รายงานการวิจัยฉบับสมบูรณ์

การศึกษาคุณสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอทโดยใช้วิธีเคดอทพี

โดย

นายวรศักดิ์ สุขบท

5 กุมภาพันธ์ 2557

รายงานการวิจัยฉบับสมบูรณ์

การศึกษาคุณสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอทโดยใช้วิธีเคดอทพี

Electronic structure and optical properties of Quantum Dots: k.p method

ผู้วิจัย	สังกัด
นายวรศักดิ์ สุขบท	ภาควิชาฟิสิกส์

โครงการวิจัยนี้ได้รับทุนอุดหนุนการวิจัยจากสำนักงบประมาณแผ่นดิน

ประจำปีงบประมาณ 2555

(ความเห็นในรายงานนี้เป็นของผู้วิจัย ม.อบ. ไม่จำเป็นต้องเห็นด้วยเสมอไป)

คำนำ

งานวิจัยเรื่อง สมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอทโดยใช้วิธีเคดอทพี (Electronic structure and optical properties of Quantum Dots: k.p method) ได้รับทุนสนับสนุนจาก กองทุนวิจัยมหาวิทยาลัยอุบลราชธานี ประจำปีงบประมาณ พ.ศ. 2555 เป็นงานวิจัยในเชิงทฤษฎีที่ศึกษาสมบัตทางโครสร้างและแสงของควอนตัมดอท โดยประยุกต์ใช้การแก้ปัญหาโดยวิธีเคดอทพี ซึ่งเป็นพื้นฐานในการประยุต์ความรู้ที่ได้ในการประดิษฐ์วัสดุทางอิเล็กทรอนิค เช่น ทรานซิสเตอร์ เลเซอร์ และ เซลล์แสงอาทิตย์ ซึ่งผู้วิจัยหวังเป็นอย่างยิ่งว่า ความรู้ที่ได้จากงานวิจัยนี้จะสามารถนำไปประยุกต์และมีประโยชน์ในอนาคต

นายวรศักดิ์ สุขบท

ผู้วิจัย

บทสรุปผู้บริหาร

ชื่อโครงการวิจัย การศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอทโดยใช้วิธีเคดอทพี

ผู้วิจัย วรศักดิ์ สุขบท

ที่ทำงาน ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยอุบลราชธานี

ระยะเวลาทำการวิจัย มิถุนายน 2555 – มิถุนายน 2556

ความเป็นมา/ปัญหาในการวิจัย

ในปัจจุบันการศึกษาอนุภาคในระดับนาโนเมตรได้รับความสนใจเป็นอย่างมาก ด้วยสมบัติโครงสร้างทางฟิสิกส์และเคมีที่แตกต่างและโดดเด่นของอนุภาคในระดับนาโนเมตร ทำให้สามารถประยุกต์ใช้คุณสมบัติดังกล่าวในทางอุตสาหกรรมสารกึ่งตัวนำ ควอนตัมดอท (Quantum Dots) เป็นโครงสร้างระดับนาโนเมตรที่ได้รับความสนใจเป็นอย่างมากในช่วงทศวรรษนี้โดยนำมาประยุกต์ใช้ในการผลิตอุปกรณ์อิเล็กทรอนิคและอุปกรณ์อิเล็กทรอนิคทางแสง ตัวอย่างเช่น ตัวตรวจจับทางแสง (Light detector), ไดโอดเปล่งแสง (Light emitting diode), โซลาร์เซลล์ (Solar cell), เลเซอร์ (Laser) เป็นต้น นอกจากนี้ควอนตัมดอทยังได้ถูกศึกษาในด้านควอนตัมคอมพิวติง (Quantum Computing) ซึ่งจะถูกพัฒนาต่อยอดเป็นคอมพิวเตอร์ที่มีการประมวลผลที่รวดเร็วกว่าคอมพิวเตอร์ในปัจจุบันอีกด้วย ด้วยเหตุนี้ทำให้ได้มีการศึกษาสมบัติของควอนตัมดอทขึ้นอย่างแพร่หลายทั้งในด้านทฤษฎีและการทดลอง

ในด้านการทดลอง งานวิจัยได้ทำการปลูกควอนตัมดอทโดยใช้วิธี Stanski Krastanov ซึ่งอาศัยคุณสมบัติความเครียดที่เกิดจากสารกึ่งตัวนำ 2 ชนิดมาประกอบกัน จนก่อให้เกิดเป็นอนุภาคควอนตัมดอทขึ้น ส่วนรูปร่างของควอนตัมดอทจะใช้เครื่อง Atomic Force Microscopy (AFM) ในการพิจารณาและวิเคราะห์ นอกจากการปลูกควอนตัมดอทแล้ว งานวิจัยยังศึกษาคุณสมบัติทางแสงของควอนตัมดอทโดยใช้เครื่อง Photoluminescence Spectroscopy ขณะที่งานวิจัยในเชิงทฤษฎีจะสร้างแบบจำลอง (Model) ขึ้นโดยอาศัยตัวแปรและเงื่อนไขต่างๆที่สอดคล้องกับการทดลอง เช่น สารกึ่งตัวนำที่นำมาสังเคราะห์ควอนตัมดอท, รูปร่างและขนาดของอนุภาคควอนตัมดอท เป็นต้น หลังจากนั้นก็จะคำนวณหาระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท ในปัจจุบันนี้มีหลายวิธีที่ถูกพัฒนาขึ้นมาใช้ในการคำนวณหาระดับพลังงานกันอย่างแพร่หลาย เช่น วิธีไทด์บายด์ดิ่ง (Tight-Binding) วิธีซูโดโพเทนเชียล (Pseudopotential) วิธีดีเอฟที (DFT) วิธีเคดอทพี (k.p) เป็นต้น หลังจากนั้นก็นำแบบจำลองดังกล่าวไปทำนายคุณสมบัติทางโครงสร้างและแสงของอนุภาคควอนตัมดอท พร้อมทั้งเปรียบเทียบกับผลการทดลอง ดังนั้นจะเห็นว่างานวิจัยในเชิงทฤษฎีจะทำนายคุณสมบัติต่างๆของอนุภาคควอนตัทดอท เมื่อได้คุณสมบัติที่ต้องการแล้ว งานวิจัยทางด้านการทดลองก็จะดำเนินการต่อเพื่อยืนยันผลงานวิจัยและได้ผลิตภัณฑ์ออกมา จากนั้นจึงนำไปประยุกต์ใช้ในด้านอุตสาหกรรมต่อไป

ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยสนใจที่จะศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอทในเชิงทฤษฎีโดยใช้วิธีเคดอทพี (k.p) ซึ่งเป็นวิธีที่ใช้กันอย่างแพร่หลายในต่างประเทศ เนื่องจากควอนตัมดอทนั้นถูกสังเคราะห์จากสาร 2 ชนิดที่มีความยาวของโครงสร้างทางผลึกที่แตกต่างกัน ดังนั้นจึงเกิดความเครียดขึ้นภายในและรอบๆควอนตัมดอท ดังนั้นผู้วิจัยจึงศึกษาการกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution) ที่เกิดขึ้นภายในบริเวณนั้น การศึกษาคุณสมบัติทางแสงของควอนตัมดอทเป็นอีกหนึ่งความรู้ที่สามารถนำไปประยุกต์ในการผลิตวัสดุอิเล็กทรอนิกส์นำแสงที่ใช้ในทางวิศวกรรมและอุตสาหกรรม ดังนั้นผู้วิจัยจึงมีความสนใจที่จะศึกษาคุณสมบัติดังกล่าว เช่น สเปคตรัมการเปล่งแสง (Emission spectrum)

การถ่ายโอนระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท (Optical transition) เป็นต้น พร้อมทั้งเปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองอีกด้วย

วัตถุประสงค์ของการวิจัย

1. ศึกษาคุณสมบัติทางโครงสร้างของควอนตัมดอทโดยใช้วิธีเคดอทพี เช่น ความเครียด รูปร่างและขนาดของควอนตัมดอทศึกษาคุณสมบัติทางแสงของควอนตัมดอทโดยใช้วิธีเคดอทพี เช่น สเปคตรัมการเปล่งแสง การเปลี่ยนถ่ายระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท เป็นต้น
2. เปรียบเทียบผลการคำนวณที่ได้รับในเชิงทฤษฎีกับผลการทดลอง

วิธีดำเนินการวิจัย

1. สถานที่ทำการทดลองและเก็บข้อมูลอยู่ที่ กลุ่มวิจัย Quantum Dot ที่อาคารภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยอุบลราชธานี
2. ค้นคว้าบทความงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับควอนตัมดอททั้งในเชิงทฤษฎีและการทดลอง
3. ทำการวิจัยตามแผนงานที่วางไว้โดยใช้คอมพิวเตอร์ทำงานวิจัยและเปรียบเทียบผลการคำนวณกับการทดลองดั่งแผนการดำเนินงานในข้อ 3.1-3.4 ดั่งแสดงในบทที่ 3
4. รายงานผลงานวิจัยในรูปของบทความงานวิจัย ตีพิมพ์ผลงานวิจัยและนำเสนอผลงานวิจัยในการประชุมสัมมนาทั้งในและต่างประเทศ

ผลการวิจัย/ข้อค้นพบ

ผู้วิจัยได้อธิบายการกระจายตัวของความเครียดในควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว โดยระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทอยู่ในช่วง 0-6 นาโนเมตร โดยประยุกต์วิธี elastic continuum theory ในคำนวณการกระจายตัวของความเครียด ศึกษาการเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงานอันเนื่องมาจากความเครียดโดยวิธี eight-band strain-dependent k.p จากผลการคำนวณพบว่ามีการบีบตัวภายในบริเวณควอนตัมดอท ( ) เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัวเพิ่มขึ้น ความเครียดแบบ biaxial ทั้งในบริเวณควอนตัมดอทและบริเวณรอบๆจะเพิ่มขึ้นเช่นกัน จากการคำนวณพบว่าความเครียดแบบ hydrostatic และ ความเครียดแบบ biaxial สามารถใช้ในการพิจารณารูปแบบของแถบพลังงาน ความเครียดแบบ hydrostatic จะยกระดับพลังงานคอนดักชันและเวเลนซ์ในขณะที่ ความเครียดแบบ biaxial จะทำให้แถบระดับพลังงานเวเลนซ์ที่เคยเท่ากัน มีค่าต่างกัน เมื่อพิจารณาความเครียด สุดท้าย ความเครียดและระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทส่งผลกระทบอันสำคัญต่อรูปร่างและระดับของแถบพลังงานในควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว

งานวิจัยนี้ศึกษาอิทธิพลของการกระจายตัวของความเครียดและปรากฏการณ์ Piezoelectricity ในเชิงทฤษฎีโดยวิธียืดหยุ่นอย่างต่อเนื่อง (continuum elasticity๗ และเคดอทพี ผลการคำนวณแสดงว่า การกระจายตัวของความเครียดและปรากฏการณ์ Piezoelectricity มีอิทธิพลอย่างมากต่อโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ของควอนตัมดอท โดยความเครียดจะยกระดับพลังงานของอิเล็กตรอนและโฮลเมื่อเทียบกับการคำนวณที่ไม่ได้พิจารณาความเครียด ในขณะที่พลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity ไม่ได้เปลี่ยนแปลงการวางตัวของฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนระดับพลังงานที่ 1 ( ) แต่จะส่งผลให้เกิดการกลับทิศทางการวางตัวของฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนระดับพลังงานที่ 2 และ 3 (และ) จาก [ ] เป็น [110] และในทางกลับกัน ในส่วนของสถานะโฮล Piezoelectricity ทำให้วางตัวของฟังก์ชันเปลี่ยนแปลงไปเมื่อเทียบกับฟังก์ชันคลื่นที่ไม่ได้พิจารณา Piezoelectricity ในการคำนวณ

ข้อเสนอแนะ

1. งานวิจัยนี้สามารถศึกษาเพิ่มเติมในเรื่องอัตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฮล ภายในควอนตัมดอม (Electron-hole interaction in Quantum dots) ซึ่งเป็นพื้นฐานในการศึกษาเซลล์สุริยะ (Solar cell)
2. งานวิจัยนี้สามารถศึกษาในการประยุกต์ควอนตัมดอทในการศึกษาปรากฏการณ์ Polarization ภายในควอนตัมดอท ซึ่งเป็นพื้นฐานในการศึกษา Quantum Computer

การนำไปใช้ประโยชน์

1. สามารถนำแบบจำลองนี้ไปทำนายสมบัติของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ที่ผลิตจากอนุภาคควอนตัมดอท เช่น ไดโอดเปล่งแสง เลเซอร์ โซลาร์เซลล์ เป็นต้น
2. เผยแพร่งานวิจัยในรูปแบบของการนำเสนอผลงานในที่ประชุมและการตีพิมพ์ผลงานในวารสารทั้งในและต่างประเทศ ในฐานะของตัวแทนนักวิจัยจากมหาวิทยาลัยอุบลราชธานี
3. ต่อยอดความรู้ที่ได้จากการวิจัยสู่นักศึกษาระดับปริญญาตรีในรูปแบบของโครงงานพิเศษหรือวิทยานิพนธ์ในระดับปริญญาโท-เอก

ชื่อเรื่อง: **การศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอทโดยใช้วิธีเคดอทพี**
ผู้วิจัย: **วรศักดิ์ สุขบท (Ph.D.) ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยอุบลราชธานี**
ปีที่เผยแพร่: **2555**

บทคัดย่อ

แสดงการคำนวณโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์และการกระจายตัวของความเครียดสำหรับ InAs/GaAs ควอนตัมดอท การคำนวณการกระจายตัวของความเครียดอยู่บนพื้นฐานทฤษฎียืดหยุ่นอย่างต่อเนื่อง (continuum elastic theory) การคำนวณศักย์เพียโซอิเล็กทริก (Piezoelectric potential) โดยการหาผลเฉลยของสมการฟ์วซง 3 มิติ คำนวณระดับพลังงานของอิเล็กตรอนและหลุมของ InAs/GaAs ควอนตัมดอทได้โดยวิธีเคดอทพี (k.p method) ที่จัดเตรียมไว้ให้ ผลการคำนวณแสดงผลกระทบของความเครียดและเพียโซอิเล็กทริก

คำค้นหา: ควอนตัมดอท, เคดอทพี

Title: **Electronic structure and optical properties of Quantum Dots: k.p method**

Author: **Worasak Sukkabot (Ph.D.) Department of Physics, Faculty of Science, Ubon Ratchathani University**

Year of Publication: **2555**

Abstract

The calculations of the electronic structure and strain distribution for self-organized InAs/GaAs quantum dots are presented. The strain calculations are based on the continuum elastic theory. The piezoelectric potential is calculated by solving the 3D Poisson's equation. The electron and hole energy levels of the InAs/GaAs quantum dots are calculated by implementing the k.p method. The calculated results show the importance of strain and piezoelectric effects.

Keywords: Quantum dot, k.p method

สารบัญ

บทสรุปผู้บริหาร	I
บทคัดย่อ	IV
Abstract	V
บทที่ 1	1
บทที่ 2	4
บทที่ 3	8
บทที่ 4	10
บทที่ 5	16
บทที่ 6	24
บรรณานุกรม	25
ภาคผนวก ก บทความงานวิจัย	26
ภาคผนวก ข ตารางเปรียบเทียบวัตถุประสงค์	27
ภาคผนวก ค รายงานการเงิน	28

บทที่ 1
ความสำคัญและที่มา

ความสำคัญและที่มาของปัญหาที่ทำการวิจัย

ในปัจจุบันการศึกษาอนุภาคในระดับนาโนเมตรได้รับความสนใจเป็นอย่างมาก ด้วยสมบัติโครงสร้างทางฟิสิกส์และเคมีที่แตกต่างและโดดเด่นของอนุภาคในระดับนาโนเมตร ทำให้สามารถประยุกต์ใช้คุณสมบัติดังกล่าวในทางอุตสาหกรรมสารกึ่งตัวนำ ควอนตัมดอท (Quantum Dots) เป็นโครงสร้างระดับนาโนเมตรที่ได้รับความสนใจเป็นอย่างมากในช่วงทศวรรษนี้โดยนำมาประยุกต์ใช้ในการผลิตอุปกรณ์อิเล็กทรอนิคและอุปกรณ์อิเล็กทรอนิคทางแสง ตัวอย่างเช่น ตัวตรวจจับทางแสง (Light detector), ไดโอดเปล่งแสง (Light emitting diode), โซลาร์เซลล์ (Solar cell), เลเซอร์ (Laser) เป็นต้น นอกจากนี้ควอนตัมดอทยังได้ถูกศึกษาในด้านควอนตัมคอมพิวติง (Quantum Computing) ซึ่งจะถูกพัฒนาต่อยอดเป็นคอมพิวเตอร์ที่มีการประมวลผลที่รวดเร็วกว่าคอมพิวเตอร์ในปัจจุบันอีกด้วย ด้วยเหตุนี้ทำให้ได้มีการศึกษาสมบัติของควอนตัมดอทขึ้นอย่างแพร่หลายทั้งในด้านทฤษฎีและการทดลอง

ในด้านการทดลอง งานวิจัยได้ทำการปลูกควอนตัมดอทโดยใช้วิธี Stanski Krastanov ซึ่งอาศัยคุณสมบัติความเครียดที่เกิดจากสารกึ่งตัวนำ 2 ชนิดมาประกอบกัน จนก่อให้เกิดเป็นอนุภาคควอนตัมดอทขึ้น ส่วนรูปร่างของควอนตัมดอทจะใช้เครื่อง Atomic Force Microscopy (AFM) ในการพิจารณาและวิเคราะห์ นอกจากการปลูกควอนตัมดอทแล้ว งานวิจัยยังศึกษาคุณสมบัติทางแสงของควอนตัมดอทโดยใช้เครื่อง Photoluminescence Spectroscopy ขณะที่งานวิจัยในเชิงทฤษฎีจะสร้างแบบจำลอง (Model) ขึ้นโดยอาศัยตัวแปรและเงื่อนไขต่างๆที่สอดคล้องกับการทดลอง เช่น สารกึ่งตัวนำที่นำมาสังเคราะห์ควอนตัมดอท รูปร่างและขนาดของอนุภาคควอนตัมดอท เป็นต้น หลังจากนั้นก็จะคำนวณหาระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท ในปัจจุบันนี้มีหลายวิธีที่ถูกพัฒนาขึ้นมาใช้ในการคำนวณหาระดับพลังงานกันอย่างแพร่หลาย เช่น วิธีไทด์บายด์ดิ่ง (Tight-Binding) วิธีซูโดโพเทนเชียล (Pseudopotential) วิธีดีเอฟที (DFT) วิธีเคดอทพี (k.p) เป็นต้น หลังจากนั้นก็นำแบบจำลองดั่งกล่าวไปทำนายคุณสมบัติทางโครงสร้างและแสงของอนุภาคควอนตัมดอท พร้อมทั้งเปรียบเทียบกับผลการทดลอง ดังนั้นจะเห็นว่างานวิจัยในเชิงทฤษฎีจะทำนายคุณสมบัติต่างๆของอนุภาคควอนตัมดอท เมื่อได้คุณสมบัติที่ต้องการแล้ว งานวิจัยทางด้านการทดลองก็จะดำเนินการต่อเพื่อยืนยันผลงานวิจัยและได้ผลิตภัณฑ์ออกมา จากนั้นจึงนำไปประยุกต์ใช้ในด้านอุตสาหกรรมต่อไป

ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยสนใจที่จะศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอทในเชิงทฤษฎีโดยใช้วิธีเคดอทพี (k.p) ซึ่งเป็นวิธีที่ใช้กันอย่างแพร่หลายในต่างประเทศ เนื่องจากควอนตัมดอทนั้นถูกสังเคราะห์จากสาร 2 ชนิดที่มีความยาวของโครงสร้างทางผลึกที่แตกต่างกัน ดังนั้นจึงเกิดความเครียดขึ้นภายในและรอบๆควอนตัมดอท ดังนั้นผู้วิจัยจึงศึกษาการกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution) ที่เกิดขึ้นภายในบริเวณนั้น การศึกษาคุณสมบัติทางแสงของควอนตัมดอทเป็นอีกหนึ่งความรู้ที่สามารถนำไปประยุกต์ในการผลิตวัสดุอิเล็กทรอนิกส์นำแสงที่ใช้ในทางวิศวกรรมและอุตสาหกรรม ดังนั้นผู้วิจัยจึงมีความสนใจที่จะศึกษาคุณสมบัติดังกล่าว เช่น สเปคตรัมการเปล่งแสง (Emission spectrum) การถ่ายโอนระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท (Optical transition) เป็นต้น พร้อมทั้งเปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองอีกด้วย

วัตถุประสงค์ของโครงการวิจัย

1. ศึกษาคุณสมบัติทางโครงสร้างของควอนตัมดอทโดยใช้วิธีเคดอทพี เช่น ความเครียด รูปร่างและขนาดของควอนตัมดอทศึกษาคุณสมบัติทางแสงของควอนตัมดอทโดยใช้วิธีเคดอทพี เช่น สเปคตรัมการเปล่งแสง การเปลี่ยนถ่ายระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท เป็นต้น
2. เปรียบเทียบผลการคำนวณที่ได้รับในเชิงทฤษฎีกับผลการทดลอง

ขอบเขตของโครงการวิจัย

งานวิจัยนี้ศึกษาสมบัติของควอนตัมดอทในกลุ่ม III-V ของสารกึ่งตัวนำโดยใช้วิธีเคดอทพีในการคำนวณ สมบัติที่จะศึกษาได้แก่ การกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution) ระดับพลังงานที่อยู่ภายในควอนตัมดอท (Energy levels) และสมบัติทางแสงของควอนตัมดอท (Optical properties) เช่น โพลาร์ไลเซชัน (Polarization) การถ่ายโอนระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท (Optical transition) เป็นต้น นอกจากนี้ยังเปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองอีกด้วย

การทบทวนวรรณกรรม/สารสนเทศ (Information) ที่เกี่ยวข้อง

ในปัจจุบัน งานวิจัยทางด้านควอนตัมดอทแบ่งออกเป็น 2 แขนงตามวิธีการวิจัย ได้แก่ งานวิจัยทางด้านการทดลองและทฤษฎี ในงานวิจัยทางด้านการทดลอง นักวิจัยได้ทำการปลูกควอนตัมดอทโดยใช้วิธี Stanski Krastanov ส่วนรูปร่างและขนาดของควอนตัมดอทจะใช้เครื่อง Atomic Force Microscopy (AFM) ในการพิจารณาและวิเคราะห์ โดยที่รูปร่างของอนุภาคควอนตัมดอทส่วนใหญ่จะมีรูปร่างเป็น พีระมิด ขนาดของอนุภาคควอนตัมดอทจะมีขนาดตั้งแต่ 10-100 นาโนเมตร ขึ้นอยู่กับสารกึ่งตัวนำที่ใช้ในการสังเคราะห์และสภาวะแวดล้อมในการปลูกควอนตัมดอท ซึ่งในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยมีความสนใจที่จะเลือกขนาดของอนุภาคควอนตัมดอทในช่วง 10-30 นาโนเมตร เนื่องมาจาก ในช่วงดังกล่าวได้มีการสังเคราะห์อนุภาคควอนตัมดอทอย่างแพร่หลายและยังนำไปประยุกต์ในการศึกษาสมบัติทางฟิสิกส์อีกด้วย นอกจากการปลูกควอนตัมดอทแล้ว งานวิจัยในด้านนี้ยังศึกษาคุณสมบัติทางแสงของควอนตัมดอทโดยใช้เครื่อง Photoluminescence Spectroscopy เพื่อศึกษาการถ่ายโอนพลังงานภายในควอนตัมดอท ขณะที่งานวิจัยในเชิงทฤษฎีจะสร้างแบบจำลอง (Model) ขึ้นโดยอาศัยตัวแปรและเงื่อนไขต่างๆที่สอดคล้องกับการทดลอง เช่น สารกึ่งตัวนำที่นำมาสังเคราะห์ควอนตัมดอท รูปร่างและขนาดของอนุภาคควอนตัมดอท เป็นต้น เพื่อที่จะคำนวณหาระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท ในปัจจุบันนี้มีหลายวิธีที่ถูกพัฒนาขึ้นมาใช้ในการคำนวณหาระดับพลังงานกันอย่างแพร่หลาย เช่น วิธีไทด์บายด์ดิ่ง (Tight-Binding) มีกลุ่มวิจัยของ Prof. Gerhard Klimeck ที่ University of Purdue ได้พัฒนา software และทำการวิจัยในเรื่องนี้ วิธีซูโดโพเทนเชียล (Pseudopotential) มีกลุ่มวิจัยที่ National Renewable Energy Laboratory ของ Prof. Alex Zunger ศึกษาควอนตัมดอทโดยใช้วิธีนี้อยู่ วิธีเคดอทพี (k.p) ก็มีกลุ่มวิจัยของ Prof. Bimberg ทำการศึกษาอยู่ในขณะนี้ เป็นต้น หลังจากนั้นก็นำแบบจำลองดังกล่าวไปทำนายคุณสมบัติทางโครงสร้างและแสงของอนุภาคควอนตัมดอท พร้อมทั้งเปรียบเทียบกับผลการทดลอง ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยสนใจที่จะศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอทในเชิงทฤษฎีโดยใช้วิธีเคดอทพี (k.p) ที่ได้รับการพัฒนาจากกลุ่มวิจัยของ Prof. Shun-Jen Cheng ที่ National University of Chiao Tung ประเทศไต้หวัน

ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. มีความรู้ความเข้าใจเกี่ยวกับคุณสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอท
2. เปรียบเทียบผลการคำนวณจากแบบจำลองของผู้วิจัยกับผลการทดลอง
3. สามารถประยุกต์ผลการวิจัยนี้ในการผลิตอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ที่ใช้สารกึ่งตัวนำเป็นวัตถุดิบ

4. เผยแพร่งานวิจัยในรูปแบบของการนำเสนอผลงานในที่ประชุมและการตีพิมพ์ผลงานในวารสารทั้งในและต่างประเทศ
5. ถ่ายทอดผลงานวิจัยสู่นักศึกษาระดับปริญญาตรีในรูปแบบของโครงงานพิเศษหรือวิทยานิพนธ์ในระดับปริญญาโท-เอก

บทที่ 2
ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

การกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution)

ตำแหน่งของอะตอมที่อยู่ภายในและรอบ ๆ อนุภาคควอนตัมดอทสามารถอธิบายในโครงสร้างของ supercell of the Face-centered cubic เนื่องจากความแตกต่างกันของ Lattice constant ระหว่างควอนตัมดอทและอะตอมที่อยู่ภายในและรอบ ๆ ควอนตัมดอท ความเครียดจึงเกิดขึ้นในโครงสร้างนี้ ในขณะที่มี 2 วิธีในการศึกษาความเครียดที่เกิดขึ้นนั้นคือ Continuum elasticity และ Valence force field (VFF) ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยประยุกต์ใช้วิธี Continuum elasticity เนื่องจากสามารถศึกษาความเครียดที่เกิดขึ้นกับอนุภาคควอนตัมดอทที่มีขนาดใหญ่ได้เป็นอย่างดี ผลรวมของพลังงานอันเนื่องมาจากการกระจายตัวของความเครียดเท่ากับ

$$U_{CE} = \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl}$$

พิจารณาอนุภาคควอนตัมดอท ค่า U_{CE} สามารถหาได้จากการทำให้ขนาดของ U_{CE} มีค่าน้อยที่สุดโดยประยุกต์วิธี Finite difference ค่าความเครียด ε_{ij} ตามแนว i และ j สามารถหาได้จาก $\varepsilon_{ij} = \left(\frac{du_i}{dx_j} + \frac{du_j}{dx_i}\right)/2$ เมื่อ u คือเวกเตอร์ของตำแหน่ง ค่า elastic moduli C_{ijkl} แทนด้วย C_{11} , C_{12} และ C_{44}

Eight-band strain-dependent k.p method

อิทธิพลของความเครียดต่อโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์สามารถศึกษาจากการเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงาน การศึกษาความเครียดสามารถเปลียนแปลงแถบพลังงานภายในโครงสร้างควอนตัมดอทสามารถทำได้โดยวิธี eight-band strain-dependent k.p Hamiltonian, $H_k + H_s$, เมื่อ H_k is the kinetic Hamiltonian และ H_s is the strained Hamiltonian. Kinetic Hamiltonian แทนด้วย:

$$\begin{bmatrix}
A & 0 & V^* & 0 & \sqrt{3}V & -\sqrt{2}U & -U & \sqrt{2}V^* \\
0 & A & -\sqrt{2}U & -\sqrt{3}V^* & 0 & -V & \sqrt{2}V & U \\
V & -\sqrt{2}U & -P+Q & -S^* & R & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}Q \\
0 & -\sqrt{3}V & -S & -P+Q & 0 & R & -\sqrt{2}R & \frac{1}{\sqrt{2}}S \\
\sqrt{3}V^* & 0 & R^* & 0 & -P+Q & S^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}R^* \\
-\sqrt{2}U & -V^* & 0 & R^* & S & -P+Q & \sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* \\
-U & \sqrt{2}V^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & -\sqrt{2}R^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}Q & -P+\Delta & 0 \\
\sqrt{2}V & U & -\sqrt{2}Q & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}R & \sqrt{\frac{3}{2}}S & 0 & -P+\Delta
\end{bmatrix}$$

โดยที่

$$A = E_c - \frac{\hbar^2}{2m_0}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$B = E_c - \gamma_1 \frac{\hbar^2}{2m_0}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

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

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

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

$$U = \frac{-i}{\sqrt{3}} P_0 k_z$$

$$V = \frac{-i}{\sqrt{6}} P_0 (k_x - ik_y)$$

P_0 แทนค่าการคาบเกี่ยวระหว่างแถบพลังงานคอนดักชันและเวเลนซ์, E_c และ E_v ค่าพลังงานคอนดักชันและเวเลนซ์เมื่อไม่ได้พิจารณาความเครียดตามลำดับ และ Δ ค่าแยกตัวอันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ spin-orbit $\gamma_{i=1,2,3}$ คือค่า Luttinger ที่ได้รับการปรับเปลี่ยนซึ่งอยู่ในรูปของค่า Luttinger แบบธรรมดา $\gamma^L_{i=1,2,3}$:

$$\gamma_1 = \gamma_1^L - \frac{E_p}{3E_g + \Delta}$$

$$\gamma_2 = \gamma_2^L - \frac{1}{2}\frac{E_p}{3E_g + \Delta}$$

$$\gamma_3 = \gamma_3^L - \frac{1}{2}\frac{E_p}{3E_g + \Delta}$$

$E_g = E_c - E_v$ คือค่าช่องว่างของแถบพลังงาน และ $E_p = 2m_0 P_0^2 / \hbar^2$ Strained Hamiltonian แทนด้วย:

$$\begin{bmatrix}
a_c e & 0 & -v^* & 0 & -\sqrt{3}v & \sqrt{2}u & u & -\sqrt{2}v^* \\
0 & a_c e & \sqrt{2}u & \sqrt{3}v^* & 0 & v & -\sqrt{2}v & -u \\
-v & \sqrt{2}u & -p+q & -s^* & r & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}s & -\sqrt{2}q \\
0 & \sqrt{3}v & -s & -p+q & 0 & r & -\sqrt{2}r & \frac{1}{\sqrt{2}}s \\
-\sqrt{3}v^* & 0 & r^* & 0 & -p+q & s^* & \frac{1}{\sqrt{2}}s^* & \sqrt{2}r^* \\
\sqrt{2}u & v^* & 0 & r^* & s & -p+q & \sqrt{2}q & \sqrt{\frac{3}{2}}s^* \\
u & -\sqrt{2}v^* & \sqrt{\frac{3}{2}}s^* & -\sqrt{2}r^* & \frac{1}{\sqrt{2}}s & \sqrt{2}q & -p & 0 \\
-\sqrt{2}v & u & -\sqrt{2}q & \frac{1}{\sqrt{2}}s^* & \sqrt{2}r & \sqrt{\frac{3}{2}}s & 0 & -p
\end{bmatrix}$$

โดยที่

$$e = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$$
$$p = a_v(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz})$$
$$q = b[e_{zz} - \frac{1}{2}(e_{xx} + e_{yy})]$$
$$r = \frac{\sqrt{3}}{2} b(e_{xx-e_{yy}}) - ide_{xy}$$
$$s = -d(e_{xz} - ie_{yz})$$
$$u = \frac{-i}{\sqrt{3}} P_0 \sum_j e_{zj} k_j$$
$$v = \frac{-i}{\sqrt{6}} P_0 \sum_j (e_{xj} - ie_{yj}) k_j$$

e_{ij} แทนค่าความเครียด, b และ d แทนค่า shear deformation potentials. a_v คือ hydrostatic valence band deformation potential และ a_c คือ conduction-band deformation potential.

Piezoelectricity

ความเครียดที่เกิดขึ้นในควอนตัมดอทก่อให้เกิดการเปลี่ยนแปลงสมมาตรของโครงสร้างทางผลึก การเปลี่ยนแปลงดังกล่าวเกิดปรากฏการณ์ โพลาไรเซชัน นิยามด้วย Piezoelectricity

พลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity สามารถหาจากสมการ Poisson แทนด้วย

$$\nabla^2 V_{pz} = \frac{\rho}{\varepsilon(r)}$$

เมื่อ V_{pz} คือ พลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity ρ แทนค่า piezoelectric charge นิยามว่า: $\rho = -\nabla \cdot P$ และ P คือ ค่า โพลาไรเซชัน แทนด้วย:

$$P = 2e_{14} \begin{vmatrix} e_{yz} \\ e_{xz} \\ e_{xy} \end{vmatrix}$$

โดยที่ e_{yz}, e_{xz} และ e_{xy} คือ ค่าความเครียดเฉือน และ e_{14} คือ ค่าคงที่ Piezoelectricity ของแต่ละสาร $\varepsilon(r)$ คือ ค่าคงที่ dielectric ที่ขึ้นอยู่กับตำแหน่ง r พลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity สามารถหาได้จากการแก้สมการ Poisson โดยวิธี Finite difference หลังจากได้พลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity Hamiltonian ของควอนตัมดอทจะเท่ากับ

$$H = H_{k.p} + V_{pz} I$$

เมื่อ $H_{k.p}$ is the Hamiltonian จากวิธีเคดอทพีซึ่งจะอธิบายในหัวข้อต่อไป และ I คือ เมทริกซ์เอกลักษณ์

วิธีเคดอทพี (k.p method)

เพื่อศึกษาคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของควอนตัมดอทเราต้องเข้าใจโครงสร้างวงของวัสดุ มีการคำนวณตามทฤษฎีของโครงสร้างหลายวิธี เช่น Tight-binding Pseudo-potential k.p เป็นต้น ซึ่งเทคนิคแต่ละอย่างมีแนวทางในการคำนวณคุณสมบัติของเซมิคอนดักเตอร์ที่แตกต่างกัน แต่เริ่มต้นจากสมการพื้นฐานสมการ Schrodinger ซึ่งในงานวิจัยนี้จะใช้วิธี k.p ในการศึกษาสมบัติของอนุภาคควอนตัมดอท

Two-band model

วิธีนี้จะใช้ในการคำนวณหาระดับพลังงานของสถานะอิเล็กตรอน ฟังก์ชันคลื่นของสถานะอิเล็กตรอน อยู่ในรูปของการรวมกันเชิงเส้นของ Conduction band ดังสมการ

$$\psi_{i_e}^{e}(\vec{r}) = \sum_{s_z=\pm 1/2} g_{i_e,s_z}^{e}(\vec{r}) u_{s;s_z}(\vec{r})$$

เมื่อ $s = 1/2, s_z = \pm 1/2$

$|u_{1/2;+1/2}> = s\uparrow$

$|u_{1/2;-1/2}> = s\downarrow$

Four-band model

วิธีนี้จะใช้ในการคำนวณหาระดับพลังงานของสถานะเวเล็นอิเล็กตรอน ฟังก์ชันคลื่นของสถานะเวเล็นอิเล็กตรอน อยู่ในรูปของการรวมกันเชิงเส้นของ Valence band ดังสมการ

$$\psi_{i_v}^{v}(\vec{r}) = \sum_{j_z=\pm 1/2,\pm 3/2} g_{i_v,j_z}^{v}(\vec{r}) u_{j;j_z}(\vec{r})$$

เมื่อ

$$|3/2;+3/2> = \frac{i}{\sqrt{2}}[|X\uparrow> + i|Y\uparrow>]$$

$$|3/2;+1/2> = \frac{i}{\sqrt{6}}[|X\downarrow> + i|Y\downarrow> - 2|Z\uparrow>]$$

$$|3/2;-1/2> = \frac{i}{\sqrt{6}}[|X\uparrow> - i|Y\uparrow> + 2|Z\downarrow>]$$

$$|3/2;-3/2> = -\frac{i}{\sqrt{2}}[|X\downarrow> + i|Y\downarrow>]$$

บทที่ 3
วิธีการดำเนินการวิจัย

วิธีการดำเนินการวิจัย และสถานที่ทำการทดลอง/เก็บข้อมูล

1. สถานที่ทำการทดลองและเก็บข้อมูลอยู่ที่ กลุ่มวิจัย Quantum Dot ที่อาคารภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยอุบลราชธานี
2. ค้นคว้าบทความงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับควอนตัมดอททั้งในเชิงทฤษฎีและการทดลอง
3. ทำการวิจัยตามแผนงานที่วางไว้โดยใช้คอมพิวเตอร์ทำงานวิจัยและเปรียบเทียบผลการคำนวณกับการทดลองดังแผนการดำเนินงานในข้อ 3.1-3.4
4. รายงานผลงานวิจัยในรูปของบทความงานวิจัย ตีพิมพ์ผลงานวิจัยและนำเสนอผลงานวิจัยในการประชุมสัมมนาทั้งในและต่างประเทศ

ระยะเวลาทำการวิจัยและแผนการดำเนินงานตลอดโครงการวิจัย

กิจกรรม	ช่วงเวลา (เดือน)												ผลงานที่จะได้จากกิจกรรม *
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
1. การเตรียมงานวิจัย/ทบทวนศึกษาเอกสาร	■												
2. กำหนดแผนการ/วิธีการดำเนินงานวิจัย		■											
3. ดำเนินงานวิจัย/เก็บข้อมูล													
3.1 ศึกษาการกระจายตัวของความเครียดภายในและรอบๆ ควอนตัมดอท			■	■									สมบัติการกระจายตัวของความเครียดเมื่อควอนตัมดอทมีรูปร่างต่างๆ
3.2 ศึกษาปรากฏการณ์เพียโซอิเล็กทรอนิคของควอนตัมดอท					■	■							เข้าใจคุณสมบัติของปรากฏการณ์เพียโซอิเล็กทรอนิคที่มีต่อควอนตัมดอท
3.3 คำนวณหาระดับพลังงานของสถานะอิเล็กตรอนและโฮลของควอนตัมดอท							■	■					มีความรู้เกี่ยวกับระดับพลังงานภายในควอนตัมดอทเมื่อควอนตัมดอทมีรูปร่างและขนาดที่เปลี่ยนแปลงไป
3.4 ศึกษาและคำนวณสเปคตรัม									■	■			มีความรู้เกี่ยวกับ

การเปล่งแสงและการเปลี่ยนถ่ายระดับพลังงานภายในอนุภาคควอนตัมดอท												สเปคตรัมการเปล่งแสงและการเปลี่ยนถ่ายระดับพลังงานภายในอนุภาคควอนตัมดอทเมื่อควอนตัมดอทมีรูปร่างและขนาดที่เปลี่ยนแปลงไป
4.การวิเคราะห์ - กิจกรรม 3.1-3.4												ตีพิมพ์ผลงานวิจัยในเรื่องที่เกี่ยวข้องและนำเสนอผลงานการวิจัย
5. จัดทำรายงานการวิจัยฉบับสมบูรณ์												รายงานการวัจัย

บทที่ 4

แถบพลังงานอันเนื่องมาจากความเครียดของ InAs/GaAs ควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน

(Strain-induced band profile of stacked InAs/GaAs Quantum Dots)

บทนำ

งานวิจัยและการพัฒนาในด้านสารกึ่งตัวนำจะพยายามลดขนาดและทิศทางการเคลื่อนที่ของอนุภาคจาก อนุภาคอิสระ (3D bulk material), ควอนตัมเวลล์ (2D Quantum Well), ควอนตัมไวร์ (1D Quantum Wire)และสุดท้ายควอนตัมดอท (0D Quantum Dot) เรียงตามลำดับการเคลื่อนที่ของอนุภาค ดังนั้นการที่อนุภาคถูกกักขังทั้ง 3 มิติ สมบัติที่พบจะแตกต่างกันอย่างมาก เช่น สมบัติการเป็นอะตอมของสาร (atomic-like orbital) พลังงานยึดเหนี่ยวเอ็กซิตอนเพิ่มขึ้น (Exciton binding energies) และการเรืองแสง (Luminescence) เป็นต้น ควอนตัมดอทสามารถประยุกต์ในการประดิษฐ์ ทรานซิสเตอร์ (Transistor) เซลล์แสงอาทิตย์ (Solar cell) หลอดเรืองแสง (LED) และ เลเซอร์ไดโอด (Laser diode) เป็นต้น ด้วยเหตุนี้เองสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอทจึงได้รับการศึกษากันอย่างกว้างขวาง [1] ตัวอย่างเช่น การศึกษาการปลดปล่อยพลังงานและกระบวนการผ่อนคลายของพาหะ (carrier relaxation process) ของควอนตัมดอท 2-10 ตัวที่เรียงทับกันห่างกัน 2-3 นาโนเมตร [2] ปัจจุบันได้มีการศึกษาควอนตัมดอทที่เรียงทับกันในแนวดิ่ง (Vertically stacked Quantum dots) ในการประยุกต์ในด้านควอนตัมดอทเลเซอร์ (Quantum dots laser) และควอนตัมคอมพิวเตอร์ (Quantum computer) [3] Kita และผู้ร่วมวิจัย [4, 5] ทำการทดลองเพื่อควบคุมปรากฏการณ์โพลาไรเซชัน (Ploarization) ที่เกิดขึ้นใน InAs/GaAs ควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน (Column stacked quantum dots) โดยที่ไม่มีระยะห่างระหว่างควอนตัมดอท Saito และผู้ร่วมวิจัย [3, 5] คำนวณหาค่าความเครียดและโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิคของ InAs/GaAs ควอนตัมดอทที่เรียงทับกันโดยที่ระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทอยู่ในช่วง 0-6 นาโนเมตรโดยใช้วิธี elastic continuum theory และวิธี eight-band k.p นอกจากนี้ Saito และผู้ร่วมวิจัยยังศึกษาปรากฏการณ์โพลาไรเซชันของแสง (Optical polarization) ใน InAs/GaAs ควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน โดยที่ไม่มีระยะห่างระหว่างควอนตัมดอท Janusz Andrzejewski และผู้ร่วมวิจัย [7] เสนอผลการคำนวณโดยวิธี eight-band k.p ของสมบัติทางโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์และโพลาไรเซชันของ $In_zGa_{1-z}As$ /GaAs ควอนตัมดอทที่เรียงทับกันโดยที่ไม่มีระยะห่างระหว่างควอนตัมดอท อย่างไรก็ตามงานวิจัยดั่งกล่าว ยังไม่ได้ศึกษาแนวโน้มของระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทต่อความเครียด (Strain) และแถบพลังงานของควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน (Band profile) ซึ่งข้อมูลดั่งกล่าวเป็นพื้นฐานในการควบคุมคุมปรากฏการณ์โพลาไรเซชันของแสงซึ่งเป็นประโยชน์ในการประยุกต์ทางแสง

ในบทนี้ จะนำเสนอผลการคำนวณการกระจายตัวของความเครียดโดยใช้ทฤษฎีที่กล่าวข้างต้น ผู้วิจัยได้ศึกษาอิทธิพลของความเครียดที่เกิดขึ้นใน InAs/GaAs ควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน โดยระยะห่างระหว่างชั้นอยู่ในช่วง 0-6 นาโนเมตร นอกจากนี้ยังศึกษาอิทธิพลของความเครียดกับแถบพลังงานของควอนตัมดอทที่เรียงทับกันอีกด้วย

ทฤษฎี

การกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution)

ผลรวมของพลังงานอันเนื่องมาจากการกระจายตัวของความเครียดเท่ากับ [3, 8, 9]

$$U_{CE} = \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl}$$

พิจารณาอนุภาคควอนตัมดอท ค่า U_{CE} สามารถหาได้จากการทำให้ขนาดของ U_{CE} มีค่าน้อยที่สุดโดยประยุกต์วิธี Finite difference ค่าความเครียด ε_{ij} ตามแนว i และ j สามารถหาได้จาก $\varepsilon_{ij} = \left(\frac{du_i}{dx_j} + \frac{du_j}{dx_i}\right)/2$ เมื่อ u คือ

เวกเตอร์ของตำแหน่ง ค่า elastic moduli C_{ijkl} แทนด้วย C_{11}, C_{12} และ C_{44} โดยในตารางที่ 1 แสดงค่าคงที่ที่ใช้ในการคำนวณความเครียด [10]

ตารางที่ 1. ค่าคงที่ที่ใช้ในการคำนวณความเครียด

	C_{11}(GPa)	C_{12}(GPa)	C_{44}(GPa)	e_{14}(C.m^{-2})	ε
InAs	83.3	45.3	39.6	-0.115	14.6
GaAs	118.8	53.8	59.4	-0.230	13.18

Eight-band strain-dependent k.p method

อิทธิพลของความเครียดต่อโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิคสามารถศึกษาจากการเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงาน การศึกษาความเครียดสามารถเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานภายในโครงสร้างควอนตัมดอทสามารถทำได้โดยวิธี eight-band strain-dependent k.p Hamiltonian, $H_k + H_s$, เมื่อ H_k is the kinetic Hamiltonian และ H_s is the strained Hamiltonian ตารางที่ 2 แสดงค่าคงที่ที่ใช้ในการคำนวณ Eight-band strain-dependent k.p method [11]

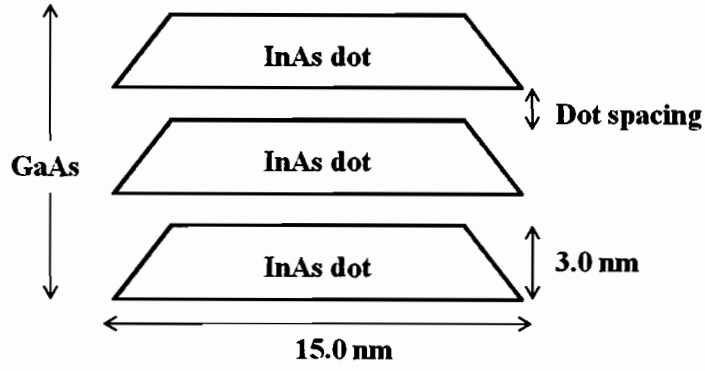
ตารางที่ 2. ค่าคงที่ที่ใช้ในการคำนวณ Eight-band strain-dependent k.p method

Parameters	InAs	GaAs
γ_1^L	19.67	6.85
γ_2^L	8.37	2.1
γ_3^L	9.29	2.9
E_g(eV)	0.418	1.519
Δ(eV)	0.38	0.33
E_p(eV)	22.2	25.7
a_c(eV)	-6.66	-8.6
a_v(eV)	0.66	-9.3
b(eV)	-1.8	0.7

d(eV)	-3.6	-2.0

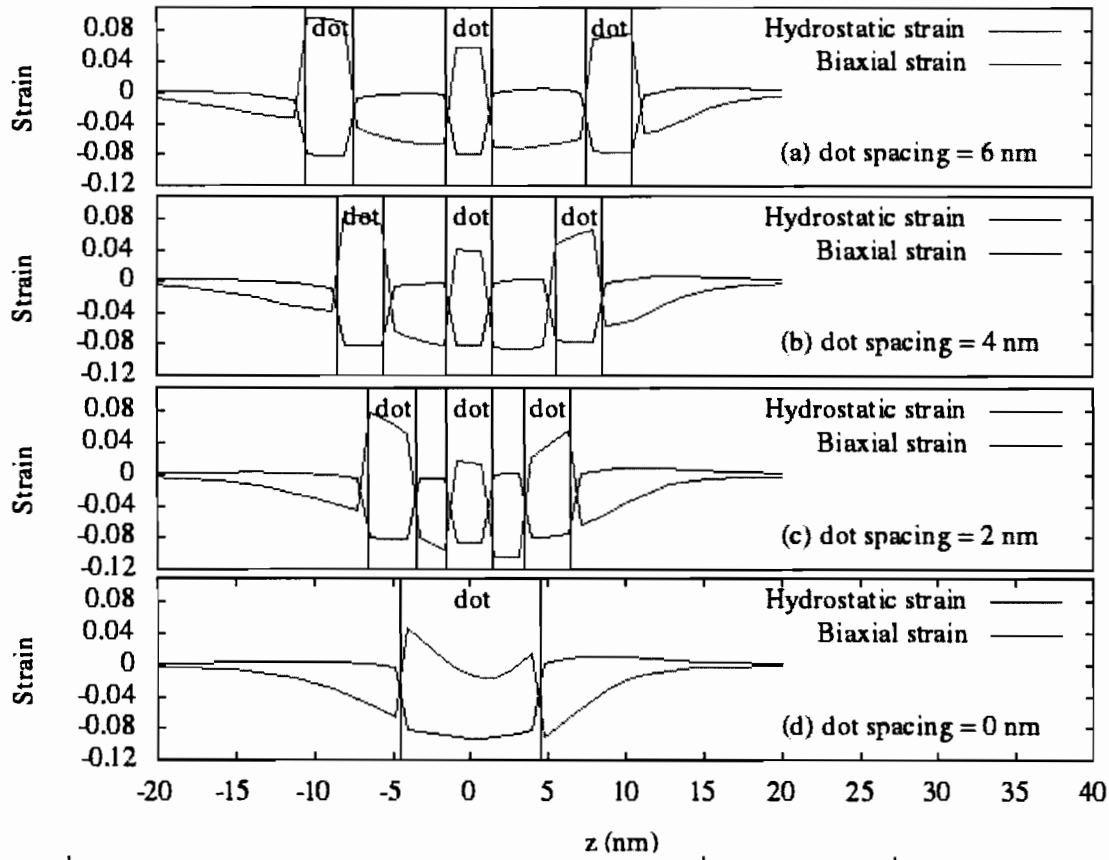
ผลการคำนวณ

ในงานวิจัยนี้ ควอนตัมดอทที่เรียงทับกันถูกจำลองขึ้นโดยประกอบด้วย InAs ควอนตัมดอทจำนวน 3 ตัวที่วางตัวในแนวตั้งบรรจุภายในสาร GaAs ซึ่งสอดคล้องกับการทดลอง ทิศทางการเรียงตัวของควอนตัมดอทจะอยู่ในแนวแกน z ควอนตัมดอทแต่ละตัวจะมีขนาดเท่ากันและมีรูปร่างเป็นพีระมิดเนื่องจากรูปร่างดังกล่าวสอดคล้องกับการทดลอง ควอนตัมดอทมีความสูงเท่ากับ 3.0 นาโนเมตร และ ฐานเป็นรูปสี่เหลี่ยมจตุรัสขนาด 15x15 นาโนเมตร^2 ระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทอยู่ในช่วง 0.0- 6.0 นาโนเมตร รูปที่ 1 แสดงภาพตัดขวางของควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว ความเครียดที่เกิดขึ้นในควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว ถูกคำนวณโดยวิธี continuum elasticity theory ซึ่งได้รับการยอมรับและใช้ในการคำนวณความเครียดในควอนตัมดอท 1 ตัว [12, 13].



รูปที่ 1 แสดงภาพตัดขวางของควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว

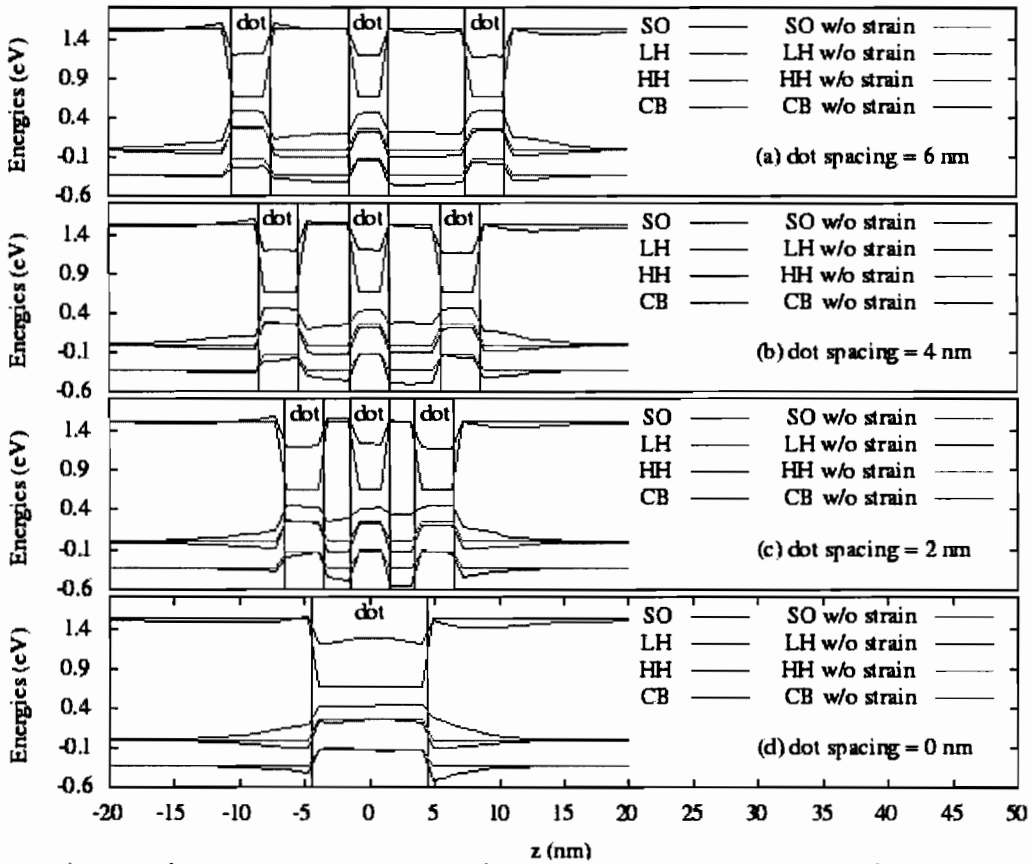
ในการศึกษาแถบพลังงานของควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว ความเครียดแบบ hydrostatic และ biaxial ได้รับการศึกษา โดยนิยาม ความเครียดแบบ hydrostatic $\varepsilon_H = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$ และ ความเครียดแบบ biaxial $\varepsilon_B = \varepsilon_{zz} - (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/2$ ความเครียดแบบ hydrostatic จะยกแถบพลังงานคอนดักชันและเวเลนซ์ ในขณะที่ ความเครียดแบบ biaxial จะทำให้แถบระดับพลังงานเวเลนซ์ที่เคยเท่ากัน มีค่าต่างกัน เมื่อพิจารณาความเครียด ในบทนี้ผู้วิจัยจะศึกษาผมของระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทต่อความเครียดแบบ hydrostatic และ ความเครียดแบบ biaxial รูปที่ 2 แสดงความเครียดแบบ hydrostatic และ ความเครียดแบบ biaxial ตามแนวแกน z เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทมีค่าเปลี่ยนไป จากกราฟพบว่า ในบริเวณ GaAs ความเครียดแบบ hydrostatic จะมีค่าเกือบเท่ากับศูนย์ ในขณะที่บริเวณควอนตัมดอท ความเครียดแบบ hydrostatic จะมีค่าเท่ากับ -0.08 ผลการคำนวณบอกว่ามีการบีบเกิดขึ้นภายในบริเวณควอนตัมดอท($\varepsilon_H < 0$) (Compressive) เนื่องจาก สาร GaAs ที่มีค่าความยาวของโครงสร้างสั้นกว่าความยาวของโครงสร้างของสาร InAs จะบีบควอนตัมดอท ณ ระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทเท่ากับ 0.0 นาโนเมตร ความเครียดแบบ biaxial มีค่าน้อยและมีค่าลบในจุดกึ่งกลางของควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทเพิ่มขึ้น ความเครียดแบบ biaxial ในบริเวณควอนตัมดอทจะมีขนาดเพิ่มขึ้น สาเหตุเกิดจากความยาวของโครงสร้างของสาร InAs ในแนวแกน z มีค่าแตกต่างกับความยาวของโครงสร้างของสาร GaAs ในแนวแกน z ส่วนในบริเวณรอบนอกควอนตัมดอท ความเครียดแบบ biaxial จะมีค่าเป็นลบ เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทเพิ่มขึ้น ความเครียดแบบ biaxial จะค่อยๆเพิ่มขึ้น



รูปที่ 2 การกระจายตัวของความเครียดใน InAs/GaAs ควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทเท่ากับ (a) 6 นาโนเมตร, (b) 4 นาโนเมตร, (c) 2 นาโนเมตร and (d) 0 นาโนเมตร

หลังจากศึกษาพฤติกรรมของความเครียด ต่อมาผู้วิจัยได้ศึกษาการเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงาน (Strain-modifying band profile) ของ InAs/GaAs ควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัวโดยใช้วิธี eight-band strain-dependent k.p ผู้วิจัยศึกษาอิทธิพลของระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทต่อแถบพลังงานของควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว ซึ่งประกอบด้วยแถบ conduction, heavy-hole, light-hole และ spin-orbit แสดงในรูปที่ 3 ในแบบจำลองนี้ ค่าผลต่างระหว่างแถบพลังงานเวเลนซ์ (valence band offset) ของ InAs และ GaAs รอยต่อเท่ากับ +0.25 eV [9]. นอกจากนี้ ผู้วิจัยพิจารณาอิทธิพลของความเครียดที่มีผลต่อแถบพลังงานเช่นกัน ผลการคำนวณพบว่า ความเครียดสามารถเปลี่ยนแปลงรูปร่างและระดับของแถบพลังงานของควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว ความเครียดแบบ biaxial จะส่งผลให้ระดับพลังงาน heavy hole และ light hole แตกต่างกันเปรียบเทียบกับผลการคำนวณที่ไม่ได้พิจารณาความเครียดแบบ biaxial ใน strained Hamiltonian (H_s) ในแถบพลังงาน conduction (CB) ความเครียดจะส่งผลให้แถบพลังงานในบริเวณควอนตัมดอทเพิ่มขึ้น ในขณะที่บริเวณรอบๆควอนตัมดอทแทบไม่มีการเปลี่ยนแปลง เนื่องมาจากอิทธิพลของความเครียดแบบ hydrostatic (ε_H) ในแถบพลังงาน heavy hole (HH) ความเครียดจะส่งผลทำให้แถบพลังงานดังกล่าวเพิ่มขึ้นในบริเวณควอนตัมดอท รอยต่อและระหว่างควอนตัมดอท ขณะที่ แถบพลังงาน heavy hole ในบริเวณที่ไกลจากควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัวไม่มีการเปลี่ยนแปลง ในแถบพลังงาน light-hole (LH) และ spin-orbit (SO) ความเครียดจะส่งผลทำให้แถบพลังงานดังกล่าวลดลงในบริเวณระหว่างควอนตัมดอทและรอยต่อ ในขณะที่บริเวณควอนตัมดอทและบริเวณรอบๆที่อยู่ห่างไกลจากควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัวไม่มีการเปลี่ยนแปลง จากนั้นพิจารณาระยะห่างระหว่างควอนตัมดอท พบว่า เมื่อไม่ได้พิจารณาความเครียดในการคำนวณ แถบพลังงานของควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัวไม่มีการเปลี่ยนแปลง แต่เมื่อพิจาณา

ความเครียดในการคำนวณจะได้ว่า จะเกิดการเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงานขึ้นอย่างมาก การเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงานอันเนื่องมาจากความเครียดของแถบพลังงานคอนดักชันและเวเลนซ์ ในบริเวณควอนตัมดอทไม่มีการเปลี่ยนแปลง ในขณะที่บริเวณระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทเกิดการเปลี่ยนแปลง เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทเพิ่มขึ้น การเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงานอันเนื่องมาจากความเครียดในบริเวณระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทจะเข้าใกล้สู้แถบพลังงานที่ไม่ได้พิจารณาความเครียดในการคำนวณ



รูปที่ 3 การเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงานอันเนื่องมาจากความเครียดในควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัวในแนวแกน z เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทเท่ากับ (a) 6 นาโนเมตร, (b) 4 นาโนเมตร, (c) 2 นาโนเมตร and (d) 0 นาโนเมตร

สรุปผลการคำนวณ

ผู้วิจัยได้อธิบายการกระจายตัวของความเครียดในควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว โดยระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทอยู่ในช่วง 0-6 นาโนเมตร ในขั้นตอนแรก ผู้วิจัยคำนวณการกระจายตัวของความเครียดโดยวิธี elastic continuum theory โดยประยุกต์วิธี Finite difference ขั้นตอนที่ 2 การเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงานอันเนื่องมาจากความเครียดสามารถหาได้จากวิธี eight-band strain-dependent k.p จากผลการคำนวณพบว่ามีการบีบตัวภายในบริเวณควอนตัมดอท ($\varepsilon_H < 0$) เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัวเพิ่มขึ้น ความเครียดแบบ biaxial ทั้งในบริเวณควอนตัมดอทและบริเวณรอบๆจะเพิ่มขึ้นเช่นกัน จากการคำนวณพบว่าความเครียดแบบ hydrostatic และความเครียดแบบ biaxial สามารถใช้ในการพิจารณารูปแบบของแถบพลังงาน ความเครียดแบบ hydrostatic จะยกระดับพลังงานคอนดักชันและเวเลนซ์ในขณะที่ ความเครียดแบบ biaxial จะทำให้แถบระดับพลังงานเวเลนซ์ที่เคยเท่ากัน มีค่าต่างกัน เมื่อพิจารณาความเครียด สุดท้าย ความเครียดและระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทส่งผลกระทบอันสำคัญต่อรูปร่างและระดับของแถบพลังงานในควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว

บรรณานุกรม

[1] M Grundmann. Nano-Optoelectronics: Concepts, Physics, and Devices. Springer-Verlag, New York, 2002, p. 167-199.

[2] T Nakaoka, T Tatebayashi, and Y Arakawa. Spectroscopy on single columns of vertically aligned InAs quantum dots. Physica E. 2004; 21, 409-413.

[3] T Saito, T Nakaoka, T Kakitsuka, Y Yoshikuni and Y Arakawa. Strain distribution and electronic states in stacked InAs/GaAs quantum dots with dot spacing 0-6 nm. Physica E. 2005; 26, 217-221.

[4] T Kita, O Wada, H Ebe, Y Nakata and M Sugawara. Polarization-Independent Photoluminescence from Columnar InAs/GaAs Self-Assembled Quantum Dots. Jpn. J. Appl. Phys. 2002; 41, L1143-L1145.

[5] T Kita, P Jayavel, O Wada, H Ebe, Y Nakata and M Sugawara. Polarization controlled edge emission from columnar InAs/GaAs self-assembled quantum dots. Physica Status Solidi (C). 2003; 0, 1137-1140.

[6] T Saito, H Ebe, Y Arakawa, T Kakitsuka and M Sugawara. Optical polarization in columnar InAs/GaAs quantum dots: 8-band k•p calculations. Phys. Rev. B. 2008; 77, 195318-195328.

[7] Janusz Andrzejewski, Grzegorz Sek, Eoin O'Reilly, Andrea Fiore, and Jan Misiewicz. Eight-band k•p calculations of the composition contrast effect on the linear polarization properties of columnar quantum dots. J. Appl. Phys. 2010; 107, 073509-073520.

[8] Oliver Stier. Electronic and Optical Properties of Quantum Dots and Wires. Wissenschaft & Technik Verlag, Germany, 2000, p. 35-40.

[9] C Pryor, J Kim, LW Wang, AJ Williamson and A Zunger. Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots. J. Appl. Phys. 1998; 83, 2548-2554.

[10] Zhao Wei, Yu Zhong-Yuan and Liu Yu-Min. Piezoelectric effects and electronic structures of InAs/GaAs quantum dots grown along (111) and (011) directions. Chin. Phys. B. 2010; 19, 067302-067305.

[11] Craig Pryor. Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations. Phys. Rev. B. 1998; 57, 7190-7195.

[12] M Grundmann, O Stier and D Bimberg. InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure. Phys. Rev. B. 1995; 52, 11969-11981.

[13] T Nakaoka, T Kakitsuka, T Saito, S Kako, S Ishida, M Nishioka, Y Yoshikuni and Y Arakawa. Strain-induced modifications of the electronic states of InGaAs quantum dots. J. Appl. Phys. 2003; 94, 6812-6817.

สำนักวิทยบริการ
มหาวิทยาลัยนเรศวร

บทที่ 5

อิทธิพลของการกระจายตัวของความเครียดและ Piezoelectricity ต่อสมบัติทางโครงสร้างของควอนตัมดอท

Effect of the strain distribution and piezoelectricity on Electronic structure of Quantum Dots

บทนำ

ในปัจจุบัน โครงสร้างในระดับนาโน เช่น ควอนตัมเวลล์ (Quantum well) ควอนตัมดอท (Quantum dots) ได้รับความสนใจในการศึกษาทั้งในด้านทฤษฎีและทดลองอย่างแพร่หลาย [1-4]. วัสดุมากมายถูกสร้างจากควอนตัมดอท เช่น ไดโอดเรืองแสง (Light-emitting diode) และ เลเซอร์ (Laser) เป็นต้น [5-8] ควอนตัมดอทสามารถสังเคราะห์โดยวิธี Stranski-Krastanov ซึ่งอาศัยความแตกต่างกันของความยาวโครงสร้างทางผลึกของสาร (Lattice constant) [9] ปัจจุบันมีหลายวิธีการคำนวณในการศึกษาโครงสร้างและสมบัติของควอนตัมดอท เช่น วิธี tight-binding, วิธี pseudopotential, วิธี DFT และวิธีเคดอทพี (k.p) เป็นต้น ในงานวิจัยนี้ ผู้วิจัยเลือกใช้วิธีเคดอทพีในการคำนวณหาระดับพลังงานและฟังก์ชันคลื่นของสถานะอิเล็กตรอน (Electron) และโฮล (Hole) เนื่องจากวิธีดังกล่าวสามารถศึกษาควอนตัมดอทในขนาดที่ใหญ่ได้

วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้คือ การศึกษาอิทธิพลของการกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution) และ Piezoelectricity ต่อสมบัติทางโครงสร้างของควอนตัมดอท (Electronic structure) โดยการคำนวณหาระดับพลังงานเมื่อขนาดของควอนตัมดอทมีค่าเปลี่ยนไป โดยพิจารณและไม่พิจารณาความเครียดและ Piezoelectricity สุดท้ายผู้วิจัยศึกษาการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันคลื่น (Wave functions) ในกรณีที่พิจารณและไม่พิจารณาความเครียดและ Piezoelectricity เช่นกัน

ทฤษฎี

การกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution)

ผลรวมของพลังงานอันเนื่องมาจากการกระจายตัวของความเครียดเท่ากับ [3, 8, 9]

$$U_{CE} = \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl}$$

พิจารณาอนุภาคควอนตัมดอท ค่า U_{CE} สามารถหาได้จากการทำให้ขนาดของ U_{CE} มีค่าน้อยที่สุดโดยประยุกต์วิธี Finite difference ค่าความเครียด ε_{ij} ตามแนว i และ j สามารถหาได้จาก $\varepsilon_{ij} = \left(\frac{du_i}{dx_j} + \frac{du_j}{dx_i}\right)/2$ เมื่อ u คือเวกเตอร์ของตำแหน่ง ค่า elastic moduli C_{ijkl} แทนด้วย C_{11}, C_{12} และ C_{44} โดยในตารางที่ 1 แสดงค่าคงที่ที่ใช้ในการคำนวณความเครียด [10]

ตารางที่ 1. ค่าคงที่ที่ใช้ในการคำนวณความเครียด

	C_{11}(GPa)	C_{12}(GPa)	C_{44}(GPa)	e_{14}(C.m^{-2})	ε
InAs	83.3	45.3	39.6	-0.115	14.6
GaAs	118.8	53.8	59.4	-0.230	13.18

วิธีเคดอทพี (k.p method)

เพื่อศึกษาคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของควอนตัมดอทเราต้องเข้าใจโครงสร้างของวัสดุ มีการคำนวณตามทฤษฎีของโครงสร้างหลายวิธี เช่น Tight-binding Pseudo-potential k.p เป็นต้น ซึ่งเทคนิคแต่ละอย่างมีแนวทางในการคำนวณคุณสมบัติของเซมิคอนดักเตอร์ที่แตกต่างกัน แต่เริ่มต้นจากสมการพื้นฐานสมการ Schrodinger ซึ่งในงานวิจัยนี้จะใช้วิธี k.p ในการศึกษาสมบัติของอนุภาคควอนตัมดอท

Two-band model

วิธีนี้จะใช้ในการคำนวณหาระดับพลังงานของสถานะอิเล็กตรอน ฟังก์ชันคลื่นของสถานะอิเล็กตรอน อยู่ในรูปของการรวมกันเชิงเส้นของ Conduction band ดังสมการ

$$\psi_{i_e}^{e}(\vec{r}) = \sum_{s_z=\pm 1/2} g_{i_e,s_z}^{e}(\vec{r}) u_{s;s_z}(\vec{r})$$

เมื่อ $s = 1/2, s_z = \pm 1/2$

$$|u_{1/2;+1/2}> = s\uparrow$$

$$|u_{1/2;-1/2}> = s\downarrow$$

Four-band model

วิธีนี้จะใช้ในการคำนวณหาระดับพลังงานของสถานะเวเล็นอิเล็กตรอน ฟังก์ชันคลื่นของสถานะเวเล็นซ์อิเล็กตรอน อยู่ในรูปของการรวมกันเชิงเส้นของ Valence band ดังสมการ

$$\psi_{i_v}^{v}(\vec{r}) = \sum_{j_z=\pm 1/2,\pm 3/2} g_{i_v,j_z}^{v}(\vec{r}) u_{j;j_z}(\vec{r})$$

เมื่อ

$$|3/2;+3/2> = \frac{i}{\sqrt{2}}[|X\uparrow> + i|Y\uparrow>]$$

$$|3/2;+1/2> = \frac{i}{\sqrt{6}}[|X\downarrow> + i|Y\downarrow> -2|Z\uparrow>]$$

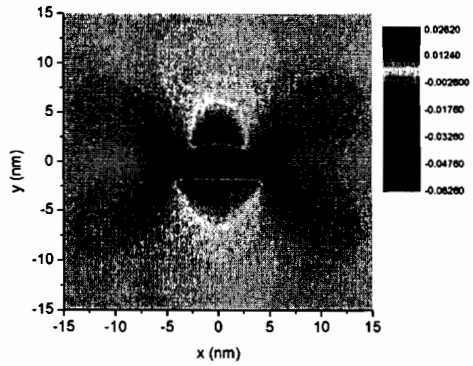
$$|3/2;-1/2> = \frac{i}{\sqrt{6}}[|X\uparrow> - i|Y\uparrow> +2|Z\downarrow>]$$

$$|3/2;-3/2> = -\frac{i}{\sqrt{2}}[|X\downarrow> + i|Y\downarrow>]$$

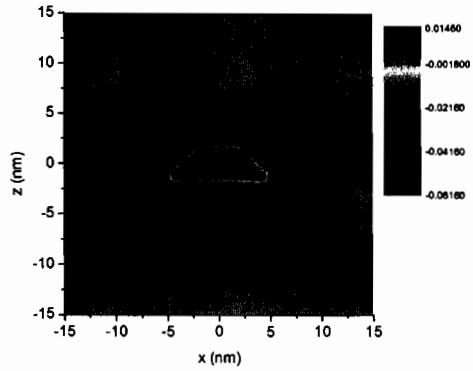
ผลการคำนวณ

การกระจายตัวของความเครียดและ Piezoelectricity

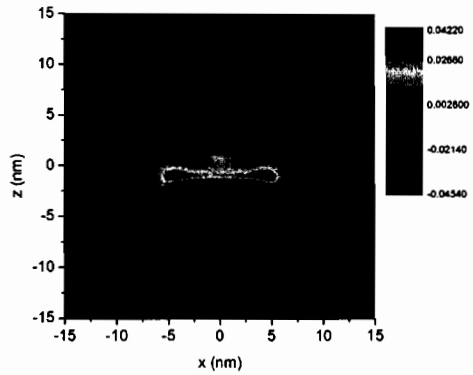
ผู้วิจัยคำนวณการกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution) และ Piezoelectricityของ InAs/GaAs ควอนตัมดอทที่มีรูปร่างแบบพีระมิดที่มีฐานเป็นรูปสี่เหลี่ยมจตุรัสขนาด 10.0x10.0 นาโนเมตร^2 สูง 3.0 นาโนเมตร เริ่มต้นผู้วิจัยศึกษาการกระจายตัวของความเครียดตามระนาบ xz ของ e_{xx} , e_{yy} และ e_{zz} แสดงในรูป 1, 2 และ 3 ตามลำดับ ณ ตำแหน่งด้านล่างของควอนตัม e_{xx} และ e_{yy} เป็นค่าบวก ขณะที่ e_{zz} เป็นค่าลบ ในบริเวณฐานของควอนตัมดอท e_{xx} , e_{yy} และ e_{zz} มีค่าตรงกันข้ามกับที่กล่าวมา e_{xx} และ e_{yy} มีค่าเป็นลบในบริเวณควอนตัมดอทและมีค่าเป็นบวกในบริเวณยอดของควอนตัมดอท เนื่อง สาร GaAs จะออกแรงบีบ InAs ควอนตัมดอทตามแนวแกน z เมื่อพิจารณาตามทิศทางความสูงของควอนตัมดอทพบว่า ค่าของ e_{zz} จะมีค่าเปลี่ยนจากบวกไปเป็นลบที่ยอดสุดของควอนตัมดอท



รูปที่ 1 กราฟ 2 มิติของ e_{xx}

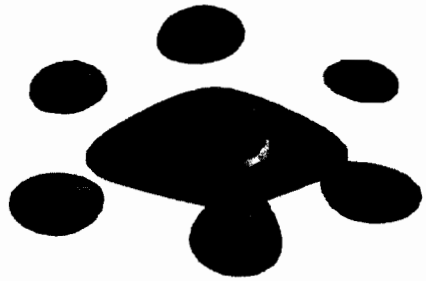


รูปที่ 2 กราฟ 2 มิติของ e_{yy}



รูปที่ 3 กราฟ 2 มิติของ e_{zz}

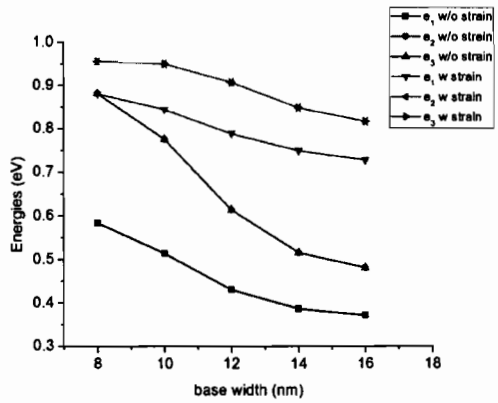
หลังจากนั้นผู้วิจัยคำนวณหาค่าพลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity ของ InAs/GaAs ควอนตัมดอทโดยหาผลเฉลยของสมการ Poissonใน 3 มิติ รูปที่ 4 แสดงค่าพลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity ใน 3 มิติ ผลการคำนวณอธิบายว่า ค่าพลังงานศักย์จะอยู่ในบริเวณที่ใกล้กับจุดยอดและฐานของควอนตัมดอท นอกจากนี้ยังพบว่า ค่าพลังงานศักย์มีค่าเป็นบวก (สีแดง) ตามแนว $[1\bar{1}0]$ และลบ สีน้ำเงิน) ตามแนว [110] พลังงานศักย์มีค่า ± 30 meV. การคำนวณยังบ่งบอกว่าเป็นสมมตารแบบ C_{2v} [3, 4].



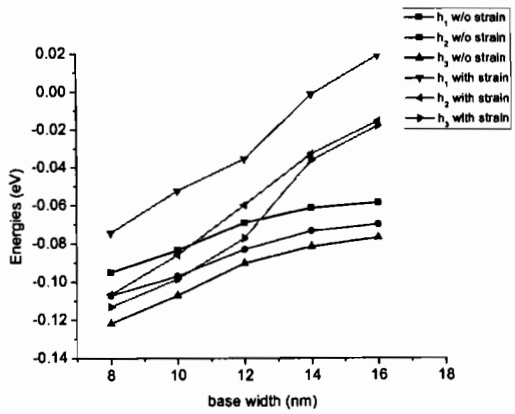
รูปที่ 4 ภาพ 3 มิติของค่าพลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity ของ InAs/GaAs ควอนตัมดอท

สมบัติโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิค

สมบัติโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ของควอนตัมดอทที่สังเคราะห์จาก InAs/GaAs โดยวิธีเดดอทพี รูปร่างของควอนตัมดอทคือ พีระมิด ที่มีฐานเป็นรูปสี่เหลี่ยมจตุรัสขนาด b นาโนเมตร^2 สูง 3.0 นาโนเมตร กราฟที่ 5, 6 แสดงระดับพลังงานของอิเล็กตรอนและโฮล เมื่อความยาวของควอนตัมดอมมีค่าต่างๆ ตามลำดับ ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยศึกษาอิทธิพลของความเครียดต่อระดับพลังงานของอิเล็กตรอน (Electron) และโฮล (Hole) จากการคำนวณพบว่า ความเครียดที่เกิดขึ้นในควอนตัมดอทมีผลกระทบต่อระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท โดยระดับพลังงานของอิเล็กตรอน (Electron) และโฮล (Hole) จะเพิ่มขึ้นเมื่อพิจารณาความเครียดในการคำนวณ เมื่อเทียบกับการคำนวณระดับพลังงานของสถานะที่ไม่ได้พิจารณาความเครียด นอกจากนี้ เมื่อขนาดของควอมตัมดอทเพิ่มขึ้น ระดับพลังงานของอิเล็กตรอนจะลดลง ในขณะที่ระดับพลังงานของโฮลจะเพิ่มขึ้น ซึ่งส่งผลให้ช่องว่างของพลังงานลดลง (Band gap) ดังนั้นค่าช่องว่างของพลังงาน (Band gap) จะถูกปรับได้โดยขนาดของควอนตัมดอท

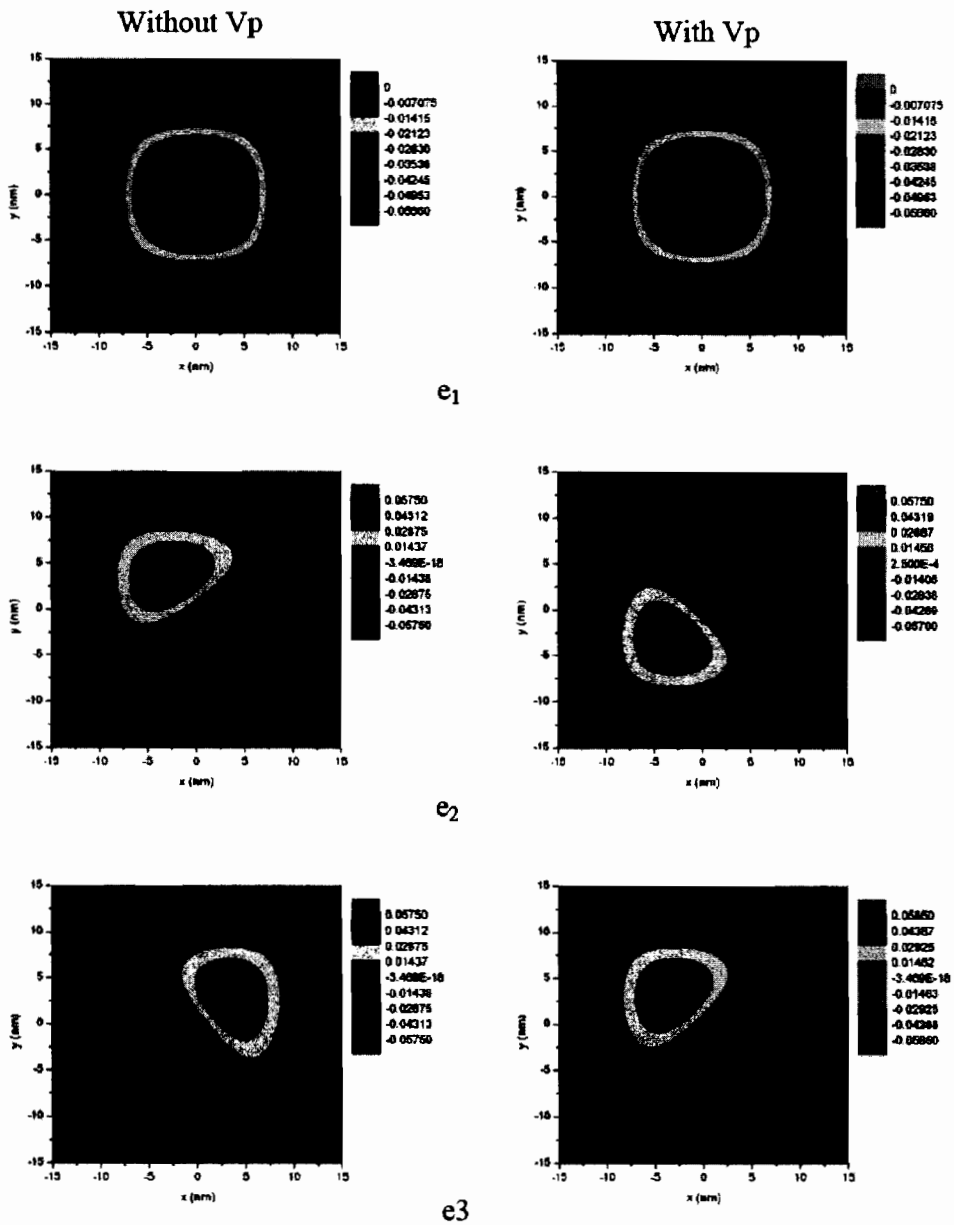


รูปที่ 5 ระดับพลังงานอิเล็กตรอนของ InAs/GaAs ควอนตัมดอม ณ ขนาดต่างๆ

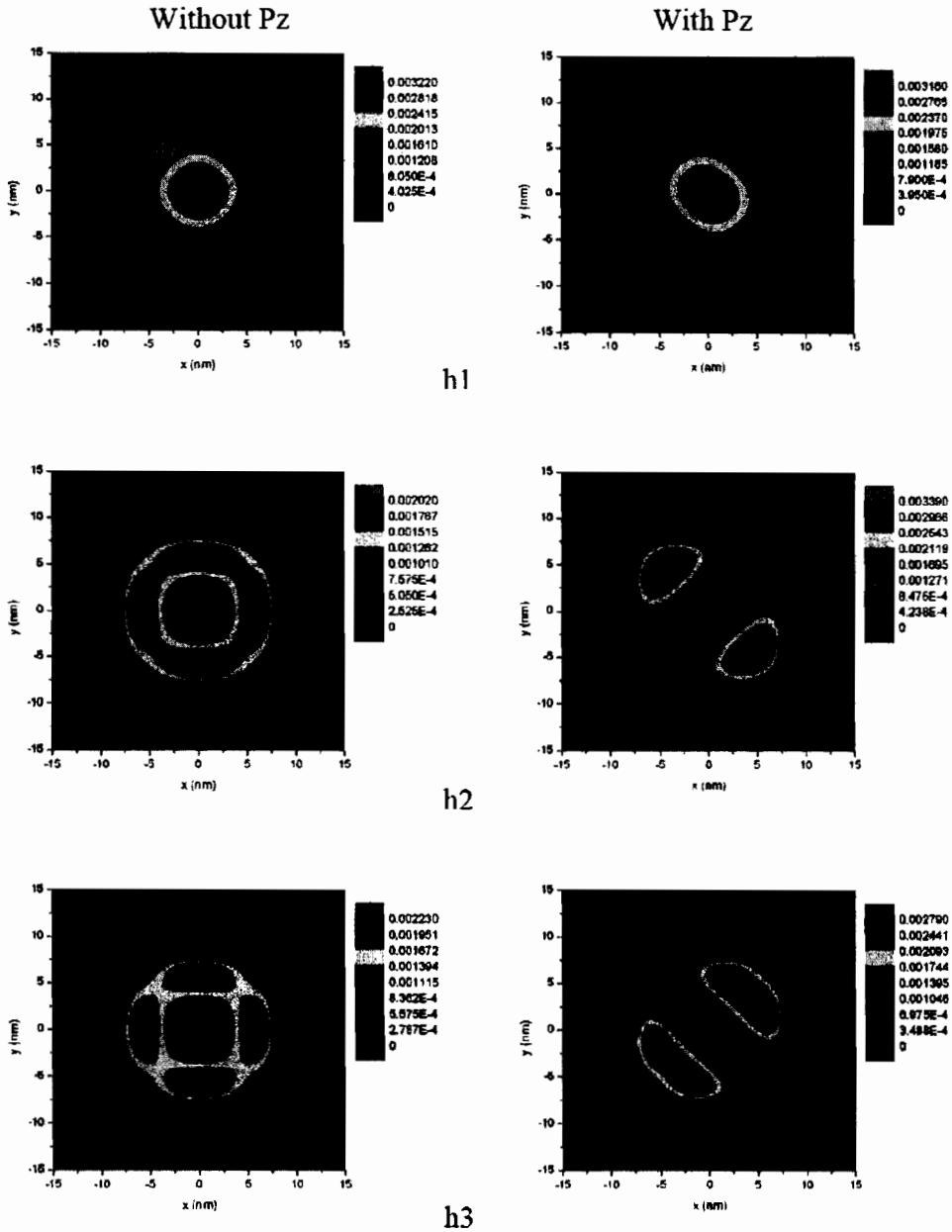


รูปที่ 6 ระดับพลังงานโฮลของ InAs/GaAs ควอนตัมดอม ณ ขนาดต่างๆ

สุดท้ายผู้วิจัยได้ศึกษาปรากฏการณ์ Piezoelectricity โดยพิจารณาควอนตัมดอทรูปพีระมิด ที่มีฐานเป็นรูปสี่เหลี่ยมจตุรัสขนาด 10.0 นาโนเมตร^2 สูง 3.0 นาโนเมตร เมื่อพิจารณา Piezoelectricity ในการคำนวณ พบว่า ระดับพลังงานของอิเล็กตรอนและโฮลจะลดลงน้อยมากเมื่อเทียบกับระดับพลังงานของอิเล็กตรอนและโฮลที่พิจารณาความเครียดในการคำนวณ นอกจากนี้ผู้วิจัยได้ศึกษาการวางตัวของฟังก์ชันคลื่นของสถานะอิเล็กตรอนและโฮล ตามแนวแกน x และ y แสดงในรูปภาพ 2 มิติ ที่ 7 และ 8 ตามลำดับ โดยพิจารณา Piezoelectricity ในการคำนวณและไม่พิจารณา Piezoelectricity ในการคำนวณ พบว่า พลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity ไม่ได้เปลี่ยนแปลงการวางตัวของสถานะอิเล็กตรอนที่ 1 (e_1) ซึ่งประกอบด้วยออร์บิตอบ เอส (s orbital) ในส่วนของสถานะอิเล็กตรอนที่ 2 และ 3 (e_2 และ e_3) ซึ่งประกอบด้วยออร์บิตอลพี (p orbital) Piezoelectricity ทำให้เกิดการกลับทิศทางการวางตัวของฟังก์ชันจาก $[1\bar{1}0]$ เป็น [110] และในทางกลับกันเมื่อเทียบกับการคำนวณที่ไม่ได้พิจารณา Piezoelectricity ในส่วนของสถานะโฮล Piezoelectricity ทำให้วางตัวของฟังก์ชันเปลี่ยนแปลงไปเมื่อเทียบกับฟังก์ชันคลื่นที่ไม่ได้พิจารณา Piezoelectricity ในการคำนวณ เนื่องจากสถานะโฮลสร้างจากการรวมตัวกันของออร์บิตอลพี (p orbital) การพิจารณา Piezoelectricity ส่งผลให้เกิดสมมตารชนิด C_{2v}



รูปที่ 7 กราฟ 2 มิติของฟังก์ชันคลื่นของสถานะอิเล็กตรอนเมื่อพิจารณาและไม่พิจารณา Piezoelectricity (Pz)



รูปที่ 8 กราฟ 2 มิติของฟังก์ชันคลื่นของสถานะโฮลเมื่อพิจารณาและไม่พิจารณา Piezoelectricity (Pz)

สรุปผลการคำนวณ

งานวิจัยนี้ศึกษาอิทธิพลของการกระจายตัวของความเครียดและปรากฏการณ์ Piezoelectricity ในเชิงทฤษฎีโดยวิธี continuum elasticity และเคคอทพี ผลการคำนวณแสดงว่า การกระจายตัวของความเครียดและปรากฏการณ์ Piezoelectricity มีอิทธิพลอย่างมากต่อโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิคของควอนตัมดอท โดยความเครียดจะยกระดับพลังงานของอิเล็กตรอนและโฮลเมื่อเทียบกับการคำนวณที่ไม่ได้พิจารณาความเครียด ในขณะที่พลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity ไม่ได้เปลี่ยนแปลงการวางตัวของฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนระดับพลังงานที่ 1 (e_1) แต่จะส่งผลให้เกิดการกลับทิศทางการวางตัวของฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนระดับพลังงานที่ 2 และ 3 (e_2 และ e_3) จาก $[1\bar{1}0]$ เป็น [110] และในทางกลับกัน

บทที่ 6
สรุปผลการคำนวณและข้อเสนอแนะ

สรุปผลการคำนวณ

ผู้วิจัยได้อธิบายการกระจายตัวของความเครียดในควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว โดยระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทอยู่ในช่วง 0-6 นาโนเมตร โดยประยุกต์วิธีทฤษฎียืดหยุ่นอย่างต่อเนื่อง (elastic continuum theory) ในคำนวณการกระจายตัวของความเครียด ศึกษาการเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงานอันเนื่องมาจากความเครียดโดยวิธี eight-band strain-dependent k.p จากผลการคำนวณพบว่ามีการบีบตัวภายในบริเวณควอนตัมดอท ($\varepsilon_H < 0$) เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัวเพิ่มขึ้น ความเครียดแบบ biaxial ทั้งในบริเวณควอนตัมดอทและบริเวณรอบๆจะเพิ่มขึ้นเช่นกัน จากการคำนวณพบว่าความเครียดแบบ hydrostatic และ ความเครียดแบบ biaxial สามารถใช้ในการพิจารณารูปแบบของแถบพลังงาน ความเครียดแบบ hydrostatic จะยกระดับพลังงานคอนดักชันและเวเล็นซ์ในขณะที่ ความเครียดแบบ biaxial จะทำให้แถบระดับพลังงานเวเลนซ์ที่เคยเท่ากัน มีค่าต่างกัน เมื่อพิจารณาความเครียด สุดท้าย ความเครียดและระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทส่งผลกระทบอันสำคัญต่อรูปร่างและระดับของแถบพลังงานในควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว

งานวิจัยนี้ศึกษาอิทธิพลของการกระจายตัวของความเครียดและปรากฏการณ์ Piezoelectricity ในเชิงทฤษฎีโดยวิธี continuum elasticity และเคดอทพี ผลการคำนวณแสดงว่า การกระจายตัวของความเครียดและปรากฏการณ์ Piezoelectricity มีอิทธิพลอย่างมากต่อโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ของควอนตัมดอท โดยความเครียดจะยกระดับพลังงานของอิเล็กตรอนและโฮลเมื่อเทียบกับการคำนวณที่ไม่ได้พิจารณาความเครียด ในขณะที่พลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity ไม่ได้เปลี่ยนแปลงการวางตัวของฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนระดับพลังงานที่ 1 (e_1) แต่จะส่งผลให้เกิดการกลับทิศทางการวางตัวของฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนระดับพลังงานที่ 2 และ 3 (e_2 และ e_3) จาก $[1\bar{1}0]$ เป็น [110] และในทางกลับกัน ในส่วนของสถานะโฮล Piezoelectricity ทำให้วางตัวของฟังก์ชันเปลี่ยนแปลงไปเมื่อเทียบกับฟังก์ชันคลื่นที่ไม่ได้พิจารณา Piezoelectricity ในการคำนวณ

ข้อเสนอแนะ

1. งานวิจัยนี้สามารถศึกษาเพิ่มเติมในเรื่องอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฮล ภายในควอนตัมดอม (Elelctron-hole interaction in Quantum dots) ซึ่งเป็นพื้นฐานในการศึกษาเซลล์สุริยะ (Solar cell)
2. งานวิจัยนี้สามารถศึกษาในการประยุกต์ควอนตัมดอทในการศึกษาปรากฏการณ์ Polarization ภายในควอนตัมดอท ซึ่งเป็นพื้นฐานในการศึกษา Quantum Computer

บรรณานุกรม

1. M.A. Naser, M.J. Deen, D.A. Thompson. (2007). Spectral function and responsivity of resonant tunneling and superlattice quantum dot infrared photodetectors using Green's function. J. Appl. Phys., 102, 083108.
2. V. Ryzhii, V. Mitin, M. Stroscio. (2001). On the detectivity of quantumdot infrared photodetectors. Appl. Phys. Lett., 78, 3523.
3. Oliver Stier. (2000). Electronic and Optical Properties of Quantum Dots and Wires. Wissenschaft & Technik Verlag.
4. Worasak Sukkabot. (2010). Electronic Structure of Quantum Dot: Tight-Binding Approach. PhD Thesis, University of Surrey.
5. S. Fafard, K. Hinzer, S. Raymond, M. Dion. (1996). J. McCaffrey, Y. Feng, S. Charbonneau, Red-Emitting Semiconductor Quantum Dot Lasers. Science, 274, 1350.
6. Pilkyung Moon, Won Jun, Kwangmin Park, Euijoon Yoon, and JaeDong Lee. (2011). Anomalous strain profiles and electronic structures of a GaAs-capped $InAs / In_{0.53}Ga_{0.47}As$ quantum ring. J. Appl. Phys., 109, 103701.
7. S. I. Rybchenko, G. Yeap, R. Gupta, I. E. Itskevich, and S. K. Haywood. (2007). Importance of aspect ratio over shape in determining the quantization potential of self-assembled zinc-blende III-V quantum dots. J. Appl. Phys., 102, 013706.
8. Beka Bochorishvili. (2011). Electronic states and oscillator strengths for interband transitions of a graded quantum dot quantum well structure. Physica E., 43, 874–876.
9. C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang, A. J. Williamson, and A. Zunger. (1998). Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots. J. Appl. Phys., 83, 2548.

บรรณานุกรม

1. Marius Grundmann Dieter Bimberg and Nikolai N. Ledentsov. Quantum dot heterostructures John Wiley, 1999.
2. Marius Grundmann. The Physics of Semiconductors: An Introduction Including Devices and Nanophysics. Springer, 2006.
3. Stephen Michael North. Electronic Structure of GaSb/GaAs and Si/Ge Quantum Dots. 2001.
4. P. Harrison. Quantum Wells, Wires and Dots. John Wiley Sons, 2006.
5. Stefan Schulz. Electronic and Optical Properties of Quantum dots: A Tight-Binding Approach. 2007.
6. W.Sukkabot. Electronic Structure of Quantum Dot: Tight-Binding Approach. 2010.
7. Lew Yan Voon, Lok C., Willatzen, Morten. The k p Method: Electronic Properties of Semiconductors, Springer, 2009

ภาคผนวก ก

บทความงานวิจัย

SCIENCE JOURNAL
Ubonratchathani University
http://scjubu.sci.ubu.ac.th

Sci. J. UBU, Vol.

Research Article

Effect of the strain distribution and piezoelectricity on Quantum Dots: k.p method

W.Sukkabot[1*]

[1]*Department of Physics, Faculty of Science, Ubon Ratchathani University, 85 Sathollmark Rd. Warinchamrab, Ubon Ratchathani, Thailand, 34190*

Received <Date>; Accepted <Date>

Abstract

This paper presents the calculations of the electronic structure and strain distribution for self-organized InAs/GaAs quantum dots. The strain calculations are based on the continuum elastic theory. The piezoelectric potential is calculated by solving the 3D Poisson's equation. The electron and hole energy levels of the InAs/GaAs quantum dots are calculated by implementing the k.p method. The calculated results show the importance of strain and piezoelectric effects.

Keywords: Quantum dot, k.p method, strain distribution and piezoelectricity.

1. Introduction

In recent years, the low-dimensional semiconductor nanostructures such as quantum wells and quantum dots (QDs) have attracted much attention in both experimental and theoretical researches [1-4]. Various semiconductor devices built from quantum dots have been studied, e.g., light emitting diodes and laser diodes [5-8]. Quantum dots can be produced by means of the Stranski-Krastanov process which uses the relief of elastic energy when two materials with a large lattice mismatch form an epitaxial structure [9]. In order to understand the electronic properties of the quantum dots, there are several approaches. In this work, we have calculated the single-particle electron and hole states and wave functions by implementing the k.p method because of the advantage to handle the computations in large sizes of quantum dots.

The aim of this study is to theoretically investigate the effect of strain and piezoelectricity on the electronic structures of self-assembled InAs/GaAs quantum dots. We calculate the energy trends as a function of dot sizes with and without

*Corresponding author.
E-mail address: w.sukkabot@gmail.com

Copyright © 2010 Faculty of Science, Ubon Ratchathani University. All rights reserved.

including the strain field and piezoelectricity. Finally, the wave functions of electron and hole states are evaluated with and without the piezoelectricity.

2. Theory

Strain Distribution

The atomic positions inside and around the quantum dot can be described in terms of the supercell of the Face-centered cubic structure. Due to the lattice mismatch between quantum dot and surrounding material, the atomic positions can change and the strain field also takes place in this structure. Continuum elasticity (CE) is determined to study. The total strain energy in the CE model is given by [3, 9]:

$$U_{CE} = \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl}$$

For a given structure, U_{CE} is minimized by using finite differences for the strains. The strain and the stress can be expressed as

$$\varepsilon_{ij} = \left(\frac{du_i}{dx_j} + \frac{du_j}{dx_i}\right)/2,$$

where u is the displacement vector field. The elastic moduli C_{ijkl} are represented by the parameters C_{11}, C_{12} and C_{44} for cubic crystals. Table I shows the material parameters [10] used for the calculation.

Piezoelectricity

The strain in quantum dot causes the atoms in the structure to change the crystal lattice geometry [10-12]. These changes can guide to the polarization in this structure. The piezoelectricity is defined as the creation of electric polarization by the application of stress to a crystal lacking a center of symmetry.

The piezoelectric potential is obtained by solving Poisson's equation.

$$\nabla^2 V_{pz} = \frac{\rho}{\varepsilon(r)}$$

Where V_{pz} is the piezoelectric potential. ρ is the piezoelectric charge defined as :

$$\rho = -\nabla \cdot P$$

And P is the polarization given by:

$$P = 2e_{14}\begin{vmatrix} e_{yz} \\ e_{xz} \\ e_{xy} \end{vmatrix}$$

Where e_{yz}, e_{xz} and e_{xy} are the off-diagonal components of the strain tensors and e_{14} is the piezoelectric constant of the considered material. $\varepsilon(r)$ is the static dielectric constant of the respective material at the position r. The parameters used to calculate the piezoelectricity are expressed in Table I. The piezoelectric potentials can be obtained by solving the 3D Poisson's equation in the path of the finite difference method. The piezoelectric potential is incorporated to k.p Hamiltonian as a diagonal term [13]:

$$H = H_{k.p} + V_{pz}I$$

Where $H_{k.p}$ is the k.p Hamiltonian and I is the identity matrix.

Electronic structure

In order to study the electronic properties of quantum dots, the band structure of the materials is symmetrically understood. There are several theoretical calculations such as effective mass [14], tight-binding [15, 16], pseudopotential [17], k.p method [3] and density functional theory [18]. Each technique has their own path to theoretically calculate the band properties of semiconductors. However, they start from the fundamental equation, Schrodinger equation. In this work, we have implemented the two-band model and four-band model to investigate the electron and valence states of quantum dots, respectively.

In two-band model, the wave functions of the electron states are a linear combination of the conduction bands given by:

$$\psi^e_{i_e}(\bar{r}) = \sum_{s_z=\pm 1/2} g^e_{i_e,s_z}(\bar{r})u_{s;s_z}(\bar{r})$$

Where $s = 1/2, s_z = \pm 1/2$

$$|u_{1/2;+1/2}> = s\uparrow$$

$$|u_{1/2;-1/2}> = s\downarrow$$

$g^e_{i_e,s_z}$ is the coefficient

Copyright © 2010 Faculty of Science, Ubon Ratchathani University. All rights reserved.

In four-band model, the wave functions of the valence states are a linear combination of the valence bands defined as:

$$\psi_{i_v}^{v}(\bar{r}) = \sum_{j_z=\pm 1/2,\pm 3/2} g_{i_v,j_z}^{v}(\bar{r}) u_{j;j_z}(\bar{r})$$

Where

$$\text{Heavy hole}\,|3/2;+3/2>=\frac{i}{\sqrt{2}}[|X\uparrow>+i|Y\uparrow>]$$

$$\text{Light hole}\,|3/2;+1/2>=\frac{i}{\sqrt{6}}[|X\downarrow>+i|Y\downarrow>-2|Z\uparrow>]$$

$$\text{Light hole}\,|3/2;-1/2>=\frac{i}{\sqrt{6}}[|X\uparrow>-i|Y\uparrow>+2|Z\downarrow>]$$

$$\text{Heavy hole}\,|3/2;-3/2>=-\frac{i}{\sqrt{2}}[|X\downarrow>+i|Y\downarrow>]$$

g_{i_v,j_z}^{v} is the coefficient

3. Results and Discussion

Strain distribution and Piezoelectricity

We have analyzed the strain distribution and the piezoelectricity in pyramidal InAs/GaAs quantum dot. To model the structure, we choose a finite GaAs zinc-blende lattice within a box with the boundary conditions. Within this box, we consider an InAs base width of 10.0 nm and height of 3.0 nm.

To consider strain influence on InAs/GaAs quantum dot, the knowledge of the strain tensors is essential. We have calculated the strain tensors at the middle of the y axis scanning along x and z directions. The contour plots of the strain tensors e_{xx}, e_{yy} and e_{zz} are visualized in Figure 1, 2 and 3, respectively. Below the InAs quantum dot, e_{xx} and e_{yy} are positive, while e_{zz} is negative. In the base region of the quantum dot, the situation is reversed. e_{xx} and e_{yy} are negative in the dot area and becomes positive at the top of quantum dot because GaAs substrate compresses the InAs dot mainly along the z direction. e_{zz} in Figure 3 is positive at the base of quantum dot. With increasing height within the dot, e_{zz} changes its sign and becomes negative at the top of the dot. At the top of dot, the force acting on the dot originates from the GaAs surrounding material. It causes the e_{zz} become negative and e_{xx} and e_{yy} become positive.

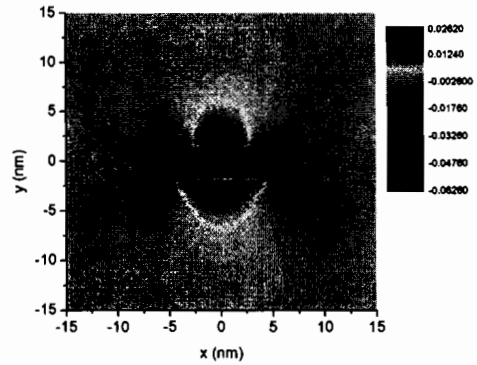


Figure 1. 2D plot of e_{xx}.

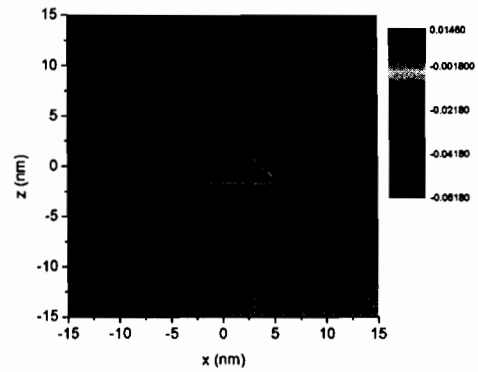


Figure 2. 2D plot of e_{yy}.

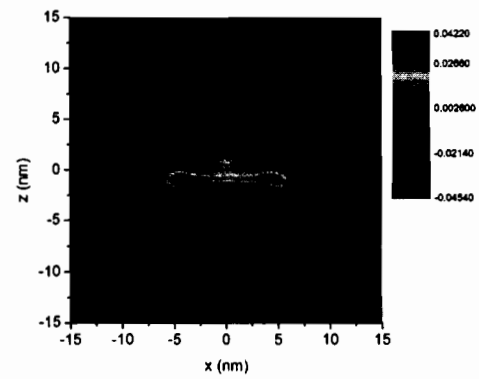


Figure 3. 2D plot of e_{zz}.

Then we have calculated the piezoelectric potential in InAs/GaAs quantum dot by solving the corresponding 3D Poisson's equation. We plot the isosurface of

Copyright © 2010 Faculty of Science, Ubon Ratchathani University. All rights reserved.

the piezoelectric potential. It shows that the piezoelectric potential is concentrated in the region close to the top and bottom of the pyramid. It illustrates that the piezoelectric potential is mostly positive (red isosurface) along the $[1\bar{1}0]$ direction and negative (blue isosurface) along the [110] direction. The isosurface potentials are ± 30 meV. This calculation introduces C_{2v} symmetry [3, 4].

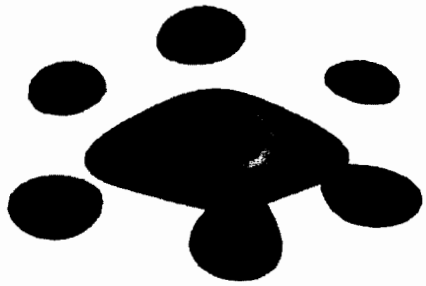


Figure 4. 3D plot of the piezoelectric potential of InAs/GaAs quantum dot.

Electronic structure

The electronic structure of InAs quantum dot in GaAs surrounding material has been studied by means of k.p calculation. The shape of quantum dot in this calculation is truncated pyramid. The base width is b nm and the height of the dot is 3.0 nm. The energy spectra of electron and hole states are plot as a function of the dot base widths in Figure 5 and 6, respectively. To investigate the influence of the strain field, these calculations are done in the presence and in the absence of strain effects. The numerical results demonstrate that the strain distribution in the quantum dot and surrounding material has a dominant influence on the electronic structure. The energies of electron and hole states taking into account the strain effect are shifted into the high energy side in comparison with ones without considering the strain effect. The graphs also show that the electron energies decrease with increasing the base widths, while the hole energies become rising as a function of the increasing base widths. Therefore, the band gap energies are reduced. The size-dependent property can be used to tune the band gap energies of the quantum dots.

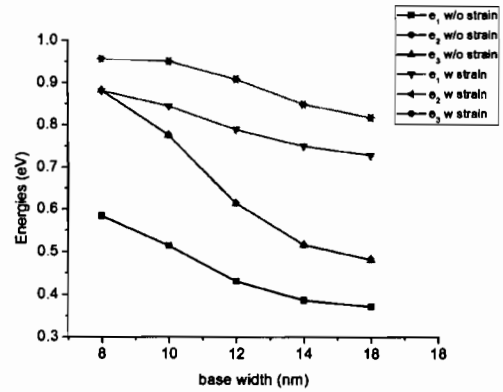


Figure 5. Electron energies of InAs/GaAs quantum dot as a function of dot sizes.

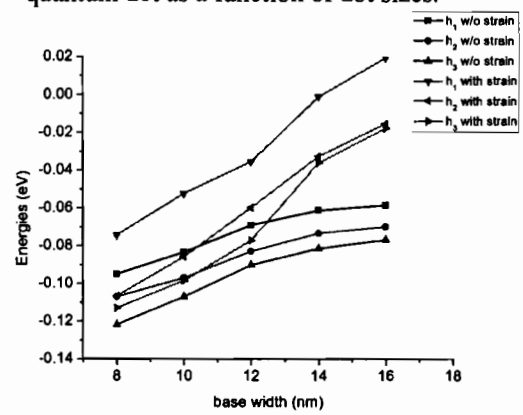


Figure 6. Hole energies of InAs/GaAs quantum dot as a function of dot sizes.

Finally the piezoelectricity (Pz) is examined. We consider the truncated pyramidal QD, basex = basey = 10.0 nm and height = 3.0 nm. The piezoelectric potential is included into the Hamiltonian. With the piezoelectricity, the electron and hole energies shift down about 10 meV which are very small compared to the strain field. The wave functions of electron and hole states are revealed as 2D plot along the x and y axis in Figure 7 and 8, respectively. The wave functions of QD are evaluated with and without the piezoelectric potential. The piezoelectric potential does not change the orientation of the s-electron states (e_1) as shown in Figure 7. In the p-electron states (e_2 and e_3), the piezoelectricity has flipped the orientations of wave functions from

Copyright © 2010 Faculty of Science, Ubon Ratchathani University. All rights reserved.

$[1\bar{1}0]$ to [110] and vice versa. The changes of the orientations also happen in the valence states of quantum dots because hole sates consist of of the linear combination of the p orbitals. The inclusion of the piezoelectricity into quantum dot introduces C_{2v} symmetry.

Table 1. Material parameters for the calculation.

	C_{11}(GPa)	C_{12}(GPa)	C_{44}(GPa)	e_{14}(C.m^{-2})	ε
InAs	83.3	45.3	39.6	-0.115	14.6
GaAs	118.8	53.8	59.4	-0.230	13.18

Copyright © 2010 Faculty of Science, Ubon Ratchathani University. All rights reserved.

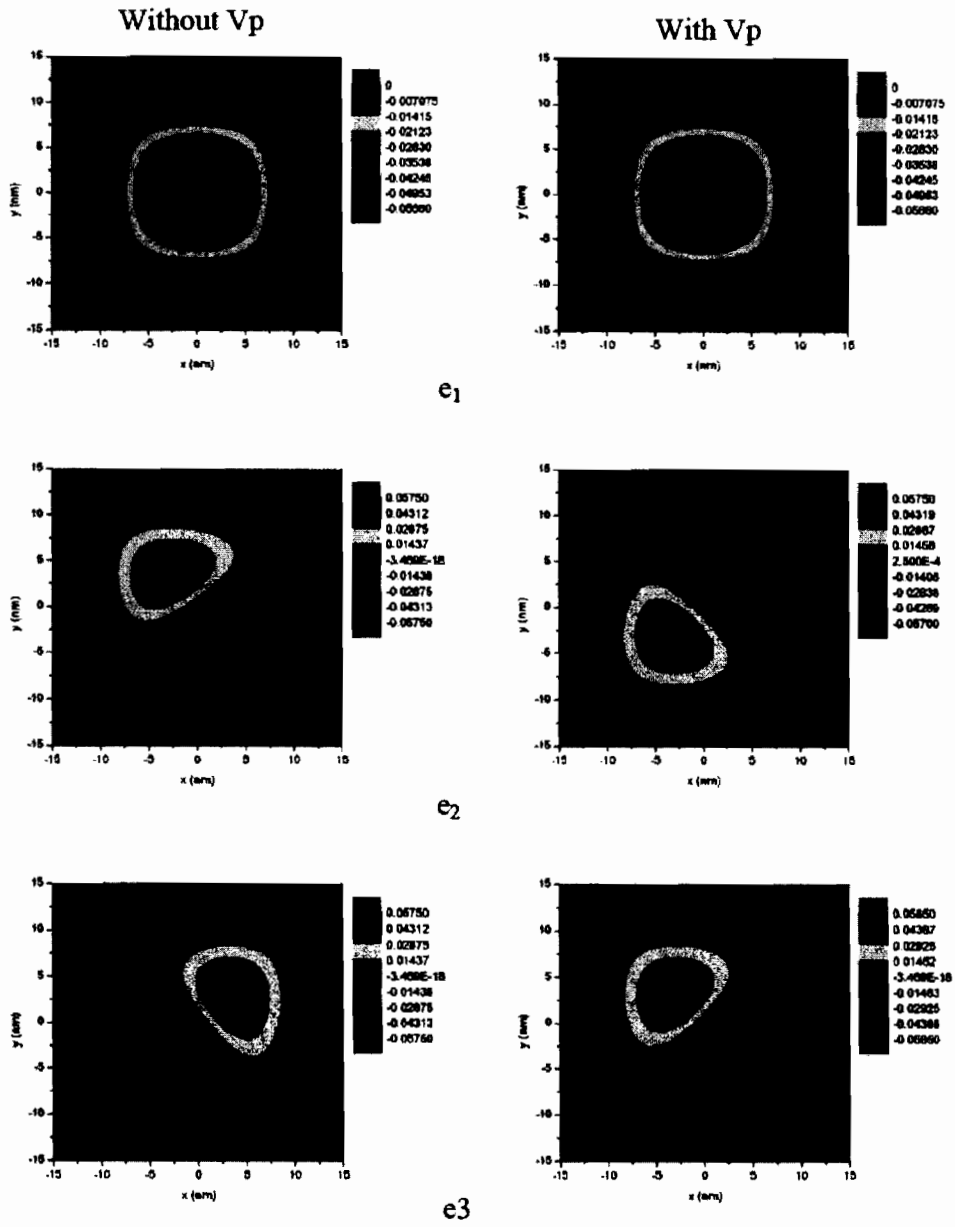


Figure 7. 2D plot of electron wave functions w/o and with the Piezoelectricity (Pz).

Copyright © 2010 Faculty of Science, Ubon Ratchathani University. All rights reserved.

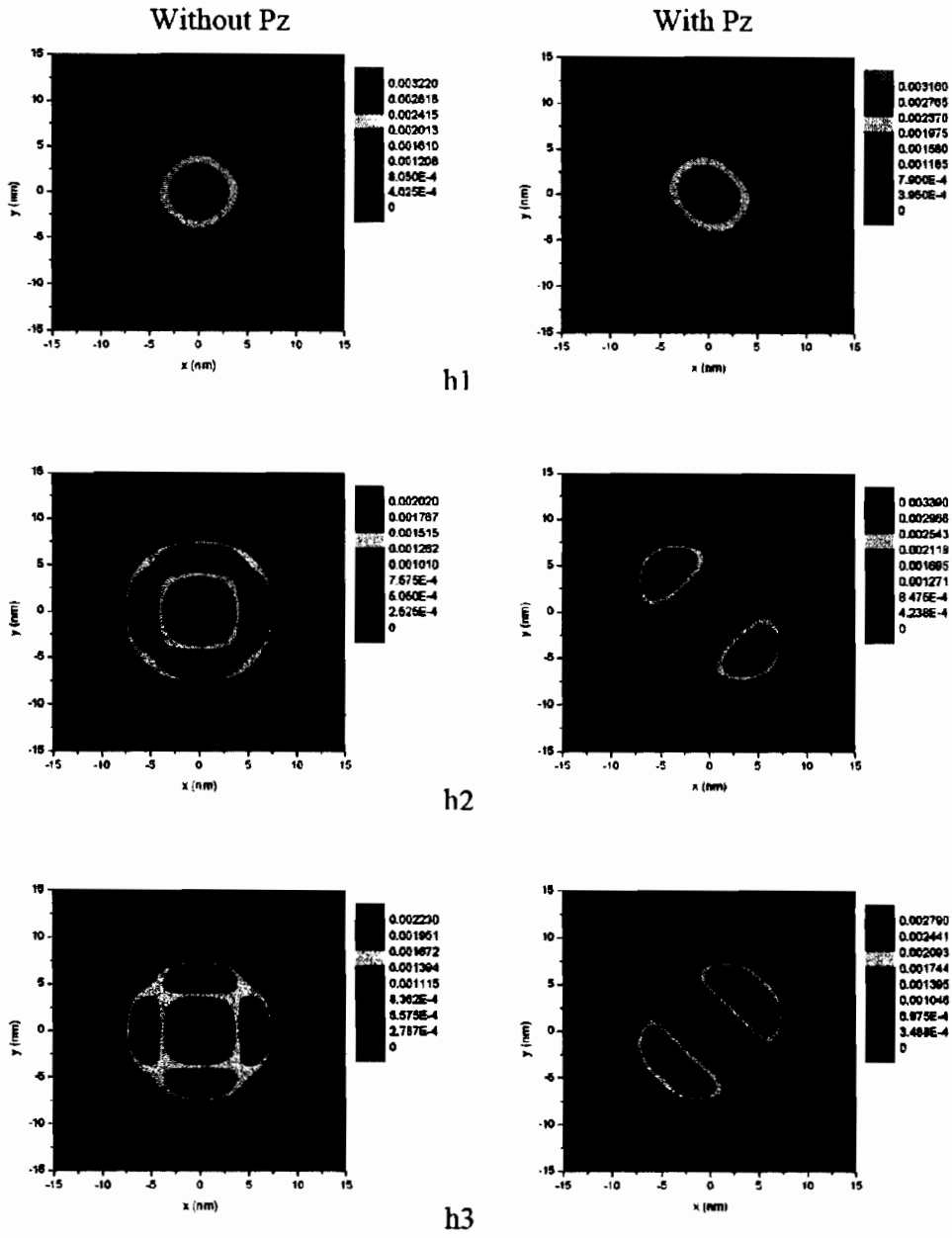


Figure 8. 2D plot of hole wave functions w/o and with the Piezoelectricity (Pz).

5. Conclusions

The effect of the strain and piezoelectricity of self-assembled InAs/GaAs quantum dots has been theoretically investigated by means of the continuum elastic theory and k.p method. The calculated results show the importance of strain and piezoelectric effects on the electronic structure. The energies of electron and hole states including the strain effect are shifted into the high energy side in comparison with

Copyright © 2010 Faculty of Science, Ubon Ratchathani University. All rights reserved.

ones excluding the strain effect. The piezoelectric potential does not change the orientation of the s-electron states (e_1), while the p-electron states (e_2 and e_3) flip the orientations of wave functions from $[1\bar{1}0]$ to $[110]$ and vice versa.

Acknowledgements

I would like to acknowledge Prof. Shun-Jen Cheng for k.p code and Ubon Ratchathani University for the grant.

References

[1] M.A. Naser, M.J. Deen, D.A. Thompson. (2007). Spectral function and responsivity of resonant tunneling and superlattice quantum dot infrared photodetectors using Green's function. J. Appl. Phys., 102, 083108.

[2] V. Ryzhii, V. Mitin, M. Stroscio. (2001). On the detectivity of quantumdot infrared photodetectors. Appl. Phys. Lett., 78, 3523.

[3] Oliver Stier. (2000). Electronic and Optical Properties of Quantum Dots and Wires. Wissenschaft & Technik Verlag.

[4] Worasak Sukkabot. (2010). Electronic Structure of Quantum Dot: Tight-Binding Approach. PhD Thesis, University of Surrey.

[5] S. Fafard, K. Hinzer, S. Raymond, M. Dion. (1996). J. McCaffrey, Y. Feng, S. Charbonneau, Red-Emitting Semiconductor Quantum Dot Lasers. Science, 274, 1350.

[6] Pilkyung Moon, Won Jun, Kwangmin Park, Euijoon Yoon, and JaeDong Lee. (2011). Anomalous strain profiles and electronic structures of a GaAs-capped $InAs/In_{0.53}Ga_{0.47}As$ quantum ring. J. Appl. Phys., 109, 103701.

[7] S. I. Rybchenko, G. Yeap, R. Gupta, I. E. Itskevich, and S. K. Haywood. (2007). Importance of aspect ratio over shape in determining the quantization potential of self-assembled zinc-blende III-V quantum dots. J. Appl. Phys., 102, 013706.

[8] Beka Bochorishvili. (2011). Electronic states and oscillator strengths for interband transitions of a graded quantum dot quantum well structure. Physica E., 43, 874–876.

[9] C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang, A. J. Williamson, and A. Zunger. (1998). Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots. J. Appl. Phys., 83, 2548.

[10] Zhao Wei, Yu Zhong-Yuan, and Liu Yu-Min. (2010). Piezoelectric effects and electronic structures of InAs/GaAs quantum dots grown along (111) and (011) directions. Chin. Phys. B., 19, 067302.

[11] Pilkyung Moon, Euijoon Yoon, Weidong Sheng, Jean-Pierre Leburton. (2009). Anisotropic enhancement of piezoelectricity in the optical properties of laterally coupled InAs/GaAs self-assembled quantum dots. Phys. Rev. B., 79, 125325.

[12] Gabriel Bester and Alex Zunger. (2005). Cylindrically shaped zinc-blende semiconductor quantum dots do not have cylindrical symmetry: Atomistic symmetry, atomic relaxation, and piezoelectric effects. Phys. Rev. B., 71, 045318.

[13] Stanko Tomic , Andrew G. Sunderland and Ian J. Bush .(2006). Parallel multi-band k.p code for electronic structure of zinc blend semiconductor quantum dots. J. Mater. Chem., 16, 1963-1972.

[14] J.Y. Marzin and G. Bastard. (1994). Calculation of the energy levels in InAs/GaAs quantum dots. Solid State Commun., 92, 5437.

[15] T. Saito and Y. Arakawa. (2002). Electronic Structure of Piezoelectric $In_{0.2}Ga_{0.8}N$ Quantum Dots in GaN Calculated Using a Tight-Binding Method. Physica E. 15, 169.

Copyright © 2010 Faculty of Science, Ubon Ratchathani University. All rights reserved.

[16] Y. M. Niquet G. Allan and C. Delerue. (2000). Quantum confinement energies in zinc-blende IIIV and group IV semiconductors. Appl. Phys. Lett., 77, 639.

[17] Jeongnim Kim Lin-Wang Wang and Alex Zunger. (1999). Electronic structures of [110]-faceted self-assembled pyramidal InAs/GaAs quantum dots. Phys. Rev. B., 59, 5678.

[18] Hong Jiang, Harold U. Baranger and Weitao Yang. (2003). Density-functional theory simulation of large quantum dots. Phys. Rev. B., 68, 165337.

Copyright © 2010 Faculty of Science, Ubon Ratchathani University. All rights reserved.

WALAILAK JOURNAL

http://wjst.wu.ac.th Article

Strain-induced band profile of stacked InAs/GaAs Quantum Dots

Worasak Sukkabot *

Department of Physics, Faculty of Science, Ubon Ratchathani University, 85 Sathollmark Rd. Warinchamrab, Ubon Ratchathani, Thailand, 34190

(*Corresponding author's e-mail: w.sukkabot@gmail.com)

Received: xxx, Revised: xxx, Accepted: xxx

Abstract

We have calculated the strain distribution and band profile in triply stacked InAs/GaAs quantum dots (QDs) with the dot spacing 0.0-6.0 nm. We have used the continuum elasticity theory for the strain distribution and the eight-band k.p theory for the band structure. We report the use of the k.p method to calculate the band structure with and without including the effects of strain. The calculated results show the importance of strain effect on the confinement potential of the band structure for triply stacked InAs/GaAs quantum dots (QDs).

Keywords: Stacked quantum dots, strain distribution and k.p method

Introduction

Research and development in semiconductor has seen progressive reduction in dimension, from bulk material to quantum well, then to quantum wire, and ultimately to quantum dot. Thus, the three-dimensional carrier confinement property can significantly lead to the superior characteristics of atom-like density-of-states (DOS), large exciton binding energies and enhanced oscillator strength in quantum dots. The quantum dots (QDs) can be the candidates in transistors, solar cells, LEDs, and diode lasers. They can be also represented as the agents for medical imaging and as possible qubits in quantum computing. Electronic structure and optical properties of semiconductor quantum dots have been intensively explored for more than two decades from the physical and technological interests to the zero-dimensional confined systems [1]. For example, the emission energy and carrier relaxation process in the 2-10-layer stacked InAs QDs with few-nm spacing have been studied in detail [2]. Recently vertically stacked InAs/GaAs quantum dots (QDs) have been investigated for the application to the quantum dot lasers and quantum computers [3]. Kita et al. [4, 5] experimentally demonstrated that the optical polarization can be controlled in the columnar InAs/GaAs quantum dots, in which the self-assembled QDs are vertically stacked with no inter-dot barrier layers. Saito et al. [3, 6] calculated the strain distribution and electronic structures in the stacked InAs/GaAs QDs with the dot spacing 0-6 nm; based on the elastic continuum theory and eight-band k.p theory. They also theoretically studied the optical polarization in columnar InAs/GaAs quantum dots. Janusz Andrzejewski et al. [7] presented the eight-band k.p calculations of the electronic and polarization properties for the columnar $In_zGa_{1-z}As$ quantum dots with high aspect ratio embedded in an $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ quantum well. However, the previous studies have not investigated the dependence of dot spacing on the strain tensors and also the strain-induced band profile of the stacked quantum dots. The fundamental knowledge of this work can be implemented further to study the control of the polarization in stacked quantum dots that can be highly beneficial in some optoelectronic applications. According to the previous research, the stacked InAs/GaAs quantum dots with 0.0 nm spacing, generally called columnar QDs (CQDs) are significantly promising candidates for amplifier applications.

In order to understand the physical properties of the triply stacked quantum dots, theoretical calculations of the electronic structures based on the realistic strain distribution are essential. In this study, we calculate the strain distribution in the stacked InAs/GaAs quantum dots with the dot spacing in the range from 0 nm to 6 nm based on the continuum elasticity (CE) theory. The confinement potentials are numerically evaluated by means of the eight-band strain-dependent k.p theory. Finally, the band alignments are numerically evaluated with and without taking account into the strain field.

Theory

Strain Distribution

The atomic positions inside and around the quantum dot can be described in terms of the supercell of the Face-centered cubic structure. Due to the lattice mismatch between quantum dot and surrounding material, the atomic positions can change and the strain field also takes place in this structure. The continuum elasticity (CE) is determined to study this purpose. The total strain energy in the CE model is given by [3, 8, 9]:

$$U_{CE} = \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl}$$

For a given structure, U_{CE} can be minimized by implementing the finite difference method for the strains $\varepsilon_{ij} = \left(\frac{du_i}{dx_j} + \frac{du_j}{dx_i}\right)/2$, where u is the displacement vector field. The elastic moduli C_{ijkl} are represented by the parameters C_{11}, C_{12} and C_{44} for cubic crystals. Table I shows the material parameters [10] used for the calculations.

Eight-band strain-dependent k.p method

The influence of the strain profiles on the electronic structure of quantum dots has been previously investigated by implementing the strain-modified band offsets [11]. The strain-modified confinement potentials can be calculated by means of the eight-band strain-dependent k.p Hamiltonian, $H_k + H_s$, where H_k is the kinetic Hamiltonian and H_s is the strained Hamiltonian. The kinetic part of the total Hamiltonian is given by:

$$\begin{bmatrix} A & 0 & V^* & 0 & \sqrt{3}V & -\sqrt{2}U & -U & \sqrt{2}V^* \\ 0 & A & -\sqrt{2}U & -\sqrt{3}V^* & 0 & -V & \sqrt{2}V & U \\ V & -\sqrt{2}U & -P+Q & -S^* & R & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}Q \\ 0 & -\sqrt{3}V & -S & -P+Q & 0 & R & -\sqrt{2}R & \frac{1}{\sqrt{2}}S \\ \sqrt{3}V^* & 0 & R^* & 0 & -P+Q & S^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}R^* \\ -\sqrt{2}U & -V^* & 0 & R^* & S & -P+Q & \sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* \\ -U & \sqrt{2}V^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & -\sqrt{2}R^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}Q & -P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}V & U & -\sqrt{2}Q & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}R & \sqrt{\frac{3}{2}}S & 0 & -P+\Delta \end{bmatrix}$$

Where

$$A = E_c - \frac{\hbar^2}{2m_0}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$B = E_c - \gamma_1 \frac{\hbar^2}{2m_0}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

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

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

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

$$U = \frac{-i}{\sqrt{3}} P_0 k_z$$

$$V = \frac{-i}{\sqrt{6}} P_0 (k_x - ik_y)$$

P_0 is the coupling between the conduction and valence bands, E_c and E_v are the unstrained conduction and valence band energy, respectively, and Δ is the spin-orbit splitting. The $\gamma_{i=1,2,3}$ are the modified Luttinger parameters defined in terms of the usual Luttinger parameters $\gamma^L_{i=1,2,3}$:

$$\gamma_1 = \gamma_1^L - \frac{E_p}{3E_g + \Delta}$$
$$\gamma_2 = \gamma_2^L - \frac{1}{2}\frac{E_p}{3E_g + \Delta}$$
$$\gamma_3 = \gamma_3^L - \frac{1}{2}\frac{E_p}{3E_g + \Delta}$$

$E_g = E_c - E_v$ is the energy gap and $E_p = 2m_0P_0^2/\hbar^2$. The strained part of the total Hamiltonian is also given by:

$$\begin{bmatrix} a_c e & 0 & -v^* & 0 & -\sqrt{3}v & \sqrt{2}u & u & -\sqrt{2}v^* \\ 0 & a_c e & \sqrt{2}u & \sqrt{3}v^* & 0 & v & -\sqrt{2}v & -u \\ -v & \sqrt{2}u & -p+q & -s^* & r & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}s & -\sqrt{2}q \\ 0 & \sqrt{3}v & -s & -p+q & 0 & r & -\sqrt{2}r & \frac{1}{\sqrt{2}}s \\ -\sqrt{3}v^* & 0 & r^* & 0 & -p+q & s^* & \frac{1}{\sqrt{2}}s^* & \sqrt{2}r^* \\ \sqrt{2}u & v^* & 0 & r^* & s & -p+q & \sqrt{2}q & \sqrt{\frac{3}{2}}s^* \\ u & -\sqrt{2}v^* & \sqrt{\frac{3}{2}}s^* & -\sqrt{2}r^* & \frac{1}{\sqrt{2}}s & \sqrt{2}q & -p & 0 \\ -\sqrt{2}v & u & -\sqrt{2}q & \frac{1}{\sqrt{2}}s^* & \sqrt{2}r & \sqrt{\frac{3}{2}}s & 0 & -p \end{bmatrix}$$

Where

$$e = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$$
$$p = a_v(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz})$$
$$q = b[e_{zz} - \frac{1}{2}(e_{xx} + e_{yy})]$$
$$r = \frac{\sqrt{3}}{2}b(e_{xx-e_{yy}}) - ide_{xy}$$
$$s = -d(e_{xz} - ie_{yz})$$
$$u = \frac{-i}{\sqrt{3}}P_0\sum_j e_{zj}k_j$$
$$v = \frac{-i}{\sqrt{6}}P_0\sum_j (e_{xj} - ie_{yj})k_j$$

e_{ij} is the strain tensor, b and d are the shear deformation potentials. a_v is the hydrostatic valence band deformation potential and a_c is the conduction-band deformation potential. Table II [11] lists the material parameters which are used to calculate the strain-induced confinement potentials.

After the total Hamiltonian $(H_k + H_s)$ matrix elements are constructed, the matrix can be diagonalized by using the powerful eigenvalue solver called EISPACK library [12]. Finally, strain-induced band alignments are achieved.

Results and discussion

To investigate the influence of the strain field on the stacked InAs/GaAs quantum dots, recently there are various layers of the InAs dots (1-9) that have been studied in theory and experiment. In this work, the stacked quantum dot structures are modeled by triply vertically stacked InAs quantum dots embedded in GaAs surrounding material corresponding to the accessible range in the theoretical and experimental data. The growth direction is mainly aligned along the z axis. Each InAs quantum dot has a truncated pyramidal shape because of the realistic shape mostly fabricated in the experiments. The dot height is 3.0 nm and the length of the square base is 15.0 nm. The dot spacing varies from 0.0 to 6.0 nm. The cross-sectional view of the triply stacked quantum dot structures is depicted in Figure 1. The strain distribution in the stacked quantum dots can be evaluated using a finite difference method based on the continuum elasticity theory. This method has fruitfully implemented to single pyramidal quantum dots in the previous studies [13, 14].

To analyze the band profiles of the triply vertically stacked InAs/GaAs quantum dots as described in the section of Eight-band strain-dependent k.p method, the calculations of the hydrostatic and biaxial strains are mainly required. The hydrostatic $\varepsilon_H = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$ and biaxial $\varepsilon_B = \varepsilon_{zz} - (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/2$ strains can determine the change of band confinement potential. The hydrostatic strains defined in the on-site diagonal term of H_s merely shift the energy levels of conduction and valence bands. While the biaxial strains defined in both of the on-site and off-site diagonal term of H_s intend to remove the degeneracy in the valence bands. Therefore, we numerically investigate the effect of the dot spacing on the hydrostatic and biaxial strains. Figure 2 illustrates the physical distribution of the hydrostatic and biaxial strain in the triply stacked InAs/GaAs quantum dots as a function of the dot spacings. The strain distribution along the z-axis (the line through the quantum dot center) is plotted. In the GaAs barrier regions, the hydrostatic strain is almost zero. In the quantum dot regions, the hydrostatic strain is approximately -0.08. The hydrostatic strain is mostly confined in the dots. The calculations demonstrate that there is compressive ($\varepsilon_H < 0$) strain inside the quantum dot regions because GaAs surrounding material compresses the InAs dots. For 0.0 nm spacing, the biaxial strain is even smaller and eventually becomes negative in the middle of the stacked quantum dots. As increasing the spacing of the stack triply quantum dots, the biaxial strain in the quantum dot regions positively increases. This is due to the condition that the vertical lattice constant of InAs mis-match that of the side GaAs when the barriers are inserted to the triply stacked quantum dots. In the barriers, the biaxial strain is negative. With increasing the spacing, the biaxial strain gradually enhances.

After understanding the physical behaviors of the strain distribution, the strain tensors and deformation potentials can be numerically used to calculate the strain-induced confinement potentials for the triply stacked InAs/GaAs quantum dots. Based on the eight-band strain-dependent k.p method as described above, we compute the influences of the strain and dot spacing on the conduction band edge, the heavy-hole band edge, light-hole band edge and spin-orbit band edge as shown in Figure 3. In this model, we use the valence band offset between InAs/GaAs junction as +0.25 eV [9]. The confinement potentials are calculated with and without taking into account the strain effect. We find that the strain distribution can essentially modify the band profile in the stacked quantum dots. The numerical results demonstrate that the biaxial strain induces a different shift of degeneracy between the heavy hole and the

light hole band as compared to the unstrained band profile which are equated in the strained Hamiltonian (H_s) defined as the diagonal q term. In the conduction band (CB) the strain principally yields the rising confinement potentials in the dots, while confinement potentials in the barrier indifferently change. The enhancement and invariant of the conduction band (CB) can be caused from the hydrostatic strain (ε_H). In the heavy hole band (HH), the strain mainly elevates the confinement potentials in the dots, interface and the inter-dots, while ones in the barriers far way from dots unimportantly modify. In the light-hole (LH) and spin-orbit (SO) band, the strain mainly lowers the confinement potentials in the inter-dots and the interfaces, while ones in the dots and the barriers far way from dots insignificantly alter. From the strained-induced band profiles of the triply stacked quantum dots, the numerical data demonstrates that the energies of the confining electron and hole states mainly rise into the higher energies as compared to the unstrained band alignments. In term of the dot spacing, there is no alteration in the unstrained band profiles, while the strained ones are principally modified. The strained band alignments of both conduction and valence band in the dots unconcernedly change. However, the strained band profiles in the inter-dot regions modify. As increasing the dot spacing, strained potential confinements in the inter-dot zones become smooth and are close to unstrained ones because the coupling of the stacked quantum dots progressively reduces.

Conclusion

We have systematically discussed the strain distributions of triply vertically stacked InAs/GaAs quantum dots with the dot spacing ranging from 0.0 nm to 6.0 nm. First, based on the finite difference method, we calculate the strain distribution by means of the elastic continuum theory. Secondly, the strained-modified band edges are also calculated in the framework of the eight-band strain-dependent k.p method. The calculations demonstrate that there is compressive ($\varepsilon_H < 0$) strain in the quantum dot region. With increasing the dot spacing of the stack triply quantum dots, the biaxial strain in both of the quantum dot regions and barriers positively raises. The hydrostatic and biaxial strains are used to judge the change of band profiles. The hydrostatic strains shift the energy levels of conduction and valence bands, while the biaxial strains eliminate the degenerate valence bands. Finally, the strain distribution and dot spacings have the significant effect in modifying the band structure of stacked triply InAs/GaAs quantum dots.

Acknowledgements

This work has been supported by Ubon Ratchathani University.

References

[1] M Grundmann. Nano-Optoelectronics: Concepts, Physics, and Devices. Springer-Verlag, New York, 2002, p. 167-199.
[2] T Nakaoka, T Tatebayashi, and Y Arakawa. Spectroscopy on single columns of vertically aligned InAs quantum dots. Physica E. 2004; 21, 409-413.
[3] T Saito, T Nakaoka, T Kakitsuka, Y Yoshikuni and Y Arakawa. Strain distribution and electronic states in stacked InAs/GaAs quantum dots with dot spacing 0-6 nm. Physica E. 2005; 26, 217-221.
[4] T Kita, O Wada, H Ebe, Y Nakata and M Sugawara. Polarization-Independent Photoluminescence from Columnar InAs/GaAs Self-Assembled Quantum Dots. Jpn. J. Appl. Phys. 2002; 41, L1143-L1145.
[5] T Kita, P Jayavel, O Wada, H Ebe, Y Nakata and M Sugawara. Polarization controlled edge emission from columnar InAs/GaAs self-assembled quantum dots. Physica Status Solidi (C). 2003; 0, 1137-1140.
[6] T Saito, H Ebe, Y Arakawa, T Kakitsuka and M Sugawara. Optical polarization in columnar InAs/GaAs quantum dots: 8-band k·p calculations. Phys. Rev. B. 2008; 77, 195318-195328.

[7] Janusz Andrzejewski, Grzegorz Sęk, Eoin O'Reilly, Andrea Fiore, and Jan Misiewicz. Eight-band k·p calculations of the composition contrast effect on the linear polarization properties of columnar quantum dots. J. Appl. Phys. 2010; 107, 073509-073520.
[8] Oliver Stier. Electronic and Optical Properties of Quantum Dots and Wires. Wissenschaft & Technik Verlag, Germany, 2000, p. 35-40.
[9] C Pryor, J Kim, LW Wang, AJ Williamson and A Zunger. Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots. J. Appl. Phys. 1998; 83, 2548-2554.
[10] Zhao Wei, Yu Zhong-Yuan and Liu Yu-Min. Piezoelectric effects and electronic structures of InAs/GaAs quantum dots grown along (111) and (011) directions. Chin. Phys. B. 2010; 19, 067302-067305.
[11] Craig Pryor. Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations. Phys. Rev. B. 1998; 57, 7190-7195.
[12] EISPACK, Available at: http://www.netlib.org/eispack/, accessed October 2012.
[13] M Grundmann, O Stier and D Bimberg. InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure. Phys. Rev. B. 1995; 52, 11969-11981.
[14] T Nakaoka, T Kakitsuka, T Saito, S Kako, S Ishida, M Nishioka, Y Yoshikuni and Y Arakawa. Strain-induced modifications of the electronic states of InGaAs quantum dots. J. Appl. Phys. 2003; 94, 6812-6817.

Table I. Material parameters for the calculations.

	C_{11}(GPa)	C_{12}(GPa)	C_{44}(GPa)	e_{14}(C.m^{-2})	ε
InAs	83.3	45.3	39.6	-0.115	14.6
GaAs	118.8	53.8	59.4	-0.230	13.18

Table II. Material parameters.

Parameters	InAs	GaAs
γ_1^L	19.67	6.85
γ_2^L	8.37	2.1
γ_3^L	9.29	2.9
E_g(eV)	0.418	1.519
Δ(eV)	0.38	0.33
E_p(eV)	22.2	25.7
a_c(eV)	-6.66	-8.6
a_v(eV)	0.66	-9.3
b(eV)	-1.8	0.7
d(eV)	-3.6	-2.0

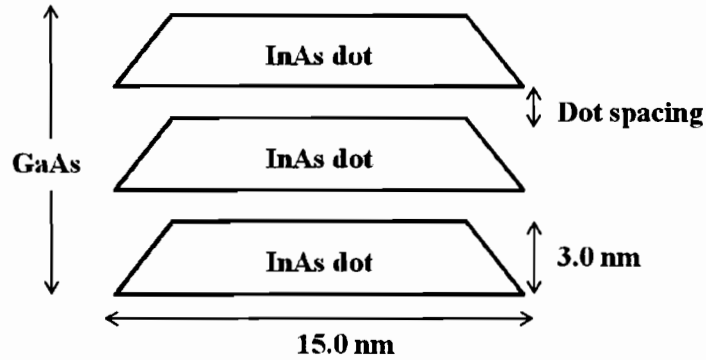


Figure 1 The cross-sectional picture of the triply stacked InAs/GaAs quantum dots.

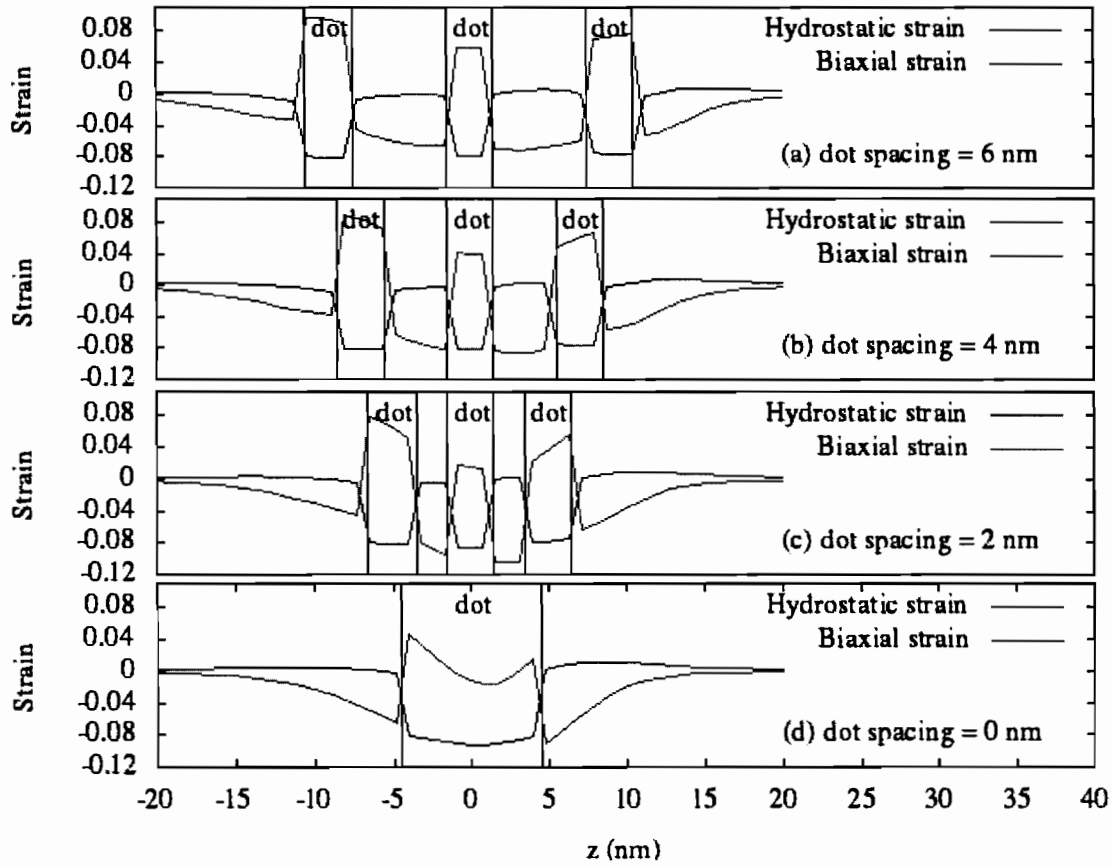


Figure 2 Strain distributions in the triply stacked InAs/GaAs quantum dots for the dot spacing; (a) 6 nm, (b) 4 nm, (c) 2 nm and (d) 0 nm.

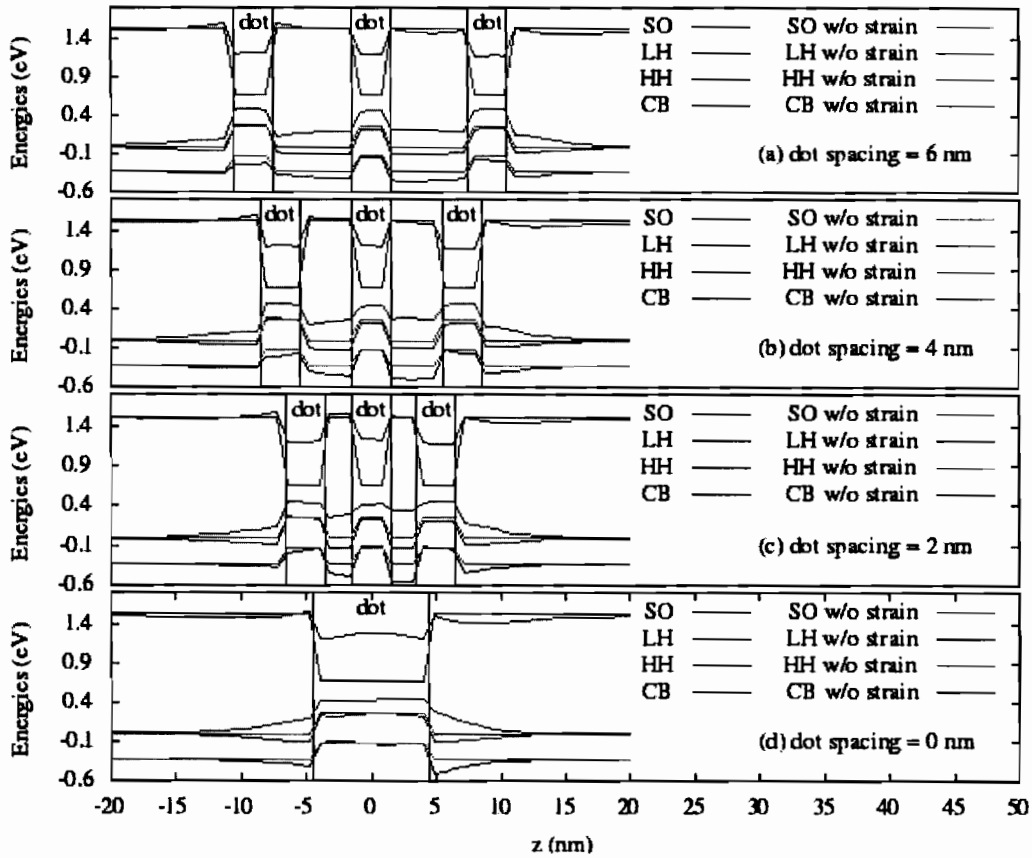


Figure 3 Strain-induced band profiles of the triply stacked InAs/GaAs quantum dots along the z direction for the dot spacing; (a) 6 nm, (b) 4 nm, (c) 2 nm and (d) 0 nm.

ภาคผนวก ข

ตารางเปรียบเทียบวัตถุประสงค์

ภาคผนวก ค

รายงานการเงิน

รายงานการเงิน

รายการ	จำนวนเงิน
ค่าตอบแทน	
- หัวหน้าโครงการวิจัย	9,000
ค่าใช้สอย	
- ค่าเดินทางในการไปสัมนาและเผยแพร่งานวิจัย	8,000
- หนังสือและเอกสารประกอบการวิจัย	7,100
ค่าวัสดุ	
- วัสดุคอมพิวเตอร์	20,900
รวมงบประมาณที่เสนอขอ	45,000

สำนักวิทยบริการ มหาวิทยาลัยอุบลราชธานี

ตารางเปรียบเทียบวัตถุประสงค์

กิจกรรม	ผลงานที่จะได้จากกิจกรรม	สถานะ
1. ศึกษาการกระจายตัวของความเครียดภายในและรอบๆควอนตัมดอท	สมบัติการกระจายตัวของความเครียดเมื่อควอนตัมดอทมีรูปร่างต่างๆ	สำเร็จ
2. ศึกษาปรากฏการณ์เพียโซอิเล็กทรอนิกส์ของควอนตัมดอท	เข้าใจคุณสมบัติของปรากฏการณ์เพียโซอิเล็กทรอนิกส์ที่มีต่อคงวอนตัมดอท	สำเร็จ
3. คำนวณหาระดับพลังงานของสถานะอิเล็กตรอนและโฮลของควอนตัมดอท	มีความรู้เกี่ยวกับระดับพลังงานภายในควอนตัมดอทเมื่อควอนตัมดอทมีรูปร่างและขนาดที่เปลี่ยนแปลงไป	สำเร็จ
4. ศึกษาและคำนวณสเปคตรัมการเปล่งแสงและการเปลี่ยนถ่ายระดับพลังงานภายในอนุภาคควอนตัมดอท	มีความรู้เกี่ยวกับสเปคตรัมการเปล่งแสงและการเปลี่ยนถ่ายระดับพลังงานภายในอนุภาคควอนตัมดอทเมื่อควอนตัมดอทมีรูปร่างและขนาดที่เปลี่ยนแปลงไป	สำเร็จ