

内建电场作用下纤锌矿 $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 量子阱中束缚极化子结合能和极化子能移随组分 x 的变化规律

赵凤岐 潘虹宇

内蒙古师范大学物理与电子信息学院功能材料物理与化学内蒙古自治区重点实验室, 内蒙古 呼和浩特 010022

摘要 用改进的 Lee-Low-Pines (LLP) 变分理论讨论了纤锌矿结构的 $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 量子阱体系中内建电场对束缚极化子结合能和极化子能移的影响, 数值研究了基态能量和结合能、不同支光学声子对能量和结合能的贡献随 Mg 组分 x 变化的规律。计算中计入了体系的介电常数、电子的带有效质量和不同支光学声子频率等参数的各向异性, 并同时考虑了长波光声子与电子和杂质中心的相互作用。结果显示, 该体系中, 内建电场对结合能和极化子能移的影响显著, 并且不同支光学声子对能量和结合能的贡献受内建电场的影响程度有所不同。内建电场增大了声子对能量的总贡献, 而降低了声子对结合能的总贡献。在内建电场作用下, 能量和结合能随 x 增大而急剧减小, 而没有内建电场时, 变化相对缓慢。计算结果还说明, 组分 x 变大时, 无论是否考虑内建电场, 界面和定域声子对能量和结合能的贡献变大, 半空间声子贡献变小, 声子对能量的总贡献变大。而声子对结合能的总贡献则要视是否考虑内建电场而不同: 有内建电场时变大, 无内建电场时变小。同闪锌矿结构的 $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 量子阱相比, 纤锌矿 $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 量子阱体系中光学声子对极化子能量和结合能的影响更大, 极化子能移更明显。

关键词 材料; 纤锌矿量子阱; 内建电场; 极化子结合能; 极化子能移

中图分类号 O471.3; O471.1 文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP53.091602

Binding Energy of Bound Polaron and the Polaron Shift as the Functions of Composition x in Wurtzite $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ Quantum Well Under the Built-in Electric Field

Zhao Fengqi Pan Hongyu

Inner Mongolia Key Laboratory for Physics and Chemistry of Functional Materials, College of Physics and Electronic Information, Inner Mongolia Normal University, Hohhot, Nei Monggol 010022, China

Abstract The influence of the built-in electric field on bound polaron binding energy and the polaron shift in a wurtzite $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ quantum well are investigated using the improved Lee-Low-Pines (LLP) variational theory. The ground-state energy and binding energy, the contributions from different branches of optical phonons to the energy and the binding energy are given as the functions of composition x . The anisotropic properties of dielectric constant, electron band mass, different branches of optical phonons frequencies, the optical phonon-electron and the impurity center interaction are considered in the numerical calculations. The results show that the influence of the built-in electric field on the binding energy and polaron shift is obvious, and the degree of the influence of the built-in electric field for the contributions of different phonon modes is different. The built-in electric field increases the total phonon contribution to the energy, but it significantly reduces the total phonon contribution to the binding energy. The binding energy with the built-in electric field rapidly decreases as increasing composition x , but the binding energy without the built-in electric field decreases slightly. The result also show that when increasing the composition x , the contributions of interface and confined phonons to the energy and the binding energy with and without the built-in electric field increase, the contributions of half space phonon reduce, and the

收稿日期: 2016-05-04; 收到修改稿日期: 2016-05-10; 网络出版日期: 2016-08-29

基金项目: 国家自然科学基金(11264027)、内蒙古自治区自然科学基金(2015MS0126)、内蒙古自治区“草原英才”工程培养项目

作者简介: 赵凤岐(1959—), 男, 博士, 教授, 主要从事凝聚态理论方面的研究。E-mail: zhaofengqi@126.com

total contributions of phonons to the energy increase. But the total contributions of phonons to the binding energy with and without the built-in electric field are different. The total contributions with the built-in electric field increase, while the total contributions without the built-in electric field decrease. In comparison with the zinc blende GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells, the influence of optical phonons on the energy and the binding energy of bound polaron in a wurtzite ZnO/Mg_xZn_{1-x}O quantum well is larger, and polaron shift is more obvious.

Key words materials; wurtzite quantum well; built-in electric field; polaron binding energy; polaron shift

OCIS codes 160.6000; 160.2100; 310.6860

1 引言

ZnO 是一种重要的宽禁带直接带隙半导体光电材料,具有良好的热稳定性和化学稳定性^[1],被认为是最有希望的光电子和纳电子材料^[2]。ZnO 可用作激光二极管、气敏传感器和紫外光发射器件而成为光电子领域的研究热点^[3-5]。在室温下,纤锌矿是 ZnO 材料的稳定结构。纤锌矿 ZnO 材料的重要特性是各向异性、宽能带、有多支奇特的声子模。人们发现,在纤锌矿 ZnO 材料中不存在纯横光学(TO)声子模和纯纵光学(LO)声子模,声子模以混合模的形式存在^[6]。因此,由纤锌矿 ZnO 构成的量子阱(如 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O)体系中光学声子与电子耦合结果不同于闪锌矿半导体构成的量子阱(如 GaAs/Al_xGa_{1-x}As)体系中相应的结果。

有些研究小组对 ZnO 基量子阱(如 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O, ZnO/Be_xZn_{1-x}O)材料的发光和吸收光谱、太阳能电池、晶格振动、能带和内建电场等问题进行了研究,获得了一些实验结果^[7-18]。理论研究^[19-23]主要集中在纤锌矿 ZnO 基量子阱材料的激子结合能和跃迁能量、能带结构参数等方面。Lee 等^[24-25]用连续介质模型和单轴模型导出纤锌矿异质结和量子阱结构中电子-光学声子相互作用 Frohlich 哈密顿量。Shi 等^[26-28]用转移矩阵方法推导出纤锌矿异质结结构中电子-光学声子相互作用 Frohlich 哈密顿量。他们的研究发现,在纤锌矿单量子阱体系中有 4 支长波光学声子与电子相互作用,分别是定域(CF)、界面(IF)、半空间(HS)和传播(PR)。由于单轴各向异性,纤锌矿 ZnO 基量子阱体系中声子与电子相互作用比 GaAs 基量子阱体系中声子与电子相互作用复杂得多,并且在纤锌矿 ZnO 基量子阱中存在较强的内建电场。因而在前者中电子与光学声子相互作用有关问题的研究比后者中相应研究难得多。

在前些工作中^[29-30]从 Lee 研究组导出的 Frohlich 哈密顿量^[24]出发,讨论了 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱材料(纤锌矿)中不同支光学声子引起的极化子能移、内建电场对极化子能量和跃迁能量的影响等问题。据了解,ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱(纤锌矿)材料中内建电场和不同支声子对束缚极化子能级和结合能的影响的报道较少。ZnO 基量子阱体系(纤锌矿)中内建电场对电子态能量和极化子能移的影响较大,并且电子与声子耦合很强($\alpha \approx 0.85$),因此有必要进一步讨论这方面的问题。

本文用改进的 Lee-Low-Pines(LLP)中间耦合理论研究了纤锌矿 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱材料中有内建电场和没有内建电场时束缚极化子能级和极化子效应,给出基态能量和结合能、不同支光学声子对能量和结合能的贡献等随组分 x 变化的规律。数值计算中计入了该体系中介电常数、不同支声子频率、电子有效质量的各向异性,同时考虑电子和杂质中心与光学声子的耦合作用。

2 哈密顿量与理论计算

量子阱阱内($j=1$)材料选为 ZnO(位于 $|z| < d/2$ 范围),阱外($j=2$)材料选为 Mg_xZn_{1-x}O(位于 $|z| > d/2$ 区间)。垂直于量子阱界面选为坐标系 Z 轴正方向,类氢杂质中心固定在 $(0, 0, Z_0)$ 处,于是纤锌矿 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱材料中电子(杂质中心)与声子相互作用系统(束缚极化子)哈密顿量为

$$H = \frac{p_{\perp}^2}{2m_{\perp j}} + p_z \left(\frac{p_z}{2m_{zj}} \right) + V(z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_j^{\infty} r} + \sum_{\mathbf{w}} \hbar\omega_n^+(\mathbf{w}) a_n^+(\mathbf{w}) + H_I, \quad (1)$$

式中 ϵ_j^{∞} 是材料($j=1, 2$)中高频介电常数, $m_{\perp j}$ 和 m_{zj} 是材料中电子带有效质量, $a_n^+(\mathbf{w})$ 和 $a_n(\mathbf{w})$ 是波矢为 \mathbf{w} 的类 TO 和类 LO 光学声子产生算符和消灭算符, \mathbf{w} 为对 IF 声子模时, $\mathbf{w} = \mathbf{q}$, 对 HS 和 CF 声子模时, $\mathbf{w} = (\mathbf{q}, k_{zj})$ 。 $n = \{p, k\}$, p 代表对称和反对称模, k 代表 CF、IF 和 HS 模(包括类 LO 和类 TO 声子)。势函数 $V(z)$ 可写为

$$V(z) = \begin{cases} V_0 - eFd/2, & z < -d/2 \\ eFz, & |z| \leq d/2, \\ V_0 + eFd/2, & z > d/2 \end{cases} \quad (2)$$

式中 e 是基本电荷, $V_0 = 0.7\Delta E_g$, $\Delta E_g = x[E_g(\text{MgO}) - E_g(\text{ZnO})] + bx(1-x)$, 调节参数 b 取为 $0.87 \text{ eV}^{[31]}$, $F = 0.41x^{[32]}$ 是该结构中的内建电场, F 的方向选为坐标轴 Z 轴正方向. 光学声子与电子(杂质中心)耦合哈密顿量 H_I 可写为

$$H_I = \sum_{\mathbf{w}_n} [g_n(z) \exp(i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}) - g_n(z_0)] [a_n(\mathbf{w}) + h.c.], \quad (3)$$

这里 \mathbf{q} 和 $\boldsymbol{\rho}$ 分别是 X - Y 平面上的声子波矢量和电子位置矢量. 对称定域光学声子耦合函数由以下方程给出^[24]

$$g_{\text{S,CF}} = -i \left[\frac{4\pi\hbar e^2 L^{-2}}{(\partial/\partial\omega)(\epsilon_{1\perp} q^2 + \epsilon_{1z} k_{1m}^2) d/2 - 2q(\partial/\partial\omega) f_s(\omega) \cos(k_{1m} d/2)} \right]^{1/2} \times \chi_{\text{S,CF}}, \quad (4)$$

式中

$$\chi_{\text{S,CF}} = \begin{cases} \cos(k_{1m} z), & |z| < d/2 \\ \cos(k_{1m} d/2) \exp[-\kappa_2(|z| - d/2)], & |z| \geq d/2 \end{cases}, \quad (5)$$

反对称定域光学声子耦合函数为^[24]

$$g_{\text{A,CF}} = -i \left[\frac{4\pi\hbar e^2 L^{-2}}{(\partial/\partial\omega)(\epsilon_{1\perp} q^2 + \epsilon_{1z} k_{1m}^2) d/2 - 2q(\partial/\partial\omega) f_A(\omega) \sin(k_{1m} d/2)} \right]^{1/2} \times \chi_{\text{A,CF}}, \quad (6)$$

式中

$$\chi_{\text{A,CF}} = \begin{cases} \sin(k_{1m} z), & |z| < d/2 \\ \sin(k_{1m} d/2) \exp[-\kappa_2(|z| - d/2)], & |z| \geq d/2 \end{cases}, \quad (7)$$

式中 $f_s(\omega)$, $f_A(\omega)$, k_{1m} 以及介电函数 $\epsilon_{jz}(\omega)$ 和 $\epsilon_{j\perp}(\omega)$ 均在文献[24]中给出, L^2 是量子阱界面面积.

类似于 CF 声子, 半空间和界面光学声子的耦合函数参看文献[24]. 为了简化求解过程, 对体系哈密顿算符做两次么正变换,

$$U_1 = \exp\left\{-i \left[\sum_{\mathbf{w}_n} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho} a_n^+(\mathbf{w}) a_n(\mathbf{w}) \right]\right\}, \quad (8)$$

$$U_2 = \exp\left\{\sum_{\mathbf{w}_n} [\beta_n \chi_n a_n^+(\mathbf{w}) - \beta_n^* \chi_n a_n(\mathbf{w})]\right\}. \quad (9)$$

变分参数 β_n 和 β_n^* 由对体系能量求最小值而确定. 两次么正变换后, 体系哈密顿量可变为

$$H^* = U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2. \quad (10)$$

体系的基态尝试波函数选为

$$\psi = N \varphi(z) \varphi(\rho) |0\rangle, \quad (11)$$

式中

$$\varphi(\rho) = \lambda \exp(-\lambda\rho/2), \quad (12)$$

式中 λ 和 N 分别是变分参数和归一化常数, $|0\rangle$ 是声子场真空态, 电子在 Z 轴方向运动的波函数 $\varphi(z)$ 通过数值求解薛定谔方程而确定. 束缚极化子基态能量为

$$E_{1s} = \langle \psi | H^* | \psi \rangle, \quad (13)$$

结合能为

$$E_b = E_f - E_{1s}, \quad (14)$$

式中 E_f 是量子阱体系中自由极化子能量.

3 计算结果和讨论

对(13)式和(14)式进行数值计算而获得束缚极化子能量和结合能、不同支光学声子模对能量和结合能的贡献随 x 变化规律, 得出的结果分别在图 1~4 中给出. 三元混晶 $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 材料的相关参数利用关系 $Q_{\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}} = xQ_{\text{MgO}} + (1-x)Q_{\text{ZnO}}$ 获得. 数值计算中所用的参数在表 1 中给出. 光学声子与电子耦合对能

量的贡献 $D_n (<0)$ 和杂质中心与光学声子耦合对能量的贡献 $Z_n (>0)$ 合称为光学声子对束缚极化子基态能量的贡献 $\Delta E_{\text{ph}}^n = D_n + Z_n$ 。因为杂质中心与光学声子耦合比电子与光学声子耦合弱,所以 Z_n 的值小于 D_n 的绝对值。光学声子与电子耦合对自由极化子(没有杂质中心)能量的贡献 $P_n (<0)$ 和 ΔE_{ph}^n 之差叫做光学声子对结合能的贡献 $\Delta E_{\text{b}}^n = P_n - D_n - Z_n$ 。杂质位置选在坐标轴原点,即 $Z_0 = 0$ 。

表 1 计算中用到的参数

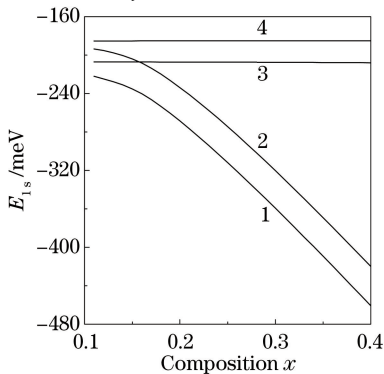
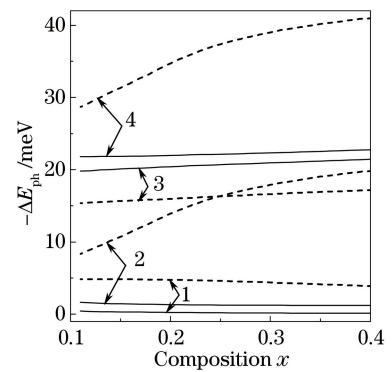
Table 1 Parameters used in the calculations

Parameter	m_{\perp}	m_z	$\epsilon_{\perp}^{\infty}$	ϵ_z^{∞}	$\hbar\omega_{\perp}$	$\hbar\omega_z$	$\hbar\omega_{\perp L}$	$\hbar\omega_{zL}$	E_g
ZnO	0.21	0.23	3.70	3.78	50.71	47.11	72.78	71.17	3.37
MgO	0.28	0.28	2.60	2.60	49.72	49.72	89.15	89.15	7.7

纤锌矿 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱(给定阱宽 $d=8$ nm)中束缚极化子基态能量随 x 变化的函数关系在图 1 中给出,线 1(有声子作用)和线 2(没有声子作用)表示有内建电场的结果,线 3(有声子作用)和线 4(没有声子作用)表示没有内建电场的结果。由图 1 可知,束缚极化子基态能量受内建电场的影响很大,有内建电场时,基态能量随组分 x 增大而迅速减小。而忽略内建电场时,基态能量随组分 x 没有明显的变化。原因是,随着 x 的变大,量子阱结构阱深度变大,内建电场强度增大,导致体系能量减小。从图 1 中还能看到,光学声子与电子和杂质中心相互作用对能量的贡献(即极化子能移)比较大,使得基态能量明显减小。

图 2 中绘出阱宽($d=8$ nm)不变时纤锌矿 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱中不同支光学声子引起的极化子能移随 x 的变化规律,有和没有内建电场的结果分别用虚线和实线表示,HS、IF 和 CF 声子贡献分别用线 1、线 2 和线 3 表示,而线 4 是声子总贡献。由图 2 可知,在组分 x 变大过程中,界面和定域声子贡献变大,并有内建电场时的界面声子贡献较快变大,而半空间光学声子贡献缓慢变小。这是因为,在 x 的变大过程中,量子阱深度变大,界面效应增强,使电子穿到阱外材料中的概率变小,引起电子与 HS 声子相互作用变弱,而与 IF 和 CF 声子相互作用增大。这过程中, D_{CF} 和 D_{IF} (Z_{CF} 和 Z_{IF}) 数值变大,但 Z_{CF} 和 Z_{IF} 数值变大程度小于 D_{CF} 和 D_{IF} 数值变大程度,即 $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{CF}} = D_{\text{CF}} + Z_{\text{CF}}$ 和 $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{IF}} = D_{\text{IF}} + Z_{\text{IF}}$ 数值变大,而 D_{HS} (Z_{HS}) 数值变小,并且 D_{HS} 数值变小程度比 Z_{HS} 数值变小程度快,即 $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{HS}} = D_{\text{HS}} + Z_{\text{HS}}$ 值变小。不同支光学声子总贡献 $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{T}}$ 随着组分 x 的增大而变大。由于电子受内建电场作用,向量子阱左界面移动,所以有内建电场时的界面和半空间光学声子贡献大于没有内建电场时的相应贡献,而定域声子贡献正相反。

图 3 中绘出阱宽不变($d=8$ nm)的 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱中不同支声子对束缚极化子 E_{b} 的贡献随 Mg 组分变化规律,实线(虚线)代表没有(有)内建电场作用的结果,线 1、线 2 和线 3 分别表示 CF、HS 和 IF 光学声子贡献,线 4 表示不同支光学声子总贡献。从图 3 中看到,界面和定域光学声子贡献随 Mg 组分的变大而缓慢变大,并且没有内建电场作用时的贡献变大速度略大于有内建电场作用时的贡献变大速度。而半空间光学声子贡献随着 Mg 组分的增大而减小。因为,根据图 2 中解释,随着组分 x 的增大, $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{CF}}$ 和 P_{CF} ($\Delta E_{\text{ph}}^{\text{IF}}$ 和 P_{IF}) 数值变大,并且 P_{CF} (P_{IF}) 数值变大速度大于 $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{CF}}$ ($\Delta E_{\text{ph}}^{\text{IF}}$) 数值变大速度,则 $\Delta E_{\text{b}}^{\text{CF}} = P_{\text{CF}} - \Delta E_{\text{ph}}^{\text{CF}}$ ($\Delta E_{\text{b}}^{\text{IF}} = P_{\text{IF}} - \Delta E_{\text{ph}}^{\text{IF}}$) 数值变大。而 $\Delta E_{\text{ph}}^{\text{HS}}$ 和 P_{HS} 数值随着 x 的变大而变小,并且 P_{HS} 数值变小速度大于

图 1 束缚极化子基态能量随 x 变化规律Fig. 1 Ground state energies of bound polaron as a function of composition x 图 2 不同支光学声子引起的极化子能移随组分 x 变化关系Fig. 2 Polaron effect caused by different branches of phonons as a function of composition x

$\Delta E_{\text{ph}}^{\text{CF}}$ 数值变小速度, 则 $\Delta E_{\text{b}}^{\text{HS}} = P_{\text{HS}} - \Delta E_{\text{ph}}^{\text{HS}}$ 数值变小。声子总贡献 $\Delta E_{\text{b}}^{\downarrow}$ (有内建电场) 随着 Mg 组分的增大而减小, 而 $\Delta E_{\text{b}}^{\uparrow}$ (没有内建电场) 随着 Mg 组分的增大而增大。这是不同支声子与电子和杂质中心共同作用的结果。从以上结果看, 光学声子对能量和 E_{b} 的贡献比较大, 若杂质中心与光学声子的相互作用忽略不计, 光学声子对能量和 E_{b} 的贡献明显变小。

在阱宽 ($d=8$ nm) 不变条件下, ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱 (纤锌矿) 中 E_{b} 随 x 变化的规律在图 4 中给出, 有声子作用和没有声子作用时的结果分别用虚线 1 和虚线 2 (有内建电场) 表示, 实线 3 和实线 4 (没有内建电场) 分别代表有声子作用和没有声子作用时的结果。当考虑内建电场作用时, E_{b} (有和没有声子作用) 随着 x 的增大明显减小。因为, 随着 Mg 组分的增大, 内建电场增强, 电子向量子阱左界面移动, 同时, 量子阱势垒变高阻止电子向量子阱左界面移动, 以及声子作用等因素的共同影响, 使束缚极化子结合能减小。当忽略内建电场作用时, 有声子作用时的结合能随着 x 的增大缓慢减小, 而没有声子作用时的 E_{b} 随着 x 的增大缓慢增大。这是因为, 有声子作用时, 随着 x 的增大, 声子对 E_{b} 贡献明显变大, 这就导致结合能降低。而没有声子作用时, 随着 Mg 组分的变大, 量子阱势垒变高, 电子向杂质中心移动, 导致结合能增大。

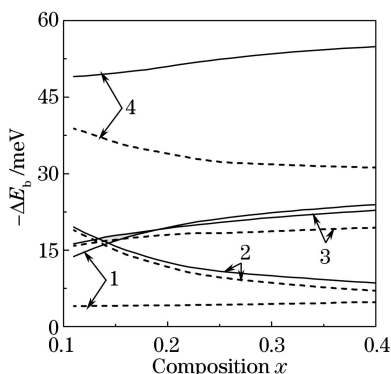


图 3 不同支声子对束缚极化子结合能的贡献随组分 x 变化规律

Fig. 3 Contributions from different branches of phonons to the binding energies of the bound polaron as a function of composition x

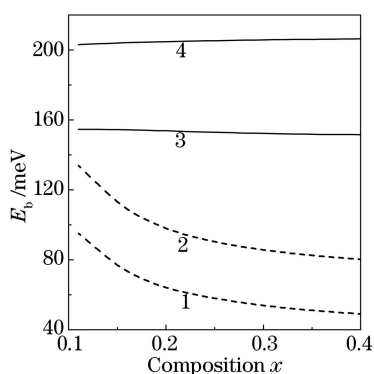


图 4 束缚极化子结合能随组分 x 变化关系

Fig. 4 Binding energies of the bound polaron as a function of composition x

从计算结果看, 类 LO 光学声子的贡献比类 TO 声子的贡献约大两个数量级, 原因是类 LO 光学声子与电子的耦合比类 TO 声子与电子的耦合强。因此在计算中类 TO 声子的贡献可以忽略不计。另外, ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱 (纤锌矿) 结构中受 $\epsilon_{1\perp}\epsilon_{1z} < 0$ ^[24] 条件的约束, 不存在类 LO 传播声子模。

4 结 论

采用改进的 LLP 变分理论研究了 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱体系中有和没有内建电场作用时束缚极化子结合能、不同支光学声子对能量和结合能的贡献随 Mg 组分变化的函数关系。在数值计算中计入纤锌矿材料中介电常数、电子带质量、不同支 (IF、CF 和 HS) 光学声子频率的各向异性, 同时考虑了光学声子与电子和杂质中心的相互作用。结果表明, 内建电场对极化子能移和 E_{b} 的影响很明显, 并且不同支声子对能量和 E_{b} 的贡献受内建电场的影响程度不一样。在纤锌矿 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱结构中阱宽 ($d=8$ nm) 不变时, 随着 x 的增大, 量子阱结构和杂质中心对电子的束缚程度增强, IF 和 CF 光学声子对能量和 E_{b} 的贡献变大, 而 HS 光学声子贡献变小。不同支光学声子对能量的总贡献 (有和没有内建电场) 随着 x 的增大均变大, 而声子对 E_{b} 的总贡献在没有内建电场时减小, 有内建电场时增大。光学声子对能量和 E_{b} 的贡献比较大, 这主要是杂质中心与光学声子的相互作用导致的。若忽略这个作用, 光学声子对能量和 E_{b} 的贡献就变小。内建电场作用被忽略时, 结合能 (有声子作用) 随着 Mg 组分的增大而缓慢减小。而有内建电场作用时, E_{b} 随 Mg 组分的增大而急剧减小。

在 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱 (纤锌矿) 材料中极化子能移和 E_{b} 受内建电场的影响较大, 并且该系统中

极化子能移明显大于 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 量子阱(闪锌矿)材料中的极化子能移。因此,在 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱材料中研究电子态能级问题时应该考虑内建电场和极化子能移。此项研究工作有助于进一步研究纤锌矿半导体低维结构中电子与光学声子系统。

参 考 文 献

- 1 Su Shichen, Lü Youming, Mei Ting. Fabrication and optical properties of ZnO/ZnMgO multiple quantum wells on m-sapphire substrates[J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(9): 096801.
宿世臣, 吕有明, 梅霆. m 面蓝宝石上 ZnO/ZnMgO 多量子阱的制备及发光特性研究[J]. 物理学报, 2011, 60(9): 096801.
- 2 Özgür Ü, Alivov Y I, Liu C, *et al.* A comprehensive review of ZnO materials and devices[J]. J Appl Phys, 2005, 98(4): 041301.
- 3 Bagnall D M, Chen Y F, Zhu Z, *et al.* High temperature excitonic stimulated emission from ZnO epitaxial layers[J]. Appl Phys Lett, 1998, 73(8): 1038-1040.
- 4 Liu Hongxia, Zhou Shengming, Li Shuzhi, *et al.* Growth of ZnO microrod array films and their optical properties[J]. Acta Physica Sinica, 2006, 55(3): 1398-1401.
刘红霞, 周圣明, 李抒智, 等. 柱状 ZnO 阵列薄膜的生长及其发光特性[J]. 物理学报, 2006, 55(3): 1398-1401.
- 5 He Xiaoxiao, Wang Wenjun, Li Shuhong, *et al.* Design and properties analogy of ZnO-based multilayer transparent conducting film[J]. Chinese J Lasers, 2014, 41(6): 0607001.
和晓晓, 王文军, 李淑红, 等. ZnO 基透明导电薄膜的制备与特性研究[J]. 中国激光, 2014, 41(6): 0607001.
- 6 Lee B C, Kim K V, Strosio M A, *et al.* Electron-optical-phonon scattering in wurtzite crystals[J]. Phys Rev B, 1997, 56(3): 997-1000.
- 7 Makino T, Segawa Y, Kawasaki M, *et al.* Band gap engineering based on Mg_xZn_{1-x}O and Cd_yZn_{1-y}O ternary alloy films [J]. Appl Phys Lett, 2001, 78(9): 1237-1239.
- 8 Makino T, Tamura K, Chia C H, *et al.* Radiative recombination of electron-hole pairs spatially separated due to quantum-confined Stark and Franz-Keldish effects in ZnO/Mg_{0.27}Zn_{0.73}O quantum wells[J]. Appl Phys Lett, 2002, 81(13): 2355-2357.
- 9 Fan W J, Xia J B, Agus P A, *et al.* Band parameters and electronic structures of wurtzite ZnO and ZnO/MgZnO quantum wells[J]. J Appl Phys, 2006, 99(1): 013702.
- 10 Coleman V A, Buda M, Tan H H, *et al.* Rapid communication: Observation of blue shifts in ZnO/ZnMgO multiple quantum well structures by ion-implantation induced intermixing[J]. Semicond Sci Technol, 2006, 21(3): L25- L28.
- 11 Furno E, Chiarra S, Penna M, *et al.* Electronic and optical properties of Mg_xZn_{1-x}O and Be_xZn_{1-x}O quantum wells[J]. J Elect Mater, 2010, 39(7): 936-944.
- 12 Jiang Jianhui, Wu Kongping, Lu Kailin, *et al.* Effect of intermediate-band on the ZnO/ZnTe photovoltaic solar cell[J]. Acta Optica Sinica, 2015, 35(9): 0916003.
蒋建慧, 吴孔平, 鲁开林, 等. 中间带对 ZnO/ZnTe 光伏太阳能电池性能的影响[J]. 光学学报, 2015, 35(9): 0916003.
- 13 Ge Lin, Xu Jianping, Zhang Xiaosong, *et al.* Study on all-inorganic light emitting devices based on ZnO nanorods with modification of SiO₂ [J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(8): 0823004.
葛林, 徐建萍, 张晓松, 等. 全无机 ZnO 纳米棒/SiO₂ 电致发光器件的研究[J]. 光学学报, 2013, 33(8): 0823004.
- 14 Coli G, Bajaj K K. Excitonic transitions in ZnO/MgZnO quantum well Heterostructures[J]. Appl Phys Lett, 2001, 78(19): 2861-2863.
- 15 Fan W J, Abiyasa A P, Tan S T, *et al.* Electronic structures of wurtzite ZnO and ZnO/MgZnO quantum well[J]. J Cryst Growth, 2006, 287(1): 28-33.
- 16 Ahn D, Park S H, Park E H, *et al.* Optical gain and luminescence of a ZnO-MgZnO quantum well[J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2006, 18(2): 349-351.
- 17 Zeng Z P, Wei S Y, Wei J B, *et al.* Hydrogenic impurity states in wurtzite ZnO/MgZnO quantum dot[J]. Mod Phys Lett B, 2010, 24(28): 2793-2801.
- 18 Bretagnon T, Lefebvre P, Guillet T, *et al.* Barrier composition dependence of the internal electric field in ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO quantum wells[J]. Appl Phys Lett, 2007, 90(20): 201912.

- 19 Park S H. Exciton binding energies in wurtzite ZnO/MgZnO quantum wells with spontaneous and piezoelectric polarizations[J]. J Korean Phys So, 2007, 51(4): 1404-1408.
- 20 Stölzel M, Kupper J, Brandt M, *et al.* Electronic and optical properties of ZnO/(Mg, Zn)O quantum wells with and without a distinct quantum-confined Stark effect [J]. J Appl Phys, 2012, 111(6): 063701.
- 21 Wang L, Ma J G, Xu H Y. Anisotropic strained cubic MgZnO/MgO multiple-quantum-well nanorods: Growths and optical properties[J]. Appl Phys Lett, 2013, 102(3): 031905.
- 22 Su S C, Zhu H, Zhang L X, *et al.* Low-threshold lasing action in an asymmetric double ZnO/ZnMgO quantum well structure[J]. Appl Phys Lett, 2013, 103(13): 131104.
- 23 Puls J, Sadofev S, Schafer P, *et al.* Optical in-plane anisotropy of ZnO/(Zn, Mg)O quantum wells grown on a-plane sapphire: Implications for optical spin control[J]. Phys Rev B, 2014, 89(8): 081301.
- 24 Lee B C, Kim K W, Stroschio M A, *et al.* Optical-phonon confinement and scattering in wurtzite heterostructures [J]. Phys Rev B, 1998, 58(8): 4860-4865.
- 25 Komirenko S M, Kim K W, Stroschio M A, *et al.* Dispersion of polar optical phonons in wurtzite quantum wells[J]. Phys Rev B, 1999, 59(7): 5013-5020.
- 26 Shi J J. Interface optical-phonon modes and electron-interface-phonon interactions in wurtzite GaN/AlN quantum wells [J]. Phys Rev B, 2003, 68(16): 165335.
- 27 Shi J J, Chu X L, Goldys E M. Propagating optical-phonon modes and their electron phonon interaction in wurtzite GaN/Al_xGa_{1-x}N quantum wells[J]. Phys Rev B, 2004, 70(11): 115318.
- 28 Li L, Liu D, Shi J J. Electron quasi-confined-optical-phonon interactions in wurtzite GaN/AlN quantum wells [J]. Eur Phys J B, 2005, 44(4): 401-413.
- 29 Zhao F Q, Zhang M, Bai J H. Effects of electron-optical phonon interactions on the polaron energy in a wurtzite ZnO/M_xZn_{1-x}O quantum well[J]. Chin Phys B, 2015, 24(9): 097105.
- 30 Zhao F Q, Guo Z Z. Effects of the built-in electric field on polaron effects in a wurtzite ZnO/Mg_xZn_{1-x}O quantum well [J]. J Appl Phys, 2015, 118(19): 195704.
- 31 Fan X F, Sun H D, Shen Z X, *et al.* A first-principle analysis on the phase stabilities, chemical bonds and band gaps of wurtzite structure A_xZn_{1-x}O alloys (A=Ca, Cd, Mg) [J]. J Phys Condens Matter, 2008, 20(23): 235221.
- 32 Morhain C, Bretagnon T, Lefebvre P, *et al.* Internal electric field in wurtzite ZnO/ Zn_{0.78}Mg_{0.22}O quantum wells [J]. Phys Rev B, 2005, 72(24): 241305.