

國立交通大學

電子物理學系

碩士論文

自組式量子點應變之理論研究

Theoretical studies of strain in self-assembled quantum dots

研究生：曾泓鈞

指導教授：鄭舜仁 教授

中華民國一百年七月

自組式量子點應變之理論研究

Theoretical studies of strain in self-assembled quantum dots

研究生：曾宏鈞

Student : Hung-Chun Tseng

指導教授：鄭舜仁 教授

Advisor : Shun-Jen Cheng

國立交通大學

電子物理學系

碩士論文

A Thesis

Submitted to Department of Electrophysics
College of Science

National Chiao Tung University
in partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of
Master
in

Electrophysics

March 2010

HsinChu, Taiwan, Republic of China

中華民國一百年七月

自組式量子點應變之理論研究

學生：曾宏鈞

指導教授：鄭舜仁 博士

國立交通大學電子物理學系碩士班

摘要

本論文主要是探討砷化銦與砷化鎵(InAs/GaAs)自組式量子點(self-assembled quantum dots)的應變分佈。文章中除了利用古典連體力學(classical continuum mechanics)來推導格林函數(Green's function)及正逆傅立葉轉換(Fourier transforms)來計算自組式量子點的應變分佈外，也使用COMSOL(有限元素軟體)計算量子點的應變，並將這兩個方法的結果做比較。

由於應變效應會直接影響量子點電子電洞的侷限位能，所以，應變的分佈相當重要，因此，在本文一開始，介紹了應變分量所呈現之位移圖像。此外，我們計算多種形狀量子點包含量子盒與截角金字塔的應變與侷限位能，包含XY對稱與不對稱的情況，藉此了解不同形狀下侷限位能的改變。此外，我們也計算垂直耦合雙量子點的應變與侷限位能。

Theoretical studies of strain in self-assembled quantum dots

Student : Hung-Chun Tseng

Advisor : Shun-Jen Cheng

**Department of Electrophysics
National Chiao Tung University**

ABSTRACT

This thesis is mainly to explore the strain distribution of InAs/GaAs of self-assembled quantum dots. The article takes advantage of classical continuum mechanics to infer Green's function and Fourier transforms, calculating the strain distribution of self-assembled quantum dots. Also using COMSOL calculate the strain of quantum dots, and comparing the results of these two methods.

Since the strain effect directly affects the confinement potential of electron and holes of quantum dots. Therefore, the strain distribution is essential. With this in mind, I start the article with the introduction of the displacement graphics of the strain component. In addition, a variety of shapes of quantum dot we calculate the strain and the confinement potential, including the XY symmetry and asymmetry, to understand the different changes in shape under the confinement potential. In addition, we calculate the strain and the confinement potential of the vertically coupled double quantum dots.

致謝

首先，感謝鄭舜仁老師在我兩年多的碩士生涯內，對我的指導，除了在研究上提供充分的資源以及細心的指導，且培養做事情該有的正確態度。並且感謝各位口試委員，林浩雄老師、陳振芳老師、以及張文豪老師提供的寶貴意見，讓我的論文內容更趨於完備。

特別感謝盧書楷、尤文廷及陳彥廷學長，在學業上時時提供意見，同時也是碩士生活中最好的朋友。感謝我的同學廖禹淮、許克銘及徐燁在課業上的討論和意見。亦感謝學弟張語宸、古智豪和鄭丞偉撥空與我的討論。

謝謝父母親不辭辛勞，讓我有無後顧之憂的生活，並且支持我所選擇想發展的方向。因為要感謝的人太多，所以，最後對所有曾給予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.....	viii
圖目錄.....	ix
第一章、導論.....	01
1.1 量子點簡介.....	01
1.2 研究動機.....	01
1.3 文獻回顧.....	02
1.4 章節概要.....	03
第二章、彈性力學理論架構.....	04
2.1 基本彈性力學概念[12-14].....	05
2.2 彈性力學的統御方程[15].....	17
2.3 材料的組成與初始應變.....	19
第三章、應變數值解法.....	21



3.1 有限元素法概論[16-17].....	21
3.2 COMSOL 軟體說明.....	23
3.3 平面波展開法[18].....	25
第四章、量子力學理論架構.....	29
4.1 薛丁格方程式.....	29
4.2 異質結構的位能與形變位能.....	32
第五章、結果與討論.....	37
5.1 金字塔形狀、正方體與球形量子點應變驗證.....	37
5.2 應變與位移.....	40
5.3 量子盒與截角金字塔形量子點系列的比較.....	43
5.4 XY 對稱破壞下量子盒與截角金字塔形量子點系列的比較.....	78
5.5 垂直耦合雙量子點的比較.....	102
第六章、結論.....	108
參考文獻.....	110
附錄 A、材料參數[23].....	112
附錄 B、實空間格林函數推導[14].....	113
附錄 C、格林函數的傅立葉形式之推導[18].....	117

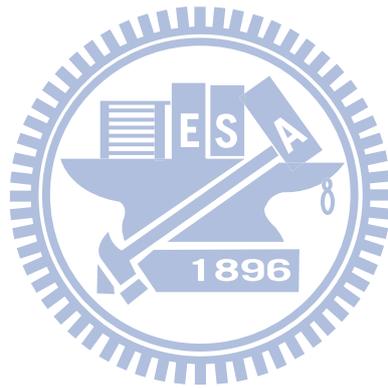
附錄 D、特徵函數.....	120
附錄 E、特徵函數之傅立葉轉換[22].....	122
附錄 F、二階張量座標轉換[25-27].....	124



表目錄

表 5.1、垂直耦合雙量子點計算參數.....102

表 A.1、材料參數[14]的材料參數.....112



圖目錄

圖 2.1、小六面體元素.....	6
圖 2.2、小六面體元素對應之應力.....	7
圖 2.3、平面對應之應力.....	7
圖 2.4、物體平面之應力與應力矩.....	9
圖 2.5、正應變示意圖.....	10
圖 2.6、剪應變示意圖.....	10
圖 2.7、P 點位移示意圖.....	11
圖 2.8、P、A、B 三點位移示意圖.....	12
圖 2.9、系統外力與虛位移示意圖.....	18
圖 3.1、一維桿問題示意圖.....	21
圖 3.2、一維桿問題(切割為兩個元素)示意圖.....	22
圖 4.1、異質材料的侷限位能示意圖.....	33
圖 5.1、不同傅立葉項數的金字塔形量子點應變比較圖(a)、體應變比較圖(b)、雙軸應變比較圖.....	38
圖 5.2、COMSOL 不同網格大小的金字塔形量子點應變比較圖(a)、體應變比較圖(b)、雙軸應變比較圖.....	38
圖 5.3、金字塔形量子點應變的比較圖.....	39
圖 5.4、正方體形量子點應變的比較圖.....	39

圖 5.5、球形量子點應變的比較圖.....40

圖 5.6、長寬為 20(nm)且高為 4(nm)的量子盒應變與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖.....41

圖 5.7、基底長度為 20(nm)且高為 10(nm)的金字塔形量子點應變與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖.....42

圖 5.8、長寬為 20(nm)高度 a_z 在改變的量子盒，其中心點應變值的比較圖.....44

圖 5.9、長寬為 20(nm)且高為 20(nm)的量子盒應變與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖.....45

圖 5.10、長寬為 20(nm)且高為 4(nm)的量子盒應變與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖.....46

圖 5.11、長寬為 20(nm)且高為 4(nm)的量子盒應變與位移對照圖(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖.....47

圖 5.12、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒沿 Z 軸的應變分佈(a)、

e_{xx} 分佈圖(b)、 e_{zz} 分佈圖.....48

圖 5.13、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒沿 Z 軸的應變分布(a)、
體應變分佈圖(b)、雙軸應變分佈圖.....49

圖 5.14、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒，在考慮四能帶與六
能帶的輕電洞位能比較圖.....51

圖 5.15、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒沿 Z 軸的侷限位能分
佈(a)、電子侷限位能分佈圖(b)、電洞侷限位能分佈圖.....52

圖 5.16、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XZ 平面的電子侷限
位能分佈(a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm) (c)、高度為 4(nm) (d)、
高度為 2(nm).....53

圖 5.17、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XY 平面的電子侷限
位能分佈(a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm) (c)、高度為 4(nm) (d)、
高度為 2(nm).....53

圖 5.18、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XZ 平面的重電洞侷
限位能分佈(a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm) (c)、高度為 4(nm)
(d)、高度為 2(nm).....54

圖 5.19、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XY 平面的重電洞侷
限位能分佈(a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm) (c)、高度為 4(nm)
(d)、高度為 2(nm).....54

圖 5.20、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XZ 平面的輕電洞侷 限位能分佈(a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm) (c)、高度為 4(nm) (d)、高度為 2(nm)	55
圖 5.21、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XY 平面的輕電洞侷 限位能分佈(a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm) (c)、高度為 4(nm) (d)、高度為 2(nm)	55
圖 5.22、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 7(nm)的金字塔形量子 點應變與位移對照圖(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分 佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖	56
圖 5.23、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 7(nm)的金字塔形量子 點應變與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分 佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖	57
圖 5.24、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 7(nm)的金字塔形量子 點應變與位移對照圖(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分 佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖	58
圖 5.25、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 3(nm)的金字塔形量子 點應變與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分 佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖	59
圖 5.26、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 3(nm)的金字塔形量子	

點應變與位移對照圖(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖.....	60
圖 5.27、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 3(nm)的金字塔形量子點應變與位移對照圖(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖.....	61
圖 5.28、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高度在改變的金字塔沿 Z 軸($x,y=0$)的應變分佈(a)、 e_{xx} 分佈圖(b)、 e_{zz} 分佈圖	62
圖 5.29、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高度在改變的金字塔沿 Z 軸($x,y=0$)的應變分佈(a)、體應變分佈圖(b)、雙軸應變分佈圖..	63
圖 5.30、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高度在改變的金字塔沿 Z 軸($x,y=0$)的侷限位能分佈(a)、電子侷限位能分佈圖(b)、重電洞侷限位能分佈圖(c)、輕電洞侷限位能分佈圖	64
圖 5.31、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XZ 平面($y=0$)的電子侷限位能分佈(a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)	65
圖 5.32、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XY 平面($z=0$)的電子侷限位能分佈(a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)	65
圖 5.33 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XZ 平面($y=0$)的重電洞侷限位能分佈(a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)	

.....	65
圖 5.34、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XY 平面 ($z=0$)的重電洞侷限位能分佈(a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)66
圖 5.35、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XZ 平面 ($y=0$)的輕電洞侷限位能分佈(a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)66
圖 5.36、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XY 平面 ($z=0$)的輕電洞侷限位能分佈 (a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)66
圖 5.37、 b_x 為 12(nm)、 b_y 為 10.8(nm)且高為 5(nm)的金字塔形量 子點應變與位移對照圖(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面 分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖67
圖 5.38、 b_x 為 12(nm)、 b_y 為 10.8(nm)且高為 5(nm)的金字塔形量 子點應變與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面 分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖68
圖 5.39、 b_x 為 12(nm)、 b_y 為 10.8(nm)且高為 5(nm)的金字塔形量 子點應變與位移對照圖(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面 分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖69
圖 5.40、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 5(nm)的截角金字塔形 量子點應變與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平	

面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖.....	70
圖 5.41、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 5(nm)的截角金字塔形 量子點應變與位移對照圖(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平 面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖.....	71
圖 5.42、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 5(nm)的截角金字塔形 量子點應變與位移對照圖(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平 面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖.....	72
圖 5.43、高度為 5(nm)而 b_x 在改變的截角金字塔沿 Z 軸($x,y=0$) 的應變分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 e_{xx} 分佈圖(b)、 e_{zz} 分佈圖	73
圖 5.44、高度為 5(nm)而 b_x 在改變的截角金字塔沿 Z 軸($x,y=0$) 的應變分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、體應變分佈圖(b)、雙軸應變分佈 圖.....	74
圖 5.45、高度為 5(nm)而 b_x 在改變的截角金字塔沿 Z 軸($x,y=0$) 的侷限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、電子侷限位能分佈圖(b)、電 洞侷限位能分佈圖.....	75
圖 5.46、高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XZ 平面($y=0$)的電 子侷限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)	76
圖 5.47、高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XY 平面($y=0$)的電 子侷限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)	

.....	76
圖 5.48 高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XZ 平面($y=0$)的重電洞侷限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)	
.....	76
圖 5.49、高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XY 平面($y=0$)的重電洞侷限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)	
.....	77
圖 5.50、高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XZ 平面($y=0$)的輕電洞侷限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)	
.....	77
圖 5.51、高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XY 平面($y=0$)的輕電洞侷限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)	
.....	77
圖 5.52、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 4(nm)，而 a_y 在改變的量子盒， e_{xx} 沿 X 軸與 e_{yy} 沿 Y 軸的比較(a)、 a_y 為 20(nm)(b)、 a_y 為 14(nm)	78
圖 5.53、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，其中心點應變值的比較圖.....	79
圖 5.54、 a_x 為 20(nm)、 a_y 為 18(nm)和 a_z 為 5(nm)的量子盒應變與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖	80
圖 5.55、 a_x 為 20(nm)、 a_y 為 18(nm)和 a_z 為 5(nm)的量子盒應變與位移對照圖(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分佈圖(c)、	

e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖	81
圖 5.56、 a_x 為 20(nm)、 a_y 為 18(nm)和 a_z 為 5(nm)的量子盒應變 與位移對照圖(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖 (c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖	82
圖 5.57、 a_x 為 20(nm)、 a_y 為 14(nm)和 a_z 為 5(nm)的量子盒應變 與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖	83
圖 5.58、 a_x 為 20(nm)、 a_y 為 14(nm)和 a_z 為 5(nm)的量子盒應變 與位移對照圖(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖	84
圖 5.59、 a_x 為 20(nm)、 a_y 為 14(nm)和 a_z 為 5(nm)的量子盒應變 與位移對照圖(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖 (c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖	85
圖 5.60、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒沿 Z 軸的應變分佈(a)、 e_{xx} 與 e_{yy} 分佈圖(b)、 e_{zz} 分佈圖	86
圖 5.61、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒沿 Z 軸的應變分布(a)、體應變分佈圖(b)、雙軸應變分佈圖	87
圖 5.62、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，考 慮四能帶與六能帶的輕電洞位能比較圖	88

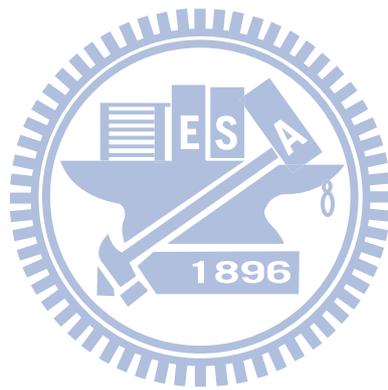
圖 5.63、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒沿 Z 軸的侷限位能(a)、電子侷限位能分佈圖(b)、電洞侷限位能分佈圖	89
圖 5.64、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，XY 平面的電子侷限位能分佈 (a)、 a_y 為 14(nm) (b)、 a_y 為 18(nm)	90
圖 5.65、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，XY 平面的重電洞侷限位能分佈(a)、 a_y 為 14(nm) (b)、 a_y 為 18(nm)	90
圖 5.66、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，XY 平面的輕電洞侷限位能分佈(a)、 a_y 為 14(nm) (b)、 a_y 為 18(nm)	90
圖 5.67、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，位於 $z=3$ (nm)之 XY 平面的輕電洞侷限位能分佈(a)、 a_y 為 14(nm) (b)、 a_y 為 18(nm)	91
圖 5.68、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒，其中心點應變值的比較圖	91
圖 5.69、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm) 和 h 為 5(nm)的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖	92
圖 5.70、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm) 和 h 為 5(nm)的截角金字塔	

形量子點應變與位移對照圖(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖.....	93
圖 5.71、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm) 和 h 為 5(nm)的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖.....	94
圖 5.72、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 14(nm)和 h 為 5(nm)的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖.....	95
圖 5.73、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 14(nm)和 h 為 5(nm)的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖.....	96
圖 5.74、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 14(nm)和 h 為 5(nm)的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖.....	97
圖 5.75、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒沿 Z 軸的應變分佈(a)、 e_{xx} 與 e_{yy} 分佈圖(b)、 e_{zz} 分佈圖.....	98
圖 5.76、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒沿 Z 軸的應變分布(a)、體應變分佈圖(b)、雙軸應變分佈圖.....	99
圖 5.77、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒沿 Z 軸	

的侷限位能(a)、電子侷限位能分佈圖(b)、電洞侷限位能分佈圖	100
圖 5.78、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒，XY 平面的電子侷限位能分佈(a)、 b_y 為 14(nm) (b)、 b_y 為 18(nm)	101
圖 5.79、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒，XY 平面的重電洞侷限位能分佈(a)、 b_y 為 14(nm) (b)、 b_y 為 18(nm)	101
圖 5.80、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒，XY 平面的輕電洞侷限位能分佈(a)、 b_y 為 14(nm) (b)、 b_y 為 18(nm)	101
圖 5.81、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒，位於 $z=3$ (nm)之 XY 平面的輕電洞侷限位能分佈(a)、 b_y 為 14(nm) (b)、 b_y 為 18(nm)	102
圖 5.82、基底長度為 28(nm)、高為 4(nm)的截角金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸的應變分布	103
圖 5.83、基底長度為 28(nm)、高為 4(nm)的截角金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸的應變分布	103
圖 5.84、基底長度為 28(nm)、高為 4(nm)的截角金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸的電子侷限位能	104
圖 5.85、基底長度為 28(nm)、高為 4(nm)的截角金字塔形量子點，	

單量子點與雙量子點沿 Z 軸的電洞侷限位能	104
圖 5.86、基底長度為 31(nm)、高為 8(nm)的截角金字塔形量子點， 單量子點與雙量子點沿 Z 軸的應變分布	104
圖 5.87、基底長度為 31(nm)、高為 8(nm)的截角金字塔形量子點， 單量子點與雙量子點沿 Z 軸的應變分布	105
圖 5.88、基底長度為 31(nm)、高為 8(nm)的截角金字塔形量子點， 單量子點與雙量子點沿 Z 軸的電子侷限位能	105
圖 5.89、基底長度為 31(nm)、高為 8(nm)的截角金字塔形量子點， 單量子點與雙量子點沿 Z 軸的電洞侷限位能	105
圖 5.90、基底長度為 21(nm)、高為 10.5(nm)的金字塔形量子點， 單量子點與雙量子點沿 Z 軸的應變分布	106
圖 5.91、基底長度為 21(nm)、高為 10.5(nm)的金字塔形量子點， 單量子點與雙量子點沿 Z 軸的應變分布	106
圖 5.92、基底長度為 21(nm)、高為 10.5(nm)的金字塔形量子點， 單量子點與雙量子點沿 Z 軸的電子侷限位能	107
圖 5.93、基底長度為 21(nm)、高為 10.5(nm)的金字塔形量子點， 單量子點與雙量子點沿 Z 軸的電洞侷限位能	107
圖 D.1、金字塔之 XZ 平面切面圖	120
圖 D.2、截角金字塔的 XZ 平面切面圖	121

圖 F.1、座標轉換示意圖.....124



第一章 序論

1.1 量子點簡介

當物體的大小與其組成物質的物質波波長相當時, 量子效應將主導材料物、化、光、電等各種特性的關鍵性因素。以IV及III-V族半導體為例, 其物質波波長約為20 ~ 40奈米, 在三度空間各方向大小均在此尺度的半導體物體因此稱之為半導體量子點, 而量子點其特性與巨觀塊材截然不同, 具有許多傳統材料所沒有的優越的性質, 如其電子態密度分佈不似塊材形成能帶, 而是與單一原子較為相似的不連續能階所組成, 故又稱為人造原子[1-2]。

量子侷限效應, 是指當量子點的尺寸變小其能階間距則變大, 因而, 提供了一個經由控制其大小而調變其能階的有效機制, 表現在光學特性上, 量子點就是一個頻寬狹窄而頻率可控制的理想光源。然其關鍵-量子點的結構如形狀、原子排列及成份分佈至今仍不甚清楚, 這些正是決定其光電特性的關鍵因素。

1.2 研究動機

近年來, 常以分子束磊晶的方法製作量子點。但在磊晶過程, 異質材料的晶格不匹配所導致的應變, 會造成量子點能帶的改變[3-4]。以砷化銻(InAs)與砷化鎵(GaAs)為例, 半導體的導電帶通常受到體應變(hydrostatic strain)的影響而改變, 價電帶則同時受體應變與雙軸應

變(biaxial strain)的雙重影響[5]，而這些改變將影響量子點的侷限效應。因此，在量子點光電性質的研究上，分析量子點結構的應變是非常重要的工作。本文將以數值模擬來分析自聚式量子點 (self-assembled quantum dot)的應變的分佈，進而估算對侷限位能的影響。

1.3 文獻回顧

分析自聚式量子點的應變場分佈，可以分為幾類：(1)原子模型法(atomistic modeling)[6] (2)內含物(inclusion)原理的解析解法[7-8] (3)有限元素法(finite element method, EM)[9]。Pryor 等人[6]利用原子價電力場(atomistic valence force field)，來計算自聚式量子點的應變分佈。然而，這種原子模型法計算的系統中所含的原子數目約在數十萬個以上，故需耗費大量的計算量。Pearson等人[7]、Faux 等人[8]則發展出一套以「艾許比內含物原理(Eshelby's inclusion theory)[10-11]」為基礎的解析解法，提供了分析量子點內及其周圍應變場的積分表示式，Liu等人[9]則建立了三維的量子點模型，以有限元素法分析其應變場之分佈。

基本上，「原子模型法」是從微觀的原子理論出發；「基於內含物原理的解析解法」和「有限元素法」則由巨觀的連續體理論所發展。本文選擇使用內含物原理的解析解法，來模擬自聚式量子點之應變場分佈，並與有限元素法軟體COMSOL做比較。

1.4 章節概要

本文第一章主要先簡介量子點與應變成因，及其對侷限位能的影響和文獻回顧。第二章則針對彈性力學給出基本理論，以便知各應變分量所代表意涵。第三章先利用數學推導給出格林函數，再以傅立葉轉換處理不連續點問題，最後求得量子點應變通式，並在最後一節提及 COMSOL 的使用介紹。第四章則介紹單能帶等效質量薛丁格方程式與應變造成的等效位能。第五章先給出與文獻的比較，再則對量子點不同形狀做比較。第六章是本篇論文的結論與未來可能之發展。



第二章 彈性力學理論架構

彈性：在外力消失後，物體恢復原狀的一種性質。

彈性體：具有彈性性質的一種理想物體。

彈性力學：研究彈性體在外界因素影響下，其內部所生成的位移與對應之應力分佈的一門學科。

人類開始利用物體的彈性特性的時間點，可以追溯到非常久遠的年代，但彈性力學做為一門學科卻是伴隨著工業革命而誕生的，且已被廣泛應用於土木、機械、材料等工程領域。

彈性力學迄今已有三百餘年的發展歷史，自 1678 年 Hooke 提出形變與外力成正比的定律，到 1821 年 Navier 和 1823 年 Cauchy 建立了關於應力的平衡方程，形成了彈性力學的初步理論為止；二十世紀下半葉，彈性理論更進一步擴展，與其它物理因素相互耦合出現了許多交疊領域，例如熱彈性力學、黏彈性力學、壓電介質彈性力學、晶體彈性力學等等，某種程度上豐富了彈性力學的研究範圍。

為了瞭解我們所要處理的物理問題，因此，在本章介紹彈性力學的基本理論，以便了解問題的所在，其中基本理論包含基本應力與應變的概念、虎克定律、統御方程，其中最後開闢一節，來說明如何連結量子點系統與巨觀的彈性力學，藉由這些介紹，簡單讓我們回顧這門古老且實用的科學。

2.1 基本彈性力學概念[12-14]

在本節的開始，我們引進彈性力學的 3 大基本理論基礎：

1. **Newton 定律** 彈性力學基本上是一門力學，遵守 Newton 三大運動定律，值得注意的是作用與反作用定律。剛體力學是從 Newton 定律演繹而來的，但彈性力學與剛體力學不同，還有新假設與定律。

2. **連續性假設** 就是指彈性體連續分布在三維歐氏空間的某個區域之內。於是密度、位移、應變、應力等物理量都將是空間點的連續變量。

在連續性假設之下，微分、積分、微分方程、微分幾何、積分方程、變分方法等數學工具都成為了研究彈性力學的方法。以 Newton 定律和連續性假設為基礎可以建立連續介質力學，其包含我們所使用的彈性力學。

3. **廣義 Hooke 定律** 意指彈性體受外力後，其內部所生成的應力和應變具有線性關係。對大多數材料，在一定的條件下，都符合這個實驗定律。線性關係的 Hooke 定律是彈性力學特有的定律，為彈性力學有別於連續介質力學其它分支的標的。

因此，Newton 定律、連續性假設、廣義 Hooke 定律，這三方面構成彈性力學的理论基礎。

2.1.1 應力(Stress)

在本節的開始，我們對於應力給予嚴謹的定義。

考慮由材料中取一個小六面體元素，我們選擇沿著此元素的三邊

為座標軸，如下圖 2.1 所示：

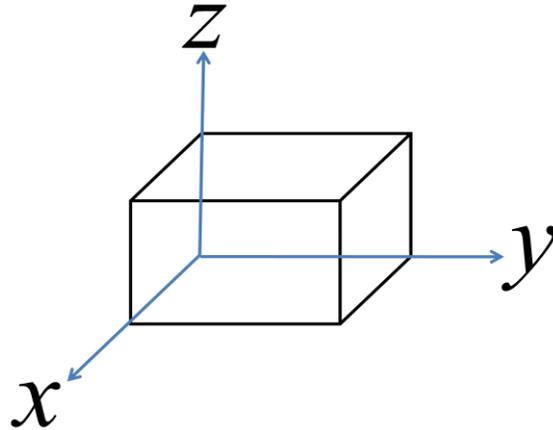


圖 2.1、小六面體元素

要描述這個微小系統的應力分佈，則可定義應力張量的分量為(2.1.1)

式：

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial F_j}{\partial A_i}, \text{ 且 } i, j = x, y, z \quad (2.1.1)$$

其中 F 表力且 A 表作用面之面積，而下標 i 表示作用的平面法向量方向， j 表示作用力方向，由(2.1.1)式可知應力為一面力，即單位面積所受的力。從應力的定義，我們知道要表示應力需要兩個方向指標，所以在三維情況下，需要9個應力分量，如同(2.1.2)式：

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (2.1.2)$$

其中 σ_{xx} 這類型的應力，稱正應力(normal stress)，而 σ_{xy} 這類型的應

力，則稱剪(切)應力(shear stress)。此外，由前文知應力為面力，因此，單位因次上， $[\sigma] = [\text{力}] \times [\text{長度}]^{-2}$ 。圖 2.2 表一微小六面體上，面所對應之應力，圖只表示其中三面；圖 2.3 表一平面，面上之應力。

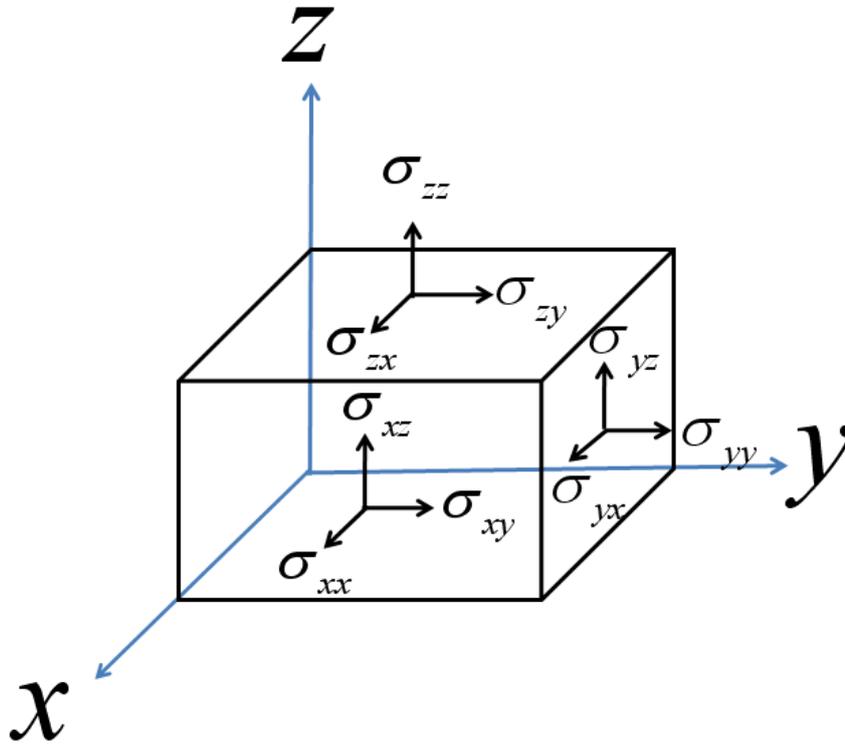


圖 2.2、小六面體元素對應之應力

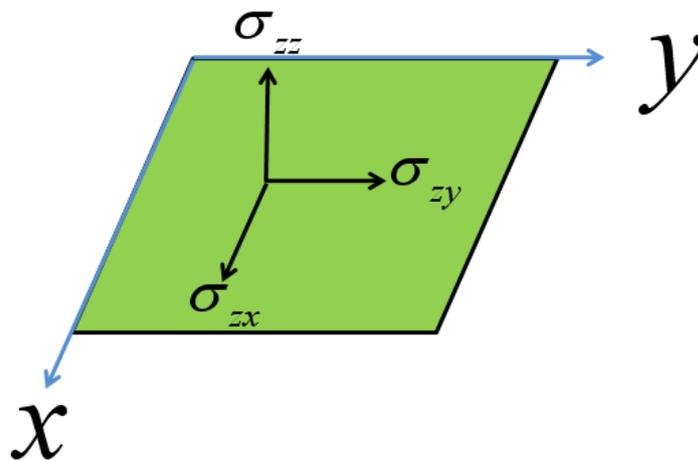


圖 2.3、平面對應之應力

再來，我們來探討應力與力的關係，當彈性體受外力作用，則力

傳達到物體各質元時，會產生形變，所以產生彈性回復勢，而彈性回復勢會衍生回復力，而這回復力即為應力。

應力由前文可知為彈性體內部質元間的耦合內力，因為質元與質元間為交界面，所以，應力的定義為(2.1.3)式：

$$\sigma = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta \vec{F}}{\Delta A} = \frac{d\vec{F}}{dA} \quad (2.1.3)$$

顯然應力與內力向量和作用面法向量有關，因此，值得注意的是內力向量，可以分為垂直與平行作用面兩種情形。

考慮一為小體積，並研究作用在它上面的合力，則可以表為(2.1.4)式



$$\vec{f} \Delta V \quad (2.1.4)$$

其中 \vec{f} 為作用在單位體積的力。但若作用之物體為一連續體，則可以表為(2.1.5)式

$$\int \vec{f} dV \quad (2.1.5)$$

但力的傳遞為面，因此，利用二階張量的高斯公式將力的體積分式化為面力的封閉面積分，在此力向量以分量式表示，如(2.1.6)式：

$$\int f_i dV = \int \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} dV = \oint \sigma_{ik} dA_k \quad (2.1.6)$$

其中 σ_{ik} 表示應力張力之分量，k 表作用面的法向量，i 表力的方向。

從(2.1.6)式可以知道應力與力的關係，在後面的平衡微分方程會再提

及。

接下來，我們來考慮一個情形，當一個物體處於力矩平衡時，畫下針對剪（切）應力之受力體圖，如圖 2.4

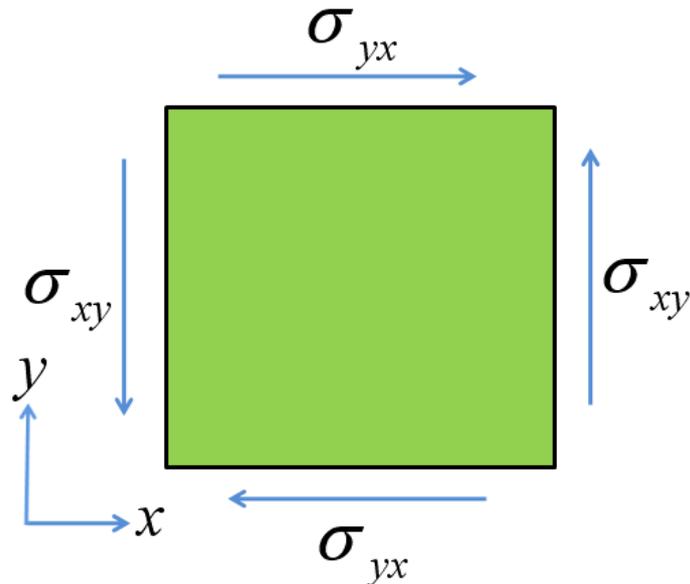


圖 2.4、物體平面之應力與應力矩

則可發現 $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$ ，

因此，

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$$

所以，當討論的情形為平衡態時，只需要 6 個應力的分量，即為

$$\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{yz}, \sigma_{xz}。$$

2.1.2 應變(Strain)

而由外力 F 所引起的形變，即為應變。在此，我們對應變下個直觀的定義((2.1.7)式)，

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\Delta l_j}{l_i}, i, j = x, y, z \quad (2.1.7)$$

如同應力一樣，應變亦可分為兩種。 ε_{xx} 這類型，稱正應變(normal strain)，圖 2.5 為其示意圖。

$$[\varepsilon_{xx}] = \frac{\Delta x}{x} = \text{伸長度}$$

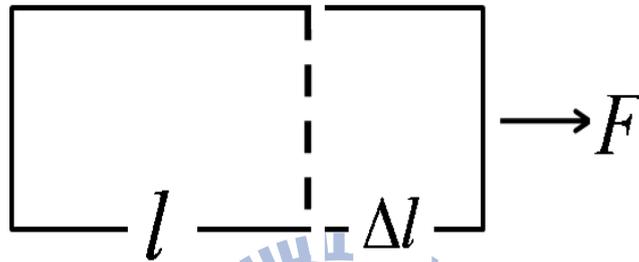


圖 2.5、正應變示意圖

而 ε_{xy} 這類型，稱剪(切)應變(shear strain)，圖 2.6 為其示意圖。

$$[\varepsilon_{xy}] = \frac{\Delta y}{x} = \tan(\alpha) = \alpha \text{ (如果 } \alpha \text{ 很小，角度變化)}$$

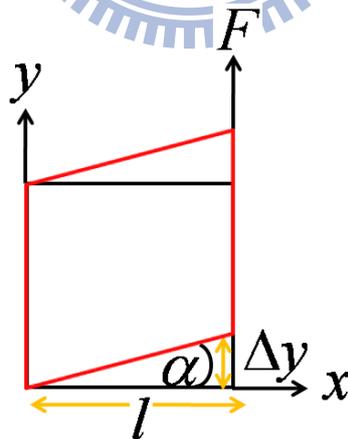


圖 2.6、剪應變示意圖

當探討的系統處在平衡態時，如同應力 $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$ 一樣，應變也存在

$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx}$ ，因此定義， $e_{ii} = \varepsilon_{ii}$ ， $e_{ij} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ji})$ 。所以，也只需要 6

個應變的分量，即為 $e_{xx}, e_{yy}, e_{zz}, e_{xy}, e_{yz}, e_{xz}$ 。

以下，開始以數學推導對應變給出嚴謹的定義。

設在三維歐氏空間中彈性體占有空間區域 V ，它在外界因素影響下產生了變形， V 內的點 $P(x, y, z)$ 變成了點 $\tilde{P}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$ ，則其位置差異為位移向量 $\vec{u}(u_x, u_y, u_z)$ ，如(2.1.8)式，其中圖 2.7 為示意圖。

$$\begin{cases} \tilde{x} = x + u_x(x, y, z) \\ \tilde{y} = y + u_y(x, y, z) \\ \tilde{z} = z + u_z(x, y, z) \end{cases} \quad (2.1.8)$$

$$\vec{r}(x, y, z), \quad \vec{\tilde{r}}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}), \quad \vec{u}(u_x, u_y, u_z)$$

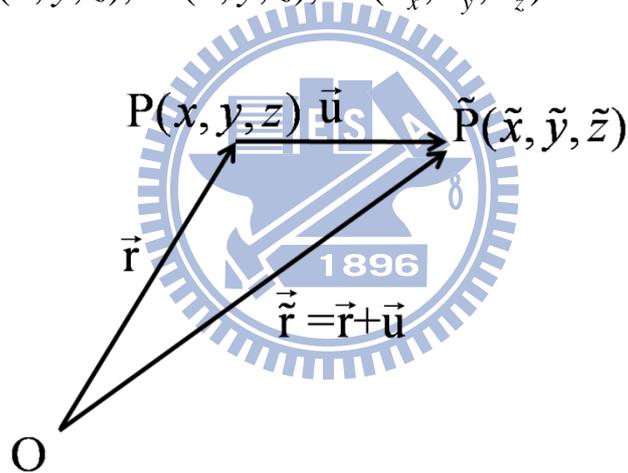


圖 2.7、P 點位移示意圖

設發生應變前點 $P(x, y, z)$ 附近有點 $D(x + dx, y + dy, z + dz)$ ，則發生應變後，按 Taylor 展開式， D 所對應之 (u, v, w) 如(2.1.9)式，其中忽略高階項：

$$\begin{aligned}
u(x+dx, y+dy, z+dz) &= u(x, y, z) + \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy + \frac{\partial u}{\partial z} dz \\
v(x+dx, y+dy, z+dz) &= v(x, y, z) + \frac{\partial v}{\partial x} dx + \frac{\partial v}{\partial y} dy + \frac{\partial v}{\partial z} dz \quad (2.1.9) \\
w(x+dx, y+dy, z+dz) &= w(x, y, z) + \frac{\partial w}{\partial x} dx + \frac{\partial w}{\partial y} dy + \frac{\partial w}{\partial z} dz
\end{aligned}$$

以此為基礎，我們開始探討最常見的兩種形變的形式，長度改變與角度改變，下列的說明，均以二維為例。

在二維空間彈性材料裡，點 $P(x, y)$ 附近有二點，點 $A(x+dx, y)$ 和點 $B(x, y+dy)$ ，發生形變後， P 、 A 和 B 變為 \tilde{P} 、 \tilde{A} 和 \tilde{B} ，如圖

2.8 所示

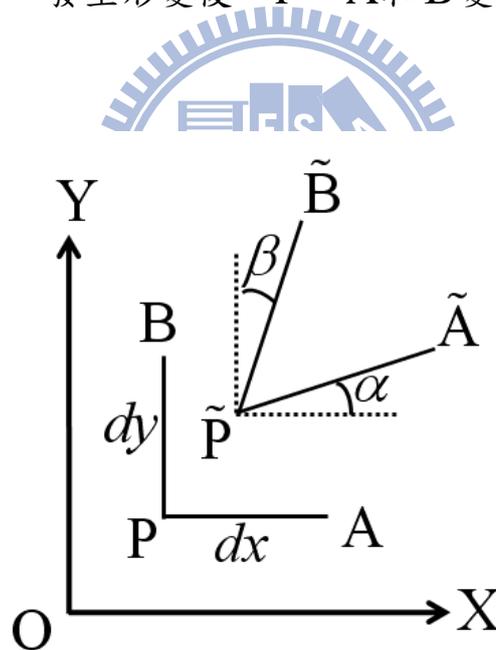


圖 2.8、 P 、 A 、 B 三點位移示意圖

其中 \tilde{P} 、 \tilde{A} 和 \tilde{B} 所對應之數學，如(2.1.10)式

$$\left\{ \begin{array}{l} P(x, y) \rightarrow \tilde{P}(x+u, y+v) \\ A(x+dx, y) \rightarrow \tilde{A}\left(x+dx+u+\frac{\partial u}{\partial x}dx, y+v+\frac{\partial v}{\partial x}dx\right) \\ B(x, y+dy) \rightarrow \tilde{B}\left(x+u+\frac{\partial u}{\partial y}dy, y+dy+v+\frac{\partial v}{\partial y}dy\right) \end{array} \right. \quad (2.1.10)$$

有了數學表示式後，我們來做正應變與剪應變的分析，首先我們針對 \overline{PA} 線段的改變做分析，將線段變化依正應變定義帶入，得式(2.1.11)，其中只展開到第一項，忽略高階項

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\tilde{PA}} - \overline{PA}}{\overline{PA}} &= \frac{\sqrt{\left(dx + \frac{\partial u}{\partial x}dx\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial x}dx\right)^2} - dx}{dx} \\ &= \sqrt{\left(1 + \frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2} - 1 \approx \frac{\partial u}{\partial x} = e_{xx} \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

再來，我們針對 \overline{PA} 和 \overline{PB} 的夾角變化做分析，考慮角 $\angle APB$ 的變化，對圖 2.8 中 α 角和 β 角，有如下之關係式，其中以級數展開到第一項，忽略高階項：

$$\tan \alpha = \frac{\frac{\partial v}{\partial x}dx}{dx + \frac{\partial u}{\partial x}dx} \approx \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \tan \beta = \frac{\frac{\partial u}{\partial y}dy}{dy + \frac{\partial v}{\partial y}dy} \approx \frac{\partial u}{\partial y}$$

經整理可以得式(2.1.12)

$$\frac{1}{2}(\alpha + \beta) \approx \frac{1}{2}(\tan \alpha + \tan \beta) \approx \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) = \frac{1}{2}(\varepsilon_{yx} + \varepsilon_{xy}) = e_{xy} \quad (2.1.12)$$

其中式(2.1.11)就是 e_{xx} ，其幾何意義為 X 方向上微線段的相對伸長比，同理可推得，Y、Z 方向。直角 $\angle APB$ 變形後，成為角 $\angle \tilde{A}\tilde{P}\tilde{B}$ ，二者之差為 $\alpha + \beta$ ，其中 e_{xy} 表示角度改變的一半。為正值時，直角變成了銳角；為負值時，直角變成了鈍角。

整理前述理論，當在討論的應力系統為穩定態時，則應變與位移函數有下列關係式，

$$e_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \quad i, j = x, y, z; \quad (2.1.13)$$

$$e_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}; e_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}; e_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z};$$

$$e_{xy} = e_{yx} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right); e_{yz} = e_{zy} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right);$$

$$e_{zx} = e_{xz} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right);$$

2.1.3 虎克定律(Hook's Law)

在一維的彈簧裡，力與位移存在關係式， $F=-kx$ ，我們稱為虎克定律。如同一維的彈簧，應力與應變也有相似的關係， $\sigma_{ij} = C_{ijkl}e_{kl}$ ，其中 $i, j, k, l = 1, 2, 3(x, y, z)$ ，稱為廣義虎克定律。關係式裡的 C_{ijkl} 稱為彈性系數。

彈性系數受材料特性影響，也受形變影響，由於本文理論均討論

微小變化，因此，本文的彈性系數不受形變影響，主要受材料特性影響。為使方便了解，將原始彈性系數張開為矩陣，如下

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1112} & C_{1123} & C_{1113} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2212} & C_{2223} & C_{2213} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & C_{3312} & C_{3323} & C_{3313} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & C_{1212} & C_{1223} & C_{1213} \\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & C_{2312} & C_{2323} & C_{2313} \\ C_{1311} & C_{1322} & C_{1333} & C_{1312} & C_{1323} & C_{1313} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ e_{12} \\ e_{23} \\ e_{13} \end{bmatrix}$$

從前文知彈性系數本身存在4個方向指標，為使其簡化，以兩個為一組意即 ij, kl ，我們令

$$11 \rightarrow 1, 22 \rightarrow 2, 33 \rightarrow 3, 12 \rightarrow 4, 23 \rightarrow 5, 13 \rightarrow 6$$

再將應力與應變的下標數字(1,2,3)還原回(x,y,z)，而經簡化之彈性系數張開為矩陣，如下

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{xy} \\ e_{yz} \\ e_{xz} \end{bmatrix}$$

以下介紹，兩種常見系統之彈性系數。

等向性彈性系統：

為彈性力學理論常研究之理想系統，其彈性係數只有兩個獨立之變數，在本文下一章計算實空間應變探討時，即採用此系統，雖然不

是真實系統，但基本上掌握了大部份的彈性力學物理。而等向性彈性

系統的彈性矩陣如下：

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{xy} \\ e_{yz} \\ e_{xz} \end{bmatrix}$$

其中

$$C_{11} = \lambda + 2\mu$$

$$C_{12} = \lambda$$

$$C_{44} = \mu$$

λ, μ 稱Lame constant

等向性彈性系統裡，對任一點而言，在沿不同方向所看見之彈性關係皆一樣，因此，其彈性係數才能如此被簡化。

立方對稱彈性系統：

為最簡單的真實系統，與等向性彈性系統最大的差別，為三個彈

性系數彼此沒關聯。此系統之彈性矩陣如下：

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{xy} \\ e_{yz} \\ e_{xz} \end{bmatrix}$$

在這個系統裡，對任一點而言，沿 x、y 和 z 軸所看見的彈性關係皆一樣，此外，對於相差 180 度的兩方向所看見的彈性關係也是一樣。由於對稱性非輻射狀對稱，也因此彈性係數比起等向性彈性系統多出一個。

2.2 彈性力學的統御方程[15]

我們在探討一個物理系統，總會需要一個或一組統御方程，由於彈性力學所探討的系統，為一力學系統，所以，直覺告知我們，其方程應為力平衡方程。

在本節，以最簡單的方法推導出該系統的力平衡方程，值得注意的是，本章節的推導只適合穩定態的彈性系統。

在推導之前，我們需要先介紹，彈性能密度和功密度這兩個名詞。如同一維彈簧的彈性能 $\frac{1}{2}kx^2$ 一樣，在彈性力學系統裡有其對應，如同式(2.2.1)，其中 $e(r)$ 表彈性能密度：

$$e(r) = \frac{1}{2} C_{ijkl} u_{l,k} u_{j,i} = \frac{1}{2} C_{ijkl} e_{kl} e_{ij} = \frac{1}{2} \sigma_{ij} e_{ij} = \frac{\text{力} \left[\text{位移} \right]}{\left[\text{面積} \right] \left[\text{長度} \right]}$$

$$\Rightarrow e(r) = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} C_{ijkl} u_{l,k} u_{j,i} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} C_{ijkl} e_{kl} e_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sigma_{ij} e_{ij} \quad (2.2.1)$$

此外，從這裡開始，我們的數學表示式中的下標，開始採用愛因斯坦標記法 (Einstein notation)，即下標相同符號如出現兩次，即表對該指標求和。

介紹完彈性能密度，我們接著介紹功密度。功密度的由來，因為我們所套討的系統，皆把系統切割一個個的小質元，因此，我們的外力描述改以力密度的概念，以方便計算。

設如果有一力密度為 \vec{f} 的外力，造成 \vec{u} 位移，則外力對系統造成的能量改變，如式(2.2.2)，為功密度，其中下標 i ，表方向指標：

$$\vec{f} \cdot \vec{u} = f_i(r)u_i(r) \quad (2.2.2)$$

有了以上的觀念後，我們開始推導力平衡方程。

假設系統受到力密度為 f_i 的外力，且有面力 T_i ，在力邊界(即系統邊界) S_σ 面上，其中系統體積為 V ；假定在某個時間點上，有一虛位移 δu_i ，則產生一個虛應變 $\delta \epsilon_{ij}$ ，根據能量守恆可得式(2.2.3)。圖 2.9 為其示意圖。

$$\int_V (\sigma_{ij} \delta \epsilon_{ij}) dV = \int_V (\delta u_i f_i) dV + \int_{S_\sigma} (\delta u_i T_i) dS \quad (2.2.3)$$

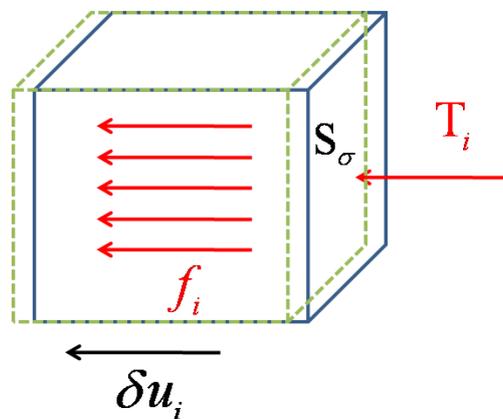


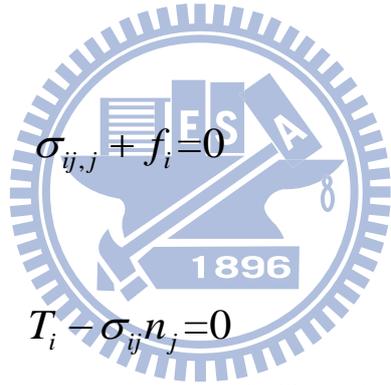
圖 2.9、系統外力與虛位移示意圖

經過一系列的推導，我們可以得到力平衡方程與邊界條件，其推導過

程如下：

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \int_V (\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}) dV &= \int_V (\sigma_{ij} \delta u_{i,j}) dV = \int_V (\sigma_{ij} \delta u_i)_{,j} dV - \int_V (\sigma_{ij,j} \delta u_i) dV \\
&= \int_{S_\sigma} \sigma_{ij} n_j \delta u_i dS - \int_V (\sigma_{ij,j} \delta u_i) dV \\
\Rightarrow \int_V (\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}) dV - \int_V (\delta u_i f_i) dV - \int_{S_\sigma} (\delta u_i T_i) dS &= 0 \\
\Rightarrow \int_{S_\sigma} \sigma_{ij} \delta u_i n_j dS - \int_V (\sigma_{ij,j} \delta u_i) dV - \int_V (\delta u_i f_i) dV - \int_{S_\sigma} (\delta u_i T_i) dS &= 0 \\
\Rightarrow \int_V (\sigma_{ij,j} + f_i) \delta u_i dV + \int_{S_\sigma} (T_i - \sigma_{ij} n_j) \delta u_i dS &= 0
\end{aligned}$$

其中 n_j 為封閉曲面向外法線向量，此外，因為 δu_i 具備任意性，因此可以得下二式



$$\sigma_{ij,j} + f_i = 0 \quad (2.2.4)$$

$$T_i - \sigma_{ij} n_j = 0 \quad (2.2.5)$$

其中，式(2.2.4)表力平衡方程，彈性力學稱為平衡微分方程，在彈性體 V 內皆成立，式(2.2.5)表邊界條件，在變界 S_σ 上成立。在本文的探討裡，因為，考慮量子點被埋藏在無窮大的母體內，因此，式(2.2.5)暫不考慮。到此，統御方程式(2.2.4)推導完畢。

2.3 材料的組成與初始應變

本節我們將簡單的介紹所計算的系統，在我們所探討的系統裡，考慮鍵長較長的量子點材料砷化銦(InAs)，被包覆埋藏在鍵長較短的

材料砷化鎵(GaAs)母體內，為了形成這個系統裡，因此，我們將晶格常數小的材料的內部挖出一個空洞，此空洞的形狀即為量子點的形狀，然後假設有一外力，將晶格常數大的材料均勻壓縮再放到此空洞中，其中，壓縮晶格常數大的材料，是為了形成原子間的鍵結，到此，第一階段完成，接著，外力消失，則被包覆物開始發生膨脹，至於最後的膨脹結果，與被包覆物的幾何有關。但值得注意的是，當壓縮砷化銦的鍵長時，就形成應變，因為是在模擬前就開始存在了，所以，我們稱為初始應變。在此，我們定義初始應變的數學，如式(2.3.1)：

$$e_{ii}^T = \frac{a_{\text{GaAs}} - a_{\text{InAs}}}{a_{\text{InAs}}}, i = x, y, z \quad (2.3.1)$$

在我們的系統裡，初始應變約略為-7%。到此，我們的模型建立完成。

第三章 應變數值解法

本章開始針對我們所遇到的問題提出可能的解法，本文主要以 Comsol(有限元素)套裝軟體，來計算量子點的應變，並搭配以格林函數求解，而在格林函數求解方法中，一般多直接採取平面波展開，本文嘗試將實空間格林函數求出，與平面波法做比較，以了解為何多採取平面波法，但細部的推導詳見附錄 B、C。最後，將兩個方法做比較。

3.1 有限元素法概論[16-17]

雖然，我們是直接使用 Comsol(有限元素)套裝軟體，但仍有必要針對有限元素法的理論，做初步的了解。在本節裡，我們針對一個一維實例，來了解有限元素法的基本理論。當我們考慮一個一維桿的問題，問題如圖：

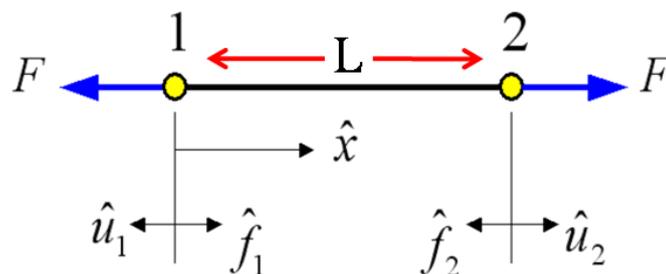


圖 3.1、一維桿問題示意圖

我們從統御方程出發，推導這個一維問題，推導如下：

$$e_{xx} = \frac{d\hat{u}}{d\hat{x}} = \frac{\hat{u}_2 - \hat{u}_1}{L} (\hat{u} \text{表示位移})$$

$$\sigma = E e_{xx} (E \text{為楊氏係數})$$

$$\sigma_{ij} + f_i = 0$$

$$\Rightarrow C_{ijkl} \partial_j \partial_l u_i = f_i$$

$$\xrightarrow{\text{一維}} EA e_{xx} = -F (A \text{表物體的截面積})$$

當我們只將系統只切割為一個元素，設節點為 1 與 2。則根據邊界條件，可以推得節點 1 與 2 的受力情況，推導如下。

$$EA e_{xx} = -F (A \text{表物體的截面積})$$

$$\Rightarrow EA \frac{\hat{u}_2 - \hat{u}_1}{L} = -F (\text{元素的統御方程})$$

$$\hat{f}_1 = -EA \frac{\hat{u}_2 - \hat{u}_1}{L} = F$$

$$\hat{f}_2 = EA \frac{\hat{u}_2 - \hat{u}_1}{L} = -F$$

$$\frac{EA}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}_1 \\ \hat{u}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{f}_1 \\ \hat{f}_2 \end{bmatrix}$$

表為 $ku=f$ (元素方程式)

k 稱為剛度矩陣

$$k = \frac{EA}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

此時，帶入邊界條件即可算得真實的位移與應變。

而當我們將系統切割為兩個元素，如圖

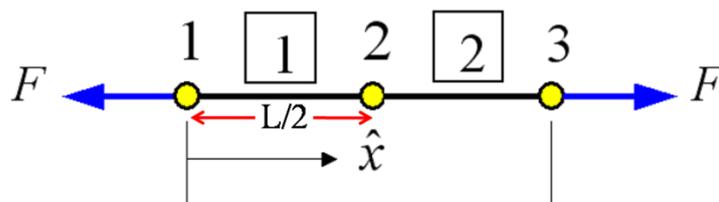


圖 3.2、一維桿問題(切割為兩個元素)示意圖

所以，可以個別求出元素 1 與元素 2 的元素方程，將其加總即為整個系統的元素方程，推導如下：

$$\frac{EA}{2L} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}_1 \\ \hat{u}_2 \\ \hat{u}_3 \end{bmatrix} + \frac{EA}{2L} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}_1 \\ \hat{u}_2 \\ \hat{u}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{f}_1 \\ \hat{f}_2 \\ \hat{f}_3 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \frac{EA}{2L} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1+1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}_1 \\ \hat{u}_2 \\ \hat{u}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{f}_1 \\ \hat{f}_2 \\ \hat{f}_3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \hat{f}_1 \\ \hat{f}_2 \\ \hat{f}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F \\ 0 \\ -F \end{bmatrix}$$

當我們切割為愈多元素則剛度矩陣越大，其準確度亦愈好，而當我們知道邊界條件，則解就可以求出。

3.2 COMSOL 軟體說明

本節將說明如何將我們的假設應用到 COMSOL 軟體上。首先，我們將整個過程分成兩個階段，第一個階段為量子點晶格長度被壓縮到與包覆層晶格長度相同，而第二階段為量子點開始發生膨脹之後。

在 COMSOL 軟體裡，我們選取結構力學模組，而中間的模型建立，在此不多加闡述，只就計算最重要的虎克定律做說明。因此，考慮所使用的材料，在第一階段裡，廣義虎克定律如下：

$$\begin{bmatrix} (\sigma_I)_{xx} \\ (\sigma_I)_{yy} \\ (\sigma_I)_{zz} \\ (\sigma_I)_{xy} \\ (\sigma_I)_{yz} \\ (\sigma_I)_{xz} \end{bmatrix}^{InAs} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}^{InAs} \begin{bmatrix} (e^T)_1 \\ (e^T)_1 \\ (e^T)_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}^{InAs}$$

$$\begin{bmatrix} (\sigma_I)_{xx} \\ (\sigma_I)_{yy} \\ (\sigma_I)_{zz} \\ (\sigma_I)_{xy} \\ (\sigma_I)_{yz} \\ (\sigma_I)_{xz} \end{bmatrix}^{GaAs} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}^{GaAs} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}^{GaAs}$$

而當進入第二階段時，則含有起始應變 e^T 之廣義虎克定律如下：

$$\begin{bmatrix} (\sigma_{II})_{xx} \\ (\sigma_{II})_{yy} \\ (\sigma_{II})_{zz} \\ (\sigma_{II})_{xy} \\ (\sigma_{II})_{yz} \\ (\sigma_{II})_{xz} \end{bmatrix}^{InAs} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}^{InAs} \begin{bmatrix} (e_{xx} + e^T)_{II} \\ (e_{yy} + e^T)_{II} \\ (e_{zz} + e^T)_{II} \\ (e_{xy})_{II} \\ (e_{yz})_{II} \\ (e_{xz})_{II} \end{bmatrix}^{InAs}$$

$$\begin{bmatrix} (\sigma_{II})_{xx} \\ (\sigma_{II})_{yy} \\ (\sigma_{II})_{zz} \\ (\sigma_{II})_{xy} \\ (\sigma_{II})_{yz} \\ (\sigma_{II})_{xz} \end{bmatrix}^{GaAs} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}^{GaAs} \begin{bmatrix} (e_{xx})_{II} \\ (e_{yy})_{II} \\ (e_{zz})_{II} \\ (e_{xy})_{II} \\ (e_{yz})_{II} \\ (e_{xz})_{II} \end{bmatrix}^{GaAs}$$

而第二階段的虎克定律，即是我們計算所用。而整個第二階段的應變，

即是我們所要求的。

3.3 平面波展開法[18]

格林函數 $G_{in}(\vec{r} - \vec{r}')$ 為連結作用在 \vec{r}' 點 n 方向的力，在 \vec{r} 點於 i

方向造成的位移量之間的關聯函數，我們定義，如式(3.3.1)：

$$u_i(\vec{r}) = \int d\vec{r}' G_{in}(\vec{r} - \vec{r}') F_n(\vec{r}') \quad (3.3.1)$$

在我們的系統裡，因為我們有初始應變，根據廣義虎克定律，我們可以算出所對應之初始應力，則該應力即為格林函數所需要之力的來源。

下面二節，我們將由古典彈性力學來推導格林函數[14][18]，其中包含實際算出等向性材料之實空間格林函數，與利用傅立葉轉換去求得異向性材料(針對立方對稱系統)之傅立葉空間格林函數。

在我們的系統裡，我們考慮下列的假設(1)量子點和包覆層的彈性係數相同；(2)量子點的晶格大小，在系統形成時，被壓縮到與包覆層的晶格大小一樣；(3)系統的應力來源，為量子點與包覆層兩者介面上之晶格不匹配；(4)彈性係數不受形變而改變[19]。因此，由式(3.1.1)與上述之假設，量子點系統的位移場，在實空間中可以表為格林函數與應力之卷積(convolution)，我們可以得式(3.3.2)

$$u_i(\vec{r}) = u_i^T(\vec{r}) X_{QD} + \int G_{in}(\vec{r} - \vec{r}') \sigma_{nk}^T dS_k' \quad (3.3.2)$$

其中， $i = x, y, z$ ， $u_x = u, u_y = v, u_z = w$ ； X_{QD} 表量子點之特徵函數(見附錄 B)，在量子點內為 1，而在量子點外為 0； u_i^T 表量子點晶格長度被壓縮到與包覆層晶格長度相同而產生的位移； σ_{nk}^T 為因晶格不匹配而產生之初始應力； S_k' 則表示量子點之表面範圍。其中右式第一項與第二項分別對應到我們的假設(2)和(3)。

我們由式(3.1.2)，可以得應變表示式，推導如下：

$$\begin{aligned}
u_i(\bar{r}) &= u_i^T(\bar{r})X_{QD}(\bar{r}) + \oint\!\!\!\!\!\oint_{QD} G_{in}(\bar{r} - \bar{r}')\sigma_{nk}^T dS'_k \\
&= u_i^T(\bar{r})X_{QD}(\bar{r}) + \oint\!\!\!\!\!\oint_{QD} G_{in}(\bar{r} - \bar{r}')C_{nkpr}e_{pr}^T dS'_k \\
e_{ij}(\bar{r}) &= \frac{1}{2}(u_{i,j}(\bar{r}) + u_{j,i}(\bar{r})) \\
&= \frac{1}{2}(u_{i,j}^T(\bar{r}) + u_{j,i}^T(\bar{r}))X_{QD}(\bar{r}) + \\
&\quad \frac{1}{2}\oint\!\!\!\!\!\oint_{QD} \left[\frac{\partial G_{in}(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial x_j} + \frac{\partial G_{jn}(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial x_i} \right] C_{nkpr}e_{pr}^T dS'_k \\
&= e_{ij}^T X_{QD}(\bar{r}) + \frac{1}{2}\oint\!\!\!\!\!\oint_{QD} \left[\frac{\partial G_{in}(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial x_j} + \frac{\partial G_{jn}(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial x_i} \right] C_{nkpr}e_{pr}^T dS'_k \\
&= e_{ij}^T X_{QD}(\bar{r}) + \frac{1}{2}\oint\!\!\!\!\!\oint\!\!\!\!\!\oint_{QD} \left[\frac{\partial G_{in}(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial G_{jn}(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial x_i \partial x_k} \right] C_{nkpr}e_{pr}^T dV'
\end{aligned}$$

經整理得式(3.3.3)，其中 e_{ij}^T 表量子點晶格長度被壓縮到與包覆層晶格長度相同而產生的初始應變，

$$\begin{aligned}
e_{ij}(\bar{r}) &= e_{ij}^T X_{QD}(\bar{r}) + \\
&\quad \frac{1}{2}\oint\!\!\!\!\!\oint\!\!\!\!\!\oint_{QD} \left[\frac{\partial G_{in}(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial G_{jn}(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial x_i \partial x_k} \right] C_{nkpr}e_{pr}^T dV' \quad (3.3.3)
\end{aligned}$$

我們發現，只要能求出格林函數的數學方程，則我們便知道，整個量子點系統的應變行為，附錄 B、C 有格林函數的詳細推導過程，在往後的推導我就假設已知格林函數的數學行為。接著我們對式(3.3.3)做傅立葉轉換，得其傅立葉形式為式(3.3.4)：

$$\tilde{e}_{ij}(q) =$$

$$e_{ij}^T \tilde{X}_{QD}(\bar{q}) - \frac{(2\pi)^3}{2} \left\{ q_i \tilde{G}_{jn}(\bar{q}) + q_j \tilde{G}_{in}(\bar{q}) \right\} C_{nkpr} e_{pr}^T q_k \tilde{X}_{QD}(\bar{q}) \quad (3.3.4)$$

至此，應變的傅立葉形式完成，其中， \tilde{X}_{QD} 表量子點的特徵函數之傅立葉轉換(見附錄 C)，接著我們處理初始應變所導致的初始應力也就是 $C_{nkpr} e_{pr}^T$ 這項，由於 e_{pr}^T 只存在 $p=r$ 的項，因此，將立方晶系的彈性係數展開為矩陣如下：

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{xy} \\ e_{yz} \\ e_{xz} \end{bmatrix}$$

可以得知 σ_{nk}^T 只存在 $n=k$ ，因此，

$$\sigma_{nk}^T = C_{nkpr} e_{pr}^T = \varepsilon_0 (C_{11} + 2C_{12}) \delta_{nk}$$

將 σ_{nk}^T 帶回式(3.3.5)，整理得式(3.3.6)：

$$\tilde{e}_{ij}(q) = e_{ij}^T \tilde{X}_{QD}(\bar{q}) \times \left\{ \delta_{ij} - \frac{(2\pi)^3}{2} (C_{11} + 2C_{12}) \left[q_i q_n \tilde{G}_{jn}(\bar{q}) + q_j q_n \tilde{G}_{in}(\bar{q}) \right] \right\} \quad (3.3.6)$$

然後將格林函數之傅立葉形式帶入式(3.3.6)，得式(3.3.7)：

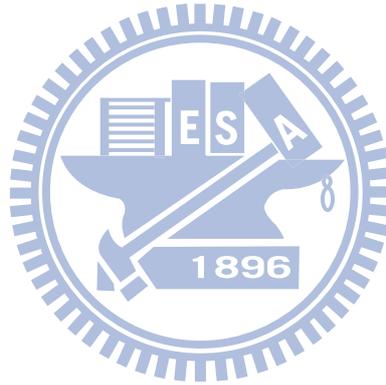
$$\tilde{e}_{ij}(q) = \varepsilon_0 \tilde{X}_{QD}(\bar{q}) \left\{ \delta_{ij} - \left[1 + (C_{12} + C_{44}) \sum_{p=1}^3 \frac{q_p^2}{C_{44} q^2 + C_{an} q_p^2} \right]^{-1} \right\} \times$$

$$\frac{1}{2} \frac{(C_{11} + 2C_{12})q_i q_j}{q^2} \left[\frac{1}{C_{44} + C_{an} q_i^2 / q^2} + \frac{1}{C_{44} + C_{an} q_j^2 / q^2} \right] \quad (3.3.7)$$

我們發現式(3.3.7)不存在奇異點，有了應變在傅立葉空間的表示式後，則可以得其實空間上的值。由於積分式 $\int \tilde{e}_{ij}(q) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) d\vec{q}$ 無法求出，因此，我們採取級數的形式，

$$e_{ij}(\vec{r}) = \sum_{nx, ny, nz} \tilde{e}_{ij}(q) \exp(i(q_{nx}x + q_{ny}y + q_{nz}z))$$

不過，由於採取級數形式，級數的項數直接影響數值計算的結果。



第四章 量子力學理論架構

計算量子點的應變，其最終目的為求得量子點的電子結構，雖然，本文並沒有探討電子結構，但仍需要去了解薛丁格方程，而應變的影響，在於將對薛丁格方程中的位能產生一巨大的改變量。本章的第一節將簡單介紹等效質量的薛丁格方程，而重要的第二節則針對應變對位能造成的改變做介紹。

4.1 薛丁格方程

在固態的系統中，原子是週期性排列的。換句話說，電子或其他帶電荷的粒子在固態的系統中受到的位能也是成週期性的排列如式

(4.1.1) :



$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{T})$$

$$\vec{T} = n_1 \hat{a}_1 + n_2 \hat{a}_2 + n_3 \hat{a}_3 \quad (4.1.1)$$

在這裡 $V(\vec{r})$ 是來自原子的位能，而不是外加位能。 \vec{T} 是一個平移向量， n_1, n_2, n_3 是整數，而 $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3$ 是晶格向量。根據 Bloch's theorem 當電子在週期性位能中，波函數可以表示成 Bloch's function 的形式，如式(4.1.2)：

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) \quad (4.1.2)$$

其中 $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ 表示電子在晶體中具有平面波的特性，而 $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ 表示電子局部的波函數，是一個週期為 \vec{T} 的函數。現在我們考慮 Schrödinger equation，如式(4.1.3)：

$$H_0 \psi_n(\vec{r}) = E_n \psi_n(\vec{r})$$

$$H_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r})$$

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \quad (4.1.3)$$

H_0 是哈密頓量(Hamiltonian)，將式(4.1.2)代入式(4.1.3)，可得

$$H_0 \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_n \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (4.1.4)$$

式(4.1.4)可改寫成式(4.1.5)：

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right] e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (4.1.5)$$

然後將式(4.1.5)展開成式(4.1.6)：

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[\frac{\hat{p}^2 + 2\hbar\vec{k} \cdot \hat{p} + \hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \cdot u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) + V(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

$$= E_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (4.1.6)$$

可以將式(4.1.6)整理成式(4.1.7)：

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{\hat{p}^2}{2m_0} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{\hbar\vec{k} \cdot \hat{p}}{m_0} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

$$= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} E_n u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (4.1.7)$$

我們把式(4.1.7)兩邊同時消去 $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ 可得式(4.1.8)：

$$\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + V(\vec{r}) \right] u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_n u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (4.1.8)$$

方程式中出現了 $\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}$ 項，所以稱之 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 法。

接下來我們考慮將式(4.1.4)利用 Löwdin 的微擾理論[20]來求得

$\vec{k} \cdot \vec{p}$ 等效的哈密頓量[19]，結果如式(4.1.9)：

$$E_c(\vec{k}) = E_c(\vec{k}=0) + \frac{\hbar^2}{2m_0 m^*} \vec{k}^2 \quad (4.1.9)$$

$$m^* \equiv \frac{1}{\left(1 + \frac{2}{m_0} \frac{(p_{cv})^2}{E_c - E_v} \right)} \quad (4.1.10)$$

其中 m^* 稱為等效質量，對於不同的材料中會有不同的等效質量，式

(4.1.9)很清楚的表示當 \vec{k} 很接近零時，電子在塊材的行為表現跟在真

空中行的為表現很像，差異是有效質量不同。在真空中 $m^*=1$ 而在許

多半導體塊材中 m^* 會小於 1，也就是說電子在塊材中的行為相當於

質量變小了。在式(4.1.10)中 $p_{cv} = \langle c | \hat{p} | v \rangle$ 指的是導帶和價帶之間動量

矩陣元素，而 $E_g = E_c - E_v$ 是導帶和價帶的能量差。

最後我們考慮波包近似法，當我們系統位能在空間中是緩慢變化

時，我們的 Hamiltonian 可以改寫成式(4.1.11)：

$$H = H_{bulk} + V_{QD}(\vec{r}) \quad (4.1.11)$$

其中 $V_{QD}(\vec{r})$ 為緩慢變化的外加位能，如此我們可以用 envelope

function $g(\vec{r})$ 取代 Bloch function 中的 $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ 得到式(4.1.12)：

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n=1}^N g_n(\vec{r}) u_{n,\vec{k}=0}(\vec{r}) \quad (4.1.12)$$

其中 N 指考慮 N 個 band，下標 n 表示第 n 個 band 的 envelope function，

$u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ 是 Bloch function 的週期性部分。考慮式(4.1.11)與式(4.1.12)後

經過計算最後可得到單能帶等效質量 Schrödinger equation

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m_0 m^*} \nabla^2 + V_{QD}(\vec{r}) \right) g(\vec{r}) = E g(\vec{r}) \quad (4.1.13)$$

4.2 異質結構的位能與形變位能

半導體異質材料不僅是材料的晶格常數不同，而且能隙 (energy - bandgap) 的大小與價電帶的頂部的絕對位置亦不相同。以本文的砷化鎵與砷化銦為例，材料能隙值 E_g 分別約為 1.52 eV 與 0.41 eV。不同能隙的材料接合時，會導致能帶差值的現象 (band offset)，所以，形成一侷限位能，如圖 4.1 所示。

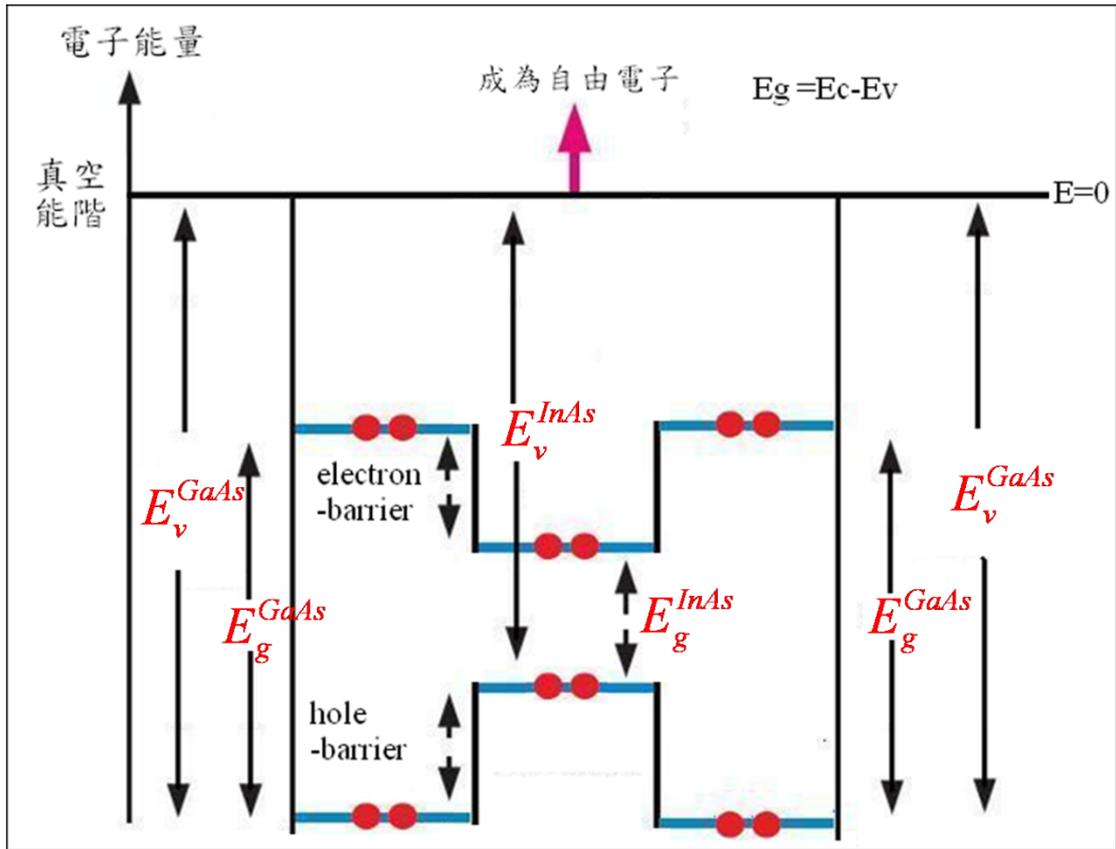


圖 4.1、異質材料的侷限位能示意圖

以電子(electron)為例，由於電子在材料砷化銻中，承受了較低的位能。因此，當載子要從材料砷化銻跨越到材料砷化鎵時，電子必須獲得額外的能量，以克服兩材料間的能量差。此能量差值即為異質結構所形成的位能。

根據Van de Walle 於1989 年提出的固體模型理論[21]，在不考慮應變效應下，半導體的導電帶能量 E_c 與價電帶能量 E_v 可分別表示為

$$E_c = E_{v,av} + \frac{\Delta_0}{3} + E_g$$

$$E_v = E_{v,av} + \frac{\Delta_0}{3}$$

其中 $E_{v,av}$ 為最接近能帶邊緣的三個價電帶平均能量， Δ_0 則為自旋軌道耦合能量， E_g 則代表材料的能隙值，因此， $\Delta E_c = E_c^{GaAs} - E_c^{InAs}$ 為電子在異質結構裡所感受到的位能；而 $\Delta E_v = E_v^{GaAs} - E_v^{InAs}$ 則為電洞 (hole) 在異質結構裡所感受到的位能。

承前面的章節，異質結構因為材料晶格不匹配，所以會產生應變。通常晶格常數小的材料晶格常數會被拉大，而晶格常數大的材料晶格常數會被縮小，最後會達到一個平衡的狀態。考慮我們的系統，InAs 的晶格常數比 GaAs 的晶格常數來的大，因此，晶格不匹配度大約 7%，所以在此量子點系統中 InAs 會被壓縮。考慮這樣的情況，則應變會造成量子點的導電帶能量的抬昇，而價電帶情形較為複雜，輕重電洞的行為不一樣。在計算形變位能 $V_{e,LH,HH}^{strain}$ 的公式上[5]，關於價電帶，在四能帶與六能帶有所不同，在四能帶裡，因為考慮自旋軌道能帶與簡併的輕重電洞帶之間有著幾百個 meV 的差異，因此，將六能帶近似為四能帶[24]，但考慮應變的影響，可能造成自旋軌道能帶與輕重電洞帶能量差異效應的減小，因此，本文將會比較之間的差異。最後包含形變位能與異質結構位能的等效位能 $V_{e,LH,HH}(\vec{r})$ 如下，其中

$$P_\varepsilon = -a_v (e_{xx}(\vec{r}) + e_{yy}(\vec{r}) + e_{zz}(\vec{r}))$$

$$Q_\varepsilon = -\frac{b}{2} (e_{xx}(\vec{r}) + e_{yy}(\vec{r}) - 2e_{zz}(\vec{r}))$$

電子為：

$$E_E^{strain}(\vec{r}) = a_c(e_{xx}(\vec{r}) + e_{yy}(\vec{r}) + e_{zz}(\vec{r}))$$

$$V_E(\vec{r}) = E_c(\vec{r}) + E_E^{strain}(\vec{r}) \quad (4.2.1)$$

輕電洞在四能帶為：

$$E_{HH}^{strain}(\vec{r}) = -P_\varepsilon + Q_\varepsilon$$

$$V_{LH}(\vec{r}) = E_v(\vec{r}) + E_{LH}^{strain}(\vec{r}) \quad (4.2.3)$$

輕電洞在六能帶為：

$$E_{LH}^{strain}(\vec{r}) = -P_\varepsilon + \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta_0 + \sqrt{\Delta_0^2 + 2\Delta_0 Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2} \right)$$

$$V_{LH}(\vec{r}) = E_v(\vec{r}) + E_{LH}^{strain}(\vec{r}) \quad (4.2.2)$$

重電洞為：

$$E_{HH}^{strain}(\vec{r}) = -P_\varepsilon - Q_\varepsilon$$

$$V_{HH}(\vec{r}) = E_v(\vec{r}) + E_{HH}^{strain}(\vec{r}) \quad (4.2.3)$$

其中 a_c 、 a_v 和 b 表示形變位能常數(deformation potential constants)，

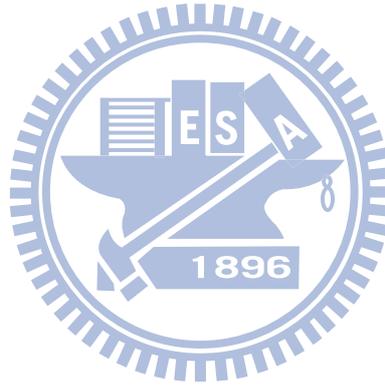
此外，值得注意的是 Δ_0 這個參數，其表示自旋軌道分裂能量，如果 Q_ε

相對於 Δ_0 可以被忽略，則根據泰勒展開式且忽略高階項，則輕電洞

位能之改變，在六能帶與四能帶相同，其推導如下：

$$\begin{aligned}
& -P_\varepsilon + \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta_0 + \sqrt{\Delta_0^2 + 2\Delta_0 Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2} \right) \\
& = -P_\varepsilon + \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta_0 + \Delta_0 \sqrt{1 + \frac{2Q_\varepsilon}{\Delta_0} + 9\left(\frac{Q_\varepsilon}{\Delta_0}\right)^2} \right) \\
& \cong -P_\varepsilon + \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta_0 + \Delta_0 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{2Q_\varepsilon}{\Delta_0} \right) \right) \\
& = -P_\varepsilon + \frac{1}{2} (Q_\varepsilon + Q_\varepsilon) = -P_\varepsilon + Q_\varepsilon
\end{aligned}$$

但上式不一定成立，因此，本文才會探討四能帶與六能帶的差異。



第五章 結果與討論

本章是根據之前的數值方法給與驗證與討論，其中第一節是與文獻[22]做比對以驗證程式，第二節則以圖像呈現位移與應變的關係，而第三節與第四節則是針對一系列長方體形與截角金字塔形量子點做計算，藉此觀察其應變與侷限位能的改變。

5.1 金字塔形狀、正方體與球形量子點應變驗證

本節將數值模擬的結果與文獻[22]做比對，此外，也將 COMSOL 的計算結果與之比較，由於文獻[22]中，其彈性係數在量子點內外皆設定為砷化鎵之彈性係數，因此，在本節的收斂與驗證中，我們的彈性係數設定同文獻[22]。

在列出與文獻[22]的比較前，圖 5.1 為我們針對基底為 6(nm)和高為 3(nm)的金字塔形量子點，在採取不同項數的傅立葉級數做了收斂測試；而圖 5.2 為我們利用 COMSOL 針對基底為 6(nm)和高為 3(nm)的金字塔形量子點做的計算，其中我們更改網格的大小來觀察其收斂情況。其中，在文獻中體應變(hydrostatic strain)為 $e_h = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$ 與雙軸應變(biaxial strain)為 $e_b = e_{zz} - (e_{xx} + e_{yy})/2$ ：

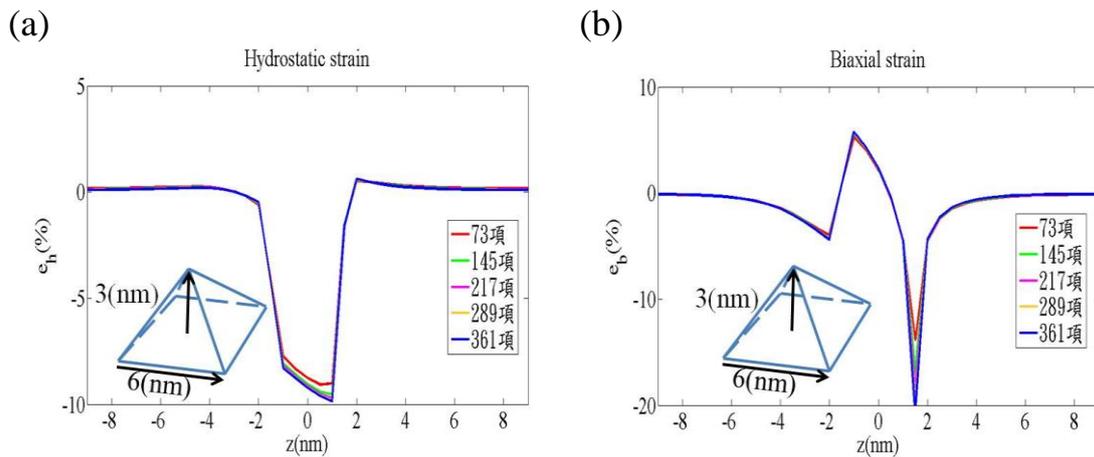


圖 5.1、不同傅立葉級數的金字塔形量子點應變比較圖

(a)、體應變比較圖(b)、雙軸應變比較圖

當我們使用越多的傅立葉級數，則收斂性越好，
圖中我們考慮在一個方向上我們使用不同項數的傅立葉級數，
而我們在三個方向上使用的項數是一樣的。

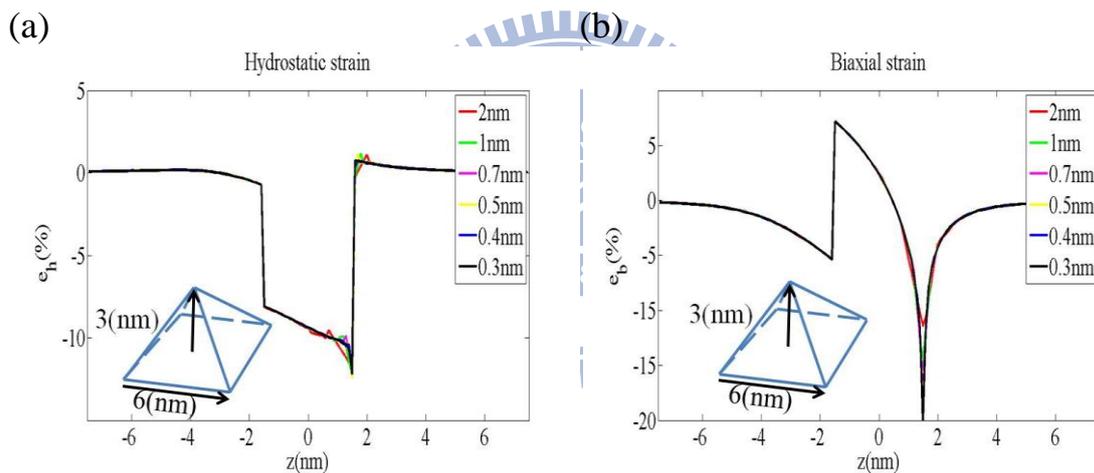


圖 5.2、COMSOL 不同網格大小的金字塔形量子點應變比較圖

(a)、體應變比較圖(b)、雙軸應變比較圖

考慮不同元素大小的收斂，圖附上元素邊長的大小。

再來，我們依序列出金字塔(圖 5.3)、正方體(圖 5.4)與球形(圖 5.5)

量子點與文獻[22]和 COMSOL 沿 Z 軸的曲線比較圖：

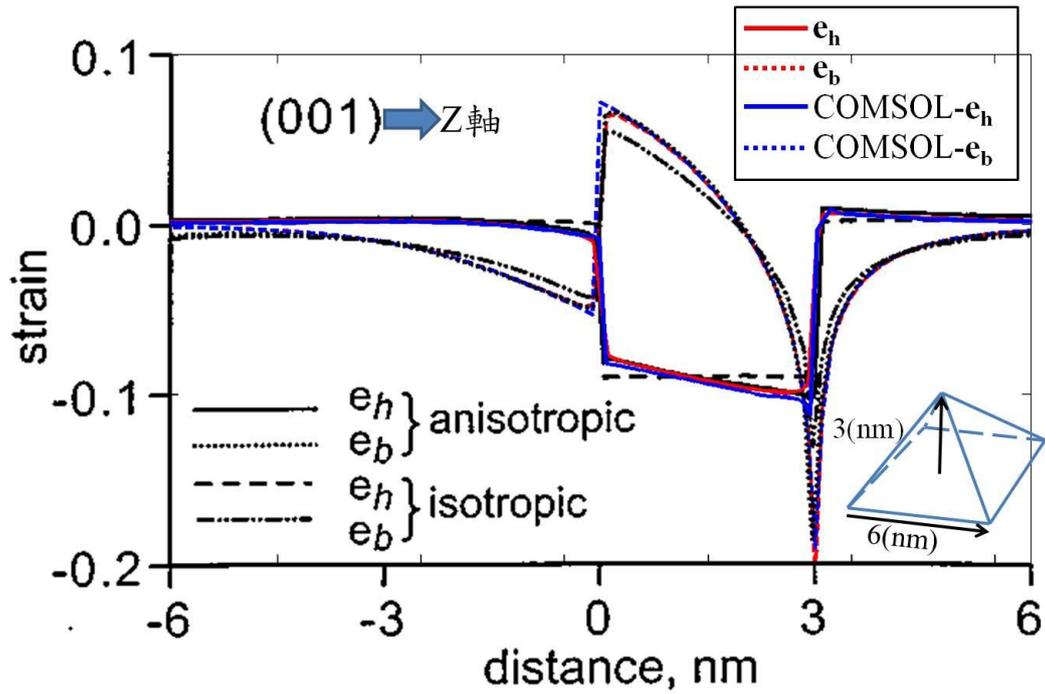


圖 5.3、金字塔形量子點應變的比較圖

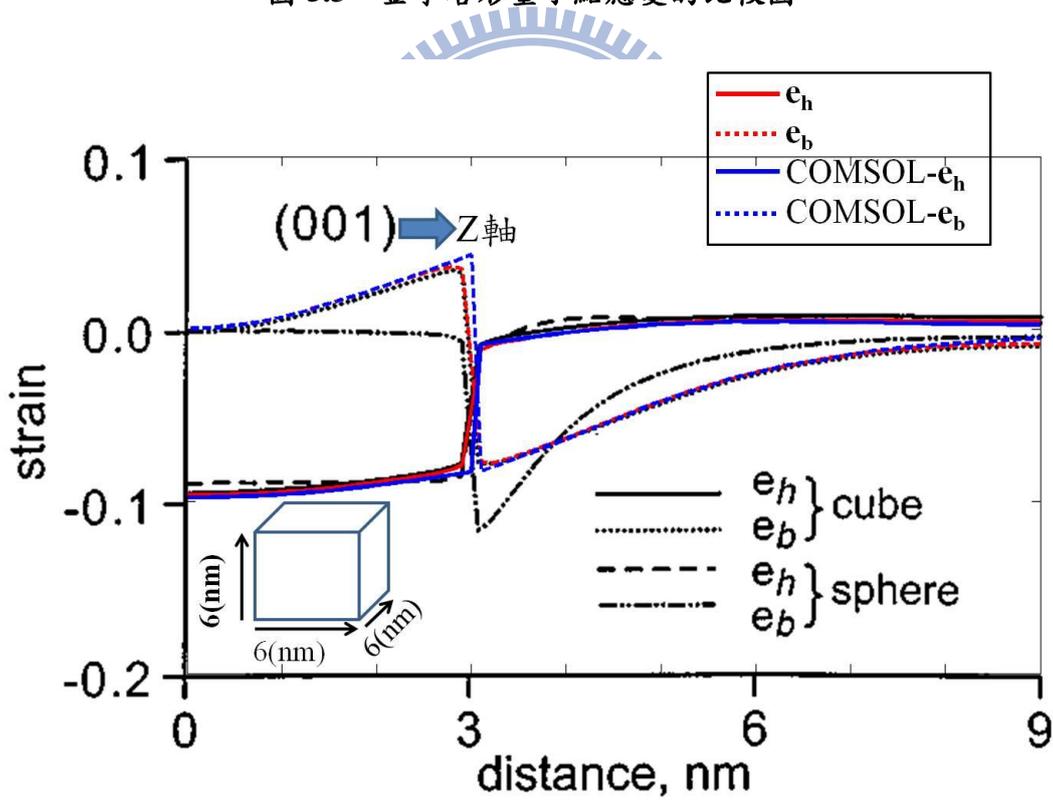


圖 5.4、正方體形量子點應變的比較圖

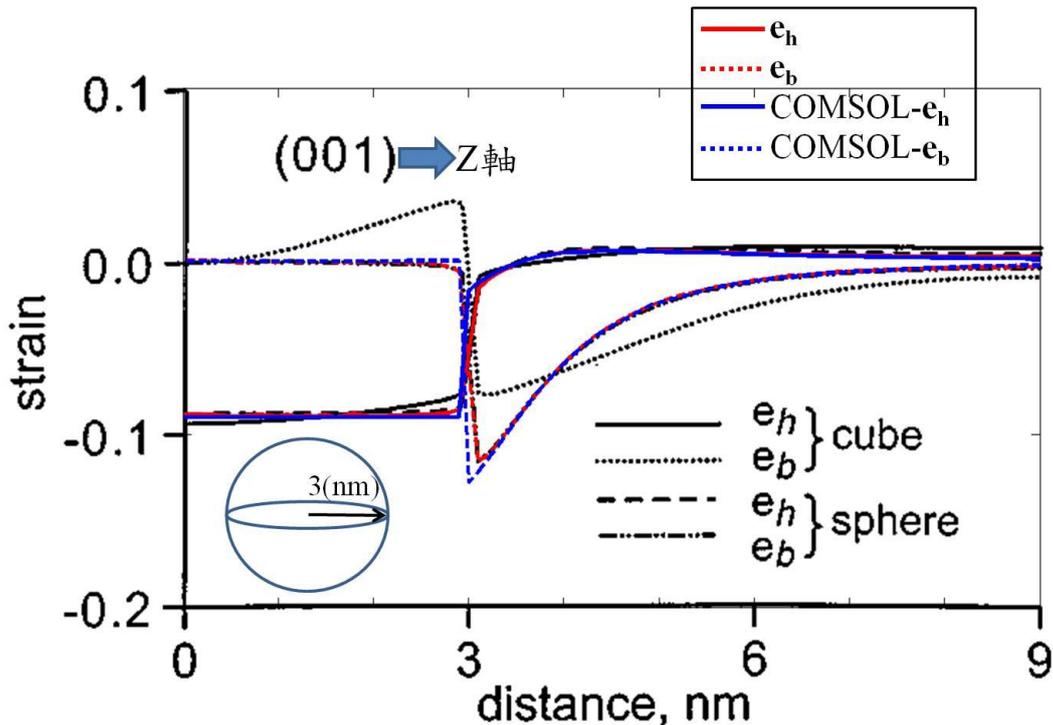


圖 5.5、球形量子點應變的比較圖

根據圖形的比較，我們可以發現，跟文獻[22]相當的吻合，此外，跟 COMSOL 軟體跑出的曲線，只有在邊界上有所差異，除此之外，曲線也幾乎相同。由於，COMSOL 軟體所使用的統御方程與格林函數法所使用的相同，因此，這是可預期的。由於，格林函數法使用上，其彈性係數量子點內外需相同的限制而 COMSOL 則無此限制，所以，為了逼近真實情況，在往後的計算上，我們皆使用 COMSOL 來計算量子點的應變。

5.2 應變與位移

為了清楚在量子點系統裡應變與位移的關係，在本節我們畫出應力鬆弛前後晶格位置的改變。而承前文，由於初始應變的關係，在發生應力鬆弛前，量子點內的晶格長度與量子點外的晶格長度同為砷化

鎵(GaAs)的晶格長度，因此，我們觀察其晶格改變時，我們以砷化鎵(GaAs)的晶格長度作為參考長度。由於量子點含初始應變，因此，應力鬆弛後，當應變值大於初始應變(-6.7%)時，則表此時量子點內的晶格大於砷化鎵(GaAs)的晶格。

由於，應變產生的位移不易觀察到，因此，為了讓我們能清楚的觀察到，在位移圖裡，我們將位移量放大了三倍，而新的晶格位置為原本的位置加上放大後的位移量，雖然不是真實的，但依舊能反映出該有的特性。

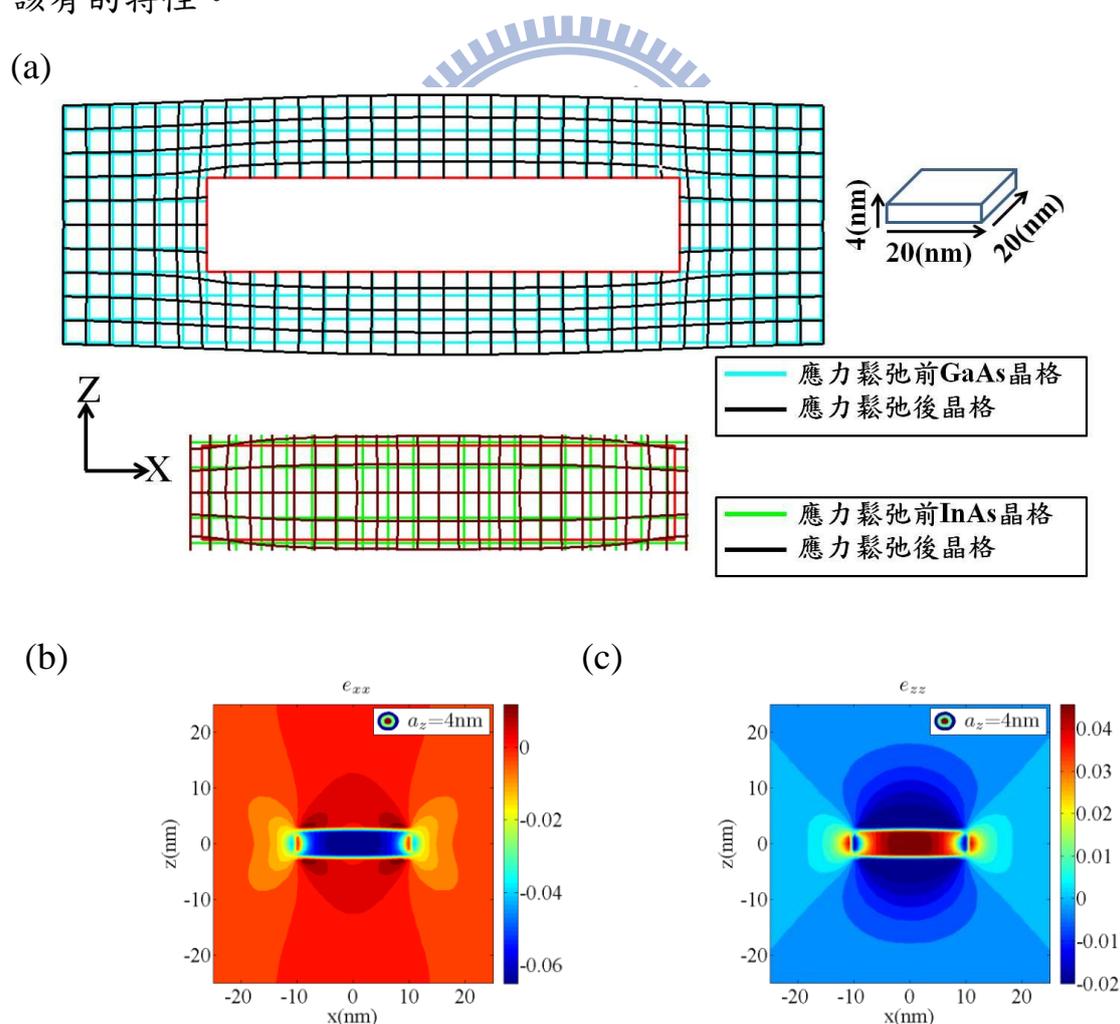
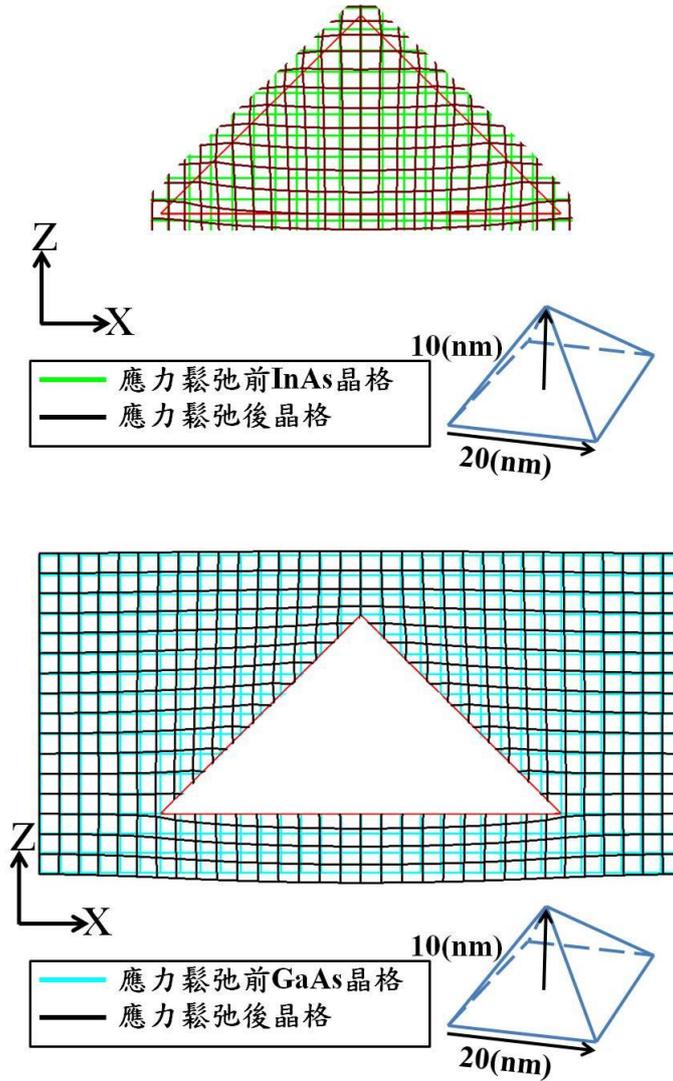


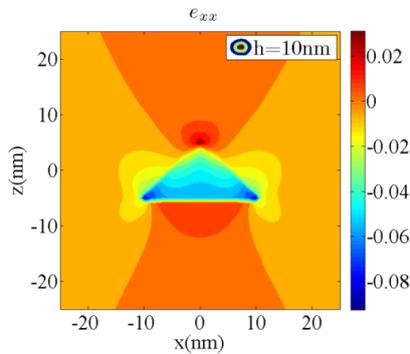
圖 5.6、長寬為 20(nm)且高為 4(nm)的量子盒應變與位移對照圖

(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

(a)



(b)



(c)

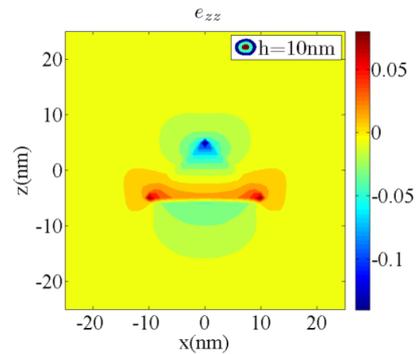


圖 5.7、基底長度為 20(nm)且高為 10(nm)的金字塔形量子點應變與位移對照圖
(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

圖 5.6 為長寬為 20(nm)且高為 4(nm)的量子盒其應變與位移的對照圖，從圖上可以發現，當量子點內部分區域 e_{zz} 為膨脹時，表該區在 Z 方向的晶格長度將大於砷化鎵的晶格，而在量子點內部分區域 e_{xx} 維持在約初始應變值時，則表該區在 X 方向的晶格將約維持在砷化鎵的晶格長度。

而圖 5.7 為基底長度為 20(nm)且高為 10(nm)的量子盒其應變與位移的對照圖，從圖上可以發現量子點內靠近金字塔的頂端其 X 方向上的晶格長度會大於砷化鎵的晶格長度，但 Z 方向上卻是幾乎維持在砷化鎵的晶格長度；而靠近底部的兩個角，其行為上卻是相反的。

至此，我們發現位移其實就是在反映應變，根據每一點的應變值，反映該點的位移量。



5.3 量子盒與截角金字塔形量子點系列的比較

本節針對量子盒在 Z 方向長度的改變作系列的計算，從立方體到扁平的長方體；亦針對金字塔系列作計算，從金字塔到扁平的截角金字塔。其中在本節裡，我們的量子點為 XY 對稱的，此外，在此以後我們定義雙軸應變為 $(e_{xx} + e_{yy})/2 - e_{zz}$ 且將座標原點定在量子點內，在其高度的一半的 XY 切面的中心位置。而 a_x 、 a_y 和 a_z 表長方體型量子點的長寬高， b_x 、 b_y 和 h 表截角金字塔型量子點的 X 方向與 Y 方向的基底長度和高度。

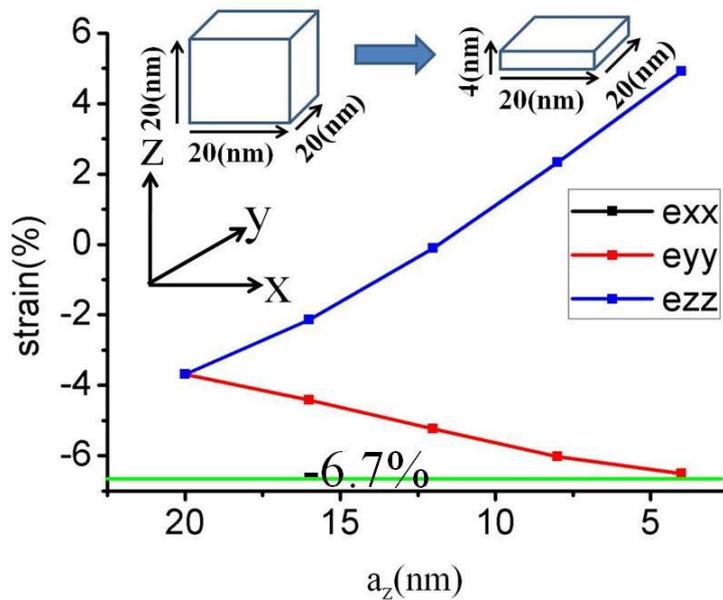


圖 5.8、長寬為 20(nm)高度 a_z 在改變的量子盒，其中心點(0,0,0)應變值的比較圖

圖 5.8 為長寬皆為 20(nm)但高度在改變的量子盒，其中心點應變值的比較圖，可以發現當量子點變的越薄時，則 e_{zz} 的值將越來越大，而 e_{xx} 、 e_{yy} 則趨向於初始應變的值(-6.7%)。由於，在異質界面處有晶格不匹配，所以，在介面處會有沿平面方向上，較大的壓應變，尤其是介面的中心點，因此，當量子盒越來越薄時，則在量子盒的上下異質界面將靠近其中心點，將導致中心點的 e_{xx} 、 e_{yy} 會幾乎保持在初始應變的值，所以，其應力釋放將轉移到短軸方向上，因此， e_{zz} 將會變得比較大。

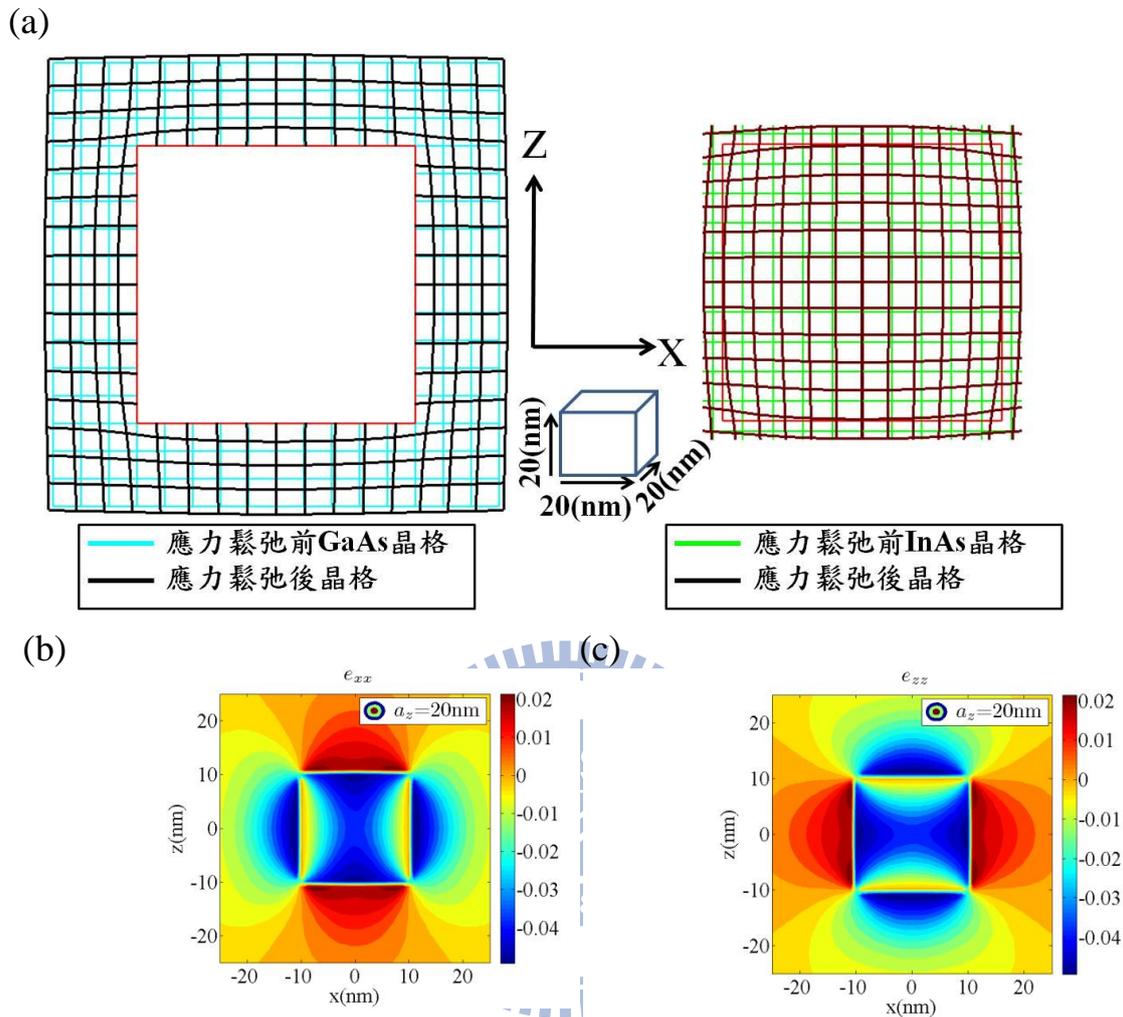


圖 5.9、長寬為 20(nm)且高為 20(nm)的量子盒應變與位移對照圖

(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

圖 5.9 為長寬為 20(nm)且高為 20(nm)的量子盒在 XZ 平面的位移圖與應變圖，而圖 5.10~圖 5.11 為長寬為 20(nm)且高為 4(nm)的量子盒在 XZ 平面與 XY 平面的位移圖與應變圖。

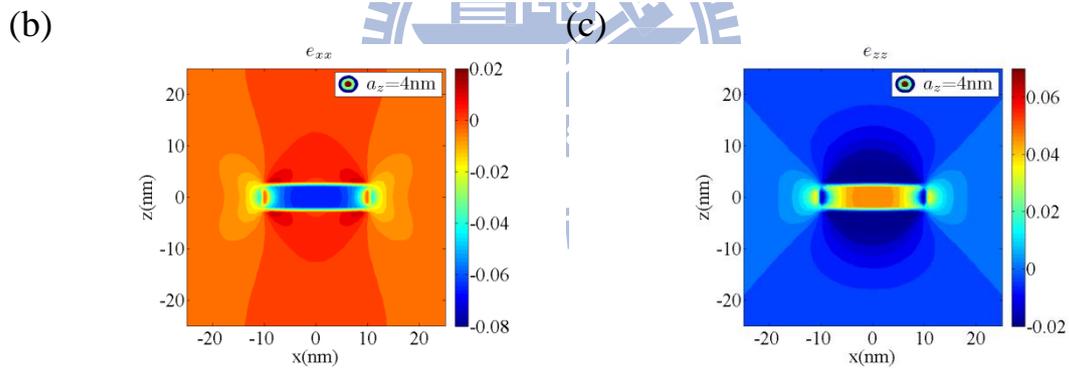
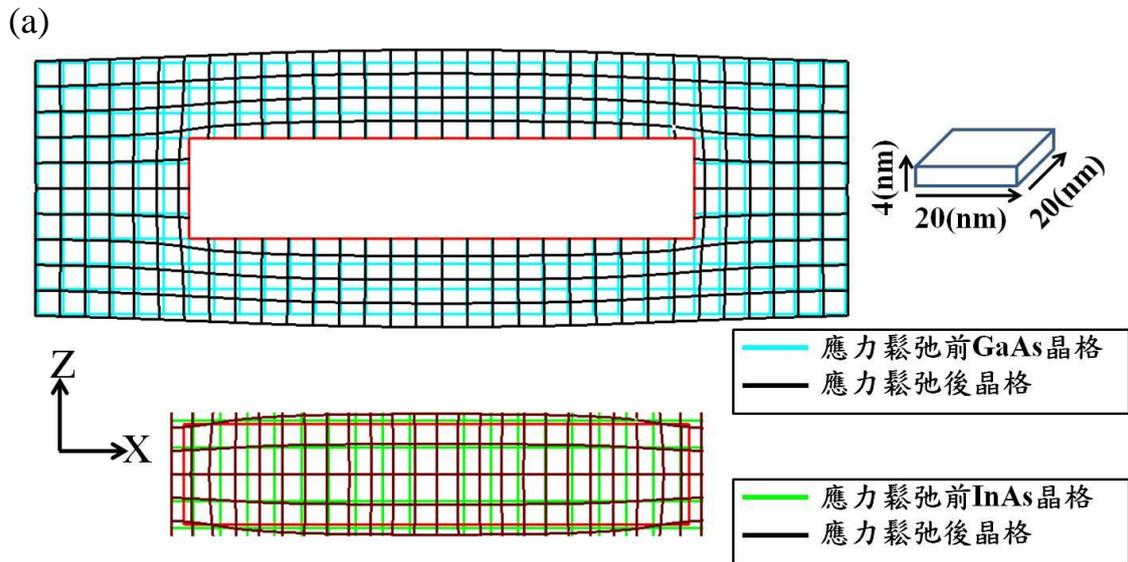
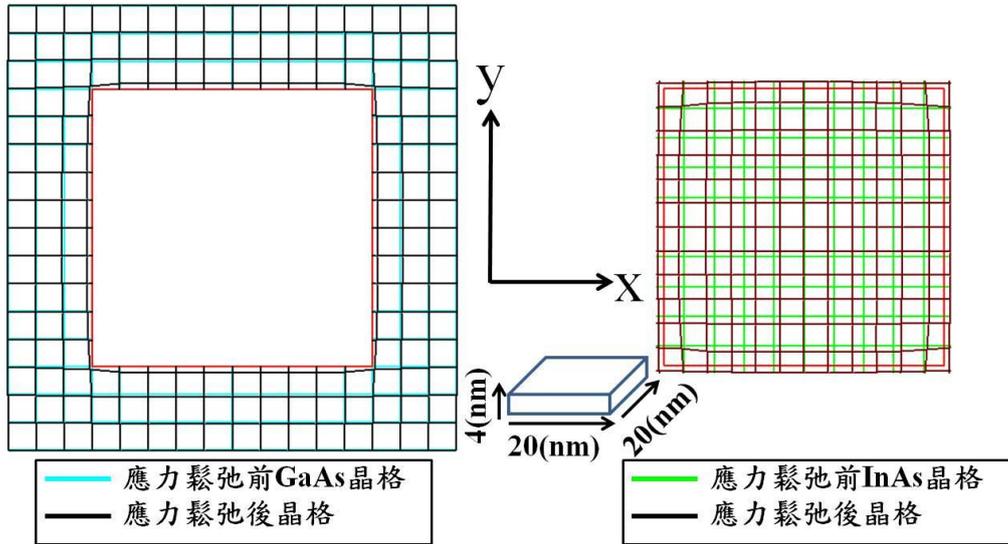


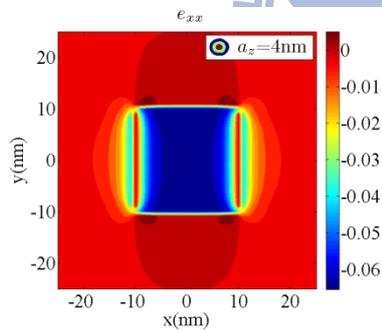
圖 5.10、長寬為 20(nm)且高為 4(nm)的量子盒應變與位移對照圖

(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

(a)



(b)



(c)

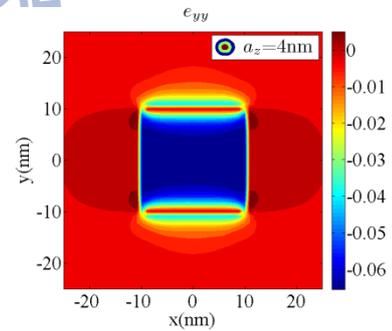
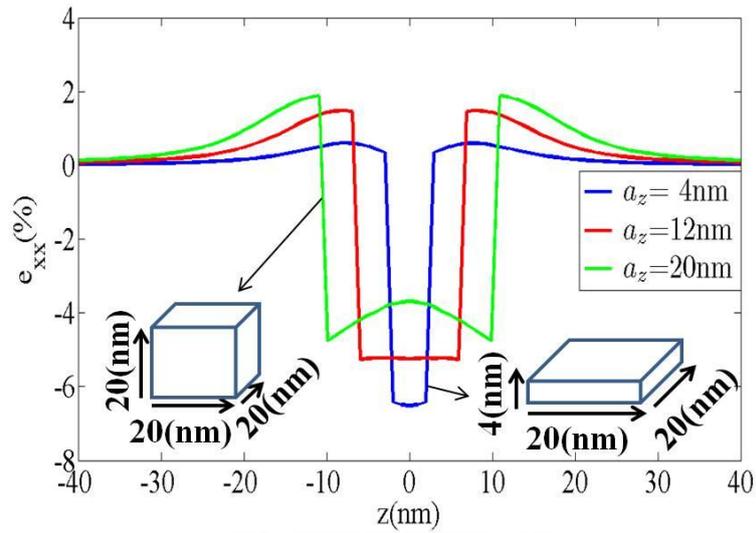


圖 5.11、長寬為 20(nm)且高為 4(nm)的量子盒應變與位移對照圖

(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖

(a)



(b)

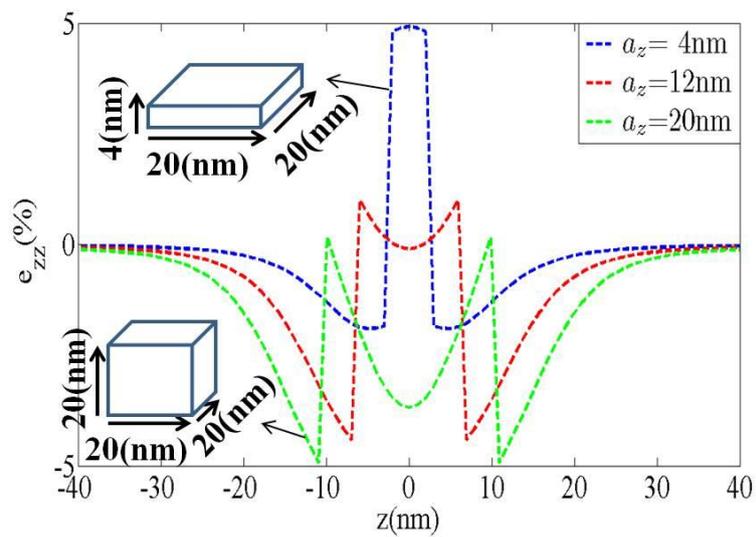
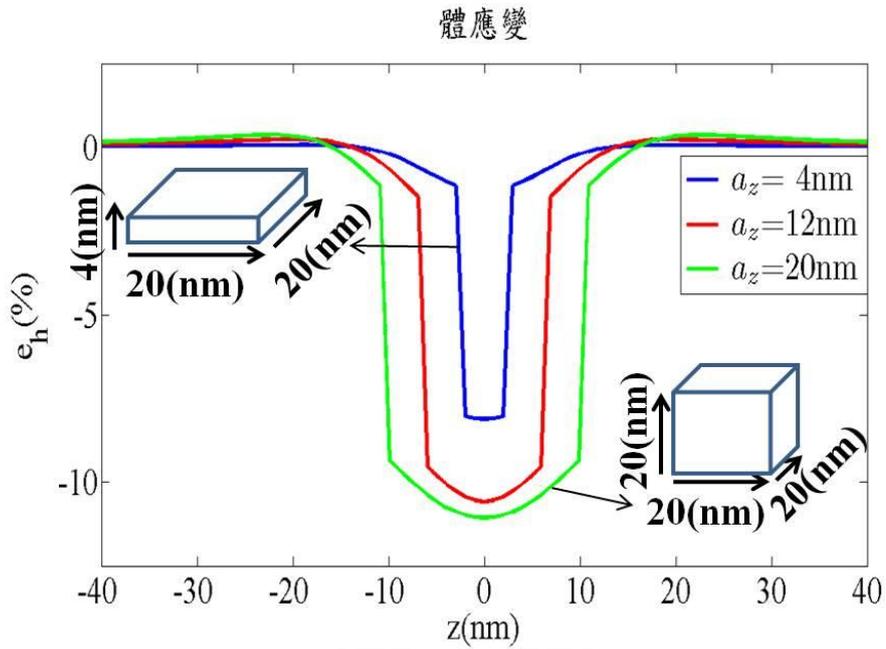


圖 5.12、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒沿 Z 軸($x,y=0$)的應變分佈
(a)、 e_{xx} 分佈圖(b)、 e_{zz} 分佈圖

(a)



(b)

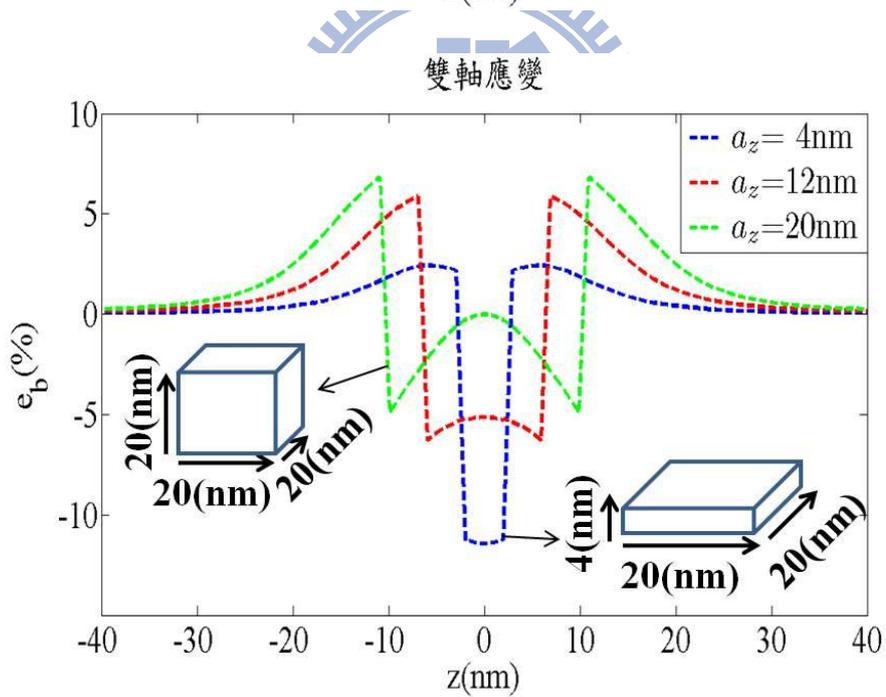


圖 5.13、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒沿 Z 軸($x,y=0$)的應變分布
(a)、體應變分佈圖(b)、雙軸應變分佈圖

而圖 5.12 與圖 5.13 分別為 e_{xx} 、 e_{zz} 、體應變與雙軸應變沿 Z 軸的分佈，伴隨著量子盒的變薄，其雙軸應變有顯著的改變。根據文獻

[5]，六能帶理論中，其輕重電洞的應變位能的數學式如下：

$$\begin{bmatrix} -P_\varepsilon - Q_\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -P_\varepsilon + Q_\varepsilon & 0 & 0 & \sqrt{2}Q_\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & -P_\varepsilon + Q_\varepsilon & 0 & 0 & -\sqrt{2}Q_\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & -P_\varepsilon - Q_\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}Q_\varepsilon & 0 & 0 & -P_\varepsilon - \Delta_{so} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}Q_\varepsilon & 0 & 0 & -P_\varepsilon - \Delta_{so} \end{bmatrix}$$

其中，

$$P_\varepsilon = -a_v(e_{xx}(\vec{r}) + e_{yy}(\vec{r}) + e_{zz}(\vec{r}))$$

$$Q_\varepsilon = -\frac{b}{2}(e_{xx}(\vec{r}) + e_{yy}(\vec{r}) - 2e_{zz}(\vec{r}))$$

因此，雙軸應變除了影響輕重電洞的位能，也影響輕電洞帶與自旋軌道能帶的耦合，進而影響輕電洞的侷限位能。

圖 5.14 是考慮四能帶與六能帶輕電洞侷限位能差異的比較。可以發現，伴隨著雙軸效應的減弱，四能帶與六能帶將趨近於一樣，因為，輕電洞能帶與自旋軌道能帶的耦合變弱了。

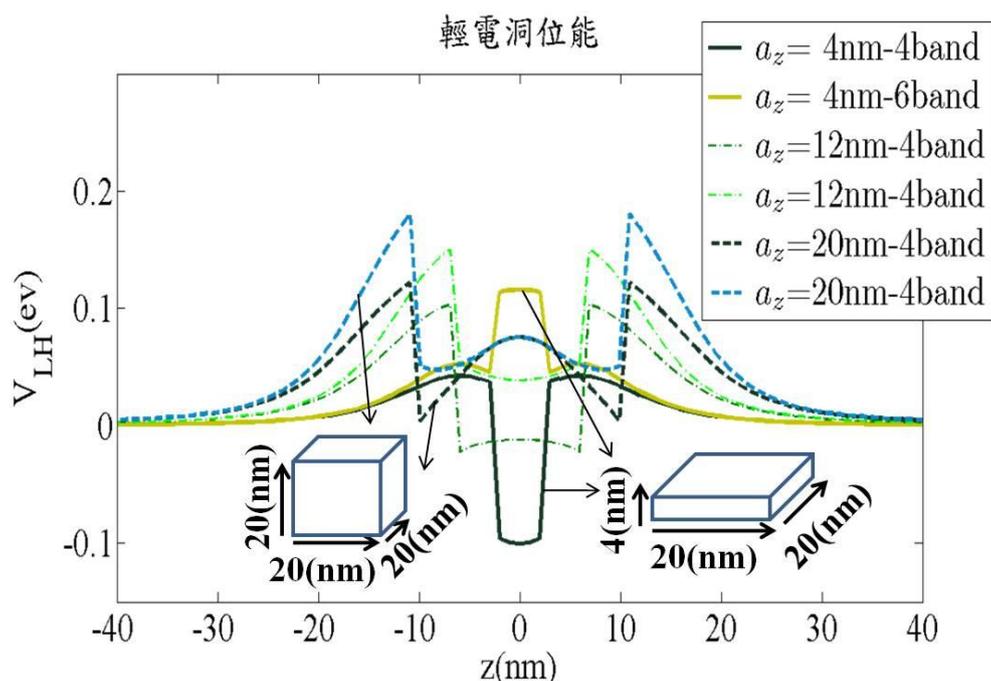
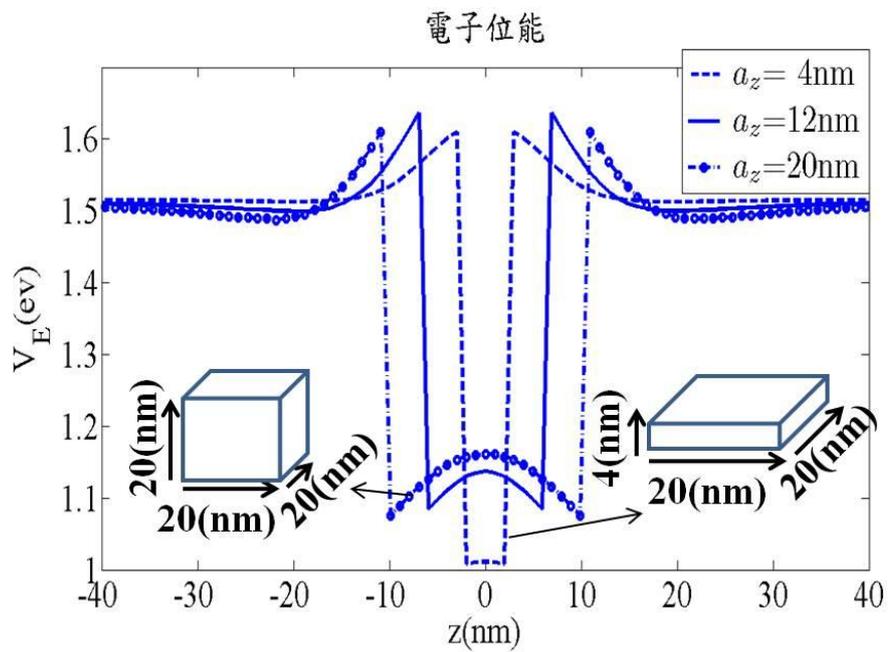


圖 5.14、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒，在考慮四能帶與六能帶的輕電洞位能比較圖，沿 Z 軸(x,y=0)

圖 5.15 為不同厚度量子盒發生應變後沿 Z 軸的侷限位能，圖 5.16 ~ 5.21 為侷限位能在 XY 與 XZ 平面的分佈，值得注意的是伴隨著量子盒越來越薄，輕電洞在量子點內的侷限強度也會伴隨著變強，XZ 與 XY 平面皆是如此，若是 Z 方向的長度較長，則輕電洞在量子盒上下外側有較強的侷限力。重電洞幾乎侷限在量子點內，當量子盒愈來愈薄時，在量子點內重電洞的侷限力也趨變強，而電子在量子點變厚的情況下，電子在量子點內靠近邊界的地方有較強的侷限力。

(a)



(b)

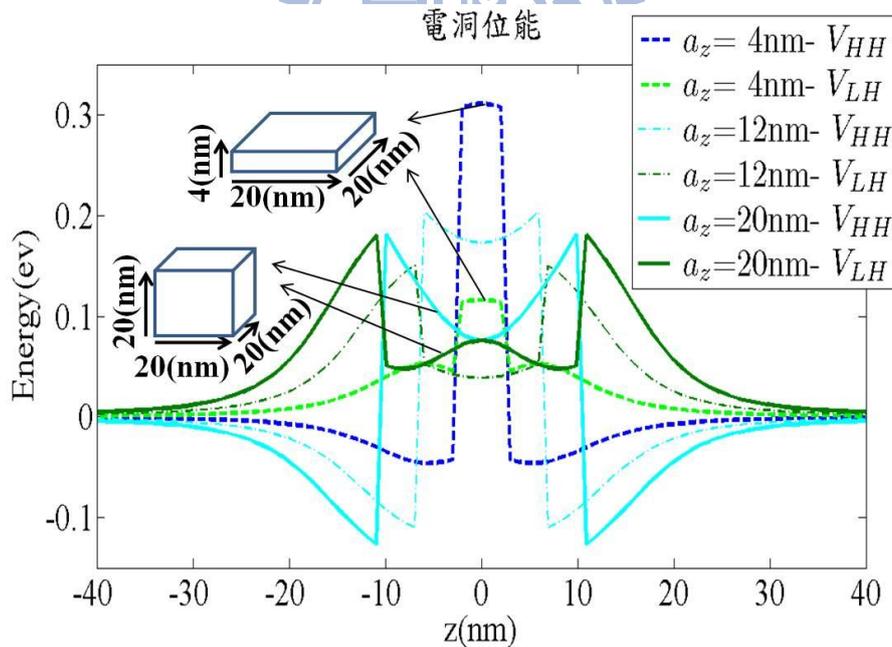


圖 5.15、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒沿 Z 軸($x,y=0$)的侷限位能分佈
(a)、電子侷限位能分佈圖(b)、電洞侷限位能分佈圖

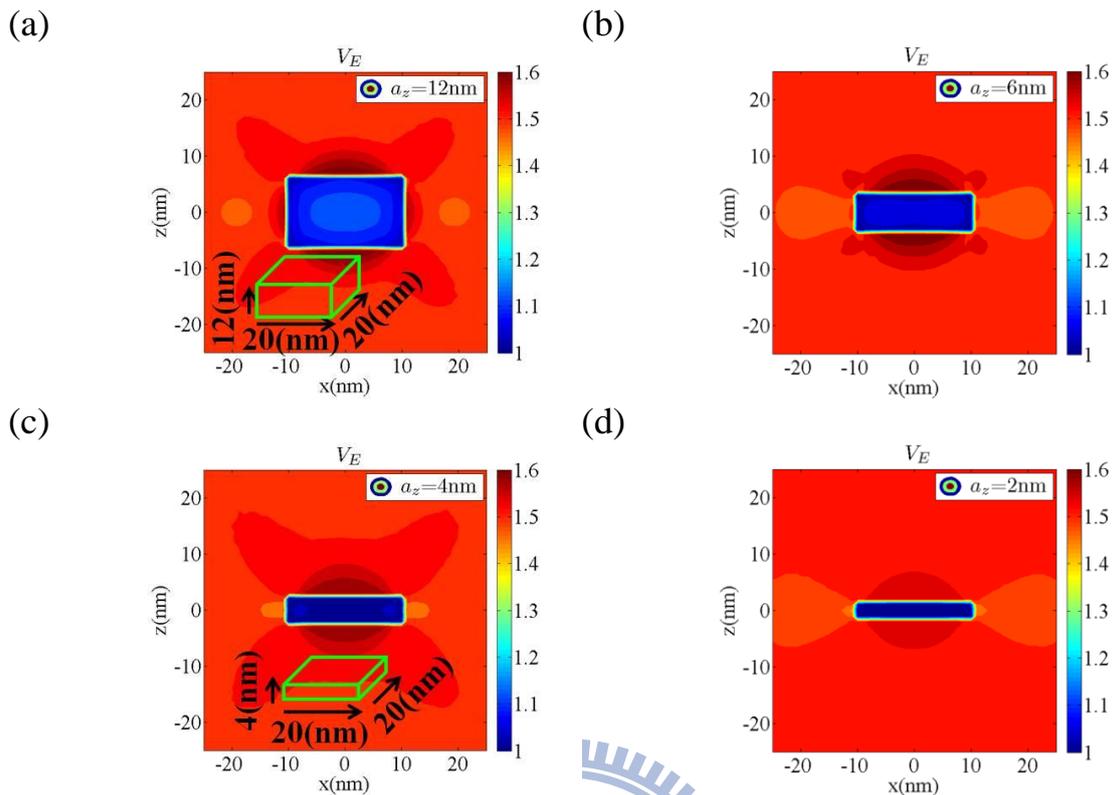


圖 5.16、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XZ 平面($y=0$)的電子侷限位能分佈 (a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm)(c)、高度為 4(nm)(d)、高度為 2(nm)

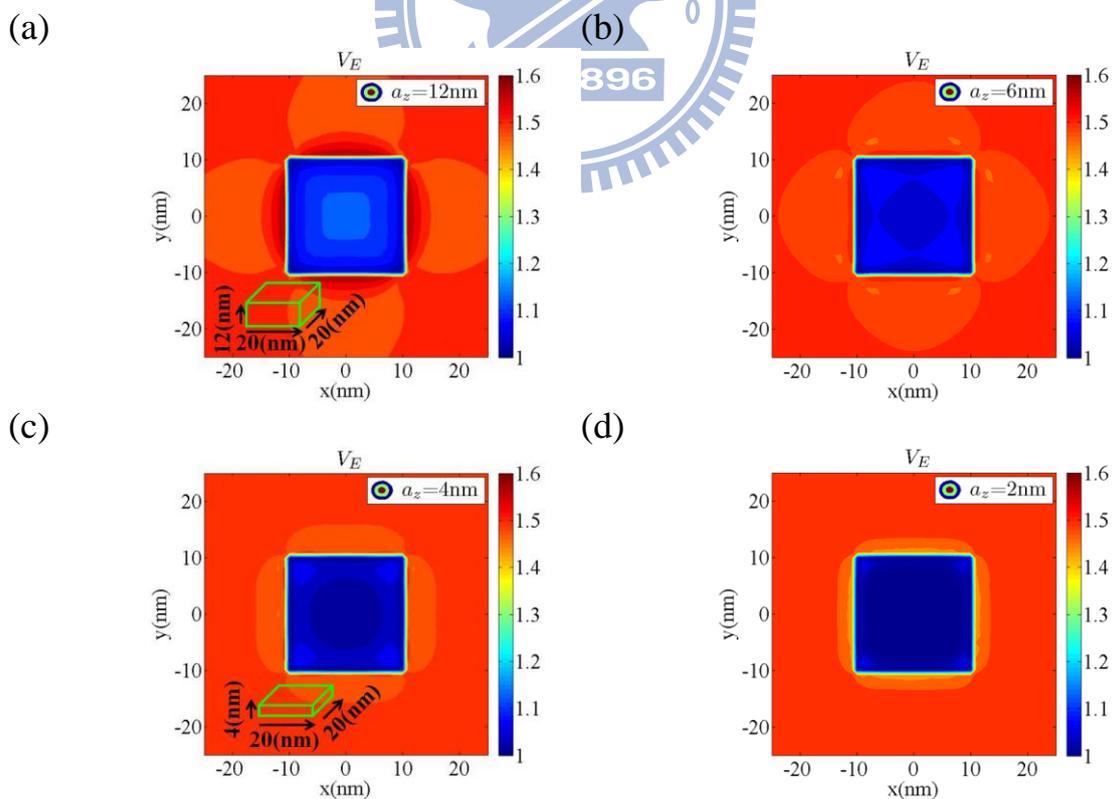


圖 5.17、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XY($z=0$)平面的電子侷限位能分佈 (a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm)(c)、高度為 4(nm)(d)、高度為 2(nm)

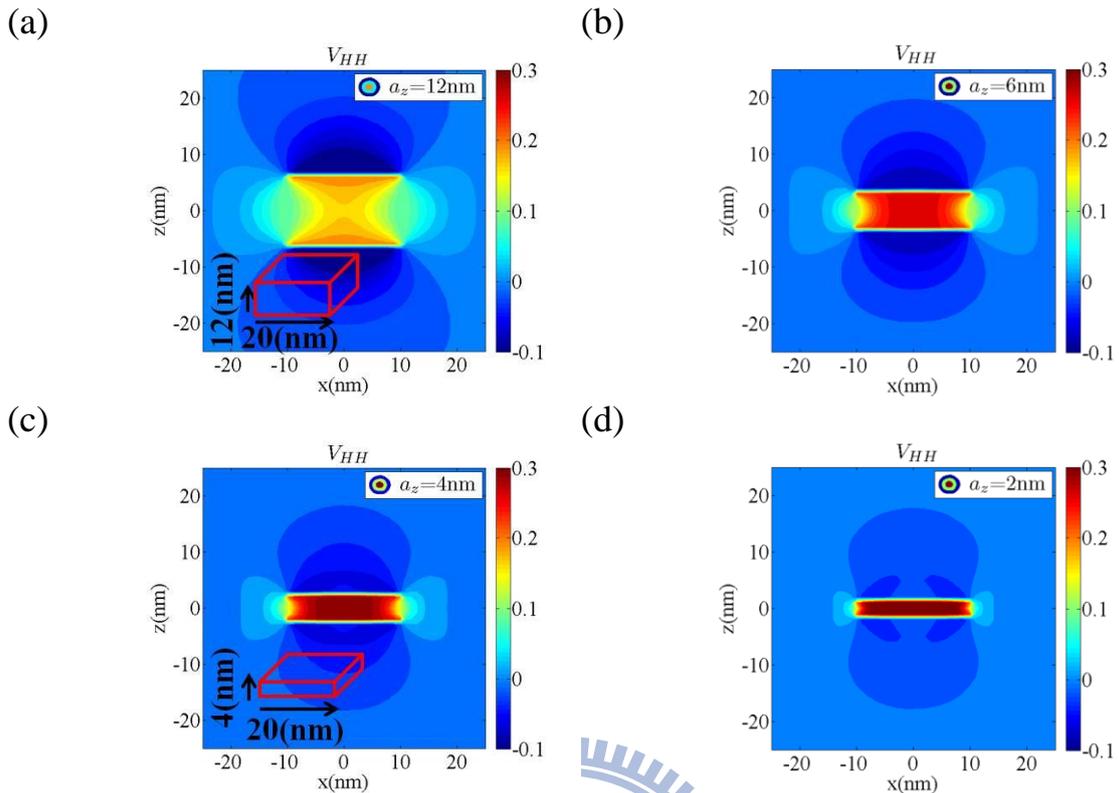


圖 5.18、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XZ($y=0$)平面的重電洞侷限位能分佈

(a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm)(c)、高度為 4(nm)(d)、高度為 2(nm)

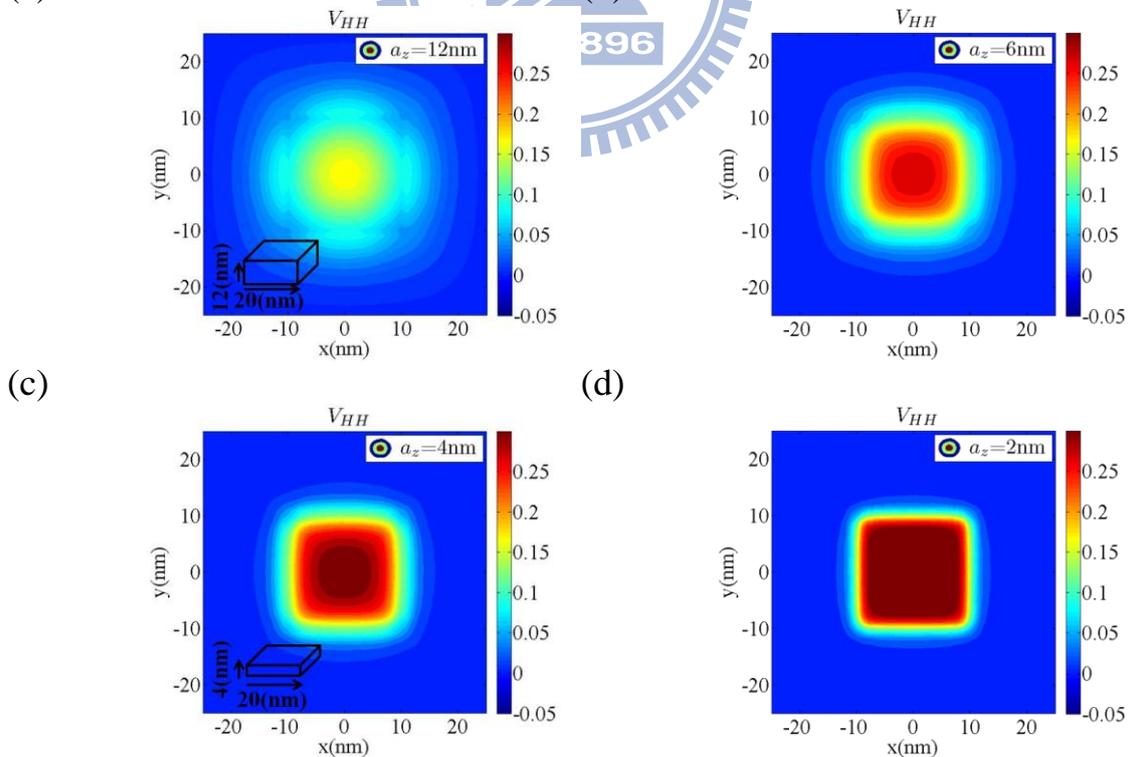


圖 5.19、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XY 平面($z=0$)的重電洞侷限位能分佈

(a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm)(c)、高度為 4(nm)(d)、高度為 2(nm)

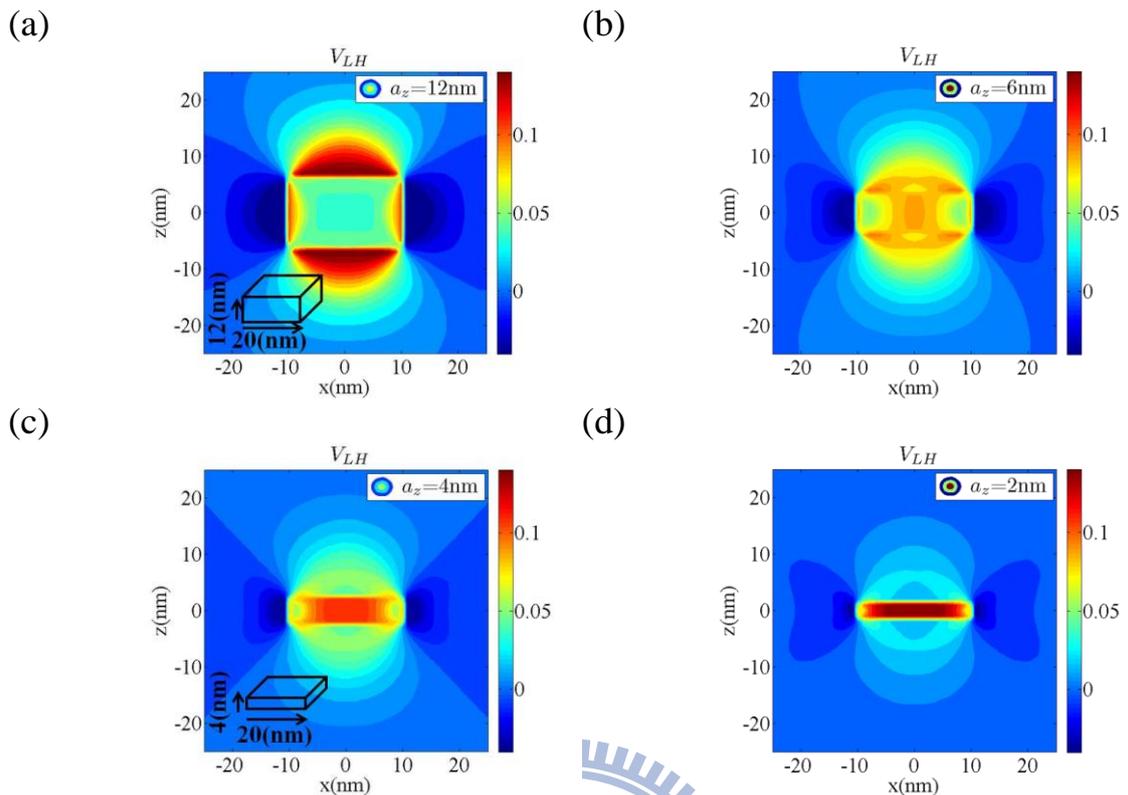


圖 5.20、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XZ 平面($y=0$)的輕電洞侷限位能分佈

(a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm)(c)、高度為 4(nm)(d)、高度為 2(nm)

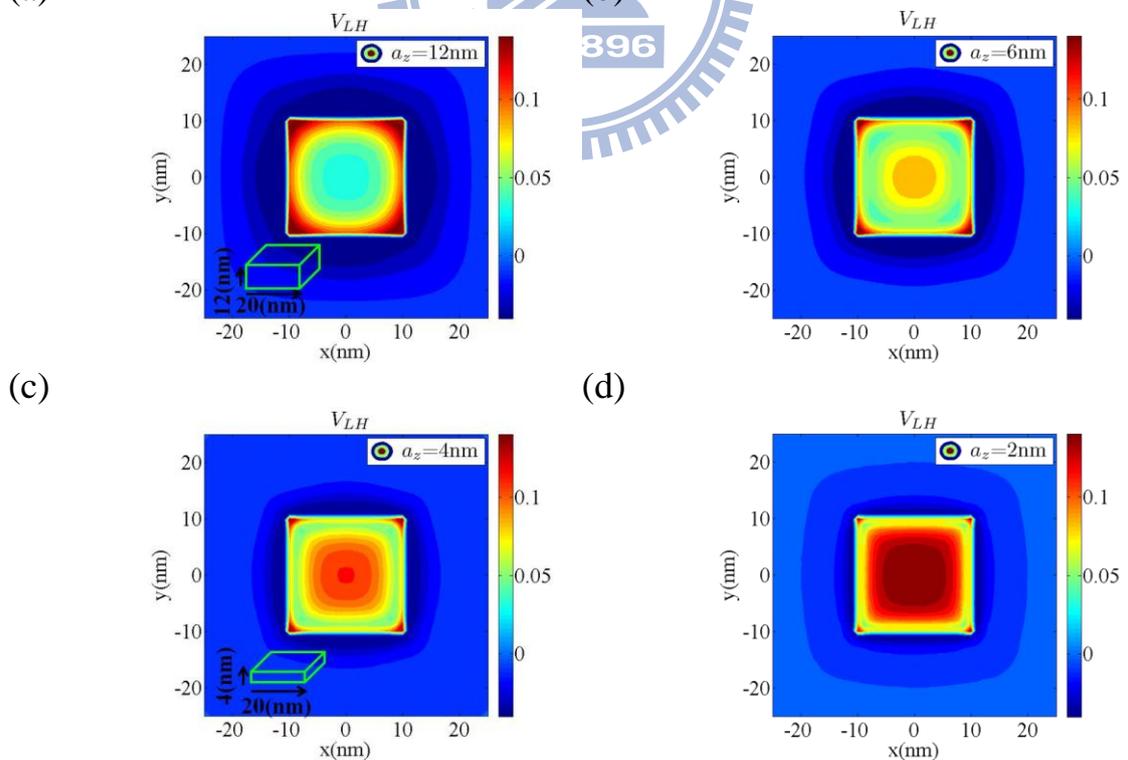


圖 5.21、長寬為 20(nm)高度在改變的量子盒 XY 平面($z=0$)的輕電洞侷限位能分佈

(a)、高度為 12(nm)(b)、高度為 6(nm)(c)、高度為 4(nm)(d)、高度為 2(nm)

接下來，我們就截角金字塔一系列的計算，圖 5.22~圖 5.24 為金字塔(b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)和高為 7(nm))在 XY、XZ 與 YZ 平面的位移與應變圖。圖 5.25~圖 5.27 為與截角金字塔(b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)和高為 3(nm))的在 XY、XZ 與 YZ 平面的位移與應變圖。

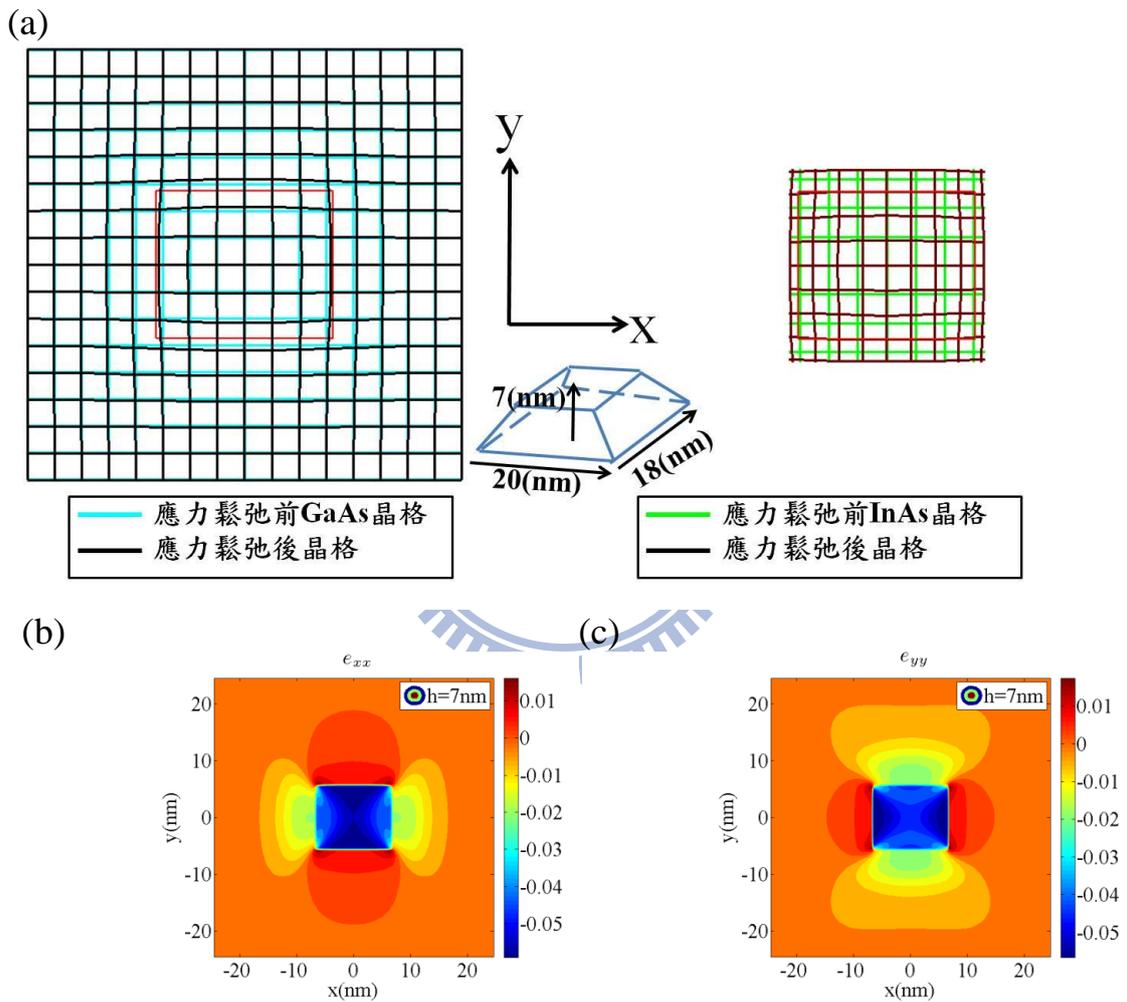


圖 5.22、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 7(nm)的金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖

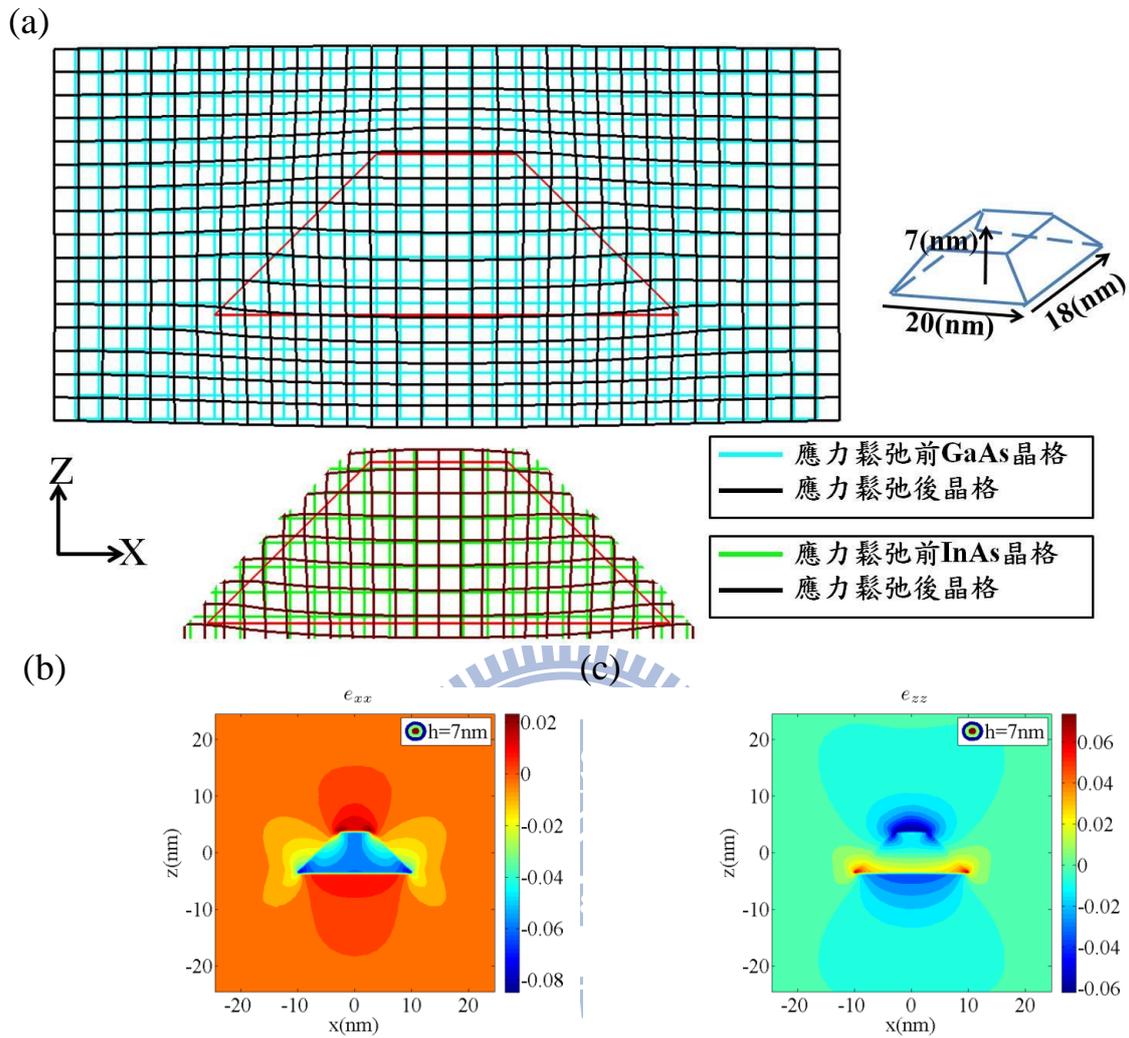


圖 5.23、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 7(nm)的金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

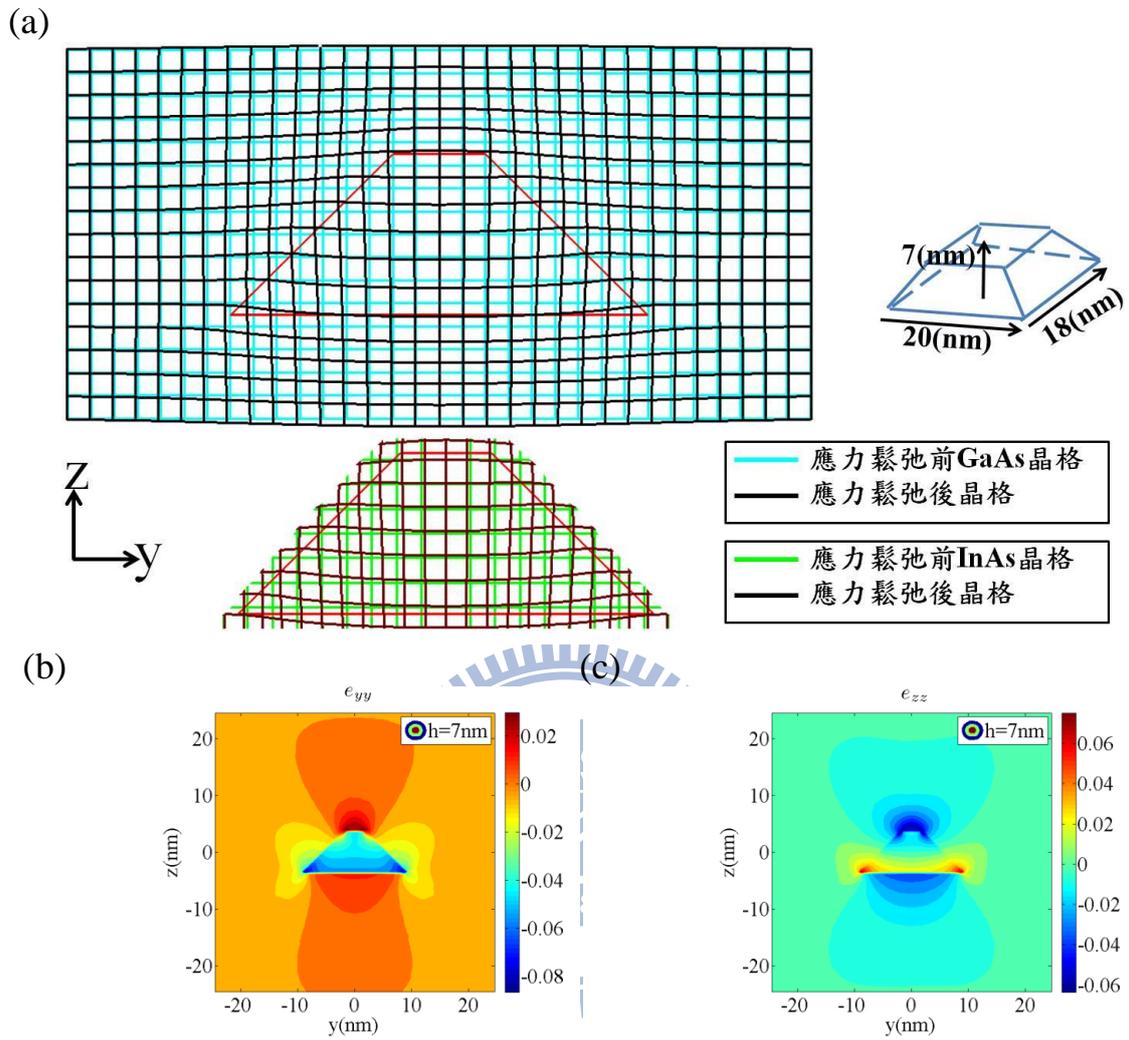


圖 5.24、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 7(nm)的金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖

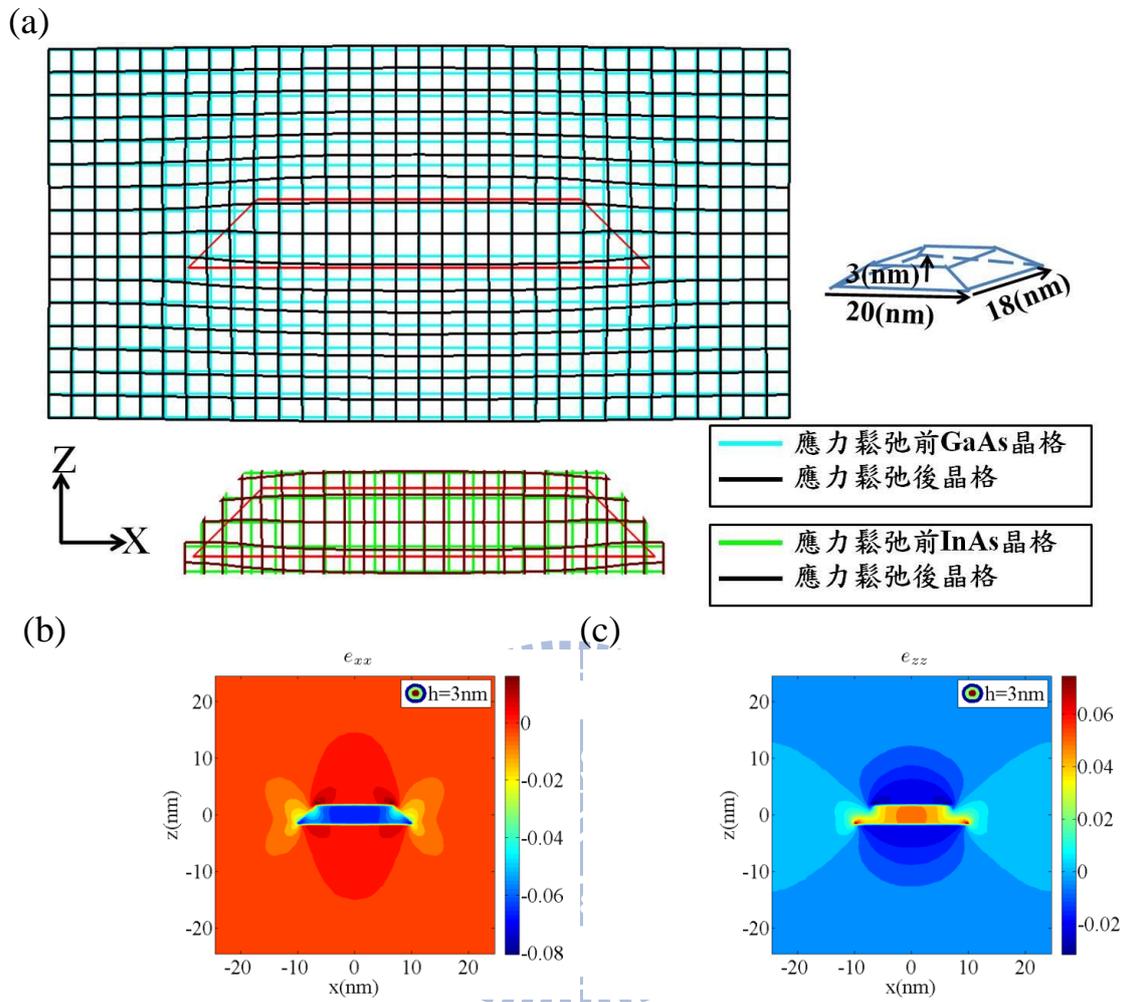


圖 5.25、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm) 且高為 3(nm) 的金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

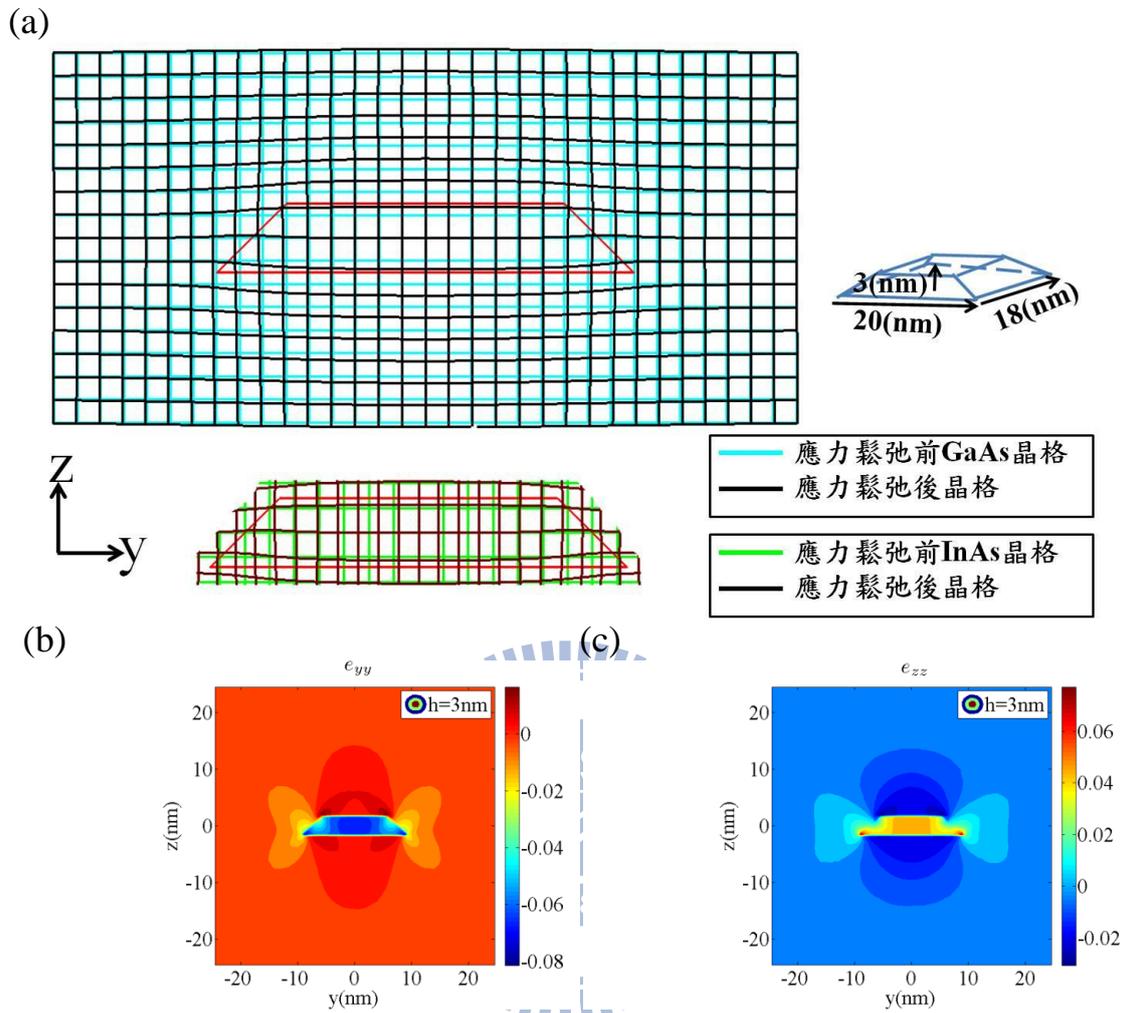


圖 5.26、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm) 且高為 3(nm) 的金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖

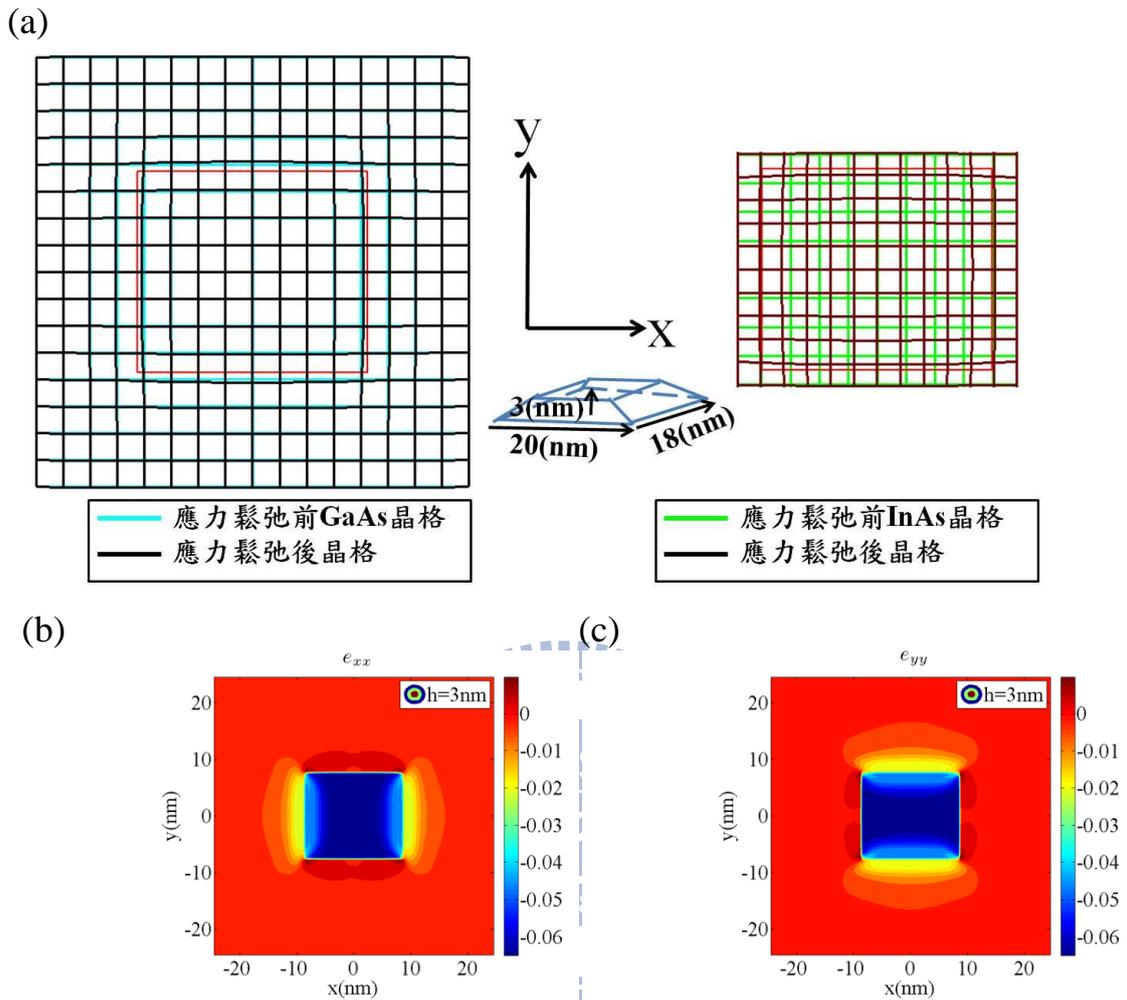


圖 5.27、 b_x 為 20 nm 、 b_y 為 18 nm 且高為 3 nm 的金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、 XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖

圖 5.28 與圖 5.29 分別為 e_{xx} 、 e_{zz} 、體應變與雙軸應變沿 Z 軸的分佈，值得注意的是，形狀漸趨金字塔，則靠近頂部的地方， e_{xx} 會變大，而 e_{zz} 會變小。也因此影響雙軸應變，導致在靠近外頂部的位置，輕電洞有著較強的侷限效應（圖 5.30）。以較高的截角金字塔形量子點為例，由於位於底部處的介面上有晶格不匹配，因此， e_{xx} 有最大的壓應變，所以，導致 Z 方向的張應變；並且伴隨著接近頂部介

面，截面積的減小， e_{xx} 的壓應變遞減，因此削弱了 e_{zz} 的膨脹。圖 5.31~

圖 5.36 為電子電洞在 XZ 與 XY 平面的侷限位能。

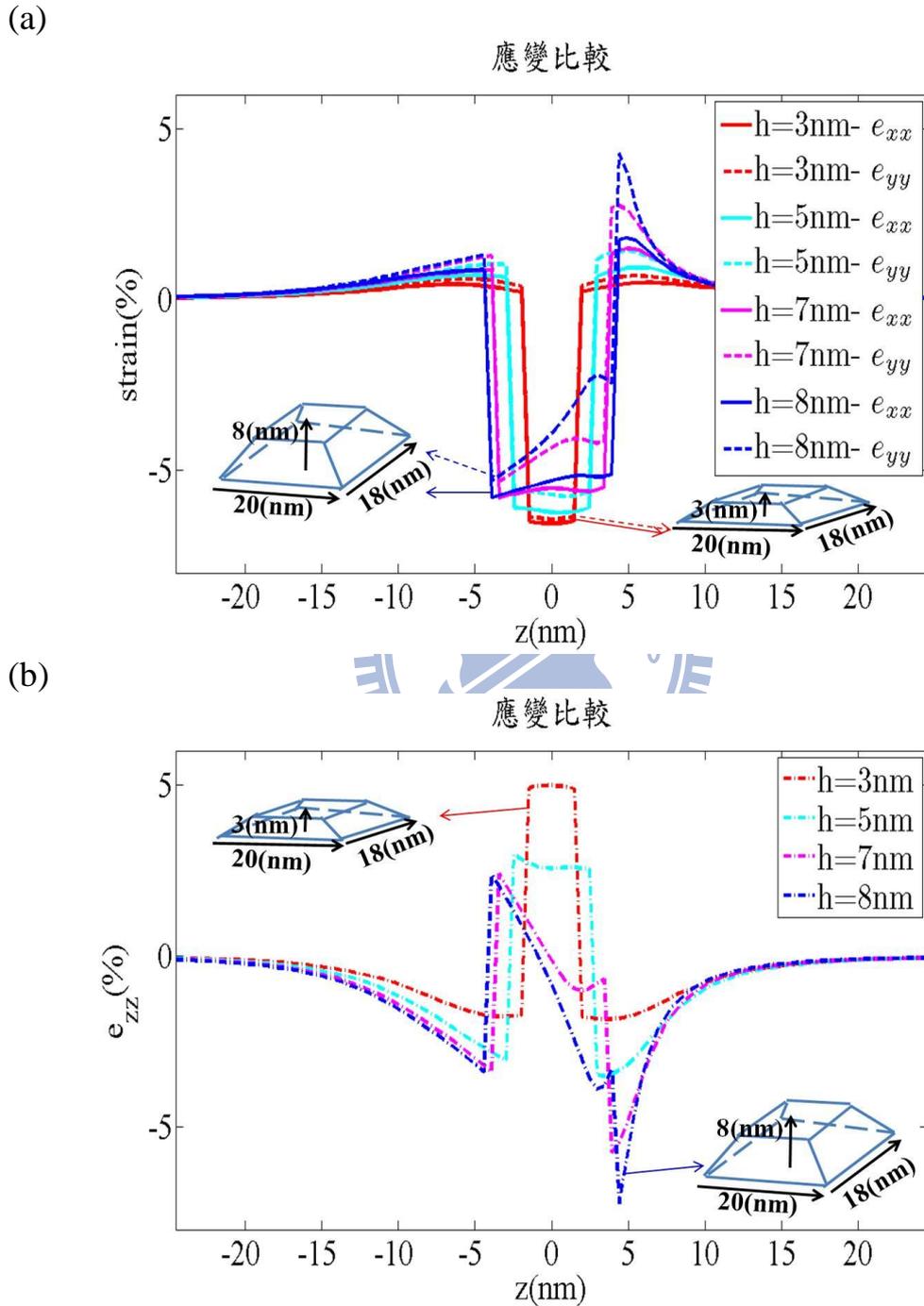


圖 5.28、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm) 且高度在改變的金字塔沿 Z 軸($x,y=0$) 的應變分佈 (a)、 e_{xx} 分佈圖(b)、 e_{zz} 分佈圖

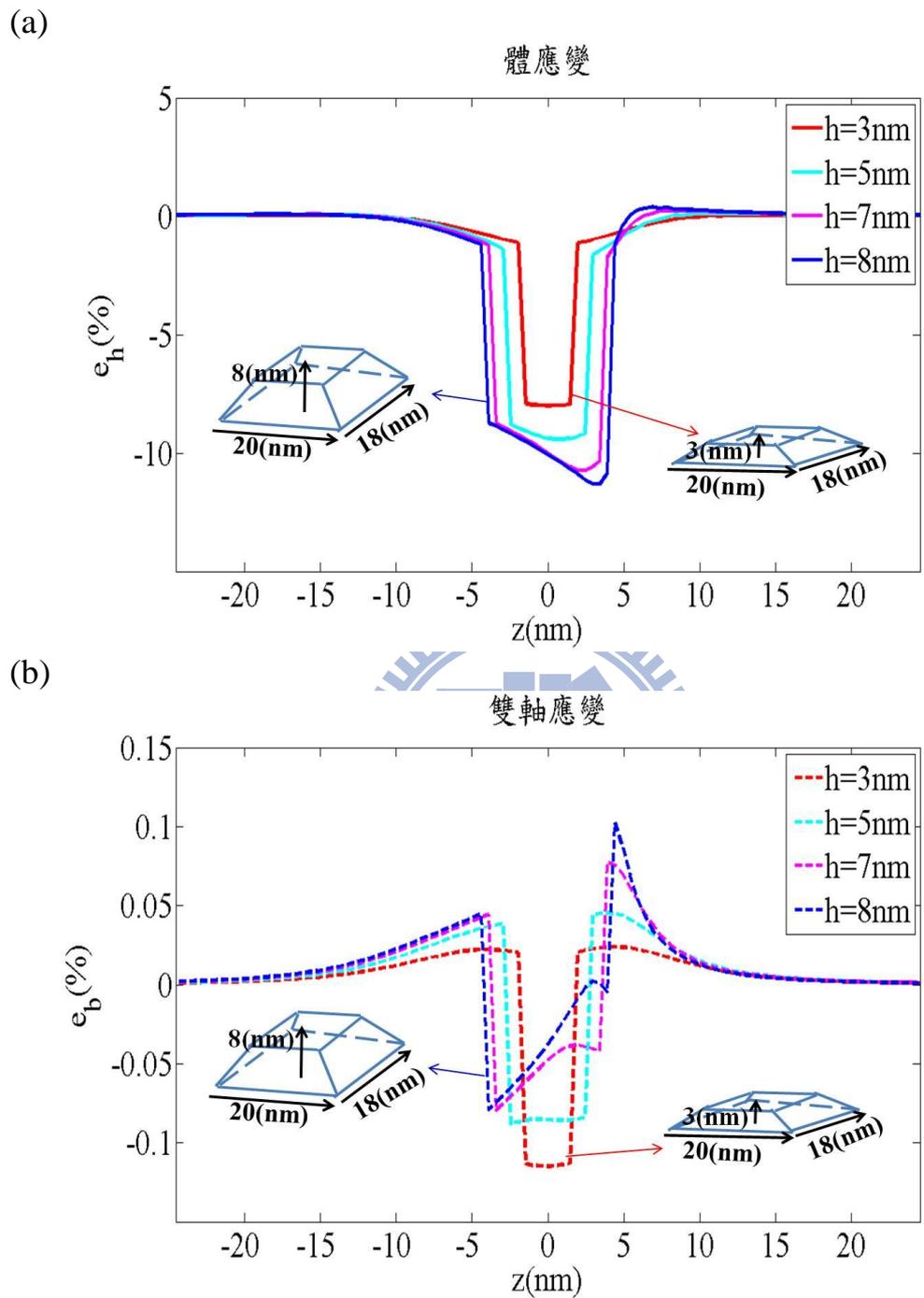
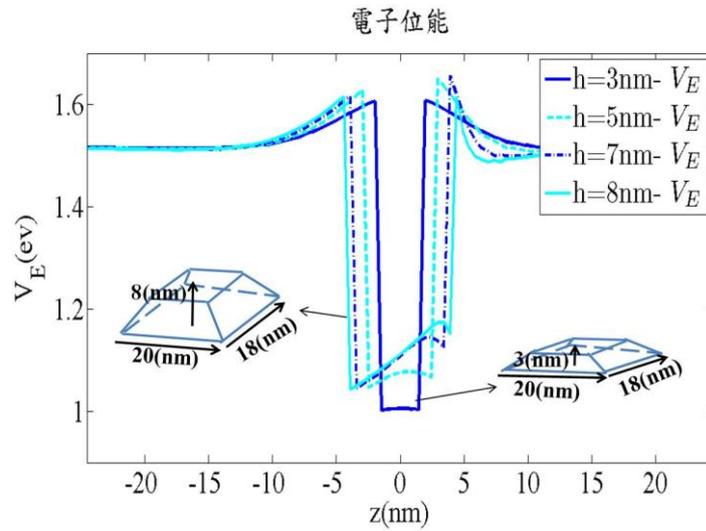
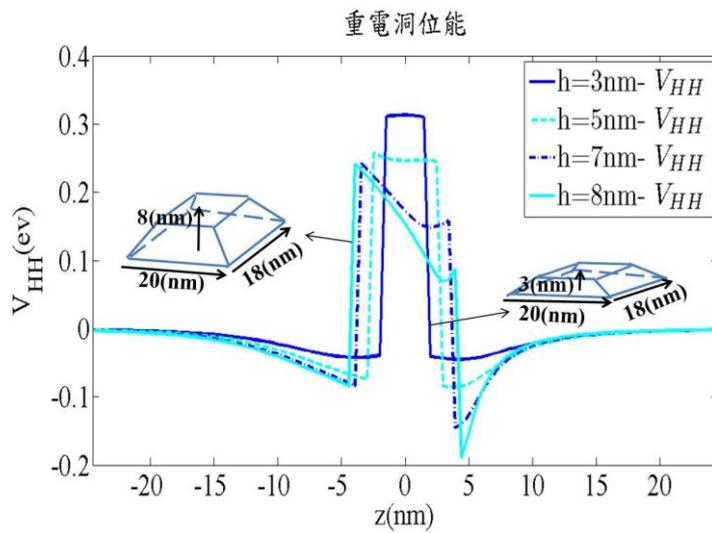


圖 5.29、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm) 且高度在改變的金字塔沿 Z 軸($x,y=0$) 的應變分佈 (a)、體應變分佈圖(b)、雙軸應變分佈圖

(a)



(b)



(c)

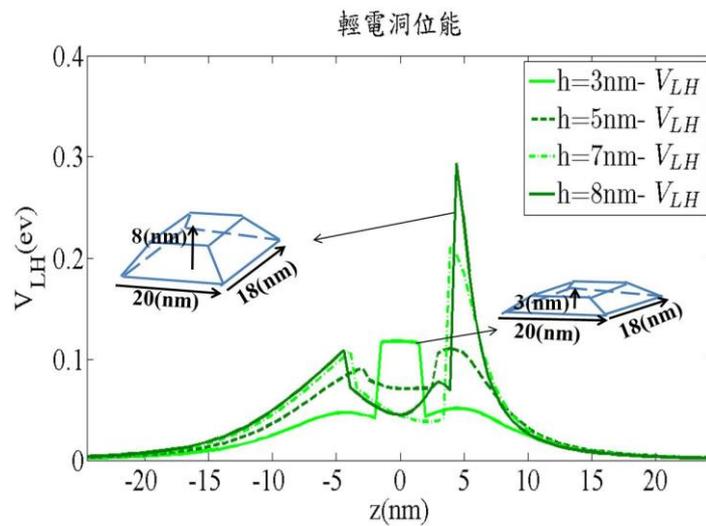


圖 5.30、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm) 且高度在改變的金字塔沿 Z 軸($x,y=0$) 的侷限能分佈 (a)、電子侷限能分佈圖(b)、重電洞侷限能分佈圖(c)、輕電洞侷限能分佈圖

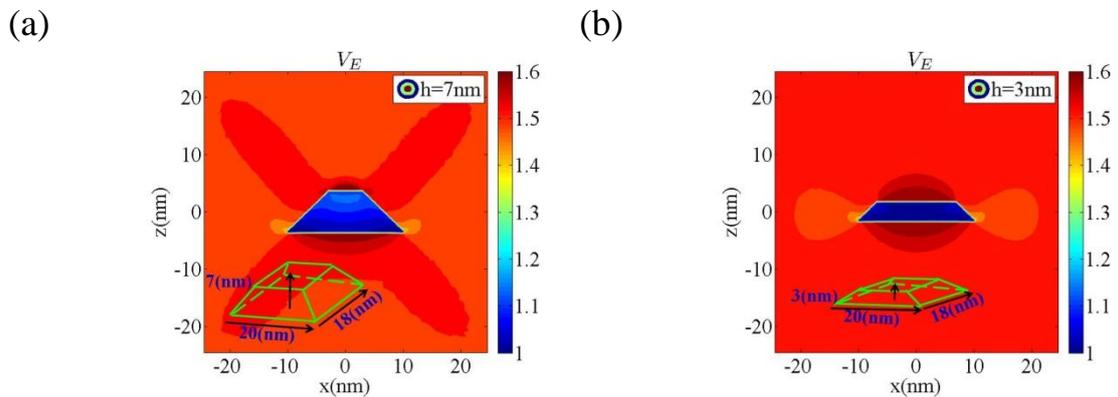


圖 5.31、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XZ 平面($y=0$)的電子侷限位能分佈 (a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)

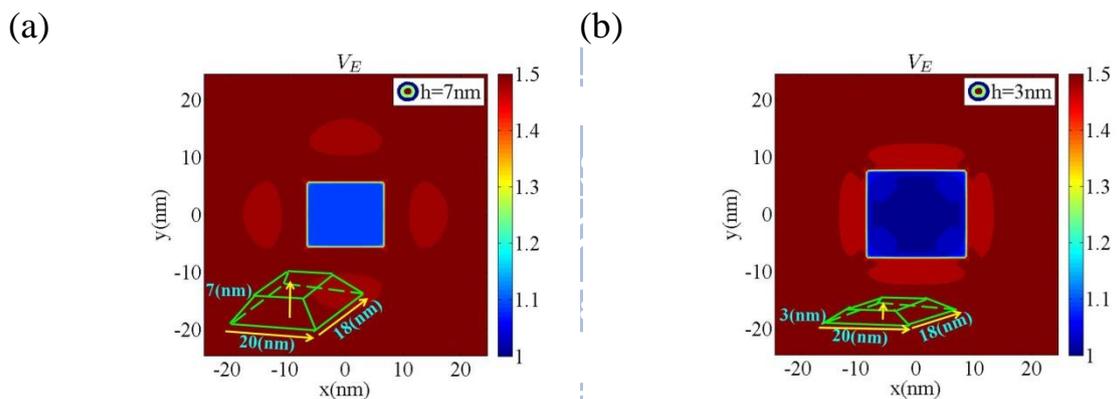


圖 5.32、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XY 平面($z=0$)的電子侷限位能分佈 (a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)

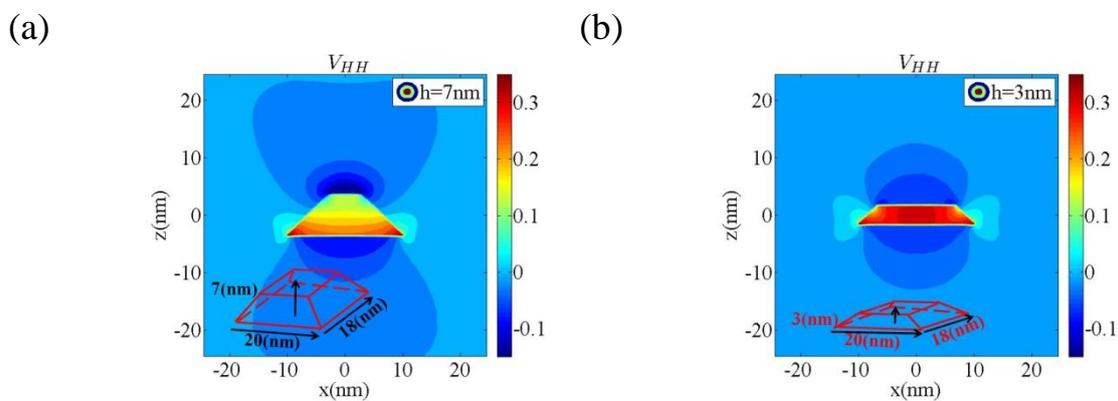


圖 5.33、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XZ 平面($y=0$)的重電洞侷限位能分佈 (a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)

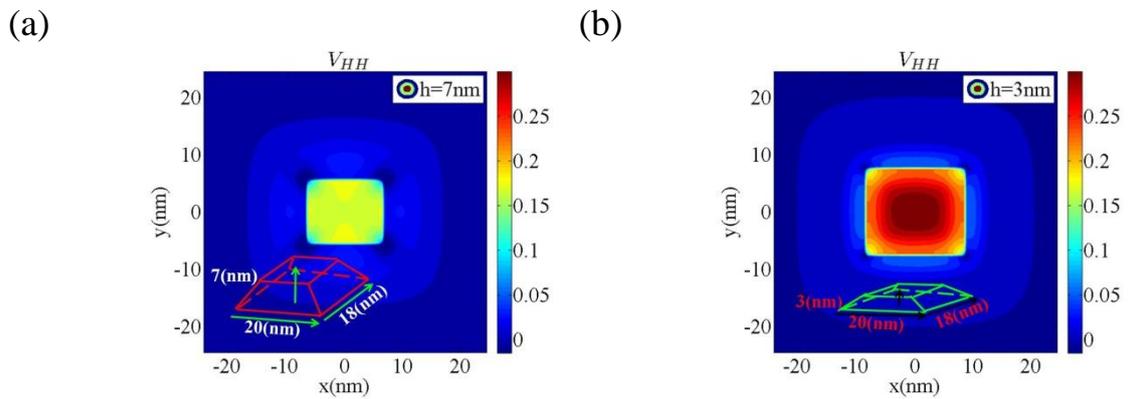


圖 5.34、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XY 平面($z=0$)的重電洞侷限位能分佈 (a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)

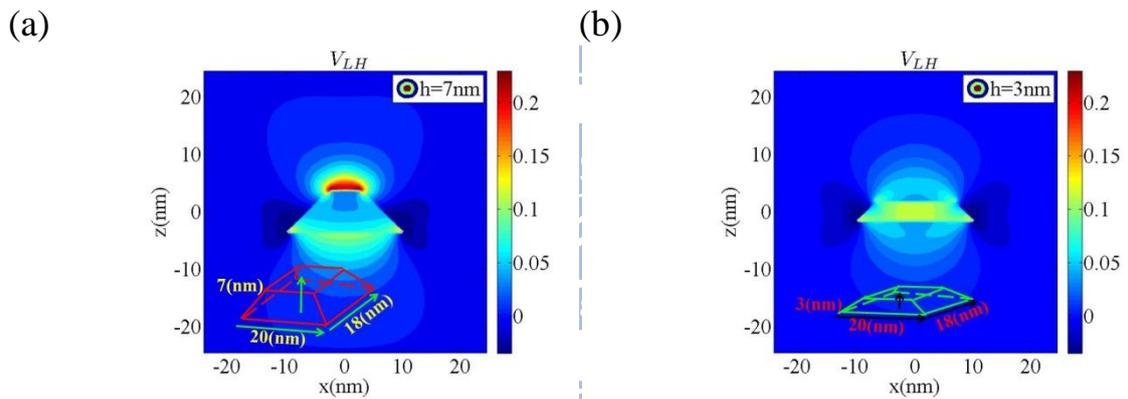


圖 5.35、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XZ 平面($y=0$)的輕電洞侷限位能分佈 (a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)

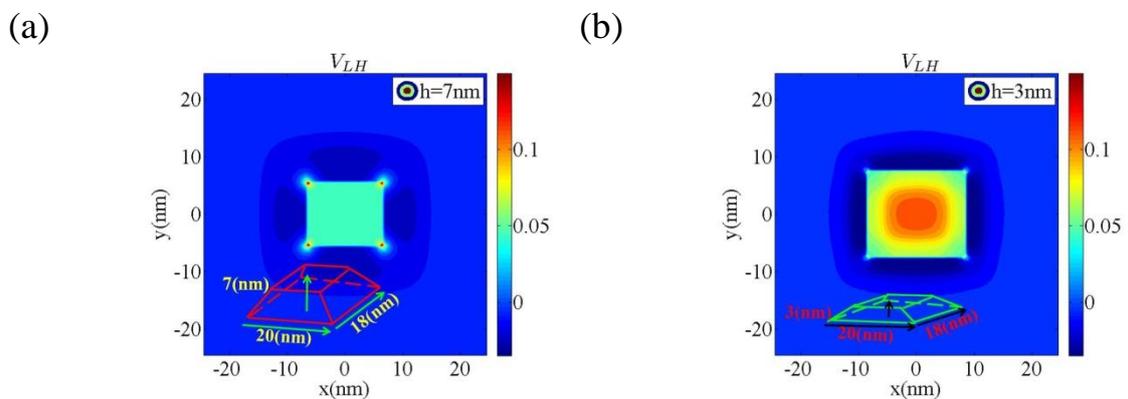


圖 5.36、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)但高度不同的金字塔 XY 平面($z=0$)的輕電洞侷限位能分佈 (a)、高度為 7(nm)(b)、高度為 3(nm)

接下來，我們就截角金字塔一系列的計算，圖 5.37~圖 5.39 為金字塔(b_x 為 12(nm)、 b_y 為 10.8(nm)和高為 5(nm))在 XY、XZ 與 YZ 平面的位移與應變圖。圖 5.40~圖 5.42 為與截角金字塔(b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)和高為 5(nm))的在 XY、XZ 與 YZ 平面的位移與應變圖。

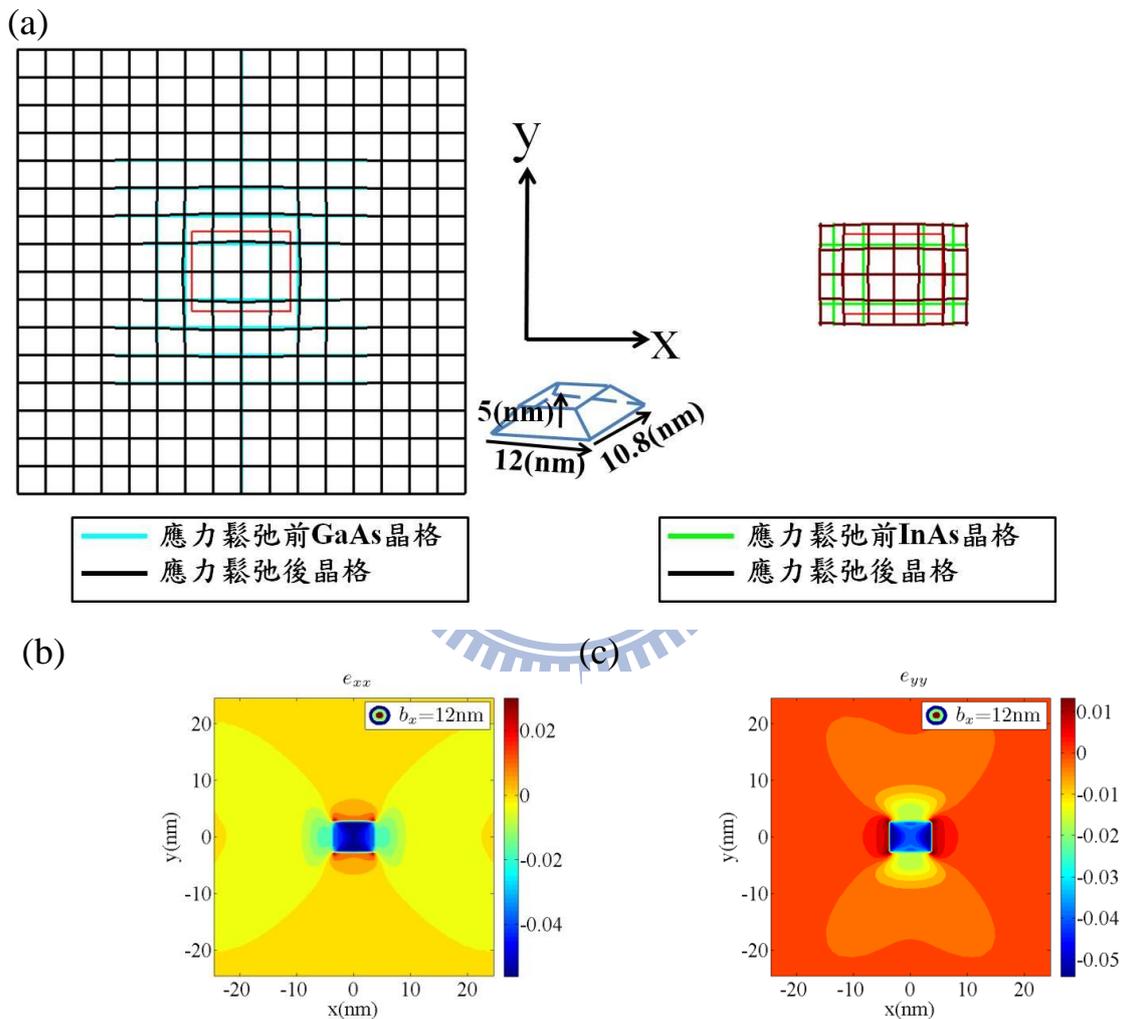


圖 5.37、 b_x 為 12(nm)、 b_y 為 10.8(nm)且高為 5(nm)的金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖

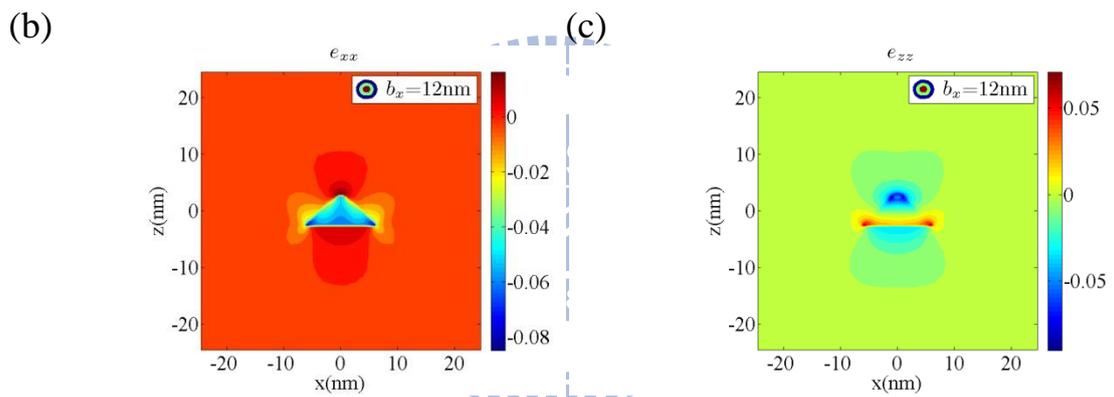
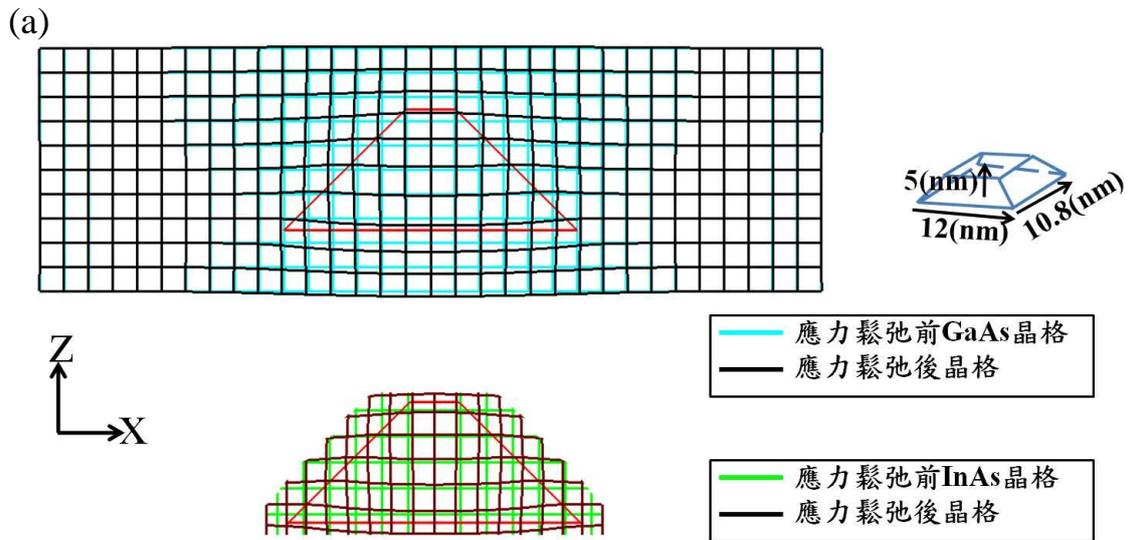


圖 5.38、 b_x 為 12(nm)、 b_y 為 10.8(nm)且高為 5(nm)的金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

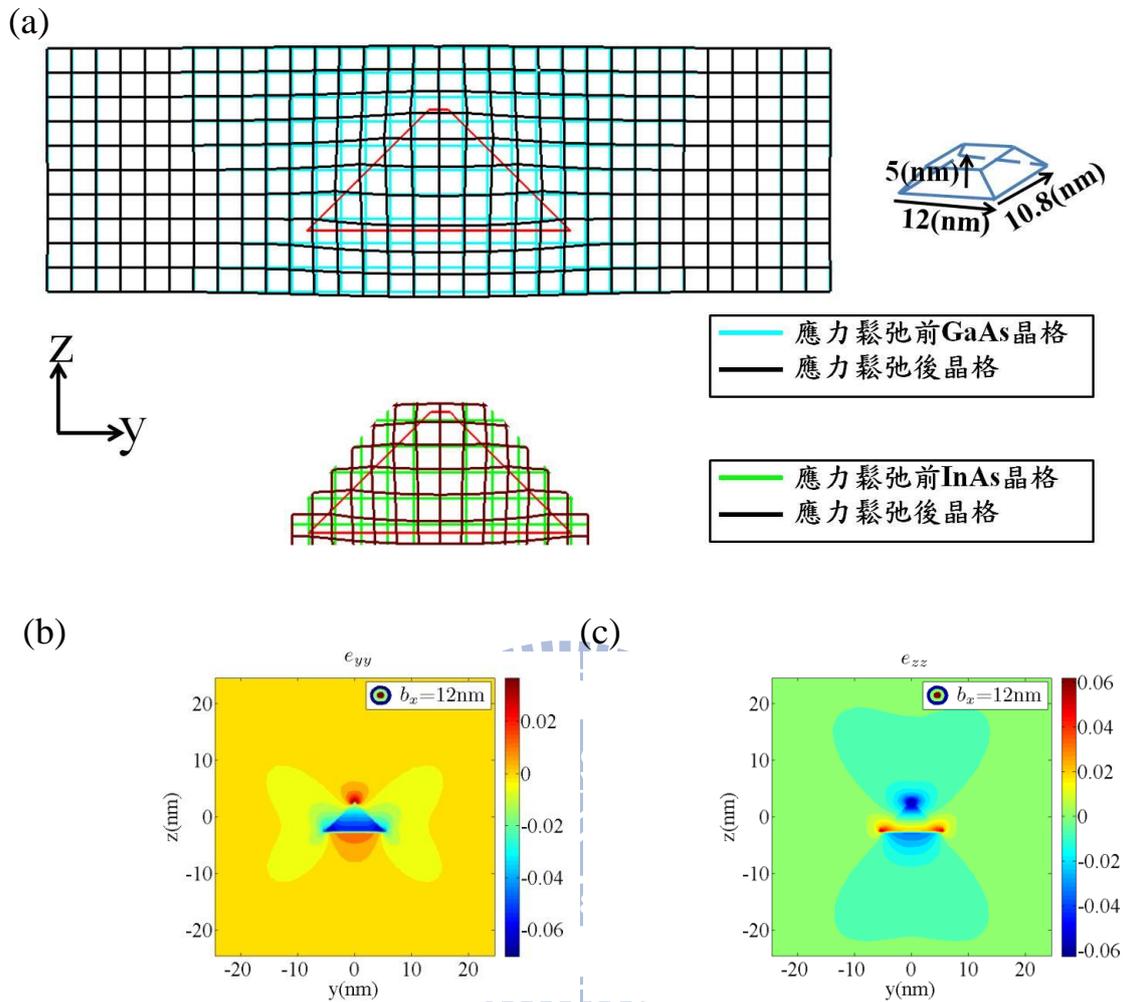


圖 5.39、 b_x 為 12(nm)、 b_y 為 10.8(nm)且高為 5(nm)的金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖

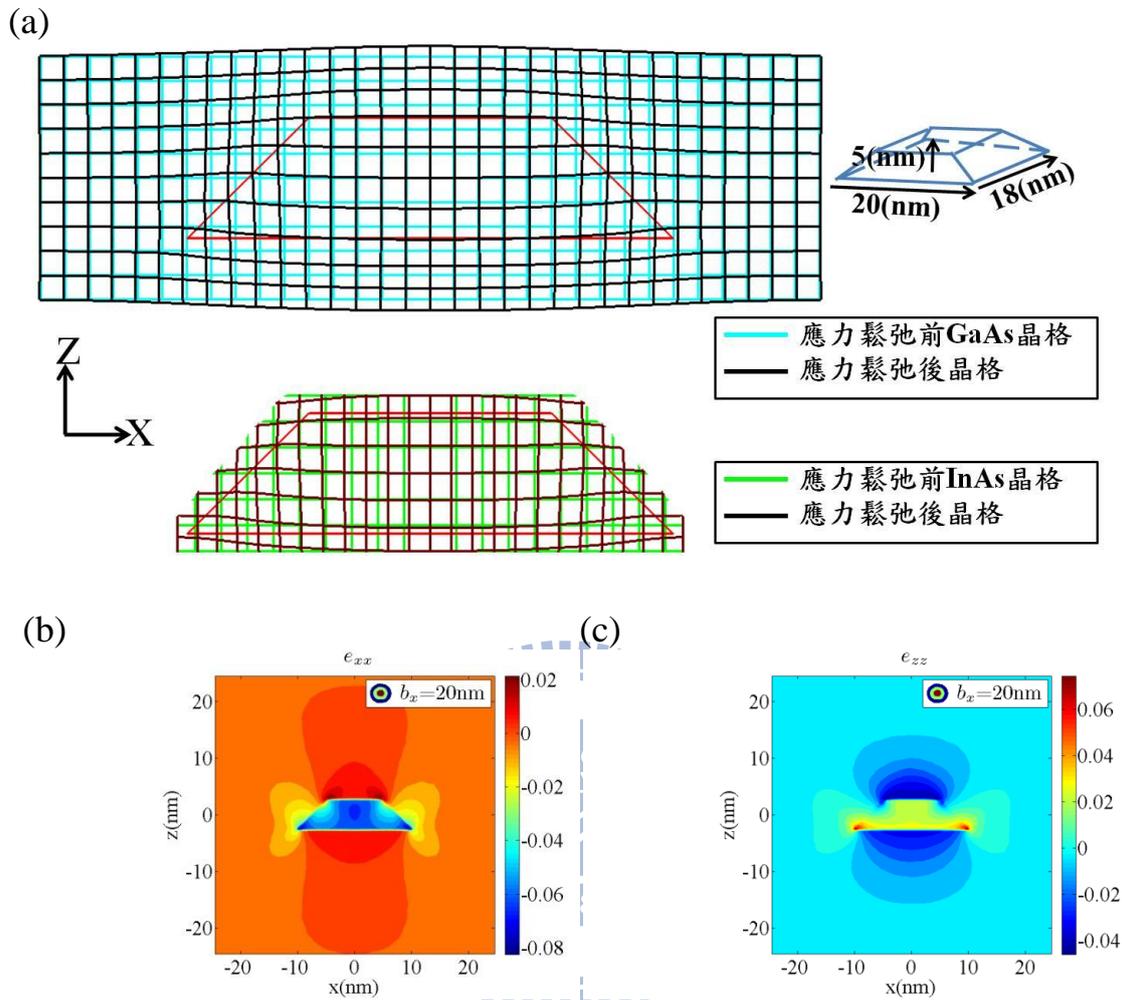


圖 5.40、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 5(nm)的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

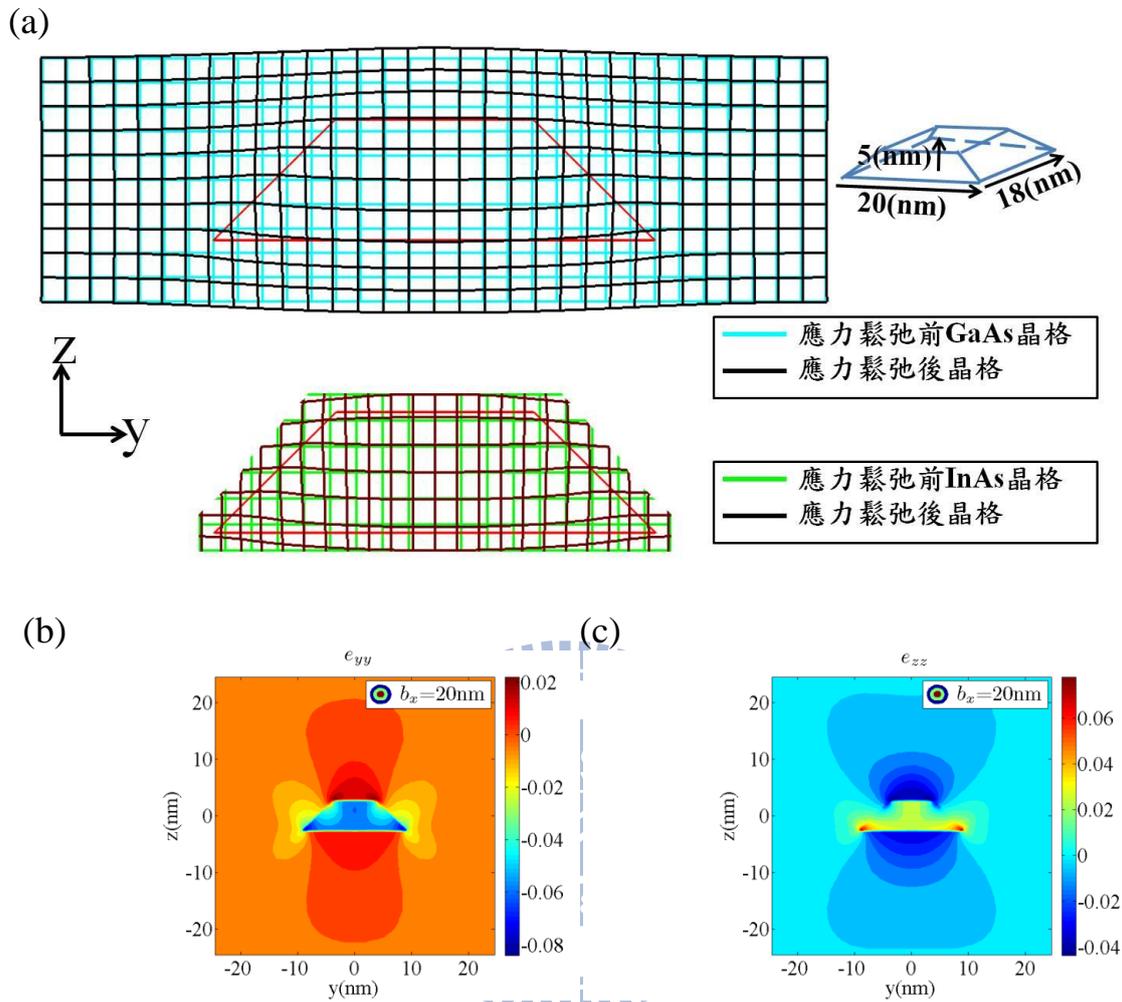


圖 5.41、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)且高為 5(nm)的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖

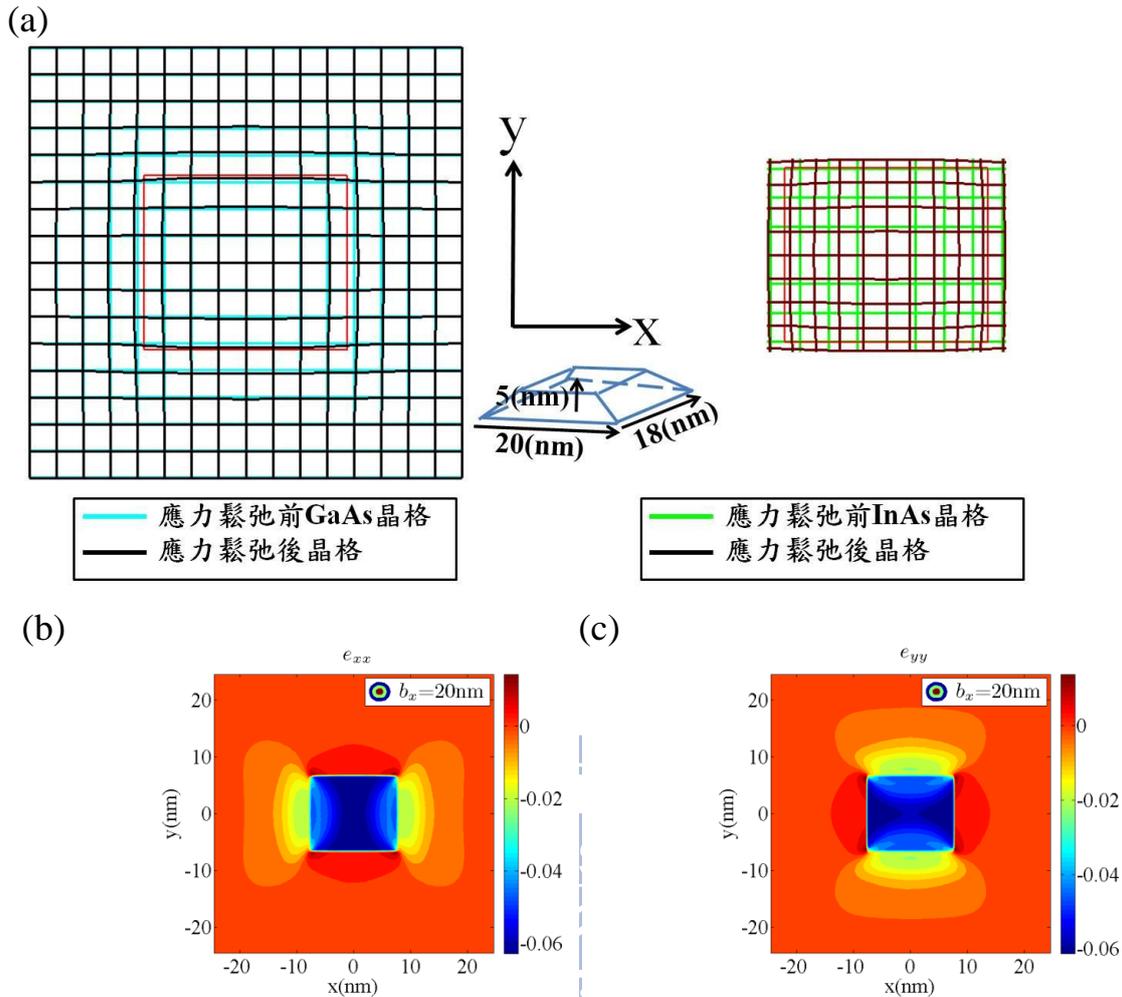


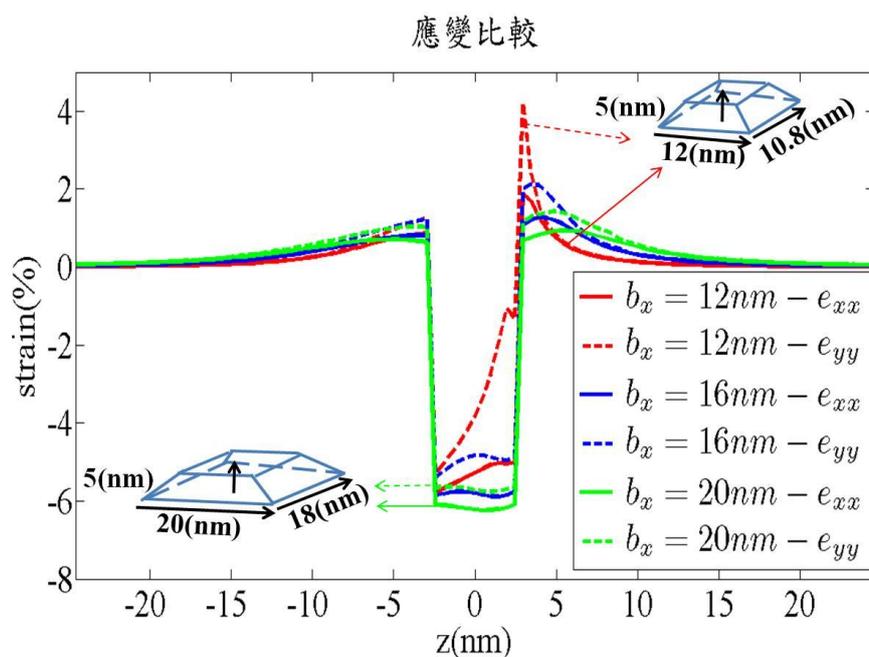
圖 5.42、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm) 且高為 5(nm) 的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖

圖 5.43 與圖 5.44 分別為 e_{xx} 、 e_{zz} 、體應變與雙軸應變沿 Z 軸的分佈，值得注意的是，當高度不變而基底長度變小時，則整體形狀會趨向於金字塔，因此，如同金字塔一般，靠近頂部的地方， e_{xx} 會變大，而 e_{zz} 會變小。也因此影響雙軸應變，導致在靠近外頂部的位位置，輕電洞有著較強的侷限效應（圖 5.45）。以基底較小的金字塔為例，由於位於底部處的介面上有晶格不匹配，因此， e_{xx} 有最大的壓應變，

所以，導致 Z 方向的張應變；並且伴隨著接近頂部介面，截面積的減小， e_{xx} 的壓應變遞減，因此削弱了 e_{zz} 的膨脹。圖 5.46~圖 5.51 為電子電洞在 XZ 與 XY 平面的侷限位能。

(a)



(b)

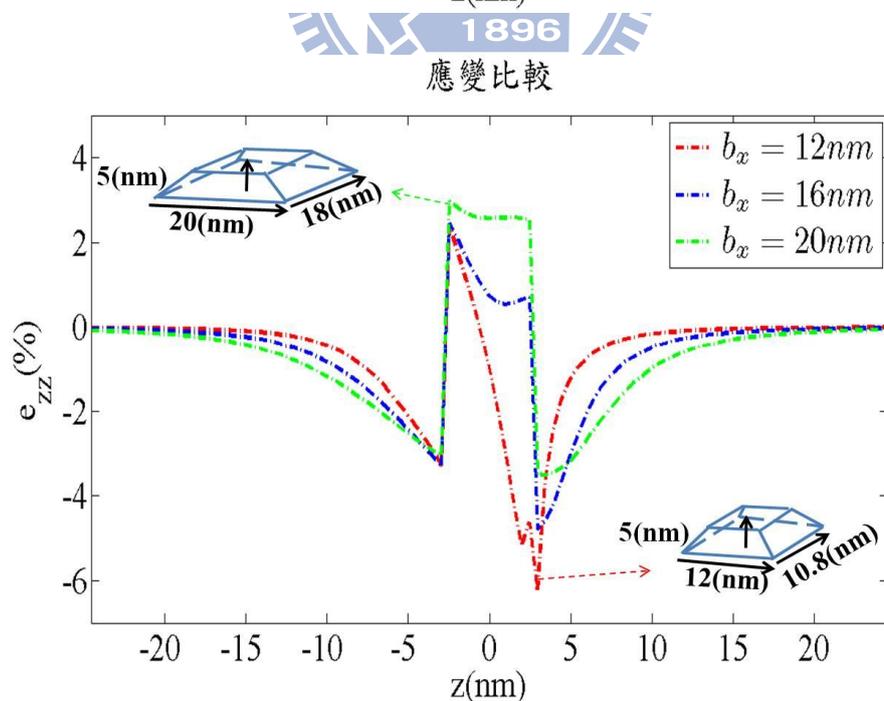


圖 5.43、高度為 5(nm)而 b_x 在改變的截角金字塔沿 Z 軸($x,y=0$)的應變分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 e_{xx} 分佈圖(b)、 e_{zz} 分佈圖

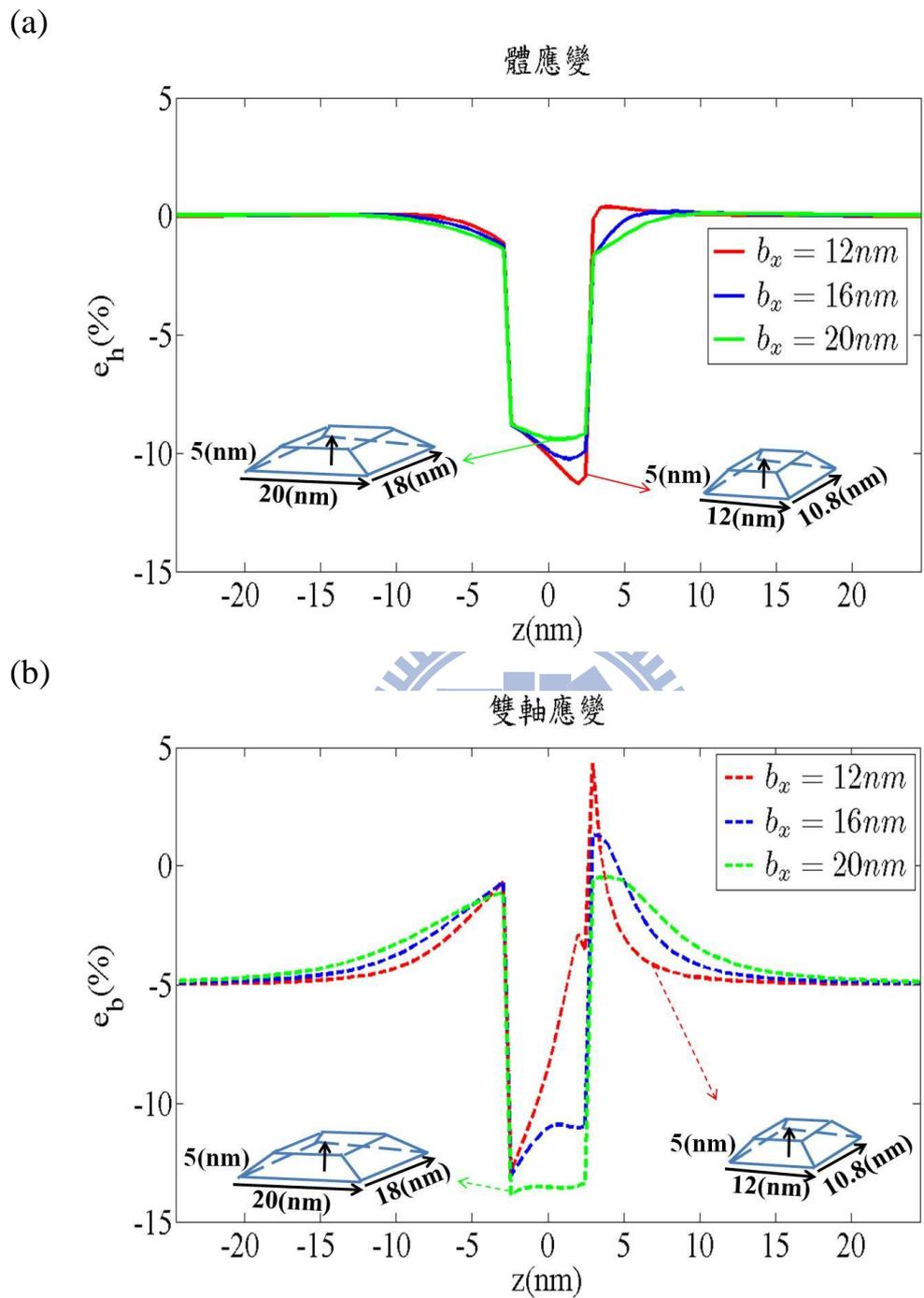
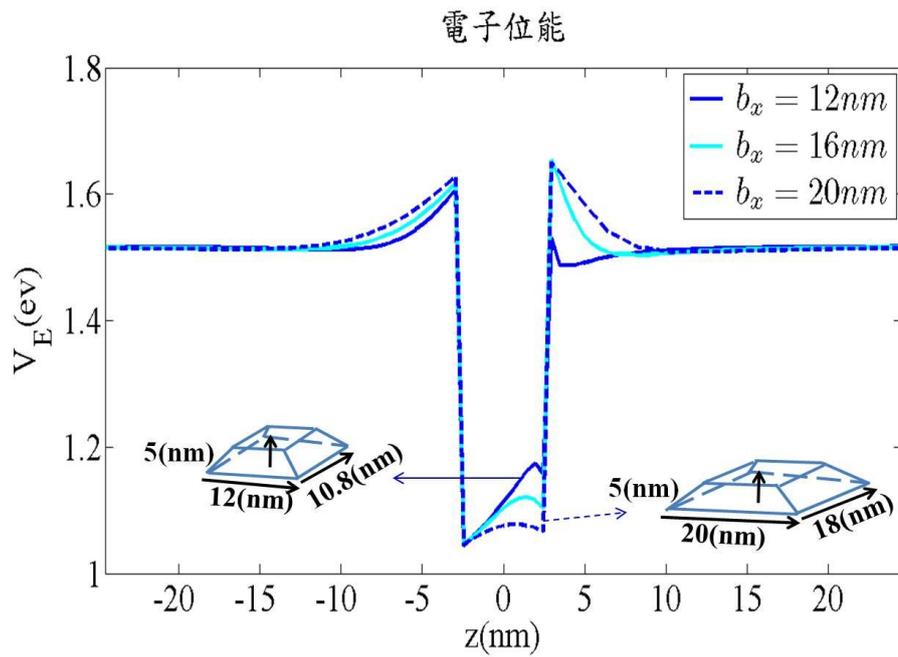


圖 5.44、高度為 5(nm)而 b_x 在改變的截角金字塔沿 Z 軸($x,y=0$)的應變分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、體應變分佈圖(b)、雙軸應變分佈圖

(a)



(b)

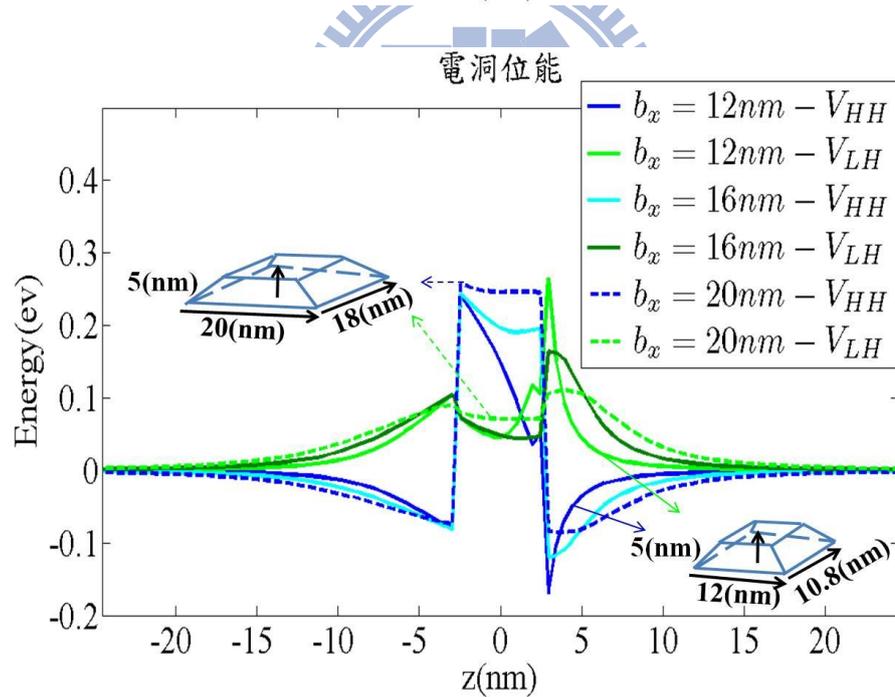


圖 5.45、高度為 5(nm)而 b_x 在改變的截角金字塔沿 Z 軸($x,y=0$)的侷限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、電子侷限位能分佈圖(b)、電洞侷限位能分佈圖

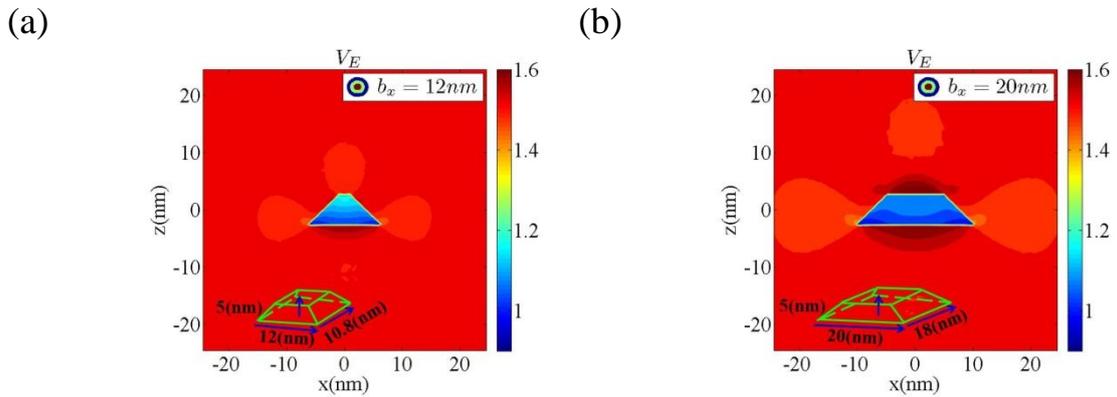


圖 5.46、高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XZ 平面($y=0$)的電子偏限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)

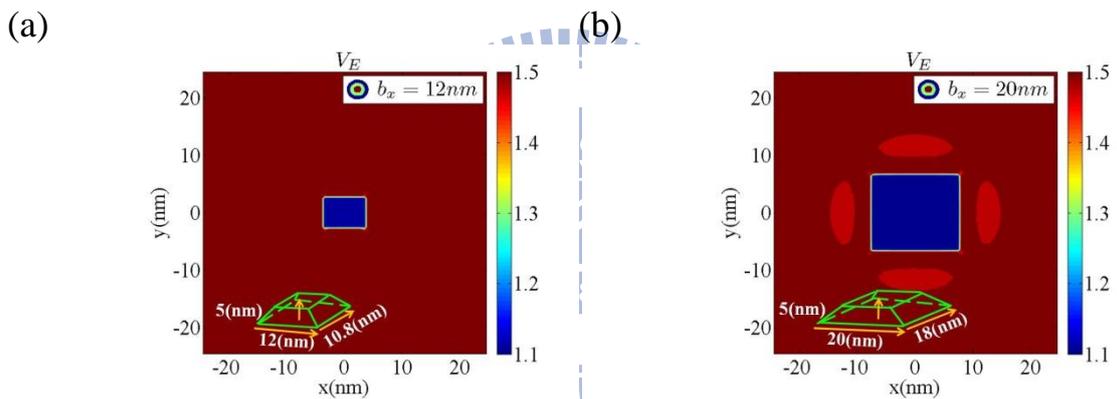


圖 5.47、高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XY 平面($z=0$)的電子偏限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)

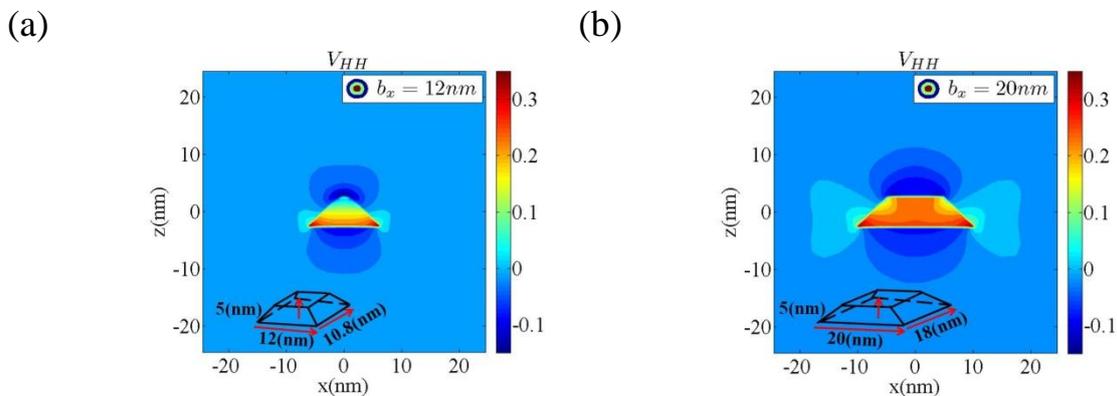


圖 5.48、高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XZ 平面($y=0$)的重電洞偏限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)

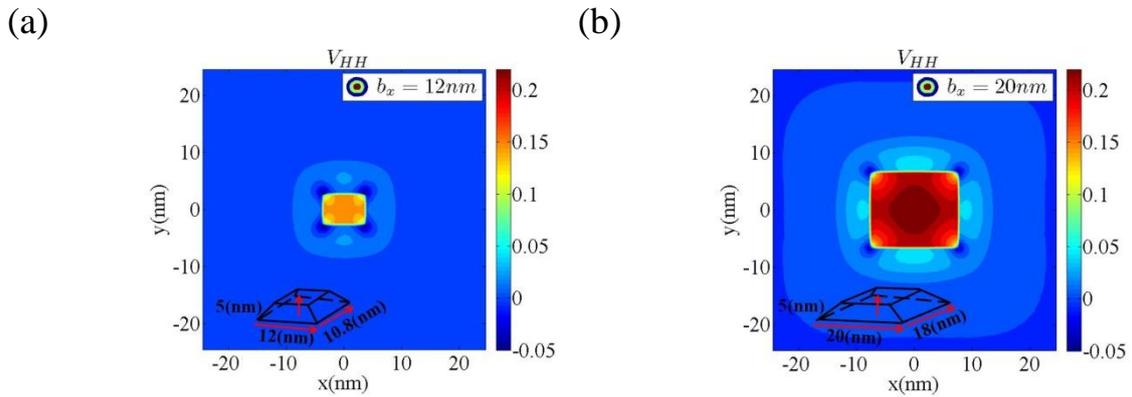


圖 5.49、高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XY 平面($y=0$)的重電洞侷限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)

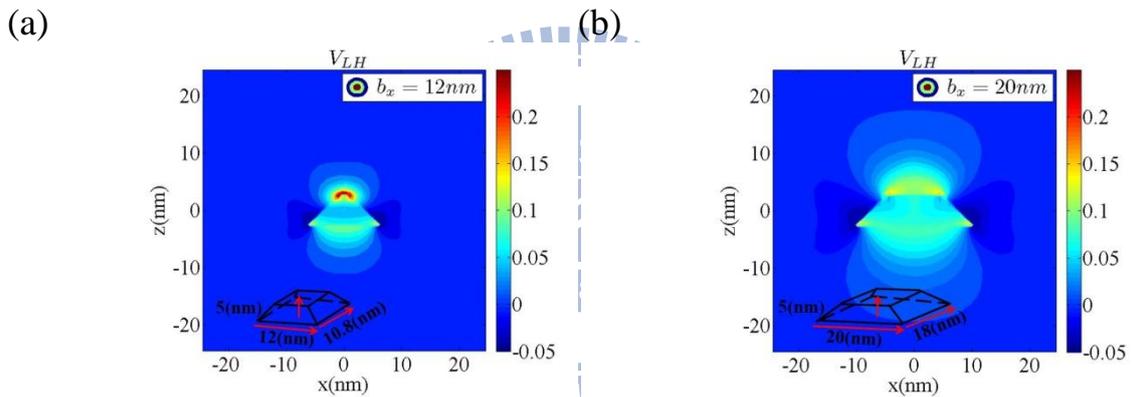


圖 5.50、高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XZ 平面($y=0$)的輕電洞侷限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)

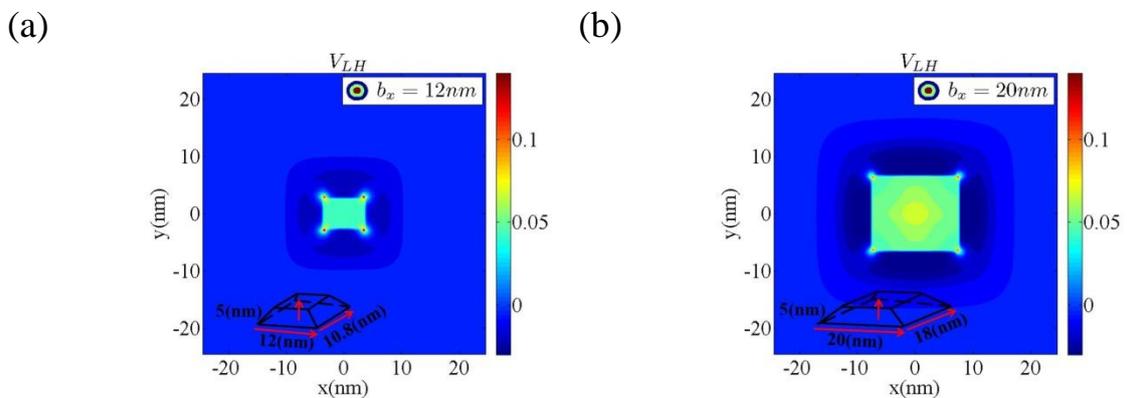


圖 5.51、高度為 5(nm)而 b_x 不同的截角金字塔 XY 平面($y=0$)的輕電洞侷限位能分佈，其中 $b_y=0.9b_x$ (a)、 b_x 為 12(nm)(b)、 b_x 為 20(nm)

5.4 XY 對稱破壞下量子盒與截角金字塔形量子點系列的比較

在本節裡，我們針對量子盒與截角金字塔形量子點去做 XY 的對稱破壞，藉此了解對侷限位能的影響。

圖 5.53 為 a_x 為 20(nm) 和 h 為 5(nm) 而 a_y 在改變的量子盒，其中心點應變值的比較圖，可以發現當 a_y 變小時，則 e_{yy} 的值會變大，而 e_{xx} 和 e_{zz} 的值會變小。由前文知道，應力的釋放會在短軸上，而當 a_y 變小時，則量子盒在 X 方向為最長軸，而在 Z 方向為短軸，Y 方向則介於其中，因此，可以預期， e_{xx} 的值最小， e_{zz} 的值最大。原本 a_x 與 a_y 相同時， e_{xx} 沿 X 軸的分佈與 e_{yy} 沿 Y 軸的分佈會一樣，伴隨著 a_x 與 a_y 的相異，則 e_{xx} 沿 X 軸的分佈與 e_{yy} 沿 Y 軸的分佈將會變得不一樣(圖 5.52)， e_{xx} 在靠近量子點中心處很大一部分幾乎維持在初始應變變的值，而 e_{yy} 相較於 e_{xx} 則有較明顯的鬆弛。

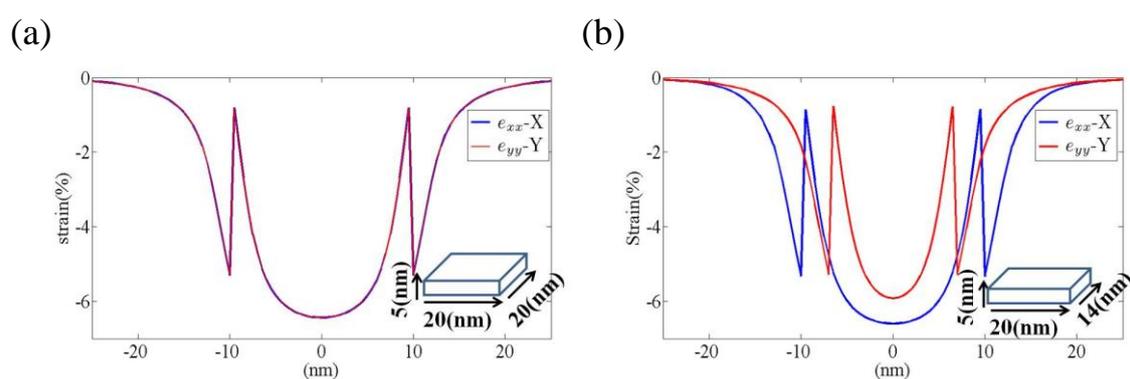


圖 5.52、 a_x 為 20(nm) 和 a_z 為 4(nm)，而 a_y 在改變的量子盒， e_{xx} 沿 X 軸與 e_{yy} 沿 Y 軸的比較

(a)、 a_y 為 20(nm) (b)、 a_y 為 14(nm)

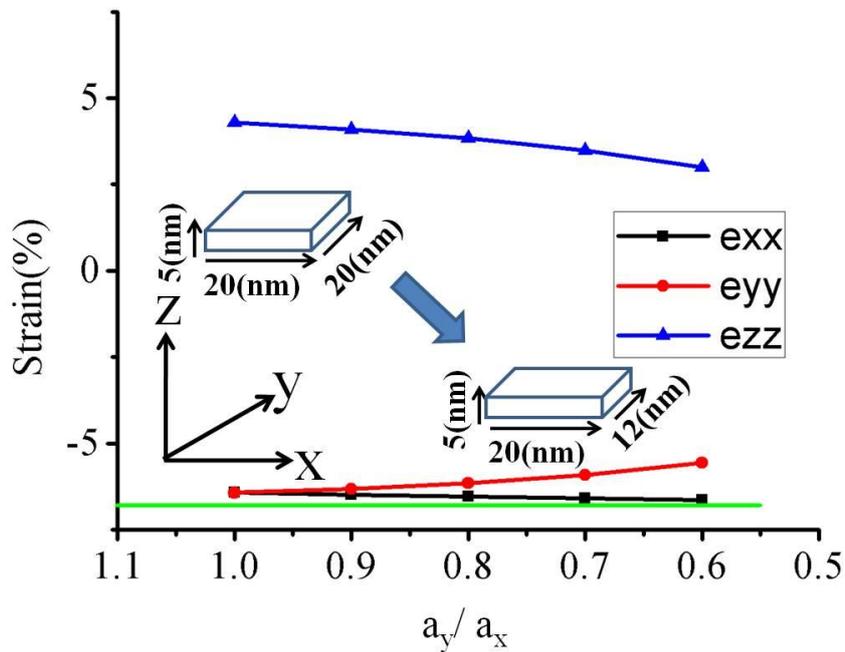


圖 5.53、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，其中心點(0,0,0)應變值的比較圖

圖 5.54~圖 5.56 分為 $a_x=20(\text{nm})$ 、 $a_y=18(\text{nm})$ 和 $a_z=5(\text{nm})$ 的量子盒在 XZ、YZ 與 XY 面的位移與應變圖；而圖 5.57~圖 5.59 分為 $a_x=20(\text{nm})$ 、 $a_y=14(\text{nm})$ 和 $a_z=5(\text{nm})$ 的量子盒在 XZ、YZ 與 XY 面的位移與應變圖。

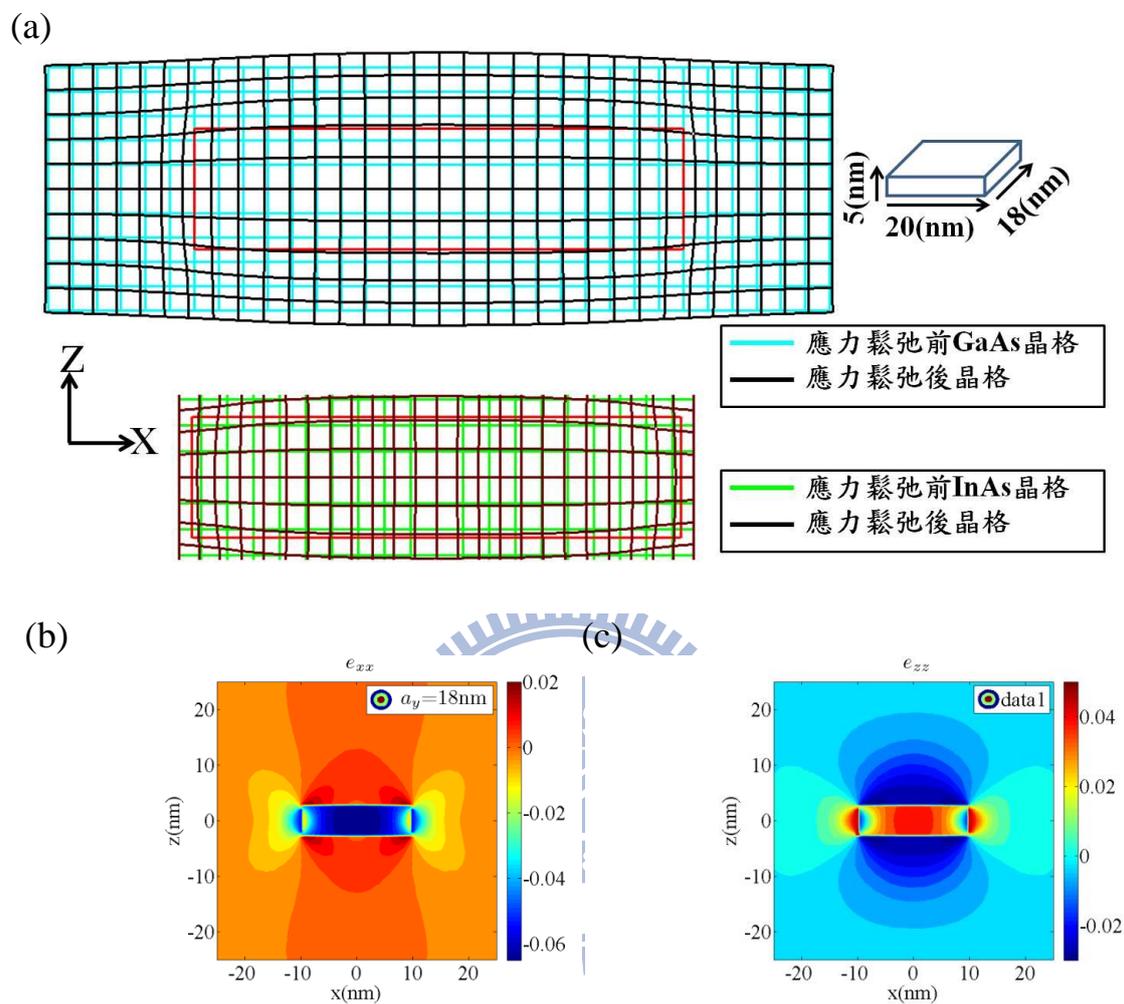


圖 5.54、 a_x 為 20(nm)、 a_y 為 18(nm)和 a_z 為 5(nm)的量子盒應變與位移對照圖
(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

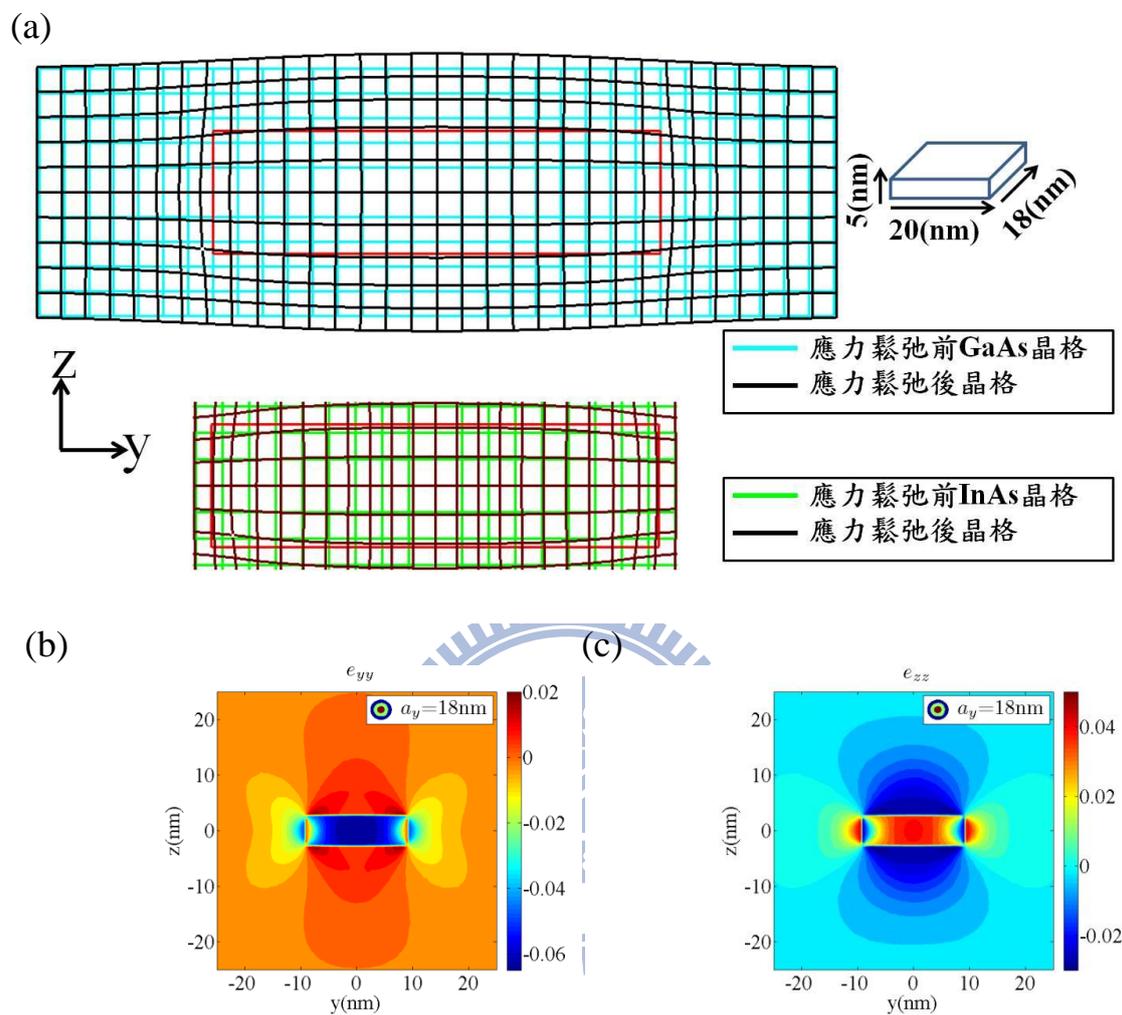
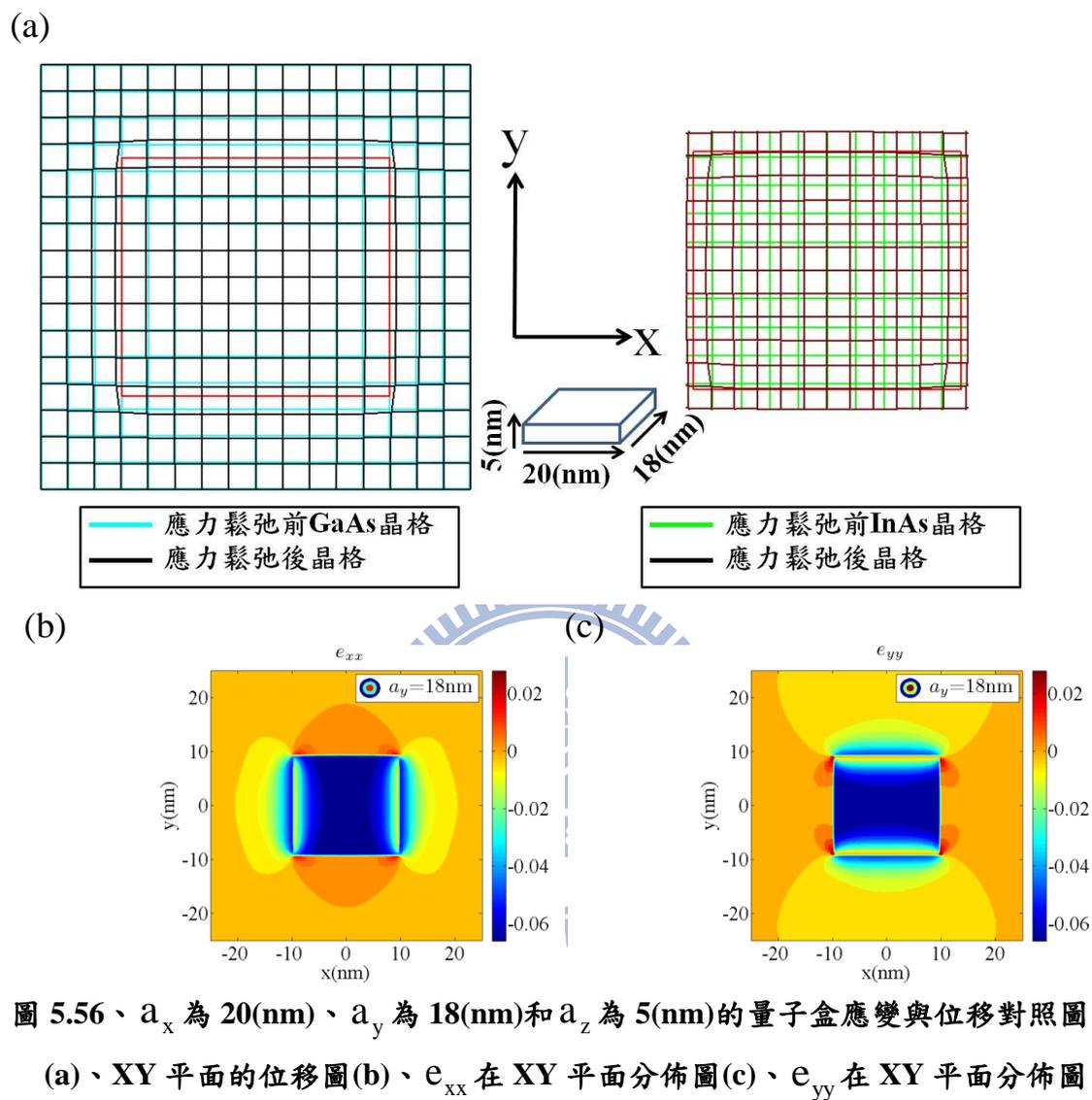


圖 5.55、 a_x 為 20(nm)、 a_y 為 18(nm)和 a_z 為 5(nm)的量子盒應變與位移對照圖
(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖



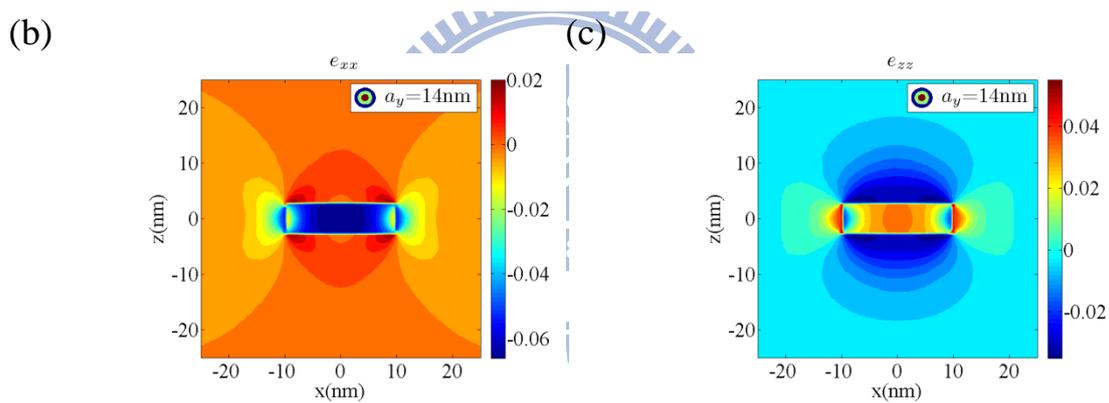
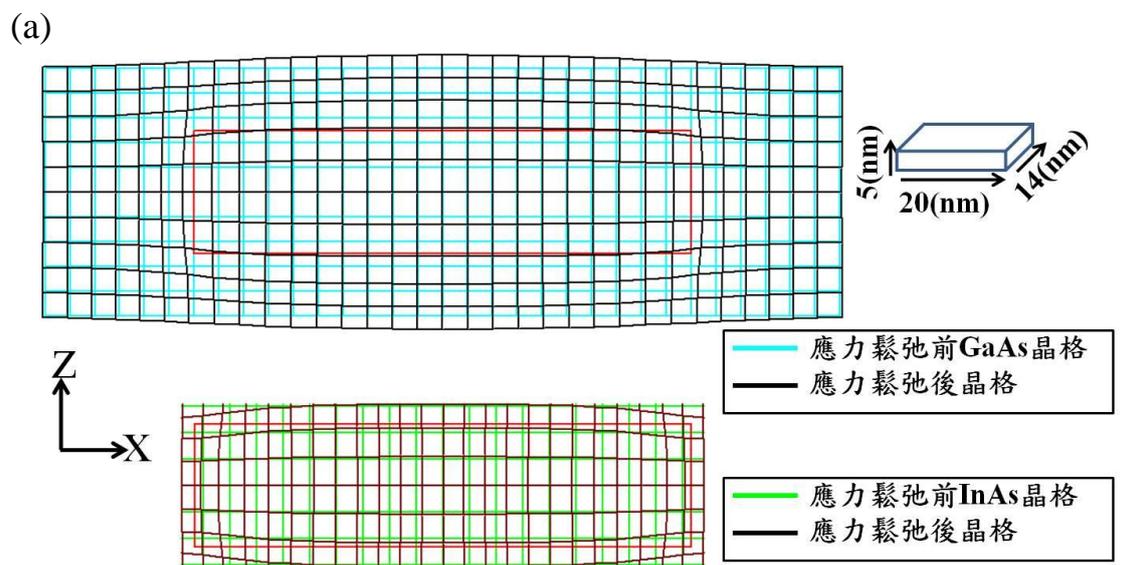


圖 5.57、 a_x 為 20(nm)、 a_y 為 14(nm)和 a_z 為 5(nm)的量子盒應變與位移對照圖
(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

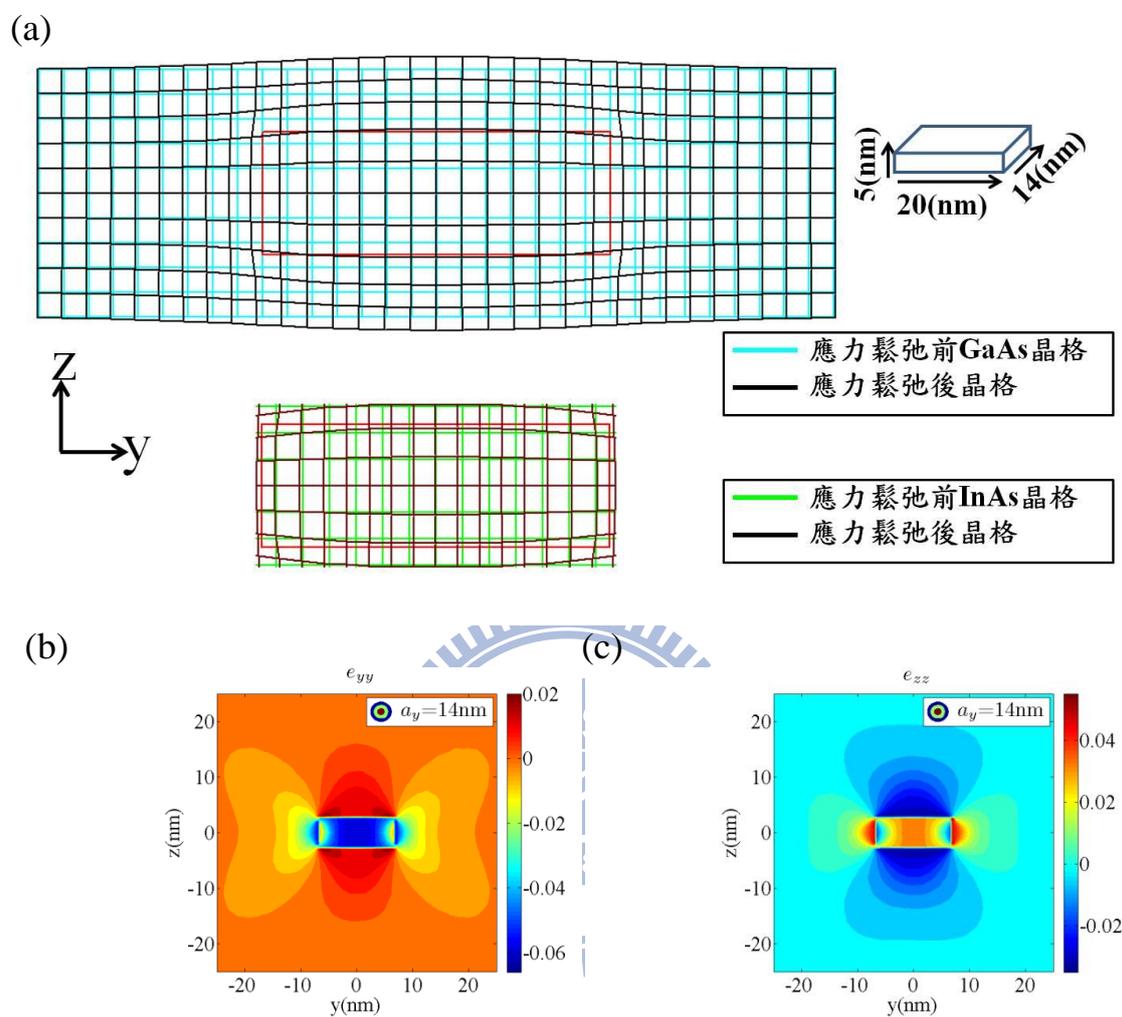


圖 5.58、 a_x 為 20(nm)、 a_y 為 14(nm)和 a_z 為 5(nm)的量子盒應變與位移對照圖
 (a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖

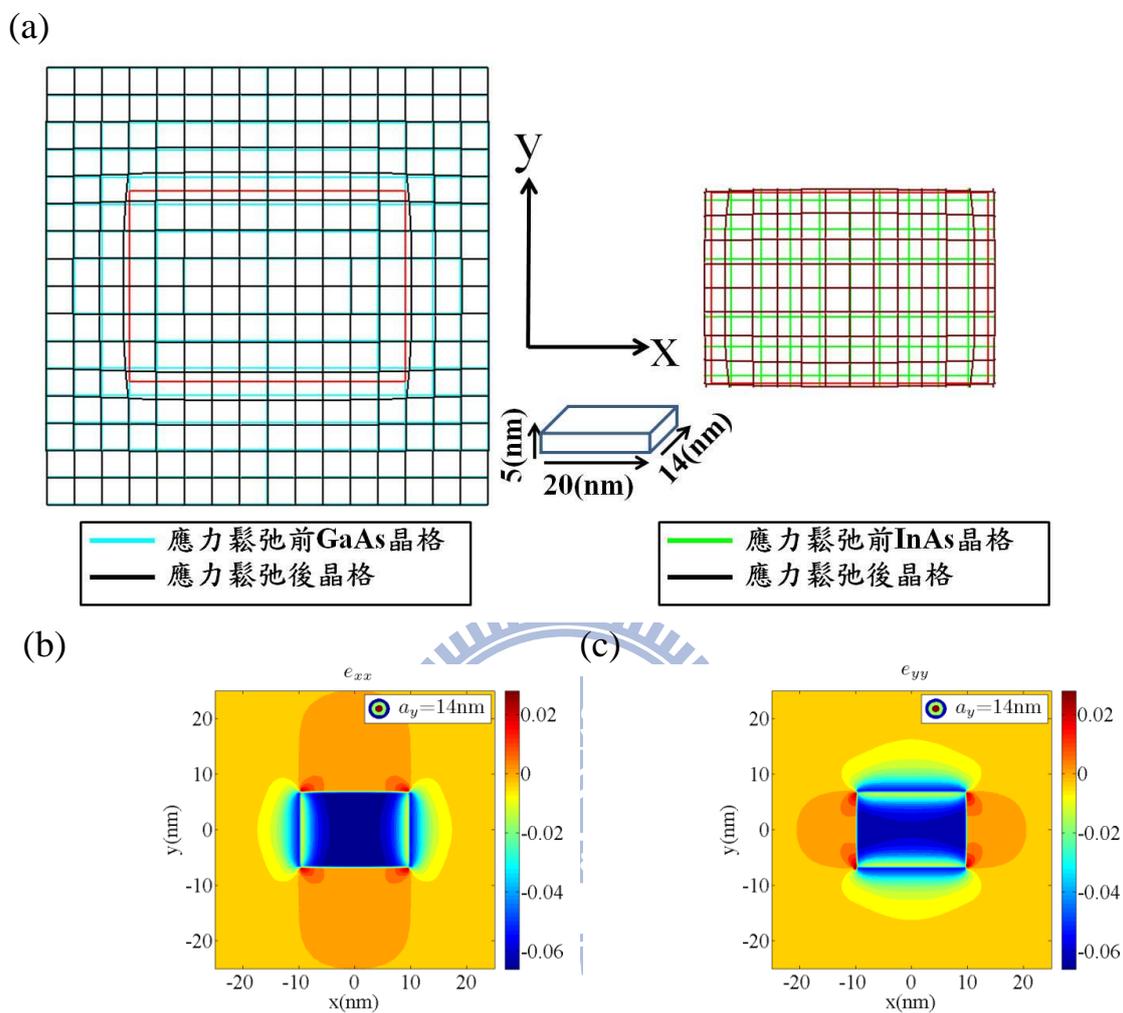
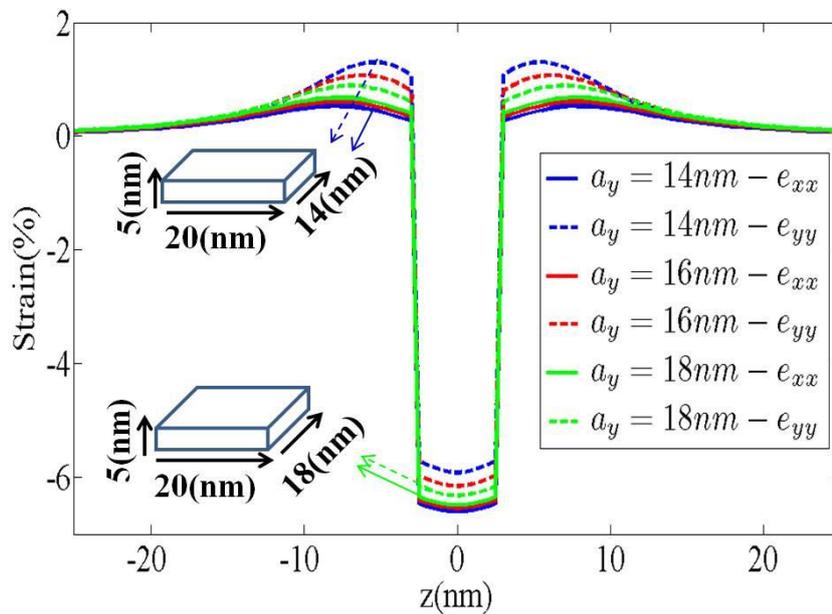


圖 5.59、 a_x 為 20(nm)、 a_y 為 14(nm)和 a_z 為 5(nm)的量子盒應變與位移對照圖
 (a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖

圖 5.60 與圖 5.61 分別為 e_{xx} 、 e_{yy} 、 e_{zz} 、體應變與雙軸應變沿 Z 軸的分佈，由於 XY 的對稱破壞，連帶影響三個正應變的改變，因此，對體應變與雙軸應變造成一些影響。

(a)



(b)

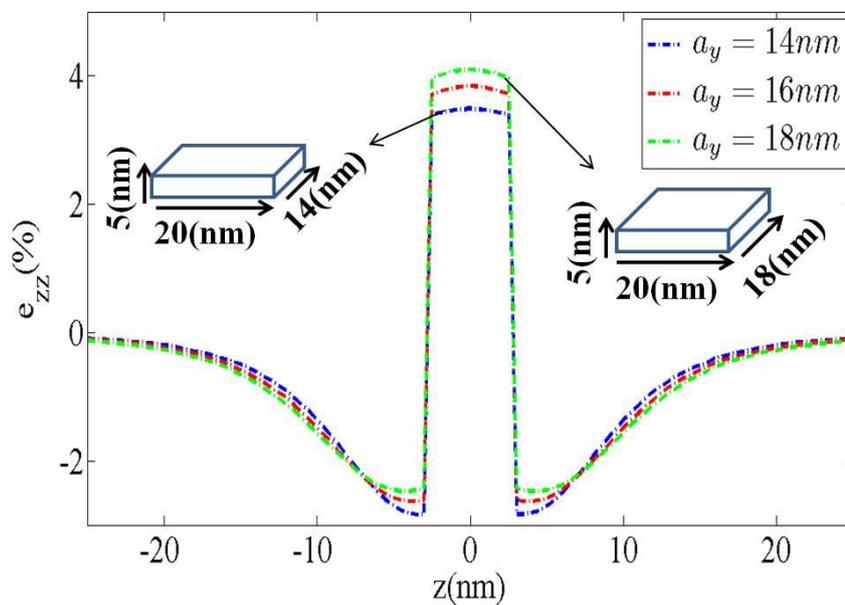


圖 5.60、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒沿 Z 軸的(x,y=0) 應變分佈

(a)、 e_{xx} 與 e_{yy} 分佈圖(b)、 e_{zz} 分佈圖

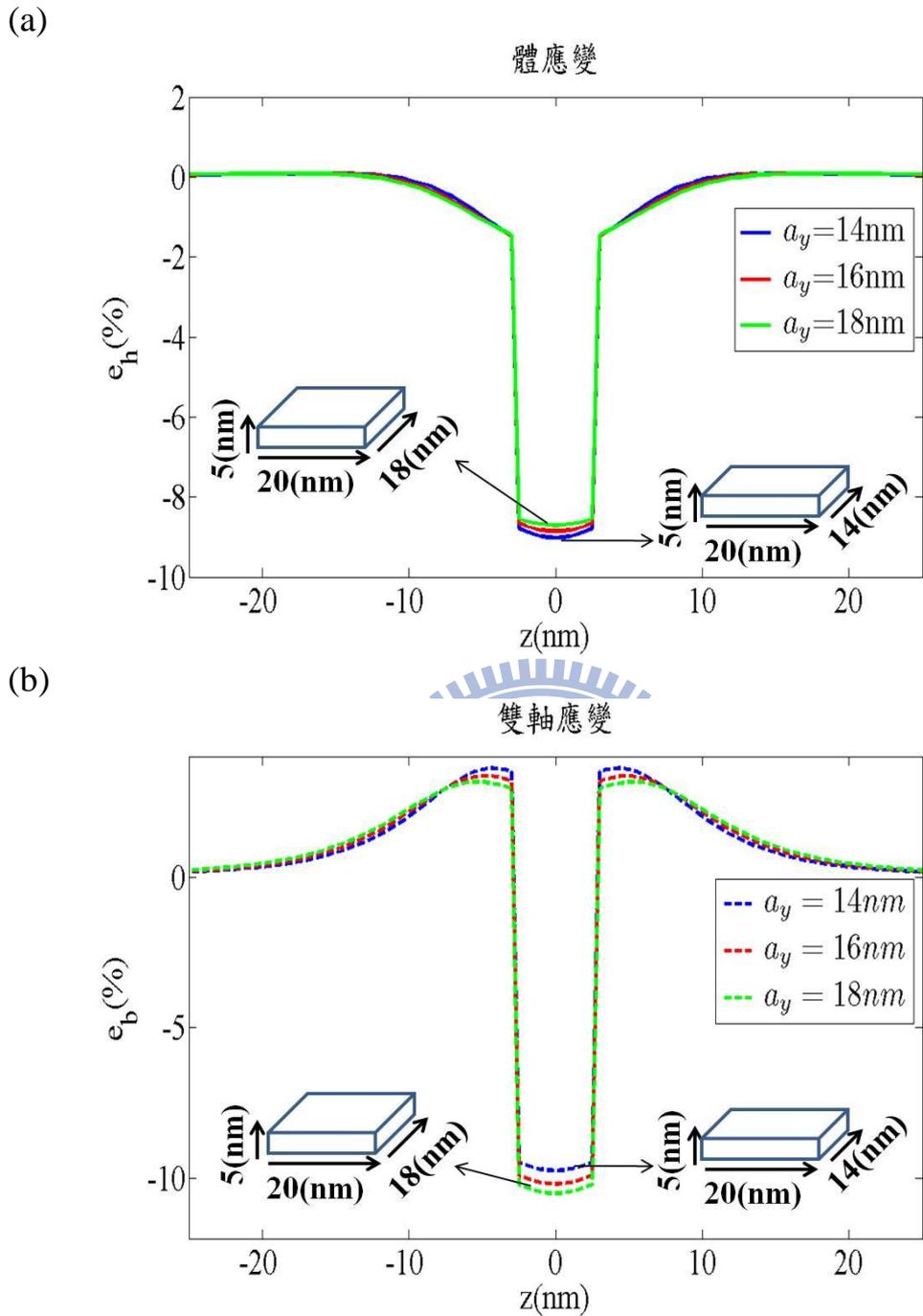


圖 5.61、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒沿 Z 軸($x,y=0$)的應變分布

(a)、體應變分佈圖 (b)、雙軸應變分佈圖

由圖 5.62 知，由於在量子點內雙軸應變的絕對值的變小，因此，與自旋軌道能帶的耦合效應減弱，因此，四能帶與六能帶的輕電洞侷限能差的差值有變小的趨勢。

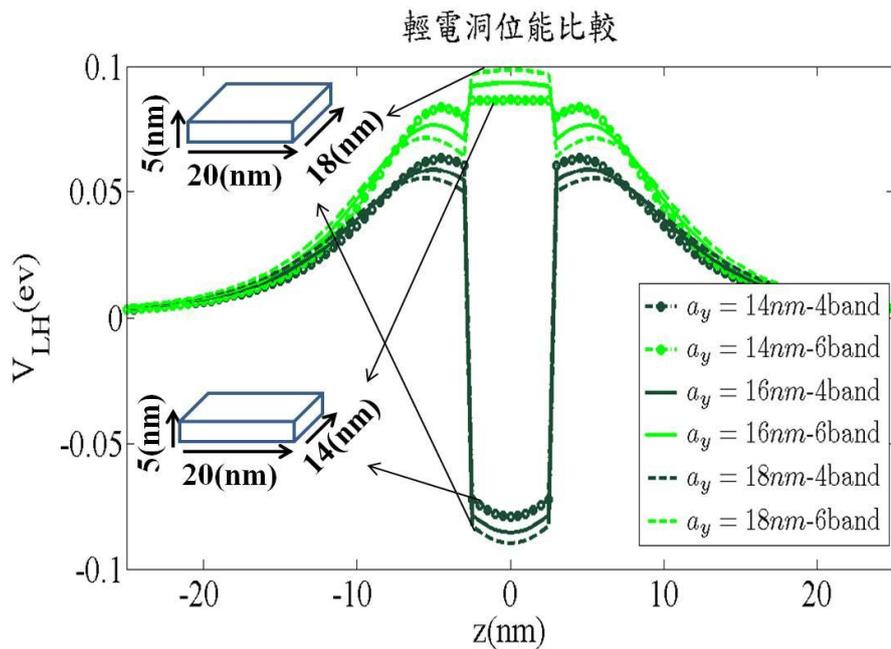
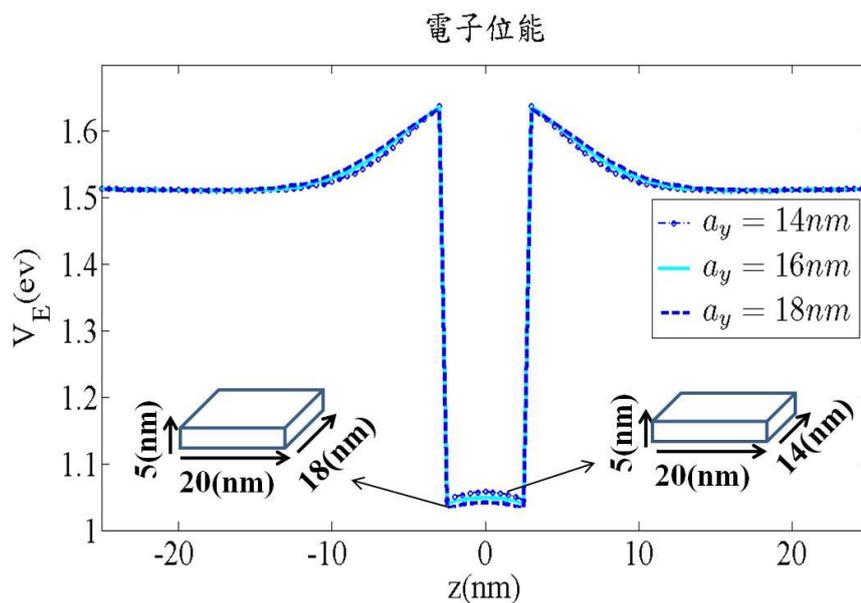


圖 5.62、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，考慮四能帶與六能帶的輕電洞位能比較圖，沿 Z 軸($x,y=0$)

而圖 5.63 ~ 5.67 為侷限位能在 XY 平面的分佈，伴隨著 a_y 越來越小，不論是輕重電洞在量子點內的侷限強度也會伴隨著變弱，不過，當 a_y 越來越小，由圖 5.67 可知輕電洞在量子點上下邊界的外側的侷限力會漸趨變強，尤其是沿長軸的上下兩側。

(a)



(b)

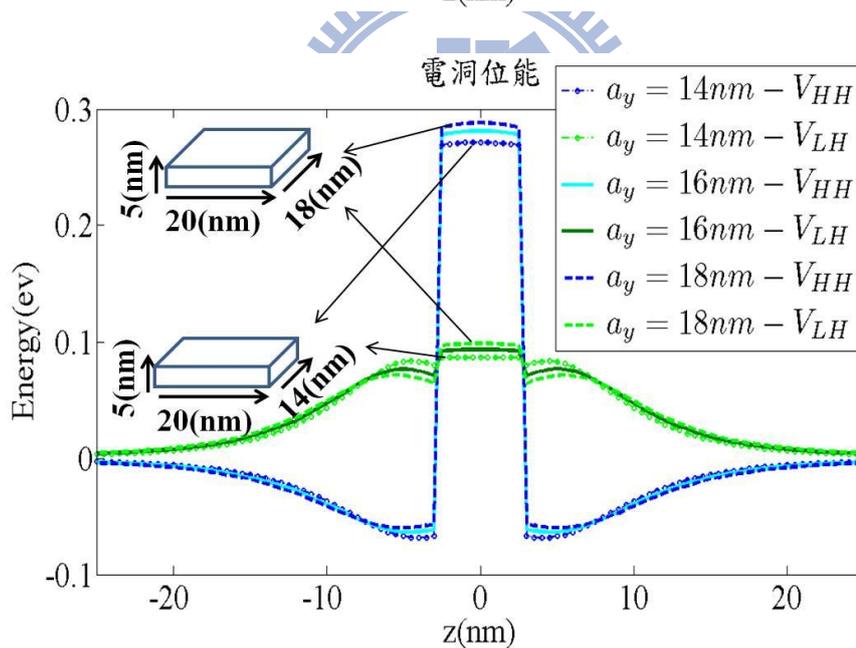


圖 5.63、 a_x 為 20 nm 和 a_z 為 5 nm ，而 a_y 在改變的量子盒沿 Z 軸 ($x,y=0$) 的
局限位能

(a)、電子局限位能分佈圖 (b)、電洞局限位能分佈圖

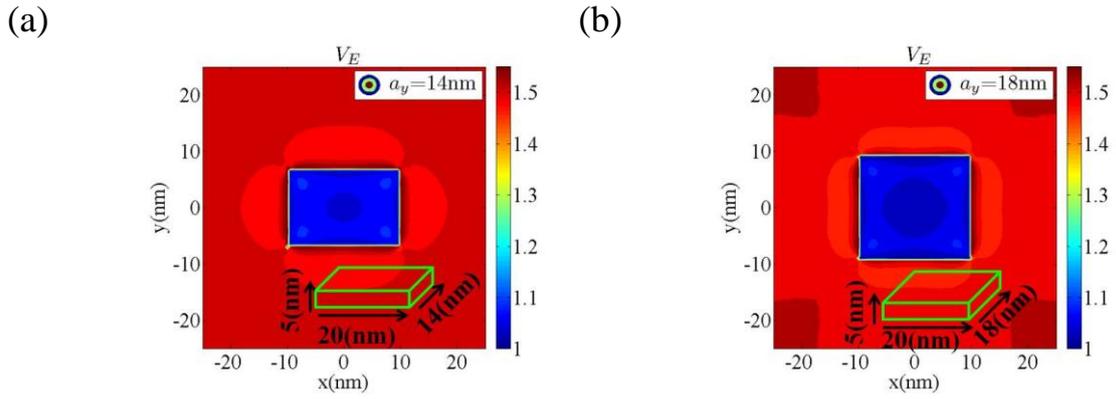


圖 5.64、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，XY 平面($z=0$)的
電子侷限位能分佈
(a)、 a_y 為 14(nm) (b)、 a_y 為 18(nm)

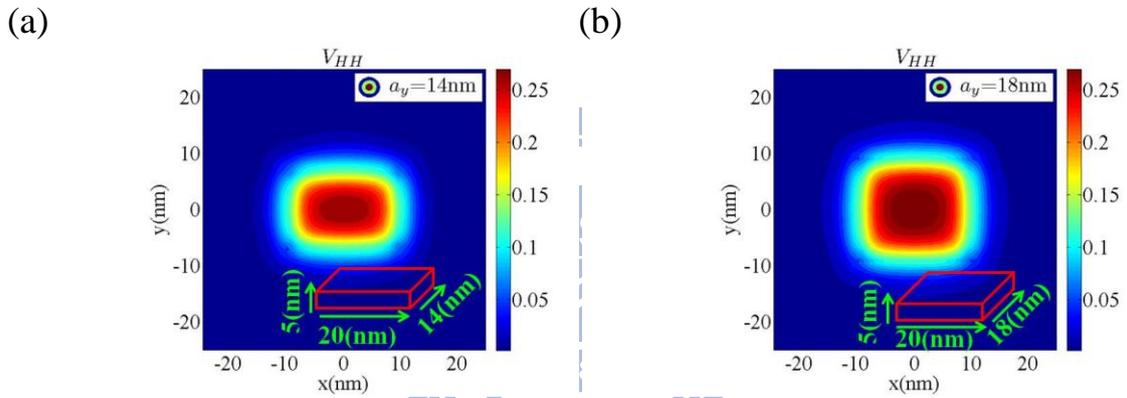


圖 5.65、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，XY 平面($z=0$)的
重電洞侷限位能分佈
(a)、 a_y 為 14(nm) (b)、 a_y 為 18(nm)

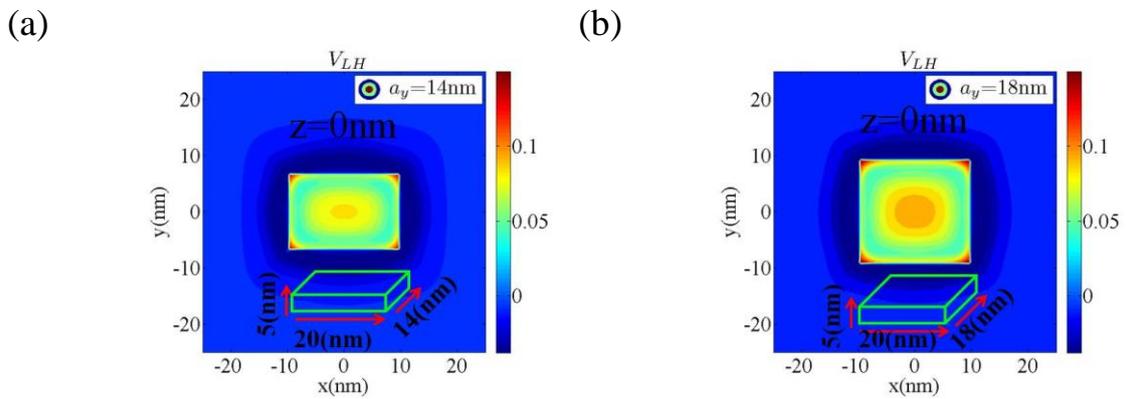


圖 5.66、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，位於 $z=0$ (nm)之
XY 平面的輕電洞侷限位能分佈
(a)、 a_y 為 14(nm) (b)、 a_y 為 18(nm)

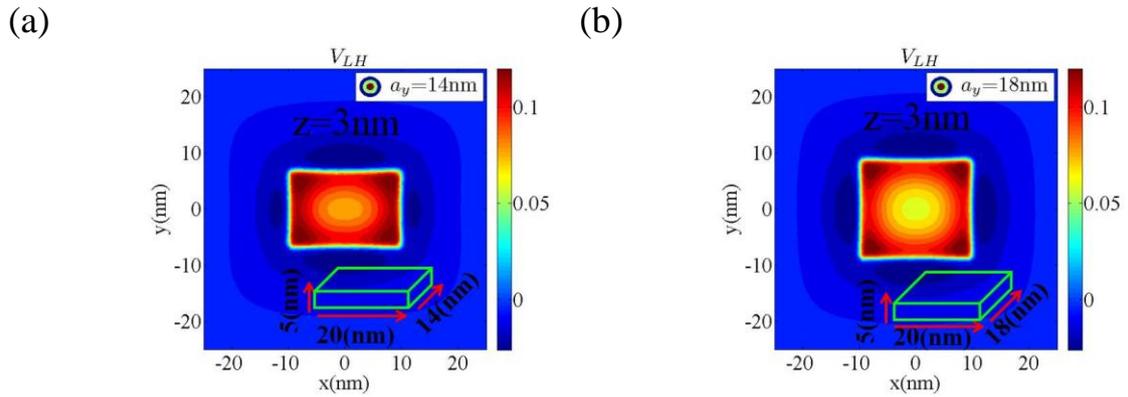


圖 5.67、 a_x 為 20(nm)和 a_z 為 5(nm)，而 a_y 在改變的量子盒，位於 $z=3$ (nm)之 XY 平面的輕電洞局限位能分佈
 (a)、 a_y 為 14(nm) (b)、 a_y 為 18(nm)

圖 5.68 為 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)而 b_y 在改變的截角金字塔形量子點，其原點應變值的比較圖，可以發現當 b_y 變小時，如同量子盒一樣，則 e_{yy} 的值會變大，而 e_{xx} 和 e_{zz} 的值會變小。

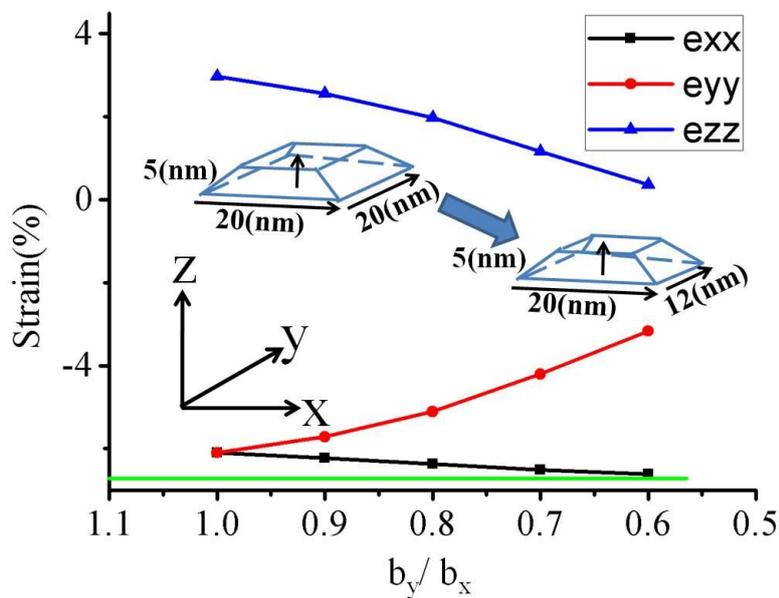


圖 5.68、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒，其中心點應變值的比較圖

圖 5.69~圖 5.71 分別為 $b_x=20(\text{nm})$ 、 $b_y=18(\text{nm})$ 和 $h=5(\text{nm})$ 的截角金字塔形量子點在 XZ、YZ 與 XY 平面的位移與應變圖；圖 5.72~圖 5.74 分別為 $b_x=20(\text{nm})$ 、 $b_y=14(\text{nm})$ 和 $h=5(\text{nm})$ 的截角金字塔形量子點在 XZ、YZ 與 XY 平面的位移與應變圖。

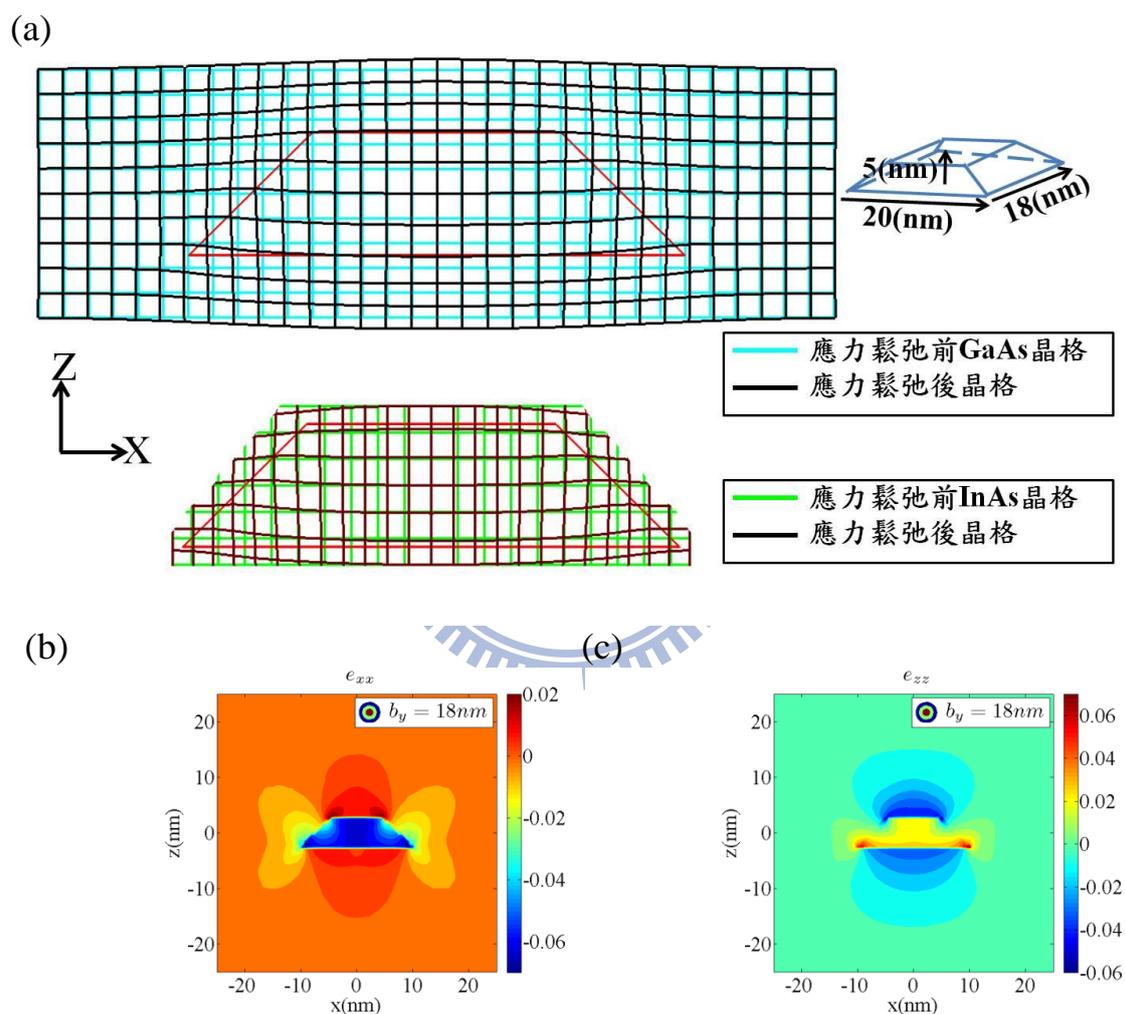


圖 5.69、 b_x 為 $20(\text{nm})$ 、 b_y 為 $18(\text{nm})$ 和 h 為 $5(\text{nm})$ 的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、XZ 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

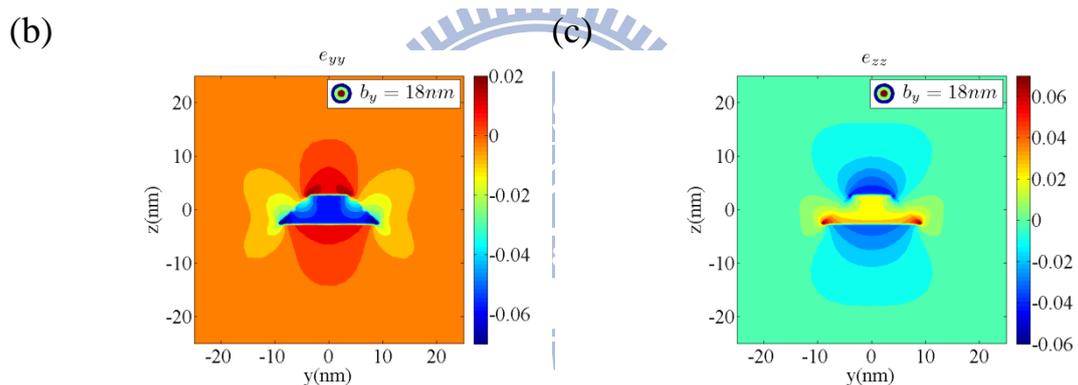
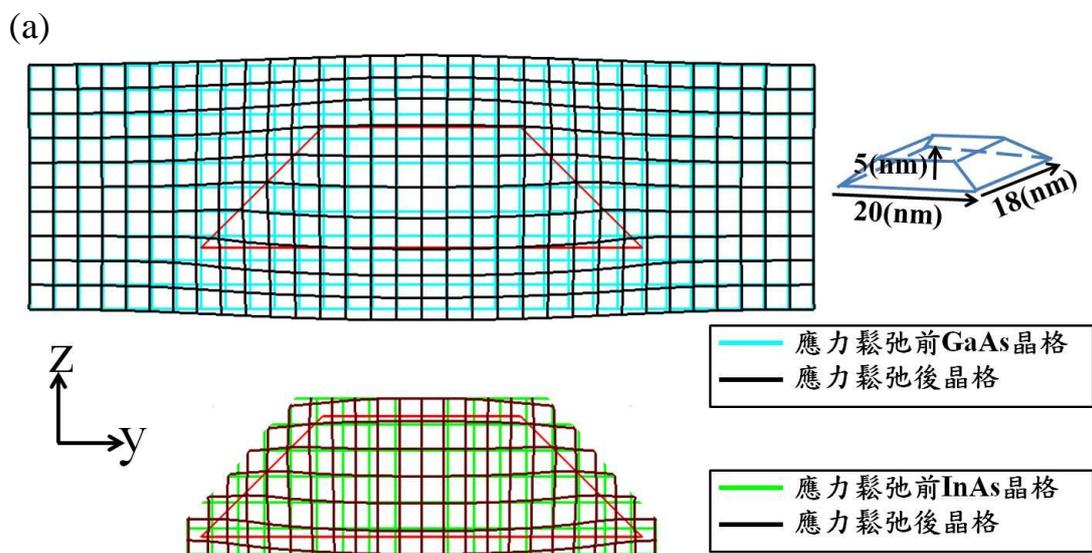


圖 5.70、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)和 h 為 5(nm)的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

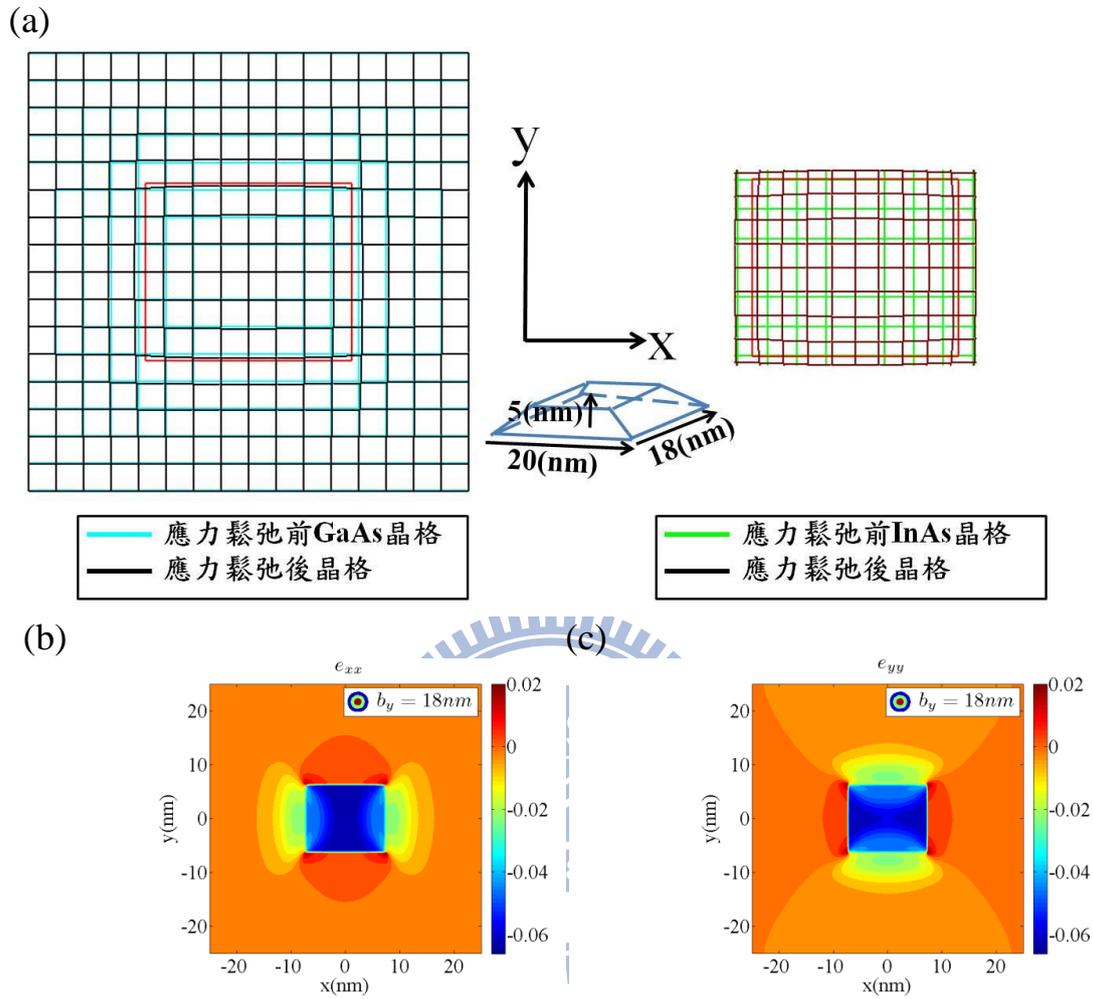


圖 5.71、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 18(nm)和 h 為 5(nm)的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖

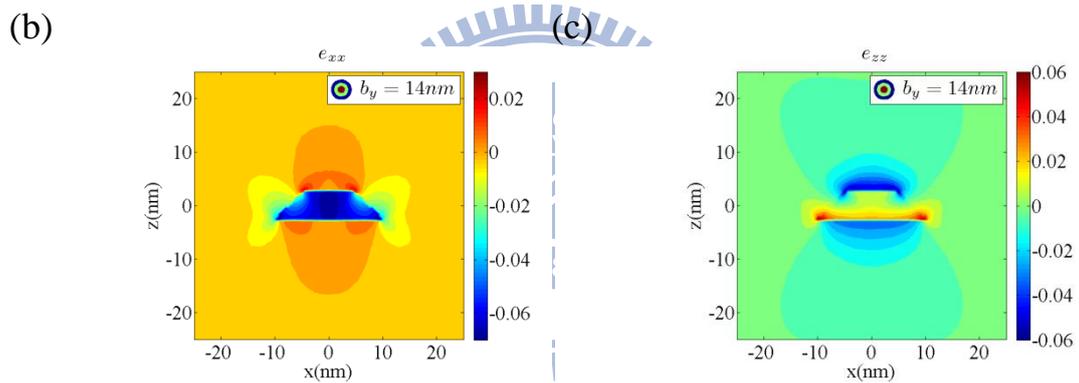
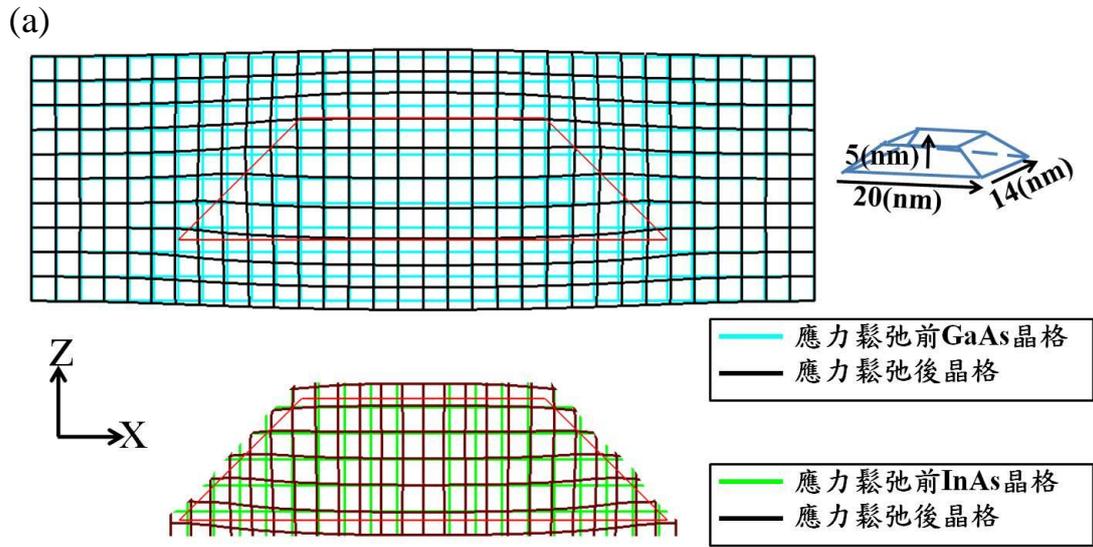


圖 5.72、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 14(nm) 和 h 為 5(nm) 的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、XZ 平面的位移圖 (b)、 e_{xx} 在 XZ 平面分佈圖 (c)、 e_{zz} 在 XZ 平面分佈圖

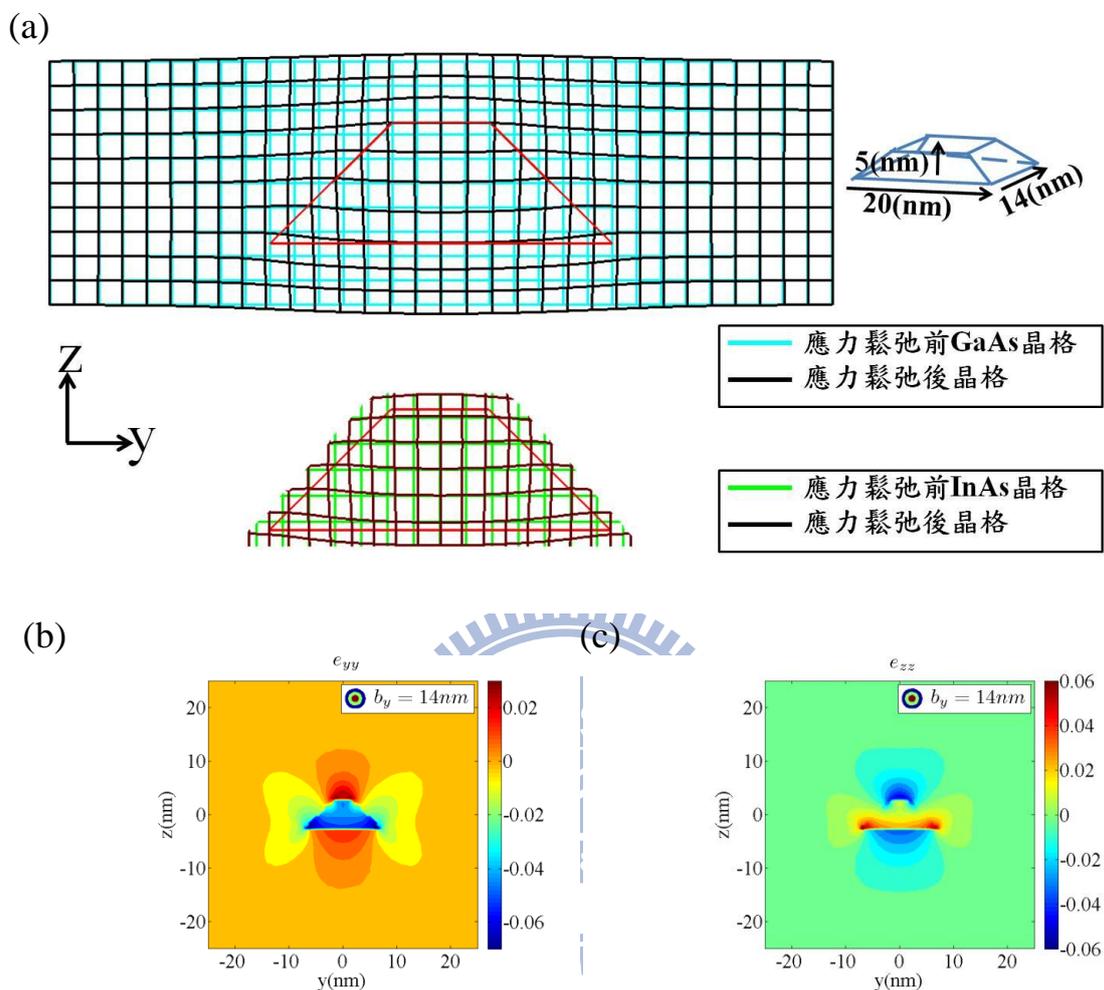


圖 5.73、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 14(nm)和 h 為 5(nm)的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、YZ 平面的位移圖(b)、 e_{yy} 在 YZ 平面分佈圖(c)、 e_{zz} 在 YZ 平面分佈圖

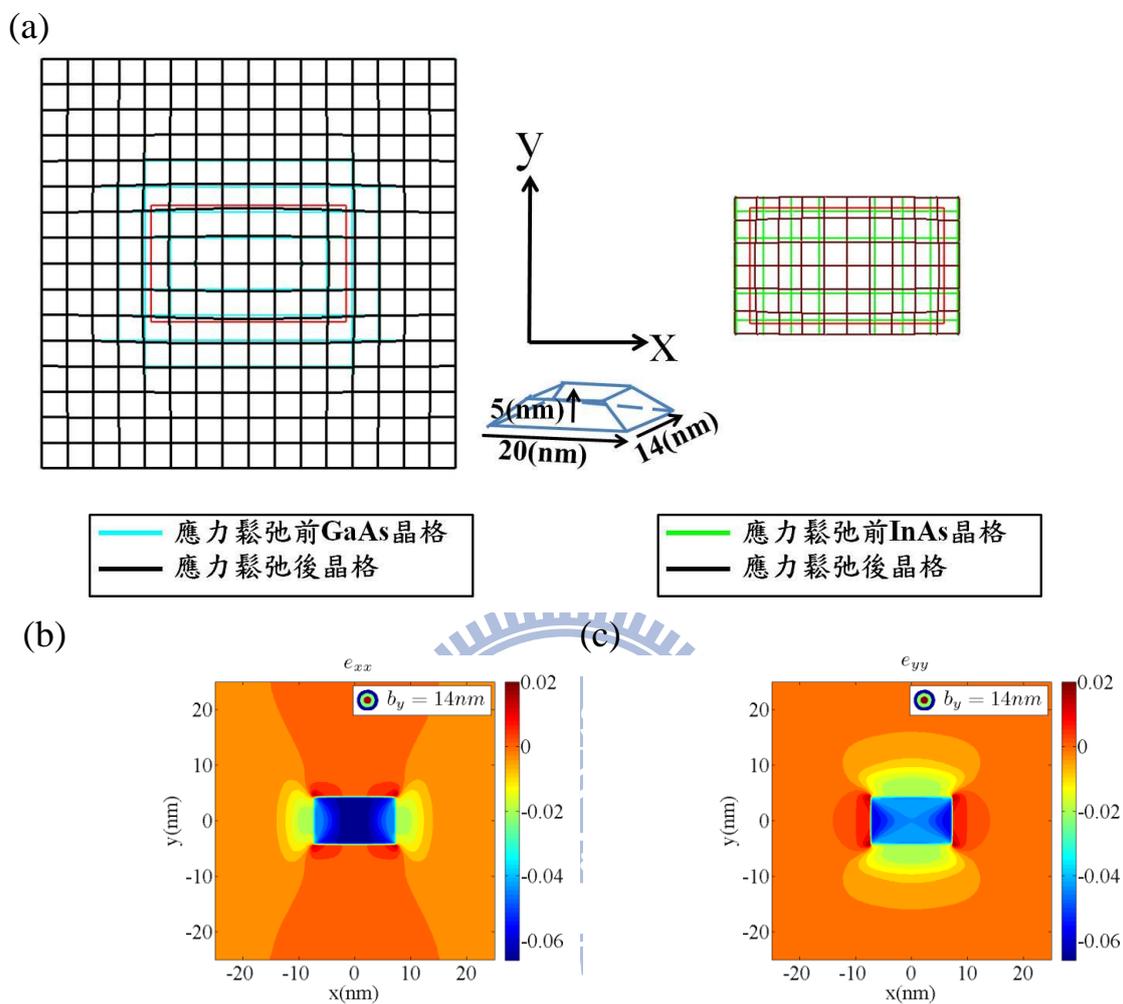
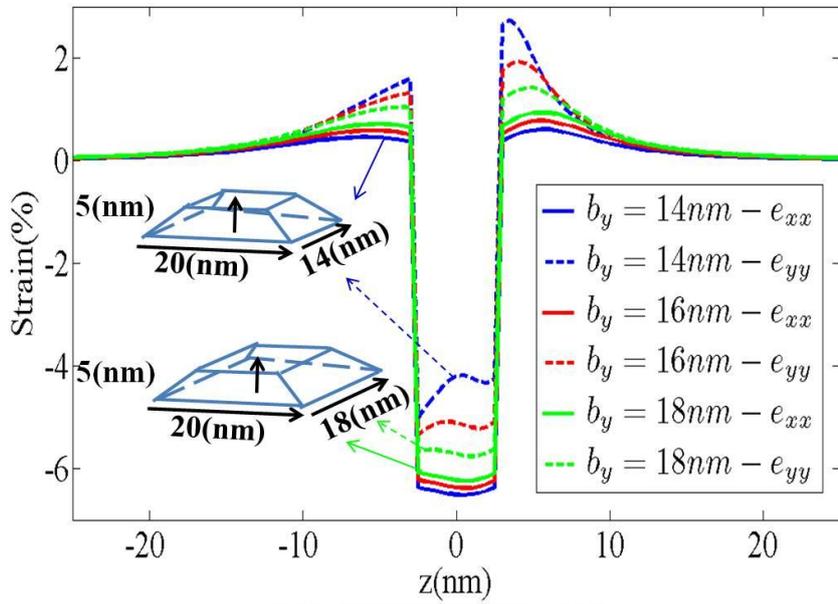


圖 5.74、 b_x 為 20(nm)、 b_y 為 14(nm)和 h 為 5(nm)的截角金字塔形量子點應變與位移對照圖

(a)、XY 平面的位移圖(b)、 e_{xx} 在 XY 平面分佈圖(c)、 e_{yy} 在 XY 平面分佈圖

圖 5.75 與圖 5.76 分別為 e_{xx} 、 e_{yy} 、 e_{zz} 、體應變與雙軸應變沿 Z 軸的分佈，其行為與量子盒相似，不過，在 b_y 為 14(nm)時，其應變曲線有較大的變化，推測原因，應該是因為 YZ 切面上快要形成三角形的原因。

(a)



b)

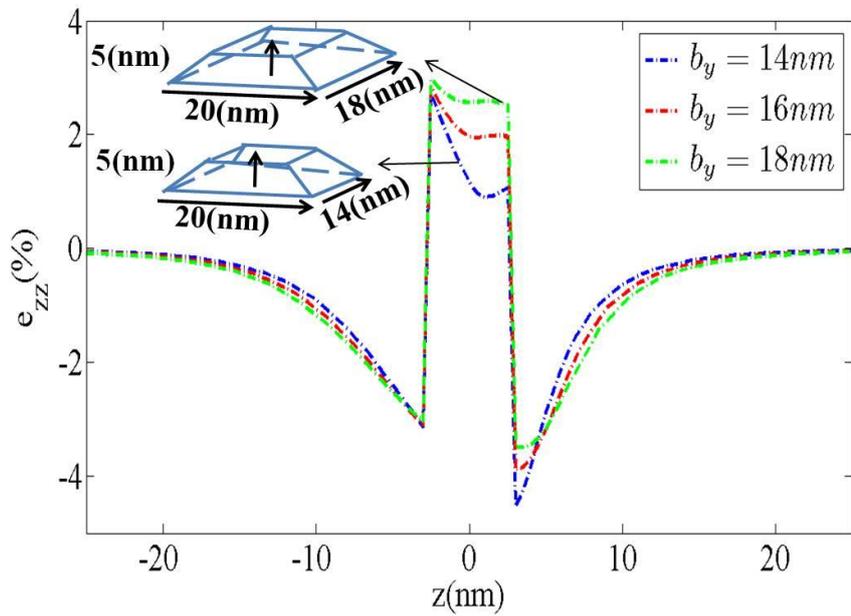
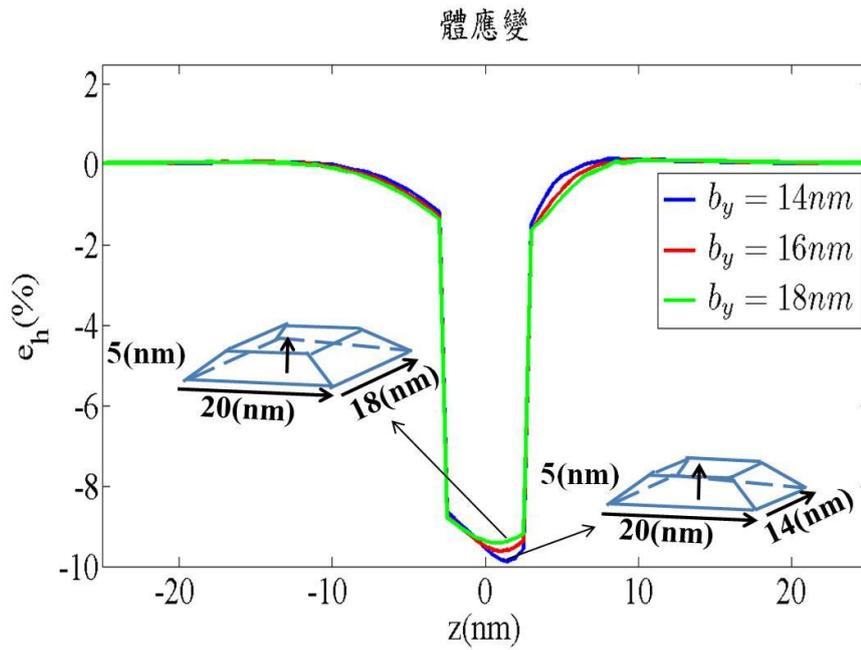


圖 5.75、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的截角金字塔形量子點沿 Z 軸($x,y=0$)的應變分佈

(a)、 e_{xx} 與 e_{yy} 分佈圖(b)、 e_{zz} 分佈圖

(a)



(b)

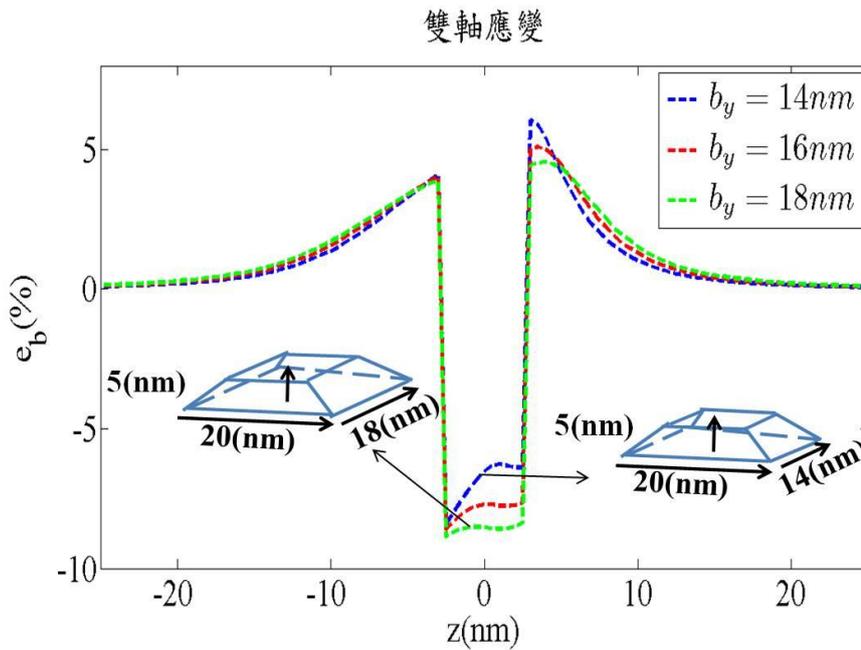


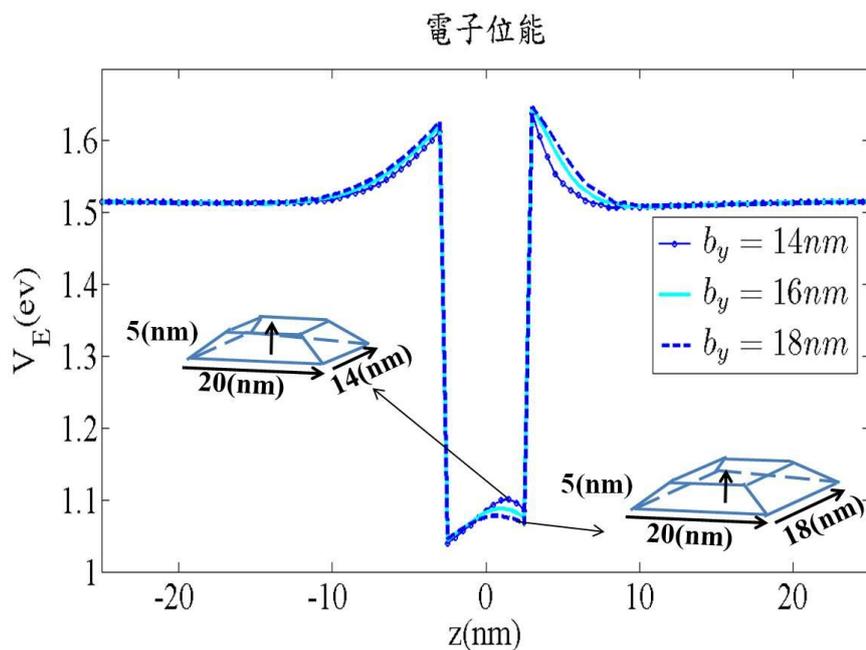
圖 5.76、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的截角金字塔形量子點沿 Z 軸($x,y=0$)的應變分布

(a)、體應變分佈圖(b)、雙軸應變分佈圖

圖 5.77 為侷限位能沿 Z 軸的分佈圖，而圖 5.78 ~ 5.81 為侷限位能在 XY 平面的分佈，伴隨著 b_y 越來越小，輕重電洞在量子點內的行為與量子盒相似，但變化較為劇烈。不過，當 b_y 越來越小，由圖

5.81 可知輕電洞在量子點上邊界的外側的侷限力會漸趨變強，尤其是沿長軸的兩側且相較於量子盒其變強的趨勢更為明顯。

(a)



(b)

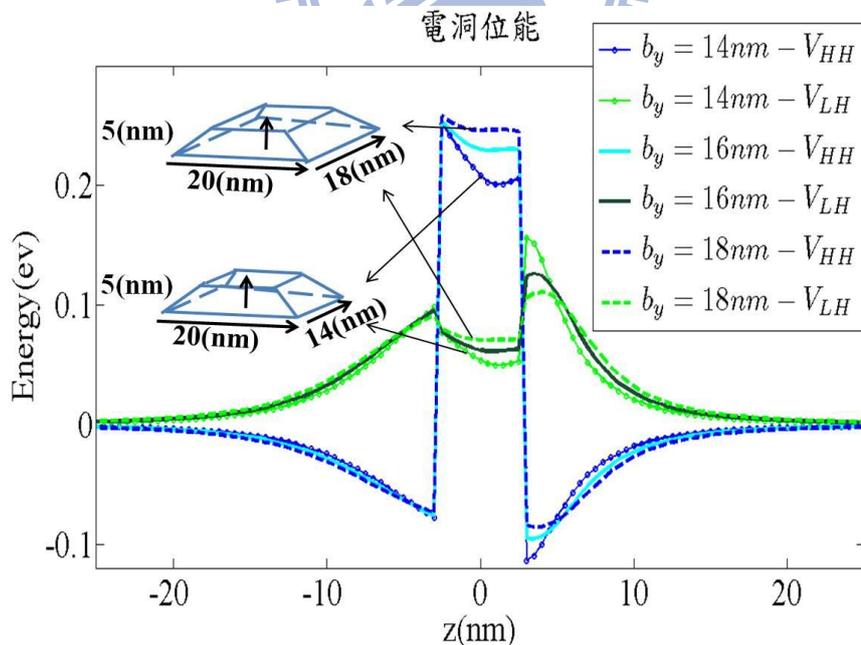


圖 5.77、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒沿 Z 軸($x,y=0$)的侷限能
 限位能
 (a)、電子侷限位能分佈圖(b)、電洞侷限位能分佈圖

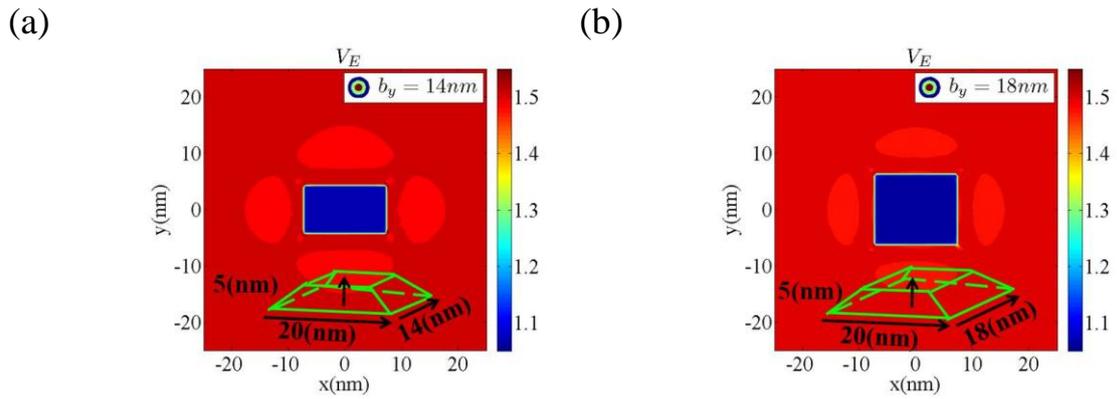


圖 5.78、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒，XY 平面($z=0$)的電子侷限位能分佈

(a)、 b_y 為 14(nm) (b)、 b_y 為 18(nm)

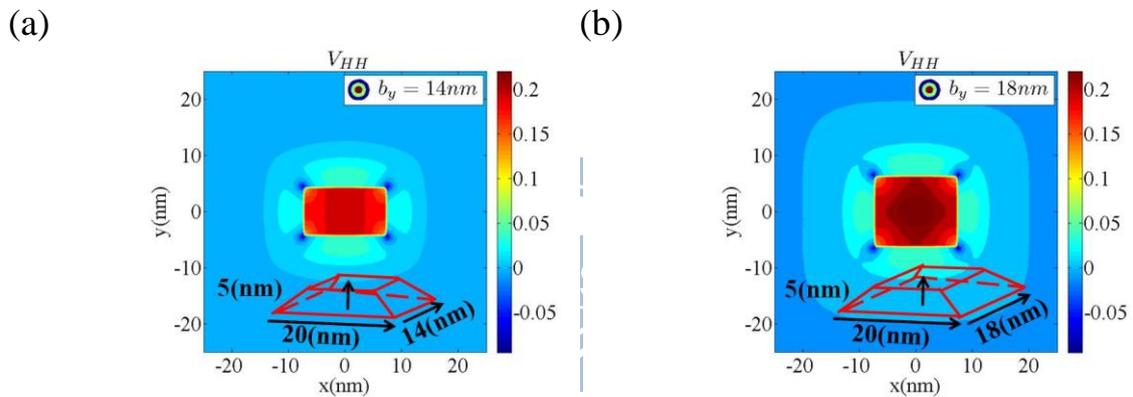


圖 5.79、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒，XY 平面($z=0$)的重電洞侷限位能分佈

(a)、 b_y 為 14(nm) (b)、 b_y 為 18(nm)

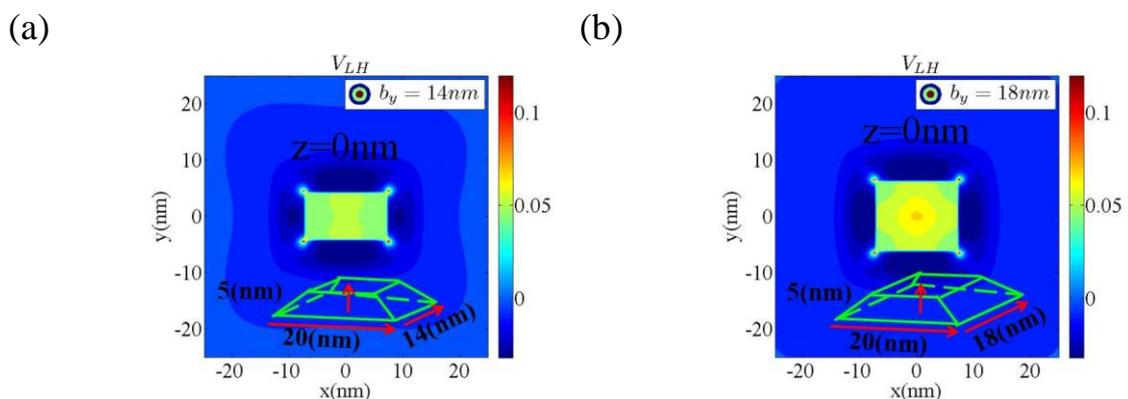


圖 5.80、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒，位於 $z=0$ (nm)之 XY 平面的輕電洞侷限位能分佈

(a)、 b_y 為 14(nm) (b)、 b_y 為 18(nm)

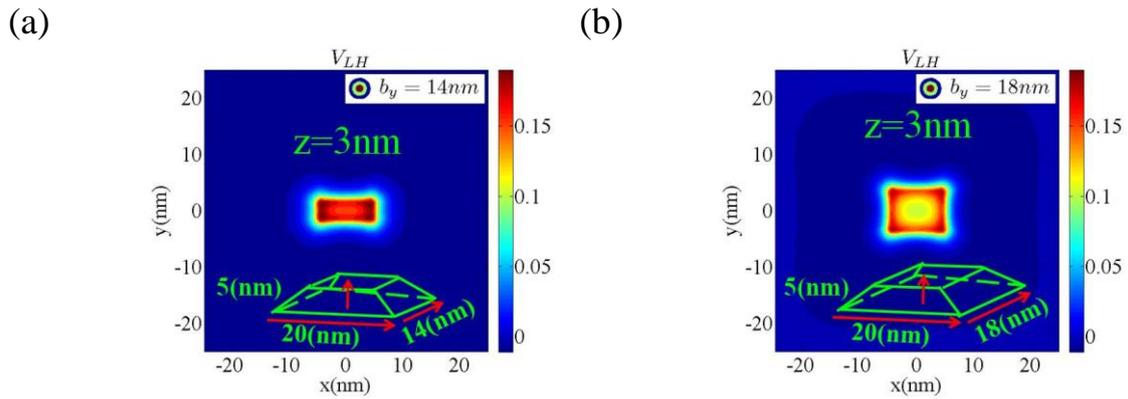


圖 5.81、 b_x 為 20(nm)和 h 為 5(nm)，而 b_y 在改變的量子盒，位於 $z=3$ (nm)之 XY 平面的輕電洞侷限位能分佈
(a)、 b_y 為 14(nm) (b)、 b_y 為 18(nm)

5.4 垂直耦合雙量子點的比較

在最後，根據本校材料所張翼老師實驗室所提供的數據，做了三個例子的垂直耦合雙量子點的計算，其計算參數如表，其中量子點與包覆層的材料為 $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ ：

表 5.1 垂直耦合雙量子點計算參數

Case	Height	Width	Aspect ratio
30nm Spacer	10.5nm	21nm	0.50
20nm Spacer	8nm	31nm	0.26
10nm Spacer	4nm	28nm	0.14

圖 5.82 ~圖 5.89 我們依序列出前兩個例子的應變與侷限位能的分佈，包含單量子點與雙量子點，而 $e_h = e_{xx} + e_{zz} + e_{zz}$ 、 $e_b = (e_{xx} + e_{zz})/2 - e_{zz}$ 。其中，我們發現在前兩個例子裡，由於，兩量子點的距離較近，因此，兩量子點的應變會彼此影響。而介於兩

量子點間的包覆層材料，遭受兩量子點在 Z 方向的擠壓，因此，也因此，在 X、Y 方向上會有膨脹的現象。而在侷限位能方面，值得注意的是在兩量子點間，輕電洞有較強的侷限力。

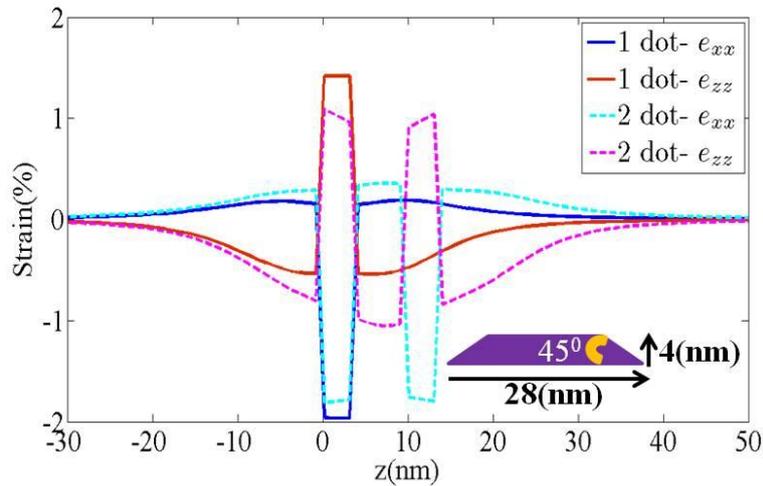


圖 5.82、基底長度為 28(nm)、高為 4(nm)的截角金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的應變分布

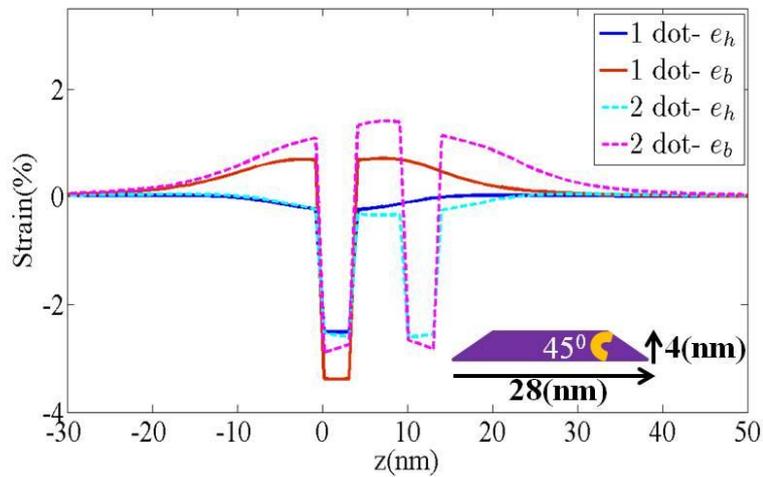


圖 5.83、基底長度為 28(nm)、高為 4(nm)的截角金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的應變分布

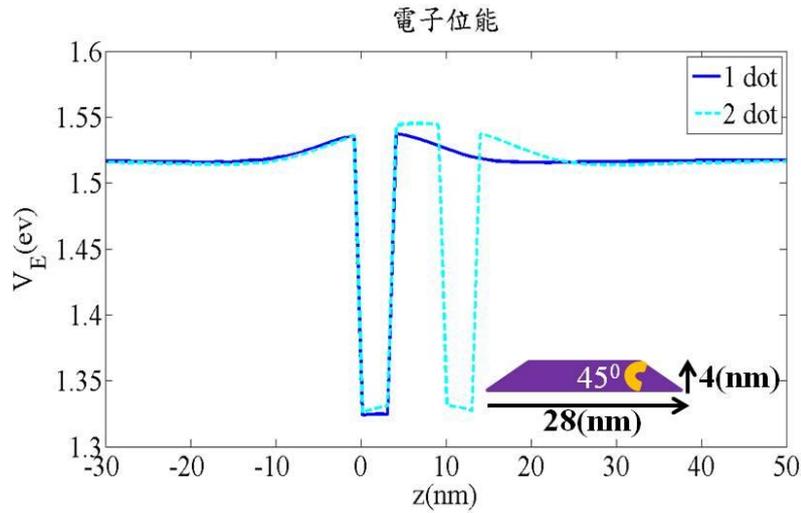


圖 5.84、基底長度為 28(nm)、高為 4(nm)的截角金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的電子侷限位能

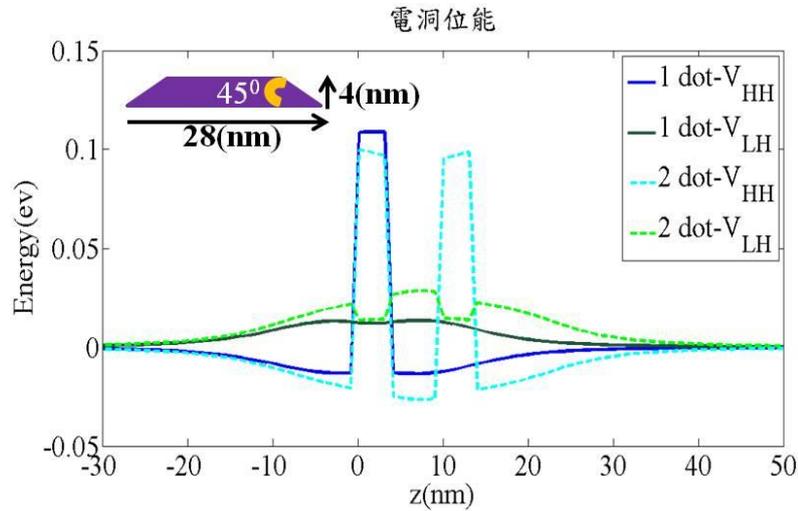


圖 5.85、基底長度為 28(nm)、高為 4(nm)的截角金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的電洞侷限位能

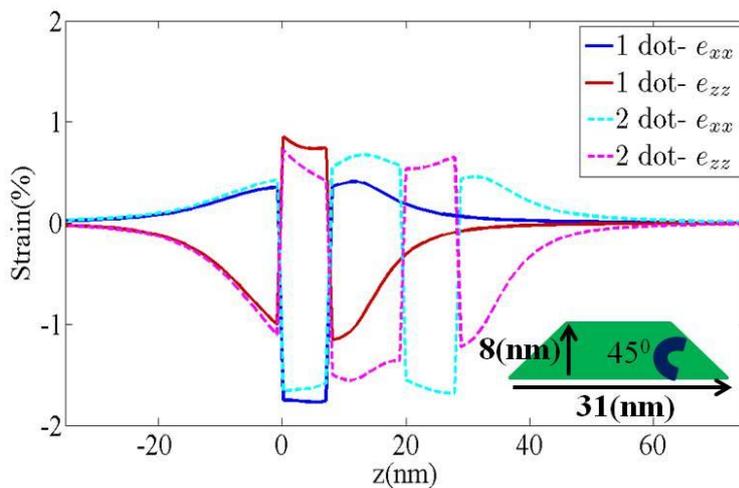


圖 5.86、基底長度為 31(nm)、高為 8(nm)的截角金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的應變分布

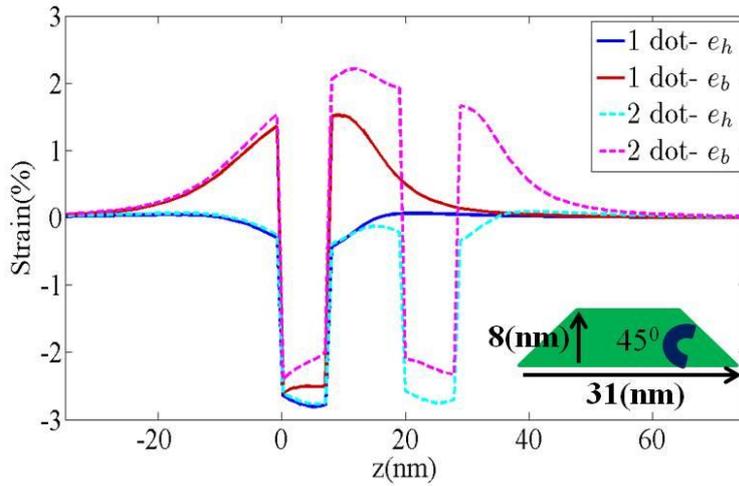


圖 5.87、基底長度為 31(nm)、高為 4(nm)的截角金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的應變分布
電子位能

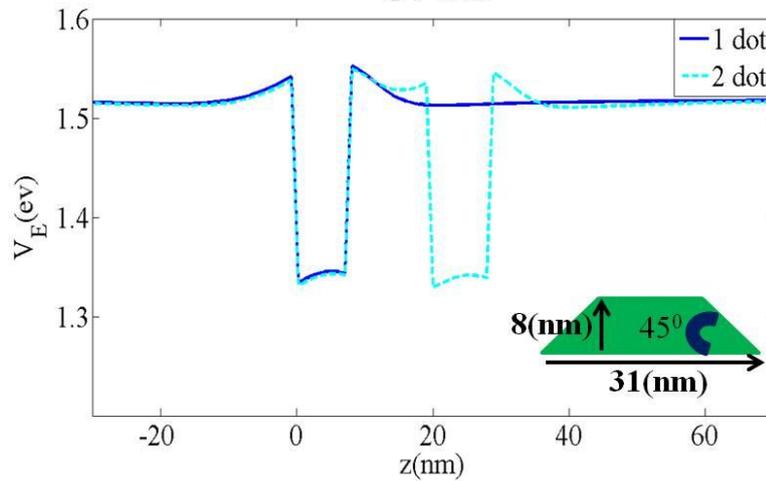


圖 5.88、基底長度為 31(nm)、高為 4(nm)的截角金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的電子侷限位能
電洞位能

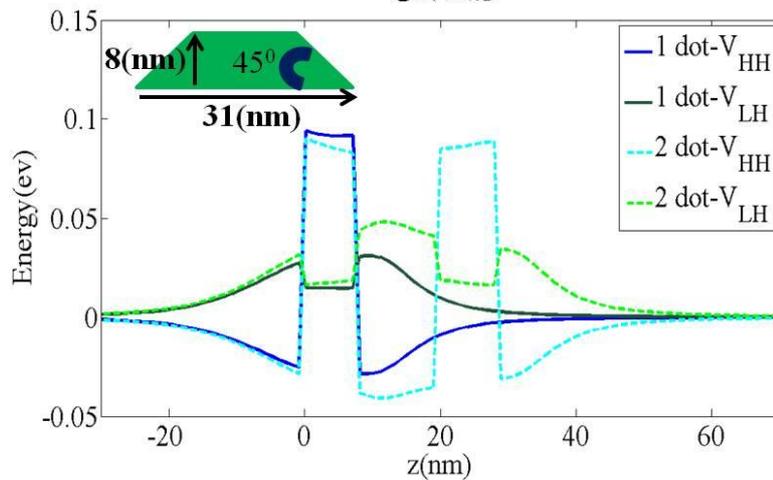


圖 5.89、基底長度為 31(nm)、高為 4(nm)的截角金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的電洞侷限位能

而從例子 3(圖 5.90 ~圖 5.93), 我們發現當兩量子點距離較遠時, 則可以視為兩個單獨的量子點, 其彼此互不影響。

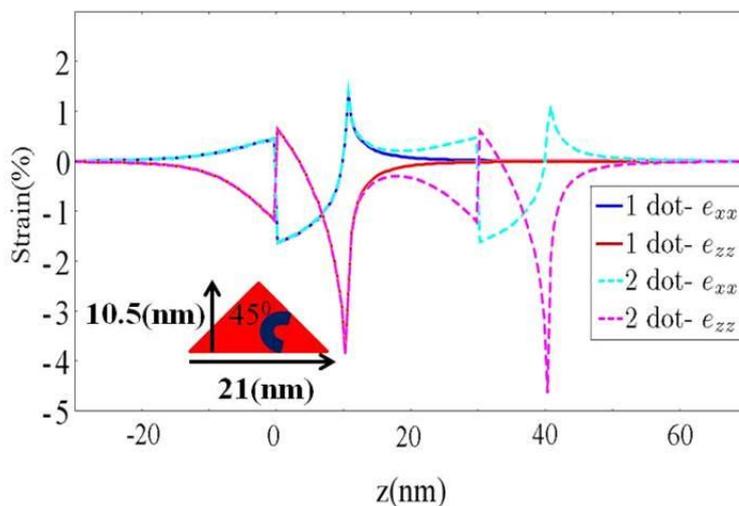


圖 5.90、基底長度為 21(nm)、高為 10.5(nm)的金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的應變分布

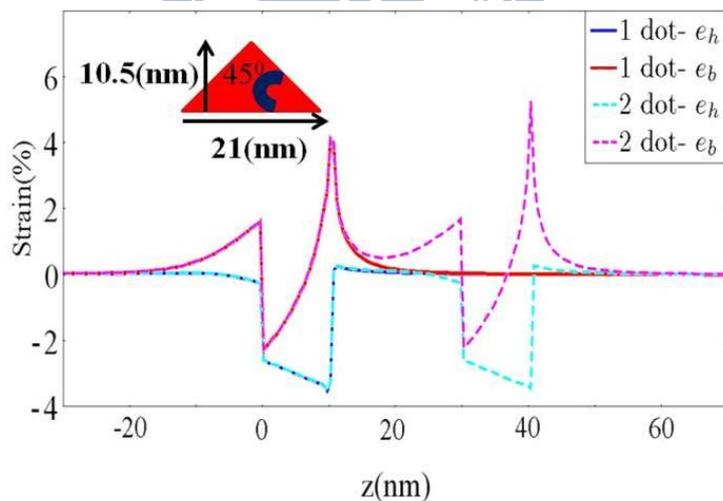


圖 5.91、基底長度為 21(nm)、高為 10.5(nm)的金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的應變分布

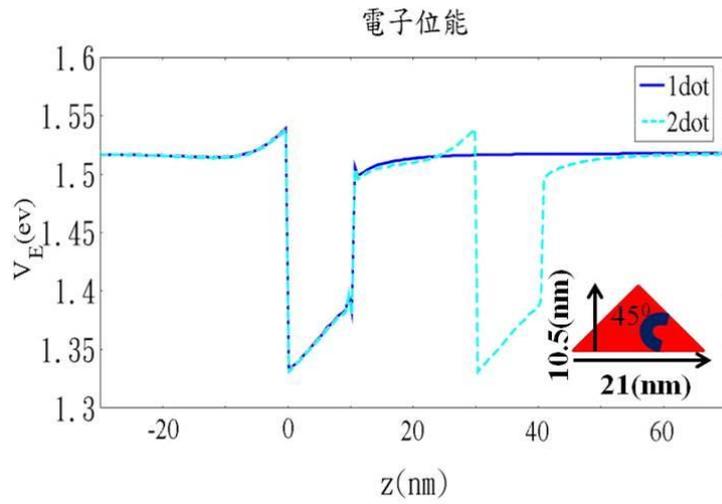


圖 5.92、基底長度為 21(nm)、高為 10.5(nm)的金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的電子侷限位能

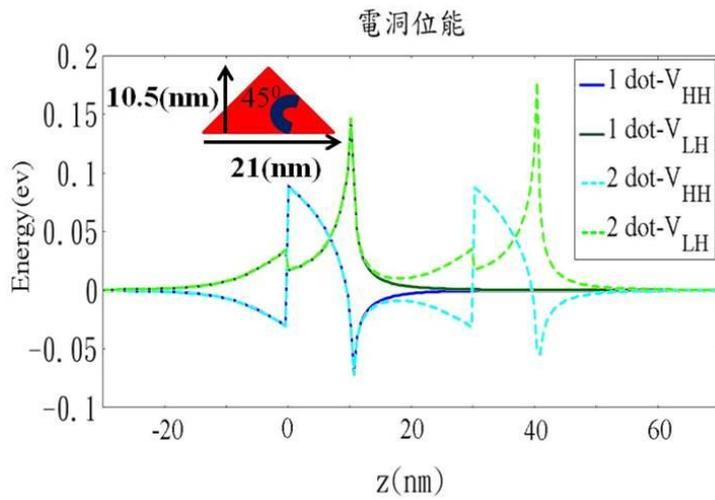


圖 5.93、基底長度為 21(nm)、高為 10.5(nm)的金字塔形量子點，單量子點與雙量子點沿 Z 軸(x,y=0)的電洞侷限位能

第六章 結論

應變場對量子點的幾何結構及其光電特性賦予決定性的影響。本文針對InAs/GaAs量子點作為分析的材料，探討一系列長方體與截角金字塔形量子點的應變行為與侷限位能的變化。

針對量子點內部的應變場，可觀察到量子點於異質介面處，由於晶格不匹配，沿平行介面方向上，通常有較大的壓應變；並且體應變於較薄型的量子點內部幾乎保持常數，亦即導電帶的偏移量幾乎為定值；相對地，雙軸性應變與量子點的長高比值則具有高度相關性，當量子點相當薄，不論長方體或是截角金字塔形量子點，其雙軸性應變在量子點內有較大的負值，而藉由應變與形變位能關係式，可以知在量子點內重電洞有很強的侷限力，而輕電洞也因此與自旋軌道帶有較強的耦合，造成其在量子點內有較強的侷限力相對於量子點外。而當我們破壞了量子點的在XY的對稱性後，發現量子點的寬高比變小，會造成 e_{zz} 在量子點內的值變小而 e_{yy} 在量子點內的值變大，因此，雙軸性應變的效應減弱，所以，輕電洞與自旋軌道帶的耦合減弱，而造成輕電洞在量子點內侷限力的減弱。

而在垂直偶和雙量子點方面，當雙量子點的距離較近時，則兩量子點的應變會互相影響，而距離較遠時，則視為兩個單量子點。而當雙量子點較近時，則在兩量子點間輕電洞有較強的侷限效應。

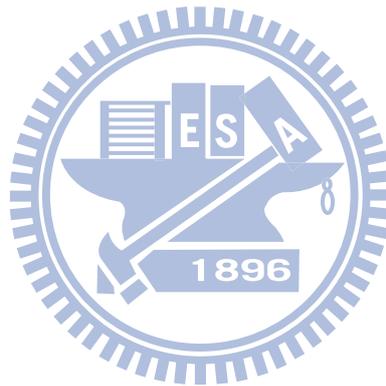
由於本文所計算的應變，皆為晶格不匹配所造成的，而我們發現對侷限位能有很大的影響，因此，在未來我們可以考慮利用外加力場的方式，來對侷限位能作一些調控，而外加的力場可以考慮加在非量子點三方向的主軸上，附錄 D 為考慮不同座標系統下，應力應變張量的數學轉換推導。



參考文獻

- [1] M. A. Kastner, “Artificial atoms”, *Phys. Today* **46**, 24 (1993).
- [2] S. Tarucha, D. G. Austing, and T. Honda, “Shell Filling and Spin Effects in a Few Electron Quantum Dot”, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3613 (1996).
- [3] G. E. Pikus and G. L. Bir, “Effects of deformation on the hole energy spectrum of germanium and silicon”, *Sov. Phys. Solid State* **1**, 1502 (1960).
- [4] G. E. Pikus and G. L. Bir, “Symmetry and strain-induced effects in semiconductors”, John Wiley & Sons, New York (1974).
- [5] S. L. Chuang, “Physics of Optoelectronic Devices”, 2nd ed. Wiley, New York, (2009).
- [6] C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang, A. J. Williamson, A. Zunger, “Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots”, *J. Appl. Phys.* **83**, 2548(1998).
- [7] G. S. Pearson, D. A. Faux, “Analytical solutions for strain in pyramidal quantum dots”, *J. Appl. Phys.* **88**, 730(2000).
- [8] D. A. Faux, J. R. Downes, E. P. O’Reilly, “A simple method for calculating strain distributions in quantum wire structures”, *J. Appl. Phys.* **80**, 2515(1996).
- [9] G. R. Liu, S. S. Quek Jerry, “A finite element study of the stress and strain fields of InAs quantum dots embedded in GaAs”, *Semicond. Sci. Technol.* **17**, 630(2002).
- [10] J. D. Eshelby, “The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems”, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **241**, 376(1957).
- [11] J. D. Eshelby, “The elastic field outside an ellipsoidal inclusion”, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **252**, 561(1959).
- [12] 王敏中，王煒，武際可，彈性力學教程，北京大學出版社，北京，2002
- [13] 錢偉長，彈性力學，亞東出版社，台北，1991
- [14] L.D.Landau and E.M.Lifshitz, “Theory of Elasticity”, 3rd ed., Pergamon Press, London ,(1986).
- [15] 王光欽，彈性力學—理論概要與典型題解，西南交通大學出版社，2009
- [16] Tirupathi R.Chandrupatla, Ashok D.Belegundu , “Introduction to Finite Elements in Engineering (3rd Edition)”
- [17] 中仿科技公司，COMSOL Multiphysics 有限元法多物理場建模與分析
- [18] H. Kleinert, “Gauge Fields in Condensed Matter”, 2nd ed., WorldScientific, Singapore ,(1989)
- [19] 吳建民，「利用 $k \cdot p$ 法研究砷化銻/砷化鎵之奈米結構」，台灣大學，碩士論文，民國九十五年七月。
- [20] Löwdin P. O. , “A Note on the Quantum-Mechanical Perturbation Theory” ,*J. Chem., Phys.* **19** 1396-401(1951).

- [21] C. G. Van de Walle, “Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory” , Phys. Rev. B **39**, 1871 (1989).
- [22] A. D. Andreev, J. R. Downes, D. A. Faux, and E. P. O’Reilly, “Strain distributions in quantum dots of arbitrary shape” , J. Appl. Phys. **86**,297 (1999)
- [23] A. Schliwa, M. Winkelkemper, D. Bimberg, “Impact of size, shape, and composition on piezoelectric effects and electronic properties of In(Ga)As/GaAs quantum dots” ,Phys. Rev. B **76**, 205324 (2007)
- [24] Calvin Yi-Ping Chao and Shun Lien Chuang, “Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells” ,Phys. Rev. B **46**, 4110–4122 (1992)
- [25]陳綱，廖理幾，郝偉，晶體物理學基礎，科學出版社，2007
- [26]Appel, Walter, “Mathematics for Physics & Physicists”, university presses, (2007).
- [27]Peter Y. Yu , Manuel Cardona, “Fundamentals of Semiconductor: Physics and Materials Properties”, Springer, (2004).



附錄 A、材料參數[23]

表 A.1 *InAs/GaAs* 材料參數

	Quantity	Unit	InAs	GaAs
Lattice constant	a	nm	6.0553	5.6503
Energy gap	E_g	eV	0.413	1.518
Averaged VB edge	$E_{v,av}$	eV	-6.747	-6.92
Spin-orbit coupling energy	Δ_0	eV	0.38	0.34
CB hydrostatic def. pot.	a_c	eV	-5.08	-8.013
VB hydrostatic def. pot.	a_v	eV	1.00	0.22
VB shear def. pot. [100]	b	eV	-1.8	-1.824
Elastic compliance	C_{11}	GPa	83.3	118.8
Elastic compliance	C_{12}	GPa	45.3	53.8
Elastic compliance	C_{44}	GPa	39.6	59.4

在本文採用量子點內為 InAs，而外部為 GaAs， $\Delta E_c \cong 918.7(meV)$ 與 $\Delta E_v \cong -186.3(meV)$ 。

附錄 B、實空間格林函數推導[14]

附錄將以古典彈性力學來求得等向性材料之格林函數的數學表

示式，其中我們的廣義虎克定律如下：

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{xy} \\ e_{yz} \\ e_{xz} \end{bmatrix}$$

其中

$$\nu(\text{泊松比(Poisson's ratio)}) = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}$$

$$E(\text{楊氏模量(Young's modulus)}) = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{(\lambda + \mu)}$$

在開始推導之前，我們對一些符號下定義，定義如下：

$R_{i,j}$ 其中下標 i, j 表對 \mathbf{R} 的 i 方向分量，做 j 方向的微分

於是開始推導，我們從式(2.2.4)出發，根據廣義虎克定律，我們可以

得式(B.1)和式(B.2)：

$$e_{ik} = \frac{1}{2}(u_{i,k} + u_{k,i}) = \frac{1}{E}[(1 + \nu)\sigma_{ik} - \nu\delta_{ik}\sigma_{ll}] \quad (\text{B.1})$$

和

$$\sigma_{ik} = \frac{E}{(1 + \nu)} \left[e_{ik} + \frac{\nu}{1 - 2\nu} \delta_{ik} e_{ll} \right]$$

$$= \frac{E}{(1+\nu)} \left[\frac{1}{2} (u_{i,k} + u_{k,i}) + \frac{\nu}{1-2\nu} \delta_{ik} u_{l,l} \right] \quad (\text{B.2})$$

對式(B.2)做 k 方向的微分，可得式(3.2.3)：

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\partial u_{l,l}}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \frac{E}{1+\nu} \frac{\partial}{\partial x_k} (u_{i,k} + u_{k,i}) \quad (\text{B.3})$$

接著將式(B.3)帶回式(2.2.4)，可以下式：

$$\frac{E}{2(1+\nu)} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2} + \frac{E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_i \partial x_l} + F_i = 0$$

經整理，則通式表為式(B.4)

$$\nabla^2 \bar{u} + \frac{1}{(1-2\nu)} \nabla \nabla \cdot \bar{u} = -\bar{F} \frac{2(1+\nu)}{E} \quad (\text{B.4})$$

式(B.4)稱為拉梅-納維(Lame - Navier)方程，是以位移來表示彈性力學的統御方程，我們以此方程式來求得 \bar{F} 與 \bar{u} 的關係。

接著，開始求解式(B.4)，開始之前，因為我們目的為求出格林函數，所以，令 \bar{F} 只發生在原點，因此，力 \bar{F} 表為 $\bar{F} \delta(\bar{r})$ ，則式(B.4)

修正為式(B.5)：

$$\nabla^2 \bar{u} + \frac{1}{(1-2\nu)} \nabla \nabla \cdot \bar{u} = -\bar{F} \delta(\bar{r}) \frac{2(1+\nu)}{E} \quad (\text{B.5})$$

於是開始我們的求解，設式(B.5)的解 \bar{u} ，可以表為 $\bar{u} = \bar{u}_0 + \bar{u}_1$ ，其中

\bar{u}_0 滿足方程式(B.6)，其中方程式(B.6)為帕松方程(Poisson's equation)，

$$\nabla^2 \bar{u}_0 = -\bar{F} \delta(\bar{r}) \frac{2(1+\nu)}{E} \quad (\text{B.6})$$

則 \bar{u}_1 滿足方程式(B.7)，

$$\nabla \nabla \cdot \bar{u}_1 + (1-2\nu) \nabla^2 \bar{u}_1 = -\nabla \nabla \cdot \bar{u}_0 \quad (\text{B.7})$$

我們假設力無法影響無窮遠處的位移，則根據這一合理假設，所以，方程式(B.6)的解 \bar{u}_0 ，在無窮遠處需為零，因此， \bar{u}_0 可以表為式(B.8)：

$$\bar{u}_0 = \frac{2(1+\nu)}{4\pi E} \frac{\bar{F}}{r} \quad (\text{B.8})$$

對式(B.7)使用旋度算符，可以得：

$$\nabla^2 \nabla \times \bar{u}_1 = 0$$

已知 \bar{u}_1 在無窮遠處需為零，所以， $\nabla \times \bar{u}_1$ 在無窮遠處為零，但 $\nabla \times \bar{u}_1$ 在無窮遠處為零，則 $\nabla \times \bar{u}_1$ 在全空間皆為零。因此，可以令 $\bar{u}_1 = \nabla \varphi$ ，並且帶回式(B.7)，可以得式(B.9)：

$$\nabla \{2(1-\nu) \nabla^2 \varphi + \nabla \cdot \bar{u}_0\} = 0 \quad (\text{B.9})$$

則 $2(1-\nu) \nabla^2 \varphi + \nabla \cdot \bar{u}_0$ 為常數，又已知無窮遠處該項須為零，因此得

$\nabla^2 \varphi$ 的數學表示式：

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\nabla \cdot \bar{u}_0}{2(1-\nu)} = \frac{(1+\nu)}{4\pi E(1-\nu)} \bar{F} \cdot \nabla \frac{1}{r}$$

為求出 φ ，令 ψ 為 $\nabla^2 \psi = \frac{1}{r}$ 的解，則

$$\varphi = -\frac{(1+\nu)}{4\pi E(1-\nu)} \vec{F} \cdot \nabla \psi$$

在此，我們取 $\psi = \frac{r}{2}$ ，則得解 \bar{u}_1 ，可以表為式(B.10)：

$$\bar{u}_1 = \nabla \varphi = \frac{(1+\nu)}{8\pi E(1-\nu)} \frac{(\vec{F} \cdot \vec{n})\vec{n} - \vec{F}}{r} \quad (\text{B.10})$$

其中 \vec{n} 為 \vec{r} 之單位向量，因此，解 \bar{u} 可獲得，其中 \bar{u} 表為式(B.11)：

$$\bar{u} = \frac{(1+\nu)}{8\pi E(1-\nu)} \frac{(3-4\nu)\vec{F} + \vec{n}(\vec{F} \cdot \vec{n})}{r} \quad (\text{B.11})$$

將式(B.11)帶回格林函數定義，可以得等向性之格林函數，其數學形

式如式(B.12)：

$$\begin{aligned} G_{ik} &= \frac{(1+\nu)}{8\pi E(1-\nu)} [(3-4\nu)\delta_{ik} + n_i n_k] \frac{1}{r} \\ &= \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)r} [(3-4\nu)\delta_{ik} + l_i l_k] \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

其中 $l_i = \frac{x_i}{r}$ ，至此，格林函數推導完成。從式(B.12)發現，格林函數

本身就存在奇異點，因此，如果要以數值方法知道全空間的應變值，

則除了要讀取三維實空間座標位置與對三維應力源點做數值積分(即

對量子點範圍做數值積分)外，最重要的是還要處理奇異點的問題，

此外，異向性之格林函數也是不易求得。為了避開奇異點問題，因此，

我們嘗試常見的平面波展開法，以求能解開這個問題。

附錄 C、格林函數的傅立葉形式之推導[18]

我們從式(2.2.4)出發，我們根據廣義虎克定律將應力換成彈性系數與應變的乘積，因此，可以得式(C.1)：

$$-C_{ijkl} \partial_j \partial_l u_k(\vec{r}) = f_i(\vec{r}) \quad (\text{C.1})$$

此時，考慮當我們系統有一力作用於原點，記為 $F_i \delta(\vec{r})$ ，所以(C.1)

改寫成為式(C.2)：

$$-C_{ijkl} \partial_j \partial_l u_k(\vec{r}) = F_i \delta(\vec{r}) \quad (\text{C.2})$$

再將格林函數的定義帶入式(C.2)，然後得式(C.3)

$$-C_{ijkl} \partial_j \partial_l \int d\vec{r}' G_{kn}(\vec{r} - \vec{r}') F_n(\vec{r}') = F_i \delta(\vec{r}) \quad (\text{C.3})$$

但整個系統只有力 $F_i \delta(\vec{r})$ 會造成位移，因此 $F_i \delta(\vec{r}) = F_n(\vec{r}')$ ，因此 $i = n$ ，且 F_n 與 F_i 大小一樣，式(C.3)改寫為式(C.4)：

$$-C_{ijkl} \partial_j \partial_l G_{kn}(\vec{r}) = \delta_{in} \delta(\vec{r}) \quad (\text{C.4})$$

最後將式(C.4)做傅立葉轉換，則可以得格林函數的傅立葉形式，推導

如下，其中推導中 $q^2 = q_x^2 + q_y^2 + q_z^2$ ：

$$C_{ijkl} q_j q_l \tilde{G}_{kn}(\vec{q}) = \frac{\delta_{in}}{(2\pi)^3} \quad (\text{C.5})$$

而在立方晶系異向性材料系統裡，彈性係數可以表為式(C.6)：

$$C_{ijkl} = C_{12} \delta_{ij} \delta_{kl} + C_{44} (\delta_{ik} \delta_{lj} + \delta_{il} \delta_{jk}) + C_{an} \sum_{p=1}^3 \delta_{ip} \delta_{jp} \delta_{kp} \delta_{lp} \quad (\text{C.6})$$

其中 $C_{an} = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}$ ，若退化為等向性則 $C_{an} = 0$ ，然後將式

(C.6)帶回式(C.5)，可以得式(C.7)：

$$\sum_k \left\{ (C_{12} + C_{44}) q_i q_k + C_{44} \delta_{ik} q^2 + C_{an} \delta_{ik} q_i^2 \right\} \tilde{G}_{kn}(\bar{q}) = \frac{\delta_{in}}{(2\pi)^3} \quad (C.7)$$

為了簡化數學式，我們令 $(q\tilde{G})_n = \sum_k q_k \tilde{G}_{kn}(q)$ 且帶回式(C.7)，則得

式(C.8)：

$$\tilde{G}_{kn}(\bar{q}) = \frac{\delta_{in}/(2\pi)^3 - (C_{12} + C_{44}) q_i (q\tilde{G})_n}{C_{44} q^2 + C_{an} q_i^2} \quad (C.8)$$

再將式(C.7)乘上 $\frac{1}{q_i}$ 並對 i 做加總，則得式(C.9)：

$$\frac{1}{(2\pi)^3 q_n} = 3(C_{12} + C_{44}) (q\tilde{G})_n + \frac{C_{an} (q\tilde{G})_n + C_{44} q^2}{\sum_i \frac{\tilde{G}_{kn}(\bar{q})}{q_i}} \quad (C.9)$$

之後，將式(C.8)帶入式(C.9)得式(C.10)：

$$(q\tilde{G})_n =$$

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{q_n}{C_{44} q^2 + C_{an} q_n^2} \left[1 + (C_{12} + C_{44}) \sum_{p=1}^3 \frac{q_p^2}{C_{44} q^2 + C_{an} q_p^2} \right]^{-1} \quad (C.10)$$

最後將式(C.10)帶回式(C.8)則可以得格林函數之傅立葉形式，其形式

為式(C.11)：

$$\tilde{G}_{kn}(\bar{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{\delta_{in}}{C_{44} q^2 + C_{an} q_i^2} - A \times B \right\} \quad (C.11)$$

其中

$$A = \frac{(C_{12} + C_{44})q_i q_n}{(C_{44}q^2 + C_{an}q_i^2)(C_{44}q^2 + C_{an}q_n^2)}$$
$$B = \left[1 + (C_{12} + C_{44}) \sum_{p=1}^3 \frac{q_p^2}{C_{44}q^2 + C_{an}q_p^2} \right]^{-1}$$

至此，格林函數的傅立葉形式推導完畢



附錄 D、特徵函數

特徵函數在量子點內為 1，外則為零，根據量子點形狀的不同，其數學表示也不同，以下針對本文提及之形狀，給與數學表示式，其中 θ 表示階梯函數。

長方體： a_x 、 a_y 和 a_z 分別表示其長寬高

$$X_{QD}^{\text{長方體}}(\vec{r}) = \left[\theta\left(x + \frac{a_x}{2}\right) - \theta\left(x - \frac{a_x}{2}\right) \right] \\ \times \left[\theta\left(y + \frac{a_y}{2}\right) - \theta\left(y - \frac{a_y}{2}\right) \right] \times \left[\theta\left(z + \frac{a_z}{2}\right) - \theta\left(z - \frac{a_z}{2}\right) \right]$$

球體： R 表示其半徑

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$X_{QD}^{\text{球體}}(\vec{r}) = [1 - \theta(r - R)]$$

金字塔： b 表基底長度，下圖為金字塔的 XZ 平面切面圖，

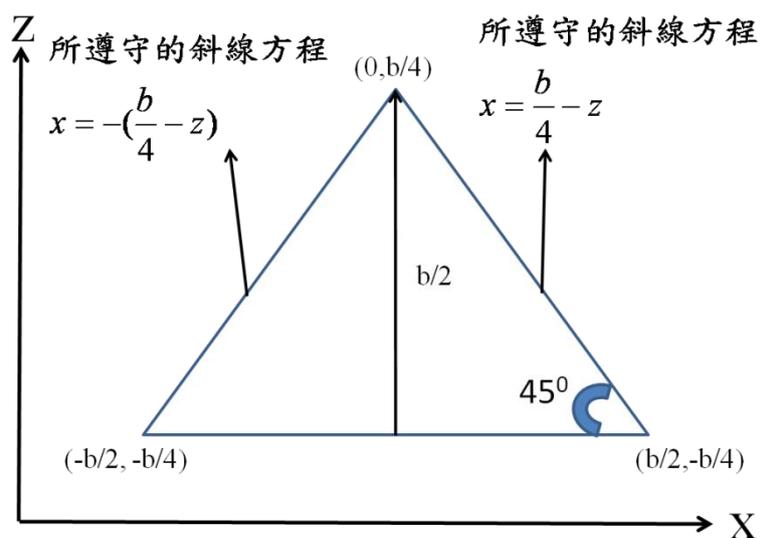


圖 D.1、金字塔之 XZ 平面切面圖

$$Z=(z-b/4)[\theta(z+b/4)-\theta(z-b/4)]+b/4$$

$$X_{QD}^z(\vec{r})=\theta(z+\frac{b}{4})-\theta(z-\frac{b}{4})$$

$$X_{QD}^x(\vec{r})=\theta(x+(b/4-Z))-\theta(z-(b/4-Z))$$

$$X_{QD}^y(\vec{r})=\theta(x+(b/4-Z))-\theta(z-(b/4-Z))$$

$$X_{QD}^{\text{金字塔}}(\vec{r})=X_{QD}^x(\vec{r})X_{QD}^y(\vec{r})X_{QD}^z(\vec{r})$$

截角金字塔： b_x 、 b_y 表 x 、 y 方向基底長度， h 為其高，下圖為截角金字塔的 XZ 平面切面圖，

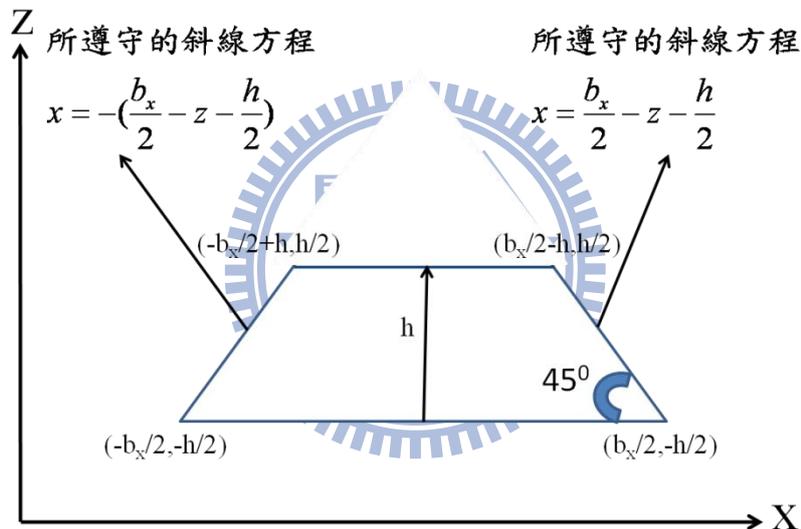


圖 D.2、截角金字塔的 XZ 平面切面圖

$$Z=(z-h/2)[\theta(z+h/2)-\theta(z-h/2)]+h/2$$

$$X_{QD}^z(\vec{r})=\theta(z+\frac{h}{2})-\theta(z-\frac{h}{2})$$

$$X_{QD}^x(\vec{r})=\theta(x+(b_x/2-Z-h/2))-\theta(z-(b_x/2-Z-h/2))$$

$$X_{QD}^y(\vec{r})=\theta(x+(b_y/2-Z-h/2))-\theta(z-(b_y/2-Z-h/2))$$

$$X_{QD}^{\text{金字塔}}(\vec{r})=X_{QD}^x(\vec{r})X_{QD}^y(\vec{r})X_{QD}^z(\vec{r})$$

附錄 E、特徵函數之傅立葉轉換[22]

特徵函數在量子點內為 1，外則為零，因此，在傅立葉轉換時，只要針對有值的部分做積分即可，其傅立葉轉換公式如下：

$$\tilde{X}_{QD}(\vec{q}) = \iiint_{QD} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} dV$$

因此，我們針對不同形狀做數學上的處理，可以得到不同形狀所對應之數學表示。首先，長方體表示如下：

$$\tilde{X}_{QD}^{\text{長方體}}(\vec{q}) = \frac{8}{q_x q_y q_z} \sin(q_x a_x / 2) \sin(q_y a_y / 2) \sin(q_z a_z / 2)$$

在球形量子點裡，其表示如下，其中 $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2}$

$$\tilde{X}_{QD}^{\text{球體}}(\vec{q}) = \frac{4\pi}{q} \left[\frac{\sin(qR)}{q^2} - \frac{R \cos(qR)}{q} \right]$$

而金字塔則較為複雜，因此我們將它表示成幾項，表示如下，其中 $h=b/2$ ：

$$\begin{aligned} \tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\vec{q})_1 &= 1/(q_x + q_y - q_z); \\ \tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\vec{q})_2 &= e^{(ibq_x)} / (q_x - q_y + q_z); \\ \tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\vec{q})_3 &= (e^{(ibq_y)} \times (q_x + q_y + q_z + e^{(ibq_x)} \times (q_x - q_y - q_z))) \\ &\quad / (q_x^2 - (q_y + q_z)^2); \\ \tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\vec{q})_4 &= ie^{(-0.5xi(bq_x + bq_y - k_z h))} \\ &\quad \times (\tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\vec{q})_1 + \tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\vec{q})_2 - \tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\vec{q})_3); \\ \tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\vec{q})_5 &= -ie^{(-0.5xi(bq_x + bq_y - h(3q_x + q_y)))} / (q_x + q_y - q_z); \\ \tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\vec{q})_6 &= -ie^{(0.5xi(bq_x - bq_y + h(-q_x + q_y)))} / (q_x - q_y + q_z); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\bar{q})_7 &= ie^{(-0.5 \times i(bq_x - bq_y + h(q_x + 3q_y)))} \\
&\quad \times (e^{(ibq_x)} \times (q_x - q_y - q_z) + e^{(2 \times iq_x h)} \times (q_x + q_y + q_z)) \\
&\quad / (q_x^2 - (q_y + q_z)^2); \\
\tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\bar{q})_8 &= e^{(-0.5 \times i(q_x - q_y + q_z)h)} \\
&\quad \times (\tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\bar{q})_5 + \tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\bar{q})_6 + \tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\bar{q})_7); \\
\tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\bar{q}) &= (-1/(q_x q_y)) \times (\tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\bar{q})_4 + \tilde{X}_{QD}^{\text{金字塔}}(\bar{q})_8);
\end{aligned}$$

最後截角金字塔如同金字塔一般複雜，所以，我們依然將它分成幾項

表示，如下：

$$\begin{aligned}
\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_1 &= 1/(q_x + q_y - q_z); \\
\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_2 &= e^{(ib_x q_x)} / (q_x - q_y + q_z); \\
\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_3 &= (e^{(ib_y q_y)} \times (q_x + q_y + q_z) + e^{(ib_x q_x)} \times (q_x - q_y - q_z)) \\
&\quad / (q_x^2 - (q_y + q_z)^2); \\
\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_4 &= ie^{(-0.5 \times i(b_x q_x + b_y q_y - k_z h))} \\
&\quad \times (\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_1 + \tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_2 - \tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_3); \\
\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_5 &= -ie^{(-0.5 \times i(b_x q_x + b_y q_y - h(3q_x + q_y)))} / (q_x + q_y - q_z); \\
\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_6 &= -ie^{(0.5 \times i(b_x q_x - b_y q_y + h(-q_x + q_y)))} / (q_x - q_y + q_z); \\
\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_7 &= ie^{(-0.5 \times i(b_x q_x - b_y q_y + h(q_x + 3q_y)))} \\
&\quad \times (e^{(ib_x q_x)} \times (q_x - q_y - q_z) + e^{(2 \times iq_x h)} \times (q_x + q_y + q_z)) \\
&\quad / (q_x^2 - (q_y + q_z)^2); \\
\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_8 &= e^{(-0.5 \times i(q_x - q_y + q_z)h)} \\
&\quad \times (\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_5 + \tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_6 + \tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_7); \\
\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q}) &= (-1/(q_x q_y)) \times (\tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_4 + \tilde{X}_{QD}^{\text{截角金字塔}}(\bar{q})_8);
\end{aligned}$$

附錄 F、二階張量座標轉換[25-27]

在考慮張量的座標轉換之前，我們先針對向量的座標轉換做一些了解，下圖為其示意圖：

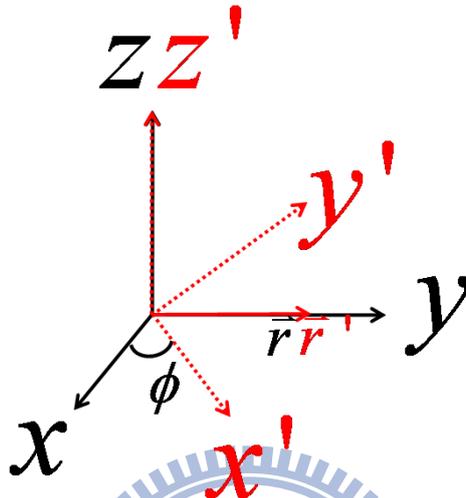


圖 F.1、座標轉換示意圖

其中 \vec{r} 和 \vec{r}' 表同一向量，但以不同座標系統表示，而當我們將座標系統沿 Z 軸旋轉 ϕ 角成為新座標系統，則座標轉換矩陣為

$$U(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

因此， \vec{r} 和 \vec{r}' 的關係式如下：

$$\begin{aligned} \vec{r}' &= U \cdot \vec{r} \Rightarrow r'_\alpha = U_{\alpha\beta} r_\beta \\ \vec{r} &= U^\dagger \cdot \vec{r}' \Rightarrow r_\alpha = U^\dagger_{\alpha\beta} r'_\beta \end{aligned}$$

r_i 表 i 方向分量的值，其中 i 以 (1,2,3) 表 (x,y,z)。

而二階張量通常表為兩向量間的張量積，現在我們考慮一二階張量 ω 在不同座標系統下，其各元素間的關係，其推導如下：

$$\begin{aligned}
\omega &= \vec{A} \otimes \vec{B} = U^\dagger \cdot \vec{A}' \otimes U^\dagger \cdot \vec{B}' \\
&\vec{A} \otimes \vec{B} \\
&= \sum_{\alpha, \gamma} A_\alpha B_\gamma (\vec{e}_\alpha, \vec{e}_\gamma) \\
&\Rightarrow A_\alpha B_\gamma = C_{\alpha\gamma} \\
&U^\dagger \cdot \vec{A}' \otimes U^\dagger \cdot \vec{B}' \\
&= \sum_{\alpha, \gamma} U^\dagger_{\alpha\beta} A'_\beta U^\dagger_{\gamma\chi} B'_\chi (\vec{e}'_\beta, \vec{e}'_\chi) \\
&\Rightarrow U^\dagger_{\alpha\beta} A'_\beta U^\dagger_{\gamma\chi} B'_\chi = U^\dagger_{\alpha\beta} U^\dagger_{\gamma\chi} C'_{\beta\chi} \\
&\xrightarrow{\text{元素對應關係}} C_{\alpha\gamma} = U^\dagger_{\alpha\beta} U^\dagger_{\gamma\chi} C'_{\beta\chi}
\end{aligned}$$

所以，當存在一二階張量 σ ，則在不同座標系統下，其各元素關係如

下：

$$\begin{aligned}
\sigma &= \sigma'_{ij'}(\mathbf{e}_{i'}, \mathbf{e}_{j'}) = \sigma_{ij}(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) \\
&\Rightarrow \sigma_{ij} = U^\dagger_{ii'} U^\dagger_{jj'} \sigma'_{ij'}
\end{aligned}$$

而我們考慮的應變為二階對稱張量，因此，只需求出 σ_{ii} 、 σ_{12} 、 σ_{13} 與

σ_{23} 即可。