



# 中科院半导体所 半导体材料科学重点实验室



# 报告内容



四、结论





晶体结构对称性对材料光电性质具有决定性 的影响!

闪锌矿结构的反演不对称

1)体反演不对称 T<sub>d</sub>, GaAs, InP



压电效应,非线性光学效应(包括线性电 光效应,或Pockels效应)

但是闪锌矿结构具有旋转反演对称性!

 场致反演不对称 应变exy, [001]电场Ez



闪锌矿结构, GaAs: Ga和As原子的相对移 动使得(110)和(1<u>1</u>0)面 内的Ga-As键不再对 称, C<sub>2v</sub>点群。





3) 结构反演不对称 半导体界面内在的反演不对称性! AlAs/GaAs 界面 AlAs GaAs (1<u>1</u>0) Ga-As键在 (110)面内 Al-As 键在(110)面内 [001] (110)A1 Ga As 结构反演不对称 [110] [110] [110] C<sub>2v</sub>点群 [1<u>1</u>0] [1<u>1</u>0] [1<u>1</u>0]  $\Delta r=0$ Λr≠0  $\Lambda r=0$ 

化学键在(001)面内的投影





#### 理想对称的量子阱

量子阱中心为对称 点,具有旋转反演对 称性! [110] 等价于 [110]







# 界面不完美! → 无旋转反演对称性





T

 $C_{2V}$ 

 $\mathbf{C}_{\mathbf{v}}$ 

# 闪锌矿半导体材料的反演不对称:

1) BIA: bulk inversion asymmetry,

材料固有的,无法调控

2) FIA: strain and electric field,3) SIA: structural inversion asymmetry

通过外场和结构设计,实现调控

反演不对称会产生怎样的效应?









目标:寻找E<sub>z</sub>,e<sub>xy</sub>等相关的哈密顿量



- $\Gamma_1: S [1];$
- $\Gamma_2: T [xl_x + yl_y + zl_z];$
- $\Gamma_3$ :  $(U, V) [\sqrt{3}(x^2 y^2), 2z^2 x^2 y^2];$

 $\Gamma_4$ : (P,Q,R) [ $l_x$ ,  $l_y$ ,  $l_z$ ];  $\sigma$ , J, H(磁场), k×E 轴矢量

 $\Gamma_5$ : (X, Y, Z) [x, y, z]. k, E(电场),  $[e_{yz}, e_{zx}, e_{xy}]$  极矢量 [ $\{j_y j_z\}, \{j_z j_x\}, \{j_x j_y\}$ ]

 $\{j_x j_y\} = (j_x j_y + j_y j_x)/2$ 





TABLE I. Multiplication table for the components of the irreducible representations of  $T_d$  group. The components are defined in Eq. (4.1). This table is equivalent to that of coupling coefficients in G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, and H. Statz, *Properties of Thirty-two Point Groups* (M.I.T., Cambridge, 1963).

s	SS'	TT'	UU' + VV'		PP' + QQ' + RR'		XX' + YY' + ZZ'
Т	ST'		UV' - VU'			PX' + QY' + RZ'	
U	SU'	-TV'	UV' + VU'		$\sqrt{3}(PP' - QQ')$	2RZ' - PX' - QY'	$\sqrt{3}(XX' - YY')$
V	SV'	TU'	UU' - VV'		2RR' - PP' - QQ'	$\sqrt{3}(QY'-PX')$	2ZZ' - XX' - YY'
P	SP'	TX'	$(\sqrt{3}U - V)P'$	$-(\sqrt{3}V+U)X'$	QR' - RQ'	QZ' + RY'	$YZ' - ZY' \mathbf{D} \vee \mathbf{D}$
Q	SQ'	TY'	$=(\sqrt{3}U+V)Q'$	$(\sqrt{3}V - U)Y'$	RP' - PR'	RX' + PZ'	ZX' - XZ'
R	SR'	TZ'	2VR'	2 <i>UZ</i> ′	PQ' = QP'	PY' + QX'	XY' = YX'
X	SX'	TP'	$-(\sqrt{3}V+V)P'$	$(\sqrt{3}U-V)X'$	QR' + RQ'	QZ' = RY'	YZ' + ZY'
Y	SY'	TQ'	$(\sqrt{3}V - U)Q'$	$-(\sqrt{3}U+V)Y'$	RP' + PR'	RX' - PZ'	ZX' + XZ'
Ζ	SZ'	TR'	2UR'	2VZ'	PQ' + QP'	PY' = QX'	XY' + YX'
$(k_{y}^{2}-k_{z}^{2})k_{x}$					$\{\mathbf{j}_{\mathbf{y}}\mathbf{j}_{\mathbf{z}}\}$	$\{\sigma_y \sigma_z\}$	
K	=   (1	$k_z^2 - k_z$	$k_{\rm x}^2)k_{\rm y}$		$\{\mathbf{j}_{\mathbf{z}}\mathbf{j}_{\mathbf{x}}\}$	$\{\sigma_z \sigma_x\}$	
$(k_{x}^{2}-k_{y}^{2})k_{z}$					$\{\mathbf{j}_{\mathbf{x}}\mathbf{j}_{\mathbf{y}}\}$	$\{\sigma_x \sigma_y\}$	





导带电子





 H'= aE<sub>z</sub>(σ<sub>x</sub>k<sub>y</sub>-σ<sub>y</sub>k<sub>x</sub>) Rashba 自旋轨道耦合;

2) H'=bκ·σ=β(σ<sub>x</sub>k<sub>x</sub>-σ<sub>y</sub>k<sub>y</sub>)一量子阱 Dresshauss自旋轨道耦合 轴矢量点乘

 $(\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 

κσ

以上 $E_z$ 均可以用  $e_{xy}$ , P $\delta(z-z_0)$ 代替



E<sub>z</sub>均可以用 e<sub>xv</sub>, Pδ(z-z<sub>0</sub>)代替



### Rashba 和Dresshauss 自旋轨道耦合 H'很复杂

电子空穴交换作用

H'=dJ·σ +空穴混合→激子精细结构



#### 能带结构和波函数的特殊变化 空穴混合(hole mixing) 自旋分裂(spin splitting)



可观察的物理效应 平面光学各向异性 激子精细结构 自旋光电流

光子偏振和电子自旋 •内在关联、相互转化 •信息载体的新自由度





hole mixing effect

# 量子阱中K<sub>|</sub>=0处空穴波函数:无空穴混合

$$H_{hh}(z)\phi_{hh}(z) = E\phi_{hh}(z) \quad for \quad |3/2, \pm 3/2\rangle$$
  
$$H_{lh}(z)\phi_{lh}(z) = E\phi_{lh}(z) \quad for \quad |3/2, \pm 1/2\rangle$$

$$\Psi_{hh} = \phi_{nhh}(z) | 3/2, \pm 3/2 \rangle$$
 二重简并(自旋简并)

  $\Psi_{lh} = \phi_{mlh}(z) | 3/2, \pm 1/2 \rangle$ 
 轻重空穴无耦合

量子阱中K<sub>||</sub>=0处空穴波函数:有空穴混合  

$$H = H_0 + F(z) \{ \hat{J}_x \hat{J}_y \}$$

$$e_{xy}, E_z, P\delta(z-z_0)$$

$$H(z) = \begin{pmatrix} H_{hh} & iF(z) & 0 & 0 \\ -iF(z) & H_{hh} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H_{hh} & iF(z) \\ 0 & 0 & -iF(z) & H_{hh} \end{pmatrix}$$

# 耦合的薛定谔方程: $H_{hh}(z)\phi_{hh}(z) + iF(z)\phi_{lh}(z) = E\phi_{hh}(z)$ $H_{lh}(z)\phi_{lh}(z) - iF(z)\phi_{hh}(z) = E\phi_{lh}(z)$

空穴波函数发生混合

$$\Psi_{nh} = \phi_{nh}(z) |3/2, \quad \pm 3/2 \rangle + i\alpha \phi_{ml}(z) |3/2, \quad \pm 1/2 \rangle$$
  
$$\Psi_{mh} = \phi_{ml}(z) |3/2, \quad \pm 1/2 \rangle + i\alpha \phi_{nh}(z) |3/2, \quad \pm 3/2 \rangle$$

能级移动 
$$\alpha^2 |E_{nh} - E_{ml}|/2$$
 非常小,可以忽略  
 $\alpha = \frac{\int \phi_{nh}(z)F(z)\phi_{ml}(z)dz}{|E_{nh} - E_{ml}|}$  1%量级

重空穴波函数中具有轻空穴的分量 轻空穴波函数中具有重空穴的分量



# 空穴混合的效应(闪锌矿结构)

- 1) 平面内光学各向异性
- 2) 激子精细结构: 平面光学各向异性的特例
- 3) 空穴自旋驰豫
- 4) 其它





#### 波函数在XY平面内的投影



$$|3/2, 3/2\rangle =$$
  
 $\frac{1}{\sqrt{2}}(X+iY)\uparrow$ 

$$|3/2, -1/2\rangle =$$
  
 $\frac{1}{\sqrt{6}} [(X - iY)\uparrow +2Z\downarrow]$ 







传统的偏振光谱: 旋转偏振片或者样品 两次测量

$$P = \frac{I_x - I_y}{I_x + I_y}$$

灵敏度有限: 5% 系统稳定性影响严重!



#### 偏振透射谱

# 反射差分谱: reflectance difference spectroscopy (RDS)





将RDS应用于半导体界面、量子阱和纳米结构等研究,量子阱和纳米结构量子跃迁RDS研究的SCI论文几乎全部来自我们。



GaAs/AlGaAs ——阱宽,应变,主动控制,激子精细结构 InGaAs/GaAs——In原子偏析、应变等 InGaAs/InP—— 界面化学键,原子互混 GaNAs/GaAs,GeSi/Si InAs/GaAs量子点的浸润层演化(InAs超薄量子阱)

# 量子阱界面相关的平面光学各向异性



Phys. Rev. B 66, 19532120 (2002)







光学各向异性来自界面不对称——界面各向异性的岛状起伏。 偏振度小于1.5%:用普通普通光学



轻重空穴混合的程度取决于空穴混合能 与空穴能级间距之比(微扰论):

 $\langle 1H | F(z) | 1L \rangle$  $\Lambda E$ 

量子阱宽度增大

 $\Delta E \propto 1/w^2$ 

 $\langle 1H | F(z) | 1L \rangle$  几乎不变:  $e_{xy}, E_z$ 近乎指数减小:界面

## 应变引起的平面光学各向异性







应力装置



GaAs/AlGaAs量子阱的RDS谱







随着阱宽增大,界面导致的 光学各向异性信号是减小 的,而应力导致的信号则是 增加!



理论计算与实验结果吻合很好,并 确定出重要的界面势参数

不同阱宽GaAs/AlGaAs量子阱的 RDS谱





#### GaAs/AlGaAs量子阱



☑ 指导新型量子器件设计





## 电子空穴交换作用+ $C_{2V}$ 反演不对称 $\rightarrow$ 激子分裂

$$H' = a\vec{J}\vec{\sigma} + F(z)\{J_xJ_y\}$$

## 如果只考虑1H和1L的空穴混合:





☑ 当量子阱的对称性降低到C<sub>2V</sub>时,由于电子空 穴交换作用,简并的激子会劈裂成两个能级。

☑ 激子分裂能很小(微电子伏量级),对光子纠 缠对形成(量子信息)有重要影响!

☑测量困难: 激子光谱线宽远大于激子劈裂能量

量子拍和ODMR: II型GaAs/AlAs量子阱 极低温,强磁场

Ⅰ型量子阱,从未有实验报道!



## RDS: 测量激子分裂的新方法

我们证明了,由于激子分裂,激子各向异性介电函数 $\Delta \epsilon_s$ 与激子介电函数 $\epsilon_s$ 具有以下关系:

$$\Delta \varepsilon_s = -\Delta E_s \frac{d\varepsilon_s}{dE} + 2P_s \varepsilon_s$$

$$2\operatorname{Re}\left\{\frac{\Delta r}{r}\right\} = -\Delta E_{s} \frac{d\ln R}{dE} + P_{s} \frac{\Delta R}{R}$$

利用RDS,通过光谱拟合,直接测量出激子分裂能∆E<sub>s</sub> 和激子偏振度P<sub>s</sub>

新方法的特点:液氮温度测量,无需磁场! 型量子阱激子分裂



一个例子: 5nm-GaAs/Al<sub>0.36</sub>Ga<sub>0.64</sub>As





# 应力能否调节激子分裂?



#### 低温应力装置: 压电陶瓷

#### 80K不同应变下的反射谱和RDS谱





#### 常规反射谱

#### 应力作用下的RDS

#### QW介电函数

#### 各向异性的QW介电函数

$$\Delta \varepsilon_s = -\Delta E_s \frac{d\varepsilon_s}{dE} + 2P_s \varepsilon_s$$






A Settionducing

## 激子分裂能随应变线性变化

## 激子偏振度随应变线性变化

电子空穴交换能基本不变

空穴耦合能反应各向异性 随应变线性变化





# 量子点(人工原子):

## 电子三维受限,产生分立能级

## 基础研究:

精细结构、相干控制、 近藤效应、库仑阻塞、 腔电动力学 等等

## 新型器件:

**QD 激光器:** 低阈值电流密度、弱的温度依赖关系

- QD 红外探测器: 正入射 QD 单光子光源: 可控发射
- QD 量子比特: 容易集成







生长初期,二维层状生长,称为浸润层(WL)。浸润 层厚度超过一个临界厚度时,生长模式转变成三维 (3D)生长!







## 不同量子点之间载流子再分布的通道



理论预言:WL对QD激光器的调制速度有重要影响

Appl.Phys. Lett. 77, 3325(2000)





### • XSTM

InAs WLs can be directly characterized by cross-sectional scanning tunneling microscopy.



APL. 87, 111903 2005

问题:样品必须在真空中解理和测量!





#### Photoluminescence

Usually hh is observable before QD formation



## Photoreflectance

Both hh and lh are observed, but interfered with  $E_g$  signal



Appl. Phys. Lett. 73, 3268(1998)

## WL系统研究缺乏!



用RDS系统研究了InAs/GaAs QD浸润层的演化

## InAs QD浸润层——超薄InAs量子阱

•In原子偏析+各向异性应变 → 平面光学各向异性, RDS技术可用;

•GaAs带边激子通常不具有平面光学各向异性, 避免了对InAs浸润层信号的干扰;

•RDS不但给出跃迁能量,还可给出各向异性强弱 信息,后者与浸润层中In原子平面分布——In原 子的运动——密切相关。







# **AFM images**



## **FM growth SK growth**

#### $2 \times 2 \,\mu m$





## Ripening

#### InAs: 530°C, 0.008ML/s

# **AFM results**







**9-16: Huge dots** 2 times larger in sizes



# 典型的RDS结果 10th



Experimental Smoothed 1.0 Extracted  $\rho$  (10<sup>-3</sup>) .H 0.5 0.0 (arb. unit) ΗH 0  $\sim$ 5 -2 Sample 10  $\mathbf{d}^2$ -3 860 880 900 920 940 960 840 Wavlength (nm)

WL as a thin QW



## **RD** spectra varying with sample numbers











2) 激子效应: binding energies for hh and lh

3) 应变效应

$$E_{hh}, E_{lh} \implies t_{WL}, l$$





 $R_2$ 





## 没人进行过相关实验研究



Segregation coefficient varies linearly with the InAs amount in WL before SK growth: **strain as driven force!** 



## 生长温度和2D-3D转变厚度的关系?

衬底不旋转 Growth Temp, Vg <t>, 2.0ML 490°C 0.1 ML/sInAs 500°C 0.1 ML/s2.0ML 100nm-GaAs 600°C, 0.7um/h 510°C 0.1 ML/s1.9ML InAs 520°C 0.1 ML/s2.0ML 600°C, 0.7um/h 200nm-GaAs 0.1 ML/s530°C 2.0ML SI-GaAs 2.0ML 0.1 ML/s540°C 1 2 3 -----15 16





2D-3D 转变标志: 3D-InAs岛密度快速增加

浸润层轻空穴相关跃迁能量的变化





先线性减小: InAs增加 后偏离线性减小, 趋近平衡值: InAs停止增加并趋 近饱和值

2D-3D 生长转变:

偏离线性减小之处

浸润层平面光学各向异性的演化





## 2D-3D生长临界厚度随生长温度的变化















空间反演不对称的自旋分裂



自旋轨道(SO)相互作用  

$$H_{SO} = -\frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p} \times (\nabla V_0)$$
 V<sub>0</sub>: 原子势

Lorentz变换:在电子静止坐标系中,以-V运动的电场E产生了一个有效磁场B

$$\mathbf{B} = -\frac{\gamma}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E}$$





ity of states in FM1

Density of states in FM2

## 自旋晶体管: SO耦合导致自旋进动

S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. 56, 665(1990)

Y方向上的电场: σ<sub>z</sub>, p<sub>x</sub>



Z方向具有结构反演不对称: 电场, 应变, 不对称的限制势



#### 纤锌矿结构

BIA哈密顿量与SIA的 相同! 各向同性的自旋分裂

自旋分裂的观察:

 (1) 零场分裂, SdH振荡
 (2) 本征自旋霍尔效应
 (逆自旋霍尔效应)
 (道自旋霍尔效应)



In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/InP调制掺杂2DEG的低温输运





PRB55R1958(1997)

可通过栅压来控制自旋分裂的大小



#### Spin Hall effect



#### 有人认为是本征的: Rashba 效应



PRL92P126603(2004)

#### $2\ \mu m$ n-GaAs on AlGaAs



Science306-1910-2004



# 自旋光电流效应 Circular photogalvanic effect



自旋分裂和光学选择定则导致kx+和kx-态不平衡占据,产生零偏压下的自旋极化光电流。





- •电流方向取决于圆偏振光方向
- •正入射时电流为零

### GaN/AlGaN 二维电子气(2DEG)的CPGE研究

与北大物理学院沈波教授合作

汤一乔:2006年底,APL 贺小伟:2007年,APL,PRL 尹春明,张琦:正在进行中,有趣的结果

GaAs/AlGaAs 二维电子气(2DEG)、InN、InAs 量子线、InAs量子点结构等的CPGE研究

中科院半导体所

# GaN 2DEG样品和CPGE实验装置







## 圆偏振光: 1060 nm (1.1 eV)



**CPGE** setup







旋转1/4波片(相位角 $\varphi$ ),改变入射光的偏振状态  $j_{\lambda} = j_c \sin 2\varphi + j_L \sin 2\varphi \cos 2\varphi + j_0$ 

Y.Q.Tang(汤一乔), et al, APL, 91, 071920 (2007)



## SdH 振荡和CPGE光电流的比较



Y.Q.Tang (汤一乔), et al, APL, 91, 071920 (2007)



## **SOC constant of BIA and SIA terms in wurtzite structure (GaN-based)**

• **BIA:** 
$$H_B = \alpha_b (k_x \sigma^y - k_y \sigma^x)$$

• **SIA:** 
$$H_s = \alpha_s (k_x \sigma^y - k_y \sigma^x)$$

$$H_B$$
,  $H_S \sim k$ , Rashba terms





$$E(k) = \frac{\hbar}{2m^*}k^2 \pm \alpha k$$



**SOC constant of BIA and SIA terms in wurtzite structure (GaN-based)** 

## 如何确定BIA和SIA自旋轨道耦合系数的相对大小?

$$\alpha = \frac{\hbar^2 eE}{4m^* E_g}$$

 $\alpha_{S} \propto E_{built-in}$ 

AlGaN/GaN异质结:极强的极化效应 极化电场:~MV/cm

应变调制CPGE → 自旋轨道耦合系数的信息


# **Experimental setup for uniaxial strain**





Y方向受张应变:

$$\varepsilon_{yy} = \frac{3hJ_0}{2a^2}$$

Z方向受压应变:

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{C_{12}}{C_{13}}\varepsilon_{yy}$$



# **CPGE current as a function of the additional uniaxial strain**



CPGE信号随外加应变线性增加, 2.2x10<sup>-3</sup>的张应变可使信号 增加 18.6%。

X.W.He(贺小伟), et al, APL, 91, 071912 (2007)



## **Ratio of SIA and BIA SOC constants**

$$\alpha_{s} \propto E_{built-in}$$

$$j_{y}(\varepsilon_{yy}) = j_{b}^{0} + j_{s}^{0} + k_{s}\varepsilon_{yy}$$

$$j_{y} = j_{b}^{0} + bE_{0} + bE_{un}(\varepsilon_{yy})$$

$$a_{s} / a_{b} = j_{b}^{0} / j^{0} \approx 13.2$$

X.W.He(贺小伟), et al, APL, 91, 071912 (2007)



#### CPGE信号:

$$J_{x} = \gamma_{xy} i \left( E \times E^{*} \right)_{y} \implies \sin \phi$$

#### 正入射时CPGE 等于零





[1-10] 9220

InAs量子线CPGE信号随入射角的变化





X.W.He(贺小伟), et al, PRL, 101, 147402 (2008)





不同入射角时电流撒随光斑 位置的变化

插图: CPGE电流由一个对称分量和反对称分量构成

X.W.He(贺小伟), et al, PRL, 101, 147402 (2008)



#### **Mechanism of the anomalous CPGE**





## Anomalous CPGE & RSHE









X.W.He, et al, PRL, 101, 147402 (2008)



## Anomalous CPGE in GaAs/AlGaAs 2DEG





#### Anomalous CPGE in GaAs/AlGaAs 2DEG



对称分量(正常CPGE)幅度和反对称分量(反常 CPGE)幅度随入射角的变化规律完全不一样!

结



- 1) 半导体材料中反演不对称会导致空穴混合 和能带自旋分裂;
- 2) 空穴混合导致QW产生平面光学各向异性, 可以用RDS观测得到;不同的反演不对称(电 场、应变、界面)会产生不同的RDS信号;
- 3) 导带的自旋分裂可以通过自旋光电流测
- 量;同时,自旋光电流还可以检测逆自旋霍尔 效应;
- 4) RDS和自旋光电流是非常灵敏的技术!



