

* 成果与应用 *

半导体超晶格的电子态与声子模理论^{*}

朱邦芬

(半导体研究所 北京 100083)

关键词 半导体, 超晶格, 声子, 电子态, 低维结构

半导体超晶格微结构是理想的技术上能很好控制的低维物理系统, 是一大类以“能带工程”为设计依据和以分子束外延(MBE)技术为基础的新型人工材料, 具有重大的光电子和微电子器件应用前景。80 年代以来, 作为物理、材料与器件 3 者的结合点, 半导体超晶格微结构一直是半导体科学最活跃的研究前沿领域。

黄昆及其合作者自 1986 年开展超晶格电子态和声子模理论研究以来, 对光学声子模式和激子态理论的发展做出了关键性的重要贡献, 在电子态理论上发展了有自己特色的计算方法。

超晶格振动是超晶格物理的基础。准二维量子结构中的光学振动通常分为类体模和界面模。这种分类以及各类模式的特征本质上都是以连续介电模型为基础而导出的。1965 年以来, 准二维系统的光学声子 LO 类体模, 一直是沿用由宏观介电模型导出的模式。这种模式的静电势在界面处为节点, 因为静电势是光学位移的导数, 且类体模被认为具有正弦驻波形式, 因而光学位移在界面极大。1985 年, 一项超晶格拉曼散射偏振实验表明, 类体模的对称性正好与连续介电模型所预言的相反。由此, 国际上一种处理是将连续介电模型所要求的静电势在界面处极小改为光学位移在界面极小, 得到光学声子的波导模型。黄昆与朱邦芬巧妙地设计了一个与连续介电模型完全相容的微观模型, 解决了理论与实验矛盾的难题, 确立了关于半导体超晶格光学振动的系统理论。

这一被国际学术界称作“黄朱模型”的要点有: (1) 光学声子类体模的光学位移和静电势在界面均应为节点, 而不仅仅是静电势为零而光学位移极大(连续介电模型)或光学位移为零而静电势极大(波导模型)。(2) 界面模与类体模之间存在内在联系。界面模具有强烈的各向异性。当声子波矢与超晶格生长方向平行时, 界面模演变为半波长等于阱宽的驻波。类体模一般应从全波长振动模起算。(3) 声子色散引起界面模与频率相近的类体模之间的混合。(4) 连续介电模型所固有的局限性(忽略声子色散效应)导致简并的类体模解具有任意性, 其所假定的正弦驻波形式导致了错误的对称性, 然而界面模对应于纵光学声子与横光学声子的混合, 不存在模式不确定的问题。这就回答了令一些权威困惑的问题: 为什么连续介电模型能导出正确的界面模, 而错误的类体模? (5) 波导模型只是在声子波矢与超晶格生长方向平行的特殊情形下给出

* 收稿日期: 1996 年 9 月 3 日

正确的光学位移表达式。(6)一套描述超晶格中光学振动模式与静电势的近似解析表达式,为进一步研究超晶格中与电子-光学声子相互作用有关的物理现象奠定了基础。

黄朱模型引起国际上普遍重视,被许多权威学者,如 E. Burnstein, D. L. Mills, M. Cardona, 在公开发表的学术论著中肯定,有力推动了这一研究领域的深入发展,由此开展了一系列的理论和实验研究工作。国外许多著名实验室特地精心设计实验来验证 3 种声子模型。美国加州大学伯克利分校 P. Y. Yu 等人特地设计一组实验,以比较量子阱中光学声子的 3 种模型,他们的结论是“唯有黄朱模型既能定性又能定量地解释我们的实验结果,而其它两种模型则不能。”(《物理评论快报》,67 卷,2557 页,1992 年)。黄朱模型已被写进许多国外专著和研究生教材。据《SCI》统计,“连续介电模型与超晶格中弗洛里希作用”一文发表以来已被引用 200 多次,是我国近年来被引用最多的文献之一,多次列入全国被引用次数最多的论文排名榜。近年来,黄朱模型还被推广到一维量子线,零维量子点结构,并基于黄朱模型建立了超晶格光学声子拉曼散射的微观理论。

激子态是量子阱光学过程的基础。这项成果导出了具有正确的角动量结构的准二维激子四分量旋量波函数,并给出量子阱中的激子跃迁选择定则。结合量子阱中轻重空穴混合效应,理论上指出了 p-, d- 态激子光跃迁的可能性,以此成功地解释了实验中观测到的 h_{12a} 峰的困惑。该研究被国际上广泛引用(据《SCI》统计为 100 多次),受到好评。

电子态计算是固体理论基础。本项目在有效质量理论和赝势理论框架内分别发展了用有限平面波展开法计算超晶格电子子带结构的系统方法,以此研究了外电磁场下和各种结构的电子态和光学跃迁矩阵元。在 $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_n$ 超晶格 Γ -X 交叉研究中,正确地指出交叉发生在 $n > 10$ 处,为实验提供了理论指导。对于半导体纳米球中空穴复杂能级和双势垒结构中空穴隧穿轻重空穴互相转化的理论研究,不但属于国际上最早的工作,而且理论方法上有所创新。这些研究被国际上大量引用,得到同行的肯定。

在创造性研究的基础上,夏建白和朱邦芬撰写了《半导体超晶格物理》,这是国内该领域第一本系统著作,在国际上也是少数几本具有自己特色的专著。

以上这些研究工作先后获得 1993 年国家自然科学奖二等奖,中国科学院 1988 年自然科学奖一等奖和中国科学院 1989 年自然科学奖二等奖。黄昆、朱邦芬、夏建白等应邀在数十个国际学术会议和全国学术会议上作报告,有关该项成果的论文被引用超过 600 次,在国内外产生了重大影响。在此过程中,一批有才华、有潜力的优秀青年人才得到培养并迅速成长起来。