

文章编号: 1000-7032(2013)09-1128-07

导带弯曲对有限深 GaN/Ga_{1-x}Al_xN 球形量子点中束缚极化子的影响及其压力效应

曹艳娟¹, 闫祖威^{1,2*}, 石磊²

(1. 内蒙古大学 物理科学与技术学院, 内蒙古 呼和浩特 010021;

2. 内蒙古农业大学 理学院, 内蒙古 呼和浩特 010018)

摘要: 采用三角势近似界面导带弯曲,研究了有限高势垒 GaN/Ga_{1-x}Al_xN 球形量子点中束缚极化子的结合能及其压力效应。数值计算了杂质态与声子之间相互作用对结合能的影响,同时与方形势垒进行了比较。结果表明,随着电子面密度的增加,导带弯曲效应增强,束缚极化子结合能逐渐下降。当电子面密度 $n_s = (6.0, 8.0) \times 10^{11}/\text{cm}^2$ 且量子点半径 $R > 10 \text{ nm}$ 时,束缚极化子的结合能趋近于一个相同且较小的值。结合能的极化效应主要来自杂质与光学声子相互作用的贡献。

关键词: 量子点; 束缚极化子; 电子面密度

中图分类号: O471.3

文献标识码: A

DOI: 10.3788/fgxb20133409.1128

Effect of Band Bending on The Bound Polaron in A GaN/Ga_{1-x}Al_xN Spherical Finite-potential Quantum Dot Under Pressure

CAO Yan-juan¹, YAN Zu-wei^{1,2*}, SHI Lei²

(1. School of Physics Science and Technology, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China;

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

* Corresponding Author, E-mail: zuyan101@126.com

Abstract: The bound polaron in a GaN/Ga_{1-x}Al_xN spherical finite-potential quantum dot under hydrostatic pressure is investigated by using a triangular potential to approximate the band bending of the interface potential. We performed numerical calculation on the binding energy of the electron-phonon and ion-phonon interactions. The binding energy of a bound polaron is compared with the case of square potential. The results show that the binding energy of bound polaron decreases with the increasing of electron areal density. We observed that the binding energy closes to the different values of electron areal density $n_s = (6.0, 8.0) \times 10^{11}/\text{cm}^2$ when the dot radius $R > 10 \text{ nm}$. The ion-phonon interactions play a major role in the polaronic effect.

Key words: quantum dot; the bound polaron; electron areal density

收稿日期: 2013-04-25; 修订日期: 2013-07-03

基金项目: 国家自然科学基金(11364028, 10964006); 内蒙古自治区自然科学基金重大项目(2013ZD02); 内蒙古农业大学科技创新团队(NDPYTD2010-7)资助项目

作者简介: 曹艳娟(1986-), 女, 内蒙古通辽人, 主要从事凝聚态理论的研究。

E-mail: caoyanjuan123@126.com

1 引言

随着纳米技术的发展,人们对于氮化物半导体材料及相关低维系统的物理特性进行了广泛研究。由于流体静力学压力和半导体掺杂对改变材料的光学、电学性质非常重要,因此人们从理论上研究了压力对量子阱^[1-2]、量子线^[3-4]和量子点^[5-7]中杂质态的影响,取得了许多重要结果。电子-声子相互作用对半导体量子阱、量子线、量子点等异质结系统中的电学性质和光学性质有显著影响。最近,Vartanian等^[8]计算了电场对柱形量子点中束缚极化子结合能的影响;皇甫等^[9]讨论了外电场下半导体球形量子点中极化子效应和 Stark 能移;Samak^[10]计算了有限高球形量子点中光学声子效应;Melnikov等^[11]计算了有限深势垒球形量子点中电-声子相互作用,考虑了电子-声子和声子-杂质之间的相互作用。很多学者对抛物形^[12-14]量子点中的极化子效应进行了计算;张敏等^[15]讨论了三角势近似下无限深势垒球形量子点中杂质态的影响;我们计算了导带弯曲对有限深 GaN/Ga_{1-x}Al_xN 球形量子点中杂质态束缚能及其压力效应,获得了一些有意义的结论^[16]。

本文在有效质量近似下,采用变分法研究了导带弯曲对有限深 GaN/Ga_{1-x}Al_xN 球形量子点中束缚极化子结合能的影响及其压力效应。考虑了电子-光学声子和杂质-光学声子之间的相互作用,利用改进的 LLP 中间耦合方法计算了束缚极化子的结合能随量子点半径、电子面密度的变化关系,进一步计算了极化子能移随量子点半径的变化关系。结果显示,导带弯曲对束缚极化子结合能的影响是明显的。

2 理论模型

2.1 模型

考虑由 GaN 和 Ga_{1-x}Al_xN 两种不同的极性材料构成的单量子点结构,量子点半径为 R ,界面处异质结势采用三角势近似,界面势垒为有限高。系统的哈密顿量写为:

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} + H_{ion-ph}, \quad (1)$$

式中

$$H_e = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} + V(r), \quad (2)$$

这里, \hbar 为普朗克常数, e 是电子的电量, ϵ 是材料

的高频介电常数, m^* 为电子的有效质量。

$$m^* = \begin{cases} m_1, & r < R \\ m_2, & r \geq R \end{cases}, \quad (3)$$

m_1 和 m_2 分别为 GaN 和 Ga_{1-x}Al_xN 材料的有效质量, R 为量子点的半径。

$$\epsilon = \begin{cases} \epsilon_{1\infty}, & r < R \\ \epsilon_{2\infty}, & r \geq R \end{cases}, \quad (4)$$

$\epsilon_{1\infty}$ 是量子点内的高频介电常数, $\epsilon_{2\infty}$ 是量子点外的高频介电常数。

导带弯曲用三角势近似, $V(r)$ 可写为下列形式:

$$V(r) = \begin{cases} eF_r(R-r), & r < R \\ V_0, & r \geq R \end{cases}, \quad (5)$$

其中

$$V_0 = 0.6(E_{g2} - E_{g1}), \quad (6)$$

E_{g2} 和 E_{g1} 分别为 Ga_{1-x}Al_xN 和 GaN 两种材料的禁带宽度, $F_r = \frac{4\pi n_s e^{[17]}}{\epsilon}$ 代表导带弯曲产生的电场, n_s 是电子的面密度。

第二项为纵光学声子的哈密顿量:

$$H_{ph} = \sum_{lmn} \hbar\Omega \left(a_{lmn}^+ a_{lmn} + \frac{1}{2} \right), \quad (7)$$

式中纵光学(LO)声子的本征频率分别为 $\Omega = \omega_{1LO}$ 或 ω_{2LO} , a_{lmn}^+ 与 a_{lmn} 是量子点材料中 LO 声子的产生与湮灭算符。

第三项为电子与 LO 声子相互作用的哈密顿量:

$$H_{e-ph}^{(LO)} = \begin{cases} H_{e-ph}^{(1)}, & r < R \\ H_{e-ph}^{(2)}, & r \geq R \end{cases}, \quad (8)$$

$$H_{e-ph}^{(1)} = - \sum_{lmn} \beta_{lmn}^{(1)} [V_{lmn}^{(1)}(r) a_{lmn} + V_{lmn}^{(1)*}(r) a_{lmn}^+], \quad (9)$$

$$H_{e-ph}^{(2)} = - \sum_{lmn} \beta_{lmn}^{(2)} [V_{lmn}^{(2)}(r) a_{lmn} + V_{lmn}^{(2)*}(r) a_{lmn}^+], \quad (10)$$

$$\beta_{lmn}^{(1)} = \left[\frac{4\pi e^2}{R} \frac{\omega_{1LO}}{\mu_{nl}^2 \mu_{l+1}(\mu_{nl})} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_{1\infty}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_{10}} \right) \right]^{1/2}, \quad (11)$$

$$V_{lmn}^{(1)}(r) = j_l(k_{nl}^{(1)} r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (12)$$

$$\beta_{lmn}^{(2)} = \left[\frac{2\pi e^2}{R} \frac{\hbar\omega_{2LO}}{I_{nl}} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_{2\infty}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_{20}} \right) \right]^{1/2}, \quad (13)$$

$$V_{lmn}^{(2)}(r) = f_l(k_{nl}^{(2)} r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (14)$$

其中, $k_{nl} = \mu_{nl}/R$, μ_{nl} 是 l 阶球贝塞尔函数 j_l 的第 n 个根, Y_{lm} 是球谐函数, β_{lmn} 为电子-声子相互作用的耦合系数。

$$f_l(k_{nl}^{(2)}r) = j_l(k_{nl}^{(2)}R) + \tilde{B}n_l(k_{nl}^{(2)}r), \quad (15)$$

式中 n_l 是 l 阶球诺依曼函数。

由量子点界面的边界条件可知

$$f_l(k_{nl}^{(2)}R) = 0, \quad (16)$$

$$f_l(k_{nl}^{(2)}R_2) = 0. \quad (17)$$

第四项为杂质与 LO 声子相互作用的哈密顿量:

$$H_{\text{ion-ph}} = \begin{cases} H_{\text{ion-ph}}^{(1)}, & r < R \\ H_{\text{ion-ph}}^{(2)}, & r \geq R \end{cases}, \quad (18)$$

$$H_{\text{ion-ph}}^{(1)} = \sum_{lmn} \beta_{lmn}^{(1)} [V_{lmn}^{(1)}(r_0)a_{lmn} + V_{lmn}^{(1)*}(r_0)a_{lmn}^+], \quad (19)$$

$$f_{nlm} = \begin{cases} -\frac{\beta_{nlm}^{(1)} \langle \varphi(r) | V_{nlm}^{(1)}(r) - V_{nlm}^{(1)}(r_0) | \varphi(r) \rangle}{\hbar\omega_{1LO}}, & r < R \\ -\frac{\beta_{nlm}^{(2)} \langle \varphi(r) | V_{nlm}^{(2)}(r) - V_{nlm}^{(2)}(r_0) | \varphi(r) \rangle}{\hbar\omega_{2LO}}, & r \geq R \end{cases}. \quad (23)$$

变换后的哈密顿量为:

$$H_{\text{eff}} = U_2^{-1}U_1^{-1}HU_1U_2, \quad (24)$$

在绝热近似下, 基态试探波函数选取为:

$$|\psi\rangle = |\varphi(r)\rangle |0\rangle, \quad (25)$$

$$\varphi(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} N\sin(\alpha r)\exp(-\lambda_2 r)/r, & r < R \\ N\sin(\alpha R)\exp(\beta R)\exp(-\beta r)\exp(-\lambda_2 r)/r, & r \geq R \end{cases}, \quad (27)$$

$|\varphi_0(r)\rangle$ 是自由电子的试探波函数, 具体形式为

$$\varphi_0(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} N_0\sin(\alpha r)\exp(-\lambda_1 r)/r, & r < R \\ N_0\sin(\alpha R)\exp(\beta R)\exp(-\beta r)\exp(-\lambda_1 r)/r, & r \geq R \end{cases}, \quad (28)$$

其中 λ_1 和 λ_2 是变分参数, $\alpha = \sqrt{2m_1E_0/\hbar^2}$,

$$\beta = \sqrt{2m_2(V_0 - E_0)/\hbar^2}.$$

束缚极化子基态能量的期望值为:

$$E = \langle \psi | H_{\text{eff}} | \psi \rangle, \quad (29)$$

变分参数 f_{lmn} 和 f_{lmn}^* 由下式确定:

$$E = \langle \varphi | H_e | \varphi \rangle - \sum_{nlm} \frac{\beta_{nlm}^{(1)2}}{\hbar\omega_{1LO}} [\langle \varphi | V_{nlm}^{(1)}(r) | \varphi \rangle]^2 - \sum_{nlm} \frac{\beta_{nlm}^{(2)2}}{\omega_{2LO}} [\langle \varphi | V_{nlm}^{(2)}(r) | \varphi \rangle]^2 + \sum_{nlm} \frac{\beta_{nlm}^{(1)2}}{\hbar\omega_{1LO}} \cdot V_{nlm}^2(0,0,0), \quad (30)$$

上式等号右边第一项是考虑导带弯曲时的杂质态结合能, 第二项为量子点内电子与光学声子的作用能 $E_{e-LO}^{(1)}$, 第三项为量子点外电子与光学声子的

$$H_{\text{ion-ph}}^{(2)} = \sum_{lmn} \beta_{lmn}^{(2)} [V_{lmn}^{(2)}(r_0)a_{lmn} + V_{lmn}^{(2)*}(r_0)a_{lmn}^+], \quad (20)$$

其中 r_0 是杂质的位置。

为了简化哈密顿量^[18], 首先进行第一次正则变换, 从总电子能量中消去杂质-声子相互作用项, 变换矩阵为:

$$U_1 = \exp\left\{ \sum_{lmn} \frac{\beta_{lmn}^{(1)}}{\hbar\omega_{LO1}} [V_{lmn}(r_0)a_{lmn} - V_{lmn}^*(r_0)a_{lmn}^+] \right\}. \quad (21)$$

为了计算方便, 我们已经从正的杂质点电荷中减去了无限常数的自能项, 相应于调整了能量的基线。接下来进行第二类 LLP 么正变换

$$U_2 = \exp \sum_{lmn} [a_{lmn}^+ f_{lmn} - a_{lmn} f_{lmn}^*], \quad (22)$$

其中 f_{lmn} 和 f_{lmn}^* 是变分参数。

$$|\psi_0\rangle = |\varphi_0(r)\rangle |0\rangle, \quad (26)$$

其中, $|0\rangle$ 为零声子态, $|\varphi(r)\rangle$ 是电子-杂质系统基态试探波函数, 其具体形式为:

作用能 $E_{e-LO}^{(2)}$, 第四项为量子点中心的杂质与光学声子的作用能 $E_{\text{ion-LO}}$ 。

最后, 第二项、第三项、第四项的具体形式可写成:

$$E_{e-LO}^{(1)} = - \left[\frac{eN^2R^{1/2}}{\pi} \right]^2 \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_{1\infty}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_{10}} \right) \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \left[\int_0^{\pi} dx \frac{\sin(nx)}{x} \sin^2\left(\frac{aRx}{\pi}\right) e^{-2\lambda_2 Rx/\pi} \right]^2, \quad (31)$$

$$E_{e-LO}^{(2)} = - \left[\frac{eN^2 \sin^2(\alpha R)}{\pi} e^{-2\beta R} \right]^2 \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_{2\infty}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_{20}} \right) \times \int_0^{\infty} \frac{dk}{k^2} \left[\int_0^{\infty} dr \frac{\sin(kr)}{r+R} e^{-2(\beta+\lambda_2)r} \right]^2, \quad (32)$$

$$E_{\text{ion-LO}} = \frac{2e^2N^2}{\pi} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_{1\infty}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_{10}} \right) \times$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left[\int_0^{\pi} dx \frac{\sin(nx)}{x} \sin\left(\frac{aRx}{\pi}\right) e^{-2\lambda_2 Rx/\pi} \right], \quad (33)$$

$$\bar{E}_0 = \min_{\lambda_1} \frac{\langle \psi_0 | H_{\text{eff}} | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle}, \quad (34)$$

$$\bar{E}_1 = \min_{\lambda_2} \frac{\langle \psi | H_{\text{eff}} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (35)$$

束缚极化子的结合能为

$$E_B = \bar{E}_0 - \bar{E}_1, \quad (36)$$

束缚极化子的结合能能移为: 考虑声子减去不考虑声子时的杂质态结合能:

$$\Delta E_{\text{ph}} = E_B(\text{with phonon}) - E'_B(\text{without phonon}). \quad (37)$$

2.2 物理参数的压力效应

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、声子、杂质态局域振动等, 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。在流体静压力作用下, 根据 kp 理论, 闪锌矿结构的半导体材料中的能隙、电子的有效质量和材料的介电常数等参数随压力的变化可写为^[19]:

$$\frac{m_0}{m(P)} = 1 + \frac{C}{E_g(P)}, \quad (38)$$

上式中 $E_g(P)$ 为压力为 P 时材料的禁带宽度; C 仅与材料有关, 不随压力变化。

禁带宽度随压力变化关系为^[20]:

$$E_g(P) = E_g(0) + \alpha P + \beta P^2, \quad (39)$$

表1 闪锌矿 GaN 和 AlN 的参数(室温)

Table 1 Parameters of zinc-blende GaN and AlN (room temperature)

Material	E/meV	$\hbar\omega_{\text{LO}}$	$\hbar\omega_{\text{TO}}$	f_i	$\alpha/(\text{meV} \cdot \text{GPa}^{-1})$	$\beta/(\text{meV} \cdot \text{GPa}^2)$	ε_{∞}	m^*/m_e	γ_{LO}	γ_{TO}
GaN	3 300 ^a	92.96 ^a	69.41 ^a	0.5 ^a	39 ^b	-0.32 ^b	5.35 ^a	0.15 ^a	1.2 ^c	1.4 ^c
AlN	5 110 ^a	112.46 ^a	82.05 ^a	0.449 ^a	40 ^b	-0.32 ^b	4.84 ^a	0.25 ^a	1.06 ^c	1.41 ^c

^aRef. [20], ^bRef. [24], ^cRef. [23]

图1给出了在不同的电子面密度的条件下, 考虑声子影响与不考虑声子时结合能随量子点半径的变化关系。从图中可以看出无论是否考虑声子效应, 杂质态的结合能随半径的变化趋势都与不考虑能带弯曲量子点、量子阱有限高势垒的结果类似^[25-26]。我们得到考虑了电子-声子相互作用和杂质-声子相互作用的结合能明显比没有考虑声子的结合能低, 也就是说当考虑杂质态-声子的相互作用时, 由于声子屏蔽了电子和杂质之间的库仑势从而在很大程度上降低了材料中杂质态

其中, α 和 β 是材料的压力系数。

我们选用 Goni 等^[21] 给出的关系, 高频介电常数与压力关系为:

$$\frac{\partial \ln \varepsilon_{\infty}(P)}{\partial \ln V} \approx \frac{5[\varepsilon_{\infty}(P) - 1]}{3\varepsilon_{\infty}(P)}(0.9 - f_i), \quad (40)$$

其中, f_i 为材料的电离度, $\varepsilon_{\infty}(P)$ 为流体静压力下的高频介电常数, 由材料体积和压力的关系

$$\partial P / \partial V = -B/V, \quad (41)$$

B 是材料闪锌矿结构的体模量。

最后, 可以得出高频介电常数随压力的变化关系

$$\varepsilon_{\infty}(P) = 1 + [\varepsilon_{\infty}(0) - 1] \exp\left[\frac{5}{3B}(f_i - 0.9)P\right], \quad (42)$$

通过 LST 关系^[22], 我们可以得出静态介电常数随压力的变化关系

$$\varepsilon_0(P) = \varepsilon_{\infty}(P) \left[\frac{\omega_{\text{LO}}}{\omega_{\text{TO}}}\right]^2, \quad (43)$$

光学声子能量 $\omega_j(P)$ 随压力的变化关系可以由 Grüneisen 参数给出^[20]:

$$\hbar\omega_j(P) = \hbar\omega_j(0) e^{\frac{\gamma_j P}{B}}. \quad (44)$$

3 结果与讨论

对 GaN/Ga_{1-x}Al_xN 有限深球形量子点的杂质态进行了数值计算, 计算中所用参数如表1所示, 计算结果如图1~4所示。

的结合能。这是由于声子减弱了电子-杂质之间的相互作用。

图1还显示, 随着电子面密度的增加, 束缚极化子的结合能逐渐减小。这与量子点中电子的限制势有关, 随着电子面密度和量子点半径的增加, 量子点中能带弯曲的三角势就越高, 这样三角势垒将排斥电子远离杂质, 因此就引起了结合能下降。当电子的面密度 $n_s = (6.0, 8.0) \times 10^{11}/\text{cm}^2$ 且量子点半径 $R > 10 \text{ nm}$ 时, 我们发现结合能趋于一个很小并且相同的值, 这是由于随着电子面

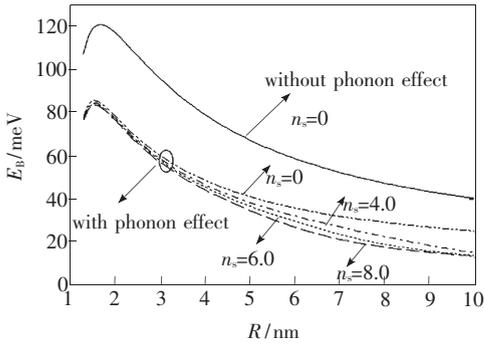


图 1 考虑声子影响与不考虑声子时结合能随半径的变化关系。电子的面密度 $n_s = (0.0, 4.0, 6.0, 8.0) \times 10^{11}/\text{cm}^2$, 铝组分 $x = 0.3$ 。

Fig. 1 Donor binding energy with and without phonons effects as a function of the dot radius for the electron areal density $n_s = (0.0, 4.0, 6.0, 8.0) \times 10^{11}/\text{cm}^2$ and Al concentration $x = 0.3$.

密度和量子点半径的增加,量子点中三角势垒就越高,当三角势垒高度增加到接近于界面势垒高度时,电子-杂质耦合相当于被解体。

图 2 给出在不同电子的面密度和不同的铝组分下,束缚极化子能移随量子点半径的变化关系。我们可以看出在不同铝组分的条件下,束缚极化子的光学声子效应随半径 R 的增加先迅速增大而后减小,当 R 为 2 nm 左右时达到最大值,然后随半径的增大几乎单调减小。这是由于量子点很小时,电子所受束缚增强,结合能的极化子能移增大。当量子点半径增大,电子所受束缚减弱,相应结合能的极化子能移减小。随着铝组分的增加,束缚极化子能移比较显著,这是因为随着铝组分的增加,势垒高度增加,量子限制效应增强,从而使电子所受束缚增加,束缚极化子的光学声子影响更显著。我们从图中还可以发现,当电子的面密度 $n_s = (0.0, 6.0, 8.0) \times 10^{11}/\text{cm}^2$ 和铝组分 $x = 0.3$ 时,束缚极化子的能移随量子点半径的变化和电子面密度的增加,量子点内的三角势垒就越高,从而减小了电子对系统的束缚,因此束缚极化子的能移越不明显,即光学声子影响越不显著。

图 3 表示在量子点半径分别为 $R = 6, 8, 10$ nm 时,束缚极化子的结合能随电子面密度的变化关系。数值计算结果显示,对于固定的量子点半径,束缚极化子的结合能随电子面密度增加逐渐降低。这是由于电子面密度越大,导带弯曲效应增强,电子所受束缚减弱,结合能相应下降,当面

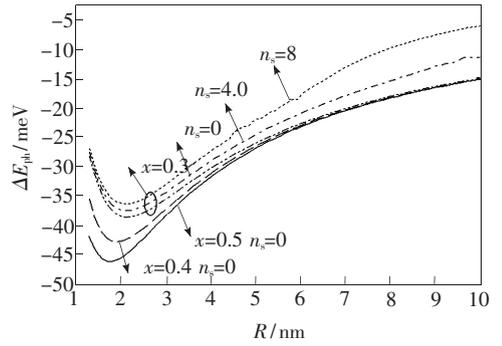


图 2 在电子的面密度 $n_s = (0.0, 4.0, 8.0) \times 10^{11}/\text{cm}^2$, 铝组分不同的情况下,束缚极化子能移随半径的变化关系。

Fig. 2 Polaronic shifts as functions of the quantum dot radius R for given electron areal density $n_s = (0.0, 4.0, 8.0) \times 10^{11}/\text{cm}^2$ and different values of Al concentration

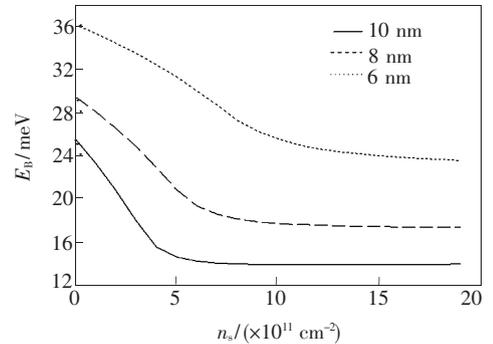


图 3 半径 $R = 6, 8, 10$ nm 时,束缚极化子的结合能随 GaN/ $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}$ 量子点中电子面密度的变化关系。

Fig. 3 The binding energy as a function of electron areal density n_s for given the quantum dot radius $R = 6, 8, 10$ nm in a GaN/ $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}$ quantum dot.

密度增加到一定程度,三角势垒的高度接近界面势垒的高度,电子-杂质耦合相当于被分解,结合能趋于一个不变的值,结果与图 1 相一致。对于固定的面密度,半径越大,三角势垒越高,电子与杂质距离越远,所以结合能越小。

图 4 给出了量子点 GaN/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 中杂质-声子-电子之间的相互作用分别对结合能的贡献,量子点内的电子-声子相互作用与量子点外电子-声子的相互作用对结合能的贡献基本没有变化,但是杂质-声子相互作用却有很大变化,与图 2 比较可知杂质-声子相互作用对结合能的贡献与极化子能移随着量子点半径的变化趋势相同,即杂质-声子相互作用对极化子能移起主要作用,其原因是杂质对电子的库仑作用力比量子点的限制作用强得多。

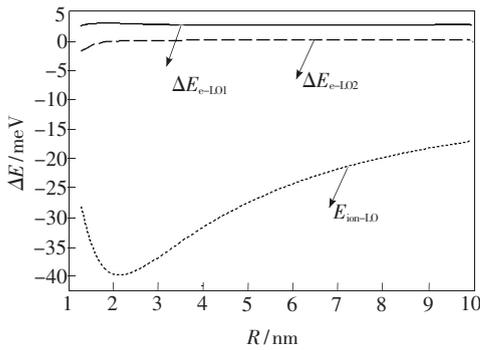


图4 杂质-声子相互作用和电子-声子相互作用对结合能的贡献随着量子点半径的变化关系

Fig. 4 Contributions of electron-phonon interaction and impurity-phonon interaction to impurity binding energy as functions of the quantum dot radius R

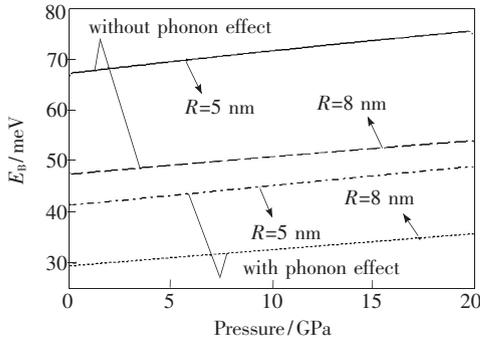


图5 半径 $R = 5, 8$ nm 时,考虑声子与不考虑声子影响时结合能随压力的变化关系。

Fig. 5 Donor binding energy with and without polaronic effects as a function of the hydrostatic pressure for given the quantum dot radius $R = 5, 8$ nm.

图5给出了在量子点半径 $R = 5, 8$ nm 时,考虑声子与不考虑声子影响时束缚极化子结合能随压力的变化关系。我们可以看出随着压力的变化结合能几乎呈线性增加,这是由于压力对介电常数、晶格等参数影响,压力下量子点对电子声子束缚进一步增强。量子点半径一定时,随着压力的变化束缚极化子的结合能低于杂质态的结合能,由于声子屏蔽了库仑势从而在很大程度上降低了材料中杂质态的结合能。我们还发现随着量子点半径的减小,压力对于结合能增加的幅度也越明显,即压力对小量子点影响更显著。

4 结 论

本文利用 LLP 变分法研究了 GaN/Ga_{1-x}Al_xN 球形量子点中束缚极化子结合能,计算了结合能随量子点半径、电子面密度、流体静压力以及极化子能移随量子点半径的变化。结果表明,光学声子的作用使束缚极化子的结合能降低。电子-声子相互作用使结合能增加,而杂质-声子相互作用使结合能降低,降低幅度明显,杂质-声子相互作用对杂质态结合能贡献起主要作用。我们还发现束缚极化子结合能随压力线性增加。

此外,随着电子面密度的增加,束缚极化子的结合能降低。由此可见,量子点中的导带弯曲效应对束缚极化子的结合能影响是显著的。

参 考 文 献:

- [1] Mora-Ramos M E, Lopez S Y, Duque C A. A variational method for the description of the pressure-induced Γ -X mixing in GaAs-based quantum wells [J]. *Phys. E*, 2008, 40(5):1212-1213.
- [2] Helm M, Peeters F M, De Rosa F, *et al.* Far-infrared spectroscopy of minibands and confined donors in GaAs/Al_xGa_{1-x}As superlattices [J]. *Phys. Rev. B*, 1991, 43(17):13983-13991.
- [3] Correa J D, Porras-Montenegro N, Duque C A. Binding energy and photoionization cross-section in GaAs quantum well-wires and quantum dots: Magnetic field and hydrostatic pressure effects [J]. *Braz. J. Phys.*, 2006, 36(2A):387-390.
- [4] Kasapoglu E, Yesilgul U, Sari H, *et al.* The effect of hydrostatic pressure on the photoionization cross-section and binding energy of impurities in quantum-well wire under the electric field [J]. *Phys. B*, 2005, 368(1-4):76-81.
- [5] Li S S, Xia J B. Electronic states of a hydrogenic donor impurity in semiconductor nanostructures [J]. *Phys. Lett. A*, 2007, 366(1-2):120-123.
- [6] John P A. The effect of hydrostatic pressure on binding energy of impurity states in spherical quantum dots [J]. *Phys. E*, 2005, 28(3):225-229.
- [7] Porras-Montenegro N, Pérez-Merchancano S T. Binding energies and density of impurity states in spherical GaAs-GaAlAs quantum dots [J]. *J. Appl. Phys.*, 1993, 74(12):7624-7626.
- [8] Vartanian A L, Vardanyan L A, Kazaryan E M. Hydrogenic impurity bound polaron in a cylindrical quantum dot in an

- electric field [J]. *Phys. Lett. A*, 2007, 360(4-5):649-654.
- [9] Huangfu Y F, Yan Z W. Bound polaron in a spherical quantum dot under an electric field [J]. *Phys. E*, 2008, 40(9): 2982-2987.
- [10] Zher Samak, Bassam Saqqa. The optical polaron versus the effective dimensionality in quantum well systems [J]. *An-Najah Univ. J. Res. (N. Sc.)*, 2010, 24(1):55-70.
- [11] Melnikov D V, Fowler W B. Electron-phonon interaction in a spherical quantum dot with finite potential barriers: The Fröhlich Hamiltonian [J]. *Phys. Rev. B*, 2001, 64(24):5320-5328.
- [12] Kandemir B S, Altanhan T. Polaron effects on an anisotropic quantum dot in a magnetic field [J]. *Phys. Rev. B*, 1999, 60(7):4834-4849.
- [13] Comas F, Trallero-Giner C. Interface optical phonons in spherical quantum-dot/quantum-well heterostructures [J]. *Phys. Rev. B*, 2003, 67(11):115301-115307.
- [14] Satori H, Sali A, Satori K. Polarizability of a polaron in spherical quantum dots [J]. *Phys. E*, 2002, 14(1-2):184-189.
- [15] Zhang M, Yan Z W. Interface effect on the impurity state in a GaN/Ga_{1-x}Al_xN quantum dot under pressure [J]. *Chin. J. Lumin. (发光学报)*, 2009, 30(4):529-534 (in Chinese).
- [16] Cao Y J, Yan Z W. Effect of band bending on the impurity state in GaN/Al_xGa_{1-x}N spherical finite potential quantum dot under pressure [J]. *J. Inner Mongolia University*, 2013, 44(1):36-42.
- [17] Sing J. *Quantum Mechanics* [M]. New York: Wiley-Inter Science Publication, 1997.
- [18] Platzman P M. Ground state energy of bound polarons [J]. *Phys. Rev.*, 1962, 125(6):1961-1965.
- [19] Ting D Z Y, Chang Y C. Mixing in GaAs/Al_xGa_{1-x}As and Al_xGa_{1-x}As/AlAs superlattices [J]. *Phys. Rev. B*, 1987, 36(8):4359-4374.
- [20] 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 [J]. *Eur. Phys. J. B*, 2003, 35(1):41-47.
- [21] Goni A R, Syassen K, Cardona M. Effect of pressure on the refractive index of Ge and GaAs [J]. *Phys. Rev. B*, 1990, 41(14):10104-10110.
- [22] Shi L, Yan Z W. Exciton in a strained (001)-oriented zinc-blende GaN/Al_xGa_{1-x}N ellipsoidal finite-potential quantum dot under hydrostatic pressure [J]. *Phys. Stat. Sol. C*, 2011, 8(1):42-45.
- [23] Sadeghi E. Impurity binding energy of excited states in spherical quantum dot [J]. *Phys. E*, 2009, 41(7):1319-1322.
- [24] Christensen N E, Gorczyca I. Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure [J]. *Phys. Rev. B*, 1994, 50(7):4397-4415.
- [25] Bose C, Sarkar C K. Binding energy of impurity states in spherical GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum dots [J]. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 2000, 218(2):461-469.
- [26] Zhao G J, Liang X X, Ban S L. Binding energies of donors in quantum wells under hydrostatic pressure [J]. *Phys. Lett. A*, 2003, 319(1-2):191-197.