# 纤锌矿结构 $ZnO/Mg_xZn_{1-x}O$ 量子阱中带间光吸 收的尺寸效应和三元混晶效应<sup>\*</sup>

## 谷卓 班士良

(内蒙古大学物理科学与技术学院,呼和浩特 010021)

(2014年1月2日收到; 2014年2月10日收到修改稿)

对于纤锌矿结构 ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O 有限深单量子阱结构,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,利用有限差分法和自洽法数值求解 Schrödinger 方程和 Poisson 方程,获得电子 (空穴)的本征 能级和本征波函数.进而,采用费米黄金法则讨论带间光吸收的尺寸效应和三元混晶效应.结果表明:三元混 晶材料 Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O 中 Mg 组分的增加会增强垒层和阱层的内建电场强度,使得电子 (空穴)平均位置靠近左 (右) 垒,导致带间跃迁吸收峰呈指数减小且发生蓝移; ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O 量子阱带间跃迁吸收峰随阱宽增大 而减小,吸收峰发生红移.所得结果可为改善异质结构材料和器件的光电性能提供理论指导,以期获得实际 应用所需的光学吸收频谱和波长.

**关键词**: ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O量子阱, 带间光吸收, 三元混晶效应, 尺寸效应 **PACS:** 73.20.At, 73.21.Fg, 78.20.Ci **DOI:** 10.7498/aps.63.107301

### 1引言

近年来, 纤锌矿结构 ZnO 是半导体领域研究的热点材料之一, 其禁带宽度为3.28 eV, 是一种宽禁带半导体材料, 在太阳能电池、蓝光及紫外光发光二极管和紫外光探测器等光电器件方面有广阔的应用前景<sup>[1-5]</sup>.对 ZnO 进行 Mg 掺杂制得 Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O 三元合金, 其禁带宽度具有可调节性<sup>[6]</sup>.通过改变三元混晶材料的组分可实现在大范围内调节其光电性质, 并呈现出随组分变化的非线性关系<sup>[7,8]</sup>.文献 [9, 10] 对 Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O 薄膜的紫外-可见光谱的分析发现, 随着 Mg 组分的增加, 吸收系数减小, 本征吸收边向短波方向移动.在 2001年, Look<sup>[11]</sup>指出 Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O 是与ZnO 构建有效异质结的理想三元合金体系, 这使得ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O 异质结构成为紫外波段光电器件研究的热点方向之一.近年来, Liu 等<sup>[12]</sup>利用分

子束外延法制备了ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O异质结,并用 紫外-可见-近红外分光光度计检测其吸收光谱,研 究发现在340—375 nm紫外光区域有本征吸收边.

量子阱结构的量子限制效应会对材料的光 电性质产生重要影响<sup>[13,14]</sup>. Fan等<sup>[15]</sup>运用经验赝 势法讨论ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O量子阱中能带随Mg组 分和量子阱宽度的变化关系,但仅给出Mg组分为 0.1, 0.2, 0.3三种情况下的结果,缺乏对三元混晶 效应的全面讨论. Zhu等<sup>[16]</sup>通过调节外加电场抑 制内建电场从而解决了电子波函数溢出阱结构的 问题,探讨ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O量子阱中电子在子带 间跃迁的光吸收,并给出子带跃迁波长随混晶组 分和阱宽的变化关系,以便获得实际器件需要的 太赫兹范围内的光学频谱和波长.在上述理论工 作中,对于三元混晶材料Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O禁带宽度的 计算均采用二元化合物的线性拟合,并未计入弯 曲因子<sup>[17]</sup>对实际异质结势的影响. 对纤锌矿结构 ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O量子阱带间光吸收的尺寸效应,

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金 (批准号: 61274098) 资助的课题.

<sup>†</sup>通讯作者. E-mail: slban@imu.edu.cn

<sup>© 2014</sup> 中国物理学会 Chinese Physical Society

特别是对三元混晶效应的理论研究仍有待深入.

本文以纤锌矿结构ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O有限深 单量子阱结构为研究对象,在有效质量近似下,考 虑二维电子(空穴)气分布导致的导带弯曲以及自 发极化和压电极化诱生的内建电场,利用有限差 分法和自洽计算法数值求解Schrödinger 方程和 Poisson方程,获得电子(空穴)的本征态和本征能 级. 然后,采用费米黄金法则细致讨论带间光吸收 的尺寸效应和三元混晶效应.

2 理论模型

本文所研究的纤锌矿结构 ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O 有限深单量子阱的阱材料为ZnO, 垒材料为 Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O. 如图1所示,取量子阱生长方向沿 纤锌矿结构的c轴,且与界面垂直,记为z方向,设 x-y平面平行于界面.





采用有效质量近似,考虑二维电子(空穴) 气的多电子(空穴)效应影响,单电子(空穴)的 Schrödinger 方程为

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{m_{z,i}^*(z)} \right] \frac{\partial}{\partial z} + V_i(z) \\ + V_{\mathrm{H},i}(z) + q_i F(z) z \end{cases} \varphi_i(z) = E_i \varphi_i(z), \qquad (1) \end{cases}$$

其中, *i*代表电子e或空穴h;  $m_{z,i}^*(z)$ 为电子(空 穴)在z方向的有效质量;  $V_i(z)$ 为电子(空穴)的 势垒高度, 即导带(价带)带阶;  $q_i$ 为电子(空穴) 的电荷; F(z)为内建电场;  $\varphi_i(z)$ 和 $E_i$ 分别为电 子(空穴)的本征态和本征能级;  $V_{\mathrm{H},i}(z)$ 为电子 (空穴)气引起的Hartree-Fock静电势, 满足Poisson 方程<sup>[18]</sup>

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \left[ \varepsilon_0(z) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} V_{\mathrm{H},i}(z) \right]$$
$$= -e^2 [N_{\mathrm{D}}^+(z) - N(z)]. \tag{2}$$

这里  $N_{\rm D}^+(z)$  为离化杂质浓度,  $\varepsilon_0(z)$  为真空中的介 电常数, N(z) 为与电子 (空穴)分布波函数有关的 二维电子(空穴)气浓度,且有

$$N_{\rm D}^{+}(z) = N_{\rm D} \\ \times \left(\frac{1}{1+2\exp[(E_{\rm F}-E_{\rm D})/(k_{\rm B}T)]}\right), (3) \\ N(z) = \sum_{i} \frac{m_{i}^{*}(z)k_{\rm B}T}{\pi\hbar^{2}} |\varphi_{i}(z)|^{2} \\ \times \ln\left[1+\exp\left(\frac{E_{\rm F}-E_{i}}{k_{\rm B}T}\right)\right], (4)$$

其中,  $N_{\rm D}$  为掺杂浓度;  $k_{\rm B}$  为玻尔兹曼常数;  $E_{\rm D}$  为施主能级能量,设定为导带底以下 0.03 eV 处;  $E_{\rm F}$  为费米能级,可由如下电中性条件获得:

$$\int_{0}^{L} [N_{\rm D}^{+}(z) - N(z)] dz = 0.$$
 (5)

(1) 式中势垒高度

$$V_{i}(z) = \begin{cases} 0 & (L_{\rm b} \leq z \leq L_{\rm w} + L_{\rm b}), \\ V_{0,i}(z) & (0 < z < L_{\rm b}, L_{\rm w} + L_{\rm b} < z < L), \end{cases}$$
(6)

其中, L<sub>w</sub>, L<sub>b</sub>和L分别为阱宽、全厚和材料总宽度. 若采用70:30原则<sup>[19]</sup>,则

$$V_{0,e}(z) = (E_{g,Mg_xZn_{1-x}O} - E_{g,ZnO}) \times 70\%,$$
  
$$V_{0,h}(z) = (E_{g,Mg_xZn_{1-x}O} - E_{g,ZnO}) \times 30\%, \quad (7)$$

其中,  $E_{g,Mg_xZn_{1-x}O}$ 和 $E_{g,ZnO}$ 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 $Mg_xZn_{1-x}O$ 的禁带宽度采用如下含有弯曲因子b的表达式<sup>[17]</sup>:

$$E_{g,Mg_xZn_{1-x}O} = xE_{g,MgO} + (1-x)E_{g,ZnO} - bx(1-x).$$
(8)

这里ZnO, MgO的禁带宽度分别取为<sup>[20,21]</sup>  $E_{g,ZnO} = 3.28 \text{ eV}, E_{g,MgO} = 7.8 \text{ eV}, 弯曲因子b$ 为3.47 eV.

(1)式中,内建电场需考虑自发极化和压电极 化的共同作用,且其在阱和垒中分别为

$$F_{i}(z) = \begin{cases} F_{w} & (L_{b} \leq z \leq L_{w}), \\ F_{b} & (0 < z < L_{b}, L_{w} + L_{b} < z < L), \end{cases}$$
(9)

其中,

$$F_{\rm w} = \frac{2L_{\rm b}P}{2L_{\rm b}\varepsilon_{\rm w} + L_{\rm w}\varepsilon_{\rm b}},\tag{10}$$

107301-2

$$F_{\rm b} = -\frac{L_{\rm w}}{2L_{\rm b}}F_{\rm w}.$$
(11)

这里  $F_{w}$ 和  $F_{b}$ 分别为阱和垒中的内建电场;  $\varepsilon_{w}$ 和  $\varepsilon_{b}$ 分别为阱材料和垒材料的介电常数; P为压电极 化和自发极化产生的总极化强度,  $P = P_{PE} + P_{SP}$ , 其中  $P_{PE}$ 和  $P_{SP}$ 分别为由压电极化和自发极化 产生的极化强度.由于  $ZnO/Mg_{x}Zn_{1-x}O$ 量子阱 中压电极化和自发极化的取向相反,且与Mg 组分的大小有关<sup>[22]</sup>,故取  $P_{PE} = -0.034x$  cm<sup>-2</sup>,  $P_{SP} = 0.066x$  cm<sup>-2</sup>.

根据实际器件构造,可假设在材料的最外侧是无穷高且无限厚的真空势垒,则电子在材料最外层的界面处没有隧穿,边界条件可取为 $\varphi_i(0) = \varphi_i(L) = 0$ .若以导带底为能量零点,根据文献 [23],对Schrödinger方程和Poisson方程进行差分及自洽计算,可获得电子(空穴)的本征能级和本征波函数.

根据费米黄金法则,电子带间跃迁的光学吸收 系数 α 可表示为<sup>[24]</sup>

$$\alpha(\hbar\omega) = \sum \frac{\omega}{L} \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_0(z)\varepsilon_{\rm w}}} |M_{\rm eh}|^2 \times \frac{(N_{\rm e}(z) - N_{\rm h}(z))\hbar/\tau}{(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau)^2}.$$
 (12)

这里,  $\omega$ 为频率,  $\mu$ 为真空磁导率;  $\tau$ 为弛豫时间, 与电子-声子相互作用相关,在本文的计算中, 假 设其为常数, 即<sup>[25]</sup>  $\tau = 20$  fs;  $\Delta E$ 为带间跃迁能,  $\Delta E = E_{\rm e} - E_{\rm h}$ ;  $N_{\rm e}(z)$ 和 $N_{\rm h}(z)$ 分别为电子和空 穴的浓度;  $M_{\rm eh}$ 为偶极矩阵元,

$$M_{\rm eh} = \int_0^L \varphi_{\rm e}^*(z) e z \varphi_{\rm h}(z) dz.$$
 (13)

3 数值计算结果及讨论

#### 3.1 $ZnO/Mg_xZn_{1-x}O$ 量子阱结构和电 子(空穴)基态波函数的三元混晶效应

我们对 Mg 组分 x > 0.1 的 ZnO/Mg $_x$ Zn<sub>1-x</sub>O 量子阱进行了数值计算,为了节省篇幅,图2 仅 给出若干x值的结果. 当阱宽  $L_w = 4$  nm, 垒厚  $L_b = 5$  nm, x 分别为0.15, 0.4, 0.7 时,导带和电子 基态波函数如图2(a) 所示,价带和空穴基态波函 数如图2(b) 所示. 当不考虑内建电场时,电子(空 穴) 的基态波函数是关于阱中心对称的偶函数,在 阱中心达到极大值,且随着电子(空穴)位置远离阱 中心而逐渐衰减,在垒中一定深度处为零. 而当考 虑内建电场时,随着 x 的增加,材料中自发极化和 压电极化受到调制,势阱逐渐发生倾斜,内建电场 促使电子(空穴)向阱的左(右)侧(即能量更低(更 高))的方向移动,与无内建电场相比,电子(空穴) 对左(右)垒的隧穿更强.同时,随着 x 增大,还会 导致量子阱的高度增加,从而使量子限制效应更 加明显,电子(空穴)基态波函数的峰值也将增高, 即电子(空穴)在量子阱内的概率更大.表1列出了 Mg组分 x 不同时,阱中内建电场 Fw 和垒中内建电 场 Fb 及电子的平均位置 ze,和空穴的平均位置 zh.



图 2 不同 Mg 组分的 ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O 量子阱的 导带势和价带势及电子(空穴)基态波函数 (a) 导带 势  $V_{c}$  及电子基态波函数  $\varphi_{e}$ ; (b) 价带势  $V_{v}$  及空穴基 态波函数  $\varphi_{h}$ 

从表1可以看出,内建电场对电子平均位置的 影响较其对空穴平均位置的影响更为明显.这主 要是由于导带的量子限制作用更为明显.此外,从 图2可以看出,即使掺杂浓度高达1.5×10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup>, Hartree-Fock静电势对导带(价带)的弯曲作用远 小于内建电场对导带(价带)的弯曲作用,使得导带 (价带)近似线性,在界面处呈三角形势阱.

### 3.2 ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O量子阱带间跃迁 吸收系数的三元混晶效应

光学吸收系数主要依赖于偶极矩阵元的大 小和各能级相对于费米能级的位置. 固定材 料厚度为 $L_b = 5 \text{ nm}, L_w = 4 \text{ nm}.$  图3给出了 ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O量子阱带间跃迁吸收系数峰值  $\alpha_{\text{max}}$ 、偶极矩阵元 $M_{\text{eh}}$ 和跃迁能 $\Delta E$ 随x的变化. 从图3可以看出,随着x的增加,带间跃迁吸收系 数峰值呈指数减小,这与偶极矩阵元随x的变化趋 势一致. 这是由于随着x的增加,逐渐增强的内建 电场和逐渐增高的势垒将电子 (空穴)限制在左 (右)侧界面处的三角阱内,从而使得电子与空穴分 布的交叠变小的缘故.此外,从图3(b)可以看出, 由于量子限制效应作用,电子基态能级与空穴基态 能级的间距随x的增加而增大,导致带间跃迁能随 x呈非线性增加,吸收峰发生蓝移.

表1 Mg组分 x 不同时, 阱和垒中的内建电场及电子 (空穴)的平均位置

x	$F_{\rm w}/{\rm MV}{\cdot}{\rm cm}^{-1}$	$F_{\rm b}/{\rm MV}{\cdot}{\rm cm}^{-1}$	${\bar z}_{\mathrm{e}}/\mathrm{nm}$	$ar{z}_{ m h}/ m nm$
0.15	0.44	-0.18	63.27	84.63
0.40	1.16	-0.47	62.47	84.64
0.70	2.02	-0.81	61.61	84.84



图 3 ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O 量子阱的带间跃迁吸收系数 峰值  $\alpha_{max}$ 、偶极矩阵元  $M_{eh}$  和跃迁能  $\Delta E$  随 Mg 组分 x 的变化 (a)  $\alpha_{max}$  和  $M_{eh}$  随 x 的变化; (b)  $\Delta E$  随 x 的变化

文献[26, 27]分别在室温下检测了厚度为

200 nm 和 200—500 nm 的 Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O 薄 膜 的 光 学性质,结果表明,随着 Mg 组分的增加,跃迁能 向高能方向移动,吸收边发生蓝移.如上所述,带 间光吸收对应于半导体吸收光谱本征吸收区的吸 收边,它的能量位置与材料带隙宽度相对应.由此 可以看出,三元混晶材料中 Mg 组分对单层薄膜材 料和量子阱材料光电性质的影响在变化趋势上是 一致的.

#### 3.3 ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O量子阱带间跃迁 吸收系数的尺寸效应

取材料总宽度L = 14 nm, Mg组分x = 0.3. 图 4 给出了当阱宽不同时, ZnO/Mg $_x$ Zn<sub>1-x</sub>O 量子 阱带间跃迁吸收系数  $\alpha$  随入射光波长  $\lambda$  的变化.从 图 4 可以看出, 吸收峰主要集中在紫外光区域.随 着阱宽的增加, 阱宽与垒厚的比例增大, 势垒高度 不变, 垒材料中内建电场变大, 但阱材料中内建电 场逐渐减小, 由此导致电子 (空穴) 的平均位置更靠 近左 (右) 侧界面, 电子波函数与空穴波函数的交叠 积分即偶极矩阵元减小.因此, 带间跃迁吸收峰随 阱宽的增大而减小, 吸收峰红移.



图 4 不同阱宽的  $ZnO/Mg_x Zn_{1-x}O$  量子阱带间跃迁吸 收系数  $\alpha$  随入射光波长  $\lambda$  的变化

本文计算的带间光吸收对应于半导体吸收光 谱本征吸收区的吸收边,它的能量位置与材料带隙 宽度相对应.文献[12]给出了ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O单 异质结的吸收光谱和透射光谱,结果显示本征吸收 边位于340—375 nm之间.而我们理论计算的结果 显示吸收峰值出现在280—330 nm之间.这主要是 由于本文采用的模型是量子阱结构,在量子限制效 应作用下,电子能级和空穴能级分立,且内建电场 的存在增大了电子能级与空穴能级的间距,导致量 子阱的带间吸收峰与单异质结的吸收峰相比出现 蓝移.此外,随着阱宽的增加,带间跃迁能随之非 线性减小,当阱宽为无穷大时,此体系趋近于ZnO 材料本征吸收边<sup>[28]</sup>,即吸收峰向长波方向移动.

#### 4 结 论

本文对ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O量子阱带间跃迁吸 收系数的尺寸效应和三元混晶效应进行了研究.结 果表明:随着Mg组分的增加, 垒层和阱层的内建 电场逐渐增强,电子(空穴)基态波函数的峰值增 大;相对于内建电场而言,Hartree-Fock静电势对 导带(价带)的弯曲作用较小;随着Mg组分的增加, 带间跃迁吸收系数峰值和偶极矩阵元均呈指数减 小,从而导致带间跃迁能呈非线性增加,吸收峰发 生蓝移;在尺寸效应方面,随着量子阱阱宽的增大, 带间跃迁吸收峰减小,吸收峰发生红移.调节异质 结构中混晶组分以及优化结构尺寸对于提高电子 器件的光电性能有着重要意义.本文的计算结果可 为改善异质结构的光电性能提供理论指导.

#### 参考文献

- Kang H S, Kim G H, Lim S H, Chang H W, Kim J H, Lee S Y 2008 Thin Solid Films 516 3147
- [2] Shinde S S, Bhosale C H, Rajpure K Y 2012 Solid State Electron. 68 22
- [3] Janthong B, Moriya Y, Hongsingthong A, Sichanugrist P, Konagai M 2013 Sol. Energy Mater. Sol. Cells 119 209
- [4] Sun H, Zhang Q F, Wu J L 2007 Acta Phys. Sin. 56 3479 (in Chinese) [孙晖, 张琦锋, 吴锦雷 2007 物理学报 56 3479]
- [5] Zhong M, Sheng D, Li C L, Xu S Q, Wei X 2014 Sol. Energy Mater. Sol. Cells 121 22
- [6] Sonawane B K, Bhole M P, Patil D S 2009 Mater. Sci. Semicond. Process. 12 212
- [7] Qu Y, Ban S L 2010 Acta Phys. Sin. 59 4863 (in Chinese) [屈媛, 班士良 2010 物理学报 59 4863]

- [8] Yang F J, Ban S L 2012 Acta Phys. Sin. 61 087201 (in Chinese) [杨福军, 班士良 2012 物理学报 61 087201]
- [9] Ning G H, Zhao X P, Li J 2004 Opt. Mater. 27 1
- [10] Ding R, Xu C X, Gu B X, Shi Z L, Wang H T, Ba L, Xiao Z D 2010 J. Mater. Sci. Technol. 26 601
- [11] Look D C 2001 Mater. Sci. Eng. B 80 383
- [12] Liu W W, Yao B, Li B H, Li Y F, Zheng J, Zhang Z Z, Shan C X, Zhang J Y, Shen D Z, Fan X W 2010 Solid State Sci. 12 1567
- [13] Khan M A, Skogman R A, van Hove J M, Krishnankutty S, Kolbas R M 1990 Appl. Phys. Lett. 56 1257
- [14] 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
- [15] Fan W J, Abiyasa A P, Tan S T, Yu S F, Sun X W, Xia J B, Yeo Y C, Li M F, Chong T C 2006 J. Cryst. Growth 7 28
- [16] Zhu J, Ban S L, Ha S H 2013 Superlattices Microstruct.56 92
- [17] Yamamoto K, Tsuboi T, Ohashi T, Tawara T, Gotoh H, Nakamura A, Temmyo J 2010 J. Cryst. Growth 312 1703
- [18] Li J M, Lü Y W, Li D B, Han X X, Zhu Q S, Liu X L, Wang Z G 2004 J. Vac. Sci. Technol. B 22 2568
- [19] Zippel J, Heitsch S, Stölzel M, Müller A, Wenckstern H, Benndorf G, Lorenz M, Hochmuth H, Grundmann M 2010 J. Lumin. 130 520
- [20] Koffyberg F P 1976 Phys. Rev. B  ${\bf 13}$  4470
- [21] Roessler D M, Walker W C 1967 Phys. Rev. 159 733
- [22] Davis J A, Dao L V, Wen X, Ticknor C, Hannaford P, Coleman V A, Tan H H, Jagadish C, Koike K, Sasa S, Inoue M, Yano M 2008 Nanotechnology 19 055205
- [23] 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]
- [24]~ Chi Y M, Shi J J 2008 J. Lumin.  $\mathbf{128}$  1836
- [25] Doyeol A, Park S H 2006 J. Semicond. Technol. Sci. 6 125
- [26] Zhang X, Li X M, Chen T L, Bian J M, Zhang C Y 2005 Thin Solid Films 492 248
- [27] Su S C, Lu Y M, Zhang Z Z, Li B H, Shen D Z, Yao B, Zhang J Y, Zhao D X, Fan X W 2008 *Appl. Surf. Sci.* 254 4886
- [28] Yuan J R, Li Y Q, Deng X H 2006 J. Nanchang Univ. (Eng. Technol. Ed.) 28 329 (in Chinese) [袁吉仁, 李要 球, 邓新华 2006 南昌大学学报 (工科版) 28 329]

# Size and ternary mixed crystal effects on interband absorption in wurtzite $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ quantum wells<sup>\*</sup>

Gu Zhuo Ban Shi-Liang<sup>†</sup>

(School of Physical Science and Technology, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China)
 (Received 2 January 2014; revised manuscript received 10 February 2014)

#### Abstract

Adopting a numerical method of solving self-consistently the Schrödinger equation and Poisson equation, the eigenstates and eigenenergies of electrons (holes) in a two-dimensional electron-hole gas are obtained for wurtzite asymmetric  $\text{ZnO/Mg}_x \text{Zn}_{1-x}$ O single quantum wells (QWs). In our computation, a realistic heterostructure potential is used, in which the influences from energy band bending, material doping and the built-in electric field induced by spontaneous and piezoelectric polarizations are taken into account. Furthermore, based on the Fermi's golden rule, the optical absorptions of electronic interband transitions in QWs, and their size and ternary mixed crystal effects are discussed. The results indicate that the increase of the Mg component in  $Mg_x Zn_{1-x}$ O enhances the build-in electric field, which forces electrons (holes) to approach to the left (right) barrier. This causes the interband transition absorption peak to decrease exponentially and to be blue-shifted. For different widths of QWs, the calculated results show that absorption peak decreases and transition energy shows a red shift with the increase of well width. The above conclusions are expected to give a theoretical guidance for improving the opto-electronic properties of materials and devices made of heterostructures with suitable optical absorption spectra and wave lengths.

**Keywords:**  $\text{ZnO/Mg}_x \text{Zn}_{1-x}$ O quantum well, interband optical absorption, ternary mixed crystal effect, size effect

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

**DOI:** 10.7498/aps.63.107301

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61274098).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: <a href="mailto:slban@imu.edu.cn">slban@imu.edu.cn</a>