

缓冲层对量子阱二能级系统中电子子带间跃迁光吸收的影响

李群 屈媛 班士良

Buffer layer influence on light absorption of electron intersubband transition in binary energy level systems of quantum wells

Li Qun Qu Yuan Ban Shi-Liang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 66, 077301 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.077301

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.077301>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I7>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

石墨烯吸附 Li 团簇的第一性原理计算

The first-principle calculation on the Li cluster adsorbed on graphene

物理学报.2017, 66(5): 057301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.057301>

双势垒抛物势阱磁性隧道结隧穿磁阻及自旋输运性质的研究

Study on tunneling magnetoresistance effects in parabolic well magnetic tunneling junction with double barriers

物理学报.2016, 65(15): 157301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.157301>

Heusler 合金 $\text{Co}_2\text{MnAl}(100)$ 表面电子结构、磁性和自旋极化的第一性原理研究

First-principles study of the electronic structure, magnetism, and spin-polarization in Heusler alloy $\text{Co}_2\text{MnAl}(100)$ surface

物理学报.2015, 64(14): 147301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.147301>

不同 N 掺杂构型石墨烯的量子电容研究

Quantum capacitance performance of different nitrogen doping configurations of graphene

物理学报.2015, 64(12): 127301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.127301>

单轴压力下 $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ (X=Sb, Bi) 薄膜拓扑相变的第一性原理研究

First-principles study on the uniaxial pressure induced topological quantum phase transitions of $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ (X = Sb, Bi) thin films

物理学报.2015, 64(10): 107301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.107301>

缓冲层对量子阱二能级系统中电子子带间跃迁光吸收的影响*

李群 屈媛 班士良†

(内蒙古大学物理科学与技术学院, 呼和浩特 010021)

(2016年11月22日收到; 2017年1月9日收到修改稿)

由于 ZnO 缓冲层对纤锌矿 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 有限深单量子阱结构左垒的限制作用, 导致阱和右垒的尺寸、Mg 组分值等因素将影响系统中形成二能级. 本文考虑内建电场、导带弯曲及材料掺杂对实际异质结势的影响, 利用有限差分法数值求解 Schrödinger 方程, 获得电子的本征能级和波函数, 探讨 ZnO 缓冲层对此类量子阱形成二能级系统的尺寸效应及三元混晶效应的影响; 利用费米黄金法则探讨缓冲层、左垒、阱及右垒宽度和三元混晶效应对此类量子阱电子子带间跃迁光吸收的影响. 计算结果显示: 对于加入 ZnO 缓冲层的 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 有限深单量子阱二能级系统, 左垒宽度临界值会随着阱宽和 Mg 组分值的增大而逐渐减小, 随着右垒宽度和缓冲层厚度的增大而逐渐增大; 量子阱中电子子带间跃迁光吸收峰会随着左垒、右垒尺寸以及 Mg 组分的增大发生蓝移, 随着阱宽增大而发生红移. 本文所得结果可为改善异质结器件的光电性能提供理论指导.

关键词: ZnO 缓冲层, ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱二能级系统, 电子子带间跃迁, 三元混晶

PACS: 73.20.At, 73.21.Fg, 78.20.Ci

DOI: 10.7498/aps.66.077301

1 引言

近年来, 应变纤锌矿半导体及其低维结构材料广泛应用于现代照明和太赫兹通信领域, 成为制备新一代电子和光电子器件的重要材料. 纤锌矿半导体材料 ZnO 和 MgO 的禁带宽度分别为 3.37^[1] 和 7.8 eV^[2], 由于 Zn 离子和 Mg 离子的晶格常数非常接近^[3], 通常在 ZnO 材料中掺杂 Mg 制成三元混晶材料 Mg_xZn_{1-x}O, 通过调节材料中 Mg 组分的大小来改变其禁带宽度, 从而调控材料的光电性质^[4-7]. 因此, 以 ZnO 为阱材料的量子阱, 其垒层材料常选用 Mg_xZn_{1-x}O^[8,9]. 虽然 ZnO 基半导体器件欠成熟的 P 型掺杂技术阻碍了量子阱带间跃迁光吸收的实现, 但是利用其量子阱电子子带间跃迁光吸收性质而制成的光电器件, 例如: 全光开关、半导体激光器和量子阱红外光探测器却有着广泛

的应用前景^[10], 从而以 ZnO 为基础的光电器件引起了人们的广泛关注^[11,12]. 量子阱结构的光学器件可以通过对量子束缚效应的控制, 调节器件的光电性质^[13]. 近年来, Ohno 等^[14] 在实验上研究了 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱子带间跃迁光吸收性质; Zhu 等^[15] 在理论上计算了 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱中电子子带间的跃迁光吸收, 并分析阐述了外加电场及阱宽对跃迁光吸收的影响.

为了制备出性能优良的 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱, 通常需要在衬底上先生长一层缓冲层来缓解晶格不匹配而造成的瑕疵. 近年来, 有作者陆续选择 ZnO 为缓冲层制备 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱^[16-18], 但在理论上尚缺乏关于缓冲层对量子阱光电性质的影响的讨论. 本文则从理论上考虑内建电场、导带弯曲及材料掺杂对实际异质结势的影响. 先利用有限差分法数值求解 Schrödinger 方程,

* 国家自然科学基金 (批准号: 61274098, 11304142) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: slban@imu.edu.cn

获得电子的本征能级和波函数, 探讨 ZnO 缓冲层对此类量子阱形成二能级系统时的尺寸效应及三元混晶效应的影响. 在此基础上, 利用费米黄金法则探讨尺寸效应和三元混晶效应对加入 ZnO 缓冲层的 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱中电子子带间跃迁光吸收的影响.

2 理论模型

加入 ZnO 缓冲层的纤锌矿 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱结构如图 1 所示, 阱材料为纤锌矿 ZnO, 垒材料为三元混晶 Mg_xZn_{1-x}O. 取量子阱生长方向沿纤锌矿的 *c* 轴, 且与界面垂直, 记为 *z* 方向, 设 *x* - *y* 平面平行于界面. 图中, *L*_{b0} 表示缓冲层厚度, *L*_{b1}, *L*_w 和 *L*_{b2} 分别表示左垒、阱和右垒的宽度.

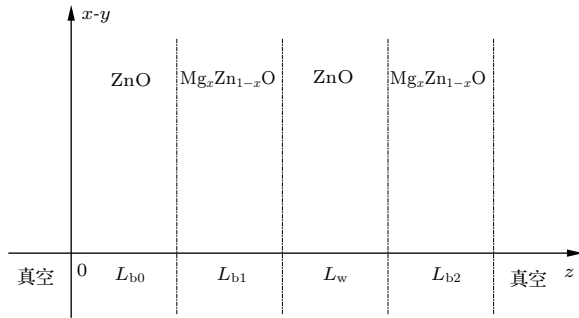


图 1 纤锌矿 ZnO/Mg_xZn_{1-x}O 量子阱取向示意图
Fig. 1. Orientation sketch map of a wurtzite ZnO/Mg_xZn_{1-x}O quantum well.

若采用有效质量近似, 考虑内建电场的影响, 单电子 Schrödinger 方程可写为

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{m(z)} \right] \frac{\partial}{\partial z} + V(z) + eF(z)z \right\} \psi_i(z) = E_i \psi_i(z), \quad (1)$$

其中, *m*(*z*) 为电量为 *e* 的电子在 *z* 方向的有效质量; *F*(*z*) 是体系各层材料中自发极化和压电极化共同决定的内建电场; $\psi_i(z)$ 和 *E_i* 分别为子带能级 *i* 上电子的本征态波函数和本征能量; *V*(*z*) 为电子的势垒高度, 即导带带阶, 可表示为

$$V(z) = \begin{cases} 0, & z \in (0, L_{b0}] \cup (L_{b0} + L_{b1}, L_{b0} + L_{b1} + L_w], \\ V_0(z), & z \in (L_{b0}, L_{b0} + L_{b1}] \cup (L_{b0} + L_{b1} + L_w, L], \end{cases} \quad (2)$$

这里, *L* 为量子阱中缓冲层、左垒、阱和右垒宽度的总和, 若采用 70 : 30 原则^[8], 则有

$$V_0(z) = (E_{g, Mg_xZn_{1-x}O} - E_{g, ZnO}) \times 70\%, \quad (3)$$

式中, *E_{g, Mg_xZn_{1-x}O}*, *E_{g, ZnO}* 分别为 Mg_xZn_{1-x}O 和 ZnO 的禁带宽度. 为了更好地接近实验结果, 三元混晶材料 Mg_xZn_{1-x}O 的禁带宽度采用含有弯曲因子 *b* = 2.58 eV^[19] 的表达式:

$$E_{g, Mg_xZn_{1-x}O} = xE_{g, MgO} + (1-x)E_{g, ZnO} - bx(1-x). \quad (4)$$

(1) 式中, 第 *k* 层材料中内建电场 *F*(*z*) = *F_k*, 满足周期性边界条件, 可表示为^[20]

$$F_k = \frac{\sum_j L_j (P_j^{\text{tot}} - P_k^{\text{tot}}) / \epsilon_j^s}{\epsilon_k^s \sum_j L_j / \epsilon_j^s} \quad (k, j = b_0, b_1, w, b_2), \quad (5)$$

上式中, *L_j* 是材料 *j* 的厚度, 对应的静态介电常数为 ϵ_j^s . 总的自发极化和压电极化 P_j^{tot} 可表达为^[20]

$$P_j^{\text{tot}} = P_j^{\text{sp}} + P_j^{\text{pz}}. \quad (6)$$

根据实际异质结器件的结构, 可假设在缓冲层与衬底的界面间没有电子隧穿, 此时边界条件可表示为 $\psi_i(0) = \psi_i(L) = 0$. 设导带底为势能零点, 根据文献^[21], 运用差分法求解薛定谔方程 (1) 即可计算出电子的能级和波函数.

利用费米黄金法则, 量子阱二能级系统中电子子带间跃迁光吸收系数可表示为^[22]

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\omega}{d_w} \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0 \epsilon_w}} |M_{21}|^2 \times \frac{(N_1 - N_2) \hbar / \tau}{(E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 + (\hbar / \tau)^2}, \quad (7)$$

这里, ϵ_0 和 μ_0 分别是真空介电常数和真空磁导率; ϵ_w 为相对介电常数; ω 为光子频率, 弛豫时间 τ 与电子-声子相互作用有关, 在本文中假设为常数, 其数值取为 $\tau = 20$ fs; *d_w* 是电子跃迁时的活动范围, 即阱宽 *L_w*; *N₁* 和 *N₂* 分别为子带基态能级和第一激发态能级上电子的浓度; *M₂₁* 为偶极矩矩阵元, 可由下式表示:

$$M_{21} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^*(z) e z \psi_1(z) dz. \quad (8)$$

3 数值计算结果与讨论

3.1 ZnO缓冲层对ZnO/Mg_xZn_{1-x}O量子阱形成二能级系统的尺寸效应及三元混晶效应的影响

对于图1所示的量子阱, 假设缓冲层左侧和右垒右侧均为真空. 在内建电场的作用下, 左垒宽度较小时则会导致缓冲层中的势能较低, 第一激发态波函数无法被束缚在阱中. 因此, 为使量子阱形成二能级系统, 左垒宽度需有一最小值, 称为左垒宽度临界值. 若右垒的宽度较大, 则在内建电场的作用下, 右垒与其右侧真空形成的势阱会俘获ZnO势阱层中的第一激发态电子. 此时, 为使量子阱形成二能级系统, 右垒宽度需有一最大值. 本文仅以左垒宽度为研究对象, 探讨缓冲层, 阱以及右垒宽度对左垒宽度临界值的影响, 对右垒宽度临界值的影响亦可做类似分析讨论.

求解(1)式可得出ZnO/Mg_xZn_{1-x}O量子阱形成二能级系统时左垒宽度 L_{b1} 的临界值. 分两种情况进行计算: 1) 当ZnO缓冲层厚度 L_{b0} 小于50 nm时, 缓冲层中考虑内建电场; 2) 当 L_{b0} 大于50 nm时, 缓冲层材料可视为体材料, 忽略其中的内建电场. 计算结果显示: 在两种情况下, L_{b1} 的临界值随Mg组分 x 、阱宽 L_w 和右垒宽度 L_{b2} 的变化趋势相似, 本文只给出 L_{b0} 大于50 nm的结果.

L_{b1} 的临界值随 x 变化关系如图2所示. 此时 L_{b0} , L_w 和 L_{b2} 分别为60, 6和5 nm, 随着 x 增大, L_{b1} 的临界值近似地以指数函数逐渐减小. 量子阱中左垒的内建电场 F_{b1} 等于右垒的内建电场 F_{b2} , 二者和阱层中的内建电场 F_w 随着 x 的增大而增大, F_w 增大的速率更快一些, 导致量子阱的量子束缚效应减弱. 但 x 的增大使量子阱的势垒高度迅速增大, 量子阱的量子束缚效应增强, 总效果表现出量子束缚效应的增强, 形成图2所示的结果. 当 $x = 0.3$, L_{b0} 和 L_{b2} 分别为60和5 nm时, L_{b1} 的临界值则随着 L_w 的增大而减小, 二者的变化趋势与图2所示的结果近似. 因为随着 L_w 的增大, F_{b1} 和 F_{b2} 逐渐增大, F_w 逐渐减小, 导致量子束缚效应增强, 所以 L_{b1} 的临界值随着 L_w 的增大而减小, 为节省篇幅, 这里不再给出具体变化趋势图.

图3给出了当 $x = 0.3$, L_{b0} 和 L_w 分别为60和7 nm时, L_{b1} 的临界值随 L_{b2} 的变化关系. L_{b1} 的

临界值近似以正比例函数随着 L_{b2} 而逐渐增大, 量子束缚效应则逐渐减弱, L_{b1} 的临界值便随着 L_{b2} 而增大.

当 L_{b0} 从50 nm而逐渐增大时, L_{b1} 的临界值几乎不变. 此时, 缓冲层中的内建电场 F_{b0} 可忽略, L_{b0} 的改变则不会对量子束缚效应产生明显影响, L_{b1} 的临界值也就不会发生明显变化; 而当 L_{b0} 小于50 nm时, 缓冲层中考虑内建电场 F_{b0} , 其变化将改变量子阱中内建电场的大小, 这将影响量子束缚效应, 进而使 L_{b1} 的临界值发生改变.

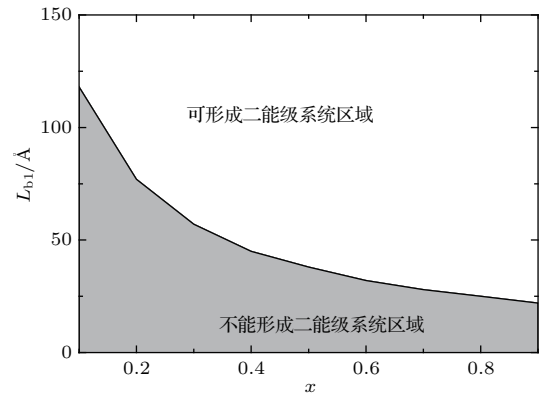


图2 左垒宽度 L_{b1} 的临界值随Mg组分 x 的变化
Fig. 2. Critical value of the left barrier width L_{b1} varies with the change of Mg component x .

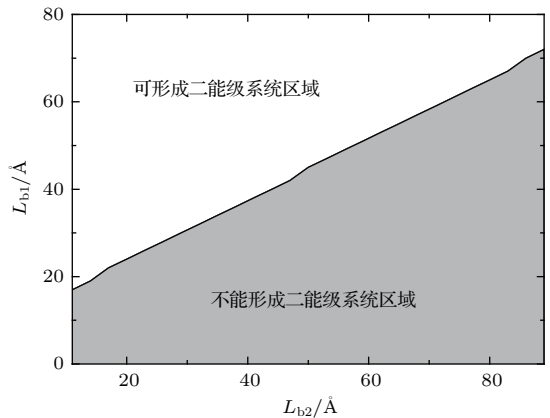


图3 左垒宽度 L_{b1} 的临界值随右垒宽度 L_{b2} 的变化
Fig. 3. Critical value of the left barrier width L_{b1} varies with the change of right barrier width L_{b2} .

图4显示 $x = 0.3$, L_w 和 L_{b2} 分别为5和4 nm时, 左垒宽度 L_{b1} 的临界值随缓冲层厚度 L_{b0} 的变化关系. 随着 L_{b0} 的增大, L_{b1} 的临界值近似以正比例函数逐渐增大. 这是由于随着 L_{b0} 的增大, F_{b0} , F_w , F_{b1} 和 F_{b2} 都在逐渐减小, 但 F_{b1} 减小的速率相对于 F_w 更平缓, 从而导致量子束缚效应减弱, 出现图4所示的现象.

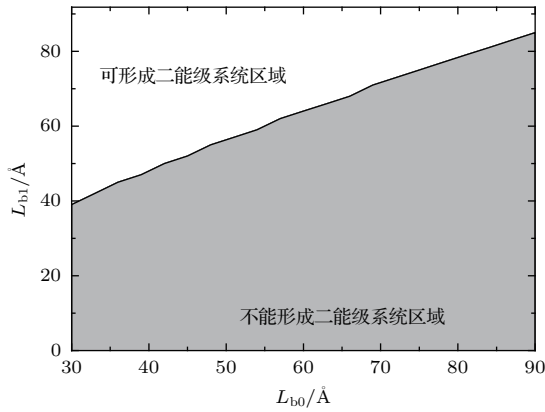


图4 左垒宽度 L_{b1} 的临界值随缓冲层厚度 L_{b0} 的变化
Fig. 4. Critical value of the left barrier width L_{b1} varies with the change of buffer layer thickness L_{b0} .

3.2 尺寸效应对 $ZnO/Mg_xZn_{1-x}O$ 量子阱中电子子带间跃迁光吸收的影响

在上述 $ZnO/Mg_xZn_{1-x}O$ 量子阱形成二能级系统的尺寸范围内, 可进一步解得电子子带间跃迁光吸收系数. 计算表明, 缓冲层、左垒、右垒以及阱尺寸均会影响吸收系数. 随着左垒宽度 L_{b1} 的增大, 吸收峰发生微小蓝移且峰值增大. 这是由于当 L_{b1} 增大时, 基态能级 E_1 和第一激发态能级 E_2 也逐渐增大, 但 E_2 增大的速率略快, 导致吸收峰发生微小蓝移. 同时, 基态与第一激发态的电子浓度差 N_{21} 和偶极矩阵元 M_{21} 都在增大, 因此吸收峰值也增大. 随着右垒宽度 L_{b2} 的增大, 吸收峰蓝移且峰值增大, 其原因与左垒情况类似, 不同之处是 L_{b2} 的增大对能级位置的影响较大, 蓝移程度更为明显. 但是随着阱宽 L_w 的增大, 吸收峰出现红移且峰值明显地减小. 这是由于随着 L_w 的增大, E_1 和 E_2 均减小, 但 E_1 较 E_2 减小的速率更快, 导致吸收峰红移. 随着阱宽的增大, M_{21} 和 N_{21} 减小, 因此吸收峰值减小. 为节省篇幅, 本文忽略其趋势图, 仅给出缓冲层厚度对跃迁光吸收的变化趋势. 当 $x = 0.3$, L_{b1} , L_w 和 L_{b2} 分别为 7, 5 和 4 nm 时, 电子子带间跃迁光吸收随 L_{b0} 的变化如图 5 所示. 可以看出, 随着 L_{b0} 的增大, 吸收峰的位置不变但峰值增大. 因为随着 L_{b0} 增大, 量子阱中的内建电场不变, 则势能不发生改变, 导致阱中各能级大小不变, 故而吸收峰的位置也保持不变. 但是随着 L_{b0} 的增大, M_{21} 则迅速增大, 从而导致吸收系数逐渐增大.

对 ZnO 缓冲层上生长的尺寸及组分不同的三

种样品, 文献 [16] 从实验上给出了多量子阱中电子子带间跃迁光吸收性质, 其结果显示: 子带间跃迁光吸收的波峰位置在 3 μm 附近, 所得结果与本文计算的波峰位置接近; 阱宽对吸收峰值位置的影响较左垒和右垒的影响更明显, 且阱宽的增大将导致吸收峰发生红移, 此结果与本文得出的尺寸效应对吸收系数的结论一致. 将文献 [16] 中量子阱的尺寸用于本文模型时, 计算结果表明量子阱将无法形成二能级系统, 即无法发生子带间跃迁光吸收. 究其原因可知, 文献中探究的是多量子阱, 在内建电场的作用下, 每个 ZnO 阱层中基态能级大小将有所偏差, 因此当阱层数量较多时, 整个系统中即使只有基态也可以观测到跃迁吸收峰, 本文研究的单量子阱情形则不同.

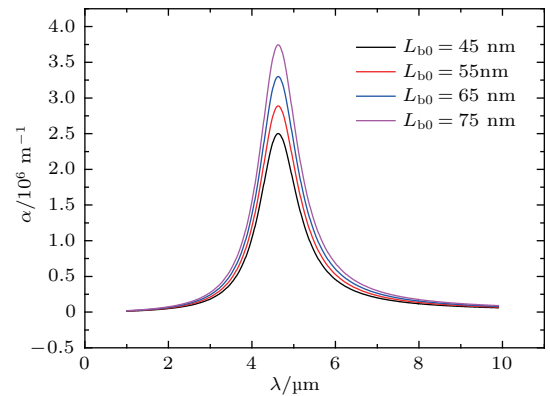


图5 (网刊彩色) 不同缓冲层厚度 L_{b0} 时吸收系数 α 随入射波长 λ 的变化

Fig. 5. (color online) Absorption coefficient varies with the change of incident light wavelength in different sizes of buffer layers thickness.

3.3 三元混晶效应对 $ZnO/Mg_xZn_{1-x}O$ 量子阱电子子带间跃迁光吸收的影响

当 $ZnO/Mg_xZn_{1-x}O$ 量子阱三元混晶垒层中的 x 改变时, 量子阱中电子子带间跃迁光吸收也会发生改变. 图 6 给出了 L_{b0} , L_{b1} , L_w 和 L_{b2} 分别为 50, 7, 5 和 4 nm 时, 吸收系数 α 随 x 的变化情况. 随着 x 的增大, 吸收峰发生蓝移且峰值逐渐增大. 此时, E_1 和 E_2 逐渐升高, 但 E_2 升高的速率更快一些, 因此电子从基态跃迁到第一激发态所需的能量增加, 即跃迁吸收峰发生蓝移. 随着 x 的增大, 偶极矩阵元 M_{21} 的绝对值在逐渐减小, 但是基态和第一激发态之间的电子浓度差 N_{21} 和入射光频率却逐渐增大, 从而导致吸收峰值增大.

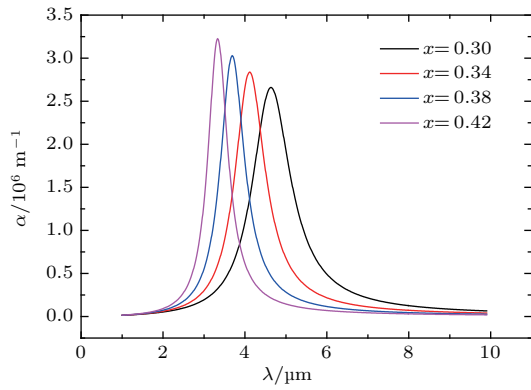


图6 (网刊彩色) Mg组分 x 不同时吸收系数 α 随入射波长 λ 的变化

Fig. 6. (color online) Absorption coefficient varies with the change of incident light wavelength for different Mg components x .

4 结 论

根据上述分析可得出, 当在纤锌矿 ZnO/Mg $_x$ Zn $_{1-x}$ O 量子阱的左侧加入 ZnO 缓冲层后, 如果使量子阱内存在两个能量状态即形成二能级系统, 左垒的宽度会有一定的限制. 因为缓冲层的材料与阱层的材料相同, 在内建电场的作用下, 如果左垒宽度较小, 则会使电子发生隧穿, 量子阱内就不会有电子跃迁行为. 在实际器件制备过程中, 如果 ZnO/Mg $_x$ Zn $_{1-x}$ O 量子阱的缓冲层选用 ZnO, 缓冲层对量子阱左垒宽度的限制作用则不可忽略. L_{b0} , L_{b2} , L_w 和 x 的变化均会对量子阱的内建电场产生影响, 从而影响 L_{b1} 的临界值. 此外, 三元混晶效应和尺寸效应也会对电子子带间跃迁光吸收产生影响, L_{b0} , L_{b1} , L_{b2} 和 x 的增大使吸收峰值增大, 但 L_w 的增大却使吸收峰值减小. L_{b1} , L_{b2} 和 x 的增大使吸收峰发生蓝移, 而 L_w 的增大则使吸收峰发生红移. 本文的计算结果可为异质结类光电器件的制备与改造提供理论指导.

参考文献

[1] Yumak A, Yahsi U, Petkova P, Boubaker K 2016 *Mater. Lett.* **164** 89

- [2] Gu Z, Ban S L 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 107301 (in Chinese) [谷卓, 班士良 2014 物理学报 **63** 107301]
- [3] Sharma A K, Narayan J, Muth J F, Teng C W, Jin C, Kvit A, Kolbas R M, Holland O W 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 3327
- [4] Han S K, Lee H S, Kim D Y, Hong S K, Ahn B J, Song J H, Jeong M, Lee J H, Lee J Y, Yao T 2015 *J. Alloy. Compd.* **623** 1
- [5] Sonawane B K, Bhole M P, Patil D S 2009 *Mater. Sci. Semicond. Process.* **12** 212
- [6] Schmidt-Grund R, Carstens A, Rheinländer B, Spemann D, Hochmut H, Zimmermann G, Lorenz M, Grundmann M, Herzinger C M, Schubert M 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 123701
- [7] Bundesmann C, Rahm A, Lorenz M, Grundmann M, Schubert M 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 113504
- [8] Zippel J, Heitsch S, Stölzel M, Müller A, Wenckstern H, Benndorf G, Lorenz M, Hochmuth H, Grundmann M 2010 *J. Lumin.* **130** 520
- [9] Zippel J, Lorenz M, Lange M, Stölzel M, Benndorf G, Grundmann M 2013 *J. Cryst. Growth* **364** 81
- [10] Zhao K L, Chen G P, Li B S, Shen A D 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 212104
- [11] Bagnall D M, Chen Y F, Zhu Z, Yao T, Shen M Y, Goto T 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 1038
- [12] Look D C 2001 *Mater. Sci. Eng. B* **80** 383
- [13] Berland K, Stattin M, Farivar R, Sultan D M S, Hyldgaard P, Larsson A, Wang S M, Andersson T G 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 043507
- [14] Ohtani K, Belmoubarik M, Ohno H 2009 *J. Cryst. Growth* **311** 2176
- [15] Zhu J, Ban S L, Ha S H 2013 *Superlattices Microstruct.* **56** 92
- [16] Zhao K L, Chen G P, Hernandez J, Tamargo M C, Shen A 2015 *J. Cryst. Growth* **425** 221
- [17] Li S M, Kwon B J, Kwack H S, Jin L H, Cho Y H, Park Y S, Han M S, Park Y S 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 033513
- [18] Su S C, Lu Y M, Zhang Z Z, Shan C X, Yao B, Li B H, Shen D Z, Zhang J Y, Zhao D X, Fan X W 2008 *Appl. Surf. Sci.* **254** 7303
- [19] Schleife A, Rödl C, Furthmüller J, Bechstedt F 2011 *New J. Phys.* **13** 085012
- [20] Łpkowski S P, Teisseyre H, Suski T, Perlin P, Grandjean N, Massies J 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 1483
- [21] Ha S H, Ban S L 2007 *J. Inner Mongolia Univ. (Nat. Sci. Ed.)* **38** 272 (in Chinese) [哈斯花, 班士良 2007 内蒙古大学学报 (自然科学版) **38** 272]
- [22] Chi Y M, Shi J J 2008 *J. Lumin.* **128** 1836

Buffer layer influence on light absorption of electron intersubband transition in binary energy level systems of quantum wells*

Li Qun Qu Yuan Ban Shi-Liang[†]

(Department of Physical Science and Technology, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China)

(Received 22 November 2016; revised manuscript received 9 January 2017)

Abstract

Due to the restriction of the ZnO buffer layer on the left barrier in a wurtzite asymmetric ZnO/Mg_xZn_{1-x}O single quantum well (QWs) structure with finite barriers, the other factors such as the size of the well and right barrier, and Mg component, etc. will influence the critical value of the left barrier width to form a binary level energy system. By adopting a finite difference method to solve the Schrödinger equation, the eigenstates and eigenenergies of electrons in a two-dimensional electron gas are obtained, and the influences of buffer layer ZnO, size and ternary mixed crystal effects on the formation of binary energy level system in QW are discussed. In our computation, the influences of energy band bending, material doping and built-in electric fields on a realistic heterostructure potential are considered. Furthermore, based on the Fermi's golden rule, the optical absorption coefficient of electronic intersubband transition in QW and the influences of buffer layer thickness, the widths of left barrier, well and right barrier and ternary mixed crystal effects are discussed. Our results indicate that the critical width of left barrier increases with the increases of the right barrier width and buffer layer thickness for a binary energy level system of ZnO/Mg_xZn_{1-x}O single quantum well with a ZnO buffer layer on the left side. However, the critical width of left barrier decreases with the increase of well width and Mg component. Besides, the buffer layer thickness, the widths of left barrier, well and right barrier and ternary mixed crystal also affect the light absorption induced by the electronic intersubband transitions. The increases of Mg component, the widths of right barrier and left barrier will increase the absorption peak and produce its blue-shift. Whereas, increasing well width will reduce the absorption peak and produce its red-shift. The above conclusions are expected to give theoretical guidance in improving the opto-electronic properties of materials and devices made of these heterostructures.

Keywords: ZnO buffer layer, binary energy level system of ZnO/Mg_xZn_{1-x}O quantum well, electron intersubband transition, ternary mixed crystal

PACS: 73.20.At, 73.21.Fg, 78.20.Ci

DOI: 10.7498/aps.66.077301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61274098, 11304142).

[†] Corresponding author. E-mail: slban@imu.edu.cn