

行政院國家科學委員會專題研究計畫 期中進度報告

彈性應變對自組式量子點光電特性之影響(1/3)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC92-2212-E-002-072-

執行期間：92 年 08 月 01 日至 93 年 07 月 31 日

執行單位：國立臺灣大學應用力學研究所

計畫主持人：郭茂坤

計畫參與人員：游景翔 林資榕 廖柏亭

報告類型：精簡報告

報告附件：出席國際會議研究心得報告及發表論文

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 93 年 5 月 24 日

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫 ☐ 成 果 報 告
☒ 期 中 進 度 報 告

彈性應變對自組式量子點光電特性之影響

計畫類別：☒ 個別型計畫 ☐ 整合型計畫

計畫編號：NSC92-2212-E-002-072

執行期間：92 年 08 月 01 日至 95 年 07 月 31 日

計畫主持人：郭茂坤 教授

共同主持人：

計畫參與人員：游景翔、林資榕、廖柏亭

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)：☒ 精簡報告 ☐ 完整報告

本成果報告包括以下之附件：

☒ 已發表國際學術期刊及國內外學術會議（共計四篇）

1. *WSEAS Transactions on Electronics*, 1(2), 284-289 (2004). (附件一)
2. 第二十屆中國機械工程學會全國學術研討會，E-541 (2003)。 (附件二)
3. 第二十七屆全國力學會議，BS-2 (2003)，**學生論文競賽第二名**。(附件三)
4. Quantum Dots 2004, Banff, Alberta, Canada, May 10-13, 2004. (附件四之二)

☒ 出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份（附件四之一、二）

處理方式：得立即公開查詢

執行單位：國立台灣大學應用力學研究所

中 華 民 國 92 年 05 月 31 日

行政院國家科學委員會專題計畫期中報告

彈性應變對自組式量子點光電特性之影響

計畫編號：NSC92－2212－E－002－072

執行期限：92 年 08 月 01 日至 95 年 7 月 31 日

主持人：郭茂坤 教授 國立台灣大學應用力學研究所

一、中文摘要：

半導體元件的光電特性決定於元件的能帶結構，而量子點中磊晶層之應變將造成半導體導電帶特徵能量的改變，進而影響電子躍遷難易度。本年度計畫以有限元素法分析砷化銦/砷化鎵自組式量子點 (InAs/GaAs self-assembled quantum dot; InAs/GaAs SAQD) 因其晶格不匹配所引致的應變場，並進而探討應變場對導電帶的特徵能量與電子機率密度函數分佈之影響。本研究以線彈性力學與熱應力理論，配合有限元素法套裝軟體—FEMLAB，估算量子點內的應變分佈，再將應變效應加入薛丁格方程式，同樣以有限元素法予以分析。本年度計畫考慮材料之異向性並與簡化為等向性材料的結果比較，發現二種分析方法之下，特徵能量與低特徵能量之簡併狀態皆受到應變的影響而提升；同時發現特徵能量與電子機率密度函數分佈，異向與等向分析的差異性不大。因此，對於砷化銦、砷化鎵而言，可以做等向性的簡化，以利於模擬的進行。

關鍵詞：自組式量子點、應變場、有限元素法、薛丁格方程式

Abstract

In this year's project, the models based on linear elasticity and thermal stress theory are developed to evaluate the strain distribution in the InAs/GaAs self-assembled quantum dot. The lattice mismatch in heterostructures induces the strain field which calculated by finite element package—FEMLAB. The Schrödinger equation, including the strain-induced potential is also solved by means of the finite element method. The solutions consist of the eigenenergy and the probability density function of the conduction band.

We treat the models by two different approaches, anisotropic material analysis and isotropic material simplification. Our results show that the strain effects shift the eigenenergy and the degeneracy of low eigenenergy. When considering the eigenenergy and the corresponding probability density function, the differences between two methods are small. Therefore, it is suitable to treat InAs and GaAs as an isotropic material.

Keywords : Self-assembled quantum dot, Strain field, Finite element method, Schrödinger equation

二、研究目的：

光電與通訊元件的研發，使得半導體相關產業快速蓬勃地發展，而元件結構要求微小化的過程，也趨使半導體元件進入了奈米尺寸的紀元，其中以半導體奈米結構—量子點，最受青睞 [1]。量子點是一種以厚度僅數奈米的幾種不同材料所做成，而在三維均受侷限之微結構。受到量子點內量子化能階的影響，電子將被侷限於一個很小的尺度內，亦即趨近於「點」的尺度內，因此量子點可視為理想之零維度電子系統。同時，由於此種三維均受侷限之微結構，所造成的量子能階類似於原子能階現象，因而量子點有時又稱為人造原子 [2-3]。

量子點元件的發光功率，與量子點的密度有極大的關係；目前能較成功得到高密度量子點的方法，係利用變形磊晶技術（例如：SK 模式）以成長自組式量子點。而自組式量子點內變形磊晶層之應變，將直接影響半導體導能帶與價電能帶的結構及分佈，進而影響量子點內部的及其鄰近之電子的特性以及元件的光電性質。應變場與量子點及母體材料的晶格不匹配、材料的彈性性質、量子點的形狀、以及量子點的位置等因素有著密切的關係。

目前的模擬研究方面，對於評估量子點與臨近母體間彈性應變的理論及方法，仍眾說紛紜未有定論。常用的方法有三種，分別為：(1)考慮內含物的解析

解 [4-6]、(2)有限元素法 [7-10]與(3)原子模型法 [11-13]。其中，內含物解析解，僅適用於簡單的量子點形狀（例如：球體）；而有限元素法雖無法提供通解，卻是有效率且適合各種量子點形狀的彈性變形場計算方法；原子模型法雖有不用建構在連體力學基礎上的優點，卻須有精確的原子間位能，且因量子點系統所需的原子數目甚多（約數萬個以上），須耗費大量的計算量。前二種方法是由巨觀的連續體理論所發展；第三種方法則是從微觀的原子理論出發。以工程效率而言，有限元素法本身發展較為成熟且計算方便。

本計畫以線彈性力學與熱應力理論模擬異質材料晶格不匹配所引致應變現象為理論基礎；接著利用 Pikus-Bir Hamiltonian [14-15]，並配合有限元素法分析量子點的特徵能量與電子機率密度函數，探討應變場對導電帶的特徵能量與電子機率密度函數分佈之影響。

三、研究方法：

3.1 應變場分佈

半導體異質結構係由兩種以上的半導體材料，互相砌合成長。異質結構的形成可視為兩種單晶界面原子的結合，以本報告為例，交界面兩邊分別為基板材料 GaAs 與量子點材料 InAs 之元素化合物，如圖 1 所示。兩者之晶格常數雖不相同，但此兩種元素化合物皆由四面體共價鍵所形成，因此能緊密砌合。也由於晶格常數的差異，兩材料緊密砌合時，交界面處會因晶格的不匹配而產生應變，一般定義晶格不匹配常數為 [16]

$$\varepsilon_0 = \frac{a_s - a_d}{a_d} , \quad (1)$$

其中 a_d 、 a_s 分別為量子點材料與基板材料的晶格常數。異質材料交界面處晶格常數不同所引致的彈性變形，可視為交界面處存在「起始應變」（晶格不匹配），而進一步引致彈性變形。本報告將以假想的溫度改變配合「等效熱膨脹係數」，而造成量子點與基板伸長率的不相等，用以模擬晶格不匹配之起始應變，進而以熱應力理論分析此起始應變所引致之彈性應變。

在熱應力理論中，若量子點與基板之等效熱膨脹係數分別為 α_d 、 α_s ，則當溫度改變時，相對基板所產生的變形為

$$\varepsilon_{th} = (\alpha_d - \alpha_s) \Delta T . \quad (2)$$

此差異，就如同交界面因晶格常數大小不同所產生的起始應變。由於晶格不匹配現象僅發生於交界面處，亦即 z 方向無晶格不匹配現象，且為二維等向不匹配，因此令其 x 方向以及 y 方向晶格不匹配之等效熱膨脹應變為

$$\beta_{11} = \beta_{22} = \varepsilon_0 , \text{ 其餘 } \beta_{ij} = 0 . \quad (3)$$

因此在熱應力理論下，材料的組成律可寫為

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \beta_{kl}) \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 . \quad (4)$$

其中， C_{ijkl} 為四階彈性模數，而 β_{kl} 為二階晶格不匹配等效之熱膨脹應變，如式(3)所定義。本計畫以有限元素法求解方程式(4)，估算出量子點內的應變分佈。

3.2 電子結構

電子在量子點晶體中必須滿足薛丁格方程式(Schrödinger equation)：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (5)$$

方程式(5)中之 $\hbar$ 為普蘭克常數除以 2π ， m^* 為電子有效質量， $V(x, y, z)$ 為量子點結構的位能函數， E 與 $\psi(x, y, z)$ 分別為系統的特徵能量與其對應的電子機率密度函數（或稱波形函數）。

本計畫考慮量子點的位能 $V(\mathbf{r})$ 為

$$V(\mathbf{r}) = V_{\text{band}}(\mathbf{r}) + V_{\text{strain}}(\mathbf{r}) , \quad (6)$$

其中， $V_{\text{band}}(\mathbf{r})$ 、 $V_{\text{strain}}(\mathbf{r})$ 分別為導電帶的能帶差與應變引致的位能函數。而異質結構 InAs/GaAs 的導電帶能帶差為

$$V_{\text{band}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \mathbf{r} \in \text{InAs dot} \\ 0.84 \text{ eV} & \mathbf{r} \in \text{GaAs substrate} \end{cases} . \quad (7)$$

根據 Pikus-Bir Hamiltonian [14-15] 理論，應變引致的位能函數可表示為

$$V_{\text{strain}} = a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) , \quad (8)$$

其中， a_c 為變形位能 (deformation potential)。因此，將上節數值模擬所得之應變場代入方程式(8)，並結合方程式(6)、(7)即可求得量子點結構的位能函數。本計畫再利用有限元素法求解方程式(5)，如此便可估算出應變效應對導電帶特徵能量及電子機率密度函數分佈之影響。

四、結果與討論：

本計畫利用有限元素法套裝軟體—FEMLAB 分析三五族材料 InAs/GaAs 自組式量子點受晶格不匹配影響產生之應變分佈，並將此應變場代入薛丁格方程式，進而探討應變對量子點的特徵能量與電子機率密度函數($|\psi|^2$)之影響。

因為 InAs/GaAs 量子點屬於立方晶格結構，故為異向性材料。因此，本報告分為兩種情況來分析並比較結果，第一種分析方法為異向性材料分析，其材料選取方向與材料主軸重合，GaAs 與 InAs 的彈性模數如表 1 所示。第二種分析方法簡化為等向性材料分析，InAs 量子點之楊氏模數及卜松比分別為 51.3 GPa 及 0.354，而基板 GaAs 的楊氏模數及卜松比分別為 85.5 GPa 及 0.316。至於邊界條件的給定，則是材料交界面位移連續、曳引力平衡，基材底部表面固定，其餘表面則為無曳引力狀態。

首先以線性彈性力學與熱應力理論模擬異質材料晶格不匹配的現象，進而求出量子點內的應變分佈，圖 2、3 分別為，於 $x=0$ 、 $z=25\text{nm}$ 的 x 、 y 方向應變 ε_{xx} 、 ε_{yy} 與 z 方向應變 ε_{zz} ，其材料等向性與異向性分析的比較圖。由圖中分佈趨勢可看出兩種不同分析方法之下，量子點中的應變差異頗大，例如 ε_{zz} 的差值可達 0.01。此外，應變的分佈於量子點和基板的交界處有極明顯的不連續性，且基板中的應變逐漸趨近於零，此現象謂之「應變鬆弛 (strain relaxation)」。

表 2 為模擬所估算出之特徵能量，其中顯示所有的特徵能量皆受到應變的影響而向上提升，尤以第一特徵能量受

應變的影響最大，約提升了 0.15eV。因此，可看出導電帶特徵能量確實在應變效應作用後會有偏移的現象發生。此外，應變效應除了會提高特徵能量的大小之外，亦會提升低特徵能量之簡併狀態 (degeneracy)，如未受應變效應影響時，第二、三特徵能量為簡併狀態；受應變效應影響後，簡併狀態提升至第四、五特徵能量。

圖 4 為第一特徵能量所對應之電子機率密度函數分佈圖(於 $x=0$ 之 $y-z$ 剖面)，若未考慮應變效應的影響時，電子機率密度函數呈球形分佈並集中於量子點內，越接近球心則電子機率密度越高，如圖 4 (a)所示。當考慮異向性材料分析時，其電子機率密度的分佈與未考慮應變效應的結果相仿，但其分佈之範圍較大，如圖 4 (b)所示。另外，考慮等向性材料分析時，可發現其電子機率密度分佈的範圍更大，延伸至基板且不再呈球形分佈，如圖 4 (c)所示。

第二特徵能量所對應之電子機率密度函數分佈 (於 $x=0$ 之 $y-z$ 剖面)則如圖 5 所示，未考慮應變效應影響時，則電子機率密度函數於 y 軸呈雙侷限分佈，並分別集中於量子點角落，越接近角落處則電子機率密度越高，如圖 5 (a)所示。當考慮異向性材料或等向性材料分析時，其電子機率密度函數的分佈與未考慮應變效應的結果差異甚大，電子機率密度函數分佈的範圍擴大並侷限於基板中，如圖 5 (b)、(c)所示。

由上述的分析可知，應變效應會提升低特徵能量之簡併狀態，圖 6 (a)、(b)分別為未受應變效應影響時，簡併狀態

(第二、三特徵能量)所對應之「等電子機率密度函數面」，分別呈雙侷限於 y 軸(第二特徵能量)與 x 軸(第三特徵能量)；圖 6 (c)、(d)則為利用異向性材料分析時，其簡併狀態(第四、五特徵能量)所對應之「等電子機率密度函數面」，與未受應變效應影響之結果比較可知，受應變影響之電子機率密度函數分佈範圍會擴大，涵蓋量子點及基材的部分，且先呈雙侷限於 x 軸上(第四特徵能量)，而後侷限於 y 軸上(第五特徵能量)，此種雙侷限順序恰與未受應變影響之雙侷限現象順序相反；圖 6 (e)、(f)則是利用等向性材料分析時，其簡併狀態(第四、五特徵能量)所對應之「等電子機率密度函數面」，其結果與利用異向性材料分析之結果極為相似，同呈雙侷限於 x 、 y 軸上，並分佈涵蓋量子點及基材中。

五、結論：

本年度計畫發現 InAs/GaAs 自組式量子點在應變效應作用下，對導電帶而言，其特徵能量的大小皆受到應變的影響而增大，尤以第一特徵能量增加最多，約增加 0.15eV。同時，應變效應亦會改變低特徵能量之簡併狀態，如將第二、三特徵能量之簡併狀態，提升至第四、五特徵能量之簡併狀態。當考慮異向性材料及簡化為等向性材料模擬時，所得之特徵能量，二者的誤差甚微，例如最大之誤差於第一特徵能量，約為 2%，其餘特徵能量之誤差皆小於 0.8%；同時若考慮電子機率密度函數的分佈，則可發現二者的差異性不大。因此，對

於 InAs、GaAs 而言，可以做等向性的簡化，以利於模擬的進行。

由本年度計畫的數值分析結果得知，應變效應會提高量子點的特徵能量，亦即能隙擴大，此現象將可提升電子的遷移率，進而提升發光效能。本計畫擬於下年度探討 InAs/GaAs 自組式量子點在應變效應對「導電帶與價電帶」的特徵能量與電子機率密度函數分佈之影響。同時將探討自組式量子點的詳細製程，俾修正本年度的分析模式，使「分析模式」能更真實模擬「量子點製程」。並將藉由數值模擬的特徵能量與電子機率密度函數分佈等結果，進一步地，估算 PL 光譜，以分析應變層對量子點光電特性之影響。

六、文獻參考：

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann & N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, John Wiley & Sons, New York (1999).
- [2] P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots: theoretical and computational physics*, John Wiley & Sons, New York (2000).
- [3] T. Chakraborty, *Quantum Dots: a survey of the properties of artificial atoms*, Elsevier, Amsterdam (1999).
- [4] V. A. Shchukin, D. Bimberg, V. G. Malyshkin & N. N. Ledentsov, "Vertical correlations and anti-correlations in multisheet arrays of two dimensional islands," *Phys. Rev. B* **57**, 12262 (1998).

- [5] D. Andreev, J. R. Downes, D. A. Faux & E. P. O'Reilly, "Strain distributions in quantum dots of arbitrary shape," *J. Appl. Phys.* **86**, 297 (1999).
- [6] G. S. Pearson & D. A. Faux, "Analytical solutions for strain in pyramidal quantum dots," *J. Appl. Phys.* **88**, 730 (2000).
- [7] T. Benabbas, Y. Androussi & A. Lefebvre, "A finite-element study of strain fields in vertically aligned InAs islands in GaAs," *J. Appl. Phys.* **86**, 1945 (1999).
- [8] G. Muralidharan, "Strains in InAs quantum dots embedded in GaAs: A finite element study," *Jpn. J. Appl. Phys.* **39**, L658 (2000).
- [9] H. T. Johnson, L. B. Freund, C. D. Akyüz & A. Zaslavsky, "Finite element analysis of strain effects on electronic and transport properties in quantum dots and wires," *J. Appl. Phys.* **84**, 3714 (1998).
- [10] L.B. Freund & H.T. Johnson, "The influence of strain on confined electronic states in semiconductor quantum structures," *J. Mech. Phys. Solids* **38**, 1045 (2001).
- [11] M. Tadic, F. M. Peeters, K. L. Janssens, M. Korkusinski & P. Hawrylak, "Strain and band edges in single and coupled cylindrical InAs/GaAs and InP/InGaP self-assembled quantum dots," *J. Appl. Phys.* **92**, 5819 (2002).
- [12] C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang, A. J. Williamson & A. Zunger, "Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots," *J. Appl. Phys.* **83**, 2548 (1998).
- [13] M. E. Bachlechner, A. Omeltchenko, A. Nakano, R. K. Kalia, P. Vashishta, I. Ebbsjö, A. Madhukar & P. Messina, "Multimillion-atom molecular dynamics simulation of atomic level stresses in Si(111)/Si₃N₄(0001) nanopixels," *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1969 (1998).
- [14] G. E. Pikus and G. L. Bir, "Effects of deformation on the hole energy spectrum of germanium and silicon," *Sov. Phys. Solid State* **1**, 1502-1517 (1960).
- [15] G. E. Pikus and G. L. Bir, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*, Wiley New York (1974).
- [16] L. B. Freund, "The mechanics of electronic materials," *J. Mech. Phys. Solids* **37**, 185 (2000).
- [17] S. L. Chuang, *Physics of optoelectronic devices*, John Wiley & Sons, New York (1995)

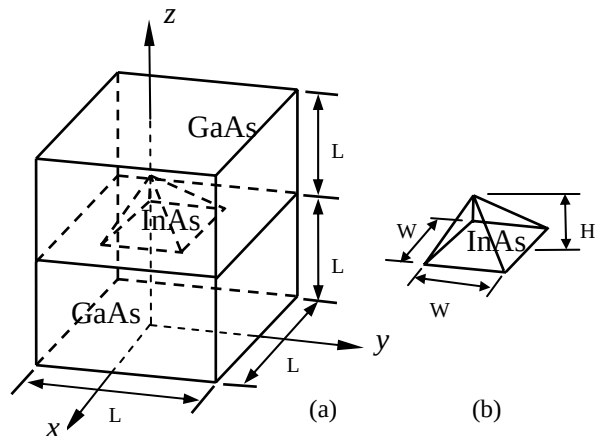


圖 1 (a)量子點元件結構 ($L = 20\text{nm}$)；(b) 金字塔量子點之細部結構 ($W = 12\text{nm}$ 、 $H = 6\text{nm}$)。

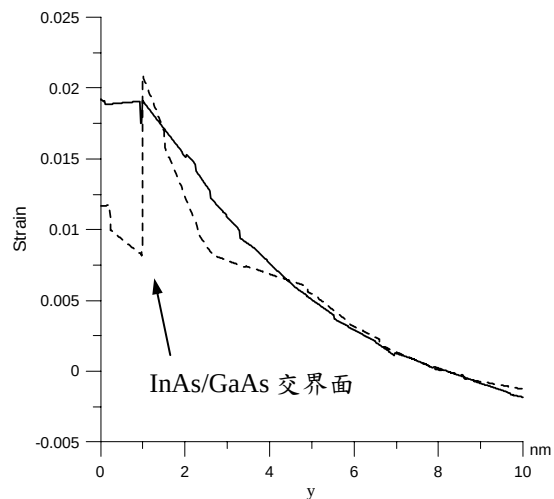


圖 3 ε_{zz} 分佈圖 ($x=0\text{nm}$ 、 $z=25\text{nm}$)，實線為異向性分析，虛線為等向性分析。

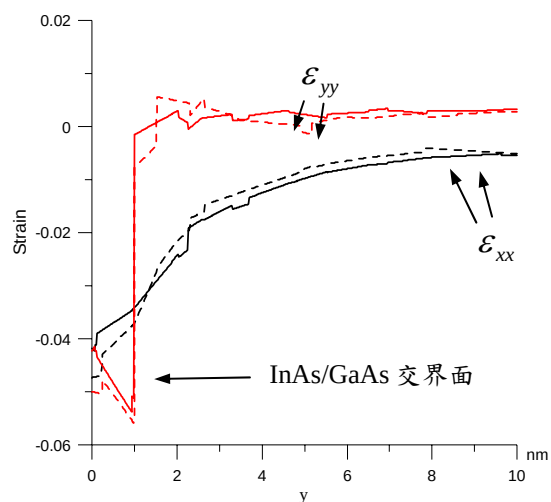


圖 2 ε_{xx} 分佈圖 ($x=0\text{nm}$ 、 $z=25\text{nm}$)，實線為異向性分析，虛線為等向性分析。

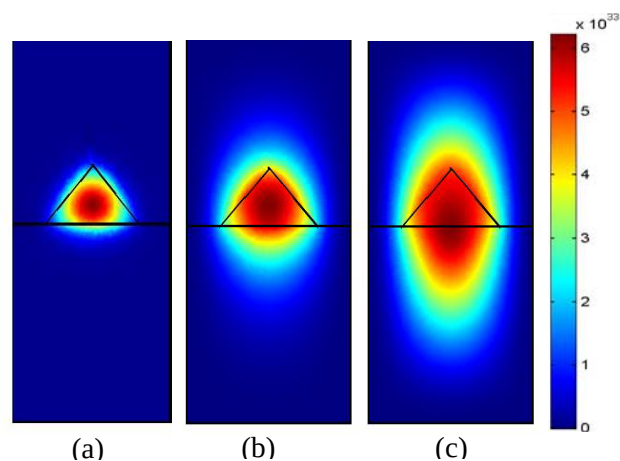


圖 4 第一特徵能量所對應之電子機率密度函數分佈，分別為(a)未考慮應變效應、(b)考慮應變及異向性材料分析、(c)考慮應變及等向性材料分析。

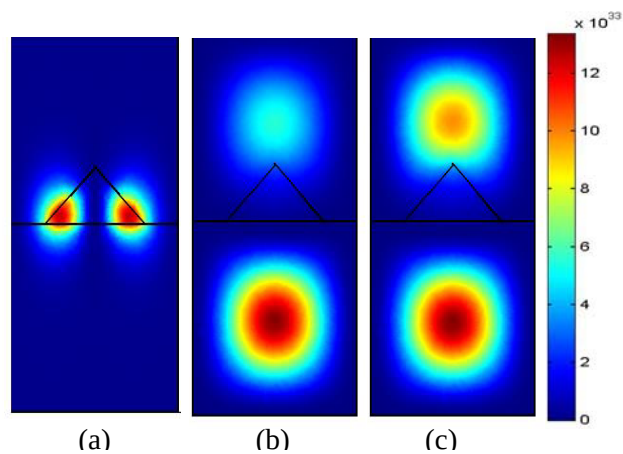


圖 5 第二特徵能量所對應之電子機率密度函數分佈，分別為(a)未考慮應變效應、(b)考慮應變及異向性材料分析、(c)考慮應變及等向性材料分析。

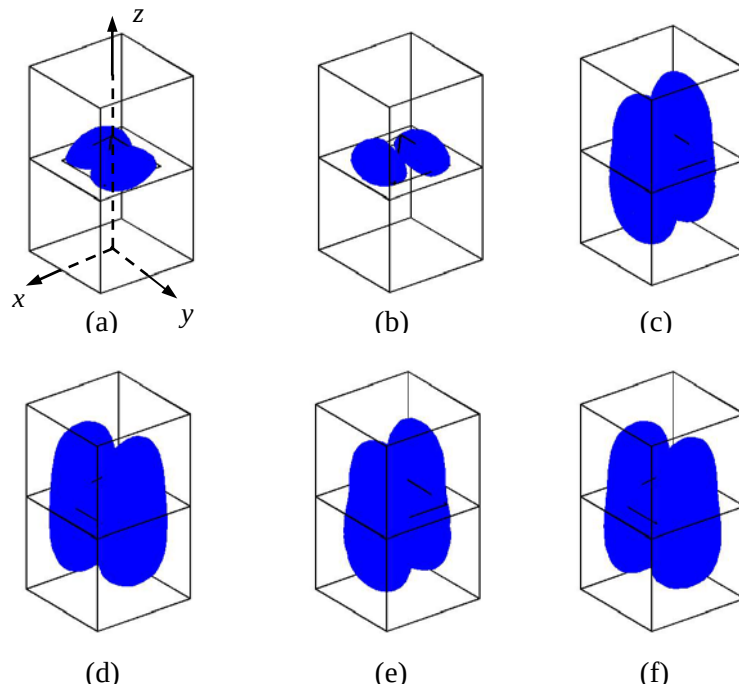


圖 6 (a)、(b) 未受應變效應影響時，第二、三特徵能量所對應之「等電子機率密度函數面」；(c)、(d) 異向性材料分析時，第四、五特徵能量所對應之「等電子機率密度函數面」；(e)、(f) 等向性材料分析時，第四、五特徵能量所對應之「等電子機率密度函數面」。

表 1 材料性質表[17]

材料		InAs	GaAs
電子有效質量 m^*/m_0		0.023	0.067
晶格常數 a(nm)		0.605	0.565
彈性模數	C_{11} (GPa)	83.29	118.79
	C_{12} (GPa)	45.26	53.76
	C_{44} (GPa)	39.6	59.4
變形位能 a_c (eV)		-5.08	-7.17
能帶隙 E_g (eV)		0.354	1.424

表 2 特徵能量數值結果(單位：eV)

特徵能量	無應變效應	應變效應	
		等向性分析	異向性分析
1	0.301	0.458	0.449
2	0.463	0.471	0.471
3	0.463	0.487	0.483
4	0.469	0.506	0.505
5	0.476	0.506	0.505
6	0.508	0.514	0.513
7	0.513	0.514	0.513
8	0.513	0.516	0.514
9	0.520	0.535	0.533
10	0.520	0.535	0.533

附註：本年度計畫之成果已發表於國際學術期刊及國內外學術會議（共計四篇）：

1. T.R. Lin, B. T. Liao, and M.K. Kuo, "Strain effects on pyramidal InAs/GaAs quantum dot," *WSEAS Transactions on Electronics*, **1**(2), pp.284-289 (2004).
2. 游景翔、林資榕、郭茂坤，“柱狀量子點應變效應之研究”，第二十屆中國機械工程學會全國學術研討會，E-541 (2003)。
3. 廖柏亭、游景翔、郭茂坤，“金字塔型量子點應變效應之研究”，第二十七屆全國力學會議學術研討會，榮獲**學生論文競賽第二名** BS-2 (2003)。
4. M. K. Kuo, T. R. Lin and B. T. Liao, "Strain Effects on Optical Properties of Pyramidal InAs/GaAs Quantum Dots," Quantum Dots 2004, Banff, Alberta, Canada, May 10-13, 2004.

Strain effects on pyramidal InAs/GaAs quantum dot

TZY-RONG LIN, BO-TING LIAO, and MAO-KUEN KUO

Institute of Applied Mechanics

National Taiwan University

No. 1 Sec. 4 Roosevelt Road, Taipei, Taiwan 106

TAIWAN

mkkuo@ntu.edu.tw

Abstract: Strain distribution in a pyramidal InAs/GaAs quantum dot is investigated. The strain field induced by mismatch of lattice constants in heterostructures is analyzed based on theories of linear elasticity and of thermal stress. The strain-induced potential is then incorporated in the steady state Schrödinger equation. Both the strain field and the solution of the steady state Schrödinger equation are found numerically with the aid of a finite element package – FEMLAB. Eigenenergy and the probability density function of conduction band of quantum dot are calculated. Results from two different models, namely anisotropic material model and isotropic material simplification, during the stage of strain analysis are also compared. Numerical results show eigenenergy and the degeneracy of low eigenenergy are affected by strains. On the other hand, the differences between anisotropic and isotropic materials are not large. Therefore, it is suitable to treat InAs/GaAs quantum dot as isotropic materials.

Key-Words: Quantum dot; Strain field; Finite element, Schrödinger equation

1 Introduction

Quantum dots (QDs), which have delta-functions distribution of density of states, discrete energy levels, and “atom-like” electronic states due to its three-dimensional quantum confinement, have recently attracted substantial attention [1-2]. The efficiency of QD is strong related to the density of dots in the quantum dot array. Self-assembled QDs (SAQDs) formed by strained epitaxy have shown promising result to have a large array of quantum dots. SAQD formation is commonly observed in large mismatch epitaxy of chemically similar materials. For example, the Stranski-Krastanow (SK) growth of InAs on GaAs first involves the growth of a ~1 to 2 monolayer thick of “wetting layer” followed by coherent island formation [1-3]. The SAQDs may be buried by a further growth of the same materials as the underlying substrate.

The strain fields inside and in the neighborhood of SAQDs strongly affect the electronic properties in vicinity of the dots, and hence the optical-electronic properties [4-5]. For the optical-electronic properties in III-V semiconductors, there are two predominated strain effects, namely changes of the conduction and valence band levels and changes of local electric fields due to piezoelectric effect. The conduction band is only affected by the hydrostatic strain, often referred to as the dilatation or trace of the strain tensor. The valence levels can change both with

hydrostatic and shear strain. In the general, for zinc blende structures, deviatoric strains give rise to piezoelectrically induced electric fields [6].

To understand the strain effects on electronic properties of QD, determination of the elastic strain field in the dots and surrounding matrix is necessary. There have been three different main methods: (i) theory of inclusions based on the analytical solution of elasticity [7-9], (ii) finite element methods (FEM) [10-13], and (iii) atomistic modeling [14-16]. The theory of inclusions provides integral expressions for elastic fields which can be integrated in closed form only for simplest inclusion shapes, e.g. cylindrical or spherical quantum dots. On the other hand, the interactions between the quantum dot and the surrounding material are not fully encountered. FEM is a very versatile and effective numerical method, which can easily accommodate various theories and model quantum dot to different levels. Atomistic models might be more reasonable, at least theoretically, to model system in nano-scale provided that accurate interatomic potentials are given. Moreover, it requires a large computing capacity to model quantum dots and the surrounding matrix.

In this article, models based on theories of linear elasticity and of thermal stress are developed to evaluate the strain distribution in the pyramidal InAs/GaAs SAQD. The mismatch of lattice constants in heterostructures induces the strain field which is then calculated with the aid of a finite element

package – FEMLAB. The Schrödinger equation, including the strain-induced potential, is then solved, again by FEMLAB. The solutions consist of eigenenergy and the probability density function of conduction band. Finally strain effects on electronic properties in pyramidal InAs/GaAs quantum dot are discussed. During the strain analysis, the materials of quantum dot are modeled by anisotropic as well as its isotropic simplification, respectively. Numerical results of two models are compared.

2 Continuum And Quantum Models

Consider a buried pyramid InAs/GaAs quantum dot structure as shown schematically in Fig. 1. The InAs island (quantum dot) is self-assembled under certain conditions during heteroepitaxy on GaAs substrates. The island is subsequently covered by additional substrate materials.

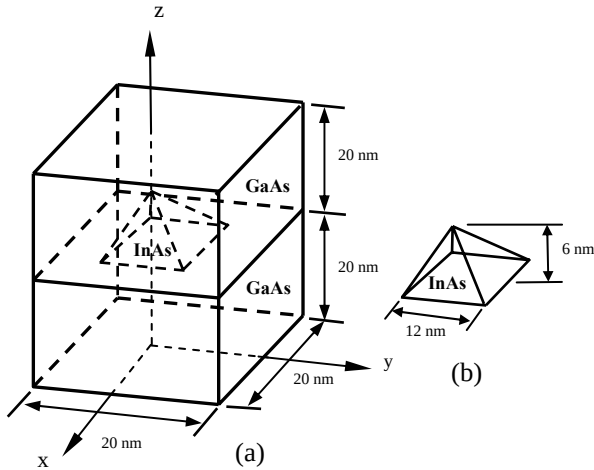


Fig.1. Schematics of (a) the buried InAs/GaAs quantum dot structure and (b) the island (InAs quantum dot).

In this article, the analysis of a quantum dot is divided into two parts. First, a linear elastic finite element calculation is performed to determine the strain field in the quantum dot structure. Second, a time-independent Schrödinger equation, with a strain-induced potential calculated using deformation potential theory, is solved numerically to obtain the spectrum of energies and probability density functions of available states.

2.1 Continuum model

Epitaxially grown semiconductor heterostructures, such as SAQDs, often consist of several materials with lattice parameters that are mismatched. The

mismatch of lattice parameters gives rise to strain field in a quantum dot structure, which will then affect the electric properties of the quantum dots. Lattice mismatch parameter is usually defined as [17]

$$\varepsilon_0 = \frac{a_s - a_d}{a_d}, \quad (1)$$

where a_s and a_d are the lattice parameter of the substrate and quantum dot materials, respectively. The lattice mismatch parameter is a system parameter of the quantum dot. In this article, the parameter ε_0 is simulated as an initial strain in the island/substrate interface. This initial strain will induce further strain in the system.

In order to analyze the effect caused by initial strain ε_0 in the island/substrate interface, theory of elasticity together with thermal stress theory [18] are utilized. The initial strain in the quantum dot is then treated as thermal strain under the thermal stress theory. Since mismatch lattice parameters is only along the island/substrate interface (i.e., 1-2 plane or x-y plane as depicted in Fig. 1), the thermal strains in the island/substrate interface are specified as

$$\beta_{11} = \beta_{22} = \varepsilon_0; \quad \text{other } \beta_{ij} = 0. \quad (2)$$

By linear elasticity and thermal stress theory, the relationship between the stresses and the strains in a quantum dot structure is expressed as

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \beta_{kl}), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3, \quad (3)$$

where τ_{ij} and ε_{kl} are the stress and strain tensors, respectively, C_{ijkl} is the elastic stiffness tensors, and β_{kl} is the thermal strain tensors.

The linear elasticity boundary value problem, arising from the mismatch in lattice parameters between the island and substrate materials, is solved using the finite element package – FEMLAB. We consider that all outer boundaries are traction free surfaces, and the substrate bottom is fixed. The displacement compatibility across the interface of island/substrate is satisfied automatically in the finite element formulation with displacement field as unknowns.

2.2 Quantum model

The strain components will induce an extra potential field which may affect the probability density functions and energies of the electrons in the quantum dot structure. Pikus-Bir Hamiltonian [4-5]

together with the computed strain field from above-mentioned continuum model are used to analyze strain-induced effects in quantum dots.

The behavior of individual electron in an undeformed crystal is governed by the steady state Schrödinger equation:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \right] \psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}), \quad (4)$$

where $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ is the momentum operator, $V_0(\mathbf{r})$ the potential field, m_0 the electron rest mass, $\hbar$ the Planck's constant, and E_n and $\psi_n(\mathbf{r})$ the n th eigenenergy and the corresponding probability density function, respectively. The $\mathbf{r}$ and ∇ are the position vector and the Laplacian operator, respectively, in the undeformed crystal coordinate. Once there being strains, the steady state Schrödinger equation (4) is modified according to Pikus-Bir Hamiltonian [4] as

$$[H_0 + H_\varepsilon] \psi_n[(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{r}] = E_n \psi_n[(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{r}], \quad (5)$$

where

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}), \quad (6)$$

$$H_\varepsilon = \sum_{\alpha, \beta} \left(-\frac{p_\alpha p_\beta}{m_0} + \frac{\partial V}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \bigg|_{\varepsilon_{\alpha\beta} \rightarrow 0} \right) \varepsilon_{\alpha\beta}. \quad (7)$$

Since the conduction band is only affected by the hydrostatic strain [6], the diagonal term of Eq. (7) leads to

$$[H_\varepsilon]_{nn} = a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (8)$$

where a_c is deformation potential constant shown in Table 1.

Equation (5) is then solved numerically again by means of the finite element method in order to obtain eigenenergy and the probability density function of conduction band in a quantum dot structure. The boundary conditions on the quantum dot/substrate interface are

$$\begin{cases} \psi_d = \psi_s \\ (d\psi_d/di)/m_{d_i} = (d\psi_s/di)/m_{s_i}, \quad i = x, y, z \end{cases} \quad (9)$$

where subscripts d and s correspond to the quantum dot and substrate regions, respectively, index i corresponds to one of the three possible coordinates x, y, z and electron effective mass is taken along one of three coordinate axes.

Table 1 Material property [6]

Material		InAs	GaAs
electron effective mass (m^*/m_0)		0.023	0.067
lattice parameter a (nm)		0.605	0.565
Yang's modulus (Gpa)		51.3	85.5
Poisson's ratio		0.354	0.316
C_{ij}	C_{11}	8.329	11.879
	C_{12}	4.526	5.376
	C_{44}	3.96	5.94
deformation potential a_c (eV)		-5.08	-7.17
energy gap E_g (eV)		0.354	1.424

Note: 1. C_{ij} is elastic constants (Unit : 10^{10} N/m²).

3 Numerical Results

The materials are modeled by anisotropic and its isotropic simplification, respectively, during the strain analysis to investigate the strain field in the pyramidal InAs/GaAs quantum dot structure. The geometry and material properties of the quantum dot structure are shown in Fig. 1 and Table 1, respectively.

Figures 2–3 show the strain components along ($x = 0, z = 25$) nm. Fig. 2 are ε_{xx} and ε_{yy} , while ε_{zz} for Fig. 3. It is easily to see that these components have significant variation with position throughout the structure. Moreover, strains are more nonuniform at InAs/GaAs interface due to the pervasive effect of relaxation.

The eigenenergies of the quantum dot structure are shown in Table 2. The strain effects shift all energy states, as one would expect, especially the first energy state increased about 0.2 eV. Furthermore, degeneracy of energy states is also shifted by strain effect.

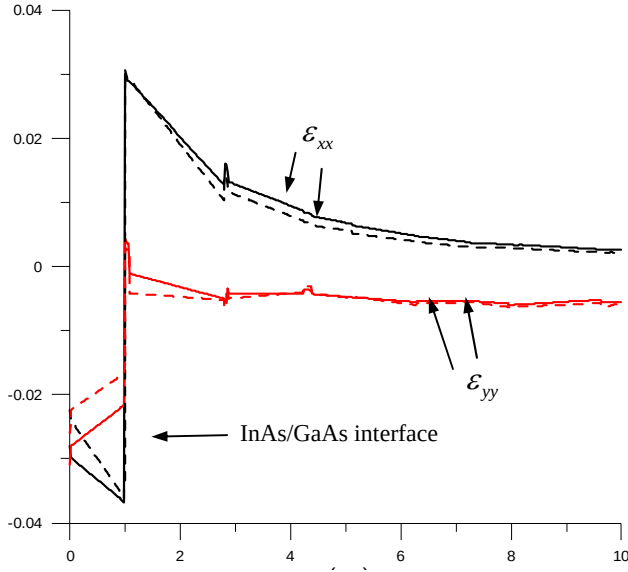


Fig. 2. Plot of Strain components ϵ_{xx} and ϵ_{yy} at $(x=0, z=25)$ nm ; a solid line is for anisotropic analysis, a dashed line is for isotropic analysis.

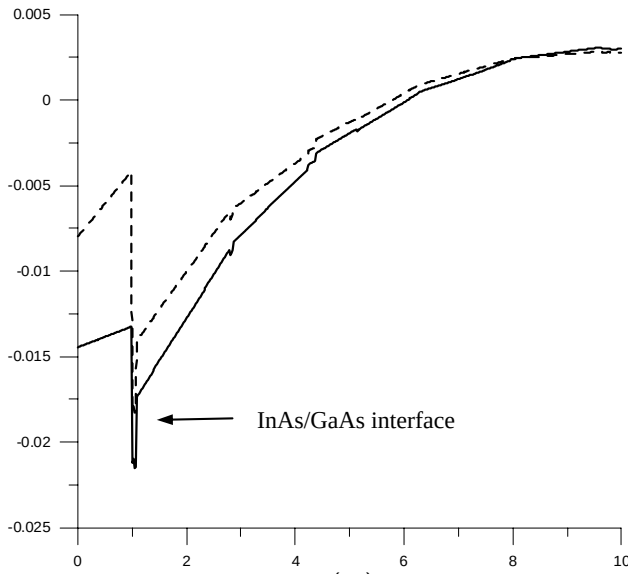


Fig. 3. Plot of Strain ϵ_{zz} at $(x=0, z=25)$ nm ; a solid line is for anisotropic analysis, a dashed line is for isotropic analysis.

Probability density profiles, given by square of probability density functions, namely $|\psi_1|^2$ and $|\psi_2|^2$, for the two lowest energy states in a quantum dot structure, are shown Fig. 4–5, respectively. Subfigure 4(a) is the result for an unstrained quantum dot structure. The states are almost entirely confined to the island region. Subfigures 4(b)–4(c) are results of the anisotropic analysis and the isotropic analysis, respectively, for a strained quantum dot structure.

The distribution of confined states is enlarged due to strain effect. In the subfigure 5(a), the states are confined to two regions in a unstrained island. In strained cases, subfigures 5(b)–5(c) show the results of isotropic analysis are similar to the results of anisotropic analysis

Three-dimensional view of the isosurface of the squared probability density functions in QD structure is shown in Fig. 6. Subfigures 6(a)–6(b) are the results for the 2nd energy state and 3rd energy state, respectively, without strain effect. The states are confined to two regions in y axis (for the 2nd energy state) and two regions in x axis (for the 3rd energy state), respectively. Subfigures 6(c)–6(d) are the results of the anisotropic analysis, for the 2th energy

Table 2 Numerical results for eigenenergy

Eigenenergy	Unstrained	Strained	
		Isotropic	Anisotropic
1	0.429	0.649	0.677
2	0.7	0.849	0.858
3	0.7	0.849	0.858
4	0.865	0.879	0.877
5	0.865	0.885	0.883
6	0.885	0.915	0.916
7	0.891	0.924	0.923
8	0.924	0.924	0.923
9	0.924	0.930	0.929
10	0.928	0.930	0.929

Unit : eV

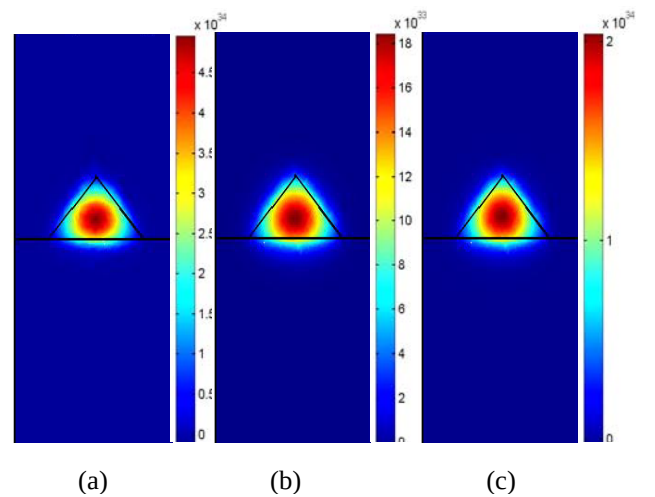
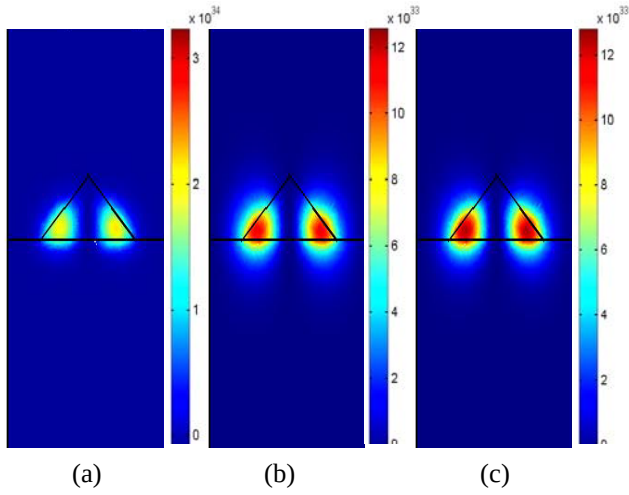


Fig. 4. Probability density fields for the 1st energy state, by (a) unstrained analysis; (b) anisotropic analysis for strained QD; (c) isotropic analysis for strained QD. The cross section is the $y-z$ plane through the dot center.



state and 3th energy state, respectively. Due to strain effect, the distribution of confined states is enlarged to the island region and substrate region. Further, the states are confined to two regions in x -axis (for the 2th energy state) and two regions in y -axis (for the 3th energy state), respectively. Subfigures 6(e)-6(f) are the results of the isotropic analysis, for the 2th energy state and 3th energy state, respectively. However, the results of isotropic analysis are similar to the results of anisotropic analysis.

Fig. 5. Probability density fields for the 2nd energy state, by (a) unstrained analysis; (b) anisotropic analysis for strained QD; (c) isotropic analysis for strained QD. The cross section is the $y-z$ plane through the dot center.

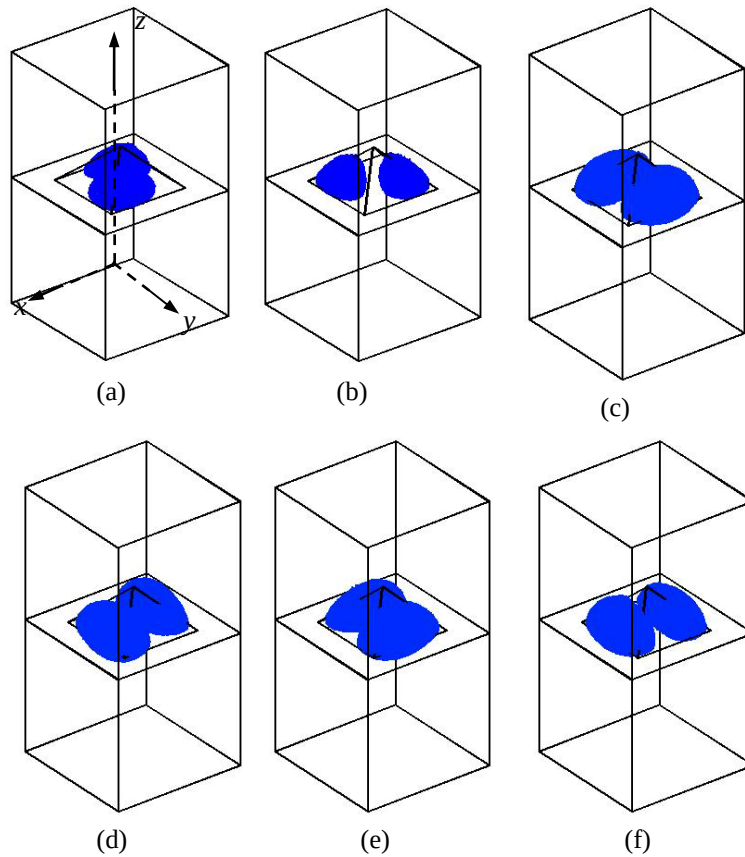


Fig. 6. The isosurface of the squared probability density functions in QD structure, (a) for the 2nd eigenenergy state without strain; (b) for the 3rd eigenenergy state without strain; (c) for the 2th eigenenergy state by anisotropic analysis with strain; (d) for the 3th eigenenergy state by anisotropic analysis with strain; (e) for the 2th eigenenergy state by isotropic analysis with strain; (f) for the 3th eigenenergy state by isotropic analysis with strain.

4 Conclusion

In this article, we have analyzed both the continuum mechanics and conduction band quantum mechanics of a strained pyramidal InAs/GaAs quantum dot, using the finite element package – FEMLAB. The strain fields in and around quantum dot induced by the lattice mismatch of the quantum dot structure have been calculated. Moreover, the steady state Schrödinger equation has been analyzed, and the eigenenergy and the probability density function of conduction band in a quantum dot structure have been found.

Numerical results have shown that strain effects will shift the eigenenergy and the degeneracy of low eigenenergy. The first eigenenergy increased about 0.2 eV. Moreover, during the strain analysis, the quantum materials have been modeled by both anisotropic and its isotropic simplification, respectively. According to the numerical results of eigenenergy and the corresponding probability density function, the differences between two material models are small. Therefore, it is suitable to simplify InAs and GaAs as equivalent isotropic materials

Acknowledgment:

This work is carried out in the course of research sponsored by the National Science Council of Taiwan under Grant NSC92-2212-E-002-072.

References:

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann & N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, John Wiley & Sons, New York, 1999.
- [2] P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots: theoretical and computational physics*, John Wiley & Sons, New York, 2000.
- [3] T. Chakraborty, *Quantum Dots: a survey of the properties of artificial atoms*, Elsevier, Amsterdam, 1999.
- [4] G. E. Pikus & G. L. Bir, Effects of deformation on the hole energy spectrum of germanium and silicon, *Sov. Phys. Solid State*, Vol.1, 1960, pp. 1502-1517.
- [5] G. E. Pikus & G. L. Bir, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*, Wiley New York, 1974.
- [6] Shun Lien Chuang, *Physics of optoelectronic devices*, John Wiley & Sons, New York, 1995.
- [7] V. A. Shchukin, D. Bimberg, V. G. Malyshkin & N. N. Ledentsov, Vertical correlations and anticorrelations in multisheet arrays of two dimensional islands, *Phys. Rev. B*, Vol.57, 1998, pp. 12262.
- [8] D. Andreev, J. R. Downes, D. A. Faux & E. P. O'Reilly, Strain distributions in quantum dots of arbitrary shape, *J. Appl. Phys.*, Vol.86, 1999, pp. 297.
- [9] G. S. Pearson & D. A. Faux, Analytical solutions for strain in pyramidal quantum dots, *J. Appl. Phys.*, Vol.88, 2000, pp.730.
- [10] T. Benabbas, Y. Androussi & A. Lefebvre, A finite element study of strain fields in vertically aligned InAs islands in GaAs, *J. Appl. Phys.*, Vol.86, 1999, pp. 1945.
- [11] G. Muralidharan, Strains in InAs quantum dots embedded in GaAs: A finite element study, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol.39, 2000, L 658.
- [12] H. T. Johnson, L. B. Freund, C. D. Akyüz & A. Zaslavsky, Finite element analysis of strain effects on electronic and transport properties in quantum dots and wires, *J. Appl. Phys.*, Vol.84, 1998, pp. 3714.
- [13] L.B. Freund & H.T. Johnson, The influence of strain on confined electronic states in semiconductor quantum structures, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.38, 2001, pp. 1045.
- [14] M. Tadic, F. M. Peeters, K. L. Janssens, M. Korkusinski & P. Hawrylak, Strain and band edges in single and coupled cylindrical InAs/GaAs and InP/InGaP self-assembled quantum dots, *J. Appl. Phys.*, Vol.92, 2002, pp. 5819.
- [15] C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang, A. J. Williamson & A. Zunger, Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots, *J. Appl. Phys.*, Vol.83, 1998, pp.2548.
- [16] M. E. Bachlechner, A. Omeltchenko, A. Nakano, R. K. Kalia, P. Vashishta, I. Ebbsjö, A. Madhukar & P. Messina, Multimillion-atom molecular dynamics simulation of atomic level stresses in Si(111)/Si₃N₄(0001) nanopixels, *Appl. Phys. Lett.*, Vol.72, 1998, pp. 1969.
- [17] L. B. Freund, The mechanics of electronic materials, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.37, 2000, pp. 185.
- [18] J. Aboudi, *Mechanics of Composite Materials*, Elsevier, Amsterdam, 1999.

柱狀量子點應變效應之研究

游景翔 林資榕 郭茂坤

國立臺灣大學 應用力學研究所

摘要

由於半導體元件的電子特性決定於元件的能帶結構，而量子點中磊晶層之應變將造成半導體導電帶特徵能量的改變，進而影響電子躍遷難易度。本文以有限元素法分析砷化銦/砷化鎵(InAs/GaAs)柱狀量子點中，因晶格不匹配所引致的應變場，以及其對導電帶的特徵能量與電子機率密度函數分佈之影響。本研究以線彈性力學理論，配合有限元素法套裝軟體 FEMLAB，估算量子點內的應變分佈，再將應變效應加入薛丁格方程式，同樣以有限元素法予以分析。

文中考慮材料之異向性並與簡化為等向性材料的結果比較，發現兩者在應變上的差異可達百分之十五；而特徵能量分佈上的差異更可高達百分之五十，因此材料之異向性實不容忽略。模擬結果同時顯示，柱狀量子點在第一及第二特徵能量時，其機率密度函數有明顯的環狀對稱現象，而於第七特徵能量以後，其環狀對稱性降低。

關鍵詞：量子點、應變場、有限元素法、薛丁格方程式

一、前言

於 1960 年代 Pikus 和 Bir 便開始探討半導體結構受應變影響時，所造成之能帶結構的改變，而發展出半導體能帶結構受應變的理論[1-2]。這些應變效應包含因應變影響所產生能隙及有效質量變化，以及因對稱性的降低而造成價電帶分離，使得導電帶與價電帶產生改變等，更進而使其能帶因應變產生變化[2]。

為了增強半導體雷射的表現，往往於材料成長時，加入對基板而言為晶格不匹配的材料予以改變能帶結構。不超過臨界厚度之成長材料，會形成一種共平面的橫向應變，並且改變能帶的結構。而其總應變可分為軸向應變與非軸向應變部分，也因此發展出軸向應變與非軸向應變對能帶結構改變之相關研究[3]。本文將採用 Pikus-Bir Hamiltonian 的方法以分析量子點內之應變對能帶的影響。

量子點結構應變的估算分析，最常見的方法有三種，分別為：(1)考慮內含物的解析解(如：Eshelby 法)[4-6]、(2)有限元素法[7-10]與(3)原子模型法[11-13]。其中，內含物解析解，僅適用於簡單的量子點形狀(例如：球體)；而有限元素法雖無法提供通解，卻是有

效率且適合各種量子點形狀的彈性變形場計算方法；原子模型法雖有不用建構在連體力學基礎上的優點，卻須有精確的原子間位能(interatomic potentials)，且因量子點系統所需的原子數目甚多(約數萬個以上)，須耗費大量的計算量。前二種方法是由巨觀的連續體理論所發展；第三種方法則是從微觀的原子理論出發。以工程效率而言，有限元素法本身發展較為成熟且計算方便，唯須加強的是在介觀尺度下之模擬修正。

本文首先介紹以熱應力理論模擬異質材料晶格不匹配所引致應變現象的理論基礎；接著利用 Pikus-Bir Hamiltonian，並配合有限元素法分析量子點的特徵能量與電子機率密度函數。

二、理論模型

2.1 熱應力理論模擬異質材料晶格不匹配

半導體異質結構係由兩種以上的半導體材料，互相砌合成長。異質結構的形成可視為兩種單晶界面原子的結合，以本文為例，界面兩邊分別為基板材料 GaAs 與量子點材料 InAs 之元素化合物，如圖 1 所示。兩者之晶格常數(lattice constant)雖不相同，但此兩種元素化合物皆由四面體共價鍵所形成，因此能緊密砌合。也由於晶格常數的差異，兩材料緊密砌合時，界面處會因晶格的不匹配而產生應變，一般定義晶格不匹配常數為[14]

$$\varepsilon_0 = \frac{a_s - a_d}{a_d} \quad (1)$$

其中 a_d 、 a_s 分別為量子點材料與基板材料的晶格常數。

異質材料界面處晶格常數不同所引致的彈性變形，可視為界面處存在「起始應變」(晶格不匹配)，而進一步引致彈性變形。本文將以假想的「溫度」改變配合「等效熱膨脹係數」，而將造成量子點與基板伸長率的不相等，用以模擬晶格不匹配之起始應變，進而以熱應力理論分析此起始應變所引致之彈性應變。

在熱應力理論中，若量子點與基板之等效熱膨脹係數分別為 α_d 、 α_s ，則當溫度改變時，相對基板所產生的變形為

$$\varepsilon_{th} = (\alpha_d - \alpha_s) \Delta T \quad (2)$$

此差異，就如同界面因晶格常數大小不同所產生的起始應變 ε_0 。由於晶格不匹配現象僅發生於界面處，亦即 z 方向無晶格不匹配現象，且為二維等向不匹配，因此令其 x 方向以及 y 方向晶格不匹配之等效熱膨脹應變為

$$\beta_{11} = \beta_{22} = \varepsilon_0, \text{ 其餘 } \beta_{ij} = 0 \quad (3)$$

因此在熱應力理論下，材料的組成律可寫為

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \beta_{kl}) \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (4)$$

其中， C_{ijkl} 為四階彈性模數，而 β_{kl} 為二階晶格不匹配等效之熱膨脹應變如式(3)所定義。

2.2 Pikus-Bir Hamiltonian

電子波函數 $\psi_n(\mathbf{r})$ 須滿足薛丁格方程式(Schrödinger equation)[15]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_n(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \psi_n(\mathbf{r}) \quad (5)$$

其中， $\hbar$ 為普朗克常數 h 除以 2π ， $V(\mathbf{r})$ 為位

能函數， $\mathbf{r}$ 為晶格中的位置向量， m_0 為電子的靜止質量， $\psi_n(\mathbf{r})$ 為特徵能量 E_n 所對應之電子波函數， n 則代表第 n 個能帶。處於週期性晶格的電子，其位能函數必含有週期性，亦即

$$V(\mathbf{r}+\mathbf{R})=V(\mathbf{r}) \quad (6)$$

其中， $\mathbf{R}=n_1\mathbf{a}_1+n_2\mathbf{a}_2+n_3\mathbf{a}_3$ ， $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 為晶格向量， $n_1, n_2, n_3 \in N$ 。

當晶體受到應變或應力影響時，則薛丁格方程式必須加以修正，將式(5)中之位置向量 $\mathbf{r}$ 以變形後之位置向量 $\mathbf{r}'$ 取代為

$$\left[\frac{\mathbf{p}'^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}') \right] \psi_n(\mathbf{r}') = E_n \psi_n(\mathbf{r}') \quad (7)$$

其中，

$$\mathbf{p}'^2 = -\hbar^2 (\nabla')^2 \quad (8)$$

$(\nabla')^2$ 表示在變形座標的 Laplace 運算子。

G. E. Pikus 和 G. L. Bir 於 1960 年代發展出分析半導體能帶結構受應變的理論，此即為著名的「Pikus-Bir Hamiltonian」。該理論在晶體受到均勻變形(uniform deformation)的假設下，若晶體均勻變形前後的位置向量 $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}$ 與 $\mathbf{r}' = x'\hat{\mathbf{x}} + y'\hat{\mathbf{y}} + z'\hat{\mathbf{z}}$ ，在忽略剛體平移與旋轉效應下，兩者的轉換關係為

$$\begin{aligned} x' &= x + \varepsilon_{xx}x + \varepsilon_{xy}y + \varepsilon_{xz}z \\ y' &= y + \varepsilon_{yx}x + \varepsilon_{yy}y + \varepsilon_{yz}z \\ z' &= z + \varepsilon_{zx}x + \varepsilon_{zy}y + \varepsilon_{zz}z \end{aligned} \quad (9)$$

式(9)可寫為

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{r} = (\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{r} \quad (10)$$

其中，

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (11)$$

方程式(10)在忽略高次項影響，可求得變形前位置向量 $\mathbf{r}$ 以變形後位置向量 $\mathbf{r}'$ 表示之關係式

$$\mathbf{r} = (\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon})^{-1} \mathbf{r}' \doteq (\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{r}' \quad (12)$$

因為，

$$\frac{\partial}{\partial r'_i} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial r_j} \frac{\partial r_j}{\partial r'_i} = \frac{\partial}{\partial r_i} - \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij} \frac{\partial}{\partial r_j} \quad (13)$$

因此，式(7)中之動量運算子 $\mathbf{p}'$ 可改寫為

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p}(\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}) \quad (14)$$

$$\mathbf{p}'^2 = \mathbf{p}^2 - 2 \sum_{i,j} p_i \varepsilon_{ij} p_j \quad (15)$$

週期位能函數能表示為

$$V(r'_i) = V(r_i + \sum_j \varepsilon_{ij} r_j) = V_0(r_i) + \sum_{i,j} \left. \frac{\partial V}{\partial \varepsilon_{ij}} \right|_{\varepsilon_{ij} \rightarrow 0} \varepsilon_{ij} \quad (16)$$

因此，式(7)可改寫成

$$[H_0 + H_\varepsilon] \psi_n [(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{r}] = E_n \psi_n [(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{r}] \quad (17)$$

其中

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \quad (18)$$

$$H_\varepsilon = \sum_{\alpha, \beta} \hat{D}_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha, \beta} \left(-\frac{p_\alpha p_\beta}{m_0} + \left. \frac{\partial V}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right|_{\varepsilon_{\alpha\beta} \rightarrow 0} \right) \varepsilon_{\alpha\beta}$$

根據文獻上的探討[3]，發現非軸向應變對導電帶的影響並不大，因此式(17)中的 H_ε 可寫為

$$(H_{\varepsilon})_{nm} = a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (19)$$

其中 a_c 為變形位能(deformation potential)，描述軸向應變對導電帶之影響，GaAs 與 InAs 的變形位能如表 1 所列。因此，將數值模擬所得之應變場代入式(19)，再利用有限元素法求解式(17)，如此便可估算出應變效應對導電帶特徵能量及電子機率密度函數分佈之影響。

三、數值算例

本文利用有限元素法之套裝軟體 FEM-LAB 分析三五族 InAs/GaAs 柱狀量子點，因晶格不匹配所引致的應變場，以及對導電帶的特徵能量與電子機率密度函數分佈之影響。

因 InAs/GaAs 柱狀量子點為立方晶格結構，屬於異向性材料。因此，本文分為兩種情況來分析並比較結果，第一種分析方法為材料之異向性分析，其材料選取方向與材料主軸重合，GaAs 與 InAs 的彈性模數如表 1 所示。

第二種分析方法為材料之等向性分析，量子點材料 InAs 之楊氏模數及卜松比分別為 51.3 GPa 及 0.354，而基板材料 GaAs 的楊氏模數及卜松比分別為 85.5 GPa 及 0.316。

圖 2、3 分別為量子點於 $z = 5\text{nm}$ 處的軸向應變 ε_{rr} 與 z 方向應變 ε_{zz} ，其材料等向性與異向性分析的比較圖。由圖中分佈趨勢可看出兩種不同分析方法之下，應變差異頗大。 ε_{zz} 於中心處差值可達 0.14，而 ε_{rr} 則有 0.09 的差值。因此，本文將探討在材料等向性與異向性分析下，其特徵能量的差異性。

量子點應變層在受壓應變作用下，平衡狀態之帶溝(band gap)會縮小，其導電帶能量為[18]

$$E_c^0(\mathbf{r}) = \begin{cases} a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & \mathbf{r} \in \text{dot} \\ \Delta E_c & \mathbf{r} \notin \text{dot} \end{cases} \quad (20)$$

表 2 為材料等向性與異向性模擬所估算之特徵能量，其中誤差量最大在第一特徵能量達百分之五十，其餘皆在百分之二十以下。因此，於低特徵能量狀況時，其材料異向性應予考慮，因其造成之偏移量不容忽略。另外，從量子點特徵能量受應變效應後之差異性，可看出導電帶特徵能量確實在應變效應作用後會有偏移的現象發生，然其簡併狀態並不因其受應變效應而有改變。

圖 4 為第一特徵能量所對應之電子機率密度函數分佈圖，其中實線為未考慮應變效應之機率密度函數，虛線與點線分別為考慮應變效應的材料等向性與異向性分析結果。我們可發現第一特徵能量於量子侷限處機率密度函數明顯變大，而其他區域，機率密度函數趨近於零。

圖 5 ~ 圖 6 分別為材料異向性之第一、七特徵能量所對應的電子機率密度函數剖面圖。圖 5 可發現機率密度函數分佈具有高度環狀對稱性，圖 6 中的環狀對稱消失，成為剖面處雙侷限的效應。

四、結論

InAs/GaAs 柱狀量子點在應變效應作用下，對導電帶而言，其簡併度並未隨之改變。電子機率密度函數於量子侷限處，其第一及第二特徵能量所對應之電子機率密度函數值較高且成環狀對稱，而其他區域，電子機率

密度函數趨近於零。第七特徵能量所對應的機率密度函數環狀對稱性質便消失，成為雙侷限的現象。

InAs/GaAs 柱狀量子點為異向性立方晶格結構，在材料之異向性與簡化為等向性分析，兩者在應變上的差異可達百分之十五；而其第一及第二特徵能量，所對應之電子機率密度函數，相差在百分之五以內。但是在第五特徵能量以後，其機率密度函數相差達百分之五十，因此材料之異向性實不容忽略。本文認為等向性簡化分析對於導電帶之低能階狀態的電子機率密度函數影響不大；但在高能階狀態，機率密度函數便會有明顯的差異出現。

五、誌謝

本研究承蒙行政院國家科學委員會專題研究計畫 NSC92-2212-E-002-072 之支持，得以順利完成，謹誌謝忱。

六、參考文獻

- [1] G. E. Pikus and G. L. Bir, "Effects of deformation on the hole energy spectrum of gennasium and silicon", Sov. Phys. Solid State **1**, 1502-1517 (1960).
- [2] G. E. Pikus and G. L. Bir, "Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors", Wiley New York (1974).
- [3] Shun Lien Chuang, *Physics of opto-eletronic devices*, John Wiley & Sons, New York (1995).
- [4] V. A. Shchukin, D. Bimberg, V. G. Malyskin & N. N. Ledentsov, "Vertical correlations and anticorrelations in multisheet arrays of two dimensional islands," Phys. Rev. B **57**, 12262 (1998).
- [5] D. Andreev, J. R. Downes, D. A. Faux & E. P. O'Reilly, "Strain distributions in quantum dots of arbitrary shape", J. Appl. Phys. **86**, 297 (1999).
- [6] G. S. Pearson & D. A. Faux, "Analytical solutions for strain in pyramidal quantum dots", J. Appl. Phys. **88**, 730 (2000).
- [7] T. Benabbas, Y. Androussi & A. Lefebvre, "A finite-element study of strain fields in vertically aligned InAs islands in GaAs", J. Appl. Phys. **86**, 1945 (1999).
- [8] G. Muralidharan, "Strains in InAs quantum dots embedded in GaAs: A finite element study", Jpn. J. Appl. Phys. **39**, L658 (2000).
- [9] H. T. Johnson, L. B. Freund, C. D. Akyüz & A. Zaslavsky, "Finite element analysis of strain effects on electronic and transport properties in quantum dots and wires", J. Appl. Phys. **84**, 3714 (1998).
- [10] L.B. Freund & H.T. Johnson, "The influence of strain on confined electronic states in semiconductor quantum structures", J. Mech. Phys. Solids **38**, 1045 (2001).
- [11] M. Tadic, F. M. Peeters, K. L. Janssens, M. Korkusinski & P. Hawrylak, "Strain and band edges in single and coupled cylindri-

cal InAs/GaAs and InP/InGaP
selfassembled quantum dots”, J. Appl.
Phys. **92**, 5819 (2002).

- [12] C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang, A. J. Williamson & A. Zunger, “Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots”, J. Appl. Phys. **83**, 2548 (1998).
- [13] M. E. Bachlechner, A. Omeltchenko, A. Nakano, R. K. Kalia, P. Vashishta, I. Ebb-sjö, A. Madhukar & P. Messina, “Multimillion-atom molecular dynamics simulation of atomic level stresses in Si(111)/Si₃N₄(0001) nanopixels”, Appl. Phys. Lett. **72**, 1969 (1998).
- [14] L. B. Freund, “The mechanics of electronic materials”, J. Mech. Phys. Solids **37**, 185 (2000).
- [15] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley (1994).

七、圖表彙整

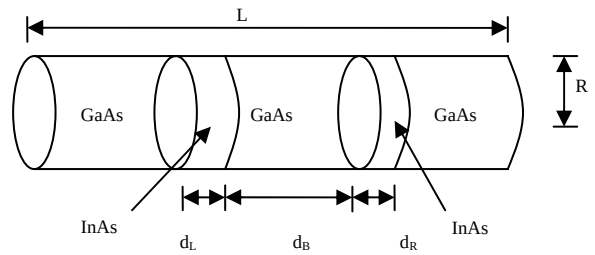


圖 1 量子點元件結構

(算例一：L=20nm, R=5nm, d_B=9nm, d_R=2nm, d_L=4nm；
算例二：L=20nm, R=5nm, d_B=9nm, d_R=2nm, d_L=2nm)

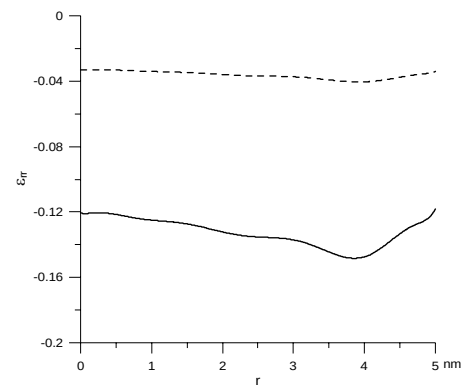


圖 2 ε_{rr} 分佈圖 ($z=5\text{nm}$ 處)，其中實線為材料之等向性分析，虛線為材料之異向性分析。

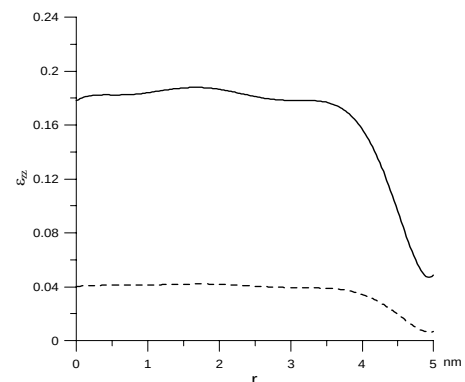


圖 3 ε_{zz} 分佈圖 ($z=5\text{nm}$ 處)，其中實線為材料之等向性分析，虛線為材料之異向性分析。

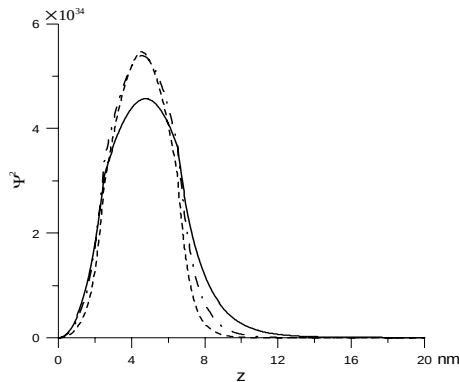


圖 4 第一特徵能量所對應於 z 軸上之機率密度函數分佈(其中實線、虛線、點虛線分別為未考慮應變效應、材料之等向性分析以及材料之異向性分析結果)。

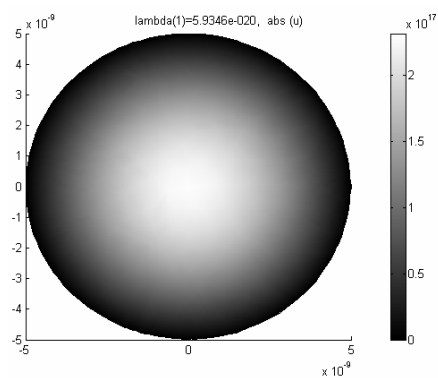


圖 5 異向性分析第一特徵值之機率密度函數分佈 ($z=5\text{nm}$ 處)。

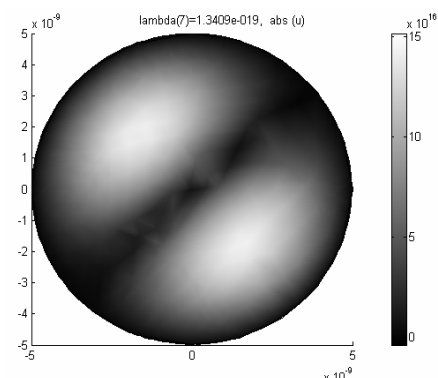


圖 6 異向性分析第七特徵值之機率密度函數分佈 ($z=5\text{nm}$ 處)。

表 1 材料性質表

材料參數		InAs	GaAs
晶格常數 $a(\text{nm})$		0.605	0.565
材料 常數	$C_{11} (10^{10}\text{N/m}^2)$	8.329	12.11
	$C_{12} (10^{10}\text{N/m}^2)$	4.526	5.48
	$C_{44}(10^{10}\text{N/m}^2)$	3.959	6.04

表 2 有限元素法分析結果(單位： 10^{-18}J)

算例一：量子點: $L=20\text{nm}$, $R=5\text{nm}$,

$d_B=9\text{nm}$, $d_R=2\text{nm}$, $d_L=4\text{nm}$

	未含應 變效應	等向性分析 (含應變)	異向性分析 (含應變)
特徵值一	0.0768	0.0283	0.0593
特徵值二	0.0863	0.0715	0.0796
特徵值三	0.1042	0.1008	0.1023
特徵值四	0.1284	0.1009	0.1261
特徵值五	0.1284	0.1010	0.1261
特徵值六	0.1322	0.1255	0.1304
特徵值七	0.1429	0.1255	0.1341
特徵值八	0.1429	0.1267	0.1341
特徵值九	0.1566	0.1395	0.1476
特徵值十	0.1566	0.1396	0.1477

算例一：量子點: $L=20\text{nm}$, $R=5\text{nm}$,

$d_B=9\text{nm}$, $d_R=2\text{nm}$, $d_L=2\text{nm}$

	未含應 變效應	等向性分析 (含應變)	異向性分析 (含應變)
特徵值一	0.01747	0.0735	0.0671
特徵值二	0.02050	0.0744	0.0677
特徵值三	0.03924	0.1039	0.1031
特徵值四	0.06009	0.1248	0.1256
特徵值五	0.06011	0.1248	0.1264
特徵值六	0.07052	0.1323	0.1341
特徵值七	0.07564	0.1323	0.1358
特徵值八	0.07565	0.1365	0.1361
特徵值九	0.09202	0.1469	0.1484
特徵值十	0.09203	0.1469	0.1504

金字塔型量子點之應變效應

廖柏亭 游景翔

中華民國 台灣省 台北市
國立臺灣大學應用力學研究所
研究生

郭茂坤

中華民國 台灣省 台北市
國立臺灣大學應用力學研究所
教授

摘要

本文分析砷化銦/砷化鎵(InAs/GaAs)金字塔型量子點中，因晶格不匹配所引致的應變場，以及對導電帶的特徵能量與電子機率密度函數分佈之影響。文中以線彈性力學理論，配合有限元素法套裝軟體 FEMLAB，估算量子點內的應變分佈，再將應變場效應加入薛丁格方程式，同樣以有限元素法予以分析。文中考慮材料之異向性並與簡化為等向性材料的結果比較，發現二種分析方法之下，特徵能量與低特徵能量之簡併狀態皆受到應變的影響而提升；同時發現特徵能量與電子機率密度函數分佈，異向與等向分析的差異性不大。因此，對於砷化銦、砷化鎵而言，可以做等向性的簡化，以利於模擬的進行。

關鍵字：量子點、應變場、有限元素法、薛丁格方程式

一、前言

光電與通訊元件的研發，使得半導體相關產業快速蓬勃地發展，而元件結構要求微小化的過程，也趨使半導體元件進入了奈米尺寸的紀元，其中以半導體奈米結構—量子點，最受青睞[1]。量子點是一種以厚度僅數奈米的幾種不同材料所做成，而在三維均受侷限之微結構。受到量子點內量子化能階的影響，電子將被侷限於一個很小的尺度內，亦即趨近於「點」的尺度內，因此量子點可視為理想之零維度(zero dimensional)電子系統。同時，由於此種三維均受侷限之微結構，所造成的量子能階類似於原子能階現象，因而量子點有時又稱為人造原子(artificial atom)[2-3]。

於1960年代Pikus和Bir便開始探討半導體結構受應變影響時，所造成之能帶結構的改變，而發展出半導體能帶結構受應變的理論[4-5]。這些應變效應包含因應變影響所產生能隙及有效質量變化，以及因對稱性的降低而造成價電帶分離，使得導電帶與價電帶

產生改變等，更進而使其能帶結構因應變產生變化[5]。

為了增強半導體雷射的表現，往往於材料成長時，加入對基板而言為晶格不匹配的材料予以改變能帶結構。不超過臨界厚度之成長材料，會形成一種共平面的橫向應變，並且改變能帶的結構。而其總應變可分為軸向應變與非軸向應變部分，也因此發展出軸向應變與非軸向應變對能帶結構改變之相關研究[6]。本文將採用Pikus-Bir Hamiltonian的方法以分析量子點內之應變對能帶的影響。

量子點結構的應變估算分析，最常見的三種方法，分別為：(1)考慮為內含物的解析解(如：Eshelby法)[7-9]、(2)有限元素法[10-13]與(3)原子模型法[14-16]。其中，內含物解析解，僅適用於簡單的量子點形狀(例如：球體)；而有限元素法雖無法提供通解，卻是有效率且適合各種形狀量子點的彈性變形場計算方法；原子模型法雖有不用建構在連體力學基礎上的優點，卻需有精確的原子間位能(interatomic potentials)，且因量子點系統所需的原子數目甚多(約

數萬個以上), 須耗費大量的計算量。前二種方法是由巨觀的連續體理論所發展; 第三種方法則是從微觀的原子理論出發。以工程效率而言, 有限元素法本身發展較為成熟且計算方便, 唯須加強的是在介觀尺度下之模擬修正。

本文首先介紹以熱應力理論模擬異質材料晶格不匹配所引致應變現象的理論基礎, 接著利用 Pikus-Bir Hamiltonian, 並配合有限元素法分析量子點的特徵能量與電子機率密度函數。

二、理論模型

2.1 熱應力理論模擬異質材料晶格不匹配現象

半導體異質結構係由兩種以上的半導體材料, 互相砌合成長。異質結構的形成可視為兩種單晶界面原子的結合, 以本文為例, 界面兩邊分別為基板材料 GaAs 與量子點材料 InAs 之元素化合物, 如圖 1 所示。

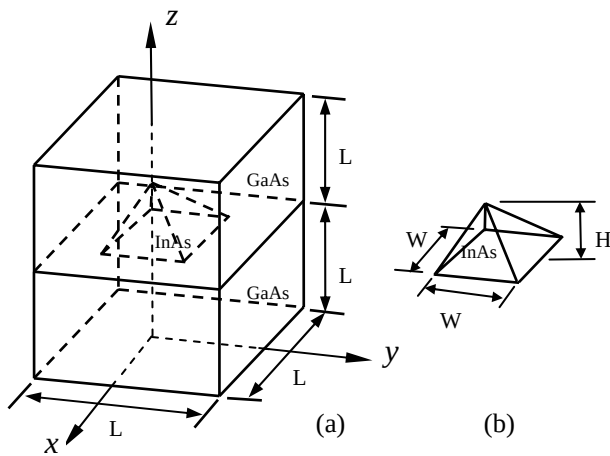


圖 1 (a)量子點元件結構(其中 $L=20\text{nm}$);
(b)金字塔量子點之細部結構(其中 $W=12\text{nm}$ 、 $H=6\text{nm}$)

兩者之晶格常數(lattice constant)雖不相同, 但此兩種元素化合物皆由四面體共價鍵所形成, 因此能緊密砌合。也由於晶格常數的差異, 兩材料緊密砌合時, 界面處會因晶格的不匹配而產生應變, 一般定義晶格不匹配常數為[17]

$$\varepsilon_0 = \frac{a_s - a_d}{a_d} \quad (1)$$

其中 a_d 、 a_s 分別為量子點材料與基板材料的晶格常數。

異質材料交界面處晶格常數不同所引致的彈性變形, 可視為交界面處存在「起始應變」(晶格不匹配), 而進一步引致彈性變形。本文將以假想的溫度改變配合「等效熱膨脹係數」, 而造成量子點與基板伸長率的不相等, 用以模擬晶格不匹配之起始應變, 進而以熱應力理論分析此起始應變所引致之彈性應變。

在熱應力理論中, 若量子點與基板之等效熱膨脹係數分別為 α_d 、 α_s , 則當溫度改變時, 相對基板所產生的變形為

$$\varepsilon_{th} = (\alpha_d - \alpha_s) \Delta T \quad (2)$$

此差異, 就如同交界面因晶格常數大小不同所產生的起始應變 ε_0 。由於晶格不匹配現象僅發生於交界面處, 亦即 z 方向無晶格不匹配現象, 且為二維等向不匹配, 因此令其 x 方向以及 y 方向晶格不匹配之等效熱膨脹應變為

$$\beta_{11} = \beta_{22} = \varepsilon_0, \text{ 其餘 } \beta_{ij} = 0 \quad (3)$$

因此在熱應力理論下, 材料的組成律可寫為

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \beta_{kl}) \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (4)$$

其中, C_{ijkl} 為四階彈性模數, 而 β_{kl} 為二階晶格不匹配等效之熱膨脹應變, 如式(3)所定義。

2.2 Pikus-Bir Hamiltonian

電子波函數 $\psi_n(\mathbf{r})$ 須滿足薛丁格方程式 (Schrödinger equation)[18]

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] \psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}) \quad (5)$$

其中, 動量運算子 $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, $\hbar$ 為普朗克常數 h 除以 2π , $V(\mathbf{r})$ 為位能函數, $\mathbf{r}$ 為晶格中的位置向量, m_0 為電子的靜止質量(Electron rest mass), $\psi_n(\mathbf{r})$ 為特徵能量 E_n 所對應之電子波函數, n 則代表第 n 個能帶。

處於週期性晶格的電子, 其位能函數必含有週

期性，亦即

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}) \quad (6)$$

其中 $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ ， $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 為晶格向量，而 $n_1, n_2, n_3 \in N$ 。

當晶體受到應變或應力影響時，則薛丁格方程式必須加以修正，將式(5)中之位置向量 $\mathbf{r}$ 以變形後之位置向量 $\mathbf{r}'$ 取代為

$$\left[\frac{\mathbf{p}'^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}') \right] \psi_n(\mathbf{r}') = E_n \psi_n(\mathbf{r}') \quad (7)$$

其中， $\mathbf{p}'^2 = -\hbar^2 (\nabla')^2$ ， $(\nabla')^2$ 表示在變形後座標的 Laplace 運算子。

G. E. Pikus 和 G. L. Bir 於 1960 年代發展出分析半導體能帶結構受應變的理論，此即為著名的「Pikus-Bir Hamiltonian」。該理論在晶體受到均勻變形(uniform deformation)的假設下，若晶體均勻變形前後的位置向量分別為 $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}$ 與 $\mathbf{r}' = x'\hat{\mathbf{x}} + y'\hat{\mathbf{y}} + z'\hat{\mathbf{z}}$ ，在忽略剛體平移與旋轉效應下，兩者的轉換關係為

$$\begin{aligned} x' &= x + \varepsilon_{xx}x + \varepsilon_{xy}y + \varepsilon_{xz}z \\ y' &= y + \varepsilon_{yx}x + \varepsilon_{yy}y + \varepsilon_{yz}z \\ z' &= z + \varepsilon_{zx}x + \varepsilon_{zy}y + \varepsilon_{zz}z \end{aligned} \quad (8)$$

式(8)可寫為

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{r} = (\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{r} \quad (9)$$

其中，

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (10)$$

方程式(9)在忽略高次項影響，可求得變形前位置向量 $\mathbf{r}$ 以變形後位置向量 $\mathbf{r}'$ 表示之關係式

$$\mathbf{r} = (\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon})^{-1} \mathbf{r}' \doteq (\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{r}' \quad (11)$$

因為，

$$\frac{\partial}{\partial r_i'} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial r_j} \frac{\partial r_j}{\partial r_i'} = \frac{\partial}{\partial r_i} - \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij} \frac{\partial}{\partial r_j} \quad (12)$$

因此，式(7)中之動量運算子 $\mathbf{p}'$ 可改寫為

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p}(\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon})$$

$$\mathbf{p}'^2 = \mathbf{p}^2 - 2 \sum_{i,j} p_i \varepsilon_{ij} p_j \quad (13)$$

週期位能函數能表示為

$$V(\mathbf{r}_i') = V(\mathbf{r}_i + \sum_j \varepsilon_{ij} \mathbf{r}_j) = V_0(\mathbf{r}_i) + \sum_{i,j} \left. \frac{\partial V}{\partial \varepsilon_{ij}} \right|_{\varepsilon_{ij} \rightarrow 0} \varepsilon_{ij} \quad (14)$$

因此，式(7)可改寫成

$$[H_0 + H_\varepsilon] \psi_n[(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{r}] = E_n \psi_n[(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{r}] \quad (15)$$

其中

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r})$$

$$H_\varepsilon = \sum_{\alpha,\beta} \hat{D}_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha,\beta} \left(-\frac{p_\alpha p_\beta}{m_0} + \left. \frac{\partial V}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right|_{\varepsilon_{\alpha\beta} \rightarrow 0} \right) \varepsilon_{\alpha\beta}$$

根據文獻上的探討[6]，發現非軸向應變對導電帶的影響並不大，因此式(15)中的 H_ε 受到軸向應變的影響可寫為

$$(H_\varepsilon)_{nn} = a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (16)$$

其中 a_c 為變形勢能(deformation potential)，描述軸向應變對導電帶之影響，GaAs 與 InAs 的變形勢能如表 1 所列。因此，將模擬所得之應變場代入式(16)，再利用有限元素法求解式(15)，如此便可估算出應變效應對導電帶特徵能量及電子機率密度函數分佈之影響。

三、數值算例

本文利用有限元素法之套裝軟體 FEMLAB 分析三五族材料 InAs/GaAs 金字塔型量子點受晶格不匹配影響產生之應變分佈，並將此應變場代入薛丁格方程式，進而探討應變對量子點的特徵能量與電子機率密度函數($|\psi|^2$)之影響。

因為 InAs/GaAs 金字塔型量子點屬於立方晶格結構，故為異向性材料。因此，本文分為兩種情況來分析並比較結果，第一種分析方法為異向性材料分

析，其材料選取方向與材料主軸重合，GaAs 與 InAs 的彈性模數如表 1 所示。

第二種分析方法簡化為等向性材料分析，金字塔 InAs 之楊氏模數及卜松比分別為 51.3 GPa 及 0.354，而基板 GaAs 的楊氏模數及卜松比分別為 85.5 GPa 及 0.316。至於邊界條件的給定，則是材料交界面位移連續、曳引力平衡，基材底部表面固定，其餘表面則為無曳引力狀態。

本文首先以熱應力理論模擬異質材料晶格不匹配的現象，進而求出量子點內的應變分佈，圖 2、3 分別為，於 $x=0$ 、 $z=25\text{nm}$ 處的 x 、 y 方向應變 ε_{xx} 、 ε_{yy} 與 z 方向應變 ε_{zz} ，其材料等向性與異向性分析的比較圖。由圖中分佈趨勢可看出兩種不同分析方法之下，金字塔中的應變差異頗大，例如 ε_{zz} 的差值可達 0.01。此外，應變的分佈於金字塔和基板的交界處有極明顯的不連續性，且基板中的應變逐漸趨近於零，此現象謂之「應變鬆弛(strain relaxation)」。

由於 InAs 與 GaAs 具有不同的能帶隙(band gap, E_g)，因此兩異質材料的接合會產生一位能差，根據實驗分析結果得知，此位能差約為

$$V_0 = 0.4 \Delta E_g \quad (17)$$

接著，我們考慮受應變影響所引致的位能函數，如同前一小節所述，該位能差可用變形勢能加以描述。因此對於整個量子點元件而言，其位能分佈如下

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & \mathbf{r} \in \text{dot} \\ V_0 & \mathbf{r} \notin \text{dot} \end{cases} \quad (18)$$

因此，分別再將異向性材料與等向性材料所模擬得到的應變場代入式(18)，便可求得應變所引致的位能函數。所以，當求出量子點的位能函數後，則薛丁格方程式(15)，便可藉由有限元素加以分析。表 2 為模擬所估算出之特徵能量，其中顯示所有的特徵能量皆受到應變的影響而向上提升，尤以第一特徵能量受應變的影響最大，約提升了 0.15eV。因此，可看出導電帶特徵能量確實在應變效應作用後會有偏移的現象發生。此外，應變效應除了會提高特徵能量的大小之

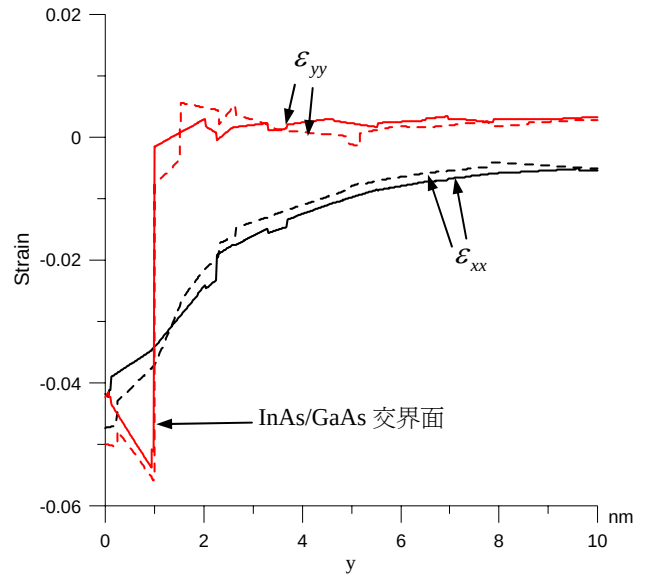


圖 2 ε_{xx} 、 ε_{yy} 分佈圖($x=0$ 、 $z=25\text{nm}$ 處)，實線為異向性分析，虛線為等向性分析

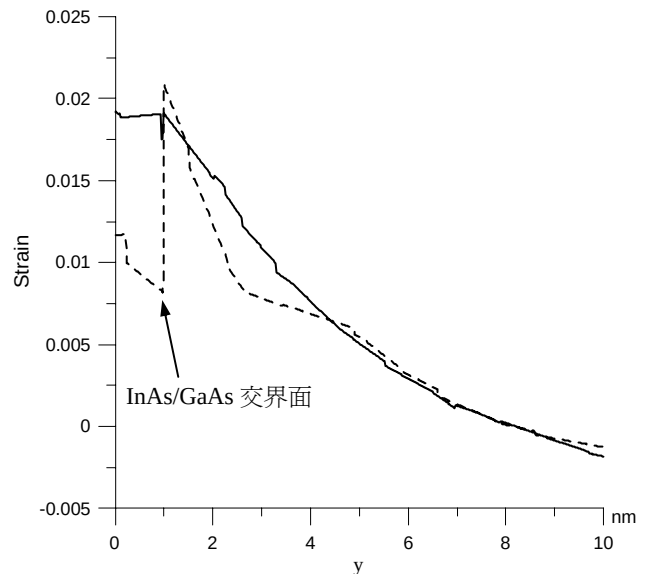


圖 3 ε_{zz} 分佈圖($x=0$ 、 $z=25\text{nm}$ 處)，其中實線為異向性分析，虛線為等向性分析

外，亦會提升低特徵能量之簡併狀態(degeneracy)，如未受應變效應影響時，第二、三特徵能量為簡併狀態；受應變效應影響後，簡併狀態提升至第四、五特徵能量。

圖 4 為第一特徵能量所對應之電子機率密度函數分佈圖(於 $x=0$ 之 $y-z$ 剖面)，若未考慮應變效應的影響時，電子機率密度函數呈球形分佈並集中於金

字塔內，越接近球心則電子機率密度越高，如圖 4 (a) 所示。當考慮異向性材料分析時，其電子機率密度的分佈與未考慮應變效應的結果相仿，但其分佈之範圍較大，如圖 4 (b) 所示。另外，考慮等向性材料分析時，可發現其電子機率密度分佈的範圍更大，延伸至基板且不再呈球型分佈，如圖 4 (c) 所示。

第二特徵能量所對應之電子機率密度函數分佈(於 $x=0$ 之 $y-z$ 剖面)則如圖 5 所示，未考慮應變效應影響時，則電子機率密度函數於 y 軸呈雙侷限分佈，並分別集中於金字塔角落，越接近角落處則電子機率密度越高，如圖 5 (a) 所示。當考慮異向性材料或等向性材料分析時，其電子機率密度函數的分佈與未考慮應變效應的結果差異甚大，電子機率密度函數分佈的範圍擴大並侷限於基板中，如圖 5 (b)、(c) 所示。

由上述的分析可知，應變效應會提升低特徵能量之簡併狀態，圖 6 (a)、(b) 分別為未受應變效應影響時，簡併狀態(第二、三特徵能量)所對應之「等電子機率密度函數面」，分別呈雙侷限於 y 軸(第二特徵能量)與 x 軸(第三特徵能量)；圖 6 (c)、(d) 則為利用異向性材料分析時，其簡併狀態(第四、五特徵能量)所對應之「等電子機率密度函數面」，與未受應變效應影響之結果比較可知，受應變影響之電子機率密度函數分佈範圍會擴大，涵蓋金字塔及基材的部分，且先呈雙侷限於 x 軸上(第四特徵能量)，而後侷限於 y 軸上(第五特徵能量)，此種雙侷限順序恰與未受應變影響之雙侷限現象順序相反；圖 6 (e)、(f) 則是利用等向性材料分析時，其簡併狀態(第四、五特徵能量)所對應之「等電子機率密度函數面」，其結果與利用異向性材料分析之結果極為相似，同呈雙侷限於 x 、 y 軸上，並分佈涵蓋金字塔及基材中。

四、結論

InAs/GaAs 金字塔型量子點在應變效應作用下，對導電帶而言，其特徵能量的大小皆受到應變的影響而增大，尤以第一特徵能量增加最多，約增加 0.15eV 。同時，應變效應亦會改變低特徵能量之簡併

狀態，如將第二、三特徵能量之簡併狀態，提升至第四、五特徵能量之簡併狀態。當考慮異向性材料及簡化為等向性材料模擬時，所得之特徵能量，二者的誤差甚微，例如最大之誤差於第一特徵能量，約為 2%，其餘特徵能量之誤差皆小於 0.8%；同時若考慮電子機率密度函數的分佈，則可發現二者的差異性不大。因此，對於 InAs、GaAs 而言，可以做等向性的簡化，以利於模擬的進行。

由分析結果得知，應變效應會提高量子點的特徵能量，亦即能隙擴大，此現象將可提升電子的遷移率，進而提升發光效能。因此，量子點擁有極佳的發光特性，相信在未來的光電產業中，將扮演舉足輕重的角色。

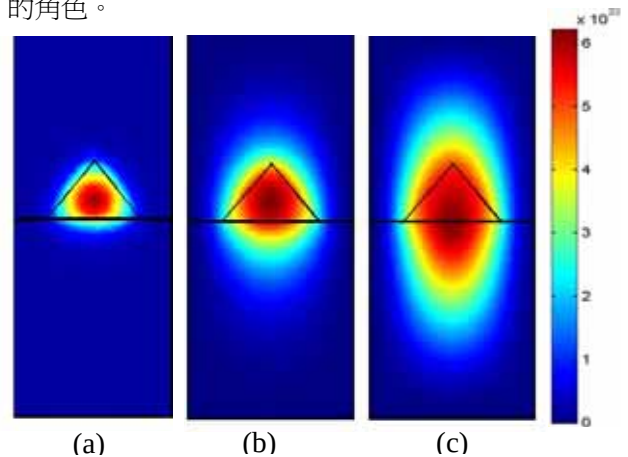


圖 4 第一特徵能量所對應之電子機率密度函數分佈，分別為(a)未考慮應變效應、(b)考慮應變及異向性材料分析、(c)考慮應變及等向性材料分析

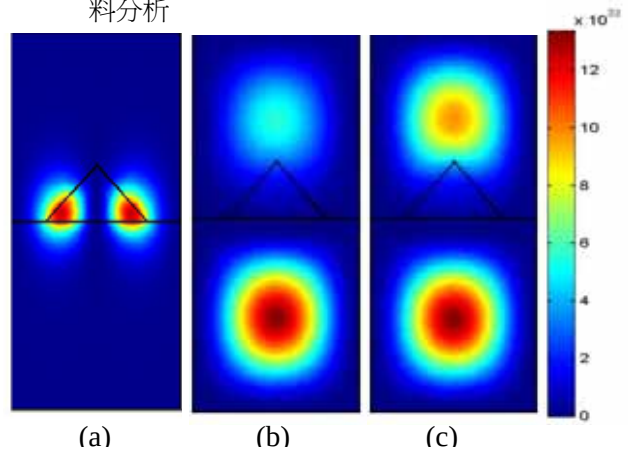


圖 5 第二特徵能量所對應之電子機率密度函數分佈，分別為(a)未考慮應變效應、(b)考慮應變及異向性材料分析、(c)考慮應變及等向性材料分析

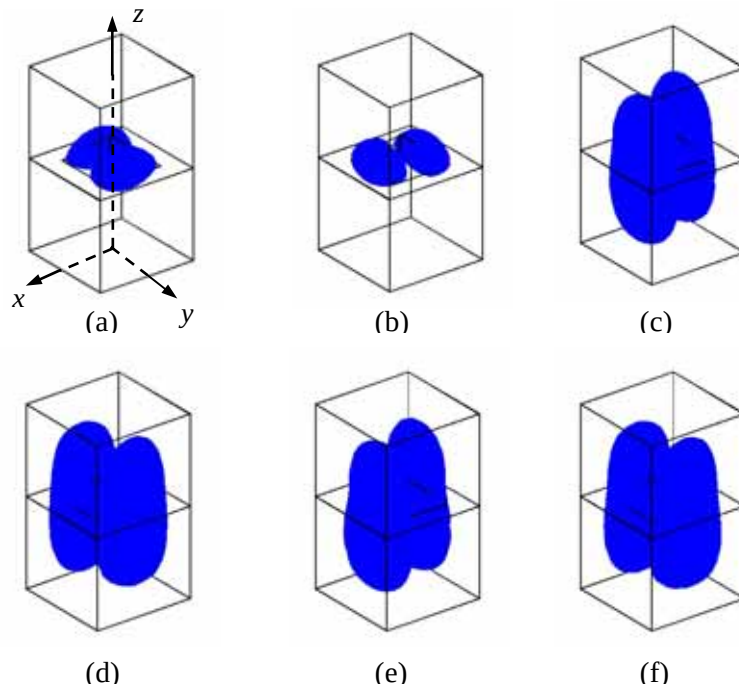


圖 6 (a)、(b) 未受應變效應影響時，第二、三特徵能量所對應之「等電子機率密度函數面」
(c)、(d) 異向性材料分析時，第四、五特徵能量所對應之「等電子機率密度函數面」
(e)、(f) 等向性材料分析時，第四、五特徵能量所對應之「等電子機率密度函數面」

表 1 材料性質表[6]

材料		InAs	GaAs
電子有效質量 m^*/m_0		0.023	0.067
晶格常數 a(nm)		0.605	0.565
彈性模數	C_{11} (10^{10} N/m ²)	8.329	11.879
	C_{12} (10^{10} N/m ²)	4.526	5.376
	C_{44} (10^{10} N/m ²)	3.96	5.94
變形勢能 a_c (eV)		-5.08	-7.17
能帶隙 E_g (eV)		0.354	1.424

五、誌謝

本研究承蒙行政院國科會機械固力學門專題研究計畫 NSC92-2212-E-002-072(彈性應變對自組式量子點光電特性之影響(1/3)，92.08.01－93.07.01)之支持，得以順利完成，謹誌謝忱。

六、參考文獻

表 2 有限元素法分析結果(單位：eV)

	未含應變效應	等向性分析 (含應變)	異向性分析 (含應變)
特徵值一	0.301	0.458	0.449
特徵值二	0.463	0.471	0.471
特徵值三	0.463	0.487	0.483
特徵值四	0.469	0.506	0.505
特徵值五	0.476	0.506	0.505
特徵值六	0.508	0.514	0.513
特徵值七	0.513	0.514	0.513
特徵值八	0.513	0.516	0.514
特徵值九	0.520	0.535	0.533
特徵值十	0.520	0.535	0.533

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann & N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, John Wiley & Sons, New York (1999).
- [2] P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots: theoretical and computational physics*, John Wiley & Sons, New York (2000).
- [3] T. Chakraborty, *Quantum Dots: a survey of the properties of artificial atoms*, Elsevier, Amsterdam (1999).
- [4] G. E. Pikus and G. L. Bir, "Effects of deformation

- on the hole energy spectrum of gersanium and silicon”, *Sov. Phys. Solid State* **1**, 1502-1517 (1960).
- [5] G. E. Pikus and G. L. Bir, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*, Wiley New York (1974).
- [6] Shun Lien Chuang, *Physics of optoelectronic devices*, John Wiley & Sons, New York (1995).
- [7] V. A. Shchukin, D. Bimberg, V. G. Malyshkin & N. N. Ledentsov, “Vertical correlations and anti-correlations in multisheet arrays of two dimensional islands,” *Phys. Rev. B* **57**, 12262 (1998).
- [8] D. Andreev, J. R. Downes, D. A. Faux & E. P. O’Reilly, “Strain distributions in quantum dots of arbitrary shape”, *J. Appl. Phys.* **86**, 297 (1999).
- [9] G. S. Pearson & D. A. Faux, “Analytical solutions for strain in pyramidal quantum dots”, *J. Appl. Phys.* **88**, 730 (2000).
- [10] T. Benabbas, Y. Androussi & A. Lefebvre, “A finite-element study of strain fields in vertically aligned InAs islands in GaAs”, *J. Appl. Phys.* **86**, 1945 (1999).
- [11] G. Muralidharan, “Strains in InAs quantum dots embedded in GaAs: A finite element study”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **39**, L658 (2000).
- [12] H. T. Johnson, L. B. Freund, C. D. Akyüz & A. Zaslavsky, “Finite element analysis of strain effects on electronic and transport properties in quantum dots and wires”, *J. Appl. Phys.* **84**, 3714 (1998).
- [13] L.B. Freund & H.T. Johnson, “The influence of strain on confined electronic states in semiconductor quantum structures”, *J. Mech. Phys. Solids* **38**, 1045 (2001).
- [14] M. Tadic, F. M. Peeters, K. L. Janssens, M. Korkusinski & P. Hawrylak, “Strain and band edges in single and coupled cylindrical InAs/GaAs and InP/InGaP self-assembled quantum dots”, *J. Appl. Phys.* **92**, 5819 (2002).
- [15] C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang, A. J. Williamson & A. Zunger, “Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots”, *J. Appl. Phys.* **83**, 2548 (1998).
- [16] M. E. Bachlechner, A. Omeltchenko, A. Nakano, R. K. Kalia, P. Vashishta, I. Ebbsjö, A. Madhukar & P. Messina, “Multimillion-atom molecular dynamics simulation of atomic level stresses in Si(111)/Si₃N₄(0001) nanopixels”, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1969 (1998).
- [17] L. B. Freund, “The mechanics of electronic materials”, *J. Mech. Phys. Solids* **37**, 185 (2000).
- [18] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley(1994).

行政院國家科學委員會補助國內專家學人出席國際學術會議報告

93 年 5 月 24 日

報告人姓名	郭茂坤	服務機構及職稱	國立臺灣大學應力所教授
會議時間地點	民國 93 年 5 月 10 日至 5 月 13 日 加拿大 Alberta, Banff	本會核定補助文號	NSC92-2212-E-002-072
會議名稱	(中文) 2004 量子點會議 (英文) Quantum Dots 2004 Conference		
發表論文題目	(中文) 應變對於金字塔型 InAs/GaAs 量子點光學性質之影響 (英文) Strain Effects on Optical Properties of Pyramidal InAs/GaAs Quantum Dots		

一、參加會議經過

Quantum Dots 2004 會議為全世界量子點研究的專門會議，每兩年召開一次，今年已經是第三屆；前兩屆則分別是 2000 年在德國慕尼黑(Munich)以及 2002 年在日本東京(Tokyo)舉辦，今年則由加拿大國科會(National Research Council, Canada)主辦。今年的會議地點選在加拿大 Alberta 州內的班夫(Banff)國家公園內，風景之優美自不在話下，雖然每天都在聽研討會的論文報告，但是只要一離開會議場所，放眼望去就是壯麗的山景，令人心曠神怡；更何況會議的幾天內，不時飄著細雪，益發覺得難得。今年參加此次會議的的我方學者還有中山大學物理系鄭德俊教授、以及工研院材料所陳學仕研究員，兩位同行。

二、與會心得

量子點是一個新的領域，更是一個跨領域的研究，包含物理、電機、化學、材料、力學等，因此雖然會議主題集中於量子點的研究，卻匯集了各領域的研究人員。也因此論文報告時，聽來十分辛苦，畢竟隔行已經如隔山了，隔領域那就更是格萬重山了。幾天的會議下來，雖然常有不知所云之嘆，然也收穫頗豐；畢竟將不同領域的學者集合在一起，的確難得。此次會議不只認識了一些同領域的研究人員，更見識了不同領域所著重的方向差異。

此次與會的研究人員，除了美加兩國外，更有不少來自歐洲，也有來自日本及韓國的研究人員，值得注意。而華人研究人員，如同近幾年來的情況，大都是來自對岸的人員，有留在加拿大的、也有留在英國、法國的；我國的除了我們三位外，僅有一位目前還在加州大學 Santa Barbara 攻讀博士的研究人員，此現象值得深思及警惕。

Strain Effects on Optical Properties of Pyramidal InAs/GaAs Quantum Dots

M. K. Kuo*, T. R. Lin and B. T. Liao

Institute of Applied Mechanics, National Taiwan University, Taipei, Taiwan 106, Rep. of China

Tel.: +886-2-3366-5630, fax: +886-2-3366-5631, e-mail: mkkuo@ntu.edu.tw

Abstract

Strain distribution and optical properties in a self-assembled pyramidal InAs/GaAs quantum dot grown by epitaxy are investigated. A model, based on the theory of linear elasticity, is developed to analyze three-dimensional induced strain field. In the model, the capping material in the heterostructure is omitted during the strain analysis to take into account the sequence of the fabrication process. The mismatch of lattice constants is the driving source of the induced strain and is treated as initial strain in the analysis. Once the strain analysis being completed, the capping material is added back to the heterostructure for electronic band calculation. The strain-induced potential is incorporated into the three-dimensional steady state Schrödinger equation with the aid of Pikus-Bir Hamiltonian with modified eight-band Luttinger-Kohn formalism for the electronic band structure calculation. The strain field, the energy levels and wave functions are found numerically by using of a finite element package FEMLAB. The energy levels as well as the wave functions of both conduction and valence bands of quantum dot are calculated. Finally, the transition energy of ground state is also computed. Numerical results reveal that not only the strain field but also all other optical properties from current model show significant difference from the counterparts from the conventional model. © 2001 Elsevier Science. All rights reserved

PACS: 73.61.-r; 73.21.La; 73.40.Gk

Keywords: quantum dot; InAs/GaAs; lattice constants mismatch; induced strain; Pikus-Bir Hamiltonian.

1. Introduction

Quantum dots (QDs), owing to its own three-dimensional quantum confinement, are found to have delta-function distributions of density of states, discrete energy levels, and “atom-like” electronic states, etc., and hence have attracted substantial attention recently [1]. Self-assembled QDs (SAQDs) formed by strained epitaxy have shown the promising result in having a large array of quantum dots. On the other hand, SAQD formation is commonly observed in large mismatch epitaxy of chemically similar materials [1, 2].

Strain fields inside quantum-dot hetrostructures strongly affect the electronic properties and hence the optoelectronic properties in the vicinity of dots [3]. To understand the strain effects on optical properties of quantum dots, determination of the induced strain field in the dots and the surrounding matrix is necessary. Finite element analysis has been used wisely to investigate the strain field in the quantum dot [4-6].

A single square-based pyramidal self-assembled InAs quantum dot buried in GaAs matrix is considered in the article as depicted in Fig. 1. The InAs is grown a thin wetting layer on (0 0 1) GaAs substrate during heteroepitaxy, followed by coherent island formation. Finally, the quantum dot island is subsequently covered by additional deposition of substrate materials.

2. Strain field

Epitaxially grown SAQD heterostructures often consist of several materials with different lattice constants. It gives rise to strain fields in a quantum-dot nanostructure, and affects the optical properties of the quantum dots [6]. In-plane lattice mismatch parameter is usually defined as

$$(\varepsilon_0)_{xx} = (\varepsilon_0)_{yy} = \frac{a_s - a_d}{a_d} \quad (1)$$

where a_s and a_d are the lattice constants of the substrate and the dot materials, respectively, i.e. GaAs and InAs, which will be taken as 0.565 nm and 0.605 nm, respectively, in the numerical computation of this article.

Notice that the mismatch of lattice constants will induce further elastic deformation in the whole nanostructure system, namely, in both the substrate and the quantum dot island. Thus the lattice mismatch parameter defined in eq. (1) is not the only strain in the quantum dot island. It will instead be treated as in-plane initial strain in the latter finite element analysis.

The out-of-plane initial strain, on the other hand, has never yet been as conclusive as its in-plane counterparts. It is a common believe that the in-plane initial strain in the epitaxy process will certainly accomplish with out-of-plane strain. In the article, the out-of-plane initial strain is taken as if it were strained elastically and in plane-stress state, which leads to

$$(\varepsilon_0)_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}(\varepsilon_0)_{xx} \quad (2)$$

Here both GaAs and InAs are treated as cubic materials with 3 independent elastic moduli each, namely, C_{11} , C_{12} , and C_{44} .

In the article, the parameters ε_0 's are regarded as the initial normal strains in the x , y , and z - directions in the latter finite element calculation. These initial strains in the wetting layer and the quantum dot island will induce further the strain field in a SAQD system.

.

According to the theory of linear elasticity, the relationship among stresses σ_{ij} , total strains ε_{kl} , and initial strains can be expressed as:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \left[\varepsilon_{kl} - (\varepsilon_0)_{kl} \right] \quad i, j, k, l = x, y, z \quad (3)$$

where C_{ijkl} is the elastic moduli, and ε_0 is the normal initial strain described in equations (1) and (2).

The wetting layer grows on the substrate during the quantum-dot fabrication process, and then further embedded in the capping material after quantum-dot island formation, as shown in Fig. 1. Since the capping material is deposited after the quantum-dot island has been formed. It should have never experienced the

deformation of quantum-dot in the self-assembled process. Hence the capping material is not included in the strain analysis.

In the stage of strain analysis, the quantum-dot heterostructure system is considered to consist of only quantum dot, wetting layer and substrate but not capping material. The mismatch of lattice constants of the heterostructure is the driving source for the induced strain. Once the strain analysis has been completed, the capping layer is then added into the system as if it is deposited after quantum-dot formation.

The adding of capping material is only for the purpose of solving the Schrödinger equation to obtain the electronic structure of the nanostructure system. This proposed model partially takes the sequence of fabrication process into account as compared to the conventional model where the capping material is considered as a body with other materials.

Figures 2 and 3 show the normal strain ε_{xx} and ε_{zz} , respectively, along the z-axis in QD nanostructures. It is not surprised that these strain components are discontinuous at the interface of the wetting layer and the substrate (i.e. InAs/GaAs interface).

Notice that, as seen from the figures, the strain field ε_{xx} inside the dot is compressive while ε_{zz} is tensile. These reflect the fact that the lattice constant of InAs is larger than that of GaAs. From Fig. 2-3, it is easily to conclude that strain distributions obtained from the conventional and proposed models lead to significant difference.

3. Optical properties

For strained quantum-dot nanostructures, the confinement potential can be written as a sum of energy offsets of the conduction band (or valence band), V_{band} , and the strain-induced potential, V_{strain} , as

$$V(\vec{r}) = V_{\text{band}}(\vec{r}) + V_{\text{strain}}(\vec{r}) \quad (4)$$

Since strain effects induce an extra potential field, it then alters the band structure and optical properties of the quantum-dot system. In spite of inhomogeneous distribution of induced strain (as depicted in Fig. 2-3), the Pikus-

Bir Hamiltonian and the Luttinger-Kohn model [4] together with the computed strain field are employed as usual as an approximation to analyze strain-induced potentials in quantum-dots.

The strain-induced potential along the z-axis is superimposed to energy band of bulk materials, as shown in Fig. 4. It is found that the strain effects on potentials of both the conduction and valence bands are non-negligible and non-uniform, especially, in the wetting layer and the quantum-dot regions.

Based on the computed energy and the computed wave function spectrum, the energy of interband optical transitions can readily be obtained. The calculated transition energies are in the range from 1.482 to 0.916 eV which correspond to 836 to 1353 nm in the optical wavelength spectrum as shown in Fig. 4. It shows that the wavelengths based on the strain fields from the proposed model differ significantly from their counterparts through the conventional model, especially for the cases of longer wavelength. It suggests that the proposed model of strain analysis might be necessary for the future optical analysis and applications.

4. Conclusions

In the article, a novel model based on the theory of linear elasticity with the aid of finite element analysis has been proposed to investigate the strain field as well as strain effects on optoelectronic properties of the pyramidal InAs/GaAs quantum-dot structures. In order to take into account the sequence of fabrication process the strain field in the heterostructure system without capping material was analyzed. The numerical results of the strain field from the proposed model have shown significant difference from the conventional model where the sequence of fabrication process was omitted.

The calculated strain field has also been used as an input for the electronic band structure calculation. The computed wavelengths of the optical transition energies ranged from 836 nm to 1353 nm. In the meantime, the wavelengths based on the strain fields from the proposed strain analysis have also differed significantly from the counterparts via the conventional strain analysis model. Hence the proposed strain analysis is necessary for future optical analysis and applications.

Acknowledgement

This work is carried out in the course of research sponsored by the National Science Council of Taiwan under Grant NSC92-2212-E-002-072.

References

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann & N. N. Ledentsov, Quantum Dot Heterostructures, 1999, John Wiley & Sons, New York.
- [2] P. Harrison, Quantum Wells, Wires and Dots: theoretical and computational physics, 2000, John Wiley & Sons, New York.
- [3] G. E. Pikus & G. L. Bir, Sov. Phys. Solid State 1 (1960) 1502.
- [4] G. Muralidharan, Jpn. J. Appl. Phys. 39 (2000) L 658.
- [5] H. T. Johnson, L. B. Freund, C. D. Akyüz, A. Zaslavsky, J. Appl. Phys. 84 (1998) 3714.
- [6] L.B. Freund, H.T. Johnson, J. Mech. Phys. Solids 38 (2001) 1045.

Figure captions:

Fig. 1. Geometry of the quantum-dot system. (a) InAs/GaAs QD heterostructure; and (b) InAs quantum dot island; where $B = H = 30$ nm, $d = 0.5$ nm, $b = 12$ nm, and $h = 6$ nm

Fig. 2. Strain component ε_{xx} along the z -axis

Fig. 3. Strain component ε_{zz} along the z -axis

Fig. 4. The wavelengths of optical transition energies from 836 nm to 1353 nm via (a) the conventional model; (b) the proposed model.

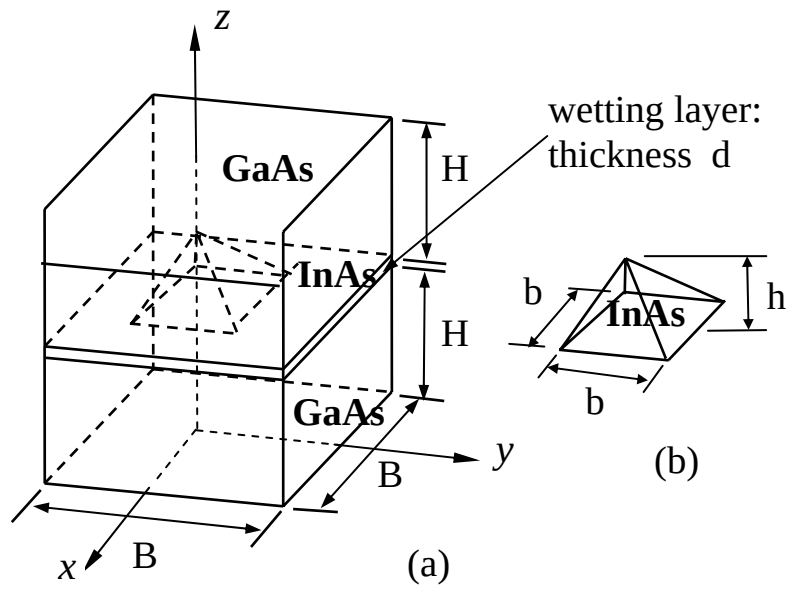


Fig. 1

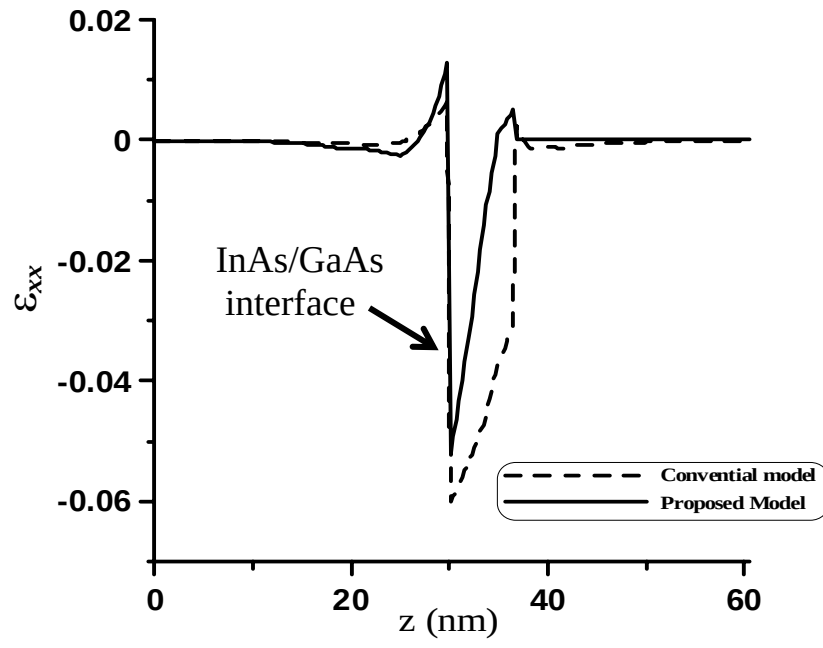


Fig. 2

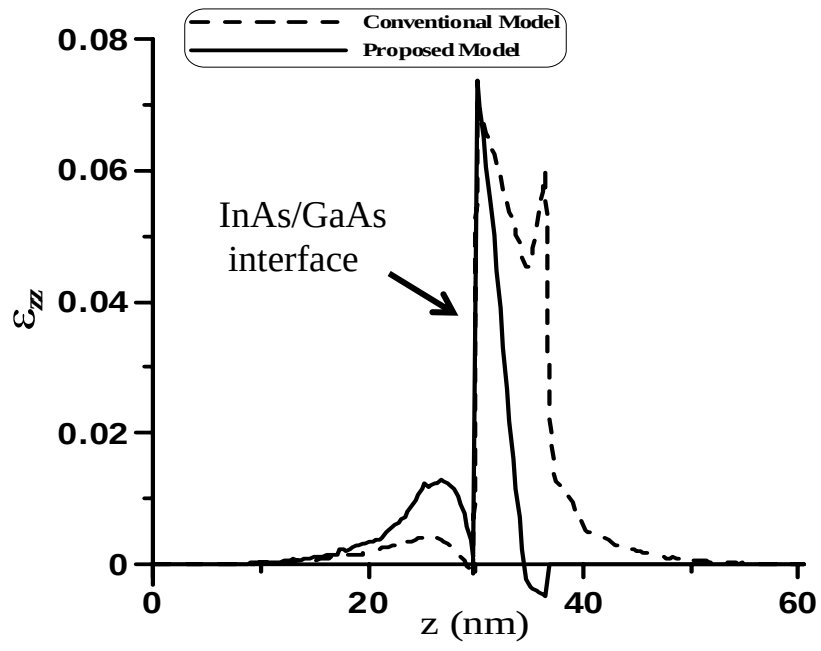


Fig. 3

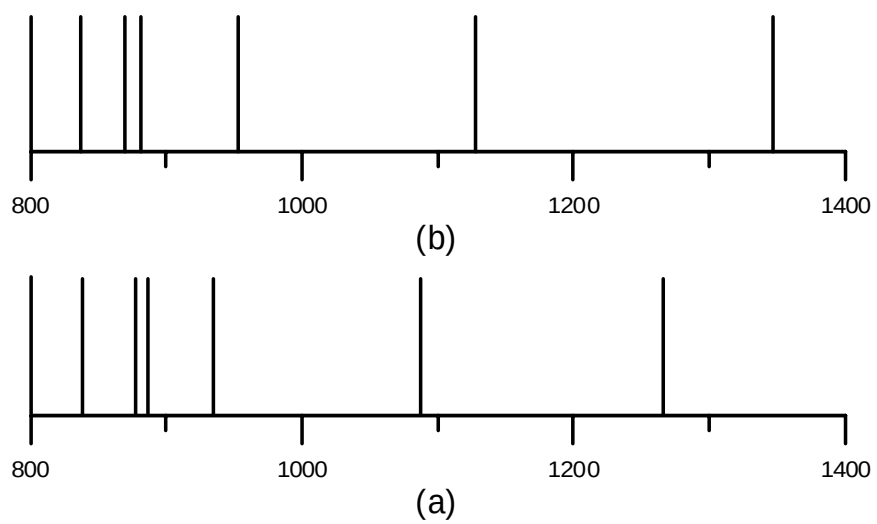


Fig. 4