



信息光子学与光通信系列丛书

丛书主编 任晓敏

量子异质结构理论与计算

**Theory and Calculations of
Quantum Heterostructures**

刘玉敏 俞重远 叶寒 编 著



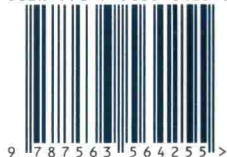
北京邮电大学出版社
www.buptpress.com

Theory and Calculations of
Quantum Heterostructures

量子异质结构理论与计算

策划编辑：马晓仟
责任编辑：孙宏颖
封面设计：七星博纳

ISBN 978-7-5635-6425-5



定价：96.00元



信息光子学与光通信系列丛书

国家出版基金项目
NATIONAL PUBLISHING FOUNDATION

量子异质结构理论与计算

丛书主编 任晓敏
刘玉敏 俞重远 叶寒 编著



北京邮电大学出版社
www.buptpress.com

此为试读, 需要完整PDF请访问: www.ertongbook.com

内 容 简 介

本书从半导体量子异质结构的晶格失配出发,首先介绍了弹性力学的基本概念和基本理论,并在此基础上讨论了应变量子异质结构应力、应变分布的模型和计算方法。此外,原子势函数法也广泛应用于量子异质结构应力、应变计算,本书对其也做了适当的介绍。本书以位错理论为基础,讨论了异质结构中位错应力、应变分布的有限元计算方法,并以能量平衡判据分析了异质结构中位错产生的临界厚度或临界尺寸。基于能量最优化,本书分析了热力学平衡条件下量子异质结构的材料组分与形貌、尺寸的相关性。在组分和应变的基础上,本书介绍了能带结构计算的多带 $k \cdot p$ 理论、量子异质结构中电子结构的计算方法,以及如何采用应变工程的方法调控量子异质结构的生长和光电特性。最后本书介绍了腔量子电动力学理论及其在“光学微腔+量子点”系统的应用,并介绍了基于几何投影法设计和优化光学微腔的结构,以提高量子点自发辐射率和辐射光子的捕获率。

本书可供半导体光电子专业的研究生和高年级本科生使用,或者供从事相关专业的工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子异质结构理论与计算 / 刘玉敏, 俞重远, 叶寒编著. -- 北京: 北京邮电大学出版社, 2021.9
ISBN 978-7-5635-6425-5

I. ①量… II. ①刘… ②俞… ③叶… III. ①量子—异质结—研究 IV. ①TN303

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2021)第 143930 号

策划编辑: 马晓仟 责任编辑: 孙宏颖 封面设计: 七星博纳

出版发行: 北京邮电大学出版社

社 址: 北京市海淀区西土城路 10 号

邮政编码: 100876

发行部: 电话: 010-62282185 传真: 010-62283578

E-mail: publish@bupt.edu.cn

经 销: 各地新华书店

印 刷: 唐山玺诚印务有限公司

开 本: 720 mm×1 000 mm 1/16

印 张: 30

字 数: 636 千字

版 次: 2021 年 9 月第 1 版

印 次: 2021 年 9 月第 1 次印刷

ISBN 978-7-5635-6425-5

定价: 96.00 元

· 如有印装质量问题,请与北京邮电大学出版社发行部联系 ·

丛书总序

2013年12月20日联合国第六十八届会议决定将2015年设定为“International Year of Light and Light-based Technologies”，即光和光基技术国际年，简称国际光年。人类对光的探索可以追溯到两三千年以前，早在我国春秋战国时期，墨翟及其弟子所著的《墨经》中就记载了光的直线传播和光在镜面上的反射等现象。光学的发展漫长而曲折：1015年前后，伊本·海赛姆写成的《光学》(Book of Optics)全面地介绍了希腊学者对光的认识，对后世欧洲学者产生了巨大影响；1657年费马(Fermat)得出了著名的费马原理，并从原理出发推出了光的反射和折射定律，这两个定律奠定了几何光学的基础，光学开始真正成为一门科学；1815年菲涅尔(Fresnel)的光波动性理论是光学发展之路里程碑式的贡献；1861年麦克斯韦建立了著名的电磁理论，该理论预言了电磁波的存在，这是继牛顿力学之后划时代的巨大贡献；1905年，爱因斯坦运用量子论对光电效应提出了新的解释，说明了光具有粒子性；1965年，华裔科学家高锟在光纤光导理论方面提出的通信新模式引起了世界信息通信技术的一次革命，高锟也由此被誉为“光纤之父”。

早期的光学主要研究物质的宏观光学特性，如光的折射、反射、衍射、成像和照明等，随着20世纪60年代初激光的出现，光学进入了现代光学的新阶段，人们着重于研究光子与物质相互作用、光子的本质，以及光子的产生、传播、探测等微观机制。光子学(photonics)这一领域应运而生，光子学是研究以光子作为信息或能量载体的科学。光子学相对于传统的光学有如电子学相对于经典电学，光子学一经提出即引起世界的高度重视。

如今光子学技术已经广泛应用到工业、农业、交通、国防、环保、医疗、生活娱乐等各个领域，当前的因特网超过90%的信息数据通过高速光纤通信网传输；微纳米光学广泛应用在信息处理和存储上；光伏太阳能发电具有节省能源、降低污染等优势，正向数以千万计用户提供电力。在世界各国经济实力与国防力量的较量中，光子学也起着重要作用。光子学，特别是信息光子学技术的应用已经深入人类活动的

方方面面,与日常生活密不可分,我们应该让人们清楚地认识到光子学对人类生活所起到的巨大作用,以及对人类社会可持续发展产生的重要意义。

2015年是国际光年,也是著名光学科学家王大珩院士和著名光通信科学家叶培大院士(依托北京邮电大学的信息光子学与光通信国家重点实验室创始人)100周年诞辰;2016年又恰逢通信光纤和半导体双异质结构制备成功50周年,信息论的创始人香农100周年诞辰。值此之际,信息光子学与光通信国家重点实验室编写完成了该丛书,旨在促进信息光子学的进一步发展。希望读者通过该丛书能够了解该领域中的一些新的重要进展,产生某些新的思考。

谨此小序,欢迎交流斧正。

信息光子学与光通信国家重点实验室(北京邮电大学)



任晓敏

徐坤

2016年8月

前 言

大数据、物联网、人工智能、数字地球等各种信息社会概念,乃至武器装备信息化等与信息相关的人类生产和生活活动,已经并正在对人们的工作方式、思维方式等各个方面产生深刻的影响。高速处理器、大规模集成电路、各种关键光电子器件和各种集成光学器件构成了信息社会的基石,而各种器件和功能芯片的基础则是半导体材料和与之相关的 pn 结或异质结构。

在理解半导体材料和结构的重要性之前,有必要回顾一下影响人类生产和生活的几个关键科技节点:望远镜和指南针的发明推动了 12 世纪航海业的进步,从而大大地拓展了人类在地球的活动空间;19 世纪蒸汽机的发明和改良成就了第一次工业革命;20 世纪初电磁感应的发现和电动机的研制,引发了第二次工业革命,人类进入电气时代,电报、电视等进入了人类生活;20 世纪初晶体管的发明带来了现代电子学的革命,同时半导体材料和器件的研究蓬勃发展,微电子产业和光电子产业及时而有效的结合造就了 20 世纪后半期的信息产业,从此人们步入信息社会。

进入 21 世纪以来,半导体材料和器件从主要服务信息社会逐步扩展到人类生活的其他领域,例如能源产业和医疗卫生行业,具体有太阳能、能量存储、白光照明、医学诊断和医学治疗等。人们对 21 世纪充满期待:有人说 21 世纪是光电子的世纪,有人说 21 世纪是生物学的世纪,有人则说 21 世纪是纳米科技的世纪。显然,争论哪种说法更正确,没有绝对意义,重要的是科技的持续进步,必将更深刻地影响人们的生产和生活方式,从某种程度来讲,这也是科技创新的动力源之一。从社会自身发展来看,步入 21 世纪,人们更加注重能源节约、环境友好以及发展的可持续性,以“绿色”和“低碳”为特征的工业、农业、能源、医学等必将获得长足的发展,相反,各种高能耗、非绿色产业必将被逐步淘汰,21 世纪应当是“绿色革命”的世纪。半导体材料和器件在绿色环保方面已经占有一席之地,并获得迅猛发展,特别是太阳能产业、白光照明工程在国民经济中发挥着重要作用。

制造和使用工具是人和动物的根本区别,然而,工具的制造受制造技术本身的限制,制造技术又受到材料固有的限制,这一规律从过去到现在一直适用。根据人类对材料的掌控,可将人类的文明大致划分为石器时代、青铜器时代和铁器时代。本书涉及的量子异质结构主要是指半导体材料的量子异质结构。即便在半导体材料领域也很难定义下一个时代为硅器、碳器或其他材料的时代,人们对未来的需求呈现多样性,未来应当是多材料并举的时代。基于半导体材料的重要性,科学家们

对元素周期表进行了深入挖掘,发现或人工制备了大量半导体化合物和半导体合金,许多独特的物理性质有望在产业化中获得应用。然而半导体产业是一个高投入的产业,在纯度、加工工业方面,不同材料要求差别较大,一种半导体材料能否被大规模应用,与其潜力、现有半导体工艺兼容性、能支撑的产业规模有关。因此,以硅为主体的半导体材料与器件在 21 世纪将发挥越来越重要的作用。新一代半导体材料会随着时间的推移、技术和工艺的成熟或者新的需求而逐步登上历史舞台。根据半导体材料发展时间的几个明显节点,其一般可划分为三代。第一代半导体以硅和锗为代表,是大规模集成电路的主要材料,占半导体产业的 95% 以上,工艺发展十分成熟,以微电子产业为代表,构成计算机和现代电子器件的核心。第二代半导体以 GaAs、InP 为典型代表,是发光二极管和激光二极管的基础。第三代半导体以 GaN、InN、AlN、ZnO、Ga₂O₃ 等宽带隙半导体为典型代表,在蓝绿光二极管和激光二极管、紫外探测、极端温度工作条件器件与高功率电子器件中有典型应用,在军工、国防领域应用前景广阔。

半导体材料按电阻率定义,主要是指电阻率在 $10^2 \sim 10^9 \Omega \cdot \text{cm}$ 的材料;按带隙定义,指带隙宽度在 $0 \sim 4 \text{ eV}$ 之间的材料。以上定义并不绝对,如金刚石带隙为 6 eV ,被视为半导体材料。半导体是唯一能够将光子和电子集成较好的材料,可以实现电子和光子的操控。作为信息产业基石的微电子产业和光电子产业,前者涉及对电子的操控,后者涉及对光子和电子的操控,这也是半导体材料在信息领域如此重要的原因:电子属于费米子,电子之间存在较强的相互作用,易于实现信息处理和计算。缺点是电子之间除了自身相互作用外,还与周围环境相互作用,信号易受噪声影响,另外电子有一定质量,存在一定的迁移率。光子不带电,静态质量为零,相互作用很弱,易于实现信号高速传输,受环境影响小,缺点是很难操控。半导体材料及其结构为电子和光子提供了很好的宿主,半导体的物理特性可以通过掺杂、温度的改变来调节,半导体中的电子受电场和磁场的作用,容易实现半导体中电子的调控,制作信号处理器件。直接带隙半导体通过电子跃迁发光制作发光二极管和激光二极管,或者通过光电效应制作各种光探测器。

Si 和 Ge 属于单元素半导体,其他半导体大多为化合物半导体,几种化合物半导体还可以制作合金半导体。一些典型的化合物半导体具有极高的电子迁移率,非常适合做高速电子器件。化合物半导体种类较多,带隙覆盖了从远红外到紫外波段。通过合金化合的组分调控还可以实现能带的裁剪,原则上可以实现任意波长的有源光学器件。更宽发光波段的光源需求和高速电子器件的需求,是化合物半导体及半导体合金研究的重要推动力。

丰富的半导体材料库为半导体器件的发展和应用提供了较多可选择性。但仅有优秀的材料特性远远不够,目前人们对半导体器件在功耗、尺寸、功能集成、工作条件等方面提出了较高的要求,要实现上述多目标的器件设计,需要将半导体材料

制成复杂的结构,这些复杂的结构既有电子学的要求,如制备量子阱、量子线、量子点等实现载流子的量子受限效应、态密度裁剪等,也包括光子学受限效应,如光波导的制备、半导体光学微腔的设计、垂直腔面发射结构等,另外对于一些需要借助量子效应的半导体器件,一些特殊的量子结构设计显得尤为重要,如单电子晶体管、量子点单光子光源、量子比特、量子级联激光器等。

下面简要回顾半导体材料、理论与器件发展中的一些重要阶段。

前期的理论发展:1899年电子被发现;1905年光子被发现;1925—1928年量子力学被建立;1928年,菲利克斯·布洛赫(Felix Bloch)的博士论文给出了金属的能带理论,费米(Fermi)提出了费势的概念,半导体理论迅速发展。

1947年11月23日,贝尔实验室的约翰·巴丁(John Bardeen)和沃尔特·布拉顿(Walter Brattain)发明了点接触型双极晶体管。1948年威廉·布拉德福德·肖克莱(William Bradford Shockley)发明了结型晶体管。晶体管的发明带来了现代电子学的革命,3人分享了1956年诺贝尔物理学奖。肖克莱1949年描述了p-n结的物理特性,1951年定义了异质结的概念,1952年引入了结型场效应晶体管。1954年查尔斯·H.汤斯(Charles H. Townes)发明了微波激光器。1958年,江崎(Leo Esaki)研制成功了隧穿二极管,这是半导体物理和量子力学的“一次成功的联姻”。



图1 从左到右依次为:巴丁、布拉顿、肖克莱以及第一个点接触型(双极)晶体管

1958年德州仪器公司(Texas Instruments)的杰克·基尔比(Jack Kilby)发明了第一块集成电路,荣获了2000年的诺贝尔物理学奖。次年,仙童半导体公司(Fairchild Semiconductor)的罗伯特·诺伊斯(Rovert Noyce)发明了第一块硅基平面集成电路。1968年,硅MOS器件被发明及其大规模集成电路开始实现产业化生产。

1962年,通用电气公司(General Electric)的罗伯特·诺尔·霍尔(Robert Noel Hall)首次实现了半导体二极管的光发射。同年报道了激光二极管的有IBM、麻省理工(MIT)的林肯实验室、德州仪器实验室。次年,苏联的尼古拉·巴索夫(Nikolay Basov)也报道了该组的GaAs激光器。在肖克莱提出了异质结概念的基础上,1963年,赫伯特·克罗默(Herbert Krometer)提出了异质结构的载流子受限和光场受限机理,此后相续发展了单异质结半导体激光二极管,取得里程碑式进展的是20世纪

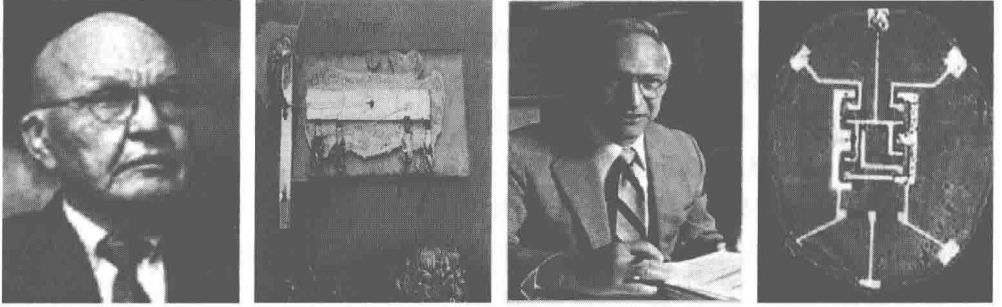


图2 从左到右依次为:基尔比(2000年诺贝尔物理学奖获得者)及其第一块集成电路,诺伊斯及其第一块平板硅基平面集成电路

70年代初由苏联的阿尔费罗夫研究组和美国的莫顿·潘尼希(Morton Panish)与哈亚希(Izuo Hayashi)等人研制的双异质结激光二极管,实现了室温下连续工作。阿尔费罗夫与集成电路的发明者基尔比共同分享了2000年诺贝尔物理学奖。1966年,华裔科学家高锟指出用石英玻璃纤维进行长距离信息传递,带来了一场通信事业的革命,并提出了当玻璃纤维损耗率下降到每千米20 dB时,光纤通信即可成功。他的研究为人类进入光导新纪元打开了大门,他被誉为“光纤之父”,并获得了2009年诺贝尔物理学奖。1970年康宁公司研制出传输损耗低于20 dB的光纤。室温连续运转半导体激光器与低损耗传输光纤制备的成功开启了光纤通信的新纪元,1970年被称为光纤通信元年。此后,在光通信的驱动下,半导体光电子技术与器件获得迅猛发展,以激光器为例,先后经历了量子阱激光器、分离受限激光器、分布反馈激光器、垂直腔面发射激光器、垂直外腔面发射激光器等。



图3 从左至右依次为:克罗默、阿尔费罗夫和高锟

20世纪70年代初江崎和朱兆祥开始人为控制半导体中电子的势分布和波函数,首次提出了半导体超晶格的概念,并提出了利用该结构实现布洛赫振荡。分子束外延设备在贝尔(Bell)实验室和IBM的成功研制为这一概念提供了实现的前提,

AlGaAs/GaAs 超晶格的成功制备标志着半导体材料进入人工剪裁时代,晶格工程学获得快速发展。

1978年丁格尔等人在调制掺杂异质结平行基面电子气的输运研究中证实了电子迁移率增强现象,使高电子迁移率晶体管(high electron mobility transistor)研制成功。在此基础上,1980年德国的克劳斯·冯·克利青(Klaus von Klitzing)发现了整数量子霍尔效应,1982年华裔科学家崔崎(Daniel Chee Tsui)等人在迁移率极高的 AlGaAs/GaAs 异质结中发现了分数量子霍尔效应,两个半导体物理的重大发现使得两人分别获得了1985年和1998年的诺贝尔物理学奖。

1969年贝尔实验室的维拉·波义耳(Willard S. Boyle)和乔治·史密斯(George E. Smith)发明了电耦合器件(Charge Coupled Devices, CCD), CCD广泛应用于数码摄像、遥测遥感以及高速摄影技术等,两人因此而获得了2009年诺贝尔物理学奖。

1988年,美国物理学家邓肯·霍尔丹(Duncan Haldane)提出了可能存在不需要外磁场的量子霍尔效应。2010年,我国理论物理学家方忠、戴希等与张首晟教授合作,提出了磁性掺杂的三维拓扑绝缘体有可能是实现量子化反常霍尔效应的最佳体系。2013年清华大学薛其坤教授团队利用分子束外延方法,生长出了高质量的 Cr 掺杂(Bi, Sb) 2Te_3 拓扑绝缘体磁性薄膜,并在极低温输运测量装置上成功地观测到了量子反常霍尔效应。

随着薄膜外延制备技术(特别是先进的 MBE 和 MOCVD 外延生长设备)、检测技术和加工工艺的进步,对半导体材料的研究逐渐延伸到纳米量级,包括纳米颗粒、纳米薄膜、量子线、纳米线和量子点等,纳米技术与半导体技术的结合进一步催生了这些材料或结构背后的量子效应,人们发现了许多新的物理现象,预期获得更好或全新的器件应用。一些在半导体材料中不容易观察到的现象,在量子异质结构中更容易观察、操控,比如量子阱或其超晶格中的量子受限斯塔克效应、激子光学的非线性效应、电子输运的 Aharonov-Bohm 振荡效应、电子干涉效应、量子点的库仑阻塞效应、自旋量子霍尔效应等。这些材料、结构和物理性质必将开拓新的半导体物理学分支(如半导体自旋物理学),并为半导体器件的设计和发展提供了新的思路。

本书主要讨论了具有量子特性的半导体异质结构的制备,结构本身的电学、光学和力学等物理特性,以及半导体量子异质结构在微电子和光电子器件中的应用。本书介绍了与半导体材料物理以及半导体异质结构物理相关的基础知识,重点介绍团队成员近年来在异质外延量子点的应变、组分、位错和电子结构等方面的研究工作。本书的主要目的是将与半导体异质结构相关的基础知识集中进行介绍,强调了基础理论与计算方法在科研中的应用,注重实用性,适用于相关专业高年级本科生与研究生阅读。囿于作者的学识基础和研究兴趣,选材上可能具有主观性,在部分

内容的选择上,与异质结构主题或许稍有偏离。本书尽量避免过于复杂的理论推导,主要注重数值仿真方法。

本书作者均为俞重远教授团队成员,多年从事半导体材料与量子异质结构方面的研究工作,承担和参加了国家 973 计划、国家 863 计划、国家自然科学基金等科研项目。

全书分为 9 章。第 1 章是对量子异质结构概念的阐述。第 2 章详细介绍了弹性力学中应力、应变的基础,以及两种常见半导体结构材料的弹性特性。第 3 章详细介绍了半导体中 3 种应变量子异质结构的应变分布计算,包括数值计算方法和解析方法。第 4 章详细介绍了半导体中的位错以及由于位错引起的应变分布计算和由位错决定的量子异质结构的临界问题。第 5 章介绍了半导体异质外延生长的动力学蒙特卡罗仿真,包括仿真方法和仿真实例。第 6 章详细介绍了热力学平衡条件下量子异质结构的组分分布和应变的关系。第 7 章详细介绍了半导体量子异质结构的电子结构计算方法,以及应变、压电效应等对电子结构的影响。第 8 章详细介绍了应变工程的应用对半导体材料形态、分布的有序性影响以及电子结构的调控。第 9 章详细介绍了半导体量子点与微腔相互作用下的腔量子电动力学及其在单光子源和量子逻辑中的应用。

感谢信息光子学与光通信国家重点实验室(北京邮电大学)的实验室主任任晓敏教授,任教授作为“信息光子学与光通信系列丛书”的主编,对本书的编写给予了大量的关心和支持。感谢国家出版基金的资助。

衷心感谢王东林、周帅、冯昊、张文、贾博雍等博士生的无私贡献。

最后,限于作者水平,书中难免有不妥甚至是错误之处,希望专家和读者指正。

作者
于北京邮电大学

目 录

| | |
|---------------------------|----|
| 第 1 章 量子异质结构概述 | 1 |
| 1.1 “异质”的理解 | 1 |
| 1.1.1 晶格失配 | 2 |
| 1.1.2 带边失配 | 6 |
| 1.1.3 折射率失配 | 9 |
| 1.1.4 热失配 | 10 |
| 1.1.5 介电常数失配 | 11 |
| 1.2 “量子”的理解 | 11 |
| 1.3 量子异质结构的制备 | 13 |
| 1.4 载流子的统计特性 | 14 |
| 1.4.1 量子统计分布函数 | 14 |
| 1.4.2 量子态密度 | 16 |
| 1.4.3 半导体中的载流子浓度 | 24 |
| 本章参考文献 | 26 |
| 第 2 章 应力应变基础 | 29 |
| 2.1 应力与应变的概念 | 29 |
| 2.1.1 位移与应变张量 | 30 |
| 2.1.2 应力张量 | 31 |
| 2.2 应力与应变的关系:广义胡克定律 | 33 |
| 2.2.1 简化下标与劲度矩阵 | 34 |
| 2.2.2 立方晶体的弹性常数 | 35 |
| 2.2.3 六角晶体的弹性常数 | 36 |
| 2.3 弹性各向异性 | 38 |
| 2.4 应变能密度 | 43 |

| | |
|------------------------------------|-----------|
| 本章参考文献 | 44 |
| 第 3 章 异质结构的应力应变计算 | 47 |
| 3.1 晶格失配 | 47 |
| 3.2 应变量子阱 | 49 |
| 3.2.1 应变分布 | 49 |
| 3.2.2 任意方向外延量子阱薄膜的有效双轴模量 | 52 |
| 3.2.3 量子阱超晶格的应变平衡 | 55 |
| 3.3 应变量子线 | 58 |
| 3.3.1 平面应变问题 | 59 |
| 3.3.2 量子线应变分布的有限差分法 | 60 |
| 3.3.3 格林函数法 | 63 |
| 3.3.4 有限元法 | 66 |
| 3.4 自组织量子点的应变分布 | 67 |
| 3.4.1 Eshelby 的 inclusion 理论 | 68 |
| 3.4.2 格林函数法(各向同性) | 71 |
| 3.4.3 傅里叶空间的格林函数法(各向异性) | 74 |
| 3.4.4 半空间问题的 inclusion 理论 | 76 |
| 3.4.5 有限差分法 | 78 |
| 3.4.6 有限元法 | 80 |
| 3.5 原子势函数法计算量子点的应变分布 | 84 |
| 3.5.1 Stinger-Weber 势函数 | 84 |
| 3.5.2 价力场势函数 | 85 |
| 3.5.3 Tersoff 势函数 | 87 |
| 3.5.4 应力应变分布的原子势函数仿真 | 88 |
| 本章参考文献 | 90 |
| 第 4 章 异质结构中的位错 | 96 |
| 4.1 位错类型与伯格矢量 | 96 |
| 4.1.1 基本位错类型 | 96 |
| 4.1.2 伯格矢量 | 99 |
| 4.2 位错的应力、应变分布 | 100 |

| | | |
|--------|---------------------------------|-----|
| 4.2.1 | 应变分布 | 100 |
| 4.2.2 | 位错的应变能 | 103 |
| 4.3 | 位错力 | 105 |
| 4.4 | 位错应变分布的有限元计算 | 110 |
| 4.5 | 立方晶体和六角晶体中的位错 | 113 |
| 4.5.1 | 金刚石和闪锌矿结构中的位错 | 113 |
| 4.5.2 | 金刚石和闪锌矿结构的贯穿位错 | 114 |
| 4.5.3 | 金刚石和闪锌矿结构的失配位错 | 114 |
| 4.5.4 | 六角晶体中的位错 | 115 |
| 4.5.5 | 六角晶体中的穿透位错 | 116 |
| 4.5.6 | 六角晶体中的失配位错 | 116 |
| 4.6 | 异质外延薄膜的临界厚度 | 117 |
| 4.6.1 | MB 力平衡模型 | 117 |
| 4.6.2 | van der Merwe 模型 | 120 |
| 4.6.3 | PB 模型 | 120 |
| 4.6.4 | 压应变与张应变外延的区别 | 122 |
| 4.7 | 纳米衬底外延 | 123 |
| 4.7.1 | 刚性纳米衬底外延薄膜的临界厚度(Suhir 模型) | 123 |
| 4.7.2 | 协变纳米衬底外延层的临界厚度(Zubia 模型) | 125 |
| 4.7.3 | 三维受限的纳米外延 | 131 |
| 4.8 | 纳米衬底位错应变计算的有限元法 | 135 |
| 4.9 | 纳米衬底异质外延临界厚度的有限元法 | 139 |
| 4.9.1 | 外延薄膜的临界厚度 | 140 |
| 4.9.2 | 三维台型纳米衬底外延的临界厚度 | 143 |
| 4.9.3 | 纳米线轴向异质外延薄膜的临界厚度 | 146 |
| 4.9.4 | 纳米线轴向异质外延临界厚度的 P-K 法 | 154 |
| 4.10 | 应变异质外延量子点的位错形成位置和临界尺寸 | 158 |
| 4.10.1 | 自组织量子点位错的优先形成位置 | 158 |
| 4.10.2 | 自组织量子点的临界尺寸 | 170 |
| 4.11 | 其他与位错有关的问题 | 179 |
| | 本章参考文献 | 181 |

| | |
|---|-----|
| 第 5 章 异质外延生长理论与仿真 | 187 |
| 5.1 动力学蒙特卡罗法模拟外延生长的基本理论 | 187 |
| 5.1.1 生长过程中的势垒 | 188 |
| 5.1.2 晶格气模型、SOS 假定以及 off-lattice 模型 | 192 |
| 5.1.3 周期边界条件 | 193 |
| 5.2 动力学蒙特卡罗算法 | 194 |
| 5.2.1 动力学蒙特卡罗算法流程 | 194 |
| 5.2.2 事件选择算法 | 196 |
| 5.2.3 动力学蒙特卡罗算法基础测试 | 198 |
| 5.2.4 理想均匀衬底同质外延的表面形态 | 199 |
| 5.3 格林函数方法计算应变 | 201 |
| 5.4 KMC 仿真实验和表面形态 | 204 |
| 5.4.1 预应变衬底——垂直有序生长条件的优化 | 204 |
| 5.4.2 温度对半导体三维岛生长的影响 | 208 |
| 5.4.3 沉积速率对半导体量子点生长的影响 | 210 |
| 5.4.4 生长中断对原子岛表面形态的影响 | 211 |
| 5.4.5 原子结合能对量子点组分分布的影响 | 212 |
| 5.5 基于衬底工程的结构衬底量子点定位生长研究 | 213 |
| 5.6 动力学蒙特卡罗方法仿真自组织量子环 | 216 |
| 5.6.1 量子环的自组织生长模型 | 217 |
| 5.6.2 自组织量子环生长尺寸的设计和优化 | 218 |
| 5.7 基于连续性方程的外延薄膜表面演化 | 221 |
| 5.7.1 半导体外延薄膜演化的方法介绍 | 222 |
| 5.7.2 基于参数优化的薄膜演化数值实现 | 224 |
| 本章参考文献 | 225 |
| 第 6 章 异质外延半导体纳米结构的组分分布 | 230 |
| 6.1 应变异质外延量子点的组分分布 | 230 |
| 6.1.1 热力学平衡组分分布理论 | 232 |
| 6.1.2 移动渐近线方法 | 235 |
| 6.1.3 GeSi/Si(001)量子点组分分布 | 238 |

| | | |
|-------------------------------|-------------------------------|---------|
| 6.1.4 | InGaAs/GaAs(001)量子点组分分布 | 243 |
| 6.1.5 | 量子点相互作用引入的组分分布 | 246 |
| 6.1.6 | 位错芯附近的应变对组分分布的影响 | 250 |
| 6.2 | 稳态合金半导体纳米线轴向组分分布 | 252 |
| 6.2.1 | 瞬态合金纳米线生长模型 | 253 |
| 6.2.2 | GaAs 基合金半导体纳米线轴向组分分布 | 255 |
| 6.2.3 | 稳态合金纳米线生长模型 | 259 |
| | 本章参考文献 | 261 |
| 第 7 章 电子结构计算 | | 266 |
| 7.1 | 单带 $k \cdot p$ 及有效质量近似 | 266 |
| 7.1.1 | 能量相关的有效质量近似 | 266 |
| 7.1.2 | 单带有效质量近似 | 269 |
| 7.1.3 | 单带有效质量近似在量子异质结构中的典型应用 | 271 |
| 7.2 | 数值计算方法 | 275 |
| 7.2.1 | 有限差分法 | 275 |
| 7.2.2 | 平面波展开法 | 279 |
| 7.2.3 | 基于偏微分方程组的有限元法 | 282 |
| 7.2.4 | 薛定谔方程的自治解 | 282 |
| 7.3 | 多带 $k \cdot p$ 理论 | 285 |
| 7.3.1 | 闪锌矿半导体 | 285 |
| 7.3.2 | 纤锌矿半导体的 $k \cdot p$ 公式 | 296 |
| 7.4 | 压电效应 | 299 |
| 7.4.1 | 压电效应与压电势 | 299 |
| 7.4.2 | 半耦合与全耦合模型 | 304 |
| 7.5 | 在量子异质结构中的应用 | 305 |
| 7.5.1 | 有限元法 | 305 |
| 7.5.2 | 平面波展开法 | 308 |
| | 本章参考文献 | 312 |

第 8 章 量子异质结构应变工程及应用 316

| | | |
|-----|-------------------------|-----|
| 8.1 | 隔离层和盖层对量子点应变分布的影响 | 316 |
|-----|-------------------------|-----|