

บทที่ 1 ความสำคัญและที่มา

ความสำคัญและที่มาของปัญหาที่ทำการวิจัย

ในปัจจุบันการศึกษาอนุภาคในระดับนาโนเมตรได้รับความสนใจเป็นอย่างมาก ด้วยสมบัติโครงสร้างทางฟิสิกส์และเคมีที่แตกต่างและโดดเด่นของอนุภาคในระดับนาโนเมตร ทำให้สามารถประยุกต์ใช้คุณสมบัติดังกล่าวในทางอุตสาหกรรมสารกึ่งตัวนำ ควอนตัมดอท (Quantum Dots) เป็นโครงสร้างระดับนาโนเมตรที่ได้รับความสนใจเป็นอย่างมากในช่วงทศวรรษนี้โดยนำมาประยุกต์ใช้ในการผลิตอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์และอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ทางแสง ตัวอย่างเช่น ตัวตรวจจับทางแสง (Light detector), ไดโอดเปล่งแสง (Light emitting diode), โซลาร์เซลล์ (Solar cell), เลเซอร์ (Laser) เป็นต้น นอกจากนี้ควอนตัมดอทยังได้ถูกศึกษาในด้านควอนตัมคอมพิวเตอร์ (Quantum Computing) ซึ่งจะถูกพัฒนาต่อเป็นคอมพิวเตอร์ที่มีการประมวลผลที่รวดเร็วกว่าคอมพิวเตอร์ในปัจจุบันอีกด้วย 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 วิธีไทด์บายด์ดิง (Tight-Binding) วิธีซูโดโพเทนเชียล (Pseudopotential) วิธีดีเอฟที (DFT) วิธีเคอทพี (k.p) เป็นต้น หลังจากนั้นก็นำแบบจำลองดังกล่าวไปทำนายคุณสมบัติทางโครงสร้างและแสงของอนุภาคควอนตัมดอท พร้อมทั้งเปรียบเทียบกับผลการทดลอง ดังนั้นจะเห็นว่างานวิจัยในเชิงทฤษฎีจะทำนายคุณสมบัติต่างๆของอนุภาคควอนตัมดอท เมื่อได้คุณสมบัติที่ต้องการแล้ว งานวิจัยทางด้านการทดลองก็จะดำเนินการต่อเพื่อยืนยันผลงานวิจัยและได้ผลิตภัณฑ์ออกมาจากนั้นจึงนำไปประยุกต์ใช้ในด้านอุตสาหกรรมต่อไป

ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยสนใจที่จะศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอทในเชิงทฤษฎีโดยใช้วิธีเคอทพี (k.p) ซึ่งเป็นวิธีที่ใช้กันอย่างแพร่หลายในต่างประเทศ เนื่องจากควอนตัมดอทนั้นถูกสังเคราะห์จากสาร 2 ชนิดที่มีความยาวของโครงสร้างทางผลึกที่แตกต่างกัน ดังนั้นจึงเกิดความเครียดขึ้นภายในและรอบๆควอนตัมดอท ดังนั้นผู้วิจัยจึงศึกษาการกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution) ที่เกิดขึ้นภายในบริเวณนั้น การศึกษาคุณสมบัติทางแสงของควอนตัมดอทเป็นอีกหนึ่งความรู้ที่สามารถนำไปประยุกต์ใช้ในการผลิตวัสดุอิเล็กทรอนิกส์นำแสงที่ใช้ในทางวิศวกรรมและอุตสาหกรรม ดังนั้นผู้วิจัยจึงมีความสนใจที่จะศึกษาคุณสมบัติดังกล่าว เช่น สเปกตรัมการเปล่งแสง (Emission spectrum) การถ่ายโอนระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท (Optical transition) เป็นต้น พร้อมทั้งเปรียบเทียบกับผลการทดลองอีกด้วย

วัตถุประสงค์ของโครงการวิจัย

1. ศึกษาคุณสมบัติทางโครงสร้างของควอนตัมดอทโดยใช้วิธีเคคอปที เช่น ความเครียด รูปร่างและขนาดของควอนตัมดอท ศึกษาคุณสมบัติทางแสงของควอนตัมดอทโดยใช้วิธีเคคอปที เช่น สเปกตรัมการเปล่งแสง การเปลี่ยนถ่ายระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท เป็นต้น
2. เปรียบเทียบผลการคำนวณที่ได้รับ ในเชิงทฤษฎีกับผลการทดลอง

ขอบเขตของโครงการวิจัย

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

การทบทวนวรรณกรรม/สารสนเทศ (Information) ที่เกี่ยวข้อง

ในปัจจุบัน งานวิจัยทางด้านควอนตัมดอทแบ่งออกเป็น 2 แขนงตามวิธีการวิจัย ได้แก่ งานวิจัยทางการทดลองและทฤษฎี ในงานวิจัยทางการทดลอง นักวิจัยได้ทำการปลูกควอนตัมดอทโดยใช้วิธี Stanski Krastanov ส่วนรูปร่างและขนาดของควอนตัมดอทจะใช้เครื่อง Atomic Force Microscopy (AFM) ในการพิจารณาและวิเคราะห์ โดยที่รูปร่างของอนุภาคควอนตัมดอทส่วนใหญ่จะมีรูปร่างเป็น พีระมิด ขนาดของอนุภาคควอนตัมดอทจะมีขนาดตั้งแต่ 10-100 นาโนเมตร ขึ้นอยู่กับสารกึ่งตัวนำที่ใช้ในการสังเคราะห์และสภาวะแวดล้อมในการปลูกควอนตัมดอท ซึ่งในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยมีความสนใจที่จะเลือกขนาดของอนุภาคควอนตัมดอทในช่วง 10-30 นาโนเมตร เนื่องจาก ในช่วงดังกล่าวได้มีการสังเคราะห์อนุภาคควอนตัมดอทอย่างแพร่หลายและยังนำไปประยุกต์ในการศึกษาสมบัติทางฟิสิกส์อีกด้วย นอกจากการปลูกควอนตัมดอทแล้ว งานวิจัยในด้านนี้ยังศึกษาคุณสมบัติทางแสงของควอนตัมดอทโดยใช้เครื่อง Photoluminescence Spectroscopy เพื่อศึกษาการถ่ายโอนพลังงานภายในควอนตัมดอท ขณะที่งานวิจัยในเชิงทฤษฎีจะสร้างแบบจำลอง (Model) ขึ้นโดยอาศัยตัวแปรและเงื่อนไขต่างๆที่สอดคล้องกับการทดลอง เช่น สารกึ่งตัวนำที่นำมาสังเคราะห์ควอนตัมดอท รูปร่างและขนาดของอนุภาคควอนตัมดอท เป็นต้น เพื่อที่จะคำนวณหาระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท ในปัจจุบันนี้มีหลายวิธีที่ถูกพัฒนาขึ้นมาใช้ในการคำนวณหาระดับพลังงานกันอย่างแพร่หลาย เช่น วิธีไทด์บายด์ดิง (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 วิธีเคคอปที (k.p) ก็มีกลุ่มวิจัยของ Prof. Bimberg ทำการศึกษาอยู่ในขณะนี้ เป็นต้น หลังจากนั้นก็นำแบบจำลองดังกล่าวไปทำนายคุณสมบัติทางโครงสร้างและแสงของอนุภาคควอนตัมดอท พร้อมทั้งเปรียบเทียบกับผลการทดลอง ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยสนใจที่จะศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอทในเชิงทฤษฎีโดยใช้วิธีเคคอปที (k.p) ที่ได้รับการพัฒนาจากกลุ่มวิจัยของ Prof. Shun-Jen Cheng ที่ National University of Chiao Tung ประเทศไต้หวัน

ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. มีความรู้ความเข้าใจเกี่ยวกับคุณสมบัติทางโครงสร้างและแสงของควอนตัมดอท
2. เปรียบเทียบผลการคำนวณจากแบบจำลองของผู้วิจัยกับผลการทดลอง
3. สามารถประยุกต์ผลการวิจัยนี้ในการผลิตอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ที่ใช้สารกึ่งตัวนำเป็นวัสดุ

4. เผยแพร่งานวิจัยในรูปแบบของการนำเสนอผลงานในที่ประชุมและการตีพิมพ์ผลงานในวารสารทั้งในและต่างประเทศ
5. ถ่ายทอดผลงานวิจัยสู่นักศึกษาระดับปริญญาตรีในรูปแบบของโครงการพิเศษหรือวิทยานิพนธ์ในระดับปริญญาโท-เอก

บทที่ 2

ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

การกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution)

ตำแหน่งของอะตอมที่อยู่ภายในและรอบ ๆ อนุภาคควอนตัมคอตสามารถอธิบายในโครงสร้างของ supercell of the Face-centered cubic เนื่องจากความแตกต่างกันของ Lattice constant ระหว่างควอนตัมคอตและอะตอมที่อยู่ภายในและรอบ ๆ ควอนตัมคอต ความเครียดจึงเกิดขึ้นในโครงสร้างนี้ ในขณะที่มี 2 วิธีในการศึกษาความเครียดที่เกิดขึ้นนั้นคือ Continuum elasticity และ Valence force field (VFF) ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยประยุกต์ใช้วิธี Continuum elasticity เนื่องจากสามารถศึกษาความเครียดที่เกิดขึ้นกับอนุภาคควอนตัมคอตที่มีขนาดใหญ่ได้เป็นอย่างดี ผลรวมของพลังงานอันเนื่องมาจากการกระจายตัวของความเครียดเท่ากับ

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

พิจารณาอนุภาคควอนตัมคอต 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}

Eight-band strain-dependent k.p method

อิทธิพลของความเครียดต่อโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์สามารถศึกษาจากการเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงาน การศึกษาความเครียดสามารถเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานภายในโครงสร้างควอนตัมคอตสามารถทำได้โดยวิธี 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

$$\begin{aligned}
A &= E_c - \frac{\hbar^2}{2m_0}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\
B &= E_c - \gamma_1 \frac{\hbar^2}{2m_0}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\
Q &= -\gamma_2 \frac{\hbar^2}{2m_0}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\
R &= \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0}[\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3 k_x k_y] \\
S &= -\sqrt{3}\gamma_3 \frac{\hbar^2}{2m_0} k_z(k_x - ik_y) \\
U &= \frac{-i}{\sqrt{3}} P_0 k_z \\
V &= \frac{-i}{\sqrt{6}} P_0(k_x - ik_y)
\end{aligned}$$

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

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

$E_g = E_c - E_v$ 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

$$\begin{aligned}
\mathbf{e} &= \mathbf{e}_{xx} + \mathbf{e}_{yy} + \mathbf{e}_{zz} \\
\mathbf{p} &= a_v (\mathbf{e}_{xx} + \mathbf{e}_{yy} + \mathbf{e}_{zz}) \\
\mathbf{q} &= b \left[\mathbf{e}_{zz} - \frac{1}{2} (\mathbf{e}_{xx} + \mathbf{e}_{yy}) \right] \\
\mathbf{r} &= \frac{\sqrt{3}}{2} b (\mathbf{e}_{xx} - \mathbf{e}_{yy}) - i \mathbf{e}_{xy} \\
\mathbf{s} &= -d (\mathbf{e}_{xz} - i \mathbf{e}_{yz}) \\
\mathbf{u} &= \frac{-i}{\sqrt{3}} P_0 \sum_j \mathbf{e}_{zj} \mathbf{k}_j \\
\mathbf{v} &= \frac{-i}{\sqrt{6}} P_0 \sum_j (\mathbf{e}_{xj} - i \mathbf{e}_{yj}) \mathbf{k}_j
\end{aligned}$$

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

ความเครียดที่เกิดขึ้นในควอนตัมคอตทอให้เกิดการเปลี่ยนแปลงสมมาตรของโครงสร้างทางผลึก การเปลี่ยนแปลงดังกล่าวเกิดปรากฏการณ์ โพลาริเซชัน นิยามด้วย Piezoelectricity

พลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity สามารถหาจากสมการ Poisson แทนด้วย

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

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

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

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

$$H = H_{k,p} + V_{pz} \cdot \mathbf{I}$$

เมื่อ $H_{k,p}$ is the Hamiltonian จากวิธีเคคอตทอที่จะอธิบายในหัวข้อต่อไป และ \mathbf{I} คือ เมทริกซ์เอกลักษณ์

วิธีเคคอตทอ (k.p method)

เพื่อศึกษาคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของควอนตัมคอตทอเราต้องเข้าใจโครงสร้างวงของวัสดุ มีการคำนวณตามทฤษฎีของโครงสร้างหลายวิธี เช่น Tight-binding Pseudo-potential k.p เป็นต้น ซึ่งเทคนิคแต่ละอย่างมีแนวทางในการคำนวณคุณสมบัติของเซมิคอนดักเตอร์ที่แตกต่างกัน แต่เริ่มต้นจากสมการพื้นฐานสมการ Schrodinger ซึ่งในงานวิจัยนี้จะใช้วิธี k.p ในการศึกษาสมบัติของอนุภาคควอนตัมคอตทอ

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

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

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

Four-band model

วิธีนี้จะใช้ในการคำนวณหาระดับพลังงานของสถานะเวเลนอิเล็กตรอน ฟังก์ชันคลื่นของสถานะเวเลนอิเล็กตรอน 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

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

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

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

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

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 ศึกษาการกระจายตัวของความเครียดภายในและรอบๆควอนตัมดอท														สมบัติการกระจายตัวของความเครียดเมื่อควอนตัมดอทมีรูปร่างต่างๆ
3.2 ศึกษาปรากฏการณ์เพียโซอิเล็กทริกของควอนตัมดอท														เข้าใจคุณสมบัติของปรากฏการณ์เพียโซอิเล็กทริกที่มีต่อควอนตัมดอท
3.3 คำนวณหาระดับพลังงานของสถานะอิเล็กทรอนิกส์และโฮลของควอนตัมดอท														มีความรู้เกี่ยวกับระดับพลังงานภายในควอนตัมดอทเมื่อควอนตัมดอทมีรูปร่างและขนาดที่เปลี่ยนแปลงไป
3.4 ศึกษาและคำนวณสเปคตรัม														มีความรู้เกี่ยวกับ

การเปล่งแสงและการเปลี่ยนถ่ายระดับพลังงานภายในอนุภาคควอนตัมคอต																				สเปกตรัมการเปล่งแสงและการเปลี่ยนถ่ายระดับพลังงานภายในอนุภาคควอนตัมคอตเมื่อควอนตัมคอตมีรูปร่างและขนาดที่เปลี่ยนแปลงไป
4.การวิเคราะห์ - กิจกรรม 3.1-3.4																				ตีพิมพ์ผลงานวิจัยในเรื่องที่เกี่ยวข้องและนำเสนอผลงานการวิจัย
5. จัดทำรายงานการวิจัยฉบับสมบูรณ์																				รายงานการวิจัย

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] ปัจจุบันได้มีการศึกษาควอนตัมดอทที่เรียงทับกันในแนวตั้ง (Vertically stacked Quantum dots) ในการประยุกต์ในด้านควอนตัมดอทเลเซอร์ (Quantum dots laser) และควอนตัมคอมพิวเตอร์ (Quantum computer) [3] Kita และผู้ร่วมวิจัย [4, 5] ทำการทดลองเพื่อควบคุมปรากฏการณ์โพลาไรเซชัน (Polarization) ที่เกิดขึ้นใน InAs/GaAs ควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน (Column stacked quantum dots) โดยที่ไม่มีระยะห่างระหว่างควอนตัมดอท Saito และผู้ร่วมวิจัย [3, 5] ค้นพบค่าความเครียดและโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ของ InAs/GaAs ควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน โดยที่ระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทอยู่ในช่วง 0-6 นาโนเมตร โดยใช้วิธี 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 ควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน โดยที่ไม่มีระยะห่างระหว่างควอนตัมดอท อย่างไรก็ตามงานวิจัยดังกล่าว ยังไม่ได้ศึกษาแนวโน้มของระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทต่อความเครียด (Strain) และแถบพลังงานของควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน (Band profile) ซึ่งข้อมูลดังกล่าวเป็นพื้นฐานในการควบคุมปรากฏการณ์โพลาไรเซชันของแสงซึ่งเป็นประโยชน์ในการประยุกต์ทางแสง

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

อิทธิพลของความเครียดต่อโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์สามารถศึกษาจากการเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงาน 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]

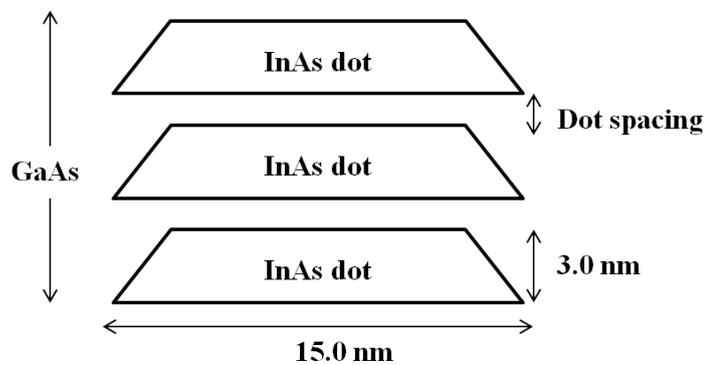
ตารางที่ 2. ค่าคงที่ที่ใช้ในการคำนวณ Eight-band strain-dependent k.p method

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
-------	------	------

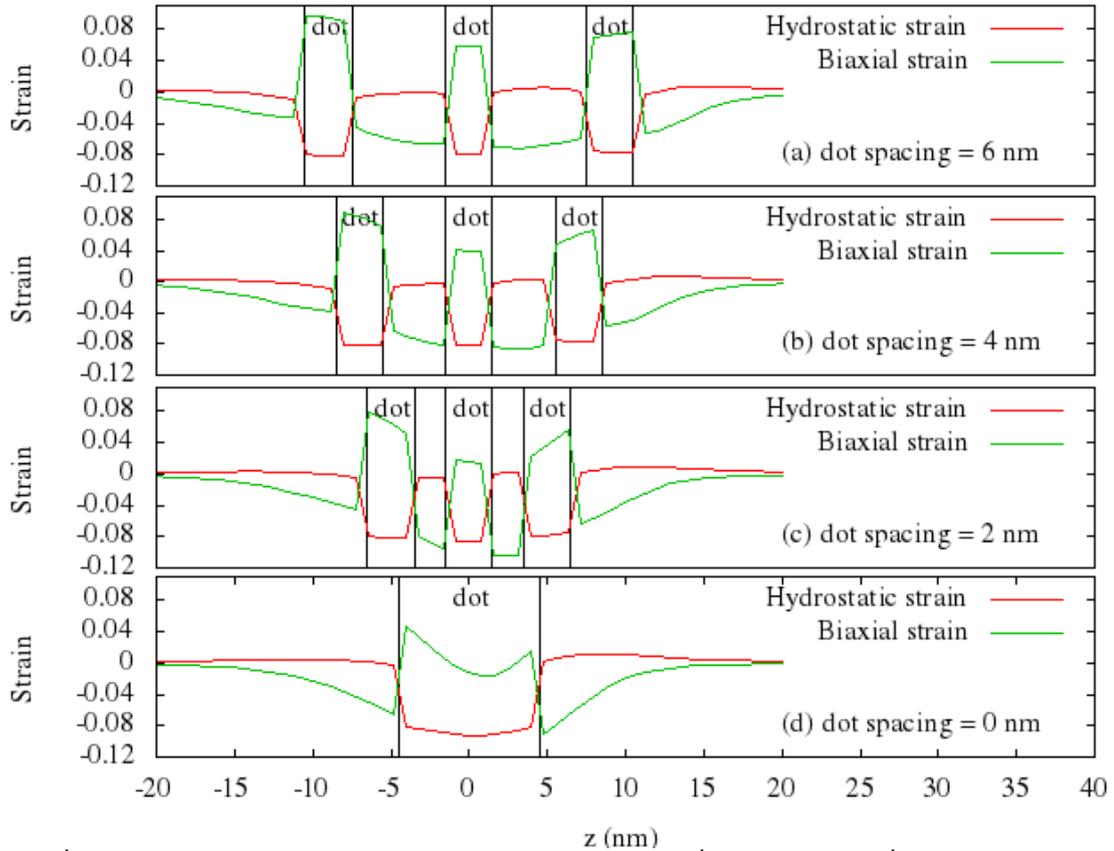
ผลการคำนวณ

ในงานวิจัยนี้ ควอนดัมดอทที่เรียงทับกันถูกจำลองขึ้นโดยประกอบด้วย InAs ควอนดัมดอทจำนวน 3 ตัวที่วางตัวในแนวตั้งบรรจุภายในสาร GaAs ซึ่งสอดคล้องกับการทดลอง ทิศทางการเรียงตัวของควอนดัมดอทจะอยู่ในแนวแกน z ควอนดัมดอทแต่ละตัวจะมีขนาดเท่ากันและมีรูปร่างเป็นพีระมิดเนื่องจากรูปร่างดังกล่าวสอดคล้องกับการทดลอง ควอนดัมดอทมีความสูงเท่ากับ 3.0 นาโนเมตร และฐานเป็นรูปสี่เหลี่ยมจัตุรัสขนาด 15x15 นาโนเมตร² ระยะห่างระหว่างควอนดัมดอทอยู่ในช่วง 0.0- 6.0 นาโนเมตร รูปที่ 1 แสดงภาพตัดขวางของควอนดัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว ความเครียดที่เกิดขึ้นในควอนดัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว ถูกคำนวณโดยวิธี continuum elasticity theory ซึ่งได้รับการยอมรับและใช้ในการคำนวณความเครียดในควอนดัมดอท 1 ตัว [12, 13].



รูปที่ 1 แสดงภาพตัดขวางของควอนดัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว

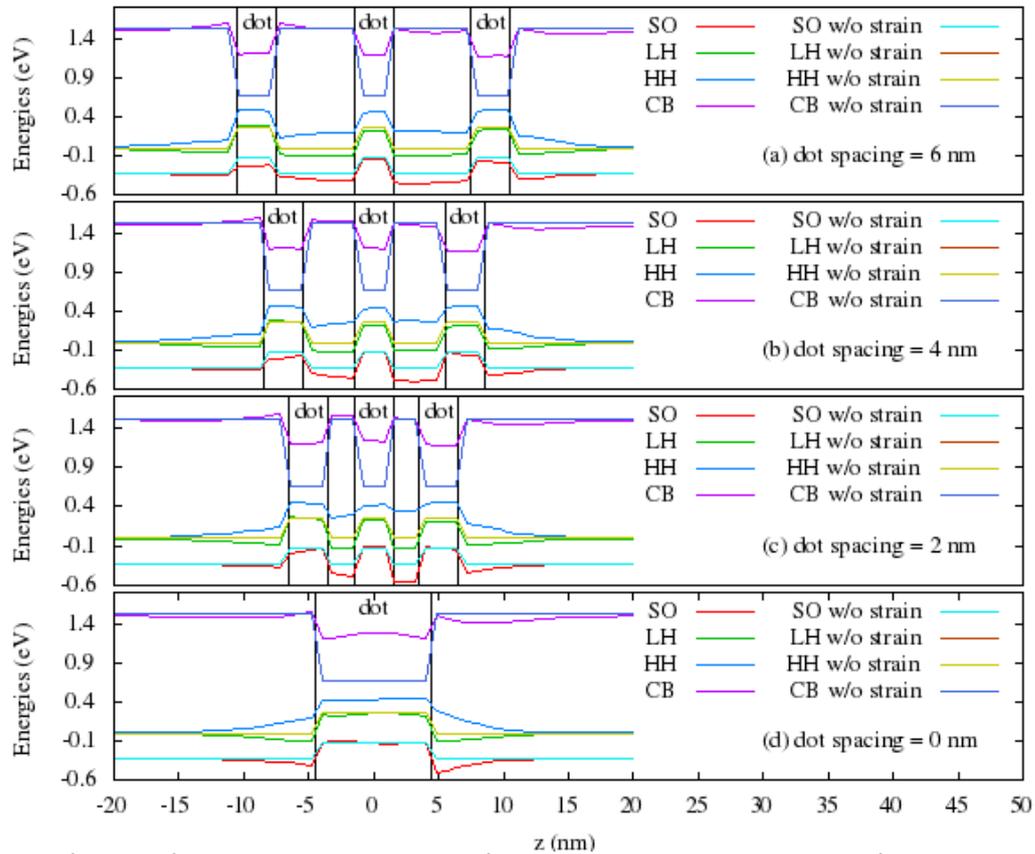
ในการศึกษาแถบพลังงานของควอนดัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว ความเครียดแบบ hydrostatic และ biaxial ได้รับการศึกษา โดยนิยาม ความเครียดแบบ hydrostatic $\epsilon_H = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}$ และ ความเครียดแบบ biaxial $\epsilon_B = \epsilon_{zz} - (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})/2$ ความเครียดแบบ hydrostatic จะยกแถบพลังงานคอนดักชันและเวเลนซ์ ในขณะที่ ความเครียดแบบ biaxial จะทำให้แถบระดับพลังงานเวเลนซ์ที่เคยเท่ากัน มีค่าต่างกัน เมื่อพิจารณาความเครียด ในบทนี้ผู้วิจัยจะศึกษาผลของระยะห่างระหว่างควอนดัมดอทต่อความเครียดแบบ hydrostatic และ ความเครียดแบบ biaxial รูปที่ 2 แสดงความเครียดแบบ hydrostatic และ ความเครียดแบบ biaxial ตามแนวแกน z เมื่อระยะห่างระหว่างควอนดัมดอทมีค่าเปลี่ยนไป จากกราฟพบว่า ในบริเวณ GaAs ความเครียดแบบ hydrostatic จะมีค่าเกือบเท่ากับศูนย์ ในขณะที่บริเวณควอนดัมดอท ความเครียดแบบ hydrostatic จะมีค่าเท่ากับ -0.08 ผลการคำนวณบอกว่ามีการบีบเกิดขึ้นภายในบริเวณควอนดัมดอท ($\epsilon_H < 0$) (Compressive) เนื่องจาก สาร GaAs ที่มีค่าความยาวของโครงสร้างสั้นกว่าความยาวของโครงสร้างของสาร InAs จะบีบควอนดัมดอท ณ ระยะห่างระหว่างควอนดัมดอทเท่ากับ 0.0 นาโนเมตร ความเครียดแบบ biaxial มีค่าน้อยและมีค่าลบในจุดกึ่งกลางของควอนดัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว เมื่อระยะห่างระหว่างควอนดัมดอทเพิ่มขึ้น ความเครียดแบบ biaxial ในบริเวณควอนดัมดอทจะมีขนาดเพิ่มขึ้น สาเหตุเกิดจากความยาวของโครงสร้างของสาร InAs ในแนวแกน z มีค่าแตกต่างกับความยาวของโครงสร้างของสาร GaAs ในแนวแกน z ส่วนในบริเวณรอบนอกควอนดัมดอท ความเครียดแบบ biaxial จะมีค่าเป็นลบ เมื่อระยะห่างระหว่างควอนดัมดอทเพิ่มขึ้น 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 ตัว โดยใช้วิธี eight-band strain-dependent $k \cdot p$ ผู้วิจัยศึกษาอิทธิพลของระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทต่อแถบพลังงานของควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว ซึ่งประกอบด้วยแถบ conduction, heavy-hole, light-hole และ spin-orbit แสดงในรูปที่ 3 ในแบบจำลองนี้ ค่าผลต่างระหว่างแถบพลังงานเวเลนซ์ (valence band offset) ของ InAs และ GaAs ร้อยต่อเท่ากับ +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 ร้อยต่อและระหว่างควอนตัมดอท 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 แต่เมื่อพิจารณา

ความเครียดในการคำนวณจะได้ว่า จะเกิดการเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงานขึ้นอย่างมาก การเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงาน อันเนื่องมาจากความเครียดของแถบพลังงานคอนดักชันและเวเลนซ์ ในบริเวณควอนตัมดอทไม่มีการเปลี่ยนแปลง ในขณะที่บริเวณระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทเกิดการเปลี่ยนแปลง เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทเพิ่มขึ้น การเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงานอันเนื่องมาจากความเครียดในบริเวณระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทจะเข้าไปใกล้กับแถบพลังงานที่ไม่ได้ พิจารณาความเครียดในการคำนวณ



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 ($\epsilon_H < 0$) เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัวเพิ่มขึ้น ความเครียดแบบ biaxial ทั้งในบริเวณควอนตัมดอทและบริเวณรอบๆจะเพิ่มขึ้นเช่นกัน จากการคำนวณพบว่าความเครียดแบบ hydrostatic และความเครียดแบบ biaxial สามารถใช้ในการพิจารณารูปแบบของแถบพลังงาน ความเครียดแบบ hydrostatic จะยกระดับพลังงานคอนดักชันและเวเลนซ์ในขณะที่ ความเครียดแบบ biaxial จะทำให้แถบระดับพลังงานเวเลนซ์ที่เคียงเท่ากัน มีค่าต่างกัน เมื่อพิจารณาความเครียด สุดท้าย ความเครียดและระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทส่งผลกระทบต่อรูปร่างและระดับของแถบพลังงานในควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 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 $k\cdot p$ calculations. *Phys. Rev. B*. 2008; 77, 195318-195328.
- [7] Janusz Andrzejewski, Grzegorz Sek, Eoin O'Reilly, Andrea Fiore, and Jan Misiewicz. Eight-band $k\cdot p$ 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.

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 และวิธีเคอทฟี (k.p) เป็นต้น ในงานวิจัยนี้ ผู้วิจัยเลือกใช้วิธีเคอทฟีในการคำนวณหาระดับพลังงานและฟังก์ชันคลื่นของสถานะอิเล็กตรอน (Electron) และ โฮล (Hole) เนื่องจากวิธีดังกล่าวสามารถศึกษาควอนตัมดอทในขนาดที่ใหญ่ได้

วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้คือ การศึกษาอิทธิพลของการกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution) และ Piezoelectricity ต่อสมบัติทางโครงสร้างของควอนตัมดอท (Electronic structure) โดยการคำนวณหาระดับพลังงานเมื่อขนาดของควอนตัมดอทมีค่าเปลี่ยนไป โดยพิจารณาและไม่พิจารณาความเครียดและ Piezoelectricity สุดท้ายผู้วิจัยศึกษาการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันคลื่น (Wave functions) ในกรณีที่พิจารณาและไม่พิจารณาความเครียดและ 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} สามารถหาได้จากการทำให้อนุพันธ์ของ 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

วิธีเคอทฟี (k.p method)

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

Two-band model

วิธีนี้จะใช้ในการคำนวณหาระดับพลังงานของสถานะอิเล็กตรอน พลังค์ชั้นคลื่นของสถานะอิเล็กตรอน อยู่ในรูปของการรวมกันเชิงเส้นของ Conduction band ดังสมการ

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

$$\text{เมื่อ } s = 1/2, s_z = \pm 1/2$$

$$|u_{1/2; +1/2}\rangle \Rightarrow s \uparrow$$

$$|u_{1/2; -1/2}\rangle \Rightarrow s \downarrow$$

Four-band model

วิธีนี้จะใช้ในการคำนวณหาระดับพลังงานของสถานะเวเลนซ์อิเล็กตรอน พลังค์ชั้นคลื่นของสถานะเวเลนซ์อิเล็กตรอน 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

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

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

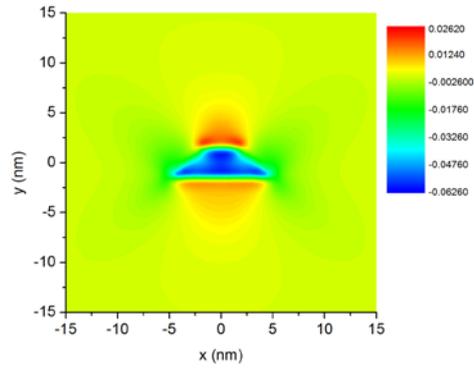
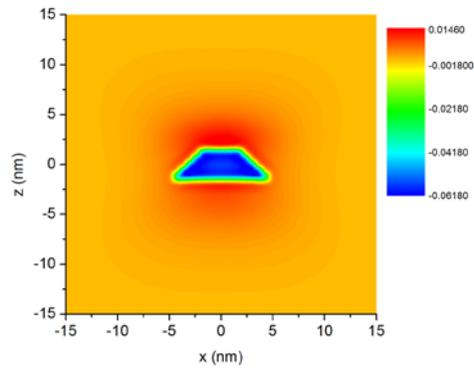
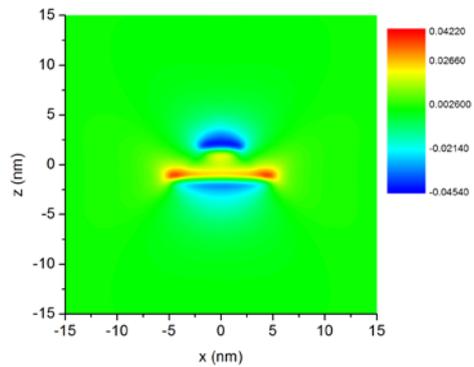
$$|3/2; -1/2\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}} [|X \uparrow\rangle - i |Y \uparrow\rangle + 2 |Z \downarrow\rangle]$$

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

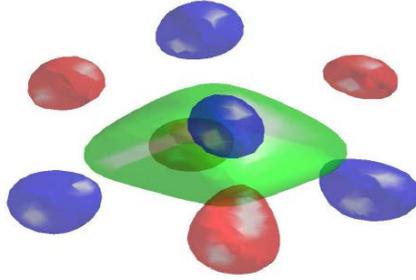
ผลการคำนวณ

การกระจายตัวของความเครียดและ Piezoelectricity

ผู้วิจัยคำนวณการกระจายตัวของความเครียด (Strain distribution) และ Piezoelectricity ของ InAs/GaAs ควอนตัมดอทที่มีรูปร่างแบบพีระมิดที่มีฐานเป็นรูปสี่เหลี่ยมจัตุรัสขนาด 10.0×10.0 นาโนเมตร² 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}

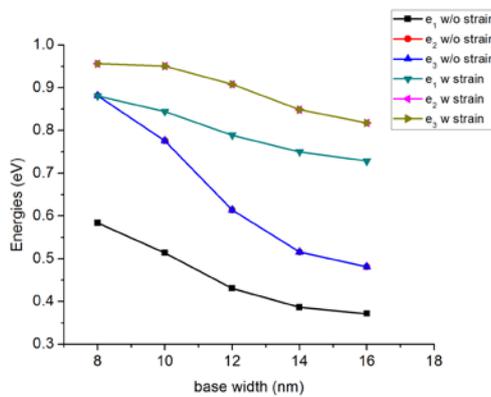
หลังจากนั้นผู้วิจัยคำนวณหาค่าพลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity ของ InAs/GaAs ควอนตัมดอทโดยหาผลเฉลยของสมการ Poisson ใน 3 มิติ รูปที่ 4 แสดงค่าพลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity ใน 3 มิติ ผลการคำนวณอธิบายว่า ค่าพลังงานศักย์จะอยู่ในบริเวณที่ใกล้กับจุดยอดและฐานของควอนตัมดอท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



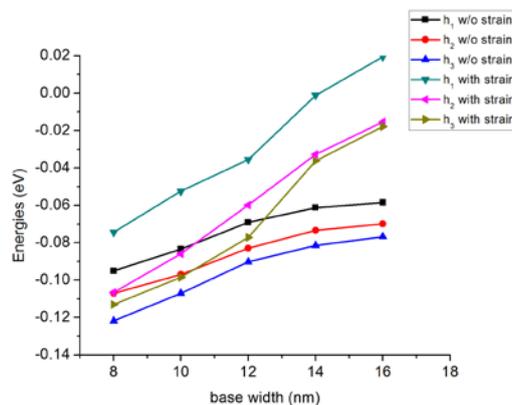
รูปที่ 4 ภาพ 3 มิติของค่าพลังงานศักย์อันเนื่องมาจากปรากฏการณ์ Piezoelectricity ของ InAs/GaAs ควอนตัมดอท

สมบัติโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์

สมบัติโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ของควอนตัมดอทที่สังเคราะห์จาก InAs/GaAs โดยวิธีเคคอตพี รูปร่างของควอนตัมดอทคือ พีระมิด ที่มีฐานเป็นรูปสี่เหลี่ยมจัตุรัสขนาด b นาโนเมตร² สูง 3.0 นาโนเมตร กราฟที่ 5, 6 แสดงระดับพลังงานของอิเล็กตรอนและโฮล เมื่อความยาวของควอนตัมดอทมีค่าต่างๆ ตามลำดับ ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยศึกษาอิทธิพลของความเครียดต่อระดับพลังงานของอิเล็กตรอน (Electron) และโฮล (Hole) จากการคำนวณพบว่า ความเครียดที่เกิดขึ้นในควอนตัมดอทมีผลกระทบต่อระดับพลังงานภายในควอนตัมดอท โดยระดับพลังงานของอิเล็กตรอน (Electron) และโฮล (Hole) จะเพิ่มขึ้นเมื่อพิจารณาความเครียดในการคำนวณ เมื่อเทียบกับการคำนวณระดับพลังงานของสถานะที่ไม่ได้พิจารณาความเครียด นอกจากนี้ เมื่อขนาดของควอนตัมดอทเพิ่มขึ้น ระดับพลังงานของอิเล็กตรอนจะลดลง ในขณะที่ระดับพลังงานของโฮลจะเพิ่มขึ้น ซึ่งส่งผลให้ช่องว่างของพลังงานลดลง (Band gap) ดังนั้นค่าช่องว่างของพลังงาน (Band gap) จะถูกปรับได้โดยขนาดของควอนตัมดอท

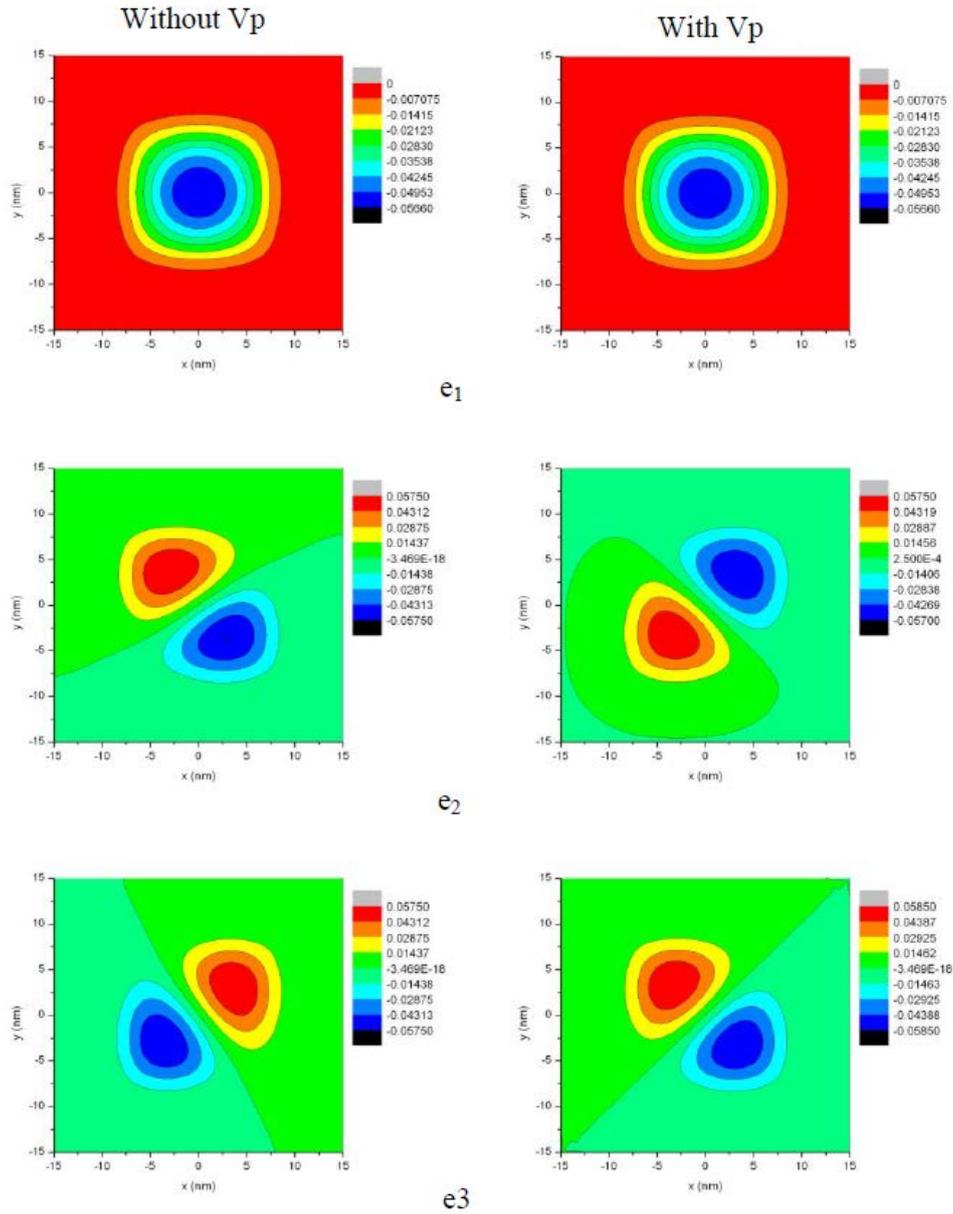


รูปที่ 5 ระดับพลังงานอิเล็กตรอนของ InAs/GaAs ควอนตัมดอท ณ ขนาดต่างๆ

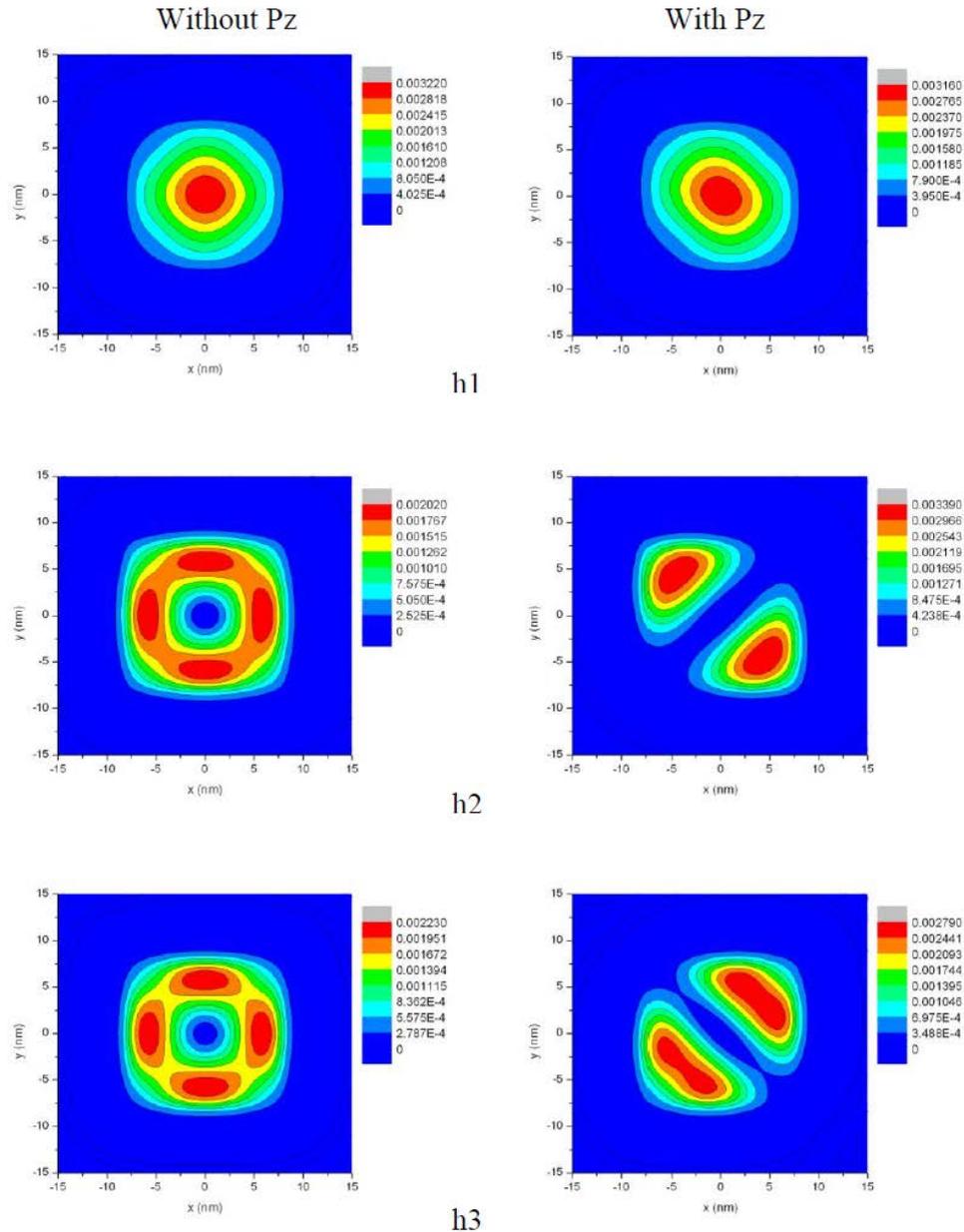


รูปที่ 6 ระดับพลังงานโฮลของ InAs/GaAs ควอนตัมดอท ณ ขนาดต่างๆ

สุดท้ายผู้วิจัยได้ศึกษาปรากฏการณ์ Piezoelectricity โดยพิจารณาควอนตัมคอร์ทรูปพีระมิด ที่มีฐานเป็นรูปสี่เหลี่ยมจัตุรัสขนาด 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) ซึ่งประกอบด้วยออร์บิตอล 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 ส่งผลให้เกิดสมมาตรชนิด C_{2v}



รูปที่ 7 กราฟ 2 มิติของฟังก์ชันคลื่นของสถานะอิเล็กตรอนเมื่อพิจารณาและไม่พิจารณา Piezoelectricity (Pz)



รูปที่ 8 กราฟ 2 มิติของฟังก์ชันคลื่นของสถานะโสมเมื่อพิจารณาและไม่พิจารณา Piezoelectricity (Pz)

สรุปผลการคำนวณ

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

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 $\text{InAs} / \text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 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.

บทที่ 6

สรุปผลการคำนวณและข้อเสนอแนะ

สรุปผลการคำนวณ

ผู้วิจัยได้อธิบายการกระจายตัวของความเครียดในควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว โดยระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทอยู่ในช่วง 0-6 นาโนเมตร โดยประยุกต์วิธีทฤษฎียืดหยุ่นอย่างต่อเนื่อง (elastic continuum theory) ในการคำนวณการกระจายตัวของความเครียด ศึกษาการเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงานอันเนื่องมาจากความเครียดโดยวิธี eight-band strain-dependent k.p จากผลการคำนวณพบที่มีการบีบตัวภายในบริเวณควอนตัมดอท ($\epsilon_H < 0$) เมื่อระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัวเพิ่มขึ้น ความเครียดแบบ biaxial ทั้งในบริเวณควอนตัมดอทและบริเวณรอบๆจะเพิ่มขึ้นเช่นกัน จากการคำนวณพบว่าความเครียดแบบ hydrostatic และความเครียดแบบ biaxial สามารถใช้ในการพิจารณา รูปแบบของแถบพลังงาน ความเครียดแบบ hydrostatic จะยกระดับพลังงานคอนดักชันและเวเลนซ์ ในขณะที่ ความเครียดแบบ biaxial จะทำให้แถบระดับพลังงานเวเลนซ์ที่เคยเท่ากัน มีค่าต่างกัน เมื่อพิจารณาความเครียด สุดท้าย ความเครียดและระยะห่างระหว่างควอนตัมดอทส่งผลกระทบต่อรูปร่างและระดับของแถบพลังงานในควอนตัมดอทที่เรียงทับกัน 3 ตัว

งานวิจัยนี้ศึกษาอิทธิพลของการกระจายตัวของความเครียดและปรากฏการณ์ Piezoelectricity ในเชิงทฤษฎีโดยวิธี continuum elasticity และเคคดอทพี 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 ภายในควอนตัมดอท (Electron-hole interaction in Quantum dots) ซึ่งเป็นพื้นฐานในการศึกษาเซลล์สุริยะ (Solar cell)
2. งานวิจัยนี้สามารถศึกษาในการประยุกต์ควอนตัมดอทในการศึกษาปรากฏการณ์ Polarization ภายในควอนตัมดอท ซึ่งเป็นพื้นฐานในการศึกษา Quantum Computer

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