

中国科学院合肥物质科学研究院

---

博士学位论文

---

基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱材料中光电特性的理论  
研究

---

姓名：魏相飞

---

申请学位级别：博士

---

专业：凝聚态物理

---

指导教师：徐文

---

20080601

## 中文摘要

半导体器件制造工艺(如分子束外延法和有机金属化学气相沉积法)的发展为制备高质量的异质结,例如量子阱、超晶格、量子线、量子点等低维结构提供了技术保障,从而激起了人们对半导体低维材料研究的热潮。其中基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱及其超晶格结构由于其特殊的能带结构而备受关注。本论文运用半经典的玻尔兹曼方程作为输运方程研究了AlSb/InAs/GaSb/AlSb量子阱体系中的光电性质,并从多体相互作用的角度研究了由于载流子之间的交换相互作用导致的电子能带和空穴能带的杂化现象。主要工作包括以下三个部分:

(1)基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中,由于载流子的带间跃迁所引起的亚太赫兹光电导特性。在基于InAs/GaSb的二类断带半导体量子阱中,由于电子和空穴的波函数沿着生长方向有交叠,所以在光场的作用下,电子和空穴可以在量子阱的两层间发生跃迁,从而可以在量子阱的生长方向产生光电导。光电导的峰值落在亚太赫兹区,而且随着温度的升高,峰的位置向低频方向移动(红移)而且在温度比较低是峰的强度更大。所以基于InAs/GaSb的二类断带半导体量子阱体系可以用来做在低温下工作的亚太赫兹光电器件。

(2)基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的双色中远红外光吸收。在AlSb/InAs/GaSb/AlSb量子阱中,当最低的电子子带和最高的空穴子带分别被电子和空穴占据时,由于电子和空穴既可以发生带间跃迁,又可以发生子带间跃迁,所以会形成一些新的跃迁通道。我们研究了各个跃迁通道对光吸收的贡献,在吸收系数中得到了两个由于载流子在同一材料层中的子带间跃迁所引起的吸收峰。由于电子和空穴的波函数的耦合比较小,所以带间跃迁对吸收系数的贡献比较小。研究发现,随着温度的升高,吸收峰的强度变化不明显,所以这种材料可以用来做室温下工作的中远红外双色光探测器。

(3)在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中,由于载流子之间的交换相互作用所引起的太赫兹微带隙。我们从理论上阐述了在基于InAs/GaSb的半导体量子阱中,载流子之间的交换相互作用可以引起体系中电子能带和空穴能带的杂化,并且在电子能带和空穴能带的交点处形成一个微带隙,其大小为THz量级(6meV)。研究发现,微带隙是由体系中电子和空穴之间的库仑相互作用导致的。我们的理论结果表明,在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中,多体相互作用是电子能带和空穴能带杂化的另一个重要原因,这与单粒子表象下的 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 方法不同。

**关键词:** AlSb/InAs/GaSb/AlSb、二类、断带半导体量子阱、超晶格、光电导、光吸收、微带隙。

## Abstract

With the development of Molecular Beam Epitaxy (MBE) and metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD) techniques, heterostructures such as quantum well (QW), superlattice (SL), quantum line as well as quantum dot with high quality can be prepared. Great interests have been focused on the InAs/GaSb based type II and broken-gap quantum well (T2BGQW) and superlattice for its unique band structures. In this thesis, we employ the semi-classical Boltzmann as the governing transport equation to study the consequence of applying an electromagnetic field to a type II and broken-gap QW structure. We also examined the band hybridization effect induced by exchange interaction from the view point of many body interaction. The main contents are presented as follows:

(1) Sub-terahertz photoconduction induced by interlayer transition in an InAs/GaSb-based T2BGQW system. We demonstrate theoretically that, when an InAs/GaSb-based T2BGQW is subjected to a light field, conductance can be observed along the growth direction due to charge transfer between electron and hole layers which are spatially separated. A peak profile can be observed in the conductance within sub-terahertz bandwidth. The peak shifts to the lower frequency (red-shift) with increasing temperature and a more broadened peak structure can be observed at lower temperatures. Our results suggest that InAs/GaSb-based quantum well systems are of potential to be applied as subterahertz photovoltaic devices working at relatively low temperatures.

(2) Two-colour mid-infrared absorption in an InAs/GaSb T2BGQW. We examine contributions from different transition channels to optical absorption in an InAs/GaSb-based T2BGQW. In such a structure, because both electron and hole subbands are occupied by the conducting carriers, new channels open up for electronic transition via intra- and inter-layer scattering mechanisms. We find that two absorption peaks can be observed through inter-subband transitions within the same material layer. The absorption induced by the inter-layer transition is rather weak due to a small overlap of electron and hole wavefunctions. The results suggest that InAs/GaSb-based type II and broken-gap QWs can be employed as two colour photodetectors working at mid-infrared bandwidth at relatively high temperatures up to room-temperature.

(3) Exchange-induced terahertz minigap in InAs/GaSb-based T2BGQWs. We theoretically demonstrate that the exchange effect induced by the carrier-carrier interaction can cause the hybridization of the electron and hole dispersion relations in InAs/GaSb-based T2BGQW systems. As a result, a terahertz minigap ( $\sim 6$  meV) at the anticrossing points of the conduction and valence bands can be induced by the interlayer electron-hole coupling via the Coulomb interaction. It is shown that the many-body effect is another important source of the hybridization of the dispersion relations in InAs/GaSb QW systems. Which is different from the  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  theory under single particle picture.

**key words:** AlSb/InAs/GaSb/AlSb, type II and broken gap quantum well (T2BGQW), superlattice (SL), photoconduction, optical absorption, minigap.

## 插图目录

1-1	二极管半导体激光器结构剖面图。 .....	3
1-2	2DEG的样品结构示意图(左), 2DEG的能带以及波函数示意图(右) [13]。 .....	5
1-3	组分超晶格样品结构示意图, A和B分别是两种晶格常数匹配的半导体材料。 .....	8
1-4	四种类型的超晶格界面的能带边不连续性。(a)I型,(b)II型一错开, (c)II型一倒转(断带)如InAs/GaSb SL,(d)III型[23]如HgTe/CdTe SL。 .....	9
1-5	多维超晶格示意图, 从左至右分别是一维超晶格(1DSL)、二维超晶格(2DSL)和三维超晶格(3DSL) [23]。 .....	10
1-6	掺杂超晶格示意图, '+'和 '-'分别表示空穴掺杂和电子掺杂[23]。 .....	11
1-7	半导体量子阱的材料结构和能带示意图。 .....	12
1-8	(a)InAs/GaSb异质结中的能带图, (b)InAs(6nm)和GaSb(7nm)量子阱的空态的形貌图(small area topographic image), 所加的偏压是+1 V, 反馈电流(feed back current)是0.1nA。(c)-(e)是样品厚度分别为: 6nm/7nm,12nm/16nm,17nm/23nm量子阱的占据态的形貌图(typical large area topographic images), 偏压为-1V[37]。 .....	13
1-9	基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱的结构示意图。InAs/GaSb量子阱的两侧被带隙更大的AlSb层所包围。 $\epsilon_i$ 分别是电子和空穴的能级, $E_F$ 是体系的费米面。 .....	14
2-1	在AlSb/InAs/GaSb/AlSb量子阱中, 电子和空穴所受到的限制势的示意图。(a)电子所受到的限制势, (b)空穴所受到的限制势。 .....	18
2-2	基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱AlSb/InAs/GaSb/AlSb中, 通过解Schrödinger方程所得的电子和空穴的基态和第一激发态波函数。其中InAs层和GaSb层的厚度分别为: $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ , $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ 。 .....	20
2-3	基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中电子和空穴的基态波函数, 实线是通过自恰计算所得的电子和空穴的基态波函数, 虚线直接解Schrödinger方程所得的结果, 其中InAs层和GaSb层的厚度分别为: $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ , $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ 。 .....	21
2-4	AlSb/InAs/GaSb/AlSb/GaSb二类断带半导体量子阱的结构示意图。其中 $m_i^*$ 和 $\kappa_i$ 分别是不同层中的有效质量和静态介电常数, $N_i$ 和 $n_i$ 是背景或者掺杂杂质的浓度, 其中将InAs层和GaSb层的界面取为 $z = 0$ 。 .....	23
2-5	(a)导带和价带沿着生长方向的分布, 这里考虑了电荷分布对势能的影响, 所以能带有弯曲。(b)电子和空穴的子带能级以及费米能量的位置[78]。 .....	25
2-6	沿着生长方向的两个最低电子带和两个最高空穴带的波函数和电荷分布[78]。 .....	26
2-7	在动量空间和位置空间中载流子在( $dkdr$ )范围内的散射情况, 箭头表明了载流子散射的方向。 .....	28

- 2-8 左图是载流子从 $k$ 态散射到 $k'$ 态的示意图, 其中阴影部分为散射区; 右图是相应的能量跃迁过程。实线给出从 $k$ 态散射到 $k'$ 态的情况, 虚线是其逆过程。..... 31
- 3-1 电子和空穴的基态波函数沿着生长方向的分布, InAs层和GaSb层的厚度如图中所示, 在这里我们将InAs层和GaSb层的界面选在 $z = 0$ 处。..... 40
- 3-2 自恰计算得到的电子和空穴的浓度沿着生长方向的分布, InAs层和GaSb层的厚度如图中所示, 在这里我们将InAs层和GaSb层的界面取为 $z = 0$ 。..... 44
- 3-3 当辐射场的强度 $E_0$ 取定值时, 回路中的光电导在不同的温度 $T$ 下随着辐射场频率 $\omega$ 的变化关系, 其中InAs层和GaSb层的厚度分别取为 $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ , 和 $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ ,  $G_0 = e^2/\hbar$ 。..... 45
- 3-4 当辐射场的强度 $E_0$ 取定值时, 回路中的光电导在不同的辐射场频率 $\omega$ 下随着温度 $T$ 的变化关系, 其中InAs层和GaSb层的厚度分别取为 $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ , 和 $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ ,  $G_0 = e^2/\hbar$ 。..... 46
- 3-5 在基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱中, 电子通过吸收光子从能量低的态跃迁到能量高的态的跃迁通道, 其中:  $E_e(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_e^* + \epsilon_0^e$ ,  $E_h(\mathbf{k}) = -\hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_h^* + \epsilon_0^h$ 分别是2DEG和2DHG的能谱,  $\epsilon_0^e$ 和 $\epsilon_0^h$ 分别是电子和空穴的基态能级,  $E_F$ 是体系的费米能级。..... 47
- 4-1 光与物质相互作用的三种形式: (a)自发辐射过程。(b)受激吸收过程。(c)受激辐射过程。..... 50
- 4-2 光在物质中的传播,  $P_1$ 和 $P_2$ 分别表示光在物质中的传播路径中 $z$ 和 $z + dz$ 处面积为 $S$ 的两个横截面,  $I_\omega(z)$ 和 $I_\omega(z + dz)$ 分别为面中光的强度。..... 51
- 4-3 在基于InAsGaSb的二类、断带半导体量子阱中电子吸收光子获得一定的能量从能量低的占据态到能量高的非占据态的跃迁通道。其中 $E_n^j(\mathbf{k}) = \epsilon_n^j + (-1)^j \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_j^*$ 是电子 ( $j = e = 0$ ) 或者空穴 ( $j = e = 1$ ) 的能谱,  $\epsilon_n^j$ 是电子或空穴的第 $n$ 个子带能级,  $E_F$ 是体系的费米能。跃迁轨道1, 3, 4, 6和7对应于带间跃迁, 而轨道2和5对应于子带间跃迁, 电子在InAs层, 而空穴在GaSb层。InAs层和GaSb层的厚度分别为:  $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ,  $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ 。.... 53
- 4-4 (a)直接带隙半导体的光吸收过程。(b)间接带隙半导体中声子吸收辅助的光吸收过程。(c)间接带隙半导体中声子发射辅助的光吸收过程[95]。..... 54
- 4-5 在基于InAsGaSb的二类、断带半导体量子阱中当InAs层和GaSb层的厚度分别为 $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ,  $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ 时, 在温度 $T = 150 \text{ K}$ 时, 不同的跃迁通道对吸收系数 $\alpha$ 的贡献, 其中 $\alpha_{ij}$ 表示载流子从 $i$ 层跃迁到 $j$ 层引起的吸收系数,  $\alpha_0 = e^2 / (\hbar \sqrt{\kappa} \epsilon_0 C)$ 。..... 58
- 4-6 在基于InAsGaSb的二类、断带半导体量子阱中当InAs层和GaSb层的厚度分别为 $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ,  $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ 时, 在不同温度下, 吸收系数 $\alpha$ 随辐射场频率的变化关系,  $\alpha_0 = e^2 / (\hbar \sqrt{\kappa} \epsilon_0 C)$ 。..... 59

- 5-1 电子气中电子浓度随着 $r_s$ 的变化示意图。可见，金属的浓度一般落在中等浓度区域，当浓度特别低时，形成Wigner晶格。其中KE表示电子的动能，PE是电子所受到的晶格势能[123]。..... 67
- 5-2 碰撞离化过程：在态1处的电子和态2处的电子相互作用后，分别在态1'和态2'处产生电子[122]。..... 70
- 5-3 在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，载流子间的库仑相互作用中的形状因子 $F_{ij}$ 随着波矢变化 $q$ 的变化关系， $F_{ij}$ 的表达式见方程(5-20)，其中量子阱的厚度为： $L_{InAs} = 17nm$ ， $L_{GaSb} = 5nm$ 。..... 74
- 5-4 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，不同载流子-载流子之间的相互作用对载流子波矢 $k$ 的依赖关系，量子阱的厚度为： $L_{InAs} = 17nm$ ， $L_{GaSb} = 5nm$ 。 $\Xi_{jj'}$ 是电子或空穴从 $j$ 层散射到 $j'$ 层所导致的自能， $\Delta = 2\sqrt{\Xi_{ch}\Xi_{he}}$ 是微带隙， $k_F^e$ 是电子的费米波矢，需要注意的是 $\Xi_{jj'} < 0$ 。..... 75
- 5-5 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中量子阱的厚度为： $L_{InAs} = 17nm$ ， $L_{GaSb} = 5nm$ 时的能量色散关系。 $E_0^e(\mathbf{k})$ 和 $E_0^h(\mathbf{k})$ （虚线所示）分别是不考虑载流子之间的相互作用时电子和空穴的能谱。图中实线所示的 $E_0^\pm(\mathbf{k})$ 是在考虑载流子之间的库仑相互作用时准粒子的色散关系， $k_F^e$ 是电子的费米波矢。..... 77

## 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、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，本学位论文的研究成果不包含他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确的方式标明。本学位论文的知识产权归属于培养单位。

本人签名：魏相飞

日期：2008年6月23日

# 第一章 引言

## §1.1 研究动机

半导体低维体系的研究和应用,在当代物理学和高新技术发展中占有重要的地位,它在一个新的水平上有力地推进着半导体的研究和应用,对半导体低维结构的研究必将源源不断地为人们提供新型的功能材料和具有新原理的器件。而半导体器件制造工艺的发展(如分子束外延(molecular-beam epitaxy, MBE)方法和有机金属化学气相沉积(metal-organic chemical vapor deposition, MOCVD)技术),使得从理论和实验上研究低维体系的物理特性成为现实,对半导体量子阱和超晶格的研究在其中占据了重要的地位。超晶格与量子阱所具有的量子约束效应、共振隧穿效应、超晶格微带效应、声子约束效应和二维电子气的性质等引起人们的广泛关注。两种半导体材料 $S_1$ 和 $S_2$ 组成异质结,在异质结的 $S_1$ 一侧再连接上一层 $S_2$ ,就组成一个 $S_2-S_1-S_2$ 型的三层结构比如 $AlGaAs-GaAs-AlGaAs$ 量子阱结构。如果中间的 $S_1$ 层厚度小到量子尺度,即可以和其中受限电子的de Broglie波长相比拟,由于量子阱中的电子和空穴的运动在生长方向受到限制而表现出量子行为。半导体量子阱材料的显著特征是:(1)由于电子沿量子阱生长方向的运动受到约束,会形成一系列分离的能级。由于不同量子能级所形成子带的贡献,使其电子态密度呈台阶形状。(2)在量子阱中激子具有二维特性,它的束缚能比三维激子束缚能大,因此不容易离解。(3)二维激子的电子和空穴相对运动半径(有效玻尔半径)比三维激子的要小,因此它的振子强度很大。这三个特性决定了量子阱材料在量子阱激光器、微腔激光器、量子阱级联红外激光器、光调制器和光双稳器件等光电器件中有广泛的应用前景。用该材料制作的激光器具有阈值电流低(小于1mA)、调制速率和频率响应高、谱线宽度窄、光增益大以及温度特性好等优点。利用其良好的频率特性,能采用直接调制方式来实现高速光通信,从而可省去价格昂贵的外调制器。由窄势垒宽度和低势垒高度形成的超晶格所具有的共振隧穿特性,可以设计制作共振隧穿量子效应器件。用它制作的红外探测器具有以下优点:响应速度快,探测率与 $HgCaTe$ 探测器相近,探测波长可通过改变量子阱的参数比如阱宽来调制。因此对半导体量子阱及其超晶格结构的研究对电子器件特别是光电子器件的研究和探索具有重要的意义。

在当今的信息时代,传统的电子器件已经很难满足人们对声音、数据以及图象信号的储存、传输以及提取的需求,于是将电子学和光子学完美的结合在一起的光电子学应运而生。目前,光电子学已经广泛应用于科学领域的每一个分支,

包括医学、科技、军事以及人们日常生产、生活和消费的每个角落。而半导体材料在光电子学中发挥了重要的作用，几乎所有的光电器件以及集成电路都是以半导体为基础的。而且基于半导体材料的光电器件已经得到了广泛的应用，并且成为人们日常生活中不可分割的一部分。比如发光二极管（LED）可以用来做发光器件及显示器件，半导体激光器可以用来读光盘以及做光源和用在激光打印机中等，探测器和光信号放大器已经在光纤通信、互联网以及无线电通信中发挥了重要作用，极大的方便了人们的生活。以半导体超晶格、量子阱、量子线和量子点为典型代表的低维半导体结构，自1969年江崎和朱兆祥[1]提出超晶格概念以来，经历了近40年的发展，已经成为凝聚态物理学中最活跃的新生长点和最富有生命力的重要前沿领域之一。半导体低维结构的能带人工可剪裁性、量子尺寸效应、共振隧穿效应和电子波的量子相干性等，赋予它许多三维固体材料所不具备的、内涵丰富而深刻的新现象和新效应，使它发展成为介观物理现象的新学科领域；另一方面，半导体低维结构又和电子、光电子等高新技术产业有着密切的联系，在这个领域内已经发现的新现象和新效应，都广泛地被用来开发具有新原理、新结构的固态电子和光电子器件。所以半导体低维结构已经成为推动整个半导体科学技术发展的主要动力。

光电子器件是利用电子与光子的相互作用工作的，而且人们很早就已经注意到了光与物质的相互作用。第一个关于光与半导体材料的光电性质的报道是在1873年，当时W.Smith用光照在硒的表面上发现硒的电阻变小了，观察到了光电导行为[2]，从此人们对光与物质的相互作用进行了大量的研究并且在很多领域取得了广泛的应用。1960年第一台固体激光器研制成功，两年后即1962年，R.N.Hall在半导体结中实现了粒子数反转，创建了第一台半导体结激光器[3]。这种器件根据特殊设计的p-n结，用电流将电子直接注入结中运行，因此可以从发射源以很高的效率产生相干光。如今以R.N.Hall的原始思想工作的二极管激光器[4, 5]，其样品结构如图(1-1)，广泛地应用于如CD、DVD显示器、激光打印机和光纤通讯系统等领域。所以说自从十九世纪七十年代量子阱激光器研制成功以来，半导体纳米结构在光电器件方面得到了广泛的应用，其中最主要的领域就是激光器和探测器。我们知道光有很多特殊的性质，使得它在与信息处理有关的器件应用方面有很多优势，例如：(1)抗电磁干扰性，(2)相互交叉的光信号间具有非相干性，(3)高度的平行性，(4)光束的可控性，(5)光的波动性，(6)光可以很容易地与电子发生相互作用等。而且光与电子的非线性相互作用可以用来做新型的光电器件，也正是由于在半导体器件中光子与电子的相互作用使得光电器件在现在信息时代的应用越来越广泛，并逐渐取代了一些传统材

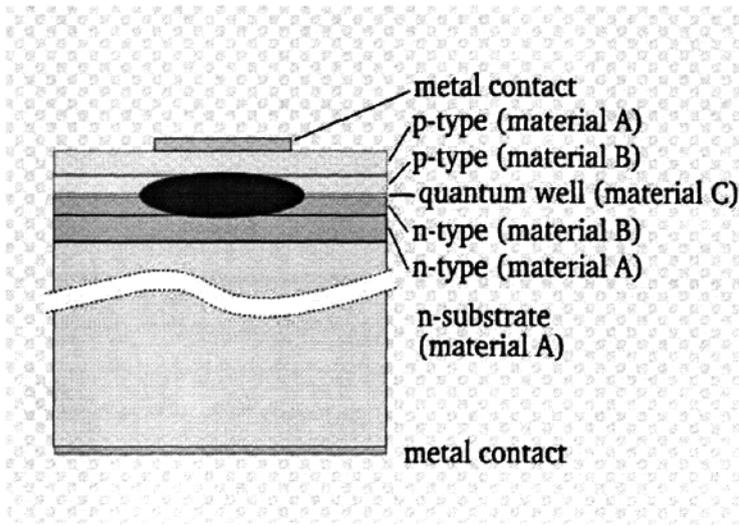


图 1-1 二极管半导体激光器结构剖面图。

料。比如：在光通信方面，这也是半导体光电子学应用的最重要的领域，与铜缆相比光纤具有成本低、容量大的优点，所以在现代通信产业中得到了广泛的应用，而且光纤技术的发展也促进了半导体激光器、发光二极管以及光电探测器的发展。这也促使人们研究和探索新材料，以期在光电器件方面有新的应用，制备性能更优越、用途更广泛的光电器件。所以半导体科学的发展与科学、技术和材料的探索和制备息息相关，因此新材料的发现和制备、物理原理的研究以及器件的设计成了半导体工艺的主要任务。

现在应用最多的电子器件材料都是以硅（Si）为基础的，然而电子器件中所用的材料与光电器件中所用的材料有很大的区别。我们知道硅是间接带隙半导体，其中的电子吸收光子从价带跃迁到导带时要借助声子或者其他过程的辅助，从而满足动量守恒条件。所以尽管以硅为基础的光电器件比如光电探测器有某些特殊的性能，但由于其光电转换效率非常低，因此在光电器件方面的应用受到了一定的限制。所以在半导体科学发展的初期，科研工作者和工程师的主要任务是寻找具有良好光电转换效率的新材料。由于GaAs是直接带隙半导体而且其光激发效率比较高，所以GaAs和与之匹配的异质结材料在光电器件方面得到了广泛的应用，人们通过对以GaAs为代表的半导体材料及其固溶体的研究而发明了半导体激光器和高速场效应管等，这些器件与计算机或者光通信系统联接在一起，对人类的文化和科技的发展产生了重大影响，做出了突出的贡献。所以在半导体材料研究的初期，人们一直在致力于发现和探索新型的半导体材料，以期

在电子器件和光电器件方面能有新的、更好的应用。然而半导体薄膜材料制备技术的发展,如分子束外延(MBE)、液相外延(LPE)、金属有机物化学汽相沉积(MOCVD)等,又给科研工作者提供了新的发展方向 and 更加广阔的研究空间。众所周知,半导体薄膜制备技术,如分子束外延、液相外延、金属有机物化学汽相沉积等,具有生长温度低、材料纯度高等优点,尤其是这种技术可以精确控制生长速率,使薄层厚度可达到与载流子平均自由程或 $De.Broglie$ 波长相比拟的程度,因而能制造出界面陡峭、结构完整的高质量异质结以及超晶格、量子阱、量子线、量子点等低维结构。这些结构按其合金成分的变化、杂质浓度的分布而呈现复杂的电子势能轮廓,甚至人们还可以通过预定的晶格应变局部的修改能带结构。这就使得物理学家和工程师们不但有可能对现有半导体器件进行实质性改进,而且可以人为地、创造性地设计天然材料所不存在的能带结构和物理性质,制造出崭新的功能器件。因此,这将对材料和器件发展产生不可估量的影响。

本论文研究的体系是基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱(AlSb/InAs/GaSb/AlSb)体系,这是一种准二维电子和空穴在空间上分离的二元体系。在具体介绍该体系的结构特征以及能带特性之前,我们首先对二维电子系统和半导体量子阱和超晶格及其分类作简单的介绍。

## §1.2 二维电子系统、半导体量子阱和超晶格的基本概念

### §1.2.1 二维电子系统

低维体系物理学是近年来凝聚态物理学取得了重大进展的领域[6]。实际应用中所涉及的低维体系大体上可分为两大类:一类是有机分子,例如长链分子或聚合物构成的准一维系统、层状分子排列的准二维系统;另一类是人工制备的界面结构,反型层和异质结中具有高迁移率的二维电子系统就是一个突出的例子。众所周知,半导体器件制造工艺的发展使得大量的低维半导体器件成为现实,因此半导体异质结构是实现半导体低维体系的基本手段,也是高速微电子、量子光电子器件的基本结构。在众多的研究中,二维电子气体的性质引起了人们广泛的兴趣[7, 8]。通过对二维电子体系做进一步的限制,可以形成量子阱、量子线和量子点接触等介观器件。当电子的相干长度和介观器件的尺寸相当时,器件中的电子呈现出丰富的量子特征以及由此引起的独特的输运性质,这些输运特性使得制造各类量子器件成为可能。所以介观输运性质的研究成为相当热门的问题。

所谓的二维电子气(Two dimensional Electron Gas, 2DEG)指的是电子在某一方向受到限制并形成不同的能带,同时可以在二维平面内自由运动的电子体系。

当这样的限制很强时，电子在这一维上的能级量子化很明显，不同子带之间的跃迁几率很低，低温情况下，电子占据最低能级的概率远大于占据其他子带的概率。量子阱和超晶格都是二维电子气系统，是一类重要的低维物理系统，有重要的理论和实验研究价值，著名的量子霍尔效应[9-12]就是在2DEG体系中观测到的一种物理效应，本论文的研究工作即基于此类低维电子系统。

目前实验上获得的二维电子系统主要有如下三种。第一种是液氮表面上吸附的单电子层。液氮表面存在一个超过1eV的势垒，阻止电子透射进液氮中去，而镜像势又吸引电子于表面。第二种是金属-氧化物-半导体(MOS)中的反型层。硅片上生长薄氧化膜后再覆盖一层铝，就是最常见的MOS结构，其厚度约为10nm或更少些。第三种是局限于两种半导体界面的2DEG系统。常见的如GaAs/AlGaAs异质结构中的2DEG，AlGaAs的禁带比GaAs的宽，主要在导带形成一个约0.3eV的台阶。AlGaAs的导带电子流向GaAs，在界面处形成空间电荷区及势阱，限制在量子阱中的电子形成准二维的电子系统。图(1-2)给出了准2DEG的样品结构示意图，以及相应的能带和波函数示意图。当两种带隙宽度

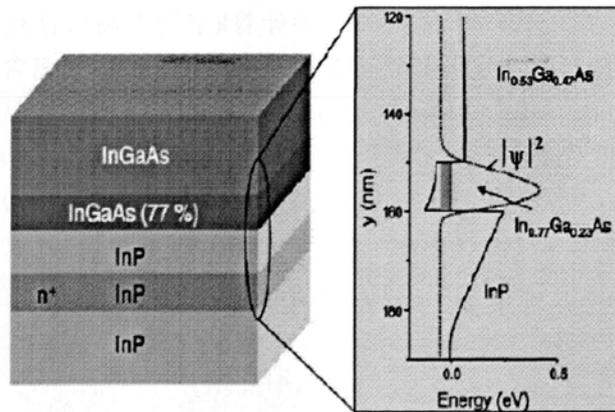


图 1-2 2DEG的样品结构示意图(左)，2DEG的能带以及波函数示意图(右) [13]。

不同的半导体材料长在同一块单晶上时则形成异质结(heterostructure)。根据这两种半导体单晶材料的导电类型，异质结又可以分为两类：(1)反型异质结：由导电类型相反的两种不同的半导体单晶材料所形成的；(2)同型异质结：由导电类型相同的两种不同的半导体单晶材料所形成的。另外随着分子束外延技术的发展和成熟，人们可以将两种半导体材料从几个到几十个nm的厚度交替排列，形

成一维周期性结构，被称为超晶格。超晶格的思想是江崎和朱兆祥在1969年提出的，并于1970年首次在砷化镓半导体上制成了超晶格结构，其薄层厚度的周期小于电子的平均自由程。分子束外延技术可控制到单层原子的生长，是目前生长半导体超晶格材料的最佳技术。这种超晶格结构提供了能够进行实验观察量子效应的物理模型，而且具有技术应用的潜力，因此对半导体超晶格材料及其性质的研究都十分活跃。

### §1.2.2 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰法和包络函数近似方法

半导体中能带计算方法有很多，为了和自洽计算方法的对比，这一节我们将介绍有关 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰法和包络函数近似(Envelope Function Approximation, EFA)方法的相关知识。

#### (一) $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 微扰法:

计算电子带结构和波函数的方法很多，比如紧束缚法、赝势法、正交平面波法、格林函数法和元胞法等。在讨论电子在能带底或者能带顶部附近的电子能级的时候（即电子波矢 $\mathbf{k}$ 很小时）， $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型非常有效。 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型是J.Bardeen和F.Seitz [14-16]提出的一种计算 $\mathbf{k}$ 空间中高对称点附近电子波函数和有效质量的方法。后来W.Shockley[17]将此方法推广到包含简并能带的情况。G.Dresselhaus等和E.O.Kane[18, 19]进一步推广到包含自旋轨道相互作用的情况。我们知道晶体中的电子可以看成在周期场 $V_0(\mathbf{r})$ 中运动，电子的哈密顿为： $H_0 = -\hbar^2 \nabla^2 / 2m + V_0(\mathbf{r})$ 。电子能量 $E_n(\mathbf{k})$ 和波函数 $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 满足周期场中的Schrödinger方程：

$$[-\hbar^2 \frac{\nabla^2}{2m} + V_0(\mathbf{r})]\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1-1)$$

波函数满足Bloch定理：

$$\begin{cases} \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \end{cases} \quad (1-2)$$

其中 $n$ 为带指标， $\mathbf{r}$ 是电子在周期场中的位置， $\mathbf{R}$ 是晶格矢量。对于III-V族化合物半导体，在 $k_0 = 0$ 附近， $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 满足以下方程：

$$[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{2m} + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r})]u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1-3)$$

其中的 $\frac{\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{2m}$ 和 $\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}$ 可以分别看作是一级微扰、二级微扰，此即 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰法。这种方法可以用来处理高对称性点附近的能带结构，具体作法是将高对称点附

近的波函数用高对称点的波函数 $u_{nk}(\mathbf{r})$ 展开并代入Schrödinger方程得到矩阵表达式，通过对角化或微扰方法求出高对称点附近的能量和波函数。

## (二) 包络函数近似(EFA)方法:

虽然我们了解周期性结构中的带结构，但是实际材料并不都是完整的晶体，可能存在少量缺陷，诸如掺杂、错位等情形，这种体系可以视为在一些微扰作用下的晶体，相当于有一个“外加”的势 $U_{ext}$ 来限制载流子的运动，而这种微扰势可以由晶体本身的非各向异性引起的(比如由离子施主或受主引起的)，也可以是外加的。当 $U_{ext}$ 是一个缓慢的势时，会提供一个比内场 $-\nabla V_r$ 小的外场 $-\nabla V_{ext}$ ，因此我们仍然可以认为基于周期性结构的能带描述是有意义的，仍然可以沿用“电子”、“空穴”的说法，可以仿照 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰方法具体求解。将波函数 $\Psi(\mathbf{r})$ 用上面正交完备的 $u_{nk}(\mathbf{r})$ 基展开 $\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n \psi(\mathbf{r}) u_{nk}(\mathbf{r})$ ，展开系数 $\psi(\mathbf{r})$ 为包络函数(Envelop Function)，这种做法称为包络函数近似(EFA)，这种方法在计算量子阱和超晶格的能带方面也得到了广泛的应用[20, 21]。

## §1.2.3 半导体量子阱及其超晶格结构

### 一、半导体超晶格

在这里我们详细介绍半导体量子阱和超晶格的定义和分类，这主要是因为量子阱和超晶格有很多相似的地方。1969年江崎和朱兆祥提出了一个全新的革命性概念：半导体超晶格(Superlattice, 简记为SL)。他们设想，如果用两种晶格匹配很好的半导体材料A和B交替生长，就可得到人工长周期的半导体晶格结构，周期长度小于载流子德布罗意波长，称为半导体超晶格。超晶格材料是由两种或者两种以上性质不同的薄膜相互交替生长而形成的多层结构的晶体。在这种超晶格材料中，由于人们可以任意改变薄膜的厚度，控制它的周期长度。一般来说，超晶格的周期长度比各个薄膜单层晶体的晶格常数大几倍或者更长。

自从江崎等最初从理论上提出并随后试制出GaAs/AlGaAs超晶格材料以来，随着超薄膜晶体制备技术的发展，超晶格结构的研究获得了重大的成果。半导体超晶格材料的制备、设计是以固体能带结构的量子力学理论为基础的，也就是说人为地改变晶体的周期，做出具有新功能的人工超晶格结构材料。半导体超晶格材料具有一般半导体材料不能实现的许多新现象，可以说是超薄膜晶体制备技术、量子物理和材料设计理论相结合而出现的第三种类型的半导体材料。利用这种材料不仅可以显著提高场效应晶体管和半导体激光器等的性能，也可以制备至今还没有的功能更优异的新器件和发现更多的新物理现象，使半导体器件的设计和制造从原来的“掺杂工程”发展到“能带工程”，所以半导体超晶格属于高科技

范畴的新型功能材料。这种材料的周期性可以按照人们的要求任意的改变，所以其中运动的电子或者空穴附加了人为的周期势，也就是说，电子的波函数本身可以被人们所控制，所以超晶格材料是一种新的人工材料。

为了了解什么是二类、断带半导体量子阱，下面我们看一下超晶格的分类：最初江崎和朱兆祥提出超晶格时，他们具体提出了两个实现方案：1)用两种晶格匹配的材料(如GaAs和 $Al_xGa_{1-x}As$ )交替成层，得到周期变化的半导体人工长周期晶格结构，称为组分超晶格，若组成超晶格的两种基质之间晶格失配较大，在界面附近产生应变，则称为应变超晶格。2)用一种材料(如GaAs)交替掺以N型和P型杂质，得到掺杂超晶格。

(I) 组分超晶格：

如果两种不同种类的半导体薄膜相互交替生长而形成超晶格时，一般来说，它们的电子亲和势和禁带宽度都不同。如果超晶格中的一个重复单元是由不同材料的薄膜所构成，则被称为组分超晶格，如图(1-3)所示。在组分超晶



图 1-3 组分超晶格样品结构示意图，A和B分别是两种晶格常数匹配的半导体材料。

格中，由于构成超晶格的材料具有不同的禁带宽度，在异质界面处将出现不连续的能量值，然后再考虑禁带宽度，就可以很方便的定出价带的不连续值。根据这些不连续的特点可以将组分超晶格分为若干类型，例如电子的亲和势为 $\phi_A$ 和 $\phi_B$ ，禁带宽度为 $E_g^A$ 和 $E_g^B$ 的两种半导体A和B组成组分超晶格时，如果满足 $\phi_A > \phi_B$ ， $\phi_A + E_g^A < \phi_B + E_g^B$ 的条件时，它们的能带结构如图(1-4)中(a)所示。GaAs和AlAs或者GaAs和AlGaAs形成的组分超晶格属于这种类型。具有这种能带结构的组分超晶格称为第I类型超晶格，其特点是GaAs材料的禁带完全包含在AlGaAs材料的带隙之中。由于GaAs/AlGaAs异质结构的界面上存在能带的差，在超晶格中的窄禁带材料（GaAs）中将形成电子和空穴的势阱，使得电子和空穴都被限制在势阱中，势阱的深度分别为导带底的能量差 $\Delta E_C$ 和价带顶的能量差 $\Delta E_V$ 。Dingle等人最早根据光吸收的测量结果[22]，得出GaAs/AlGaAs结构中 $\Delta E_C$ 和 $\Delta E_V$ 的数值为：

$$\begin{cases} \Delta E_C = (0.85 \pm 0.03)\Delta E_g \\ \Delta E_V = (0.15 \pm 0.03)\Delta E_g. \end{cases} \quad (1-4)$$

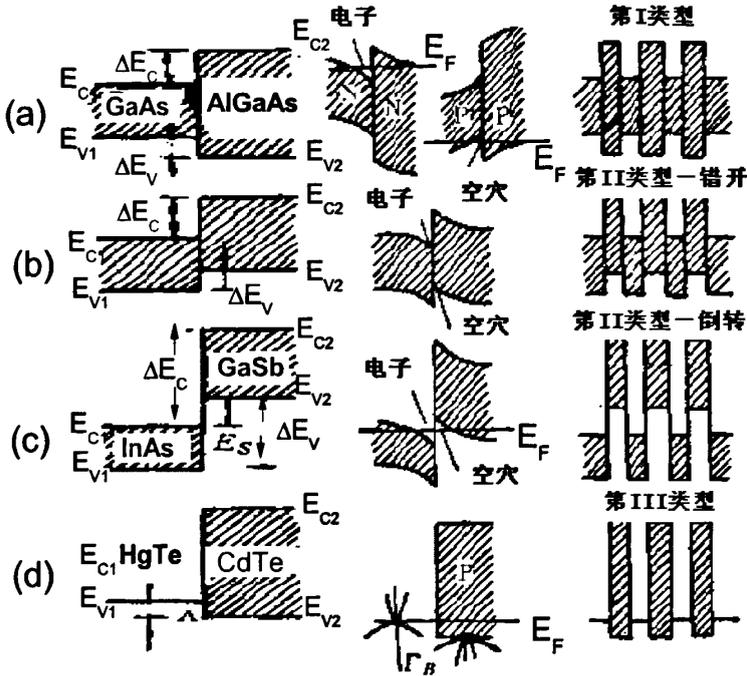


图 1-4 四种类型的超晶格界面的能带边不连续性。(a)I型,(b)II型-错开,(c)II型-倒转(断带)如InAs/GaSb SL,(d)III型[23]如HgTe/CdTe SL。

图(1-4)(b)所示的超晶格能带结构与第I类型的不同，它是一种半导体的导带和另一种半导体的价带相重叠。具有这种能带结构的超晶格称为第II类型的组分超晶格，由InAs和GaSb形成的超晶格属于这种能带结构。这种超晶格的特性很大程度上取决于其异质界面处的能带关系，第II类型超晶格的能隙差为：

$$\Delta E_g = |\Delta E_c - \Delta E_v|. \quad (1-5)$$

从图(1-4)(c)可以看出第II类型的超晶格又可以分为两种：倒转型(又称断带)和错开型。倒转型超晶格中，GaSb的价带顶位于InAs的导带底之下，能量相差 $E_s$ ，这与(b)中的情况不同。

在第II类型的超晶格中，由于一种材料的导带处在另一种材料的价带附近，引起载流子空间分离。即电子被限制在一种材料的薄层中，空穴被限制在另一种材料薄层中，能带关系表现为时空间的间接跃迁型结构。对于第I类型的超晶格，两种半导体材料的导带之间或者价带之间载流子的相互作用是重要的；而对于第II类型的超晶格，由于导带和价带存在交叠，所以两种半导体材料的导带中的载流子和价带中的载流子之间的相互作用是非常重要的。而且在第I类型的超晶格和第II类型的超晶格中，电子的状态也有很大的差别，第I类型的超晶格为半

导体，而第II类型的超晶格中可能存在半导体和半金属转变现象[24, 25]。

目前人们发现还有以HgTe/CdTe结构为代表的第III类型的超晶格。HgTe是一种零带隙的半导体，其能带结构是颠倒的，即类S带位于类P的 $\Gamma$ 四重态之下。所谓常规半导体中的空穴带现在是一个导带，而在GdTe中是导带的类S带，在HgTe中具有轻空穴的特性。我们知道CdTe是宽禁带半导体，在温度为300 K时，禁带宽度为1.49 eV。在HgTe/CdTe超晶格中，价带的能量不连续值 $\Delta E_V$ 近似为零，导带的能量不连续值近似为两种材料的能隙之差，而这正好是CdTe的禁带宽度，即：

$$\begin{cases} \Delta E_C = \Delta E_g = E_g(\text{CdTe}) \\ \Delta E_V = 0 \end{cases} \quad (1-6)$$

正是由于这种特殊的能带结构，我们称之为第III类型的超晶格。

另外，在组分超晶格中除了上述几种类型的超晶格外，还有所谓的多元超晶格，即重复单元是由三种或者三种以上的材料构成的，从而提供了更多的选择结构的自由度。此外，随着制备工艺比如MBE结合光刻和化学腐蚀等工艺手段的发展，人们已经可以生长多维超晶格，如图(1-5)，还有晶格参数不匹配的应变超晶格等。

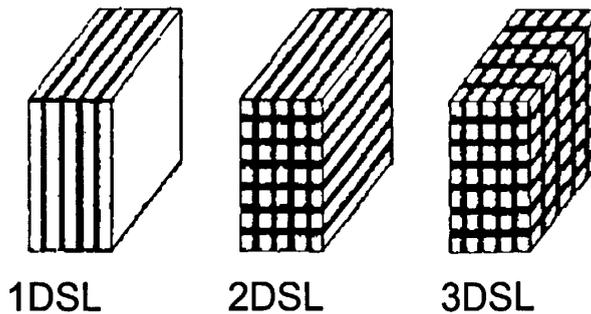


图 1-5 多维超晶格示意图，从左至右分别是一维超晶格（1DSL）、二维超晶格（2DSL）和三维超晶格（3DSL）[23]。

### (II) 掺杂超晶格：

半导体超晶格的另一个大类是掺杂超晶格[26, 27]，通过杂质离子的掺杂可以调制半导体材料的电荷属性，比如有电子型（n型）掺杂和空穴型（p型）掺杂。而这一掺杂技术自然而然的被应用到了半导体超晶格的设计中来。在同一半导体材料中，用交替改变掺杂类型的方法构成的半导体超晶格称为掺杂超晶格，图(1-6)给出了掺杂超晶格的能带结构。

在掺杂超晶格中，电离杂质的空间电荷场在层序列的方向上变换，产生周

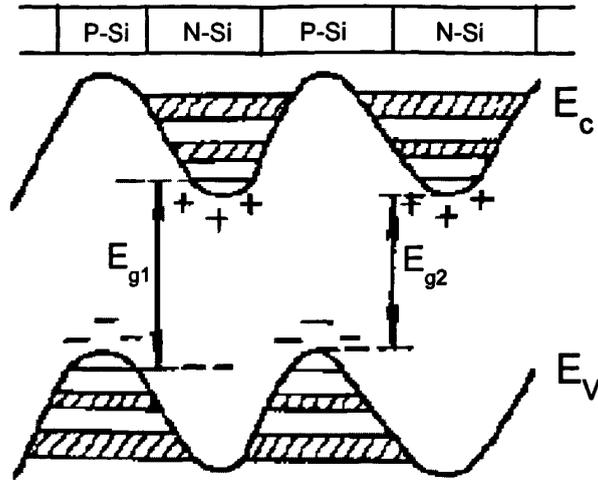


图 1-6 掺杂超晶格示意图，‘+’和‘-’分别表示空穴掺杂和电子掺杂[23]。

期性的能带平行调制。这种调制使得电子和空穴在空间中分离，而适当选择掺杂浓度和层的厚度，可以使得电子和空穴的完全分离，所以这种调制作用决定了材料的一些独特的电学和光学性质。其优点是，任何一种双极性半导体比如Si、PbTe、PbGeTe等都可以作为半导体超晶格的基本材料，而且多层结构的完整性比较好。

## 二、半导体量子阱

可以说半导体量子阱是半导体超晶格结构的原型，最早的关于量子阱的生长和受限粒子光学性质测量的报道是由Dingle[22]在1974年发表的，随后人们对量子阱的一些电学性质等进行了深入细致的研究，并且量子阱体系在半导体太阳能电池、半导体激光器和光电探测器方面得到了广泛的应用。两种半导体材料 $S_1$ 和 $S_2$ 组成异质结，在异质结的 $S_1$ 一侧再连接上一层 $S_2$ ，就组成一个 $S_2-S_1-S_2$ 型的三层结构比如 $AlGaAs-GaAs-AlGaAs$ 量子阱结构。如果中间的 $S_1$ 层厚度小到量子尺度，即可以和其中受限电子的de Broglie波长相比拟。由于量子阱中的电子和空穴的运动在生长方向受到限制而表现出量子行为，该体系的能带图如图(1-7)所示，显然，对于载流子来说， $S_1$ 区犹如一口“阱”，处于其中的载流子如同掉进了阱里，无论向左还是向右离开 $S_1$ 进入 $S_2$ 都必须越过一个势垒，所以电子或者空穴垂直于阱壁方向的运动受到限制。由于有关尺寸是量子尺度，故这样的体系称为量子阱。在量子阱中，载流子的运动在平行于阱壁的方向上不受势垒的限制，可视为自由的；但在垂直于阱壁的方向上受势垒限制，阱宽为量子尺度，载流子在该方向上的运动表现出量子受限行为，能级是量子化

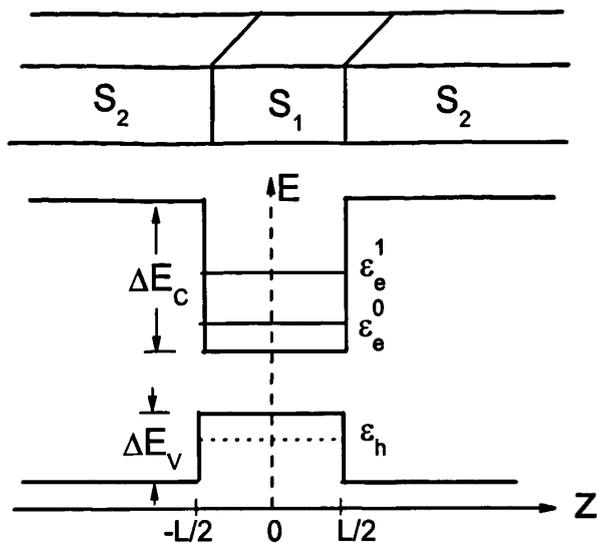


图 1-7 半导体量子阱的材料结构和能带示意图。

的。或者说：该体系中的载流子只是在二维空间中可自由运动，这是一种准二维体系（Q2D）。与超晶格非常相似的是多量子阱体系，它的生长方式和超晶格完全相同，只是多量子阱中阱层的厚度要比超晶格厚，电子的波函数不能穿透阱壁所形成的势垒而进入另一个阱层，所以在多量子阱中载流子的能带结构以及性质都与超晶格有不同的地方。多量子阱的分类也与超晶格完全相同，比如我们称基于InAs/GaSb的量子阱(AlSb/InAs/GaSb/AlSb)称为二类、断带半导体量子阱。

### §1.3 论文的研究目的和意义

基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱和超晶格结构首先是由M. Altarelli[28]于1983年在理论上提出，随后在1987年由H. Munekata及其合作者[29]从实验上制备成功，从而掀起了对这种异质结构研究的热潮。人们期待这种具有特殊能带结构的材料可以在物理性质比如光电性质、输运性质等方面有与传统的半导体量子阱材料不同的地方，从而在器件方面能够有独特的应用。由于体系中有电子和空穴两种载流子，所以基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱以及超晶格材料是各种电子器件比如远红外探测器、中远红外激光器和高速电子器件的理想的首选材料[31]，随着制备技术的发展，已经可以生长高质量的样品材料[32]，为下一步制造价格便宜、性能可靠的热光伏电池、新一代焦平面多色红外探测器件[54]等提供了重要的技术基础。随着分子束外延生长技术（MBE）和化学气相蒸发沉淀法（VOD）[33-36]的发展和日益成熟，人们已

经可以很好的实现晶体在原子量级的生长，从而可以很好的制备一些低维体系的样品，如量子阱、超晶格、异质结等。而扫描隧道显微(Scanning tunneling microscopy and spectroscopy(STM and STS))技术的发展使得人们可以观测到量子阱和超晶格材料中电子的局域态密度[37]，如图(1-8)，从而可以很好的检测样品的质量。

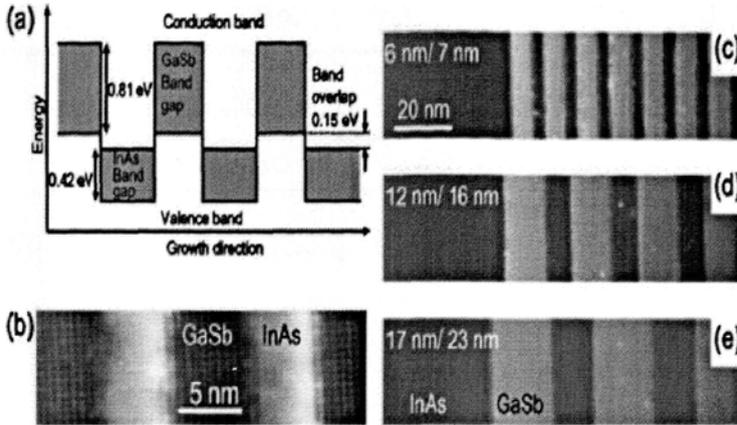


图 1-8 (a)InAs/GaSb异质结中的能带图, (b)InAs(6nm)和GaSb(7nm)量子阱的空态的形貌图(small area topographic image), 所加的偏压是+1 V, 反馈电流(feed back current)是0.1nA。 (c)-(e)是样品厚度分别为: 6nm/7nm,12nm/16nm,17nm/23nm 量子阱的占据态的形貌图(typical large area topographic images), 偏压为-1V[37]。

我们知道，基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱(T2BGQW)体系有着特殊的子能带结构[38]如图(1-9)，通过自恰的能带计算和实验测量[78]发现：当InAs和GaSb两种晶格常数相匹配的材料生长在一起时，由于GaSb的价带比InAs的导带还要高，因此在低温下GaSb的价带中的电子会转移到InAs的导带上，于是在InAs的导带中会产生电子，而在GaSb的价带中就会出现相等数量的空穴，于是在这个体系中就会形成一个在空间上分离的电子-空穴二元、准二维体系。这是基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱如AlSb/InAs/GaSb/AlSb的本征特征，不需要任何的外界掺杂。其具有以下几个特征：

(1) GaSb层的价带顶 $E_V^{GaSb}$ 比InAs层的导带底 $E_C^{InAs}$ 要高140 meV[39]，这也是这种材料被称为二类半导体量子阱的原因，其能带特征是导带和价带有交叠。

(2) 导带中的电子和价带中的空穴在空间上是分离的，电子处于InAs层而空穴处于GaSb层，所以这是一个电子和空穴共存的二元粒子体系。

(3) InAs层中的电子子带和GaSb层中空穴子带都分别被电子和空穴所占

据，于是在InAs层和GaSb层中分别形成了二维电子气（2DEG）和二维空穴气（2DHG）。

因此在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，可以在不做任何掺杂的情况下分别在两层中得到2DEG和2DHG，这两种载流子的获得完全是样品的本征行为。这些特征都是与传统的半导体量子阱所不同的地方，我们知道在传统的半导体量子阱中，电子和空穴总是分布在同一层样品材料中，而且导带总是比价带高。而且量子阱中载流子主要来源于离化的杂质，因此对n型半导体，只有电子子带被占据，对p型半导体，只有空穴子带被占据。

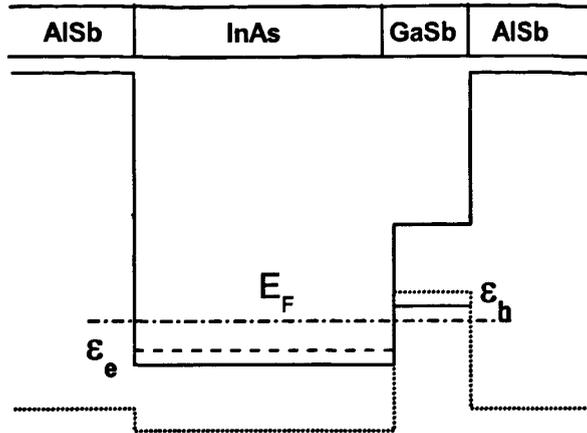


图 1-9 基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱的结构示意图。InAs/GaSb量子阱的两侧被带隙更大的AISb层所包围。 $\epsilon_i$  分别是电子和空穴的能级， $E_F$ 是体系的费米面。

基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱及其超晶格正是由于它特殊的能带特征而备受关注。人们对这种材料进行了大量的理论和实验研究，目前已经在器件的研究方面取得了很大的进展。随着样品制备技术的发展和成熟，人们已经可以制备出高质量的InAs/GaSb量子阱和超晶格，这为其在器件应用方面的研究奠定了基础。目前，这种材料在光电器件方面的应用取得了很大的进展，比如在发光二极管(LED)[40, 41] 和光电二极管(photodiode)[42-44]应用方面的研究不断取得进展，而且随后工作范围在中远红外[45-47] 和远红外[48-52] 波段的光电二极管被陆续报道，足以见得此种材料在光电二极管应用方面所具有的独特吸引力。最近Pierre及其合作者[53]又报道了具有较高量子效率的双色(two-colour)光电二极管，这无疑又为这种材料在光电器件方面的应用开辟了更加广阔的前景，而且目前已经有报道指出，双色光电器件在第三代探测器和传感器[54-56]方面有巨大的应用前景。目前基于InAs/GaSb的量子阱和超晶格在光电探测器以及激光器方面的研究也取得了很大的进展，已经先后研制出远红外[58-60] 和中远红外探测

器[61, 62]。1997年, Baranov等人在室温下观测到在基于InAs/GaSb多量子阱结构中的激光激发[63]现象, 另外, 基于InAs/GaSb的量子阱结构还可以用来做非磁性半导体自旋二极管[64]。总之经过几十年的研究, 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱以及超晶格结构已经在电子器件以及光电器件方面得到了广泛的应用, 主要领域有: 远红外探测器、激光器二极管、带间隧穿二极管和电子晶体管[65-69, 111]等等, 所以对其光电性质的理论研究很有必要。

众所周知, 研究体系的物理性质以及探索其在器件方面的应用, 首先要知道体系中载流子所处的状态, 比如能谱、波函数以及分布情况等等。在过去的几十年里, 人们对基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱的子能带结构进行了大量的理论研究, 发展了很多计算子能带结构的方法比如从Luttinger哈密顿量[70, 113]和Burt's哈密顿量出发的 $k \cdot p$ 微扰法[71, 98]、赝势平面波近似法[73]和紧束缚有效键轨道模型(effective-bond-orbit model)[74]等。这些凝聚态理论的发展已经可以很好的展现了这种新型半导体量子阱材料的能带特征, 一些重要的样品参数(比如电子和空穴的有效质量、能谱的色散关系、导带和价带间的带阶(band offsets)、带边的不连续性、InAs的导带和GaSb的价带的交叠等)已经可以很好的从上述理论计算方法得出, 并且与实验测量值符合得很好。

综上所述, 随着薄膜生长技术如分子束外延生长技术和化学气相蒸发沉淀法的发展和日益成熟, 使得人们可以制备高质量的样品, 从而掀起了这种异质结构研究的热潮。发展了包括 $k \cdot p$ 以及包络函数在内的多种理论方法来计算体系中电子和空穴的能带特征。然而在这些计算忽略了实际样品中可能对结果有重要影响的一些因素, 比如电荷分布、施主和受主杂质的掺杂、背景杂质和电荷的耗尽效应等。因此从器件应用的角度来讲, 研究基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱中的电子性质(比如电子和空穴的子带能级、电子和空穴的浓度、电荷分布以及耗尽浓度)随着样品参数(比如InAs和GaSb层的厚度、掺杂位置和浓度以及夹层的存在)的变化是非常重要的。在一般情况下, 电子的浓度和空穴的浓度不相等, 因此由于电荷守恒所决定的电荷分布对样品中电子的性质会有很大的影响, 而自洽计算的方法是计算在这种半导体量子阱材料中电子和空穴的子带结构随样品参数的变化情况的比较好的方法。我们知道, 材料的能带结构对体系的物理性质有着重要的影响, 由于在这种体系中, 电子的导带和空穴的价带有交叠, 所以这样的异质结构本征上是半金属, 然而实验却发现基于InAs/GaSb二类、断带半导体异质结构有半导体的特征。所以人们也对其能带结构进行了大量的理论研究, 比如 $k \cdot p$ 方法等, 很好的解释了体系的半导体特征。然而 $k \cdot p$ 能带方法是建立在单粒子图象的基础上的, 众多的理论和实验已经证明, 多体效应即载流子

之间的相互作用会对体系的能带性质产生重要的影响。而且,从目前的研究状况来看,人们特别关注基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱及其超晶格的光电性质,所以研究体系中载流子与光子的相互作用,无论对物理原理的研究还是对器件应用方面的探索都有重要的意义。所以在本论文中,我们主要研究在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱材料的光电导和光吸收性质,以及由于交换相互作用导致的电子能带和空穴能带的杂化效应。

#### §1.4 本论文的结构

在本论文的第二章,主要介绍在基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱中电子和空穴子能带的计算方法,然后介绍研究体系输运性质的玻尔兹曼方程(Boltzmann)方法以及用平衡方程方法来解玻尔兹曼方程。

在第三章我们介绍在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中由于电子和空穴在InAs层和GaSb层间由于吸收光子而发生的带间跃迁所引起的光电导性质。

在第四章中我们介绍在基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱中的光吸收性质,这主要是受前一章的启发,我们发现电子和空穴在光场的作用下除了可以在两个不同的层间发生带间跃迁外,还可以在同一材料层中发生跃迁,这是传统的半导体量子阱材料所不具有的性质。

在第五章中我们介绍了在基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱中由于多体效应引起的电子能带和空穴能带的杂化效应,这与以往的 $k \cdot p$ 理论有本质的区别,从另一个角度阐述了能带杂化和微带隙出现的原因。

第六章给出本论文的总结和下一步工作的展望。

## 第二章 基本理论方法

**摘要：**本章主要介绍在基于的InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱(AlSb/InAs/GaSb/AlSb)中电子和空穴的波函数和能级的计算方法，在这里我们给出直接解Schrödinger方程得到电子(空穴)的能级和波函数的方法，并将得到的结果和自恰计算的结果比较。简要介绍解Schrödinger方程和泊松方程的自恰计算过程。当载流子在半导体材料中运动时，它总会受到各种各样的散射作用，在凝聚态物理中比较常见散射过程主要有：晶格的散射即电子-声子散射、电子-电子散射、以及电子与杂质或缺陷的散射等。材料的许多物理性质比如电容、电导、热导率以及磁电阻等都与载流子在器件中的散射过程有关。所以输运问题的研究对器件的设计、性能的测量以及应用有重要的意义，而玻尔兹曼(Boltzmann)方程是研究输运问题的主要工具之一，而且由不同的散射机制导致的输运现象也是目前人们研究的热点之一。所以在本节的第二部分介绍研究体系输运性质的玻尔兹曼方程方法。众所周知，由于玻尔兹曼方程中散射几率的复杂形式，使得直接求解玻尔兹曼方程存在很大的困难。在此，我们根据所求的物理量，采用相应形式的平衡方程方法[75, 76]来解玻尔兹曼方程。这也是下面两章研究量子阱中光电性质的理论基础。

### §2.1 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的电子(空穴)的量子态

#### §2.1.1 解Schrödinger方程求电子和空穴的能级及波函数

众所周知，要研究体系的物理性质，最重要的是要知道体系中载流子的量子态，即能谱和波函数以及分布情况。在本节中我们介绍在AlSb/InAs/GaSb/AlSb半导体量子阱中，求解电子和空穴的能级和波函数的方法，并将所得到的结果与自恰计算所得到的结果做对比。

量子阱或者超晶格中的电子和空穴的运动在生长方向(一般取为z方向)受到限制，其能级是量子化的，而在二维平面内的粒子的运动是自由的，其波函数为平面波。所以电子和空穴的波函数及能谱可以写为：

$$\begin{cases} \Psi_n^i(R) = \psi_n^i(z)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ E_n^i(k) = (-1)^i \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} + \epsilon_n^i. \end{cases} \quad (2-1)$$

其中  $R = (r, x)$ ,  $r = (x, y)$ ,  $\varepsilon_n^i$  是电子(空穴)的子带能级,  $\psi_n^i(z)$  是电子(空穴)沿着  $z$  方向的波函数, 对电子  $i = 0$ , 对空穴  $i = 1$ , 分别表示电子的能谱开口向上而空穴的能谱开口向下。

在有效质量近似下电子和空穴沿着生长方向的单粒子Schrödinger方程:

$$\frac{d^2}{dz^2} \psi_n^i(z) + \frac{2m_n^*}{\hbar^2} [E - V(x)] = 0, \quad (2-2)$$

AlSb/InAs/GaSb/AlSb量子阱结构如图(1-9)所示, 由于AlSb的带隙比较大, 所以对电子和空穴来说, 可以将AlSb的势垒层近似的看作无限高, 于是电子和空穴都被限制在两边为无限深的InAs/GaSb量子阱中运动, 下面我们分别求解Schrödinger方程得到电子和空穴的能级及波函数。

在AlSb/InAs/GaSb/AlSb量子阱中, 电子处在如图(2-1)(a)所示的势阱中运动。取InAs的导带底作为能量的零参考点, 取AlSb和InAs的界面作为  $z$  轴的零点, InAs层和GaSb层的交界处的坐标记为  $a$ , GaSb层和AlSb层的交界处的坐标记为  $b$ , 量子阱中电子所受势垒的分布为:

$$V(z)_e = \begin{cases} \infty & \text{AlSb(I)} (z < 0) \\ 0 & \text{InAs(II)} (0 \leq z \leq a) \\ V_3^e & \text{GaSb(III)} (a < z < b) \\ \infty & \text{AlSb(IV)} (z > b) \end{cases} \quad (2-3)$$

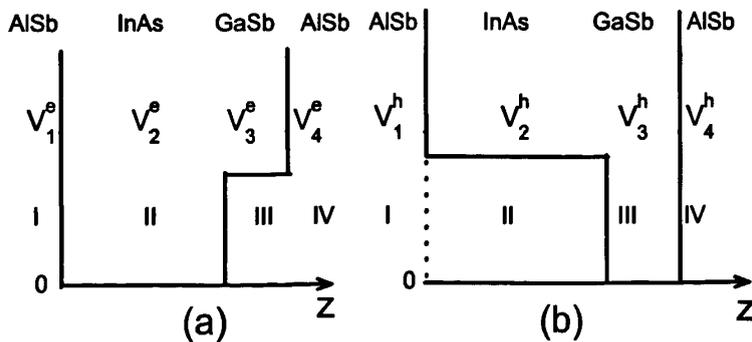


图 2-1 在AlSb/InAs/GaSb/AlSb量子阱中, 电子和空穴所受到的限制势的示意图。(a)电子所受到的限制势, (b)空穴所受到的限制势。

在量子阱中电子的波函数的形式为:

$$\psi_n^e(z) = \begin{cases} 0 & \text{I} \\ A_2 \cos(k_2 z) + B_2 \sin(k_2 z) & \text{II} \\ A_3 e^{k_3 z} + B_3 e^{-k_3 z} & \text{III} \\ 0 & \text{IV} \end{cases} \quad (2-4)$$

其中  $k_2^2 = \frac{2m_2^*E}{\hbar^2}$ ,  $k_3^2 = \frac{2m_3^*(V_3-E)}{\hbar^2}$ , 其中波函数的系数  $A_2, A_3, B_2, B_3$  可以通过归一化条件来确定。

利用在边界  $z = 0, a, b$  处波函数及其导数连续的边界条件:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) & (a) \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) & (b) \\ \psi_{II}(a)' / m_2^* = \psi_{III}(a)' / m_3^* & (c) \\ \psi_{III}(b) = \psi_{IV}(b) & (d) \end{cases} \quad (2-5)$$

需要注意的是在上式中波函数一阶导数的连续性条件(c)式, 还要除以各自层中电子的有效质量, 这是概率流守恒条件的要求:

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar^2}{2m^*} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*] \quad (2-6)$$

由 (a)、(b)、(c) 和 (d) 式可以得到电子的能级方程:

$$k_3 m_2^* \tan[k_2 a] + k_2 m_3^* \tanh[k_3 (b - a)] = 0 \quad (2-7)$$

超越方程(5-23)没有简单的解析解, 在样品生长参数(量子阱的宽度)给定的情况下, 我们可以通过数值的方法得到电子的能级。

而波函数的系数可以通过归一化条件确定:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(z)|^2 dz = 1. \quad (2-8)$$

用同样的方法可以求得空穴的能级和波函数, 值得注意的是在求空穴的能级时, 为了处理的方便, 我们取向向下作为空穴能量的正方向, 则空穴可以看作在如图(2-1)(b)的量子阱中运动, 并选取GaSb的导带顶作为能量的零参考点。

在计算过程中, 对AlSb、InAs和GaSb层中, 电子和空穴的有效质量及其各层材料的介电常数分别取为:

$$\begin{cases} m_1^e = 0.12m_e & \text{AlSb;} \\ m_2^e = 0.038m_e & \text{InAs;} \\ m_3^e = 0.04m_e & \text{GaSb;} \\ m_1^h = 0.98m_e & \text{AlSb;} \\ m_2^h = 0.40m_e & \text{InAs;} \\ m_3^h = 0.33m_e & \text{GaSb;} \end{cases} \quad (2-9)$$

其中  $m_e$  是自由电子的质量。

$$\begin{cases} \kappa_1 = 17.76 & \text{AlSb;} \\ \kappa_2 = 15.15 & \text{InAs;} \\ \kappa_3 = 15.69 & \text{GaSb;} \end{cases} \quad (2-10)$$

选取InAs的导带底为零势能参考点，则不同层中导带和价带的位置分别为：

$$[\Delta E_c(z), \Delta E_v(z)] = \begin{cases} (2000\text{meV}, -300\text{meV}) & I; \\ (0\text{meV}, -450\text{meV}) & II; \\ (960\text{meV}, 140\text{meV}) & III; \\ (2000\text{meV}, -300\text{meV}) & IV, \end{cases} \quad (2-11)$$

选取InAs层的导带底作为能量的零参考点电子和空穴的基态能级和第一激发态能级分别为： $\epsilon_1^e = 32.0\text{meV}$ ， $\epsilon_2^e = 119.9\text{meV}$ ， $\epsilon_1^h = 106.3\text{meV}$ ， $\epsilon_1^h = 4.2\text{meV}$ 。由电子浓度和空穴浓度的表达式：

$$\begin{cases} n_e = \sum_n \frac{m_n^e}{\pi \hbar^2} \Theta(E_F - \epsilon_n^e)(E_F - \epsilon_n^e) \\ n_h = \sum_n \frac{m_n^h}{\pi \hbar^2} \Theta(\epsilon_n^h - E_F)(\epsilon_n^h - E_F) \end{cases} \quad (2-12)$$

求得电子和空穴的浓度分别为： $n_e = 1.14 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ， $n_h = 3.10 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。

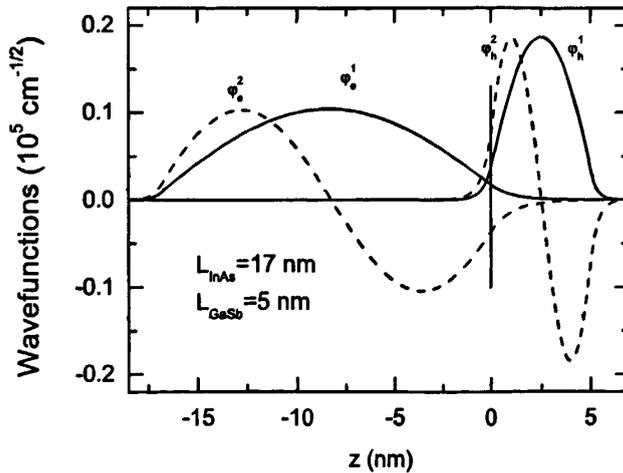


图 2-2 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱AlSb/InAs/GaSb/AlSb中，通过解Schrödinger方程所得的电子和空穴的基态和第一激发态波函数。其中InAs层和GaSb层的厚度分别为： $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ， $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ 。

相应的波函数的形式如图（2-2），在图中取InAs层和GaSb层的界面作为坐标的零点，InAs层和GaSb层的厚度分别为： $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ， $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ 。实线是电子和空穴的基态波函数，虚线是电子和空穴的第一激发态波函数，从图上可以看出，电子和空穴的波函数在界面处有交叠，而且由于GaSb层比较窄，所以空穴的波函数更局域。

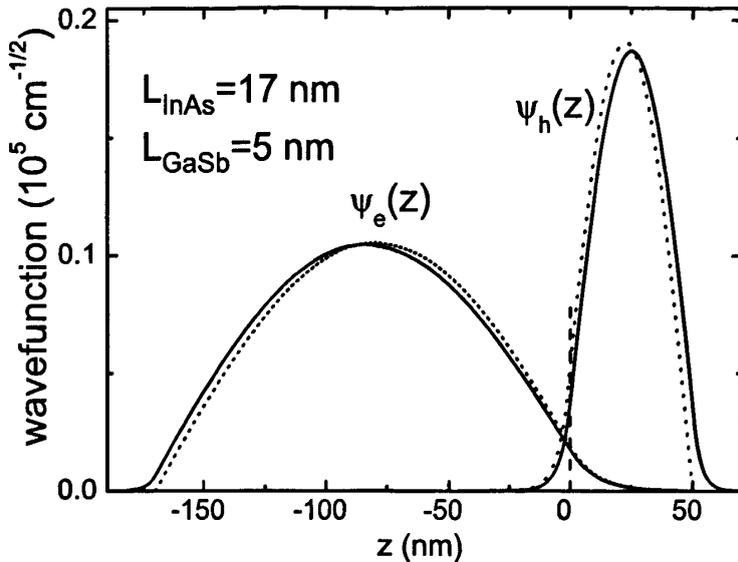


图 2-3 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中电子和空穴的基态波函数，实线是通过自恰计算所得的电子和空穴的基态波函数，虚线直接解Schrödinger方程所得的结果，其中InAs层和GaSb层的厚度分别为： $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ， $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ 。

而通过自恰计算所得的电子和空穴的基态波函数如图（2-3）中实线所示，虚线是直接解Schrödinger方程得到的电子和空穴的基态波函数。可见，两种方法得到的基态波函数在InAs层和GaSb层的界面处符合的非常好，而电子和空穴在两层之间跃迁的相关性质主要是由InAs层和GaSb层的界面处波函数的耦合决定的。只是由于直接解Schrödinger方程的时候，我们假设AlSb层的势垒为无限深，所以在AlSb的界面处电子和空穴的波函数迅速的衰减为零，这是由边界条件决定的。由于在界面处电子和空穴的波函数有交叠，所以电子和空穴都有一定的几率在两层之间发生隧穿。在某种驱动场（例如电磁场）的作用下，电子和空穴可以在两层之间发生跃迁，从量子阱的一层跃迁到另一层。而且空穴的位置更局域，有效质量更大，所以更不容易运动，因此，电子从InAs层跃迁到GaSb层的隧穿在跃迁过程中起主要作用。我们随后的理论研究发现，正是由于电子和空穴的波函数在界面处的这种交叠，使得电子和空穴能够在半导体量子阱的两层之间发生跃迁，从而引起一些独特的而有趣的物理现象。这也是我们研究这种材料中与电子和空穴在两层之间跃迁有关性质的物理基础。

### §2.1.2 自恰计算方法

所谓的自恰计算方法就是自恰的解Schrödinger方程和泊松（Poisson）方程，

通过求解薛定谔方程得到电子的波函数和能级，而通过解泊松方程给出薛定谔方程中的势能。而泊松方程与麦克斯韦（Maxwell）方程有关，所以在介绍自洽计算方法之前，我们首先介绍麦克斯韦方程和泊松方程。

（一）麦克斯韦方程：

麦克斯韦方程由著名的英国科学家*J.C.Maxwell*于1864年在总结前人工作的基础上提出的。这组方程给出了电磁场的场矢量与电荷、电流之间的关系。若采用矢量微分算符，用SI单位制，这组方程是：

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon} & (1) \\ \nabla \cdot \vec{B} = 0 & (2) \\ \nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} & (3) \\ \nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} & (4) \end{cases} \quad (2-13)$$

其中 $\vec{E}$ 是电场强度， $\vec{B}$ 是磁场强度， $\vec{J}$ 为电流密度， $\rho$ 为电荷密度， $c$ 是真空中光速， $\epsilon$ 是材料的介电常数， $\mu_0$ 是真空导磁率。

对大多数半导体器件的理解和分析都要借助于计算器件中的静电势随电荷分布的变化。电磁理论或者更特别的静电理论可以用来计算这种势，因此在这里我们有必要介绍一下高斯定理和泊松方程。高斯定理是麦克斯韦方程(2-13)中的式(1)，它给出了电荷浓度 $\rho$ 和外电场 $\vec{E}$ 的关系。在不存在外磁场的作用下，一维高斯方程为：

$$\frac{dE(x)}{dx} = \frac{\rho(x)}{\epsilon} \quad (2-14)$$

对上式积分可以得到电场和一维电荷分布的关系：

$$E(x_2) - E(x_1) = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\rho(x)}{\epsilon} dx \quad (2-15)$$

同样，高斯定理也可以推广到三维情况，具有以下形式：

$$\nabla \cdot \vec{E}(x, y, z) = \frac{\rho(x, y, z)}{\epsilon} \quad (2-16)$$

（二）泊松方程：

电场强度 $\vec{E}$ 定义为静电势 $\phi$ 的极小值，在一维情况下：

$$\frac{d\phi(x)}{dx} = -E(x) \quad (2-17)$$

对上式取微分并结合高斯定理可以得到：

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon} \quad (2-18)$$

这就是泊松方程(2-18)在一维情况下的形式。对三维情况，电势和电场强度的关系为：

$$\nabla^2\phi(x, y, z) = -\frac{\rho(x, y, z)}{\epsilon} \quad (2-19)$$

取微分可得一般形式的泊松方程:

$$\nabla^2 \phi(x, y, z) = -\frac{\rho(x, y, z)}{\epsilon} \quad (2-20)$$

泊松方程给出了电荷分布对电势的影响, 后面我们将看到, 所谓的自恰计算就是解泊松方程和Schrödinger方程, 考虑电荷分布对Schrödinger方程中的势能的影响。二维电子气的电子态一般要通过解Schrödinger方程以获得波函数和电子的本征能量, 又要通过解泊松方程来得到电子的势能, 所以要通过自恰的方法来解[77]。

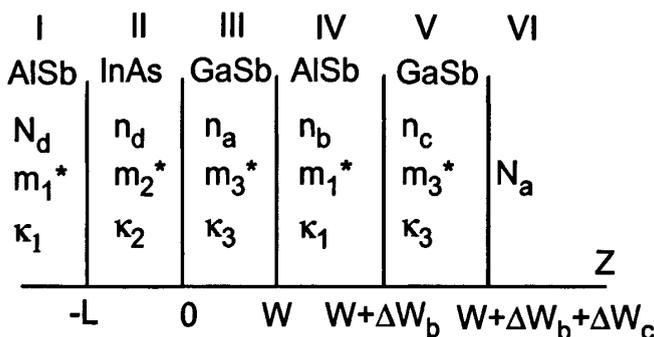


图 2-4 AlSb/InAs/GaSb/AlSb/GaSb 二类断带半导体量子阱的结构示意图。其中  $m_i^*$  和  $\kappa_i$  分别是不同层中的有效质量和静态介电常数,  $N_i$  和  $n_i$  是背景或者掺杂杂质的浓度, 其中将 InAs 层和 GaSb 层的界面取为  $z = 0$ 。

(三) AlSb/InAs/GaSb/AlSb/GaSb 二类断带半导体量子阱中的自恰计算方法:

在这里我们以 AlSb/InAs/GaSb/AlSb/GaSb 二类断带半导体[78]为例来介绍自恰计算过程。图(2-4)是样品结构示意图以及各种参数。取样品生长的方向为  $z$  方向, 在 I 区 ( $z < -L$ ) 是 AlSb 层, 这是为了给电子和空穴提供一个很大的势垒, 而将其限制在阱中, II 区 ( $-L < z < 0$ ) 是 InAs 层, III 区 ( $0 < z < W$ ) 是 GaSb 层, 如前所述, 由于 GaSb 的价带比 InAs 的导带要高, 所以分别在 InAs 层和 GaSb 层形成了二维电子气和二维空穴气。在 IV 区 ( $W < z < W + \Delta W_b$ ) 是厚度为  $\Delta W_b$  的 AlSb 层, 它的存在是为了给 GaSb 层中的空穴提供一个势垒。V 区 ( $W + \Delta W_b < z < W + \Delta W_b + \Delta W_c$ ) 是 GaSb 层, 它可以给系统提供额外的电荷。VI 区 ( $z > W + \Delta W_b + \Delta W_c$ ) 是 GaSb 层表面的氧化层。自恰计算主要包括以下几个过程:

(1) 在有效质量近似下用已知的材料参数来计算电子和空穴的子带结构。电子和空穴的能级和波函数由单粒子 Schrödinger 方程给出:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^i(z)} \frac{d^2}{dz^2} + U_i(z) - \epsilon_n^i \right] \psi_n^i(z) = 0 \quad (2-21)$$

(2) 电子和空穴的限制势为:

$$U_i(z) = U_H(z) + U_{ex}^i(z) + \Delta E_i(z) \quad (2-22)$$

我们知道, 在自恰计算中往往要考虑交换、关联能, 但是在二类、断带半导体量子阱体系中人们还不清楚交换、关联能的泛函形式, 所以在这里仅仅考虑电子和空穴的交换势[79, 80]。

$$U_{ex}^i(z) = 0.0783 \frac{e^2}{\kappa(z)} [n^i(z)]^{1/3} \quad (2-23)$$

$n^i(z)$ 是电子或空穴在生长方向的分布函数。

(3) 电子和空穴的Hartree势由泊松方程给出:

$$\frac{d}{dz} \kappa(z) \frac{d}{dz} U_H(z) = -e\rho(z), \quad (2-24)$$

$\rho(z)$ 是沿生长方向的电荷分布:

$$\rho(z) = \begin{cases} \Delta n(z) & I_1 : z \leq -L - L_d \\ \Delta n(z) - N_d & I_2 : -L - L_d < z \leq -L; \\ \Delta n(z) - n_d & II; \\ \Delta n(z) + n_a & III; \\ \Delta n(z) + n_b & IV; \\ \Delta n(z) + n_c & V, \end{cases} \quad (2-25)$$

其中:  $\Delta n(z) = n_e(z) - n_h(z)$ , 由于体系中的杂质都是局域的, ‘-’表示施主杂质, ‘+’表示受主杂质。在这里假设了在AlSb层中 ( $z < -L$ ) 有一施主型杂质, 其浓度为 $N_d$ , 并且认为一个杂质粒子带一个单位的电荷, 隧穿长度为 $L_d$ , 在自恰计算中可以确定 $N_d$ 和 $L_d$ 。因此电子和空穴的薛定谔方程和与泊松方程通过哈特里 (Hartree) 势联系在了一起, 所以要自恰求解。

(4) 载流子的分布情况为:

$$n_i(z) = \sum_n N_n^i |\psi_n(z)|^2, \quad (2-26)$$

其中 $N_n^i$ 是第 $n$ 个子带上的载流子的浓度, 当我们用InAs(GaSb)阱中电子(空穴)的有效质量来描述电子或者空穴的态密度 (DOS) 并且将费米能级 $E_F$ 取做一个常数时, 在低温下 ( $T = 0K$ ),  $N_n^i$ 可以写成:

$$\begin{cases} N_n^e = \frac{m_n^e}{\pi \hbar^2} \Theta(E_F - \epsilon_n^e) (E_F - \epsilon_n^e), \\ N_n^h = \frac{m_n^h}{\pi \hbar^2} \Theta(\epsilon_n^h - E_F) (\epsilon_n^h - E_F) \end{cases} \quad (2-27)$$

其中 $\Theta(x)$ 是阶梯函数, 满足:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0, \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (2-28)$$

那么在体系中电子和空穴的总浓度为:

$$n_i = \sum_n N_n^i, \quad (2-29)$$

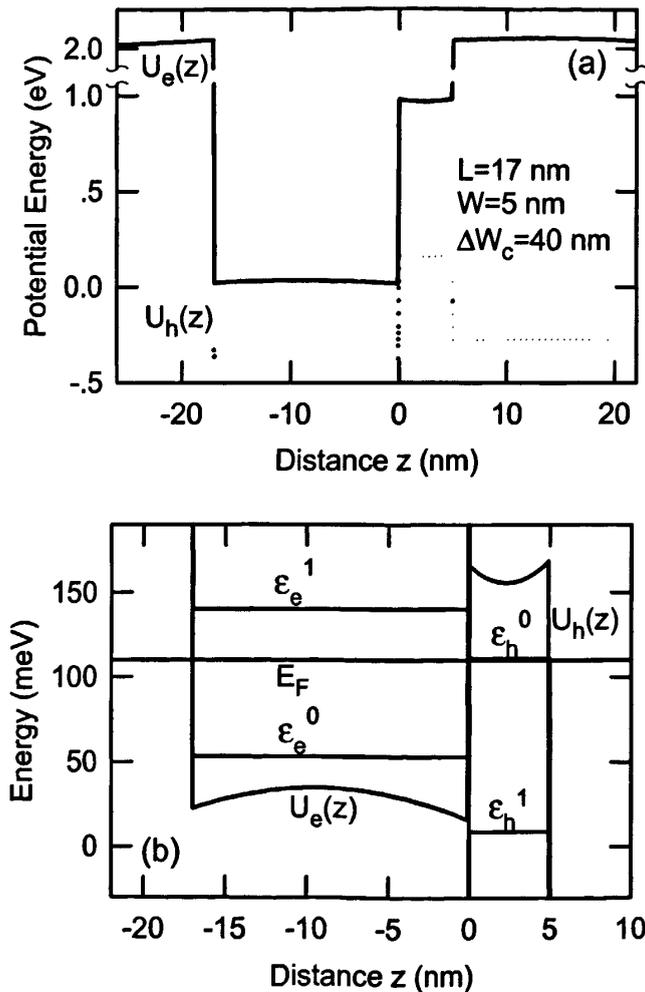


图 2-5 (a)导带和价带沿着生长方向的分布, 这里考虑了电荷分布对势能的影响, 所以能带有弯曲。(b)电子和空穴的子带能级以及费米能量的位置[78]。

总的说来, 自恰计算就是利用一些已知的材料参数(比如电子和空穴的有效质量、介电常数、导带和价带的带阶(band offsets)等)和样品的生长参数

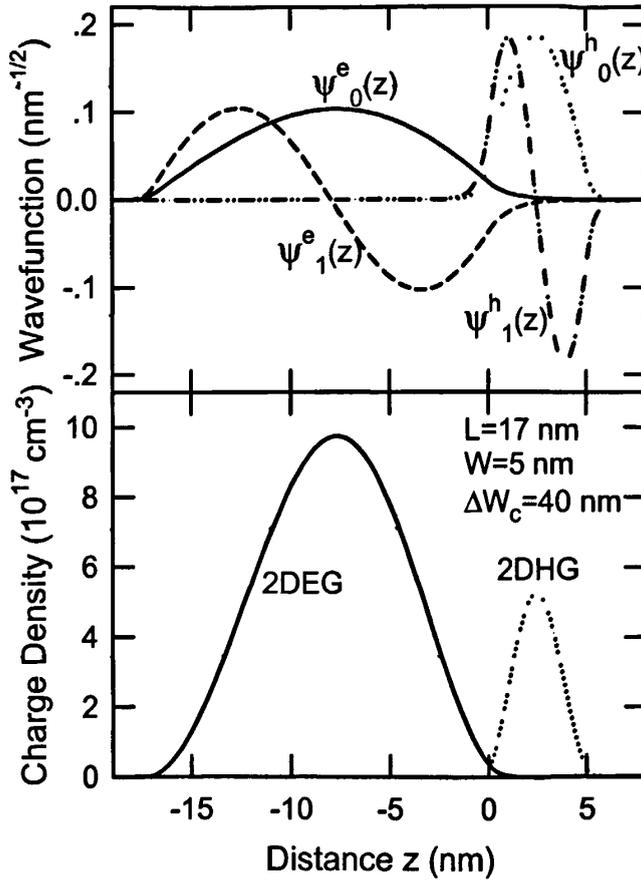


图 2-6 沿着生长方向的两个最低电子带和两个最高空穴带的波函数和电荷分布[78]。

(InAs和GaSb阱层的厚度以及不同层中背景杂质的浓度等) 来解Schrödinger方程和Poisson方程, 从而得到我们所需要的电子或空穴的量子态, 比如电子或空穴的波函数、子带能量、总的限制势、电子和空穴在不同带中的态密度以及总的态密度和电荷分布等。需要指出的是: 在自恰计算中, 取定 $E_F$ 的值作为自恰计算中的唯一的输入参量。当 $\Delta W_c \leq 50\text{nm}$ 时, 费米能级钉扎在受主能级 $E_F = E_F^0 \sim 110\text{meV}$ [81]; 当 $\Delta W_c > 50\text{nm}$ 时,  $E_F = E_F^0 + \Delta W_c(-2.5 \times 10^{-4} + 5 \times 10^{-7} \Delta W_c)$ ,  $\Delta W_c$ 在纳米量级, 所以 $E_F \sim \text{meV}$ , 当帽层(cap layer)的厚度比较大时,  $E_F$ 的变化主要是由于空穴的注入使得能带发生弯曲引起的[78]。如图(2-4), 对于样品的生长参数取为:  $L = 17\text{nm}$ ,  $W = 5\text{nm}$ ,  $\Delta W_b = 30\text{nm}$ , 并且假设背景或杂质的浓度为:  $n_d = n_a = n_b = 10^{15}\text{cm}^{-3}$ ,  $n_d = 3 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$ 。

## §2.2 输运理论—玻尔兹曼方程方法

玻尔兹曼方程是研究输运问题的主要工具之一。本论文采用玻尔兹曼方程方法作为主要的输运理论来研究基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的电子和空穴对外加电磁场的响应, 所以我们有必要对其基本理论做简要的介绍。

### §2.2.1 二维电子气中的玻尔兹曼方程

众所周知, 为了描述材料中的一个问题, 必须要知道载流子在体系中所处的状态, 即要弄清楚在 $t$ 时刻, 每个粒子所处的位置 $\mathbf{r}$ 以及所具有的动量 $\mathbf{p}$ 的概率, 即要知道载流子的统计分布函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ , 它包含了体系中载流子的一些基本信息。在热平衡情况下, 即温度均匀且无外场的作用, 电子系统的分布满足费米狄拉克分布:

$$f_0(E_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{e^{(E_{\mathbf{k}} - E_F)/k_B T} + 1}, \quad (2-30)$$

其中 $E_F$ 是体系的费米能或者化学势。由于体系均匀, 所以 $f_0$ 与位置 $\mathbf{r}$ 和时间 $t$ 无关。偏离平衡状态时, 非平衡分布函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ 随空间位置和时间变化, 电子的位置 $\mathbf{r}$ 和波矢 $\mathbf{k}$ 可以因为外场的作用或者粒子间散射而改变。

玻尔兹曼方程方法就是用分布函数随着时间的变化来描述电子输运行为的一个比较常用的方法, 用玻尔兹曼方程方法来讨论电导等输运行为时, 电子被看成是一个准经典粒子(波包)[82], 波包在外场作用下的运动是比较自由的。这是为了使波包具有确定的中心 $(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}_0)$ , 波包中所含 $\Delta\mathbf{k}$ 的范围必须小于布里渊区的线度(1/晶格长度)。由于测不准原理, 波包在实空间延伸的范围需远大于元胞, 因此在实际问题中, 只能在这个限度内把电子看成准经典粒子。所以在讨论电导等输运问题时, 只有在自由程大于元胞的情况下, 才可以把电子看成经

典粒子，采用玻尔兹曼方程的方法。这个条件对一般金属材料来说是可以满足的，但是在有些情况下，比如非晶态材料就不一定满足，更一般讨论电导的方法是利用Kubo - Greenwood公式，在自由程很大的情况，Kubo - Greenwood公式和玻尔兹曼方程方法的结果一致，Kubo - Greenwood公式首先分析在频率为 $\omega$ 的交变电场作用下的电导 $\sigma(\omega)$ ，然后再讨论 $\omega$ 趋向于零时的极限情况，即为直流电导 $\sigma(0)$ 。半经典模型对外电场、磁场用经典的方式处理，对晶格周期场沿用能带论量子力学的处理方式，具体表述为：每个电子具有确定的位置 $\mathbf{r}$ 和波矢 $\mathbf{k}$ 和能带指标 $n$ 。对于给定的 $E_n(\mathbf{k})$ ，在外电场 $E(\mathbf{r}, t)$ 和外磁场 $B(\mathbf{r}, t)$ 的作用下，位置、波矢、能带指标随时间的变化满足：

- (1) 电子总待在同一能带中，忽略带间跃迁的可能性。
- (2) 电子的速度： $\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k})$ 。
- (3) 波矢 $\mathbf{k}$ 随时间的变化： $\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e[E(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times B(\mathbf{r}, t)]$ 。

半经典模型使能带结构与输运性质，即电子对外场的响应相联系，提供了从能带结构推断输运性质或者从输运性质的测量结果推断能带结构的理论基础。可见波矢 $\mathbf{k}$ 与外场有关，从而影响能带结构，而位置 $\mathbf{r}$ 取决于能带结构。

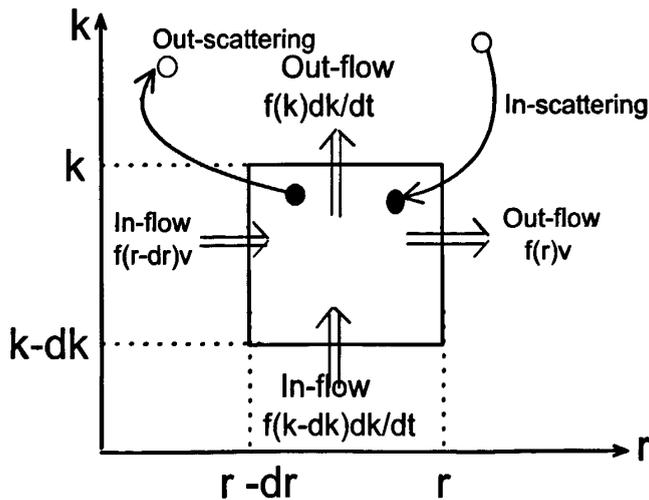


图 2-7 在动量空间和位置空间中载流子在 $(dkdr)$ 范围内的散射情况，箭头表明了载流子散射的方向。

如图(2-7)所示，如果不存在散射， $t$ 时刻 $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ 处的电子必定来自 $t - dt$ 时刻 $(\mathbf{r} - d\mathbf{r}, \mathbf{k} - d\mathbf{k})$ 处，即：

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f(\mathbf{r} - d\mathbf{r}, \mathbf{k} - d\mathbf{k}, t - dt), \quad (2-31)$$

然而实际上由于散射的存在， $dt$ 时间内从 $(\mathbf{r} - d\mathbf{r}, \mathbf{k} - d\mathbf{k})$ 处出发的电子并不都能到

达 $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ 处, 同样 $t$ 时刻在 $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ 处的电子也不一定都来自 $(\mathbf{r} - d\mathbf{r}, \mathbf{k} - d\mathbf{k})$ 处。将散射或者说碰撞引起的分布函数 $f$ 的改变写出 $(\partial f / \partial t)_{coll}$ , 则分布函数的演化关系为:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f(\mathbf{r} - \dot{\mathbf{r}}dt, \mathbf{k} - \dot{\mathbf{k}}dt, t - dt) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}, \quad (2-32)$$

将 $f(\mathbf{r} - \dot{\mathbf{r}}dt, \mathbf{k} - \dot{\mathbf{k}}dt, t - dt)$ 做泰勒展开保留到 $dt$ 的线性项有:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{k}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}, \quad (2-33)$$

此即电子系统的玻尔兹曼方程。其中左边的前两项称为漂移项, 右边的项称为碰撞项或者散射项, 散射项与电子所受到的散射机制有关。

### §2.2.2 玻尔兹曼方程的平衡方程解法

众所周知, 由于散射项 $(\frac{\partial f}{\partial t})_{coll}$ 的复杂形式, 使得直接解玻尔兹曼方程存在很大的困难, 因此如何绕开直接解玻尔兹曼方程的困难而求得所要讨论的物理量成了人们迫切需要解决的问题。比较普遍的方法是驰豫时间近似和低场条件下的平衡方程方法[75, 76]。平衡方程方法有非常明确的物理意义, 可以给出载流子的平均浓度(carrier density)、动量浓度(momentum density)以及能量密度(energy density)。为了计算载流子的总动量, 我们要计算动量态被占据的几率, 然后对所有的态求和, 则与泛函动量 $\phi(\mathbf{k})$ 有关的物理量可以表示为:

$$n_\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t). \quad (2-34)$$

适当的选取泛函动量 $\phi(\mathbf{k})$ ,  $n_\phi(\mathbf{r}, t)$ 可以表示不同的物理量, 比如:

(1)  $\phi(\mathbf{k}) = 1$ ,  $\Rightarrow n_\phi$ 对应于载流子的浓度, 可以得到质量平衡方程(mass-balance equation)。

(2)  $\phi(\mathbf{k}) = \mathbf{k}$ ,  $\Rightarrow n_\phi$ 对应于载流子的动量密度, 可以得到动量平衡方程(momentum-balance equation)。

(3)  $\phi(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k})$ ,  $\Rightarrow n_\phi$ 对应于载流子的能量密度, 可以得到能量平衡方程(energy-balance equation)。

为了得到 $n_\phi$ 的平衡方程, 我们在玻尔兹曼方程(2-33)的两边同时乘以 $\phi(\mathbf{k})/\Omega$ 并对所有的动量求和得到:

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) (-q) \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}, \quad (2-35)$$

由于 $\phi(\mathbf{k})$ 与时间无关, 所以方程(2-35)中左边的第一项变为:

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial n_\phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (2-36)$$

在低场条件下可以得到所关心的物理量 $n_\phi$ :

$$\frac{\partial n_\phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{F}_\phi + G_\phi - R_\phi \quad (2-37)$$

其中 $F_\phi$ 是 $\phi$ 的通量，负号表示流入， $G_\phi$ 是场的产生率（可以是光生载流子的产生率或者是雪崩(avalanche generation)产生率等）， $R_\phi$ 是复合率。方程（2-36）中各项的表达式[83]为：

载流子浓度(Density):  $n_\phi(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ 。

流通量(Associated flux):  $\mathbf{F}_\phi \equiv \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ 。

场产生率(Field generation rate):

$$G_\phi(\mathbf{r}, t) \equiv -q\mathbf{E} \cdot \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$$

散射复合率(Scattering recombination rate):

$$R_\phi(\mathbf{r}, t) \equiv 5 \frac{1}{\tau_\phi(\mathbf{k})} 6 [n_\phi(\mathbf{r}, t) - n_\phi^0(\mathbf{r}, t)]$$

(Associated out-scattering rate):

$$\frac{1}{\tau_\phi(\mathbf{k})} \equiv \sum_{\mathbf{k}'} S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [1 - \phi(\mathbf{k}') / \phi(\mathbf{k})]$$

系综的驰豫率(Ensemble relation rate)为：

$$\langle\langle \frac{1}{\tau_\phi(\mathbf{k})} \rangle\rangle \equiv \frac{\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) / \tau_\phi(\mathbf{k})}{[n_\phi(\mathbf{r}, t) - n_\phi^0(\mathbf{r}, t)]}$$

### §2.2.3 玻尔兹曼方程中的散射项以及费米黄金规则

我们知道，在玻尔兹曼方程中除了与能带结构以及外场有关的项外，还有一个非常重要的项即散射项 $\frac{\partial f}{\partial t}|_{coll}$ ，它与载流子的散射机制以及所加的外场有关，由图(2-7)可以看出：散射可以改变(增加或者减少)t时刻在态 $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ 处的载流子的数目，从而改变其分布函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ 。所以由于散射导致的 $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ 的静增加率为散射进来的和散射出去的差，即：

$$\frac{\partial f}{\partial t}|_{coll} = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{r}', \mathbf{k}', t) [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)] - \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) [1 - f(\mathbf{r}', \mathbf{k}', t)], \quad (2-38)$$

其中右边的第一项表示由其他所有的态 $(\mathbf{r}', \mathbf{k}')$ 散射到 $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ 态的散射几率，而第二项表示由态 $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ 散射到其他所有态 $(\mathbf{r}', \mathbf{k}')$ 的散射几率，分布函数 $f(\mathbf{k})$ 表示 $\mathbf{k}$ 态被占据的几率，而 $1 - f(\mathbf{k})$ 表示 $\mathbf{k}$ 态未被占据的几率，所以在这里我们考虑了粒子能级的简并情况。 $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ 是粒子从 $\mathbf{k}$ 态被散射到 $\mathbf{k}'$ 态的散射几率。在非简并情况下，即 $f(\mathbf{k}) \ll 1$ ， $1 - f(\mathbf{k}) \sim 1$ ，方程(2-38)可以进一步被简化：

$$\frac{\partial f}{\partial t}|_{coll} = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{r}', \mathbf{k}', t) - \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t), \quad (2-39)$$

至此我们可以看到，散射项是各种散射机制之和，而且与分布函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ 有关。这就给解析的求解玻尔兹曼方程带来了困难，所以通常需要做一些近似。研究不同的散射机制导致的输运行为也成了理论工作者和实验工作者的一项重要课题。

至此，在非简并情况下玻尔兹曼方程(2-33)可以重新写为：

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} = -\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \sum_{\mathbf{k}'} [W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t) - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)]. \quad (2-40)$$

通常散射率 $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ 由费米黄金规则给出 (Feimi's-Golden rule)，所以在这里我们有必要对费米黄金规则做简要的介绍。

假设系统的哈密顿量为 $H_0$ ，假设系统受到一个很小的外力 $F_e(t)$ 的作用，则系统的总哈密顿量为：

$$H = H_0 + B F_e(t) = H_0 + H' \quad (2-41)$$

其中 $B$ 是体系中的载流子与外力的相互作用算符， $H'$ 是外力产生的微扰哈密顿量。一般说来，外力会导致载流子在不同的本征态之间的跃迁。我们假设初态 $|i\rangle$ ，能量为 $E_i$ ，末态 $|f\rangle$ ，能量为 $E_f$ ，并假设 $E_f > E_i$ 。如图(2-8)所示，当载流子从外场获得的能量 $\hbar\omega$ 满足： $E_f = E_i + \hbar\omega$ 时就会发生载流子在两个态之间的跃迁。而跃迁率可以由费米黄金规则给出：

$$W_{i,f}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega) \quad (2-42)$$

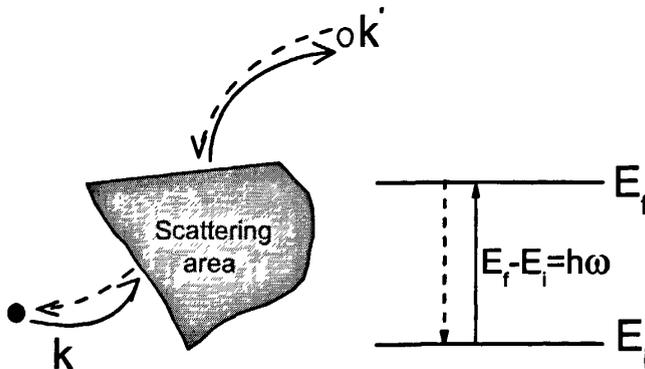


图 2-8 左图是载流子从 $k$ 态散射到 $k'$ 态的示意图，其中阴影部分为散射区；右图是相应的能量跃迁过程。实线给出从 $k$ 态散射到 $k'$ 态的情况，虚线是其逆过程。

其具体的推导过程可以见一般的量子力学教材[84]。其中 $\delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega)$ 要求在散射过程中能量要守恒。所以只要确定了载流子所受到的散射机制导致的跃迁

矩阵元就可以得到其散射几率，结合玻尔兹曼方程的输运理论就可以得到电导等与输运相关的物理量。

### §2.3 本章小结

在本章中我们介绍了本论文中所用到的一些基本理论，包括基于InAs/GaSb的二类断带半导体量子阱中能带和波函数的自恰计算方法，以及用来研究输运问题的玻尔兹曼方程方法，并介绍了与之相关的描述载流子散射（跃迁）率的费米黄金规则。由于散射率和分布函数的复杂形式，导致解析的求解玻尔兹曼方程有很大的难度，在这里我们给出了在低场条件下求解玻尔兹曼方程的平衡方程方法。这也是我们下面研究在基于InAs/GaSb的二类断带半导体量子阱中的载流子对外加辐射场的相互作用的理论基础。

## 第三章 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的 亚太赫兹光电导特性的研究

**摘要：**本章主要从理论上研究了基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱(AlSb/InAs/GaSb/AlSb)体系在沿着样品生长方向线性极化的光场的作用下，由于电子和空穴吸收光子而在InAs和GaSb两层之间发生跃迁，沿着生长方向产生的亚太赫兹光电导的特性。研究发现光电导产生的物理原因是由于电子和空穴的波函数在生长方向有交叠，使得电子和空穴可以吸收一定能量的光子从量子阱的一层跃迁到另一层，从而在生长方向产生光电导。我们的理论研究发现，光电导的峰值落在亚太赫兹，因此该理论研究为这种量子阱系统做为工作在亚太赫兹波段的光电器件提供了理论基础。我们知道，电子器件的工作温度也是人们特别关注的问题，因为只有能够在室温甚至更高的温度下工作的电子器件才会对人们的生产生活产生重大的影响，所以我们研究了这种体系对温度的响应情况，发现在低温下器件的性能较好，但是温度升高对器件的性能影响并不是非常明显，而且随着温度的升高，峰的位置发生向低频方向移动（红移）。所有这些性质都表明：基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱体系可以用来做亚太赫兹光电器件，而且可以在一个比较大的温度范围内工作。

### §3.0.1 引言

进入2000年代，太赫兹(TeraHertz,THz)波段(300GHz-10THz)和THz应用引起科技界的广泛关注，形成一股THz技术热潮，与THz有关的科技成果不断涌现，例如：(1)晶体管截止频率接近1 THz，工作频率高速100 GHz的集成电路完成实验芯片；(2)低压差分的串行数据传输率达到300 Gb/s；(3)PC芯片组成的并行阵列计算机速度10 TFLOP (floating point operations per second 每秒所执行的浮点运算次数)；(4)数据率300GHz的亚毫米波实验收发装置完成；(5)多路复用光纤网数据传输速度运行600 Gb/s；(6)第一台商品远红外波谱仪进入THz波段。

THz波段低端连接毫米波，高端进入远红外，显然低端振荡源容易从电子器件产生，高端辐射源可借助光子器件产生。最常用的激光介质有固相、气相和液相，固相的半导体激光器的工艺虽然复杂，但电路结构简单，施加直流电流至发光阈值即产生相干激光束，而且能量效率最高可到60%，遥遥领先于其它类型的激光器。可惜半导体激光器最多只能产生远红外光束，未能进入THz波段的高端，目前还没有由半导体激光器直接产生THz波的辐射源。然而，P型Ge(P-

Ge)材料的半导体激光器在液氦的低温和置于外部电/磁场作用下,能够产生 $< 10$  mm的远红外辐射,但在长时间只有不大的进展。直至在THz应用的推动下,近年取得突破,对远红外半导体激光器材料生长过程进行控制,形成特定的量子级联使发射波长进入 $2 \times 10^4$  THz,故称为量子级联激光器(QCL)。THz波段的量子级联激光器在4K的液体He下运行并不方便,可望继续改进设计提高工作温度和输出功率,例如提高到液体空气下运行,甚至室温下运行。专家认为,THz波段量子级联激光器是潜在的重要辐射源。

当前,THz技术已打开上至空间,下至地面,巨大至机场货物的安检、微小至动物细胞分析的应用大门。随着THz辐射源的性能不断升级,THz应用越来越广泛。

半导体量子阱材料独特的能带结构使得这种材料比体材料有更加优越的光电性质,这也是人们对半导体量子阱材料的光电性质进行广泛研究的原因之一。随着半导体技术和制备工艺的进步<sup>[33-36]</sup>,使得制备更小、性能更好的器件称为可能,使得人们可以制备之前理论上提出的一些量子阱、超晶格、纳米线、量子点等低维体系。因此技术的发展使得科研工作者有了更大的想象空间,同时,人们对性能更好的器件材料的探索也更加的迫切。在第一章里我们提到过,人们之所以对基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱材料感兴趣主要是因为这种材料的特殊的能带结构。即:GaSb的价带顶比InAs的导带底还要高,因此在低温下GaSb价带中的电子会转移到InAs的导带上,于是在InAs层形成一个二维电子气(2DEG),而在GaSb层中会形成一个二维空穴气(2DHG),而二维电子气和二维空穴气在空间上是分离的。自从1987年这种材料从试验室制备成功以来<sup>[85]</sup>,人们对基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱体系作为电学以及光电器件的可行性提出了很多的设想,并且在某些领域取得了一定的进展。比如今年来人们对这种体系在光电器件方面的应用取得了很大的进展,已经将这种量子阱材料成功的制备了高性能的远红外光电二极管<sup>[86]</sup>、负光电导器件<sup>[87, 88]</sup>等。最近,人们又在用InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱材料作为激光器<sup>[89]</sup>和光电探测器<sup>[90]</sup>方面取得了突破。所有这些工作都表明,由于基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱及其超晶格材料独特的能带特征,在作为新型的光电器件方面具有非常光明的前景和独特的优势。

在本章的工作中,我们也是利用这种材料的独特的能带结构,研究了体系中,由于电子和空穴吸收光子在InAs层和GaSb层之间跃迁所引起的光电导特性,并研究了光电导对温度的依赖关系,揭示了光电导产生的物理原因。

## §3.1 理论方法

### §3.1.1 电子与电磁波的相互作用

光与物质存在电磁相互作用，这种相互作用不仅决定着光在物质中的传播，还决定了光被物质的吸收或者发射。所以光和物质的相互作用存在两个方面的内容：一个是光在物质中的传播，这主要是光波动性的表现，另一个是光与物质的相互作用，涉及光与物质中的原子和电子相互作用的精细过程，主要与光的粒子性有关。在这里我们介绍光场与物质相互作用的量子力学理论，也可以称之为半经典理论，其物理图象是：用量子力学的语言来描述原子及原子中的各层电子在外加的经典电磁场强迫振动下发生能级间的量子跃迁，与此同时发射或吸收光子。其实质是用量子力学的语言来描述物质中的原子、分子和电子，而对光场仍然采用经典的电磁波来描述。

按照半经典理论，电子和电磁场组成的体系的哈密顿量为：

$$\begin{cases} H = \frac{1}{2m_e}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) - e\phi \\ \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \end{cases} \quad (3-1)$$

其中 $m_e$ 、 $\mathbf{p}$ 、 $-e$ 、 $V(\mathbf{r})$ 分别是电子的质量、动量、电荷和所受到的晶体场的周期势， $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 和 $\phi$ 分别是电磁场的矢量势和标量势。他们和电磁场的电场分量和磁场分量的关系为：

$$\begin{cases} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi & (a) \\ \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} & (b) \end{cases} \quad (3-2)$$

从上式(a)可以看出电场 $\mathbf{E}$ 的特性与一般静电场不同，它一方面受到电荷的激发，另一方面也受到变化磁场的激发，后者所激发的电场是有旋的，因此一般情况下电场是有源和有旋的场。从上式(b)可以看出矢势 $\mathbf{A}$ 的物理意义是：在任一时刻 $\mathbf{A}$ 沿着任一闭合回路的线积分等于该时刻通过回路内的磁通量。用矢势 $\mathbf{A}$ 和标势 $\phi$ 描述电磁场不是唯一的[91]，即给定 $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{B}$ 并不对应唯一的 $\mathbf{A}$ 和 $\phi$ 。对矢势 $\mathbf{A}$ 加上一个任意函数的梯度，结果不影响 $\mathbf{B}$ 。而这加在 $\mathbf{A}$ 上的梯度部分又可以从 $\nabla\phi$ 中除去，也不影响 $\mathbf{E}$ 。假设 $\varphi$ 是任意的与时间和空间位置有关的函数，作变换：

$$\begin{cases} \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\varphi, \\ \phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial\varphi}{\partial t} \end{cases} \quad (3-3)$$

则:

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{A}' = \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}, \\ -\nabla\phi' - \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \mathbf{E} \end{cases} \quad (3-4)$$

可见 $(\mathbf{A}', \phi')$ 和 $(\mathbf{A}, \phi)$ 描述同一个电磁场, 变换(3-3)称为规范变换, 每一组 $(\mathbf{A}, \phi)$ 称为一种规范。用势来描述电磁场时, 客观规律和势的特殊的规范选择无关, 当势作规范变换时, 所有的物理量和物理规律保持不变, 这种不变性称为规范不变性。从数学上来说, 规范变换自由度的存在是由于在定义势时只给出了矢势 $\mathbf{A}$ 的旋度, 而没有给出矢势 $\mathbf{A}$ 的散度。而仅仅由矢量场的旋度不足以确定这个矢量场, 为了确定矢量场 $\mathbf{A}$ 必须给定它的散度。电磁场 $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{B}$ 本身对 $\mathbf{A}$ 的散度没有任何限制。因此, 为了确定矢量势 $\mathbf{A}$ 我们可以取其散度 $\nabla \cdot \mathbf{A}$ 为任意值。每一种选择就对应一种规范, 采用适当的规范条件可以使得基本方程和计算简化, 而且物理意义也比较明显。从计算方面考虑, 在不同的问题中可以采用不同的规范。应用最广的是库仑规范和洛仑兹规范, 下面分别对两种规范做介绍。

(1) 库仑规范:  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$

在这种规范下 $\mathbf{A}$ 为无源场, 因此电场为:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (3-5)$$

式中第一项 $-\nabla\phi$ 是无旋场(纵场), 第二项 $-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ 是无源场(横场)。这种规范的特点是 $\mathbf{E}$ 的纵场部分完全由 $\phi$ 描述, 而横场部分由 $\mathbf{A}$ 描述,  $-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ 对应于感应电场。

(2) 洛仑兹规范:  $\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$  采用这种规范时, 势的基本方程化为特别简单的对称形式—达朗贝尔方程, 物理意义也非常明显, 在基本理论研究和解决实际辐射问题中特别方便。

在本论文我们处理电子和空穴与光场的作用时, 采用库仑规范并且取标量场为零, 即:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{A} = 0, \\ \phi = 0 \end{cases} \quad (3-6)$$

### §3.1.2 光电导的计算

在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱材料(AlSb/InAs/GaSb/AlSb)中存在两种载流子, 即电子和空穴。当在该量子阱材料中加上一个沿着样品生长方向线性极化的光场时, 既存在电子—光子相互作用, 又存在空穴—光子相互作用, 则体系的哈密顿量可以写为:

$$H = H_e + H_h + H'_{e-o} + H'_{h-o} \quad (3-7)$$

其中  $H_e = \mathbf{p}_e^2/2m_e^* + U_e(z_e)$ ,  $H_h = -\mathbf{p}_h^2/2m_h^* + U_h(z_h)$  分别是电子和空穴的单粒子哈密顿量, 势能的零参考点取在InAs层的导带底,  $\mathbf{p}_i = (p_{x,i}, p_{y,i}, p_{z,i})$ , ( $i = e, h$ ), 分别表示电子和空穴的动量。  $\mathbf{R}_i = (\mathbf{r}_i, z_i) = (x_i, y_i, z_i)$ , 分别是电子和空穴的位置坐标,  $m_i^*$  是电子或空穴的有效质量,  $U_i(z_i)$  是电子或者空穴所受到的限制势, 在方程(3-7)中, 电子或空穴与光子的相互作用哈密顿量为:

$$H'_{i-o} = \pm \frac{e}{m_i^*} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i \quad (3-8)$$

其中“±”分别表示电子和空穴与沿着生长方向线性极化的光场的相互作用,  $\mathbf{A}$  是电磁辐射场的电磁矢势。在这里我们没有考虑电子和空穴或者同种载流子之间的库仑相互作用, 这主要是因为在该体系中, 由于电子和空穴的波函数的交叠比较小, 导致电子和空穴之间的库仑相互作用比较弱, 电子和空穴间的相互作用(激子效应)可以忽略。

量子阱中运动的电子和空穴的特征是: 在二维平面内做自由运动, 而沿着阱的生长方向的运动受到限制, 而沿着生长方向的运动的波函数和能级可以通过解Schrödinger方程得到。于是关于电子和空穴的单粒子哈密顿量  $H_e$  和  $H_h$  的Schrödinger方程可以分别得到解析的求解, 于是可以得到电子和空穴的波函数及相应的能谱。

$$\begin{cases} |e\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi_n^e(z_e) \\ |h\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi_n^h(z_h) \end{cases} \quad (3-9)$$

$\mathbf{r}_i$  是电子或空穴在二维平面内的坐标,  $\psi_n^i(z_i)$  是电子或空穴沿着生长方向的波函数。

相应的能谱为:

$$\begin{cases} E_n^e(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e^*} + \varepsilon_n^e \\ E_n^h(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_h^*} + \varepsilon_n^h \end{cases} \quad (3-10)$$

$\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  是电子或空穴在二维平面内运动的波矢,  $\varepsilon_n^i$  是电子或者空穴由于在生长方向上的运动受到限制而产生的分立的量子化能级, 和波函数  $\psi_n^i(z_i)$  一起由Schrödinger方程求得。于是这个关于  $H_e$  和  $H_h$  的二体问题的波函数  $|e, h\rangle$  可以写成分离变量的形式:  $|e, h\rangle = |e\rangle |h\rangle$ 。具体求解电子和空穴波函数以及能级的方法我们在第二章已经讨论过, 可以通过直接求解Schrödinger方程得到, 更精确的做法是用自恰求解Schrödinger方程和Poisson方程的方法来得到电子和空穴的能级和波函数以及限制势的分布情况[78-80]。

有了电子和空穴的能谱和波函数以及电子或空穴与光场相互作用的哈密顿

量 $H'_{i-o}$ ，我们就可以通过费米黄金规则（Fermi's-Golden rule）来确定电子或空穴从 $i$ 层的量子态 $k$ 跃迁到 $j$ 层的态 $k'$ 的跃迁几率。费米黄金规则是量子力学中的一个非常重要的工具之一，它给出了粒子在微扰作用下从一个态跃迁到另一个态的跃迁几率的一般公式。而粒子受到的散射的方式或者说散射机制有很多种，这也决定了散射几率的不同形式，在凝聚态物理中电子所受到的散射主要有：

(1) 电子-杂质散射，这种散射主要是将电子或空穴从一个Bloch态散射到另一个Bloch态，而在散射过程中只改变电子或空穴的动量而不改变其能量，电子-杂质散射在低温下对电子的电导影响比较大。

(2) 电子-声子散射，在这种散射过程中既改变电子的能量又改变电子的动量，在温度比较高时，由于晶格振动比较剧烈，所以对电子的散射比较强。

(3) 电子-光子散射，这种过程可以看作是电子振荡与光子的相互作用，与声子类似，在散射过程中既可以吸收光子又可以发射光子，这种散射只改变电子的能量而不改变其动量。

总的来说，在散射过程中要求总动量和总能量守恒，但从上面三种散射情况来看，我们发现散射前后电子的动量和能量的变换情况不同，这主要是由于电子所受到的散射势的情况不同引起的。散射势大概可以分为以下两大类：

(I) 散射势与时间无关，或者说不随时间变换，例如电子-杂质散射中电子感受到的杂质势，在这种情况下散射前后电子的能量不变。

(II) 散射势随时间变化，比如随时间振荡 $U(t) \sim \cos(\omega_q t)$ ，比如电子-声子或电子-光子散射，在这种情况下电子的能量变化为 $\pm \hbar \omega_q$ ，“ $\pm$ ”分别对应于声子或光子的吸收和发射。

费米黄金规则的具体推导在量子力学[84]教科书上已经讲的非常详细，在这里我们不准备赘述。其具体形式为：

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i) \quad (3-11)$$

其中 $U_{fi}$ 是散射势，由电子所受到的散射机制决定，一般具有比较复杂的形式。 $\epsilon_i$ 和 $\epsilon_f$ 分别是初态和末态的能量本征值， $\delta$ 函数给出能量守恒条件。

在本章中，我们研究电子和空穴与光场的相互作用，光场的电场矢量部分我们取为：

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(-\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + \omega t)} \quad (3-12)$$

其中 $\mathbf{q}$ 是光子的波矢。我们知道光场是电磁波，还具有磁场分量，但在一般的材料中磁场部分的贡献很小，可以忽略。我们采用库仑规范下的矢势来描述电磁场即： $\mathbf{E} = -\partial\mathbf{A}/\partial t$ ，则： $\mathbf{A} = -\mathbf{E}_0/\omega e^{i(-\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + \omega t)}$ 。

在光场作用下电子（电荷为 $-e$ ）的Schrödinger方程可以写为：

$$\frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m_e^*} \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (3-13)$$

在这里我们已经将晶格周期势对电子的影响考虑在了电子的有效质量 $m_e^*$ 中。将方程左边展开得：

$$H = H_0 + H'_{e-o}, \quad (3-14)$$

其中：

$$\begin{cases} H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e^*} \\ H'_{e-o} = \frac{e}{2m_e^*} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) + e\mathbf{A}^2, \end{cases} \quad (3-15)$$

其中 $\mathbf{A}^2$ 项是电磁场的二阶分量，当电磁场比较弱时，可以忽略，只保留 $\mathbf{A}$ 的线性项这也就是所谓的线性理论。 $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ 项中将 $\mathbf{p}$ 用算符表示 $-i\hbar\nabla$ ，作用在波函数上为：

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}\psi = -i\hbar\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) = -i\hbar[(\nabla \cdot \mathbf{A})\psi + \mathbf{A} \cdot (\nabla\psi)], \quad (3-16)$$

在库仑规范下： $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ ，所以有 $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ ，所以电子与光场的微扰哈密顿量可以写成：

$$H'_{e-o} = \frac{e}{m_e^*} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{e}{m_e^* \omega} \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{p}, \quad (3-17)$$

值得注意的是 $\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{p} = -i\hbar(E_0^x \frac{\partial}{\partial x} + E_0^y \frac{\partial}{\partial y} + E_0^z \frac{\partial}{\partial z})$ 。在这里我们取的电场是沿着 $z$ 方向线性极化的 $E_0^z = E_0$ ，所以电子和空穴与光场的相互作用哈密顿量为：

$$H'_{i-o} = \pm \frac{e\hbar E_0}{m_i^* \omega} e^{i(-\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + \omega t)}, \quad (3-18)$$

由于在这里我们只考虑电子和空穴吸收光子的过程，所以没有包含其共厄项，即发射光子的过程。光子的动量可以忽略，所以电子和空穴与光场的相互作用哈密顿量可以进一步化简：

$$H'_{i-o} = \pm \frac{e\hbar E_0}{m_i^* \omega} e^{i\omega t}, \quad (3-19)$$

在此哈密顿量作用下，通过费米黄金规则来求电子或空穴从一个态跃迁到另一个态的跃迁概率 $W_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_{ij}(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$

$$W_{ij}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{e\hbar^2 E_0}{m_i^* \omega} \right)^2 |X_{ij}|^2 \delta[E_n^i(\mathbf{k}) - E_{n'}^j(\mathbf{k}) + \hbar\omega], \quad (3-20)$$

其中 $E_0$ 和 $\omega$ 分别是电磁场的强度和频率， $X_{ij} = \int dz \psi_{n'}^{j*}(z) d\psi_n^i(z) / dz$ ，是与 $z$ 方向的波函数有关的量，从图(3-1)我们可以看到，虽然波函数的耦合比较小，但波函数的微分 $d\psi_n^i(z) / dz$ 可以是一个比较大的值，所以总体上说 $X_{ij}$ 是一个比较大的量，也正是因为这个量的存在使得电子和空穴可以通过吸收光子在两层之间发生跃迁。值得指出的是，我们采用半经典的方法来处理电磁场与电子和空穴相互作用

用，即用量子力学的语言来描述电子和空穴的量子态，而仍用经典的电磁理论来描述电磁场，所以在这个过程中，我们只考虑了单个光子的吸收，多光子吸收需要完全用量子力学的方法来处理，而在辐射场比较弱时，只有单光子吸收是可能的跃迁通道，所以在这里我们的方法是适用的。

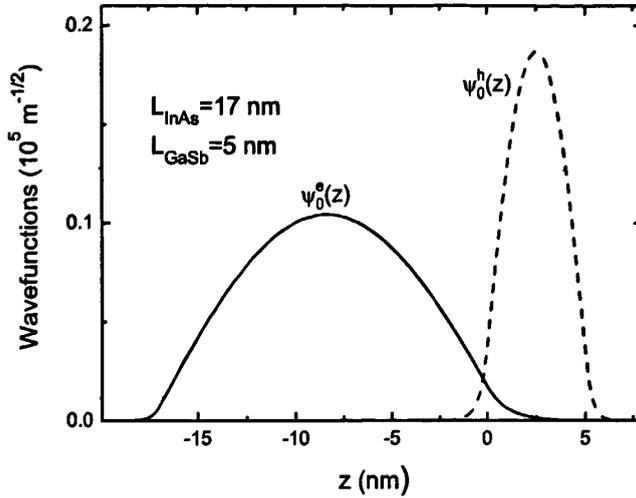


图 3-1 电子和空穴的基态波函数沿着生长方向的分布，InAs层和GaSb层的厚度如图中所示，在这里我们将InAs层和GaSb层的界面选在 $z = 0$ 处。

我们用半经典的玻尔兹曼方程方法来研究基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱在沿着 $z$ 方向线性极化的光场的作用下的输运性质。我们知道电子或空穴吸收或发射光子的跃迁性质与其能带占据情况有非常重要的关系。在这里我们考虑只有最低的电子带和最高的空穴带分别被电子和重空穴所占据的情况。对于电子或空穴吸收光子的跃迁过程是一个非平衡过程，电子或空穴的分布函数随时间变化。电子或空穴从 $i$ 层跃迁到 $j$ 层时，时间依赖的玻尔兹曼方程可以写为：

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = g_s \Sigma_{\mathbf{k}'} [F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, t) - F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t)] + g_s \Sigma_{\mathbf{k}'} [F_{ii}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, t) - F_{ii}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t)], \quad (3-21)$$

其中 $F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t) = f_i(\mathbf{k}, t)[1 - f_j(\mathbf{k}', t)]W_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ， $f_i(\mathbf{k}, t)$ 是电子或者空穴的动量分布函数，在这里我们没有考虑电子的自旋所以引入 $g_s = 2$ 作为自旋简并指标。在方程(3-21)中 $F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t)$ 对应于电子或空穴在带间的跃迁，而 $F_{ii}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t)$ 对应于电子或空穴在同一带内的跃迁，而我们知道电子或空穴吸收或发射光子的跃迁过程中电子和空穴的动量不发生改变，所以同一带内的跃迁对电子或空穴的分布没有影响。通过前面关于玻尔兹曼方程的讨论我们知道：由于分布函数 $f_i(\mathbf{k}, t)$ 是波矢 $\mathbf{k}$ 和时间 $t$ 的函数，当对时间求导时，应该有两项：

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = \frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t}, \quad (3-22)$$

需要注意的是我们将电磁场对电子和空穴的影响已经包含在了电子和空穴的分布函数和跃迁几率里面，所以为了避免重复计算，在玻尔兹曼方程的左边没有出现力学项（式(3-22)中的第二项）。

由于散射几率 $W_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ 的复杂形式，导致玻尔兹曼方程（3-21）没有简单的解析解，必须近似求解玻尔兹曼方程，传统的做法是对方程（3-21）做弛豫近似[82]，引入电子的寿命 $\tau$ 来求得与输运相关的性质，比如电导率等。当然我们解玻尔兹曼方程的最终目的还是要得到我们所感兴趣的物理量，如果能够避开直接解玻尔兹曼方程的繁杂过程而得到所感兴趣的物理量那将是一个非常好的方法。雷啸霖[75, 76]等人提出的平衡方程方法很好的解决了这个问题并且在输运问题方面得到了广泛的应用，在这里我们从玻尔兹曼方程（3-21）出发得到所谓的质量平衡方程（mass-balance equation）。具体的做法是在方程（3-21）的两边同时乘以 $g_s \sum_{\mathbf{k}}$ 。下面我们以电子的分布函数为例来说明具体的过程。

$$g_s \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f_e(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = g_s^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [F_{he}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, t) - F_{eh}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t)] + g_s^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [F_{ee}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, t) - F_{ee}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t)], \quad (3-23)$$

由于 $\sum_{\mathbf{k}} f_i(\mathbf{k}, t) = Q_i(t)$ ，而且从方程（3-23）左边的第二项中可以看出，由于 $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ 是哑指标可以互换，则同一带内的跃迁相互抵消，即不引起电子数的变化，只有带间跃迁才改变电子数或空穴数，从而对光电导有贡献。并且利用电子浓度和分布函数的关系： $n_e(t) = g_s \sum_{\mathbf{k}} f_e(\mathbf{k}, t)$ 和 $n_h(t) = g_s \sum_{\mathbf{k}} f_h(\mathbf{k}, t)$ 得到：

$$\frac{dQ_e(t)}{dt} = \frac{dQ_h(t)}{dt} = -Q_h(t)\lambda_{he} - Q_e(t)\lambda_{eh}, \quad (3-24)$$

其中 $Q_e(t)$ 和 $Q_h(t)$ 分别是电子和空穴的电荷数，满足： $Q_e(t) = en_e(t)S$ ， $Q_h(t) = -en_h(t)S$ ， $S$ 是二维平面的面积，也是样品受光照射的面积。从方程（3-24）可以得到总电荷守恒条件： $d[Q_e(t) - Q_h(t)]/dt = 0$ 。 $\lambda_{ij}$ 是从 $i$ 层跃迁到 $j$ 层的散射率，我们定义 $\lambda_{eh} = \lambda_E$ 和 $\lambda_{he} = \lambda_C$ 分别为电子的发射率和俘获率，则：

$$\begin{cases} \lambda_E = \frac{4}{n_e} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} f_e(\mathbf{k}, t)[1 - f_h(\mathbf{k}', t)]W_{eh}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\ \lambda_C = \frac{4}{n_h} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} f_h(\mathbf{k}, t)[1 - f_e(\mathbf{k}', t)]W_{he}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \end{cases} \quad (3-25)$$

从式（3-25）可以看出电子的发射率和俘获率与分布函数和散射几率有关，而电子的分布函数是与时间有关的物理量，这主要是因为电磁场的存在会影响电子和空穴的分布，从而使其达到一个非平衡状态。而分布函数随时间的演化是一个非常复杂或者未知的关系，所以我们处理电子的发射率和俘获率时，近似地用电子和空穴在稳态的能量分布函数分别代替其与时间相关的动量分布函数，即 $f_e(\mathbf{k}, t) \simeq f_e(E_0^e(\mathbf{k}))$ ， $f_h(\mathbf{k}, t) \simeq f_h(E_0^h(\mathbf{k}))$ ，其中 $f_i(x) = \frac{1}{e^{(x-E_F)/k_B T} + 1}$ 是电子或空穴的费米狄拉克分布函数，这个近似在电磁场比较弱的情况下是适用的。在此近似

下电子的发射率和俘获率可以写为:

$$\begin{cases} \lambda_E \simeq \frac{4}{n_e} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} f_e(E_0^e(\mathbf{k})) [1 - f_h(E_0^h(\mathbf{k}))] W_{eh}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\ \lambda_C \simeq \frac{4}{n_h} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} f_h(E_0^h(\mathbf{k})) [1 - f_e(E_0^e(\mathbf{k}))] W_{he}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \end{cases} \quad (3-26)$$

并且将 $n_e$ 和 $n_h$ 也取作与时间无关的量, 那么电子的发射率和俘获率也与时间无关。根据电流的定义:  $I = dQ/dt$ , 由方程 (3-24) 可得:

$$I(t) = -\frac{dQ_e(t)}{dt} = Q_e(t)\lambda_E + Q_h(t)\lambda_C, \quad (3-27)$$

在频率为 $\omega$ 的电磁场 $\delta V_t = V_0 e^{i\omega t}$ 的驱动下, 量子阱中的电子数 $Q_e(t)$ 是运动的电荷数 $\delta Q_e(t)$ 和被激发的电荷数的差:

$$Q_e(t) = \delta Q_e(t) - \int_0^t dt I(t), \quad (3-28)$$

当驱动场比较弱的时候, 我们可以用线性响应来描述电荷和驱动场的关系:

$$\begin{cases} \delta Q_e(t) = \kappa \delta V_t = \kappa V_0 e^{i\omega t} \\ I(t) = I_0 e^{i\omega t}, \end{cases} \quad (3-29)$$

其中电荷和电压的比例系数 $\kappa$ 为:

$$\kappa = \frac{\delta Q_e(t)}{\delta V_t} = \frac{dQ_e(t)}{dV_t} = 2eS \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f_e(E_0^e(\mathbf{k}))}{\partial \mu_t \frac{\partial \mu_t}{\partial V_t}}, \quad (3-30)$$

我们假设电磁场只影响体系的费米面, 在线性响应下:

$$\partial \mu_t / \partial V_t = e, \quad (3-31)$$

相应的 $\kappa$ 为:

$$\kappa = \frac{2e^2 S}{k_B T} \sum_{\mathbf{k}} f_e(E_0^e(\mathbf{k})) [1 - f_e(E_0^e(\mathbf{k}))], \quad (3-32)$$

这个结果表明电子或空穴的发射或者俘获主要是通过费米面附近的载流子的跃迁发生, 这主要是因为费米面附近的电子或空穴更容易被激发。

将方程 (3-28)、(3-29) 代入方程 (3-27) 得到回路中的电流为:

$$I(t) = (\kappa V_0 e^{i\omega t} - \int_0^t I(t) dt) \lambda_E + Q_h(t) \lambda_C, \quad (3-33)$$

方程 (3-33) 两边同时对时间 $t$ 求导得到:

$$\dot{I}(t) = (i\omega \kappa V_0 e^{i\omega t} - I(t)) \lambda_E + \dot{Q}_h(t) \lambda_C, \quad (3-34)$$

在平衡条件下总的电荷数应该守恒, 即电子和空穴电荷的变化量应该相等。注意到在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱材料中, 电子数和空穴数的增减情况一致, 即电子数增加, 空穴数也增加, 反之亦然。所以我们有:  $\dot{Q}_h(t) = \dot{Q}_e(t) = -I(t)$ , 在此条件下方程 (3-34) 可以有解析解。利用电导

的定义:  $G = I_0/V_0$ 得到:

$$\begin{cases} \mathcal{G} = \frac{i\kappa\omega\lambda_E}{\lambda_E + \lambda_C + i\omega} \\ G = \text{Re}\mathcal{G} = \frac{\kappa\omega^2\lambda_E}{(\lambda_E + \lambda_C)^2 + \omega^2} \end{cases} \quad (3-35)$$

从方程(3-35)可以看出电导与电子的发射率和俘获率有重要的依赖关系,所以只要求得电子的发射率和俘获率就可以得到电导的一些信息,比如对电磁场频率的依赖关系和对温度的依赖关系等。所以我们的主要任务就是通过已经用费米狄拉克分布函数作为电子和空穴的能量分布函数来定义的电子发射率和俘获率(式3-26),将对k的求和化积分并利用费米黄金规则给出的电子和空穴的散射率 $W_{ij}(\mathbf{k})$ 中 $\delta$ 函数的性质可以解析的求得电子的发射率和俘获率:

$$\begin{cases} \lambda_E = C \frac{m_h^* |X_{eh}|^2}{m_e^* n_e} f_e(x_h^+) [1 - f_h(x_e^-)] \\ \lambda_C = C \frac{m_e^* |X_{he}|^2}{m_h^* n_h} f_h(x_e^+) [1 - f_e(x_h^-)] \end{cases} \quad (3-36)$$

其中 $C = 4(eE_0)^2 / [\hbar\omega^2(m_e^* + m_h^*)]$ ,  $x_i^\pm = (m_e^* \varepsilon_0^e + m_h^* \varepsilon_0^h \pm m_i^* \hbar\omega) / [e(x - E_F) / k_B T + 1]^{-1}$ ,  $E_F$ 是体系的费米面,由方程(3-32)可以求得 $\kappa = m_e^* e^2 S f_e(\varepsilon_0^e) / (\pi \hbar^2)$ 。

至此,我们从玻尔兹曼方程出发,用平衡方程的方法求解玻尔兹曼方程,得到了在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的电子与电磁场相互作用,吸收光子从InAs层跃迁到GaSb层而在体系中产生的光电导。值得指出的是,由于我们的体系存在两种载流子—电子和空穴,所以空穴也可以吸收光子从GaSb层跃迁到InAs层从而产生和电子跃迁方向相同的光电导,其表达式与式(3-35)类似,但我们的理论研究发现由空穴引起的光电导比由于电子跃迁引起的光电导要小很多,这主要是因为空穴的有效质量比较大,不容易发生跃迁或者说跃迁几率很小,所以对光电导的贡献很小。

### §3.2 数值结果和讨论

在本章的工作中,我们研究了在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的光电性质,这种材料早在1987年首次从实验上制备成功,在我们的理论研究中,我们采用Folkes [92]及其合作制最近成功制备的样品参数,即InAs和GaSb层的厚度分别为:  $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ,  $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ ,电子和空穴沿着z方向的波函数以及子带能级通过自恰解Schrödinger方程和泊松(Poisson)方程[78]给出。电子和空穴的Schrödinger方程是通过哈特里(Hartree)势与泊松方程联系起来的。利用InAs和GaSb层的样品参数比如层的厚度、各层中电子和空穴的有效质量、各层的介电常数以及导带和价带的带阶(band offsets)等,在这里我们取InAs层的

导带底和GaSb层的价带顶间的带隙为： $E_g = 140 \text{ meV}$ ，并且取InAs层的导带底作为能量的零参考点。则从该自恰计算中得到的结果为：

$$\begin{cases} \epsilon_0^e = 32.0 & \text{meV} \\ \epsilon_0^h = 106.3 & \text{meV} \\ n_e = 1.14 \times 10^{12} & \text{cm}^{-2} \\ n_h = 3.10 \times 10^{11} & \text{cm}^{-2} \end{cases} \quad (3-37)$$

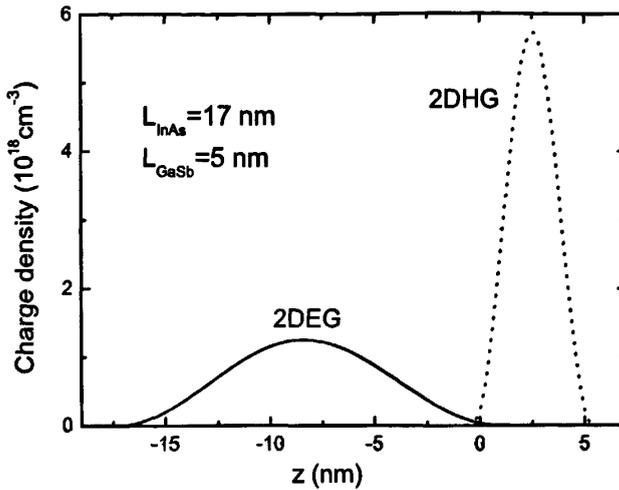


图 3-2 自恰计算得到的电子和空穴的浓度沿着生长方向的分布，InAs层和GaSb层的厚度如图中所示，在这里我们将InAs层和GaSb层的界面取为 $z = 0$ 。

在这里我们只考虑电子和空穴的基态，即只有最低的电子态和最高的空穴态分别被电子和空穴占据。图（3-1）和图（3-2）分别是用自恰计算得到的电子和空穴的波函数以及电荷分布，从我们的理论结果可以看出电子和空穴的分布有以下几个特点：

（1）在InAs和GaSb的界面处电子和空穴的波函数有交叠，这种交叠对电子和空穴能在两层间跃迁起着重要作用。

（2）从图（3-2）可以看出电子和空穴分别局域在InAs层和GaSb层。

（3）空穴的浓度比电子的浓度低，而且更局域，这主要是由于GaSb层的厚度比InAs层薄，从而将空穴限制在一个更局域的范围。因此电子和空穴的交叠主要是InAs层中的电子隧穿到GaSb层。

我们的理论研究发现当基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱在线性极

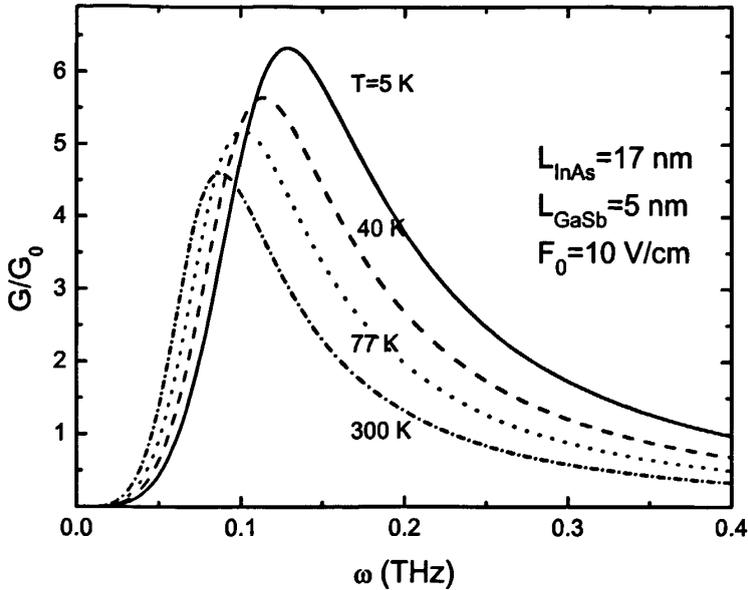


图 3-3 当辐射场的强度 $E_0$ 取定值时，回路中的光电导在不同的温度 $T$ 下随着辐射场频率 $\omega$ 的变化关系，其中InAs层和GaSb层的厚度分别取为 $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ，和 $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ ， $G_0 = e^2/h$ 。

化的电磁场的作用下会产生电子跃迁，其物理过程是电子或空穴吸收光子获得一定的能量，从量子阱的一层转移到另一层从而在体系中产生光电导，从能级情况来看就是电子或空穴吸收光子跃迁到能量更高的态上去，所以光吸收伴随着电子的跃迁。这个过程对应于电子-空穴对的产生和复合，因此也对应于电荷在量子阱中的转移。由于光场是一个周期性变化的辐射场 $\sim e^{i\omega t}$ ，所以如果在光场的前半个周期形成电子-空穴对，那么在后半个周期将会湮灭一个电子-空穴对，而对应于前一种情况，不同层中的电荷数会增加，而对于后一种过程，不同层中的电荷数会减少。这是与一般的半导体量子阱中相似的地方，我们知道在传统的半导体量子阱中，电子和空穴在同一层中导带中电子数的增加对应于价带中空穴数的增加，反之亦然。只是在InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，电子和空穴分别在两种不同的材料层中，电子-空穴对的形成和符合对应于电子和空穴在两层间的转移，因此在不同的材料层中可以形成层间的电流。图（3-3）给出的是在一定的辐射场强度 $E_0$ 下，回路中的光电导在不同温度下随着辐射场频率的变化关系。从图中我们可以看到光电导在亚太赫兹（ $\sim 0.1 \text{ THz}$ ）频率范围出现了非常强的峰值，这表明当辐射场的频率在亚太赫兹区时，器件中可以观测到非常强的光电导信号，或者通过亚太赫兹频率的电磁场在器件中激发电流。随着温度的升高，光电导的峰值会变小并且峰的位置会向能

量低的方向移动（红移），所以在低温下可以比较明显的探测到这种光电导信号。为了更好的了解光电导对温度的依赖关系，我们在图（3-4）中给出在辐射场强度一定的条件下（ $E_0 = 10 \text{ Vcm}^{-1}$ ），光电导在不同的频率下随温度的变化关系。在这里我们可以看出如果给定的辐射场的频率大于其峰值所对应的频率 $\omega_p$ （如，图（3-4）中给出的 $\omega = 0.15 \text{ THz}$ ，和 $\omega = 0.20 \text{ THz}$ ），光电导随着温度的升高而减小；当给定的辐射场的频率小于其峰值所对应的频率 $\omega_p$ 时（如图（3-4）中给出的 $\omega = 0.10 \text{ THz}$ ，和 $\omega = 0.08 \text{ THz}$ ），光电导随着温度的升高先升高（如图（3-4）中的 $\omega = 0.10 \text{ THz}$ ），或者先升高再下降（如图（3-4）中的 $\omega = 0.08 \text{ THz}$ ）。这主要是由于我们选定的辐射场的频率落在其对应的峰值的左侧（ $\omega < \omega_p$ ）和右侧（ $\omega > \omega_p$ ）决定的。

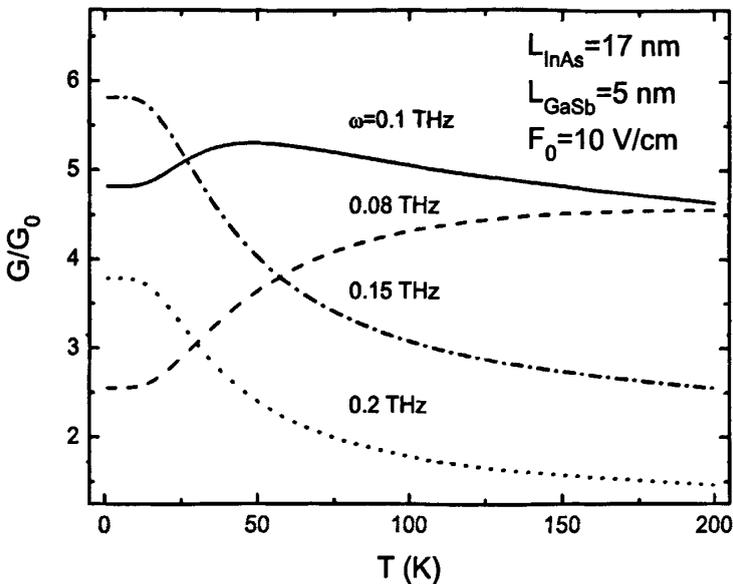


图 3-4 当辐射场的强度 $E_0$ 取定值时，回路中的光电导在不同的辐射场频率 $\omega$ 下随着温度 $T$ 的变化关系，其中InAs层和GaSb层的厚度分别取为 $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ，和 $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ ， $G_0 = e^2/h$ 。

在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中由于InAs层的导带和GaSb层的价带都分别被电子和空穴占据，而且空穴子带的能级比电子子带的能级高，其能谱有交叠（如图（3-5）），所以对于电子或空穴吸收光子从低能级从能量低的态跃迁到能量高的态会比传统的半导体量子阱多出一些新的通道（如图（3-5）中的通道1、2、3、4）。我们知道在传统的半导体量子阱中光吸收跃迁过程是价带中的电子吸收光子获得一定的能量，穿过带隙进入导带的过程<sup>[7]</sup>。而在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中电子或空穴由于吸收光子而发生的

光跃迁过程与非掺杂的传统的半导体量子阱中光吸收跃迁过程非常不同，电子和空穴可以通过如图（3-5）中所示的通道发生跃迁。在波矢 $k$ 比较小时（如图（3-5）中的1和2通道），InAs层中的电子可以吸收一定能量的光子从占据态跃迁到GaSb层的非占据态，这个过程对应于电子的激发。而在波矢 $k$ 比较大时（如图（3-5）中的3和4通道），GaSb层中的空穴也可以吸收光子获得一定的能量从占据态跃迁到InAs层中的非空穴占据态，这对应于空穴的激发或者说是电子的俘获。所有这些光透穿过程都对电子的激发和俘获有贡献，对应于电荷在不同的层间的转移。于是，虽然在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中电子和空穴的波函数在界面处的耦合不像传统的半导体量子阱材料中那样强，依然可以在体系中观测到比较强的光电流。

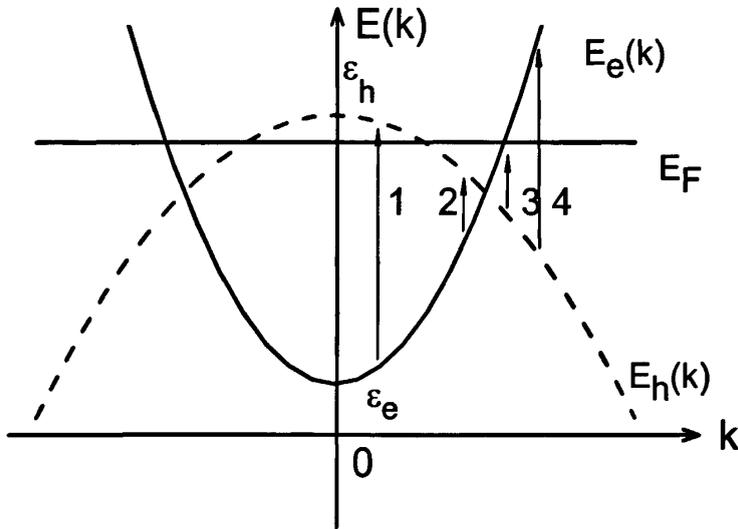


图 3-5 在基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱中，电子通过吸收光子从能量低的态跃迁到能量高的态的跃迁通道，其中： $E_e(k) = \hbar^2 k^2 / 2m_e^* + \epsilon_0^e$ ， $E_h(k) = -\hbar^2 k^2 / 2m_h^* + \epsilon_0^h$ 分别是2DEG和2DHG的能量谱， $\epsilon_0^e$ 和 $\epsilon_0^h$ 分别是电子和空穴的基态能级， $E_F$ 是体系的费米能级。

从我们的理论计算得到的光电导的表达式（3-35）中可以看出光电导的峰值的位置与电子的激发率和俘获率有关，即当电子激发率和俘获率之和与光子频率相等时光电导取得最大值，其频率对应的位置在： $\omega \sim \lambda_E + \lambda_C$ 。这表明当电荷的转移率与电磁场的频率发生共振时在回路中产生比较强的光电流。我们的理论计算表明，在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，当InAs层和GaSb层的厚度分别取： $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ， $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ 时， $\lambda_E + \lambda_C \sim 10^{11} \text{ Hz}$ ，即在亚太赫兹。所以在这个体系中可以用高频的微波辐射场来激发体系中的光电流。

我们知道光跃迁强烈的依赖于体系中载流子的占据情况，而载流子的分布函数与温度有关，所以光电导对温度非常敏感，这可以从图（3-4）明显的看出来。对温度的影响还反映在光电导表达式中的 $\kappa$ 和电子的激发率 $\lambda_E$ 和俘获率 $\lambda_C$ 上，这些量都是与温度有关的物理量。我们知道，随着温度的降低，费米面一下的电子的占据态数目增加，费米面以上的非占据态数目也增加，所以电子吸收光子的跃迁通过图（3-4）中的通道1和4发生跃迁的几率比较大。这也是光电导的峰值随着温度的升高而降低和峰值发生红移的原因。

### §3.3 本章小结

在本章的工作中，我们从理论上研究了当一个沿着量子阱的生长方向线性极化的、频率在亚太赫兹的电磁场，比如高频的微波辐射场加在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的时候，由于在体系中的载流子吸收光子在样品的两层间发生转移，从而在回路中形成光电流。我们用半经典的玻尔兹曼方程方法来研究该量子阱体系中的电子和空穴对电磁辐射场的响应，运用平衡方程的方法来解玻尔兹曼方程从而得到体系中的光电导，并研究了光电导随着辐射场频率和温度的变化情况，发现该量子阱器件的光电导在亚太赫兹处出现很强的峰，而且随着温度的升高，峰的强度有所下降，峰的位置发生红移。我们的理论研究表明：基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱体系可以用来做在低温下（ $T = 10\text{ K}$ ）工作的亚太赫兹光电器件。我们希望我们理论探索和研究能在实验上得到证明。

## 第四章 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的 双色中远红外光吸收

**摘要：**在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中由于在InAs层中的电子子带和GaSb层中的空穴子带都分别被电子和空穴所占据，在沿着样品的生长方向(z方向)线性极化的光场的作用下，载流子吸收光子发生跃迁，当两支电子子带和两支空穴子带分别被电子和空穴占据时，电子或者空穴吸收光子的跃迁既存在载流子在同一材料层中的带间跃迁，又存在载流子在两个不同的材料层之间的子带间跃迁，一共有七个跃迁通道。本章研究了不同的跃迁通道对光吸收系数的贡献。我们用半经典的玻尔兹曼方程方法来研究体系在光场作用下的输运行为，计算了量子阱的吸收系数，得到了由于电子和空穴在同一层中的子带间跃迁所引起的两个吸收峰，峰的位置在中远红外波段；而电子和空穴的带间跃迁对吸收系数的贡献比较小，这主要是因为电子和空穴沿着z方向的波函数的耦合比较小。我们知道，光电器件的性质对工作环境的温度有很强的依赖关系，所以研究了吸收系数与温度的关系，发现在基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱体系中，温度对吸收系数的影响不大。我们的理论结果表明，基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱体系可以用来做中远红外双色光探测器，而且这种探测器可以在比较高的温度范围（比如室温）内良好的工作。

### §4.1 引言

光与物质的相互作用包括光子与材料中的电子、原子、离子以及杂质和缺陷的相互作用等等，其中包含两个方面的内容，一个是光在物质中的传播，另一个就是光与物质中的粒子的相互作用。一般说来，光与物质的相互作用有三种形式：自发辐射、受激辐射和受激吸收[93]。

(1) 自发辐射：处于高能级 $E_2$ 的原子自发的向低能级 $E_1$ 跃迁，并发射出一定频率的光子的过程，如图(4-1)(a)所示。这个过程可以用自发跃迁的几率 $A_{12}$ 来描述，它定义为发光材料在单位时间内，从高能级上产生自发辐射的发光粒子数密度占据高能级总粒子数密度的比值，它与原子处在 $E_2$ 能级上的寿命 $\tau_2$ 有关。即： $A_{21} = (\frac{dN_{21}}{dt})_{sp} \frac{1}{N_2}$ ，其中 $dN_{21}$ 是 $dt$ 时间内自发辐射粒子数密度， $N_2$ 是在能级 $E_2$ 上的粒子数密度。在不考虑其他辐射跃迁的情况下，

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = A_{21}N_2(t) = -\frac{dN_2(t)}{dt}, \quad (4-1)$$

积分可得：

$$N_2(t) = N_2(0)e^{-A_{21}t} \quad (4-2)$$

其中 $N_2(0)$ 是 $t = 0$ 时刻的粒子数。定义 $N_2(t)$ 由 $t = 0$ 时刻 $N_2(0)$ 衰减到它的 $1/e$ 所用时间为 $E_2$ 能级的平均寿命 $\tau_2$ ，可以得出：

$$\tau_2 = \frac{1}{A_{21}} \quad (4-3)$$

其中 $A_{21}$ 又称为爱因斯坦常数。

(2) 受激辐射。处在高能级 $E_2$ 上的原子在频率 $\nu = (E_2 - E_1)/h$ 的辐射场的诱发下，向低能级 $E_1$ 跃迁并辐射出一个与诱发辐射场光子的状态完全相同的光子的过程称为受激辐射跃迁。

$$\frac{dN_2(t)}{dt} = -B_{21}N_2\rho(\omega_{21}), \quad (4-4)$$

跃迁概率为：

$$W_{21} = \left(\frac{dN_{21}}{dt}\right)_{st} \frac{1}{N_2} \quad (4-5)$$

$dN_{21}$ 是 $dt$ 时间内受激吸收粒子数密度，由于受激吸收过程是在辐射场 $u_\nu$ 的作用下产生的，所以跃迁几率与辐射场的大小成正比，即 $W_{21} = B_{21}u_\nu$ 。 $B_{21}$ 称为受激辐射跃迁的爱因斯坦常数。

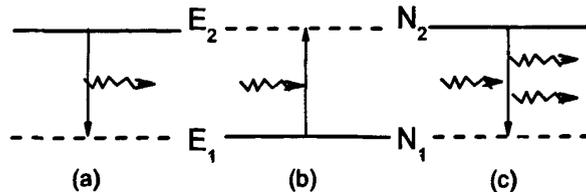


图 4-1 光与物质相互作用的三种形式：(a)自发辐射过程。(b)受激吸收过程。(c)受激辐射过程。

(3) 受激吸收：处于低能级 $E_1$ 上的一个原子在频率 $\nu = (E_2 - E_1)/h$ 的辐射场作用下吸收一个光子向高能级跃迁的过程称为受激吸收跃迁。

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = -B_{12}N_1\rho(\omega_{21}) = -\frac{dN_2}{dt}, \quad (4-6)$$

$\rho$ 是光能流密度（energy density of the incident photo flux）。它与受激辐射跃迁的过程恰好相反，跃迁几率为：

$$W_{12} = \left(\frac{dN_{12}}{dt}\right)_{st} \frac{1}{N_1} \quad (4-7)$$

$dN_{12}$ 是 $dt$ 时间内受激吸收粒子数密度， $N_1$ 是在能级 $E_1$ 上的粒子数密度。由于受激吸收过程是在辐射场 $u_\nu$ 的作用下产生的，所以跃迁几率与辐射场的大小成正比，即 $W_{12} = B_{12}u_\nu$ 。 $B_{12}$ 称为受激吸收跃迁的爱因斯坦常数。在热平衡条件下，粒子

数密度按能级分布服从玻尔兹曼分布，从而得到三个爱因斯坦常数的关系为：

$$\begin{cases} B_{12} = B_{21} = B \\ \frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{A}{B} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \\ W_{21} = N_2 \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \tau_{sp} \eta^3} \int \frac{\rho(\omega)}{\omega^3} S_f(\omega) d\omega \end{cases} \quad (4-8)$$

其中 $S_f(\omega)d\omega$ 是线性归一的函数，给出原子与频率在 $\omega$ 和 $\omega + d\omega$ 之间发生相互左右的概率。

#### §4.1.1 电磁波在介质中的传播：吸收和放大

我们介绍一束频率为 $\omega$ 的单色光沿着 $z$ 方向在物质中的传播情况如图(4-2)。在 $z$ 方向面积为 $S$ 的两个面 $P_1$ 和 $P_2$ 分别在 $z$ 和 $z + dz$ 处，单位时间内，单位体积吸收的光子数为 $W_{12}Sdz$ ，而且每秒受激吸收的能量为： $W_{12}\hbar\omega Sdz$ ，同样，每秒受激辐射的能量为： $W_{21}\hbar\omega Sdz$ ，则在体积 $Sdz$ 内样品单位时间内吸收的净能量为两者之差：

$$[I_\omega(z + dz) - I_\omega(z)]S = \frac{\partial I_\omega}{\partial z} S dz = -(W_{12} - W_{21})\hbar\omega S dz. \quad (4-9)$$

将 $W_{12}$ 和 $W_{21}$ 用方程(4-8)代入得：

$$\frac{\partial I_\omega}{\partial z} = -\frac{\pi^2 c^3}{\eta^3 \tau_{sp} \omega^2} S_t(\omega) \rho(\omega) (N_1 - N_2) = \alpha_\omega I_\omega, \quad (4-10)$$

$$\Rightarrow I_\omega(z) = I_\omega(0)e^{-\alpha_\omega z}. \quad (4-11)$$

所以吸收系数是光场穿过单位距离时，光场强度的衰减因子，如果 $N_1 > N_2$ ，则说明材料中存在光子的吸收，而如果 $N_1 < N_2$ ，则说明光场穿过介质时，强度反而增加了，此时对应于一个负的吸收系数，说明介质是一种增益介质，激光器就是利用这种特性工作的。

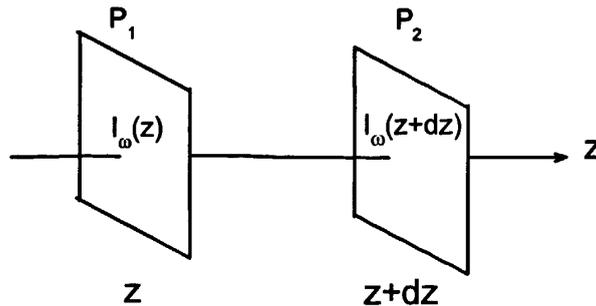


图 4-2 光在物质中的传播， $P_1$ 和 $P_2$ 分别表示光在物质中的传播路径中 $z$ 和 $z + dz$ 处面积为 $S$ 的两个横截面， $I_\omega(z)$ 和 $I_\omega(z + dz)$ 分别为面中光的强度。

研究光与半导体材料的相互作用，不仅可以使人们能够清晰的了解光与物质相互作用的物理原理，而且对利用半导体材料研发新的光电器件，以及优化器件的性能也有重要的意义。人们之所以对半导体的光电性质感兴趣正是由于半导体光电器件的良好性能以及广泛的应用前景。目前人们已经研制成功或正在使用的光电器件主要有：激光器、发光二极管（LEDs）、半导体光学放大器、光电探测器、光电导元件、 $p-n$ 结光探测器以及光信息储存和处理元件等等。而且有很多光电器件比如LEDs和一些光电导元件（比如激光器）已经商业化，极大的改善和方便了人们的生活。所有这些器件都是利用了半导体独特的物理性质，所以研究半导体材料的光电性质对物理的基本理论和器件的开发利用都有重要价值。

在III-V族半导体量子阱中，由于导带和价带间的带隙比较大，带间跃迁所需要的光子的能量比子带间跃迁所需要的光子能量大的多。而与此有显著区别的是在II类、断带半导体量子阱中，由于电子子带和空穴子带在不同的材料层中都被载流子占据，而且电子的能带和空穴的能带有交叠，所以电子从能量低的占据态到能量高的非占据态的跃迁通道比一般的半导体量子阱中要多。而且我们知道在一般的III-V族半导体量子阱中，电子吸收光子从价带跃迁到导带，光子的能量必须足够大，即光子的能量要大于导带和价带间的带隙，因此反映在吸收系数上就是吸收系数有一个阈值能量。而在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，由于电子和空穴的能带有交点，所以在光子的能量很小时，就可以有光吸收。在此，当考虑两个电子带和两个空穴带，并且只有电子和空穴的基态被占据时，其第一激发态是空态，这样电子和空穴就可以吸收光子从占据的基态跃迁到各自的第一激发态，载流子由于直接光跃迁所引起的跃迁通道有如图（4-3）所示的七个跃迁通道。在这种情况下，直接光吸收可以通过将占据态上的电子或空穴激发到非占据态来实现。值得注意的是：在这样一个空间分离的电子、空穴二元体系中，既存在由于电子和空穴在同一材料层中的子带间跃迁，又存在由于电子和空穴的波函数在生长方向的交叠引起的电子和空穴在两个材料层之间跃迁所引起的带间跃迁，所以在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的光吸收性质比一般的半导体量子阱有更加丰富的内容，我们希望这种独特的量子阱体系在光电性质方面会有新奇的物理现象，并且会在器件方面有独特的应用。因此，无论从物理学原理本身还是从器件应用的角度来看，研究这些光跃迁过程对光吸收系数的影响都是非常重要的，这也是本章的研究动机之一。

我们知道大多数的半导体光电器件比如光电二极管、太阳能电池、发光二极管和激光器二极管等都是利用半导体中的电子或者空穴与光的相互作用工作

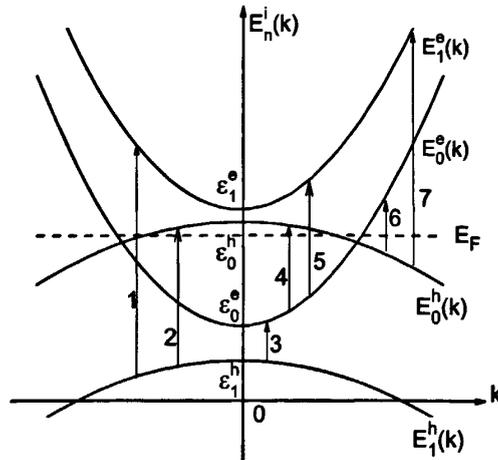


图 4-3 在基于InAsGaSb的二类、断带半导体量子阱中电子吸收光子获得一定的能量从能量低的占据态到能量高的非占据态的跃迁通道。其中  $E_n^j(k) = \epsilon_n^j + (-1)^j \hbar^2 k^2 / 2m_j^*$  是电子 ( $j = e = 0$ ) 或者空穴 ( $j = e = 1$ ) 的能谱,  $\epsilon_n^j$  是电子或空穴的第  $n$  个子带能级,  $E_F$  是体系的费米能。跃迁轨道 1, 3, 4, 6 和 7 对应于带间跃迁, 而轨道 2 和 5 对应于子带间跃迁, 电子在 InAs 层, 而空穴在 GaSb 层。InAs 层和 GaSb 层的厚度分别为:  $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ,  $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ 。

的, 合理的设计这些器件可以得到最大化的光电转换效率。因此光电器件的设计和新的光敏材料的探索和研发成了光电器件研发者的主要任务。研究半导体材料的光电性质的最直接、有效的方法就是光吸收或者光激发[94], 而半导体材料的光吸收和激发性质强烈的依赖于半导体材料的能带结构, 特别是带边的能带结构。对于直接带隙半导体(导带的带底和价带的带顶具有相同的波矢  $\vec{k}$ ), 光吸收要更强一些, 对应于一个大的光吸收系数, 同样, 这类材料也是制作光发射器件的首选材料。对于间接带隙半导体材料(导带的带底和价带的带顶具有不同的波矢  $\vec{k}$ ), 这类材料的光吸收系数比较小, 因此在光吸收和发射器件中用的都比较少。这两类材料的光吸收过程我们可以参照图(4-4)。从图中可以看出, 电子与光相互作用从一个带跃迁到另一个带的过程中要求动量和能量守恒。这也是直接带隙半导体和间接带隙半导体在光吸收性质方面的显著区别。对于直接带隙半导体, 由于价带和导带在同一条竖直的线上, 所以只要电子吸收足够的能量就能从价带跃迁到非占据的导带上去, 由于光子的动量很小, 与电子相比可以忽略, 因此我们在处理电子和空穴与光子的相互作用时, 都认为光子的动量为零, 光子的存在仅仅是为了提供电子跃迁所需要的能量, 因此自动满足了动量守恒条件, 不需要任何其他粒子或过程的辅助。然而间接带隙半导体中的光吸收与直接带隙半导体中的光吸收最大的不同之处在于: 由于吸收过程要求动量和能量守恒, 所以电子不但要吸收光子获得足够的能量, 还要借助其他散射过程获得

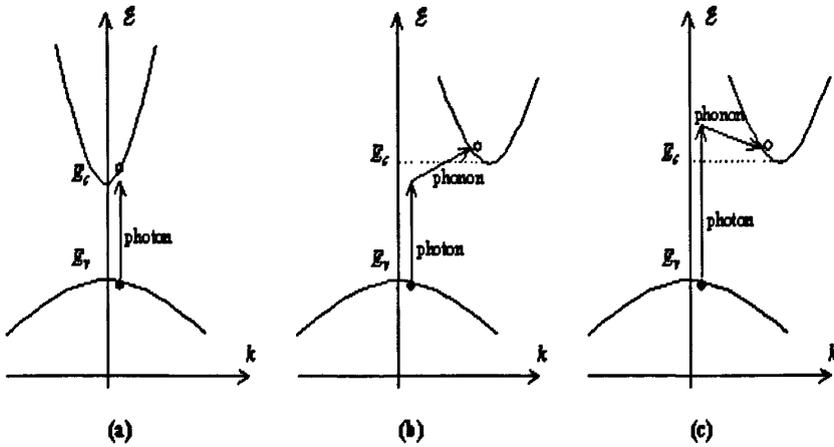


图 4-4 (a)直接带隙半导体的光吸收过程。(b)间接带隙半导体中声子吸收辅助的光吸收过程。(c)间接带隙半导体中声子发射辅助的光吸收过程[95]。

一定的动量，因此在间接半导体中的光吸收往往伴随着声子的发射或吸收如图（4-4）中的（b）和（c）过程。我们知道声子是晶格振动的量子，声子的速度比较小，一般和材料中的声速差不多，所以声子与光子相比具有较大的动量和较小的能量。因此在间接带隙半导体中的光吸收包含电子与光子的相互作用以获得一定的能量，然后电子还要与声子相互作用以获得一定的动量，这是一个二阶过程，所以间接带隙半导体中的光吸收的概率要比直接带隙中电子只与光子相互作用发生光吸收的概率要小得多，这就导致了在直接带隙半导体中的光吸收系数要比间接带隙半导体中的大得多，因此直接带隙半导体在光电器件方面的得到了广泛的应用。

## §4.2 理论方法

理论[92, 96]和实验[99, 100]研究都发现，基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱在应力下会在二维（2D）平面内发生电子和空穴能带的杂化，这种能带的杂化将在电子和空穴的单粒子能带的交点处产生一个微带隙。对于基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱体系，当InAs层比较薄（ $L_{InAs} \leq 10$  nm）而GaSb层的厚度比较大（ $L_{GaSb} \geq 10$  nm）时，两支杂化能带间的微带隙大约是几个毫电子伏[99]。然而理论研究[92]发现，随着InAs层厚度的增加

( $L_{InAs} \geq 15 \text{ nm}$ ,  $L_{GaSb} = 10 \text{ nm}$ )，能带杂化引起的微带隙会迅速的减小。当InAs层的比较厚 ( $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ，而GaSb比较薄 ( $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ ) 时，电子和空穴的浓度、沿着z方向的波函数以及电子和空穴的量子迁移率都可以通过Shubnikov-de Haas (SdH) [101] 振荡测得。而且实验的测量值和不考虑能带杂化时理论计算的结果一致[78, 92]。这表明，在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，当InAs层的比较厚，而GaSb比较薄时，电子和空穴的能带间的杂化效应可以大大的降低。

目前关于基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构在远红外[59, 60]和中远红外探测器[61, 62]方面的应用不断被报道。我们知道探测器主要是运用了器件的光吸收性质。本章从理论上研究了当在体系中加上一个沿着z方向线性极化的中远红外辐射场时，由于电子和空穴与光场的相互作用所引起的光吸收性质。我们知道电子和空穴与光子的相互作用过程并不改变电子在2D平面内的动量，所以在2D平面内的能级杂化效应也不会对光吸收产生重要的影响。这主要是因为我们所研究的体系中，对光吸收系数有重要贡献的波段落在中远红外区，在这个区域光子的能量 $\hbar\omega$ 比由于能带杂化效应引起的微带隙要大得多。所以在本章中我们主要研究在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，当InAs层比较厚，而GaSb比较薄时，即能带杂化效应可以忽略时，体系对高频的辐射场的响应。

在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱材料上加上一个沿着生长方向线性极化的光场时，既存在电子-光子相互作用，又存在空穴-光子相互作用，在这里我们采用半经典理论来研究光与电子和空穴的相互作用，即用经典的电磁势来描述电磁场，而用量子力学的语言来描述电子和空穴。当电磁场比较弱时，这是一个非常好的近似，因为在这种近似下只包含了单个光子的吸收过程，而没有考虑多光子吸收。采用半经典的玻尔兹曼方程作为主要的输运方程来研究电子和空穴对电磁场的响应。对于电子 ( $i = e$ ) 和空穴 ( $i = h$ ) 与光场的相互作用，玻尔兹曼方程可以写成：

$$\frac{\partial f_n^i(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = g_s \sum_{j, \mathbf{k}', n'} [F_{n'n}^{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, t) - F_{nn'}^{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t)]. \quad (4-12)$$

其中  $F_{nn'}^{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t) = f_n^i(\mathbf{k}, t)[1 - f_{n'}^j(\mathbf{k}', t)]W_{nn'}^{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ， $n$  是电子或者空穴的带指标， $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  是电子或者空穴在2D平面内的波矢， $f_n^i(\mathbf{k}, t)$  是电子或者空穴在  $|\mathbf{k}, n\rangle$  态的动量分布函数， $g_s = 2$  是自旋简并指标， $W_{nn'}^{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  是稳态下，电子从  $i$  层中的  $|\mathbf{k}, n\rangle$  态跃迁到  $j$  层中  $|\mathbf{k}', n'\rangle$  态的几率。在玻尔兹曼方程 (4-12) 中，原则上方程的左边还有力项，但在这里，我们已经将电磁场对载流子的影响包含在电子或空穴的时间依赖的分布函数和电子的跃迁概率中，所以，为了避免

重复计算电磁场的影响，在方程的左边没有出现力项。跃迁几率可以由费米黄金规则给出， $W_{nn'}^{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_{nn'}^{ij}(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ ，

$$W_{nn'}^{ij}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{e\hbar F_0}{m_j^* \omega} \right)^2 |X_{nn'}^{ij}|^2 \delta[E_n^i(\mathbf{k}) - E_{n'}^j(\mathbf{k}) + \hbar\omega], \quad (4-13)$$

其中 $F_0$ 和 $\omega$ 分别是电磁场的强度和频率，并且 $X = \int dz/z\psi_e^*(z)\psi_h(z)$ 是与 $z$ 方向的波函数密切相关的量， $E_n^e(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2/2m_e^* + \epsilon_n^e$ 和 $E_n^h(\mathbf{k}) = -\hbar^2 k^2/2m_h^* + \epsilon_n^h$ 分别是电子和空穴的能谱， $m_j^*$ 是电子或者空穴的有效质量 $\psi_n^i(z)$ 和 $\epsilon_n^i$ 分别是电子和空穴沿着 $z$ 方向的波函数和在量子阱中量子化的能级，电子和空穴分别在2D平面内做自由运动其波函数具有平面波的形式，而在量子阱的方向上的运动受到限制，因此电子和空穴的能谱在2D平面内是自由运动的形式，而在量子阱的生长方向是量子化的。

在第二章中提到过，对于散射几率形如(4-13)所示的形式，玻尔兹曼方程(4-12)没有简单的解析解，必须要做一些近似处理。在本章的工作中，我们要研究与体系的光吸收系数相关的物理性质，在这里我们采用雷啸霖等人发展的处理输运问题的平衡方程方法[75, 76]来研究体系对于线性辐射场的响应。首先，我们在玻尔兹曼方程(4-12)的两边同时乘以 $g_s \sum_{\mathbf{k}} E_n^i(\mathbf{k})$ ，那么我们分别可以得到电子和空穴的能量平衡方程，从能量平衡方程我们可以得到由于电子和空穴与光子相互作用导致的总的能量密度（能量转移率）：

$$P = P_e + P_h = \sum_{i,j} P_{ij}, \quad (4-14)$$

其中 $P_i = g_s \partial [\sum_n \sum_{\mathbf{k}} E_n^i(\mathbf{k}) f_n^i(\mathbf{k}, t)] / \partial t$ 是电子和空穴的能流密度（能量转移率）。

$$P_{ij} = 4\hbar\omega \sum_{n', n, \mathbf{k}} f(E_n^i(\mathbf{k})) [1 - f(E_{n'}^j(\mathbf{k}))] W_{nn'}^{ij}(\mathbf{k}). \quad (4-15)$$

在稳态情况下，我们用电子和空穴的能量统计分布，例如费米狄拉克分布函数来代替与时间有关的动量分布函数作为电子和空穴的分布函数，即 $f_n^i(\mathbf{k}, t) \simeq f(E_n^i(\mathbf{k}))$ ，其中 $f(x) = [1 + e^{(x-E_F)/k_B T}]^{-1}$ ， $E_F$ 是体系的费米能级， $k_B$ 是玻尔兹曼常数，则由于电子和空穴吸收光子所引起的吸收系数[75]为：

$$\alpha = \alpha_0 (2\hbar P / e^2 F_0^2) = \sum_{i,j} \alpha_{ij}, \quad (4-16)$$

其中 $\alpha_0 = e^2 / (\hbar \sqrt{\kappa} \epsilon_0 C)$ ， $\kappa$ 和 $\epsilon_0$ 分别是材料的静态介电常数和真空中的介电常数， $C$ 是真空中的光速。

考虑到在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，既存在电子和空穴在同一层内的子带间跃迁，又存在由于电子和空穴的波函数的交叠所导致的电子和空穴在两种不同的材料层中的带间跃迁。所以吸收系数有两种形式，对于同一

测量层内的跃迁:

$$\alpha_{ii} = \beta_i \frac{k_B T}{\pi} \sum_{n',n} \frac{|X_{nn'}^{ii}|^2 B_{n'n}^i \Gamma_i}{(\varepsilon_{n'}^i - \varepsilon_n^i - \hbar\omega)^2 + \Gamma_i^2}, \quad (4-17)$$

对于电子和空穴在不同材料层中的带间跃迁:

$$\alpha_{eh} = \beta_e (M^*/m_e^*) \sum_{n',n} \Theta(\varepsilon_{n'}^h - \varepsilon_n^e - \hbar\omega) |X_{nn'}^{eh}|^2 F_{nn'}^{he}, \quad (4-18)$$

方程(4-18)给出的是电子从电子层跃迁到空穴层所引起的吸收系数。而载流子从空穴层向电子层跃迁所引起的吸收系数为:

$$\alpha_{he} = \beta_h (M^*/m_h^*) \sum_{n',n} \Theta(\varepsilon_{n'}^h - \varepsilon_n^e + \hbar\omega) |X_{n'n}^{he}|^2 F_{n'n}^{eh}. \quad (4-19)$$

其中  $\beta_i = \alpha_0(8\hbar/m_i^*\omega)$ ,  $1/M^* = 1/m_e^* + 1/m_h^*$ ,  $B_{n'n}^i = [A_{n'}^i/(A_n^i - A_{n'}^i)] \ln[A_n^i(1 + A_{n'}^i)/A_{n'}^i(1 + A_n^i)]$ ,  $A_n^i = \exp[(\varepsilon_n^i - E_F)/k_B T]$ ,  $F_{nn'}^{ij} = f(x_j^-)[1 - f(x_i^+)]$ ,  $x_i^\pm = (m_e^*\varepsilon_n + m_h^*\varepsilon_{n'} \pm m_i^*\hbar\omega)/(m_e^* + m_h^*)$ 。在方程(5-20)中, 我们用洛仑兹展开来表示 $\delta$ 函数, 即:  $\delta(x) \rightarrow (\Gamma_i/\pi)/(x^2 + \Gamma_i^2)$  其中 $\Gamma_i$ 是散射率的展宽。

### §4.3 数值结果和讨论

我们结合Folkess[92]及合作者在2006年从实验上制备典型的典型的二类半导体量子阱结构, 研究了在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的光吸收性质。即量子阱中InAs层的厚度为:  $L_{InAs} = 17$  nm, GaSb层的厚度为:  $L_{GaSb} = 5$  nm。样品中电子和空穴的浓度以及迁移率可以通过磁输运实验比如霍尔效应[102, 103]和Shubnikov-de Haas(SdH)振荡[101]来测定。运用自洽解薛定谔方程和泊松方程的方法[78]得到电子和空穴的子带能级以及沿着z方向的波函数, 我们的理论计算得到的电子和空穴的浓度分别为:  $n_e = 1.14 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $n_h = 3.10 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。选取InAs层的导带底作为能量的零参考点电子和空穴的基态能级和第一激发态能级分别为:  $\varepsilon_1^e = 32.0$  meV,  $\varepsilon_2^e = 119.9$  meV,  $\varepsilon_1^h = 106.3$  meV,  $\varepsilon_1^h = 4.2$  meV。为了研究电子或者空穴由于吸收光子从能量低的占据态通过吸收光子从能量低的占据态跃迁到能量高的非占据态对吸收系数的贡献, 我们总共选取电子和空穴的四个子带, 即最低的电子子带和最高的空穴子带分别被电子和空穴占据, 而电子和空穴的第一激发态是空态, 这种情况可以通过费米面的选取来实现。在计算基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的光吸收系数的过程中, 我们考虑了温度对费米能(化学势)的影响, 具体做法是利用电荷守恒条件:  $n_e = g_s \sum_{n,k} f(E_n^e(k))$ , 其中 $g_s = 2$ 是自旋简并指标。 $f(x)$ 是费米狄拉克分布函数。为了计算吸收系数, 我们考虑了图(4-3)所示的7个跃迁通道, 对于子带间跃迁情况, 由于两个子带中电子和空穴的有效质

量相同，而且在电子和空穴与光子相互作用的过程中并不改变电子或空穴的动量，所以在能量守恒条件下 $\delta$ 函数是一个与波矢 $k$ 无关的量，为了从数学上很好的描述 $\delta$ 函数的行为，我们对 $\delta$ 函数做洛仑兹展开，而且取能量展宽 $\Gamma_e = \Gamma_h = 1$  meV。

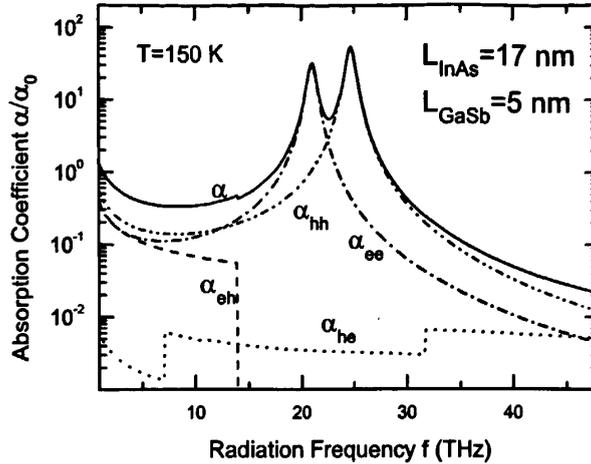


图 4-5 在基于InAsGaSb的二类、断带半导体量子阱中当InAs层和GaSb层的厚度分别为 $L_{InAs} = 17$  nm,  $L_{GaSb} = 5$  nm时, 在温度 $T = 150$  K时, 不同的跃迁通道对吸收系数 $\alpha$ 的贡献, 其中 $\alpha_{ij}$ 表示载流子从 $i$ 层跃迁到 $j$ 层引起的吸收系数,  $\alpha_0 = e^2/(\hbar\sqrt{\kappa}\epsilon_0 C)$ 。

图(4-5)给出了不同跃迁通道对总的吸收系数的贡献以及各个通道所引起的吸收系数。在温度 $T = 150$  K时, 随着辐射光场频率的变化情况。从图中可以看到, 吸收系数出现两个尖锐的峰, 通过对各个跃迁通道对吸收系数的贡献的分析发现, 吸收系数主要是由电子和空穴吸收光子在同一材料层中的子带间跃迁引起的, 即电子和空穴的子带间跃迁对吸收系数的贡献要比带间跃迁的贡献大得多。也就是说在图(4-3)中所示的(2)过程(空穴在GaSb层中的子带间跃迁)和(5)过程(电子在InAs层中的子带间跃迁)对吸收系数的贡献要比其他过程(电子和空穴在GaSb和InAs两层之间的跃迁)大得多。由于在InAs层和GaSb层中, 两个电子的子带能级差和两个空穴的子带能级的差不相等, 所以会在两个不同的位置出现两个吸收峰(我们称之为双色光吸收峰, 双色的意思是两个峰值所对应的光子的频率不同), 峰的位置分别与子带间的能量差有关, 对电子和空穴的子带间跃迁, 峰的位置分别位于:  $\hbar\omega \sim \epsilon_1^e - \epsilon_0^e$  和  $\hbar\omega \sim \epsilon_0^h - \epsilon_1^h$ 。由于 $\epsilon_1^e - \epsilon_0^e \sim 88$  meV 和  $\epsilon_0^h - \epsilon_1^h \sim 102$  meV, 所以, 吸收峰落在中远红外区。当我们把两层的宽度分别取为:  $L_{InAs} = 17$  nm 和  $L_{GaSb} = 5$  nm时, 电子和空穴的分布在生长方向是高度局域化的, 而且电子和空穴的波函数在界面处的交叠很小, 所以

由于带间跃迁所引起的光吸收系数(例如 $\alpha_{eh}$ 和 $\alpha_{he}$ )要比子带间跃迁所引起的光吸收系数(例如 $\alpha_{ee}$ 和 $\alpha_{hh}$ )小得多。而且在我们最近的一个理论工作[104]中,我们研究了在线型极化的辐射场的作用下,电子和空穴在InAs和GaSb两个不同的层之间发生跃迁所导致的光电导性质,研究发现,由于电子或者空穴和亚太赫兹场的相互作用载流子的带间散射率大约是:  $10^{11} \text{ s}^{-1}$  (0.1) THz。所以,需要强调的是,尽管电子和空穴的波函数在界面处的交叠很小,但是正是由于电子和空穴沿生长方向的波函数的这种交叠,才使得电子或者空穴能够从量子阱的一层跃迁到另一层。相比之下,在本章的工作中,我们的理论研究发现,由于电子或空穴在子带间跃迁所引起的子带间散射率可以高达  $10^{12} \text{ s}^{-1}$  (THz)。这也是子带间跃迁所引起的光吸收强度比带间跃迁大的多的一个主要原因。

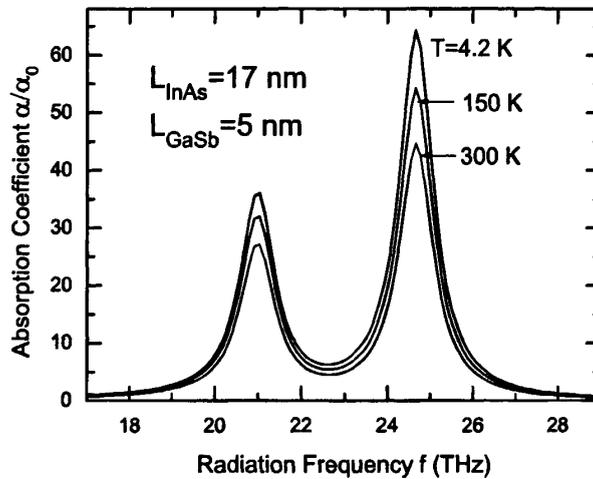


图 4-6 在基于InAsGaSb的二类、断带半导体量子阱中当InAs层和GaSb层的厚度分别为 $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ,  $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ 时,在不同温度下,吸收系数 $\alpha$ 随辐射场频率的变化关系,  $\alpha_0 = e^2/(\hbar\sqrt{\kappa}\epsilon_0 C)$ 。

在图(4-6)中我们给出了由于电子和空穴子带间跃迁导致的光吸收系数的峰值在不同温度下的情况。第一个峰是由电子在InAs层中的子带间跃迁引起的,第二个峰是由空穴在GaSb层的子带间跃迁引起的。我们给出了在温度 $T = 4.2 \text{ K}$ ,  $150 \text{ K}$ 和 $300 \text{ K}$ 三个温度下的吸收系数随着辐射场频率的变化情况。从图中可以看到,在温度比较低时( $T = 4.2 \text{ K}$ )峰强度比较大,随着温度的升高,峰强度略有下降,但是我们发现从低温到室温( $T = 4.2 \text{ K} \rightarrow 300 \text{ K}$ )这样一个比较大的温度范围内变化时,峰强度衰减的并不是非常明显。我们知道在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中,电子所受到的限制势大约是 $2 \text{ eV}$ ,空穴所受到的限制势大约是 $0.6 \text{ eV}$ ,比III-V族半导体量子阱中电子和空穴所受到的限制势大得多。所以对于相对比较窄的量子阱厚度 $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ 、 $L_{GaSb} = 5$

nm, 电子(空穴)子带间的能量差比较大。正是由于电子的第一激发态 $\epsilon_1^e$ 和基态 $\epsilon_0^e$ 以及空穴的基态 $\epsilon_0^h$ 和第一激发态 $\epsilon_1^h$ 间的能量差比较大, 所以随着温度的升高, 电子和空穴的分布费米狄拉克函数或者说电子和空穴的占据情况随着温度的变化不大, 所以吸收系数随温度的变化不是非常明显。另外一个显著的原因就是, 由于在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中, 光吸收系数主要是由于电子吸收光子发生的子带间跃迁和空穴吸收光子的子带间跃迁引起的, 而在跃迁过程中所吸收光子的能量 $\hbar\omega$ 比温度效益引起的热能 $k_B T$ 大得多, 所以吸收系数与温度的依赖关系不是很强, 这就决定了基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱材料做成的光电器件可以在室温下良好的工作。

我们知道, 增加量子阱的宽度可以使得电子或者空穴的两个能级之间的能量差 $|\epsilon_1^j - \epsilon_0^j|$ 减小, 所以从理论上讲, 我们可以通过改变量子阱中InAs层和GaSb层的厚度来调制双色光吸收所需要的光子的频率。然而实际上InAs和GaSb的宽度变化会导致子带间的杂化和载流子在不同带上占据数的改变, 这部分内容我们将在下一章做详细的讨论。随着分子束外延生长技术的发展和日益成熟, 我们可以制备出不同宽度的量子阱材料。实验上已经有了很多关于用基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构做双色光电二极管[53], 第三代探测器和传感器[54-56, 105]、远红外、中远红外光探测器[52, 90]和半导体激光器[63]的报道。我们的理论研究发现基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱结构可以用来做双色光电转换器件或者双色光探测器, 这为实验工作者提供了理论基础。我们从自恰计算方法[78]的得到的数值结果表明, 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱结构的实现还依赖于其他的样品参数, 比如GaSb夹层的厚度和在AlSb势垒层中的本征缺陷。所以实际上, 以上的诸多因素包括电子能带和空穴能带的杂化都可能影响光吸收的性质, 也正因为如此, 我们在本章的理论研究中, 只对样品厚度分别为 $L_{InAs} = 17$  nm、 $L_{GaSb} = 5$  nm时的光吸收性质, 而没有考虑双色光吸收性质随着InAs和GaSb层厚度的变化。

#### §4.4 本章小结

本章利用自恰计算得到的电子和空穴的子带能级以及沿着样品生长方向的波函数, 用半经典的玻尔兹曼方程方法来研究基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱结构中的电子和空穴与光子的相互作用, 用平衡方程方法计算了当样品厚度分别为 $L_{InAs} = 17$  nm、 $L_{GaSb} = 5$  nm时的光吸收系数。在吸收系数得到了两个分别由电子子带间跃迁和空穴子带间跃迁导致的吸收峰, 由于峰的位置对应的光子的频率不同, 所以我们称之为双色光吸收。而由于电子和空穴在InAs层

和GaSb层间跃迁发生的带间跃迁引起的光吸收系数比较小，这主要是由于电子和空穴沿着 $z$ 方向的波函数交叠比较小。随着光子频率的增大，相应的各个载流子跃迁的通道依次打开，所以会在吸收系数上出现几个台阶。我们知道，温度对器件的性能以及应用都会产生重大的影响，在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱结构中，由于两个电子子带间的带隙和两个空穴间的带隙比较大，因此所吸收的光子的能量 $\hbar\omega$ 比温度效益引起的热能 $k_B T$ 大得多，所以温度对光吸收系数的影响不大。所以我们的理论发现：如果用基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱结构做光电转换器件，比如光电探测器和感应器等，可以在比较高的温度下很好的工作。由于在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱结构中的吸收系数出现了两个尖锐的吸收峰，所以用这种材料做成的光电器件可以在两个光频波段工作，所以具有其他材料所不能替代的性能。而且由于吸收峰对应的光子的频率在中远红外区，我们知道在远红外区的双色光有着广泛的应用前景，所以基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱及其超晶格结构也是第三代远红外光探测器[54, 105]良好的候选材料。然而，正如我们所提到的，在我们的理论研究中没有考虑电子能带和空穴能带的杂化效应，也没有考虑电子-电子之间、空穴-空穴之间以及电子-空穴之间的相互作用即激子效应，而且实际样品中的杂质和表明缺陷的影响也是不可避免的影响材料性质的因素，以及在实际中如何消除样品中的噪声等等，这些因素既为科研工作者提供了机遇，也提出了挑战。

## 第五章 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中由于交换相互作用引起的能带杂化效应

**摘要：**本章研究了在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱(AlSb/InAs/GaSb/AlSb/GaSb)中由于交换相互作用引起的电子能带和空穴能带的杂化效应。在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中有电子和空穴两种载流子分别处在InAs层和GaSb层中，可以预见，由于载流子之间的相互作用，在InAs层和GaSb层的交界处必定存在电子和空穴的杂化现象。本论文从多体相互作用的角度讨论了在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中由于电子和空穴之间的库仑相互作用引起的微带隙，其大小为THz量级（6meV）。我们指出，多体效应是体系中能带杂化的另一个重要原因，这与单粒子表象下的 $k \cdot p$ 等方法不同。

### §5.1 引言

在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格中[28, 29]，GaSb的价带顶比InAs的导带底还要高，因此在低温下GaSb价带中的电子会转移到InAs的导带上，于是在InAs层形成一个二维电子气（2DEG），而在GaSb层中会形成一个二维空穴气（2DHG），而且二维电子气和二维空穴气在空间上是分离的。正是由于这种材料独特的子能带结构，基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格一直以来都被人们作为用来研制和开发新型电子器件和光电器件的候选材料，并且近年来科研工作者也一直在致力于探索基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格在新型光电器件方面的应用，负的持续光电导[106]、本质激子器件[107]、半金属异质结结构[108]、远红外激光器[109]、非冷却中远红外光探测器[110]还有最近的关于光电导器件方面的理论研究[104]等等。

众所周知，材料的能带结构对体系的物理性质有着重要的影响，由于在基于的InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，电子的导带和空穴的价带有交叠，所以这样的异质结构在本征上是半金属。所以自从这种量子阱结构问世以来，人们对这种材料是半导体还是半金属存在很多争议[97, 111–113]。后来的实验测量[114]和理论计算[96–98]都表明：基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中由于在不同的材料层中电子的导带和空穴的价带之间的耦合导致电子和空穴在二维（2D）平面内的能带杂化，并且在电子和空穴的色散关系的交点处形成微带隙（mini-band），对于一个经典的样品结

构，比如InAs层和GaSb层的厚度分别为： $L_{InAs} = 17 \text{ nm}$ ， $L_{GaSb} = 5 \text{ nm}$ ，在能带交点处的微带隙大约为几个毫电子伏特[96, 114]。这种微带隙的出现就导致基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构表现为半导体行为，而不是之前的半金属[100]。最近的理论和实验工作[114]发现：微带隙的出现会导致在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中出现巨磁电阻，巨磁电阻在信息储存方面有着重要而广泛的应用。所以无论从基础理论研究还是从器件应用方面来讲，研究基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中的能带的杂化效应都是非常重要的。然而以 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 为代表的能带计算方法是建立在单粒子图象的基础上的，众多的理论和实验已经证明，多体效应即载流子之间的相互作用会对体系的能带性质产生重要的影响。本章从多体相互作用的角度证明了基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱材料的半导体特征。

我们知道计算于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中的能带杂化的方法有很多，比较常用的方法 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰方法[96]、原子轨道线性组合法、波函数匹配法（wave function matches）[111]、紧束缚方法和平面波赝势方法[115]等。一般来说，只要在不同的材料层中的价带和导带有耦合，并且空穴的子带比电子的子带高，能带的杂化效应都可以通过 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 能带计算方法得到。而 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法是基于单粒子图像下的纯粹的数值方法， $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法[96]得到的结果表明对于一个经典的二类、断带半导体量子阱体系，当InAs层的厚度比较小（比如 $L_{InAs} \leq 10 \text{ nm}$ ），而GaSb层的厚度比较大时（比如 $L_{GaSb} \geq 10 \text{ nm}$ ）， $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法计算得到的微带隙大约微几个毫电子伏特，这与实验观测的结果[114]一致。然而理论计算也发现随着InAs厚度的增加（比如 $L_{InAs} \geq 15 \text{ nm}$ ， $L_{GaSb} = 10 \text{ nm}$ ），由于电子和空穴的耦合变弱导致的微带隙迅速的减小，因此在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中电子和空穴能带的杂化效应强烈的依赖于InAs层和GaSb层的厚度。另一方面，也有理论计算提出，在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中，电子和空穴的隧穿遂穿相互作用也可以引起体系中电子和空穴带的杂化[116]，其物理基础是：载流子可以穿过两个量子阱之间的势垒，使得体系的哈密顿量不再是对角的，而是出现了由载流子隧穿引起的非对角元，因此色散关系交点处的微带隙 $\Delta$ 强烈的依赖于隧穿参数 $\omega$ 和载流子的波矢 $\mathbf{k}$ 。由于隧穿相互作用引起的电子能带和空穴能带的杂化效应可以有非常简单的解析形式，其依赖关系为： $\Delta = \omega k$ 。从由于隧穿引起的带隙的表达式可以看出，当波矢 $\mathbf{k} \sim 0$ 时，微带隙 $\Delta \sim 0$ 。这与 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法计算所得的结果以及实验结果截然不同， $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理论计算表明在波矢 $\mathbf{k} \sim 0$ 时，微带隙 $\Delta$ 取得最大值。所以虽然隧穿相互作用法有简单的解析解，但其可靠性有待改进。

值得注意的是，不论 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 理论计算方法还是隧穿相互作用理论都是建立的单粒子模型的基础上的。在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中，电子态和空穴态都分别被电子和空穴所占据，所以在这个体系中既有电子又有空穴，而且电子和空穴分别被局域在InAs层和GaSb层。在这种情况下由于库仑相互作用引起的多体相互作用可以有更丰富的形式。既包括同一材料层中的电子-电子相互作用和空穴-空穴相互作用，又包括两个不同材料层中的电子-空穴之间的库仑相互作用，因此在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中多体效应被显著的增强了。所以在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中通过载流子间的库仑相互作用导致的多体效应可以引起电子能带和空穴能带的杂化效应。我们知道库仑相互作用是长程相互作用，因此两个不同材料层间的电子-空穴间的库仑相互作用的存在也是必然的，问题的关键之处在于如何定量的描述这种相互作用的大小。在量子阱体系中，载流子间的库仑相互作用既不同于三维体材料中的形式，又不同于二维情况下的形式。电子-电子相互作用在二维（2D）、准二维（Q2D）和三维（3D）情况下的表达式分别为：

$$\left\{ \begin{array}{ll} V(\mathbf{q}) = \frac{2\pi e^2}{\kappa q} & 2D \\ V(\mathbf{q}) = \frac{2\pi e^2}{\kappa q} H_{ij}(q) & Q2D \\ V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{\kappa q^2} & 3D \end{array} \right. \quad (5-1)$$

其中 $\kappa$ 是材料的介电常数， $H_{ij}(q) = \int dz_1 \int dz_2 |\psi_i(z_1)|^2 |\psi_j(z_2)|^2 e^{-q|z_1-z_2|}$ 称为量子阱中电子-电子相互作用的形状因子（form factor）， $\psi_i(z)$ 是第*i*层上的电子沿着*z*方向的波函数， $z_1$ 和 $z_2$ 是两层中电子的位置坐标。所以，在量子阱中载流子之间的相互作用与载流子沿着样品生长方向（*z*方向）的分布有关。

本章研究了在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱(AlSb/InAs/GaSb/AlSb/GaSb)中，多体效应对电子能带和空穴能带杂化效应的影响，计算了杂化能带在电子能谱和空穴能谱交点处的微带隙以及电子-电子相互作用、电子-空穴相互作用、空穴-电子相互作用和空穴空穴相互作用导致的自能。从另一个角度证明了InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，微带隙出现的物理机制。我们的理论结果和 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 方法计算所得的结果以及实验测量的结果一致。值得注意的是，本论文的理论出发点是考虑了载流子之间的的相互作用即多体效应，而之前的 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 理论方法是建立在单粒子图象的基础上的。这也是我们的理论创新点之一。

## §5.2 理论方法

在本章的工作中，我们发展了一套简单有效的方法来研究在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中电子和空穴能谱的杂化效应。在这里我们考虑只有一个电子能级和只有一个重空穴能级分别被电子和空穴所占据的情况，即只考虑电子和空穴的基态。在有效质量近似以及不考虑载流子之间的相互作用的情况下，电子 ( $j = e = 2$ ) 和空穴 ( $j = h = 1$ ) 的波函数和能谱分别可以写为：

$$\begin{cases} \Psi_{\mathbf{k}}^j(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_0^j(z) \\ E_{\mathbf{k}}^j = (-1)^j \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_j^*} + \varepsilon_0^j \end{cases} \quad (5-2)$$

其中  $\mathbf{R} = (x, y, z)$  是电子或空穴的位置坐标， $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  是电子或空穴沿着2D平面内的波矢， $m_j^*$  是电子或空穴在2D平面内的有效质量，电子和空穴沿着z方向的基态波函数  $\psi_0^j(z)$  和子带能级  $\varepsilon_0^j$  可以通过自恰求解Schrödinger方程和泊松方程得出。

### §5.2.1 无规相近似(Random Phase Approximation,RPA) 及其成立的条件

#### 一、无规相近似成立的条件：

最近的实验如plasmon dispersion, retardation effects and damping都证明了体系中电子之间的关联是非常重要的[117-119]。我们知道在二维电子气中，比如Si表面的反型层中，电子的浓度大约是  $10^{12} \text{cm}^{-2}$ ，人们计算得到的体系中的电子的交换关联能大约是几个meV，这个能量对半导体的性质会产生重要影响，所以一般要考虑电子-电子之间的交换关联能对能谱的影响。然而，我们知道无规相近似成立的条件要求电子的浓度要足够大，在块体金属材料中这个条件可以很好的满足，因此无规相近似也是一个非常好的近似方法。然而在半导体中特别是二维电子系统中由于电子的浓度比较小，那么无规相近似能否成立也是人们关注的问题。

定义  $r_s$  是描述电子系统中电子间的平均距离的一个参量，在二维情况下满足：

$$\frac{S}{N} = \frac{1}{n} \left( \frac{cm^2}{electron} \right) = \pi (r_s a_0)^2, \quad (5-3)$$

其中  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e^* e^2}$  是电子的有效玻尔半径(Bohr radius)。从方程(5-3)得到：

$$r_s = e^2 m_e^* / (4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \sqrt{\pi n e}).$$

如图(5-1)所示， $r_s$  也成了衡量体系中电子浓度的一个非常有效的物理量。当在高浓度状态，即  $r_s \ll 1$  时，RPA是一个好的近似[120, 121]。在窄带半导

体二维电子气中，如InAs, GaSb等，由于它们的有效质量比较小，而介电常数比较大，而在这类体系中比较经典的电子浓度为 $10^{12} \text{cm}^{-2}$ ，所以 $r_s \ll 1$ 的条件是很容易满足的，这也是我们可以在半导体低维系统中用无规相近似来计算与多体效应有关的量的原因。

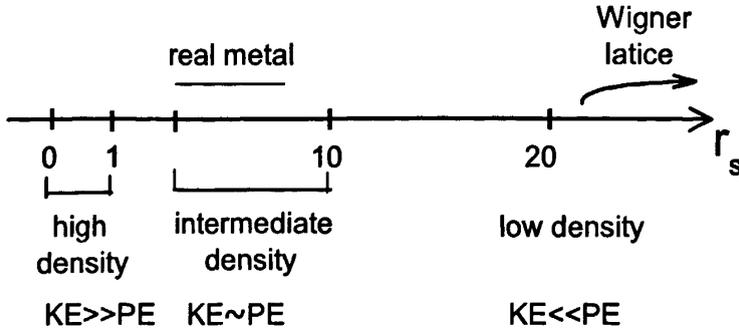


图 5-1 电子气中电子浓度随着 $r_s$ 的变化示意图。可见，金属的浓度一般落在中等浓度区域，当浓度特别低时，形成Wigner晶格。其中KE表示电子的动能，PE是电子所受到的晶格势能[123]。

## 二、电子-电子相互作用系统运动方程的无规相近似方法：

为了知道给定物理系统的特性必须以某种方式扰动体系，比如加外场或用粒子辐照等方式，然后观察系统的物理量因外加扰动所引起的改变即响应，通过扰动与响应的关系可以知道系统的元激发信息。在这里我们假设在电子气中加一个试探电荷，且试探电荷局域在电子气的原点处，然后我们来看它如何影响载流子的分布 $n(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r})$ ，而电荷分布的变化又会重新修正静电势 $U(\mathbf{r})$ ，这种方法是一种自恰的量子力学方法。在电子气中屏蔽的电荷密度算符可以用电子的两个场算符的乘积来表示：

$$\hat{n}^s(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{q}} \hat{n}_{\mathbf{q}}^s e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})}, \quad (5-4)$$

其中 $\hat{n}_{\mathbf{q}}^s$ 是密度分布算符的傅立叶变换形式， $\mathcal{V}$ 是半导体的体积， $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ 我们将自旋简并指标包含在 $\sum_{\mathbf{k}}$ 中。

$$\hat{n}_{\mathbf{q}}^s = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}}, \quad (5-5)$$

电子密度 $n_{\mathbf{q}}^s$ 与其密度算符 $\hat{n}_{\mathbf{q}}^s$ 的运动方程有关，在单粒子的有效哈密顿量为：

$$H_{eff} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \mathcal{V} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^s \hat{n}_{\mathbf{q}}^s, \quad (5-6)$$

其中 $V_{\mathbf{q}}^s$ 是屏蔽库仑势 $V^s(\mathbf{r})$ 的傅立叶变换形式：

$$V_{\mathbf{q}}^s = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3\mathbf{r} V^s(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (5-7)$$

屏蔽库仑势 $V^s(\mathbf{r})$ 可以写为:

$$V^s(\mathbf{r}) = eU^s(\mathbf{r}), \quad (5-8)$$

$U^s(\mathbf{r})$ 屏蔽的静电势, 它包含了试探电荷对静电势的修正, 可以通过泊松方程来求解 $U^s(\mathbf{r})$ 。首先我们要求解电子的浓度 $n_{\mathbf{q}}^s = \langle \hat{n}_{\mathbf{q}}^s \rangle$ , 我们从电子的产生算符和湮灭算符的乘积 $a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}$ 海森堡运动方程出发:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} = [a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}, H_{eff}] = (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'}^s (a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}'}^+ a_{\mathbf{k}}). \quad (5-9)$$

由于 $V_{\mathbf{q}'}^s$ 和类似 $a^+ a$ 项的乘积中包含四个算符, 所以我们要对运动方程做截断。当粒子的浓度比较高时, 最常用的截断近似是无规相近似(RPA), 即只保留一些缓变的项, 即对 $\mathbf{q}'$ 的求和中我们只取 $\mathbf{q}' = -\mathbf{q}$ 的项:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle = (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle + V_{\mathbf{q}}^s (n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}). \quad (5-10)$$

为了求得电子的浓度 $n_{\mathbf{q}}^s$ 我们假设 $a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}$ 随时间的演化关系为:  $e^{(\delta-i\omega)t}$ 。无限小的量 $\delta$ 是假设试探电荷是绝热的加在体系中的, 而且我们假设电荷分布也有相同的时间依赖关系, 所以从方程(5-10)可以得到:

$$n_{\mathbf{q}}^s = \langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle = V_{\mathbf{q}}^s \frac{n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}}{\hbar(\omega + i\delta) + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (5-11)$$

在这里 $n_{\mathbf{q}}^s$ 可以从泊松方程求得, 在实空间的泊松方程为:

$$\nabla^2 U^s(\mathbf{r}) = -\frac{e}{\epsilon} (n(\mathbf{r}) + n^s(\mathbf{r})), \quad (5-12)$$

由于:

$$n_{\mathbf{q}} = \frac{1}{V} \int d^3\mathbf{r} \delta^3(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (5-13)$$

方程(5-12)的傅立叶变换(波矢空间)为:

$$U_{\mathbf{q}}^s = \frac{e}{\epsilon q^2} \left( \frac{1}{V} + n_{\mathbf{q}}^s \right), \quad (5-14)$$

由于 $V_{\mathbf{q}}^s = eU_{\mathbf{q}}^s$ , 将方程(5-11)插入方程(5-14)并且解 $V_{\mathbf{q}}^s$ 得到,

$$V_{\mathbf{q}}^s(\omega) = V_{\mathbf{q}} \left[ 1 - V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}}{\hbar(\omega + i\delta) + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}} \right]^{-1}, \quad (5-15)$$

其中 $V_{\mathbf{q}}$ 是非屏蔽的库仑势 $V(\mathbf{r})$ 的傅立叶变换形式。从方程(5-15)可以看出 $V_{\mathbf{q}}^s(\omega)$ 是一个与 $\omega$ 有关的量, 所以我们称之为动态屏蔽库仑势,  $\omega$ 来源于动态介电函数 $\epsilon_{\mathbf{q}}(\omega)$ :

$$\epsilon_{\mathbf{q}}(\omega) = 1 - V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}}{\hbar(\omega + i\delta) + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (5-16)$$

方程(5-16)给出的就是RPA下的介电函数, 这种形式是由Lindhard最先推导出来的, 所以又称为Lindhard公式, 从其表达式可以看到介电函数是一个复数。我们可以令其实部为零, 得到电子的集体激发即等离子体激发, 而其虚部给出等离子体激发的寿命。通过动态介电函数计入多体效应对库仑势 $V_{\mathbf{q}}$ 的影响, 利用有效

相互作用讨论屏蔽效应，计算相关能和准粒子的寿命等是非常方便、有效的。然而我们注意到，RPA给出的介电函数中含有奇点，所以直接用Lindhard公式来计算屏蔽库仑势是比较困难的，所以要做适当的近似，比较常用的近似是长波近似 ( $q \rightarrow 0$ ) 和静态近似 ( $\omega \rightarrow 0$ )。

### §5.2.2 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的介电函数矩阵

在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中有电子和空穴两种载流子，所以包含电子-电子、空穴-空穴和电子-空穴相互作用的哈密顿量可以写为：

$$H = H_0^e + H_0^h + H_{e-e} + H_{h-h} + H_{e-h} \quad (5-17)$$

其中  $H_0^e$  和  $H_0^h$  分别是不考虑载流子间的相互作用时电子和空穴的哈密顿量， $H_{e-e}$  是电子-电子间的库仑相互作用， $H_{h-h}$  是空穴-空穴间的库仑相互作用， $H_{e-h}$  是电子-空穴间的库仑相互作用，在二次量子化表象下可以写为：

$$\left\{ \begin{array}{l} H_0^e = \sum_{\mathbf{k}} E_e(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}} \\ H_0^h = \sum_{\mathbf{k}} E_h(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} \\ H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{ee}(q) c_{\mathbf{k}+q}^+ c_{\mathbf{k}'-q}^+ c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}} \\ H_{h-h} = \frac{1}{2} \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{hh}(q) d_{\mathbf{k}+q}^+ d_{\mathbf{k}'-q}^+ d_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}} \\ H_{e-h} = \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{eh}(q) c_{\mathbf{k}+q}^+ d_{\mathbf{k}'-q}^+ d_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}} \end{array} \right. \quad (5-18)$$

从相互作用项中可以看出，在散射前后，粒子的总动量守恒，而且各种载流子的总粒子数也是守恒的，这是因为在这里我们忽略了一些与碰撞离化和俄歇复合[122]相关的相互作用项如图(5-2)所示。

其中  $E_e(\mathbf{k})$  和  $E_h(\mathbf{k})$  分别是电子和空穴的动能项， $c_{\mathbf{k}}^+$  ( $d_{\mathbf{k}}^+$ ) 和  $c_{\mathbf{k}}$  ( $d_{\mathbf{k}}$ ) 分别是电子(空穴)的产生和湮灭算符， $V_{ij}(q)$  ( $i, j = e, h$ ) 是载流子之间的库仑相互作用。将电子和空穴的波函数作用在载流子-载流子间由于库仑势引起的相互作用哈密顿量可得载流子间裸的相互作用为：

$$V_{jj'}(q) = (-1)^{j+j'} V_q^j F_{jj'}(q), \quad (5-19)$$

对于电子-电子相互作用或者空穴-空穴相互作用， $V_{jj'}(q)$  取正值，而对于电子-空穴相互作用， $V_{jj'}(q)$  取负值，这是因为载流子之间的相互作用为库仑相互作用，对于同种载流子，其电荷的电性相同，比如电子-电子或者空穴-空

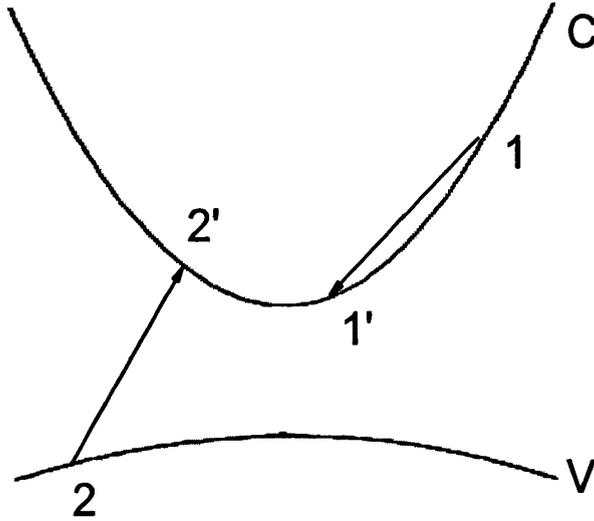


图 5-2 碰撞电离过程：在态1处的电子和态2处的电子相互作用后，分别在态1'和态2'处产生电子[122]。

穴，它们之间的相互作用为排斥作用，而对于不同电性的粒子间的相互作用，比如电子—空穴，由于其电荷的符号不同，所以会在库仑相互作用势前产生负号，其相互作用力为吸引相互作用。其中  $V_q^j = \frac{2\pi e^2}{\kappa_j q}$ ， $\kappa_j$  材料层  $j$  的静态介电常数， $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$  是由于载流子—载流子间的库仑相互作用导致的载流子的波矢在 2D 平面内的改变， $F_{jj'}(\mathbf{q})$  是形状因子，它与相互作用的两种粒子在  $z$  方向的波函数以及由于载流子—载流子相互作用在 2D 平面内引起的波矢的改变  $\mathbf{q}$  有关，具体形式为：

$$F_{jj'}(\mathbf{q}) = \int dz_1 \int dz_2 |\psi_0^j(z_1)|^2 |\psi_0^{j'}(z_2)|^2 e^{-q|z_1 - z_2|}, \quad (5-20)$$

我们可以通过无规相近似下的动态介电函数来描述载流子间的有效相互作用，

$$V_{jj'}^{eff}(\mathbf{q}) = \epsilon_{jj'}^{-1}(\Omega, \mathbf{q}) V_{jj'}(\mathbf{q}), \quad (5-21)$$

无规相近似下的介电函数矩阵元为：

$$\epsilon_{jj'}(\Omega, \mathbf{q}) = \delta_{jj'} - V_{jj'}(\mathbf{q}) \Pi_{jj'}(\Omega, \mathbf{q}), \quad (5-22)$$

其中  $\Pi_{jj'}(\Omega, \mathbf{q})$  是密度—密度关联函数或称为 (pair bubble)，可以由无规相近似下的格林函数或者运动方程方法给出：

$$\Pi_{jj'}(\Omega, \mathbf{q}) = g_s \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{j'}) - f(E_{\mathbf{k}}^j)}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{j'} - E_{\mathbf{k}}^j + \hbar\Omega + i\delta}, \quad (5-23)$$

其中  $f(x)$  是电子或空穴的费米狄拉克分布函数， $g_s = 2$  是自旋简并因子。在基于 InAs/GaSb 的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中有电子和空穴两种载流子，我们只考虑在同一层中的电子—电子相互作用、空穴—空穴相互作用以及在

两层中的电子-空穴相互作用，这时介电函数可以写成矩阵形式：

$$\epsilon(\Omega, q) = \begin{bmatrix} 1 - A_{ee} & A_{eh} \\ A_{he} & 1 - A_{hh} \end{bmatrix}, \quad (5-24)$$

其中  $A_{jj'}(\Omega, q) = V_q^j F_{jj'}(q) \Pi_{jj'}(\Omega, q)$  是电子或空穴从  $j$  层到  $j'$  层跃迁所导致的。从方程 (5-21) 可以看出载流子间的有效相互作用与介电函数的逆矩阵有关，从表达式 (5-22) 可以求得介电函数的逆矩阵：

$$\epsilon^{-1}(\Omega, q) = \begin{bmatrix} 1 - A_{hh} & -A_{eh} \\ -A_{he} & 1 - A_{ee} \end{bmatrix} / A_0, \quad (5-25)$$

其中  $A_0 = (1 - A_{ee})(1 - A_{hh}) - A_{eh}A_{he}$ 。

在我们所研究的基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱结构中，由于存在电子和空穴两种载流子，我们分别用电子和空穴的单粒子波函数来描述这个体系，则这个二粒子体系的Slater波函数为：

$$\Psi_{kk_1}^{jj'}(R_1, R_2) = C[\Psi_k^j(R_1)\Psi_{k_1}^{j'}(R_2) - \Psi_{k_1}^{j'}(R_1)\Psi_k^j(R_2)], \quad (5-26)$$

其中  $C = 1/\sqrt{2}$ 。载流子间由于库仑势  $V(\mathbf{R}) = e^2/(\kappa|\mathbf{R}|)$  导致的静态散射能为：

$$E_{cc}^{jj'} = \langle \Psi_{k'k_1}^{jj'*}(R_1, R_2) | V(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) | \Psi_{kk_1}^{jj'}(R_1, R_2) \rangle = \mathcal{U}_{jj'}^H - \mathcal{U}_{jj'}^E, \quad (5-27)$$

第一项是哈特里散射项  $\mathcal{U}_{jj'}^H = \lim_{q \rightarrow 0} V_q F_{jj'}(q)$ ，第二项是福克项或者称为交换项  $\mathcal{U}_{jj'}^E = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{q}} V_q F_{jj'}(q)$ 。在方程 (5-27) 中已经考虑了在载流子-载流子相互作用的过程中的动量守恒条件<sup>[7]</sup>。当我们考虑载流子间的屏蔽效应时，有效的哈特里 ( $\alpha = H$ ) 和福克 ( $\alpha = F$ ) 相互作用能为：

$$U_{jj'}^\alpha = \epsilon_{jj'}^{-1}(q) \mathcal{U}_{jj'}^\alpha, \quad (5-28)$$

其中  $\epsilon_{jj'}(q) = \lim_{\Omega \rightarrow 0} \epsilon_{jj'}(\Omega, q)$  是静态 ( $\Omega \rightarrow 0$ ) 介电函数矩阵元。因此当考虑载流子间的屏蔽效应时，哈特里自能只是给电子或空穴提供了一个常数形式的能量背景，这与之前的凝胶模型 (jellium model) 和无规相近似的结果一致[124]。在低温下 ( $T \rightarrow 0$ )，当考虑载流子间的屏蔽效应时，由于交换相互作用引起的自能可以表示为[123]：

$$\Xi_{jj'}(k) = - \sum_{k' < k_F^j} \frac{2\pi e^2}{\kappa_j [q + K_{jj'}(q)]} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{q}}. \quad (5-29)$$

其中  $k_F^j$  是电子或者空穴的费米波矢，

$$\begin{cases} k_F^e = \sqrt{2m_e^*(E_F - \epsilon_0^e)}/\hbar \\ k_F^h = \sqrt{2m_h^*(\epsilon_0^h - E_F)}/\hbar \end{cases} \quad (5-30)$$

$E_F$  是体系的费米面， $K_{jj'}(q)$  是无规相近似下屏蔽常数的倒数或者称为屏蔽波矢，一般来说对于不同的载流子-载流子散射过程，有不同的屏蔽长度  $K_{jj'}(q)$ 。

通过方程 (5-29) 和方程 (5-25) 可以得到在无规相近似下屏蔽波矢为:

$$\left\{ \begin{array}{l} K_{ee}(q)/q = \frac{A_0}{(1-A_{hh})F_{ee}(q) - A_{he}F_{eh}(q)} - 1 \\ K_{eh}(q)/q = \frac{A_0}{(1-A_{ee})F_{eh}(q) - A_{eh}F_{ee}(q)} - 1 \\ K_{he}(q)/q = \frac{A_0}{(1-A_{hh})F_{he}(q) - A_{he}F_{hh}(q)} - 1 \\ K_{hh}(q)/q = \frac{A_0}{(1-A_{ee})F_{hh}(q) - A_{eh}F_{he}(q)} - 1, \end{array} \right. \quad (5-31)$$

可见, 不同的载流子-载流子散射过程对应于不同的屏蔽长度,  $A_0$ 和 $A_{ij}$ 已经由方程 (5-25) 给出。

### §5.2.3 格林函数 (Green's function) 和能谱

我们知道格林函数方法是用来处理多体问题的简单有效的方法, 在这里我们应用格林函数方法来求由于载流子之间的交换相互作用导致的能谱的杂化效应。由于载流子-载流子间的屏蔽效应导致的哈特里自能只是给量子阱体系中的载流子提供一个常数的能量背景, 对能带的杂化没有影响, 所以在这里我们忽略哈特里自能的影响, 只考虑由于交换相互作用导致的福克自能对能谱的影响。将由于载流子-载流子间的交换相互作用应用于费因曼图技术, 在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格结构中, 由于存在电子和空穴两种载流子, 所以在这样一个电子、空穴二元体系中, 多体准粒子系统的格林函数可以写为:

$$G_{jj}(E, k) = \frac{1}{B_0 + iB_1\delta} \begin{bmatrix} E_e + i\delta & -\Xi_{eh}(k) \\ -\Xi_{he}(k) & E_h + i\delta \end{bmatrix}, \quad (5-32)$$

其中 $E_j = E - E_k^j - \Xi_{jj}(k)$ ,  $B_0 = E_e(E, k)E_h(E, k) - \Xi_{eh}(k)\Xi_{he}(k)$ ,  $B_1 = E_e(E, k) + E_h(E, k)$ 。由格林函数的实部可以得到准粒子的能谱, 而其虚部可以给出准粒子的寿命, 从格林函数的表达式 (5-33) 可以看出准粒子的寿命为 $\tau_k = 1/\delta = \infty$ , 其能谱可以通过 $B_0(E, k) = 0$ 给出:

$$E_{\pm}(k) = \frac{1}{2} \left[ E_k^e + \Xi_{ee}(k) + E_k^h + \Xi_{hh}(k) \pm \sqrt{[E_k^e + \Xi_{ee}(k) - E_k^h - \Xi_{hh}(k)]^2 + \Delta^2} \right], \quad (5-33)$$

其中 $\Delta = 2\sqrt{\Xi_{eh}(k)\Xi_{he}(k)}$ 是依赖于波矢 $k$ 的两支杂化能谱之间的带隙。方程 (5-33) 的形式与Lakrimi及其合作者[114]给出关于在二类、断带半导体中能带杂化的表达式非常相似。方程 (5-33) 表明, 在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱或超晶格体系中, 当考虑多体相互作用时, 不同层中电子和空穴之间的库仑相互作用将会导致粒子杂化能级间出现带隙。

所以我们的主要任务就是通过方程(5-31)求得无规相近似下的屏蔽长度,代入自能的表达式(5-30)可以求得载流子-载流子散射的不同散射通道(比如电子-电子、空穴-空穴和电子-空穴)导致的自能,从而得到在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中由于载流子之间的交换相互作用导致的杂化能谱。从方程(5-31)可以看出无规相近似下载流子-载流子间的屏蔽效应在长波极限下 $q \rightarrow 0$ 对自能的影响比较大。因此,为了得到一个简单的解析解,我们研究在长波极限下载流子-载流子散射对交换能的影响。当 $q \rightarrow 0$ 时,  $\lim_{q \rightarrow 0} K_{jj'}(q) = K_{jj'}$ , 而且形状因子 $F_{ee}(q) = F_{eh}(q) = F_{he}(q) = F_{hh}(q) \rightarrow 1$ , 这是由于 $q \rightarrow 0$ 时波函数的归一化决定的。

在长波极限下( $q \rightarrow 0$ ), 密度关联函数的实部为:

$$\begin{cases} \text{Re}\Pi_{ee}(q) \rightarrow -m_e^*/\pi\hbar^2 \\ \text{Re}\Pi_{hh}(q) \rightarrow -m_h^*/\pi\hbar^2 \\ \text{Re}\Pi_{eh}(q) = \text{Re}\Pi_{he}(q) \rightarrow \alpha M^*/\pi\hbar^2 \end{cases} \quad (5-34)$$

其中 $\alpha = \ln\left(\frac{2n_e + (n_e - n_h)m_e^*/m_h^*}{n_e + n_h}\right)$ ,  $M^* = m_e^*m_h^*/(m_e^* + m_h^*)$ 。  $n_e$  和  $n_h$  分别是体系中电子和空穴的浓度。在长波极限下多体相互作用导致的屏蔽长度 $K_{jj'}(q) \rightarrow K_{jj'}$ 为:

$$\begin{cases} K_{ee} \simeq K_{he} \rightarrow \frac{2e^2}{\hbar^2\kappa_e} \frac{m_e^*m_h^* - (\alpha M^*)^2}{m_h^* - \alpha M^*} \\ K_{hh} \simeq K_{eh} \rightarrow \frac{2e^2}{\hbar^2\kappa_h} \frac{m_e^*m_h^* - (\alpha M^*)^2}{m_e^* - \alpha M^*} \end{cases} \quad (5-35)$$

所以自能可以写为:

$$\Xi_{jj'}(k) \rightarrow -\frac{e^2}{\pi\kappa_j} \int_0^\pi d\theta \int_0^{\sqrt{2\pi n_j}} \frac{dx}{k_\theta + K_{j'j}}, \quad (5-36)$$

其中 $k_\theta = \sqrt{x^2 - 2xk \cos\theta + k^2}$ ,  $n_j$ 是电子或空穴的浓度。

### §5.3 数值结果和讨论

在本章的工作中,我们研究的体系是基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱(AlSb/InAs/GaSb/AlSb/GaSb)结构,我们选取与实验上[92]相同的样品参数,即InAs层和GaSb层的厚度分别取为 $L_{InAs} = 17\text{nm}$ ,  $L_{GaSb} = 5\text{nm}$ 。在这样一个经典的样品结构中,电子和空穴的浓度以及量子迁移率可以通过磁输运实验测得[92]。运用已知的样品参数,比如电子和空穴的有效质量、量子阱的限制势、材料的介电常数和样品的厚度等,我们通过自恰的解Schrödinger方程和

泊松 (Poisson) 方程可以得到电子和空穴沿着生长方向 ( $z$  方向) 的子带能级和波函数[78]。在计算能量时, 我们将InAs层的导带底作为能量的零参考点。自恰计算得到的数值结果是: 电子的浓度为:  $n_e = 9.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , 空穴的浓度为:  $n_h = 1.4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , 电子的基态能级为:  $\epsilon_0^e = 52.0 \text{ meV}$ , 空穴的基态能级为:  $\epsilon_0^h = 111.1 \text{ meV}$ ,

在这样一个样品结构中, InAs层中电子的最低子带和GaSb层中空穴的最高子带分别被电子和空穴所占据[78, 92], 所以在体系中形成了一个空间上分离的电子-空穴二元体系。在低温下 ( $T \rightarrow 0 \text{ K}$ ), 系统的费米能大约是  $E_F = 110 \text{ meV}$ , 这是靠近InAs层的AlSb势垒层中的本征缺陷中施主束缚能级的平均值。在计算中, 我们选取的样品参数为:  $m_e^* = 0.038m_e$ ,  $m_h^* = 0.33m_e$ ,  $\kappa_e = 15.15$ ,  $\kappa_h = 15.69$ ,  $m_e$  是电子的剩余质量 (裸质量), 为了处理密度关联函数的方便我们只计算在低温下的情况 ( $T \rightarrow 0 \text{ K}$ )。

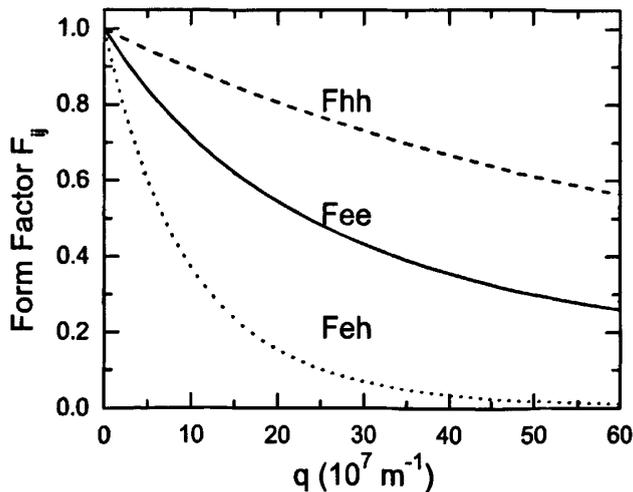


图 5-3 在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中, 载流子间的库仑相互作用中的形状因子  $F_{ij}$  随着波矢变化  $q$  的变化关系,  $F_{ij}$  的表达式见方程 (5-20), 其中量子阱的厚度为:  $L_{\text{InAs}} = 17 \text{ nm}$ ,  $L_{\text{GaSb}} = 5 \text{ nm}$ 。

为了研究载流子之间的库仑相互作用与  $z$  方向的波函数之间的关系, 也为了更清楚的了解形状因子对波矢改变  $q$  的依赖关系, 我们在图 (5-3) 中给出形状因子  $F_{ij}(q)$  与波矢改变  $q$  的关系。从图上可以看出随着波矢  $q$  的增大, 形状因子  $F_{ij}$  迅速的减小, 这是因为形状因子随着波矢  $q$  的增加, 呈现  $e^{-1}$  指

数( $\sim e^{-q|z_1-z_2|}$ 形式的衰减)。而且由于空穴-空穴相互作用引起的形状因子 $F_{hh}$ 要比由于电子-电子相互作用的形状因子 $F_{ee}$ 衰减的要慢,这是因为空穴沿着 $z$ 方向的波函数更局域,相互作用更强。而电子-空穴相互作用的形状因子 $F_{eh}$ 衰减的更快,这是因为电子和空穴分别处在InAs层和GaSb层中,它们的距离更大,所以相互作用更弱。但它们都有一个共同点,那就是在 $q \rightarrow 0$ 时,  $F_{ij} \rightarrow 1$ 。这是由沿着 $z$ 方向的波函数的归一化条件决定的,所以在长波极限下取 $F_{ij} \rightarrow 1$ 是一个好的近似。

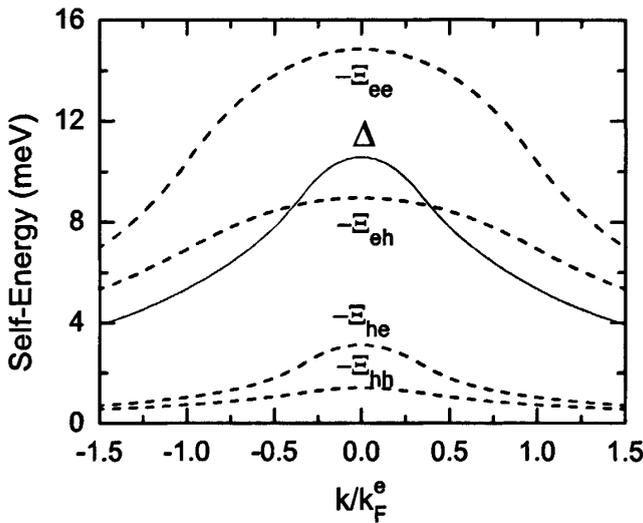


图 5-4 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中,不同载流子-载流子之间的相互作用对载流子波矢 $k$ 的依赖关系,量子阱的厚度为: $L_{InAs} = 17nm$ ,  $L_{GaSb} = 5nm$ 。 $\Xi_{jj'}$ 是电子或空穴从 $j$ 层散射到 $j'$ 层所导致的自能,  $\Delta = 2\sqrt{\Xi_{eh}\Xi_{he}}$ 是微带隙,  $k_F^e$ 是电子的费米波矢,需要注意的是 $\Xi_{jj'} < 0$ 。

在图(5-4)中我们给出在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中,由于不同载流子-载流子相互作用导致的交换自能随着波矢 $k$ 的变化关系,从图上可以看出自能的绝对值 $|\Xi_{jj'}(k)|$ 随着波矢 $k$ 的增加而减小,在 $k = 0$ 时,取得最大值。而由交换相互作用导致的能隙 $\Delta$ 与波矢 $k$ 的依赖关系与在哈密顿量中直接加上隧穿相互作用得到的结果很不一样,他们的结果是能隙随着波矢 $k$ 的增加而线性增加能隙 $\Delta = \omega k$ ,在 $k = 0$ 时,能隙 $\Delta = 0$ 。而从我们的结果可以看到,当波矢 $k = 0$ 时,能隙 $\Delta$ 取得最大值。因此由于交换相互作用导致的能隙与 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 的理论计算和实验测量的结果一致[96, 114]。在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中,当量子阱中InAs层和GaSb层的厚度分别取为 $L_{InAs} = 17$

nm,  $L_{\text{GaSb}} = 5 \text{ nm}$ 时, 系统的费米能级非常靠近重空穴的子带 $e_0^h$ , 理论上得到的结果是:  $\epsilon_0^h - E_F \sim 1 \text{ meV}$ [78], 而实验上也测得空穴的浓度非常低[92], 因此电子的费米波矢 $k_F^e$ 比空穴的费米波矢 $k_F^h$ 大得多。而且电子的有效质量要比空穴的有效质量小得多, 所以电子-电子间的屏蔽效应要比空穴-空穴间的屏蔽效应强得多, 所以从图(5-4)中可以看到电子-电子相互作用引起的自能最大, 即:  $|\Sigma_{ee}| > |\Sigma_{eh}| > |\Sigma_{he}| > |\Sigma_{hh}|$ 。

在图(5-5)中的实线给出了当考虑多体效应时, 由于交换相互作用导致的电子和空穴的杂化能带, 虚线给出的是在不考虑多体效应时电子和空穴的单粒子能谱。从图上可以看到, 由于交换相互作用, 使得电子和空穴的能谱发生了杂化, 产生了两支杂化的能带 $E_+(\mathbf{k})$ 和 $E_-(\mathbf{k})$ , 由于 $\mathbf{k} \sim 0$ 时,  $\partial^2 E_-(\mathbf{k})/\partial \mathbf{k} > 0$ , 所以称 $E_-(\mathbf{k})$ 支为电子型的, 而 $E_+(\mathbf{k})$ 支为空穴型的。从两支杂化能谱上可以看出: 交换相互作用的存在, 使得体系的能量降低了, 而且电子型的能谱能量降低得更厉害, 这主要是由于电子-电子间的屏蔽效应要比空穴-空穴间的屏蔽效应强得多。从我们的理论结果来看, 在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中, 由于载流子间相互作用的影响能带的杂化效应特别明显, 这种杂化能带的出现完全是多体相互作用的结果。因此我们提出的这种能带杂化产生的机制与建立在单粒子模型基础上的方法比如 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [96]方法完全不同, 也与隧穿相互作用的结果不同[116]。在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中, 由于存在库仑势导致的交换相互作用, 对于多体准粒子体系, 在原来电子和空穴的单粒子能谱的交点处出现一个微带隙。对于一个经典的基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱体系即InAs层和GaSb层的厚度分别取为 $L_{\text{InAs}} = 17 \text{ nm}$ ,  $L_{\text{GaSb}} = 5 \text{ nm}$ , 在单粒子能谱的交点处, 由于交换相互作用导致的微带隙大约为 $6 \text{ meV}$ 或者 $1.5 \text{ THz}$ , 这个数值与实验测量以及单粒子近似下的 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理论计算的结果一致, 但在这里我们要强调的是, 微带隙的出现是建立在多体相互作用基础上的, 是由载流子间的交换相互作用引起的。

在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱体系中, 由于在不同的阱层中电子和空穴的子带都分别被电子和空穴所占据, 载流子间可以通过库仑势有如下形式的散射相互作用: 电子-电子散射、电子-空穴散射、空穴-电子散射和空穴-空穴散射。由于在量子阱体系中, 电子和空穴波函数在 $z$ 方向的交叠使得在不同的层中会出现电子-空穴和空穴-电子之间的散射[78], 即电子和空穴都有一定的几率在两层间发生跃迁。两层间电子和空穴的这种相互作用表明InAs层的导带和GaSb层的价带之间存在着耦合。从 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理论方法我们知道, 只要导带和价带间存在耦合就会在体系中产生杂化能带[96]。所以在这个体系中由于载流子之

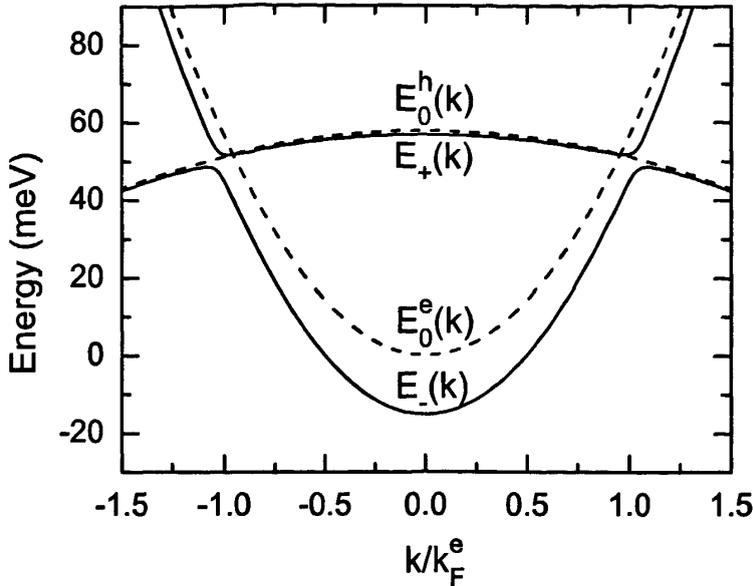


图 5-5 基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中量子阱的厚度为： $L_{InAs} = 17nm$ ， $L_{GaSb} = 5nm$ 时的能量色散关系。 $E_0^e(k)$ 和 $E_0^h(k)$ （虚线所示）分别是不考虑载流子之间的相互作用时电子和空穴的能谱。图中实线所示的 $E_0^\pm(k)$ 是在考虑载流子之间的库仑相互作用时准粒子的色散关系， $k_F^e$ 是电子的费米波矢。

间的交换相互作用导致的电子带和空穴带的杂化与 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理论方法得到的结论是一致的。由交换相互作用导致的杂化能带之间的带隙依赖于电子—空穴相互作用和空穴—电子相互作用。也就是说正是由于电子—空穴和空穴—电子散射机制的存在，才使得体系中的能谱会出现杂化从而出现带隙，这完全是多体相互作用的结果，为杂化能谱中带隙的出现提供了一种新的机制。

#### §5.4 本章小结

在本章的工作中，我们发展了一套简单的理论方法，从多体相互作用的角度研究了在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中由于交换相互作用所导致的电子能带和空穴能带的杂化效应。我们知道在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中有电子和空穴两种载流子，我们的理论研究发现，在体系中电子—空穴和空穴—电子相互作用的存在加强了体系中多体相互作用的强度，导致在体系中出现了电子和空穴能带的杂化。多体准粒子的杂化能级在单粒子能谱的交点处出现了微带隙，这主要是由于两层间电子—空穴相互作用和空穴—电子相互作用引起的，因此微带隙依赖于电子—空穴和空穴—电子间的交换相互作用引起的自能。在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中我们通过研究交

换相互作用对能带杂化的影响发现，由于交换相互作用导致的导带和价带的杂化效应与单粒子近似下的 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 理论方法所得到的结果一致。对于一个经典的样品结构，即InAs层和GaSb层的厚度分别取为 $L_{InAs} = 17\text{ nm}$ ， $L_{GaSb} = 5\text{ nm}$ [92]，我们发现在准粒子能谱的交点处，由于交换相互作用导致的微带隙大约是6 meV或者1.5 THz，与实验测量和 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 理论方法所得到的结果一致[114]。在此我们要强调的是：由于体系中粒子波函数的交换反对称性，载流子（电子-电子、空穴-空穴、电子-空穴和空穴-电子）间通过库仑相互作用中不仅有直接相互作用（哈特里势）还存在交换相互作用（福克势）。哈特里势只为载流子提供一个常数型的能量背景，对能带的杂化没有影响。我们发现多体相互作用下的交换势可以引起体系中导带和价带的能带杂化，并且由于电子-空穴和空穴-电子散射势的存在，使得在能谱的交点处出现一个微带隙。总之，载流子之间的交换相互作用是基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱体系中能带出现杂化的另一种机制。

在此，我们需要指出的是， $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 能带计算方法完全是一种数值方法，杂化能谱和微带隙只能通过数值计算得到。相对而言，在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱体系中，由交换相互作用引起的能带杂化现象以及微带隙可以有简单的解析表达式，并且可以清晰的看到各种散射对能带杂化以及微带隙的贡献。通过我们的理论计算，我们可以对InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱体系的能带特征有更加深入的了解，在此基础上可以对体系的物理性质进行深入细致的研究，比如输运性质和光电性质等等。

## 第六章 论文结论和展望

### §6.1 论文总结

半导体低维体系的研究和应用,在当代物理学和高新技术发展中占有突出的地位。而半导体器件制造工艺的发展(如分子束外延(molecular-beam epitaxy, MBE)方法或有机金属化学气相沉积技术(metal-organic chemical vapor deposition, MOCVD)),使得从理论和实验上研究低维体系的特征成为现实。其中半导体量子阱和超晶格的研究在其中占据了重要的地位,在此基础上,包括光电二极管、探测器、激光器、高速场效应管等器件源源不断地被制备成功。而基于InAs/GaSb二类、断带半导体量子阱结构(如AlSb/InAs/GaSb/AlSb量子阱结构)由于其独特的能带结构而备受关注。由于在这种量子阱结构中, GaSb的价带顶比InAs的导带底还要高,所以体系中会形成一个电子和空穴在空间上分离的二粒子体系。由于电子和空穴同时存在,所以势必导致这种材料有与众不同的物理性质。本论文主要研究了AlSb/InAs/GaSb/AlSb以及AlSb/InAs/GaSb/AlSb/GaSb量子阱中的电以及光电性质,主要包括以下三个方面的内容:

(一)、基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中,由于带间跃迁所引起的光电导特性。为了探讨AlSb/InAs/GaSb/AlSb量子阱体系在光电器件方面的应用,比如做光电导器件或者光电开关等。我们研究了在量子阱中加上一个沿着生长方向线型极化的光场时,由于电子和空穴吸收光子在量子阱的两层之间发生跃迁所引起的光电导特性。光电导的峰值落在亚太赫兹光频区,而且随温度的升高,光电导的峰值向低频方向移动(红移)。所以我们的理论结果表明, AlSb/InAs/GaSb/AlSb量子阱体系可以用来做亚太赫兹光电导器件,而且在低温下工作性能良好。

(二)、基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中的中远红外双色光吸收。光与物质的相互作用主要有自发辐射、受激辐射和受激吸收三种形式。光吸收是研究半导体量子阱的性质,特别是表征量子阱的能带结构的最方便、有效的手段之一,而且大多数光电器件都是利用载流子和光子的相互作用来工作的。所以研究器件的光吸收性质对器件的开发和利用具有重要意义。在AlSb/InAs/GaSb/AlSb量子阱中,由于价带和导带有交叠,所以当最低的电子子带和最高的空穴子带分别被电子和空穴占据时,在体系中电子和空穴由于吸收

光子而发生的带间跃迁和子带间跃迁的通道一共有七个。在此我们研究了由各个跃迁通道对吸收系数的贡献。我们的理论研究发现，由电子和空穴的子带间跃迁导致吸收系数出现两个吸收峰，而由于电子和空穴沿着生长方向的波函数的耦合比较小，带间跃迁对吸收系数的贡献比较小。而且吸收系数随温度的变化不明显。理论结果表明这种材料可以用来做双色光电器件。目前双色光电器件已经在第三代光探测器和第三代传感器的方面得到应用。

(三)、在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中，由于交换相互作用引起的能带杂化现象的理论研究。在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱(AlSb/InAs/GaSb/AlSb/GaSb)中有电子和空穴两种载流子分别处在InAs层和GaSb层中，可以预见，由于载流子之间的相互作用，在InAs层和GaSb层的交界处必定存在电子和空穴的杂化现象。本论文中，我们从多体相互作用的角度讨论了在基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱中由于电子和空穴之间的库仑相互作用引起的微带隙，其大小为THz量级(6meV)。我们指出，多体效应是体系中能带杂化的另一个重要原因，这与之前的单粒子表象下的 $k \cdot p$ 等方法不同。

## §6.2 展望

由于基于InAs/GaSb的二类、断带半导体量子阱和超晶格结构特殊的能带结构，所以引起了人们极大的研究兴趣，对其性质进行了深入而广泛的研究，其能带结构、光电性质以及与自旋相关的性质等都得到了人们的极大关注，人们希望这种具有特殊能带结构的材料可以在新型器件的应用方面能有所突破。鉴于其在光电器件方面的广泛应用，其光电性质成为人们研究的热点，并依此为基础制备了包括光电二极管、探测器、激光器等多种光电器件。然而，目前在该体系中的自旋相关的性质也已经引起了人们的极大关注，并且研制了自旋过滤器和自旋晶体管，以及在强磁场下的光吸收性质等都是科研工作者探讨的方向。另外，最近实验上用Shubnikov-de Hass (SdH)振荡和霍尔实验测得了电子和空穴的迁移率随着GaSb层厚度的变化，而且发现在 $L_{GaSb} = 100\text{nm}$ 处空穴的迁移率发生了反常现象，而其物理原因还有待探讨。在本论文中，我们都是电子和空穴电荷守恒的条件下讨论体系中的多体效应的，然而，电荷不守恒的相互作用过程比如碰撞离化(impact ionization)和俄歇复合(Auger recombination)过程也应该考虑在内。然而，这会带来判断形如 $V_{eeh}(q)$ 的库仑相互作用的符号的问题。另外，从器件应用的角度讲，超晶格结构的应用更广泛，所以对于基于InAs/GaSb的二类、断带半导体超晶格光电性质的理论研究也具有重要的价值。

## 攻读博士学位期间已发表和待发表论文目录

- [1] X.F. Wei, W Xu and Z Zeng, *Sub-terahertz photoconduction induced by interlayer transition in an InAs/GaSb-based type II and broken-gap quantum well system*, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 026216 (2007).
- [2] X.F. Wei, W Xu and Z Zeng, *Two-color mid-infrared absorption in an InAs/GaSb based type II and broken-gap quantum well*, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 506209 (2007).
- [3] X.F. Wei, W. Xu , Z. Zeng, and C. Zhang, *Photocurrent Induced by Intersubband Transition in Type II And Broken-Gap Quantum Well Systems*, Phys.Stat. Sol.(c)**4**, 544 (2007).
- [4] X.F. Wei, W. Xu , Z. Zeng, and C. Zhang, *Two-color mid-infrared absorption in an InAs/GaSb based type II and broken-gap quantum well*, Physica E.,**40**,1069-1071(2008).
- [5] W. Xu and X.F. Wei and J. Zhang, *Exchange-induced terahertz minigap in InAs/GaSb type II and broken-gap quantum wells*, Appl. Phys. Lett.,**92**,162108 (2008).
- [6] Huai-Bao Tang, Dong-Meng Chen, Xiang-Fei Wei, and Liang-Jian Zou, *Phase transition and critical properties of spin-orbital interacting systems* Phys. Lett. A ,**372**, 316 (2008).

## 参考文献

- [1] L. Esaki and R. Tsu, *Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors* IBM Journal of Research and Development.1970,(vol.14),no.1,pp.61-65.
- [2] W.Smith, *Effect of Light on Selenium during the passage of an Electric Current* Nature.1873(20):303
- [3] R. N. Hall, G. E. Fenner, J. D. Kingsley, T. J. Soltys, and R. O. Carlson, *Coherent Light Emission From GaAs Junctions* Phys. Rev. Lett.,1962(9):366.
- [4] Nick Holonyak, Jr. and S. F. Bevacqua, *COHERENT (VISIBLE) LIGHT EMISSION FROM Ga(As<sub>1-x</sub>P<sub>x</sub>) JUNCTIONS* Appl. Phys. Lett.,1962(1):82.
- [5] Nick Holonyak, *Semiconductor alloy lasers—1962* IEEE J. Quant. Electron. QE.,1987(23):684.
- [6] 杨翠红,自旋电子系统光电特性的理论研究 中国科学院研究生院博士学位论文,2007.
- [7] Tsuneya Ando, Alan B.Fouler and Frank Stern, *Electron properties of two-dimensional systems*, Rev.Mod.Phys.,1982(54),2437.
- [8] Igor Zutic, Jaroslav Fabian, and S.Das Sarma, *Spintronics: Fundamentals and applications*, Rev.Mod.Phys.,2004(76),323.
- [9] E. H. Hall, *On a New Action of the Magnet on Electric Currents* American Journal of Mathematics.,1879(2),No.3,pp.287-292.
- [10] K. v. Klitzing,G. Dorda, and M. Pepper, *New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance* Phys. Rev. Lett.,1980(45):494-497.
- [11] D.C. Tsui,H.L. Stormer, and A. C. Gossard, *Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit* Phys. Rev. Lett.,1982(48):1559-1562.
- [12] R. B. Laughlin, *Anomalous Quantum Hall Effect: An Incompressible Quantum Fluid with Fractionally Charged Excitations*, Phys. Rev. Lett.,1983(50):1395-1398.
- [13] Th. Schddcotapers,J. Knobbe,A. van der Hart, H.Hardtdegen, *Rashba effect in strained InGaAs/InP quantum wire structures*, Science and Technology of Advanced Materials,2003(4),19-25.

- [14] Bardeen. J, *An Improved Calculation of the Energies of Metallic Li and Na*, J.Chem. Phys.,1938(6):367.
- [15] Seitz. F, *The Modern Theory of Solids*, New York:McGraw-Hill.,1940,p.352.
- [16] Kane.E.O, *The  $k \cdot p$  Method. In: Semiconductors and Semimetals, Vol.I,p.75*,ed. by Willardson.R.K and Beer.A.C,New York:Academic Press,1996.
- [17] Shockley.W, *Energy Band Structures in Semiconductors*, Phys.Rev.,1950(78):173.
- [18] G. Dresselhaus, A. F. Kip, and C. Kittel, *Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals*, Phys.Rev.,1955(98):368-384.
- [19] Evan O. Kane, *Band structure of indium antimonide*, J. Phys. Chem. Solids.,1957(1).249.
- [20] G. Bastard, *Superlattice band structure in the envelope-function approximation* Phys. Rev. B.1981 (24):5693.
- [21] G. Bastard, *Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope-function approximation*, Phys. Rev. B.1982 (25):7584.
- [22] R. Dingle, W. Wiegmann, and C. H. Henry, *Quantum States of Confined Carriers in Very Thin  $Al_xGa_{1-x}As-GaAs-Al_xGa_{1-x}As$  Heterostructures*, Phys. Rev. Lett.1974(33):827-830.
- [23] 康昌鹤,杨树人, 半导体超晶格材料及其应用 国防工业出版社,(1992).
- [24] A. Zakharova,S. T. Yen, and K. A. Chao, *Strain-induced semimetal-semiconductor transition in InAs/GaSb broken-gap quantum wells*, Phys. Rev. B.,2002(66):085312.
- [25] G. A. Sai-Halasz, L. Esaki, and W. A. Harrison, *InAs-GaSb superlattice energy structure and its semiconductor-semimetal transition* Phys. Rev. B.1978(18):2812.
- [26] Klaus Ploog and G. Dohler, *Compositional and doping superlattices in III-V semiconductors*, Advances in Physics,1983(32),pp.285-359.
- [27] G. H. Dohler, *Light Generation, Modulation, and Amplification by n-i-p-i doping superlattices*, Optical Engineering, vol.1986 (Vol25),No.2,pp. 211-218.
- [28] ALTARELLI. M, *ELECTRONIC-STRUCTURE OF SEMICONDUCTOR SUPER-LATTICES*, PHYSICA B and C.,1983(117):747-749.

- [29] MUNEKATA, H; ESAKI, L; CHANG, LL, *CARRIER DENSITIES IN INAS-GA(AL)SB(AS) QUANTUM-WELLS*, PHYSICA B and C.,1983(117):747-749. JOURNAL OF VACUUM SCIENCE and TECHNOLOGY B., 1987(Volume: 5,Issue: 3),Pages: 809-810.
- [31] A.Tahraoui,P.Tomasini,L.Lassabatere,J.Bonnet. *Growth and optimization of InAs/GaSb and GaSb/InAs interfaces*, Applied Surface Science, 2000(162-163):425-429.
- [31] A.Tahraoui,P.Tomasini,L.Lassabatère,J.Bonnet, *Growth and optimization of InAs/GaSb and GaSb/InAs interfaces*, Applied Surface Science,2000 (162-163),425-429.
- [32] N. Bertru, M. Nouaoura, J. Bonnet, L. Lassabatere ,E. Bedel, and M. Mamy, *Preparation of GaSb(100) surfaces by ultraviolet irradiation*, J.Vac.Sci.Technol., 1997 (A 15),2043.
- [33] X. B. Zhang, J. H. Ryou, R. D. Dupuis, A. Petschke, S. Mou, S. L. Chuang, C. Xu, and K. C. Hsieh, *Metalorganic chemical vapor deposition growth of high-quality InAs/GaSb type II superlattices on (001) GaAs substrates*, Appl. Phys. Lett.,2006(88):072104.
- [34] James Werking, Jeff Schramm, Chanh Nguyen, Evelyn L. Hu, and Herbert Kroemer, *Methane/hydrogen-based reactive ion etching of InAs, InP, GaAs, and GaSb*, Appl. Phys. Lett.,1991(58):2003.
- [35] B. V. Shanabrook, J. R. Waterman, J. L. Davis, and R. J. Wagner, *Large temperature changes induced by molecular beam epitaxial growth on radiatively heated substrates*, Appl. Phys. Lett.,1992(61):2338.
- [36] Brian R. Bennett, B. V. Shanabrook, R. J. Wagner, John L. Davis, and J. R. Waterman, *Control of interface stoichiometry in InAs/GaSb superlattices grown by molecular beam epitaxy* Appl. Phys. Lett.,1993(63):949.
- [37] K.Suzuki, K. Kanisawa, C. Janer,S. Perraud, K. Takashina, T. Fujisawa, and Y. Hirayama, *Spatial Imaging of Two-Dimensional Electronic States in Semiconductor Quantum Wells*, Phys.Rev. Lett.,2007(98):136802.
- [38] X.F. Wei, W. Xu and Z. Zeng, *Two-color mid-infrared absorption in an InAs/-GaSb based type II and broken-gap quantum well*, J. Phys.: Condens. Matter.,2007 (19), 506209.

- [39] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, *Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys*, J. Appl. Phys., 2001 (89), 5815-5875.
- [40] K. Ohtani, H. Sakuma, and H. Ohno, *Emission wavelength control by potential notch in type-II InAs/GaSb/AlSb intersubband light-emitting structures*, Appl. Phys. Lett., 2001(78):4148.
- [41] E. J. Koerperick, J. T. Olesberg, T. F. Boggess, J. L. Hicks, L. S. Wassink, L. M. Murray, and J. P. Prineas *InAs/GaSb cascaded active region superlattice light emitting diodes for operation at 3.8 $\mu$ m*, Appl. Phys. Lett., 2008(92):121106.
- [42] L. J. Olafsen, I. Vurgaftman, W. W. Bewley, C. L. Felix, E. H. Aifer, J. R. Meyer, J. R. Waterman, and W. Mason, *Negative luminescence from type-II InAs/GaSb superlattice photodiodes*, Appl. Phys. Lett., 1999(74):2681.
- [43] A. Gin, Y. Wei, A. Hood, A. Bajowala, V. Yazdanpanah, M. Razeghi, and M. Tidrow, *Ammonium sulfide passivation of Type-II InAs/GaSb superlattice photodiodes*, Appl. Phys. Lett., 2004(84):2037.
- [44] Jian V. Li, Shun Lien Chuang, Eric M. Jackson, and Edward Aifer, *Minority carrier diffusion length and lifetime for electrons in a type-II InAs/GaSb superlattice photodiode*, Appl. Phys. Lett., 2004(85):1984.
- [45] Yajun Wei, Andrew Hood, Haiping Yau, Aaron Gin, Manijeh Razeghi, Meimei Z. Tidrow, and Vaidya Nathan, *Uncooled operation of type-II InAs/GaSb superlattice photodiodes in the midwavelength infrared range*, Appl. Phys. Lett., 2005(86):233106.
- [46] Shubhrangshu Mallick, Koushik Banerjee, Siddhartha Ghosh, Elena Plis, Jean Baptiste Rodriguez, Sanjay Krishna, and Christoph Grein, *Ultralow noise midwave infrared InAs - GaSb strain layer superlattice avalanche photodiode*, Appl. Phys. Lett., 2007(91):241111.
- [47] Mallick, S.; Banerjee, K.; Ghosh, S.; Rodriguez, J.B.; Krishna, S. *Mid-wavelength Infrared Avalanche Photodiode Using InAs - GaSb Strain Layer Superlattice*, Photonics Technology Letters, IEEE. 2007(19):1843.
- [48] Andrew Hood, Manijeh Razeghi, Edward H. Aifer, and Gail J. Brown, *On the performance and surface passivation of type II InAs/GaSb superlattice photodiodes for the very-long-wavelength infrared*, Appl. Phys. Lett., 2005(87):151113.

- [49] Darin Hoffman, Andrew Hood, Yajun Wei, Aaron Gin, Frank Fuchs, and Manijeh Razeghi, *Negative luminescence of long-wavelength InAs/GaSb superlattice photodiodes*, Appl. Phys. Lett.,2005(87):201103.
- [50] Andrew Hood, Darin Hoffman, Binh-Minh Nguyen, Pierre-Yves Delaunay, Erick Michel, and Manijeh Razeghi, *High differential resistance type-II InAs/GaSb superlattice photodiodes for the long-wavelength infrared*, Appl. Phys. Lett.,2006(89):093506.
- [51] Binh-Minh Nguyen, Darin Hoffman, Yajun Wei, Pierre-Yves Delaunay, Andrew Hood, and Manijeh Razeghi, *Very high quantum efficiency in type-II InAs/GaSb superlattice photodiode with cutoff of 12  $\mu\text{m}$* , Appl. Phys. Lett.,2007(90):231108.
- [52] Binh-Minh Nguyen, Darin Hoffman, Pierre-Yves Delaunay, and Manijeh Razeghi, *Dark current suppression in type II InAs/GaSb superlattice long wavelength infrared photodiodes with M-structure barrier*, Appl. Phys. Lett.,2007(91):163511.
- [53] Pierre-Yves Delaunay, Binh-Minh Nguyen, Darin Hoffman, Andrew Hood, Edward Kwei-Wei Huang, Manijeh Razeghi, and Meimei Z. Tidrow, *High quantum efficiency two color type-II InAs/GaSb n-i-p-i-n photodiodes*, Appl. Phys. Lett.,2008(92):111112.
- [54] P.Norton, *Third-generation sensors for night vision*, Opto-Electronics Review.,2006(14)(1),1-10.
- [55] P.Norton, J.Campbell III, S.Horn, and D.Reago, *Third-generation infrared imagers*, Proc. SPIE.,2000(4130),226-236.
- [56] S.Horn, P.Norton, T.Cincotta, A.J. Stoltz, Jr., J.D.Benson, P.Perconti, and J.Campbell III, *Challenges for third-generation cooled imagers*, Proc. SPIE.,2003(5074),44-51.
- [57] Zhu, Z.M.; Bhattacharya, P.; Plis, E.; Su, X.H.; Krishna, S. *Low dark current InAs/GaSb type-II superlattice infrared photodetectors with resonant tunnelling filters*, Journal of Physics D: Applied Physics.2006(39):4997.
- [58] SMITH, DL; and MAILHIOT, C, *PROPOSAL FOR STRAINED TYPE-II SUPERLATTICE INFRARED DETECTORS*, JOURNAL OF APPLIED PHYSICS.,1987(62): 2545-2548.

- [59] H. Mohseni, A. Tahraoui, J. Wojkowski, M. Razeghi, G. J. Brown, W. C. Mitchel, and Y. S. Park, *Very long wavelength infrared type-II detectors operating at 80 K*, Appl. Phys. Lett.,2000(77):1572.
- [60] Y. Wei, A. Gin, M. Razeghi, and G. J. Brown, *Advanced InAs/GaSb superlattice photovoltaic detectors for very long wavelength infrared applications*, Appl. Phys. Lett.,2002(80):3262.
- [61] H. J. Haugan, F. Szmulowicz, K. Mahalingam, G. J. Brown, S. R. Munshi, and B. Ullrich, *Short-period InAs/GaSb type-II superlattices for mid-infrared detectors*, Appl. Phys. Lett.,2005(87):261106.
- [62] Shin Mou, Adam Petschke, Qi Lou, Shun Lien Chuang, Jian V. Li, and Cory J. Hill, *Midinfrared InAs/GaSb type-II superlattice interband tunneling photodetectors*, Appl. Phys. Lett.,2008(92):153505.
- [63] A. N. Baranov, N. Bertru, Y. Cuminal, G. Boissier, C. Alibert, and A. Joullié, *Observation of room-temperature laser emission from type III InAs/GaSb multiple quantum well structures*, Appl. Phys. Lett.,1997(71):735.
- [64] K. C. Hall, Wayne H. Lau, K. Gündodu, Michael E. Flatté, and Thomas F. Boggess, *Nonmagnetic semiconductor spin transistor*, Appl. Phys. Lett.,2003(83):2937.
- [65] G. A. Sai-Halasz, L. Esaki, and W. A. Harrison. *InAs-GaSb superlattice energy structure and its semiconductor-semimetal transition*, Phys. Rev. B.1978(18):2812.
- [66] J. R. Söderström, D. H. Chow, and T. C. McGill. *New negative differential resistance device based on resonant interband tunneling*, Appl. Phys. Lett.1989 (55):1094.
- [67] L. F. Luo, R. Beresford, and W. I. Wang. *Interband tunneling in polytype GaSb/AlSb/InAs heterostructures*, Appl. Phys. Lett.1989(55):2023.
- [68] D. Z.Y. Ting, D. A. Collins, E. T. Yu, D. H. Chow, and T. C. McGill. *Large peak current densities in novel resonant interband tunneling heterostructures*, Appl. Phys. Lett.1990(57):1257.
- [69] M. P. Houn, Y. H. Wang, and C. L. Shen, J. F. Chen and A. Y. Cho. *Improvement of peak-to-valley ratio by the incorporation of the InAs layer into the GaSb/AlSb/GaSb/AlSb/InAs double barrier resonant interband tunneling structure*, Appl. Phys. Lett.1992(60):713.

- [70] M. Altarelli, U. Ekenberg and A. Fasolino, *Calculations of hole subbands in semiconductor quantum wells and superlattices* Phys. Rev. B, 1985(32): 5138.
- [71] A. Zakharova, S. T. Yen and K. A. Chao, *Strain-induced semimetal-semiconductor transition in InAs/GaSb broken-gap quantum wells*, Phys. Rev. B, 2002(66): 085312.
- [98] A. Zakharova, S.T. Yen and K.A. Chao *Hybridization of electron, light-hole, and heavy-hole states in InAs/GaSb quantum wells* Phys. Rev. B, 2001(64): 235332.
- [73] Rita Magri, L. W. Wang, Alex Zunger, I. Vurgaftman and J. R. Meyer, *Anticrossing semiconducting band gap in nominally semimetallic InAs/GaSb superlattices*, Phys. Rev. B, 2000(61): 10235.
- [74] E. Halvorsen, Y. Galperin and K. A. Chao, *Optical transitions in broken gap heterostructures*, Phys. Rev. B, 2000(61): 16743.
- [75] X.L. Lei, and S.Y. Liu, *Nonlinear free-carrier absorption of intense THz radiation in semiconductors*, J. Phys.: Condens. Matter., 2000(12):4655-4664.
- [76] X.L. Lei and C.S. Ting, *Green's-function approach to nonlinear electronic transport for an electron-impurity-phonon system in a strong electric field*, Phys. Rev. B., 1985 (32):1112.
- [77] F. Stern and S. Das Sarma, *Electron energy levels in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As heterojunctions*, Phys. Rev. B., 1984(30):840-848.
- [78] W. Xu, P.A. Folkes and Godfrey Gumbs, *Self-consistent electronic subband structure of undoped InAs/GaSb-based type II and broken-gap quantum well systems* J. Appl. Phys. 2007(102):033703.
- [79] G. A. M. Hurkx and W. van Haeringen, *Self-consistent calculations on GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions*, J. Phys. C: Solid State Phys., 1985(18):5617-5627.
- [80] W. Kohn and L. J. Sham, *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*, Phys. Rev., 1965(140):A1133-A1138.
- [81] W. E. Spicer, I. Lindau, P. Skeath, C. Y. Su, and Patrick Chye, *Unified Mechanism for Schottky-Barrier Formation and III-V Oxide Interface States* Phys. Rev. Lett., 1980(44): 420.
- [82] 黄昆, 韩汝琦, 固体物理学, 高等教育出版社, 1985.

- [83] 李汐, 低维半导体体系导纳谱的研究, 复旦大学博士学位论文, 2007
- [84] 曾谨言, 量子力学, 北京大学出版社 (第二版), 1997.
- [85] H. Munekata, L. Esaki, and L. L. Chang, *Carrier densities in InAs - Ga(Al)Sb(As) quantum wells* H. Munekata, L. Esaki, and L. L. Chang *Journal of Vacuum Science and Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures.*,1987,Volume 5, Issue 3, pp. 809-810.
- [86] H. Mohseni, M. Razeghi, G. J. Brown, and Y. S. Park, *High-performance InAs/GaSb superlattice photodiodes for the very long wavelength infrared range* H. Munekata, L. Esaki, and L. L. Chang *Appl. Phys. Lett.*,2001(78):2107.
- [87] A.S. Chaves and H. Chacham, *Negative photoconductivity in semiconductor heterostructures* *Appl. Phys. Lett.*,1995(66):727.
- [88] Yu.G. Sadofyev, A. Ramamoorthy, J.P. Bird, S.R. Johnson and Y.-H. Zhang, *Large negative persistent photoconductivity in InAs/AlSb quantum wells* *Appl. Phys. Lett.*,2005(86):192109.
- [89] Wayne H. Lau and Michael E. Flatté, *Effect of interface structure on the optical properties of InAs/GaSb laser active regions* *Appl. Phys. Lett.*,2002(80):1683.
- [90] Yajun Wei, Aaron Gin, Manijeh Razeghi, and Gail J. Brown, *Type II InAs/GaSb superlattice photovoltaic detectors with cutoff wavelength approaching 32  $\mu\text{m}$*  *Appl. Phys. Lett.*,2002(81):3675.
- [91] 郭硕鸿, 电动力学, 高等教育出版社 (第二版), 1995.
- [92] P. A. Folk, Godfrey Gumbs, Wen Xu, and M. Taysing-Lara, *Measurement of the GaSb surface band bending potential from the magnetotransport characteristics of GaSb - InAs - AlSb quantum wells*, *Appl.Phys.Lett.*,2006(89):202113.
- [93] Basu. P. K, *Theory of Optical Processes in Semiconductors: Bulk and Microstructures*, Oxford University Press Inc., 1997,(Oxford: Clarendon)
- [94] see e.g. Bastad G, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, (Paris: Monographies de Physique) p237.
- [95] B. Van Zeghbroeck, *Principles of Semiconductor Devices* [http : //ece - www.colorado.edu/ bart/book/book/chapter4/ch4\\_6.htm](http://ece-www.colorado.edu/bart/book/book/chapter4/ch4_6.htm)
- [96] Zakharova. A, Yen. S.T and Chao.K.A, *Strain-induced semimetal-semiconductor transition in InAs/GaSb broken-gap quantum wells* *Physical Review B*.2002(66):085312.

- [97] I.Lapushkin, A.Zakharova, S.T. Yen, and K.A. Chao. *A self-consistent investigation of the semimetal - semiconductor transition in InAs/GaSb quantum wells under external electric fields* Journal of Physics Condensed Matter 2004(16):4677.
- [98] A. Zakharova, S. T. Yen, and K. A. Chao. *Hybridization of electron, light-hole, and heavy-hole states in InAs/GaSb quantum wells* Physical Review B 2001 (64):235332.
- [99] M. Lakrimi, S. Khym, R. J. Nicholas, D. M. Symons, F. M. Peeters, N. J. Mason, and P. J. Walker, *Minigaps and Novel Giant Negative Magnetoresistance in InAs/GaSb Semimetallic Superlattices* Physical Review Lett.,1997(79):3034.
- [100] M. J. Yang, C. H. Yang, B. R. Bennett, and B. V. Shanabrook, *Evidence of a Hybridization Gap in 'Semimetallic' InAs/GaSb Systems*, Physical Review Lett.,2002(78):4613.
- [101] F. B. Mancoff, L. J. Zielinski, C. M. Marcus, K. Campman and A. C. Gossard, *Shubnikov - de Haas oscillations in a two-dimensional electron gas in a spatially random magnetic field*, Physical Review B.,1996(53):7559.
- [102] CHIEN TR, WANG ZZ, ONG NP, *EFFECT OF ZN IMPURITIES ON THE NORMAL-STATE HALL ANGLE IN SINGLE-CRYSTAL YBA<sub>2</sub>CU<sub>3</sub>XZN<sub>XO<sub>7</sub>-DELTA</sub>* Phys. Rev. Lett.,1991 (67):2088-2091.
- [103] E. E. Mendez, L. Esaki, and L. L. Chang, *Quantum Hall Effect in a Two-Dimensional Electron-Hole Gas*, Phys. Rev. Lett.,1985(55):2216.
- [104] X.F. Wei, W. Xu, and Z. Zeng, *Sub-terahertz photoconduction induced by inter-layer transition in an InAs/GaSb-based type II and broken-gap quantum well system*, J. Phys.: Condens. Matter.,2007(19):026216.
- [105] A.Rogalski, *Competitive technologies of third generation infrared photo detectors*, J. Phys.: Condens. Matter.,2007(19):026216.
- [106] Ikai Lo, W. C. Mitchel, R. Kaspi, Said Elhamri and R. S. Newrock, *Observation of a negative persistent photoconductivity effect in In<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>Sb/InAs quantum wells*, Appl. Phys. Lett.,1994 (65):1024.
- [107] J. -P. Cheng, J. Kono, B. D. McCombe, I. Lo, W. C. Mitchel, and C. E. Stutz, *Evidence for a Stable Excitonic Ground State in a Spatially Separated Electron-Hole System*, Phys. Rev. Lett.,1995(74):450-453.

- [108] Rita Magri, L. W. Wang, Alex Zunger, I. Vurgaftman and J. R. Meyer, *Anticrossing semiconducting band gap in nominally semimetallic InAs/GaSb superlattices*, Phys. Rev. B.,2000(61):10235-10241.
- [109] E. Halvorsen, Y. Galperin, and K. A. Chao, *Optical transitions in broken gap heterostructures*, Phys. Rev. B.,2000(61):16743-16749.
- [110] H. J. Haugan, F. Szmulowicz, G. J. Brown, and K. Mahalingam, *Band gap tuning of InAs/GaSb type-II superlattices for mid-infrared detection*, J. Appl. Phys.,2004(96):2580.
- [111] G. A. Sai-Halasz, R. Tsu, and L. Esaki. *A new semiconductor superlattice* Appl. Phys. Lett.1977(30):651.
- [112] L. L. Chang, N. Kawai, G. A. Sai-Halasz, R. Ludeke, and L. Esaki. *Observation of semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices* Appl. Phys. Lett.1979(35):939.
- [113] M. Altarelli, *Electronic structure and semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices* Phys. Rev. B,1983(28): 842.
- [114] M. Lakrimi, S. Khym, R. J. Nicholas, D. M. Symons, F. M. Peeters, N. J. Mason, and P. J. Walker, *Minigaps and Novel Giant Negative Magnetoresistance in InAs/GaSb Semimetallic Superlattices*, Phys. Rev. Lett.,1997(79):3034-3037.
- [115] L.-W. Wang, S.-H. Wei, T. Mattila, A. Zunger, I. Vurgaftman, and J. R. Meyer, *Multiband coupling and electronic structure of  $(\text{InAs})_n/(\text{GaSb})_n$  superlattices* Phys. Rev. B.1999(60):5590.
- [116] B.Laikhtman, S. de-Leon, and L.D.Shvartsman, *Energy spectrum of InAs/-GaSb heterostructures*, Solid State Commun., 1997(104),no.5,pp:257-262.
- [117] T. Nagao, T. Hildebrandt, M. Henzler and S. Hasegawa, *Dispersion and Damping of a Two-Dimensional Plasmon in a Metallic Surface-State band* Phys. Rev. Lett.,2001(86): 5747.
- [118] C. F. Hirjibehedin, A. Pinczuk, B.S. Dennis, L.N. Pfeiffer and K. W. West, *Evidence of electron correlations in plasmon dispersions of ultralow density two-dimensional electron systems*, Phys. Rev. B.,2005(65): 161309(R).
- [119] I.V.Kukushkin, J.H. Smet, S.A.Mikhailov, D.V.Kulakovskii, K.von Klitzing and W.Wegscheider *Observation of retardation effects in spectrum of two-dimensional plasmons* Phys. Rev. Lett.,2003(90): 156801.

- [120] Guang-Hong Chen and M. E. Raikh, *Exchange-induced enhancement of spin-orbit coupling in two-dimensional electronic systems*, Phys. Rev. B.,1999(60):4826.
- [121] I. L. Aleiner and L. I. Glazman, *Two-dimensional electron liquid in a weak magnetic field*, Phys. Rev. B.,1995(52):11296.
- [122] Wolfgang Quade, Eckehard Schöll, Fausto Rossi, and Carlo Jacoboni, *Quantum theory of impact ionization in coherent high-field semiconductor transport*, Phys. Rev. B.,1994(50):7398.
- [123] R.D.Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*, (New York: McGraw-Hill, 1976).
- [124] See, e.g.,J.T.Devreese, A.B. Kunz, and T.C. Collins, *Elementary Excitations in Solid Molecules and Atoms*, Plenum,1974,New York.

## 致谢

光阴似箭，转眼间在合肥渡过了五个春秋，我很庆幸自己在这五年中遇到了这么好的师长，结识了这么多的好朋友，你们将是我一生的最大的财富。在论文完成之际，请允许我表达我衷心的感谢。

本论文是在徐文研究员的悉心指导和关怀下完成的，论文工作的每一步进展都凝聚着导师的心血。在此，首先感谢我的导师徐文研究员。感谢他对我科研工作上的指导和培养、生活上的关心和照顾。导师渊博的学识、敏锐的洞察力、严谨的治学态度、勤奋钻研的治学精神和孜孜以求、执着向前的勇气是我远远不能企及的；导师积极乐观的生活态度以及平易近人的生活作风使我能够在宽松、快乐的气氛中学习和工作。几年来，徐老师在我学习、科研工作中给予了大量具体、全面的指导和培养，他的谆谆教诲将使我受益终生。在此，谨向我的恩师表达衷心的感谢和崇高的敬意！

一段特殊而曲折的经历使我有幸得到了二室的邹良剑研究员和曾维研究员的教诲。我在硕士期间师从邹良剑研究员，非常感谢邹老师对我的学习和生活的关心和帮助。邹老师渊博的学识、严谨的治学态度给我印象深刻，并使我由衷的敬仰。非常感谢曾维研究员几年来对我的关心和帮助。在我工作最困难的时候，曾老师为我提供了极大的便利和帮助，给予了我很多的关怀和包容。曾老师严于律己、宽以待人的作风给我印象深刻，每当在危难之际找到曾老师，她总是竭尽所能来帮助别人。她严谨的治学态度和宽容博大的胸怀是我终身学习的榜样。在此真诚地向他们鞠躬敬礼！

从07年9年到07年11月在澳大利亚wollongong大学的学习期间，非常感谢张潮教授、高峰老师和北京大学的马中水教授在学习和生活方面给我的关心和帮助。同时也非常感谢wollongong大学的李文献博士和陈荣华女士和姜春海老师、上海微系统所的王长博士和北京大学的刘军丰博士陪我渡过了一段难忘的时光，在学习生活中给了我极大的帮助。

特别感谢郑庆祺研究员不辞劳苦、认真细致地审阅了全文并提出许多宝贵的意见和建议。郑老师坚实的理论功底、严谨求实的科学态度让我领略到的老一辈科学家的风范。

感谢范巍副研究员、胡文英老师、王江龙老师和王小兵高访为我们创造了良好的学习和科研环境，他们高度的责任心和求实、创新的科研作风值得我学习。日常的学习工作中我经常向他们请教，每个人都以热情的态度帮我解答问题，借此机会，再次向他们表达深深的谢意！

我很庆幸自己在二室这样一个团结友爱，互相帮助，有良好学习和科研氛围的集体中。整个研究室弥漫着勤奋、乐观和友爱的气氛，在其中生活让我感到如沐春风。感谢师姐杨翠红，师弟董海明和李龙龙，与他们在一起的讨论使我受益匪浅，特别是杨翠红师姐对我的帮助很大。感谢陈东猛、戴振翔、郑小红、王维华、王卫超、赵高峰、袁定旺、余隕金、邢艳霞、石兴强、汪洋、钟国华、王贤龙、李长生、倪美燕、唐怀宝、董传鼎、乔彦彬、任国武、杨雯、刘大勇、卢峰、张国仁、张素华、徐勇、周裕鸿、黄良峰、郝华、王翠芝等同学给予我的友情，这份感情将会伴我一生！借此机会也感谢我的大学同学：张献博士、阮久福博士、王志伟博士和王志芳博士，同宿舍好友张守宝博士、韩奇峰博士和杨登科博士，陪我在合肥渡过了非常美好的五年时光。另外和王贤龙博士经常小酌一杯也非常让人难忘。

特别感谢研究生部的李家明老师、张艳丽老师、叶海燕老师及固体所所有领导、老师及其他工作人员在平时生活和学习上给予的关心和帮助！是他们的辛勤劳动为我们营造了

良好的生活和学习环境，在此向他们付出的辛勤劳动表示感谢！

感谢我的亲朋好友这么多年来对我的支持和帮助，特别欣慰的是我80多岁的奶奶身体一直非常健康，终于看到了我博士毕业的这一天。感谢我的叔伯、舅舅和姑姑们，在我读书期间给了我非常大的帮助和支持。特别遗憾的是最疼爱我的姥姥在我读研期间去世，而我又没能回来尽孝，这也是我终生的遗憾！

感谢我的父母这么多年来对我的鼓励和支持，他们为了我们兄妹三个的成长付出了艰辛的劳动，这份感情我无以回报，愿二老健康、平安。感谢我的弟弟和妹妹，他们一直以来默默的为我加油、付出，并且为了我过早的放弃了上学的机会，这也是我做为哥哥对你们永远的愧疚。当然，令我高兴的是，我读研期间我的侄女魏佳一的诞生，给家里带来了欢乐，希望她永远活泼、可爱，健康成长。

感谢我的爱人孙东菊女士，在我最困难的时候走进了我的生活，她默默地给我鼓励、支持与帮助，与我一起分享成功的喜悦、共同迎接困难与挑战，使我在前进的道路上永远充满信心和勇气！

魏相飞2008年5月于合肥市科学岛