

在外电场作用下有限抛物量子阱中 类氢杂质态结合能*

赵凤岐[†] 萨茹拉

(内蒙古师范大学物理与电子信息学院, 呼和浩特 010022)

摘要: 采用变分方法研究 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 有限抛物量子阱中类氢杂质态能量和结合能随外电场和阱宽的变化关系. 在计算中考虑了电子有效带质量和介电常数随空间坐标(或合金组分)的变化因素. 结果表明, 外电场对类氢杂质态能量和结合能均有明显的影响, 并且这些影响随着阱宽的增大而增大. 电子有效带质量和介电常数随空间坐标的变化效应使得类氢杂质态基态能量减小, 结合能增大, 此效应随着阱宽的增大明显变小.

关键词: 抛物量子阱; 类氢杂质态; 外电场; 结合能

PACC: 7320; 7340L

中图分类号: O471.1

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2006)05-0830-04

1 引言

近年来,人们对抛物量子阱(PQW)材料的电子态做了许多研究,给出一些实验^[1-7]和理论的结果^[8-17]. 抛物量子阱有两种类型,一是掺杂 PQW^[11],另一个是组分 PQW^[2,3]. 前者是在外延生长某种半导体材料过程中交替进行 n 型和 p 型掺杂构成的. 后者(如 GaAs/Al_xGa_{1-x}As)是由 GaAs 和 Al_xGa_{1-x}As 层交替生长而产生的,且每层厚度均改变. Al_xGa_{1-x}As 的厚度从中心向外急剧增大,而 GaAs 层的厚度从中心向外急剧减小^[2]. 这种 PQW 也可以用三元混晶 Al_xGa_{1-x}As 的组分 x 从阱中心到阱边连续变化而生成的 PQW 来近似^[4,5]. 在这些材料中出现的许多新物理问题是十分有趣的,而且对新型器件有重要的影响,因此成为近年来一个活跃的研究方向.

Luna-Acosta^[8]和 Learitt^[9]用变分法计算了位于无限 PQW 中心处的类氢杂质结合能和波函数. 在计算中采用了含有两个变分参数的波函数. 研究表明:结合能随着抛物阱深度(或抛物性参数)的增大而增大,但随着阱宽的增大而减小,并且 PQW 中的结合能大于方量子阱中的结合能. Zang 和 Rustgi^[10]研究无限 PQW 中外磁场作用下类氢杂质的能量,给出杂质态基态和激发态能量随外磁场和抛物参数的变化关系. 他们指出,杂质态能量随着外磁场和抛物参数的增大而增加,越高的激发态,能量的增

加速度就越大. Niculescu 等人^[12,13]用变分法计算了有限 PQW 中单个和双施主的结合能. 结果表明:有限 PQW 中杂质态结合能随着阱宽的增大有一个极大值,出现于阱宽较小处,而且有限 PQW 中结合能比无限 PQW 中结合能小,尤其是对双施主更明显. Kasapoglu 等^[16,17]用变分法计算了不同形状的量子阱中浅杂质态结合能,但他们没有考虑 PQW 中电子有效带质量随空间坐标变化(SDEM)效应对电子态能量的影响.

PQW 中电子有效带质量随空间坐标变化效应对电子态能量的影响问题在文献[4,5]中做了讨论. 他们指出,SDEM 效应降低电子或空穴基态能量,增大类氢杂质基态结合能. 同时还发现 SDEM 效应随着阱宽的增大而减小,原因是当阱宽增大时,有效带质量随空间坐标变化比较缓慢, m^* 逐渐接近于 3D 的值. 有些学者^[18-22]研究抛物量子阱中电子-声子相互作用对电子态能量的影响,给出极化子能量、跃迁能量和结合能等物理量随阱宽、阱有效深度、外磁场等的变化关系.

据我们了解,在 PQW 中外电场对有 SDEM 效应的杂质态能量和结合能的影响如何等方面的研究工作很不完善,有待于进一步深入细致地研究. 本文讨论有限 PQW 中杂质态能量和结合能随外电场和阱宽的变化关系. 在计算中考虑电子有效带质量和介电常数随空间坐标(或合金组分 x)的变化因素. 采用变分方法获得类氢杂质态能量和结合能,并对结果进行数值计算和讨论.

*国家自然科学基金资助项目(批准号:10364003)

[†] 通信作者. Email: fqzhao@imnu.edu.cn

2005-06-26 收到,2005-12-04 定稿

2 理论推导

考虑一个电子处于阱宽为 $L = 2d$ 的抛物量子阱中,该电子受处于点 $(0,0,0)$ 的类氢杂质(电荷为 e)的束缚.阱材料是充满在区间“1” $(|z| \leq d)$,而垒材料占居在区间“2” $(|z| > d)$.抛物量子阱中阱材料是由三元混晶 $Al_xGa_{1-x}As$ 材料的组分 x 从阱中心 $x=0$ 到阱边 $x=0.32$ 连续变化而产生,而垒材料是 $Al_{0.32}Ga_{0.68}As$.外电场 F 方向选为 z 轴方向,利用有效质量近似,系统的哈密顿量可写为

$$H = p_z \left(\frac{1}{2m(z)} \right) + \frac{p_{xy}^2}{2m(z)} - \frac{e^2}{4\epsilon(z)r} + V(z) + ezF \quad (1)$$

其中

$$V(z) = \begin{cases} V_0 z^2 / d^2, & |z| \leq d \\ V_0, & |z| > d \end{cases} \quad (2)$$

$$V_0 = 0.6 \times 1250x(x = 0.32) \quad (3)$$

$$m(z) = \begin{cases} m_1(z), & |z| \leq d \\ m_2, & |z| > d \end{cases} \quad (4)$$

这里 $\epsilon = 10.06x + 13.18(1-x)^{[23]}$ 是区间 1 中静态介电常数; V_0 是 PQW 的深度; $m_2 (= 0.094 m_e)$ 是垒材料 $Al_{0.32}Ga_{0.68}As$ 中电子的有效带质量; $r = \sqrt{z^2 + z^2}$ 是电子与类氢杂质间的距离.考虑 SDEM 效应后,区间 1 中电子的有效带质量可写为^[24]

$$m_1(z) = 0.0665 + 0.0835x \quad (5)$$

合金组分 x 与坐标 z 的关系是 $x = 0.32z^2 / d^2$.

对类氢杂质态的基态,试探波函数选为下面形式^[25]

$$\psi = N(z)e^{-r} \quad (6)$$

其中 r 是变分参数; N 是归一化常数.(6)式的波函数中 e^{-r} 描述束缚于类氢杂质周围的电子运动;

$\psi_0(z)$ 为没有杂质势时的电子基态波函数.杂质态变分能量 E_{is} 为

$$E_{is} = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (7)$$

通过数值求解方程(7)且对能量求极小值而获得波函数 ψ_0 和杂质态能量 E_{is} .

杂质态基态结合能为

$$E_b = E_f - E_{is} \quad (8)$$

E_f 是系统中没有杂质势的电子基态能量.

3 数值计算和讨论

利用(1)~(8)式,对 $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ PQW 中类氢杂质态基态能量和结合能进行了数值计算,计算结果在图 1~4 中给出.能量的参考点选在导带的底.

图 1 是 PQW 中有 SDEM 效应和无 SDEM 效应的杂质态基态能量随阱宽 L 的函数关系. L 是以 $GaAs$ 材料中的晶格常数 $a (= 0.5653nm)$ 为单位.从图可以看出,阱宽 L 较小时,杂质态基态能量随着 L 的增大而急剧减小,而阱宽 L 较大时,杂质态基态能量随着 L 的增大而缓慢减小.这是因为构成抛物阱的两个垒材料对处于阱中的电子排斥作用,这一排斥作用随量子阱宽度 L 的增大而减弱,因此 E_{is} 随着量子阱宽度 L 的增加而减小.另一方面,由于有 SDEM 效应的电子有效带质量大于没有 SDEM 效应的电子有效带质量,所以有 SDEM 效应的能量曲线低于没有 SDEM 效应的能量曲线.这是因为在无限简谐振荡极限下能量正比于 $m^{-1/2}(z)$.

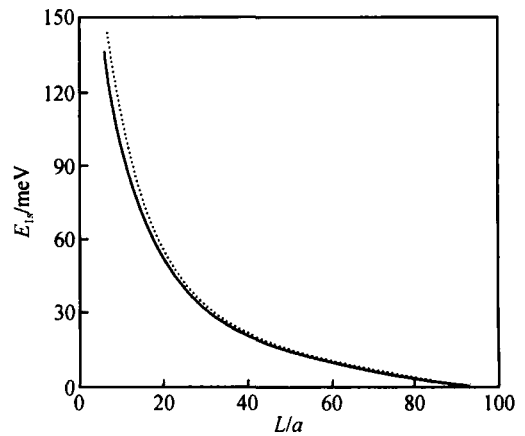


图 1 给定外电场 ($F = 30kV/cm$) 条件下, $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ PQW 中类氢杂质态基态能量与阱宽 L 的函数关系.实线是有 SDEM 效应的结果,虚线是无 SDEM 效应的结果.

Fig. 1 Ground state energies of a hydrogenic impurity as a function of well width L in $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ PQW for given electric field ($F = 30kV/cm$). The solid line is the result with the effects of the SDEM, and the dashed line is the result without the effects of the SDEM.

图 2 给出杂质态基态结合能随阱宽 L 的函数关系.为了对比,有 SDEM 效应、无 SDEM 效应的曲线均绘在图 2 中.由图 2 可知:杂质态基态结合能首先随着 L 的增大而急剧减小,然后缓慢地减小,最后趋近于体材料 $GaAs$ 中的 3D 值.原因是量子阱宽度 L 越小,抛物阱的两个垒材料对处于阱中的电子排斥作用越大,使得电子处于抛物阱中心附近(类氢杂质处于阱中心处),这就引起较大的结合能;而量子阱宽度 L 变大时,排斥作用减弱,使得电子偏离抛物阱中心处,因而引起较小的结合能.这一变化规律与文献[5,13]中得到的规律基本一致.有 SDEM 效应的结合能大于无 SDEM 效应的结合能,这一特性与文献[5]的结果定性相同,而定量上有所差别.从图 1 和图 2 还可以看出,SDEM 效应随着 L

的增大而减小(除非常窄阱 $L < 4a$ 外),最后减小到零.原因是随着 L 的增大,电子处在 PQW 中心处的几率增大,有效带质量随空间坐标变化速度变小,这时电子的有效带质量接近于 GaAs 材料的值,因此 SDEM 效应会消失.

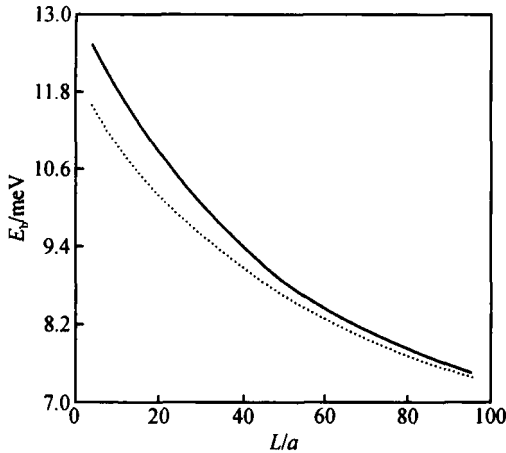


图 2 给定外电场 ($F = 30\text{kV/cm}$) 条件下, GaAs/Al_xGa_{1-x}As PQW 中类氢杂质态基态结合能随阱宽 L 的变化关系. 实线和虚线分别是有 SDEM 效应和没有 SDEM 效应的结果.

Fig.2 Ground state binding energies of a hydrogenic impurity as a function of the well width L in GaAs/Al_xGa_{1-x}As PQW for given electric field ($F = 30\text{kV/cm}$) The solid and the dashed line are respectively the results with the effects of the SDEM and without the effects of the SDEM.

在给定阱宽 $L (20a, 50a)$ 的抛物量子阱中,有 SDEM 效应和无 SDEM 效应的杂质态基态能量和结合能随外电场的函数关系分别在图 3 和图 4 中给出.从图 3 和图 4 中可以看出,在两种阱中杂质态基态能量和结合能都随着外电场的增大而降低,但降低的程度有所不同.例如,在窄阱 ($L = 20a$) 中,基态能量和结合能随着外电场的增大而缓慢降低,而宽阱 ($L = 50a$) 中降低的速度比较快.外电场与电子的相互作用在一定程度上削弱处于类氢杂质中心附近电子的局域性,使得描写该电子系统的波函数向外扩展,这导致杂质态基态结合能随着外电场的增大而减小.杂质态基态结合能随外电场变化规律与文献[16]中得到的规律一致.对杂质态基态能量, SDEM 效应随外电场的变化很小;对杂质态基态结合能, SDEM 效应随外电场的变化很明显.

本文中我们考虑电子有效带质量和介电常数随空间坐标(或合金组分 x) 的变化因素,采用变分方法讨论了有限 PQW 中杂质态能量和结合能随外电场和阱宽的变化关系.研究表明,外电场对杂质态能量和结合能均有明显的影响,并且这些影响随着阱宽 L 的增大而增大. SDEM 效应使得类氢杂质态基态能量减小,结合能增大, SDEM 效应随着阱宽 L

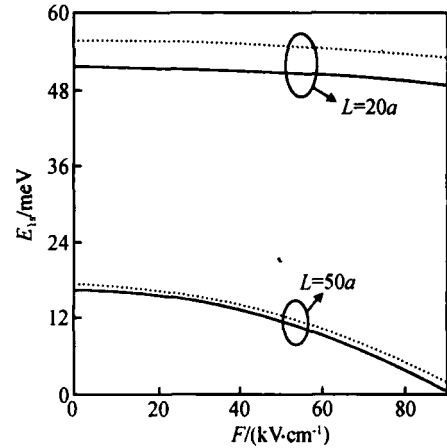


图 3 给定阱宽的 GaAs/Al_xGa_{1-x}As PQW 中类氢杂质态基态能量与外电场 F 的函数关系. 实线代表有 SDEM 效应的结果,虚线代表无 SDEM 效应的结果.

Fig.3 Ground state energies of a hydrogenic impurity as a function of a electric field F in GaAs/Al_xGa_{1-x}As PQW for given well width The solid line is the result with the effects of the SDEM, and the dashed line is the result without the effects of the SDEM.

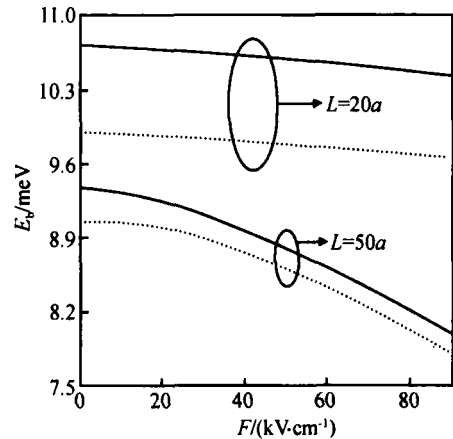


图 4 给定阱宽的 GaAs/Al_xGa_{1-x}As PQW 中类氢杂质态基态结合能随外电场 F 的变化关系. 实线代表有 SDEM 效应的结果,虚线代表无 SDEM 效应的结果.

Fig.4 Ground state binding energies of the hydrogenic impurity as a function of the electric field F in GaAs/Al_xGa_{1-x}As PQW for given well width The solid line is the result with the effects of the SDEM, and the dashed line is the result without the effects of the SDEM.

的增大而明显变小.

参考文献

[1] Ploog K, Dohler G H. Compositional and doping superlattices in - semiconductors. Adv Phys, 1983, 32 :285
 [2] Miller R C, Gossard A C, Leinman D A, et al. Parabolic quan-

- tum wells with the $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ system. *Phys Rev B*, 1984, 29:3740
- [3] Sergio C S, Gusev G M, Leite J R, et al. Coexistence of two- and three-dimensional Landau states in a wide parabolic quantum well. *Phys Rev B*, 2001, 64:115314-1
- [4] Herling G H, Rustgi M L. Spatially dependent effective mass and optical properties in a finite parabolic quantum wells. *J Appl Phys*, 1992, 71:796
- [5] Qi X H, Kong X Y, Lin J Y. Effect of a spatially dependent effective mass on the hydrogenic impurity binding energy in a finite parabolic quantum well. *Phys Rev B*, 1998, 58:10578
- [6] Bittkau K, Mecking N, Gui Y S, et al. Photoconductivity of $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ parabolic quantum wells in the optical-phonon regime. *Phys Rev B*, 2005, 71:035337
- [7] Shao Jun. Absorption and reflectivity of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}/\text{AlGaInP}$ multiple quantum wells: influence and reduction of multi-beam interference. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2004, 25(6):651 (in Chinese) [邵军. $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}/\text{AlGaInP}$ 多量子阱的吸收/反射光谱:多光束干涉的影响与消减. *半导体学报*, 2004, 25(6):651]
- [8] Luna-Acosta G A. Hydrogenic impurity in superlattices with parabolic quantum well potentials. *Solid State Commun*, 1985, 55:5
- [9] Learitt R P. Binding energy of hydrogenic impurities in parabolic quantum wells. *Phys Rev B*, 1987, 36:7650
- [10] Zang J X, Rustgi M L. Energy levels of a hydrogenic impurity in a parabolic quantum well with a magnetic field. *Phys Rev B*, 1993, 48, 2465
- [11] Yuen W P. Exact analytic of finite parabolic quantum wells with and without a static electric field. *Phys Rev B*, 1993, 48:17316
- [12] Nculescu E C. Binding energy of a double donor in a parabolic quantum well. *Phys Lett A*, 1995, 197:330
- [13] Nculescu E C. Donor impurity in a parabolic quantum wells. *Phys Lett A*, 1996, 213:85
- [14] Zang L, Xie H J. Electric field effect on the second-order nonlinear optical properties of parabolic and semiparabolic quantum wells. *Phys Rev B*, 2003, 68:235315
- [15] Zang L, Xie H J. Bound state and third-harmonic generation in a semi-parabolic quantum well with an applied electric field. *Physica E*, 2004, 22:791
- [16] Kasapoglu E, Sari H, Sokmen I. Binding energies of shallow donor impurities in different shaped quantum wells under an applied electric field. *Physica B*, 2003, 339:17
- [17] Kasapoglu E, Sokmen I. Shallow donor impurity binding energy in the V-shaped quantum well under the crossed electric and magnetic fields. *Physica E*, 2005, 27:198
- [18] Brey L, Johnson N, Dempsey J. Infrared optical absorption in imperfect parabolic quantum wells. *Phys Rev B*, 1990, 42:1240
- [19] Haupt R, Wendler L. Resonant magnetopolaron effects in parabolic quantum wells in a tilted magnetic field. *Z Phys B*, 1994, 94:49
- [20] Senger R T, Ercelebi A. Path-integral approximation on the stability of large bipolarons in quasi-one-dimensional confinement. *Phys Rev B*, 2000, 61:6063
- [21] Zhao F Q, Liang X X. Polarons with spatially dependent mass in a finite parabolic quantum well. *Chin Phys Lett*, 2002, 19(7):974
- [22] Zhao F Q, Liang X X, Ban S L. Influence of spatially dependent effective mass on bound polarons in a finite parabolic quantum well. *Eur Phys J B*, 2003, 33:3
- [23] Adachi S. GaAs, AlAs, and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: Material parameters for use in research and device applications. *J Appl Phys*, 1985, 58:R1
- [24] Miller D A B, Chemla D S, Damen T C, et al. Electric field dependence of optical absorption near the band gap of quantum well structures. *Phys Rev B*, 1985, 32:1043
- [25] Bastard G. Hydrogenic impurity state in a quantum well: A simple model. *Phys Rev B*, 1981, 24:4714

Binding Energy of a Hydrogenic Impurity in a Finite Parabolic Quantum Well Under an External Electric Field^{*}

Zhao Fengqi[†] and Sarula

(College of Physics and Electron in Information, Inner Mongolia Normal University, Hohhot 010022, China)

Abstract: The ground state and binding energy of a hydrogenic impurity as functions of the electric field and well width in a $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ PQW are investigated with the variational method. The effects of spatial dependent effective mass and spatial dependent dielectric constant are considered in the calculation. The results indicate that the effects of the external electric field on the ground state and binding energy of the hydrogenic impurity are noticeable, and they increase with increasing well width. The effects of the spatial dependent effective mass and spatial dependent dielectric constant make the ground state energy decrease and the binding energy increase. These effects decrease with increasing well width.

Key words: parabolic quantum well; hydrogenic impurity; external electric field; binding energy

PACC: 7320; 7340L

Article ID: 0253-4177(2006)05-0830-04

^{*}Project supported by the National Natural Science Foundation of China(No.10364003)

[†]Corresponding author. Email:fqzhao@mnu.edu.cn

Received 26 June 2005, revised manuscript received 4 December 2005