

國立交通大學

電子物理學系

碩士論文

應變對三五族半導體能帶結構及傳輸特性

之影響

Theoretical studies of band structures and transport
properties of strained III-V semiconductors

研究生：鄭丞偉

指導教授：鄭舜仁 教授

中華民國一百年七月

應變對三五族半導體能帶結構及傳輸特性之影響

Theoretical studies of band structures and transport properties
of strained III-V semiconductors

研究生：鄭丞偉

Student : Cheng-Wei Cheng

指導教授：鄭舜仁 教授

Advisor : Prof. Shun-Jen Cheng



A Thesis
Submitted to Department of Electrophysics
College of Science
National Chiao Tung University
in partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of
Master
in
Electrophysics

July 2011

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國一百年七月


應變對三五族半導體能帶結構及傳輸特性之影響

學生：鄭丞偉

指導教授：鄭舜仁 教授

國立交通大學電子物理研究所碩士班

摘要



在本研究中，我們利用多能帶 k.p 理論來模擬作用於不同晶面上之應變對三五族半導體能帶結構的影響，並進一步應用於評估高度摻雜的應變半導體傳輸特性，透過能帶結構計算，可以得到受應變作用後半導體中載子傳輸時的有效質量，並估算出半導體中溫度及應變對載子遷移率的影響。且可利用 Slater-orbital 的模型計算晶胞中微觀電荷密度的分佈，進而解釋載子遷移率的變化。此模擬結果可提供往後研發高效能半導體元件的參考資訊。

Theoretical studies of band structures and transport properties of strained III-V semiconductors

Student : Cheng-Wei Cheng

Advisor : Prof. Shun-Jen Cheng

Department of Electrophysics
National Chiao Tung University

ABSTRACT

In this thesis, I present a theoretical investigation of the electronic structures and transport properties of strained InAs bulk semiconductor. The numerical tool is developed within the framework of the $\bar{k} \cdot \bar{p}$ theory. From the calculated band structures, the transport effective masses and the density of states of carriers in the strained semiconductors can be extracted. Then, the mobilities of carriers in the InAs semiconductors under biaxial and uniaxial stresses are evaluated as a function of temperature and strain strength, under the assumption of constant e-phonon scattering time. Moreover, the charge density of fast-varying Bloch function in a crystalline unit cell of a strained semiconductor is modeled by using Slater-orbital model, which provides useful information for gaining more physical insight into the strain-engineered transport properties. The simulation results provide useful information for seeking for the new materials suitable for the next generation high speed transistors.

致謝

首先，感謝鄭舜仁老師在我兩年的碩士生涯內，不時的討論並指點我正確的方向，在研究上提供我們充分的資源以及給予細心的指導，並且培養我們做事情該有的正確態度，使我在這些年中獲益匪淺。感謝各位口試委員，陳振芳老師、林浩雄老師、以及柯誌欣博士提供的寶貴意見，讓我的研究能夠更趨近完備。

在碩士班的日子裡，所結識的夥伴都是幫助我成長的重要人物，感謝書楷學長讓我學會了很多研究上和生活中的智慧及克銘學長帶領我作研究紮實的基本功和品嚐收穫的喜悅，也感謝禹淮學長不時的給予適當的建議。當然，在這過程中也少不了同窗們的互相體諒與幫忙，我的同學建智、語宸、智豪、力瑋、以理與書瑜在課業與研究上的討論和幫助，因有你們的陪伴讓研究生生活變得絢麗多彩。此外，幸運的我還要感謝一群老朋友，謝謝他們在各分東西後還能從各方稍來關心，讓我更有力量。

兩年的碩士生涯，我最要感謝父母為孩子的犧牲與苦心栽培，讓我有著無後顧之憂的生活，並讓我在徬徨與挫折中找回自信，希望我的努力能讓你們感到欣慰與驕傲。

對於無法在致謝中一一答謝的親朋好友們說一聲，謝謝你們。

目錄：

中文摘要.....	iii
英文摘要.....	iv
目錄.....	vi
表目錄.....	viii
圖目錄.....	ix
第一章 導論	1
1.1 簡介.....	1
1.2 研究動機	2
1.3 章節概要	3
第二章 應變對塊材能帶結構及傳輸性質	4
2.1 $\bar{k}\cdot\bar{p}$ 法	4
2.1.1 八能帶 $\bar{k}\cdot\bar{p}$ 模型	4
2.1.2 考慮應變時 InAs 的塊材的能帶性質	9
2.2 塊材反轉不對稱 (BIA)[20]	12
2.3 應變.....	14
2.3.1 應變張量與應變矩陣[21](Pikus-Bir Hamiltonian)	14
2.3.2 定位(hkl)、晶面方向[hkl]及軸方向<hkl>	19
2.3.3 特定應變之應變張量形式	21

2.3.4 考慮 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 時 InAs 的塊材的性質變化	26
2.4 Löwdin 微擾理論[22]	32
第三章 不同晶面下塊材能帶結構及傳輸性質	39
3.1 晶面轉換[13-16]	39
3.2 (110)晶面下 InAs 塊材能帶結構及傳輸性質	43
3.3 (111)晶面下 InAs 塊材能帶結構及傳輸性質	45
第四章 結果與討論	47
4.1 (001)晶面下 InAs 塊材能帶結構及傳輸性質	47
4.2 (110)晶面下 InAs 塊材能帶結構	53
4.3 (111)晶面下 InAs 塊材能帶結構及傳輸性質	55
第五章 結論	57
參考文獻	59
附錄	61
附錄 A、半導體塊材的載子遷移率計算	61
附錄 B、Slater Orbital	67
附錄 C、晶胞中微觀電荷密度的分佈	71
附錄 D、Löwdin 微擾理論解析詳解	72

表目錄：

表 2.1.1、Luttinger-Kohn 八能帶模型基底	7
表 2.1.2 InAs 未考慮施加應變於 Γ 點微觀電荷密度(As)分佈圖	11
表 2.2.1 Kane 模型線性項至三次項八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型	12
表 2.3.1 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 拉長應變於 Γ 點微觀電荷密度(As)分佈圖	27
表 2.3.2 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 壓縮應變於 Γ 點微觀電荷密度(As)分佈圖	28
表 2.3.3 InAs 未施加應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖([100]-[010]面)	29
表 2.3.4 InAs 未施加應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖([100]-[010]面)	29
表 2.3.5 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 拉長應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖	30
表 2.3.6 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 拉長應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖	30
表 2.3.7 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 壓縮應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖	31
表 2.3.8 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 壓縮應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖	31
表 4.1.1 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型常溫(T=300K) InAs 塊材電子遷移率增益表	48
表 4.1.2 Tight-Binding 模型常溫(T=300K) InAs 塊材電子遷移率增益表	48
表 4.1.3 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型常溫(T=300K) InAs 塊材電洞遷移率增益表	50
表 4.1.4 Tight-Binding 模型常溫(T=300K) InAs 塊材電洞遷移率增益表	50
表 4.1.5 As 原子考慮施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 應變 X-Y 平面微觀電荷密度分佈圖	51
表 4.1.6 As 原子考慮施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 應變 X-Z 平面微觀電荷密度分佈圖	52
表 B.1 主量子數與真實主量子數對照表	67
表 B.2 S 與 P 軌道 Slater Orbital 型式	68
表 B.3 陰離子八能帶模型基底	70

圖目錄：

圖 2.1.1 左圖為未考慮應變作用 InAs 塊材之能帶.....	9
(a). k_x - k_y 平面導電帶底部之等位面 (b). k_x - k_y 平面價電帶頂部之等位面	9
(c). k_x - k_z 平面導電帶底部之等位面 (d) k_x - k_z 平面價電帶頂部之等位面.....	9
圖 2.2.1 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型並加入 S.O. 線性項 InAs 塊材之能帶	13
(a) InAs 塊材之能帶 (b) 小範圍 InAs 塊材之能帶.....	13
圖 2.3.1 受應力後形變示意圖	14
圖 2.3.2 一維應變示意圖	14
圖 2.3.3 (a) 未受應變的晶格排列 (b) 受應變後的晶格排列	15
圖 2.3.4 應變作用於二維平面示意圖 (a) 正應變 (b) 剪應變.....	16
圖 2.3.5 wafer orientation (001) 示意圖	20
且將垂直晶面方向定為 Z 軸[001].....	20
圖 2.2.6 wafer orientation (110) 示意圖	20
且將垂直晶面方向定為 Z 軸[110].....	20
圖 2.2.6 wafer orientation (111) 示意圖.....	20
且將垂直晶面方向定為 Z 軸[111]	20
圖 2.3.7 uniaxial strain [100] 作用於閃鋅結構單位晶胞。	22
(a) 受擠壓(compressive)應變示意圖 (b) 受拉長(tensile)應變示意圖	22
圖 2.3.8 不考慮材料彈性 uniaxial strain [100] 作用於閃鋅結構單位晶胞。	23
(a) 受擠壓(compressive)應變示意圖 (b) 受拉長(tensile)應變示意圖	23
圖 2.3.8 不考慮材料彈性 uniaxial Strain <110> 作用於閃鋅結構單位晶胞。	24
(a) 受擠壓(compressive)應變示意圖 (b) 受拉長(tensile)應變示意圖	24
圖 2.3.9 Biaxial strain 作用於閃鋅結構單位晶胞。	25
(a) 受擠壓(compressive)應變示意圖 (b) 受拉長(tensile)應變示意圖	25
圖 2.3.10 左圖為考慮 Uniaxial Strain <110> 拉長作用 InAs 塊材之能帶	26

(a). k_x - k_y 平面導電帶底部之等位面	(b). k_x - k_y 平面價電帶頂部之等位面	26
(c). k_x - k_z 平面導電帶底部之等位面	(d) k_x - k_z 平面價電帶頂部之等位面	26
圖 2.3.11 左圖為考慮 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 壓縮作用 InAs 塊材之能帶		28
(a). k_x - k_y 平面導電帶底部之等位面	(b) k_x - k_y 平面價電帶頂部之等位面	28
(c). k_x - k_z 平面導電帶底部之等位面	(d) k_x - k_z 平面價電帶頂部之等位面	28
圖 2.4.1 微擾法的示意圖		33
圖 2.4.2 InAs 施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 能帶結構示意圖		37
(a) 壓縮應變 2% (b) 無應變 (c) 拉長應變 2%		37
圖 2.4.3 原子鍵結示意圖		37
圖 2.4.4 能階分裂示意圖		38
圖 3.4.1 晶體轉軸示意圖		39
圖 4.1.1 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ InAs 塊材之能帶		47
圖 4.1.2 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ InAs 塊材之電子有效質量		48
圖 4.1.3 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ InAs 塊材之電洞有效質量		49
圖 4.2.1 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型晶面方向(110)考慮 Biaxial Strain InAs 塊材之能帶		53
圖 4.2.2 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮 Biaxial Strain 於晶面(110)上 InAs 塊材之電子有效質量		54
圖 4.2.3 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮 Biaxial Strain 於晶面(110)上 InAs 塊材之電洞有效質量		54
圖 4.3.1 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型晶面方向(111)考慮 Biaxial Strain InAs 塊材之能帶		55
圖 4.3.2 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮 Biaxial Strain 於晶面(111)上 InAs 塊材之電子有效質量		56
圖 4.3.3 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮 Biaxial Strain 於晶面(111)上 InAs 塊材之電洞有效質量		56
圖 A.1 費米能階位置與濃度關係示意圖		61

第一章 導論

1.1 簡介

多年以來，半導體工業的蓬勃發展，使得更小的電晶體得到更便宜的製造，並且也能產生較佳的性能。他們花費較少的成本來生產，蓋因為大多數的生產步驟均是整片晶圓的處理。因此，將更多的元件安置在相同的空間內，能夠減少每個元件的成本。此種便是 Moore's Law[1]定律的精髓。

當金屬氧化物半導體尺寸進入奈米等級時，矽互補型金屬氧化物半導體(CMOS)的尺寸顯著影響其傳輸性質，為增進元件性能，提昇載子遷移率，應變工程[2,3](Strain engineering)已漸成為量產的必要技術。而應變效應主要來自半導體所受的應力(使原子離開其平衡位置，將造成能帶結構產生變化)，透過操縱應變技術將可進行能帶結構的設計，進而決定其傳輸性質[4-7]。

然而傳輸性質也受不同的通道方向與晶面方向影響，因此研發的焦點必然的都放在高遷移率的通道技術上。半導體的研究至今，已有許多研究[8,9]發現未施加應變時 nMOS 於晶面方向(001)與通道方向 $\langle 001 \rangle$ 與 pMOS 於晶面方向(110)與通道方向 $\langle 110 \rangle$ 有較佳的傳輸性質，結合其應變作用，來達到載子遷移率最佳的增益效果。

1.2 研究動機

半導體工業發展至今已約有半世紀，電晶體的尺度也隨著 Moore's Law 來到了奈米等級，矽互補型金屬氧化物半導體(CMOS)的傳輸性質與特性已被廣泛的研究。然而，在現今製程遇上瓶頸，人們開始尋求不同的材料與方法，III-V 族半導體的傳輸性質與特性被所期待，而投入新的發展需要大量的人力與金錢，為更有效的應用，模擬計算可提供我們一個很直觀的圖像，去了解應變作用於半導體所造成的能帶結構變化是如何影響半導體的傳輸性質，促使研發的進行更有效率。

在此論文工作之中，我們利用 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 理論[10,11]來模擬 InAs 的能帶結構並分析應變對於 n 型及 p 型載子，再已 STO[12]來模擬基底於真實空間中的原子軌道分佈，用一簡單圖像解釋其應變作用對傳輸性質的影響，而不同的通道方向與晶面方向對於半導體的傳輸性質有著絕對的關係，我們也已旋轉矩陣[13-16]建構出於任意晶面下的 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 模型，並對(110)、(111)晶面方向的能帶結構與有效質量做計算。藉由這論文工作，以期對半導體的傳輸性質以及應變作用有著更深一層的認識。

1.3 章節概要

首先第一章介紹我們對於應變的影響有基本的認識，並了解應變工程對當代半導體工業的重要性，第二章介紹 $\bar{k}\cdot\bar{p}$ 理論並使用八能帶 $\bar{k}\cdot\bar{p}$ 模型[17-18]來模擬定位於(001)晶面下，加入應變作用受應變 III-V 族複合半導體的能帶結構與傳輸特性。第三章介紹如何利用旋轉矩陣，建構出於任意晶面下的 k.p 模型，並且討論其能帶結構與有效質量上的差異。第四章則是討論應變作用對於 InAs 的等效質量與載子遷移率的影響，並利用 STO(Slater-Type Orbital)來模擬基底於真實空間中的原子軌道分佈，解釋傳輸性質的增益情形。第五章對本篇文章做總結討論，並思考其後續的發展性



第二章 應變對塊材能帶結構及傳輸性質

本章節將介紹我們計算塊材所使用的能帶模型- $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 法，探討於不同基板下，加入不同形式的應變對於閃鋅結構能帶造成的影響，並且介紹計算加入電場後的載子遷移率的計算方法。

2.1 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 法

2.1.1 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型

在固態系統當中，單電子的薛丁格方程式為：

$$H_0 \psi_{n,\bar{k}}(\bar{r}) = E_{n,\bar{k}} \psi_{n,\bar{k}}(\bar{r}) \quad (2.1.1)$$
$$H_0 = \left[\frac{\bar{p}^2}{2m} + V(\bar{r}) \right]$$

H_0 為 Hamiltonian, $V(\bar{r})$ 為成週期性排列的晶格位能: $V(\bar{r} + \bar{T}) = V(\bar{r})$, $\bar{T} = n_1 \bar{a}_1 + n_2 \bar{a}_2 + n_3 \bar{a}_3$ 為晶格平移向量, 其中 \bar{a}_1 、 \bar{a}_2 、 \bar{a}_3 為原始平移向量, 藉由 n_1 、 n_2 、 n_3 進行平移可描繪整個固態系統。根據 Bloch theorem 當電子在呈週期性的位能中, 它的波函數可以表示成 Bloch's function, 如(2.1.2)式,

$$\psi_{n,\bar{k}}(\bar{r}) = e^{i\bar{k} \cdot \bar{r}} u_{n,\bar{k}}(\bar{r}) \quad (2.1.2)$$
$$u_{n,\bar{k}}(\bar{r} + \bar{T}) = u_{n,\bar{k}}(\bar{r})$$

其中 $e^{i\bar{k} \cdot \bar{r}}$ 為電子在晶體中具有平面波的特性, 而 $u_{n,\bar{k}}(\bar{r})$ 表示的是電子局部的波函數, 而後我們將(2.1.2)式代入薛丁格方程(2.1.1)式

$$\left[\frac{\bar{p}^2}{2m} + V(\bar{r}) \right] e^{i\bar{k} \cdot \bar{r}} u_{n,\bar{k}}(\bar{r}) = E_{n,\bar{k}} e^{i\bar{k} \cdot \bar{r}} u_{n,\bar{k}}(\bar{r}) \quad (2.1.3)$$

然後將(2.1.3)式展開，

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

$$= E_{n,\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.1.4)$$

可以將(2.1.6)式整理成(2.1.7)式，

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

$$= E_{n,\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.1.5)$$

我們把(2.1.7)式兩邊同時消去 $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ 可得(2.1.8)式，

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \vec{k}\cdot\vec{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.1.6)$$

方程式中出現了 $\vec{k}\cdot\vec{p}$ 項，所以才稱之 $\vec{k}\cdot\vec{p}$ 法。

接著進一步考慮自旋軌道耦合，將我們 Hamiltonian 改寫(2.1.7)式

$$(H_0 + H_{s.o.}) \psi_n(\vec{r}) = E_n \psi_n(\vec{r})$$

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (2.1.7)$$

$$H_{s.o.} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot \nabla V \times \vec{p}$$

(2.1.9)式中 $\vec{\sigma}$ 為包利自旋矩陣(Pauli spin matrix)

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.1.8)$$

藉由(2.1.1)式到(2.1.6)式類似的運算步驟，最後我們得到類似(2.1.6)

式的形式，只是多加了考慮自旋角動量的部分，如(2.2.3)式，

$$\left[\frac{\bar{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \bar{k} \cdot \bar{\Pi} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\bar{r}) \right] u_{n,\bar{k}}(\bar{r}) = E_{n,\bar{k}} e^{i\bar{k} \cdot \bar{r}} u_{n,\bar{k}}(\bar{r}) \quad (2.1.9)$$

$$\bar{\Pi} = \bar{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \bar{\sigma} \cdot \bar{\nabla} V$$

接下來我們考慮將(2.1.6)式並利用 Löwdin 的微擾理論來求得 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 等效的 Hamiltonian，結果如

$$E_c(\bar{k}) = E_c(\bar{k}=0) + \frac{\hbar^2}{2m_0 m^*} \bar{k}^2 \quad (2.1.10)$$

$$m^* \equiv \frac{1}{1 + \frac{2}{m_0} \frac{(P_{cv})^2}{E_g}} \quad (2.1.11)$$

其中 m^* 稱之為等效質量，對於不同的材料中會有不同的等效質量，(2.1.7)式很清楚的表示當 \bar{k} 很接近零時，電子在塊材的行為表現跟在真空中行的為表現很像，差異是有效質量不同。在真空中 $m^* = 1$ ，而在許多半導體塊材中 m^* 會小於 1，也就是說電子在塊材中如同質量變小。在(2.1.8)式中 $p_{cv} = \langle c | \hat{P} | v \rangle$ 指的是導帶和價帶之間動量矩陣元素，而 $E_g = E_c - E_v$ 是導電帶與價電帶的能量差。

在本論文中，我們使用八能帶模型(eight-band model)，其推導請參考[11]，所採取 Luttinger-Kohn 的基底 $|S \uparrow\rangle$ 、 $|S \downarrow\rangle$ 、 $|HH \uparrow\rangle$ 、 $|LH \uparrow\rangle$ 、 $|LH \downarrow\rangle$ 、 $|HH \downarrow\rangle$ 、 $|SO \uparrow\rangle$ 、 $|SO \downarrow\rangle$ 如表 2.1.1

表 2.1.1、Luttinger-Kohn 八能帶模型基底

分類	Bloch function $u_{J,j_z}(\vec{r})$	原子對應的軌道形態
電子	$ S \uparrow\rangle = \left \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_c$	$u_{1/2,1/2}^c(\vec{r}) = \left\langle r \left \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_c$
Electron	$ S \downarrow\rangle = \left \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_c$	$u_{1/2,-1/2}^c(\vec{r}) = \left\langle r \left \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_c$
重電洞	$ HH \uparrow\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}} (X+iY) \uparrow\rangle = \left \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle_v$	$u_{3/2,3/2}^v(\vec{r}) = \left\langle r \left \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle_v$
Heavy hole	$ HH \downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (X-iY) \downarrow\rangle = \left \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle_v$	$u_{3/2,-3/2}^v(\vec{r}) = \left\langle r \left \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle_v$
輕電洞	$ LH \uparrow\rangle = \frac{-1}{\sqrt{6}} ((X+iY) \downarrow\rangle - 2 Z \uparrow\rangle) = \left \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_v$	$u_{3/2,1/2}^v(\vec{r}) = \left\langle r \left \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_v$
Light hole	$ LH \downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} ((X-iY) \uparrow\rangle + 2 Z \downarrow\rangle) = \left \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_v$	$u_{3/2,-1/2}^v(\vec{r}) = \left\langle r \left \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_v$
裂帶電洞	$ SO \uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} ((X+iY) \downarrow\rangle + Z \uparrow\rangle) = \left \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_v$	$u_{1/2,1/2}^v(\vec{r}) = \left\langle r \left \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_v$
Split off	$ SO \downarrow\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}} ((X-iY) \uparrow\rangle - Z \downarrow\rangle) = \left \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_v$	$u_{1/2,-1/2}^v(\vec{r}) = \left\langle r \left \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_v$

而在此論文中，由於電洞部份會有較明顯混成，當我們判別重電洞與輕電洞時，將以角動量 j_z 來辨別重電動與輕電洞， $j_z = \pm 3/2$ 稱重電洞， $j_z = \pm 1/2$ 稱輕電洞，而當重電洞成份比較多時，我們稱類重電洞(Heavy hole like)，當輕電洞成份比較多時，我們稱類輕電洞(Light hole like)反之，不以有效質量來區別重電洞與輕電洞。

由表 2.1.1 的所採取 Luttinger-Kohn 的基底，並以 $|S \uparrow\rangle$ 、 $|S \downarrow\rangle$ 、 $|HH \uparrow\rangle$ 、 $|LH \uparrow\rangle$ 、 $|LH \downarrow\rangle$ 、 $|HH \downarrow\rangle$ 、 $|SO \uparrow\rangle$ 、 $|SO \downarrow\rangle$ 的順序，將 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 以 Luttinger-Kohn 八能帶模型展開，如(2.1.12)式。

$$H_{LK}^K = \begin{bmatrix} A & 0 & \sqrt{3}V^+ & -\sqrt{2}U & -V & 0 & -U & -\sqrt{2}V \\ 0 & A & 0 & V^+ & -\sqrt{2}U & -\sqrt{3}V & -\sqrt{2}V^+ & U \\ \sqrt{3}V & 0 & -P-Q & S & -R & 0 & \sqrt{\frac{1}{2}}S & -\sqrt{2}R \\ -\sqrt{2}U & V & S^+ & -P+Q & 0 & -R & \sqrt{2}Q & -\sqrt{\frac{3}{2}}S \\ -V^+ & -\sqrt{2}U & -R^+ & 0 & -P+Q & -S & -\sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & -\sqrt{2}Q \\ 0 & -\sqrt{3}V^+ & 0 & -R^+ & -S^+ & -P-Q & \sqrt{2}R^+ & \sqrt{\frac{1}{2}}S^+ \\ -U & -\sqrt{2}V & \sqrt{\frac{1}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q^+ & -\sqrt{\frac{3}{2}}S & \sqrt{2}R & -P-\Delta & 0 \\ -\sqrt{2}V^+ & U & -\sqrt{2}R^+ & -\sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & -\sqrt{2}Q^+ & \sqrt{\frac{1}{2}}S & 0 & -P-\Delta \end{bmatrix} \quad (2.1.12)$$

$$P = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (2.1.13)$$

$$Q = \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \quad (2.1.14)$$

$$R = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} \left[-\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y \right] \quad (2.1.15)$$

$$S = \frac{\sqrt{3}\hbar^2 \gamma_3}{m_0} (k_x - ik_y) k_z \quad (2.1.16)$$

$$A = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (2.1.17)$$

$$U = -\frac{1}{\sqrt{3}} P_0 k_z \quad (2.1.18)$$

$$V = -\frac{1}{\sqrt{6}} P_0 (k_x - ik_y) \quad (2.1.19)$$

在上式矩陣中， γ_1 、 γ_2 、 γ_3 為 Luttinger-Kohn 參數[19]，此參數會依不同材料而不同。在此模型下可分為導電帶的電子，與價電帶的重電洞、輕電洞和裂帶電洞， A 為對應電子的矩陣元素， U 、 V 為電子與電洞之間的耦合項， $-P-Q$ 為對應到重電洞的矩陣元素， $-P+Q$ 為對應到輕電洞的矩陣元素， R 、 S 為重電洞與輕電洞之間的耦合項。

2.1.2 考慮應變時 InAs 的塊材的能帶性質

在此先了解未考慮應變時 InAs 的塊材的能帶性質，以下為利用八能帶 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 模型計算出的能帶結果。

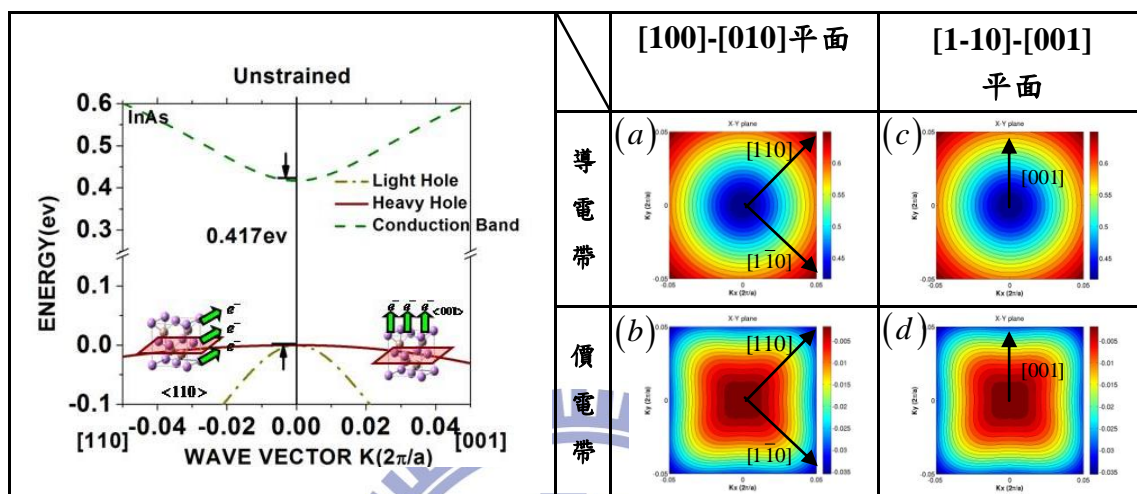


圖2.1.1 左圖為未考慮應變作用InAs塊材之能帶

- (a). k_x - k_y 平面導電帶底部之等位面 (b). k_x - k_y 平面價電帶頂部之等位面
(c). k_x - k_z 平面導電帶底部之等位面 (d). k_x - k_z 平面價電帶頂部之等位面

其中未加應變時 InAs 塊材的能隙大小為 0.417eV，載子遷移率與有效質量成反比，我們可利用(2.1.20)式來計算出有效質量。

$$\frac{1}{m_i^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 E(\vec{K})}{\partial k_i^2} \right|_{\vec{K}=0} \quad (2.1.20)$$

電子於 Γ 點沿各方向的有效質量為 $0.026m_0$ (m_0 為電子質量，其值為 $9.10938188 \times 10^{-31} \text{ kg}$)，電洞有效質量不為等向性， Γ 點沿 [100]，[010]，[001] 方向為重電洞有效質量為 $m_{hh} = 0.333m_0$ ，輕電洞為 $m_{lh} = 0.014m_0$ ，而沿 [110] 方向重電洞為 $m_{hh} = 0.514m_0$ ，輕電洞為 $m_{lh} = 0.0138m_0$ 。由於未考慮施加應變在 Γ 點輕重電洞為簡併狀態，故我們需算出平均的有效質量。

我們由算數平均數(2.1.21)式

$$\frac{n}{m_{avg}} = \frac{n_{HH}}{m_{HH}} + \frac{n_{LH}}{m_{LH}} \quad (2.1.21)$$

n 為態密度(Density of state)，且 $n \propto m^{\frac{3}{2}}$ ，其 m_D (Density of state Effective Mass)，則可將(2.1.21)式整理成(2.1.22)式

$$\frac{1}{m_{avg}} = \frac{m_{hh}^{\frac{1}{2}} + m_{lh}^{\frac{1}{2}}}{m_{hh}^{\frac{3}{2}} + m_{lh}^{\frac{3}{2}}} \quad (2.1.22)$$

能算出沿[100]，[010]，[001]方向為平均有效質量為 $m_{hh} = 0.279m_0$ ，而沿[110]方向平均有效質量為 $m_{hh} = 0.443m_0$ 。

載子遷移率與有效質量成反比，故能從施加應變後，有效質量變化的約略估計，來看出載子遷移率的增益情況，但我們也能從微觀的電子雲分佈方向，來看出施加應變時，晶胞中微觀電荷分佈的情形。

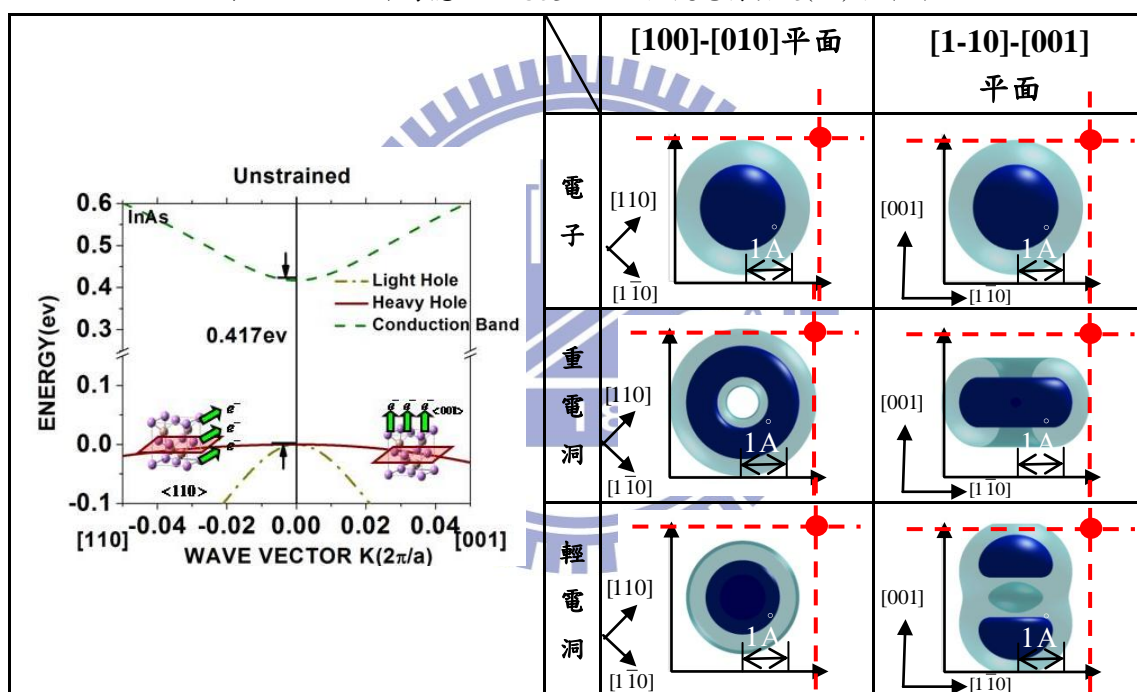
我們利用 STO 如下式(2.1.23)來模擬基底於真實空間中的原子軌道分佈。

$$\varphi_{nlm}(\vec{r}) = N \cdot r^{n^*-1} \cdot e^{\left(\frac{Z-s}{n^*} \cdot r\right)} \cdot Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2.1.23)$$

上式 N 為歸一化常數， n^* 為真實主量子數(real principle quantum number)， $Z-s$ 項即等效核電荷(effective nuclear charge)，角度項為球諧函數(Spherical Harmonic)，相關細節請參照附錄 B、C。

首先我們先觀察未考慮施加應變時晶胞中微觀電荷密度分佈情形，其深色所畫出的電荷密度分佈為最大值的 60% 等位面，淺色所畫出的電荷密度分佈為最大值的 25% 等位面，我們所討論的材料為 InAs，而閃鋅結構最近臨原子的距離為 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})a$ ， a 為晶格常數(InAs 約 6.0583\AA)，在此利用 As 原子來描述晶胞中微觀電荷密度的分佈，圖中紅點位置為近臨原子位置，如下表 2.1.2

表 2.1.2 InAs 未考慮施加應變於 Γ 點微觀電荷密度(As)分佈圖



能由圖中我們能看出電子的微觀電荷分佈為一球型，而重電洞電荷為橫躺於 X-Y 平面上環狀分佈，輕電洞則是沿著 Z 軸的啞鈴形。

2.2 塊材反轉不對稱 (BIA)[20]

由於三五族結構不同於四族有明確的反轉中心，造成塊材反轉不對稱(bulk inversion asymmetry ; BIA)，而自旋軌道交互作用會造成自旋的能量匹裂，此效應為自旋軌道耦合的 Dresselhaus 項。

表 2.2.1 Kane 模型線性項至三次項八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型

$$H_{6c6c}^b = b_{41}^{6c6c} \left(\{k_x, k_y^2 - k_z^2\} \sigma_x + c.p. \right)$$

$$\begin{aligned} H_{8v8v}^b &= \frac{2}{\sqrt{3}} C_k \left[k_x \{J_x, J_y^2 - k_z^2\} + c.p. \right] \\ &+ b_{41}^{8v8v} \left(\{k_x, k_y^2 - k_z^2\} J_x + c.p. \right) + b_{42}^{8v8v} \left(\{k_x, k_y^2 - k_z^2\} J_x^3 + c.p. \right) \\ &+ b_{51}^{8v8v} \left(\{k_x, k_y^2 + k_z^2\} \{J_x, J_y^2 - J_z^2\} + c.p. \right) \\ &+ b_{52}^{8v8v} \left(k_x^3 \{J_x, J_y^2 - J_z^2\} + c.p. \right) \end{aligned}$$

$$H_{7v7v}^b = b_{41}^{7v87v} \left(\{k_x, k_y^2 - k_z^2\} \sigma_x + cp \right)$$

$$\begin{aligned} H_{8v7v}^b &= -i\sqrt{3} C_k \left[k_x U_{yz} + c.p. \right] + b_{41}^{8v7v} \left(\{k_x, k_y^2 - k_z^2\} U_x + c.p. \right) \\ &+ b_{51}^{8v7v} \left(\{k_x, k_y^2 + k_z^2\} U_{yz} + c.p. \right) + b_{52}^{8v7v} \left(k_x^3 U_{yz} + c.p. \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_{6c8v}^b &= iB_{8v}^+ \left(T_x \{k_y k_z\} + c.p. \right) \\ &+ \frac{1}{2} B_{8v}^- \left[(T_{xx} - T_{yy}) \left(k_z^2 - \frac{1}{3} k^2 \right) - T_{zz} \left(k_x^2 - \frac{2}{3} k^2 \right) \right] \end{aligned}$$

$$H_{6c7v}^b = -\frac{i}{\sqrt{3}} B_{7v} \left(\sigma_x \{k_y k_z\} + c.p. \right)$$

其表中 6c 代表導電帶電子，8v 代表重電洞與輕電洞，7v 代表裂帶電洞，由於我們較關心 Γ 點($k=0$)附近的物理特性，因此 k^3 項影響較 k 項小很多，故我們只考慮 k 一次項。

而我們一樣使用表 2.1.1 Luttinger-Kohn 八能帶模型基底作展開，

由表 2.2.1 我們可寫成矩陣形式(2.2.1) 式

$$H_{ik}^{in} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}GF_4^- & -i\sqrt{\frac{2}{3}}GF_4^+ + N_2F_3^2 & \frac{1}{\sqrt{6}}GF_4^+ & -N_2F_3^1 & \frac{i}{\sqrt{3}}G'F_4^+ & \frac{1}{\sqrt{3}}G'F_4^+ \\ 0 & 0 & N_2F_3^1 & \frac{1}{\sqrt{6}}GF_4^- & -i\sqrt{\frac{2}{3}}GF_4^+ - N_2F_3^2 & \frac{1}{\sqrt{2}}GF_4^+ & \frac{1}{\sqrt{3}}G'F_4^- & -\frac{i}{\sqrt{3}}G'F_4^- \\ \frac{1}{\sqrt{2}}GF_4^+ & N_2F_3^1 & 0 & -\frac{1}{2}Ck^+ & Ck_z & -\frac{\sqrt{3}}{2}Ck^- & -\frac{1}{\sqrt{8}}C'k^+ & -\frac{1}{\sqrt{2}}C'k_z \\ i\sqrt{\frac{2}{3}}GF_4^+ + N_2F_3^2 & \frac{1}{\sqrt{6}}GF_4^+ & -\frac{1}{2}Ck^- & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}Ck^+ & -Ck_z & 0 & \frac{\sqrt{3}}{8}C'k^+ \\ \frac{1}{\sqrt{6}}GF_4^- & i\sqrt{\frac{2}{3}}GF_4^+ - N_2F_3^2 & Ck_z & \frac{\sqrt{3}}{2}Ck^- & 0 & -\frac{1}{2}Ck^+ & -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8}}C'k^- & 0 \\ -N_2F_3^1 & \frac{1}{\sqrt{2}}GF_4^- & -\frac{\sqrt{3}}{2}Ck^+ & -Ck_z & -\frac{1}{2}Ck^- & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}C'k_z & \frac{1}{\sqrt{8}}C'k^- \\ -\frac{i}{\sqrt{3}}G'F_4^+ & \frac{1}{\sqrt{3}}G'F_4^+ & -\frac{1}{\sqrt{8}}C'k^- & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8}}C'k^+ & -\frac{1}{\sqrt{2}}C'k_z & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}G'F_4^- & \frac{i}{\sqrt{3}}G'F_4^- & -\frac{1}{\sqrt{2}}C'k_z & \frac{\sqrt{3}}{8}C'k^- & 0 & \frac{1}{\sqrt{8}}C'k^+ & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.1)$$

$$k^\pm = k_x \pm ik_y \quad (2.2.2)$$

$$F_3^1 = 2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2 \quad (2.2.3)$$

$$F_3^1 = \sqrt{3}(k_x^2 - k_y^2) \quad (2.2.4)$$

$$F_4^\pm = 2(k_x k_z \pm ik_y k_z) \quad (2.2.5)$$

$$F_4^z = \frac{\hbar^2}{m_0} 2k_x k_y \quad (2.2.6)$$

接著我們看加上 k 線性項的能帶結果如下圖 2.2.1

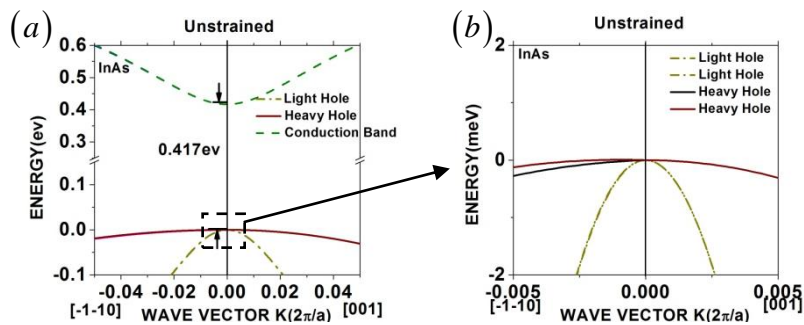


圖 2.2.1 八能帶 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 模型並加入 S.O. 線性項 InAs 塊材之能帶

(a) InAs 塊材之能帶 (b) 小範圍 InAs 塊材之能帶

由圖所示，雖與未加線性項的結果幾乎沒有差別，但實值上自旋向上與自旋向下的能帶已造成匹裂，不再是簡併的狀態。

2.3 應變

一般而言晶體受到外加應力作用時，會根據材料的特性，產生對應的應變。在本論文我們假設應力在晶體均勻分布，其內部所生成的應力和應變具有線性關係，在此節將討論特定形式的應變對於閃鋅結構造成的變化。

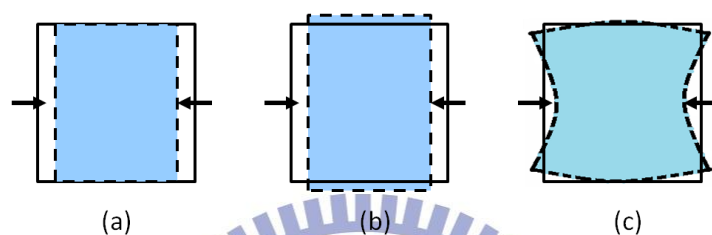


圖2.3.1受應力後形變示意圖

(a)不考慮彈性 (b)考慮彈性且力均勻分佈 (c)考慮彈性但力不均勻分佈

2.3.1 應變張量與應變矩陣 [21](Pikus-Bir Hamiltonian)

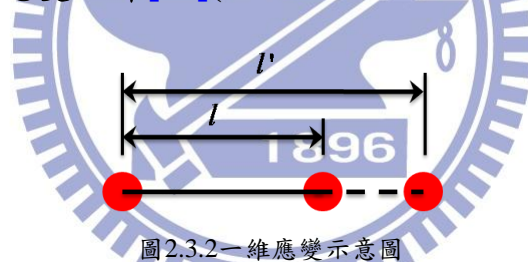


圖2.3.2一維應變示意圖

上圖 2.3.1 為一維應變，其中應變量 ε 可以定義為：

$$\varepsilon = \frac{l' - l}{l} \quad (2.3.1)$$

(2.3.1)式中 l 為受應變前的長度，而 l' 為受應變之後的長度，從(2.3.1)

式可以了解應變量 ε 是不具單位的，其意義為形變的比例。

接著，我們進一步討論晶格受到外力所產生的形變，圖 2.3.2(a)為原本晶格排列，圖 2.3.2(b)為原本為週期性排列的晶格受到外力影響，造成晶格偏移。

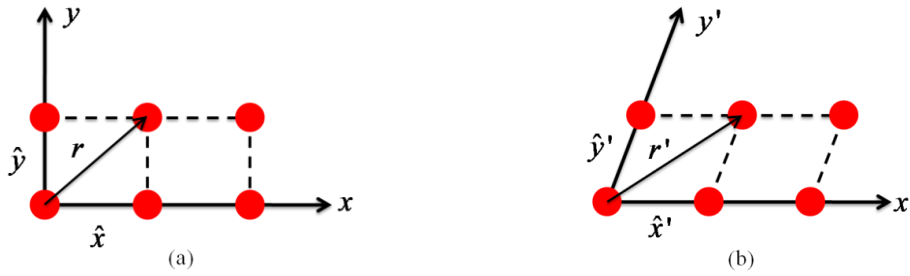


圖2.3.3 (a)未受應變的晶格排列 (b)受應變後的晶格排列

我們假設對於某一個晶格位置為 \vec{r} ，他受到應變後的位置為 \vec{r}' 其關係如(2.3.2)式

$$\begin{aligned}\hat{x}' &= (1 + \varepsilon_{xx})\hat{x} + \varepsilon_{xy}\hat{y} + \varepsilon_{xz}\hat{z} \\ \hat{y}' &= \varepsilon_{yx}\hat{x} + (1 + \varepsilon_{yy})\hat{y} + \varepsilon_{yz}\hat{z} \\ \hat{z}' &= \varepsilon_{zx}\hat{x} + \varepsilon_{zy}\hat{y} + (1 + \varepsilon_{zz})\hat{z}\end{aligned}\quad (2.3.2)$$

\hat{x} 、 \hat{y} 、 \hat{z} 為未受應變時的單位向量， \hat{x}' 、 \hat{y}' 、 \hat{z}' 為受應變後的單位向

量。 $\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}$ ， $\varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}$ ， $\varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}$ 為正應變(normal strain)， u_i 為應變後

晶格於 i 方向的位移量其意義即為(2.3.1)中的 $l'-l$ 。而正應變 ε_{ii} 會造成 i 方向長度的變化 ($i = x, y, z$) 其值小於零既為壓縮應變長度將縮短，大

於零為拉長應變長度將伸長如圖 2.3.3(a)。 $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right)$ ，

$\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right)$ ， $\varepsilon_{zx} = \varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right)$ 則為剪應變(shear strain)，

ε_{ij} 會造成 ij 軸之間的夾角 θ_{ij} 的變化，當值大於零為壓縮應變 θ_{ij} 將會變小，值小於零為拉長應變 θ_{ij} 將會變大圖 2.3.3(b)。



圖2.3.4 應變作用於二維平面示意圖 (a)正應變 (b)剪應變

最後我們將應變整理成張量形式(2.3.4)式

$$\vec{r}' = (1 + [\varepsilon])\vec{r} \quad (2.3.3)$$

$$[\varepsilon] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.3.4)$$

接著我們考慮應力與應變關係，若我們知道外力施加的形式，便可將其表示為一應力張量 $[\tau]$ ：

$$[\tau] = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.3.5)$$

一般而言，應力與應變的關係遵循虎克定律(Hooke's Law)，且系統為立方晶體時，我們能用以下的關係式來轉換應力張量及應變張量：

$$\begin{bmatrix} \tau_{xx} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{zz} \\ 2\tau_{yz} \\ 2\tau_{xz} \\ 2\tau_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (2.3.6)$$

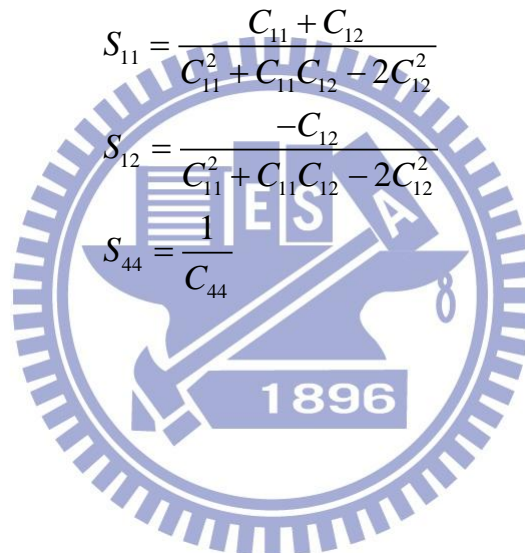
C_{11} 、 C_{12} 及 C_{44} 表示彈性常數，而我們也能由應力轉換為應變如下(2.3.7)式。

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{xz} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau_{xx} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{zz} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{xy} \end{bmatrix} \quad (2.3.7)$$

S_{11} 、 S_{12} 及 S_{44} 表示剛性常數，這些常數會根據材料改變而有所不同。

(InAs、GaAs、Si、Ge 等常見材料的彈性常數可參考文獻[1])。

而彈性常數 C 及剛性常數 S 之間，可透過下式轉換：

$$\begin{aligned} S_{11} &= \frac{C_{11} + C_{12}}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2} \\ S_{12} &= \frac{-C_{12}}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2} \\ S_{44} &= \frac{1}{C_{44}} \end{aligned} \quad (2.3.8)$$


而我們的應變矩陣(Pikus-Bir Hamiltonian)形式為(2.3.8)式，而基底與動能量相同如表 2.1.1，其推導方式請參考[11]

$$H_{LK}^{\epsilon} = \begin{bmatrix} a_c e & 0 & \sqrt{3}v^{\dagger} & -\sqrt{2}u & -v & 0 & u & \sqrt{2}v \\ 0 & a_c e & 0 & -v^{\dagger} & -\sqrt{2}u & -\sqrt{3}v & \sqrt{2}v^{\dagger} & u \\ \sqrt{3}v & 0 & -p-q & s^{\dagger} & -r & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}s & -\sqrt{2}r \\ -\sqrt{2}u & -v & s & -p+q & 0 & -r & \sqrt{2}q & -\sqrt{\frac{3}{2}}s \\ -v^{\dagger} & -\sqrt{2}u & -r^{\dagger} & 0 & -p+q & -s & -\sqrt{\frac{3}{2}}s^{\dagger} & -\sqrt{2}q \\ 0 & -\sqrt{3}v^{\dagger} & 0 & -r^{\dagger} & -s^{\dagger} & -p-q & \sqrt{2}r^{\dagger} & \frac{1}{\sqrt{2}}s^{\dagger} \\ u & \sqrt{2}v & \frac{1}{\sqrt{2}}s^{\dagger} & \sqrt{2}q & -\sqrt{\frac{3}{2}}s & \sqrt{2}r & -a^*e & 0 \\ -\sqrt{2}v^{\dagger} & u & -\sqrt{2}r^{\dagger} & -\sqrt{\frac{3}{2}}s^{\dagger} & -\sqrt{2}q & \frac{1}{\sqrt{2}}s & 0 & -a^*e \end{bmatrix} \quad (2.3.8)$$

$$p = a_v (e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) \quad (2.3.9)$$

$$q = b \left[e_{zz} - \frac{1}{2}(e_{xx} + e_{yy}) \right] \quad (2.3.10)$$

$$r = \frac{\sqrt{3}}{2} b (e_{xx} - e_{yy}) - i d e_{xy} \quad (2.3.11)$$

$$s = -d (e_{xz} - i e_{yz}) \quad (2.3.12)$$

$$e = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} \quad (2.3.13)$$

$$u = \frac{1}{\sqrt{3}} P_0 \sum_j e_{\cdot j} k_j \quad (2.3.14)$$

$$v = \frac{1}{\sqrt{6}} P_0 \sum_j (e_{\cdot j} - i e_{\cdot j}) k_j \quad (2.3.15)$$

其中， a_c 、 a_v 、 b 及 d 為形變位能(deformation potential)，其參數值參

考[19]。而我們的 Hamiltonian 將變為 $H = H_{LK}^K + H_{LK}^{\epsilon}$ 。

2.3.2 定位(hkl)、晶面方向[hkl]及軸方向<hkl>

我們可以選用相互垂直及大小相同的三向量所對應的單元胞建構出立方晶格，而晶格中的任一特定平面皆會與此三向量形成的軸相交，將相交的截距大小分別倒數而得密勒指數(hkl)，此可用來描繪特定平面相對於晶格的關係。

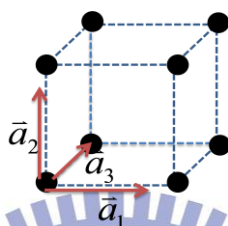


圖 2.3.1 晶格位移圖

一般半導體 wafer 定位於(001)、(110)及(111)三個方向，垂直於(hkl)面的晶體方向定義為[hkl]而軸方向定義為<001>，例如：長晶方向為(110)面時，垂直的晶面方向為[110]而軸方向為<001>。而 wafer 定位於(001)時，軸方向<hkl>等價於[hkl]。

當製作半導體時，載子通道方向皆在晶圓面上，而我們施加應變的方向為垂直或平行於通道方向。

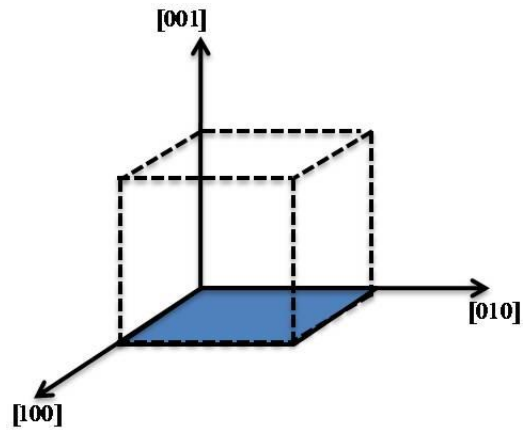


圖2.3.5 wafer orientation (001) 示意圖
且將垂直晶面方向定為Z軸[001]

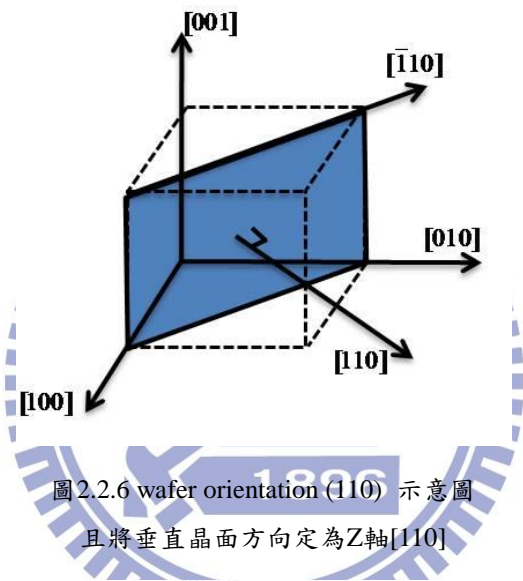


圖2.2.6 wafer orientation (110) 示意圖
且將垂直晶面方向定為Z軸[110]

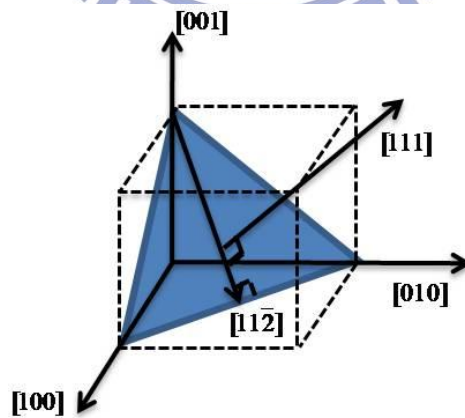


圖2.2.6 wafer orientation (111) 示意圖
且將垂直晶面方向定為Z軸[111]

2.3.3 特定應變之應變張量形式

本章節中所考慮的應變型式，當我們施加應力於單軸方向上時，稱為 Uniaxial Strain，而當應力施於雙軸方向且大小相等時，稱為 Biaxial Strain。

在此章節後將會常用到符號來表示應變施加方向與電流流向，在此先定義符號表示意思，以方便更快明白外加應變形式以及討論的方向等情形：



(一) Uniaxial strain along [100]

當應力作用於[100]方向，會在[100]方向產生對應的應變，且相對於[010]、[001]方向受晶格彈性作用(與材料相關)。

$$[\tau_{100}] = \begin{bmatrix} \tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

接著，透過(2.3.6)式關係式來轉換應力張量成應變張量，其應變張量如下

$$[\varepsilon_{100}] = \begin{bmatrix} S_{11}\tau & 0 & 0 \\ 0 & S_{12}\tau & 0 \\ 0 & 0 & S_{12}\tau \end{bmatrix}$$

令 $S_{11}\tau$ 為 ε (表示將所施加的應力直接考慮為應變的大小)，並將彈性常數 C 及剛性常數 S 之間作轉換，可得到以下形式：

$$[\varepsilon_{100}] = \begin{bmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \varepsilon \end{bmatrix}$$

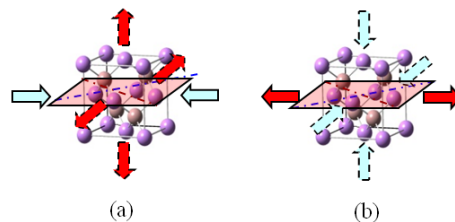


圖2.3.7 uniaxial strain [100] 作用於閃鋅結構單位晶胞。
(a)受擠壓(compressive)應變示意圖 (b)受拉長(tensile)應變示意圖

而在本論文中，為了解基本的物理，忽略材料的彈性效應，使 Uniaxial strain [100] 僅考慮 X 方向上的應變，因此可將應變張量改寫：

$$[\varepsilon_{100}] = \begin{bmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

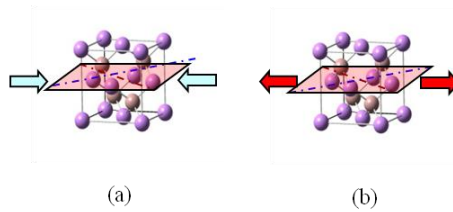


圖2.3.8 不考慮材料彈性uniaxial strain [100] 作用於閃鋅結構單位晶胞。
 (a)受擠壓(compressive)應變示意圖 (b)受拉長(tensile)應變示意圖



(二) Uniaxial strain along [110]

當應力作用於[110]方向，會在[110]方向產生對應的應變，且相對於[110]、[001]方向受晶格彈性作用(與材料相關)。

而我們力用 Uniaxial stress[110]

$$[\tau_{110}] = \begin{bmatrix} \tau/2 & \tau/2 & 0 \\ \tau/2 & \tau/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

接著，透過(2.3.6)式關係式來轉換應力張量成應變張量，其應變張量如下

$$[\epsilon_{100}] = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(S_{11} + S_{12})\tau & \frac{1}{4}S_{44}\tau & 0 \\ \frac{1}{4}S_{44}\tau & \frac{1}{2}(S_{11} + S_{12})\tau & 0 \\ 0 & 0 & S_{12}\tau \end{bmatrix}$$

而我們不考慮彈性效應，即表示將所施加的應力直接考慮為應變的大小，使 Uniaxial Strain <110> 可以由應力轉直接換成應變張量得到以下形式：

$$[\epsilon_{110}] = \begin{bmatrix} \epsilon/2 & \epsilon/2 & 0 \\ \epsilon/2 & \epsilon/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

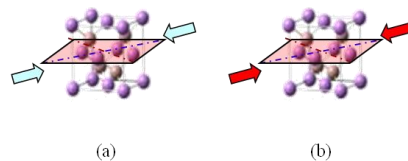


圖2.3.8 不考慮材料彈性uniaxial Strain <110> 作用於閃鋅結構單位晶胞。

(a)受擠壓(compressive)應變示意圖 (b)受拉長(tensile)應變示意圖

(三) Biaxial strain

當外力同時作用於[100]及[010]方向且大小相等，因此[100]及[010]方向有著相同的應變量，而[001]方向受晶格彈性作用如圖(2.2.8)。因此稱為 Bi-axial strain，其應力張量形式如下：

$$[\tau_{bi}] = \begin{bmatrix} \tau & 0 & 0 \\ 0 & \tau & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

接著，透過(2.3.6)式關係式來轉換應力張量成應變張量，其應變張量如下：

$$[\varepsilon_{bi}] = \begin{bmatrix} S_{11} + S_{12} & 0 & 0 \\ 0 & S_{11} + S_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 2S_{12} \end{bmatrix} \tau$$

令 $(S_{11} + S_{12})\tau$ 為 ε (表示將所施加的應力直接考慮為應變的大小)， ε 為 [100]、[010] 方向的形變量，可得到以下形式：

$$[\varepsilon_{bi}] = \begin{bmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & -2\frac{C_{12}}{C_{11}}\varepsilon \end{bmatrix}$$

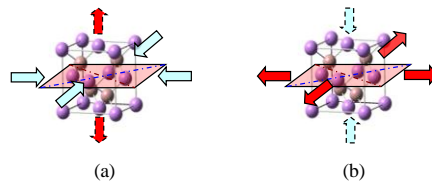


圖2.3.9 Biaxial strain作用於閃鋅結構單位晶胞。

(a)受擠壓(compressive)應變示意圖 (b)受拉長(tensile)應變示意圖

2.3.4 考慮 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 時 InAs 的塊材的性質變化

透過八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 的拉長應變時

InAs 的塊材性質，其能帶變化如下。

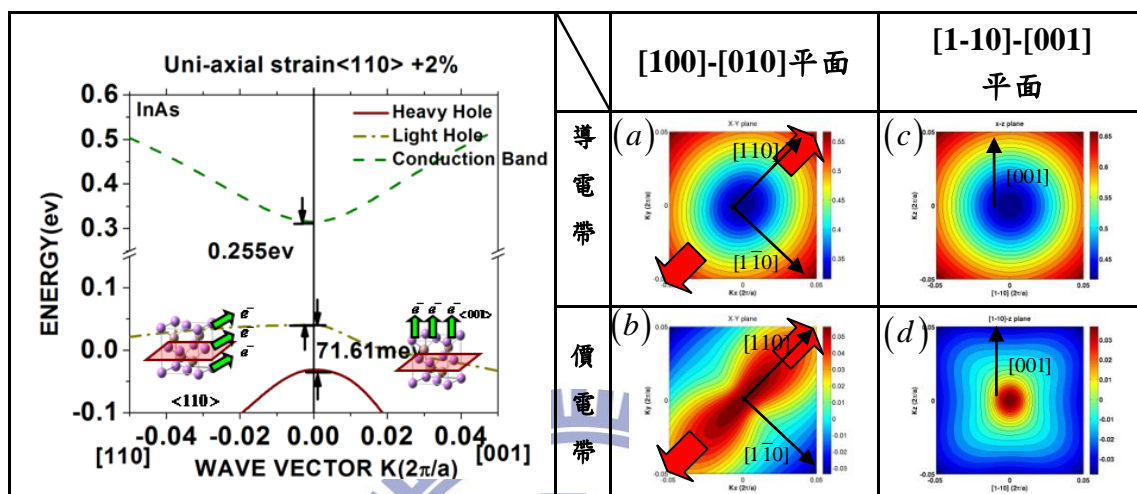


圖 2.3.10 左圖為考慮 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 拉長作用 InAs 塊材之能帶

(a). k_x - k_y 平面導電帶底部之等位面 (b). k_x - k_y 平面價電帶頂部之等位面

(c). k_x - k_z 平面導電帶底部之等位面 (d). k_x - k_z 平面價電帶頂部之等位面

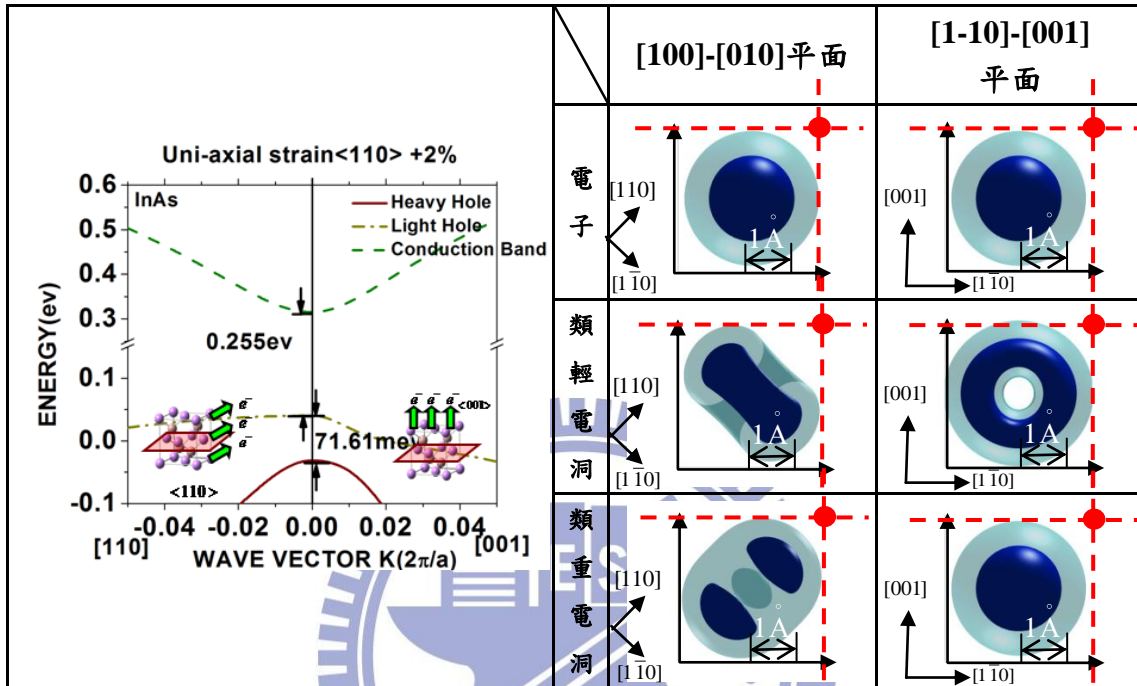
由上圖我們看觀察出施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 的拉長應變時，InAs 能隙變小，其值為 0.255eV，而從等位面圖可看出等向性已明顯被破壞，拉長作用會導致與施力垂直方向 $[1\bar{1}0]$ 與 $[001]$ 的能帶變化較為快速，意即該方向的有效質量較小，載子遷移率有較未失加應變時來的增益。

而當施加應變後，輕電洞與重電洞之間開始混成(由於能隙較大，未考慮電子與電洞混成)，由上章節提到，我們將以角動量 j_z 來辨別重電動與輕電洞， $j_z = \pm 3/2$ 稱重電洞， $j_z = \pm 1/2$ 稱輕電洞，意即由我們的所算出的本徵態來定義重電洞與輕電洞。

再來我們觀察考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 的拉長應變時電荷分佈

情形，如下表 2.3.1

表 2.3.1 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 拉長應變於 Γ 點微觀電荷密度(As)分佈圖



由圖所示，電子因與電洞之間能隙過大，彼此沒有交互作用，原子軌道較沒有明顯的改變，而電洞部份因重電洞與輕電洞有耦合作用，Top Band 是以輕電洞成份多，可以看出施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 的拉長應變時，電荷往 $[1\bar{1}0]$ 分佈，即表示載子遷移率在 $[1\bar{1}0]$ 方向有明顯增益，而 $[110]$ 方向則降低。

而 InAs 塊材施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 的壓縮作用，其能帶變化如下：

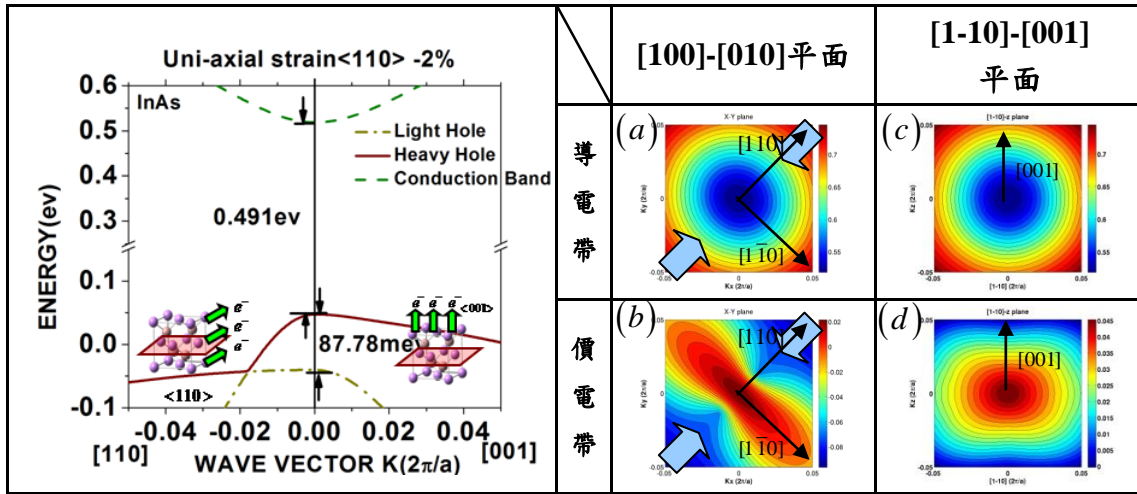


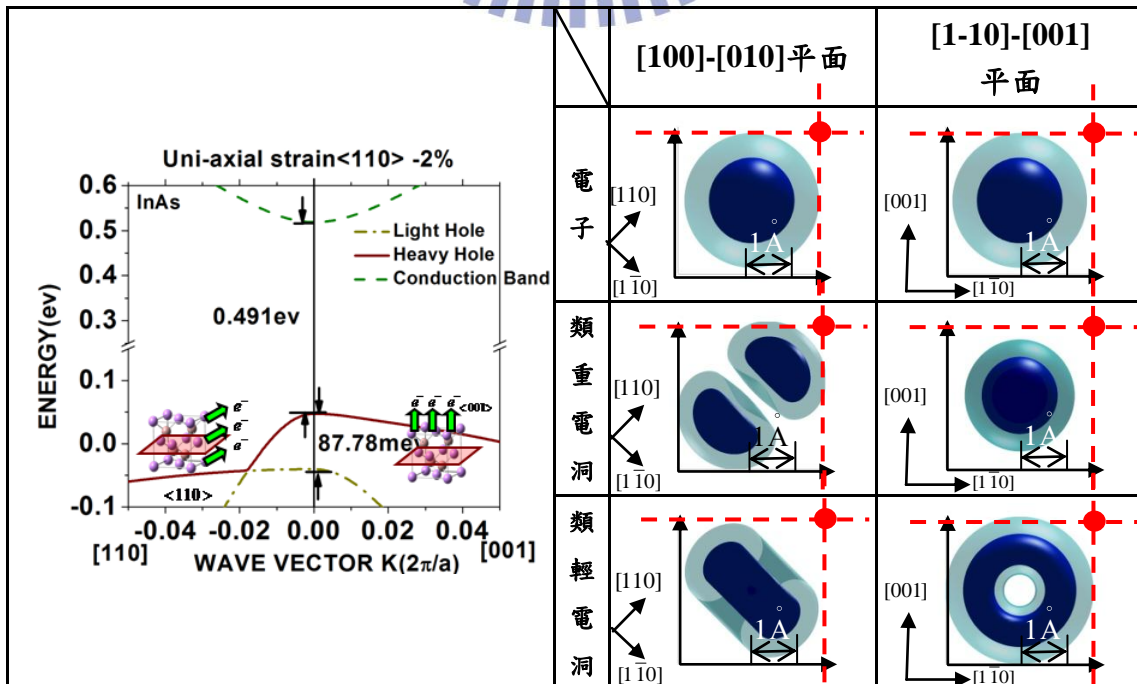
圖2.3.11左圖為考慮Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 壓縮作用InAs塊材之能帶

- (a). k_x-k_y 平面導電帶底部之等位面 (b) k_x-k_y 平面價電帶頂部之等位面
 (c). k_x-k_z 平面導電帶底部之等位面 (d) k_x-k_z 平面價電帶頂部之等位面

由上圖我們看觀察出施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 的壓縮應變時，InAs 能隙變大，其值為 0.491eV，而拉長作用會導致與施力平行方向[110] 的能帶變化較為快速，載子遷移率有較未施加應變時來的增益。

施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 的壓縮應變時電荷分佈情形，如下表 2.3.2

表 2.3.2 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 壓縮應變於 Γ 點微觀電荷密度(A_s)分佈圖



◆ 未施加應變(Unstrained)

未施加應變時的能帶與晶胞中微觀電荷密度分佈，如下表 2.3.3、
表 2.3.4。電荷密度分佈圖中紅點位置為臨近原子位置，其距離為
 $(\frac{a}{4} \ \frac{a}{4} \ \frac{a}{4})$ 。

表 2.3.3 InAs 未施加應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖([100]-[010]面)

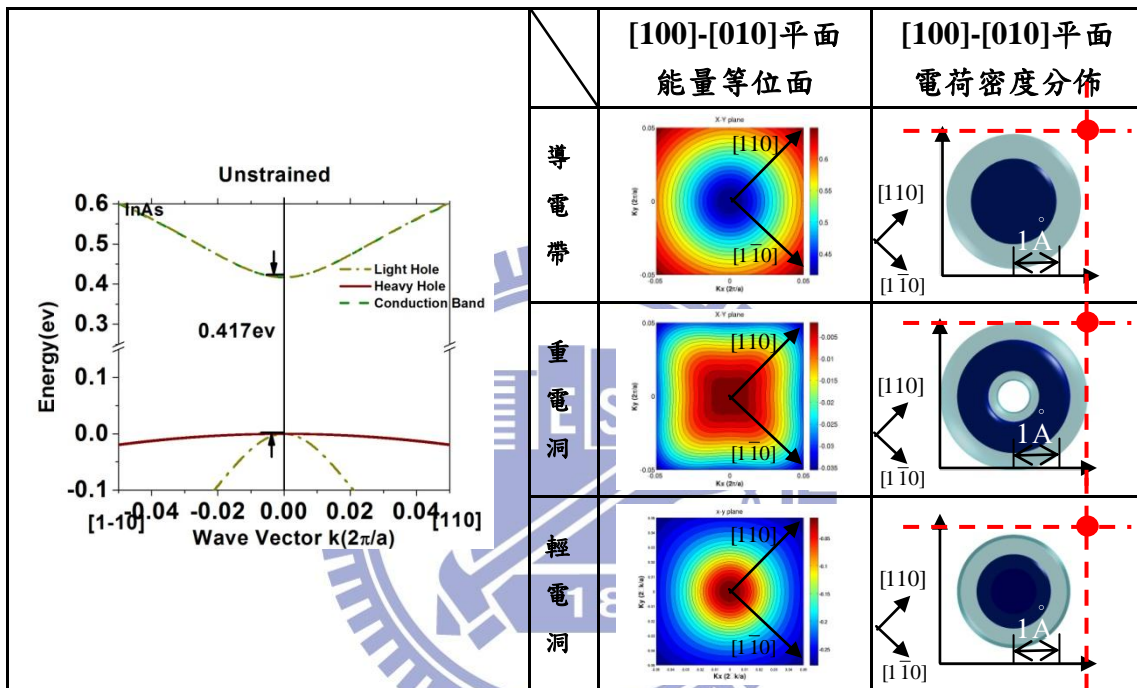
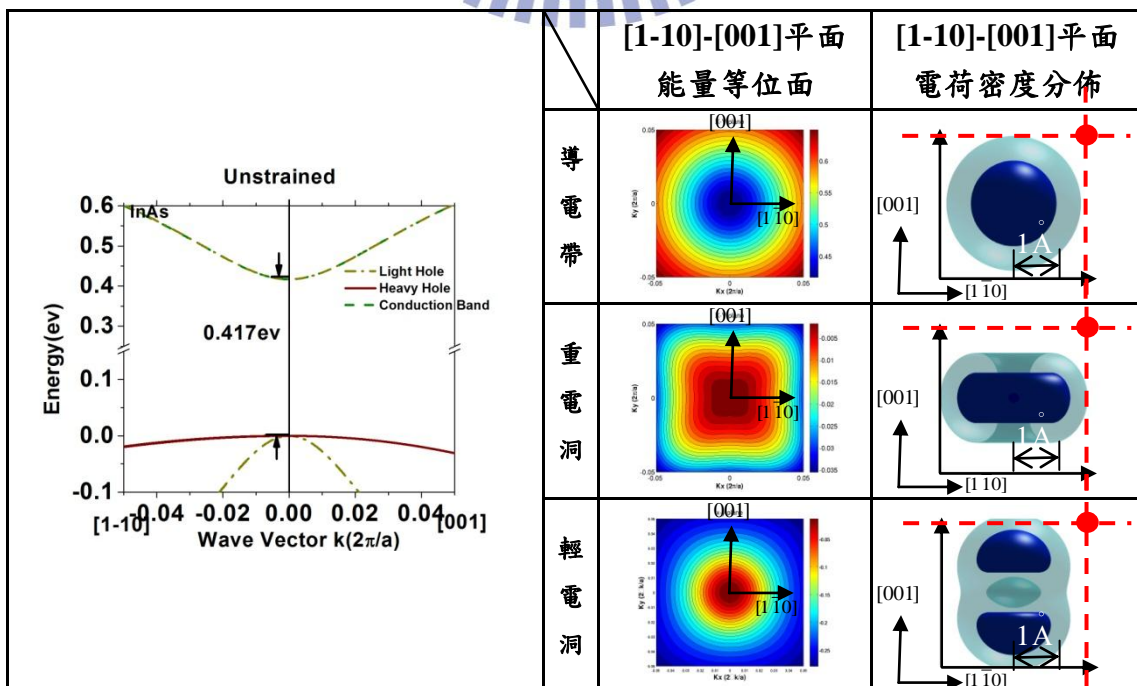


表 2.3.4 InAs 未施加應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖([1-10]-[001]面)



◆ 施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle +2\%$ (Tensile)

施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 拉長應變時的能帶與晶胞中微觀電荷密度的分佈，如下表 2.3.5、表 2.3.6。電荷密度分佈圖中紅點位置為臨近原子位置，其距離為 $(\frac{a}{4} \ \frac{a}{4} \ \frac{a}{4})$ 。

表 2.3.5 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 拉長應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖

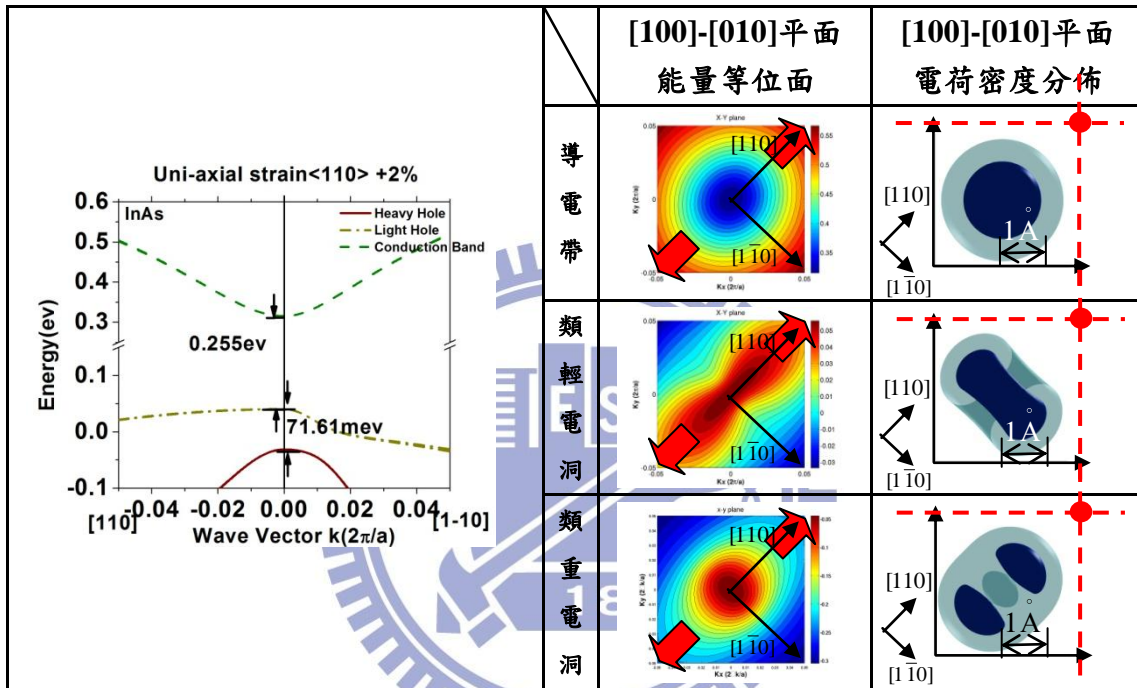
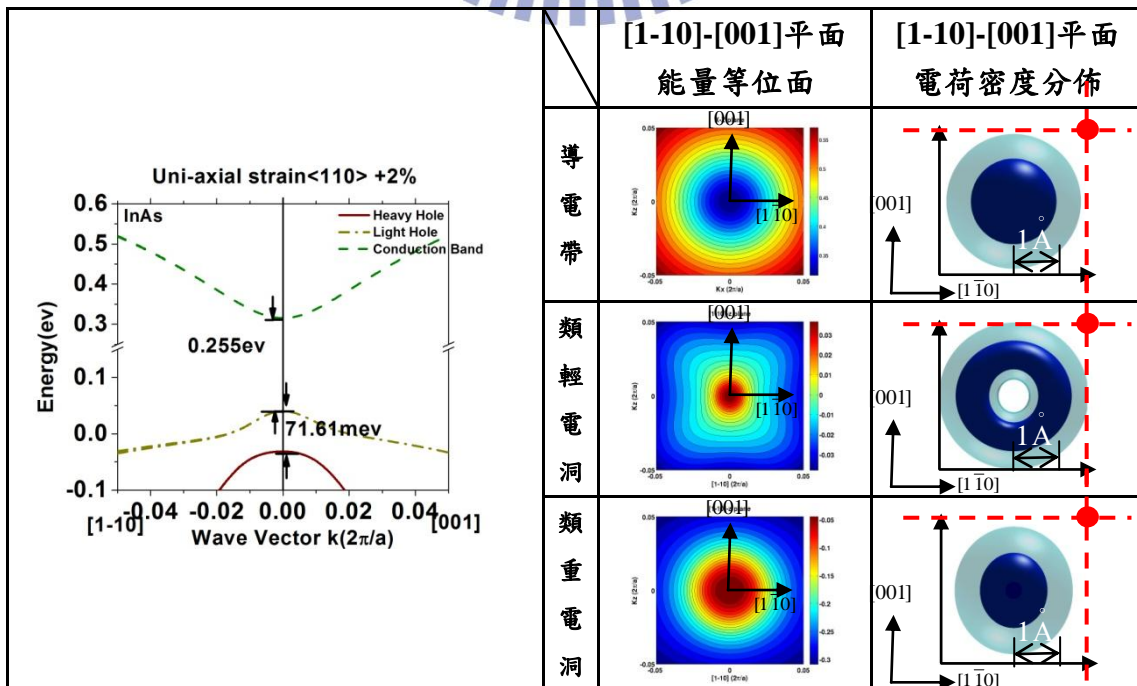


表 2.3.6 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 拉長應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖



◆ 施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle +2\%$ (Compressive)

施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 壓縮應變時的能帶與晶胞中微觀電荷密度的分佈，如下表 2.3.7、表 2.3.8。電荷密度分佈圖中紅點位置為臨近原子位置，其距離為 $(\frac{a}{4} \ \frac{a}{4} \ \frac{a}{4})$ 。

表 2.3.7 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 壓縮應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖

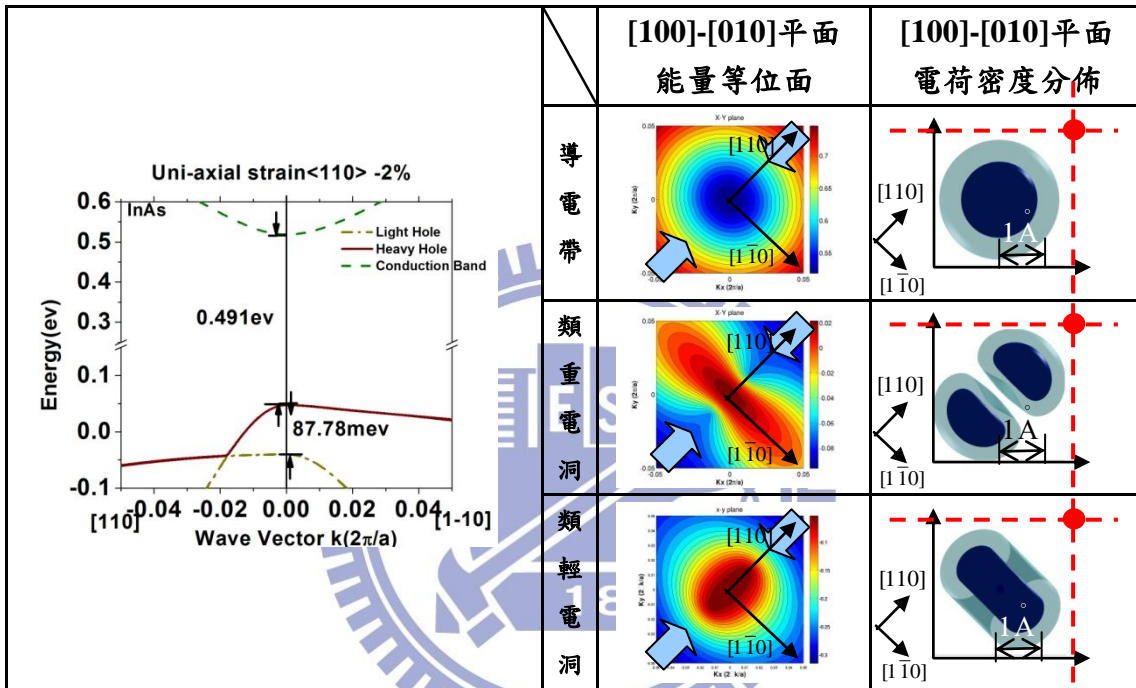
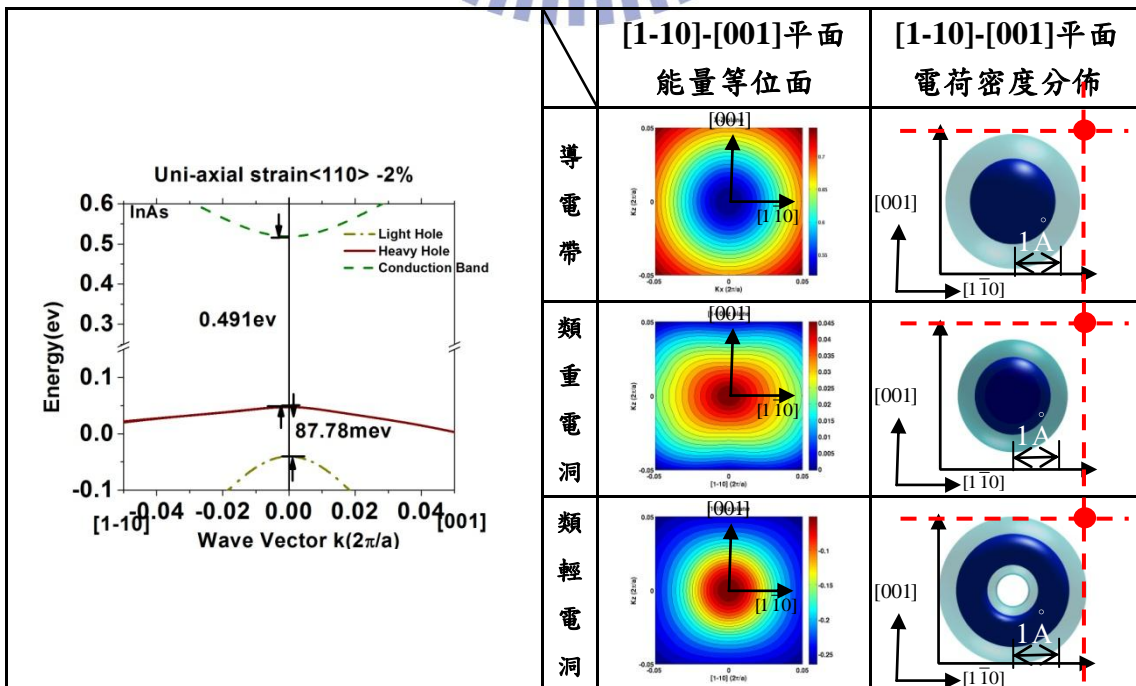


表 2.3.8 InAs 考慮施加 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 壓縮應變能帶結構與微觀電荷密度(As)分佈圖



2.4 Löwdin 微擾理論[22]

此章節將利用 Löwdin 微擾理論推導於 Γ 點($k=0$)解析計算的結果，我們利用四能帶模型探討重電洞與輕電洞在施加應變時，能帶的變化，其四能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ Hamiltonian 形式為(2.4.1)式

$$H_{LK}^K = \begin{bmatrix} -P-Q & S & -R & 0 \\ S^+ & -P+Q & 0 & -R \\ -R^+ & 0 & -P+Q & -S \\ 0 & -R^+ & -S^+ & -P-Q \end{bmatrix} \begin{array}{l} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{array} \quad (2.4.1)$$

$$P = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (2.4.2)$$

$$Q = \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \quad (2.4.3)$$

$$R = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} \left[-\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y \right] \quad (2.4.4)$$

$$S = \frac{\sqrt{3}\hbar^2 \gamma_3}{m_0} (k_x - ik_y) k_z \quad (2.4.5)$$

而 Strain Hamiltonian 的形式為(2.4.6)式

$$H_{LK}^\varepsilon = \begin{bmatrix} -P-q & s & -r & 0 \\ s^+ & -p+q & 0 & -r \\ -r^+ & 0 & -p+q & -s \\ 0 & -r^+ & -s^+ & -p-q \end{bmatrix} \begin{array}{l} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{array} \quad (2.4.6)$$

$$p = a(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) \quad (2.4.7)$$

$$q = b \left[e_{zz} - \frac{1}{2}(e_{xx} + e_{yy}) \right] \quad (2.4.8)$$

$$r = \frac{\sqrt{3}}{2} b(e_{xx} - e_{yy}) - ide_{xy} \quad (2.4.9)$$

$$s = -d(e_{xz} - ie_{yz}) \quad (2.4.10)$$

首先我們將主要考慮的部份獨立出來，其它的矩陣元視為微擾項，如

圖 2.4.1

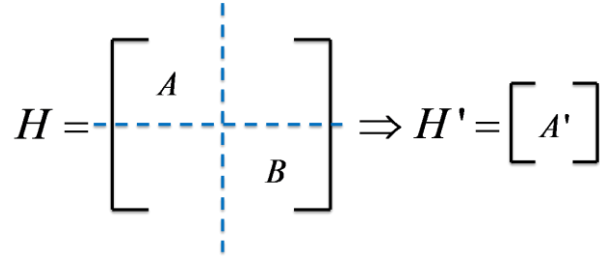


圖2.4.1 微擾法的示意圖

將基底重新排列後，圖 2.4.1 中令 A 屬於重電洞的基底，B 屬於輕電洞的基底，而利用微擾法(2.4.11)式將 4X4 矩陣縮小，得 2X2 矩陣 H'。

$$A' = U_{mn}^A = H_{mn} + \sum_{\alpha}^B \frac{H_{m\alpha} H_{\alpha n}'}{E - H_{\alpha\alpha}} + \sum_{\alpha\beta}^B \frac{H_{m\alpha} H_{\alpha\beta}' H_{\beta n}'}{(E - H_{\alpha\alpha})(E - H_{\beta\beta})} + \dots \quad (2.4.11)$$

接下來計算特徵向量，我們能利用(2.4.12)式，將 2X2 矩陣所計算出來的特徵向量，擴展回原本 4X4 矩陣的特徵向量。

$$\sum_n^A (U_{mn}^A - E\delta_{mn}) C_n = 0, \quad m \text{ in } (A) \quad (2.4.12)$$

$$C_m = \sum_n^A \frac{U_{mn}^A}{E - H_{mm}} C_n, \quad m \text{ in } (B)$$

由特徵向量，我們可以比較出重電洞與輕電洞的成份比例，並可了解重電洞與輕電洞混成的情況，而在前面有提過我們定義當重電洞成份比較多時，我們稱類重電洞(Heavy hole like)，反之，當輕電洞成份比較多時，我們稱類輕電洞(Light hole like)，由此，我們可得之該能帶是由何種所主導。

此章節我們僅討論施加 Uniaxial Strain <110> 於 Γ 點(k=0)的能量做計算。其 Uniaxial Strain <110> 應變張量如下。

$$[\varepsilon_{110}] = \begin{bmatrix} \varepsilon/2 & \varepsilon/2 & 0 \\ \varepsilon/2 & \varepsilon/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.4.13)$$

將應變張量代入微擾所計算出的結果，於 Γ 點($k=0$)的能量可求得一

通式，以重電洞為主，輕電洞與其耦合項視其微擾結果如下。

$$\{H'_{HH}\} = \begin{bmatrix} \left[-a_v + \left(\frac{1}{2}b + \frac{d^2}{4b}\right)\right]\varepsilon & 0 \\ 0 & \left[-a_v + \left(\frac{1}{2}b + \frac{d^2}{4b}\right)\right]\varepsilon \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix} \quad (2.4.14)$$

$$E_{HH} = \left[-a_v + \left(\frac{1}{2}b + \frac{d^2}{4b}\right)\right]\varepsilon \quad (2.4.15)$$

接著利用(2.4.12)式，計算輕電洞與重電洞的特徵向量，其通式如下。

$$\{\varphi_{HH}\} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -i \times d \\ 4b \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix}, \quad \{\varphi_{HH}\} = \begin{bmatrix} 0 \\ i \times d \\ -4b \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix} \quad (2.4.16)$$

再來計算以輕電洞為主，重電洞與其耦合項視其微擾結果如下。

$$\{H'_{LH}\} = \begin{bmatrix} \left[-a_v - \left(\frac{1}{2}b + \frac{d^2}{4b}\right)\right]\varepsilon & 0 \\ 0 & \left[-a_v - \left(\frac{1}{2}b + \frac{d^2}{4b}\right)\right]\varepsilon \end{bmatrix} \begin{matrix} |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \end{matrix} \quad (2.4.17)$$

$$E_{LH} = \left[-a_v - \left(\frac{1}{2}b + \frac{d^2}{4b}\right)\right]\varepsilon \quad (2.4.18)$$

接著一樣利用(2.4.12)式，計算輕電洞與重電洞的特徵向量，其通式

如下。

$$\{\varphi_{LH}\} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ i \times d \\ 4b \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix}, \quad \{\varphi_{LH}\} = \begin{bmatrix} i \times d \\ -4b \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix} \quad (2.4.19)$$

而電子經施加應變後能量變化如下。

$$E_c = E_g + a_c \varepsilon \quad (2.4.20)$$

以下我們討論主要的導電帶底部與價電帶 Top Band 的能量，其詳細的解析結果請參照附錄 D。

◆ 施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle +2\%$ (Compressive)

當施加 2% 壓縮應變時，電子的能量變化由(2.4.20)式得

$$E_c = 0.519(eV) \quad (2.4.21)$$

以重電洞為主輕電洞與其耦合項視其微擾所解出的能量變化由

(2.4.15)式得

$$E_{HH} = 0.034(eV) \quad (2.4.22)$$

可以得知施加 2% 壓縮應變時，Top Band 為能量上升 0.034eV，再經由(2.4.16)式，判別輕電洞與重電洞的特徵向量如下式。

$$\{\varphi_{HH}\} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -i \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix}, \quad \{\varphi_{HH}\} = \begin{bmatrix} 0 \\ i \\ 2 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix} \quad (2.4.23)$$

可看出重電洞所佔其比例比輕電洞來的多，因此我們將此 Top Band 定為類重電洞。

由上面所計算的結果，施加 2% 壓縮應變時，其能隙大小變化由未施加應變時的 0.417eV 變為 0.485eV，能隙增大，而 Top Band 為重電洞為主導。

◆ 施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle +2\%$ (Tensile)

再來我們討論當施加 2% 拉長應變時，能帶結構上的變化，電子的能量變化由(2.4.20)式得

$$E_c = 0.315(eV) \quad (2.4.26)$$

以輕電洞為主重電洞與其耦合項視其微擾所解出的能量變化由

(2.4.18)式得

$$E_{LH} = 0.074(eV) \quad (2.4.29)$$

得知施加 2% 拉長應變時，Top Band 能量上升 0.074eV，再經由(2.4.19)

式，判別輕電洞與重電洞的特徵向量如下式。

$$\{\varphi_{LH}\} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{i}{2} \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix}, \quad \{\varphi_{LH}\} = \begin{bmatrix} -\frac{i}{2} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix} \quad (2.4.30)$$

可看出輕電洞所佔其比例比重電洞來的多，因此我們將此 Top Band 定為類輕電洞。

由上面所計算的結果，施加 2% 拉長應變時，其能隙大小變化由未施加應變時的 0.417eV 變為 0.241eV，能隙變小，而 Top Band 為輕電洞為主導。

圖(2.4.2)為塊材 InAs 施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 簡單示意能帶圖。

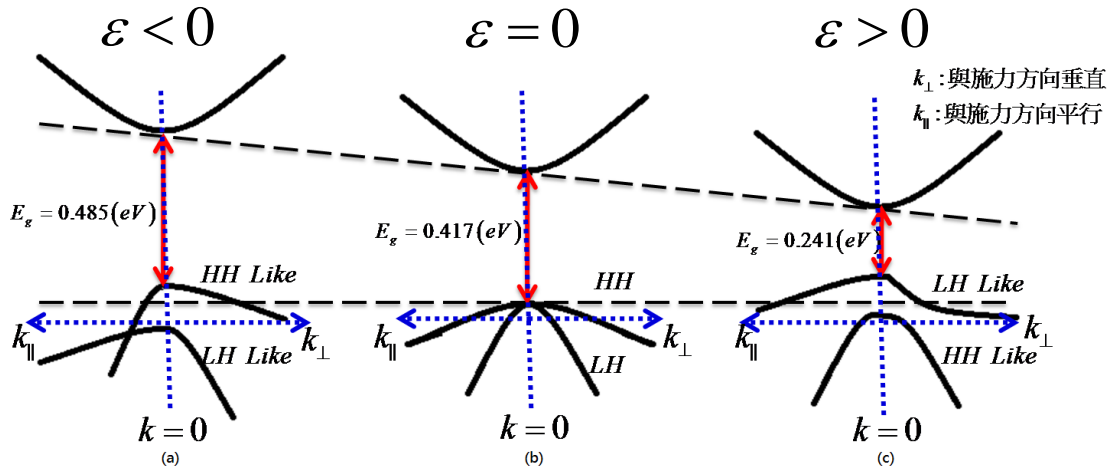


圖2.4.2 InAs施加Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 能帶結構示意圖

(a)壓縮應變2% (b)無應變 (c)拉長應變2%

圖(2.4.2)可明顯看出 E_g 的變化，而我們能由原子鍵結與原子間距來解釋能隙的變化。鍵結與反鍵結指的是鍵結(bonding)軌域與反鍵結(antibonding)軌域，這是分子軌域理論解釋化學鍵所提出的概念。以氫分子為例，當氫原子由逐漸接近，在氫原子上的兩個 1s 原子軌域開始重疊，產生兩個分子軌域，其中一個能量較低，且不含節點(node)的分子軌域，稱為鍵結軌域，另一個分子軌域能量較原來的原子軌域高，含有一個節點，是所謂的反鍵結軌域，如圖(2.4.3)所示。

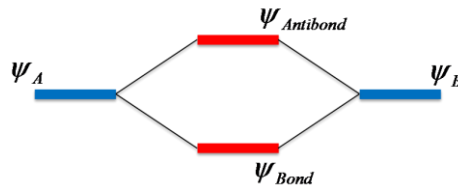


圖2.4.3 原子鍵結示意圖

我們再次考慮周期性排列的原子，而且每個原子包含一個以上的電子，當原子間距離非常大時，則相鄰原子不會互相作用，因此每個電子會佔據系統的能階。而當原子拉近時，原子間會開始互相作用，能階會分裂成能帶，而當原子繼續縮小時，能帶會繼續分裂成兩個能帶，形成導電帶(conduction band)及價電帶(valence band)，如圖 2.4.4。

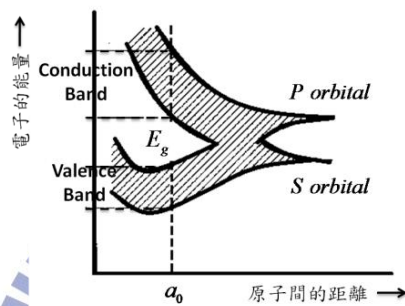


圖2.4.4 能階分裂示意圖

a_0 為原子平衡的距離，而我們能由圖 2.4.3 與圖 2.4.4 得知電子於導電帶反鍵結軌域，並且能由圖 2.4.4 得知當施加壓縮應變時，原子間距離縮小導電帶能量往上升，反之，當施加拉長應變時，原子間距離變長，導電帶能量往下降，與我們利用 Löwdin 微擾理論所計算的結果相符，解釋了能隙施加應變時，所造成的變化。

第三章 不同晶面下塊材能帶結構及傳輸性質

3.1 晶面轉換[13-16]

當製作半導體長晶方向不同時，可能會使半導體的傳輸性質而有所不同，而我們能由原本於(001)晶面的 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 模型，利用旋轉矩陣(3.1.1)式改變 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 的基底 $\vec{r}' = R\vec{r}$ 和 $\vec{k}' = R\vec{k}$ ，轉成我們所需的任意晶面方向。

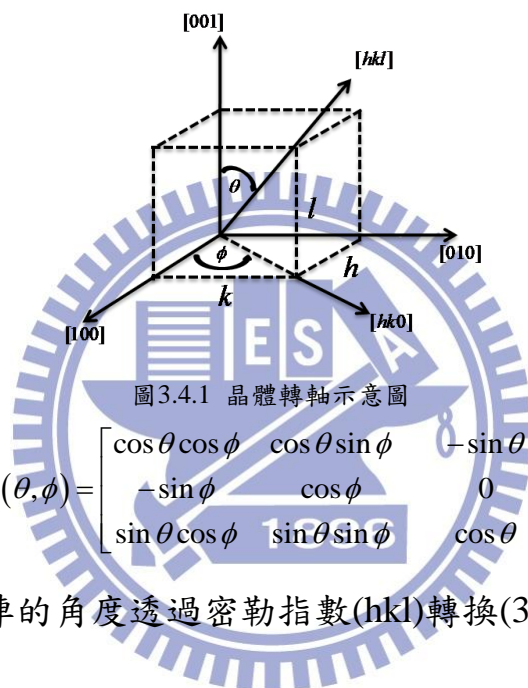


圖3.4.1 晶體轉軸示意圖

$$R(\theta, \phi) = \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \phi & \cos \theta \sin \phi & -\sin \theta \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (3.1.1)$$

而我們將旋轉矩陣的角度透過密勒指數(hkl)轉換(3.1.2)式成我們較容易計算的形式，以方便我們做轉晶面的計算。

$$\tan \theta = \frac{\sqrt{h^2 + k^2}}{l}, \quad \tan \phi = \frac{k}{h} \quad (3.1.2)$$

將(3.1.2)式代入我們的旋轉矩陣(3.1.1)式可得我們用密勒指數表示的旋轉矩陣(3.1.3)式。

$$R_{hkl} = \begin{bmatrix} C_1 l h & C_1 l k & -C_1 (h^2 + k^2) \\ -C_2 k & C_2 h & 0 \\ C_3 h & C_3 k & C_3 l \end{bmatrix} \quad (3.1.2)$$

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{l^2 h^2 + l^2 k^2 + (h^2 + k^2)^2}} \quad (3.1.3)$$

$$C_2 = \frac{1}{\sqrt{h^2 + k^2}} \quad (3.1.4)$$

$$C_3 = \frac{1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (3.1.5)$$

由上章所介紹 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Hamiltonian 的晶圓定位於(001)上，而我們能把 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Hamiltonian 寫成通式(3.1.6)。

$$H_{(hkl)}(k'_x, k'_y, k'_z) = \sum_{\alpha, \beta=x', y', z'} k'_\alpha D_{(hkl)}^{\alpha\beta} k'_\beta + \sum_{\alpha=x', y', z'} F_{(hkl)}^\alpha k'_\alpha + V(k'_x, k'_y, k'_z) \quad (3.1.6)$$

我們可由以 $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ 展開的 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Hamiltonian，且電子與電洞的耦合項為(3.1.7)式。

$$P_0 = \langle S | p_x | X \rangle = \langle S | p_y | Y \rangle = \langle S | p_z | Z \rangle \quad (3.1.7)$$

其 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Hamiltonian 形式如(3.1.8)、(3.1.9)式

$$D_{XYZ}^{(001)}(\vec{k}) = - \begin{bmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Nk_y k_x & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_y k_z \\ Nk_z k_x & Nk_z k_y & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix} \quad (3.1.8)$$

$$F_{XYZ}^{(001)}(\vec{k}) = \begin{bmatrix} P_0 k_x & P_0 k_y & P_0 k_z \end{bmatrix} \quad (3.1.9)$$

$$L = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + 4\gamma_2) \quad (3.1.10)$$

$$M = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - 2\gamma_2) \quad (3.1.11)$$

$$N = \frac{\hbar^2}{2m_0} 6\gamma_3 \quad (3.1.12)$$

介由轉 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 基底的方式 $\bar{k}' = R\bar{k}$ ，來得到任意晶面方向的以 $|X'\rangle, |Y'\rangle, |Z'\rangle$ 基底所展開的 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ Hamiltonian。

$$F_{hkl}^\alpha = \sum_{\alpha'} D_{001}^{\alpha'} R_{\alpha'\alpha}^{-1} \quad (3.1.11)$$

$$D_{hkl}^{\alpha\beta} = \sum_{\alpha'\beta'} R_{\alpha\alpha'} D_{001}^{\alpha'\beta'} R_{\beta'\beta}^{-1} \quad (3.1.12)$$

而後得到以新基底 $|X'\rangle, |Y'\rangle, |Z'\rangle$ 展開的 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ Hamiltonian，並根據

Luttinger-Kohn (LK) 的基底如表 2.1.1，夾出完整的 8×8 LK

Hamiltonian。

$$H_{\bar{k}}(\bar{k}) = \begin{bmatrix} H_c(\bar{k}) & C \\ C^\dagger & H_v(\bar{k}) \end{bmatrix} \quad (3.1.13)$$

式中 $H_c(\bar{k})$ 為 2×2 導電帶項， $H_v(\bar{k})$ 6×6 價電帶項，而 C 為電子與電洞的耦合項。

接著我們討論應變的 Hamiltonian，與動能項一樣的作法，我們可由以 $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ 所展開的應變 Hamiltonian 其形式如(3.1.15)式

$$D_{XYZ}^\varepsilon = \begin{bmatrix} l_s \varepsilon_{xx} + m_s (\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & n_s \varepsilon_{xy} & n_s \varepsilon_{xz} \\ n_s \varepsilon_{yx} & l_s \varepsilon_{yy} + m_s (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) & n_s \varepsilon_{yz} \\ n_s \varepsilon_{zx} & n_s \varepsilon_{zy} & l_s \varepsilon_{zz} + m_s (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \end{bmatrix} \quad (3.1.15)$$

$$l_s = -a + 2b \quad (3.1.16)$$

$$m_s = -a - b \quad (3.1.17)$$

$$n_s = \sqrt{3d} \quad (3.1.18)$$

接著介由(3.1.11)、(3.1.12)式來旋轉成我們所需要的晶面方向，並根

據 Luttinger-Kohn (LK)的基底，如同動能項夾出完整的 8×8 應變 Hamiltonian。

$$H_{LK}^{\varepsilon} = \begin{bmatrix} H_c^{\varepsilon} & 0 \\ 0 & H_v^{\varepsilon} \end{bmatrix} \quad (3.1.19)$$

而應變 Hamiltonian 電子與電洞的耦合項很小，我們呼略其耦合作用。

再來我們旋轉我們的應變張量，其旋轉張量公式如下式(3.1.20)

$$\varepsilon'_{ij} = R_{i\alpha} R_{j\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} \quad (3.1.20)$$

介由(3.1.20)式我們能將特定應變張量，旋轉成我們任意晶面方向的應變張量。



3.2 (110)晶面下 InAs 塊材能帶結構及傳輸性質

經由晶面旋轉後，我們的晶面為(110)的八能帶 Hamiltonian 的形

式如下式(3.2.1)與矩陣元(3.2.2)~ (3.2.8)式

$$H_{LK}^K = \begin{bmatrix} A & 0 & \sqrt{3}V^+ & -\sqrt{2}U & -V & 0 & -U & -\sqrt{2}V \\ 0 & A & 0 & V^+ & -\sqrt{2}U & -\sqrt{3}V & -\sqrt{2}V^+ & U \\ \sqrt{3}V & 0 & -P-Q & S & -R & 0 & \sqrt{\frac{1}{2}}S & -\sqrt{2}R \\ -\sqrt{2}U & V & S^+ & -P+Q & 0 & -R & \sqrt{2}Q & -\sqrt{\frac{3}{2}}S \\ -V^+ & -\sqrt{2}U & -R^+ & 0 & -P+Q & -S & -\sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & -\sqrt{2}Q \\ 0 & -\sqrt{3}V^+ & 0 & -R^+ & -S^+ & -P-Q & \sqrt{2}R^+ & \sqrt{\frac{1}{2}}S^+ \\ -U & -\sqrt{2}V & \sqrt{\frac{1}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q^+ & -\sqrt{\frac{3}{2}}S & \sqrt{2}R & -P-\Delta & 0 \\ -\sqrt{2}V^+ & U & -\sqrt{2}R^+ & -\sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & -\sqrt{2}Q^+ & \sqrt{\frac{1}{2}}S & 0 & -P-\Delta \end{bmatrix} \quad (3.2.1)$$

$$P = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) \quad (3.2.2)$$

$$Q = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{1}{2} \gamma_2 (-2k_1^2 - k_2^2 - 2k_3^2) + \frac{3}{2} \gamma_3 (k_2^2 - k_3^2) \right] \quad (3.2.3)$$

$$R = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{\hbar^2}{m_0} \left[\gamma_2 (2k_1^2 - k_2^2 - k_3^2) - \gamma_3 [(k_2^2 - k_3^2) + i4k_1k_2] \right] \quad (3.2.4)$$

$$S = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} [\gamma_3 k_1 k_3 - i\gamma_2 k_2 k_3] \quad (3.2.5)$$

$$A = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (3.2.6)$$

$$U = -\frac{1}{\sqrt{3}} P_0 k_z \quad (3.2.7)$$

$$V = -\frac{1}{\sqrt{6}} P_0 (k_x - ik_y) \quad (3.2.8)$$

而經由晶面轉後，我們的晶面為(110)的八能帶應變 Hamiltonian

的形式如下式(3.2.9)與矩陣元(3.2.10)~ (3.2.14)式

$$H_{LK}^e = \begin{bmatrix} a_c e & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_c e & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -p-q & s^\dagger & -r & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}s & -\sqrt{2}r \\ 0 & 0 & s & -p+q & 0 & -r & \sqrt{2}q & -\sqrt{\frac{3}{2}}s \\ 0 & 0 & -r^\dagger & 0 & -p+q & -s & -\sqrt{\frac{3}{2}}s^\dagger & -\sqrt{2}q \\ 0 & 0 & 0 & -r^\dagger & -s^\dagger & -p-q & \sqrt{2}r^\dagger & \frac{1}{\sqrt{2}}s^\dagger \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}s^\dagger & \sqrt{2}q & -\sqrt{\frac{3}{2}}s & \sqrt{2}r & -a^*e & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}r^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}s^\dagger & -\sqrt{2}q & \frac{1}{\sqrt{2}}s & 0 & -a^*e \end{bmatrix} \quad (3.2.9)$$

$$p = a_v (e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) \quad (3.2.10)$$

$$q = \frac{1}{4}b(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) + \frac{\sqrt{3}}{2}d\varepsilon_{xy} \quad (3.2.11)$$

$$r = \frac{\sqrt{3}}{4}b(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) + \frac{1}{2}d[\sqrt{2}i(\varepsilon_{xz} - \varepsilon_{yz}) - \varepsilon_{xy}] \quad (3.2.12)$$

$$s = \frac{1}{\sqrt{2}}d(\varepsilon_{xz} + \varepsilon_{yz}) + i\frac{1}{2\sqrt{3}}b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) \quad (3.2.13)$$

$$e = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} \quad (3.2.14)$$

3.3 (111)晶面下 InAs 塊材能帶結構及傳輸性質

經由晶面轉後後，我們的晶面為(111)的八能帶 Hamiltonian 的形

式如下式(3.2.15)與矩陣元(3.2.16)~ (3.2.22)式

$$H_{LK}^K = \begin{bmatrix} A & 0 & \sqrt{3}V^+ & -\sqrt{2}U & -V & 0 & -U & -\sqrt{2}V \\ 0 & A & 0 & V^+ & -\sqrt{2}U & -\sqrt{3}V & -\sqrt{2}V^+ & U \\ \sqrt{3}V & 0 & -P-Q & S & -R & 0 & \sqrt{\frac{1}{2}}S & -\sqrt{2}R \\ -\sqrt{2}U & V & S^+ & -P+Q & 0 & -R & \sqrt{2}Q & -\sqrt{\frac{3}{2}}S \\ -V^+ & -\sqrt{2}U & -R^+ & 0 & -P+Q & -S & -\sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & -\sqrt{2}Q \\ 0 & -\sqrt{3}V^+ & 0 & -R^+ & -S^+ & -P-Q & \sqrt{2}R^+ & \sqrt{\frac{1}{2}}S^+ \\ -U & -\sqrt{2}V & \sqrt{\frac{1}{2}}S^+ & \sqrt{2}Q^+ & -\sqrt{\frac{3}{2}}S & \sqrt{2}R & -P-\Delta & 0 \\ -\sqrt{2}V^+ & U & -\sqrt{2}R^+ & -\sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & -\sqrt{2}Q^+ & \sqrt{\frac{1}{2}}S & 0 & -P-\Delta \end{bmatrix} \quad (3.2.15)$$

$$P = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) \quad (3.2.16)$$

$$Q = \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} (k_1^2 + k_2^2 - 2k_3^2) \quad (3.2.17)$$

$$R = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{\sqrt{3}}{3} (\gamma_2 + 2\gamma_3) (k_1 - ik_2)^2 - \frac{2\sqrt{6}}{3} (\gamma_2 - \gamma_3) (k_1 + ik_2) k_3 \right] \quad (3.2.18)$$

$$S = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[-\frac{\sqrt{6}}{3} (\gamma_2 - \gamma_3) (k_1 + ik_2)^2 + \frac{2\sqrt{3}}{3} (2\gamma_2 + \gamma_3) (k_1 - ik_2) k_3 \right] \quad (3.2.19)$$

$$A = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (3.2.20)$$

$$U = -\frac{1}{\sqrt{3}} P_0 k_z \quad (3.2.21)$$

$$V = -\frac{1}{\sqrt{6}} P_0 (k_x - ik_y) \quad (3.2.22)$$

而經由晶面轉後後，我們的晶面為(111)的八能帶 Hamiltonian 的

形式如下式(3.2.23)與矩陣元(3.2.24)~ (3.2.28)式

$$H_{LK}^e = \begin{bmatrix} a_c e & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_c e & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -p-q & s^\dagger & -r & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}s & -\sqrt{2}r \\ 0 & 0 & s & -p+q & 0 & -r & \sqrt{2}q & -\sqrt{\frac{3}{2}}s \\ 0 & 0 & -r^\dagger & 0 & -p+q & -s & -\sqrt{\frac{3}{2}}s^\dagger & -\sqrt{2}q \\ 0 & 0 & 0 & -r^\dagger & -s^\dagger & -p-q & \sqrt{2}r^\dagger & \frac{1}{\sqrt{2}}s^\dagger \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}s^\dagger & \sqrt{2}q & -\sqrt{\frac{3}{2}}s & \sqrt{2}r & -a^*e & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}r^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}s^\dagger & -\sqrt{2}q & \frac{1}{\sqrt{2}}s & 0 & -a^*e \end{bmatrix} \quad (3.2.23)$$

$$p = a_v (e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) \quad (3.2.24)$$

$$q = -\frac{1}{\sqrt{3}} d (\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yz} + \varepsilon_{zx}) \quad (3.2.25)$$

$$r = -\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} b [(-1+i\sqrt{3})\varepsilon_{xx} - (1+i\sqrt{3})\varepsilon_{yy} + 2\varepsilon_{zz}] \\ + \frac{1}{2\sqrt{3}} d [(-1+i\sqrt{3})\varepsilon_{yz} - (1+i\sqrt{3})\varepsilon_{zx} + 2\varepsilon_{xy}] \end{array} \right\} \quad (3.2.26)$$

$$s = \sqrt{\frac{2}{3}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} b (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) + \frac{1}{2\sqrt{3}} d (2\varepsilon_{xy} - \varepsilon_{yz} - \varepsilon_{zx}) \\ + i\sqrt{3} \left[\frac{1}{2} b (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) + \frac{1}{2\sqrt{3}} d (\varepsilon_{xz} - \varepsilon_{yz}) \right] \end{array} \right\} \quad (3.2.27)$$

$$e = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} \quad (3.2.28)$$

第四章 結果與討論

4.1 (001)晶面下 InAs 塊材能帶結構及傳輸性質

在此節，我們將加入 uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 應變後各通道方向上的結果整合後進行討論，並觀察對應的微觀晶胞中電荷密度的分佈改變情形，進而說明載子遷移率增益變化。從下方圖表可明顯比較應變作用後的能帶變化情況：

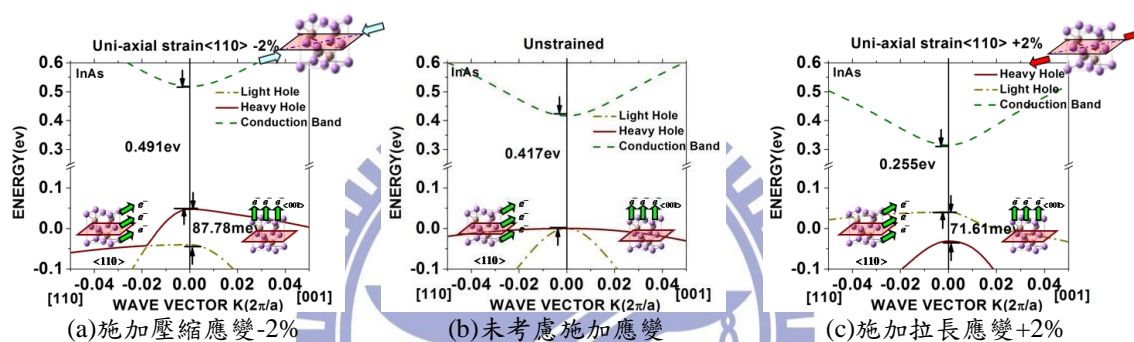


圖4.1.1 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ InAs 塊材之能帶

由能帶圖可看出，施加壓縮應變時導電帶上移，能隙變大，而拉長應變時導電帶下移，能隙變小，與 Löwdin Perturbation theory 解析結果一致。

接著我們比較電子於 Γ 點各方向的有效質量，由於施加應變方向應與通道方向垂直或平行，故我們施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 考慮的通道方向為 $[110]$ 、 $[1\bar{1}0]$ 、 $[001]$ 。

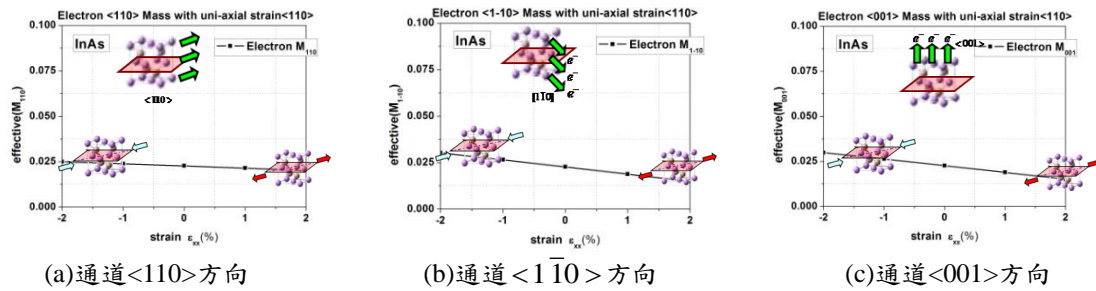


圖4.1.2八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮Uniaxial Strain <110> InAs塊材之電子有效質量

由圖所示，施加拉長應變於各通道方向皆使有效質量降低，而壓縮應變則是升高，故電子遷移率應在施拉長應變時有所增益。

接著我們看在常溫下沿各通道方向施加 Uniaxial Strain <110>應變後的電子遷移率的增益情況，如下表 4.1.1 (八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型結果)

表 4.1.2 (Tight-Binding 模型結果)

表 4.1.1 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型常溫(T=300K) InAs 塊材電子遷移率增益表

		Carrier Concentration = $1.0 \times 10^{18} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$		各方向 mobility 的相對變化 $\equiv \frac{\mu_{\langle Direction \rangle}^{\text{strain}} - \mu_{\langle Direction \rangle}^0}{\mu_{\langle Direction \rangle}^0} \times 100\%$		
		$\mu_{\langle 100 \rangle}^0 = 3.87 \times 10^4 \text{ (cm}^2 / \text{volt} \cdot \text{s)}$ $\mu_{\langle 100 \rangle}^0 = \mu_{\langle 010 \rangle}^0 = \mu_{\langle 001 \rangle}^0 = \mu_{\langle 110 \rangle}^0 = \mu_{\langle 1-10 \rangle}^0$		<110>	<1-10>	<001>
Wafer orientation (001)	Uni-axial Strain <110>	Diagram				
		Strain = +2% Tensile		↑ 5.2%	↑ 33.9%	↑ 31.8%
		Strain = -2% Compressive		↓ 4.9%	↓ 19.4%	↓ 18.8%

表 4.1.2 Tight-Binding 模型常溫(T=300K) InAs 塊材電子遷移率增益表

		Carrier Concentration = $1.0 \times 10^{18} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$		各方向 mobility 的相對變化 $\equiv \frac{\mu_{\langle Direction \rangle}^{\text{strain}} - \mu_{\langle Direction \rangle}^0}{\mu_{\langle Direction \rangle}^0} \times 100\%$		
		$\mu_{\langle 100 \rangle}^0 = 5.51 \times 10^4 \text{ (cm}^2 / \text{volt} \cdot \text{s)}$ $\mu_{\langle 100 \rangle}^0 = \mu_{\langle 010 \rangle}^0 = \mu_{\langle 001 \rangle}^0 = \mu_{\langle 110 \rangle}^0 = \mu_{\langle 1-10 \rangle}^0$		<110>	<1-10>	<001>
Wafer orientation (001)	Uni-axial Strain <110>	Diagram				
		Strain = +2% Tensile		↓ 5.6%	↑ 23.1%	↑ 29.1%
		Strain = -2% Compressive		↓ 2.3%	↓ 24.5%	↓ 22.2%

當沿 $\langle 110 \rangle$ 方向施加應變後，沿 $\langle 110 \rangle$ 通道方向的 Γ 點電子有效質量並無明顯變化，而壓縮應變作用有效質量略為增加，拉長應變作用則略減，而電子遷移率的增益與有效質量成反比，趨勢結果一致。而垂直施力方向的通道 ($\langle 1\bar{1}0 \rangle$ 、 $\langle 001 \rangle$) 的 Γ 點電子有效質量壓縮應變作用有效質量為增加，拉長應變作用則降低，趨勢也為一致。電子由於與電洞能隙過大，較無法用晶胞中微觀電荷密度的分佈去判斷其結果。

接著我們來看 InAs 塊材施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 應變後的電洞的有效質量變化，如下圖 4.1.3

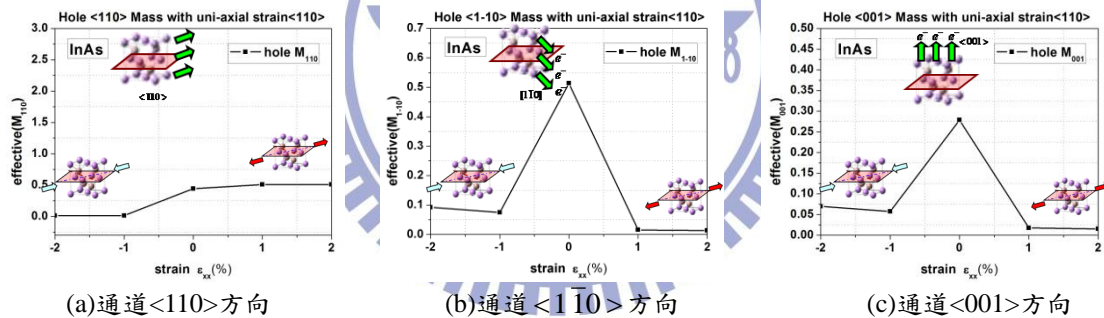


圖4.1.3八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ InAs 塊材之電洞有效質量

由圖所示，通道 $\langle 110 \rangle$ 方向施加拉長應變使有效質量升高，而壓縮應變則是降低，故電洞遷移率應在施壓縮應變時有所增益。而垂直施力方向的通道 ($\langle 1\bar{1}0 \rangle$ 、 $\langle 001 \rangle$) 的 Γ 點電洞有效質量施加壓縮或拉長應變後皆明顯降低。接著與我們計算結果比較。

表 4.1.3 八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型常溫(T=300K) InAs 塊材電洞遷移率增益表

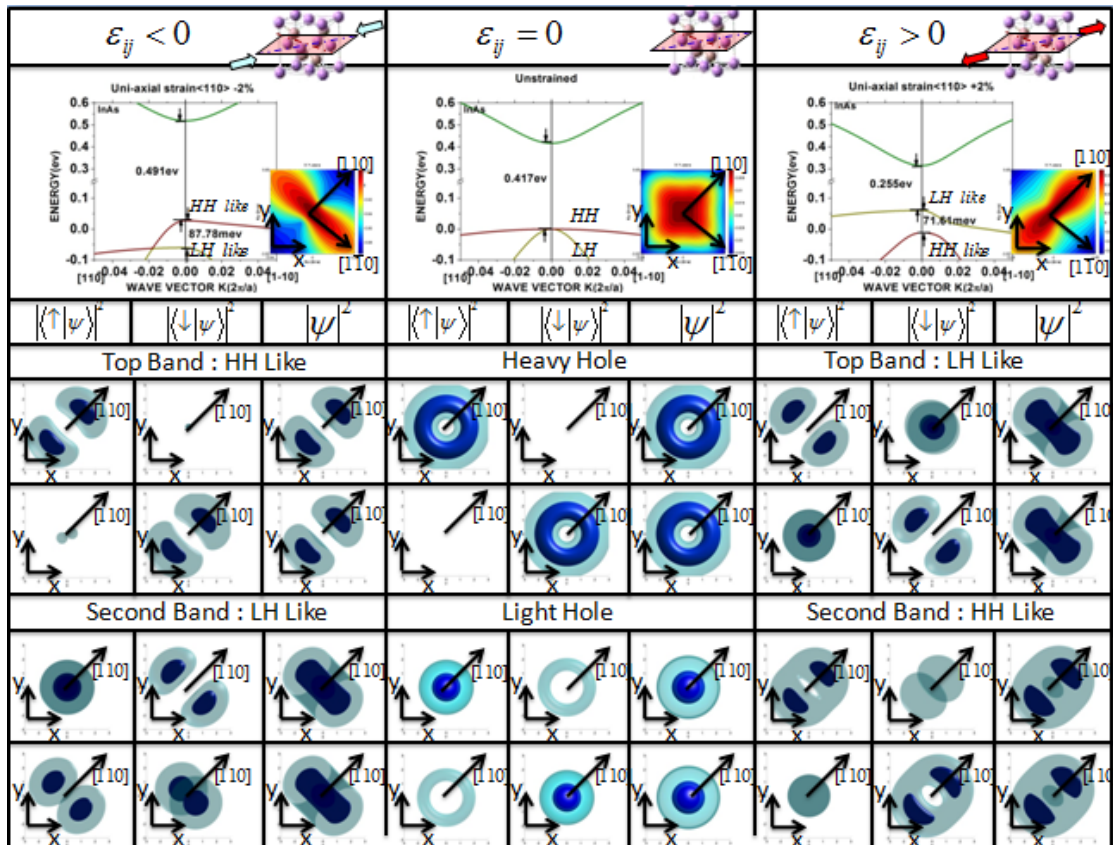
		Carrier Concentration = $1.0 \times 10^{18} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$		各方向 mobility 的相對變化 $\equiv \frac{\mu_{\langle Direction \rangle}^{\text{Strain}} - \mu_{\langle Direction \rangle}^0}{\mu_{\langle Direction \rangle}^0} \times 100\%$		
Wafer orientation (001)	Uni-axial Strain <110>	$\mu_{\langle 100 \rangle}^0 = 3.71 \times 10^3 \text{ (cm}^2 \text{ / volt}\cdot\text{s)}$ $\mu_{\langle 100 \rangle}^0 = \mu_{\langle 110 \rangle}^0 = \mu_{\langle 1\bar{1}0 \rangle}^0 = \mu_{\langle 001 \rangle}^0$		<110>	<1-10>	<001>
		Strain = +2% Tensile		↓ 48.3%	↑ 56.4%	↑ 47.4%
		Strain = -2% Compressive		↑ 171%	↓ 75.7%	↑ 27.4%

表 4.1.4 Tight-Binding 模型常溫(T=300K) InAs 塊材電洞遷移率增益表

		Carrier Concentration = $1.0 \times 10^{18} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$		各方向 mobility 的相對變化 $\equiv \frac{\mu_{\langle Direction \rangle}^{\text{Strain}} - \mu_{\langle Direction \rangle}^0}{\mu_{\langle Direction \rangle}^0} \times 100\%$		
Wafer orientation (001)	Uni-axial Strain <110>	$\mu_{\langle 100 \rangle}^0 = 3.20 \times 10^3 \text{ (cm}^2 \text{ / volt}\cdot\text{s)}$ $\mu_{\langle 100 \rangle}^0 = \mu_{\langle 110 \rangle}^0 = \mu_{\langle 1\bar{1}0 \rangle}^0 = \mu_{\langle 001 \rangle}^0$		<110>	<1-10>	<001>
		Strain = +2% Tensile		↓ 38.4%	↑ 77%	↑ 54.0%
		Strain = -2% Compressive		↑ 276%	↓ 65.9%	↑ 17.7%

有效質量與電洞遷移率比較結果其變化，較不相符，我們利用晶胞中微觀電荷密度的分佈來分析電洞遷移率的結果，首先先比較 X-Y 平面上的晶胞中微觀電荷密度的分佈，可比較通道 <110> 與 <1 $\bar{1}$ 0> 通道方向的電洞遷移率趨勢(表 4.1.3 表 4.1.4 框內)。下表 4.1.5 為施加 Uniaxial Strain <110> 應變後的電荷密度變化分佈圖。

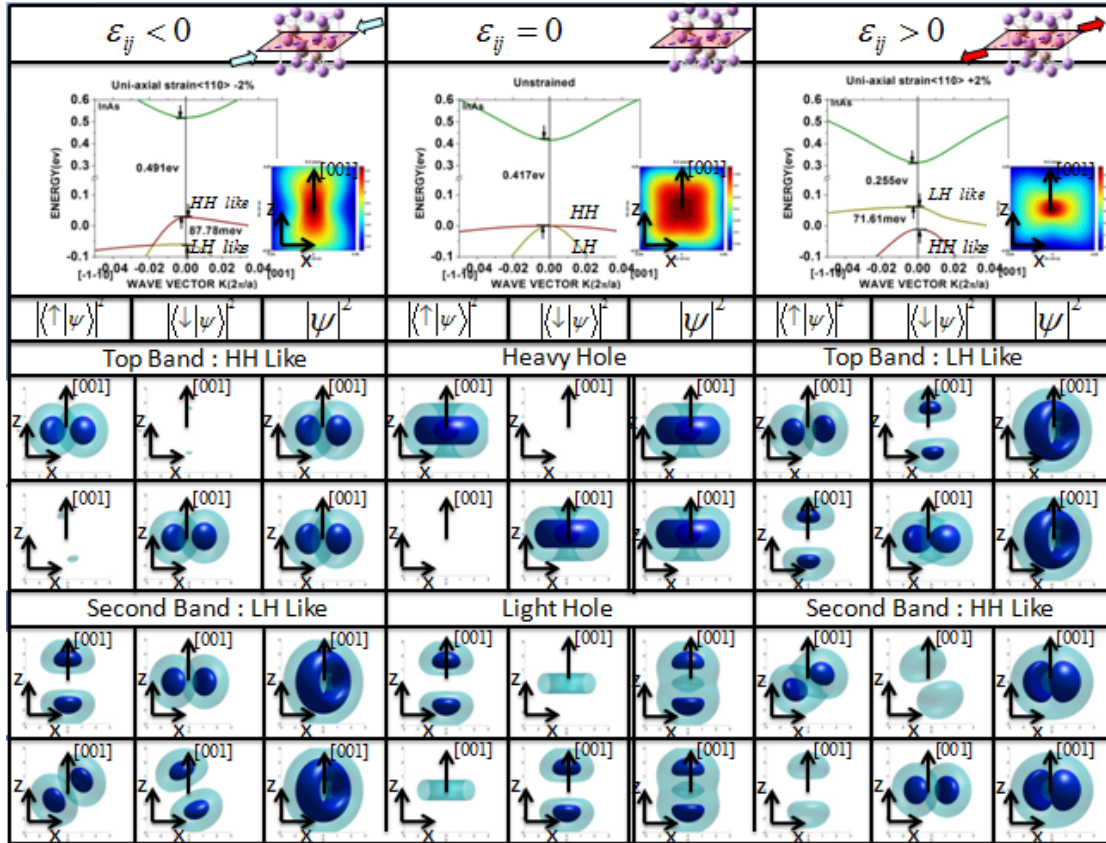
表 4.1.5 As 原子考慮施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ 應變 X-Y 平面微觀電荷密度分佈圖



由圖我們能看出施加壓縮應變與為考慮應變晶胞中微觀電荷密度的分佈比較，施加壓縮應變分佈往通道 $\langle 110 \rangle$ 方向電荷密度分佈為密集，而 $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ 通道方向較少，而施加拉長應變則反之，與我們電洞遷移率趨勢擁有一致的結果。

再來比較 X-Z 平面上的晶胞中微觀電荷密度的分佈如下表 4.1.6，觀察<001>通道方向電荷密度分佈，電洞遷移率如表 4.1.3、表 4.1.4。

表 4.1.6 As 原子考慮施加 Uniaxial Strain <110>應變 X-Z 平面微觀電荷密度分佈圖



由圖我們能看出施加壓縮應變與為考慮應變晶胞中微觀電荷密度的分佈比較，施加拉長應變分佈往<001>通道方向電荷密度分佈為密集，而施加壓縮應變則反之，與我們電洞遷移率趨勢也有一致的結果。

4.2 (110)晶面下 InAs 塊材能帶結構

我們利用旋轉矩陣將 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型轉換為(110)晶面，並施加 Biaxial strain 應變，觀察其各通道方向上的結果整合後進行討論，並觀察對有效質量的變化情形，進而預測載子遷移率增益變化。

下圖為(110)晶面施加 Biaxial strain 應變八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型的能帶圖，並以與晶面平行 $\langle 001 \rangle$ 、垂直 $\langle 110 \rangle$ 的通道方向，做為例子。

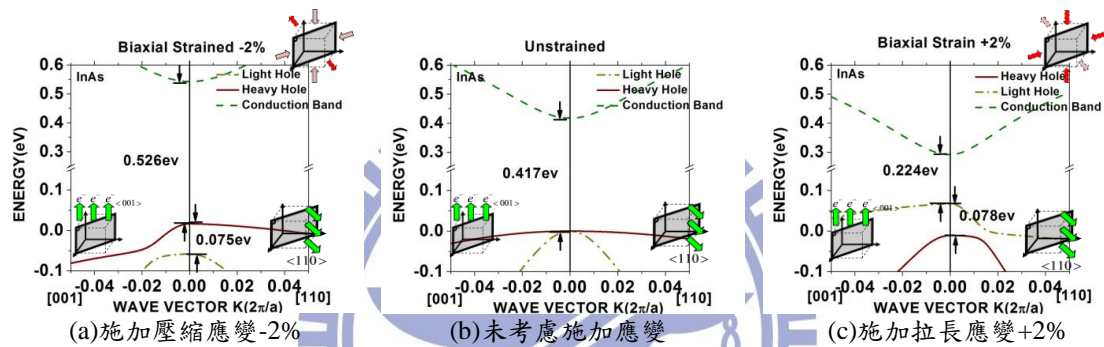
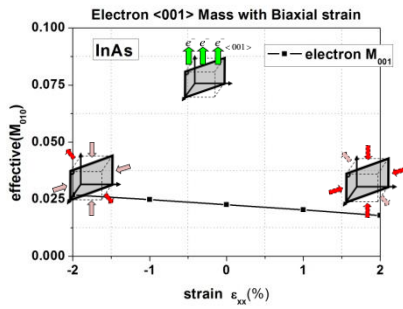
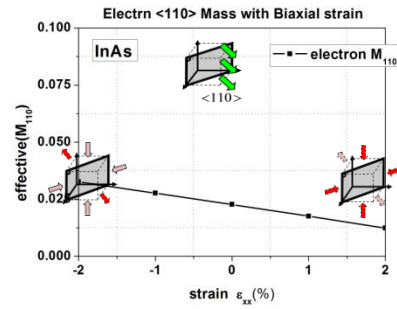


圖4.2.1八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型晶面方向(110)考慮 Biaxial Strain InAs 塊材之能帶

由能帶圖可看出，施加壓縮應變時導電帶上移，能隙變大，而拉長應變時導電帶下移，能隙變小。接著我們比較電子於 Γ 點觀察其 $\langle 001 \rangle$ 通道方向(平行晶面)與 $\langle 110 \rangle$ 通道方向(垂直晶面)的有效質量隨應變的變化情形。



(a)通道<001>方向

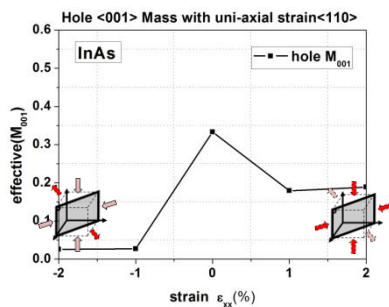


(c)通道<110>方向

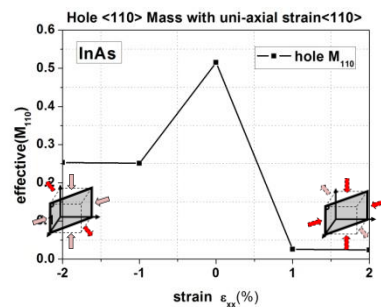
圖4.2.2八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮 Biaxial Strain 於晶面(110)上InAs塊材之電子有效質量

Γ 點電子有效質量並無明顯變化，而壓縮應變作用有效質量略為增加，拉長應變作用則略減，而電子遷移率的增益與有效質量成反比，估計電子施加拉長應變作用電子遷移率應會有所增益。

接著我們來看 InAs 塊材於(110)晶面下施加 Biaxial Strain 應變後的電洞的有效質量變化，如下圖 4.1.3



(a)通道<001>方向



(c)通道<110>方向

圖4.2.3八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮 Biaxial Strain 於晶面(110)上InAs塊材之電洞有效質量

由圖所示，通道<001>與<110>通道方向在施加應變時皆使有效質量降低，故電洞遷移率應在施加應變時應有所增益。

4.3 (111)晶面下 InAs 塊材能帶結構及傳輸性質

再來，我們利用旋轉矩陣將 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型轉換為(111)晶面，並施加 Biaxial strain 應變，觀察其各通道方向上的結果整合後進行討論，並觀察對有效質量的變化情形，進而預測載子遷移率增益變化。

下圖為(111)晶面施加 Biaxial strain 應變八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型的能帶圖，並以與晶面平行 $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ 、垂直 $\langle 111 \rangle$ 的通道方向，做為例子。

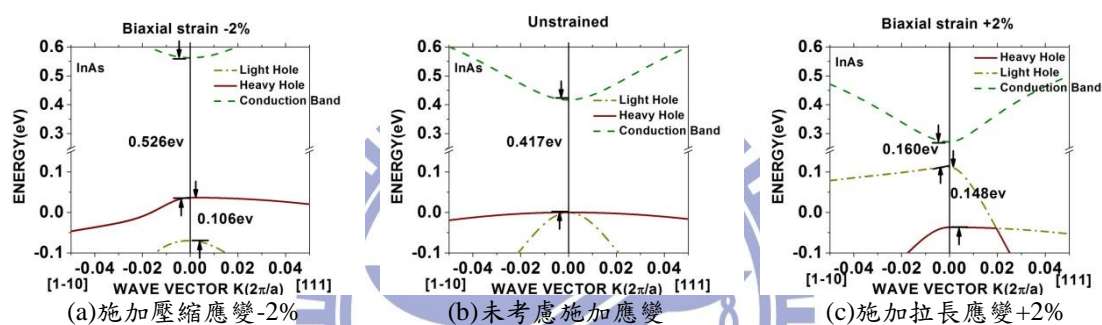
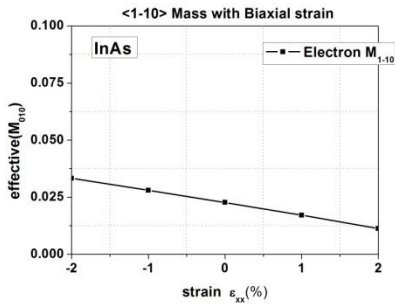
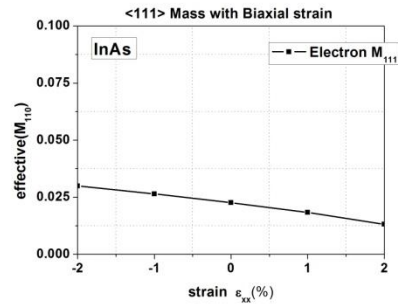


圖4.3.1八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型晶面方向(111)考慮Biaxial Strain InAs塊材之能帶

由能帶圖可看出，施加壓縮應變時導電帶上移，能隙變大，而拉長應變時導電帶下移，能隙變小。接著我們比較電子於 Γ 點觀察其 $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ 通道方向(平行晶面)與 $\langle 111 \rangle$ 通道方向(垂直晶面)的有效質量隨應變的變化情形。



(a)通道<1-10>方向

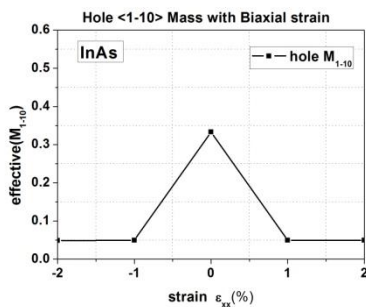


(c)通道<111>方向

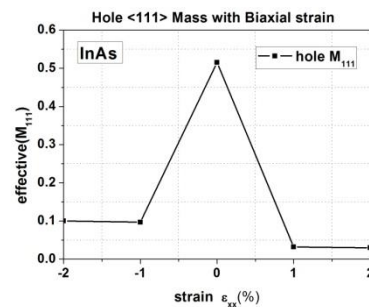
圖4.3.2八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮Biaxial Strain 於晶面(111)上InAs塊材之電子有效質量

Γ 點電子有效質量並無明顯變化，而壓縮應變作用有效質量略為增加，拉長應變作用則略減，而電子遷移率的增益與有效質量成反比，估計電子施加拉長應變作用電子遷移率應會有所增益。

接著我們來看 InAs 塊材於(111)晶面下施加 Biaxial Strain 應變後的電洞的有效質量變化，如下圖 4.1.3



(a)通道<1-10>方向



(c)通道<111>方向

圖4.3.3八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型考慮Biaxial Strain 於晶面(111)上InAs塊材之電洞有效質量

由圖所示，通道<001>與<110>通道方向在施加應變時皆使有效質量降低，故電洞遷移率應在施加應變時應有所增益。

第五章 結論

本論文中，我們在定位為不同晶面下的 InAs 塊材，討論加入 $\langle 110 \rangle$ 方向的 Uniaxial strain，p 型及 n 型載子的傳輸性質變化，然而透過此論文工作進而分析應變對半導體傳輸性質的影響：

1. 我們能由原子鍵結與原子間距來解釋能隙的變化，由於導電帶電子為鍵結軌域，當原子間距離縮小，導電帶能量往上升，當施加拉長應變時，原子間距離變長，導電帶能量往下降。
2. 我們由八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 能帶模型，做載子遷移率的計算，並與 Tight-Banding 模型進行比較，得知經由拉長應變時，電子遷移率有著增益的效果，而施與壓縮應變時，電洞遷移率有著增益的效果。並且能藉由晶胞中微觀電荷密度的分佈的情形，來解釋電洞遷移率的增益情形。

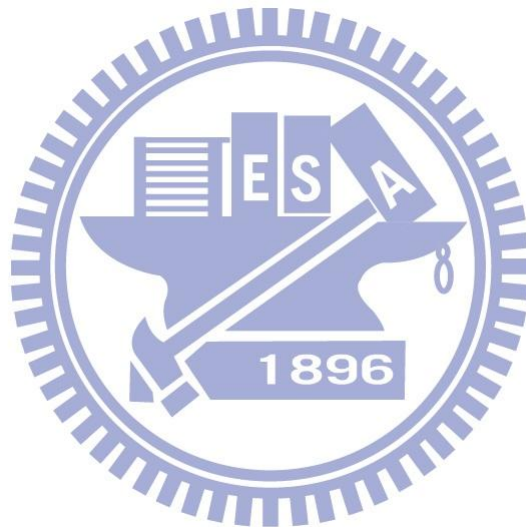
然而，對於提升半導體元件的傳輸性質，與一些還無法使用簡單圖像來解釋的物理特性，未來或許也可利用以下做法來沿伸此題目：

1. 更完整的 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型：

在此論文工作中，是利用無法利用晶胞中微觀電荷密度的分佈簡單圖像來解釋對於 n 型載子的傳輸機制，或許利用更完整的 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型，既可描述施加應變時，電子的原子軌道變化情況。

2. 考慮載子-聲子散射時間：

為了方便進行簡單的物理討論，在此將載子-聲子散射時間假設為常數(1 ps)，若要模擬更類似現實情形的情況，可以將電子及電洞與聲子的作用考慮進來，而散射時間變會與電子、電洞的運動狀態有關。



參考文獻

- [1] G. E. Moore. "Cramming more components onto integrated circuits", IEEE Electronics, **38**, 82 , April (1965)
- [2] H. M. Manasevit, I. S. Gergis, and A. B. Jones, "Electron mobility enhancement in epitaxial multilayer Si-Si_{1-x}Gex alloy films on (100) Si", Appl. Phys. Lett, **41**, 464 (1982)
- [3] R. People, J. C. Bean, D. V. Lang, A. M. Sergent, and H. L. Stomer. "Modulation doping in GexSi_{1-x}/Si strained layer heterostructures", Appl. Phys. Lett. **45**, 1231 (1984)
- [4] A. Al-Bayati, L. W. L. Q. Xia, M. Balseanu, Z. Yuan, and M. Kawagushi. "Production processes for inducing strain in CMOS channels", in Semiconductor Fabtech, 26th ed. London, U.K.: Bernard Henry, Trans-World House , pp.84-86 (2004)
- [5] A. Murthy, R. S. Chau, T. Ghani, and K. R. Mistry. "Semiconductor Transistor Having a Stressed Channel", Santa Clara, CA: Intel (2005)
- [6] H. S. Yang *et al.* "Daul stress linear for high performance sub — 45 nm gate length SOI CMOS manufacturing", in *IDEM Tech. Dig.*, pp.1075 — 1077, (2004)
- [7] Y. C. Liu, J. W. Pan, T. Y. Chang, P. W. Liu, B. C. Lan, C. H. Tung, C. H. Tsai *et al.* "Single stress linear for both NMOS and PMOS current enhancement by a novel ultimate spacer process", in *IDEM Tech. Dig.*, Washington (2005)
- [8] H. S. Momose, T. Ohguro, S. Nakamura, Y. Toyoshima, H. Ishiuchi, and H. Iwai, "Ultrathin gate oxide CMOS on (111) surface-oriented Si substrate", IEEE Trans. on Electron Devices, 49 (9), p.1597, 2002.

- [9] H. S. Momose, T. Ohguro, K. Kojima, S. Nakamura, and Y. Toyoshima, "1.5-nm gate oxide CMOS on (110) surface-oriented Si substrate", IEEE Trans. on Electron Devices, 50 (4), p.1001, 2003.
- [10] J. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
- [11] S. L. Chuang *"Physics of Optoelectronic Devices"*, Wiley (1995)
- [12] J. C. Slater, *Phys. Rev.* **36**, 57 (1930).
- [13] J. B. Xia, *Phys. Rev. B* **43**, 9856 (1991).
- [14] G. Fishman, *Phys. Rev. B* **52**, 11132 (1995).
- [15] J. Los, A. Fasolino, and A. Catellani, *Phys. Rev. B* **53**, 4630 (1996)
- [16] W.-H. Seo and J. F. Donegan, *Phys. Rev. B* **68**, 075318 (2003)
- [17] L. R. Ram-Mohan, K. H. Yoo, and R. L. Aggarwal, *Phys. Rev. B* **38**, 6151 (1988)
- [18] T. B. Bahder, *Phys. Rev. B* **45**, 1629 (1992); **41**, 11992 (1990)
- [19] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, "Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys," J. Appl. Phys., vol. 89, pp. 5815–5875, 2001
- [20] Roland Winkler , "Spin-Orbital Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and hole System", Springer ,pp.69-79 (2003)
- [21] Peter Y. Yu , Manuel Cardona , "*Fundamentals of Semiconductors*", 3rd Ed. , Springer , pp. 107-158 (2001)
- [22] P. O. Löwdin, *J. Chem. Phys.* **19**, 1396 (1951)
- [23] J.-M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **57**, 6493 (1998).

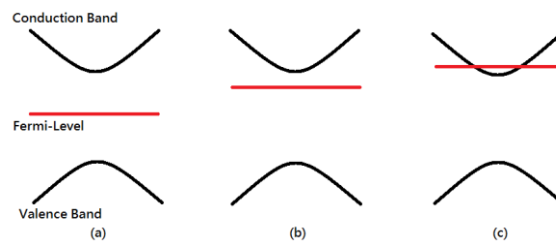
附錄

附錄 A、半導體塊材的載子遷移率計算

載子遷移率(carrier mobility)是半導體中一項重要的參數，因為他描述了粒子受到電場作用時可以移動的難易程度。於一般教科書中，推導載子遷移率過程往往討論本質(Intrinsic)半導體或輕度摻雜的情況，這是因為本質半導體或輕度摻雜的費米能階(Fermi-Level E_F)遠低於導電帶底部，因此我們可將費米-狄拉克分佈(Fermi-Dirac distribution) 近似為馬克斯威-波茲曼分佈(Maxwell-Boltzmann distribution) 如(A.1)式。

$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{(E - E_F)}{kT}\right]} \approx \exp\left[-\frac{(E - E_F)}{kT}\right] \quad (\text{A.1})$$

在此我們先分別對重度摻雜做一定義，對重摻雜半導體中，其摻雜物與半導體原子濃度比約為千分之一，而對半導體原子濃度約為 $10^{22} \sim 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ (矽約為 $5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ，InAs 約為 $2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$)，由此推算一般積體電路製程摻雜濃度約在 $10^{13} \text{ cm}^{-3} \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 之間，由圖 A.1 可看出輕度與重度摻雜費米能階的變化情況。



圖A.1 費米能階位置與濃度關係示意圖

(a)本質半導體 (b)輕度摻雜 n 型半導體 (c)重度摻雜 n 型半導體

當半導體重度摻雜時，由圖 A.1 可看出費米能階深入於能帶內，導電帶底部量子態以被許多電子佔據，而由半導體退化成導體，馬克斯威-波茲曼分佈的近似不再適用，故在本論文中我們將考慮以費米-狄拉克分佈來計算摻雜濃度較高時的載子遷移率。

首先我們先利用簡單拋物線能帶 $E(\vec{K}) = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ 推導出載子遷移率的簡單型式如(A.1)式

$$\mu = e \frac{\langle \tau \rangle}{m^*} \quad (\text{A.1})$$

式中 $\langle \tau \rangle$ 為載子與聲子碰撞的散射時間(Electron-Phonon Scattering Time)，在本論文中我們假定為常數 $\langle \tau \rangle \approx 1(\text{ps})$ ，由上式我們可看出載子遷移率與有效質量成反比關係，有效質量的計算如(A.2)式。

$$\frac{1}{m_i^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 E(\vec{K})}{\partial k_i^2} \right|_{\vec{K}=0} \quad (\text{A.2})$$

i 表示其方向。

而實際的能帶在動量空間中雖並非完美拋物線型，但是當雜質的摻雜濃度在 $10^{16} \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (一般元件所參雜的濃度)時，其對率移率有所貢獻的載子的有效質量隨著應變的變化，與 Γ 點有效質量隨應變的變化趨勢類似，因此以 Γ 點有效質量為一指標來討論遷移率的變化。

首先，介紹摻雜濃度與費米能量的關係，費米能量 E_F 與摻雜 n 型雜質後的載子濃度 n_e 的關係式如(A.1)

$$n_e(E_F) = \frac{N(E_F)}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{all } k \text{ space}} \frac{1}{\exp\left(\frac{E(\vec{k}) - E_F}{k_B T}\right) + 1} d^3\vec{k} \quad (\text{A.1})$$

未考慮應變作用時 InAs 電子於 Γ 點的有效質量 m^* 為 $0.026m_0$ ，當摻雜濃度為 10^{16} cm^{-3} 時， E_F 約落於導電帶底部 E_C ，而摻雜濃度為 10^{18} cm^{-3} 時費米能量 E_F 約為 $E_C + 10 \text{ meV}$ 。再來我們考慮電洞的摻雜濃度，費米能量 E_F 與摻雜 p 型雜質後的載子濃度 n_h 的關係式如(A.2)

$$n_h(E_F) = \frac{N(E_F)}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{all } k \text{ space}} \frac{1}{\exp\left(\frac{E_F - E(\vec{k})}{k_B T}\right) + 1} d^3\vec{k} \quad (\text{A.2})$$

InAs 電洞於 Γ 點的有效質量 m^* 為 $0.635m_0$ ，當摻雜濃度為 10^{16} cm^{-3} 時， E_F 約落於價電帶頂部 E_V ，而摻雜濃度為 10^{18} cm^{-3} 時費米能量 E_F 約為 $E_V - 1 \text{ meV}$ 。

半導體中的載子傳輸性質基本上會與其各方向的平均傳輸速度 $\langle \bar{v}_e \rangle$ 有關，下式為某一物理量 Q 的期望值 $\langle Q \rangle$ 的定義：

$$\langle Q \rangle \equiv \frac{1}{n} \int_{\text{all } k \text{ space}} Q_k \cdot f_{k,T} d\vec{k} \quad (\text{A.3})$$

Q 算符為 k 的函數， n 為單位體積內的狀態數 $n \equiv \frac{N}{V}$ ，將單位體積內所有的狀態對應的存在機率 $f_{k,T}$ (其形式可能受外在環境影響，而不再為平衡態的分佈函數 $f_{k,T}^0$)，並乘上對應的物理量 Q_k 並對整個 K 空間積分，在除去單位體積內的狀態數 n ，即平均物理量的定義。

加入電場 $\bar{\varepsilon}$ 之後，系統將由平衡態改變至非平衡態，載子平衡態分佈機率函數 $f_{\bar{k},T}^0$ 受外場微擾改變為 $f_{\bar{k},T}$ ，透過 Boltzmann equation 可以得到兩者間的關係式為：

$$f_{\bar{k},T} = f_{\bar{k},T}^0 + \Delta f_{\bar{k},T} = f_{\bar{k},T}^0 + e\tau_{\bar{k}}\bar{\varepsilon} \cdot \bar{v}_e(\bar{k}) \frac{\partial f_{\bar{k},T}^0}{\partial E} \quad (\text{A.4})$$

e 為電子電量， $\bar{\varepsilon}$ 為電場， $\bar{v}_e(\bar{k})$ 為電子速度即能帶的微分 ($\bar{v}_e = \hbar \nabla_{\bar{k}} E(\bar{k})$)， $\tau(\bar{k})$ 表示狀態為 \bar{k} 的載子與聲子碰撞的散射時間。再將(A.3)及(A.4)代入下式電流密度(A.5)式：

$$\bar{J}_e = -ne \langle \bar{v}_e \rangle \quad (\text{A.5})$$

而電流密度將改寫成(A.6)式

$$\bar{J}_e = -\frac{e}{(2\pi)^3} \int_{\text{all } \bar{k} \text{ space}} \bar{v}_e(\bar{k}) \cdot (f_{\bar{k},T}^0 + e\tau_{\bar{k}}\bar{\varepsilon} \cdot \bar{v}_e(\bar{k}) \frac{\partial f_{\bar{k},T}^0}{\partial E}) \cdot d\bar{k} \quad (\text{A.6})$$

塊材能帶中速度 $\bar{v}_e(\bar{k})$ 為奇函數 $\bar{v}_e(-\bar{k}) = -\bar{v}_e(\bar{k})$ ，能帶為偶函數 $E(-\bar{k}) = E(\bar{k})$ ，分佈積率函數代入能帶後亦為偶函數 $f_{-\bar{k},T}^0 = f_{\bar{k},T}^0$ ，便可改寫為：

$$\bar{J}_e = -\frac{e^2 \bar{\varepsilon}}{(2\pi)^3} \int_{\text{all } \bar{k} \text{ space}} \tau_{\bar{k}} \cdot \bar{v}_e(\bar{k}) \cdot \bar{v}_e(\bar{k}) \frac{\partial f_{\bar{k},T}^0}{\partial E} \cdot d\bar{k} \quad (\text{A.7})$$

即加入電場 $\bar{\varepsilon}$ 時的電流密度 \bar{J}_e (current density) (不考慮自旋性質)

式中 $\frac{\partial f_{\bar{k},T}^0}{\partial E}$ 帶入費米-迪拉克分佈函數 $f_{\bar{k},T}^0 = \frac{1}{\exp(\frac{E(\bar{k}) - E_F}{K_B T}) + 1}$ 為：

$$\frac{\partial f_{\bar{k},T}^0}{\partial E} = -\frac{1}{K_B T} f_{\bar{k},T}^0 (1 - f_{\bar{k},T}^0) \quad (\text{A.8})$$

因此(A.7)可改寫為：

$$\vec{J}_e = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{K_B T} \int_{\text{all } k \text{ space}} \vec{v}_e(\vec{k}) \cdot \tau_{\vec{k}} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{v}_e \cdot f_{k,T}^0 (1 - f_{k,T}^0) \cdot d\vec{k} \quad (\text{A.9})$$

電流密度也可以表示成：

$$\vec{J}_e = \sigma_e \vec{\varepsilon} = ne\mu \vec{\varepsilon} \quad (\text{A.10})$$

σ_e 為電導率(conductivity)， μ 為載子遷移率(carrier mobility)。

從上式推出兩者之間的關係為：

$$\mu = \frac{\sigma_e}{ne} \quad (\text{A.11})$$

而考慮單一分量的電流密度之形式則為：

$$J_i = \sum_j \sigma_{ij} \varepsilon_j \quad (\text{A.12})$$

電導率 σ_{ij} 的張量元意義為j方向電場作用後造成多少的i方向的電流密度，可利用(A.9)及(A.12)得到：

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{K_B T} \frac{e^2}{(2\pi)^3} \int_{\text{all } k \text{ space}} (\vec{v}_e)_i \cdot (\vec{v}_e)_j \cdot \tau_{\vec{k}} \cdot f_{k,T}^0 (1 - f_{k,T}^0) \cdot d\vec{k} \quad (\text{A.13})$$

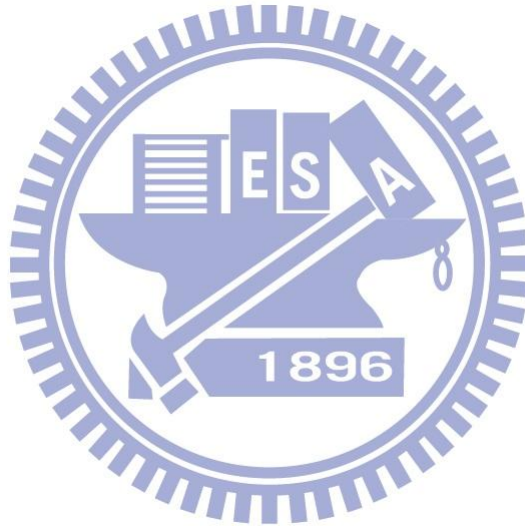
而利用(A.11)得到遷移率 μ_{ij} 的張量元

$$\mu_{ij} = \frac{e}{K_B T} \frac{\int_{\text{all } k \text{ space}} (\vec{v}_e)_i \cdot (\vec{v}_e)_j \cdot \tau_{\vec{k}} \cdot f_{k,T}^0 (1 - f_{k,T}^0) \cdot d\vec{k}}{\int_{\text{all } k \text{ space}} f_{k,T}^0 \cdot d\vec{k}} \quad (\text{A.14})$$

且一般來說考慮 $i = j$ 的情況:

$$\mu_{ii} = \frac{e}{K_B T} \frac{\int_{\text{all } k \text{ space}} (\bar{v}_e)_i^2 \cdot \tau_{\bar{k}} \cdot f_{k,T}^0 (1 - f_{k,T}^0) \cdot d\bar{k}}{\int_{\text{all } k \text{ space}} f_{k,T}^0 \cdot d\bar{k}} \quad (\text{A.15})$$

在本論文的計算中，將討論 $\tau_{\bar{k}}$ 假設為常數(1 ps)的情況，並且針對不同的狀態[溫度，摻雜載子濃度(費米能階的位置)]來討論應變對於塊材的傳輸性質的影響。



附錄 B、Slater Orbital

載子遷移率與有效質量成反比，故能從施加應變後，有效質量變化的約略估計，來看出載子遷移率的增益情況，但我們也能從微觀的電子雲分佈方向，來看出施加應變時，其電子雲變化情況。

我們利用 STOs(Slater-Type Orbitals)來描述基底的原子軌道，

$$\varphi_{nlm}(\vec{r}) = N \cdot r^{n^*-1} \cdot e^{\left(\frac{Z-s}{n^*} \cdot r\right)} \cdot Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (\text{B.1})$$

上式 N 為歸一化常數， n^* 為真實主量子數(real principle quantum number)，下為主量子數與真實主量子數對照表 B.1，

表 B.1 主量子數與真實主量子數對照表

n	1	2	3	4	5	6
n^*	1	2	3	3.7	4	4.2

而 STOs 不同於氫原子模型，在多電子的情況下，核電荷需考慮因電子屏蔽影響，修正如上式中 Z-s 項即等效核電荷(effective nuclear charge)，其修正規則請參照[12]，角度項為球諧函數(Spherical Harmonic)，其型式如下

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (i)^{m+|m|} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (\text{B.2})$$

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x) \quad (\text{B.3})$$

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l \quad (\text{B.4})$$

接下來，我們利用(B.1)式來建構出所需的原子軌道

表 B.2 S 與 P 軌道 Slater Orbital 型式

軌道(Orbital)	角動量(l)	Slater Orbital
S	$l=0$	$\varphi_s(\vec{r}) = N \cdot r^{n^*-1} \cdot e^{\left(\frac{Z-s}{n^*} \cdot r\right)} \cdot Y_{00}$
P _x	$l=1$	$\varphi_{p_x}(\vec{r}) = N \cdot r^{n^*-1} \cdot e^{\left(\frac{Z-s}{n^*} \cdot r\right)} \cdot \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(Y_{11} - Y_{1-1})$
P _y	$l=1$	$\varphi_{p_y}(\vec{r}) = N \cdot r^{n^*-1} \cdot e^{\left(\frac{Z-s}{n^*} \cdot r\right)} \cdot \left(\frac{i}{\sqrt{2}}\right)(Y_{11} + Y_{1-1})$
P _z	$l=1$	$\varphi_{p_z}(\vec{r}) = N \cdot r^{n^*-1} \cdot e^{\left(\frac{Z-s}{n^*} \cdot r\right)} \cdot Y_{10}$

由於 k.p 模型並沒有考慮到原子層面，III-V 族半導體閃鋅結構的一單位晶胞將退化為兩個原子(陰離子(anion)與陽離子(cation))，所以我們將利用緊束縛法(Tight-binding model)的 sp^3 原子軌域基底，並考慮自旋軌道交互作用($|\varphi_s \uparrow\rangle, |\varphi_s \downarrow\rangle, |\varphi_{p_x} \uparrow\rangle, |\varphi_{p_x} \downarrow\rangle, |\varphi_{p_y} \uparrow\rangle, |\varphi_{p_y} \downarrow\rangle, |\varphi_{p_z} \uparrow\rangle, |\varphi_{p_z} \downarrow\rangle$)，來計算出 k.p 模型陰離子與陽離子的比例。

首先我們計算緊束縛法於 Γ 點的本徵值與本徵態，再和 k.p 模型的基底表 2.1.1 與之對應。如同下(B.5)~(B.12)式，可使得 k.p 模型的基底分成陰離子與陽離子部份，而前面的係數即是陰離子與陽離子的比例。

$$|S \uparrow\rangle = -\sqrt{1-(\alpha_s^{AB})^2} \cdot |S^a \uparrow\rangle + \alpha_s^{AB} \cdot |S^c \uparrow\rangle \quad (\text{B.5})$$

$$|S \downarrow\rangle = -\sqrt{1-(\alpha_s^{AB})^2} \cdot |S^a \downarrow\rangle + \alpha_s^{AB} \cdot |S^c \downarrow\rangle \quad (\text{B.6})$$

$$|HH \uparrow\rangle = -\sqrt{1-(\alpha_p^B)^2} \cdot |HH^a \uparrow\rangle + \alpha_p^B \cdot |HH^c \uparrow\rangle \quad (\text{B.7})$$

$$|LH \uparrow\rangle = -\sqrt{1-(\alpha_p^B)^2} \cdot |LH^a \uparrow\rangle + \alpha_p^B \cdot |LH^c \uparrow\rangle \quad (\text{B.8})$$

$$|LH \downarrow\rangle = -\sqrt{1-(\alpha_p^B)^2} \cdot |LH^a \downarrow\rangle + \alpha_p^B \cdot |LH^c \downarrow\rangle \quad (\text{B.9})$$

$$|HH \downarrow\rangle = -\sqrt{1-(\alpha_p^B)^2} \cdot |HH^a \downarrow\rangle + \alpha_p^B \cdot |HH^c \downarrow\rangle \quad (\text{B.10})$$

$$|SO \uparrow\rangle = -\sqrt{1-(\alpha_{SO}^B)^2} \cdot |SO^a \uparrow\rangle + \alpha_{SO}^B \cdot |SO^c \uparrow\rangle \quad (\text{B.11})$$

$$|SO \downarrow\rangle = -\sqrt{1-(\alpha_{SO}^B)^2} \cdot |SO^a \downarrow\rangle + \alpha_{SO}^B \cdot |SO^c \downarrow\rangle \quad (\text{B.12})$$

上式 α_s^{AB} 、 α_p^B 、 α_{SO}^B 型式如 (B.13)~(B.15) 式

$$\alpha_s^{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{E_s^a - E_s^c}{\sqrt{(E_s^a - E_s^c)^2 + 4 \cdot V_{ss}^2}}} \quad (\text{B.13})$$

$$\alpha_p^B = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{E_s^a - E_s^c + \lambda_a - \lambda_c}{\sqrt{(E_s^a - E_s^c + \lambda_a - \lambda_c)^2 + 4 \cdot V_{xx}^2}}} \quad (\text{B.14})$$

$$\alpha_{SO}^B = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{E_s^a - E_s^c - 2\lambda_a + 2\lambda_c}{\sqrt{(E_s^a - E_s^c - 2\lambda_a + 2\lambda_c)^2 + 4 \cdot V_{xx}^2}}} \quad (\text{B.15})$$

式中皆為緊束縛法 sp^3 的參數[23]，現在我們由 InAs 只取其中 As 原子，也就是只取陰離子的基底出來看，可發現基底的組成與原 k.p 模型相似，其八能帶 $\bar{k} \cdot \bar{p}$ 模型的基底(陰離子)如下表

表 B.3 陰離子八能帶模型基底

分類	符號	原子對應的軌道形態
電子 Electron	$ S^a \uparrow\rangle$	$ \phi_s^a \uparrow\rangle$
	$ S^a \downarrow\rangle$	$ \phi_s^a \downarrow\rangle$
重電洞 Heavy hole	$ HH^a \uparrow\rangle$	$\frac{-1}{\sqrt{2}}(\phi_{p_x}^a \uparrow\rangle + i \phi_{p_y}^a \uparrow\rangle)$
	$ HH^a \downarrow\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{p_x}^a \downarrow\rangle - i \phi_{p_y}^a \downarrow\rangle)$
輕電洞 Light hole	$ LH^a \uparrow\rangle$	$\frac{-1}{\sqrt{6}}(\phi_{p_x}^a \downarrow\rangle + i \phi_{p_y}^a \downarrow\rangle - 2 \phi_{p_z}^a \uparrow\rangle)$
	$ LH^a \downarrow\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_{p_x}^a \uparrow\rangle - i \phi_{p_y}^a \uparrow\rangle + 2 \phi_{p_z}^a \downarrow\rangle)$
裂帶電洞 Split off	$ SO^a \uparrow\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(\phi_{p_x}^a \downarrow\rangle + i \phi_{p_y}^a \downarrow\rangle + \phi_{p_z}^a \uparrow\rangle)$
	$ SO^a \downarrow\rangle$	$\frac{i}{\sqrt{3}}(\phi_{p_x}^a \uparrow\rangle - i \phi_{p_y}^a \uparrow\rangle - \phi_{p_z}^a \downarrow\rangle)$

而藉由其一原子於真實空間中的原子軌道分佈，來探討半導體的傳輸性質。

附錄 C、晶胞中微觀電荷密度的分佈

應變作用能影響元件的傳輸性質，而當晶體施加應變後，將破壞單位晶胞的對稱性，使得沿各方向傳輸性質的物理量不再與未施加應變時相等，如載子遷移率於不同方向的增益情況大不相同，本章節將利用 Slater Orbital 的原子軌道模型，來描述電子雲的分佈情況，提供一直觀的圖像來了解應變作用造成的結構變化是如何影響半導體的傳輸性質。

首先我們將計算出的特徵向量與基底作線性疊加成系統的波函數，如(C.1)式

$$|\psi\rangle = \sum_i^n c_i |\varphi_i\rangle \quad (\text{C.1})$$

c 為特徵向量， n 為有多少基底對波函數做展開，再本論文中為八能帶模型。再來將我們系統的波函數投影在實空間座標上，如(C.2)式。

$$\psi(r) = \sum_i^n c_i \varphi_i(r) \quad (\text{C.2})$$

其 $\varphi_i(r)$ 我們使用 Slater Orbital 來描述我們的基底函數(basis function)，再來將系統的波函數絕對值平方，即是晶胞中微觀電荷密度的分佈，如(C.3)式。

$$D(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 \quad (\text{C.2})$$

而介由晶胞中微觀電荷密度的分佈情形，簡單的分析出載子遷移率因應變作用所造成的增益情況。

附錄 D、Löwdin 微擾理論解析詳解

◆ 施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle$ -2% (Compressive)

當施加 2% 壓縮應變時，電子的能量變化由(2.4.20)式得

$$E_c = 0.519(eV) \quad (D.1)$$

重電洞能量變化由(2.4.15)式得

$$E_{HH} = 0.034(eV) \quad (D.2)$$

可以得知施加 2% 壓縮應變時，重電洞能量上升 0.034eV，再經由

(2.4.16)式，判別輕電洞與重電洞的特徵向量如下式。

$$\{\varphi_{HH}\} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -i \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix}, \quad \{\varphi_{HH}\} = \begin{bmatrix} 0 \\ i \\ 2 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix} \quad (D.3)$$

而由(2.4.18)式得知輕電洞能量變化為

$$E_{LH} = -0.074(eV) \quad (D.4)$$

得知施加 2% 壓縮應變時，輕電洞能量下降 0.074eV，再經由(2.4.19)

式，判別輕電洞與重電洞的特徵向量如下式。

$$\{\varphi_{LH}\} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ i \\ 2 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix}, \quad \{\varphi_{LH}\} = \begin{bmatrix} -i \\ 2 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix} \quad (D.5)$$

由上面所計算的結果，施加 2% 壓縮應變時，其能隙大小變化由未施加應變時的 0.417eV 變為 0.485eV，能隙增大，而 Top Band 為重電洞為主導。

◆ 施加 Uniaxial Strain $\langle 110 \rangle +2\%$ (Tensile)

再來我們討論當施加 2% 拉長應變時，能帶結構上的變化，電子的能量變化由(2.4.20)式得

$$E_c = 0.315(eV) \quad (D.6)$$

重電洞能量變化由(2.4.15)式得

$$E_{HH} = -0.034(eV) \quad (D.7)$$

可以得知施加 2% 拉長應變時，重電洞能量下降 0.034eV，再經由(2.4.16)式，判別輕電洞與重電洞的特徵向量如下式。

$$\{\varphi_{HH}\} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -i \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix}, \quad \{\varphi_{HH}\} = \begin{bmatrix} 0 \\ i \\ 2 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix} \quad (D.8)$$

而由(2.4.18)式得知輕電洞能量變化為

$$E_{LH} = 0.074(eV) \quad (D.9)$$

得知施加 2% 拉長應變時，輕電洞能量上升 0.074eV，再經由(2.4.19)式，判別輕電洞與重電洞的特徵向量如下式。

$$\{\varphi_{LH}\} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ i \\ 2 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix}, \quad \{\varphi_{LH}\} = \begin{bmatrix} -i \\ 2 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} |HH \uparrow\rangle \\ |LH \uparrow\rangle \\ |LH \downarrow\rangle \\ |HH \downarrow\rangle \end{matrix} \quad (D.10)$$

由上面所計算的結果，施加 2% 拉長應變時，其能隙大小變化由未施加應變時的 0.417eV 變為 0.241eV，能隙變小，而 Top Band 為輕電洞為主導。