

半导体极性界面电子结构的理论研究

张东 娄文凯 常凯

Theoretical progress of polarized interfaces in semiconductors

Zhang Dong Lou Wen-Kai Chang Kai

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 167101 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20191239

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191239>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

金属表面Rashba自旋轨道耦合作用研究进展

Recent progress in Rashba spin orbit coupling on metal surface

物理学报. 2015, 64(18): 187103 <https://doi.org/10.7498/aps.64.187103>

自旋轨道耦合作用下石墨烯pn结的电子输运性质

Electronic transport properties of graphene pn junctions with spin-orbit coupling

物理学报. 2015, 64(9): 097201 <https://doi.org/10.7498/aps.64.097201>

Rashba自旋-轨道耦合下二维双极化子的基态性质

Properties of the ground state of two-dimensional bipolaron with Rashba spin-orbit coupling

物理学报. 2016, 65(17): 177801 <https://doi.org/10.7498/aps.65.177801>

Rashba自旋轨道耦合下square-octagon晶格的拓扑相变

Topological phase transitions in square-octagon lattice with Rashba spin-orbit coupling

物理学报. 2018, 67(23): 237101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180624>

光在Metasurface中的自旋-轨道相互作用

Spin-orbit interaction of light in metasurface

物理学报. 2015, 64(24): 244202 <https://doi.org/10.7498/aps.64.244202>

自旋-轨道耦合作用下双组分量子气体中的动力学结构因子与求和规则

Dynamic structure factors and sum rules in two-component quantum gases with spin-orbit coupling

物理学报. 2016, 65(13): 131101 <https://doi.org/10.7498/aps.65.131101>

专题：纪念黄昆先生诞辰百年

半导体极性界面电子结构的理论研究*

张东¹⁾ 娄文凯¹⁾ 常凯^{1)2)†}

1) (中国科学院半导体研究所, 超晶格国家重点实验室, 北京 100083)

2) (中国科学院大学拓扑量子计算卓越中心, 北京 100190)

(2019年8月16日收到; 2019年8月18日收到修改稿)

半导体电子结构的有效调控一直是人们长期关注的科学问题,也是主流半导体材料物性与器件设计的核心科学问题之一.传统栅极技术只能在小范围内改变半导体材料的带隙,作者从理论上通过人工设计半导体极性界面,产生约10 MV/cm的内建电场,从而实现了对Ge、InN等主流半导体带隙在0—2 eV范围内的有效调控,并显著增强Rashba自旋轨道耦合强度,作者进一步利用构建的多带 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 模型证明增强的Rashba自旋轨道耦合可以将常规半导体驱动至拓扑相.文章重点介绍极性半导体InN的极性界面能隙调控;以及IV族非极性半导体Ge的极性界面能带调控.半导体极性界面的制备与主流半导体工艺兼容,展现了极性界面在主流半导体量子结构的物性调控与光电器件中潜在的应用前景.

关键词: 自旋轨道耦合, 极化, 界面与异质结, 半导体**PACS:** 71.70.Ej, 77.22.Ej, 79.60.Jv, 61.82.Fk**DOI:** 10.7498/aps.68.20191239

1 引言

在过去的80年的时间内,Ge、Si、GaAs等主流半导体伴随着集成电路技术和光电器件的发展,成为基础研究和技术的热点.从20世纪80年代开始,随着半导体制备技术的进步和提高,人们对半导体低维量子结构的研究兴趣日益浓厚.当半导体材料缩小到纳米尺度时,量子效应开始显现,出现了许多有趣的新现象,例如,整数^[1]、分数霍尔效应^[2]及后来的自旋霍尔效应等能带拓扑现象^[3-7].随着半导体技术的进一步提高和发展,人们可以期待有更多的新奇量子效应在半导体材料中涌现出来.这些量子效应展现人们对半导体量子物性的有效调控,不仅会导致基础科学的创新,更具有潜在的应用前景甚至经济效应.

半导体量子结构物性调控的核心科学问题之

一是半导体能带的有效调控.半导体材料的能隙由半导体材料本征性质决定,是影响其光电响应最重要的物理参数.最有效的带隙调控手段是量子结构的制备及其栅压来改变半导体电子结构和物性.栅极技术已被广泛地应用于集成电路工艺中,取得了长足的进步和成功.但现有的半导体栅极调控技术所能提供的电场强度范围约为100 kV/cm至1 MV/cm,只能小范围改变半导体能隙,还无法满足对半导体量子结构能隙进行大范围调控的要求.同时,电场还能诱导和增强半导体材料中自旋轨道耦合强度,为构造半导体自旋电子器件提供物理基础.因此,如何在半导体量子结构中实现极强的局域电场,并对半导体能隙实现大范围地有效调控成为半导体物理的关键科学问题之一.

随着半导体技术的发展,对于传统的主流半导体材料,人们已可以通过MBE技术制备高质量的半导体极性界面.由于表面/界面垂直方向对称性

* 国家重点研发计划(批准号:2017YFA0303400)和国家自然科学基金(批准号:11574303)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: kchang@semi.ac.cn

缺失及化学环境改变, 界面处晶格、电荷、电子自旋和轨道的相互作用相比于体材料内部更为复杂. 半导体极性界面的研究可以追溯到日本科学家 S. Yoshida、H. Amano 等于 1983 年 [8]、1986 年 [9] 先后制备的 GaN/AlN 极性异质结构以及 1991 年美国 M. Khan 等制备的 GaN/AlGaIn 异质结 [10]. 这种多层极性异质结迁移率与单纯的半导体材料相比提高了几十倍. 后续的系统研究发现, 在半导体极性界面处, 可以产生丰富的层展现象 [11]. 例如, 破坏界面的空间反演对称性将使绝缘体出现导电性或铁电性; 破坏界面的时间反演对称性会引致磁性; 破坏界面的规范对称性则会导致超导、超流等特性 [11,12], 极性界面引致的 Spin-Galvanic 效应 [13].

综上所述, 极性界面本身具有丰富的物理亟待研究, 并逐渐成为新型功能器件的构建基础. 这一趋势正如诺贝尔奖获得者 Kroemer 教授当初的预言: “界面即器件” [14]. 本文中, 我们将重点介绍如何利用极性半导体界面设计实现局域的强大电场, 及其引致的新物理与新效应.

2 极性半导体中的极性界面

2.1 极性半导体 III-V 族氮化物极化场起源

第三代半导体材料 III-V 族氮化物在白光照明和大功率电子器件中有重要而广泛的应用. 不同于一般的 III-V 族化合物半导体, 纤锌矿 III-V 族氮化物具有极强的自发极化与压电极化.

其中自发极化源于平衡态纤锌矿晶格结构本身的成键对称性破缺, 以 GaN 为例, Ga 原子与最近邻的 4 个 N 原子构成四面体结构, Ga 原子作为正电中心, 其实际位置与 N 原子的有效负电中心并不重合, 正电中心与负电中心空间上的分离就造成了一个天然的电偶极矩, 从而形成沿 [0001] 晶向的宏观有效极化场 (见图 1(a)), 成为纤锌矿 III-V 族自发极化的微观起源. 而压电极化则源于晶格内部电偶极矩对晶格失配或外部机械应力的响应. 相比于自发极化, 压电极化的存在更为广泛, 仅要求晶格中心反演对称性破缺, 因此在 III-V 族氮化物材料中, 自发极化与压电极化常常是同时存在的. 值得注意的是, 计算表明 [15], III-V 族氮化物纤锌矿半导体的压电极化强度要比一般的 III-V 族或 II-VI 族半导体材料高出一个数量级. 界面晶格匹

配关系可以设计压应力或张应力, 产生与自发极化或同向或反向的压电极化, 从而增强或减弱系统宏观极化场, 构成了纤锌矿极性半导体极性界面调控的物理基础 (见图 1(b)).

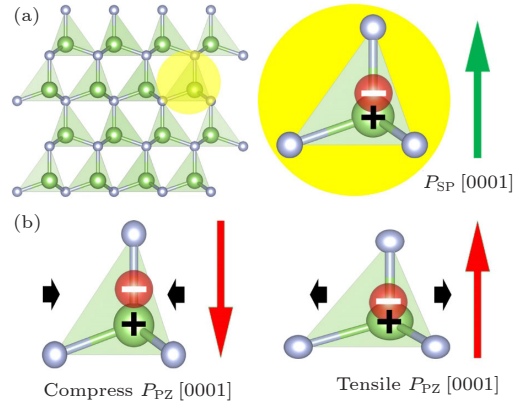


图 1 纤锌矿 III-V 族氮化物中自发极化 (a) 与压电极化 (b)
Fig. 1. Schematics of spontaneous polarization (a) and piezoelectric polarization (b). The orientations of piezoelectric polarization can be tuned by external strain.

2.2 GaN/InN/GaN 量子阱能隙调控

长期以来, 纤锌矿 III 族氮化物, 包括 InN、GaN 与 AlN 等材料, 由于在白光照明、高频大功率晶体管等方面的广泛应用引起人们广泛地关注. 这里我们首先考虑 GaN/InN/GaN 量子阱结构, 其中 GaN 与 InN 构成了 I 型异质结 (参见图 2). GaN 为带隙约 3.44 eV 的直接带隙半导体, 其晶格常数为 $a = b = 3.182\text{\AA}$; $c = 5.175\text{\AA}$; 而 InN 晶格常数为 $a = b = 3.548\text{\AA}$; $c = 5.751\text{\AA}$, 为直接带隙 0.64 eV 的半导体. GaN/InN/GaN 量子阱结构如

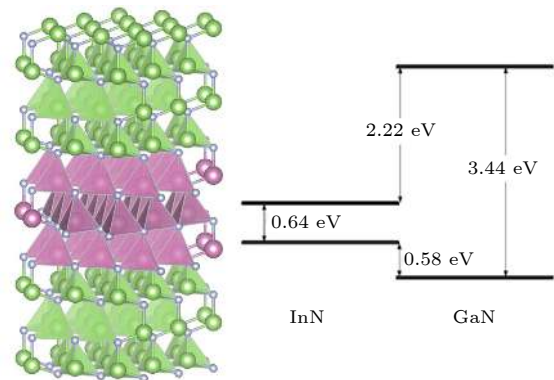


图 2 GaN/InN/GaN [0001] 方向生长量子阱示意图 (左), GaN、InN 带阶关系 (右)

Fig. 2. Schematics of GaN/InN/GaN QW (left panel) and the relative band alignment (right panel).

图 2 左侧所示, 量子阱生长方向为与自发极化平行的 [0001] 方向. 由于 InN 与 GaN 平面内晶格失配约为 12%, 极性界面应力引致的压电极化不容忽视, 与自发极化以及量子限域效应竞争, 共同决定了 GaN/InN/GaN 量子阱的电子结构.

图 3 中 (a)、(b) 所示分别为 InN 层厚为 2 层和 4 层时 GaN/InN/GaN 量子阱的能隙, 二者直接带隙分别为 0.8 eV 和 0 eV, 单层情形下能隙约为 2 eV, 此时量子限域效应占优势. 随着 InN 层数的增加, 量子限域效应衰减, 极化场显著降低系统能隙直至关闭能隙, 甚至能带翻转. 图 3(c) 清楚地表明极性面和非极性界面对能隙的影响. 对比沿自

发极性方向 [0001] 和非极性方向 [1010] 生长的 GaN/InN/GaN 量子阱带隙随 InN 层厚的改变, 非极性方向生长的量子阱, 其带隙总是高于极性方向生长的量子阱, 系统能隙无法被关闭. 而极性界面情形, 能隙在三层 InN 厚度时, 能隙接近零. 图 3(d) 展示了 GaN/InN/GaN 量子阱内建极化场随 InN 层厚改变的变化情况. 量子结构中内建极化场是自发极化与压电极化叠加的结果. 对于 GaN/InN/GaN 量子阱, GaN 区域的压电极化与自发极化同向, 而 InN 区域的压电极化与自发极化反向, 因此对于沿 [0001] 方向生长的量子阱, 内建极化场强度随着 InN 层厚增加下降较 [1010] 方向量子阱更快,

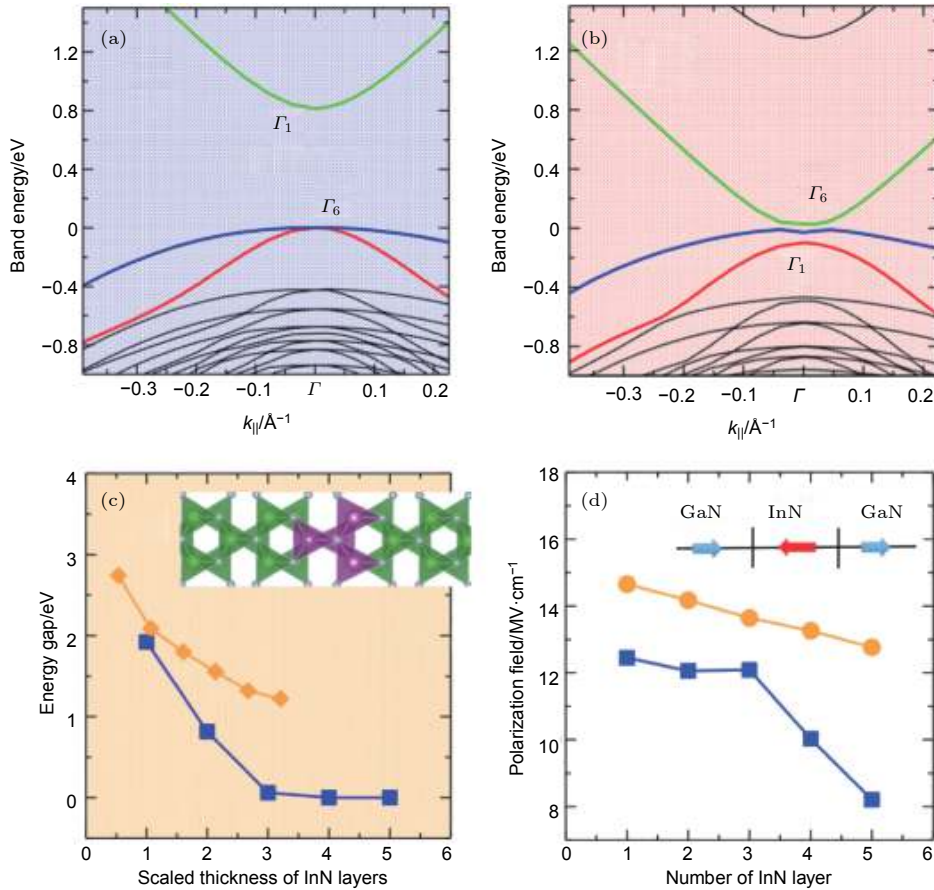


图 3 InN 厚度为 2 层 (a)、4 层 (b) 情况下 GaN/InN/GaN 量子阱 Γ 点直接带隙. (c) 极性方向 [0001] 与非极性方向 [1010] 生长 GaN/InN/GaN 量子阱带隙随 InN 层厚变化关系, 内插 [1010] 方向生长量子阱晶格示意图. (d) 内建极化场随量子阱中 InN 厚度变化关系, 蓝色与橙色点线分别表示极性方向 [0001] 和非极性方向 [1010] 生长量子阱情况. GaN、InN 区域极化场方向由内插图例示意

Fig. 3. (a) and (b) Band structure of a GaN/InN/GaN QW around the Γ point for 2 and 4 ML of InN, based on first-principles DFT-HSE calculations. The green lines represent electron states, red lines light-hole states, and blue lines heavy-hole states. (c) calculated energy gaps as a function of the thickness of InN layers for polar ([0001]) (blue squares) and nonpolar ([1010]) (orange diamonds) GaN/InN/GaN QWs. The thicknesses were scaled to the thickness of 1 ML of InN in a polar QW and therefore correspond to the number of InN layers in the polar case. The inset shows a ([1010]) QW with two InN layers. (d) polarization field as a function of number of inserted InN layers calculated by DFT-HSE (blue squares) and based on theoretical polarization constants (orange circles). The blue and red block arrows in the inset show the polarization direction of GaN and InN regions.

但内建电场强度均为 10 MV/cm 量级, 远远超过了半导体栅极技术所能达到的强度.

2.3 GaN/InN/GaN 量子阱中的拓扑相: $k \cdot p$ 理论模型

基于群论不变量理论发展的多带 $k \cdot p$ 理论模型具有物理图像清晰、计算量相对较小、可考虑尺寸较大的量子体系、外场效应 (如: 电场、磁场和应变场等) 易于计入等特点, 已经广泛成功应用于半

导体低维量子结构^[16–18]的研究. 并且晶体的对称性要求使得利用 $k \cdot p$ 模型中少许待定参量就可以将量子体系在布里渊区高对称点的能谱性质完全刻画, 近年来我们采用 30 带的 kp 模型可以刻画整个布里渊区的电子能谱.

我们发展了考虑应变效应的纤锌矿半导体结构八带 $k \cdot p$ 哈密顿量. 在 GaN/InN/GaN 量子阱系统^[19]中, InN 的轻空穴和重空穴之间的劈裂很小, 这样相对于 HgTe 的四带 BHZ 模型^[20], 我们

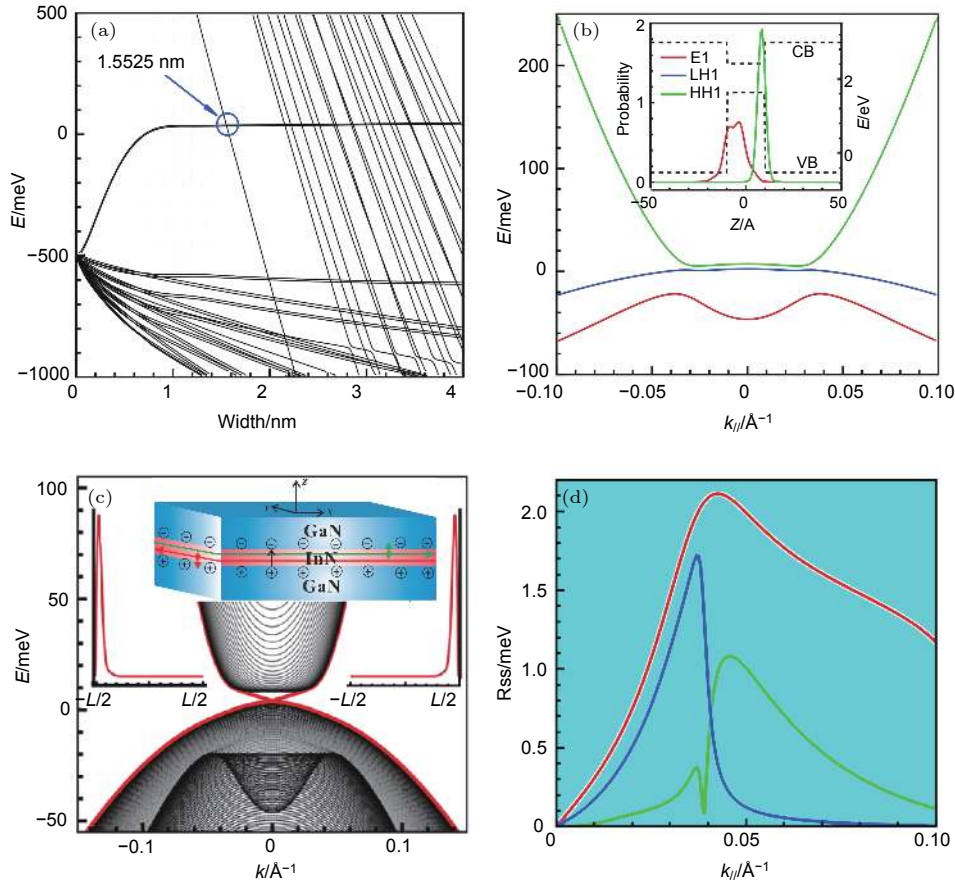


图 4 (a)GaN/InN/ GaN 量子阱能级随阱宽的变化关系; (b) 从八带 Kane 哈密顿量得到的 16Å GaN/InN/ GaN QW 的能带结构, 红线, 蓝线和绿线分别代表电子态 E1, 轻空穴态 LH1 和重空穴态 HH1. 内插图为 E1, LH1 和 HH1 在波矢 $k = 0$ 处的波函数分布; (c) 通过求解有效六带模型得到的霍尔条带的能带结构. 左右插图显示了一对 Kramers 边缘态的密度分布: 左边是 $k_{\parallel} = -0.1 \text{Å}^{-1}$ 处的自旋态, 右边是 $k_{\parallel} = 0.1 \text{Å}^{-1}$ 处的自旋向下态. 中间插图为无限长霍尔条带的示意图, 其宽度 (沿 y) 为 1000 埃. 沿 [0001] 生长方向的厚度 (标记为 z) 包括 InN 量子阱区、加上两侧的两个 200 Å 厚的 GaN 势垒层. 黄线表示螺旋边缘态, 绿色箭头表示自旋方向. 短黑箭头表示极化电场方向. (d) 电子 (绿色), HH (蓝色) 和 LH (红色) 子带的 Rashba 自旋劈裂 (RSS)

Fig. 4. (a) The energy level varies with GaN/InN/GaN quantum wells width ; (b) the energy band structure of 16Å GaN/InN/GaN QW obtained from the eight-band Kane Hamiltonian, the red line, the blue line and the green line represent the electronic state E1, the light hole state LH1 and the heavy hole state HH1, respectively. The inner illustrations are the wave function distribution of E1, LH1 and HH1 at the wave vector $k = 0$; (c) band structure of the Hall bar obtained by solving the effective six-band model. The left and right insets show the density distributions of one Kramers pair of edge states: on the left the spin-up state at $k_{\parallel} = -0.1 \text{Å}^{-1}$, on the right the spin-down state at $k_{\parallel} = 0.1 \text{Å}^{-1}$; The middle inset is schematic of an infinite long spin Hall bar with a width (along y) of 1000 Å. The thickness along the [0001] growth direction (labeled as z) comprises the InN QW plus two 200-Å -thick GaN barrier layers on either side. The yellow lines show the helical edge states, and the green arrows show the spin orientation. The short black arrows indicate the polarization induced electric field; (d) rashba spin splitting (RSS) of electron (green), HH (blue) and LH (red) subbands.

构建一个有效六带 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 模型研究 InN 量子阱在极化电场下的电子结构。

图 4(a) 表述的是量子阱能级随阱宽的变化关系, 从八带 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 模型计算结果看出, GaN/InN/GaN 量子阱系统, 在阱宽大于 15.5\AA 的时候, 带隙反转. 这一临界转变厚度, 大约为 5 个 InN 单层厚度. $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 模型使得我们能够对压变, 极化电场和自旋轨道耦合作用相互之间的竞争和调制进行详细研究, 同时也方便于我们揭示拓扑相变背后蕴藏的物理图像. 图 4(b) 为 GaN/InN/GaN 量子阱的反转带隙能谱图, 从图可以看出具有 Γ_6 对称性的电子态 E1 (红颜色标记) 在具有 Γ_8 对称性的空穴态 (重空穴态 HH1 绿线标记, 轻空穴态 LH1 蓝线标记) 下面, 能带发生反转. 内插图 of E1, LH1 和 HH1 在 $k=0$ 点处的波函数分布. 自旋轨道耦合在拓扑相变中起着十分关键的作用. InN 和 GaN 的本征自旋轨道耦合非常小, 数量级为大概几个 meV. 我们发现强烈的界面极化电场诱导了一个可观的 Rashba 自旋轨道耦合. 量子阱中的 Rashba 自旋轨道耦合吸引了人们的广泛注意, 因为 Rashba 自旋轨道耦合可以通过门电压 [21,22] 和能带工程 [23,24] 调控. 在图 4(d) 中, 我们从八带 Kane 模型出发, 估算 Rashba 自旋轨道耦合的强度为 $1\text{--}2$ meV 数量级, 这与 InAs 和 HgTe 量子阱中的由于外加电场引起的 Rashba 自旋劈裂相当 [25–27]. 通常这种较强的 Rashba 自旋轨道耦合只能发生在重原子系统中.

更为直接的证据拓扑相变是在拓扑绝缘体中, 在边界处总会存在奇数对 Kramers 简并对 [5,28]. 边缘态能谱可以通过解有限宽度的自旋霍尔条带结构的有效六带模型而得到. 我们构造与生长方向垂直的自旋霍尔条带结构系统 (见图 4(c) 内插图), 并计算了该系统的边缘态. 能带结构在图 4(c) 中呈现, 图 4(c) 左右内插图还给出了边缘态的 Kramers 对的密度分布. 结果明显的表明: 在电子态 E1 和轻空穴态 LH1 之间的带隙内出现了边缘态, 边缘态的分布在实空间是局域在自旋霍尔条带结构的边界. 该系统中拓扑非平庸的带隙大概为 15 meV, 这比 HgTe/CdTe 系统中相当 [29], 但 InN 量子阱中无需重原子元素存在, 并可以被集成于 InN 基的晶体管中, 原则上可以被广泛应用于高频和高功率器件中 [30].

GaN/InN/GaN 量子阱结构目前已经被实验

成功制备 [31], 其中 InN 的厚度可以少至 $1\text{--}2$ 个原子层, 并且 GaN、InN 极性界面具有可原子级分辨的平整度, 我们所提出的 GaN/InN/GaN 量子阱中强烈的极化场及其能隙的大范围调控 [19] 为实验所验证 [32]. 这一量子相变是由材料本身具有的强的极化电场驱动的, 这是首次在弱本征自旋轨道耦合和常规轻原子半导体系统中提出利用本征极化电场实现拓扑绝缘体相.

3 非极性半导体的能隙调控

IV 族元素半导体如 Si、Ge 均为非极性半导体材料, 其晶格结构为金刚石型晶体, 原子间的键为纯共价键. 但相比于 III-V 族的化合物半导体, 如 GaAs 等重要光电材料, IV 族元素半导体存在着载流子迁移率较低、光电性能较差 (Si、Ge 均为间接带隙半导体材料) 的弱点. III-V 族化合物半导体大多具有闪锌矿晶格结构, 原子间形成的是极性键, 因此本质上存在极性界面, 非极性-极性半导体界面的生长有着长期的积累, 早期的工作着眼于降低 III-V 族化合物半导体集成电路的生产成本 [33]. 我们的工作 [34] 发现, 非极性半导体与极性半导体的极性界面, 不但可以显著改变非极性半导体材料的本征能隙, 同时可以使间接能隙转变为直接能隙, 使 Ge、Si 满足如太赫兹、红外等重要波段光电应用的需求.

3.1 IV 族非极性半导体极化场起源

我们考虑 GaAs-Ge 极性界面系统, GaAs 与 Ge 晶格常数均为 5.65\AA , 二者晶格完美匹配, 同时, Ge 本身具有中心反演对称性, 压电极化在该系统中的贡献微乎其微. 我们设计的 GaAs/Ge/GaAs 量子阱沿 [111] 方向生长, 这样的设计基于以下考虑: (1) 处于 GaAs 中间的 Ge 层, 其上下界面成键方式不同, 如图 5(a) 和 5(c) 所示, 上界面处 Ge 与 As 原子成极性键, 界面处积累电子, 下界面处 Ge 与 Ga 原子成极性键, 界面处积累空穴, 在 Ge 的量子结构产生内建极化场; (2) 极性界面使 GaAs 与 Ge 的布里渊区同时发生折叠, 其结果是倒空间 L 点的能带被折叠到 Γ 点, 如图 5(b) 所示, 由于体材料的 Ge 是导带底在 L 点的间接能隙半导体, 因此这样的界面设计可以使 Ge 的量子结构变为直接能隙.

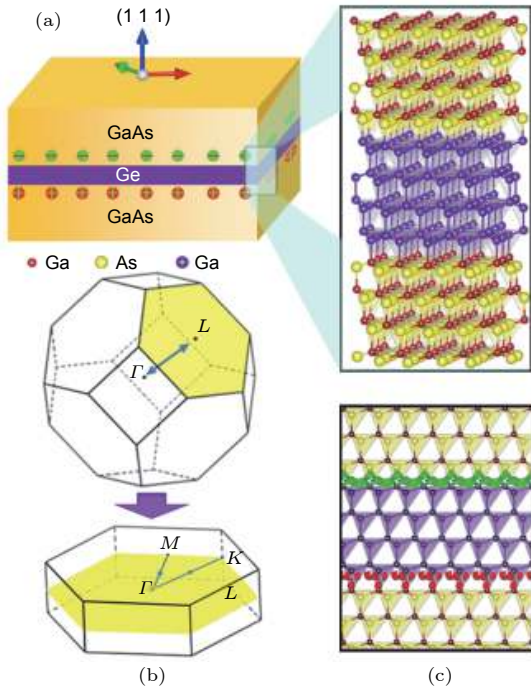


图 5 (a) GaAs/Ge/GaAs[111] 量子阱示意图, (b) 布里渊区折叠示意图, (c) GaAs/Ge/GaAs[111] 量子阱上下极性界面电荷积累示意图.

Fig. 5. (a) Schematic of the structure of an ultrathin Ge layer sandwiched by thick GaAs layers (the upper left-hand panel). The upper right-hand panel amplifies the atomic configuration of the GaAs/Ge/GaAs quantum well containing four bilayer Ge. Notice that the Ga and As atoms locate at the opposite interfaces which leads to a charge accumulation schematically shown in the left-hand panel. (b) the BZ of bulk Ge and the folded BZ of GaAs = Ge = GaAs QW along the [111] crystallographic direction. (c) the charge accumulation at two opposite interfaces obtained from the first-principles calculation. The red and green isosurfaces describe the positive and negative charge accumulations at opposite interfaces.

另外需要指出的是, GaAs/Ge 界面晶格常数的完美匹配使这一方案相较于大晶格失配的 GaN/InN/GaN 量子阱更易生长.

3.2 GaAs/Ge/GaAs 极性界面电子结构调控

尽管 GaAs/Ge/GaAs 量子阱中极化场的来源与 GaN/InN/GaN 量子阱截然不同, 极化场的强度仍可比拟, 约为 10 MV/cm 量级. GaAs/Ge/GaAs 量子阱的带隙由量子限域效应和极化场竞争决定, 随着 Ge 层厚的增加, 带隙由 1.6 eV 单调下降至 0 eV (见图 6(a)、(b)). 此外, GaAs/Ge/GaAs 量子阱破坏了 Ge 材料本身的中心反演对称性, 体系也具有较强的压电效应. 由于 GaAs 与 Ge 晶格的完

美匹配, 我们可以通过掺杂、机械应力等方式对量子阱施加平面内应力, 平面内的张应力会增强极化场, 使能隙降低, 而压应力则会削弱极化场, 是能隙增大. 对于 1% 范围内的形变, 带隙的变化是线性的, 且变化范围在 0.13 eV 左右 (见图 6(c)), 这使得我们可能通过 Ge 的层厚以及应力手段, 连续覆盖 0–1.6 eV 波段, 准确设计满足特定波段光电应用需求的 GaAs/Ge/GaAs 量子阱.

3.3 GaAs/Ge/GaAs 量子阱的拓扑相: $k \cdot p$ 理论模型

类比 GaN/InN/GaN 量子阱系统, 我们也尝试建立 GaAs/Ge/GaAs 量子阱 $k \cdot p$ 理论模型来刻画量子阱中的拓扑相变, 与 InN 不同的是 Ge 为间接带隙半导体材料. 为了完整刻画材料体系整个布里渊区的能带信息, 我们成功的发展了研究间接带隙半导体的三十带 $k \cdot p$ 理论模型^[34]. 三十带 $k \cdot p$ 模型可以有效在整个布里渊区中较准确的描述半导体的能带结构.

图 7(a) 为三十带 $k \cdot p$ 理论量子阱能带结构. 计算发现带隙附近最重要的态是自旋向上和向下的电子态 ($|E, \uparrow\rangle$ 和 $|E, \downarrow\rangle$), 以及自旋向上和向下的重空穴态 ($|HH, \uparrow\rangle$ 和 $|HH, \downarrow\rangle$). 值得注意的是, 电子和重空穴子带仅表示最低导带和最高价子带的主要分量, 实际上由于带间耦合而使得与电子和重、轻空穴态混合. 通过 $k \cdot p$ 理论计算, 我们首先确认 GaAs/Ge/GaAs 量子阱系统中的能带反转. 数值模拟表明, 当 Ge 层的厚度大于 18 Å 且量子阱受到约 0.5% 的拉伸应变时, 发生反转. 反转能带结构如图 7(a) 所示; 电子 Γ_1 态的能量低于价态 Γ_5 . 通常 Ge 和 GaAs 本征的自旋轨道耦合比较小, 不足以实现拓扑相变. 从图 7(a) 内插图的三十带的 $k \cdot p$ 理论计算中, 我们发现大的界面电场可以诱导一个相当大的 Rashba 自旋轨道耦合 (~ 15 meV), 量级上可与强自旋轨道耦合重元素体系的 HgTe 系统相比拟^[25,26]. 值得指出的是这里没有任何拟合参数, GaAs/Ge/GaAs 量子阱中的这种大的 Rashba 自旋轨道耦合是强电场的自然结果, 可以将体系驱动至拓扑绝缘体相.

在 GaAs/Ge/GaAs 量子阱中, 由于具有 Γ_5 对称性的轻空穴带远离对拓扑相变起主要作用的电子带和重空穴带, 而我们只关注体带隙 (10 meV) 内的边缘态, 因此我们将三十带哈密顿量约化到一个类似于 BHZ 的四带 $k \cdot p$ 模型, 以研究自旋霍尔

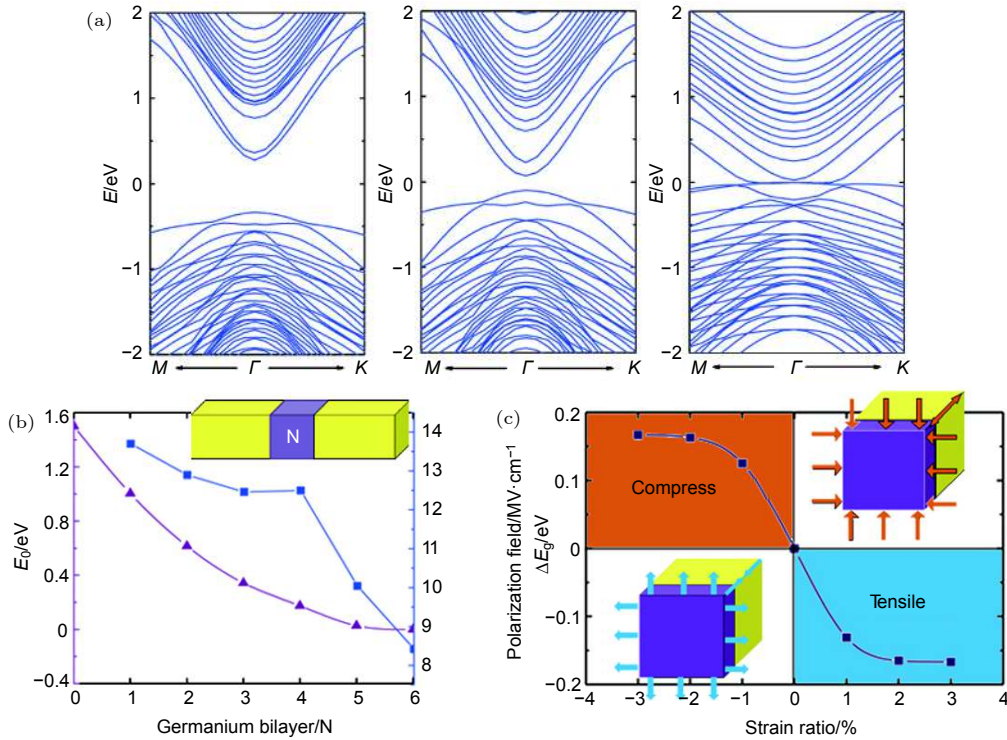


图 6 不同 Ge 层厚 GaAs/Ge/GaAs[111] 量子阱的带隙, (a) 从左至右分别对应 Ge 层厚为 2、4 个双原子层以及 4 个双原子层量子阱并考虑 3% 平面内张应力情况. 左下 (b) 为量子阱能隙以及内建电场大小随 Ge 层厚增加的变化关系. (d) 平面内应力对能隙的改变.

Fig. 6. (a) Band structures of GaAs/Ge/GaAs sandwiched structures with different Ge portions obtained from the first-principles HSE calculations. From left to right, two Ge bilayers, four Ge bilayers, and four Ge bilayers with 3% in-plane tensile strain. (b) the band gap (purple line with diamonds) and the inner polarization field strength (blue line with squares) as functions of the number of Ge bilayers. (c) the variation of band gap $E_g = E_{\text{strain}} - E_g$ as a function of in-plane strain.

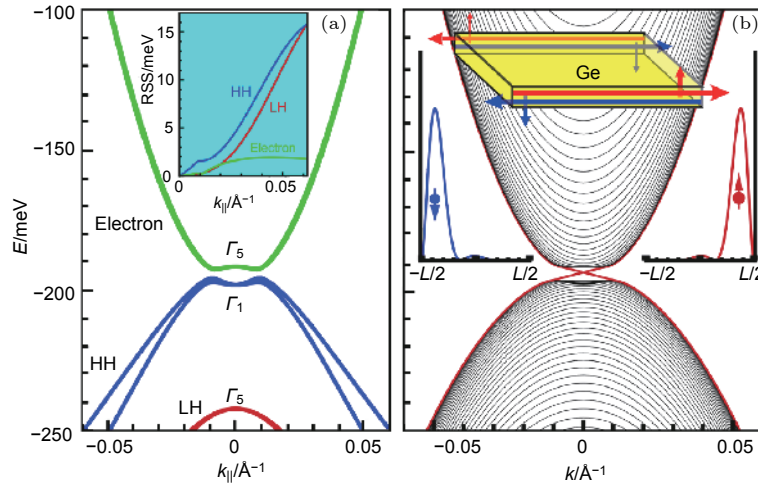


图 7 (a) 从 30 带 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 模型获得的具有 18 Å 的 Ge 层厚度的 GaAs/Ge/GaAs QW 结构的能带结构. 插图显示了电子, 重空穴 (HH) 和轻空穴 (LH) 的 Rashba 自旋分裂 (RSS). (b) 通过求解有效四带模型得到的量子线的能带结构. 无能隙的边缘态由图中的红线表示. 中心插图显示了量子线的示意图和螺旋边缘态. 右 (红色) 和左峰 (蓝色) 分别描述了在 $k_{\parallel} = -0.01 \text{\AA}^{-1}$ 处的自旋向上和自旋向下边缘状态的密度分布.

Fig. 7. (a) Band structures of a GaAs/Ge/GaAs QW structure with 18 Å Ge layer thickness obtained from the 30-band $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ model. The inset shows the Rashba spin splitting (RSS) of electron, heavy hole (HH), and light hole (LH). (b) Band structure of the quantum wire obtained by solving the effective four-band model. The gapless edge states are shown by the red line. The central inset shows the schematic of the quantum wire and the helical edge states. The right (red) and left peaks (blue) describe the density distribution of the spin-up and spin-down edge states at $k_{\parallel} = -0.01 \text{\AA}^{-1}$, respectively.

条带中的边缘态性质. 二维拓扑绝缘体的基本特征是在二维拓扑绝缘体边界附近存在螺旋边缘态. 我们考虑宽度为 1000Å 的量子线结构. 沿 (111) 生长方向上, 是由厚度为 18Å 的 Ge 层夹在两个 200Å 的 GaAs 层之间组成. 图 7(b) 为上述量子线的能带结构以及一对 Kramers 边缘态的密度分布. 如图所示, 新的能量分支出现并扫过整个带隙, 这些态局域在量子线的边缘附近. 具有相同的面内动量 k_{\parallel} , 自旋向上和向下的边缘态分布在量子线在相对边缘处. 这些螺旋边缘态的存在, 清楚地证明了这种二维 GaAs/Ge/GaAs 量子阱系统已被驱动之拓扑绝缘体相.

4 总结与展望

综上所述, 我们针对不同类型的半导体材料设计了相应的极性界面方案, 以调控半导体量子结构的电子结构. 对于极性半导体, 如 InN, 极化场的增强源于纤锌矿半导体中自发极化与压电极化的效果叠加; 而对于 Ge 等非极性半导体, 极化场则源于非极性半导体与极性半导体界面成键的电荷积累差异. 计算表明两种极性界面方案都可以产生 10 MV/cm 的内建极化场, 这样的内建极化场比当前最高记录的栅极电场高 1 个数量级, 可以在 0–2 eV 的大范围内有效调控主流半导体材料带隙, 从而可能实现广泛的光电器件应用. 同时, 极性界面产生的极化场显著增强了半导体系统的 Rashba 自旋轨道耦合效应, 足以将 InN、Ge 等主流半导体转变为非平庸带隙与 HgTe/CdTe 量子阱相当的拓扑绝缘体.

极性界面本身还具有丰富的物理亟待研究, 包括极性界面半导体界面的缺陷与重构, 电荷积累与转移的机制、以及新奇的物相与新原理的器件设计. 我们相信半导体极性界面这一领域既有丰富的物理, 也有较乐观的应用前景, 值得大家深入地开展实验和理论研究.

参考文献

- [1] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M 1980 *Physical Review Letters* **45** 494
- [2] Tsui D C, Stormer H L, Gossard A C 1982 *Physical Review*

- Letters* **48** 1559
- [3] Haldane F D M 1988 *Physical Review Letters* **61** 2015
- [4] Chang C Z, Zhang J, Feng X, Shen J, Zhang Z, Guo M, Li K, Ou Y, Wei P, Wang L L, Ji Z Q, Feng Y, Ji S, Chen X, Jia J, Dai X, Fang Z, Zhang S C, He K, Wang Y, Lu L, Ma X C, Xue Q K 2013 *Science* **340** 167
- [5] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [6] He Q L, Pan L, Stern A L, Burks E C, Che X, Yin G, Wang J, Lian B, Zhou Q, Choi E S, Murata K, Kou X, Chen Z, Nie T, Shao Q, Fan Y, Zhang S C, Liu K, Xia J, Wang K L 2017 *Science* **357** 294
- [7] Weng H, Fang C, Fang Z, Bernevig B A, Dai X 2015 *Physical Review X* **5** 011029
- [8] Yoshida S, Misawa S, Gonda S 1983 *Appl. Phys. Lett.* **42** 427
- [9] Amano H, Sawaki N, Akasaki I, Toyoda Y 1986 *Appl. Phys. Lett.* **48** 353
- [10] Asif Khan M, Kuznia J N, Olson D T, George T, Pike W T 1993 *Appl. Phys. Lett.* **63** 3470
- [11] Hwang H Y, Iwasa Y, Kawasaki M, Keimer B, Nagaosa N, Tokura Y 2012 *Nat. Mater.* **11** 103
- [12] Natural Editorial 2012 *Nat. Mater.* **11** 91
- [13] Seibold G, Caprara S, Grilli M, Raimondi R 2017 *Physical Review Letters* **119** 256801
- [14] Kroemer H 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 783
- [15] Bernardini F, Fiorentini V, Vanderbilt D 1997 *Physical Review B* **56** R10024
- [16] Xia J-B 1989 *Physical Review B* **40** 8500
- [17] Xia J B, Zhu B F 1995 *Semiconductor Superlattice Physics*(Shanghai: Shanghai Scientific & Technical Publishers) (in Chinese) [夏建白, 朱邦芬 1995 半导体超晶格物理 (上海: 上海科学技术出版社)]
- [18] Chu J H 2005 *Narrow Gap Semiconductor Physics* (1 Ed.) (Beijing: Science Press) (in Chinese) [褚君浩 2005 窄禁带半导体物理学 (1 Ed.) (北京: 科学出版社)]
- [19] Miao M S, Yan Q, Van de Walle C G, Lou W K, Li L L, Chang K 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 186803
- [20] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757
- [21] Nitta J, Akazaki T, Takayanagi H, Enoki T 1997 *Physical Review Letters* **78** 1335
- [22] Grundler D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 6074
- [23] Winkler R 2003 *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Springer)
- [24] Zawadzki W, Pfeffer P 2004 *Semicond. Sci. Technol.* **19** R1
- [25] Yang W, Chang K, Zhang S C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 056602
- [26] Li J, Chang K 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 222110
- [27] Li J, Yang W, Chang K 2009 *Phys. Rev. B* **80** 035303
- [28] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [29] Knez I, Du R-R, Sullivan G 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 136603
- [30] Mishra U K, Shen L, Kazior T E, Yi-Feng W 2008 *Proceedings of the IEEE* **96** 287
- [31] Songbek C, Akihiko Y, Hiroshi W, Yoshihiro I, Akihiko Y 2009 *Appl. Phys. Express* **2** 021001
- [32] Pan W, Dimakis E, Wang G T, Moustakas T D, Tsui D C 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 213503
- [33] Jiang W D, Zang X J, Wang X 1989 *Acta Phys. Sin.* **18** 205 (in Chinese) [蒋维栋, 张翔九, 王迅 1989 物理 **18** 205]
- [34] Zhang D, Lou W, Miao M, Zhang S-c, Chang K 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 156402

SPECIAL TOPIC—In commemoration of the 100th anniversary of the birth of Kun Huang
Theoretical progress of polarized interfaces in semiconductors*

Zhang Dong¹⁾ Lou Wen-Kai¹⁾ Chang Kai^{1)2)†}

1) (*SKLSM, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

2) (*Center for Excellent in Topological Quantum Computation, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

(Received 16 August 2019; revised manuscript received 18 August 2019)

Abstract

The manipulation of electronic structures of conventional semiconductors remains the key issue of modern semiconductor physics and devices. Compare to limited modulation of semiconductors by conventional gate technique, we theoretically demonstrate that, polarized interfaces can generate a strong built-in electric field (about 10 MV/cm) in both polar and non-polar semiconductors, and the polarized interfaces can tune the band gaps in a wide range (approximately 0—2 eV), and significantly enhances the Rashba spin-orbit coupling strength as well. In this paper, we introduce polarized interfaces in polar semiconductor InN and non-polar semiconductor Ge, and generate topological insulator phases by polarized interfaces. The polarized interface is compatible with conventional semiconductor fabrication techniques and shows interesting physics and potential optoelectronic applications.

Keywords: spin-orbit coupling, polarization, interfaces, semiconductors

PACS: 71.70.Ej, 77.22.Ej, 79.60.Jv, 61.82.Fk

DOI: [10.7498/aps.68.20191239](https://doi.org/10.7498/aps.68.20191239)

* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2017YFA0303400) and National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11574303).

† Corresponding author. E-mail: kchang@semi.ac.cn