

纤锌矿氮化物半导体束缚极化子及压力效应*

薛亚光¹ 闫祖威^{1,2,†} 皇甫艳芳¹

(1 内蒙古大学物理系, 呼和浩特 010021)
(2 内蒙古农业大学理学院, 呼和浩特 010018)

摘要: 考虑到纤锌矿结构的氮化物半导体材料的单轴异性, 采用变分法研究了两支异常光学声子 LO-like 和 TO-like 对杂质态结合能的影响, 即极化子效应. 计及电子有效质量, 材料介电常数及晶格振动频率随流体静压力的变化, 讨论了束缚极化子结合能的压力效应. 数值结果表明, 极化子效应使杂质态结合能明显降低, 极化子效应的主要贡献来自杂质态与 LO-like 声子的相互作用. 压力使得结合能增加, 且增强了结合能各向异性.

关键词: 结合能; 极化子; 氮化物半导体

PACC: 6320K; 7138; 7280E

中图分类号: O471.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-4177(2008)08-1535-05

1 引言

近年来, 基于宽带氮化物半导体材料的发光特性, 特别是白光器件的研制, 以及在微电子和光电子器件上的广阔应用前景, 引起了人们极大的兴趣, 此类材料物性的理论和实验研究已成为凝聚态物理领域的研究热点^[1,2]. 由于半导体掺杂对改变材料的电学、光学性质非常重要, 因此对氮化物半导体材料中的杂质态问题也已有较多的研究^[3]. Moore 等人^[4]研究了 GaN 材料中的浅施主杂质的赛曼光谱和结合能问题. Wang 等人^[5]考虑有效质量的各向异性讨论了 GaN 材料中杂质态问题, 结果表明质量的各向异性使得纤锌矿结构中的杂质电离能高于闪锌矿结构中的电离能.

极化子是电子和包裹其周围的声子云相互作用的准粒子态. Frohlich^[6]最早给出了描述这种相互作用的哈密顿量. 大量的极化子理论研究主要集中于闪锌矿结构体系, 但也有一些作者研究了纤锌矿结构单轴异性体系的极化子问题. Mora-Ramos 等人^[7]采用微扰法计算了纤锌矿结构氮化物材料中的极化子结合能和有效质量, 结果表明导带电子和极性光学声子之间的耦合作用很强. 近年来, 我们^[8]采用变分法讨论了纤锌矿结构氮化物材料以及其三元混晶中极化子的自陷能和有效质量, 发现异常声子中类纵光学 (LO-like) 声子对极化子的自陷能和有效质量起主要作用, 材料的结构异性增强了电子-声子相互作用.

大量的研究表明, 流体静力学压力可用来调制材料的能带结构、介电常数、载流子的有效质量、晶格振动 (声子) 频率等, 这将影响材料中电子、杂质态、激子及其与声子的相互作用从而改变其光学性质和电学性质等.

为了了解压力下氮化物的结构和光学性质, 人们做了许多实验和理论研究. Dridi 等人^[9]对压力影响下的纤锌矿结构的氮化物的能带结构问题进行了研究, 发现带隙随压力增大. Aouas 等人^[10]研究了压力对氮化物材料声子模的影响, 结果表明体纵光学声子和体横光学声子的振动频率随压力而提高. 我们^[11]对压力影响下的闪锌矿结构的氮化物半导体材料的表面态进行了研究, 结果表明, 随着压力的增加, 电子表面态能级移动以及电子-声子相互作用明显增大.

通过大量的理论和实验研究, 人们对纤锌矿结构氮化物半导体的性质已有较全面的认识, 但是对该结构中杂质态问题的研究还有待进一步深入, 特别是材料的结构异性对杂质态的影响问题. 本文计入材料的各向异性, 考虑纤锌矿氮化物材料中两支异常声子: 类纵光学 (LO-like) 声子和类横光学 (TO-like) 声子与电子及杂质的作用, 利用改进的 LLP 中间耦合方法处理电子-声子相互作用, 讨论了流体静压力及极化子效应对杂质态结合能的影响.

2 理论模型

对于纤锌矿结构的氮化物半导体材料, 采用 Loudon 模型^[12], 记六角结构的对称轴 c 轴为 z 方向, 与方向有关的介电函数 $\epsilon_{\perp}(\omega)$ 和 $\epsilon_z(\omega)$ 有如下关系:

$$\epsilon_{\perp}(\omega) = \epsilon_{\perp}^{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{\perp L}^2}{\omega^2 - \omega_{\perp T}^2} \quad (1)$$

$$\epsilon_z(\omega) = \epsilon_z^{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{z L}^2}{\omega^2 - \omega_{z T}^2} \quad (2)$$

其中 $\epsilon_{\perp}^{\infty}$ (ϵ_z^{∞}) 是垂直 (平行) 于主轴的高频介电常数; $\omega_{\perp L}$ 和 $\omega_{z L}$ 是纵向 E_1 (LO) 和 A_1 (LO) 声子频率; $\omega_{\perp T}$ 和

* 国家自然科学基金 (批准号: 10564003) 和教育部科学技术研究重点 (批准号: 208025) 资助项目

† 通信作者. Email: zwyang@imau.edu.cn

2008-01-03 收到, 2008-04-09 定稿

ω_{zT} 是横向 E_1 (TO) 和 A_1 (TO) 声子频率. 纤锌矿结构中的异常声子色散关系为^[8,12]

$$\epsilon_{\perp}(\omega)\sin^2\theta + \epsilon_z(\omega)\cos^2\theta = 0 \quad (3)$$

从中解得 LO-like 和 TO-like 两支异常声子的特征频率

$$\omega_L = \omega_{zL}\cos^2\theta + \omega_{\perp L}\sin^2\theta \quad (4)$$

$$\omega_T = \omega_{zT}\sin^2\theta + \omega_{\perp T}\cos^2\theta \quad (5)$$

其中 θ 是声子波矢 \mathbf{q} 与晶格对称轴 c 轴的夹角.

考虑电子被杂质中心所束缚. 杂质产生的势场采取类氢库仑势近似. 束缚电子与异常声子 LO-like 和 TO-like 相互作用. 体系的哈密顿量可以写成

$$H = H_c + H_p + H_i \quad (6)$$

其中 H_c 为未考虑声子影响时的电子杂质态哈密顿量

$$H_c = \frac{p_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + \frac{p_z^2}{2m_z} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{\infty}\sqrt{\rho^2 + z^2}} \quad (7)$$

其中 m_{\perp}, m_z 分别为电子的横向、纵向(垂直、平行 c 轴)有效质量; ϵ_{∞} 为高频介电常数.

H_p 为自由声子哈密顿量

$$H_p = \sum_{jq} \hbar\omega_j a_{jq}^{\dagger} a_{jq} \quad (8)$$

其中 $j = L, T; a_{jq}^{\dagger}, a_{jq}$ 为声子产生、湮灭算符.

H_i 为电子与异常声子 LO-like, TO-like 的相互作用哈密顿量^[8,13], 具有类似于弗留里希哈密顿量形式

$$H_i = \sum_{jq} (G_{jq} (e^{i(\mathbf{q}_{\perp} \cdot \boldsymbol{\rho} + q_z z)} - 1) a_{jq} + \text{h. c.}) \quad (9)$$

其中

$$G_{jq} = \left(\frac{4\pi e^2 \hbar}{V} \right)^{\frac{1}{2}} \times \frac{1}{q} \times \left(\frac{\partial \epsilon_0^j}{\partial \omega_j} \right)^{-1/2} \quad (10)$$

$$\frac{\partial \epsilon_0^j}{\partial \omega_j} = \frac{\partial \epsilon_{\perp}(\omega_j)}{\partial \omega_j} \sin^2\theta + \frac{\partial \epsilon_z(\omega_j)}{\partial \omega_j} \cos^2\theta \quad (11)$$

“-1”项是由于杂质局域在原点位置引入的^[14], 可通过引入如下么正变换消除

$$U_0 = \exp(-i \sum_{jq} (G_{jq} a_{jq}^{\dagger} + G_{jq}^* a_{jq}) / \hbar \omega_j) \quad (12)$$

则哈密顿量变为

$$\begin{aligned} H^* &= U_0^{-1} H U_0 \\ &= \frac{p_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + \frac{p_z^2}{2m_z} - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + z^2}} + \sum_{jq} \hbar\omega_j a_{jq}^{\dagger} a_{jq} + \\ &\quad \sum_{jq} (G_{jq} e^{i(\mathbf{q}_{\perp} \cdot \boldsymbol{\rho} + q_z z)} a_{jq} + \text{h. c.}) \end{aligned} \quad (13)$$

其中

$$\frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{\infty}} - \sum_j \int \frac{1}{\hbar \omega_j} \left(\frac{\partial \epsilon_0^j}{\partial \omega_j} \right)^{-1} \sin\theta d\theta \quad (14)$$

为了计算的方便, 已略去了点电荷 $-\sum_{jq} \frac{|G_{jq}|^2}{\hbar \omega_j}$ 的无穷常数自能项.

为了求解哈密顿量(13)式, 我们采用类 LLP 方法, LLP 方法已经成功地解决了立方(各向同性)极性晶体中的中间耦合极化子问题, 而对于纤锌矿结构, 电子和 LO-like 及 TO-like 两支声子都有相互作用. 为此, 引入下面两个么正变换

$$U_1 = \exp(-i \sum_{jq} a_{jq}^{\dagger} a_{jq} (\mathbf{q}_{\perp} \cdot \boldsymbol{\rho} + q_z z)) \quad (15)$$

$$U_2 = \exp(-i \sum_{jq} a_{jq}^{\dagger} f_j(\mathbf{q}) + a_{jq} f_j^*(\mathbf{q})) \quad (16)$$

其中 移位振幅 $f_j(\mathbf{q})$ 和 $f_j^*(\mathbf{q})$ 为变分参数. 则系统的哈密顿量可以化简为

$$H^{**} = U_2^{-1} U_1^{-1} H^* U_1 U_2 \quad (17)$$

体系的试探波函数可写成如下形式

$$|\Phi\rangle = |r\rangle |0\rangle \quad (18)$$

其中 $|0\rangle$ 为零声子态波函数; $|r\rangle$ 为杂质态波函数, 选择类氢基态形式

$$|r\rangle = A e^{-\left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}\right)^{\frac{1}{2}}} \quad (19)$$

其中 A 为波函数的归一化系数; a 和 b 为变分参数.

哈密顿量(17)式在零声子态 $|0\rangle$ 下的期望值为

$$\begin{aligned} E(\mathbf{P}) &= \langle 0 | H^{**} | 0 \rangle = \frac{1}{2m_{\perp}} \mathbf{P}_{\perp}^2 + \frac{1}{2m_z} P_z^2 - \\ &\quad \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + z^2}} + \sum_{jq} [G_{jq} f_j(\mathbf{q}) + G_{jq}^* f_j^*(\mathbf{q})] + \\ &\quad \sum_{jq} |f_j(\mathbf{q})|^2 \left(\hbar \omega_j - \frac{\hbar}{m_{\perp}} \mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{P}_{\perp} - \right. \\ &\quad \left. \frac{\hbar}{2m_z} q_z P_z + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + \frac{\hbar^2 q_z^2}{2m_z} \right) + \\ &\quad \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \left[\sum_{jq} |f_j(\mathbf{q})|^2 \mathbf{q}_{\perp} \right]^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z} \left(\sum_{jq} |f_j(\mathbf{q})|^2 q_z \right) \end{aligned} \quad (20)$$

于是, 得到体系的基态能量

$$E_g = \langle r | E(\mathbf{P}) | r \rangle \quad (21)$$

根据变分原理, $f_j(\mathbf{q})$ 和 $f_j^*(\mathbf{q})$ 由 $E(\mathbf{P})$ 极小值条件确定

$$\frac{\partial E(\mathbf{P})}{\partial f_j(\mathbf{q})} = \frac{\partial E(\mathbf{P})}{\partial f_j^*(\mathbf{q})} = 0 \quad (22)$$

得到束缚极化子的基态能

$$\begin{aligned} E_g &= \iiint e^{-\left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}\right)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m^*} - \frac{1}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + z^2}} \right) e^{-\left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}\right)^{\frac{1}{2}}} \\ &\quad d\rho dz d\theta + \sum_{jq} \frac{|G_{jq}|^2}{\hbar \omega_j + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m}} \end{aligned} \quad (23)$$

束缚极化子基态结合能为

$$E_b = E_{\text{free}} - E_g \quad (24)$$

其中 E_{free} 为自由极化子的基态能量.

声子对杂质态结合能的贡献定义为

$$\Delta E_{\text{ph}} = E_b(\text{with phonon}) - E_b(\text{without phonon}) \quad (25)$$

3 物理参数的压力效应

在流体静压力作用下, 半导体的能隙、电子的有效质量、材料的介电常数以及晶格振动频率等参数均发生变化.

当流体静压力作用于半导体材料时, 其能带结构将发生变化. 在低压下, 对宽带半导体能隙随压力的增加而增大, 是压力 P 的二次函数^[9]:

表 1 计算中所用参数(室温和零外压;能量的单位为 meV;质量以裸电子质量 m_0 为单位)Table 1 Parameters used in the computation (room temperature and zero external pressure; energy is measured in meV; mass in electron rest mass m_0)

Material	E_g	ϵ^0	ϵ_z^0	ϵ_{\perp}^0	$\epsilon_z^{\infty} = \epsilon_{\perp}^{\infty}$	$m_{\perp}^{\dagger} = m_z^*$	$\hbar \omega_{zL}$	$\hbar \omega_{zT}$	$\hbar \omega_{\perp T}$	$\hbar \omega_{\perp L}$
GaN	3390	9.6	10.18	9.36	5.35	0.20	91.10	66.06	69.53	91.97
AlN	6200	9.08	11.72	8.97	4.84	0.30	110.68	71.10	83.42	113.54
InN	1970	13.6	14.70	13.64	8.40	0.12	72.63	54.91	57.88	73.75

表 2 计算中所用纤锌矿氮化物的压力参数(体模量 B_0 的单位为 GPa)
Table 2 Pressure parameters used in the computation for wurtzite nitrides (bulk modulus B_0 in units of GPa)

Material	B_0	B'	γ_{zL}	γ_{zT}	$\gamma_{\perp L}$	$\gamma_{\perp T}$
GaN	237	4.3	1.13	1.5	1.09	1.24
AlN	207.9	6.3	0.93	1.39	1.26	1.57
InN	125.5	12.7	1.43	1.5	1.43	1.5

$$E_g(P) = E_g(0) + \alpha P + \beta P^2 \quad (26)$$

其中 $E_g(0)$ 为材料在 $P=0$ 的能隙,单位为 meV; P 为压力,单位为 GPa; α 和 β 分别为能隙的一阶和二阶压力系数. 根据文献[9]的数据,对 GaN: $\alpha = 31.8 \text{ meV/GPa}$, $\beta = -0.23 \text{ meV/GPa}^2$; AlN: $\alpha = 40.5 \text{ meV/GPa}$, $\beta = -0.19 \text{ meV/GPa}^2$; InN: $\alpha = 18.8 \text{ meV/GPa}$, $\beta = -0.23 \text{ meV/GPa}^2$.

在外加压力作用下,能带结构的变化将导致电子有效质量的变化. 电子的有效质量随压力变化关系

$$\frac{m_0}{m(P)} = 1 + \frac{C}{E_g(P)} \quad (27)$$

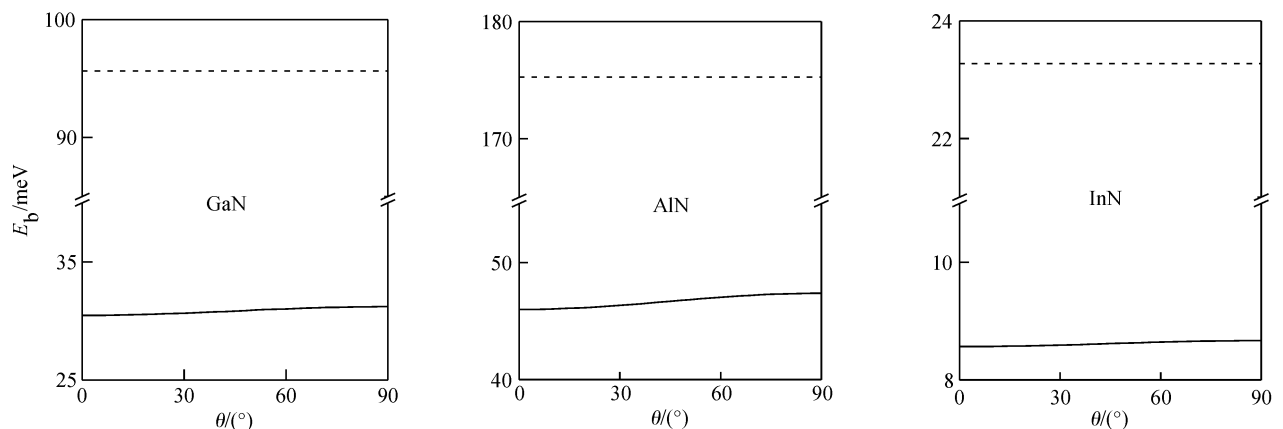
式中 m_0 是自由电子的质量; $m(P)$ 是压力 P 作用下电子的有效质量; C 为 $P=0$ 时只与材料有关的常数. 根据表 1 中 GaN, AlN 和 InN 材料的数据,可以得到 $C = 13.2 \text{ eV (GaN)}$, 14.46 eV (AlN) 和 13.86 eV (InN) .

高频介电常数对压强的依赖关系为[11]:

$$\epsilon_{\infty}(P) = 1 + [\epsilon_{\infty}(0) - 1] \exp\left[-\frac{5}{3B}(0.9 - f_i)P\right] \quad (28)$$

其中 $B = B_0 + B'P$, B 是体弹性模量; $B' = dB/dP$; f_i 是材料的离子性参数.

静态介电常数与高频介电常数的关系则可用 LST

图 1 杂质态结合能随异性角 θ 的函数变化关系 实线和虚线分别表示有/无光子时的结果.Fig. 1 Binding energies of impurity states as functions of the anisotropic angle θ The solid (dashed) curves stand for the results with (without) phonon contributions, respectively.

关系:

$$\epsilon_0(P) = \epsilon_{\infty}(P) \left(\frac{\hbar \omega_{LO}}{\hbar \omega_{TO}} \right)^2 \quad (29)$$

为了得到体光学声子随压力的变化,在低压下可利用 Grüneisen 参数模型[11]

$$\gamma_j = - \frac{\partial \ln \omega_j}{\partial \ln V} \Big|_{V=V_0} = B_0 \frac{\partial \ln \omega_j}{\partial P} \Big|_{P=0}, \quad j = L, T \quad (30)$$

γ_j 是 Grüneisen 参数. 在低压下对 LO 和 TO 声子 γ_j 分别近似为常数,故声子能量对压力的依赖关系为

$$\hbar \omega_j(P) = \hbar \omega_j(0) e^{\frac{\gamma_j}{T} P} \quad (31)$$

4 数值计算与结果讨论

我们对纤锌矿结构的半导体材料 GaN, AlN 和 InN 分别进行了数值计算,所用数据见表 1 和表 2,计算结果分别如图 1~4 所示.

图 1 分别给出了 3 种材料中束缚极化子结合能随异性角 θ 的变化关系,这里的异性角 θ 指极化子总动量与对称轴 c 轴的夹角. 发现束缚极化子结合能随异性角的增大而单调增加,当电子的动量垂直于对称轴方向时 ($\theta = 90^\circ$) 结合能达到最大值,这表明纤锌矿结构杂质中心束缚电子在沿对称轴方向最弱. 对实验观察有指导意义,可在实验上预言晶体的结构. 图中曲线还显示,光学声子的影响使杂质态的结合能降低,降低幅度比较显著,降低幅度从十几个 meV 到一百三十多 meV 分别对应 InN, GaN 和 AlN. 这是由于光学声子屏蔽了库仑势,电子和杂质与光学声子相互作用通过屏蔽库仑势减少了杂质态的结合能.

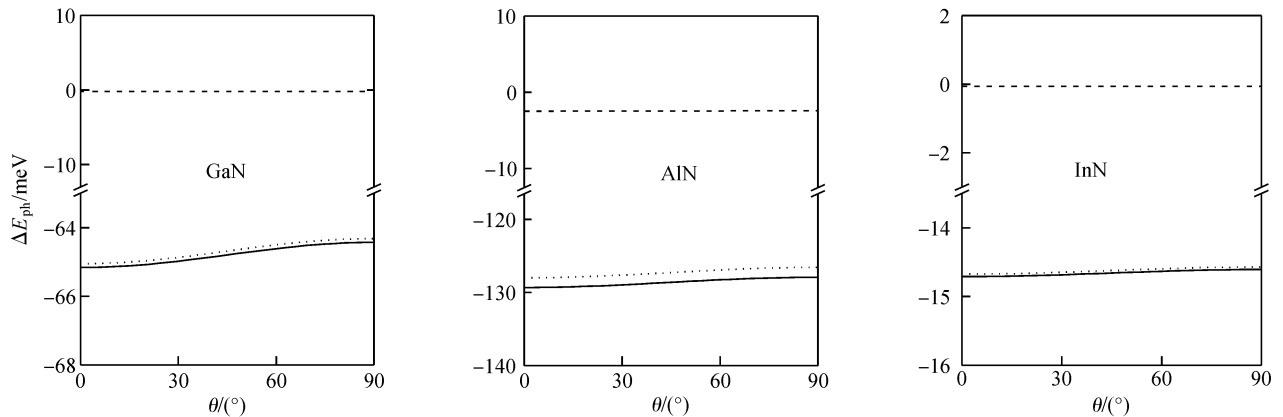


图 2 TO 声子(虚线)、LO 声子(点线)以及两支声子总和(实线)对极化子结合能的贡献随异性角 θ 的变化关系

Fig. 2 Contributions of TO-like phonons (dashed curve), LO-like phonons (dotted curve), and the two branch phonons (solid curve) to the binding energy of polarons as functions of the anisotropic angle θ

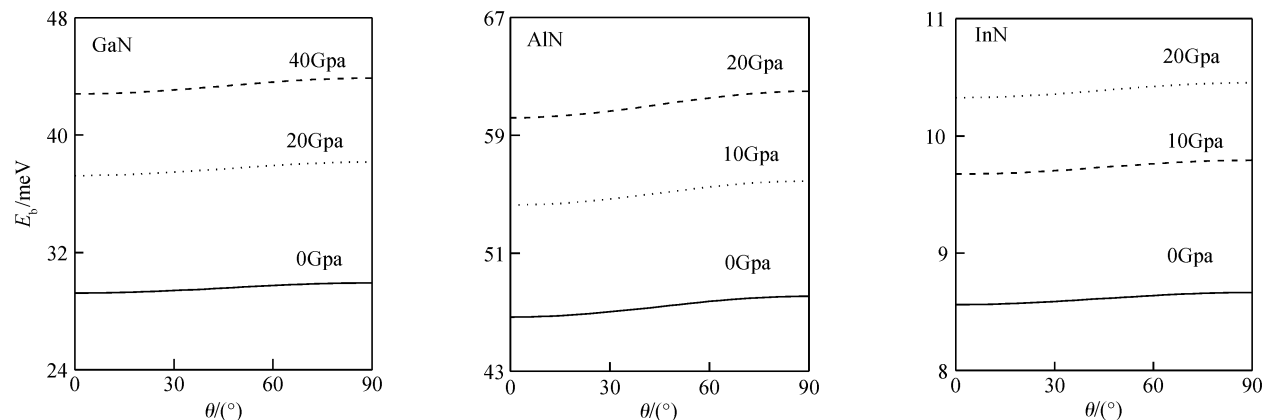


图 3 压力下极化子结合能随异性角 θ 的变化关系

Fig. 3 Binding energies as functions of the anisotropic angle θ for bound polarons under the hydrostatic pressure

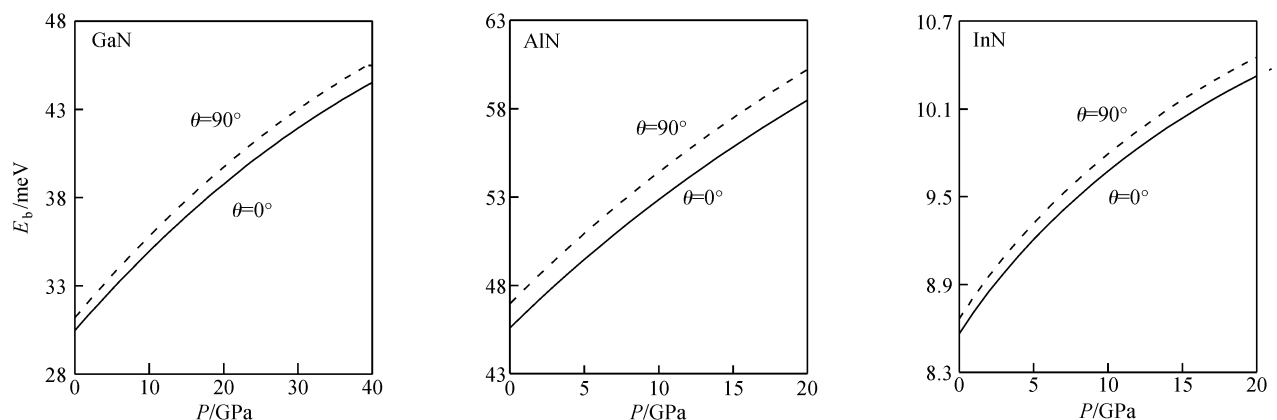


图 4 极化子结合能随压力的函数变化关系

Fig. 4 Binding energies as functions of pressure for bound polarons

图 2 给出 3 种材料中两支异常光学声子对杂质态结合能的贡献随异性角 θ 的变化关系. 图中分别给出了单独考虑 LO-like 声子, TO-like 声子以及同时考虑两支声子的情形. 可看出两支声子对杂质态结合能的贡献依赖于异性角. 在对称轴方向 ($\theta = 0^\circ$), 声子的影响最大, 使得杂质态结合能降低最大. 另外一方面, 在对称轴方向 ($\theta = 0^\circ$), TO-like 声子造成的结合能的能量移动占总的能量移动的 0.2% (GaN), 1.9% (AlN) 和 0.4% (InN). 可见其对杂质态结合能的影响较小, 其贡献可

以略去, LO-like 声子对杂质态的结合能起主要作用.

图 3 给出不同定压下杂质态结合能随结构异性角 θ 的变化关系. 由于在高压下, 纤锌矿结构的氮化物将发生结构相变, 变成岩盐晶结构. 实验上^[15]发生相变的压强: GaN; 52.2 GPa, AlN; 22.9 GPa, InN; 23.0 GPa. 考虑到材料的相变, 计算时压力的值低于材料发生相变的压力值. 从图中看出, 压力使束缚极化子结合能增大, 加压后的束缚极化子结合能变化趋势与零压时的变化趋势相同. 由于压力对半导体的能隙、电子的有效质量、材料

的介电常数以及晶格振动频率等参数均有影响,比较复杂,这些影响的综合结果使结合能近线性增加.

图 4 给出异性角度取固定值时($\theta = 0^\circ$ 或 90°)束缚极化子结合能随压力的变化关系.从图看出,结合能在这两个方向上随压力近似线性增加,压力效应是显著的,注意到在对称轴方向结合能的增幅低于垂直于对称轴方向的结合能的增幅.材料的各向异性使得束缚极化子结合能表现出明显的异性特征.从图中还可以看到,在 $\theta = 0^\circ$ 和 $\theta = 90^\circ$ 结合能的差别随压力而加大,这说明压力使得结合能的各向异性增强.

我们前期^[16]对闪锌矿结构的半导体材料 GaN, AlN 和 InN 杂质态结合能做了计算,并与纤锌矿结构做了比较.结果表明,在平行于对称轴方向($\theta = 0^\circ$)时,对上述 3 种材料,考虑纤锌矿结构单轴异性时的结合能分别比闪锌矿结构的结合能低,分别降低了 11.1%, 40.0% 和 14.4%.在垂直于对称轴方向时,对于 GaN 和 AlN 材料纤锌矿结构的结合能增大,分别提高 5.2% 和 2.5%;而对 InN 材料结合能的差别不大.在其他方向,对 GaN 和 AlN 当角度增大到某一角度时,两种结构的结合能相同.而 InN 材料纤锌矿结构的结合能在任意方向都下降.指出结构的单轴异性对杂质态结合能的影响是显著的.本文研究纤锌矿结构束缚极化子结合能随异性角 θ 的变化与闪锌矿结构比较可得到与文献^[16]相一致的结论.

5 结论

针对纤锌矿结构氮化物材料,考虑 LO-like 声子和 TO-like 声子与电子和杂质的相互作用,在流体静压力下利用变分法研究了氮化物材料中束缚极化子结合能.通过对 GaN, AlN 和 InN 3 种材料的数值计算表明:考虑声子的影响使杂质态结合能明显下降,且 LO-like 声子对结合能的贡献是主要的,TO-like 声子的影响很小,可以忽略.压力使得结合能增加,压力效应显

著,且压力增强了结合能的各向异性.

参考文献

- [1] Strite S, Morkoc H. GaN, AlN, and InN: A review. *J Vac Sci Technol B*, 1992, 10: 1237
- [2] Jain S C, Willander M, Narayan J, et al. III-nitrides: Growth, characterization, and properties. *J Appl Phys*, 2000, 87: 965
- [3] McGill S A, Cao K, Foeler W B, et al. Bound-polaron model of effective-mass binding energies in GaN. *Phys Rev B*, 1998, 57: 8951
- [4] Moore W J, Freitas J A, Molnar R J. Zeeman spectroscopy of shallow donors in GaN. *Phys Rev B*, 1997, 57: 12073
- [5] Wang H, Chen A B. Calculation of shallow donor levels in GaN. *J Appl Phys*, 2000, 87: 7859
- [6] Frohlich H. Electrons in lattice fields. *Adv Phys*, 1954, 3: 325
- [7] Mora-Ramos M E, Rodriguez F J, Quiroga L. Polarons in wurtzite nitride semiconductors. *Solid State Commun*, 1999, 109: 767
- [8] Yan Z W, Ban S L, Liang X X. Intermediate-coupling polaron properties in wurtzite nitride semiconductors. *Phys Lett A*, 2004, 326: 157
- [9] Dridi Z, Bouhafs B, Ruterana P. Pressure dependence of energy band gaps for $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$. *New Journal of Physics*, 2002, 4: 94. 1
- [10] Aouas M R, Sekkal W, Zaouib A. Pressure effect on phonon modes in gallium nitride: a molecular dynamics study. *Solid State Commun*, 2001, 120: 413
- [11] Yan Z W, Ban S L, Liang X X. Effect of electron-phonon interaction on surface states in zinc-blende GaN, AlN, and InN under pressure. *Eur Phys J B*, 2003, 35: 41
- [12] Loudon R. The Raman effect in crystals. *Adv Phys*, 1964, 13: 423
- [13] Lee B C, Kim K W, Dutta M, et al. Electron-optical-phonon scattering in wurtzite crystals. *Phys Rev B*, 1997, 56: 997
- [14] Platzman P M. Ground-state of bound polarons. *Phys Rev B*, 1962, 125: 1961
- [15] Serrano J, Rubio A, Hernandez E, et al. Theoretical study of the relative stability of structural phases in group-III nitrides at high pressures. *Phys Rev B*, 2000, 62: 16612
- [16] Xue Yaguang, Yan Zuwei. Influence of uniaxial anisotropy on binding energies of shallow impurity states in wurtzite nitrides. *Journal of Inner Mongolia University*, 2006, 37(6): 633 (in Chinese) [薛亚光, 闫祖威. 单轴异性对氮化物半导体浅杂质态的影响. *内蒙古大学学报(自然科学版)*, 2006, 37(6): 633]

Bound Polaron in Wurtzite Nitrides Semiconductor and Pressure Effect*

Xue Yaguang¹, Yan Zuwei^{1,2,†}, and Huangfu Yanfang¹

(1 Department of Physics, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China)

(2 College of Science, Inner Mongolia Agricultural University, Hohhot 010018, China)

Abstract: A variational approach is used to study the polaron effect from both the abnormal optical LO-like and TO-like phonons on the binding energies of impurity states in wurtzite nitrides semiconductor crystals by considering the uniaxial anisotropy. Taking the variations of electronic effective mass, material dielectric constants and crystal lattice vibrational frequencies with hydrostatic pressure into account, the pressure effect on the binding energy of bound polaron is discussed. The numerical results show that the polaron effect obviously decreases the binding energy, and the contributions from impurity-LO-like phonon interaction to the polaron effect are dominant. It is also found that pressure enhances the binding energy and its anisotropy.

Key words: binding energy; polaron; nitrides semiconductors

PACC: 6320K; 7138; 7280E

Article ID: 0253-4177(2008)08-1535-05

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 10564003) and the Key Project of the Science and Technology Research of the Educational Ministry of China (No. 208025)

† Corresponding author. Email: zuyan@imau.edu.cn

Received 3 January 2008, revised manuscript received 9 April 2008