

压力下极化子效应对有限深量子阱中 施主结合能的影响^{*}

温淑敏^{1,2} 班士良^{1,†}

(1 内蒙古大学理工学院 物理系, 呼和浩特 010021)

(2 内蒙古工业大学理学院 物理系, 呼和浩特 010051)

摘要: 考虑压力及屏蔽效应,同时计入量子阱结构中三类光学声子模(局域类体光学声子、半空间类体光学声子和界面光学声子)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,讨论有限深量子阱中极化子效应对杂质态结合能的影响.结果表明,极化子效应使杂质态结合能明显降低,但压力使极化子效应减弱,屏蔽对极化子效应的影响不明显.

关键词: 量子阱; 屏蔽; 压力; 杂质态; 结合能; 极化子效应

PACC: 6320K; 7155G; 7320H

中图分类号: O471.3

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)06-0848-08

1 引言

在量子阱等低维量子限制系统中,电子和声子间的相互作用(极化子效应)对于材料的光学性质和输运性质起着重要作用.在有限深量子阱中,由于界面的出现,存在着三种光学声子模(阱中的局域体光学声子模、垒中的半空间体光学声子模和局域在界面附近的界面光学声子模),这些声子与电子相互作用的复杂性质,是上世纪80年代以来受到重视的研究课题.对量子阱中的电子-声子相互作用问题,人们已进行了大量的理论研究和计算.

Degani等人^[1]在仅计入体声子与电子的相互作用时,讨论了量子阱中束缚极化子;Sarma等人^[2]计入体纵光学声子研究过零温下无限势垒量子阱中极化子结合能及有效质量;Hai等人^[3]对三种不同的局域势研究了量子阱中的极化子能量及有效质量;陈瑞明等人^[4]和梁希侠等人^[5,6]曾各自独立地导出了量子阱中的体光学声子模和界面光学声子模以及电子与光学声子相互作用的哈密顿量,这些工作为进一步研究量子阱中的电子-声子相互作用打下了基础.随后,人们开始计入界面声子与电子的相互作用,讨论了量子阱中杂质态的特性^[7];郑瑞生等人^[8]计算了体纵光学声子和界面光学声子对GaAs/AlAs量子阱中自由极化子的影响,并讨论了有限深量子阱中电子能谱的极化子效应^[9];赵国忠

等人^[10]研究了对称量子阱中极化子的有效质量和自陷能.

Mason等人^[11]在讨论半导体异质结构中的杂质态问题时,仅考虑了电子-体纵光学声子相互作用对于浅施主类氢杂质态结合能的影响;后来,Sil等人^[12]不但计入电子-声子相互作用而且计入杂质-声子相互作用,研究了量子阱中的束缚极化子问题,但他们对量子阱采用了纯二维近似,得出的结论在窄阱时偏离实际过远;然而,Chen等人^[13]在随后讨论量子阱中杂质态的另一工作中,又仅计入电子与声子的相互作用,而未考虑杂质与声子的相互作用,得到声子对结合能的贡献为正的结论.在讨论杂质态与声子的相互作用(束缚极化子)时,应计入杂质与声子的相互作用,否则,无法与已有理论自洽,在极限情况下(如自由极化子和激子)得到的结论也是错误的.班士良等人^[14]计入了实际异质结势的影响,先讨论了半导体异质结中的极化子问题.进而,在讨论束缚极化子的结合能问题时,考虑体声子和两支界面声子与电子以及与杂质的相互作用^[15],得出声子对结合能的贡献为负,杂质-声子作用显著的结论.近年来,该研究组又讨论了磁场对异质结系统中束缚极化子的影响^[16].文献^[15,16]的计算结果也表明杂质-声子相互作用对结合能的影响大于电子-声子相互作用对结合能的影响.近来我们还研究了压力下屏蔽对有限深量子阱中施主结合能的影响^[17],但未考虑声子的影响.本文则计入声子讨论

^{*} 国家自然科学基金(批准号:60566002)和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

2006-10-18收到,2007-02-07定稿

极化子效应以及屏蔽作用对杂质态的影响.

本文计入量子阱结构中三类光学声子模(局域类体光学声子、半空间类体光学声子和界面光学声子)的作用,利用改进的LLP中间耦合方法处理电子(杂质)-声子相互作用,讨论有屏蔽时,压力下有限深量子阱中极化子效应对杂质态结合能的影响.给出结合能随压力、阱宽及铝组分的变化关系.结果表明,极化子效应使杂质态结合能明显降低,但压力使极化子效应减弱,屏蔽对极化子效应的影响不明显.

2 理论模型

考虑由GaAs(1)和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (2)两种不同的极性半导体材料构成阱宽为 $2d$ 的单量子阱结构.取坐标系之 x - y 平面平行于材料的界面, $|z| \leq d$ 的区域为阱材料“1”, $|z| > d$ 的区域为垒材料“2”,并将坐标原点选在阱中心.设电量为 e 的施主杂质位于阱中 $(0, 0, z_0)$ 处($|z_0| < d$).在该量子阱系统中,电子与局域类体声子(阱中)、半空间类体声子(垒中)和界面声子三种光学声子之间存在相互作用.此外,我们还考虑杂质与局域类体声子(阱中)和界面声子之间的相互作用.在有效质量近似下,系统的哈密顿量可以写成电子、电子-杂质相互作用、自由声子以及电子-声子、杂质-声子相互作用几部分之和,即

$$H = H_e + H_c + H_{\text{ph}} + H_{\text{ei-ph}} \quad (1)$$

式中 H_e 可写成

$$H_e = \frac{p_{\parallel}^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + V(z) \quad (2)$$

式中 $V(z)$ 是势垒高度,满足:

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq d \\ V_0, & |z| > d \end{cases} \quad (3)$$

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

$$H_c = - \frac{e^2}{\epsilon(z, z_0) \sqrt{(z - z_0)^2 + \rho^2}} f(r) \quad (4)$$

其中 $\epsilon(z, z_0)$ 是与材料有关的介电常数

$$\epsilon(z, z_0) = \begin{cases} \epsilon_{\infty}, & |z| \leq d \\ \frac{(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2})}{2}, & |z| > d \end{cases} \quad (5)$$

这里 $\epsilon_{\infty 1}$ 和 $\epsilon_{\infty 2}$ 分别为材料1和2的高频介电常数; $f(r)$ 是屏蔽因子,具体形式由文献[18]给出.

自由声子哈密顿量为^[9]:

$$H_{\text{ph}} = \sum_{k, m} \hbar \omega_{L1} a_{km}^+ a_{km} \theta(d - |z|) + \sum_{k, k_z} \hbar \omega_{L2} a_{k, k_z}^+ a_{k, k_z} \theta(|z| - d) + \sum_{k, \sigma, p} \hbar \omega_{k\sigma p} a_{k\sigma p}^+ a_{k\sigma p} \quad (6)$$

这里 a_{km}^+ (a_{km})是频率为 ω_{L1} 波矢为 (k_{\parallel}, k_m) 的阱中局域类体光学声子的产生(湮灭)算符,且 $k_m = \frac{m\pi}{2d} < \frac{\pi}{a}$ (a 为阱材料的晶格常数); a_{k, k_z}^+ (a_{k, k_z})是频率为 ω_{L2} 波矢为 (k, k_z) 的垒中半空间类体光学声子的产生(湮灭)算符; $a_{k\sigma p}^+$ ($a_{k\sigma p}$)是频率为 $\omega_{k\sigma p}$ 波矢为 k 的局域界面光学声子的产生(湮灭)算符.这里,下标 $p = (+, -)$ 分别代表对称和反对称界面光学声子, $\sigma = (+, -)$ 分别代表高频和低频界面光学声子.界面光学声子的色散由文献[9]给出.

电子及杂质与光学声子的相互作用哈密顿量可以写为

$$H_{\text{ei-ph}} = H_{\text{ei-L01}} + H_{\text{e-L02}} + H_{\text{ei-I0}} \quad (7)$$

$H_{\text{ei-L01}}$ 是阱内纵光学声子和电子及杂质相互作用的哈密顿量

$$H_{\text{ei-L01}} = \sum_{k, m} \{ V_{km} [L_{km}(z) \exp(i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}) - L_{km}(z_0)] a_{km} + h.c. \} \quad (8)$$

其中

$$V_{km} = i \left[\frac{\hbar \omega_{L1}}{2DS} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\epsilon_{01}} \right) \frac{4\pi e^2}{k^2 + k_m^2} \right]^{1/2} \quad (9)$$

$$L_{km}(z) = \sin[k_m(z + d)], \quad |z_j| \leq d \quad (10)$$

$H_{\text{e-L02}}$ 是阱外纵光学声子和电子相互作用的哈密顿量,为

$$H_{\text{e-L02}} = \sum_{k, k_z} \{ V_{kk_z} [L_{kk_z}(z) \exp(i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho})] a_{kk_z} + h.c. \} \quad (11)$$

其中

$$V_{kk_z} = i \left[\frac{\hbar \omega_{L2}}{DS} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty 2}} - \frac{1}{\epsilon_{02}} \right) \frac{4\pi e^2}{k^2 + k_m^2} \right]^{1/2} \quad (12)$$

$$L_{k, k_z}(z) = \sin[k_z(|z| - d)] \theta(|z| - d) \quad (13)$$

$H_{\text{ei-I0}}$ 为电子及杂质与界面光学声子相互作用哈密顿量,为

$$H_{\text{ei-I0}} = \sum_{k\sigma p} \{ V_{k\sigma p} [L_{k\sigma p}(z) \exp(i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}) - L_{k\sigma p}(z_0)] a_{k\sigma p} + h.c. \} \quad (14)$$

其中

$$V_{k\sigma p} = i \left(\frac{\hbar \omega_{k\sigma p}}{S} \times \frac{1 + pe^{-2kd}}{a_1^p \xi_{1\sigma p} + a_2^p \xi_{2\sigma p}} \times \frac{\pi e^2}{k} \right)^{1/2} \quad (15)$$

$$\xi_{i\sigma p} = \left(\frac{\omega_{Li}^2 - \omega_{Ti}^2}{\omega_{Ti}^2 - \omega_{\sigma p}^2} \right) \frac{\omega_{\sigma p}^2}{\omega_{Ti}^2} \times \frac{\epsilon_i}{\epsilon_{0i}}, \quad i = 1, 2 \quad (16)$$

$$\frac{1}{\epsilon_i} = \frac{1}{\epsilon_{\infty i}} - \frac{1}{\epsilon_{0i}}, \quad i = 1, 2 \quad (17)$$

$$L_{k\sigma p} = \begin{cases} \exp[-k(z - d)], & z > d \\ \frac{\cosh(kz)}{\cosh(kd)}, & -d < z < d \\ \exp[k(z + d)], & z < -d \end{cases} \quad (18)$$

$$L_{k\sigma^-} = \begin{cases} \exp[-k(z-d)], & z > d \\ \frac{\sinh(kz)}{\sinh(kd)}, & -d < z < d \\ -\exp[k(z+d)], & z < -d \end{cases} \quad (19)$$

为简化计算,我们作两次么正变换,通过第一次么正变换^[19],在含有声子算符项中消去杂质坐标以简化杂质-声子相互作用能.第一次么正变换算符为

$$U_0 = \exp\left\{\sum_{k,m} [(a_{km}^+ + a_{km}) V_{km}^* L_{km}^*(z_0)/\hbar\omega_{l_1} + \sum_{k\sigma p} (a_{k\sigma p}^+ + a_{k\sigma p}) V_{k\sigma p}^*(z_0)/\hbar\omega_{k\sigma p}]\right\} \quad (20)$$

第一次么正变换后的哈密顿量为

$$H_1 = \frac{p_{//}^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + V(z) + H_c + \sum_{k,m} \hbar\omega_{L1} a_{km}^+ a_{km} \theta(d - |z|) + \sum_{k,k_z} \hbar\omega_{L1} a_{k,k_z}^+ a_{k,k_z} \theta(|z| - d) + \sum_{k\sigma p} [V_{k\sigma p} L_{k\sigma p} \exp(ik \cdot \rho) a_{k\sigma p} + h.c.] - \sum_{k\sigma p} [V_{k\sigma p}^2 L_{k\sigma p}(z) L_{k\sigma p}(z_0) \exp(ik \cdot \rho) / \hbar\omega_{k\sigma p} + h.c.] - \sum_{k,m} [V_{km}^2 L_{km}(z) L_{km}(z_0) \exp(ik \cdot \rho) / \hbar\omega_{l_1} + h.c.] + \sum_{k,k_z} [V_{kk_z} L_{kk_z}(z) \exp(ik \cdot \rho) a_{kk_z} + h.c.] + \sum_{k\sigma p} \hbar\omega_{k\sigma p} a_{k\sigma p}^+ a_{k\sigma p} + \sum_{k,m} [V_{km} L_{km}(z) \exp(ik \cdot \rho) a_{km} + h.c.] \quad (21)$$

再采用变分法计算体系的基态能量.杂质态-声子系的试探波函数可写成杂质态波函数和声子波函数乘积的形式

$$|\Psi\rangle = U|0\rangle|\Psi\rangle, \quad (22)$$

其中 $|\Psi\rangle$ 是杂质态的波函数,具体形式为

$$|\Psi\rangle = \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\sqrt{(z-z_0)^2 + \rho^2}\right]\xi(z) \quad (23)$$

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

$$\xi(z) = \begin{cases} A_1 \cos(k_w z), & |z| \leq d \\ A_2 \cos(k_b d) e^{-k_b(|z|-d)}, & |z| > d \end{cases} \quad (24)$$

其中 A_1 和 A_2 为归一化常数; k_w 和 k_b 分别表示电子在阱和垒中的波矢,由以下两式确定

$$k_w = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}}, k_b = \sqrt{\frac{2m_2 (V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (25)$$

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:

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

式中 $|0\rangle$ 代表声子基态,即零声子态(零温极限);

U 为准二维 LLP 么正变换^[20],将其选为

$$U = \exp\left\{\sum_{k,m} [F_{km}(z) \exp(-ik \cdot \rho) a_{km}^+ - h.c.] + \sum_{k,k_z} [Q_{k,k_z}(z) \exp(-ik \cdot \rho) a_{k,k_z}^+ - h.c.] + \sum_{k\sigma p} [G_{k\sigma p}(z) \exp(-ik \cdot \rho) a_{k\sigma p}^+ - h.c.]\right\} \quad (26)$$

其中

$$F_{km}(z) = f_{km}(z) L_{km}(z) \theta(d - |z|) \quad (27)$$

$$Q_{kk_z} = q_{kk_z} L_{kk_z}(z) \theta(|z| - d) \quad (28)$$

$$G_{k\sigma p} = g_{k\sigma p} L_{k\sigma p}(z) \quad (29)$$

这里 $f_{km}, q_{k,k_z}, g_{k\sigma p}$ 均为变分参数,它们可通过变分计算确定.

第二次么正变换后哈密顿量中的零声子项为

$$H_0^* = \langle 0 | U^+ H_1 U | 0 \rangle$$

$$= \frac{p_{//}^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + V(z) + H_c +$$

$$\frac{1}{2m} \left[\sum_{k,m} \hbar k |F_{km}|^2 + \sum_{k,k_z} \hbar k |Q_{k,k_z}|^2 + \sum_{k\sigma p} \hbar k |G_{k\sigma p}|^2 \right] + \sum_{k,m} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} + \hbar\omega_{L1} \right] |F_{km}|^2 + \sum_{k,k_z} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m_2} + \hbar\omega_{L2} \right] |Q_{k,k_z}|^2 + \sum_{k\sigma p} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar\omega_{k\sigma p} \right] |G_{k\sigma p}|^2 + \sum_{k,m} \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m_1} |f_{km}|^2 \cos^2[k_m(z+d)] \theta(d - |z|) + \sum_{k,k_z} \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_2} |q_{k,k_z}|^2 \cos^2[k_z(|z|-d)] \theta(|z|-d) + \sum_{k\sigma p} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |g_{k\sigma p}|^2 |J_{k\sigma p}(z)|^2 + \sum_{k,m} [V_{km}(z) F_{km}(z) + h.c.] + \sum_{k,k_z} [V_{k,k_z}(z) Q_{k,k_z}(z) + h.c.] + \sum_{k\sigma p} [W_{k\sigma p}(z) G_{k\sigma p}(z) + h.c.] - \sum_{k,m} [V_{k,m}^2 L_{k,m}(z) L_{k,m}(z_0) / \hbar\omega_{l_1} \exp(ik \cdot \rho) + h.c.] - \sum_{k\sigma p} [V_{k\sigma p}^2 L_{k\sigma p}(z) L_{k\sigma p}(z_0) / \hbar\omega_{k\sigma p} \exp(ik \cdot \rho) + h.c.] \quad (30)$$

这里

$$J_{k\sigma^+} = \begin{cases} -\exp[-k(z-d)], & z > d \\ \frac{\sinh(kz)}{\cosh(kd)}, & -d < z < d \\ \exp[k(z+d)], & z < -d \end{cases} \quad (31)$$

$$J_{k\sigma^-} = \begin{cases} -\exp[-k(z-d)], & z > d \\ \frac{\cosh(kz)}{\sinh(kd)}, & -d < z < d \\ -\exp[k(z+d)], & z < -d \end{cases} \quad (32)$$

可以通过对上述能量求变分极小确定参数 f_{km} , q_{k,k_z} 和 $g_{k\sigma p}$, 即

$$\frac{\partial \langle \Psi | H_0^* | \Psi \rangle}{\partial f_{km}^*} = 0 \quad (33)$$

$$\frac{\partial \langle \Psi | H_0^* | \Psi \rangle}{\partial q_{k,k_z}^*} = 0 \quad (34)$$

$$\frac{\partial \langle \Psi | H_0^* | \Psi \rangle}{\partial g_{k\sigma p}^*} = 0 \quad (35)$$

杂质态-声子相互作用系统的变分能量为

$$\begin{aligned} E_v &= \min_{\lambda} \langle \Psi | H^* | \Psi \rangle = \\ &= \min_{\lambda} \langle \Psi | \langle 0 | U^+ H_1 U | 0 \rangle | \Psi \rangle = \\ &= \min_{\lambda} \langle \Psi | H_0^* | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \frac{p_{x-y}^2}{2m} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{p_z^2}{2m} | \Psi \rangle + \\ &= \langle \Psi | V(z) | \Psi \rangle + \langle \Psi | H_c | \Psi \rangle - \\ &= E_{c-LO1} - E_{c-LO2} - E_{c-IO} - E_{i-LO1} - E_{i-IO} \quad (36) \end{aligned}$$

这里 E_{c-LO1} 是电子与阱中的局域类体光学声子相互作用能量; E_{c-LO2} 是电子与垒中的半空间类体光学声子的相互作用能量; E_{c-IO} 是电子与局域在界面附近的界面光学声子的相互作用能量; E_{i-LO1} 是杂质与阱中的局域类体光学声子相互作用能量; E_{i-IO} 是杂质与局域在界面附近的界面光学声子的相互作用能量. 其表达式分别为

$$\begin{aligned} E_{c-LO1} &= \sum_{k,m} | \langle \Psi | V_{km}^*(z) \sin^2[k_m(z + \\ &= d)] \theta(d - |z|) | \Psi \rangle |^2 \times \\ &= \left[\left(\hbar \omega_{L1} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} \right) \langle \Psi | \sin^2[k_m(z + \\ &= d)] \theta(d - |z|) | \Psi \rangle + \right. \\ &= \left. \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m_1} \langle \Psi | \cos^2[k_m(z + d)] \theta(d - |z|) | \Psi \rangle \right]^{-1} \quad (37) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{c-LO2} &= \sum_{k,k_z} | \langle \Psi | V_{k,k_z}^*(z) \sin^2[k_z(z + \\ &= d)] \theta(d - |z|) | \Psi \rangle |^2 \times \\ &= \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_2} + \hbar \omega_{L2} \right) \langle \Psi | \sin^2[k_z(|z| - \\ &= d)] \theta(|z| - d) | \Psi \rangle + \right. \\ &= \left. \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_2} \langle \Psi | \cos^2[k_z(|z| - d)] \theta(|z| - d) | \Psi \rangle \right]^{-1} \quad (38) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{c-IO} &= \sum_{k,\sigma,p} | \langle \Psi | V_{k,\sigma,p}^*(z) L_{k,\sigma,p}^2 | \Psi \rangle |^2 \times \\ &= \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar \omega_{k\sigma p} \right) \langle \Psi | L_{k\sigma p}^2(z) | \Psi \rangle + \right. \\ &= \left. \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle \Psi | J_{k\sigma p}^2(z) | \Psi \rangle \right]^{-1} \quad (39) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{i-LO1} &= \sum_{k,m} \langle \Psi | V_{k,m}^2 L_{k,m}(z) L_{k,m}(z_0) \exp \\ &= (ik \cdot \rho) / \hbar \omega_{ll} + h.c. | \Psi \rangle \quad (40) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{i-IO} &= \sum_{k,\sigma,p} \langle \Psi | V_{k\sigma p}^2 L_{k\sigma p}(z) L_{k\sigma p}(z_0) \exp \\ &= (ik \cdot \rho) | \hbar \omega_{k\sigma p} + h.c. | \Psi \rangle \quad (41) \end{aligned}$$

杂质态的结合能为:

$$E_B = E_{free} - E_v \quad (42)$$

其中 E_{free} 为自由极化子的基态能量. 令所有与杂质有关的项为零, 重复以上过程即可得出其值.

3 压力对参数的影响

在压力作用下, 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.

3.1 禁带宽度的压力系数为^[21]

$$E_g(P) = E_g + \alpha P \quad (43)$$

其中 E_g 为材料在常压下的能隙; P 为压力; α 为能隙的压力系数.

3.2 电子有效质量的压力系数为^[22]

$$\frac{m_0}{m(P)} = 1 + \frac{C}{E_g(P)} \quad (44)$$

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 为只与材料有关而不随压力变化的常数.

3.3 介电常数的压力系数为^[21]

高频介电常数随压力的变化关系为

$$\epsilon_{\infty}(P) = 1 + [\epsilon_{\infty}(0) - 1] e^{-\frac{5}{3B}(0.9 - f_1)P} \quad (45)$$

静态介电常数与高频介电常数的关系则可用 LST 关系

$$\epsilon_0(P) = \epsilon_{\infty}(P) (\hbar \omega_{LO} / \hbar \omega_{TO})^2 \quad (46)$$

来确定.

3.4 晶格振动频率的压力系数

对于三元体材料的各支光学声子, 有如下的结果

类 GaAs 声子支

$$\begin{aligned} \hbar \omega_{LO_1} &= [36.25 - 6.55x + 1.79x^2] + \\ &= [0.0491 + 0.00870x]P \quad (47) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hbar \omega_{TO_1} &= [33.29 - 0.64x + 1.16x^2] + \\ &= [0.0494 + 0.00691x]P \quad (48) \end{aligned}$$

类 AlAs 声子支

$$\begin{aligned} \hbar \omega_{LO_2} &= [44.63 + 8.78x - 3.32x^2] + \\ &= [0.0758 - 0.0186x]P \quad (49) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hbar \omega_{TO_2} &= [44.63 + 0.55x - 0.30x^2] + \\ &= [0.0689 - 0.00634x]P \quad (50) \end{aligned}$$

本文采用有效声子近似^[23]

表 1 数值计算中所用到的参数

Table 1 Parameters used in the computation

	ϵ_{∞}	$\hbar\omega_{LO}$	$\hbar\omega_{TO}$	m_0	f_i	B_0	B'_0	E_g	α
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^[23], 2):Lam 等人^[24].

$$\hbar\omega_{LO(TO)} = (1-x)\hbar\omega_{LO(TO)}^{GaAs} + x\hbar\omega_{LO(TO)}^{AlAs} \quad (51)$$

则有

$$\hbar\omega_{LO} = [36.25 + 1.83x + 17.12x^2 - 5.11x^3] + [0.0491 + 0.0351x - 0.0273x^2]P \quad (52)$$

$$\hbar\omega_{TO} = [33.29 + 10.70x + 0.03x^2 + 0.86x^3] + [0.0494 + 0.0264x - 0.0133x^2]P \quad (53)$$

数值计算中所用参数由表 1 给出.

4 数值计算与结果讨论

我们只讨论铝组分 $x \leq 0.4$ 和压力 $P \leq 4\text{GPa}$ 时直接带隙半导体的情况. 计算中所取的电子面密度为 $4 \times 10^{15}/\text{m}^2$. 计算结果分别如图 1~6 所示.

图 1 和图 2 分别给出考虑屏蔽及未考虑屏蔽时, 在给定量子阱宽度(窄阱)及 Al 组分条件下, 杂质态结合能随压力的变化关系. 由半导体材料的压力系数可知, 电子的有效质量和体纵光学声子能量均随压力增大, 而高频介电常数和静态介电常数则随压力的增大而减小. 由此可以得出, 电子与局域体声子、半空间类体声子以及界面声子的相互作用能量均随压力而增加. 此时, 电子与界面声子的作用和杂质与局域体声子的作用对杂质态结合能的贡献较

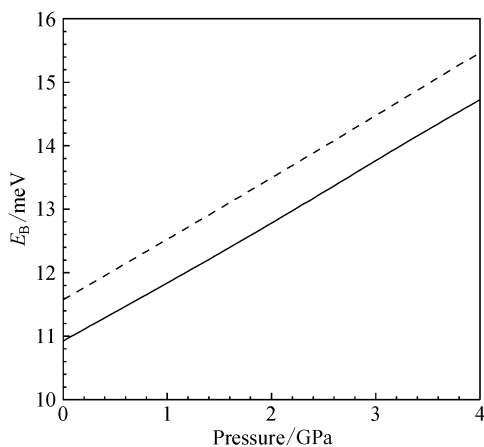


图 1 考虑屏蔽, 铝组分为 0.15, 阱宽为 2nm 时, 结合能随压力的变化关系. 实(虚)线分别为有(无)声子的结果.

Fig. 1 Considering screening effect, binding energies as functions of hydrostatic pressure for the given Al concentration $x = 0.15$, well width $2d = 2\text{nm}$. Solid (dashed) lines are the results with (without) phonon effect.

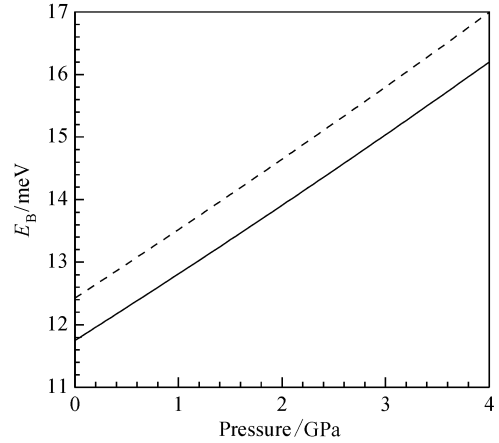


图 2 铝组分为 0.15, 阱宽为 2nm 时, 结合能随压力的变化关系. 实(虚)线分别为有(无)声子的结果.

Fig. 2 Binding energies as functions of hydrostatic pressure for the given Al concentration $x = 0.15$, well width $2d = 2\text{nm}$. Solid (dashed) lines are the results with (without) phonon effect.

大, 但一方面, 后者对压力的敏感程度远小于前者, 另一方面, 后者对杂质态结合能的极化子效应的贡献起主要作用. 而库仑相互作用乃至屏蔽作用对压力敏感. 这些影响导致在考虑极化子效应的情况下, 杂质态结合能仍然随压力明显增大. 极化子效应随压力增加减弱但对压力不敏感, 如: 无屏蔽时, $P = 0$ 时极化子效应使结合能降低 7.6%, $P = 4\text{GPa}$ 时结合能降低 5.7%; 有屏蔽时, $P = 0$ 时极化子效应使结合能降低 7.8%, $P = 4\text{GPa}$ 时结合能降低 6.7%.

图 3 和图 4 分别给出考虑屏蔽及未考虑屏蔽时, 在给定 Al 组分及压力的情况下, 结合能随阱宽的变化关系. 由图可见, 在有无屏蔽及极化子效应时结合能均随阱宽先增大, 达到极大值后随阱宽增加而减小, 极化子效应使结合能的峰值略有移动. 未考虑极化子效应时, 结合能在阱宽为 4.2nm 时达到最大, 而考虑极化子效应时结合能在阱宽 3.6nm 时达到最大. 极化子效应使结合能降低, 屏蔽及压力均使极化子效应对结合能的影响降低. 在阱很窄时, 电子在阱内的几率很小, 穿透到势垒中的几率较大, 使得电子与阱中声子相互作用能量 E_{c-L01} 很小, 而电子与垒中的声子相互作用能量 E_{c-L02} 很大. 随着阱宽的增加, 电子在阱内的几率逐渐变大, 从而使得 E_{c-L01} 不断增加在宽阱极限趋于饱和, E_{c-L02} 随着阱宽的增加而逐渐减小, 直至为零. 当阱很窄时, 阱内电子穿透到阱外离界面较远, 界面声子对电子的影响非常小, 导致电子与界面声子相互作用能量 E_{c-10} 很小; 随着阱宽的增加, 电子在界面附近出现的几率增大, 阱宽达到一定值时, 电子在界面附近出现的几率最大, 使得 E_{c-10} 达到最大; 随着阱宽的增

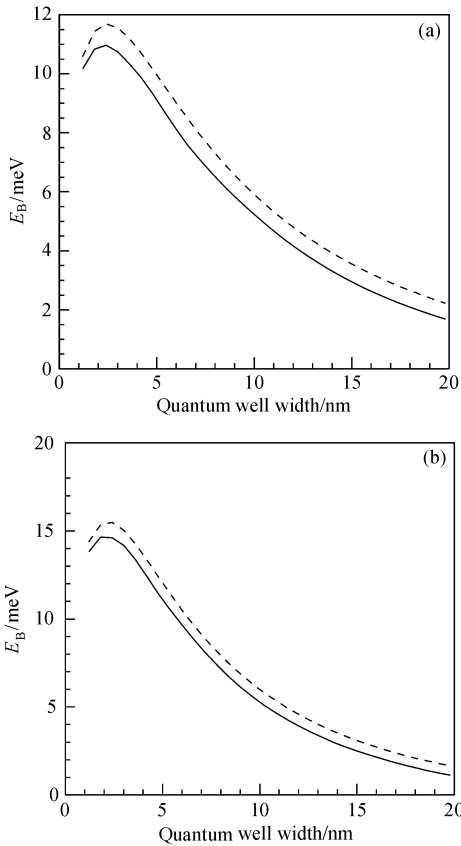


图 3 (a)考虑屏蔽,铝组分为 0.15,压力为 0 时,结合能随阱宽的变化关系 实(虚)线分别为有(无)声子时的结果;(b)考虑屏蔽,铝组分为 0.15,压力为 4GPa 时,结合能随阱宽的变化关系 实(虚)线分别为有(无)声子时的结果.

Fig. 3 (a) Considering screening effect, binding energies as functions of well width for the given Al concentration $x = 0.15$ pressure = 0 Solid (dashed) lines are the results with (without) phonon effect; (b) Considering screening effect, binding energies as functions of well width for the given Al concentration $x = 0.15$ pressure = 4GPa Solid (dashed) lines are the results with (without) phonon effect.

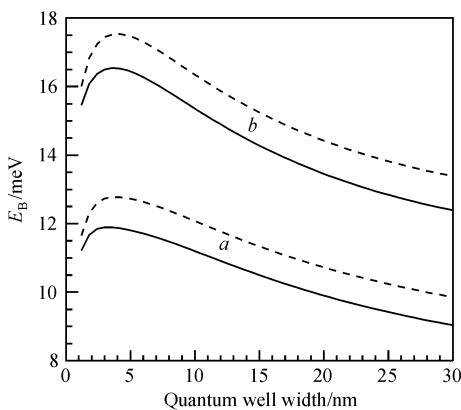


图 4 铝组分为 0.15 时,结合能随阱宽的变化关系 实(虚)线分别为有(无)声子时的结果, a: 压力为 0, b: 压力为 4GPa. Fig. 4 Binding energies as functions of well width for the given Al concentration $x = 0.15$ Solid (dashed) lines are the results with (without) phonon effect. a: $P = 0$; b: $P = 4GPa$

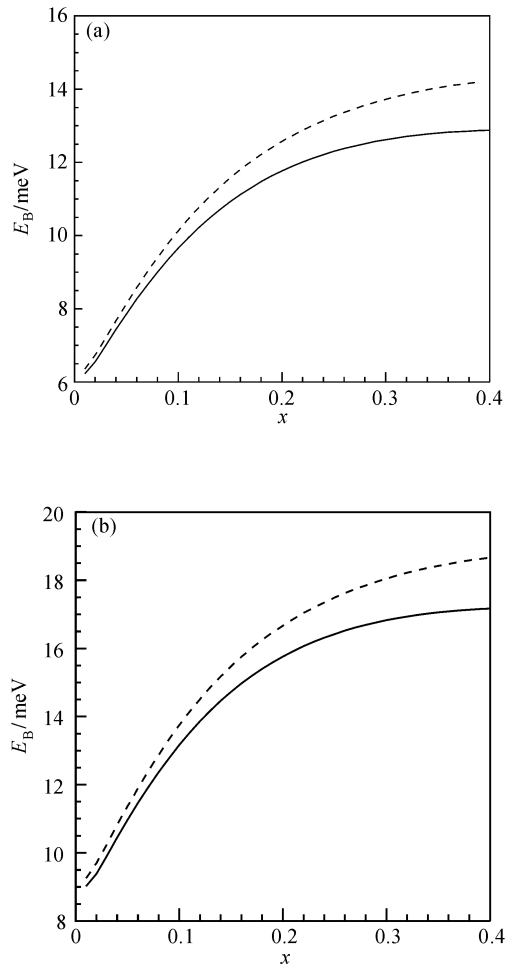


图 5 (a)考虑屏蔽,阱宽为 2nm,压力为 0 时,结合能随铝组分的变化关系 实(虚)线分别为有(无)声子时的结果;(b)考虑屏蔽,阱宽为 2nm,压力为 4GPa 时,结合能随铝组分的变化关系 实(虚)线分别为有(无)声子时的结果.

Fig. 5 (a) Considering screening effect, binding energies as functions of Al concentration x for the given well width $2d = 2nm$, pressure = 0 Solid (dashed) lines are the results with (without) phonon effect; (b) Considering screening effect, binding energies as functions of Al concentration x for the given well width $2d = 2nm$, pressure = 4GPa Solid (dashed) lines are the results with (without) phonon effect.

加,由于界面势的排斥作用,电子在界面附近出现的几率减小,从而 E_{c-10} 逐渐减小. 即 3 类声子分别在不同的阱宽范围起主要作用,在有屏蔽及压力时,情况相同. 杂质与界面声子和局域体声子作用对结合能的贡献随阱宽的变化与电子类似,但对杂质态的贡献远大于电子的贡献.

图 5 和图 6 分别给出考虑屏蔽及未考虑屏蔽时(窄阱时)结合能随 Al 组分变化关系. 可以看出,结

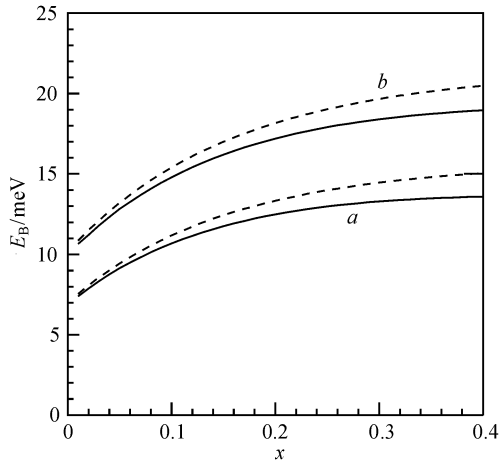


图6 阱宽为2nm时,结合能随铝组分的变化关系 实(虚)线分别为有(无)声子时的结果, *a*: 压力为0, *b*: 压力为4GPa.

Fig. 6 Binding energies as functions of Al concentration x for the given well width $2d = 2\text{nm}$ Solid (dashed) lines are the results with (without) phonon effect. a : $P = 0$; b : $P = 4\text{GPa}$

合能随铝组分的增加而增大,极化子效应使结合能降低.当Al组分较大时,极化子效应使结合能降低的更为明显.在无屏蔽, $P = 0$, 铝组分为0.4时,极化子效应使结合能降低9.7%; $P = 4\text{GPa}$ 时,极化子效应使结合能降低7.4%.有屏蔽, $P = 0$, Al组分为0.4时,极化子效应使结合能降低9.5%;而 $P = 4\text{GPa}$ 时,极化子效应使结合能降低8%.此时,极化子效应使结合能降低的主要原因为杂质与界面声子作用的贡献.

5 结论

本文计入量子阱结构中3类光学声子模(局域类体光学声子、半空间类体光学声子和界面光学声子)的作用,讨论有限深量子阱中极化子效应对杂质态结合能的影响.结果表明,考虑极化子效应与不考虑极化子效应时,杂质态结合能随压力和阱宽的变化趋势相同,极化子效应使杂质态结合能明显降低,但压力使极化子效应减弱,屏蔽对极化子效应的影响不明显.窄阱时,极化子效应随Al组分增加而明显.在不考虑压力、屏蔽及极化子效应时,本文所得结论与文献[25]一致.

采用连续介质模型考虑在压力和屏蔽作用下声子对杂质态结合能的影响涉及的因素过多,其机理有待进一步的讨论.

参考文献

- [1] Degani M H, Hipolito O. Bound polaron in GaAs-GaAlAs quantum-well structures. *Phys Rev B*, 1986, 33: 4090
- [2] Sarma S D, Stopa M. Phonon renormalization effects in quantum well. *Phys Rev B*, 1987, 36: 9595
- [3] Hai G, Peeters F M, Derreese J T. Polaron energy and effective mass in a quantum well. *Phys Rev B*, 1990, 42: 11063
- [4] Chen R M, Lin D L, George T F. Optical-phonon modes in a double heterostructure of polar crystals. *Phys Rev B*, 1990, 41: 1435
- [5] Liang X X, Wang X. Electron-phonon interaction in a quantum well. *Phys Rev B*, 1991, 43: 5155
- [6] Liang X X. Interaction of interface optical phonons in an asymmetric quantum well. *J Phys*, 1992, CM4: 9769
- [7] Shen Z J, Yuan X Z, Shen G T, et al. Effect of the electron-surface-optical-phonon interaction on the impurity-state energies in a square quantum well. *Phys Rev B*, 1994, 49: 11035
- [8] Zheng R S, Ban S L, Liang X X. Effects of interface and bulk optical phonons on polarons in a quantum well. *Phys Rev B*, 1994, 49: 1796
- [9] Zheng R S, Ban S L, Liang X X. Polaronic effect on the electron energy spectrum in a quantum well. *J Phys Condens Matter*, 1994, 6: 10307
- [10] Zhao G Z, Pan S H, Yang G Z. Effective mass and self-trapped energy of polaron in symmetric quantum well. *Acta Physica Sinica*, 1995, 44: 1335 (in Chinese) [赵国忠, 潘少华, 杨国桢. 对称量子阱中极化子的有效质量和自陷能. *物理学报*, 1995, 44: 1335]
- [11] Mason B A, Sarma S D. Phonon-induced shift in shallow donor levels of semiconductor quantum structures. *Phys Rev B*, 1986, 33: 8379
- [12] Sil S, Chatterjee A. Ground and excited states of a bound polaron in a purely two-dimensional quantum well. *J Phys Condens Matter*, 1991, 3: 9401
- [13] Chen Y N, Chuu D S, Lin Y K. The effect of electron-phonon interaction on the impurity binding energy in a quantum well. *J Phys Condens Matter*, 1999, 11: 8185
- [14] Ban S L, Hasbun J E. Interface polarons in a realistic hetero-junction potential. *Eur Phys J*, 1999, B 8: 453
- [15] Ban S L, Hasbun J E. Bound polarons in a polar semiconductor heterojunction. *Phys Rev B*, 1999, 59: 2276
- [16] Zhang M, 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]
- [17] Wen Shumin, Ban Shiliang. Screening influence on the binding energies of donors in quantum wells with finite barriers under hydrostatic pressure. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2006, 27(1): 63 (in Chinese) [温淑敏, 班士良. 压力下屏蔽对有限深量子阱中施主结合能的影响. *半导体学报*, 2006, 27(1): 63]
- [18] Ban S L, Hasbun J E. Donor level in a quasi-two dimensional heterojunction system. *Solid State Commun*, 1999, 109: 93
- [19] Platzman P M. Ground-state energy of bound polarons. *Phys Rev*, 1962, 125: 1961
- [20] Lee T D, Low F E, Pines D. The motion of slow electrons in a polar crystal. *Phys Rev*, 1953, 90: 297

- [21] 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
- [22] Ting D Z Y, Chang Y C. Γ -X mixing in GaAs/Al_xGa_{1-x}As and Al_xGa_{1-x}As/AlAs superlattices. *Phys Rev B*, 1987, 36: 4359
- [23] Adachi S. GaAs, AlAs, and Ga_{1-x}Al_xAs material parameters for use in research and device applications. *J Appl Phys*, 1985, 58: R1
- [24] Lam P K, Cohen M L, Martinez G. Analytic relation between bulk moduli and lattice constants. *Phys Rev B*, 1987, 35: 9190
- [25] Oliveira L E. 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: 10641

Influence of Polaronic Effect 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 *Department of Physics, Inner Mongolia University of Technology, Hohhot 010051, China*)

Abstract: A modified LLP variational method is adopted to discuss the polaronic effect on the binding energy of an impurity in an infinite quantum well by considering the pressure and screening effects. The influences from three optical phonon modes in the system (including confined longitudinal optical (LO) phonons, half-space LO phonons, and interface optical phonons) on the binding energy are considered. The results show that the polaronic effect significantly decreases the binding energy, but pressure weakens the polaronic effect. The influence of screening on the polaronic effect is not apparent.

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

PACC: 6320K; 7155G; 7320H

Article ID: 0253-4177(2007)06-0848-08

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 60566002) and the Project for Excellent Subject-Directors of Inner Mongolia Autonomous Region

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

Received 18 October 2006, revised manuscript received 7 February 2007

©2007 Chinese Institute of Electronics