

量子尺寸效应对 InGaN/GaN 量子点中的类氢杂质态的影响

蒋逢春, 苏玉玲, 李俊玉

(郑州轻工业学院 技术物理系, 河南 郑州 450002)

摘要:在有效质量近似下,运用变分法研究了量子尺寸效应对闪锌矿 InGaN/GaN 量子点中类氢杂质的施主束缚能的影响.数值结果显示,类氢杂质的施主束缚能在很大程度上依赖于杂质位置和量子点结构参数,当杂质位于量子点中心时,施主束缚能最大;当量子点尺寸增加时,位于该量子点任一位置处的杂质束缚能均降低.

关键词:InGaN/GaN;量子点;类氢杂质态;变分法;量子尺寸效应;束缚能
中图分类号:0471.4 **文献标志码:**A

Quantum size effect on hydorgenic impurity states in zinc-blende InGaN/GaN quantum dot

JIANG Feng-chun, SU Yu-ling, LI Jun-yu

(Dept. of Tech. Phy., Zhengzhou Univ. of Light Ind., Zhengzhou 450002, China)

Abstract:Based on the effective-mass approximation, the quantum size effect on binding energy of hydorgenic impurity states in zinc-blende InGaN/GaN quantum dot was investigated by means of variational method. Numerical results showed that the donor binding energy of hydorgenic impurity depended on the impurity position and quantum dot structure in a large extent. The donor binding energy of impurity located at the center of quantum dot was the largest. Impurity donor binding energy decreased when quantum dot height and radius increase for any impurity position.

Key words:InGaN/GaN; quantum dot; hydorgenic impurity state; variational method; quantum size effect; binding energy

0 引言

近年来,由于氮化物基高效光电子器件的应用,闪锌矿 GaN 及其合金低维结构的研究受到越来越广泛的关注^[1-2].研究表明,在闪锌矿氮化物的异

质结构中,在(001)生长方向生长的闪锌矿 GaN 基异质结构中的压电极化场可以忽略^[3].因此,内建电场是闪锌矿 InGaN/GaN 量子异质结构的一个物理特性的结论不存在.此外,闪锌矿氮化物的带隙还低于钎锌矿结构的带隙,所以在含 In 量较低的闪

收稿日期:2011-11-14

基金项目:河南省基础与前沿技术研究计划项目(102300410108);河南省教育厅自然科学研究计划项目(2011A140028);郑州轻工业学院重大预研基金项目(2009XYJJ006)

作者简介:蒋逢春(1964—),女,河南省舞阳县人,郑州轻工业学院教授,硕士,主要研究方向为低维半导体结构.

锌矿 InGaN/GaN 垒层中就可以合理地得到 510 nm 的光. 因此, 闪锌矿 InGaN/GaN 量子异质结构因其在光电子应用方面的优势而引起越来越多人的关注^[4]. 最近, 有实验证明, 在闪锌矿 InGaN/GaN 量子异质结构中存在富 In 的团簇, 这些团簇被称为富 In 量子点, 且这些量子点一般可以被认为是三维陷阱^[5], 可用来捕捉 InGaN 活动垒层中的载流子. 由于量子点状对载流子三维受限, 所以闪锌矿 InGaN 量子点基的一些光电子器件的性能可获得很大提高.

众所周知, 杂质态在一些半导体光电子器件中非常重要. 对半导体异质结构的电子态杂质影响的深层理解在半导体物理上是一个基础问题, 因为它们的存在很大程度上改变了量子器件的性能. 在过去的许多年里, 对许多不同材料的球形量子点、立方体量子点和柱形量子点类氢杂质结合能, 曾广泛地进行过理论研究^[6-8]. 这些研究表明, 在纳米级系统中类氢杂质束缚能依赖于材料、量子点的几何结构(大小和形状)和杂质位置. 据笔者所知, 在闪锌矿 InGaN 量子点中类氢杂质态还没有过详细的理论研究. 鉴于此, 本文将运用变分方法研究闪锌矿 InGaN/GaN 量子点中的类氢杂质态.

1 理论模型

本文中, 笔者考虑圆柱型闪锌矿 InGaN/GaN 量子点中的类氢施主杂质态, 径向和点高分别用 R 和 H 表示. 在有效质量近似的框架下, 圆柱型闪锌矿 InGaN/GaN 量子点中类氢施主杂质的哈密顿量可以表示为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}$$

其中

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^{-2}}{2m^*} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(\vec{r}) \quad (1)$$

此处电子与杂质位置之间的距离 $r = \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}$; $x(x_i)$, $y(y_i)$ 和 $z(z_i)$ 是耦合量子点中电子(或空穴)的坐标; e 是绝对电荷量; ϵ_0 是自由空间介电常数; $\bar{\epsilon}$ 是嵌入材料的有效平均相对介电常数; m^* 是电子有效质量; $V(\vec{r})$ 是由闪锌矿 InGaN/GaN 耦合量子点中带阶引起的电子(空穴)束缚势.

为了计算闪锌矿 InGaN/GaN 耦合量子点中类氢施主杂质的基态能, 选择试探波函数^[9]

$$\phi = \psi(\rho, \varphi, z) e^{-\alpha\rho^2 - \beta z^2}$$

其中, α 和 β 是变分参数, $\rho_{ei}^2 = (x-x_i)^2 + (y-y_i)^2$, $z_{ei}^2 = (z-z_i)^2$. 式(1)所描述哈密顿量的本征函数可以写成

$$\psi(\rho, \varphi, z) = f(\rho) h(z) e^{im\varphi} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

其中, m 是角动量量子数, 径向波函数 $f(\rho)$ 可以通过 m 阶贝塞尔函数 J_m 和变型贝塞尔函数 K_m 得到, z 轴波函数 $h(z)$ 可以通过分析函数 $\sin(\xi)$ 和 $\cos(\xi)$ (量子点)及 $\exp(\xi)$ (垒层)的线性组合得到.

闪锌矿 InGaN/GaN 量子点中类氢施主杂质态的能量可通过下面的方程变分得到:

$$E = \min_{\alpha, \beta} \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

施主束缚能 $E_b = E_0 - E$, 其中 E_0 是方程(1)表示的哈密顿量的基态能.

2 数值结果和讨论

图 1 为计算了闪锌矿 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ 量子点中杂质束缚能 E_b 随杂质位置 z_i 的变化关系(量子点高度 $H = 6$ nm, 半径 $R = 10$ nm). 从图 1 可以看出, 当杂质位于量子点的中心位置时, 施主束缚能 E_b 达到最大值. 原因是电子波函数主要在量子点的中心位置. 图 1 表明施主束缚能 E_b 是关于量子点中心对称的, 这是因为电子几率分布是关于量子点中心对称的.

图 2 为闪锌矿 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ 量子点中施主束缚能 E_b 随量子点高度 H 的变化关系(量子点半径 $R = 10$ nm; 曲线 a, b 和 c 分别代表 $z_i = 0, z_i = L/4, z_i = L/2$; 同时考虑了杂质的不同位置). 从图 2 可知, 当把杂质放在量子点中心时, 施主束缚能 E_b 最大. 然而, 当把杂质放在边界时, 施主束缚能 E_b 最小. 原因是电子波函数主要分布在量子点的中心. 图 2 也表明, 在任意位置, 当高度 H 增加时, 施主束缚能 E_b 减小. 这是因为在任意位置, 当高度增加时, 电子与杂质之间的距离也增加.

图 3 为闪锌矿 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ 量子点中施主束缚能 E_b 随量子点半径 R 的变化关系(量子点高度 $H = 6$ nm; 曲线 a, b 和 c 分别代表 $\rho_i = 0, \rho_i = R/2, \rho_i = R$). 图 3 显示, 当把杂质放在量子点中心时施主束缚能 E_b 最大, 当把杂质放在边界时施主束缚能

E_b 最小. 这是因为电子波函数主要分布在量子点的中心. 图 3 也表明在任意位置, 当半径 R 增加, 施主束缚能 E_b 减小. 原因是在任意位置, 当半径 R 增加, 电子与杂质之间的距离也增加.

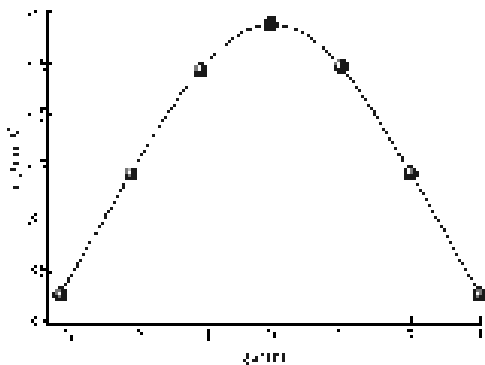


图 1 闪锌矿 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ 量子点中的类氢杂质束缚能 E_b 随杂质位置的变化关系

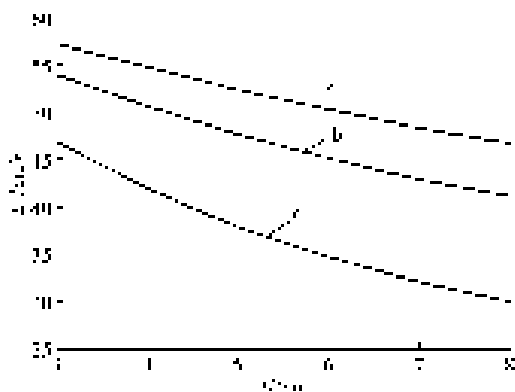


图 2 闪锌矿 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ 量子点中的类氢杂质束缚能 E_b 随量子点高度的变化关系

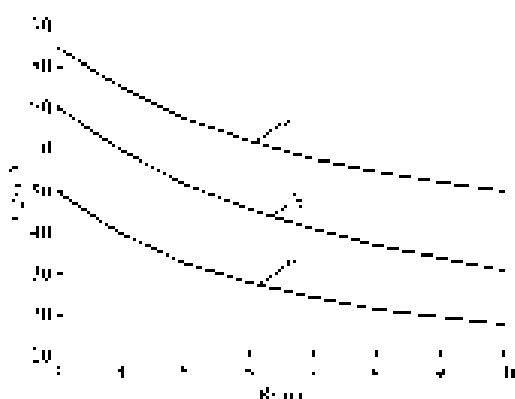


图 3 闪锌矿 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ 量子点中的类氢杂质束缚能 E_b 随量子点半径的变化关系

3 结论

在有效质量近似下, 本文研究了类氢杂质的束缚能 E_b 随闪锌矿 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ 量子点的结构参

数的变化关系, 数值结果显示闪锌矿 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ 量子点中的量子尺寸效应对类氢杂质的束缚能 E_b 有非常明显的影响: 当杂质位于量子点中心时, 束缚能 E_b 达到最大值; 当杂质位于边界时, 束缚能最小. 此外, 当量子点高度(半径)增加时, 类氢杂质的束缚能 E_b 减小. 目前, 在闪锌矿 InGaN 量子点中类氢杂质的实验结果较少, 本文的计算结果或能引发对物理和 III - 氮化物器件应用的进一步研究.

参考文献:

- [1] Zhang M, Shi J. Exciton states and optical transitions in InGaN/GaN quantum dot nanowire heterostructures: Strong built-in electric field and dielectric mismatch effects[J]. J Lumines, 2011, 131:1908.
- [2] Bavencove A, Tourbot G, Garcia J, et al. Submicrometre resolved optical characterization of green nanowire-based light emitting diodes[J]. Nanotechnology, 2011, 22:345705.
- [3] Xia C, Zeng Z, Wei S. Electric field effects on optical properties in zinc-blende InGaN/GaN quantum dot[J]. J Lumines, 2011, 131:623.
- [4] Zhu S, Shi J, Zhang S, et al. Microscopic indium distribution and electron localization in zinc blende InGaN alloys and InGaN/GaN strained quantum wells[J]. Appl Phys B, 2011, 104:3401.
- [5] Caetano C, Teles L K, Marques M. Phase stability, chemical bonds, and gap bowing of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys: Comparison between cubic and wurtzite structures[J]. Phys Rev B, 2006, 74:045215.
- [6] Sahin M. Photoionization cross section and intersublevel transitions in a one- and two-electron spherical quantum dot with a hydrogenic impurity[J]. Phys Rev B, 2008, 77:045317.
- [7] Li S S, Xia J B. Binding energy of a hydrogenic donor impurity in a rectangular parallelepiped-shaped quantum dot: Quantum confinement and Stark effects[J]. J Appl Phys, 2007, 101:093716/1.
- [8] Raigoza N, Morales A L, Montes A, et al. Stress effects on shallow-donor impurity states in symmetrical GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ double quantum wells[J]. Phys Rev B, 2004, 69:045323.
- [9] 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, 94:407.