

半导体纳米结构物理性质的理论研究

——2004 年国家自然科学二等奖获奖项目介绍*

夏建白[†] 李树深 常 凯 朱邦芬

(超晶格国家重点实验室 中国科学院半导体研究所 北京 100083)

摘 要 半导体纳米结构是纳米材料的一个重要组成部分,纳米结构的电子和光子器件将成为下一代微电子和光电子器件的核心.半导体纳米结构有多种多样,如自组织量子点、纳米晶体、硅团簇、量子结构等,它们可以制成各种纳米电子学器件.根据以上几类半导体纳米结构,文章介绍的获奖项目提出了研究半导体纳米结构电子结构的四个理论,并利用这些理论研究了它们的电子态和物理性质,发现了许多新的效应.这些理论包括:一维量子波导理论、孤立量子线、量子点的有效质量理论、异质结构的空穴有效质量理论、经验赝势同质结模型.专著《半导体超晶格物理》全面系统地介绍了超晶格物理的概念、原理、理论和实验结果,主要总结了获奖项目参加者所在的研究组在超晶格物理研究方面所取得的成果.

关键词 自组织量子点,量子波导,有效质量理论,经验赝势,超晶格

Theoretical study of the physical properties of semiconductor nano-structures

XIA Jian-Bai[†] LI Shu-Shen CHANG Kai ZHU Bang-Fen

(National Laboratory for Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China)

Abstract Semiconductor nano-structures are an important type of nano-material that will become the core of the next generation of micro-electronic and opto-electronic devices. There are various kinds of such nano-structures, for example, self-assembled quantum dots, nano crystallites and silicon clusters, which can be used to fabricate nano-electronic devices. Based on these nano-structures, our NNSFC funded project proposed four theories for studying their electronic structures, and found many new effects regarding their electronic states and physical properties. These theories include: one-dimensional quantum waveguide theory, effective-mass theory of isolated quantum dots and quantum wires, hole effective-mass theory for hetero structures, and empirical pseudopotential homo-junction models. The monograph *Semiconductor Superlattice Physics* presents a comprehensive introduction to the concepts, principles, theories, and experimental results of semiconductor superlattice physics, with a special summary of our group's theoretical research results in this area.

Keywords self-assembled quantum dots, quantum waveguide, effective-mass theory, empirical pseudopotential, superlattice

半导体纳米结构是纳米材料的一个重要组成部分,它与电子学、光电子学以及通信技术、计算机技术密切相关.它将在 21 世纪引起一场新的技术革命,纳米结构的电子和光子器件将成为下一代微电子和光电子器件的核心.在即将来临的这一场纳米电子学革命中,纳米晶体管和记忆芯片将几百万倍地改善计算机的速度和效率.海量存储器将存储几

个 Terabits(10^{12} bit)的信息量,并减小功耗几千倍.通信系统的带宽将增加 100 倍,显示器的亮度将增

* 国家重点基础研究发展计划(批准号:G2001CB3095),国家自然科学基金(批准号:29890217,69736010,60325416,60328407,69876039,19874060,19974043,10174043,90301007)资助项目,中国科学院纳米科学基金资助项目
2005-05-17 收到

[†] 通讯联系人. Email: xiajb@red.semi.ac.cn

加 100 倍. 将生物和非生物器件集成将产生新一代的传感器、处理器和纳米器件.

半导体纳米结构有多种多样, 如自组织量子点、纳米晶体、硅团簇等, 它们的尺寸都在几个纳米至几十纳米之间.

(1) 自组织量子点

它是利用两种材料晶格常数不匹配的特点, 采用传统的分子束外延 (MBE) 或金属有机气相外延 (MOVPE) 方法, 在一种材料的衬底上生长另一种材料的量子点. 这称为 Stranski-Krastanov 生长模式, 简称为 SK 模式. 它的优点是生长的量子点大小均匀, 密度高, 发光效率高, 并且没有表面缺陷的问题, 大大减小了非辐射跃迁的几率. 用 SK 模式在 GaAs 衬底上自组织生长 InGaAs 岛状量子点, 已经制成了 InGaAs/GaAs 量子点激光器.

(2) 硅基纳米材料

硅是微电子器件的主要材料, 它具有其他半导体材料无可比拟的优越性. 但是硅又是一种间接带隙的半导体, 它的发光效率极低. 1990 年, Canham 发现了多孔硅发光现象, 为在硅片上实现光电集成开辟了一个新的前景. 如果这一类技术得以成功, 无疑将对显示、通信、计算机等产生深远的影响. 例如: 器件之间的电互联造成的时间滞后已成为发展超大规模集成电路的瓶颈. 如果能用光互联代替目前所采用的电互联, 将大大改善集成电路的性能, 提高计算机的速度. 因此硅纳米结构已经成为复兴 Si 大规模集成技术的最有兴趣和挑战性的研究方向. 这要求 Si 纳米结构新的制备技术, 将它的大小和均匀性控制在纳米的精度内. 目前在几种 Si 纳米晶体样品上都已经观察到荧光, 并已制成电致发光器件.

(3) 半导体纳米晶体

利用液相化学反应, 能制成半导体 (主要是 II-VI 族和 III-V 族) 纳米微晶胶体. 用这种方法已经制备各种尺寸的纳米晶体, 它们的发光强度很大, 波长可以在很宽的范围内变化. 利用选择沉淀的方法, 在胶体中加一种非溶剂使较大尺寸的粒子沉淀, 从而达到尺寸选择的目的. 多次重复这种方法, 可以使纳米晶体的尺寸分布缩小到平均直径的百分之几. 最近已经制成用另一种无机材料包裹的纳米晶体, 减少了表面复合, 使发光效率大大提高. 这类半导体纳米晶体有可能制成大面积的显示屏, 或者医学诊断用的生物探针. 此外, 纳米晶体由于它们的三维量子限制效应, 因而具有较强的非线性光学性质, 将可能在快速光调制、光开关、相共扼、光波导和光

存储器件中得到应用.

(4) 量子器件和单电子晶体管

当电子元件的尺寸小于 $0.1\mu\text{m}$ 时, 量子效应就要显示出来. 利用量子效应构成的全新的量子结构系统称为量子器件, 包括量子点、量子线、单电子晶体管、单原子开关等. 所用的技术除了在线实时控制的分子束外延外, 还包括纳米的刻蚀技术、掺杂元素的定位技术以及寻找更高结构分辨率的成像和分析技术, 同时还需要扫描隧道显微镜作为观察和加工的工具.

单电子晶体管的物理基础是库仑阻塞效应. 当一个量子点的尺寸足够小, 以至于它与周围的电容达到了 aF ($\sim 10^{-18}\text{F}$) 范围, 单电荷效应就显现出来. 通过量子点的电流受到量子点中电子电荷的库仑排斥力而被阻止. 在这基础可以建立以量子点中电荷为基础的单电子晶体管, 用作超大容量的存储器, 使得功耗大大降低, 有可能成为 21 世纪超大容量存储器的最好选择. 除了库仑阻塞效应, 还发现了许多与单电荷效应有关的新现象, 如: 库仑台阶、旋转门效应、量子干涉效应等, 这些效应有可能成为研制新一代量子器件的基础.

根据以上几类半导体纳米结构, 本项目提出了研究半导体纳米结构电子结构的四个理论, 并利用这些理论研究了各种半导体纳米结构的电子态和物理性质, 发现了许多新的效应.

(1) 一维量子波导理论

在国际上首次提出了介观系统的一维量子波导理论^[1], 可以解决任意形状一维波导网络的电导问题. 主要包括两个方程, 在网络节点上满足: 波函数数值相等, 即波函数的单值性; 波函数的微分之和等于零, 即粒子流守恒. 理论提出后, 国际上开始了在理论上用该方程研究一维量子波导网络 (串联、并联、无磁场、有磁场等) 的大量工作.

(2) 孤立量子线、量子点的有效质量理论

在国际上首次提出了适用于一般情形的半导体量子球和量子线的电子结构理论, 结果作为评论文章发表在 1996 年 J. Luminescence 杂志的纳米晶体专集上^[2]. 用这理论研究了纤锌矿半导体孤立量子线、量子球^[3]、量子椭球中的电子态、激子态和光学性质, 发现了暗激子、光跃迁的线偏振、量子线中的大激子结合能等新的效应.

在国际上首次从理论上研究了一种新型的半导体团簇: 量子点-量子阱结构的电子态和激子态, 首次发现由于电子、空穴的空间分离, 将导致由 I 型激

