

分类号_____

密级_____

UDC _____

编号_____

中国科学院研究生院 博士学位论文

InAs/GaSb 第二类超晶格系统的红外光电特性研究

李龙龙

指导教师_____徐文 研究员_____

_____中国科学院固体物理研究所_____

申请学位级别_____博士_____学科专业名称_____凝聚态物理_____

论文提交日期_____2011 年 4 月_____论文答辩日期_____2011 年 5 月_____

培养单位_____中国科学院合肥物质科学研究院_____

学位授予单位_____中国科学院研究生院_____

答辩委员会主席_____张裕恒 院士_____

中国科学院研究生院博士学位论文

InAs/GaSb 第二类超晶格系统的红外光电特性研究

作者： 李龙龙

导师： 徐文 研究员

中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所

中国合肥 1129 信箱，邮编： 230031

2011 年 5 月

**Graduate University of Chinese Academy of Sciences
PhD Thesis for Degree of Doctor**

**Theoretical Study of Infrared Optoelectronic Properties
of InAs/GaSb Type-II Superlattices**

Author: Li Long Long

Supervisor: Prof. Xu Wen

**Institute of Solid State Physics,
Hefei Institute of Physical Science,
Chinese Academy of Sciences
P. O. Box 1129, 230031 Hefei, P. R. China**

May 2011

独创性声明

本人呈交的学位论文是在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果,所有数据和图片资料真实可靠。尽我所知,除文中已经注明引用的内容外,本论文的研究成果不包含他人已发表或撰写过的内容。对本论文的研究工作做出贡献的他人和集体,均在文中以明确的方式表明。本学位论文的知识产权归属培养单位。

签名: 日期:

摘要

在本篇论文中,我们利用八带 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 有效质量理论和 Boltzmann 平衡方程方法研究了沿[001]方向生长的 InAs/GaSb 第二类超晶格系统的红外光电特性,主要包括:

(1) 理论研究了 InAs/GaSb 超晶格系统中的本征光学各向异性现象。我们发现当光场沿着超晶格二维平面内的不同方向偏振时,超晶格系统的光跃迁矩阵元和光吸收系数会出现明显的各向异性。定义任意两个不同偏振方向的光吸收系数之间的相对差为光极化率,我们发现当光场沿[110]和 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 方向偏振时,光极化率可以达到 50%以上。另外,我们详细地研究了光极化率与温度、光生载流子浓度、以及超晶格层厚之间的依赖关系。

(2) 理论研究了 InAs/GaSb 超晶格系统的中红外光吸收特性。我们发现当 InAs 层和 GaSb 层的厚度在 20 Å 和 25 Å 左右时,超晶格禁带宽度在 3~5 μm 的中红外波段内。通过拟合一个表征 InSb 型界面势强度的参数,理论计算的禁带宽度与实验结果在一系列超晶格样品上都非常吻合。在这些超晶格系统中,光吸收的截止频率取决于超晶格禁带宽度。改变超晶格层厚,我们可以连续系统地调节光吸收的截止频率。理论计算的光吸收谱与实验测量的光响应谱符合的很好。

(3) 理论研究了微观界面效应在 InAs/GaSb 超晶格中红外探测器设计中的作用。我们发现通过调节超晶格层厚,给定的超晶格禁带宽度可以在很多可能的超晶格系统中实现。在这些超晶格系统中:如果不考虑微观界面效应,为了保持给定的超晶格禁带宽度,减小或增大 InAs 层的厚度要求必须增大或减小 GaSb 层的厚度;如果考虑微观界面效应,保持给定的超晶格禁带宽度需要同时减小或增大 InAs 层和 GaSb 层的厚度。我们还发现当考虑微观界面效应时,较薄的 InAs/GaSb 超晶格系统在中红外探测器设计中具有有一些很明显的优点。

关键词: InAs/GaSb 第二类超晶格, $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 有效质量理论, Boltzmann 平衡方程方法, 微观界面效应, 红外光电特性。

Theoretical Study of Infrared Optoelectronic Properties of InAs/GaSb Type-II Superlattice Systems

L. L. Li (Subject: Condensed Matter Physics)

Directed by Prof. Xu Wen

Abstract

In the present thesis, we have used the eight-band $\vec{K}\cdot\vec{P}$ effective mass theory and Boltzmann balance equation approach to study the infrared optoelectronic properties of InAs/GaSb type-II superlattices (SLs) grown along the [001] direction. The main contents are following:

(1) The intrinsic optical anisotropy of InAs/GaSb SLs is theoretically investigated. We found that when the light field is polarized along different in-plane directions, the optical matrix element and optical absorption coefficient for such SLs exhibit a significant anisotropy. Defining the relative difference between two different optical absorption coefficients as the optical polarization ratio, we found that when the light field is polarized along the [110] and $[1\bar{1}0]$ directions this polarization ratio is larger than 50%. Moreover, the dependence of the optical polarization ratio on temperature, photo-excited carrier density, and SL layer thickness is examined in detail.

(2) The mid-infrared optical absorption by InAs/GaSb SLs is theoretically investigated. We found that when the InAs/GaSb layer thicknesses are around 20/25 Å, the SL band gaps are within the mid-infrared bandwidth of 3~5 μm . With a fitting parameter characterizing the strength of the InSb-like interface potential, we find a good agreement between theory and experiment for the SL band gaps over a series of SL samples. In these SL structures, we found that the cutoff frequency of the optical absorption was determined by the SL band gap. By varying the SL layer thickness, we are able to change the cutoff frequency continuously and systematically. The theoretical optical absorption spectra agree well with the experimental photoresponse spectra.

(3) The role of the microscopic interface effect in the design of short-period InAs/GaSb SLs for mid-infrared detectors is investigated theoretically. It is found that for a given band gap, there are many possible designs for these SLs that can produce the same gap by adjusting the SL layer thicknesses. In these SL designs, without the microscopic interface effect considered, to maintain a given band gap, a decrease or an increase in the InAs layer thickness must be compensated by an increase or a decrease in the GaSb layer thickness. However, with the microscopic interface effect considered, a given band gap can be reached by decreasing or increasing the InAs and GaSb layer thicknesses at the same time. We also found that when considering the microscopic interface effect, the thinner InAs/GaSb SL structures have some apparent advantages in the design of mid-infrared detectors.

Keywords: InAs/GaSb type-II superlattices, $\vec{k} \cdot \vec{p}$ effective mass theory, Boltzmann balance equation approach, Microscopic interface effect, Infrared optoelectronic properties.

目 录

摘 要	I
Abstract	III
目 录	V
第一章 绪论	1
1.1 半导体超晶格系统概述	1
1.2 超晶格电子结构理论概述	4
1.3 论文研究的科学意义	9
1.4 论文的主要研究内容	13
第二章 基本理论方法	15
2.1 III-V 族体材料的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿量	16
2.2 超晶格有效质量方程及其有限差分解法	24
2.3 玻尔兹曼能量平衡方程方法	28
第三章 InAs/GaSb 超晶格系统的本征光学各向异性	30
3.1 研究背景	30
3.2 理论方法	34
3.3 结果与讨论	36
3.4 本章小结	48
第四章 InAs/GaSb 超晶格系统的中红外光吸收特性	49
4.1 研究背景	49
4.2 理论方法	51
4.3 结果与讨论	54
4.4 本章小结	62
第五章 微观界面效应在 InAs/GaSb 超晶格设计中的作用	63
5.1 研究背景	63
5.2 理论方法	64
5.3 结果与讨论	65
5.4 本章小结	70

第六章 全文总结	72
参考文献	75
已发表和待发表文章	89
致 谢	91

第一章 绪论

半个多世纪以来,半导体的研究在当代物理学和高新技术的发展中起着非常重要的作用。这是因为半导体不仅具有丰富的物理内涵,而且用它制成的器件性能可在持续发展的工艺技术下不断提高。传统的晶体管,微电子集成电路以及其他很多的半导体电子元件都是明显的例证。随着半导体工艺的日益成熟,现代材料生长技术如分子束外延和化学气相沉积技术可以生长出像半导体超晶格这样的人工微结构材料。这些材料系统中的载流子沿生长方向上的运动是量子化的,导致一些不同于传统半导体材料的新奇的物理现象。近年来,对半导体超晶格材料的研究已经成为一个新兴的领域,这个领域的开拓和深化将会有力地推动半导体技术的发展。

1.1 半导体超晶格系统概述

半导体超晶格的概念由 Esaki 和 Tsu 在 1970 年提出的[1]。他们设想将两种不同材料组分或不同掺杂类型的半导体薄层进行交替生长,使得在生长方向产生一个附加的周期性势场,可以形成一种周期性结构的人造材料。这个具有周期性结构的人造材料就称为超晶格,而附加在其生长方向上的周期性势场称为超晶格势场。因此,超晶格势场可以通过两种方式获得:(1) 通过各层的组分突变而引起的异质结能带变化;(2) 通过各层的掺杂类型突变而引起的内建电场变化。由于各层的厚度通常在几个到几十个原子层范围内,超晶格的生长周期一般大于半导体材料的晶格常数,但是接近或小于电子的平均自由程或者德布罗意波长。因此,电子在超晶格势场作用下沿生长方向上的运动是量子化的,这将导致一些新奇有趣的物理现象的产生。

半导体超晶格材料是 1970 年利用化学气相沉积技术在 $\text{GaAs}/\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 材料系统中首次实验实现[2]。然而,组分材料之间相对较大的晶格常数失配度($x=0.5$ 时失配度为 1.8%)给早期的这些材料生长实验带来了很大的困难。一年之后, $\text{GaAs}/\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 材料系统开始受到关注[3,4]。在这个材料系统中,组分材料之间的晶格常数失配度很小($x=0.5$ 时失配度为 0.08%)。负微分电阻的实验观测是对该超晶格系统中的量子限制效应的第一次证实[5]。从此以后, $\text{GaAs}/\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$

材料系统被广泛的用于电学输运和光学方面的研究,是目前被研究的最为彻底的超晶格材料系统。

由于 Al 成分的引入, $\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 的禁带宽度比 GaAs 的禁带宽度大。在 $\text{GaAs}/\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 异质结中, GaAs 的导带边能量比 $\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 的要低而它的价带边能量比 $\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 的要高。因此, 在 $\text{GaAs}/\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 超晶格系统中, GaAs 充当了电子和空穴的势阱而 $\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 充当了它们的势垒, 电子和空穴被束缚在同一材料层即 GaAs 层中。另外, 由于组分材料之间的晶格常数失配度很小, 材料系统在生长过程中不会有较大的应变产生。因此, 组分材料的重空穴带和轻空穴带在布里渊区中心是保持简并的。

随着外延生长技术的提高, 特别是分子束外延和金属有机化学气相沉积的出现, 生长和研究大量的超晶格材料系统成为一种可能。一些不同于 $\text{GaAs}/\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 超晶格系统的新的物理现象将会出现在这些材料系统中。关于这些新的物理现象, 其中一个很重要的原因是由于超晶格组分材料的能带排布结构不同。InAs/GaSb 超晶格系统的晶格常数失配度很低(大约为 0.39%), 但是其组分材料的导带边和价带边的相对能量值明显的不同于 $\text{GaAs}/\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 超晶格系统。在 InAs/GaSb 异质结中, InAs 的导带边能量比 GaSb 的价带边能量要低[6,7]。因此, 在 InAs/GaSb 超晶格系统中, 对于电子而言, InAs 充当了它的势阱而 GaSb 充当了它的势垒, 但对于空穴来说, GaSb 充当了它的势阱而 InAs 充当了它的势垒, 即电子被束缚在 InAs 材料层中而空穴被束缚 GaSb 材料层中。另外一类比较有趣的超晶格系统是 HgTe/CdTe 材料系统[8], 它的晶格常数失配度也很低(大约为 0.3%)。在这类超晶格系统中, HgTe 是禁带宽度为零的半导体材料, 它的导带边和价带边重合, 均落在 CdTe 的禁带宽度内。因此, 在 HgTe/CdTe 超晶格系统中, HgTe 充当了电子和空穴的势阱而 CdTe 充当了它们的势垒, 即电子和空穴被束缚在同一材料层中。综合以上三类超晶格系统, 可以看出不同的能带排布结构会对超晶格系统中的电子和空穴产生不同的量子限制效应。根据组分材料的能带排布结构, Esaki 将以上三类材料系统分为 $\text{GaAs}/\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 第一类超晶格系统, InAs/GaSb 第二类超晶格系统和 HgTe/CdTe 第三类超晶格系统[9]。图 1-1 给出了这三类超晶格系统典型的能带排布结构示意图。由于 InAs/GaSb 和

HgTe/CdTe 超晶格系统和 GaAs/GaAl_{1-x}As_x 超晶格系统一样, 组分材料之间的晶格常数失配度很低, 这两种材料系统在生长过程中不会有较大的应变产生。因此, 组分材料的重空穴带和轻空穴带在布里渊区中心仍然是保持简并的。

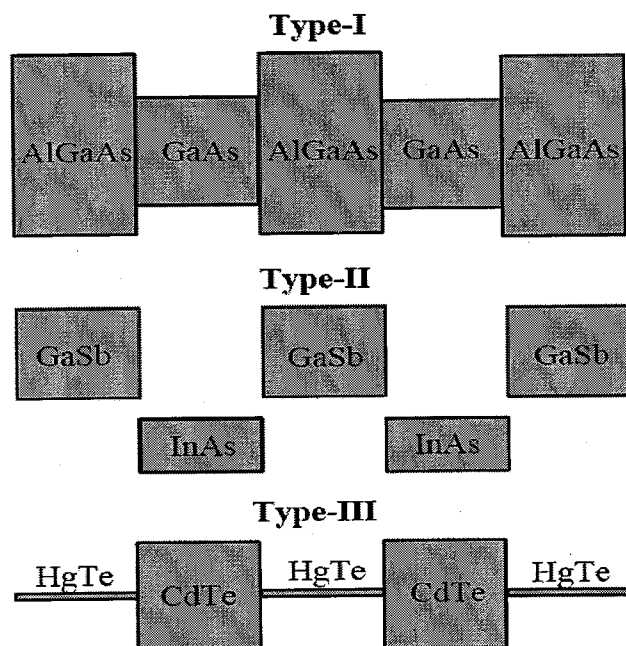


图 1-1 三类典型的超晶格能带排布结构图。

无论是 GaAs/GaAl_{1-x}As_x 第一类超晶格系统, InAs/GaSb 第二类超晶格系统, 还是 HgTe/CdTe 第三类超晶格系统, 它们都是晶格常数相当匹配的超晶格系统。随着研究的深入和发展, 人们希望能够生长出更多的半导体超晶格系统, 但是却发现自然界中两种晶格常数相等或相近的半导体材料组合是很少的。于是, 人们开始研究晶格常数不匹配的半导体超晶格系统, 并发现若两种半导体材料的晶格失配在一定限度内, 只要组分材料层的厚度不超过一个临界值, 就可以通过弹性形变来补偿晶格常数之间差别, 在界面处不会产生位错和缺陷。这样形成的超晶格具有一定的弹性形变, 称为应变超晶格[10,11]。InP/Ga_{1-x}In_xAs 系统和 Si/Ge_{1-x}Si_x 系统是典型的应变超晶格系统。应变超晶格不仅增加了超晶格的种类, 更重要的是由于形变势效应引起的应变[12,13], 超晶格的能带排布结构会发生很大的变化, 从而对系统中的电子和空穴产生一些新的量子束缚效应, 并由此导致一些新的物理现象产生。不仅如此, 由于材料系统在生长的过程中会有较大的应变产生, 组分材料的重空穴带和轻空穴带在布里渊区中心的简并特性会被解除。

绝大多数的半导体超晶格系统不管是晶格匹配的还是存在应变效应的,都是沿[001]方向外延生长的。除了这个生长方向,现代材料生长技术还可以使得超晶格系统在衬底上沿不同的方向外延生长。最常用的外延生长方向除了[001]还有[110]和[111]。超晶格沿着这些不同的方向外延生长会使得材料系统中的电子和空穴的有效质量发生很大的变化[14,15],从而会对这些载流子产生新的量子限制效应,并由此导致一些新的物理效应产生。另外,对于一些应变超晶格系统沿[110]和[111]方向外延生长时,材料系统中的压电极化效应已经被理论预测[16,17]和实验证实[18,19]。

除了以上这些已被深入研究的半导体超晶格系统,成熟的外延生长技术还可以生长出许多没有被研究的新型的半导体超晶格系统。由于不同的能带排布结构,应变条件以及外延生长方向,可以预计这些新型的超晶格系统将会表现出不同的物理行为。

1.2 超晶格电子结构理论概述

半导体超晶格系统的电子结构取决于组分材料层厚、应变条件和生长取向等一些材料和生长参数。因为这些参数在现代材料生长技术条件下可以得到精确控制,它可以允许人们方便地设计半导体超晶格系统的电子结构。由这种电子结构设计带来的灵活性使得半导体超晶格系统在很多器件应用中变得非常有用。另外,电子结构理论可以用来设计新型的半导体超晶格系统,而这些材料系统可以表现出一些新奇有趣的物理现象。在一些情况下,这些物理现象可以指导人们利用半导体超晶格系统进行新的器件应用。因此,电子结构理论在半导体超晶格系统的基础研究和器件设计中起着至关重要的作用。

由于超晶格周期势场的能量尺度一般在几百个 meV 左右,对超晶格电子结构的描述必须要处理在这个能量尺度上的相关问题。对于平均自由程大于或等于超晶格周期的电子和空穴,它们的状态会受到超晶格周期势场强烈的调制;而对于平均自由程小于超晶格周期的电子和空穴,它们的状态受到超晶格周期势场的调制作用相对较弱。因此,对于靠近布里渊区中心的电子态,由于这些状态对应的能量一般在几百个 meV 左右,它们是超晶格电子结构中最感兴趣的部分。而对于远离布里渊区中心的电子态,由于这些状态对应的能量大约在几个到几十个

eV, 在这个能量尺度上考察超晶格的电子结构没有太大的意义。因此, 从能量尺度的角度来说, 超晶格电子结构理论是一种带边电子态的理论。在超晶格周期势场的能量尺度范围内, 一些微扰作用如自旋-轨道相互作用、超晶格应变势以及超晶格界面势对超晶格电子态的影响都是相当重要的。这些因素的考虑将决定如何选择一种精确的理论方法来描述超晶格电子结构。

超晶格电子结构的计算通常比一般的体材料要复杂的多, 主要原因在于在生长方向上的周期比体材料的晶格常数大很多, 为几个到几十个原子层, 因此它的一个元胞包含的原子要多的多, 我们称在生长方向上的这种元胞为超单胞。通常对体材料适用的电子结构计算方法, 如经验赝势方法, 经验紧束缚方法以及第一原理方法, 对于超晶格的电子结构计算都由于超单胞的计算量太大而遇到困难。尽管如此, 近 30 年来, 超晶格的电子结构计算仍然取得了不少的进展。在计算体材料电子结构的理论方法的基础上, 人们发展了很多可以计算超晶格电子结构的理论方法, 它们的复杂程度可以从最简单的单带有效质量模型到最精确的多电子自洽场模型。哪一种计算方法是最适合的取决于材料系统本身以及所要研究的物理问题。例如, 对于比较简单的 $\text{GaAs}/\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 超晶格系统, 由于组分材料具有较大的禁带宽度, 系统本身具有第一类的能带排布结构以及组分材料之间没有应变, 基于单带有效质量理论的 Kronig-Penney 模型[20]就可以给出相当精确的布里渊区中心的电子和空穴能级; 而对于比较复杂的超晶格系统, 像 InAs/GaSb 系统和 HgTe/CdTe 系统, 在这两类超晶格系统中, 导带和价带之间的耦合效应强烈, 计算它们的电子结构需要比单带有效质量理论更高级的理论方法, 比如包含能带耦合效应的理论方法。总的来说, 计算半导体超晶格的电子结构主要有四种理论方法: 超单胞经验赝势方法, 超单胞经验紧束缚方法, 第一性原理方法以及 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量理论方法。顺便提及一下, 单带有效质量理论实际上是 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量理论的一个简化形式, 因此可以认为是同一类理论方法。

超单胞经验赝势方法是计算超晶格电子结构比较早期的理论方法。Caruthers 和 Lin-Chuang 利用此方法计算了极薄的 $\text{GaAs}/\text{GaAl}_{1-x}\text{As}_x$ 超晶格系统的电子结构 [21-23]。在这些电子结构计算中, 超晶格的波函数用平面波来展开, 而包含屏蔽

效应的原子赝势是通过一些经验参数来确定。由于在生长方向上的超单胞中的原子个数正比于超晶格的周期,所需的平面波个数随超晶格的周期呈线性增加的关系。因此计算量与超晶格周期的平方成正比。对于组分材料只有三个原子层厚度的 GaAs/AlAs 短周期超晶格, Caruthers 和 Lin-Chuang 用了 190 个平面波来计算该系统的电子结构。由于经验方法的特点,用来确定屏蔽原子赝势的经验参数的选取是非常重要的。而且,对于超晶格系统的电子结构计算,这些经验参数的个数比体材料要多的多。因此,正确的选择这些参数并不是一件容易的事情。另外,用超单胞经验赝势方法计算超晶格系统的电子结构并没有考虑自旋-轨道相互作用。如果考虑这一相互作用,超晶格哈密顿矩阵的维度将加倍,同时计算量也将加倍。由于计算量随超晶格的周期迅速增加的关系,超单胞经验赝势方法只限于计算非常薄的超晶格系统的电子结构,这是该理论方法不能广泛地运用于超晶格电子结构计算的一个瓶颈。

超单胞经验紧束缚方法也是计算超晶格电子结构比较早期的理论方法。利用这种理论方法, Schulman 和 McGill 分别计算了 GaAs/GaAl_{1-x}As_x 超晶格系统 [24,25]和 HgTe/CdTe 超晶格系统的电子结构[26,27], Nucho 和 Madhukar 计算了 InAs/GaSb 超晶格系统的电子结构[28,29], Madhukar 和 Delgado 计算了 Si/GaP 超晶格系统的电子结构[30], 以及 Osbourn 计算了 GaAs/GaAs_{1-x}P_x 应变超晶格系统的电子结构[31,32]。在这些理论计算中,紧束缚表象的基函数一般由原子的一个 s 型轨道波函数和三个 p 型轨道波函数构成。由于每个原子轨道包含两重简并的自旋分量,在紧束缚表象中共有八个基函数,并且满足正交归一条件。因为并不知道这些原子轨道波函数的具体形式,所以超晶格系统的哈密顿矩阵元是通过一些经验参数来拟合的。通常这些经验参数是通过拟合体材料的能带来确定的。由于拟合方法不能唯一确定紧束缚理论中的经验参数,在选择这些参数的时候要特别小心。Harrison 在他的书中详细地讨论了选取紧束缚参数的物理基础[33]。价带通常可以拟合的很好,但是导带拟合的不是很理想;超晶格组分材料的导带(价带)之间的带阶通过调节它们的在位能参数来确定;而超晶格界面两边的原子轨道基函数之间的交叠参数通过外插方法来确定。当所有的紧束缚参数被确定之后,超晶格系统的哈密顿矩阵也就被确立了。然而,超单胞经验紧束缚方法中的

参数个数甚至比超单胞经验赝势方法中的参数还要多,正确的拟合这些参数更不是一件容易的事情。如果不考虑自旋-轨道相互作用,超晶格系统的哈密顿矩阵的维度为 $(M+N) \times L$,其中 M 和 N 是组分材料的原子层数目, L 是基函数的个数。如果考虑自旋-轨道相互作用,哈密顿矩阵的维度将加倍。因为对于比较厚的超晶格系统,由于在生长方向上的超单胞中的原子个数较多,其哈密顿矩阵的维度将会变得很大,所以超单胞经验紧束缚方法也只限于计算包含 20 个原子层甚至更小厚度的超晶格系统的电子结构。

基于密度泛函理论的第一性原理方法也可以用来计算半导体超晶格系统的电子结构。这种理论方法是通过构造超单胞的方法来计算超晶格电子结构的,本质上无异于对应的体材料电子结构计算。和一般的经验方法相比,如经验赝势方法和经验紧束缚方法,第一原理方法用于超晶格电子结构计算要少的多。由于第一性原理电子结构计算基于局域密度近似和广义梯度近似,在计算半导体的禁带宽度时会导致较大的误差[34,35]。但是,如果人为地将半导体的导带或价带移动到一个较高或较低的能量位置,那么第一性原理计算将会给出一个正确的电子能带结构,其中包含符合实验结果的禁带宽度。因为第一性原理计算是一种多体自洽计算且不含任何的经验参数,它对于研究超晶格系统的电子结构是有必要的[36,37]。在超晶格电子结构计算方面,第一性原理计算方法已经被用于极薄的 Si/Ge 超晶格系统[38,39]。另外,人们利用第一性原理和赝势方法结合计算了短周期 GaAs/AlAs 超晶格系统的电子结构[40,41]。尽管第一性原理计算是一种包含多体效应的自洽计算且不含任何经验参数,在计算体材料和表面系统的电子结构时取得了很大的成功,但是在计算超晶格系统的电子结构时,由于需要同时构造超单胞和进行自洽循环,其计算量比一般的经验方法大很多。目前该理论方法也只限于极薄的超晶格电子结构计算。更重要的是,对于半导体超晶格,由于系统中的多体效应很弱,利用一般的经验方法就可以相当好的描述其电子结构[42]。

半导体超晶格系统的带边电子态往往是人们最感兴趣的,因为超晶格系统的很多物理性质如电学性质和光学性质都是由这些电子态所决定的。对于普通的半导体材料,如 III-V 族和 II-VI 族半导体材料, $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量理论在描述其导带和

价带的带边电子态是特别有用的[43-47]。由于这个原因,人们很自然地想到用这种理论方法来描述半导体超晶格系统的带边电子态。Sai-Halasz 等人首先将基于单带有效质量理论的 Kronig-Penney 模型用于半导体超晶格电子结构的计算,建立了包络函数模型[48]。这一模型不仅具有明显的物理意义,而且数学上容易求解。前面提到,因为单带有效质量理论是 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量的一种简化形式,所以基于它的 Kronig-Penney 模型可以认为是单带的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量模型。单带 Kronig-Penney 模型并没有包含体材料的能带耦合效应。对于由禁带宽度较大的半导体材料组成的第一类超晶格系统,比如 GaAs/GaAl_{1-x}As_x 超晶格系统,这一模型在描述其光学性质方面取得了很大的成功[49,50]。但是,对于一些由禁带宽度较小的半导体材料组成的超晶格系统,如 InAs/GaSb 第二类超晶格系统,由于这类系统存在很强的导带、价带耦合效应,单带 Kronig-Penney 模型就不再适用。为了解决这一问题,Bastard 从 Kane 的有效质量哈密顿量[45]出发,考虑导带和轻空穴带之间的耦合效应,建立了两带 Kane 模型[51,52]。这一模型通常被称作两带包络函数模型,在计算布里渊区中心的电子、空穴能级以及解释大量的实验数据方面获得了相当大的成功。与单带 Kronig-Penney 模型一样,两带 Kane 模型只能描述沿超晶格波矢方向(与生长方向一致)的能量色散关系,而不能描述垂直于超晶格波矢方向的能量色散关系,即二维平面波矢方向的能量色散关系。两带 Kane 模型考虑了导带和轻空穴带之间的耦合效应,但并没有考虑这些能带与重空穴带之间的相互作用。从体材料的布里渊区中心的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量哈密顿量出发,很容易建立导带电子和价带轻空穴之间的耦合包络函数方程以及退耦合的重空穴带的包络函数方程。显然,对于重空穴带的退耦合的包络函数方程,可以用 Kronig-Penney 模型求解。事实上,导带和轻空穴带之间的耦合包络函数方程最终也可以通过类似于 Kronig-Penney 模型的方程来求解。Altarelli 及其合作者将 Bastard 的两带 Kane 模型推广到多带包络函数模型[53-56]。这一模型从体材料的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量哈密顿量出发,考虑了导带、轻空穴带以及重空穴带之间的相互作用。与单带 Kronig-Penney 模型和两带 Kane 模型不同的是,多带包络函数模型不仅可以很好的描述布里渊区中心的电子和空穴能级,而且还能同时给出沿超晶

格波矢方向和二维平面波矢方向的能量色散关系。当然,多带的耦合包络函数方程要比两带 Kane 模型要复杂的多。这些耦合方程一般通过变分法来近似求解,超晶格系统的哈密顿矩阵维度一般在几十乘以几十左右[53,54],因此计算量不是很大。从此以后,多带包络函数模型被推广到外加磁场下的超晶格系统中朗道能级的计算[57-61];同时,该理论模型也被广泛地用来计算超晶格系统的光学性质[62-66]。这些理论计算与实验结果符合的相当好。

尽管 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量理论在研究超晶格系统的电子结构和光学性质方面取得了很大的成功,但是它有一定的局限性:一是对于周期特别短的超晶格系统有效质量理论不再适用;二是只适用于带边电子态的计算,不能描述整个布里渊区空间的电子态。关于 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量理论以及半导体超晶格电子结构的更多介绍和应用可参阅 Smith 和 Mailhoit 的现代物理评论综述[67]以及夏建白和朱邦芬著的《半导体超晶格物理》[68]。

1.3 论文研究的科学意义

材料在红外波段的光电特性研究是了解和掌握红外光电技术以及设计、生长和制备红外光电器件的物理基础。利用半导体材料制备的红外探测器是目前应用最为广泛的红外光电器件,它的发展是红外光电技术发展的先导和基础。目前常用的半导体红外探测器主要是基于碲镉汞(HgCdTe)和量子阱(QW)材料[69]。但是,随着对红外探测器性能要求的不断提高,这些红外探测器材料表现出了一些缺点。碲镉汞红外探测器材料的主要缺点是:(1) 隧道电流大和俄歇复合速率快,导致器件性能的降低。为了改善器件的性能,必须保证器件在低温下工作,使得器件难以实现小型化、低成本和便携式运作;(2) Hg-Te 键结合的比较弱,易形成 Hg 空位以及活动力强的 Hg 原子,从而影响器件的长期稳定性;(3) 为了精确确定器件的截止波长,必须精确控制材料的组分,使得材料生长比较困难;(4) 材料均匀性差同时成本昂贵,不利于制作大面积的器件平面阵列。量子阱红外探测器材料的主要缺点是:(1) 无法接收垂直入射的光,光子的利用率低,为了提高光子的利用率,不得不采用光栅耦合的方法来解决;(2) 利用子带内光跃迁的工作机理,子带上的电子浓度受掺杂限制,因此导致器件量子效率的降低;(3) 隧

道电流比较大, 器件工作温度低, 温度升高将会引起器件噪声信号的迅速增加, 因而器件性能受到限制。

近年来, 随着材料生长技术的进步与提高, 用 InAs/GaSb 半导体异质结构制备的第二类超晶格材料系统成为新一代红外探测器的首选材料系统[70]。这是一种通过交替生长厚度为几个到几十个原子层厚度的半导体薄膜层构成的新型低维材料系统, 具有独特的材料和物理性质。由于两种材料薄层的厚度为纳米尺度, 系统中的电子和空穴在材料生长方向的运动是量子化的。在这类超晶格材料系统中, 组分材料 InAs 的导带在组分材料 GaSb 的价带之下, 能带排布结构彼此错开; 电子被束缚在 InAs 材料层中, 而空穴被束缚在 GaSb 材料层中。因此, 通过改变 InAs 和 GaSb 材料层的厚度, 可以方便的调节束缚在 InAs 材料层中的电子态和束缚在 GaSb 材料层中的空穴态, 从而调节电子态和空穴态之间的能量差即超晶格的禁带宽度。与常规的碲镉汞和量子阱材料系统相比, InAs/GaSb 第二类超晶格材料系统具有以下优点: (1) 在光场的作用下, 光跃迁发生在 GaSb 材料层中的空穴态和 InAs 材料层中的电子态之间, 属于不同材料层之间的带间跃迁, 因此该材料系统可以吸收垂直入射的光, 提高了光电转换效率; (2) 通过调节 InAs 和 GaSb 材料层的厚度, 不但禁带宽度可调, 而且能带结构也可调。对禁带宽度的调节可以使得该材料系统的探测截止波长在 2~30 μm 之间任意波段范围。对该材料系统能带结构的调节, 可以有效的抑制俄歇复合和隧道电流效应, 提高了器件应用的工作温度; (3) 基于 III-V 族材料生长技术, 材料的均匀性好, 成本便宜, 利用分子束外延技术生长, 超晶格系统的组分和层厚参数容易控制, 没有合金涨落和簇状缺陷, 制作的探测器均匀性好。基于这些优点, InAs/GaSb 第二类超晶格系统成为研究、设计和开发新一代红外探测器的首选材料系统, 用这种材料系统制备的红外探测器具有小型化, 高性能, 低成本和便携式等特点。

由于强烈的军事应用背景, 西方先进国家将 InAs/GaSb 第二类超晶格系统视为制备第三代红外探测器的首选材料, 投入了大量的人力、物力、财力进行研究。但是最初由于材料设计上存在的缺陷, 样品生长和器件制备存在困难, 相关研究于 1990 年代中后期几乎停顿。自 2002 年后, 情况有了转变, 美国西北大学、国

家反导弹机构、陆、海、空军研究实验室、喷气推进实验室，德国 IAF 研究所和 AIM 公司等研究机构对 InAs/GaSb 第二类超晶格材料的设计、生长、器件工作机理和焦平面探测器研制等进行了深入研究，并取得了重大突破。2004 年德国 IAF 研究所和 AIM 公司报道了高性能 InAs/GaSb 第二类超晶格中红外单色焦平面探测器，获得了非常清晰的热成像效果[71]，如图 1-2 所示。图中人手、人脸及颈部的血管清晰可见。2006 年德国 IAF 研究所和 AIM 公司又研制出 InAs/GaSb 第二类超晶格中红外双色(截止吸收波长为 $4\text{ }\mu\text{m}$ 和 $5\text{ }\mu\text{m}$)焦平面探测器[72]，于 2007 年报道了在 3 英寸的 GaSb 衬底上直接研制 288×384 的 InAs/GaSb 第二类超晶格中红外双色探测器焦平面阵列[73]，并获得了非常清晰的双色热成像效果[74]，如图 1-3 所示。这些成果充分显示了 InAs/GaSb 第二类超晶格探测器材料的优越性和器件工艺的成熟性。在更大面阵焦平面探测器研制方面，美国喷气推进实验室已经制造出 1000×1000 截止波长大约为 $4\text{ }\mu\text{m}$ 的中红外相机[75]。室温探测方面，美国新墨西哥大学制造的 $5\text{ }\mu\text{m}$ 超晶格探测器室温探测率达到 $4.6\times 10^9\text{ cm Hz}^{1/2}\text{ W}^{-1}$ [76]，已经接近红外焦平面探测器对单个像元探测率的最低要求并超过了碲镉汞探测器的记录。美国西北大学量子信息中心将 InAs/GaSb 探测器与级联激光器集成为中红外自由空间无线通信系统，其成本仅为 450 美元，有 3 节 9 V 电池供电，寿命在 1000 小时[77]。相对于中红外波段，目前 InAs/GaSb 第二类超晶格探测器在远红外波段的探测性能还略逊于碲镉汞探测器。InAs/GaSb 第二类超晶格探测器的最长截止波长可超过 $18\text{ }\mu\text{m}$ [78]，但国际上主要研究机构的研究重点都放在 $8\sim 12\text{ }\mu\text{m}$ 的长波红外和 $3\sim 5\text{ }\mu\text{m}$ 的中波红外超晶格焦平面探测器上。2007 年，美国 Raytheon Vision System 公司和喷气推进实验室推出第一台 256×256 截止波长为 $10.5\text{ }\mu\text{m}$ 的长波红外摄像机[79]。而美国海军实验室则演示了在长波红外区 InAs/GaSb 第二类超晶格探测器的双色探测能力[80]。除了在军事领域的应用研究，InAs/GaSb 第二类超晶格探测器在民用领域的应用研究也有所进展。总的来说国际上 InAs/GaSb 第二类超晶格探测器的发展趋势就是要满足当前第三代红外探测器对高效率、高性能、高温、大面阵及多色彩的探测性能要求。除了在红外探测器上取得的重要成果，基于 InAs/GaSb 量子结构的激光器研究也取得了不少的进展。1995 年，休斯公司报道了基于

InAs/GaSb 超晶格结构的中红外激光器[81]。同一年,美国陆军研究实验室提出了利用这一材料系统实现量子级联激光器的方案[82]。此后,InAs/GaSb 红外激光器的研究工作已经取得了相当大的进展,现已获得室温工作的脉冲模式激光器。但是,同探测器相比,InAs/GaSb 激光器离实际应用还需要更进一步的研究。



图 1-2 单色 InAs/GaSb 超晶格中红外焦平面探测器的热成像效果[71]。图中人手、人脸及颈部的血管清晰可见。

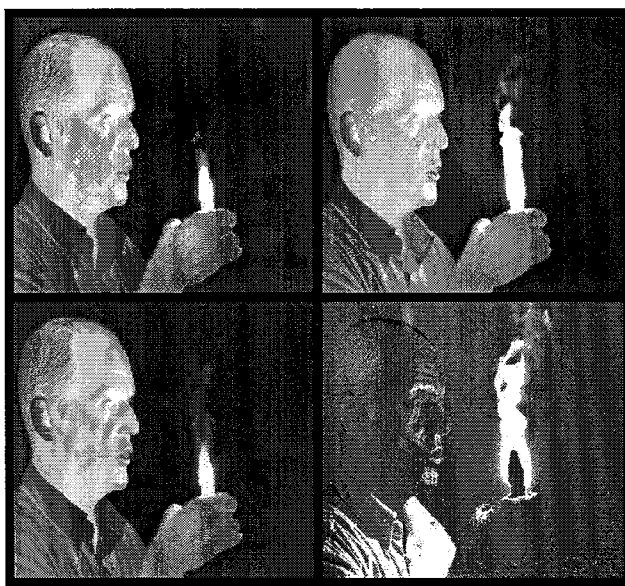


图 1-3 双色 InAs/GaSb 超晶格中红外焦平面探测器的热成像效果[74]: 左上图和右上图分别表示单色通道成像, 左下图和右下图分别表示两个单色通道像元素之间的相加图和相减图。

目前国内红外探测器的发展还停留在以碲镉汞和锑化铟(InSb)为主的第二代红外探测器,刚刚开始对第三代 InAs/GaSb 超晶格红外探测器材料进行研究。中科院半导体所已开始该材料系统在生长方面的基础研究并制备了单波段光电导原型探测器[83-85]。中科院物理所已开始研究材料在高速电子器件中的应用,中科院上海技物所刚刚开始材料生长方面的研究,兵器工业部 211 研究所刚获得基金委和云南省的资助立项从事器件制备研究、航天部 014 研究所刚完成项目规划从事材料生长和器件制备研究。中国人民解放军总装部已于今年将锑化物量子阱和超晶格光电器件首次列入“光电子预研”研究指南。这些事实和现状表明 InAs/GaSb 超晶格材料系统已经引起我国科研和国防单位的高度重视和关注。

尽管国际上基于 InAs/GaSb 第二类超晶格材料系统的红外光电器件的研究和研发上已经取得了很大的进展,但是为了获得性能更好制备工艺更简便的器件,仍有很多基础物理问题有待更详细的研究,以获得更为深入细致的知识,为改善器件性能提供详尽的理论指导。为此,在本篇论文中,我们将结合国内外现有的实验结果,在理论方面对这类材料系统的光电特性进行深入的研究,详细地研究材料和生长参数对其电子结构和光电特性的影响。通过理论和实验相结合,探索 InAs/GaSb 第二类超晶格系统在红外光电器件应用方面的物理机制,为器件设计提供可靠的理论指导和坚实的物理支撑。

1.4 论文的主要研究内容

由于 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量理论方法具有清晰的物理图像,简单的程序实现以及良好的计算精度,在本篇论文中,我们将采用该理论方法研究 InAs/GaSb 第二类超晶格系统的电子结构和光学性质。论文的主要内容分为以下几个部分:

在第二章中,我们阐述 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量理论和 Boltzmann 平衡方程方法,这些基本理论方法是研究半导体超晶格材料光电特性的基础。

在第三章中,我们利用八带 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量理论和 Boltzmann 能量平衡方程方法,研究 InAs/GaSb 短周期超晶格系统中的光学各向异性现象,探索其作为中红外光学极化器件应用背后的物理机制。

在第四章中, 我们利用八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量理论和 Boltzmann 能量平衡方程方法并结合相关的实验结果, 研究材料生长参数对 InAs/GaSb 短周期超晶格系统的中红外光电性质的影响, 探索其作为中红外探测器件应用背后的物理机制。

在第五章中, 我们利用八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量理论和 Boltzmann 能量平衡方程方法, 研究微观界面效应在 InAs/GaSb 短周期超晶格中红外探测器设计中的作用和机制, 为优化器件设计和增强器件性能提供相关的理论指导。

在第六章中, 我们对本篇论文做了最后的全文总结, 给出了论文每章的主要研究内容。

第二章 基本理论方法

真实的晶体能带结构是相当复杂的,只有掌握了整个布里渊区空间的能量色散关系,才能对这种复杂的能带结构有一个清晰完整的认识。确定整个布里渊区空间的能量色散关系需要求解晶体中电子的薛定谔方程,它是能带理论所要专门解决的问题。对于一般的晶体而言,这是一个相当复杂的任务因为电子受到的晶体势场的具体形式并不清楚。但是,对于半导体材料来说,其电学和光学等物理性质主要是由导带和价带的带边电子态所决定。因此,只要掌握导带底和价带顶附近的电子态信息就足够了。如果我们知道导带底和价带顶处的电子态,那么在那些能带极值点附近的电子态就可以通过量子力学微扰理论来求解。通过对一些实验可测物理量的参数化以及对晶体点群对称性的考虑,这个微扰理论可以相当精确地求解半导体导带和价带的带边电子态。这个微扰理论就是非常著名的 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 有效质量理论,它的漂亮之处在于可以允许我们概括关于晶体的所有信息以及电子-电子和电子-晶格的相互作用,而这些信息和相互作用可以全部被归并到一些实验可测的物理参数里面。对于特定的半导体材料,这些参数可以用一种非常漂亮紧凑的数学符号被称为有效质量张量的物理量来表示。由于 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 有效质量理论相对于其他电子结构理论具有较为简单的理论形式和良好的计算精度,在讨论半导体材料的导带底和价带顶附近的电子能带结构时,它被公认为是一种有效而且实用的理论方法。 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 有效质量理论最初是由 Bardeen 引入的[86],是一种确定半导体材料非简并能带的带边电子态及其带边有效质量的理论方法;之后, Luttinger 和 Kohn 将这个理论方法推广到半导体材料含有简并能带的情形[87];接着, Kane 进一步将该理论方法推广到半导体材料包含导带和价带耦合的情形[88]。在包络函数的框架下, $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 有效质量理论可以计算半导体量子阱、超晶格、量子线以及量子点等低维系统的电子结构。该理论方法的准确性和实用性已经被很多的实验结果所证实。而且,通过 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 有效质量理论计算出的电子能带结构具有很清晰的物理图像,无论对于理论工作者还是对于实验工作者都非常适用。

通过对半导体材料的电子结构计算,我们获得了关于材料系统中的电子态及其态密度的相关信息。在此基础上,我们可以进一步计算材料系统的光学吸收系数,这对于研究它的光电特性是很有必要的。计算半导体材料的光学吸收系数一般可以用基于密度矩阵理论的介电函数方法来实现[89]。在本篇论文中,我们将利用基于 Boltzmann 方程的平衡方程方法来计算材料系统的光学吸收系数。在弛豫时间近似下,Siggia 和 Kwork 最初用 Boltzmann 方程理论研究半导体系统的输运特性[90]。该理论方法不仅可以计算线性输运特性还可以计算非线性输运性质,因而被广泛地运用于半导体系统中载流子的迁移率和电导率的计算,其准确性和实用性已经被很多的输运实验所证实。在 Boltzmann 输运理论的基础上,一些研究人员又提出了二个平衡方程理论:动量平衡方程方法和能量平衡方程方法[91]。基于 Boltzmann 方程的动量平衡方程方法和弛豫时间近似一样,可以用来计算半导体系统的输运性质[92],而基于它的能量平衡方程方法可以用来计算材料系统的光学性质[93]。

2.1 III-V 族体材料的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿量

在半导体材料中,有效质量理论的基本想法实际上很简单:处于导带底附近状态上的电子的运动行为可以用自由电子来近似描述,只是它们的质量不再是静止质量 m_0 ,而是一个有效值 m^* 。因此,导带底附近的电子态可以通过一个含有有效质量的单电子薛定谔方程来描述,我们称之为单带有效质量模型。为简单起见,在下面的论述中,我们只关注具有直接带隙的 III-V 族半导体材料且只讨论布里渊区空间中 Γ 点附近的电子态。尽管单带有效质量模型对于导带底附近的电子态的描述比较准确,但是对于价带顶附近的空穴态的描述却不是很好。这是由于 Γ 点上的价带一般是简并的,远离 Γ 点将导致简并的价带劈裂成重空穴带和轻空穴带,这两个能带存在混合效应并由此引起价带的各向异性。更严重的是,在某些半导体材料中,由于其禁带宽度较小,导带和价带之间的耦合效应强烈,单带有效质量模型甚至都不能准确地描述导带底附近的电子态。这些由单带有效质量模型带来的局限性可以通过 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量理论来克服[87,88]。它是通过选择 Γ

点上的一些周期性的 Bloch 轨道来展开单粒子波函数而建立的。下面我们将给出体材料的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量哈密顿量的建立过程。

根据固体能带理论，晶体的单电子薛定谔方程可以写成：

$$\left[\frac{\vec{P}^2}{2m_0} + V(\vec{R}) \right] \Psi_N(\vec{K}, \vec{R}) = E_N(\vec{K}) \Psi_N(\vec{K}, \vec{R}) \quad (2-1)$$

这里， $\vec{P}=(\vec{p}_x, \vec{p}_y, \vec{p}_z)=(p_x, p_y, p_z)$ 是电子的动量算符， $\vec{K}=(\vec{k}_x, \vec{k}_y, \vec{k}_z)=(k_x, k_y, k_z)$ 是电子的波矢， $\vec{R}=(\vec{r}_x, \vec{r}_y, \vec{r}_z)=(x, y, z)$ 是电子的空间坐标， $V(\vec{R})$ 是周期性的晶体势场， N 是电子能带指标， $E_N(\vec{K})$ 是电子的能量， $\Psi_N(\vec{K}, \vec{R})$ 是电子的波函数。根据 Bloch 定理，由于晶体具有平移对称性，电子的波函数可以写成一个指数函数和周期性函数的乘积形式：

$$\Psi_N(\vec{K}, \vec{R}) = \text{Exp}(i\vec{K} \cdot \vec{R}) U_N(\vec{K}, \vec{R}) \quad (2-2)$$

这里，周期函数 $U_N(\vec{K}, \vec{R})$ 称为晶体的 Bloch 轨道，和晶体势场 $V(\vec{R})$ 具有相同的周期性。将等式(2-2)代入到方程(2-1)中，并利用动量算符表达式 $\vec{P} = -i\hbar \nabla$ ，我们可以得到如下的方程：

$$\left[\frac{\vec{P}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{K} \cdot \vec{P} + V(\vec{R}) \right] U_N(\vec{K}, \vec{R}) = E_N(\vec{K}) U_N(\vec{K}, \vec{R}) \quad (2-3)$$

此式是 Bloch 轨道 $U_N(\vec{K}, \vec{R})$ 满足的状态方程，注意 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量理论的名称由来源于该式左边的第三项。为方便起见，在下面的论述中，我们只考虑布里渊区空间的 Γ 点 $\vec{K} = \vec{K}_0$ 。由于 Bloch 轨道 $U_N(\vec{K}_0, \vec{R})$ 满足方程(2-3)，数学上我们不难发现其解 $\{U_N(\vec{K}_0, \vec{R})\}$ 构成了一组正交完备的基函数。我们利用这组基函数展开 $\vec{K} \neq \vec{K}_0$ 处的解集 $\{U_N(\vec{K}, \vec{R})\}$ ：

$$U_N(\vec{K}, \vec{R}) = \sum_M C_M U_N(\vec{K}_0, \vec{R}) \quad (2-4)$$

其中, C_M 是展开系数。将等式(2-4)代入到方程(2-3)中, 再将所得到的方程两边同时乘以 $U_L^*(\vec{K}_0, \vec{R})$ 并对晶体的一个元胞体积 Ω 积分, 我们可以得到:

$$\sum_M \left\{ \left[\frac{\hbar}{m_0} (\vec{K} - \vec{K}_0) \cdot \vec{P}_{LM} \right] + [E_M(\vec{K}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0} (\vec{K}^2 - \vec{K}_0^2)] \delta_{LM} \right\} C_M = E_N(\vec{K}) C_L \quad (2-5)$$

这里, $\vec{P}_{LM}$ 是动量矩阵元, 其表达式为:

$$\vec{P}_{LM} = \int_{\Omega} U_L^*(\vec{K}_0, \vec{R}) \vec{P} U_M(\vec{K}_0, \vec{R}) d\vec{R} \quad (2-6)$$

方程(2-5)称为 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿方程, 在推导过程中, 我们利用了 Bloch 轨道函数的正交归一性质:

$$\int_{\Omega} U_L^*(\vec{K}_0, \vec{R}) U_M(\vec{K}_0, \vec{R}) d\vec{R} = \delta_{LM} \quad (2-7)$$

通过给方程(2-5)中的能带指标 L 取一系列整数值, 我们得到一个线性的能量本征值方程:

$$HC = EC \quad (2-8)$$

这里, H 是哈密顿矩阵, C 是由列向量构成的本征态, E 是本征能量, 哈密顿矩阵元由下式给出:

$$H_{LM} = \frac{\hbar}{m_0} (\vec{K} - \vec{K}_0) \cdot \vec{P}_{LM} + [E_M(\vec{K}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0} (\vec{K}^2 - \vec{K}_0^2)] \delta_{LM} \quad (2-9)$$

根据等式(2-9), 给定 Γ 点 $\vec{K} = \vec{K}_0$ 处的电子能量 $E_M(\vec{K}_0)$ 和动量矩阵元 $\vec{P}_{LM}$, 我们就可以通过直接对角化方程(2-8)获得 $\vec{K} \neq \vec{K}_0$ 处的电子能量 $E_N(\vec{K})$ 。

$\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿矩阵方程(2-8)的维度与所取的能带数目即能带指标 L 的取值有关, 能带数目取得越多, 波函数的展开系数就越多, 所求得能量就越精确。理论上, 能带指标 L 应取无穷多个值, 然而, 在很多的实际问题中, 我们只需要取若干个能带作为主要贡献来展开波函数, 比如说取最低的导带和最高的价带为主要贡献, 而其他能带的贡献作为微扰处理。对于具有直接带隙的 III-V 族半导体材料, 导带底和价带顶位于 Γ 点, 它是布里渊区中具有最高对称性的点, 材料的许多物理性质如电学和光学性质是由导带底和价带顶的电子态决定的。在常见的

III-V 族半导体材料中，最重要的四个能带是导带(CB)，重空穴带(HH)，轻空穴带(LH)，以及自旋-轨道空穴带(SH)，如图 2-1 所示。因此，我们只关注在这四个能带基组表象下的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿量。

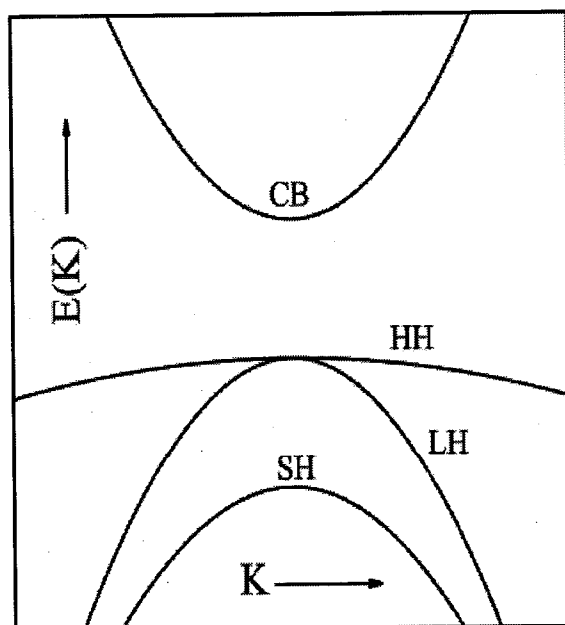


图 2-1 III-V 族半导体材料的电子能带结构示意图。图中 CB/HH/LH/SH 分别表示导带/重空穴带/轻空穴带/自旋-轨道空穴带。

III-V 族半导体材料的能带结构是由导带和价带构成，两带之间隔以禁带宽度，导带底的电子态可以用一个具有球对称性的 s 型轨道波函数来描述，标记为 $|S\rangle$ ，而价带顶在四面体点群的对称操作下是三度简并的，其电子态可以用三个哑铃状的 p 型轨道波函数来描述，分别标记为 $|X\rangle$ ， $|Y\rangle$ ， $|Z\rangle$ 。这里，我们采用 Dirac 符号表示导带底和价带顶的电子态，其对应的 Bloch 轨道可表示为： $U_c(\vec{R}) = \langle \vec{R} | S \rangle$ 和 $U_v(\vec{R}) = \langle \vec{R} | X \rangle$ ， $\langle \vec{R} | Y \rangle$ ， $\langle \vec{R} | Z \rangle$ 。在晶体点群的作用下，导带电子的 Bloch 轨道 $U_c(\vec{R})$ 的空间变化行为可以用一个各向同性的数学函数来近似描述： $U_c(\vec{R}) \sim f(R)$ 。而价带电子的 Bloch 轨道 $U_v(\vec{R})$ 的空间变化行为可以分别用三个各向异性的数学函数来近似描述： $U_v(\vec{R}) \sim yzf(R)$ ， $zxf(R)$ ， $xyf(R)$ 。这里，

$R=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$, $f(R)$ 是一个具有球对称性的各向同性函数。我们取 $|S\rangle$, $|X\rangle$, $|Y\rangle$, $|Z\rangle$ 这四个 Bloch 轨道为基组, 考虑自旋简并度后, 对应的 Bloch 轨道可以写成 $|S\uparrow\rangle$, $|S\downarrow\rangle$, $|X\uparrow\rangle$, $|X\downarrow\rangle$, $|Y\uparrow\rangle$, $|Y\downarrow\rangle$, $|Z\uparrow\rangle$, $|Z\downarrow\rangle$ 。这里, 符号 $\uparrow$ 和 $\downarrow$ 表示自旋朝上和朝下的本征态。取包含自旋态的 Bloch 轨道基函数的顺序如下:

$$|S\uparrow\rangle, |X\uparrow\rangle, |Y\uparrow\rangle, |Z\uparrow\rangle, |S\downarrow\rangle, |X\downarrow\rangle, |Y\downarrow\rangle, |Z\downarrow\rangle \quad (2-10)$$

在这个基底下, Γ 点的 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 哈密顿量可以写成一个 8×8 的矩阵形式:

$$H_{\text{KP}} = \begin{bmatrix} H_4 & 0 \\ 0 & H_4 \end{bmatrix} \quad (2-11)$$

这里, H_{KP} 是块对角化因为自旋朝上和朝下的本征态之间是相互正交的, H_4 是一个 4×4 的 Kane 矩阵[88]。根据 Lowdin 二阶微扰理论[94], H_4 可以写成[88]:

$$H_4 = \begin{bmatrix} E_C + D_C & iP_k_x & iP_k_y & iP_k_z \\ -iP_k_x & E_V - \Delta/3 + D_H & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ -iP_k_y & Nk_x k_y & E_V - \Delta/3 + D_L & Nk_y k_z \\ -iP_k_z & Nk_x k_z & Nk_y k_z & E_V - \Delta/3 + D_S \end{bmatrix} \quad (2-12)$$

这里, E_C 和 E_V 表示导带和价带的带边能量; Δ 是价带的自旋-轨道劈裂能; P 是导带和价带之间的动量矩阵元, 其表达式为 $P = -i(\hbar/m_0)\langle S|p_x|X\rangle$;

$$D_C = A_C(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), D_L = Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2), D_L = Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2), D_S = Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2),$$

其中 A_C , L , M , N 为四个能带参数。严格的计算可以给出 A_C , L , M , N 的表达式如下[95]:

$$A_C = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_j \frac{|\langle S|p_x|U_j\rangle|^2}{E_C - E_j} \quad (2-13a)$$

$$L = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_j \frac{|\langle X|p_x|U_j\rangle|^2}{E_V - E_j} \quad (2-13b)$$

$$M = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_j \frac{|\langle X | p_y | U_j \rangle|^2}{E_v - E_j} \quad (2-13c)$$

$$N = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_j \frac{\langle X | p_x | U_j \rangle \langle U_j | p_y | X \rangle + \langle X | p_y | U_j \rangle \langle U_j | p_x | X \rangle}{E_v - E_j} \quad (2-13d)$$

这里, $U_j = U_j(\vec{K}_0, \vec{R})$ 是 Γ 点上第 j 个能带的 Bloch 轨道, 在计算 A_c 时, $\sum_j'$ 是对所有 $E_c - E_j \neq 0$ 的状态求和, 计算 L , M , N 时 $\sum_j'$ 是对所有 $E_v - E_j \neq 0$ 的状态求和。在实际计算时, 我们不需要像等式(2-13)那样计算能带参数 A_c , L , M 和 N , 它们可由下列等式给出[96]:

$$A_c = \frac{\hbar^2}{2m^*} - \frac{2P^2}{3E_G} - \frac{P^2}{3(E_G + \Delta)} \quad (2-14a)$$

$$L = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 4\gamma_2) + \frac{P^2}{E_G} \quad (2-14b)$$

$$M = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2) \quad (2-14c)$$

$$N = -\frac{\hbar^2}{2m_0}6\gamma_3 + \frac{P^2}{E_G} \quad (2-14d)$$

其中, m^* 是导带电子有效质量, γ_i ($i=1,2,3$) 是与价带空穴有效质量相关的三个 Luttinger 参数[87], $E_G = E_c - E_v$ 是体材料的禁带宽度, Δ 是价带的自旋-轨道劈裂能, 这些能带参数可以很方便地从现有的半导体工艺数据库获得。

到目前为止, 我们还没有考虑 III-V 族半导体材料中的自旋-轨道相互作用。接下来我们将考虑这一相互作用, 因为对于绝大多数的 III-V 族半导体材料它是不能被忽略的。我们将从真空中自由电子的自旋-轨道相互作用的起源出发, 引入 III-V 族半导体材料中的自旋-轨道相互作用哈密顿量。严格地说, 为了研究半导体材料中的自旋-轨道相互作用, 我们必须研究 Dirac 方程在周期势场中的解, 但实际上半导体中的电子速度远远小于光速, 因此低速极限下的 Dirac 方程仍然适用, 这相当于在单电子薛定谔方程中加入自旋-轨道相互作用。

真空中的自由电子在受到电磁场的作用下，其运动行为可以由四分量的 Dirac 方程描述[97]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = (c\vec{\alpha} \cdot \vec{\pi} + \beta m_0 c^2 + V) \Psi \quad (2-15)$$

其中， $\vec{\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{bmatrix}$ ， $\vec{\sigma}$ 是电子自旋的 Pauli 矩阵； $\beta = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 \end{bmatrix}$ ， I_2 是 2×2 的单位矩阵； $\vec{\pi} = \vec{P} + e\vec{A}$ 是电子的机械动量， $\vec{A}$ 是电磁场的矢势； $V(\vec{R}) = -e\phi(\vec{R})$ 是电子受到的静电势， $\phi(\vec{R})$ 是电磁场的标势。Dirac 波函数 Ψ 的前后两个分量 Ψ_+ 和 Ψ_- 分别描述电子的正负能态： $\beta m_0 c^2$ 项表明正负能态之间存在 $2m_0 c^2$ 的 Dirac 能隙，其量级大约为 1 MeV； $c\vec{\alpha} \cdot \vec{\pi}$ 项则把正负能态耦合起来，其耦合强度正比于电子的机械动量 $\vec{\pi}$ 。在低速极限下，可以将正负能态之间的耦合视为微扰，从而 Dirac 方程过渡到描述正能态电子的两分量 Pauli 方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_+ = \left[\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\nabla V \times \vec{\pi}) \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar^2}{8m_0^2 c^2} \nabla^2 V + \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^4}{8m_0^3 c^2} + V \right] \Psi_+ \quad (2-16)$$

其中，第二项为电子的自旋-轨道相互作用哈密顿量，可见自旋-轨道耦合起源于相对论效应，其强度与 Dirac 能隙成反比，与电子的机械动量和感受的电场强度 $|\vec{E}| = |\nabla V/e|$ 成正比。真空中的电子运动速度较慢，感受的电场强度较弱，因而巨大的 Dirac 能隙使得真空中电子的自旋-轨道耦合相互作用非常弱。而在半导体材料中，离子实产生较大的周期性势场，作用在晶体电子上的电场强度高达 10^6 kV/cm，它将绕离子实运动的电子加速到 10^6 kV/cm，从而得以克服 Dirac 能隙，产生强度远大于真空情形的自旋-轨道相互作用。因此，自旋-轨道相互作用在半导体材料中是不能忽略的。根据等式(2-16)，在没有外加电磁场的情况下，III-V 族半导体材料中的自旋-轨道相互作用哈密顿量可以写成：

$$H_{so} = \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\nabla V \times \vec{P}) \cdot \vec{\sigma} \quad (2-17)$$

在半导体材料中，自旋-轨道相互作用的强度可以用一个能量参数来表征，它是价带的自旋-轨道劈裂能，可以用下面的等式表示：

$$\Delta = -\frac{3i\hbar^2}{4m_0^2c^2} \langle X | \nabla V \times \vec{P} | Z \rangle \quad (2-18)$$

在等式(2-10)所表示的基底下，自旋-轨道相互作用哈密顿量 H_{so} 可以写成一个与 $\vec{K}$ 无关的矩阵形式：

$$H_{so} = -\frac{\Delta}{3} \times \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i & 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2-19)$$

对于应变层半导体材料沿[001]方向外延生长，如果外延层和衬底层之间的晶格常数失配度较大，还需要考虑由晶格失配引起的应变哈密顿量[97]。在等式(2-10)所表示的基底下，应变哈密顿量可以写成一个与 $\vec{K}$ 无关的块对角矩阵的形式[98]：

$$H_{ST} = \begin{bmatrix} H_s & 0 \\ 0 & H_s \end{bmatrix} \quad (2-20)$$

这里， H_s 是一个 4×4 的矩阵，其表达式为：

$$H_s = \begin{bmatrix} a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & l\varepsilon_{xx} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{xy} & n\varepsilon_{xz} \\ 0 & n\varepsilon_{yx} & l\varepsilon_{yy} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{yz} \\ 0 & n\varepsilon_{yz} & n\varepsilon_{zy} & l\varepsilon_{zz} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \end{bmatrix} \quad (2-21)$$

这里， a_c 是导带的形变势能参数， ε_{ij} ($i, j=x, y, z$) 是应变张量分量，其具体表达式为：

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_0 - a}{a} \quad (2-22a)$$

$$\varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{xx} \quad (2-22b)$$

$$\varepsilon_{ij} = 0 \quad (i \neq j) \quad (2-22c)$$

其中, a_0 与 a 分别是衬底和外延层的晶格常数参数, C_{11} 与 C_{12} 是材料的弹性常数。

l , m , n 与价带三个形变势能参数 a_v , b_v , d_v 有关, 可以表示为:

$$l = a_v + 2b_v \quad (2-23a)$$

$$m = a_v - b_v \quad (2-23b)$$

$$n = \sqrt{3}d_v \quad (2-23c)$$

考虑自旋-轨道相互作用和应变效应之后, III-V 族半导体材料在 Γ 点处总的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿量可以表示为与 $\vec{K}$ 相关的 H_{KP} 以及与 $\vec{K}$ 无关的 H_{SO} 和 H_{ST} 之和:

$$H(\vec{K}) = H_{KP} + H_{SO} + H_{ST} \quad (2-24)$$

因为 $H(\vec{K})$ 是一个矩阵哈密顿量, 所以通过矩阵对角化方法, 我们可以很容易地计算体材料在导带底和价带顶附近的电子态, 同时由于其包含了自旋-轨道相互作用和应变效应, 可以很方便地研究它们对这些电子态的影响。

2.2 超晶格有效质量方程及其有限差分解法

在前一节中, 我们给出了 III-V 族半导体材料在 Γ 点的八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿量: 以一个导带底和三个价带顶的 Bloch 轨道作为基组, 在考虑自旋简并度后, 该哈密顿量可以表示成一个 8×8 的矩阵。利用这个八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿量, 我们可以通过矩阵对角化方法很容易得到导带底和价带顶附近的电子能带结构。在这一节中, 我们将给出半导体超晶格系统的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量理论, 用以求解超晶格系统的电子能带结构。为此, 我们将超晶格系统中 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿量所满足的有效质量方程或包络函数方程。

考虑半导体超晶格沿 $[001]$ 方向或 z 方向外延生长, 由于在生长方向上存在周期性的一维调制势场, 系统中的电子和空穴在这个方向上的运动是量子化的, 而在超晶格的二维平面或在 (x, y) 平面内的运动是自由的, 这是二维电子气和空穴气

系统最基本的特征。因为一维周期势场在超晶格生长方向上随坐标 z 是缓慢变化的，所以超晶格波函数可以写成 Bloch 轨道和包络函数乘积的线性组合形式：

$$\Psi(\vec{k}, \vec{r}, z) = \sum_{\mu} \text{Exp}(i\vec{k} \cdot \vec{r}) U_{\mu}(\vec{R}) F_{\mu}(z) \quad (2-25)$$

这里， μ 是能带指标， $U_{\mu}(\vec{R}) = U_{\mu}(\vec{K}_0, \vec{R})$ 是 Γ 点上第 μ 个能带的 Bloch 轨道， $F_{\mu}(z)$ 是对应的沿 z 方向的包络函数。根据有效质量理论，如果波函数 $\Psi(\vec{k}, \vec{r}, z)$ 是下面的薛定谔方程的解：

$$[H(\vec{k}, k_z) + V(z)]\Psi(\vec{k}, \vec{r}, z) = E(\vec{k})\Psi(\vec{k}, \vec{r}, z) \quad (2-26)$$

那么包络函数将是如下方程的解：

$$\sum_{\mu, \nu} [H_{\mu\nu}(\vec{k}, -i\partial_z) + V(z)\delta_{\mu\nu}] F_{\nu}(z) = E(\vec{k}) F_{\mu}(z) \quad (2-27)$$

这里， $\partial_z = d/dz$ 是一个微分算符， $V(z)$ 是沿超晶格生长方向上的一维周期势场并且是关于 z 的缓变函数。方程(2-27)可以写成如下的压缩形式：

$$[H(\vec{k}, -i\partial_z) + V(z)]\mathbf{F}(z) = E(\vec{k})\mathbf{F}(z) \quad (2-28)$$

其中， $\mathbf{F}(z)$ 是由不同的 $F_{\mu}(z)$ 构成的列向量，在八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量理论中，它含有八个分量，分别是包含自旋分量的导带、重空穴带、轻空穴带和自旋-轨道空穴带的包络函数。另外，体材料的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量哈密顿量可以展开成关于 k_z 的二次多项式形式：

$$H(\vec{k}, k_z) = H^{[2]}k_z^2 + H^{[1]}(\vec{k})k_z + H^{[0]}(\vec{k}) \quad (2-29)$$

联立方程(2-28)和(2-29)，我们可以得到如下的耦合微分方程组：

$$[-H^{[2]} \frac{d^2}{dz^2} - iH^{[1]}(\vec{k}) \frac{d}{dz} + H^{[0]}(\vec{k}) + V(z)]\mathbf{F}(z) = E(\vec{k})\mathbf{F}(z) \quad (2-30)$$

方程(2-30)就是用来求解超晶格系统电子能带结构的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量方程。

一般来说，解析求解方程(2-30)这样的耦合微分方程是比较困难的，但是数值求解这个耦合微分方程可以有很多方法，比较常用的有转移矩阵方法，散射矩阵方法，平面波展开方法，有限元方法和有限差分方法。在本篇论文中，我们采

用有限差分方法来数值求解方程(2-30)。这种数值方法最大的好处是：(1) 可以处理任意形状的势场；(2) 边界条件比较容易处理；(3) 实空间计算的数值稳定性较好。由于有限差分方法是一个离散化的数值方法，它首先需要将实空间的坐标和对应的物理量网格化。为此，我们将超晶格系统沿其生长方向分成N个均匀的网格点。在有限差分方法中， $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿量中的微分算符需要通过算符的对称化方法使之满足厄米条件[96]：

$$H^{[2]} \frac{d^2}{dz^2} F(z) \rightarrow \frac{d}{dz} \left[H^{[2]} \frac{d}{dz} F(z) \right] \quad (2-31a)$$

$$H^{[1]} \frac{d}{dz} F(z) \rightarrow \frac{1}{2} \left[H^{[1]} \frac{d}{dz} F(z) + \frac{d}{dz} H^{[1]} F(z) \right] \quad (2-31b)$$

利用三点的有限差分格式，我们可以得到 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿量中这些厄米微分算符的差分形式如下[89]：

$$\frac{d}{dz} \left[H^{[2]} \frac{d}{dz} F(z) \right] \Big|_{z=z_l} \approx \frac{H_{l+1}^{[2]} + H_l^{[2]}}{2h^2} F_{l+1} - \frac{H_{l+1}^{[2]} + 2H_l^{[2]} + H_{l-1}^{[2]}}{2h^2} F_l + \frac{H_{l-1}^{[2]} + H_l^{[2]}}{2h^2} F_{l-1} \quad (2-32a)$$

$$\frac{1}{2} \left[H^{[1]} \frac{d}{dz} F(z) + \frac{d}{dz} H^{[1]} F(z) \right] \Big|_{z=z_l} = \frac{H_{l+1}^{[1]} + H_l^{[1]}}{4h} F_{l+1} - \frac{H_{l+1}^{[1]} + H_l^{[1]}}{4h} F_{l-1} \quad (2-32b)$$

这里， $l=1,2,\dots,N$ ， z_l 是超晶格生长方向上第 l 个网格点的位置， h 是相邻网格点之间的步长， $H_l^{[j]}=H^{[j]}(z_l)$ ($j=1,2$)。将等式(2-31)和(2-32)运用到方程(2-30)上，我们可以得到如下的矩阵本征值方程：

$$H_{l,l-1} F_{l-1} + H_{l,l} F_l + H_{l,l+1} F_{l+1} = E F_l \quad (l=1,2,\dots,N) \quad (2-33)$$

这里， F_l 表示第 l 个网格点上的本征值向量，在八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量理论中，它包含了对应网格点上的八个包络函数分量， $H_{l,l'}$ 表示第 l 个网格点和第 l' 个网格点之间的相互作用哈密顿量，其具体的表达式为：

$$H_{l,l-1} = -\frac{H_{l-1}^{[2]} + H_l^{[2]}}{2h^2} + i\frac{H_{l-1}^{[1]} + H_l^{[1]}}{4h} \quad (2-34a)$$

$$H_{l,l} = \frac{H_{l-1}^{[2]} + 2H_l^{[2]} + H_{l+1}^{[2]}}{2h^2} + H_l^{[0]} + V_l \quad (2-34b)$$

$$H_{l,l+1} = -\frac{H_{l+1}^{[2]} + H_l^{[2]}}{2h^2} - i\frac{H_{l+1}^{[1]} + H_l^{[1]}}{4h} \quad (2-34c)$$

这些表达式都是从差分格式的 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量方程中得到的, 无论对于相邻网格点还是对于相同网格点之间的相互作用都是成立的。方程(2-33)表示的本征值问题可以进一步写成更为清晰的矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} H_{1,1} & H_{1,2} & 0 & \cdots & \cdots & \bar{H}_{1,0} \\ H_{2,1} & H_{2,2} & H_{2,3} & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & H_{3,2} & H_{3,3} & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & H_{N-1,N-2} & H_{N-1,N-1} & H_{N-1,N} \\ \bar{H}_{N,N+1} & 0 & \cdots & \cdots & H_{N,N-1} & H_{N,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \mathbf{F}_{N-1} \\ \mathbf{F}_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \mathbf{F}_{N-1} \\ \mathbf{F}_N \end{bmatrix} \quad (2-35)$$

这里, $\bar{H}_{1,0}$ 和 $\bar{H}_{N,N+1}$ 是由体系边界条件确定的值。对于超晶格系统, 由于在其生长方向上存在周期性势场, 因此需要用到周期性边界条件, 此时 $\mathbf{F}_{N+1}(z) = e^{iqd}\mathbf{F}_1(z)$ 和 $\mathbf{F}_0(z) = e^{-iqd}\mathbf{F}_N(z)$ 等价于 $\bar{H}_{N,N+1} = e^{iqd}H_{N,N+1}$ 和 $\bar{H}_{1,0} = e^{-iqd}H_{1,0}$, q 和 d 分别代表超晶格沿生长方向上的波矢和周期。对于等式(2-35)表示的矩阵本征值方程, 可以利用标准的数学矩阵函数库(如 LAPACK 和 LINPACK)来求解其本征值和本征矢。因为等式(2-35)中的哈密顿矩阵元是 $\vec{k}$ 和 q 的函数, 所以给定不同的 $\vec{k}$ 和 q , 反复求解该矩阵本征值方程便得到了超晶格系统的电子能带结构和相关的载流子波函数, 即 $E(\vec{k}, q)$ 和 $\Psi(\vec{k}, q, \vec{r}, z)$ 。

2.3 玻尔兹曼能量平衡方程方法

经过电子能带结构计算,我们获得了关于材料系统中载流子的能级、波函数和态密度的相关信息。在此基础上,我们可以计算材料系统的光学吸收系数。在本篇论文中,我们从费米黄金规则出发,运用基于 Boltzmann 方程的能量平衡方程方法来计算超晶格系统的光吸收系数。这里,我们只考虑带间光跃迁矩阵元和光吸收系数。

我们标记超晶格价带和导带的电子态为初态和末态,分别标记为 $|\Psi_m(\vec{k}, \vec{q}, \vec{r}, z)\rangle$ 和 $|\Psi_n(\vec{k}, \vec{q}, \vec{r}, z)\rangle$, 其中 m 和 n 为价带和导带的能带指标。对于任意给定的光场偏振方向 $\vec{\epsilon}$ (单位矢量), 这两个态之间的光跃迁矩阵元可以写成:

$$\begin{aligned} \vec{\epsilon} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k}, \vec{q}) &= \langle \Psi_n(\vec{k}, \vec{q}, \vec{r}, z) | \vec{\epsilon} \cdot \vec{p} | \Psi_m(\vec{k}, \vec{q}, \vec{r}, z) \rangle \\ &= \vec{\epsilon} \cdot \sum_{\mu, \nu} \left[\langle F_\nu(n, \vec{k}, \vec{q}, \vec{r}, z) | F_\mu(m, \vec{k}, \vec{q}, \vec{r}, z) \rangle P_{\mu\nu} + \langle F_\nu(n, \vec{k}, \vec{q}, \vec{r}, z) | \vec{p} | F_\mu(m, \vec{k}, \vec{q}, \vec{r}, z) \rangle \delta_{\mu\nu} \right] \quad (2-36) \end{aligned}$$

上式中的第一项给出的是带间光跃迁的振荡强度,而第二项给出的是带内光跃迁的振荡强度,它包含了初末态相同的包络函数分量之间的耦合。对于由窄禁带半导体材料组成的超晶格系统,如 InAs/GaSb 第二类超晶格系统,由于导带和价带之间耦合作用强烈,初末态相同的包络函数分量之间的耦合较大,所以材料系统中的带内光跃迁也会对带间光跃迁有所贡献。将等式(2-36)代入费米黄金定则,我们可以得到由直接的电子-光子相互作用导致的光跃迁几率为:

$$W_{mn}(\vec{k}, \vec{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eE_0}{m_0\omega} \right)^2 |\vec{\epsilon} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k}, \vec{q})|^2 \delta[E_m(\vec{k}, \vec{q}) - E_n(\vec{k}, \vec{q}) + \hbar\omega] \quad (2-37)$$

这里, E_0 和 ω 分别是光场的强度和角频率。

在本篇论文中,我们将利用基于 Boltzmann 方程的能量平衡方程方法来研究材料系统对光场的响应。在简并统计情形下, Boltzmann 方程可以写成:

$$\frac{\partial f_n(\vec{k}, \vec{q}, t)}{\partial t} = \sum_m \sum_{\vec{k}, \vec{q}} [F_{mn}(\vec{k}, \vec{q}, t) - F_{nm}(\vec{k}, \vec{q}, t)] \quad (2-38)$$

这里, $F_{mn}(\vec{k}, \vec{q}, t) = f_m(\vec{k}, \vec{q}, t)[1 - f_n(\vec{k}, \vec{q}, t)]W_{mn}(\vec{k}, \vec{q})$, $f_n(\vec{k}, \vec{q}, t)$ 是电子处在状态 $|\Psi_n(\vec{k}, \vec{q}, \vec{r}, z)\rangle$ 上的动量分布函数。在方程(2-38)中,光场的效应已经被包括在含时

的动量分布函数和光跃迁几率里面。因此，为了避免重复计算，由光场引起的电场力项没有出现在 Boltzmann 方程的左边。对于方程(2-38)，目前还没有简单的解析解。这里，我们运用通常的能量平衡方程[93]来近似求解 Boltzmann 方程。

将等式(2-38)两边同乘以 $\sum_n \sum_{\vec{k}, \vec{q}} E_n(\vec{k}, \vec{q})$ 可以得到：

$$P_t = \hbar\omega \sum_{m,n} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} f_m(\vec{k}, \vec{q}, t) [1 - f_n(\vec{k}, \vec{q}, t)] W_{mn}(\vec{k}, \vec{q}) \quad (2-39)$$

这里， $P_t = \partial [\sum_n \sum_{\vec{k}, \vec{q}} E_n(\vec{k}, \vec{q}) f_n(\vec{k}, \vec{q}, t)] / \partial t$ 是超晶格系统中电子在一个单胞体积内的能量转移率。材料系统的光学吸收系数可以通过下面的表达式计算[93]：

$$\alpha = \alpha_0 (2\hbar P_t / e^2 E_0^2) \quad (2-40)$$

这里， $\alpha_0 = e^2 / (\hbar \epsilon_0 c \sqrt{\kappa})$ 是一个无量纲系数， ϵ_0 和 κ 分别是真空和材料系统的介电常数， c 是真空中光速。利用稳态能量分布函数如费米狄拉克函数作为动量分布函数的近似即 $f_n(\vec{k}, \vec{q}, t) \approx f[E_n(\vec{k}, \vec{q})]$ ，我们得到带间光吸收系数的表达式为：

$$\alpha = C \sum_{m,n} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} f[E_m(\vec{k}, \vec{q})] \{1 - f[E_n(\vec{k}, \vec{q})]\} |\vec{\epsilon} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k}, \vec{q})|^2 \delta[E_m(\vec{k}, \vec{q}) - E_n(\vec{k}, \vec{q}) + \hbar\omega] \quad (2-41)$$

这里，系数 $C = 4\pi\hbar\alpha_0 / (m_0^2\omega)$ 。由于电子能带结构和光跃迁矩阵元都是数值求出的，等式(2-41)中的求和需要数值完成。

第三章 InAs/GaSb 超晶格系统的本征光学各向异性

摘要：我们利用八带 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量理论和 Boltzmann 能量平衡方程方法研究了在沿[001]方向生长的 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格系统中，当光场沿着超晶格二维平面内不同方向偏振时，超晶格系统的光跃迁矩阵元和光吸收系数会出现明显的各向异性。由于这些超晶格是无共有原子系统，微观界面效应是导致这种光学各向异性的物理原因。计算结果显示在这类超晶格材料系统中，当光场沿[110]和 $[1\bar{1}0]$ 方向偏振时会出现最强的光学各向异性。定义任意两个不同偏振方向的光吸收系数之间的相对差为光极化率，我们发现这两个方向的光极化率可以达到 50%以上。另外，我们详细地研究了光极化率与温度、光生载流子浓度、以及超晶格层厚之间的依赖关系。这些研究结果对设计基于 InAs/GaSb 短周期超晶格系统的光学极化器件具有重要的指导意义。

3.1 研究背景

在现代光信息通讯系统中，很多光电器件的工作条件要求与光场的偏振方向无关即没有光学极化，而对于激光二极管，需要探索与偏振相关的工作机理以降低激光器的阈值电流[100]。近年来，垂直空腔表面发射激光器(VCSELs)中的光学极化现象在理论和实验上已被广泛地研究[101-103]。除了 VCSELs 系统，一些特殊的 III-V 半导体超晶格系统在光学极化方面也引起了人们很大的兴趣[104-106]。

在 C1A1/C2A2 型的 III-V 族半导体超晶格中，如果组分材料 C1A1 和 C2A2 没有公共原子，比方说 $C1 \neq C2$ 和 $A1 \neq A2$ ，我们就称这种类型的超晶格为无共有原子超晶格；相反如果 $C1 = C2$ 或 $A1 = A2$ ，我们就称这种类型的超晶格为共有原子超晶格。这里，C1和C2是 III-V 族阳离子，A1和A2是 III-V 族阴离子。因此，在无共有原子超晶格系统中，界面处的化学键和组分材料中的化学键存在明显的不同：比方说界面处的化学键是 C1-A2 和 C2-A1 而组分材料中的化学键是 C1-A1 和 C2-A2。根据定义标准，典型的无共有原子超晶格有 GaAs/InP 和 InAs/GaSb 系统；典型的共有原子超晶格有 GaAs/AlAs 和 GaAs/InAs 系统。共有原子和无共有原子超晶格系统最大的区别在于组分材料中的化学键和超晶格界

面处的化学键是否相同。在过去几十年里,人们对无共有原子超晶格如 GaAs/InP 系统中与这一区别相关的物理性质进行了大量的研究并发现了一些新奇有趣的物理现象[104-107]。在这些物理性质中,无共有原子和共有原子系统所表现出来的最明显的不同之处就是它们的光学性质。实验上已经观测到在 GaAs/InP 超晶格系统中,当外加光场沿 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向偏振时,系统的光学吸收系数会出现明显的各向异性[105,106],我们称为光学极化现象。然而,共有原子超晶格系统没有表现出任何的光学各向异性。

沿 $[001]$ 方向生长的无共有原子超晶格系统中的光学各向异性现象并不难理解。在公有原子超晶格如 GaAs/AlAs 系统中,连续的超晶格界面具有如下空间排列的化学键:在一个超晶格周期内,第一个界面含有 Ga-As 键位于 (110) 平面内和 Al-As 键位于 $(1\bar{1}0)$ 平面内,而相邻的第二个界面含有 Al-As 键位于 (110) 平面内和 Ga-As 键位于 $(1\bar{1}0)$ 平面内。因此,这两个超晶格界面处的化学键的空间排列情形正好相互补偿。然而,这种补偿效应在无公有原子超晶格如 GaAs/InP 系统中却并不存在:在一个超晶格周期内,第一个界面含有 Ga-As 键位于 (110) 平面内和 In-As 键位于 $(1\bar{1}0)$ 平面内,而相邻的第二个界面含有 InP 键位于 (110) 平面内和 Ga-P 键位于 $(1\bar{1}0)$ 平面内。因此,这两个超晶格界面处的化学键的空间排列情形不能相互补偿。图 3-1 给出了 GaAs/InP 无共有原子超晶格系统的界面化学键的空间排列结构,将图中的 InP 材料换成 AlAs 材料,我们便得到 GaAs/AlAs 共有原子超晶格系统中界面化学键的空间排列结构。由于补偿效应的存在,在公有原子超晶格系统中,相邻两个界面从系统平均的角度来说是等价的;而对于无公有原子超晶格系统,相邻两个界面是不等价。当线性偏振的光场沿着无共有原子超晶格系统的生长方向传播时,它会感受到不等价的超晶格界面,结果在一个超晶格周期内,由相邻两个界面引起的光学特性不能相互补偿,导致差异的存在。特别是,当光场沿着超晶格二维平面内的不同方向偏振时,这一差异的幅度是明显不同的,从而引起所谓的二维平面内的光学各向异性。从群论的角度来说,共有原子超晶格系统的界面具有 D_{2d} 点群对称性,而无共有原子超晶格

系统的界面具有 C_{2v} 点群对称性。 C_{2v} 的界面对称性比 D_{2d} 的界面对称性要低 [108]。我们把这种较低的界面对称性称作微观界面不对称性。因此, 由这种微观界面效应引起的光学各向异性是无共有原子超晶格系统的本征光学特性。

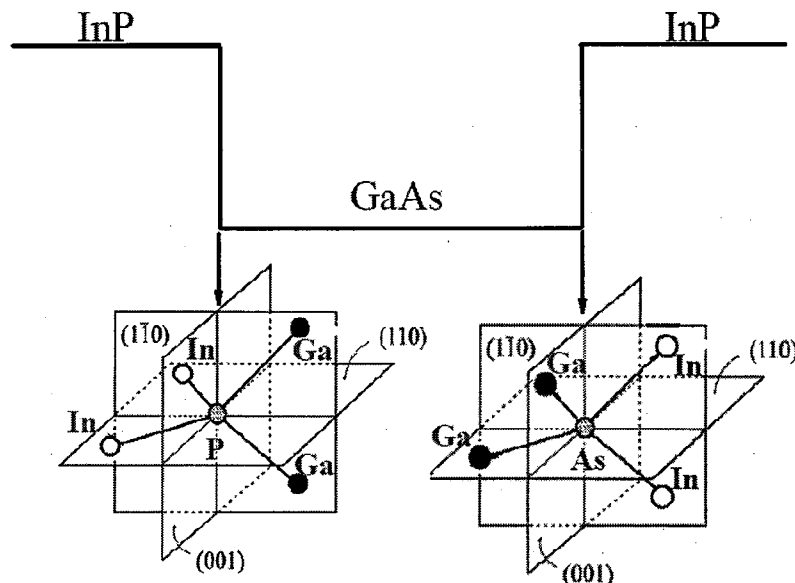


图 3-1 GaAs/InP 无共有原子超晶格系统中界面化学键的空间排列结构。

InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统由于其独特的材料和物理性质, 在过去的几十年里引起了人们广泛的研究兴趣。利用这类超晶格系统, 人们可以制备出波长可调的红外探测器和激光器 [109,110]。大多数的理论和实验研究只关注 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统的电子性质 [111-113] 和自旋电子性质 [114,115], 但是很少有关于这类系统中光学各向异性方面的研究。尽管微观界面效应对光学各向异性的影响在 GaAs/InP 无共有原子超晶格系统中已经被描述的相当好, 但是在 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统中, 这一影响还并不清楚因为该系统中强烈的导带和价带耦合效应在 GaAs/InP 系统中是不存在的。另外, InAs/GaSb 超晶格系统具有第二类的能带排布结构, 其中的电子和空穴分别被束缚在 InAs 层和 GaSb 层中。由于这一特点, 我们可以预想在 InAs/GaSb 第二类无共有原子超晶格系统中光学各向异性对微观界面效应更加的敏感, 因为本质上这种光学性质与电子和空穴的波函数在超晶格界面处的交叠耦合密切相关。因此, 对于由微观界面效应引起的光学各向异性, 一些新的物理现象将会出现在 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统中。

人们利用很多理论方法来研究 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统的物理性质, 比如经验紧束缚方法[116,117], 经验赝势方法[111,112], 包络函数近似方法[118,119]。在这些理论方法中, 包络函数近似方法的应用最为广泛因为该方法具有清楚的物理图像, 简单的数值编程以及良好的计算精度。然而, 在计算无共有原子超晶格系统的光学各向异性的时候, 标准的包络函数近似方法却不能区分这类超晶格系统与共有原子超晶格系统的差别, 即在标准的包络函数近似方法的框架下, 两类超晶格系统都不出现光学各向异性现象。因此, 在描述无共有原子超晶格系统的光学各向异性时, 我们需要更为精准的理论方法。因为无共有原子超晶格系统的光学各向异性是由其中的微观界面效应引起的, 所以将此效应考虑进标准的包络函数近似方法中, 我们便得到修正的包络函数近似方法。与标准的包络函数近似方法相比, 这个修正的理论方法在描述无共有原子超晶格系统的光学各向异性时显得更为精准。将微观界面效应包含到标准的包络函数近似方法中可以有很多的理论方案: Krebs 和 Voisin 提出了一个唯象的理论模型叫做 H_{BF} 模型, 它通过区分超晶格界面化学键的前后排列方向[104]来建立理论模型。Ivchenko 及其合作者建议了多带有效质量理论的广义边界条件模型[120], 其中空穴的包络函数在超晶格界面处的边界条件被广义化并且混合了重空穴和轻空穴的自旋分量。Fszmulowicz 及其合作者发展了包含微观界面效应的八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量模型[113]。最近, Mlinar 及其合作者证明非对称的八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量模型[121]在 Burt-Foreman 理论[122]的框架下可以处理微观界面效应的问题; 而 Hong 及其合作者则在八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量模型的框架下利用阶梯型不对称的界面势模型描述了 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统中的微观界面效应[123]。在这个工作中, 我们将运用 H_{BF} 模型来研究 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统中的光学各向异性现象。为了得到材料系统的电子能带结构和相关的载流子波函数, 我们利用有限差分方法来求解包含微观界面效应的八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量方程。获得了电子能带结构和相关的载流子波函数, 我们利用基于 Boltzmann 方程的能量平衡方程方法计算材料系统的光吸收系数。定义不同偏振方向的光吸收系数之间的相对差为光极

化率,我们可以进一步地在光吸收系数计算的基础上计算这个极化率。在这个工作中,我们详细地研究了光极化率对温度、光生载流子浓度、以及超晶格层厚的依赖关系,目的在于更好地理解 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统中的光学各向异性以及该超晶格系统在光学极化器件应用方面的物理机制。

3.2 理论方法

考虑 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统沿[001]方向生长,如图 3-2 所示。图中,生长方向被定义为z轴,x轴和y轴分别沿[100]和[010]方向。在如下的 Bloch 轨道基组下,

$$|S\uparrow\rangle, |X\uparrow\rangle, |Y\uparrow\rangle, |Z\uparrow\rangle, |S\downarrow\rangle, |X\downarrow\rangle, |Y\downarrow\rangle, |Z\downarrow\rangle \quad (3-1)$$

超晶格系统的八带 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 哈密顿量可以写成:

$$H(\vec{K}) = H_{KP} + H_{SO} + H_{IF} \quad (3-2)$$

这里, H_{KP} 是与 $\vec{K}$ 相关的哈密顿量, H_{SO} 是自旋-轨道相互作用哈密顿量, H_{IF} 描述的是由微观界面效应引起的哈密顿量。

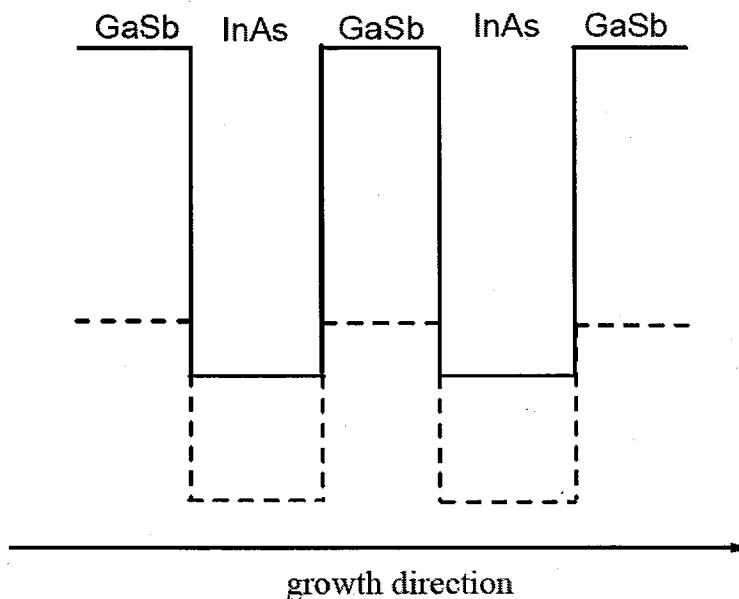


图 3-2 InAs/GaSb 第二类超晶格系统的能带排布结构图。

哈密顿量 H_{KP} 和 H_{SO} 的具体表达式可参考第二章第一节的内容,这里我们仅需要对哈密顿量 H_{IF} 作一下描述。 H_{IF} 实际上是由微观界面效应引起的一个短程的

局域界面势，局域在超晶格界面处半个原子层厚度的范围内(大约 2 Å)。在等式 (3-1)所表示的 Bloch 轨道基组下， H_{IF} 是块对角化，因此 H_{IF} 没有耦合电子和空穴的不同自旋分量。在 $|S\rangle$, $|X\rangle$, $|Y\rangle$, $|Z\rangle$ 代表的 Bloch 轨道基组下， H_{IF} 具有如下的形式[104]:

$$H_{\text{IF}} = H_{\text{XY}} \times \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3-3)$$

其中， H_{XY} 是表征微观界面势强度的可调参数。可见， H_{IF} 也并没有耦合系统中的导带电子态和价带空穴态。因此，我们可以推测在无共有原子超晶格系统中，导带的电子态受到微观界面效应的影响远小于价带的空穴态。另外，在这个理论模型中，由于组分材料 InAs 和 GaSb 之间的晶格失配度很低(大约 0.39%)，我们忽略了超晶格系统中的应变效应。

超晶格系统的电子能带结构和相关的载流子波函数可以通过如下的薛定谔方程求出：

$$H\Psi = E\Psi \quad (3-4)$$

这里， $H = H(\vec{K})$ 是系统的八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿量， $\Psi = \Psi(\vec{k}, \vec{q}, \vec{r}, z)$ 是系统中电子和空穴的波函数， $E = E(\vec{k}, \vec{q})$ 是系统的电子能带结构。通过做算符替换 $k_z \rightarrow -i d/dz$ ，我们可以将(3-4)所示的薛定谔方程转变为八个耦合的二阶微分方程。利用有限差分方法，我们可以将这个耦合的二阶微分方程组转化为一个求解矩阵本征值的问题，通过直接对角化方法便得到了超晶格系统的本征值和本征态。该数值方法的具体实现过程可参见第二章第二节的内容。

获得了电子能带结构和相关的载流子波函数，我们可以利用基于 Boltzmann 方程的能量平衡方程方法计算超晶格系统的光吸收系数。带间光吸收系数由下式给出：

$$\alpha = C \sum_{m,n} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} f[E_m(\vec{k}, \vec{q})] \{1 - f[E_n(\vec{k}, \vec{q})]\} |\vec{\epsilon} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k}, \vec{q})|^2 \delta[E_m(\vec{k}, \vec{q}) - E_n(\vec{k}, \vec{q}) + \hbar\omega] \quad (3-5)$$

这里, 系数 $C = 4\pi\hbar\alpha_0 / (m_0^2\omega)$, m 和 n 为价带和导带的能带指标, $f[E_n(\vec{k}, q)]$ 是用费米-狄拉克函数表示的电子能量分布函数, $\vec{\epsilon} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k}, q) = \langle \Psi_n(\vec{k}, q, \vec{r}, z) | \vec{\epsilon} \cdot \vec{p} | \Psi_m(\vec{k}, q, \vec{r}, z) \rangle$ 是导带和价带之间的光跃迁矩阵元, $\vec{\epsilon}$ 是一单位矢量, 代表光场的偏振方向。等式(3-5)中的求和需要数值进行。关于等式(3-5)的具体推导过程可参考第二章第三节的内容。

表 3-1 AlSb/InAs/GaSb 的材料参数。

Parameter	AlSb	InAs	GaSb
E_G (eV)	2.32	0.41	0.81
E_P (eV)	18.7	22.2	22.4
Δ (eV)	0.75	0.38	0.75
m^*/m_0	0.18	0.023	0.042
γ_1	4.15	19.67	11.80
γ_2	1.01	8.37	4.03
γ_3	1.75	9.26	5.26

3.3 结果与讨论

在这个工作中, 我们只研究 InAs/GaSb 短周期超晶格系统中的光学各向异性现象。表 3-1 列出了用于电子能带结构计算的主要材料参数。表中的材料参数的物理意义如下: m^* 是导带电子有效质量, γ_i ($i=1,2,3$) 是与价带空穴有效质量相关的三个 Luttinger 参数, $E_G = E_C - E_V$ 是体材料的禁带宽度, E_P 是与体材料的带间动量矩阵元 $P = -i(\hbar/m_0) \langle S | p_x | X \rangle$ 有关, 其定义式为 $E_P = 2m_0 P^2 / \hbar^2$, Δ 是价带的自旋-轨道劈裂能。由于 InAs/GaSb 系统具有第二类的能带排布结构, InAs 的导带和 GaSb 的价带之间的交叠能量取为 150 meV。在 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统中, 理想的界面有两种: 一种是 InSb 型的界面, 另外一种是在 GaAs 型的界面[124]。图 3-3 给出了这两种理想的超晶格界面。因此, 在电子结构能带计算中, 我们还需要确定两个额外参数 H_{XY}^{BA} 和 H_{XY}^{AB} , 分别表示 InSb 型和 GaAs 型的界

面势的强度。实际上,这两个参数可以通过拟合现有的实验结果得到:我们让 H_{XY}^{BA} 和 H_{XY}^{AB} 在一个范围内同时变化,使禁带宽度的理论计算值与其对应的实验值达到最佳的吻合。图 3-4 给出了两组 InAs/GaSb 短周期超晶格系统中禁带宽度的理论结果和实验结果之间[125]的比较,其中子图(a)显示的是固定 GaSb 层的厚度时超晶格禁带宽度随 InAs 层厚度的变化关系而子图(b)显示的是固定 InAs 层的厚度时超晶格禁带宽度随 GaSb 层厚度的变化关系。图中的理论计算需要的拟合参数是 $H_{XY}^{BA} = 490 \text{ meV}$ 和 $H_{XY}^{AB} = 870 \text{ meV}$, 可见理论结果和实验结果符合的非常好。这里, $H_{XY}^{BA} \neq H_{XY}^{AB}$ 是因为两种不同的超晶格界面。

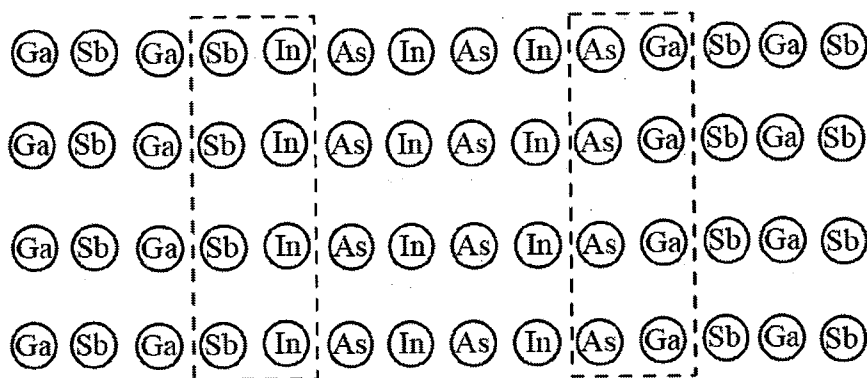


图 3-3 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统中的 InSb 型和 GaAs 型界面。

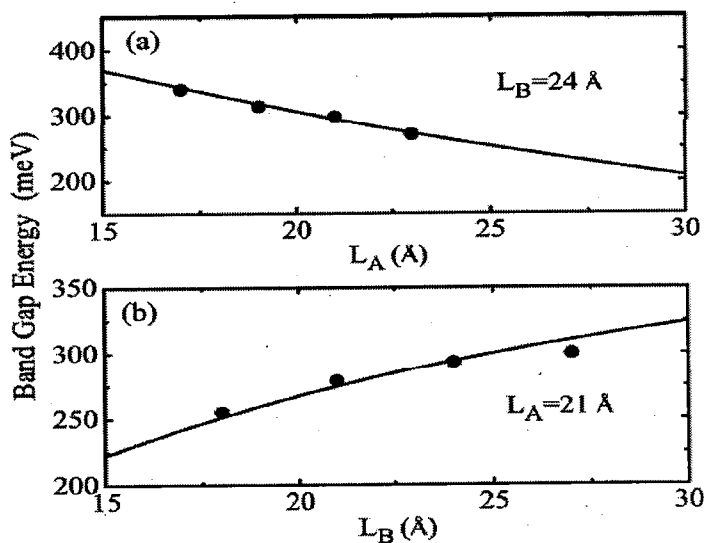


图 3-4 超晶格禁带宽度随 InAs/GaSb 层厚度的变化关系。实线代表理论计算的结果, 实心小圆点代表实验结果[125]。

我们取 InAs/GaSb 的厚度 L_A/L_B 为 25/25 Å。图 3-5 显示的是 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格系统的电子能带结构，其中子图(a)和子图(b)分别对应不包含和包含微观界面效应的计算结果， $d=L_A+L_B$ 是超晶格的周期。从图中可以看出，这里只有四个超晶格能带，分别以 CB1 标记第一个电子导带，以 HH1 和 HH2 标记第一个和第二个重空穴带，以 LH1 标记第一个轻空穴带。这种以载流子类型命名各个能带的方式遵循了对应的布里渊区中心的包络函数的相关性质。比较图 3-5 中的两个子图，我们发现三个主要的不同之处：(1) 沿着二维平面波矢 $\vec{k}$ 的方向，微观界面效应使超晶格导带和价产生了自旋劈裂现象，这是由于微观界面效应使体系的对称性降低造成的。而且，微观界面效应对导带电子态的影响远小于价带空穴态，这一特点可以从微观界面哈密顿量的表达式(3-3)明显地看出。(2) 沿着超晶格波矢 q 的方向，微观界面效应引起了 LH1 和 HH2 之间的能带不交叉行为，这一特点与紧束缚模型的计算结果是一致的[117]。这个能带不交叉现象是由微观界面效应引起的重空穴态和轻空穴态之间的耦合造成的。(3) 在布里渊区中心，微观界面效应导致了超晶格禁带宽度的明显减小。由于微观界面效应引起了重空穴态和轻空穴态之间的耦合，超晶格价带之间相互排斥，导致 HH1 能量的上升，而超晶格导带 CB1 受到的影响很小，因此超晶格的禁带宽度减小。

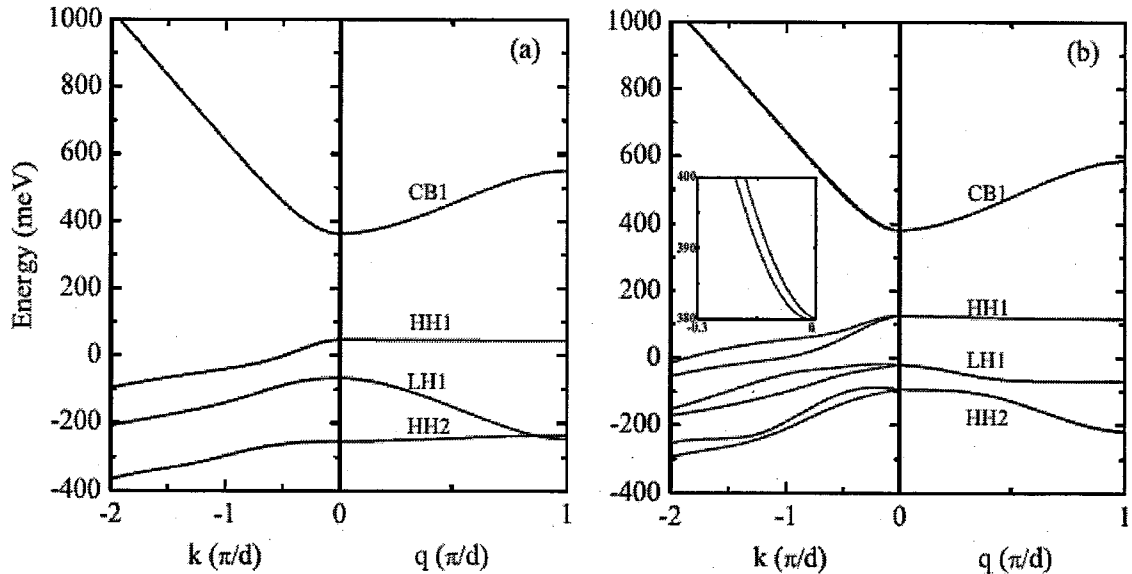


图 3-5 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的电子能带结构：图(a)和图(b)分别对应不包含和包含微观界面效应的计算结果，图(b)中的小插图给出的是导带(CB1)自旋劈裂的放大尺寸。

图 3-6 显示的是 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的布里渊区中心的包络函数模方，其中子图(a)和子图(b)分别对应不包含和包含微观界面效应的计算结果。两个子图显示的结果有一个很明显的共同点：由于电子和空穴的有效质量不同以及由此带来的量子尺寸限制效应的不同，重空穴主要束缚在 GaSb 材料层中，电子和轻空穴的包络函数从一个 InAs 层和 GaSb 层到另一个 InAs 层和 GaSb 层的交叠却很明显。比较这两个子图，我们可以发现 CB1, HH1, LH1, 和 HH2 的包络函数在 InAs/GaSb 异质结界面处出现了一些尖锐的峰，这些尖峰是由局域的微观界面势导致的。而且，HH1 和 HH2 的包络函数比 CB1 和 LH1 的包络函数在超晶格界面处出现的峰要更为尖锐，这是因为重空穴的有效质量比较大因此受到微观界面势的束缚更为强烈一些。重空穴的包络函数在超晶格界面处出现的尖峰表明微观界面势具有束缚空穴的能力。更为重要的是，由于微观界面效应的存在，电子和空穴的包络函数在界面处的交叠程度明显提高，这意味着在 InAs/GaSb 无共有原子短周期超晶格系统中存在很强的带间光跃迁。

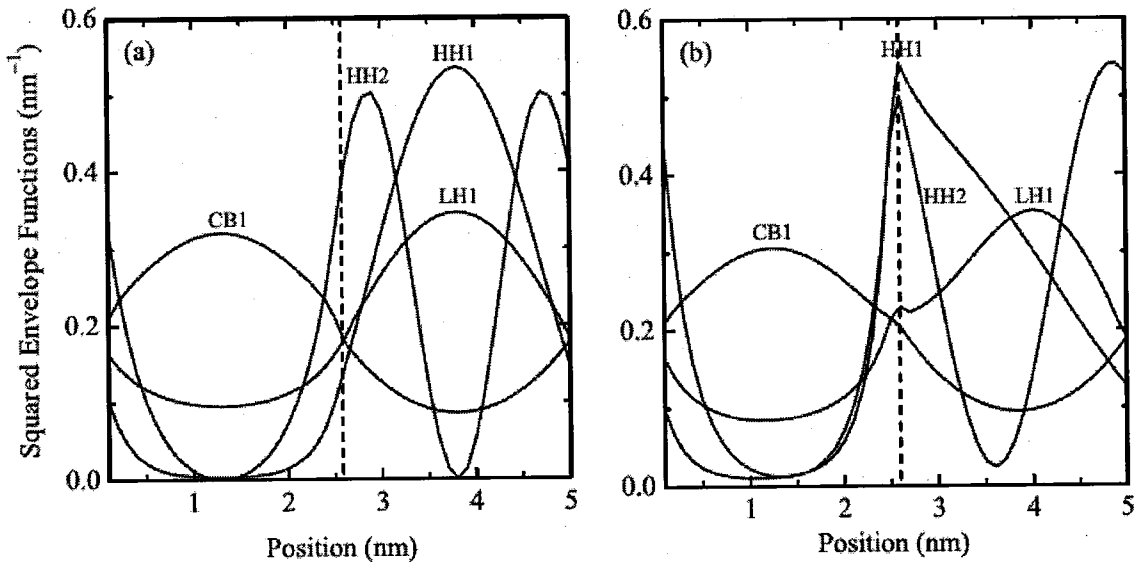


图 3-6 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的布里渊区中心的包络函数模方：图(a)和图(b) 分别对应不包含和包含微观界面效应的计算结果，图中的竖直虚线代表超晶格的界面。

对于 InAs/GaSb 超晶格在光电器件方面的应用，计算光学跃迁矩阵元是非常有必要的，因为它基本上确定了这些光电器件的光学性质。对于给定的光场偏振方向 $\vec{\epsilon}$ ，我们首先定义在超晶格价带 ζ 和导带 η 之间的带间光跃迁矩阵元模方：

$$I_{\zeta\eta}(\vec{\epsilon}, \vec{k}, q) = \frac{2}{m_0} \sum_{m,n} |\vec{\epsilon} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k}, q)|^2 \quad (3-6)$$

这里，由于能带的自旋特性，指标 n 取遍导带 η 上的所有自旋态，指标 m 取遍价带 ζ 上的所有自旋态。然后，相对于不同的光场偏振方向 $\vec{\epsilon}_1$ 和 $\vec{\epsilon}_2$ ，光学各向异性可定义为：

$$\lambda_{\zeta\eta}(\vec{k}, q) = \frac{|I_{\zeta\eta}(\vec{\epsilon}_2, \vec{k}, q) - I_{\zeta\eta}(\vec{\epsilon}_1, \vec{k}, q)|}{|I_{\zeta\eta}(\vec{\epsilon}_2, \vec{k}, q) + I_{\zeta\eta}(\vec{\epsilon}_1, \vec{k}, q)|} \quad (3-7)$$

以前的研究结果已经表明在无共有原子超晶格系统中，相对于不同的光场偏振方向，系统中的微观界面效应可以引起明显的光学各向异性现象[105-107]。为了观测到无共有原子超晶格系统中这个明显的光学各向异性，实验中的光场偏振方向通常设定为 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向[105,106]。这一实验设置将在下面的讨论中给出其原因。在数值计算中，我们让光场的偏振方向 $\vec{\epsilon}$ 在超晶格二维平面或 (x,y) 平面内变化，用一个角度 θ 来表示光场的偏振方向沿 x 轴和 y 轴的投影，即 $\vec{\epsilon} = \cos(\theta)\vec{e}_x + \sin(\theta)\vec{e}_y$ ，其中 $\vec{e}_x$ 和 $\vec{e}_y$ 为单位矢量。我们计算的是布里渊区中心的带间光跃迁矩阵元随二维平面角 θ 的变化关系。

图 3-7 显示的是 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的布里渊区中心的两个主要带间光跃迁矩阵元模方在二维平面内 x 和 y 方向上的投影，其中子图(a)和子图(b)分别对应不包含和包含微观界面效应的计算结果。比较这两个子图，我们不难发现：

- (1) 不考虑微观界面效应，光跃迁矩阵元模方是不随光场的偏振方向变化而变化的，因为光跃迁矩阵元模方在二维平面内 x 和 y 方向上的投影是各向同性的圆。
- (2) 考虑微观界面效应，光跃迁矩阵元模方在二维平面内 x 和 y 方向上的投影呈现出明显的各向异性并具有二重旋转对称性，这一特点是由于无共有原子超晶格系统具有 C_{2v} 点群对称性：它包括一个平行于生长方向的二重旋转轴和两个相互垂直的镜像对称面。从图 3-7 可以很明显的看出，微观界面效应是导致光跃迁矩阵元各向异性的原因，当光场沿 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向偏振时，二维平面内的光学各向异性最强。这一特点可以作如下的理解：在 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统

中, 在一个超晶格周期内, 其中一个界面含有 Ga-As 键位于(110)平面内和 In-As 键位于(1 $\bar{1}$ 0)平面内, 而相邻的另一个界面含有 In-Sb 键位于(110)平面内和 Ga-Sb 键位于(1 $\bar{1}$ 0)平面内。由于光学各向异性强烈的依赖于界面化学键空间排列的各向异性, 当光场沿着两个不等价的超晶格界面的法线方向即[110]和[1 $\bar{1}$ 0]方向偏振时, 系统呈现出最强的光学各向异性。而且, 由于这种光学各向异性是由微观界面效应引起的, 其程度很敏感地依赖于微观界面势的强度, 微观界面势的强度越大, 光学各向异性的程度越高。从以上的讨论可以看出, 为了在无共有原子超晶格系统中观测到很明显的光学各向异性现象, 实验中的光场偏振方向应该设定为[110]和[1 $\bar{1}$ 0]方向。在下面的计算中, 我们将和通常的实验设置一样[105,106], 将光场的偏振方向设定为[110]和[1 $\bar{1}$ 0]方向。

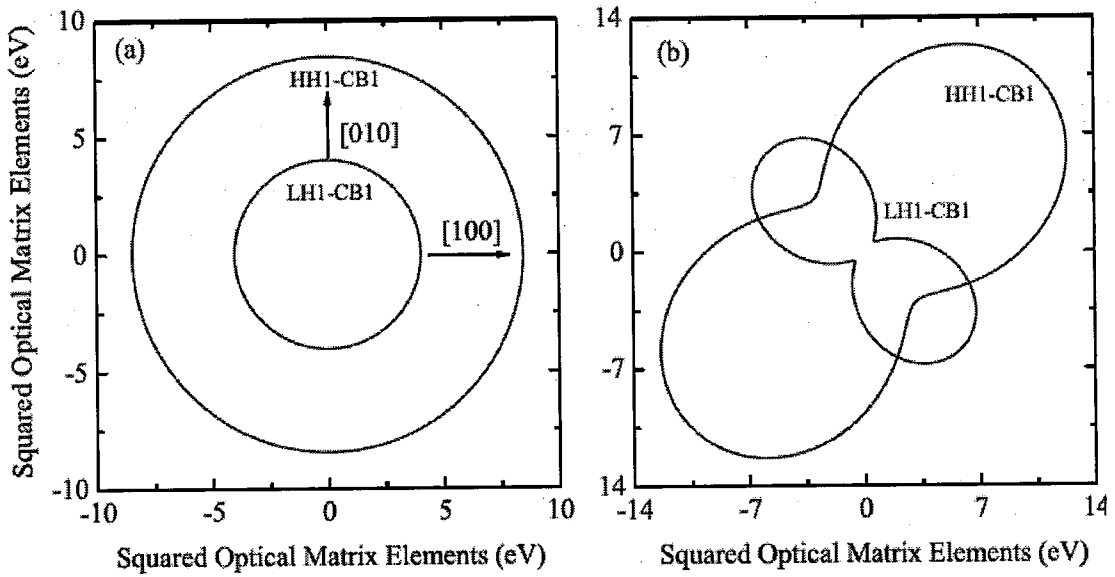


图 3-7 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的布里渊区中心的光学矩阵元模方在二维平面内 x 和 y 方向的投影: 图(a)和图(b)分别对应不包含和包含微观界面效应的计算结果。

图 3-8 显示的是在 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格系统中 HH1-CB1, LH1-CB1, 以及 HH2-CB1 的光跃迁矩阵元模方随二维平面波矢 $\vec{k}$ 和超晶格波矢 $\vec{q}$ 的变化关系, 其中子图(a)和子图(b)分别对应不包含和包含微观界面效应的计算结果。从该图可以看出: (1) 由于所考虑的超晶格系统的层厚很薄, $L_A/L_B=25/25$ Å, 光跃

迁矩阵元强烈地依赖于波矢 $\vec{k}$ 和 q 。(2) 沿着波矢 $\vec{k}$ 和 q 的方向, 微观界面效应在 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向的光跃迁矩阵元之间引起了很大的差异性。这是由于系统中的微观界面效应不仅降低了系统二维平面的对称性, 其后果是引起了光跃迁矩阵元依赖波矢 $\vec{k}$ 的光学各向异性, 而且也降低了系统沿 $[001]$ 生长方向的平移对称性, 其后果是引起了光跃迁矩阵元依赖于波矢 q 的各向异性。

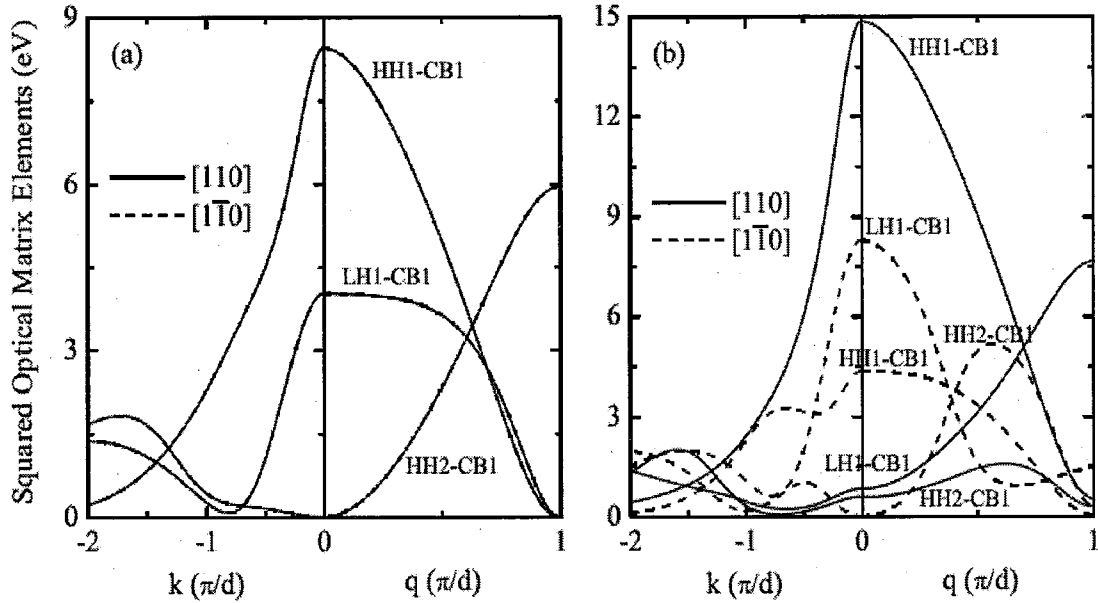


图 3-8 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的光学矩阵元模方随波矢 k 和 q 的变化关系: 图(a)和图(b)分别对应不包含和包含微观界面效应的计算结果。

为了计算 InAs/GaSb 无共有原子系统的光学吸收系数, 我们利用洛仑兹函数来展开等式(3-5)中的能量守恒 δ 函数, 即 $\delta(x) = (\Gamma_0/\pi)/(x^2 + \Gamma_0^2)$, 其中 Γ_0 是由系统中的各种散射机制导致的能级展宽因子。一般来说, 展宽因子 Γ_0 可以通过费米黄金规则计算得到。这里, 我们用一个唯象的公式来计算 [126]: $\Gamma_0 = \Gamma_1 + \Gamma_2/[\text{Exp}(\hbar\omega_0/k_B T) - 1]$, 其中 Γ_1 和 Γ_2 是常数, $\hbar\omega_0$ 是光学声子的能量。在这个唯象的表达式中, 第一项 Γ_1 表示的是由与温度无关的散射机制引起的展宽因子, 比如杂质散射和界面散射, 第二项与 Γ_2 和 $\hbar\omega_0$ 有关的, 表示的是由与温度有关的散射机制引起的展宽因子, 比如声子散射。对于 InAs 和 GaSb 材料, 它

们的光学声子能量几乎相等, $\hbar\omega_0(\text{InAs}) = \hbar\omega_0(\text{GaSb}) = 30 \text{ meV}$ 。目前在 InAs/GaSb 系统中还没有 Γ_1 和 Γ_2 的文献值, 在这个工作中, 我们取 $\Gamma_1 = 4.5 \text{ meV}$ 和 $\Gamma_2 = 44.3 \text{ meV}$ 。在这两个取值情况下, 展宽因子在 $T=77 \text{ K}$ 时为 $\Gamma_0 = 5 \text{ meV}$ 而在 $T=300 \text{ K}$ 时为 $\Gamma_0 = 25 \text{ meV}$, 其量级与一般的与温度相关的吸收线宽值相吻合 [127,128]。我们知道在非掺杂的 InAs/GaSb 超晶格系统中, 光场的存在可以使 GaSb 层中的价带电子激发到 InAs 层中的导带上去。一般来说, 激发的光生载流子浓度与光场的强度和频率以及各种散射机制有关。在这个工作中, 我们假定在非掺杂的 InAs/GaSb 超晶格系统中, 光生载流子浓度 N_0 大约为 $10^{15} \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 。在光激发的状态下, 系统中的电子和空穴的准费米能级可以通过下式计算:

$$N_0 = \sum_{n,\vec{k},q} f[E_n(\vec{k},q)] = \sum_{m,\vec{k},q} \{1 - f[E_m(\vec{k},q)]\} \quad (3-8)$$

图 3-9 显示的是 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格系统在 $T=77 \text{ K}$ 和 $N_0=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 时的光吸收谱, 其中子图(a)和子图(b)分别对应不包含和包含微观界面效应的计算结果。从该图我们可以看出以下几个特征: (1) 光吸收谱线相当的展宽并且几乎没有明显的结构。这是因为我们所考虑的超晶格体系非常薄, 超晶格能带具有很强的色散, 比如沿波矢 $\vec{k}$ 方向的超晶格子带和沿波矢 q 方向的超晶格微带的色散都很强。(2) 由于第二类超晶格系统不存在体系的宏观对称性, 光跃迁的字称选择定则被解除, 导致本来一些宇称禁戒的光跃迁变为宇称允许的, 这种情况在具有宏观对称性的第一类超晶格系统中是不存在的。因此, 除了 HH1-CB1 和 LH1-CB1 的光跃迁通道对超晶格系统的光吸收有贡献外, HH2-CB1 的光跃迁通道也有贡献, 尽管由于 HH2 和 CB1 的包络函数在超晶格界面处的交叠耦合很小而导致这个贡献并不是很大。(3) 微观界面效应使 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向的光吸收系数之间产生了很明显的各向异性, 这是各向异性的光跃迁矩阵元带来的直接后果, 如图 3-8 所示。(4) 由于光吸收系数正比与光跃迁矩阵元的模方, 对于光场沿 $[110]$ 方向偏振, 考虑微观界面效应时的光吸收系数比不考虑时要大, 而对于光场沿 $[1\bar{1}0]$ 方向偏振, 考虑微观界面效应时的光吸收系数比不考虑时要小。另

外,我们还发现当考虑微观界面效应时,光吸收的截止频率出现蓝移的特点,这是微观界面效应导致禁带宽度减小的缘故。

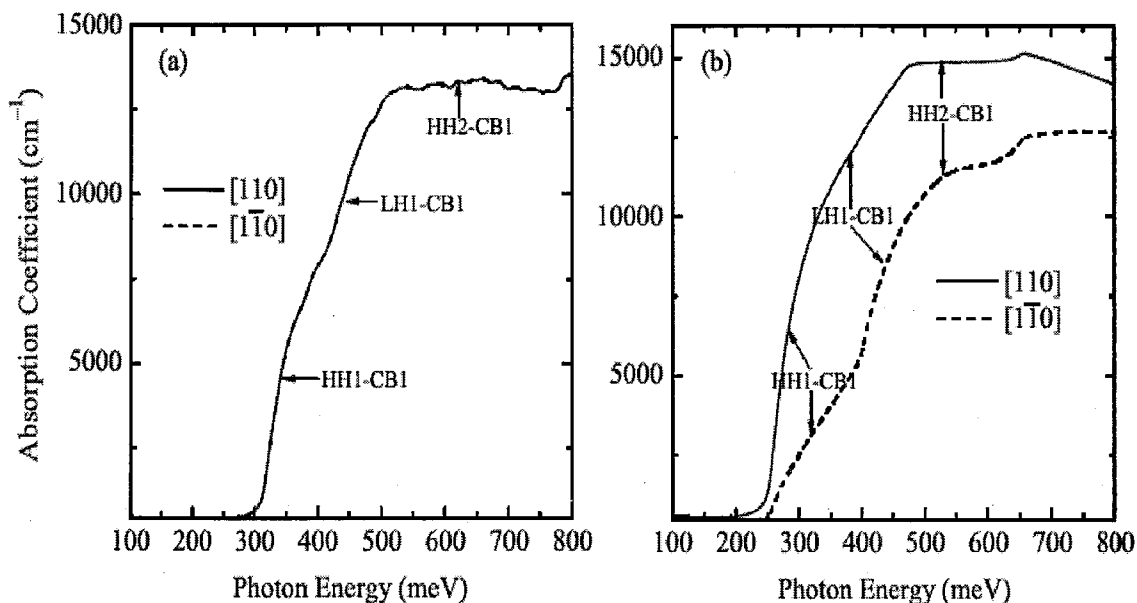


图 3-9 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的光学吸收系数: 图(a)和图(b)分别对应不包含和包含微观界面效应的计算结果。图中温度设定为 $T=77\text{ K}$ 和光生载流子浓度设定为 $N_0=10^{16}\text{ cm}^{-3}$ 。

定义任意两个不同偏振方向的光学吸收系数之间的相对差为光学极化率,我们可以进一步地在光吸收系数计算的基础上计算这个极化率,其表达式为:

$$P_{\omega} = \frac{|\alpha_2(\omega) - \alpha_1(\omega)|}{|\alpha_2(\omega) + \alpha_1(\omega)|} \quad (3-9)$$

这里, $\alpha_1(\omega)$ 和 $\alpha_2(\omega)$ 分别表示光场偏振方向为 $\vec{\epsilon}_1$ 和 $\vec{\epsilon}_2$ 时的吸收系数。对应图 3-9, 图 3-10 显示的是当光场的偏振方向为 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向时 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格系统的光极化率随光子频率的变化关系, 我们称为光极化谱。从图中我们可以看到: (1) 极化谱在整个给定的光子频率区间都相当的展宽, 这是因为所有的从价带到导带的光跃迁通道对光吸收都有贡献。(2) 极化率的最大值接近 55% 并且这个峰值的位置在 HH1-CB1 光跃迁的频率区间内, 这是因为光场沿 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向偏振时 HH1-CB1 光跃迁矩阵元之间的相对差最大。为了证明在第二类无共有原子超晶格系统中微观界面效应对光学各向异性的影响比第一类无共有原子超晶格系统更加明显, 我们比较了 InAs/GaSb 系统的结果和 Krebs 及其合作

者在 GaAs/InP 系统中得到的结果[105]。我们发现这两个系统的光极化谱存在两个明显的不同之处：(1) 极化率的最大值对于 InAs/GaSb 系统是 55%而对于 GaAs/InP 系统是 40%。(2) 极化谱的宽度对于 InAs/GaSb 系统是 350 meV 而对于 GaAs/InP 系统是 50 meV。从以上这两点可以看出，在 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统中微观界面效应对光学各向异性的影响更加明显因为它本质上取决于电子和空穴的波函数在超晶格界面处的耦合交叠。

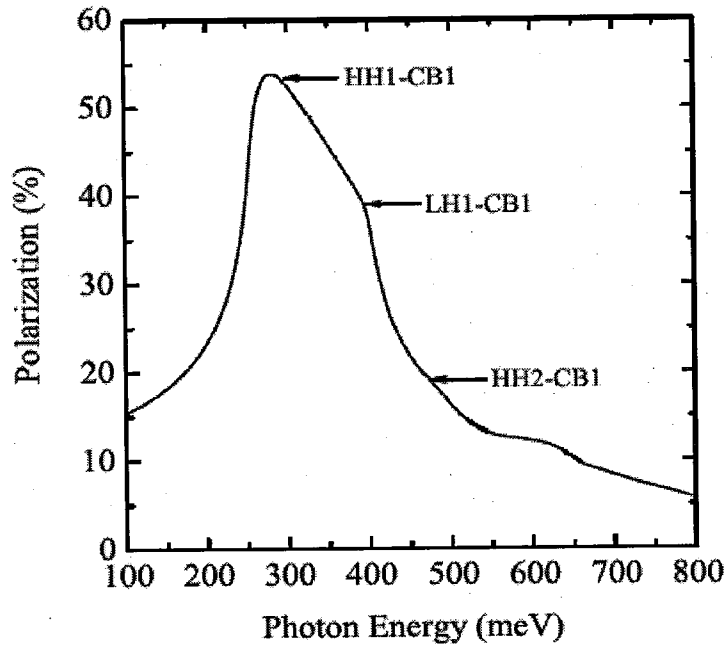


图 3-10 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的光极化谱。图中温度设定为 $T=77\text{ K}$ 和光生载流子浓度设定为 $N_0=10^{16}\text{ cm}^{-3}$ 。

图 3-11 显示的是 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的光极化谱随温度的变化关系。光生载流子浓度取为 $N_0=10^{16}\text{ cm}^{-3}$ 。从图中可以看出，随着温度的升高，光极化率减小并且极化谱的峰宽增加。在高温区 ($T>77\text{ K}$)，光极化率强烈地依赖于温度因为能级的展宽因子 Γ_0 主要是由光学声子散射引起的：温度越高，电子-光学声子相互作用越强，能级越展宽；而在低温区 ($T<77\text{ K}$)，能级的展宽因子 Γ_0 几乎不随温度的变化而变化因为在这个温度区间界面散射起主导作用，这里我们假定的是非掺杂的 InAs/GaSb 超晶格系统。因此，我们预计在无共有原子超晶格系统中，不同的散射机制将会严重地影响由微观界面效应导致的光学极化现象。

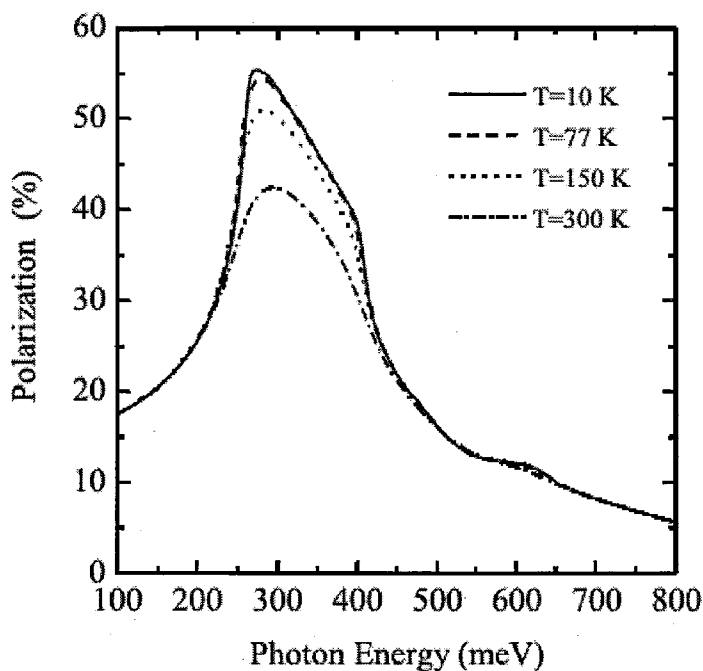


图 3-11 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的光极化谱随温度的变化关系。图中光生载流子浓度设定为 $N_0=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 。

图 3-12 显示的是 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的光极化谱随光生载流子浓度的变化关系。温度设定为 $T=77 \text{ K}$ 。从图中可以看出，光极化谱峰的位置和强度随光生载流子浓度变化很明显。随着光生载流子浓度的增加，InAs 层中的导带电子的准费米能级上升，而 GaSb 层中的价带空穴的准费米能级下降。因为最强的光跃迁发生在这两个准费米能级附近的态上，所以它们之间的能量差反映的是光极化谱峰的位置。因此，随着光生载流子浓度的增加，光极化谱峰的位置出现蓝移。另外，光极化谱峰的强度随着光生载流子浓度的增加而减小，这是由于载流子的能带填充效应导致高浓度下的光跃迁通道数减少，从而导致光吸收强度的减小。图 3-11 和图 3-12 所示的结果表明：为了在 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统中实现最大的光学极化率，我们应该让系统在相对低的温度和载流子浓度的条件下工作。

InAs/GaSb 超晶格系统的一个重要特点在于其光吸收的截止频率和强度可以简单地通过改变 InAs 层和 GaSb 层的厚度来调节。因此，我们可以预计这一特点将会对光吸收谱及其极化谱产生很大的影响。图 3-13 显示的是在 $T=77 \text{ K}$ 和

$N_0=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 时具有不同层厚的 InAs/GaSb 超晶格系统的光极化谱。为简单起见, 我们取 InAs 和 GaSb 层的厚度相等, 即 $L_A=L_B$ 。根据上面的讨论, 光极化谱峰的位置在 HH1-CB1 的光跃迁频率范围内。随着超晶格层厚的增加, 由于量子尺寸效应的减弱, 电子和空穴的束缚能级之间的能量差减小, 因此光极化谱峰的位置出现红移。同时, 随着超晶格层厚的增加, 微观界面的尺寸在整个超晶格周期中所占的比重减小, 导致微观界面效应对光学各向异性的影响减弱, 因此光极化谱峰的强度减小。另外, 对于层厚较大的 InAs/GaSb 超晶格系统如 $L_A=L_B=30$ 和 $35 \text{ \AA}$, 光极化谱曲线出现一些强度较小的次峰, 它们对应于更高导带和更低价带之间的光跃迁。

在结束结果与讨论这部分之前, 我们想强调一点: 在 InAs/GaSb 无共有原子超晶格系统中, 由我们理论计算给出的光学各向异性可以通过光学吸收系数的实验测量进行验证。改变光场在二维平面内的偏振方向, 测量对应的光学吸收系数, 我们很容易观测到有无光学各向异性现象。光场偏振方向的改变可以很方便通过光偏振器来实现。

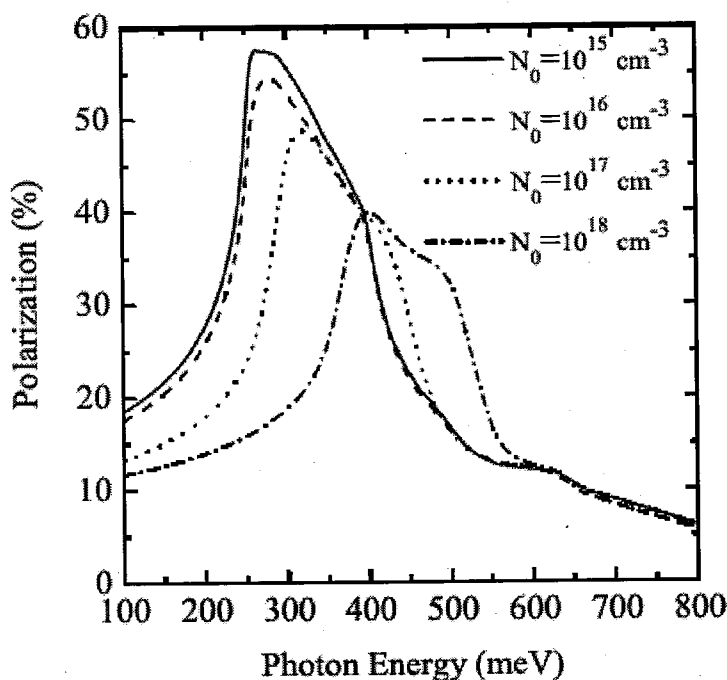


图 3-12 25/25 Å InAs/GaSb 超晶格的光极化谱随光生载流子浓度的变化关系。图中温度设定为 $T=77 \text{ K}$ 。

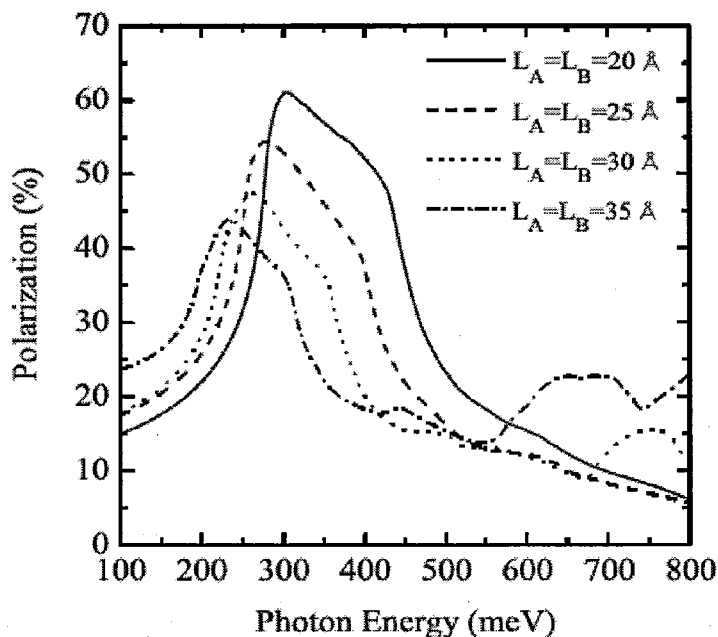


图 3-13 具有不同层厚的 InAs/GaSb 超晶格系统的光极化谱。图中温度设定为 $T=77\text{ K}$ 和光生载流子浓度设定为 $N_0=10^{16}\text{ cm}^{-3}$ 。

3.4 本章小结

我们理论研究了沿[001]方向生长的 InAs/GaSb 短周期超晶格系统中,当光场沿着超晶格二维平面内不同方向偏振时,超晶格系统的光跃迁矩阵元和光吸收系数会出现明显的各向异性。由于这些超晶格是无共有原子系统,微观界面效应是导致这种光学各向异性的物理原因。计算结果显示在这类超晶格系统中,当光场沿[110]和 $[1\bar{1}0]$ 方向偏振时光学各向异性最强。定义任意两个不同偏振方向的光吸收系数之间的相对差为光极化率,我们发现这两个方向的光极化率可以达到50%以上。另外,我们详细地研究了光极化率与温度、光生载流子浓度、以及超晶格层厚之间的依赖关系并得到以下结果: (1) 随着温度的升高,电子-光学声子相互作用增强,能级的展宽因子增大,导致光极化率减小。(2) 随着载流子浓度的增大,由于能带填充效应,光极化率峰值的位置蓝移,同时由于光跃迁通道数的减少,光极化率减小。(3) 随着超晶格层厚的增大,由于量子限制效应的减弱,光极化率峰值的位置红移,同时微观界面的尺寸在整个超晶格周期中所占的比重减小,导致光极化率的减小。这些结果对设计基于 InAs/GaSb 短周期超晶格系统的光学极化器件具有重要的指导意义。

第四章 InAs/GaSb 超晶格系统的中红外光吸收特性

摘要: 我们利用八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量理论和 Boltzmann 能量平衡方程方法研究了沿 [001] 方向生长的 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格系统的中红外光吸收特性。我们发现当 InAs 和 GaSb 层的厚度在 20 Å 和 25 Å 左右时, 超晶格的禁带宽度在 3~5 μm 的中红外波段内。因为 InAs/GaSb 超晶格是无共有原子的材料系统, 所以微观界面效应对其禁带宽度的影响非常重要。通过调节一个表征 InSb 型界面势强度的参数, 理论计算的禁带宽度与实验结果在一系列超晶格样品上都非常吻合。在这些超晶格系统中, 光吸收的截止频率取决于超晶格的禁带宽度。改变超晶格的层厚, 我们可以连续系统地调节光吸收的截止频率: 固定 GaSb 层的厚度为 24 Å, 当 InAs 层的厚度从 17 Å 增加到 23 Å, 光吸收的截止频率从 346 meV 减小到 275 meV; 而固定 InAs 层的厚度为 21 Å, 当 GaSb 层的厚度从 18 Å 增加到 24 Å, 光吸收的截止频率却从 254 meV 增加到 310 meV。理论计算的光吸收谱与实验测量的光响应谱符合的比较好。这些研究表明 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格可以用于中红外波段的光探测, 证实了相关的实验发现。

4.1 研究背景

在 InAs/GaSb 第二类超晶格系统中, 电子和空穴分别被束缚在 InAs 和 GaSb 层中。这一特点和传统的第一类超晶格系统如 GaAs/AlGaAs 系统有着明显的不同: 在 GaAs/AlGaAs 超晶格系统中, 电子和空穴被束缚在同一材料层中 (GaAs 层)。因此, 在 InAs/GaSb 超晶格系统中, InAs 层中的束缚电子态和 GaSb 层中的束缚空穴态之间的能量差可以简单地通过改变超晶格层厚来调节。而且, 由于在 InAs/GaSb 第二类超晶格系统的能带排布结构中, 组分材料 InAs 的导带边能量比 GaSb 的价带边能量要低, 超晶格的禁带宽度可以在 2~30 μm 之间很大的一个波段范围内调节。在非掺杂的 InAs/GaSb 超晶格系统中, 光子-电子相互作用使得系统存在两种主要的光跃迁途径: 一种是光将 GaSb 层中的价带电子激发到 InAs 层中的导带上去, 我们称这一过程为发生在不同层之间的带间光跃迁, 这种光跃迁主要通过电子和空穴的波函数在 InAs/GaSb 异质结界面处的交叠耦合实现, 跃迁不受波函数的宇称选择定则限制; 另一种是光将 GaSb 层中能量较低

的价带电子激发到能量较高的价带上去, 或者 InAs 层中能量较低的导带电子激发到能量较高的导带上去, 我们称这一过程为发生在同一层内的带内光跃迁, 这种光跃迁类似于传统的第一类超晶格系统中的带内光跃迁, 它主要通过电子或空穴的波函数在 InAs 或 GaSb 层内的交叠耦合实现, 跃迁受波函数的宇称选择定则限制。由于 InAs 层中的束缚电子态和 GaSb 层中的束缚空穴态可以简单地通过改变超晶格层厚来调控, 这些带间和带内的光跃迁通道也可以很方便地通过这一手段来控制。由于这些独特的材料和物理性质, InAs/GaSb 超晶格系统被认为是制备第三代红外探测器的首选材料系统[70]。特别是, 近年来 InAs/GaSb 短周期超晶格系统被建议用来制备工作在中红外波段的非冷却型的光探测器[125]。

实验上已经发现当 InAs/GaSb 超晶格的层厚在 20/25 Å 左右时, 处在中红外波段的超晶格禁带宽度可以在 InAs 层中的最低导带和 GaSb 层中的最高价带之间实现[125]。更重要的是, 在 $T=10\text{ K}$ 时, 实验已经观测到在这两个能带之间的光跃迁可以产生很强的光响应信号[125]。这些重要的实验发现对 InAs/GaSb 短周期超晶格系统可以用来制备非冷却型的中红外探测器带来了一些新的曙光。为了解释这些实验发现, Szmulowicz 及其合作者发展了一个修正的包络函数近似模型来计算 InAs/GaSb 短周期超晶格系统的禁带宽度[113]。这一理论模型将 InAs/GaSb 短周期超晶格系统中的微观界面效应考虑到标准的包络函数近似方法中。由于 InAs/GaSb 超晶格是无共有原子的材料系统, 其中存在 InSb 型和 GaAs 型两种不对称的理想界面, 导致微观界面效应的产生。通过拟合两个分别表征 InSb 型和 GaAs 型界面势强度的可调参数, 理论计算的禁带宽度和实验结果符合的非常好[113]。

理论上, InAs/GaSb 超晶格系统的电子性质如电子能带结构、载流子波函数分布、以及自旋劈裂性质已经被很多模型方法描述的相当好了, 这些模型方法包括经验赝势方法[112], 修正的包络函数近似方法[113], 和经验紧束缚方法[129]。Haugan 及其合作者在实验上对这类超晶格系统的光学性质进行了广泛而系统的研究[125,130]: 他们测量并分析了这类超晶格系统的光响应谱[125]和光致发光谱[130]。尽管如此, 在 InAs/GaSb 超晶格系统的光学性质方面, 仍然缺乏系统的理论研究, 而这些研究却可以为超晶格探测器设计提供一些重要的物理基础。

因此,在这个工作中,我们将系统地研究 InAs/GaSb 短周期超晶格系统的光学性质,比方说光吸收特性。在前一个工作中,我们利用包含微观界面效应的八带 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量模型和 Boltzmann 能量平衡方程方法研究了 InAs/GaSb 超晶格系统中由微观界面效应引起的光学各向异性现象。在这个工作中,我们仍然利用包括微观界面效应的八带 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量模型来计算 InAs/GaSb 短周期超晶格系统的电子能带结构并寻找对应于中红外波段的禁带宽度。在电子能带结构的基础上,我们可以进一步运用 Boltzmann 能量平衡方程方法计算材料系统的光吸收系数。应当注意的是,在前一个工作中,为了研究超晶格系统中的光学各向异性现象,我们采用的是正入射的线偏振光,这与相关的实验设置是一致的,而在这个工作中,我们采用正入射的非偏振光研究超晶格系统的光吸收特性,这是实验测量光响应谱和光致发光谱的一般要求,我们将系统地研究超晶格层厚对超晶格禁带宽度和光吸收谱的影响并将研究结果与实验发现联系起来,它能帮助我们更好地理解 InAs/GaSb 短周期超晶格系统在中红外探测应用方面的物理机制并且也能为超晶格红外探测器的设计提供一些有用的指导。

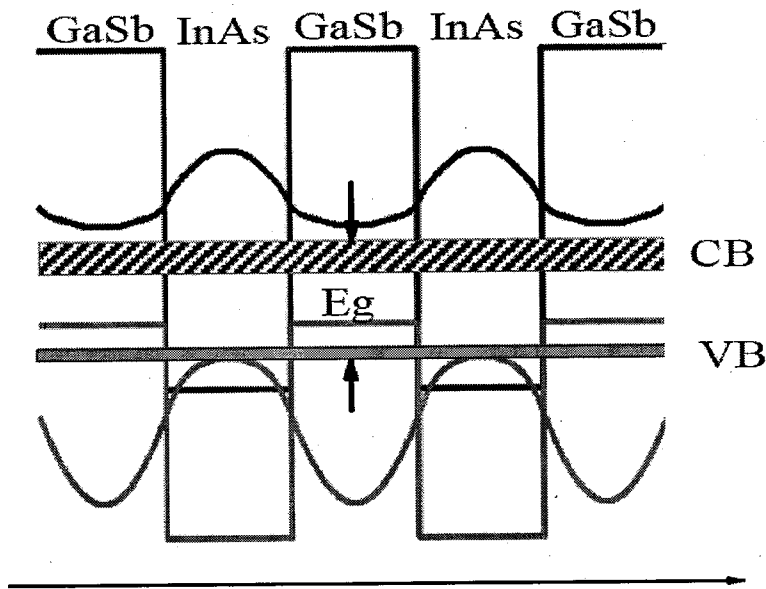


图 4-1 InAs/GaSb 第二类超晶格系统的能带排布结构图。图中示意了超晶格最低的电子微带(CB)和最高的空穴微带(VB)的形成机制以及两者之间的禁带宽度(E_g)。

4.2 理论方法

我们考虑具有第二类能带排布结构的 InAs/GaSb 短周期超晶格系统，其中的电子和空穴波函数在界面处有很明显的交叠，如图 4-1 所示。定义 z 轴是超晶格的系统的生长方向即[001]方向， x 轴和 y 轴分别沿[100]和[010]方向。在如下的 Bloch 轨道基组下，

$$|S\uparrow\rangle, |X\uparrow\rangle, |Y\uparrow\rangle, |Z\uparrow\rangle, |S\downarrow\rangle, |X\downarrow\rangle, |Y\downarrow\rangle, |Z\downarrow\rangle \quad (4-1)$$

超晶格系统的八带 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 哈密顿量可以写成：

$$H(\vec{K}) = H_{KP} + H_{SO} + H_F \quad (4-2)$$

这里， H_{KP} 是与 $\vec{K}$ 相关的哈密顿量， H_{SO} 是自旋-轨道相互作用项， H_F 描述的是由微观界面效应引起的哈密顿量。

以上三个哈密顿量的具体表达式可参考第二章第一节和第三章理论方法的内容，本章不再重复。这里我们只是简单介绍一下各个哈密顿量依赖的一些物理参数。 H_{KP} 依赖以下这些参数：导带边和价带边的能量 E_c 和 E_v ，带间动量矩阵元 P ，导带的电子有效质量 m^* ，价带的三个 Luttinger 参数 γ_i ($i=1,2,3$)； H_{SO} 依赖于价带的自旋-轨道劈裂能 Δ ； H_F 表示的是由微观界面效应引起的一个短程的界面势，其局域在超晶格界面处半个原子层厚度的范围内(大约 $2 \text{ \AA}$)，它依赖于一个表征该界面势强度的参数 H_{XY} 。

超晶格系统的电子能带结构和相关的载流子波函数可以通过如下的薛定谔方程求出：

$$H\Psi = E\Psi \quad (4-3)$$

这里， $H = H(\vec{K})$ 是系统总的八带 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 哈密顿量， $\Psi = \Psi(\vec{k}, \vec{q}, r, z)$ 是系统中的电子和空穴的波函数， $E = E(\vec{k}, \vec{q})$ 是系统的电子能带结构。通过做算符替换 $k_z \rightarrow -i d/dz$ ，我们可以将(4-3)所示的薛定谔方程转变为八个耦合的二阶微分方程。利用有限差分方法，我们可以将这个耦合的二阶微分方程组转化为一个求解矩阵本征值的问题。

题,通过直接对角化方法便能得到超晶格系统的本征值和本征态。该数值方法的具体实现过程可参考第二章第二节的内容。

获得了电子能带结构和相关的载流子波函数,我们可以利用基于 Boltzmann 方程的能量平衡方程方法计算超晶格系统的光学吸收系数。带间光学吸收系数由下式给出:

$$\alpha = C \sum_{m,n} \sum_{\vec{k},q} f[E_m(\vec{k},q)] \{1-f[E_n(\vec{k},q)]\} |\vec{\varepsilon} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k},q)|^2 \delta[E_m(\vec{k},q) - E_n(\vec{k},q) + \hbar\omega] \quad (4-4)$$

这里,系数 $C = 4\pi\hbar\alpha_0 / (m_0^2\omega)$, m 和 n 为价带和导带的能带指标, $f[E_n(\vec{k},q)]$ 是用费米-狄拉克函数表示的电子能量分布函数, $\vec{\varepsilon} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k},q) = \langle \Psi_n(\vec{k},q,\vec{r},z) | \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} | \Psi_m(\vec{k},q,\vec{r},z) \rangle$ 是导带和价带之间的光跃迁矩阵元, $\vec{\varepsilon}$ 是一单位矢量,代表光场的偏振方向。关于等式(4-4)的具体推导可参考第二章第三节的内容。

理论上,等式(4-4)的求和可以通过数值计算进行。然而,我们可以做一些合理的近似来简化这一计算。做这些近似的物理依据是:由于电子和空穴在超晶格二维平面内的运动可以看成是自由的,只在生长方向上的运动是受到量子尺寸效应限制的,因此电子和空穴的总波函数可以近似地写成一个与二维平面波矢 $\vec{k}$ 相关的平面波函数和一个沿生长方向的包络函数的乘积。在这个物理原因下,我们可以做如下的近似:(1) 假定光跃迁矩阵元模方与 $\vec{k}$ 无关,而只与超晶格波矢 q 有关:

$$|\vec{\varepsilon} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k},q)|^2 = |\vec{\varepsilon} \cdot \vec{M}_{mn}(0,q)|^2 = Q_{mn}(q) \quad (4-5)$$

在计算半导体超晶格的光学性质时,这是一个很常见的近似[131]。Chang 和 Schulman 检验了这一近似的有效性和合理性[117]。(2) 假定导带的能量色散关系可以用抛物线近似[131]:

$$E_n(\vec{k},q) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} + \varepsilon_n(q) \quad (4-6)$$

这里, m_n^* 是电子在第 n 个导带沿二维平面方向的有效质量, $\varepsilon_n(q)$ 是第 n 个导带沿超晶格波矢 q 方向的微带能量色散关系。类似地,我们可以得到价带空穴的抛

物型能量色散关系。一般来说,抛物线近似对导带电子的能量色散关系描述的很好,但对价带空穴的能量色散关系的描述却不是很好。但是文献[131]指出,对于从价带到导带的带间光跃迁,跃迁能量随 $\vec{k}$ 的变化关系主要由导带的能量色散关系确定,因为空穴的有效质量比电子大导致价带比导带要平直。载流子在每一个能带沿二维平面方向的有效质量是根据它们各自的能带结构数值计算出来的。在以上这些合理的近似下,等式(4-4)可以简化成如下的表达式:

$$\alpha = \left(\frac{2\alpha_0}{m_0^2 \hbar \omega} \right) \sum_{m,n} \sum_q \mu_{mn} Q_{mn}(q) f[x_n^-(q)] \{1 - f[x_m^+(q)]\} \Theta[\varepsilon_m(q) - \varepsilon_n(q) + \hbar\omega] \quad (4-7)$$

其中,

$$\begin{aligned} 1/\mu_{mn} &= 1/m_m^* + 1/m_n^* \\ x_n^-(q) &= [m_m^* \varepsilon_m(q) + m_n^* \varepsilon_n(q) - m_n^* \hbar\omega] / (m_m^* + m_n^*) \\ x_m^+(q) &= [m_m^* \varepsilon_m(q) + m_n^* \varepsilon_n(q) + m_m^* \hbar\omega] / (m_m^* + m_n^*) \\ \Theta(x) &= 1 \quad (x \geq 0) \quad [0 \quad (x < 0)] \end{aligned} \quad (4-8)$$

4.3 结果与讨论

在这个工作中,我们只关注沿[001]方向生长的 InAs/GaSb 短周期超晶格的物理性质。我们利用包含微观界面效应的八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 模型来计算超晶格系统的电子能带结构。计算所需要的物理参数在前一章中已经给出过,这里我们不再重复。在 InAs/GaSb 第二类超晶格系统中,理想的界面有两种:一种是 InSb 型的界面,另外一种是在 GaAs 型的界面[124]。早期的研究工作通过比较这两种界面类型发现:(1) 具有 InSb 型界面的系统具有更小的禁带宽度和更大的光吸收系数[132];(2) InSb 型的界面比 GaAs 型的界面更为光滑,导致更高的载流子迁移率以及更长的载流子寿命[133]。近期的研究工作发现 InSb 型的界面可以补偿超晶格系统在生长过程中产生的应变[134]。综合以上这些因素,我们可以看出 InSb 型的界面更有利于 InAs/GaSb 超晶格系统的外延生长和红外探测。因此,在这个工作中我们假定 InAs/GaSb 超晶格系统只存在 InSb 型的微观界面,即 $H_{XY}^{AB} = H_{XY}^{BA} = H_{XY}$, 其中 H_{XY}^{AB} 和 H_{XY}^{BA} 分别是表征 GaAs 型和 InSb 型界面势强度的可调参数。另外,在这个工作中,我们还忽略了超晶格系统中的应变效应,主要是由于(1) InAs 和

GaSb 之间的晶格失配度很低(大约 0.39%)以及(2) InSb 型界面层对系统的应变补偿[134]。

由于超晶格能带在二维平面方向已经被近似为抛物型的色散关系, 这里我们只关注沿超晶格生长方向的能量色散关系, 即超晶格微带也就是能带结构随超晶格波矢 q 的变化关系。我们用一个典型的 InAs/GaSb 短周期超晶格系统来呈现其微带结构的计算结果。取 InAs/GaSb 的层厚为 $L_A/L_B=20/25 \text{ \AA}$, 以及表征 InSb 型界面势强度的可调参数 $H_{XY}=500 \text{ meV}$ (这个值和其他一些理论工作[113]所取的数值在同一个数量级)。图 4-2 显示的是这个超晶格系统的微带结构的计算结果, 其中 $d=L_A+L_B$ 是超晶格的周期。从图中可以看出, 这里只有四个超晶格微带, 分别以 CB1 标记第一个电子微带, 以 HH1 和 HH2 标记第一个和第二个重空穴微带, 以 LH1 标记第一个轻空穴微带。沿着超晶格波矢 q 的方向, CB1 微带是强烈色散的而 HH1 微带的色散非常弱。这是因为重空穴的有效质量比电子的要大, 导致相邻两个超晶格周期内的 HH1 包络函数的交叠小于这两个周期内的 CB1 包络函数的交叠。由于系统中的微观界面效应引起了重空穴态和轻空穴态之间的混合, 在有限的 q 值处 LH1 和 HH2 微带之间出现了不交叉行为。我们发现 CB1 微带和 HH1/LH1/HH2 微带之间的能量差在中红外波段内。

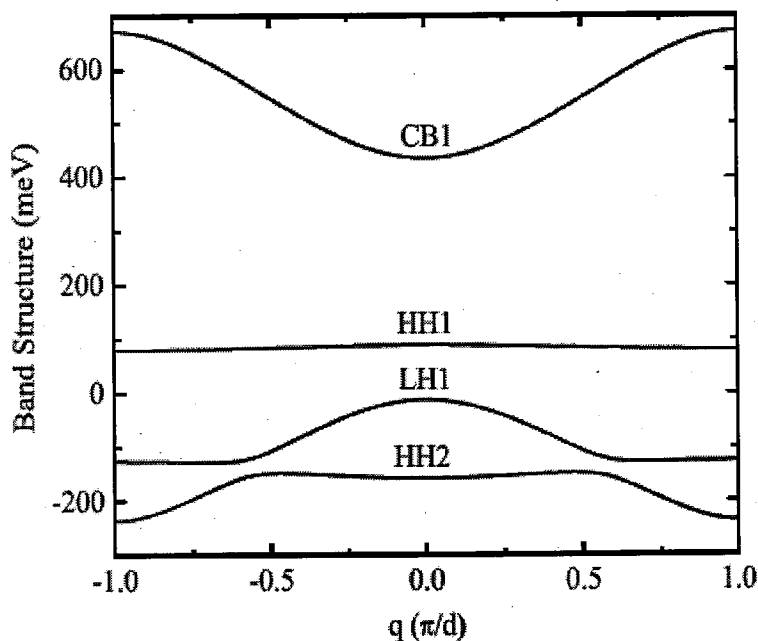


图 4-2 20/25 Å InAs/GaSb 超晶格的能带结构随波矢 q 的变化关系。

为了理解 InAs/GaSb 超晶格系统在红外探测器应用方面的物理机制, 我们有必要计算超晶格系统的光跃迁矩阵元和光吸收系数。对于给定的光场偏振方向 $\vec{\epsilon}$, 我们首先定义在超晶格价带 ζ 和导带 η 之间的带间光跃迁矩阵元模方:

$$I_{\zeta\eta}(\vec{\epsilon}, \vec{k}, q) = \frac{2}{m_0} \sum_{m,n} |\vec{\epsilon} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k}, q)|^2 \quad (4-9)$$

这里, 由于能带的自旋特性, 指标 n 取遍导带 η 上的所有自旋态, 指标 m 取遍价带 ζ 上的所有自旋态。等式(4-9)表明光跃迁动量矩阵元模方的大小与光场的偏振方向有关。由于超晶格系统光吸收谱的实验测量一般要求光场是正入射(沿生长方向传播)且非偏振的[117], 在这种情况下光跃迁动量矩阵元模方可以写成:

$$I_{\zeta\eta}(\vec{\epsilon}, \vec{k}, q) = \frac{1}{m_0} \sum_{m,n} |\vec{x} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k}, q)|^2 + |\vec{y} \cdot \vec{M}_{mn}(\vec{k}, q)|^2 \quad (4-10)$$

这里, $\vec{x}$ 和 $\vec{y}$ 是光场的偏振方向, 分别表示[100]和[010]方向。我们知道在非掺杂的 InAs/GaSb 超晶格系统中, 光场的存在可以使 GaSb 层中的价带电子被激发到 InAs 层中的导带上去。一般来说, 被激发的光生载流子浓度与光场的强度和频率以及各种散射机制有关。在这个工作中, 我们假定在非掺杂的 InAs/GaSb 超晶格系统中, 光生载流子浓度 N_0 大约为 $10^{15} \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 。在光激发的状态下, 系统中的电子和空穴的化学势可以通过下式计算:

$$N_0 = \frac{m_n^* k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_{n,q} \text{Ln} \left\{ 1 + \text{Exp} \left[\frac{E_F^n - \epsilon_n(q)}{k_B T} \right] \right\} = \frac{m_m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_{m,q} \text{Ln} \left\{ 1 + \text{Exp} \left[\frac{\epsilon_m(q) - E_F^m}{k_B T} \right] \right\} \quad (4-11)$$

其中, E_F^n 和 E_F^m 分别是电子和空穴的化学势。另外, 我们设定超晶格系统的温度为 $T=10 \text{ K}$, 和实验条件一致[125]。

图 4-3 显示的是 $20/25 \text{ \AA}$ InAs/GaSb 超晶格的光跃迁矩阵元模方随波矢 q 的变化关系。从图中可以看出, 由于所考虑的超晶格层厚很薄, 光跃迁动量矩阵元强烈地依赖于 q : 随着 $|q|$ 的增加, HH1-CB1 的光跃迁矩阵元模方单调下降, LH1-CB1 的光跃迁矩阵元模方先减小后增加, HH2-CB1 的光跃迁矩阵元模方先增加后减小。LH1-CB1 和 HH2-CB1 的光跃迁矩阵元之间的不交叉行为是 LH1

和 HH2 微带之间的不交叉行为的直接后果。在布里渊区中心, HH2-CB1 的光跃迁矩阵元模方很小, 这是由于 HH2 和 CB1 包络函数在 InAs/GaSb 界面处的交叠耦合很弱。而对于两个主要的光跃迁过程, HH1-CB1 的光跃迁矩阵元模方大约是 LH1-CB1 的三倍。对于这个结果, 我们可以做如下的理解: 将 Bloch 原子轨道 $|S\rangle$ 、 $|X\rangle$ 、 $|Y\rangle$ 以及 $|Z\rangle$ 做适当的线性组合, 我们可以得到导带(CB)、重空穴带(HH)以及轻空穴带(LH)的原子轨道形式, 即导带 $|CB\rangle=|S\rangle$ 、重空穴带 $|HH\rangle=(|X\rangle+i|Y\rangle)/\sqrt{2}$ 以及轻空穴带 $|LH\rangle=(|X\rangle+i|Y\rangle-2|Z\rangle)/\sqrt{6}$ 。对于正入射且非偏振的光场, HH-CB 的光跃迁振荡强度是 LH-CB 的三倍因为 $|\langle CB|p_j|HH\rangle|^2=3|\langle CB|p_j|LH\rangle|^2$ ($j=x,y$)。

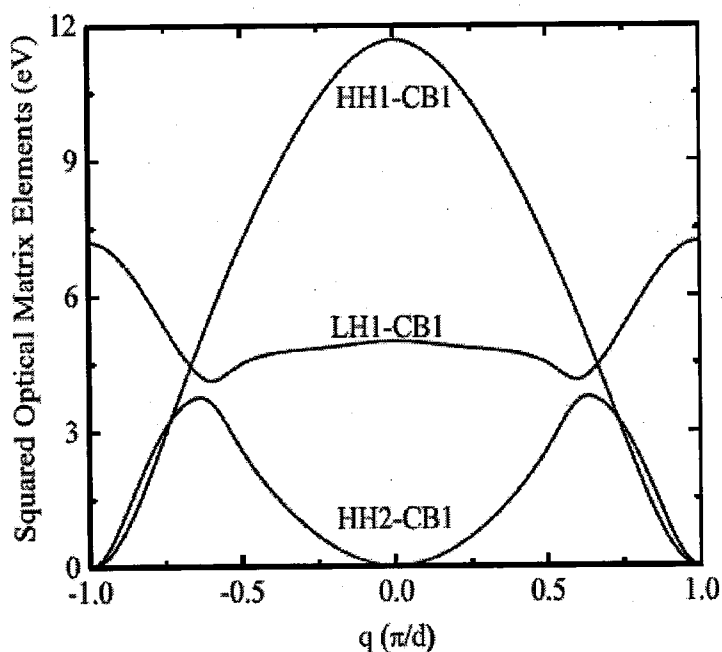


图 4-3 20/25 Å InAs/GaSb 超晶格的光跃迁矩阵元模方随 q 的变化关系。

图 4-2 以及图 4-3 显示的结果已经表明在 20/25 Å InAs/GaSb 超晶格系统中:

- (1) 存在一个电子微带 CB1 和三个空穴微带 HH1/LH1/HH2;
- (2) 电子微带和空穴微带之间的能量差在中红外波段内;
- (3) 存在两个主要的光跃迁通道 HH1-CB1 和 LH1-CB1。根据这些结论, 我们在图 4-4 中给出不同的光跃迁通道在不同的光子能量区间内对系统总的光吸收系数的贡献。因为光吸收系数正比与光跃迁矩阵元的模方, 所以 HH1-CB1 和 LH1-CB1 跃迁对总的光吸收系数有很明显的贡

献, 其中主要贡献来源于 HH1-CB1 跃迁。因为电子微带和空穴微带之间的能量差在中红外波段内, 所以入射光子的能量也在这个频谱范围内, 我们把对应这个波段内的光吸收称为中红外光吸收。在 InAs/GaSb 短周期超晶格中, 由于电子和空穴的包络函数在超晶格界面处的交叠很大, 导致很强的带间光跃迁, 因此在光吸收谱曲线上可以观测到一个很强的吸收边; 同时, 由于超晶格微带结构色散很强, 光吸收谱曲线很宽而且很平滑。

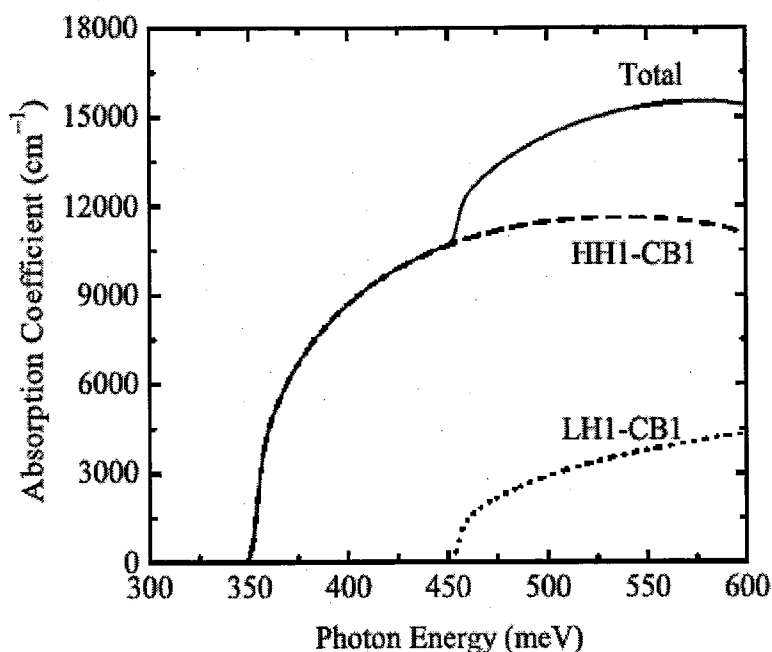


图 4-4 20/25 Å InAs/GaSb 超晶格的光吸收谱曲线。

为了和实验结果对比, 我们的理论模型需要拟合一个表征 InSb 型界面势强度的可调参数 H_{xy} 。我们让 InAs 层和 GaSb 层的厚度从 10 Å 到 30 Å 以 1 Å 的步长变化, 同时固定 GaSb 层和 InAs 层的厚度为 24 Å 和 21 Å。这一连续变化的超晶格层厚覆盖了实验样品的尺寸[125]。通过拟合 19/24 Å InAs/GaSb 超晶格样品的禁带宽度实验值, 我们可以得到 $H_{xy}=750$ meV, 并将这个拟合值用于其他所有超晶格样品的计算。图 4-5 显示的是理论计算的禁带宽度随 InAs 层和 GaSb 层厚度的变化关系。图中实心小圆点表示的禁带宽度的实验值, 实线和虚线分别对应包含和不包含微观界面效应的计算结果, 子图(a)显示的是固定 GaSb 层的厚度时禁带宽度随 InAs 层厚度的变化关系而子图(b)显示的是固定 InAs 层的厚度时禁带宽度随 GaSb 层厚度的变化关系。从图中可以看出, 超晶格样品的禁带宽度在

3~5 μm 的中红外波段内并且可以简单地通过改变 InAs 层和 GaSb 层的厚度来调节。固定 GaSb 层的厚度，禁带宽度随 InAs 层厚度的增加而减小；而固定 InAs 层厚度，禁带宽度随 GaSb 层厚度的增加而增大。如果不考虑超晶格系统中的微观界面效应，我们发现禁带宽度的理论值要比实验值大几十个 meV，而且随超晶格层厚的变化趋势也不符合实验结果(如图中虚线表示的结果)。

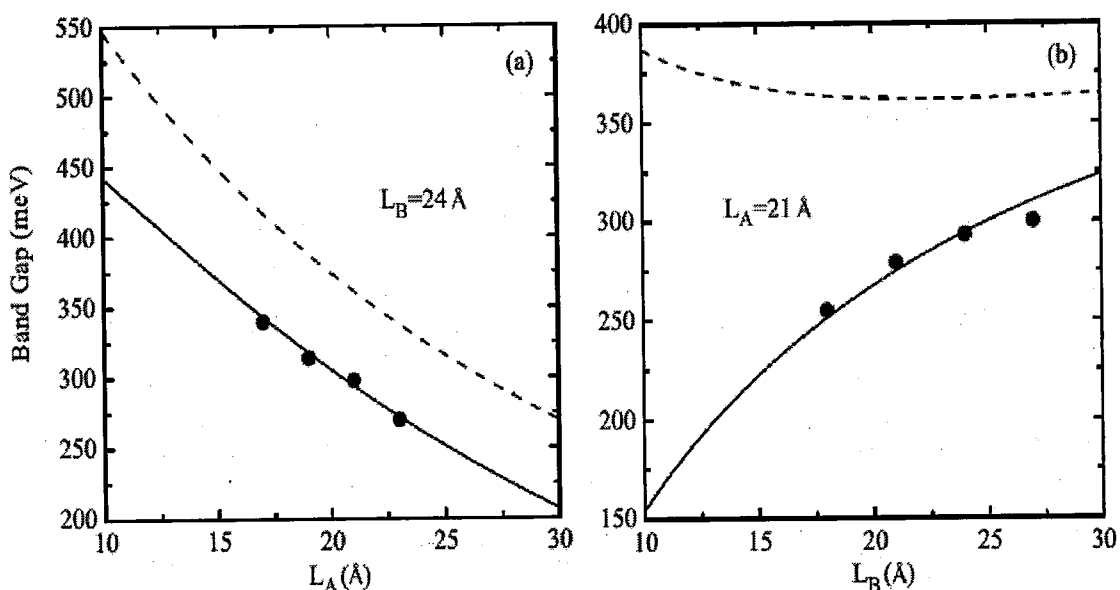


图 4-5 超晶格禁带宽度随 InAs/GaSb 层厚度的变化关系。图中实线和虚线分别代表包含和不包含微观界面效应的计算结果，实心小圆点代表实验结果[125]。

对于图 4-5 中超晶格禁带宽度随 InAs 层和 GaSb 层厚度的变化关系，我们可以做如下理解：对于子图(a)，增加 InAs 层的厚度，超晶格系统的量子尺寸效应减弱，导致 CB1 微带的底部能量下降，同时由于 GaSb 层的厚度是固定的，HH1 微带的顶部能量基本上不会变化，因此超晶格的禁带宽度是减小的；对于子图(b)，超晶格系统的量子尺寸效应似乎不能解释图中超晶格禁带宽度的变化趋势，因为量子尺寸效应给出的解释结果与这一变化趋势正好相反。实际上这一变化趋势的物理原因是这样的：重空穴由于具有较大的有效质量，其包络函数主要被局域在 GaSb 层中，同时电子的包络函数在整个超晶格周期内都比较扩展，因此，随着 GaSb 层厚度的增加，HH1 微带的顶部能量是增加的，同时电子的包络函数在相邻的两个 InAs 层之间的交叠减小，导致 CB1 微带宽度的减小。因为 CB1 微带的中心能量是基本不变的，其带宽的减小导致其底部能量的上升和其顶部能

量的下降。尽管随着 GaSb 层厚度的增加, HH1 微带的顶部能量和 CB1 微带的底部能量是同时增加的, 然而, HH1 微带的顶部能量增加的速率比 CB1 微带的底部能量增加的速率要慢, 因此最终结果是超晶格禁带宽度随 GaSb 层厚度的增加而增大。为了更清楚地看到这些特点, 我们在图 4-6 中给出了 CB1 和 HH1 微带的顶部、中间、以及底部能量随超晶格层厚的变化关系。实际上, 以上所描述的物理图像可以很容易在能带形成的紧束缚理论的框架下理解。

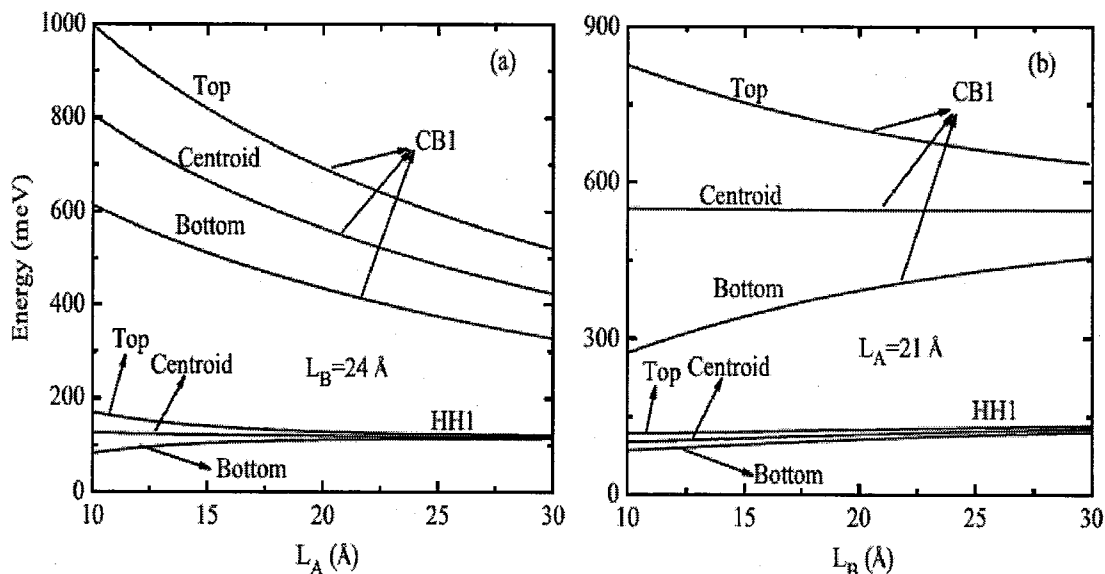


图 4-6 CB1 和 HH1 微带的顶部、中间以及底部能量随超晶格层厚的变化关系。

图 4-7 显示的是理论计算的光吸收谱随超晶格层厚的变化关系, 其中子图(a)显示的是在固定 GaSb 层的厚度时光吸收谱随 InAs 层厚度的变化关系而子图(b)显示的是在固定 InAs 层的厚度时光吸收谱随 GaSb 层厚度的变化关系。这里, 我们选取的是实验中所用的超晶格样品 (其中 0.5 Å 的差别在样品生长尺寸的误差范围内), 目的是为了和实验结果进行直接的对比。从图中可以看出, 这一系列的短周期超晶格样品在 $3\sim 5 \mu\text{m}$ 的中红外波段内具有很强的光吸收, 吸收系数达到 10^4 cm^{-1} 。从子图(a)中可以看到, 固定 GaSb 层的厚度为 24 Å , 增加 InAs 的厚度从 17 Å 到 23 Å , 光吸收的截止频率红移, 从 346 meV 减小到 275 meV 。从子图(b)中可以看到, 固定 InAs 层的厚度为 21 Å , 增加 GaSb 的厚度从 18 Å 到 27 Å , 光吸收的截止频率蓝移, 从 254 meV 增大到 313 meV 。为了和实验结果对比, 我们在图 4-8 中给出实验的光响应谱[125]。可见, 理论的光吸收谱与实验的光响应谱符合的较好。图 4-7 所示的结果表明: 固定 GaSb 层的厚度为 24 Å , 通

过在 20 Å 左右改变 InAs 层的厚度, 超晶格系统光吸收的截止波长可以在 3~5 μm 的中红外波段内调节, 或者固定 InAs 层的厚度为 21 Å, 通过在 25 Å 左右改变 GaSb 层的厚度, 超晶格系统光吸收的截止波长可以在相同波段内调节。这些理论结果表明当 InAs/GaSb 层的厚度在 20/25 Å 左右时, 形成的超晶格系统可以用于 3~5 μm 波段的中红外探测, 证实了相关的实验发现[125]。

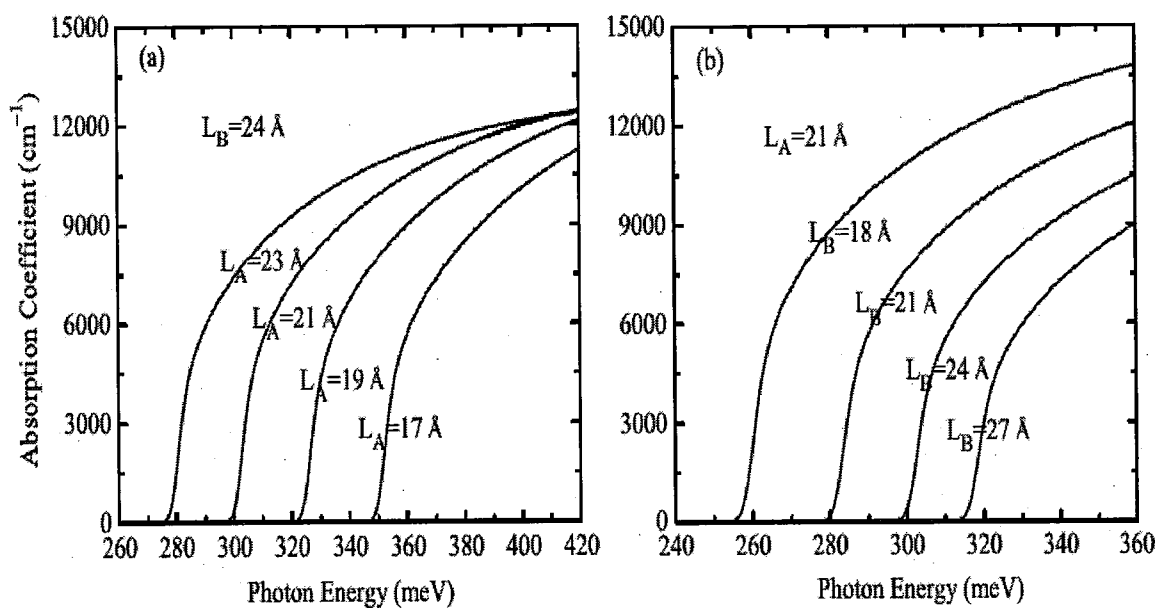


图 4-7 理论计算的光吸收谱随超晶格层厚的变化关系。

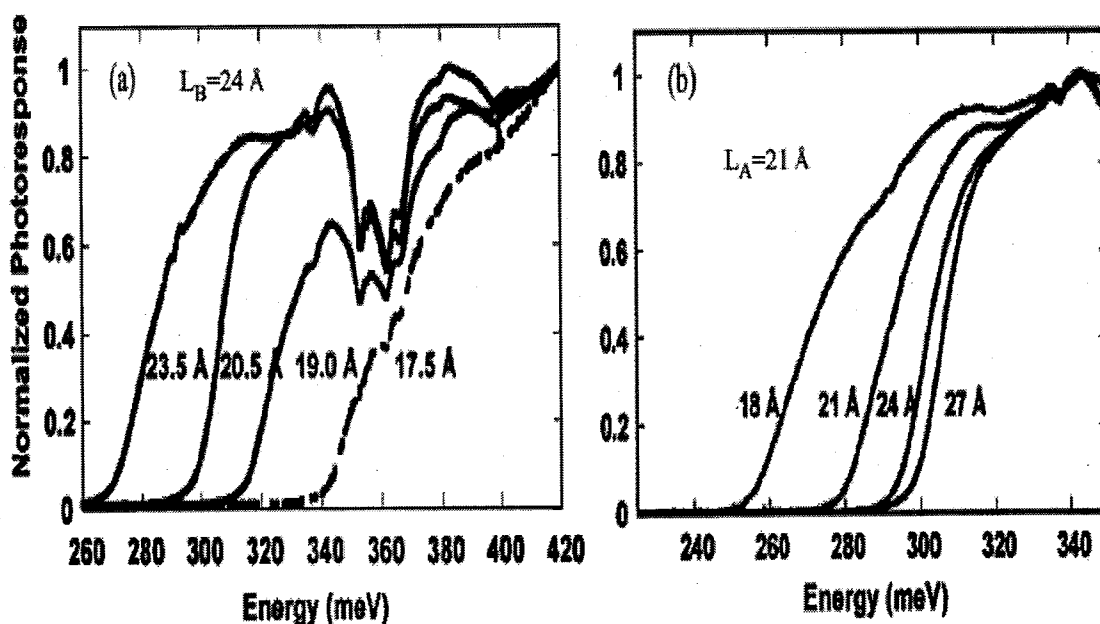


图 4-8 实验测量的光响应谱随超晶格层厚的变化关系[125]。

4.4 本章小结

我们利用八带 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量理论和 Boltzmann 能量平衡方程方法研究了沿 [001] 方向生长的 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格系统的中红外光吸收特性。我们发现当 InAs 层和 GaSb 层的厚度在 20 Å 和 25 Å 左右时, 超晶格系统的禁带宽度在 3~5 μm 的中红外波段内。因为 InAs/GaSb 超晶格系统是无共有原子的材料系统, 所以微观界面效应对其禁带宽度的影响非常重要。通过调节一个表征 InSb 型界面势强度的参数, 理论计算的禁带宽度与实验结果在一系列超晶格样品上都非常吻合。在这些超晶格系统中, 光吸收的截止频率取决于超晶格的禁带宽度。改变超晶格的层厚, 我们可以连续系统地调节光吸收的截止频率: 固定 GaSb 层的厚度为 24 Å, 当 InAs 层的厚度从 17 Å 增加到 23 Å, 光吸收的截止频率从 346 meV 减小到 275 meV; 固定 InAs 层的厚度为 21 Å, 当 GaSb 层的厚度从 18 Å 增加到 24 Å, 光吸收的截止频率却从 254 meV 增加到 310 meV。理论计算的光吸收谱与实验测量的光响应谱符合的比较好。这些研究表明 InAs/GaSb 短周期超晶格可以用于中红外波段的光探测, 证实了相关的实验发现。

第五章 微观界面效应在 InAs/GaSb 超晶格设计中的作用

摘要：我们利用八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 有效质量理论研究了微观界面效应在 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格中红外探测器设计中的作用。研究结果表明通过调节超晶格的层厚，给定的超晶格禁带宽度可以在很多可能的超晶格系统中实现。在这些超晶格系统中：如果不考虑微观界面效应，为了保持给定的超晶格禁带宽度，减小或增大 InAs 层的厚度需要用增大或减小 GaSb 层的厚度来补偿；如果考虑微观界面效应，保持给定的超晶格禁带宽度需要同时减小或增大 InAs 层和 GaSb 层的厚度。微观界面效应除了影响超晶格系统的禁带宽度之外，还会影响到超晶格系统其他的一些物理性质，这些性质包括轻-重空穴带的劈裂能，电子和重空穴的有效质量，以及光跃迁的偶极振荡强度。我们发现当考虑微观界面效应时，较薄的 InAs/GaSb 短周期超晶格系统中红外探测器设计中具有有一些很明显的优点。这些理论研究表明微观界面是一个很重要的设计参数，可以被用来设计优化的 InAs/GaSb 短周期超晶格中红外探测器以增强器件的性能。

5.1 研究背景

Sai-Halasz 和 Esaki 在 1977 年首先提出 InAs/GaSb 超晶格可以用于中红外探测[48]。这些异质结构具有第二类的能带排布结构并且 InAs 层的导带边能量比 GaSb 层的价带边能量要低。由于这一特点，InAs/GaSb 超晶格的禁带宽度可以通过改变 InAs 层和 GaSb 层的厚度在 2~30 μm 的很宽的一个波段范围内调节。在中红外探测方面，InAs/GaSb 超晶格材料引起的极大兴趣是因为它们是相当成熟的 HgCdTe 合金材料的替代物。这两类材料系统具有可比拟的光吸收系数、可调节的截止吸收波长、以及可能的光压效应[135]，但是它们之间有一个很大的不同：除了禁带宽度，InAs/GaSb 超晶格系统的电子能带结构可以进行人工剪裁。这种在能带工程层面上的人工剪裁使得 InAs/GaSb 超晶格材料比 HgCdTe 合金材料在红外探测方面具有更多的优势：(1) 通过电子能带结构的剪裁可以使得重空穴带和轻空穴带之间的能带劈裂较大，从而抑制系统中的 Auger 复合过程；(2) 通过电子能带结构的剪裁可以得到较大的载流子有效质量，从而降低系统的隧穿电流。这些优势使得用 InAs/GaSb 超晶格材料制备的红外探测器在高温操作方面具

有很大的吸引力[136]。相比之下，用 HgCdTe 合金材料制备的红外探测器只能在低温下工作以提高器件的信噪比。低温工作需要的冷却装置不仅增加了整个探测器系统的重量和成本，而且也缩短了它的使用寿命。

InAs/GaSb 超晶格系统的电子性质比如电子能带结构等强烈地依赖于 InAs 层和 GaSb 层的厚度。通过选取合适的超晶格层厚，我们可以调节 InAs/GaSb 超晶格系统的电子能带结构，从而提高材料系统的光吸收强度、抑制系统中的 Auger 复合过程、以及降低系统的隧穿电流。除了超晶格层厚，InAs/GaSb 超晶格系统中的微观界面效应对其电子性质的影响也很大[112]。因为这类超晶格系统是无共有原子超晶格系统，其中存在两种不等价的界面类型即 InSb 型和 GaAs 型的界面[132]，由此导致微观界面效应的产生。在 InAs/GaSb 超晶格红外探测器设计的过程中，微观界面效应在引发一些问题的同时也带来了一些机遇。引发的问题是在这类材料系统的生长过程中，真实的界面可能是 InSb 型和 GaAs 型的界面相互扩散而形成，这使得实验生长和理论模拟都相当的困难。带来的机遇是微观界面效应可以给 InAs/GaSb 超晶格红外探测器设计提供更多的自由度。例如，具有不同晶格常数的 InSb 和 GaAs 界面层可以被用来生长应变补偿的 InAs/GaSb 超晶格系统[134]。在这个工作中，我们从光吸收特性、Auger 复合过程以及载流子的迁移率这三个角度来研究微观界面效应在 InAs/GaSb 短周期超晶格系统中红外探测器设计中的作用，因为这些物理性质直接决定着红外探测器性能的优劣。为此，我们将利用八带 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 模型研究微观界面效应对 InAs/GaSb 短周期超晶格系统的禁带宽度、光跃迁的偶极振荡强度，轻-重空穴带的劈裂能以及载流子的有效质量等物理性质的影响。

5.2 理论方法

考虑具有第二类的能带排布结构的 InAs/GaSb 短周期超晶格系统，定义 z 轴是超晶格的系统的生长方向即[001]方向，x 轴和 y 轴分别沿[100]和[010]方向。在如下的 Bloch 轨道基组下，

$$|S\uparrow\rangle, |X\uparrow\rangle, |Y\uparrow\rangle, |Z\uparrow\rangle, |S\downarrow\rangle, |X\downarrow\rangle, |Y\downarrow\rangle, |Z\downarrow\rangle \quad (5-1)$$

超晶格系统的八带 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 哈密顿量可以写成：

$$H(\vec{K}) = H_{\text{KP}} + H_{\text{SO}} + H_{\text{IF}} \quad (5-2)$$

这里, H_{KP} 是与 $\vec{K}$ 相关的哈密顿量, H_{SO} 是自旋-轨道相互作用项, H_{IF} 描述的是由微观界面效应引起的哈密顿量。以上三个哈密顿量的具体表达式以及其中的物理参数的意义可参见前两章的理论方法部分, 因此我们不再重复。

超晶格系统的电子能带结构和相关的载流子波函数可以通过求解如下的薛定谔方程得到:

$$H\Psi = E\Psi \quad (5-3)$$

这里, $H = H(\vec{K})$ 是系统的八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 哈密顿量, $\Psi = \Psi(\vec{k}, \vec{q}, \vec{r}, z)$ 是系统中的电子和空穴的波函数, $E = E(\vec{k}, \vec{q})$ 是系统的电子能带结构。我们利用有限差分方法来数值求解等式(5-3)所示的薛定谔方程。通过直接对角化所得到的哈密顿矩阵, 我们便得到超晶格系统的本征值和本征态。该数值方法的具体实现过程可参见第二章第二节的内容。

获得了电子能带结构和相关的载流子波函数, 我们可以数值计算(1)带边载流子的有效质量, 即通过对能量色散关系求关于 $\vec{K}$ 的二阶导数:

$$\frac{1}{m_i^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial K_i^2} \quad (i=x, y, z) \quad (5-4)$$

以及(2)光跃迁的偶极振荡强度, 它正比于初末态之间的光跃迁矩阵元模方:

$$f_s = \frac{2}{m_0} |\langle \Psi_f | \vec{\epsilon} \cdot \vec{p} | \Psi_i \rangle|^2 \quad (5-5)$$

其中指标 i 和 f 分别代表光跃迁的初态和末态。

5.3 结果与讨论

在这个工作中, 我们利用八带 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 模型研究微观界面效应对 InAs/GaSb 短周期超晶格系统的禁带宽度、光跃迁的偶极振荡强度、轻-重空穴带的劈裂能以及载流子的有效质量等物理性质的影响, 因为超晶格系统的光吸收特性、Auger 复合过程以及载流子的迁移率与这些物理性质相关而它们又直接决定着 InAs/GaSb 超晶格红外探测器性能的优劣。理论计算所需要的材料参数和第三章

相同,这里不再重复论述。根据第四章的论述,InSb 型的界面更有利于 InAs/GaSb 超晶格系统的外延生长和红外探测,表征其界面势强度的参数 $H_{xy}=750 \text{ meV}$, 这个参数在第四章中也已经给出过。

我们首先研究的是微观界面效应对 InAs/GaSb 短周期超晶格的禁带宽度的影响。表 4-1 列出了 InAs/GaSb 超晶格系统的禁带宽度随 InAs 层和 GaSb 层厚度 L_A 和 L_B 的变化关系。从表中的数据可以看出,包含微观界面效应的计算结果和实验结果符合的非常好。当固定 GaSb 层的厚度时,不包含微观界面效应的计算结果表明虽然禁带宽度的理论值比实验值普遍高出了大约 70 meV 但是它随 InAs 层厚度的变化趋势和实验结果相同,当固定 InAs 层的厚度时,不包含微观界面效应的计算结果表明不仅禁带宽度的理论值比实验值高出了大约 $70\sim 100\text{meV}$ 而且它随 GaSb 层厚度的变化趋势和实验结果大不相同。可见,微观界面效应对 InAs/GaSb 短周期超晶格系统的禁带宽度影响非常大而且超晶格周期越短影响越大,这主要是因为 InAs/GaSb 短周期超晶格系统中,微观界面的尺寸相对于整个超晶格周期来说是不可以被忽略的,它在整个超晶格周期中所占的比重随超晶格周期的减小而增大。

表 4-1 不同的 InAs/GaSb 短周期超晶格系统的禁带宽度,其中 E_g^1 、 E_g^2 、以及 E_g^3 分别对应不包含微观界面效应的计算结果、包含微观界面效应的计算结果以及实验结果[125]。

$L_A/L_B (\text{\AA})$	$E_g^1 (\text{meV})$	$E_g^2 (\text{meV})$	$E_g^3 (\text{meV})$
17/24	417.2	343.3	340
19/24	388.1	317.9	314
21/24	361.7	294.1	298
23/24	337.8	272.0	270
21/18	363.3	251.2	255
21/21	361.6	274.8	279
21/27	362.8	310.1	299

接下来,我们研究微观界面效应在 InAs/GaSb 短周期超晶格中红外探测器设计中的作用。由于光吸收特性、Auger 复合过程以及载流子的迁移率直接决定着

InAs/GaSb 超晶格红外探测器性能的优劣,而它们又与超晶格系统中光跃迁的偶极振荡强度、轻-重空穴带的劈裂能以及载流子的有效质量等物理性质相关,因此我们可以通过计算这些物理性质来研究微观界面效应在 InAs/GaSb 短周期超晶格中红外探测器设计中的作用。利用不包含和包含微观界面效应的八带 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 有效质量模型,我们分别设计了两组 InAs/GaSb 短周期超晶格系统可以用于截止吸收波长为 $4\text{ }\mu\text{m}$ 的中红外探测。我们的设计思想如下:让 InAs 层和 GaSb 层的厚度在 $10\sim 50\text{ }\text{\AA}$ 的区间内同时以 $1\text{ }\text{\AA}$ 的步长变化,逐一的计算对应超晶格系统的禁带宽度,然后在所得到的计算结果中,选取禁带宽度为 310 meV 即截止吸收波长为 $4\text{ }\mu\text{m}$ 的 InAs/GaSb 超晶格系统。利用这一设计思想,在不考虑微观界面效应时我们得到了满足截止吸收波长为 $4\text{ }\mu\text{m}$ 的第一组超晶格系统,其中光跃迁的偶极振荡强度、轻-重空穴带的劈裂能以及载流子的有效质量等物理性质的计算结果列于表 4-2;而在考虑微观界面效应时我们得到了满足截止吸收波长为 $4\text{ }\mu\text{m}$ 的第二组超晶格系统,其中光跃迁的偶极振荡强度、轻-重空穴带的劈裂能以及载流子的有效质量等物理性质的计算结果列于表 4-3。为了方便后面的论述,我们先对两个表中的相关物理量作一些说明: E_g 表示超晶格系统的禁带宽度即最低的导带和最高的重空穴带之间的能量差, Δ_{LH} 表示轻-重空穴带的劈裂能即最高的重空穴带和最高的轻空穴带之间的能量差, m_{CB}^* 和 m_{HH}^* 分别表示超晶格系统中最低导带的带边电子有效质量即电子的有效质量和最高价带的带边空穴有效质量即重空穴的有效质量,以及 f_s 表示超晶格系统中最低导带和最高价带之间的光跃迁振荡强度。

在表 4-2 中,我们可以很清楚地看到为了保持超晶格系统的禁带宽度在 310 meV ,减小或增大 InAs 层的厚度需要用增大或减小 GaSb 层的厚度来补偿,这是由于不考虑微观界面效应而造成的结果。这一结果背后的物理机制不难理解:当减小或增大 InAs 层的厚度时,由于量子限制效应,超晶格系统中最低导带的电子能量增大或减小,为了保持给定的超晶格禁带宽度,要求 GaSb 层的厚度必须增大或减小,因为量子限制效应使得最高价带的空穴能量增大或减小。除了超

晶格禁带宽度保持恒定外,我们从表中还发现三个重要的特点:(1) 轻-重空穴能带劈裂 Δ_{LH} 随着超晶格层厚的变化几乎是不变的。减小 GaSb 层的厚度,最高的重空穴带和最高的轻空穴带的能量也随之减小。然后,这两个能带下移的速率几乎是相等的,导致 Δ_{LH} 几乎不随超晶格层厚的变化而变化。(2) 最低导带的带边电子有效质量 m_{CB}^* 随着 GaSb 层厚度的减小而减小但其变化幅度不大。当 GaSb 层的厚度变薄时,电子的包络函数在相邻两个 InAs 层之间的交叠耦合增大,于是最低导带的展宽增大,导致 m_{CB}^* 的减小。与此同时,恒定的禁带宽度要求 InAs 层的厚度随着 GaSb 层厚度的减小而增大,这一要求使得电子的包络函数模方减小因为其主要部分必须分布在一个较厚的 InAs 层中,其后果是电子的包络函数在相邻两个 InAs 层之间的交叠耦合随之减小,于是最低导带的展宽减小,导致 m_{CB}^* 的增大。由此可见,导致 m_{CB}^* 变化幅度不大的原因是因为以上两种效应是相互补偿的。根据同样的分析,当 InAs 层的厚度增大时,空穴的包络函数在相邻

表 4-2 不考虑微观界面效应时, InAs/GaSb 短周期超晶格系统中相关物理性质的计算结果。

L_A/L_B (Å)	E_g (meV)	Δ_{LH} (meV)	m_{CB}^* (m_0)	m_{HH}^* (m_0)	f_s (eV)
26/19	310.9	120.2	0.0307	3.501	10.03
27/16	309.8	121.3	0.0297	3.007	10.12
28/14	310.7	120.1	0.0291	2.698	10.54
29/13	309.5	119.5	0.0287	2.662	10.64
30/12	310.2	118.9	0.0283	2.571	10.81

两个 GaSb 层之间的交叠耦合减小,于是最高价带的展宽减小,导致最高价带的带边空穴有效质量 m_{HH}^* 的增大。与此同时,恒定的禁带宽度要求 GaSb 层的厚度随着 InAs 层厚度的增大而减小,这一要求使得空穴的包络函数模方增大因为其主要部分必须分布在一个较薄的 GaSb 层中,其后果是空穴的包络函数在相邻两个 GaSb 层之间的交叠耦合随之增大,于是最高价带的展宽增大,导致 m_{HH}^* 的减小。然而,导致 m_{HH}^* 减小的因素不能被导致 m_{HH}^* 增大的因素所补偿,因此净的效

应是 m_{HH}^* 随着 GaSb 层厚度的减小而减小。尽管如此, 由于 m_{HH}^* 比 m_{CB}^* 大很多, 甚至比自由电子质量还大 2~3 倍, 因此重空穴对超晶格系统的光电流并无贡献。(3) 最低导带和最高价带之间的光跃迁振荡强度随超晶格层厚的变化几乎是不变的。这是因为在不考虑超晶格系统中的微观界面效应时, 保持恒定的禁带宽度要求 InAs 层的厚度随着 GaSb 层厚度的减小而增大或增大而减小, 导致电子和重空穴的包络函数在 InAs/GaSb 异质结界面处的交叠耦合几乎不变。

在表 4-3 中, 我们可以很清楚地看到为了保持超晶格系统的禁带宽度在 310 meV, 减小或增大 InAs 层的厚度需要同时减小或增大 GaSb 层的厚度, 这是由于考虑微观界面效应而造成的结果。这一结果背后的物理机制可以根据表 4-1 中的内容来理解: 在考虑微观界面效应时, 固定 GaSb 层的厚度, 超晶格系统的禁带宽度随着 InAs 层厚度的增大而减小, 而固定 InAs 层的厚度, 超晶格系统的禁带宽度随着 GaSb 层厚度的增大而增大, 因此为了保持恒定的禁带宽度必须要求同时减小或增大 InAs 层和 GaSb 层的厚度。这一理论结果已经在近期的实验发现中得到了证实[130]。尽管随着超晶格层厚的减小系统的禁带宽度是保持恒定的, 比较薄的超晶格系统在中红外探测方面具有一些很明显的优点。首先, 轻重空穴带的劈裂能 Δ_{LH} 随着 GaSb 层厚度的减小而增大。尽管由于量子限制效应最高重空穴带和轻空穴带的能量随着 GaSb 层厚度的减小而减小, 但是由于微观界面效应的存在, 最高轻空穴带的能量下降速率比最高重空穴带的要大, 因此净的效应是 Δ_{LH} 随着 GaSb 层厚度的减小而增大。因为在 p 型的超晶格系统中能带之间的 Auger 复合过程需要同时满足能量守恒和动量守恒的条件, 所以大的 Δ_{LH} 可以延长少子(电子)的 Auger 寿命从而达到抑制 Auger 复合过程的目的[136], 最终使超晶格红外探测器可以在高温下工作。第二, 最低导带的带边电子有效质量 m_{CB}^* 和最高价带的带边空穴有效质量 m_{HH}^* 随着超晶格层厚的减小而减小。这是由于当 InAs 层和 GaSb 层的厚度减小时, 电子的包络函数在相邻两个 InAs 层之间的交叠耦合增大, 空穴的包络函数在相邻两个 GaSb 层之间的交叠耦合也增大, 于是最低导带和最高价带的展宽增大, 导致 m_{CB}^* 和 m_{HH}^* 的同时减小。因为载流子

的迁移率与其有效质量成反比,所以较小的有效质量对应较大的迁移率,导致超晶格系统中光电流的增大。特别地,重空穴的有效质量比不考虑微观界面效应时的结果小了一个数量级,甚至比自由电子的质量还要小很多,因此重空穴对超晶格系统的光电流也会有所贡献。第三,随着超晶格层厚的减小,电子和空穴的包络函数在超晶格界面处的交叠耦合增大,导致最低导带和最高价带之间的光跃迁振荡强度增大,从而提高超晶格系统的光吸收系数。可见,这三个优点带来的最终结果是提高了 InAs/GaSb 超晶格红外探测器的信噪比。

表 4-3 考虑微观界面效应时, InAs/GaSb 短周期超晶格系统中相关物理性质的计算结果。

L_A/L_B (Å)	E_g (meV)	Δ_{LH} (meV)	m_{CB}^* (m_0)	m_{HH}^* (m_0)	f_s (eV)
15/17	309.2	155.2	0.0292	0.114	15.06
17/20	311.8	142.5	0.0298	0.141	14.04
19/23	311.5	133.7	0.0304	0.172	12.91
21/27	310.2	123.2	0.0315	0.215	11.59
23/33	310.6	108.8	0.0339	0.276	10.04

5.4 本章小结

我们利用八带 $\bar{K}\cdot\bar{P}$ 有效质量理论研究了微观界面效应在 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格中红外探测器设计中的作用。研究结果表明通过调节超晶格的层厚,给定的超晶格禁带宽度可以在很多可能的超晶格系统中实现。在这些超晶格系统中:如果不考虑微观界面效应,为了保持给定的超晶格禁带宽度,减小或增大 InAs 层的厚度需要用增大或减小 GaSb 层的厚度来补偿;如果考虑微观界面效应,为了保持给定的超晶格禁带宽度,需要同时减小或增大 InAs 层和 GaSb 层的厚度。微观界面效应除了影响超晶格系统的禁带宽度之外,还会影响到超晶格系统其他的一些物理性质,其中包括轻-重空穴带的劈裂能,电子和重空穴的有效质量,以及光跃迁的偶极振荡强度。我们发现当考虑微观界面效应时,较薄的 InAs/GaSb 短周期超晶格系统在中红外探测器设计中具有一些很明显的优点。这些优点包括:(1) 较大的轻-重空穴带的劈裂能可以抑制系统中的 Auger 复合过程从而可以提高探测器的工作温度。(2) 较小的载流子有效质量对应较高的载流子

迁移率从而可以提高探测器的光电流响应。(3) 较大的光跃迁振荡强度可以提高系统的光吸收系数从而可以提高探测器的光子利用率以及光电转换率。总之, 这些理论研究表明微观界面是一个很重要的设计参数, 可以被用来设计优化的 InAs/GaSb 短周期超晶格系统的中红外探测器以增强器件的性能, 比方说提高超晶格红外探测器的信噪比。

第六章 全文总结

由于 InAs/GaSb 第二类超晶格系统是一种无共有原子的材料系统,即组分材料 InAs 和 GaSb 没有公共原子,微观界面效应对材料系统的物理性质有重要的影响。这种微观界面效应对于短周期超晶格系统来说尤为重要,因为微观界面的尺度相对于整个超晶格的周期长度来说是无法忽略的。在本篇论文中,我们利用包含微观界面效应的八带 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ 有效质量理论和 Boltzmann 平衡方程方法研究了沿 [001] 方向生长的 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格系统的红外光电特性。在这一章中,我们将对本篇论文做全文总结,给出论文的主要研究内容。

首先,我们理论研究了 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格系统中的本征光学各向异性现象。我们发现当光场沿着超晶格二维平面内不同方向偏振时,超晶格系统的光跃迁矩阵元和光吸收系数会出现明显的各向异性。由于这些超晶格是无共有原子系统,微观界面效应是导致这种光学各向异性的物理原因。计算结果显示在这类超晶格材料系统中,当光场沿 [110] 和 $[1\bar{1}0]$ 方向偏振时会出现最强的光学各向异性。定义任意两个不同偏振方向的光吸收系数之间的相对差为光极化率,我们发现 [110] 和 $[1\bar{1}0]$ 方向的光极化率可以达到 50% 以上。另外,我们详细地研究了光极化率与温度、光生载流子浓度、以及超晶格层厚之间的依赖关系并得到以下结果: (1) 随着温度的升高,由于能级的展宽因子增大,光极化率减小。(2) 随着载流子浓度的增大,由于能带填充效应,光极化率峰值的位置蓝移,同时由于光跃迁通道数的减少,光极化率减小。(3) 随着超晶格层厚的增大,由于量子限制效应的减弱,光极化率峰值的位置蓝移,同时微观界面的尺寸在整个超晶格周期中所占的比重减小,导致光极化率的减小。这些研究结果对设计基于 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格系统的光学极化器件具有重要的指导意义。

然后,我们理论研究了 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格系统的中红外光吸收特性。我们发现当 InAs 和 GaSb 层的厚度在 20 Å 和 25 Å 左右时,超晶格禁带宽度在 3~5 μm 的中红外波段内。通过调节一个表征 InSb 型界面势强度的参数,理论计算的禁带宽度与实验结果在一系列超晶格样品上都非常吻合。在这些超晶格系统中,光吸收的截止频率取决于超晶格禁带宽度。变化超晶格层厚,我们可以

连续系统地调节光吸收的截止频率：固定 GaSb 层的厚度为 24 Å，当 InAs 层的厚度从 17 Å 增加到 23 Å，光吸收的截止频率从 346 meV 减小到 275 meV；而固定 InAs 层的厚度为 21 Å，当 GaSb 层的厚度从 18 Å 增加到 24 Å，光吸收的截止频率却从 254 meV 增加到 310 meV。理论计算的光吸收谱与实验测量的光响应谱符合的很好。这些研究表明 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格可以用于中红外波段的光探测，证实了相关的实验发现。

最后，我们理论研究了微观界面效应在 InAs/GaSb 第二类短周期超晶格中红外探测器设计中的作用。研究结果表明通过调节超晶格的层厚，给定的超晶格禁带宽度可以在很多可能的超晶格系统中实现。在这些超晶格系统中：如果不考虑微观界面效应，为了保持给定的超晶格禁带宽度，减小或增大 InAs 层的厚度需要用增大或减小 GaSb 层的厚度来补偿；如果考虑微观界面效应，为了保持给定的超晶格禁带宽度，需要同时减小或增大 InAs 层和 GaSb 层的厚度。微观界面效应除了影响超晶格系统的禁带宽度之外，还会影响到超晶格系统其他的一些物理性质，这些性质包括轻-重空穴带的劈裂能，电子和重空穴的有效质量，以及光跃迁的偶极振荡强度。我们发现当考虑微观界面效应时，较薄的 InAs/GaSb 短周期超晶格系统中红外探测器设计中具有一些很明显的优点。这些优点包括：(1) 较大的轻-重空穴能带劈裂可以抑制系统中的 Auger 复合过程从而提高探测器的工作温度。(2) 较小的载流子有效质量对应较高的载流子迁移率从而提高探测器的光电流响应。(3) 较大的光跃迁振荡强度可以提高系统的光吸收系数从而提高探测器的光电转换率。这些理论研究表明微观界面是一个很重要的设计参数，可以被用来设计优化的 InAs/GaSb 短周期超晶格中红外探测器以增强器件的性能。

尽管 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 有效质量理论在研究超晶格系统的电子结构和光学性质方面取得了很大的成功，但是它有一定的局限性：一是对于周期特别短的超晶格系统有效质量理论不再适用；二是只适用于带边电子态的计算，不能描述整个布里渊区空间的电子态。在这些情况下，超单胞经验赝势方法和超单胞经验紧束缚方法显得非常有用，因为它们不仅可以更为准确地计算超短周期的超晶格系统的电子能带结构，而且可以进行整个布里渊区空间的计算。