

國防大學中正理工學院

赴美短期進修心得報告書

第一原理分析量子井紅外線偵測器電子 能態可能性評估

報告人：中校助理教授 唐立權

中華民國 95 年 01 月

目錄

壹、短期進修依據.....	3
貳、短期進修學校科系.....	3
參、短期進修過程.....	4
一、研究動機.....	5
二、研究內容.....	5
三、研究成果.....	6
四、未來發展.....	10
肆、短期進修心得與建議.....	12

壹、短期進修依據

職係奉國防大學中正理工學院民國94年05月24日集鋼字第0940001821 號令轉國防部民94年05月06日選返字第0940006300號令，赴美國伊利諾大學香檳校區物理系(Department of Physics, University of Illinois at Urbana-Champaign)進修。進修期限自民國94年06月25日至94年12月19日止。

貳、短期進修學校科系

伊利諾大學香檳校區是全美傳統的頂尖理工科技學府。該校物理系在『凝態物理』方面分項排名是全美第一，研究人員素質、設備及環境均為理想的短期進修之首選單位，可供學習的主題非常豐富。根據該校物理系之來函，應用物理系中校助理教授唐立權受安排參與張亞中教授之研究工作。(請參閱報告書後『參考文獻』)

張亞中教授1980年自加州理工學院獲得博士學位，同年前往伊利諾大學香檳校區物理系擔任教職，由於張亞中教授學術、專業表現及對民生工業和國防工業貢獻，1991年成為該系正教授。

張亞中教授開發了新穎的理論工具，成功的計算出複雜線狀結構

激態耦合次帶間躍遷產生之光訊號並分析，應用領域及其他學術專業包含了：

1. 自組合量子點之理論研究 (Theoretical Studies of Self-assembled Quantum Dots)；
2. 應變誘發橫向有序成長半導體量子線之光學性質 (Optical Properties of Semiconductor Quantum Wires grown by the SILO Process)；
3. 磁性多層膜中的置換耦合 (Exchange Coupling in Magnetic Multilayers)；
4. 表面及異質結構之電子和光學性質 (Electronic and Optical Properties of Surfaces and Heterostructures) 詳細內容可參閱張亞中教授網頁內容。(www.physics.uiuc.edu/People/Faculty/profiles/ChangYC/)

參、短期進修過程

研究主題為：『第一原理分析量子井紅外線偵測器電子態可能性評估』 (Optical Properties of Quantum-Well Infrared Photodetectors (QWIPs) based on Self-Assembled Nano-Structure

Materials)，預計期程自九十四年六月廿五日到九十四年十二月十九日。

一、研究動機

量子井紅外線光偵測器(QWIPs)有別於經典之汞鎘碲半導體寬頻紅外線偵測器，重要性在於：

1. 量子井紅外線光偵測器是窄頻或特定紅外波長吸收的光偵測器
2. 紅外波長吸收的的機制來自次能帶間(inter-subband)之光致躍遷
3. 製成平面高密度紅外影像擷取陣列的候選元件

這些偵測能力以及國防科技特色引起美國軍方在相關應用的重視。。

二、研究內容

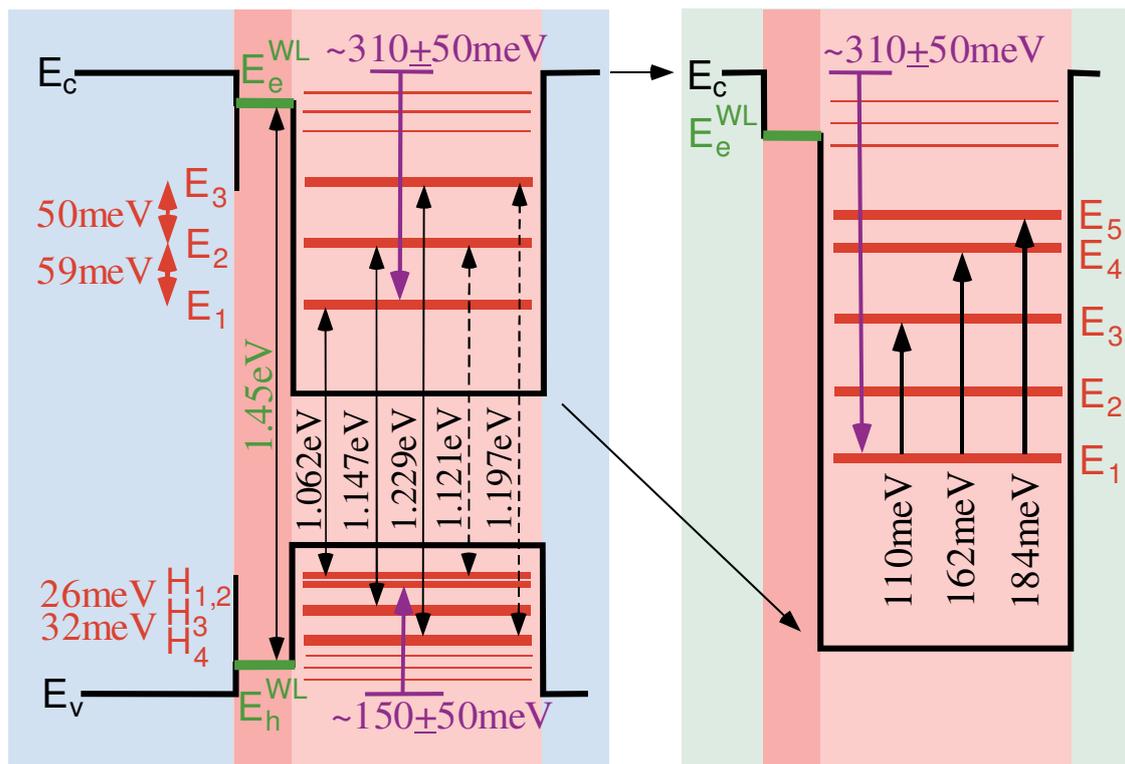
研整個研究主題是圍繞在量子井紅外線光偵測器(QWIPs)之上，其研發特色是：

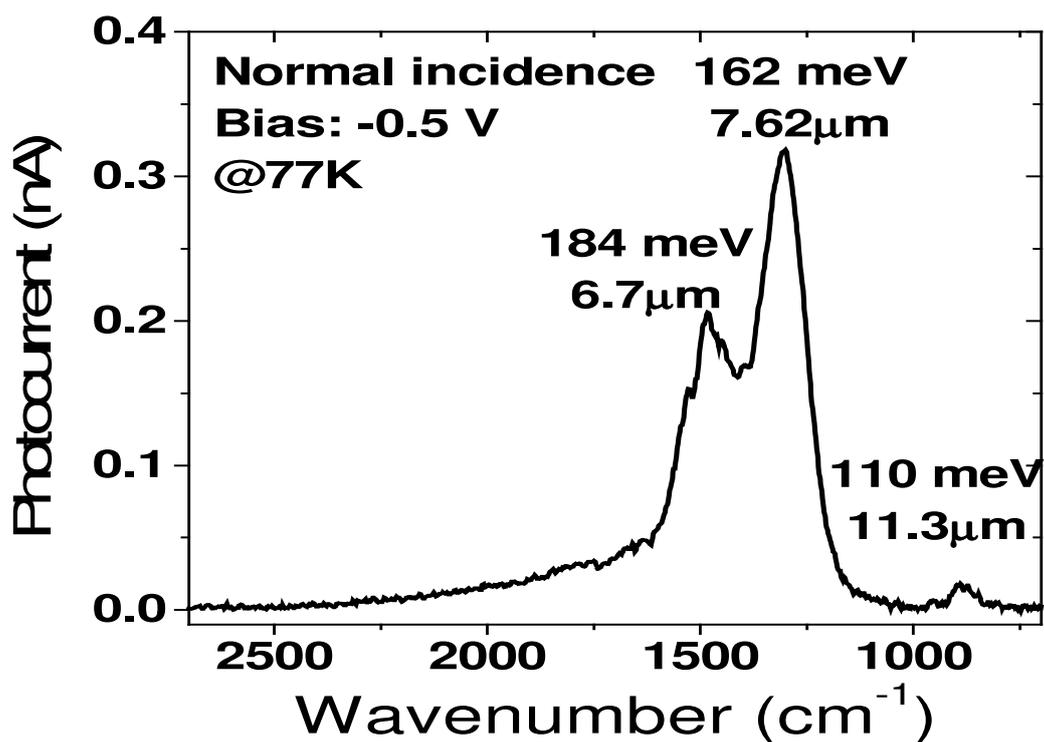
1. 使用傳統三五族半導體材料，調變其異質結構可獲得特定紅外波長吸收，目前研究內容包括：閃鋅礦結構之砷化鎳銻、鈣鈦礦結構之三元鹵化物等。
2. 自組合奈米線或奈米點結構，應變誘發橫向有序成長(SILO, Strain-Induced Lateral Ordering)

3. 結合有效鍵結軌域模式以及共價力場模式進行理論分析其能態結構，包含激子與其能態結構效應，以探討量子吸收效率之評估。

三、研究成果

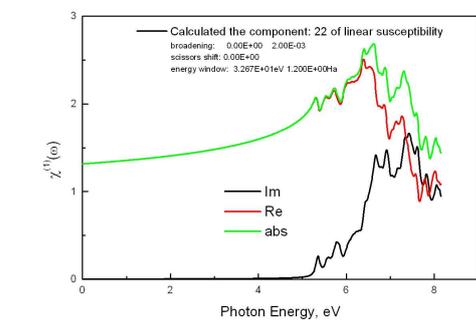
學習並應用張亞中教授的計算：應變誘發橫向有序成長半導體量子線之光學性質 (Optical Properties of Semiconductor Quantum Wires grown by the SILO Process)，圖一之中光電流的中紅外線吸收能譜顯示其應用價值。



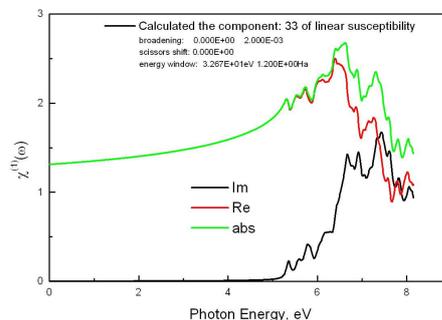


圖一、(a)帶間能帶計算結果示意；(b)與A. Madhkar (USC)光電流量測結果比較頗相近。

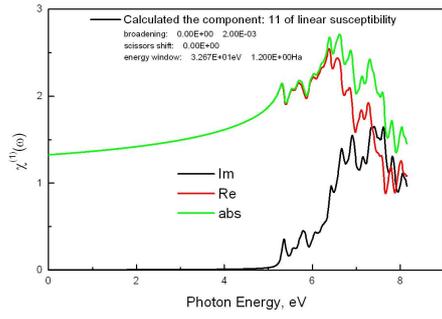
利用Abinit第一原理計算求得三元鹵化物的線性光學性質之介質函數與二階非線性光學性質之頻率函數，結果如圖二、三所示。



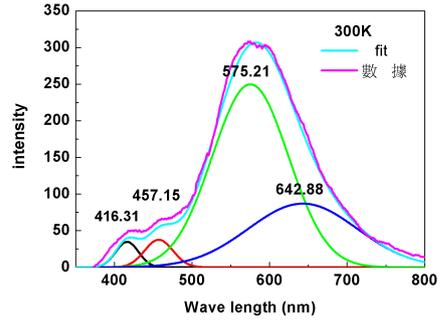
(a)



(b)



(c)

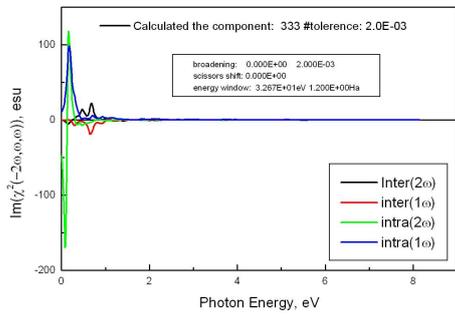


(d)

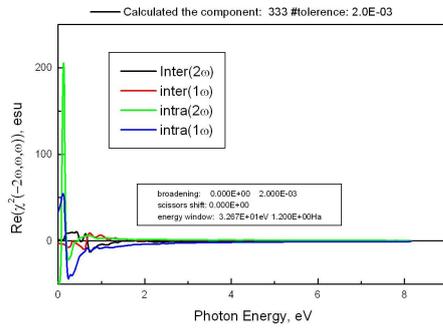
圖二、三元鹵化物的線性光學性質之介質函數(a)22 (b)33 (c)11

(d)交大光電所量測光致發光結果。

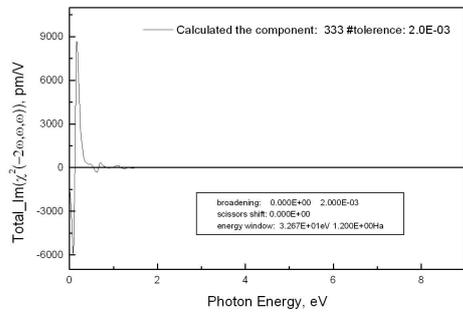
比較圖二、(d)交大光電所量測光致發光結果，此計算結果大致相符，在未進行能隙修正的情形下，此結果尚可接受。



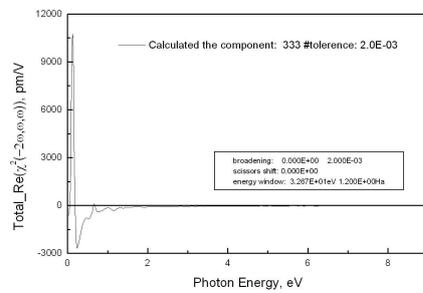
(a)



(b)



(c)

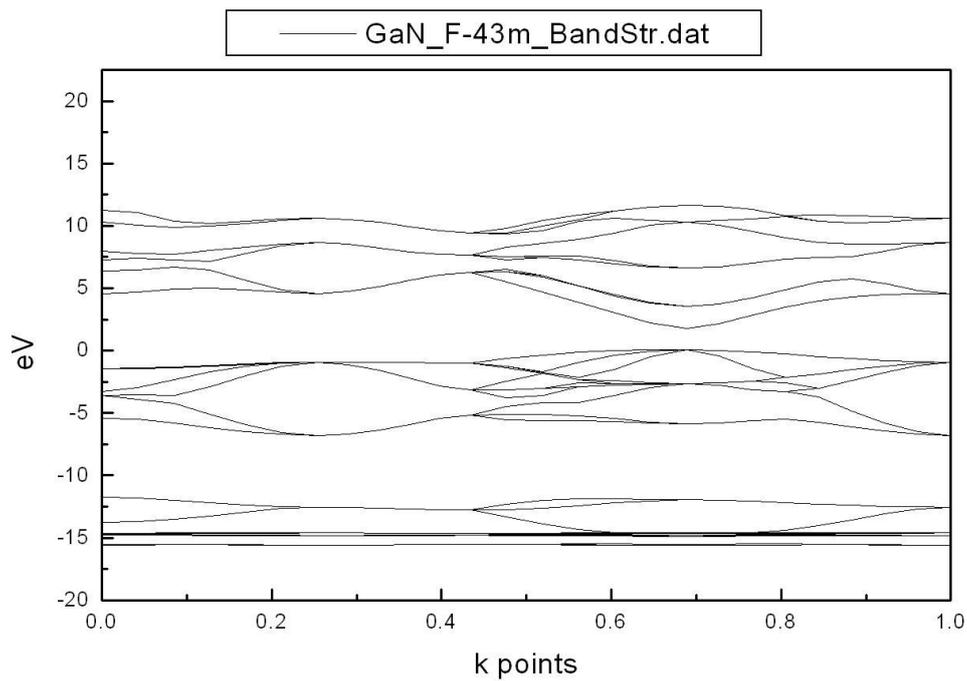


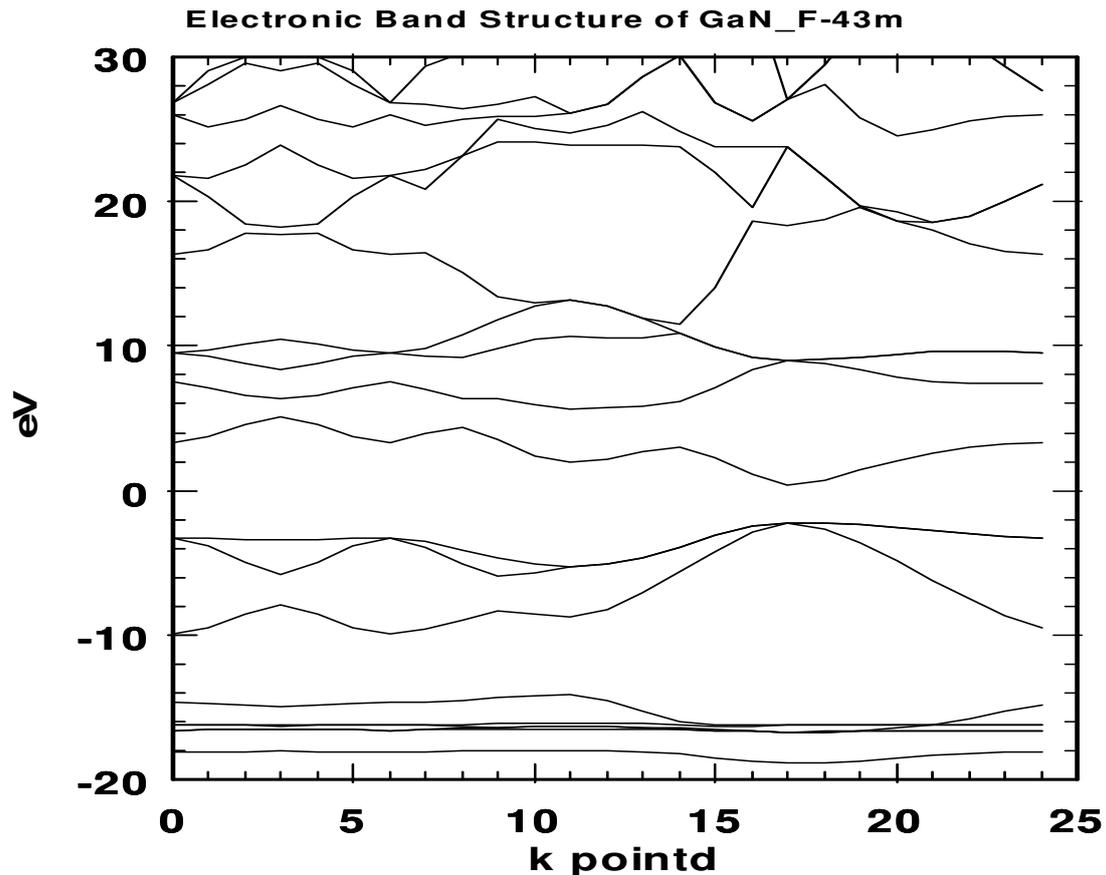
(d)

圖三、三元鹵化物的非線性光學性質之能譜函數(a)333虛部 (b)333實部 (c) 全域虛部 (d) 全域實部。

這些計算結果為首次提出，也頗有意義，提供了菱方晶系的鈣鈦礦結構之三元鹵化物晶體在中遠紅外線範圍的頻率轉換應用頗值得期待。再經過驗證計算之後，將撰寫投稿學術期刊。

此外，也應用張亞中教授的第一原理計算程式計算氮化鎵的電子能態結構，並與作者使用CASTEP第一原理計算程式計算結果比較，如圖四所示。





圖四、第一原理計算程式計算氮化鎵的電子能態結構示意。

這些計算結果頗有意義，提供了閃鋅礦結構之氮化鎵晶體在量子尺度的光電應用頗值得期待。再經過驗證計算並與實驗數據比對之後，將撰寫投稿學術期刊。

第一原理計算在計算完美晶體電子能態結構時，比計算量子尺度材料的電子能態結構較為簡單，待計算機硬體配備提昇與平行化處理之後，此分析形式非常可行且有明顯貢獻。

四、 未來發展

由於研究主題涵蓋光電工程以及理論物理背景知識，應有助於下

列課程開授：

1. 基礎學能學科教學：普通物理、電磁學、量子力學、固態物理等。

a. 光電相關學科教學：奈米光電、半導體光學、非線性光學、光電材料等

b. 軍事應用學科教學：紅外線工程、紅外線光偵測器、軍用光電系統導論等。對象可以是院內相關科系或受訓班次。

返院後預期後續量子井紅外線光偵測器(QWIPs)之研發可朝向：

1. 使用二六族半導體材料，調變其異質結構可獲得特定紅外波長吸收可行性評估。

2. 在院內實驗室建立結合有效鍵結軌域模式以及共價力場模式進行理論分析量子井紅外線光偵測器光學性質的研究能量。

3. 可否利用第一原理計算結合緊束縛分子動力學(TBMD, Tight-Binding Molecular Dynamics)分析次能帶間(inter - subband)之光致躍遷機制。

3. 院內實驗室建構平行化的科學運算環境，提升研析效率與品質。

期待研發有意義之成果提供參考，引起國防科技管理階層在相關應用的重視。

返院後預期後續提供服務包含：

1. 提供友軍單位，如：軍備局聯勤四零二場、飛彈勤務處光電所等單位紅外線偵測能力諮詢；
2. 提供友軍單位，如：飛彈勤務處光電所等單位紅外線偵測器件採購規格建議；
3. 共提相關研究計畫；
4. 相關光電偵測能力研發方向建議；
5. 提供相關光電訓練班次。

以回饋國家以及國防大學中正理工學院的栽培。

肆、短期進修心得與建議

職非常感謝國家栽培及長官支持，始能獲得此次機會赴美進修。期間除精進個人學識及加強研究能力外，獲益最多乃是開拓個人視野，對於開明開放明理守法的制度、崇尚體能展現力爭上游的文化氣息及工作與休閒公私分明的生活方式、開朗活潑的學習態度之體驗尤其深刻。其中以美國人之守法守紀、實事求是的精神是最值得學習的。伊利諾大學香檳校區是全美傳統的頂尖理工科技學府，於學術各領域上均有其特色，目前韓國與中國大陸前往進修或像職擔任訪問學者的人數十分驚人，在當地影響力亦日益顯著，的確值得我們參考警

惕，如國防經費許可，建議未來持續選派適員前往進修並觀摩學習。

論文著述：

- 1 **Li Chuan Tang**, J Y Huang, C S Chang, M H Lee and L Q Liu, “New infrared nonlinear optical crystal CsGeBr₃: synthesis, structure and powder second-harmonic generation properties ”, J. Phys.: Condens. Matter **17** (1 November 2005) 7275–7286(**SCI,EI**)
- 2 C.C. Chang, H.C. Chang, **L.C. Tang**, W.K. Young, J.C. Wang, K.L. Huang, “Hybrid-integrated prism array optoelectronic targeting system ”, Optics & Laser Technology 37 (2005) 591–596(**SCI,EI**)
- 3 **Li Chuan Tang**, M.H. Lee, C.H. Yang, Jung Y. Huang, and Chen-Shiung Chang “Cation substitution effects on structural, electronic and optical properties of nonlinear optical AgGa(S_xSe_{1-x})₂ crystals”, J. Phys.: Condens. Matter **15** (10 September 2003) 6043-6055(**SCI,EI**)
- 4 Jung Y. Huang, **L.-C. Tang**, and M.H.Lee “*Ab initio* study of the structural and optical properties of orthorhombic ternary nitride crystals”, J. Phys. Condense Matter , 13 (2001) 10417-10431. (**SCI, EI**)
- 5 **Li Chuan Tang**, Chi Ching Chang, Tzu Chiang Chen , Hon Fai Yau, Pei Xian Ye (2001) “Fast response self-pumped phase conjugator based on a +c-face incident configuration in a pentagon-shaped BaTiO₃ crystal”, Optical and Quantum Electronics,34: 1241-1249, 2002. (代表作，**SCI impact factor:0.706 @2001**)
- 6 Chi Ching Chang, **Li Chuan Tang**, Tzu Chiang Chen, and Guang Wei Hu, (2001), “A Modified Numerical Simulation of the Exposure Schedule for Photorefractive Holographic Data Storage,” Optical Memory & Neural Network, vol.10, No.2, pp.73-80.(**EI**)
- 7 Tzu Chiang CHEN, Chi Ching Chang, **Li Chuan Tang**, and Fon Fai Yau

- (2000), “*High-resolution double self-pumped phase conjugations with +c-face incident configuration in a BaTiO₃*,” Jpn. J. Appl. Phys. **39**, pp L1090-L1093 (**SCI,EI**).
- 8 Chi Ching Chang, Guang Wei Hu, **Li Chuan Tang**, Kendra L. Russell Yuh Ping Tong, Hon Fai Yau, and Chen Shiung Chang (2000), “*Holographic Triple Random Phase-Encoded Optical Data Encryption*,” Optical Memory & Neural Network, vol.9, No.4, pp.239-249 (**EI**).
 - 9 **Li Chuan Tang**, Chen-Shiung Chang, and Jung Y. Huang, “Electronic structure and optical properties of rhombohedral CsGeI₃ crystal”, J. Phys. Condense Matter, 12 (2000) 9129-9143. (**SCI,EI**)
 - 10 Chi Ching Chang, Tzu Chiang Chen, **Li Chuan Tang**, and Hon Fai Yau (1999), “*Elimination of dynamic instabilities in the +c-face incident photorefractive BaTiO₃ mutually pumped phase conjugator*,” Jpn. J. Appl. Phys. **38**, pp L567-L570 (**SCI,EI**).