

# 行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

## 中紅外線第二型/碎能隙量子井雷射之研究(I)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC91-2215-E-009-058-

執行期間：91 年 08 月 01 日至 92 年 07 月 31 日

執行單位：國立交通大學電子工程學系

計畫主持人：顏順通

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 92 年 10 月 22 日

# 行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

## 第二型碎能隙量子系統之電子結構與自旋相關傳輸之研究

計畫編號：NSC91-2215-E009-058

執行期限：91 年 8 月 1 日至 92 年 7 月 31 日

主持人：顏順通

計畫參與人員：楊呈尉、卓秋儀、黃士哲、王德賢、鄭璧如、簡立欣、鐘佩鋼

### 一、 中文摘要

本研究利用  $8 \times 8$  的  $k \cdot p$  Hamiltonian 及 scattering matrix 方法，在考慮應力效應下，計算碎能隙量子井的能態結構和對應各量子化能態的波函數機率密度分布。發現電子能態和輕電洞能態有強烈的混成效應，且藉由改變量子井的寬度和應力大小之後，發現碎能隙量子井有機會由半導體特性轉變為劣金屬特性。同時本研究成功設計出發光波長在中紅外線波段之量子井結構。當改變材料使其受到一相反應力效應，但維持系統為碎能隙結構時，發現在受擴張應力下無法像傳統量子井結構中輕電洞能態成為第一個量子化價帶能階。並且在計算動量矩陣元素後得知，此系統對電子躍遷速率沒有明顯改進。但當變化系統為 W 形對稱結構後，發現此系統能有效改進電子躍遷速率，尤其是由電子能態至重電洞能態時。

對於碎能隙共振穿透元件，本研究觀察不同方向入射時穿透頻譜的變化情形，並研究在不同入射電子自旋能態情形下穿透此系統後至各自旋能態的穿透率譜圖及相對比例，發現在一自旋相混的入射電子群，穿透此系統後在某些能量下兩自旋能態穿透率比例不同。此特性可以應用在自旋濾波器上。而當入射電子群為單一自旋時，發現在非對稱及非正向入射情況下穿透電子有部分會到另一自旋能態，並且在某些能量下其穿透機率較原來自旋穿透機率高，此現象可以有助於自旋正反器的應用。

**關鍵詞：**broken gap、W-shaped、spintronics

### Abstract

In this research, we have performed a theoretical investigation of the electronic structures, and optical and spin-dependent transport properties of broken-gap quantum wells. The calculations are based on the  $8 \times 8$   $k \cdot p$  Hamiltonian and the scattering matrix method, with strain effect taken into account. We found that the electron states and light hole states can be strongly mixing with each other even at zone center while the heavy hole states are decoupled from them. By varying the thicknesses and the stress of the layers, we also found that a phase transition of the system can occur from the semiconducting phase to the semimetallic phase. The active layers for semiconductor lasers emitting in mid IR range were designed using the broken-gap quantum wells. For flexibility in the design and efficient optical transition between

electron and light hole states, we use the ternary compounds that make the epitaxial layers tensile-strained. However, it is difficult to pull up the the first light hole band above the first valence state by means of the tensile strain for broken gap structures, unlike the case in type I quantum wells. By comparing the momentum matrix elements of the structures with different stress, we found that the strain effect cannot give any significant improvement in the transition efficiency. Fortunately, a significant improvement in transition rate can be achieved in structures consisting of W-shaped quantum wells. A structure of ultra-thin layers (superlattice) has also proposed and the calculated results showed that it can give momentum matrix elements much larger than those of the W-shaped structure.

The broken-gap system is a good candidate for spintronics because of the strong spin-orbit interaction. We therefore paid some attention to the spin-dependent transport in the system. The transmission spectra through the broken-gap structures are calculated with the incident electron polarized in various directions and impinging at various angles. It was found that the spin orientation of obliquely incident electrons can be rotated arbitrarily in properly designed asymmetric structures. Our tunneling structure can therefore serve as spin filters and spin flip-flops.

## 二、 目的

Type-II 量子井由於特殊的能帶排列，引起很多特殊的物理現象。這些現象除了可以克服一些以往材料上固有的缺點外，也會有一些創新的應用。本研究主要針對 type-II 碎能隙量子井的能帶結構來觀察在中紅外線光源上的可行性，和量子傳輸經碎能隙穿隧元件後特性的研究。紅外線為容易被大氣中各種氣體分子所吸收之波段，其中只有波長在 3 到 5 $\mu\text{m}$  和 8 到 12 $\mu\text{m}$  可穿過大氣不被吸收，為大氣層之窗口。對應此大氣窗口的波段為紅外線波段中的中紅外線範圍。中紅外線在生物、軍事、化學等方面有相當大的應用，可用於 IR 手術、紅外線雷達、紅外線偵測以及化學製程監控，並可做大氣污染程度之檢測。

## 三、 研究報告內容

### 3-1 理論架構

#### 3-1-1. 塊材結構

考慮 spin-orbit interaction 情況下，Schrodinger 方程式為

$$H\Psi(\mathbf{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_b} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{\eta}{4m_b^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \mathbf{p}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{r})$$

其中  $\boldsymbol{\sigma}$  為 Pauli spin matrix。利用  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  近似並由 L~~and~~owdin 微擾理論選擇基底函數(Bloch basis)：

$$S \uparrow, X \uparrow, Y \uparrow, Z \uparrow, S \downarrow, X \downarrow, Y \downarrow, Z \downarrow,$$

可以得到對 zinc blende 結構的  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Hamiltonian 為

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_4 & 0 \\ 0 & \hat{H}_4 \end{pmatrix} + \hat{H}_{so} + \hat{H}_\varepsilon$$

其中  $\hat{H}_4$  為和  $k$  相關之 4x4 block Hamiltonian，僅考慮由  $\hat{H}_0$  所產生之微擾項， $\hat{H}_{so}$  是由於 spin-orbit 作用所產生的無微擾(unperturbed)項，而  $\hat{H}_\varepsilon$  則為 strain 項。

### 3-1-2. 多層結構

在計算多層結構時，首先必須了解異質界面間 band edge 能量的 offset，此處採用估計方法：

$$\Delta E_v = (E_{v,av}^A + \frac{\Delta^A}{3}) - (E_{v,av}^B + \frac{\Delta^B}{3})$$

式中 A、B 代表不同材料，如此可計算出多層材料的 band edge 隨位置變化情形。

當系統為多層結構時，電子的波函數可以表示成

$$\Psi = \sum_j^A F_j u_j$$

其中  $u_j$  為與前面相同的 basis 函數， $F_j$  為 envelope 函數。為求得此函數必須解八個 couple 的有效質量方程式：

$$\sum_{j=1}^8 \hat{H}_{ij} F_j = E F_i, \quad i = 1, 2, \dots, 8$$

式中  $E$  為電子能量，此處考慮長晶方向為 [001]，並定義為  $z$  軸，選擇  $x$  軸沿著 [100]， $y$  軸沿著 [010] 方向。因此 Hamiltonian 中  $k_z$  需表示為  $-i\partial/\partial z$ ，接著可以求得波函數在介面需滿足的邊界條件，計算方法為對式 (2-4) 沿著  $z$  方向做一積分，積分範圍為材料介面附近一趨近於零的間距，結果得 envelope 函數在介面  $\mathbf{F}$  和  $\hat{H}_B \mathbf{F}$  須連續，其中

$$\mathbf{F} = (F_1 F_2 F_3 F_4 F_5 F_6 F_7 F_8)^T \quad (2-1),$$

$$\hat{H}_B = \begin{pmatrix} \hat{B}_4 & 0 \\ 0 & \hat{B}_4 \end{pmatrix} \quad (2-2),$$

而 4x4 block  $\hat{B}_4$  表示如下

$$\hat{B}_4 = \begin{pmatrix} A_c \partial/\partial z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M\partial/\partial z & 0 & iN_- k_x \\ 0 & 0 & M\partial/\partial z & iN_- k_y \\ P & iN_+ k_x & iN_+ k_y & L\partial/\partial z \end{pmatrix} \quad (2-3),$$

電子能量  $E$  的 envelope 函數在第  $n$  層可以表示為

$$\mathbf{F} = \exp[ik_x x + ik_y y] \sum_{j=1}^8 \{ a_j^{(n)} \exp[ik_{z,j}^{(n)}(z - z_{n1})] \mathbf{e}_{+j}^{(n)} + b_j^{(n)} \exp[ik_{z,j}^{(n)}(z - z_{n2})] \mathbf{e}_{-j}^{(n)} \} \quad (2-4)$$

式中  $k_{z,j}^{(n)}$  ( $j=1, \dots, 8$ ) 為  $n$  層塊材  $z$  方向的複數波前 (complex wave vector)，取其虛部大於零和純實數大於零的部分來表示穿透方向行進的狀態，並對應穿透係數  $a_j^{(n)}$ ，而  $-k_{z,j}^{(n)}$  為反射狀態，對應反射係數  $b_j^{(n)}$ 。 $z_{n1}$  和  $z_{n2}$  為第  $n$  層左右界面的座標，向量  $\mathbf{e}_{+j}^{(n)}$  和  $\mathbf{e}_{-j}^{(n)}$  為塊材的 eigen-vectors 分別對應 eigenstates  $k_{z,j}^{(n)}$  和  $-k_{z,j}^{(n)}$ 。

其中，在求得各層穿透和反射係數  $a_j^{(n)}$ 、 $b_j^{(n)}$  時，採用的是 scattering matrix 方法配合邊界條件來求得，而不像一般利用 transfer matrix 方法來計算。原因在於當某一層厚度相當大時，若採用 transfer matrix 會造成數值上的不穩定，可能獲得錯誤的計算結果。而利用 scattering matrix 方法數值上可較穩定。

Scattering matrix 的運算方式和過程描述如下：藉由之前兩邊界的連續條件可求得在相鄰材料連接兩係數的 transfer 矩陣，關係為

$$(2-5)$$

$$\begin{aligned} \text{其中 } \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(n)} \\ \mathbf{b}^{(n)} \end{pmatrix} &= M^{(n+1)} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(n+1)} \\ \mathbf{b}^{(n+1)} \end{pmatrix} \\ M^{(n+1)} &= \begin{pmatrix} D^{(n)-1} & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \overline{M}^{(n+1)} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & D^{(n+1)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2-6)$$

此處  $I$  為  $4 \times 4$  的單位矩陣， $D^{(n)}$  則為  $4 \times 4$  的對角矩陣，矩陣元素描述如下：

$$D_{ij}^{(n)} = \delta_{ij} \exp[ik_{z,j}^{(n)}(y_n - y_{n-1})] \quad (2-7a)$$

並且

$$\overline{M}^{(n+1)} = \begin{pmatrix} \mathbf{e}_+^{(n)} & \mathbf{e}_-^{(n)} \\ \mathbf{f}_+^{(n)} & \mathbf{f}_-^{(n)} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_+^{(n+1)} & \mathbf{e}_-^{(n+1)} \\ \mathbf{f}_+^{(n+1)} & \mathbf{f}_-^{(n+1)} \end{pmatrix} \quad (2-7b)$$

等式中  $\mathbf{f}_{\pm j}^{(n)} = \hat{H}_B^{(n)} \mathbf{e}_{\pm j}^{(n)}$ ，此時  $\hat{H}_B^{(n)}$  中將  $\partial/\partial z$  置換為  $\pm k_{z,j}^{(n)}$ 。由式(2-6)可獲得以下關係式

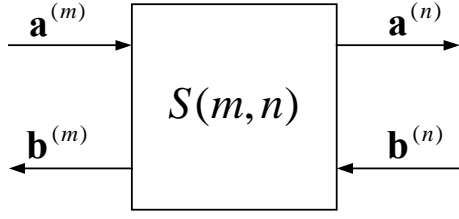
$$M_{11}^{(n+1)-1} = \overline{M}_{11}^{(n+1)-1} D^{(n)} \quad (2-8a)$$

$$M_{12}^{(n+1)} = D^{(n)-1} \overline{M}_{12}^{(n+1)} D^{(n+1)} \quad (2-8b)$$

$$M_{21}^{(n+1)} = \overline{M}_{21}^{(n+1)} \quad (2-8c)$$

$$M_{22}^{(n+1)} = \overline{M}_{22}^{(n+1)} D^{(n+1)} \quad (2-8d)$$

運用 scattering matrix 演算方法，可藉由示意圖表示：



將經過系統的 incoming 和 outgoing 波係數用一 scattering 矩陣做連結

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(n)} \\ \mathbf{b}^{(m)} \end{pmatrix} = S(m, n) \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(m)} \\ \mathbf{b}^{(n)} \end{pmatrix} \quad (2-9) ,$$

式中係數  $\mathbf{a}^{(n)}$ 、 $\mathbf{b}^{(m)}$  為 outgoing 波而  $\mathbf{a}^{(m)}$ 、 $\mathbf{b}^{(n)}$  為 incoming 波係數。  
Scattering 矩陣元素  $S_{i,j}(m, n)$  可由下列式子求得

$$S_{11}(m, n+1) = [I - M_{11}^{(n+1)-1} S_{12}(m, n) M_{21}^{(n+1)}]^{-1} M_{11}^{(n+1)-1} S_{11}(m, n)$$

(2-10a) ,

$$S_{12}(m, n+1) = [I - M_{11}^{(n+1)-1} S_{12}(m, n) M_{21}^{(n+1)}]^{-1} M_{11}^{(n+1)-1} [S_{12}(m, n) M_{22}^{(n+1)} - M_{12}^{(n+1)}]$$

$$= [I - M_{11}^{(n+1)-1} S_{12}(m, n) M_{21}^{(n+1)}]^{-1} [M_{11}^{(n+1)-1} S_{12}(m, n) M_{22}^{(n+1)} - \overline{M}_{11}^{(n+1)-1} \overline{M}_{12}^{(n+1)} D^{(n+1)}]$$

(2-10b) ,

$$S_{21}(m, n+1) = S_{22}(m, n) M_{21}^{(n+1)} S_{11}(m, n+1) + S_{21}(m, n)$$

(2-10c) ,

$$S_{22}(m, n+1) = S_{22}(m, n) M_{21}^{(n+1)} S_{12}(m, n+1) + S_{22}(m, n) M_{22}^{(n+1)}$$

(2-10d) ,

並且利用

$$S(m, m) = I \quad (2-10e)。$$

由式 (2-9) 可知各層係數

$$\alpha(\eta\omega) = \frac{\pi e^2}{n_r c \epsilon_0 m_0^2 \omega} \frac{1}{V} \sum_{\sigma, \eta} \sum_{n, m} \sum_{\mathbf{k}} \left| \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{nm}^{\eta\sigma} \right|^2 \delta(E_n^\eta - E_m^\sigma - \eta\omega) (f^{\sigma m})$$

$$\mathbf{a}^{(m)} = S_{11}(1, m) \mathbf{a}^{(1)} + S_{12}(1, m) \mathbf{b}^{(m)}$$

(2-11a) ,

$$\mathbf{b}^{(1)} = S_{21}(1, m) \mathbf{a}^{(1)} + S_{22}(1, m) \mathbf{b}^{(m)}$$

(2-11b) ,

$$\mathbf{a}^{(N)} = S_{11}(m, N) \mathbf{a}^{(m)} + S_{12}(m, N) \mathbf{b}^{(N)}$$

(2-11c) ,

$$\mathbf{b}^{(m)} = S_{21}(m, N) \mathbf{a}^{(m)} + S_{22}(m, N) \mathbf{b}^{(N)}$$

(2-11d) ,

1 和  $N$  代表的是結構最外層左側和右側的層數標號。

### 3-1-2-1 能帶結構 (Band structure)

當計算能帶結構時最外層為能障(barrier)，令最外層 incoming 波的係數  $\mathbf{a}^{(1)}$  和  $\mathbf{b}^{(N)}$  為零，來決定侷限在量子井中的能階。將(2-11a)代入(2-11d)後可得方程式：

$$[I - S_{12}(m, N)S_{12}(1, m)]\mathbf{b}^{(m)} = 0 \quad (2-12)。$$

藉由能量的改變來滿足上式，而此能量即為量子化之能階，並可求得對應之固有向量  $\mathbf{b}^{(m)}$ ，再經由之前關係式(2-11)即可得知  $\mathbf{a}^{(m)}$ 、 $\mathbf{b}^{(1)}$  和  $\mathbf{a}^{(N)}$ 。在數值計算上，加入一層虛擬層，即此層為任一材料但厚度為零，先以此層為  $m$  算出能階能量及  $\mathbf{b}^{(m)}$ ，再依序將所有層係數求出，如此在能帶能量的計算上可以得到完整的結果。求其他層係數時則由式(2-11)可延伸出，當其中一層  $n$  而  $n < m$  時

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(n)} \\ \mathbf{b}^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & -S_{12}(1, n) \\ -S_{21}(n, m) & I \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ S_{22}(n, m)\mathbf{b}^{(m)} \end{pmatrix} \quad (2-13a)，$$

而  $n > m$  時，第  $n$  層係數求法為

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(n)} \\ \mathbf{b}^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & -S_{12}(m, n) \\ -S_{21}(n, N) & I \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} S_{11}(m, n)\mathbf{a}^{(m)} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2-13b)。$$

### 3-1-2-2 動量矩陣元素 (Momentum matrix elements)

吸收係數由 Fermis' golden rule 在不考慮 scattering relaxation 因素下可表示為：

$$(2-14)，$$

其中標號  $n$  表示能量高能階， $m$  為低能量能階標號， $\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{nm}$  為 subband 自旋的標號， $f$  為 Fermi-Dirac 分佈。而(2-13)式中  $|\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{nm}|^2$  稱之為動量矩陣元素，描述如下：

$$\begin{aligned} |\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{nm}|^2 &= \left| \langle \Psi_n^\eta | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} | \Psi_m^\sigma \rangle \right|^2 \\ &= \left| \sum_{i,j} \langle F_j^{n\eta} u_j | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} | F_i^{m\sigma} u_i \rangle \right|^2 \\ &= \left| \sum_{i,j} \langle F_j^{n\eta} | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} | F_i^{m\sigma} \rangle \langle u_j | u_i \rangle + \sum_{i,j} \langle F_j^{n\eta} | F_i^{m\sigma} \rangle \langle u_j | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} | u_i \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (2-15)$$

式中  $\hat{\mathbf{e}}$  代表的為不同的極化方向。

### 3-1-2-3 電子傳輸

此時結構的最外層為 electrode，考慮電子自一端入射後，計算其穿透和反射率，令  $\mathbf{b}^{(N)}$  為零，只有一個入射端(射極 emitter)，經由 flux 的計算可求得穿透率(T)和反射率(R)。

## 3-2 結果與討論

### 3-2-1 能帶結構計算結果

#### 3-2-1-1. MWIR 主動層設計

對一碎能隙量子井主動層 interband 躍遷發光的示意圖如下：

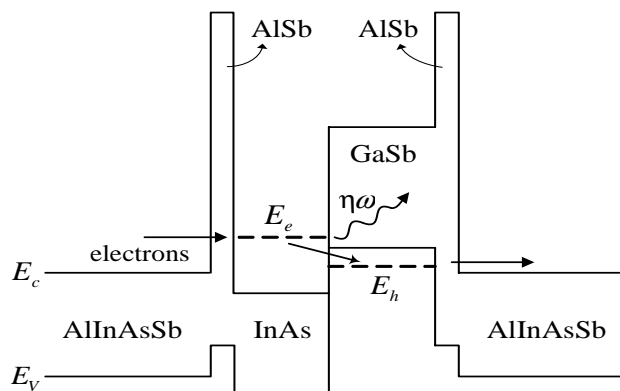


圖 1. 碎能隙量子井 interband 發光示意圖，圖為 band edge 能量隨位置的變化情形。

由於 band edge 特殊的排列方式，可使得量子化能階的電子和價帶能階能量差異較傳統 type-I III-V 族的量子井小，因此可以發出長波長數量級為  $\mu\text{m}$  的光。由示意圖可看出電子在藉由注入端(injector，由 AlInAsSb 組成)將電子灌入碎能隙量子井，再躍遷發光後由另一端的 AlInAsSb 將電子快速抽走，如此量子化能階  $E_e$  和  $E_h$  即形成分佈反駐(population inversion)的狀況以達成雷射發光之條件。

在此設計一碎能隙量子井 inter-band 發光波長在中紅外線波段。當量子井結構為 30Å-InAs/55Å-GaSb 基板是 InAs 時能隙能量所對應的波長為 4.187  $\mu\text{m}$ ，畫出能帶結構如圖：

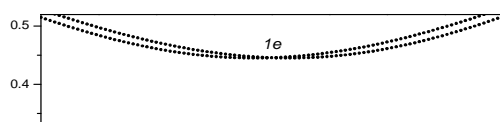




圖 2 . 量子井能帶結構，量子井為 30A-InAs/55A-GaSb，考慮基板為 InAs。

接著藉由動量矩陣元素的計算，來了解各能態間躍遷的速率，在此處計算動量矩陣時將其除以 InAs 塊材之動量矩陣元素( )作歸一化，並且由於電磁場的極化方向不同有 TE 模式和 TM 模式，其中 TE 模式下考慮的電場極化方向為  $k_{||}$  方向。首先計算  $1e-1hh$  之動量元素矩陣，由於系統為非對稱結構，因此各能態在  $k_{||}$  不為零會分裂開來，此處將各能態分裂開的能帶以下標 1 和 2 由上而下座標號以示區別，計算結果如下：

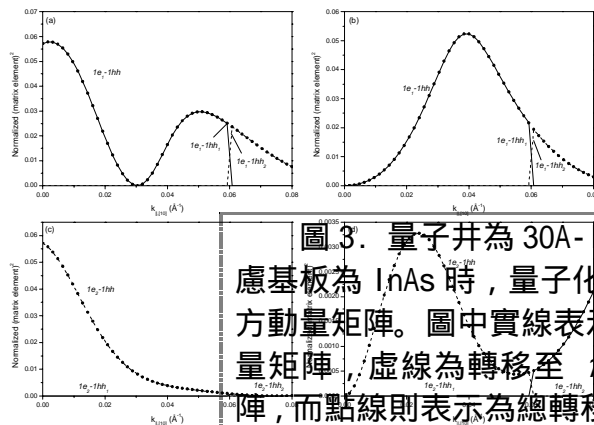


圖 3. 量子井為 30A-InAs/55A-GaSb，考慮基板為 InAs 時，量子化能態  $1e-1hh$  之平方動量矩陣。圖中實線表示至  $1hh_1$  之平方動量矩陣，虛線為轉移至  $1hh_2$  之平方動量矩陣，而點線則表示為總轉移至  $1hh$  (a) 為 TE 模式下  $1e_1-1hh$  平方動量矩陣隨  $k_{||,[10]}$  之變化情形，(b) 為 TM 模式下  $1e_1-1hh$  平方動量矩陣，(c) 為 TE 模式下  $1e_2-1hh$  平方動量矩陣，(d) 為 TM 模式下  $1e_2-1hh$  平方動量矩陣。

由圖 3 可以發現各能態間的動量矩陣元素變化都不相同，對同一電洞能態但在分裂開不同能帶後發現其動量矩陣元素有互補的現象，在  $k_{||}$  小於某個值(此處約為  $0.06 \text{ \AA}^{-1}$ )時，只會轉移至其中一個價帶能態，當大於此值後則變為轉移至另一能態(兩能態在 zone center 時為簡併，如  $1hh_1$  和  $1hh_2$ )。

因此，接下來將電子能態轉移至各電洞能態間的平方動量元素隨  $k_{||}$  變化做圖如下：(此時轉移至電洞能態的平方動量矩陣已將兩分裂能帶考慮進去)

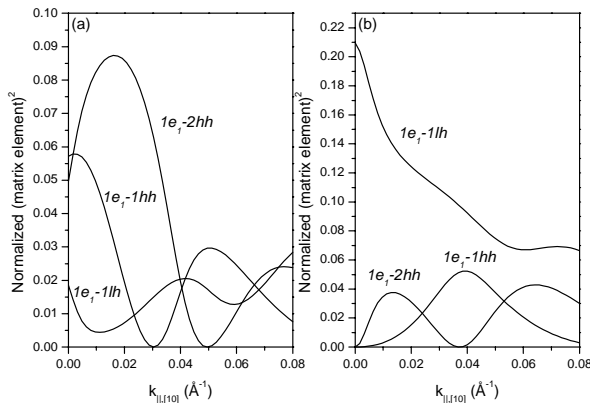


圖 4. 量子井為 30A-InAs/55A-GaSb，考慮基板為 InAs 時，量子化能態  $1e_i$  轉移至各電洞能態之平方動量矩陣隨  $k_{||,[10]}$  之變化情形。(a)為 TE 模式，(b)為 TM 模式。

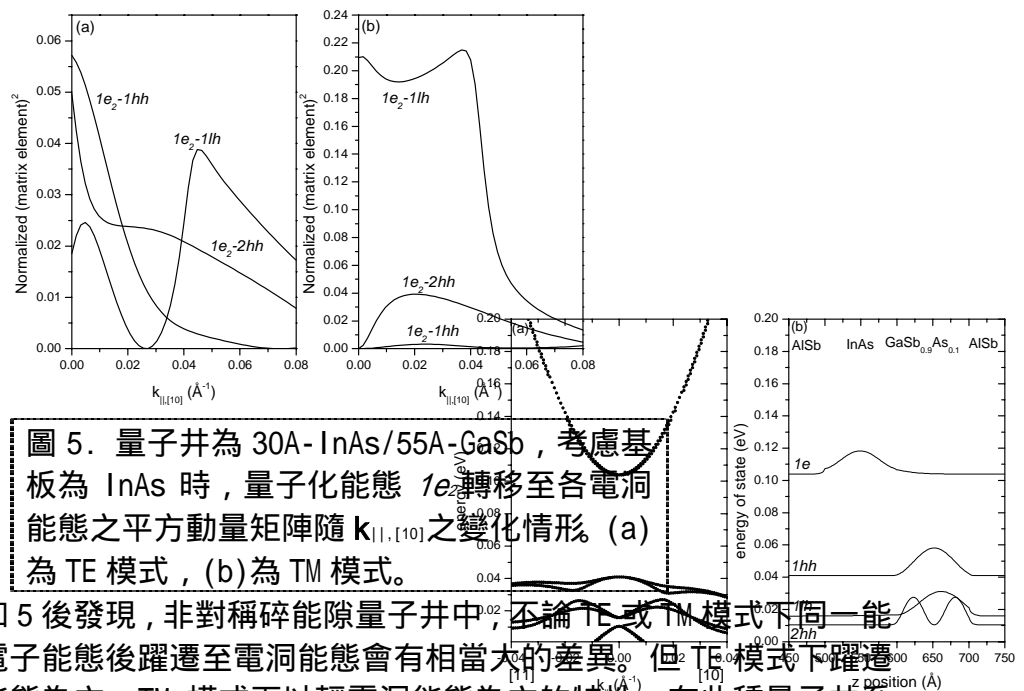


圖 5. 量子井為 30A-InAs/55A-GaSb，考慮基板為 InAs 時，量子化能態  $1e_2$  轉移至各電洞能態之平方動量矩陣隨  $k_{||,[10]}$  之變化情形。(a)為 TE 模式，(b)為 TM 模式。

觀察圖 4 和 5 後發現，非對稱碎能隙量子井中，不論 TE 或 TM 模式下同一能帶分裂成不同電子能態後躍遷至電洞能態會有相當大的差異，但 TE 模式下躍遷主要以重電洞能態為主，TM 模式下以輕電洞能態為主的特性，在此種量子井系統下依舊相同。

### 3-2-1-2. InAs/GaSbAs<sub>1-x</sub>系統

對之前討論的碎能隙系統，當電子躍遷發光時是利用 interband 方式放出光的能量範圍可以對應在波長範圍恰為  $\mu m$  的等級，屬於中紅外線的波段。但由之前的一些電子機率分布圖可以看出只有輕電洞能帶混成的效應較好，和電子能態的波函數重疊(overlap)大，在電子躍遷發光後可以有效且快速的將電子抽出來維持分佈反駐的條件。可是由於 GaSb 層受到的為壓縮應力，所以重電洞帶會位在輕電洞帶之上，如此會降低電子躍遷至輕電洞能態的速率，可能使發光效能不佳。因此有興趣改變量子井受到的應力情形，觀察應力變化後各能帶的變化情形

以及對躍遷速率的影響。此處考慮加入少部份 GaAs 來使 GaSb 層受一擴張應力，且依舊維持碎能隙結構，來研究輕電洞能態的變化情形。在此處三元混合物的各種參數依照下列的計算法：

對  $A_xB_{1-x}C$  能量參數方面利用[18]

$$E(A_xB_{1-x}C) = xE(AC) + (1-x)E(BC) + 3x(1-x)[-a_i(AC) + a_i(BC)]\frac{\Delta a}{a_0}$$

式中  $a_i$  為材料的 deformation potential 且

$$\Delta a = a_0(AC) - a_0(BC)$$

其他參數則用內插法求得

$$P(A_xB_{1-x}C) = xP(AC) + (1-x)P(BC)$$

考慮系統為 InAs 100 Å、GaSb<sub>0.9</sub>As<sub>0.1</sub> 100 和 200 Å，能障 AlSb 且 InAs 為基板時，可以得到能帶結構如下圖所示：

圖 6. 量子井為 100Å-InAs/100Å-GaSb<sub>0.9</sub>As<sub>0.1</sub>，考慮基板為 InAs，(a)為能帶結構圖，(b)為波函數機率密度分佈當  $k_{||}=0$  Å<sup>-1</sup> 時。

由圖 3(a)可以發現輕電洞能帶雖向上提升但卻沒有在  $1hh$  之上，因此在改變 GaSb<sub>0.9</sub>As<sub>0.1</sub> 層厚度，將其厚度變後，觀察輕電洞態是否有可能成為第一個價帶，結果如圖

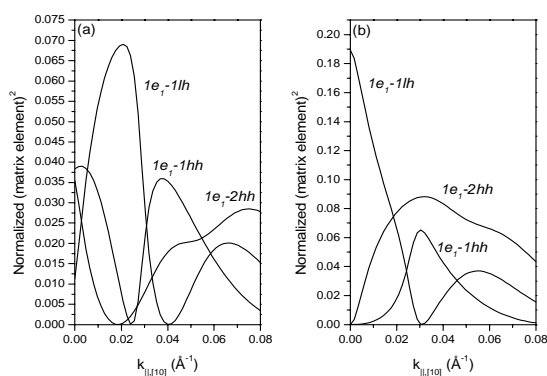


圖 7. 量子井為 100Å-InAs /200Å-GaSb<sub>0.9</sub>As<sub>0.1</sub>，考慮基板為 InAs，(a)為能帶結構，(b)為波函數機率密度分佈當  $k_{||}=0 \text{ Å}^{-1}$  時。

但由圖 7 可看出，加寬量子井厚度後也僅有向上些許提升而無法像 type-I 量子井結構一樣，受到一擴張應力即會使輕電洞能態位在重電洞能態上。原因有可能是在碎能隙結構電子能態和輕電洞能態的強烈交互作用，使得輕電洞能態受到影響而向下降。

接著針對中紅外線量子井作一設計，設計量子井結構為 40Å-InAs/60Å-GaSb<sub>0.9</sub>As<sub>0.1</sub> 基板是 InAs，此系統能隙能量所對應波長為 4.171。其能帶結構如下圖：

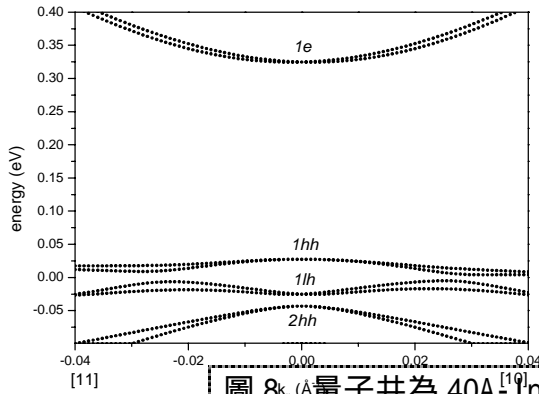


圖 8. 量子井為 40Å-InAs/60Å-GaSb<sub>0.9</sub>As<sub>0.1</sub>，考慮基板為 InAs 之能帶結構圖。

接著計算各能態間平方動量矩陣元素，研究在改變應力情況後對各能態躍遷速率的變化情形，計算結果如下：

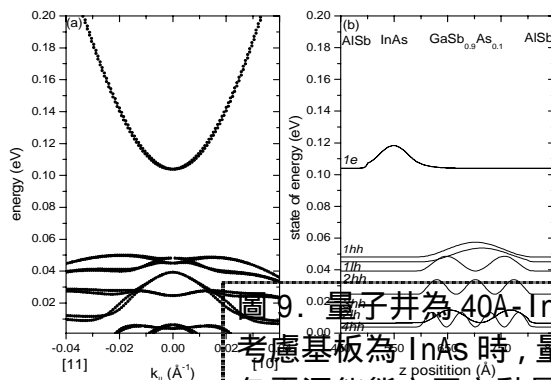


圖 9. 量子井為 40Å-InAs/60Å-GaSb<sub>0.9</sub>As<sub>0.1</sub>，考慮基板為 InAs 時，量子化能態  $1e$  轉移至各電洞能態之平方動量矩陣隨  $k_{||,[10]}$  之變化情形。(a)為 TE 模式，(b)為 TM 模式。

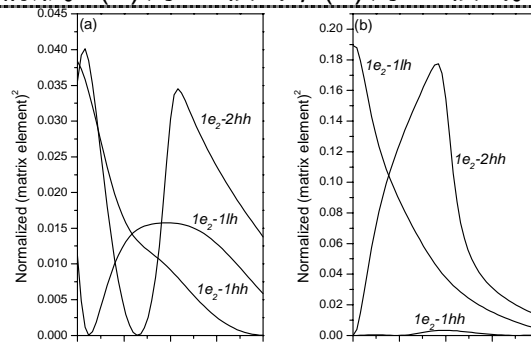


圖 10. 量子井為 40A-InAs/60A-GaSb<sub>0.9</sub>As<sub>0.1</sub>, 考慮基板為 InAs 時, 量子化能態  $1e_2$  轉移至各電洞能態之平方動量矩陣隨  $k_{||,[10]}$  之變化情形。(a) 為 TE 模式, (b) 為 TM 模式。

將圖 9、10 和圖 4、5 比較後發現, 在碎能隙量子井中當改變所受到應力的型態時, 躍遷至電洞能態的速率並不會有相當大的提升。僅有在  $k_{||}$  不為零時, 當為 TE 模式下躍遷至輕電洞的速率有稍微的提高, 而 TM 模式下則稍微提高了重電洞的躍遷速率。無法對輕電洞在 TM 模式下有明顯變化的原因有可能就是在於碎能隙量子井的量子化能態在受擴張應力後不能有效的成為第一個價帶能帶。

### 3-2-1-3. W 形碎能隙量子井

由於在碎能隙量子井中電子能態波函數和重電洞能態的重合度小, 因此可將結構設計成 W 型[19]來增加波函數在量子井中的重合度。考慮 W 形量子井為 100 A-InAs /100 A-GaSb /100 A-InAs, 基板是 InAs, 可以得到能帶結構如圖:

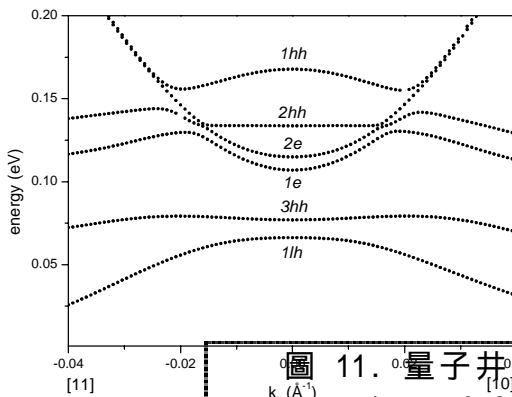


圖 11. 量子井能帶結構, 量子井為 100A-InAs/100A-GaSb/100A-InAs, 考慮基板為 InAs。

可以看出  $k_{||}$  不為零時能帶為一雙簡併狀態。原因是此時的 W 形量子井為一對稱結構有反轉對稱, 因此系統的對稱性變高, 使得簡併的情況提高。此可由之前討論能帶結構簡併情形得知。並且可以知道各能態波函數機率密度在此結構中的分布情形。在  $k_{||}=0$  時, 分佈如下圖:

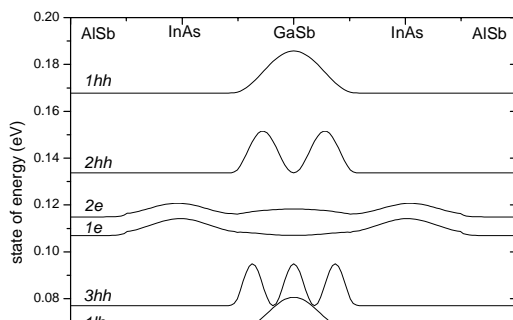


圖 12. 波函數機率密度分布當  $k_{||}=0 \text{ \AA}^{-1}$  時，在量子井 100A-InAs/100A-GaSb/100A-InAs，考慮基板是 InAs。

由上圖觀察後可以發現，此種結構和之前結構比較後確實會增加電子態和電洞態的波函數重合度。

接著針對 W 形碎能隙量子井作一設計，使其發光範圍在中紅外線波段。設計系統為 30A-InAs/55A-GaSb/30A-InAs，基板是 InAs，此時系統能隙能量對應的波長為 4.284  $\mu\text{m}$ ，其能帶結構如下圖：

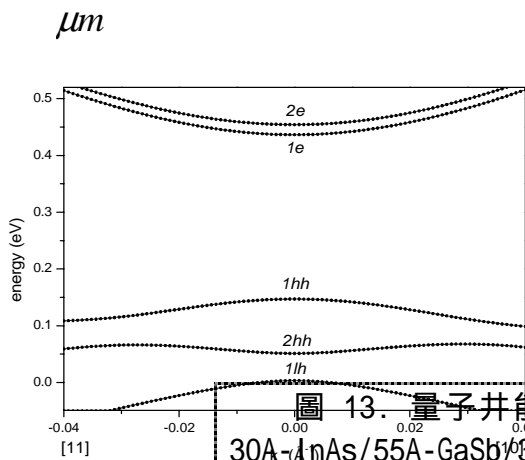


圖 13. 量子井能帶結構，量子井為 30A-InAs/55A-GaSb/30A-InAs，考慮基板為 InAs。

接著計算其平方動量矩陣元素，研究此 W 形結構在增加波函數的重合度後是否有效的提升躍遷的速率，計算各能態的平方動量矩陣結果如下：

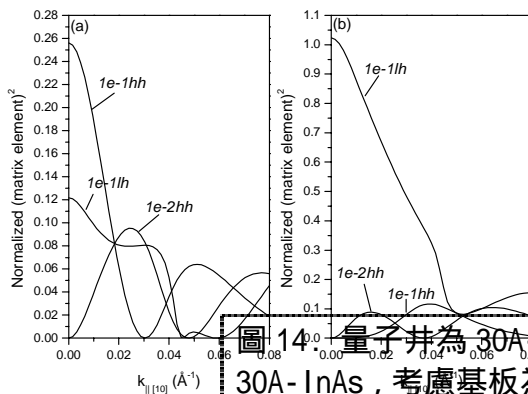
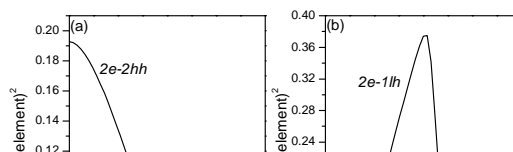


圖 14. 量子井為 30A-InAs/55A-GaSb/30A-InAs，考慮基板為 InAs 時，量子化能態 1e 轉移至各電洞能態之平方動量矩陣隨  $k_{||,[10]}$  之變化情形。(a)為 TE 模式，(b)



為 TM 模式。

圖 25. 量子井為 30Å-InAs/55Å-GaSb/30Å-InAs, 考慮基板為 InAs 時, 量子化能態  $2e$  轉移至各電洞能態之平方動量矩陣隨  $k_{||,[10]}$  之變化情形。(a) 為 TE 模式, (b) 為 TM 模式。

由計算的結果發現, 在結構為對稱的系統下由於能態兩兩簡併不會分裂開來, 其動量元素矩陣  $1e_1$  至電洞能態隨  $k_{||}$  的變化情形和  $1e_2$  完全一樣, 和之前非對稱碎能隙系統有很大的不同, 因此圖 14 和 15 的平方動量矩陣元素為兩簡併的電子能態數值之總合(即為 2 倍)。並且和之前計算動量矩陣元素結果比較後發現, 在利用 W 形結構後可以有效的增加電子躍遷的速率, 改進的幅度約為 2 倍, 對 TE 模式下電子躍遷至  $1hh$  速率有相當大的改進。

#### 3-2-1-4. 超晶格結構碎能隙量子井

在上一節中我們考慮 W 形結構來增加波函數的重合度, 藉而提高躍遷的速率。為了能更有效的提高波函數的重合度, 在此考慮一對稱超晶格的碎能隙量子井結構, 設計超晶格各層為分子厚度(monolayer), 對 InAs 和 GaSb 而言皆為 3 Å, 總共為 50 層, 將系統的 band edge 能量變化情形以及  $k_{||}$  為零時量子化能階能量經計算後, 結果如下圖:

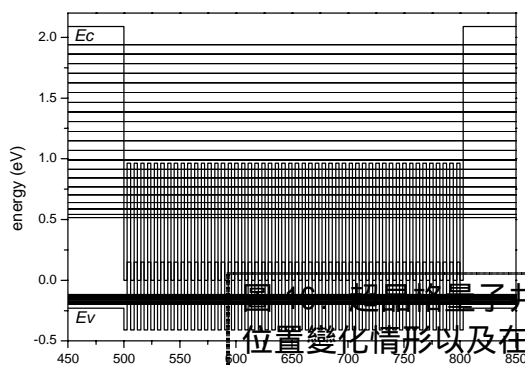


圖 16. 超晶格量子井之 band edge 能量隨位置變化情形以及在  $k_{||}$  為零下量子井各能態之能量, 超晶格為 3Å-InAs/3Å-GaSb, 考慮共 50 層超晶格和基板為 InAs。

在設計超晶格量子井主動層發光波段在中紅外區間時，發現當各層為分子厚度時，在改變不同層數後無法達到發光波長在 3  $\mu\text{m}$  以上。之前 50 層超晶格的量子井對應的發光波長為 1.965  $\mu\text{m}$ 。雖然無法有效的達到長波長光源，但是仍有興趣在利用超晶格增加波函數間重合度時，是否有效的提高躍遷的速率。針對所設計的超晶格量子井結構，計算第一個電子能帶和第一個價帶的動量矩陣元素隨  $k_{||}$  變化，結果如下：

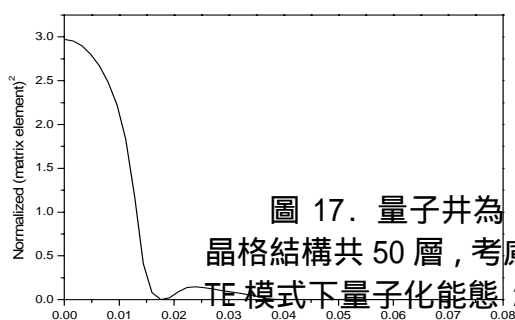


圖 17. 量子井為 3A-InAs/3A-GaSb 超晶格結構共 50 層，考慮基板為 InAs 時，在 TE 模式下量子化能態  $1e-1hh$  之平方動量矩陣隨  $k_{||}$  之變化情形。

藉由和之前計算各結構的動量元素矩陣比較後發現，在利用超晶格量子井結構時可以大幅的提升電子躍遷的速率。

### 3-3 量子傳輸

#### 3-3-1. 電子混合自旋能態入射

由於 type II 碎能隙結構能帶排列特殊，使得系統有強烈的 spin-orbit 作用。因此有興趣在當此系統作為 interband 共振穿隧(resonant tunneling)元件時，電子穿透或反射後自旋的變化情形，接下來考慮的系統為 InAs/10 Å-AlSb/100 Å-InAs/100 Å-GaSb/10 Å-AlSb/InAs，其中最外兩層 InAs 為極版(electrode)，在 InAs 為基板條件下，研究電子入射後的變化情形。下圖為此研究共振穿隧元件能帶對材料做圖：

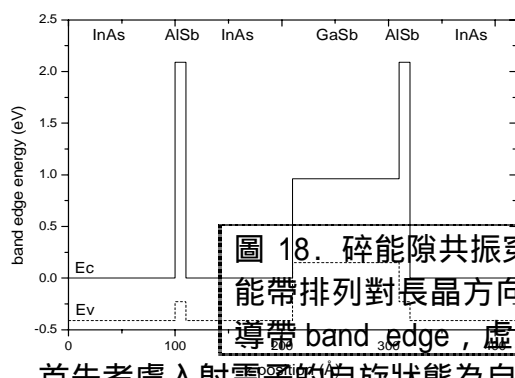


圖 18. 碎能隙共振穿隧元件不考慮應力下能帶排列對長晶方向做圖，圖中實線為傳導帶 band edge，虛線線價帶 band edge。

首先考慮入射電子的自旋狀態為自旋向上(spine)和自旋向下(spindown)



混合且成分比重相同時的情況，在此處表示為 $[1;1]$ (由 Pauli matrix 可知此情形自旋在  $x$  方向，因為此時為  $\sigma_x$  的固有向量)。接著藉由上一章理論的計算可以畫出在  $k_{||}$  為零情況下，電子經系統後穿透率對能量的變化情形：

圖 19. 在  $k_{||}=0A^{-1}$  時，入射電子在不同能量下經過碎能隙穿隧元件的穿透率變化情形。

圖中  $y$  為對數刻度，可以發現有兩個 peak，表示電子在這兩能量下會有共振穿隧的情形。更進一步可以對應到之前所計算的量子井能帶結構圖，發現這兩 peak 恰好對應在電子能態和輕電洞能態的能量。而重電洞能態在  $k_{||}$  為零則沒有任何 peak 產生，原因在於重電洞能態此時並不會和其他能態有所作用。其波函數相當集中在 GaSb 區域，使得入射電子和其波函數重合度小，不會造成共振穿隧。反之，電子和輕電洞的混成效應使波函數分布在整著量子井，因此當電子能量和其相同時就會有穿隧現象。此外由此穿透率的做圖可以發現，type-II 碎能隙和傳統的 type-I 共振穿碎元件有不同之處。

傳統共振穿碎元件在當電子能量變高時穿透率會逐漸上升，而此處的碎能隙穿隧元件在入射電子能量變高時經過 peak 後穿透率會向下降，這是傳統元件難以達到的。原因在於此高能量恰位在 GaSb 的能隙中，所以無法穿透，這樣的特性會使得元件有較高的 peak-to-valley 比例，有助於在高速元件上的應用。

接著考慮  $k_{||}=0.02A^{-1}$  時，入射電子穿透率的變化情形，如圖所示：

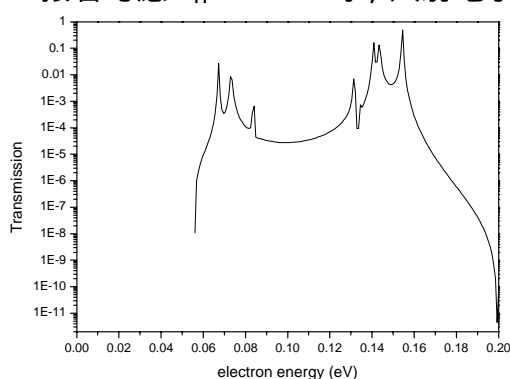


圖 20. 在  $k_{||}=0.02A^{-1}$  時，入射電子在不同能量下經過碎能隙穿隧元件的穿透率變化情形。

由上圖可以看出穿透的 peak 數變多了，和之前結果對應後，發現所有的 peak 皆對應到各個能態，此時重電洞能態亦會有穿透機會，但可以發現有些 peak 的穿透率無法相當高，而這些 peak 即對應到某些重電洞能態，由於靠近電子或輕

電洞能態的重電洞能態和其有較大的相互作用，所以波函數在 InAs 層機率較遠離的重電洞能態高。故對應於重電洞能態的穿透 peak 會因和其他能態的交互作用強弱而使穿透率有所不同。而此種現象亦反應了如何由實驗求得一系統的能帶結構，可以將藉由一不同角度的入射電流(不同  $k_{||}$ )量測其穿透頻譜，所有的 peak 即對應量子井中量子化的能階，如此可得到不同入射角的能階位置，此即為量子井之能帶結構。

經由之前的討論，可以再一次驗證在 3-2-3 節中能帶結構的計算。實際上由波函數分布圖 7b 不易直接由分佈情形判斷重電洞和輕電洞能態，需要利用觀察固有向量  $e$  的比重才可斷定。但現在亦可以利用穿透譜圖來做判斷，將系統 InAs/10A-AlSb/100A-InAs/

200A-GaSb<sub>0.9</sub>As<sub>0.1</sub>/10A-AlSb/InAs 的入射電子能量在不同  $k_{||}$  下穿透率隨能量變化做圖如下：

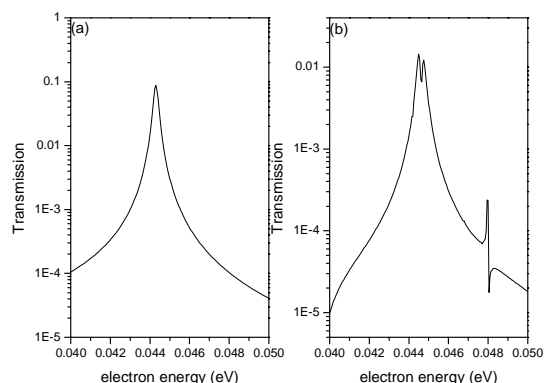


圖 21. 在不同  $k_{||}$  時，入射電子在不同能量下經過碎能隙穿隧元件 (100A-InAs/200A-GaSb<sub>0.9</sub>As<sub>0.1</sub>) 的穿透率變化情形，(a)  $k_{||}=0A^{-1}$ ，(b)  $k_{||}=0.002A^{-1}$ 。

藉由上圖(a)和(b)的比較後可以看出第一個價帶能態為重電洞能態，因為其在  $k_{||}$  不為零時才有機會穿透，而輕電洞能態則皆有 peak 產生。

當改變入射電子的自旋狀態相位差且將能量範圍放小且固定時，觀察穿透電子到自旋向上和自旋向下能態的穿透率差異，此處入射電子自旋依舊為混合狀態除了考慮之前[1;1](自旋在  $x$  方向外)，並考慮[1;-1]有  $180^\circ$  相位差，自旋在  $-x$  方向(之固有向量)，以及[1; $i$ ]差  $90^\circ$  相位，自旋在  $y$  方向(之固有向量)，和[1;- $i$ ]差  $-90^\circ$  相位，自旋在  $-y$  方向(之固有向量)，共四種情形，並將其穿透率能譜計算如下圖：

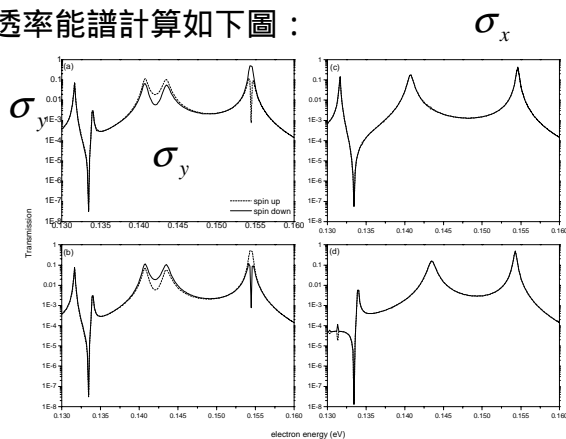
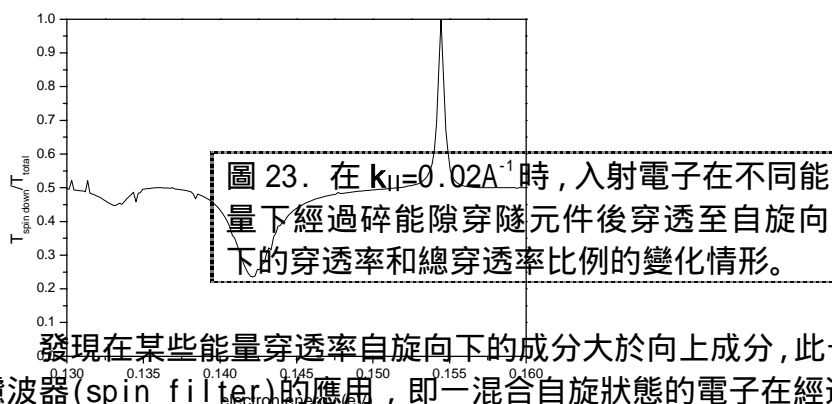


圖 22. 在  $k_{||}=0.02\text{\AA}^{-1}$  時，入射電子在不同能量及不同入射自旋方向下經過碎能隙穿隧元件後穿透至不同自旋態穿透率的變化情形，圖中虛線代表穿透電子為自旋向上態的穿透率，實線則為穿透電子為自旋向下態的穿透率。(a)為入射電子在  $x$  方向，(b)為入射電子在  $-x$  方向，(c)為入射電子在  $y$  方向，(d)為入射電子在  $-y$  方向。

由圖中看出，當入射電子自旋方向在  $x$  和  $-x$  方向時，其穿透電子到自旋向上和自旋向下的穿透率能譜恰好對調。而當入射電子 spin 方向在  $y$  方向時，發現穿透後到兩不同自旋量的機率幾乎一樣。而且穿透的 peak 和圖 22(a)比只有對應到一半的 peak。若入射電子為自旋在  $-y$  方向時則恰好對應的為圖 22(a)另一半 peak。換句話說，入射電子自旋為  $y$  和  $-y$  方向時，所有 peak 的位置才為自旋  $x$  或  $-x$  方向之 peak。同時由圖 22(a)可以觀察出在對應電子態 peak 附近穿透至自旋向上和自旋向下的機率相差很大。若將圖 22(a)的穿透至自旋向下的機率對總穿透機率做圖，如下圖：



發現在某些能量穿透率自旋向下的成分大於向上成分，此一現象有助於自旋濾波器 (spin filter) 的應用，即一混合自旋狀態的電子在經過此一碎能隙穿隧元件系統後可以變為僅有單一自旋方向的電子。

### 3-3-2 電子單一自旋態入射

接著，考慮當入射電子只有單一自旋狀態時(假設只有自旋向上[1;0])，穿透此系統後至各自旋狀態的情形。單一自旋入射的電子可以經由在 emitter 端摻雜一些磁性雜質(如 Mn)，如此一來電流在流經此處時會因為磁性作用自旋都在同一方向。若  $k_{||}$  為零時，電子穿透率對能量變化如圖：

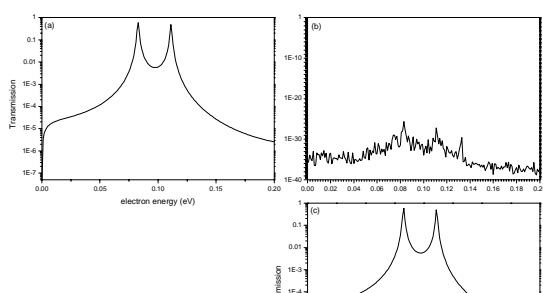


圖 24. 在  $k_{||}=0\text{\AA}^{-1}$  時，單一自旋入射電子(自旋向上)在不同能量下經過碎能隙穿隧元件後穿透至不同自旋態穿透率的變化情形，(a)圖為穿透至自旋向上態，(b) 圖為穿透至自旋向下態，(c)圖為總穿透率。

由圖發現圖 24(b)的穿透率相當小趨近於零，為電腦在運算時產生的誤差，因此視為零。故單一自旋電子在  $k_{||}$  為零情形下入射，穿透後並不會有另一方向自旋的狀態產生。但若  $k_{||}$  不為零時情況又會有所不同。當  $k_{||}=0.02\text{\AA}^{-1}$  時，電子穿透率對能量變化如圖：

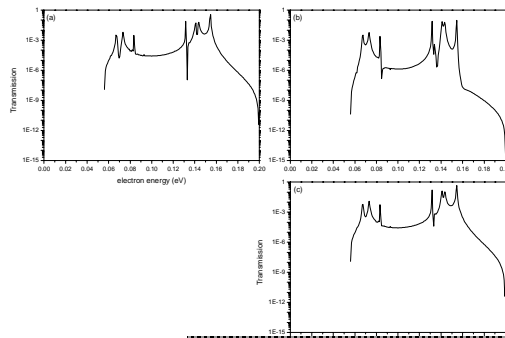


圖 25 在  $k_{||}=0.02\text{\AA}^{-1}$  時，單一自旋入射電子(自旋向上)在不同能量下經過碎能隙穿隧元件後穿透至不同自旋態穿透率的變化情形，(a)圖為穿透至自旋向上態，(b)圖為穿透至自旋向下態，(c)圖為總穿透率。

可以看出電子在此情況下一自旋向上的電子穿透後，除了自旋向上的穿透電子外亦會有自旋向下的機率，表示一單一自旋電子經過此碎能隙穿隧元件系統後有可能變為一混合自旋之電子，此時再將穿透後自旋向下的機率對總穿透率做圖：

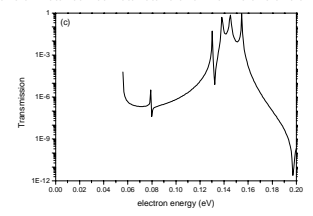
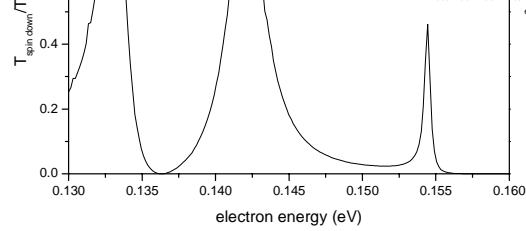


圖 26. 在  $k_{||}=0.02\text{\AA}^{-1}$  時，自旋向上入射電子在不同能量下經過碎能隙穿隧元件後穿透至自旋向下的穿透率和總穿透率比例的變化情形。

可以發現，在某些能量下穿透至自旋向下的電子比向上高。如此一來有機會使一自旋向上的電子在入射經碎能隙穿隧元件後，穿透電子變為自旋向下狀態電子，因此可以成為自旋的正反器 (spin flip-flop)，一個讓電子在穿透後自旋改變方向的元件。

之前所討論的碎能隙穿隧元件為一非對稱結構 (asymmetric)，沒有反轉對稱。若改變系統為一對稱結構 (InAs/10A-AlSb/100A-InAs/100A-GaSb/100A-InAs/10A-AlSb/InAs) 結構中的量子井和之前所計算的 W 形結構 (圖 11) 相同。觀察當一自旋向上電子入射此對稱碎能隙穿隧元件後穿透電子狀態情況變化，當  $k_{||}$  為零時，穿透頻譜如圖：

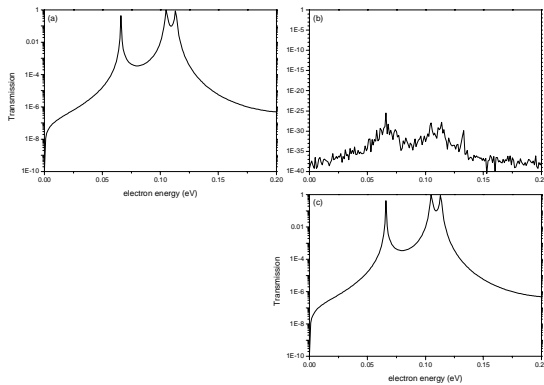


圖 27. 在  $k_{||}=0\text{\AA}^{-1}$  時，單一自旋入射電子 (自旋向上) 在不同能量下經過對稱結構碎能隙穿隧元件後穿透至不同自旋態穿透率的變化情形，(a) 圖為穿透至自旋向上態，(b) 圖為穿透至自旋向下態，(c) 圖為總穿透率。

可以看出和非對稱結構相同，並沒有穿透至自旋向下的機會。而當  $k_{||}=0.02\text{\AA}^{-1}$  時，觀察穿透頻譜如圖：

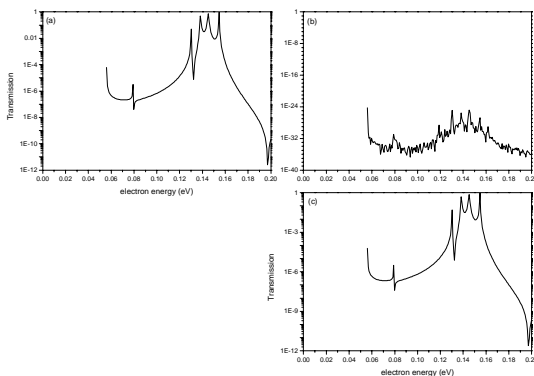


圖 28. 在  $k_{||}=0.02\text{\AA}^{-1}$  時，單一自旋入射電子(自旋向上)在不同能量下經過對稱結構碎能隙穿隧元件後穿透至不同自旋態穿透率的變化情形，(a) 圖為穿透至自旋向上態，(b) 圖為穿透至自旋向下態，(c) 圖為總穿透率。

發現和之前非對稱結構有很大的不同，在此種對稱性的結構下，即使  $k_{||}$  不為零，自旋向上的入射電子無法有自旋向下的穿透電子。因此可以針對以上的討論做一結論：一單一自旋的電子入射 type-II 碎能隙結構，在穿透後若要有另一自旋方向的電子時需同時滿足兩個條件(1)此結構需為非對稱結構(2)入射電子  $k_{||}$  需不為零(即非正向入射)。

#### 四、 文獻

1. R. Q. Yang and S. S. Pie, J. Appl. Phys **79**, 8197 (1996).
2. I. Vurgaftman et al., IEEE Photonics Technology Lett. **9**, 170 (1997).
3. B. H. Yang et al., Appl. Phys. Lett. **72**, 2220 (1998).
4. P. Christol, IEE Proc.-Optoelectron **147**, 181, (2000).
5. W. W. Bewley et al., Appl. Phys. Lett. **17**, 256 (2000).
6. K. Fobelets et al., Semicond. Sci. Technol. **8**, 1815(1993).
7. J. Genoe et al., Phys. Rev. B **52**, 14025 (1995).
8. Y. X. Liu, D. Z.-Y. Ting and T. C. McGill, Phys. Rev. B **54**, 5675 (1996).
9. Zakharova, Solid State Commun. **113**, 599 (2000).
10. *Physics of Optoelectronic Devices*, edited by S. L. Chuang, (Wiley-Interscience, New York, 1995).
11. Zakharova, S. T. Yen, K. A. Chao, Phys. Rev. B **66**, 085312 (2002).
12. Bradley A. Foreman, Phys. Rev. B **56**, R12 748 (1997).
13. Chris G. Van de Walle, Phys. Rev. B **39**, 1871 (1989).
14. D. L. Smith, C. Hailhiot, Phys. Rev. B **33**, 8345 (1986).
15. Zakharova, S. T. Yen, K. A. Chao, Phys. Rev. B **64**, 235332 (2001).
16. E. Halvorsen, Y. Galperin and K. A. Chao, Phys. Rev. B **61**, 16743 (2000).
17. M. P. C. M. Krijn, Semicond. Sci. Technol. **6**, 27 (1991).
18. M. Cardona, N. E. Christensen, Phys. Rev. B **37**, 1011 (1988)
19. J. R. Meyer et al., Appl. Phys. Lett. **67**, 757 (1995)