摘要

铁磁半导体兼具铁磁性与半导体性，具有丰富的自旋极化效应，是研究自旋电子学的一种新型材料。铁磁半导体相关异质结具有将信息处理与信息存储集于一身的应用潜能，成为研究自旋电子学的热门电子器件。

本文扩展了研究半导体的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰理论，得到了适用于研究铁磁半导体的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰方法，并得到了铁磁半导体的能带结构信息以及波函数。进一步采用结合传输矩阵的量子散射方法，对铁磁半导体相关异质结的传输性质进行了研究。另外，用旋转矩阵的近似方法研究了铁磁半导体相关异质结在任意磁构型下的传输性质，并得到了隧道磁致电阻TMR。具体研究两种异质结：

一则，分别在两种模型即自由空穴带模型和扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰模型的基础上，使用结合传输矩阵的量子散射方法，对双势垒隧道结GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/GaMnAs的隧穿性质进行研究，并对两者所得的结果进行比较。发现能带间的混合作用对隧道结透射系数有显著影响，势垒的存在使隧道结产生共振隧穿现象，以及隧道结的透射系数和TMR随中间势阱层厚度的变化具有周期性等结论。此外，用旋转矩阵的近似方法研究任意磁构型时隧道结的输运性质，结果表明在自由空穴带近似模型下，TMR随相对磁化角度θ变化显示出单调关系，并随$\sin^2(\theta/2)$的变化为线性关系，而在扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰模型下，由于铁磁半导体中能带的混合作用，TMR随相对磁化角度θ的变化呈现出非单调性变化。

二则，在扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰模型基础上，使用结合传输矩阵的量子散射方法研究了自旋过滤器件GaAs/GaMnAs/AlAs/GaMnAs/GaAs，得到了透射系数随入射能量的变化关系，透射系数随中间势垒层AlAs厚度的变化关系，TMR随中间势垒层AlAs厚度的变化关系，TMR随磁性层相对磁化角度θ的变化关系等传输性质。

在实验上，对铁磁半导体构成的相关异质结的研究能为制备新的高效率信息处理和磁存储器件提供理论指导。

关键词：$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰方法，铁磁半导体，异质结

Abstract

Ferromagnetic semiconductor with magnetic and semiconducting properties, showing abundant spin-polarizing effects, becomes one of the most attractive materials of spintronics. The relevant hetero-junctions composed of ferromagnetic semiconductor possess the potential application of designing a device with information process and data storage and become one kind of popular-researching spin-dependent electronic component.

In this article, we extend the $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ perturbation method to studying ferromagnetic semiconductor materials, and obtain the wave functions and information of energy bands for ferromagnetic semiconductor. Furthermore, we combine the extended $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ perturbation method with quantum scattering method (transfer matrix) to study the transport properties of hetero-junctions consisting of ferromagnetic semiconductor. We also study the transport properties and TMR in different magnetic configurations by using spin transformation matrix approximation. Two hetero-junctions are discussed:

First, we study the double barrier tunnel junction GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs using free-hole approximation model and extended $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ perturbation model, respectively, combining quantum scattering method, and then we compare their results. Transmission coefficients are found to strongly depend on bands-mixing effect. The spin-polarized resonant tunneling phenomena with transmission coefficients and TMR changing periodically with the width of middle potential well are also exhibited. Furthermore, it is shown that the dependence of TMR on relative magnetization angle θ is not monotonous in the $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ perturbation model, which is different from that in the free-hole approximation model.

Second, we study the spin-filter GaAs/GaMnAs/AlAs/GaMnAs/GaAs structure and obtain abundant transport properties. The dependences of transmission coefficients on incident energy and middle AlAs thickness are presented. The variation of TMR with AlAs thickness and relative magnetization angle θ are also illustrated.

Experimentally, it is hoped that the results can provide a theoretical guide for manufacturing devices with high-effective information process and magnetic memory

keywords: $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ perturbation method, ferromagnetic semiconductor, heterojunction

第一章 绪论

在信息技术迅速发展的今天，自旋电子学在信息处理与数据存储方面日益显示出其重大的应用前景。自旋电子学研究器件中电子自旋自由度的控制与操纵，自旋动力学和自旋极化的输运性质等等，是凝聚态物理中一个新兴而重要的分支。铁磁半导体材料因同时具有铁磁性与半导体性，加之多种潜在的优越性，使得它成为自旋电子学中的新兴材料，引起人们越来越多的关注。

铁磁半导体是在半导体材料中掺入磁性离子形成的，通常分为（II,VI）族铁磁半导体和（III,V）族铁磁半导体两种，它们分别是在（II,VI）族化合物半导体和（III,V）族化合物半导体中进行Mn离子掺杂而形成的。以$Ga_{1-x}Mn_xAs$为例：Mn离子占据了原本属于Ga的格点，扮演了磁矩和受主的角色，结果是产生的高浓度的自由空穴，导致Mn离子之间长程序的铁磁相互作用，使材料产生铁磁性 [1-3]。这种铁磁相互作用使材料能带发生了自旋劈裂，产生了如巨Faraday和Kerr旋转效应 [4-6]、磁致金属-绝缘体相变 [7]等一些自旋极化效应。当Mn离子浓度处于$0.02 < x < 0.08$范围内时，观察到了$Ga_{1-x}Mn_xAs$的居里温度达到了110K [8, 10]。铁磁半导体具有广阔的应用前景：通过调整Mn离子的掺杂浓度，可以调整材料的晶格常数以及能带参数 [9]，使铁磁半导体成为量子阱、超晶格和其它相关能带工程的理想材料。铁磁半导体的高居里温度（达110K）显示出可能的技术用途。另外，成熟的材料生长工艺 [11-13]为铁磁半导体的应用奠定了基础。

近年来，在铁磁半导体隧道结中发现了隧道磁致电阻（TMR）和自旋极化相关现象 [14, 15]，显示出铁磁半导体相关异质结的重大应用前景。人们在研究半导体异质结的基础上，对铁磁半导体相关异质结作出进一步研究。其中铁磁半导体层处于异质结的不同位置将影响异质结的输运性质。普遍的隧道结将铁磁半导体层作为自旋极化载流子的注入层，得到自旋极化的电流。如GaMnAs/GaAs/GaMnAs隧道结 [16]和GaMnAs/AlAs/GaMnAs隧道结 [14, 15]等。又因为铁磁半导体具有铁磁性，可将它作为自旋过滤器件中的过滤势垒层。目前有很多其它磁性材料构成的自旋过滤器件 [17-19]，其磁性层中自旋劈裂的能带造成高度不同的势垒，对具有不同自旋的载流子有过滤作用，使结中产生极化电流。这些自旋过滤器件的极化电流可以通过外场

进行调节，因而实现对自旋自由度的控制。对于铁磁半导体构成的双势垒或多势垒隧道结，在理论上和实验上的研究都比较少，而且关于任意磁构型下的异质结的输运性质几乎没有此类研究。特别是对于自旋过滤器件来说，考虑用铁磁半导体材料如GaMnAs来构成过滤层，目前似乎还没有文献表明研究过此类结构。

异质结作为一种材料与结构相结合的系统，对其研究需要使用分析材料的理论方法与分析结构的理论方法相结合。以铁磁半导体相关异质结为例，分析铁磁半导体材料的理论方法有有效质量理论 [20–22]，平均场理论 [23, 24]，第一性原理 [25–27]，$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰方法 [21, 28]等。在分析异质结结构方面，处理较厚的异质结有隧道哈密顿方法 [29]。处理较薄的系统时，有传输矩阵的量子散射方法 [30, 31]。另外，Y.X.Liu等人发明了大矩阵的方法 [32]，将异质结划分为格点，巧妙地得到了递推的哈密顿来研究异质结。

研究铁磁半导体相关异质结时，由于铁磁半导体兼具铁磁性与半导体性，并和异质结结构结合起来，对其进行理论研究是比较复杂的。常见的一种做法是用自由电子（或空穴）模型和量子散射方法相结合。1989年J.C.Slonczewski发展的量子散射方法 [33]，使用自旋极化的自由电子模型来描述两边铁磁金属和中间方势垒模型的绝缘层，在依据量子力学的薛定谔方程给出入射波函数、反射波函数和透射波函数的形式后，保持隧穿前后电子的能量守恒、自旋守恒和平行动量守恒，用量子散射的方法计算隧穿矩阵元，再根据隧穿矩阵元来计算极化电流和隧道磁致电阻效应。这种方法使隧道结两边的量子态严格地一一对应，电子在隧穿过程中保持能量守恒和动量的平行分量守恒，并且保留了反射、折射等丰富的物理现象，表现了清晰的物理图象，适用于处理绝缘层比较薄、界面比较光滑、杂质散射较少的物理系统。这种方法也可以用来求解空穴载流子的隧穿问题和TMR问题 [16, 34, 35]。这种自由电子（或空穴）模型结合量子散射方法的求解理论的优点是形式简单，求解方便，并且可以得到精确的解析解。缺点是以自由电子（或空穴）来近似处理铁磁半导体，不能充分地反映材料的半导体性。对于铁磁性的描述，也只考虑简单的分子场作用，简化了铁磁半导体中的能带结构。在解释含有铁磁半导体这种能带比较复杂的材料的异质结的时候，自由电子（或空穴）模型显得不够精确。另外能带间的混合作用也被忽略，自旋轨道耦合作用也很难用这种方法加以考虑。

考虑到用$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰方法与传输矩阵的量子散射方法相结合的做法在研究半导体异质结时取得了很大的成功 [35]，而铁磁半导体材料可以理解为是在半导体材料的基础上掺入磁性离子构成的。受此启发，试想扩展$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰方法，使之能适用于分析铁磁半导

体材料，并结合传输矩阵的量子散射的方法，便可以比较精确地分析铁磁半导体相关异质结的输运性质。

在本文第二章中，介绍了研究铁磁半导体材料的相关理论，并在第四章中得到了适用于分析铁磁半导体材料的扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰方法。在第三章中，我们用自由空穴带模型结合传输矩阵的量子散射方法对铁磁半导体双势垒隧道结GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs进行了理论推导。在第四章中，我们在得到扩展了的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰方法的基础上，结合传输矩阵的量子散射方法对铁磁半导体相关异质结进行了理论推导。在第五章中，我们把理论方法具体应用于两个异质结结构模型，分别是双势垒隧道结GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs和自旋过滤器件GaAs/GaMnAs/AlAs/GaMnAs/GaAs。在分析双势垒隧道结时，我们分别用了自由空穴带模型和扩展的$K\cdot P$模型结合传输矩阵的量子散射方法，并对两者得到的结果进行了对比讨论分析。在分析自旋过滤器件时，我们用的是扩展的$K\cdot P$模型结合传输矩阵的方法，对得到的相关结果进行了讨论。第六章中总结了本论文得到的结果并阐述了进一步深入研究该课题的展望。

第二章 铁磁半导体材料的相关理论

$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰方法原本是用于讨论半导体导带底和价带顶极值附近能带结构的一种有效而且实用的方法 [21]。由于铁磁半导体是在半导体的基础上进行磁性离子掺杂而成，为了能够进一步扩展$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰方法使之适用于分析铁磁半导体材料，有必要先对$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰方法作初步地介绍和说明。

2.1 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰方法

$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰方法首先是由J.Bardeen [36]和F.Seitz [37]引进的，是一种确定$\vec{k}$空间高对称点邻近的晶体电子波函数和有效质量的方法。后来，W.Shockley [38]将此方法推广到包含简并能带的情况，G.Dresslgaus [39]等和E.O.Kane [40]进一步推广到包含自旋-轨道相互作用的情况。Luttinger和Kohn [28]给出了包含自旋轨道耦合的6×6的哈密顿矩阵，具体方法作如下介绍 [21]:

已知半导体导带底或价带顶高对称点$\vec{k_0}$处的能量$E_n(\vec{k_0},\vec{r})$与波函数$\phi_n(\vec{k_0},\vec{r})$，首先将处于$\vec{k_0}$处周期势场$V(\vec{r})$的单电子薛定谔方程做一些变换：

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\vec{r})\right]\phi_n(\vec{k_0},\vec{r})=E_n(\vec{k_0},\vec{r})\phi_n(\vec{k_0},\vec{r}) \tag{2-1}$$

将$\phi_n(\vec{k_0},\vec{r})=e^{i\vec{k_0}\vec{r}}u_n(\vec{k_0},\vec{r})$代入上式，经变换整理可得只关于晶格周期函数的方程：

$$\left[\frac{\hbar^2\vec{k_0}^2}{2m}+\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\hbar}{m}\vec{k_0}\cdot\vec{P}-E_n(\vec{k_0},\vec{r})\right]\cdot u_n(\vec{k_0},\vec{r})=0 \tag{2-2}$$

此时的能量E_n 还是精确的$\vec{k_0}$处的能量。

$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 方法就是在已知$\vec{k_0}$处能量与波函数的基础上，求其附近$\vec{k}$处的能量与波函数。下面就来考虑$\vec{k_0}$附近$\vec{k}$处的能级波函数以及薛定谔方程。$\vec{k}$处的波函数可以用$\vec{k_0}$处的周期函数展开：$\psi_n(\vec{k},\vec{r})=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_n(\vec{k},\vec{r})=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\sum_j A_{nj}u_j(\vec{k_0},\vec{r})$ 对应能级为$E_n(\vec{k},\vec{r})$，仿照前面改写薛定谔方程的做法，将：

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\vec{r})\right]\psi_n(\vec{k},\vec{r})=E_n(\vec{k},\vec{r})\psi_n(\vec{k},\vec{r})$$

改写成：

$$\frac{1}{2m}\left[\hbar^2k^2+2\hbar\vec{k}\cdot\hat{p}+\hat{p}^2+V(\vec{r})\right]e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\sum_j A_{nj}u_j(\vec{k_0},\vec{r})$$
$$=E_n(\vec{k},\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\sum_j A_{nj}u_j(\vec{k_0},\vec{r}) \tag{2-4}$$

约去$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$，考虑到$\sum_j A_{nj}u_j(\vec{k_0},\vec{r})=u_n(\vec{k},\vec{r})$，再将$\vec{k}=\vec{k_0}+\Delta\vec{k}$代入得：

$$\left\{\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{\hbar}{m}\vec{k_0}\cdot\vec{p}+\frac{\hbar^2\vec{k_0}^2}{2m}+V(\vec{r})\right]+\left[\frac{\hbar}{m}\Delta\vec{k}\cdot\vec{p}\right]+\left[\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}^2-\vec{k_0}^2)\right]\right\}u_n(\vec{k},\vec{r})$$
$$=E_n(\vec{k},\vec{r})u_n(\vec{k},\vec{r}) \tag{2-5}$$

大括号内第一项即为$\vec{k_0}$处的能级$E_n(\vec{k_0},\vec{r})$，第二项为$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰项，第三项为能量的平移。如果设$\vec{k_0}=0$，则上式简化为：

$$\left[\hat{H}_0+\hat{H}_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}}\right]u_n(\vec{k},\vec{r})=E_n(\vec{k},\vec{r})u_n(\vec{k},\vec{r}) \tag{2-6}$$

其中，

$$\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2,\quad \hat{H}_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}}=\frac{\hbar}{2m}\vec{k}\cdot\vec{p}$$

将$\hat{H}_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}}$ 作为微扰项，用微扰论的方法即可以求得$\vec{k}$处的能级和波函数。

下面就介绍用$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰方法求解典型半导体材料Si和Ge的能带，并得到著名的Luttinger—Kohn哈密顿矩阵。如果不忽略电子的自旋轨道耦合作用，那么上面$\vec{k}$空间的薛定谔方程可表示成：

$$\left[\hat{H}_0+\hat{H}_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}}+\hat{H}_{so}\right]u_n(\vec{k},\vec{r})=E_n(\vec{k},\vec{r})u_n(\vec{k},\vec{r}) \tag{2-7}$$

其中，$\hat{H}_{so}=\frac{\hbar}{4m^2C^2}(\nabla V\times P)\cdot\hat{\sigma}$为自旋轨道耦合哈密顿量。已知Si和Ge在价带顶Γ点（$\vec{k}=0$）处是三重简并态，考虑自旋之后为六重简并态，分别标记为$|\phi_1\uparrow\rangle$,$|\phi_2\uparrow\rangle$,$|\phi_3\uparrow\rangle$,$|\phi_1\downarrow\rangle$, $|\phi_2\downarrow\rangle$,$|\phi_3\downarrow\rangle$。由于晶体点群的作用，晶体周期函数ϕ_1,ϕ_2,ϕ_3 按照一定的函数方式变换。

首先考虑$\hat{H}_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}}$ 微扰项，以ϕ_1,ϕ_2,ϕ_3三个周期函数为基的哈密顿矩阵为：

$$\begin{bmatrix} Ak_x^2+B(k_y^2+k_z^2) & Ck_xk_y & Ck_xk_z \\ Ck_xk_y & Ak_y^2+B(k_x^2+k_z^2) & Ck_yk_z \\ Ck_xk_z & Ck_yk_z & Ak_z^2+B(k_x^2+k_y^2) \end{bmatrix} \tag{2-8}$$

其中:

$$A=\frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{m\neq n}\frac{\langle\phi_1|p_x|m\rangle\langle m|p_x|\phi_1\rangle}{E_n^0-E_m^0}$$

$$B=\frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{m\neq n}\frac{\langle\phi_1|p_y|m\rangle\langle m|p_y|\phi_1\rangle}{E_n^0-E_m^0}$$

$$C=\frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{m\neq n}\frac{\langle\phi_1|p_x|m\rangle\langle m|p_y|\phi_1\rangle+\langle\phi_1|p_y|m\rangle\langle m|p_x|\phi_1\rangle}{E_n^0-E_m^0}$$

自旋轨道耦合哈密顿量为:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{so}&=\frac{\hbar}{4m^2C^2}(\nabla V\times P)\cdot\hat{\sigma}\\&=\frac{\hbar}{4m^2C^2}[(V_yp_z-V_zp_y)\sigma_x+(V_zp_x-V_xp_z)\sigma_y+(V_xp_y-V_yp_x)\sigma_z]\end{aligned}\tag{2-9}$$

在$|\phi_1\uparrow\rangle,|\phi_2\uparrow\rangle,|\phi_3\uparrow\rangle,|\phi_1\downarrow\rangle$, $|\phi_2\downarrow\rangle,|\phi_3\downarrow\rangle$下的矩阵元$\hat{H}_{ij}^{so}=\langle\phi_i\chi_i|\hat{H}_{so}|\phi_j\chi_j\rangle$,可求解得:

$$\hat{H}_{so}=\frac{\Delta_{so}}{3}\begin{bmatrix}0&i&0&0&0&-1\\-i&0&0&0&0&i\\0&0&0&1&-i&0\\0&0&1&0&-i&0\\0&0&i&i&0&0\\-1&-i&0&0&0&0\end{bmatrix}\tag{2-10}$$

其中矩阵元共同因子$\Delta_{so}/3=i\hbar\langle\phi_1|V_zp_x-V_xp_z|\phi_3\rangle/(4m^2C^2)$,由上哈密顿矩阵可求得自旋轨道耦合哈密顿的本征值与本征态,分别为:$E_{so}^1=-\Delta_{so}/3$对应四重简并态u_1,u_2,u_3,u_4, $E_{so}^2=2\Delta_{so}/3$对应二重简并态u_5,u_6:

$$\begin{cases}u_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1+i\phi_2)\chi_\uparrow\\u_2=\frac{i}{\sqrt{6}}[(\phi_1+i\phi_2)\chi_\downarrow-2\phi_3\chi_\uparrow]\\u_3=\frac{1}{\sqrt{6}}[(\phi_1-i\phi_2)\chi_\uparrow+2\phi_3\chi_\downarrow]\\u_4=\frac{i}{\sqrt{2}}(\phi_1-i\phi_2)\chi_\downarrow\end{cases}\quad\begin{cases}u_5=\frac{1}{\sqrt{3}}[(\phi_1+i\phi_2)\chi_\downarrow+\phi_3\chi_\uparrow]\\u_6=\frac{-i}{\sqrt{3}}[(\phi_1-i\phi_2)\chi_\uparrow+\phi_3\chi_\downarrow]\end{cases}\tag{2-11}$$

重新以u_1,u_2,u_3,u_4,u_5,u_6为$\hat{H}_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}}$哈密顿量新的基矢。这样做的理由如下:一方面,自旋轨道耦合哈密顿量在本征态构成的基下只有对角元非零,包含自旋轨道耦合作用的计算将比较简便。另一方面,在前面已经得到$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰哈密顿作用于$\phi_1$,$\phi_2$,$\phi 3$的积分元。因此在新基下$\hat{H}_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}}$的矩阵元运算将相对简单。如此,便可以得到包含自旋轨道耦

合作用的6×6 的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰哈密顿矩阵，也就是著名的Luttinger-Kohn哈密顿矩阵：

$$\hat{H}_{k\cdot p}+\hat{H}_{so}=$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}P & L & M & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}L & \sqrt{2}M \\ L^* & \frac{1}{6}P+\frac{2}{3}Q & 0 & M & \frac{1}{3\sqrt{2}}(P-2Q) & \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}L \\ M^* & 0 & \frac{1}{6}P+\frac{2}{3}Q & -L & -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}L^* & \frac{1}{3\sqrt{2}}(P-2Q) \\ 0 & M^* & -L^* & \frac{1}{2}P & \sqrt{2}M^* & \frac{1}{\sqrt{2}}L^* \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}L^* & \frac{1}{3\sqrt{2}}(P-2Q) & -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}L & \sqrt{2}M & \frac{1}{3}(P+Q) & 0 \\ \sqrt{2}M^* & \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}L^* & \frac{1}{3\sqrt{2}}(P-2Q) & \frac{1}{\sqrt{2}}L & 0 & \frac{1}{3}(P+Q) \end{bmatrix} \tag{2-12}$$

其中：

$$P=(A+B)(k_x^2+k_y^2)+2Ck_z^2$$

$$Q=Ak_z^2+B(k_x^2+k_y^2)$$

$$L=\frac{1}{\sqrt{3}}(-Ck_xk_z+iCk_yk_z)$$

$$M=\frac{1}{2\sqrt{3}}[(A-B)(k_x^2-k_y^2)-2iCk_xk_y]$$

将A、B、C按照下列关系代换，用γ_1、γ_2、γ_3改写Luttinger-Kohn哈密顿矩阵，可得到更实用的形式。γ_1、γ_2、γ_3为与具体半导体材料相关的参数，其数值可以由实验测得。

$$\begin{cases} A=\frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1+4\gamma_2) \\ B=\frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1-2\gamma_2) \\ C=\frac{3\hbar^2}{m}\gamma_3 \end{cases} \tag{2-13}$$

改写后的Luttinger-Kohn哈密顿矩阵形式如下，其中P、Q、L、M用γ_1、γ_2、γ_3重新定义。

$$\begin{bmatrix} P+Q & L & M & 0 & i/\sqrt{2}L & -i\sqrt{2}M \\ L^* & P-Q & 0 & M & -i\sqrt{2}Q & i\sqrt{3/2}L \\ M^* & 0 & P-Q & -L & -i\sqrt{3/2}L^* & -i\sqrt{2}Q \\ 0 & M^* & -L^* & P+Q & -i\sqrt{2}M^* & -i/\sqrt{2}L^* \\ i/\sqrt{2}L^* & i\sqrt{2}Q & i\sqrt{3/2}L & i\sqrt{2}M & P+\Delta_{so} & 0 \\ i\sqrt{2}M^* & -i\sqrt{3/2}L^* & i\sqrt{2}Q & i/\sqrt{2}L & 0 & P+\Delta_{so} \end{bmatrix} \tag{2-14}$$

重新定义的P、Q、L、M为：

$$P=\frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1k^2)$$

$$Q=\frac{\hbar^2}{2m}[\gamma_2(k_x^2+k_y^2-2k_z^2)]$$

$$L = \frac{\hbar^2}{2m}[-i2\sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)k_z]$$
$$M = \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{3}[\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) - i2\gamma_3 k_x k_y]$$

电子价带顶$\vec{k}$处的能量色散关系可由矩阵上方的4×4矩阵和下方的2×2矩阵近似得到:

$$\begin{aligned} E_{1,2} &= P \pm (Q^2 + LL^* + MM^*)^{1/2} \\ E_{so} &= P + \Delta_{so} \end{aligned} \tag{2-15}$$

在$\vec{k}$空间内，考虑自旋轨道耦合的Si和Ge半导体的电子价带有三条，各为二重简并，其中，E_{so}为自旋轨道耦合分裂带。可以看到，在$\vec{k}=0$处，原来的六重简并态，由于自旋轨道耦合作用分裂成两组，在下面考虑铁磁交换相互作用后能带还将继续分裂解简并。在不考虑自旋轨道耦合作用时，能带E_{so}可以不考虑，同时哈密顿矩阵也可以只取左上方的4×4矩阵。值得注意的是，空穴的色散关系与电子的色散关系相差一个负号。在下面的计算中，考虑的是以空穴为载流子的情况。

2.2 铁磁交换相互作用

目前已经有很多文献 [23, 24, 41, 42]对铁磁半导体中的铁磁交换作用作了深入研究，并给出了该作用在$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 方法下的哈密顿矩阵形式。以J.K.Furdyna的研究 [24]为例:

在铁磁半导体材GaMnAs中，Mn离子占据了GaAs半导体晶格中某些Ga的格点，半导体包含局域的磁动量，材料的能带结构将由磁离子与导带空穴间的交换相互作用修正。这种交换相互作用用$\hat{H}_{ex}$来表示:

$$\hat{H}_{ex} = \sum_{R_i} J^{sp-d}(\vec{r} - \vec{R}_i)\vec{S}_i \cdot \vec{\sigma} \tag{2-16}$$

其中，求和包含所有Mn离子占据的格点，J^{sp-d}为空穴-Mn离子间的sp-d交换积分，$\vec{r}, \vec{R}_i$分别为空穴和Mn离子的坐标，$\vec{S}_i$为在格点$\vec{R}_i$处的磁性离子自旋算符，$\vec{\sigma}$为导带空穴的自旋泡利算符。

在具体运算中采取两个近似来简化$\hat{H}_{ex}$。首先，用分子场近似将$\vec{S}_i$用所有Mn离子自旋的热力学平均值$\langle \boldsymbol{S} \rangle$代替。假设磁化方向沿$z$方向，那么就有$\langle \boldsymbol{S} \rangle = \langle S_z \rangle$。另外，将对所有Mn离子晶格的求和$\sum_{R_i}$作近似转化。做法为：对晶格进行重新划分，每个晶胞含有一个Mn离子，这样就把对所有阳离子的晶格求和转化成对x个晶胞的交换积分的求

和。简化后的$\hat{H}_{ex}$为：

$$\hat{H}_{ex} = \sigma_z \langle S_z \rangle x \sum_R \boldsymbol{J}^{sp-d}(\vec{r} - \vec{R}) \tag{2-17}$$

铁磁半导体总的哈密顿量可以表示成半导体部分与铁磁部分哈密顿相加，半导体部分哈密顿可以用前一节中的Luttinger-Kohn 哈密顿表示：

$$\hat{H} = \hat{H}_{L-K} + \hat{H}_{ex} \tag{2-18}$$

因此，将$\hat{H}_{ex}$用$\hat{H}_{L-K}$相同的基（2-11式）u_1, u_2, u_3, u_4 展开成矩阵，以便于进一步求解铁磁半导体的本征能量和本征态。简化后的$\hat{H}_{ex}$在u_1, u_2, u_3, u_4下的矩阵为对角化的：

$$\hat{H}_{ex} = \begin{bmatrix} 3B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3B \end{bmatrix} \tag{2-19}$$

其中：

$$B = \frac{1}{6} N_0 \beta x \langle S_z \rangle \tag{2-20}$$

$$\beta = \langle \phi_1 | \boldsymbol{J}^{sp-d} | \phi_1 \rangle / \Omega_0$$

矩阵中的B为铁磁半导体中由于铁磁性造成的自旋劈裂能，它可以由一组方程自洽求解得到，将在下一节介绍。

2.3 铁磁半导体的自旋劈裂能

铁磁半导体中自旋劈裂能和磁性离子的掺杂浓度、温度都有关系。用Δ_{ex}表示铁磁自旋劈裂能, $\overline{x}$表示Mn离子浓度，J^{Mnh}表示Mn离子和空穴之间的交换耦合作用常数,则2-20式改写为：

$$\Delta_{ex} = \overline{x} J^{Mnh} \langle S_z \rangle \tag{2-22}$$

A.VanEsch等人 [34, 43]用一组方程自洽求得Mn离子的自旋平均值$\langle S_z \rangle$，并得到铁磁半导体中的自旋劈裂能，具体理论求解介绍如下：

铁磁半导体材料的自发磁化不同于单纯的铁磁体，是多重交换相互作用的结果。用扩展的平均场理论可以定量地描述这些交换相互作用，包括空穴与空穴之间的交换

相互作用，空穴与Mn离子间的交换相互作用，以及Mn离子与Mn离子间的交换相互作用。

考虑一个处在磁场B中的自旋量子数为j的空穴，它的哈密顿量可以表示为：

$$H^h = -\sum_l J_l^{hh} \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{j}_l - J^{Mnh} \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{S} + g_h \mu_B \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{B} \tag{2-23}$$

其中，$\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{j}_l$表示空穴的自旋，$\boldsymbol{S}$表示Mn离子的自旋。J^{hh}, J^{Mnh}分别表示空穴-空穴交换耦合常数以及Mn离子-空穴交换耦合常数。只考虑最近邻粒子间的作用，并假设Mn离子的自旋$\boldsymbol{S}$只和它周围的一个空穴作用，可以求得空穴能量为：

$$E^h = [-qJ^{hh}\langle j_z\rangle - J^{Mnh}\langle S_z\rangle + g_h\mu_B B]j_z \tag{2-24}$$

上式中的q指的是在该空穴周围的最近邻的空穴数目。根据平均场近似，空穴自旋的平均值为：

$$\langle j_z\rangle = \frac{3}{2}B_j\left[\frac{(-qJ^{hh}\langle j_z\rangle - J^{Mnh}\langle S_z\rangle + g_h\mu_B B)j}{kT}\right] \tag{2-25}$$

其中，$B_j(x)$为布里渊函数。

再用同样的方法考虑Mn离子，忽略Mn离子与Mn离子间的交换相互作用，得到Mn离子的哈密顿量为：

$$H_{Mn} = -J^{Mnh}\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{S} + g_{Mn}\mu_B \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{B} \tag{2-26}$$

Mn离子的自旋平均值为：

$$\langle S_z\rangle = \frac{5}{2}B_s\left[\frac{(-J^{Mnh}\langle j_z\rangle + g_{Mn}\mu_B B)S}{kT}\right] \tag{2-27}$$

联合2-25式与2-27式，就可以自洽求得$\langle j_z\rangle$ 和$\langle S_z\rangle$，从而进一步求得自旋劈裂能Δ_{ex}。可以看出，自旋劈裂能Δ_{ex}不仅与磁性杂质离子的浓度$\bar{x}$ 有关，而且与温度T有关，表现为$\langle S_z\rangle$是温度T的函数。

以上介绍的是应用于铁磁半导体材料的相关理论和物理图象，目的是为了更精确地解释铁磁半导体的能带结构以及得到相关异质结中载流子的入射波、反射波波函数，以便于进一步研究铁磁半导体相关异质结。

第三章 自由空穴带模型

3.1 自由空穴带模型下对异质结的理论推导

考虑铁磁半导体双势垒隧道结GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs，它的结构可由图3-1表示，隧道结层面处于$x-y$平面，各层沿z方向堆叠。由自由空穴模型可以得到各层中载流子的哈密顿：

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\vec{h}(r)\cdot\vec{\sigma}\Theta\left[|z|-(\frac{d}{2}+w)\right]+U\Theta\left[(\frac{d}{2}+w)-|z|\right]\Theta\left[|z|-\frac{d}{2}\right] \quad (3\text{-}1)$$

上式$\Theta(z)$ 表示阶跃函数。当z取不同数值时，上式表示处于某一层中的空穴哈密顿。方程右边第一项表示有效质量为m^*的自由空穴哈密顿量。根据有效质量的不同，载流子可分为重、轻空穴。第二项为铁磁半导体层中的铁磁交换作用项，$\vec{h}(r)$表示分子场，其大小近似等于$\Delta_{ex}/2$,$\vec{\sigma}$为泡利自旋算符。分子场的存在，又使空穴分成多数与少数载流子。第三项为势垒层的影响，U为相对于E_0的势垒高度。第二项也可表示成关于Δ_{ex}的

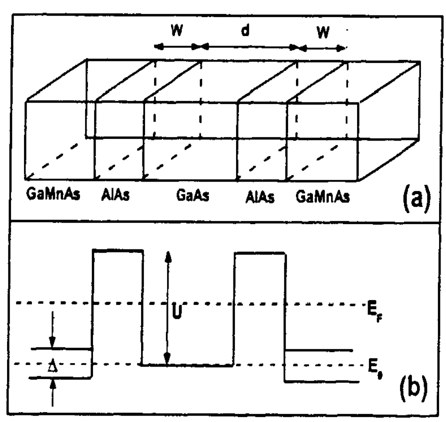

图 3-1 (a)GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs 双势垒隧道结示意图，其中w、d 分别表示AlAs、GaAs层的厚度。(b) 各层相对能级示意图，Δ_{ex} 表示GaMnAs层中自旋极化劈裂能，U 表示势垒层AlAs的能级相对高度。

形式：

$$-\vec{h}(r)\cdot\vec{\sigma}\Theta\left[|z|-(\frac{d}{2}+w)\right]=-\frac{\Delta_{ex}}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\Theta\left[|z|-(\frac{d}{2}+w)\right]$$

隧穿过程中不包含自旋反转的情况，保持$\vec{k}$的平行分量$k_\parallel$在隧穿过程中守恒。由3-1式可以得到不同层下的本征能量与波函数。

$$\text{GaMnAs层：}\quad\begin{cases}\phi_\uparrow=e^{ik_\uparrow r}\binom{1}{0}e^{i(k_x x+k_y y)}, & k_\uparrow=\sqrt{2m^*(E-\Delta_{ex}/2)-k_\parallel^2}\\ \phi_\downarrow=e^{ik_\downarrow r}\binom{0}{1}e^{i(k_x x+k_y y)}, & k_\downarrow=\sqrt{2m^*(E+\Delta_{ex}/2)-k_\parallel^2}\end{cases}$$

$$\text{AlAs层：}\ \phi_\uparrow=e^{ik_{Al}r}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}e^{i(k_x x+k_y y)},\quad \phi_\downarrow=e^{ik_{Al}r}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}e^{i(k_x x+k_y y)},\quad k_{Al}=\sqrt{2m^*(E-U)-k_\parallel^2}$$

$$\text{GaAs层：}\ \phi_\uparrow=e^{ik_{Ga}r}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}e^{i(k_x x+k_y y)},\quad \phi_\downarrow=e^{ik_{Ga}r}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}e^{i(k_x x+k_y y)},\quad k_{Ga}=\sqrt{2m^*E-k_\parallel^2}$$

根据散射方法，定出各个区域的入射波、反射波波函数。图3-1中将双势垒隧道结划分为五个区域，其中第一区和第五区为铁磁半导体区。当这两层的磁化方向平行时，每个区域对应的波函数为（约去因子$e^{i(k_x x+k_y y)}$）：

$$\begin{cases}\Psi_1=a_1e^{ik_\uparrow z}\binom{1}{0}+b_1e^{ik_\downarrow z}\binom{0}{1}+c_1e^{-ik_\uparrow z}\binom{1}{0}+d_1e^{-ik_\downarrow z}\binom{0}{1}, & z\le -w-d/2\\ \Psi_2=a_2e^{ik_{Al}z}\binom{1}{0}+b_2e^{ik_{Al}z}\binom{0}{1}+c_2e^{-ik_{Al}z}\binom{1}{0}+d_2e^{-ik_{Al}z}\binom{0}{1}, & -w-d/2<z<-d/2\\ \Psi_3=a_3e^{ik_{Ga}z}\binom{1}{0}+b_3e^{ik_{Ga}z}\binom{0}{1}+c_3e^{-ik_{Ga}z}\binom{1}{0}+d_3e^{-ik_{Ga}z}\binom{0}{1}, & -d/2\le z\le d/2\\ \Psi_4=a_4e^{ik_{Al}z}\binom{1}{0}+b_4e^{ik_{Al}z}\binom{0}{1}+c_4e^{-ik_{Al}z}\binom{1}{0}+d_4e^{-ik_{Al}z}\binom{0}{1}, & d/2<z<w+d/2\\ \Psi_5=a_5e^{ik_\uparrow z}\binom{1}{0}+b_5e^{ik_\downarrow z}\binom{0}{1}+c_5e^{-ik_\uparrow z}\binom{1}{0}+d_5e^{-ik_\downarrow z}\binom{0}{1}, & z\ge w+d/2\end{cases}\tag{3-2}$$

其中，a_i,b_i,c_i,d_i为第i个区的各种波的入射、反射系数。当两铁磁半导体层的磁化方向相反时，假设第一区的磁性层的磁化方向保持不变，第五区的磁性层磁化方向变化，则相应地只需改变第五区的波函数：

$$\Psi_5=a_5e^{ik_\uparrow z}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}+b_5e^{ik_\downarrow z}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+c_5e^{-ik_\uparrow z}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}+d_5e^{-ik_\downarrow z}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

各区波函数在每个边界上都必须满足边界条件，即波函数连续以及波函数的导数连续。以第一个边界(记为z_1)为例，在z_1边界上，Ψ_1和Ψ_2波函数连续以及导数连续，可以得到：

$$\begin{cases}a_1e^{ik_\uparrow z_1}+0+c_1e^{-ik_\uparrow z_1}+0=a_2e^{ik_{Al}z_1}+0+c_2e^{-ik_{Al}z_1}+0\\ 0+b_1e^{ik_\downarrow z_1}+0+d_1e^{-ik_\downarrow z_1}=0+b_2e^{ik_{Al}z_1}+0+d_2e^{-ik_{Al}z_1}\\ a_1ik_\uparrow e^{ik_\uparrow z_1}+0+c_1(-ik_\uparrow)e^{-ik_\uparrow z_1}+0=a_2ik_{Al}e^{ik_{Al}z_1}+0+c_2(-ik_{Al})e^{-ik_{Al}z_1}+0\\ 0+b_1ik_\downarrow e^{ik_\downarrow z_1}+0+d_1(-ik_\downarrow)e^{-ik_\downarrow z_1}=0+b_2ik_{Al}e^{ik_{Al}z_1}+0+d_2(-ik_{Al})e^{-ik_{Al}z_1}\end{cases}\tag{3-3}$$

稍加整理便可以得到关于a_i, b_i, c_i, d_i矩阵方程：

$$\begin{bmatrix} e^{ik_\uparrow z_1} & 0 & e^{-ik_\uparrow z_1} & 0 \\ 0 & e^{ik_\downarrow z_1} & 0 & e^{-ik_\downarrow z_1} \\ ik_\uparrow e^{ik_\uparrow z_1} & 0 & -ik_\uparrow e^{-ik_\uparrow z_1} & 0 \\ 0 & ik_\downarrow e^{ik_\downarrow z_1} & 0 & -ik_\downarrow e^{-ik_\downarrow z_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \\ d_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_{Al} z_1} & 0 & e^{-ik_{Al} z_1} & 0 \\ 0 & e^{ik_{Al} z_1} & 0 & e^{-ik_{Al} z_1} \\ ik_{Al} e^{ik_{Al} z_1} & 0 & -ik_{Al} e^{-ik_{Al} z_1} & 0 \\ 0 & ik_{Al} e^{ik_{Al} z_1} & 0 & -ik_{Al} e^{-ik_{Al} z_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \\ d_2 \end{bmatrix} \tag{3-4}$$

可将上式简写如下形式。其它边界上按照同样的方法可以得到一系列矩阵方程。双势垒隧道结有四个边界分别标记为z_1, z_2, z_3, z_4，则有：

$$\begin{aligned} &\text{边界}z_1: \quad M_1X_1 = M_2X_2; \\ &\text{边界}z_2: \quad M_3X_2 = M_4X_3; \\ &\text{边界}z_3: \quad M_5X_3 = M_6X_4; \\ &\text{边界}z_4: \quad M_7X_4 = M_8X_5. \end{aligned} \qquad \text{其中:} \quad X_i = \begin{bmatrix} a_i \\ b_i \\ c_i \\ d_i \end{bmatrix} \tag{3-5}$$

综合上式矩阵方程，即可以由初始入射状态X_1求得最终的异质结透射系数X_5：

$$M_8^{-1}M_7M_6^{-1}M_5M_4^{-1}M_3M_2^{-1}M_1X_1 = X_5 \tag{3-6}$$

其中M_i^{-1}表示矩阵M_i的逆矩阵。令$M_8^{-1}M_7M_6^{-1}M_5M_4^{-1}M_3M_2^{-1}M_1 = M$可使上式得到更为简洁的形式：

$$MX_1 = X_5 \tag{3-7}$$

其中M即为传输矩阵。

由于第一层中已知入射情况（已知a_1, b_1），最后一层只存在透射波函数而不包含反射项（$c_5 = 0, d_5 = 0$），由这些初始可以求得另外四个未知的系数c_1, d_1, a_5, b_5。其中c_1, d_1是第一层中的反射系数，a_5, b_5为最后铁磁半导体层中的透射系数。

当隧道结结构比较简单时，例如只有三层的三明治结构，按照以上步骤解析最后的透射系数还是比较方便的，但是当隧道结的层数增加，传输矩阵的数目也将随之增加，用解析求解的复杂程度便会增大。但用计算机进行数值求解便不存在上述问题。

3.2 透射系数和透射电流

由上节得到的透射系数可以进一步求得隧道结的透射电流。仍然按照上述模型，隧道结载流子有四种入射情况，分别为重空穴的多数载流子入射、重空穴的少数载流子入射、轻空穴的多数载流子入射以及轻空穴的少数载流子入射，相应的出射情况也有四种。总的电流为四种出射电流的总和：$I_{total} = \sum_\sigma (I_{h\sigma} + I_{l\sigma})$，其中$h, l$分别表示重空穴和轻空穴，$\sigma = \uparrow, \downarrow$分别表示载流子的多数和少数状态。以出射态为由重空穴多数载流子能带出射为例，透射电流可由Landauer Büticker公式 [35, 44]得到：

$$I_{h\uparrow} = \frac{Ae}{2\pi\hbar}\int_0^{+\infty} dE[f(E-eV) - f(E)]T_\uparrow(E,\uparrow) \tag{3-8}$$

其中：

$$T_\uparrow(E,\uparrow) = \int_0^{k_{\parallel\uparrow cutoff}} dk_\parallel t_\uparrow(E, k_\parallel, \uparrow) \tag{3-9}$$

式3-8中的$f(E)$ 表示平衡费米方程，A为隧道结截面，V为偏置电压，透射几率$t_\uparrow = |a_5|^2|v_\uparrow|/|v_\sigma| = |a_5|^2 k_\uparrow/k_\sigma$，与出射态和入射态的能带群速之比相关 [32, 35]。当入射态为重空穴多数载流子时有$|v_\uparrow|/|v_\sigma| = 1$，即出、入射态的能带群速相等。在低温以及低偏置电压的情况下，由于$\partial f/\partial E = -\delta(E - E_F)$ [44]，式3-8可以简化为：

$$I_{h\uparrow} = [Ae/(2\pi\hbar)]T_\uparrow(E,\uparrow) \tag{3-10}$$

进而可以求得电导：

$$G_{h\uparrow} = [A'me^2/(\pi\hbar^3)]T_\uparrow(E,\uparrow) \tag{3-11}$$

总的电导为各电导之和：$G_{total} = \sum_\sigma (G_{h\sigma} + G_{l\sigma})$。

在GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs双势垒隧道结中，两层磁性层的磁化方向可以相对变化。磁化方向平行与反平行时，得到相应的平行电导与反平行电导，可以求得隧道磁致电阻（TMR）。

以上求解过程是建立在自由空穴带模型的基础上的。我们可以看到用这种近似的优越之处，一是计算简便，二是隧道结的隧穿机制容易理解，物理图像清晰。但同时这种近似的不足之处也不可忽略。第一，自由空穴带模型求解的重、轻空穴载流子的抛物线型能带过于简单。半导体材料中，重、轻空穴能带的等能面已表现出各项异性 [45, 46]，铁磁半导体材料的能带结构将更加复杂，如果用抛物线型的能带作为近似，则必然会丢失许多重要的信息。第二，由于在自由空穴带模型中，只能分开分析重、轻空穴载流子的透射情况，故重、轻空穴能带间的混合作用无法考虑。实际情况是，

当$k_{\parallel}$的值不为零时，重、轻空穴间的混合作用不可忽略。第三，自由空穴带模型中铁磁交换作用引起的分子场的影响也比较简单，从以上推导可以看出，这种影响只是使空穴的能带产生简单的分裂，分成的多数载流子能带与少数载流子能带之间的差别仅是带底位置发生了上下移动。综上所述，研究铁磁半导体构成的相关异质结需要更为精确的方法。

3.3 隧道磁致电阻（TMR）

1975年，M.Julliere最早发现了隧道磁致电阻（TMR）效应 [47]，在由铁磁体/绝缘层/铁磁体构成的隧道结中，两铁磁体层的磁化方向处于平行和反平行时的隧道结电阻存在差异，他用隧道结电导定义了这种隧道磁致电阻：

$$TMR = \frac{G_p - G_{ap}}{G_p} \tag{3-12}$$

其中，G_p和G_{ap}分别表示平行磁构型以及反平行磁构型时隧道结的电导。

1988年，Fert和Gruenberg分别独立地在铁磁/非磁/铁磁的三层薄膜结构中发现巨磁阻效应（GMR） [20]，自此，兴起了研究电子自旋学的热潮。GMR 同样也是由于两铁磁层中磁化方向不一致引起电阻差异造成的。TMR 与GMR 有着类似的现象，但两者的机制不同。隧道磁致电阻效应来自于自旋相关的隧穿过程，巨磁阻效应是源于铁磁/非磁界面和铁磁体内部的自旋相关散射过程。磁致电阻现象虽然很早就被发现，但是对于一般的材料而言，它是一种比较微弱的效应。由于磁场变化带来的电阻变化并不显著，因此很难判断原本就很微小的电流变化。但随着纳米技术的发展和制备技术的完善，磁性隧道结的质量不断上升，同时也获得了更高的隧道磁致电阻效应。M.Tanaka等人发现在低温下，$GaMnAs/AlAs/GaMnAs$隧道结的TMR能达到75% [14, 15]。

90年代后，自旋阀、磁隧道结等具有磁阻效应的器件得到了很快的发展以及广泛的应用，例如基于磁阻效应的磁阻内存，其具有大密度、快访问、极省电、可复用和不易失的特点。2007年，磁记录产业巨头IBM公司和TDK公司合作开发新一代MRAM，使用了一种称为自旋扭矩转换（spin-torque-transfer，STT）的新型技术，利用放大了的隧道效应，使得磁致电阻的变化达到了一倍左右。东芝在一枚邮票见方的芯片上做出了1GB内存，这也使得世界看到了磁阻内存的威力。

第四章　扩展的$k\cdot p$ 微扰模型

4.1　应用于铁磁半导体的扩展的$k\cdot p$ 微扰方法

上一章中，我们用自由空穴带模型推导了铁磁半导体中载流子的透射情况，虽然简便易行，却存在不足。我们试图寻求更为精确的理论方法。前面提到，铁磁半导体是在半导体的基础上掺入磁性杂质得到的，而$k\cdot p$ 方法在研究半导体材料方面获得了巨大成功。可以想见，将引入磁性杂质产生的影响包含进$k\cdot p$方法中，对$k\cdot p$方法进行扩展，能为更精确地研究铁磁半导体提供切实可行的途径。幸运的是，描述半导体中空穴状态的Luttinger-Kohn哈密顿量和铁磁交换作用哈密顿量能在一组共同基下展开，并且形式相对简单，这为我们将两者结合起来打开了方便之门。

4.1.1　铁磁半导体的空穴色散关系

已知描述半导体中空穴状态Luttinger-Kohn哈密顿矩阵H_{L-K}（2-14式）以及描述Mn离子-空穴相互作用的交换作用哈密顿矩阵H_{ex}（2-19式），假设铁磁半导体中的磁化方向沿z方向，铁磁半导体中空穴的哈密顿矩阵可以表示为：

$$
\begin{aligned}
H_{FS} &= H_{L-K} + H_{ex} \\
&= \begin{bmatrix} P+Q+3B & L & M & 0 \\ L^* & P-Q+B & 0 & M \\ M^* & 0 & P-Q-B & -L \\ 0 & M^* & -L^* & P+Q-3B \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4-1}
$$

以上所用的Luttinger-Kohn哈密顿矩阵为4×4的，表示忽略了自旋-轨道耦合作用。若要考虑包含自旋-轨道耦合作用，则需要用到6×6甚至更高阶的Luttinger-Kohn哈密顿矩阵。由于考虑的载流子是空穴，矩阵中的P,Q,L,M含有的共同因子为$-\hbar^2/(2m_0)$,与

电子相反。接下来求解4-1式哈密顿矩阵的本征态和本征波函数。为使计算简便，令：

$$\begin{cases} a = P + Q + 3B \\ b = P - Q + B \\ c = P - Q - B \\ d = P + Q - 3B \end{cases}$$

求得关于本征值λ_i的一元四次方程：

$$A\lambda^4 + B\lambda^3 + C\lambda^2 + D\lambda + E = 0 \tag{4-2}$$

其中，

$$\begin{cases} A = 1 \\ B = -(a+b+c+d) \\ C = ab + cd + (a+b)(c+d) - 2(LL^* + MM^*) \\ D = (a+b+c+d)(LL^* + MM^*) - ab(c+d) - cd(a+b) \\ E = abcd - (ab+cd)LL^* - (ac+bd)MM^* + (LL^* + MM^*)^2 \end{cases} \tag{4-3}$$

根据一元四次方程的解法，4-2式的解可以化成两个一元二次方程的根：

$$\begin{cases} \lambda^2 + \frac{\lambda}{2}(B + \sqrt{8y + B^2 - 4C}) + \left(y + \frac{By - D}{\sqrt{8y+B^2-4C}}\right) = 0 \\ \lambda^2 + \frac{\lambda}{2}(B - \sqrt{8y + B^2 - 4C}) + \left(y - \frac{By - D}{\sqrt{8y+B^2-4C}}\right) = 0 \end{cases} \tag{4-4}$$

其中y满足一元三次方程，取其的任意一个实根：

$$8y^3 - 4Cy^2 + (2BD - 8E)y + E(4C - B^2) - D^2 = 0 \tag{4-5}$$

令：

$$\begin{cases} k_1 = 1 \\ k_2 = -\frac{C}{2} \\ k_3 = \frac{1}{4}(BD - 4E) \\ k_4 = \frac{1}{8}[E(4C - B^2) - D^2] \end{cases}$$

这里的k_i为方程的系数，应与波矢$\vec{k}$以及其各分量k_x, k_y, k_z加以区别。令：

$$y = x - \frac{k_2}{3k_1} \tag{4-6}$$

方程4-5转化成关于x的方程：

$$x^3 + px + q = 0 \tag{4-7}$$

其中：

$$p = \frac{k_3}{k_1} - \frac{k_2^2}{3k_1^2}, \quad q = \frac{2k_2^3}{27k_1^3} - \frac{k_2 k_3}{3k_1^2} + \frac{k_4}{k_1}$$

则4-7式的三个根表示为：

$$\begin{cases} x_1 = \left\{-\frac{q}{2} + [(\frac{q}{2})^2 + (\frac{p}{3})^3]^{\frac{1}{2}}\right\}^{\frac{1}{3}} + \left\{-\frac{q}{2} - [(\frac{q}{2})^2 + (\frac{p}{3})^3]^{\frac{1}{2}}\right\}^{\frac{1}{3}} \\ x_2 = \omega\left\{-\frac{q}{2} + [(\frac{q}{2})^2 + (\frac{p}{3})^3]^{\frac{1}{2}}\right\}^{\frac{1}{3}} + \omega^2\left\{-\frac{q}{2} - [(\frac{q}{2})^2 + (\frac{p}{3})^3]^{\frac{1}{2}}\right\}^{\frac{1}{3}} \\ x_3 = \omega^2\left\{-\frac{q}{2} + [(\frac{q}{2})^2 + (\frac{p}{3})^3]^{\frac{1}{2}}\right\}^{\frac{1}{3}} + \omega\left\{-\frac{q}{2} - [(\frac{q}{2})^2 + (\frac{p}{3})^3]^{\frac{1}{2}}\right\}^{\frac{1}{3}} \end{cases} \tag{4-8}$$

其中，$\omega = (-1 + i\sqrt{3})/2$。将上式的实根代入4-6式即得到$y$的值。结合4-4式，得到本征值为：

$$\begin{cases} \lambda_1 = (-F_1 + \sqrt{F_1^2 - 4G_1})/2 \\ \lambda_2 = (-F_1 - \sqrt{F_1^2 - 4G_1})/2 \\ \lambda_3 = (-F_2 + \sqrt{F_2^2 - 4G_2})/2 \\ \lambda_4 = (-F_2 - \sqrt{F_2^2 - 4G_2})/2 \end{cases} \quad \text{其中:} \begin{cases} F_1 = \frac{1}{2}(B + \sqrt{8y + B^2 - 4C}) \\ F_2 = \frac{1}{2}(B - \sqrt{8y + B^2 - 4C}) \\ G_1 = y + (By - D)/(\sqrt{8y + B^2 - 4C}) \\ G_2 = y - (By - D)/(\sqrt{8y + B^2 - 4C}) \end{cases} \tag{4-9}$$

本征值也即本征能量，是关于波矢$\vec{k}$的函数，上式即为铁磁半导体中空穴的色散关系。

从表达式的形式上来看，用扩展后的$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$方法求解的铁磁半导体的空穴色散关系相比于自由空穴带模型得到的抛物线型色散关系要复杂的多。我们将得到的铁磁半导体的空穴色散关系与半导体的空穴色散关系作了对比，能够反映出由于Mn离子-空穴的交换相互作用的引入，使得铁磁半导体能带与半导体能带有所不同。

由图4-1显示的半导体空穴能带在波矢空间的等能面可以看出，半导体空穴能带有两条。曲率较大的为重空穴能带，曲率较小的为轻空穴能带。重、轻空穴能带分别为二重简并态。能带在$k_x - k_y$平面、$k_y - k_z$平面以及$k_x - k_z$平面上的等能面图形基本一致，表明能带的等能面在$\vec{k}$空间具有比较高的对称性，但不是各向同性的球形等能面。重、轻空穴等能面形状的不一致以及在$\vec{k}$空间中的各向异性，是半导体中载流子能带的重要细节，说明了用自由空穴带求得的重、轻空穴抛物线型能带是极其简单的。

铁磁半导体中的Mn离子-空穴交换相互作用对能带有明显的影响，如图4-2。与半导体能带相对比，原本简并的重、轻空穴能带解简并，分成四条独立的能带。这可以解释为由于铁磁半导体的铁磁性，使简并的能带发生自旋劈裂，产生自旋极化的载流子能带。交换相互作用越强，载流子能带分裂的情况越复杂。此外，铁磁半导体能带的等能面在三个平面内的形状明显不同，表明能带对称性降低，等能面在$\vec{k}$空间具有明显的各向异性。

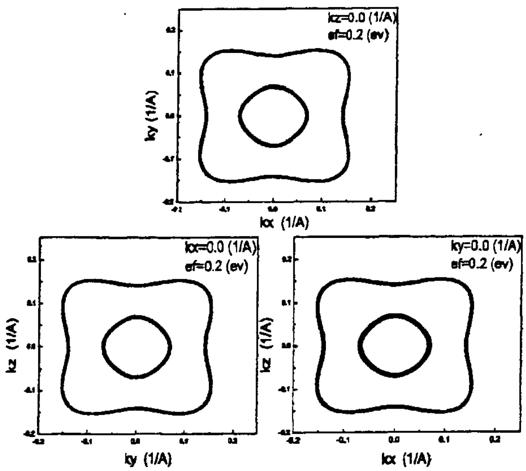

图 4-1 半导体空穴能带在费米能量附近的等能面，费米能量$E_f = 0.2ev$。图像分别显示等能面在$k_x - k_y$平面、$k_y - k_z$平面以及$k_x - k_z$平面上的情况。

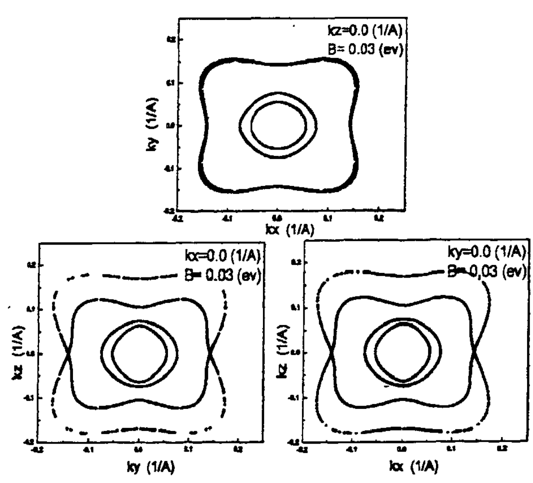

图 4-2 铁磁半导体空穴能带等能面。自旋劈裂能$B = 0.03ev$。图像分别显示等能面在$k_x - k_y$平面、$k_y - k_z$平面以及$k_x - k_z$平面上的情况。

4.1.2 铁磁半导体的空穴波函数

已知4-1式的本征能量λ_i，由$H_{FS}F_i = \lambda_i F_i$可以求得相应的态函数。包络函数$F_i$的矩阵元设为$x_1, x_2, x_3, x_4$，能得到关于矩阵元的一组方程组如下：

$$\begin{cases} (a-\lambda)x_1 + Lx_2 + Mx_3 + 0x_4 = 0 \\ L^*x_1 + (b-\lambda)x_2 + 0x_3 + Mx_4 = 0 \\ M^*x_1 + 0x_2 + (c-\lambda)x_3 - Lx_4 = 0 \\ 0x_1 + M^*x_2 - L^*x_3 + (d-\lambda)x_4 = 0 \end{cases} \tag{4-10}$$

矩阵元间的相互关系为：

$$\begin{cases} [LL^* + MM^* - (a-\lambda)(b-\lambda)]x_1 = (b-c)Mx_3 \\ [LL^* + MM^* - (c-\lambda)(d-\lambda)]x_3 = (d-a)M^*x_1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} [LL^* + MM^* - (a-\lambda)(c-\lambda)]x_1 = (c-b)Lx_2 \\ [LL^* + MM^* - (b-\lambda)(d-\lambda)]x_2 = (d-a)L^*x_1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} [LL^* + MM^* - (a-\lambda)(b-\lambda)]x_2 = (a-d)Mx_4 \\ [LL^* + MM^* - (c-\lambda)(d-\lambda)]x_4 = (c-b)M^*x_2 \end{cases}$$

$$\begin{cases} [LL^* + MM^* - (a-\lambda)(c-\lambda)]x_3 = (d-a)Lx_4 \\ [LL^* + MM^* - (b-\lambda)(d-\lambda)]x_4 = (c-b)L^*x_3 \end{cases}$$

$$\begin{cases} [LL^* + MM^* - (a-\lambda)(c-\lambda)]M^*x_1 = [LL^* + MM^* - (c-\lambda)(d-\lambda)]Lx_4 \\ [LL^* + MM^* - (a-\lambda)(b-\lambda)]L^*x_1 = [(b-\lambda)(d-\lambda) - (LL^* + MM^*)]Mx_4 \end{cases}$$

$$\begin{cases} [LL^* + MM^* - (b-\lambda)(d-\lambda)]M^*x_2 = [LL^* + MM^* - (c-\lambda)(d-\lambda)]L^*x_3 \\ [LL^* + MM^* - (a-\lambda)(b-\lambda)]Lx_2 = [(a-\lambda)(c-\lambda) - (LL^* + MM^*)]Mx_4 \end{cases} \tag{4-11}$$

对表达式中的公共部分进行定义：

$$\begin{cases} [LL^* + MM^* - (a-\lambda)(b-\lambda)] = \alpha_1 \\ [LL^* + MM^* - (a-\lambda)(c-\lambda)] = \alpha_2 \\ [LL^* + MM^* - (b-\lambda)(d-\lambda)] = \beta_1 \\ [LL^* + MM^* - (c-\lambda)(d-\lambda)] = \beta_2 \end{cases} \tag{4-12}$$

则关于x_1, x_2, x_3, x_4之间的关系式可以简化为：

$$
\begin{cases}\alpha_1 x_1 = (b-c)Mx_3 \\ \beta_2 x_3 = (d-a)M^* x_1\end{cases},\quad
\begin{cases}\alpha_2 x_1 = (c-b)Lx_2 \\ \beta_1 x_2 = (d-a)L^* x_1\end{cases},\quad
\begin{cases}\alpha_1 x_2 = (a-d)Mx_4 \\ \beta_2 x_4 = (c-b)M^* x_2\end{cases},
$$

$$
\begin{cases}\alpha_2 x_3 = (d-a)Lx_4 \\ \beta_1 x_4 = (c-b)L^* x_3\end{cases},\quad
\begin{cases}\alpha_2 M^* x_1 = \beta_2 L x_4 \\ \alpha_1 L^* x_1 = -\beta_1 M x_4\end{cases},\quad
\begin{cases}\beta_1 M^* x_2 = \beta_2 L^* x_3 \\ \alpha_1 L x_2 = -\alpha_2 M x_4\end{cases}
\tag{4-13}
$$

以上关系式之间可以互相验证。由矩阵元关系式得到四组态函数，其中C_i为归一化常数：

$$
F_1 = C_1\begin{bmatrix}\beta_1\beta_2 \\ -\beta_2(a-d)L^* \\ -\beta_1(a-d)M^* \\ (a-d)(b-c)M^*L^*\end{bmatrix},\quad
F_2 = C_2\begin{bmatrix}-\beta_2(b-c)L \\ \alpha_2\beta_2 \\ (a-d)(b-c)M^*L \\ -\alpha_2(b-c)M^*\end{bmatrix},
$$

$$
F_3 = C_3\begin{bmatrix}\beta_1(b-c)M \\ -(a-d)(b-c)ML^* \\ \alpha_1\beta_1 \\ -\alpha_1(b-c)L^*\end{bmatrix},\quad
F_4 = C_4\begin{bmatrix}-(a-d)(b-c)ML \\ \alpha_2(a-d)M \\ -\alpha_1(a-d)L \\ \alpha_1\alpha_2\end{bmatrix}
\tag{4-14}
$$

由于铁磁半导体中Mn离子-空穴交换作用的引入，使原本简并的重、轻空穴能带分裂，相应地态函数F_1, F_2, F_3, F_4对应不同的本征值。对于重空穴能带的分裂，F_1为重空穴多数载流子的态函数，F_4为重空穴少数载流子的态函数。同样，对于轻空穴能带的分裂，F_2为轻空穴多数载流子的态函数，F_3为轻空穴少数载流子的态函数。

我们的模型中还包含半导体层，为此我们需要知道半导体中的空穴色散关系与对应的包络函数。至今已有很多研究 [20, 21, 41, 46]给出了结果：半导体空穴哈密顿用2-14式中左上方4×4的Luttinger-Kohn哈密顿矩阵表示，空穴色散关系为：

$$
E_{1,2} = P \pm (Q^2 + LL^* + MM^*)^{1/2} \tag{4-15}
$$

其中，E_1对应+号表示重空穴态，E_2对应−号表示轻空穴态。这里的P, Q, L, M含有的共同因子为$-\hbar^2/(2m_0)$，应与2-15式表示的电子色散关系加以区别。对应的包络函

数V_i为 [35]:

$$V_1 = C_1'\begin{bmatrix} R_1 \\ L^* \\ M^* \\ 0 \end{bmatrix},\quad V_2 = C_2'\begin{bmatrix} -L \\ R_2 \\ 0 \\ -M^* \end{bmatrix},\quad V_3 = C_3'\begin{bmatrix} -M \\ 0 \\ R_2 \\ L^* \end{bmatrix},\quad V_4 = C_4'\begin{bmatrix} 0 \\ M \\ -L \\ R_1 \end{bmatrix} \tag{4-16}$$

其中，C_i'为归一化常数，V_1,V_4为重空穴两个简并态的本征函数，V_2,V_3为轻空穴两个简并态的本征函数。本征函数中$R_1=P-Q+E_1$，以及$R_2=-Q-P-E_2$。

以上，我们得到了铁磁半导体以及半导体的本征能量与本征态，明确了各层中载流子的基本情况，可以进一步写出铁磁半导体异质结各层中的入射波、反射波波函数，用传输矩阵的量子散射方法研究铁磁半导体相关异质结。

4.2 扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰模型下对异质结的理论推导

我们已知半导体中空穴的本征态和其包络函数，并用扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 方法计算了铁磁半导体中自旋极化的空穴的本征态和包络函数。下面将结合传输矩阵的量子散射方法，仍以GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs为模型，如图3-1，仿照第三章的过程，推导平行磁构型下异质结的传输矩阵。

异质结中载流子的波函数为:

$$\begin{cases} \phi_{FS} = F_i(\vec{r})\boldsymbol{u}_0(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, & \text{铁磁半导体层} \\ \phi_{SM} = V_i(\vec{r})\boldsymbol{u}_0(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, & \text{半导体层} \end{cases} \tag{4-17}$$

其中F_i和V_i为4-14式以及4-16式中表示的包络函数之一，$\boldsymbol{u}_0(\vec{r})=(u_1,u_2,u_3,u_4)$为布洛赫函数中的周期函数部分。每个区域中的波函数是各个波包的线性组合，保持$k_\|$守恒。以第一个区域GaMnAs层和第二个区域AlAs层为例:

在第一层GaMnAs中:

$$\begin{aligned}\Psi_1 =& [a_1F_1(+k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z} + a_2F_2(+k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z} + a_3F_3(+k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z} + a_4F_4(+k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z} + \\ & a_5F_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z} + a_6F_2(-k_{l\uparrow})e^{-ik_{l\uparrow}z} + a_7F_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z} + \\ & a_8F_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z}]\boldsymbol{u}_0(\vec{r})e^{i(k_xx+k_yy)}\end{aligned} \tag{4-18}$$

上式中$a_1,a_2,\cdots,a_8$为线性组合的系数，$k_{h\uparrow},k_{l\uparrow},k_{l\downarrow},k_{h\uparrow}$ 分别为铁磁半导体中重空穴多数载流子、轻空穴多数载流子、轻空穴少数载流子以及重空穴多数载流子的波矢k_z分量。它们可以由铁磁半导体中空穴的色散关系4-9式得到，对应的入射能量为E。

同样地令$b_1, b_2, \cdots, b_8$为系数，在第二层AlAs中：

$$\begin{aligned}\Psi_2 =&[b_1 V_1(+k_{Alh})e^{ik_{Alh}z} + b_2 V_2(+k_{All})e^{ik_{All}z} + b_3 V_3(+k_{All})e^{ik_{All}z} + b_4 V_4(+k_{Alh})e^{ik_{Alh}z} \\ &+ b_5 V_1(-k_{Alh})e^{-ik_{Alh}z} + b_6 V_2(-k_{All})e^{-ik_{All}z} + b_7 V_3(-k_{All})e^{-ik_{All}z} \\ &+ b_8 V_4(-k_{Alh})e^{-ik_{Alh}z}] u_0(\vec{r}) e^{i(k_x x + k_y y)}\end{aligned} \tag{4-19}$$

其中，k_{Alh}, k_{All}为AlAs层中重、轻空穴波矢分量。GaAs层中的波矢分量用k_{Gah}, k_{Gal}表示。半导体中没有自旋极化，故空穴没有多数、少数载流子之分，即它们是简并的。波矢分量可以用半导体中空穴色散关系2-15式得到，此时对应的能量为$E-U$。以此类推可以得到其它各层中的波函数表达式。

波函数在分界面上满足连续性条件，以第一个分界面z_1处为例，可以得到：

$$\begin{cases}\Psi_1(z_1) = \Psi_2(z_1) \\ B\Psi_1(z_1) = B\Psi_2(z_1)\end{cases} \tag{4-20}$$

矩阵$\boldsymbol{B}$由M.Altarelli等人得到 [35]，其作用是使界面处波函数导数连续。将波函数改写成矩阵与系数矩阵相乘的形式，再由连续性条件得到传输矩阵方程：

$$\begin{aligned}&\text{边界}z_1\text{:}\quad M_1\boldsymbol{a} = M_2\boldsymbol{b}; \qquad && \boldsymbol{a} = \left(a_1\ a_2 \cdots a_8\right)^T \\ &\text{边界}z_2\text{:}\quad M_3\boldsymbol{b} = M_4\boldsymbol{c}; \qquad \text{其中：} && \boldsymbol{b} = \left(b_1\ b_2 \cdots b_8\right)^T \\ &\text{边界}z_3\text{:}\quad M_5\boldsymbol{c} = M_6\boldsymbol{d}; && \qquad \vdots \\ &\text{边界}z_4\text{:}\quad M_7\boldsymbol{d} = M_8\boldsymbol{t}; && \boldsymbol{t} = \left(t_1\ t_2 \cdots t_8\right)^T\end{aligned} \tag{4-21}$$

符号T表示对矩阵取转置。具体的$\boldsymbol{B}$矩阵形式以及各个矩阵M_i的形式见附录（A）。由上式可得到：

$$\boldsymbol{t} = M_8^{-1}M_7M_6^{-1}M_5M_4^{-1}M_3M_2^{-1}M_1\boldsymbol{a} = M\boldsymbol{a} \tag{4-22}$$

由已知的入射情况a_1, a_2, a_3, a_4以及透射最后一层无反射的条件$t_5 = t_6 = t_7 = t_8 = 0$，有：

$$\left(t_1\ t_2\ t_3\ t_4\ 0\ 0\ 0\ 0\right)^T = M\left(a_1\ a_2\ a_3\ a_4\ a_5\ a_6\ a_7\ a_8\right)^T \tag{4-23}$$

可求得第一层中的反射系数a_5, a_6, a_7, a_8以及最后一层中的透射系数t_1, t_2, t_3, t_4。由Landauer Büticker公式可进一步求得透射电流、电导以及TMR。

此时我们可以看到，四个透射系数表明载流子通过了四个通道出射，总的电流包含了四个通道的全部透射几率。与用自由空穴带模型的方法对比，我们将四个能带放在了一起考虑。在此，重、轻空穴的名称并不是很贴切，因为这里的载流子与自由空穴带模型中的载流子以及半导体中的重、轻空穴载流子是不相同的，而是四

种单独的、无简并、自旋极化的载流子。但是我们还是保留重、轻空穴的名称，用多数、少数载流子对有自旋极化的四种载流子加以区分。同时，对各种载流子相应的出射通道，分别命名为：重空穴多数载流子通道，对应t_1；轻空穴多数载流子通道，对应t_2；轻空穴少数载流子通道，对应t_3；重空穴少数载流子通道，对应t_4。简称为：T_1、T_2、T_3、T_4通道。用扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰模型结合传输矩阵的量子散射方法的方法来计算铁磁半导体相关异质结得到的结果清楚地显示了能带间的混合作用。关于对结果的讨论，将在下一章详细叙述。

以上理论方法在研究具有相似结构的铁磁半导体相关异质结时显示出其简便的一面。本文中研究了两种模型，即GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs双势垒隧道结以及GaAs/GaMnAs/AlAs/GaMnAs/GaAs自旋过滤器件。可以看到，该自旋过滤器件相比于双势垒隧道结，在结构模型上只需将各层做一下调换。这样的操作并不会使理论推导变得复杂。各层中的波函数同样可以很容易地写出，还是按照传输矩阵的推导过程，只需要将连续方程中各M_i调换，再代入相应数值即可。方程形式保持不变，最终仍得到4-22式。

4.3 任意磁构型下的近似理论

在研究平行磁构型下铁磁半导体相关异质结时，我们可以用简化的对角矩阵哈密顿量$\hat{H}_{ex}$求得磁性层的包络函数以及波函数。为了研究不同磁构型下异质结的传输性质，需要使磁性层间的磁化方向发生相对改变。在本文所用的模型中涉及到两层磁性层。假设入射层或靠近入射层的铁磁半导体层的磁化方向总是保持不变，沿着z方向，而使出射层或靠近出射层的铁磁半导体的磁化方向发生（θ,φ）的改变，其中θ表示磁化方向与x轴的夹角，φ表示磁化方向与z轴的夹角。我们用旋转矩阵 [16]的方法近似求得磁化方向发生改变的铁磁半导体层中的包络函数与波函数，

先求得算符$\hat{H}_r$在四个基u_1,u_2,u_3,u_4下的本征值与本征态，$\hat{H}_r$可表示成：

$$\hat{H}_r=\vec{\sigma}\cdot\vec{n} \tag{4-24}$$

其中，$\vec{\sigma}=\sigma_x\hat{i}+\sigma_y\hat{j}+\sigma_z\hat{k}$为自旋泡利算符，$\hat{i},\hat{j},\hat{k}$分别表示沿$x,y,z$轴的单位向量。磁化方向单位向量$\vec{n}=(\sin\varphi\cos\theta,\sin\varphi\sin\theta,\cos\varphi)$。泡利算符$\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$在四个

基矢u_1, u_2, u_3, u_4下的形式 [45]为：

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = i\begin{bmatrix} 0 & \frac{-1}{2\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 & \frac{-1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{-1}{2\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-1}{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{-1}{2} \end{bmatrix} \tag{4-25}$$

则得到$\hat{H}_r$在四个基矢u_1, u_2, u_3, u_4下的矩阵算符为 [45]:

$$\hat{H}_r = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\cos\varphi & \frac{1}{2\sqrt{3}}\sin\varphi e^{-i\theta} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{3}}\sin\varphi e^{i\theta} & \frac{1}{6}\cos\varphi & \frac{1}{3}\sin\varphi e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3}\sin\varphi e^{i\theta} & -\frac{1}{6}\cos\varphi & \frac{1}{2\sqrt{3}}\sin\varphi e^{-i\theta} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}}\sin\varphi e^{i\theta} & -\frac{1}{2}\cos\varphi \end{bmatrix} \tag{4-26}$$

本征值与对应的本征态为：

$$\begin{aligned} &\lambda_1 = \frac{1}{2}, \begin{bmatrix} \cos^3\frac{\varphi}{2}e^{-2i\theta} \\ \sqrt{3}\sin\frac{\varphi}{2}\cos^2\frac{\varphi}{2}e^{-i\theta} \\ \sqrt{3}\sin^2\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2} \\ \sin^3\frac{\varphi}{2}e^{i\theta} \end{bmatrix}; \quad \lambda_2 = \frac{1}{6}, \begin{bmatrix} -\sqrt{3}\sin\frac{\varphi}{2}\cos^2\frac{\varphi}{2}e^{-2i\theta} \\ \frac{1}{2}\cos\frac{\varphi}{2}(3\cos\varphi - 1)e^{-i\theta} \\ \frac{1}{2}\sin\frac{\varphi}{2}(3\cos\varphi + 1) \\ \sqrt{3}\sin^2\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2}e^{i\theta} \end{bmatrix}; \\ &\lambda_3 = -\frac{1}{6}, \begin{bmatrix} \sqrt{3}\sin^2\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2}e^{-i\theta} \\ -\frac{1}{2}\sin\frac{\varphi}{2}(3\cos\varphi + 1) \\ \frac{1}{2}\cos\frac{\varphi}{2}(3\cos\varphi - 1)e^{i\theta} \\ \sqrt{3}\sin\frac{\varphi}{2}\cos^2\frac{\varphi}{2}e^{2i\theta} \end{bmatrix}; \quad \lambda_4 = -\frac{1}{2}, \begin{bmatrix} -\sin^3\frac{\varphi}{2}e^{-i\theta} \\ \sqrt{3}\sin^2\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2} \\ -\sqrt{3}\sin\frac{\varphi}{2}\cos^2\frac{\varphi}{2}e^{i\theta} \\ \cos^3\frac{\varphi}{2}e^{2i\theta} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{4-27}$$

由此得到旋转矩阵$\hat{T}_r$为：

$$\hat{T}_r = \begin{bmatrix} \cos^3\frac{\varphi}{2}e^{-2i\theta} & -\sqrt{3}\sin\frac{\varphi}{2}\cos^2\frac{\varphi}{2}e^{-2i\theta} & \sqrt{3}\sin^2\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2}e^{-i\theta} & -\sin^3\frac{\varphi}{2}e^{-i\theta} \\ \sqrt{3}\sin\frac{\varphi}{2}\cos^2\frac{\varphi}{2}e^{-i\theta} & \frac{1}{2}\cos\frac{\varphi}{2}(3\cos\varphi - 1)e^{-i\theta} & -\frac{1}{2}\sin\frac{\varphi}{2}(3\cos\varphi + 1) & \sqrt{3}\sin^2\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2} \\ \sqrt{3}\sin^2\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2} & \frac{1}{2}\sin\frac{\varphi}{2}(3\cos\varphi + 1) & \frac{1}{2}\cos\frac{\varphi}{2}(3\cos\varphi - 1)e^{i\theta} & -\sqrt{3}\sin\frac{\varphi}{2}\cos^2\frac{\varphi}{2}e^{i\theta} \\ \sin^3\frac{\varphi}{2}e^{i\theta} & \sqrt{3}\sin^2\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2}e^{i\theta} & \sqrt{3}\sin\frac{\varphi}{2}\cos^2\frac{\varphi}{2}e^{2i\theta} & \cos^3\frac{\varphi}{2}e^{2i\theta} \end{bmatrix} \tag{4-28}$$

已知铁磁半导体中磁化方向沿z方向时，铁磁半导体层中载流子的包络函数为F_i，由旋转矩阵可求得磁化方向旋转(θ, φ)后载流子新的包络函数F_i'：

$$F_i' = \hat{T}_r F_i \tag{4-29}$$

用新的包络函数构成磁化方向发生旋转的铁磁半导体层的波函数。

与$k\cdot p$ 微扰模型下得到的旋转矩阵$\hat{T}_r$不同的是，自由空穴带模型下的旋转矩阵形式

要简单得多，因为自由空穴带模型下只有两个自旋相反的态函数为基，得到的旋转矩阵为2×2的，具体形式为：

$$\hat{T}'_r = \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} & \sin\frac{\varphi}{2}e^{i\theta} \\ -\sin\frac{\varphi}{2}e^{-i\theta} & \cos\frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \tag{4-30}$$

在下一章中，我们将对在$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰模型下和自由空穴带模型下运用旋转矩阵的近似方法研究铁磁半导体相关异质结得到的相关结果进行详细叙述并作对比说明。

尽管最精确的求解方法是直接从最原始的哈密顿开始求解，但是任意磁化方向的铁磁半导体的交换作用哈密顿 [41]是比较复杂的非对角矩阵，再与Luttinger-Kohn哈密顿结合在一起，总的哈密顿量将变成一个矩阵元全为非零、形式复杂的4×4矩阵。在解析推导本征态与本征函数时十分不便，在具体数值计算时对变量控制也很困难。用旋转矩阵近似方法可使计算变得简便可控，它对磁化方向发生改变的磁性层作单独处理，并且不用重新求解本征值与本征态。另外，旋转矩阵的近似方法还适用于处理任意角度的磁化方向变化。

第五章 关于两种异质结的数值计算结果及讨论

5.1 两种铁磁半导体相关异质结的结构模型

以前面两章的理论为基础，我们对两种铁磁半导体相关异质结进行研究，分别是GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs 双势垒隧道结和GaAs/GaMnAs/AlAs/ GaMnAs/GaAs 自旋过滤器件。我们建立它们的结构模型，分别用自由空穴带模型和扩展的$K \cdot P$微扰模型，结合传输矩阵的量子散射方法，用计算机模拟的数值计算得到相关物理信息，并对这些结果进行对比讨论。

两种铁磁半导体异质结结构模型的能带示意图如图5-1（a）和图5-1（b）所示。图中粗略表示出了铁磁半导体GaMnAs、半导体势垒AlAs与半导体势阱GaAs的能带间的高低差异。铁磁半导体劈裂的四条能带的具体细节未完全画出或近似画出。关于铁磁半导体的具体能带结构，我们已在前文中给予了说明，在下一节中，我们也可从另一个角度讨论铁磁半导体空穴的能带结构。

图5-1（a）中的d、w 分别表示势垒AlAs层的厚度以及势阱GaAs层的宽度；U表示势垒顶部与势阱底部的势差，即势垒高度；z_1, z_2, z_3, z_4分别表示隧道结的四个界面，它

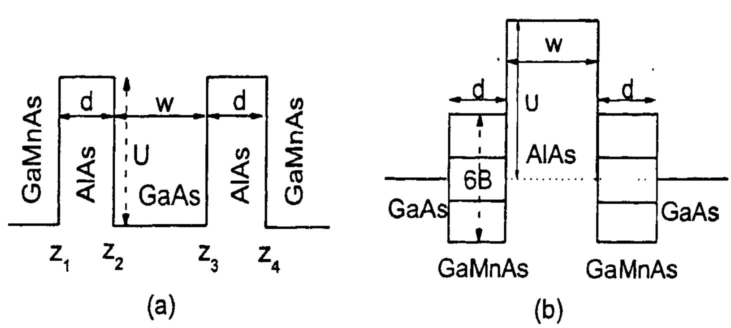

图 5-1 (a) GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs 双势垒隧道结能带示意图(b)GaAs/GaMnAs/AlAs/GaMnAs/GaAs 自旋过滤器件能带示意图

们将隧道结分成五个区域。

图5-1（b）中的d、w 分别表示自旋过滤层GaMnAs层的厚度以及中间半导体层AlAs层的厚度。在GaMnAs铁磁半导体层，画出的四个能带只是按照能带带底的差别取的近似画法，其中B为铁磁半导体中的自旋劈裂能，能带带底间的最大差值为$6B$。

在这两个理想模型中，没有考虑外界偏置电压的影响，如果考虑外置偏置电压，能带结构将发生倾斜，隧道结载流子的隧穿过程将产生所谓的FN隧穿现象 [48–50]。

5.2 具体数值计算中对波函数的一点说明

我们用到的量子散射方法要求给出异质结各层中的波函数，在数值计算的过程中，这些波函数都将被代入数值。在已知载流子入射能量E和$k_{\|}$的条件下，铁磁半导体以及半导体中构成波函数的包络函数F_i和V_i是关于k_z的函数，因此需要从铁磁半导体和半导体中载流子的色散关系（4-2式和2-15式）出发，得到各种载流子相应的k_z值。对于半导体中的k_z值并不难得到。对于铁磁半导体中求解k_z如下：

以k_z为未知数，由色散关系4-2式改写得到关于k_z的方程式：

$$A'k_z^8 + B'k_z^6 + C'k_z^4 + D'k_z^2 + E' = 0 \tag{5-1}$$

其中系数分别为：

$$\begin{cases} A' = \epsilon_1^2 \\ B' = 2\epsilon_1(\epsilon_2 - b') - 4\epsilon_1 d_1' E \\ C' = 2\epsilon_1\epsilon_3 + 6\epsilon_1 B^2 + \epsilon_2^2 - \xi_1^2 - 2a'\epsilon_1 - 2b'\epsilon_2 + b'^2 + 4E(b'd_1' - \epsilon_2 d_1' - \epsilon_1 c_1') \\ \qquad + 2E^2(\epsilon_1 + 2d_1'^2) \\ D' = 2(\epsilon_2 - b')(\epsilon_3 + 3B^2) - 2(\xi_1\eta_1 + a'\epsilon_2 - a'b') + 4E[(a'd_1' + b'c_1') - \epsilon_3(c_1' + d_1') \\ \qquad - 3d_1'B^2 - 2\xi_1 B] + 2E^2(\epsilon_2 + 4c_1'd_1' - b') - 4d_1'E^3 \\ E' = (\epsilon_3 + 3B^2)^2 - \eta_1^2 - 2a'(\epsilon_3 - 3B^2) + a'^2 + 4E(a'c_1' - c_1'\epsilon_3 - 2B\eta_1 - 3B^2 c_1') \\ \qquad + 2E^2(\epsilon_3 + 2c_1'^2 - a' - 5B^2) - 4E^3 c_1' + E^4 \end{cases} \tag{5-2}$$

其中，E为载流子入射能量，取为费米能量E_f，B为铁磁半导体中的自旋劈裂能。其它

参数如下：

$$\begin{cases} a' = 3\gamma_3^2[(k_x^2 - k_y^2)^2 + 4k_x^2k_y^2] \\ b' = 12\gamma_3^2(k_x^2 + k_y^2) \end{cases} ; \quad \begin{cases} c_1' = \gamma_1(k_x^2 + k_y^2) \\ c_2' = \gamma_2(k_x^2 + k_y^2) \end{cases} ; \quad \begin{cases} d_1' = \gamma_1 \\ d_2' = -2\gamma_2 \end{cases} \tag{5-3}$$

以及：

$$\begin{cases} \epsilon_1 = d_1'^2 - d_2'^2 \\ \epsilon_2 = 2c_1'd_1' - 2c_2'd_2' \\ \epsilon_3 = c_1'^2 - c_2'^2 \end{cases} ; \quad \begin{cases} \xi_1 = -4Bd_1' + 2Bd_2' \\ \xi_2 = -2Bd_1' + 4Bd_2' \end{cases} ; \quad \begin{cases} \eta_1 = -4Bc_1' + 2Bc_2' \\ \eta_2 = -2Bc_1' + 4Bc_2' \end{cases} \tag{5-4}$$

其中，$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$为与材料相关的参数。在GaAs和AlAs中它们的值分别为$6.85, 2.1, 2.9$以及$3.45, 0.68, 1.29$ [45]。GaMnAs中γ值和GaAs相同。

用数值求解一元八次方程得到k_z值。取载流子的入射能量为$E = 0.2ev$，铁磁半导体中的自旋劈裂能为$B = 0.03ev$ [24, 34]，得到GaMnAs中四种载流子的k_z随$k_\parallel$的变化如图5-2，k_z值的实部与虚部分别用实线与虚线表示。其中$k_\parallel = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$。

半导体中没有自旋极化，故可使$B = 0ev$。通过计算分别得到GaAs和AlAs中载流子

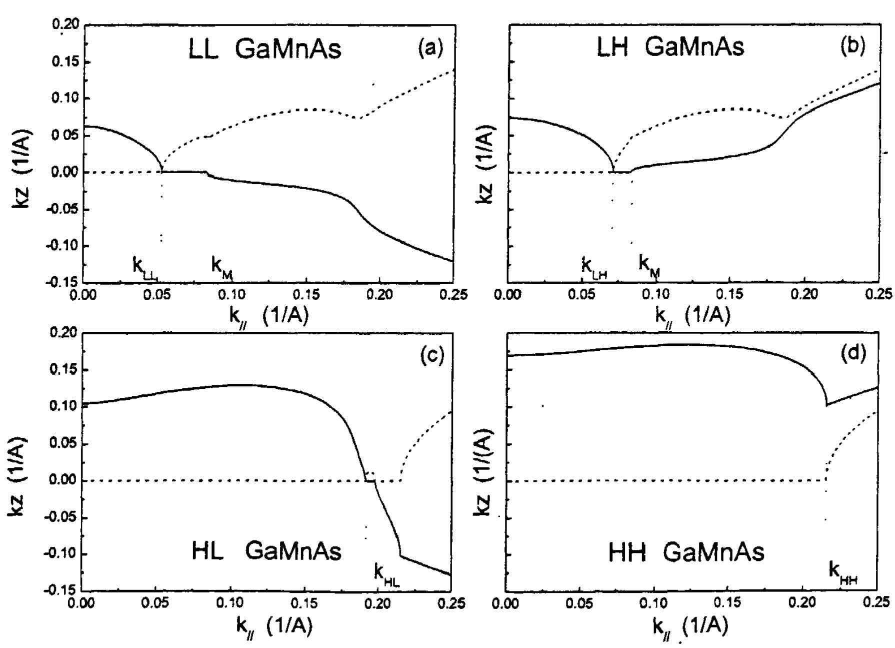

图 5-2 铁磁半导体中各载流子k_z随$k_\parallel$的变化。(a) 轻空穴少数载流子的k_z情况；(b)轻空穴多数载流子的k_z情况；(c) 重空穴少数载流子的k_z情况；(d) 重空穴多数载流子的k_z情况。

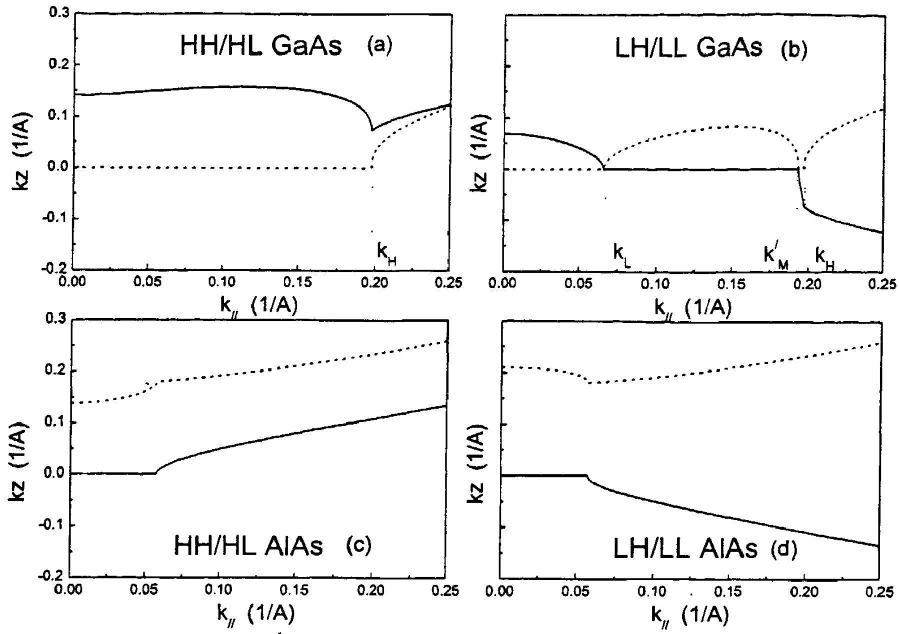

图 5-3 半导体中各载流子k_z随$k_\parallel$的变化。(a) GaAs中重空穴的k_z情况；(b) GaAs中轻空穴的k_z情况；(c) AlAs中重空穴的k_z情况；(d) AlAs中轻空穴的k_z情况。

的k_z随$k_\parallel$的变化，如图5-3。

在图5-2中，k_z值有四组（每组反号），说明铁磁半导体能带为解简并的四条。当$k_\parallel < k_{LL}$时，轻空穴少数载流子k_z为实数，$k_{LL} < k_\parallel < k_M$时为纯虚数；当$k_\parallel < k_{LH}$时，轻空穴多数载流子$k_z$为实数，$k_{LH} < k_\parallel < k_M$时为纯虚数；当$k_\parallel > k_M$时，轻空穴多数、少数载流子$k_z$均为复数。为使波函数满足辐射条件 [51]，即在$z$ 方向传播过程中是衰减的，在确定k_z的值的时候，保持k_z的虚部为正。当$k_\parallel < k_{HL}$时，重空穴少数载流子k_z为实数；当$k_\parallel < k_{HH}$时，重空穴多数数载流子k_z为实数；当$k_\parallel > k_{HH}$时，重空穴多数、少数载流子均为复数。在$k_{HL} > k_\parallel > k_{HH}$这段区间里，重空穴少数载流子的$k_z$值比较复杂，这是由重空穴少数载流子能带在这段区域中的鞍形等能面引起的，见图4-2。四种载流子的k_z值的情况，都可以与能带的等能面一一对应，因此从k_z的情况也可以反映铁磁半导体中载流子的能带情况。

图5-3中，GaAs和AlAs中载流子的k_z值各有两个，每个为二重简并的，对应重空穴与轻空穴。虽然半导体中没有多数与少数载流子之分，但图中仍然用HH, HL表示重空穴，表明是二重简并的。轻空穴亦然，用LH, LL表示。GaAs中，当$k_\parallel < k_L$时，

轻空穴k_z为实数; 当$k_L < k_\parallel < k'_M$时轻空穴k_z为纯虚数。$k_\parallel < k_H$时，重空穴k_z为实数。当$k_\parallel > k_H$时，重、轻空穴k_z均为复数。AlAs和GaAs同为半导体材料，但是AlAs中重、轻空穴的k_z皆为复数，这是由于AlAs的能带高于GaAs的能带，形成了势垒U。GaAs和AlAs中载流子的k_z值情况也与半导体能带等能面一一对应，见图4-1。

由图5-2和图5-3中可以看出，k_z随$k_\parallel$ 的变化能清晰地反映材料中能带结构的细节。另外，铁磁半导体的能带结构比半导体的能带结构复杂得多。

5.3 GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs 双势垒隧道结

分别在自由空穴带模型以及扩展的$K \cdot P$微扰模型基础上，使用结合传输矩阵的量子散射方法研究GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs 双势垒隧道结，得到透射系数随入射能量，波矢平行分量，势阱宽度等物理量的变化情况，并求得透射电流以及隧道磁致电阻TMR。另外还对两种方法下得到的结果进行了对比说明。

5.3.1 自由空穴带模型

在运用自由空穴带模型对双势垒隧道结进行研究时，不能将重空穴与轻空穴载流子同时考虑，而只能根据重空穴与轻空穴的有效质量不同以及由于铁磁交换作用能带间劈裂能的差别，将重空穴载流子与轻空穴载流子的透射情况分别考虑。以重空穴载流子的透射情况来说明自由空穴带模型下双势垒隧道结的透射性质。

图5-4是重空穴多数载流子的透射系数随$k_\parallel$的变化情况，其中a_5, b_5是透射系数，与3-2式中的透射系数相对应，表示载流子可以由两个通道透射。通道的数目是由自由空穴带模型决定的，因为自由空穴带模型只能单独地考虑重空穴或者轻空穴，而无法将重、轻空穴结合在一起考虑。在分子场作用下载流子分为多数与少数载流子，a_5对应多数载流子出射通道，b_5对应少数载流子出射通道。只考虑费米面附近载流子的透射情况，取$E_f = 0.2ev$，中间GaAs势阱层宽度$d = 30\mathring{A}$，势垒层AlAs厚度$w = 10\mathring{A}$。

由图5-4可以看出，重空穴多数载流子透射有显著的共振峰，但从两个通道透射的情况有显著差别。从多数载流子通道出射的载流子透射系数曲线存在共振峰，而于少数载流子通道透射则没有峰。这种情况说明，用自由空穴带模型研究双势垒隧道结时，多数与少数载流子能带间也没有耦合作用，但是模型很好地反映了双势垒隧道结中共振透射的情况。

图5-5是在不同中间势阱层厚度时，重空穴多数载流子的透射系数随波矢平行分

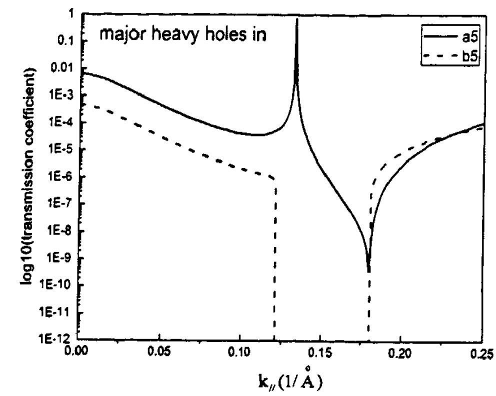

图 5-4 重空穴多数载流子的透射系数随$k_{\parallel}$的变化

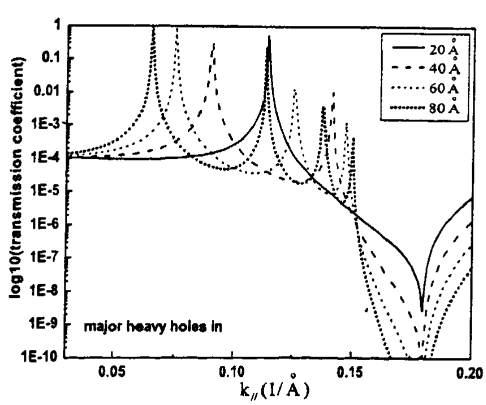

图 5-5 不同GaAs厚度时，重空穴多数载流子的透射系数随$k_{\parallel}$的变化

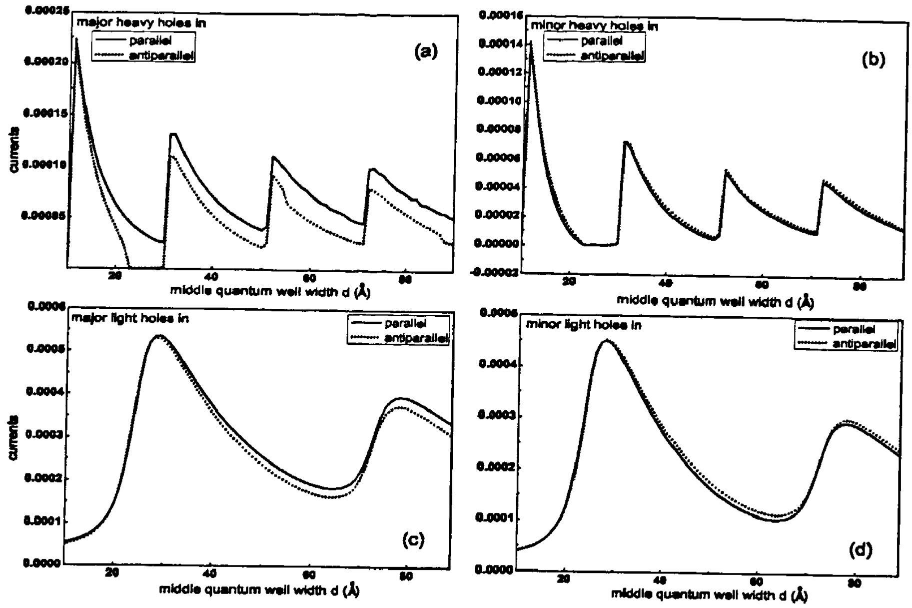

图 5-6 四种载流子透射电流随中间层势阱GaAs宽度的变化。其中：(a)重空穴多数载流子透射电流；(b)重空穴少数载流子透射电流；(c)轻空穴多数载流子透射电流；(d)轻空穴少数载流子透射电流

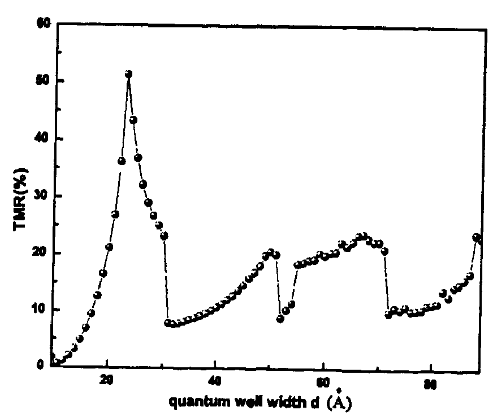

图 5-7 TMR随中间层GaAs势阱宽度d的变化，其中$\theta = \pi$

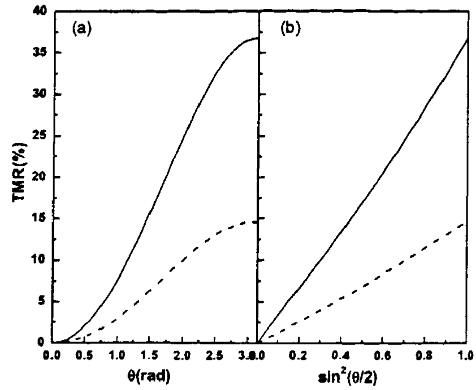

图 5-8 （a）TMR随相对磁化角度θ的变化；（b）TMR随$\sin^2(\theta/2)$的变化。图中，实线与虚线分别对应隧道结势阱层宽度$d = 25\mathring{A}$和$d = 45\mathring{A}$。

量的变化情况。中间势阱层GaAs的宽度分别取20$\mathring{A}$、40$\mathring{A}$、60$\mathring{A}$以及80$\mathring{A}$。图中可以看出，由于双势垒的存在，隧道结产生共振隧穿，表现为透射系数存在共振透射峰。隧道结的共振透射主要是受势阱宽度的影响。共振峰的个数随着势阱宽度的增加而增加。以上结果也暗示着隧道结的透射电流也将随着势阱宽度的变化而呈现周期性变化，因为隧道结的透射电流主要是由透射系数的峰值贡献的。

图5-6得到了四种载流子的电流随中间势阱层宽度的变化情况。实线和虚线分别表示平行磁构型下以及反平行磁构型下的结果。图中显示，重空穴和轻空穴载流子的透射电流随势阱宽度增加呈周期性振荡，但两者的振荡周期不同。重空穴载流子电流的振荡周期约为20$\mathring{A}$，轻空穴载流子电流的振荡周期约为48$\mathring{A}$。当势阱宽度为载流子波矢对应波长的半整数倍时，载流子透射出现共振透射峰，电流对应出现周期性。由$\Delta d = \pi/k_F$ 以及已知的费米能量可以求得，重空穴与轻空穴的共振周期分别为20.42$\mathring{A}$和48.46$\mathring{A}$，图中的结果符合这一结果。重空穴与轻空穴电流有各自独立的周期也显示了重空穴与轻空穴之间没有耦合作用。另外，多数载流子透射电流在平行与反平行磁构型下有明显差别，少数载流子透射电流在两种情形下有细微差别，即总电流将在平行与反平行磁构型时有不同的情况，这种差别可以由TMR显示，如图5-7。

图5-7计算了相对磁化角度$\theta = \pi$时的TMR随势阱层GaAs厚度的变化。即此时的$TMR = (G_p - G_{ap})/G_p$，反映的是平行磁构型与反平行磁构型时的双势垒隧道结的隧穿电流之间的差别。可以看到，TMR整体为正值，其值随着势阱层宽度呈周期性变化。这一结果说明，反平行磁构型下，隧道结总的透射电流受到了铁磁层自旋极化的

限制，其值小于平行磁构型下的的透射电流。另外，双势垒隧道结的共振透射性质，也影响到了隧道磁致电阻TMR。由TMR的周期与重空穴电流周期比较相近这一点可以看出，重空穴电流对总电流的贡献不可忽略，并且使TMR明显带有重空穴透射电流的特征。

我们用旋转矩阵的近似方法得到了TMR随相对磁化角度θ的变化情况，θ 从0 变化至π，如图5-8所示。图（a）中显示，TMR随θ的增加而单调增加，当达到$\theta=\pi$即反平行磁构型时，TMR达到最大值，说明反平行磁构型下的透射电流受到的透射限制最大。TMR随θ的变化关于$\theta=\pi$对称，说明在自由空穴带模型下，隧道结中铁磁半导体层的自旋极化对电流的限制作用是高度对称的。这一高度对称性还可以从图（b）中明显看出，TMR关于$\sin^2(\theta/2)$的变化是线性的，这一结果与J.E.Bunder的研究 [16]所得结论是一致的。

自由空穴带模型中忽略了重、轻空穴间的混合作用，得到了具有高度对称性的结果。事实上，重、轻空穴间的混合作用对隧道结的透射性质影响很大，研究铁磁半导体相关异质结需要用更精确的方法。

5.3.2 扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰模型

用扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰模型结合传输矩阵的量子散射方法研究铁磁半导体相关异质结，弥补了用自由空穴带模型中的不足。它将重、轻空穴多数、少数载流子能带同时考虑，包含了重、轻空穴带间的混合作用。考虑到扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰方法是以半导体材料研究为基础的，我们首先把铁磁半导体构成的双势垒隧道结的研究结果与半导体构成的双势垒隧道结的结果作了对比，显示出铁磁半导体中的铁磁交换相互作用对隧道结透射的影响。再与同为研究铁磁半导体相关异质结的自由空穴带模型的结果进行对比。

图5-9给出了两种异质结的透射系数随入射能量E的变化。其中，（a）和（b）图为半导体双势垒隧道结的结果，隧道结结构为GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs。（c）和（d）图为铁磁半导体双势垒隧道结的结果。分别用HH、LH、LL、HL代表重空穴多数载流子、轻空穴多数载流子、轻空穴少数载流子和重空穴多数载流子。两种隧道结中间层势阱宽度都为$d=30\AA$，势垒层厚度为$w=20\AA$。当自旋劈裂能$B=0.00ev$时，表示隧道结为半导体构成，不含有铁磁交换作用；自旋劈裂能为$B=0.03ev$时，表示隧道结为铁磁半导体构成，含有铁磁交换作用。从取不同的波矢平行分量得到的结果可以明显看出能带间混合作用的影响，其中$k_{\parallel}=0.00(1/\AA)$时表示能带间没有混合作用，$k_{\parallel}=0.03(1/\AA)$ 时显示出能带间的混合作用。

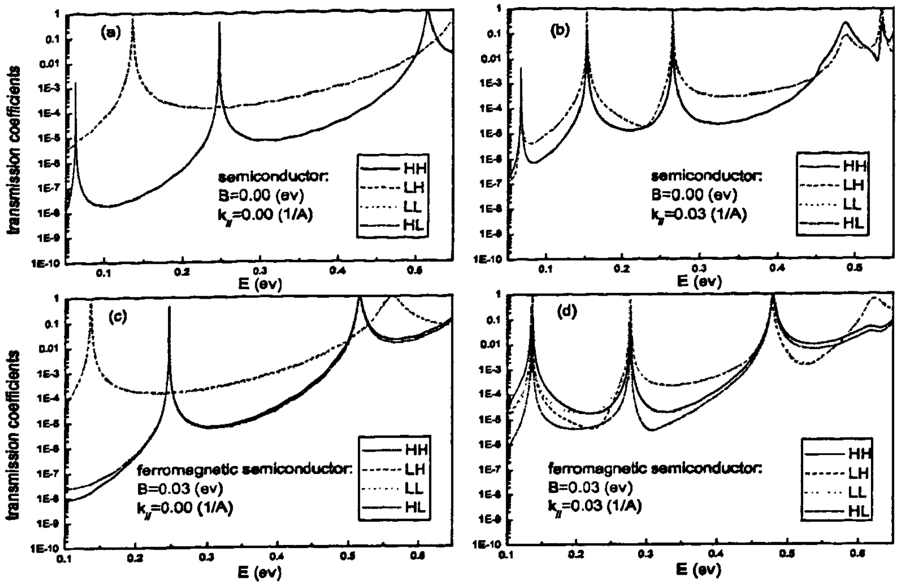

图 5-9 （a）、（b）GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs双势垒隧道结透射系数随入射能量变化，其中，$k_{\|}$分别为$0.00(1/\AA)$以及$0.03(1/\AA)$。（c）、（d）GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs双势垒隧道结透射系数随入射能量变化，其中$B=0.03ev$，$k_{\|}$分别为$0.00(1/\AA)$以及$0.03(1/\AA)$。

一方面，由图（a）和（b）中半导体构成隧道结的透射系数曲线显示，半导体中没有自旋极化，重、轻空穴能带是二重简并的，因此图中重空穴的多数、少数载流子是重合的，轻空穴也是如此，即半导体构成隧道结中没有多数、少数载流子之分。图（c）和（d）中铁磁半导体构成隧道结的结果则相反，四种载流子之间的透射系数曲线发生了分离，说明由于铁磁半导体中铁磁交换作用的存在使简并能带发生分裂，产生载流子的自旋极化。另一方面，能带间混合作用对载流子的透射情况有显著的影响。图（a）以及图（c）中，不考虑能带间的混合作用时，重、轻空穴载流子不在同一能量发生共振透射，它们的共振峰是分离的。而取$k_{\|}=0.03(1/\AA)$时得到的结果显示，如图（b）和（d），载流子能带间的混合作用使共振透射峰的个数有所增加，重、轻空穴间的透射系数的数值相互趋近，并且使四种载流子在相同能量处发生了共振透射。

我们进一步计算了GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs双势垒隧道结在费米面附近的载流子的透射情况，如图5-10。图中显示了隧道结中四种载流子的透射电流随势阱宽度的变化，其中势垒厚度取为$20\AA$。（a）图和（b）图分别是在平行磁构型和反平行

磁构型下得到的结果。图中显示，透射电流随势阱宽度变化呈现明显的周期性，而且各种载流子的电流在相同的势阱宽度产生周期峰值，这不同于由自由空穴带模型得到的结果（图5-6）。这一结果表明，在铁磁半导体双势垒隧道结中，能带间的混合作用对隧道结的透射电流有比较大的影响而且不可忽略。

图5-11给出了平行磁构型下和反平行磁构型下双势垒隧道结的总透射电流随势阱宽度的变化，并求得隧道磁致电阻TMR随隧道结势阱宽度的变化。由（a）图可以看到总透射电流在平行磁构型时的值大于反平行磁构型时的值，说明铁磁半导体中的自旋极化作用使反平行磁构型时载流子的透射受到抑制。总的透射电流随势阱宽度产生周期性变化，周期大约为$20\AA$。（b）图中显示的TMR随势阱宽度变化同样具有周期性，但与自由空穴带模型下的结果（图5-7）对比可以看出，两者的周期是不等的。自由空穴带模型下的TMR的周期明显具有重空穴载流子电流的周期特征，而图（b）中的TMR曲线周期则与总电流周期相似。这可以解释为：用自由空穴带近似计算TMR的过程中，由于重、轻空穴能带间没有混合作用，重、轻空穴载流子的透射电流是各自独立的，总的透射电流就会具有重、轻空穴某一方透射电流的特征。而用扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰模型考虑了重、轻空穴能带间的混合作用，使隧道结中各种载流子透射不再是独立的，而是相互联系的，这使得各种载流子的透射电流具有相似的峰值与相同的周期，因而对应的TMR也具有透射电流的整体特征。

我们进一步计算了任意磁构型下的TMR，如图5-12。在$0\sim\pi$范围内，发现TMR随相对磁化角度θ的变化是非单调的，TMR的最大值并不是出现在$\theta=\pi$的位置处。这

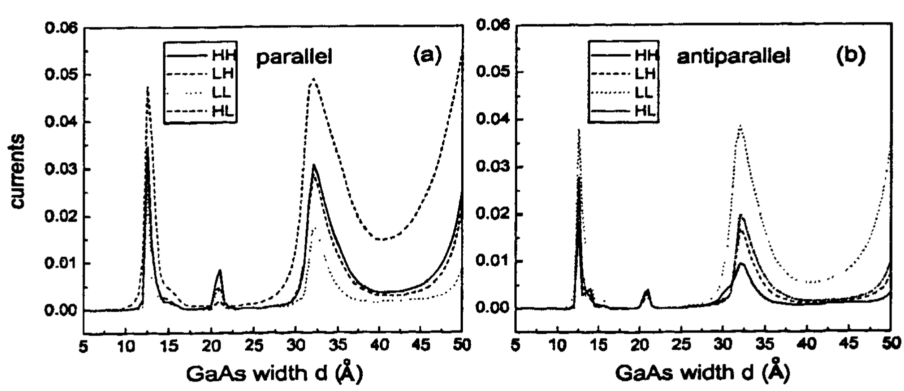

图 5-10 GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs双势垒隧道结的透射电流随势阱宽度的变化。（a）：平行磁构型，（b）：反平行磁构型。

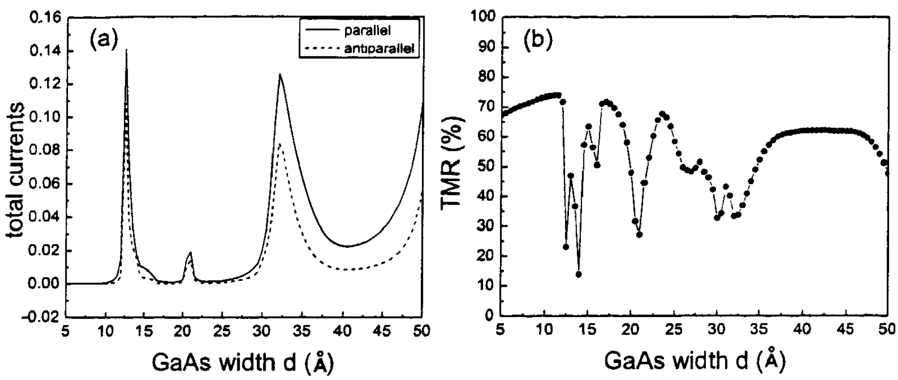

图 5-11 （a）GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs双势垒隧道结的总透射电流随势阱宽度的变化，（b）TMR随势阱宽度的变化。

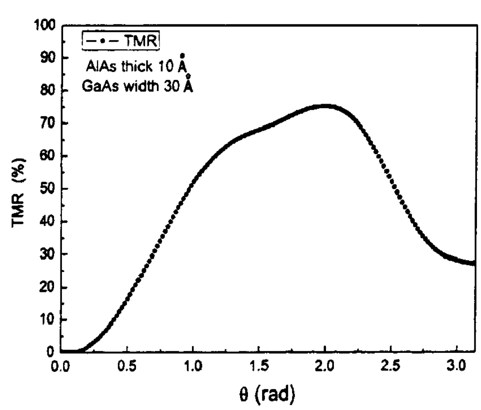

图 5-12 TMR随相对磁化角度θ的变化，其中，势垒厚度取为$w = 10\mathring{A}$，势阱宽度取为$d = 30\mathring{A}$。

说明反平行磁构型下的隧道结的透射电流不是最小的。反平行磁构型下，极化载流子的透射过程虽然受到抑制，但不是最大的抑制。在其它磁构型时，例如隧道结处于TMR曲线坡顶附近的范围内所表示的磁构型时，极化载流子隧穿时受到的抑制比反平行磁构型时大。造成这种结果的原因可以作如下解释：铁磁半导体的能带结构不是简单的抛物线型，在$\vec{k}$的等能面呈现各向异性，如图4-2。因此极化载流子透射的各个出射通道本身也随着磁构型的变化而变化；另外，能带间的混合作用使载流子以一定的几率通过各个通道出射，磁构型变化时，载流子在各个通道的透射几率也相应受到调节，最终造成了总电流非单调性的变化。

5.4 GaAs/GaMnAs/AlAs/GaMnAs/GaAs 自旋过滤器件

铁磁半导体层中铁磁交换作用对隧道结透射性质的影响，铁磁半导体能带间混合作用对隧道结透射性质的影响以及铁磁半导体中自旋极化作用的各向异性对隧道结的透射性质影响，在铁磁半导体构成的自旋过滤器件的输运性质中也得到了体现。自旋过滤器件中将具有铁磁性的材料作为势垒层，从而对载流子起到自旋过滤使之产生极化的作用。我们以GaAs/GaMnAs/AlAs/GaMnAs/GaAs为模型，用扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰模型，结合传输矩阵的量子散射方法对其进行研究，得到了丰富的结果。

图5-13显示了自旋过滤器件中载流子透射系数随入射能量的关系。可以看出隧穿过程中没有共振透射的情况，这是因为异质结中不存在势阱，中间层是一个势

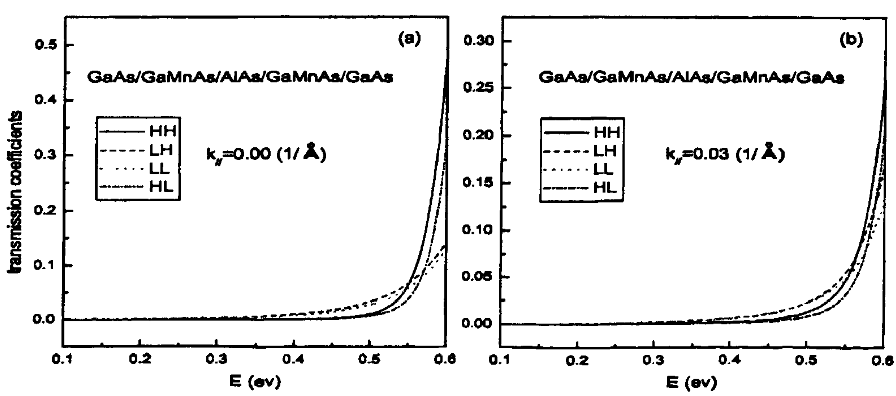

图 5-13 透射系数随入射能量的变化。(a) $k_{\|} = 0(1/\AA)$，(b) $k_{\|} = 0.03(1/\AA)$。其中，GaMnAs层厚度取为$w = 20\AA$，中间AlAs层取为$d = 30\AA$。

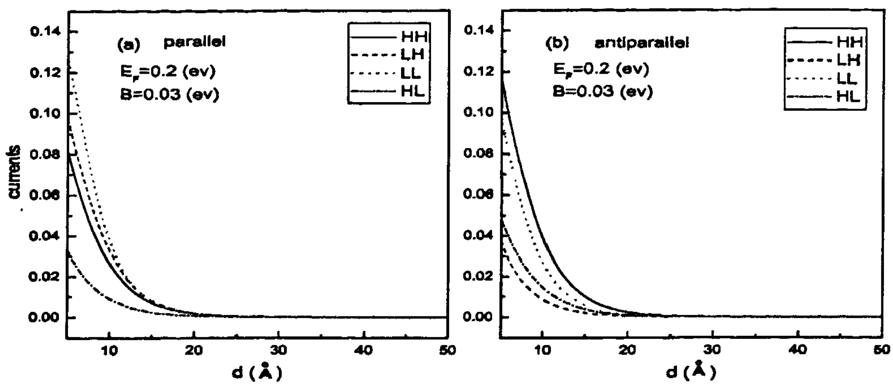

图 5-14 透射电流随中间层AlAs厚度的变化。(a) 平行磁构型时的情况，(b) 反平行磁构型时的情况。其中，GaMnAs层厚度取为$w = 20\mathring{A}$，中间AlAs层厚度变化为$5\mathring{A}$至$50\mathring{A}$，GaAs层费米能$E_F = 0.2ev$，GaMnAs层中自旋劈裂能$B = 0.03ev$。

垒。从四种载流子的透射情况来看，原本入射层GaAs中的非自旋极化的载流子在经过GaMnAs层后，产生了微小的自旋极化，从而使四种载流子的透射系数曲线分离了，也就是说，铁磁半导体层在这个异质结中起到了自旋过滤的作用。在能带间无混合作用（$k_\parallel = 0(1/\mathring{A})$）时，重空穴与轻空穴的透射系数曲线分离得比较明显；当混合作用存在（$k_\parallel = 0.03(1/\mathring{A})$）时，重空穴与轻空穴的透射系数曲线明显地靠近了许多。这一结果显示了在研究铁磁半导体相关异质结时，能带间的混合作用不能被忽略，因为它对载流子的透射系数的影响是明显的，而使用扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰模型是合适的。

考虑费米面附近的载流子的透射情况，入射能量选为费米能量$E_f = 0.2ev$。可以注意到的是，对于拥有该入射能量的载流子来说，GaMnAs层起到势垒的作用其实并不明显，因为我们所选取的GaMnAs材料中由于铁磁交换作用而产生的能带劈裂能B只有$0.03ev$。但是，从前面的讨论中可以看出，铁磁半导体层还是起到了自旋过滤的作用。从载流子的透射电流中也可以反映出铁磁半导体层对载流子的自旋选择作用，如图5-14。

从图中可以看出，在中间势垒AlAs层比较薄的时候，载流子在费米面附近透射时电流有明显的极化现象。随着中间层势垒厚度的增加，透射电流也逐渐减小趋向于零，这与双势垒隧道结的结果有所区别（如图5-10）。双势垒隧道结中由于存在共振透射的情况，随着中间层势阱宽度的增加，载流子的透射峰数将增加，使得载流子的透射电流不一定单调减小，而是呈现出周期性。但通过计算发现，如果增加双势垒隧道

结的势垒厚度，载流子的透射系数以及透射电流也将相应地减小。这也表明了在制作异质结时不能把势垒层做得太厚，势垒层的厚度对异质结的透射电流的大小有很大影响。另外，对图5-14中（a）图和（b）图比较发现，平行磁构型下的自旋过滤器件的总透射电流值略大于反平行磁构型下的总透射电流值，我们进一步计算了这种差别随着自旋过滤器件中间势垒层厚度的变化情况，如图5-15。

图5-15中的$TMR = (G_p - G_{ap})/G_p$。由图中可以看出，当势垒层厚度比较小的时候，即电流的极化现象比较明显的时候，TMR的值相对较大；当势垒厚度增加，电流都减小并趋向于零时，TMR的值也逐渐减小；在势垒厚度大约为10$\mathring{A}$时，TMR有最大值约为16%。

同双势垒隧道结一样，我们也计算了任意磁构型下，自旋过滤器件的TMR。保持自旋过滤器件模型中左侧的GaMnAs层的磁化方向不变，改变右侧的GaMnAs层中的磁化方向，两层磁化方向间的相对角度为θ，令$TMR = [G(0) - G(\theta)]/G(0)$，得图5-16中所示的变化关系。可以看到，TMR的值随θ的变化呈现非单调性，其曲线趋势基本与前一节中双势垒隧道结的TMR随相对磁化角度θ的变化趋势一致，即在某些磁构型下，结的透射电流受到抑制而小于反平行磁构型的情况。产生这种结果的原因可以归结为两个：一是铁磁半导体中能带的混合作用，二是异质结磁构型变化对铁磁半导体异质结中载流子出射通道的调节作用。另外可以由双势垒隧道结与自旋过滤器件的结果（图5-12和图5-16）对比看出，TMR随相对磁化角度θ的变化趋势是受两层铁磁半导体层中相对磁化方向影响，反映的是异质结中铁磁半导体磁化方向在$x-y$平面内的相对关系。异质结z方向的影响，如异质结的结构和异质结的厚度对主要反映在TMR的值

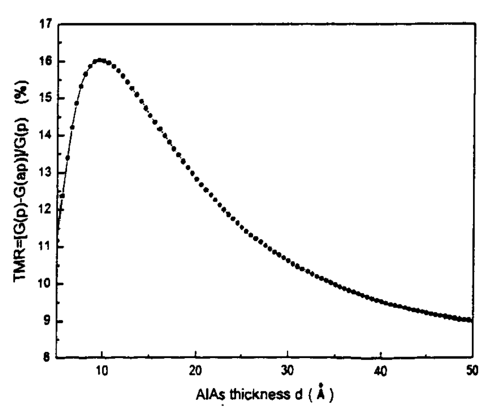

图 5-15 TMR随中间层势垒AlAs的厚度d 的变化。

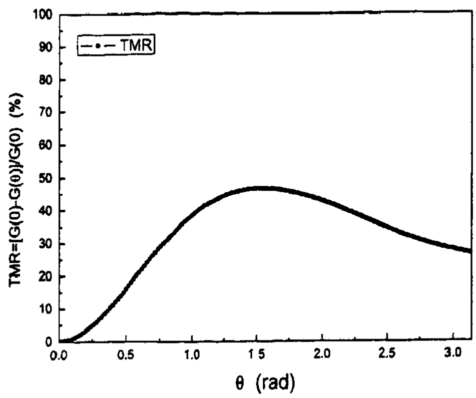

图 5-16 TMR随相对磁化角度θ的变化。其中，中间AlAs层厚度$d = 20\mathring{A}$，两GaMnAs层宽度$w = 10\mathring{A}$。

上。

第六章　总结与展望

铁磁半导体兼具铁磁性与半导体性，其相关异质结具有丰富的隧穿性质。对铁磁半导体相关异质结的研究可以为研发新型磁存储器件提供理论指导。

本文首先介绍了研究半导体材料的理论方法，即$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰方法，作为研究铁磁半导体材料的理论基础；其次介绍了铁磁半导体中的铁磁相互作用以及由于铁磁相互作用造成的自旋劈裂能，作为研究铁磁半导体材料的铺垫。根据以上理论基础，推导了适用于研究铁磁半导体材料的扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰模型，得到了铁磁半导体中空穴的色散关系和波函数表达式。

分别用自由空穴带模型以及扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰模型，结合传输矩阵的量子散射方法，对铁磁半导体相关异质结的输运过程进行了理论推导。另外还运用旋转矩阵的近似方法，对任意磁构型下的异质结的TMR进行了研究。本文对两种异质结结构模型进行了研究。一种是GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs双势垒隧道结，另一种是GaAs/GaMnAs/AlAs/GaMnAs/GaAs自旋过滤器件。

对GaMnAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaMnAs双势垒隧道结的研究，采用了自由空穴带近似结合量子散射的方法以及扩展的$K\cdot P$微扰方法结合传输矩阵的方法，并对两者得到的结果进行了对比，主要得出如下结论：一，双势垒隧道结中具有共振透射的现象。二，双势垒隧道结的透射电流随中间势阱层宽度的变化具有周期性。三，双势垒隧道结的TMR随势阱层宽度的变化具有周期性。四，铁磁半导体的铁磁交换作用使简并能带（相对半导体能带而言）解简并，并引入能带间的混合作用。五，能带间的混合作用对载流子的透射系数以及透射电流有较大影响而不可忽略。六，能带间的混合作用以及能带$\vec{k}$空间的各向异性使TMR随磁性层间相对磁化角度的变化不是单调的。

对GaAs/GaMnAs/AlAs/ GaMnAs/GaAs自旋过滤器件的研究，采用了扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰模型结合传输矩阵的量子散射方法，得到了透射系数随入射能量的关系，透射系数随中间层AlAs厚度的变化，TMR随中间层AlAs厚度的变化，TMR随磁性势垒层相对磁化角度θ的变化等输运性质。结果表明器件左层的铁磁半导体层起到了自旋过滤的作用，右层铁磁半导体层对极化载流子起到调节透射的作用。

本文试图在已有的理论基础上，寻找更精确的研究铁磁半导体相关异质结的方法。

但是由于时间和能力有限，本文取得的结果是初步的，还有许多地方需要修正改进，可以从以下几个方面说明：一，扩展的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$微扰模型是有前提条件的，即它需要使铁磁半导体中的磁化方向沿着z方向。对于不同磁构型时的铁磁半导体中的磁化方向变化，是通过旋转矩阵的近似方法得到的。因此，为了能更精确地研究铁磁半导体相关异质结，可以从最根本的哈密顿求解出发，而不是使用近似方法。或者运用其它理论方法进行研究，例如运用第一性原理，格林函数法等等。二，目前对任意磁构型下的铁磁半导体相关异质结的输运性质的研究还不广泛，但其具有丰富的输运性质，值得深入研究。三，本文所研究的自旋过滤器件中，虽然各层材料可以很好地匹配而方便制作，但是铁磁半导体GaMnAs作为过滤层势垒还是不太理想的。因此可以从其它铁磁半导体材料出发，设计出更新型的自旋过滤器件。

附录 A

A.1 $\boldsymbol{B}$矩阵

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}(\gamma_1-2\gamma_2)(\partial/\partial z) & \sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y) & 0 & 0\\ -\sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y) & (\gamma_1+2\gamma_2)(\partial/\partial z) & 0 & 0\\ 0 & 0 & (\gamma_1+2\gamma_2)(\partial/\partial z) & -\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)\\ 0 & 0 & \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y) & (\gamma_1-2\gamma_2)(\partial/\partial z)\end{bmatrix} \tag{1-1}$$

A.2 各个矩阵M_i的形式

首先，用字母表示铁磁半导体GaMnAs中的四个包络函数中的各个元：

$$F_1=\begin{bmatrix}A_1\\B_1\\C_1\\D_1\end{bmatrix},F_2=\begin{bmatrix}A_2\\B_2\\C_2\\D_2\end{bmatrix},F_3=\begin{bmatrix}A_3\\B_3\\C_3\\D_3\end{bmatrix},F_4=\begin{bmatrix}A_4\\B_4\\C_4\\D_4\end{bmatrix}. \tag{1-2}$$

同理，半导体GaAs和AlAs中四个包络函数表示为：

$$V_1=\begin{bmatrix}A_1'\\B_1'\\C_1'\\D_1'\end{bmatrix},V_2=\begin{bmatrix}A_2'\\B_2'\\C_2'\\D_2'\end{bmatrix},V_3=\begin{bmatrix}A_3'\\B_3'\\C_3'\\D_3'\end{bmatrix},V_4=\begin{bmatrix}A_4'\\B_4'\\C_4'\\D_4'\end{bmatrix}. \tag{1-3}$$

M_i为8×8的矩阵。其中对于$i=1$和$i=8$，表示的是分别在第一个边界（$n=1$）和

第四个边界处（$n=4$）、属于铁磁半导体层的矩阵。各个矩阵元可表示为：

$$\begin{bmatrix} M_{i,11} & \cdots & M_{i,14} \\ \vdots & & \vdots \\ M_{i,41} & \cdots & M_{i,44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n} & A_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n} & A_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n} & A_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n} \\ B_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n} & B_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n} & B_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n} & B_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n} \\ C_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n} & C_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n} & C_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n} & C_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n} \\ D_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n} & D_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n} & D_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n} & D_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n} \end{bmatrix};$$

$$\begin{bmatrix} M_{i,15} & \cdots & M_{i,18} \\ \vdots & & \vdots \\ M_{i,45} & \cdots & M_{i,48} \end{bmatrix} = \tag{1-4}$$

$$\begin{bmatrix} A_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n} & A_2(-k_{l\uparrow})e^{-ik_{l\uparrow}z_n} & A_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n} & A_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n} \\ B_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n} & B_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n} & B_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n} & B_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n} \\ C_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n} & C_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n} & C_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n} & C_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n} \\ D_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n} & D_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n} & D_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n} & D_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n} \end{bmatrix};$$

$$\begin{aligned}
M_{i,51} &= (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{h\uparrow}A_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n}+\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)B_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n},\\
M_{i,52} &= (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{l\uparrow}A_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n}+\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)B_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n},\\
M_{i,53} &= (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{l\downarrow}A_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n}+\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)B_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n},\\
M_{i,54} &= (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{h\downarrow}A_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n}+\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)B_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n},\\
M_{i,55} &= -(\gamma_1-2\gamma_2)ik_{h\uparrow}A_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n}+\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)B_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n},\\
M_{i,56} &= -(\gamma_1-2\gamma_2)ik_{l\uparrow}A_2(-k_{l\uparrow})e^{-ik_{l\uparrow}z_n}+\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)B_2(-k_{l\uparrow})e^{-ik_{l\uparrow}z_n},\\
M_{i,57} &= -(\gamma_1-2\gamma_2)ik_{l\downarrow}A_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n}+\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)B_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n},\\
M_{i,58} &= -(\gamma_1-2\gamma_2)ik_{h\downarrow}A_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n}+\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)B_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n};
\end{aligned} \tag{1-5}$$

$$\begin{aligned}
M_{i,61} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)A_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n}+(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{h\uparrow}B_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n},\\
M_{i,62} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)A_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n}+(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{l\uparrow}B_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n},\\
M_{i,63} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)A_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n}+(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{l\downarrow}B_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n},\\
M_{i,64} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)A_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n}+(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{h\downarrow}B_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n},\\
M_{i,65} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)A_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n}-(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{h\uparrow}B_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n},\\
M_{i,66} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)A_2(-k_{l\uparrow})e^{-ik_{l\uparrow}z_n}-(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{l\uparrow}B_2(-k_{l\uparrow})e^{-ik_{l\uparrow}z_n},\\
M_{i,67} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)A_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n}-(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{l\downarrow}B_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n},\\
M_{i,68} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)A_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n}-(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{h\downarrow}B_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n};
\end{aligned} \tag{1-6}$$

$$
\begin{aligned}
M_{i,71} &= (\gamma_1+2\gamma_2)ik_{h\uparrow}C_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n} - \sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n},\\
M_{i,72} &= (\gamma_1+2\gamma_2)ik_{l\uparrow}C_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n} - \sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n},\\
M_{i,73} &= (\gamma_1+2\gamma_2)ik_{l\downarrow}C_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n} - \sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n},\\
M_{i,74} &= (\gamma_1+2\gamma_2)ik_{h\downarrow}C_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n} - \sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n},\\
M_{i,75} &= -(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{h\uparrow}C_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n} - \sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n},\\
M_{i,76} &= -(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{l\uparrow}C_2(-k_{l\uparrow})e^{-ik_{l\uparrow}z_n} - \sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_2(-k_{l\uparrow})e^{-ik_{l\uparrow}z_n},\\
M_{i,77} &= -(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{l\downarrow}C_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n} - \sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n},\\
M_{i,78} &= -(\gamma_1+2\gamma_2)ik_{h\downarrow}C_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n} - \sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n};
\end{aligned}
\tag{1-7}
$$

$$
\begin{aligned}
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n} + (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{h\uparrow}D_1(k_{h\uparrow})e^{ik_{h\uparrow}z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n} + (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{l\uparrow}D_2(k_{l\uparrow})e^{ik_{l\uparrow}z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n} + (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{l\downarrow}D_3(k_{l\downarrow})e^{ik_{l\downarrow}z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n} + (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{h\downarrow}D_4(k_{h\downarrow})e^{ik_{h\downarrow}z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n} - (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{h\uparrow}D_1(-k_{h\uparrow})e^{-ik_{h\uparrow}z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_2(-k_{l\uparrow})e^{-ik_{l\uparrow}z_n} - (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{l\uparrow}D_2(-k_{l\uparrow})e^{-ik_{l\uparrow}z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n} - (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{l\downarrow}D_3(-k_{l\downarrow})e^{-ik_{l\downarrow}z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n} - (\gamma_1-2\gamma_2)ik_{h\downarrow}D_4(-k_{h\downarrow})e^{-ik_{h\downarrow}z_n}.
\end{aligned}
\tag{1-8}
$$

对于其它的M_i，也有类似形式，只是原本是铁磁半导体的包络函数换成了半导体的包络函数，原本是铁磁半导体中各种载流子的波矢换成了半导体中各种载流子的波矢。具体说明如下：

$$
\begin{bmatrix} M_{i,11} & \cdots & M_{i,14}\\ \vdots & & \vdots\\ M_{i,41} & \cdots & M_{i,44}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A'_1(k_1)e^{ik_1z_n} & A'_2(k_2)e^{ik_2z_n} & A'_3(k_2)e^{ik_2z_n} & A'_4(k_1)e^{ik_1z_n}\\ B'_1(k_1)e^{ik_1z_n} & B'_2(k_2)e^{ik_2z_n} & B'_3(k_2)e^{ik_2z_n} & B'_4(k_1)e^{ik_1z_n}\\ C'_1(k_1)e^{ik_1z_n} & C'_2(k_2)e^{ik_2z_n} & C'_3(k_2)e^{ik_2z_n} & C'_4(k_1)e^{ik_1z_n}\\ D'_1(k_1)e^{ik_1z_n} & D'_2(k_2)e^{ik_2z_n} & D'_3(k_2)e^{ik_2z_n} & D'_4(k_1)e^{ik_1z_n}\end{bmatrix};
\tag{1-9}
$$

$$
\begin{bmatrix} M_{i,15} & \cdots & M_{i,18}\\ \vdots & & \vdots\\ M_{i,45} & \cdots & M_{i,48}\end{bmatrix} =
$$

$$\begin{bmatrix} A_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n} & A_2'(-k_2)e^{-ik_2z_n} & A_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n} & A_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n} \\ B_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n} & B_2'(k_2)e^{ik_2z_n} & B_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n} & B_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n} \\ C_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n} & C_2'(k_2)e^{ik_2z_n} & C_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n} & C_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n} \\ D_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n} & D_2'(k_2)e^{ik_2z_n} & D_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n} & D_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n} \end{bmatrix}; \tag{1-10}$$

$$\begin{aligned} M_{i,51} &= (\gamma_1 - 2\gamma_2)ik_1A_1'(k_1)e^{ik_1z_n} + \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)B_1'(k_1)e^{ik_1z_n}, \\ M_{i,52} &= (\gamma_1 - 2\gamma_2)ik_2A_2'(k_2)e^{ik_2z_n} + \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)B_2'(k_2)e^{ik_2z_n}, \\ M_{i,53} &= (\gamma_1 - 2\gamma_2)ik_2A_3'(k_2)e^{ik_2z_n} + \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)B_3'(k_2)e^{ik_2z_n}, \\ M_{i,54} &= (\gamma_1 - 2\gamma_2)ik_1A_4'(k_1)e^{ik_1z_n} + \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)B_4'(k_2)e^{ik_1z_n}, \\ M_{i,55} &= -(\gamma_1 - 2\gamma_2)ik_1A_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n} + \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)B_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n}, \\ M_{i,56} &= -(\gamma_1 - 2\gamma_2)ik_2A_2'(-k_2)e^{-ik_2z_n} + \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)B_2'(-k_2)e^{-ik_2z_n}, \\ M_{i,57} &= -(\gamma_1 - 2\gamma_2)ik_2A_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n} + \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)B_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n}, \\ M_{i,58} &= -(\gamma_1 - 2\gamma_2)ik_1A_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n} + \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)B_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n}; \end{aligned} \tag{1-11}$$

$$\begin{aligned} M_{i,61} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y)A_1'(k_1)e^{ik_1z_n} + (\gamma_1 + 2\gamma_2)ik_1B_1'(k_1)e^{ik_1z_n}, \\ M_{i,62} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y)A_2'(k_2)e^{ik_2z_n} + (\gamma_1 + 2\gamma_2)ik_2B_2'(k_2)e^{ik_2z_n}, \\ M_{i,63} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y)A_3'(k_2)e^{ik_2z_n} + (\gamma_1 + 2\gamma_2)ik_2B_3'(k_2)e^{ik_2z_n}, \\ M_{i,64} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y)A_4'(k_1)e^{ik_1z_n} + (\gamma_1 + 2\gamma_2)ik_1B_4'(k_1)e^{ik_1z_n}, \\ M_{i,65} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y)A_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n} - (\gamma_1 + 2\gamma_2)ik_1B_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n}, \\ M_{i,66} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y)A_2'(-k_2)e^{-ik_2z_n} - (\gamma_1 + 2\gamma_2)ik_2B_2'(-k_2)e^{-ik_2z_n}, \\ M_{i,67} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y)A_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n} - (\gamma_1 + 2\gamma_2)ik_2B_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n}, \\ M_{i,68} &= -\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y)A_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n} - (\gamma_1 + 2\gamma_2)ik_1B_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n}; \end{aligned} \tag{1-12}$$

$$
\begin{aligned}
M_{i,71} &= (\gamma_1+2\gamma_2)ik_1C_1'(k_1)e^{ik_1z_n}-\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_1'(k_1)e^{ik_1z_n},\\
M_{i,72} &= (\gamma_1+2\gamma_2)ik_2C_2'(k_2)e^{ik_2z_n}-\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_2'(k_2)e^{ik_2z_n},\\
M_{i,73} &= (\gamma_1+2\gamma_2)ik_2C_3'(k_2)e^{ik_2z_n}-\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_3'(k_2)e^{ik_2z_n},\\
M_{i,74} &= (\gamma_1+2\gamma_2)ik_1C_4'(k_1)e^{ik_1z_n}-\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_4'(k_1)e^{ik_1z_n},\\
M_{i,75} &= -(\gamma_1+2\gamma_2)ik_1C_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n}-\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n},\\
M_{i,76} &= -(\gamma_1+2\gamma_2)ik_2C_2'(-k_2)e^{-ik_2z_n}-\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_2'(-k_2)e^{-ik_2z_n},\\
M_{i,77} &= -(\gamma_1+2\gamma_2)ik_2C_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n}-\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n},\\
M_{i,78} &= -(\gamma_1+2\gamma_2)ik_1C_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n}-\sqrt{3}\gamma_3(k_x-ik_y)D_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n};
\end{aligned}
\tag{1-13}
$$

$$
\begin{aligned}
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_1'(k_1)e^{ik_1z_n}+(\gamma_1-2\gamma_2)ik_1D_1'(k_1)e^{ik_1z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_2'(k_2)e^{ik_2z_n}+(\gamma_1-2\gamma_2)ik_2D_2'(k_2)e^{ik_2z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_3'(k_2)e^{ik_2z_n}+(\gamma_1-2\gamma_2)ik_2D_3'(k_2)e^{ik_2z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_4'(k_1)e^{ik_1z_n}+(\gamma_1-2\gamma_2)ik_1D_4'(k_1)e^{ik_1z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n}-(\gamma_1-2\gamma_2)ik_1D_1'(-k_1)e^{-ik_1z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_2'(-k_2)e^{-ik_2z_n}-(\gamma_1-2\gamma_2)ik_2D_2'(-k_2)e^{-ik_2z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n}-(\gamma_1-2\gamma_2)ik_2D_3'(-k_2)e^{-ik_2z_n},\\
M_{i,81} &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x+ik_y)C_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n}-(\gamma_1-2\gamma_2)ik_1D_4'(-k_1)e^{-ik_1z_n}.
\end{aligned}
\tag{1-14}
$$

其中，M_2、M_3、M_6、M_7分别处于第一个、第二个、第三个和第四个边界，属于AlAs层，因此此时n分别对应$1,2,3,4$。另外，$k_1=k_{Alh},k_2=k_{All}$。

对于M_4和M_5，它们分别处于第二个和第三个边界，属于GaAs层，因此n分别对应2和3。另外，$k_1=k_{Gah},k_2=k_{Gal}$。

参考文献

[1] T. Dietl, J. Cibertb, P. Kossackib, D. Ferrandb, S. Tatarenkob, A. Wasielab, Y. Merle d'aubigné, F. Matsukura, N. Akiba, and H. Ohno,*Ferromagnetism induced by free carriers in p-type structures of diluted magnetic semiconductors*, Physica E **7**,967 (2000).

[2] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, and D. Ferrand, *Zener Model Description of Ferromagnetism in Zinc-Blende Magnetic Semiconductors*, Science **287**, 1019 (2000).

[3] H. Ohno, *Properties of ferromagnetic III-V semiconductors*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **200** 110-129,(1999).

[4] Petros N. Argyres, *Theroy of the Faraday and Kerr Effects in Ferromagnetics*, Phys.Rev **97(2)**,334 (1955).

[5] P. Fumagalli, H. Munekata, *Magneto-optic properties and ferromagnetism of (In,Mn)As/(In,Al)As/(Ga,Al)Sb heterostructures*, Phys.Rev.B **53(22)**,15045 (1996).

[6] Jairo Sinova, T. Jungwirth, J. Kucera, and A.H. MacDonald, *Infrared magneto-optical properties of (III,Mn) V ferromagetic semiconductors*, Phys.Rev.B **67**,235203 (2003).

[7] T.Wojtowicz, T.Dietl, M.Sawicki, W.Plesiewicz, and J.Jaroszynsk, *Metal-Insullator Transition in Semimagnetic Semiconductors*, Phys.Rev.Lett **56(22)**,2419 (1986).

[8] A.Oiwa, S.Katsumoto, A.Endo, M.Hirasawa, Y.Iye, F.Matsukura, A.Shen, Y.Sugawara, and H.Ohno, *Low-temperature conduction and giant negtive magnetoresistance in III-V-based dilluted magnetic semiconductor:(Ga,Mn)As/GaAs*, Physica B **249**,775 (1998).

[9] Yoder-Short, D.R.Debska, U.Furdyna and J.K., *Lattice parameters of* $Zn_{1-x}Mn_xSe$ *and tetrahedral bond lengths in* $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$ *alloys*, J.Appl.Phys **58**,4056 (1985).

[10] H.Ohno,*Making Nonmagnetic Semiconductors Ferromagnetic*, Science **281**,951 (1998).

[11] Fernando Rinaldi, *Basics of Molecular Beam Epitaxy(MBE)*, Annual Report 2002, Optoelectrics Department, University of ULM.

[12] K.H. Kim, J.H. Park, B.D. Kim, et al, *Optimization of GaMnAs growth in low temperature molecular beam eptaxy*, Metals and meterials international **8(2)**,117 (2002).

[13] Fucheng Yu, Cunxu Gao, Se Young Jeong, P.B. Parchinskiy, Dojin Kim, Hyojn Kim, and Young Eon lhm, *Effect of annealing on the electric and magnetic properties of GaMnAs and Be-codoped GaMnAs*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **304(1)**,e155 (2006).

[14] Y.Higo, H.Shimizu, and M.Tanaka, *Anisotropic tunneling magnetoresistance in GaMnAs/AlAs/GaMnAs Ferromagnetic semiconductor tunnel junctions*, Journal of Applied Physics **89(11)**,6745 (2001).

[15] M.Tanaka and Y.Higo, *Large Tunneling Magnetoresistance in GaMnAs/AlAs/GaMnAs Ferromagnetic semiconductor tunnel junctions*, Phys.Rev.Lett **87(2)**,026602 (2001).

[16] J.E.Bunder, *Spin-polarized transport in dilute magnetic semiconductor tunnel junctions*, Appl.Phys.Lett **91**,092111 (2007).

[17] Gasey W.Miller, *The critical role of the barrier thickness in spin-filter tunneling*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **321**,2563-2565 (2009).

[18] Ju Yan and Xing Ding-Yu,*Spin-fltering junctions with double ferroelectric barriers*, Chinese Physics B **18(06)**,1674 (2009).

[19] Guo-Xing Miao, Martina Muller, and Jagadeesh S.Moodera, *Magnetoresistance in Double Spin Filter Tunnel Junctions with Nonmagnetic Electrodes and its Unconventional Bias Dependence*, Phys.Rev.Lett **102**,1076601 (2009).

[20] 夏建白，葛惟昆，常凯著，《半导体自旋电子学》，科学出版社（2008年），P.31.

[21] 谢希德，陆栋著，《固体能带理论》，复旦大学出版社（1998），P58.

[22] J.M. Luttiner, *Quantum theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory*, Phys.Rev **102**,1030 (1956).

[23] T.Jungwirth, W.A.Atkinson, B.H.Lee and A.H.MacDonald, *Interlayer coupling in ferromagnetic semiconductor superlattics*, Phys.Rev.B **59**,9818 (1999).

[24] J.K. Furdyna, *Diluted magnetic semiconductors*, Journal of Applied Physics **64(4)**,R29 (1988).

[25] Van Hove L, *The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution of a Crystal*, Phys.Rev **89**,1189 (1953).

[26] W. Kohn, L.J. Sham, *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*, Phys.Rev **140**, A1133 (1965).

[27] W. Kohn, N. Rostoker, *Solution of the Schordinger Equation in Periodic Lattices with an Application to Metallic Lithium*, Phys.Rev **94**, 1111 (1954).

[28] J.M. Luttinger and W. Kohn, *Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields*, Phys.Rev **97**, 869 (1954).

[29] R.Y. Gu, D.Y. Xing, and Jinming Dong, *Spin-polarized tunneling between ferromagnetic films*, J.Appl.Phys **80**,7163 (1996).

[30] R.Tsu and L.Esak, *Tunneling in a finite superlattice*, Appl.Phys.Lett **22**,562 (1973).

[31] M.O. Vassel, J. Lee, and H.F.Lockwood, *Multibarrier tunneling in* $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ *heterostructures*, J.Appl.Phys **54**, 5206 (1983).

[32] Y.X.Liu, D.Z-Y.Ting, and T.C.McGill, *Efficient, numerically stable multiband* $k \cdot p$ *treatment of quantum transport in semiconductor hetrostructures*, Phys.Rev.B **54(8)**,5675 (1996).

[33] J.C.Slonezewski, *Conductance and exchange coupling of two ferromagnets seperated by a tunneling barrier*, Phys.Rev.B **39(10)**,6995 (1989).

[34] Y.C.Tao, J.G.Hu, H.Liu, *Spin-Polarized transport in diluted GaMnAs/AlAs/GaMnAs ferromagnetic semiconductor tunnel junctions*, J.Appl.phys **96(1)**,448 (2004).

[35] R.Wessel, M.Altarelli, *Resonant tunneling of holes in double-barrier heterostructures in the envelope-function approximation*, Phys.Rev.B **39(17)**,12802 (1989).

[36] J.Bardeen, *An Improved Calculation of the Energies of Matallic Li and Na*, J.Chem.Phys **6**,367 (1938).

[37] F.Seitz, "The Modern Theory of Solids" , P.352, NewYork: McGraw-Hill (1940).

[38] W.Shockley, *Energy Band Structures in Semiconductors*, Phys.Rev **78**, 173 (1950).

[39] G. Dresselhaus, A.F. Kip, and C. Kittel, *Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals*, Phys.Rev **98**, 368 (1955).

[40] E. O.Kane, *Energy band structure in p-type Germanium and Silicon*, J. Phys. Chem. Solids **1**, 83 (1956).

[41] T.Dietl, H.Ohno and F.Matsukura, *Hole-mediated ferromagnetism in tetrahedrally coordinated semiconductors*, Phys.Rev.B **63**, 195205 (2001).

[42] F. Matsukura, H. Ohno, A. Shen, and Y. Sugawara, *Transport properties and origin of ferromagnetism in (Ga,Mn)As*, Phys.Rev.B **57**, R2037 (1998).

[43] A. Van Esch, et al, *Interplay between the magnetic and transport properties in the III-V diluted magnetic semiconductor* $Ga_{1-x}MnxAs$, Phys.Rev.B **56**,13103 (1997).

[44] Zhiming Zheng, Yunong Qi, D.Y. Xing, and Jinming Dong, *Oscillating tunneling magnetoresistance in magnetic double-tunnel-junction structures*, Phys.Rev.B **59**, 14505 (1999).

[45] M.Abolfath, T.Jungwirth, J.Brum, and A.H. MacDonald, *Theory of magnetic anisotropy in* $III_{1-x}Mn_xV$ *ferromagnets*, Phys.Rev.B **63**, 054418 (2001).

[46] Calvin Yi-Ping Chao and Shun Lien Chuang, *Resonant tunneling of holes in the multiband effective-mass approximation*, Phys.Rev.B **43**, 7027 (1991).

[47] M. Julliere, *Tunneling between ferromagnetic films*, Phys. Lett. A **54**, 225 (1975).

[48] M.Lezlinger, E.H. Snow, *Fowler-Nordheim tunneling into thermally grown* SiO_2, J.Appl.Phys **53(7)**,5052 (1982).

[49] Zheng-Wei, Bo-Zang Li, *Bias dependence of the tunneling nagnetoresistance in double spin-filter junctions*, J.Appl.Phys **93(11)** (2003).

[50] B.Ricco and M.Ya. Azbel, *Physics of resonant tunneling. The one-dimensional double-barrier case*, Phys.Rev.B **29**,1970 (1984).

[51] Shun-Lien Chuang, *Theory of hole refractions from heterojunctions*, Phys.Rev.B **40(15)**, 10379 (1989).

致谢

本论文从选题到成文都是在恩师陶永春副教授的悉心指导下完成的，陶老师对文章的质量提出了严格的要求，并仔细审阅和修改了全文。三年来，他给予了我无私的指导，无论是在学习上，还是生活上。在学习和研究课题时，陶老师总是认真、耐心、细致地指导，不厌其烦地给我讲解、讨论、修改，以身作责教导我要培养戒骄戒躁、严谨、认真勤奋的学习态度。在生活上，陶老师对我总是宽容和关怀备至，在人生最迷茫的时刻给我指明了方向。陶老师给予我无微不至的关怀，陪伴我顺利地走过了入学的彷徨期、科研的浮躁期、以及找工作的烦躁期，回顾走过的这些路程，我内心充满了感激。陶老师渊博的知识、严谨的治学态度、无私的敬业精神和慈爱的品性熏陶了我，永远激励着我奋发向上。作为他的学生，我感到非常荣幸，特此谨向恩师致以最崇高的敬意！

感谢物理科学与技术学院的陈凌孚教授、童培庆教授、平加仑教授、肖振军教授、罗成林教授、刘红教授（大）、郭立波教授、杨双波教授、熊烨副教授、杨仲侠副教授、丁鹤平老师教授我详尽的专业知识，教导我学习进步。感谢刘红教授（大）、杨双波教授、黄桂芹教授、刘红副教授（小）对文章提出的宝贵意见和给予我建议指导。

感谢我的师兄鲁明亮，在对课题的研究时给予了我极大的帮助。感谢我的师妹赵旭丽和师弟利志平给我的关心和鼓励。感谢我的密友蔡伟和薛娟，对我的信任和鼓励给予了我信心。感谢我的室友陈绍娜、李文娟、翟雪雅、代丽丽，在三年中给我生活上无微不至的关怀。感谢南京师范大学物理实验室的张玉安、吴晓君、路怡、翟羽佳、陈伟、王钰岚、夏艳、骆文玲、冯青、万吉利、杨帆、刘静、翟燕、朱琼干、黄黎等硕士生，与他们的交流和讨论给了我莫大的启迪和鼓励。特别感谢我父母，他们的无限关爱、支持和鼓励促进了我的成长和进步！感谢始终鼓励和支持我前进的男友巫可益，感谢他和他父母对我的支持和关爱！

在南京师范大学多年的学习和生活即将过去，但珍藏心底的永远是那份感激、眷恋和依依不舍！相信在南京师范大学的这段经历将成为我人生的宝贵回忆和珍贵财富！