低维半导体量子器件基础

郝智彪

Email: zbhao@tsinghua.edu.cn

电话: 62798240

办公室:罗姆楼 2-305 房间

本课程的主要内容

- 低维半导体结构中的量子效应 能带结构、电子状态、输运特性、光学性质
- 低维半导体量子结构的制备常用半导体材料制备技术、低维材料的制备
- 低维半导体电子器件
- 低维半导体光电子器件

参考书

• 傅英、陆卫,半导体量子器件物理,科学出版社



- 夏建白,现代半导体物理,北京大学出版社
- John H. Davies, The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: An Introduction. Cambridge University Press

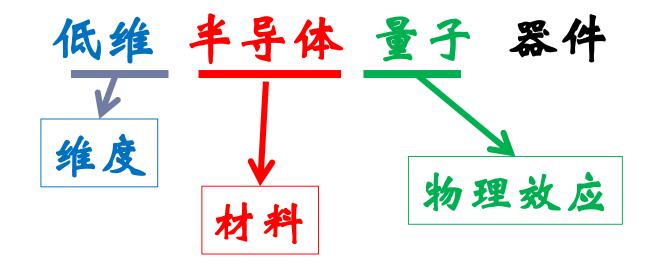
考核

- •考核依据:
 - □平时成绩 (30~40分)
 - □大作业: 调研报告, 口头 + 书面 基于低维半导体结构中量子效应的新器件

第一章 绪论

1.1 本课程讨论的对象

本课程讨论的对象



维度

•维度,又称维数

是数学或物理量中独立参数的数目; 在普通物理中,指独立时空坐标的数目

光的电磁场表达 → 光电多维探测

$$\vec{E} = \vec{A}e^{i\Phi} = f(t, \lambda, r, \Omega, \vartheta)$$

t: 时间; λ : 波长; r: 空间位置; Ω : 空间频率; θ : 环境效应

零维:点

一维:线

二维:面

三维:体

四维: 三维空间加一维时间

•低维

本课程中指维数小于 3 的情况, 包括

- > 二维(量子阱)
- >一维(量子线)
- > 零维(量子点)

本课程讨论的对象

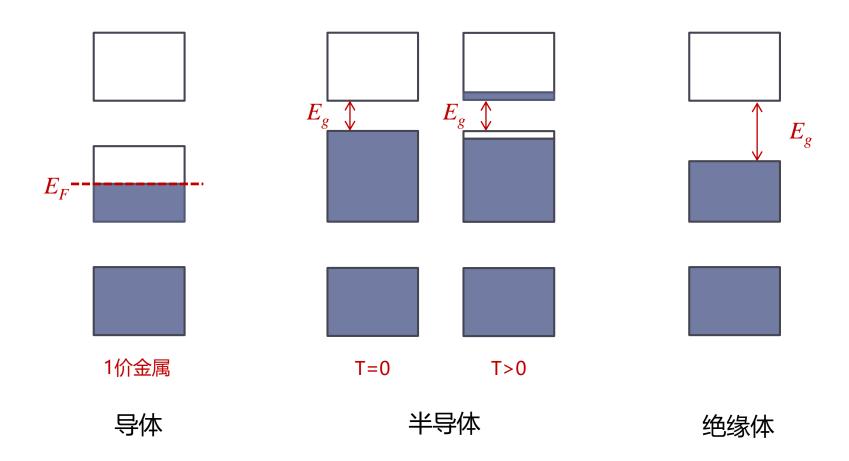
低维 半导体 量子 器件 材料

半导体材料

• 半导体

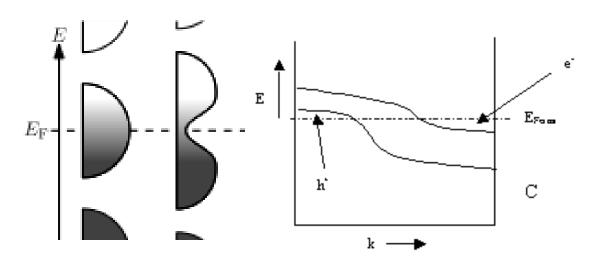
通常指 导电性介于导体 (电阻率 $\rho \le 1~0^{-6}\Omega$. cm)与绝缘体 (电阻率 $\rho \approx 1~0^{-2}\sim 1~0^{-2}\Omega$. cm)之间的材料 (电阻率 $\rho \approx 1~0^{-3}\sim 1~0^{-9}\Omega$. cm)

- □20世纪30年代初,由于量子力学的发展,提出能 带概念,固体能带论才揭示了半导体的本质
- □什么是导体、什么是绝缘体? 导带(传导带)、价带(价电带)、带隙



Semimetal 半金属





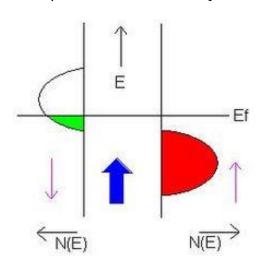
与非金属作用时常作为电子给予体,而与金属作用时常作为电子接受体。

1	1 H 氢 1.0079	IIA	化学元素周期表										IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	2 He 氦 4.0026
2	3 Li 锂 6.941	4 Be 铍 9.0122											5.B 硼 811	6 C 碳 12.011	7 N 氮 14.007	8 O 氧 15.999	9 F 氟 18 998	10 Ne 氖 20.17
3	11 Na 钠 22.9898	12 Mg 镁 24.305	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB		VIII		IB	IIB	13 铝 26.982	14 Si 硅 2 985	15 P 磷 30.974	16 S 硫 32.06	17 Cl 氯 35 453	18 Ar 氩 39.94
4	19 K 钾 39.098	20 Ca 钙 40.08	21 Sc 钪 44.956	22 Ti 钛 47.9	23 V 钒 50.9415	24 Cr 辂 51.996	25 Mn 猛 54.938	26 Fe 铁 55.84	27 Co 钴 58.9332	28 Ni 镍 58.69	29 Cu 铜 63.54	30 Zn 锌 65.38	31 Ga 镓 69.72	32 G 锗 72.59	33 As 砷 74 216	34 Se 硒 78.9	35 Br 溴 79.904	36 Kr 氦 83.8
5	37 Rb 铷 85.467	38 Sr 锶 87.62	39 Y 钇 88.906	40 Zr 锆 91.22	41 Nb 铌 92.9064	42 Mo 钼 95.94	43 Tc 锝 99	44 Ru 钌 101.07	45 Rh 铑 102.906	46 Pd 钯 106.42	47 Ag 银 107.868	48 Cd 镉 112.41	49 In 铟 114.82	50 Sn 锡 118.6	51 S、 锑 121.7	52 Te 碲 1. 76	53 I 碘 126.905	54 Xe 氙 131.3
6	55 Cs 铯 132,905	56 Ba 钡 137.33	57-71 La-Lu 镧系	72 Hf 给 178.4	73 Ta 钽 180.947	74 W 钨 183.8	75 Re 铼 186.207	76 Os 锇 190.2	77 Ir 铱 192.2	78 Pt 铂 195.08	79 Au 金 196.967	80 Hg 汞 200.5	81 TI 铊 204.3	82 Pb 铅 207.2	83 Bi 铋 208.98	84 Pk 钋 (209)	85 At 破 (4 V)	86 Rn 氯 (222)
7	87 Fr 钫 (223)	88 Ra 镭 226.03	89-103 Ac-Lr 锕系	104 Rf 鑪 (261)	105 Db 妣 (262)	106 Sg 纏 (266)	107 Bh 皴 (264)	108 Hs (269)	109 Mt 쬻 (268)	110 Ds 鍵 (271)	111 Rg 錀 (272)	112 Uub (285)	113 Uut (284)	114 Uuq (289)	115 Uup (288)	116 Uuh (292)	117 Uus	118 Vuo

半金属: 硼、硅、锗、砷、碲、硒、锑

Semimetal 半全属

Halfmetal 半极性全属



铁磁性或亚铁磁性

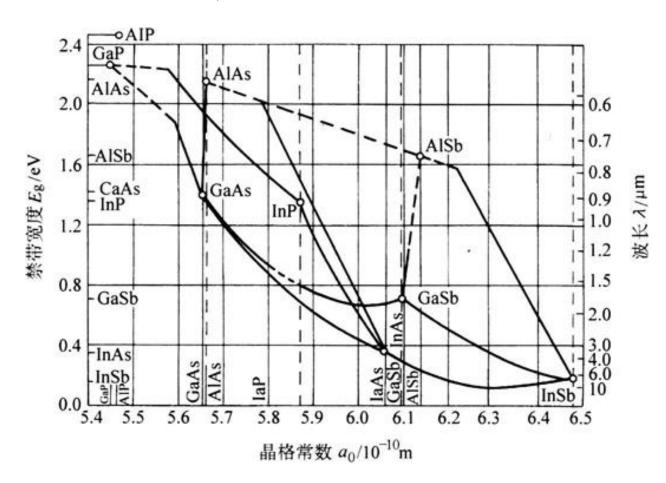
老鼠形半导体 老鼠形半导体 化合物半导体 元素半导体 无定形半导体 化合物半导体 化合物半导体

1	1 H 氢 1.0079	IIA	化学元素周期表									IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	2 He 氦 4.0026	
2	3 Li 锂 6.941	4 Be 铍 9.0122										5.B 44 10.811	6 C 碳 12.011	7 N 氮 14.007	8 O 氧 15.999	9 F 氟 18.998	10 Ne 氖 20.17	
3	11 Na 钠 22.9898	12 Mg 镁 24.305	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB		VIII		IB	IIB	13 Al 铝 26.982	14 Si 養 28.085	15 P 磷 30.974	16 S 硫 32.06	17 Cl 氯 35 453	18 Ar 氩 39.94
4	19 K 钾 39.098	20 Ca 钙 40.08	21 Sc 钪 44.956	22 Ti 钛 47.9	23 V 钒 50.9415	24 Cr 铬 51.996	25 Mn 猛 54.938	铁	27 Co 钴 58.9332	28 Ni 镍 58.69	29 Cu 铜 63.54	30 Zn 锌 65.38	31 Ga 镓 69.72	32 Ge 锗 72.59	33 As 砷 74.9216	34 Se 硒 78.9	35 Br 溴 79 904	36 Kr 氪 83.8
5	37 Rb 铷 85.467	38 Sr 锶 87.62	39 Y 钇 88.906	40 Zr 锆 91.22	41 Nb 铌 92.9064	42 Mo 钼 95.94	43 Tc 锝 99	44 Ru 钌 101.07	45 Rh 铑 102.906	46 Pd 钯 106.42	47 Ag 银 107.868	48 Cd 镉 112.41	49 In 铟 114.82	50 Sn 锡 118.6	51 Sb 锑 121.7	52 Te 碲 127.6	53 I 碘 126.905	54 Xe 氙 131.3
6	55 Cs 铯 132.905	56 Ba 钡 137.33	57-71 La-Lu 镧系	72 Hf 转合 178.4	73 Ta 钽 180.947	74 W 钨 183.8	75 Re 铼 186.207	76 Os 锇 190.2	77 Ir 铱 192.2	78 Pt 铂 195.08	79 Au 金 196.967	80 Hg 汞 200.5	81 TI 铊 204.3	82 Pb 铅 207.2	83 Bi 铋 208.98	84 Po 钋 (209)	85 At 砹 (210)	86 Rn 氦 (222)
7	87 Fr 钫 (223)	88 Ra 镭 226.03	89-103 Ac-Lr 锕系	104 Rf 鑪 (261)	105 Db 針 (262)	106 Sg 纏 (266)	107 Bh 皴 (264)	108 Hs 錁 (269)	109 Mt 쬻 (268)	110 Ds 鑵 (271)	111 Rg 錀 (272)	112 Uub (285)	113 Uut (284)	114 Uuq (289)	115 Uup (288)	116 Uuh (292)	117 Uus	118 Uuo

●常用半导体材料

- □硅、锗、碳基材料
- □砷化镓(GaAs)、磷化铟(InP)、氮化镓(GaN)、 碳化硅(SiC)、碲镉汞(HgCdTe)、锑化铟(InSb)

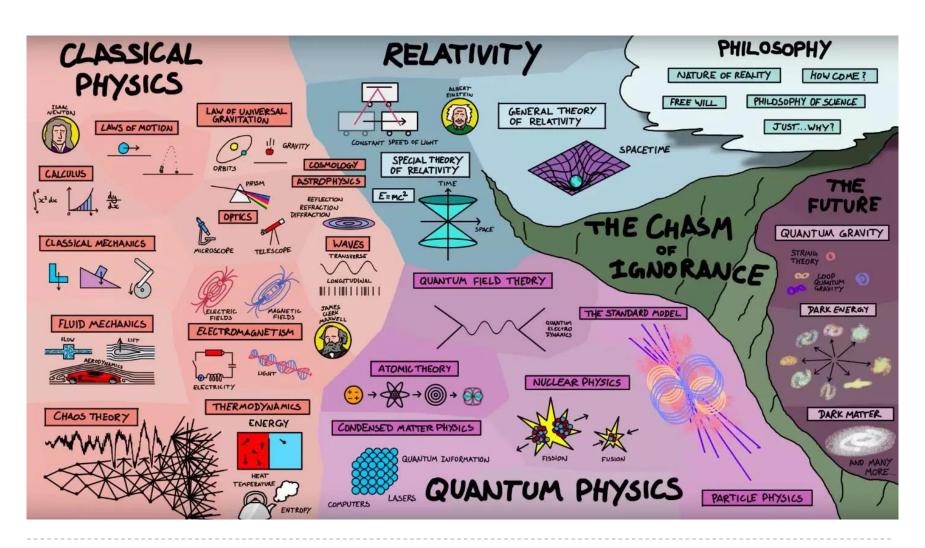
●常用的化合物半导体材料



本课程讨论的对象

低维半导体量子器件物理效应

器件中还必须考虑除量子之外的其它效应



量子力学

量子力学是一个描写各种微观现象的理论。像其它物理理论一样,量子力学并不是这些实验现象的直接反映。人类引入了一些革命性的象概念,如数、态叠加等等。通过这些革命性的概念,加上线性代数的数学基础,人类构造了量子力学理论,而其正好能描写所有我们能看到的微观现象。

—— 文小刚

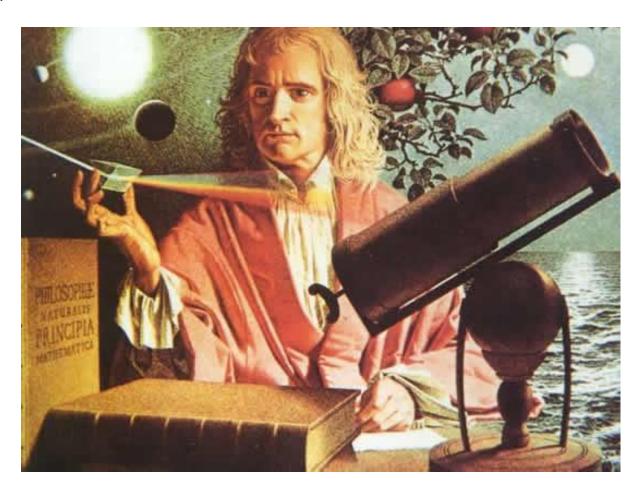
美国科学院院士、狄拉克奖获得者

量子效应

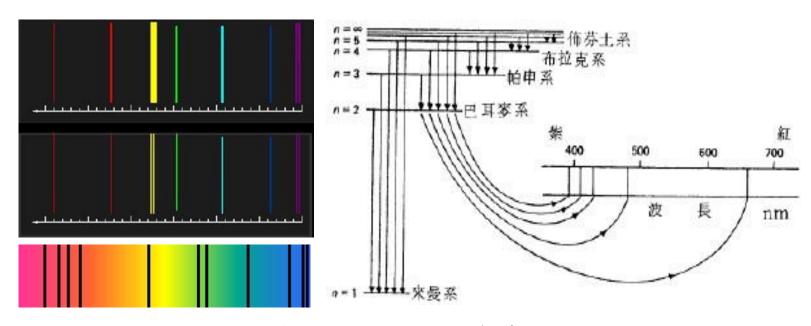
- ●量子(quantum)的含义
 - □拉丁语 "quantus", 意为 "有多少(how much)", 代表"相当数量的某物质"。
 - □在物理学中,通常指一个不可分割的基本 个体
 - □"量子化"指物理量的数值是特定的,而不是任意值

量子力学(物理)的发展

• 光谱



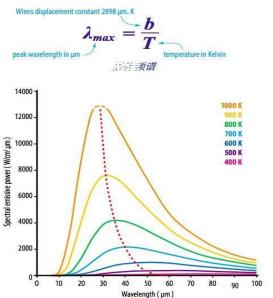
•原子光谱

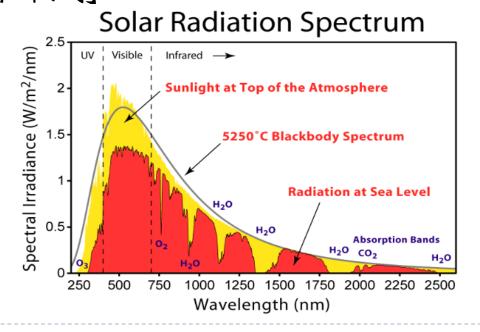


氢原子发光谱系



普朗克, "量子力学之父"
 普朗克常数 h= 6.626×10⁻³⁴ J·s
 E = hv "联系波粒二性的纽带"
 黑体辐射:



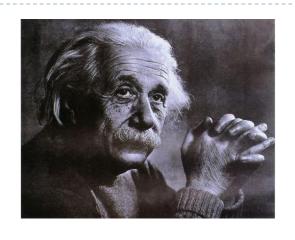


●黑体辐射公式

$$\rho_{\nu} d\nu = \frac{8\pi h \nu^{3}}{c^{3}} \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu$$

对于一定频率v的电磁辐射,物体只能以hv为单位吸收或发射它,即,吸收或发射电磁辐射只能以"量子"方式进行,每个"量子"的能量为 hv

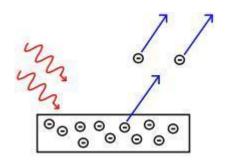
1877年, 玻尔兹曼就假设原子能量可取某个单位值的整数倍,则在粒子数和总能量一定的条件下,最可几分布是每个能量Ej对应的粒子数是: Exp(-Ej/kT),此即玻尔兹曼分布。这种存在分立能量的思想对建立量子力学有启发意义。

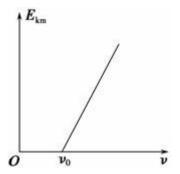


• 爱因斯坦

- □光电效应
- □引入玻色—爰因斯坦统计, 引入谐振子零点能的概念
- □始终认为哥本哈根学派的量 子力学是不完备的









●徳布罗意

- □提出物质波的概念 把束缚粒子的能量量子化与有限空 问中驻波波长的离散性联系起来
- □徳布罗意公式h $\lambda = \frac{h}{p}$

电子的德布罗意波长

$$\lambda_{\rm e} = \frac{1.226}{\sqrt{\rm U_{\rm e}(V)}}(nm)$$



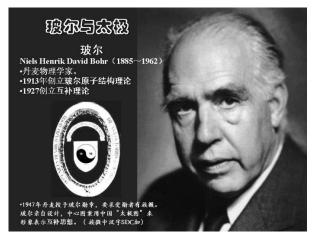
- ●薛定谔,波动力学的创始人
 - □提出用波动方程描述微观粒子运动状态, 即薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$

把粒子的离散能级与微分方程在一定的边 界条件下的本征值问题联系起来

在常用的坐标表象
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(t)$$

□证明波动力学与矩阵力学在数学上等价



- •波尔, 哥本哈根学派创始人
 - □氢原子模型,首次给出电子轨 道的量子化条件,原子发光是 电子在不同能级上跃迁造成的
 - □互补原理:经典理论是量子理 论的极限近似

体系能量本征值的离散性与连 续性

概率性描述与决定论性描述



●玻恩

- □波函数的统计诠释,即波函数的 模平方代表粒子出现的几率
 - □把波粒二象性统一起来的唯一 符合实验的方案
 - □相对概率分布
 - □对粒子测量结果的一种预期
- □矩阵力学的创始人之一



●海森堡

- □矩阵力学的创始人之一
- $lacksymbol{\square}$ 测不准原理 $\Delta p \cdot \Delta q \sim h$

两个力学量A和B是否可以同时具有确定值,取决于相应的算符是否对易

$$\Delta A \cdot \Delta B \ge \frac{1}{2} \left| \overline{[\hat{A}, \hat{B}]} \right|$$

"量子"巨人们



SOLVAY CONFERENCE 1927

colourized by pastinc

	A. F	PICARD E.	HENRIOT P. EHRENFES	T Ed. HERSEN T	h. DE DONDER	E. SCHRÖDINGER	E. VERSCHAFFELT W. PAU	U W. HEISENBERG	R.H FOWLER L. BR	RILLOUIN
P. DEBYE	P. DEBYE M. KNUD		W.L. BRAGG	H.A. KRAMERS	P.A.M. DIRAC	A.H. COMPTON	L. de BROGLIE	M. BORN	N. BOHR	
I. LAI	NGMUIR	M. PLANCK	Mme CURIE	H.A. LORENTZ		A. EINSTEIN P	. LANGEVIN Ch.E. G	JYE C.T.R	. WILSON O.W. R	RICHARDSON
				Absents : Sir W.F	H. BRAGG, H. DE	SLANDRES et E. VAI	N AUBEL			

Solvay Conference 1927 (第五届索尔维会议) 会议主题: Electrons and photons

光子的基本性质

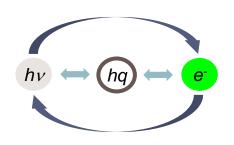
波粒二象性

光的粒子属性

$hv = E_j - E_i$, $\vec{k} = \vec{k}_j - \vec{k}_i \pm \vec{G}$

电-光/光-电转换

光源/探测等器件

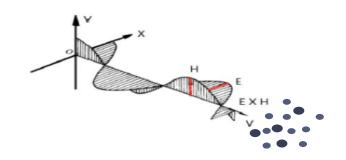


光的波动属性

$$\vec{E} = \vec{A}e^{i\Phi} = f(t, r, \lambda, \Omega, \vartheta)$$

t: 时间; r: 空间; λ : 波长; Ω : 空间频率; θ : 环境效应

感知、传输、处理



光子的基本性质

- 能量:一个光子的能量,即一个光量子ε=hν, 正比于相对应的电磁波频率
- 质量:按照相对论理论,一定的质量与一定的能量相联系,

$$\varepsilon = mc^2$$
, $m = \frac{\varepsilon}{c^2} = \frac{h \nu}{c^2}$

另一方面,运动物体的质量随速度 V 的增大而增加

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}}$$

因光子速度 $\nu = c$, 则 $m_0 = 0$, 即光子没有静止质量, 或者说, 不存在光子在其中静止的坐标系。

● 动量: 光子的动量可以表示为

$$\mathbf{p} = \mathbf{m} c \mathbf{n}_0 = \frac{\mathbf{h} \ \mathbf{v}}{c} \mathbf{n}_0 = \frac{\mathbf{h}}{\lambda} \mathbf{n}_0 = \hbar \mathbf{k}$$

 角动量: 光子角动量包括自旋角动量和轨道角动量 光子的固有自旋角动量为ħ,与光的偏振有关 其在特殊方向上的投影值可用量子数 μ=0,±1表示, 它们对应于线偏振光和左旋/右旋偏振光

由于光子具有角动量,在电磁波和粒子的相互作用中为了保持角动量守恒,所以对光的偏振性有特殊要求并和选择定则有关

光子的状态

•测不准关系: $\Delta x p_x \approx \hbar$, $\Delta y p_y \approx \hbar$, $\Delta z p_z \approx \hbar$ 设光子局限于 $V = \Delta x \Delta y \Delta z$ 空间,相应的动量不确定量为

$$\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \approx \frac{h^3}{V}$$

动量在h3/V范围内的光子是不可区分的

● 动量间隔在P及P+dp范围内的模占有的总体积为:

$$4 \pi p^2 dp = 4 \pi \left(\frac{hv}{c}\right)^2 \frac{hdv}{c} = 4 \pi \frac{h^3}{c^3} v^2 dv$$

除以每模体积 $\frac{h^3}{V}$,得该间隔范围内的模数P,因为每模有两种独立的偏振

模数=p=
$$\frac{8\pi}{c^3}v^2$$
dv/V

光子的统计涨落

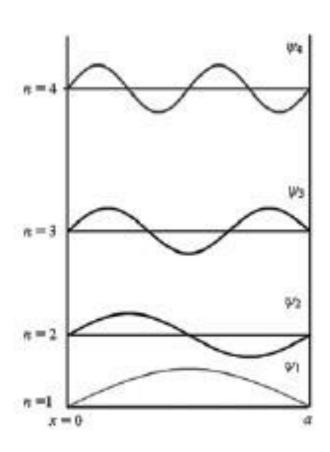
 涨落是一种统计现象,指物理量围绕看它的平均值的 波动变化。一个处于热平衡的系统,平均总能量为 \overline{E} ,则能量起伏的平均偏差服从爱因斯坦-否勒公式

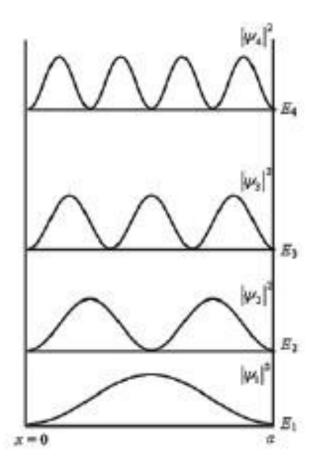
$$\langle (E - \overline{E})^2 \rangle = kT^2 \frac{\partial E}{\partial T}$$

用
$$\overline{E} = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/kT} - 1}$$
代入,得
$$\langle (E - \overline{E})^2 \rangle = (h \nu)^2 \left[\frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} + \frac{1}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2} \right]$$
 由 $f \langle (E - \overline{E})^2 \rangle = \langle (n - \overline{n})^2 \rangle (h \nu)^2$,所以有
$$\langle (n - \overline{n})^2 \rangle = \overline{n} + \overline{n}^2$$

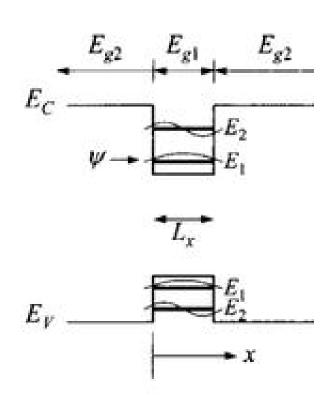
当n≫1时,忽略第一项,辐射场主要体现波动性 (射频) 当n≪1时,忽略第二项,辐射场主要体现粒子性 (光频)

• 无限深势阱





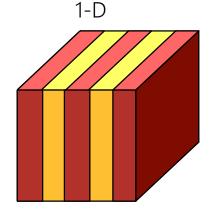
• 半导体材料量子阱与电子波函数

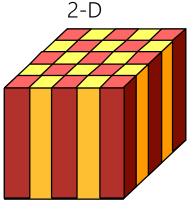


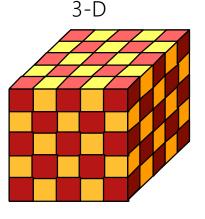
• 低维半导体结构

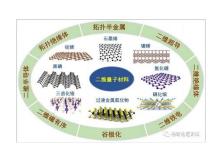
至少在一个空间维度上对其中的载流子输运和光学跃迁等物理行为具有量子限制的材料体系

- □一维受限:二维材料结构——量子阱
- □二维受限:一维材料结构——量子线(纳米线)
- □三维受限:零维材料结构——量子点









半导体器件制作从"杂质工程"走向"能带工程"

•注意:

物理学中的"势阱" "量子阱" 一维受限的材料结构 1.2 低维半导体器件的发展

• 第一支半导体晶体管



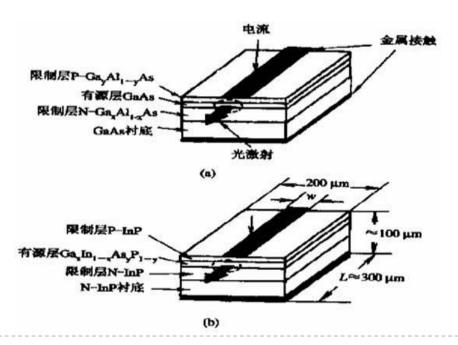
1947年发明的锗晶体管



肖克利(中)、巴丁(左)和布莱顿(右)

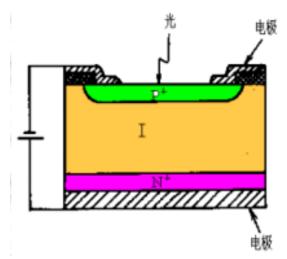
• 半导体激光器

1957年阿尔费罗夫(Alferov)提出异质结激光器的概念 1963年克勒默(Kroemer)提出双异质结激光器的概念 但这种激光器直到1980年代才研制成功



双异质结平面条形 半导体激光器 (a)短波长 (b)长波长 • 半导体光探测器

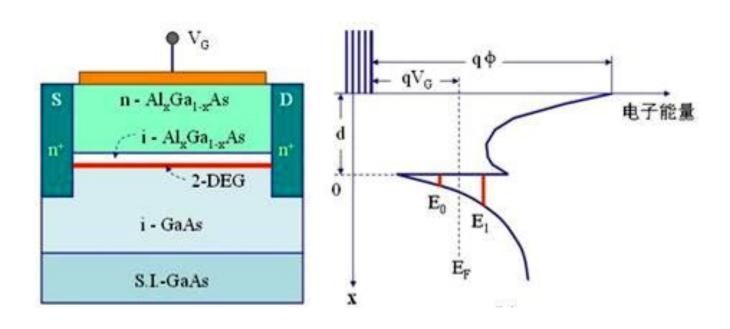
—— PIN光电二极管



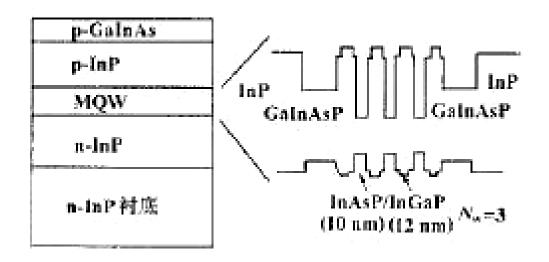
- 该类器件在当下仍是重要的光探测器
- 其探测波长范围由半导体材料带隙直接决定

上述半导体器件与低维半导体结构量子效应 无直接关系

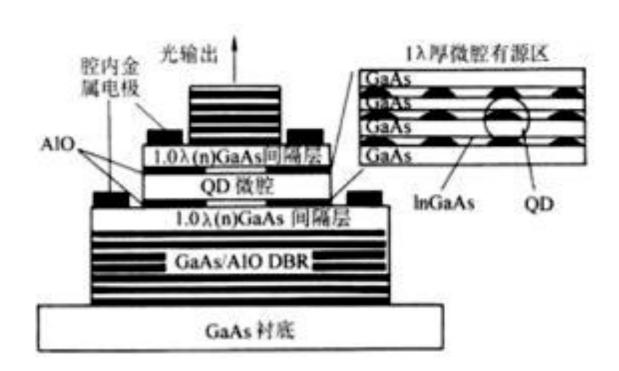
●高电子迁移率晶体管



•量子阱激光器

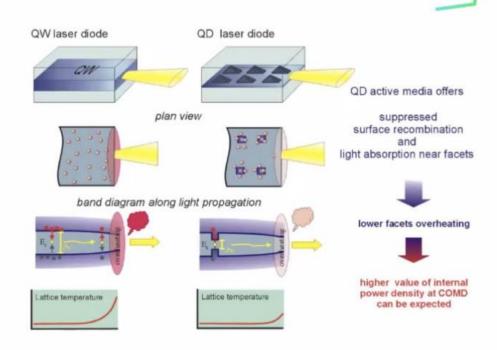


•量子点激光器

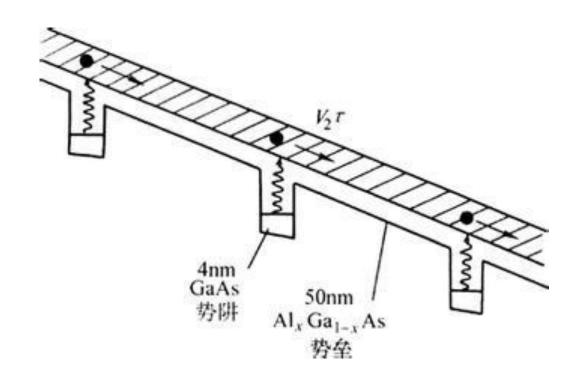


•量子点激光器

In-situ window structure prevents Catastrophic Optical Mirror Damage (COMD)



●量子阱红外光探测器



·低维电子 器件 高电子迁移率晶体管 共振隧穿电子器件 单电子输运器件

低 维 半导体器件

> 低维光电子 器件

量子结构激光器 量子结构红外探测器 量子结构太阳能电池 量子信息器件

1.3 低维半导体器件的应用

· "更快、更高、更强" 通信,感知,处理。。。

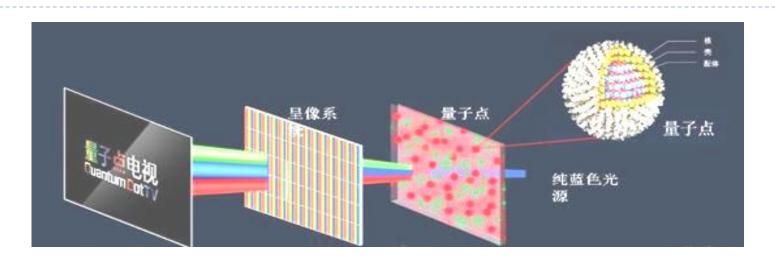
新的功能器件量子信息技术、生物光子学。。。

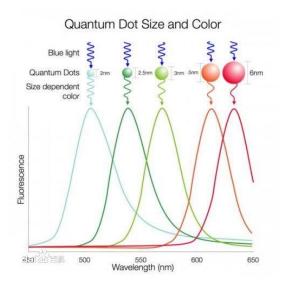
显示器件

•量子点电视

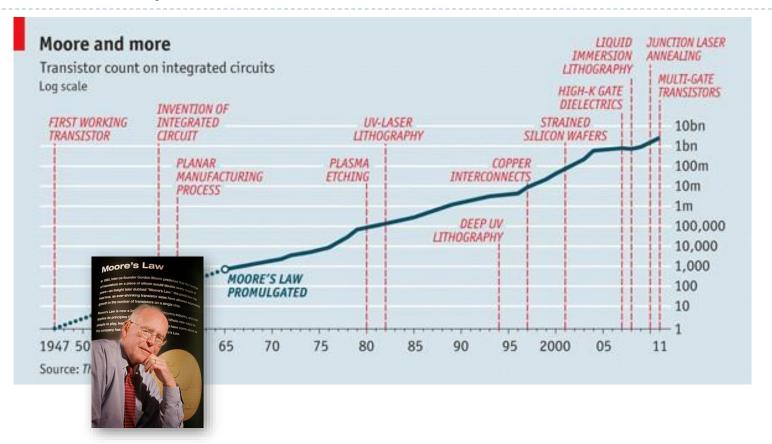






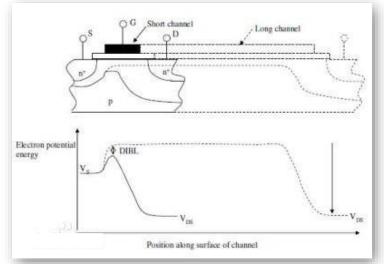


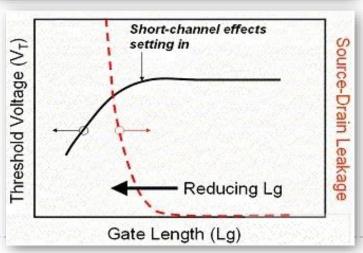
摩尔定律



是否还可以通过不断减小节点尺寸来提高性能?

短沟道效应





是否还可以通过不断减小节点尺寸来提高性能?

短沟道效应

统计效应

半导体材料掺杂的统计特性

以掺杂浓度10¹⁸ cm⁻³、掺杂深度100 nm 为例 10 nm × 10 nm 面积内的杂质原子的平均个数是 10!

是否还可以通过不断减小节点尺寸来提高性能?

短沟道效应

统计效应

量子效应

电子的德布罗意波长

$$\lambda_{\rm e} = \frac{1.226}{\sqrt{\rm U_{\rm e}(V)}}(nm)$$

是否还可以通过不断减小节点尺寸来提高性能?

短沟道效应

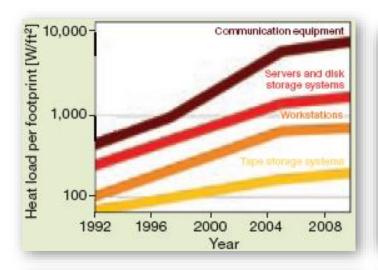
统计效应

量子效应

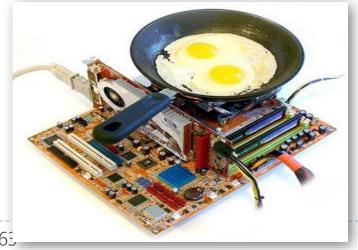
器件功能失效

功耗问题

是否还可以通过不断减小节点尺寸来提高性能?







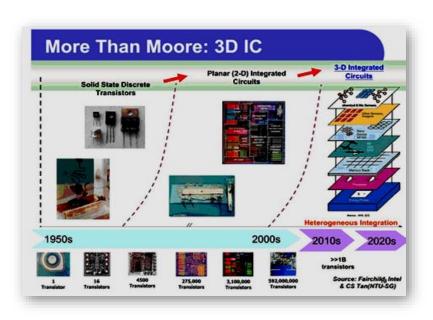


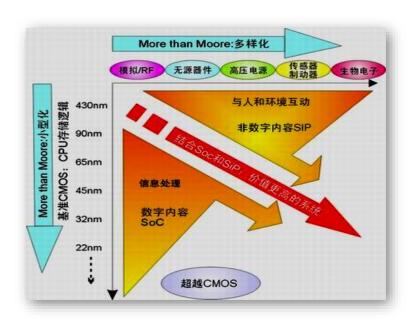
经典计算的原理性限制

- 计算速度不断提高的追求,需要微电子集成电路不断提高集成度,器件尺寸的减小必然受到量子极限尺寸的限制
- 电子计算机的每一步操作都是不可逆的,根据热力学原理,这样的过程一定要消耗热量,CPU的发热问题是提高计算能力的另一个瓶颈
- 电子计算机的计算是串行的而不具有内在的并行性, 通过连接更多的计算资源来解决大规模并行计算需要 的复杂性极大
- 冯诺依曼架构下,计算过程中处理器和存储器之间频 繁进行海量数据的读取(存储墙)

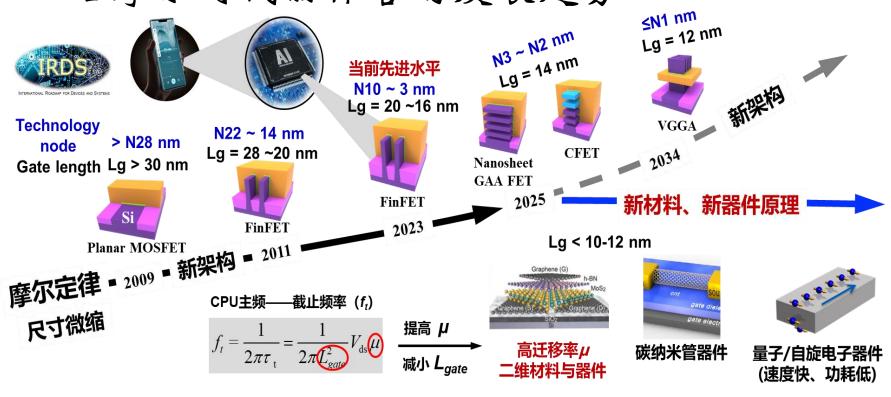
Moore and More/More Than Moore

- 单电子晶体管、自旋电子器件。。。
- 碳纳米管、纳米线、化合物半导体、石墨烯、拓扑材料。。
- 光计算、量子计算。。。





• 后摩尔时代晶体管的发展趋势



新材料: 亟需开发新的二维高迁移率(µ) 沟道/高k介电/电极材料

挑战 新结构:实现多维沟道材料与高k自氧化栅介质的三维异质集成

新器件:探索延续摩尔定律及兼容硅基工艺的高算力低功耗新架构器件

量子计算的优点

- •量子计算机的核心元器件是量子器件
- 量子计算是由一系列可逆的幺正演化完成的, 理论上说在计算过程中并不消耗能量
- 量子计算是建立在量子态叠加原理基础上的, 自动地具有多位、并行性

量子计算的主要步骤

- 制备:将"芯片"中的各个比特制备在某个 特定的量子初态上(通常是基态,具有良好 的相干性)
- 计算:施行完成预想计算功能的各种可逆幺 正演化
- 读取:对量子存储器进行量子测量,读出计算结果

这些步骤都有赖于 基于低维半导体结构的固态器件

本课程的主要内容

- 低维半导体结构中的量子效应 能带结构、电子状态、输运特性、光学性质
- 低维半导体量子结构的制备常用半导体材料制备技术、低维材料的制备
- 低维半导体电子器件
- 低维半导体光电子器件