

压力下屏蔽对有限深量子阱中施主结合能的影响*

温淑敏^{1,2} 班士良^{1,†}

(1 内蒙古大学理学院物理系, 呼和浩特 010021)

(2 集宁师范高等专科学校, 乌兰察布 012000)

摘要: 考虑电子有效质量、材料介电常数及禁带宽度随流体静压力的变化, 以及准二维电子气对杂质库仑势的屏蔽影响, 利用变分法讨论有限深量子阱中的施主杂质态能级. 对 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子阱系统中的杂质态结合能进行了数值计算, 给出结合能随铝组分、阱宽和压力的变化关系, 并讨论了有无屏蔽时的区别. 结果表明, 屏蔽效应随着压力增加而增加且显著降低杂质态的结合能.

关键词: 量子阱; 屏蔽; 压力; 杂质态; 结合能

PACC: 7155 G; 7320 H; 7360 L

中图分类号: O471. 3 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-4177(2006)01-0063-05

1 引言

随着材料技术的发展, Al_xGa_{1-x}As 等混晶材料被广泛用于制造半导体异质结、量子阱等. 半导体量子阱和异质结界面附近施主杂质能级的准二维特性, 显著地影响着体系的光吸收和发射等性质, 且表现出不同于三维体系的特征, 对其特性的研究有着十分重要的意义.

早年, Hollox 曾讨论了半导体异质结构中杂质态结合能与磁场强度的变化关系^[1]. Farias 等研究了声子对此类系统中杂质态的影响^[2]. 后来, 本文作者之一讨论了实际异质结界面附近的施主结合能^[3,4], 给出了结合能与杂质位置, 电子面密度的变化关系. 随着研究的不断深入, 有些学者分别研究了压力^[5]、屏蔽^[5,6]、外磁场^[7]及声子^[8]对异质结附近施主结合能的影响, 得出压力使结合能增大而屏蔽使结合能降低的结论. 自从上世纪 80 年代 Bastard 从理论上研究了无限深量子阱中类氢杂质态结合能随杂质位置的变化关系以来^[9], 人们对量子阱中杂质态结合能的研究也在不断深入. Mailhiot 等采用有效质量近似讨论了有限深量子阱中杂质态结合能随杂质位置, 阱宽的变化关系^[10]. Luiz 考虑了屏蔽对量子阱中杂质态结合能的影响^[11]. Masoon 等研究了声子对该结合能的影响^[12]. Sukumar 等较早地讨论了此类问题的压力效应^[13]. 后来, 赵国军等研究了压力对量子阱中施主结合能的影响^[14], 得出了

结合能随压力而增大的结论. 就作者所知, 目前尚未有关于压力下量子阱中施主结合能屏蔽效应的报道.

本文采用变分法讨论压力下屏蔽效应对有限深量子阱中施主结合能的影响, 对 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 系统, 数值计算量子阱中施主结合能随铝组分、阱宽、压力及杂质位置的变化关系. 结果表明, 屏蔽显著降低了杂质态的结合能.

2 理论模型

考虑阱材料为 GaAs (1) 垒材料为 Al_xGa_{1-x}As (2) 组成的宽度为 $2d$, 势垒高度为 V_0 的量子阱. 选取两种材料的界面为 $x-y$ 平面方向, 坐标原点选为阱中央. 设电量为 e 的施主杂质位于阱中 $(0, 0, z_0)$ 处 ($|z_0| < d$). 则单电子-杂质系统的哈密顿量为

$$H = H + H + H_c \quad (1)$$

其中 H 代表电子在 $x-y$ 平面内的动能, 其形式可写为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m(z)} \times \frac{\partial}{\partial x} \times \frac{\partial}{\partial x} \quad (2)$$

这里 $m(z) = \sqrt{x^2 + y^2}$; $m(z)$ 为各向同性近似下电子的有效质量, 在阱材料和垒材料中的取值为

$$m(z) = \begin{cases} m_1, & |z| < d \\ m_2, & |z| > d \end{cases}$$

式中下标“1”和“2”分别表示材料 1 和材料 2.

(1) 式中, H 为杂质态哈密顿量的 z 方向分

*国家自然科学基金(批准号:60566102)及内蒙古自治区优秀学科带头人计划资助项目

†通信作者. Email:slban@imu.edu.cn

2005-07-09 收到

量:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \times \frac{\partial}{\partial z} \times \frac{1}{m(z)} \times \frac{\partial}{\partial z} + V(z) \quad (3)$$

(3)式中的量子阱势垒满足

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq d \\ V_0, & |z| > d \end{cases} \quad (4)$$

这里,势垒高度由阱材料和垒材料能带的不连续性决定,本文采用 60-40 规则^[5],即由下式确定

$$V_0 = 0.6(E_{g2} - E_{g1}) \quad (5)$$

其中 E_{gi} ($i=1,2$) 为材料 i 的禁带宽度.

(1)式中, H_c 代表电子与杂质的库仑相互作用,考虑屏蔽效应时,其形式为

$$H_c = -\frac{e^2}{(z, z_0) \sqrt{(z - z_0)^2 + a_b^2}} f(r) \quad (6)$$

其中 (z, z_0) 是与材料有关的介电常数

$$(z, z_0) = \begin{cases} \epsilon_{01}, & |z| \leq d \\ \frac{\epsilon_{01} + \epsilon_{02}}{2}, & |z| > d \end{cases} \quad (7)$$

这里 ϵ_{01} 和 ϵ_{02} 分别为材料 1 和 2 的静态介电常数.在准二维情况下,经傅里叶变换后,屏蔽因子 $f(r)$ 的形式为 $V(q) = -4\pi e^2 / (Q) q^2$. 这里, q 为波矢量,依赖于 x - y 方向二维波矢 Q 的托马斯-费米项可选为^[3]

$$(Q) = 1 + \frac{2}{a_b Q} G(Q) F(Q) \quad (8)$$

式中 $a_b = \hbar^2 / m^* e^2$ 为有效玻尔半径;

$$G(Q) = \begin{cases} 1, & Q < 2Q_F \\ 1 - [1 - (2Q_F / Q)^2]^{1/2}, & Q > 2Q_F \end{cases} \quad (9)$$

这里二维费米波矢满足 $Q_F = (2n_s)^{1/2}$, n_s 为电子面密度.屏蔽因子 $F(Q)$ 的表达式为

$$F(Q) = \iint z dz \int (z) |z|^2 e^{-Q|z-z'|} |z| |z'|^2 \quad (10)$$

其中 (z) 为电子在 z 方向的波函数.无屏蔽时的结果可取(8)式之值为 1 得出.

用变分法计算杂质态的结合能,可选择如下形式的试探波函数:

$$\psi = \exp\left[-\frac{1}{2} \sqrt{(z - z_0)^2 + a_b^2}\right] (z) \quad (11)$$

式中 (z) 是变分参数; (z) 代表有限深量子阱中电子的基态波函数,具体形式为

$$(z) = \begin{cases} A \cos(k_w z), & |z| \leq d \\ A \cos(k_w d) e^{-k_b(|z| - d)}, & |z| > d \end{cases} \quad (12)$$

其中 A 为归一化常数; k_w 和 k_b 分别代表电子在阱和垒中的波矢,由以下两式确定:

$$k_w = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}}, \quad k_b = \sqrt{\frac{2m_2 (V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (13)$$

式中 E 为自由电子在阱中的基态能量,可由波函数在边界处的连续性条件定出:

$$\frac{\sqrt{m_1} \sqrt{V_0 - E}}{\sqrt{m_2} \sqrt{E - 1}} - \tan\left[\sqrt{\frac{2m_1 d^2 E}{\hbar^2}}\right] = 0$$

根据变分法,杂质态的变分能量由(1)式对 (z) 的变分极小给出

$$E_V = \min \frac{|H|}{\int} = E + E + V_e + E_c \quad (14)$$

杂质态结合能为

$$E_B = E_{\text{free}} - E_V \quad (15)$$

式中 E_{free} 为(1)式无库仑相互作用时,即(14)式取 $E_c = 0$ 时的自由电子能量.(14)式右端各项的定义为

$$E = -\int \frac{\hbar^2}{2m(z)} \times \frac{1}{\partial} \times \frac{\partial}{\partial} \times \frac{\partial}{\partial} \int \int \int \quad (16)$$

$$E = -\int \frac{\hbar^2}{2} \times \frac{\partial}{\partial z} \times \frac{1}{m_z} \times \frac{\partial}{\partial z} \int \int \int \quad (17)$$

$$V_e = \int V_z \int \int \int \quad (18)$$

$$E_c = -\frac{\int \frac{e^2}{(z, z_0) \sqrt{(z - z_0)^2 + a_b^2}} \int}{\int \frac{4e^2}{(z, z_0) (Q) q^2} e^{iq(r - z_0)} \int} \quad (19)$$

3 物理参数的压力影响

在流体静压力作用下,电子的有效质量、半导体材料的能隙、介电常数等参数均发生变化.当压力较低时,这些参数随压力的变化关系接近线性^[14].

通常,直接带隙半导体材料的能隙随压力而增大,满足^[14]

$$E_g(p) = E_g + p \quad (20)$$

其中 E_g 为材料在常压下的能隙,单位为 meV; p 为压力,单位为 GPa; α 为能隙的压力系数.

依赖于能隙的电子有效质量为

$$\frac{m_0}{m(p)} = 1 + \frac{C}{E_g(p)} \quad (21)$$

式中 m_0 是自由电子的质量; $m(p)$ 是压力作用下电子的有效质量; C 为仅与材料有关而不随压力变化的常数.

高频介电常数 (p) 对体积的依赖关系为^[14]

$$\frac{\partial n}{\partial nV} (p) = \frac{5}{3} \frac{(p) - 1}{(p)} (0.9 - f_i) \quad (22)$$

其中 f_i 是材料的电离度; V 是材料的体积.再利用材料体积和压力的关系

$$B = -V \frac{\partial p}{\partial V} = B_0 + B_0 p \quad (23)$$

其中 B_0 是体模量; $B_0 = [dB/dp]_{p=0}$. 最后可得高频介电常数随压力的变化关系为

$$\epsilon(p) = 1 + [\epsilon(0) - 1] e^{-\frac{\epsilon}{3B}(0.9 - f_i) p} \quad (24)$$

设静态介电常数与高频介电常数的关系可由著名的 LST 关系确定:

$$\epsilon_0(p) = \epsilon(p) (\hbar \epsilon_{LO} / \hbar \epsilon_{TO})^2 \quad (25)$$

有关 $Al_x Ga_{1-x} As$ 的其他参数可用线性插值法^[15]得出.

表 1 计算中所用参数

Table 1 Parameters used in the computation

	$\hbar \epsilon_{LO}$	$\hbar \epsilon_{TO}$	m_0	f_i	B_0	B_0	E_g	
GaAs ¹⁾	10.89	36.25	33.29	0.067	0.310	770 ²⁾	46 ²⁾	1.424 115
AlAs ¹⁾	8.16	50.09	44.88	0.15	0.274	748 ²⁾	46 ²⁾	2.168 102

1) :Adachi^[15], 2) :Lam 等^[16]

4 结果与讨论

对于 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 有限深量子阱,我们只讨论铝组分 $x = 0.4$ 和压力 $p = 4$ GPa 时的直接带隙半导体之情况. 计算中所取的电子面密度为 $4 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. 为节省篇幅,本文仅给出杂质位于阱中央即 $(0, 0, 0)$ 处,杂质态结合能随压力、阱宽的变化关系.

图 1(a), (b) 给出铝组分为 0.3, 阱宽分别为 2

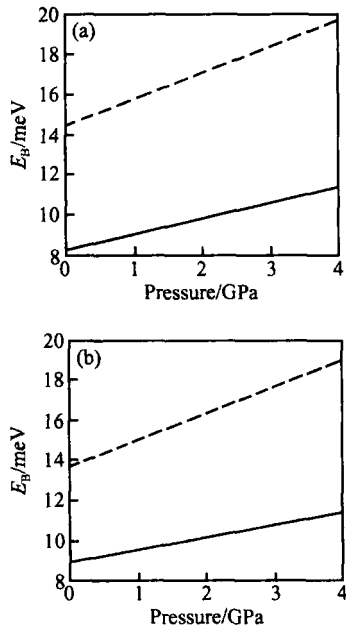


图 1 阱宽为 2nm, 铝组分为 0.3 时 (a), 阱宽为 4nm, 铝组分为 0.3 时 (b), 结合能随压力的变化关系, 实(虚)线分别为有(无)屏蔽的结果

Fig. 1 Binding energies as function of hydrostatic pressure for well width $2d=2\text{nm}$ and the given Al concentration $x=0.3$ (a), $2d=4\text{nm}$ and the given Al concentration $x=0.3$ (b). Solid (dashed) line is the result with (without) screening effect.

和 4nm 时, 杂质态结合能随压力的变化关系. 由于压力对禁带宽度、介电常数及电子有效质量均有影响. 该影响的综合结果使结合能随压力线性增加, 这与前人的结论相符^[14]. 可以看出, 阱宽为 4nm 时结合能的压力效应明显增强. 如: $p = 4$ GPa 时的结合能比压力为 0 时增加了约 38%. 一方面, 屏蔽则使结合能明显下降, 考虑屏蔽效应后, $p = 4$ GPa 时的结合能比压力为 0 时增加了大约 21%; 另一方面, 屏蔽使结合能对压力的敏感程度降低.

图 2(a), (b) 给出铝组分为 0.3, 压力分别为 0 和 2 GPa 时, 结合能随阱宽的变化关系, 实(虚)线分别为有(无)屏蔽时的结果. 结合能在有、无屏蔽时均随阱宽的增加先增后减. 与零压情形类似, 在宽阱情况下, 电子波函数主要局域在量子阱中, 穿透到垒中的几率非常小, 因此, 随着阱宽的增加, 杂质态的二维特性逐渐减弱, 其结合能逐渐减小, 当阱宽 d

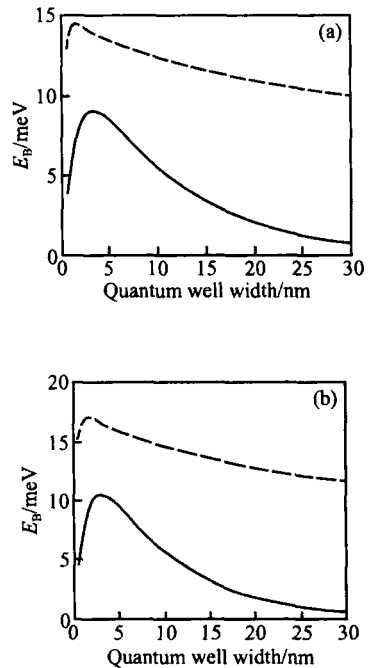


图 2 压力为 0, 铝组分为 0.3 时 (a), 压力为 2 GPa, 铝组分为 0.3 时 (b) 结合能随阱宽的变化关系. 实(虚)线分别为有(无)屏蔽的结果.

Fig. 2 Binding energies as function of well width for the given pressure = 0 and Al concentration $x = 0.3$ (a), pressure = 2 GPa and Al concentration $x = 0.3$ (b). Solid (dashed) line is the result with (without) screening effect.

时, 趋于三维垒材料的结果. 另一方面, 在窄阱时, 随着阱宽的逐渐减小, 对于无限深势阱, 电子在 z 方向的量子限制效应逐渐增强从而杂质态的二维特性逐渐增强, 结合能亦随之增大, 最终达到二维极限结果; 而在有限深势阱情况下, 当阱宽较窄而小于有效

波尔半径时,电子的波函数则不能完全局域在量子阱中,而会部分地穿透到势垒中,该穿透随阱宽减小而增强,在窄阱极限时,波函数全部穿透到垒中,杂质态结合能应为三维垒材料的结果. 综上可知,结合能在中间阱宽时出现极值. 应该指出的是,屏蔽不仅使结合能大为减小,而且使其极值位置向宽阱方向移动. 如压力为 0 且无屏蔽时,阱宽为 1.5nm 时结合能达到最大,考虑屏蔽效应后,结合能最大值则移到 3.5nm 处. 屏蔽使极值峰更为尖锐,偏离极值点越远,屏蔽更加明显,也即:屏蔽效应在宽、窄阱时更加明显. 但由于采用了二维屏蔽模型,这一结论有待进一步的讨论.

图 3(a), (b), (c) 给出压力分别为 0, 2 和

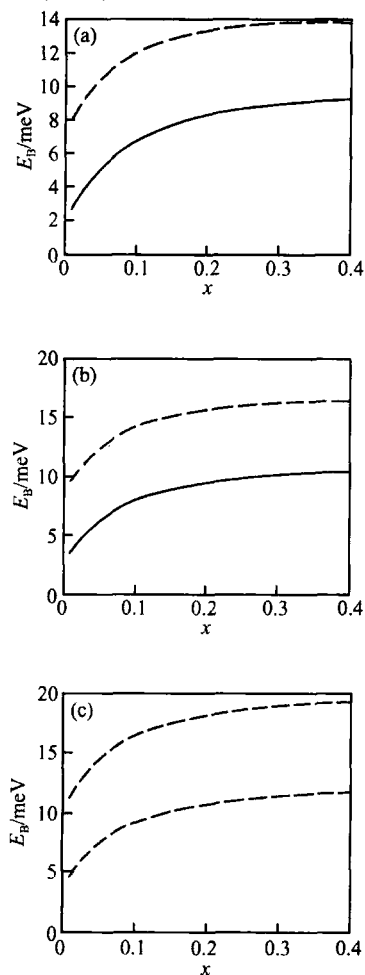


图 3 压力为 0, 阱宽为 4nm 时 (a), 压力为 2 GPa, 阱宽为 4nm 时 (b), 压力为 4 GPa, 阱宽为 4nm 时 (c) 结合能随铝组分的变化关系. 实(虚)线分别为有(无)屏蔽时的结果.

Fig. 3 Binding energies as functions of Al concentration x for the given pressure = 0 and well width $2d = 4\text{nm}$ (a), pressure = 2 GPa and well width $2d = 4\text{nm}$ (b); pressure = 4 GPa and well width $2d = 4\text{nm}$ (c). Solid (dashed) line is the result with (without) screening effect.

4 GPa, 阱宽为 4nm 时, 结合能随铝组分的变化关系, 实线和虚线分别为有无屏蔽时的结果. 结果表明结合能随铝组分而增大. 有压力时结合能增大, 变化趋势与无压力时相同. 屏蔽效应使结合能降低, 变化趋势大致与无屏蔽时一致. 但压力大时, 屏蔽更为显著. 其原因是: 铝组分的增加使垒高度增加, 压力使这一效应更为显著, 因而杂质态的二维特性随之愈加明显, 导致结合能随铝组分和压力而增大. 此时, 电子气的二维屏蔽作用也随之增加.

此外, 我们还计算了结合能随杂质位置的变化, 当杂质从 $-d$ 到 d 变化时, 结合能先增大后减小, 中心处最大, 且两边对称. 有压力及有屏蔽时的变化趋势与零压无屏蔽时的结果趋势类似.

5 结论

本文考虑了压力对材料禁带宽度、介电常数、电子有效质量以及晶格振动频率的影响, 计入屏蔽效应, 利用变分法数值计算了有限深 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子阱中杂质态的结合能. 给出结合能随压力、阱宽和铝组分的变化关系. 结果表明, 屏蔽效应使结合能明显下降, 在我们所计算的压力范围内, 杂质态结合能随压力单调增加. 屏蔽效应随压力而增加, 并使结合能与阱宽关系曲线的极大值向宽阱方向移动.

参考文献

- [1] Hollox D M, Antoniewicz P R. Bound state of an external impurity at a semiconductor-semiconductor interface in the presence of a magnetic field. *Phys Rev B*, 1986, 33(12): 8558
- [2] Farias G A, Degani M H, Hipolito O. Theory of bound polarons near interface of polar semiconductor. *Phys Rev B*, 1991, 43: 4113
- [3] Ban S L, Hasbun J E. Donor level in a quasi-two dimensional heterojunction system. *Solid State Commun*, 1999, 109: 93
- [4] Gong Jian, Ban S L. Donor level in a Zn_{1-x}Cd_xSe/ZnSe heterojunction system. *Acta Scientiarum Naturalium Universitatis NeiMongol*, 2000, 31(5): 482 (in Chinese) [宫箭, 班士良. Zn_{1-x}Cd_xSe/ZnSe 异质结系统中的施主能级. 内蒙古大学学报(自然科学版), 2000, 31(5): 482]
- [5] Ban S L, Liang X X. Pressure effect on the binding energies of donors in GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterojunctions. *Journal of Luminescence*, 2001, 94/95: 417
- [6] Cao Yile, Ban S L. Screening influence on the binding energy of a donor in a GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterojunction system. *Acta Scientiarum Naturalium Universitatis NeiMongol*, 2001, 32(4): 392 (in Chinese) [曹轶乐, 班士良. 屏蔽对 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 异质结系统中施主结合能的影响. 内蒙古大学学报(自然科学版), 2001, 32(4): 392]
- [7] Zhang Min, Ban S L. Impurity states in semiconductor GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterojunctions with an external magnetic field. *Chinese Journal of Luminescence*, 2004, 25(4): 369 (in Chi-

- nese) [张敏,班士良. 磁场下半导体 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 异质结中的杂质态. 发光学报, 2004, 25(4):369]
- [8] Zhang Min, Ban S L. Influence of magnetic field on bound polarons in semiconductor GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterojunctions. Chinese Journal of Semiconductors, 2004, 25(12):1618 (in Chinese) [张敏,班士良. 磁场对 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 异质结系统中束缚极化子的影响. 半导体学报, 2004, 25(12):1618]
- [9] Bastard G. Hydrogenic impurity state in a quantum well: A simple model. Phys Rev B, 1981, 24:4714
- [10] Mailhot C, Chang Y C, McGill T C. Energy spectra of donors in GaAs/Al_{1-x}Ga_xAs quantum well structures in the effective-mass approximation. Phys Rev B, 1982, 26(8):4449
- [11] Luiz E Olivera. Spatially dependent screening calculation of binding energies of hydrogenic impurity states in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum wells. Phys Rev B, 1988, 38:641
- [12] Masoon B A, Sarma S D. Phonon-induced shift in shallow donor levels of semiconductor quantum structures. Phys Rev B, 1986, 33(12):8379
- [13] Sukumar A, Navaneethakrishnan K. Effect of the dielectric function and pressure on the binding energies of excitons in GaAs and GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs superlattices. Solid State Commun, 1990, 76(4):561
- [14] Zhao G J, Liang X X, Ban S L. Binding energies of donors in quantum wells under hydrostatic pressure. Phys Lett A, 2003, 319:191
- [15] Adachi S. GaAs, AlAs, and Ga_{1-x}Al_xAs material parameters for use in research and device applications. J Appl Phys, 1985, 58(3):R1
- [16] Lam P K, Cohen M L, Martinez G. Analytic relation between bulk moduli and lattice constants. Phys Rev B, 1987, 35(17):9190

Screening Influence on Binding Energies of Donors in Quantum Wells with Finite Barriers Under Hydrostatic Pressure *

Wen Shumin^{1,2} and Ban Shiliang^{1,†}

(1 Department of Physics, College of Sciences and Technology, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China)

(2 Jining Teachers College, Wulanchabu 012000, China)

Abstract : The energy levels of donors in quantum wells with finite barriers are investigated using a variational method. We consider the variations of the electron effective mass, dielectric constant, and conduction band offset between the well and barriers with hydrostatic pressure, and we take into account the screening effect on the Coulombic potential of an impurity from the 2D electron gas. Numerical calculations are performed for the binding energies of impurity states in GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum well systems. The relations between the binding energies of donors and Al concentration, well width, and hydrostatic pressure are given. The difference between the cases with and without screening is discussed. The results indicate that the screening increases with pressure, resulting in a decrease in the binding energies of the impurity states.

Key words : quantum well; screening; pressure; impurity state binding energy

PACC : 7155 G; 7320 H; 7360 L

Article ID : 0253-4177(2006)01-0063-05

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 60561102) and the Plan of Excellent Subject Directors of Inner Mongolia Autonomous Region

† Corresponding author. Email: slban@imu.edu.cn

Received 9 July 2005