

# 一、緒論

在電子產業中，因為其成熟的製程技術及經濟成本的考量，矽（Si）一直都扮演一十分重要的角色，但是在光電和通訊產業的應用上，其光性不比一般的 III-V 族半導體；但是近年來光學元件及半導體技術的快速發展，有應力作用的半導體受到了許多研究人員的關注，其中又以矽和矽鍺材料（SiGe）最受到重視。

在實驗部分，從六零年代開始 p-型矽和鍺的光譜就已經被量測出來[1][2]，陸續都還有一些量測的結果[3]~[9]，到近年來已有實驗發現摻雜硼（B）的矽鍺量子井（SiGe/Si）在強電場的作用下似乎可產生兆赫波（terahertz, THz）的激發雷射[10]。

但是相對的在理論部分，半導體內部受子能階的問題，一直是固態理論上不易處理的部分。因為使用 k.p 理論在處理此問題時，是處理一組向量的六個偶合的偏微分方程式，在處理上是十分的不方便。從五零年代開始，有 Kohn 和 Schecheru 開始研究，使用 4-band 的模型計算出 Ge 的基態能階[11]；直到七零年代，Lipari 和 Baldereschi 才有較突破性的發展[12]，將 Lutting-Kohn Hamiltonian[13]分成球型對稱項（spherical symmetry）及立方對稱項（cubic symmetry），先算出球型對稱部分，再將立方對稱部份當成微擾計算，得到矽和鍺摻雜不同受子的基態能階；1992 年，Buczko 和 Bassani 延續此方法，針對矽和鍺的受子能接作較完整的計算，並且對於共振態及各能態之躍遷有所討論[14]，但是此計算，只適用於塊材（bulk Si），無法延伸至受應力的矽鍺材料（strained SiGe）上，這引發我們對受應力的矽鍺材料的研究興趣。在計算考慮應力的矽鍺材料的受子能階的時候，會牽涉到共振態及束縛態的問題；而共振態的討論可由六零年代 Fano 開始[15]，討論分離態（discrete states）和連續態（continuous states）的交互作用開始，之後也還有相關之研究。同樣的，

對於共振態隨應力變化的相關特性，還未有相關的討論。

本研究以形變應力作用下的 SiGe/Si 異質接面為結構，作為本計算的主題，因為其可成為理想的 THz 激發材料。



## 二、理論部分

本研究提出一套適用於受應力及非受應力之半導體材料的受子能階計算理論；在此以矽鍺異質接面材料（SiGe）為理論研究的對象，矽鍺合金（ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ）成長在方向為（100）方向的矽基板（Si）上，由於  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  磊晶層和矽基板的晶格常數不匹配（lattice mismatch）而產生應力，其應力隨著  $x$  比例增加而增加。

本部分的內容先在 2.1 節介紹如何計算受子能階的方法，以及如何把應力的效應考慮進去；接下來在 2.2 節介紹如何有效的選取波函數，以方便我們的計算；在算出了全部的能階之後，2.3 節就來討論如何有效的判斷共振態，及其一些特性。



### 2.1 基本理論

#### 2.2.1 受子能階計算

雜質能階之計算最重要的部分在於其波函數的選取，如何有效率的使用波函數以得到想要的結果，在本研究我們有效選取波函數的方法是以群論為輔助，選取合適的雜質波函數之後，只要帶回系統 Hamiltonian，以變分法求其最小能量期望質。

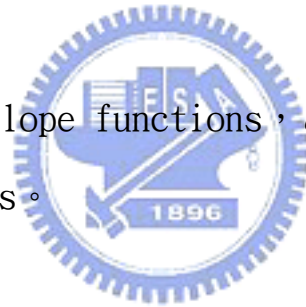
自旋-軌道交互作用（spin-orbit interaction）在現在我們考慮的受子能階計算上是很強的影響，計算時不能忽略分裂電動能帶和重電洞能帶及輕電洞

能帶之間的交互作用。所以在計算受子能階時，會把其全部考慮進去，在之後的情況，如不同材料，或不同條件之下，有時也需要把第一傳導帶的效應一起考慮進來，但在此不予考慮。

在此我們採用 Luttinger-Kohn 的等效質量理論以及 Bir-Pikus 的應力理論出發。以 effective Bohr radius  $a_B^* = \frac{\hbar^2 \epsilon_0 \gamma_1}{e^2 m}$  和 effective Rydberg  $Ry^* = \frac{e^4 m}{2\hbar^2 \epsilon_0^2 \gamma_1}$  分別為長度和能量的單位。將受子波函數用未受應之力反晶格共間價帶的 6 個  $\Gamma$  點 Bloch functions 的線性組合來表示：

$$\psi(r) = \sum_{j=1}^6 F_j(r) \phi_j \quad (1)$$

其係數  $F_j(r)$  即為所謂的 envelope functions， $\phi_j$  為重電洞，輕電洞和分裂電洞能帶頂點的 Bloch functions。



$$\text{Heavy hole : } \phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY) \uparrow, \phi_4 = \frac{i}{\sqrt{2}}(X - iY) \downarrow$$

$$\text{Light hole : } \phi_2 = \frac{i}{\sqrt{6}}[(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow], \phi_3 = \frac{1}{\sqrt{6}}[(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow]$$

$$\text{Split-off hole : } \phi_5 = \frac{1}{\sqrt{3}}[(X + iY) \downarrow + Z \uparrow], \phi_6 = \frac{i}{\sqrt{3}}[-(X - iY) \uparrow + Z \downarrow]$$

(2)

以此六個沒有考慮 strain 的 functions 為基底， $F_j(r)$  即為等效質量方程式[13]的解：

$$F(r) \equiv \psi(r) = \sum_{j=1}^6 F_j(r) \phi_j$$

$$\widehat{H}F(r) = EF(r) \quad (3)$$

Hamiltonian  $\widehat{H}$  (包含應力項) 表示成：

$$\widehat{H} = - \begin{bmatrix} P+Q+V & -S & R & 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^\dagger & P-Q+V & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^\dagger & 0 & P-Q+V & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^\dagger & S^\dagger & P+Q+V & -\sqrt{2}R^\dagger & \frac{-1}{\sqrt{2}}S^\dagger \\ \frac{-1}{\sqrt{2}}S^\dagger & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta+V & 0 \\ \sqrt{2}R^\dagger & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q & \frac{-1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta+V \end{bmatrix} \begin{matrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{matrix}$$

$$(4)$$

$$P = P_k + P_\varepsilon, \quad Q = Q_k + Q_\varepsilon, \quad R = R_k + R_\varepsilon, \quad S = S_k + S_\varepsilon$$

$$P_k = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$Q_k = \frac{\gamma_2}{\gamma_1} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2)$$

$$R_k = -\frac{\sqrt{3}\gamma_2}{\gamma_1} (k_x^2 - k_y^2) + \frac{i2\sqrt{3}\gamma_3}{\gamma_1} k_x k_y$$

$$S_k = 2\sqrt{3} \frac{\gamma_3}{\gamma_1} (k_x - ik_y) k_z$$

$P_\varepsilon$  ,  $Q_\varepsilon$  ,  $R_\varepsilon$  ,  $S_\varepsilon$  為應力項，來自於晶格的不匹配，根據 Bir-Pikus 的理論[16] 可表示成：

$$P_\varepsilon = -a_v(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33})$$

$$Q_\varepsilon = -\frac{b}{2}(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} - 2\varepsilon_{33})$$

$$R_\varepsilon = \frac{\sqrt{3}}{2}b(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22}) - id\varepsilon_{12}$$

$$S_\varepsilon = -d(\varepsilon_{12} + i\varepsilon_{13})$$

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \frac{a_0 - a}{a}$$

$$\varepsilon_{33} = -\frac{C_{12}}{C_{11}}\varepsilon_{11}$$

$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  晶格常數由 Ref[17] 可得：

$$a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}(x) = a_{\text{Si}}(1-x) + a_{\text{Ge}}x - 1.88 \times 10^{-2} \times (x - x^2) (\text{\AA})$$

由此可看出  $x$  大，應力的影響就越大，材料參數如下：


表 2.1 材料參數

	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\gamma_3$	$\varepsilon_0$	$\Delta$	$a_v$	$b$	$C_{11}$	$C_{12}$	$a_0$
Si	4.22	0.39	1.44	11.9	44	118.8	-101.45	1.675	1.315	5.43
Ge	13.35	4.25	5.69	15.4	296	59.9	14	0.650	0.494	5.65

$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  之材料參數由 Si 和 Ge 之參數線性內插得到。

## 2.1.2 應力理論

矽鍺合金 ( $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ) 成長在矽基板 (Si),  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  晶格會因受到壓縮力而形變, 而不同的成長方向會因為不同的受應力方向而使其晶格由原來同一種點群下降到不同的點群。原本 SiGe 之晶格點群為  $T_d$  群因為受到應力變形而使得其對稱性下降成不同的群, 成長方向為 (100) 的話, 變成  $D_{2d}$  群, 成長方向為 (110) 的話, 變成  $C_{2v}$  群, 而如果是成長方向為 (111) 的話, 則變成  $C_{3v}$  群。這些不同的群在對於之後使用投影運算子(下一節會討論)來選取基底的時候是有分別的。現在在此先討論成長方向為 (100) 的情況。也就是由原來的  $T_d$  群下降變成  $D_{2d}$  群。在原本  $T_d$  群的時候, 價帶頂點對應的不可約表徵為  $\Gamma_8$  和  $\Gamma_7$  其基底函數分別就是 Bloch functions  $\{\phi_1, \phi_4\}$ ,  $\{\phi_2, \phi_3\}$  和  $\{\phi_5, \phi_6\}$  (2.2.1 中會有敘述) 此時重電洞能帶及輕電洞能帶為簡併狀態; 變成  $D_{2d}$  群之後, 可由  $T_d$  群及  $D_{2d}$  群的特性表 (character table) 得知:


$$\begin{aligned}\Gamma_8(T_d) &\rightarrow \Gamma_7 + \Gamma_6(D_{2d}) \\ \Gamma_7(T_d) &\rightarrow \Gamma_7(D_{2d})\end{aligned}\quad (5)$$

此時重電洞能帶及輕電洞能帶也就因此分開, 其價帶頂點對應的不可約表徵分別為  $\Gamma_6$  和  $\Gamma_7$ ,  $\Gamma_6$  和  $\Gamma_7$  的基底函數為  $\{\phi_1, \phi_4\}$  和  $\{\phi_2, \phi_3\}$ ,  $\{\phi_5, \phi_6\}$ , 而分裂電洞能帶仍然為  $\Gamma_7$ ; 隨著應力的加強, 分開的重電洞能帶及輕電洞能帶頂點其趨勢正好相反, 重電洞能帶上移, 輕電洞能帶下降, 而隨著應力的加大其分離的情形更為明顯。之後會有更詳細的討論。

由式(4)Hamiltonian 中的應力項可看出只有輕電洞能帶和分裂電洞能帶會受應力而耦合:

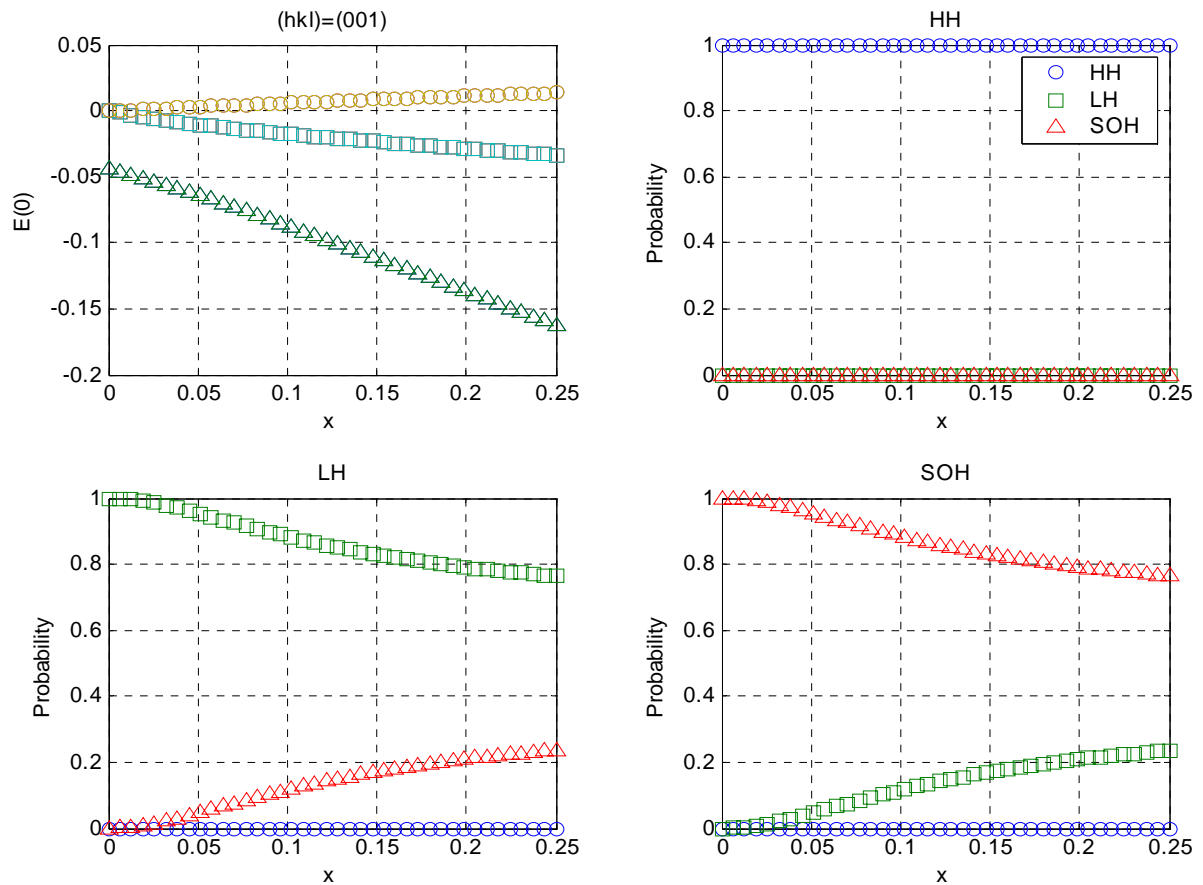
$$\hat{H}_{strain} = - \begin{bmatrix} P_\varepsilon + Q_\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P_\varepsilon - Q_\varepsilon & 0 & 0 & -\sqrt{2}Q_\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & P_\varepsilon - Q_\varepsilon & S & 0 & \sqrt{2}Q_\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & P_\varepsilon + Q_\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}Q_\varepsilon & 0 & 0 & P_\varepsilon + V & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}Q_\varepsilon & 0 & 0 & P_\varepsilon + V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{bmatrix} \quad (6)$$

在有應力作用之下，我們可以算出沒有 strain 的 Bloch functions 在各自的能帶中所佔的比例，可由圖 2.1 看出隨著應力的加大，輕電洞能帶和分裂電洞能帶的耦合越嚴重。

如果我們使用在有應力之下，strained Bloch functions 來處理的話，就不會看到輕電洞能帶和分裂電洞能帶的耦合。







HH: Block functions of heavy hole at  $k=0$

LH: Block functions of light hole at  $k=0$

SOH: Block functions of split-off hole at  $k=0$

圖 2.1

左上圖為能帶頂點能量對 Ge 的比例  $x$  增加的變化圖，

右上圖為重電洞能帶的比例隨著 Ge 的比例  $x$  增加的變化圖，

左下圖為輕電洞能帶的比例隨著 Ge 的比例  $x$  增加的變化圖，

右下圖為分裂電洞能帶的比例隨著 Ge 的比例  $x$  增加的變化圖，

## 2.2 波函數

### 2.2.1 受子波函數

此段開始討論如何選取受子波函數的方法及能階的計算。等效質量方程式其中的 Hamiltonian，以雜質為中心，作用空間反轉運算（inversion operation  $P_i$ ）是不變的。

Envelope functions  $F_j(r)$  和  $P_i F_j(r)$  為對應相同固有能量之簡併的固有函數。由此可看出  $F_j(r)$  具有純奇或純偶對稱性（odd parity or even parity）。但整體的受子波函數不具有此特性，因為 Bloch functions 並無此特性。我們將利用 envelope functions 此純奇或純偶的特性來選取合適的波函數。

在計算雜質能階問題的時候，參考 Ref. [14]，把其雜質位能  $V$  取為：

$$V = \frac{2}{r} [1 + (\epsilon_0 - 1)e^{-\alpha r}] + \frac{A}{r} e^{-\beta r} \quad (7)$$

其中的參數  $\alpha$  是參考 Ref. [14]，而  $A$  和  $\beta$  是半實驗參數，使之符合實驗數據。  
[3]~[9]

表 2.2 計算參數

$A_{Si}$	$A_{Ge}$	$\alpha$	$\beta$
21.9	28.96	0.93	0.96

我們將 envelope functions 表示成以下的線性組合：

$$F_j(r) = \sum_{\substack{l=\text{even} \\ \vee \text{odd}, m}} f_{l,m}^{(j)}(E,r) Y_l^m \quad (8)$$

$f_l^j(E,r)$  為徑函數(radial parts)， $Y_l^m$  為 spherical harmonics， $l$  為角動量量子數， $m$  為磁量子數，奇對稱及偶對稱分別取至  $l \leq 3$  及  $l \leq 4$ ，為符合波函數在原點（雜質中心）的特性，徑函數用一組指數遞減函數，乘上  $r$  的多項式來表示[14]：

$$f_n^{(l)}(r) = \sum_k C_k e^{-\alpha_k r} \quad \text{for } l=0$$

$$f_n^{(l)}(r) = \sum_k C_k r e^{-\alpha_k r} \quad \text{for } l=1,2,4 \quad (9)$$

$$f_n^{(l)}(r) = \sum_k C_k r^2 e^{-\alpha_k r} \quad \text{for } l=3$$

指數函數中的參數 ( $\alpha_k$ ) 則是選一組幾何數列。

$$\alpha_1 = 0.01$$

$$\alpha_k = 1.5\alpha_1$$

指數遞減函數這樣可以符合束縛態 (bound states) 侷限化 (localized)，以及連續態 (continuous states) 電子波函數具有延伸性的特性。

波函數分別如下(下節討論，表 2.4)：

$$\psi^{\Gamma_6^+}(r) = \begin{pmatrix} f_{00}^1(r)Y_0^0 + f_{20}^1(r)Y_2^0 + f_{40}^1(r)Y_4^0 + f_{44c}^1(r)Y_4^{4c} + f_{44s}^1(r)Y_4^{4s} \\ f_{21}^2(r)Y_2^1 + f_{41}^2(r)Y_4^1 + f_{4-3}^2(r)Y_4^{-3} \\ f_{22c}^3(r)Y_2^{2c} + f_{22s}^3(r)Y_2^{2s} + f_{42c}^3(r)Y_4^{2c} + f_{42s}^3(r)Y_4^{2s} \\ f_{2-1}^4(r)Y_2^{-1} + f_{4-1}^4(r)Y_4^{-1} + f_{43}^4(r)Y_4^3 \\ f_{21}^5(r)Y_2^1 + f_{41}^5(r)Y_4^1 + f_{4-3}^5(r)Y_4^{-3} \\ f_{22c}^6(r)Y_2^{2c} + f_{22s}^6(r)Y_2^{2s} + f_{42c}^6(r)Y_4^{2c} + f_{42c}^6(r)Y_4^{2s} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix} \quad (10a)$$

$$\psi^{\Gamma_6^-}(r) = \begin{pmatrix} f_{32s}^1(r)Y_3^{2s} + f_{32c}^1(r)Y_3^{2c} \\ f_{1-1}^2(r)Y_1^{-1} + f_{33}^2(r)Y_3^3 + f_{3-1}^2(r)Y_3^{-1} \\ f_{10}^3(r)Y_1^0 + f_{30}^3(r)Y_3^0 \\ f_{11}^4(r)Y_1^1 + f_{3-3}^4(r)Y_3^{-3} + f_{31}^4(r)Y_3^1 \\ f_{1-1}^5(r)Y_1^{-1} + f_{33}^5(r)Y_3^3 + f_{3-1}^5(r)Y_3^{-1} \\ f_{10}^6(r)Y_1^0 + f_{30}^6(r)Y_3^0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix} \quad (10b)$$

$$\psi^{\Gamma_7^+}(r) = \begin{pmatrix} f_{2-1}^1(r)Y_2^{-1} + f_{41}^1(r)Y_4^{-1} + f_{43}^1(r)Y_4^3 \\ f_{00}^2(r)Y_0^0 + f_{20}^2(r)Y_2^0 + f_{40}^2(r)Y_4^0 + f_{44c}^2(r)Y_4^{4c} + f_{44s}^2(r)Y_4^{4s} \\ f_{21}^3(r)Y_2^1 + f_{41}^3(r)Y_4^1 + f_{4-3}^3(r)Y_4^{-3} \\ f_{22c}^4(r)Y_2^{2c} + f_{22s}^4(r)Y_2^{2s} + f_{42c}^4(r)Y_4^{2c} + f_{42s}^4(r)Y_4^{2s} \\ f_{00}^5(r)Y_0^0 + f_{20}^5(r)Y_2^0 + f_{40}^5(r)Y_4^0 + f_{44c}^5(r)Y_4^{4c} + f_{44s}^5(r)Y_4^{4s} \\ f_{21}^6(r)Y_2^1 + f_{41}^6(r)Y_4^1 + f_{4-3}^6(r)Y_4^{-3} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix} \quad (10c)$$

$$\psi^{\Gamma_7^-}(r) = \begin{pmatrix} f_{11}^1(r)Y_1^1 + f_{3-3}^1(r)Y_3^{-3} + f_{3-1}^1(r)Y_3^{-1} \\ f_{32s}^2(r)Y_3^{2s} + f_{32c}^2(r)Y_3^{2c} \\ f_{1-1}^3(r)Y_1^{-1} + f_{33}^3(r)Y_3^3 + f_{3-1}^3(r)Y_3^{-1} \\ f_{10}^4(r)Y_1^0 + f_{30}^4(r)Y_3^0 \\ f_{32s}^5(r)Y_3^{2s} + f_{32c}^5(r)Y_3^{2c} \\ f_{1-1}^6(r)Y_1^{-1} + f_{33}^6(r)Y_3^3 + f_{3-1}^6(r)Y_3^{-1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix} \quad (10d)$$

其各能階在應力下變化的行為可由波函數的分析得知。

## 2.2.2 投影運算

在各個群中，每一個不可約表徵 (irreducible representation) 都有其對應的基底函數。

將此群內的所有對稱運算子作用於 Bloch functions，可得到其表徵，可驗證其 character 以滿足對應不可約表徵之特性，故可確定  $\{\phi_1, \phi_4\}$  為  $\Gamma_6$  的基底函數，而  $\{\phi_2, \phi_3\}$ ， $\{\phi_5, \phi_6\}$  為  $\Gamma_7$  的基底函數：

$$P_o \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_4 \end{pmatrix} = \Gamma_6(O) \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_4 \end{pmatrix}, \quad P_o \begin{pmatrix} \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix} = \Gamma_7(O) \begin{pmatrix} \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix}, \quad P_o \begin{pmatrix} \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix} = \Gamma_7(O) \begin{pmatrix} \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix} \quad (11)$$

得

$$\begin{aligned} \Gamma_6(E) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \Gamma_6(C_2^z) &= \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \\ \Gamma_6(C_2^x) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \Gamma_6(C_2^y) &= \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \Gamma_6(\sigma_d) &= \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\frac{\pi}{4}} \\ -e^{-i\frac{\pi}{4}} & 0 \end{pmatrix} & \Gamma_6(\sigma_d') &= \begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\frac{\pi}{4}} \\ e^{i\frac{\pi}{4}} & 0 \end{pmatrix} \\ \Gamma_6(S_4) &= \begin{pmatrix} e^{i\frac{\pi}{4}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} & \Gamma_6(S_4') &= \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\pi}{4}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

和

$$\Gamma_7(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \Gamma_7(C_2^z) = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_7(C_2^x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Gamma_7(C_2^y) = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_7(\sigma_d) = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\pi/4} \\ -e^{i\pi/4} & 0 \end{pmatrix} \quad \Gamma_6(\sigma_d') = \begin{pmatrix} 0 & -e^{i\pi/4} \\ e^{-i\pi/4} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_6(S_4) = \begin{pmatrix} -e^{-i\pi/4} & 0 \\ 0 & -e^{i\pi/4} \end{pmatrix} \quad \Gamma_6(S_4') = \begin{pmatrix} -e^{i\pi/4} & 0 \\ 0 & -e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_i(RO) = -\Gamma_i(O)$$

其 trace 符合  $D_{2d}$  群的 character table:

表 2.3  $D_{2d}$  群的 character table

$D_{2d}$	$1E$	$1R$	$C_z, RC_z$	$(C_x, C_y)$ $R(C_x, C_y)$	$2S_4$	$2RS_4$	$2\sigma_d, 2R\sigma_d$
$\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma_2$	1	1	1	-1	1	1	-1
$\Gamma_3$	1	1	1	1	-1	-1	-1
$\Gamma_4$	1	1	1	-1	-1	-1	1
$\Gamma_5$	2	2	-2	0	0	0	0
$\Gamma_6$	2	-2	0	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
$\Gamma_7$	2	-2	0	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0

相同的，將此群內的所有對稱運算子作用於 spherical harmonics，可驗證 character 以滿足對應不可約表徵之特性，故可確定  $\Gamma_i$  表徵的基底函數。同理可得下表：

表 2.4  $D_{2d}$  群的基底

$D_{2d}$	$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$	$l=4$
$\Gamma_1$	$Y_0^0$		$Y_2^0$	$Y_3^{2s}$	$Y_4^0; Y_4^{4c}$
$\Gamma_2$				$Y_3^{2c}$	$Y_4^{4s}$
$\Gamma_3$			$Y_2^{2c}$		$Y_4^{2c}$
$\Gamma_4$		$Y_1^0$	$Y_2^{2s}$	$Y_3^0$	$Y_4^{2s}$
$\Gamma_5$		$\{Y_1^1, Y_1^{-1}\}$ or $\{Y_1^{1c}, Y_1^{1s}\}$	$\{Y_2^1, Y_2^{-1}\}$ or $\{Y_2^{1c}, Y_2^{1s}\}$	$\{Y_3^3, Y_3^{-3}\}$ or $\{Y_3^{3c}, Y_3^{3s}\}$	$\{Y_4^1, Y_4^{-1}\}$
				$\{Y_3^1, Y_3^{-1}\}$ or $\{Y_3^{1c}, Y_3^{1s}\}$	$\{Y_4^3, Y_4^{-3}\}$

在此研究中，我們將受子波函數假設為

$$\psi^{\Gamma_i^j}(r) = \sum_{j=1}^6 F_j(r) \phi_j = \sum_{j=1}^6 \sum_{\substack{l=0,2,4 \\ \sqrt{l}=1,3}} f_l^j(r) Y_l^m \phi_j \quad (12)$$

此時，波函數的對稱特性完全由  $Y_l^m \phi_j$  決定，所以我們以群論中的投影運算子，來找出對應每種對稱性能態  $Y_l^m \phi_j$  的組合。

投影運算子的通式可表示成：

$$P_{\lambda k}^{(i)} \equiv \frac{l_i}{h} \sum_{P_R} \Gamma^{(i)}(P_R)_{\lambda k}^* P_R \quad (13)$$

$l_i$  為不可約表徵  $\Gamma^{(i)}$  的維度， $h$  為點群中對稱運算  $P_R$  的個數， $\lambda$  和  $k$  為行列的標號。

在  $D_{2d}$  群中，只有  $\Gamma_6$  和  $\Gamma_7$  兩種不可約表徵，envelope functions  $F_j(r)$  是純奇或純偶對稱，所以所有的波函數可分為  $\Gamma_6^+$ ， $\Gamma_7^+$ ， $\Gamma_6^-$ ， $\Gamma_7^-$  四種；而經由投影運算，可得出相對應的角度部分的基底如下：

表 2.5 envelope functions 角度部分的基底

	$F_1$	$F_2$	$F_3$
$\Gamma_6^+$	$Y_0^0, Y_2^0, Y_4^0, Y_4^{4c}, Y_4^{4s}$	$Y_2^1, Y_4^1, Y_4^{-3}$	$Y_2^{2c}, Y_2^{2s}, Y_4^{2c}, Y_4^{2s}$
$\Gamma_7^+$	$Y_2^{-1}, Y_4^{-1}, Y_4^3$	$Y_0^0, Y_2^0, Y_4^0, Y_4^{4c}, Y_4^{4s}$	$Y_2^1, Y_4^1, Y_4^{-3}$
$\Gamma_6^-$	$Y_3^{2s}, Y_3^{2c}$	$Y_1^{-1}, Y_3^3, Y_3^{-1}$	$Y_1^0, Y_3^0$
$\Gamma_7^-$	$Y_1^1, Y_3^{-3}, Y_3^1$	$Y_3^{2s}, Y_3^{2c}$	$Y_1^{-1}, Y_3^3, Y_3^{-1}$

	$F_4$	$F_5$	$F_6$
$\Gamma_6^+$	$Y_2^{-1}, Y_4^{-1}, Y_4^3$	$Y_2^1, Y_4^1, Y_4^{-3}$	$Y_2^{2c}, Y_2^{2s}, Y_4^{2c}, Y_4^{2s}$
$\Gamma_7^+$	$Y_2^{2c}, Y_2^{2s}, Y_4^{2c}, Y_4^{2s}$	$Y_0^0, Y_2^0, Y_4^0, Y_4^{4c}, Y_4^{4s}$	$Y_2^1, Y_4^1, Y_4^{-3}$
$\Gamma_6^-$	$Y_1^1, Y_3^{-3}, Y_3^1$	$Y_1^{-1}, Y_3^3, Y_3^{-1}$	$Y_1^0, Y_3^0$
$\Gamma_7^-$	$Y_1^0, Y_3^0$	$Y_3^{2s}, Y_3^{2c}$	$Y_1^{-1}, Y_3^3, Y_3^{-1}$

這些 envelope functions 角度部分的基底對於分析和預測波函數的行為都有其方便性。



## 2.3 共振態及束縛態

對於能量介與重電洞能帶頂點與輕電洞能帶頂點之間的雜質能階，其波函數會與能帶的態，或稱連續態(continuum state)相混而形成共振態(resonant state)。然而在計算中會出現一些不正確的連續態，而這些不正確的連續態是因為侷域性的基底不足以描述非侷域性的連續態所造成。當在某些特定鍺含量  $x$  下所計算的雜質態會與這些不正確的連續態相混很嚴重而得到不正確的結果。

我們要判斷那些能階是真正各自屬於重電洞能帶，輕電洞能帶，還是分裂電洞能帶。其中有很多算出來的能階其主要貢獻是來自於連續能帶的部分，這些態在我們增加基底 (bases) 之後，這些連續能帶貢獻的部分的能量，都會隨之改變，因為我們是使用有限的基底，沒辦法完整的描述此連續能帶的部分，這些即不是我們所要的態。

把式(9)中  $\alpha_1$  變小來增加侷限化的基底 (localized bases)，或是把  $\alpha_k$  的  $k$  加大以增加非侷限化的基底 (extending bases)，都可以得到相同的結果，而其中的一些差異後面再討論。


而另外一種判斷的方法，可由把這些態投影到考慮應力的能帶頂點 (strained band edge)，由其重電洞能帶，輕電洞能帶和分裂電洞能帶的機率來判斷此態到底是不是我們所要的態。沒有考慮應力的 Bloch functions  $\phi_j$  和有考慮應力的 Bloch functions  $\tilde{\phi}_j$  之間的變換如下：

$$\begin{aligned}\phi_j &= \sum_{j'} (M^{-1})_{jj'} \tilde{\phi}_{j'} \\ \tilde{\phi}_j &= \sum_{j'} M_{jj'} \phi_{j'}\end{aligned}\tag{14}$$

波函數 $\psi(r)$ 可以改用有考慮應力的 Bloch functions 來表示：

$$\begin{aligned}
 F_j(r) &= \sum_k C_k^{(j)} \varphi_k^{(j)}(r) \\
 \varphi_k^{(j)}(r) &= N(L, \alpha_k) r^L e^{-\alpha_k r} Y_l^m(\theta, \phi) \\
 \psi(r) &= \sum_j F_j(r) \phi_j = \sum_j \sum_k C_k^{(j)} \varphi_k^{(j)}(r) \sum_{j'} (M^{-1})_{jj'} \tilde{\phi}_{j'} = \sum_{j'} \tilde{F}_{j'}(r) \tilde{\phi}_{j'} \\
 \tilde{F}_{j'}(r) &= \sum_j \sum_k C_k^{(j)} (M^{-1})_{jj'} \varphi_k^{(j)}(r)
 \end{aligned}
 \tag{15}$$

因此在此態上有考慮應力的 envelop function  $\tilde{F}_{j'}(r)$  的機率即為：

$$P_j = \int |\tilde{F}_{j'}(r)|^2 d^3r = \sum_{j''} \sum_{k''} C_{k''}^{(j'')} C_{k'}^{(j')} (M^{-1})_{j''j'}^* (M^{-1})_{j'j} \langle \varphi_{k''}^{(j'')} | \varphi_{k'}^{(j')} \rangle$$


$$\tag{16}$$

$P_1 + P_4$ ， $P_2 + P_3$ ， $P_5 + P_6$  分別為重電洞能帶，輕電洞能帶和分裂電洞能帶的機率；在重電洞能帶之上的束縛態，其比例幾乎大部分皆為重電洞為主；在重電洞能帶之下，輕電洞能帶之上的束縛態，其比例幾乎大部分皆為輕電洞為主；在輕電洞能帶之下，分裂電洞能帶之上的束縛態，其比例幾乎大部分皆為分裂電洞為主。

我們即以此來判斷適合的態。

### 三、結果與討論

我們以沒有受應力的 heavy hole 能帶頂點為能量原點，原本簡併的重電洞能帶和輕電洞能帶，隨著應力的加大，而分離開來，但是重電洞能帶是隨著應力增加而能量升高，反之輕電洞能帶是隨著應力增加而下降；分裂電洞能帶也是隨應力增加而下降。

而重電洞能帶和輕電洞能帶隨著應力而有不同的行為，對於之後雜質能階隨著應力變化的行為，可以做出合理的解釋。相同的，由同一能態中重電洞能帶，輕電洞能帶和分裂電洞能帶的機率隨著應力的改變的趨勢也可以看出。

圖 3.1 到圖 3.4 分別為不同對稱性之束縛能對不同應力之變化圖，圖中的能階皆為減去 band edge 之後的能量。

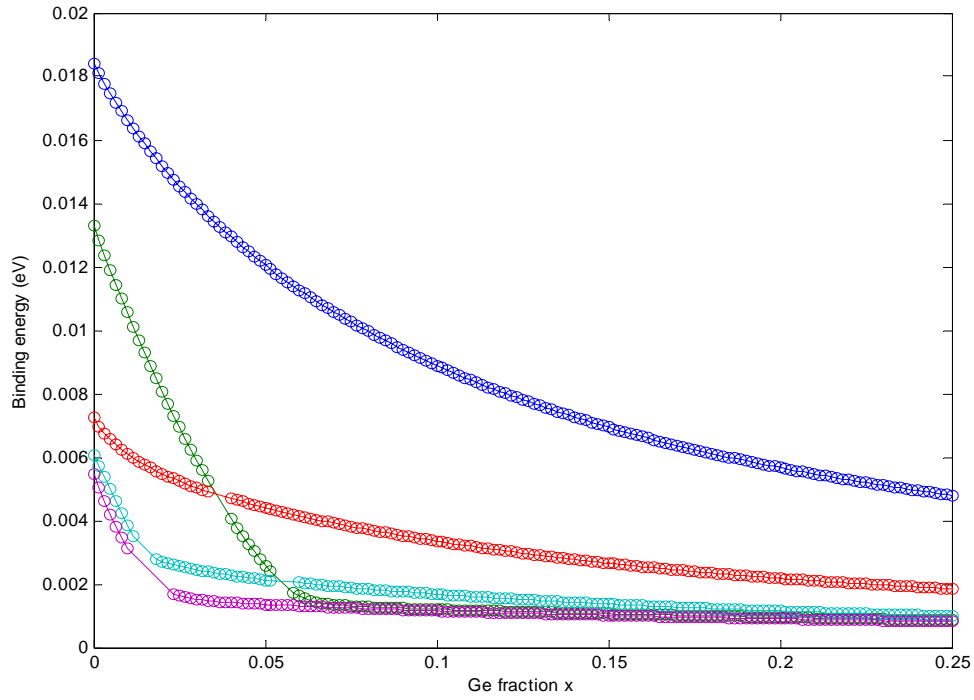


圖 3.1  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  (參雜 B)  $\Gamma_6^-$  之束縛能對 Ge 含量  $x$  之變化圖。

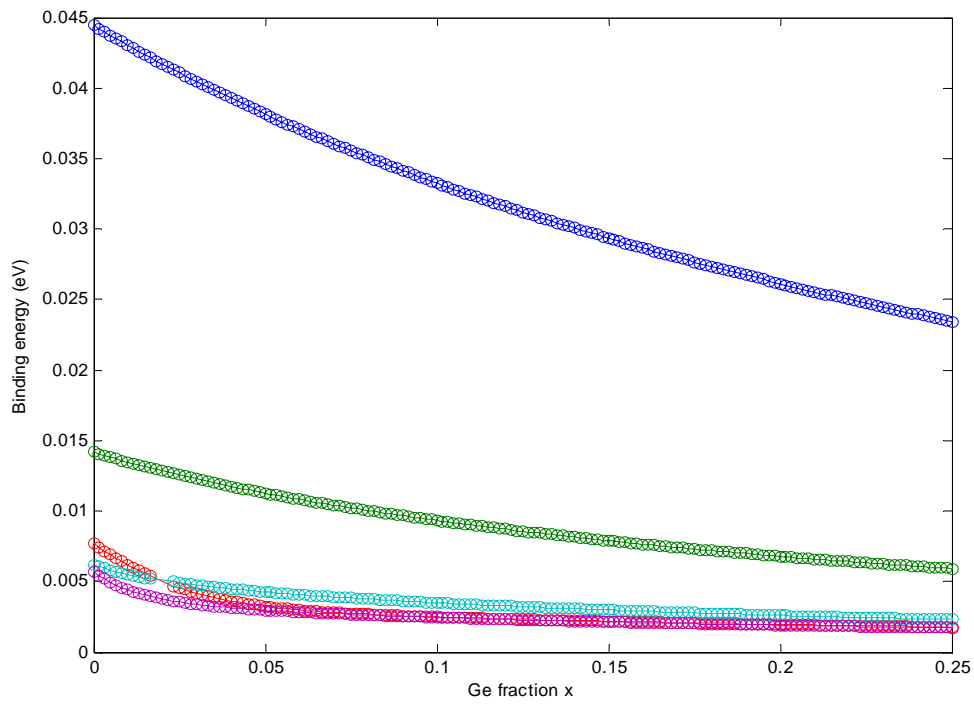


圖 3.2  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  (參雜 B)  $\Gamma_6^+$  之束縛能對 Ge 含量  $x$  之變化圖。

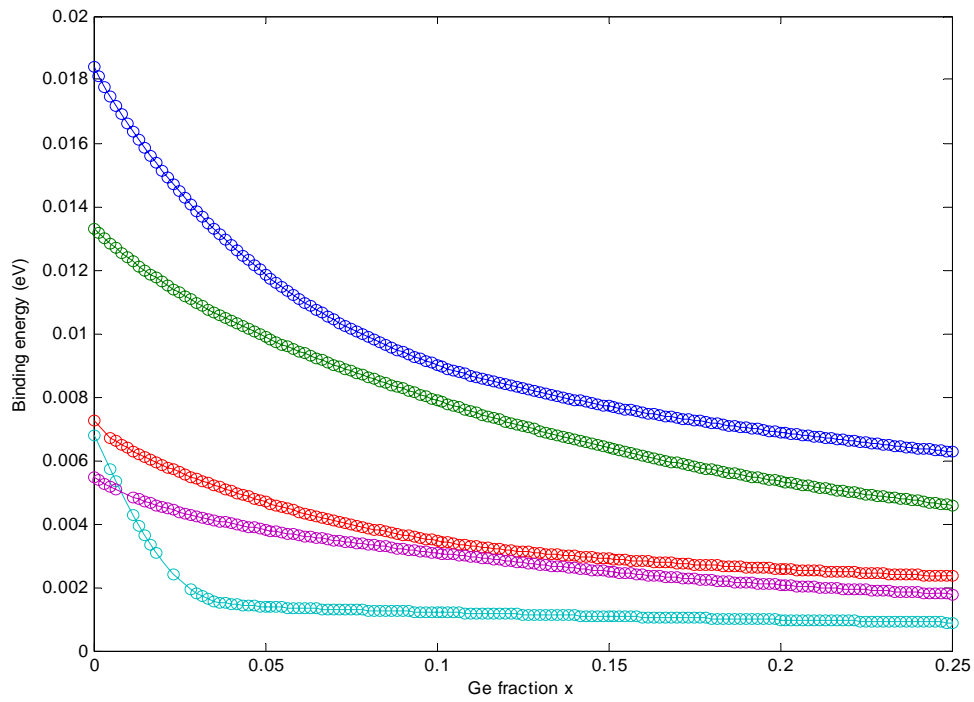


圖 3.3  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  (參雜 B)  $\Gamma_7^-$  之束縛能對 Ge 含量  $x$  之變化圖。

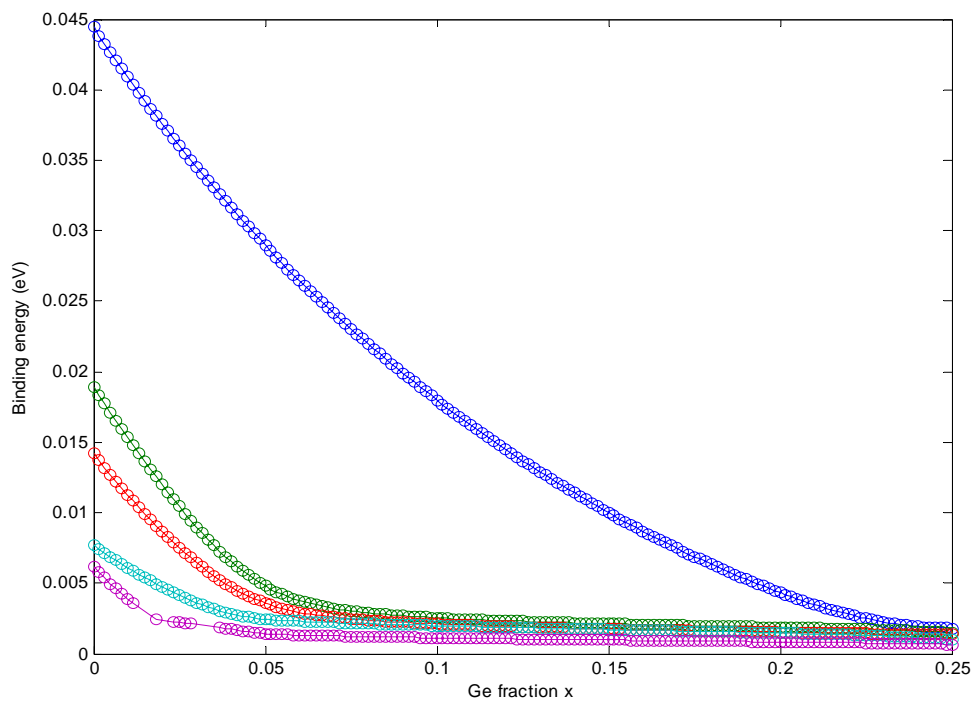


圖 3.4  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  (參雜 B)  $\Gamma_7^+$  之束縛能對 Ge 含量  $x$  之變化圖。

### 3.1 應力對受子能階之影響

由前面 4 圖我們可以發現，隨著 Ge 含量  $x$  增加，雜質能態隨之下降，而其下降速率隨著 Ge 含量  $x$  增加而變小。對於不同對稱性之雜質能階隨 Ge 含量  $x$  增加，下降速率各有不同。

可由波函數的組成來分析前 5 條能態下降比例趨勢的不同；

波函數表示如下：

$$\psi^{\Gamma_6^+}(r) = \begin{pmatrix} f_{00}^1(r)Y_0^0 + f_{20}^1(r)Y_2^0 + f_{40}^1(r)Y_4^0 + f_{44c}^1(r)Y_4^{4c} + f_{44s}^1(r)Y_4^{4s} \\ f_{21}^2(r)Y_2^1 + f_{41}^2(r)Y_4^1 + f_{4-3}^2(r)Y_4^{-3} \\ f_{22c}^3(r)Y_2^{2c} + f_{22s}^3(r)Y_2^{2s} + f_{42c}^3(r)Y_4^{2c} + f_{42s}^3(r)Y_4^{2s} \\ f_{2-1}^4(r)Y_2^{-1} + f_{4-1}^4(r)Y_4^{-1} + f_{43}^4(r)Y_4^3 \\ f_{21}^5(r)Y_2^1 + f_{41}^5(r)Y_4^1 + f_{4-3}^5(r)Y_4^{-3} \\ f_{22c}^6(r)Y_2^{2c} + f_{22s}^6(r)Y_2^{2s} + f_{42c}^6(r)Y_4^{2c} + f_{42c}^6(r)Y_4^{2s} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix}$$

$$\psi^{\Gamma_6^-}(r) = \begin{pmatrix} f_{32s}^1(r)Y_3^{2s} + f_{32c}^1(r)Y_3^{2c} \\ f_{1-1}^2(r)Y_1^{-1} + f_{33}^2(r)Y_3^3 + f_{3-1}^2(r)Y_3^{-1} \\ f_{10}^3(r)Y_1^0 + f_{30}^3(r)Y_3^0 \\ f_{11}^4(r)Y_1^1 + f_{3-3}^4(r)Y_3^{-3} + f_{31}^4(r)Y_3^1 \\ f_{1-1}^5(r)Y_1^{-1} + f_{33}^5(r)Y_3^3 + f_{3-1}^5(r)Y_3^{-1} \\ f_{10}^6(r)Y_1^0 + f_{30}^6(r)Y_3^0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix}$$

$$\psi^{\Gamma_7^+}(r) = \begin{pmatrix} f_{2-1}^1(r)Y_2^{-1} + f_{41}^1(r)Y_4^{-1} + f_{43}^1(r)Y_4^3 \\ f_{00}^2(r)Y_0^0 + f_{20}^2(r)Y_2^0 + f_{40}^2(r)Y_4^0 + f_{44c}^2(r)Y_4^{4c} + f_{44s}^2(r)Y_4^{4s} \\ f_{21}^3(r)Y_2^1 + f_{41}^3(r)Y_4^1 + f_{4-3}^3(r)Y_4^{-3} \\ f_{22c}^4(r)Y_2^{2c} + f_{22s}^4(r)Y_2^{2s} + f_{42c}^4(r)Y_4^{2c} + f_{42s}^4(r)Y_4^{2s} \\ f_{00}^5(r)Y_0^0 + f_{20}^5(r)Y_2^0 + f_{40}^5(r)Y_4^0 + f_{44c}^5(r)Y_4^{4c} + f_{44s}^5(r)Y_4^{4s} \\ f_{21}^6(r)Y_2^1 + f_{41}^6(r)Y_4^1 + f_{4-3}^6(r)Y_4^{-3} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix}$$

$$\psi^{\Gamma_7}(r) = \begin{pmatrix} f_{11}^1(r)Y_1^1 + f_{3-3}^1(r)Y_3^{-3} + f_{3-1}^1(r)Y_3^1 \\ f_{32s}^2(r)Y_3^{2s} + f_{32c}^2(r)Y_3^{2c} \\ f_{1-1}^3(r)Y_1^{-1} + f_{33}^3(r)Y_3^3 + f_{3-1}^3(r)Y_3^{-1} \\ f_{10}^4(r)Y_1^0 + f_{30}^4(r)Y_3^0 \\ f_{32s}^5(r)Y_3^{2s} + f_{32c}^5(r)Y_3^{2c} \\ f_{1-1}^6(r)Y_1^{-1} + f_{33}^6(r)Y_3^3 + f_{3-1}^6(r)Y_3^{-1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix}$$

方便起見，以基態作為例子來做討論。比較 even envelop functions 的部分， $\Gamma_7^+$  下降的速度比  $\Gamma_6^+$  來的快，因為  $\Gamma_7^+$  主要貢獻來自於  $F_2$  的  $f_4(r)Y_0^0$  和  $F_5$  的  $f_{16}(r)Y_0^0$ ，而  $F_2$  和  $F_5$  又分別是屬於輕電洞能帶及分裂電洞能帶，都是隨著應力增加而下降的；而  $\Gamma_6^+$  的主要貢獻則是來自於  $F_1$  的  $f_1(r)Y_0^0$ ，屬於重電洞能帶，是隨著應力增加而上升的；所以比例上來看，其下降的速度就不會像  $\Gamma_7^+$  那樣迅速。同樣的理由也可解釋  $\Gamma_8^+(T_d) \rightarrow \Gamma_7^+ + \Gamma_6^+(D_{2d})$  分裂後  $\Gamma_6^+$  在上， $\Gamma_7^+$  在下的行為。

而  $\Gamma_8^-(T_d) \rightarrow \Gamma_7^- + \Gamma_6^-(D_{2d})$  基態的行為沒像  $\Gamma_8^+(T_d) \rightarrow \Gamma_7^+ + \Gamma_6^+(D_{2d})$  明顯可由波函數的組成直接看出，但是仍然可由波函數中的  $F_1 \sim F_6$  之機率來判斷，圖 3.7 至圖 3.13 為單一能階中其重電洞能態，輕電洞能態，以及分裂電洞能態所佔的比例。分別以  $\Gamma_7^-$  及  $\Gamma_6^-$  的基態能階來舉例，在  $x=0$ ， $\Gamma_7^-$  基態能階  $F_1 \sim F_6$  的機率分別為：

$$F_1=0.170672, F_4=0.318832,$$

$$F_2=0.00576199, F_3=0.479972,$$

$$F_5=0.015684, F_6=0.00907821$$

重電洞能帶及輕電洞能帶的機率各為 48%

而  $\Gamma_6^-$  基態能階  $F_1 \sim F_6$  的機率分別為：

$$F_1=0.00554602, F_4=0.480188,$$

$$F_2=0.16946, F_3=0.320044,$$

$$F_5=0.023938, F_6=0.000824151$$

重電洞能帶及輕電洞能帶的機率也是各為 48% 兩者的比例一開始是差不多的， $x$  在漸漸增加的時候，可由圖 3.7 及圖 3.9 看出，波函數比例也還是差不多，所以一開始其變化情形也就如圖 3.6 看起來的一樣差不多，但隨著  $x$  的加大，也可以由圖 3.7 及圖 3.9 其機率的變化，看到其分別對應在圖 3.6 的變化趨勢；相較於圖 3.8 及圖 3.10 可看出  $\Gamma_7^+$  和  $\Gamma_6^+$  兩者組成比例變化較不同，而  $\Gamma_7^-$  和  $\Gamma_6^-$  兩者十分接近；如此也可說明  $\Gamma_8^+$  和  $\Gamma_8^-$  分裂趨勢的不同。如果輕電洞能帶及分裂電洞能帶的比例佔多數，其隨著應力增加而下降的速度就會較快，反之如重電洞能帶的比例佔多數，則其隨著應力增加而下降的速度就會較慢。



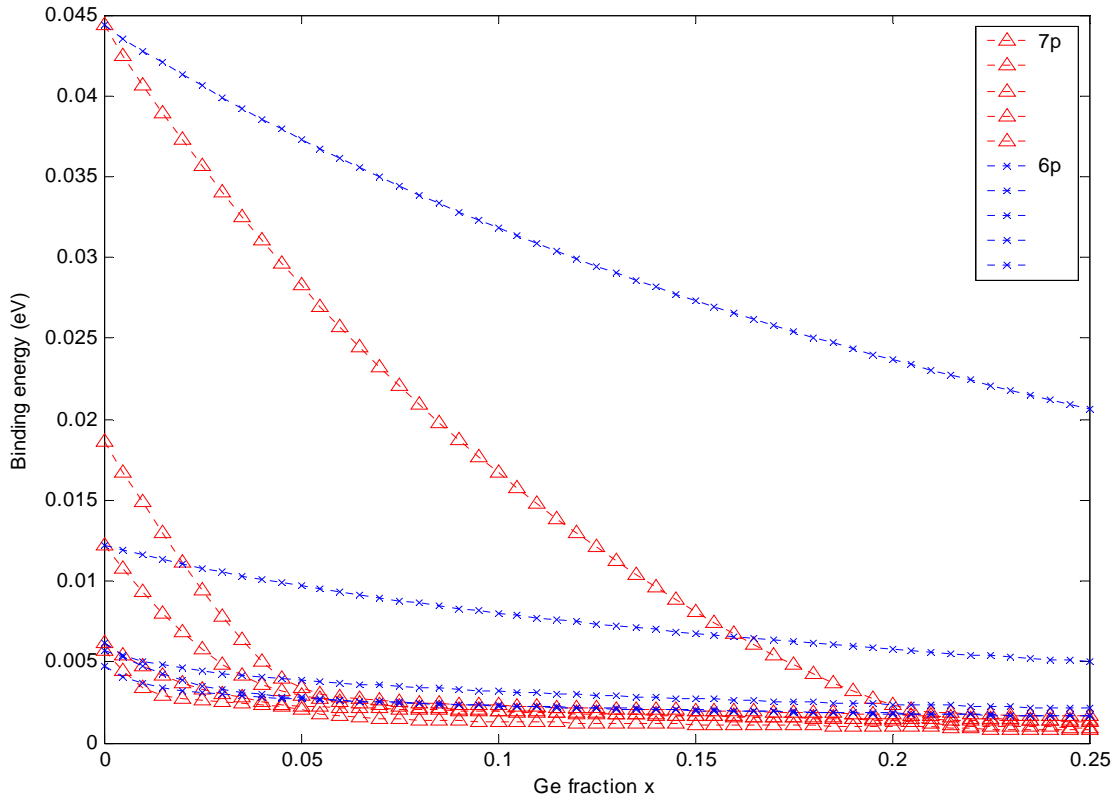


圖 3.5 偶對稱能態隨  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  中  $x$  比例之變化圖。

圖中明顯可看出  $\Gamma_7^+$  下降的速度比起  $\Gamma_6^+$  快速，其原因可由組成的波函數說明。

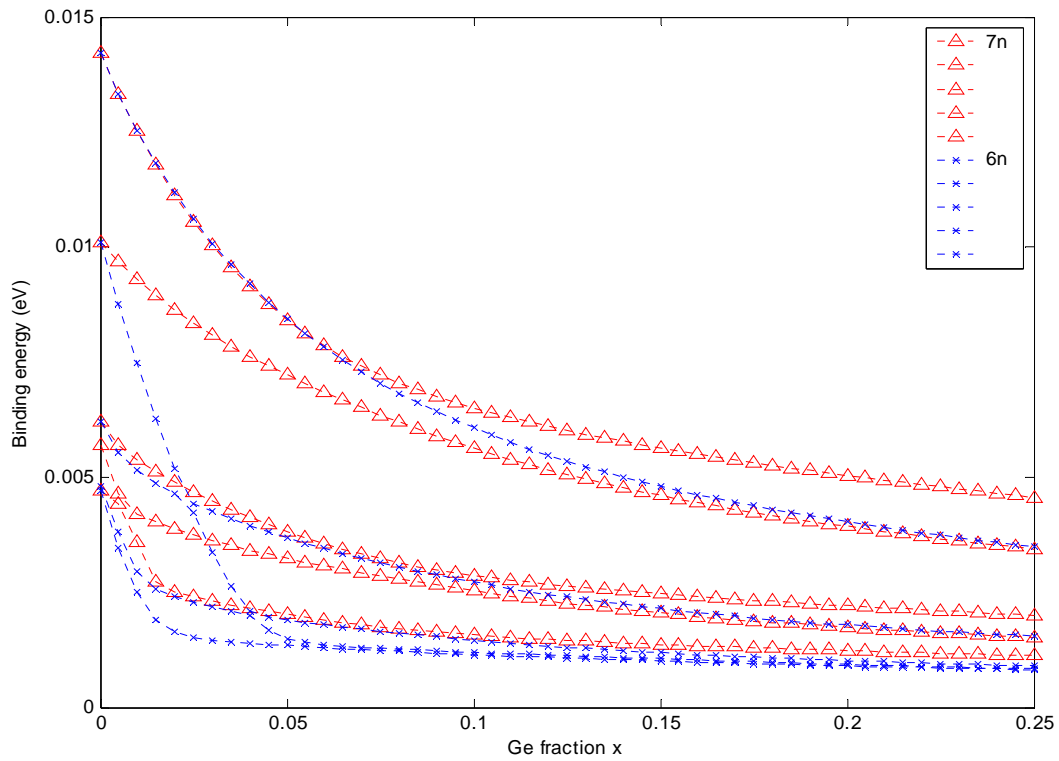


圖 3.6 奇對稱能態隨  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  中  $x$  比例之變化圖

$\Gamma_7^-$  及  $\Gamma_6^-$  下降的速度可由其組成的波函數說明，看其中重電洞，輕電洞和分裂電洞的比例各是佔多少來判斷

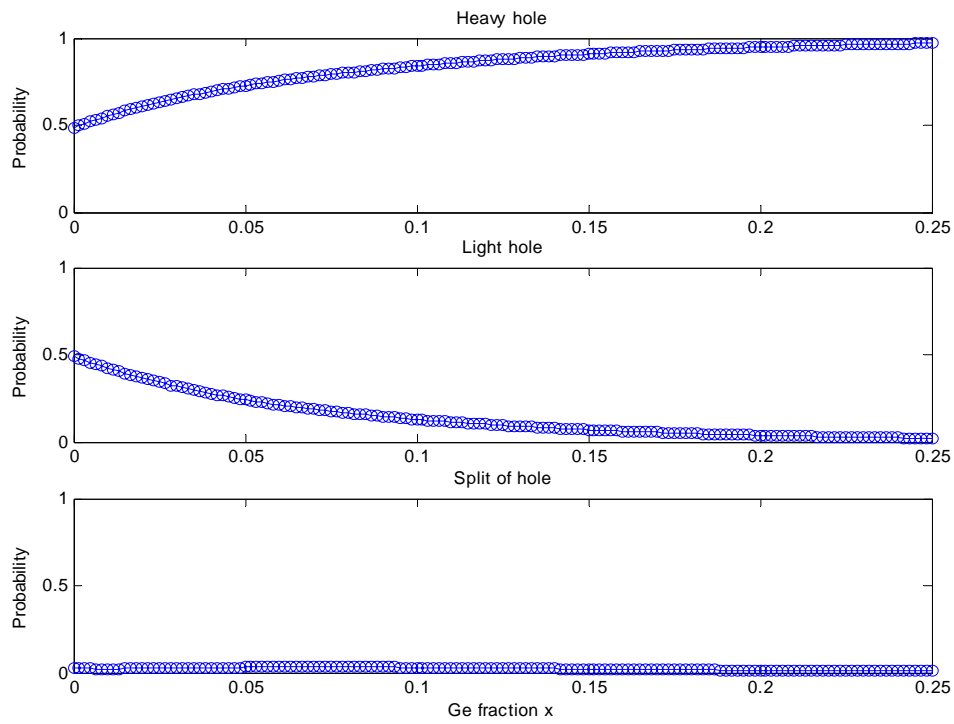


圖 3.7  $\Gamma_6^-$  的基態中重電洞，輕電洞，分裂電洞機率隨著  $x$  變化之變化圖

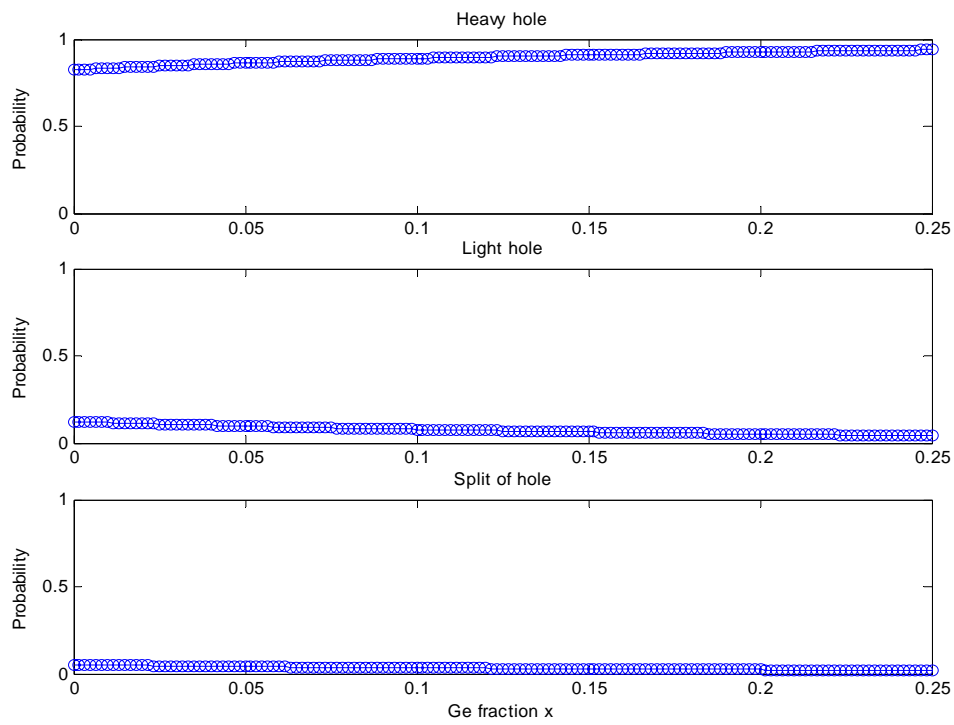


圖 3.8  $\Gamma_6^+$  的基態中重電洞，輕電洞，分裂電洞機率隨著  $x$  變化之變化圖

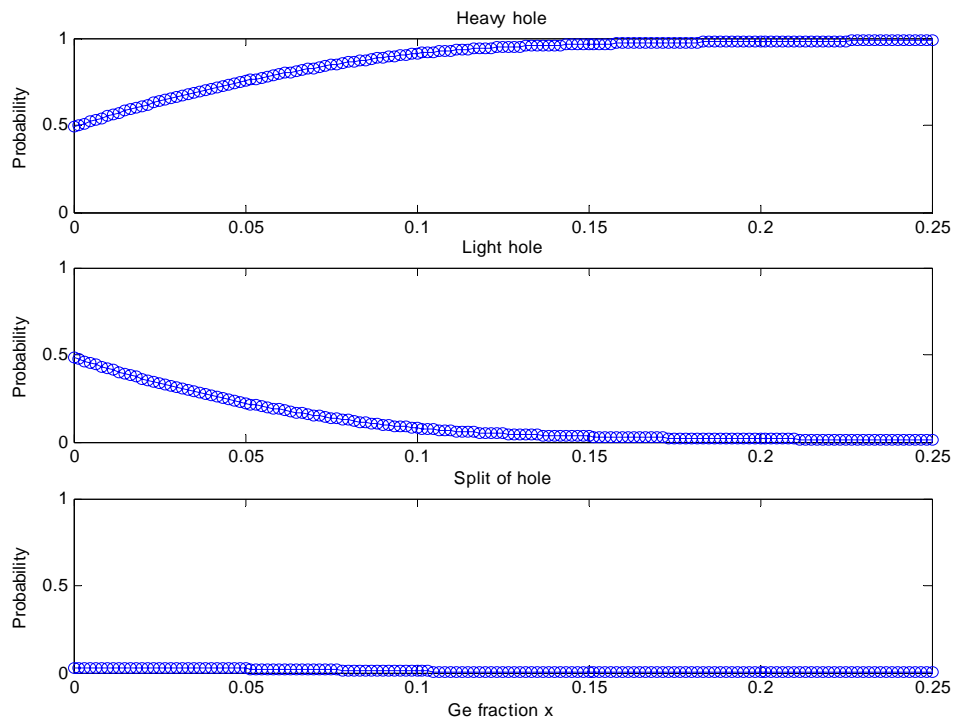


圖 3.9  $\Gamma_7^-$  的基態中重電洞，輕電洞，分裂電洞機率隨著  $x$  變化之變化圖

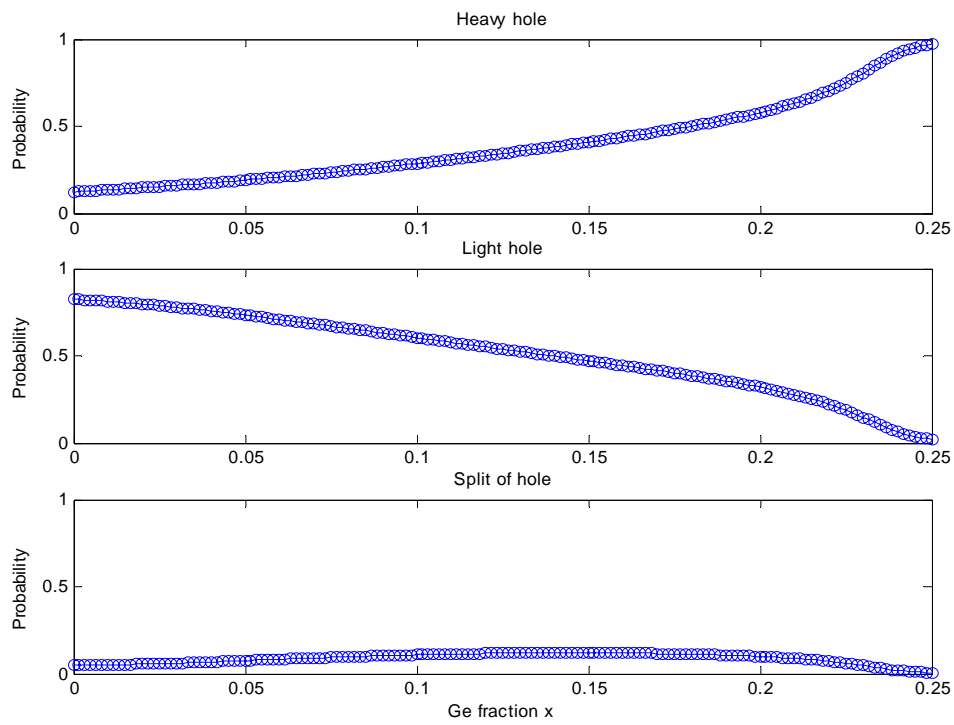


圖 3.10  $\Gamma_7^+$  的基態中重電洞，輕電洞，分裂電洞機率隨著  $x$  變化之變化圖

在圖 3.1 至圖 3.4 中，兩條能階相交的地方其波函數會有相混的情形（即二個雜質態能量簡併的位置附近），以  $\Gamma_6^+$  的第二激發態（圖 3.2 中第三條）及第三激發態（圖 3.2 中第四條）為例，其重電洞能帶，輕電洞能帶和分裂電洞能帶機率隨著  $x$  變化之情形為圖 3.11 及 3.12，在  $x$  值等於二個雜質態能量簡併的位置時其機率明顯看出不連續，但當我們把二個雜質態波函數的各成份各別相加後，則整體的機率還是連續的（圖 3.13），此結果暗示著當鍺含量  $x$  達到某些特定的量使得雜質能階能量接近簡併時其波函數隨鍺含量的劇烈變很有可能是由波函數相互混成所造成的。故在圖 3.1 到圖 3.4 中，會避開此區。

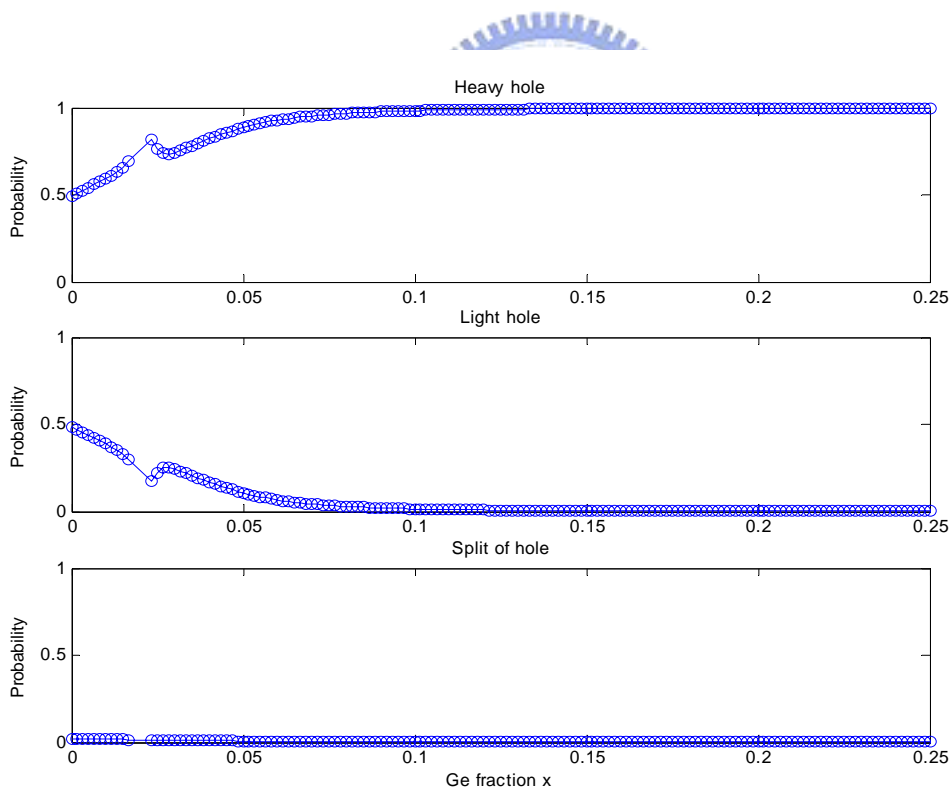


圖 3.11  $\Gamma_6^+$  的第二激發態中重電洞，輕電洞，分裂電洞機率隨著  $x$  變化之變化圖

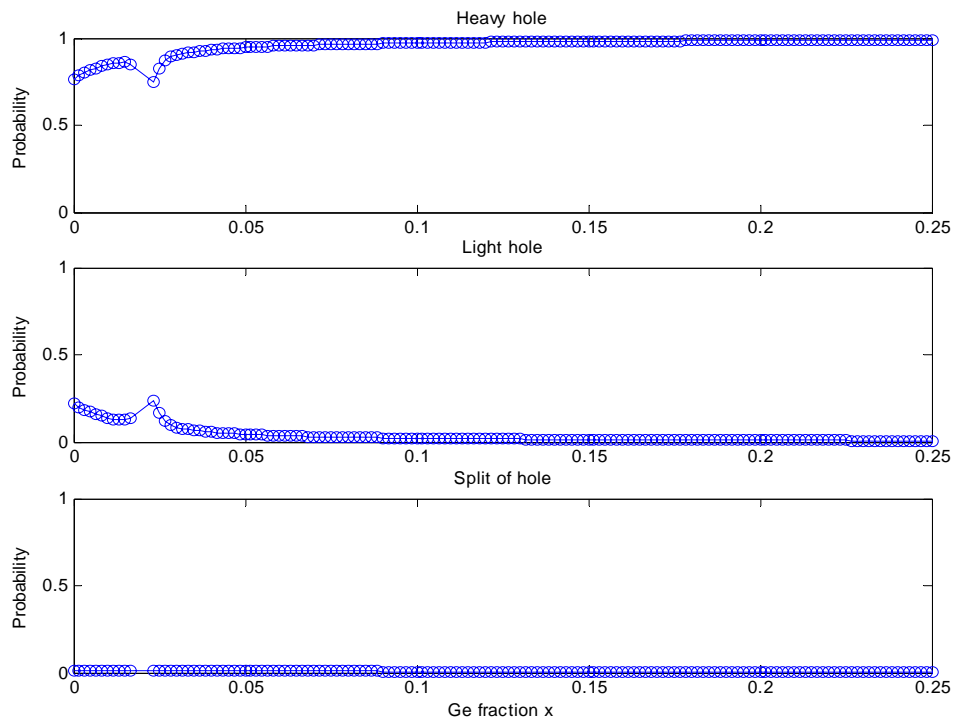


圖 3.12  $\Gamma_6^+$  的第三激發態中重電洞，輕電洞，分裂電洞機率隨著  $x$  變化之變化圖

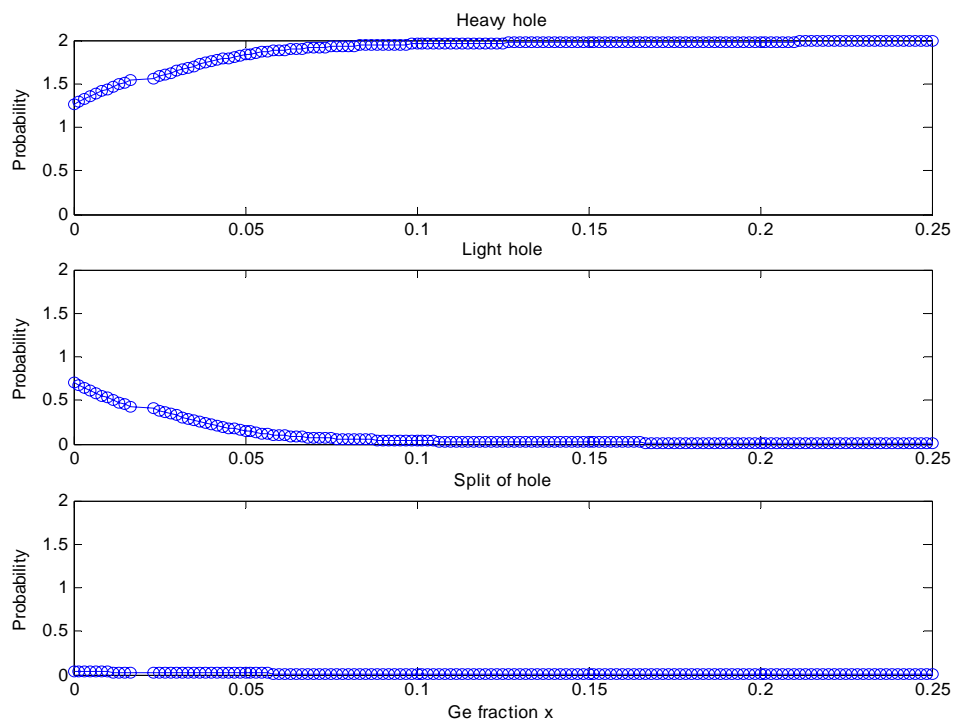


圖 3.13  $\Gamma_6^+$  的第二激發態中重電洞，輕電洞，分裂電洞機率加上第三激發態中重電洞，輕電洞，分裂電洞機率隨著  $x$  變化之變化圖，因為機率相加，所以縱軸的單位為二。

## 3.2 共振態及束縛態之判斷

我們可以看到原來沒有應力時全部在簡併的重電洞能帶和輕電洞能帶之上的受子能階，隨著應力的增加，有一部分是跟著重電洞能帶變化，另一部分則是跟著輕電洞能帶變化。跟著輕電洞能帶變化的能階，投影到考慮應力的能帶頂點時其比例大部分皆為輕電洞能帶為主。在考慮  $k \neq 0$  的情形，重電洞能帶，輕電洞能帶和分裂電洞能帶相混的情形較嚴重，用看各自組成能帶機率的方法，並不能很有效的區分出來，但此情形大部分是在  $x$  很小的時候較明顯，在此不予考慮。

在剛加入應力效應（ $x$  很小時），由  $T_d$  群變成  $D_{2d}$  群（100 方向）的時候，大部分會跟著輕電洞能帶由重電洞能帶之上下降到重電洞能帶之下的束縛能（即屬於  $\Gamma_6$  的束縛能），都馬上隨之應力的發生而下去，而且大部分都是原本  $\Gamma_8$  較高能階的態，這些都是分裂後輕電洞能帶為主的束縛態，即  $\Gamma_8(T_d) \rightarrow \Gamma_6(D_{2d})$  的束縛能。而隨著  $x$  加大緩慢下降的其實都是分裂後重電洞為主的束縛態，即  $\Gamma_8(T_d) \rightarrow \Gamma_7(D_{2d})$  的束縛能。由圖 3.15 看到，較接近基態的都不是跟著輕電洞能帶變化的能階，在應力大的情況下，這些能階都是漸漸接近重電洞能帶。圖 3.16 中的能階則是由在  $x=0$   $\Gamma_8^+$  的高能階掉下去的。

因為在沒有應力的情況之下  $\Gamma_6$  和  $\Gamma_7$  是簡併在一起的  $\Gamma_8$ ，但應力一加下去的時候，原本屬於  $\Gamma_6$  的  $\Gamma_8$  其行為就會跟著輕電洞能階頂點變化；而原本屬於  $\Gamma_7$  的  $\Gamma_8$  其行為就會跟著重電洞能階頂點變化。這分裂的行為就在對稱性被破壞掉的時候就馬上決定了。

由圖 3.14 可看出各自屬於各自能帶中能量最低的幾個能階，都會在  $x$  加大之後慢慢的接近各自的能階，更高的能階行為也是差不多。這行為也可以由之前的圖 3.7 至圖 3.12 看出，重電洞之上的能階，其重電洞的比例隨著  $x$  的增加而不斷提高，到  $x=0.25$  的時候都已接近百分之百。同時也沒有看到在  $x$  大的時候還有

能階由重電洞能階之上掉到重電洞能階之下。由圖 3.15 圖 3.17 可以看出，其束縛能離 band edge 都是越來愈接近，可發現束縛能都是隨著應力的加大而減小。

同樣的，這些能階在加大基底數目之後能量都不太會變化，增加的基底是侷限化的基底 (localized base)，和增加非侷限化的基底 (extending base) 多出來的能階會在不同的地方；如果增加的是侷限化的基底，則這些增加基底而能量不變，組成大部分為單一能帶為主的能階數目不會改變，多出來的都是我們不需要的部分；但如果增加的是非侷限化的基底，這些增加基底而能量不變，組成是由單一能帶為主的能階數目會增加，但都是在相對很高能階的部分，也就是連續能階的地方，那裡本來也就沒法把每個能階分辨的十分清楚；但是接近基態，每個能階距離分的較明顯的部分，加的是那一種基底結果都是一樣的。





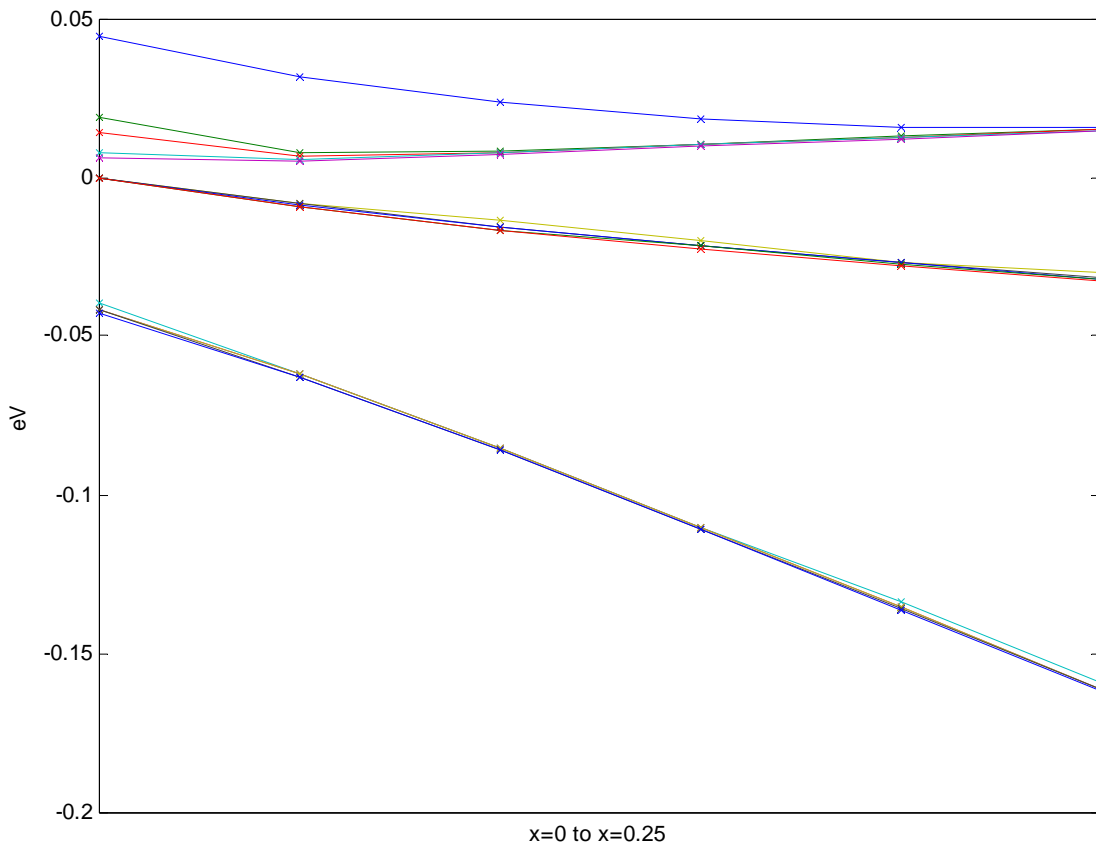


圖 3.14 束縛態及共振態隨著 Ge 含量  $x$  之變化圖

重電洞 hh，輕電洞 lh，分裂電洞 soh 由基態開始，能量由低到高各 5 條， $x=0$ ， $x=0.05$ ， $x=0.1$ ， $x=0.15$ ， $x=0.2$ ， $x=0.25$  共 6 點；隨著  $x$  加大之後慢慢的接近各自的能階， $x$  較大的時候，所有的能階都各自緊鄰各自屬於的能帶。下面的圖 3.15 圖 3.16 圖 3.17 分別為屬於重電洞 hh，輕電洞 lh 和分裂電洞 soh 的能態之能量減掉 band edge energy 之後放大的圖

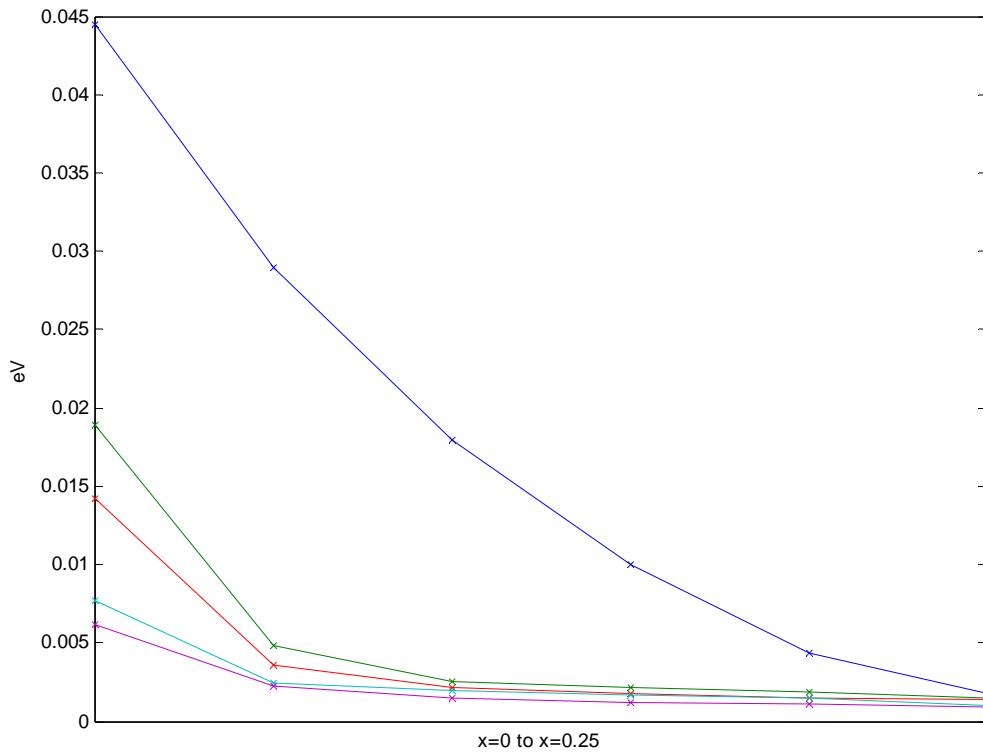


圖 3.15 重電洞能帶之上的束縛態能階(減去 band edge)

重電洞 hh 由基態開始，解離能量由低到高各 5 條（能階減去 band edge energy）， $x=0$ ， $x=0.05$ ， $x=0.1$ ， $x=0.15$ ， $x=0.2$ ， $x=0.25$  共 6 點。

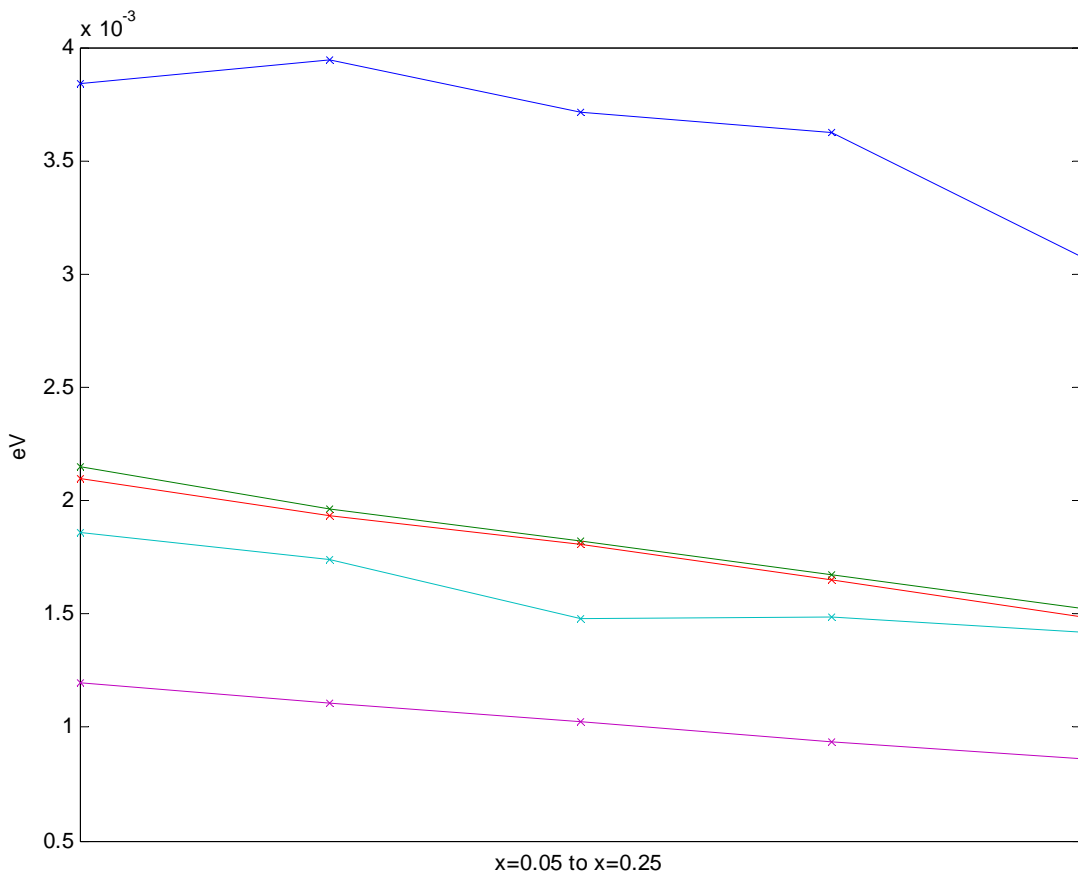


圖 3.16 重電洞能帶之下輕電洞能帶之上的共振態能階

輕電洞  $1h$  由基態開始，解離能量由低到高各 5 條（能階減去 band edge energy）， $x=0.05$ ， $x=0.1$ ， $x=0.15$ ， $x=0.2$ ， $x=0.25$  共 5 點；在  $x=0$  的時候，輕電洞和重電洞還是簡併在一起，這些能階都是  $\Gamma_8^+$  的高能階，故此圖由  $x=0.05$  開始畫起

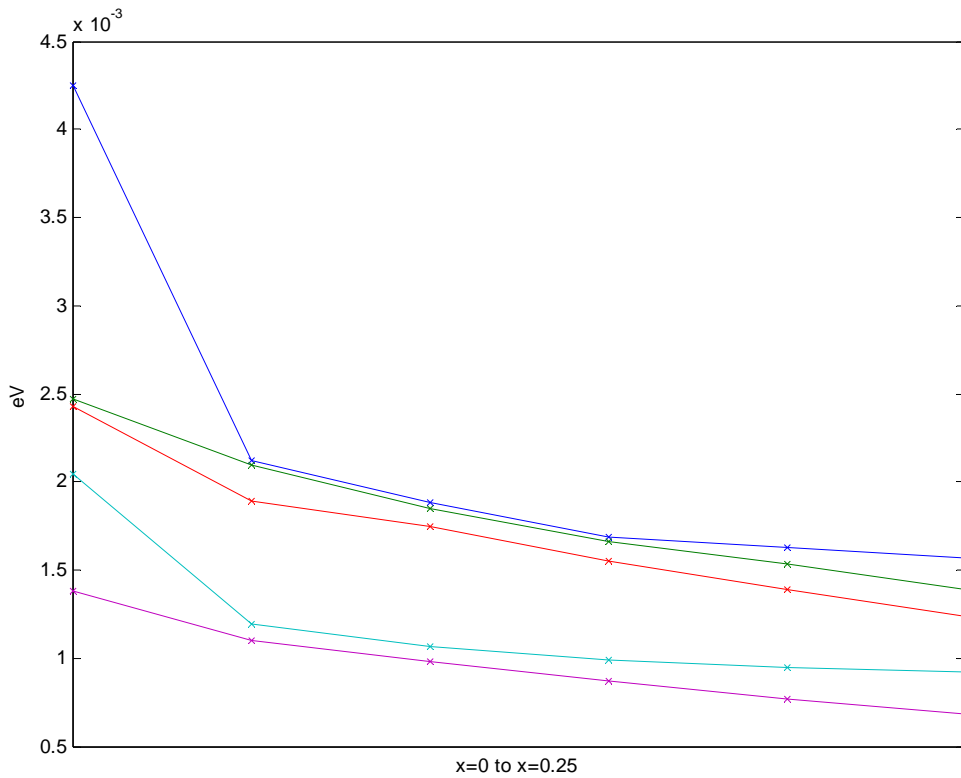


圖 3.17 輕電洞能帶之下分裂電洞能帶之上的共振態能階

分裂電洞 soh 由基態開始，解離能量由低到高各 5 條（能階減去 band edge energy）， $x=0$ ， $x=0.05$ ， $x=0.1$ ， $x=0.15$ ， $x=0.2$ ， $x=0.25$  共 6 點。

### 3.3 結果與比較

算出來的共振態能階在沒有應力作用 ( $x=0$ ) 之下對照，由表 3.1 及表 3.2 看出，和 Buczkor 及 Bassani 的結果是相當的一致。

還有和其他實驗結果的能態比較如表 3.3，但都是針對  $x=0$  的塊材 Si，因為對於受應力之  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  合金材料及其能階，沒有合適的理論計算及實驗文獻結果可以參考比較；而計算的結果是十分的接近已有的實驗數據，因此可認為此計算的結果是可靠的。

由表 3.3 可看出在  $\Gamma_8^+$  基態和其前兩條激發態的結果都是十分的接近； $\Gamma_8^-$  與結果相比，前幾個能階是和能量較高的一組數據相接近，比其他組的結果略高一點，而之後的能階就和大部分結果相當； $\Gamma_7^-$  和  $\Gamma_6^-$  也是和能量較高的一組數據相接近，比其他組的結果略高一點； $\Gamma_7^+$  唯一的比較數據為測量 donor 和 acceptor 之拉曼散射 (Raman scattering) 光譜[3]所得，我們計算的能階比起其測量結果 23meV，低了 4meV；比起其他的結果算是差距較大的部分，此部分我們還無法有效的說明。

表 3.1 偶對稱共振態

	Buczko & Bassani	my work
$\Gamma_7^+$	4.39	4.25
$\Gamma_8^+$	2.60	2.47
$\Gamma_8^+$	2.56	2.43
$\Gamma_6^+$	2.54	2.41
$\Gamma_7^+$	1.90	2.04
$\Gamma_8^+$	1.44	1.38
$\Gamma_8^+$	1.41	1.36
$\Gamma_6^+$	1.40	1.33
$\Gamma_7^+$	1.20	1.19

表中數字是指由此能階到分裂電洞能帶 band edge 的能量，單位為 meV。



表 3.2 奇對稱共振態

	Buczko & Bassani	my work
$\Gamma_6^-$	5.34	5.64
$\Gamma_8^-$	5.26	5.42
$\Gamma_6^-$	2.41	2.41
$\Gamma_8^-$	2.35	2.34
$2\Gamma_8^- + 2\Gamma_7^- + \Gamma_6^-$	$1.48 \pm 0.01$	1.42

表中數字是指由此能階到分裂電洞能帶 band edge 的能量，單位為 meV。

表 3.3 實驗結果比較：對應重電洞之上的束縛能階 (meV)

	Solid State Comm 33 277 (1979)	Solid State Comm 23 733 (1977)	PRB 27 4826 (1983)	PR 163 686 (1967)	PRL 18 608 (1967)	J. Appl. Phys. 52 5148 (1981)	Rep. Prog. Phys. 44 1297 (1981)	Solid State Comm 15 1403 (1974)	our work
$\Gamma_8^+$ ground state	45.83	45.25±0.25	44.39	44.32		44.3	45.71	43.71	44.6
$\Gamma_8^+$	13.44±0.1	12.86±0.1							13.01
	6.38±0.1	5.8±0.1							6.66
	3.85±0.15	3.27±0.15							5.89
	2.7±0.2	2.12±0.2							3.68
$\Gamma_8^-$	14.83±0.1	14.02	13.94		13.93	15.33			15.75
	10.71±0.1	9.9	9.79		9.71	11.18	9.19		11.24
		6.04	5.97		5.86	7.36	5.34		6.58
		4.48	4.41			6.03	3.8		4.99
		3.48	2.8			4.19	2.26		3.59
		2.33	1.82			3.52	1.55		
$\Gamma_7^-$			4.8	4.68		4.25	6.1	4.11	6.05
$\Gamma_6^-$			4.72	4.41			5.79	4.03	5.18
			2.48	1.82			3.52	1.55	2.36
$\Gamma_7^+$									19.0

Ref. [3]~Ref. [9]

## 四、結論

本研究在  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  異質接面結構中使用考慮應力效應的  $k \cdot p$  理論及使用群論的投影運算來決定各種對稱性能態之受子波函數，進而得到摻雜 B 的受子能態隨應力變化的情形。分別對於束縛態及共振態做了相關之討論。

根據與現有的實驗結果相比較，結果十分接近；因此認為此受應力之摻雜 B 的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  的計算結果有其可信度。而此方法可同樣應用在其他受壓縮應力的半導體材料的受子能階問題，只要改變其材料參數。

而之後共振態判斷的方法也可以利用格林函數 (Green functions) 的方法去求得，其延伸可得知此能階存在的時間長短，以及其他相關之特性。





## 附錄一

自然界中，共有 32 個晶格點群 (the crystallographic point groups)，每一個點群都有其所屬的特性表，對稱運算，不可約表徵，以及對應其不可約表徵的基底函數。

特性表 (character table) 中的數值為 characters，第一行為不可約表徵， $\Gamma_1 \sim \Gamma_5$  為 single-valued representations， $\Gamma_6$  及  $\Gamma_7$  為 double-valued representations，第一列為  $D_{2d}$  群的對稱運算：

$E$  : identity, 不作用

$C_z$  : 以  $z$  軸作 180 度旋轉

$C_x$  : 以  $x$  軸作 180 度旋轉

$C_y$  : 以  $y$  軸作 180 度旋轉

$S_4$  : 以  $z$  軸順時旋轉 90 度，再作空間反轉

$\sigma_d$  : 以對角平面作反射

$R$  : 以  $z$  軸旋轉 360 度

$RP$  : 先作用  $P$ ，再以  $z$  軸旋轉 360 度



single-valued representations 和 double-valued representations 的不同在於前者的  $P$  和  $RP$  的 characters 相同，而後者  $P$  和  $RP$  的 characters 不同。

附表 1.1  $D_{2d}$  群的 character table

$D_{2d}$	$1E$	$1R$	$C_z, RC_z$	$(C_x, C_y)$ $R(C_x, C_y)$	$2S_4$	$2RS_4$	$2\sigma_d, 2R\sigma_d$
$\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma_2$	1	1	1	-1	1	1	-1
$\Gamma_3$	1	1	1	1	-1	-1	-1
$\Gamma_4$	1	1	1	-1	-1	-1	1
$\Gamma_5$	2	2	-2	0	0	0	0
$\Gamma_6$	2	-2	0	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
$\Gamma_7$	2	-2	0	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0

## 參考文獻

- [1] S. Zwerdling, K. J. Button, B. Lax, and L. M. Roth, “Internal impurity levels in semiconductors: experiments in p-type silicon” Phys. Rev. Lett. **4**, 173 (1960)
- [2] A. Onton, P. Fisher, and A. K. Ramdas, “Spectroscopic investigation of group-III acceptor states in silicon” Phys. Rev. **163**, 686 (1967)
- [3] G. B. Wright and A. Mooradian, “Raman scattering from donor and acceptor impurities in silicon” Phys. Rev. Letters **18**, 608 (1967)
- [4] M. L. W. Thewalt, “Even-parity acceptor excited states in Si from bound exciton two hole transitions” Solid State Comm. **23**, 733 (1973)
- [5] K. Niizeki and M. Endo, “CPA conductivity of a binary alloy with off-diagonal disorder” Solid State Comm. **14**, 687 (1974)
- [6] M. S. Skolmick, L. Eaves, R. A. Stradling and J. C. Portal, S. Askenazy, “Far infrared photoconductivity from majority and minority impurities in high purity Si and Ge” Solid State Comm. **15**, 1403 (1974)
- [7] A K Ramdas and S Rodriguez, “Spectroscopy of the solid-state analogues of the hydrogen atom: donors and acceptors in semiconductors” Rep. Prog. Phys. **44**, 1297 (1981)
- [8] Colin E. Jones, David Schafer, Walter Scott, and R. J. Hager, “Carbon-acceptor pair centers ( $x$  centers) in silicon” J. Appl. Phys. **52**, 5148 (1981)

- [9] David W. Fischer and John J. Rome, “Additional structure in infrared excitation spectra of group-III acceptors in silicon” Phys. Rev. B **27**, 4826 (1983)
- [10] I. V. Altukhov, E. G. Chirkova, V. P. Sinis, and M. S. Kagan, “Towards Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> quantum-well resonant-state terahertz laser” Phys. Lett. **79**, 3909 (2001)
- [11] D. Schechter, “Theory of shallow acceptor resonant state in Si and Ge” J. Phys. Chem. Solids. **23**, 237 (1961)
- [12] N. O. Lipari, A. Baldereschi, and M. L. W. Thewalt, “Central cell effects on acceptor spectra in Si and Ge” Solid State Comm. **33**, 277 (1980)
- [13] J. M. Lutting and W. Kohn, “Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields” Phys. Rev. **97**, 869 (1955)
- [14] R. Buczko and F. Bassani, “Shallow acceptor resonant states in Si and Ge” Phys. Rev. B **45**, 5838 (1992)
- [15] U. Fano, “Effects of configuration on intensities and phase shifts” Phys. Rev. **124**, 1866 (1961)
- [16] S. L. Chuang, Physics of Optoelectronics Devices Wiley, 1995, p147-149
- [17] Martin M. Rieger and P. Vogl, “Electronic-band parameters in strained Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> alloys on Si<sub>1-y</sub>Ge<sub>y</sub> substrates” Phys. Rev. B **48**, 14276 (1993)