

# 國立交通大學

## 電子物理學系

### 碩士論文

無應力 GaAs/AlGaAs 量子點光學異向性的理論研究

**Theoretical studies of optical polarization anisotropy of stress-free  
GaAs/AlGaAs quantum dots**

研究生：廖建智

指導教授：鄭舜仁 教授

中華民國一百零一年六月

無應力 GaAs/AlGaAs 量子點光學異向性的理論研究

**Theoretical studies of optical polarization anisotropy of stress-free**

**GaAs/AlGaAs quantum dots**

研究生：廖建智

Student : Chien-Chih Liao

指導教授：鄭舜仁 教授

Advisor : Shun-Jen Cheng



in partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of

Master

in

Electrophysics

2012

HsinChu, Taiwan, Republic of China

中華民國一百零一年六月

# 無應力 GaAs/AlGaAs 量子點光學異向性的理論研究

學生：廖建智

指導教授：鄭舜仁 博士

國立交通大學電子物理研究所碩士班

## 摘要

本論文主要探討droplet-epitaxial GaAs/AlGaAs量子點的光學異向性(optical polarization anisotropy)。相較大多數量子點系統，因為droplet-epitaxial量子點沒有應力效應，所以可以專注在量子點幾何大小對光學異向性的影響。

文章中使用 $k \cdot p$ 方法模擬激子系統的電子結構，透過對真實量子點形狀的模擬進而建立而量子點的三維拋物線模型，再使用費米黃金定理(Fermi's Golden rule)計算電子由導電帶躍遷至價電帶的發光強度和偏振，當量子點越不對稱則偏振越強，而且量子點越高其偏振也越強，在量子點體積固定下，量子點越不對稱則高度越矮，使得偏振變弱。最後本文章使用部分組態交互作用計算偏振(DOP)，該理論結果顯示激子中電子和電洞間的關聯性的庫倫作用力導致DOP進一步微幅下修(<5%)。

# **Theoretical studies of optical polarization anisotropy of stress-free GaAs/AlGaAs quantum dots**

**Student : Chien-Chih Liao**

**Advisor : Shun-Jen Cheng**

**Department of Electrophysics**

**National Chiao Tung University**

## **Abstract**

This thesis theoretically investigates the optical anisotropy of GaAs/AlGaAs quantum dots grown by droplet epitaxy. The stress-free QD system allows us to focus on the geometry effects on optical anisotropy.

First, the single particle spectra are separately calculated using the single-band effective mass model for conduction electron and four-band Luttinger-Kohn  $k \cdot p$  theory for valence hole using 3D finite difference method. For more analysis, we further build up three dimensional(3D) parabolic models for the quantum dots under study according to the numerically calculated electronic structures. Second, the photoluminescence (PL) intensity and the degree of optical polarization (DOP) for the recombination of e-h pairs are calculated using the Fermi's Golden Rule. It is found that, besides the commonly known effect of lateral elongation, the height of QD is even more essential in the optical DOP of the droplet epitaxial dots.

Finally, the influence of Coulomb interaction on polarization anisotropy is examined by using the partial configuration interaction (PCI) method. The calculated results show that Coulomb interactions in excitons make the DOPs slightly decreased (<5%).

## 誌謝

碩班三年的生活中，首先感謝家人支持和鼓勵，陪伴著我走到碩班生活的尾聲。

感謝實驗室的書楷、禹淮、虔震、彥廷、野人、小銘、勇達…學長們的幫助，不管是在學業上的討論或者生活上的建議都讓我獲益良多，希望你們都可以找到自己的一片天空；也要感謝同屆的智豪、丞偉、語宸、力璋、以理和書瑜的陪伴，祝福你們往後可以過著自己喜歡的生活；也要感謝學弟妹家祥、智璋、佩儀和書睿在最後一年的陪伴，期望你們可以趕快完成碩士工作；更要感謝鄭舜仁老師三年來的敦敦教誨，讓我了解一個研究生應該具備的能力和心態，也讓我了解進行物理研究將面臨的困難和挑戰，祝福老師身體健康。

在此感謝日本筑波材料實驗機構的黑田隆老師的研究團隊提供的實驗數據。

最後感謝口試委員朱仲夏老師，牟中瑜老師，張文豪老師和林炯源老師對我的碩士工作以及論文的指導，點出我碩班工作的缺陷，讓我將碩士工作做得更完整。

目錄

|                                |     |
|--------------------------------|-----|
| 摘要 .....                       | i   |
| <b>Abstract</b> .....          | ii  |
| 誌謝 .....                       | iii |
| 目錄 .....                       | iv  |
| 表目錄 .....                      | v   |
| 圖目錄 .....                      | vi  |
| 第一章、導論 .....                   | 1   |
| 1.1 簡介 .....                   | 1   |
| 1.2 研究動機 .....                 | 1   |
| 1.3 章節概要 .....                 | 6   |
| 第二章、量子點內單一激子系統的電子結構和交互作用 ..... | 7   |
| 2.1 量子點內單一激子系統的電子結構 .....      | 7   |
| 2.2 激子系統的直接庫倫作用 .....          | 11  |
| 2.3 激子系統的組態交互作用 .....          | 19  |
| 第三章、單一激子系統的偏振光譜 .....          | 22  |
| 3.1 偏振光譜的一般形式 .....            | 22  |
| 3.2 三維拋物線模型的偏振光譜的解析解 .....     | 28  |
| 3.3 組態交互作用對偏振光譜的修正 .....       | 40  |
| 第四章、結果與討論 .....                | 42  |
| 4.1 真實量子點結構的探討 .....           | 42  |
| 4.2 量子點大小對基態激子偏振光譜的影響 .....    | 45  |
| 4.3 基態和激發態激子的偏振光譜 .....        | 56  |
| 4.4 組態交互作用對偏振光譜的影響 .....       | 68  |
| 第五章、結論 .....                   | 73  |
| 參考文獻 .....                     | 74  |
| 附錄A .....                      | 76  |
| 附錄B .....                      | 79  |

## 表目錄

|   |    |
|---|----|
| 表 1.2.1、DROPLET-EPITAXIAL量子點的幾何大小.....  | 4  |
| 表 2.1.1、 $x\parallel[1\bar{1}0]$ 、 $y\parallel[110]$ 和 $z\parallel[001]$ 座標系統下的 $P$ ， $Q$ ， $R$ ， $S$ 數學形式..... | 10 |
| 表 2.2.1、價電帶空軌域和電洞的BLOCH'S FUNCTION轉換.....   | 12 |
| 表 2.3.1、不同激子組態的示意圖.....   | 20 |
| 表 2.3.2、不同激子組態的數學形式.....  | 20 |
| 表 3.2.1、輕重電洞不同方向的有效質量.....  | 29 |
| 表 4.4.1、不同激子組態的示意圖。.....  | 70 |



## 圖目錄

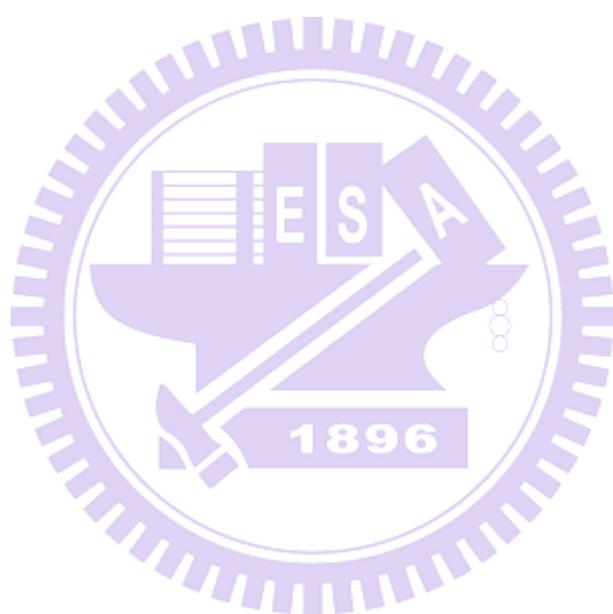
|  |    |
|--|----|
| 圖 1.2.1、(A) 退火溫度 $500^{\circ}\text{C}$ 下，形成的 DROPLET-EPITAXIAL 量子點。(B) DROPLET-EPITAXIAL 量子點的幾何形狀，A 表示量子點短軸方向，B 表示量子點長軸方向。.....  | 2  |
| 圖 1.2.2、退火溫度 $500^{\circ}\text{C}$ 下，形成的 DROPLET-EPITAXIAL 量子點長軸方向(A)和短軸方向(B)的剖面圖。.....  | 2  |
| 圖 1.2.3、(A) 量子點在樣本上的位置示意圖。(B) 量子點結構形狀參數的示意圖。.....  | 3  |
| 圖 1.2.4、DROPLET-EPITAXIAL 量子點的幾何大小和 $xy$ 方向的不對稱性，量子點長軸方向為 $[\bar{1}10]$ ，量子點短軸方向為 $[110]$ 。.....   | 5  |
| 圖 2.1.1、電子在量子點內感受到異質結構形成的位能示意圖。.....   | 8  |
| 圖 2.1.2、電洞在量子點內感受到異質結構形成的位能示意圖。.....   | 9  |
| 圖 2.1.3、座標系的示意圖。(A)卡式座標系。(B)利用旋轉得到的新座標系，黑色虛線為卡式(舊)座標系，紅色實線為新座標系統。.....   | 10 |
| 圖 2.2.1、位置向量分解示意圖。.....  | 13 |
| 圖 3.1.1、激子系統的再結合產生輻射光子的示意圖。(A)激子總角動量為-1 的發光機制。(B)激子總角動量為+1 的發光機制。.....   | 22 |
| 圖 3.1.2、 $xy$ 平面發光強度示意圖。.....  | 26 |
| 圖 3.1.3、固定 $l_y = 8.0\text{nm}$ , $l_z = 2.5\text{nm}$ 時，重電洞(+3/2)和輕電洞(-1/2)的混成比例隨量子點長軸長度 $l_x$ 的改變。.....  | 27 |
| 圖 4.1.1、QD-A 其 $x$ - $z$ 平面的剖面圖，取 $y=0(\text{NM})$ 的切面圖。.....  | 42 |
| 圖 4.1.2、QD-A 其 $y$ - $z$ 平面的剖面圖，取 $x=0(\text{NM})$ 的切面圖。.....  | 42 |
| 圖 4.1.3、量子點結構為 2D-GAUSSIAN，數值模擬輻射光子波長。.....  | 43 |
| 圖 4.1.4、實驗量測得到的輻射光子波長。.....  | 43 |
| 圖 4.1.5、量子點結構為 2D-GAUSSIAN，數值模擬輻射光子偏振的強度。.....   | 43 |
| 圖 4.1.6、實驗量測得到的輻射光子偏振的強度。.....   | 43 |
| 圖 4.1.7、量子點結構為 2D-GAUSSAIN 模擬的波函數和三維拋物線模型採用 $l_x = 10(\text{nm})$ 、 $l_y = 8(\text{nm})$ 和 $l_z = 3.5625(\text{nm})$ 下，模擬的波函數比較圖。.....   | 44 |
| 圖 4.2.1、固定 $l_y = 8.0\text{nm}$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下，電子的束縛位能。(A) $x$ 方向，取 $y=0, z=0, \eta_{\parallel} = 1.5$<br>。(B) $x$ 方向，取 $y=0, z=0, \eta_{\parallel} = 3.0$ 。..... | 45 |
| 圖 4.2.2、固定 $l_y = 8.0\text{nm}$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下，電子基態波包函數。(A) $xy$ 平面，取 $z=0, \eta_{\parallel} = 1.5$ 。   |    |

|   |    |
|---|----|
| (B) $xy$ 平面，取 $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.0$ ° .....  | 46 |
| 圖 4.2.3、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下，電子基態波包函數。(A) $xz$ 平面，取 $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.5$ ° .....  | 46 |
| (B) $xz$ 平面，取 $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.0$ ° .....  | 46 |
| 圖 4.2.4、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下，輕重電洞的束縛位能。(A) $x$ 方向，取 $y=0, z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.5$ ° (B) $x$ 方向，取 $y=0, z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.0$ ° .....          | 47 |
| 圖 4.2.5、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下，電洞基態波包函數。(A) $xy$ 平面，取 $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.5$ ° .....  | 48 |
| (B) $xy$ 平面，取 $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.0$ ° .....  | 48 |
| 圖 4.2.6、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下，電洞基態波包函數。(A) $xz$ 平面，取 $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.5$ ° .....  | 48 |
| (B) $xz$ 平面，取 $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.0$ ° .....  | 48 |
| 圖 4.2.7、固定量子點高度 ( $\eta_{\perp} \approx 0.19, 0.25, 0.31, 0.38, 0.44$ ) 及短軸長度 $l_y = 8.0nm$ 下，改變量子點不對稱性 ( $\eta_{\parallel} = 1.25 \sim 3.50$ ) 對偏振的影響。 .....                               | 49 |
| 圖 4.2.8、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下，純輕重電洞個別的基態能階圖。 .....   | 49 |
| 圖 4.2.9、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下， $\rho_{HL}$ 隨不對稱性的改變。 .....   | 49 |
| 圖 4.2.10、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下，不對稱性 $\eta_{\parallel} = 1.25 \sim 3.50$ 的重電洞 (3/2) 和輕電洞 (-1/2) 的成份圖。 .....   | 50 |
| 圖 4.2.11、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下，不對稱性 $\eta_{\parallel} = 1.25 \sim 3.50$ 的輕電洞 (-1/2) 和電子波包函數的重疊比例圖。 .....   | 50 |
| 圖 4.2.12、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\parallel} \approx 2.25$ 下，電子的束縛位能。(A) $z$ 方向，取 $x=0, y=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ ° (B) $z$ 方向，取 $x=0, y=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ ° ..... | 51 |
| 圖 4.2.13、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\parallel} \approx 2.25$ 下，電子基態波包函數。(A) $xy$ 平面，取 $z=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ ° (B) $xy$ 平面，取 $z=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ ° .....        | 51 |
| 圖 4.2.14、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\parallel} \approx 2.25$ 下，電子基態波包函數。(A) $xz$ 平面， $y=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ ° .....   | 51 |

|   |    |
|---|----|
| ◦ (B) $xz$ 平面， $\gamma=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ ◦ .....   | 52 |
| 圖 4.2.15、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\parallel} \approx 2.25$ 下，電洞的束縛位能。(A) $z$ 方向，取 $x=0, y=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。(B) $z$ 方向，取 $x=0, y=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ ◦ .....  | 52 |
| 圖 4.2.16、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\parallel} = 2.25$ 下，電洞基態波包函數。(A) $xy$ 平面，取 $z=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ ◦ (B) $xy$ 平面，取 $z=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ ◦ .....  | 53 |
| 圖 4.2.17、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\parallel} = 2.25$ 下，電洞基態波包函數。(A) $xz$ 平面， $\gamma=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ ◦ (B) $xz$ 平面， $\gamma=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ ◦ .....  | 54 |
| 圖 4.2.18、固定量子點短軸長度 $l_y = 8.00(nm)$ 及 $xy$ 平面不對稱性( $\eta_{\parallel} = 1.25、1.75、2.25、2.75、3.50$ )下，改變量子點高度( $\eta_{\perp} \approx 0.19、0.25、0.31、0.38、0.44$ )對偏振強度的影響。.....  | 54 |
| 圖 4.2.19、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\parallel} = 2.25$ 下，純輕重電洞個別的基態能階圖。.....   | 55 |
| 圖 4.2.20、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\parallel} = 2.25$ 下， $\rho_{HL}$ 隨不對稱性的改變。.....   | 55 |
| 圖 4.2.21、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\parallel} = 2.25$ 下，縱向不對稱性 $\eta_{\perp} \approx 0.19、0.25、0.31、0.38$ 和 $0.44$ 的重電洞( $3/2$ )和輕電洞( $-1/2$ )的成份圖。.....  | 55 |
| 圖 4.2.22、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\parallel} = 2.25$ 下，縱向不對稱性 $\eta_{\perp} \approx 0.19、0.25、0.31、0.38$ 和 $0.44$ 的輕電洞( $-1/2$ )和電子波包函數的重疊比例圖。.....  | 55 |
| 圖 4.3.1、固定 $l_y = 8nm, \Omega_l = 285nm^3$ 時，量子點幾何大小變化圖。.....   | 56 |
| 圖 4.3.2、固定 $l_y = 8nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 的電子的束縛位能。(A) $x$ 方向，取 $y=0, z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50, \eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $x$ 方向，取 $y=0, z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00, \eta_{\perp} \approx 0.19$ 。(C) $z$ 方向，取 $x=0, y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50, \eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $z$ 方向，取 $x=0, y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00, \eta_{\perp} \approx 0.19$ ◦ ..... | 57 |
| 圖 4.3.3、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下，電子基態波包函數。(A) $xy$ 平面，取 $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $xy$ 平面，取 $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ ◦ .....   | 58 |
| 圖 4.3.4、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下，電子基態波包函數。(A) $xz$ 平面，取 $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50$ ，  |    |

|   |    |
|---|----|
| $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $xz$ 平面，取 $Y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。  | 58 |
| 圖 4.3.5、固定 $l_y = 8nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 的輕重電洞的束縛位能。(A) $x$ 方向，取 $y=0$ ， $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50, \eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $x$ 方向，取 $y=0$ ， $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00, \eta_{\perp} \approx 0.19$ 。(C) $z$ 方向，取 $x=0$ ， $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50, \eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $z$ 方向，取 $x=0$ ， $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00, \eta_{\perp} \approx 0.19$ 。 | 59 |
| 圖 4.3.6、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下，電洞基態波包函數。(A) $xy$ 平面，取 $Z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $xy$ 平面，取 $Z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。   | 60 |
| 圖 4.3.7、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下，電洞基態波包函數。(A) $xz$ 平面，取 $Y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $xz$ 平面，取 $Y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。   | 60 |
| 圖 4.3.8、固定不同的 $l_y$ 和 $\Omega_l$ 後，基態激子的躍遷能量圖。  | 61 |
| 圖 4.3.9、固定不同的 $l_y$ 和 $\Omega_l$ 後，基態激子的偏振強度圖。  | 61 |
| 圖 4.3.10、固定 $l_y = 8nm, \Omega_l = 285nm^3$ 時，解析方法和數值模擬的偏振強度結果圖。  | 61 |
| 圖 4.3.11、固定 $l_y = 8nm, \Omega_l = 285nm^3$ 時，純輕重電洞個別的基態能階圖。  | 61 |
| 圖 4.3.12、固定 $l_y = 8nm, \Omega_l = 285nm^3$ 時，重電洞(+3/2)和輕電洞(-1/2)的混成比例隨著 $xy$ 平面的不對稱向的改變。   | 62 |
| 圖 4.3.13、固定 $l_y = 8nm, \Omega_l = 285nm^3$ 時，輕電洞(-1/2)和電子(1/2)的波包函數隨著 $xy$ 平面的不對稱向的改變。   | 62 |
| 圖 4.3.14、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下，電子 $xy$ 平面 $P_x$ 軌域波包函數。(A) $xy$ 平面，取 $Z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $xy$ 平面，取 $Z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。   | 64 |
| 圖 4.3.15、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下，電子 $xy$ 平面 $P_x$ 軌域波包函數。(A) $xz$ 平面，取 $Y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $xz$ 平面，取 $Y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。   | 64 |

|  |    |
|--|----|
| 圖 4.3.16、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下，電洞 $xy$ 平面 $P_x$ 軌域波包函數。(A) $xy$ 平面，取 $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $xy$ 平面，取 $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。.....   | 65 |
| 圖 4.3.17、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下，電洞 $xz$ 平面 $P_x$ 軌域波包函數。(A) $xz$ 平面，取 $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(B) $xz$ 平面，取 $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。.....   | 65 |
| 圖 4.3.18、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下。(A) 基態和 $P_x$ 軌域的激子系統偏振強度圖，點線為數值模擬，實線則為解析解的結果。(B) $\eta_{\parallel} = 1.50$ ，基態激子系統的 $XY$ 平面發光強度圖。(C) $\eta_{\parallel} = 3.00$ ，基態激子系統的 $XY$ 平面發光強度圖。(D) $\eta_{\parallel} = 1.50$ ， $P_x$ 軌域激子系統的 $XY$ 平面發光強度圖。(E) $\eta_{\parallel} = 3.00$ ， $P_x$ 軌域激子系統的 $XY$ 平面發光強度圖。..... | 66 |
| 圖 4.3.19、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下，基態(紅色虛線)和 $P_x$ 軌域(藍色實線)的激子系統的 $\Delta_{HL}$ 的圖。.....   | 67 |
| 圖 4.3.20、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下，基態和 $P_x$ 軌域的激子系統的輕重電洞成份圖。.....   | 67 |
| 圖 4.3.21、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\Omega_l = 285nm^3$ 下， $P_x$ 軌域的激子系統的電子和輕重電洞的波包函數重疊比例圖。.....  | 67 |
| 圖 4.4.1、自組式(SELF-ASSEMBLED) INAs/GAAs 量子點。.....  | 68 |
| 圖 4.4.2、HIERARCHICAL GAAs/ALGAAs 量子點。.....   | 69 |
| 圖 4.4.3、電子能譜隨著量子點不對稱性的變化。.....   | 69 |
| 圖 4.4.4、輕重電洞耦合後的電洞能譜隨著量子點不對稱性的變化。.....   | 69 |
| 圖 4.4.5、固定 $l_y = 8nm, \Omega_l = 285nm^3$ 下，不同激子組態( $S$ 軌域、 $P_x$ 軌域、 $P_y$ 軌域、 $D_x$ 軌域、 $F_x$ 軌域)的偏振強度隨不對稱性改變圖。.....  | 71 |
| 圖 4.4.6、固定 $l_y = 8nm, \Omega_l = 285nm^3$ 下，不同激子組態( $S$ 軌域、 $P_x$ 軌域、 $P_y$ 軌域、 $D_x$ 軌域、 $F_x$ 軌域)混成的成分隨不對稱性改變圖。.....  | 72 |
| 圖 4.4.7、固定 $l_y = 8nm, \Omega_l = 285nm^3$ 下，紅色實心圓為考慮 PCI 方法的數值模擬、藍色實心三角形為 $S$ 軌域激子系統的數值模擬和灰色實線解析方法的 $XY$ 平面偏振強度結果圖。   |    |



# 第一章、導論

## 1.1 簡介

在上世紀，人類為理解小尺寸世界提出量子力學，在量子力學的世界中，一切的狀態都有可能存在只是機率高低的問題。近十多年，人們持續研究量子資訊(Quantum information)[1]，傳統計算機中利用「0」和「1」，兩種不同的位元狀態，進行演算和儲存等等工作。量子資訊的主要研究內容之一，便是利用不同偏振狀態的量子態當成量子位元(quantum bit)來取代傳統計算機中「0」和「1」的位元體的功能。當兩個粒子處於不同的量子態且彼此的量子態會互相影響不可區分便是量子糾纏態，而且量子糾纏態具有疊加性和量測量子態時不會破壞原本的量子態的特性，其中疊加性使得我們可以利用少數的量子位元儲存大量的資訊，讓計算機可以儲蓄更大量的資料；糾纏的特性可以讓我們知道訊息傳遞過程中是否被攔截竊聽，這使得量子傳輸比起傳統傳輸具有更好的保密性，也因為訊息傳遞速度趨近無窮快，可以讓計算機的處理速度進一步提升。

## 1.2 研究動機

本文主要研究的系統是，droplet-epitaxial 量子點[2]如下圖 1.2.1(a)和 1.2.1(b)，它是由液滴狀的 GaAs 噴灑在 AlGaAs 的基板上再根據不同的溫度的退火處理微調量子點的幾何大小，而且 droplet-epitaxial 量子點因為 GaAs 和 AlGaAs 的晶格常數(lattice constant)匹配，所以 droplet-epitaxial 量子點是一個沒有應力作用的系統，讓我們可以專注在幾何形狀大小對物理量的影響。

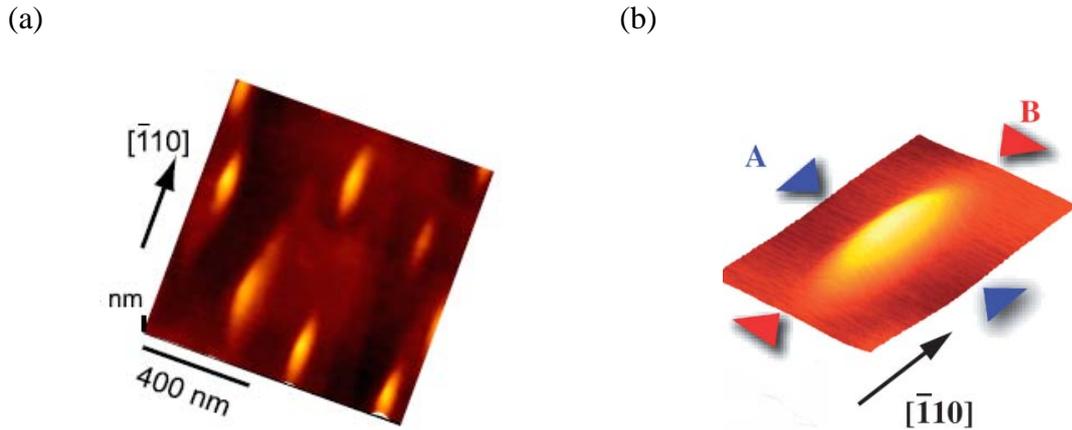


圖 1.2.1、(a) 退火溫度 500<sup>0</sup>C 下，形成的 droplet-epitaxial 量子點。(b) droplet-epitaxial 量子點的幾何形狀，A 表示量子點短軸方向，B 表示量子點長軸方向。

參考資料:Appl. Phys. Exp. 3, 045502(2010).[2]

上面兩圖 1.2.1(a)和 1.2.1(b)是利用原子力顯微鏡(AFM)量測得到的 droplet-epitaxial 量子點樣本的俯視圖，其中 A 表示量子點短軸方向，B 表示量子點長軸方向，則量子點長軸方向(A || [1-10])和短軸方向(B || [110])的剖面圖如下圖 1.2.2：

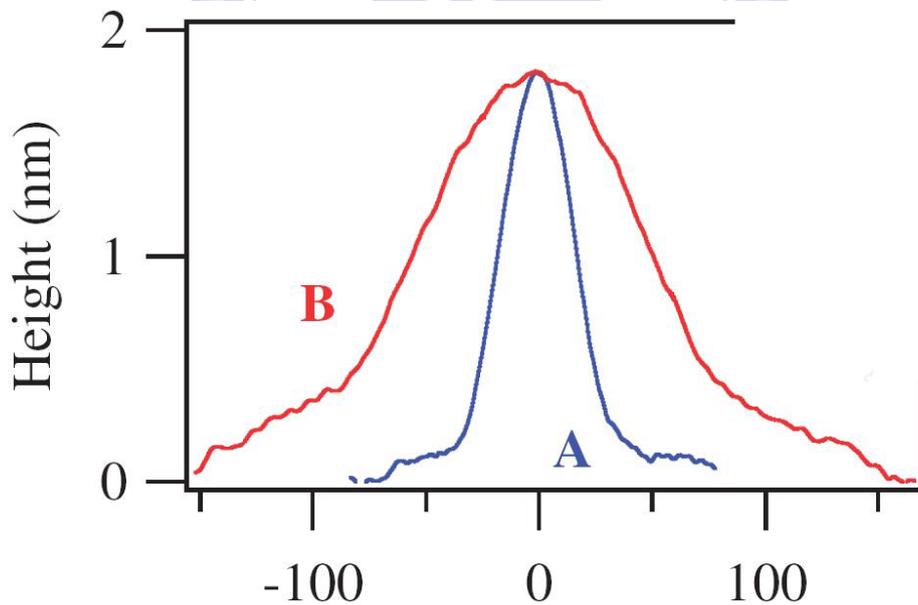


圖 1.2.2、退火溫度 500<sup>0</sup>C 下，形成的 droplet-epitaxial 量子點長軸方向(A)和短軸方向(B)的剖面圖。

參考資料:Appl. Phys. Exp. 3, 045502(2010).[2]

由圖 1.2.2 所示，定義量子點結構形狀為 2D-gaussian，數學形式如下(1.2.1)式：

$$\left\{ (x, y, z) \mid z \leq H \exp \left[ -\frac{(x-x_0)^2}{\sigma_x^2} - \frac{(y-y_0)^2}{\sigma_y^2} \right] \cap z \geq 0 \right\} \quad (1.2.1)$$

(1.2.1)式中， $(x, y, z)$ 表示量子點表面和內部位置座標的空間集合， $(x_0, y_0)$ 表示量子點中心點在樣本上的位置座標，其示意圖如下圖 1.2.3(a)， $H$ 代表量子點中心的高度， $\sigma_x$ 和 $\sigma_y$ 分別代表反映量子點底部長軸和短軸長短的參數示意圖如下圖 1.2.3(b)，其關係式如下(1.2.2)和(1.2.3)式：

$$\text{長軸底部長度} \equiv 2\sigma_x \quad (1.2.2)$$

$$\text{短軸底部長度} \equiv 2\sigma_y \quad (1.2.3)$$

則量子點結構形狀的示意圖：

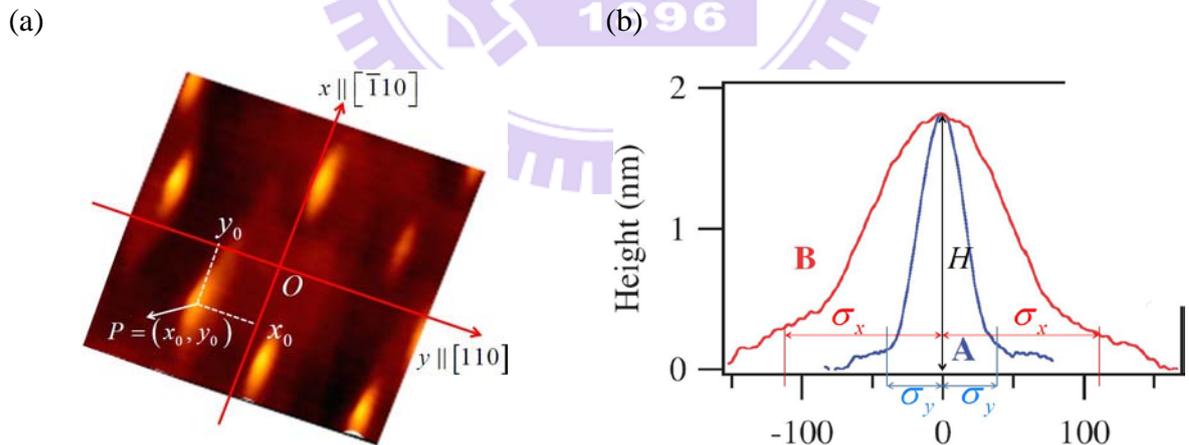


圖 1.2.3、(a) 量子點在樣本上的位置示意圖。(b) 量子點結構形狀參數的示意圖。

參考資料:Appl. Phys. Exp. 3, 045502(2010).[2]

在此，我們將介紹日本筑波國家材料研究所 Takashi 老師等，提供的實驗資料，如 Appl. Phys. Exp. 3, 045502，他們先藉由 droplet-epitaxy 技術製作一組幾何形狀一樣但大小不同的量子點，其量子點幾何大小收錄在下表 1.2.1 中，不同大小的量子點有著不同的高度和  $xy$  方向的不對稱性如下圖 1.2.2。然後量測沿  $z$  方向傳遞的光隨不同偏振片角度下的發光強度，最後得到偏振強度和輻射光子能量的結果則隨不同量子點幾何大小改變：

表 1.2.1、droplet-epitaxial 量子點的幾何大小

|      | 溫度                 | 長軸底部長度 $[1\bar{1}0]$ | 短軸底部長度 $[110]$ | 高度 $[001]$     |
|------|--------------------|----------------------|----------------|----------------|
| 單位   | $^{\circ}\text{C}$ | nm                   | nm             | nm             |
| QD-A | 400                | $68.3 \pm 4.8$       | $52.7 \pm 6.1$ | $11.1 \pm 2.1$ |
| QD-B | 450                | $89.1 \pm 6.3$       | $57.7 \pm 4.5$ | $7.5 \pm 1.1$  |
| QD-C | 475                | $118.0 \pm 13.0$     | $55.4 \pm 4.7$ | $4.6 \pm 1.7$  |
| QD-D | 500                | $220.0 \pm 39.0$     | $64.5 \pm 7.9$ | $1.5 \pm 0.6$  |

量子點幾何形狀的不對稱性定義，如下(1.2.4)式：

$$\eta_{\parallel}^{geom} (\text{Aspect ratio}) = \frac{\text{長軸底部長度}(2\sigma_x)}{\text{短軸底部長度}(2\sigma_y)} \quad (1.2.4)$$

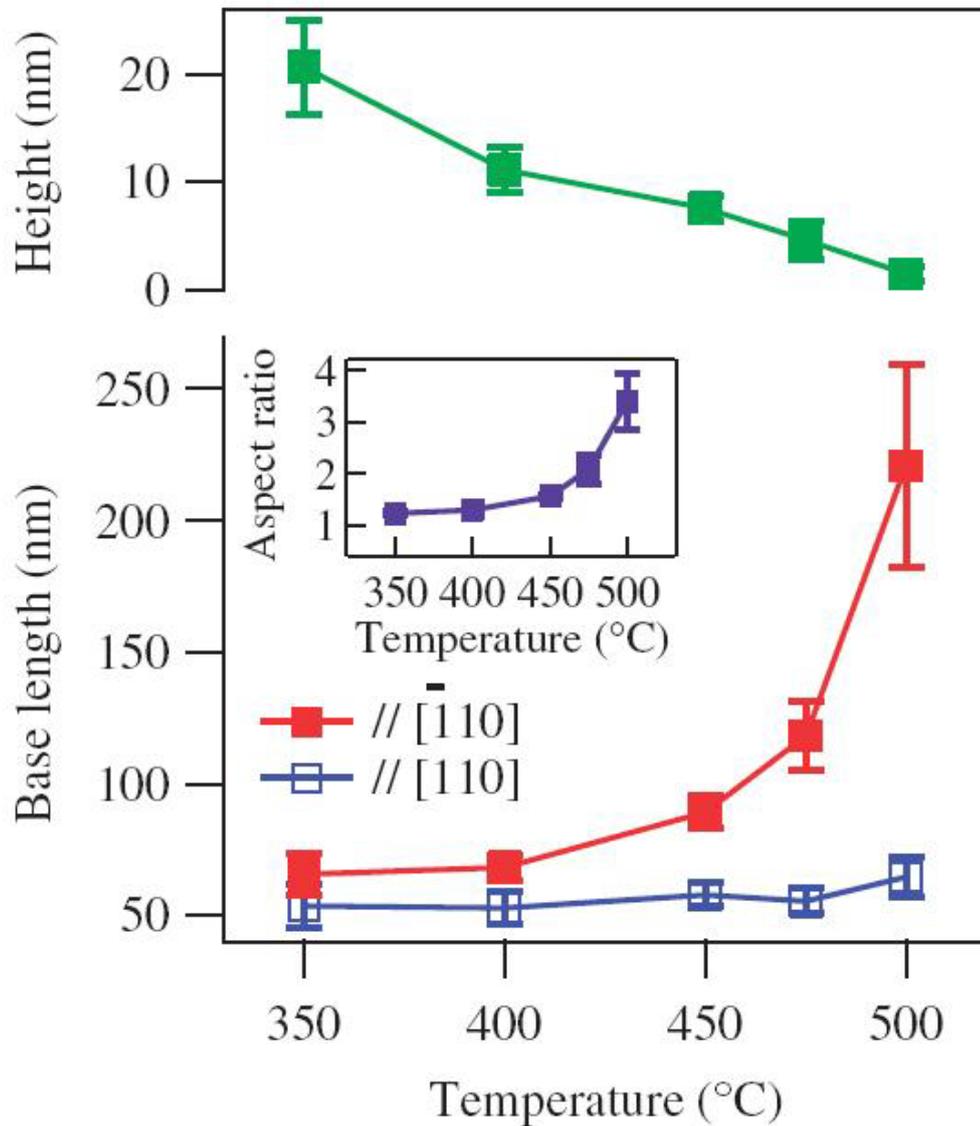


圖 1.2.4、droplet-epitaxial 量子點的幾何大小和  $xy$  方向的不對稱性，量子點長軸方向為  $[\bar{1}10]$ ，量子點短軸方向為  $[110]$ 。

參考資料:Appl. Phys. Exp. 3, 045502(2010).[2]

在 InAs/GaAs 量子點的研究中顯示，當量子點不對稱性越大，偏振越強，可是自組式 InAs/GaAs 量子點為晶格不匹配形成的量子點，此種量子點會有應力的效應，讓我們很難區分造成光偏振是因為結構幾何或者是應力造成，所以本文章主要的研究關注在沒有應力的量子點其結構幾何對光偏振的影響。

### 1.3 章節概要

第一章、我們簡介 droplet-epitaxial 量子點和實際上的應用。第二章、我們利用  $k \cdot p$  單能帶和四能帶理論搭配波包近似法計算激子系統的電子結構、庫倫交互作用以及組態交互作用。第三章、我們利用費米黃金定理(Fermi's Golden Rule)推導激子系統發光強度，進一步利用三維拋物線模型推導出基態( $S$  軌域)激子系統偏振強度的解析式，最後考慮組態交互作用找出不同激子組態混成後的發光強度。第四章是主要的結果，在此我們會討論，真實量子點結構大小，進而將量子點結構位能用三維拋物線模型近似接著討論量子點幾何大小對基態激子系統偏振的影響，進一步探討激發態的偏振的變化，最後加入組態交互作用修正後的偏振的改變。第五章，則是做最後的結論以及本工作未來的展望。



## 第二章、量子點內單一激子系統的電子結構和交互作用

本文章為研究量子點內單一激子系統經過一段時間(約  $10^{-9}$  秒)，激子系統湮滅(電子-電洞對再結合)，多餘的能量以電磁波形式輻射，其中輻射光子的物理性質。

本章節將介紹我們考慮的量子點內單一激子系統的 Hamiltonian。

### 2.1 量子點內單一激子系統的電子結構

激子系統由導電帶電子和價電帶電洞組成，計算激子系統的電子結構，必須先分別計算導電帶電子和價電帶電洞的電子結構，導電帶電子以  $k \cdot p$  單能帶模型搭配波包近似法、價電帶電洞以  $k \cdot p$  四能帶模型搭配波包近似法則波函數可分別表示為下(2.1.1)、

(2.1.2)二式:

$$\Psi_{i_e}^e(\vec{r}) = \sum_{s_z = \pm 1/2} g_{i_e, s_z}^e(\vec{r}) u_{s_z}^e(\vec{r}) \quad (2.1.1)$$

$$\Psi_{i_h}^h(\vec{r}) = \sum_{j_z = \pm 3/2, \pm 1/2} g_{i_h, j_z}^h(\vec{r}) u_{j_z}^h(\vec{r}) \quad (2.1.2)$$

(2.1.2)式為導電帶電子的波函數，(2.1.3)式為價電帶電洞的波函數。 $g_{i_e, s_z}^e(\vec{r})$  與  $g_{i_h, j_z}^h(\vec{r})$  分別為導電帶電子，價電帶電洞的波包方程式(envelope function)， $u_{s_z}^e(\vec{r})$  與  $u_{j_z}^h(\vec{r})$  為導電帶電子，價電帶電洞的 Bloch's function 且  $s_z$  與  $j_z$  分別表示導電帶電子，價電帶電洞的自旋角動量  $z$  方向的分量。

利用(2.1.1)式的電子波函數搭配單能帶有效質量近似法寫下電子等效的 Schrödinger equation，如下(2.1.3)式：

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0 m_e^*} + V_{QD}^e(\vec{r}) \right] g_{i_e}^e(\vec{r}) = E_{i_e}^e g_{i_e}^e(\vec{r}) \quad (2.1.3)$$

(2.1.3)式中， $V_{QD}^e$  為電子感受的量子點結構和材料形成的位能[3]， $m_e^*$  為電子的有效質量，且每一能態均有電子自旋向上和自旋向下形成二重簡併態。

因為 $V_{QD}^e$  為異質結構(heterostructure)具有不同的能隙(Energy gap)[4]造成異質結構的界面有能隙不連續的現象(band offset)使得電子在量子點的邊緣感受到一個有限深位能井且位障高度(barrier high)取決於 Al 的成分，如下圖 2.1.1，本文所探討的 droplet-epitaxy 技術所製作的量子點其結構形狀為 2D-gaussian 如圖 1.2.1(b)，所以對於 droplet-epitaxial 量子點，電子會被束縛在一個幾何形狀像 2D-gaussian 的三維有限深位能井內。

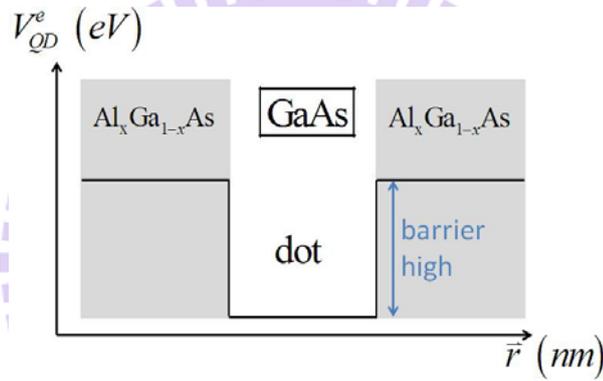


圖 2.1.1、電子在量子點內感受到異質結構形成的位能示意圖。

價電帶電洞的電子結構的計算，我們並非直接計算價電帶存在一顆電洞的電子結構情形，而是計算價電帶遺留一個電子空軌域(未被電子占據的狀態)的情況，則價電帶空軌域的波函數可以表示為：

$$\Psi_{i_v}^v(\vec{r}) = \sum_{j_z = \pm 3/2, \pm 1/2} g_{i_v, j_z}^v(\vec{r}) u_{j_z}^v(\vec{r}) \quad (2.1.4)$$

利用(2.1.4)式的波函數和  $k \cdot p$  四能帶模型和波包近似法得到價電帶空軌域的 Hamiltonian 如下式(2.1.5)：

$$H = H^{LK} + V_{QD}^v \quad (2.1.5)$$

(2.1.5)式中， $H^{LK}$  為 Luttinger Kane matrix 形式如下(2.1.6)式。

$$H^{LK} = - \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 \\ -S^\dagger & P-Q & 0 & R \\ R^\dagger & 0 & P-Q & S \\ 0 & R^{\dagger\dagger} & S & P+Q \end{bmatrix} \begin{array}{l} |J=3/2, J_z=3/2\rangle \\ |J=3/2, J_z=1/2\rangle \\ |J=3/2, J_z=-1/2\rangle \\ |J=3/2, J_z=-3/2\rangle \end{array} \quad (2.1.6)$$

(2.1.7)式中， $|J=3/2, J_z=3/2\rangle$ ， $|J=3/2, J_z=1/2\rangle$ ， $|J=3/2, J_z=-1/2\rangle$ ，

$|J=3/2, J_z=-3/2\rangle$  為 Luttinger Kane matrix 的基底[5]。

而  $V_{QD}^v$  為電洞在價電帶感受到的量子點結構和形狀(2D-gaussian)形成的位能，其原因同

上  $V_{QD}^e$  的討論則示意圖如下圖 2.1.2：

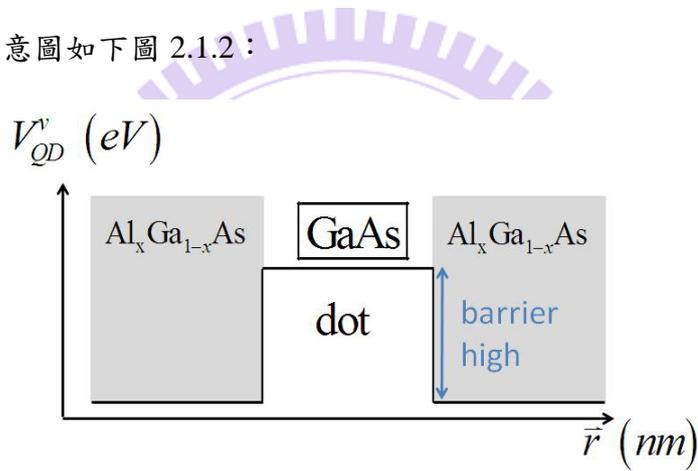
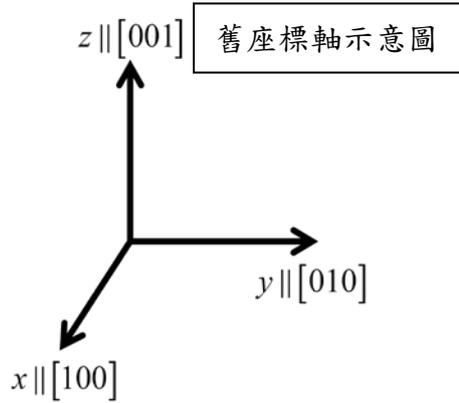


圖 2.1.2、電洞在量子點內感受到異質結構形成的位能示意圖。

在本文中，我們參考[6,7]的座標轉換方法，將固定晶面方向為  $z \parallel [001]$  方向利用旋轉將原本  $x \parallel [100]$  和  $y \parallel [010]$  的座標系統轉換成  $x \parallel [1\bar{1}0]$  和  $y \parallel [110]$  的新座標系統後，則新舊座標的示意圖可參考，如下圖 2.1.1，其中矩陣元素  $P$ ， $Q$ ， $R$ ， $S$  在  $x \parallel [1\bar{1}0]$ 、 $y \parallel [110]$  和  $z \parallel [001]$  的座標系統下的形式收錄在下表 2.1.1：

(a)



(b)

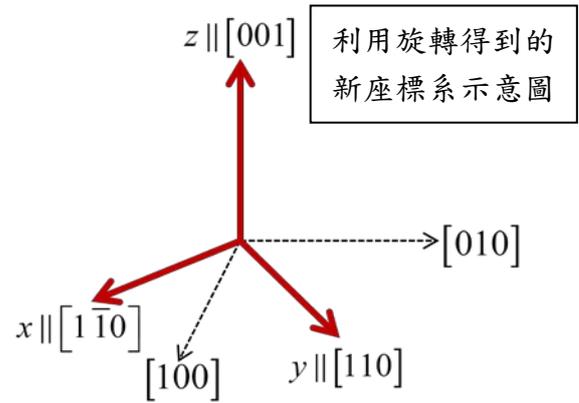


圖 2.1.3、座標系的示意圖。(a)卡式座標系。(b)利用旋轉得到的新座標系，黑色虛線為卡式(舊)座標系，紅色實線為新座標系統。

表 2.1.1、 $x \parallel [1\bar{1}0]$ 、 $y \parallel [110]$ 和  $z \parallel [001]$ 座標系統下的  $P$ ， $Q$ ， $R$ ， $S$  數學形式

|     |   |
|-----|---|
| $P$ | $-\frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$   |
| $Q$ | $-\frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - 2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$   |
| $R$ | $-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ -\sqrt{3} \gamma_3 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + i 2 \sqrt{3} \gamma_2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right]$ |
| $S$ | $-\frac{\hbar^2 \gamma_3}{m_0} \sqrt{3} \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \frac{\partial}{\partial z}$   |

最後利用有限差分法(finite difference method)離散化(2.1.4)和(2.1.6)兩式成為矩陣形式，再使用 ARPACK 對角化[8]，分別得知導電帶電子、價電帶空軌域，不同態所對應的系統動能與波包函數。

價電帶使用空軌域來描述，被我們稱為電子觀點，若價電帶用電洞描述則為電洞觀點，價電帶空軌域和電洞的電子結構是不同的，這部分將在下一節中介紹。

## 2.2 激子系統的直接庫倫作用

在此，本文章考慮系統的 Hamiltonian 的二次量子化形式如下(2.2.1)式：

$$H_X = \sum_{i_e, s_z} E_{i_e}^e c_{i_e, s_z}^{\dagger\dagger\dagger\dagger} c_{i_e, s_z} + \sum_{i_h, j_z} E_{i_h}^h h_{i_h, j_z} h_{i_h, j_z} - \sum_{i_e, j_h, k_h, l_e} V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh} c_{i_e, s_z} h_{j_h, j_z} h_{k_h, j_z} c_{l_e, s_z} \quad (2.2.1)$$

(2.2.1)式中， $E_{i_e}^e$  為單電子處於第  $i_e$  狀態的系統動能， $E_{i_h}^h$  為單電洞處於第  $i_h$  狀態的系統動

能， $V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh} \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{i_e}^{e*}(\vec{r}_1) \Psi_{j_h}^{h*}(\vec{r}_2) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi_{k_h}^h(\vec{r}_2) \Psi_{l_e}^e(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$  表示單激子系統的庫倫

矩陣元素， $c_{i_e}^{\dagger}$  和  $h_{i_e}^{\dagger}$  分別表示電子和電洞的產生算符，而  $c_{i_e}$  和  $h_{i_e}$  則分別表示電子和電洞

的湮滅算符。

我們首先要利用上一節的價電帶空軌域電子結構找出電洞的電子結構，電洞為價電帶少了一個束縛電子，剩餘束縛電子的整體運動行為，簡化成一個電洞來描述，在廖禹淮學長和鄭舜仁老師的努力下，找出價電帶空軌域和電洞的波函數的轉化為如下(2.2.2)式：

$$\Psi_i^h(\vec{r}) = \hat{T} \left( \sum_{j_z = \pm 1/2, \pm 3/2} g_{i, j_z}^v(\vec{r}) f_{-j_z} u_{-j_z}^v(\vec{r}) \right) \quad (2.2.2)$$

$$= \sum_{j_z = \pm 1/2, \pm 3/2} \left( g_{i, -j_z}^v(\vec{r}) \right)^* u_{j_z}^h(\vec{r}) \quad (2.2.3)$$

(2.2.2)和(2.2.3)式中， $\hat{T}$  為時間反轉算符， $\Psi_i^h(\vec{r})$  和  $\Psi_i^v(\vec{r})$  分別為電洞和空軌域的波函

數， $g_{i, j_z}^v(\vec{r})$  為空軌域的波包波函數， $u_{j_z}^v(\vec{r})$ 、 $u_{j_z}^h(\vec{r})$  為空軌域和電洞的 Bloch's function，

$f_{-j_z} = (-1)^{j-(-j_z)}$  為一般所選擇的因子，在此  $j = 3/2$ 。

價電帶空軌域和電洞的波包函數轉換為(2.2.3)式，Bloch's function 轉換列表供參考：

$$g_{i,j_z}^h(\vec{r}) = \left( g_{i,-j_z}^v(\vec{r}) \right)^* \quad (2.2.3)$$

表 2.2.1、價電帶空軌域和電洞的 Bloch's function 轉換

| $j_z$ | 空軌域狀態                  | 電洞狀態                   | $f_{-j_z}$      |
|-------|------------------------|------------------------|-----------------|
| +3/2  | $-u_{-3/2}^v(\vec{r})$ | $+u_{+3/2}^h(\vec{r})$ | $f_{-3/2} = -1$ |
| +1/2  | $+u_{-1/2}^v(\vec{r})$ | $+u_{+1/2}^h(\vec{r})$ | $f_{-1/2} = +1$ |
| -1/2  | $-u_{+1/2}^v(\vec{r})$ | $+u_{-1/2}^h(\vec{r})$ | $f_{+1/2} = -1$ |
| -3/2  | $+u_{+3/2}^v(\vec{r})$ | $+u_{-3/2}^h(\vec{r})$ | $f_{+3/2} = +1$ |

在上節的討論，我們知道電子和電洞的波函數分別為(2.1.1)和(2.1.2)兩式，在本節將(2.2.1)式中的庫倫矩陣元素的一般形式離散化展開並討論在奇點部分的處理方式。

庫倫矩陣元素定義，如下(2.2.4)式：

$$V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh} \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{i_e}^{e*}(\vec{r}_1) \Psi_{j_h}^{h*}(\vec{r}_2) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi_{k_h}^h(\vec{r}_2) \Psi_{l_e}^e(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (2.2.4)$$

(2.2.4)式， $e$ 為電子電量， $\epsilon_0$ 、 $\epsilon$ [9]分別為真空、材料的電導率， $\vec{r}_1$ 、 $\vec{r}_2$ 分別為電子、電洞在空間中的位置， $\Psi_{i_e}^e(\vec{r}_1)$ 表示單電子處於第 $i_e$ 狀態的波函數， $\Psi_{j_h}^h(\vec{r}_2)$ 表示單電洞處於第 $j_h$ 狀態的波函數。

定義電子在空間建立的電位為如下(2.2.5)式：

$$U_{i_e, l_e}^e(\vec{r}_2) \equiv \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Psi_{i_e}^{e*}(\vec{r}_1) \times \Psi_{l_e}^e(\vec{r}_1)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 \quad (2.2.5)$$

則庫倫矩陣元素可整理成：

$$V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{j_h}^{h*}(\vec{r}_2) \Psi_{k_h}^h(\vec{r}_2) U_{i_e, l_e}(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \quad (2.2.6)$$

下一步，我們將拆解位置向量  $\vec{r}_1 = \vec{R}_I + \vec{\tau}_1$ ， $\vec{r}_2 = \vec{R}_J + \vec{\tau}_2$ ，如下圖 2.2.1 所表示：

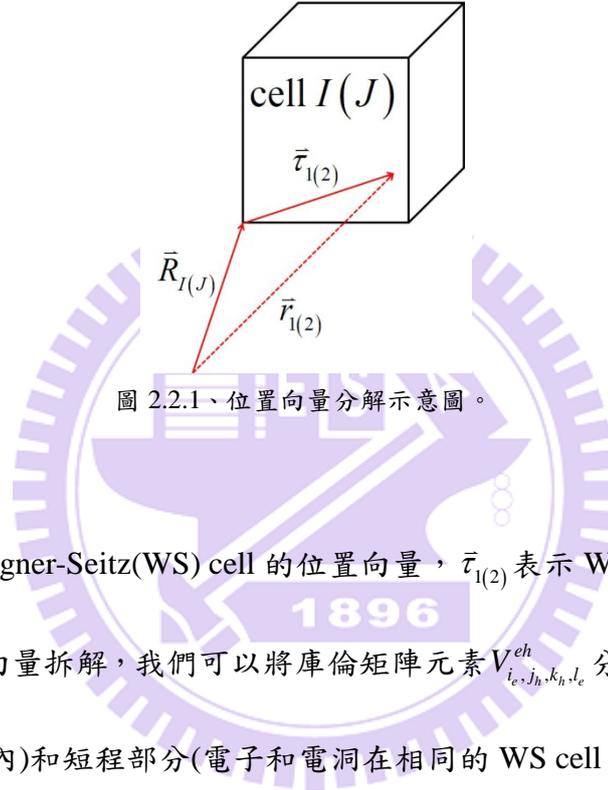


圖 2.2.1、位置向量分解示意圖。

$\vec{R}_{I(J)}$  表示第  $I(J)$  個 Wigner-Seitz(WS) cell 的位置向量， $\vec{\tau}_{1(2)}$  表示 WS cell 內的位置向量。

參考[10]後，將位置向量拆解，我們可以將庫倫矩陣元素  $V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh}$  分成長程部分(電子和電洞在不同的 WS cell 內)和短程部分(電子和電洞在相同的 WS cell 內)，如下(2.2.7)式：

$$\begin{aligned} V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{I=1}^{N_{cell}} \int_{\vec{r}_2 \in WS(\vec{R}_I)} \Psi_{j_h}^{h*}(\vec{r}_2) \Psi_{k_h}^h(\vec{r}_2) \int_{\vec{r}_1 \in WS(\vec{R}_I)} \Psi_{i_e}^{e*}(\vec{r}_1) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi_{l_e}^e(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{\substack{I, J=1 \\ I \neq J}}^{N_{cell}} \int_{\vec{r}_2 \in WS(\vec{R}_I)} \Psi_{j_h}^{h*}(\vec{r}_2) \Psi_{k_h}^h(\vec{r}_2) \int_{\vec{r}_1 \in WS(\vec{R}_J)} \Psi_{i_e}^{e*}(\vec{r}_1) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi_{l_e}^e(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

(2.2.7)式中， $N_{cell}$  為 WS cell 的數量，表示第  $I(J)$  個 WS cell，在此，我們忽略第二項的貢獻，則庫倫矩陣元素可以表達成(2.2.8)式：

$$V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh} \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{I=1}^{N_{cell}} \int_{\vec{r}_2 \in WS(\vec{R}_I)} \Psi_{j_h}^{h*}(\vec{r}_2) \Psi_{k_h}^h(\vec{r}_2) \int_{\vec{r}_1 \in WS(\vec{R}_I)} \Psi_{i_e}^{e*}(\vec{r}_1) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi_{l_e}^e(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (2.2.8)$$

其中，電位  $U_{i_e, l_e}(\bar{r}_2)$  為如下(2.2.9)式：

$$U_{i_e, l_e}(\bar{r}_2) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \int_{\bar{r}_1 \in \text{WS}(\bar{R}_I)} \Psi_{i_e}^{e*}(\bar{r}_1) \frac{1}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|} \Psi_{l_e}^e(\bar{r}_1) d\bar{r}_1 \quad (2.2.9)$$

庫倫矩陣元素可以整理成：

$$V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh} = \sum_{J=1}^{N_{\text{cell}}} \int_{\bar{r}_2 \in \text{WS}(\bar{R}_J)} \Psi_{j_h}^{h*}(\bar{r}_2) \Psi_{k_h}^h(\bar{r}_2) U_{i_e, l_e}(\bar{r}_2) d\bar{r}_2 \quad (2.2.10)$$

由於電子和電洞的波函數為波包函數(envelope function)和 Bloch's function 組成，其中波包函數具有緩慢變化的性質且 Bloch's function 為週期性函數，如下(2.2.11)和(2.2.12)式：

$$g(\bar{R}_I + \bar{\tau}) \approx g(\bar{R}_I) \quad (2.2.11)$$

$$u(\bar{R}_I + \bar{\tau}) = u(\bar{\tau}) \quad (2.2.12)$$

而且電子和電洞之間的距離主要取決於電子和電洞分處的 WS cell 的距離，假設：

$$|\bar{r}_1 - \bar{r}_2| \approx |\bar{R}_I - \bar{R}_J| \quad (2.2.13)$$

利用(2.2.11)、(2.2.12)和(2.2.13)式代入(2.2.10)式，庫倫矩陣元素整理成每個 WS cell 的

貢獻以及 WS cell 內的積分：

$$V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh} = \sum_{J=1}^{N_{\text{cell}}} \sum_{j_z = \pm 3/2, \pm 1/2} \sum_{j'_z = \pm 3/2, \pm 1/2} \left[ \begin{aligned} &g_{j_h, j_z}^{h*}(\bar{R}_J) g_{k_h, j'_z}^h(\bar{R}_J) U_{i_e, l_e}(\bar{R}_J) \\ &\times \int_{\text{WS}} u_{j_z}^{h*}(\bar{\tau}_2) u_{j'_z}^h(\bar{\tau}_2) d\bar{\tau}_2 \end{aligned} \right] \quad (2.2.14)$$

其中電位表示為：

$$U_{i_e, l_e}(\bar{R}_J) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{\substack{I=1 \\ I \neq J}}^{N_{\text{cell}}} \sum_{s_z = \pm 1/2} \sum_{s'_z = \pm 1/2} \frac{g_{i_e, s_z}^{e*}(\bar{R}_I) g_{l_e, s'_z}^e(\bar{R}_I)}{|\bar{R}_I - \bar{R}_J|} \int_{\text{WS}} u_{s_z}^{e*}(\bar{\tau}_1) u_{s'_z}^e(\bar{\tau}_1) d\bar{\tau}_1 \quad (2.2.15)$$

參考[11]，可以知道 Bloch's function 在 WS cell 內的積分結果為：

$$\int_{WS} u_{s_z}^{e*}(\bar{\tau}_1) u_{s_z'}^e(\bar{\tau}_1) d\bar{\tau}_1 = \Delta V_e \delta_{s_z, s_z'} \quad (2.2.16)$$

$$\int_{WS} u_{j_z}^{h*}(\bar{\tau}_2) u_{j_z'}^h(\bar{\tau}_2) d\bar{\tau}_2 = \Delta V_h \delta_{j_z, j_z'} \quad (2.2.17)$$

上兩式中， $\Delta V_e = \Delta V_h = \Delta V_{WS}$  為 Wigner-Seitz cell 的體積。

電位重新改寫成：

$$U_{i_e, l_e}(\bar{R}_h) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \times \sum_{s_z = \pm 1/2} \sum_{\substack{I=1 \\ I \neq J}}^{N_{cell}} \left[ \frac{g_{i_e, s_z}^{e*}(\bar{R}_I) g_{i_e, s_z}^e(\bar{R}_I)}{|\bar{R}_I - \bar{R}_J|} \right] \Delta V_{WS} \quad (2.2.18)$$

則庫倫矩陣元素：

$$V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh} = \sum_{j_z = \pm 3/2, \pm 1/2} \sum_{J=1}^{N_{cell}} g_{j_h, j_z}^{h*}(\bar{R}_J) g_{k_h, j_z}^h(\bar{R}_J) U_{i_e, l_e}(\bar{R}_J) \Delta V_{WS} \quad (2.2.19)$$

因為波包函數為連續分佈函數，所以黎曼和可以改用積分形式來取代，假設  $\bar{R}_I = \bar{R}_e$ ，

$\bar{R}_J = \bar{R}_h$ ，電位和庫倫矩陣元素形式如下：

$$U_{i_e, l_e}(\bar{R}_h) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \times \sum_{s_z = \pm 1/2} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_{i_e, s_z}^{e*}(\bar{R}_e) g_{i_e, s_z}^e(\bar{R}_e)}{|\bar{R}_e - \bar{R}_h|} d\bar{R}_e \right] \quad (2.2.20)$$

$$V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh} = \sum_{j_z = \pm 3/2, \pm 1/2} \int_{-\infty}^{\infty} g_{j_h, j_z}^{h*}(\bar{R}_h) g_{k_h, j_z}^h(\bar{R}_h) U_{i_e, l_e}(\bar{R}_h) d\bar{R}_h \quad (2.2.21)$$

我們將(2.2.20)式拆解成兩個部分，當  $\bar{R}_e \neq \bar{R}_h$  時， $U_{i_e, l_e}^{LR}(\bar{R}_h)$  稱為長程作用(Long Range)，

當  $\bar{R}_e = \bar{R}_h$  時， $U_{i_e, l_e}^{SR}(\bar{R}_h)$  稱為短程作用(Short Range)：

$$U_{i_e, l_e}(\bar{R}_h) = U_{i_e, l_e}^{LR}(\bar{R}_h) + U_{i_e, l_e}^{SR}(\bar{R}_h) \quad (2.2.22)$$

當  $\bar{R}_e = \bar{R}_h$  時，短程作用的積分是瑕積分形式，這部分的處理將參考[12,13]，將積分視為單位晶胞內的積分且  $g_{i_e, s_z}^e(\bar{R}_e)$  和  $g_{l_e, s_z'}^e(\bar{R}_e)$  在單位晶胞內可視為常數：

假設  $\bar{R}_e = (x_i, y_j, z_k)$ 、 $\bar{R}_h = (x_m, y_n, z_l)$ ，則  $U_{i_e, l_e}^{LR}(\bar{R}_h)$  和  $U_{i_e, l_e}^{SR}(\bar{R}_h)$  將可離散化：

當  $\bar{R}_e \neq \bar{R}_h$  時， $U_{i_e, l_e}^{LR}(\bar{R}_h)$  離散化形式如下(2.2.23)式：

$$U_{i_e, l_e}^{LR}(x_m, y_n, z_l) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{s_z = \pm 1/2} \left[ \sum_{i \neq m}^{N_x+1} \sum_{j \neq n}^{N_y+1} \sum_{k \neq l}^{N_z+1} \frac{g_{i_e, s_z}^{e*}(x_i, y_j, z_k) g_{l_e, s_z}^e(x_i, y_j, z_k) \Delta x \Delta y \Delta z}{\sqrt{(x_i - x_m)^2 + (y_j - y_n)^2 + (z_k - z_l)^2}} \right] \quad (2.2.23)$$

當  $\bar{R}_e = \bar{R}_h$  時， $U_{i_e, l_e}^{SR}(\bar{R}_h)$  離散化形式如下(2.2.25)式：

定義單位晶胞內的積分式  $F_s$ ：

$$F_s \equiv \int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} \int_{-\Delta y/2}^{\Delta y/2} \int_{-\Delta z/2}^{\Delta z/2} \frac{dx dy dz}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (2.2.24)$$

$$U_{i_e, l_e}^{SR}(x_m, y_n, z_l) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \times F_s \times \sum_{s_z = \pm 1/2} \left[ \sum_{m=1}^{N_x+1} \sum_{n=1}^{N_y+1} \sum_{l=1}^{N_z+1} g_{i_e, s_z}^{e*}(x_m, y_n, z_l) g_{l_e, s_z}^e(x_m, y_n, z_l) \right] \quad (2.2.25)$$

(2.2.25)式中有單位晶胞內的積分式  $F_s$ ，下面我們討論此  $F_s$  的處理。

首先，當  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = a$  時，單位晶胞形狀為正方體，則  $F_s$  會有解析結果，如下(2.2.26)

式：

$$F_s = 3a^2 \left\{ -\frac{\pi}{6} + \ln \left[ \frac{(1 + \sqrt{3})^2}{2} \right] \right\} \quad (2.2.26)$$

(2.2.26)式中， $F_s$  和晶胞的長度平方成正比關係，所以我們選取的晶胞體積越大， $F_s$  的量也變大。

當單位晶胞的形狀不是正方體時， $F_s$  無法找出解析結果的方程式，而本文討論的量子點內單一激子系統的庫倫位能，因為量子點的高度相比底部寬度較小，利用有限差分法模擬電子結構時， $z$  方向的格點密度會比  $x$ 、 $y$  方向密。所以本文章計算的情況一律為

$$\boxed{\Delta x = \Delta y = 1(nm)}, \boxed{\Delta z = 0.5(nm)}, \text{ 再來利用 Mathematica 程式語言計算 } F_s。$$

當  $\boxed{\Delta x = \Delta y = 1(nm)}, \Delta z = 0.5(nm)}$ ：

$$F_s = \int_{-1/2}^{1/2} \int_{-1/2}^{1/2} \int_{-1/4}^{1/4} \frac{dx dy dz}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = 1.42726 \quad (2.2.27)$$

如果單位晶胞並非正方體和  $\boxed{\Delta x = \Delta y = 1(nm)}, \Delta z = 0.5(nm)}$  這兩種情況時，我們可以使用 Mathematica 程式語言計算不同單位晶胞大小的  $F_s$ 。

將整理電位離散化形式為：

$$U_{i_e, l_e}(x_m, y_n, z_l) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{s_z = \pm 1/2} \left\{ \begin{aligned} & \sum_{i \neq m}^{N_x+1} \sum_{j \neq n}^{N_y+1} \sum_{k \neq l}^{N_z+1} \frac{g_{i_e, s_z}^{e*}(x_i, y_j, z_k) g_{l_e, s_z}^e(x_i, y_j, z_k) \Delta V}{\sqrt{(x_i - x_m)^2 + (y_j - y_n)^2 + (z_k - z_l)^2}} \\ & + F_s \times \sum_{m=1}^{N_x+1} \sum_{n=1}^{N_y+1} \sum_{l=1}^{N_z+1} \left[ g_{i_e, s_z}^{e*}(x_m, y_n, z_l) \times g_{l_e, s_z}^e(x_m, y_n, z_l) \right] \end{aligned} \right\} \quad (2.2.28)$$

(2.2.28) 式中， $\Delta V \equiv \Delta x \Delta y \Delta z$ 。

最後，電位離散化形式為：

$$\boxed{U_{i_e, l_e}(x_m, y_n, z_l) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{s_z = \pm 1/2} \left\{ \begin{aligned} & \sum_{i \neq m}^{N_x+1} \sum_{j \neq n}^{N_y+1} \sum_{k \neq l}^{N_z+1} \frac{g_{i_e, s_z}^{e*}(x_i, y_j, z_k) g_{l_e, s_z}^e(x_i, y_j, z_k) \Delta V}{\sqrt{(x_i - x_m)^2 + (y_j - y_n)^2 + (z_k - z_l)^2}} \\ & + F_s \times \sum_{m=1}^{N_x+1} \sum_{n=1}^{N_y+1} \sum_{l=1}^{N_z+1} \left[ g_{i_e, s_z}^{e*}(x_m, y_n, z_l) \times g_{l_e, s_z}^e(x_m, y_n, z_l) \right] \end{aligned} \right\}} \quad (2.2.29)$$

則庫倫積分的離散化形式如下(2.2.30)式：

$$V_{i_e, j_h, k_h, l_e}^{eh} = \sum_{j_z = \pm 3/2, \pm 1/2} \sum_{m=1}^{N_x+1} \sum_{n=1}^{N_y+1} \sum_{l=1}^{N_z+1} \left[ g_{j_h, j_z}^{h*}(x_m, y_n, z_l) g_{k_h, j_z}^h(x_m, y_n, z_l) \times U_{i_e, l_e}(x_m, y_n, z_l) \times \Delta x \Delta y \Delta z \right] (eV) \quad (2.2.30)$$

觀察(2.2.29)、(2.2.30)式，我們可以發現，當電子和電洞因為庫倫作用力導致碰撞後，其庫倫散射後的電子和電洞個別粒子的自旋角動量不會改變。

Fortran 的程式的編寫便是根據(2.2.29)和(2.2.30)兩式進行編寫。



### 2.3 激子系統的組態交互作用

在本節我們將學習透過庫倫作用導致的激子系統組態混成的行為。

定義無交互作用的激子系統不同組態可表示如下(2.3.1)式：

$$|\Psi_{i_h, i_e}^X\rangle = \sum_{j_z, s_z} C_{j_z, s_z} h_{i_h, j_z}^{\dagger\dagger} c_{i_e, s_z} |0\rangle \quad (2.3.1)$$

在三維非等向性拋物線模型下， $i_e$ 和 $i_h$ 表示電子和電洞不同狀態的符號，可以改用量子數來表達如下(2.3.2)式：

$$i_{e(h)} = (n_x, n_y, n_z) \quad (2.3.2)$$

(2.3.2)式中， $i_h$ 在此是指沒有輕重電洞混成的電洞狀態。

若電洞有輕重電洞混成的情況，則 $i_h$ 表達為，如下(2.3.3)式：

$$i_h = (n_x, n_y, n_z)' \quad (2.3.3)$$

(2.3.2)和(2.3.3)兩式中， $n_x$ 表示 $x$ 方向的量子數， $n_y$ 表示 $y$ 方向的量子數， $n_z$ 表示 $z$ 方向的量子數。

下表 2.3.1 和表 2.3.2 分別為拋物線模型下 $S$ 軌域、 $P_x$ 軌域、 $P_y$ 軌域、 $D_x$ 軌域和 $F_x$ 軌域的激子組態的示意圖和表達形式：

表 2.3.1、不同激子組態的示意圖

| $S$ 軌域 | $P_x$ 軌域 | $D_x$ 軌域 |
|--------|----------|----------|
|        |          |          |
|        |          |          |

表 2.3.2、不同激子組態的數學形式

| 軌域       | 激子組態的數學形式  |
|----------|--|
| $S$ 軌域   | $ \Psi_{000',000}^X\rangle = \sum_{j_z, s_z} C_{j_z, s_z} h_{000', j_z}^{\dagger\dagger} c_{000, s_z}  0\rangle$ |
| $P_x$ 軌域 | $ \Psi_{100',100}^X\rangle = \sum_{j_z, s_z} C_{j_z, s_z} h_{100', j_z}^{\dagger\dagger} c_{100, s_z}  0\rangle$ |
| $D_x$ 軌域 | $ \Psi_{200',200}^X\rangle = \sum_{j_z, s_z} C_{j_z, s_z} h_{200', j_z}^{\dagger\dagger} c_{200, s_z}  0\rangle$ |

在此，我們考慮三個組態的例子，用  $S$  軌域、 $P_x$  軌域和  $D_x$  軌域為基底，展開(2.1.1)式的

Hamiltonian 矩陣：

$$\begin{aligned}
 & [H_X] \\
 & = \begin{bmatrix} \langle \Psi_{000',000}^X | H_X | \Psi_{000',000}^X \rangle & \langle \Psi_{000',000}^X | H_X | \Psi_{100',100}^X \rangle & \langle \Psi_{000',000}^X | H_X | \Psi_{200',200}^X \rangle \\ \langle \Psi_{100',100}^X | H_X | \Psi_{000',000}^X \rangle & \langle \Psi_{100',100}^X | H_X | \Psi_{100',100}^X \rangle & \langle \Psi_{100',100}^X | H_X | \Psi_{200',200}^X \rangle \\ \langle \Psi_{200',200}^X | H_X | \Psi_{000',000}^X \rangle & \langle \Psi_{200',200}^X | H_X | \Psi_{100',100}^X \rangle & \langle \Psi_{200',200}^X | H_X | \Psi_{200',200}^X \rangle \end{bmatrix} \quad (2.3.4)
 \end{aligned}$$

展開後的矩陣為(2.3.4)式，將(2.3.4)式對角化後，可以找出組態混成後的  $S$  軌域激子系統

的能量為  $E'_{000',000}{}^X$  和波函數  $|\Psi'_{000',000}{}^X\rangle$ ，則組態混成後的  $S$  軌域激子系統波函數的形式，如

下(2.3.5)式：

$$|\Psi'_{000',000}{}^X\rangle = \sum_{i=000,100,200} C_{i',i}^{000',000} |\Psi_{i',i}^X\rangle \quad (2.3.5)$$

(2.3.5)式中， $|\Psi_{i',i}^X\rangle$  表示無交互作用激子系統處在  $i$  軌域的狀態，而  $\{C_{i',i}^{000',000} | i=000,100,200\}$

表示組態交互作用後  $S$  軌域激子組態的特徵向量，其中  $|C_{000',000}^{000',000}|^2 + |C_{100',100}^{000',000}|^2 + |C_{200',200}^{000',000}|^2 = 1$ 。

三維拋物線模型考慮更多組態交互作用後，基態的波函數可以表示為：

$$|\Psi'_{000',000}{}^X\rangle = \sum_{i_h, i_e} C_{i_h, i_e}^{000',000} |\Psi_{i_h, i_e}^X\rangle \quad (2.3.6)$$

我們找到組態交互作用後的激子系統波函數後，就可以找出組態混成後的物理量，在本文章主要討論的議題是自發輻射光子的偏振，所以下一章中，我們將利用費米黃金定理計算無交互作用的發光強度和偏振，並利用(2.3.6)式，找出組態交互作用後的發光強度和偏振。

### 第三章、單一激子系統的偏振光譜

本文章主要探討的物理量為激子系統再結合後產生輻射光子的偏振，所以此章節將利用費米黃金定理(Fermi's Golden Rule)計算，導帶電子由導電帶躍遷至價電帶的躍遷機制(inter-band transition)，並推導偶極矩陣元素(dipole matrix element)，找出發光強度(intensity)，更進一步求得自發輻射(spontaneous emission)的偏振光譜。

#### 3.1 偏振光譜的一般形式

激子系統的再結合產生輻射光子的示意圖，如下圖 3.1.1：

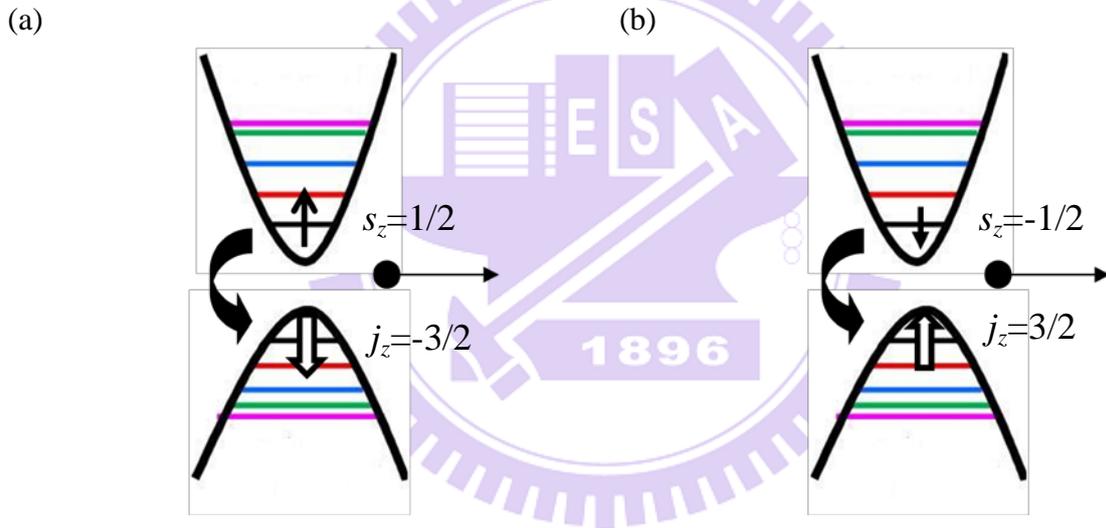


圖 3.1.1、激子系統的再結合產生輻射光子的示意圖。(a)激子總角動量為-1的發光機制。(b)激子總角動量為+1的發光機制。

當激子系統的總角動量為 $\pm 1$ 時，在激子系統湮滅時，產生自發輻射光子的機制，可由費米黃金定理(Fermi's Golden Rule)得知，躍遷後自發輻射光子的發光強度為：

$$I_n(\vec{e}; \omega) (\text{intensity}) \propto \left| \langle 0 | P_e^- | \Psi_n^X \rangle \right|^2 \delta(E_n^X - \hbar\omega) \quad (3.1.1)$$

(3.1.1)式中， $I_n(\vec{e}; \omega)$ 代表發光強度， $|\Psi_n^X\rangle$ 表示激子系統處於第 $n$ 狀態， $E_n^X$ 表示激子

處於第  $n$  狀態時的系統能量， $\omega$  表示輻射光子的頻率，最後  $P_{\bar{e}}^-$  代表著偏振算符(polarization operator)。

偏振算符的定義如下(3.1.2)式：

$$P_{\bar{e}}^- = \sum_{i_h, i_e} D_{i_h, i_e}(\bar{e}) h_{i_h} c_{i_e} \quad (3.1.2)$$

(3.1.2)式中， $D_{i_h, i_e}(\bar{e})$  為偶極矩陣元素(dipole matrix element)， $c_{i_e}$  和  $h_{i_e}$  則分別表示電子和電洞的產生算符。

偶極矩陣元素的定義如下(3.1.3)式：

$$D_{i_h, i_e}(\bar{e}) \equiv \langle \Psi_{i_h}^h | \bar{e} \cdot \hat{p} | \Psi_{i_e}^e \rangle \quad (3.1.3)$$

(3.1.3)式中， $|\Psi_{i_e}^e\rangle$  和  $|\Psi_{i_h}^h\rangle$  分別代表躍遷電子的初始狀態和末狀態。

我們推導偶極矩陣元素(dipole matrix element)時，參考[11,12]， $|\Psi_{i_e}^e\rangle$  和  $|\Psi_{i_h}^h\rangle$  用(2.1.1)

和(2.1.5)代入(3.1.3)式後，則整理後的偶極矩陣元素的結果如下(3.1.4)式：

$$D_{i_h, i_e}(\bar{e}) \approx \sum_{j_z} \sum_{s_z} \langle g_{i_h, j_z}^v | g_{i_e, s_z}^e \rangle \langle u_{j_z}^v | \hat{e} \cdot p | u_{s_z}^e \rangle \quad (3.1.4)$$

定義： $d_{j_z, s_z}(\bar{e}) \equiv \langle u_{j_z}^v | \hat{e} \cdot p | u_{s_z}^e \rangle$ ， $\bar{e}$  表示沿著偏振方向的單位向量。

根據上述定義，偶極矩陣元素(dipole matrix element)可以整理為如下(3.1.5)式：

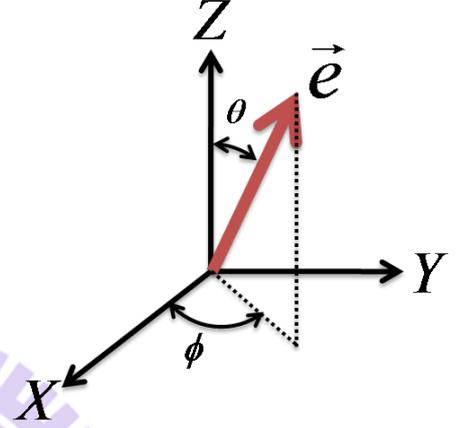
$$\begin{aligned} D_{i_h, i_e}(\bar{e}) &\approx \sum_{j_z} \sum_{s_z} \langle g_{i_h, j_z}^v | g_{i_e, s_z}^e \rangle \langle u_{j_z}^v | \hat{e} \cdot p | u_{s_z}^e \rangle \\ &= \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle d_{3/2, 1/2}(\bar{e}) + \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle d_{1/2, 1/2}(\bar{e}) \\ &\quad + \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle d_{-1/2, 1/2}(\bar{e}) + \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle d_{-3/2, 1/2}(\bar{e}) \\ &\quad + \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle d_{3/2, -1/2}(\bar{e}) + \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle d_{1/2, -1/2}(\bar{e}) \\ &\quad + \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle d_{-1/2, -1/2}(\bar{e}) + \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle d_{-3/2, -1/2}(\bar{e}) \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

假設  $\vec{e} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ ，則  $D_{i_h, i_e}(\vec{e}) = D_{i_h, i_e}(\theta, \phi)$ ，最後  $d_{j_z, s_z}(\theta, \phi)$  如下所表

3.1.1 :

表 3.1.1、 $\vec{e} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$

| $j_z$          | $s_z$          | $d_{j_z, s_z}(\theta, \phi)$   |
|----------------|----------------|--|
| $\frac{3}{2}$  | $\frac{1}{2}$  | $d_{3/2, 1/2}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{-i\phi}$   |
| $\frac{1}{2}$  | $\frac{1}{2}$  | $d_{1/2, 1/2}(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta$             |
| $-\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$  | $d_{-1/2, 1/2}(\theta, \phi) = \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{i\phi}$  |
| $-\frac{3}{2}$ | $\frac{1}{2}$  | $d_{-3/2, 1/2}(\theta, \phi) = 0$  |
| $\frac{3}{2}$  | $-\frac{1}{2}$ | $d_{3/2, -1/2}(\theta, \phi) = 0$  |
| $\frac{1}{2}$  | $-\frac{1}{2}$ | $d_{1/2, -1/2}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{-i\phi}$  |
| $-\frac{1}{2}$ | $-\frac{1}{2}$ | $d_{-1/2, -1/2}(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta$           |
| $-\frac{3}{2}$ | $-\frac{1}{2}$ | $d_{-3/2, -1/2}(\theta, \phi) = \frac{-1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{i\phi}$ |



利用表 3.1.1，上式(3.1.5)可以整理為：

$$\begin{aligned}
 D_{i_h, i_e}(\theta, \phi) \approx & \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{-i\phi} \right] + \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle \left[ -\sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta \right] \\
 & + \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle \left[ -\frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{i\phi} \right] + \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle [0] \\
 & + \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle [0] + \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \left[ \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{-i\phi} \right] \\
 & + \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \left[ -\sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta \right] + \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \left[ -\frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{i\phi} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sin \theta e^{-i\phi} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right] \\
&+ \sin \theta e^{i\phi} \left[ -\frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right] \\
&+ \cos \theta \left[ -\sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right]
\end{aligned} \tag{3.1.6}$$

由(3.1.1)式知， $I_{i_h, i_e}(\theta, \phi)$ (intensity)  $\propto |D_{i_h, i_e}(\theta, \phi)|^2$ ，所以任意方向的發光強度可以寫成：

$$I_{i_h, i_e}(\theta, \phi) \propto |p_{cv}(\vec{0})|^2 \left| \begin{array}{l} \sin \theta \left[ e^{-i\phi} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right] \right. \\ \left. + e^{i\phi} \left[ -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right] \right] \\ \left. + \cos \theta \left[ -\sqrt{\frac{2}{3}} \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right] \right| \end{array} \right|^2 \tag{3.1.7}$$

由(3.1.7)式，發光強度和偏振方向以及電子和重輕電洞的波包函數的重疊比例相關。

定義最強發光強度和最弱發光強度為：

$$I_{\max} \equiv \max [I_{i_h, i_e}(\theta, \phi)] \tag{3.1.8}$$

$$I_{\min} \equiv \min [I_{i_h, i_e}(\theta, \phi)] \tag{3.1.9}$$

定義偏振：

$$DOP(\text{degree of linear polarization}) \equiv \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} \tag{3.1.10}$$

利用(3.1.7)、(3.1.8)和(3.1.9)式找出光強度最高值 $I_{\max}$ 和最低值 $I_{\min}$ 後再代入偏振定義

(3.1.10)式，就可以算出沿任意方向輻射的光子偏振強度。

本文章討論的狀況為輻射光子沿著 z 方向行進時，則偏振方向在 xy 平面，則  $\theta = \frac{\pi}{2}$

代入，則發光強度可以改寫，如下(3.1.11)：

$$I_{i_h, i_e} \left( \frac{\pi}{2}, \phi \right) \propto |p_{cv}(\vec{0})|^2 \left| e^{-i\phi} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right] + e^{i\phi} \left[ -\frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right] \right|^2 \quad (3.1.11)$$

xy 平面發光強度示意圖，如下圖 3.1.3：

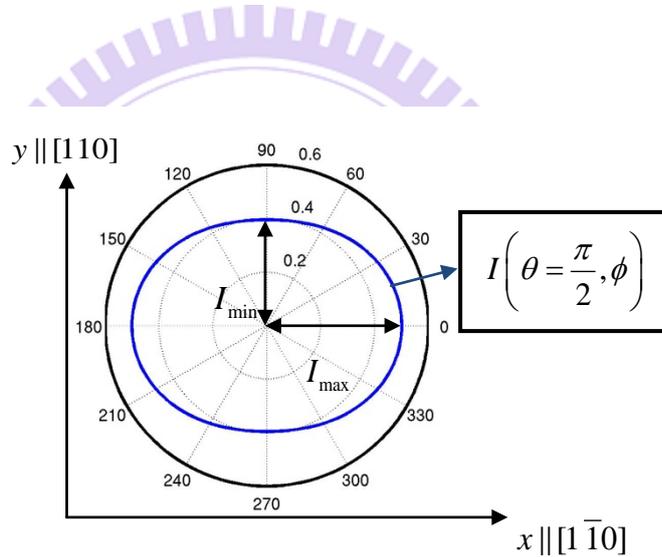


圖 3.1.2、xy 平面發光強度示意圖。

由附錄 A，我們可以得到 xy 平面偏振強度和電子和重輕電洞的波包函數的重疊比例的關係式：

關係式：

$$DOP = \frac{\sqrt{12} \left| \langle g_{i_h, \mp 3/2}^h | g_{i_e, \pm 1/2}^e \rangle \right| \left| \langle g_{i_h, \pm 1/2}^h | g_{i_e, \pm 1/2}^e \rangle \right|}{3 \left| \langle g_{i_h, \mp 3/2}^h | g_{i_e, \pm 1/2}^e \rangle \right|^2 + \left| \langle g_{i_h, \pm 1/2}^h | g_{i_e, \pm 1/2}^e \rangle \right|^2}$$

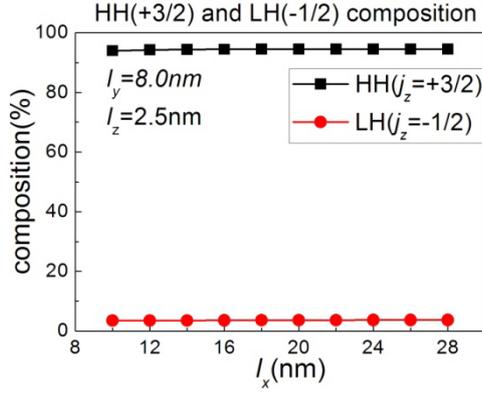


圖 3.1.3、固定  $l_y = 8.0nm, l_z = 2.5nm$  時，重電洞(+3/2)和輕電洞(-1/2)的混成比例隨量子點長軸長度  $l_x$  的改變。

由上圖得知，基態電洞的狀態是以重電洞為主，耦合些許的輕電洞，假設：

$$\left| \langle g_{i_h, +3/2}^h | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right| \gg \left| \langle g_{i_h, 1/2}^h | g_{i_e, +1/2}^e \rangle \right|$$

或

$$\left| \langle g_{i_h, -3/2}^h | g_{i_e, +1/2}^e \rangle \right| \gg \left| \langle g_{i_h, -1/2}^h | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right|$$

則偏振強度的式子，可以簡化為：

$$DOP = \frac{\sqrt{12} \left| \langle g_{i_h, \pm 1/2}^h | g_{i_e, \pm 1/2}^e \rangle \right|}{3 \left| \langle g_{i_h, \mp 3/2}^h | g_{i_e, \pm 1/2}^e \rangle \right|} \quad (3.1.12)$$

由上式我們可以得知，當輕電洞的混成越多時， $\left| \langle g_{i_h, \pm 1/2}^h | g_{i_e, \pm 1/2}^e \rangle \right|$  的比例較高，導致偏振

變強，若輕電洞的混成越少， $\left| \langle g_{i_h, \pm 1/2}^h | g_{i_e, \pm 1/2}^e \rangle \right|$  的比例較低，則偏振較弱。

### 3.2 三維拋物線模型的偏振光譜的解析解

此節中，我們假設量子點結構位能為三維拋物線位能，找出  $xy$  平面偏振光譜的解析解。

假設電子感受到的位能為三維非等向性拋物線位能：

$$V_{QD}^e(\vec{r}) = \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{1}{2} m_e^* \omega_{e,\alpha}^2 \alpha^2 \quad (3.2.1)$$

(3.2.1) 式中， $m_e^*$  表示電子的有效質量， $\omega_{e,\alpha}$  代表電子的特徵頻率。

則電子的 Schrödinger equation 可以寫成如下：

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V_{QD}^e(\vec{r}) \right] \phi_{n_x^e, n_y^e, n_z^e}^e(\vec{r}) = E_{n_x^e, n_y^e, n_z^e}^e \phi_{n_x^e, n_y^e, n_z^e}^e(\vec{r}) \quad (3.2.2)$$

(3.2.2) 式中， $n_x^e$ 、 $n_y^e$  和  $n_z^e$  分別代表  $x$ 、 $y$  和  $z$  方向的量子數。

由(3.2.2)式解出電子的 Schrödinger equation 的系統能量解為：

$$E_{n_x^e, n_y^e, n_z^e}^e = \hbar \omega_{e,x} \left( n_x^e + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_{e,y} \left( n_y^e + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_{e,z} \left( n_z^e + \frac{1}{2} \right) \quad (3.2.3)$$

且任意態的電子波函數的解為：

$$\begin{aligned} \phi_{n_x^e, n_y^e, n_z^e}^e(x, y, z) = & \left( \frac{1}{\sqrt{\pi^{3/2} 2^{n_x^e+n_y^e+n_z^e} n_x^e! n_y^e! n_z^e!}} \right) \left( \frac{1}{(l_x^e)^{n_x^e+1/2} (l_y^e)^{n_y^e+1/2} (l_z^e)^{n_z^e+1/2}} \right) \\ & \times \left( x - (l_x^e)^2 \frac{\partial}{\partial x} \right)^{n_x^e} \left( y - (l_y^e)^2 \frac{\partial}{\partial y} \right)^{n_y^e} \left( z - (l_z^e)^2 \frac{\partial}{\partial z} \right)^{n_z^e} e^{-\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x}{l_x^e} \right)^2 + \left( \frac{y}{l_y^e} \right)^2 + \left( \frac{z}{l_z^e} \right)^2 \right]} \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

(3.2.4) 式中， $l_x^e$ 、 $l_y^e$  和  $l_z^e$  分別代表電子  $x$ 、 $y$  和  $z$  方向的特徵長度且定義如下式(3.2.5)。

$$l_{\alpha(=x,y,z)}^e \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m_e^* \omega_{e,\alpha(=x,y,z)}}} \quad (3.2.5)$$

由(3.2.4)式可以得到電子的基態波函數 $\phi_{000}^e(x, y, z)$ 為：

$$\phi_{000}^e(x, y, z) = \left( \frac{1}{\sqrt{\pi^{3/2} l_x^e l_y^e l_z^e}} \right) e^{-\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x}{l_x^e} \right)^2 + \left( \frac{y}{l_y^e} \right)^2 + \left( \frac{z}{l_z^e} \right)^2 \right]} \quad (3.2.6)$$

在電洞方面，輕重電洞感受到相同的 $\sqrt{\quad}$ 三維非等向性拋物線位能：

$$V_{QD}^h(\vec{r}) = \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{1}{2} m_{HH,\alpha}^* \omega_{HH,\alpha}^2 \alpha^2 = \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{1}{2} m_{LH,\alpha}^* \omega_{LH,\alpha}^2 \alpha^2 \quad (3.2.7)$$

(3.2.7)式中， $m_{LH,\alpha(=x,y,z)}^*$ 和 $m_{HH,\alpha(=x,y,z)}^*$ 分別表示輕重電洞的有效質量且電洞的有效質量

與方向有關， $\omega_{LH,\alpha(=x,y,z)}$ 和 $\omega_{HH,\alpha(=x,y,z)}$ 代表輕重電洞的特徵頻率也跟方向有關。

我們整理輕重電洞不同方向的有效質量，如下表 3.2.1 所示：

表 3.2.1、輕重電洞不同方向的有效質量

|                      | x 方向                                   | y 方向                                   | z 方向                                    |
|----------------------|--|--|---|
| 重電洞(heavy hole)的有效質量 | $\frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2}$ (較輕) | $\frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2}$ (較輕) | $\frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2}$ (較重) |
| 輕電洞(light hole)的有效質量 | $\frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2}$ (較重) | $\frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2}$ (較重) | $\frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2}$ (較輕) |

表(3.2.1)中， $m_0$ 代表電子靜止時的質量。

由(2.1.2)、(2.1.3)和(3.2.7)三式知道，電洞的 Hamiltonian 表示如下(3.2.8)式：

$$\begin{bmatrix} P+Q+V_{QD}^h(\vec{r}_h) & -S & R & 0 \\ -S^\dagger & P-Q+V_{QD}^h(\vec{r}_h) & 0 & R \\ R^\dagger & 0 & P-Q+V_{QD}^h(\vec{r}_h) & S \\ 0 & R^{\dagger\dagger} & S & P+Q+V_{QD}^h(\vec{r}_h) \end{bmatrix} \quad (3.2.8)$$

首先假設忽略(3.2.8)式矩陣中的非對角線項如下式：

$$\begin{bmatrix} P+Q+V_{QD}^h(\bar{r}_h) & \cancel{\times} & \cancel{\times} & 0 \\ \cancel{\times} & P-Q+V_{QD}^h(\bar{r}_h) & 0 & \cancel{\times} \\ \cancel{\times} & 0 & P-Q+V_{QD}^h(\bar{r}_h) & \cancel{\times} \\ 0 & \cancel{\times} & \cancel{\times} & P+Q+V_{QD}^h(\bar{r}_h) \end{bmatrix} \quad (3.2.9)$$

忽略矩陣的非對角線項後，矩陣的對角線項不會互相耦合，所以可以將問題簡化成解四個等效的 Schrödinger equation 且此四個等效的 Schrödinger equation 為自旋不可分離，所以純重電洞(+3/2)和(-3/2)的 Schrödinger equation 形式一致，純輕電洞(+1/2)和(-1/2)的 Schrödinger equation 形式一致，最後可簡化為兩個等效的 Schrödinger equation：

首先先計算純重電洞的 Schrödinger equation：

$$\begin{aligned} [P+Q+V_{QD}^h(\bar{r})]\phi_{n_x^{HH}, n_y^{HH}, n_z^{HH}}^{HH}(\bar{r}) &= E_{n_x^{HH}, n_y^{HH}, n_z^{HH}}^{HH}\phi_{n_x^{HH}, n_y^{HH}, n_z^{HH}}^{HH}(\bar{r}) \\ \left[ -\left( \frac{\hbar^2}{2m_{HH,x}^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m_{HH,y}^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hbar^2}{2m_{HH,z}^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V_{QD}^h(\bar{r}) \right] \phi_{n_x^{HH}, n_y^{HH}, n_z^{HH}}^{HH}(\bar{r}) \\ &= E_{n_x^{HH}, n_y^{HH}, n_z^{HH}}^{HH}\phi_{n_x^{HH}, n_y^{HH}, n_z^{HH}}^{HH}(\bar{r}) \end{aligned}$$

上式 Schrödinger equation 的系統能量解為：

$$E_{n_x^{HH}, n_y^{HH}, n_z^{HH}}^{HH} = \hbar\omega_{HH,x} \left( n_x^{HH} + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_{HH,y} \left( n_y^{HH} + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_{HH,z} \left( n_z^{HH} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.2.10)$$

任意態的純重電洞波函數的解為：

$$\begin{aligned} \phi_{n_x^{HH}, n_y^{HH}, n_z^{HH}}^{HH}(x, y, z) &= \left( \frac{1}{\sqrt{\pi^{3/2} 2^{n_x^{HH} + n_y^{HH} + n_z^{HH}} n_x^{HH}! n_y^{HH}! n_z^{HH}!}} \right) \left( \frac{1}{(l_x^{HH})^{n_x^{HH} + 1/2} (l_y^{HH})^{n_y^{HH} + 1/2} (l_z^{HH})^{n_z^{HH} + 1/2}} \right) \\ &\times \left( x - (l_x^{HH})^2 \frac{\partial}{\partial x} \right)^{n_x^{HH}} \left( y - (l_y^{HH})^2 \frac{\partial}{\partial y} \right)^{n_y^{HH}} \left( z - (l_z^{HH})^2 \frac{\partial}{\partial z} \right)^{n_z^{HH}} e^{-\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x}{l_x^{HH}} \right)^2 + \left( \frac{y}{l_y^{HH}} \right)^2 + \left( \frac{z}{l_z^{HH}} \right)^2 \right]} \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

(3.2.11)式中， $l_x^{HH}$ 、 $l_y^{HH}$ 和 $l_z^{HH}$ 分別代表純重電洞 $x$ 、 $y$ 和 $z$ 方向的特徵長度且定義如下

式(3.2.12)。

$$l_{\alpha}^{HH} \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m_{HH,\alpha}^* \omega_{HH,\alpha}}}, \alpha = x, y, z \quad (3.2.12)$$

由(3.2.11)式，可以得到純重電洞的基態波函數 $\phi_{000}^{HH}(x, y, z)$ 為：

$$\phi_{000}^{HH}(x, y, z) = \left( \frac{1}{\sqrt{\pi^{3/2} l_x^{HH} l_y^{HH} l_z^{HH}}} \right) e^{-\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x}{l_x^{HH}} \right)^2 + \left( \frac{y}{l_y^{HH}} \right)^2 + \left( \frac{z}{l_z^{HH}} \right)^2 \right]} \quad (3.2.13)$$

同理可以得到純輕電洞的 Schrödinger equation，解得純輕電洞的系統能量(3.2.14)式及任

意態的純輕電洞波函數(3.2.15)式：

$$E_{n_x^{LH}, n_y^{LH}, n_z^{LH}}^{LH} = \hbar \omega_{LH,x} \left( n_x^{LH} + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_{LH,y} \left( n_y^{LH} + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_{LH,z} \left( n_z^{LH} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.2.14)$$

$$\phi_{n_x^{LH}, n_y^{LH}, n_z^{LH}}^{LH}(x, y, z) = \left( \frac{1}{\sqrt{\pi^{3/2} 2^{n_x^{LH} + n_y^{LH} + n_z^{LH}} n_x^{LH}! n_y^{LH}! n_z^{LH}!}} \right) \left( \frac{1}{(l_x^{LH})^{n_x^{LH} + 1/2} (l_y^{LH})^{n_y^{LH} + 1/2} (l_z^{LH})^{n_z^{LH} + 1/2}} \right) \quad (3.2.15)$$

$$\times \left( x - (l_x^{LH})^2 \frac{\partial}{\partial x} \right)^{n_x^{LH}} \left( y - (l_y^{LH})^2 \frac{\partial}{\partial y} \right)^{n_y^{LH}} \left( z - (l_z^{LH})^2 \frac{\partial}{\partial z} \right)^{n_z^{LH}} e^{-\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x}{l_x^{LH}} \right)^2 + \left( \frac{y}{l_y^{LH}} \right)^2 + \left( \frac{z}{l_z^{LH}} \right)^2 \right]}$$

(3.2.15)式中， $l_x^{LH}$ 、 $l_y^{LH}$ 和 $l_z^{LH}$ 分別代表純輕電洞 $x$ 、 $y$ 和 $z$ 方向的特徵長度且定義如下

(3.2.16)式。

$$l_{\alpha}^{LH} \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m_{LH,\alpha}^* \omega_{LH,\alpha}}}, \alpha = x, y, z \quad (3.2.16)$$

其純輕電洞基態波函數 $\phi_{000}^{LH}(x, y, z)$ 為：

$$\phi_{000}^{LH}(x, y, z) = \left( \frac{1}{\sqrt{\pi^{3/2} l_x^{LH} l_y^{LH} l_z^{LH}}} \right) e^{-\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x}{l_x^{LH}} \right)^2 + \left( \frac{y}{l_y^{LH}} \right)^2 + \left( \frac{z}{l_z^{LH}} \right)^2 \right]} \quad (3.2.17)$$

觀察(3.2.13)和(3.2.17)式，純輕重電洞的基態波函數的差異在於特徵長度不一樣，在此

定義：

$$r_{\parallel} \equiv \frac{l_{\alpha}^{LH}}{l_{\alpha}^{HH}} \quad (3.2.18)$$

$$r_{\parallel} = \left( \frac{m_{HH,x(y)}^*}{m_{LH,x(y)}^*} \right)^{1/4} = \left( \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \right)^{1/4} \quad (3.2.19)$$

$$r_{\perp} \equiv \frac{l_z^{LH}}{l_z^{HH}} \quad (3.2.20)$$

$$r_{\perp} = \left( \frac{m_{HH,z}^*}{m_{LH,z}^*} \right)^{1/4} = \left( \frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \right)^{1/4} \quad (3.2.21)$$

利用(3.2.18)和(3.2.20)兩式，我們可以把(3.2.17)式整理為：

$$\phi_{000}^{LH}(x, y, z) = \left( \frac{1}{\sqrt{\pi^{3/2} r_{\parallel}^2 r_{\perp} l_x^{HH} l_y^{HH} l_z^{HH}}} \right) e^{-\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x}{r_{\parallel} l_x^{HH}} \right)^2 + \left( \frac{y}{r_{\parallel} l_y^{HH}} \right)^2 + \left( \frac{z}{r_{\perp} l_z^{HH}} \right)^2 \right]} \quad (3.2.22)$$

為了下面推導方便，在此假設： $l_{\alpha} = l_{\alpha}^e = l_{\alpha}^{HH} \neq l_{\alpha}^{LH}$  ( $\alpha = x, y, z$ )。

當我們不忽略(B.8)式矩陣的非對角線項，則(3.2.8)式的矩陣可以整理成：

$$\begin{bmatrix} P+Q+V_{QD}^h & -S & R & 0 \\ -S^{\dagger} & P-Q+V_{QD}^h & 0 & R \\ R^{\dagger} & 0 & P-Q+V_{QD}^h & S \\ 0 & R^{\dagger\dagger} & S & P+Q+V_{QD}^h \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{i_h,+3/2}^h \\ g_{i_h,+1/2}^h \\ g_{i_h,-1/2}^h \\ g_{i_h,-3/2}^h \end{bmatrix} = E_{i_h}^h \begin{bmatrix} g_{i_h,+3/2}^h \\ g_{i_h,+1/2}^h \\ g_{i_h,-1/2}^h \\ g_{i_h,-3/2}^h \end{bmatrix} \quad (3.2.23)$$

我們要對角化(3.2.23)式的矩陣將無法得到解析解，所以為了簡化問題，我們採用固定軌

道模型，假設輕重電洞的波包函數均為純輕重電洞的基態波函數(S 軌域波函數)當基底

$\{[\phi_{000}^{HH}, \phi_{000}^{LH}, \phi_{000}^{LH}, \phi_{000}^{HH}]\}$  重新展開(3.2.8)式矩陣：

$$\begin{bmatrix}
\langle \phi_{000}^{HH} | \begin{pmatrix} P+Q \\ +V_{QD}^h \end{pmatrix} | \phi_{000}^{HH} \rangle & \langle \phi_{000}^{HH} | -S | \phi_{000}^{LH} \rangle & \langle \phi_{000}^{HH} | R | \phi_{000}^{LH} \rangle & 0 \\
\langle \phi_{000}^{LH} | -S^\dagger | \phi_{000}^{HH} \rangle & \langle \phi_{000}^{LH} | \begin{pmatrix} P-Q \\ +V_{QD}^h \end{pmatrix} | \phi_{000}^{LH} \rangle & 0 & \langle \phi_{000}^{LH} | R | \phi_{000}^{HH} \rangle \\
\langle \phi_{000}^{LH} | R^\dagger | \phi_{000}^{HH} \rangle & 0 & \langle \phi_{000}^{LH} | \begin{bmatrix} P-Q \\ +V_{QD}^h \end{bmatrix} | \phi_{000}^{LH} \rangle & \langle \phi_{000}^{LH} | S | \phi_{000}^{HH} \rangle \\
0 & \langle \phi_{000}^{HH} | R^{\dagger\dagger} | \phi_{000}^{LH} \rangle & \langle \phi_{000}^{HH} | S | \phi_{000}^{LH} \rangle & \langle \phi_{000}^{HH} | \begin{pmatrix} P+Q \\ +V_{QD}^h \end{pmatrix} | \phi_{000}^{HH} \rangle
\end{bmatrix} \quad (3.2.24)$$

定義：

$$\rho_{HL} \equiv \langle \phi_{000}^{HH} | R | \phi_{000}^{LH} \rangle \quad (3.2.25)$$

$$= \frac{4r_{\parallel}}{(1+r_{\parallel}^2)^2} \times \frac{\sqrt{3}\hbar^2\gamma_3}{4m_0} \times \frac{1}{(l_y)^2} \left(1 - \frac{1}{\eta_{\parallel}^2}\right) \quad (3.2.26)$$

$$\Delta_{HL} \equiv \langle \phi_{000}^{LH} | P - Q + V_{QD}^h | \phi_{000}^{LH} \rangle - \langle \phi_{000}^{HH} | P + Q + V_{QD}^h | \phi_{000}^{HH} \rangle \quad (3.2.27)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ \begin{array}{l} \left[ \frac{(\gamma_1 - \gamma_2)}{r_{\parallel}^2 (l_x)^2} + \frac{(\gamma_1 - \gamma_2)}{r_{\parallel}^2 (l_y)^2} + \frac{(\gamma_1 + 2\gamma_2)}{r_{\perp}^2 (l_z)^2} \right] \\ - \left[ \frac{(\gamma_1 + \gamma_2)}{(l_x)^2} + \frac{(\gamma_1 + \gamma_2)}{(l_y)^2} + \frac{(\gamma_1 - 2\gamma_2)}{(l_z)^2} \right] \end{array} \right\} \quad (3.2.28)$$

由(3.2.10)和(3.2.14)式得知：

$$\langle \phi_{000}^{HH} | P + Q + V_{QD}^h | \phi_{000}^{HH} \rangle = E_{000}^{HH} \quad (3.2.29)$$

$$\langle \phi_{000}^{LH} | P - Q + V_{QD}^h | \phi_{000}^{LH} \rangle = E_{000}^{LH} \quad (3.2.30)$$

而  $S$  項由純輕重電洞的基態波函數的期望值為：

$$\langle \phi_{000}^{HH} | S | \phi_{000}^{LH} \rangle = -\frac{\hbar^2\gamma_3}{m_0} \sqrt{3} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{000}^{HH*}(\vec{r}) \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \frac{\partial}{\partial z} \phi_{000}^{LH}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.2.31)$$

假設：

$$\phi_{000}^{HH}(x, y, z) = X_0^{HH}(x)Y_0^{HH}(y)Z_0^{HH}(z) \quad (3.2.32)$$

$$\phi_{000}^{LH}(x, y, z) = X_0^{LH}(x)Y_0^{LH}(y)Z_0^{LH}(z) \quad (3.2.33)$$

所以(3.2.31)式子可以分離變數如下：

$$\begin{aligned} & \langle \phi_{000}^{HH} | S | \phi_{000}^{LH} \rangle \\ &= -\frac{\sqrt{3}\hbar^2\gamma_3}{m_0} \left[ \left( \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} X_0^{HH*}(x)Y_0^{HH*}(y) \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) X_0^{LH}(x)Y_0^{LH}(y) dx dy \right) \right. \\ & \quad \left. \times \left( \int_{-\infty}^{\infty} Z_0^{HH*}(z) \frac{\partial}{\partial z} Z_0^{LH}(z) dz \right) \right] \end{aligned} \quad (3.2.34)$$

此(3.2.34)式，我們先處理變數 $z$ 的積分式：

$$\int_{-\infty}^{\infty} Z_0^{HH*}(z) \frac{\partial}{\partial z} Z_0^{LH}(z) dz = \frac{1}{\sqrt{\pi r_{\perp} l_z^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z}{l_z}\right)^2} \frac{\partial}{\partial z} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z}{r_{\perp} l_z}\right)^2} dz = 0 \quad (3.2.35)$$

將(3.2.35)式的結果代回(3.2.34)式，我們可以得到：

$$\langle \phi_{000}^{HH} | S | \phi_{000}^{LH} \rangle = 0 \quad (3.2.36)$$

由(3.2.25)、(3.2.27)、(3.2.29)、(3.2.30)和(3.2.36)式知道(3.2.24)可以改寫為：

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} E_{000}^{HH} & 0 & \rho_{HL} & 0 \\ 0 & E_{000}^{LH} & 0 & \rho_{HL} \\ \rho_{HL}^{\dagger} & 0 & E_{000}^{LH} & 0 \\ 0 & \rho_{HL}^{\dagger} & 0 & E_{000}^{HH} \end{bmatrix} \\ & \begin{bmatrix} E_{000}^{HH} & 0 & \rho_{HL} & 0 \\ 0 & E_{000}^{HH} + \Delta_{HL} & 0 & \rho_{HL} \\ \rho_{HL}^{\dagger} & 0 & E_{000}^{HH} + \Delta_{HL} & 0 \\ 0 & \rho_{HL}^{\dagger} & 0 & E_{000}^{HH} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{000}^{HH} \\ \phi_{000}^{LH} \\ \phi_{000}^{LH} \\ \phi_{000}^{HH} \end{bmatrix} = E_{000}^h \begin{bmatrix} \phi_{000}^{HH} \\ \phi_{000}^{LH} \\ \phi_{000}^{LH} \\ \phi_{000}^{HH} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.37)$$

(3.2.37)式中，我們可以知道當電洞處於重電洞(+3/2)的狀態時，只會耦合些許的輕電洞(-1/2)，其餘重電洞(-3/2)和輕電洞(+1/2)不會參與混成，經由 Lödwen 微擾理論得知，輕重電洞混成後電洞的基態波函數為：

$$|\phi_{000}^h\rangle \approx |\phi_{000}^{HH}\rangle - \frac{\rho_{HL}}{\Delta_{HL}} |\phi_{000}^{LH}\rangle \quad (3.2.38)$$

對照(3.2.38)式，則電洞波包函數每個分量如下：

$$|g_{000',+3/2}^h\rangle = 0 \quad (3.2.39)$$

$$|g_{000',1/2}^h\rangle = -\frac{\rho_{HL}}{\Delta_{HL}} |\phi_{000}^{LH}\rangle \quad (3.2.40)$$

$$|g_{000',-1/2}^h\rangle = 0 \quad (3.2.41)$$

$$|g_{000',-3/2}^h\rangle = |\phi_{000}^{HH}\rangle \quad (3.2.42)$$

所以偶極矩陣元素(3.1.5)式，考慮電子狀態處於純自旋角動量+1/2，如下(3.2.43)式：

$$D_{000',000} \left( \theta = \frac{\pi}{2}, \phi \right) \approx \sum_{j_z} \langle g_{000',j_z}^h | g_{000',1/2}^e \rangle A_{j_z,1/2} \quad (3.2.43)$$

將(3.2.39)~(3.2.42)代入(3.2.43)式：

$$D_{000',000} \left( \theta = \frac{\pi}{2}, \phi \right) \approx \langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle A_{-3/2,1/2} - \frac{\rho_{HL}}{\Delta_{HL}} \langle \phi_{000}^{LH} | \phi_{000}^e \rangle A_{1/2,1/2} \quad (3.2.44)$$

其中， $A_{-3/2,1/2} = d_{3/2,1/2}$ 、 $A_{1/2,1/2} = d_{-1/2,1/2}$  可查表 3.1.1。

$$D_{000',000} \left( \frac{\pi}{2}, \phi \right) = \frac{p_{cv}}{\sqrt{2}} e^{-i\phi} \times \langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle + \frac{p_{cv}}{\sqrt{6}} e^{+i\phi} \times \frac{\rho_{HL}}{\Delta_{HL}} \langle \phi_{000}^{LH} | \phi_{000}^e \rangle \quad (3.2.45)$$

$$D_{000',000} \left( \frac{\pi}{2}, \phi \right) = \frac{p_{cv}}{\sqrt{2}} \langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle \left[ e^{-i\phi} + \frac{\rho_{HL}}{\sqrt{3}\Delta_{HL}} \frac{\langle \phi_{000}^{LH} | \phi_{000}^e \rangle}{\langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle} \times e^{+i\phi} \right] \quad (3.2.46)$$

定義：

$$\alpha_{HL} \equiv \frac{\rho_{HL}}{\sqrt{3}\Delta_{HL}} \frac{\langle \phi_{000}^{LH} | \phi_{000}^e \rangle}{\langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle} \quad (3.2.47)$$

所以偶極矩陣元素，可以寫成：

$$\begin{aligned} & D_{000',000} \left( \theta = \frac{\pi}{2}, \phi \right) \\ &= \frac{P_{cv}}{\sqrt{2}} \langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle \left[ e^{-i\phi} + \alpha_{HL} e^{+i\phi} \right] \\ &= \frac{P_{cv}}{\sqrt{2}} \langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle \left[ (1 + \alpha_{HL}) \cos \phi - i(1 - \alpha_{HL}) \sin \phi \right] \end{aligned} \quad (3.2.48)$$

則發光強度為：

$$\begin{aligned} I_{000',000} \left( \frac{\pi}{2}, \phi \right) &\propto \left| D_{000',000} \left( \frac{\pi}{2}, \phi \right) \right|^2 \\ &= \left| \frac{P_{cv}}{\sqrt{2}} \langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle \right|^2 \left| \left[ (1 + \alpha_{HL}) \cos \phi - i(1 - \alpha_{HL}) \sin \phi \right] \right|^2 \\ &= \left| \frac{P_{cv}}{\sqrt{2}} \langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle \right|^2 \left[ (1 + \alpha_{HL})^2 \cos^2 \phi + (1 - \alpha_{HL})^2 \sin^2 \phi \right] \\ &= \left| \frac{P_{cv}}{\sqrt{2}} \langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle \right|^2 \left[ (1 + \alpha_{HL})^2 (1 - \sin^2 \phi) + (1 - \alpha_{HL})^2 \sin^2 \phi \right] \\ &= \left| \frac{P_{cv}}{\sqrt{2}} \langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle \right|^2 \left[ (1 + \alpha_{HL})^2 - 4\alpha_{HL} \sin^2 \phi \right] \end{aligned} \quad (3.2.49)$$

當  $\phi = 0$  or  $2\pi$ ，則發光強度會有最大值：

$$I_{\max} \propto (1 + \alpha_{HL})^2 \quad (3.2.50)$$

當  $\phi = \frac{\pi}{2}$  or  $\frac{3\pi}{2}$ ，則發光強度會有最小值：

$$I_{\max} \propto (1 - \alpha_{HL})^2 \quad (3.2.51)$$

將(3.2.50)、(3.2.51)兩式代入偏振定義：

$$\begin{aligned} DOP_{000',000} &= \frac{(1 + \alpha_{HL})^2 - (1 - \alpha_{HL})^2}{(1 + \alpha_{HL})^2 + (1 - \alpha_{HL})^2} \\ &= \frac{2\alpha_{HL}}{1 + \alpha_{HL}^2} \end{aligned} \quad (3.2.52)$$

再來，電子波函數和純重電洞的波包函數的重疊比例為：

$$\langle \phi_{000}^{HH} | \phi_{000}^e \rangle = 1 \quad (\because l_{\alpha}^e = l_{\alpha}^{HH}, \alpha = x, y, z) \quad (3.2.53)$$

電子波函數和純輕電洞的重疊比例為：

$$\begin{aligned} &\langle \phi_{000}^{LH} | \phi_{000}^e \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \left( \frac{1}{\sqrt{\pi^{3/2} r_{\parallel}^2 r_{\perp} l_x l_y l_z}} \right) e^{-\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x}{r_{\parallel} l_x} \right)^2 + \left( \frac{y}{r_{\parallel} l_y} \right)^2 + \left( \frac{z}{r_{\perp} l_z} \right)^2 \right]} \right] dx dy dz \\ &\quad \times \left[ \left( \frac{1}{\sqrt{\pi^{3/2} l_x l_y l_z}} \right) e^{-\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x}{l_x} \right)^2 + \left( \frac{y}{l_y} \right)^2 + \left( \frac{z}{l_z} \right)^2 \right]} \right] \\ &= \left( \frac{1}{\sqrt{\pi^3 r_{\parallel}^2 r_{\perp} l_x^2 l_y^2 l_z^2}} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ e^{-\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x}{r_{\parallel} l_x} \right)^2 + \left( \frac{y}{r_{\parallel} l_y} \right)^2 + \left( \frac{z}{r_{\perp} l_z} \right)^2 \right]} \right] dx dy dz \\ &\quad \times \left[ e^{-\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x}{l_x} \right)^2 + \left( \frac{y}{l_y} \right)^2 + \left( \frac{z}{l_z} \right)^2 \right]} \right] \\ &= \left( \frac{1}{\sqrt{\pi^3 r_{\parallel}^2 r_{\perp} l_x^2 l_y^2 l_z^2}} \right) \left( \sqrt{\frac{r_{\parallel}^2}{r_{\parallel}^2 + 1}} \right)^2 \left( \sqrt{\frac{r_{\perp}^2}{r_{\perp}^2 + 1}} \right) (\sqrt{2\pi})^3 l_x l_y l_z \end{aligned}$$

$$= \sqrt{8} \left( \sqrt{\frac{r_{\parallel}}{r_{\parallel}^2 + 1}} \right)^2 \left( \sqrt{\frac{r_{\perp}}{r_{\perp}^2 + 1}} \right)$$

$$\langle \phi_{000}^{LH} | \phi_{000}^e \rangle \approx 1 \quad (3.2.54)$$

將(3.2.53)和(3.2.54)代入(3.2.47)，可以得到：

$$\alpha_{HL} \approx \frac{\rho_{HL}}{\sqrt{3}\Delta_{HL}} \quad (3.2.55)$$

所以偏振，可以整理為：

$$\begin{aligned} DOP_{000',000} &= \frac{2\alpha_{HL}}{1 + \alpha_{HL}^2} \\ &\approx \frac{2 \left( \frac{\rho_{HL}}{\sqrt{3}\Delta_{HL}} \right)}{1 + \left( \frac{\rho_{HL}}{\sqrt{3}\Delta_{HL}} \right)^2} \end{aligned}$$

對基態電洞而言，輕電洞的混成比例很低：

$$\frac{\rho_{HL}}{\Delta_{HL}} \ll 1 \quad (3.2.56)$$

最後偏振整理成：

$$DOP_{000',000} \approx \frac{2\rho_{HL}}{\sqrt{3}\Delta_{HL}} \quad (3.2.57)$$

對於  $\rho_{HL}$  我們參考(3.2.26)，而  $\Delta_{HL}$  部分我們進一步作近似如下(3.2.58)式：

$$\begin{aligned} \Delta_{HL} &\approx - \left[ \langle \phi_{000}^{LH} | Q | \phi_{000}^{LH} \rangle + \langle \phi_{000}^{HH} | Q | \phi_{000}^{HH} \rangle \right] \\ &= - \frac{\hbar^2 \gamma_2}{m_0} \left[ \left( \frac{1}{2r_{\parallel}^2 l_x^2} + \frac{1}{2r_{\parallel}^2 l_x^2} - \frac{1}{r_{\perp}^2 l_z^2} \right) + \left( \frac{1}{2l_x^2} + \frac{1}{2l_x^2} - \frac{1}{l_z^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.2.58)$$

假設：

$$l_z \ll l_x, l_y \quad (3.2.59)$$

則(3.2.58)式，可以整理如下：

$$\Delta_{HL} \approx \left( \frac{1+r_{\perp}^2}{r_{\perp}^2} \right) \frac{\hbar^2 \gamma_2}{m_0} \times \frac{1}{l_z^2} \quad (3.2.60)$$

將(3.2.26)和(3.2.60)代入(3.2.57)式，則基態激子的偏振可以整理為：

$$\begin{aligned} DOP_{000',000} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{4r_{\parallel}}{(1+r_{\parallel}^2)^2} \times \frac{\sqrt{3}\hbar^2 \gamma_3}{4m_0} \times \frac{1}{l_y^2} \left( 1 - \frac{1}{\eta_{\parallel}^2} \right) \times \frac{2m_0}{\hbar^2 \gamma_2} \left( \frac{r_{\perp}^2 l_z^2}{1+r_{\perp}^2} \right) \\ &= \frac{8r_{\parallel} r_{\perp}^2}{(1+r_{\parallel}^2)^2 (1+r_{\perp}^2)} \times \frac{1}{2} \times \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \times \frac{l_z^2}{l_y^2} \left( 1 - \frac{1}{\eta_{\parallel}^2} \right) \end{aligned}$$

假設：

$$F = \frac{8r_{\parallel} r_{\perp}^2}{(1+r_{\parallel}^2)^2 (1+r_{\perp}^2)} \quad (3.2.61)$$

最後基態激子的偏振可以簡化為：

$$DOP_{000',000} = F \times \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \times \frac{1}{2} \times \frac{l_z^2}{l_y^2} \left( 1 - \frac{1}{\eta_{\parallel}^2} \right) \quad (3.2.62)$$

(3.2.62)式，基態激子的偏振和量子點  $xy$  平面不對稱性 $(\eta_{\parallel})$ ，量子點的底部短軸長度 $l_y$ 以及量子點的高度 $l_z$ 相關。

### 3.3 組態交互作用對偏振光譜的修正

在此節，我們考慮組態交互作用找出不同激子狀態的系統混成後的偏振光譜形式，利用組態混成後的基態激子波函數(2.3.7)式，代入費米黃金定理(3.1.1)式，找出組態交互作用後的發光強度。

假設組態混成後的  $S$  軌域激子組態發光強度的符號為：

$$I'_{000',000}(\bar{e}, \omega)$$

發光強度如下(3.3.1)式：

$$I'_{000',000}(\bar{e}; \omega)(\text{intensity}) \propto \left| \langle 0 | P_{\bar{e}}^- | \Psi_{000',000}^X \rangle \right|^2 \delta(E'_{000',000} - \hbar\omega) \quad (3.3.1)$$

則組態混成後的  $S$  軌域激子組態的偶極矩陣元素如下推導：

$$\begin{aligned} D'_{000',000}(\bar{e}) &= \langle 0 | P_{\bar{e}}^- | \Psi_{000',000}^X \rangle' \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

$$\begin{aligned} &= \langle 0 | \sum_{i_h, i_e} D_{i_h, i_e}(\bar{e}) \hbar_{i_h} c_{i_e} \left( \sum_{i_h', i_e'} C_{i_h', i_e'}^{000',000} | \Psi_{i_h', i_e'}^X \rangle \right) \rangle \\ &= \sum_{i_h', i_e'} C_{i_h', i_e'}^{000',000} D_{i_h', i_e'}(\bar{e}) \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

(3.3.3)式，表示組態混成後激子系統的偶極矩陣元素，其中  $D_{i_h', i_e'}(\bar{e})$  表示無交互作用的激子組態的偶極矩陣元素， $C_{i_h', i_e'}^{000',000}$  為激子系統組態的混成係數。

由(3.3.3)式，我們可知道發光強度如下(3.3.4)式：

$$I'_{000',000} \left( \bar{e}, \frac{E'_{000',000}}{\hbar} \right) \propto \left| \sum_{i_h', i_e'} C_{i_h', i_e'}^{000',000} D_{i_h', i_e'}(\bar{e}) \right|^2 \quad (3.3.4)$$

為了描述方便，將發光強度簡化為：

$$I'_{000',000}(\vec{e})$$

當輻射光子沿  $z$  方向傳遞，則偏振方向在  $xy$  平面，(3.3.4)式可以改寫成如下(3.3.5)

式：

$$I'_{000',000}\left(\frac{\pi}{2}, \phi\right) \propto \left| \sum_{i_h, i_e} C_{i_h, i_e}^{000',000} D_{i_h, i_e}\left(\frac{\pi}{2}, \phi\right) \right|^2 \quad (3.3.5)$$

我們知道發光強度後，再找出最強的光強度和最弱的光強度：

$$I_{\max} = \max\left[I'_{000',000}\left(\frac{\pi}{2}, \phi\right)\right] \quad (3.3.6)$$

$$I_{\min} = \min\left[I'_{000',000}\left(\frac{\pi}{2}, \phi\right)\right] \quad (3.3.7)$$

代入偏振定義(3.1.10)式，就可以找出組態混成後的基態激子的偏振。

## 第四章、結果與討論

在本文章，我們探討真實量子點結構後，採用量子點的結構位能為三維拋物線模型，探討量子點幾何大小如何影響基態激子的偏振，再來討論激發態激子偏振的結果，最後加入庫倫作用，透過庫倫散射考慮不同組態的混成對  $S$  軌域激子組態偏振的修正。

### 4.1 真實量子點結構的探討

由第一章的介紹，我們知道 droplet-epitaxy 技術所製造的量子點的結構形狀為類似 2D-gaussian 的結構形狀，如圖 1.2.1(b)，所以我們考慮量子點結構為 2D-gaussian 形狀進行數值模擬，下圖 4.1.1 和 4.1.2 為數值模擬的量子點的結構的剖面圖：

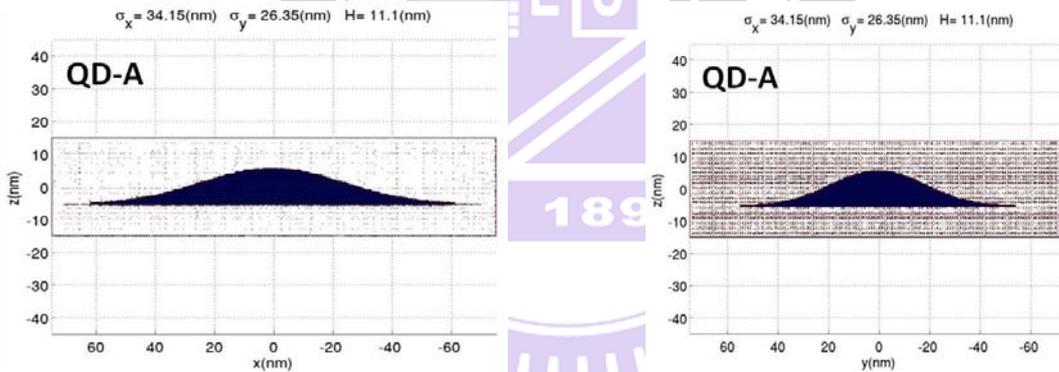


圖 4.1.1、QD-A 其  $x-z$  平面的剖面圖，取  $y=0(\text{nm})$  的切面圖。 圖 4.1.2、QD-A 其  $y-z$  平面的剖面圖，取  $x=0(\text{nm})$  的切面圖。

由上圖 4.1.1 到 4.1.2 我們可以相信，數值程式模擬的量子點結構是可信的，下圖 4.1.3 和圖 4.1.4 為數值模擬和文獻[2]上實驗的偏振結果：

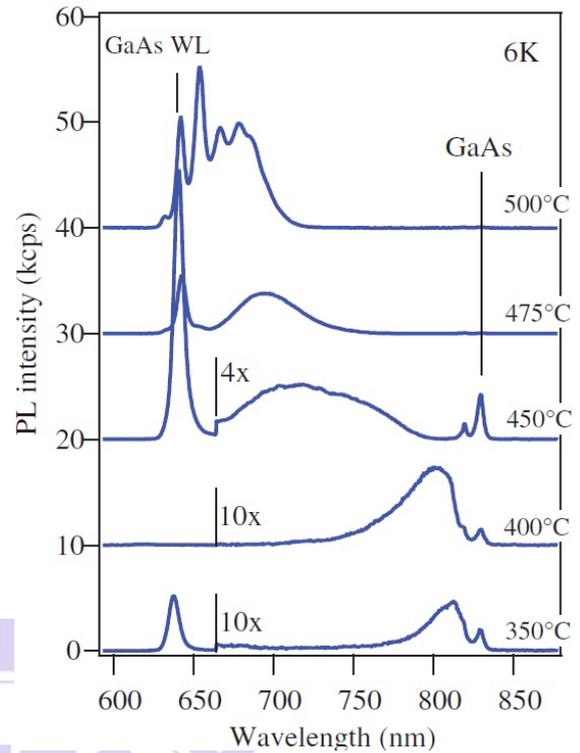
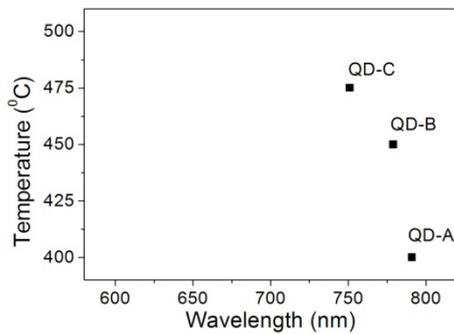


圖 4.1.3、量子點結構為 2D-gaussian，數值模擬輻射光子波長。

圖 4.1.4、實驗量測得到的輻射光子波長。  
參考資料:Appl. Phys. Exp. 3, 045502(2010).[2]

我們可以看出光子波長部分的比較，只有 QD-A 數值模擬的結果落在實驗的結果的範圍內，其餘 QD-B 和 QD-C 相比並不是太符合，下面則是偏振的比較，如圖 4.1.5 和圖 4.1.6：

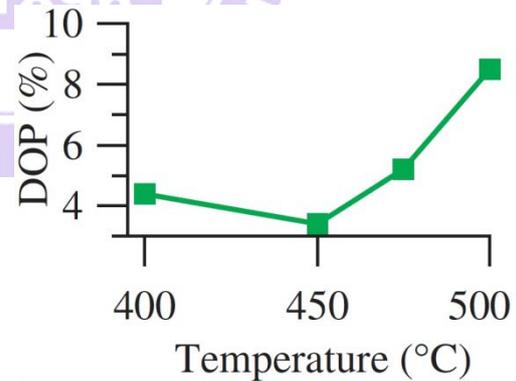
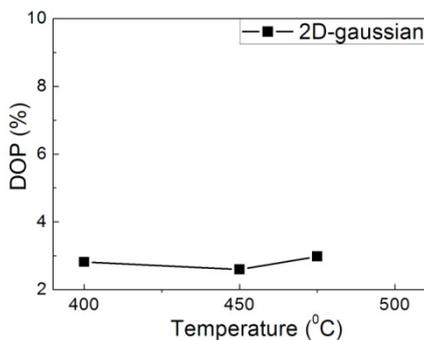


圖 4.1.5、量子點結構為 2D-gaussian，數值模擬輻射光子偏振的強度。

圖 4.1.6、實驗量測得到的輻射光子偏振的強度。  
參考資料:Appl. Phys. Exp. 3, 045502(2010).[2]

在文獻[2]上的實驗的偏振結果，最低約為 3.5%，最高約為 9%，且 QD-A 到 QD-C 數值模擬的結果普遍偏低。

由波長和偏振的比較結果，數值模擬和實驗的結果有著顯著的差異，我們猜測偏差的原因可能來自於 AFM 在量測量子點的結構大小是不準確的，因為 AFM 在量測時會和樣本保持些許距離，造成 AFM 的量測結果會高估量子點結構大小，所以我們改採用量子點結構位能為三維拋物線位能並且調控能量去符合實驗的光子波長，如此，我們可以用拋物線模型三個方向的特徵長度( $l_x$ 、 $l_y$  和  $l_z$ )去描述量子點結構的大小，而且量子點結構的不對稱性  $\eta_{||}^{geom}$  可以用  $l_x/l_y$  來描述。下面則是拋物線位能和 2D-gaussian 結構其數值模擬撥函數的比較結果，圖 4.1.8：

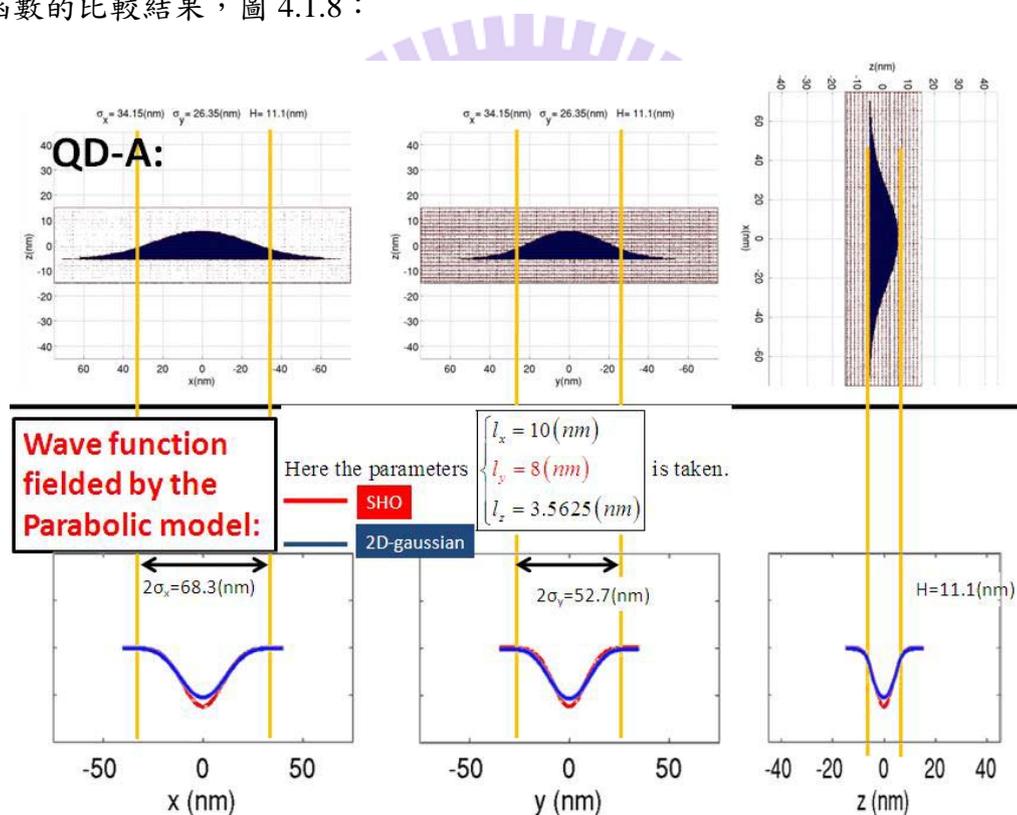


圖 4.1.7、量子點結構為 2D-gaussian 模擬的波函數和三維拋物線模型採用  $l_x = 10(nm)$ 、 $l_y = 8(nm)$  和  $l_z = 3.5625(nm)$  下，模擬的波函數比較圖。

此比較結果告訴我們，用拋物線位能取代 2D-gaussian 結構是合理的做法。

## 4.2 量子點大小對基態激子偏振光譜的影響

由上一章，我們藉由解析解知道基態激子組態的偏振和量子點的幾何大小相關，因為量子點幾何大小不同會導致電子結構改變，對電洞而言，電子結構改變造成輕重電洞耦合程度不同，進一步影響發光強度。

參考表 1.2.1，droplet-epitaxial 量子點短軸方向的底部長度差不多，所以在此我們固定  $l_y$  為定值，則基態激子偏振的強度和以下量子點幾何大小有關，我們利用三維拋物性模型的波函數不對稱性來反應量子點不對稱的程度和量子點的高度：

(a) 量子點不對稱性  $\eta_{\parallel}^{geom} \propto \eta_{\parallel} \equiv \frac{l_x}{l_y}$ 。

(b) 量子點縱向的不對稱性  $H \propto \eta_{\perp} \equiv \frac{l_z}{l_y}$ 。

量子點不對稱性  $\eta_{\parallel}^{geom}$  對偏振的影響：

在此討論量子點不對稱性  $\eta_{\parallel}^{geom}$  ( $\propto \eta_{\parallel}$ ) 對偏振的影響，取  $l_y$  和  $l_z$  為定值，則激子的束縛位能在不同的不對稱性條件下，只有  $x$  方向的位能會不同，所以束縛位能部分，將觀察  $x$  方向的位能變化。

數值模擬的電子感受到的束縛位能，如下圖 4.2.1：

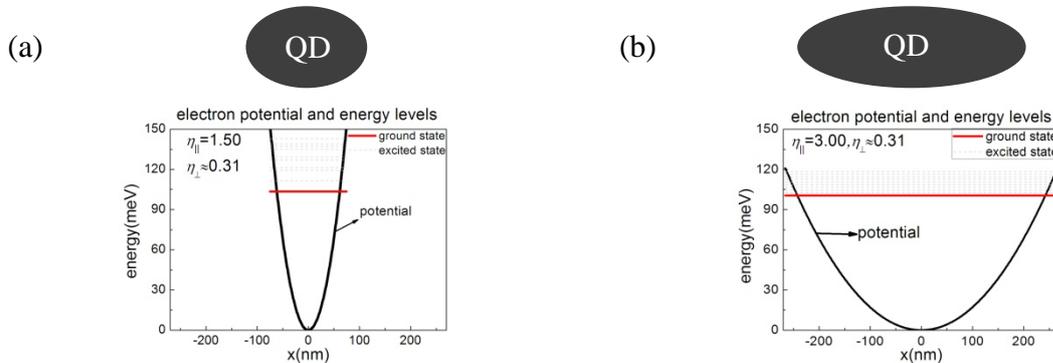


圖 4.2.1、固定  $l_y = 8.0\text{nm}$  和  $\eta_{\perp} \approx 0.31$  下，電子的束縛位能。(a)  $x$  方向，取  $y=0, z=0, \eta_{\parallel} = 1.5$ 。(b)  $x$  方向，取  $y=0, z=0, \eta_{\parallel} = 3.0$ 。

在固定量子點短軸長度和高度時，當量子點長軸長度被拉長，則電子感受到的位能井的寬度變大，所以電子基態的能量下降，因為  $x$  方向為量子點長軸方向，所以拉長  $x$  方向對基態能階的改變不大。

其電子基態波包函數在  $xy$  平面，如下圖 4.2.2：

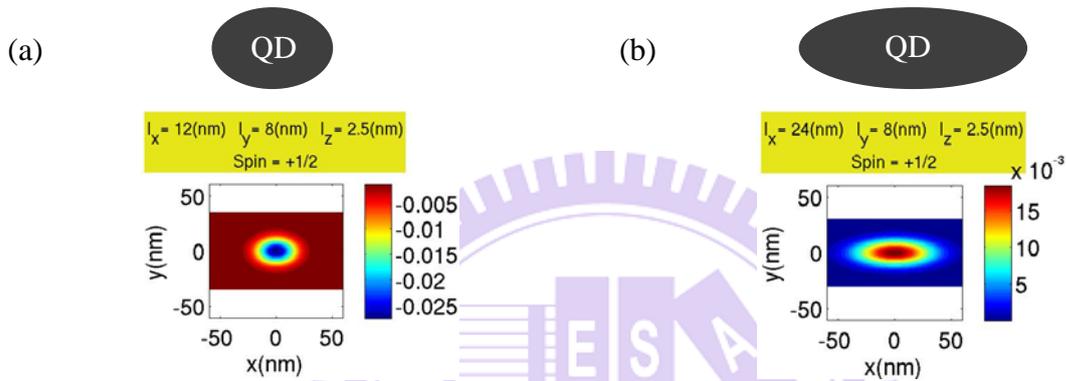


圖 4.2.2、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\eta_{\perp} \approx 0.31$  下，電子基態波包函數。(a)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.5$ 。(b)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.0$ 。

電子基態波包函數在  $xz$  平面，如下圖 4.2.3：

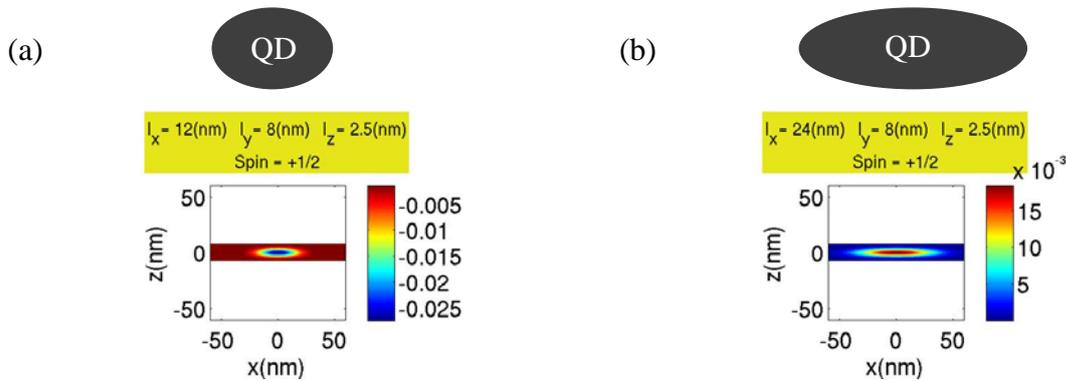


圖 4.2.3、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\eta_{\perp} \approx 0.31$  下，電子基態波包函數。(a)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.5$ 。(b)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.0$ 。

在電洞部分，輕重電洞的束縛位能，如下圖 4.2.4：

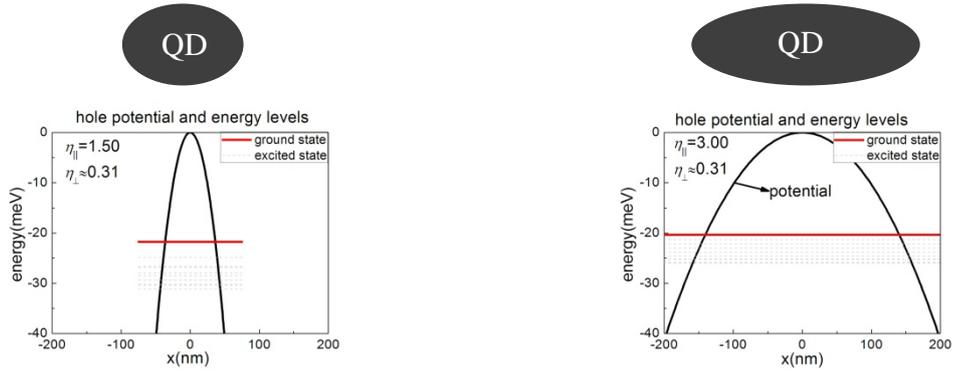
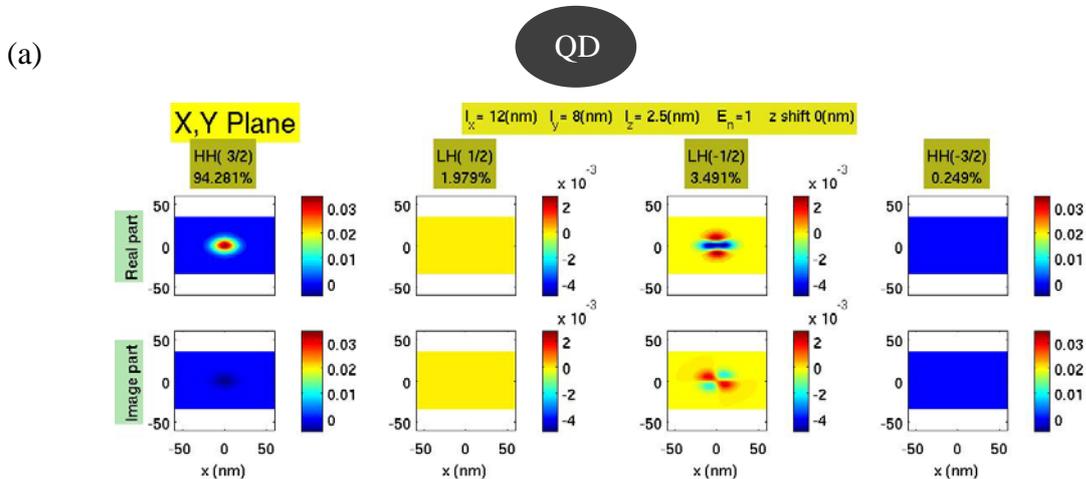


圖 4.2.4、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\eta_{\perp} \approx 0.31$  下，輕重電洞的束縛位能。(a)  $x$  方向，取  $y = 0, z = 0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.5$ 。  
(b)  $x$  方向，取  $y = 0, z = 0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.0$ 。

在固定量子點短軸長度和高度時，當量子點長軸長度被拉長，則電洞感受到的位能井的寬度變大，所以電洞基態的能量下降，因為  $x$  方向為量子點長軸方向，所以拉長  $x$  方向對基態能階的改變不大。這部分的結果和電子的結論是一致的。

電洞的波包函數在  $xy$  平面，如下圖 4.2.5：



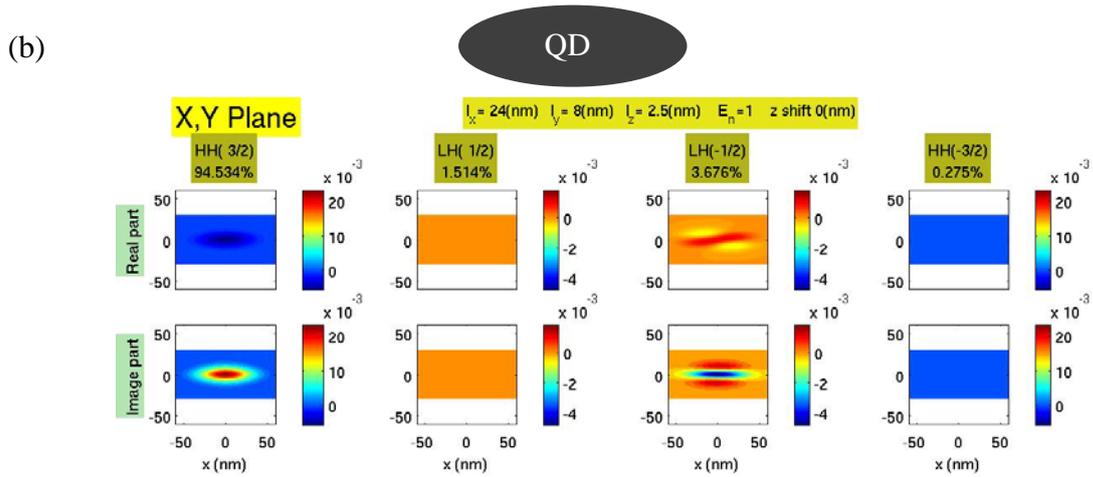


圖 4.2.5、固定  $l_y = 8.0\text{nm}$  和  $\eta_{\perp} \approx 0.31$  下，電洞基態波包函數。(a)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.5$ 。(b)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.0$ 。

電洞的波包函數在  $xz$  平面，如下圖 4.2.6：

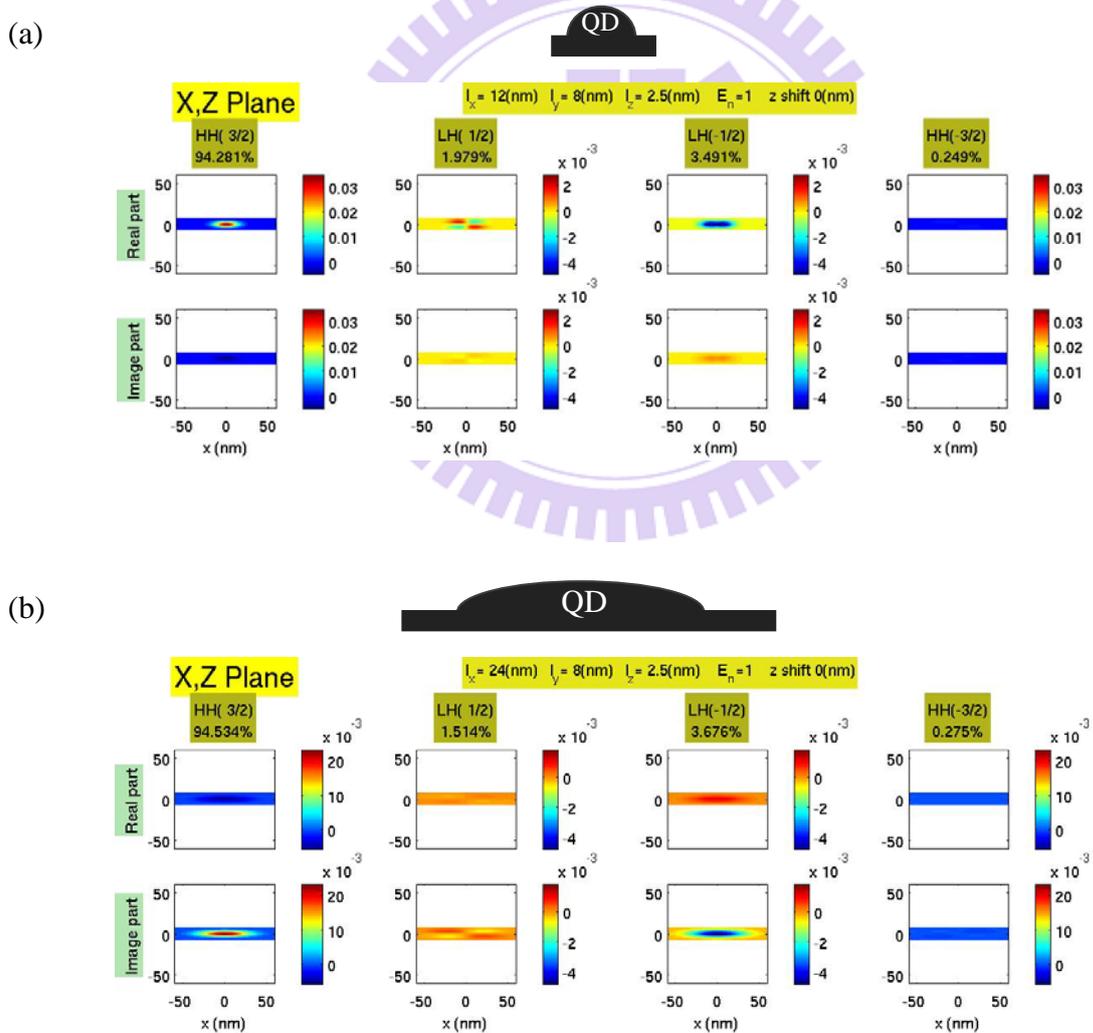


圖 4.2.6、固定  $l_y = 8.0\text{nm}$  和  $\eta_{\perp} \approx 0.31$  下，電洞基態波包函數。(a)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.5$ 。(b)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.0$ 。

量子點  $xy$  平面不對稱性對偏振的影響，其數值模擬結果如下圖 4.2.7：

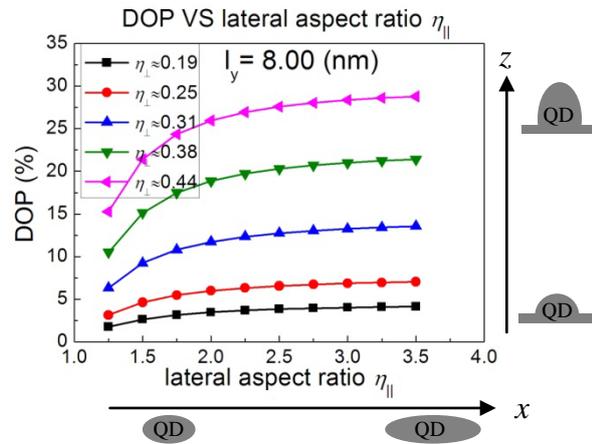


圖 4.2.7、固定量子點高度( $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 、 $0.25$ 、 $0.31$ 、 $0.38$ 、 $0.44$ )及短軸長度 $l_y = 8.0nm$ 下，改變量子點不對稱性( $\eta_{||} = 1.25 \sim 3.50$ )對偏振的影響。

圖 4.2.7 我們可以學習到，量子點不對稱性增加時，偏振變強和文獻[5]有相同的結果，但是當量子點不對稱性( $\eta_{||}$ )大於 3 時，偏振強度已經達到飽和，所以當我們改變量子點不對稱性使得偏振變強，會有極限。

我們進一步分析，當量子點不對稱性越大時， $\Delta_{HL}$  和  $\rho_{HL}$  對偏振強度的影響：

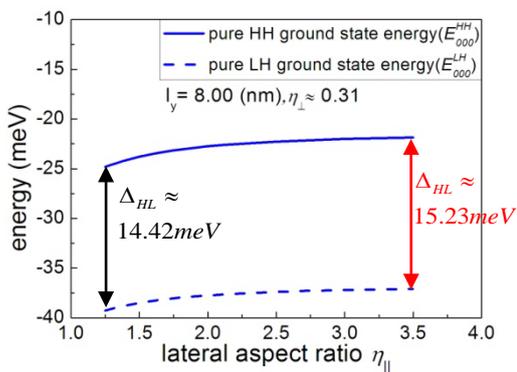


圖 4.2.8、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下，純輕重電洞個別的基態能階圖。

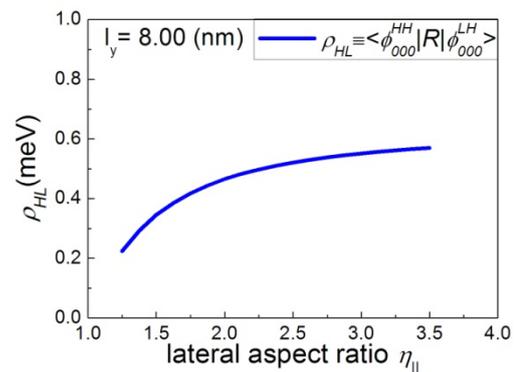


圖 4.2.9、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{\perp} \approx 0.31$ 下， $\rho_{HL}$  隨不對稱性的改變。

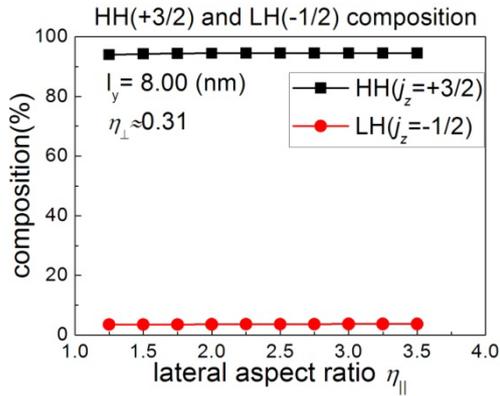


圖 4.2.10、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\eta_{\perp} \approx 0.31$  下，不對稱性  $\eta_{||} = 1.25 \sim 3.50$  的重電洞(3/2)和輕電洞(-1/2)的成份圖。

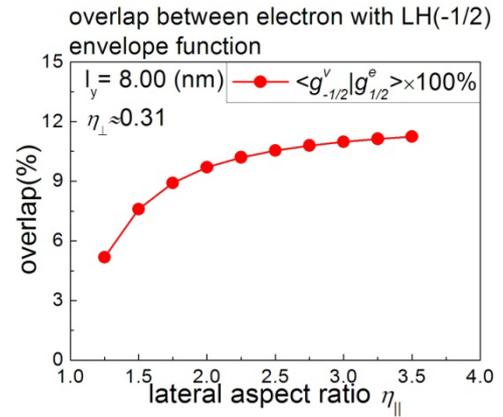


圖 4.2.11、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\eta_{\perp} \approx 0.31$  下，不對稱性  $\eta_{||} = 1.25 \sim 3.50$  的輕電洞(-1/2)和電子波包函數的重疊比例圖。

在圖 4.2.10 和 4.2.11 中發現，當固定量子點短軸長度  $l_y$  時，量子點不對稱性增加，其  $\Delta_{HL}$  變化不大，所以輕電洞的混成比例幾乎不變，如圖 4.2.10，但是  $\rho_{HL}$  卻大幅的增加，使得電子(+1/2)和輕電洞(-1/2)的波包函數的重疊比例上升，如圖 4.2.11，導致偏振強度變強。

(b) 量子點的高度  $H$  對偏振的影響：

在探討量子點的高度  $H(\propto \eta_{\perp})$  對偏振強度的影響，取  $l_y$  和  $\eta_{\parallel}$  定值，則激子系統的束縛位能的變化主要是在  $z$  方向，所以首先看  $z$  方向的位能變化。

電子感受到的  $z$  方向束縛位能，如下圖 4.2.12：

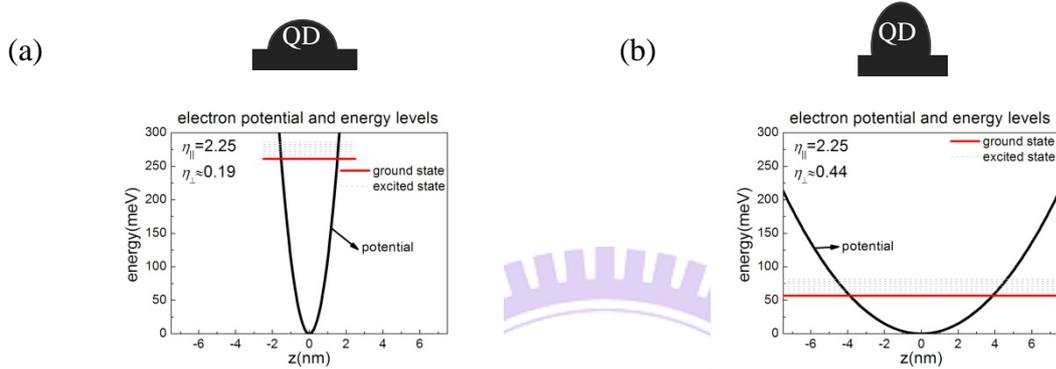


圖 4.2.12、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\eta_{\parallel} \approx 2.25$  下，電子的束縛位能。(a)  $z$  方向，取  $x = 0, y = 0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。

(b)  $z$  方向，取  $x = 0, y = 0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ 。

在固定量子點長短軸長度後，將量子點變高，所以電子感受到的位能井變寬，使得基態能階下降，而下降幅度較大的原因是量子點的高度一般來說都較小，當量子點高度變化時造成基態能階的變化幅度也較大。

電子基態波包函數  $xy$  平面，如下圖 4.2.13：

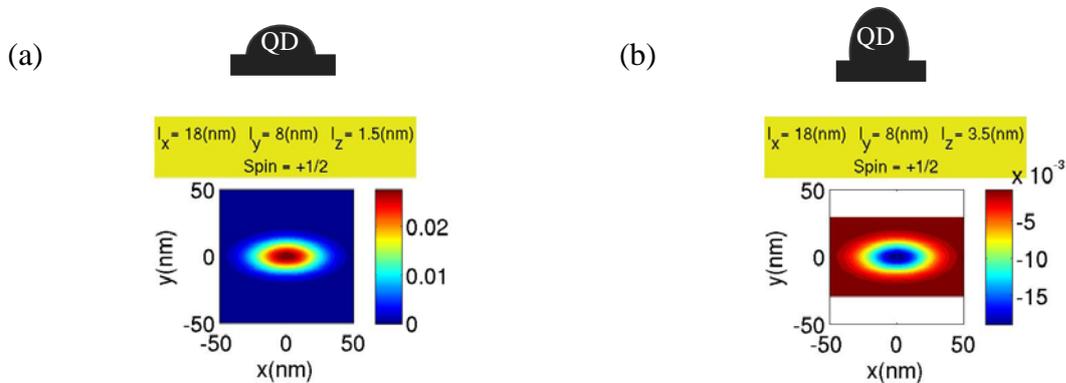


圖 4.2.13、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\eta_{\parallel} \approx 2.25$  下，電子基態波包函數。(a)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。(b)  $xy$

平面，取  $z=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ 。

電子基態波包函數  $xz$  平面，如下圖 4.2.14：

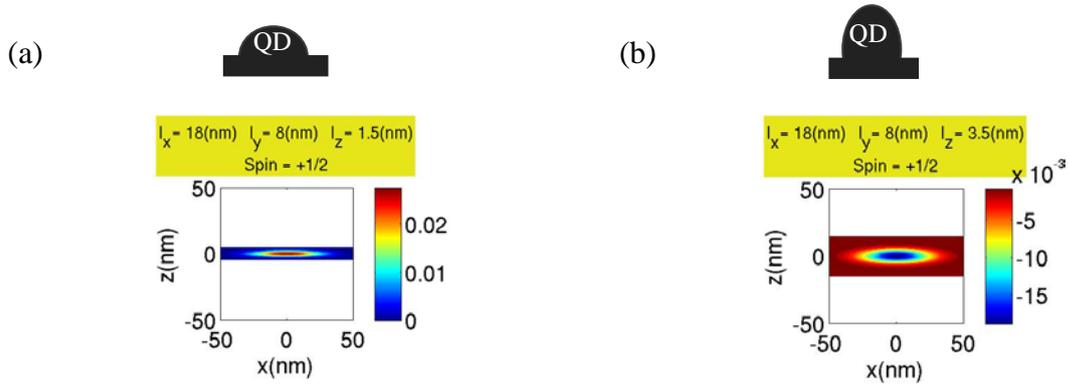


圖 4.2.14、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\eta_{||} \approx 2.25$  下，電子基態波包函數。(a)  $xz$  平面， $y=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。(b)  $xz$  平面， $y=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ 。

電洞部分，首先是輕重電洞感受到的  $z$  方向束縛位能，如下圖 4.2.15：

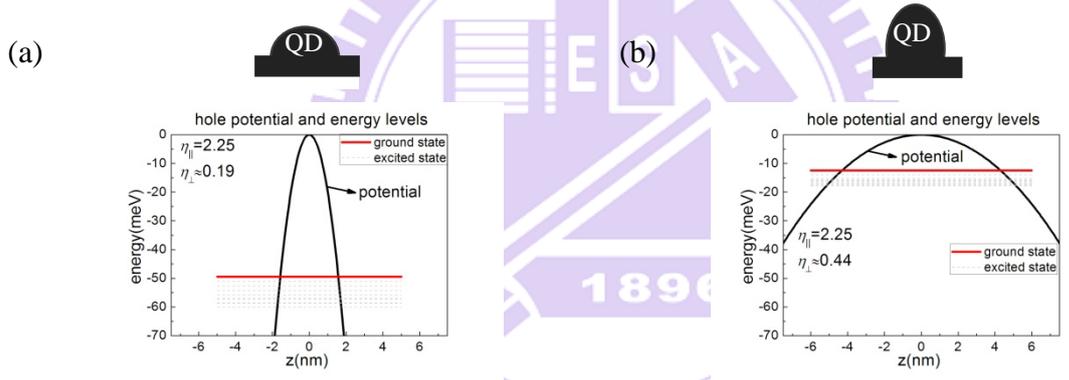


圖 4.2.15、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\eta_{||} \approx 2.25$  下，電洞的束縛位能。(a)  $z$  方向，取  $x=0, y=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。(b)  $z$  方向，取  $x=0, y=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ 。

在固定量子點長短軸長度後，將量子點變高，電洞的基態能階變化和電子的基態能階變化一樣，都是下降的趨勢。

電洞的基態  $xy$  平面波包函數，如下圖 4.2.16：

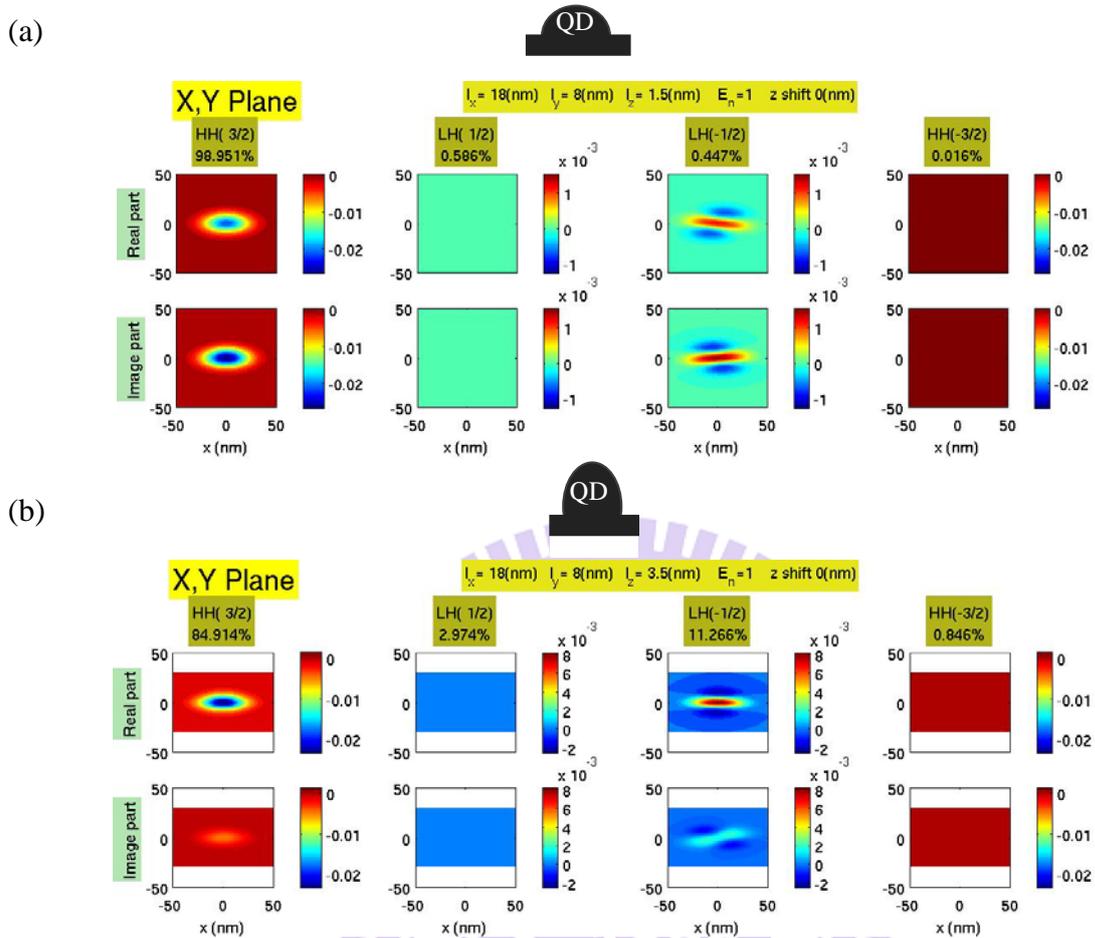
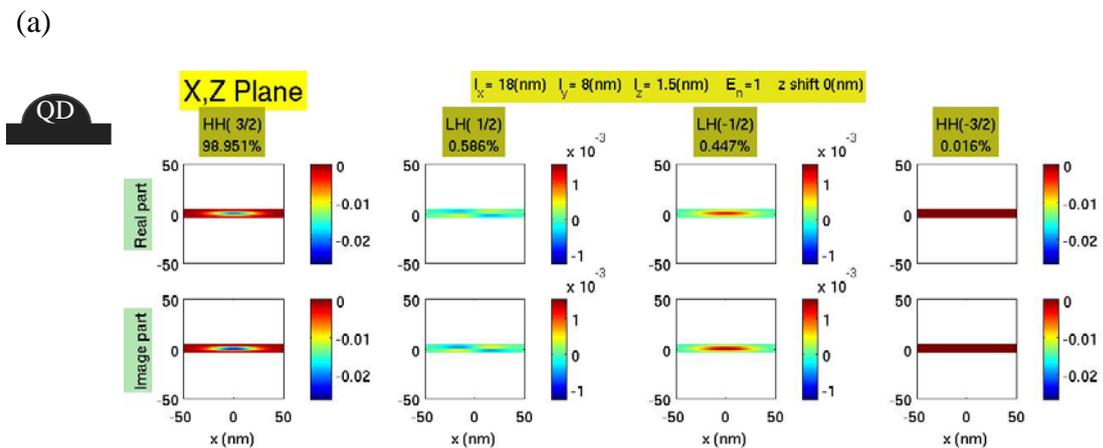


圖 4.2.16、固定  $L_y = 8.0\text{nm}$  和  $\eta_{\parallel} = 2.25$  下，電洞基態波包函數。(a)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。(b)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ 。

電洞的基態  $xz$  平面波包函數，如下圖 4.2.17：



(b)

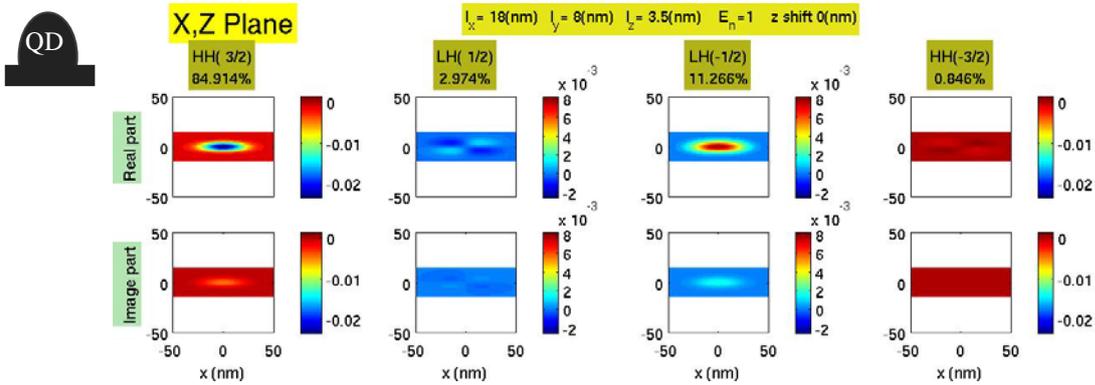


圖 4.2.17、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\eta_{||} = 2.25$  下，電洞基態波包函數。(a)  $xz$  平面， $y=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。(b)  $xz$  平面， $y=0$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.44$ 。

量子點高度改變下，偏振強度的數值模擬結果，如下圖 4.2.18：

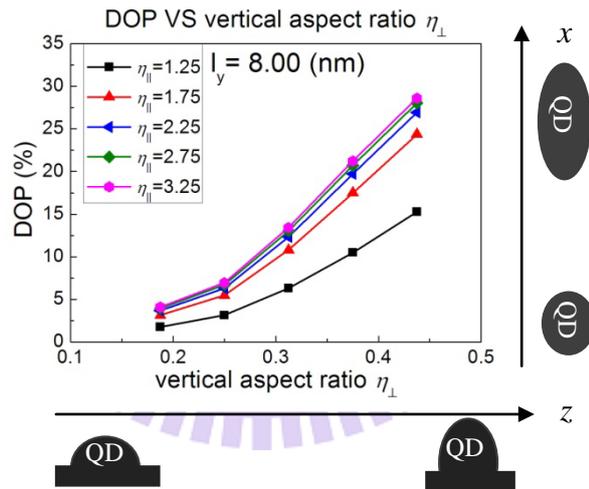


圖 4.2.18、固定量子點短軸長度  $l_y = 8.00(nm)$  及  $xy$  平面不對稱性 ( $\eta_{||} = 1.25、1.75、2.25、2.75、3.50$ ) 下，改變量子點高度 ( $\eta_{\perp} \approx 0.19、0.25、0.31、0.38、0.44$ ) 對偏振強度的影響。

在圖 4.2.18 中，我們可以看到，當量子點高度上升時，偏振持續變強，且量子點越高時偏振變強的速率越快，所以當我們想要偏振變強時，提高量子點高度是一個相當有效率的方法。

量子點高度增加，則偏振變強的原因，由 $\Delta_{HL}$ 和 $\rho_{HL}$ 進行了解：

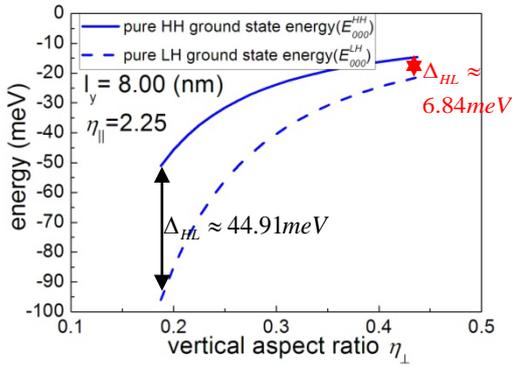


圖 4.2.19、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{||} = 2.25$ 下，純輕重電洞個別的基態能階圖。

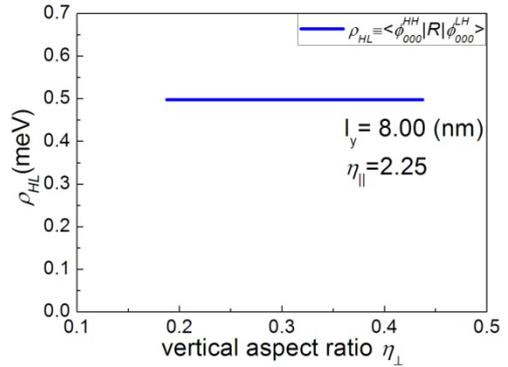


圖 4.2.20、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{||} = 2.25$ 下， $\rho_{HL}$  隨不對稱性的改變。

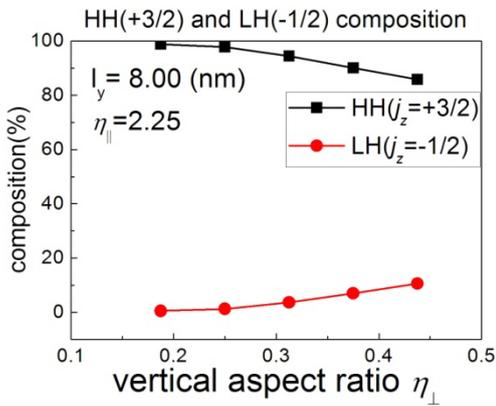


圖 4.2.21、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{||} = 2.25$ 下，縱向不對稱性 $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 、 $0.25$ 、 $0.31$ 、 $0.38$ 和 $0.44$ 的重電洞(3/2)和輕電洞(-1/2)的成份圖。

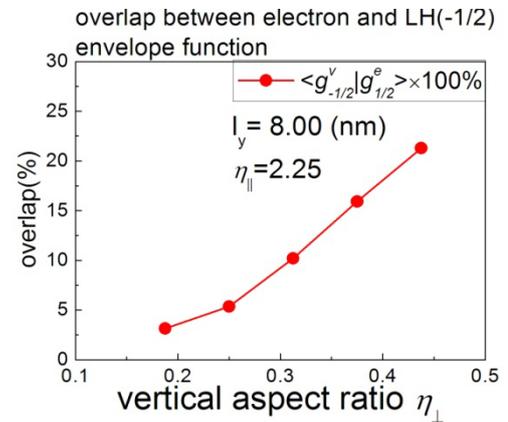


圖 4.2.22、固定 $l_y = 8.0nm$ 和 $\eta_{||} = 2.25$ 下，縱向不對稱性 $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 、 $0.25$ 、 $0.31$ 、 $0.38$ 和 $0.44$ 的輕電洞(-1/2)和電子波包函數的重疊比例圖。

由圖 4.2.19 中發現，量子點變高，因為輕電洞的有效質量在 $z$ 方向比重電洞輕，使得輕電洞的能階變化較重電洞劇烈，導致 $\Delta_{HL}$ 變小，使得輕電洞的混成比例升高，如圖 4.2.21，也讓電子(+1/2)和輕電洞(-1/2)的波包函數的重疊比例上升，如圖 4.2.22，所以偏振變強。

換言之，當我們想要利用量子點幾何大小來控制偏振強度時，最重要是我們必須控制量子點的高度，因為拉長量子點長軸長度使得不對稱性增加對偏振強度的改變是有極限的，如圖 4.2.7，但是控制量子點高度，可以讓我們大幅度的調控偏振的強度，如圖 4.2.18，所以當我們可以控制量子點高度時，就可以控制偏振的強度。

### 4.3 基態和激發態激子的偏振光譜

在此，因為 droplet-epitaxial 量子點體積差異不大，所以我們將固定量子點體積，討論等體積的情況下，偏振的強度隨不對稱性的改變。我們定義特徵體積用來反應量子點的體積，如下(4.2.1)式：

$$V_{QD} \propto \Omega_l \equiv l_x \cdot l_y \cdot l_z \quad (4.2.1)$$

我們取 SHO 模型，固定  $l_y = 8(\text{nm})$  和  $\Omega_l = 285(\text{nm}^3)$  下，則量子點幾何大小隨著  $xy$  的平面不對稱性的變化，如圖 4.3.1：

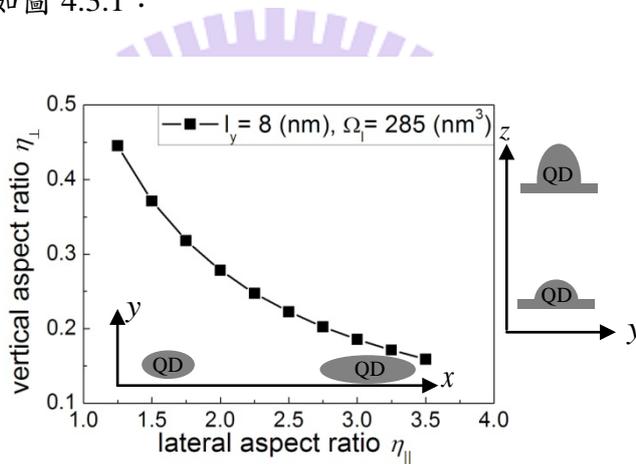


圖 4.3.1、固定  $l_y = 8\text{nm}$ ,  $\Omega_l = 285\text{nm}^3$  時，量子點幾何大小變化圖。

由圖 4.3.1 得知，在固定量子點體積的情況下，當量子點越不對稱時，量子點的高度會變矮。由上一節的分析，我們知道當量子點不對稱性和高度會改變輕重電洞耦合程度，導致偏振強度的改變。當固定量子點體積時，量子點的不對稱性和高度，兩種造成偏振強度改變的因素會互相競爭，為了釐清此問題，我們將找出量子點體積固定時的解析解以及搭配數值模擬進行了解：

首先我們先找出 SHO 模型架構下，偏振強度解析式在量子點體積固定時的解析解：

$$DOP_{000',000}$$

$$= F \times \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \times \frac{1}{2} \times \frac{l_z^2}{l_y^2} \left( 1 - \frac{1}{\eta_{\parallel}^2} \right) \quad (3.2.48)$$

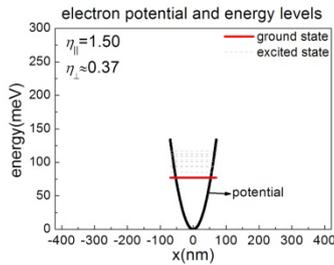
$$= F \times \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \times \frac{1}{2} \times \frac{l_z^2}{l_y^2} \left( 1 - \frac{1}{\eta_{\parallel}^2} \right) \times \frac{l_x^2 l_y^2}{l_x^2 l_y^2}$$

$$= F \times \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \times \frac{1}{2} \times \frac{\Omega_l^2}{l_y^6} \left( \frac{\eta_{\parallel}^2 - 1}{\eta_{\parallel}^4} \right) \quad (4.3.2)$$

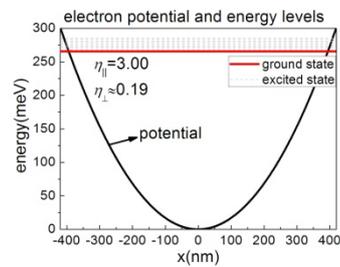
(4.3.2)式，便是在固定量子點體積下，基態激子系統偏振的解析解，其中 $\gamma_2$ 和 $\gamma_3$ 為材料參數[5]， $F$ 則參考(3.2.61)式。

再來進行數值模擬，首先看電子感受到的束縛位能，如下圖 4.3.2：

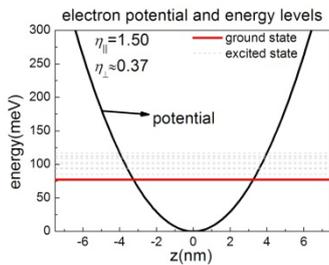
(a)



(b)



(c)



(d)

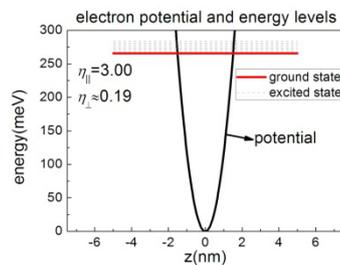


圖 4.3.2、固定 $l_y = 8\text{nm}$ 和 $\Omega_l = 285\text{nm}^3$ 的電子的束縛位能。(a) $x$ 方向，取 $y = 0$ ， $z = 0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50, \eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(b) $x$ 方向，取 $y = 0$ ， $z = 0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00, \eta_{\perp} \approx 0.19$ 。(c) $z$ 方向，取 $x = 0$ ， $y = 0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50, \eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(d) $z$ 方向，取 $x = 0$ ， $y = 0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00, \eta_{\perp} \approx 0.19$ 。

當固定量子點體積時，電子基態波包函數  $xy$  平面，如下圖 4.3.3：

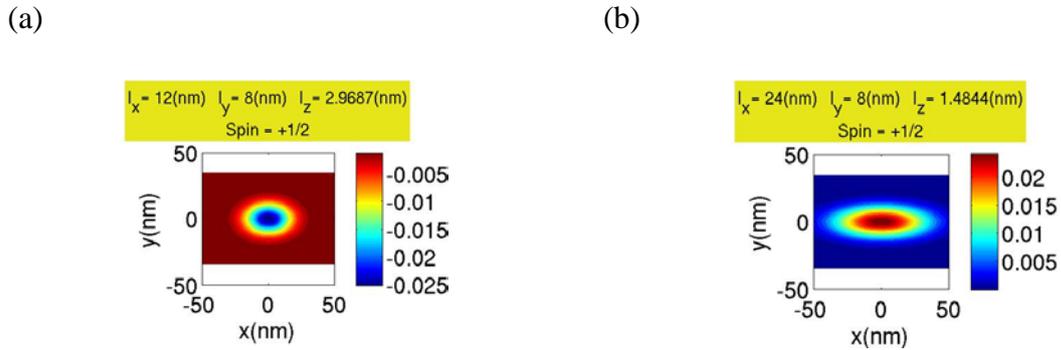


圖 4.3.3、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\Omega_l = 285nm^3$  下，電子基態波包函數。(a)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{||} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(b)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{||} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。

當固定量子點體積時，電子基態波包函數  $xz$  平面，如下圖 4.3.4：

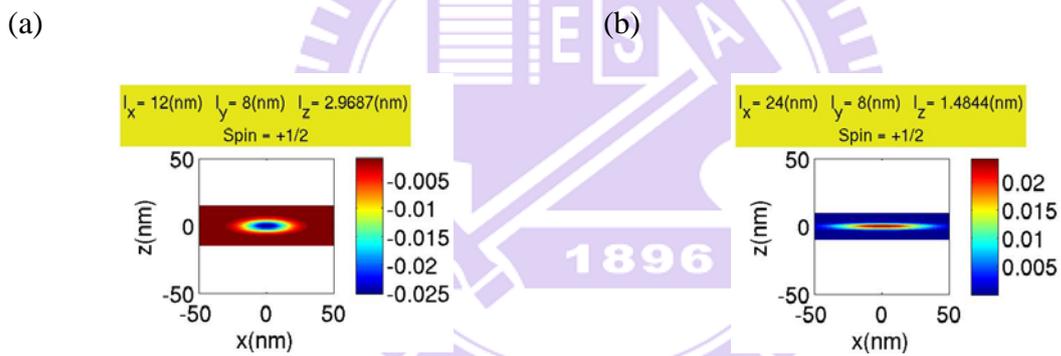


圖 4.3.4、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\Omega_l = 285nm^3$  下，電子基態波包函數。(a)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{||} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(b)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{||} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。

電洞感受到的束縛位能，如下圖 4.3.5：

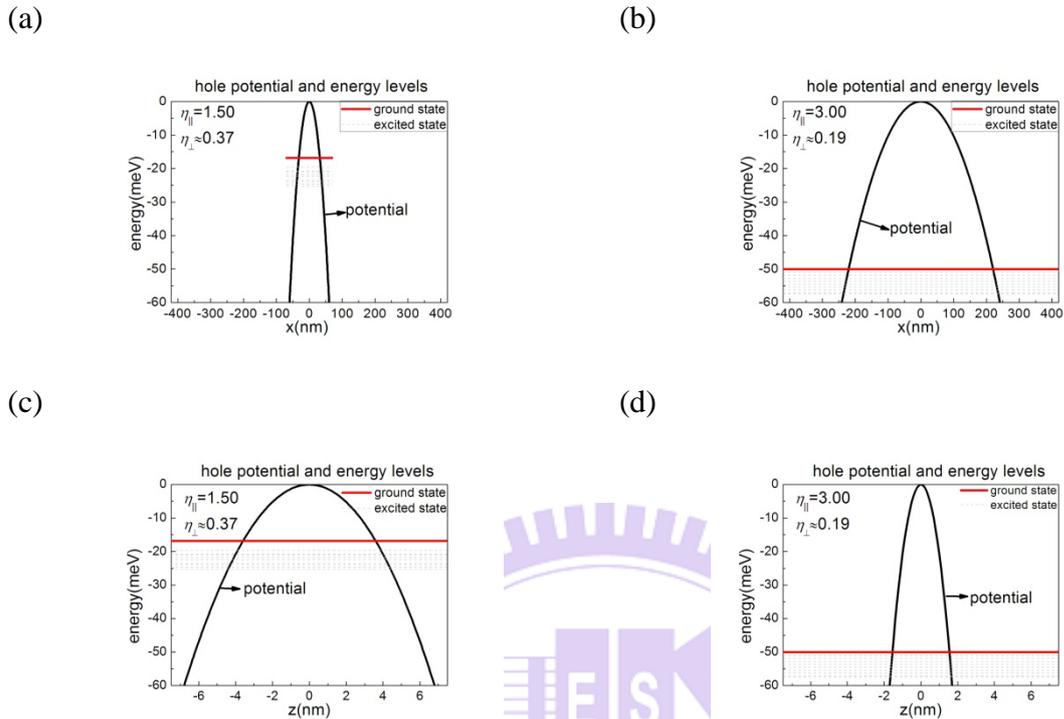
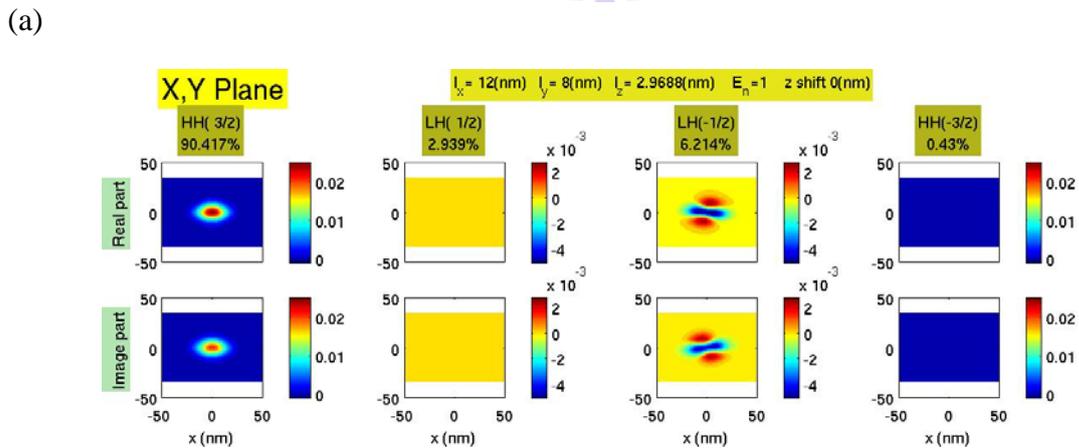


圖 4.3.5、固定  $l_y = 8\text{nm}$  和  $\Omega = 285\text{nm}^3$  的輕重電洞的束縛位能。(a)  $x$  方向，取  $y = 0, z = 0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50, \eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(b)  $x$  方向，取  $y = 0, z = 0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00, \eta_{\perp} \approx 0.19$ 。(c)  $z$  方向，取  $x = 0, y = 0$ ， $\eta_{\parallel} = 1.50, \eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(d)  $z$  方向，取  $x = 0, y = 0$ ， $\eta_{\parallel} = 3.00, \eta_{\perp} \approx 0.19$ 。

當固定量子點體積時，電洞基態波包函數  $xy$  平面，如下圖 4.3.6：



(b)

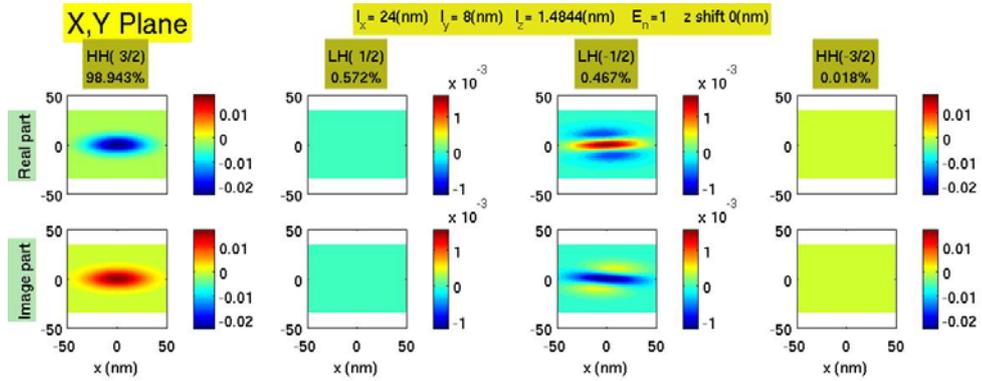
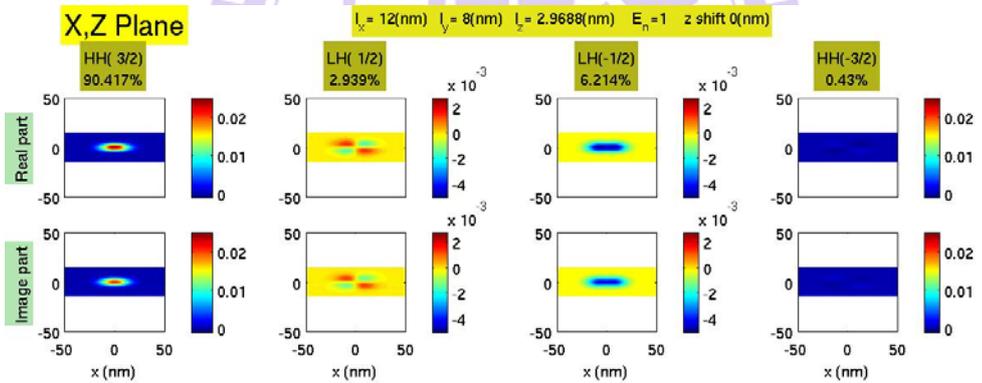


圖 4.3.6、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\Omega_l = 285nm^3$  下，電洞基態波包函數。(a)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{||} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(b)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{||} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。

當固定量子點體積時，電洞基態波包函數  $xz$  平面，如下圖 4.3.7：

(a)



(b)

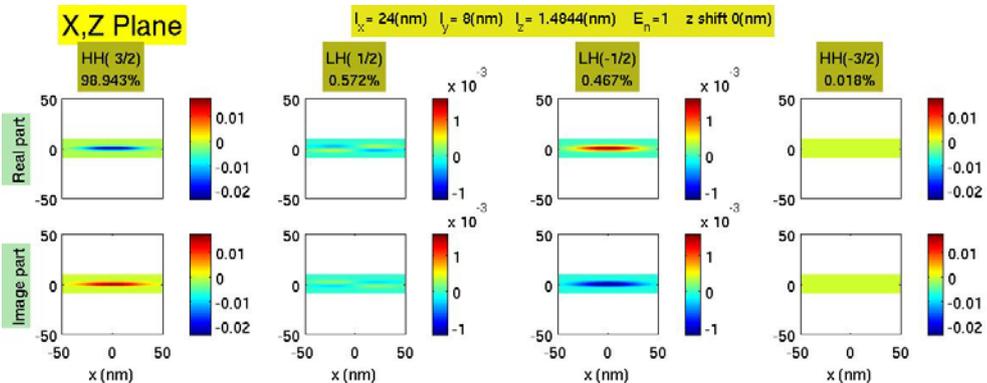


圖 4.3.7、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\Omega_l = 285nm^3$  下，電洞基態波包函數。(a)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{||} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(b)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{||} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。

下面兩圖為固定不同的  $l_y$  和特徵體積  $\Omega_l$  的數值模擬結果和實驗結果做比較：

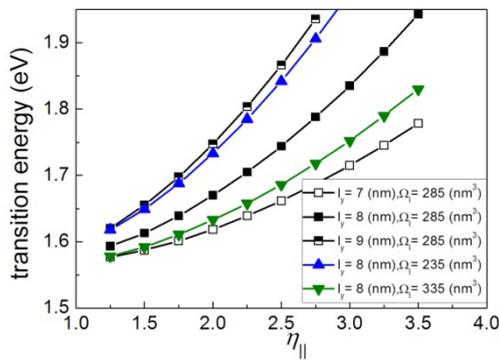


圖 4.3.8、固定不同的  $l_y$  和  $\Omega_l$  後，基態激子的躍遷能量圖。

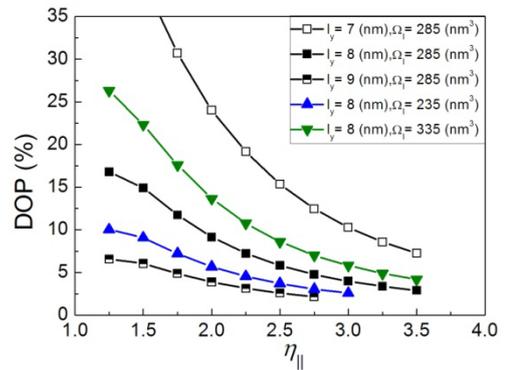


圖 4.3.9、固定不同的  $l_y$  和  $\Omega_l$  後，基態激子的偏振強度圖。

在圖 4.3.8 和 4.3.9 中，我們將針對  $l_y = 8\text{nm}$ ,  $\Omega_l = 285\text{nm}^3$  的例子，討論基態和激發態的偏振強度。

首先，我們討論基態激子偏振的強度，在固定量子點短軸的長度 ( $l_y$ ) 和體積 ( $\Omega_l$ ) 的情況下，圖 4.3.10 中，表示數值模擬和簡單模型的偏振結果：

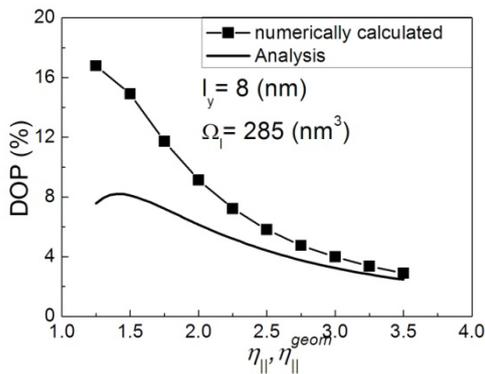


圖 4.3.10、固定  $l_y = 8\text{nm}$ ,  $\Omega_l = 285\text{nm}^3$  時，解析方法和數值模擬的偏振強度結果圖。

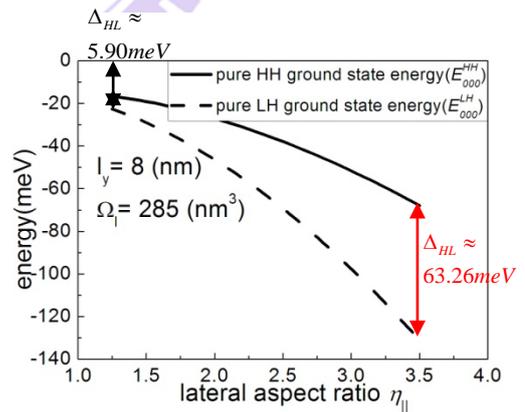


圖 4.3.11、固定  $l_y = 8\text{nm}$ ,  $\Omega_l = 285\text{nm}^3$  時，純輕重電洞個別的基態能階圖。

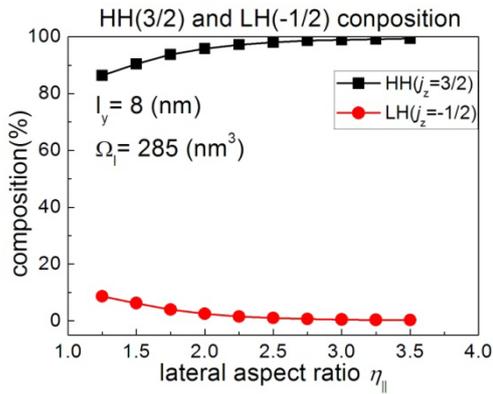


圖 4.3.12、固定  $l_y = 8nm$ ,  $\Omega_l = 285nm^3$  時，重電洞(+3/2) 和輕電洞(-1/2)的混成比例隨著  $xy$  平面的不對稱向 的改變。

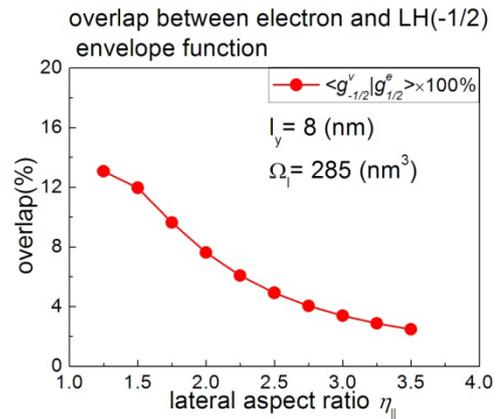


圖 4.3.13、固定  $l_y = 8nm$ ,  $\Omega_l = 285nm^3$  時，輕電洞(-1/2) 和電子(1/2)的波包函數隨著  $xy$  平面的不對稱向的 改變。

圖 4.3.10 中，反應隨著量子點不對稱性的變大則偏振變弱，因為當拉長量子點的長軸長度增加量子點不對稱性時，量子點的高度會變矮，使得  $\Delta_{HL}$  變小，如圖 4.3.11，造成輕重電洞的耦合程度降低，如圖 4.3.12，所以偏振變弱。說明在量子點體積固定的狀況下，偏振的強度主要取決於量子點的高度和上一節的結論是一致的。

我們討論激發態激子組態偏振的強度，這裡討論的激發態激子系統為  $P_x$  軌域的激子組態，表示電子、電洞均處於  $P_x$  軌域。

討論激發態激子的偏振強度前先說明，當偏振強度大於 0 時，表示最強的發光強度落在  $x$  軸(量子點長軸的方向)上，最弱的發光強度落在  $y$  軸(量子點短軸的方向)上，當偏振強度小於 0 時，表示最強的發光強度落在  $y$  軸(量子點短軸的方向)上，最弱的發光強度落在  $x$  軸(量子點長軸的方向)上。激子在  $P_x$  軌域的偏振強度，由廖禹淮學長推導的激發態的偏振強度式子，如下(4.3.3)式：

$$DOP_{(n_x, n_y, n_z) \rightarrow (n_x, n_y, n_z)} \propto \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \times \frac{\Omega_l^2}{(2n_z + 1)l_y^6} \left[ \frac{(2n_y + 1)\eta_{\parallel}^2 - (2n_x + 1)}{\eta_{\parallel}^4} \right] \quad (4.3.3)$$

則激子處於  $P_x$  軌域狀態的偏振強度，如下(4.3.4)式：

$$DOP_{(100) \rightarrow (100)} = \frac{16r_{\parallel}^2 r_{\perp}^2}{(r_{\parallel}^2 + 1)^3 (r_{\perp}^2 + 1)} \times \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \times \frac{\Omega_l^2}{2l_y^6} \times \left( \frac{\eta_{\parallel}^2 - 3}{\eta_{\parallel}^4} \right) \quad (4.3.4)$$

觀察(4.3.4)式，可以知道在  $\eta_{\parallel} < \sqrt{3}$  時， $P_x$  軌域的激子系統的最強發光強度沿著量子點短軸的方向，在  $\eta_{\parallel} > \sqrt{3}$  時， $P_x$  軌域的激子系統的最強發光強度沿著量子點長軸的方向。

則  $P_x$  軌域的激子系統在量子點不對稱性增加時，發光強度的最大值會由原本沿著量子點短軸的方向轉變成沿量子點長軸的方向。

數值模擬的結果，首先是電子  $P_x$  軌域波包函數  $xy$  平面，如下圖 4.3.14：

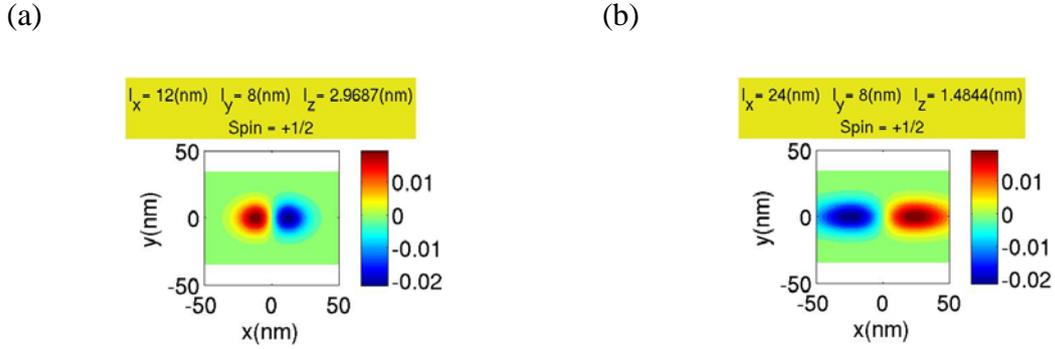


圖 4.3.14、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\Omega_l = 285nm^3$  下，電子  $xy$  平面  $P_x$  軌域波包函數。(a)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{||} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(b)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{||} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。

電子  $P_x$  軌域波包函數  $xz$  平面，如下圖 4.3.15：

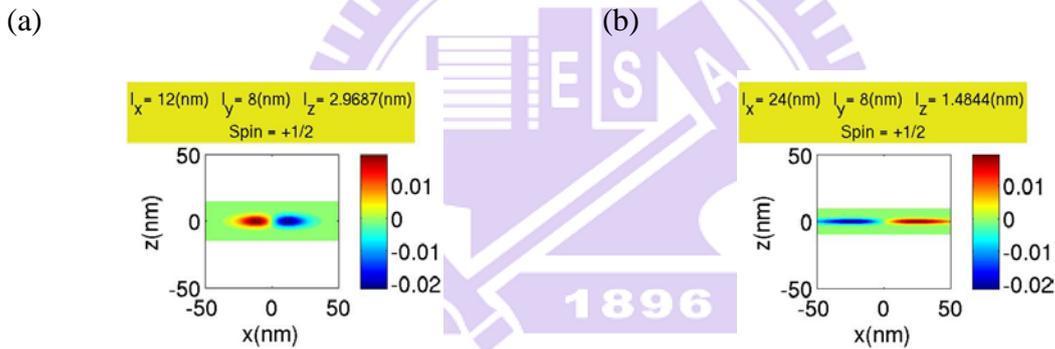
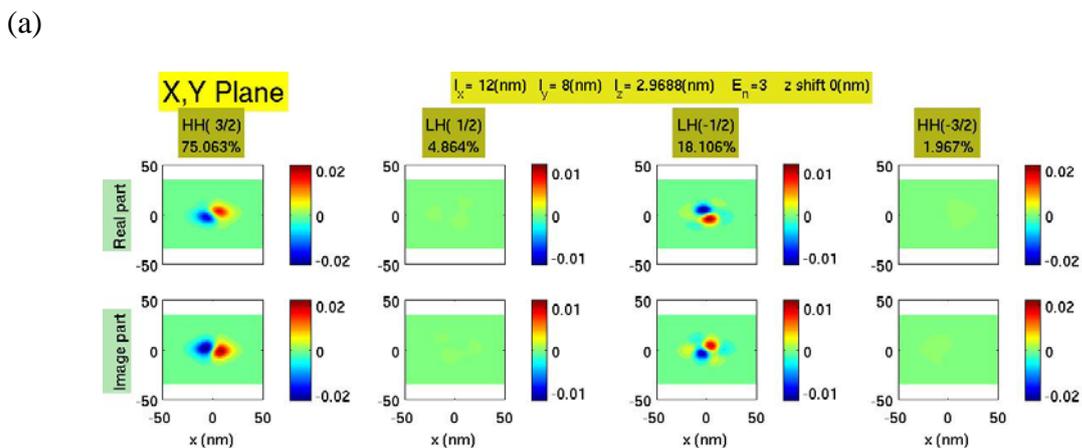


圖 4.3.15、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\Omega_l = 285nm^3$  下，電子  $xy$  平面  $P_x$  軌域波包函數。(a)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{||} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(b)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{||} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。

電洞  $P_x$  軌域波包函數  $xy$  平面，如下圖 4.3.16：



(b)

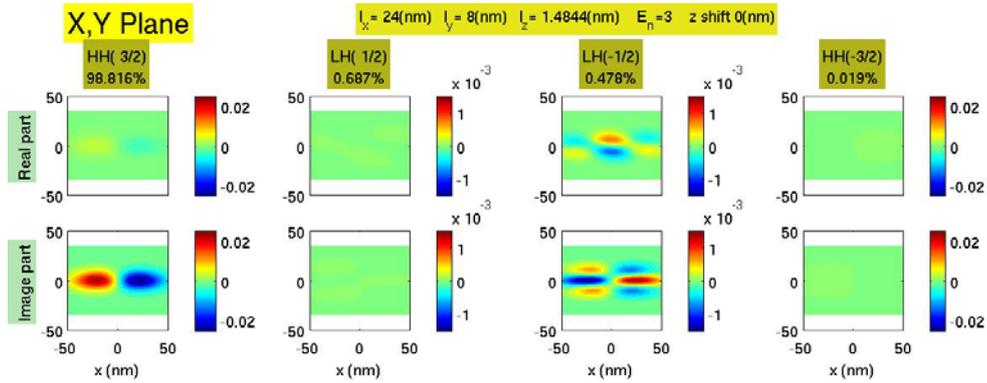
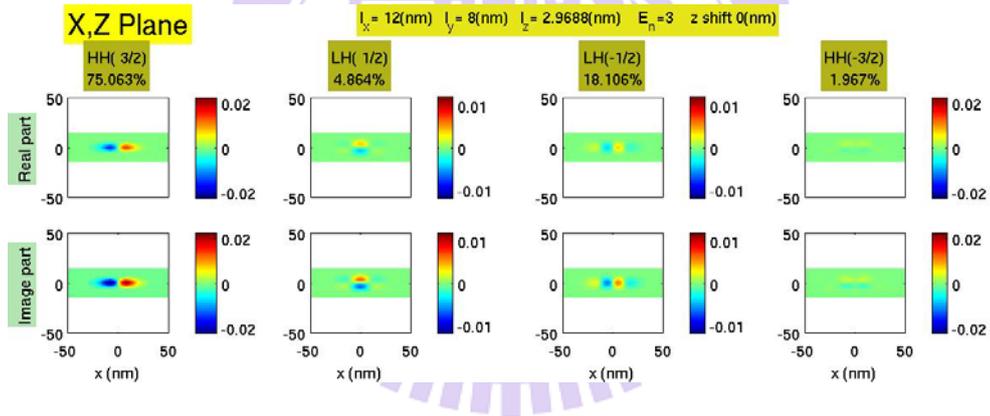


圖 4.3.16、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\Omega_i = 285nm^3$  下，電洞  $xy$  平面  $P_x$  軌域波包函數。(a)  $xy$  平面，取  $z=0$ ，

$\eta_{||} = 1.50$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(b)  $xy$  平面，取  $z=0$ ， $\eta_{||} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。

電洞  $P_x$  軌域波包函數  $xz$  平面，如下圖 4.3.17：

(a)



(b)

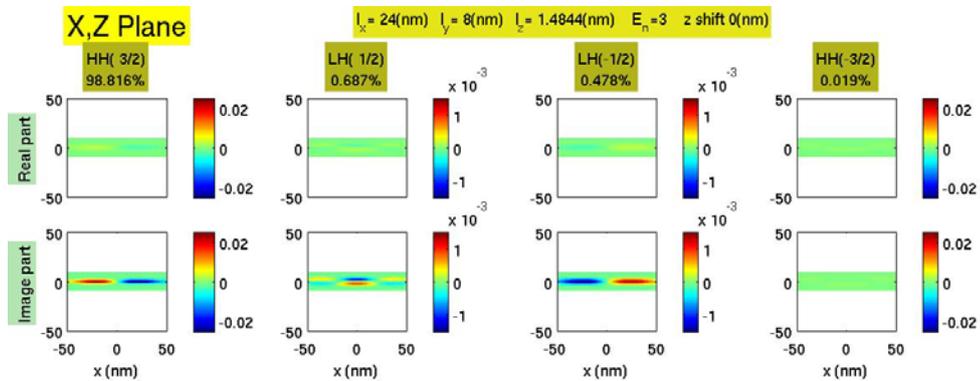
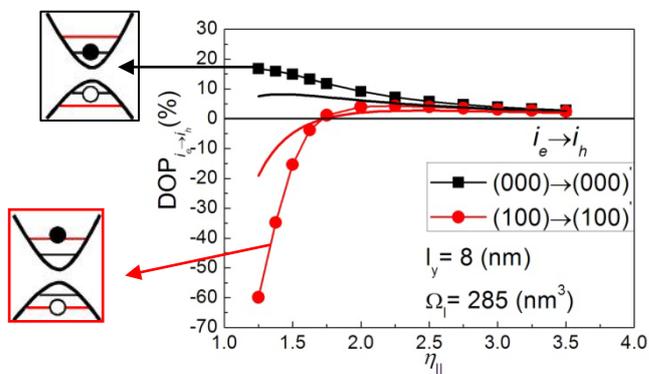


圖 4.3.17、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\Omega_i = 285nm^3$  下，電洞  $xz$  平面  $P_x$  軌域波包函數。(a)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{||} = 1.50$ ，

$\eta_{\perp} \approx 0.37$ 。(b)  $xz$  平面，取  $y=0$ ， $\eta_{||} = 3.00$ ， $\eta_{\perp} \approx 0.19$ 。

則基態( $S$  軌域)和  $P_x$  軌域的激子系統的偏振強度，如下圖 4.3.18：

(a)



(b)

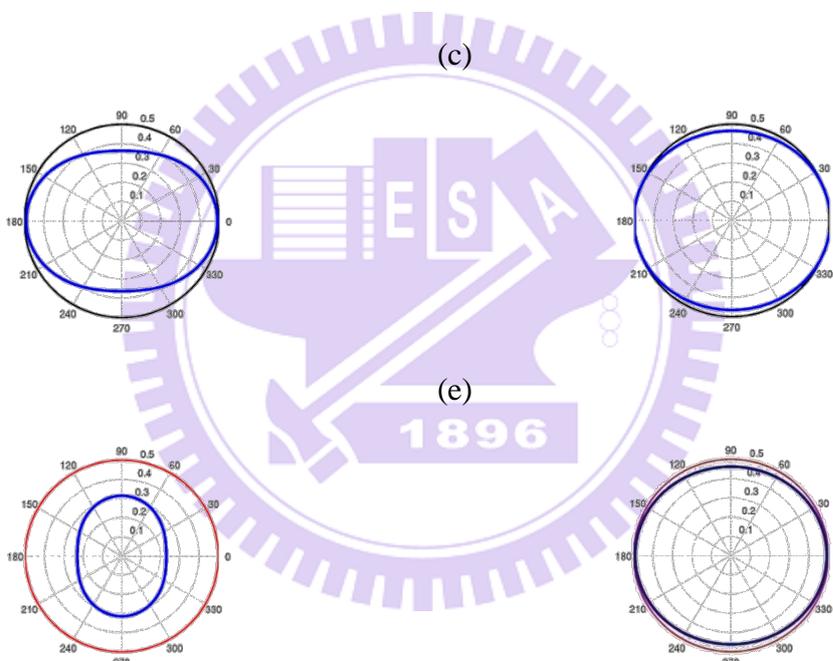


圖 4.3.18、固定  $l_y = 8.0\text{nm}$  和  $\Omega_l = 285\text{nm}^3$  下。(a)基態和  $P_x$  軌域的激子系統偏振強度圖，點線為數值模擬，實線則為解析解的結果。(b)  $\eta_{||} = 1.50$ ，基態激子系統的  $xy$  平面發光強度圖。(c)  $\eta_{||} = 3.00$ ，基態激子系統的  $xy$  平面發光強度圖。(d)  $\eta_{||} = 1.50$ ， $P_x$  軌域激子系統的  $xy$  平面發光強度圖。(e)  $\eta_{||} = 3.00$ ， $P_x$  軌域激子系統的  $xy$  平面發光強度圖。

圖 4.3.18 中，在量子點較對稱時， $P_x$  軌域的激子系統偏振的強度會大於基態偏振的

強度，但是在量子點較不對稱時，基態和  $P_x$  軌域的激子系統偏振的強度則差異不大。

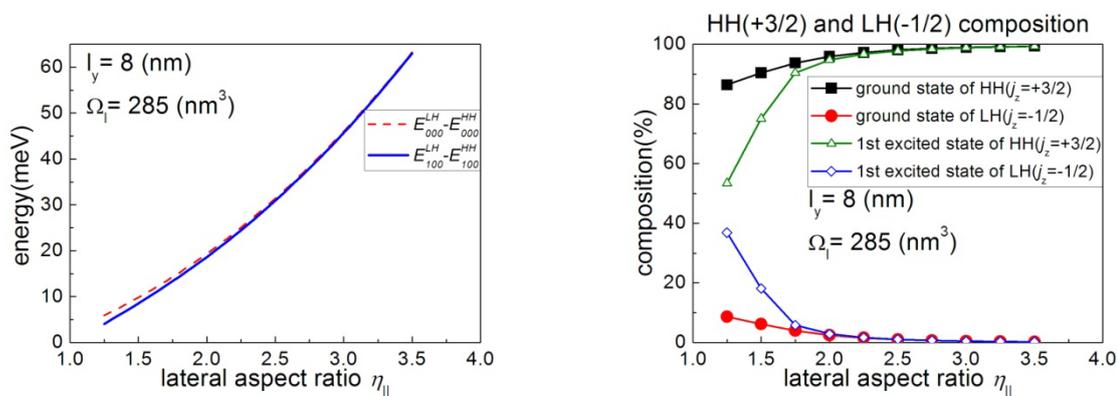


圖 4.3.19、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\Omega_l = 285nm^3$  下，基態 (紅色虛線) 和  $P_x$  軌域 (藍色實線) 的激子系統的  $\Delta_{HL}$  的圖。  
圖 4.3.20、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\Omega_l = 285nm^3$  下，基態 (紅色虛線) 和  $P_x$  軌域的激子系統的輕重電洞成份圖。

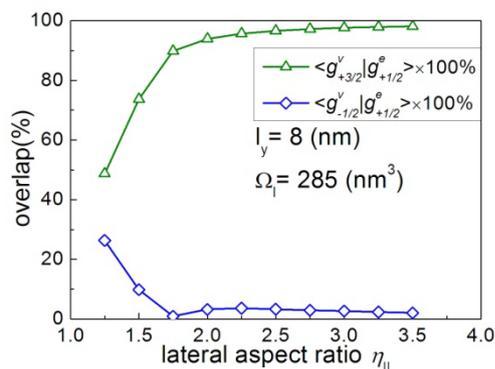


圖 4.3.21、固定  $l_y = 8.0nm$  和  $\Omega_l = 285nm^3$  下， $P_x$  軌域的激子系統的電子和輕重電洞的波包函數重疊比例圖。

由圖 4.3.18 中，在量子點較對稱時， $P_x$  軌域的激子系統偏振的強度較基態強是因為  $P_x$  軌域的激子系統的  $\Delta_{HL}$  較低，如圖 4.3.19，所以輕重電洞的耦合更強，使得輕電洞占據的成分更多，進一步也拉低重電洞的成分，所以偏振變強。

#### 4.4 組態交互作用對偏振光譜的影響

在此我們要討論經由庫倫作用導致不同組態之間的混成對基態激子偏振的修正，在此先說明為何我們要考慮組態交互作用，由於 droplet-epitaxial 量子點，相比其他方法製作的量子點(如：利用晶格不匹配的自組式量子點[14]，如圖 4.4.1 和 hierarchical 量子點[15]，如圖 4.4.2)具有較大的幾何大小，激子系統動能正比於量子點邊長平方的倒數，激子系統的庫倫位能正比於粒子間距離的倒數，所以在量子點具有較大的幾何大小時，激子系統動能變小的速率會快於庫倫位能，使得激子系統有更高的機率透過庫倫散射躍遷到更高的激子狀態上，在本文章中，我們只考慮部分組態的交互作用做定性上的分析，在組態的選擇上，我們會選擇能量較低的組態，因為組態能量愈接近基態激子的能量時，耦合程度會越大對基態激子的影響程度也越大。

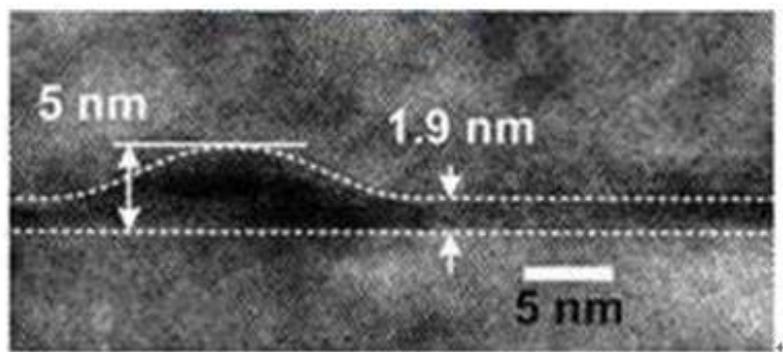


圖 4.4.1、自組式(self-assembled) InAs/GaAs 量子點。

資料來源：國立交通大學，電物系張文豪老師實驗室。

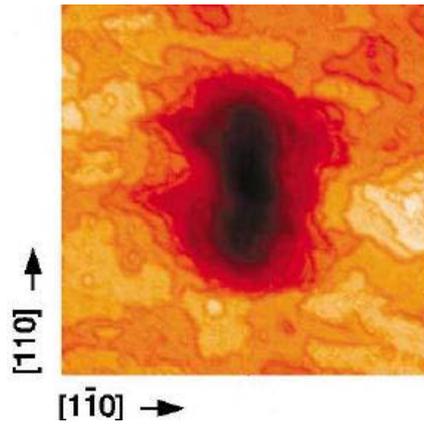


圖 4.4.2、hierarchical GaAs/AlGaAs 量子點。  
資料來源：PRL 92, 166104 (2004)。

我們選擇激子組態時，必須先確認電子和電洞的能譜，電子能譜如下圖 4.4.3：

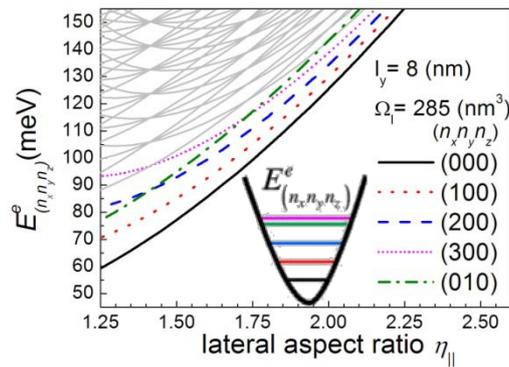


圖 4.4.3、電子能譜隨著量子點不對稱性的變化。

電洞能譜如下圖 4.4.4：

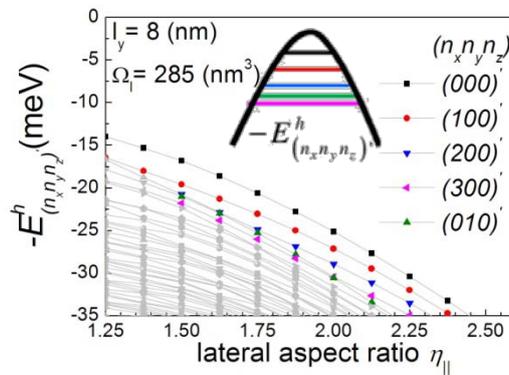
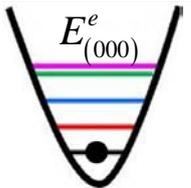
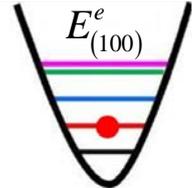
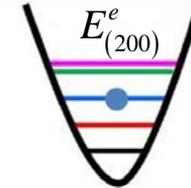
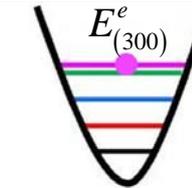
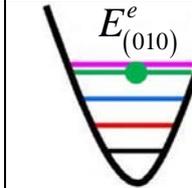
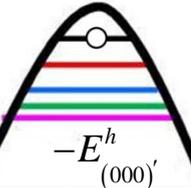
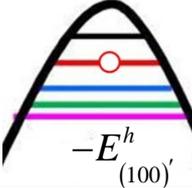
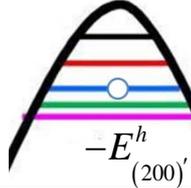
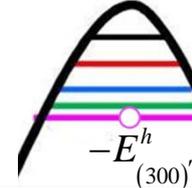
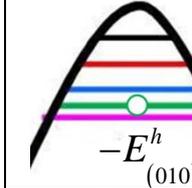


圖 4.4.4、輕重電洞耦合後的電洞能譜隨著量子點不對稱性的變化。

圖 4.4.1 和 4.4.2 中，我們可以發現  $S$  軌域、 $P_x$  軌域、 $D_x$  軌域、 $F_x$  軌域和  $P_y$  軌域這五個軌域的電子和電洞的能量都是較低的能態，則激子系統在  $S$  軌域、 $P_x$  軌域、 $D_x$  軌域、 $F_x$  軌域和  $P_y$  軌域的能量也都會是較低的能階，所以在本文章便挑選  $S$  軌域、 $P_x$  軌域、 $D_x$  軌域、 $F_x$  軌域和  $P_y$  軌域的激子組態做定性的分析。

下表 4.4.1 不同激子組態的示意圖：

表 4.4.1、不同激子組態的示意圖。

| $S$ 軌域   | $P_x$ 軌域   | $D_x$ 軌域   | $F_x$ 軌域  | $P_y$ 軌域   |
|--|--|--|---|--|
|  $E_{(000)}^e$   |  $E_{(100)}^e$   |  $E_{(200)}^e$   |  $E_{(300)}^e$   |  $E_{(010)}^e$   |
|  $-E_{(000)}^h$ |  $-E_{(100)}^h$ |  $-E_{(200)}^h$ |  $-E_{(300)}^h$ |  $-E_{(010)}^h$ |

我們利用數值模擬  $S$  軌域、 $P_x$  軌域、 $P_y$  軌域、 $D_x$  軌域和  $F_x$  軌域激子組態的偏振強度，

如下圖 4.4.5：

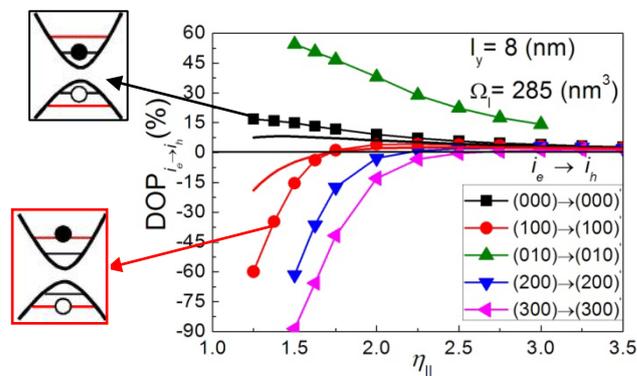


圖 4.4.5、固定  $l_y = 8nm, \Omega_l = 285nm^3$  下，不同激子組態 ( $S$  軌域、 $P_x$  軌域、 $P_y$  軌域、 $D_x$  軌域、 $F_x$  軌域) 的偏振強度隨不對稱性改變圖。

圖 4.4.5 中， $P_x$  軌域、 $P_y$  軌域、 $D_x$  軌域和  $F_x$  軌域的激子組態的偏振強度，只有  $P_y$  軌域激子組態的偏振強度大於  $S$  軌域激子組態，所以激子組態混成後，只有  $P_y$  軌域激子組態會使偏振強度變強，其餘  $P_x$  軌域、 $D_x$  軌域和  $F_x$  軌域的激子組態都會讓偏振強度變弱。

下圖 4.4.6 中，組態混成後的激子系統還是以  $S$  軌域激子組態為主，其餘  $P_x$  軌域、 $P_y$  軌域、 $D_x$  軌域和  $F_x$  軌域的激子組態都少量的混成，其中以  $P_x$  軌域的混成成分最多，因為  $P_x$  軌域激子能階最接近  $S$  軌域激子能階，圖 4.4.3 和 4.4.4，所以組態混成後， $P_x$  軌域激子組態對  $S$  軌域激子組態的影響也最大。

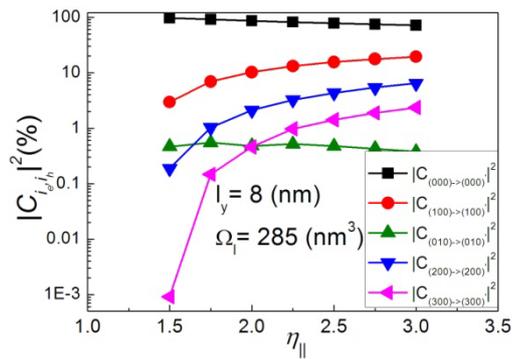


圖 4.4.6、固定  $l_y = 8nm$ ,  $\Omega_l = 285nm^3$  下，不同激子組態 ( $S$  軌域、 $P_x$  軌域、 $P_y$  軌域、 $D_x$  軌域、 $F_x$  軌域) 混成的成分隨不對稱性改變圖。

最後我們透過庫倫作用考慮  $S$  軌域、 $P_x$  軌域、 $P_y$  軌域、 $D_x$  軌域和  $F_x$  軌域的組態交互作用

用後的偏振的強度，如下圖 4.4.7：

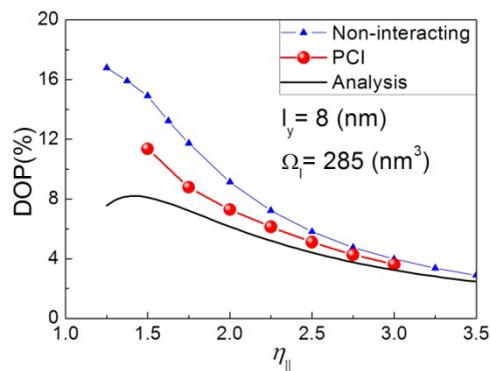


圖 4.4.7、固定  $l_y = 8nm$ ,  $\Omega_l = 285nm^3$  下，紅色實心圓為考慮 PCI 方法的數值模擬、藍色實心三角形為  $S$  軌域激子系統的數值模擬和灰色實線解析方法的  $xy$  平面偏振強度結果圖。

圖 4.4.5 中，基態激子系統考慮組態混成後以  $P_x$  軌域激子系統耦合程度最高，且  $P_x$  軌域

激子系統的偏振普遍低於基態激子系統的偏振，所以透過庫倫作用考慮  $S$  軌域、 $P_x$  軌域、

$P_y$  軌域、 $D_x$  軌域和  $F_x$  軌域的組態交互作用後，偏振的強度會下修。

## 第五章、結論

本文章考慮量子點結構位能為三維拋物線位能並利用  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  單能帶和四能帶模型搭配波包近似法和有效質量近似法計算激子系統的電子結構，再使用費米黃金定理計算躍遷電子由導電帶躍遷至價電帶後，輻射光子的發光強度和偏振。當量子點不對稱性增加，則偏振變強的程度會有極限，但是增加量子點高度，則輕電洞的耦合程度會大幅度的增加，造成偏振大幅度變強。在量子點體積固定的狀況下，當拉長量子點長軸長度則量子點的高度變矮，所以輕電洞的耦合程度下降，造成量子點不對稱性增加時，偏振變弱。激發態( $P_x$  軌域)激子系統在量子點不對稱性增加時，偏振方向會由原本沿著量子點短軸轉變成沿量子點長軸方向，且偏振的強度在量子點較對稱時會較基態激子系統強。

最後考慮庫倫作用後， $P_x$  軌域激子系統的能階最接近  $S$  軌域激子系統的能階，使得  $P_x$  軌域激子系統的混成最多，造成偏振的強度微幅下修(<5%)。

本文章中，分別使用  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  單能帶和四能帶模型計算電子和價電帶空軌域的電子結構，往後可改用更精準的八能帶模型計算激子系統的電子結構。在組態交互作用方面，可以考慮更多的組態，看 full CI 對偏振的修正，也可以利用外加電場，看史塔克效應對偏振的影響。

## 參考文獻

- [1] V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 197(2002).
- [2] Masafumi Jo, Takaaki Mano, Kazuaki Sakoda, *Appl. Phys. Exp.* **3**, 045502(2010).
- [3] 古智豪,「利用有限差分法計算半導體量子點電子結構」,交通大學電子物理研究所碩士論文,2011年。
- [4] C. Bosio , J. L. Staehli, M. Guzzi, G. Burri, R. A. Logan, *Phys. Rev. B* **38**, 3263(1988).
- [5] S. L. Chuang, *Physics of Optoelectronic Devices*, Wiley, Hoboken, 2009.
- [6] 余書睿,交通大學電子物理研究所,碩士論文,to be published。
- [7] 林佩儀,交通大學電子物理研究所,碩士論文,to be published。
- [8] 陳勇達,「單一原子石墨層電子結構的計算模擬及大型矩陣對角化技術研究」,交通大學電子物理研究所,碩士論文,2009年。
- [9] Ireneusz Strzalkowski, Sharad Joshi, and C. R. Crowell, *Appl. Phys. Lett.* **28**, 350 (1976)
- [10] Eugene Kadantsev and Pawel Hawrylak, *Phys. Rev. B* **81**, 045311(2010).
- [11] 張語宸,「自組式量子點在史塔克效應下的光學異向性」,交通大學電子物理研究所,碩士論文,2011年。
- [12] Weidong Sheng, Shun-Jen Cheng, and Pawel Hawrylak, *Phys. Rev. B* **71**, 035316 (2005).
- [13] 趙虔震,「自組式量子點中單一激子的庫倫交互作用」,交通大學電子物理研究所,碩士論文,2010年。

[14] 張文豪，徐子民，「半導體量子光學」，物理雙月刊，廿八卷五期，2006 年 10 月.

[15] A. Rastelli, S. Stufler, A. Schliwa, R. Songmuang, C. Manzano, G. Costantini, K. Kern,

A. Zrenner, D. Bimberg, and O.G. Schmidt, Phys. Rev. Lett. **92**, 166104 (2004).



## 附錄A.

在此，我們主要探討  $xy$  平面的偏振光譜，所以取  $\theta = \frac{\pi}{2}$  代入 (3.1.4) 式，其中偶極矩陣元

素可以寫成：

$$D_{i_h, i_e} \left( \theta = \frac{\pi}{2}, \phi \right) \approx e^{-i\phi} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right] \\ + e^{i\phi} \left[ -\frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right]$$

假設：

$$A = \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right]$$

$$B = \left[ -\frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right]$$

因為光強度  $I_{i_h, i_e}(\theta, \phi)$  (intensity)  $\propto |D_{i_h, i_e}(\theta, \phi)|^2$ ，重新推導：

$$I_{i_h, i_e} \left( \frac{\pi}{2}, \phi \right) \propto |Ae^{-i\phi} + Be^{i\phi}|^2 \\ = |Ae^{i\phi_1} e^{-i\phi} + Be^{i\phi_2} e^{i\phi}|^2 \\ = (|A|e^{i\phi_1} e^{-i\phi} + |B|e^{i\phi_2} e^{i\phi})^* (|A|e^{i\phi_1} e^{-i\phi} + |B|e^{i\phi_2} e^{i\phi}) \\ = (|A|e^{-i\phi_1} e^{i\phi} + |B|e^{-i\phi_2} e^{-i\phi}) (|A|e^{i\phi_1} e^{-i\phi} + |B|e^{i\phi_2} e^{i\phi}) \\ = |A|^2 + |B|^2 + |A||B|e^{i[2\phi + (-\phi_1 + \phi_2)]} + |A||B|e^{-i[2\phi + (-\phi_1 + \phi_2)]} \\ = |A|^2 + |B|^2 + 2|A||B|\cos[2\phi + (-\phi_1 + \phi_2)] \quad (\text{A.1})$$

觀察(B.1)式知：

當  $\cos[2\phi + (-\phi_1 + \phi_2)] = 1$  時， $I_{i_h, i_e} \left( \frac{\pi}{2}, \phi \right)$  有最大值  $|A|^2 + |B|^2 + 2|A||B|$ 。

當  $\cos[2\phi + (-\phi_1 + \phi_2)] = -1$  時， $I_{i_h, i_e} \left( \frac{\pi}{2}, \phi \right)$  有最小值  $|A|^2 + |B|^2 - 2|A||B|$ 。

將上述推導的發光強度最大值和最小值代入偏振定義：

$$DOP \equiv \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}}$$

可以得知：

$DOP$

$$\begin{aligned} &= \frac{(|A|^2 + |B|^2 + 2|A||B|) - (|A|^2 + |B|^2 - 2|A||B|)}{(|A|^2 + |B|^2 + 2|A||B|) + (|A|^2 + |B|^2 - 2|A||B|)} \\ &= \frac{2|A||B|}{|A|^2 + |B|^2} \\ &= \frac{2 \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right| \left| \frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right|}{\left| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right|^2 + \left| \frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right|^2} \\ &= \frac{2 \left| \sqrt{3} \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right| \left| \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \sqrt{3} \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right|}{\left| \sqrt{3} \langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right|^2 + \left| \langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \sqrt{3} \langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle \right|^2} \quad (A.2) \end{aligned}$$

(B.2)式代表輻射光子在  $xy$  平面偏振強度的一般形式。

在本文章中，我們不考慮庫倫交換作用，所以電子自旋向上和自旋向下的兩種狀態不會混成，所以(2.1.4)式中電子的波函數可以改寫成：

$$\Psi_{i_e}^e(\vec{r}) = g_{i_e, 1/2}^e(\vec{r}) u_{1/2}^e(\vec{r}) \quad (A.3)$$

或

$$\Psi_{i_e}^e(\vec{r}) = g_{i_e, -1/2}^e(\vec{r}) u_{-1/2}^e(\vec{r}) \quad (A.4)$$

(B.3)、(B.4)兩式，表示電子在第  $i_e$  狀態，有電子自旋向上和自旋向下的兩種簡併態。

當電子狀態處於自旋向上時，可以得知  $\langle g_{i_h, -3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle = 0$ 、 $\langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle = 0$ ，所以(A.2)

式可以進一步簡化。

*DOP*

$$\begin{aligned}
 &= \frac{2\left|\sqrt{3}\langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle\right| \left|\langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \sqrt{3}\langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle\right|}{\left|\sqrt{3}\langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \langle g_{i_h, 1/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle\right|^2 + \left|\langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle + \sqrt{3}\langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, -1/2}^e \rangle\right|^2} \\
 &= \frac{2\left|\sqrt{3}\langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle\right| \left|\langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle\right|}{\left|\sqrt{3}\langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle\right|^2 + \left|\langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle\right|^2} \\
 &= \frac{\sqrt{12} \left|\langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle\right| \left|\langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle\right|}{3 \left|\langle g_{i_h, 3/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle\right|^2 + \left|\langle g_{i_h, -1/2}^v | g_{i_e, 1/2}^e \rangle\right|^2} \tag{A.5}
 \end{aligned}$$

最後(B.5)式，便是偏振強度只和電子和輕重電洞的波包函數的重疊比例相關。

## 附錄B.

表 B.1、GaAs/Al<sub>0.27</sub>Ga<sub>0.73</sub>As 材料參數文獻[4,5,9]

| Quantity                 |            | Unit         | GaAs    | Al <sub>0.27</sub> Ga <sub>0.73</sub> As |
|--------------------------|------------|--------------|---------|--|
| Lattice constant         | $a$        | nm           | 0.565   | 0.565                                    |
| Energy gap               | $E_g$      | eV           | 1.5194  | 1.90                                     |
| CB edge                  | $E_c$      | eV           | -5.289  | -5.51736                                 |
| VB edge                  | $E_v$      | eV           | -6.8084 | -6.65616                                 |
| electron effective mass  | $m_e^*$    | $m_0$        | 0.067   | 0.089                                    |
| Luttinger parameter      | $\gamma_1$ |              | 6.85    |  |
| Luttinger parameter      | $\gamma_2$ |              | 2.1     |  |
| Luttinger parameter      | $\gamma_3$ |              | 2.9     |  |
| Dielectric constant (0K) | $\epsilon$ | $\epsilon_0$ | 12.35   |  |