

DOI: 10.3969/j.issn.1007-5461. 2013.02.018

GaInAsP/InP 阶梯量子阱中氢施主杂质束缚能

尹新¹, 王海龙¹, 龚谦², 封松林²

(1 曲阜师范大学物理工程学院, 山东 曲阜 273165 ;

2 中国科学院上海微系统与信息技术研究所信息功能材料国家重点实验室, 上海 200050)

摘要: 在有效质量近似下, 利用变分法对 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 阶梯量子阱中氢施主杂质束缚能进行了理论计算, 并研究了外加电场和阶梯阱的高度对阶梯量子阱中氢施主杂质电子态特性的影响。计算结果显示当施主杂质位于阶梯量子阱的中心时, 束缚能达到最大值; 外加电场使得电子波函数从阱中心偏移, 引起束缚能的非对称分布; Ga 与 As 组分的变化使得阶梯阱的势能高度发生变化, 从而明显地影响阱中氢杂质束缚能。计算结果对一些基于半导体阶梯型量子阱的光电子器件的设计制作有一定的指导意义。

关键词: 光电子学; 束缚能; 变分法; 氢施主杂质; 阶梯量子阱

中图分类号: O471.1

文献标识码: A

文章编号: 1007-5461(2013)02-0236-07

Binding energy of hydrogenic donor impurity in GaInAsP/InP stepped quantum well

YIN Xin¹, WANG Hai-long¹, GONG Qian², FENG Song-lin²

(1 College of Physics and Engineering, Qufu Normal University, Qufu 273165, China ;

2 State Key Laboratory of Functional Materials for Informatics, Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China)

Abstract: Within the framework of effective mass approximation, the binding energy of a hydrogenic donor impurity in $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ stepped quantum wells (SQWs) is theoretically calculated using the variational method. The influence of applied electric fields and SQWs height on hydrogenic donor impurity electronic state is investigated. The results show that the hydrogen impurity binding energy reaches its maximum when the donor impurity is located at the center of the stepped quantum wells. The applied electric fields drive the electron wave function away from the stepped quantum well center, and induce asymmetric distribution of the donor binding energy in the SQWs. The variation of Ga and As content leads to the corresponding changes in the stepped quantum well height, which significantly affects the binding energy of hydrogenic impurities in the stepped quantum wells. The results are meaningful and can be applied in the design of optoelectronic devices based on stepped quantum wells.

基金项目: 国家自然科学基金 (60976015), 山东省自然科学基金 (ZR2010FM023) 以及信息功能材料国家重点实验开放课题资助

作者简介: 尹新 (1986 -), 女, 山东潍坊人, 研究生, 主要从事低维半导体纳米结构电子态的研究。

E-mail: yinxinbeauty@163.com

导师简介: 王海龙 (1971 -), 山东莘县人, 博士, 教授, 主要从事光通信与半导体光电子学方面的研究。

E-mail: hlwang@mail.qfnu.edu.cn

收稿日期: 2012-02-14; **修改日期:** 2012-03-09

Key words: optoelectronics; binding energy; variational method; hydrogenic donor impurity; stepped quantum well

1 引 言

随着分子束外延生长技术的发展, 可以制作出不同限制势的半导体量子阱, 如方形量子阱、抛物型量子阱、V 型量子阱等。阶梯量子阱减弱了量子限制效应, 且其应变效应和量子尺寸效应使得半导体激光器^[1~3]价带的有效质量减小, 态密度降低, 以获得较低的阈值电流密度, 从而提高激光器的工作特性; 此外, 阶梯量子阱结构在其他新型半导体光电子器件^[4,5]的制作中也有广泛的潜在应用。GaInAsP 量子阱材料具有较高的晶体对称性和较大的饱和电子漂移速率^[6,7], 通过外加电场可以改变其电学性能^[8,9], 并且自发极化和压电极化可以忽略, 因此, GaInAsP/InP 结构应用于半导体光电子器件方面有很大优势。

关于低维异质结构中氢施主杂质的束缚能已经开展了很多的理论和实验研究^[10~13], 这些研究显示了氢施主杂质束缚能与组分的浓度、限制势的形状和杂质的位置密切相关。同时外加电场可以引起载流子波函数的分布变化和量子态的能量转移, 改变载流子能谱, 用来抑制和调节激光器等光电器件的输出强度, 因此有很多理论研究了外加电场对氢施主杂质电子态的影响^[14~16]。Wu 等^[17]计算了闪锌矿 GaAlN/GaN 球形量子点在电场影响下的氢杂质束缚能。Aktas 等^[18]研究了电场对同轴的量子阱线中的施主杂质结合能的影响。Kasapoglu 等^[19]计算了静水压力下和施加外加电场下不同形状的双量子阱中的浅施主杂质。Kasapoglu^[20]研究了双反抛物量子阱中阱的大小、垒的宽度、阱中心 Al 组分和外加电场对杂质束缚能的影响。Liang 等^[21]开展了外加电场、静水压力和温度对量子点极化和氢施主杂质束缚能的影响研究。据我们所知, 很少有报道关于外加电场对 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 阶梯量子阱氢施主杂质电子态束缚能的影响。在本文中, 我们将在有效质量近似下采用变分法计算 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 阶梯量子阱中氢施主杂质的束缚能。

2 理论方法

2.1 打靶法

考虑一维薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + [V(z) - E] \psi(z) = 0, \quad (1)$$

为求任意给定 $V(z)$ 时的基态能量 E_0 , 可以利用有限差分法, 方程 (1) 可以转化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left[\frac{\psi(z + \delta z) - 2\psi(z) + \psi(z - \delta z)}{(\delta z)^2} \right] + [V(z) - E] \psi(z) = 0, \quad (2)$$

整理后得

$$\psi(z + \delta z) = \left[\frac{2m^*}{\hbar^2} (\delta z)^2 (V(z) - E) + 2 \right] \psi(z) - \psi(z - \delta z). \quad (3)$$

如果波函数在 $(z - \delta z)$ 和 z 处已知, 则对于任意能量 E 可计算出波函数在 $(z + \delta z)$ 处的值, 这种迭代方程形成了求解差分方程数值解的标准方法, 此方法就叫做打靶法^[22]。利用打靶法可以求得无杂质时的电子基态能量 E_0 。

2.2 变分法求解束缚能^[23,24]

在有效质量近似下, 考虑外加电场的情况, 量子阱中有杂质时哈密顿量可以写为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \pm eF(z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\gamma}, \quad (4)$$

其中, $\gamma = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - \gamma_d)^2}$ 是电子和杂质之间的距离, e 是电子电量的绝对值, ϵ_0 是真空介电常数, γ_d 是施主所在的位置, F 是外加电场强度, \pm 表示外加电场的方向沿 $\pm z$ 轴, $V(z)$ 表示沿 z 轴的限制势能, z_0 表示坐标原点, 此处取阱的中心。

为了计算量子阱中氢施主杂质的束缚能, 选取如下的试探波函数

$$\psi = \chi(z) \exp\left(-\frac{\gamma_{\perp}}{\lambda}\right), \quad (5)$$

其中 $\chi(z)$ 是 z 方向上的基态电子波函数, λ 是变分参数, $\gamma_{\perp} = \sqrt{x^2 + y^2}$ 是量子阱中电子和施主电荷的平面距离。

将试探波函数 (5) 代入

$$\bar{H} = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau}, \quad (6)$$

算出体系的平均能量 $\bar{H}(\lambda)$, 然后由 $\frac{d\bar{H}(\lambda)}{d\lambda} = 0$, 求出 $\bar{H}(\lambda)$ 的最小值, 所得结果就是体系基态能量 E 的近似值。

施主束缚能 E_b 可通过如下方程求得

$$E_b = E_0 - E, \quad (7)$$

其中 E_0 是无杂质时的电子基态能量。

3 结果与讨论

以 $\text{InP}/\text{Ga}_{0.419}\text{In}_{0.581}\text{As}_{0.9}\text{P}_{0.1}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 阶梯量子阱结构为例来研究外加电场对量子阱中氢施主杂质电子态的影响。此结构由一个 $\text{Ga}_{0.419}\text{In}_{0.581}\text{As}_{0.9}\text{P}_{0.1}$ 阱层 L_w , 一个 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 阶梯阱层 L_s 和两个 InP 垒层 L_b 组成。以下的计算中取阱宽 $L_w=5$ nm, 阶梯阱宽 $L_s=5$ nm, 垒宽 $L_b=10$ nm。

$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 的禁带宽度为

$$E_g = 1.344 + 0.668x - 1.068y + 0.758x^2 + 0.078y^2 - 0.069xy - 0.332x^2y + 0.03xy^2, \quad (8)$$

通过改变 x 、 y 的值来改变其禁带宽度, 从而可以调节阶梯阱垒的高度。为了满足量子阱不同材料之间晶格匹配, x 和 y 之间要保持一定的关系。InP 材料中电子的有效质量为 $m^*=0.08 m_0$, $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 中电子的有效质量近似取为 $m^* = (0.08 - 0.039y)m_0$, 其中 m_0 为真空中电子的质量, 能带的偏移率假定为 53:47, 外加电场沿 z 轴负方向。

图 1 给出了不同电场强度情况下 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 阶梯量子阱导带势和基态电子波函数。从图中可以看出, 当不加外电场时电子波函数主要分布在阶梯量子阱内。当加入外加电场后, 阶梯量子阱导带势和基态电子波函数都发生了明显变化, 量子阱导带势发生了倾斜, 基态电子波函数的中心随着电场强度的增加逐渐偏离出量子阱。这表明外加电场可以有效地调节阶梯量子阱中载流子分布、能带和电子态。

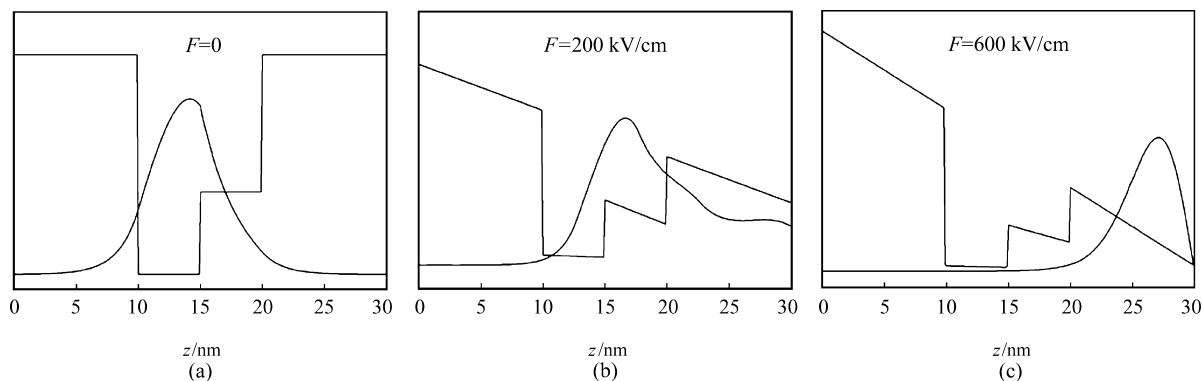


Fig.1 The conduction band and ground-state electron wave function of a InP/Ga_{0.419}In_{0.581}As_{0.9}P_{0.1}/Ga_{0.137}In_{0.863}As_{0.3}P_{0.7}/InP stepped quantum well under the different electric fields (a) $F=0$, (b) $F=250$ kV/cm and (c) $F=600$ kV/cm, respectively

图 2 给出了不同 Ga 和 As 组分、不同杂质位置的情形下阶梯量子阱内施主杂质束缚能随外加电场的变化情况。从图 2(a) 中可以看出, 当 $F < 100$ kV/cm 时, 束缚能变化较小, 当 100 kV/cm $< F < 250$ kV/cm 束缚能急剧减小, 当 $F > 250$ kV/cm 时, 束缚能逐渐减小。从图 2(b) 中可以看出, 对于任意施主位置, 当 $F < 200$ kV/cm 时, 束缚能变化较小, 当 200 kV/cm $< F < 250$ kV/cm 时束缚能急剧减小, 当 $F > 250$ kV/cm 时束缚能逐渐减小。从图 2(c) 可以看出, 当 $F < 250$ kV/cm 时束缚能变化较小, 当 250 kV/cm $< F < 350$ kV/cm 时束缚能急剧减小, 当 $F > 350$ kV/cm 时束缚能逐渐减小。这是因为当电场较小时, 对波函数的影响不大, 因而束缚能变化缓慢; 随电场增大, 波函数从阱中逐渐偏移到阶梯阱中, 束缚能迅速减小; 当电场很大时, 波函数偏移到垒中, 对阱内电子杂质影响变小, 束缚能的变化也变得缓慢。此外随着 Ga 和 As 的组分增加, 阶梯阱垒的高度减小, 电子更容易向阶梯阱中移动。图 2 中束缚能的复杂变化主要由这两方面的因素共同确定。

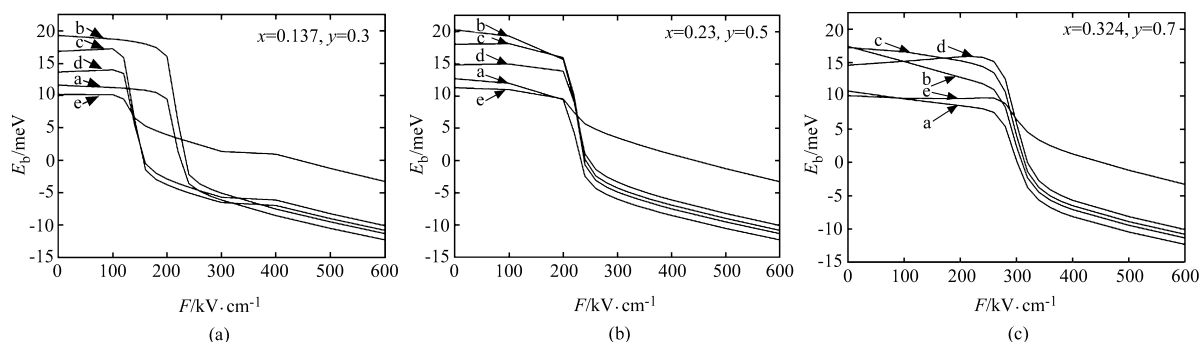


Fig.2 The ground-state donor binding energy E_b as a function of the electric field F in InP/Ga_{0.419}In_{0.581}As_{0.9}P_{0.1}/Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}/InP stepped quantum well for different impurity positions and Ga, As content (a) $x=0.137, y=0.3$, (b) $x=0.23, y=0.5$ and (c) $x=0.324, y=0.7$.

The curves a, b, c, d and e are for the impurity located at $\frac{L_b}{2}=5$ nm, $L_b + \frac{L_w}{2}$, $L_b + L_w$,

$$L_b + L_w + \frac{L_s}{2} \text{ and } \frac{3L_b}{2} + L_w + L_s, \text{ respectively}$$

图 3 给出了考虑不同的外加电场、Ga 和 As 的组分, 施主杂质束缚能随杂质位置的变化情况。在没有外加电场 (曲线 a) 时, 电子波函数关于量子阱中心大致呈对称分布, 所以施主束缚能关于量子阱中心

近似呈对称分布且在杂质位于阱中心处达到最大值。沿 z 轴方向外加电场后, 施主束缚能达最大值处偏离阱中心。当 $F < 250$ kV/cm 时, 从图 3(a) 和 (b) 中曲线 b 可看出, 杂质位于阱内时施主束缚能达到最大值, 而从图 3(c) 中曲线 b 看出杂质位于阶梯阱内束缚能达到最大值。这是因为外加电场使电子波函数分布中心从阱中心向阶梯阱中移动, 且 x 、 y 的增加使得阶梯阱垒的高度减小, 更容易向阶梯阱中移动。当 $F \geq 250$ kV/cm 时, 从图 3 中曲线 c、d、e 可看出, 大的电场使施主束缚能在杂质位于阶梯阱右垒中时达到最大值。当 $F = 600$ kV/cm(曲线 e) 时, 电子波函数偏移出阶梯阱到右垒中, 束缚能随 x 、 y 的变化(也就是阶梯阱的高度的变化) 很小。

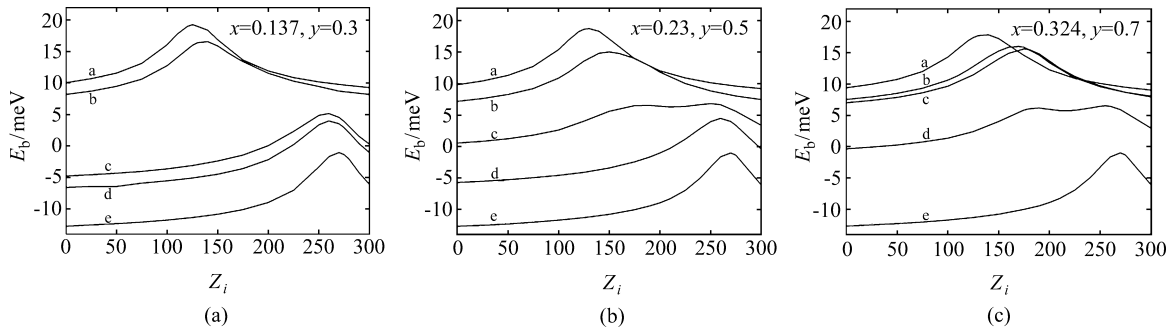


Fig.3 The ground-state donor binding energy E_b as a function of impurity positions Z_i in $\text{InP}/\text{Ga}_{0.419}\text{In}_{0.581}\text{As}_{0.9}\text{P}_{0.1}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ stepped quantum well for different electric fields F and different Ga, As content (a) $x=0.137$, $y=0.3$, (b) $x=0.23$, $y=0.5$, (c) $x=0.324$, $y=0.7$. The curves a, b, c, d and e are for $F=0, 200$ kV/cm, 250 kV/cm, 300 kV/cm, 600 kV/cm

图 4 给出了考虑不同的外加电场、施主杂质, 阶梯量子阱中施主杂质束缚能随 Ga 和 As 组分的变化情况。图 4(a) 给出没有外加电场的情况, 当杂质位于量子阱的中心(曲线 b) 时, 施主杂质束缚能最大。从曲线 a, b 中可看出, 随 x 、 y 的增加, 束缚能逐渐减小。这是因为随着 x 、 y 的增加, 阶梯阱垒高度减小, 电子更容易向阶梯阱中移动, 使得电子和位于 a 和 b 处的杂质的距离增加, 所以束缚能变小。当施主杂质位于阶梯阱内(c, d) 和右侧垒(e) 时, 随 x 、 y 的增加束缚能逐渐增大。因为随 x 、 y 的增加阶梯阱垒

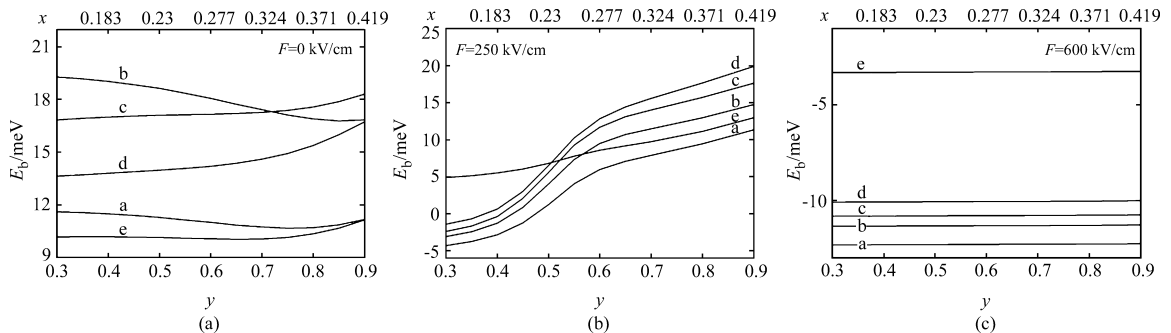


Fig.4 The ground-state donor binding energy E_b as a function of Ga (As) content $x(y)$ in $\text{InP}/\text{Ga}_{0.419}\text{In}_{0.581}\text{As}_{0.9}\text{P}_{0.1}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ stepped quantum well for different impurity positions and electric field (a) $F = 0$ kV/cm, (b) $F = 250$ kV/cm, (c) $F = 600$ kV/cm, respectively.

The curves a, b, c, d and e are for the impurity located at $\frac{L_b}{2} = 5$ nm, $L_b + \frac{L_w}{2}$,

$$L_b + L_w, L_b + L_w + \frac{L_s}{2} \text{ and } \frac{3L_b}{2} + L_w + L_s, \text{ respectively}$$

的高度下降, 电子更容易进入阶梯阱垒中, 使得电子与杂质之间的距离变小所致。图 4(b) 给出外加电场 $F=250$ kV/cm 的情况, 在 $x < 0.277, y < 0.6$ 时, 随着 x 、 y 的增加无论杂质位于什么位置束缚能都迅速变大, 随 x 、 y 的进一步增加束缚能增大变得缓慢。这是因为外加电场使得电子波函数向阶梯阱垒中偏移, x 、 y 的增加使得阶梯阱垒高度变小, 更容易向阶梯阱垒中移动。图 4(c) 表示外加电场 $F=600$ kV/cm 的情况, 随杂质位置从阱的左侧垒向阶梯阱右侧垒移动, 束缚能增加, 但对 Ga、As 的组分变化不敏感。原因是大的外加电场使得电子波函数完全偏移出阶梯阱而进入到阶梯阱右侧垒, 对束缚能影响变小, 束缚能只受阶梯阱垒高度的影响。

4 结 论

有效质量近似下, 用变分法对 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 阶梯量子阱中氢施主杂质束缚能进行了理论计算, 并研究了外加电场和阶梯阱的高度对阶梯量子阱中氢施主杂质电子态特性的影响。计算结果表明当施主杂质位于阶梯量子阱的中心时, 束缚能达到最大值; 外加电场使电子波函数从阱中心偏移, 引起了束缚能的非对称分布; Ga 与 As 组分变化使得阶梯阱的高度相应变化, 从而明显地影响阶梯量子阱中氢杂质束缚能。我们的计算结果对一些基于半导体阶梯型量子阱的光电子器件的设计制作有一定的指导意义。

参考文献:

- [1] Zhao Hongping, Tansu Nelson. Optical gain characteristics of staggered InGaN quantum wells lasers [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2010, 107: 113110.
- [2] Li H, Katz S, et al. Broad gain bandwidth injectorless quantum-cascade lasers with a step well design [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2011, 98: 131113.
- [3] Giacomo S, Maria A I, Milan F, et al. Step well quantum cascade laser emitting at 3 THz [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2009, 94: 041114.
- [4] Machhadani H, Kotsar Y, et al. Terahertz intersubband absorption in GaN/AlGaN step quantum well [J]. *J. Appl. Phys.*, 2010, 97: 191101.
- [5] Ronald A A, Zhao Hongping, Ee Yik-Khoon, et al. Spontaneous emission and characteristics of staggered InGaN quantum-well light-emitting diodes [J]. 2008, 44(6): 573-580.
- [6] Xia C X, Jiang F C, Wei S Y, et al. Hydrogenic impurity in zinc-blende GaN/AlGaN quantum dot [J]. *Microelectr. J.*, 2007, 38(6-7): 663-666.
- [7] Garayt J P, Gerard J M, Enjalbert F, et al. Study of isolated cubic GaN quantum dots by low-temperature cathodoluminescence [J]. *Physica E*, 2005, 26(1-4): 203-206.
- [8] Zhu Haiyan, Zhang Tongyi, Zhao Wei. Intersubband optical absorption in a step asymmetric semiconductor quantum well driven by a terahertz field [J]. *J. Appl. Phys.*, 2009, 105: 043518.
- [9] Lim A C, Gupta R, Haywood S K, et al. Electric field induced blueshift of the e1-hh1 exciton transition in a $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaAs}$ ($x < 1\%$) stepped quantum well [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, 89: 261110.
- [10] Li S S, Xia J B. Electronic states of a hydrogenic donor impurity in semiconductor nano-structures [J]. *Phys. Rev. A*, 2007, 366(1-2): 120-123.
- [11] Guo Fusheng, Zhao hua, Zhu mengzhao, et al. Interface effects on the banding energy levels of hydrogenic impurities in quantum dot heterostructures [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics* (量子电子学报), 2007, 24(6): 722-726 (in Chinese).

- [12] Vartanian A L, Yeranossyan M A, Kirakosyan A A. Electron-phonon effect on the ground-state binding energy of hydrogenic impurity in quantum-well wire in presence of an electric field [J]. *Physica B-Condens. Matter.*, 2007, 390(1-2): 256-162.
- [13] Jiang Liming, Wang Hailong, Wu Huiting. Electronic states of a shallow hydrogenic donor impurity in different shaped semiconductor quantum wells [J]. *Comm. in Theor. Phys.*, 2009, 51(6): 1135.
- [14] Narayani V, Sukumar B. Polarizability of a shallow donor in a quantum well wire-geometric effects [J]. *Solid State Commun.*, 1994, 90(9): 575-579.
- [15] Duque C A, Montes A, Morales A L, *et al.* Effects of an applied electric field on the binding energy of shallow donor impurities in GaAs low-dimensional systems [J]. *J. Phys.: Condens. Matter.*, 1997, 9(27): 5977.
- [16] Ulas M, Akbas H, Tomak M. Shallow donors in a quantum well wire: Electric field and geometrical effects [J]. *Phys.*, 1998, 22(1): 369-375.
- [17] Wu Huiting, Wang Hailong, Jiang Liming. The electric field effect on binding energy of hydrogenic impurity in zinc-blende GaN/Al_xGa_{1-x}N spherical quantum dot [J]. *Physica B*, 2009, 404(1): 122-126.
- [18] Aktas S, Boz F K, Dalgic S S. Electric and magnetic field effects on the binding energy of a hydrogenic donor impurity in a coaxial quantum well wire [J]. *Physica E*, 2005, 28(1): 96-105.
- [19] Kasapoglu E, Sari H, Sokmen I. Shallow donor impurities in different shaped double quantum wells under the hydrostatic pressure and applied electric field [J]. *Physica B: Condensed Matter.*, 2005, 362(1-4): 56-61.
- [20] Kasapoglu E. Binding energy of donor impurities in double inverse parabolic quantum well under electric field [J]. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2009, 41(7): 1222-1225.
- [21] Liang Shijun, Xie Wenfang, Li Xiaofeng, *et al.* Photoionization and binding energy of a donor impurity in a quantum dot under an electric field: Effects of the hydrostatic pressure and temperature [J]. *Superlattices and Microstructures*, 2011, 49(6): 623-631.
- [22] Paul Harrison. *Quantum Wells, Wires and Dots* [M]. 2nd Edition, England: John Wiley and Sons Ltd., 2009: 1-168.
- [23] Barseghyan M G, Hakimyfarid Alireza, Kirakosyan A A, *et al.* Hydrostatic pressure and electric and magnetic field effects on the binding energy of a hydrogenic donor impurity in InAs Pöschl-Teller quantum ring [J]. *Superlattices and Microstructures*, 2012, 51 (1): 119-127.
- [24] Zhou Dongmei, Su Chunyan. Effect of built-in electric field and impurity on binding energy of cylindrical quantum dot with two electron [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics* (量子电子学报), 2011, 28(1): 96-103 (in Chinese).