

# 纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子能量

赵凤岐 萨初荣贵 乌仁图雅

(内蒙古师范大学物理与电子信息学院, 内蒙古功能材料物理与化学重点实验室, 内蒙古 呼和浩特 010022)

**摘要** 采用改进的 Lee-Low-Pines 变分方法研究纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱材料中磁极化子能级, 给出纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子基态能量随阱宽  $L$  和外磁场强度  $B$  的变化关系以及跃迁能量和回旋频率随磁场强度变化的函数关系。计算中考虑了纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中光学声子模的各向异性和电子与光学声子之间的相互作用。为了定量分析和对比, 还给出了闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子能量和回旋频率的相应值。

**关键词** 纤锌矿量子阱; 磁极化子; 能量; 回旋频率

**中图分类号** O471.1; O471.3 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201131.0416003

## Energy of Magnetopolaron in Wurtzite GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N Quantum Well

Zhao Fengqi Sachuronggui Wurentuya

(Inner Mongolia Key Laboratory for Physics and Chemistry of Functional Materials, College of Physics and Electronic Information, Inner Mongolia Normal University, Huhhot, Inner Mongolia 010022, China)

**Abstract** The energy levels of magnetopolaron in the wurtzite GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N quantum well structure are studied by using Lee-Low-Pines (LLP) variational method. The ground state energy in wurtzite GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N quantum well structure is calculated as a function of well width  $L$  and external magnetic field  $B$ . The transition energy and cyclotron frequency of magnetopolarons are calculated as functions of magnetic field  $B$ . The anisotropy of the optical phonon modes and the interaction of electron-optical phonon in wurtzite GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N quantum well are considered in numerical calculation. For the qualitative analysis and comparison, the energy and cyclotron frequency of magnetopolaron in zinc blende GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N quantum well are calculated.

**Key words** wurtzite quantum well; magnetopolaron; energy; cyclotron frequency

**OCIS codes** 160.5140; 160.6000; 250.5590

## 1 引 言

近年来, 许多学者<sup>[1~4]</sup>对氮化物半导体(如 AlN, GaN, InN, AlGaIn 和 GaInN)材料的结构、光学声子模以及电子-声子相互作用做了一些研究, 发现了许多特殊物理现象。氮化物半导体具有闪锌矿和纤锌矿两种结构, 纤锌矿半导体材料不同于通常结构的半导体, 它具有单轴异性、禁带宽度大、击穿电场高、热导率大和有多支独特的声子模等特殊的物理性质。氮化物半导体在光电子和光探测器件(蓝、绿光和紫外光)、激光二极管等电学和光学器件的应用方面具有极大潜力<sup>[5,6]</sup>, 已成为第三代半导体材料<sup>[1,7]</sup>。目前国内外一些研究人员<sup>[1,5,8~12]</sup>对氮

化物半导体(如 AlN, GaN, InN, AlGaIn, GaInN)材料构成的量子阱、超晶格和异质结等材料的发光和吸收光谱、能带、晶格振动、杂质态、激子能量和结合能等问题进行了研究, 获得了一些实验和理论结果。B. C. Lee 等<sup>[13,14]</sup>对纤锌矿氮化物体材料和量子阱材料的光学振动模进行了研究, 导出体材料和量子阱材料中电子与长波光学声子相互作用哈密顿量。研究发现在纤锌矿体材料中存在多支独特的声子模(9 个光学、3 个声学模), 在纤锌矿结构中没有纯的纵光学(LO)声子模和横光学(TO)声子模, 并且类 LO(LO-like)声子模和类 TO(TO-like)声子模均呈现各向异性。薛亚光等<sup>[15]</sup>在文献[14]的基础上研

**收稿日期**: 2010-10-08; **收到修改稿日期**: 2010-12-13

**基金项目**: 国家自然科学基金(10964007)和内蒙古自治区高等学校科学研究重点项目(NJ09026)资助课题。

**作者简介**: 赵凤岐(1959—), 男, 博士, 教授, 主要从事凝聚态物理方面的研究。E-mail: fqzhao@imnu.edu.cn

究了纤锌矿氮化物半导体材料束缚极化子结合能,给出了类 LO 声子模和类 TO 声子模对结合能的贡献。史俊杰等<sup>[16~19]</sup>研究了纤锌矿氮化物量子阱材料的光学振动模,导出该体系中电子与长波光声子相互作用哈密顿量,并讨论了不同声子模对电子态能级的影响。赵凤岐等<sup>[20~22]</sup>采用变分法研究了纤锌矿氮化物抛物量子阱中极化子能级,给出了相应的数值计算结果。最近,屈媛等<sup>[23]</sup>研究了纤锌矿氮化物量子阱材料的界面和局域光学声子模,结果表明在 GaN 阱区引入 InN 纳米凹槽使纤锌矿 AlN/GaN/AlN 量子阱的光学声子发生较大变化。据了解,在纤锌矿 GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 量子阱中磁极化子的研究工作比较少,有待于进行深入研究。

随着磁光技术的发展,人们对磁极化子在半导体和晶体中的性质产生了浓厚的兴趣。磁场中的极化子因其在磁光技术中的重要作用,比如在磁传感器、光热辐射探测器、场效应晶体管及磁制冷等方面的应用而引起国内外学者的广泛重视。Larsen<sup>[24]</sup>提出了一种新颖的四级微扰法,并用这种方法研究了磁场中二维极化子的回旋共振质量和频率及基态能量等问题;近年来,Hu 等<sup>[25]</sup>用微扰法导出了极性晶体中界面磁极化子的有效哈密顿量。Ding 等<sup>[26]</sup>研究抛物量子阱中强耦合磁极化子,给出极化子有效质量量子阱宽度的变化关系。本文采用 Lee-Low-Pines (LLP)变分方法研究纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子的能级,给出基态能量随阱宽  $L$  和外磁场强度  $B$  的变化关系以及跃迁能量和回旋频率随磁场强度的变化关系。理论计算中考虑了纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中光学声子模的各向异性和电子与长波光声子之间的相互作用。为了定量分析和对比,本文还计算了闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子基态能量和回旋频率。

## 2 理论计算

考虑由 GaN 和 Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 两种不同的极性半导体材料构成的对称量子阱结构,量子阱宽度为  $L = 2d$ ,且沿  $z$  轴方向生长,即  $z$  轴垂直于量子阱界面, $x$ - $y$  平面平行于量子阱界面。阱内材料位于区间  $|z| < d$  ( $\lambda = 1$ ),垒材料位于区间  $|z| \geq d$  ( $\lambda = 2$ )。考虑一个电子在沿  $z$  轴加外磁场  $B$  的量子阱中运动,并且与声子相互作用。在有效质量近似下,该系统中磁极化子的哈密顿量可以写为

$$H = \frac{1}{2m_\lambda^*} (P - eA)^2 + V(z) + \sum_k \hbar\omega_k^+ \alpha_k + H_I, \quad (1)$$

式中  $A$  是磁场的矢势,与磁场强度  $B$  之间的关系是

$$B = \nabla \times A, \quad A = \frac{1}{2} B \times r. \quad (2)$$

用柱坐标系简化上式可以得出

$$H = \frac{p^2}{2m_\lambda^*} + \frac{e^2 B^2}{8m_\lambda^*} \rho^2 + \frac{1}{2} \hbar\omega_c L_z + V(z) + \sum_k \hbar\omega_k^+ \alpha_k + H_I, \quad (3)$$

式中  $\rho^2 = x^2 + y^2$ ,  $m_\lambda^*$  是电子有效质量,  $\omega_c = \frac{eB}{m_\lambda^*}$  是电子的回旋频率,  $L_z = xP_y - yP_x$  是电子的  $z$  方向上角动量,  $a_k^+$  ( $a_k$ ) 是波矢为  $k$ 、频率为  $\omega$  的声子产生算符(湮灭算符)。(3)式中第 4 项是量子阱的势能,它可写为

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| < d \\ V_0, & |z| \geq d \end{cases}, \quad (4)$$

式中

$$V_0 = Q_i [E_{gAl_xGa_{1-x}N}(x) - E_{gGaN}]^{[27,28]}, \quad (5)$$

$$E_{gAl_xGa_{1-x}N}(x) = (1-x)E_{gGaN} + xE_{gAlN} + bx(x-1), \quad (6)$$

纤锌矿中  $Q_i = 0.7$ ,  $b = 1.0$  eV; 闪锌矿中  $Q_i = 0.6$ ,  $b = 0.53$  eV。其中  $E_{gGaN}$  和  $E_{gAl_xGa_{1-x}N}$  分别表示阱材料和垒材料的能隙<sup>[8]</sup>。

(3)式中第 5 项是声子场哈密顿量,最后一项是电子-声子相互作用哈密顿量<sup>[13]</sup>

$$H_I = \sum_k [V_k^* a_k^+ \exp(-ik \cdot r) + V_k a_k \exp(ik \cdot r)], \quad (7)$$

式中

$$V_k = \left\{ \frac{4\pi e^2 \hbar V^{-1}}{(\partial/\partial\omega)[\epsilon_\perp(\omega)\sin^2\theta + \epsilon_z(\omega)\cos^2\theta]} \right\}^{1/2} \frac{1}{k}, \quad (8)$$

$$\epsilon_\perp(\omega) = \epsilon_\perp^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{\perp L}^2}{\omega^2 - \omega_\perp^2}, \quad \epsilon_z(\omega) = \epsilon_z^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{zL}^2}{\omega^2 - \omega_z^2}, \quad (9)$$

式中  $e$  是基本电荷,  $r = (\rho^2 + z^2)^{1/2}$  是电子坐标,  $\epsilon_\perp(\omega)$  和  $\epsilon_z(\omega)$  是介电函数,  $\omega_\perp$  ( $\omega_z$ ) 是晶格色散频率,  $\omega_{\perp L}$  ( $\omega_{zL}$ ) 是纵光学声子频率,  $\epsilon_\perp^\infty$  ( $\epsilon_z^\infty$ ) 是垂直(平行)于  $Z$  轴的高频介电常数,静态介电常数  $\epsilon_\perp^0 = \epsilon_\perp^\infty \omega_{\perp L}^2 / \omega_\perp^2$ ,  $\epsilon_z^0 = \epsilon_z^\infty \omega_{zL}^2 / \omega_z^2$ 。本征频率  $\omega$  由方程<sup>[13]</sup>

$$\epsilon_\perp(\omega)\sin^2\theta + \epsilon_z(\omega)\cos^2\theta = 0, \quad (10)$$

决定,其中  $\theta$  是波矢  $k$  与  $Z$  轴之间的夹角。

因为哈密顿量(3)式不能严格求解,需要做两次 LLP 么正变换,第一次么正变换消去相互作用哈密顿量中的电子坐标;第二次么正变换将晶格振动的原点移到平衡点上。第一次么正变换形式为

$$U_1 = \exp(-i \sum_k \mathbf{k} \cdot r a_k^+ a_k), \quad (11)$$

第二次么正变换形式为

$$U_2 = \exp\left[\sum_k (f_k a_k^+ - f_k^* a_k)\right], \quad (12)$$

式中  $f_k, f_k^*$  为变分参数, 分别取为

$$f_k = -\frac{V_k^*}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\lambda^*}}, \quad f_k^* = -\frac{V_k}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\lambda^*}}. \quad (13)$$

经过以上两次么正变换后得到磁极化子的有效哈密顿量为  $H^{**} = U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2$ 。系统的波函数选为

$$|\Psi_{n,m}(\rho, z, \phi)\rangle = N |\varphi_n(\rho)\rangle |\varphi_m(z)\rangle |\varphi_m(\phi)\rangle |0\rangle. \quad (14)$$

式中  $N$  是归一化常数,  $|0\rangle$  是声子场真空态波函数。波函数中量子数  $n$  和  $m$  分别描述电子的径向运动和角运动。磁极化子的能量为

$$E_n(L) = \langle \Psi_{n,m} | H^{**} | \Psi_{n,m} \rangle, \quad (15)$$

对磁极化子基态, 波函数为 ( $n=0, m=0$ )

$$|\Psi_{0,0}(\rho, z, \phi)\rangle = N |\phi_0(\rho)\rangle |\phi_0(z)\rangle |\phi_0(\phi)\rangle |0\rangle, \quad (16)$$

式中

$$|\phi_0(\rho)\rangle = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}\rho^2\right), \quad (17)$$

$$|\phi_0(\phi)\rangle = 1, \quad \alpha = (m_\lambda w_c / \hbar)^{1/2}, \quad (18)$$

$$|\phi_0(z)\rangle = \begin{cases} \cos(k_1 z), & |z| < d \\ \cos(k_1 d) \exp[-k_2 (|z| - d)], & |z| \geq d \end{cases}, \quad (19)$$

式中的

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_1^* E}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_2^* (V_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad (20)$$

式中  $E$  是量子阱中电子第一子带能量。磁极化子第一激发态波函数为 ( $n=1, m=0$ )

$$|\Psi_{1,0}\rangle(\rho, z, \phi) = N |\varphi_1(\rho)\rangle |\varphi_0(z)\rangle |\varphi_0(\phi)\rangle |0\rangle, \quad (21)$$

其中电子  $x$ - $y$  平面上电子的波函数选为

$$|\varphi_1(\rho)\rangle = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}\right)^{1/2} \alpha \rho \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 \rho^2\right). \quad (22)$$

磁极化子第一激发态到基态的跃迁能量由以下公式得出

$$\Delta E = E_1 - E_0. \quad (23)$$

磁极化子回旋频率为

$$\omega_c^* = (E_1 - E_0) / \hbar, \quad (24)$$

式中  $E_1$  和  $E_0$  分别表示磁极化子第一激发态能量和基态能量。

### 3 数值计算与讨论

为了获得纤锌矿和闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子基态能量、第一激发态到基态的跃迁能量及回旋频率, 对 (16)~(24) 式进行了数值求解。在数值计算中所需的参数在表 1, 2 中给出, 其中声子频率以 meV 为单位, 能隙以 eV 为单位。能量的参考点选在导带底。

表 1 纤锌矿 GaN 和 AlN 的相应参数

Table 1 Parameters of wurzite GaN and AlN

Wurtzite	$m^*/m_e$	$\epsilon^\infty$	$\hbar\omega_{\perp L}$	$\hbar\omega_{\perp L}$	$\hbar\omega_{\perp}$	$\hbar\omega_Z$	$E_g$
GaN	0.2 <sup>[29]</sup>	5.29 <sup>[29]</sup>	92.12 <sup>[29]</sup>	91.13 <sup>[29]</sup>	69.56 <sup>[29]</sup>	66.08 <sup>[29]</sup>	3.39 <sup>[31]</sup>
AlN	0.35 <sup>[30]</sup>	4.68 <sup>[30]</sup>	113.57 <sup>[30]</sup>	110.72 <sup>[30]</sup>	83.44 <sup>[30]</sup>	81.83 <sup>[30]</sup>	6.20 <sup>[30]</sup>

表 2 闪锌矿 GaN 和 AlN 的相应参数

Table 2 Parameters of zinc blende GaN and AlN

Zinc blende	$m^*/m_e$	$\epsilon^\infty$	$\hbar\omega_L$	$E_g$
GaN	0.15 <sup>[32]</sup>	5.41 <sup>[33]</sup>	90.63 <sup>[32]</sup>	3.3 <sup>[34]</sup>
AlN	0.25 <sup>[32]</sup>	4.46 <sup>[33]</sup>	112.58 <sup>[32]</sup>	6.0 <sup>[34]</sup>

阱内材料 GaN 的参数在表 1, 2 中给出, 纤锌矿 (闪锌矿) 三元混晶 Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 的参数 (除能隙外) 由 GaN 与 AlN 的参数通过线性插值法求得, 即  $F_{\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}} = 0.7F_{\text{GaN}} + 0.3F_{\text{AlN}}$ 。数值计算的结果在图 1~4 中给出。

图 1(a) 给出了外加磁场强度  $B=6\text{T}$  时纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子基态能量  $E_0$  随阱宽  $L$  的变化关系。图 1(a) 中实线和虚线分别表示有限深量子阱中有和无电子-声子相互作用时

的基态能量, 点线表示无限深量子阱中有电子-声子相互作用时的基态能量。从函数关系曲线可知, 基态能量都随阱宽  $L$  的增大逐渐减小, 当阱宽  $L$  较小时, 磁极化子的基态能量  $E_0$  的值急剧减小; 当阱宽较大时基态能量随阱宽的增大而减小的幅度比较小, 最后趋于平缓。因为量子阱较小时有较强的量子尺寸效应; 而阱宽比较大时候量子尺寸效应不显著。这一结果定性上与 GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 量子阱中的相应结果相似<sup>[35,36]</sup>, 但定量上有所不同。当考虑电子-声子相互作用时, 电子-声子相互作用使能量降低, 并且降低的程度比较大, 这表明纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中电子-声子相互作用对磁极化子能量的贡献较大。例如, 纤锌矿 GaN/

$\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  量子阱中,约 40 meV,闪锌矿  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  量子阱中,约 35 meV。而  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  量子阱中,约 2.5 meV。为了定性分析和对比,图 1(a)中还给出了无限深势阱中磁极化子有电子-声子相互作用时的基态能量随阱宽  $L$  的变化

关系。当阱宽较小时,磁极化子能量明显大于有限深势阱中的相应值;当阱宽较大时,这两种势阱中磁极化子能量值基本一致。这一规律也与量子阱中电子受量子效应有关。

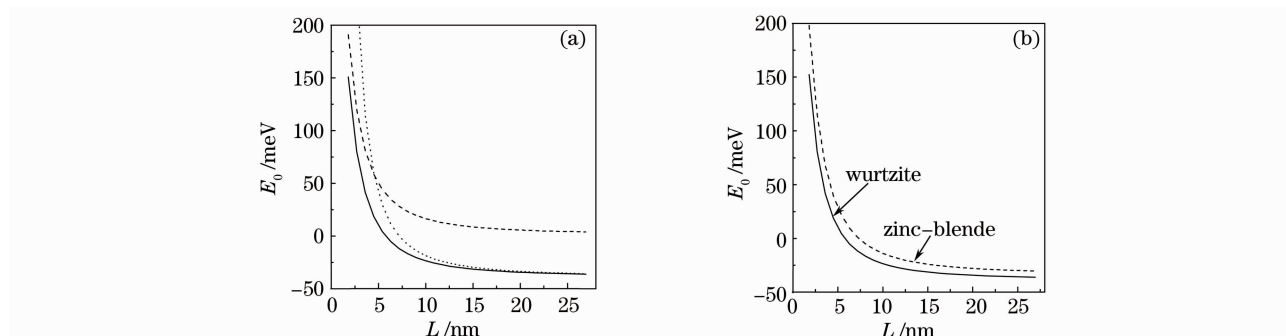


图 1 (a)外加磁场强度  $B=6\text{T}$  时纤锌矿  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  量子阱中磁极化子基态能量  $E_0$  随阱宽  $L$  的变化关系, (b)纤锌矿和闪锌矿  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  量子阱中磁极化子基态能量

Fig.1 (a) Ground state energies  $E_0$  of the magnetopolaron as functions of well width  $L$  in wurtzite  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  quantum well for given magnetic field  $B=6\text{T}$ , (b) ground state energies in wurtzite quantum well and in zinc-blende quantum well

为了定性分析和对比,图 1(b)中给了外加磁场强度  $B=6\text{T}$  时纤锌矿和闪锌矿  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  量子阱中磁极化子基态能量  $E_0$  随阱宽  $L$  的变化关系。从图可知,闪锌矿  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  量子阱中磁极化子基态能量随阱宽  $L$  的变化趋势基本上跟纤锌矿量子阱中一致,但是闪锌矿  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  量子阱中磁极化子基态能量明显大于纤锌矿结构相应的值。阱宽较小时,两种结构中能量相应值差距比较大,随着阱宽的增加而能差减少。这是因为纤锌矿  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  量子阱中长波光学声子模的各向异性、电子的有效质量、能隙大小、介电常数等物理性质不同于闪锌矿结构的性质而导致的。

在量子阱结构中磁性极化子能量由 3 个部分构成,即电子在量子阱中的子带能量,电子-声子相互作用能量和磁场引起的能量。这 3 个能量中,电子在量子阱中的子带能量大于零,并且随阱宽  $L$  的增大而急剧减小;而电子-声子相互作用能量始终小于零,随阱宽  $L$  的增大而变化不明显;磁场引起的能量也随阱宽  $L$  的增大而变化不明显。因此,在量子阱结构中磁性极化子基态能量都随阱宽  $L$  的增大而减小,并出现正值、零和负值等现象。

图 2(a)表示纤锌矿  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  量子阱中阱宽为 4 nm 和 16 nm 时,磁极化子有(无)电子-声子相互作用时的基态能量  $E_0$  与外加磁场  $B$  变化

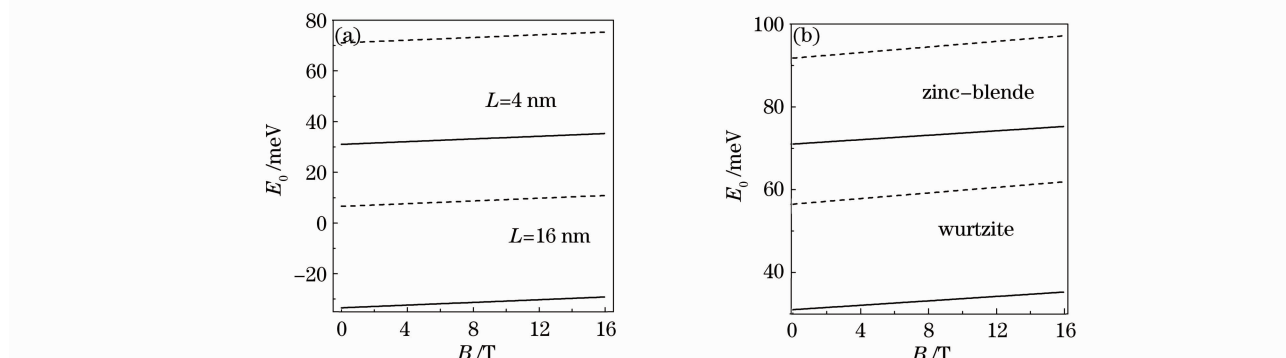


图 2 (a)纤锌矿  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  量子阱中,给定阱宽时,磁极化子基态能量  $E_0$  与外加磁场  $B$  变化的函数关系, (b)纤锌矿和闪锌矿  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  量子阱 ( $L=4\text{ nm}$ ) 中有(实线)和无(虚线)电子-声子相互作用时的基态能量

Fig.2 (a) Ground state energies  $E_0$  of the magnetopolaron as functions of external magnetic field  $B$  in wurtzite  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  quantum well with the given well widths, (b) ground state energies (solid lines) with and without (dotted lines) the electron-phonon interaction in wurtzite and in zinc-blende  $\text{GaN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$  quantum well ( $L=4\text{ nm}$ )

的函数关系曲线。图 2(a)中,实线和虚线分别表示有和无电子-声子相互作用时的基态能量。从图 2(a)中看出,量子阱中阱宽为 4 nm 和 16 nm 时,有(无)电子-声子相互作用时基态能量随着磁场的增强而线性增加,窄阱和宽阱中变化趋势相同。该性质可以这样理解,当阱宽一定时,随着外磁场强度的增强,运动电子在磁场中的受力加强而电子回旋频率增大,电子与外磁场之间的相互作用增强所致。图 2(a)中还可以看出不同磁场强度下电子-声子相互作用使能量降低的程度大致相同,这说明电子与声子相互作用对磁场强度的依赖性不明显。

图 2(b)表示纤锌矿和闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中阱宽为 4 nm 时磁极化子基态能量  $E_0$  与外加磁场  $B$  变化的函数关系。两种结构中基态能量都随着磁场的增强而线性增加,但是在闪锌矿和纤锌矿两种结构中电常数、声子频率、能隙大小和电子有效质量等物理量不相同,使得闪锌矿结构中能量明显大于纤锌矿中能量的相应值。图中还能看出这两种结构中电子-声子相互作用使能量降低的程度不一样,纤锌矿量子阱中的作用能比闪锌矿量子阱中作用能大,这说明纤锌矿结构的各向异性对磁极化子能量的影响很明显。

图 3 表示纤锌矿和闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中,阱宽为  $L=4$  nm 时,跃迁能量随外加磁场强度的变化关系,其中实线和虚线分别表示纤锌矿和闪锌矿量子阱中磁极化子从第一激发态到基态的跃迁能量。从图 3 中看出两种结构中磁极化子的跃迁能量随磁场强度的增强而增加,这是因为图中给

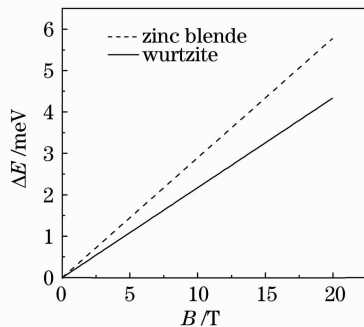


图 3 纤锌矿和闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中,阱宽  $L=4$  nm 时磁极化子的跃迁能量  $\Delta E$  与外加磁场强度  $B$  的函数关系

Fig. 3 Transition energies  $\Delta E$  of the magnetopolaron as functions of external magnetic field  $B$  in wurtzite and zinc-blende GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N quantum well with the given well width 4 nm

出的是磁极化子朗道能级的跃迁,所以跃迁能量只与外加磁场强度有密切的关系,即随磁场强度  $B$  的增强而单调地增大。图中还可以看出闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中跃迁能量略大于纤锌矿中能量,并且能量差距随着磁场强度的增强而越来越大,这主要是因为闪锌矿量子阱中电子有效质量小于纤锌矿中电子有效质量而引起的。

图 4 表示纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中,阱宽为  $L=4$  nm 时,回旋频率随外加磁场强度的变化关系。其中实线和虚线分别表示纤锌矿量子阱和闪锌矿量子阱中磁极化子回旋频率。图 4 中看出磁极化子的回旋频率随磁场强度的增强而线性增加。这是因为磁极化子的回旋频率是由跃迁能量决定的,当外磁场增加时,跃迁能量线性增加,从而导致磁极化子回旋频率的增大。从图中还可以看出闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中回旋频率始终( $B \neq 0$ )比纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱回旋频率大,这是因为闪锌矿量子阱中跃迁能量大于纤锌矿量子阱中跃迁能量而导致的。

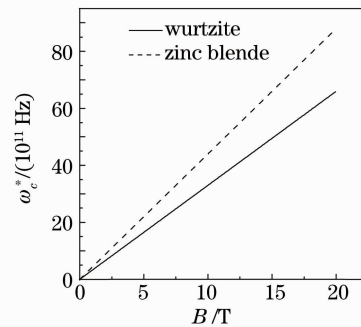


图 4 纤锌矿和闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中,阱宽  $L=4$  nm 时磁极化子回旋频率与外加磁场强度  $B$  的函数关系

Fig. 4 Cyclotron frequency of the magnetopolaron as functions of external magnetic field  $B$  in wurtzite and zinc-blende GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N quantum well with the given well width 4 nm

## 4 结 论

研究了纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中的磁极化子能级和回旋频率。结果表明纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱磁极化子基态能量随着量子阱宽度  $L$  的增大而减小,最后趋近于 GaN 体材料的相应值。当阱宽较小时,无限深势阱中的磁极化子基态能量明显大于有限深势阱中的相应值;随着阱宽的增大两种势阱中的磁极化子能量值基本一致。纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子基态能量随着

外磁场的增加而单调增加。纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子第一激发态到基态的跃迁能量、回旋频率随外加磁场强度  $B$  的增强而线性增加。计算结果还表明纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中电子-声子相互作用对能量的贡献比较大,其值约 40 meV,比 GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 量子阱中相应值(约 2.5 meV)大得多,也比闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中电子-声子相互作用对能量的贡献(约 35 meV)大,这主要是跟纤锌矿结构的单轴异性有关。从纤锌矿量子阱和闪锌矿量子阱中相应量的对比还能看出闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子能量、回旋频率随阱宽及磁场强度的变化趋势基本上一致,但是闪锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子能量及回旋频率的值略大于纤锌矿 GaN/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>N 量子阱中磁极化子能量及回旋频率相应的值。这说明纤锌矿结构的各向异性对磁极化子能量和回旋频率的影响很明显。

## 参 考 文 献

- 1 J. D. Perkins, A. Mascarenhas, Y. Zhang *et al.*. Nitrogen-activated transition, level repulsion and band gap reduction in GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> with  $x < 0.03$ [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, **82**(16): 3312~3315
- 2 W. Shan, W. Walukiewicz, K. M. Yu *et al.*. Effect of nitrogen on the electronic band structure of group III-N-V alloys[J]. *Phys. Rev. B*, 2000, **62**(7): 4211~4214
- 3 K. Karch, J. M. Wagner, F. Bechstedt. Ab initio study of structural, dielectric, and dynamical properties of GaN[J]. *Phys. Rev. B*, 1998, **57**(12): 7043~7049
- 4 J. Q. Wu. When group-III nitrides go infrared: new properties and perspectives[J]. *J. Appl. Phys.*, 2009, **106**(1): 011101
- 5 I. Akasaki, H. Amano. Crystal growth and conductivity control of group III nitride semiconductors and their application to short wavelength light emitters[J]. *Jpn. J. Appl. Phys. Part I*, 1997, **36**(9A): 5393~5396
- 6 S. Nakamura. III-V nitride based light-emitting devices[J]. *Solid State Commun.*, 1997, **102**(2): 237~248
- 7 Wang Ruimin, Chen Guangde, Zhu Youzhang. Micro-Raman scattering study of hexagonal InGaN epitaxial layer[J]. *Acta Physica Sinica*, 2006, **55**(2): 914~919  
王瑞敏, 陈光德, 竹有章. 六方相 InGaN 外延膜的显微 Raman 散射[J]. *物理学报*, 2006, **55**(2): 914~919
- 8 R. Cingolani, G. Coli, R. Rinaldi *et al.*. Optical properties of GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N quantum wells[J]. *Phys. Rev. B*, 1997, **56**(3): 1491~1494
- 9 Sarula, Guan Yuqin. Impurity energy level of nitride parabolic quantum wells with magnetic field[J]. *J. Optoelectronics · Laser*, 2006, **17**(7): 891~894  
萨茹拉, 关玉琴. 氮化物抛物量子阱中磁极化子的能量[J]. *光电子·激光*, 2006, **17**(7): 891~894
- 10 X. J. Zhou, S. L. Ban. Influence of optical phonons on the electronic mobility in a strained wurtzite AlN/GaN heterojunction under hydrostatic pressure[J]. *Chinese J. Semiconductors*, 2009, **38**(8): 082001~082001-6
- 11 Eerdunchaolu, Wuyunqimuge, Wang Hongyan. Effective potential of strong-coupling bipolaron in a parabolic quantum dot [J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(9): 2730~2740  
额尔敦朝鲁, 乌云其木格, 王鸿雁. 抛物量子点中强耦合双极化子的有效势[J]. *光学学报*, 2010, **30**(9): 2730~2740
- 12 Eerdunchaolu, Yu Ruomeng. Temperature dependence of quasi-two dimensional strong-coupling excitons effective mass[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(4): 1105~1112  
额尔敦朝鲁, 于若蒙. 准二维强耦合激子有效质量的温度依赖性[J]. *光学学报*, 2009, **29**(4): 1105~1112
- 13 B. C. Lee, K. V. Kim, M. A. Strosio *et al.*. Electron-optical-phonon scattering in wurtzite crystals [J]. *Phys. Rev. B*, 1997, **56**(3): 997~1000
- 14 B. C. Lee, K. W. Kim, M. A. Strosio *et al.*. Optical-phonon confinement and scattering in wurtzite heterostructures [J]. *Phys. Rev. B*, 1998, **58**(8): 4860~4865
- 15 Xue Yaguang, Yan Zuwei, Huangfu Yanfang. Bound polaron in wurtzite nitride semiconductor and pressure effect[J]. *Chinese J. Semiconductor*, 2008, **29**(8): 1535~1539  
薛亚光, 闫祖威, 皇甫艳芳. 纤锌矿氮化物半导体束缚极化子及压力效应[J]. *半导体学报*, 2008, **29**(8): 1535~1539
- 16 J. J. Shi. Electron-interface-phonon interactions in wurtzite multilayer heterostructures [J]. *Solid. State. Commun.*, 2003, **127**(1): 51~55
- 17 J. J. Shi. Interface optical-phonon modes and electron-interface-phonon interactions in wurtzite GaN/AlN quantum wells [J]. *Phys. Rev. B*, 2003, **68**(16): 165335-1~165335-11
- 18 J. Cui, J. J. Shi. Exciton states in wurtzite InGaN/GaN quantum wells: strong built-in electric field and interface optical-phonon effects[J]. *Solid State Commun.*, 2008, **145**(5-6): 235~240
- 19 Y. H. Zhu, J. J. Shi. Effects of built-in electric field on polarons in wurtzite GaN/AlN quantum wells [J]. *Physica E*, 2009, **41**(4): 746~752
- 20 F. Q. Zhao, J. Gong. Influence of electric field on the binding energies of hydrogenic impurity with spatially dependent mass in nitride parabolic quantum wells [J]. *Mod. Phys. Lett. B*, 2007, **21**(5): 279~286
- 21 Zhao Fengqi, Zhou Peiqin. Energy levels of a polaron in wurtzite nitride parabolic quantum well under external electric field [J]. *Acta Physica Sinica*, 2007, **56**(8): 4856~4862  
赵凤岐, 周炳卿. 外电场作用下纤锌矿氮化物抛物量子阱中极化子能级[J]. *物理学报*, 2007, **56**(8): 4856~4862
- 22 F. Q. Zhao, J. Gong. Energy of a polaron in a wurtzite nitride finite parabolic quantum well [J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2007, **24**(5): 1327~1330
- 23 Qu Yuan, Ban Shiliang. Interface and confined optical-phonon modes in wurtzite AlN/GaN/InN/GaN/AlN quantum wells [J]. *Inner Mongolia University*, 2010, **41**(1): 57~65  
屈媛, 班士良. 纤锌矿 AlN/GaN/InN/GaN/AlN 量子阱的界面和局域光学声子[J]. *内蒙古大学*, 2010, **41**(1): 57~65
- 24 David M. Larsen. Forth-order perturbation calculation of the cyclotron resonance frequency of the two-dimensional polaron [J]. *Phys. Rev. B*, 1986, **35**(9): 4428~4434
- 25 Z. Hu, Y. T. Wang, S. W. Gu *et al.*. The effect of electron-phonon interactions on the cyclotron mass and selftrapping energy of an interface polaron [J]. *J. Phys. Condens. Matter*, 1992, **4**(22): 5087~5091
- 26 Ding Zhaohua, Zhao Cuilan, Xiao Jinglin. Effective mass of strong coupling magnetopolaron in a parabolic quantum wells [J]. *J. Optoelectronics · Laser*, 2005, **16**(7): 240~243  
丁朝华, 赵翠兰. 肖景林抛物量子线中强耦合极化子的有效质量 [J]. *光电子·激光*, 2005, **16**(7): 240~243
- 27 H. Angerer, D. Brunner, F. Freudenberg *et al.*. Determination of the Al mole fraction and the band gap bowing of epitaxial Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N films [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1997, **71**(11): 1504~1506

- 28 M. F. MacMillan, L. L. Clemen, R. P. Devaty *et al.*. Cathodoluminescence of AlN-GaN short period Superlattices[J]. *Appl. Phys.*, 1996, **80**(4): 2378~2382
- 29 T. Azuhata, T. Sota, K. Suzuki *et al.*. Polarized raman spectra in GaN [J]. *J. Phys. Condens. Matter*, 1995, **7**(10): L129~L133
- 30 P. Perlin, A. Polian, T. Suski. Raman-scattering studied of aluminum nitride at high pressure[J]. *Phys. Rev. B*, 1993, **47**(5): 2874~2877
- 31 I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan. Band parameter for III-V compound semiconductor and their alloys[J]. *Appl. Phys.*, 2001, **89**(11): 5815~5875
- 32 K. Kim, W. R. L. Lambrecht, B. Segall. Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, Al, GaN, and InN [J]. *Phys. Rev. B*, 1996, **53**(24): 16310~16326
- 33 K. Karch, F. Bechstedt, T. Pletl. Lattice dynamics of GaN: effect of 3d electron[J]. *Phys. Rev. B*, 1997, **56**(7): 3560~3563
- 34 H. Wang, G. A. Farias, V. N. Freire. Interface-related exciton energy blueshift in GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N zinc-blende and wurtzite single quantum well[J]. *Phys. Rev. B*, 1999, **60**(8): 5705~5713
- 35 Zhao Fengqi, Liang Xixia. Cyclotron effective mass of a polaron in single quantum well[J]. *Phys. Lett. A*, 1993, **175**(3-4): 225~232
- 36 Z. X. Liu, Z. J. Lai, Y. C. Huang. Polaronic effect on the energy level of a double donor impurity in quantum well in the presence of a magnetic field[J]. *Eur. Phys. J. B*, 1999, **12**(3): 347~350