论文

体横光学声子双模性对纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱中光学声子的影响

屈媛, 宗易昕, 马健, 李冬雪, 班士良*

内蒙古大学物理科学与技术学院, 呼和浩特 010021

*联系人, E-mail: slban@imu.edu.cn

收稿日期: 2013-04-06; 接受日期: 2013-05-23

国家大学生创新性试验计划项目(编号: 101012608)和国家自然科学基金(批准号: 61274098)资助项目

摘要 本文采用介电连续模型讨论纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的体横光学(TO)声子双模性对其量子阱中光学声子的影响. 首先, 给出 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中 TO 声子的频率的二次多项式拟合公式, 在组分 $x=0$ 和 $x=1$ 时, 使 TO 声子频率可回归至 GaN 和 AlN 情形. 进而, 分析 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 含频介电函数随组分的变化. 结果显示 TO 声子频率的单模或双模性将影响单个或两个共振频率下的含频介电函数; 最后, 以 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱为例, 计算界面和局域光学声子色散关系和声子静电势的影响. 结果表明, 纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 TO 声子双模性在量子阱光学声子以及相关的理论计算中是不可忽略的.

关键词 纤锌矿, 量子阱, 三元混晶, 色散关系, 声子静电势

PACS: 63.20.Dj, 68.65.Fg, 74.70.Dd

doi: 10.1360/132013-161

1 引言

纤锌矿三元混晶 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 及其异质结构在发光二极管、高电子迁移率晶体管等光电子器件方面有重要应用, 可通过改变混晶组分在大范围内调节其光电性质, 并可在特定组分下表现优良性能^[1–3]. 纤锌矿氮化物量子阱是一种常见的异质结构, 由于增强对电子的束缚作用而比传统单异质结具有更小的漏电流和更高的击穿电压^[4]等优异特性. Qu 等人^[5]在讨论室温下 InGaN 凹槽层的引入对 $\text{AlN}/\text{GaN}/\text{AlN}$ 量子阱中电子迁移率的作用时, 发现随着 In 组分的改

变使量子阱光学声子的发生模式转变, 进而影响主要决定于光学声子散射作用的电子迁移率.

电子-声子相互作用是影响半导体器件光电性质的重要机制, 例如室温下光学声子散射就对电子迁移率起主要作用^[5,6]. 国外研究者通过拉曼谱分析发现, 纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的体纵光学(LO)声子频率表现出单模性, 而体横光学(TO)声子频率则为双模性^[7]. 在理论上, 对三元混晶(TMC)体光学声子解析表达式的拟合方法除虚晶近似(VCA)外, 还有简化相干势近似(SCPA)^[8]、忽略统计相关性的无规元素等位移模型(MREI)^[9]等. 然而, 这几种方法均属单模近似, 未能

引用格式: 屈媛, 宗易昕, 马健, 等. 体横光学声子双模性对纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱中光学声子的影响. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2014, 44: 150–161
Qu Y, Zong Y X, Ma J, et al. Optical phonons in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ quantum wells affected by two-mode property of TO phonons (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2014, 44: 150–161, doi: 10.1360/132013-161

体现 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 TO 声子为双模的特殊性. Grille 等人^[10]采用改进的 MREI 模型, 通过第一性原理计算声子态密度且同时获得全组分下纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 非线性的 LO 声子频率单模拟合和 TO 声子频率的双模拟合结果, 但因无解析表达式, 难以应用于进一步的理论计算.

对纤锌矿二元化合物(BMC)异质结和对称单量子阱, Lee 等人^[11]在介电连续模型和 Loudon 单轴模型下给出局域(CO)、界面(IF)、半空间(HS)及传播(PR)等模式光学声子的色散关系及其与电子相互作用哈密顿量的解析表达式; 对 BMC 多界面体系, 通常采用转移矩阵法求解之. 然而, 在讨论含 TMC 异质结构时, 若从微观动力学模型出发获得光学声子的解析解则较为困难, 故而通常先采用 VCA 拟合 TMC 的体声子频率和含频介电函数, 再代入由 BMC 体系获得的结果中求解光学声子的色散关系及声子静电势. 例如 Shi 等人^[12]在讨论纤锌矿 $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 量子阱时, 首先用 VCA 获得 $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 体 TO 和 LO 声子频率, 再进一步计算含频介电函数, 最后采用转移矩阵法求解 PR 光学声子模. 然而, VCA 方法为单模线性拟合, 忽略了混晶 AlGaIn 的 TO 声子为双模的特殊性.

屈等人^[13]曾依据 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 双模性 TO 声子频率的实验数据, 对其采用一次线性拟合(LF), 结合对 LO 声子频率的单模近似, 探讨含 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱光学声子色散关系的 TMC 效应. 但该工作对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中 TO 声子频率的 LF 近似在 $x=0$ 和 $x=1$ 时仍存在两个 TO 声子频率值, 这与 AlN 和 GaN 的 TO 声子频率均为单值的实验事实不符, 需进一步改进之; 此外, 对体现与电子相互作用强度的光学声子静电势亦未作讨论.

就我们所知, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中 TO 声子双模性对含 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱光学声子色散关系及静电势 TMC 效应影响的工作鲜见报道. 本文首先采用纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 双模性 TO 声子的二次多项式拟合(QPF)方法, 进而讨论其体含频介电函数的 TMC 效应; 然后, 在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中 TO 声子频率的双模近似下, 给出纤锌矿 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中各类光学声子模式存在的条件、以及界面声子和局域声子的色散关系和静电势, 并与对 TO 声子单模近似的情形做了对比.

2 理论与模型

考虑纤锌矿 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱, 设异质结生长方向为晶轴方向, 记为 z 方向, 垂直晶轴平面则为 x - y 平面(记为“ $\perp$ ”), 以量子阱中心为原点建立直角坐标系, 讨论其光学声子的 TMC 效应.

2.1 纤锌矿三元混晶的体光学声子

MREI 以及赝元胞(PUC)等模型均只适用于对低频极化有贡献的可被红外谱激发的声子模^[9]. 纤锌矿 III-N 化合物是单轴晶体, 其能带 Γ 点的光学声子可分为轴向振动模(A_1 或 Γ_1)和平行振动模(E_1 或 Γ_5), 其中可被红外激发的仅有 A_1 和 E_1 模, 每个方向又分为横模(TO)和纵模(LO), 分别记为“ t ”和“ l ”, 对应于 A_1 (TO), A_1 (LO), E_1 (TO)和 E_1 (LO)模的特征频率分别表示为 ω_{xt} , ω_{xl} , $\omega_{\perp t}$ 和 $\omega_{\perp l}$.

2.1.1 无规元素等位移模型(MREI)

MREI 仅考虑元胞中最近邻原子的相互作用, 将组分为 x 的 A 原子和组分为 $1-x$ 的 B 原子共同视为 C 原子的最近邻原子, 建立元胞的微观动力学方程, 再结合波恩-黄昆方程, 在长波极限近似下解得混晶 $\text{A}_x\text{B}_{1-x}\text{C}$ 光学声子频率^[14]. Yu 等人^[9]在不计统计相关性的近似下, 将 MREI 模型推广至纤锌矿 TMC, 获得其光学声子频率 ω_{iX} 随组分变化的解析表达式:

$$\omega_{iX}^2 = \frac{\Omega_{iXa}^2 + \Omega_{iXb}^2}{2} \pm \left[\left(\frac{\Omega_{iXa}^2 - \Omega_{iXb}^2}{2} \right)^2 + x(1-x)\Omega_{iXab}^4 \right]^{1/2}. \quad (1)$$

式中, 下标 $i=z, \perp$ 表示声子振动的传播方向, $X=t, l$ 表示声子的横纵模式, a, b 表示 BMC 材料 AC 和 BC. 这里 Ω_{iXa}^2 , Ω_{iXb}^2 和 Ω_{iXab}^4 的定义已由文献[9]给出.

2.1.2 虚晶近似(VCA)

VCA 是一种线性近似方法, 即假设 $\text{A}_x\text{B}_{1-x}\text{C}$ 的光电性质均随组分 x 由 AC 线性变化至 BC, 对光学声子频率有

$$\omega_{iX} = x\omega_{iXa} + (1-x)\omega_{iXb}, \quad (2)$$

$$\varepsilon_{i\infty} = x\varepsilon_{i\infty a} + (1-x)\varepsilon_{i\infty b}. \quad (3)$$

当然, 这是一种非常粗糙的近似, 但因其定性上的正确性和简单性, 在涉及 TMC 的计算中曾被广泛采用^[12,15-17].

2.1.3 简化相干势近似(SCPA)

通常用 SCPA 拟合 $\text{A}_x\text{B}_{1-x}\text{C}$ 的能量量纲参数^[8], 若选取 $E_a(E_b)$ 代表 AC(BC) 的能量, 则可以构造 TMC 的相应能量^[18]

$$E_{\text{TMC}} = \frac{E_a E_b}{(1-x)E_a + xE_b}. \quad (4)$$

将类氢杂质的结合能表达式带入(4)式, 可得到 $\text{A}_x\text{B}_{1-x}\text{C}$ 的介电常数满足^[18]

$$\varepsilon_{\text{TMC}}^2 = \left[(1-x)m_b \varepsilon_a^2 + x m_a \varepsilon_b^2 \right] \times \left[x/m_a + (1-x)/m_b \right]. \quad (5)$$

若分别将 AC 和 BC 的光学声子频率以 $\hbar\omega_{IXa}$ 和 $\hbar\omega_{IXb}$ 的形式赋予 E_a 和 E_b , 可得到不同组分 x 下 $\text{A}_x\text{B}_{1-x}\text{C}$ 的光学声子频率满足

$$\omega_{IX} = \frac{\omega_{IXa} \omega_{IXb}}{(1-x)\omega_{IXa} + x\omega_{IXb}}. \quad (6)$$

2.1.4 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 TO 声子频率

因上述三种方法本质上均属单模近似, 故仅适于 TMC 单模行为的声子频率拟合. 在计算 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中双模性的 TO 声子频率时, 屈等人^[13]曾依据实验数据提出 LF 公式, 然而这种线性近似在 $x=0$ 和 $x=1$ 时, 声子频率仍为双值. 考虑到在 $x=0$ 和 $x=1$ 时, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 即为 GaN 和 AlN, 其 $\omega_{\perp t}$ 和 $\omega_{\perp l}$ 均为单值; 而当 $0 < x < 1$ 时, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 $\omega_{\perp t}$ 和 $\omega_{\perp l}$ 则有类 AlN 模和类 GaN 模, 为双值. 鉴于此, 本文将 LF 改进为 QPF 公式 $\omega(x) = C_1 x^2 + C_2 x + C_3$ (系数 C_i 由表 1 给出). 其中 $\omega_{\perp ta, \text{AlGa}}(\omega_{\perp ta, \text{AlGa}})$ 指 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的类-AlN $A_1(\text{TO})$ ($E_1(\text{TO})$) 声子频率, $\omega_{\perp tb, \text{AlGa}}(\omega_{\perp tb, \text{AlGa}})$ 指 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的类-GaN $A_1(\text{TO})$ ($E_1(\text{TO})$) 声子频率.

2.1.5 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的含频介电函数

纤锌矿的介电函数具有各向异性, 将其沿平行和垂直晶轴的方向分解, 依据 III-N 族 BMC 的含频介

表 1 纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中 TO 声子频率的二次多项式拟合系数

Table 1 Coefficients by quadratic polynomial fitting of TO phonon frequencies in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

$\omega(x) (\text{cm}^{-1})$	$C_1 (\text{cm}^{-1})$	$C_2 (\text{cm}^{-1})$	$C_3 (\text{cm}^{-1})$
$\omega_{\perp ta, \text{AlGa}}$	-148	230	532
$\omega_{\perp la, \text{AlGa}}$	-87	201	559
$\omega_{\perp tb, \text{AlGa}}$	50	32	532
$\omega_{\perp lb, \text{AlGa}}$	141	-27	559

电函数表达式, 对 LO 和 TO 声子均为单模性的 TMC, 其含频介电函数可表示为

$$\varepsilon_z(\omega) = \varepsilon_z^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{zl}^2}{\omega^2 - \omega_{zl}^2}, \quad \varepsilon_\perp(\omega) = \varepsilon_\perp^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{\perp l}^2}{\omega^2 - \omega_{\perp l}^2}. \quad (7)$$

而对 LO 和 TO 声子均为双模性的 TMC, 其依赖频率的介电函数则为^[19]

$$\varepsilon_{z, \text{TMC}}(\omega) = \varepsilon_{z, \text{TMC}}^\infty \frac{(\omega^2 - \omega_{za}^2)(\omega^2 - \omega_{zb}^2)}{(\omega^2 - \omega_{za}^2)(\omega^2 - \omega_{zb}^2)}, \quad (8)$$

$$\varepsilon_{\perp, \text{TMC}}(\omega) = \varepsilon_{\perp, \text{TMC}}^\infty \frac{(\omega^2 - \omega_{\perp la}^2)(\omega^2 - \omega_{\perp lb}^2)}{(\omega^2 - \omega_{\perp la}^2)(\omega^2 - \omega_{\perp lb}^2)}. \quad (9)$$

对 LO 声子为单模而 TO 声子为双模的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, 屈等人^[13]曾依据量纲的正确性, 并为避免在声子模式判别中丢根或增根, 给出近似公式:

$$\varepsilon_{z, \text{AlGa}}(\omega) = \text{sign}(\omega^2 - \omega_{zl, \text{AlGa}}^2) \varepsilon_{z, \text{AlGa}}^\infty \times \frac{(\omega^2 - \omega_{zl, \text{AlGa}}^2)^2}{(\omega^2 - \omega_{za}^2)(\omega^2 - \omega_{zb}^2)}, \quad (10)$$

$$\varepsilon_{\perp, \text{AlGa}}(\omega) = \text{sign}(\omega^2 - \omega_{\perp l, \text{AlGa}}^2) \varepsilon_{\perp, \text{AlGa}}^\infty \times \frac{(\omega^2 - \omega_{\perp l, \text{AlGa}}^2)^2}{(\omega^2 - \omega_{\perp la}^2)(\omega^2 - \omega_{\perp lb}^2)}, \quad (11)$$

并基于此讨论 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱中光学声子色散关系的 TMC 效应.

然而, 通过进一步分析, 我们发现由式(10)和(11)获得的在组分 $x=0$ 和 $x=1$ 时 $\varepsilon_{\text{AlGa}}$ 并不分别等于 ε_{GaN} 和 ε_{AlN} , 这与经验不符. 于是, 我们对其做如下改进:

$$\varepsilon_{z, \text{AlGa}}(\omega) = \text{sign} \left(\frac{(\omega^2 - \omega_{zl, \text{AlGa}}^2)}{(\omega^2 - \omega_{za}^2)(\omega^2 - \omega_{zb}^2)} \right) \times \varepsilon_{z, \text{AlGa}}^\infty \sqrt{\frac{(\omega^2 - \omega_{zl, \text{AlGa}}^2)^2}{(\omega^2 - \omega_{za}^2)(\omega^2 - \omega_{zb}^2)}}, \quad (12)$$

$$\varepsilon_{\perp, \text{AlGa}}(\omega) = \text{sign} \left(\frac{(\omega^2 - \omega_{\perp l, \text{AlGa}}^2)}{(\omega^2 - \omega_{\perp la}^2)(\omega^2 - \omega_{\perp lb}^2)} \right) \times \varepsilon_{\perp, \text{AlGa}}^\infty \sqrt{\frac{(\omega^2 - \omega_{\perp l, \text{AlGa}}^2)^2}{(\omega^2 - \omega_{\perp la}^2)(\omega^2 - \omega_{\perp lb}^2)}}. \quad (13)$$

2.2 纤锌矿氮化物量子阱的光学声子

量子阱属一维受限体系, 可将声子势在 z 轴方向

的分量 $\phi(z)$ 写为^[20]

$$\phi_i(z) = A_i e^{ik_i z} + B_i e^{-ik_i z}, \quad (14)$$

其中, $A_i e^{ik_i z}$ ($B_i e^{-ik_i z}$) 表示向右(左)传播. 声子在 z 方向的波矢 $k_i = \sqrt{-(\varepsilon_{\perp i} / \varepsilon_{z i})} q$, 下标 i 表示第 i 层材料. 当 $\varepsilon_{\perp} \varepsilon_z < 0$ (条件①) 时, 得振荡势; 而当 $\varepsilon_{\perp} \varepsilon_z > 0$ (条件②) 时则得衰减势. 表 2 给出纤锌矿量子阱中可能存在的 IF, CO, HS 和 PR 等光学声子模的判别条件, 这里记阱材料为“1”, 垒材料为“2”.

对阱宽为 d 的对称 BMC 单量子阱情形, 解得 IF 和 CO 声子的色散关系和声子静电势如下^[15].

IF 光学声子色散关系的反对称模满足

$$Q = \frac{1}{2\alpha} \ln [(\xi_1 + \xi_2) / (\xi_2 - \xi_1)], \quad (15)$$

对称模满足

$$Q = \frac{1}{2\alpha} \ln [(\xi_1 + \xi_2) / (\xi_1 - \xi_2)], \quad (16)$$

其中,

$$Q = qd, \quad \xi_1 = \sqrt{\varepsilon_{z1}(\omega) \varepsilon_{\perp 1}(\omega)},$$

$$\xi_2 = \sqrt{\varepsilon_{z2}(\omega) \varepsilon_{\perp 2}(\omega)},$$

$$\alpha = 1/2 \sqrt{|\varepsilon_{\perp 1}(\omega) / \varepsilon_{z1}(\omega)|}.$$

IF 光学声子的静电势为^[11]

$$\phi_{\text{IF},q}^S(z) = \left[\frac{4\pi \hbar S^{-1}}{(\partial/\partial\omega)(\sqrt{\varepsilon_{\perp 1} \varepsilon_{z1}} \tanh(\sqrt{\varepsilon_{\perp 1} / \varepsilon_{z1}} qd/2) - \sqrt{\varepsilon_{\perp 2} \varepsilon_{z2}})} \right]^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2q}} \begin{cases} \cosh(\sqrt{\varepsilon_{\perp 1} / \varepsilon_{z1}} qz) / \cosh(\sqrt{\varepsilon_{\perp 1} / \varepsilon_{z1}} qd/2), & |z| \leq d/2, \\ \exp(-\sqrt{\varepsilon_{\perp 2} / \varepsilon_{z2}} q(|z| - d/2)), & |z| > d/2. \end{cases} \quad (17)$$

$$\phi_{\text{IF},q}^A(z) = \left[\frac{4\pi \hbar S^{-1}}{(\partial/\partial\omega)(\sqrt{\varepsilon_{\perp 1} \varepsilon_{z1}} \coth(\sqrt{\varepsilon_{\perp 1} / \varepsilon_{z1}} qd/2) - \sqrt{\varepsilon_{\perp 2} \varepsilon_{z2}})} \right]^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2q}} \begin{cases} \sinh(\sqrt{\varepsilon_{\perp 1} / \varepsilon_{z1}} qz) / \sinh(\sqrt{\varepsilon_{\perp 1} / \varepsilon_{z1}} qd/2), & |z| \leq d/2, \\ \text{sign}(z) \exp(-\sqrt{\varepsilon_{\perp 2} / \varepsilon_{z2}} q(|z| - d/2)), & |z| > d/2. \end{cases} \quad (18)$$

反对称模 CO 光学声子的色散关系^[15]满足

$$Q = [m\pi - \lambda \arctan(\xi_1 / \xi_2)] / \alpha, \quad (19)$$

$m = 1, 2, 3 \dots$ 或者 0 当 $\lambda = -1$.

对称模满足

$$Q = [m\pi + \lambda \arctan(\xi_2 / \xi_1)] / \alpha, \quad (20)$$

$m = 1, 2, 3 \dots$ 或者 0 当 $\lambda = 1$.

其中, m 为量子数, $\lambda = \text{sign}(\varepsilon_{z1} \varepsilon_{z2})$. CO 模声子势则为

$$\phi_{\text{CO},q}^S(z) = \sum_m \left[\frac{4\pi \hbar S^{-1}}{(\partial/\partial\omega)(\varepsilon_{\perp 1} q^2 + \varepsilon_{z1} k_{1m}^2) d/2 - 2q(\partial/\partial\omega) f_s(\omega) \cos(k_{1m} d/2)} \right]^{1/2} \begin{cases} \cos(k_{1m} z), & |z| \leq d/2, \\ \cos(k_{1m} d/2) \exp(-\kappa_2(|z| - d/2)), & |z| > d/2. \end{cases} \quad (21)$$

$$\phi_{\text{CO},q}^A(z) = \sum_m \left[\frac{4\pi \hbar S^{-1}}{(\partial/\partial\omega)(\varepsilon_{\perp 1} q^2 + \varepsilon_{z1} k_{1m}^2) d/2 - 2q(\partial/\partial\omega) f_a(\omega) \sin(k_{1m} d/2)} \right]^{1/2} \begin{cases} \sin(k_{1m} z), & |z| \leq d/2, \\ \text{sign}(z) \sin(k_{1m} d/2) \exp(-\kappa_2(|z| - d/2)), & |z| > d/2. \end{cases} \quad (22)$$

这里, k_{1m} , $f_a(\omega)$ 和 $f_s(\omega)$ 的定义已由文献[11]给出.

3 数值计算结果和讨论

首先, 讨论纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体光学声子频率及含频介电函数随 x 的变化; 然后, 进一步讨论纤锌矿

$\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中光学声子的 TMC 效应. 最后, 以组分 x 为 0.1 和 0.95 为例, 在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体光学声子频率和含频介电函数不同近似下, 获得 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中 IF 声子和 $m=1$ 时 CO 声子的色散关系和静电势(阱宽取常数 $d=3 \text{ nm}$).

表 2 纤锌矿量子阱中光学声子模式的判别条件

Table 2 Criteria of optical phonon modes in wurtzite quantum wells (QWs)

光学声子	$\varepsilon_{\perp 1}\varepsilon_{\perp 2}$	$\varepsilon_{\perp 1}\varepsilon_{\perp 2}$
IF	>0	>0
CO	<0	>0
HS	>0	<0
PR	<0	<0

 表 3 计算中所用参数值(频率 ω 的单位为 cm^{-1})^[13]

 Table 3 Parameters used in calculations. Frequencies ω are in units of cm^{-1} [13]

	ω_{t}	ω_{z}	$\omega_{\perp 1}$	$\omega_{\perp 2}$	$\varepsilon_{\infty}^{\text{z}}$	$\varepsilon_{\infty}^{\text{t}}$
AlN	614	888	673	898	5.36	5.17
GaN	532	734	559	741	6.38	6.11

3.1 纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的光学声子及含频介电函数的 TMC 效应

3.1.1 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的光学声子

图 1 为纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体声子频率随 x 的变化关系. 图 1(a), (b) 对比双模行为频率 ω_{t} 和 $\omega_{\perp 1}$ 的 QPF 和 LF 曲线, 其中频率较高的为类 AlN 模, 较低的为类 GaN 模. 可以看出, 当 $x=0$ 和 $x=1$ 时, 由 LF 方法仍得到两个频率值, 而 QPF 拟合的双模频率则汇于 GaN 和 AlN 的相应频率, 由于 GaN 和 AlN 的 ω_{t} 和 $\omega_{\perp 1}$ 均为单值, 故 QPF 与实际情形更加符合. 但注意到, 由拉曼散射测得的 $\omega_{\text{zlb, AlGa}}$ 和 $\omega_{\perp 1\text{b, AlGa}}$ 近似直线变化^[21], 并随着 x 的增大逐渐偏离 QPF 拟合曲线, 特别是在 x 接近 1 时仍存在明显的类 GaN 模, 我们认为这是由于实验上生长的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体材料的组分涨落即原子分布的不均匀性所导致的, 而我们的理论则是以 AlGa 的组分各处均匀为前提的. 图(c), (d) 给出 MREI, VCA 和 SCPA 对纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单模行为 LO 声子的拟合结果, 可以看出 MREI 与实验获得的频率随组分的变化趋势更为一致.

3.1.2 纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的介电函数

图 2 给出 $\omega=580 \text{ cm}^{-1}$ 时, 对纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 采用表 4 中几种近似方法获得的含频介电函数.

计算发现, 若忽略 TO 声子的双模性, 采用近似①时, $\varepsilon_{\text{z, AlGa}}$ 仅在 $x=0.585$ 时出现一共振峰, 共振频率为 MREI 拟合获得的单值 $\varepsilon_{\text{z, Al}_0.585\text{Ga}_{0.415}\text{N}}=580 \text{ cm}^{-1}$; 若计入 TO 声子的双模性, 采用近似②和③时, $\varepsilon_{\text{z, AlGa}}$

 表 4 纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中 LO 和 TO 声子频率及介电函数的拟合方法

 Table 4 Fitting methods of LO and TO phonon frequencies and dielectric functions in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

拟合方法	$\omega_{\text{t, AlGa}}$	$\omega_{\text{z, AlGa}}$	$\varepsilon_{\text{AlGa}}(\omega)$
①	MREI ^[9]	MREI ^[9]	(7)
②	MREI ^[9]	QPF	(10), (11)
③	MREI ^[9]	QPF	(12), (13)

分别在 $x_1=0.248$ 和 $x_2=0.711$ 时出现共振峰, 共振频率为由 QPF 获得的 $\omega_{\text{zlb, Al}_0.248\text{Ga}_{0.752}\text{N}}=\omega_{\text{zlb, Al}_0.711\text{Ga}_{0.289}\text{N}}=580 \text{ cm}^{-1}$. 注意到, 由近似②所得的 $\varepsilon_{\text{z, AlGa}}$ 在 $x=0$ 和 1 处仍大于而不是等于 $\varepsilon_{\text{z, GaN}}$ 和 $\varepsilon_{\text{z, AlN}}$, 这与实际情形不符, 若由此进一步计算声子静电势则必造成更大误差. 而由近似③则介电函数即可在 $x=0$ 和 1 处回归到 $\varepsilon_{\text{z, GaN}}$ 和 $\varepsilon_{\text{z, AlN}}$, 又可计入 TO 声子双模性质, 基于此对含纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体系进行进一步讨论更具有合理性.

3.2 纤锌矿 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中的光学声子

3.2.1 纤锌矿 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中的各类光学声子模式的频率

作为对比, 我们首先对纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 LO 和 TO 体声子频率均采用单模近似, 求解 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中的光学声子, 结果获得类似 $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱的 TMC 效应^[13], 见图 3. 计算表明, 随着 x 变化, 量子阱中光学声子出现 CO 与 HS 以及 IF 与 PR 之间的模式转变, 且在任一组分下各种光学声子模存在的频率区间总数均为 6 个.

然后, 计入 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中 TO 声子的双模性, 采用 3.1.2 节中的近似③, 求解 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中光学声子存在的条件(由表 5 给出). 计算发现: 随着 x 由 0 变化至 1, 量子阱的阱垒频率出现 6 个交点, 如图标注的 A, B, C, D, E 和 F, 交点对应的横轴坐标即为该量子阱光学声子模式变化的临界组分. 依据量子阱中的光学声子模式判断条件(表 2), 给出任意组分下各类光学声子模式存在的频率区间, 如表 5 所示. 此时, $x_A=0.122$, $x_B=0.317$, $x_C=0.554$, $x_D=0.728$, $x_E=0.778$, $x_F=0.92$. 由表 5 可以看出, 含 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱亦存在随 x 变化产生的 CO 与 HS 模以及 IF 与 PR 模之间的模式转变. 但四种光学声子模存在频率区间总数增加为最少 7 个, 最多 8 个, 这是由于考虑了 TO 声子的双模行为而引起的. 我们把量

图1 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 双模性 TO 声子频率 ω_{TL} (a) 和 ω_{LT} (b) 的理论拟合. 实线和虚线分别为 LF 和 QPF 结果. 实心点代表 Davydov^[21] 等用二次拉曼谱测得的实验数据. 纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单模性 LO 声子频率 ω_{L} (c) 和 ω_{TL} (d) 的理论拟合. 实线, 虚线和点虚线分别为 MREI, VCA 和 SCPA 拟合结果. 实心点为 Demangeot 等人^[22]测得的实验数据

Figure 1 Theoretical fitted two-mode TO phonon frequencies ω_{TL} (a) and ω_{LT} (b) in AlGa_N . Solid and dashed lines refer to the LF and QPF fitting results. Solid dots are the experimental data measured by Davydov et al [21] using Raman spectrum. Theoretical fitted LO phonon frequencies ω_{L} (c) and ω_{TL} (d) in wurtzite AlGa_N . Solid, dashed and dot-dashed lines refer to frequency fitted by MREI, VCA and SCPA respectively. Solid dots are experimental data measured by Demangeot et al [22].

图2 $\omega=580\text{ cm}^{-1}$ 时, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体材料中各向异性含频介电函数 $\varepsilon_{\text{L,AlGa}_N}$ (a) 和 $\varepsilon_{\text{z,AlGa}_N}$ (b) 的对数值. 曲线①, ②和③分别表示由 3.1.2 节中近似①, ②和③解得的结果. “④”表示 ε_{AlN} 和 ε_{GaN} . (a) 图中较大的为 $\varepsilon_{\text{z,GaN}}$, 较小的为 $\varepsilon_{\text{z,AlN}}$, (b) 图中较大的为 $\varepsilon_{\text{L,AlN}}$, 较小的为 $\varepsilon_{\text{L,GaN}}$

Figure 2 When $\omega=580\text{ cm}^{-1}$, logarithmic anisotropy dielectric functions $\varepsilon_{\text{L,AlGa}_N}$ (a) and $\varepsilon_{\text{z,AlGa}_N}$ (b) in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Lines ①, ② and ③ refer to the results deduced from approximations ①, ② and ③ described in section 3.1.2. Lines ④ refer to ε_{AlN} and ε_{GaN} , the higher one is $\varepsilon_{\text{z,GaN}}$ and lower one is $\varepsilon_{\text{z,AlN}}$ in (a), whereas the higher one is $\varepsilon_{\text{L,AlN}}$ and lower one is $\varepsilon_{\text{L,GaN}}$ in (b).

表 5 各组分下 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱各光学声子模存在的频率范围 ^{a)}

 Table 5 Allowable frequency domains of optical phonons in $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ QWs with different components

组分	声子模式	存在频率范围		
$0 < x < x_A$	CO	$(\omega_{z1}, \omega_{11})$	$(\omega_{1tb}, \omega_{1ta})$	$(\omega_{z1b}, \omega_{z1a})$
	HS	$(\omega_{z12}, \omega_{112})$	$(\omega_{z12}, \omega_{112})$	—
	IF	$(\omega_{11}, \omega_{z12})$	$(\omega_{1ta}, \omega_{z12})$	$(\omega_{z1a}, \omega_{11b})$
	PR	—	—	—
$x_A \leq x < x_B$	CO	$(\omega_{z1}, \omega_{11})$	$(\omega_{z1a}, \omega_{11a})$	$(\omega_{z1b}, \omega_{11b})$
	HS	$(\omega_{z12}, \omega_{112})$	$(\omega_{z12}, \omega_{112})$	—
	IF	$(\omega_{11}, \omega_{z12})$	$(\omega_{1ta}, \omega_{z12})$	—
	PR	—	—	—
$x_B \leq x < x_C$	CO	$(\omega_{z1}, \omega_{11})$	$(\omega_{z1b}, \omega_{11b})$	$(\omega_{z1a}, \omega_{z12})$
	HS	$(\omega_{z12}, \omega_{112})$	$(\omega_{1ta}, \omega_{112})$	—
	IF	$(\omega_{11}, \omega_{z12})$	—	—
	PR	$(\omega_{z12}, \omega_{11a})$	—	—
$x_C \leq x < x_D$	CO	$(\omega_{z1}, \omega_{11})$	$(\omega_{z1b}, \omega_{11b})$	—
	HS	$(\omega_{z12}, \omega_{112})$	$(\omega_{1ta}, \omega_{112})$	$(\omega_{z12}, \omega_{z1a})$
	IF	$(\omega_{11}, \omega_{112})$	—	—
	PR	$(\omega_{z1a}, \omega_{11a})$	—	—
$x_D \leq x < x_E$	CO	$(\omega_{z1}, \omega_{11})$	$(\omega_{z1b}, \omega_{z12})$	—
	HS	$(\omega_{z12}, \omega_{112})$	$(\omega_{1ta}, \omega_{112})$	$(\omega_{11b}, \omega_{z1a})$
	IF	$(\omega_{11}, \omega_{z12})$	—	—
	PR	$(\omega_{z1a}, \omega_{11a})$	$(\omega_{z12}, \omega_{11b})$	—
$x_E \leq x < x_F$	CO	$(\omega_{z1}, \omega_{11})$	$(\omega_{z1b}, \omega_{z12})$	—
	HS	$(\omega_{z12}, \omega_{112})$	$(\omega_{1ta}, \omega_{112})$	$(\omega_{z1a}, \omega_{11b})$
	IF	$(\omega_{11}, \omega_{z12})$	—	—
	PR	$(\omega_{11b}, \omega_{11a})$	$(\omega_{z12}, \omega_{z1a})$	—
$x_F \leq x < 1$	CO	$(\omega_{z1}, \omega_{z12})$	$(\omega_{z1b}, \omega_{z12})$	—
	HS	$(\omega_{11}, \omega_{112})$	$(\omega_{1ta}, \omega_{112})$	$(\omega_{z1a}, \omega_{11b})$
	IF	—	—	—
	PR	$(\omega_{z12}, \omega_{11})$	$(\omega_{11b}, \omega_{11a})$	$(\omega_{z12}, \omega_{z1a})$

a) 量子阱的类型为 BTB

 图 3 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中光学声子模式变化的临界组分 x_A, x_B, x_C, x_D, x_E 和 x_F . 图中, 虚线为 MREI 拟合的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体 LO 声子频率及 2.1.4 中拟合的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体 TO 声子频率, 实线表示 AlN 体声子频率

Figure 3 Mode transformation critical components x_A, x_B, x_C, x_D, x_E and x_F of optical phonons in $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ QWs. Dashed lines refer to LO and TO phonon frequencies in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ fitted by MREI and assumptions described in section 2.1.4 respectively.

子阱中处于上下界均为体横(纵)光学声子频率范围内的 IF 或 CO 声子, 分别称为横(纵)IF 声子或横(纵)CO 声子, 下脚标 2 表示垒材料 AlN.

3.2.2 纤锌矿 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中光学声子的色散关系

图 4 给出忽略 TO 声子的双模性, 分别由 MREI, VCA 和 SCPA 三种单模近似拟合 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体 LO 与 TO 声子频率时, 求解的量子阱中 IF 和 CO 光学声子色散关系. 计算发现, 当 $x=0.1$ 时, 同时存在 IF 和 CO 声子, $x=0.95$ 时无 IF 声子. 由图 4(a)可以看出, 在忽略 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 TO 声子双模性的近似下, 解得的 IF 和 CO 声子的色散关系定性相似, 仅有量值上的差别.

图 5 给出计入 TO 声子的双模性时, 分别基于 3.1.2 节的近似②和近似③获得的纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 LO, TO 声子频率以及 $\epsilon_{\text{AlGa}}\text{N}$, 解得量子阱中 IF 和 CO 光学声子的色散关系. 近似②和近似③得到的 IF 和

CO 声子存在的频率区间相同. 当 $x=0.1$ 时, 量子阱中的 IF 声子存在于 3 个频率区间, 其中 $(\omega_{z12}, \omega_{z1a})$ 范围中横 IF 声子频率很小, 所得色散关系曲线近似为直线, 图 5(a) 仅给出区间 $(\omega_{\perp 1}, \omega_{z12})$ 和 $(\omega_{\perp 1a}, \omega_{z12})$ 中 IF 声子的色散关系.

对比图 4 和 5, 可以看出计入 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中 TO 声子的双模性, 使量子阱在 $x=0.1$ 时分别增加了横 IF 和横 CO 声子存在的频率范围. 当 $x=0.95$ 时, 虽未增加频率区间, 但色散关系曲线亦发生变化, 量值差别明显. 由此可以看出, 在涉及体含频介电函数 $\epsilon_{\text{AlGa}}N$ 以及含 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱中 IF 和 CO 声子色散关系的相关计算中不可忽略双模型.

3.2.3 纤锌矿 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱的光学声子静电势

本节对应于 3.2.2 节给出的色散关系计算量子阱的 IF 和 CO 光学声子静电势.

图 6 给出忽略 TO 声子的双模性时, 分别由 MREI, VCA 和 SCPA 三种单模近似拟合 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体 LO 与 TO 声子频率, 求解的量子阱中 IF 和 CO 纵光学声子静电势. 结果表明在 $x=0.1$ 和 0.95 时, 用三种拟合方法得到的 IF 模的对称与反对称支的声子静电势的形态相似, 在阱中心处的量值相差最大在 1% 以内; CO 模的结果亦然.

图 7 给出计入 TO 声子的双模性时, 分别采用

图 4 忽略纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体 TO 声子双模性时, $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中 IF 和 CO 光学声子的色散关系. 图中实线, 虚线和点虚线分别为由 MREI, SCPA 和 VCA 拟合 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 LO 和 TO 声子频率解得的结果. s(a) 代表对称支(反对称支), s1(a1) 代表量子数 $m=1$ 时对称支(反对称支)

Figure 4 Dispersion relations of IF and CO optical phonons in $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ QWs ignoring the two-mode property of TO phonons in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Solid, dashed and dot-dashed lines refer to LO and TO phonon frequencies fitted by MREI, SCPA and VCA, respectively. s(a) refer to symmetric (anti-symmetric) branches, and s1(a1) indicates symmetric (anti-symmetric) branches when quantum number $m=1$.

图 5 计入纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体 TO 声子双模性时, $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中光学声子的色散关系. 图中, 虚线和实线分别为采用近似②和近似③解得的结果

Figure 5 Dispersion relations of IF and CO optical phonons in $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ QWs considering the two-mode property of TO phonons in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Dashed, solid lines refer to the results deduced from approximations ② and ③, respectively.

图 6 忽略纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体 TO 声子双模性时, $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中 IF 和 CO 光学声子的声子静电势. 图中, 实线、虚线和点虚线分别代表采用 MREI, SCPA 和 VCA 拟合 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体 LO 和 TO 声子频率的结果. 相应的 IF 和 CO 声子的频率(cm^{-1})依次为(a) s: 808.53, 855.39, 806.28; a: 856.45, 809.22, 857.53; (b) s1: 747.15, 750.12, 749.59; a1: 757.35, 756.75, 747.67; (c) s1: 882.24, 885.95, 883.77; a1: 887.35, 885.56, 884.56

Figure 6 Electrostatic potentials of IF and CO optical phonons in $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ QWs ignoring the two-mode property of TO phonons in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Solid, dashed and dot-dashed lines refer to the results deduced from LO and TO phonon frequencies in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ fitted by MREI, SCPA and VCA, respectively. The corresponding IF and CO optical phonon frequencies (cm^{-1}) are (a) s: 808.53, 855.39, 806.28; a: 856.45, 809.22, 857.53; (b) s1: 747.15, 750.12, 749.59; a1: 757.35, 756.75, 747.67; (c) s1: 882.24, 885.95, 883.77; a1: 887.35, 885.56, 884.56.

图 7 计入纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体 TO 声子双模性, $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中纵 IF 和纵 CO 光学声子的静电势. 图中, 虚线和实线分别代表采用近似②和近似③解得的结果. 相应的 IF 和 CO 声子频率(cm^{-1})分别为(a) ②s 874.8; a 843.6; ③s 857.0, a 810.7; (b) ②s1 758.5; a1 757.6; ③s1 759.4, a1 756.3; (c) ②s1 887.4; a1 885.8 ③s1 885.5, a1 883.8

Figure 7 Electrostatic potentials of longitudinal IF and CO phonons in $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ QWs considering the two-mode property of TO phonons in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Dashed and Solid lines refer to the results deduced from assumptions ② and ③. The corresponding IF and CO optical phonon frequencies (cm^{-1}) are (a) ② s 874.8; a 843.6; ③ s 857.0, a 810.7; (b) ② s1 758.5; a1 757.6; ③ s1 759.4, a1 756.3; (c) ② s1 887.4; a1 885.8; ③ s1 885.5, a1 883.8.

3.1.2 节的近似②和近似③获得的纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 LO, TO 声子频率以及 $\varepsilon_{\text{AlGa}}\text{N}$, 解得的量子阱中纵 IF 和纵 CO 光学声子的静电势. 可以看出, 在两种近似下解得的纵 IF 和 CO 声子的声子静电势的形态类似. 当

$x=0.1$, $qd=1$ 时, 由近似③解得的纵 IF 声子势的峰值较小, 而由近似②解得的纵 CO 声子势峰值约为由近似③解得值的 4 倍左右. 当 $x=0.95$, $qd=3$ 时, 由近似②解得的对称支纵 CO 声子势峰值约为由近似③获得

值的 3 倍, 而反对称支则为 5 倍左右. 注意到近似②和近似③的不同仅在于对介电函数的拟合, 这说明在考虑 TO 声子双模性的前提下, 采用式(10)和(11)或式(12)和(13)近似 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的含频介电函数将导致纵 IF 和纵 CO 声子静电势的量值上不可忽略的差

别, 但因式(10)和(11)得到的 $\varepsilon_{\text{AlGa}}\text{N}$ 在 $0 \leq x \leq 1$ 区间内始终远大于 $\varepsilon_{\text{Ga}}\text{N}$ 和 $\varepsilon_{\text{Al}}\text{N}$, 我们认为若计入 TO 声子的双模性, 由近似③获得的声子势更为合理.

图 8 对比忽略或计入 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 TO 声子双模性时, 分别采用 3.1.2 节近似①和近似③求解的量子

图 8 计入纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体 TO 声子双模性, $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中纵 IF 和纵 CO 光学声子的静电势. 图中, 虚线和实线分别代表采用近似①和近似③解得的结果. 相应的 IF 和 CO 声子频率(cm^{-1})分别为(a) ① a 809.2, s 856.4; ③ a 810.7, s 856.9; (b) ① a1 756.8, s1 757.4; ③ a1 756.3, s1 756.9; (c) ① a1 885.6, s1 887.3, ③ a1 885.5, s1 887.3.

Figure 8 Electrostatic potentials of longitudinal IF and CO phonons in $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ QWs considering the two-mode property of TO phonons in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Dashed and solid lines refer to the results deduced from assumptions ① and ③, respectively. The corresponding IF and CO optical phonon frequencies (cm^{-1}) are (a) ① a 809.2, s 856.4; ③ a 810.7, s 856.9; (b) ① a1 756.8, s1 757.4; ③ a1 756.3, s1 756.9; (c) ① a1 885.6, s1 887.3, ③ a1 885.5, s1 887.3.

图 9 计入纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体 TO 声子的双模性, $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 量子阱中横 IF 和横 CO 光学声子的静电势. 图中, 虚线和实线分别代表采用近似①和近似③解得的结果. 相应的 IF 和 CO 声子频率(cm^{-1})分别为(a) ① s 593.2, a 600.0; ③ s 584.8, a 603.8; (b) ① s1 576.5; a1 580.4; ③ s1 558.0, 574.3, a1 557.8, 577.6; (c) ① s1 612.6, a1 613.6; ③ s1 608.1, a1 607.6.

Figure 9 Electrostatic potentials of transverse IF and CO phonons in $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ QWs considering the two-mode property of TO phonons in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Dashed and solid lines refer to the results deduced from assumptions ① and ③, respectively. The corresponding IF and CO optical phonon frequencies (cm^{-1}) are (a) ① s 593.2, a 600.0; ③ s 584.8, a 603.8; (b) ① s1 576.5; a1 580.4; ③ s1 558.0, 574.3, a1 557.8, 577.6; (c) ① s1 612.6, a1 613.6; ③ s1 608.1, a1 607.6.

阱中纵 IF 和纵 CO 光学声子的静电势. 图 9 给出相应的横 IF 和横 CO 声子势. 计算表明, 与忽略 TO 声子双模性的结果比较, 考虑双模性对称支的纵 CO 声子势的峰值将增大 2–3 倍; 同时, 也产生了更多的横 CO 声子, 相应声子势峰值也可增大至 4 倍左右. 这说明 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中 TO 声子的双模性对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱中光学声子的影响不可忽略, 应在相关的理论计算中充分考虑此因素.

4 结论

本文首先采用 QPF 拟合纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的双模性 TO 声子频率, 使其在 $x=0$ 和 1 时可以回归到 AlN

和 GaN 的单模频率; 然后, 讨论 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 体含频介电函数的 TMC 效应. 计算发现, 忽略或计入 TO 声子的双模性将使含频介电函数随着组分的变化出现 1 个或 2 个共振峰; 最后, 分别对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 LO, TO 声子频率以及含频介电函数采用单模和双膜近似下, 以给定阱宽 $d=3\text{ nm}$ 的纤锌矿 $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 为例计算其 IF 和 CO 声子的色散关系和静电势. 结果表明, TO 声子的双模性对量子阱光学声子的色散关系以及静电势的形态和量值均有较大影响. 可见, 在进行纤锌矿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子阱光学声子的相关理论研究时, 应充分考虑 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 TO 声子双模性的影响.

参考文献

- 1 Park S H. Theoretical study of optical properties in deep ultraviolet Al-rich AlGaN/AlN quantum wells. *Semicond Sci Technol*, 2009, 24: 035002
- 2 Northrup J E, Chua C L, Yang Z, et al. Effect of strain and barrier composition on the polarization of light emission from AlGaN/AlN quantum wells. *Appl Phys Lett*, 2012, 100: 021101
- 3 Hsu L, Walukiewicz W. Effect of polarization fields on transport properties in AlGaN/GaN heterostructures. *J Appl Phys* 2001, 89: 1783
- 4 Hisayoshi M, Hiroaki U, Tetsuzo U, et al. Improvement of breakdown voltage in AlGaN/GaN/AlGaN double-heterojunction FET with AlN buffer layer. *IEIC Technical Rep.* 2007, 106: 189–192
- 5 Qu Y, Ban S L. Ternary mixed crystal effect on electron mobility in a strained wurtzite AlN/GaN/AlN quantum well with an $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ nanogroove. *J Appl Phys*, 2011, 110: 013722
- 6 Strosio M A, Dutta M. *Phonons in Nanostructures*. Cambridge: Cambridge University Press, 2001. 2–3
- 7 Harima H, Inoue T, Nakashima S, et al. Raman studies on phonon modes in cubic AlGaN alloy. *Appl Phys Lett*, 1999, 74: 191–193
- 8 Ban S L, Hasbun J E. Interface polarons in a realistic heterojunction potential. *Eur Phys J B*, 1999, 8: 453–461
- 9 Yu S G, Kim K W, Bergman L, et al. Long-wavelength optical phonons in ternary nitride-based crystals. *Phys Rev B*, 1998, 58: 15283–15287
- 10 Grille H, Schnittler C, Bechstedt F. Phonons in ternary group-III nitride alloys. *Phys Rev B*, 2000, 61: 6091–6105
- 11 Lee B C, Kim K W, Strosio M A, et al. Optical-phonon confinement and scattering in wurtzite heterostructures. *Phys Rev B*, 1998, 58: 4860–4865
- 12 Shi J J, Chu X L, Goldys E M. Propagating optical-phonon modes and their electron-phonon interactions in wurtzite GaN/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ quantum wells. *Phys Rev B*, 2004, 70: 115318
- 13 Qu Y, Ban S L. Effect of ternary mixed crystals on optical phonon modes in wurtzite nitride quantum well (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2010, 7: 4863–4873 [屈媛, 班士良. 纤锌矿氮化物量子阱中光学声子模的三元混晶效应. *物理学报*, 2010, 7: 4863–4873]
- 14 Chang I F, Mitra S S. Application of a modified random element isodisplacement model to long-wavelength optic phonons of mixed crystals. *Phys Rev*, 1968, 172: 924–933
- 15 Komirenko S M, Kim K W, Strosio M A, et al. Dispersion of polar optical phonons in wurtzite quantum wells. *Phys Rev B*, 1999, 59: 5013–5020
- 16 Komirenko S M, Kim K W, Strosio M A, et al. Energy-dependent electron scattering via interaction with optical phonons in wurtzite crystals and quantum wells. *Phys Rev B*, 2000, 61: 2034–2040
- 17 Wendler L. Electron-phonon interaction in dielectric bilayer systems. *Phys Stat Sol b*, 1985, 129: 513–530
- 18 Yu X L, Ban S L. The band gap calculation of wide-gap ternary compound nitride semiconductors in group III-V (in Chinese). *J Inner Mongolia Univ (Nat Sci)*, 2003, 34: 235–237 [于晓龙, 班士良. III-V 族宽禁带含氮三元混晶半导体禁带宽度的计算. *内蒙古大学学报 (自然科学版)*, 2003, 34: 235–237]

- 19 Zheng R S, Matsuura M. Electron-optical-phonon interaction in quantum wells consisting of mixed crystals. *Phys Rev B*, 1999, 60: 4937–4943
- 20 Lü J T, Cao J C. Interface and confined optical-phonon modes in wurtzite multi-interface heterostructures. *J Appl Phys*, 2005, 97: 033502
- 21 Davydov V Y, Goncharuk I N, Smirnov A N, et al. Composition dependence of optical phonon energies and Raman line broadening in hexagonal $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys. *Phys Rev B*, 2002, 65: 125203
- 22 Demangeot F, Groenen J, Frandon J, et al. Coupling of GaN- and AlN-like longitudinaloptic phonons in $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{N}$ solid solutions. *Appl Phys Lett*, 1998, 72: 2674–2676

Optical phonons in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ quantum wells affected by two-mode property of TO phonons

QU Yuan, ZONG YiXin, MA Jian, LI DongXue & BAN ShiLiang*

School of Physical Science and Technology, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China

In this paper, the dielectric continuum model is adopted to investigate the influence from two-mode property of transverse optical (TO) phonons on the optical phonons in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ quantum wells (QWs). Firstly, a quadratic polynomial fitting has been proposed to approximate frequencies of TO phonons of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and to obtain the consistent values of GaN and AlN when x is 0 and 1 respectively. Furthermore, the dielectric functions of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ varying with the Al component have been analyzed. The results show that the one-mode or two-mode behavior of TO phonons will lead to one or two resonant frequencies of dielectric functions. Finally, as an example, the dispersion relations and electrostatic potential of interface and confined optical phonons in $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ QWs have been calculated. The results indicate that the two-mode property of TO phonons in AlGaN should not be ignored in the calculation of optical phonons in QWs and related theoretical works.

wurtzite, quantum well, ternary mixed crystal, dispersion relationship, electrostatic potential of phonon

PACS: 63.20.Dj, 68.65.Fg, 74.70.Dd

doi: 10.1360/132013-161