具有更为显著的量子化效应, 产生了许多独特的光学性质和电学性质。特别是宽带隙的氮化物半导体量子点在光电子和光探测器件、激光器件以及量子通信等领域具有极强的应用潜力, 使之成为近年来凝聚态物理领域低维量子系统的研究热点之一。GaN 和 AlN 晶体可以形成六方对称纤锌矿和立方对称闪锌矿两种结构, 尽管闪锌矿结构 GaN 材料的晶体质量劣于六角相, 但其较小的能带间隙, 较高的饱和电子迁移率, 高对称性以及易于解理等优于纤锌矿材料的特点仍然受到人们的广泛关注。

近年来, 高压、强电场、强磁场等作为一种对低维材料的强有力的探测手段成为人们研究的热点。Oyoko 等^[1]通过有效质量近似和变分法计算了压力以及量子点尺寸、浅施主离子的位置对浅施主杂质态密度和束缚能的影响。Rosas 等^[2]讨论了均匀磁场对球形量子点中类氢杂质态的影响。本文作者^[3]也曾对磁场下异质结中的杂质态进行了讨论。Oshiroi 等^[4]对镶嵌在非极性材料中的球形量子点的极化子和激子进行了探讨。

但量子点界面势垒多数采用直角势近似, 尚未考虑量子点界面势垒的弯曲。由于半导体量子点的尺寸接近或小于电子的德布罗意波长, 因而有很高的比表面积, 表面电子的运动特性与量子点内部的电子相比明显不同, 因而界面效应造成了对电子能级的扰动, 也对结合能产生较显著的影响。因此, 半导体异质结量子点的界面效应, 特别是由于两种异质结材料的不同而导致的整体能带弯曲对杂质态能级的影响应予以考虑。另外, 如果周期势被破坏或者空间势变化太快超出有效玻尔半径, 有效质量近似就会不适用^[5], 关于有效质量随空间位置的变化关系人们做了一些相关探讨^[6,7], 发现有效质量对于位置的依赖性不容忽视。

本文考虑量子点中电子的有效质量随位置的依赖性, 采用变分法研究了无限高势垒球形 GaN/Ga_{1-x}Al_xN 量子点中杂质态的压力效应和界面效应。计算了杂质态结合能随量子点半径、电子面密度以及压力的变化关系。结果表明, 结合能随压力的增大呈近线性变化的关系。当量子点半径较小时, 导带弯曲对于结合能基本没有影响, 随着量子点尺寸的逐渐增大, 界面对于结合能的影响逐渐加剧, 此外, 电子有效质量的位置依赖性也不容忽视。

收稿日期: 2008-11-13; 修订日期: 2009-05-07

基金项目: 国家自然科学基金(10564003); 教育部科学技术研究重点项目(208025); 内蒙古师范大学科研基金(QN06050)资助项目

作者简介: 张敏(1973-), 女, 内蒙古包头人, 博士研究生, 主要从事凝聚态物理方面的研究。

E-mail: smile_zm@126.com

2 理论模型

对球形 GaN/Ga_{1-x}Al_xN 量子点,我们考虑基态为电子处于最低子带的情形,可将界面处异质结势的处理采用三角势近似,界面势垒视为无穷高,导带弯曲采用线性近似。设一个电量为 e 的施主杂质位于量子点的中心处。系统的哈密顿量写为:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} + V(\mathbf{r}) \quad (1)$$

(1)式中, m_e^* 是 GaN 中电子的有效质量, $V(\mathbf{r})$ 是异质结三角势,可以写为:

$$V(z) = \begin{cases} eF_r(R-r) & 0 < r < R \\ \infty & r > R \end{cases} \quad (2)$$

其中 $F_r = \frac{4\pi n_s}{\varepsilon}$ 代表导带弯曲产生的电场^[8], n_s 是电子面密度。

为了得到杂质电子的基态能量,我们选择下面的试探波函数:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} N \frac{\sin \frac{\pi r}{R}}{r} e^{-\alpha r} (1 + \beta r) & r \leq R \\ 0 & r > R \end{cases} \quad (3)$$

其中, α, β 是变分参数,可通过对系统能量求变分极小得出, N 为归一化系数。根据电子波函数,可得到基态变分能量。

$$E(r, \theta, \varphi) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle T \rangle + \langle U \rangle + \langle V \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (4)$$

对 $E(r, \theta, \varphi)$ 求变分极小,可以得到杂质态的基态变分能量 E_{ig} , 还可通过上述方法求得自由电子的基态能量 E_{fg} , 但此时(1)式中的库仑项为零。

基态结合能可以写成:

$$E_B = E_{fg} - E_{ig} \quad (5)$$

3 流体静压力对物理参数的影响

在流体静压力的作用下,闪锌矿结构的半导体材料中的能隙、载流子的有效质量、材料的介电常数以及晶格的振动频率等参数都要发生变化。

3.1 压力对晶格常数的影响

晶格常数随压力的变化满足 Murnaghan 状态方程^[9]

$$a_i(P) = a_i(0) \left[1 - \frac{P}{3B_{0,i}(P)} \right] \quad (i = 1, 2) \quad (6)$$

其中 $B_{0,i}$ 为材料 i 随压力变化的体弹性模量, 可通过 Vinet 状态方程^[10] 表示为

$$B_{0,i}(P) = \frac{1}{3} [C_{11,i}(P) + 2C_{12,i}(P)] \quad (7)$$

3.2 载流子有效质量的压力系数和位置依赖性

当流体静压力作用于半导体材料时,其能带结构发生变化。电子的有效质量也随压力而变化,它将随着压力的增加而增大。所以有

$$\frac{m_0}{m(P)} = 1 + \frac{C}{E_g(P)} \quad (8)$$

这里以 $E_{g,i}(P) = E_{g,i}(0) + \alpha_i P + \beta_i P^2$ ^[11] 表示材料的能隙随压力的变化。

对于无限高势垒的球型量子点,由于不存在隧穿,故其有效质量对位置的依赖性可表示为随量子点半径的变化关系,考虑压力影响后,表示为

$$\frac{1}{m(R, P)} = \frac{1}{m^*(P)} + \left[1 - \frac{1}{m^*(P)} \right] e^{-\lambda R} \quad (9)$$

其中 R 是量子点半径的尺寸, λ 为常数, 取为 0.01^[7]。

3.3 介电常数的压力系数

材料的介电常数随压力的变化关系因材料而不同,我们选用 Goñi 等^[12] 给出的关系,考虑压力对高频介电常数 ε_∞ 的影响时,则有

$$\frac{\partial \ln \varepsilon_\infty(P)}{\partial \ln V} \approx \frac{5[\varepsilon_\infty(P) - 1]}{3\varepsilon_\infty(P)} (0.98 - f_i) \quad (10)$$

其中 f_i 为材料离子性参数。通过 LST 关系可以得到静态介电常数

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_\infty \left(\frac{\omega_{LO}}{\omega_{TO}} \right)^2 \quad (11)$$

这里, ω_{LO}, ω_{TO} 分别表示闪锌矿晶体中 LO 声子和 TO 声子的本征频率。对于二元化合物半导体,声子频率随压力的变化可以由 Grüneisen 参数 γ_j 描述^[13]

$$\gamma_j = B_0 \frac{1}{\omega_j} \frac{\partial \omega_j(P)}{\partial P} \quad (j = LO, TO) \quad (12)$$

三元混晶的介电常数采用简化相干势近似(SCPA)^[14]

$$\varepsilon_{TMC} = \left\{ \left[(1-x)m_B \varepsilon_A^2 + x m_A \varepsilon_B^2 \right] \cdot \left[x/m_A + (1-x)/m_B \right] \right\}^{1/2} \quad (13)$$

3.4 压力对禁带宽度的影响

流体静压力对带隙的影响可以表示为^[15]

$$E_{g,i}(P) = E_{g,i}(0) + \alpha_i P + \beta_i P^2 \quad (i = 1, 2) \quad (14)$$

三元混晶化合物 Al_xGa_{1-x}N 的禁带宽度可选用简化相干势近似(SCPA)^[14]

$$E_{TMC} = \frac{E_A E_B}{xE_A + (1-x)E_B} \quad (15)$$

表1 计算所用参数

Table 1 Parameter data used in calculation

材料	E_g (eV)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	ϵ_∞	α (meV/GPa)	β (meV/GPa ²)	γ_{LO}	γ_{TO}
GaN	3.3 ^a	293 ^a	159 ^a	5.41 ^b	39 ^d	-0.32 ^d	1.02 ^e	1.19 ^e
AlN	4.9 ^a	304 ^a	160 ^a	4.46 ^e	40 ^d	-0.32 ^d	0.89 ^e	1.14 ^e

^a Ref. [17], ^b Ref. [18], ^c Ref. [19], ^d Ref. [15], ^e Ref. [13]

图1为 GaN/Ga_{0.7}Al_{0.3}N 量子点中,考虑有效质量对量子点半径的依赖性,电子面密度 $n_s = 4.0 \times 10^{12}/\text{cm}^2$ 时杂质态的结合能 E_B 随压力 P 的变化关系。可以看出结合能随压力的变化呈近线性的增加,当量子点半径分别等于 5 nm 和 8 nm 时,压力从 0 GPa 变化到 10 GPa,结合能分别增加了 11.8% 和 12.2%,这是由于压力对介电常数、晶格振动频率、有效质量等参数的影响所致。施加压力以后,由于压力使有效玻尔半径减小,所以量子点对于电子的束缚进一步增强。但是我们发现随着量子点半径的增大,压力对于结合能的影响幅度也随之增加,这主要是由于有效质量随量子点尺寸和压力均在变化,二者共同作用的结果。

图2给出流体静压力 $P = 0$ GPa,电子面密度 $n_s = 4.0 \times 10^{12}/\text{cm}^2$,考虑有效质量随量子点半径

其中, E_A, E_B 分别代表 GaN 和 AlN 两种材料的禁带宽度。

4 结果与讨论

对 GaN/Ga_{1-x}Al_xN 无限深势球形量子点系统,本文仅考虑 $x < 0.53$ 的情形,这时, GaN (阱区) 和 Al_xGa_{1-x}N (垒区) 均为直接带隙半导体^[16]。计算中所选用的主要参数如表1所示。

的变化 $m(R)$ 和 $m^* = 0.15m_0$ 时,结合能随量子点半径 R 的变化关系。可以看出在量子点中,电子除受到杂质的库仑势作用外,还受到界面势垒和导带弯曲对它的作用。当 $R \rightarrow 0$,由于所选择的模型为无限深势阱模型,电子受到施主离子的强烈束缚,因而结合能 E_B 趋于无穷大。而当量子点半径逐渐增大时,量子点趋近于体材料,势阱的限制几乎不影响束缚能的大小,此时的库仑势起主要作用。而且从图中可以看到,有效质量对量子点半径的依赖性不容忽视,考虑其影响后结果呈非线性的增大。

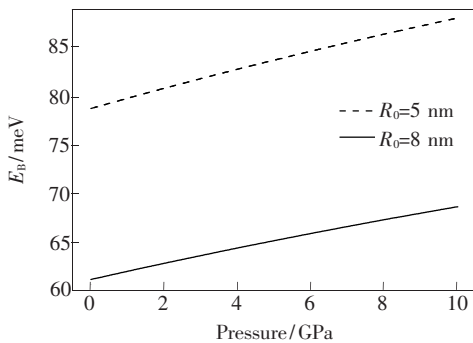


图1 GaN/Ga_{0.7}Al_{0.3}N 量子点中,结合能 E_B 随压力 P 的变化关系

Fig. 1 The binding energy E_B as a function of the pressure P in a GaN/Ga_{0.7}Al_{0.3}N quantum dot

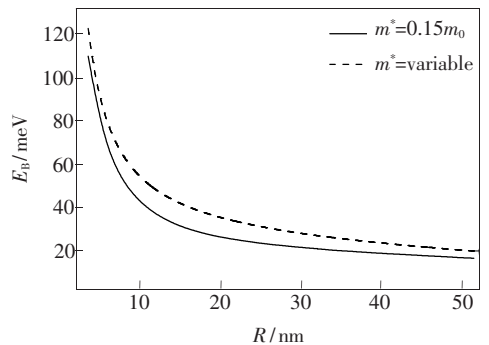


图2 GaN/Ga_{0.7}Al_{0.3}N 量子点中,结合能 E_B 随量子点半径 R 的变化关系

Fig. 2 The binding energy E_B as functions of the quantum dot radius R in a GaN/Ga_{0.7}Al_{0.3}N quantum dot

图3表示当 $P = 0$ GPa 时,对于不同的电子面密度,结合能随量子点半径的变化关系,可以看到,当 $R < 5$ nm 时,电子面密度的变化对于结合能基本没有影响。由于电子面密度代表了导带的

弯曲程度, n_s 增大, 导带弯曲增加, 但是在量子点尺寸较小的时候, 尺寸效应对于电子的限制作用以及界面势垒还有电子与杂质的库仑相互作用对于结合能的影响起主要作用, 所以界面效应对于结合能的影响较小。随着量子点半径的逐渐增大, 导带弯曲所带来的影响将逐渐显著, 故而随着 n_s 的增加, 结合能逐渐增大, 且量子点半径越大, 这种增加的幅度就越为显著, 也就是说此时界面效应对于结合能的影响将不容忽视, 图中我们对有无界面效应做了对比, 可以明显看出这种趋势。

图 4 表示在不同流体静压力下, 量子点半径分别为 $R = 10, 20$ nm 时, 结合能随电子面密度的变化关系。可以看到, 对于固定的量子点半径, 结

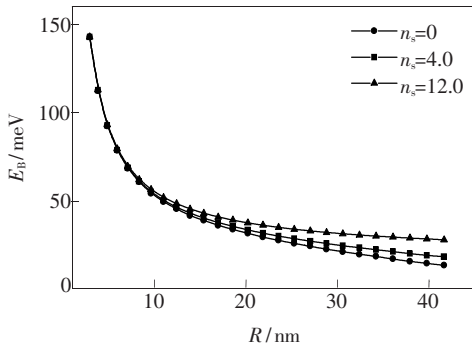


图 3 $n_s = 0, 4.0, 12.0 \times 10^{12}/\text{cm}^2$ 时, 结合能 E_B 随 GaN/Ga_{0.7}Al_{0.3}N 量子点半径的变化关系

Fig. 3 The binding energy E_B as a function of the quantum dot radius R for given electron areal density $n_s = 0, 4.0, 12.0 \times 10^{12}/\text{cm}^2$ in a GaN/Ga_{0.7}Al_{0.3}N quantum dot

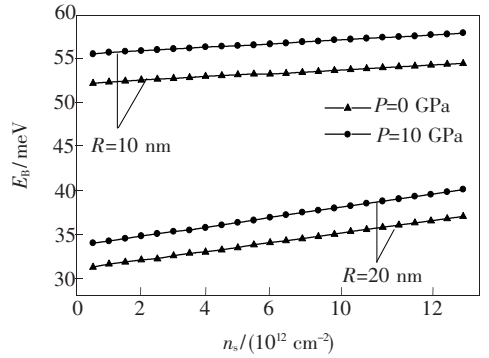


图 4 $P = 0, 10$ GPa 时, 结合能 E_B 随 GaN/Ga_{0.7}Al_{0.3}N 量子点半径、电子面密度的变化关系, 半径 $R = 10, 20$ nm

Fig. 4 For given pressure $P = 0, 10$ GPa, the binding energy E_B as a function of electron areal density n_s , corresponding to the quantum dot radius $R = 10, 20$ nm in a GaN/Ga_{0.7}Al_{0.3}N quantum dot.

合能随电子面密度的增加呈线性增加的趋势, 结果与图 3 的结果相自治。

5 结 论

GaN/Al_xGa_{1-x}N 球形量子点中杂质态结合能随流体静压力的改变呈近线性变化的趋势。随着压力的增大, 结合能明显增大。当量子点半径较小时, 结合能基本不受导带弯曲的影响, 但随着量子点尺寸的增加, 结合能随电子面密度的增大而逐渐增大。同时, 在考虑了有效质量对位置的依赖关系后, 结合能呈现非线性的增大趋势。

参 考 文 献:

- [1] Oyoko H O, Duque C A, Porras-Montenegro N. Uniaxial stress dependence of the binding energy of shallow donor impurities in GaAs(Ga, Al)As quantum dots [J]. *J. Appl. Phys.*, 2001, **90**(2):819-823.
- [2] Rosas R, Marin J L, Riera R. Hydrogenic impurities in spherical quantum dots in a magnetic field [J]. *J. Appl. Phys.*, 2001, **90**(5):2333-2337.
- [3] Zhang M, Ban S L. Impurity states in semiconductor GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterojunction with an external magnetic field [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2004, **25**(4):369-374 (in Chinese).
- [4] Oshiro K, Akai K, Matsuura M. Exciton-optical phonon interaction in a spherical quantum dot embedded in nonpolar matrix [J]. *Phys. Rev. B*, 2002, **66**(15):153308-1-4.
- [5] Kohn W. Shallow impurity states in silicon and germanium [J]. *Solid State Phys.*, 1957, **5**:257-320.
- [6] Qi X H, Kong X J, Liu J J. Effect of aspatially dependent effective mass on the hydrogenic impurity binding energy in a finite parabolic quantum well [J]. *Phys. Rev. B*, 1998, **58**(16):10578-10582.
- [7] Rajashabala S, Navaneethakrishnan K. Effective masses for donor binding energies in quantum well systems [J]. *Mod. Phys. Lett. B*, 2006, **20**(24):1529-1541.
- [8] Sing J. *Quantum Mechanics* [M]. A. Wiley-Inter Science Publication: John Wiley & Sons INC, 1997.

- [9] Perlin P, Mattos L, Shapiro N A, *et al.* Reduction of the energy gap pressure coefficient of GaN due to the constraining presence of the sapphire substrate [J]. *J. Appl. Phys.*, 1999, **85**(4):2385-2389.
- [10] Vinet P, Ferrante J, Smith J R, *et al.* A universal equation of state for solids [J]. *J. Phys. C*, 1986, **19**(20): L467-L473.
- [11] Christensen N E, Gorczyca I. Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure [J]. *Phys. Rev. B*, 1994, **50**(7):4397-4415.
- [12] Goñi A R, Syassen K, Cardona M. Effect of pressure on the refractive index of Ge and GaAs [J]. *Phys. Rev. B*, 1990, **41**(14):10104-10110.
- [13] Wagner J M, Bechstedt F. Pressure dependence of the dielectric and lattice-dynamical properties of GaN and AlN [J]. *Phys. Rev. B*, 2000, **62**(7):4526-4534.
- [14] Ban S L, Hasbun J E. Interface polarons in a realistic heterojunction potential [J]. *Eur. Phys. J. B*, 1999, **8**(3):453-461.
- [15] Christensen N E, Gorczyca I. Optical and structural properties of I-III nitrides under pressure [J]. *Phys. Rev. B*, 1994, **50**(7):4397-4415.
- [16] Fan W J, Li M F, Chong T C. Electronic properties of zinc-blende GaN, AlN and their alloys Ga_{1-x}Al_xN [J]. *J. Appl. Phys.*, 1996, **79**(1):188-194.
- [17] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys [J]. *J. Appl. Phys.*, 2001, **89**(11):5815-5874.
- [18] Karch K, Bechstedt F, Plehl T. Lattice dynamics of GaN: Effects of 3d electrons [J]. *Phys. Rev. B*, 1997, **56**(7): 3560-3563.
- [19] Karch K, Bechstedt F. Ab initio lattice dynamics of BN and AlN: Covalent versus ionic forces [J]. *Phys. Rev. B*, 1997, **56**(12):7404-7415.

Interface Effect on the Impurity State in a GaN/Ga_{1-x}Al_xN Quantum Dot under Pressure

ZHANG Min^{1,2}, YAN Zu-wei³

(1. School of Physics Science and Technology, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China;

2. College of Physics and Electron Information, Inner Mongolia Normal University, Hohhot 010022, China;

3. Department of Physics, Inner Mongolia Agricultural University, Hohhot 010018, China)

Abstract: Semiconductor structures with quantum confinement have shown interesting behavior. In recent years, the physical properties of quantum heterostructures composed of the group-III nitrides semiconductors with wide-band-gaps, such as AlN, GaN and InN, as well as their ternary compounds, have been widely studied arising from their promising application in short-wavelength electroluminescence devices. The high pressure, high electric-field, intense magnetic-field become the powerful tools to explore the property of material. Some authors investigated the effects of electric field and hydrostatic pressure on donor binding energies in a GaAs quantum dot. Some authors calculated the ground-state binding energies for a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot within a uniform magnetic field. However, few studies focused interface effect and hydrostatic pressure on zinc-blende nitride quantum dots. As the periodicity of the host semiconductor is lost, or when the impurity potential varies too rapidly over an effective Bohr radius the effective mass approximation is not reliable. In the present work, a modified variational method within the simplified coherent potential approximate was adopted to investigate the impurity state binding energies of GaN/Ga_{1-x}Al_xN infinite barrier spherical shape quantum dot by using a triangular potential to approximate the interface potential.

Considering the hydrostatic pressure and a position dependent mass, the relations among the impurity binding energies, the hydrostatic pressure, quantum dot radius and the electron areal density were calculated. The result indicated that the binding energies of impurity state nearly linearly increase with pressure. It also showed that the influence of conductive band bending and the position dependent effective mass should not be neglected. As the quantum dot radius is smaller, the binding energies are not affected by conductive band bending. With the increasing of the quantum dot size, the binding energies increase gradually with it. For a given hydrostatic pressure and Al component, the electron areal density n_s strengthens the band bending of the interface to increase the binding energy.

Key words: quantum dot; binding energy; electron areal density; pressure

CLC number: O471.3

PACS: 72.80.Ey; 73.20.Hb

PACC: 7320C; 7280E

Document code: A