

國立交通大學

電子物理學系

碩士論文

自組式量子點偏振螢光之理論研究

Theoretical studies of polarized photoluminescence

Spectrum of self-assembled quantum dots

研究生：尤文廷

指導教授：鄭舜仁 教授

中華民國九十九年三月

自組式量子點偏振螢光之理論研究

Theoretical studies of polarized photoluminescence

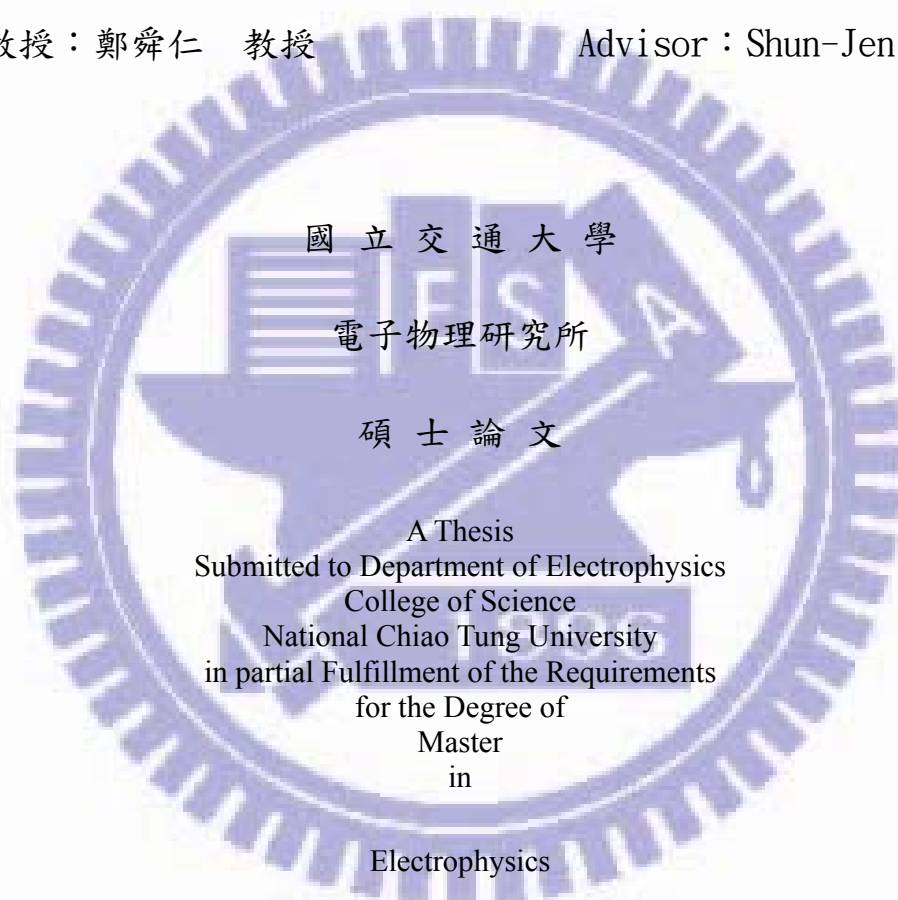
Spectrum of self-assembled quantum dots

研究生：尤文廷

Student : Wen-Ting You

指導教授：鄭舜仁 教授

Advisor : Shun-Jen Cheng



March 2010

HsinChu, Taiwan, Republic of China

中華民國九十九年三月

自組式量子點偏振螢光之理論研究

學生：尤文廷

指導教授：鄭舜仁 博士

國立交通大學電子物理研究所碩士班

摘要

本篇文章主要是探討激子(電子-電洞對)在自組式量子點中所釋放的旋光。文章中利用 $k.p$ 多能帶理論以及波包近似法理解激子中電子和電洞的性質，接著將於系統中引入重電洞、輕電洞耦合並使用費米黃金定律了解其對激子所釋放出旋光的影響。而關於重電洞、輕電洞的耦合包含兩大因素：(1)Luttinger-Kohn Hamiltonian 因為量子點得不對稱性(形狀、應力)而產生耦合 (2)激子間的交換能。結果發現其耦合效應的強弱會影響線性偏振光的能量劈裂大小，甚至可以發現有一個臨界點(能量簡併)會造成X、Y方向線偏振光能量反轉；量子點的不對稱性會造成光學的異相性；激子能量劈裂差距和光學異相性程度(極化率)具有成正比的關係。

Theoretical studies of polarized photoluminescence Spectrum of self-assembled quantum dots

Student : Wen-Ting You

Advisor : Shun-Jen Cheng

Department of Electrophysics
National Chiao Tung University

ABSTRACT

This thesis presents a theoretical study of polarized photoluminescence spectrum of a single spin exciton confined in a strained self-assembled quantum dot (QD). The electronic structure of an exciton in QD is studied in the framework of four-band strain $k \cdot p$ model. The time-dependent perturbation theory is employed to calculate the polarized emission spectrum of strained quantum dot. The study shows that the effect of heavy- and light-hole (HH and LH) mixing is especially pronounced in quantum dots with lateral shape deformation and is essential in the polarized photoluminescence spectrum of QD. The HH-LH mixing results in pronounced optical anisotropy and substantially renormalize the magnitude of fine structure splitting between the bright exciton states of deformed QD.

致謝

這兩年多的碩士生活裡，首先感謝鄭舜仁老師兩年多來的指導，讓我不僅對固態物理以及理論計算有所了解，更使我的求學生涯由單純的讀書跨入了嚴謹的研究領域。並感謝口試委員在口試上所提出的寶貴意見，使得研究內容更趨於完備。

在固態理論研究室的碩士研究學習過程中，也很感謝盧書楷、黃上瑜、陳彥廷學長給予研究上的意見以及碩士生活的參考指標；還有感謝共同度過碩士生活的趙虔震學長以及陳勇達同學在課業上的討論；也要感謝廖禹淮、許克銘、徐燁、曾泓鈞等學弟妹在各方面提供各種不同的參考意見；同時也要感謝張文豪實驗室的林家賢同學提供實驗數據並撥空與我討論研究內容。

而在求學的過程中更感謝父母對我的長久以來的支持，以及家人親戚的鼓勵，使我得以無後顧之憂的持續這十幾年來學習，直至如今所完成的碩士論文。而所要感謝的人太多，最後對所有曾經給予我幫助的人說一聲謝謝。

目錄：	
中文摘要.....	ii
英文摘要.....	iii
致謝.....	iv
目錄.....	v
表目錄.....	vii
圖目錄.....	viii
第一章、導論.....	01
1.1 簡介.....	01
1.2 研究動機.....	01
1.3 章節概要.....	04
第二章、量子點的電子結構.....	06
2.1 自組量子點簡介.....	06
2.2 電子的電子結構.....	08
2.3 電洞的電子結構.....	09
2.4 電洞的基底波函數.....	13
第三章、激子的電子結構與交互作用.....	18
3.1 固定軌道模型.....	18
3.2 激子的波函數.....	20
3.3 激子的交互作用.....	26
3.4 激子的 Hamiltonian.....	28
第四章、結果與討論.....	36
4.1 激子系統不具有重電洞、輕電洞耦合.....	36
4.2 激子系統中加入重電洞、輕電洞耦合.....	43
4.3 討論.....	53

第五章、結論.....	65
附錄 A.....	66
附錄 B.....	73
參考文獻.....	81



表目錄：

表 2.2.1、電子 Bloch function 的定義及符號.....	08
表 2.3.1、電洞 Bloch function 的定義及符號.....	09
表 2.3.2、式子(2.3.2)中的矩陣元素.....	12
表 2.3.3、式子(2.3.2)矩陣元素所使用的參數.....	13
表 3.2.1、定義激子符號所對應波函數、總角動量.....	22
表 3.4.1、式子(3.4.1)矩陣參數列表.....	29
表 3.4.2、文章所使用的估計參數.....	35
表 4.1.1、式子(4.1.1)矩陣的特徵值和特徵向量.....	36、38
表 4.1.2、各個激子基底所釋放旋光振幅的 θ 函數.....	37
表 4.1.3、將基態、第一激發態旋光區分為 π_x 、 π_y 旋光.....	40
表 4.2.1、將(圖 4.2.1)的線性偏振旋光區分為 π_x 、 π_y	45
表 4.3.1、參數對旋光特性影響.....	53
表 A.1、各個激子基底所釋放旋光振幅的 θ 函數.....	70
表 A.2、定義矩陣基底所對應波函數、總角動量.....	71
表 B.1、新基底所釋放旋光特性.....	76
表 B.2、2X2 矩陣特徵值、特徵向量.....	79

圖目錄：

圖 1.2.1、理想狀態下量子點中雙激子系統串聯放射示意圖...	03
圖 1.2.2、實際量子點所測的螢光光譜，摘自參考文獻[8].....	03
圖 1.3.1、實驗量測 PL 圖、旋光極座標圖、FSS-polarizability 關係圖.....	05
圖 2.1.1、量子點形狀(a)[1 $\bar{1}$ 0]方向 (b) [110]方向，摘自參考 文獻[10].....	06
圖 2.1.2、模擬長方體量子點(X 方向 16nm，Y 方向 12nm，Z 方向 4nm)導電帶位能.....	07
圖 2.3.1、單激子(電子-電洞對)系統示意圖.....	10
圖 3.1.1、固定軌域的模型(“rigid orbital” model)示意圖.....	18
圖 3.1.2、透鏡形狀量子點因應力造成的位能剖面圖.....	20
圖 3.2.1、左示透鏡形量子點的位能剖視圖，右示臆測的重電 洞、輕電洞的基態波包方程式.....	25
圖 3.4.1、各激子間能階關係圖.....	30
圖 3.4.2、同於圖 3.1.2，摘自參考文獻[17].....	31
圖 3.4.3、以 comsol 模擬長方體量子點(GaAs/InAs)因應力所造 成的位能剖面圖，沿[1 0 0]方向、沿[0 0 1]方向.....	31
圖 3.4.4、長方體量子點模擬的應力分佈.....	33

圖 4.1.1、(表 4.1.2)中 θ 在實空間中的示意圖.....	37
圖 4.1.2、對(4.1.4a)作圖，左為 XY 座標，右為極座標.....	39
圖 4.1.3、對(4.1.4b)作圖，左為 XY 座標，右為極座標.....	40
圖 4.1.4、所模擬的量子點形狀之示意圖，以 X 為長軸.....	42
圖 4.1.5、模擬重電洞、輕電洞未耦合的結果，含 PL 圖、極座標圖.....	42
圖 4.2.1、重電洞耦合輕電洞對激子能量的影響.....	43
圖 4.2.2、如何區分偏振旋光為 π_x 、 π_y 的範例圖.....	45
圖 4.2.2、以 Δ_{lh} 為變數且 $\varphi_S=0$ 的能量模擬結果示意圖.....	47
圖 4.2.3、模擬重、輕電洞耦合且 $\varphi_S=0$ 的結果，分別(a) Δ_{lh} -FSS (b) Δ_{lh} -Intensity (c) Δ_{lh} -極化率 (d)極化率- FSS.....	48
圖 4.2.4、模擬重、輕電洞耦合且 $\varphi_S=0$ 的結果，並分別繪出強耦合($\Delta_{lh}=50\text{meV}$)以及弱耦合($\Delta_{lh}=350\text{meV}$)的 PL 圖、極座標圖.....	48
圖 4.2.5、以 Δ_{lh} 為變數且 $\varphi_S \neq 0$ 的能量模擬結果示意圖.....	50
圖 4.2.6、模擬重、輕電洞耦合且 $\varphi_S \neq 0$ 的結果，分別(a) Δ_{lh} -FSS (b) Δ_{lh} -Intensity (c) Δ_{lh} -極化率 (d)極化率- FSS.....	50
圖 4.2.7、模擬重、輕電洞耦合且 $\varphi_S \neq 0$ 的結果，並分別繪出強耦合($\Delta_{lh}=50\text{meV}$)以及弱耦合($\Delta_{lh}=350\text{meV}$)的 PL 圖、極	

座標圖.....	51
圖 4.2.8、模擬結果與解析結果的比較.....	55
圖 4.2.9、新基底的能量分析示意圖，並考慮 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S = 0^\circ$ 系統 之後的變化.....	57
圖 4.2.10、新基底的能量分析示意圖，並考慮 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S = 0^\circ$ 系 統之後的變化.....	58
圖 4.2.11、實驗量測 FSS 對極化率(polarizability)作圖，且左為 量子點以長軸為 X 軸，右為量子點以長軸為 Y 軸.....	59
圖 4.2.12、模擬“FSS-極化率”關係圖，增加 φ_S 個數的結果.....	60
圖 4.2.13、當 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S = 0$ 的系統下， π_x 、 π_y 線性偏振旋光夾 角的模擬結果.....	62
圖 4.2.14、當 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S \neq 0(10^\circ)$ 的系統下， π_x 、 π_y 線性偏振旋 光夾角的模擬結果.....	63
圖 4.2.15、當 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S \neq 0(10^\circ)$ 的系統下，“FSS- π_x 、 π_y 夾角” 和“FSS- Polarizability”的模擬結果以及實驗數據比對...	64
圖 A.1、起始態為一個激子，藉由釋放光(微擾)，轉變為類似 真空的最終態.....	66
圖 A.2、檢偏器的偏振方向.....	72
圖 B.1、微擾法的示意圖，可以將矩陣縮小.....	77

第一章 導論

1.1 簡介

隨著量子力學理論的漸趨完備，人們開始思考著量子力學的應用，因此近年開始有量子資訊(quantum information)[1,2]一類的研究發展，而單就量子資訊的名詞看來，可以知道它和以往的資訊科學必有一部分相似的概念，但卻亦有其不同之處。以往的資訊科學中的基礎單位是位元(bit)，位元是用來代表一個非 0 即 1 的狀態，所以資訊科學便是利用此二次進位來處理所有資料；而量子資訊方面亦是產生兩個狀態(古典資訊的 0 和 1)，但極為不同的是兩個狀態乃為量子態，量子態具備不同於古典態的兩大特性：(1)疊加性 (2)糾纏態的特性，這兩種特性直接的說明兩個量子態之間不是「非 0 即 1」的關係。疊加性是指當兩個正交的量子態經過疊加後亦屬於量子態，所以少量的量子位元可以創造出許多量子態，提升了資訊科學的儲存或計算空間；兩狀態間的糾纏態則指出了它們之間具有強烈的相干性以及非定域性(Non-locality)，利用於量子計算(不具有古典的邏輯運算)可加速某些困難的計算，也可利用於量子傳輸(quantum teleportation)以及量子密碼學(quantum cryptography)[3]使得訊息可以保密傳輸。

1.2 研究動機

當要發展這一類的應用學，必然要先創造出屬於量子態的量子位

元，而在量子力學中大多屬於極小尺度的探討，因此量子態應該也是創造於極小尺度，所以原子或是分子便是一個不錯的選擇，但是在現實中要捕捉到一個原子或分子並非是易於處理的事，因此便往創造類原子或類分子模型方向發展，進而產生了所謂的量子點系統。而量子點是否真的易於創造量子態？這並不是一個肯定的答案，但是光就量子點的特性(1)屬於小尺度 (2)具有離散的能階狀態 (3)可以控制發出單光子，便足以構成量子點研究的原因。

而如何利用量子點創造出所謂的量子糾纏態，便有人提出當激發電子從導電帶激發至價電帶時，分別在價電帶和導電帶分別產生電洞以及電子，而電子、電洞相互牽引形成所謂激子(exciton)得準粒子，發光激子具角動量 ± 1 ，當電子、電洞的再結合(recombination)便會釋放出光子，利用所釋放光子為“左/右旋光(或水平/垂直偏振)”的特性當作量子位元。當激發了雙電子使之同時存在於激發態時，這便是雙激子系統，雙激子系統由排列組合可以知道具有兩種釋放雙光子的路徑，如(圖 1.2.1a)所示分別為紅線及藍線的兩條路徑，且兩路徑因為角動量守恆關係而將先後釋放出左、右(或右、左)旋光，不過兩路徑的中間暫態的單激子能量簡併，使得這兩種路徑彼此間形成不可分辨的關係，因此不知先釋放左旋光還是右旋光，使得先後釋放的旋光形成雙量子位元[4,5]。

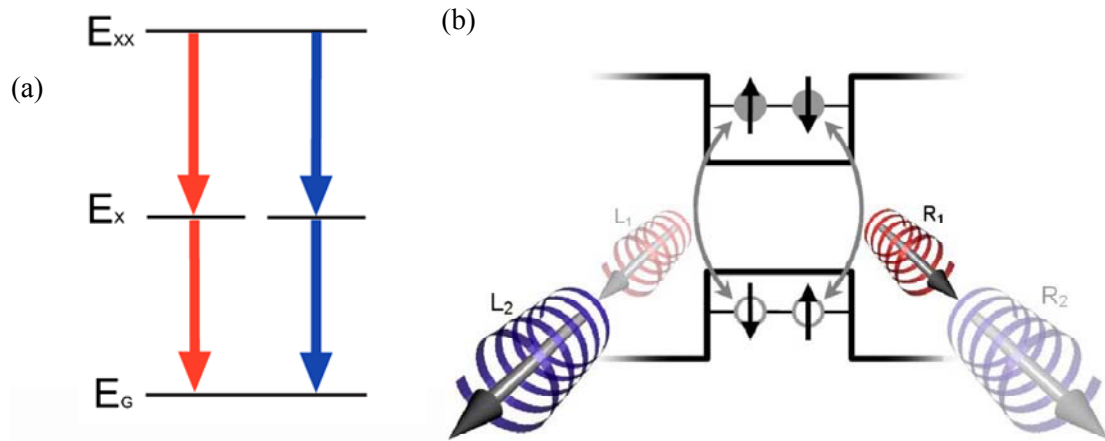
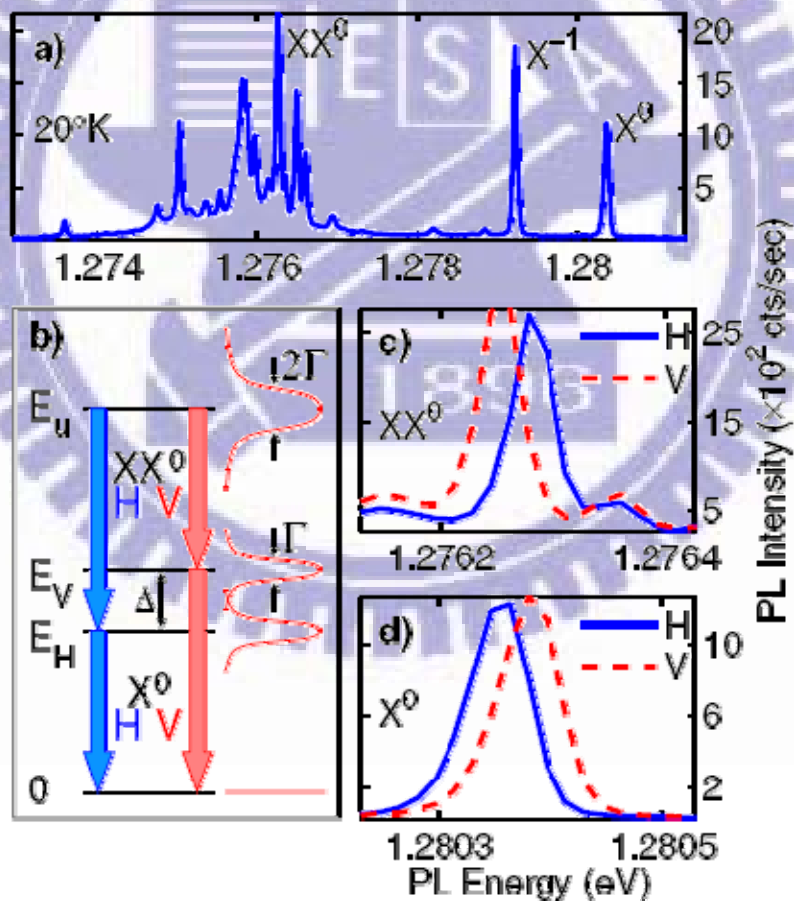


圖 1.2.1、理想狀態下量子點中雙激子系統，串聯放射(cascade emission)
 (a) Biexciton \rightarrow exciton \rightarrow vacuum，連續發出的光子因能量簡併而路徑不可分辨[6]
 (b) 高度糾纏態將會連續釋放左(右)、右(左)旋光[7]



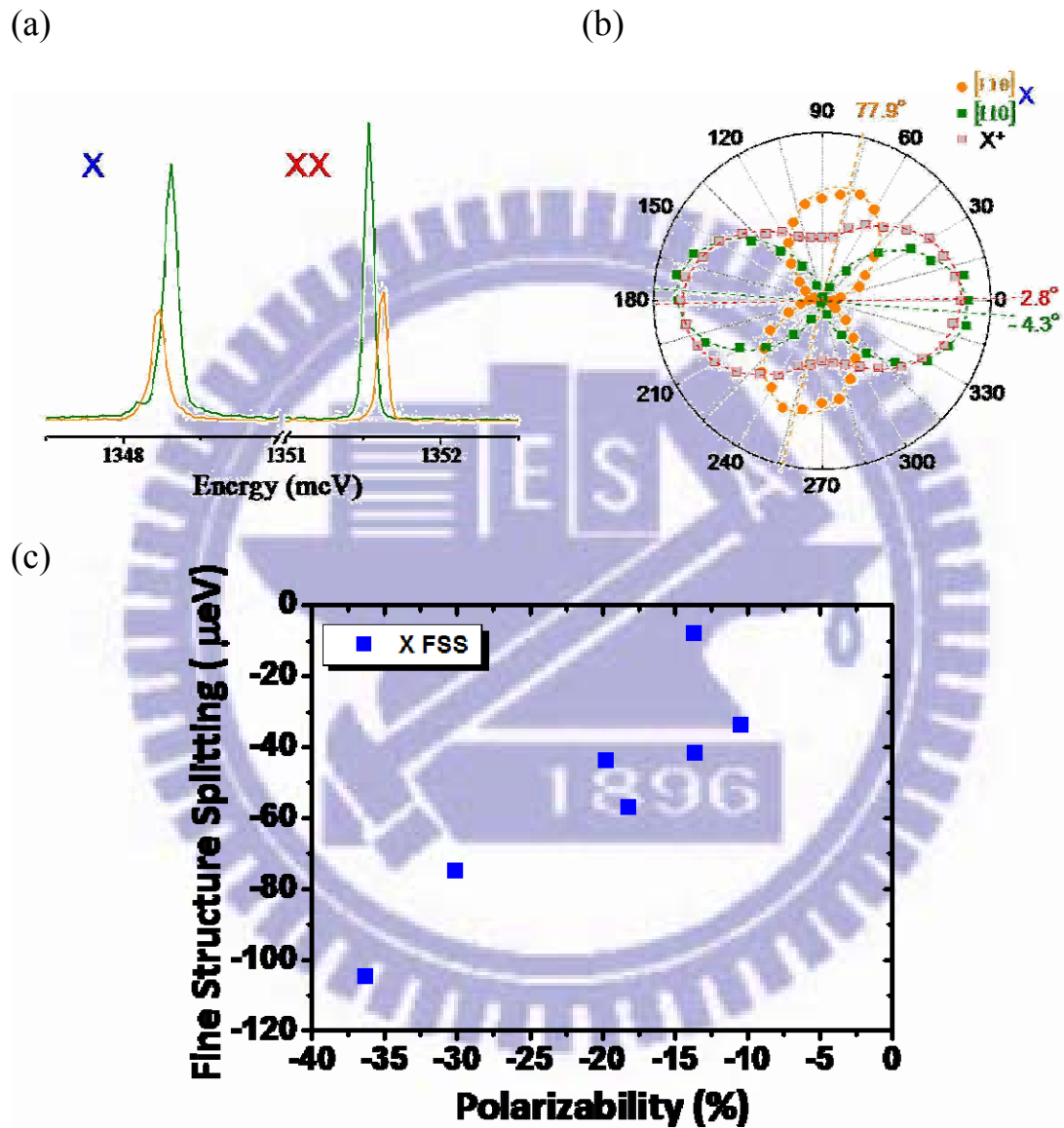
(圖 1.2.2)、 (a、c、d)實際量子點的實驗螢光光譜(photoluminescence spectrum)
 (b)量子點雙激子系統釋放螢光之能量示意圖，與(圖 1.2.1a)比較
 H代表水平線偏振，V代表垂直線偏振[8]

但是在實驗上的量測(圖 1.2.2)和預期中理想狀態(圖 1.2.1)有所出入：(1)單激子釋放的螢光能量並非簡併，因交換能而劈裂 (2)螢光偏振不是糾纏態的圓偏振光，而是相同性質的線性偏振光 (3)螢光具有光學各方異向性(optical anisotropy)。以上的差異性均展現出雙光子被釋放的過程得以分辨，失去了當作量子位元的重要條件(糾纏態)[8]，而此篇文章將探討的是在激子系統中考慮輕電洞和重電洞的耦合項所造成的影響，而其中包含 (1)Luttinger-Kohn Hamiltonian (2)交換能，兩者所產生的重、輕電洞耦合項，而且還因為重、輕電洞的能量差距的大小影響這兩項的耦合強度。

1.3 章節概要

第一章主要先介紹本篇文章所探討自組式量子點所釋放旋光，以及其實際上有何應用。第二章則用 k.p 原理、波包近似法介紹電子、電洞的電子結構。第三章先利用第二章所介紹電子、電洞的電子結構(矩陣)去得到激子的電子結構系統，並且加入了電子、電洞間的交互作用項，其中的電子、電洞交換能以 spin Hamiltonian 型式展開，接著便可得到激子的 Hamiltonian。第四章則是此文章最主要的部分，先模擬出激子不具重電洞、輕電洞耦合系統之結果，再進而模擬激子系統加入重電洞、輕電洞耦合的系統，所得模擬結果藉由 Fermi's golden rule 可分析出其旋光特性，並且將與實驗(圖 1.3.1)做個比較，

最後則對所模擬之結果進行探討，其中包含利用 P.O.Löwdiu method [9]的一種為擾方法去解析結果。第五章對本篇文章做總結討論，並思考其後的發展性。



(圖 1.3.1)、(a)實驗上所量測的 PL 圖 (b)旋光極座標圖
(c) 實驗量測 FSS 對極化率(polarizability)作圖，於之後章節再對 FSS 與 polarizability 定義

資料來源：張文豪老師實驗室

第二章 量子點的電子結構

2.1 自組式量子點簡介

自組式量子點形成是因為異質介面間的晶格長度不匹配，進而產生了應力使得材料變形而突起，所以其形狀類似於島狀(圖 2.1.1)或是截角金字塔。

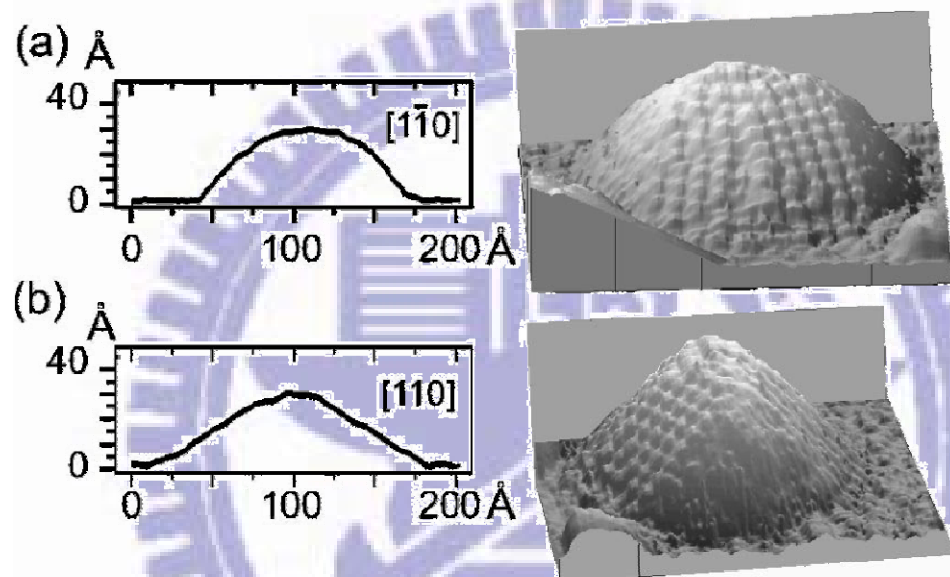


圖 2.1.1、量子點形狀(a)[$1\bar{1}0$]方向 (b) [110]方向

資料來源：J. Marquez, et al, Appl. Phys. Lett. **78**, 2309 (2001). [10]

量子點被稱之為一種準零維系統，是因為其三個維度均被侷限，因此形成了一個三維的有限深位能井，而得以類似於原子系統將電子、電洞侷限住，甚至於其電子、電洞態亦產生了離散的能階，由於自組式量子點是因應力擠壓而產生，而擠壓的過程改變了量子點附近的晶格偏移，導致材料的位能改變(圖 2.1.2)，所以位能主要受(1)量子點形狀 (2)量子點材料成分 (3)應力分佈的主要三要素構成[11]，參考文獻[12]便是以金字塔形狀之量子點為例的文章。

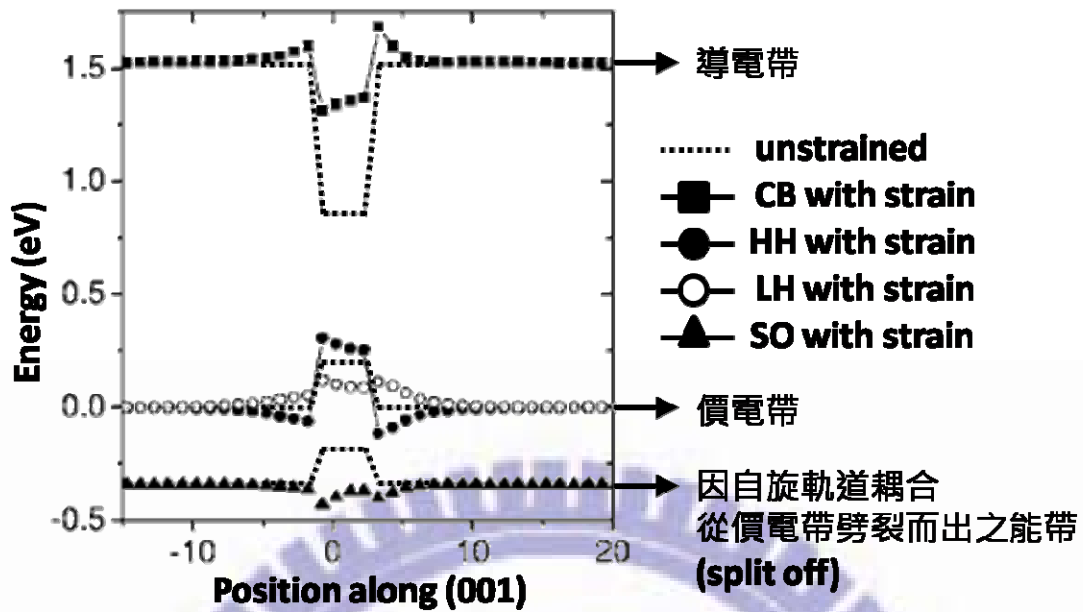


圖 2.1.2、以緊束縛法(Tight-binding)模擬透鏡形狀量子點的位能剖面圖(Z 方向)，而虛線代表沒有應力影響下的位能剖面圖，至於點線則為受應力影響後的位能剖面圖。
資料來源：Phys. Rev. B 74, 195339 (2006) [13]

在半導體材料中具有少量電子存在並負責傳輸的導電帶，以及幾乎填滿電子的價電帶，然而還是有部分未填電子的空軌域，價電帶的電子會因空軌域而產生流動或是交互作用，但是價電帶的電子相當多，若要確確實實的計算這些電子是一項近乎不可能的任務，所以有人提出了電洞的想法，而這個想法便是將價電帶中的空軌域視為一個性質跟電子完全相反的粒子，而半導體中的電洞又可分為能量相近的輕電洞以及重電洞。然而當量子點因應力而形成時，重、輕電洞也因為應力以及量子侷限的關係而產生劈裂(圖 2.1.2)，而重電洞顧名思義知道有效質量較大比較容易形成量子侷限，所以電洞的基態基本上屬於重電洞，不過輕電洞仍會對重電洞進行混成，因此若要考慮兩者混成，至少要使用四能帶 Luttinger Kohn 模型的 $k.p$ 理論。

2.2 電子的電子結構

在考慮量子點中電子的電子結構時，文章中主要是以 k.p 理論的單能態模型[14]以及波包近似法[14]為基礎。因此電子波函數可表示成：

$$\Psi_i^e = g_i^e(\vec{r}_e) u_{c,s_e,z}(\vec{r}_e) \quad (2.2.1)$$

(2.2.1)中的第一項波函數 $g_i^e(\vec{r}_e)$ 為波包方程式(envelope function)，而第二項波函數 $u_{c,s_e,z}(\vec{r}_e)$ 則為 Bloch function。

為了方便起見而定義下列符號以表示電子的 Bloch function：

符號代表	Bloch function	原子對應的軌道形態
$ \uparrow\rangle_e$	$u_{c,+1/2}(\vec{r}_e)$	$ S,\uparrow\rangle$
$ \downarrow\rangle_e$	$u_{c,-1/2}(\vec{r}_e)$	$ S,\downarrow\rangle$

表 2.2.1、電子 Bloch function 的定義及符號

由波函數的型式和單能態有效質量理論(single-band effective mass theory)，可以得到波函數和能量的 Schrödinger equation：

$$H_e g_i^e = E_i^e g_i^e \quad (2.2.2a)$$

$$\left[\frac{p^2}{2m_0 m_e^*} + V_{QD}^e(\vec{r}) \right] g_i^e = E_i^e g_i^e \quad (2.2.2b)$$

(2.2.2b)中的 m_e^* 為電子的有效質量，且 Schrödinger equation 和自旋無關，所以每一個軌道波函數都有自旋上、下兩個態而形成二重簡併。

2.3 電洞的電子結構

由參考文獻[15]知道價電帶的混成將會對量子點釋放之旋光產生影響，因此本篇文章中最主要討論的是重電洞、輕電洞的耦合對在激子系統發光過程的影響，所以電洞的電子結構主要是以 k.p 理論的多能態模型 [14]以及波包近似法[14]為基礎。而寫下電洞的波函數：

$$\Psi_i^h = \sum_{j_{v,z}=\pm 3/2, \pm 1/2} f_{i,j_{v,z}}^h(\vec{r}_h) u_{j_{v,z}}(\vec{r}_h) \quad (2.3.1)$$

(2.3.1)相似於電子的波函數型式， $f_{i,j_{v,z}}^h(\vec{r}_h)$ 為電洞的波包方程式而

$u_{j_{v,z}}(\vec{r}_h)$ 為電洞的 Bloch function，列下電洞 Bloch function 的波函數並定義其符號如下。

表 2.3.1、電洞 Bloch function 的定義及符號

分類	電洞觀點	電子觀點	
	符號	Bloch function	原子對應的軌道形態
重電洞 heavy hole	$ \downarrow\rangle_h$	$u_{v,+3/2}(\vec{r}_h)$	$\frac{-1}{\sqrt{2}} (P_x + iP_y), \uparrow\rangle$
	$ \uparrow\rangle_h$	$u_{v,-3/2}(\vec{r}_h)$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (P_x - iP_y), \downarrow\rangle$
輕電洞 light hole	$ \downarrow\rangle_h$	$u_{v,+1/2}(\vec{r}_h)$	$\frac{-1}{\sqrt{6}} (P_x + iP_y), \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} P_z, \uparrow\rangle$
	$ \uparrow\rangle_h$	$u_{v,-1/2}(\vec{r}_h)$	$\frac{1}{\sqrt{6}} (P_x - iP_y), \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} P_z, \downarrow\rangle$

備註： 表中箭頭符號的方向和所對應 Bloch function 的 j_z 值不一樣，因為前者為電洞觀點，後者為電子觀點

在此對(表 2.3.1)中的電洞觀點、電子觀點稍做解釋。激子的再結

合(recombination)代表了電子從導電帶跳回了價電帶的空軌域中(電洞)，所以激子的總角動量(M)等於電子($s_{e,z}$)和空軌域總角動量($j_{v,z}$)的差值，則可寫成數學式 $M=s_{e,z}-j_{v,z}$ ；若將具一空軌域的價電帶視為電洞，則電洞的角動量($j_{h,z}$)為空軌域角動量的反號($-j_{v,z}$)，而總角動量反而等於電子和電洞總角動量的加總，同樣寫成數學示 $M=s_{e,z}-(-j_{h,z})=s_{e,z}+j_{h,z}$ ，因此空軌域以電洞觀點看待比較直觀，所以文章中關於電洞的符號(箭頭)均為電洞觀點(圖 2.3.1)。至於電洞波函數(Bloch function 以及 envelope function)的部分，由於在實空間中電子為真實存在的粒子，而電洞只是空軌域非真實粒子，所以在利用波函數做物理計算時仍然以電子觀點為準。

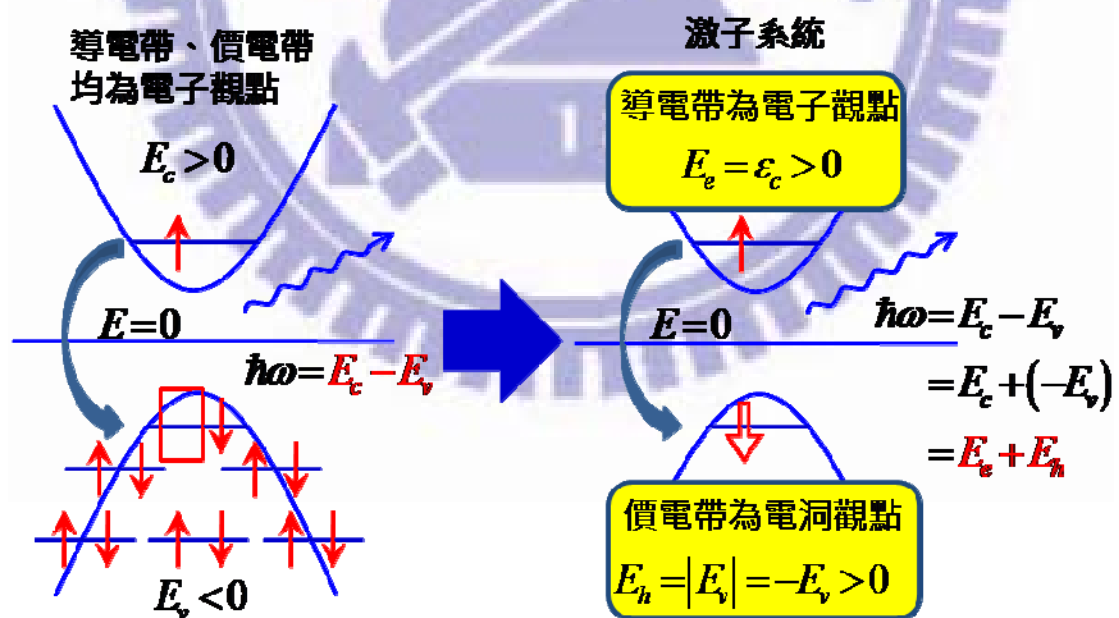


圖 2.3.1、單激子(電子-電洞對)系統示意圖

由波函數的型式和 $k.p$ 理論的多態模型，可以得到波函數和能量的 Schrödinger equation，並藉由波包近似法：

$$\begin{array}{cccc}
 |\downarrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_h \\
 \left[\begin{array}{cccc}
 (P_k + P_\varepsilon) & & & \\
 +(Q_k + Q_\varepsilon) & -S & R & 0 \\
 +V_{QD}^v & & & \\
 & (P_k + P_\varepsilon) & & \\
 -S^+ & -(Q_k + Q_\varepsilon) & 0 & R \\
 +V_{QD}^v & & & \\
 & & (P_k + P_\varepsilon) & \\
 R^+ & 0 & -(Q_k + Q_\varepsilon) & S \\
 +V_{QD}^v & & & \\
 & & & (P_k + P_\varepsilon) \\
 0 & R^+ & S^+ & +(Q_k + Q_\varepsilon) \\
 +V_{QD}^v & & & \\
 & & & +V_{QD}^v
 \end{array} \right] \begin{bmatrix} f_{+3/2}^h(\vec{r}) \\ f_{+1/2}^h(\vec{r}) \\ f_{-1/2}^h(\vec{r}) \\ f_{-3/2}^h(\vec{r}) \end{bmatrix} = E_h \begin{bmatrix} f_{+3/2}^h(\vec{r}) \\ f_{+1/2}^h(\vec{r}) \\ f_{-1/2}^h(\vec{r}) \\ f_{-3/2}^h(\vec{r}) \end{bmatrix}
 \end{array} \dots\dots\dots(2.3.2a)$$

$$\begin{array}{cccc}
 |\downarrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_h \\
 \left[\begin{array}{cccc}
 (P_k + Q_k) & & & \\
 +V_{QD}^{hh} & -(S_k + S_\varepsilon) & (R_k + R_\varepsilon) & 0 \\
 & (P_k - Q_k) & 0 & (R_k + R_\varepsilon) \\
 -(S_k + S_\varepsilon)^+ & +V_{QD}^{lh} & & \\
 & & (P_k - Q_k) & \\
 (R_k + R_\varepsilon)^+ & 0 & +V_{QD}^{lh} & (S_k + S_\varepsilon) \\
 & & & \\
 0 & (R_k + R_\varepsilon)^+ & (S_k + S_\varepsilon)^+ & (P_k + Q_k) \\
 +V_{QD}^{hh} & & & +V_{QD}^{hh}
 \end{array} \right] \begin{bmatrix} f_{+3/2}^h(\vec{r}) \\ f_{+1/2}^h(\vec{r}) \\ f_{-1/2}^h(\vec{r}) \\ f_{-3/2}^h(\vec{r}) \end{bmatrix} = E_h \begin{bmatrix} f_{+3/2}^h(\vec{r}) \\ f_{+1/2}^h(\vec{r}) \\ f_{-1/2}^h(\vec{r}) \\ f_{-3/2}^h(\vec{r}) \end{bmatrix}
 \end{array} \dots\dots\dots(2.3.2b)$$

(2.3.2a)、(2.3.2b)和一般的參考書籍[14]中的式子在能量上相差了一個負號，因為一般參考書籍的價電帶Schrödinger equation為電子觀點，然而本文章對於電洞的Schrödinger equation則採用電洞觀點，其間

的轉換如(圖 2.3.1)。至於(2.3.2a)到(2.3.2b)之間的不同在於用 V_{QD}^{hh} 、 V_{QD}^{lh} 分別取代了 $P_\varepsilon + Q_\varepsilon + V_{QD}^v$ 、 $P_\varepsilon - Q_\varepsilon + V_{QD}^v$ ，而 P_ε 、 Q_ε 均是來自於應力項，所以 V_{QD}^{hh} 、 V_{QD}^{lh} 分別代表了重電洞、輕電洞在Schrödinger equation 中的位能項，其中包含了應力，也說明了應力對重電洞、輕電洞的影響明顯不同。

表 2.3.2、式子(2.3.2)中的矩陣元素

動量部分	重電洞(P+Q)、	$P_k = \frac{-\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$
	輕電洞(P-Q)	$Q_k = \frac{-\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - 2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$
	耦合項	$R_k = \frac{-\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \left[-\gamma_2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + 2i \left(\gamma_3 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) \right]$
		$S_k = \frac{-\hbar^2}{m_0} \sqrt{3} \left[\gamma_3 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \right]$
應力部分 (strain)	重電洞(P+Q)、	$P_\varepsilon(\vec{r}) = -a_v \left[\varepsilon_{xx}(\vec{r}) + \varepsilon_{yy}(\vec{r}) + \varepsilon_{zz}(\vec{r}) \right]$
	輕電洞(P-Q)	$Q_\varepsilon(\vec{r}) = -\frac{b}{2} \left[\varepsilon_{xx}(\vec{r}) + \varepsilon_{yy}(\vec{r}) - 2\varepsilon_{zz}(\vec{r}) \right]$
	耦合項	$R_\varepsilon(\vec{r}) = \frac{\sqrt{3} \cdot b}{2} \left[\varepsilon_{xx}(\vec{r}) - \varepsilon_{yy}(\vec{r}) \right] - id\varepsilon_{xy}(\vec{r})$
		$S_\varepsilon(\vec{r}) = -d \left[\varepsilon_{xz}(\vec{r}) - i\varepsilon_{yz}(\vec{r}) \right]$

	單位	In _c Ga _{1-c} As , 0 ≤ c ≤ 1	InAs	GaAs
γ_1	無	1/[(1-c)/7.10+c/19.7]	19.7	7.10
γ_2	無	1/[(1-c)/2.02+c/8.4]	8.4	2.02
γ_3	無	1/[(1-c)/2.91+c/9.3]	9.3	2.91
a_c	meV	-8013+2933c	-5060	-8013
a_g	meV	-8233+2153c	-6080	-8233
b	meV	-1824+24c	-1800	-1824
d	meV	-5062+1462c	-3600	-5062
備註：	a_c 為導電帶之參數， a_g 為導電帶、價電帶差距參數，因此 (2.3.2)矩陣元素中的價電帶參數 a_v 表示為 $a_c - a_g$			

表 2.3.3、式子(2.3.2)矩陣元素所使用的參數

資料來源：Phys. Rev. B, **59**, 5688 [16]

2.4 電洞的基底波函數

為了探討重電洞、輕電洞的耦合效應，可以採用重電洞、輕電洞未耦合時的 eigenstate 為基底，而重電洞、輕電洞未耦合系統即為(2.3.2b)刪去非對角項，形成(2.4.1)的矩陣。

$$\begin{bmatrix} (P_k + Q_k) + V_{QD}^{hh} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (P_k - Q_k) + V_{QD}^{lh} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (P_k - Q_k) + V_{QD}^{lh} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (P_k + Q_k) + V_{QD}^{hh} \end{bmatrix} \quad (2.4.1)$$

因此重電洞、輕電洞的方程式將可以獨立形成，而不再具有相關性。

可分別定義為(2.4.2a)、(2.4.2b)，其中(2.4.2a)的 $E_{hh,i}$ 為重電洞第*i*個能階的能量，而(2.4.2b)的 $E_{lh,i}$ 為輕電洞第*i*個能階的能量。

$$\text{重電洞：} \left(P_k + Q_k + V_{QD}^{hh} \right) g_{i,\pm 3/2} = E_{hh,i} g_{i,\pm 3/2} \quad (2.4.2a)$$

$$\text{輕電洞：} \left(P_k - Q_k + V_{QD}^{lh} \right) g_{i,\pm 1/2} = E_{lh,i} g_{i,\pm 1/2} \quad (2.4.2b)$$

由(2.4.2a)、(2.4.2b)的定義將可以把前一小節中重電洞波包方程式

$(f_{\pm 3/2}^h)$ 和輕電洞波包方程式 $(f_{\pm 1/2}^h)$ 以 $g_{i,\pm 3/2}$ 、 $g_{i,\pm 1/2}$ 為基底展開

$$f_{j_z} = \sum_i c_i \cdot g_{i,j_z} \quad (2.4.3)$$

如此一來便能明確得寫下電洞的波函數：

$$\begin{aligned} \Psi_i^h &= \begin{pmatrix} \sum_i c_{i,+3/2} \cdot g_{i,+3/2} \\ \sum_n c_{n,+1/2} \cdot g_{n,+1/2} \\ \sum_m c_{j,-1/2} \cdot g_{m,-1/2} \\ \sum_j c_{j,-3/2} \cdot g_{j,-3/2} \end{pmatrix} \\ &= \left(\sum_i c_{i,+3/2} \cdot g_{i,+3/2} \right) + \left(\sum_n c_{n,+1/2} \cdot g_{n,+1/2} \right) \\ &\quad + \left(\sum_m c_{j,-1/2} \cdot g_{m,-1/2} \right) + \left(\sum_j c_{j,-3/2} \cdot g_{j,-3/2} \right) \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

當寫下了電洞的波函數後，將以此為基底將電洞的 Hamiltonian 當作矩陣展開。

首先將(2.4.4)簡化為均只有基態波包方程式(i 等於 0)的電洞波函數為

例子，先列下此波函數：

$$\begin{aligned} &c_{0,+3/2} \cdot g_{0,+3/2} \cdot u_{v,+3/2} + c_{0,+1/2} \cdot g_{0,+1/2} \cdot u_{v,+1/2} \\ &\quad + c_{0,-1/2} \cdot g_{0,-1/2} \cdot u_{v,-1/2} + c_{0,-3/2} \cdot g_{0,-3/2} \cdot u_{v,-3/2} \end{aligned}$$

因此取 $([g_{0,+3/2} \cdot u_{v,+3/2}], [g_{0,+1/2} \cdot u_{v,+1/2}], [g_{0,-1/2} \cdot u_{v,-1/2}], [g_{0,-3/2} \cdot u_{v,-3/2}])$

為基底，而 H_h 表示為電洞 Hamiltonian，其矩陣元素計算如下。

矩陣第一列、第一行元素：

$$\begin{aligned} & \langle g_{0,+3/2} | \langle u_{v,+3/2} | H_h | u_{v,+3/2} \rangle | g_{0,+3/2} \rangle \\ &= \langle g_{0,+3/2} | P_k + Q_k + V_{QD}^{hh} | g_{0,+3/2} \rangle \\ &= E_{hh,0} \end{aligned}$$

矩陣第二列、第二行元素：

$$\begin{aligned} & \langle g_{0,+1/2} | \langle u_{v,+1/2} | H_h | u_{v,+1/2} \rangle | g_{0,+1/2} \rangle \\ &= \langle g_{0,+1/2} | P_k - Q_k + V_{QD}^{hh} | g_{0,+1/2} \rangle \\ &= E_{lh,0} \end{aligned}$$

矩陣第一列、第二行元素：

$$\begin{aligned} & \langle g_{0,+3/2} | \langle u_{v,+3/2} | H_h | u_{v,+1/2} \rangle | g_{0,+1/2} \rangle \\ &= \langle g_{0,+3/2} | -(S_k + S_\varepsilon) | g_{0,+1/2} \rangle \\ &= \langle g_{0,+3/2} | - \left(\frac{-\hbar^2}{m_0} \sqrt{3} \left[\gamma_3 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] + S_\varepsilon(r) \right) | g_{0,+1/2} \rangle \\ &= -S_{0,0} \end{aligned}$$

矩陣第二列、第一行元素：(因為矩陣為 Hermitian)

$$\begin{aligned} & \langle g_{0,+1/2} | \langle u_{v,+1/2} | H_h | u_{v,+3/2} \rangle | g_{0,+3/2} \rangle \\ &= -S_{0,0}^+ \end{aligned}$$

矩陣第一列、第三行元素：

$$\begin{aligned} & \langle g_{0,+3/2} | \langle u_{v,+3/2} | H_h | u_{v,-1/2} \rangle | g_{0,-1/2} \rangle \\ &= \langle g_{0,+3/2} | R_k + R_\varepsilon | g_{0,-1/2} \rangle \\ &= \langle g_{0,+3/2} | \frac{-\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \left[-\gamma_2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + 2i \left(\gamma_3 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) \right] + R_\varepsilon(r) | g_{0,-1/2} \rangle \\ &= R_{0,0} \end{aligned}$$

同理可得全部的 16 個矩陣元素，並且排列如下(2.4.4)

$$H_h^{00} = \begin{matrix} \begin{matrix} |u_{v,+3/2} \cdot g_{0,+3/2}\rangle & |u_{v,+1/2} \cdot g_{0,+1/2}\rangle & |u_{v,-1/2} \cdot g_{0,-1/2}\rangle & |u_{v,-3/2} \cdot g_{0,-3/2}\rangle \end{matrix} \\ \left[\begin{matrix} E_{hh,0} \cdot \delta_{0,0} & -S_{0,0} & R_{0,0} & 0 \\ -S_{0,0}^+ & E_{lh,0} \cdot \delta_{0,0} & 0 & R_{0,0} \\ R_{0,0}^+ & 0 & E_{lh,0} \cdot \delta_{0,0} & S_{0,0} \\ 0 & R_{0,0}^+ & S_{0,0}^+ & E_{hh,0} \cdot \delta_{0,0} \end{matrix} \right] \end{matrix} \dots\dots\dots(2.4.5)$$

當要做較為精準的計算時，勢必會增加電洞的基底數，因此將其基底數擴展到第 f 個激發態時，矩陣亦擴展如下。

$$H_h^{ij} = \begin{matrix} \begin{matrix} |u_{v,+3/2} \cdot g_{j,+3/2}\rangle & |u_{v,+1/2} \cdot g_{j,+1/2}\rangle & |u_{v,-1/2} \cdot g_{j,-1/2}\rangle & |u_{v,-3/2} \cdot g_{j,-3/2}\rangle \end{matrix} \\ \left[\begin{matrix} E_{hh,i} \cdot \delta_{i,j} & -S_{i,j} & R_{i,j} & 0 \\ -S_{i,j}^+ & E_{lh,i} \cdot \delta_{i,j} & 0 & R_{i,j} \\ R_{i,j}^+ & 0 & E_{lh,i} \cdot \delta_{i,j} & S_{i,j} \\ 0 & R_{i,j}^+ & S_{i,j}^+ & E_{hh,i} \cdot \delta_{i,j} \end{matrix} \right] \end{matrix} \dots\dots\dots(2.4.6a)$$

第三章 激子的電子結構與交互作用：

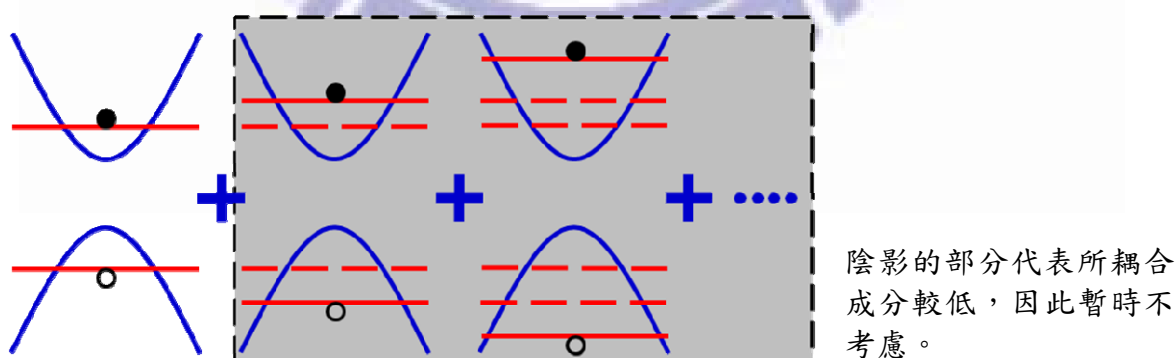
激子由電子和電洞所組成，可以列出其 Hamiltonian 的成分

$$H_x = H_e + H_h - V_{eh}^d + V_{eh}^{ex} \quad (3.0.1)$$

(3.0.1)中第一項為電子 Hamiltonian，第二項為電洞 Hamiltonian，第三項由直接庫倫作用力造成 Hamiltonian，第四項則由電子、電洞的交換能的 Hamiltonian[19]。

3.1 固定軌道模型(Rigid Orbital Model)

有了激子完整的 Hamiltonian (3.0.1)之後便可以逐一的計算各項的能量，而(3.0.1)的第一項以及第二項可以分別由前面章節所提的方法求得，但是在所有的模擬系統(不論是物理還是其他領域)，當所取樣品數、基底越多的時候，模擬的結果越精確。不過本文章在此所做的討論並不包含精確性的計算，而只是對量子點的旋光特性作定性上的探討，因此文章將採取“固定軌道模型”進行模擬。



(圖 3.1.1)、固定軌域的模型(“rigid orbital” model)示意圖

而所謂的“固定軌道模型”是針對於已混成的電子或電洞軌道部份，當要計算的軌域因耦合而有所混成時僅採取最主要的部份，至於次要部份則當作少量的影響將其省略，(圖 3.1.1)即為其示意圖。激子系統中的電子軌域從黃上瑜學長的有限差分法模擬結果知道，其基態波包方程式主要類似於氫原子 S 型軌道方程式[11]，因此電子軌域僅僅採用基態的波包方程式；而激子系統的電洞軌域由於有重電洞、輕電洞的混成效應，不過由多態模型的模擬得知重電洞基態的波包方程式和電子一樣，屬於氫原子 S 型軌道方程式且侷限於量子點中，至於所混成的輕電洞則可能包含了各種類型，而利用“固定軌道模型”便可以化簡問題，如今在此文章中假設重電洞、輕電洞混成的主要軌道(基態所佔最大比例的軌道)均類似於於氫原子 S 型軌道且侷限於量子點中，此種假設則應該近似於參考文獻[17]的量子點形狀(lens shape)，因為重電洞、輕電洞的位能 $V_{\text{QD}}^{\text{hh}}$ 、 $V_{\text{QD}}^{\text{lh}}$ 相似，如(圖 2.1.2)、(圖 3.1.2)所示，所以便有可能跟假設雷同，兩者的基態波包方程式均屬於氫原子 S 型軌道方程式且侷限於量子點中。

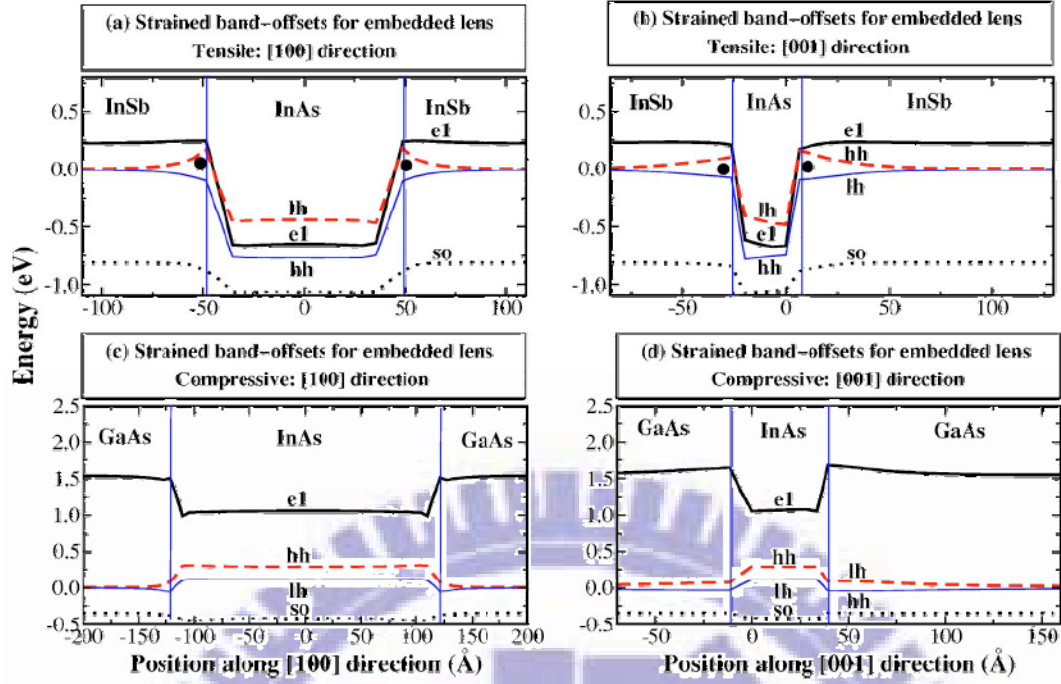


圖 3.1.2、為透鏡形狀量子點因應力造成的位能剖面圖[17]

3.2 激子的波函數

至目前為止，已經探討單一粒子(電子、電洞)的 Hamiltonian，因此也知道電子、電洞的波函數(2.2.1)、(2.4.3a)、(2.4.3b)，但是激子乃是由電子和電洞所組成，所以此一小節將要利用電子、電洞波函數來介紹激子的波函數。因為我們大多是在做矩陣的計算，所以可以由線性代數的方法來處理，電子和電洞為不同的空間集合，因此將兩個單一粒子組合時可以將它理解為兩個集合的聯集。

$$(H_e + H_h)[\psi_e(\vec{r}_e) \otimes \psi_h(\vec{r}_h)] = (E_e + E_h)[\psi_e(\vec{r}_e) \otimes \psi_h(\vec{r}_h)]$$

$$\psi_{exciton} = \psi_{electron} \otimes \psi_{hole} = \left[g_0^e(\vec{r}_e) \begin{Bmatrix} u_{c,+1/2}(\vec{r}_e) \\ u_{c,-1/2}(\vec{r}_e) \end{Bmatrix} \right] \otimes \begin{Bmatrix} \left(\sum_i c_{i,+3/2} \cdot g_{i,+3/2} \right) \cdot u_{v,+3/2} \\ \left(\sum_n c_{n,+1/2} \cdot g_{n,+1/2} \right) \cdot u_{v,+1/2} \\ \left(\sum_m c_{m,-1/2} \cdot g_{m,-1/2} \right) \cdot u_{v,-1/2} \\ \left(\sum_j c_{j,-3/2} \cdot g_{j,-3/2} \right) \cdot u_{v,-3/2} \\ \dots\dots\dots \end{Bmatrix} \quad (3.2.1)$$

文章中所考慮的系統屬於固定軌域模型(“rigid orbital” model→僅考慮最低能態的部分)，因此便可以簡化系統的複雜程度，將波包方程式餘留下基態的部分；至於會耦合重電洞的輕電洞部分，一樣採取固定軌域模型，僅考慮其中一個軌域能態(輕電洞的基態波包方程式)對重電洞耦合。因此系統中的激子波函數便可以簡單列下：

$$\psi_{exciton} = \left[g_0^e(\vec{r}_e) \begin{Bmatrix} u_{c,+1/2}(\vec{r}_e) \\ u_{c,-1/2}(\vec{r}_e) \end{Bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} g_{0,+3/2}^h(\vec{r}_h) \cdot u_{v,+3/2}(\vec{r}_h) \\ g_{0,+1/2}^h(\vec{r}_h) \cdot u_{v,+1/2}(\vec{r}_h) \\ g_{0,-1/2}^h(\vec{r}_h) \cdot u_{v,-1/2}(\vec{r}_h) \\ g_{0,-3/2}^h(\vec{r}_h) \cdot u_{v,-3/2}(\vec{r}_h) \end{Bmatrix} \right] \quad (3.2.2)$$

這一些激子的波函數中，並非均藉由發光而釋放能量，只有當其總角動量等於±1 才會放出光子(自旋量等於 1)，而激子的總角動量(M)由電子總角動量($s_{e,z}$)和電洞總角動量($j_{h,z}$)加總而得。為了方便起見將以簡單符號來代表激子波函數(3.2.1a)、(3.2.1b)，並同時列下其總角動量以判斷其為 Bright exciton 或 Dark exciton。

波函數		符號	$s_{e,z}$	$j_{h,z}$	M	
波包方程式	Bloch					
$g_0^e(\vec{r}_e)g_{3/2}^h(\vec{r}_h)$	$u_{e,1/2}(\vec{r}_e)u_{v,3/2}(\vec{r}_h)$	$ \uparrow\rangle_e \downarrow\rangle_h$	1/2	-3/2	-1	Bright exciton
$g_0^e(\vec{r}_e)g_{1/2}^h(\vec{r}_h)$	$u_{e,1/2}(\vec{r}_e)u_{v,1/2}(\vec{r}_h)$	$ \uparrow\rangle_e \downarrow\rangle_h$	1/2	-1/2	0	Dark exciton
$g_0^e(\vec{r}_e)g_{-1/2}^h(\vec{r}_h)$	$u_{e,1/2}(\vec{r}_e)u_{v,-1/2}(\vec{r}_h)$	$ \uparrow\rangle_e \uparrow\rangle_h$	1/2	1/2	1	Bright exciton
$g_0^e(\vec{r}_e)g_{-3/2}^h(\vec{r}_h)$	$u_{e,1/2}(\vec{r}_e)u_{v,-3/2}(\vec{r}_h)$	$ \uparrow\rangle_e \uparrow\rangle_h$	1/2	3/2	2	Dark exciton
$g_0^e(\vec{r}_e)g_{3/2}^h(\vec{r}_h)$	$u_{e,-1/2}(\vec{r}_e)u_{v,3/2}(\vec{r}_h)$	$ \downarrow\rangle_e \downarrow\rangle_h$	-1/2	-3/2	-2	Dark exciton
$g_0^e(\vec{r}_e)g_{1/2}^h(\vec{r}_h)$	$u_{e,-1/2}(\vec{r}_e)u_{v,1/2}(\vec{r}_h)$	$ \downarrow\rangle_e \downarrow\rangle_h$	-1/2	-1/2	-1	Bright exciton
$g_0^e(\vec{r}_e)g_{-1/2}^h(\vec{r}_h)$	$u_{e,-1/2}(\vec{r}_e)u_{v,-1/2}(\vec{r}_h)$	$ \downarrow\rangle_e \uparrow\rangle_h$	-1/2	1/2	0	Dark exciton
$g_0^e(\vec{r}_e)g_{-3/2}^h(\vec{r}_h)$	$u_{e,-1/2}(\vec{r}_e)u_{v,-3/2}(\vec{r}_h)$	$ \downarrow\rangle_e \uparrow\rangle_h$	-1/2	3/2	1	Bright exciton

備註：M 為激子的總角動量，由電子和電洞總角動量加總而得，
所以 $M = s_{e,z} + j_{h,z}$ 。

表 3.2.1、定義激子符號所對應波函數、總角動量

回到本節最初的式子(3.0.1)，由於文章主要探討旋光特性，因此只以 Bright exciton 為基底將 Hamiltonian 展開成矩陣型式。

$$\begin{bmatrix} \langle \vec{r}_h | \langle \vec{r}_e | \uparrow \rangle_e | \downarrow \rangle_h \\ \langle \vec{r}_h | \langle \vec{r}_e | \downarrow \rangle_e | \uparrow \rangle_h \\ \langle \vec{r}_h | \langle \vec{r}_e | \uparrow \rangle_e | \uparrow \rangle_h \\ \langle \vec{r}_h | \langle \vec{r}_e | \downarrow \rangle_e | \downarrow \rangle_h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_0^e(\vec{r}_e)u_{e,+1/2}(\vec{r}_e) \cdot g_{+3/2}^h(\vec{r}_h)u_{v,+3/2}(\vec{r}_h) \\ g_0^e(\vec{r}_e)u_{e,-1/2}(\vec{r}_e) \cdot g_{-3/2}^h(\vec{r}_h)u_{v,-3/2}(\vec{r}_h) \\ g_0^e(\vec{r}_e)u_{e,+1/2}(\vec{r}_e) \cdot g_{-1/2}^h(\vec{r}_h)u_{v,-1/2}(\vec{r}_h) \\ g_0^e(\vec{r}_e)u_{e,-1/2}(\vec{r}_e) \cdot g_{+1/2}^h(\vec{r}_h)u_{v,+1/2}(\vec{r}_h) \end{bmatrix} \quad (3.2.3)$$

因此矩陣向量表示波函數如下：

$$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = \begin{aligned} & c_1 \left[g_0^e(\vec{r}_e)u_{e,+1/2}(\vec{r}_e) \cdot g_{+3/2}^h(\vec{r}_h)u_{v,+3/2}(\vec{r}_h) \right] \\ & + c_2 \left[g_0^e(\vec{r}_e)u_{e,-1/2}(\vec{r}_e) \cdot g_{-3/2}^h(\vec{r}_h)u_{v,-3/2}(\vec{r}_h) \right] \\ & + c_3 \left[g_0^e(\vec{r}_e)u_{e,+1/2}(\vec{r}_e) \cdot g_{-1/2}^h(\vec{r}_h)u_{v,-1/2}(\vec{r}_h) \right] \\ & + c_4 \left[g_0^e(\vec{r}_e)u_{e,-1/2}(\vec{r}_e) \cdot g_{+1/2}^h(\vec{r}_h)u_{v,+1/2}(\vec{r}_h) \right] \end{aligned}$$

以此四個基底對 Bright exciton 的首兩個 Hamiltonian(H_e 、 H_h)做矩陣

展開，將會形成 16 個矩陣元素，而其矩陣元素的計算如下：

$$\langle i|H|j\rangle \equiv \langle H \rangle_{ij} = \langle H_e + H_h \rangle_{ij} - \langle V_{eh}^d \rangle_{ij} + \langle V_{eh}^{ex} \rangle_{ij}$$

矩陣第一列、第一行：

$$\begin{aligned} (H_e + H_h)_{11} &= \langle u_{v,+3/2} | \cdot \langle g_{+3/2}^h | \cdot \langle u_{e,+1/2} | \cdot \langle g_0^e | H_e + H_h | g_0^e \rangle \cdot | u_{e,+1/2} \rangle \cdot | g_{+3/2}^h \rangle \cdot | u_{v,+3/2} \rangle \\ &= \left(\langle g_0^e | \cdot \langle u_{e,+1/2} | H_e | u_{e,+1/2} \rangle \cdot | g_0^e \rangle \right) \cdot \langle g_{+3/2}^h | \langle u_{v,+3/2} | u_{v,+3/2} \rangle | g_{+3/2}^h \rangle \\ &\quad + \langle g_0^e | \langle u_{e,+1/2} | u_{e,+1/2} \rangle | g_0^e \rangle \cdot \left(\langle g_{+3/2}^h | \cdot \langle u_{v,+3/2} | H_h | u_{v,+3/2} \rangle \cdot | g_{+3/2}^h \rangle \right) \\ &= E_{e,0} + E_{hh} \end{aligned}$$

矩陣第二列、第二行：

$$\begin{aligned} (H_e + H_h)_{22} &= \langle u_{v,-3/2} | \cdot \langle g_{-3/2}^h | \cdot \langle u_{e,-1/2} | \cdot \langle g_0^e | H_e + H_h | g_0^e \rangle \cdot | u_{e,-1/2} \rangle \cdot | g_{-3/2}^h \rangle \cdot | u_{v,-3/2} \rangle \\ &= E_{e,0} + E_{hh} \end{aligned}$$

矩陣第三列、第三行：

$$\begin{aligned} (H_e + H_h)_{33} &= \langle u_{v,-1/2} | \cdot \langle g_{-1/2}^h | \cdot \langle u_{e,+1/2} | \cdot \langle g_0^e | H_e + H_h | g_0^e \rangle \cdot | u_{e,+1/2} \rangle \cdot | g_{-1/2}^h \rangle \cdot | u_{v,-1/2} \rangle \\ &= \left(\langle g_0^e | \cdot \langle u_{e,+1/2} | H_e | u_{e,+1/2} \rangle \cdot | g_0^e \rangle \right) \cdot \langle g_{-1/2}^h | \langle u_{v,-1/2} | u_{v,-1/2} \rangle | g_{-1/2}^h \rangle \\ &\quad + \langle g_0^e | \langle u_{e,+1/2} | u_{e,+1/2} \rangle | g_0^e \rangle \cdot \left(\langle g_{-1/2}^h | \cdot \langle u_{v,-1/2} | H_h | u_{v,-1/2} \rangle \cdot | g_{-1/2}^h \rangle \right) \\ &= E_{e,0} + E_{hh} \end{aligned}$$

矩陣第四列、第四行：

$$\begin{aligned} (H_e + H_h)_{44} &= \langle u_{v,+1/2} | \cdot \langle g_{+1/2}^h | \cdot \langle u_{e,-1/2} | \cdot \langle g_0^e | H_e + H_h | g_0^e \rangle \cdot | u_{e,-1/2} \rangle \cdot | g_{+1/2}^h \rangle \cdot | u_{v,+1/2} \rangle \\ &= E_{e,0} + E_{hh} \end{aligned}$$

矩陣第一列、第三行：

$$\begin{aligned} (H_e + H_h)_{13} &= \langle u_{v,+3/2} | \cdot \langle g_{+3/2}^h | \cdot \langle u_{e,+1/2} | \cdot \langle g_0^e | H_e + H_h | g_0^e \rangle \cdot | u_{e,+1/2} \rangle \cdot | g_{-1/2}^h \rangle \cdot | u_{v,-1/2} \rangle \\ &= \left(\langle g_0^e | \cdot \langle u_{e,+1/2} | H_e | u_{e,+1/2} \rangle \cdot | g_0^e \rangle \right) \cdot \langle g_{+3/2}^h | \langle u_{v,+3/2} | u_{v,-1/2} \rangle | g_{-1/2}^h \rangle \\ &\quad + \langle g_0^e | \langle u_{e,+1/2} | u_{e,+1/2} \rangle | g_0^e \rangle \cdot \left(\langle g_{+3/2}^h | \cdot \langle u_{v,+3/2} | H_h | u_{v,-1/2} \rangle \cdot | g_{-1/2}^h \rangle \right) \\ &= \langle g_{+3/2}^h | R_k + R_\varepsilon | g_{-1/2}^h \rangle \\ &= \tilde{\rho}_S \end{aligned}$$

矩陣第二列、第四行：

$$\begin{aligned}
(H_e + H_h)_{24} &= \langle u_{v,-3/2} | \cdot \langle g_{-3/2}^h | \cdot \langle u_{e,-1/2} | \cdot \langle g_0^e | H_e + H_h | g_0^e \rangle \cdot | u_{e,-1/2} \rangle \cdot | g_{+1/2}^h \rangle \cdot | u_{v,+1/2} \rangle \\
&= \left(\langle g_0^e | \cdot \langle u_{e,-1/2} | H_e | u_{e,-1/2} \rangle \cdot | g_0^e \rangle \right) \cdot \langle g_{-3/2}^h | \langle u_{v,-3/2} | u_{v,+1/2} \rangle | g_{+1/2}^h \rangle \\
&\quad + \langle g_0^e | \langle u_{e,-1/2} | u_{e,-1/2} \rangle | g_0^e \rangle \cdot \left(\langle g_{-3/2}^h | \cdot \langle u_{v,-3/2} | H_h | u_{v,+1/2} \rangle \cdot | g_{+1/2}^h \rangle \right) \\
&= \langle g_{-3/2}^h | R_k + R_\varepsilon | g_{+1/2}^h \rangle \\
&= \tilde{\rho}_S^+
\end{aligned}$$

矩陣第一列、第二行：(由基底的正交性可知其為 0)

$$\begin{aligned}
(H_e + H_h)_{12} &= \langle u_{v,+3/2} | \cdot \langle g_{+3/2}^h | \cdot \langle u_{e,+1/2} | \cdot \langle g_0^e | H_e + H_h | g_0^e \rangle \cdot | u_{e,-1/2} \rangle \cdot | g_{-3/2}^h \rangle \cdot | u_{v,-3/2} \rangle \\
&= \left(\langle g_0^e | \cdot \langle u_{e,+1/2} | H_e | u_{e,-1/2} \rangle \cdot | g_0^e \rangle \right) \cdot \langle g_{+3/2}^h | \langle u_{v,+3/2} | u_{v,-3/2} \rangle | g_{-3/2}^h \rangle \\
&\quad + \langle g_0^e | \langle u_{e,+1/2} | u_{e,-1/2} \rangle | g_0^e \rangle \cdot \left(\langle g_{+3/2}^h | \cdot \langle u_{v,+3/2} | H_h | u_{v,-3/2} \rangle \cdot | g_{-3/2}^h \rangle \right) \\
&= 0 + 0 = 0
\end{aligned}$$

由於正交性的關係， $H_{14}=H_{23}=H_{34}=0$ 。且利用矩陣為 Hermitian 的性值

將可以得到其他的矩陣元素並呈現如(3.2.4)

$$H_e + H_h = \begin{bmatrix} \langle \uparrow \rangle_e | \downarrow \rangle_h & \langle \downarrow \rangle_e | \uparrow \rangle_h & \langle \uparrow \rangle_e | \uparrow \rangle_h & \langle \downarrow \rangle_e | \downarrow \rangle_h \\ E_{e,0} + E_{hh} & 0 & \tilde{\rho}_S & 0 \\ 0 & E_{e,0} + E_{hh} & 0 & \tilde{\rho}_S^+ \\ \tilde{\rho}_S^+ & 0 & E_{e,0} + E_{lh} & 0 \\ 0 & \tilde{\rho}_S & 0 & E_{e,0} + E_{lh} \end{bmatrix} \quad (3.2.4)$$

將(3.2.4)所有可能的矩陣元素簡的統整如下。

$$\begin{cases} E_{e,0} = \langle g_{e,0}(\vec{r}) | H_e | g_{e,0}(\vec{r}) \rangle \\ E_{hh} = \langle g_{h,\pm 3/2}(\vec{r}) | P_k + Q_k + V_{QD}^{hh} | g_{h,\pm 3/2}(\vec{r}) \rangle \\ E_{lh} = \langle g_{h,\pm 1/2}(\vec{r}) | P_k - Q_k + V_{QD}^{lh} | g_{h,\pm 1/2}(\vec{r}) \rangle \\ \tilde{\rho}_S = \langle g_{h,\pm 3/2}(\vec{r}) | R_k + R_\varepsilon | g_{h,\mp 1/2}(\vec{r}) \rangle \\ S = \langle g_{h,\pm 3/2}(\vec{r}) | S_k + S_\varepsilon | g_{h,\pm 1/2}(\vec{r}) \rangle \approx 0 \end{cases} \quad (3.2.5)$$

從(3.2.4)中的矩陣比對(3.2.5)的矩陣元素，發現似乎缺少了 S 項，其

實當基底也把 dark exciton 考慮進來時，則 S 也會出現，因為此項屬於 Bright exciton 和 Dark exciton 的交互作用項，不過於此將其忽略。

因為由(表 2.3.2)中知道 S_k 為 $\frac{-\hbar^2}{m_0} \sqrt{3} \left[\gamma_3 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \right]$ 而正比於 $\frac{\partial}{\partial z}$ ，且文

章前段已假設量子點為透鏡形狀，所以重電洞與輕電洞的波包方程式

沿 Z 軸方向為對稱型式，(圖 3.2.1)為其簡單示意圖，則 S_k 的值將等

於零。

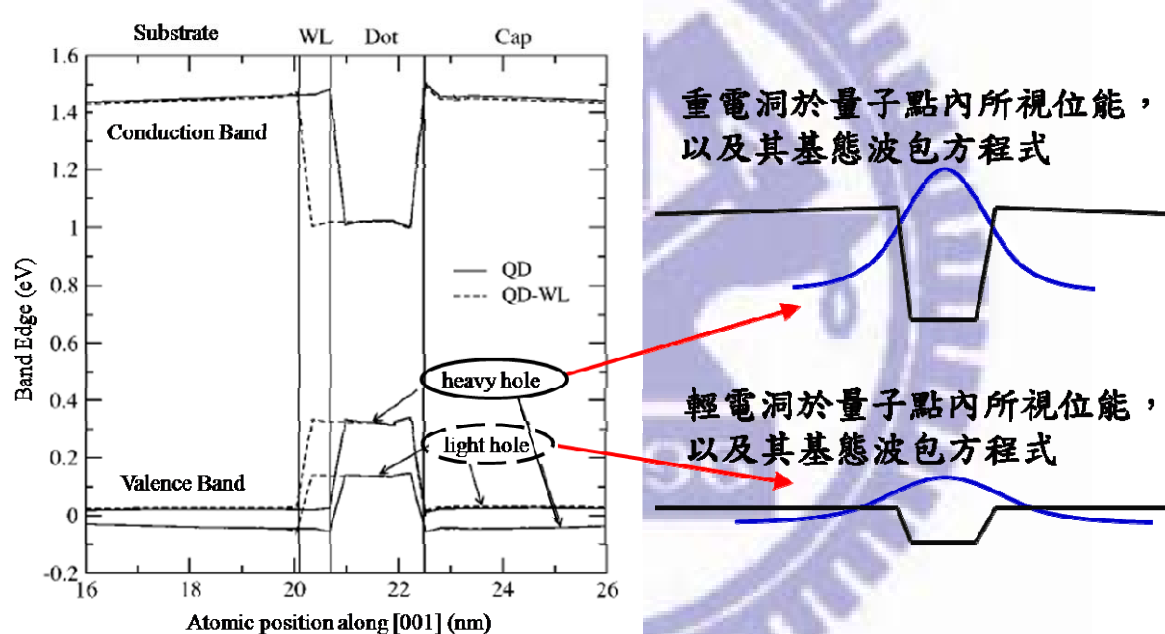


圖 3.2.1、左半邊為透鏡形量子點的位能剖視圖，摘自參考文獻[18] 右半邊維臆測的重電洞、輕電洞的基態波包方程式

至於 S_e 的部份可利用 comsol 軟體計算出的實空間分佈，在同樣地乘上重電洞、輕電洞波包方程式並對實空間進行積分，由於 $S_e(r)$ 在空間中屬於奇函數對稱，而氫原子 S 型軌道方程式屬於偶函數對稱，所以 S_e 的積分亦等於零。因此 S 項在本文章的假設下將不會對 Bright exciton 和 Dark exciton 進行交互作用。

3.3 激子的交互作用

直接庫倫作用力

這一小節將要介紹(3.0.1)中的交互作用項，首先從其第三項的直接庫倫作用力(Direct Coulomb Interact)計算式開始：

$$\begin{aligned}
 V_{eh}^d &= \iint d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \Psi_0^{e*}(\vec{r}_1) \Psi_i^{h*}(\vec{r}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} \Psi_i^h(\vec{r}_1) \Psi_0^e(\vec{r}_2) \\
 &= \iint d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \left[g_0^{e*}(\vec{r}_1) u_{c,s_z}^*(\vec{r}_1) g_{i,j_z}^*(\vec{r}_2) u_{v,j_z}^*(\vec{r}_2) \right. \\
 &\quad \left. \times \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} \times g_{i,j_z}(\vec{r}_1) u_{v,j_z}(\vec{r}_1) g_0^e(\vec{r}_2) u_{c,s_z}(\vec{r}_2) \right] \\
 &\approx \iint d^3\vec{R}_1 d^3\vec{R}_2 \left[g_0^{e*}(\vec{R}_1) g_{i,j_z}^*(\vec{R}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\vec{R}_1-\vec{R}_2|} g_{i,j_z}(\vec{R}_2) g_0^e(\vec{R}_1) \right] \\
 &\quad \times \iint d^3\vec{\tau}_1 d^3\vec{\tau}_2 \left[u_{c,s_z}^*(\vec{\tau}_1) u_{v,j_z}^*(\vec{\tau}_2) \right. \\
 &\quad \left. \times u_{v,j_z}(\vec{\tau}_2) u_{c,s_z}(\vec{\tau}_1) \right] \dots\dots\dots(3.3.1)
 \end{aligned}$$

(3.3.1)為激子系統中電子和電洞的直接庫倫力的積分式，而其最末項會因為 Bloch function 的正交性使積分式僅和波包方程式相關，如今分別代入含重電洞激子、含輕電洞激子，將得到(3.3.2a)(3.3.2b)。

$$V_{eh,hh}^d = \iint d^3\vec{R}_1 d^3\vec{R}_2 \left[g_0^{e*}(\vec{R}_1) g_{0,\pm 3/2}^*(\vec{R}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\vec{R}_1-\vec{R}_2|} g_{0,\pm 3/2}(\vec{R}_2) g_0^e(\vec{R}_1) \right] \dots\dots\dots(3.3.2a)$$

$$V_{eh,th}^d = \iint d^3\vec{R}_1 d^3\vec{R}_2 \left[g_0^{e*}(\vec{R}_1) g_{0,\pm 1/2}^*(\vec{R}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\vec{R}_1-\vec{R}_2|} g_{0,\pm 1/2}(\vec{R}_2) g_0^e(\vec{R}_1) \right] \dots\dots\dots(3.3.2b)$$

一樣的運用 Bloch function 的正交性(orthogonal)將使得其在 Bright exciton 的基底中只會於斜對角項形成非零項(3.3.3)。

$$-V_{eh}^d = - \begin{matrix} \begin{matrix} |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} V_{eh,hh}^d & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V_{eh,hh}^d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_{eh,lh}^d & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_{eh,lh}^d \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (3.3.3)$$

電子電洞間交換能

對於(3.0.1)的第四項電子、電洞交換能(e-h exchange energy)計算式：

$$V_{eh}^{ex} = \iint d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \Psi_0^{e*}(\vec{r}_1) \Psi_0^{h*}(\vec{r}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi_0^h(\vec{r}_1) \Psi_0^e(\vec{r}_2) \quad (3.3.4)$$

在一般得參考書籍[19]以及論文[20]都將其寫成另一種 spin

Hamiltonian 的型式：

$$V_{eh}^{ex} = - \sum_{i=x,y,z} \left(a_i \cdot J_{h,i} \cdot S_{e,i} + b_i \cdot J_{h,i}^3 \cdot S_{e,i} \right) \quad (3.3.5)$$

$s_{e,i}$ 為電子的自旋 1/2 的泡立矩陣(Pauli matrix)， $J_{h,i}$ 為電洞的總角動量 3/2 的泡立矩陣，在此我們取正的 Z 方向為 $S_{e,i}$ 和 $J_{h,i}$ 的基準方向。

同於前例，僅僅抽出 bright exciton 的基底。

$$H_{eh}^{ex} = \begin{matrix} \begin{matrix} |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} \delta_0 & \delta_1 & 0 & \delta_{lh} \\ \delta_1 & \delta_0 & \delta_{lh} & 0 \\ 0 & \delta_{lh} & \delta_0' & \delta_1' \\ \delta_{lh} & 0 & \delta_1' & \delta_0' \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (3.3.6)$$

(3.3.6)中的矩陣元素可以將其展開如下：

$$\begin{cases} \delta_0 = a_z \frac{3}{4} + b_z \frac{27}{16} & \delta_0^l = -\left(a_z \frac{1}{4} + b_z \frac{1}{16} \right) \\ \delta_1 = \frac{-6}{16}(b_x - b_y) & \delta_1^l = \frac{-1}{2}(a_x - a_y) - \frac{5}{4}(b_x - b_y) \\ \delta_{lh} = \frac{-\sqrt{3}}{4}(a_x + a_y) - \frac{7\sqrt{3}}{16}(b_x + b_y) \end{cases}$$

3.4 激子 Hamiltonian

至目前為止已經將(3.0.1)所有作用項用 Bright exciton 的基底展開成矩陣型式，把矩陣加總起來將得到 Bright Exciton Hamiltonian。

$$H_{BX} = H_e + H_h - V_{eh}^d + H_{eh}^{ex}$$

$$H_{BX} = \begin{matrix} \begin{matrix} |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \end{matrix} \\ \left[\begin{array}{cccc} E_{e,0} + E_{hh} & & & \\ -V_{eh,hh}^d + \delta_0 & \delta_1 & \tilde{\rho}_S & \delta_{lh} \\ & E_{e,0} + E_{hh} & & \\ \delta_1 & -V_{eh,hh}^d + \delta_0 & \delta_{lh} & \tilde{\rho}_S^+ \\ & & E_{e,0} + E_{lh} & \\ \tilde{\rho}_S^+ & \delta_{lh} & -V_{eh,lh}^d + \delta_0^l & \delta_1^l \\ & & & E_{e,0} + E_{lh} \\ \delta_{lh} & \tilde{\rho}_S & \delta_1^l & -V_{eh,lh}^d + \delta_0^l \end{array} \right] \end{matrix} \quad (3.4.1a)$$

將(3.4.1a) 的矩陣作能量的平移，就是把矩陣抽離出一個單位矩陣，這樣的動作並不會改變矩陣的特徵向量，所以旋光特性將不受影響，至於特徵值可以之後再把平移的能量加回即可。

$$\underbrace{\begin{pmatrix} E_{e,0} + E_{hh} - V_{eh,hh}^d \\ \text{重電洞能量} \end{pmatrix}}_{\text{重電洞能量}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \delta_0 & \delta_1 & \tilde{\rho}_s & \delta_{lh} \\ \delta_1 & \delta_0 & \delta_{lh} & \tilde{\rho}_s^+ \\ \tilde{\rho}_s^+ & \delta_{lh} & \Delta_{lh} + \delta_0^l & \delta_1^l \\ \delta_{lh} & \tilde{\rho}_s & \delta_1^l & \Delta_{lh} + \delta_0^l \end{bmatrix} \quad (3.4.1b)$$

而(3.4.1b)式子中的 Δ_{lh} 等於 $(E_{lh} - V_{eh,lh}^d) - (E_{hh} - V_{eh,hh}^d)$ ，也就是輕電洞、重電洞的能量差，且此式子第二項的斜對角項都還有值，因此再做一次平移以簡化矩陣。

$$\underbrace{\begin{pmatrix} E_{e,0} + E_{hh} \\ -V_{eh,hh}^d + \delta_0 \\ \text{重電洞能量} \end{pmatrix}}_{\text{重電洞能量}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \delta_1 & \tilde{\rho}_s & \delta_{lh} \\ \delta_1 & 0 & \delta_{lh} & \tilde{\rho}_s^+ \\ \tilde{\rho}_s^+ & \delta_{lh} & \Delta_{lh} & \delta_1^l \\ \delta_{lh} & \tilde{\rho}_s & \delta_1^l & \Delta_{lh} \end{bmatrix} \quad (3.4.1c)$$

上述(3.4.1)中的 $\tilde{\rho}_s$ 為複數，所已表示為 $\tilde{\rho}_s = \rho_s e^{-2i\phi_s}$ 。(3.4.1c)中為了降低參數，其實做了 $\Delta_{lh} + \delta_0^l - \delta_0 \approx \Delta_{lh}$ 的假設，如此才能真正降低所處理的參數數目。之後所要處理的矩陣便是(3.4.1c)的第二項矩陣。

估計參數值

不過要模擬出較接近真實量子點的結果就要使用正確的參數值，先由(3.4.1b)的第二項矩陣中列出所有參數。

表 3.4.1、式子(3.4.1)矩陣參數列表

分類	符號	說明		能量尺度
電子-重電洞 交換能	δ_0	BX 和 DX 之間 的能量差	$2\delta_0$	0.5~1 meV
	δ_1	BX 因交換能產生 的能量差	$2\delta_1 = \frac{-3}{4}(b_x - b_y)$	0.01~0.05 meV

電子-輕電洞 交換能	δ_0^l	BX 和 DX 之間的 能量差	$2\delta_0^l$	0.5~1 meV
	δ_1^l	BX 因交換能產生 的能量差	$2\delta_1^l = -1(a_x - a_y) - \frac{5}{2}(b_x - b_y)$	0.03~0.15 meV
Bright Exciton (Dark exciton) 間的耦合	$\tilde{\rho}_S$	重電洞、輕電洞耦合，因量子點的幾何不對稱性以及應力不對稱性所造成。激子之間總角動量相差 2 會產生此項耦合。		
	ρ_S	$\tilde{\rho}_S$ 的量值大小		10~50 meV
	φ_S	$\tilde{\rho}_S$ 的相位角		0°
	δ_{lh}	激子總角動量一樣時，藉由此項耦合		0.1meV
	Δ_{lh}	重電洞和輕電洞能階的能量差值		100~500 meV

總共八個參數，不過還能再藉由能量的再次平移和 $\Delta_{lh} \approx \Delta_{lh} + \delta_0^l - \delta_0$

關係式，將參數再降為六個($\delta_1^l, \delta_1^l, \Delta_{lh}, \rho_S, \varphi_S, \delta_{lh}$)。

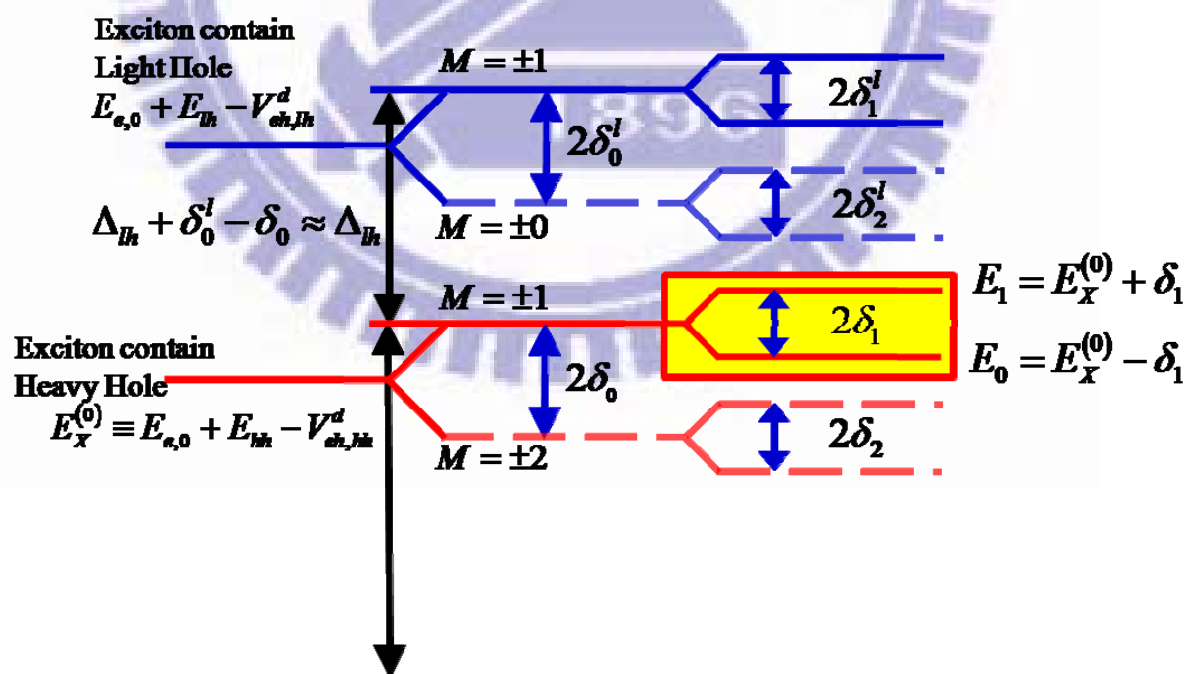


圖 3.4.1、各激子間能階關係圖

M 代表各激子的總角動量，標示於(表 3.2.1)

而且 M 可以分辨 Bright exciton(±1)和 Dark exciton(±2、±0)

(1) Δ_{lh} (重電洞和輕電洞的能量差距)

重電洞和輕電洞的能量在自組式量子點中會因為應力的變化而產生差距，所以若是要 Δ_{lh} 估計值可以取輕電洞、重電洞考慮應力的位能差距，因此取用參考文獻[17]、[18]的資訊加以估計。

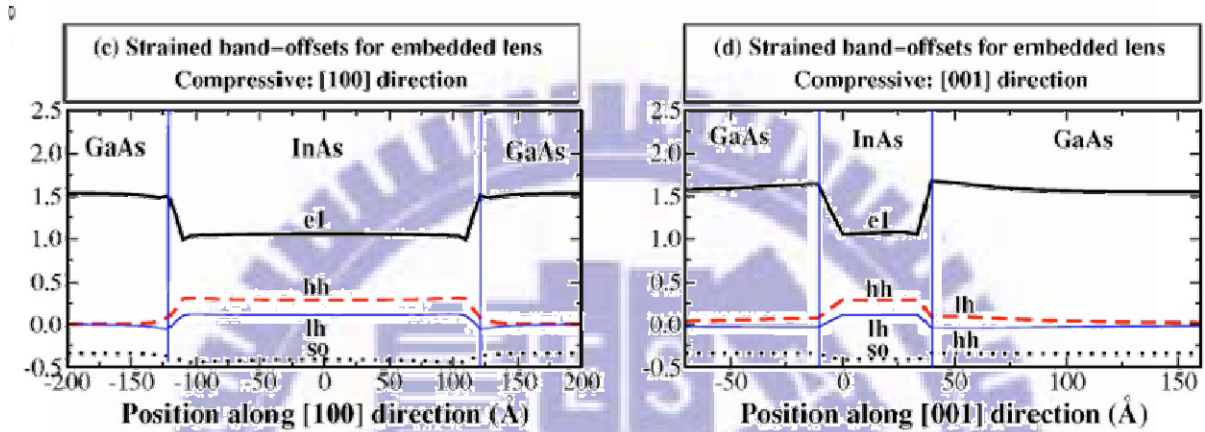


圖 3.4.2、為透鏡形狀量子點因應力造成的位能剖面圖[17]

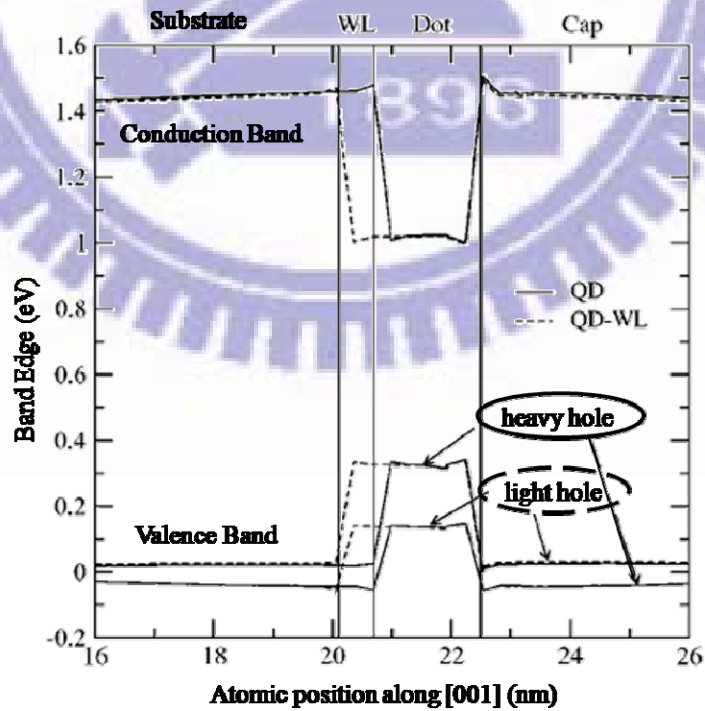


圖 3.4.3、為透鏡形狀量子點因應力造成的位能剖面圖[18]

由(圖 3.4.2)、(圖 3.4.2)可以發現，重電洞和輕電洞的位能剖面圖相似，為文章所假設的情況，其基態波包函數均類似於S型氫圓子軌道，且所以重電洞和輕電洞能量差便可以單純的假設為其位能差距，其值大概 0.2eV。

(2) $\rho_s e^{-2i\phi_s}$ (來自 Luttinger-Kohn 和 Bir-Pikus Hamiltonian)

$\rho_s e^{-2i\phi_s} = R_k + R_\varepsilon$ ，由(表 2.3.1)可以知道 R_k 、 R_ε 的型式。現在假設有一長方體形狀的量子點，其長寬高分別為 20nm、15nm、3nm，屬於無限深位能井的型式，其重電洞、輕電洞則均為基態型式，屬於氫原子 S 型軌道且侷限於量子點中，可以列波包方程式為(3.4.2)。

$$g_{\pm 3/2}(\vec{r}) = g_{\pm 1/2}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{8}{900}} \cdot \cos\left[\frac{\pi}{20}x\right] \cdot \cos\left[\frac{\pi}{15}y\right] \cdot \cos\left[\frac{\pi}{3}z\right] \quad (3.4.2)$$

得到此假設得波函數便可取得 R_k 、 R_ε 的值。

$$\begin{aligned} R_\varepsilon &= \left\langle g_{3/2}(\vec{r}_h) \left| \frac{\sqrt{3}b}{2} [\varepsilon_{xx}(\vec{r}) - \varepsilon_{yy}(\vec{r})] - id\varepsilon_{xy}(\vec{r}) \right| g_{-1/2}(\vec{r}_h) \right\rangle \\ &= 0.0103155 + i \cdot 0.0000699 (eV) \end{aligned} \quad (3.4.3a)$$

(3.4.3a)的應力計算是曾滋鈞學弟由 comsol 軟體計算而得，上述式子中的參數以 InAs 材料的值[16]代入，將得到 $\frac{\sqrt{3}b}{2} [\varepsilon_{xx}(\vec{r}) - \varepsilon_{yy}(\vec{r})]$ 以及 $id\varepsilon_{xy}(\vec{r})$ 的空間中分佈為(圖 3.4.4)。

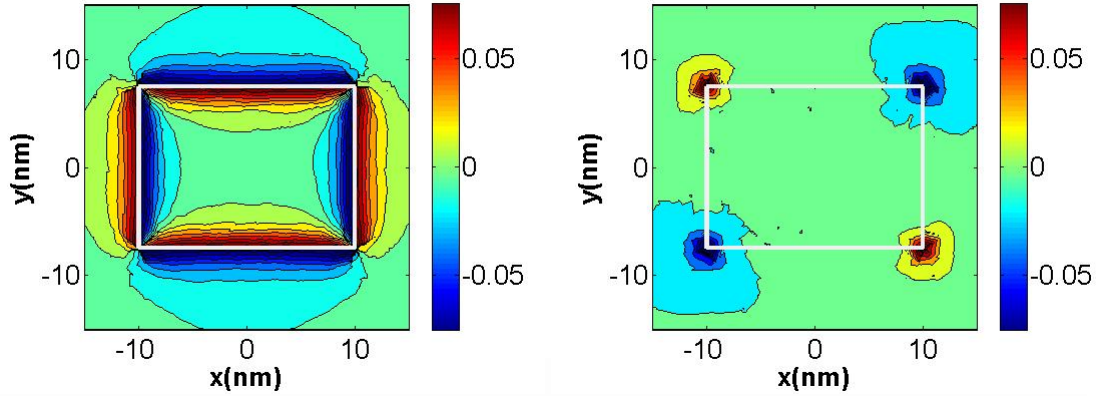


圖 3.4.4、(a) $\frac{\sqrt{3}b}{2}[\epsilon_{xx}(\vec{r}) - \epsilon_{yy}(\vec{r})]$ 在 XY 平面的空間分佈
 (b) $d \cdot \epsilon_{xy}(\vec{r})$ 在 XY 平面的空間分佈

$$\begin{aligned}
 R_k &= \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} \left\langle g_{3/2}(\vec{r}_h) \left| \gamma_2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - i \left[2\gamma_3 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right] \right| g_{-1/2}(\vec{r}_h) \right\rangle \\
 &= \gamma_2 \times 1.2585 \times 10^{-3} + i \cdot 0 \\
 &= 8.4 \times 1.2585 \times 10^{-3} = 0.01057 (eV) \tag{3.4.3b}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \rho_s e^{-i2\phi_s} &= \left\langle g^i(\vec{r}_h) \left| \mathbf{R} \right| g^j(\vec{r}_h) \right\rangle = (0.0103155 + i \cdot 0.0000699) + (0.01057 + i \cdot 0) \\
 &= 0.0208855 + i \cdot 0.0000699 \quad (eV)
 \end{aligned}$$

$$\rho_s = 0.0208856 \quad \phi_s = -0.192^\circ$$

$$(3) \quad \delta_1 = \frac{-6}{16}(b_x - b_y)$$

此一參數主要為交換能所造成，由其所形成的基底寫成積分式如下：

$$\begin{aligned}
 V_{eh}^{ex} &= \iint d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \Psi_0^{e*}(\vec{r}_1) \Psi_0^{h*}(\vec{r}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi_0^h(\vec{r}_1) \Psi_0^e(\vec{r}_2) \\
 &= \iint d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \left[\begin{aligned} &g_0^{e*}(\vec{r}_1) u_{c,1/2}^*(\vec{r}_1) g_{0,-3/2}^*(\vec{r}_2) u_{v,-3/2}^*(\vec{r}_2) \\ &\times \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \times g_{0,3/2}(\vec{r}_1) u_{v,3/2}(\vec{r}_1) g_0^e(\vec{r}_2) u_{c,-1/2}(\vec{r}_2) \end{aligned} \right]
 \end{aligned}$$

而此交換能數值可由研究室的博士後 Hanz Ramirez 以及學長趙虔震的研究工作中獲得，其值大約是幾十個微電子伏特(μeV)。

$$(4) \quad \delta_1^l = \frac{-1}{2}(a_x - a_y) - \frac{5}{4}(b_x - b_y)$$

關於這一個參數，由於也是交換能，所以也能寫成積分是並計算之，

不過由於其 spin Hamiltonian 的型式恰似為 δ_1 ，因此直接藉由 spin

Hamiltonian 的型式進行估計。 $\frac{-1}{2}(\mathbf{a}_x - \mathbf{a}_y) - \frac{5}{4}(\mathbf{b}_x - \mathbf{b}_y)$ 中的 \mathbf{a}_x 、 \mathbf{a}_y

的部分可能屬於短程交換能的部分(因原子結構內部 Bloch function 不對稱所引起)，其值大多遠小於長程交換能(因量子點幾何不對稱所引起)

而得以忽略，所以 δ_1^l 約為 $\frac{-5}{4}(\mathbf{b}_x - \mathbf{b}_y)$ ，且 δ_1 等於 $\frac{-6}{16}(\mathbf{b}_x - \mathbf{b}_y)$ ，所

以 $\delta_1^l \approx \frac{10}{3}\delta_1$ 。

$$(5) \quad \delta_{lh} = \frac{-\sqrt{3}}{4}(a_x + a_y) - \frac{7\sqrt{3}}{16}(b_x + b_y)$$

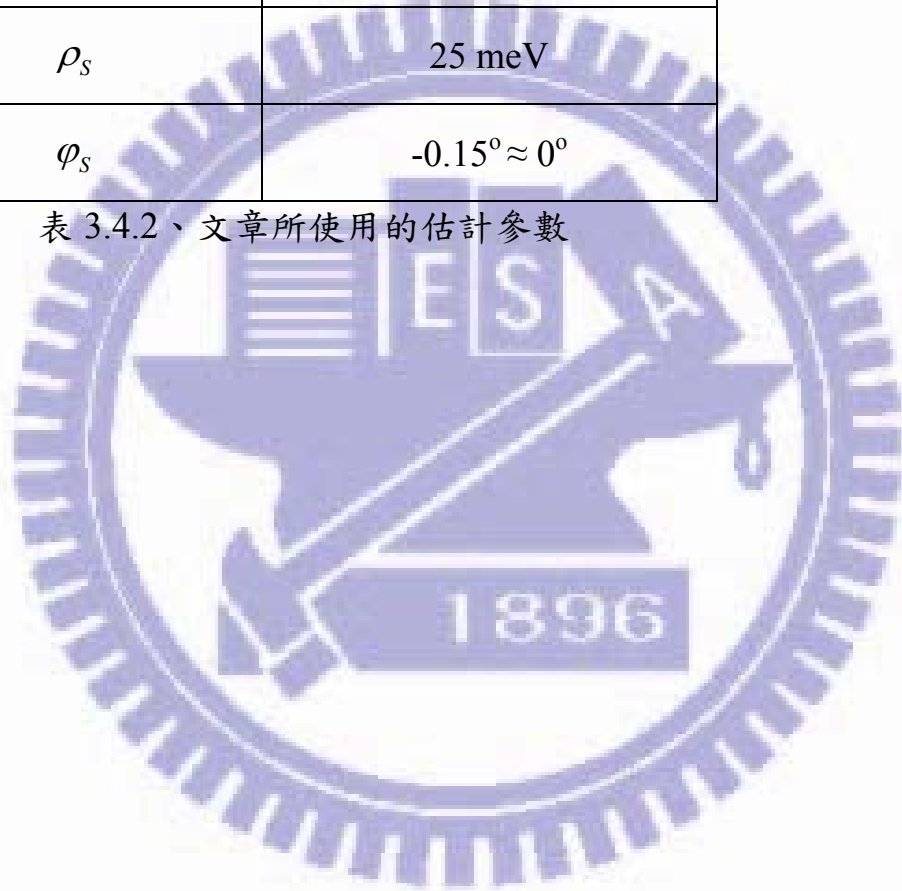
至於最後一項參數，其屬於短程交換能，雖然一樣可以寫成積分式計

算之，但至目前仍尚未確定正確值以及其正、負號，不過其數量級應

該和其他的交換能一樣，並且先暫定此參數大於零。

符號	數值
δ_1	0.025 meV
δ_1'	$0.025 \times \frac{10}{3} = 0.083$ meV
δ_{lh}	0.1 meV
Δ_{lh}	200 meV
ρ_s	25 meV
φ_s	$-0.15^\circ \approx 0^\circ$

表 3.4.2、文章所使用的估計參數



第四章 結果與討論

這一章是列出模擬結果並探討之，因此章節一開始先列出主要所要處理的式子，也就是(3.4.1c)的第二項矩陣。

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cccc}
 |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h
 \end{array} \\
 \left[\begin{array}{cccc}
 0 & \delta_1 & \rho_S e^{-2i\varphi_S} & \delta_{lh} \\
 \delta_1 & 0 & \delta_{lh} & \rho_S e^{+2i\varphi_S} \\
 \rho_S e^{+2i\varphi_S} & \delta_{lh} & \Delta_{lh} & \delta_1' \\
 \delta_{lh} & \rho_S e^{-2i\varphi_S} & \delta_1' & \Delta_{lh}
 \end{array} \right]
 \end{array} \quad (4.0.1)$$

4.1 激子系統不具有重電洞、輕電洞耦合(電子-重電洞對)

在只有電子、重電洞對的激子系統，相當於只抽出第一個和第二個基底，而將矩陣簡化為 2X2 的大小(4.1.1)：

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cc}
 |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h
 \end{array} \\
 \left[\begin{array}{cc}
 0 & \delta_1 \\
 \delta_1 & 0
 \end{array} \right]
 \end{array} \quad (4.1.1)$$

處理矩陣最一般的動作便是將其對角化，求其特徵值以及特徵向量，對於(4.1.1)也是一樣。

	E_j	$ X, j\rangle$
	Eigenvalues	Eigenvectors
基態(E_0)	$E_X^{(0)} - \delta_1$	$ X, 0\rangle = \frac{ \uparrow\rangle_e \downarrow\rangle_h - \downarrow\rangle_e \uparrow\rangle_h}{\sqrt{2}}$
第一激發態(E_1)	$E_X^{(0)} + \delta_1$	$ X, 1\rangle = \frac{ \uparrow\rangle_e \downarrow\rangle_h + \downarrow\rangle_e \uparrow\rangle_h}{\sqrt{2}}$

備註：由(圖 3.4.1)知道 $E_X^{(0)}$ 為激子(包含重電洞)的能量
表 4.1.1、式子(4.1.1)矩陣的特徵值和特徵向量

本文章主要探討的是旋光特性，然而得到特徵值以及特徵向量並不足以表達出所有計算態的旋光特性，因為要完全表達一個態需要基底以及特徵向量，因為特徵向量只是基底態的組合，真正的物理涵義均隱藏於基底之中。而在此所取的 Bright exciton 基底則要依 Fermi's Golden Rule(附錄 A)以及參考文獻[22]的做法來剖析旋光的特性，在此不重覆附錄 A 的過程，不過將其結果列表如下：

激子基底	$j_{h,z}$	$s_{e,z}$	旋光振幅
$ \uparrow\rangle_e \downarrow\rangle_h$	-3/2	+1/2	$A_{+1/2,-3/2}(\theta) = \left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right)$
$ \downarrow\rangle_e \uparrow\rangle_h$	+3/2	-1/2	$A_{-1/2,+3/2}(\theta) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right)$
$ \uparrow\rangle_e \uparrow\rangle_h$	+1/2	+1/2	$A_{+1/2,+1/2}(\theta) = \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right)$
$ \downarrow\rangle_e \downarrow\rangle_h$	-1/2	-1/2	$A_{-1/2,-1/2}(\theta) = \left(\frac{-1}{\sqrt{6}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right)$
備註： $i \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} = \langle S \mathbf{p}_x X \rangle = \langle S \mathbf{p}_y Y \rangle = \langle S \mathbf{p}_z Z \rangle$			

表 4.1.2、各個激子基底所釋放旋光振幅的 θ 函數

(表 4.1.2)中所列的 $A_{s_{e,z}, j_{h,z}}(\theta)$ 平方正比於旋光強度而稱之為旋光振幅，而 θ 所代表的是 \hat{e} 和 \hat{p}_x (相同於實空間 X 軸方向)之間相差角度， \hat{p} 為電子的動量算符， \vec{e} 為平行檢偏器(analyzer)的偏振方向， \mathbf{P} 則為 Kane's parameter。

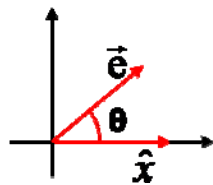


圖 4.1.1、(表 4.1.2)中 θ 在實空間中的示意圖

在探討結果前，先將所要討論的物理量值定義：

- (1) **本徵能量及本徵態**：在此章節所計算的是重電洞、輕電洞不具耦合的系統，所處理的是(4.1.1)的 2X2 矩陣，因此可以很容易得到其解析的特徵值、特徵向量，其分別代表了此系統的特徵能量、特徵態，結果為 (表 4.1.1)。

	E_j	$ X, j\rangle$
	Eigenvalues	Eigenvectors
基態(E_0)	$E_X^{(0)} - \delta_1$	$ X, 0\rangle = \frac{ \uparrow\rangle_e \downarrow\rangle_h - \downarrow\rangle_e \uparrow\rangle_h}{\sqrt{2}}$
第一激發態(E_1)	$E_X^{(0)} + \delta_1$	$ X, 1\rangle = \frac{ \uparrow\rangle_e \downarrow\rangle_h + \downarrow\rangle_e \uparrow\rangle_h}{\sqrt{2}}$

備註：由(圖 3.4.1)知道 $E_X^{(0)}$ 為激子(包含重電洞)的能量
表 4.1.1、式子(4.1.1)矩陣的特徵值和特徵向量

- (2) **旋光強度**：依照(表 4.1.2)的 $A_{j_z, s_z}(\theta)$ 將可以計算出基態、第一激發態的旋光強度。

基態：

$$\begin{aligned}
 I_0(\theta) &\propto \left| \langle vac | \sum_{j_z, s_z} A_{j_z, s_z}(\theta) \hat{h}_{j_z} \hat{c}_{s_z} |X, 0\rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - E_X) \\
 &= \left| \langle vac | \left(\sum_{j_z, s_z} A_{j_z, s_z}(\theta) \hat{h}_{j_z} \hat{c}_{s_z} \right) \frac{|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h - |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h}{\sqrt{2}} \right|^2 \\
 &= \left| \frac{A_{-3/2, 1/2}(\theta)}{\sqrt{2}} \langle vac | (\hat{h}_{-3/2} \hat{c}_{1/2}) |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \right. \\
 &\quad \left. - \frac{A_{3/2, -1/2}(\theta)}{\sqrt{2}} \langle vac | (\hat{h}_{3/2} \hat{c}_{-1/2}) |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h \right|^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right) - \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right) \right]^2 \\
&= \frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2} |\cos \theta|^2
\end{aligned} \tag{4.1.4a}$$

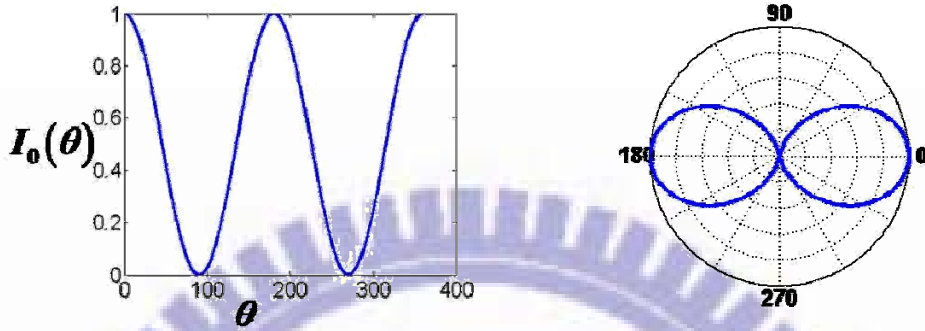


圖 4.1.2、對(4.1.4a)作圖，左為 XY 座標，右為極座標

第一激發態：

$$\begin{aligned}
I_1(\theta) &\propto \left| \langle \text{vac} | \sum_{j_z, S_z} A_{j_z, S_z}(\theta) \hat{h}_{j_z} \hat{c}_{S_z} | X, 1 \rangle \right|^2 \\
&= \left| \langle \text{vac} | \left(\sum_{j_z, S_z} A_{j_z, S_z}(\theta) \hat{h}_{j_z} \hat{c}_{S_z} \right) \frac{|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h + |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h}{\sqrt{2}} \right|^2 \\
&= \left| \frac{A_{-3/2, 1/2}(\theta)}{\sqrt{2}} \langle \text{vac} | (\hat{h}_{-3/2} \hat{c}_{1/2}) |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \right. \\
&\quad \left. + \frac{A_{3/2, -1/2}(\theta)}{\sqrt{2}} \langle \text{vac} | (\hat{h}_{3/2} \hat{c}_{-1/2}) |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h \right|^2 \\
&= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right) + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right) \right]^2 \\
&= \frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2} |\sin \theta|^2
\end{aligned} \tag{4.1.4b}$$

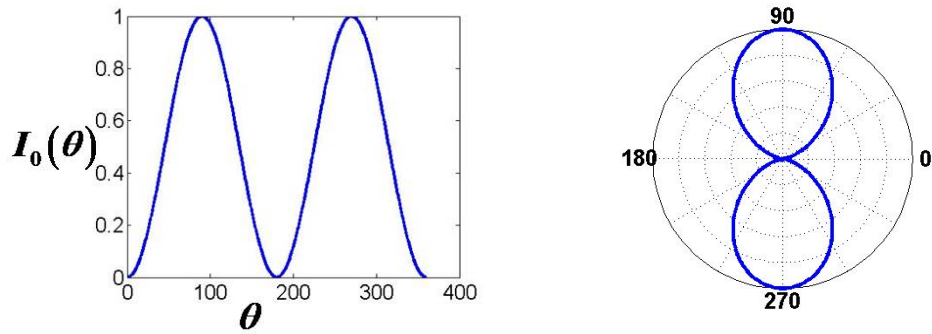


圖 4.1.3、對(4.1.4b)作圖，左為 XY 座標，右為極座標

- (3) **旋光的偏振方向**：藉由上述的計算將得到各個 θ 所對應的旋光強度，只要當旋光不是圓偏振光亦不是非極化光時，其旋光強度必然有強有弱，而最大強度旋光所對應的 θ 定義為 θ_{\max} ，且 θ_{\max} 也透露了旋光的偏振方向。以下將列表出此系統的基態、第一激發態旋光的 θ_{\max} ，並且當 θ_{\max} 較為接近 0° 、 180° (X 軸) 的旋光定為 π_x 旋光，而 θ_{\max} 較為接近 90° 、 270° (Y 軸) 的旋光定為 π_y 旋光。

表 4.1.3、將基態、第一激發態旋光區分為 π_x 、 π_y 旋光

	旋光強度	θ_{Max}	以偏振方向為基準，重新定義	
基態 $I_0(\theta)$	$\frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2} \cos \theta ^2$	0° 、 180°	沿著 X 軸方向 的強度最大	$I_0(\theta_{\text{Max}})$ $= I_{\pi_x}(\theta_{\text{Max}})$
第一激發態 $I_1(\theta)$	$\frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2} \sin \theta ^2$	90° 、 270°	沿著 Y 軸方向 的強度最大	$I_1(\theta_{\text{Max}})$ $= I_{\pi_y}(\theta_{\text{Max}})$

- (4) **精細結構劈裂**：特徵值即代表了能量，因此發現此系統能量(特徵值)不再簡併，便可求得激子的精細結構能量劈裂(Fine

Structure Splitting)，並將其定義如下：

$$FSS(\text{Fine structure splitting}) = E_{\pi_y} - E_{\pi_x} \dots\dots\dots(4.1.3)$$

不過由於本篇文章主要在探討旋光特性，所以能量也將以旋光特性來區分，而不是能量高低來區分，藉由(表 4.1.3)的結果了解基態屬於 π_x 旋光，而第一激發態屬於 π_y 旋光，因此接下來將以 E_{π_x} 代表 E_0 ，而 E_{π_y} 代表 E_1 。

(5) **Polarizability**：(圖 4.1.2)、(圖 4.1.3)表現出 π_x 、 π_y 線偏振為相同強度，似乎看不出量子點中的光學異相性(optical anisotropy)，其簡單的來說是光從物質中釋放出來時，會因方向的不同而有不同的強度。不過為了方便辨認所謂的光學異相性，將在此定義極化率的值。前面的 FSS 以旋光偏振方向為基準定義，所以此處極化率亦是以旋光偏振方向為基準。

$$\text{Polarzability} = \frac{I_{\pi_y}(\theta_{\max}) - I_{\pi_x}(\theta_{\max})}{I_{\pi_y}(\theta_{\max}) + I_{\pi_x}(\theta_{\max})} \quad (4.1.5)$$

在此系統中，Polarizability=0，所以當極化率的值越大表示光學異相性越大。

由 (表 4.1.3)知道，當基態以及第一激發態均發出線性偏振光且分別沿著 X 軸、Y 軸，以此特性可以知道文章中矩陣所模擬的不對稱量子點且長軸沿 X 方向(圖 4.1.4)。

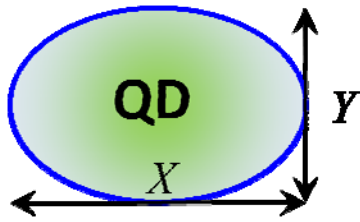


圖 4.1.4、
所模擬的量子點形狀之示意圖，以 X 為長軸。因為基態釋放出 X 軸方向旋光，所以價電帶的 P_x 軌域較易與電子形成激子(電子-電洞對)。

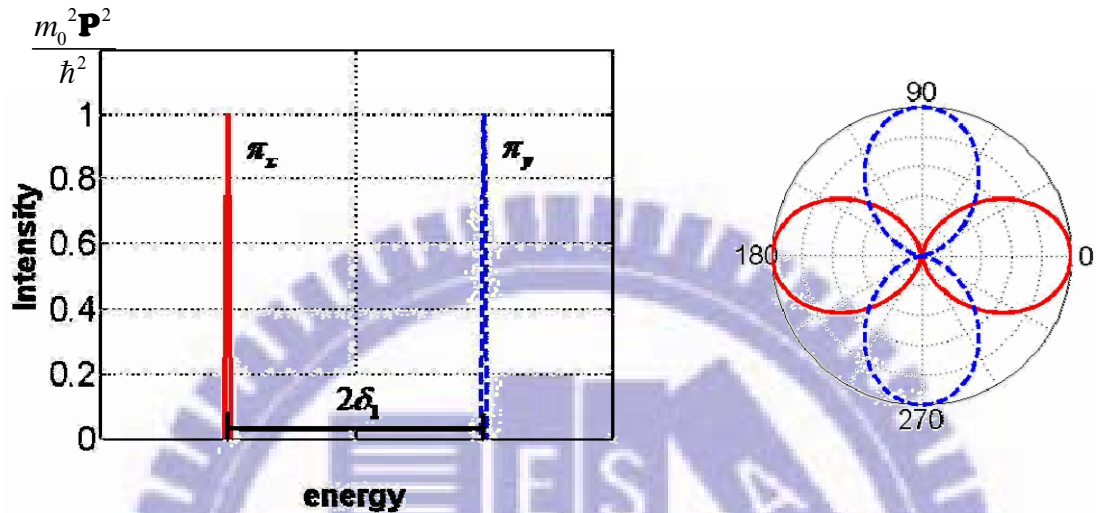


圖 4.1.5、 左：頻譜圖 右：(4.1.4a) (4.1.4b)所得極座標圖
實線: X 方向偏振(π_x) 虛線: Y 方向偏振(π_y)

此節最後將模擬結果和實驗做比較可以發現，當激子系統中不考慮重電洞、輕電洞耦合時，便會有能量的劈裂而使得雙激子系統不再具有糾纏態特性，其乃由交換能所造成。然而卻觀察不到光學的異相性，且兩線性偏振光標準的躺於 X、Y 而相差 90° 並無產生偏轉現象，無法完全說明實驗結果，文章主旨便是增加考慮重電洞、輕電洞耦合以提高模擬真實性。

4.2 激子的系統中加入重電洞、輕電洞耦合

在上一節討論過純粹電子、重電洞對的激子系統後，將要考慮重電洞耦合輕電洞對系統的影響，系統所受的影響可能如(圖 4.2.0)，所以矩陣也重新加入了新的激子(電子、輕電洞)使矩陣回到了(4.0.1)：

$$\begin{array}{cccc}
 |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \\
 \left[\begin{array}{cccc}
 0 & \delta_1 & \rho_s e^{-2i\varphi_s} & \delta_{lh} \\
 \delta_1 & 0 & \delta_{lh} & \rho_s e^{+2i\varphi_s} \\
 \rho_s e^{+2i\varphi_s} & \delta_{lh} & \Delta_{lh} & \delta_1^l \\
 \delta_{lh} & \rho_s e^{-2i\varphi_s} & \delta_1^l & \Delta_{lh}
 \end{array} \right]
 \end{array}$$

同樣得要先找出矩陣的特徵值以及相對應的特徵向量。

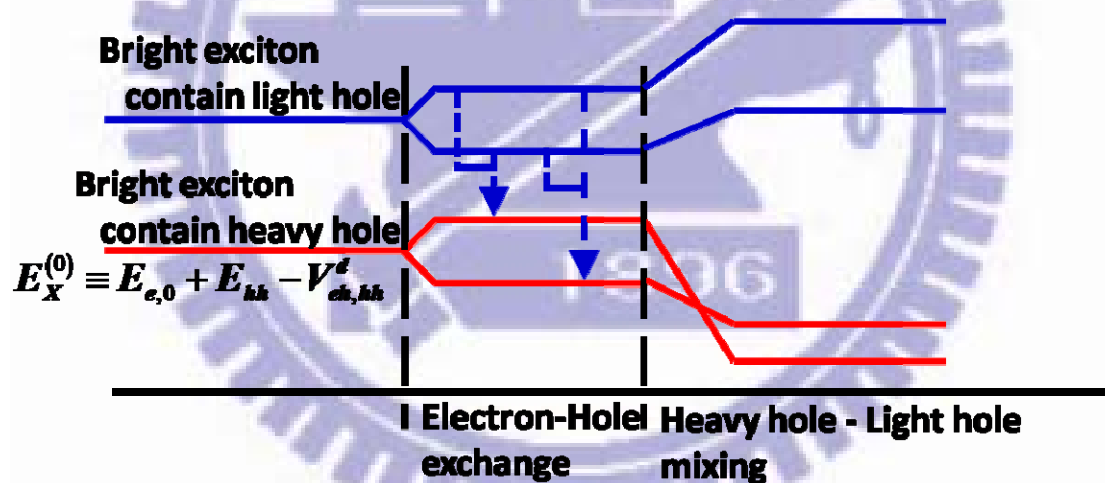


圖 4.2.1、重電洞耦合輕電洞對激子能量的影響

- (1) 本徵能量及本徵態：由於現在是一個 4X4 矩陣所以將會有四個本徵值並對應四組本徵態，由於文章所要探討的是發光激子為何因素導致精細結構的能量劈裂(FSS)，所以著重的是最易發生再結合而發出旋光的激子(最低能量的基態)，以及最有可能由此能態劈裂而出的能態，也就是最靠近基態的第一激發態。由

(圖 4.2.1)知道這兩個最低能量的態為包含重電洞的激子，所以只要取含有重電洞的兩個激子(最低的兩個特徵值及對應的特徵態)即可。

(2) 旋光強度：如今將得到兩組特徵向量(對應最低能量)均為 1X4 的維度大小，例如： (a_1, a_2, a_3, a_4) 的特徵向量

$$\begin{aligned}
 I(\hbar\omega, \theta) &\propto \left| \langle \text{vac} | \sum_{j_z, s_z} A_{j_z, s_z}(\theta) \hat{h}_{j_z} \hat{c}_{s_z} | X \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - E_X) \\
 &= \left| \langle \text{vac} | \sum_{j_z, s_z} A_{j_z, s_z}(\theta) \hat{h}_{j_z} \hat{c}_{s_z} \left(a_1 |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h + a_2 |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + a_3 |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h + a_4 |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \right) \right|^2 \\
 &= \left| \langle \text{vac} | a_1 \cdot A_{1/2, -3/2}(\theta) \hat{h}_{-3/2} \hat{c}_{1/2} |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \right. \\
 &\quad + \langle \text{vac} | a_2 \cdot A_{-1/2, 3/2}(\theta) \hat{h}_{3/2} \hat{c}_{-1/2} |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h \\
 &\quad + \langle \text{vac} | a_3 \cdot A_{1/2, 1/2}(\theta) \hat{h}_{1/2} \hat{c}_{1/2} |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h \\
 &\quad \left. + \langle \text{vac} | a_4 \cdot A_{-1/2, -1/2}(\theta) \hat{h}_{-1/2} \hat{c}_{-1/2} |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \right|^2 \\
 &= \left[a_1 \left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right) + a_2 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right) \right. \\
 &\quad \left. + a_3 \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right) + a_4 \left(\frac{-1}{\sqrt{6}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right) \right]^2 \\
 &= \left[\left(a_1 + \frac{a_4}{\sqrt{3}} \right) \left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right) + \left(a_2 + \frac{a_3}{\sqrt{3}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right) \right]^2 \\
 &= \left[\left(\left(a_1 + \frac{a_4}{\sqrt{3}} \right) - \left(a_2 + \frac{a_3}{\sqrt{3}} \right) \right) \frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i \cdot \cos \theta \right. \\
 &\quad \left. + \left(\left(a_1 + \frac{a_4}{\sqrt{3}} \right) + \left(a_2 + \frac{a_3}{\sqrt{3}} \right) \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} \cdot \sin \theta \right]^2
 \end{aligned}
 \tag{4.2.1}$$

(3) 旋光的偏振方向：使用(4.2.1)計算各個 θ 角的 $I(\theta)$ 找出最大值即可知道此特徵向量的旋光強度，同樣的要將最低兩個能量的旋光區分為 π_x 、 π_y 。而區分的方法以(圖 4.2.1)為例，將線偏振旋光的最大強度繪一軸線，並且取出其和 0° 、 180° (X 軸)的相差角度，而兩個線偏振的軸線和 0° 、 180° (X 軸)相差較小角度者定為 π_x ，另一個必將較偏離 X 軸而定為 π_y ，所以(圖 4.2.2)的例子看來，基態的實線將定為 π_x ，第一激發態的虛線將定為 π_y 。

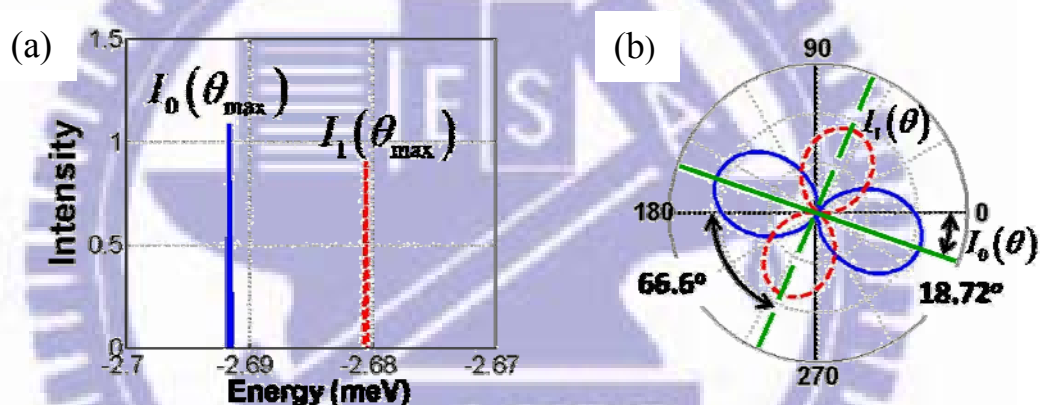


圖 4.2.2、(a)為能量對旋光強度的頻譜圖
(b)以左圖的兩個態所對應的極座標旋光強度分佈圖
實線和 X 軸相差 18.72° ，虛線和 X 軸相差 66.6° 。

	能量	和 X 軸相差	以偏振方向為基準， 重新定義	
基態	E_0	-18.72° 、 161.28°	和 X 軸差值較小，定為 π_x	
			$E_0 \equiv E_{\pi_x}$	$I_0(18.72^\circ) \equiv I_{\pi_x}(18.72^\circ)$
第一激發態	E_1	66.6° 、 246.6°	差值較大，定為 π_y	
			$E_1 \equiv E_{\pi_y}$	$I_1(66.6^\circ) \equiv I_{\pi_y}(66.6^\circ)$

表 4.2.1、將(圖 4.2.1)的線性偏振旋光區分為 π_x 、 π_y

- (4) **精細結構劈裂**：由於現在是一個 4X4 矩陣所以將會有四個特徵值，而僅著重含有重電洞的激子(最低的兩個能量)，且為了相同於先前的定義，而將態以旋光特性來區分能量，所以把最低的兩個能量分為 E_{π_x} 、 E_{π_y} ，便可代入(4.1.3)算出 FSS。

$$FSS = E_{\pi_y} - E_{\pi_x}$$

- (5) **Polarizability**：(圖 4.1.5)表現出 π_x 、 π_y 線偏振為相同強度，似乎看不出量子點中的光學異相性(optical anisotropy)，其簡單的來說是光從物質中釋放出來時，會因方向的不同而有不同的強度。不過為了方便辨認所謂的光學異相性，將在此定義極化率的值。將兩個最低能量求的旋光強度代入(4.1.5)即可。

$$\text{Polarizability} = \frac{I_{\pi_y}(\theta_{\max}) - I_{\pi_x}(\theta_{\max})}{I_{\pi_y}(\theta_{\max}) + I_{\pi_x}(\theta_{\max})}$$

模擬結果：

(1) 僅考慮單軸應力(uniaxial strain)， $\rho_s \neq 0$ 、 $\varphi_s = 0$

先前的章節已估計了參數量值，利用(表 3.4.2)的參數模擬出能量、旋光強度以及極化率，並且以 Δ_{lh} 為變數，當 Δ_{lh} 大的時候代表了重電洞、輕電洞的能量差距較大，所以耦合的力量較小，反之亦然，當 Δ_{lh} 小的時候，耦合的力量較大；因此對 Δ_{lh} 選了一段恰好大小的區間，約為 50 至 350 毫電子伏特(meV)。至於其他交換能的參數則使用(表 3.4.2)中估計值，所以 δ_1 、 δ_1^l 、 δ_{lh} 分別選取了 0.025、0.031、0.1 毫電子伏特(meV)。首先要模擬的系統假設 $\rho_s = 25$ meV、 $\varphi_s = 0^\circ$ ，由(圖 3.4.4)中知道這代表了 X、Y 方向的晶格改變量不相同使得 $\rho_s \neq 0$ ，且空間中的 ε_{xy} (相關於剪應力)積分為零代表了應力並不造成量子點旋轉；因此可將此系統簡單的思考為僅具有單軸應力。

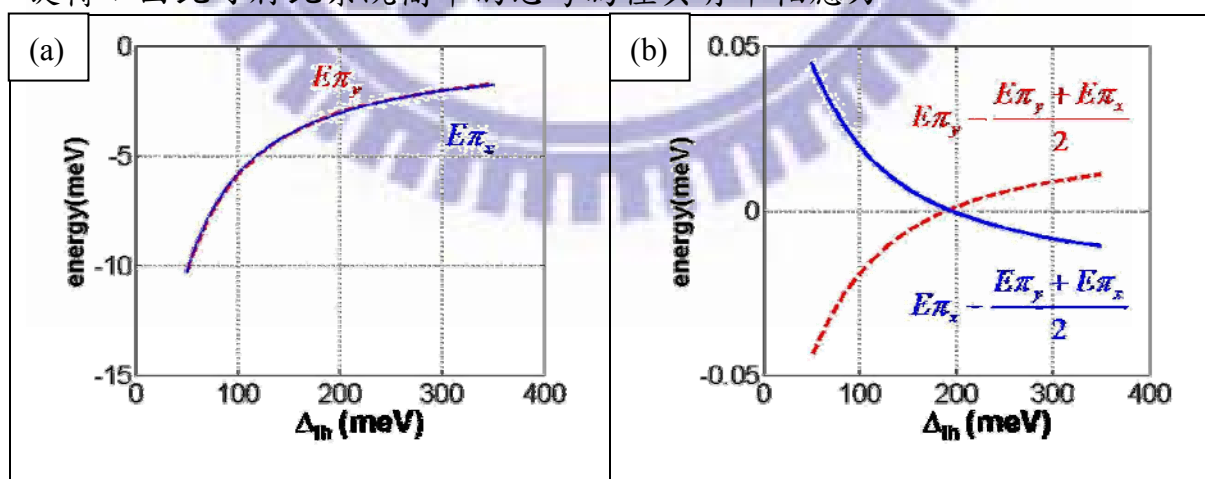


圖 4.2.2、(a)激子能量隨 Δ_{lh} 值大小變化的曲線，其中實線代表激子所釋放旋光偏近 X 軸，而虛線代表激子所釋放旋光偏近 Y 軸。

(b)由於能量變化遠大於此二激子而分辨不出兩條線，因此將能量減去兩者能量的平均值以便於分辨此二激子的能量關係，且發現能量翻轉。

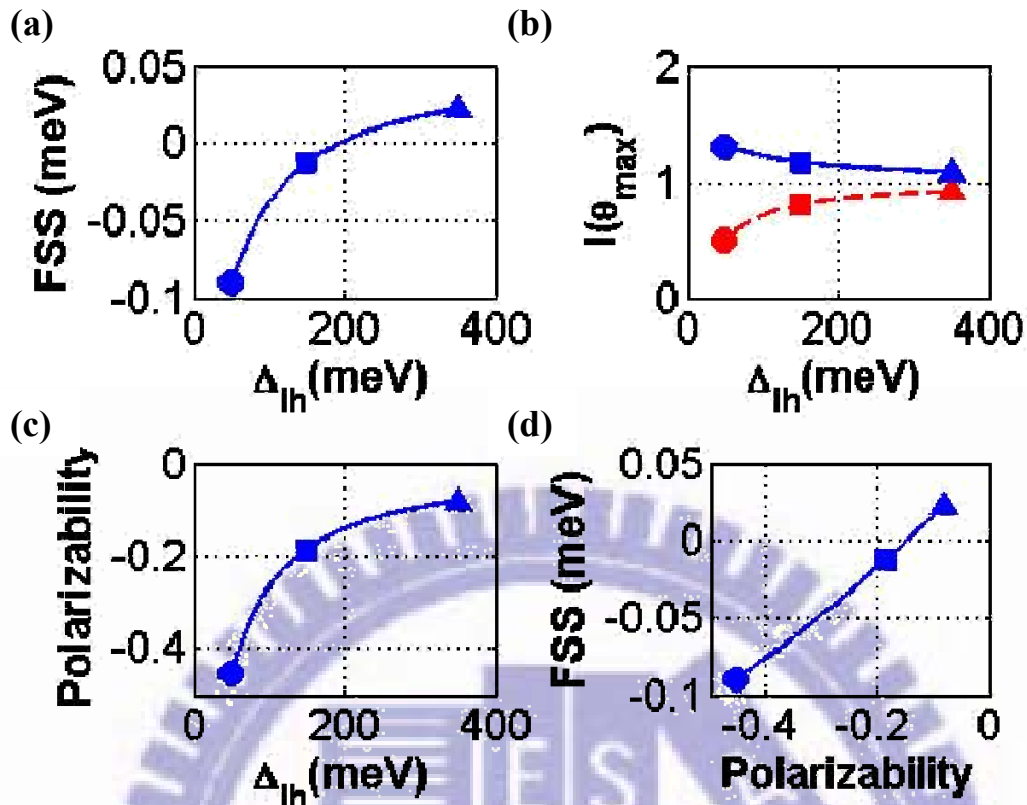


圖 4.2.3、激子特性對 Δ_{lh} 的變化曲線 (a) Δ_{lh} 對 FSS 關係圖 (b) Δ_{lh} 對 $I(\theta_{max})$ 關係圖 (c) Δ_{lh} 對 Pol. 關係圖 (d) Pol. 對 FSS 關係圖
 ▲代表 $\Delta_{lh} = 350\text{meV}$ ■代表 $\Delta_{lh} = 150\text{meV}$ ●代表 $\Delta_{lh} = 50\text{meV}$

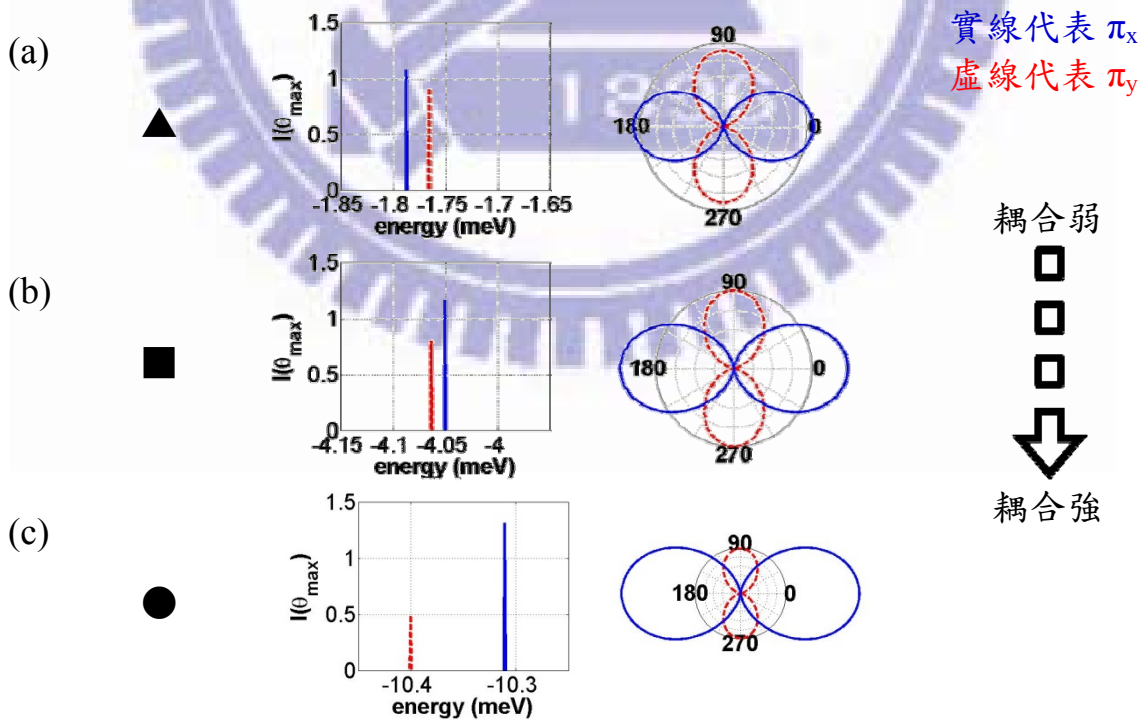


圖 4.2.4、模擬基態、第一激發態激子所釋放旋光的頻譜圖和極座標圖，且(a)(b)(c)這三組分別代表(圖 4.2.3)中▲、■、●各自的 Δ_{lh} 值

(2) 考慮單軸應力(uniaxial strain)以及剪應力(shear strain)

$$\rho_s \neq 0, \varphi_s \neq 0$$

由(圖 4.2.4)和實驗的結果(圖 1.3.1)比較發現重電洞、輕電洞的耦合會形成 X、Y 線性偏振的強度不同，也就是產生了光學異相性，不過依舊未發現線性偏振的偏轉，兩者還是相差 90° ，所以接下來將考慮當 $\varphi_s \neq 0$ 的時候(虛部項因應而生)，由前面知道 $\rho_s e^{-2i\varphi_s} = R_k + R_\varepsilon$ 。

$$R_k = \left\langle g_{3/2}(\vec{r}_h) \left| \frac{-\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \left[-\gamma_2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + 2i \left(\gamma_3 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) \right] \right| g_{-1/2}(\vec{r}_h) \right\rangle$$

R_k 的虛部來自於重電洞、輕電洞波包方程式間的不對稱性。

$$R_\varepsilon = \left\langle g_{3/2}(\vec{r}_h) \left| \frac{\sqrt{3}b}{2} \left[\varepsilon_{xx}(\vec{r}) - \varepsilon_{yy}(\vec{r}) \right] - id\varepsilon_{xy}(\vec{r}) \right| g_{-1/2}(\vec{r}_h) \right\rangle$$

而 R_ε 的部分由上述公式來看，將可以知道 R_ε 虛部來自剪應力(ε_{xy} ，shear strain)，配合(圖 3.4.4)將發現空間中的 ε_{xy} 積分不為零代表了應力造成量子點的旋轉。而此二者便是在文章所模擬的系統造成 $\varphi_s \neq 0$ 的主要因素，其對旋光特性的影響將呈現於以下模擬的結果之中。為了和前一個例子($\varphi_s = 0$)得以對照，所採用的參數除了 φ_s 將改為 10° 以外，其餘均跟前一個例子相同，所以 δ_1 、 δ_1^l 、 δ_{lh} 、 ρ_s 分別選取了 0.025、0.031、0.1、25 毫電子伏特(meV)。

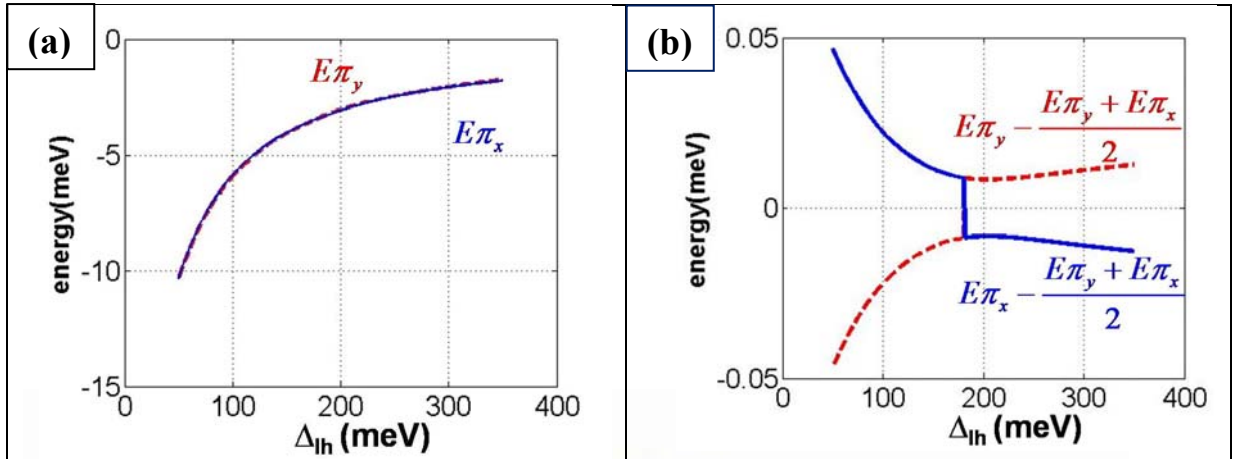


圖 4.2.5、(a)激子能量隨 Δ_{lh} 值大小變化的曲線，其中實線代表激子所釋放旋光偏近 X 軸，而虛線代表激子所釋放旋光偏近 Y 軸。
 (b)由於能量變化遠大於此二激子而分辨不出兩條線，因此將能量減去兩者能量的平均值以便於分辨此二激子的能量關係，具有能量翻轉現象。

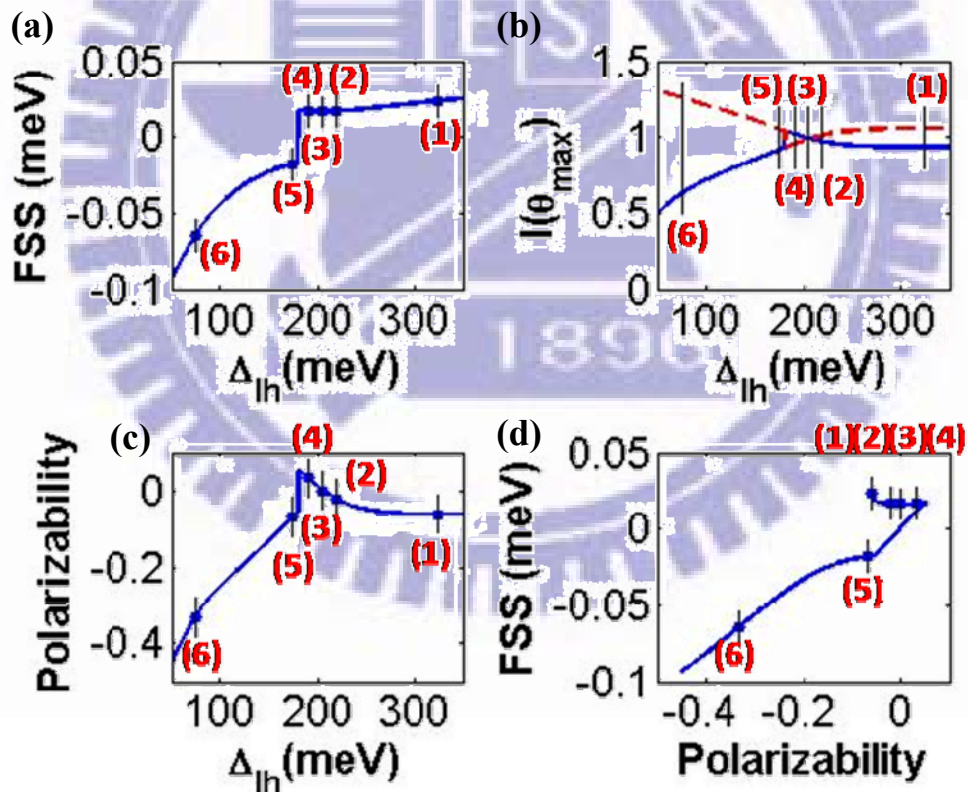


圖 4.2.6、激子特性對 Δ_{lh} 的變化曲線 (a) Δ_{lh} 對 FSS 關係圖
 (b) Δ_{lh} 對 $I(\theta_{max})$ 關係圖 (c) Δ_{lh} 對 Pol. 關係圖 (d) Pol. 對 FSS 關係圖
 圖中的數字標號代表著不同的 Δ_{lh} ，
 (1)~(6)分別為 75、175、190、206、220、325 (meV)

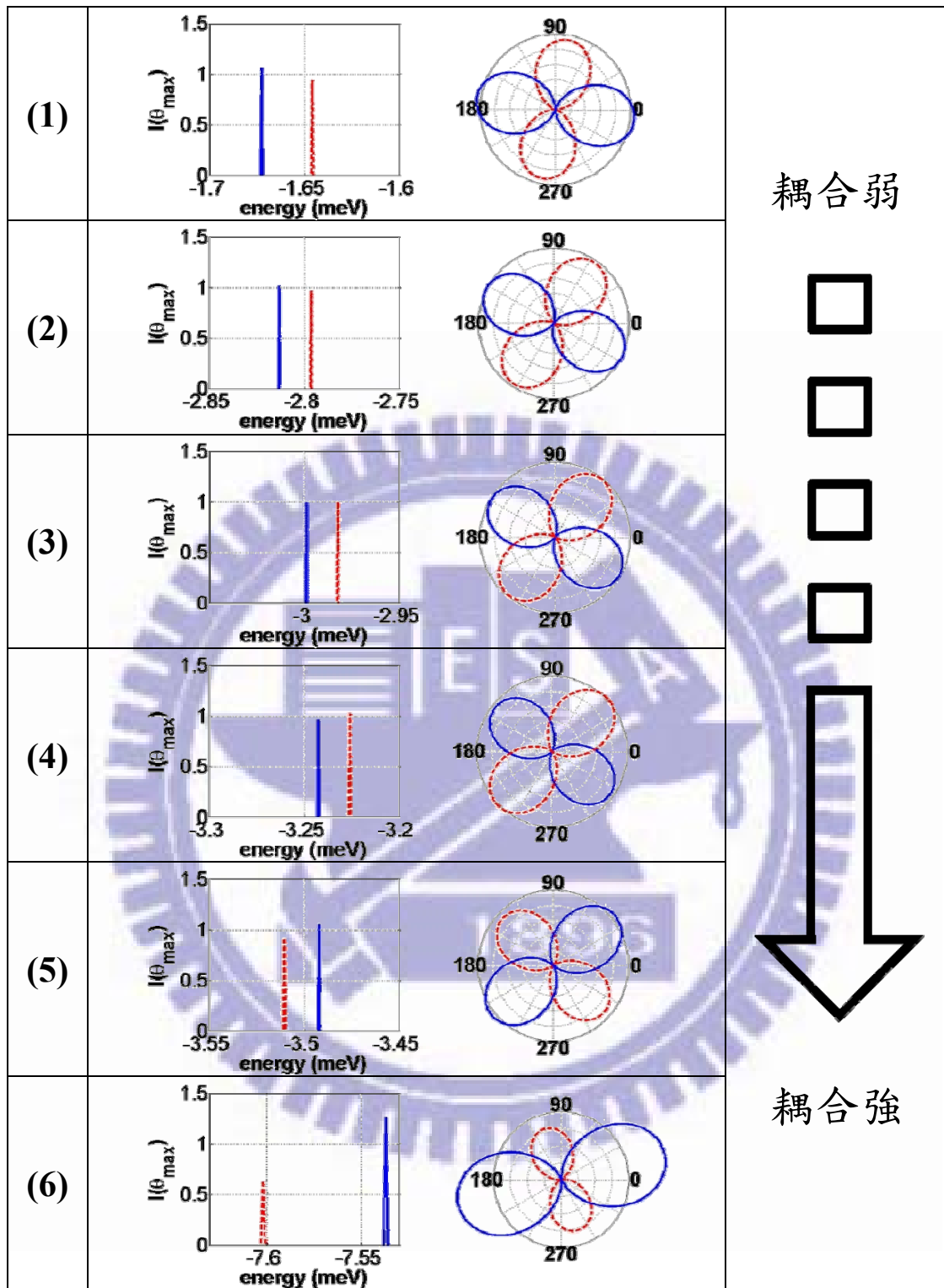


圖 4.2.7、模擬基態、第一激發態激子所釋放旋光的頻譜圖和極座標圖。(1)~(6)這六組分別代表(圖 4.2.3)中所標示的不同 Δ_{lh} 值,分別為 75、175、190、206、220、325 (meV),且實線代表激子釋放偏 X 軸極化光,相對的虛線代表激子釋放偏 Y 軸極化光。

(圖 4.2.6)的不連續線斷，藉由(圖 4.2.7)中不同 Δ_{lh} 值所模擬的頻譜圖、極座標圖發現，其實並不是真的產生斷層現象，而是因為高能量的線偏振光漸漸遠離 X 軸，低能量的線偏振光則漸漸偏向 X 軸，造成了所定義的 π_x 、 π_y 能量產生翻轉，(圖 4.2.7)的(4)到(5)便可看見此一現象。



4.3 討論：

(1) 各參數對旋光特性的影響：

將之前的結果做總結，並且比較其影響

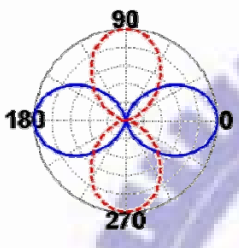
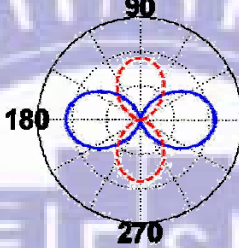
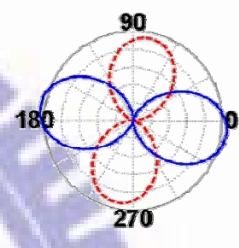
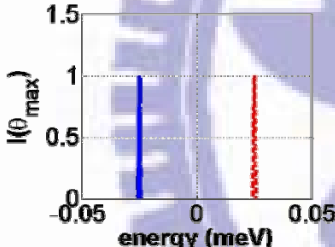
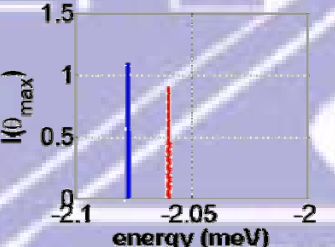
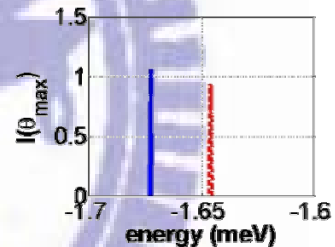
<p>交換能 δ_1、δ_1'</p>	<p>重電洞、輕電洞耦合： 1. 交換能 δ_{lh} 2. Luttinger-Kohn 耦合項 ρ_S</p>	<p>φ_S：控制 Luttinger-Kohn 耦合項 ρ_S 的虛部，包含重電洞、輕電洞波包不對稱性，以及 x-y 方向的剪應力</p>
		
		
<p>造成 FSS，並且令旋光形成線性偏振</p>	<p>使得線性偏振強度不同，也就是光學異相性</p>	<p>令線性偏振光的角度偏轉，並且角度相差值不再保持 90°</p>

表 4.3.1、參數對旋光特性影響

至於最後的一個參數 Δ_{lh} ，其為重電洞、輕電洞的能量差，由前面模擬結果看來似乎對旋光特性並無直接的影響，然而先前有提到它和耦合強弱的關係，並且由前面結果知道 Δ_{lh} 所影響的為激子的能量以及精細結構的能量劈裂(FSS)。另外，由(圖 4.2.3)和(圖 4.2.6)左上角 Δ_{lh} -FSS 的圖發現，當 Δ_{lh} 夠小時(耦合夠強時)，會造成 X 與 Y 方向的線性偏振光的能量翻轉。

(2) 解析解比較

模擬的結果可以藉由大量的結果中比對出各參數的影響，如同(表 4.2.2)所示，不過卻只能對定性的結果做出簡單的判斷，若要知道真正知道參數之間對各項模擬結果的影響，解析結果可能會是另一條可行之路。解析此一系統，首要工作便是求得 4X4 矩陣的特徵值以及特徵向量，經過計算可以發現，其實在某些條件將系統簡化後可以得到模擬的解析解($\varphi_s=0$)，不過利用這些本徵態在求取旋光狀態的解析過程仍然過於繁雜，因此接下來利用 P.O.Löwdiu method 微擾法[9]把矩陣簡化，進而將模擬結果以解析的型式呈現(詳見附錄 B)。

$$(a) \text{FSS (B.7)} : \Delta E \approx 2\delta_1 - \frac{4\delta_{lh}\rho_s}{\Delta_{lh}}$$

$$(b) \text{Intensity} : \varphi_\alpha^{(0)} \text{ 態 (B.9a)}, I_0(\theta_{Max}) \approx \left(1 + \frac{2\rho_s}{\sqrt{3}\Delta_{lh}}\right) \frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2}$$

$$\varphi_\beta^{(0)} \text{ 態 (B.9b)}, I_1(\theta_{Max}) \approx \left(1 - \frac{2\rho_s}{\sqrt{3}\Delta_{lh}}\right) \frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2}$$

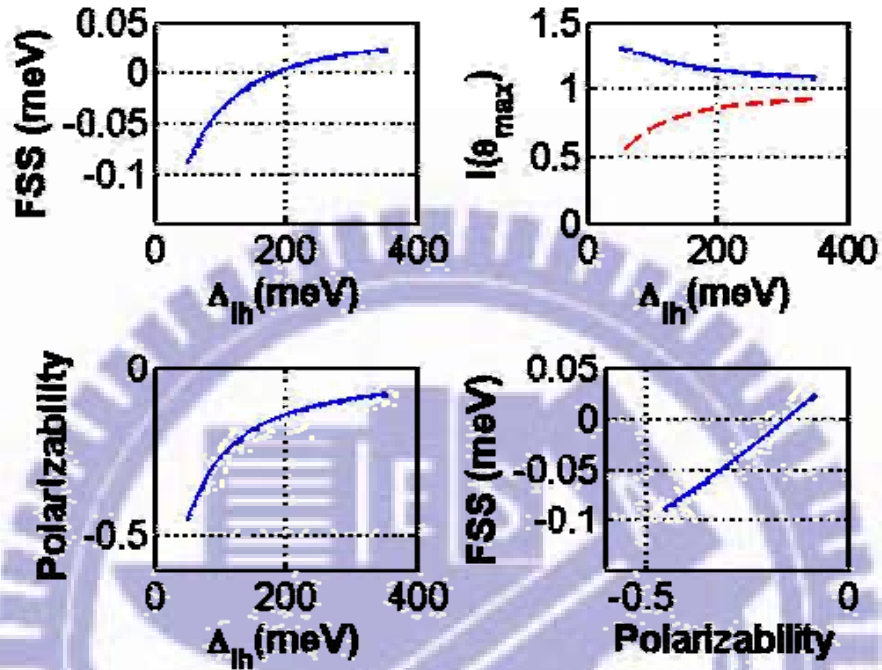
其中 $\varphi_\alpha^{(0)}$ 態所釋放的旋光為線性偏振且沿著 X 軸方向，而 $\varphi_\beta^{(0)}$

態所釋放的旋光為線性偏振且沿著 Y 軸方向。

$$(c) \text{極化率(B.10)} : \text{Polarizability} \approx \frac{-2}{\sqrt{3}\Delta_{lh}} \rho_s$$

上述(a)、(b)、(c)的公式是以 $\varphi_S=0^\circ$ 的條件下所推導的結果，接下來把(圖 4.2.2)的參數帶入公式中，並將得到解析解的結果(圖 4.2.9b)，兩相比較以確認解析結果的可靠性。

(a)



(b)

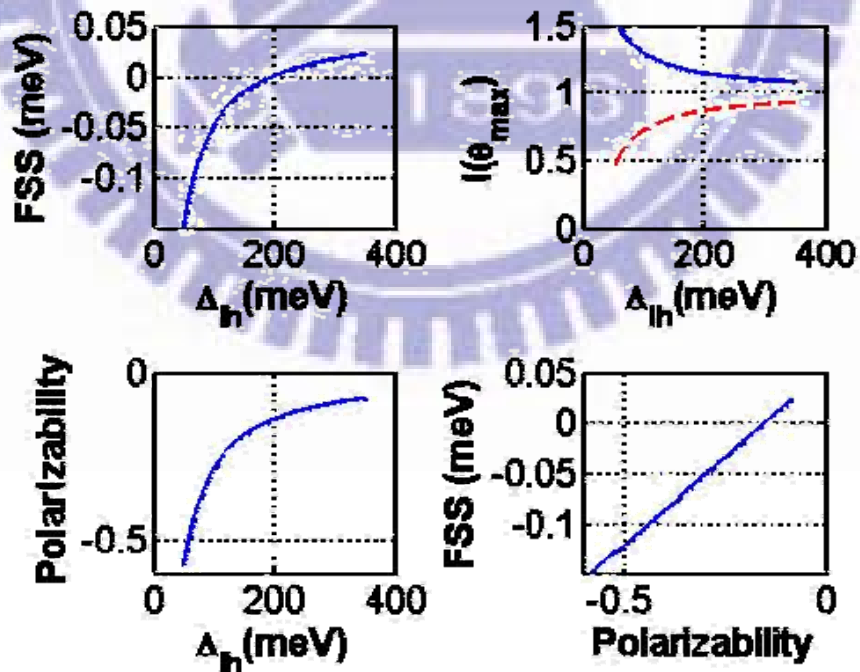


圖 4.2.8、(a)跟(圖 4.1.2)一樣的模擬結果，放此用於比較，至於(b)則是將(圖 4.1.2)所使用之參數代入解析的式子所得結果。可以發現定性上的結果相同，數值誤差隨著耦合強弱而有大小變化。

(3) 釋放 X、Y 偏振光之兩激子態發生能量翻轉

在第四章一開始時已經先列下兩種不同的情形模擬的結果，一個因空間中的應力主要相關於單軸應力(uniaxial strain)而使得 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S = 0^\circ$ ，另一個則因空間中的應力亦受到剪應力(shear strain)的影響而使得 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S \neq 0^\circ$ ，不過這兩種情形都出現了當 FSS 隨著由大變小時而產生了由正轉負的現象，這代表著釋放 X、Y 偏振光之兩激子態發生能量翻轉。為了理解因何模擬出此結果，首先回顧所處理之矩陣：

$$\begin{array}{cccc}
 |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \\
 \left[\begin{array}{cccc}
 0 & \delta_1 & \rho_S e^{-2i\varphi_S} & \delta_{lh} \\
 \delta_1 & 0 & \delta_{lh} & \rho_S e^{+2i\varphi_S} \\
 \rho_S e^{+2i\varphi_S} & \delta_{lh} & \Delta_{lh} & \delta_1' \\
 \delta_{lh} & \rho_S e^{-2i\varphi_S} & \delta_1' & \Delta_{lh}
 \end{array} \right]
 \end{array}$$

為了便於解析矩陣，將重覆(附錄 B)的步驟來做基底轉換。

新基底：

$$|ehh_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h + |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h \right] \quad (\text{B.2a})$$

$$|ehh_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h - |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h \right] \quad (\text{B.2b})$$

$$|elh_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h + |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \right] \quad (\text{B.2c})$$

$$|elh_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-|\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h + |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \right] \quad (\text{B.2d})$$

新的矩陣：

$$\begin{pmatrix} |ehh_Y\rangle & |ehh_X\rangle & |elh_Y\rangle & |elh_X\rangle \\ +\delta_1 & 0 & \delta_{lh} + \rho_S \cos[2\varphi_S] & i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] \\ 0 & -\delta_1 & -i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] & \delta_{lh} - \rho_S \cos[2\varphi_S] \\ \delta_{lh} + \rho_S \cos[2\varphi_S] & i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] & \Delta + \delta_1^l & 0 \\ -i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] & \delta_{lh} - \rho_S \cos[2\varphi_S] & 0 & \Delta - \delta_1^l \end{pmatrix}$$

若是將前面所提的兩個情況帶入新的矩陣可先進行初步的分析。

(a) $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S = 0^\circ$ ，新矩陣以及能量分析示意圖如下：

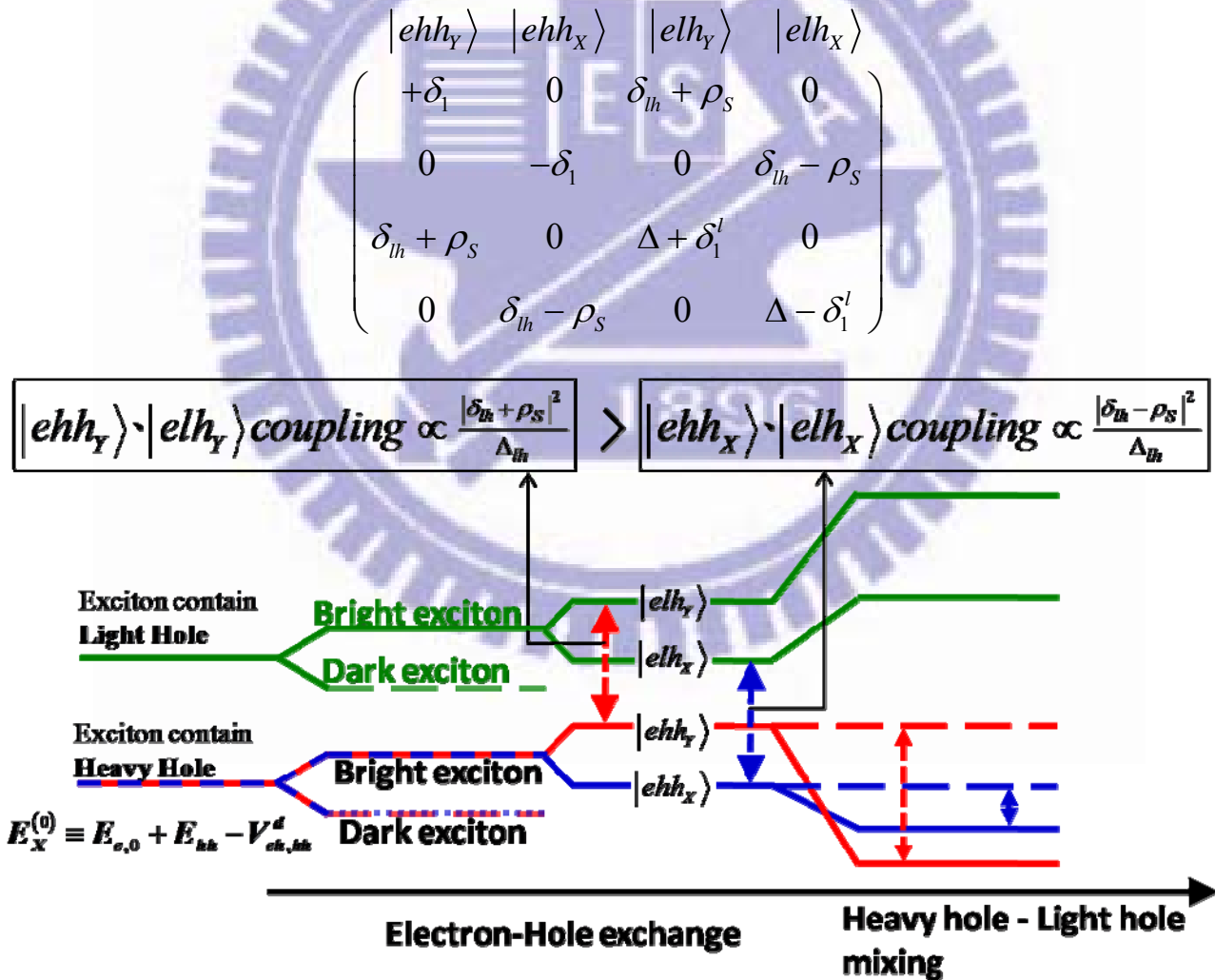


圖 4.2.9、新基底的能量分析示意圖，並考慮 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S = 0^\circ$ 系統之後的變化，當耦合夠強時， π_x (紅線)、 π_y (藍線) 產生能量翻轉

(b) $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S \neq 0^\circ$ ，新矩陣以及能量分析示意圖如下：

$$\begin{pmatrix}
 |ehh_y\rangle & |ehh_x\rangle & |elh_y\rangle & |elh_x\rangle \\
 +\delta_1 & 0 & \delta_{lh} + \rho_S \cos[2\varphi_S] & i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] \\
 0 & -\delta_1 & -i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] & \delta_{lh} - \rho_S \cos[2\varphi_S] \\
 \delta_{lh} + \rho_S \cos[2\varphi_S] & i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] & \Delta + \delta_1' & 0 \\
 -i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] & \delta_{lh} - \rho_S \cos[2\varphi_S] & 0 & \Delta - \delta_1'
 \end{pmatrix}$$

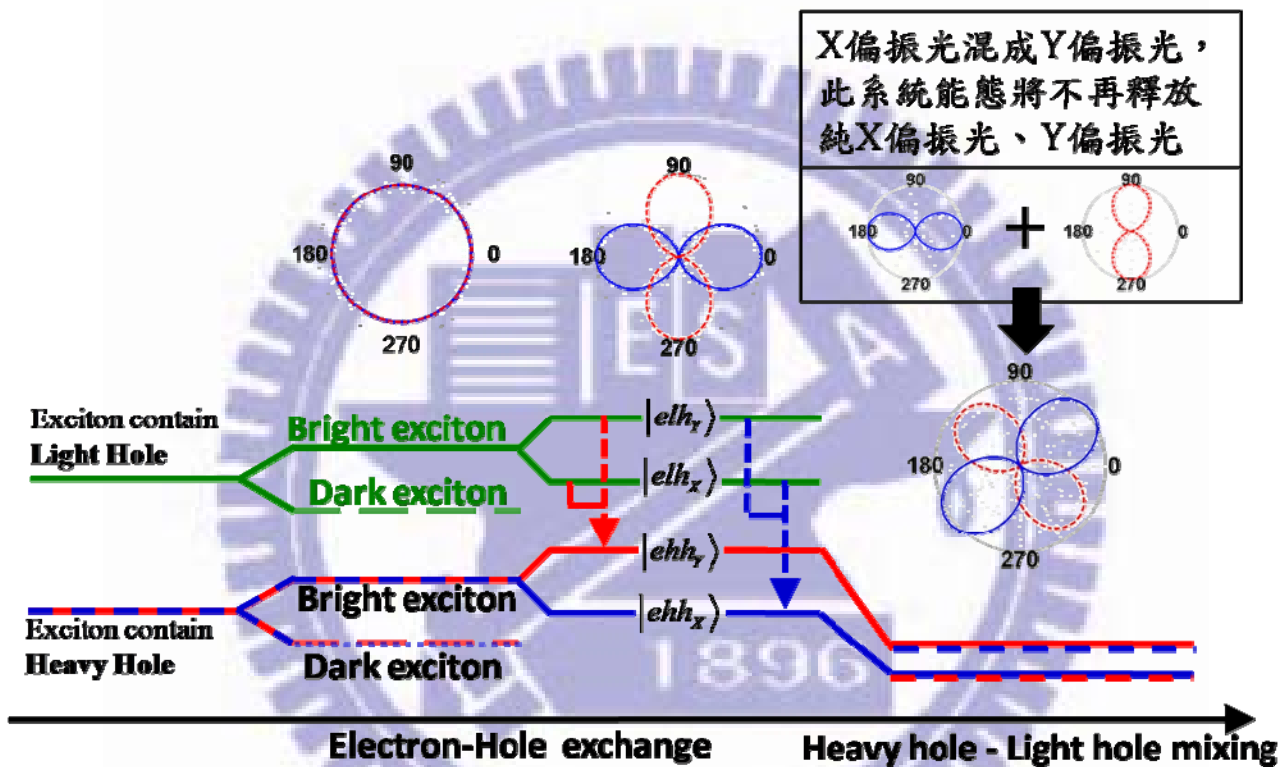
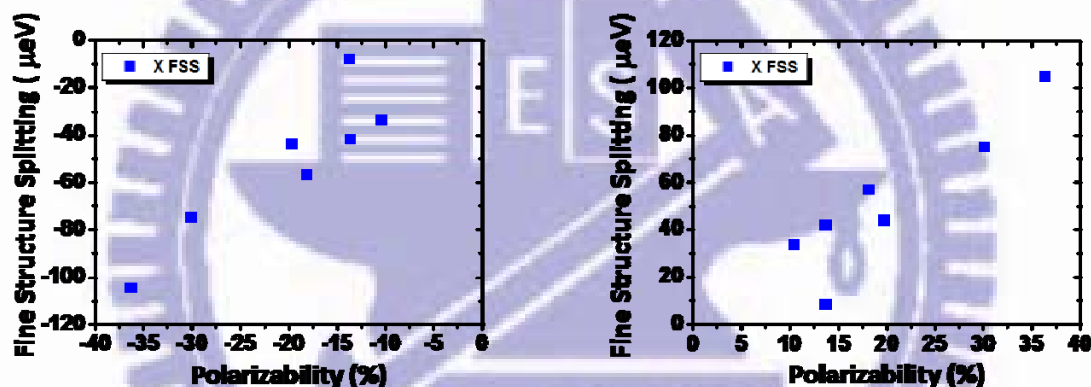


圖 4.2.10、新基底的能量分析示意圖，並考慮 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S \neq 0^\circ$ 系統之後的變化，此系統下的耦合強弱相關於 X、Y 偏振混成多寡，導致線偏振將會偏離 X、Y 軸。

因此由新基底矩陣的分析以及(圖 4.2.9)、(圖 4.2.10)的結果看來，可以定性上發現，會造成 X、Y 偏振光的能量翻轉的原因，因為釋放 X 偏振光的激子間交互作用較小，導致其經過交互作用後能量偏移較小，而釋放 Y 偏振光的激子則與其相反，而具有較大的能量偏移，在彼此能量的消長間使得其能量差漸小，甚至產生翻轉。

(4) FSS 對極化率成正比關係

由(圖 4.2.3)和(圖 4.2.6)右下角“極化率-FSS”的關係圖看來，發現兩者之間似乎成正比的關係。不過此結果為模擬所得，因此若要確認其正確性必然要與實驗結果做個比較(圖 4.2.7)。不過由於實驗的數據無法表達真實量子點長軸方向，如此一來便無法依照先前的定義計算出 FSS 以及極化率，因此分別以長軸為 X 軸和長軸為 Y 軸的假設繪出實驗量測 FSS 對極化率的圖。



(圖 4.2.11)、實驗量測 FSS 對極化率(polarizability)作圖

左為以長軸為 X 軸，右為以長軸為 Y 軸

資料來源：交通大學電物系張文豪老師實驗室

而將先前模擬的結果和(圖 4.2.11)比較，發現確實都是 FSS 對極化率成正比之關係，不過(圖 4.2.11)中以長軸為 X 軸的圖比較符合模擬的結果，因為 FSS 和極化率均為負值。不過前面 FSS-極化率的關係圖均只有一條線各是代表著固定 ϕ_s ，現在增加模擬 ϕ_s 的結果，結果如(圖 4.2.12)。

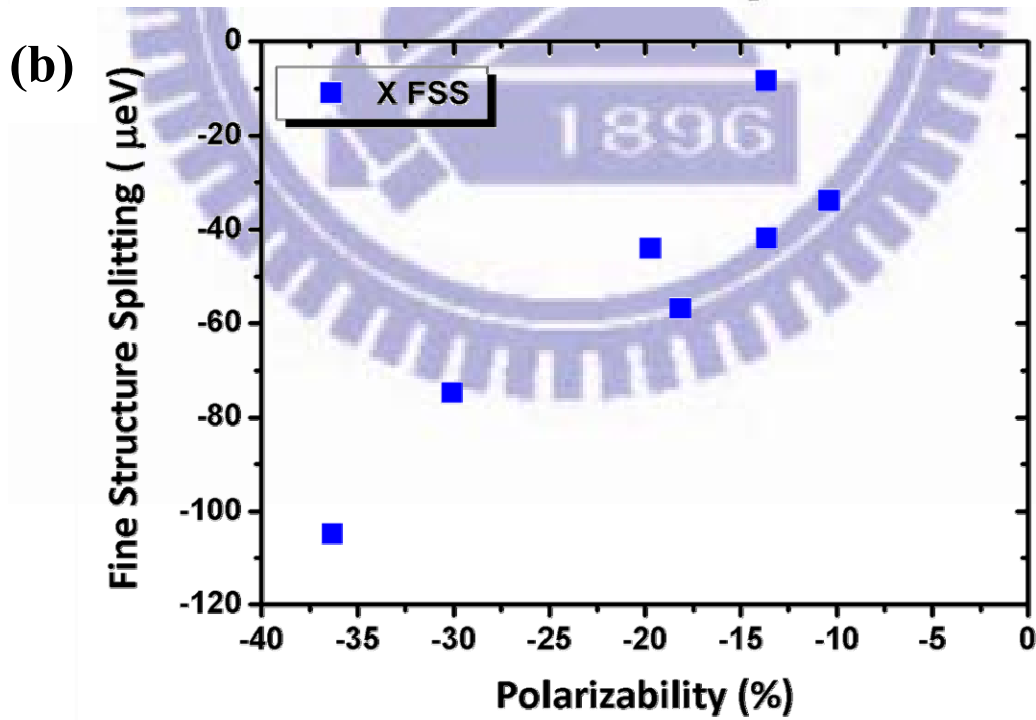
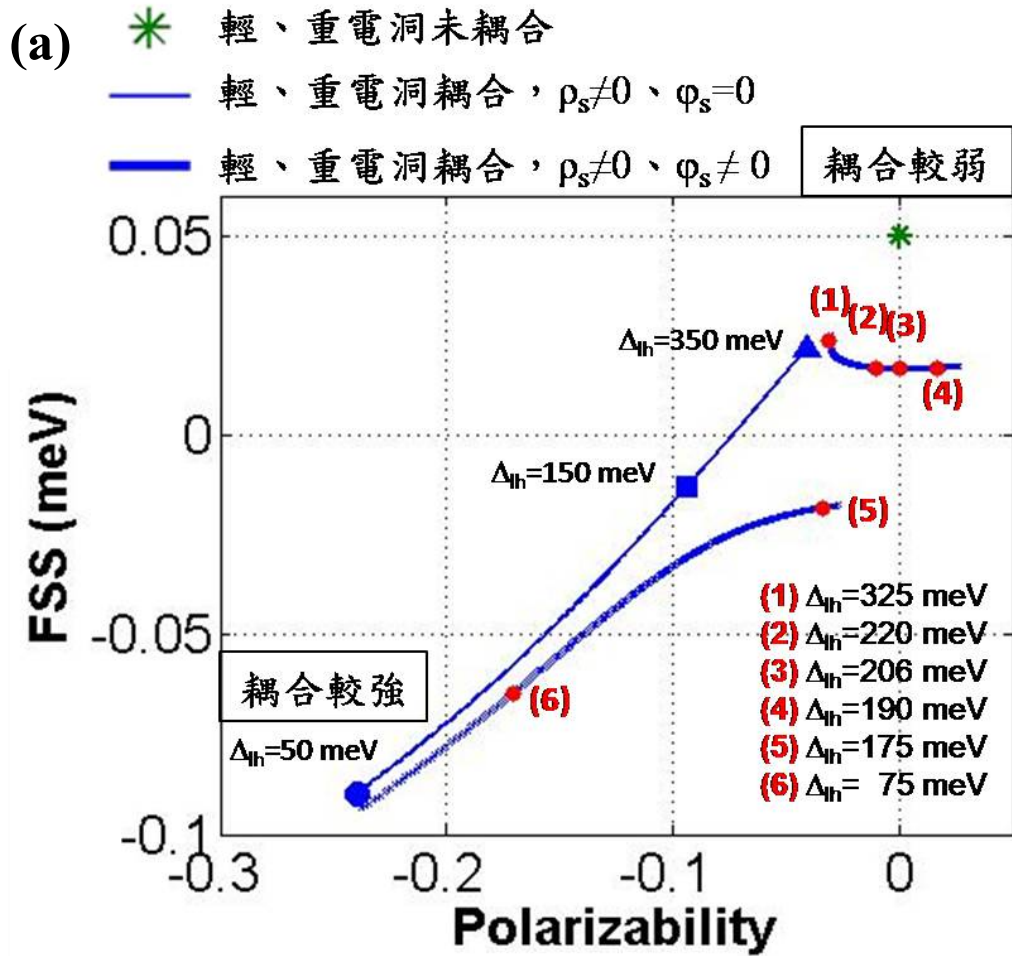


圖 4.2.12、比較模擬與實驗的“FSS-Polarizability”關係圖，其中的(a)即為(圖 4.2.3)、(圖 4.2.6)中兩者右下角的疊圖，而(b)則是(圖 4.2.11)的左圖，以 X 為長軸

由(圖 4.2.10)和(圖 4.2.11)比較，定性上結果大致相同，更可以發現此組實驗數據的量子點較符合模擬結果的是在 Δ_{lh} 比較小的區間(重、輕電洞耦合較大)，如果模擬結果沒有錯誤的話，更可以進一步認定此組量子點的基態線性偏振光垂直長軸，且長軸座落於 X 軸上。接著以(附錄 B)的公式來找出 FSS 和 polarizability 的正比關係受哪些參數影響，所以現在要看 FSS 和 polarizability 的比值，利用(B.7)、(B.9)。

(a) 以 Δ_{lh} 為變數

$$\begin{aligned} \frac{\partial \text{FSS}}{\partial \text{Pol.}} &= \frac{\left(\delta_1 - \frac{2 \cdot \delta_{lh} \rho_S}{\Delta_{lh\text{大}} + \delta_0^l - \delta_0} \right) - \left(\delta_1 - \frac{2 \cdot \delta_{lh} \rho_S}{\Delta_{lh\text{小}} + \delta_0^l - \delta_0} \right)}{\frac{-2\rho_S}{\sqrt{3}\Delta_{lh\text{大}}} - \frac{-2\rho_S}{\sqrt{3}\Delta_{lh\text{小}}}} \\ &= \frac{-2 \cdot \delta_{lh} \rho_S (\Delta_{lh\text{小}} - \Delta_{lh\text{大}}) / (\Delta_{lh\text{大}} \cdot \Delta_{lh\text{小}})}{-2\rho_S (\Delta_{lh\text{小}} - \Delta_{lh\text{大}}) / (\sqrt{3}\Delta_{lh\text{大}} \cdot \Delta_{lh\text{小}})} \\ &= \sqrt{3} \delta_{lh} \end{aligned}$$

(b) 以 ρ_S 為變數

$$\begin{aligned} \frac{\partial \text{FSS}}{\partial \text{Pol.}} &= \frac{\left(\delta_1 - \frac{2 \cdot \delta_{lh} \rho_{S\text{大}}}{\Delta_{lh} + \delta_0^l - \delta_0} \right) - \left(\delta_1 - \frac{2 \cdot \delta_{lh} \rho_{S\text{小}}}{\Delta_{lh} + \delta_0^l - \delta_0} \right)}{\frac{-2\rho_{S\text{大}}}{\sqrt{3}\Delta_{lh}} - \frac{-2\rho_{S\text{小}}}{\sqrt{3}\Delta_{lh}}} \\ &= \frac{-2 \cdot \delta_{lh} (\rho_{S\text{大}} - \rho_{S\text{小}}) / \Delta_{lh}}{-2(\rho_{S\text{大}} - \rho_{S\text{小}}) / \sqrt{3}\Delta_{lh}} \\ &= \sqrt{3} \delta_{lh} \end{aligned}$$

FSS 和 polarizability 的正比關係似乎來自於 $\delta_{lh} > 0$ 。

(5) π_x 、 π_y 線性偏振旋光之夾角

由前面所模擬的結果可以發現，當 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S = 0$ 的系統下， π_x 、 π_y 線性偏振光並不會彼此耦合，因此兩者線性偏振不會有偏轉現象產生，至使彼此之間的夾角持續保持 X、Y 方向的 90° 夾角(圖 4.2.13)。

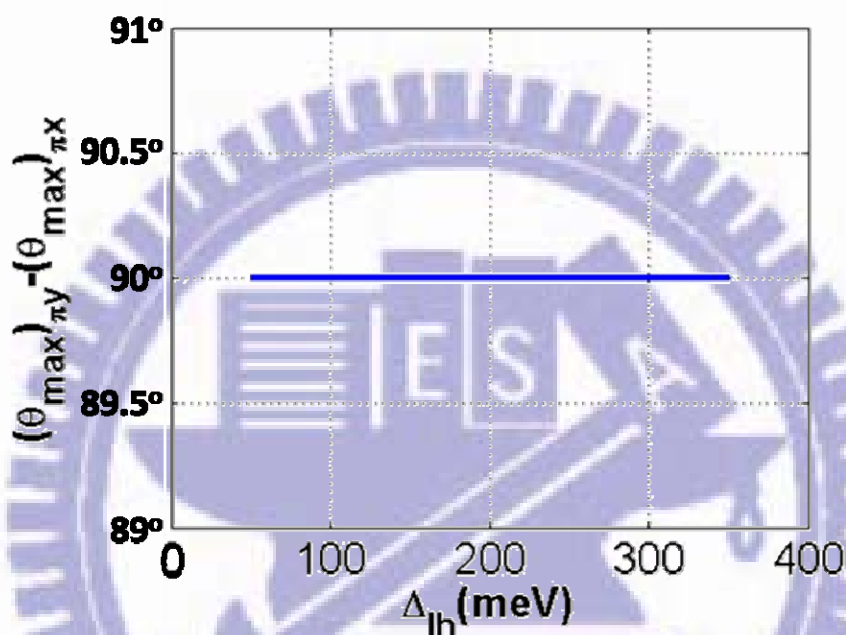


圖 4.2.13、當 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S = 0$ 的系統下， π_x 、 π_y 線性偏振旋光夾角的模擬結果

而當 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S \neq 0$ 的系統下，卻可以發現 π_x 、 π_y 線性偏振光彼此之間產生耦合而有了偏轉的現象，線性偏振旋光將不再是單純的 X、Y 方向，不過為了便於區分兩者旋光的偏振方向性值，所以於文章前段部分強硬的定義 π_x (靠近 X 軸)、 π_y (靠近 Y 軸)，不過耦合的強弱致使偏轉角度漸大，甚至產生定義 π_x 、 π_y 的能態交替，其結果反應於(圖 4.2.14)上。

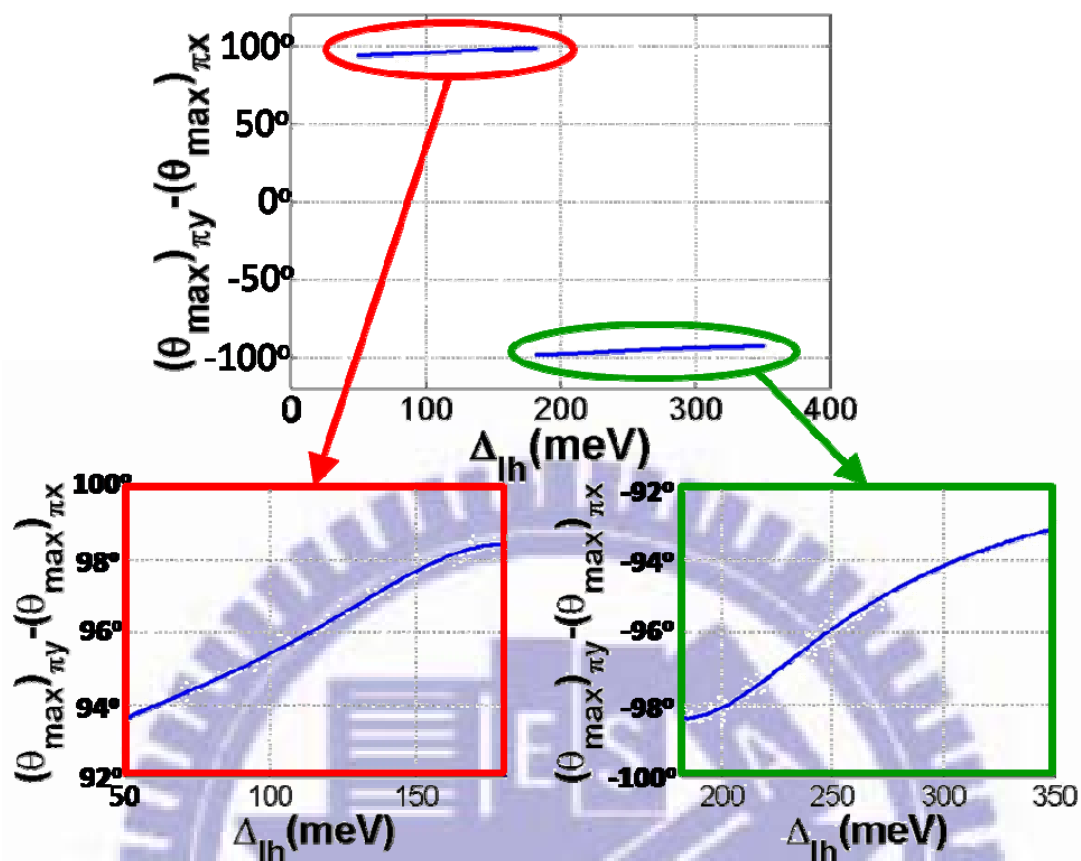


圖 4.2.14、當 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S \neq 0(10^\circ)$ 的系統下， π_x 、 π_y 線性偏振旋光夾角的模擬結果

接著便跟實驗的結果做一個比較，因此以“FSS- π_x 、 π_y 夾角”和“FSS- Polarizability”兩者的關係圖與實驗數據比對，看看 π_x 、 π_y 夾角是否也存在跟參數間的關係式。不過由(圖 4.2.15)的模擬結果與實驗數據的結果看來，似乎找不出特殊的趨勢，因此暫時不做過於深入的探究，不過至少知道 $\rho_S \neq 0$ 、 $\varphi_S \neq 0$ 的參數(量子點的剪應力效應)關係著線偏振的偏轉，所以其後的延伸沿就可將其列為一個探討主題。

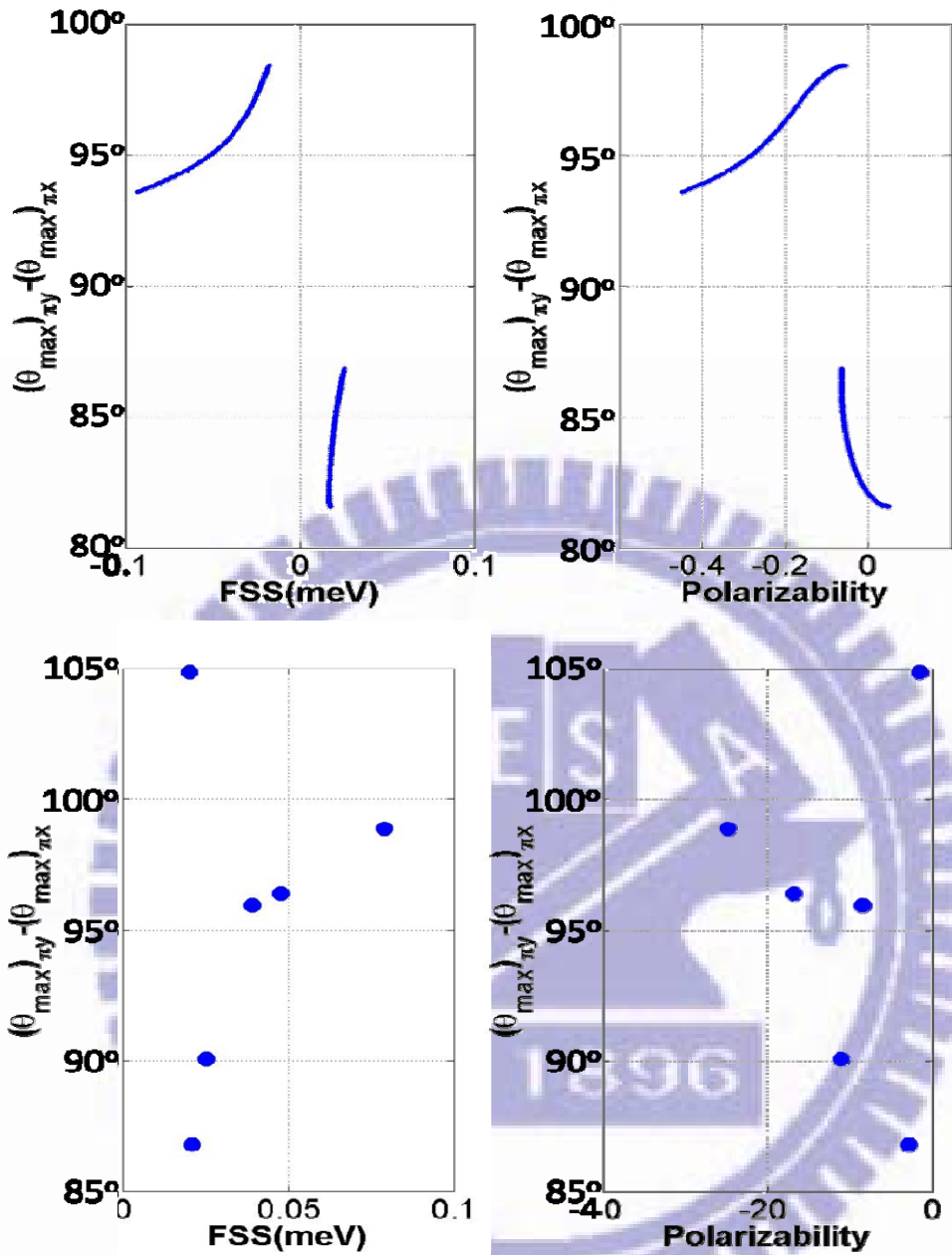


圖 4.2.15、當 $\rho_s \neq 0$ 、 $\varphi_s \neq 0(10^\circ)$ 的系統下，“FSS- π_x 、 π_y 夾角”和“FSS- Polarizability”的模擬結果以及實驗數據比對

第五章 結論

本文章至此為止所做的一些討論，主要是利用電子和電洞的電子結構加入交換能後，模擬此系統中激子所釋放旋光的特性。在模擬的過程中發現激子含重電洞的能量劈裂並不是只和交換能相關，它也會因為重電洞、輕電洞的耦合造成激子能量的改變。關於能量劈裂和極化率的關係可以因為得到和實驗相同的成正比關係，而且解析方式也能推得其主要來自於參數 δ_{lh} (總角動量相同的激子間交換能) 的正負值。

文章中有許多的參數，不過在文章都還只是估計，因此在未來若要做一些更為正確的模擬便要確實的計算之，例如：(1) 利用更多態的 $k.p$ 模型並加上 strain (利用 comsol 軟體得到) 計算 (2) 交換能的部分它還包括了電子、電洞的 overlap，不過文章中都把其假定為 100% 的 overlap，之後可以利用黃上瑜學長的程式算出電子、電洞波函數，便可計算兩者的 overlap (3) 參數 Δ_{lh} 代表了重電洞、輕電洞的能量差距，不過文章中只用了應力所造成的能量差為準，並不夠精確，以及參數 δ_{lh} 還有待商榷。如果正確的計算出這些量子點的參數便可模擬出其旋光的特性。

附錄 A：

Fermi's Golden Rule 是用來計算當系統受到微擾時態躍遷的機率 (transition rate)，一般教科書[22]大多列出簡單兩種範例：1.不隨時間變化的固定型式微擾(static potential) 2.隨著時間的週期性變化微擾 (oscillating potential)。從教科書的推導中可以找到這兩種範例的躍遷率(transition rate)，其分別表示如下：

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (\text{A.1a})$$

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_0) \quad (\text{A.1b})$$

$$V_{fi}(t) = \int \phi_f^*(\vec{r}) \hat{V}(\vec{r}, t) \phi_i(\vec{r}) d\vec{r} = \langle \phi_f(\vec{r}) | \hat{V}(\vec{r}, t) | \phi_i(\vec{r}) \rangle$$

$\phi_i(\vec{r})$ 代表起始態(initial state)， $\phi_f(\vec{r})$ 代表最終態(final state)

以上的式子(A.1a)屬於微擾不隨時變的躍遷率；而(A.1b)則屬於微擾呈現週期性變化的躍遷率，其中的 ω_0 便是其隨時變的週期。如今文章中所提及的系統可以將所釋放出的旋光當作微擾項看代之，由於光為電磁波具有週期性變化，因此所適用的公式為(A.1b)。

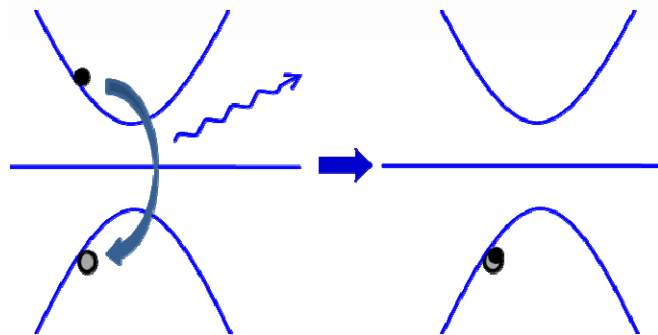


圖 A.1、
起始態為一個激子，藉由
釋放光(微擾)，轉變為類似
真空的最終態

因為光屬於電磁波(具週期性)，所以將光當作一個週期性的微擾項，並且要換成 vector potential 得型式才能加入 Schrodinger equation

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = \vec{A} = \hat{e} \left(\frac{E_0}{\omega} \right) \left(e^{i(\vec{Q} \cdot \vec{r} \omega_0 t)} + e^{-i(\vec{Q} \cdot \vec{r} \omega_0 t)} \right) \quad (\text{A.2})$$

$\hat{e} \Rightarrow$ 電磁波震盪方向 $\hat{Q} \Rightarrow$ 電磁波傳遞方向

將(A.4)代入 Schrodinger equation

$$H_0 \Psi = \left(\frac{\hat{P}^2}{2m_0} + V_{crystal} \right) \Psi \quad (\text{A.3})$$

$$H \Psi = \left\{ \frac{[\hat{P} - (-e\hat{A})]^2}{2m_0} + V_{crystal} \right\} \Psi = \left(H_0 + \hat{V}_{e-ph} \right) \Psi \quad (\text{A.4})$$

\hat{V}_{e-ph} 便成了微擾項

$$\begin{aligned} \hat{V}_{e-ph} &= \frac{e}{2m_0} \left(\vec{A} \cdot \hat{P} + \hat{P} \cdot \vec{A} + e\vec{A}^2 \right) \\ &\approx \frac{e}{2m_0} \left(\vec{A} \cdot \hat{P} + \hat{P} \cdot \vec{A} \right) = \frac{e}{m_0} \vec{A} \cdot \hat{P} \\ &= \frac{eE_0}{m_0\omega} \left[e^{i(\vec{Q} \cdot \vec{r} \omega_0 t)} + e^{-i(\vec{Q} \cdot \vec{r} \omega_0 t)} \right] (\hat{e} \cdot \hat{P}) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

因此當躍遷率的式子(A.1b)類比為發光強度的式子，將可以發現：

$$\text{發光強度} \propto W_{fi} \propto |V_{fi}|^2 \propto |\hat{e} \cdot \hat{P}|^2$$

藉由上述的推導過程可以得到釋放旋光過程的交互作用項主要是

$(\hat{e} \cdot \hat{P})$ ，也就是一般教科書[22]會提到的 electron photon interaction，為

了化簡這一連串的推導過程，可以參考文獻[21]將發光強度理解成以

下簡易的式子。

$$I(\omega, \theta) = \sum_i \left| \langle \text{vac} | P^-(\theta) | X_i \rangle \right|^2 \delta(E_i - \hbar\omega) \quad (\text{A.6})$$

$$P^-(\theta) = \sum_{nm} P_{mn}^{s_e j_z}(\theta) \hat{c}_{m\sigma_e} \hat{h}_{n\sigma_h} \quad (\text{A.7})$$

$$\vec{e} \cdot \hat{x} = \cos\theta, \quad |\vec{e}| = 1, \quad |\hat{x}| = 1$$

\vec{e} 為平行檢偏器(analyzer)的偏振方向，因此旋光只有檢偏器偏振方向得以過濾保存， θ 所代表的是 \hat{e} 和 \hat{p}_x (相同於實空間 X 軸方向) 之間相差角度， \hat{p} 為電子的動量算符，如(圖 A.2)。而(A.7)中的 \hat{h}_{j_z} 、 \hat{c}_{s_z} 分別代表了電動、電子的湮滅運算子(annihilation operator)。

$$P_{mn}^{s_e j_z}(\theta) \equiv \left\langle \Psi_{m, s_e, z}^e \left| \hat{e} \cdot \vec{p} \right| \Psi_{n, j_h, z}^h \right\rangle \quad (\text{A.8})$$

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \right)$$

$$\vec{e} = (\cos\theta, \sin\theta, 0)$$

$$\left\langle \vec{r}_e \left| \Psi_{m, s_e, z}^e \right. \right\rangle = g_m^e(\vec{r}_e) u_{c, s_e, z}(\vec{r}_e)$$

$$\left\langle \vec{r}_h \left| \Psi_{n, j_h, z}^h \right. \right\rangle = f_n^h(\vec{r}_h) u_{v, j_h, z}(\vec{r}_h)$$

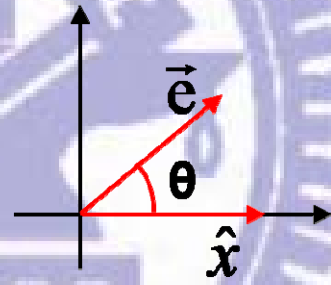


圖 A.2、檢偏器的偏振方向

$$P_{mn}^{s_e, z j_h, z}(\theta) = \underbrace{\left\langle u_{c, s_e, z} \left| \hat{e} \cdot \vec{p} \right| u_{v, j_h, z} \right\rangle}_{A_{s_e, z j_h, z}(\theta)} \underbrace{\left\langle g_m^e \left| f_n^h \right. \right\rangle}_{S_{mn}} + \underbrace{\left\langle u_{c, s_e, z} \left| u_{v, j_h, z} \right. \right\rangle \left\langle g_m^e \left| \hat{e} \cdot \vec{p} \right| f_n^h \right\rangle}_{\text{忽略}}$$

.....(A.9)

上述最後一個式子可以分為兩項，分別為 Bloch function、波包方程式對 electron dipole 項($\hat{e} \cdot \vec{p}$)作用。而第一項 Bloch function 所作用的 electron dipole 項以 θ 方程式的 $A_{s_e, z j_h, z}(\theta)$ 型式表示之，至於第二項波包方程式所作用的 electron dipole 項省略[21]。式子(A.9)將得

以化簡如(A.10)。

$$P_{mn}^{s_e, z, j_{h, z}}(\theta) \approx A_{s_e, z, j_{h, z}}(\theta) \cdot S_{nm} \quad (\text{A.10})$$

由於 S_{nm} 為電子、電洞波包方程式的重疊率(overlap)，當在一個理想的無限深位能井例子下，波函數是具有正交性，而波函數之間的重疊率非 0 即 1，而量子點的波包方程式屬於一種有限深位能井，因此波包方程式具有一定程度上的正交性，其重疊率值應該近似於 0 或 1，所以在此為了將問題簡單化，以 δ_{nm} 取代 S_{nm} 。而在文章系統的假設中，重電洞、輕電洞因量子點應力所產生的位能均類似於有限深位能井，所以其基態波包方程式都是局限於量子點內且屬於氫原子 S 型軌道方程式，因此電子和任何電洞的重疊率均假設為 1(S_{nm} 等於 1)。

$$\begin{aligned} A_{+1/2, -3/2}(\theta) &= \langle u_{c, s_z} | \hat{e} \cdot \vec{p} | u_{v, j_z} \rangle = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left|_e \hat{e} \cdot \vec{p} \right| \frac{3}{2}, \frac{-3}{2} \right\rangle_h \\ &= \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left|_e \hat{e} \cdot \vec{p} \right| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle_e = \left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{-1/2, +3/2}(\theta) &= \langle u_{c, s_z} | \hat{e} \cdot \vec{p} | u_{v, j_z} \rangle = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \left|_e \hat{e} \cdot \vec{p} \right| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle_h \\ &= \left\langle \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \left|_e \hat{e} \cdot \vec{p} \right| \frac{3}{2}, \frac{-3}{2} \right\rangle_e = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{+1/2, +1/2}(\theta) &= \langle u_{c, s_z} | \hat{e} \cdot \vec{p} | u_{v, j_z} \rangle = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left|_e \hat{e} \cdot \vec{p} \right| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_h \\ &= \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left|_e \hat{e} \cdot \vec{p} \right| \frac{3}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle_e = \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right) \end{aligned}$$

$$A_{-1/2,-1/2}(\theta) = \left\langle u_{c,s_z} \left| \hat{e} \cdot \vec{p} \right| u_{v,j_z} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \left| \hat{e} \cdot \vec{p} \right| \frac{3}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle_h$$

$$= \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{e} \cdot \vec{p} \right| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_e = \left(\frac{-1}{\sqrt{6}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right)$$

藉由上述的推導可以知道 $A_{s_{e,z}, j_{h,z}}(\theta)$ 依不同的起始激子(不同的 $j_{h,z}$ 、 $s_{e,z}$) 將會有不同的 θ 函數，且 $A_{s_{e,z}, j_{h,z}}(\theta)$ 平方正比於旋光強度而暫時稱之為旋光振幅，於(表 4.1.2)列下所有的 Bright exciton 基底所對應的 $A_{s_{e,z}, j_{h,z}}(\theta)$ ，直到最後式子中所提 \mathbf{P} 則為 Kane's parameter，關於此值可由(表 4.1.2)的備註所表示式子計算，不過其中亦包含了一些材料參數，所以在相同條件會因材料不同而計算出不同強度旋光，不過並不影響所欲觀察的旋光特性。

表 A.1、各個激子基底所釋放旋光振幅的 θ 函數

激子基底	$j_{h,z}$	$s_{e,z}$	旋光振幅
$ \uparrow\rangle_e \downarrow\rangle_h$	-3/2	+1/2	$A_{+1/2,-3/2}(\theta) = \left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right)$
$ \downarrow\rangle_e \uparrow\rangle_h$	+3/2	-1/2	$A_{-1/2,+3/2}(\theta) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right)$
$ \uparrow\rangle_e \uparrow\rangle_h$	+1/2	+1/2	$A_{+1/2,+1/2}(\theta) = \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right)$
$ \downarrow\rangle_e \downarrow\rangle_h$	-1/2	-1/2	$A_{-1/2,-1/2}(\theta) = \left(\frac{-1}{\sqrt{6}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right)$
備註： $i \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} = \langle S \mathbf{p}_x X \rangle = \langle S \mathbf{p}_y Y \rangle = \langle S \mathbf{p}_z Z \rangle$			

現在將示範如何利用上述的式子計算文章中的發光強度。文章主要處理矩陣為(4.0.1)的 4X4 矩陣，若對其做對角化將會得到四組特徵值、

特徵向量，而每一組特徵向量有四個分量，每一個分量均分別對應了 4X4 矩陣的基底。

$$\begin{matrix} |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \\ \begin{bmatrix} 0 & \delta_1 & \rho_s e^{-2i\varphi_s} & \delta_{lh} \\ \delta_1 & 0 & \delta_{lh} & \rho_s e^{+2i\varphi_s} \\ \rho_s e^{+2i\varphi_s} & \delta_{lh} & \Delta_{lh} & \delta_1' \\ \delta_{lh} & \rho_s e^{-2i\varphi_s} & \delta_1' & \Delta_{lh} \end{bmatrix} \end{matrix}$$

基底 符號	波函數		S _{e,z}	j _{h,z}	M
	波包方程式	Bloch function			
$ \uparrow\rangle_e \downarrow\rangle_h$	$[g_0^e(\vec{r}_e) g_{3/2}^h(\vec{r}_h)]$	$[u_{e,1/2}(\vec{r}_e) u_{v,3/2}(\vec{r}_h)]$	1/2	-3/2	-1
$ \uparrow\rangle_e \uparrow\rangle_h$	$[g_0^e(\vec{r}_e) g_{-1/2}^h(\vec{r}_h)]$	$[u_{e,1/2}(\vec{r}_e) u_{v,-1/2}(\vec{r}_h)]$	1/2	1/2	1
$ \downarrow\rangle_e \downarrow\rangle_h$	$[g_0^e(\vec{r}_e) g_{1/2}^h(\vec{r}_h)]$	$[u_{e,-1/2}(\vec{r}_e) u_{v,1/2}(\vec{r}_h)]$	-1/2	-1/2	-1
$ \downarrow\rangle_e \uparrow\rangle_h$	$[g_0^e(\vec{r}_e) g_{-3/2}^h(\vec{r}_h)]$	$[u_{e,-1/2}(\vec{r}_e) u_{v,-3/2}(\vec{r}_h)]$	-1/2	3/2	1

備註：M 為激子的總角動量，由電子和電洞總角動量加總而得，所以 M = S_{e,z} + j_{h,z}。

表 A.2、定義矩陣基底所對應波函數、總角動量

假設 4X4 矩陣解的一組特徵向量(a₁,a₂,a₃,a₄)，則發光強度計算如下：

$$\begin{aligned} I(\omega, \theta) &= \sum_i |\langle vac | P^-(\theta) | X_i \rangle|^2 \delta(E_i - \hbar\omega) \\ &= |\langle vac | P^-(\theta) | X_i \rangle|^2 \\ &= \left| \langle vac | \sum_{nm} P_{mn}^{S_{e,z} j_{h,z}}(\theta) c_{m S_{e,z}} h_{n j_{h,z}} | X_i \rangle \right|^2 \\ &= \left| \langle vac | \sum_{nm} P_{mn}^{S_{e,z} j_{h,z}}(\theta) c_{m S_{e,z}} h_{n j_{h,z}} \left(a_1 \cdot c_{+1/2}^+ h_{-3/2}^+ | vac \rangle + a_2 \cdot c_{-1/2}^+ h_{+3/2}^+ | vac \rangle \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + a_3 \cdot c_{+1/2}^+ h_{+1/2}^+ | vac \rangle + a_4 \cdot c_{-1/2}^+ h_{-1/2}^+ | vac \rangle \right) \right|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left| \langle \text{vac} | P^{+1/2, -3/2}(\theta) c_{+1/2} h_{-3/2} (a_1 \cdot c_{+1/2}^+ h_{-3/2}^+ | \text{vac} \rangle) \right. \\
& \quad + \langle \text{vac} | P^{-1/2, +3/2}(\theta) c_{-1/2} h_{+3/2} (a_2 \cdot c_{-1/2}^+ h_{+3/2}^+ | \text{vac} \rangle) \\
& \quad + \langle \text{vac} | P^{+1/2, +1/2}(\theta) c_{+1/2} h_{+1/2} (a_3 \cdot c_{+1/2}^+ h_{+1/2}^+ | \text{vac} \rangle) \\
& \quad \left. + \langle \text{vac} | P^{-1/2, -1/2}(\theta) c_{-1/2} h_{-1/2} (a_4 \cdot c_{-1/2}^+ h_{-1/2}^+ | \text{vac} \rangle) \right|^2 \\
& = \left| a_1 \cdot P^{+1/2, -3/2}(\theta) + a_2 \cdot P^{-1/2, +3/2}(\theta) \right. \\
& \quad \left. + a_3 \cdot P^{+1/2, +1/2}(\theta) + a_4 \cdot P^{-1/2, -1/2}(\theta) \right|^2 \\
& = \left| a_1 \left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right) + a_2 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right) \right. \\
& \quad \left. + a_3 \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right) + a_4 \left(\frac{-1}{\sqrt{6}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right) \right|^2 \\
& = \left| \left(a_1 + \frac{a_4}{\sqrt{3}} \right) \left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right) + \left(a_2 + \frac{a_3}{\sqrt{3}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right) \right|^2
\end{aligned}$$

當確定了特徵向量(a₁,a₂,a₃,a₄)的值之後，便可藉由此式子知道各個角度的旋光強度，進而分析其旋光的偏振特性。

附錄 B :

此是利用 Perturbation theory[09]推導 Matlab 所計算的結果，首先列下

4X4 矩陣，(3.2.5c)的第二項(交為簡單且參數較少)。

$$\begin{array}{cccc}
 |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h & |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \\
 \left[\begin{array}{cccc}
 0 & \delta_1 & \rho_s e^{-2i\varphi_s} & \delta_{lh} \\
 \delta_1 & 0 & \delta_{lh} & \rho_s e^{+2i\varphi_s} \\
 \rho_s e^{+2i\varphi_s} & \delta_{lh} & \Delta_{lh} & \delta_1^l \\
 \delta_{lh} & \rho_s e^{-2i\varphi_s} & \delta_1^l & \Delta_{lh}
 \end{array} \right] & & & (B.1)
 \end{array}$$

先做一個基底轉換，將重電洞對重電洞(輕電洞對輕電洞)的耦合先行處理，如此一來將可以把上述的非零矩陣元素數量降低，亦能僅餘下重電洞、輕電洞之間的耦合項。

新基底：

$$|ehh_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h + |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h] \quad (B.2a)$$

$$|ehh_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h - |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h] \quad (B.2b)$$

$$|elh_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h + |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h] \quad (B.2c)$$

$$|elh_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [-|\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h + |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h] \quad (B.2d)$$

新的矩陣：

$$\begin{pmatrix}
 |ehh_Y\rangle & |ehh_X\rangle & |elh_Y\rangle & |elh_X\rangle \\
 +\delta_1 & 0 & \delta_{lh} + \rho_S \cos[2\varphi_S] & i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] \\
 0 & -\delta_1 & -i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] & \delta_{lh} - \rho_S \cos[2\varphi_S] \\
 \delta_{lh} + \rho_S \cos[2\varphi_S] & i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] & \Delta + \delta_1' & 0 \\
 -i \cdot \rho_S \sin[2\varphi_S] & \delta_{lh} - \rho_S \cos[2\varphi_S] & 0 & \Delta - \delta_1'
 \end{pmatrix}
 \dots\dots\dots(B.3)$$

由(表 A.4)知道原本矩陣(B.1)的基底所對應的旋光振幅，如今做了基底轉換，所以將利用(B.2a)~(B.2d)以及(表 A.4)來計算出新基底所對應的旋光振幅。

$$(a) |ehh_Y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h + |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h \right]$$

$$\begin{aligned}
 I(\hbar\omega, \theta) &\propto \left| \langle vac | \sum_{j_z, s_z} A_{j_z, s_z}(\theta) \hat{h}_{j_z} \hat{c}_{s_z} |ehh_Y\rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - E_X) \\
 &= \left| \frac{\langle vac | A_{-3/2, 1/2}(\theta) \hat{h}_{-3/2} \hat{c}_{1/2} |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h + \langle vac | A_{3/2, -1/2}(\theta) \hat{h}_{3/2} \hat{c}_{-1/2} |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h}{\sqrt{2}} \right|^2 \\
 &= \left| \left(\frac{-1}{2} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{i\theta} \right) + \left(\frac{1}{2} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} i e^{-i\theta} \right) \right|^2 \\
 &= \left| \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} \sin[\theta] \right|^2
 \end{aligned}$$

$$(b) |ehh_X\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h - |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h]$$

$$\begin{aligned} I(\hbar\omega, \theta) &\propto \left| \langle vac | \sum_{j_z, s_z} A_{j_z, s_z}(\theta) \hat{h}_{j_z} \hat{c}_{s_z} |ehh_X\rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - E_X) \\ &= \left| \frac{\langle vac | A_{-3/2, 1/2}(\theta) \hat{h}_{-3/2} \hat{c}_{1/2} |\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h}{\sqrt{2}} - \frac{\langle vac | A_{3/2, -1/2}(\theta) \hat{h}_{3/2} \hat{c}_{-1/2} |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h}{\sqrt{2}} \right|^2 \\ &= \left| \left(\frac{-1}{2} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} ie^{i\theta} \right) - \left(\frac{1}{2} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} ie^{-i\theta} \right) \right|^2 \\ &= \left| -i \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} \cos[\theta] \right|^2 \end{aligned}$$

$$(c) |elh_Y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h + |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h]$$

$$\begin{aligned} I(\hbar\omega, \theta) &\propto \left| \langle vac | \sum_{j_z, s_z} A_{j_z, s_z}(\theta) \hat{h}_{j_z} \hat{c}_{s_z} |elh_Y\rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - E_X) \\ &= \left| \frac{\langle vac | A_{-3/2, 1/2}(\theta) \hat{h}_{-3/2} \hat{c}_{1/2} |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h}{\sqrt{2}} + \frac{\langle vac | A_{3/2, -1/2}(\theta) \hat{h}_{3/2} \hat{c}_{-1/2} |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h}{\sqrt{2}} \right|^2 \\ &= \left| \left(\frac{1}{2\sqrt{3}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} ie^{-i\theta} \right) + \left(\frac{-1}{2\sqrt{3}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} ie^{i\theta} \right) \right|^2 \\ &= \left| \frac{m_0 \mathbf{P}}{\sqrt{3}\hbar} \sin[\theta] \right|^2 \end{aligned}$$

$$(d) |elh_X\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-|\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h + |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h \right]$$

$$\begin{aligned} I(\hbar\omega, \theta) &\propto \left| \langle \text{vac} | \sum_{j_z, s_z} A_{j_z, s_z}(\theta) \hat{h}_{j_z} \hat{c}_{s_z} | ehh_Y \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - E_X) \\ &= \left| \frac{-\langle \text{vac} | A_{-3/2, 1/2}(\theta) \hat{h}_{-3/2} \hat{c}_{1/2} |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_h}{\sqrt{2}} + \frac{\langle \text{vac} | A_{3/2, -1/2}(\theta) \hat{h}_{3/2} \hat{c}_{-1/2} |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_h}{\sqrt{2}} \right|^2 \\ &= \left| -\left(\frac{1}{2\sqrt{3}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} ie^{-i\theta} \right) + \left(\frac{-1}{2\sqrt{3}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} ie^{i\theta} \right) \right|^2 \\ &= \left| -i \frac{m_0 \mathbf{P}}{\sqrt{3}\hbar} \cos[\theta] \right|^2 \end{aligned}$$

同於(附錄 A)的做法，將新基底的旋光振幅列表：

新激子基底	旋光振幅	旋光強度 $I(\hbar\omega, \theta)$	θ_{Max}
$ ehh_Y\rangle$	$\frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} \sin[\theta]$	$\frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2} \sin(\theta) ^2$	$90^\circ, 270^\circ$
$ ehh_X\rangle$	$-i \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} \cos[\theta]$	$\frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2} \cos(\theta) ^2$	$0^\circ, 180^\circ$
$ elh_Y\rangle$	$\frac{m_0 \mathbf{P}}{\sqrt{3}\hbar} \sin[\theta]$	$\frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{3\hbar^2} \sin(\theta) ^2$	$90^\circ, 270^\circ$
$ elh_X\rangle$	$-i \frac{m_0 \mathbf{P}}{\sqrt{3}\hbar} \cos[\theta]$	$\frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{3\hbar^2} \cos(\theta) ^2$	$0^\circ, 180^\circ$

表 B.1、新基底所釋放旋光特性

由(表 B.1)知道 $|ehh_Y\rangle$ 、 $|elh_Y\rangle$ 基底所對應的激子釋放沿著 Y 軸得線偏振光，而第 $|ehh_X\rangle$ 、 $|elh_X\rangle$ 個基底則沿著 X 軸。

由於含有重電洞的激子的能量較低，比較易於發生激子的再結合，而且文章中主要是求最低的兩個態，也就是偏重於含有重電洞激子的討論，因此將把激子含重電洞以外的效應當作為擾處理。

$$H = \begin{bmatrix} A & \\ & B \end{bmatrix} \Rightarrow H' = \begin{bmatrix} A' \end{bmatrix}$$

圖 B.1、微擾法的示意圖，可以將矩陣縮小

(圖 4.2.1) 中 A 屬於含重電洞激子，B 屬於含輕電洞的基底，而利用微擾法[09]將得到 2×2 矩陣 H' 。

$$A' = U_{mn}^A = H_{mn} + \sum_{\alpha}^B \frac{H'_{m\alpha} H'_{\alpha n}}{E - H_{\alpha\alpha}} + \sum_{\alpha\beta}^B \frac{H'_{m\alpha} H'_{\alpha\beta} H'_{\beta n}}{(E - H_{\alpha\alpha})(E - H_{\beta\beta})} + \dots$$

$$\sum_n^A (U_{mn}^A - E\delta_{mn})c_n = 0 \quad m \text{ in } (A) \quad (\text{B. 3a})$$

$$c_m = \sum_n^A \frac{U_{mn}^A}{E - H_{mm}} c_n \quad m \text{ in } (B) \quad (\text{B. 3b})$$

$$H'_{2 \times 2} = \begin{bmatrix} H'_{11} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_1 & 0 \\ 0 & -\delta_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{bmatrix} \quad (\text{B. 4})$$

(B. 4) 的第一項微原本的矩陣，而第二項則是為擾項。

$$U_{11} \approx \frac{\delta_{lh}^2 + \rho_s^2 + 2\delta_{lh}\rho_s \cos[2\varphi_s]}{-\Delta_{lh}} \left(1 + \frac{\delta_1}{\Delta_{lh}} \right) + \frac{\delta_{lh}^2 + \rho_s^2 \cos[4\varphi_s] + 2\delta_{lh}\rho_s \cos[\varphi_s]}{\Delta_{lh}} \frac{\delta_1'}{\Delta_{lh}}$$

$$U_{22} \approx \frac{\delta_{lh}^2 + \rho_s^2 - 2\delta_{lh}\rho_s \cos[2\varphi_s]}{-\Delta_{lh}} \left(1 - \frac{\delta_1}{\Delta_{lh}} \right) - \frac{\delta_{lh}^2 + \rho_s^2 \cos[4\varphi_s] - 2\delta_{lh}\rho_s \cos[2\varphi_s]}{\Delta_{lh}} \frac{\delta_1'}{\Delta_{lh}}$$

$$U_{12} \approx \frac{-i}{\Delta_{lh}} \left\{ 2\delta_{lh}\rho_S \sin[2\varphi_S] - \frac{\rho_S^2 \delta_1'}{\Delta_{lh}} \sin[4\varphi_S] \right\}$$

$$U_{21} \approx \frac{i}{\Delta_{lh}} \left\{ 2\delta_{SR}\rho_S \sin[2\varphi_S] - \frac{\rho_S^2 \delta_1'}{\Delta_{lh}} \sin[4\varphi_S] \right\}$$

上述四個式子已到了微擾的第二階，發現似乎過於冗長，因此將其化簡為一階微擾即可。

$$U_{11} \approx \frac{\delta_{lh}^2 + \rho_S^2 + 2\delta_{lh}\rho_S \cos[2\varphi_S]}{-\Delta_{lh}} \quad (\text{B. 5a})$$

$$U_{22} \approx \frac{\delta_{lh}^2 + \rho_S^2 - 2\delta_{lh}\rho_S \cos[2\varphi_S]}{-\Delta_{lh}} \quad (\text{B. 5b})$$

$$U_{12} \approx \frac{-i}{\Delta_{lh}} 2\delta_{lh}\rho_S \sin[2\varphi_S] \quad (\text{B. 5c})$$

$$U_{21} \approx \frac{i}{\Delta_{lh}} 2\delta_{SR}\rho_S \sin[2\varphi_S] \quad (\text{B. 5d})$$

由第三章末估計參數值時知道 $\varphi_S \approx 0^\circ$ ，所以將其帶入時，將得到如下得 2X2 矩陣。

$$H' = \begin{pmatrix} a & ci \\ -ci & b \end{pmatrix} \quad (\text{B. 6})$$

$$\begin{cases} a \approx \delta_1 - \frac{\delta_{lh}^2 + \rho_S^2 + 2\delta_{lh}\rho_S}{\Delta_{lh}} \\ b \approx -\delta_1 - \frac{\delta_{lh}^2 + \rho_S^2 - 2\delta_{lh}\rho_S}{\Delta_{lh}} \\ c = 0 \end{cases}$$

對於(B. 6)簡單的 2X2 矩陣，可以得到其解析特徵值、特徵向量。

	特徵值		特徵向量	
	$\begin{pmatrix} a & ci \\ -ci & b \end{pmatrix}$	E_α	$a = \frac{a+b}{2} - \sqrt{\left(\frac{a-b}{2}\right)^2 + c^2}$	$\varphi_\alpha^{(0)}$
	E_β	$b = \frac{a+b}{2} + \sqrt{\left(\frac{a-b}{2}\right)^2 + c^2}$	$\varphi_\beta^{(0)}$	$\begin{bmatrix} \left(\frac{a-b}{2}\right) + \sqrt{\left(\frac{a-b}{2}\right)^2 + c^2} & -ic \end{bmatrix}$

表 B.2、2X2 矩陣特徵值、特徵向量

(1) Energy splitting :

$$\Delta E = E_\beta - E_\alpha = 2\sqrt{\left(\frac{a-b}{2}\right)^2 + c^2} \approx 2\delta_1 - \frac{4\delta_{lh}\rho_s}{\Delta_{lh}} \quad (\text{B. 7})$$

(2) Intensity :

$$\text{特徵向量：} \varphi_\alpha^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \varphi_\beta^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B. 8a})$$

利用(附錄 B)的公式可以將(4.2.8)擴展回原本 4X4 矩陣的特徵值

$$\left. \begin{array}{l} \varphi_\alpha^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{\delta_{lh} - \rho_s}{-\Delta_{lh} - \delta_1 + \delta_1^l} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{\delta_{lh} - \rho_s}{-\Delta_{lh}} \end{bmatrix} \\ \varphi_\beta^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{\delta_{lh} + \rho_s}{-\Delta_{lh} + \delta_1 - \delta_1^l} \\ 0 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{\delta_{lh} + \rho_s}{-\Delta_{lh}} \\ 0 \end{bmatrix} \end{array} \right\} \quad (\text{B. 8b})$$

由(表 A.1)中可以知道 $\varphi_\alpha^{(0)}$ 態所釋放的旋光為線性偏振且沿著 X 軸方

向，而 $\varphi_\beta^{(0)}$ 態所釋放的旋光為線性偏振且沿著 Y 軸方向。

$\varphi_\alpha^{(0)}$ 態旋光強度：

$$I(\theta_{Max}) = \left| \frac{1 + \frac{\rho_s}{\sqrt{3}\Delta}}{\sqrt{1^2 + \left(\frac{\rho_s}{\Delta_{lh}}\right)^2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} \right|^2 \approx \left(1 + \frac{2\rho_s}{\sqrt{3}\Delta_{lh}} + \frac{\rho_s^2}{3\Delta_{lh}^2} - \frac{\rho_s^2}{2\Delta_{lh}^2} \right) \frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2} \approx \left(1 + \frac{2\rho_s}{\sqrt{3}\Delta_{lh}} \right) \frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2}$$

.....(B. 9a)

$\varphi_\beta^{(0)}$ 態旋光強度：

$$I(\theta_{Max}) = \left| \frac{1 - \frac{\rho_s}{\sqrt{3}\Delta}}{\sqrt{1^2 + \left(\frac{-\rho_s}{\Delta_{lh}}\right)^2}} \frac{m_0 \mathbf{P}}{\hbar} \right|^2 \approx \left(1 - \frac{2\rho_s}{\sqrt{3}\Delta_{lh}} + \frac{\rho_s^2}{3\Delta_{lh}^2} - \frac{\rho_s^2}{2\Delta_{lh}^2} \right) \frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2} \approx \left(1 - \frac{2\rho_s}{\sqrt{3}\Delta_{lh}} \right) \frac{m_0^2 \mathbf{P}^2}{\hbar^2}$$

.....(B. 9b)

(3) 極化率：

$$\text{Polarizability} \approx \frac{\left(1 - \frac{\rho_s + \delta_{lh}}{\Delta_{lh}\sqrt{3}} \right)^2 - \left(1 + \frac{\rho_s - \delta_{lh}}{\Delta_{lh}\sqrt{3}} \right)^2}{\left(1 - \frac{\rho_s + \delta_{lh}}{\Delta_{lh}\sqrt{3}} \right)^2 + \left(1 + \frac{\rho_s - \delta_{lh}}{\Delta_{lh}\sqrt{3}} \right)^2} \approx \frac{-4}{\sqrt{3}\Delta_{lh}} \frac{\rho_s}{2} = \frac{-2}{\sqrt{3}\Delta_{lh}} \rho_s$$

.....(B. 10)

參考文獻：

- [01] NSF report: Quantum Information Science(1999)
- [02] v. Vedral “The role of relative entropy in quantum information theory”, Rev. Mod. Phys. **74**, 197 (2002)
- [03] Nicolas Gisin“Quantum cryptography”, Rev. Mod. Phys. **74**, 145 (2002)
- [04]O. Benson, C. Santori, M. Pelton, and Y. Yamamoto, Phys. Rev. Lett. **84**, 2513 (2000)
- [05] N. Akopian, N. H. Lindner, E. Poem, Y. Berlatzky, J. Avron, and D. Gershoni, Phys. Rev. Lett. **96**, 130501(2006)
- [06] R. Johne, N. A. Gippius, G. Pavlovic, D. D. Solnyshkov, I. A. Shelykh, and G. Malpuech, Phys. Rev. Lett. **100**, 240404 (2008).
- [07] R. J. Young, R. M. Stevenson, A. J. Hudson, C. A. Nicoll, D. A. Ritchie, and A. J. Shields, Phys. Rev. Lett. **102**, 030406 (2009).
- [08] N. Akopian, N. H. Lindner, E. Poem, Y. Berlatzky, J. Avron, and D. Gershoni, Phys. Rev. Lett. **96**, 130501 (2006).
- [09] P. O. Löwdin, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951).
- [10] J. Marquez, et al, Appl. Phys. Lett. **78**, 2309 (2001).
- [11]黃上瑜，利用k·p法計算垂直耦合雙量子點的電子結構，交通大學，碩士論文，民國九十七年十月
- [12] M. A. Cusack, P. R. Briddon, and M. Jaros, Phys. Rev. B, **54**, R2300 (1996).
- [13] W. Jaskólski, M. Zieliński, G. W. Bryant, and J. Aizpurua, Phys. Rev. B **74**, 195339 (2006).
- [14] S. L. Chuang “Physics of Optoelectronic Devices”, Second Edition, Wiley (2008)
- [15] L’eger Y, Besombes L, Maingault L and Mariette H 2007 Phys. Rev. B **76** 045331 (2007)
- [16] O. Stier, M. Grundmann, and D. Bimberg, Phys. Rev. B, **59**, 5688 (1999).
- [17] L. He, G. Bester, and A. Zunger, Phys. Rev. B, **70**, 235316 (2004).
- [18] S. Lee, O. L. Lazarenkova, P. von Allmen, F. Oyafuso, and G. Klimeck, Phys. Rev. B **70**, 125307 (2004).
- [19] E. L. Ivchenko and G.E. Pikus, *Superlattices and other Heterostructures*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 110 (Springer-Verlag, Berlin, 1997).
- [20] M. Bayer et al., Phys. Rev. B **65**, 195315 (2002).
- [21] W. Sheng, S.-J. Cheng, and P. Hawrylak, Phys. Rev. B, **71**, 035316 (2005).
- [22] J. H. Davies “The physics of low-dimensional semiconductors : an introduction”, Ch8, (1998).