

國立交通大學

電子物理學系

碩士論文

自組式量子點在史塔克效應下的光學異向性

**Stark effects in optical anisotropies of self-assembled quantum
dots**

研究生：張語宸

指導教授：鄭舜仁 教授

中華民國一 百 年 七 月

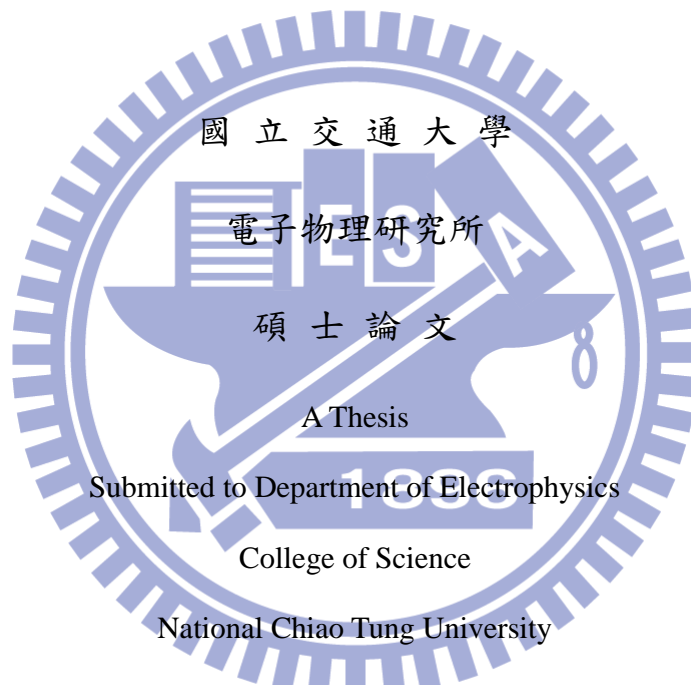
自組式量子點在史塔克效應下的光學異向性
**Stark effects in optical anisotropies of self-assembled quantum
dots**

研究生：張語宸

Student : Yu-Chen Chang

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

2011

HsinChu, Taiwan, Republic of China

中華民國一百年七月

自組式量子點在史塔克效應下的光學異向性

學生：張語宸

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

在本論文中使用 $k \cdot p$ 六能帶理論計算InAs/GaAs 自組式量子點在外加電場下的電子結構與光學性質。首先使用有限差分法計算量子盒、金字塔與截角金字塔形狀量子點內單一粒子(導電帶的電子與價電帶的電洞)的電子結構。而量子點內外的應變分布則使用有限元素法 $Comsol\ multiphysics^{\circledR}$ 。費米黃金定律與電子結構的計算可得到量子點中激子所產生的光子偏振。應變的計算發現垂直方向的應變主導重電洞侷限位能，平行方向的應變則主導輕電洞侷限位能的變化。比較量子盒與截角金字塔的形狀發現金字塔狹窄的上半部區域為較大的體應變分布(較小的雙軸應變分布)，導致截角金字塔尖端效應越強則輕重電洞耦合越強。所以較高的截角金字塔量子點，輕電洞成分較多，則導致偏振越大。此外，外加電場於量子點的成長方向導致基態的輕電洞成分改變。研究結果發現，在較高的量子點外加電場200 KeV/cm，史塔克效應大約增加偏振5%。

Stark effects in optical anisotropies of self-assembled quantum dots

Student : Yu-Chen Chang

Advisor : Shun-Jen Cheng

Department of Electrophysics

National Chiao Tung University

ABSTRACT

This thesis theoretically investigates the electronic structures and optical properties of InAs/GaAs self-assembled quantum dots under external electric fields by using six-band Luttinger-Kohn $k \cdot p$ theory. First, the single-particle (conduction electron or valence hole) spectra of box, pyramid, and truncated-pyramid shaped quantum dots are calculated by using finite difference method. The strain distributions in and out of dots are computed by using finite element software package *Comsol multiphysics*®. Based on the single particle spectra, optical polarization degree of the ground states of an exciton photo-generated in a quantum dot is calculated by using Fermi's golden rule. The strain calculations show that the effective confining potential for heavy-hole in a strained dot is governed by out-of-plane strain while the one for light-hole by in-plane strain. The theoretical results show that, compared with box and truncated-pyramid shaped dots, heavy- and light-hole coupling is significantly increased in a pyramid-shaped dot because of larger hydrostatic strain (smaller bi-axial strain) in the narrow upper region of the nano-pyramid. With more light-hole component, larger optical polarization degree is observed for high pyramid-shaped dots. Furthermore, the light-hole component in a hole ground state can be significantly changed by applying an external electric field along the growth-axis. As a result, it is found that the stark effect could increase the polarization degree of a high pyramid dot by 5% by applying an electric field up to 200 KeV/cm.

致謝

感謝鄭舜仁老師兩年來的細心指導，使我在固態物理的領域有更深入的了解，以及追求物理世界研究的態度。感謝口試委員周武清老師、張文豪老師與林炯源老師提出的寶貴意見。

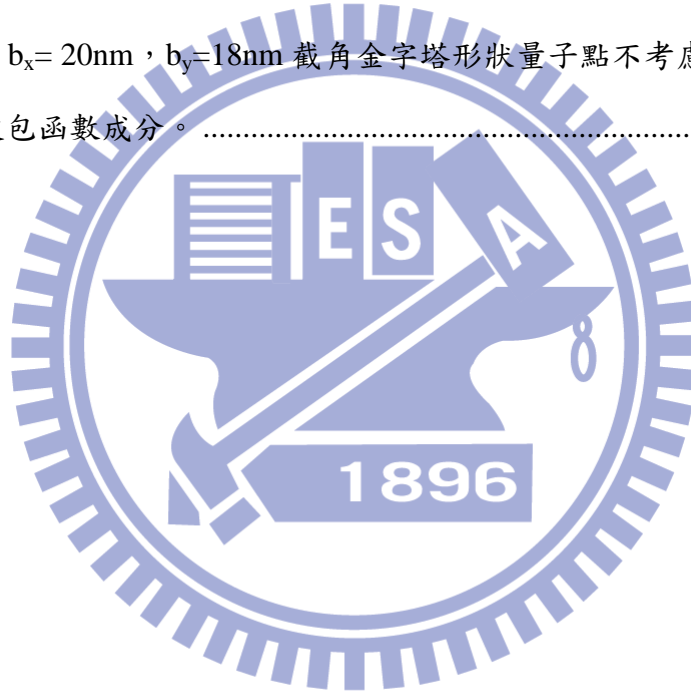
感謝我家庭中的父母親與弟弟的支持，家人的支持讓我無後顧之憂的完成學業。以及婉靈在我碩士兩年生活的耐心陪伴與支持，也感謝研究室博士班學長盧書楷與廖禹淮對我論文研究的建議與指導，使我在課業與生活上得到許多幫助。感謝陳彥廷學長、陳勇達學長、趙虔震學長、徐燁學長、許克銘學長與尤文廷學長的帶領，使我在碩士研究上獲益良多。感謝同屆的智豪、建智與丞偉工作上的討論與幫助；力瑋、以理與書瑜在課業上的討論。也要感謝學弟妹，智瑋、書睿、佩儀與家祥平常生活上的陪伴，使我的碩士生活多采多姿。感謝我的室友昆毅、國榮與小魚在宿舍生活的陪伴，以及清大交大與高中的同學讓我在新竹能有生活上的幫助。感謝大學的學長文宗使我踏入物理的領域，大學同學中南與彥彬在研究所考試的討論與陪伴，師大機電系壘與交大電物系棒的學長與學弟在我課業之餘能有運動的環境，最後感謝所有的朋友與曾經幫助我的人，祝福你們一帆風順。

目錄

摘要	i
致謝	iii
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	4
第二章、自組式量子點的電子結構	5
2.1、量子點中電子與電洞的電子結構	5
2.2、量子點偏振光譜	7
第三章、量子點的電子結構與光學異相性	17
3.1、輕重電洞與偏振的關係	17
3.2、應變效應對輕重電洞能量的影響	24
3.3、輕重電洞耦合與光學異向性	35
第四章、結果與討論	46
4.1、量子點形狀對偏振光譜的影響	46
4.2、量子點外加電場對偏振光譜的影響	53
第五章、結論	89
參考文獻	90
附錄 A	91
附錄 B	96
附錄 C	98
附錄 D	100

表目錄

表 2.1.1、式子(2.1.4)中的矩陣元素	6
表 2.2.1、Bloch function 的定義及符號[5].....	11
表 2.2.2、 $\vec{e} = \hat{x}\sin\theta\cos\phi + \hat{y}\sin\theta\sin\phi + \hat{z}\cos\theta$	12
表 2.2.3、令 $\theta = \pi/2$ ，則偏振為水平方向 $\vec{e} \parallel \hat{x}, \hat{y}$ 。 $\vec{e} = \hat{x}\cos\phi + \hat{y}\sin\phi$ 。	13
表 2.2.4、令 $\theta = 0$ ，則偏振為垂直方向 $\vec{e} \parallel \hat{z}$ 。 $\vec{e} = \hat{z}$ 。	13
表 3.3.1、輕重電洞在各方向的等效質量	37
表 3.3.2、 $h=5\text{nm}$ ， $b_x=20\text{nm}$ ， $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點不考慮輕重電洞耦合時，各態所對應的波包函數成分。	39



圖目錄

圖 1.2.1、量子點的形狀，(a)[1 $\bar{1}0$]方向。(b)[110]方向。	3
圖 1.2.2、受到應變效應的金字塔形狀量子點位能。(a)底部大小 17nm，高度 3.57nm。 (b)底部大小 17nm，高度 8.5nm。	3
圖 2.2.1、位置向量分解示意圖	8
圖 3.1.1、電子躍遷至價電帶空軌域示意圖。(a)電子自旋為 1/2 的躍遷。(b) 電子自旋為 -1/2 的躍遷。	18
圖 3.1.2、偏振強度的定義示意圖，此圖為高度 5nm、長 20nm、寬 18nm 的 XY 平面發 光強度與角度關係圖	19
圖 3.1.3、 $\xi=0.9$ ， $h=5(\text{nm})$ 的截角金字塔形狀量子點中，電子與輕重電洞波包函數的 重疊率。	20
圖 3.1.4、量子盒形狀示意圖	21
圖 3.2.1、截角金字塔形狀量子點示意圖	24
圖 3.2.2、塊材外加雙軸應變的示意圖。(a)XY 方向壓縮。(b)XY 方向膨脹.....	27
圖 3.2.3、InAs 的塊材在四能帶模型外加雙軸應變，電子與輕重電洞在 Γ 點的能量變化。	27
圖 3.2.4、InAs 的塊材在六能帶模型外加雙軸應變，輕重電洞在 Γ 點的能量變化。	28
圖 3.2.5、量子盒內外加理想的雙軸應變	29
圖 3.2.6、 $b_x=20(\text{nm})$ ， $b_y=18(\text{nm})$ ， $h=5(\text{nm})$ 的量子盒形狀量子點外加雙軸壓縮應變 $\varepsilon_{\parallel}=-7\%$ ，於量子點內部的輕重電洞位能。	29
圖 3.2.7、 $b_x=20(\text{nm})$ ， $b_y=18(\text{nm})$ ， $h=5(\text{nm})$ 的量子盒形狀量子點。	30
圖 3.2.8、 $b_x=20(\text{nm})$ ， $b_y=18(\text{nm})$ ， $h=5(\text{nm})$ 的量子盒形狀量子點的輕重電洞位能。 ..	30
圖 3.2.9、高 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點考慮應變效應對	

電子與輕重電洞位能的變化。	31
圖 3.2.10、截角金字塔與量子盒形狀量子點的形變示意圖	32
圖 3.2.11、 $b_x = 20$ (nm), $b_y = 18$ (nm), $h = 5$ (nm) 的量子點應變。(a)截角金字塔。(b)量子盒。 量子點輕重電洞的位能。	32
圖 3.2.12、截角金字塔形狀量子點高度變高的形變示意圖	33
圖 3.2.13、 $b_x = 20$ (nm), $b_y = 18$ (nm), $h = 7$ (nm) 的量子點。	34
圖 3.3.1、高 $h = 5$ nm, 長 $b_x = 20$ nm, 寬 $b_y = 18$ nm 截角金字塔形狀量子點的電子位能與能階。	35
圖 3.3.2、高 $h = 5$ nm, 長 $b_x = 20$ nm, 寬 $b_y = 18$ nm 截角金字塔形狀量子點的電子基態波函數。(a) $z = 0$ (nm) 的 XY 平面。(b) $y = 0$ (nm) 的 XZ 平面。	35
圖 3.3.3、量子盒形狀示意圖	37
圖 3.3.4、 $h = 5$ nm, $b_x = 20$ nm, $b_y = 18$ nm 截角金字塔形狀量子點不考慮輕重電洞耦合的位能與能階。(a)輕重電洞的位能。(b)輕重電洞的能階, 基態波函數為 100% 的重電洞, 其中 Δ_{lh} 為輕重電洞基態能量差。	38
圖 3.3.5、高度 $h = 5$ nm, $\xi = 0.9$ 的截角金字塔的量子點。量子點變大輕重電洞能量差 Δ_{lh} 隨之變大。	39
圖 3.3.6、高 $h = 5$ nm, 長 $b_x = 20$ nm, 寬 $b_y = 18$ nm 截角金字塔形狀量子點不考慮輕重電洞耦合的基態波函數, 成分為 100% 的重電洞。(a) $z = 0$ (nm) 的 XY 平面波函數。(b) $y = 0$ (nm) 的 XZ 平面波函數。	40
圖 3.3.7、此為不考慮輕重電洞耦合之高度 5 nm 截角金字塔的量子點模擬結果, 橫座標為量子點長軸長度。(a)為輕重電洞所占成分。(b)電子基態躍遷至電洞空軌域基態的偏振。	41
圖 3.3.8、高 $h = 5$ nm, 長 $b_x = 20$ nm, 寬 $b_y = 18$ nm 截角金字塔形狀量子點考慮輕重電洞耦合的輕重電洞位能與能階。	42

圖 3.3.9、高 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點考慮輕重電洞耦合的基態波函數。基態波函數均為重電洞為主要成分，並混了少量的輕電洞。(a) $z=0(\text{nm})$ 的 XY 平面波函數。(b) $y=0(\text{nm})$ 的 XZ 平面波函數。.....	43
圖 3.3.10、 $\xi=0.9$ 、高度 $h=5\text{nm}$ ，改變大小的截角金字塔形狀量子點模擬結果。量子點變大， Δ_{lh} 變大，導致輕電洞成分下降，輕電洞與電子的波函數重疊比例下降，此效應導致偏振變小。(a)不考慮輕重電洞耦合的輕重電洞能量差 Δ_{lh} 。考慮輕重電洞耦合，(b) 自旋(-1/2)輕電洞成分。(c) 電子基態躍遷至電洞空軌域基態的偏振。(d)自旋(-1/2)輕電洞與電子波函數重疊比例。.....	44
圖 3.3.11、高度 $h=5\text{nm}$ 的截角金字塔的發光強度。(a)長 $b_x=20\text{nm}$ 、寬 $b_y=18\text{nm}$ 。(b)長 $b_x=12\text{nm}$ 、寬 $b_y=10.8\text{nm}$ 。.....	44
圖 4.1.1、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點的電子位能與能階。(a)高度 $h=3\text{nm}$ 。(b)高度 $h=7\text{nm}$ 。.....	46
圖 4.1.2、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點的電子基態波函數。高度 $h=3\text{nm}$ 量子點，(a) $z=0(\text{nm})$ 的 XY 平面波函數。(b) $y=0(\text{nm})$ 的 XZ 平面波函數。高度 7nm 量子點 (c) $z=0(\text{nm})$ 的 XY 平面波函數。(d) $y=0(\text{nm})$ 的 XZ 平面波函數。.....	47
圖 4.1.3、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點的輕重電洞位能與能階。(a) 高度 $h=3\text{nm}$ 。(b)高度 $h=7\text{nm}$ 。.....	47
圖 4.1.4、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ ，高 $h=3\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點的電洞空軌域基態波函數。.....	48
圖 4.1.5、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ ，高 $h=7\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點的電洞空軌域基態波函數。.....	49
圖 4.1.6、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點的輕重電洞位能與 Δ_{lh} 變化示意圖。高度增加造成重電洞位能底部逐漸下降，使得 Δ_{lh} 越來越小。.....	50
圖 4.1.7、 $b_x=20\text{nm}$ 、 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔形狀量子點基態輕重電洞 Z 方向波函數。	

(a) $h = 3\text{nm}$ 。 (b) $h = 7\text{nm}$	51
圖 4.1.8、長 $b_x = 20\text{nm}$ ，寬 $b_y = 18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點隨高度變化的輕重電洞能量差與基態波函數輕電洞成分。(a)不考慮輕重電洞耦合的輕重電洞能量。(b)基態波函數自旋(-1/2)的輕電洞成分。(c)隨高度變化的偏振強度。(d)高度 $h = 8\text{nm}$ 量子點的發光強度。(e)高度 $h = 3\text{nm}$ 的發光強度。	52
圖 4.2.1、外加電場的量子點系統，量子點內為 InAs，外部為 GaAs，更外層則有 AlGaAs。	53
資料來源：NATURE PHYSICS, VOL6, DECEMBER 2010, p947.[4]	53
圖 4.2.2、外加電場下，電子與輕重電洞位能變化示意圖。	53
圖 4.2.3、 $b_x = 20\text{nm}$ ，寬 $b_y = 18\text{nm}$ 、高 $h = 8\text{nm}$ 量子盒的電子位能。(a)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。	54
圖 4.2.4、 $b_x = 20\text{nm}$ ，寬 $b_y = 18\text{nm}$ 、高 $h = 8\text{nm}$ 量子盒的電子波函數。(a)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。	54
圖 4.2.5、 $b_x = 20\text{nm}$ ，寬 $b_y = 18\text{nm}$ 、高 $h = 8\text{nm}$ 量子盒的輕重電洞位能。(a)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。	55
圖 4.2.6、 $b_x = 20\text{nm}$ ，寬 $b_y = 18\text{nm}$ 、高 $h = 8\text{nm}$ 量子盒的輕重電洞波函數。(a)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。	56
圖 4.2.7、 $b_x = 20\text{nm}$ ，寬 $b_y = 18\text{nm}$ 、高 $h = 8\text{nm}$ 量子盒的電子與輕重電洞波函數重疊圖。(a)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。	56
圖 4.2.8、長 $b_x = 20\text{nm}$ ，寬 $b_y = 18\text{nm}$ 、高 $h = 8\text{nm}$ 量子盒。(a)輕重電洞基態能量。(b)基態波函數自旋(-1/2)輕電洞所占的成分。(c)基態波函數中，電子與自旋(3/2)重電洞、自旋(-1/2)輕電洞的波函數重疊比例。(d)基態波函數中，電子與自旋(-1/2)輕電洞的波函數重疊比例。(e)發光強度。(f)偏振大小。(g)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 的發光強度。(f)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$ 的發光強度。	58
圖 4.2.9、長 $b_x = 20\text{nm}$ ，寬 $b_y = 18\text{nm}$ 、高 $h = 8\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子位能。(a)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。	59

圖 4.2.10、高度 8nm，長 20nm，寬 18nm 之截角金字塔量子點的電子基態波函數。(a) 電場強度 0(kV/cm)。(b) 電場強度 200(kV/cm)。	60
圖 4.2.11、高度 8nm，長 20nm，寬 18nm 之截角金字塔量子點的輕重電洞位能。(a)電場強度 0(kV/cm)。(b) 電場強度 200(kV/cm)。(c)電場強度為 -200(kV/cm)。	60
圖 4.2.12、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的基態波函數。(a)電場強度 0(kV/cm)。(b) 電場強度 200(kV/cm)。	61
圖 4.2.13、高度 8nm，長 20nm，寬 18nm 之截角金字塔量子點基態波函數輕重電洞基態波函數重疊圖。(a)自旋(3/2)重電洞波函數。(b)自旋(-1/2)輕電洞波函數。	62
圖 4.2.14、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電洞空軌域基態的能量受到電場影響的變化。	62
圖 4.2.15、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點外加電場下，輕重電洞能量與基態波函數輕電洞成分的關係。(a) 不考慮輕重電洞耦合的輕重電洞能量。(b) 基態波函數自旋(-1/2)輕電洞的成分。	63
圖 4.2.16、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子基態躍遷至電洞空軌域基態。(a)發光強度。(b)偏振強度。(c)電子基態躍遷至電洞空軌域的能量。(d)電場為 0(kV/cm)的發光強度。(e) 電場為 200(kV/cm)的發光強度	64
圖 4.2.17、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的基態自旋(-1/2)輕電洞與基態電子波函數重疊圖。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	64
圖 4.2.18、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 。(a)電場強度為 0(kV/cm)的量子盒。(b)電場強度為 0(kV/cm)的截角金字塔。(c)電場強度為 200(kV/cm)的量子盒。(d)電場強度為 200(kV/cm)的截角金字塔。	66
圖 4.2.19、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的輕重電洞基態能量，(a)量子盒。(b)截角金字塔。(c)量子盒的偏振大小。(d)截角金字塔的偏振大小。	66
圖 4.2.20、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子位能。(a) 電場強度 0(kV/cm)。(b) 電場強度 200(kV/cm)。	67

圖 4.2.21、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的基態電子波函數。(a)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b) 電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。.....	67
圖 4.2.22、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的輕重電洞位能。(a)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b) 電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。.....	68
圖 4.2.23、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的基態輕重電洞波函數。(a)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b) 電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。.....	69
圖 4.2.24、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點外加電場下輕重電洞波函數重疊圖。(a)自旋 $(3/2)$ 重電洞基態波函數。(b)自旋 $(-1/2)$ 輕電洞基態波函數。.....	70
圖 4.2.25、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點隨電場變化輕重電洞能量差與輕電洞成分的關係。(a)不考慮輕重電洞耦合的輕重電洞能量。(b)基態自旋 $(-1/2)$ 輕電洞波函數的成分.....	71
圖 4.2.26、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點隨電場增加所對應的發光強度與偏振強度。(a)發光強度。(b)偏振強度。(c)電子基態躍遷至電洞空軌域基態的能量。(c)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 的發光強度。(d) 電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 的發光強度。.....	72
圖 4.2.27、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點電子基態波函數與基態自旋 $(-1/2)$ 輕電洞波函數重疊圖。(a)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$ 。.....	72
圖 4.2.28、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子位能。(a)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$	73
圖 4.2.29、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子基態波函數。(a)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$	73
圖 4.2.30、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的輕重電洞位能。(a)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$	74
圖 4.2.31、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點基態輕重電洞波	

函數。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm).....	75
圖 4.2.32、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的基態電子波函數、基態自旋(3/2)重電洞與基態自旋(-1/2)輕電洞波函數隨電場增加的波函數重疊圖。	
.....	75
圖 4.2.33、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點隨電場變化輕重電洞能量差與輕電洞成分的關係。(a)不考慮輕重電洞耦合的輕重電洞能量。(b)基態自旋(-1/2)輕電洞波函數的成分。	76
圖 4.2.34、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子基態波函數與基態自旋(-1/2)輕電洞波函數重疊圖。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	76
圖 4.2.35、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點隨電場變化的發光強度與偏振強度。(a)發光強度。(b)偏振強度。(c)電子基態躍遷至電洞空軌域基態的能量。(d)電場強度 0(kV/cm)的發光強度。(e) 電場強度 200(kV/cm)的發光強度。	77
圖 4.2.36、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子基態波函數與基態自旋(-1/2)輕電洞波函數重疊圖。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	77
圖 4.2.38 高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之未考慮應變效應的截角金字塔量子點，內部為 InAs，外部為 GaAs，更外層則有 AlGaAs。(a)電子位能。(b)電洞空軌域位能。	79
圖 4.2.39、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點外加電場於量子點垂直方向的電子位能，電場方向為+Z。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	80
圖 4.2.40、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點外加電場於量子點垂直方向的電子基態波函數。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	81
圖 4.2.41、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量	

子點垂直方向的輕重電洞位能，電場方向為+Z。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	81
圖 4.2.42、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向。自旋(3/2)的重電洞基態波函數，(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	82
自旋(-1/2)的輕電洞基態波函數，(c) 電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	82
圖 4.2.43、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向。(a)輕重電洞能量差。(b)基態波函數自旋(-1/2)輕電洞成分。	83
圖 4.2.44、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向。(a)發光強度與電場的關係。(b)偏振強度。(c)電子基態躍遷至電洞空軌域基態的能量(d)電場為 0(kV/cm)的發光強度。(e) 電場為 200(kV/cm)的發光強度。	84
圖 4.2.45、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向的電子位能。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	84
圖 4.2.46、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向的電子波函數。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	85
圖 4.2.47、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向的輕重電洞位能。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	85
圖 4.2.48、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向的基態自旋(3/2)重電洞波函數。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	86
圖 4.2.49、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向的基態自旋(-1/2)輕電洞波函數。(a)電場強度為 0(kV/cm)。(b)電場強度為 200(kV/cm)。	86
圖 4.2.50、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向。(a)輕重電洞能量差。(b)基態波函數自旋(-1/2)輕電洞成分。(c)發光強度	

與電場的關係。(d)偏振強度。(e)電場為 0(kV/cm)的發光強度。(f) 電場為 200(kV/cm)的發光強度。..... 87

圖 4.2.51、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ ，不同高度的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向。量子點內部為 InAs，外部為 GaAs，(a)最外層有材料 AlGaAs。(b) 最外層無材料 AlGaAs。..... 88



第一章、導論

1.1 簡介

量子力學發展至今，近年有量子資訊(quantum information)的研究[1]。傳統的計算機或數位資訊建構在一個可產生「0」、「1」兩種狀態的實體上，這兩種狀態即為位元。藉由位元的操作，可達成各種的邏輯運算。量子資訊則是利用量子狀態產生「0」、「1」兩個位元，而量子位元與古典計算最大的不同在於狀態的疊加性與糾纏態的特性。疊加性的特性在於量子態經過疊加之後仍然屬於量子態，所以少量的量子位元可產生大量的量子態。糾纏的性質則使量子態具有不確定性，不可在不影響量子態的情況下測量量子態，這項性質可使得量子資訊的安全性大為提升，使訊息可加密傳輸。

1.2 研究動機

應用量子資訊的理論，必須先創造量子位元，而量子點系統可當成人造原子，因此量子點有幾項特性以利於創造量子位元。(1)小尺度。(2)具有離散的能階。(3)可作為單光子光源，以上原因便可構成研究量子點的原因。

量子點內的電子由導電帶躍遷至價電帶空軌域而發出光子，利用光子為水平或垂直偏振的特性可當作量子位元，所以藉由研究量子點發出光子偏振的特性，可了解量子點所發出的光源是否可做為適當的量子位元。量子點中激子的精細結構劈裂導致發出的光子無法形成糾纏態，在文獻上發現[4]，利用外加電場消除激子的精細結構劈裂，進而發出糾纏態的光子對。本論文未討論精細結構劈裂，而先討論史塔克效應對量子點的電

子結構與光學特性的影響，未來工作將會更深入探討激子的精細結構劈裂。

本論文中所討論的皆為自組式量子點，自組式量子點為異質介間的晶格長度不匹配而產生應變使材料變形突起形成島狀物(圖 1.2.1)。例如 InAs 長在 GaAs 表面上，而 InAs 的晶格常數比 GaAs 小，所以 InAs 變會突起形成量子點。量子點為準零維系統，電子在量子點內三個維度均被侷限，形成三維的有限深位能井(圖 1.2.2)，所以電子的能量在量子點內為離散的能階。而量子點的位能主要是受以下三種因素影響，(1)形狀。(2)材料。(3)應變分布。量子點中導電帶存在著電子，而價電帶幾乎填滿電子但有少量的空軌域。空軌域的能態可由 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 多能帶理論計算得知含有輕電洞與重電洞的成分，重電洞的有效質量較大，所以能量較低，空軌域基態以重電洞為主並混了少量的輕電洞。當空軌域的能態為百分之百的重電洞時，發出的光子為圓偏振，若是同時含有重電洞與輕電洞，則發出的光子為橢圓偏振，所以在探討偏振的效應時，輕電洞將是很重要的因素，因此在本論文中將會探討量子點系統與輕電洞的關係，以及輕電洞如何的影響偏振效應。了解輕重電洞耦合對光學異向性的影響以及應變效應對輕電洞的改變，在論文的最後將討論量子點垂直方向外加電場的史塔克效應對光學異向性所造成的改變。

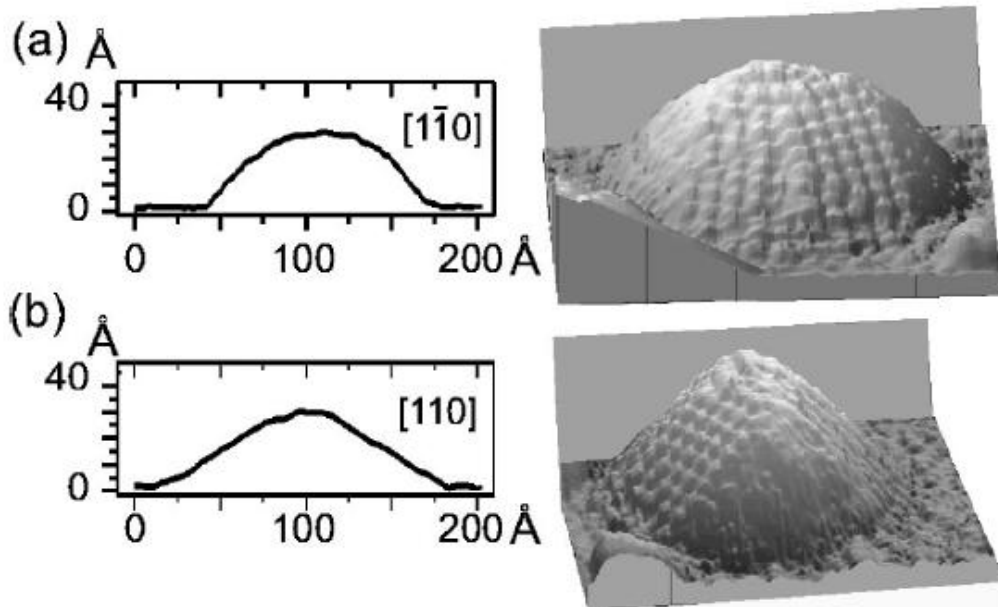


圖 1.2.1、量子點的形狀，(a)[110] 方向。(b)[110] 方向。

資料來源： J. Ma rquez, L. Geelhaar, and K. Jacobi, Appl. Phys. Lett. 78, 2309 (2001).[2]

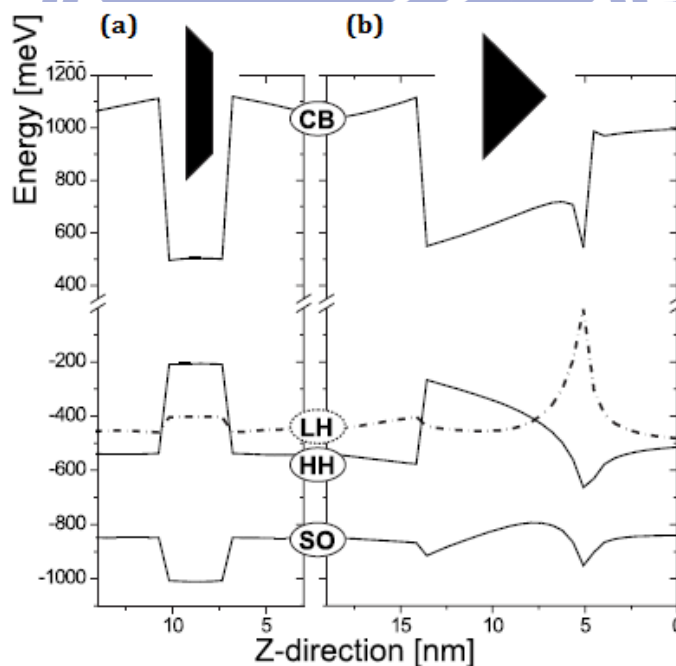
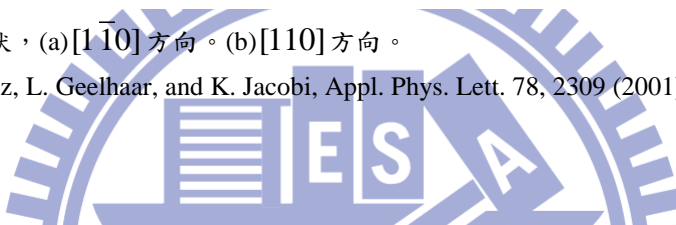
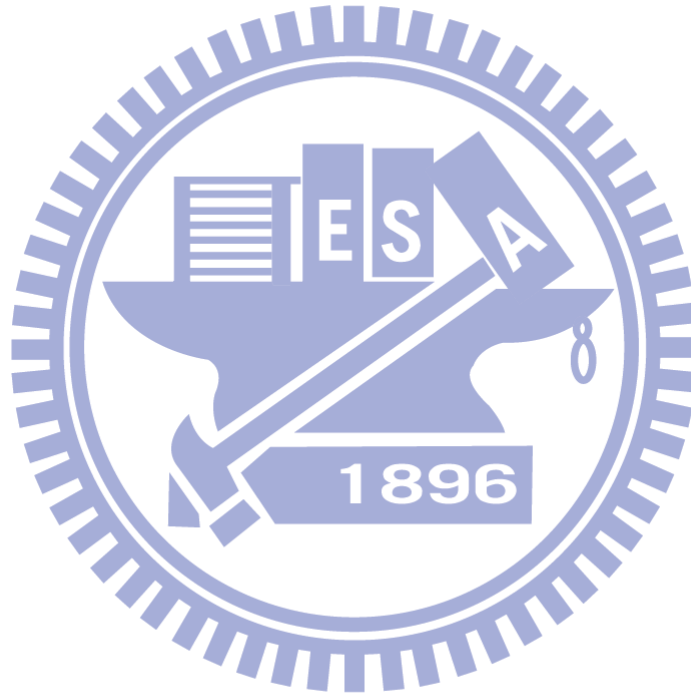


圖 1.2.2、受到應變效應的金字塔形狀量子點位能。(a)底部大小 17nm ，高度 3.57nm。(b)底部大小 17nm ，高度 8.5nm。

資料來源： Phys. Rev. B 76, 205324(2007).[3]

1.3 章節概要

第一章介紹量子點以及實際上的應用。第二章使用 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 多能帶理論計算量子點電子結構，以及費米黃金定律(Fermi's Golden Rule)計算量子點的發光強度。第三章討論量子點的應變效應以及輕重電洞耦合對偏振的影響。第四章是主要的物理結果，討論量子點的大小與高度變化對偏振的影響，以及史塔克效應下量子點的光學異向性。第五章為總結與討論，以及未來的發展性。



第二章、自組式量子點的電子結構

2.1、量子點中電子與電洞的電子結構

在本文章計算量子點的電子結構以 k.p 理論的單能帶模型、四能帶模型與波包近似法為基礎。價電帶的電子被激發至導電帶形成自由電子，而價電帶則產生電子的空軌域，其中使用單能帶模型計算電子，六能帶模型計算價電帶中的空軌域。電子與空軌域的波函數表示成：

$$\Psi_i^c(\vec{r}) = \sum_{S_z=\pm 1/2} g_{i,S_z}^c(\vec{r}) u_{c,S_z}(\vec{r}) \quad (2.1.1)$$

$$\Psi_i^v(\vec{r}) = \sum_{J_z=\pm 3/2, \pm 1/2} g_{i,J_z}^v(\vec{r}) u_{v,J_z}(\vec{r}) \quad (2.1.2)$$

(2.2.1)為電子的波函數，(2.2.2)為空軌域的波函數。 $g_{i,S_z}^c(\vec{r})$ 與 $g_{i,J_z}^v(\vec{r})$ 為波包方程式(envelope function)， $u_{c,S_z}(\vec{r})$ 與 $u_{v,J_z}(\vec{r})$ 為 Bloch function 而 S_z 與 J_z 分別為電子與空軌域的自旋。

由(2.2.1)的波函數與單能帶有效質量理論可得到電子的波函數和能量的 Schrödinger equation：

$$\left[\frac{p^2}{2m_0 m_e^*} + V_{QD}^e(\vec{r}) \right] g_i^e = E_i^e g_i^e \quad (2.2.3)$$

(2.2.3)中 m_e^* 為電子的有效質量，且此方程式與自旋無關，所以每一波函數均有自旋向上與自旋向下而形成二重簡併。

計算價帶中的空軌域由式子(2.2.2)的波函數與 k.p 六能帶理論可得到波函數和能量的 Schrödinger equation，並藉由波包近似法可得到下列形式[5]：

$$H^{LK} = - \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -S/\sqrt{2} & \sqrt{2}R \\ -S^\dagger & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{3/2}S \\ R^\dagger & 0 & P-Q & S & \sqrt{3/2}S^\dagger & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^\dagger & S^\dagger & P+Q & -\sqrt{2}R^\dagger & -S^\dagger/\sqrt{2} \\ -S^\dagger/\sqrt{2} & -\sqrt{2}Q^\dagger & \sqrt{3/2}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^\dagger & \sqrt{3/2}S^\dagger & \sqrt{2}Q^\dagger & -S/\sqrt{2} & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \begin{matrix} |J=3/2, J_z=3/2\rangle \\ |J=3/2, J_z=1/2\rangle \\ |J=3/2, J_z=-1/2\rangle \\ |J=3/2, J_z=-3/2\rangle \\ |J=1/2, J_z=1/2\rangle \\ |J=1/2, J_z=-1/2\rangle \end{matrix}$$

.....(2.1.4)

表 2.1.1、式子(2.1.4)中的矩陣元素

$P = P_k + P_\varepsilon, \quad Q = Q_k + Q_\varepsilon$ $R = R_k + R_\varepsilon, \quad S = S_k + S_\varepsilon$
$P_k = -\frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right), \quad Q_k = -\frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - 2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$ $R_k = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[-\sqrt{3} \gamma_2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + i 2 \sqrt{3} \gamma_3 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right]$ $S_k = -\frac{\hbar^2 \gamma_3}{m_0} \sqrt{3} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \frac{\partial}{\partial z}$
$P_\varepsilon = -a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad Q_\varepsilon = -\frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$ $R_\varepsilon = \frac{\sqrt{3}b}{2} (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - i d \varepsilon_{xy}, \quad S_\varepsilon = -d (\varepsilon_{xy} - i \varepsilon_{yz})$

在此利用有限差分法(finite difference)求解(2.2.4)之特徵值問題，即可得知重電洞與輕電洞所對應的能量與波包函數。

2.2、量子點偏振光譜

在本節中我們考慮一個被激發至導電帶的電子躍遷至價電帶空軌域，躍遷的機制可利用費米黃金定律(Fermi's Golden Rule) 以及 2.1 節所求得的電子與電洞的波函數來計算偶極矩陣元素(dipole matrix element)，並可進一步求得自發輻射(spontaneous emission)的偏振。

由 Fermi's Golden Rule 得知受激輻射的躍遷速率(transition rate)為

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eE_0}{m_0\omega} \right) |\langle f | \hat{e} \cdot \hat{p} | i \rangle|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar\omega) \quad (2.2.1)$$

鬆弛時間(relaxation time)為

$$\tau = \frac{1}{W_{fi}} \quad (2.2.2)$$

而自發輻射(spontaneous emission)的強度(Intensity)可藉由受激輻射的躍遷速率得知，

$$I_{fi}(\text{intensity}) \propto W_{fi} \propto |\langle f | \hat{e} \cdot \hat{p} | i \rangle|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar\omega) \quad (2.2.3)$$

所以只要能知道電子的初始狀態與末狀態，便可藉由 Fermi's Golden Rule 算出自發輻射(spontaneous emission)的光強度與鬆弛時間。

躍遷的發光機制為導電帶電子跳回價電帶的空軌域，所以電子狀態即為初始狀態，末狀態為電洞所對應的空軌域狀態。在此我們先考慮一個電子一個空軌域的情況。由式子(2.2.1)與(2.2.2)可知，電子的狀態為：

$$\Psi_{i_c}^c(\vec{r}) = \sum_{S_z=\pm 1/2} g_{i_c, S_z}^c(\vec{r}) u_{c, S_z}(\vec{r})$$

而電洞所對應的狀態為：

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

將初始狀態與末狀態代入式子(2.4.3)可得到：

$$I_{fi}(\text{intensity}) \propto \left| \langle \Psi_{i_v}^v | \hat{e} \cdot \hat{p} | \Psi_{i_c}^c \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega)$$

其中 $\langle \Psi_{i_v}^v | \hat{e} \cdot \hat{p} | \Psi_{i_c}^c \rangle$ 即為偶極矩陣元素(dipole matrix element)。此項的推導過程如下[6]：

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_{i_v}^v | \hat{e} \cdot \hat{p} | \Psi_{i_c}^c \rangle \\ &= \int d^3\vec{r} (\Psi_{i_v}^v(\vec{r}))^* \hat{e} \cdot \hat{p} (\Psi_{i_c}^c(\vec{r})) \\ &= \sum_{S_z, J_z} \int d^3\vec{r} (g_{i_v, J_z}^v(\vec{r}) u_{v, J_z}(\vec{r}))^* \hat{e} \cdot \hat{p} (g_{i_c, S_z}^c(\vec{r}) u_{c, S_z}(\vec{r})) \\ &= \sum_{S_z, J_z} \int d^3\vec{r} (g_{i_v, J_z}^v(\vec{r}) u_{v, J_z}(\vec{r}))^* (u_{c, S_z}(\vec{r}) \hat{e} \cdot \hat{p} g_{i_c, S_z}^c(\vec{r}) + g_{i_c, S_z}^c(\vec{r}) \hat{e} \cdot \hat{p} u_{c, S_z}(\vec{r})) \\ &= \sum_{S_z, J_z} \int d^3\vec{r} (g_{i_v, J_z}^v(\vec{r}) u_{v, J_z}(\vec{r}))^* u_{c, S_z}(\vec{r}) \hat{e} \cdot \hat{p} g_{i_c, S_z}^c(\vec{r}) \\ & \quad + \sum_{S_z, J_z} \int d^3\vec{r} (g_{i_v, J_z}^v(\vec{r}) u_{v, J_z}(\vec{r}))^* g_{i_c, S_z}^c(\vec{r}) \hat{e} \cdot \hat{p} u_{c, S_z}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

我們將位置向量 \vec{r} 分解，如圖(2.2.1)所示：

$$\vec{r} = \vec{R}_I + \vec{\tau} \quad (2.2.5)$$

其中 \vec{R}_I 為單位晶胞(unit cell)的位置向量， $\vec{\tau}$ 為單位晶胞內的向量。

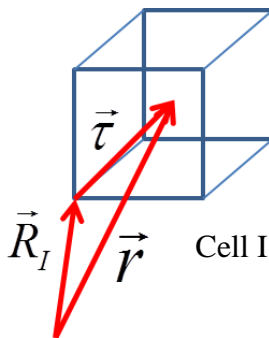


圖 2.2.1、位置向量分解示意圖

式子(2.2.4)可改寫成：

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi_{i_v}^v | \hat{e} \cdot \hat{p} | \Psi_{i_c}^c \rangle \\
&= \sum_{S_z, J_z} \int d^3 \vec{r} \left(g_{i_v, J_z}^v(\vec{R}_l + \vec{\tau}) u_{v, J_z}(\vec{R}_l + \vec{\tau}) \right)^* u_{c, S_z}(\vec{R}_l + \vec{\tau}) \hat{e} \cdot \hat{p} g_{i_c, S_z}^c(\vec{R}_l + \vec{\tau}) \\
&+ \sum_{S_z, J_z} \int d^3 \vec{r} \left(g_{i_v, J_z}^v(\vec{R}_l + \vec{\tau}) u_{v, J_z}(\vec{R}_l + \vec{\tau}) \right)^* g_{i_c, S_z}^c(\vec{R}_l + \vec{\tau}) \hat{e} \cdot \hat{p} u_{c, S_z}(\vec{R}_l + \vec{\tau})
\end{aligned} \tag{2.2.6}$$

在波包函數近似法中，波包函數 $g_{i_c, S_z}^c(\vec{r})$ 與 $g_{i_v, J_z}^v(\vec{r})$ 為緩慢變化的函數，所以

$$\begin{aligned}
g_{i_c, S_z}^c(\vec{r}) &= g_{i_c, S_z}^c(\vec{R}_l + \vec{\tau}) \approx g_{i_c, S_z}^c(\vec{R}_l) \\
g_{i_v, J_z}^v(\vec{r}) &= g_{i_v, J_z}^v(\vec{R}_l + \vec{\tau}) \approx g_{i_v, J_z}^v(\vec{R}_l)
\end{aligned} \tag{2.2.7}$$

Bloch 函數為週期性變化的函數

$$\begin{aligned}
u_{c, S_z}(\vec{r}) &= u_{c, S_z}(\vec{R}_l + \vec{\tau}) = u_{c, S_z}(\vec{\tau}) \\
u_{v, J_z}(\vec{r}) &= u_{v, J_z}(\vec{R}_l + \vec{\tau}) = u_{v, J_z}(\vec{\tau})
\end{aligned} \tag{2.2.8}$$

式子(2.2.6)第一項可化簡為

$$\begin{aligned}
& \sum_{S_z, J_z} \int d^3 \vec{r} \left(g_{i_v, J_z}^v(\vec{R}_l + \vec{\tau}) u_{v, J_z}(\vec{R}_l + \vec{\tau}) \right)^* u_{c, S_z}(\vec{R}_l + \vec{\tau}) \hat{e} \cdot \hat{p} g_{i_c, S_z}^c(\vec{R}_l + \vec{\tau}) \\
&\approx \sum_{S_z, J_z} \sum_{\vec{R}_l} g_{i_v, J_z}^v(\vec{R}_l)^* \hat{e} \cdot \hat{p} g_{i_c, S_z}^c(\vec{R}_l) \int_I d^3 \vec{\tau} \left(u_{v, J_z}(\vec{\tau}) \right)^* u_{c, S_z}(\vec{\tau}) \\
&= \sum_{S_z, J_z} \sum_{\vec{R}_l} g_{i_v, J_z}^v(\vec{R}_l)^* [\hat{e} \cdot \hat{p}] g_{i_c, S_z}^c(\vec{R}_l) \int_I d^3 \vec{\tau} \left(u_{v, J_z}(\vec{\tau}) \right)^* u_{c, S_z}(\vec{\tau})
\end{aligned} \tag{2.2.9}$$

考慮 Bloch 函數的正交條件，並且先假設塊材中的波函數為：

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

考慮波函數正交條件：

$$\begin{aligned}
& \int \left(\frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \right)^* \frac{e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) d^3 r = 1 \\
& \int u_{\vec{k}}(\vec{r})^* u_{\vec{k}'}(\vec{r}) d^3 r = V
\end{aligned}$$

$$\int_I u_{\vec{k}}(\vec{\tau})^* u_{\vec{k}}(\vec{\tau}) d^3\vec{\tau} = \Delta V$$

其中 V 為整體塊材體積， ΔV 為一個晶胞的體積。Bloch 函數具有正交性，可得到：

$$\int_I d^3\vec{\tau} u_n^*(\vec{\tau}) u_m(\vec{\tau}) = \Delta V \delta_{nm}$$

所以式子(2.2.9)最後化簡成

$$\begin{aligned} & \sum_{S_z, J_z} \sum_I g_{i_v, J_z}^v(\vec{R}_I)^* [\hat{e} \cdot \hat{p}] g_{i_c, S_z}^c(\vec{R}_I) \cdot \langle u_{v, J_z} | u_{c, S_z} \rangle \\ &= \sum_{S_z, J_z} \sum_I \langle g_{i_v, J_z}^v | \vec{R}_I \rangle [\hat{e} \cdot \hat{p}] \langle \vec{R}_I | g_{i_c, S_z}^c \rangle \cdot \langle u_{v, J_z} | u_{c, S_z} \rangle \\ &= \sum_{S_z, J_z} \langle g_{i_v, J_z}^v | [\hat{e} \cdot \hat{p}] | g_{i_c, S_z}^c \rangle \cdot \langle u_{v, J_z} | u_{c, S_z} \rangle \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

式子(2.2.4)中的第二項可化簡為

$$\begin{aligned} & \sum_{J_z, S_z} \int d^3\vec{\tau} d^3\vec{R}_I \left(g_{i_v, J_z}^v(\vec{R}_I) u_{v, J_z}(\vec{\tau}) \right)^* g_{i_c, S_z}^c(\vec{R}_I) \hat{e} \cdot \hat{p} u_{c, S_z}(\vec{\tau}) \\ &= \sum_{J_z, S_z} \sum_I g_{i_v, J_z}^v(\vec{R}_I)^* g_{i_c, S_z}^c(\vec{R}_I) \int d^3\vec{\tau} u_{v, J_z}^*(\vec{\tau}) [\hat{e} \cdot \hat{p}] u_{c, S_z}(\vec{\tau}) \\ &= \sum_{J_z, S_z} \sum_I \langle g_{i_v, J_z}^v | \vec{R}_I \rangle \langle \vec{R}_I | g_{i_c, S_z}^c \rangle \int d^3\vec{\tau} u_{v, J_z}^*(\vec{\tau}) [\hat{e} \cdot \hat{p}] u_{c, S_z}(\vec{\tau}) \\ &= \sum_{J_z, S_z} \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_c, S_z}^c \rangle \langle u_{v, J_z} | [\hat{e} \cdot \hat{p}] | u_{c, S_z} \rangle \end{aligned} \quad (2.2.11)$$

利用式子(2.2.10)與(2.2.11)可將式子(2.3.4)整理成

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{i_v}^v | \hat{e} \cdot \hat{p} | \Psi_{i_c}^c \rangle &= \sum_{J_z, S_z} \langle g_{i_v, J_z}^v | [\hat{e} \cdot \hat{p}] | g_{i_c, S_z}^c \rangle \cdot \langle u_{v, J_z} | u_{c, S_z} \rangle \\ &\quad + \sum_{J_z, S_z} \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_c, S_z}^c \rangle \langle u_{v, J_z} | [\hat{e} \cdot \hat{p}] | u_{c, S_z} \rangle \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

上式中的第一項，由於價電帶與導電帶的 Bloch 函數互相正交，所以可忽略第一項。

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{i_v}^v | \hat{e} \cdot \hat{p} | \Psi_{i_e}^e \rangle &= \sum_{J_z, S_z} \langle g_{i_v, J_z}^v | [\hat{e} \cdot \hat{p}] | g_{i_e, S_z}^e \rangle \cdot \langle u_{v, J_z} | u_{c, S_z} \rangle \\ &\quad + \sum_{J_z, S_z} \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_e, S_z}^e \rangle \langle u_{v, J_z} | [\hat{e} \cdot \hat{p}] | u_{c, S_z} \rangle \\ \langle \Psi_{i_v}^v | \hat{e} \cdot \hat{p} | \Psi_{i_c}^c \rangle &\approx \sum_{J_z, S_z} \langle u_{v, J_z} | [\hat{e} \cdot \hat{p}] | u_{c, S_z} \rangle \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_c, S_z}^c \rangle \end{aligned}$$

$$\equiv \sum_{J_z, S_z} [d_{J_z, S_z}(\vec{e})] \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_c, S_z}^c \rangle \quad (2.2.13)$$

其中 $d_{J_z, S_z}(\vec{e}) \equiv \langle u_{v, J_z} | [\hat{e} \cdot \hat{p}] | u_{c, S_z} \rangle$ ， \vec{e} 為沿著偏振方向的單位向量。

$$\begin{aligned} D_{i_v, i_c}(\vec{e}) &\equiv \langle \Psi_{i_v}^v | \hat{e} \cdot \hat{p} | \Psi_{i_c}^c \rangle \\ &= \sum_{J_z, S_z} [d_{J_z, S_z}(\vec{e})] \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_c, S_z}^c \rangle \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

波函數中的 Bloch 函數可由參考文獻[5] 得知，如下表：

表 2.2.1、Bloch function 的定義及符號[5]

分類	Bloch function	原子對應的軌道形態
電子	$u_{c, 1/2} = \left \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$	$ S, \uparrow\rangle$
	$u_{c, -1/2} = \left \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle$	$ S, \downarrow\rangle$
重電洞	$u_{v, 3/2} = \left \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle_v$	$\frac{-1}{\sqrt{2}} (P_x + iP_y), \uparrow\rangle$
heavy hole	$u_{v, -3/2} = \left \frac{3}{2}, \frac{-3}{2} \right\rangle_v$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (P_x - iP_y), \downarrow\rangle$
輕電洞	$u_{v, 1/2} = \left \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_v$	$\frac{-1}{\sqrt{6}} (P_x + iP_y), \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} P_z, \uparrow\rangle$
light hole	$u_{v, -1/2} = \left \frac{3}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle_v$	$\frac{1}{\sqrt{6}} (P_x - iP_y), \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} P_z, \downarrow\rangle$

由上表得知 Bloch 函數，代入式子(2.2.14)：

$$D_{i_v, i_c}(\vec{e}) = \sum_{J_z, S_z} [d_{J_z, S_z}(\vec{e})] \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_c, S_z}^c \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= d_{3/2,1/2} \langle g_{i_v,3/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle + d_{3/2,-1/2} \langle g_{i_v,3/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle \\
&\quad + d_{1/2,1/2} \langle g_{i_v,1/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle + d_{1/2,-1/2} \langle g_{i_v,1/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle \\
&\quad + d_{-1/2,1/2} \langle g_{i_v,-1/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle + d_{-1/2,-1/2} \langle g_{i_v,-1/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle \\
&\quad + d_{-3/2,1/2} \langle g_{i_v,-3/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle + d_{-3/2,-1/2} \langle g_{i_v,-3/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle
\end{aligned} \tag{2.2.15}$$

由附錄 A 的推導可得到成下表：

表 2.2.2、 $\vec{e} = \hat{x} \sin \theta \cos \phi + \hat{y} \sin \theta \sin \phi + \hat{z} \cos \theta$

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

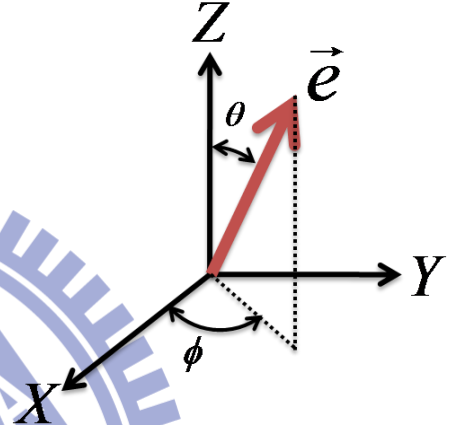


表 2.2.3、令 $\theta = \pi/2$ ，則偏振為水平方向 $\vec{e} \parallel \hat{x}, \hat{y}$ 。

$$\vec{e} = \hat{x} \cos \phi + \hat{y} \sin \phi。$$

J_z	S_z	$d_{J_z, S_z}(\vec{e})$
$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$d_{3/2, 1/2}(\vec{e}) = \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) e^{-i\phi}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$d_{1/2, 1/2}(\vec{e}) = 0$
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$d_{-1/2, 1/2}(\vec{e}) = \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) e^{i\phi}$
$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$d_{-3/2, 1/2}(\vec{e}) = 0$
$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$d_{3/2, -1/2}(\vec{e}) = 0$
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$d_{1/2, -1/2}(\vec{e}) = \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) e^{-i\phi}$
$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$d_{-1/2, -1/2}(\vec{e}) = 0$
$-\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$d_{-3/2, -1/2}(\vec{e}) = \frac{-1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) e^{i\phi}$

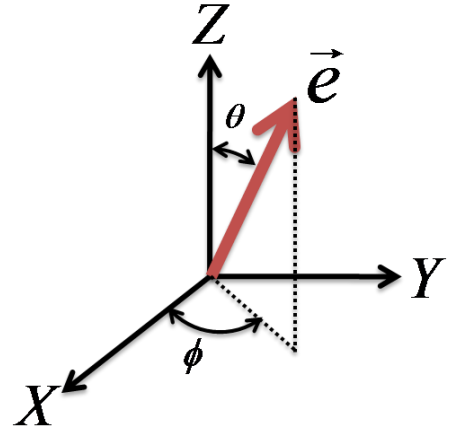


表 2.2.4、令 $\theta = 0$ ，則偏振為垂直方向 $\vec{e} \parallel \hat{z}$ 。 $\vec{e} = \hat{z}$ 。

J_z	S_z	$d_{J_z, S_z}(\vec{e})$
$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$d_{3/2, 1/2}(\vec{e}) = 0$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$d_{1/2, 1/2}(\vec{e}) = -\sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0})$
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$d_{-1/2, 1/2}(\vec{e}) = 0$
$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$d_{-3/2, 1/2}(\vec{e}) = 0$
$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$d_{3/2, -1/2}(\vec{e}) = 0$
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$d_{1/2, -1/2}(\vec{e}) = 0$

$\frac{-1}{2}$	$\frac{-1}{2}$	$d_{-1/2,-1/2}(\vec{e}) = -\sqrt{\frac{2}{3}}p_{cv}(\vec{0})$
$\frac{-3}{2}$	$\frac{-1}{2}$	$d_{-3/2,-1/2}(\vec{e}) = 0$

振子強度(Oscillator strength)為：

$$\text{Oscillator strength} \propto |D_{i_v, i_c}(\vec{e})|^2$$

最後式子(2.2.13)整理成：

$$\begin{aligned}
D_{i_v, i_c}(\vec{e}) &= \sum_{J_z, S_z} [d_{J_z, S_z}(\vec{e})] \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_c, S_z}^c \rangle \\
&= d_{3/2, 1/2} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \cancel{d_{3/2, -1/2} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle} \\
&\quad + d_{1/2, 1/2} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + d_{1/2, -1/2} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\
&\quad + d_{-1/2, 1/2} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + d_{-1/2, -1/2} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\
&\quad + \cancel{d_{-3/2, 1/2} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle} + d_{-3/2, -1/2} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\
&= +\frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta (e^{-i\phi}) \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{-i\phi} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\
&\quad + \left(-\sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle \right) + \left(-\sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \right) \\
&\quad + \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{i\phi} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{i\phi} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\
&= p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta \left(\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\phi} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} e^{-i\phi} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \right. \\
&\quad \left. + \frac{-1}{\sqrt{6}} e^{i\phi} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \right) \\
&\quad + p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta \left(-\sqrt{\frac{2}{3}} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \right)
\end{aligned} \tag{2.2.16}$$

上式中的第一項可整理成：

$$\begin{aligned}
& p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta \left(\begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\phi} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} e^{-i\phi} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\ + \frac{-1}{\sqrt{6}} e^{i\phi} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \end{array} \right) \\
&= p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta \left(\begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos \phi - i \sin \phi) \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (\cos \phi - i \sin \phi) \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\ + \frac{-1}{\sqrt{6}} (\cos \phi + i \sin \phi) \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} (\cos \phi + i \sin \phi) \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \end{array} \right) \\
&= p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta \left[\begin{array}{l} \cos \phi \left(\begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\ + \frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \end{array} \right) \\ + i \sin \phi \left(\begin{array}{l} \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\ + \frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \end{array} \right) \end{array} \right] \quad (2.2.17)
\end{aligned}$$

最後式子(2.3.18)可整理成：

$$\begin{aligned}
D_{i_v, i_c}(\vec{e}) &= p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta \cos \phi \left(\begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\ + \frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \end{array} \right) \quad (2.2.18) \\
&+ ip_{cv}(\vec{0}) \sin \theta \sin \phi \left(\begin{array}{l} \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\ + \frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \end{array} \right) \\
&+ p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta \left(-\sqrt{\frac{2}{3}} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \right)
\end{aligned}$$

發光強度(Intensity)為： $I_{\vec{e}}(\omega) \propto |D_{i_v, i_c}(\vec{e})|^2$ 。得到發光強度之後，我們定義偏振為：

$$\text{Pol} = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} \quad (2.2.19)$$

本論文中，所討論的偏振強度以 XY 平面為主，即當 $\theta = \pi/2$ 時的振子強度與偏振強度。

當 $\theta = \frac{\pi}{2}$ ，則 $\vec{e} = \hat{x} \cos \phi + \hat{y} \sin \phi$

$$\begin{aligned}
 D_{i_v, i_c}(\vec{e} = \hat{x} \cos \phi + \hat{y} \sin \phi) &= \sum_{J_z, S_z} [d_{J_z, S_z}(\vec{e} = \hat{x} \cos \phi + \hat{y} \sin \phi)] \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_c, S_z}^c \rangle \\
 D_{i_v, i_c}(\vec{e}) &= p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta \cos \phi \left(\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\ &+ \frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \end{aligned} \right) \\
 &+ ip_{cv}(\vec{0}) \sin \theta \sin \phi \left(\begin{aligned} &\frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\ &+ \frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \end{aligned} \right)
 \end{aligned} \tag{2.2.20}$$

根據附錄 A 可求得各方向的振子強度 $|D_{i_v, i_c}(\vec{e})|^2$ 的比例。在下個章節中，將會討論量子點在各種情況下，影響偏振強度的效應。



第三章、量子點的電子結構與光學異相性

第二章的理論可計算電子電洞的電子結構與波函數，並求得偏振光譜。而電子結構與波函數會受到量子點不同的形狀、應變效應或是外加的場的影響，若能知道電子結構、輕重電洞波函數與偏振光譜的關係，就能進一步了解各種不同的效應對偏振光譜的影響。

3.1、輕重電洞與偏振的關係

使用單能帶模型計算電子的電子結構與波函數，我們忽略其中的自旋軌道耦合，所以電子每個能量的狀態皆為自旋向上與自旋向下的簡併態，波函數可寫成下列形式：

$$\Psi_{i_c}^c(\vec{r}) = f_{i_c,1/2}^c(\vec{r})u_{c,1/2}(\vec{r}) \text{ 或 } \Psi_{i_c}^c(\vec{r}) = f_{i_c,-1/2}^c(\vec{r})u_{c,-1/2}(\vec{r}) \quad (3.1.1)$$

上式兩個波函數分別為電子能量相同的簡併態。則式子(2.4.15)可整理成：

當 $\Psi_{i_c}^c(\vec{r}) = f_{i_c,1/2}^c(\vec{r})u_{c,1/2}(\vec{r})$ (圖 3.1.1(a))，則

$$D_{i_v, i_c}(\vec{e}) = \sum_{J_z = \pm 3/2, \pm 1/2, S_z = 1/2} [d_{J_z, S_z}(\vec{e})] \langle g_{i_v, J_z}^v | f_{i_c, S_z}^c \rangle \quad (3.1.2)$$

當 $\Psi_{i_c}^c(\vec{r}) = f_{i_c,-1/2}^c(\vec{r})u_{c,-1/2}(\vec{r})$ (圖 3.1.1(b))，則

$$D_{i_v, i_c}(\vec{e}) = \sum_{J_z = \pm 3/2, \pm 1/2, S_z = -1/2} [d_{J_z, S_z}(\vec{e})] \langle g_{i_v, J_z}^v | f_{i_c, S_z}^c \rangle \quad (3.1.3)$$

式子(3.1.2)可推導成：

$$D_{i_v, i_c}(\vec{e}) = d_{3/2, 1/2} \langle g_{i_v, 3/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle + d_{1/2, 1/2} \langle g_{i_v, 1/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle \\ + d_{-1/2, 1/2} \langle g_{i_v, -1/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle$$

再根據表(2.2.3)可得到；

$$D_{i_v, i_c}(\vec{e}) = \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{-i\phi} \langle g_{i_v, 3/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta \langle g_{i_v, 1/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{i\phi} \langle g_{i_v, -1/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle \quad (3.1.4)$$

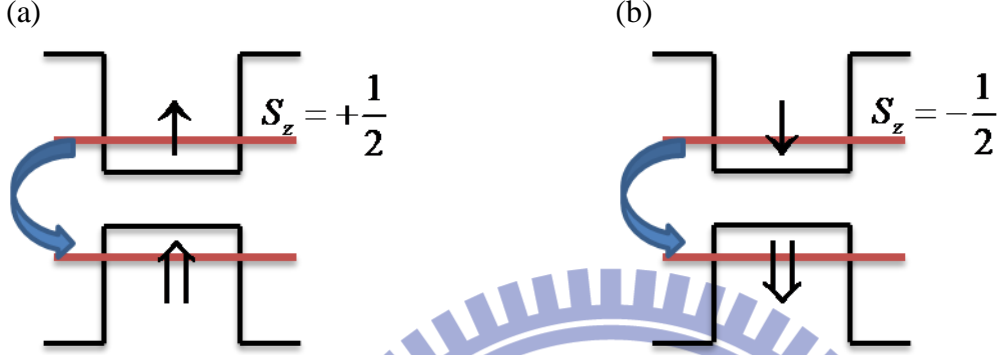


圖 3.1.1、電子躍遷至價電帶空軌域示意圖。(a) 電子自旋為 1/2 的躍遷。(b) 電子自旋為 -1/2 的躍遷。

所以當 $\Psi_{i_c}^c(\vec{r}) = g_{i_c, 1/2}^c(\vec{r}) u_{c, 1/2}(\vec{r})$ (圖 3.1.1(a))，發光強度為：

$$\begin{aligned} I_{\vec{e}}(\omega) &\propto |D_{i_v, i_c}(\vec{e})|^2 \\ &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{-i\phi} \langle g_{i_v, 3/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta \langle g_{i_v, 1/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{i\phi} \langle g_{i_v, -1/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle \right|^2 \\ &= \left| \sin \theta \left(\frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) e^{-i\phi} \langle g_{i_v, 3/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) e^{i\phi} \langle g_{i_v, -1/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle \right) - \cos \theta \sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i_v, 1/2}^v | f_{i_c, 1/2}^c \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

同理可得知，當 $\Psi_{i_c}^c(\vec{r}) = g_{i_c, -1/2}^c(\vec{r}) u_{c, -1/2}(\vec{r})$ (圖 3.1.1(b))，發光強度為：

$$\begin{aligned} I_{\vec{e}}(\omega) &\propto |D_{j, i}(\vec{e})|^2 \\ &= \left| \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{-i\phi} \langle g_{i_v, 1/2}^v | f_{i_c, -1/2}^c \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta \langle g_{i_v, -1/2}^v | f_{i_c, -1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{i\phi} \langle g_{i_v, -3/2}^v | f_{i_c, -1/2}^c \rangle \right|^2 \end{aligned}$$

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

再由偏振的定義 $\text{Polarization} = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}}$ 即可求得電子與電洞不同狀態躍遷的偏振強度。

度。

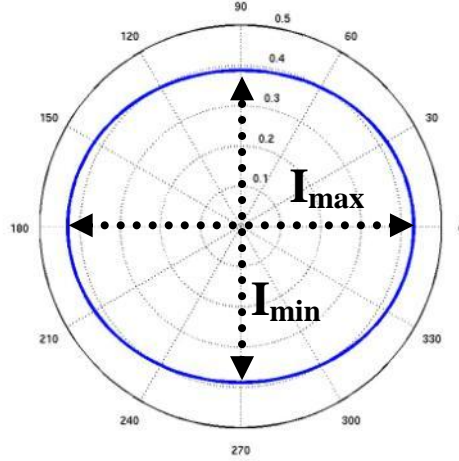


圖 3.1.2、偏振強度的定義示意圖，此圖為高度 5nm、長 20nm、寬 18nm 的 XY 平面發光強度與角度關係圖

若只考慮 XY 平面的偏振強度，將 $\theta = \frac{\pi}{2}$ 代入式子(3.1.5)與(3.1.6)：

當 $\Psi_{i_c}^c(\vec{r}) = f_{i_c,1/2}^c(\vec{r}) u_{c,1/2}(\vec{r})$ ，

$$I_{\vec{e}}(\omega) \propto \left| \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) e^{-i\phi} \langle g_{i_v,3/2}^v | f_{i_c,1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) e^{i\phi} \langle g_{i_v,-1/2}^v | f_{i_c,1/2}^c \rangle \right|^2 \quad (3.1.7)$$

$$I_{\vec{e}}(\omega) \propto \left| \begin{aligned} & p_{cv}(\vec{0}) \cos \phi \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v,3/2}^v | f_{i_c,1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v,-1/2}^v | f_{i_c,1/2}^c \rangle \right) \\ & + i p_{cv}(\vec{0}) \sin \phi \left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i_v,3/2}^v | f_{i_c,1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i_v,-1/2}^v | f_{i_c,1/2}^c \rangle \right) \end{aligned} \right|^2 \quad (3.1.8)$$

當 $\Psi_{i_c}^c(\vec{r}) = f_{i_c,-1/2}^c(\vec{r}) u_{c,-1/2}(\vec{r})$ ，

$$I_{\vec{e}}(\omega) \propto \left| \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) e^{-i\phi} \langle g_{i_v,1/2}^v | f_{i_c,-1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) e^{i\phi} \langle g_{i_v,-3/2}^v | f_{i_c,-1/2}^c \rangle \right|^2, \quad (3.1.9)$$

$$I_{\vec{e}}(\omega) \propto \left| \begin{aligned} & p_{cv}(\vec{0}) \cos \phi \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \langle g_{i,1/2}^v | f_{i,-1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i,-3/2}^v | f_{i,-1/2}^c \rangle \right) \\ & + i p_{cv}(\vec{0}) \sin \phi \left(\frac{-1}{\sqrt{6}} \langle g_{i,1/2}^v | f_{i,-1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle g_{i,-3/2}^v | f_{i,-1/2}^c \rangle \right) \end{aligned} \right|^2 \quad (3.1.10)$$

以式子(3.1.8)為例，式子中 $\langle g_{i,3/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle$ 為重電洞與電子波包函數重疊比例、

$\langle g_{i,-1/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle$ 為自旋(-1/2)的輕電洞與電子波包函數重疊比例，偏振則受到重疊比例的影響。

響。

由附錄 B 可知，偏振與電子、輕重電洞波包函數的關係為

$$\text{Pol} = \frac{\sqrt{12} \left| \langle g_{i,-1/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right| \left| \langle g_{i,3/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right|}{\left| \langle g_{i,-1/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right|^2 + 3 \left| \langle g_{i,3/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right|^2} \quad (3.1.11)$$

由圖(3.1.3)可知，可假設

$$\left| \langle g_{j,3/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right| \lesssim 100\%$$

$$\left| \langle g_{j,3/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right| < 100\%$$

$$\left| \langle g_{j,-1/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right| \ll 100\%$$

所以偏振可簡化為，

$$\text{Pol} \approx \frac{\sqrt{12}}{3} \left| \langle g_{i,-1/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right| \quad (3.1.12)$$

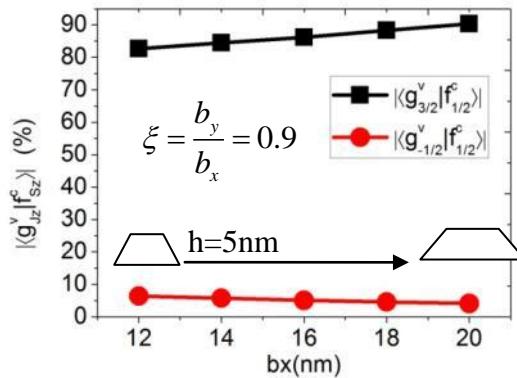


圖 3.1.3、 $\xi = 0.9$ ， $h=5(\text{nm})$ 的截角金字塔形狀量子點中，電子與輕重電洞波包函數的重疊率。

在數值計算時，使用較為精準的六能帶模型，但由於 split off 對輕重電洞的影響較小，所以利用簡單模型分析時，忽略 split off 而使用四能帶模型，並根據波包近似法可得到

$$-\begin{bmatrix} P+Q-V & -S & R & 0 \\ -S^\dagger & P-Q-V & 0 & R \\ R^\dagger & 0 & P-Q-V & S \\ 0 & R^\dagger & S^\dagger & P+Q-V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{i_v,3/2}^v \\ g_{i_v,1/2}^v \\ g_{i_v,-1/2}^v \\ g_{i_v,-3/2}^v \end{bmatrix} = E_{i_v} \begin{bmatrix} g_{i_v,3/2}^v \\ g_{i_v,1/2}^v \\ g_{i_v,-1/2}^v \\ g_{i_v,-3/2}^v \end{bmatrix} \quad (3.1.13)$$

式子(3.1.13)中的矩陣元素與表(2.1.1)相同，矩陣的基底為 $|J=3/2, J_z=3/2\rangle$ 、

$|J=3/2, J_z=1/2\rangle$ 、 $|J=3/2, J_z=-1/2\rangle$ 、 $|J=3/2, J_z=-3/2\rangle$ 。

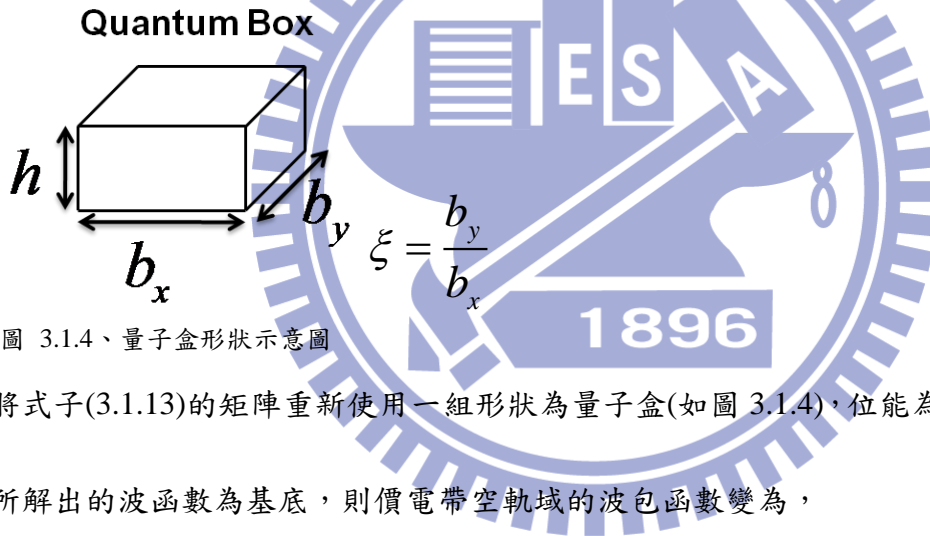


圖 3.1.4、量子盒形狀示意圖

將式子(3.1.13)的矩陣重新使用一組形狀為量子盒(如圖 3.1.4)，位能為三維無窮深位能井所解出的波函數為基底，則價電帶空軌域的波包函數變為，

$$g_{i_v, J_z}^v = \sum_{J_z} \sum_{i_v} c_{i_v}^{J_z} \phi_{i_v} \approx \sum_{J_z} c_1^{J_z} \phi_1 \quad (3.1.14)$$

電子的波包函數為，

$$g_{i_c, s_z}^c = \sum_{i_c} c_{i_c}^{s_z} \phi_{i_c} \approx c_1^{s_z} \phi_1 \approx \phi_1 \quad (3.1.15)$$

其中 ϕ_1 為三微無窮深位能井基態波函數。則式子(3.1.12)可整理成

$$\begin{aligned} \text{Pol} &\approx \frac{\sqrt{12}}{3} \left| \left\langle g_{i_v,3/2}^v \left| f_{i_c,1/2}^c \right. \right\rangle \right| \\ &= \frac{\sqrt{12}}{3} \left| \int d\vec{r} (c_1^{-1/2} \phi_1(\vec{r}))^* \phi_1(\vec{r}) \right| \end{aligned}$$

$$= \frac{\sqrt{12}}{3} |c_1^{-1/2}| \quad (3.1.16)$$

其中 $c_1^{-1/2}$ 表示自旋(-1/2)輕電洞的成分，式子(3.1.13)用新的基底展開後變成，

$$- \begin{bmatrix} \langle P+Q-V \rangle & \langle -S \rangle & \langle R \rangle & 0 \\ \langle -S^\dagger \rangle & \langle P-Q-V \rangle & 0 & \langle R \rangle \\ \langle R^\dagger \rangle & 0 & \langle P-Q-V \rangle & \langle S \rangle \\ 0 & \langle R^\dagger \rangle & \langle S^\dagger \rangle & \langle P+Q-V \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^{3/2} \\ c_1^{1/2} \\ c_1^{-1/2} \\ c_1^{-3/2} \end{bmatrix} = E_i \begin{bmatrix} c_1^{3/2} \\ c_1^{1/2} \\ c_1^{-1/2} \\ c_1^{-3/2} \end{bmatrix} \quad (3.1.17)$$

其中矩陣的基底依序為 $|\phi_1\rangle |J=3/2, J_z=3/2\rangle$ 、 $|\phi_1\rangle |J=3/2, J_z=1/2\rangle$ 、

$|\phi_1\rangle |J=3/2, J_z=-1/2\rangle$ 、 $|\phi_1\rangle |J=3/2, J_z=-3/2\rangle$ 。在此定義不考慮輕重電洞耦合的輕重

電洞基態能量差 Δ_{lh} ，重電洞基態能量為

$$E_1^{HH} = \langle P+Q \rangle$$

輕電洞基態能量為

$$E_1^{LH} = \langle P-Q \rangle$$

不考慮輕重電洞耦合的輕重電洞基態能量差 Δ_{lh} 為

$$\begin{aligned} \Delta_{lh} &= E_1^{HH} - E_1^{LH} \\ &= 2\langle Q \rangle \end{aligned}$$

由附錄 C 可得到，

$$|c_1^{-1/2}| = \left| \frac{\langle R \rangle}{2\Delta_{lh}} \right|$$

$$|c_1^{-1/2}| = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{h^2}{b_y^2} (1-\xi^2) \quad (3.1.18)$$

將式子(3.1.18)代入(3.1.16)，

$$\text{Pol} \approx \frac{\sqrt{12}}{3} |c_1^{-1/2}|$$

$$\text{Pol} \approx \frac{1}{2} \frac{h^2}{b_y^2} (1 - \xi^2) \quad (3.1.19)$$

由此可了解到， Δ_{lh} 越小，輕電洞成分越多，則偏振越強。式子(3.1.19)可了解偏振與量子點高度，大小與不對稱性的定性關係。在下個章節各種量子點的分析，由簡單模型得到可幫助我們了解數值計算的結果。



3.2、應變效應對輕重電洞能量的影響

先針對較典型的量子點做討論，量子點材料內部為 InAs，外部為 GaAs，形狀為截角金字塔，高度為 5nm，長為 20nm，寬為 18nm。在此定義原點在量子點中心，長軸大小為 b_x 沿著 x 方向，短軸大小為 b_y 沿著 y 方向，高為 h 沿著 z 方向，而長寬不對稱性的定義為 $\xi = b_y / b_x$

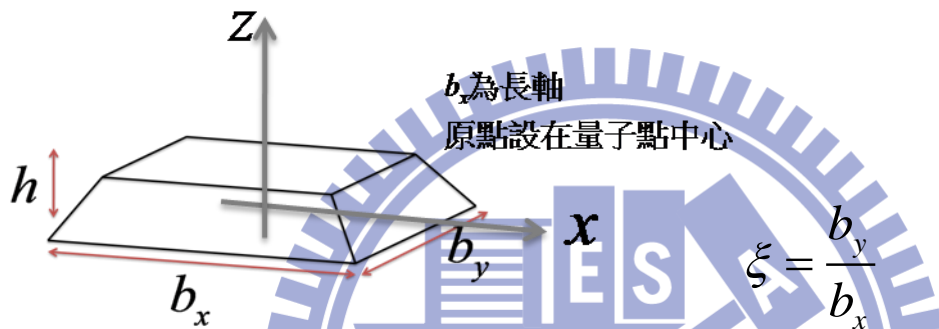


圖 3.2.1、截角金字塔形狀量子點示意圖

此外，材料中的晶格不匹配會產生應變效應，晶格常數小的材料晶格會被拉大，而晶格常數大的材料晶格則被縮小，這些現象在交界面上最為顯著，最終將達到平衡狀態。量子點內的 InAs 的晶格常數較外部的 GaAs 大，晶格不匹配程度大約為 7%，此效應造成量子點的位能改變[7] [8]。

在 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 單能帶模型中，量子點內電子的等效位能如下式：

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

$$\Delta E_c'(\vec{r}) = \Delta E_c + V_c^{strain}(\vec{r}) \quad (3.2.1)$$

其中， ΔE_c 為電子在量子點中所感受到的位能高度。在 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 六能帶模型中，量子點內重電洞的等效位能如下式：

$$\begin{aligned}
V_{HH}^{strain}(\vec{r}) &= -P_\varepsilon - Q_\varepsilon \\
P_\varepsilon &= -a_v(\varepsilon_{xx}(\vec{r}) + \varepsilon_{yy}(\vec{r}) + \varepsilon_{zz}(\vec{r})), \quad Q_\varepsilon = -\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx}(\vec{r}) + \varepsilon_{yy}(\vec{r}) - 2\varepsilon_{zz}(\vec{r})) \\
\Delta E'_{HH}(\vec{r}) &= \Delta E_v + V_{HH}^{strain}(\vec{r})
\end{aligned} \tag{3.2.2}$$

$\vec{k} \cdot \vec{p}$ 四能帶模型的輕電洞等效位能：

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

$\vec{k} \cdot \vec{p}$ 六能帶模型的輕電洞等效位能：

$$\begin{aligned}
V_{LH}^{strain}(\vec{r}) &= -P_\varepsilon + \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta + \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2} \right) \\
P_\varepsilon &= -a_v(\varepsilon_{xx}(\vec{r}) + \varepsilon_{yy}(\vec{r}) + \varepsilon_{zz}(\vec{r})), \quad Q_\varepsilon = -\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx}(\vec{r}) + \varepsilon_{yy}(\vec{r}) - 2\varepsilon_{zz}(\vec{r})) \\
\Delta E'_{LH}(\vec{r}) &= \Delta E_v + V_{LH}^{strain}(\vec{r})
\end{aligned} \tag{3.2.3}$$

其中 ε_{ij} 為應變量， i 為形變方向、 j 為參考軸方向。量子點中應變的形為類似於塊材的雙軸應變，所以我們先考慮 InAs 塊材受到雙軸應變後輕重電洞與電子在 Γ 點的能量變化。

雙軸應變施加的方向為 XY 方向，應變張量為

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\parallel} \\
\varepsilon_{zz} &= \varepsilon_{\perp} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{\parallel}
\end{aligned}$$

其中 ε_{\parallel} 為量子點垂直方向(Z 方向)的應變， ε_{\perp} 為量子點平行方向(XY 方向)的應變。塊材中電子的能量變化為

$$\begin{aligned}
V_c^{strain}(\vec{r}) &= a_c(\varepsilon_{xx}(\vec{r}) + \varepsilon_{yy}(\vec{r}) + \varepsilon_{zz}(\vec{r})) \\
&= a_c \left(2 - \frac{2C_{12}}{C_{11}} \right) \varepsilon_{\parallel}
\end{aligned} \tag{3.2.4}$$

塊材中重電洞的能量變化為

$$\begin{aligned}
V_{HH}^{strain} &= -P_{\varepsilon} - Q_{\varepsilon} \\
&= -\left(-a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})\right) - \left(-\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})\right) \\
&= a_v(\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) + \frac{b}{2}(\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\parallel} - 2\varepsilon_{\perp}) \\
V_{HH}^{strain} &= (2a_v + b)\varepsilon_{\parallel} + (a_v - b)\varepsilon_{\perp} \tag{3.2.5}
\end{aligned}$$

塊材中四能帶模型輕電洞的能量變化為

$$\begin{aligned}
V_{LH}^{strain} &= -P_{\varepsilon} + Q_{\varepsilon} \\
&= -\left(-a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})\right) + \left(-\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})\right) \\
&= a_v(\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) - \frac{b}{2}(\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\parallel} - 2\varepsilon_{\perp}) \\
V_{LH}^{strain} &= (2a_v - b)\varepsilon_{\parallel} + (a_v + b)\varepsilon_{\perp} \tag{3.2.6}
\end{aligned}$$

由式子(3.2.4-6)可得到 InAs 的塊材外加雙軸應變，電子與輕重電洞在 Γ 點的能量變化。

如圖(3.2.2)，由於雙軸應變施加的方向為 XY 方向，Z 方向為自由膨脹，所以 XY 方向的形狀變化趨勢與 Z 方向將會相反。討論 Γ 點的能量變化時，Z 方向的變化為很重要的因素。由圖(3.2.3(b)(c))可知，不考慮 Z 方向變化時，雙軸壓縮應變造成輕重電洞能量均下降，雙軸拉伸應變造成輕重電洞能量均上升，而考慮 Z 方向變化時，雙軸壓縮應變將造成重電洞能量上升，雙軸拉伸應變造成重電洞能量下降。最後將 InAs 的材料參數代入式子(3.2.5-6)可得知重電洞能量變化以垂直方向的應變為主要貢獻，輕電洞能量變化以水平方向應變為主要貢獻。

$$V_{HH}^{strain} = 0.2\varepsilon_{\parallel} + \boxed{2.8\varepsilon_{\perp}}$$

$$V_{LH}^{strain} = \boxed{3.8\varepsilon_{\parallel}} - 0.8\varepsilon_{\perp}$$

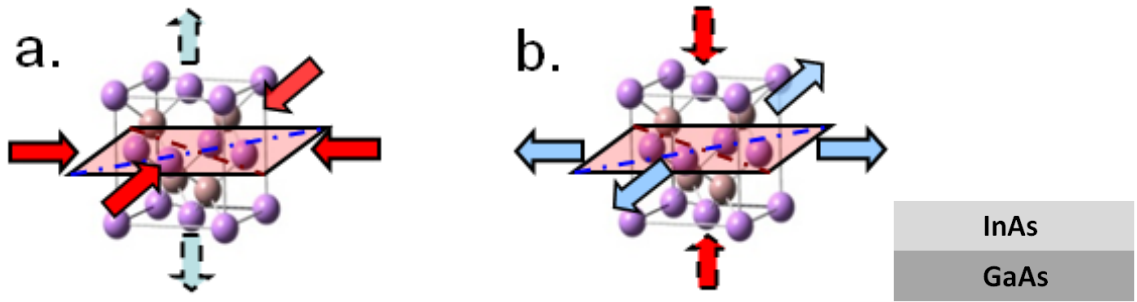


圖 3.2.2、塊材外加雙軸應變的示意圖。(a)XY 方向壓縮。(b)XY 方向膨脹

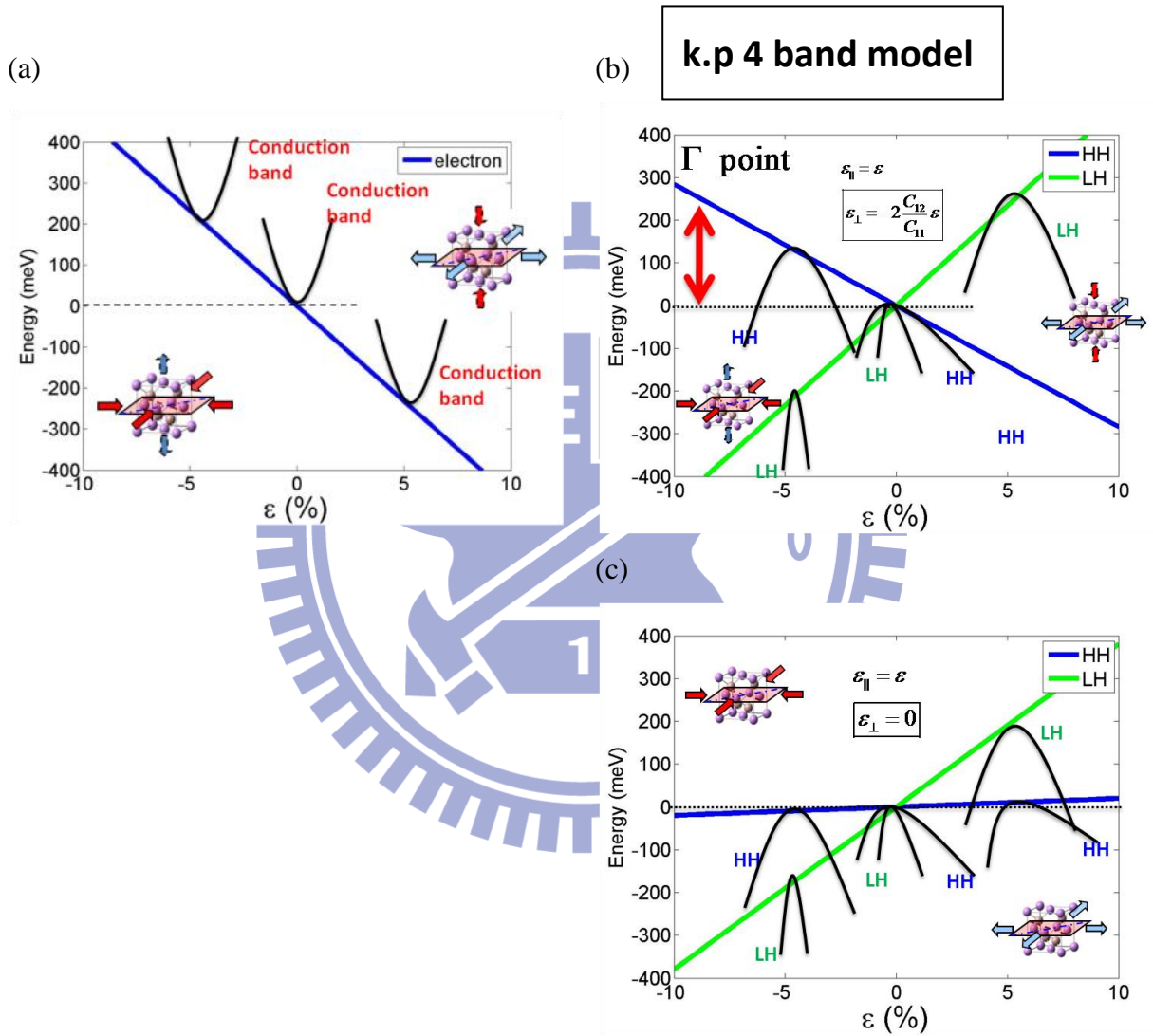


圖 3.2.3、InAs 的塊材在四能帶模型外加雙軸應變，電子與輕重電洞在 Γ 點的能量變化。(a)電子能量。(b)考慮 Z 方向變化的輕重電洞能量。(c)忽略 Z 方向變化的輕重電洞能量。

本論文中所計算的量子點均使用 k.p 六能帶模型，塊材中六能帶模型輕電洞與應變的關係為：

係為：

$$V_{LH}^{strain} = (2a_v - b)\varepsilon_{\parallel} + (a_v + b)\varepsilon_{\perp} + \frac{9}{4} \frac{[-b(\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp})]^2}{\Delta}$$

$$= 3.8\varepsilon_{\parallel} - 0.8\varepsilon_{\perp} + \boxed{19.18(\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp})^2}$$

其中 a_v, b 為 InAs 的材料參數。圖(3.2.4(a))為 InAs 的塊材在六能帶模型中受到雙軸應變的輕重電洞能量變化，重電洞的變化與四能帶模型相同，但輕電洞在六能帶模型中多了 split off 的效應，在雙軸壓縮應變效應較大時，能量變化的趨勢往上升，與四能帶模型有所差異。若忽略 Z 方向的應變(圖 3.2.4(b))，輕電洞能量變化的趨勢與四能帶相同，由此可知，雙軸壓縮應變效應較大時，Z 方向的應變對輕電洞有很大的影響。

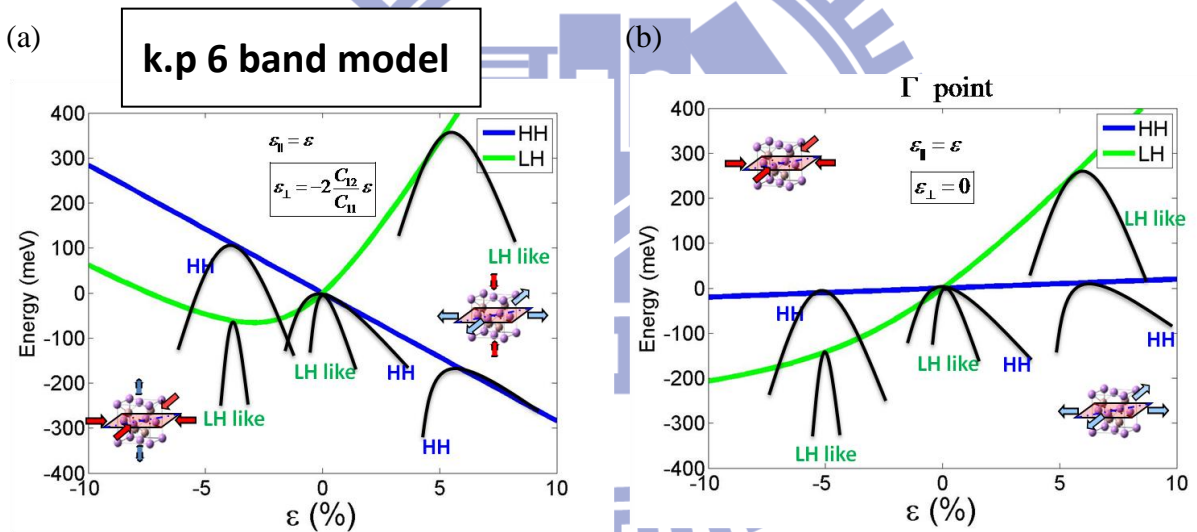


圖 3.2.4、InAs 的塊材在六能帶模型外加雙軸應變，輕重電洞在 Γ 點的能量變化。(a)考慮 Z 方向應變的輕重電洞能量。(b)忽略 Z 方向應變的輕重電洞能量。

了解 k.p 四能帶模型與六能帶模型在雙軸應變效應下輕重電洞能量的變化，現在考慮形狀為量子盒，在量子點內外加理想的雙軸壓縮應變效應 $\varepsilon_{\parallel} = -7\%$ (圖 3.2.5)。在雙軸壓縮應變效應下，可發現量子點內輕重電洞位能變化的趨勢與能帶理論相同。如圖 (3.2.6(a))壓縮造成重電洞能量上升，輕電洞能量下降。若忽略 Z 方向應變效應(圖 3.2.6(b))，

則輕重電洞能量均下降。

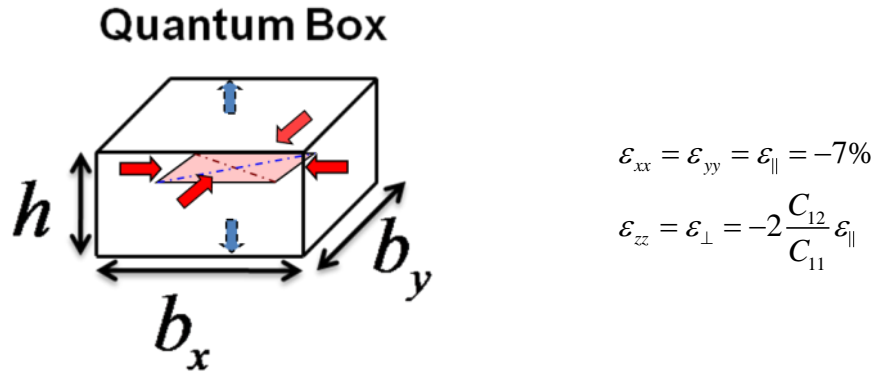


圖 3.2.5、量子盒內外加理想的雙軸應變

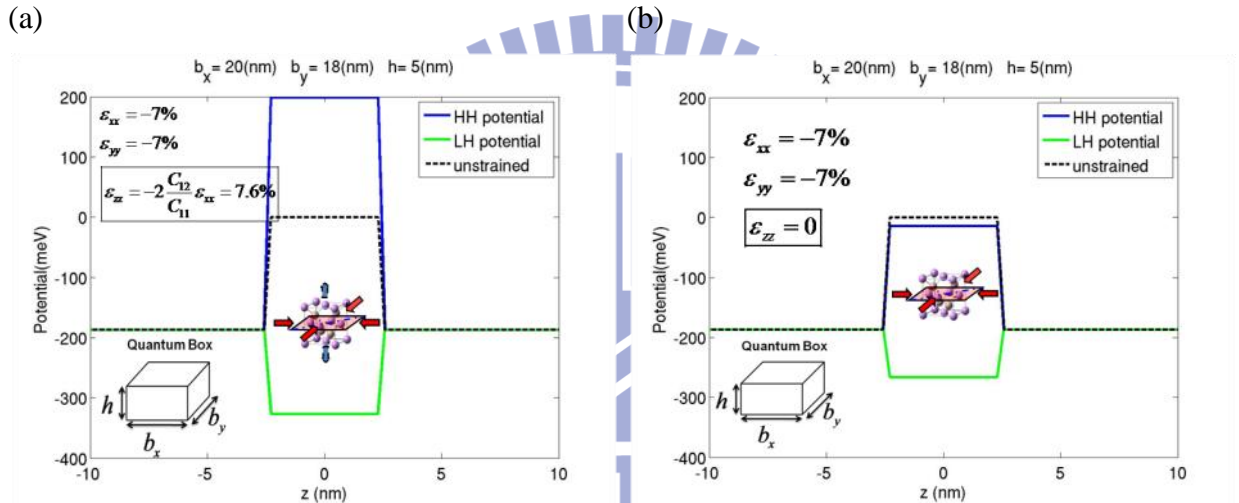


圖 3.2.6、 $b_x = 20 \text{ (nm)}$ ， $b_y = 18 \text{ (nm)}$ ， $h = 5 \text{ (nm)}$ 的量子盒形狀量子點外加雙軸壓縮應變 $\varepsilon_{\parallel} = -7\%$ ，於量子點內部的輕重電洞位能。(a)考慮Z方向應變效應。(b)忽略Z方向的應變效應。

以上討論量子點內為理想的雙軸應變。本論文中使用有限元素法的套裝軟體 *Comsol*

multiphysics® 計算量子點內外的應變。由圖(3.2.7(b))可知，量子點內 Z 方向膨脹，XY 方向壓縮，而量子點外 XY 方向膨脹，Z 方向壓縮。量子盒形狀的量子點的應變類似於雙軸應變效應，量子點內類似雙軸壓縮效應，量子點外類似雙軸拉伸效應。由塊材的四能帶模型可知，雙軸壓縮與拉伸的效應對輕重電洞能量造成相反的趨勢，所以如圖

(3.2.7(a))量子點內部重電洞能量上升，輕電洞能量下降，量子點外部則與內部相反。若考慮六能帶模型，由塊材理論可知(圖 3.2.4(a))，輕電洞能量在雙軸壓縮應變效應較大時，

將會由下降的趨勢轉為上升，所以在量子點內類似雙軸壓縮效應時，六能帶模型的輕電洞能量將會比四能帶模型高(圖 3.2.8)。

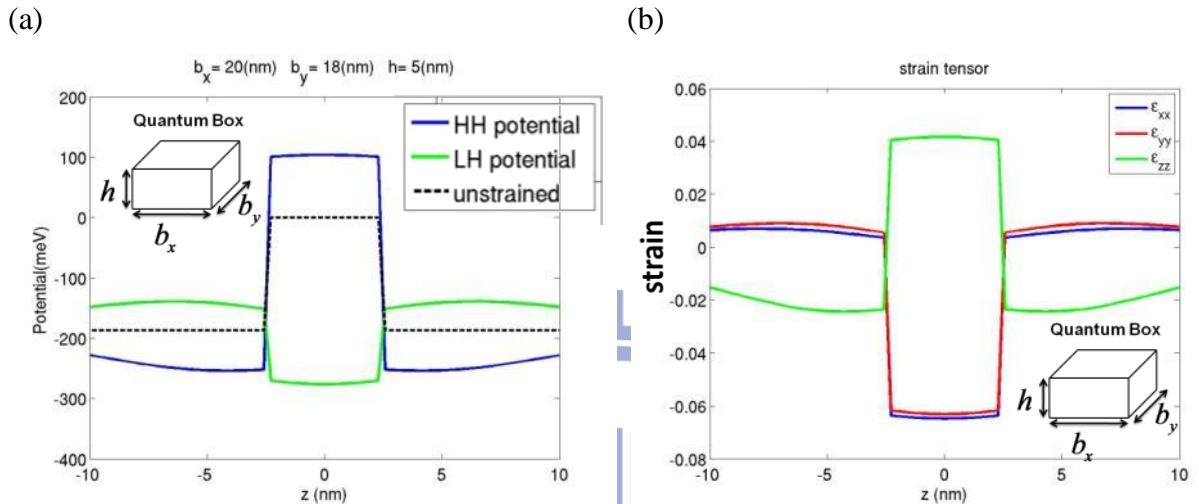


圖 3.2.7、 $b_x = 20$ (nm)， $b_y = 18$ (nm)， $h = 5$ (nm)的量子盒形狀量子點。(a)輕重電洞位能。(b)使用 *Comsol multiphysics*® 所計算的應變。

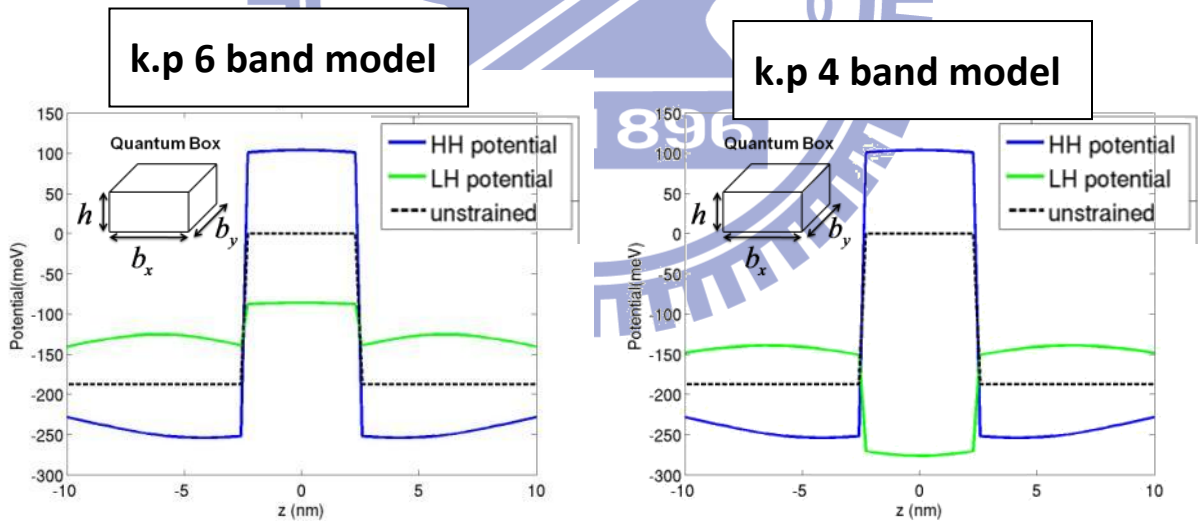


圖 3.2.8、 $b_x = 20$ (nm)， $b_y = 18$ (nm)， $h = 5$ (nm)的量子盒形狀量子點的輕重電洞位能。(a)六能帶模型。(b)四能帶模型。

真實的量子點形狀較接近於截角金字塔，由簡單的量子盒得到一些應變與位能的概
念後，以下開始討論較真實的截角金字塔形狀量子點。由圖(3.2.9)可知，電子受到類似

雙軸壓縮應變的效應能量上升，與塊材理論趨勢相同(圖 3.2.3(a))。

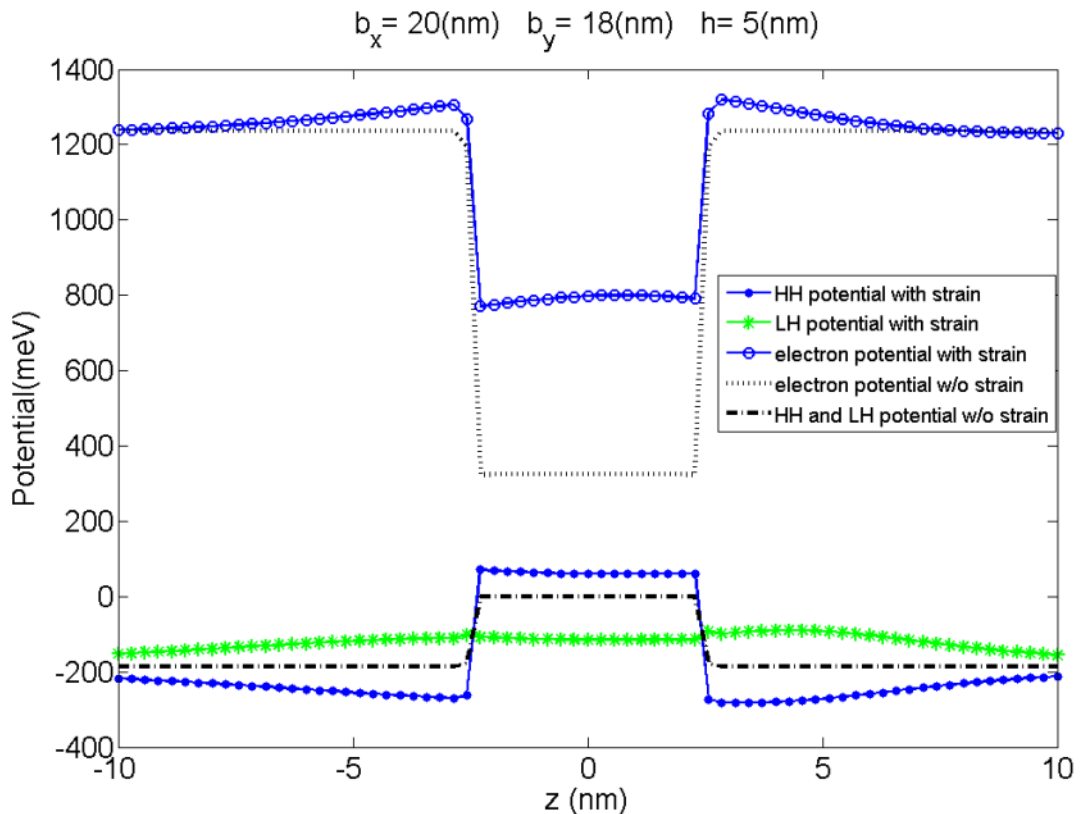


圖 3.2.9、高 $h = 5\text{nm}$ ，長 $b_x = 20\text{nm}$ ，寬 $b_y = 18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點考慮應變效應對電子與輕重電洞位能的變化。

量子盒與截角金字塔由於形狀的不同，所以應變也有所差異。由圖(3.2.10)的形變示意圖可知，截角金字塔由於邊界為斜邊的影響使得 Z 方向膨脹量縮小，此效應在量子點頂端最為明顯，所以 ε_{zz} 在量子點底部最大，量子點頂端最小(如圖 3.2.11(a))。量子點的應變類似於雙軸效應，所以 Z 方向膨脹量縮小連帶使得 XY 方向壓縮量減少。而量子點界面內外不同的材料為了維持相同的晶格長度，內部的 InAs 的 XY 方向壓縮量減少，這將會使得外部的 GaAs 的 XY 膨脹量增大。所以量子點外 Z 方向的壓縮量變得更大。由圖(3.2.4(a))塊材的六能帶模型可知，當 ε 較大時，輕電洞能量上升，重電洞能量下降。

所以圖(3.2.11(c)(d))量子點外能量變化趨勢與塊材理論相同。

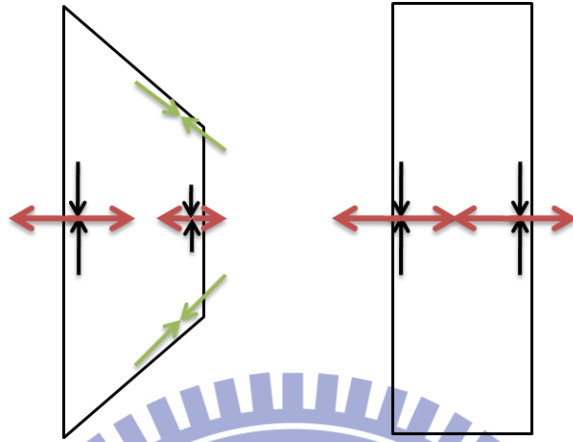


圖 3.2.10、截角金字塔與量子盒形狀量子點的形變示意圖

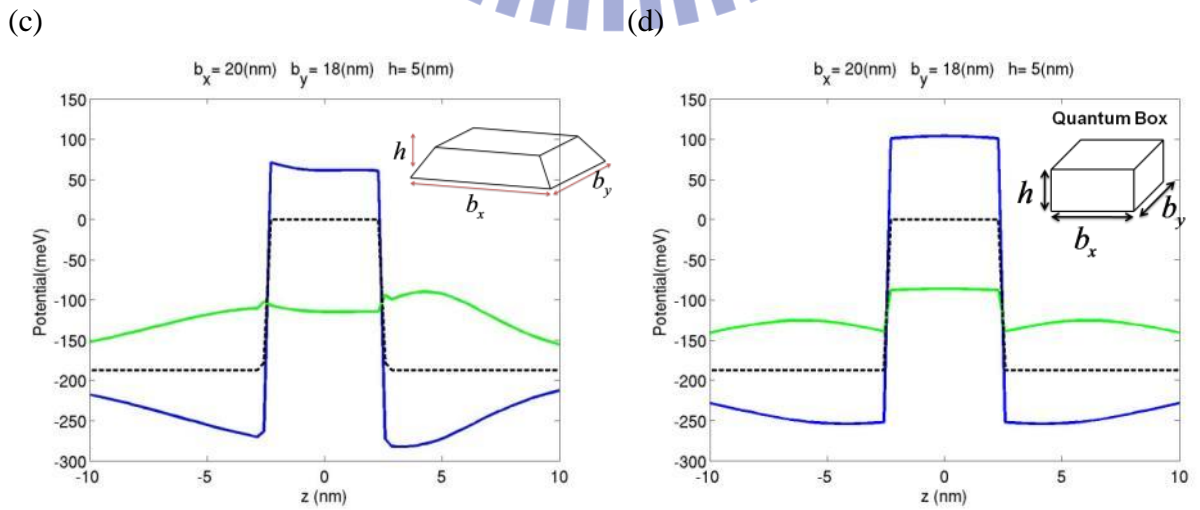
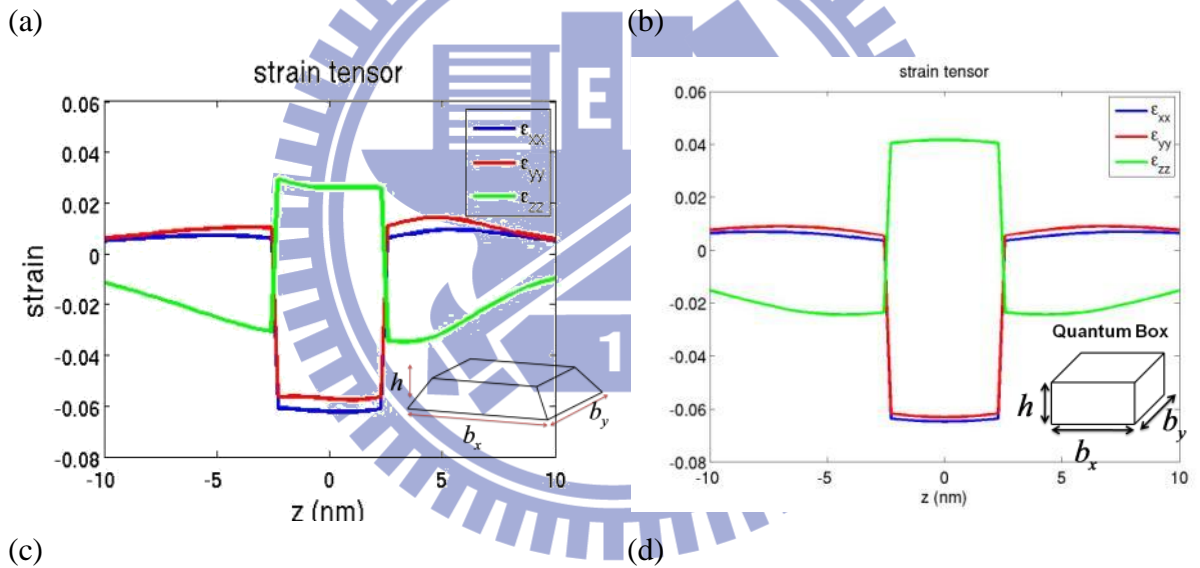


圖 3.2.11、 $b_x = 20$ (nm), $b_y = 18$ (nm), $h = 5$ (nm) 的量子點應變。(a)截角金字塔。(b)量子盒。量子點輕重電洞的位能。(c)截角金字塔。(d)量子盒。

截角金字塔與量子盒的應變差異在於截角金字塔量子點頂端的 Z 方向膨脹量較小，當量子點逐漸變高時，量子點斜邊的效應越來越大，頂端 Z 方向的膨脹量將會越來越小，到達一定高度時 Z 方向將會轉為壓縮的效應(圖 3.2.12)。所以量子點底部的應變類似雙軸壓縮應變，越往頂端雙軸壓縮效應越來越弱，體應變的效應則越來越強。如圖(3.2.13(a))，量子點底部類似雙軸壓縮效應，而頂端則變成 X、Y 與 Z 三個方向均為壓縮。所以量子點底部的位能變化可由圖(3.2.13(c))的六能帶模型雙軸效應的塊材理論分析能量變化，A 點到 B 點可看出輕重電洞能量均下降，圖(3.2.13(b))也得知 A 點到 B 點的輕重電洞位能均下降。而 B 點到 C 點的雙軸效應較弱，體應變效應較強，所以由圖(3.2.13(d))得知，輕重電洞能量均上升，但量子點頂端仍然有較弱的雙軸效應，所以由圖(3.2.13(b))可看出 B 點到 C 點的能量變化趨勢介於雙軸效應與體應變效應兩者之間，能量下降較為平緩，C 點之後則有微微上升的趨勢。

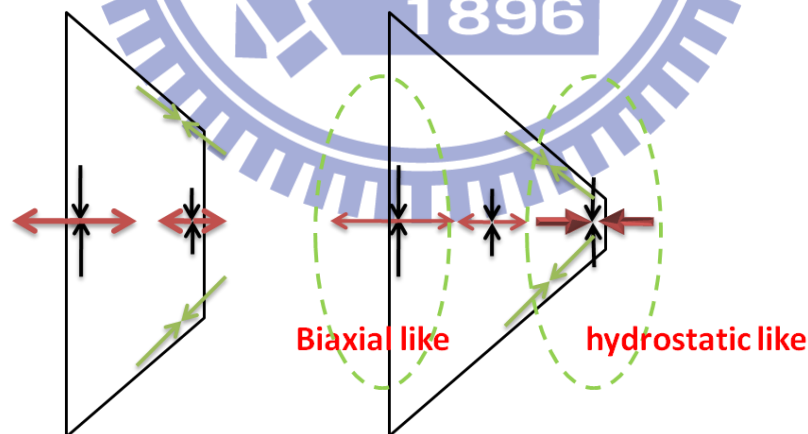


圖 3.2.12、截角金字塔形狀量子點高度變高的形變示意圖

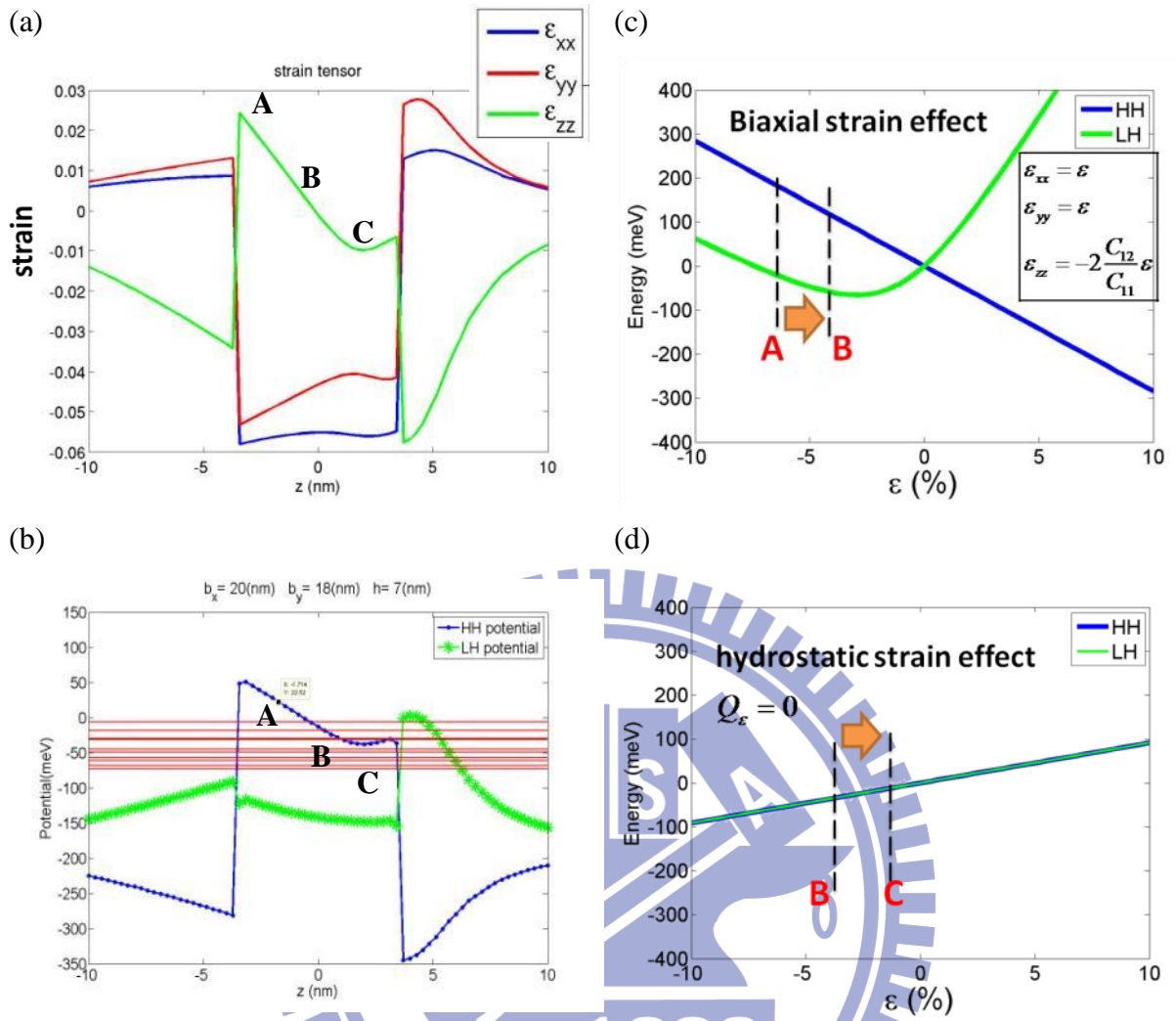


圖 3.2.13、 $b_x = 20$ (nm)， $b_y = 18$ (nm)， $h = 7$ (nm) 的量子點。(a) 應變分布。(b) 輕重電洞位能。InAs 的塊材六能帶模型的 Γ 點能量變化。(c) 考慮雙軸應變效應的整體能量變化。(d) 忽略雙軸效應，只剩下體應變效應的能量變化。

3.3、輕重電洞耦合與光學異向性

由以上可得知位能的變化之後，接著討論電子與輕重電洞的電子結構與波函數。使用單能帶模型計算電子，六能帶模型計算輕重電洞，而計算輕重電洞時分兩部分討論：不考慮輕重電洞耦合，討論能階與波函數的變化；考慮輕重電洞耦合，了解真實情況量子點內的能階與波函數。

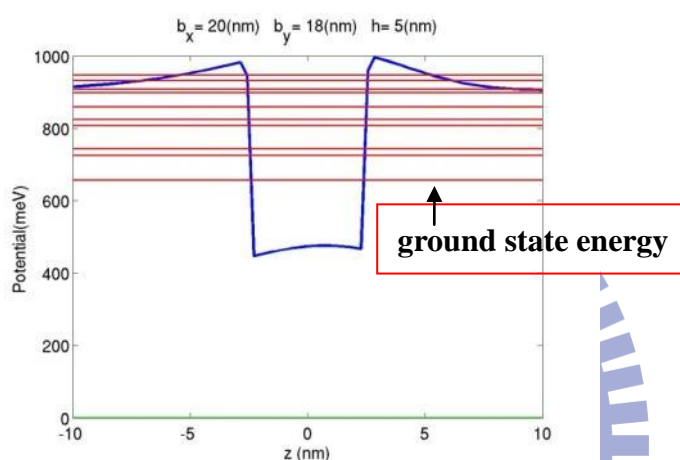


圖 3.3.1、高 $h = 5$ nm，長 $b_x = 20$ nm，寬 $b_y = 18$ nm 截角金字塔形狀量子點的電子位能與能階。

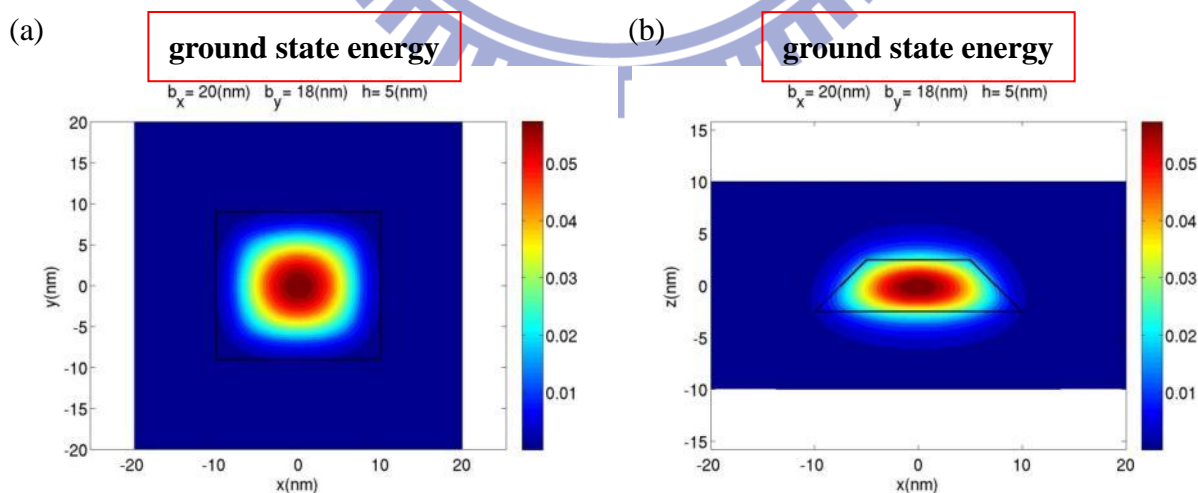


圖 3.3.2、高 $h = 5$ nm，長 $b_x = 20$ nm，寬 $b_y = 18$ nm 截角金字塔形狀量子點的電子基態波函數。(a) $z = 0$ (nm) 的 XY 平面。(b) $y = 0$ (nm) 的 XZ 平面。

由圖(3.3.2)可得知電子的基態波函數在量子點中為球對稱的形式。輕重電洞的部分先討論不考慮輕重電洞耦合的情況，在六能帶模型中，若不考慮輕重電洞耦合，即是不考慮矩陣中的非對角線項，則矩陣變成，

$$H^{LK} = \begin{bmatrix} P+Q & \cancel{S} & \cancel{R} & 0 & \cancel{-S\sqrt{2}} & \cancel{\sqrt{2}R} \\ \cancel{S^\dagger} & P-Q & 0 & \cancel{R} & -\sqrt{2}Q & \cancel{\sqrt{3}\sqrt{2}S} \\ \cancel{R} & 0 & P-Q & \cancel{S} & \cancel{\sqrt{3}\sqrt{2}S^\dagger} & \sqrt{2}Q \\ 0 & \cancel{R} & \cancel{S} & P+Q & \cancel{-\sqrt{2}R^\dagger} & \cancel{-S\sqrt{2}} \\ \cancel{-S\sqrt{2}} & -\sqrt{2}Q^\dagger & \cancel{\sqrt{3}\sqrt{2}S} & \cancel{\sqrt{2}R} & P+\Delta & 0 \\ \cancel{\sqrt{2}R^\dagger} & \cancel{\sqrt{3}\sqrt{2}S^\dagger} & \sqrt{2}Q^\dagger & \cancel{-S\sqrt{2}} & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \begin{array}{l} |J=3/2, J_z=3/2\rangle \\ |J=3/2, J_z=1/2\rangle \\ |J=3/2, J_z=-1/2\rangle \\ |J=3/2, J_z=-3/2\rangle \\ |J=1/2, J_z=1/2\rangle \\ |J=1/2, J_z=-1/2\rangle \end{array} \quad (3.3.1)$$

不考慮非對角線項的情況下，六能帶模型將變為單能帶模型的數學形式。因此計算矩陣所得到的能階所對應的波函數均為純的重電洞或是純的輕電洞，此方法可找到重電洞與輕電洞的基態能量差，並且定義此能量差的值為 Δ_h 。先假設量子點系統的位能為三維無窮深位能井，形狀為量子盒，計算輕重電洞的能量，

$$\left[-(P+Q)+V \right] g_{n_x n_y n_z, 3/2}^v = E_{n_x n_y n_z}^{HH} g_{n_x n_y n_z, 3/2}^v \quad (3.3.2)$$

$$\left[-(P-Q)+V \right] g_{n_x n_y n_z, -1/2}^v = E_{n_x n_y n_z}^{LH} g_{n_x n_y n_z, -1/2}^v \quad (3.3.3)$$

其中， $E_{n_x n_y n_z}^{HH}$ 為重電洞能量， $E_{n_x n_y n_z}^{LH}$ 為輕電洞能量，位能 V 為，

$$V = \begin{cases} 0, & -\frac{b_x}{2} < x < \frac{b_x}{2} \quad \text{and} \quad -\frac{b_y}{2} < y < \frac{b_y}{2} \quad \text{and} \quad -\frac{h}{2} < z < \frac{h}{2} \\ \infty, & \text{else} \end{cases}$$

將表(2.1.1)的矩陣元素代入可得到，

$$\left[-\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left((\gamma_1 + \gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (\gamma_1 + \gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial y^2} + (\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right) + V \right] g_{n_x n_y n_z, 3/2}^v = E_{n_x n_y n_z}^{HH} g_{n_x n_y n_z, 3/2}^v$$

$$\left[-\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left((\gamma_1 - \gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (\gamma_1 - \gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial y^2} + (\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right) + V \right] g_{n_x n_y n_z, -1/2}^v = E_{n_x n_y n_z}^{LH} g_{n_x n_y n_z, -1/2}^v$$

由此可知，X、Y 方向重電洞的等效質量為 $1/(\gamma_1 + \gamma_2)$ 、輕電洞等效質量為 $1/(\gamma_1 - \gamma_2)$ ，而 Z 方向重電洞的等效質量為 $1/(\gamma_1 - 2\gamma_2)$ 、輕電洞等效質量為 $1/(\gamma_1 + 2\gamma_2)$ 。將此結果整理成下表，

表 3.3.1、輕重電洞在各方向的等效質量

	X 方向	Y 方向	Z 方向
重電洞(heavy hole)等效質量	$\frac{1}{(\gamma_1 + \gamma_2)}$ (較輕)	$\frac{1}{(\gamma_1 + \gamma_2)}$ (較輕)	$\frac{1}{(\gamma_1 - 2\gamma_2)}$ (較重)
輕電洞(light hole)等效質量	$\frac{1}{(\gamma_1 - \gamma_2)}$ (較重)	$\frac{1}{(\gamma_1 - \gamma_2)}$ (較重)	$\frac{1}{(\gamma_1 + 2\gamma_2)}$ (較輕)

由表(3.3.1)可知，重電洞在 Z 方向等效質量較重，在 XY 方向等效質量較輕。因現在所考慮的位能為三維無窮深位能井，所以求得的能量為

$$E_{n_x, n_y, n_z}^{HH} = -\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0} \left(\frac{n_x^2}{b_x^2} (\gamma_1 + \gamma_2) + \frac{n_y^2}{b_y^2} (\gamma_1 + \gamma_2) + \frac{n_z^2}{h^2} (\gamma_1 - 2\gamma_2) \right) \quad (3.3.4)$$

$$E_{n_x, n_y, n_z}^{LH} = -\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0} \left(\frac{n_x^2}{b_x^2} (\gamma_1 - \gamma_2) + \frac{n_y^2}{b_y^2} (\gamma_1 - \gamma_2) + \frac{n_z^2}{h^2} (\gamma_1 + 2\gamma_2) \right) \quad (3.3.5)$$

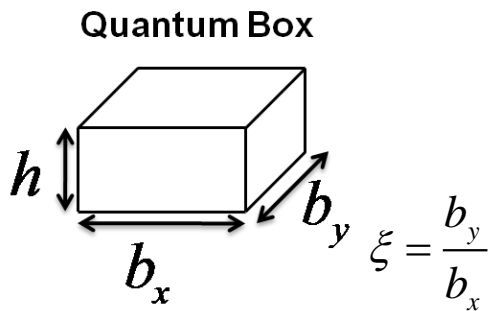


圖 3.3.3、量子盒形狀示意圖

當 $n_x = n_y = n_z = 1$ 時，即可求得輕重電洞的基態能量，所以無窮深位能井量子盒的輕重

電洞能量差 Δ_{lh} 為，

$$\begin{aligned}
\Delta_{lh} &= E_{111}^{HH} - E_{111}^{LH} \\
&= \frac{\hbar^2 \pi^2}{m_0} \gamma_2 \left(-\frac{1}{b_x^2} - \frac{1}{b_y^2} + \frac{2}{h^2} \right) \\
&= \frac{\hbar^2 \pi^2}{m_0} \gamma_2 \left(\frac{2}{h^2} - \frac{1}{b_y^2} (1 + \xi^2) \right)
\end{aligned} \tag{3.3.6}$$

式子(3.3.6)為簡單模型無窮深位能井的量子盒所得到的結果，此結果可幫助我們定性的了解截角金字塔量子點的數值結果。

圖(3.3.4)為不考慮輕重電洞耦合所計算得到的能態，若分析每個能態各波包函數所占的成分(表(3.3.2))可發現前幾個態均為 100% 的重電洞，直到第 11 個態才出現輕電洞的成分，由此可知第 11 個態為輕電洞的基態能量，所以輕重電洞的基態能量差

$$\Delta_{lh} = E_1 - E_{11} \text{。}$$

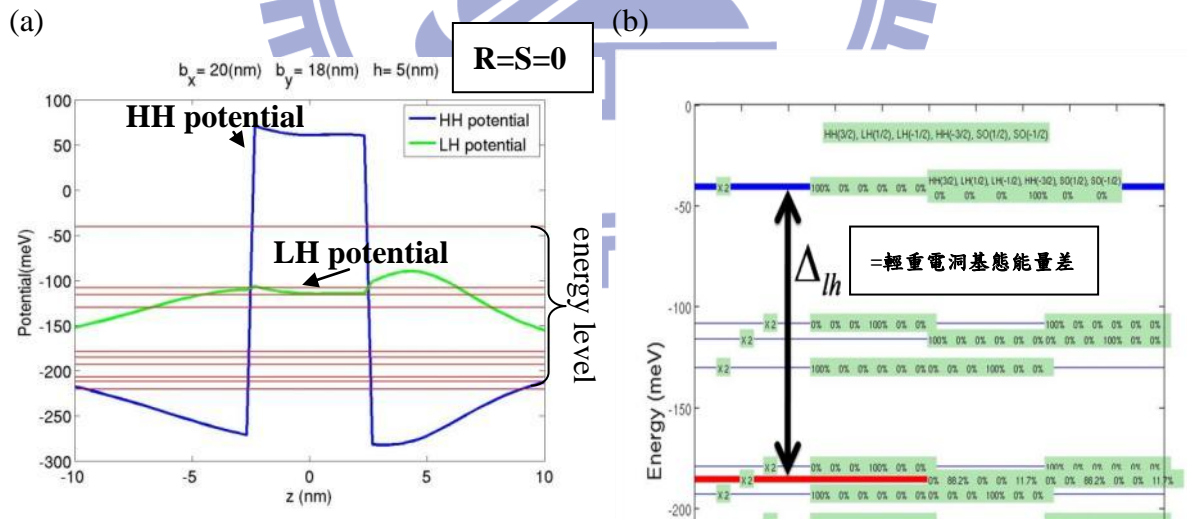


圖 3.3.4、 $h = 5 \text{ nm}$ ， $b_x = 20 \text{ nm}$ ， $b_y = 18 \text{ nm}$ 截角金字塔形狀量子點不考慮輕重電洞耦合的位能與能階。(a) 輕重電洞的位能。(b) 輕重電洞的能階，基態波函數為 100% 的重電洞，其中 Δ_{lh} 為輕重電洞基態能量差。

表 3.3.2、 $h=5\text{nm}$ ， $b_x=20\text{nm}$ ， $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點不考慮輕重電洞耦合時，各能態所對應的波包函數成分。

	HH(3/2)	LH(1/2)	LH(-1/2)	HH(-3/2)	SO(1/2)	SO(-1/2)
	$ \langle g_{i,-3/2}^v g_{i,-3/2}^v \rangle ^2$	$ \langle g_{i,-1/2}^v g_{i,-1/2}^v \rangle ^2$	$ \langle g_{i,-1/2}^v g_{i,-1/2}^v \rangle ^2$	$ \langle g_{i,-3/2}^v g_{i,-3/2}^v \rangle ^2$	$ \langle g_{i,1/2}^v g_{i,1/2}^v \rangle ^2$	$ \langle g_{i,-1/2}^v g_{i,-1/2}^v \rangle ^2$
E_1	100%	0%	0%	0%	0%	0%
E_2	100%	0%	0%	0%	0%	0%
E_3	100%	0%	0%	0%	0%	0%
E_4	100%	0%	0%	0%	0%	0%
E_5	100%	0%	0%	0%	0%	0%
E_6	100%	0%	0%	0%	0%	0%
E_7	100%	0%	0%	0%	0%	0%
E_8	100%	0%	0%	0%	0%	0%
E_9	100%	0%	0%	0%	0%	0%
E_{10}	100%	0%	0%	0%	0%	0%
E_{11}	0%	88%	0%	0%	12%	0%

若固定高度與不對稱性改變量子點的大小，即為 h 與 ξ 固定， b_y 改變，由於重電洞在水平方向的等效質量比輕電洞輕，所以當量子點變大時，重電洞能量上升的比輕電洞快，這將導致輕重電洞的基態能量差 Δ_{lh} 變大。

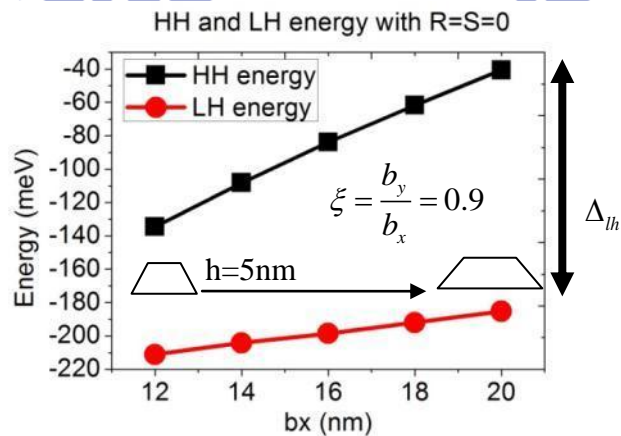


圖 3.3.5、高度 $h=5\text{nm}$ ， $\xi=0.9$ 的截角金字塔的量子點。量子點變大輕重電洞能量差 Δ_{lh} 隨之變大。

不考慮輕重電洞耦合的波函數在基態(ground state)的情況下，重電洞為 100%。因此若不考慮輕重電洞耦合，式子(3.1.7)將會變成 $I_{\bar{e}}(\omega) \propto \left| \left(1/\sqrt{2}\right) p_{cv}(\vec{0}) e^{-i\phi} \langle g_{i_v,3/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle \right|^2$ ，此時電子基態躍遷至電洞空軌域基態的偏振為 0。

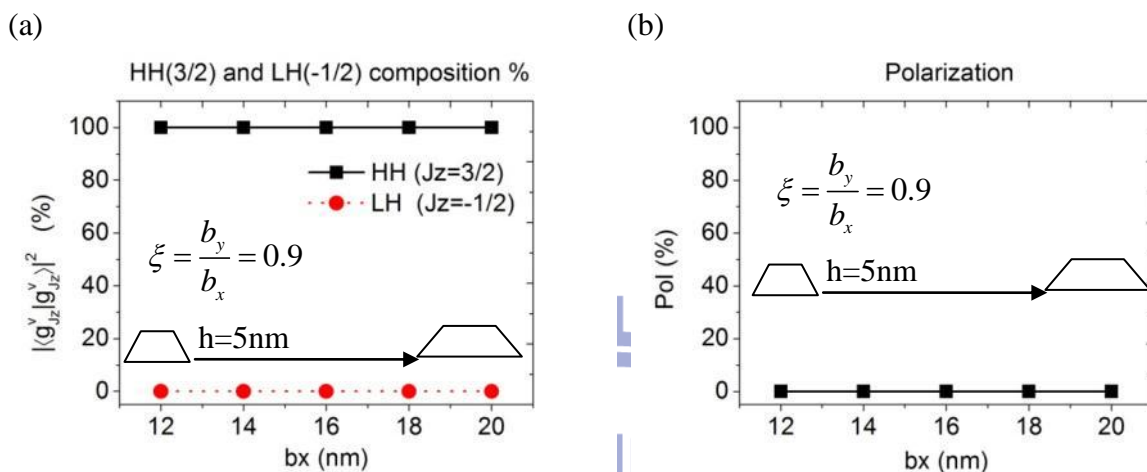


圖 3.3.7、此為不考慮輕重電洞耦合之高度 5nm 截角金字塔的量子點模擬結果，橫座標為量子點長軸長度。(a)為輕重電洞所占成分。(b)電子基態躍遷至電洞空軌域基態的偏振。

在真實情況下，計算輕重電洞的電子結構需要考慮輕重電洞耦合，基態的波函數是以重電洞的成分為主，同時混了少量的輕電洞(圖(3.3.9))。自旋的不可分辨性造成了電子與電洞空軌域的能態皆為兩重簡併，而在本論文中所討論電子基態躍遷至電洞空軌域的基態均為電子自旋(1/2)的狀態躍遷至主要成分為重電洞(3/2)的狀態。由式子(3.1.7)可知，自旋(-1/2)輕電洞與電子波函數重疊的比例越高，則偏振越強。在一般的情況下，輕電洞成分越多與電子波函數重疊的比例也越高，而影響輕電洞成分的主要因素為 Δ_{lh} 的大小， Δ_{lh} 越小，則輕電洞成分越多(圖 3.3.10(a)(b))。

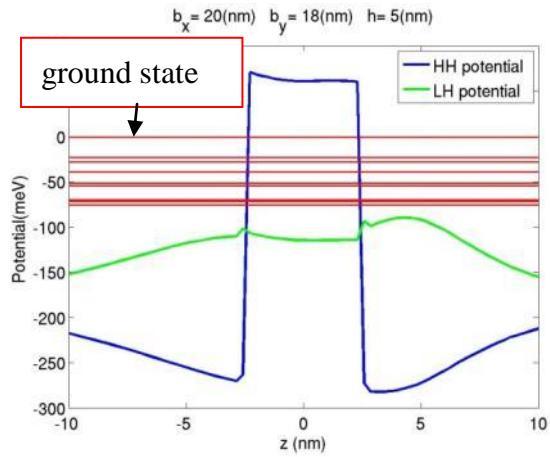
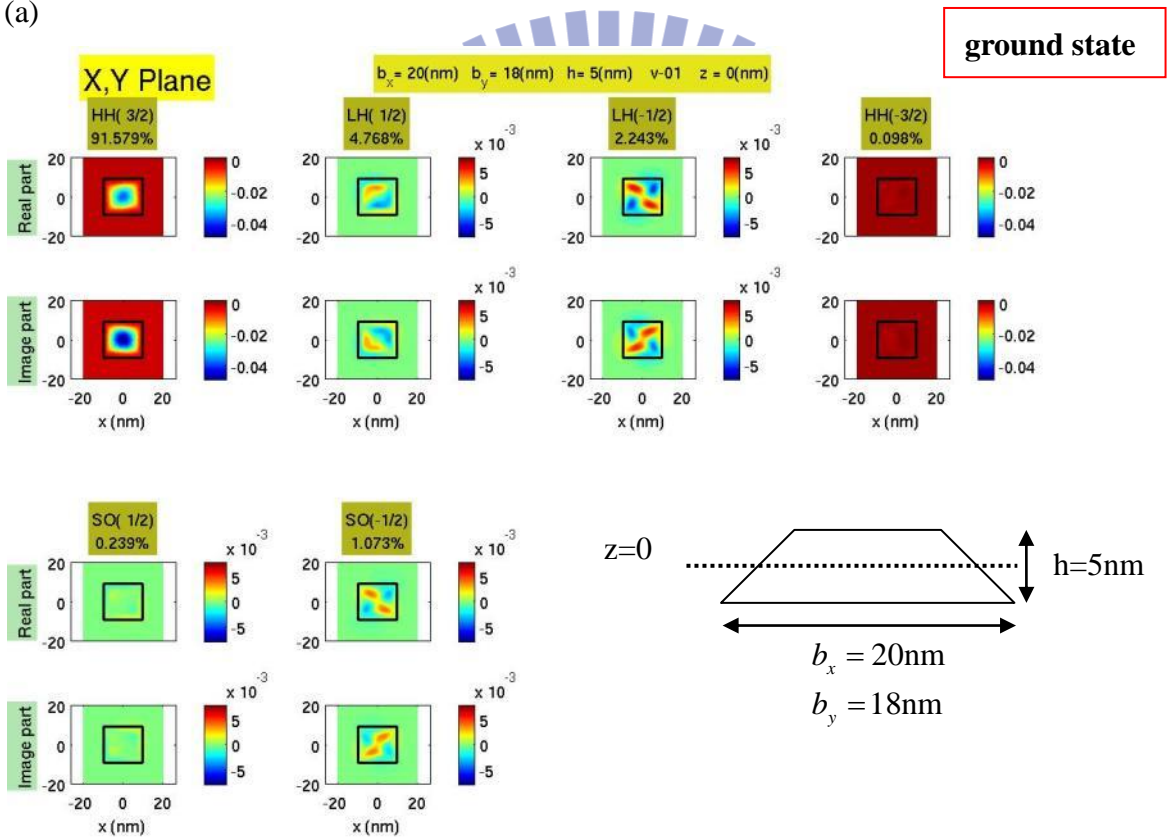


圖 3.3.8、高 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點考慮輕重電洞耦合的輕重電洞位能與能階。

(a)



(b)

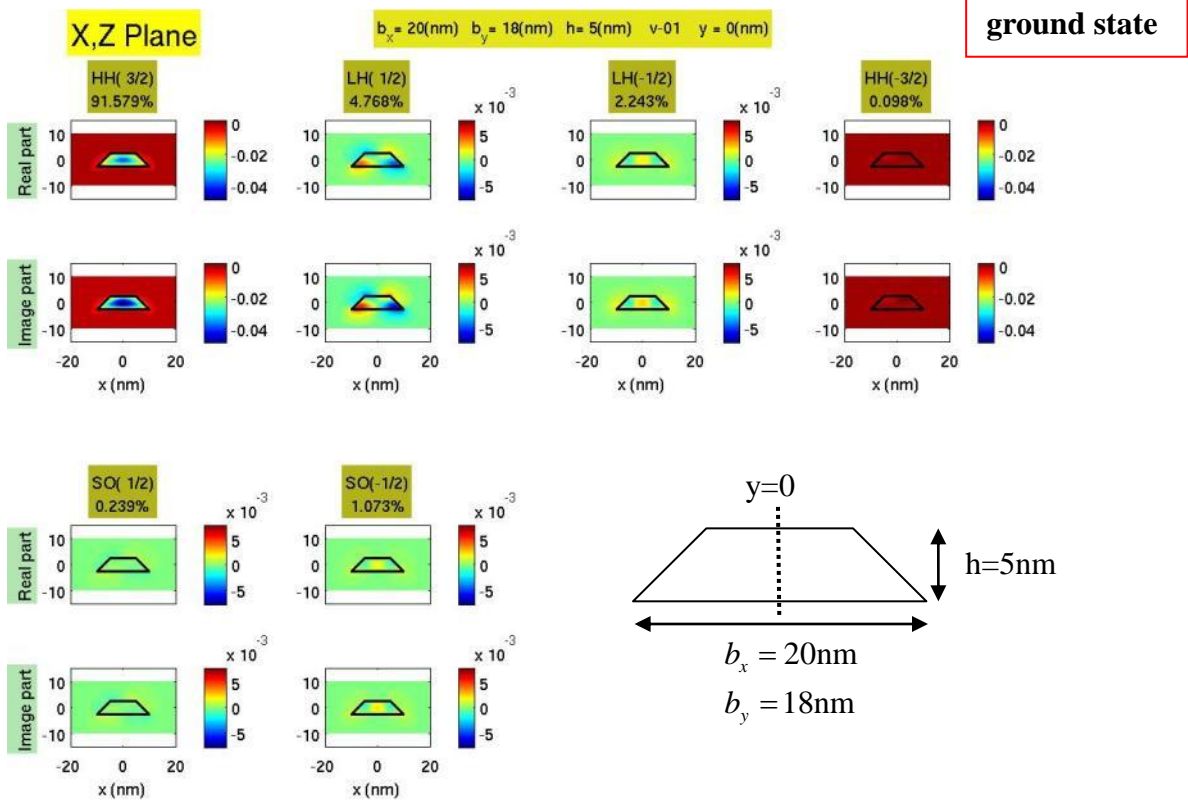


圖 3.3.9、高 $h = 5\text{nm}$ ，長 $b_x = 20\text{nm}$ ，寬 $b_y = 18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點考慮輕重電洞耦合的基態波函數。基態波函數均為重電洞為主要成分，並混了少量的輕電洞。(a) $z = 0(\text{nm})$ 的 XY 平面波函數。(b) $y = 0(\text{nm})$ 的 XZ 平面波函數。

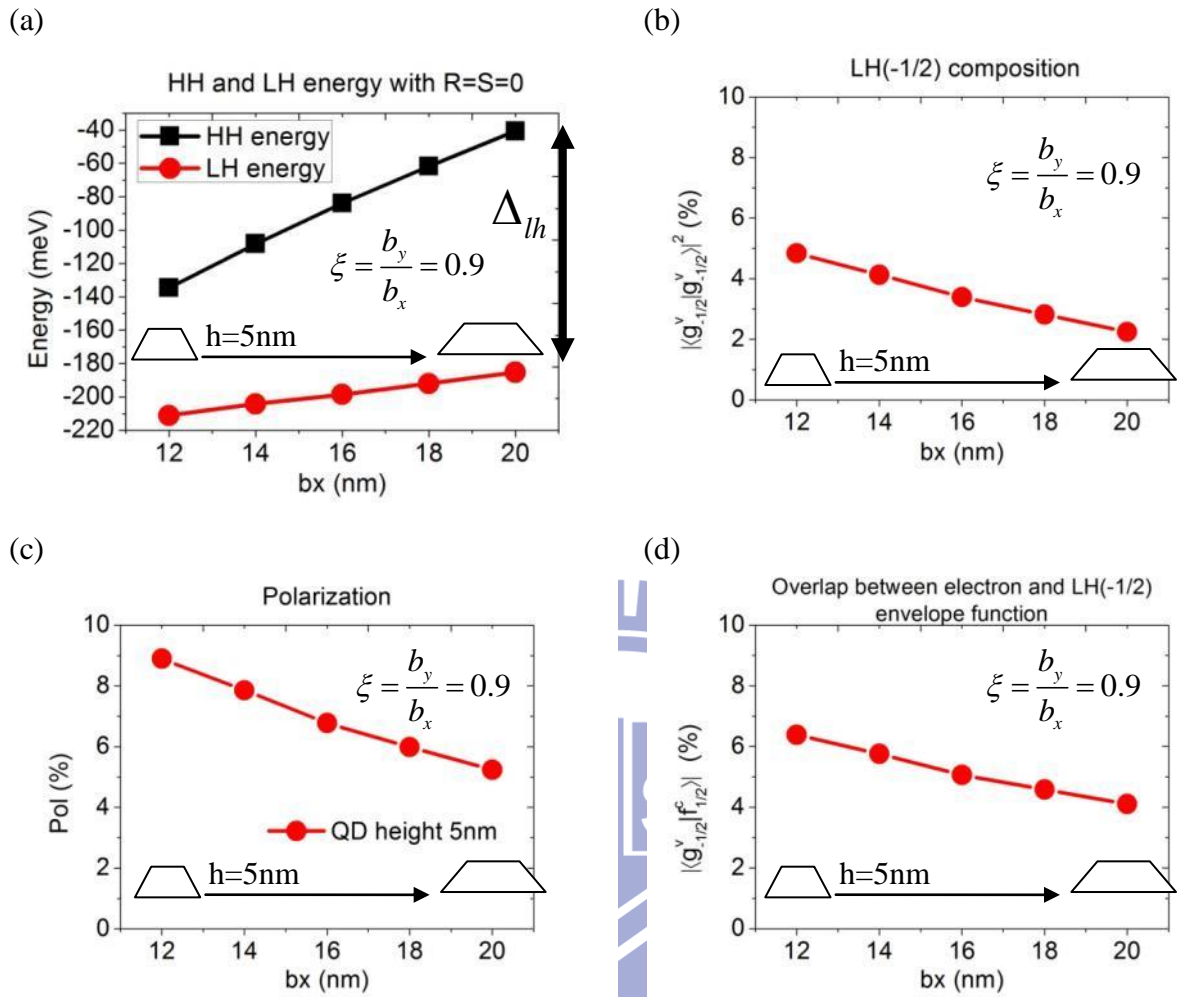


圖 3.3.10、 $\xi = 0.9$ 、高度 $h = 5\text{nm}$ ，改變大小的截角金字塔形狀量子點模擬結果。量子點變大， Δ_{lh} 變大，導致輕電洞成分下降，輕電洞與電子的波函數重疊比例下降，此效應導致偏振變小。(a) 不考慮輕重電洞耦合的輕重電洞能量差 Δ_{lh} 。考慮輕重電洞耦合，(b) 自旋(-1/2)輕電洞成分。(c) 電子基態躍遷至電洞空軌域基態的偏振。(d) 自旋(-1/2)輕電洞與電子波函數重疊比例。

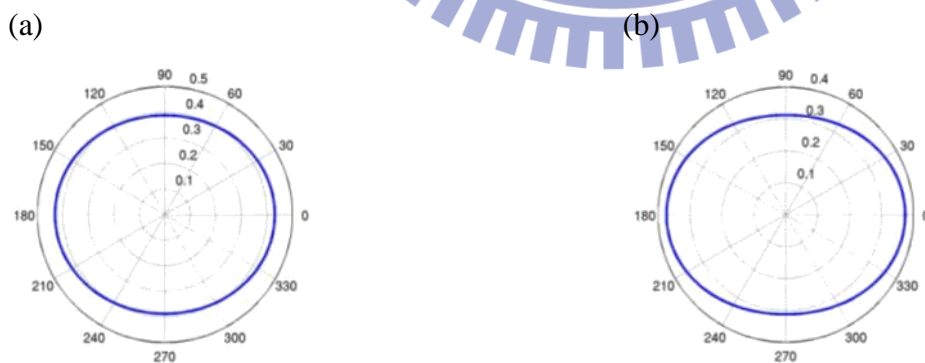


圖 3.3.11、高度 $h=5\text{nm}$ 的截角金字塔的發光強度。(a) 長 $b_x=20\text{nm}$ 、寬 $b_y=18\text{nm}$ 。(b) 長 $b_x=12\text{nm}$ 、寬 $b_y=10.8\text{nm}$ 。

以 $k \cdot p$ 理論計算量子點電子結構時，電洞在基態時重電洞為主要的波函數成分，並且混成了少量的輕電洞。根據微擾理論，基態波函數輕電洞成分的多寡與輕重電洞能量

差有關。當輕重電洞能量差越大，則基態波函數的輕電洞成分越少(圖 3.3.10(a)(b))，而輕電洞成分直接影響偏振。一般而言，輕電洞成分越多，則輕電洞與電子波函數的重疊部分越多，偏振強度越強。所以當輕重電洞能量差越大，偏振則會越強。圖(3.3.10)為高度 $h=5nm$ ，不對稱性 $\xi=0.9$ ， b_x 與 b_y 逐漸變大，由式子(3.1.19)與式子(3.3.6)可知，量子點變大時 Δ_{lh} 會變大，而偏振則會變小。

$$\Delta_{lh} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m_0} \gamma_2 \left(\frac{2}{h^2} - \frac{1}{b_y^2} (1 + \xi^2) \right) \quad (3.3.6)$$

$$Pol \approx \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{b_y^2} (1 - \xi^2) \quad (3.1.19)$$

由此可得知，影響電子基態躍遷至電洞空軌域基態的偏振強度主要的因素為自旋(-1/2)的輕電洞波函數成分與電子輕電洞波函數的重疊部分。輕電洞成分與輕重電洞能量差有很大的關係，所以只要能了解各種狀況下的輕重電洞能量差的變化，即可得知偏振的變化。

第四章、結果與討論

4.1、量子點形狀對偏振光譜的影響

量子點形狀會影響電子與輕重電洞所感受到的位能，導致能量與波函數因形狀有所不同。在此章節中，先討論量子點大小與偏振強度的關係。

固定量子點長寬(b_x 與 b_y 均固定)，改變高度(h)的大小。圖(4.1.1)為不同高度電子所感受到的位能，圖(4.1.2)為電子基態的波包函數，在基態均為球對稱的形式。

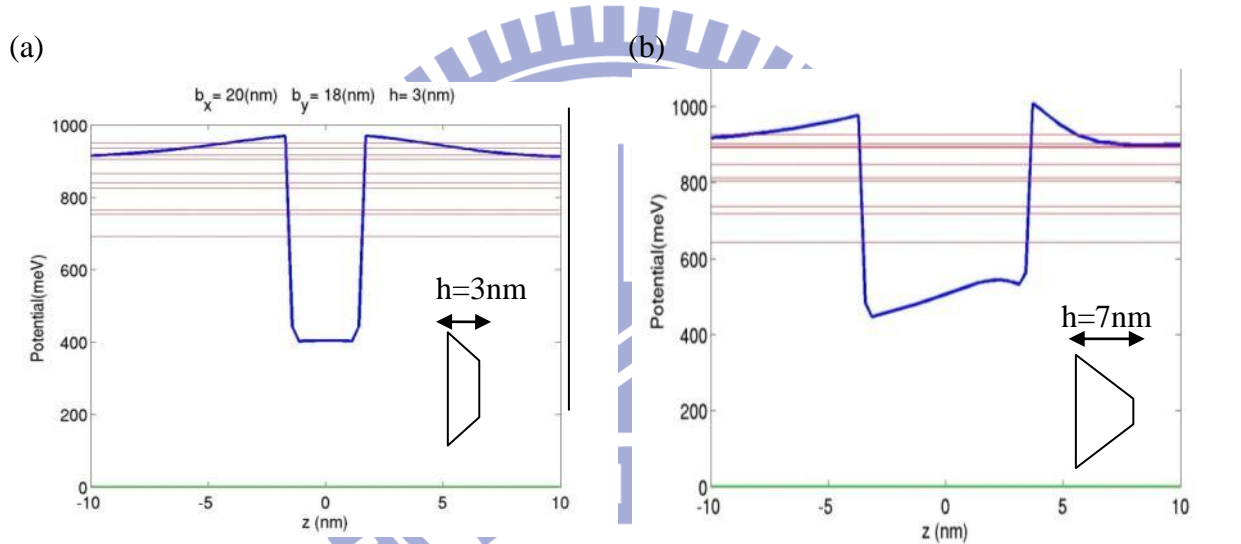
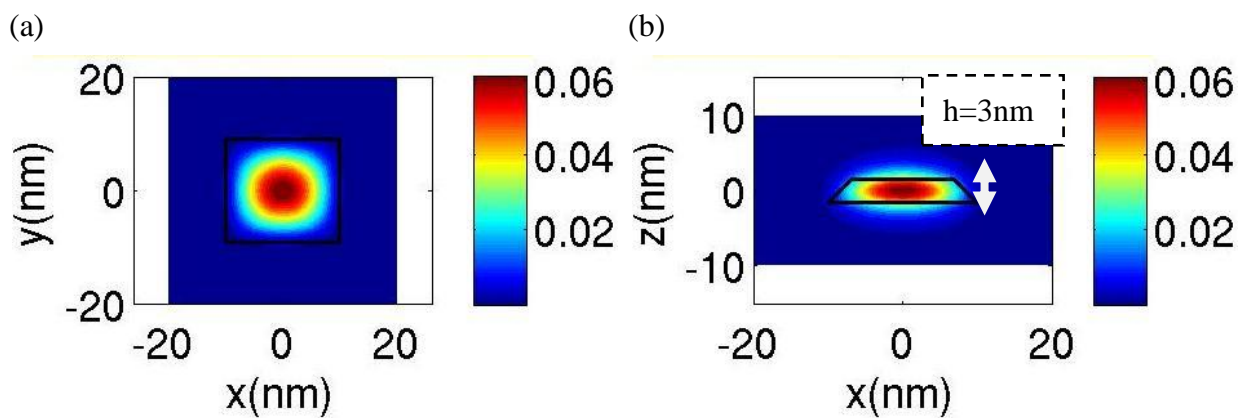


圖 4.1.1、長 $b_x=20$ nm，寬 $b_y=18$ nm 截角金字塔形狀量子點的電子位能與能階。(a)高度 $h=3$ nm。(b)高度 $h=7$ nm。



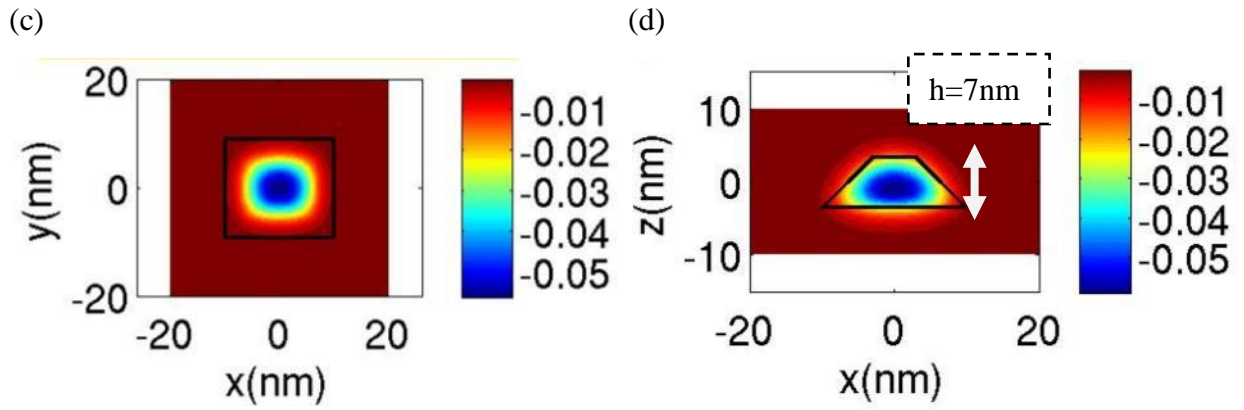


圖 4.1.2、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點的電子基態波函數。高度 $h=3\text{nm}$ 量子點，(a) $z=0(\text{nm})$ 的 XY 平面波函數。(b) $y=0(\text{nm})$ 的 XZ 平面波函數。高度 7nm 量子點(c) $z=0(\text{nm})$ 的 XY 平面波函數。(d) $y=0(\text{nm})$ 的 XZ 平面波函數。

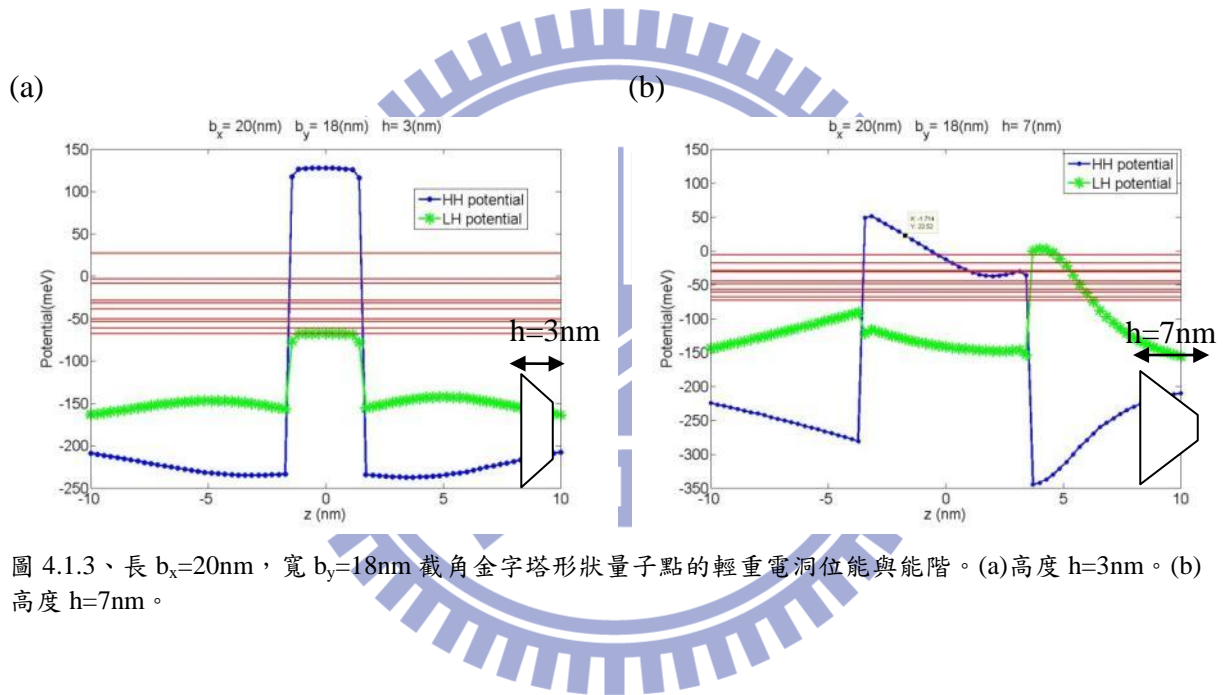


圖 4.1.3、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點的輕重電洞位能與能階。(a)高度 $h=3\text{nm}$ 。(b)高度 $h=7\text{nm}$ 。

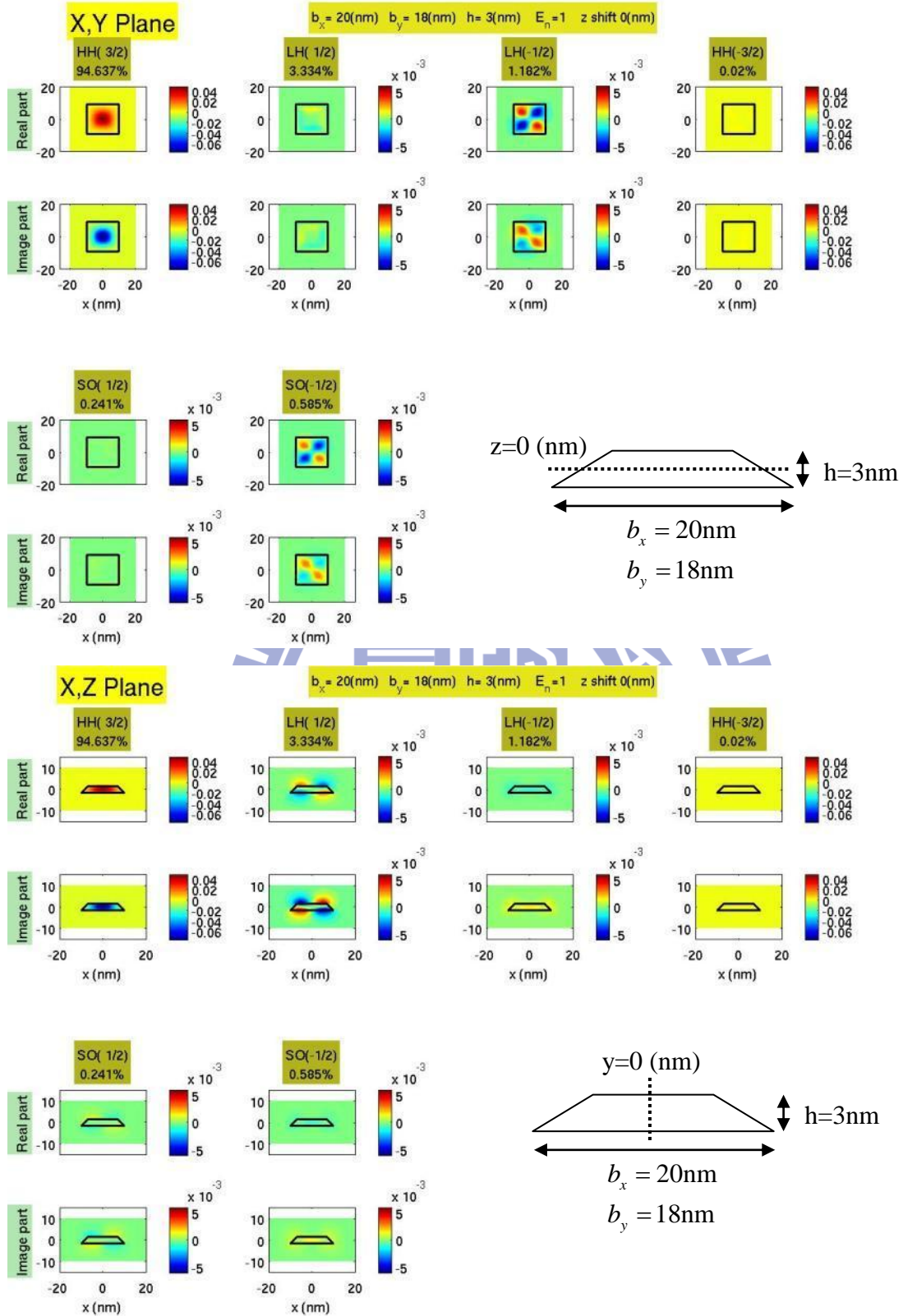


圖 4.1.4、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ ，高 $h=3\text{nm}$ 截角金字塔形量子點的電洞空軌域基態波函數。

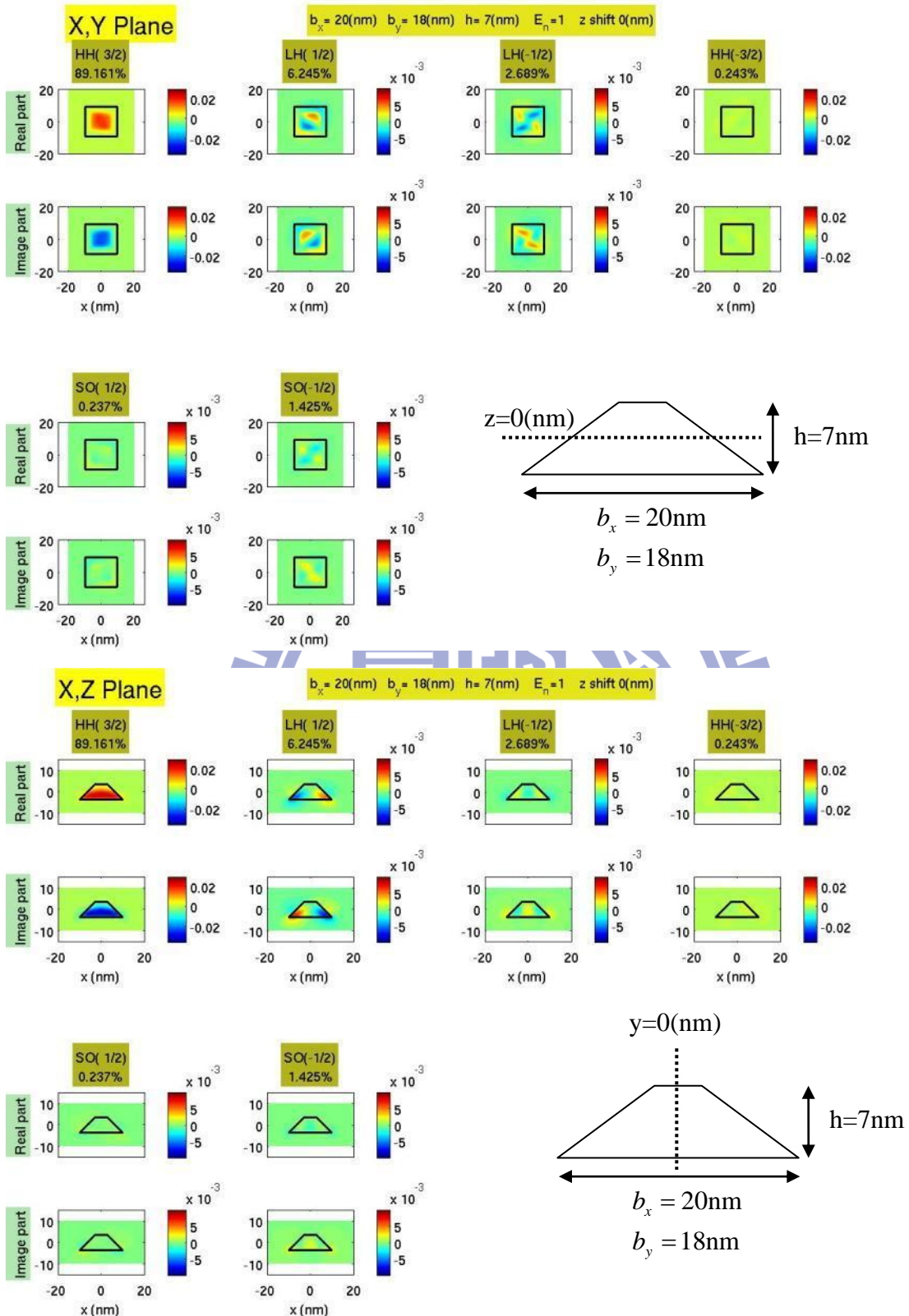


圖 4.1.5、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ ，高 $h=7\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點的電洞空軌域基態波函數。

高度增加時，輕重電洞受到應變的影響所感受到的位能因高度有所不同(圖 4.1.3)。輕重

電洞位能如圖(4.1.6)所示，重電洞所感受的位能隨著高度增加而越來越淺，所以重電洞

的基態能量逐漸下降。而輕電洞的基態能量已經大於輕電洞位能的侷限強度，所以位能的改變對輕電洞的能量並不會造成太大的影響。由簡單模型的式子(3.2.9)與(3.1.19)可知，當 $\xi=0.9$ ， $b_y=18$ ，高度 h 增加時， Δ_{lh} 變小，偏振變強。而數值計算的結果與簡單模型的趨勢有一致性，如圖(4.1.8a))高度增加 Δ_{lh} 變小，導致輕電洞成分增加(圖(4.1.8b))，最終的效應為高度增加偏振變強(圖(4.1.7(c)))。

$$\Delta_{lh} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m_0} \gamma_2 \left(\frac{2}{h^2} - \frac{1}{b_y^2} (1 + \xi^2) \right) \quad (3.2.9)$$

$$Pol \approx \frac{1}{2} \frac{h^2}{b_y^2} (1 - \xi^2) \quad (3.1.19)$$

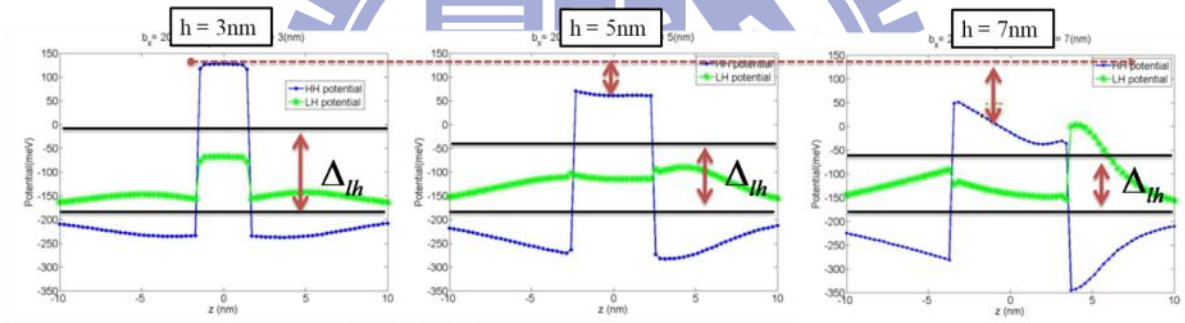
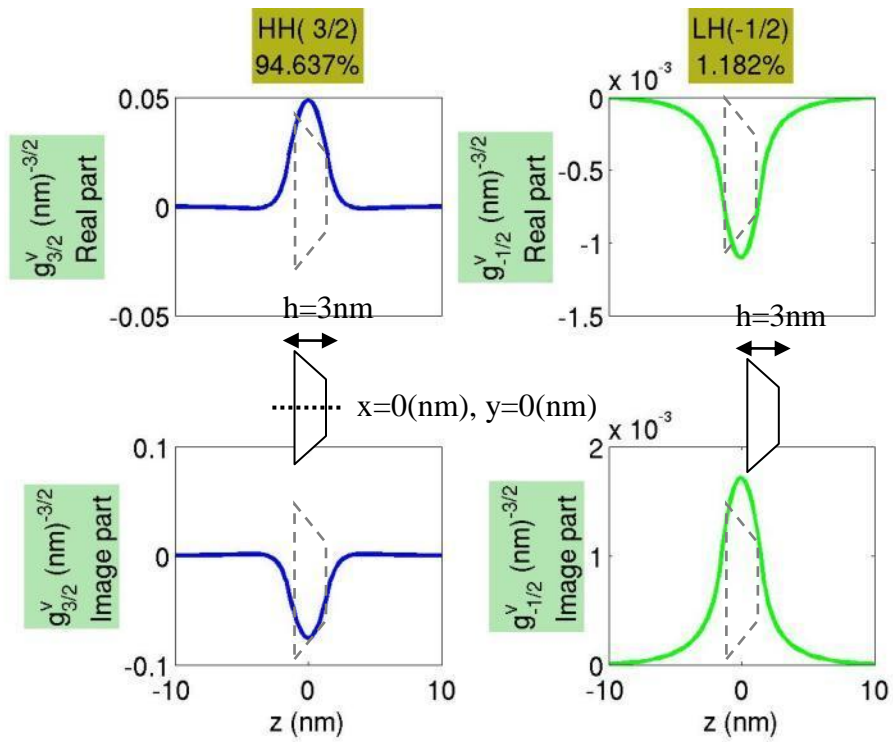


圖 4.1.6、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 截角金字塔形狀量子點的輕重電洞位能與 Δ_{lh} 變化示意圖。高度增加造成重電洞位能底部逐漸下降，使得 Δ_{lh} 越來越小。

(a)



(b)

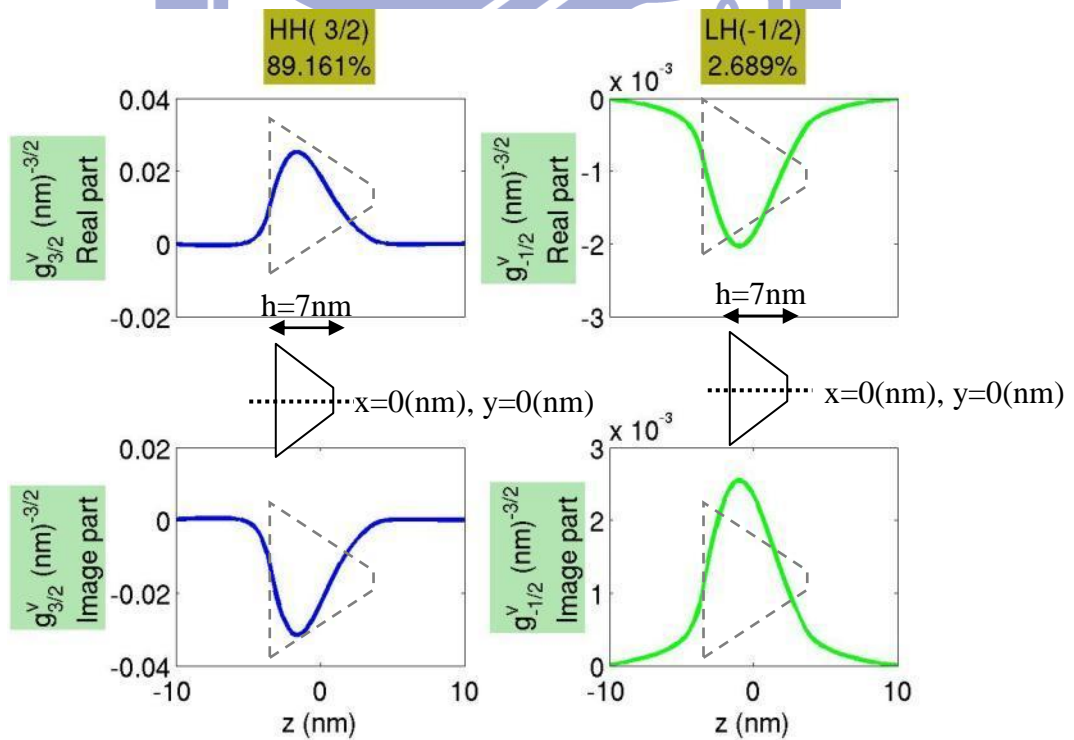


圖 4.1.7、 $b_x = 20\text{nm}$ 、 $b_y = 18\text{nm}$ 的截角金字塔形狀量子點基態輕重電洞 Z 方向波函數。(a) $h = 3\text{nm}$ 。(b) $h = 7\text{nm}$

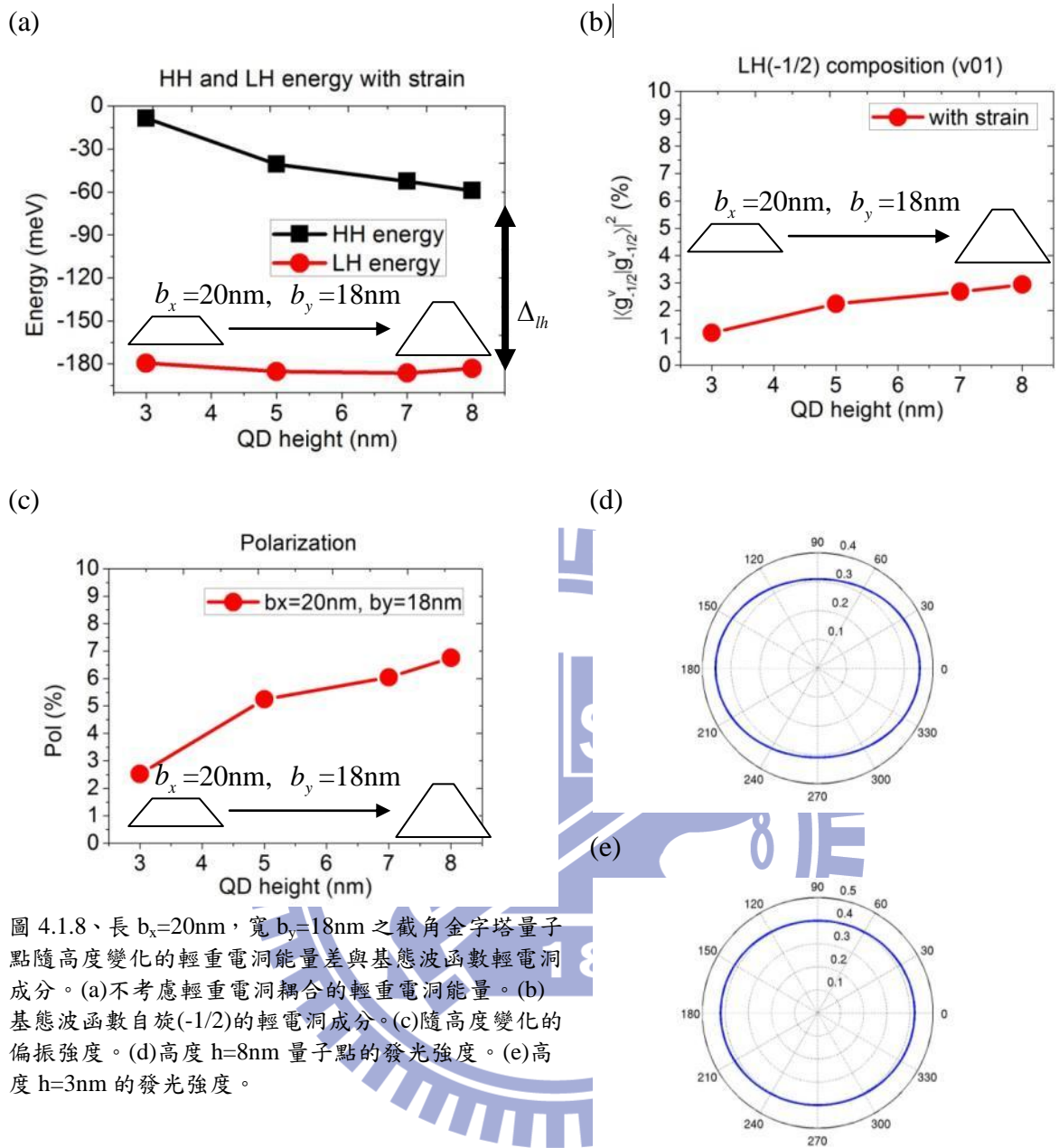


圖 4.1.8、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點隨高度變化的輕重電洞能量差與基態波函數輕電洞成分。(a)不考慮輕重電洞耦合的輕重電洞能量。(b)基態波函數自旋(-1/2)的輕電洞成分。(c)隨高度變化的偏振強度。(d)高度 $h=8\text{nm}$ 量子點的發光強度。(e)高度 $h=3\text{nm}$ 的發光強度。

4.2、量子點外加電場對偏振光譜的影響

在量子點的系統外加電場後，量子點的躍遷能量與發光強度均會受到改變[9]。由參考文獻[4] 可得知，在量子點垂直方向外加電場可改變精細結構劈裂的大小，此效應可產生糾纏態的光子對，所以此章節將討論量子點外加電場對偏振的影響。

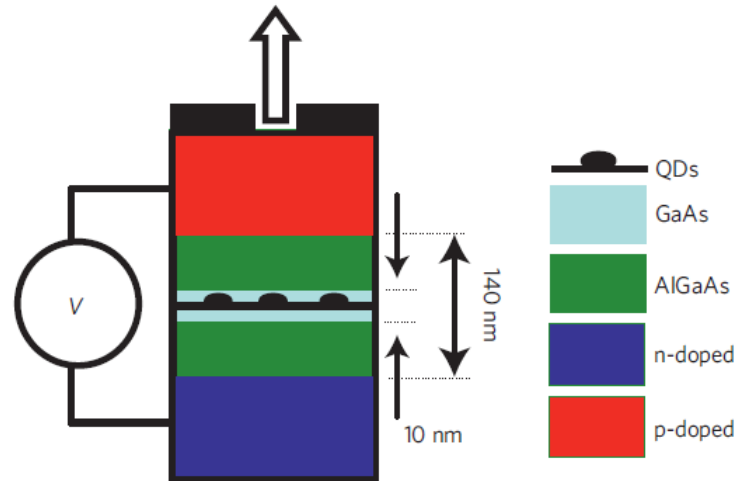


圖 4.2.1、外加電場的量子點系統，量子點內為 InAs，外部為 GaAs，更外層則有 AlGaAs。
資料來源：NATURE PHYSICS, VOL6, DECEMBER 2010, p947.[4]

首先考慮量子點系統內部為 InAs，外部為 GaAs，形狀為量子盒，電場只加在量子點內部的電子結構與偏振的變化。最後討論不同高度的截角金字塔形狀量子點與偏振的關係。外加電場後電子與輕重電洞位能變化示意圖如圖(4.2.2)。在此討論的量子盒大小為長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 、高 $h=8\text{nm}$ 。

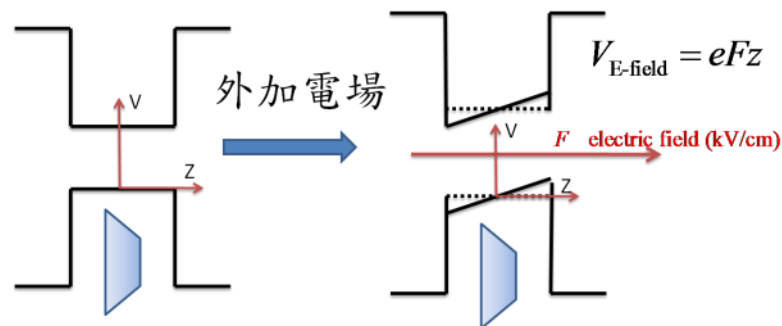


圖 4.2.2、外加電場下，電子與輕重電洞位能變化示意圖。

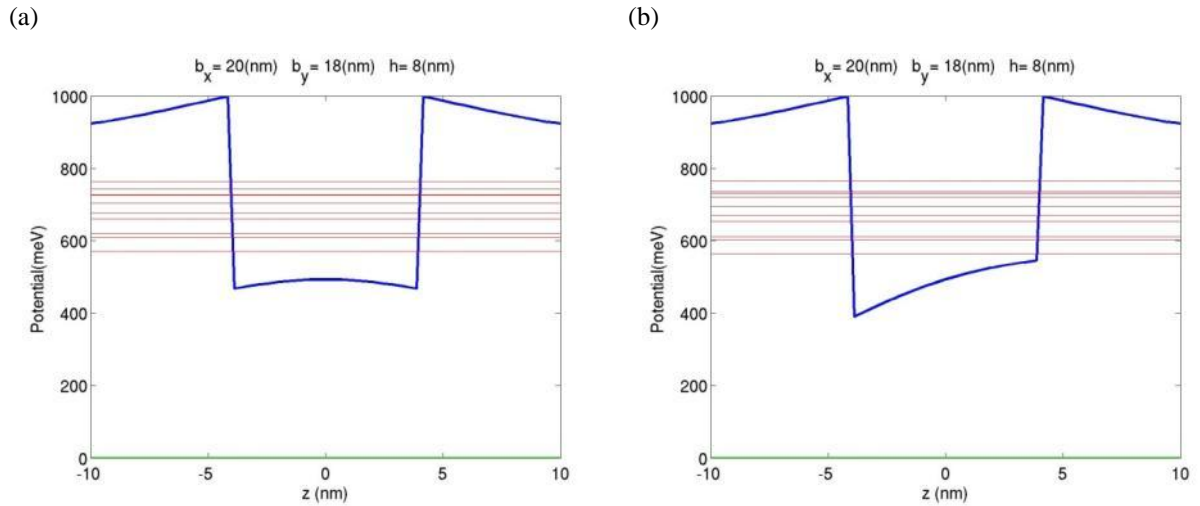


圖 4.2.3、 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 、高 $h=8\text{nm}$ 量子盒的電子位能。(a)電場強度 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 。(b)電場強度 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 。

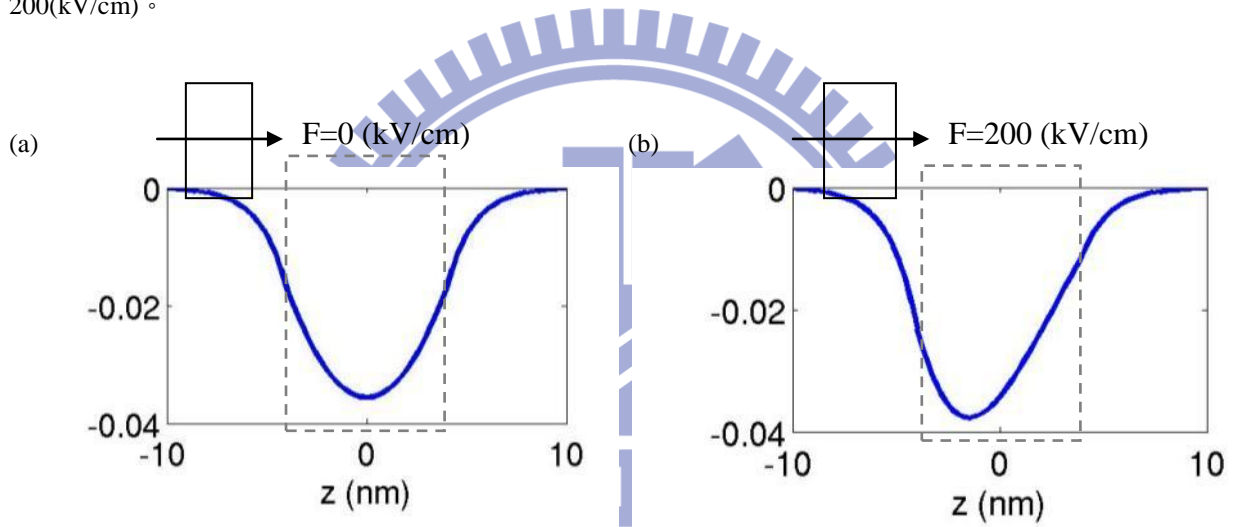
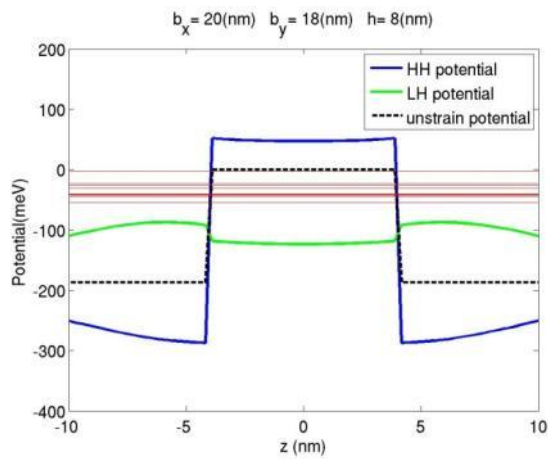


圖 4.2.4、 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 、高 $h=8\text{nm}$ 量子盒的電子波函數。(a)電場強度 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 。(b)電場強度 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 。

由圖(4.2.3)可看出外加電場後，電子位能的最低點偏向量子點的底部，而波函數(圖(4.2.4))也偏向量子點的底部。輕重電洞的位能則是加了電場後，最低點偏向量子點的頂端(圖 4.2.5)，而輕重電洞的波函數也同樣的偏向量子點頂端(圖 4.2.6)。此效應造成了在電場較大時，如圖(4.2.7)電子與輕重電洞波函數分別往不同方向移動，造成重疊比例減少，發光強度下降(圖 4.2.8(e))。

(a)



(b)

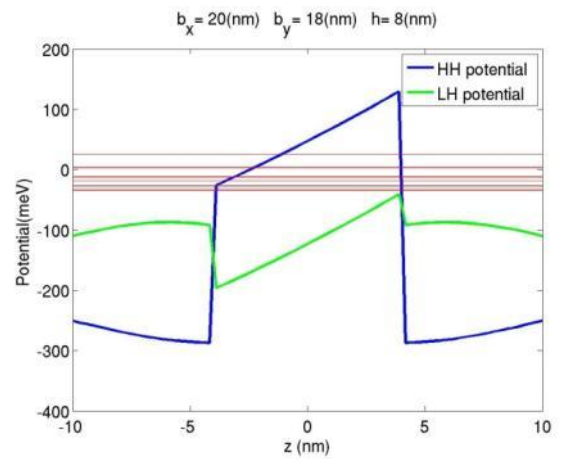
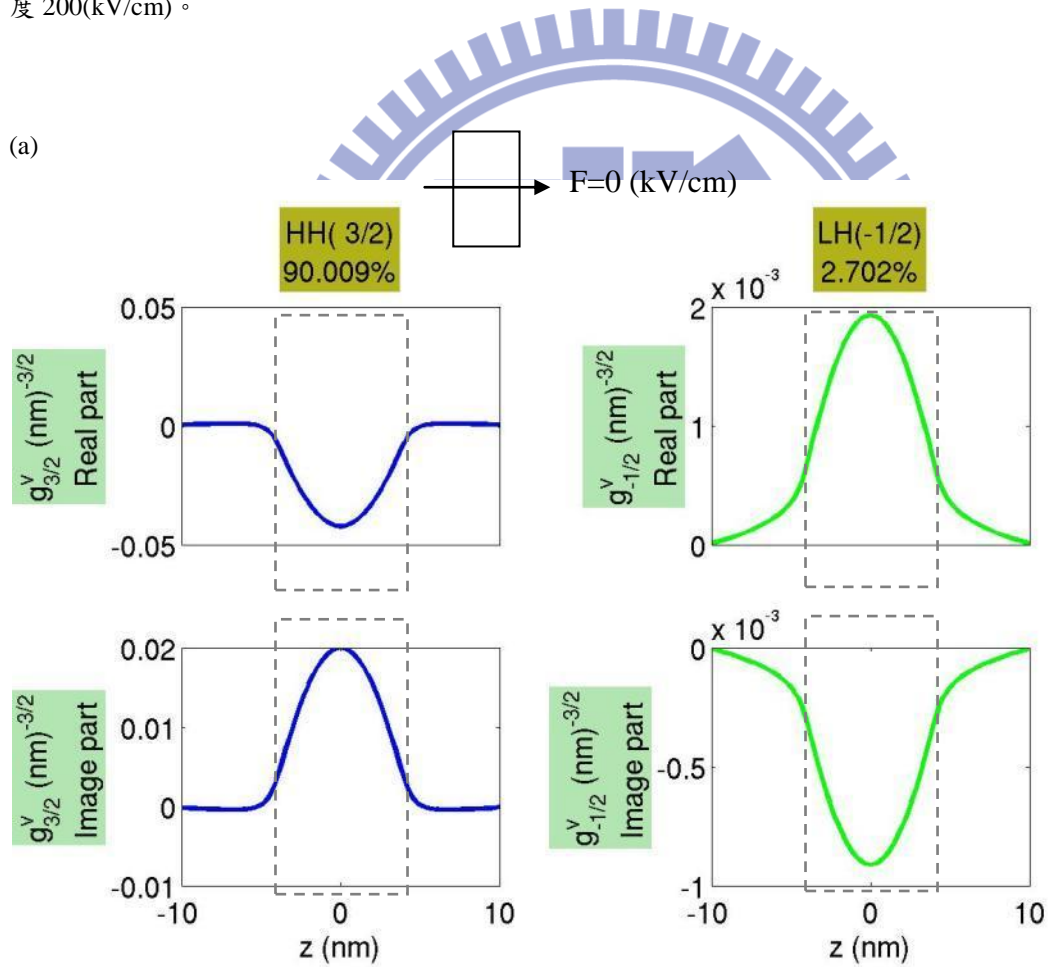


圖 4.2.5、 $b_x=20$ nm，寬 $b_y=18$ nm、高 $h=8$ nm 量子盒的輕重電洞位能。(a)電場強度 0 (kV/cm)。(b)電場強度 200 (kV/cm)。

(a)



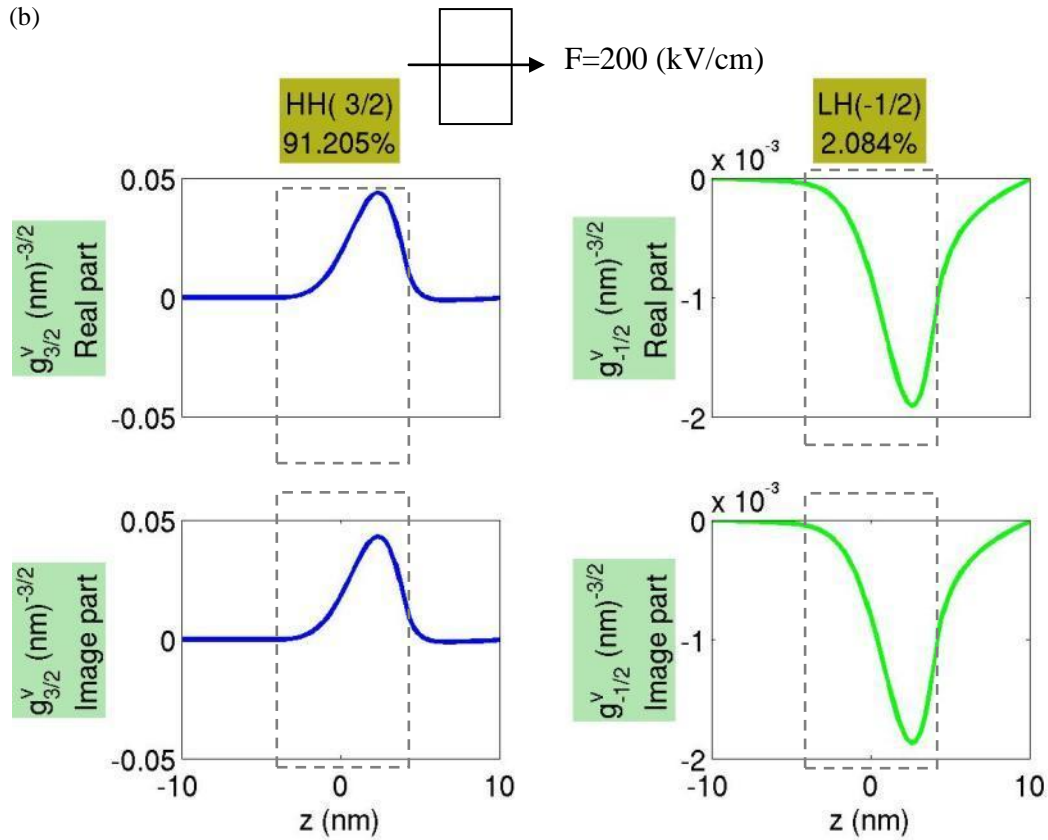


圖 4.2.6、 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 、高 $h=8\text{nm}$ 量子盒的輕重電洞波函數。(a) 電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b) 電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。

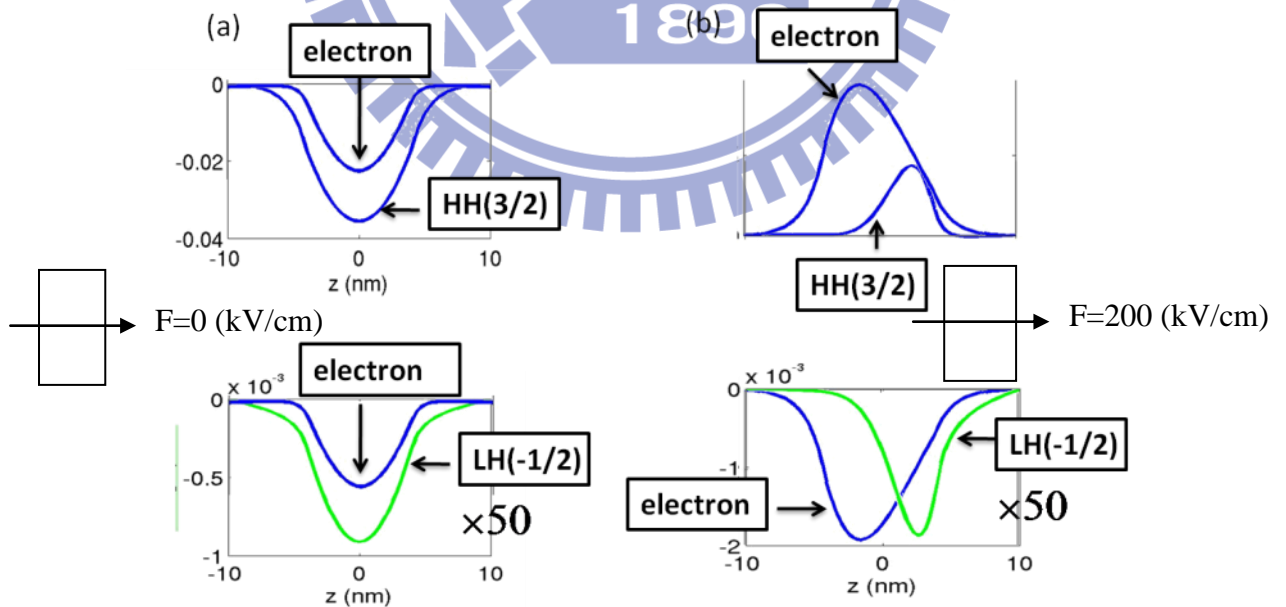


圖 4.2.7、 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 、高 $h=8\text{nm}$ 量子盒的電子與輕重電洞波函數重疊圖。(a) 電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b) 電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。

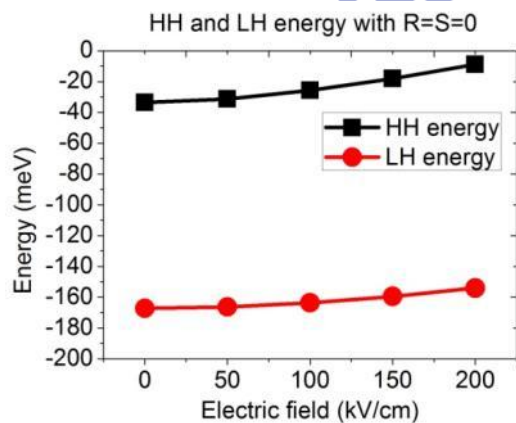
如圖(4.2.5(b))所示，輕重電洞位能再加了電場後變得較深，較深的位能井將會造成輕重電洞能量均下降(圖 4.2.8(a))，而重電洞有效質量較重能量較低，使得電場造成的位能變化對重電洞的影響較大，所以重電洞能量下降較多，輕電洞能量下降較少， Δ_{lh} 變大。

如圖(4.2.8(b))， Δ_{lh} 變大造成輕電洞成分變少。電子與輕重電洞的波函數被電場推到量子點不同的位置，在加上輕電洞成分變少，如圖(4.2.8(c)(d))這兩項效應均造成了波函數重疊比例變少。由式子(3.1.11)可知，

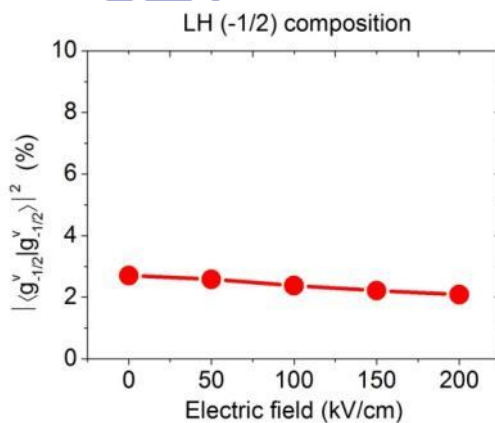
$$Pol = \frac{\sqrt{12} \left| \langle g_{i,-1/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right| \left| \langle g_{i,3/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right|}{\left| \langle g_{i,-1/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right|^2 + 3 \left| \langle g_{i,3/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right|^2} \quad (3.1.11)$$

雖然電子與輕電洞波函數重疊比例($\left| \langle g_{i,-1/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right|$)減少，但由圖(4.2.8(c))可了解到電子與重電洞波函數重疊比例($\left| \langle g_{i,3/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right|$)也隨之變小，所以綜合這兩種效應造成偏振(圖 4.2.8(f))並無明顯改變。

(a)



(b)



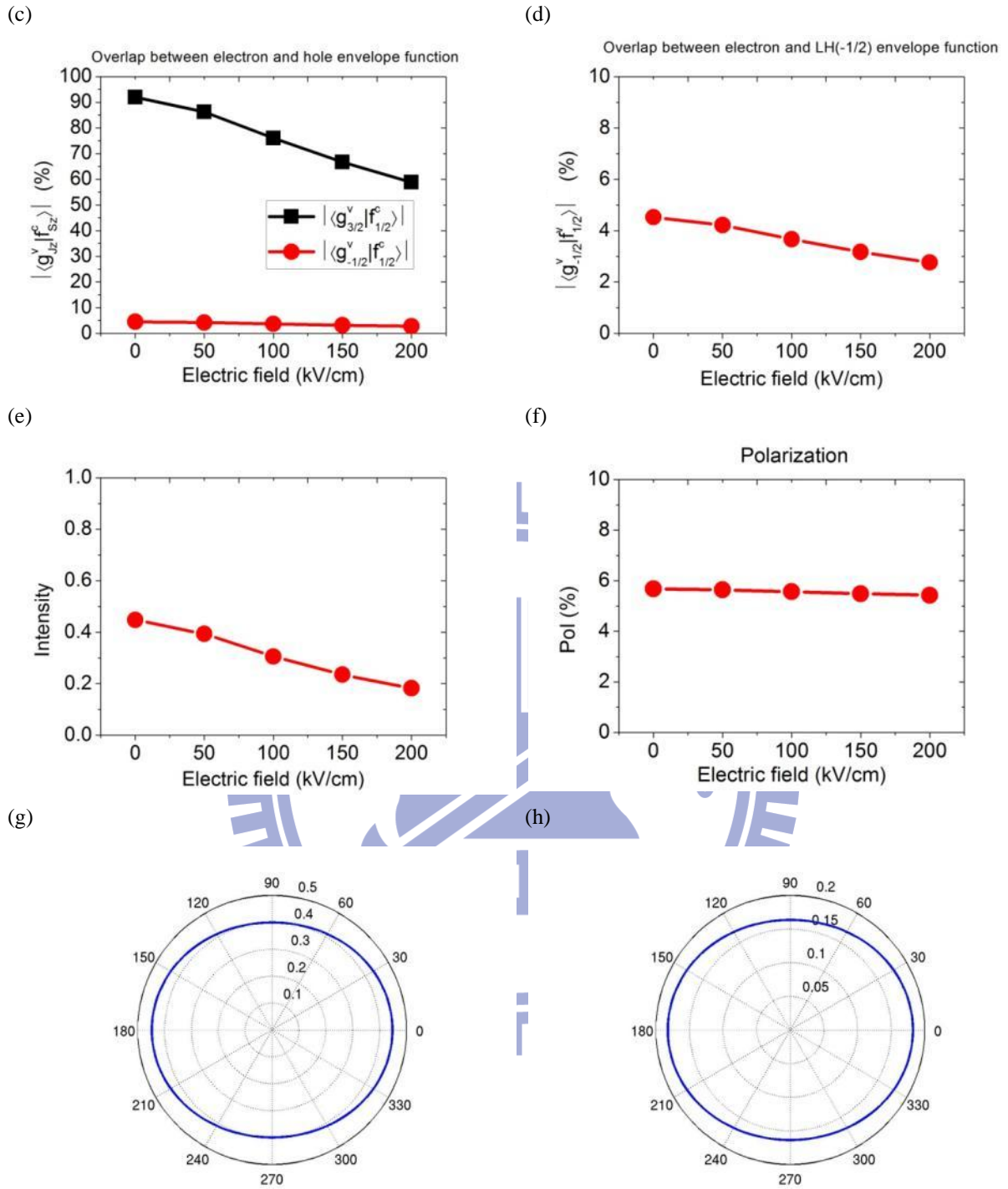


圖 4.2.8、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 、高 $h=8\text{nm}$ 量子盒。(a)輕重電洞基態能量。(b)基態波函數自旋(-1/2)輕電洞所占的成分。(c)基態波函數中，電子與自旋(3/2)重電洞、自旋(-1/2)輕電洞的波函數重疊比例。(d)基態波函數中，電子與自旋(-1/2)輕電洞的波函數重疊比例。(e)發光強度。(f)偏振大小。(g)電場強度為 0(kV/cm)的發光強度。(f)電場強度為 200(kV/cm)的發光強度。

以下針對截角金字塔形狀量子點長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ ，在各種高度下外加電場後的效應。

(1)高度 $h=8\text{nm}$ ：

如圖(4.2.9)，外加電場後電子的位能在量子點底部變得更低，波函數略為偏向底部。外加電場後的輕重電洞的位能如圖(4.2.11)所示。由於應變效應的影響，使得重電洞位能在未外加電場時，在量子點底部的位能較低，而外加電場後電洞的位能則較為平緩。所以重電洞波函數由量子點底部被推向量子點中心。輕電洞位能則是位能較低點移到了量子點頂端，所以輕電洞波函數被推向量子點頂端(圖(4.2.12))。

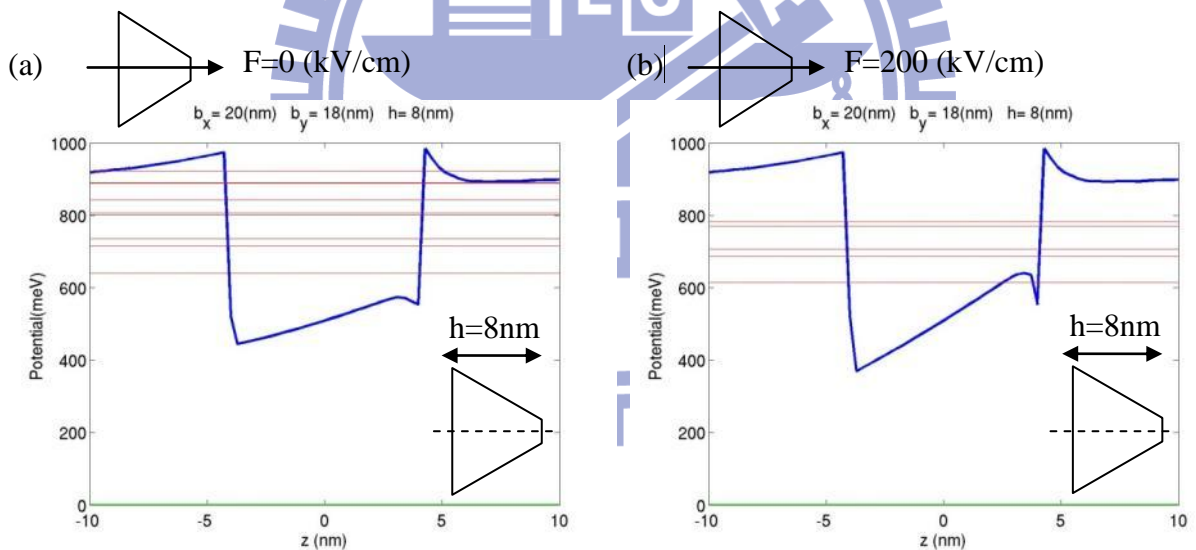


圖 4.2.9、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 、高 $h=8\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子位能。(a)電場強度 0 kV/cm 。(b) 電場強度 200 kV/cm 。

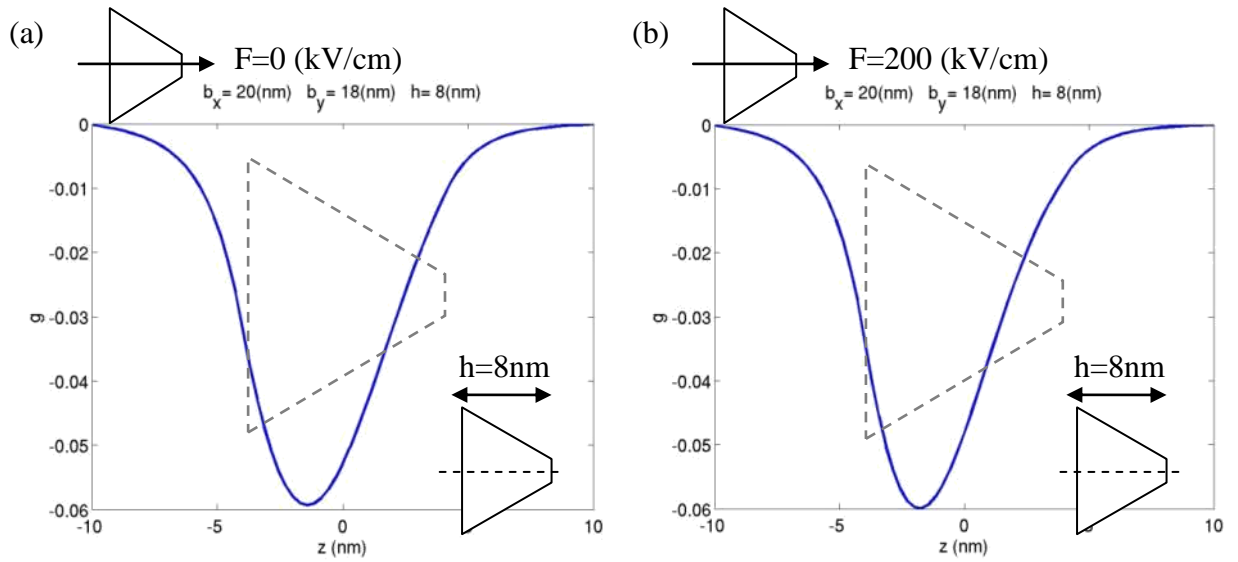


圖 4.2.10、高度 8nm，長 20nm，寬 18nm 之截角金字塔量子點的電子基態波函數。(a) 電場強度 0(kV/cm)。(b) 電場強度 200(kV/cm)。

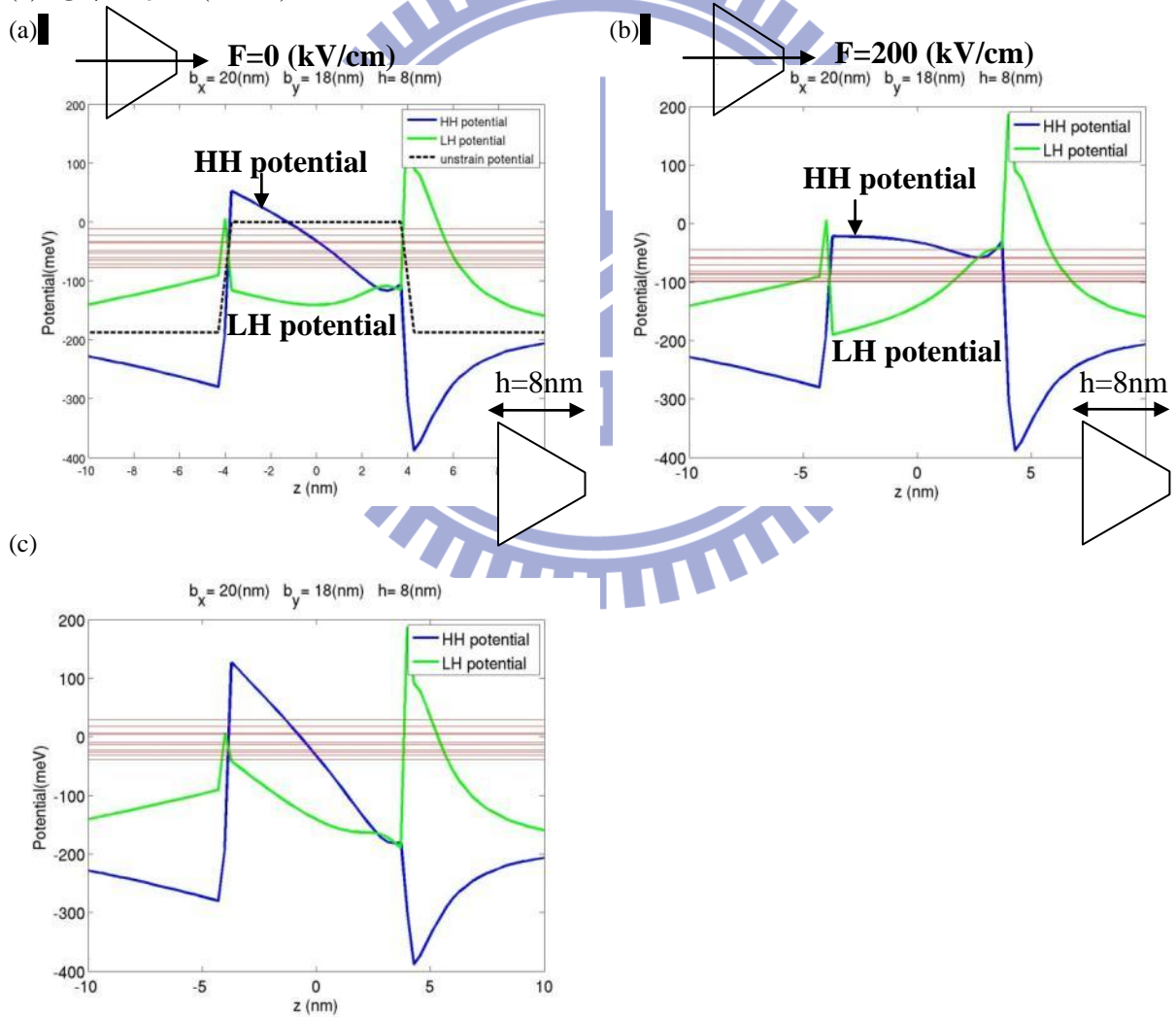


圖 4.2.11、高度 8nm，長 20nm，寬 18nm 之截角金字塔量子點的輕重電洞位能。(a) 電場強度 0(kV/cm)。(b) 電場強度 200(kV/cm)。(c) 電場強度為 -200(kV/cm)。

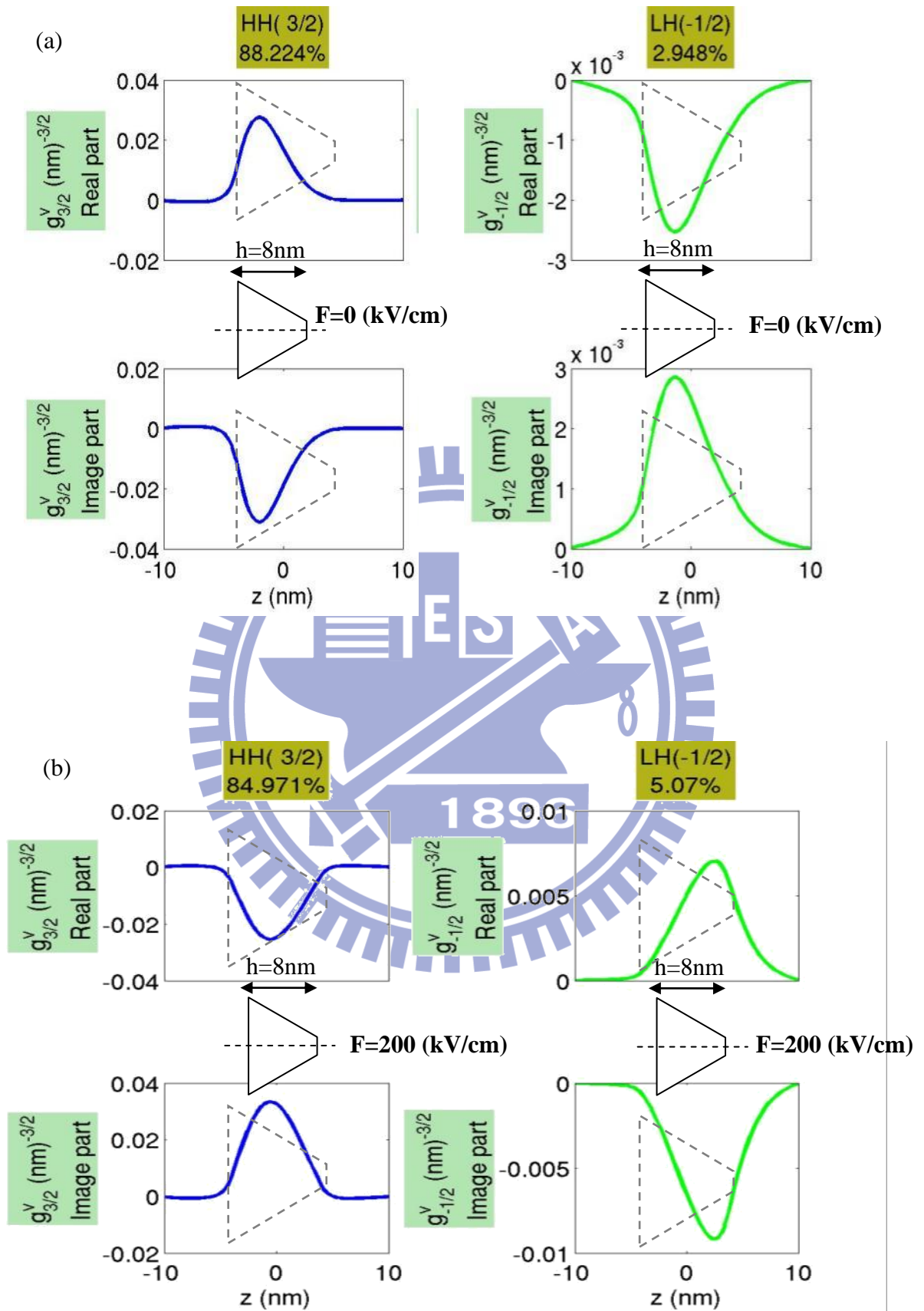


圖 4.2.12、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的基態波函數。(a) 電場強度 0(kV/cm) 。(b) 電場強度 200(kV/cm) 。

電場將輕重電洞波函數推向量子點頂端。由圖(4.2.11(b))可知，電場造成輕電洞位能在量子點頂端較深，所以輕電洞波函數受到較大的影響(圖 4.2.13)。但不考慮輕重電洞耦合的輕電洞能量大於輕電洞的局限位能，所以能量受到電場的影響較小。如圖(4.2.14)所示，重電洞基態的能量受到位能高度的影響，隨著電場增大則基態能量逐漸降低。此項效應造成輕重電洞能量差 Δ_{lh} 變小，基態波函數輕電洞成分變多(圖 4.2.15)。

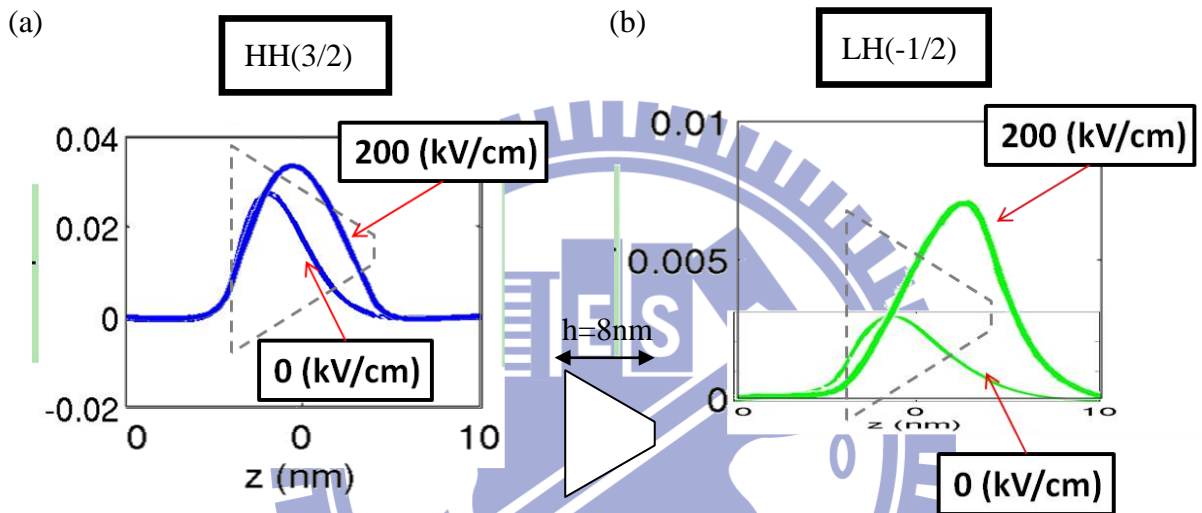


圖 4.2.13、高度 8nm，長 20nm，寬 18nm 之截角金字塔量子點基態波函數輕重電洞基態波函數重疊圖。(a)自旋(3/2)重電洞波函數。(b)自旋(-1/2)輕電洞波函數。

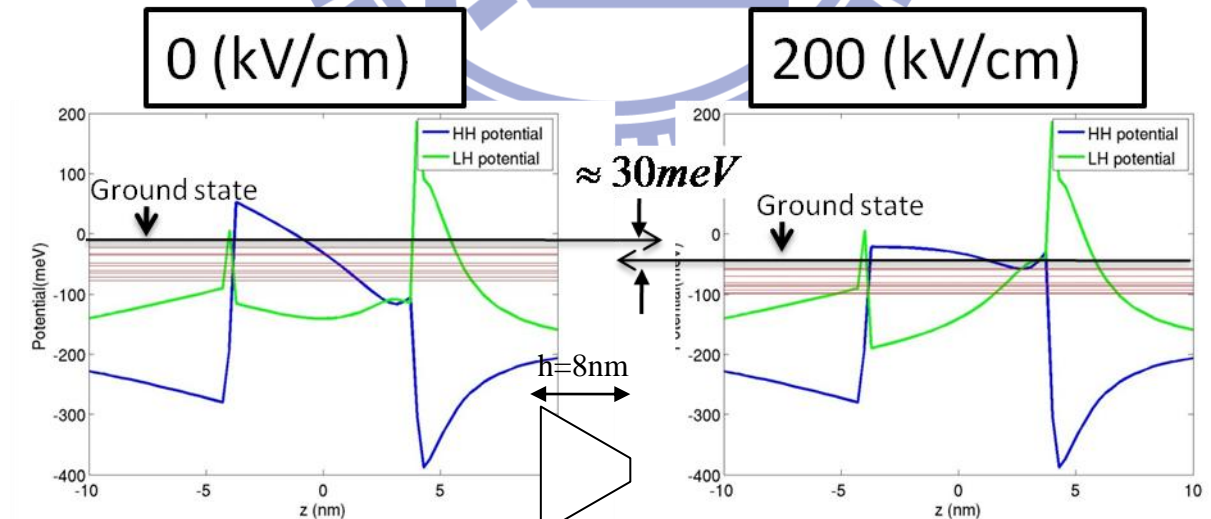


圖 4.2.14、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電洞空軌域基態的能量受到電場影響的變化。

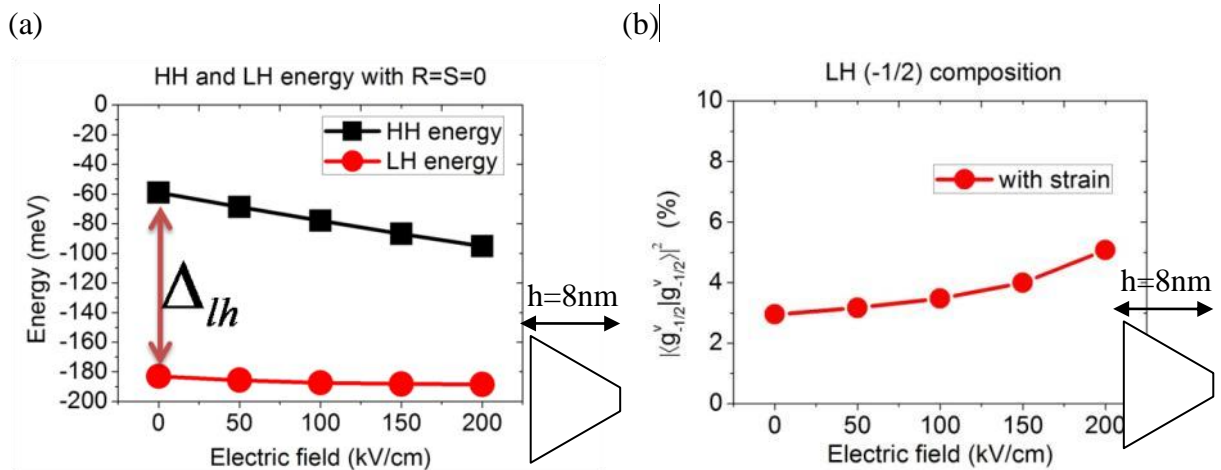
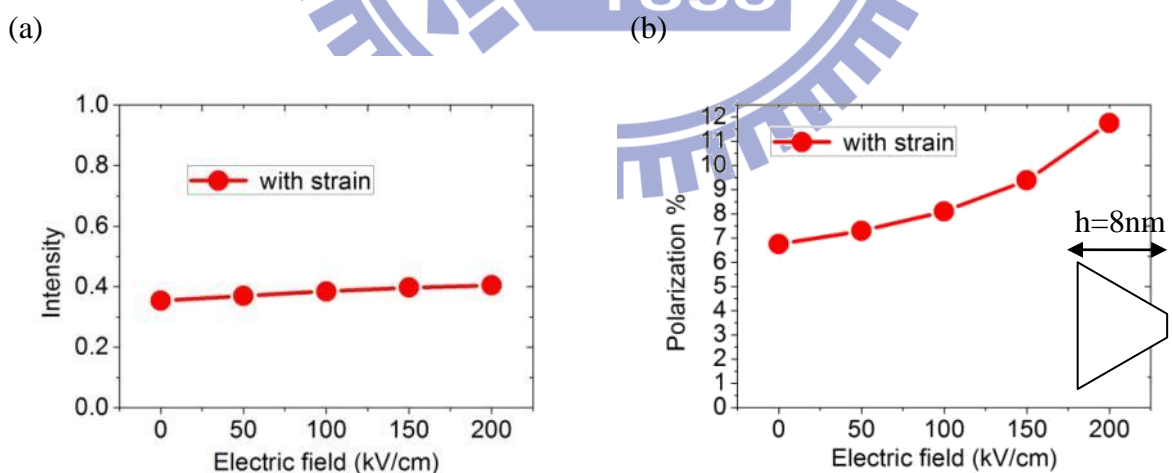


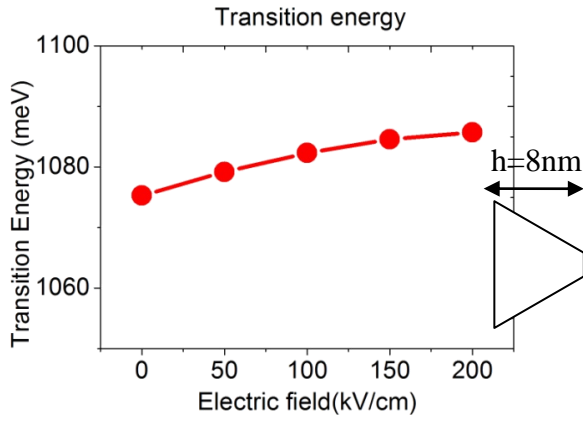
圖 4.2.15、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點外加電場下，輕重電洞能量與基態波函數輕電洞成分的關係。(a) 不考慮輕重電洞耦合的輕重電洞能量。(b) 基態波函數自旋(-1/2)輕電洞的成分。

以上了解外加電場下輕重電洞位能與波函數的變化，再來討論偏振的影響。圖

(4.2.16(a)(b))為發光強度與偏振的變化，電場加大發光強度與偏振隨之上升。影響偏振的效應還有電子與輕電洞波函數的重疊比例，電場對電子的波函數影響較小，而輕電洞波函數則被電場推向量子點頂端。如圖(4.2.17)，在電場增大時，電子與輕電洞的波函數分佈有著相當的差異。



(c)



(d)

(e)

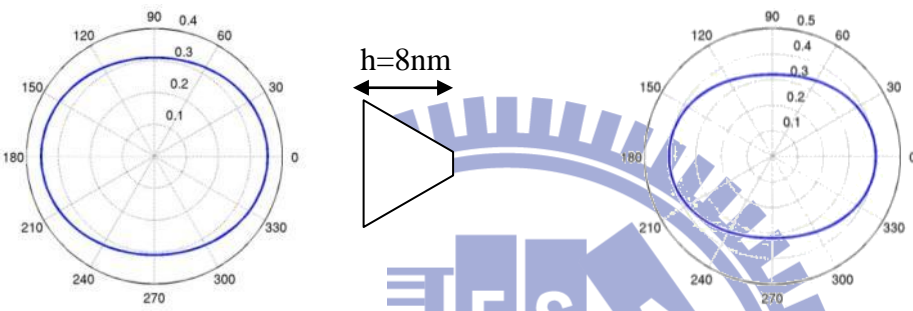


圖 4.2.16、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子基態躍遷至電洞空軌域基態。(a)發光強度。(b)偏振強度。(c)電子基態躍遷至電洞空軌域的能量。(d)電場為 $0(\text{kV/cm})$ 的發光強度。(e) 電場為 $200(\text{kV/cm})$ 的發光強度

(a)

(b)

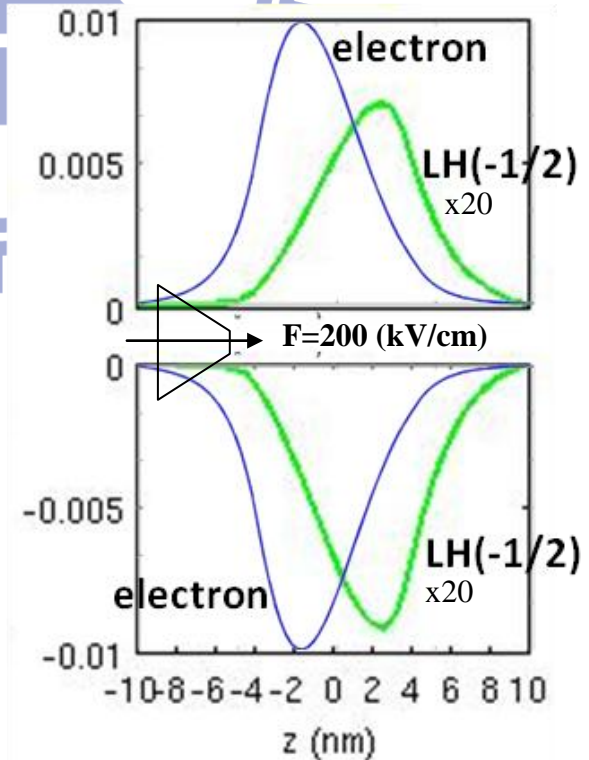
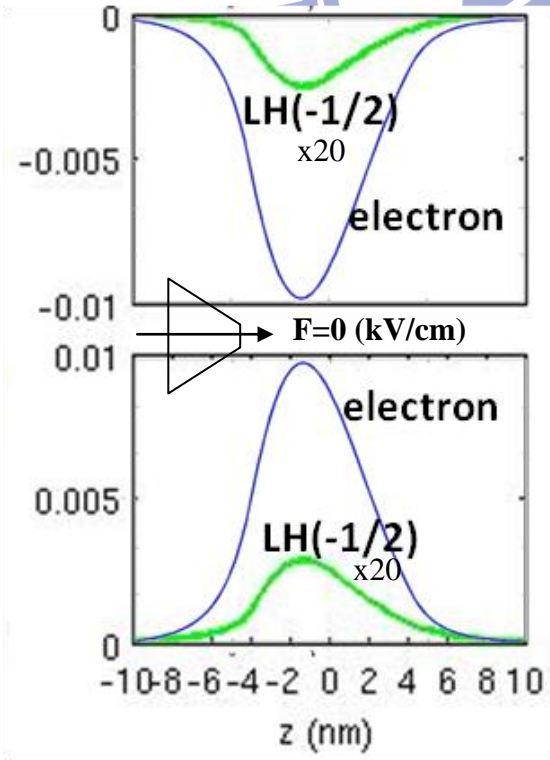
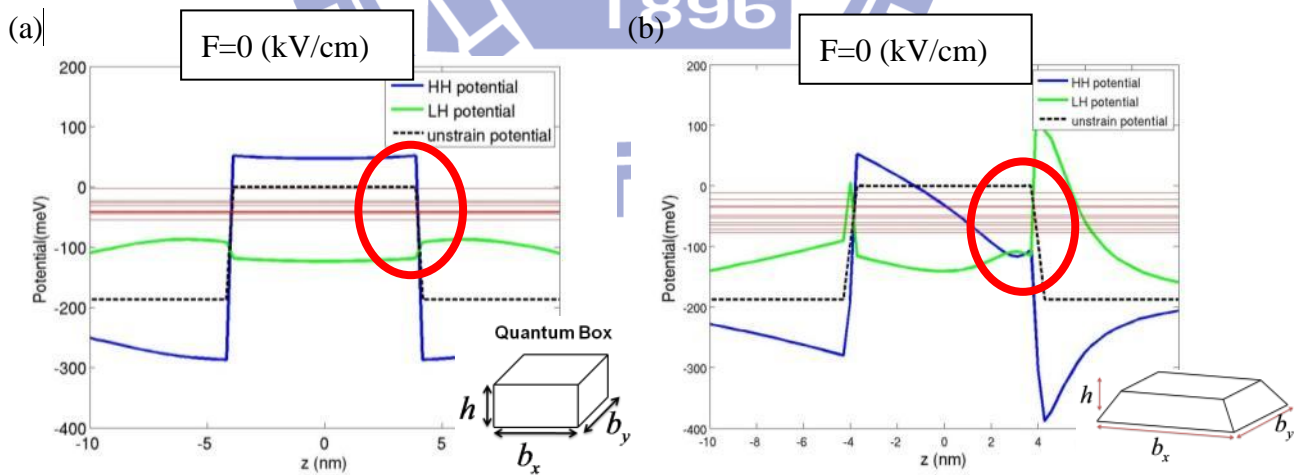


圖 4.2.17、高度 $h=8\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的基態自旋 $(-1/2)$ 輕電洞與基態電子波函數重疊圖。(a)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$ 。

電場增加主要造成兩個效應：(1)位能的改變造成重電洞侷限位能變弱，輕重電洞能量差 Δ_{lh} 減小使得輕電洞成分上升。(2)位能改變了輕電洞波函數分布，使得電子與輕電洞波函數分布有所差異。在電場為 200(kV/cm)時，輕重電洞能量差 Δ_{lh} 減小造成輕電洞成分較 0(kV/cm)時增加約兩倍，此項效應遠超過波函數分布所造成的影響，所以在電場增大時，偏振強度有著顯著的上升。

如圖(4.2.18)，比較截角金字塔形狀的量子點與量子盒，可發現頂端受到應變效應的輕重電洞位能有明顯的差異，電場 $F=0$ (kV/cm)時，截角金字塔的量子點位能最低處在量子點的底部(圖 4.2.18(b))。電場 $F=200$ (kV/cm)時，量子盒的位能最低處在量子點頂端(圖 4.2.18(c))，而截角金字塔的位能則是較均勻的分佈(圖 4.2.18(d))。位能變化的差異造成電場增大時，量子盒的重電洞基態能量上升，截角金字塔的重電洞基態能量下降(圖 4.2.19(a)(b))，導致 Δ_{lh} 有所不同，使得截角金字塔的偏振較大(圖 4.2.19(c)(d))。



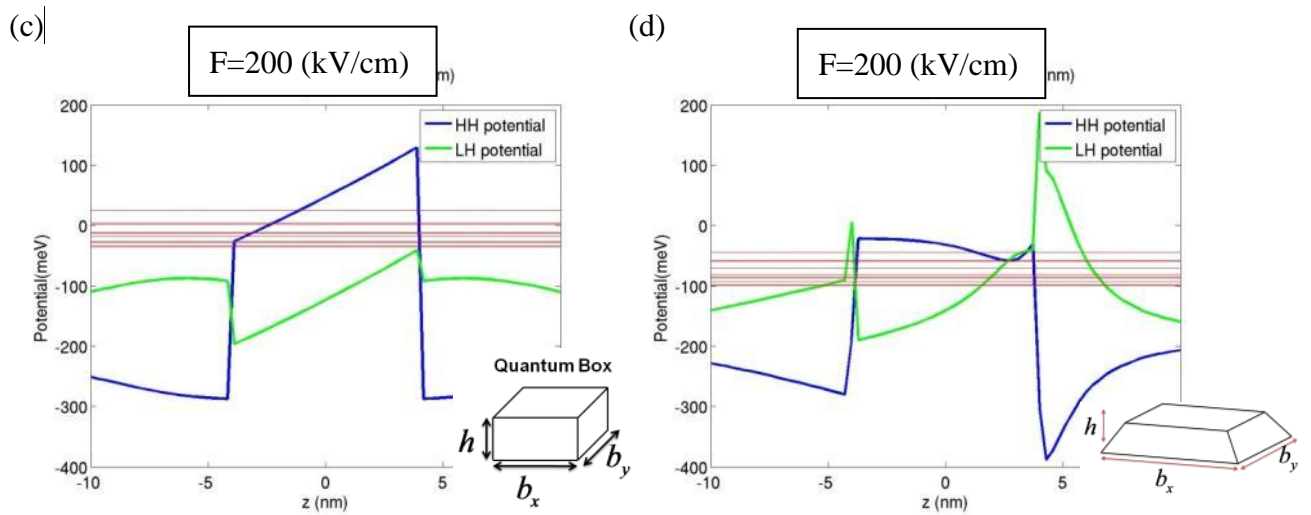


圖 4.2.18、高度 $h=8\text{nm}$ 、長 $b_x=20\text{nm}$ 、寬 $b_y=18\text{nm}$ 。(a) 電場強度為 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 的量子盒。(b) 電場強度為 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 的截角金字塔。(c) 電場強度為 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 的量子盒。(d) 電場強度為 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 的截角金字塔。

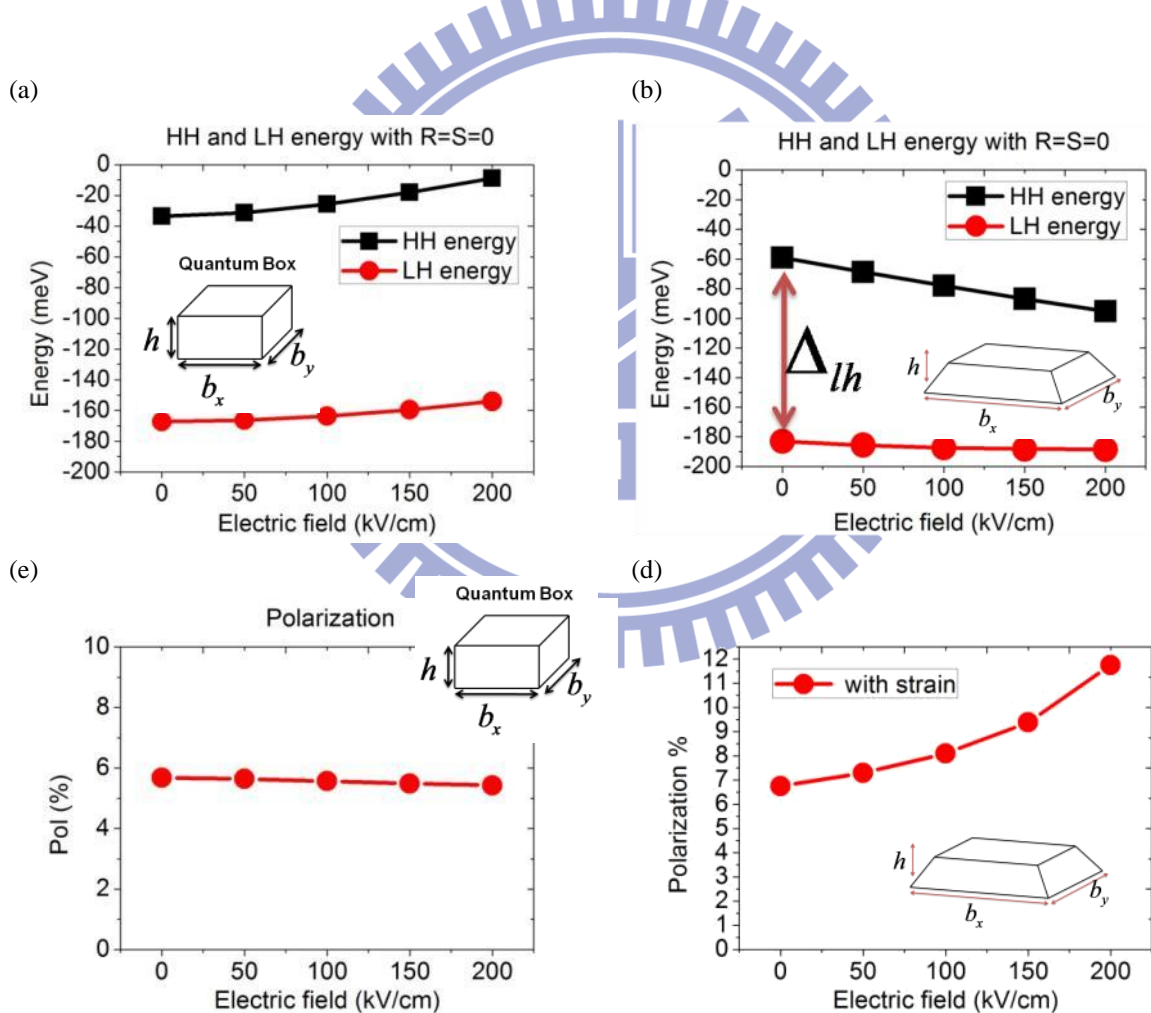


圖 4.2.19、高度 $h=8\text{nm}$ 、長 $b_x=20\text{nm}$ 、寬 $b_y=18\text{nm}$ 的輕重電洞基態能量，(a) 量子盒。(b) 截角金字塔。(c) 量子盒的偏振大小。(d) 截角金字塔的偏振大小。

(2)高度 $h=5\text{nm}$

如圖(4.2.20)，加入電場後的電子位能最低處為量子點底部。電子的波函數偏向底部。電場造成的輕重電洞位能最深處在量子點頂端(圖 4.2.22)，電場將輕重電洞的波函數推向量子點頂端。

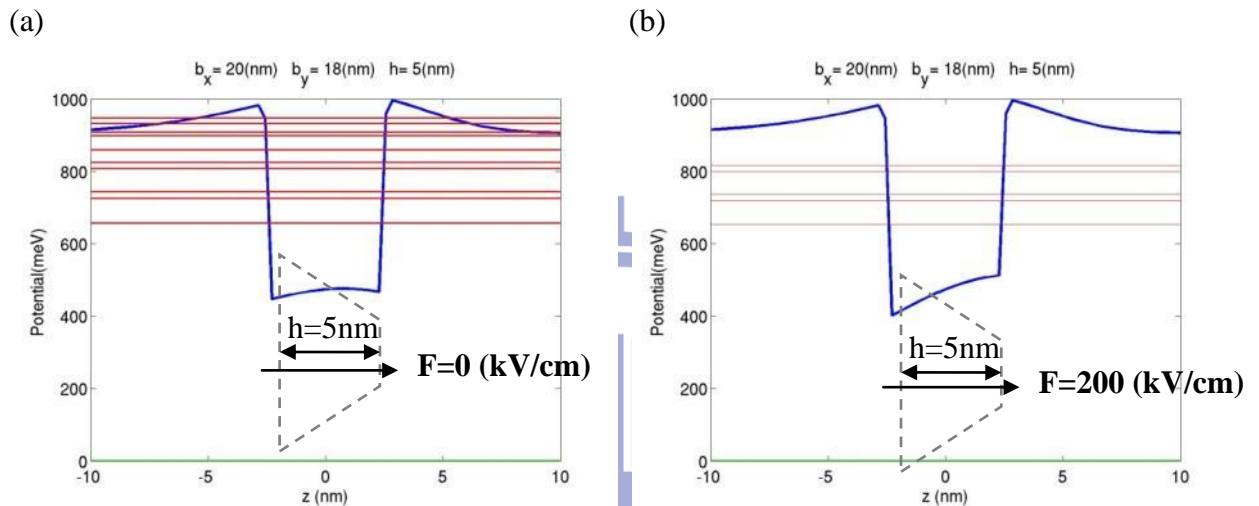


圖 4.2.20、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子位能。(a)電場強度 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 。(b) 電場強度 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 。

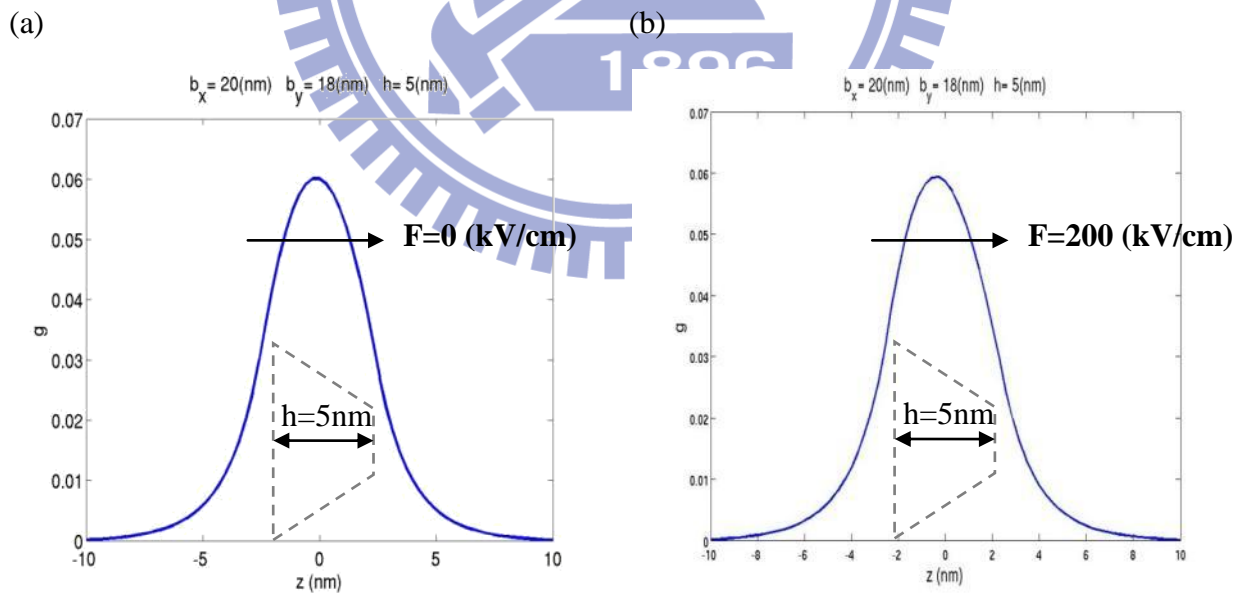


圖 4.2.21、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的基態電子波函數。(a)電場強度 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 。(b) 電場強度 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 。

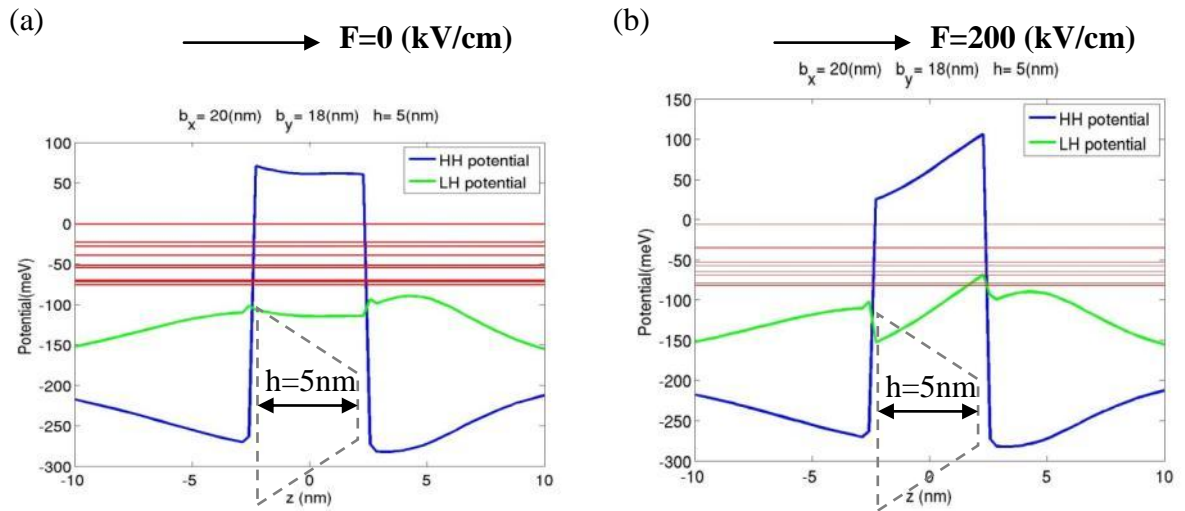
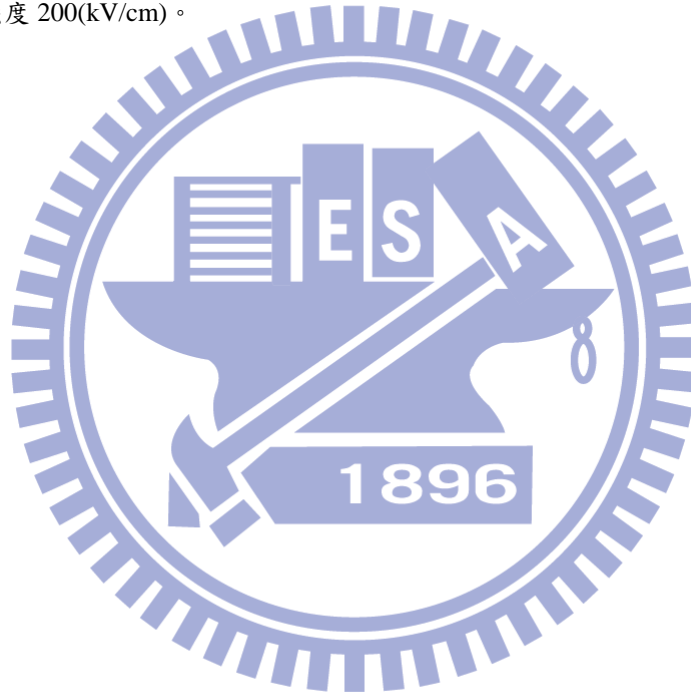
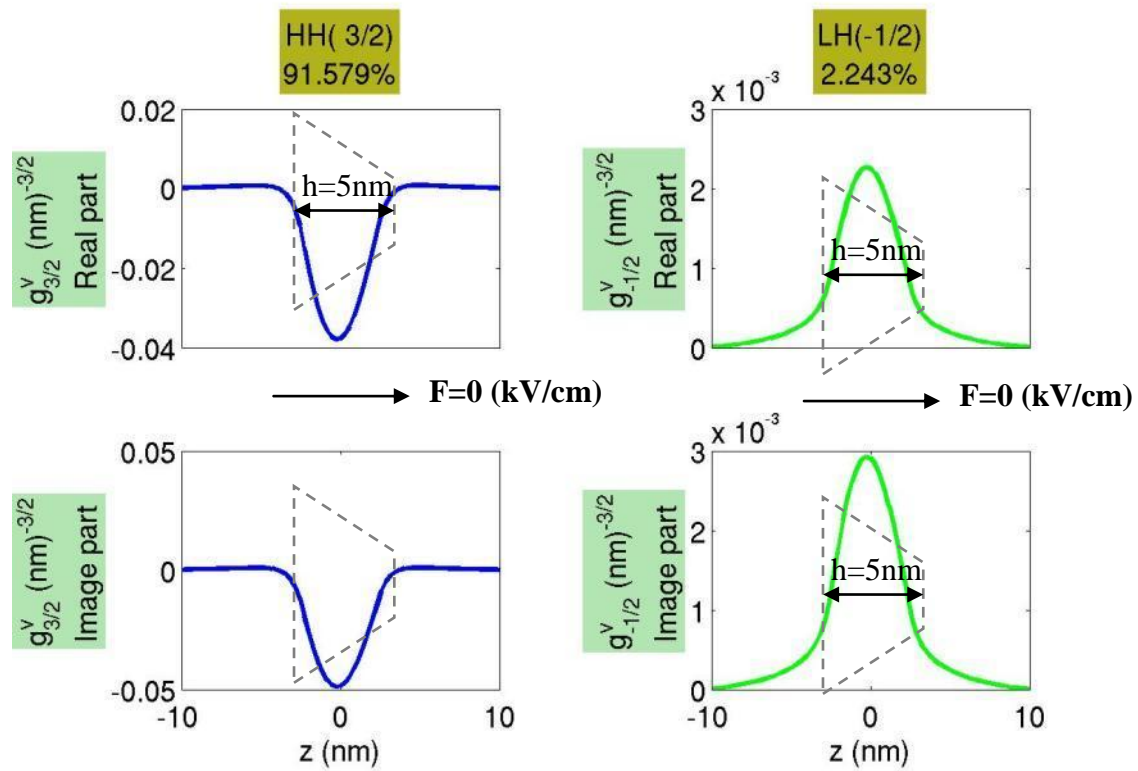


圖 4.2.22、高度 $h=5$ nm，長 $b_x=20$ nm，寬 $b_y=18$ nm 之截角金字塔量子點的輕重電洞位能。(a) 電場強度 0 (kV/cm)。(b) 電場強度 200 (kV/cm)。



(a)



(b)

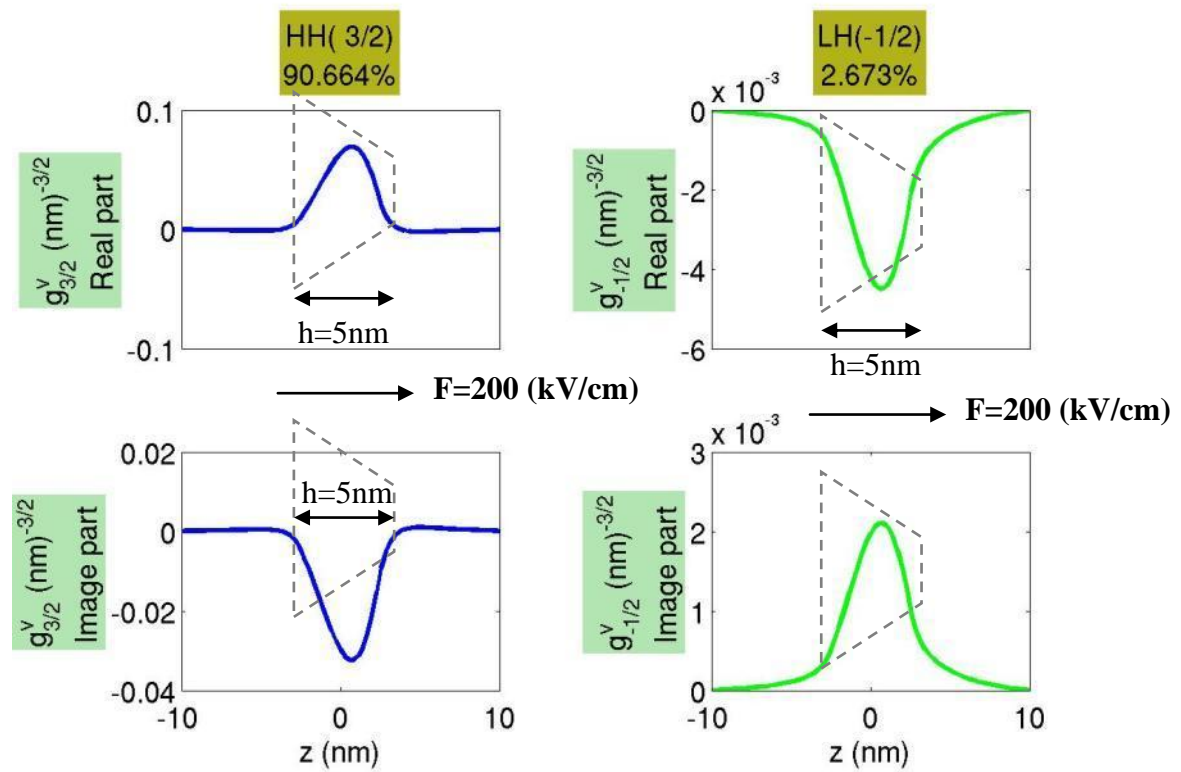


圖 4.2.23、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的基態輕重電洞波函數。(a) 電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 。(b) 電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 。

圖(4.2.24)可明顯知道，輕重電洞波函數均受到電場作用被推向量子點頂端。由於位能的寬度較窄，所以輕電洞波函數受到位能的影響較小，變化程度也較小。輕重電洞能量差 Δ_{lh} 隨著電場增加而減小 (圖 4.2.25(a))，但高度 5nm 重電洞位能變化的程度沒有高度 8nm 大，所以重電洞能量下降較小，導致輕重電洞能量差 Δ_{lh} 下降也較小，輕電洞成分略微上升(圖 4.2.25(b))。如圖(4.2.27)，電子的波函數受到電場影響較小，均分布在量子點底部，而電場將輕電洞波函數推向量子點頂端。輕電洞成分增加的效應超過波函數分布所造成的影響，所以偏振隨著電場增大而增加(圖 4.2.26(b))。但高度較低時，偏振的變化較小。

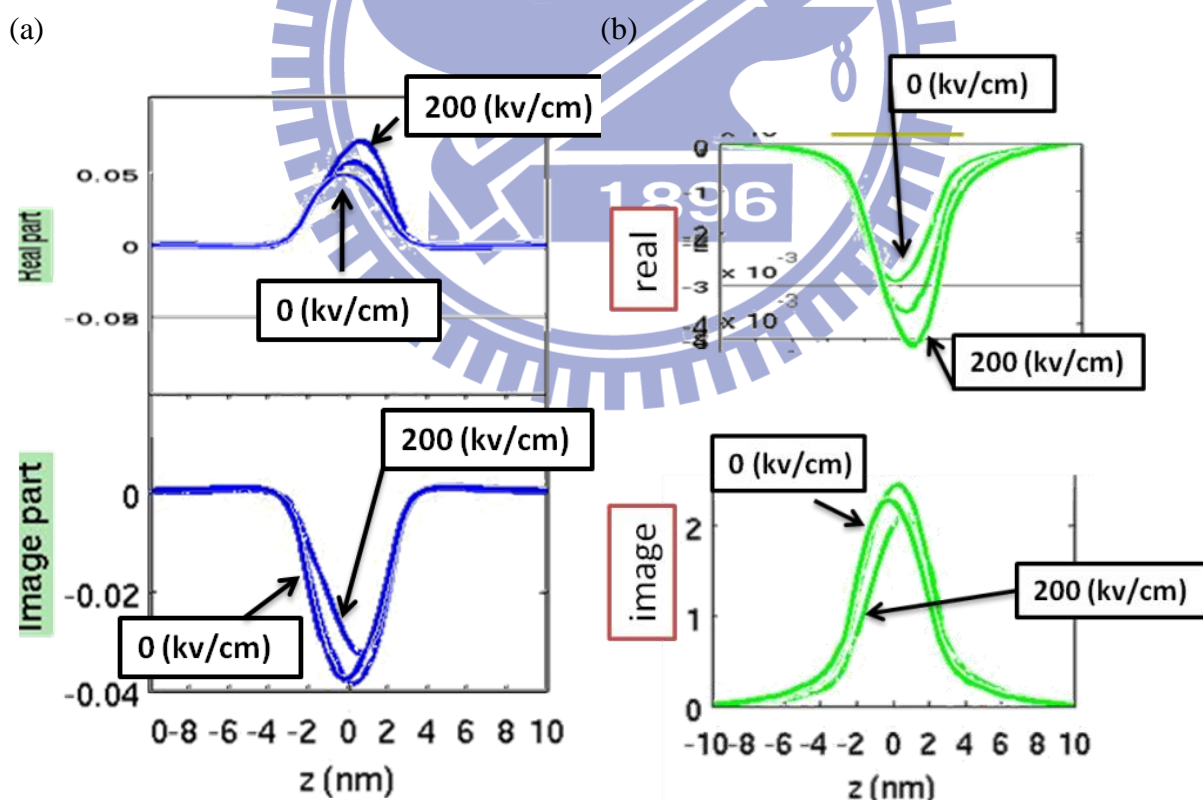


圖 4.2.24、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點外加電場下輕重電洞波函數重疊圖。(a)自旋(3/2)重電洞基態波函數。(b)自旋(-1/2)輕電洞基態波函數。

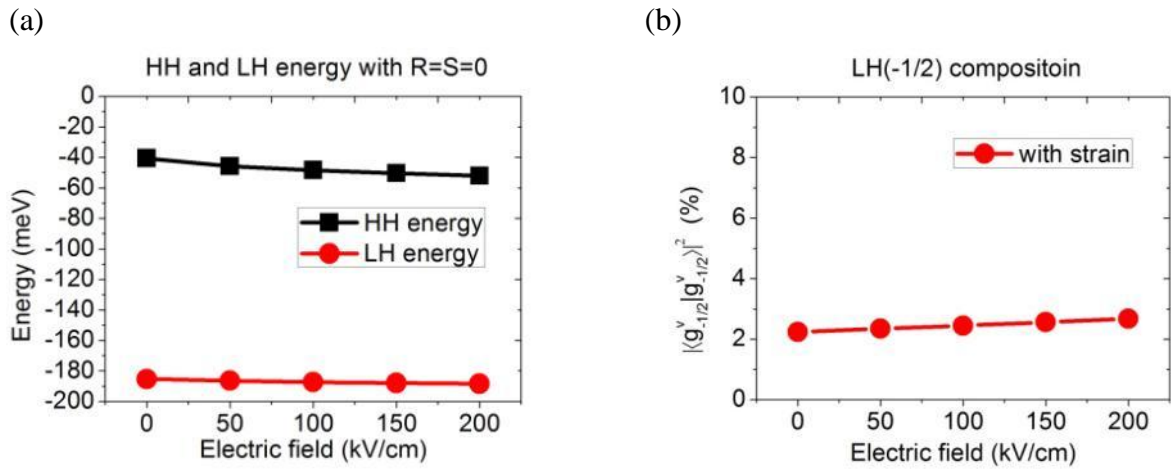
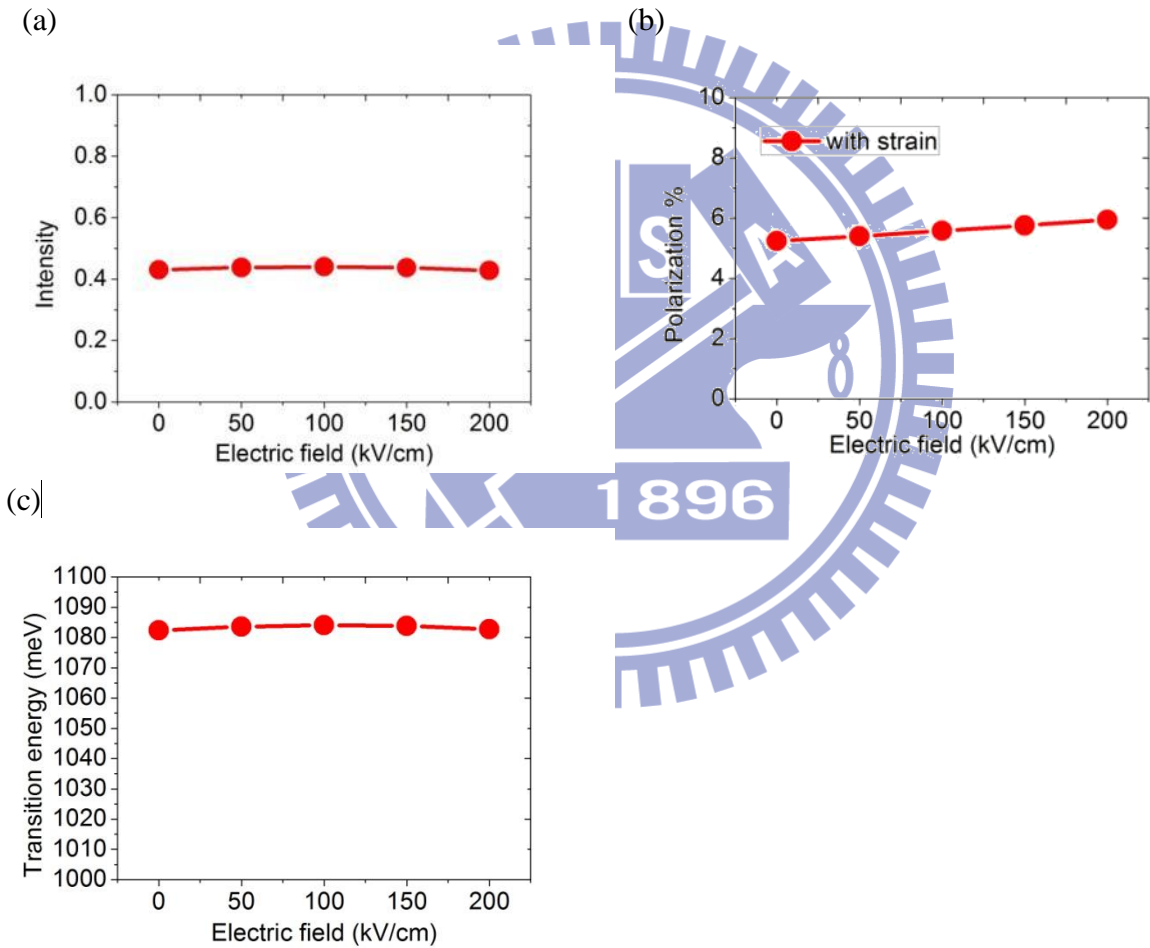
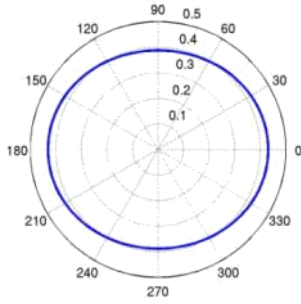


圖 4.2.25、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點隨電場變化輕重電洞能量差與輕電洞成分的關係。(a)不考慮輕重電洞耦合的輕重電洞能量。(b)基態自旋(-1/2)輕電洞波函數的成分



(d)



(f)

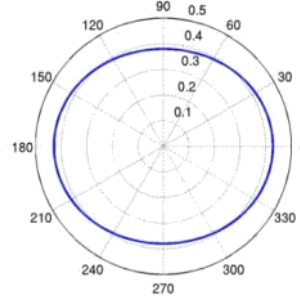


圖 4.2.26、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點隨電場增加所對應的發光強度與偏振強度。(a)發光強度。(b)偏振強度。(c)電子基態躍遷至電洞空軌域基態的能量。(c)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 的發光強度。(d) 電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 的發光強度。

(a)

(b)

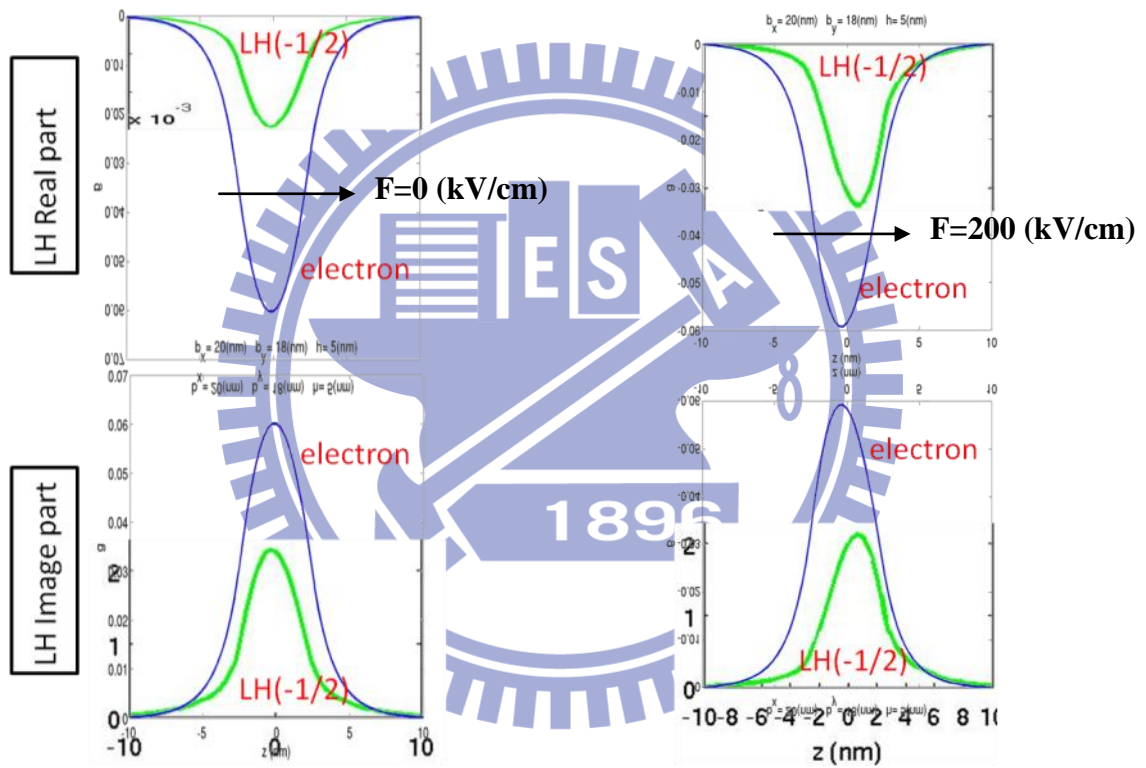


圖 4.2.27、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點電子基態波函數與基態自旋(-1/2)輕電洞波函數重疊圖。(a)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$ 。

(3)高度 $h=3\text{nm}$

如圖(4.2.28)，電子的位能受到電場作用，位能在量子點底部較深，而波函數受到電場的影響不大。輕重電洞的位能受到電場影響，位能較深處在量子點頂端，高度 3nm 的量子點位能井相當窄，導致能量的量化程度較高，底部位能井的變化不容易影響波函數的形

式，所以波函數幾乎沒有受到電場的影響(圖 4.2.32)。同樣的，如圖(4.2.33)重電洞能量也幾乎不受到外加電場的影響，輕重電洞能量差 Δ_{lh} 沒有太大改變，輕電洞成分也沒有太大變化。輕電洞成分與波函數均不受到電場影響，所以偏振也幾乎沒有改變(圖 4.2.35(b))。

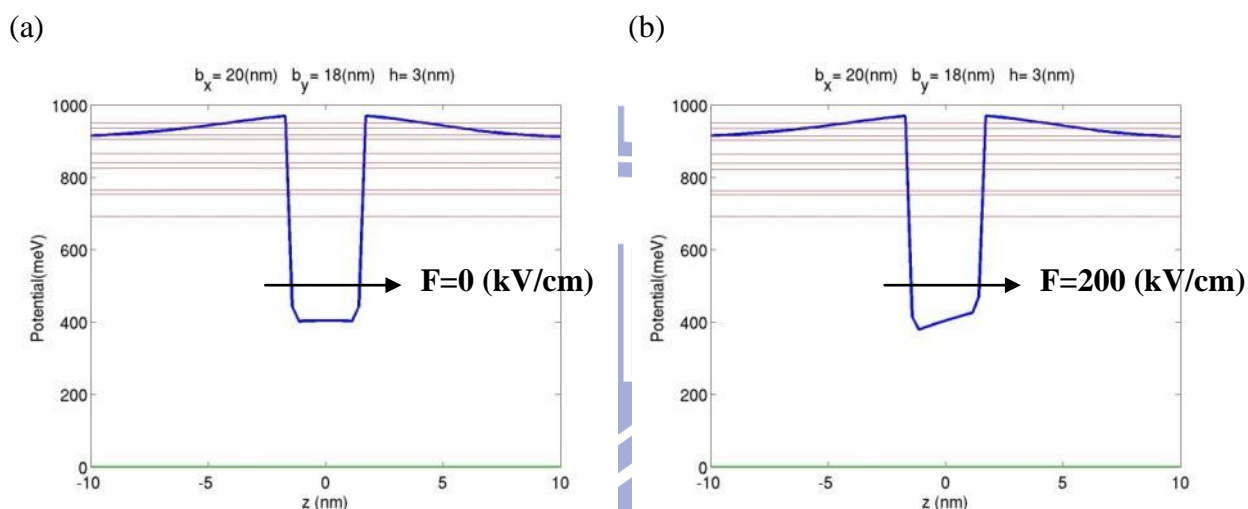


圖 4.2.28、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子位能。(a)電場強度為 0(kV/cm) 。(b)電場強度為 200(kV/cm)

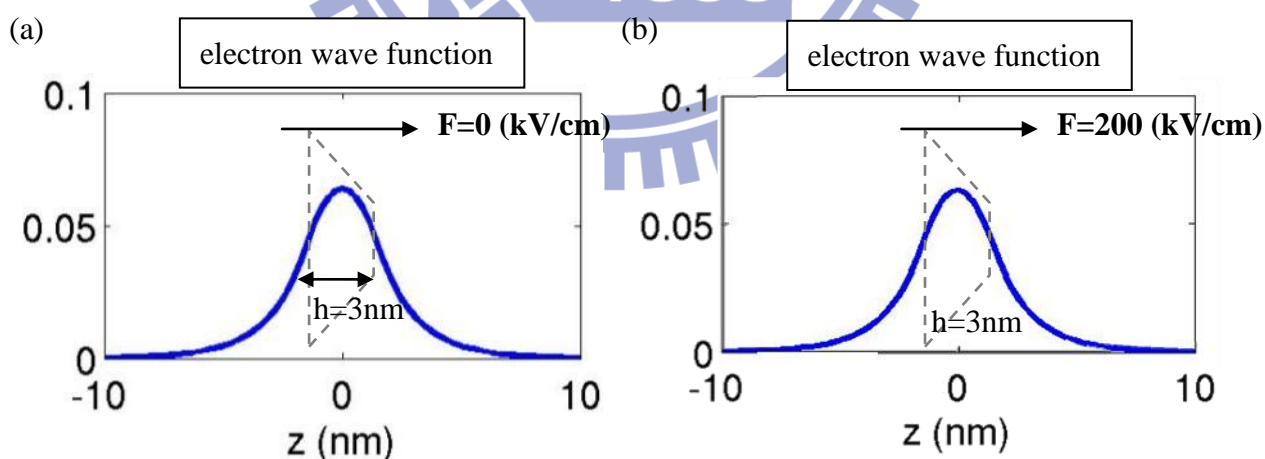
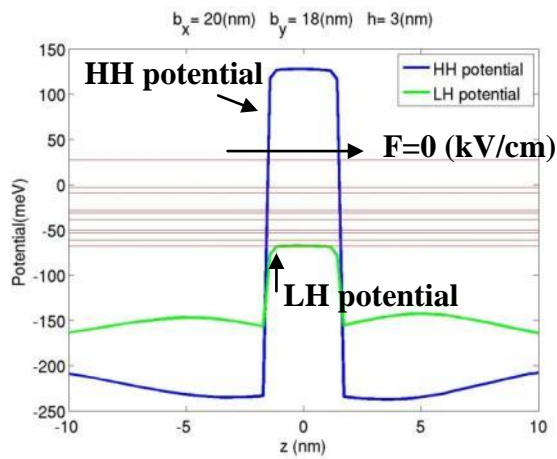


圖 4.2.29、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子基態波函數。(a)電場強度為 0(kV/cm) 。(b)電場強度為 200(kV/cm)

(a)



(b)

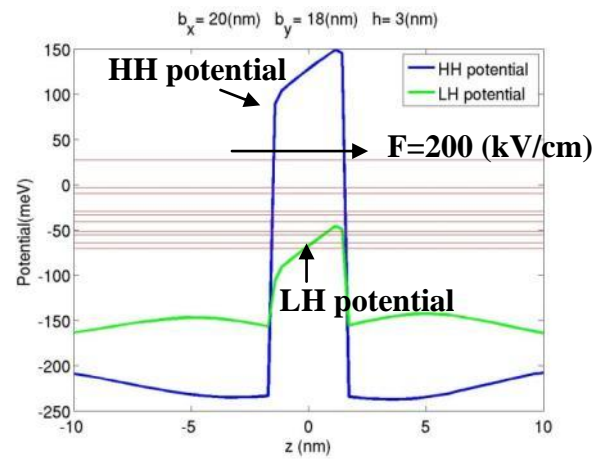
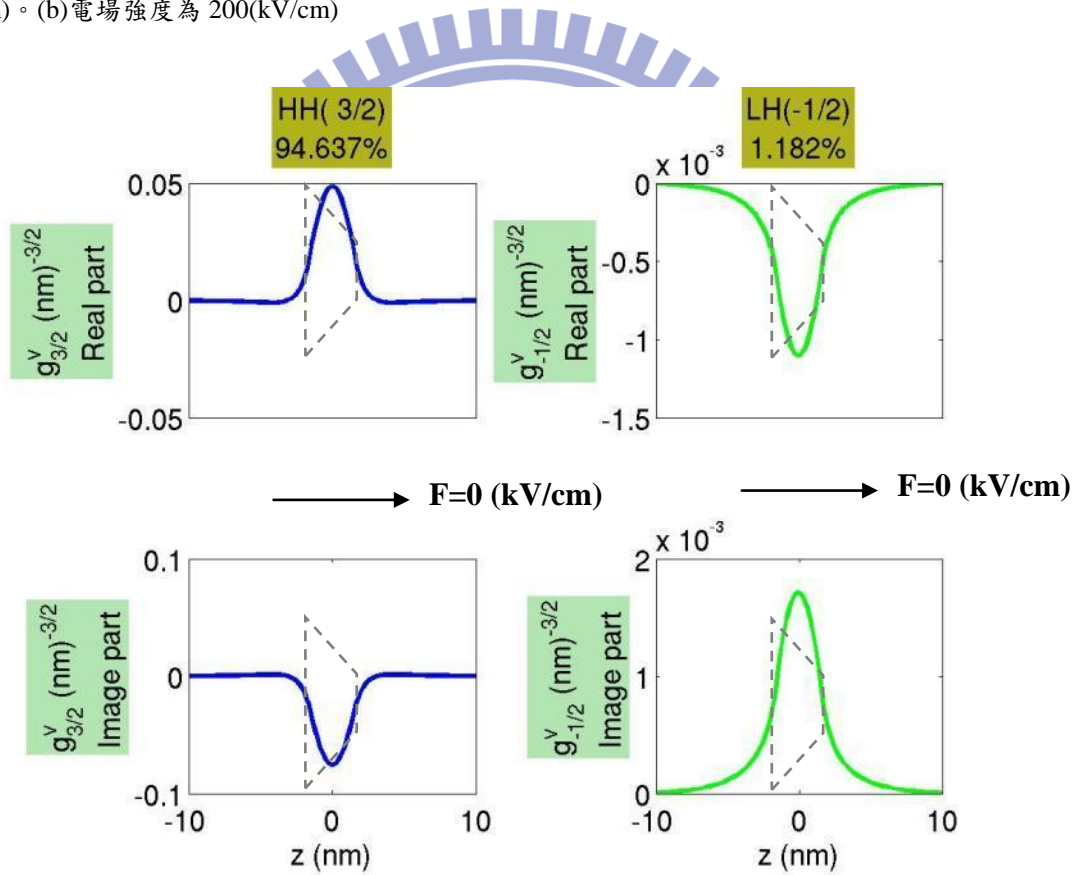


圖 4.2.30、高度 $h=3 \text{ nm}$ ，長 $b_x=20 \text{ nm}$ ，寬 $b_y=18 \text{ nm}$ 之截角金字塔量子點的輕重電洞位能。(a) 電場強度為 0 kV/cm 。(b) 電場強度為 200 kV/cm

(a)



(b)

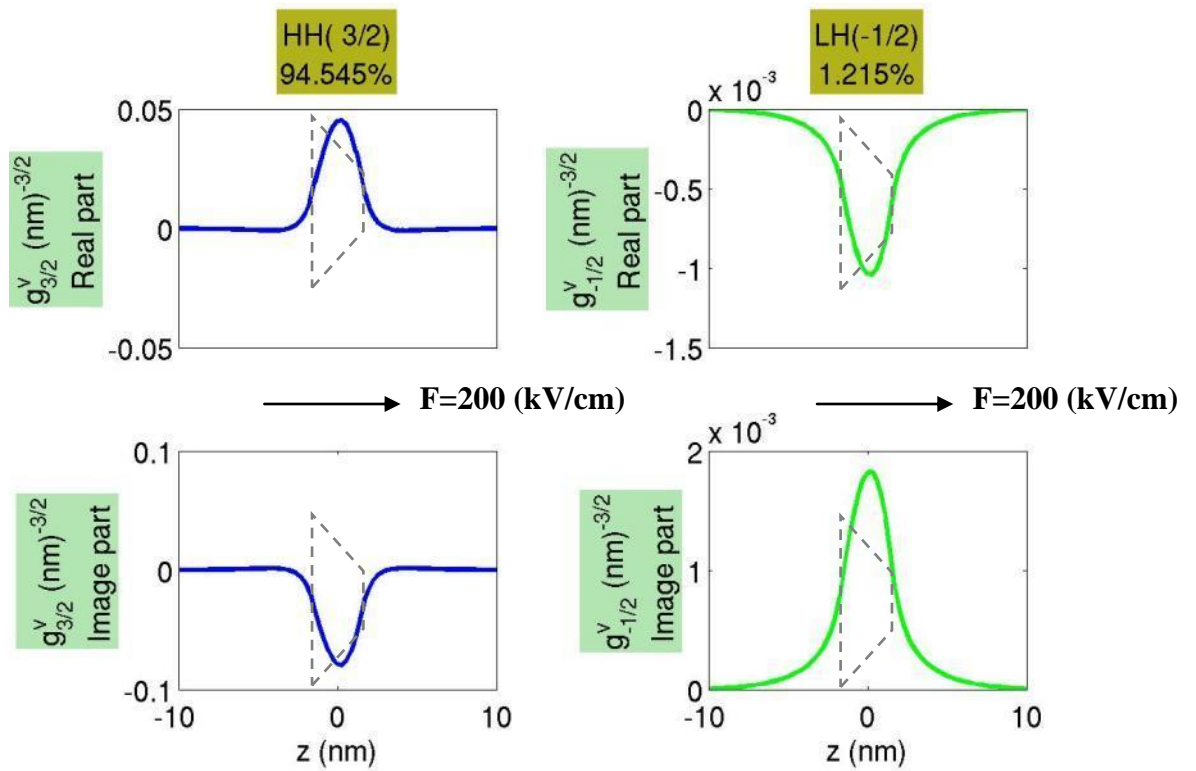


圖 4.2.31、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點基態輕重電洞波函數。(a) 電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b) 電場強度為 $200(\text{kV/cm})$

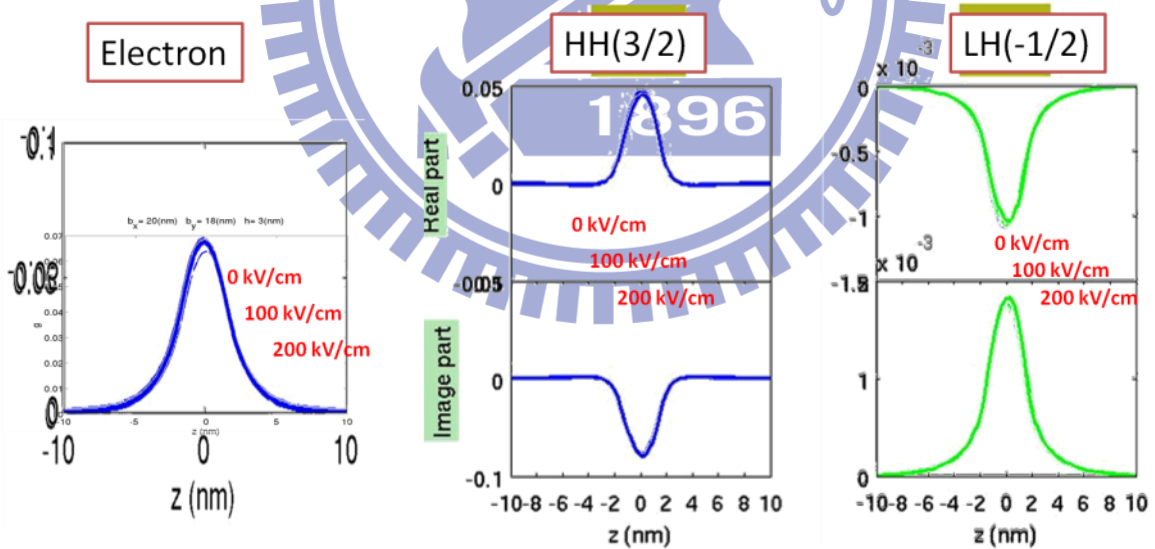


圖 4.2.32、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的基態電子波函數、基態自旋(3/2)重電洞與基態自旋(-1/2)輕電洞波函數隨電場增加的波函數重疊圖。

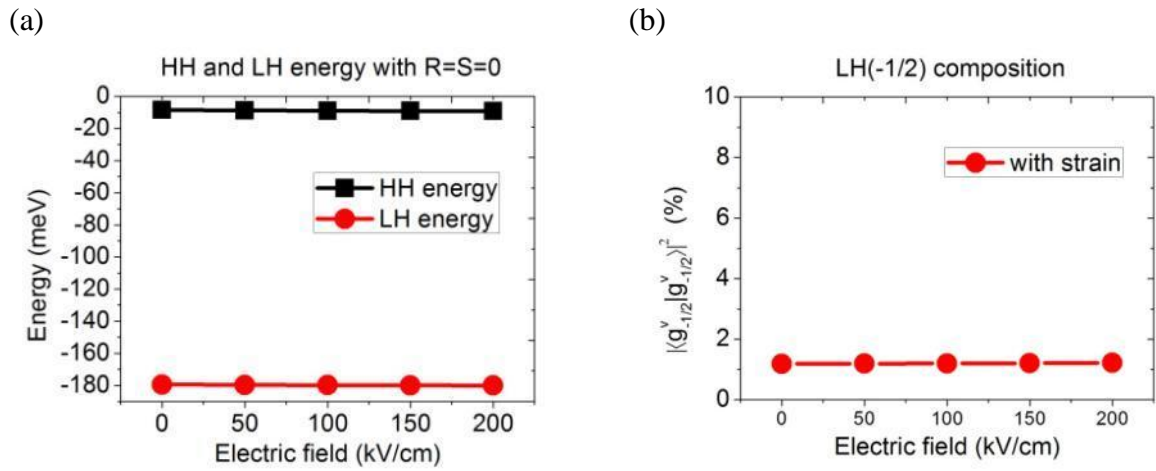


圖 4.2.33、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點隨電場變化輕重電洞能量差與輕電洞成分的關係。(a)不考慮輕重電洞耦合的輕重電洞能量。(b)基態自旋(-1/2)輕電洞波函數的成分。

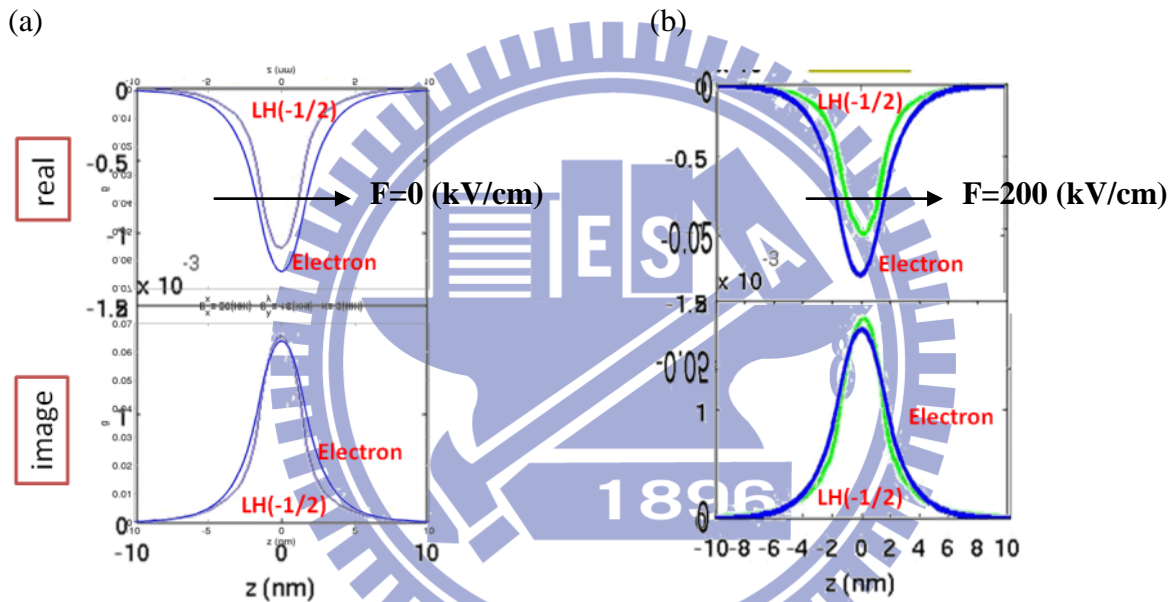
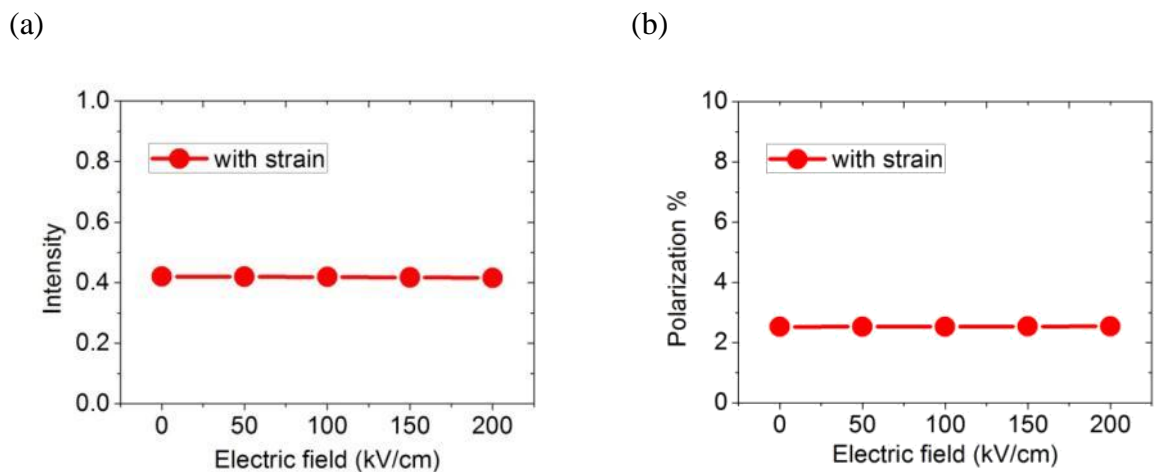
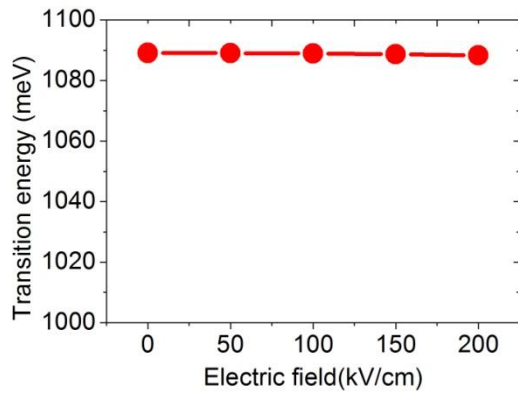


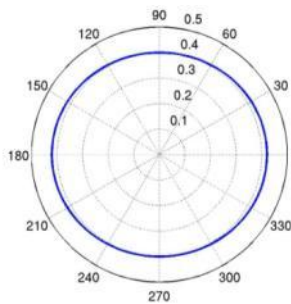
圖 4.2.34、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子基態波函數與基態自旋(-1/2)輕電洞波函數重疊圖。(a)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$ 。



(c)



(d)



(e)

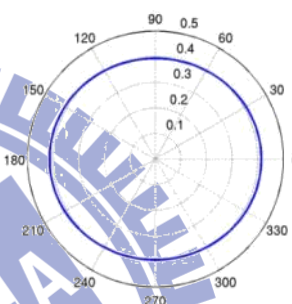
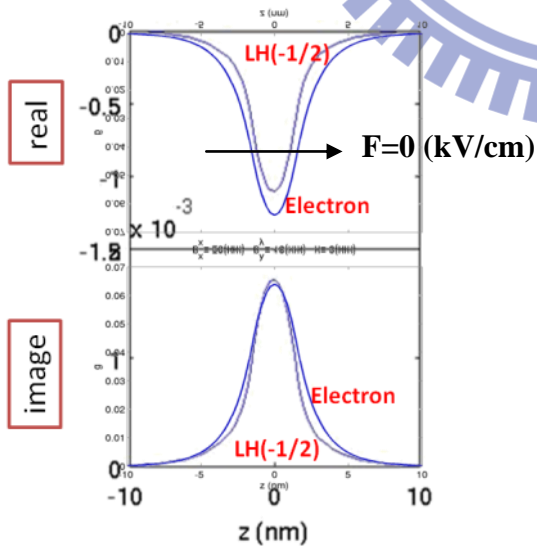


圖 4.2.35、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點隨電場變化的發光強度與偏振強度。(a)發光強度。(b)偏振強度。(c)電子基態躍遷至電洞空軌域基態的能量。(d)電場強度 $0(\text{kV/cm})$ 的發光強度。(e) 電場強度 $200(\text{kV/cm})$ 的發光強度。

(a)



(b)

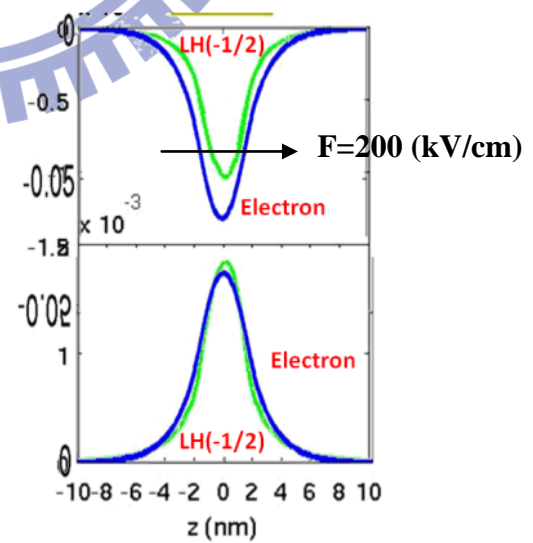


圖 4.2.36、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點的電子基態波函數與基態自旋(-1/2) 輕電洞波函數重疊圖。(a)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$ 。

由以上分析可得知，高度較高時，量子點的形狀較接近金字塔，應變的效應與高度的效應造成位能的改變。電場造成高度較高的量子點，能量與波函數的變化較大，所以偏振與躍遷能量在越高的量子點受到電場的影響越明顯(圖 4.2.37)。

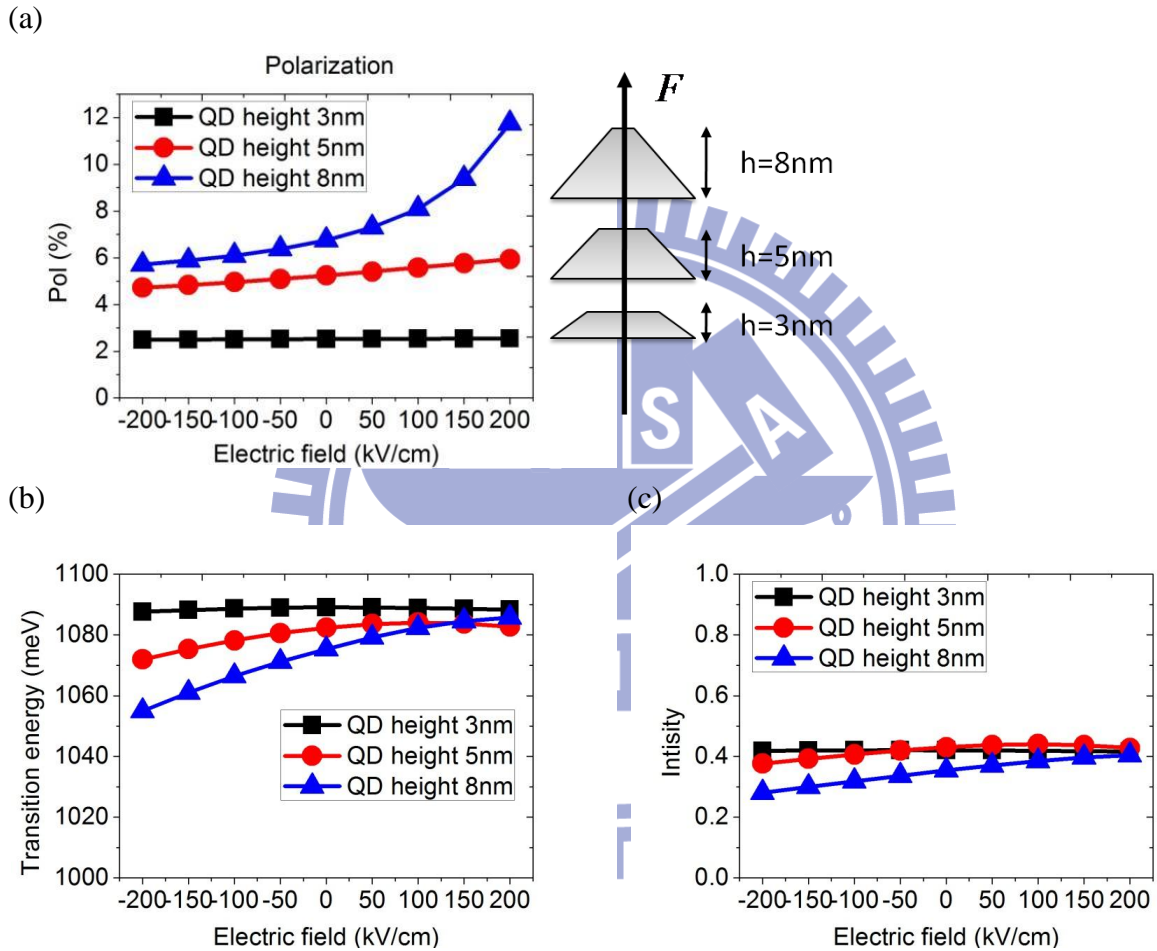


圖 4.2.37、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之截角金字塔量子點在不同高度時，隨電場改變的(a)偏振。(b)躍遷能量。(c)發光強度。

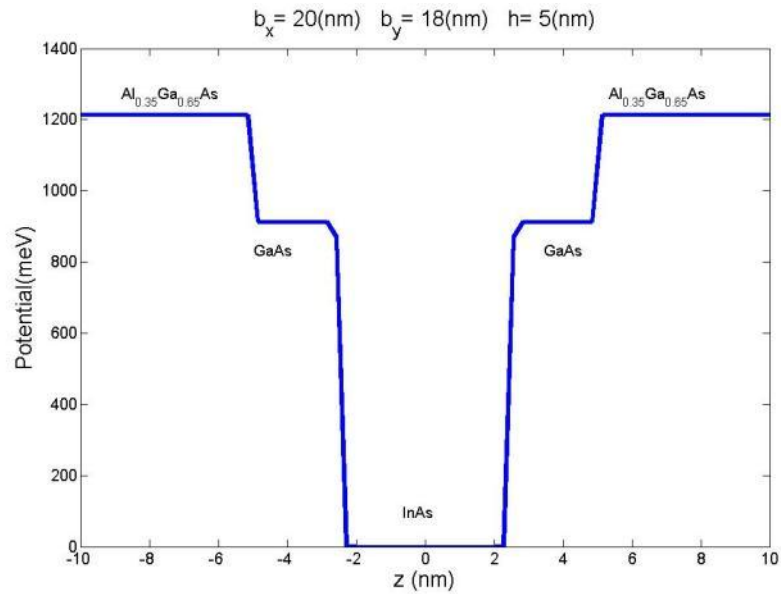
由圖(4.2.1)可知，量子點外的 GaAs 厚度為 10nm ，垂直方向的更外層則有 AlGaAs。

所以現在考慮電場外加於量子點內 InAs 與量子點外 GaAs 的範圍內，而此系統的位能示

意圖如(圖 4.2.38)所示。現在考慮應變效應並外加電場於垂直方向，電場強度為

0~200(kV/cm)，並且固定量子點長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ ，改變量子點的高度。

(a)



(b)

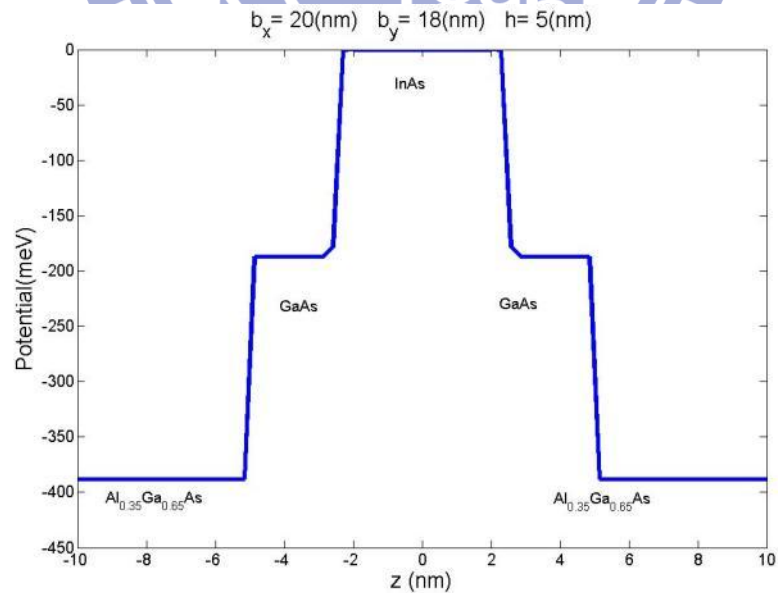


圖 4.2.38 高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 之未考慮應變效應的截角金字塔量子點，內部為 InAs，外部為 GaAs，更外層則有 AlGaAs。(a)電子位能。(b)電洞空軌域位能。

(1)高度 $h=5\text{nm}$

外加電場於垂直方向的電子位能如圖(4.2.39)所示，外加電場後電子的位能在量子點底部是較低的，波函數分布會略往底部移動。由於電子能量較高，所以外加電場對電子波函數的影響並不大。而外加電場使得輕重電洞的位能在量子點頂端較低(圖 4.2.41)，輕重電洞的波函數分布被電場略為推向量子點頂端。圖(4.2.43)可知，輕重電洞能量差 Δ_{lh} 的計算結果與不考慮 AlGaAs 的系統相當接近，而偏振的大小也沒有太大的差異(圖

4.2.51)。

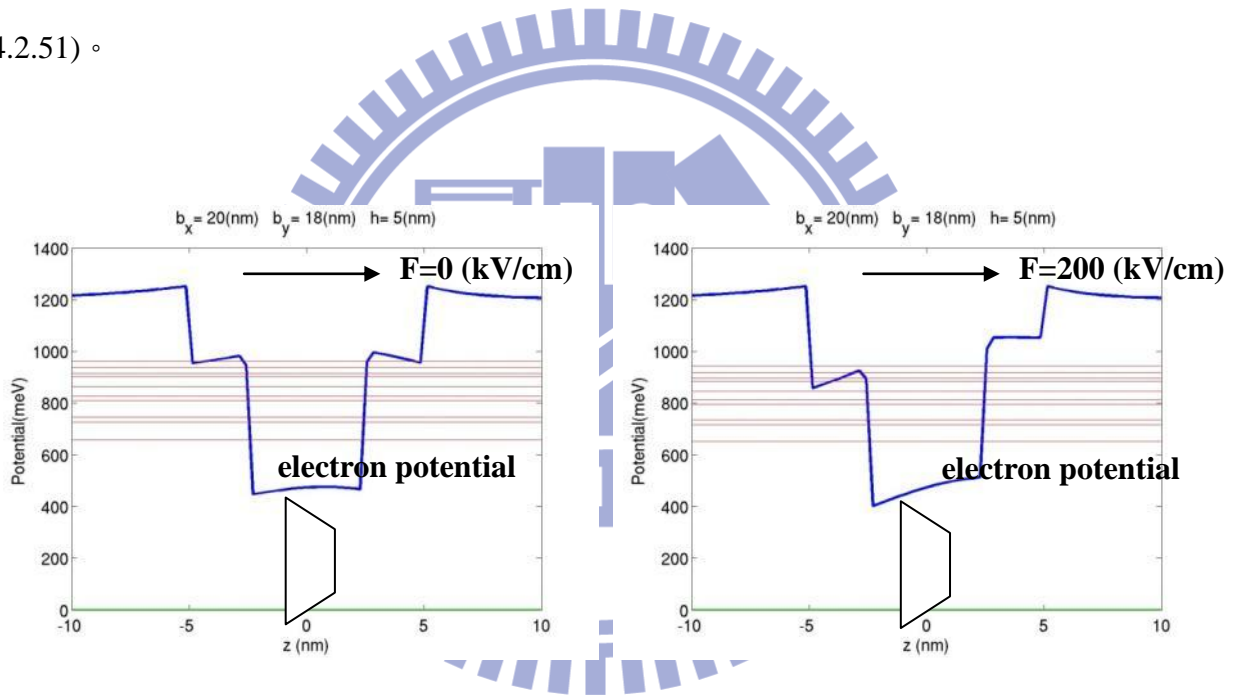


圖 4.2.39、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點外加電場於量子點垂直方向的電子位能，電場方向為 $+Z$ 。(a)電場強度為 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 。

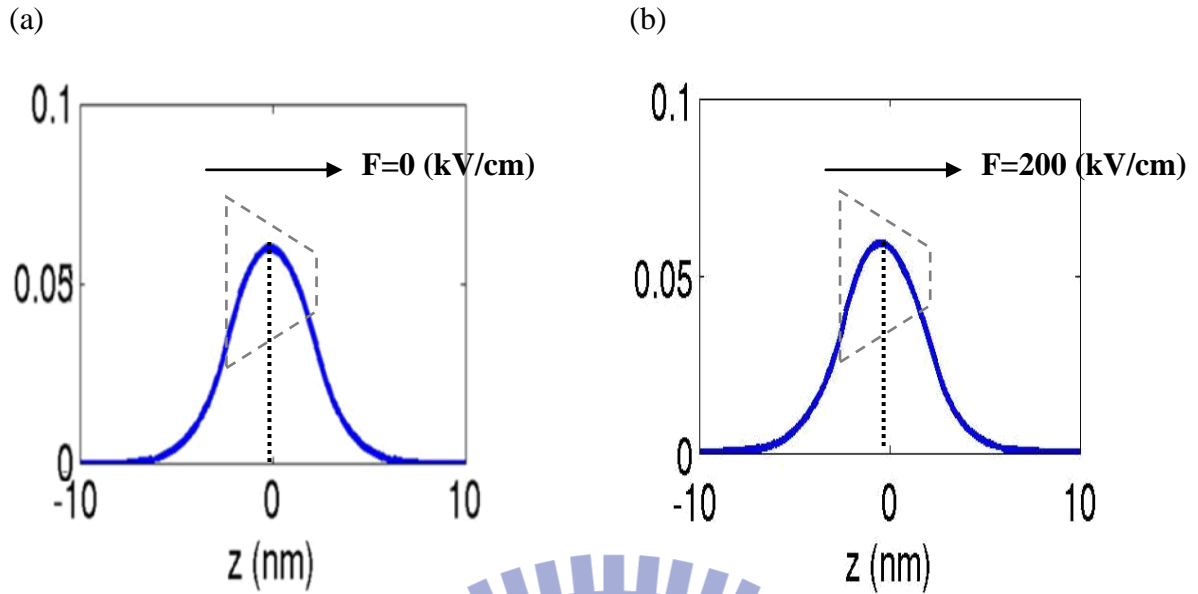


圖 4.2.40、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點外加電場於量子點垂直方向的電子基態波函數。(a)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$ 。

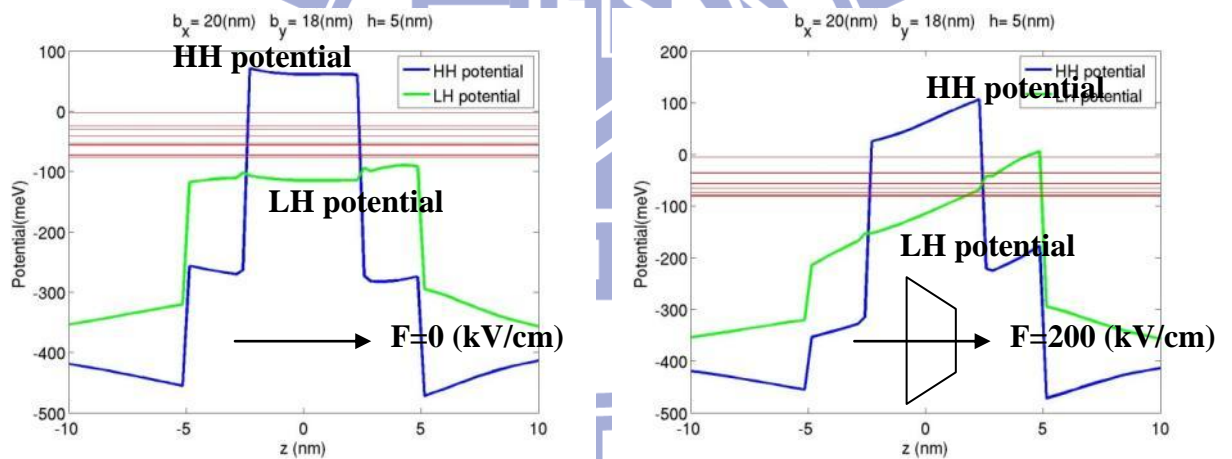
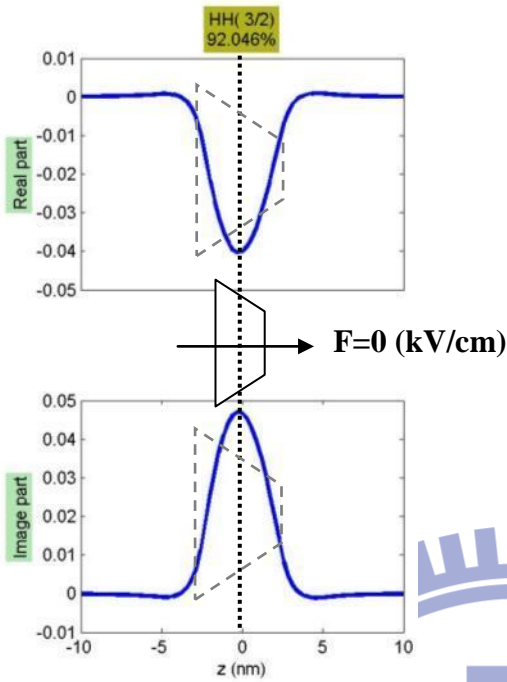
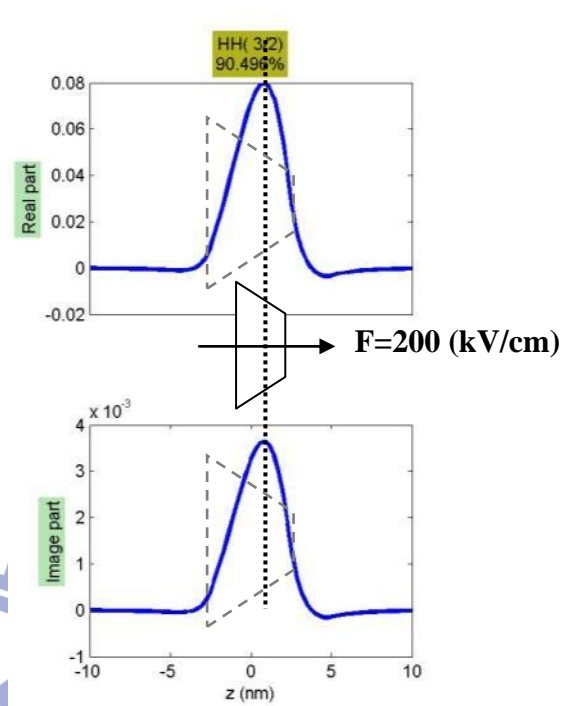


圖 4.2.41、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向的輕重電洞位能，電場方向為 $+Z$ 。(a)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$ 。

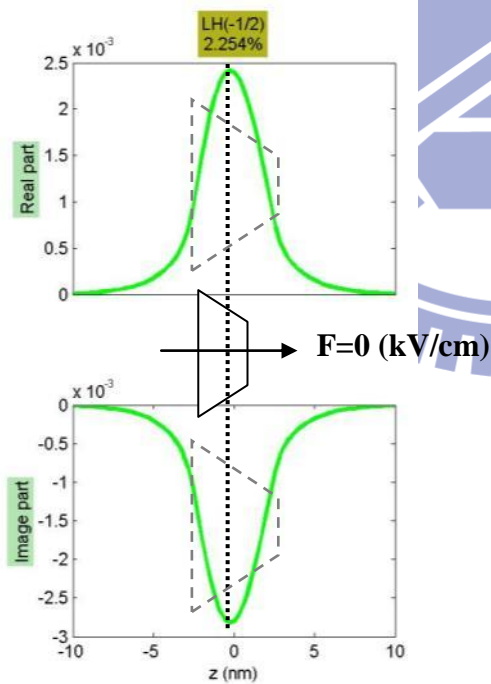
(a)



(b)



(c)



(d)

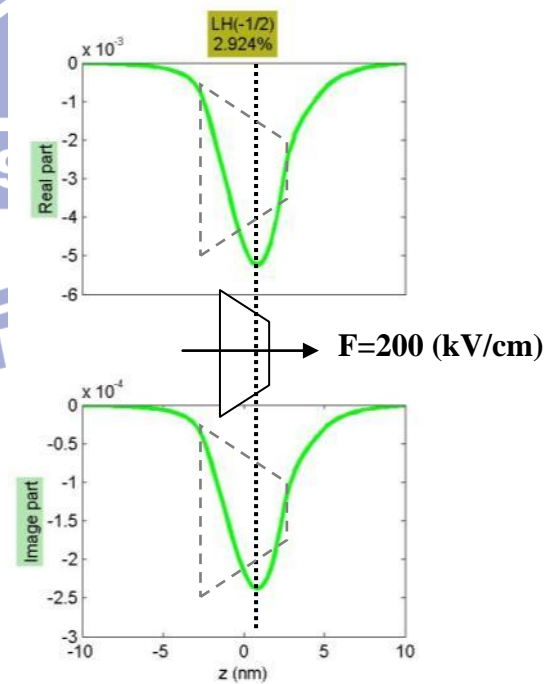


圖 4.2.42、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向。自旋(3/2)的重電洞基態波函數，(a)電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$ 。自旋(-1/2)的輕電洞基態波函數，(c) 電場強度為 $0(\text{kV/cm})$ 。(d)電場強度為 $200(\text{kV/cm})$ 。

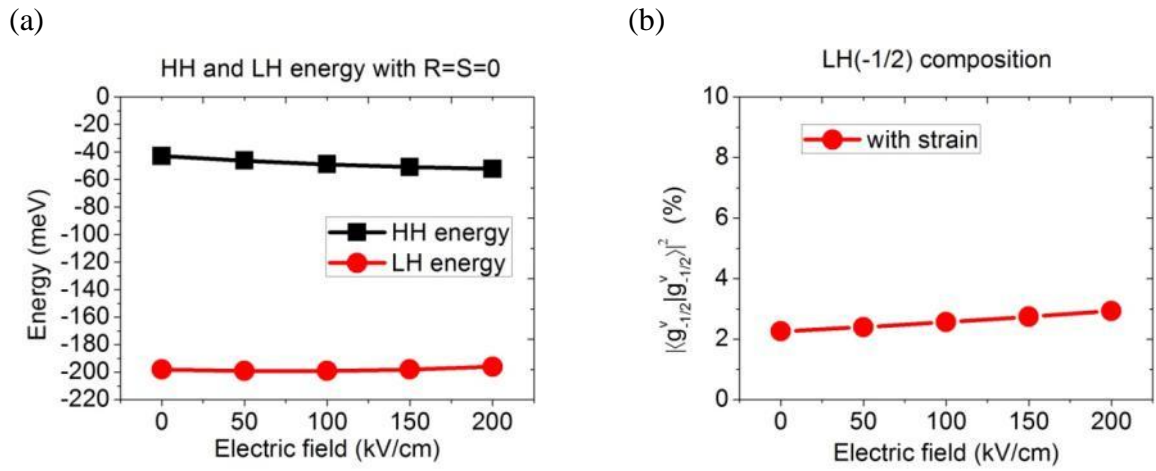
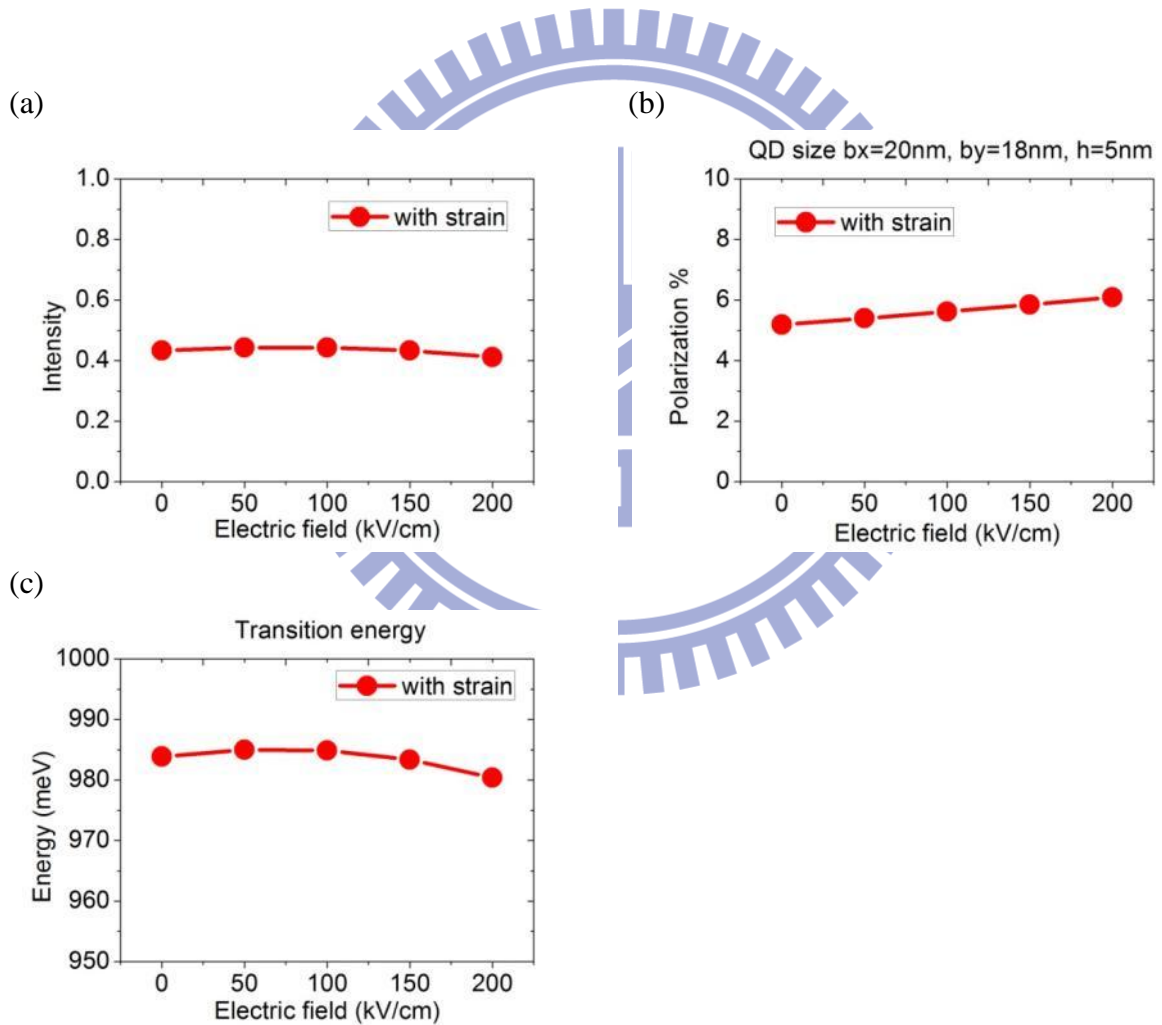
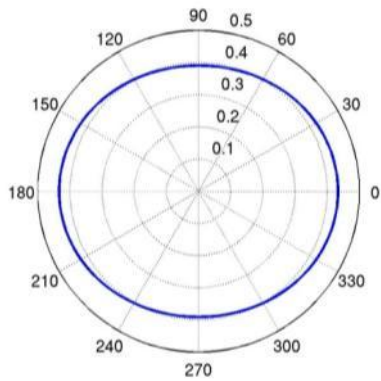


圖 4.2.43、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向。(a) 輕重電洞能量差。(b) 基態波函數自旋(-1/2)輕電洞成分。



(d)



(e)

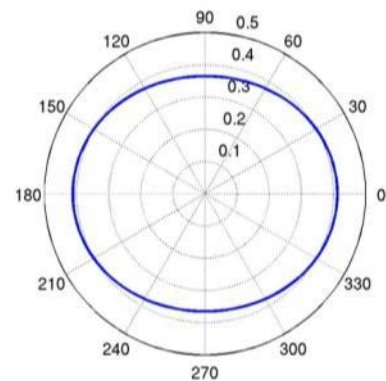
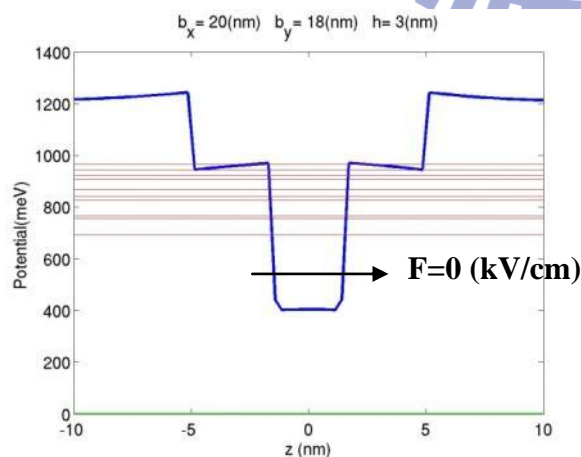


圖 4.2.44、高度 $h=5\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向。(a) 發光強度與電場的關係。(b) 偏振強度。(c) 電子基態躍遷至電洞空軌域基態的能量 (d) 電場為 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 的發光強度。(e) 電場為 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 的發光強度。

(2) 高度 $h=3\text{nm}$

外加電場於量子點垂直方向，高度 $h=3\text{nm}$ 的位能井較窄，與不考慮 AlGaAs 的系統相同，波函數幾乎不受外加電場的影響(圖 4.2.46、4.2.48、4.2.49)。較窄的位能井同樣的也造成輕重電洞能量不受到外加電場的影響(圖 4.2.50(a))，所以導致輕電洞成分不會增加或減少(圖 4.2.50(b))，而偏振則是與未加電場幾乎相同(圖 4.2.50(d))。

(a)



(b)

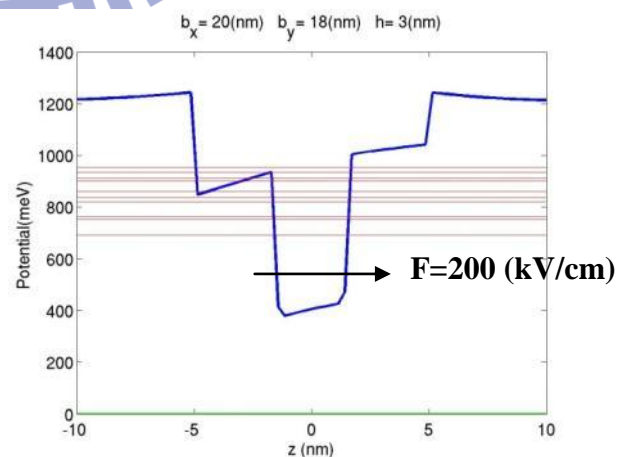


圖 4.2.45、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向的電子位能。(a) 電場強度為 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 。(b) 電場強度為 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 。

(a)

(b)

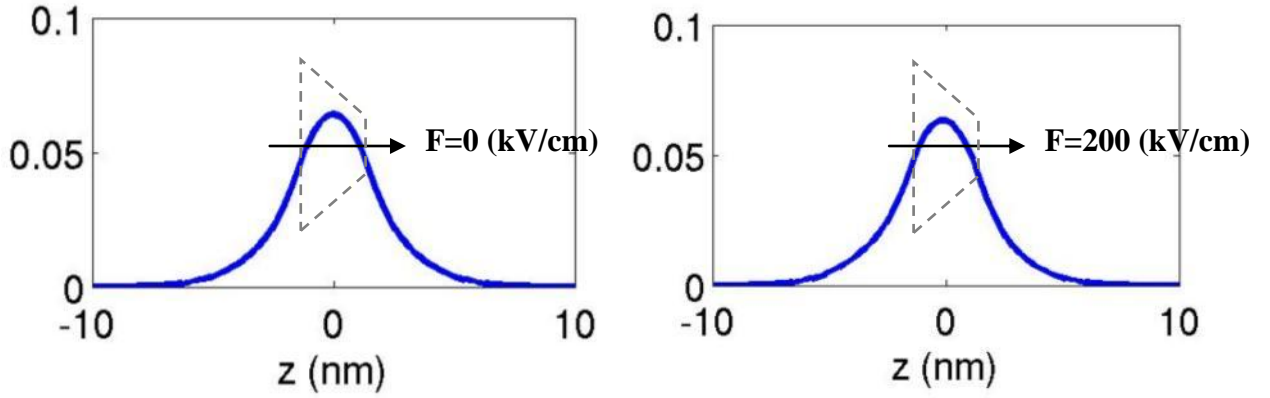


圖 4.2.46、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向的電子波函數。(a)電場強度為 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 。

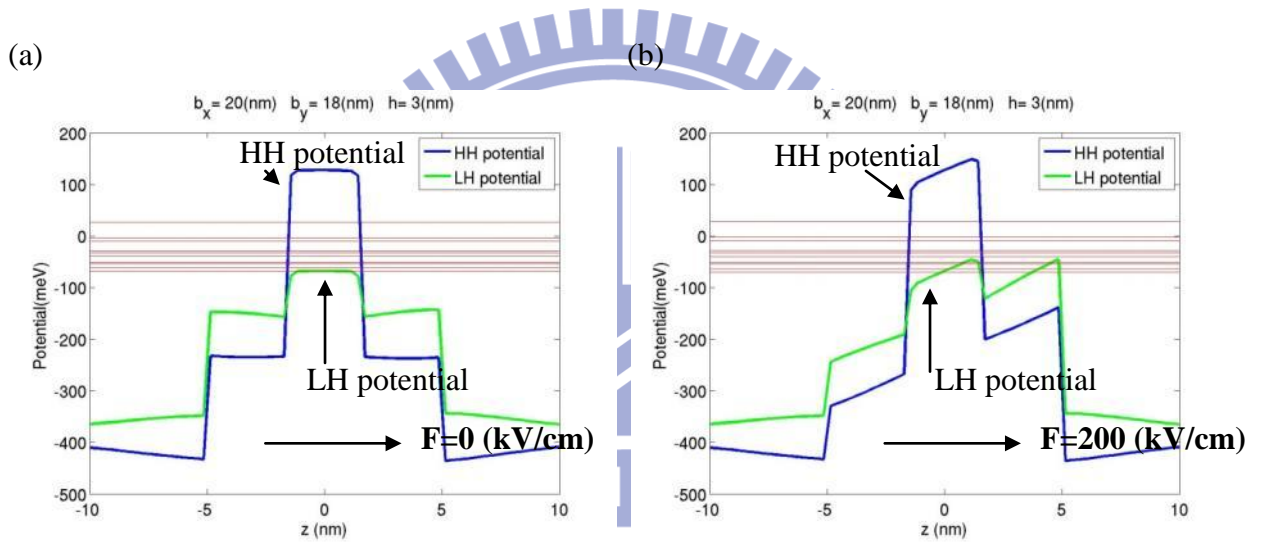


圖 4.2.47、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向的輕重電洞位能。(a)電場強度為 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 。

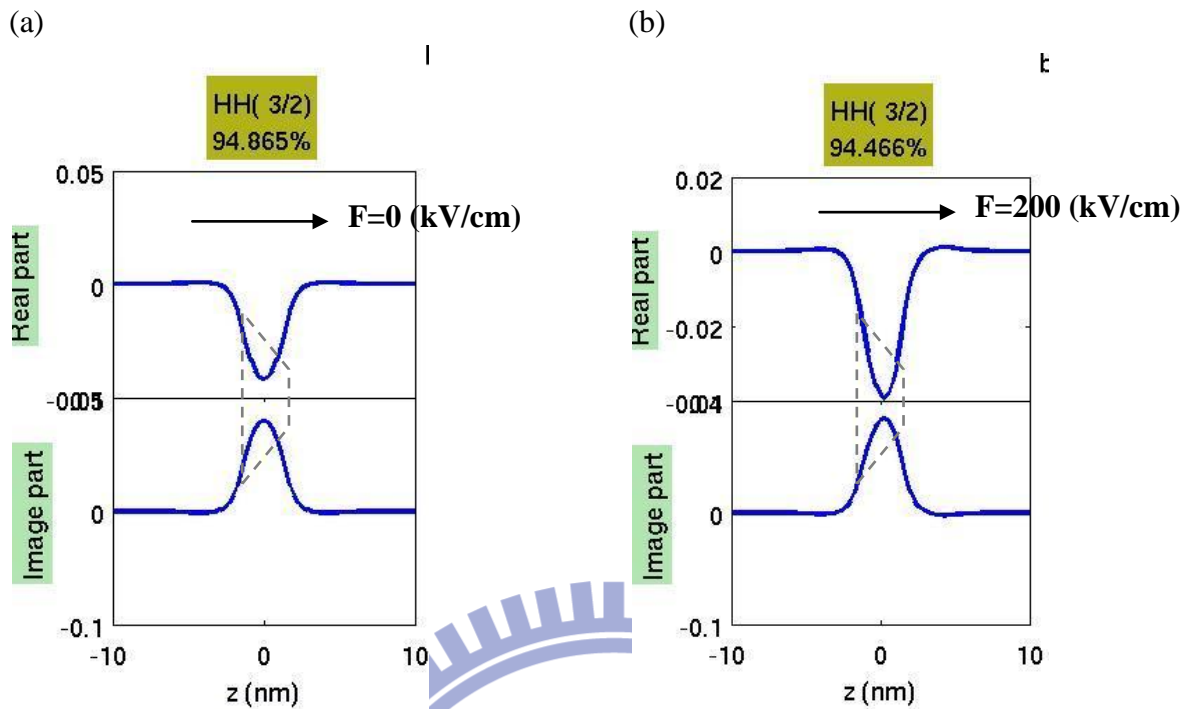


圖 4.2.48、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向的基態自旋(3/2)重電洞波函數。(a)電場強度為 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 。

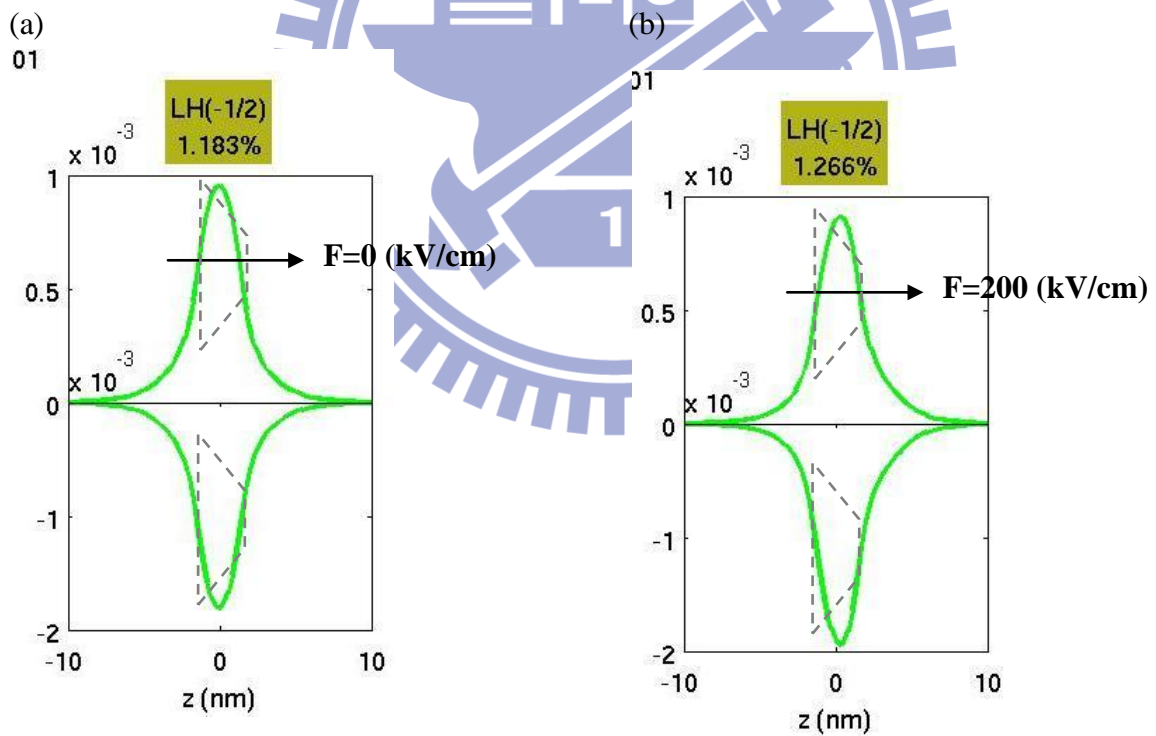


圖 4.2.49、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向的基態自旋(-1/2)輕電洞波函數。(a)電場強度為 $0(\text{kV}/\text{cm})$ 。(b)電場強度為 $200(\text{kV}/\text{cm})$ 。

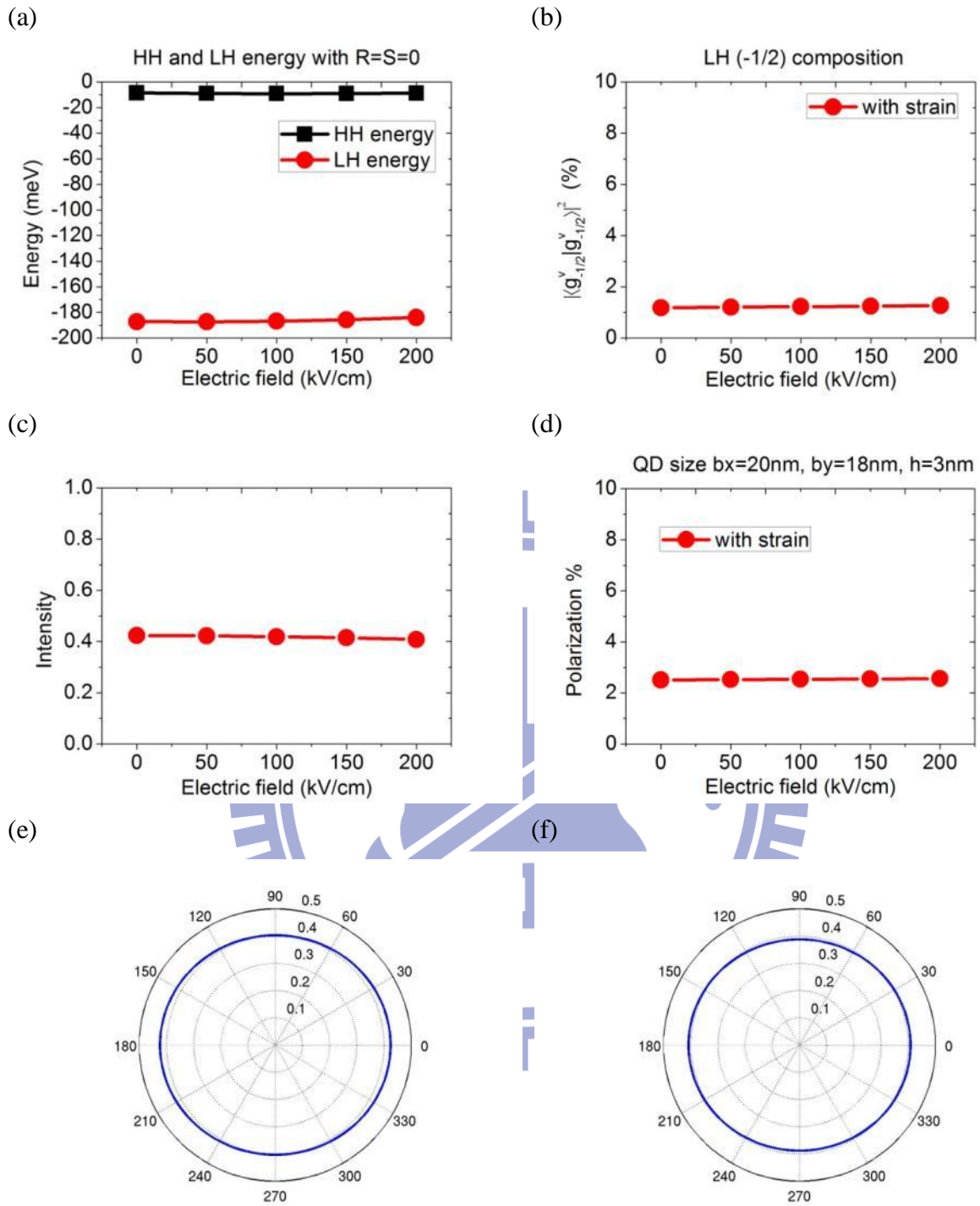


圖 4.2.50、高度 $h=3\text{nm}$ ，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ 的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向。(a) 輕重電洞能量差。(b) 基態波函數自旋(-1/2)輕電洞成分。(c) 發光強度與電場的關係。(d) 偏振強度。(e) 電場為 0 kV/cm 的發光強度。(f) 電場為 200 kV/cm 的發光強度。

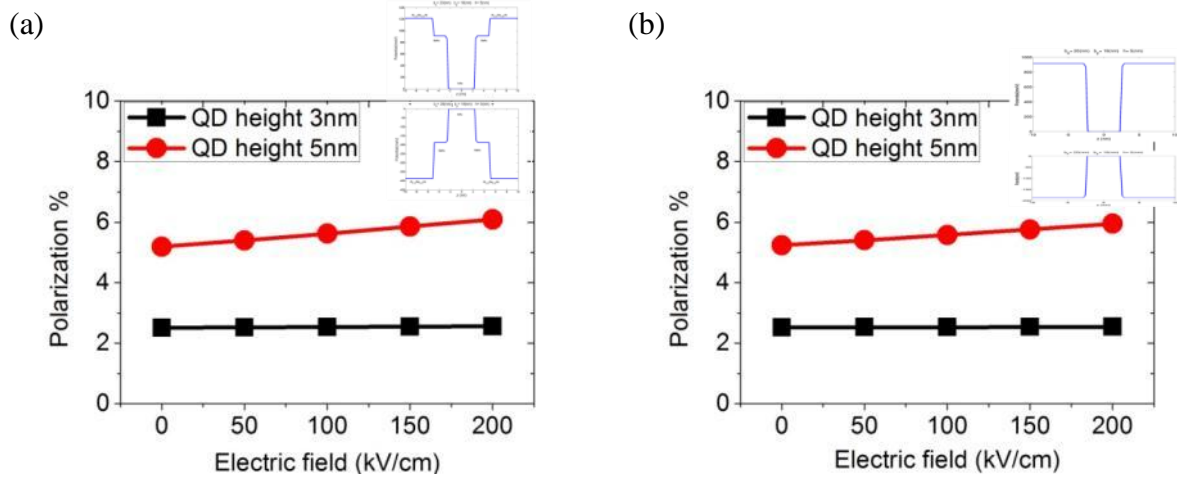


圖 4.2.51、長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ ，不同高度的截角金字塔量子點，外加電場於量子點垂直方向。量子點內部為 InAs，外部為 GaAs，(a)最外層有材料 AlGaAs。(b) 最外層無材料 AlGaAs。

由以上分析可得知，在典型的量子點大小，長 $b_x=20\text{nm}$ ，寬 $b_y=18\text{nm}$ ，高度 3~5nm 的量子點，最外層有無 AlGaAs 對電子結構與波函數並無太大影響，使得偏振也不受到此系統的影響(圖 4.2.51)。

第五章、結論

本文章由 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 多能帶理論與波包近似法計算量子點電子結構，並用費米黃金定律計算電子由導電帶躍遷至價電帶的發光強度與偏振。輕重電洞的侷限位能分別受到不同方向的應變效應，垂直方向的應變主導重電洞侷限位能，平行方向的應變則主導輕電洞侷限位能的變化。若比較量子盒與截角金字塔的形狀發現金字塔狹窄的上半部區域為較大的體應變分布(較小的雙軸應變分布)，導致截角金字塔尖端效應越強則輕重電洞耦合越強。所以當截角金字塔形狀的量子點高度增加時，尖端效應越強，輕電洞成分較多，則導致偏振越大。當不對稱性 ξ 與高度固定時，較大的量子點使輕重電洞耦合變弱，則偏振變小。最後外加電場於量子點成長方向，史塔克效應導致基態的輕電洞成分改變，截角金字塔的形狀與應變效應造成較高的量子點受到電場影響的程度較大，偏振的變化相較於薄的量子點來的劇烈，電場強度 200kV/cm 導致較高的量子點大約增加 5% 偏振。

文章中使用 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 單能帶模型計算電子的電子結構， $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 六能帶模型計算價電帶空軌域的電子結構。未來可使用更精準的 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 八能帶模型模擬量子點的電子結構。此外，可外加單軸應變改變電子結構與偏振，並進一步探討量子點中激子的精細結構劈裂。

參考文獻

- [1] V. Vedral, Rev. Mod. Phys. 74, 197(2002)
- [2] J. Ma´rquez, L. Geelhaar, and K. Jacobi, Appl. Phys. Lett. 78, 2309 (2001).
- [3] Andrei Schliwa, Momme Winkelkemper , and Dieter Bimberg, Phys. Rev. B **76**, 205324(2007).
- [4] A. J. Bennett, NATURE PHYSICS, VOL6, DECEMBER (2010), p947.
- [5] S. L. Chuang "Physics of Optoelectronic Devices", Second Edition, Wiley (2008).
- [6] Weidong Sheng, Shun-Jen Cheng, and Pawel Hawrylak, Phys. Rev. B, 71, 035316 (2005).
- [7] Andrei Schliwa, Momme Winkelkemper, and Dieter Bimberg, Phys. Rev. B, 76, 205324 (2007).
- [8] O. Stier, M. Grundmann, and D. Bimberg, Phys. Rev. B, **59**, 5688 (1999)
- [9] W. D. Sheng and J. P. Leburton, Phys. Rev. B 67, 125308 (2003).
- [10] 尤文廷，「自組式量子點偏振螢光之理論研究」，國立交通大學，碩士論文，民國九十九年。
- [11] 黃上瑜，「利用 k.p 法計算垂直耦合雙量子點的電子結構」，國立交通大學，碩士論文，民國九十七年。

附錄 A

$$\begin{aligned}
 D_{i_v, i_c}(\vec{e}) &= \sum_{J_z, S_z} [d_{J_z, S_z}(\vec{e})] \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_c, S_z}^c \rangle \\
 &= d_{3/2, 1/2} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + d_{3/2, -1/2} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\
 &\quad + d_{1/2, 1/2} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + d_{1/2, -1/2} \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\
 &\quad + d_{-1/2, 1/2} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + d_{-1/2, -1/2} \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\
 &\quad + d_{-3/2, 1/2} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + d_{-3/2, -1/2} \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

將 $\vec{e} = \hat{x} \sin \theta \cos \phi + \hat{y} \sin \theta \sin \phi + \hat{z} \cos \theta$ 代入可得到：

$$\begin{aligned}
 d_{J_z, S_z}(\vec{e}) &\equiv \langle u_{v, J_z} | [\hat{e} \cdot \hat{p}] | u_{c, S_z} \rangle \\
 &= \langle u_{v, J_z} | p_x \sin \theta \cos \phi + p_y \sin \theta \sin \phi + p_z \cos \theta | u_{c, S_z} \rangle \\
 &= \langle u_{v, J_z} | p_x | u_{c, S_z} \rangle \sin \theta \cos \phi + \langle u_{v, J_z} | p_y | u_{c, S_z} \rangle \sin \theta \sin \phi \\
 &\quad + \langle u_{v, J_z} | p_z | u_{c, S_z} \rangle \cos \theta
 \end{aligned} \tag{A.2}$$

我們先計算式子(2.2.15)中的第一項，其餘幾項以此類推。第一項推導如下：

$$\begin{aligned}
 &d_{3/2, 1/2} \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle \\
 &= \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| p_x \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \sin \theta \cos \phi + \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| p_y \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \sin \theta \sin \phi \\
 &\quad + \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \left| p_z \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \cos \theta \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle \\
 &= \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle (P_x - iP_y), \uparrow | p_x | S, \uparrow \rangle \sin \theta \cos \phi + \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle (P_x - iP_y), \uparrow | p_y | S, \uparrow \rangle \sin \theta \sin \phi \\
 &\quad + \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle (P_x - iP_y), \uparrow | p_z | S, \uparrow \rangle
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

式子中我們令 $\langle S | p_x | P_x \rangle = \langle S | p_y | P_y \rangle = \frac{im_0 P}{\hbar}$ ，且 $\langle P_y | p_x | S \rangle = \langle P_x | p_y | S \rangle = \langle P_z | p_z | S \rangle = 0$ ，另

外定義：

$$p_{cv}(\vec{0}) \equiv \frac{im_0 P}{\hbar}$$

又 $E_P = 2m_0 P^2 / \hbar^2$ ，則

$$\frac{P}{\hbar} = \sqrt{\frac{E_P}{2m_0}}$$

$$P = \hbar \sqrt{\frac{E_P}{2m_0}}$$

$$p_{cv}(\vec{0}) = im_0 \sqrt{\frac{E_P}{2m_0}}$$

$$= i \sqrt{\frac{m_0 E_P}{2}}$$

所以

$$\langle S | p_x | P_x \rangle = \langle S | p_y | P_y \rangle = p_{cv}(\vec{0}) = i \sqrt{\frac{m_0 E_P}{2}}$$

則：

$$\begin{aligned} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle P_x | p_x | S \rangle \sin \theta \cos \phi + \frac{-1}{\sqrt{2}} \langle -iP_y | p_y | S \rangle \sin \theta \sin \phi \\ &= \left(\frac{-1}{\sqrt{2}} (-p_{cv}(\vec{0})) \sin \theta \cos \phi + \frac{-1}{\sqrt{2}} (-i) (-p_{cv}(\vec{0})) \sin \theta \sin \phi \right) \langle g_{i_v,3/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta \cos \phi + \frac{-1}{\sqrt{2}} (i) p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta \sin \phi \right) \langle g_{i_v,3/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta (\cos \phi - (i) \sin \phi) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{-i\phi} \langle g_{i_v,3/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle \end{aligned}$$

同理可得到式子(A.3)另外幾項：

$$d_{-1/2,1/2} \langle g_{i_v,-1/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle = \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{i\phi} \langle g_{i_v,-1/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle$$

$$\begin{aligned}
d_{1/2,-1/2} \langle g_{i_v,1/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{-i\phi} \langle g_{i_v,1/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle \\
d_{-3/2,-1/2} \langle g_{i_v,-3/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \sin \theta e^{i\phi} \langle g_{i_v,-3/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle \\
d_{1/2,1/2} \langle g_{i_v,1/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta \langle g_{i_v,1/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle \\
d_{-1/2,-1/2} \langle g_{i_v,-1/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \cos \theta \langle g_{i_v,-1/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle \\
d_{-3/2,1/2} \langle g_{i_v,-3/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle &= 0 \\
d_{3/2,-1/2} \langle g_{i_v,3/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle &= 0
\end{aligned}$$

各方向的振子強度如下，

$$\begin{aligned}
D_{i_v, i_c}(\vec{e}) &= \sum_{J_z, S_z} [d_{J_z, S_z}(\vec{e})] \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_c, S_z}^c \rangle \\
&= d_{3/2,1/2} \langle g_{i_v,3/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle + \cancel{d_{3/2,-1/2} \langle g_{i_v,3/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle} \\
&\quad + d_{1/2,1/2} \langle g_{i_v,1/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle + d_{1/2,-1/2} \langle g_{i_v,1/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle \\
&\quad + d_{-1/2,1/2} \langle g_{i_v,-1/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle + d_{-1/2,-1/2} \langle g_{i_v,-1/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle \\
&\quad + \cancel{d_{-3/2,1/2} \langle g_{i_v,-3/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle} + \cancel{d_{-3/2,-1/2} \langle g_{i_v,-3/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle}
\end{aligned}$$

線偏振 π_x : 當 $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\phi = 0$ 則 $\vec{e} = \hat{x}$

$$\begin{aligned}
D_{i_v, i_c}(\vec{e} = \hat{x}) &= \sum_{J_z, S_z} [d_{J_z, S_z}(\vec{e} = \hat{x})] \langle g_{i_v, J_z}^v | g_{i_c, S_z}^c \rangle \\
&= +d_{3/2,1/2}(\vec{e} = \hat{x}) \langle g_{i_v,3/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle + \cancel{d_{3/2,-1/2}(\vec{e} = \hat{x}) \langle g_{i_v,3/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle} \\
&\quad + d_{1/2,1/2}(\vec{e} = \hat{x}) \langle g_{i_v,1/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle + d_{1/2,-1/2}(\vec{e} = \hat{x}) \langle g_{i_v,1/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle \\
&\quad + d_{-1/2,1/2}(\vec{e} = \hat{x}) \langle g_{i_v,-1/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle + d_{-1/2,-1/2}(\vec{e} = \hat{x}) \langle g_{i_v,-1/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle \\
&\quad + \cancel{d_{-3/2,1/2}(\vec{e} = \hat{x}) \langle g_{i_v,-3/2}^v | g_{i_c,1/2}^c \rangle} + \cancel{d_{-3/2,-1/2}(\vec{e} = \hat{x}) \langle g_{i_v,-3/2}^v | g_{i_c,-1/2}^c \rangle}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= +\frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i,3/2}^v | g_{i,1/2}^c \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i,1/2}^v | g_{i,-1/2}^c \rangle \\
&\quad + \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i,-1/2}^v | g_{i,1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i,-3/2}^v | g_{i,-1/2}^c \rangle
\end{aligned} \tag{A.4}$$

線偏振 π_y : 當 $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\phi = \frac{\pi}{2}$ 則 $\vec{e} = \hat{y}$

$$\begin{aligned}
D_{i,i_c}(\vec{e} = \hat{y}) &= \sum_{J_z, S_z} [d_{J_z, S_z}(\vec{e} = \hat{y})] \langle g_{i, J_z}^v | g_{i, S_z}^c \rangle \\
&= +d_{3/2, 1/2}(\vec{e} = \hat{y}) \langle g_{i, 3/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + \cancel{d_{3/2, -1/2}(\vec{e} = \hat{y})} \langle g_{i, 3/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle \\
&\quad + d_{1/2, 1/2}(\vec{e} = \hat{y}) \langle g_{i, 1/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + d_{1/2, -1/2}(\vec{e} = \hat{y}) \langle g_{i, 1/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle \\
&\quad + d_{-1/2, 1/2}(\vec{e} = \hat{y}) \langle g_{i, -1/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + d_{-1/2, -1/2}(\vec{e} = \hat{y}) \langle g_{i, -1/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle \\
&\quad + \cancel{d_{-3/2, 1/2}(\vec{e} = \hat{y})} \langle g_{i, -3/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + d_{-3/2, -1/2}(\vec{e} = \hat{y}) \langle g_{i, -3/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle \\
&= +\frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) (-i) \langle g_{i, 3/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) (-i) \langle g_{i, 1/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle \\
&\quad + \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) (i) \langle g_{i, -1/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) (i) \langle g_{i, -3/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle \\
&= +\frac{-1}{\sqrt{2}} ip_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i, 3/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{6}} ip_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i, 1/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle \\
&\quad + \frac{-1}{\sqrt{6}} ip_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i, -1/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} ip_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i, -3/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle
\end{aligned} \tag{A.5}$$

線偏振 π_z : 當 $\theta = 0$, 則 $\vec{e} = \hat{z}$

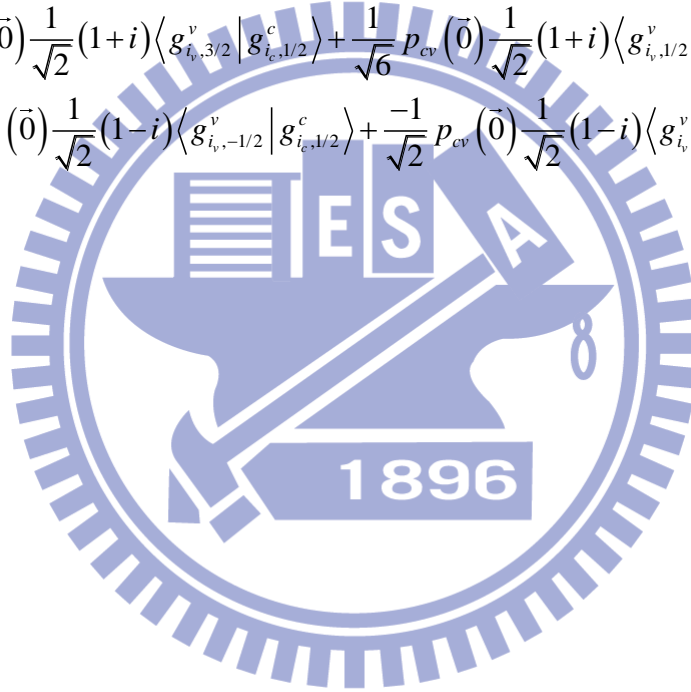
$$\begin{aligned}
D_{i,i_c}(\vec{e} = \hat{z}) &= \sum_{J_z, S_z} [d_{J_z, S_z}(\vec{e} = \hat{z})] \langle g_{i, J_z}^v | g_{i, S_z}^c \rangle \\
&= +d_{3/2, 1/2}(\vec{e} = \hat{z}) \langle g_{i, 3/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + \cancel{d_{3/2, -1/2}(\vec{e} = \hat{z})} \langle g_{i, 3/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle \\
&\quad + d_{1/2, 1/2}(\vec{e} = \hat{z}) \langle g_{i, 1/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + d_{1/2, -1/2}(\vec{e} = \hat{z}) \langle g_{i, 1/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle \\
&\quad + d_{-1/2, 1/2}(\vec{e} = \hat{z}) \langle g_{i, -1/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + d_{-1/2, -1/2}(\vec{e} = \hat{z}) \langle g_{i, -1/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle \\
&\quad + \cancel{d_{-3/2, 1/2}(\vec{e} = \hat{z})} \langle g_{i, -3/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle + d_{-3/2, -1/2}(\vec{e} = \hat{z}) \langle g_{i, -3/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle \\
&= -\sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i, 1/2}^v | g_{i, 1/2}^c \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{i, -1/2}^v | g_{i, -1/2}^c \rangle
\end{aligned} \tag{A.6}$$

圓偏振 σ_+ : $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\vec{e} = \hat{x} + i\hat{y}$

$$\begin{aligned}
 D_{i_v, i_c}(\sigma_+) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(D_{i_v, i_c}(\hat{x}) + iD_{i_v, i_c}(\hat{y})) \\
 &= +\frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \frac{1}{\sqrt{2}}(1-i) \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \frac{1}{\sqrt{2}}(1-i) \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\
 &\quad + \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \frac{1}{\sqrt{2}}(1+i) \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \frac{1}{\sqrt{2}}(1+i) \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

圓偏振 σ_- : $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\vec{e} = \hat{x} - i\hat{y}$

$$\begin{aligned}
 D_{i_v, i_c}(\sigma_-) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(D_{i_v, i_c}(\hat{x}) - iD_{i_v, i_c}(\hat{y})) \\
 &= +\frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \frac{1}{\sqrt{2}}(1+i) \langle g_{i_v, 3/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \frac{1}{\sqrt{2}}(1+i) \langle g_{i_v, 1/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle \\
 &\quad + \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \frac{1}{\sqrt{2}}(1-i) \langle g_{i_v, -1/2}^v | g_{i_c, 1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \frac{1}{\sqrt{2}}(1-i) \langle g_{i_v, -3/2}^v | g_{i_c, -1/2}^c \rangle
 \end{aligned} \tag{A.8}$$



附錄 B

由式子(3.1.7)可推導發光強度的最大值與最小值，

$$I_{\bar{e}}(\omega) \propto \left| \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) e^{-i\phi} \langle g_{i,3/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle + \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) e^{i\phi} \langle g_{i,-1/2}^v | f_{i,1/2}^c \rangle \right|^2 \quad (\text{B.1})$$

假設

$$A = \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{j,-1/2}^v | g_{i,1/2}^e \rangle, B = \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{j,3/2}^v | g_{i,1/2}^e \rangle \quad (\text{B.2})$$

則式子(B.1)變成

$$\begin{aligned} I_{\bar{e}}(\omega) &\propto |Ae^{i\phi} + Be^{-i\phi}|^2 \\ I_{\bar{e}}(\omega) &\propto \left| |A|e^{i\delta_1}e^{i\phi} + |B|e^{i\delta_2}e^{-i\phi} \right|^2 \\ I_{\bar{e}}(\omega) &\propto |A|^2 + |B|^2 + 2|A||B|(\cos(2\phi + \delta_1 - \delta_2)) \\ &= |A| \left[\cos(\phi + \delta_1) + i \sin(\phi + \delta_1) \right] + |B| \left[\cos(\phi - \delta_2) - i \sin(\phi - \delta_2) \right]^2 \\ &= \left[|A| \cos(\phi + \delta_1) + |B| \cos(\phi - \delta_2) \right] + i \left[|A| \sin(\phi + \delta_1) - |B| \sin(\phi - \delta_2) \right]^2 \\ &= \left[|A| \cos(\phi + \delta_1) + |B| \cos(\phi - \delta_2) \right]^2 + \left[|A| \sin(\phi + \delta_1) - |B| \sin(\phi - \delta_2) \right]^2 \\ &= |A|^2 \cos^2(\phi + \delta_1) + |B|^2 \cos^2(\phi - \delta_2) + 2|A||B| \cos(\phi + \delta_1) \cos(\phi - \delta_2) \\ &\quad + |A|^2 \sin^2(\phi + \delta_1) + |B|^2 \sin^2(\phi - \delta_2) - 2|A||B| \sin(\phi + \delta_1) \sin(\phi - \delta_2) \\ &= |A|^2 (\cos^2(\phi + \delta_1) + \sin^2(\phi + \delta_1)) + |B|^2 (\cos^2(\phi - \delta_2) + \sin^2(\phi - \delta_2)) \\ &\quad + 2|A||B| (\cos(\phi + \delta_1) \cos(\phi - \delta_2) - \sin(\phi + \delta_1) \sin(\phi - \delta_2)) \\ &= |A|^2 + |B|^2 + 2|A||B| (\cos(2\phi + \delta_1 - \delta_2)) \end{aligned}$$

所以發光強度的最大值 $I_{\bar{e},\max}$ 與最小值 $I_{\bar{e},\min}$ 為，

$$I_{\bar{e},\max} \propto |A|^2 + |B|^2 + 2|A||B| \quad (\text{B.3})$$

$$I_{\bar{e},\min} \propto |A|^2 + |B|^2 - 2|A||B| \quad (\text{B.4})$$

由偏振的定義可知

$$\text{Pol} = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}}$$

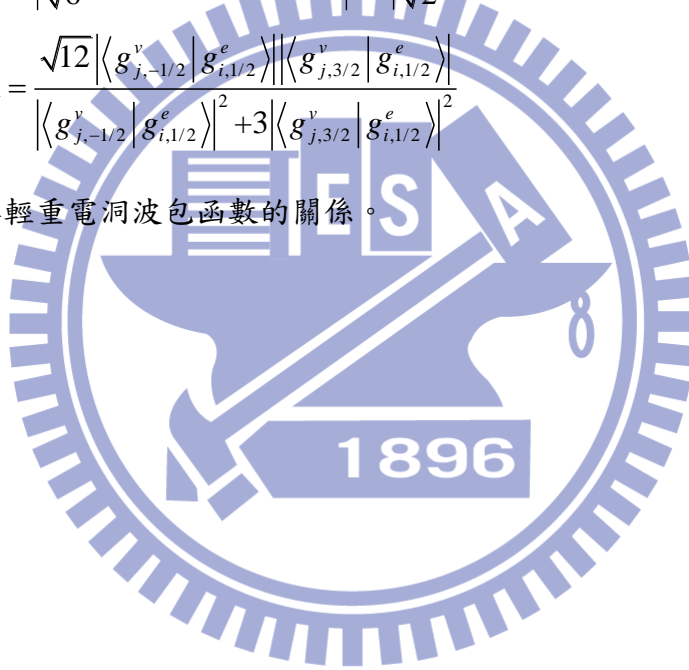
$$\text{Pol} = \frac{2|A||B|}{|A|^2 + |B|^2} \quad (\text{B.5})$$

將式子(B.2)代入式子(B.5)可得到

$$\text{Pol} = \frac{2 \times \left| \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{j,-1/2}^v | g_{i,1/2}^e \rangle \right| \left| \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{j,3/2}^v | g_{i,1/2}^e \rangle \right|}{\left| \frac{-1}{\sqrt{6}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{j,-1/2}^v | g_{i,1/2}^e \rangle \right|^2 + \left| \frac{1}{\sqrt{2}} p_{cv}(\vec{0}) \langle g_{j,3/2}^v | g_{i,1/2}^e \rangle \right|^2}$$

$$\text{Pol} = \frac{\sqrt{12} \left| \langle g_{j,-1/2}^v | g_{i,1/2}^e \rangle \right| \left| \langle g_{j,3/2}^v | g_{i,1/2}^e \rangle \right|}{\left| \langle g_{j,-1/2}^v | g_{i,1/2}^e \rangle \right|^2 + 3 \left| \langle g_{j,3/2}^v | g_{i,1/2}^e \rangle \right|^2} \quad (\text{B.6})$$

由此可得知偏振與輕重電洞波包函數的關係。



附錄 C

由微擾理論可求得式子(3.1.17)中的特徵向量，與偏振有關的特徵向量為 $c_1^{-1/2}$ ，所以在此

只推導此項，推導過程如下，

$$- \begin{bmatrix} \langle P+Q-V \rangle & \langle -S \rangle & \langle R \rangle & 0 \\ \langle -S^\dagger \rangle & \langle P-Q-V \rangle & 0 & \langle R \rangle \\ \langle R^\dagger \rangle & 0 & \langle P-Q-V \rangle & \langle S \rangle \\ 0 & \langle R^\dagger \rangle & \langle S^\dagger \rangle & \langle P+Q-V \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^{3/2} \\ c_1^{1/2} \\ c_1^{-1/2} \\ c_1^{-3/2} \end{bmatrix} = E_{i_v} \begin{bmatrix} c_1^{3/2} \\ c_1^{1/2} \\ c_1^{-1/2} \\ c_1^{-3/2} \end{bmatrix} \quad (\text{C.1})$$

$$\begin{aligned} |c_1^{-1/2}| &= \left| \frac{\langle R \rangle}{\langle P+Q-V \rangle - \langle P-Q-V \rangle} \right| \\ &= \frac{|\langle R \rangle|}{2|\langle Q \rangle|} \\ &= \frac{|\langle R \rangle|}{2\Delta_{lh}} \\ &= \frac{\left| \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \gamma_2 \pi^2 \left(\frac{1}{b_x^2} - \frac{1}{b_y^2} \right) \right|}{\left| 2 \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 \pi^2 \left(\frac{1}{b_x^2} + \frac{1}{b_y^2} - \frac{2}{h^2} \right) \right|} \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\left| \left(\frac{1}{b_x^2} - \frac{1}{b_y^2} \right) \right|}{\left| \left(\frac{1}{b_x^2} + \frac{1}{b_y^2} - \frac{2}{h^2} \right) \right|} \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\left| \frac{1}{b_y^2} \left(\frac{b_y^2}{b_x^2} - 1 \right) \right|}{\left| \left[\frac{1}{b_y^2} \left(\frac{b_y^2}{b_x^2} + 1 \right) - \frac{2}{h^2} \right] \right|} \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

令 $\xi \equiv \frac{b_y}{b_x}$ ，則式子(C.2)變成

$$|c_1^{-1/2}| = \frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{\frac{1}{b_y^2}(1-\xi^2)}{\frac{2}{h^2} - \frac{1}{b_y^2}(\xi^2+1)} \right| \quad (\text{C.3})$$

一般而言，我們所計算的均為較薄的量子點，所以量子點高度小於長寬，所以可假設

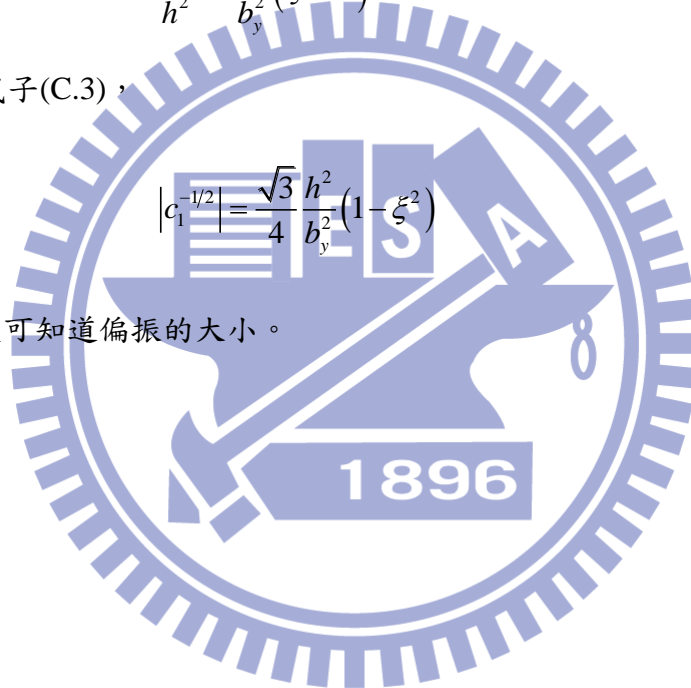
$h \ll b_x, b_y$ ，則

$$\frac{2}{h^2} \gg \frac{1}{b_y^2}(\xi^2+1) \quad (\text{C.4})$$

將式子(C.4)代入式子(C.3)，

$$|c_1^{-1/2}| = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{h^2}{b_y^2} (1-\xi^2) \quad (\text{C.5})$$

求得 $c_1^{-1/2}$ 之後，便可知道偏振的大小。



附錄 D

表 D.1、InAs/GaAs 材料參數[4,7]

Quantity		Unit	InAs	GaAs
Lattice constant	a	nm	0.6055	0.565
Energy gap	E_g	eV	0.413	1.518
CB edge	E_c	eV	-6.207	-5.289
VB edge	E_v	eV	-6.620	-6.807
Spin-orbit coupling energy	Δ_0	eV	0.38	0.34
CB effective mass	m^*	m_0	0.05	0.0665
Luttinger parameter	γ_1		19.7	6.85
Luttinger parameter	γ_2		8.4	2.1
Luttinger parameter	γ_3		9.3	2.9
CB hydrostatic def. pot	a_c	eV	-5.08	-8.013
VB hydrostatic def. pot	a_v	eV	1.00	1.16
VB shear def. pot. [100]	b	eV	-1.8	-1.824
VB shear def. pot. [111]	d	eV	-3.6	-5.062
Elastic compliance	C_{11}	GPa	83.3	118.8
Elastic compliance	C_{12}	GPa	45.3	53.8
Elastic compliance	C_{44}	GPa	39.6	59.4