

掺杂浓度及掺杂层厚度对 Si 均匀掺杂的 GaAs 量子阱中电子态结构的影响

杨双波[†]

(南京师范大学物理科学与技术学院, 南京 210046)

(2013 年 2 月 27 日收到; 2013 年 4 月 17 日收到修改稿)

本文通过自洽地求解薛定谔方程及泊松方程计算了在温度 $T = 0$, 有效质量近似下, Si 均匀掺杂的 GaAs/AlGaAs 量子阱系统的电子态结构. 研究了掺杂浓度及掺杂层厚度对子带能量, 本征包络函数, 自洽势, 电子密度分布, 及费米能量的影响. 发现在给定掺杂浓度下, 子带能量随掺杂层厚度的增加单调递减, 自洽势的势阱变宽变浅, 电子密度分布变宽, 峰值变低; 在给定掺杂层厚度下, 随掺杂浓度的增加子带能量及费米能级单调递增, 自洽势阱变深变陡变窄, 电子密度分布的峰值变高, 集中在中心.

关键词: 掺杂, 量子阱, 电子结构, 半导体 GaAs

PACS: 73.21.Fg

DOI: 10.7498/aps.62.157301

1 引言

众所周知, 半导体是一种极其重要的材料, 广泛应用于科学研究, 生产和日常生活中, 没有半导体材料就没有今天的科学发展和技术上的进步. 半导体电子态的结构与半导体材料的结构, 有无掺杂, 掺杂材料, 掺杂方式, 温度和外加场有很大关系. 正是因为半导体电子态的性质极易改变, 使得它们如此重要, 吸引了世界上无数科研工作者. 到目前为止, 在结构研究上人们对三维体材料, 二维量子阱^[1], 一维量子线^[2], 零维量子点^[3]进行了广泛的研究. 在合成半导体材料方面, 人们研究了异质结^[4], 超晶格^[5]结构的性质. 在掺杂方式的研究方面人们研究了均匀掺杂^[6], 调制掺杂^[7], δ 层^[8]及多 δ 层^[9]掺杂. 在掺杂材料方面人们研究了 Si 掺杂的 GaAs^[10] 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, Be 掺杂 GaAs^[11], Sb, Ga, As, B 掺杂的 Si^[12], Ni, Fe 离子掺杂的 Ge-Sb-Se 薄膜^[13]等. 人们研究了温度和外加电场^[14], 磁场^[15]对掺杂半导体电子态的影响.

半导体掺杂可以改变半导体材料的电学性能(电导率)^[16]和光学性能(光吸收)^[17]. 随着技术的

进步, 人们可以通过分子束外延的方法精确的控制掺杂的浓度及掺杂层的厚度, 使得理论与实验结果可以精确的比较, 这大大促进了包括光电子器件在内的理论和应用研究的进展. 本文通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程的方法研究了 Si 均匀掺杂的 GaAs/AlGaAs 量子阱中掺杂浓度和掺杂层厚度对电子态性质的影响. 研究发现, 随着掺杂层厚度的增加, 子带能级能量单调递减, 自洽势阱变宽变浅, 电子密度分布的峰值降低, 宽度增加, 而随掺杂浓度的增加, 有效势阱变深变陡, 子带能量及费米能量单调递增, 电子密度分布向中央集中.

2 模型及理论

为方便起见, 把 GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 组成的量子阱等价为一维无限深(或有限深)势阱, GaAs 为势阱, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 为势垒, Si 杂质层处在势阱中央部分. 设势阱宽为 L_0 , 杂质层厚度为 L_D , Si 在 L_D 内均匀分布, 面密度为 n_{2d} , GaAs 的介电常数为 ϵ_r . 在有效质量近似下, 量子阱中电子的本征能量 E_i 及本征包络函数 ψ_i 可通过自洽地求解薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi_i + (V(z) + V_H(z)) \psi_i = E_i \psi_i, \quad (1)$$

[†] 通讯作者. E-mail: yangshuangbo@njnu.edu.cn

及泊松方程

$$\frac{d^2}{dz^2} V_H(z) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_r} [N(z) - N_d(z)] \quad (2)$$

得到. 这里 $V(z)$ 为势阱的势能, 对无限深势阱其势为

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq L_0/2, \\ \infty, & \text{其他,} \end{cases}$$

而对有限深势阱其势为

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq L_0/2 \\ U_0, & \text{其他,} \end{cases}$$

U_0 为势垒的势能; V_H 为自洽势. 电子密度为

$$N(z) = \sum_{i=1}^{n_d} \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} |\psi_i(z)|^2 \ln\{1 + \exp[(E_F - E_i)/k_B T]\} = \sum_{i=1}^{n_d} n_i |\psi_i(z)|^2, \quad (3)$$

其中, n_d 为填充态的数目, i 为子带的指数, E_F 为费米能级. 而 n_i 为第 i 个子带的布居密度

$$n_i = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln\{1 + \exp[(E_F - E_i)/k_B T]\}, \quad (4)$$

$N_d(z)$ 是电离施主的总密度, 在均匀掺杂情况下为

$$N_d(z) = \begin{cases} n_{2d}/L_D, & -L_D/2 \leq z \leq L_D/2, \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \quad (5)$$

因为未掺杂本征载流子的浓度 \ll 掺杂杂质电子浓度, 作为近似可以忽略本征载流子的贡献. 设施主杂质全部电离, 使得电子数等于带正电的离子数, 则

$$\int_{-L_0/2}^{L_0/2} N(z) dz = \int_{-L_0/2}^{L_0/2} N_d(z) dz,$$

等号两边积分得

$$\sum_{i=1}^{n_d} \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln[1 + \exp(E_F - E_i)/k_B T] = n_{2d}, \quad (6)$$

或 $\sum_{i=1}^{n_d} n_i = n_{2d}$, 即各子带布居之和等于掺杂面密度. 这是一个确定费米能量 E_F 的方程. 在温度 $T = 0$ 时, 上式给出

$$\sum_{i=1}^{n_d} \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_i) \theta(E_F - E_i) = n_{2d}, \quad (7)$$

这里

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

为台阶函数.

由此得到

$$E_F = \frac{\pi \hbar^2 n_{2d} + \sum_{i=1}^{n_d} E_i \theta(E_F - E_i)}{m^* \sum_{i=1}^{n_d} \theta(E_F - E_i)}, \quad (8)$$

这是同时决定 E_F 及 n_d 的方程. 操作上首先让 n_d 取某个值如 6, 假定 $E_F > E_6$, 利用上式计算 E_F , 将结果代入上式右端计算, 如果这时 $E_F < E_6$, 那么取 $n_d = 5$ 计算直至得到 $E_F > E_{n_d}$ 为止. E_F 是 $T = 0$ 时电子能填充到的最高能量. 此时电子密度公式简化为

$$N(z) = \sum_{i=1}^{n_d} \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_i) |\psi_i(z)|^2 = \sum_{i=1}^{n_d} n_i |\psi_i(z)|^2, \quad (9)$$

及第 i 个子带的布居密度变为

$$n_i = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_i), \quad i = 1, 2, \dots, n_d. \quad (10)$$

若 $T \neq 0$, 则少数电子可能填充高于 E_F 的能级 E_i .

3 自洽计算

先假定自洽势 $V_H = 0$, 求解一维无限深 (有限深) 势阱的薛定谔方程, 得到本征能量 E_i 和本征函数 ψ_i ($i = 1, \dots, n_d$), 进而得到与之对应的费米能量 E_F . 由 (3) 式可构造量子阱中电子密度 $N(z)$. 由 $N(z)$ 及杂质离子的电荷分布 $N_d(z)$ 作为源, 求解泊松方程可得自洽势 $V_H(z)$. 将 $V_H(z)$ 代回薛定谔方程求解得新的本征能量 E'_i 及本征函数 $\psi'_i(z)$, 进而得到新的费米能量 E'_F , 完成了一次自洽迭代. 将 E'_i , $\psi'_i(z)$, 及 E'_F 代入 (3) 式可得新得电子密度 $N'(z)$. 将 $N'(z)$ 及 $N_d(z)$ 作为新的源求解泊松方程得新的自洽势 $V'_H(z)$. 为保证迭代的收敛性及快速, 将前后两个解混合, 即作线性组合 $V''_H(z) = \alpha V_H(z) + \beta V'_H(z)$ 作为薛定谔方程的自洽势代入求解, α, β 为常数可调, 满足 $\alpha + \beta = 1$. 以后以这种方式反复迭代, 直至前后两次的迭代势的差维持在一个指定的精度, 自洽计算结束. 迭代次数一般在 40—100 次之间.

4 无限深量子阱的结果及讨论

计算中我们采用如下输入参数值: 有效质量 $m^* = 0.067m$, m 为电子静止质量; $\epsilon_r = 12.5$ 为 GaAs 的介电常数; $n_{2d} = 0.5 \times 10^{12} - 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 为掺杂 Si 的浓度; 掺杂层厚度 $L_D = 2 - 400 \text{ \AA}$; 自洽计算

的精度要求前后两次计算的自洽势之差的平方的积分 < 1% 平均势平方的积分, 即

$$\int_{-L_0/2}^{L_0/2} \Delta V_H^2 dz / \int_{-L_0/2}^{L_0/2} \bar{V}_H^2 dz < 1\%;$$

温度 $T = 0$; 势阱宽 $L_0 = 600 \text{ \AA}$; 填充态的数目先取为 $n_d = 4$.

4.1 自洽势, 电子密度分布, 本征能量及本征包络函数

对掺杂层厚度 $L_D = 20 \text{ \AA}$, 浓度 $n_{2d} = 2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} = 2.0 \times 10^{-4} \text{ \AA}^{-2}$ 的系统, 我们计算了自洽势 V_H , 电子密度分布 $N(z)$, 本征能量 E_i , 本征包络函数 ψ_i ($i = 1, 2, 3, 4$) 及费米能量 E_F 其结果示于图 1 中. 可以看出, 自洽势在势阱中央部分最小, 带

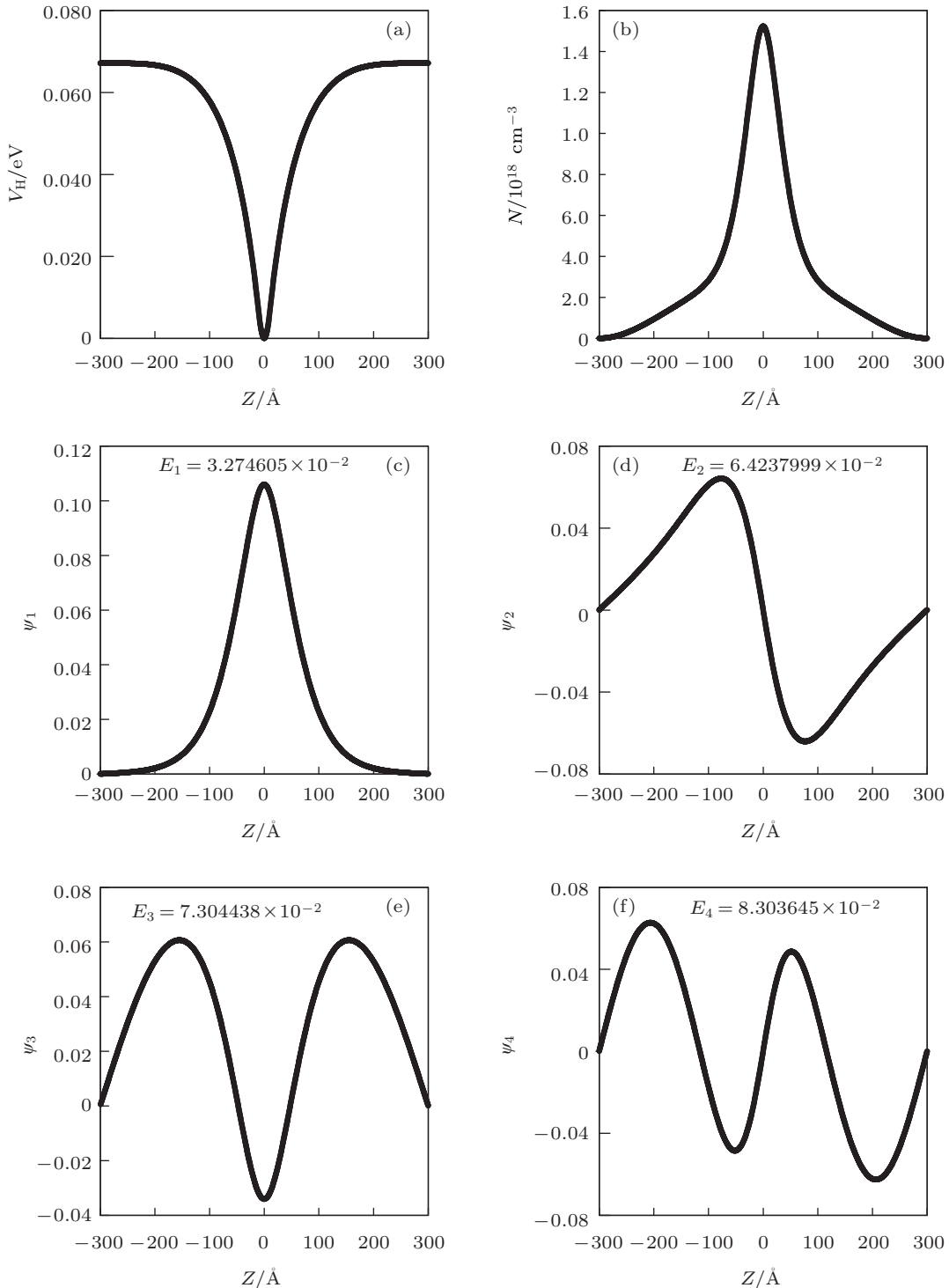


图 1 掺杂层厚度 $L_D = 20 \text{ \AA}$, 浓度 $n_{2d} = 2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 的量子阱的电子态结构 ($E_F = 8.054569 \times 10^{-2} \text{ eV}$) (a) 自洽势; (b) 电子密度分布; (c)—(f) 最低 4 个能级的波函数

负电的电子密度在阱中央最大,带正电的离子在阱中央部分均匀分布.4个子带能级的包络波函数的节点数目分别为0,1,2,3.从本征能量可知,第一个本征态局域在阱内,第二个在势垒边上为扩展态,第三,四个为扩展态在势垒之上,费米能量介于 E_3 与 E_4 之间,从(10)式可知在这种情况下只有少量电子局域在自洽势阱内.

4.2 自洽势,电子密度分布,及本征能量等随掺杂浓度的变化

对掺杂层厚度 $L_D = 20 \text{ \AA}$,浓度从 $n_{2d} = 0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 到 $n_{2d} = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 之间可变情况,我们计算了自洽势 V_H ,电子密度分布 $N(z)$,本征

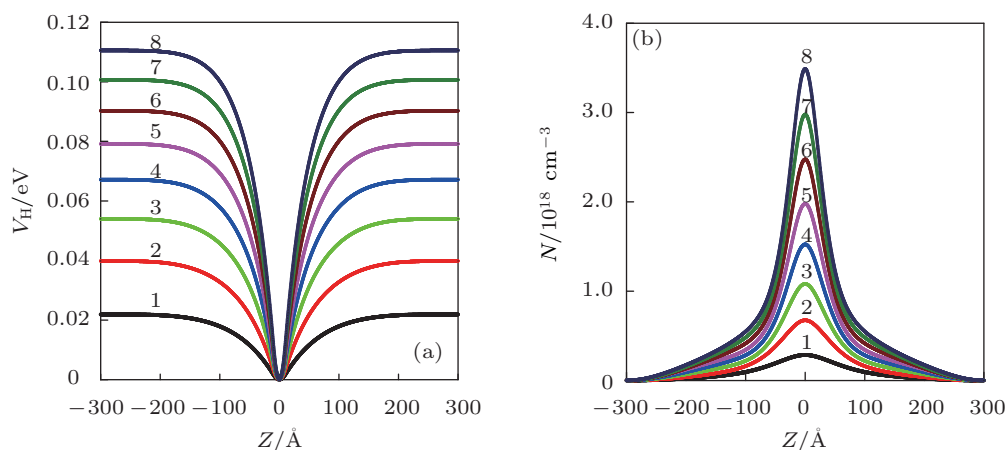


图2 不同掺杂浓度下的自洽势及对应的电子密度分布 (a) 自洽势; (b) 电子密度分布 (1: $N_{2d} = 0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; 2: $N_{2d} = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; 3: $N_{2d} = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; 4: $N_{2d} = 2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; 5: $N_{2d} = 2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; 6: $N_{2d} = 3.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; 7: $N_{2d} = 3.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; 8: $N_{2d} = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$)

4.3 自洽势,电子密度分布随掺杂层厚度的变化

对掺杂层浓度 $n_{2d} = 3.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$,我们计算了自洽势 V_H ,电子密度分布 $N(z)$ 随杂质层厚度的变化,其结果示于图4中.结果显示,在掺杂层厚度 $L_D < 50 \text{ \AA}$ 时,自洽势阱较深较陡较窄,电子密度分布的形状与图1中的相同,在中心部位(即杂质离子处)有很高的电子密度,即较多电子局域在阱内.随着掺杂层厚度的增加,自洽势阱变宽变浅,电子密度分布的形状也发生改变,如在 $L_D = 150, 175, 210 \text{ \AA}$ 时,电子密度分布变宽,峰值变小,顶部变平坦等.

4.4 本征能量,矩阵元随掺杂层厚度的变化

对掺杂层浓度 $n_{2d} = 2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$,我们也计

能量 E_i ($i = 1, \dots, n_d$),及费米能量 E_F 等随掺杂浓度的变化,其结果示于图2和图3.显然,随掺杂浓度的增加,自洽势变得越来越深,越陡,但其基本形状不变,电子密度的峰值变得越来越,分布越来越集中,因此阱内将有更多的束缚能级,更多的电子局域在阱内.由于电子受限所导致的电子间的排斥及其电子与正的杂质离子间的库仑吸引共同作用的结果使得本征能量及费米能量随浓度的增加而单调增加.电子填充的能级对浓度 $n_{2d} \leq 0.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 时只有最低的两个能级得到填充,而当 $0.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} < n_{2d} \leq 2.25 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 时最低的三个能级得到填充,当 $2.25 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} < n_{2d} \leq 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 时4个能级得到填充.

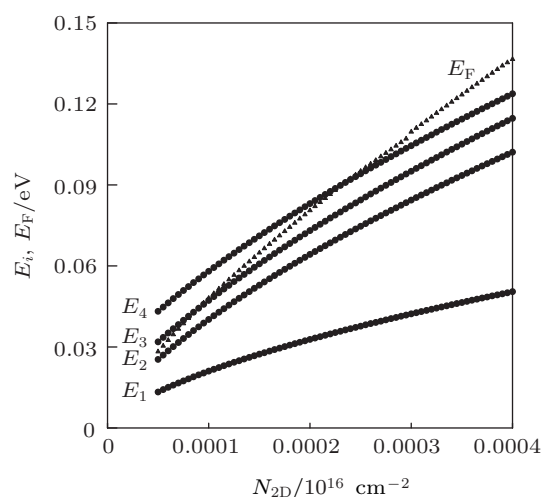


图3 不同掺杂浓度下的前4个本征能量及对应的费米能级的能量(其中填充的圆代表本征能量,填充的三角形代表费米能)

算了本征能量 E_i ($i = 1, \dots, 4$), z 的矩阵元 $\langle 1|z|2 \rangle$ (定义为 z_{12}), $\langle 1|z|3 \rangle$, $\langle 1|z|4 \rangle$, $\langle 2|z|3 \rangle$, $\langle 2|z|4 \rangle$, $\langle 3|z|4 \rangle$ 等

随掺杂层厚度 L_D 的变化, 其结果由图 5, 图 6 所示. 从图 5 可以看出, 在 L_D 从 2 Å 到 400 Å 之间本征能量 E_i ($i = 1, \dots, 4$) 随 L_D 的增加而单调递减. 与此对应的矩阵元的情况是 $\langle 1|z|3 \rangle = \langle 2|z|4 \rangle = 0$, 这是因为 ψ_1 和 ψ_3 都是偶函数, z 是奇函数, 故 $\psi_1^* z \psi_3$ 为奇函数, 而 ψ_2 和 ψ_4 都为奇函数, 故 $\psi_2^* z \psi_4$ 为奇函数, 奇函数在对称区间内积分为 0 的缘故. 其他 4 个矩阵元的情况相似: 随 L_D 增加, 矩阵元 $\langle 1|z|2 \rangle$ 及 $\langle 1|z|4 \rangle$ 单调衰减, 矩阵元 $\langle 2|z|3 \rangle$ 先增加, 经过最大值后现减小, 矩阵元 $\langle 3|z|4 \rangle$ 先减小经最小值后再

增加.

5 有限深量子阱的结果

这一节我们考虑更实际的情况, 有限深量子阱. 一些固有参量如 GaAs 导带底的有效质量 m^* 及介电常数 ϵ_r 等与无限深势阱中的相同, 即 $m^* = 0.067m$, $\epsilon_r = 12.5$. 我们取 GaAs 量子阱的宽度 $L_0 = 300$ Å (无限深势阱中 $L_0 = 600$ Å), 掺杂离子的浓度取为 $n_{2d} = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

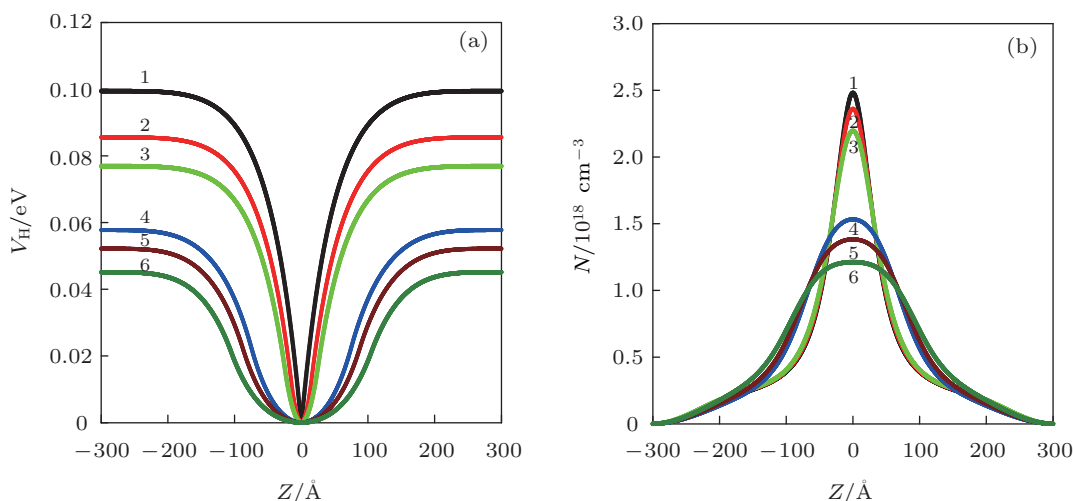


图 4 (a), (b) 不同掺杂厚度下的自洽势及对应的电子密度分布 ($n_{2d} = 3.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$): 1: $L_D = 2$ Å; 2: $L_D = 30$ Å; 3: $L_D = 50$ Å; 4: $L_D = 150$ Å; 5: $L_D = 175$ Å; 6: $L_D = 210$ Å

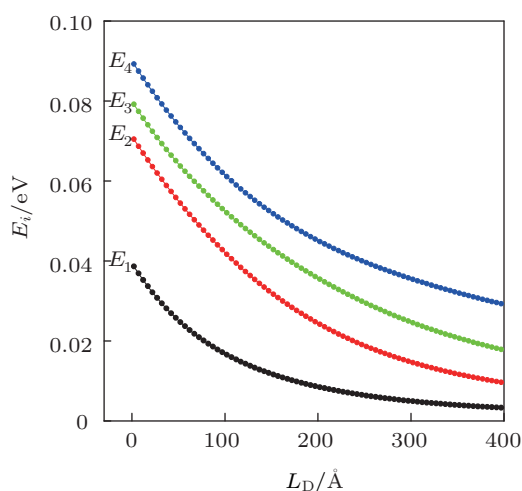


图 5 前 4 个本征能量随掺杂层厚度的变化 ($N_{2d} = 2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$)

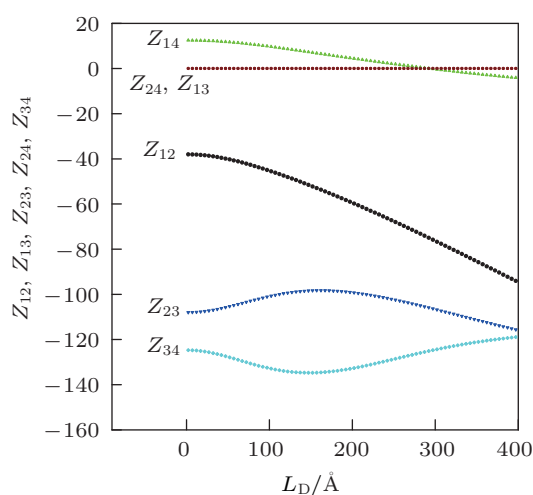


图 6 z 的矩阵元随掺杂层厚度的变化 ($N_{2d} = 2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$)

对有限势垒高 $U_0 = 0.3 \text{ eV}$, 我们研究了子带能级能量 E_i 与掺杂层厚度 L_D 的关系, 其结果示于图 7 中, 可以看出, 这与无限深势阱的结果 (图 5) 极为相似, 不同的是子带能级能量比图 5 中对应的能量高, 这是因为势阱变窄了, 束缚能级能量所以要升

高, 如无限深势阱中能量 $\propto 1/L_0^2$. 掺杂浓度 $n_{2d} = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 比图 5 降低了 1/4 倍, 能量应降低些, 但二者总贡献还是使能量增高. 研究发现, 第三节无限深量子阱的结果, 在有限深量子阱中都可以看到. 然而为了研究有限势垒高的影响, 我们对系统参数 $n_{2d} = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $L_D = 30$ Å,

$L_0 = 300 \text{ \AA}$ 的系统, 计算了子带能级能量与势垒高 U_0 的关系, 其结果示于图 8. 可以看出随着势垒高的增加, 子带能级能量的确在增加, 增加的速度在低势垒时较大, 高势垒时较小, 甚至达到饱和.

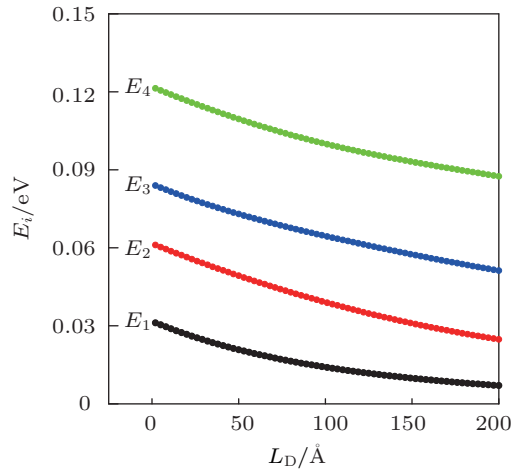


图 7 前 4 个本征能量随掺杂层厚度的变化 ($n_{2d} = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $U_0 = 0.3 \text{ eV}$)

6 结论

本文对 Si 均匀掺杂的半导体 GaAs 量子阱系统作了自洽计算, 得到了自洽势 V_H , 电子密度分布 $N(z)$, 本征能量 E_i , 本征包络函数 ψ_i , 及费米能级 E_F 等. 在给定掺杂层厚度情况下, 研究了自洽势, 电子

密度分布, 本征能量及费米能级随掺杂浓度的变化. 在给定掺杂浓度情况下, 研究了自洽势, 电子密度分布, 本征能量及 z 的矩阵元随掺杂层厚度的变化.

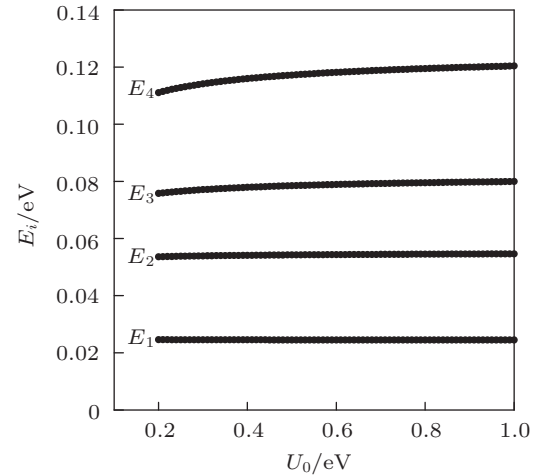


图 8 前 4 个本征能量随势垒高的变化 ($n_{2d} = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $L_D = 30 \text{ \AA}$)

研究发现随着掺杂浓度的增加, 自洽势变深变陡, 电子密度分布的峰值变高, 但其基本形状不变, 本征能量及费米能量单调递增. 而随着掺杂层厚度增加, 自洽势阱变浅, 变宽, 电子密度分布变宽, 峰值减小, 本征值单调递减, z 的矩阵元 $\langle 1|z|2 \rangle$, $\langle 3|z|4 \rangle$ 单调递减. 研究结果对光电探测器, 电光调制器等光电子器件的研发及应用具有参考指导意义.

- [1] Chandhuri S 1983 *Phys. Rev. B* **28** 4480
- [2] Yang Y, Fedorov G, Barbara P 2013 *Phys. Rev. B* **87** 045403
- [3] Wolf G V, Chuburin Y P 2012 *Physica E: Low dimensional system and Nanostructures* **44** 2063
- [4] Stern F, Das Sarma S 1984 *Phys. Rev. B* **30** 840
- [5] Rauch C, Strasser G, Unterrainer K, Boxleitner W, Gornik E 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3495
- [6] Chang C Y, Lin W, Hsu W C, Wu T S, Chang S Z, Wang C 1991 *Jpn. J. Appl. Phys.* **30** 1158
- [7] Dohler G H, Kunzel H, Olego D 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 864
- [8] Hai G Q, Studart N, Peeters F M 1995 *Phys. Rev. B* **52** 11273
- [9] Schubert E F, Ullrich B, Harris T D, Cunningham J E 1988 *Phys. Rev. B* **38** 8305
- [10] Gaggero-Sager L M, Naumis G G, Munoz-Hernandez M A, Palma-Montiel V 2010 *Physica B* **405** 4267
- [11] Miller R C 1984 *J. Appl. Phys.* **56** 1136
- [12] Gaggero-Sager L M, Perez-Alvarez R 1996 *Phys. Stat. Sol.* **197** 105
- [13] Zhang H F, Du P Y, Wong W J, Han G R 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5329 (in Chinese) [张海芳, 杜丕一, 翁文剑, 韩高荣 2005 物理学报 **54** 5329]
- [14] Ugan Fatih, Kasapoglu Esin, Sari Huseyin, Sokmen Ismailol 2009 *Superlattices and Microstructures* **46** 864
- [15] Ozturk E 2009 *Superlattices and Microstructures* **46** 752
- [16] Yue S L, Tang C C, Huang Y 2005 *Physics* **34** 791 (in Chinese) [岳双林, Tang C C, 黄阳 2005 物理 **34** 791]
- [17] Zhang L, Lin F Y, Hu H F 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1378 (in Chinese) [张龙, 林凤英, 胡和方 2001 物理学报 **50** 1378]

Effect of doping concentration and doping thickness on the structure of electronic state of the Si uniformly doped GaAs quantum well

Yang Shuang-Bo[†]

(School of Physical Science and Technology Nanjing Normal University, Nanjing 210046, China)

(Received 27 February 2013; revised manuscript received 17 April 2013)

Abstract

By solving Schrodinger equation and Poisson equation self-consistently, we have calculated the electronic structure for Si-doped GaAs/AlGaAs quantum well system at $T = 0$ in the effective mass approximation. We studied the influence of the doping concentration and the thickness of the doping layer on the subband energies, eigen-envelope functions, Hartree potential, density distribution of the electrons, and the Fermi energy. It is found that at the given doping concentration, the subband energies decrease with the increase of the doping thickness, the width of the self consistent potential well increase, the depth of the well decrease, the distribution of the electron density becomes wider, the peak value reduced. At the given thickness of the doping layer, with the increase of the doping concentration, the subband energies and Fermi energy monotonically increase, the self consistent potential well becomes narrower and deeper, the peak of the electron density distribution becomes higher, and concentrated around the center of the well.

Keywords: doping, quantum well, electronic structure, semiconductor GaAs

PACS: 73.21.Fg

DOI: 10.7498/aps.62.157301

[†] Corresponding author. E-mail: yangshuangbo@nynu.edu.cn