

CdTe/ZnTe 应变量子阱中的浅施主结合能

刘魁勇 邢金海

(辽宁大学物理系 沈阳 110036)

摘要 本文研究了介电常数失配对 CdTe/ZnTe 应变量子阱中浅施主杂质结合能的影响。在有效质量近似下,利用变分方法计算了阱宽、杂质位置及应变对结合能的影响,得到了介电失配使结合能减小的结论。

PACC: 7155, 6865, 7340L

1 引言

近十几年,有关介电失配对 III-V 族异质结中杂质结合能的影响的研究较多^[1-3],并且均得出介电失配使结合能增大的结论。关于介电失配对 II-VI 族异质结杂质结合能的影响却未见报道。自 1984 年生长出第一块 II-VI 族半导体超晶格 ZnSe/ZnS^[4]以来,II-VI 族半导体超晶格因其特殊性质备受人们关注。随着晶体生长技术的发展现在已经可以制备象 CdTe/ZnTe 这样失配度较大(6.2%)的应变量子阱样品。CdTe/ZnTe 异质结构的发光范围在黄绿光区域,在光电器件方面有巨大的潜在应用价值。本文计算了介电失配、杂质位置及应变对 CdTe/ZnTe 应变量子阱中浅施主杂质结合能的影响,得到了介电失配使结合能减小的结果。我们分析了这一结论与前人结果不同的原因。

2 计算方法

我们考虑沿 [001] 方向生长的单量子阱结构,生长方向为 z 轴,阱的边界为 $-L/2 < z < L/2$ 。在有效质量近似下,有效哈密顿量可以写成:

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + V_{\text{qw}}(z) + V_{\text{imp}}(\vec{r}) \quad (1)$$

其中 $\vec{k} = -i\nabla$; 有效质量 m^* 在阱层 $|z| < L/2$ 和垒层 $|z| > L/2$ 中分别为 m_1^* 和 m_2^* ; $V_{\text{qw}}(z)$ 是包括了应变影响的方阱势,在阱层其值为零,在垒层为 V_0 ,它由阱层与垒层的带偏移决定(关于 V_0 的计算方法将在附录中给出); V_{imp} 是杂质势。因阱层与垒层之间存在着介电失配,我们以镜像电荷法来处理杂质势,可以得到如下形式的杂质势:

刘魁勇 男,硕士,从事半导体超晶格的研究
邢金海 男,教授,主要从事半导体超晶格的理论研究
1997-09-21 收到,1998-01-27 定稿

$$V_{\text{imp}} = \begin{cases} -\frac{(1+\beta)e^2}{\epsilon_1} \left[\frac{1}{R_0} + \sum_{n=1}^{\infty} \beta^n \frac{1}{R_n^+} \right] & z < -L/2 \\ -\frac{e^2}{\epsilon_1} \left[\frac{1}{R_0} + \sum_{n=1}^{\infty} \beta^n \left(\frac{1}{R_n^-} + \frac{1}{R_n^+} \right) \right] & |z| < L/2 \\ -\frac{(1+\beta)e^2}{\epsilon_1} \left[\frac{1}{R_0} + \sum_{n=1}^{\infty} \beta^n \frac{1}{R_n^-} \right] & z > L/2 \end{cases} \quad (2)$$

其中 $\beta = \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}$; ϵ_1 是阱中的介电常数; ϵ_2 是垒中的介电常数

$$R_0 = [\rho^2 + (z - z_0)^2]^{1/2} \quad (3a)$$

$$R_n^\pm = [\rho^2 + (z - z_0^\pm)^2]^{1/2} \quad (3b)$$

$$z_n^\pm = \begin{cases} z_0 \pm nL \\ -z_0 \pm nL \end{cases} \quad (3c)$$

其中 z_0 是阱中杂质所在位置, 有效质量方程的包络函数写为 $F(\vec{r})$, 其有效质量方程为:

$$H F(\vec{r}) = E F(\vec{r}) \quad (4)$$

其中包络函数 $F(\vec{r})$ 在界面上 ($z = \pm L/2$) 应满足如下匹配条件:

$$F^{(1)}(\vec{r}) \Big|_{z=L/2} = F^{(2)}(\vec{r}) \Big|_{z=L/2} \quad (5a)$$

$$\frac{1}{m_1^*} \frac{\partial F^{(1)}(\vec{r})}{\partial z} \Big|_{z=L/2} = \frac{1}{m_2^*} \frac{\partial F^{(2)}(\vec{r})}{\partial z} \Big|_{z=L/2} \quad (5b)$$

由于有效哈密顿量 H 中有不同对称性的两个势 (球对称势和方势阱势), 有效质量方程 (4) 没有解析解, 因此我们采用一种变分方法来求解施主杂质的波函数和本征值. 以不含杂质势的有效质量方程的本征解:

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) f_{n\vec{k}}(z) \quad (6)$$

为基将包络函数 $F(\vec{r})$ 展开:

$$F(\vec{r}) = \sum_{n, \vec{k}} A_{n\vec{k}} \Psi_{n\vec{k}} = \sum_n g_n(\vec{r}) f_{n, \vec{k}=0}(z) \quad (7)$$

其中 $f_{n0}(z)$ 是不含杂质势的哈密顿量的本征函数; n 包含所有的分立态. 对于确定的 \vec{k} (我们选为 $\vec{k} = 0$), 考虑到轴对称性的要求 $g(\vec{r})$ 可写成 $e^{im\theta} \rho^m |h_n(\rho)$, 其中 m 是轨道角动量 z 分量. 对于 $L \rightarrow 0$ 时的情形我们所考虑的问题趋于二维类氢问题, h_n 可以写为 $\exp(-\alpha\rho)$. $F(\vec{r})$ 最终可展开为如下形式:

$$F(\vec{r}) = \sum_{n, j} C_{nj} e^{im\theta} \rho^m |e^{-\alpha_j \rho} f_{n0}(z) \quad (8)$$

其中 α_j 为一先验的系数; C_{nj} 为变分常数, 可用变分方法由下式解出

$$\langle n, j | H | n, j \rangle C_{nj} = E \langle n, j | n, j \rangle C_{nj} \quad (9)$$

这样就将求解薛定谔方程的问题化为求解 (9) 式的本征值问题. 为计算基态结合能, 在 (8) 式 中选取 $m = 0$, f_{n0} 为偶函数形式

$$f_{\text{even}} = \begin{cases} D_n e^{-k_n z} & z > L/2 \\ \cos(k_n z) & |z| < L/2 \\ D_n e^{k_n z} & z < -L/2 \end{cases} \quad (10)$$

其中 $k_n = [2m_1^* E_0]^{1/2} / \hbar$, $k_n = [2m_2^* (V_0 - E_0)]^{1/2} / \hbar$, E_0 是 H_0 的本征值, 由匹配条件(5) 式得:

$$D_n = e^{k_n L/2} \cos(k_n L/2) \quad (11a)$$

$$k_n = \frac{m_2^*}{m_1^*} k_n \tan(k_n L/2) \quad (11b)$$

(9) 式中, 除杂质势的矩阵元不能解析计算外, 其余部分均可解析计算, 对于杂质势部分可采用如下变换:

$$\frac{1}{[\rho^2 + (z - z_0)^2]^{1/2}} = \int_0^\infty e^{-\rho s} J_0(\rho s) ds \quad (12)$$

关于零阶贝塞尔函数在(9)式中的积分可以由下式给出^[5]:

$$\int_0^\infty \rho^{m+1} e^{-\rho s} J_\nu(\rho s) d\rho = (-1)^{m+1} s^{-\nu} \frac{d^{m+1}}{d\alpha^{m+1}} \left[\frac{(\sqrt{\alpha^2 + s^2} - \alpha)^\nu}{\sqrt{\alpha^2 + s^2}} \right] \quad (13)$$

应用(12)、(13)式可以将对杂质势矩阵元的积分化为一个对 s 求积的数值积分, 如此即可以求出(9)式的本征值, 得到结合能如下式:

$$E_b = E_0 - E_{\text{min}} \quad (14)$$

其中 E_0 是不含杂质势的有效质量方程本征值, 可由(11)式求出; E_{min} 是(9)式解的最小值

3 结果与讨论

我们在计算过程中采用了原子单位制($e^2 = 1, m_e = 1, \hbar = 1$), 下面是计算过程中的一些参数 考虑应变对带偏移的影响得到 $V_0 = 543.8222 \text{ m eV}$ (关于应变对带偏移的影响在附录中给出). 在阱中有效质量为 $m_1^* = 0.096 m_e$ ^[6], 在垒中有效质量为 $m_2^* = 0.18 m_e$ ^[6], 在阱中的介电常数为 $\epsilon_1 = 9.4$ ^[7], 在垒中的介电常数为 $\epsilon_2 = 9.67$ ^[7], 未考虑应变影响得到 $V_0 = 690 \text{ m eV}$ (见附录), 阱层有效里德堡 $Ry^* = 29.5912 \text{ m eV}$, 阱层中有效玻尔半径 $a^* = 5.17899 \text{ nm}$. 关于(8)式中 α 的确定, 选取中间项为 $\alpha = 1.5/a^*$, 比率为 1.6 的几何级数, 本文中 α 共取 10 项

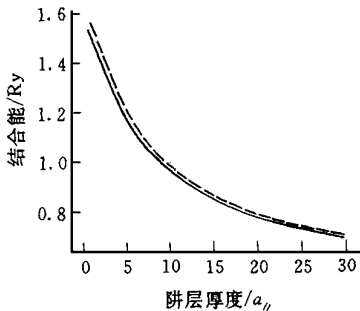


图 1 杂质位置 $z_0 = 0$ 时, 结合能随阱宽的变化
实线为 $E_b(\epsilon_1 \neq \epsilon_2)$, 虚线为 $E_b(\epsilon_1 = \epsilon_2)$.

在图 1 中可以看到, 杂质位置 $z_0 = 0$ 时, 结合能随着阱层的增大而减小, 这一规律与前人结果相符合(文献[2]). 但是, 考虑介电失配所得结合能 E_b (实线) 小于未考虑介电失配时的结合能 E_b (虚线), 这个结论与前人结果相反. 据我们所知, 第一个考虑介电失配影响的 Mailhot, Chang 和 McGill^[1], 及详细讨论了介电失配影响的 Fraizzoli 等^[2] 均得出了介电失配使结合能增大的结论. 造成这种不同的原因在于, 以前所讨论的为 GaAs/GaAlAs 等 III-V 族量子阱系统, 这类异质结其阱中介电常数 ϵ_1 大于垒中介电常数 ϵ_2 , 在以镜像电荷法处理介电失配时, 其镜像电荷加强了杂质势. 在我们

所讨论的 CdTe/ZnTe 结构中, 阱中介电常数 ϵ_1 小于垒中介电常数 ϵ_2 , 镜像电荷减小了杂质势的作用, 这导致了结合能的减小 这一点可由下面的推导得到

未考虑介电失配作用的杂质势可以写成如下形式:

$$V_{\text{imp}} = \begin{cases} -\frac{e^2}{\epsilon_1} \int_0^{\rho_s} ds J_0(\rho_s) e^{z_s} e^{-z_0^s} & z < -L/2 \\ -\frac{e^2}{\epsilon_1} \int_0^{\rho_s} ds J_0(\rho_s) e^{z_s} e^{-z_0^s} & -L/2 < z < z_0 \\ -\frac{e^2}{\epsilon_1} \int_0^{\rho_s} ds J_0(\rho_s) e^{-z_s} e^{z_0^s} & z_0 < z < L/2 \\ -\frac{e^2}{\epsilon_1} \int_0^{\rho_s} ds J_0(\rho_s) e^{-z_s} e^{z_0^s} & z > L/2 \end{cases} \quad (15)$$

以 ΔV_{imp} 表示未考虑介电失配的杂质势与考虑介电失配的杂质势的差, 并考虑杂质在阱中心的简单情况, ΔV_{imp} 如下式:

$$\Delta V_{\text{imp}} = \begin{cases} -\frac{\beta e^2}{\epsilon_1} \int_0^{\rho_s} J_0(\rho_s) ds \left[\frac{2e^{-L_s} e^{z_s}}{1 - \beta e^{-L_s}} \right] & z < -L/2 \\ -\frac{\beta e^2}{\epsilon_1} \int_0^{\rho_s} J_0(\rho_s) ds \left[\frac{e^{-L_s} [e^{z_s} + e^{-z_s}]}{1 - \beta e^{-L_s}} \right] & -L/2 < z < z_0 \\ -\frac{\beta e^2}{\epsilon_1} \int_0^{\rho_s} J_0(\rho_s) ds \left[\frac{e^{-L_s} [e^{z_s} + e^{-z_s}]}{1 - \beta e^{-L_s}} \right] & z_0 < z < L/2 \\ -\frac{\beta e^2}{\epsilon_1} \int_0^{\rho_s} J_0(\rho_s) ds \left[\frac{2e^{-L_s} e^{z_s}}{1 - \beta e^{-L_s}} \right] & z_0 > L/2 \end{cases} \quad (16)$$

在(16)式中可以看到 β 是决定 ΔV_{imp} 符号的因子, 因 β 的符号由 $(\epsilon_1 - \epsilon_2)$ 的符号来决定, 所以对于阱中介电常数大于垒中介电常数的情况, 镜像电荷加强了杂质势, 而对于阱中介电常数小于垒中介电常数的情况, 镜像电荷减弱了杂质势. 在(16)式中我们还可看到每段积分的分子中都含有 e^{-L_s} 项, 随阱宽 L 的增大 e^{-L_s} 减小, 并导致 ΔV_{imp} 减小. 这使得随阱宽的增大介电失配的影响逐步减小, 这一点与图 1 中随阱宽的增大两曲线趋于一致的结果相符合.

图 2 中给出了结合能随阱中杂质位置的变化, 这里选取阱层厚度为 $13a$ (约为 9.2nm , a 为应变后阱层中平行 z 轴的晶格常数). 在考虑了介电失配、应变及有效质量不同的情况下, 所得到的结合能随杂质向边界移动而减小的结论与前人结果相同. 在比较考虑介电失配作用的结合能 E_b (实线) 与未考虑介电失配作用的结合能 E_b (虚线) 时, 仍得到 $E_b > E_b$ 的

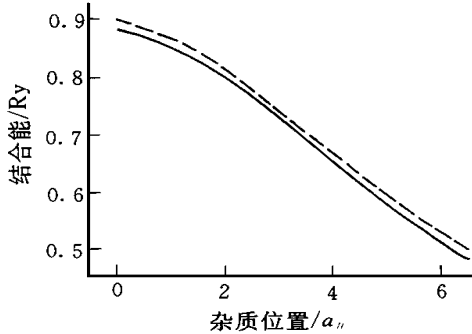


图 2 阱宽为 $13a$ 时, 结合能随杂质位置的变化 实线为 $E_b(\epsilon_1 < \epsilon_2)$, 虚线为 $E_b(\epsilon_1 = \epsilon_2)$.

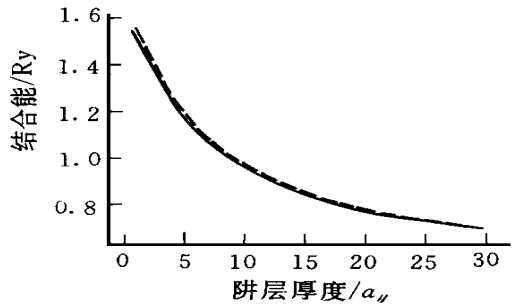


图 3 考虑应变影响的结合能 E_b^s (实线), 与未考虑应变影响的结合能 E_b^b (虚线) 的对比

结论,其原因与上文所述相同

在图 3 中我们将未考虑应变影响所得到的结合能 E_b^0 (实线) 与考虑应变的结合能 E_b^s (虚线) 作了比较,除在窄阱时两条曲线差别略大外,随阱宽的增大两条曲线趋于一致, E_b^s 对 E_b^0 的修正只在窄阱情况下是不可以忽略的

4 结 论

在本文中我们用一种变分方法计算了 CdTe/ZnTe 应变单量子阱中的浅施主杂质结合能,得出了介电失配既可使结合能增加也可使结合能减小的结论,对于我们所讨论的阱中介电常数小于垒中介电常数的系统,介电失配的影响使结合能减小,而对于阱中介电常数大于垒中介电常数的系统,介电失配的影响使结合能增大.随阱宽增大镜像电荷的作用减弱导致介电失配引入的修正随阱宽增大而减小.因此由介电失配引起的修正是不可忽略的,尤其是对窄阱的情况 ($L = 7.0\text{nm}$).

在阱宽一定的情况下,杂质的基态结合能随着杂质位置向界面的移动而减小.应变使结合能略有减小,除在窄阱情况下 ($L = 4.0\text{nm}$) 其影响可以忽略

参 考 文 献

- [1] C. Mailhot, Yia-Chung Chang and T. C. McGill, Phys. Rev., 1982, **B26**: 4449~ 4457.
- [2] S. Fraizzoli[†] and F. Bassani, Phys. Rev., 1990, **B41**: 5096~ 5103
- [3] J. H. Xing and H. L. Huang, ACTA METALLURGICA SINICA (ENGLISH LETTERS), 1997, **10**(2): 88~ 92
- [4] H. Fujiyasu, H. Taknhashi, The 17th. Inter. Conf. on the Physics of Semiconductors, 1984
- [5] Table of Integrals, Series, and Products, Corrected and Enlarged Edition, I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, 712
- [6] P. Lawaetz, Phys. Rev., 1971, **B4**: 3460~ 3467.
- [7] Landolt-Bornstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Vol 22a, Edited by O. Madelung (Springer, Berlin, 1987).
- [8] Chris G. Van de Walle^{*}, Phys. Rev., 1989, **B39**: 1871~ 1882

Binding Energy of Shallow Donor Impurity in CdTe/ZnTe Strained Quantum Well

Liu Kuiyong, Xing Jinhai

(Department of Physics, Liaoning University, Shenyang 110036)

Received 21 September 1997, revised manuscript received 27 January 1998

Abstract The effect of dielectric mismatch and donor position on binding energy in CdTe/ZnTe strained quantum well is investigated. We get the conclusion that the effect of dielectric mismatch causes the decrease of binding energy. We have discussed the difference between our conclusions and previous conclusions.

PACC: 7155, 6865, 7340L

附 录

A 关于应变情况下 V_0 的确定^[8]

晶格发生的双轴应变可分解为流体静压应变和沿生长方向的单轴应变, 其中的流体静压应变增大了带隙宽度, 而单轴应变使带变轻, 重空穴发生劈裂 对于我们所考虑的导带偏移可由如下方法确定:

$$a = \frac{a_1 G_1 h_1 + a_2 G_2 h_2}{G_1 h_1 + G_2 h_2}$$

$$\epsilon_i = \frac{a}{a_i} - 1$$

$$a_i = a_i \left[1 - D_i \left(\frac{a}{a_i} - 1 \right) \right]$$

$$\epsilon_i = \frac{a_i}{a_i} - 1$$
(A 1)

其中 i 用来标志不同的材料; a_i 是体材料晶格常数; G_i 是剪切模量; D_i 是由体材料弹性系数 c_{11}, c_{12}, c_{44} 确定的, ϵ_i 是应变张量, 对于我们所考虑的 $[001]$ 方向:

$$D^{001} = 2 \frac{c_{12}}{c_{11}}$$
(A 2)

在 CdTe/ZnTe 量子阱中, 可以认为 $h_1/h_2 \rightarrow 0$ 即只在阱中有应变 导带偏移为:

$$E_c^{\text{CdTe}} = E_c^{\text{CdTe},0} + a_c^{\text{CdTe}} \frac{\Delta\Omega}{\Omega}$$
(A 3)

$$\Delta E_c = E_c^{\text{ZnTe},0} - E_c^{\text{CdTe}}$$
(A 4)

其中 $(\Delta\Omega)/\Omega = (\epsilon_x + \epsilon_y + \epsilon_z)$, 流体静压形变势 a_c^{CdTe} , 可由文献[8]给出 由此得到:

$$V_0 = \Delta E_c$$
(A 5)

B 不考虑应变影响的 V_0

对于不考虑应变的情况, 可以认为在阱层和垒层中晶格常数没有变化, 由(17)式可得应变张量为零:

$$\frac{\Delta\Omega}{\Omega} = \epsilon_x + \epsilon_y + \epsilon_z = 0$$
(B 1)

因此带偏移可以直接由下式给出:

$$\Delta E_c = E_c^{\text{ZnTe},0} - E_c^{\text{CdTe},0}$$
(B 2)

其中 $E_c^{\text{ZnTe},0} = -5.17\text{eV}$, $E_c^{\text{CdTe},0} = -4.48\text{eV}$, 可以由文献[8]给出

$$V_0 = \Delta E_c$$
(B 3)