

圆柱形 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环中 类氢施主杂质态的电场效应

何 浩^a, 王广新^b

(华北理工大学 a. 电气工程学院; b. 理学院, 河北 唐山 063000)

摘要: 在有效质量近似理论下, 利用变分法研究了外电场下圆柱形 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环中类氢施主杂质束缚能。讨论了施主杂质束缚能与量子环尺寸(径向厚度、高度)、杂质位置以及外电场间的变化规律。结果表明: 随着量子环径向厚度(高度)的增大, 中心施主杂质束缚能先增大后减小, 显示有一极大值; 施加的电场明显地改变了量子环中电子波函数的分布, 导致施主杂质束缚能相应的改变; 施主杂质束缚能随杂质位置的变化呈现出规律性。

关键词: 圆柱形 GaAs/Al_xGa_{1-x}As; 量子环; 电场效应; 施主杂质; 束缚能

中图分类号: O474 **文献标志码:** A **文章编号:** 1672-349X(2017)03-0018-05

DOI: 10.16160/j.cnki.tsxyxb.2017.03.004

On the Electric Field Effect of Hydrogenic Donor Impurity in the Quantum Ring of Cylindrical GaAs/Al_xGa_{1-x}As

HE Hao^a, WANG Guang-xin^b

(a. College of Electrical and Engineering; b. College of Science, North China University of Science and Technology, Tangshan 063000, China)

Abstract: Within the framework of the effective mass approximation and with the variational method, the author of this paper have studied the binding energy of the hydrogenic donor impurity in the quantum ring of cylindrical GaAs/Al_xGa_{1-x}As and researched the change rules of the donor impurity binding energy, the size of quantum ring (radial thickness, height), impurity position and the external electric field are discussed. The results show that when the quantum ring radial thickness (height) increases, center donor impurity binding energy increases first and then decreases, with a maximum value at a certain stage, the applied electric field significantly changes the distribution of the electron wave function in the quantum ring, resulting in change of the donor impurity binding energy, and the donor impurity binding energy changes with the impurity position regularly.

Key Words: cylindrical GaAs/Al_xGa_{1-x}As; quantum ring; electric field effect; donor impurity; binding energy

基金项目: 河北省教育厅青年基金项目(QN2015050)

作者简介: 何浩(1995-), 男, 河北唐山人, 本科生, 主要从事物理学研究。

0 引言

随着现代半导体制造技术的快速发展,实验上通过液滴外延实验^[1]等技术生长出了许多新颖的低维半导体结构,这些低维半导体结构展示出了优良的光电特性,因此吸引了越来越多的学者对诸如量子阱、量子线、量子点、量子环等低维半导体结构中的光电性质进行研究。众所周知,杂质的引入可以改变低维半导体结构的电子性质和光学性质,因此对低维半导体结构中施主杂质的研究是重要的研究课题。Xie 等^[2]利用对角化和紧束缚近似理论研究了半导体量子环中非线性光吸收系数的外电场效应。Monozon 等^[3]利用解析法研究了电磁场中半导体量子环中的杂质能级。Aichinger 等^[4]研究了磁场中量子环中电子的尺寸和掺杂效应。Barseghyan 等^[5]研究了 InAs 量子环中类氢施主杂质束缚能的电磁场及静压效应。Baghramyan 等^[6]研究了 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs 双量子环中类氢施主杂质结合能的静压、温度、Al 的含量及量子尺寸效应。Zounoubi 等^[7]研究了圆柱形量子点中浅施主杂质的磁场效应和磁极化率。Pan 等^[8]研究了外电场下 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子点中类氢杂质态。Wang 等^[9]探究了圆柱形 GaAs 量子环中施主杂质束缚能的磁场效应。由于外电场下低维半导体结构中掺杂效应对半导体光电子器件的设计、制备及其发光性能的分析具有重要的意义,因此本文将研究有限势垒束缚下自组织量子环中类氢施主杂质态,探讨施主杂质束缚能随量子环的尺寸、杂质位置及外电场强度间的变化规律。

1 理论模型

图1为内径为 R_1 , 外径为 R_2 , 径向厚度为 ΔR 和高度为 d 的圆柱形 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环模型。为简化原子单位,长度、能量、电场强度分别以 GaAs 材料的有效玻尔半径 $a^* = \hbar^2 \epsilon_0 / m_e^2$ 、有效里德伯常数 $R_y = m_e^4 / 2\hbar \epsilon_0^2$ 和 $\eta = e a^* F / R_y$ 为单位。根据有效质量近似理论,沿量子环生长方向的外电场作用下 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环中类氢施主杂质体系的哈密顿^[3]可写为:

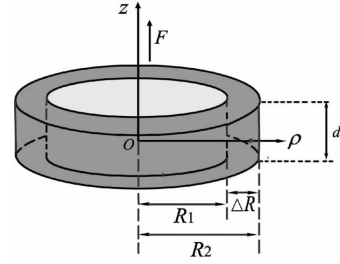


图1 量子环内径为 R_1 , 外径为 R_2 , 高度为 d 的圆柱形 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子

$$H = \begin{cases} -\nabla^2 + \eta z - \frac{2}{\sqrt{(\rho - \rho_0)^2 + (z - z_0)^2}} + V(\rho, z) \\ (R_1 \leq \rho \leq R_2 \text{ and } |z| \leq \frac{d}{2}) \\ -\frac{m_1^*}{m_2^*} \nabla^2 - \frac{2}{\sqrt{(\rho - \rho_0)^2 + (z - z_0)^2}} + V(\rho, z) \\ (\text{others}) \end{cases}, \quad (1)$$

式中 $\rho(\rho_0)$ 和 $z(z_0)$ 分别为 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环中电子(杂质离子)的径向和轴向坐标, m_1^* 和 m_2^* 分别为 GaAs 和 Al_xGa_{1-x}As 材料中电子的有效质量。GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环中电子的有效约束势 $V(\rho, z)$ 可写为:

$$V(\rho, z) = \begin{cases} 0 & R_1 \leq \rho \leq R_2 \text{ and } |z| \leq \frac{d}{2} \\ V_0 & \text{other} \end{cases}. \quad (2)$$

有限约束势垒 V_0 为 $0.6 \times (1.36x + 0.22x^2)$ (eV), 其中 Al 的含量为 0.3。电场中自组织 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环中类氢杂质体系的尝试波函数可写为^[7]:

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = N \phi(\rho, \varphi) f(z) \exp[-\lambda(\rho - \rho_0)^2 - \tau(z - z_0)^2], \quad (3)$$

$$\phi(\rho, \varphi) =$$

$$\begin{cases} \frac{N_0 J_0(\beta R_1) + Y_0(\beta R_1)}{I_0(\alpha R_1)} I_0(\alpha \rho) & \rho < R_1 \\ N_0 J_0(\beta \rho) + Y_0(\beta \rho) & R_1 \leq \rho \leq R_2 \\ \frac{N_0 J_0(\beta R_2) + Y_0(\beta R_2)}{K_0(\alpha R_2)} K_0(\alpha \rho) & \rho > R_2 \end{cases}, \quad (4)$$

其中 N 为归一化系数, λ 和 τ 为变分参数, $\phi(\rho, \varphi)$ 为 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环中电子的基态径向波函数。

利用边界 $\rho = R_1$ 和 $\rho = R_2$ 处径向波函数 $\phi(\rho, \varphi)$ 连续和一阶导数连续, 可求出系数 N_0, α

和 β , 分别如下:

$$N_0 = \frac{-m_2^* \beta Y_1(\beta R_1) I_0(\alpha R_1) - m_1^* \alpha Y_0(\beta R_1) I_1(\alpha R_1)}{m_2^* \beta J_1(\beta R_1) I_0(\alpha R_1) + m_1^* \alpha J_0(\beta R_1) I_1(\alpha R_1)}, \quad (5)$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{m_2^*}{m_1^*} (V_0 - E_{0\rho})}, \beta = \sqrt{E_{0\rho}}, \quad (6)$$

$E_{0\rho}$ 为量子环材料中电子的径向基态能量。

有限势垒约束下, GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环中电子的基态轴向波函数为^[9]:

$$f(z) = \begin{cases} C_1 \exp\left[k_1\left(z + \frac{d}{2}\right)\right] & z < -d/2 \\ D_1 Ai(\xi) + D_2 Bi(\xi) & |z| \leq d/2 \\ C_2 \exp\left[-k_2\left(z - \frac{d}{2}\right)\right] & z > d/2 \end{cases}, \quad (7)$$

$Ai(\xi)$ 和 $Bi(\xi)$ 为艾里函数, 可由界面 $z = \pm d/2$ 处轴向波函数连续系数 C_1 和 C_2 表示:

$$C_1 = D_1 Ai(\xi_1) + D_2 Bi(\xi_1), \quad (8)$$

$$C_2 = D_1 Ai(\xi_2) + D_2 Bi(\xi_2), \quad (9)$$

$$\xi = \frac{\eta z - E_{0z}}{\eta^{2/3}}, \quad (10)$$

$$\xi_1 = \frac{\eta(-d/2) - E_{0z}}{\eta^{2/3}}, \quad (11)$$

$$\xi_2 = \frac{\eta(d/2) - E_{0z}}{\eta^{2/3}}, \quad (12)$$

$$Ai(Bi)(\xi_1) = Ai(Bi)\left(\frac{\eta(-d/2) - E_{0z}}{\eta^{2/3}}\right), \quad (13)$$

$$Ai(Bi)(\xi_2) = Ai(Bi)\left(\frac{\eta d/2 - E_{0z}}{\eta^{2/3}}\right), \quad (14)$$

$$Ai'(Bi') = dAi(\xi)[Bi(\xi)]/d\xi, \quad (15)$$

$$k_{1,2} = \sqrt{\frac{m_2^*}{m_1^*} (V_{1,2} - E_{0z})}, V_{1,2} = V_0 \mp \eta d/2. \quad (16)$$

由轴向波函数在 $z = \pm d/2$ 边界处一阶导数连续, 则轴向电子的基态能量 E_{0z} 通过下面的方程可求得。

$$\frac{1}{m_1^*} \frac{d \exp\{C_1[k_1(z + d/2)]\}}{dz} \Big|_{z=-d/2} = \frac{1}{m_2^*} \frac{d[D_1 Ai(\xi) + D_2 Bi(\xi)]}{dz} \Big|_{z=-d/2}, \quad (17)$$

$$\frac{1}{m_1^*} \frac{d \exp\{C_1[-k_2(z - d/2)]\}}{dz} \Big|_{z=d/2} = \frac{1}{m_2^*} \frac{d[D_1 Ai(\xi) + D_2 Bi(\xi)]}{dz} \Big|_{z=d/2}, \quad (18)$$

$$m_2^2 \eta^{2/3} [Ai'(\xi_2) Bi'(\xi_1) - Ai'(\xi_1) Bi'(\xi_2)] + m_1 m_2 k_1 \eta^{1/3} [Ai(\xi_1) Bi'(\xi_2) - Bi(\xi_1) Ai'(\xi_2)] - m_1 m_2 k_2 \eta^{1/3} [Ai(\xi_2) Bi'(\xi_1) - Ai'(\xi_1) Bi(\xi_2)] - m_1^2 k_1 k_2 [Ai(\xi_1) Bi(\xi_2) - Ai(\xi_2) Bi(\xi_1)] = 0. \quad (19)$$

绝热近似下, 外电场下圆柱形 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环中类氢施主杂质基态束缚能^[8]为:

$$E_b = E_{0\rho} + E_{0z} - \min_{\lambda, \tau} \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (20)$$

2 结果与讨论

为了优化及改进半导体量子结构光电性能的调控机制, 以及为制备高性能半导体光电子器件提供可借鉴的理论数据, 本文将探究施主杂质束缚能随量子环结构参数(径向厚度 R 、高度 d)、杂质位置以及外电场的变化规律。计算过程中采用文献[9]中的一些物理参数, 具体如下: 有效玻尔半径 $a^* = 10.0$ nm, 有效里德伯常数 $R_y = 5.72$ meV, 真空中介电常数 $\epsilon_0 = 12.5$, Al 的含量 x 为 0.3。

图 2 描述了 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环内径 R_1 为 $0.3a^*$, 高度 d 为 $1.0a^*$, 杂质离子位于量子环中心位置($\rho_0 = (R_1 + R_2)/2$, $z_0 = 0.0a^*$), 电场强度 F 分别取 0 kV/cm, 50 kV/cm, 150 kV/cm 时, 施主杂质束缚能随量子环径向厚度的变化关系。随着量子环径向厚度的不断减小, 杂质束缚能先增大后减小, 有一最大值。这是因为随着量子环径向厚度的减小, 量子环中电子波函数受到的量子局域效应逐渐增大, 量子环中电子与杂质离子间的库仑束缚作用逐渐增强, 中心施主杂质束缚能逐渐增大, 当径向厚度减小到某一值时, 量子环中电子波函数渗透到势垒的几率大大增加, 因此电子和杂质间的库仑作用减弱, 中心施主杂质束缚能也相应逐渐减小。由图 2 中曲线可知, 当量子环结构参数一定时, 随着外加电场强度的增大, 电子沿外加电场方向的反方向移离中心, 量子环中电子与杂质间的库仑作用将会减小, 因此施主杂质束缚能相应减小。

图 3 描述了 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环内径 R_1 为 $0.3a^*$, 内径 R_2 为 $3.0a^*$, 杂质离子位于量子环中心位置($\rho_0 = (R_1 + R_2)/2$, $z_0 = 0.0a^*$), 电场

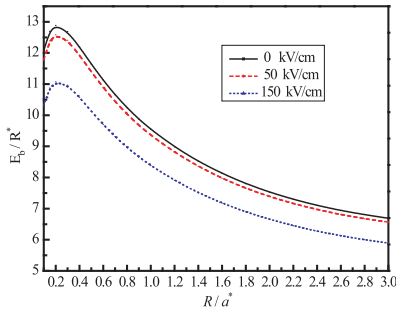


图2 沿 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环生长方向施加的电场强度取不同值时,中心施主杂质束缚能随量子环径向厚度 ΔR 的变化关系

强度 F 分别取 0 kV/cm, 50 kV/cm, 150 kV/cm 时,施主杂质束缚能随量子环高度的变化关系。随着量子环高度的不断减小,杂质束缚能先增大后减小,有一最大值。这是因为随着量子环高度的减小,较强的量子约束作用使电子波函数局域在量子环内,电子受到杂质的束缚作用增强,相应中心杂质束缚能增大。当量子环的高度减小到某一值时,电子波函数较容易地渗入到势垒层,电子与中心杂质间的距离增大,导致它们间的库仑作用减小,中心施主杂质束缚能减小。图3显示了量子环中电子的量子尺寸和外电场的竞争效应,当量子环的高度较小时,量子环中电子受到的量子尺寸限制效应占重要地位,施加不同强度的外电场,中心施主杂质束缚能变化不明显。当量子环的高度大于 $0.8a^*$ 时,外电场对量子环中电子的作用大于量子限制效应,并且在较强电场作用下,量子环中的电子波函数远离中心杂质离子,因此中心施主杂质与电子间的库仑作用相应减弱。

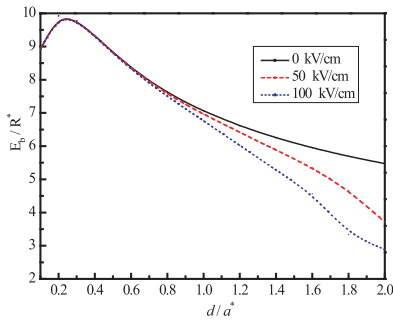


图3 沿 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环生长方向施加的电场强度取不同值时,中心施主杂质束缚能与量子环高度 d 的变化关系

图4描述了 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环内径 R_1 为 $0.5a^*$, 内径 R_2 为 $3.5a^*$, 高度 d 为 $1.0a^*$, 杂质离子径向坐标 ρ_0 为 $(R_1 + R_2)/2$, 杂质离子轴向坐标 z_0 分别取 $-d/2, d/2, d/4, -d/4, 0$ 时,施主杂质束缚能随外电场的变化关系。从图4中可以看出,施主杂质处于不同位置时,外电场对量子环中施主杂质束缚能的影响非常明显。曲线1,3表明,随着外加电场强度的增大,施主杂质束缚能逐渐增大;然而曲线2,4,5表明,随着外加电场强度的增大,施主杂质束缚能逐渐减小。这是因为在量子环轴向方向施加的电场明显地改变了量子环中电子波函数的分布。随着沿 z 轴电场强度的不断增大,量子环中电子波函数沿电场反方向移动。正如图4曲线所示,杂质处于 z 轴的不同位置时,电子和杂质间的库仑作用强弱也不同,因此施主杂质束缚能也发生了相应的变化。在同样的量子限制效应和电场作用下,杂质离子位于量子环 z 轴负半轴时,施主杂质束缚能较大。

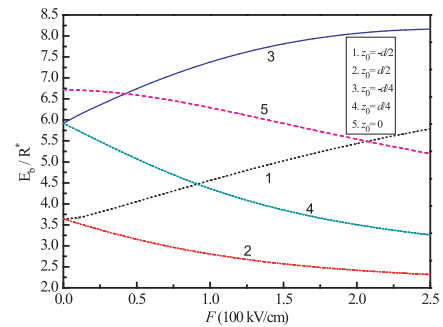


图4 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环中轴向杂质位置 z_0 取不同值时,中心施主杂质束缚能随电场强度的变化关系

图5描述了 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环内径 R_1 为 $0.3a^*$, 内径 R_2 为 $2.0a^*$, 高度 d 为 $1.0a^*$, 杂质离子轴向坐标 z_0 为零, 电场强度 F 分别取 0 kV/cm, 50 kV/cm, 150 kV/cm 时,施主杂质束缚能随径向坐标 ρ_0 间的变化关系。由图5中曲线可以看出,在任一电场下,随着杂质离子从量子环内表面移动到外表面,杂质束缚能先增大后减小,显示有一极大值,并且随着外加电场强度的增大,杂质束缚能相应会减小。这是因为随着杂质离子沿径向方向偏离量子环

中心时,杂质与电子间的库仑作用逐渐减弱,杂质束缚能相应地减少。与此同时,随着电场强度的逐渐增大,电子波函数沿施加外电场的反方向移动,因此杂质离子与电子波函数间的距离增大,导致杂质束缚能相应的会减小。

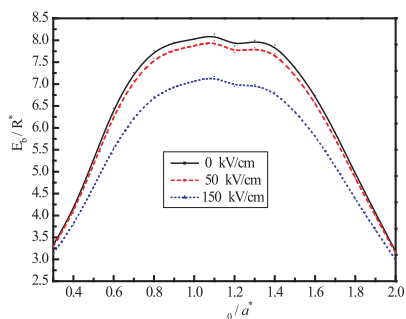


图 5 沿 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环生长方向施加的电场强度取不同值时,中心施主杂质束缚能随杂质径向杂质位置的变化关系

3 结论

本文研究了圆柱形 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子环中类氢施主杂质束缚能随量子环结构参数(高度、径向厚度)、径向杂质位置以及电场强度的变化关系。得到如下结论:

(1)当给定量子环的高度,在任一电场下,随着量子环径向厚度的减小,中心施主杂质束缚能先增大后减小,有一极大值,并且随着电场强度逐渐增大,中心施主杂质束缚能相应会减小。

(2)当给定量子环的内径和外径时,随着量子环高度的增大,中心施主杂质束缚能先增大后减小,有一极大值,当量子环高度较大时,外电场对量子环中电子的作用占主要地位。

(3)同样的空间约束下,较强的电场使电子波函数沿施加外电场的反方向偏离中心,因此杂质离子轴向位置的变化导致杂质束缚能相应变化。

(4)当杂质离子从量子环的内表面被移至外表面时,杂质束缚能先增大后减小,有一极大值。

参考文献:

[1] Gedamu D, Paulowicz I, Jebril S, et al. Procedures and properties for a direct nano-micro integration of metal and semiconductor nanowires on Si Chips[J]. J

Nanotech, 2012(7):325732-325744.

- [2] Xie W F. Absorption spectra of a donor impurity in a quantum ring[J]. Phys Status Solidi B, 2009, 246(6):1313-1317.
- [3] Monozon B S, Schmelcher P. Impurity center in a semiconductor quantum ring in the presence of crossed magnetic and electric fields[J]. Phys Rev B, 2003, 67(4):045203-045216.
- [4] Aichinger M, Chin S A, Krotscheck E, et al. Effects of geometry and impurities on quantum rings in magnetic fields[J]. Phys Rev B, 2006, 73(19):195310-195317.
- [5] Bareghyan M G, Hajuntfard A, Kirakosyan A A, et al. Hydrostatic pressure and electric and magnetic field effects on the binding energy of a hydrogenic donor impurity in InAs Pöshl-Teller quantum ring[J]. Superlattice Microst, 2012, 51(1):119-127.
- [6] Baghrmian H M, Barseghyan M G, Duque C A, et al. Binding energy of hydrogenic donor impurity in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs concentric double quantum rings: effects of geometry, hydrostatic pressure, temperature, and aluminum concentration[J]. Physica E, 2013, 48(1):164-170.
- [7] Zounoubi A, Zorkani I, Messaoudi K EI, et al. Magnetic field effect on the polarizability of shallow donor in cylindrical quantum dot[J]. Phys Lett A, 2003, 312(1):220-227.
- [8] Pan H J, Liu L Z, Liu M. Hydrogenic-donor impurity states in GaAsAl_xGa_{1-x}As quantum dots in the presence of an electric field[J]. Chin Phys Lett, 2011, 28(8):086201-086207.
- [9] 王广新. 圆柱形 GaAs 量子环中施主杂质束缚能的磁场效应[J]. 华北理工大学学报:自然科学版, 2016, 38(3):47-52.

(责任编辑:夏玉玲)