文章编号：1000-7032(2012)11-1198-06

外场下压力及屏蔽对无限深量子阱中施主结合能的影响

刘 贺，温淑敏*，赵春旺，哈斯花
（内蒙古工业大学 理学院物理系，内蒙古 呼和浩特 010051）

摘要： 考虑外加磁场、压力及屏蔽效应，利用变分方法数值计算 $GaN/Al_xGa_{1-x}N$ 无限深量子阱系统中的杂质态结合能。给出结合能随磁场和阱宽的变化关系，同时讨论了有无屏蔽时的区别。结果表明：在磁场和压力作用下，结合能随阱宽的增大而减小；阱宽和压力一定时，结合能随磁场的增大而增大。屏蔽效应使得有效库仑吸引作用减弱而导致杂质态结合能显著下降。屏蔽效应对结合能的影响随压力增大而增强，随磁场强度增大而减弱。

关 键 词： 量子阱；压力；外磁场；屏蔽；结合能
中图分类号： O471.3 **文献标识码：** A **DOI：** 10.3788/fgxb20123311.1198

Hydrostatic Pressure and Screening Influence on Binding Energies of Impurity in Quantum Wells with Infinite Barriers Under An External Magnetic Field

LIU He, WEN Shu-min*, ZHAO Chun-wang, HA Si-hua
(*Department of Physics, Inner Mongolia University of Technology, Hohhot* 010051, *China*)
* *Corresponding Author, E-mail: wsm1973a@126.com*

Abstract: Considering the hydrostatic pressure and screening effect on the $GaN/Al_xGa_{1-x}N$ quantum well with infinite barriers under an external magnetic field. The variational methods are used to numerical calculation the binding energies of the impurity in the system. The relations between the binding energies of donors with magnetic field strength and well width is given. We also discussed the difference between the cases with and without screening. The resultds indicate that the binding energy increases with the well width under a fixed magnetic field strength and pressure. The results also show that the binding energy increases with the magnetic field strength for a given well width and pressure. Because of the screening reduce coulomb interaction effectively, the binding energy of impurity states decreases significantly. Screening effect increases with the pressure and decreases with the magnetic field strength.

Key words: quantum well; pressure; external magnetic field; screening; binding energy

收稿日期： 2012-06-29；**修订日期：** 2012-09-24
基金项目： 国家自然科学基金(11062008)；教育部新世纪优秀人才支持计划(NCET-10-D909)；内蒙古工业大学校基金(ZD201220)；内蒙古自治区自然科学基金(2010BS0102)资助项目
作者简介： 刘贺(1987－)，男，安徽阜阳人，主要从事半导体光电方面的研究。
E-mail：505318759@qq.com

1　引　　言

GaN 是一种技术比较成熟的第三代半导体材料，在光电子器件、高频大功率器件和高频微波器件中有着广泛的应用。氮化物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。氮化物材料的稳定相为纤锌矿结构，与纤锌矿相比较，闪锌矿结构的氮化物材料属于亚稳态的结构相，在实际晶体生长中不容易获得，或者形成的晶体质量不佳。但是，闪锌矿结构的氮化物材料及其层状结构因为对称性好、易于掺杂、载流子浓度高、声子散射低等特点，在一些光电器件的制备上具有很多优越性[1-4]。

杂质对材料的光电性能有很大的影响。Bastard[5]首先采用变分法研究了无限深势阱中的施主态，Elangovan 等[6-7]分析了强磁场及压力对半导体低维系统中束缚极化子的影响，Hollox 等[8]讨论了磁场强度的变化对半导体异质结构中杂质态结合能的影响。量子阱系统中杂质态结合能随压力[9-12]、屏蔽效应[10,13]和外电场的变化关系以及磁场对异质结系统中杂质态的影响[14]等也得到了深入的研究。但迄今为止，同时考虑磁场、压力及屏蔽对无限深势垒方阱中杂质态结合能影响的报道还很少。

本文采用变分法讨论了磁场下压力及屏蔽效应对无限深量子阱中施主结合能的影响，对 GaN/$Al_xGa_{1-x}N$ 量子阱系统进行了数值计算，分析了量子阱中施主结合能随磁场、阱宽的变化趋势以及有无屏蔽时的区别。结果表明：一方面，当磁场固定时，给定不同压力，施主结合能随阱宽的增大而减小，且压力越大结合能越大；另一方面，当阱宽固定时，给定不同压力，结合能随磁场的增大而增大，同样压力越大结合能也越大。屏蔽效应使得有效库仑吸引作用减弱而导致杂质态结合能显著下降。

2　理论模型

考虑阱宽为 $2d$ 的 GaN/$Al_xGa_{1-x}N$ 量子阱系统，阱材料为 GaN，填充在 $|z|\leqslant d$ 的区域；垒材料为 $Al_xGa_{1-x}N$，填充在 $|z|>d$ 的区域。这里选取两种材料的界面为 x-y 平面，量子阱沿着 z 轴方向生长，即 z 轴垂直于量子阱界面。将坐标原点选在量子阱的中心，并且沿着 z 轴方向施加磁场 $\boldsymbol{B}$，其矢量势 $\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})$。考虑电量为 e 的施主杂质位于阱内 $(0,0,z_0)$ 处，则外加磁场下的电子与杂质系统的哈密顿量为

$$H=H_e+H_c, \tag{1}$$

上式中 H_e 的具体形式为

$$H_e=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2+V(z)+\frac{e}{2m_e}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L})+\frac{e^2A^2}{2m_e}, \tag{2}$$

其中 m_e 为电子的有效质量，$\boldsymbol{L}$ 为角动量，$V(z)$ 是量子阱势垒，其满足关系

$$V(z)=\begin{cases}0, & |z|\leqslant d\\ \infty, & |z|>d\end{cases}, \tag{3}$$

式(1)中 H_c 表示电子与杂质的库仑相互作用，其形式为

$$H_c=-\frac{e^2}{\varepsilon_0\sqrt{\rho^2+(z-z_0)^2}}, \tag{4}$$

当考虑屏蔽效应时，H_c 的形式应该为

$$H_c=-\frac{e^2}{\varepsilon_0\sqrt{\rho^2+(z-z_0)^2}}f(r), \tag{5}$$

式中 ε_0 是与材料有关的介电常数，$f(r)$[15]是屏蔽因子。在准二维情况下，经傅立叶变换后，屏蔽因子 $f(r)$ 的形式为 $V(\boldsymbol{q})=-4\pi e^2/\varepsilon(Q)\boldsymbol{q}^2$。这里 $\boldsymbol{q}$ 为波矢量，依赖于 x-y 方向二维波矢 $\boldsymbol{Q}$ 的托马斯-费米项可选为[15]

$$\varepsilon(Q)=1+\frac{2}{a_BQ}G(Q)F(Q), \tag{6}$$

上式中，$a_B=\varepsilon_0\hbar^2/me^2$ 为有效玻尔半径。式(6)中

$$G(Q)=\begin{cases}1 & Q<2Q_F\\ 1-[1-(2Q_F/Q)^2]^{\frac{1}{2}} & Q>2Q_F\end{cases}, \tag{7}$$

这里，二维费米波矢满足 $Q_F=(2\pi n_s)^{1/2}$，n_s 为电子面密度。屏蔽因子 $F(Q)$ 的表达式为

$$F(Q)=\iint \mathrm{d}z\mathrm{d}z'\,|\varphi_0(z)|^2e^{-Q|z-z'|}|\varphi_0(z')|^2, \tag{8}$$

其中 $\varphi_0(z)$ 为电子在 z 方向的波函数。

我们利用变分法计算杂质态的结合能，选取如下形式的试探波函数

$$|\varphi\rangle=\begin{cases}\varphi_0(z)\exp[-(x^2+y^2)/8a^2]\exp[-z^2/8b^2] & |z|\leqslant d\\ 0 & |z|>d\end{cases}, \tag{9}$$

式中 a 与 b 是变分参数，$\varphi_0(z)$ 表示无限深量子阱中的电子基态波函数，其形式为

$$\varphi_0(z) = N_0\cos\left(\frac{\pi z}{L}\right), \tag{10}$$

上式中的 N_0 是归一化常数。根据电子波函数，利用变分法，通过式(1)对 a 和 b 的变分极小给出磁场作用下杂质态的变分能量，如下所示

$$E_v = \min_{a,b}\frac{\langle \Phi | H | \Phi\rangle}{\langle \Phi | \Phi\rangle} = R_1 + R_2 + R_3 + E_C, \tag{11}$$

杂质态的结合能为

$$E_B = E_{\text{free}} - E_v, \tag{12}$$

式中的 E_{free} 表示在磁场下无库仑相互作用时的自由电子能量。(11)式右侧各项表达式分别为

$$R_1 = \frac{\langle \Phi | -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 | \Phi\rangle}{\langle \Phi | \Phi\rangle}, \tag{13}$$

$$R_2 = \frac{\langle \Phi | \frac{e}{2m_e}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}) | \Phi\rangle}{\langle \Phi | \Phi\rangle} = 0, \tag{14}$$

$$R_3 = \frac{\langle \Phi | \frac{e^2A^2}{2m_e} | \Phi\rangle}{\langle \Phi | \Phi\rangle} = \frac{e^2B^2a^2}{2m_e}, \tag{15}$$

$$E_C = \frac{\langle \Phi | H_c | \Phi\rangle}{\langle \Phi | \Phi\rangle}, \tag{16}$$

将(4)式中的 H_c 代入式(16)可得

$$E_C = \frac{\langle \Phi | -\frac{e^2}{\varepsilon_0\sqrt{\rho^2 + (z - z_0)^2}} | \Phi\rangle}{\langle \Phi | \Phi\rangle}, \tag{17}$$

将式(5)中的 H_c 代入式(16)可得

$$E_C = \frac{\langle \Phi | -\frac{e^2}{\varepsilon_0\sqrt{\rho^2 + (z - z_0)^2}} f(r) | \Phi\rangle}{\langle \Phi | \Phi\rangle}. \tag{18}$$

3 物理参数的压力影响

半导体材料的能带间隙、电子有效质量、介电常数和晶格振动频率等参数都将因有压力的作用而相应的发生变化。

(1)禁带宽度的压力系数

$$E_g(P) = E_g + \alpha P, \tag{19}$$

式中 E_g 是材料在常压下的能隙，单位为 meV；P 是压力，单位为 GPa；α 是能隙的压力系数。

(2)电子有效质量的压力系数

$$\frac{m_0}{m(P)} = 1 + \frac{C}{E_g(P)}, \tag{20}$$

式中 m_0 是自由电子的质量，$m(P)$ 是在压力 P 作用下的电子的有效质量，C 是不随压力变化而只与材料有关的常数。

(3) 介电常数的压力系数

高频介电常数随压力的变化关系为

$$\varepsilon_\infty(P) = 1 + [\varepsilon_\infty(0) - 1]e^{-\frac{5}{3B}(0.9 - f_i)P}, \tag{21}$$

式中的 f_i 是材料的电离度，$\varepsilon_\infty(P)$ 是高频介电常数。

静态介电常数与高频介电常数的关系由 LST 关系确定如下

$$\varepsilon_0(P) = \varepsilon_\infty(P)(\hbar\omega_{LO}/\hbar\omega_{TO})^2. \tag{22}$$

4 数值计算与结果讨论

为了分析讨论磁场作用下压力和屏蔽效应对无限深量子阱中杂质态结合能的影响，我们利用变分方法数值计算了闪锌矿结构的 GaN/$Al_xGa_{1-x}N$量子阱中的杂质态结合能。对于 GaN/$Al_xGa_{1-x}N$ 量子阱系统，由于在压力 $P \leqslant 4$ GPa 时，GaN 为直接带隙半导体，因此我们的计算只在压力为 0 ~ 4 GPa 的范围内进行。表 1 中列出了计算中所需的参数，计算结果如图 1 和图 2 所示。

首先讨论在外加磁场作用下，压力不同时的杂质态结合能随阱宽的变化关系，同时考虑有无屏蔽时的区别。

图 1 中的(a)、(b)、(c)三幅图对应的压力 $P = 0, 2, 4$ GPa，同时分别给出了外加磁场 $B = 0$ 和

表 1 数值计算中用到的参数

Table 1 Parameters used in the computation

	ε_∞	$\hbar\omega_{LO}$	$\hbar\omega_{TO}$	m_e	f_i	B_0	B_0'	E_g	α	γ_{LO}	γ_{TO}
GaN	5.41(1)	92.99(3)	69.43(3)	0.19(4)	0.5(5)	2054(6)	4.6(6)	3.3(4)	3.6(6)	1.02(3)	1.19(3)
AlN	4.46(2)	112.5(3)	82.08(3)	0.33(4)	0.499(5)	2158(6)	4.2(6)	6.0(4)	4.7(6)	0.89(3)	1.14(3)

(1) Karch 等[16]，(2) Karch 等[17]，(3) Wagner 等[18]，(4) Wang 等[19]，(5) Phillips[20]，(6) Wei 等[21]。

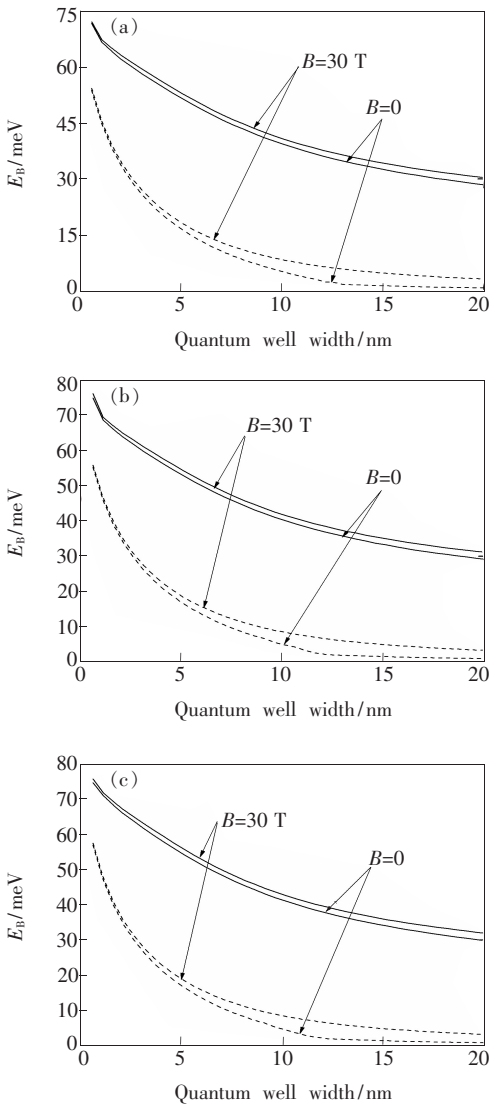

图 1　(a) $P=0$，(b) $P=2$ GPa，(c) $P=4$ GPa 时，杂质态结合能随阱宽的变化关系。虚(实)线分别为有(无)屏蔽的结果，磁场强度分别为 $B=0$ 和 $B=30$ T。

Fig. 1　Dashed (solid) line is the result with (without) screening effect. The donor binding energies as functions of the well width for the given pressure (a) $P=0$, (b) $P=2$ GPa, (c) $P=4$ GPa, and the magnetic field strength are $B=0$ and $B=30$ T.

$B=30$ T 时，闪锌矿结构的 GaN/$Al_xGa_{1-x}N$ 量子阱中杂质态结合能随阱宽的变化关系。其中每幅图中的实线表示未考虑屏蔽时的结合能，虚线表示计入屏蔽以后结合能的变化情况。

当阱宽 $d=15$ nm，磁场强度分别为 0，30 T 时，在图 1(a) 中压力 $P=0$，屏蔽效应使结合能分别降低了约 95.37% 和 85.63%；在图 1(b) 中压力 $P=2$ GPa，屏蔽效应使结合能分别降低了约 95.50% 和 85.99%；在图 1(c) 中压力 $P=4$ GPa，屏蔽效应使结合能分别降低了约 95.63% 和 86.33%。结果显示，屏蔽效应有效地降低了杂质态结合能，这是由于屏蔽使得有效库仑吸引作用减弱所导致。当磁场和压力大小确定时，结合能随阱宽的变化趋势基本相同，在整个研究的阱宽范围内，都随着阱宽的增大而减小，这是由于随着阱宽的不断增大，电子与杂质间的库仑相互作用相对减弱而导致的。无论是否考虑屏蔽，结合能在窄阱时都快速减小，原因在于随着阱宽的逐渐减小，电子在 z 方向的量子效应逐渐增强。

下面讨论了不同阱宽时，在压力作用下，杂质态结合能随磁场的变化关系，同时考虑有无屏蔽时的区别。

图 2 中的(a)和(b)对应阱宽 $d=5$ nm，(c)和(d)对应阱宽 $d=15$ nm，同时分别给出了外加压力 $P=0$ 和 $P=4$ GPa 时，量子阱中杂质态结合能随磁场的变化关系。同样，每幅图中的实线表示未考虑屏蔽时的结合能，虚线表示计入屏蔽以后结合能的变化情况。

结果显示，当阱宽和压力的大小确定时，结合能随磁场的增大而线性增加，这与前人的研究结果相符合[14]。这是由于：在没有外加磁场作用时，x-y 平面内的电子与杂质只有库仑势的作用，z 方向的运动分量由于受到量子阱界面势垒及库仑势的综合作用而被束缚在 GaN 阱中。当施加外界磁场时，x-y 平面内的电子将沿着磁场所致的量子化轨道运动，因为回旋频率 ω 随着磁场强度的增强而增大，其对电子的束缚性增强，使得电子波函数局限性更强，从而导致结合能随磁感应强度的增强呈递增趋势。并且随着磁场强度的增大，量子化轨道中平均所能容纳的电子数明显的增多，从而导致量子化轨道的减少，电子波函数被局限在更小的范围内，这也使得结合能随磁感应强度的增强呈递增趋势。当不考虑屏蔽，阱宽分别为 5 nm 和 15 nm，压力为 0 时，随着磁场强度由 0 增大到 30 T，结合能分别增加了 2.62% 和 5.09%；压力为 4 GPa 时，随着磁场强度由 0 增大到 30 T，结合能分别增加了 2.75% 和 5.33%。当考虑屏蔽时，无论压力为 0 还是 4 GPa，随着磁场强度由 0 增大到 30 T，阱宽 $d=15$ nm 时结合能的增加都要比 $d=5$ nm 时显著。由以上的数据分析可知：屏蔽效应随着压力的增大而增大，这也与前

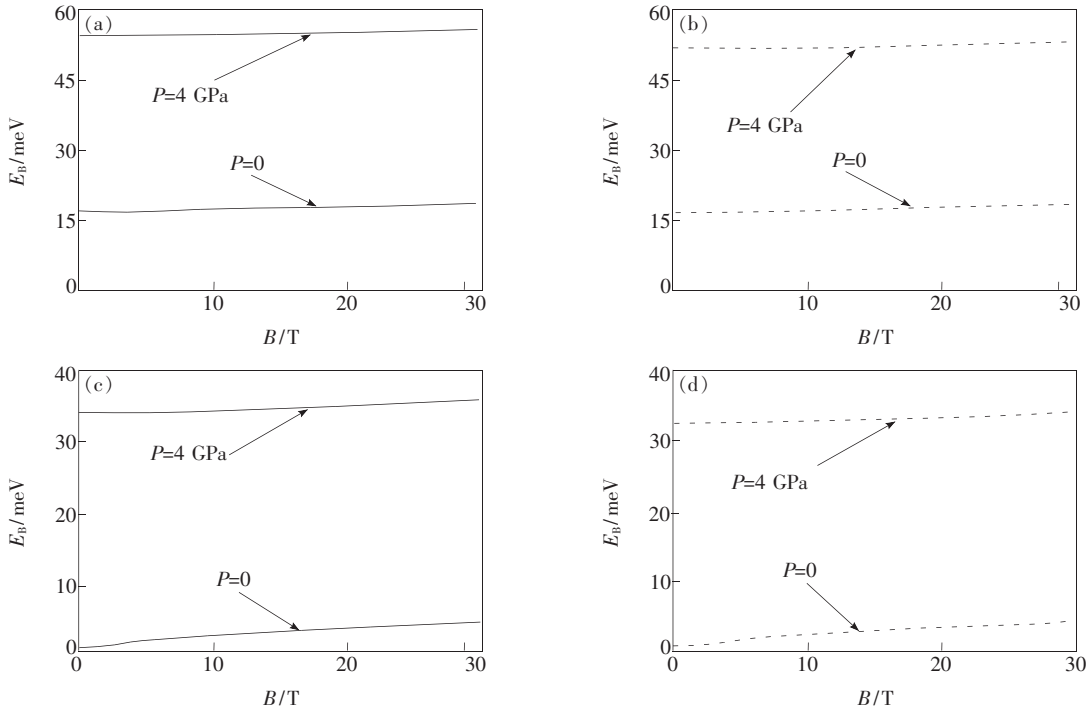

图2 (a)和(b)阱宽 $d=5$ nm,(c)和(d)阱宽 $d=15$ nm 时,压力分别为0和4 GPa,杂质态结合能随磁场的变化关系。虚(实)线分别为有(无)屏蔽的结果。

Fig. 2 The donor binding energies as functions of the magnetic field strength for the given well width (a) and (b) $d=5$ nm, (c) and (d) $d=15$ nm, and the hydrostatic pressure are 0 and 4 GPa. Dashed (solid) line is the result with (without) screening effect.

面固定磁场和压力时的分析结果相吻合;另外,屏蔽效应对结合能的影响随磁场强度增大而减弱;且宽阱时屏蔽效应对结合能的影响较窄阱时要明显。如考虑屏蔽效应,固定压力 $P=4$ GPa,磁场强度 $B=0$ 和 $B=30$ T,当阱宽 $d=5$ nm 时,结合能比未考虑屏蔽时分别降低了68.91%、66.35%;当阱宽 $d=15$ nm 时,结合能比未考虑屏蔽时分别降低了95.63%、86.38%。

5 结 论

研究了在不同外加磁场作用下,压力及屏蔽效应对无限深量子阱中杂质态结合能的影响。利用变分法数值计算了闪锌矿结构的无限深 GaN/$Al_xGa_{1-x}N$ 量子阱中的杂质态结合能,给出了结合能随磁场强度、阱宽的变化关系,同时考虑了有无屏蔽时的区别。结果表明:随着阱宽的增大,电子与杂质间的库仑相互作用减弱,使得杂质态结合能随阱宽的增大而减小。当在 z 方向施加磁场时,电子在 x-y 平面内沿着磁场所致的量子化轨道运动,对电子的束缚性增强,使得电子波函数局限性更强,从而导致结合能随磁感应强度的增强呈递增趋势。考虑压力对半导体材料的能带间隙、电子有效质量、材料的介电常数和晶格振动频率等参数的影响后,结合能随压力的增大而增大。屏蔽能明显削弱库仑势的吸引作用,有效降低了杂质态结合能,且阱宽愈宽则屏蔽效应愈明显。屏蔽效应对结合能的影响随磁场强度的增大而减弱,随压力的增大而增强。上述结果说明,分析屏蔽效应对结合能的影响时,要综合考虑磁场和压力的作用。

参 考 文 献:

[1] Thompson M P, Auner G W, Zheleva T S, *et al.* Deposition factors and band gap of zinc-blende AlN [J]. *J. Appl. Phys.*, 2000, 89(6):3331-3336.

[2] Lemos V, Silveira E, Leite J R, *et al.* Evidence for phase-separated quantum dots in cubic InGaN layers from resonant

Raman scattering [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, 84(16):3666-3669.

[3] Park S H, Chuang S L. Comparison of zinc-blende and wurtzite GaN semiconductors with spontaneous polarization and piezoelectric field effects [J]. *J. Appl. Phys.*, 2000, 87(1):353-364.

[4] Li Z Y, Wang M, Su X Y, *et al.* First-principles study on electron structure and light absorption of the blende $Ga_{1-x}Al_xN$ systems [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2010, 31(4):521-526 (in Chinese).

[5] Bastard G. Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model [J]. *Phys. Rev.* B, 1981, 24(8):4714-4722.

[6] Elangovan A, Navaneethakrishnan K. Binding energy of a bound polaron in strong magnetic fields in low-dimensional semiconductor systems [J]. *J. Phys.: Condens. Matter*, 1993, 5(24):4021-4028.

[7] Elangovan A, Navaneethakrishnan K. Pressure dependence of the diamagnetic susceptibility of a donor in low-dimensional semiconductor systems [J]. *Phys. Rev.* B, 1993, 48(11):7986-7990.

[8] Hollox D M, Antoniewicz P R. Bound state of an external impurity at a semiconductor-semiconductor interface in the presence of a magnetic field [J]. *Phys. Rev.* B, 1986, 33(12):8558-8563.

[9] Zhao G J, Liang X X, Ban S L. Binding energies of donors in quantum wells under hydrostatic pressure [J]. *Phys. Lett.* A, 2003, 319(1-2):191-197.

[10] Wen S M, Ban S L. Screening influence on binding energies of donors in quantum wells with finite barriers under hydrostatic pressure [J]. *J. Semiconductors* (半导体学报), 2006, 27(1):63-67 (in Chinese).

[11] Wen S M, Zhao C W, Wang X J. Pressure effect on the binding energies of donors in strained GaN/AlGaN quantum well [J]. *J. Func. Mater.* (功能材料), 2010, 41(1):97-100 (in Chinese).

[12] Wen S M, Ban S L. Influence of polaronic effect on binding energies of donors in quantum wells with finite barriers under hydrostatic pressure l [J]. *J. Semiconductors* (半导体学报), 2007, 28(6):848-855 (in Chinese).

[13] Cao Y L, Ban S L. Screening influence on the binding energy of a donor in a GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ heterojunction system [J]. *Acta Scientiarum Naturalium Universitatis Neimongol* (内蒙古大学学报), 2001, 32(4):392-396 (in Chinese).

[14] Zhang M, Ban S L. Impurity states in semiconductor GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ heterojunctions with an external magnetic field [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2004, 25(4):369-374 (in Chinese).

[15] Ban S L, Hasbun J E. Level in a quasi-two dimensional heterojunction system [J]. *Solid State Commun.*, 1999, 109(2):93-98.

[16] Karch K, Bechstedt F, Pletl T. Lattice dynamics of GaN: Effects of 3d electrons [J]. *Phys. Rev.* B, 1997, 56(7):3560-3563.

[17] 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.

[18] 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.

[19] Wang H, Farias G A, Freire V N. Interface related exciton energy blue shift in GaN/$Al_xGa_{1-x}N$ zinc blende and wurtzite single quantum wells [J]. *Phys. Rev.* B, 1999, 60(8):5705-5713.

[20] Phillips J C, Lucovsky G. *Bonds and Bands in Semiconductors* [M]. 2nd Edition, New York: Momentum Press, 1973: 125-129.

[21] Wei S H, Zunger A. Predicted band-gap pressure coefficients of all diamond and zincb-lende semiconductors [J]. *Phys. Rev.* B, 1999, 60(8):5404-5411.