

量子點內能帶結構對於光激過渡之非線性效應
Nonlinear Effects of Energy Band Structures on Optical Transitions
in Quantum Dots

計畫編號：NSC 89-2215-E-009-061

執行期限：88年8月1日至89年7月31日

主持人：吳啓宗 交通大學電子工程系所 教授

一、中文摘要(關鍵詞：光激過渡，準零維量子點，非拋物線，極化光振子散射，非簡併半導體，自由載子吸收係數)

探討由N型三五化合物半導體如N型砷化鎵製造之準零維(Q0D)量子點內電子之光激過渡所引起之非線性效應，此乃因其能帶為非拋物線型所產生的現象。利用量子點內載子之有效質量近似法，來處理本計畫之計算過程。實際上，大部份之量子點系統可視為其深度為 c ，而橫向尺度為 (a, b) 之箱形大小。我們利用和時間無關之擾動原理計算此系統之至第一階修正之固有函數及固有能量值。一般僅討論非簡併半導體材料，故載子之分佈函數可使用馬克斯威爾分佈函數。我們考慮將極化光振子散射列為主要之散射機構，來計算自由載子之吸收係數。發現準零維量子點之自由載子吸收係數因溫度之升高而減少，這個結果與準一維半導體量子細線之結果迥異[1]，我們並討論N型砷化鎵準零維量子點區域內尺寸量子化之效應。

英文摘要(Keywords: optical transitions, quasi-zero-dimensional quantum dots, nonparabolicity, polar-optical-phonon scattering, nondegenerate semiconductors, free-carrier absorption coefficient)

The quantum theory of the nonlinear effects for optical transitions of electrons in quasi-zero-dimensional (Q0D) quantum dots fabricated from n-type III-V compound semiconductor materials such as n-type GaAs has been studied due to the nonparabolicity of energy band structures. We use the effective mass approximation for carriers in the quantum dots. Most realistic quantum dot systems contain the box with a thickness c and the lateral width (a, b) . Using the time-

independent perturbation theory, the first order correction of the eigenfunctions and eigenvalues for the system has been calculated. Since we are interested in nondegenerate semiconductors in general, thus the distribution function of carriers can be used Maxwell-Boltzmann distribution. The free-carrier absorption can be calculated for Q0D quantum dots fabricated from n-type GaAs where the polar optical phonon scattering is important. Results are shown that the free-carrier absorption coefficient in Q0D quantum dots decreases with increasing temperature. This is quite different from the result of quasi-one-dimensional structures [1]. We give a discussion about the dot size effect of quantum confinement regions in n-type GaAs Q0D quantum dots.

二、計畫緣由與目的

近來對於低維半導體結構製造技術一再地進步，經由三維體材料之縮小體積，至準二維量子井系統之製造[2, 3]，再到準一維量子線之研製[4, 5]，甚至於準零維量子點之設計[6]是種自然趨勢連續地將系統之尺度縮減。本計畫是討論有關三五化合物半導體材料如N型砷化鎵準零維量子點區域內尺度量子化之效應，並探討這些量子現象之溫度效應。

三、研究方法及成果

利用量子力學方法求適用於討論準零維半導體量子點之固有能量值及其相對應之固有波動函數，在此我們利用與時間無關之擾動論方法，計算固有能量值及其相對應之固有波動函數，其結果為

$$E_{lmn} = -\frac{E_g}{2} \left\{ 1 - \left[1 + \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m^* E_g} \left(\frac{\ell^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right) \right]^{1/2} \right\} + \frac{e^2 P(\ell, m, n; a, b, c)}{2\pi^2 abc \epsilon} \quad (1)$$

$$\Psi_{lmn}(\mathbf{r}) = \left(\frac{8}{abc} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi \ell x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi m y}{b}\right) \sin\left(\frac{\pi n z}{c}\right)$$

$$+ \frac{2\sqrt{2}e^2}{\pi^2 (abc)^{3/2} \epsilon E_g} \sum_{\substack{(\ell', m', n') \\ n'(\ell', m', n')}} \sin\left(\frac{\pi \ell' x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi m' y}{b}\right) \times \sin\left(\frac{\pi n' z}{c}\right) P(\ell' - \ell, m' - m, n' - n; a, b, c) \times \left\{ \left[1 + \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m^* E_g} \left(\frac{\ell'^2}{a^2} + \frac{m'^2}{b^2} + \frac{n'^2}{c^2} \right) \right]^{1/2} - \left[1 + \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m^* E_g} \left(\frac{\ell^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right) \right]^{1/2} \right\}^{-1} \quad (2)$$

此處 $P(\ell, m, n; a, b, c)$ 為 ℓ, m, n, a, b 和 c 之函數如下：

$$P(\ell, m, n; a, b, c) = \frac{ab}{\ell m} + \frac{bc}{m n} + \frac{ca}{n \ell} \times \ell n \left[\frac{\frac{a}{\ell} + \frac{b}{m} + \frac{c}{n} + \sqrt{\frac{a^2}{\ell^2} + \frac{b^2}{m^2} + \frac{c^2}{n^2}}}{\sqrt[3]{\frac{abc}{\ell m n}}} \right] + \frac{1}{8\sqrt{2}\pi} \times \left[\left(\frac{a}{\ell} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{c}{n} \right)^{\frac{1}{2}} K_{\frac{1}{2}} \left(\frac{2\pi c \ell}{a} \right) + \left(\frac{b}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{a}{\ell} \right)^{\frac{1}{2}} K_{\frac{1}{2}} \left(\frac{2\pi a m}{b} \right) + \left(\frac{c}{n} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{b}{m} \right)^{\frac{1}{2}} K_{\frac{1}{2}} \left(\frac{2\pi b n}{c} \right) \right] + \frac{1}{32\pi} \left(\frac{\ell^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} \right)^{-1} \times \left(1 - e^{-2\pi^2 c \sqrt{\frac{\ell^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2}}} \right) + \frac{1}{32\pi} \left(\frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right)^{-1} \times \left(1 - e^{-2\pi^2 a \sqrt{\frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2}}} \right) + \frac{1}{32\pi} \left(\frac{n^2}{c^2} + \frac{\ell^2}{a^2} \right)^{-1}$$

$$\times \left(1 - e^{-2\pi^2 b \sqrt{\frac{n^2}{c^2} + \frac{\ell^2}{a^2}}} \right) + \frac{1}{32\pi} \left(\frac{\ell^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right)^{-1} \times \left(1 - \frac{1}{3} e^{-2\pi^2 c \sqrt{\frac{\ell^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2}}} - \frac{1}{3} e^{-2\pi^2 b \sqrt{\frac{\ell^2}{a^2} + \frac{n^2}{c^2}}} - \frac{1}{3} e^{-2\pi^2 a \sqrt{\frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2}}} \right) \quad (3)$$

載子之分佈函數為

$$f_{lmn} = n_e e^{-E_{lmn}/k_B T} \left(\sum_{\ell, m, n} e^{-E_{lmn}/k_B T} \right)^{-1} \quad (4)$$

n_e 為載子密度。則自由載子之吸收係數可由下式求得：

$$\alpha = \frac{\epsilon^{1/2}}{n_e v_c} \sum_{\ell, m, n} W_i f_{\ell, m, n} \quad (5)$$

此處 n_e 為輻射場之光子數， v_c 為光速，而 W_i 為載子之躍遷機率。

四、結論與討論

令 N 型非簡併砷化鎵之相關物理參數值為 [8] 電子密度 $n_e = 1.73 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ， $m^* = 0.07m_0$ (m_0 是自由電子質量)， $\epsilon = \epsilon_0 = 12.9$ ， $\epsilon_\infty = 11.1$ ， $E_g = 151 \text{ eV}$ ，又光振子之頻率為 $\omega = 5.5 \times 10^{13} \text{ rad/sec}$ ，則可得相關之數值結果如圖一、二、和三所示。

五、參考文獻

1. C. C. Wu, Short Report of NSC (NSC 88-2215-E-009-031, unpublished) (1999).
2. L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Dev. 14, 61 (1970).
3. L. L. Chang and L. Esaki, in *Molecular Beam Epitaxy*, edited by B. R. Pamplin (Pergamon, Oxford, 1980), p. 3.
4. P. H. Petroff, A. C. Gossard, R. A. Logan, and W. Wiegmann, Appl. Phys. Lett. 41, 635 (1982).
5. T. P. Smith, III, J. A. Brun, J. M. Hong, C. M.

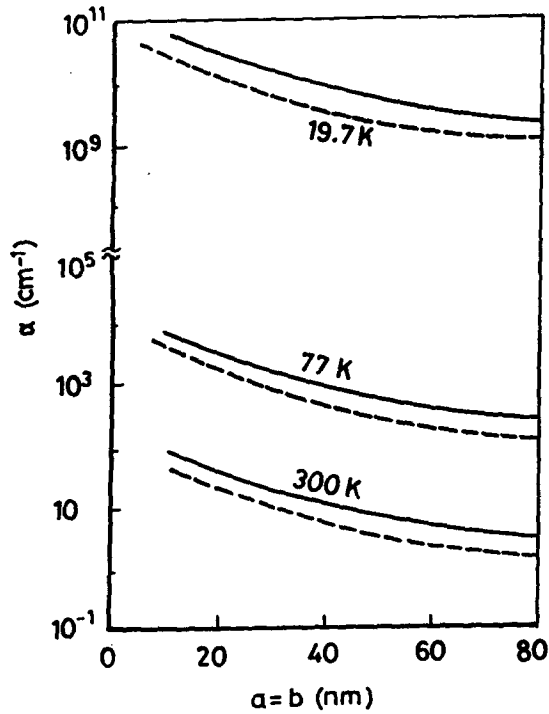
Knoedler, H. Arnot, and L. Esaki, Phys. Rev. Lett. **61**, 585 (1988).

6. H. Gotoh, H. Ando, and H. Kanbe, Appl. Phys. Lett. **68**, 2132 (1996).

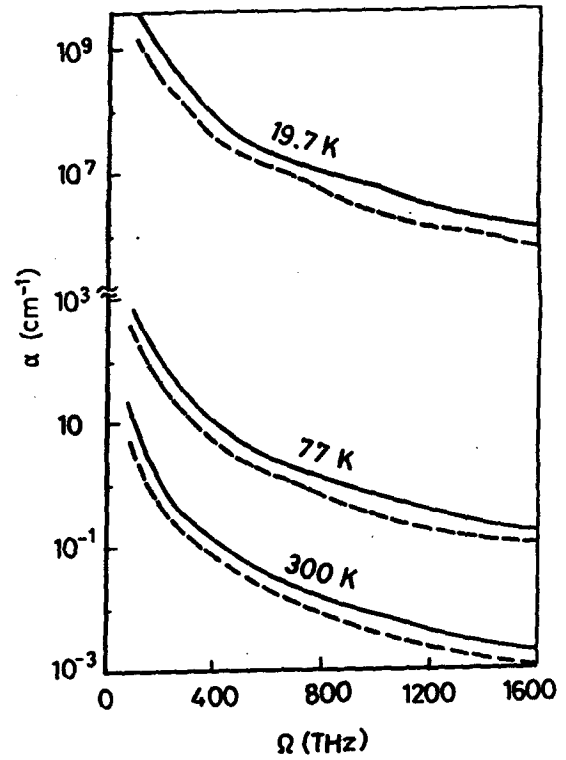
7. H. Gotoh and H. Ando, J. Appl. Phys. **82**, 1667 (1997).

8. C. C. Wu and C. J. Lin, J. Appl. Phys. **79**, 781 (1996).

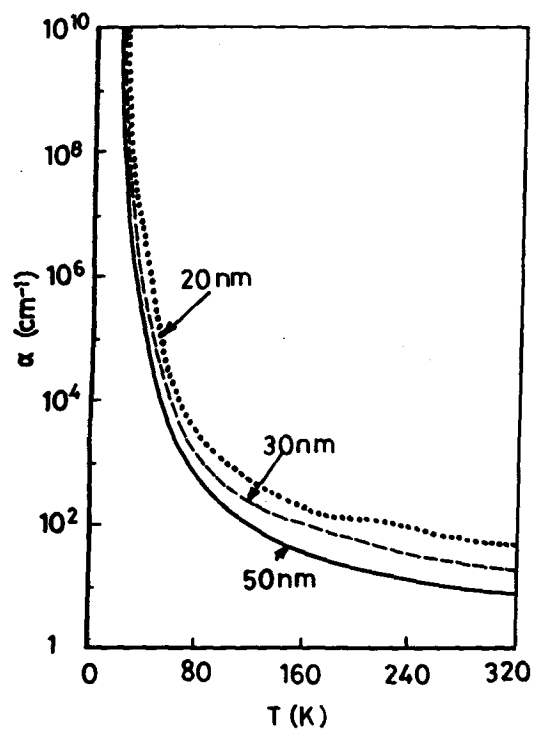
六、圖表



圖一、N型砷化鎵內自由載子吸引係數與半導體橫截面尺度之關係， $\Omega = 53.4$ THz(或 $5.6 \mu\text{m}$ CO_2 雷射之波長)。實線： $c = 10$ nm；虛線： $c = 20$ nm。



圖二、N型砷化鎵內自由載子吸收係數與光子頻率之關係，當 $a = b = 20$ nm。實線： $c = 10$ nm；虛線： $c = 20$ nm。



圖三、N型砷化鎵內自由載子吸收係數與溫度之關係， $\Omega = 53.4$ THz(或 $5.6 \mu\text{m}$ CO_2 雷射之波長)， $c = 10 \text{ nm}$ ， $a = b = 20, 30, 50 \text{ nm}$ 。