

文章编号: 1000-7032(2010)05-0628-07

## 纤锌矿 GaN 柱形量子点中类氢施主杂质态

郑冬梅, 王宗麓, 肖荣辉

(三明学院 物理与机电工程系, 福建 三明 365004)

**摘要:** 在有效质量近似和变分原理的基础上, 选取含两个变分参数的波函数, 研究了纤锌矿结构的 GaN / AlGa<sub>1-x</sub>N 单量子点中类氢施主杂质体系的结合能随量子点 (QD) 尺寸以及杂质在量子点中位置的变化, 并与以前使用不同尝试波函数的计算结果进行了比较。结果表明: 由我们选取的两变分参数波函数得到的结果与前人选取的两变分参数波函数得到的结果相比有所改进, 而与选取一个变分参数波函数得到的结果一致。同时我们还计算了体系的维里定理值随量子点半径的变化情况, 所得结果与前人工作结果一致, 说明本文选取的两变分参数波函数能很好地描述柱形量子点中施主杂质态的运动。

**关键词:** 柱形量子点; 类氢施主杂质; 内建电场; 维里定理值

中图分类号: O471.1

PACS 71.55.-j 71.55.Eq

PACC: 7155G; 7320D

文献标识码: A

## 1 引 言

氮化物半导体材料因其特殊的物理性质, 在发展高温、高频、大功率激光器件等方面有着极为广阔的应用价值, 成为第三代电子材料。半导体掺杂能够改变材料的电学、光学性质, 因此对半导体材料中杂质态问题的研究则显示出重要的意义。由于 GaN 及其合金材料在光电子器件方面有广阔的应用价值, 因此对该材料中杂质态问题的讨论仍需进一步深入。近年来, 对氮化物低维量子结构中杂质态理论的研究取得了很大的进展。赵凤岐等<sup>[1]</sup>采用变分法研究了 GaN / AlGa<sub>1-x</sub>N 抛物量子阱中类氢杂质态的能级, 给出基态能量、第一激发态能量、结合能和跃迁能量等物理量随抛物量子阱宽度变化的函数关系。Zhang 等<sup>[2]</sup>引入简化相干势近似, 采用变分法讨论了纤锌矿结构 GaN / AlGa<sub>1-x</sub>N 异质结系统中流体静压力及外加电场对束缚于界面附近的浅杂质态的影响。Zhang 等<sup>[3]</sup>还进一步研究了外加电场和流体静压力下无规相近似引起的屏蔽对纤锌矿 GaN / AlGa<sub>1-x</sub>N 异质结系统中浅施主杂质态的影响。Wu 等<sup>[4,5]</sup>用平面波展开法分别讨论了量子点内外电子有效质量的差异和外加电场对闪

锌矿及纤锌矿 GaN / AlGa<sub>1-x</sub>N 球形量子点中杂质态的影响。Xia 等<sup>[6]</sup>用变分法研究了闪锌矿 GaN / AlGa<sub>1-x</sub>N 柱形量子点中杂质态结合能随量子点尺寸、杂质位置及 Al 组分的变化规律。近来, 本文作者<sup>[7,8]</sup>分别采用了含有一个变分参数的平面波函数和高斯波函数对纤锌矿 GaN / AlGa<sub>1-x</sub>N 柱形量子点中杂质态进行了研究, 得出一些结论。Xia 等<sup>[9]</sup>采用含有两个变分参数的波函数研究了内建电场对纤锌矿 GaN / AlGa<sub>1-x</sub>N 柱形量子点中杂质态的影响。

众所周知, 运用变分方法研究杂质态体系, 关键是选择合适的体系尝试波函数。本文利用有效质量方法和变分原理, 选用与前人不同的变分波函数对有无内建电场时纤锌矿 GaN / AlGa<sub>1-x</sub>N 柱形量子点中类氢施主杂质态结合能随量子点尺寸及杂质在量子点中位置的变化进行了研究, 同时还计算了体系的维里定理值随量子点半径的变化情况, 并对所得结果和前人的计算结果进行了比较。

## 2 理论模型

考虑一个半径为  $R$  和高为  $L$  的三维圆柱形 AlGa<sub>1-x</sub>N / GaN / AlGa<sub>1-x</sub>N 单量子点 (如图 1 所

收稿日期: 2009-12-28 修订日期: 2010-06-07

基金项目: 福建省教育厅科技项目 (JK2009038); 三明学院科学研究发展基金 (B0820/G) 资助项目

作者简介: 郑冬梅 (1971-), 女, 福建上杭人, 主要从事宽禁带半导体材料理论的研究。

E-mail: smdnzheng@sina.com

示), 势垒为无限大, 量子点中有一个电子和一个带单位正电荷的施主杂质离子, 坐标原点选在量子点中心,  $z$  轴沿材料生长方向。电子的坐标为  $(\rho_e, \varphi_e, z_e)$ , 施主杂质离子中心位于量子点中的

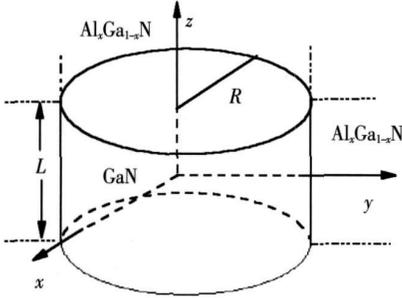


图 1 半径为  $R$  高度为  $L$  的柱形量子点模型

Fig 1 A model of cylindrical GaN QD with radius  $R$  and height  $L$

坐标为  $(\rho_0, 0, z_0)$ 。

在有效质量近似的框架下, 体系的哈密顿量可以表示为

$$\hat{H} = \hat{H}_e - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\bar{\epsilon}r} \quad (1)$$

其中

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[ \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial}{\partial \rho_e} \left( \rho_e \frac{\partial}{\partial \rho_e} \right) + \frac{1}{\rho_e^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \right] + V(z_e) + V(\rho_e) - eFz_e \quad (2)$$

式中,  $r = \sqrt{\rho_e^2 + \rho_0^2 - 2\rho_e\rho_0\cos\varphi_e + (z_e - z_0)^2}$  是电子和类氢施主杂质离子的距离;  $\epsilon_0$  是自由空间的介电常数;  $\bar{\epsilon}$  是电子和类氢施主杂质离子间嵌入材料的有效平均相对介电常数;  $m_e^*$  为电子的有效质量;  $V(\rho_e)$  和  $V(z_e)$  分别为应变异质结的带阶 ( $Q$ ) 引起的  $x$ - $y$  平面和  $z$  方向受限势, 表达式为

$$V(\rho_e) = \begin{cases} 0 & \rho_e \leq R \\ Q[E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) - E_g(\text{GaN})], & \rho_e > R \end{cases} \quad (3)$$

$$V(z_e) = \begin{cases} 0 & |z_e| \leq \frac{L}{2} \\ Q[E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) - E_g(\text{GaN})], & |z_e| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4)$$

$E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N})$  和  $E_g(\text{GaN})$  分别为  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  和  $\text{GaN}$  材料的带隙。

由于自发极化和压电极化引起的  $\text{GaN}$  和  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  层的内建电场强度  $F$  为<sup>[10]</sup>

$$\begin{cases} F^{\text{GaN}} = \left| -\frac{P_{\text{sp}}^{\text{GaN}} \hat{z} + [e_{31}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) + e_{33}\epsilon_{zz}] \hat{z} - P_{\text{sp}}^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} \hat{z}}{\epsilon_e^{\text{GaN}} \epsilon_0} \right| \\ F^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} \rightarrow 0 \end{cases} \quad (5)$$

其中,  $\epsilon_e^{\text{GaN}}$  为  $\text{GaN}$  材料的电子介电常数;  $P_{\text{sp}}^{\text{GaN}}$  和  $P_{\text{sp}}^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}$  分别是  $\text{GaN}$  和  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  层的自发极化;  $e_{31}$ ,  $e_{33}$  是  $\text{GaN}$  材料的压电常数,  $\epsilon_{xx}$ ,  $\epsilon_{yy}$ ,  $\epsilon_{zz}$  是  $\text{GaN}$  层的应变。

根据文献 [12~14], 本文的计算中我们选取变分波函数为

$$F_{e0}(\rho_0, |z_e - z_0|) = e^{-\alpha\rho_0} e^{-\beta(z_e - z_0)^2}, \quad (9)$$

式中,  $\rho_0^2 = (x_e - x_0)^2 + (y_e - y_0)^2$ ;  $\alpha$ ,  $\beta$  为变分参数,  $\alpha$  描述  $x$ - $y$  平面内电子-类氢施主杂质离子之间的关联,  $\beta$  描述  $z$  方向电子-类氢施主杂质离子的相互关联。

束缚于  $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  量子点中类氢施主杂质态的基态能可以由下式得到:

$$E(\alpha, \beta) = \frac{\int \langle \phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) | \hat{H} | \phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \rangle}{\int \langle \phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) | \phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \rangle}, \quad (10)$$

施主杂质态的结合能  $E_b$  为

$$E_b = E_e - E(\alpha, \beta), \quad (11)$$

其中  $E_e$  为无杂质情况下电子的基态能。

为了研究量子点约束势对电子、类氢施主杂质离子空间分离的影响, 本文类似于文献 [9] 定

选取尝试波函数为

$$\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \phi_e(\rho_e, \varphi_e, z_e) F_{e0}(\rho_0, |z_e - z_0|), \quad (6)$$

其中  $\phi_e$  是单电子在量子点中的波函数, 选取为<sup>[10,11]</sup>

$$\begin{aligned} \phi_e(\rho_e, \varphi_e, z_e) &= f(\rho_e) h(z_e) e^{im\varphi_e} \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (7)$$

通过解薛定谔方程 (2) 可以求得电子的能量和波函数。  $F_{e0}(\rho_0, |z_e - z_0|)$  描写电子和类氢施主杂质离子的内部关联运动, 在变分计算中 Xia 等<sup>[6,9]</sup> 选取为

$$F_{e0}(\rho_0, |z_e - z_0|) = e^{-\alpha\rho_0} e^{-\beta(z_e - z_0)^2}, \quad (8)$$

义了电子、类氢施主杂质离子在  $x-y$  平面内的平均分离  $\bar{\rho}_{e0}$  和其在  $z$  方向上的平均分离  $\bar{z}_{e0}$ :

$$\bar{\rho}_{e0} = \left[ \frac{\langle \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) | \rho_{e0}^2 | \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \rangle}{\langle \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) | \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \rangle} \right]^{1/2}, \quad (12)$$

$$\bar{z}_{e0} = \left[ \frac{\langle \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) | (z_e - z_0)^2 | \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \rangle}{\langle \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) | \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \rangle} \right]^{1/2}. \quad (13)$$

计算出施主杂质态结合能后, 可以计算出势能和动能的平均值, 进而计算出体系的维里定理值:

$$V = - \frac{E_C}{E_K}, \quad (14)$$

式中,  $E_C = \langle -e^2/4\pi\epsilon_0\bar{\epsilon} \sqrt{\bar{\rho}_{e0}^2 + (z_e + z_0)^2} \rangle$  是库仑势能项, 平均动能  $E_K = \langle H \rangle - E_C - E_{es}$ , 又因为  $E_b = E_e - m \ln \langle H \rangle$ , 所以有  $E_K = -E_C - E_{ib}$ .

### 3 结果分析与讨论

考虑一有限高势垒, 变分计算了有无内建电场时类氢施主杂质态结合能随量子点尺寸及杂质在量子点中位置的变化情况, 同时计算了体系的维里定理值随量子点半径的变化关系。在计算中, 仅考虑电子的角动量量子数  $m$  为 0 的情况, GaN 材料的静态介电常数为  $8.9^{[15]}$ , 其余参数同文献 [10], AlGaN 材料的带隙为  $E_g = [3.5 \times (1-x) + 6.28x - 1.3x(1-x)] \text{ eV}^{[16,17]}$ , 晶格常数  $a = [0.3189(1-x) + 0.3112x] \text{ nm}^{[18]}$ , 自发极化  $[-0.029(1-x) - 0.081x] \text{ C/m}^{[18]}$ , 电子有效质量  $m_e^* = [0.20(1-x) + 0.32x]m_0^{[18]}$ , 其中  $m_0$  是自由电子质量, 静态介电常数为  $8.9 \times (1-x) + 8.5x^{[15]}$ 。取 Al 含量  $x = 0.15$  导带和价带的带阶比为  $75:25^{[19]}$ 。

图 2 给出了式 (8) 和式 (9) 两种尝试波函数用文献 [9] 的参数从理论上变分计算的类氢施主杂质态结合能, 其中虚线是用式 (8) 作为尝试波函数的理论值, 实线是用本文的式 (9) 作为尝试波函数变分计算出的杂质态结合能。从图中可以看出, 用我们所选取的尝试波函数计算得到的杂质态结合能比用式 (8) 计算得到的杂质态结合能要高, 也就是说以式 (9) 作为尝试波函数计算得到的杂质态基态能量较低, 从变分原理的角度来看, 尝试波函数式 (9) 更适用于描述量子点中施主杂质电子的运动。

图 3 给出了有无内建电场时高度  $L = 4 \text{ nm}$ ,

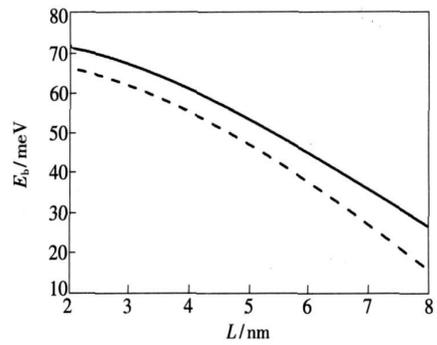


图 2 用两种不同尝试波函数计算所得的类氢施主杂质态结合能的比较

Fig. 2 Comparison of the donor binding energy given by two different trial wavefunctions

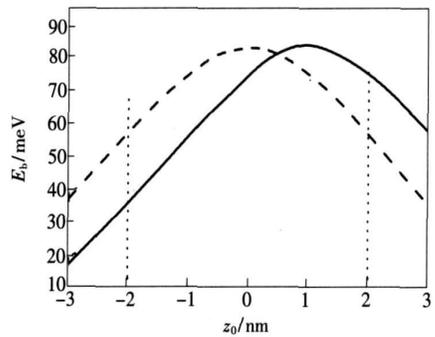


图 3 类氢施主杂质态结合能  $E_b$  随杂质位置  $z_0$  的变化关系, 实线和虚线分别代表有, 或无内建电场的情况。

Fig. 3 The donor binding energy  $E_b$  as a function of the impurity position  $z_0$ . The solid (dashed) line is with (without) the built-in electric field.

半径  $R = 5 \text{ nm}$  的量子点中类氢施主杂质态结合能随施主杂质离子位置  $z_0$  的变化情况。由图可知, 随着杂质沿量子点生长方向移动时, 结合能先增大后减小, 有一最大值。若不考虑内建电场的影响, 施主杂质离子处于量子点中心时杂质态结合能最大, 而考虑内建电场的情况下, 杂质态结合能关于量子点中心的对称性遭到破坏, 最大值出现在施主离子位于  $z_0 = 1.1 \text{ nm}$  处。这是因为在不考虑内建电场的情况下, 由于量子点的束缚, 电子的概率分布是关于量子点中心对称的, 在越远离中心的位置上电子存在的概率越小, 这就导致了当施主杂质离子位于量子点中心时杂质态结合能最大。当考虑内建电场时, GaN 量子点内强的内建电场使得电子被局域在靠近量子点的顶部, 且电子波函数的中心约在  $z_0 = 1.1 \text{ nm}$  处, 即电子在  $z_0 = 1.1 \text{ nm}$  处存在的概率最大<sup>[10]</sup>。这一结果和文献 [7, 8] 是一致的。

图 4 给出了有无内建电场时施主杂质离子位于半径  $R = 5 \text{ nm}$  的量子点中不同位置情况下类氢施主杂质态结合能随量子点高度  $L$  的变化曲线。由图 4(a)可知, 当类氢施主离子位于空间对称位置  $z_0 = \pm L/2$  和  $z_0 = \pm L/4$  时, 杂质态结合能简并。这是因为电子的概率分布是关于量子点中心对称的。图 4(a)也可进一步说明, 若不考虑内建电场, 施主离子局域在量子点中心时杂质态结合能最大(曲线 C)。由图 4(a)还可看到, 杂质态结合能随量子点高度  $L$  的增加先增大后减小, 存在一最大值, 且当杂质局域在量子点界面附近时, 变化趋势更明显, 这一结果不同于文献 [9] (单调下降)。从图 4(b)可看到, 由于内建电场的影响, 当类氢施主离子位于空间对称位置  $z_0 = \pm L/2$  和  $z_0 = \pm L/4$  时, 杂质态结合能的简并消除而出现能级分裂, 且随着量子点高度的增加, 能级分裂也增大。这是因为内建电场使得电子被局域在靠近量

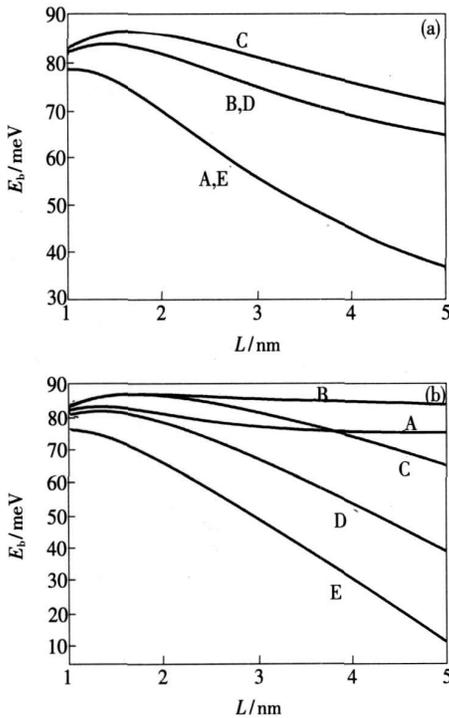


图 4 类氢施主杂质态结合能  $E_b$  随量子点高度  $L$  的变化曲线, (a) 不考虑内建电场; (b) 考虑内建电场。曲线 A、B、C、D、E 分别对应施主杂质离子的位置为  $L/2$ 、 $L/4$ 、 $0$ 、 $-L/4$ 、 $-L/2$ 。

Fig 4 The donor binding energy  $E_b$  as a function of the height  $L$  of QD, where the built in electric field is ignored in (a) and considered in (b). The curves A, B, C, D and E are for the impurity positions at  $L/2$ ,  $L/4$ ,  $0$ ,  $-L/4$  and  $-L/2$  respectively.

子点的顶部, 施主杂质离子位于  $z_0 = L/2$ ,  $z_0 = L/4$  时施主杂质离子与电子之间的平均距离比不考虑内建电场时小, 施主杂质离子-电子之间的库仑相互作用强, 而施主杂质离子位于  $z_0 = -L/2$ ,  $z_0 = -L/4$  的情形相反。从图 4(b)还看到, 内建电场并不影响杂质态结合能随量子点高度的变化趋势: 杂质态结合能随量子点高度  $L$  的增加先增大后减小, 存在一极大值。这一结果也不同于文献 [9] (单调下降), 但与文献 [7] 和 [8] 是一致的。这是因为当量子点的高度比较小时, 电子波函数的分布延伸到量子点外, 施主杂质离子与电子之间的平均距离  $\bar{z}_{e0}$  增大(图 5), 库仑相互作用减小, 导致结合能较小; 当量子点的高度  $L$  增加到一定值时, 电子的波函数完全被局域在量子点内, 施主杂质离子与电子之间的平均距离  $\bar{z}_{e0}$  最小(图 5), 库仑相互作用最强, 杂质态结合取得极大值, 此时电子被最有效的约束在量子点内部; 进一步增加量子点的高度  $L$ , 内建电场引起的电子-类氢施主杂质离子的空间分离增大(图 5), 它们之间的库仑作用减小, 故杂质态结合能减小。此外, 从图 4(b)可以看到, 当施主杂质离子局域于量子点上界面附近 ( $z_0 = L/2$ ,  $z_0 = L/4$ ) 时, 杂质态结合能随量子点高度  $L$  的变化趋势不明显, 当量子点高度  $L > 30 \text{ nm}$  时, 杂质态结合能趋于一常数。这是由强的内建电场使得电子被局域在靠近量子点的顶部, 从而电子与施主杂质离子的  $z$  平均距离

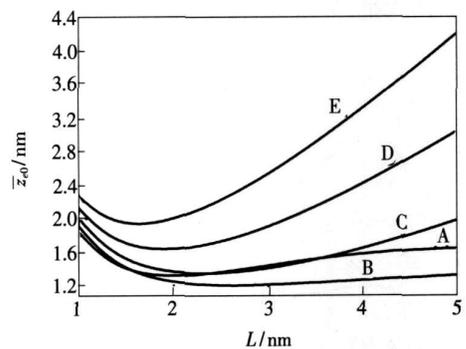


图 5 考虑内建电场影响, 类氢施主杂质离子与电子在  $z$  方向上的平均分离随量子点高度  $L$  的变化曲线, 图中曲线 A、B、C、D、E 分别对应施主杂质离子的位置为  $L/2$ 、 $L/4$ 、 $0$ 、 $-L/4$ 、 $-L/2$ 。

Fig 5 Considering the effect of the built in electric field, the distance between the electron and the impurity position  $z$  versus the height  $L$  of QD. The curves A, B, C, D and E are for the impurity positions at  $L/2$ ,  $L/4$ ,  $0$ ,  $-L/4$  and  $-L/2$  respectively.

$z_0$ 对量子点高度的变化不敏感导致的(图 5)。从图 4(b)知,当施主离子局域于  $z_0 = L/4$ 时,杂质态结合能最大,这一结果不同于文献 [9](施主杂质离子局域于  $z_0 = L/2$ 处杂质态结合能最大)。文献 [10]给出了 GaN/AlGa<sub>1-x</sub>N 量子点内电子在  $z$  方向的概率分布,由于强的内建电场存在,电子被局域在靠近量子点的顶部大约是  $z_0 = L/4$ 处,而不是量子点的上界面  $z_0 = L/2$ 处,所以本文的结果更合理。

考虑强的内建电场效应,图 6 给出了高度  $L = 5$  nm 的量子点中,杂质态结合能随量子点半径  $R$  的变化曲线。从图 6 我们可以看到,杂质态结合能随量子点半径  $R$  的增大而先急剧增大后减小,出现了一个最大值,结合能的最大值约出现在  $R = 1.5$  nm 处。这主要是因为当量子点半径较小时,电子的波函数不能完全的局域在量子点内,会部分地穿透到势垒中,且随着量子点半径的减小,电子隧道贯穿效应越强,电子与施主杂质离子间的平均距离  $\bar{\rho}_0$  越大,库仑相互作用越小,所以当量子点半径较小时,随着量子点半径的减小杂质态结合能减小。在量子点半径较大的情况下,电子的波函数主要局域在量子点内,穿到垒中的几率非常小,且随着量子点半径的增加,电子-施主杂质离子间的平均距离  $\bar{\rho}_0$  增大,则库仑相互作用减小,因此,杂质态结合能随着半径  $R$  的增大而减小。这一结果也不同于文献 [9](单调下降),但和文献 [8]是一致的。这主要是因为文献

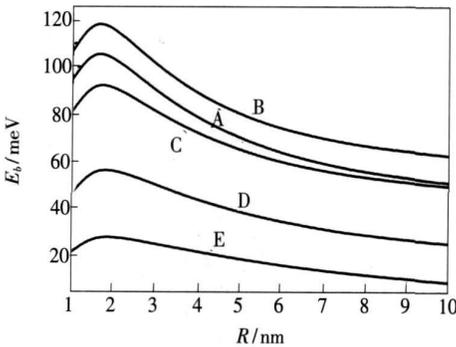


图 6 考虑内建电场影响,杂质态结合能  $E_b$  随量子点半径  $R$  的变化曲线,图中曲线 A、B、C、D、E 分别对应施主杂质离子的位置为  $L/2$ 、 $L/4$ 、 $0$ 、 $-L/4$  和  $-L/2$ 。  
Fig 6 Considering the effect of the built in electric field the donor binding energy  $E_b$  as a function of the QD radius  $R$ . The curves A, B, C, D and E are for the impurity positions at  $L/2$ ,  $L/4$ ,  $0$ ,  $-L/4$  and  $-L/2$  respectively.

[9]中没有讨论量子点半径  $R < 3$  nm 的情形。此外,从图中也可以看到,当施主杂质离子局域于  $z_0 = L/4$ 时结合能最大,这是由纤锌矿 GaN 量子点内强的内建电场导致的。

图 7 给出了量子点中施主杂质体系的维里定理值和库仑作用势随量子点半径  $R$  的变化情况。从图 7(a)可以知道,量子点半径  $R < 6$  nm 时,随量子点半径的减小,维里定理值急剧增大。这是因为量子点的强约束,电子与施主杂质离子的库仑势快速增大,然而电子的相对运动减弱,动能减小。但到临界值 ( $R = 1.5$  nm)后,随着量子点半径的减小,维里定理值急剧减小,由于电子隧道贯穿效应,电子与施主杂质离子之间的平均距离增大,库仑势减小,同时电子的相对运动动能增大。可以预测,当量子点半径  $R \rightarrow \infty$ 时,量子点从 0 维变化到二维,维里定理值趋于 2。这些结果和文献 [13]中的结论一致,这也说明本文选取的变分波函数能很好地描述柱形量子点中杂质态的运动。从图 7(b)可以看到对于不同高度的柱形量子点,当量子点半径在 1.5 nm 附近,电子与施主杂质离子间的库仑势的数值最大,这也说明杂质态结合能随量子点半径的变化有一极大值存在,而不是像文献 [9]所说呈单调变化。

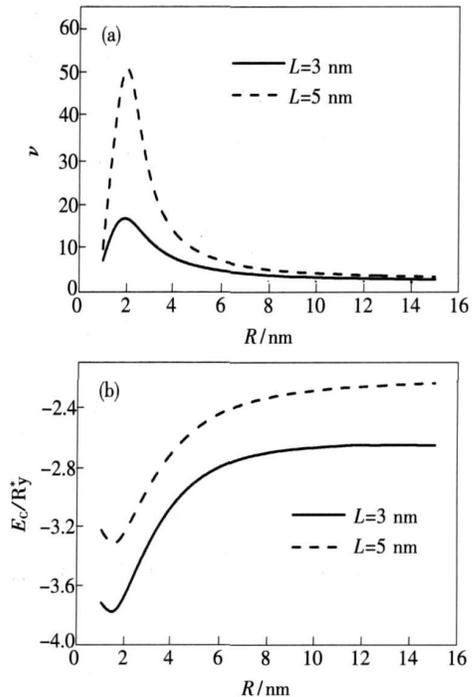


图 7 维里定理值 (a) 和库仑作用势 (b) 随量子点半径  $R$  的变化曲线  
Fig 7 The virial theorem number (a) and the Coulombic energy term  $E_c$  (b) versus the radius  $R$  of QD

## 4 结 论

采用两参数波函数变分地计算了纤锌矿结构的柱形 GaN/A<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N 单量子点中类氢施主杂质态结合能随量子点尺寸和杂质离子在量子点中位置的变化关系。结果表明: 施主杂质态结合能强烈依赖于量子点的尺寸和施主杂质离子的位置。有无内建电场时, 随着施主杂质离子沿量子点生长方向移动, 杂质态结合能有一极大值; 随量子点高度和半径的增加先增大, 达到极大值后逐渐减小。强的内建电场破坏了杂质态结合能关于量子点中心的对称性分布。此外, 我们发现, 当施主杂质局域在量子点上界面附近 ( $z_0 = L/2$ ,  $z_0 =$

$L/4$ ) 时, 杂质态结合能随量子点高度  $L$  的变化趋势不明显。我们把以上结果与以前使用不同尝试波函数计算所得结果做了比较, 由我们选取的两变分参数波函数得到的结果与前人选取的两变分参数波函数得到的结果相比有所改进, 而与选取一个变分参数波函数得到的结果一致。同时我们还计算了体系的维里定理值随量子点半径的变化情况, 所得结果与前人工作结果一致, 说明本文选取的两变分参数波函数能很好地描述纤锌矿柱形量子点中施主杂质态的运动。目前有关 GaN/A<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N 量子点中施主杂质态的实验结果仍然缺乏, 我们希望文中的计算结果能对 II 族氮化物材料的理论研究和器件应用提供有益的信息。

## 参 考 文 献:

- [ 1 ] Zhao F Q, Sa R L, Wu R T Y. Energy level of a hydrogenic impurity in nitride parabolic quantum well [ J ]. *Chin. J. Luminescence* (发光学报), 2005, **26**(6): 719-722 ( in Chinese).
- [ 2 ] Zhang M, Ban S L. Pressure influence on the Stark effect of impurity states in a strained wurtzite GaN/A<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N heterojunction [ J ]. *Chin. Phys. B*, 2009, **18**(10): 4449-4455
- [ 3 ] Zhang M, Ban S L. Screening influence on the Stark effect of impurity states in strained wurtzite GaN/A<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N heterojunctions under pressure [ J ]. *Chin. Phys. B*, 2009, **18**(12): 5437-5442
- [ 4 ] Wu H T, Wang H L, Jiang L M, et al. The electric field effect on binding energy of hydrogenic impurity in zinc-blende GaN/A<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N spherical quantum dot [ J ]. *Phys. B*, 2009, **404**(1): 122-126
- [ 5 ] Wu H T, Wang H L, Jiang L M. Effect of different effective mass and electric field on the electronic structure in GaN/A<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N spherical quantum dot [ J ]. *Acta Phys. Sin.* (物理学报), 2009, **58**(1): 465-470 ( in Chinese).
- [ 6 ] Xia C X, Jiang F C, Wei S Y, et al. Hydrogenic impurity in zinc-blende GaN/A<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N quantum dot [ J ]. *Microelectr. J.*, 2007, **38**(6-7): 663-666
- [ 7 ] Zheng D M, Dai X Q. Binding energy of a hydrogenic-like impurity in GaN/A<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N quantum dots [ J ]. *J. Guizhou Normal University* (Natural Sciences) (贵州师范大学学报, 自然科学版), 2006, **24**(1): 64-68 ( in Chinese).
- [ 8 ] Zheng D M, Wang Z C. Influence of an impurity on the binding energy for an cylindrical quantum dot [ J ]. *J. Hebei Normal University* (Natural Science Edition) (河北师范大学学报, 自然科学版), 2009, **33**(2): 193-197 ( in Chinese).
- [ 9 ] Xia C X, Wei S Y, Zhao X. Built-in electric field effect on hydrogenic impurity in wurtzite GaN/A<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N quantum dot [ J ]. *Appl. Surf. Sci.*, 2007, **253**(12): 5345-5348
- [ 10 ] Dai X Q, Huang F Z, Zheng D M. Influence of Al content on exciton confined in GaN/A<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N quantum dots [ J ]. *Chin. J. Semicond.* (半导体学报), 2005, **26**(4): 697-701 ( in Chinese).
- [ 11 ] Shi J J, Gan Z Z. Effects of piezoelectricity and spontaneous polarization on localized excitons in self-formed InGaN quantum dots [ J ]. *J. Appl. Phys.*, 2003, **94**(1): 407-415
- [ 12 ] Goff S L, Stebe B. Influence of longitudinal and lateral confinements on excitons in cylindrical quantum dots of semiconductors [ J ]. *Phys. Rev. B*, 1993, **47**(3): 1383-1391
- [ 13 ] Koh T S, Feng Y P, Xu X, et al. Excitons in semiconductor quantum discs [ J ]. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2001, **13**(7): 1485-1498
- [ 14 ] Xu X, Feng Y P. Excitons in coupled quantum dots [ J ]. *J. Phys. Chem. Solids*, 2003, **64**(11): 2301-2306
- [ 15 ] Levinshtein M E, Rumyantsev S L, Shur M S. *Properties of Advanced Semiconductor Materials* (Translated by Yang S R, Yin J Z) [ M ]. Beijing: Chemistry Industry Press, 2003, 1: 42-66 ( in Chinese).

- [16] Wang H, Farias G A, Freire V N. Interface related exciton energy blue shift in GaN/Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N zinc blende and wurtzite single quantum wells [J]. *Phys Rev B*, 1999, **60**(8): 5705-5713.
- [17] Angerer R, Bunner D, Freudenberg F, *et al*. Determination of the Al mole fraction and the band gap bowing of epitaxial Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N films [J]. *Appl Phys Lett*, 1997, **71**(11): 1504-1506.
- [18] Vurgaftm 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): 5815-5873.
- [19] Martin G, Botchkarev A, Rockett A, *et al*. Valence band discontinuities of wurtzite GaN, AlN, and InN heterojunctions measured by X-ray photoemission spectroscopy [J]. *Appl Phys Lett*, 1996, **68**(26): 2541-2543.

## Hydrogenic Donor Impurity States in a Cylindrical Wurtzite GaN Quantum Dot

ZHENG Dongmei, WANG Zong-chi, XIAO Rong-hui

(Department of Physics and Electromechanical Engineering, Sannong University, Sannong 365004, China)

**Abstract** Based on the framework of effective mass approximation and variational approach, the binding energy of a hydrogenic donor impurity state is investigated theoretically as functions of the impurity position and the quantum dot size by employing a trial wavefunction with two variational parameter for a cylindrical wurtzite GaN/Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N quantum dot(QD) with finite potential barriers. The numerical results show that the donor binding energy of the hydrogenic impurity is highly dependent on the impurity position and QD size. When the built-in electric field is ignored or considered, the donor binding energy has a maximum value with moving the impurity position along the growth direction. The donor binding energy increases firstly, reaches a maximum value, then decreases with increasing the height and the radius of QDs. The strong built-in electric field induces an asymmetrical distribution of the donor binding energy with respect to the center of the QD. In particular, we find that the donor binding energy is insensitive to the dot height when the impurity is located near the top boundary ( $z_0 = L/2$ ,  $z_0 = L/4$ ) of the WZ GaN/Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N QD. And we compare the above results with previous calculation results using different trial wavefunction. The present results using two variational parameter wavefunction is better than the results given by previous two-parameter wavefunction. A good agreement between the present results using two variational parameter wavefunction and the results of the wavefunction with one variational parameter is found. Using the binding energy obtained from the present calculations, we further calculate the virial theorem number as a function of the quantum dot radius. Our present result coincides with the previous finding, so we may say that the present trial wavefunction with two variational parameter can describe better the internal motion of hydrogenic donor impurity state in the cylindrical wurtzite QD.

**Key words** cylindrical quantum dot; hydrogenic donor impurity; built-in electric field; virial theorem number

**CLC number** O471.1

**PACS** 71.55.-i; 71.55.Eq

**PACC** 7155G; 7320D

**Document code** A