

國 立 交 通 大 學

電子物理研究所

碩士論文

半導體介電函數解析模式之建立

Modeling the dielectric function of semiconductors



學生：林昆毅

指導教授：蘇冠暉 教授

中華民國 一 百 年 九 月

半導體介電函數解析模式之建立

Modeling the dielectric function of semiconductors

學生：林昆毅

Student：Kun-Yi Lin

指導教授：蘇冠暉 教授

Advisor：Kuan-Wei Su

國立交通大學

電子物理研究所



A Thesis Submitted to Institute of Electrophysics

College of science

National Chiao Tung University

In Partial Fulfillment of the Requirements

For the Degree of Master of Science

In Electrophysics June 2011

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國 一 百 年 九 月

半導體介電函數解析模式之建立

學生：林昆毅

指導教授：蘇冠暉 教授

國立交通大學電子物理所碩士班



Driven Harmonic Oscillator (DHO)模型是以電子在原子中的運動方程式來描述其振幅大小，將此模型用於介電函數的計算，在吸收帶範圍的介電函數實部與虛部通常高於實驗值許多，因此我們提出一個以 $N=2$ 或 $N=4$ 次方的輻射阻尼常數取代 DHO 模型原有的阻尼係數，將 DHO 修改為 Γ -modified DHO 與 DHO 混合的模型。並重新計算原有 DHO 模型在靠近能隙範圍的模擬，計算數個半導體材料的介電函數實部與虛部，將計算結果與實驗數值及其他模型比較，證實我們的模型能符合大範圍的實驗數值，並且改善其他模型在靠近能隙範圍計算不準確的情況。

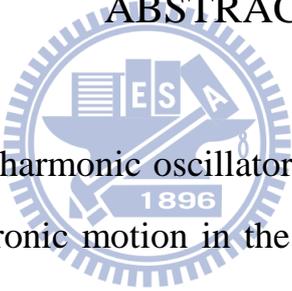
Modeling the dielectric function of semiconductors

Student : Kun-Yi Lin

Advisor : Kuan-Wei Su

Institute of Electrophysics
National Chiao Tung University

ABSTRACT



We use the driven harmonic oscillator (DHO) model that is described the amplitude of electronic motion in the atom to calculate the dielectric function. In the region of absorption edge, the real part and imaginary part of dielectric function are higher than experimental data. Thus we propose a mixed Γ -modified DHO model that ordinary damping constants are replaced by $N=2$ or $N=4$ degrees radiation damping constants. And we use the new model to recalculate the simulation of DHO model near the band gap. After calculating dielectric function of semiconductors, we compare results with experimental data and other models. We demonstrate that our model can fit in with experimental data in a large region and improve effectively poor fitting of other models near band gap.

致 謝

在交大兩年多，要感謝的人太多，在此對所有實驗室的成員致上誠心的感謝，尤其感謝蘇冠暉老師、陳永富老師的勉勵與細心精湛的研究方式，以及老師說的最經典的一句話，”跟前輩相處，要先學會蹲，才跳的高”，讓我畢生受用。

另外要感謝的是那些陪伴我兩年的室友們，語宸、小魚、國榮，有你們在寢室裡面切磋研究議題，共同奮鬥考試的日子真好，才不至於被挫折打敗，也感受到其他實驗室不同的學習風氣，有歡樂的氣氛才有快樂研究的動力。

最後要感謝的是我的父母以及女朋友姿君，感謝你們支持我所做的每一個決定，陪我度過每一個難關。

昆毅

目 錄

摘 要	I
ABSTRACT	II
致 謝	III
目 錄	IV
圖目錄.....	VI
表目錄.....	X
第一章 簡介	1
1.1 動機.....	1
1.2 本文架構.....	2
第二章 折射率的量測方式.....	3
2.1 橢圓儀.....	3
2.1.1 橢圓儀架構.....	3
2.1.2 橢圓儀原理.....	5
2.2 表面分析的儀器.....	9
2.2.1 電子能損譜.....	10
2.2.2 能量損失函數.....	13
第三章 模型介紹	15
3.1 阻尼簡諧震盪模型.....	15
3.2 阻尼擴大介電函數模型 (MDF).....	17
3.3 Model of Forouhi and Bloomer (MFB)	20
3.4 Model of Chen	21
3.5 混合阻尼簡諧震盪模型.....	22
3.6 Sum rule	26
第四章 結果與討論	29
4.1 矽 (Silicon , Si)	30
4.1.1 矽材料 DHO 模型與混合 DHO 模型比較	30
4.1.2 矽材料混合 DHO 模型與其他模型比較.....	35

4.2 砷化鎵 (GaAs)	39
4.2.1 砷化鎵 DHO 模型與混合 DHO 模型比較	39
4.2.2 砷化鎵混合 DHO 模型與其他模型比較	42
4.3 鍺 (Ge)	46
4.3.1 鍺 DHO 模型與混合 DHO 模型比較	46
4.3.2 鍺混合 DHO 模型與 MFB 模型比較	49
4.4 磷化銦 (InP)	51
4.4.1 磷化銦 DHO 模型與混合 DHO 模型比較	51
4.4.2 磷化銦混合 DHO 模型與 MFB 模型比較	54
4.5 磷化鎵 (GaP)	56
4.5.1 磷化鎵 DHO 模型與混合 DHO 模型比較	56
4.5.2 磷化鎵混合 DHO 模型與 MFB 模型比較	59
4.6 銻化鎵 (GaSb)	61
4.6.1 銻化鎵 DHO 模型與混合 DHO 模型比較	61
4.6.2 銻化鎵混合 DHO 模型與 MFB 模型比較	64
4.7 氮化鎵 (GaN)	66
4.7.1 氮化鎵 DHO 模型與混合 DHO 模型比較	66
4.7.2 氮化鎵混合 DHO 模型與 MDF 模型比較	69
4.8 砷化銦 (InAs)	71
4.8.1 砷化銦 DHO 模型與混合 DHO 模型比較	71
4.8.2 砷化銦 DHO 模型與 MFB 模型比較	74
4.9 銻化銦 (InSb)	76
4.9.1 銻化銦 DHO 模型與混合 DHO 模型比較	76
4.9.2 銻化銦 DHO 模型與 MFB 模型比較	79
4.10 氮化銦 (InN)	81
4.10.1 氮化銦 DHO 模型與混合 DHO 模型比較	81
第五章 結論與未來工作	93
References	94

圖目錄

圖. 2.1 橢圓儀架構示意圖.....	4
圖. 2.2 P-偏振與 S-偏振電磁波的入射與反射.....	5
圖. 2.3 電場 E 與感應磁場 B 在(a) P-polarization 及 (b) S-polarization 的表示方向。.....	5
圖. 2.4 多次反射的薄膜干涉現象.....	8
圖. 2.5 量測電子能量損失的裝置.....	10
圖. 2.6 入射電子撞擊樣品產生散射電子示意圖.....	11
圖. 2.7 電子能量損失譜.....	11
圖. 2.8 Ni 與 O 的電子能量損失譜.....	12
圖. 2.9 EELS 實驗的電子散射幾何示意圖.....	13
圖. 3.1 DHO 模型與不同 N 值的 Γ -modified DHO 模型介電函數實部.....	25
圖. 3.2 DHO 模型與不同 N 值的 Γ -modified DHO 模型介電函數虛部.....	25
圖. 3.3 Silicon 實驗數據的有效電子數 $n_{eff}(\omega)$	28
圖. 4.1 實驗數值的介電函數實部(black hallow dot curve) , 虛部(red hallow dot curve).....	30
圖. 4.2 由 0 到 10eV DHO 模型每一項參數的分佈位置.....	32
圖. 4.3 由 0 到 8eV 混合 DHO 模型每一項參數的分佈位置.....	32
圖. 4.4 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 Si 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較.....	33
圖. 4.5 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 Si 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較.....	33
圖. 4.6 混合 DHO 與 DHO 模型計算 Si 的 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 與實驗曲線比較.....	34
圖. 4.7 混合 DHO (solid curve)與 DHO (dash curve)模型計算 Si 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較.....	34
圖. 4.8 MDF (pink solid curve) 、MFB (blue solid curve) 、Chen (green solid curve) 、混合 DHO (red solid curve)對 Si 的 $\epsilon_1(\omega)$ 模擬。.....	36
圖. 4.9 MDF (pink solid curve) 、MFB (blue solid curve) 、Chen (green solid curve) 、混合 DHO (red solid curve)對 Si 的 $\epsilon_1(\omega)$ 模擬。.....	37
圖. 4.10 (a)靠近吸收帶 MFB(blue solid curve) 、MDF(pink solid curve)及混合 DHO(red solid curve)模型對 Si 的 $\epsilon_1(\omega)$ 模擬.....	37
圖. 4.10 (b)靠近吸收帶 MFB、MDF 及混合 DHO 模型對 Si 的 $\epsilon_2(\omega)$ 模擬.....	37
圖. 4.11 (a)MFB、MDF、Chen 及混合 DHO 模型的 energy loss function 比較.....	38
圖. 4.11 (b)MFB (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的有效電子數比較.....	38
圖. 4.11 (c)Chen (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的有效電子數比較.....	38
圖. 4.11 (d)MDF (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的有效電子數比較.....	38
圖. 4.12 由 0 到 10eV DHO 模型每一項參數的分佈位置.....	40
圖. 4.13 由 0 到 10eV 混合 DHO 模型每一項參數的分佈位置.....	40
圖. 4.14 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaAs 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較.....	41

圖. 4.15 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaAs 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較.....	41
圖. 4.16 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaAs 的 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 與實驗曲線比較.....	41
圖. 4.17 混合 DHO (solid curve)與 DHO (dash curve)模型計算 GaAs 的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 之比較。.....	42
圖. 4.18 MFB、Chen 及混合 DHO 模型對 GaAs 材料介電函數實部模擬.....	44
圖. 4.19 MFB、Chen 及混合 DHO 模型對 GaAs 材料介電函數虛部模擬.....	44
圖. 4.20 靠近吸收帶 MFB、Chen 及混合 DHO 模型對 GaAs 材料實部模擬.....	44
圖. 4.21 靠近吸收帶 MFB、Chen 及混合 DHO 模型對 GaAs 材料虛部模擬.....	45
圖. 4.22 (a)MFB、MDF、Chen 及混合 DHO 模型的 energy loss function 比較.....	45
圖. 4.22 (b)MFB (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 比較.....	45
圖. 4.22 (c)MDF (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 比較.....	45
圖. 4.22 (d)Chen (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 比較.....	45
圖. 4.23 由 0eV-7eV DHO 模型每一項參數的分佈位置.....	47
圖. 4.24 由 0eV-7eV 混合 DHO 模型每一項參數的分佈位置.....	47
圖. 4.25 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 Ge 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較.....	48
圖. 4.26 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 Ge 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較.....	48
圖. 4.27 混合 DHO (solid curve)與 DHO (dash curve)模型計算 Ge 的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 之比較。.....	48
圖. 4.28. MFB 及混合 DHO 模型對 Ge 材料介電函數實部模擬.....	50
圖. 4.29 MFB 及混合 DHO 模型對 Ge 材料介電函數虛部模擬.....	50
圖. 4.30 混合 DHO (solid curve)與 MFB (dash curve)模型計算 Ge 的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 之比較。.....	50
圖. 4.31 由 0eV-8eV DHO 模型每一項參數分佈位置.....	52
圖. 4.32 由 0eV-8eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置.....	52
圖. 4.33 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InP 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較.....	53
圖. 4.34 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InP 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較.....	53
圖. 4.35 混合 DHO (solid curve)與 DHO (dash curve)模型計算 InP 的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 之比較。.....	53
圖. 4.36 MFB 及混合 DHO 模型對 InP 材料介電函數實部模擬.....	55
圖. 4.37 MFB 及混合 DHO 模型對 InP 材料介電函數虛部模擬.....	55
圖. 4.38 混合 DHO (solid curve)與 MFB (dash curve)模型計算 InP 的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 之比較。.....	55
圖. 4.39 由 0eV-10eV DHO 模型每一項參數分佈位置.....	57
圖. 4.40 由 0eV-10eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置.....	57

圖. 4.41 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaP 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較	58
圖. 4.42 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaP 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較	58
圖. 4.43 混合 DHO (solid curve)與 DHO (dash curve)模型計算 GaP 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較。	58
圖. 4.44 MFB 及混合 DHO 模型對 GaP 材料介電函數實部模擬	60
圖. 4.45 MFB 及混合 DHO 模型對 GaP 材料介電函數虛部模擬	60
圖. 4.46 混合 DHO (solid curve)與 MFB (dash curve)模型計算 GaP 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較。	60
圖. 4.47 由 0eV-7eV DHO 模型每一項參數分佈位置	62
圖. 4.48 由 0eV-7eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置	62
圖. 4.49 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaSb 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較	63
圖. 4.50 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaP 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較	63
圖. 4.51 混合 DHO (solid curve)與 DHO (dash curve)模型計算 GaSb 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較。	63
圖. 4.52 MFB 及混合 DHO 模型對 GaSb 材料介電函數實部模擬	65
圖. 4.53 MFB 及混合 DHO 模型對 GaSb 材料介電函數虛部模擬	65
圖. 4.54 混合 DHO (solid curve)與 MFB (dash curve)模型計算 GaSb 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較	65
圖. 4.55 由 0eV-9eV DHO 模型每一項參數分佈	67
圖. 4.56 由 0eV-9eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈	67
圖. 4.57 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaN 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較	68
圖. 4.58 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaN 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較	68
圖. 4.59 MDF 及混合 DHO 模型對 GaN 材料介電函數實部模擬	70
圖. 4.60 MDF 及混合 DHO 模型對 GaN 材料介電函數虛部模擬	70
圖. 4.61 由 0eV-6.5eV DHO 模型每一項參數分佈位置	72
圖. 4.62 由 0eV-6.5eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置	72
圖. 4.63 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InAs 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較	73
圖. 4.64 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InAs 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較	73
圖. 4.65 混合 DHO (dash curve)與 DHO (solid curve)模型計算 InAs 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較。	73
圖. 4.66 MFB 及 DHO 模型對 InAs 材料介電函數實部模擬	75
圖. 4.67 MFB 及 DHO 模型對 InAs 材料介電函數虛部模擬	75
圖. 4.68 DHO model (solid curve)與 MFB model (dash curve)模型計算 InAs 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較	75
圖. 4.69 由 0eV-6.5eV DHO 模型每一項參數分佈位置	77
圖. 4.70 由 0eV-6.5eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置	77
圖. 4.71 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InSb 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較	78
圖. 4.72 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InSb 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較	78

圖. 4.73 混合 DHO (dash curve)與 DHO (solid curve)模型計算 InSb 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較	78
圖. 4.74 MFB 及 DHO 模型對 InSb 材料介電函數實部模擬.....	80
圖. 4.75 MFB 及 DHO 模型對 InSb 材料介電函數虛部模擬.....	80
圖. 4.76 DHO (solid curve)與 MFB (dash curve)模型計算 InSb 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較.....	80
圖. 4.77 由 0eV-9eV DHO 模型每一項參數分佈位置	82
圖. 4.78 由 0eV-9eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置	82
圖. 4.79 混合 DHO 及 DHO 模型對 InN 材料介電函數實部模擬.....	83
圖. 4.80 混合 DHO 及 DHO 模型對 InN 材料介電函數虛部模擬.....	83



表目錄

表. 2.1 表面分析儀器.....	9
表. 4.1 所有材料的特性參數.....	29
表. 4.2 矽相對方均根誤差.....	31
表. 4.3 矽所有模型相對方均根誤差.....	36
表. 4.4 砷化鎵相對方均根誤差.....	39
表. 4.5 砷化鎵所有模型相對方均根誤差.....	43
表. 4.6 鎘相對方均根誤差.....	46
表. 4.7 鎘相所有模型對方均根誤差.....	49
表. 4.8 磷化銦相對方均根誤差.....	51
表. 4.9 磷化銦所有模型相對方均根誤差.....	54
表. 4.10 磷化鎵相對方均根誤差.....	56
表. 4.11 磷化鎵所有模型相對方均根誤差.....	59
表. 4.12 銻化鎵相對方均根誤差.....	61
表. 4.13 銻化鎵所有模型相對方均根誤差.....	64
表. 4.14 氮化鎵相對方均根誤差.....	66
表. 4.15 氮化鎵 1.24eV~9eV 有效貢獻的電子數.....	66
表. 4.16 氮化鎵所有模型相對方均根誤差.....	69
表. 4.17 砷化銦相對方均根誤差.....	71
表. 4.18 砷化銦所有模型相對方均根誤差.....	74
表. 4.19 銻化銦相對方均根誤差.....	76
表. 4.20 銻化銦所有模型相對方均根誤差.....	79
表. 4.21 氮化銦所有模型相對方均根誤差.....	81
表. 4.22 氮化銦 2.2eV~9eV 有效貢獻的電子數.....	81
表. 4.23 矽 DHO 模型建模使用參數.....	84
表. 4.24 矽混合 DHO 模型建模使用參數, k=4, N=2.....	84
表. 4.25 矽 Chen 模型建模使用參數, $\eta_b=1.015$	84
表. 4.26 Si GaAs Ge InP GaP GaSb InAs InSb, MFB 模型建模使用參數.....	85
表. 4.27 $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ MDF 模型建模使用參數.....	86
表. 4.28 砷化鎵 DHO 模型建模使用參數.....	86
表. 4.29 砷化鎵混合 DHO 模型建模使用參數, k=3, N=2.....	87
表. 4.30 砷化鎵 Chen 模型建模使用參數, $\eta_b=1.01$ [17].....	87
表. 4.31 砷化鎵 MDF 模型建模使用參數.....	88
表. 4.32 鎘 DHO 模型建模使用參數.....	88
表. 4.33 鎘 混合 DHO 模型建模使用參數, k=3, $\epsilon_b=1.01$, N=2.....	88
表. 4.34 磷化銦 DHO 模型建模使用參數.....	89
表. 4.35 磷化銦 混合 DHO 模型建模使用參數, k=2, N=2.....	89

表. 4.36 磷化鎵 DHO 模型建模使用參數.....	89
表. 4.37 磷化鎵 混合 DHO 模型建模使用參數, $k=2$, $N=2$	89
表. 4.38 銻化鎵 DHO 模型建模使用參數.....	90
表. 4.39 銻化鎵 混合 DHO 模型建模使用參數, $k=4$, $N=2$	90
表. 4.40 氮化鎵 DHO 模型建模使用參數, $\epsilon_b=1.02$	90
表. 4.41 氮化鎵 混合 DHO 模型建模使用參數, $k=11$, $N=4$	90
表. 4.42 氮化鎵 MDF 模型建模使用參數.....	91
表. 4.43 砷化鎵 DHO 模型建模使用參數, $\epsilon_b=1.02$	91
表. 4.44 砷化鎵 混合 DHO 模型建模使用參數, $k=2$, $N=2$	91
表. 4.45 銻化銻 DHO 模型建模使用參數, $\epsilon_b=1.02$	92
表. 4.46 銻化銻 混合 DHO 模型建模使用參數, $k=4$	92
表. 4.47 氮化銻 DHO 模型建模使用參數, $\epsilon_b=1.5$	92
表. 4.48 氮化銻 混合 DHO 模型建模使用參數, $\epsilon_b=1.5$, $k=2$, $N=2$	92
表. 5.1 能矽大小與 N 值的關係	93



第一章 簡介

1.1 動機

光在大部份材料中傳播的過程可以簡單的分為下列幾個現象：反射、傳播、及穿透，這些現象通常與光在物質內的折射與吸收有關。而固態材料的光學性質可以複數折射率 $\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega)$ 或複數介電常數 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 來表示；其中，折射率 n 與消耗係數 κ 可由反射與吸收光譜得到，且 $\epsilon = \tilde{n}^2$ ，故可得與能量有關介電函數實部 $\epsilon_1 = n^2 - \kappa^2$ 與虛部 $\epsilon_2 = 2n\kappa$ 。

半導體材料在科學應用已經扮演著重要的角色，例如：light sources、detectors、switches、modulators 這些元件的製造及整合，為了設計及分析這些元件裝置，必須知道大範圍波長的介電函數值。傳統上介電函數通常藉由實驗獲得數值，例如：以反射率的量測、橢圓儀及電子能量損失光譜的方式。但實驗上的介電函數不能以光子能量 $E = \hbar\omega$ 表示成一個解析函數，找到一個適當的模型與實驗數值匹配，就可克服沒有解析函數的缺陷，並且可以針對我們有興趣的材料或是科學應用上較為重要的材料做模擬。

在折射率實部與虛部已經有解析函數被提出，但符合的範圍只有在材料能隙之上且範圍太狹小，某些模擬範圍不準確。1988 年，Forouhi and Bloomer (FB) 提出 Model of Forouhi and Bloomer (MFB) 消耗係數表達式[16]，但此模型不滿足對稱關係且不遵從 f-sum rule[17]。另一個是 Chen 所提出的模型，Chen 模型滿足對稱關係及符合 f-sum rule，而 Chen 所提出的模型在電漿共振頻率範圍的計算也可以很準確，改善了 MFB 模型無法計算的範圍[18]。

近期另一個常用於半導體光學常數計算是 Sadao Adachi 所提出的介電函數模型 Model of Dielectric Function (MDF) 模型，是一個以能帶內主要的 critical point transition 及 excitonic effect 來計算介電函數[8]。隨後研究介電函數的人，進一步的使用可調的 broadening function 來改善原始 MDF 模型在靠近能隙範圍不準確的地方[10-15]，並沒

有提及從何而來或是物理的源頭，只是數學上的操作。

現在我們使用較為簡單的 driven harmonic oscillator (DHO) 模型為基礎來計算，DHO 模型是以電子在原子中的運動方程式來描述其振幅大小，若考慮輻射阻尼的作用，將 DHO 修改為 Γ -modified DHO 與 DHO 混合的模型，並計算數個半導體材料由低能量到高能範圍的介電函數實部與虛部。將計算結果與實驗數值及其他模型比較，證實我們的模型能符合大範圍的實驗數值，並且改善其他模型在靠近能隙範圍計算不符合的情況。

1.2 本文架構

本文共分爲五個章節，架構如下：

第一章：敘述研究動機及研究內容大綱

第二章：簡介量測介電函數的實驗方式，例如：橢圓儀、電子能損譜

第三章：由電子運動方程式出發，探討外加電磁場對介質內部電子震盪的影響，及推導介電函數的解析模型；再簡單介紹其他已提出的模型。進一步由考慮輻射阻尼的電子運動方程式推導介電函數的解析解，並且說明改善的方式；最後介紹驗證各個模型是否能收斂或計算有效電子數的 sum rule。

第四章：先使用 DHO 模型與混合 DHO 模型模擬十個材料的介電函數，再將模擬結果較好的模型與其他已提出過的模型比較，並且使用 sum rule 計算每個模型的有效電子數。

第五章：結論與未來工作

第二章 折射率的量測方式

2.1 橢圓儀

橢圓偏振技術是一種多功能和強大的光學技術，可用以取得薄膜的介電性質(複數折射率或介電常數)。它已被應用在許多不同的領域，從基礎研究到工業應用，如半導體物理研究、微電子學和生物學。橢圓偏振是一個很敏感的薄膜性質測量技術，且具有非破壞性和非接觸之優點。

分析自樣品反射之極化光的改變，橢圓偏振技術可得到膜厚比探測光本身波長更短的薄膜資訊，小至一個單原子層，甚至更小。橢圓儀可測得複數折射率或介電函數張量，可以此獲得基本的物理參數，並且這與各種樣品的性質，包括形態、晶體質量、化學成分或導電性，有所關聯。它常被用來鑑定單層或多層堆疊的薄膜厚度，可量測厚度由數埃（Angstrom）或數奈米到幾微米皆有極佳的準確性。之所以命名為橢圓偏振，是因為一般大部分的極化多是橢圓的。此技術已發展近百年，現在已有許多標準化的應用。然而，橢圓偏振技術對於在其他學科如生物學和醫學領域引起研究人員的興趣，並帶來新的挑戰。例如以此測量不穩定的液體表面和顯微成像。

2.1.1 橢圓儀架構

橢圓儀示意圖如圖. 2.1 所示，由各個光學元件所組成。

(A). Light source

光源可為單一波長的雷射光或者是白光產生器加上單光儀（monochromator）藉以調變所須的波長。

(B). Polarizer

從光源出來的光一般為非偏極光，因此需藉一偏光片，將光源轉成線性偏極光（Linearly polarized light）。

(C). Compensator

通常為四分之一波片（Quarter Wave Plate），光學上稱為延相器(Retarder)，若置於樣品之前，其作用在於將線性偏極光轉成適當的橢圓偏極光，使光線經樣品反射後能變成線性偏極光再進入檢測器。若置於樣品之後，其作用在於將樣品反射出的橢圓偏極光轉成線性偏極光，再進入檢測器。無論何種擺置，延相器的功能在確定入射於析光片之前的光為線性偏極光。

(D). 樣品置放台(sample)

為使光線能準確的入射到須要量測的位置，並準確的反射到檢測器，樣品置放台通常配備精密的三維微調裝置，以便精確的控制。

(E). Analyzer

其實就是另一個偏光片，其作用在分析反射光的極化狀態。

(F). Detector

用來量測經過析光片的光強度，其裝置可為光電倍增管（Photomultiplier）或光電二極體（Photodiode）。

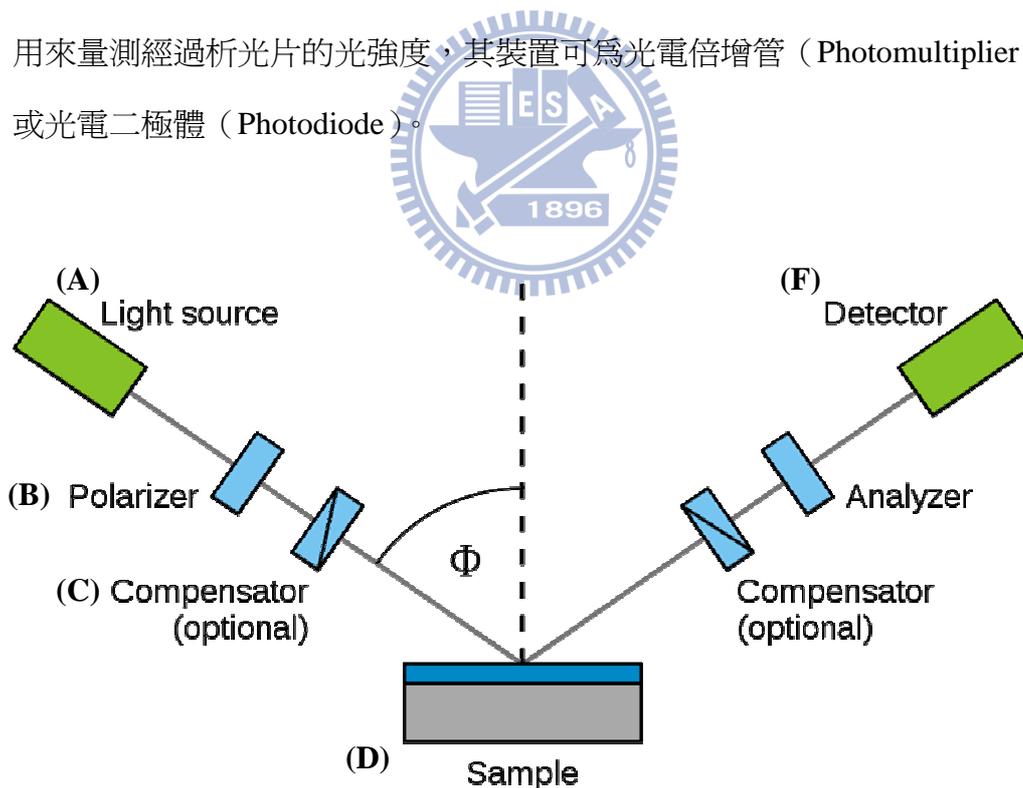


圖. 2.1 橢圓儀架構示意圖

2.1.2 橢圓儀原理

光波為一電磁波，當一光波斜向入射在基板時，部份會反射、部份會被吸收、部份會穿透，如圖圖. 2.2 所示，入射波的電場可以兩個分量，平行入射平面分量稱為 P 偏極光(TM 偏極光)，而垂直入射平面分量稱為 S 偏極光(TE 偏極光)。

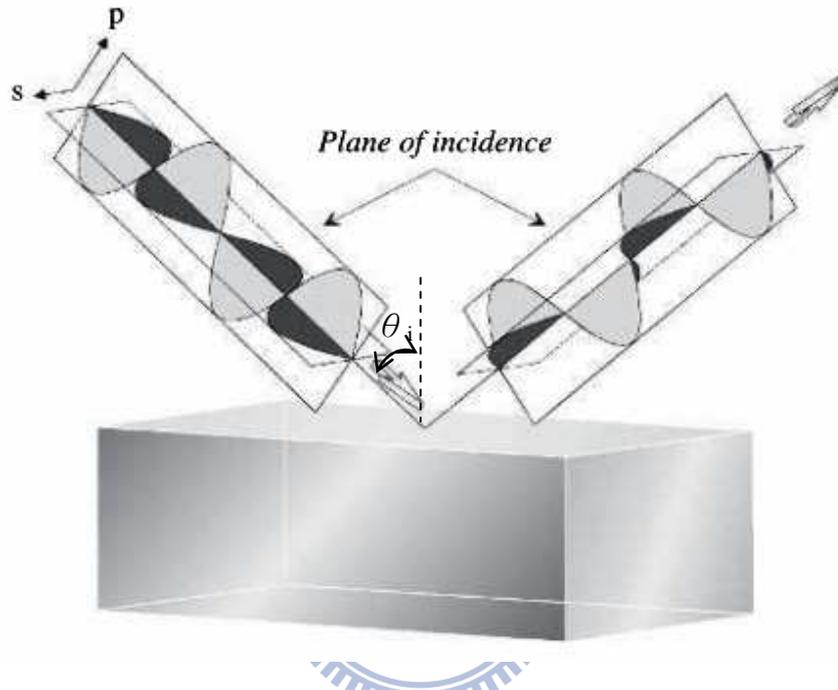


圖. 2.2 P-偏振與 S-偏振電磁波的入射與反射[1]

更進一步探討 P-偏振與 S-偏振態電磁波的電場與磁場，入射物體表面所呈現的行為。

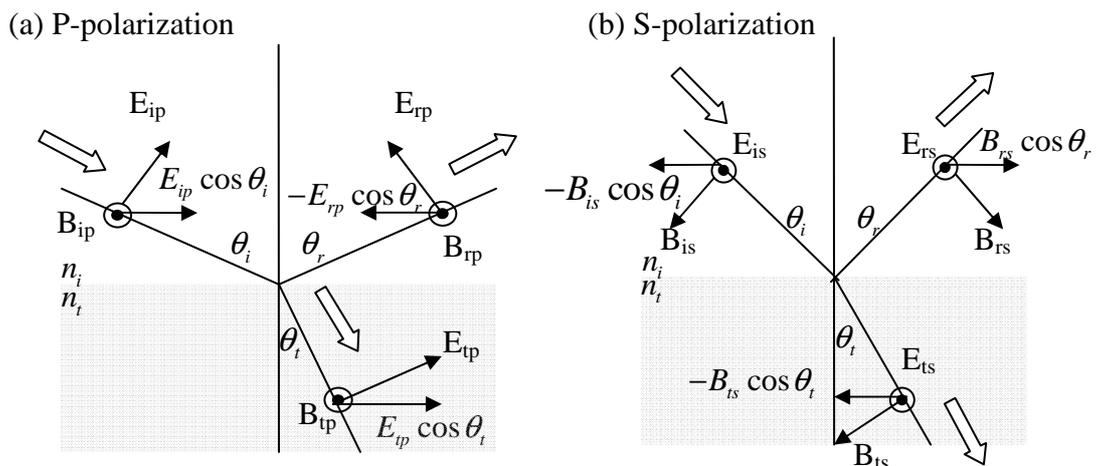


圖. 2.3 電場 E 與感應磁場 B 在(a) P-polarization 及 (b) S-polarization 的表示方向。在圖中，(a)圖內的磁場 B 與(b)圖內的電場 E 均指出紙面。

以 P-polarization 電磁波為例，其中 θ_i ：入射角， θ_t ：折射角，依 *Snell's law* 可得：

$$n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t \quad (2-1)$$

且電場 E 與磁場 B 邊界條件為：

$$E_{ip} \cos \theta_i - E_{rp} \cos \theta_r = E_{tp} \cos \theta_t \quad (2-2)$$

$$B_{ip} + B_{rp} = B_{tp} \quad (2-3)$$

下標 ip、rp 及 tp 分別代表 P-polarization 的入射、反射及穿透，且 $B = \frac{n}{c} E$ ，則我們可

將(2-3)式寫為：

$$n_i(E_{ip} + E_{rp}) = n_t E_{tp} \quad (2-4)$$

利用(2-2)、(2-4)式即可算出 P-polarization 的反射係數：

$$r_p \equiv \frac{E_{rp}}{E_{ip}} = \frac{n_t \cos \theta_i - n_i \cos \theta_t}{n_t \cos \theta_i + n_i \cos \theta_t} \quad (2-5)$$

以此類推，我們也可從 S-polarization 的邊界條件推導出反射係數：

$$r_s \equiv \frac{E_{rs}}{E_{is}} = \frac{n_i \cos \theta_i - n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} \quad (2-6)$$

當電磁波由一基板介面反射時，P-polarization 與 S-polarization 的振幅與相位會產生變化，故可將反射係數表示為複數形式：

$$r_p = |r_p| \exp(i\delta_p) \quad (2-7)$$

$$r_s = |r_s| \exp(i\delta_s) \quad (2-8)$$

將上述兩式的比值稱之為橢圓率 ρ ：

$$\rho \equiv \frac{r_p}{r_s} \equiv \tan \psi \exp(i\Delta) \equiv \left(\frac{E_{rp}}{E_{ip}} \right) / \left(\frac{E_{rs}}{E_{is}} \right) \quad (2-9)$$

$$\psi = \tan^{-1} \frac{|r_p|}{|r_s|} \quad (2-10)$$

$$\Delta = \delta_p - \delta_s \quad (2-11)$$

其中， $\tan \psi$ 為反射係數振幅的比值， Δ 為反射造成 S-polarization 與 P-polarization 的相位差。考慮介質折射率為複數形式 \tilde{N} 且令 $n_i = 1$ ，代入(2-5)、(2-6)式，故可將(2-9)式整理為：

$$\rho = \frac{\tilde{N}(\cos^2 \theta_i - \cos^2 \theta_t) + (\tilde{N}^2 - 1) \cos \theta_i \cos \theta_t}{\tilde{N}(\cos^2 \theta_i - \cos^2 \theta_t) + (1 - \tilde{N}^2) \cos \theta_i \cos \theta_t} \quad (2-12)$$

再把 $\cos \theta_t$ 、 $\cos^2 \theta_t$ 項以 Snell's law 換掉，即可得：

$$\tilde{N} = \sin \theta_i \sqrt{1 + \frac{(1 - \rho)^2}{(1 + \rho)^2} \tan^2 \theta_i} = n + ik \quad (2-13)$$

上式即表示知道電磁波入射介質表面的入射角，以及反射後的 P-偏振和 S-偏振態的電磁波振幅比值及相位差，即可求得基板的折射率、消耗係數及吸收係數：

$$\sigma = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (2-14)$$

若基板上有一層薄膜，如圖. 2.4 所示且 N_0 、 N_1 、 N_2 分別為空氣、薄膜及基板的複數折射率，當薄膜對入射光的吸收較弱時，入射光會在薄膜表面與薄膜基板介面被反射，如此一來，多次反射就會形成薄膜干涉。考慮入射點 A 且反射後到達 D，則主要的光束可表示為 $E = E_0 \exp[i(\omega t - K_0 x + \delta)]$ ， K_0 為空氣中的傳播常數，光傳播距離 \overline{AD} ，

而穿透薄膜由基板反射的次級光束傳播距離 $\overline{AB} + \overline{BC}$ ，故兩道光束的相位差為：

$$\alpha = K_1(\overline{AB} + \overline{BC}) - K_0 \overline{AD} \quad (2-15)$$

其中 $\overline{AD} = 2d \tan \theta_1 \sin \theta_0$ ， $\overline{AB} = \overline{BC} = d / \cos \theta_1$ ， d 為薄膜物理厚度，故(2-15)式可表示

$$\text{為：} \alpha = \frac{4\pi d N_1}{\lambda} \cos \theta_1 \quad (2-16)$$

λ ：入射光波長，另外薄膜表面與薄膜基板介面相位差為 $\alpha = 2\beta$ ， β 可表示為：

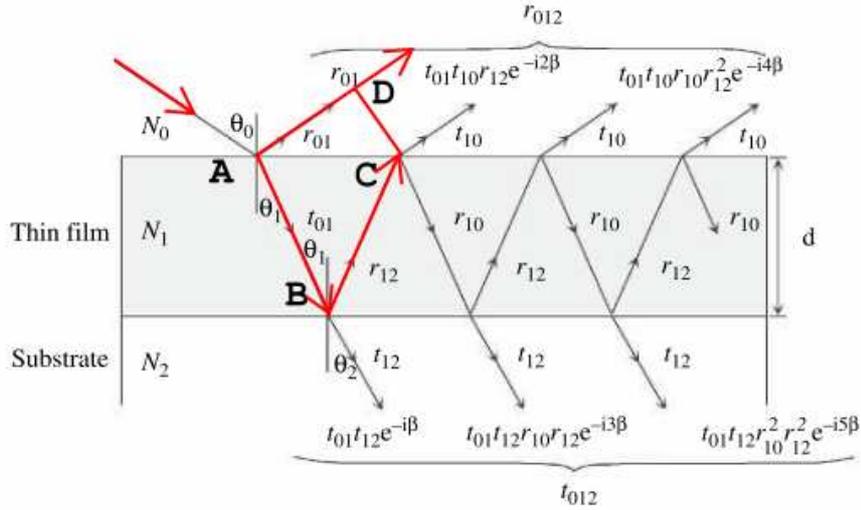


圖. 2.4 多次反射的薄膜干涉現象[1]

$$\beta = \frac{2\pi d}{\lambda} N_1 \cos_1 = \frac{2\pi d}{\lambda} (N_1^2 - N_0^2 \sin^2 \theta_0)^{1/2} \quad (2-17)$$

上式又稱為薄膜相位厚度。由圖. 2.4 所示反射係數的振幅可表示成所有反射波的疊

$$\text{加: } r_{012} = r_1 + t_{01}t_{10}r_{12}e^{-i2\beta} + t_{01}t_{10}r_{10}r_{12}^2e^{-i4\beta} + t_{01}t_{10}r_{10}^2r_{12}^3e^{-i6\beta} + \dots \quad (2-18)$$

其中可將 $r_{10} = -r_{01}$ 、 $t_{01}t_{10} = 1 - r_{01}^2$ 替換，再以等比級數表示：

$$r_{012} = \frac{r_{01} + r_{12} \exp(-i2\beta)}{1 + r_{01}r_{12} \exp(-i2\beta)} \quad (2-19)$$

所以可知 P-polarization 與 S-polarization 的反射係數可為：

$$r_{012,p} = \frac{r_{01,p} + r_{12,p} \exp(-i2\beta)}{1 + r_{01,p}r_{12,p} \exp(-i2\beta)} \quad (2-20)$$

$$r_{012,s} = \frac{r_{01,s} + r_{12,s} \exp(-i2\beta)}{1 + r_{01,s}r_{12,s} \exp(-i2\beta)} \quad (2-21)$$

若結構越多層，由(2-9)、(2-10)、(2-11)、(2-17)、(2-20)、(2-21)等式子之間的關聯性，逆向計算的過程十分複雜，但隨著電腦普及化，繁複的計算過程可交由電腦執行，橢圓偏光儀目前已成為重要的非破壞性分析儀器。

2.2 表面分析的儀器

近代材料分析與檢測技術的快速發展，使得材料分析不僅包括傳統的化學成份、晶體結構分析，也包括材料表面與界面分析。而在各式材料分析儀器中，電子束是最常用的入射激發源之一；入射電子照射在固體材料時，會與固體內的原子相互作用，包括：入射電子散射及入射電子對固體原子的激發。而電子與材料的作用區會有彈性散射(elastic scattering)與非彈性散射(inelastic scattering)同時發生。我們可藉由彈性散射電子(elastic scattering)得到材料內部微結構及原子結構訊息。此外，亦可利用非彈性散射電子(inelastic scattering)得到材料內部成份與鍵結訊息。表. 2.1[5]列多項分析技術訊號分類及儀器名稱。

輸入訊號		量測儀器	備註
電子	二次電子	掃描式電子顯微鏡(SEM)	EELS 提供固態費米能階以上空能帶密度的資訊，而 AES 提供費米能階以下填充太密度的資訊
	彈性散射電子	低能電子繞射(LEED)	
		反射式高能電子繞射(RHEED)	
		穿透式電子顯微鏡(TEM)	
	非彈性背散射電子	電子能量損失譜(EELS)	
歐傑電子	歐傑電子能譜(AES)		
光子	特徵 X 射線	能譜(EDS)	
		波譜(WDS)	
	X 射線的吸收	陰極激發光(CL)	

近年來，利用穿透式電子顯微鏡(TEM)的顯微分析技術配件－高解析能量分析器，如圖. 2.5，可以從電子能損譜(EELS，electron energy loss spectrum)來獲取較強的訊號和較高的能量分辨率，故可提供成份的訊息，也可獲得元素化學鍵結狀態的訊息。並且可透過能量過濾穿透式電子顯微鏡(EFTEM，energy filter TEM)之技術，來選擇不同能損的電子成像，以得到材料內部成份分佈與鍵結影像。故裝有高解析能量分析器的穿透式電子顯微鏡(TEM)已不再只能擷取材料內部微結構分析及較重元素之成份分析，更能得到輕元素成份分析與鍵結訊息。

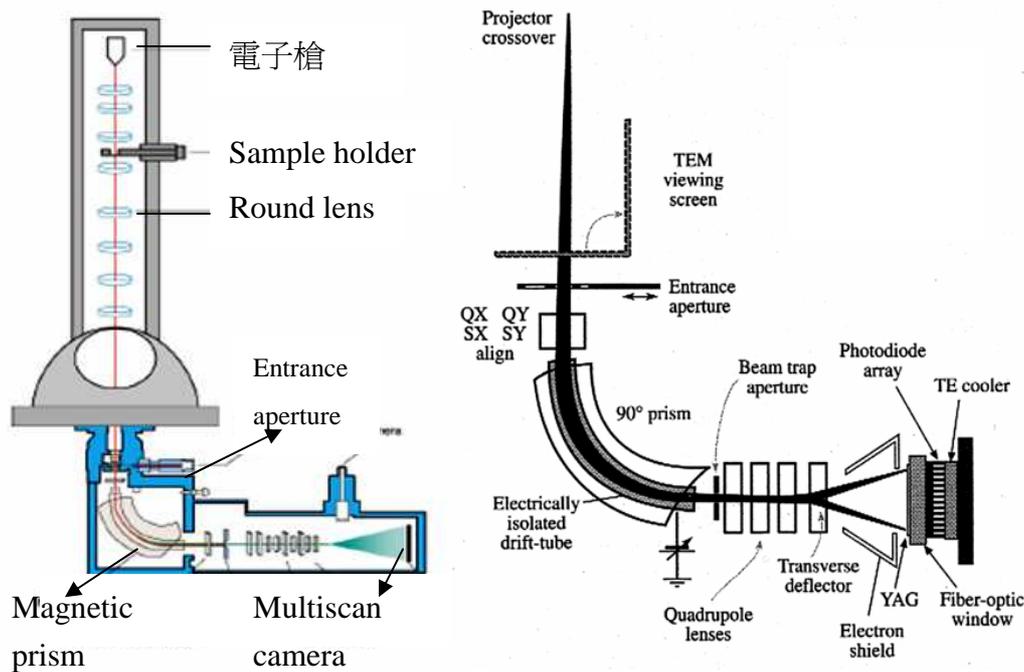


圖. 2.5 量測電子能量損失的裝置[2-4]

2.2.1 電子能損譜

電子能量損失譜是藉由非彈性散射電子所減損的特定能量，以分析材料內組成元素與鍵結訊息，如圖. 2.6 所示。當入射電子穿透試片後，產生的非彈性散射電子通過電子能量損失譜儀，不同損失能量的電子會被散射在不同電子能量分析器位置。依電子強度對能量做圖譜，即形成電子能量損失譜。電子能損譜基本包括三部份：零損失峰(zero loss peak)、低能損區(low energy loss region)和核損失區(core loss region)，如圖. 2.7 所示。

(1) 零損失峰

零損失峰能損範圍為 0-5 eV，主要是由直射電子和未損失能量的彈性散射電子組成。由於受限於電子能損譜儀的能量解析度，故此區也包括能量損失非常微小的電子。能量解析度(energy resolution)是由零損失峰之半高寬定義。而能量解析度會受到電子槍射出電子束之能量擴散(energy spread)的嚴重影響。

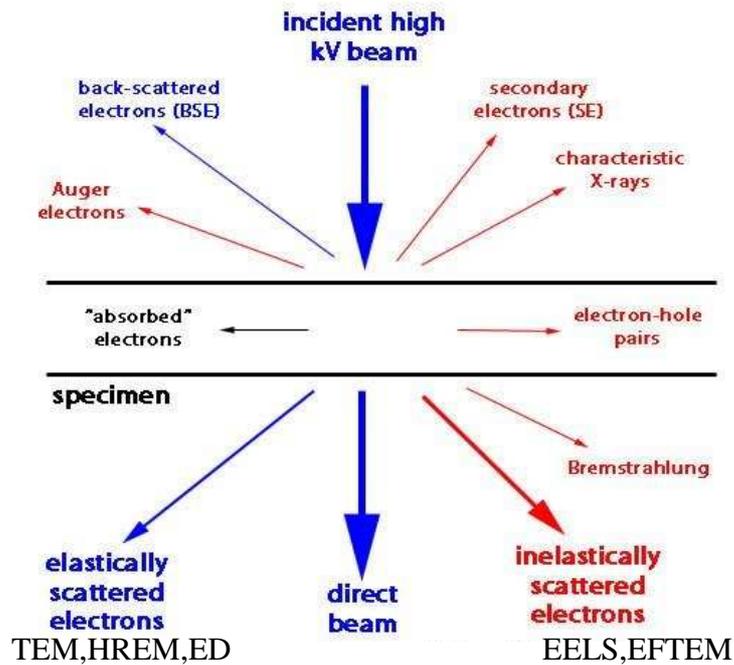


圖. 2.6 入射電子撞擊樣品產生散射電子示意圖

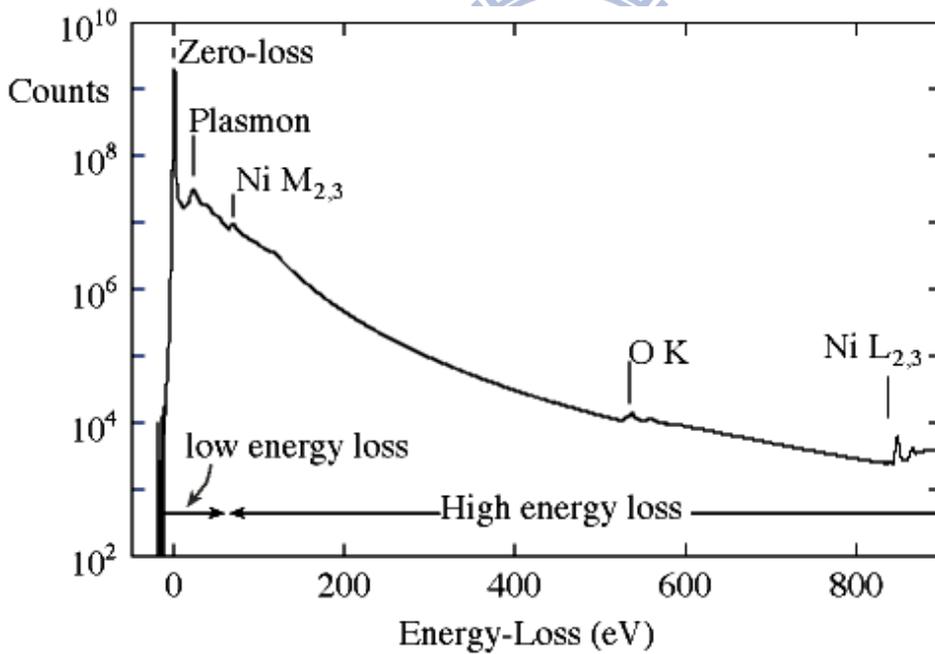


圖. 2.7 電子能量損失譜[2,3]

(2) 低能損區

低能損區能損範圍為 5-50 eV 之間，主要由入射電子與樣品的原子價電子或導電電子作用，引起能帶中的電子集體振動，即造成入射電子的能量損失。利用形成的電

漿子(plasmon)損失峰特徵，可用來計算試片厚度。當試片厚度太厚時，會有數個週期性的電漿子損失峰呈現出來，而且強度較強。相對的，當試片厚度較薄時，會有較少的電漿子損失峰呈現出來，而且強度較弱。故可利用電漿子損失峰的個數與強度粗略判別試片厚度。[4]

(3) 核損失區

由於入射電子非彈性碰撞樣品內層電子時會有能量損失，所損失的能量相當於內層電子束縛能量，故稱為核損失(core loss)。核損失區能損範圍為 50 eV 以上。不同電子軌域的電子，通常以 K、L、M、N、O 表示。如入射電子游離氧原子的 1s 軌域電子，則它的特徵邊緣(characteristic edges)為 K 邊緣，此時損失的能量相當於 1s 軌域電子束縛能，532 eV。入射電子游離鎳原子的 2p 軌域電子，則它的特徵邊緣為 L 邊緣，損失能量相當於 855 eV，其餘類推，如圖. 2.8 所示。

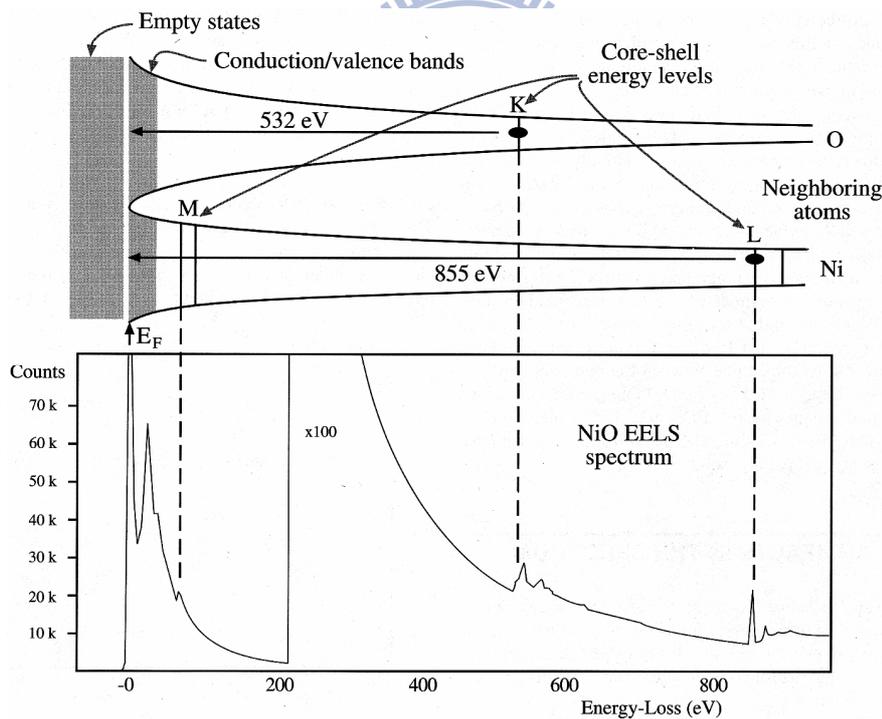


圖. 2.8 Ni 與 O 的電子能量損失譜[2]

2.2.2 能量損失函數

一高度準直的電子束動能為 50-300 keV，擴散角(angular spread) $\Delta\vartheta \approx 0.3-0.5$ mrad，當電子束穿過樣品(厚度大約為 0.5-2 μ m)，電子會以 scattering angle θ 非彈性散射，並損失能量 ΔE ，如圖. 2.9 所示。

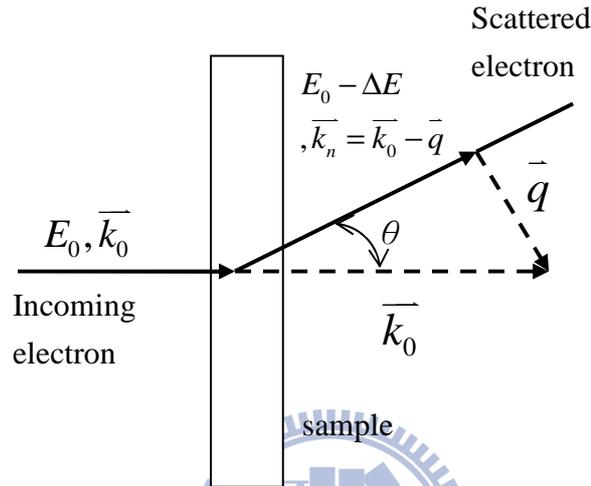


圖. 2.9 EELS 實驗的電子散射幾何示意圖

$$\text{依據能量與動量守衡 } \Delta E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_0^2 - k_n^2) \quad (2-22)$$

$$\hbar q = \hbar(k_0 - k_n) \quad (2-23)$$

k_0 與 k_n 分別為非散射與散射電子的波向量， \hbar 為 Planck's constant 除以 2π ， m 為電子質量，其中 $\hbar q$ 可分為水平分量與垂直分量：

$$\hbar q_{\parallel} = \hbar k_0 \vartheta_E \quad (2-24)$$

$\vartheta_E = \Delta E / 2E_0$ ，縱向的動量轉換只與 energy loss 有關，且橫向的動量可表示為：

$$\hbar q_{\perp} = \hbar k_0 \vartheta \quad (2-25)$$

上式與 energy loss 無關只與 scattering angle 有關，總動量可寫為：

$$\hbar q = \hbar k_0 (\vartheta^2 + \vartheta_E^2)^{1/2} \quad (2-26)$$

ϑ_E 為 EELS 的特徵角略微比 scattering angle 小。

另外高能量的電子在固體內部，對每一原子的二次微分 scattering cross-section 以 Born

$$\text{近似可表示爲：} \frac{d^2\sigma}{d\omega dq} = \frac{\hbar\gamma^2}{(\pi ea_0)^2 Nq^2} \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right) \quad (2-27)$$

e ：電子電量， a_0 ：波爾半徑， N ：單位體積的電子密度， $\gamma = 1 + E_0/m_0c^2$ ，其中

$m_0c^2 = 511\text{keV}$ 爲靜止質量的電子能量。

將(2-26)式代入(2-27)式，可得：

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega dq} = \frac{\hbar\gamma^2}{(\pi ea_0)^2 k_0^2 (\nu^2 + \nu_E^2)} \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right) \quad (2-28)$$

因此量測非彈性散射的電子 cross-section 即可得到 loss function $\text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right)$ 。

再經由因果關係的 Kramers-Kronig integrals 算出在 EELS 實驗中具有微小動量轉換($q \rightarrow 0$)的 loss function 實部：

$$\text{Re} \left(\frac{-1}{\varepsilon(\omega)} \right) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(\omega')} \right) \frac{\omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (2-29)$$

其中 P 爲柯西主值積分，如此一來即可求出材料相應的複數介電常數：

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) = \frac{\text{Re} \left(\frac{-1}{\varepsilon(\omega)} \right) + i \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(\omega)} \right)}{\left[\text{Re} \left(\frac{-1}{\varepsilon(\omega)} \right) \right]^2 + \left[\text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(\omega)} \right) \right]^2} \quad (2-30)$$

$$\text{其中 } \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(\omega)} \right) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{[\varepsilon_1(\omega)]^2 + [\varepsilon_2(\omega)]^2} \quad (2-31)$$

第三章 模型介紹

介電函數的實部與虛部可由量子力學推導出來，也可由電子運動方程式推導出來，再由這些方程式建構一個可以滿足 sum rule 的解析形式，我們將要把這些實驗取得的介電函數值用解析形式模型化，第一步會先使用 Lorentz model 所呈現的 **DHO** 模型將實驗數值模型化，其次再使用混合 DHO 模型與之比較，再將效果好的模型與其它已提出的模型做比較；最後要驗證這些解析的模型是否滿足 f-sum rule，並計算所有模型對實驗數值的 relative root mean square errors。

3.1 阻尼簡諧震盪模型

考慮光與內部有共振頻率 ω_0 的束縛電子的原子交互作用，我們可將原子偶極的位移量視為一個簡諧振子，藉由碰撞的過程震盪的偶極會受到阻尼的作用，此阻尼的作用會降低吸收係數的峰值並使吸收譜線變寬。電磁波的電場與原子偶極交互作用時，會產生一驅動力而作用在電子上，在此假設原子核質量遠大於電子 ($m_N \gg m_0$)，可忽略原子核的移動，將電子的振幅表示成下列位移方程式[6,7]：

$$m_0 \frac{d^2 x}{dt^2} + m_0 \gamma \frac{dx}{dt} + m_0 \omega_0^2 x = -e\mathcal{E} \quad (3-1)$$

γ : damping rate, e : 電子帶電量大小, \mathcal{E} : 電磁波電場, 考慮 monochromatic 電磁波的角頻率 ω 與原子交互作用, 則時變的電場：

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t + \Phi) = \mathcal{E}_0 \Re(e^{-i(\omega t + \Phi)}) \quad (3-2)$$

\mathcal{E}_0 : 電磁波振幅, Φ : 電磁波相位, 若考慮所解得振幅：

$$x(t) = X_0 \Re(e^{-i(\omega t + \Phi')}) \quad (3-3)$$

X_0 : 震盪的振幅, Φ' : 震盪的相位, 假設震盪的電子與驅動力有相同的頻率, 將(3-2)、(3-3)式的 phase factor 併入振幅, 使振幅 \mathcal{E}_0 與 X_0 可具有複數形式, 將(3-3)式代入(3-1)式, 在由 Fourier transform 可解得 ω domain :

$$X_0 = \frac{-e\mathcal{E}_0}{m_0(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)} \quad (3-4)$$

當電子偏離平衡點時會產生時變的偶極矩 $p(t) = -ex(t)$ ，故微小共振極化表達為：

$$P_{resonant} = Np = -Nex = \frac{Ne^2}{m_0(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)} \mathcal{E} \quad (3-5)$$

N：單位體積的原子數，假設介質是 isotropic，並定義介質內電位移有一相對介電常數：

$$D = \epsilon_0 \epsilon_r \mathcal{E} \quad (3-6)$$

ϵ_r ：相對介電常數，將共振極化與非共振極化加入介質內的電位移：

$$D = \epsilon_0 \mathcal{E} + P_{background} + P_{resonant} = \epsilon_0 \mathcal{E} + \epsilon_0 \chi \mathcal{E} + P_{resonant} \quad (3-7)$$

結合(3-5)、(3-6)、(3-7)式可得與共振能量有關的介電函數：

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \chi + \frac{f}{(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)} \quad (3-8)$$

其中 oscillator strength $f = Ne^2 / \epsilon_0 m_0$ ，將其分為實部與虛部

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \chi + \frac{f(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2} \quad (3-9)$$

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{f\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2} \quad (3-10)$$

阻尼簡諧震盪模型 (Driven Harmonic Oscillator, DHO) 是一個只需要數個震盪子就達到與實驗的介電常數數值接近的簡單模型，且使用的震盪子越多模擬的結果就越準確；然而，電磁波的能量越靠近共振能量時，所使用的震盪子數量也越多。DHO 模型在靠近能隙鄰近區域的模擬通常不太準確。根據 DHO 模型，介電函數實部與虛部可表示為：

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \sum_j^k \frac{f_j(\omega_j^2 - \omega^2)}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + (\gamma_j\omega)^2} \quad (3-11)$$

$$\epsilon_2(\omega) = \sum_j^k \frac{f_j\gamma_j\omega}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + (\gamma_j\omega)^2} \quad (3-12)$$

ω_j ：oscillator energy， ω ：photon energy

這個模型主要的缺點，在 absorption edge 附近區有較低的準確率，要使用較多的

參數才使達到較高的準確率；優點則是，此模型非常的簡單不需要複雜的方程式，在吸收帶以上的範圍能達到高準確率。

3.2 阻尼擴大介電函數模型 (MDF)

傳統的 MDF model 是由 Sadao Adachi 所提出[8,9]，是一個結合了 standard critical point model 與 DHO model 的簡單模型，利用四個最低能隙與間接能隙 ($E_0, E_0 + \Delta_0, E_1, E_1 + \Delta_1, \text{and } E_g^{id}$) 以及 DHO 模型由較高的 transition ($E_0^i, E_2(X), E_2(\Sigma)$) 貢獻，爲了要改善準確率，此模型需要考慮 excitonic effect。

以下明確的描述此模型使用的介電函數， E_0 與 $E_0 + \Delta_0$ 是三維的 critical point 貢獻在較低的能量範圍，且介電函數表達爲：

$$\varepsilon_I(\omega) = A E_0^{-3/2} \left[f(x_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{E_0}{E_0 + \Delta_0} \right)^{3/2} f(x_{0s}) \right] \quad (3-13)$$

$$\text{其中， } f(y) = y^{-2} \left[2 - (1+y)^{1/2} - (1-y)^{1/2} \right] \quad (3-14)$$

$$x_0 = \frac{\omega + i\Gamma_0}{E_0}, \quad x_{0s} = \frac{\omega + i\Gamma_0}{E_0 + \Delta_0} \quad (3-15)$$

A 與 Γ_0 分別是 E_0 與 $E_0 + \Delta_0$ transition 的強度及阻尼常數， ω ：光子能量。

另外，考慮貢獻在最低直接能帶邊緣的 exciton transition，眾所周知在最低直接能帶邊緣附近有許多分開的能帶線及連續的 exciton 能改變光譜，在 E_0 gap 可以將一連串分開的 exciton lines 表達成一個簡單的 Lorentzian line shape 的形式：

$$\varepsilon_{0x}(\omega) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{A_{0x}^n}{n^3} \frac{1}{E_0 - \left(\frac{R_y^{3D}}{n^2}\right) - \omega - i\Gamma_0} \quad (3-16)$$

A_{0x}^n ：exciton strength， R_y^{3D} ：3D exciton Rydberg energy

且因爲縱向的有效質量比橫向的有效質量大很多，故 3D M_1 可視爲 E_1 及 $E_1 + \Delta_1$ 爲二維的 critical point，因此這些 critical point transition 所貢獻的介電函數可表達爲：

$$\varepsilon_{II}(\omega) = -B_1 x_1^{-2} \ln(1 - x_1^2) - B_{1s} x_{1s}^{-2} \ln(1 - x_{1s}^2) \quad (3-17)$$

$$x_1 = \frac{\omega + i\Gamma_1}{E_1}, \quad x_{1s} = \frac{\omega + i\Gamma_1}{E_1 + \Delta_1}, \quad (3-18)$$

或是可表達為：

$$\varepsilon_{II}(\omega) = - \sum_{\beta=ABC} B_{1\beta} \chi_{1\beta}^{-2} \ln(1 - \chi_{1\beta}^2) \quad (3-19)$$

$$\chi_{1\beta} = \frac{\omega + i\Gamma_{1\beta}}{E_{1\beta}} \quad (3-20)$$

$B_1(B_{1s})$ 、 $B_{1\beta}$ 與 Γ_1 、 $\Gamma_{1\beta}$ 分別是 E_1 與 $E_1 + \Delta_1$ 、 $E_{1\beta}$ transition 的強度及阻尼常數，在 $E_{1\beta}$ critical points 也有一連串 Wannier type 2D exciton 貢獻給介電函數：

$$\varepsilon_{1x} = \sum_{\beta=ABC} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{B_{1\beta}^x}{(2m-1)^3} \frac{1}{E_{1\beta} - \left(\frac{G_{1\beta}^{2D}}{(2m-1)^2} \right) - \omega - i\Gamma_{1\beta}} \quad (3-21)$$

$B_{1\beta}^x$ 、 $G_{1\beta}^{2D}$ 分別為 exciton 在 $E_{1\beta}$ 的強度及 binding energy。

另外，被模型使用的三個阻尼簡諧振子($E_0, E_2(X), E_2(\Sigma)$)表示為 E_j ，共振強度

$F_j = \sqrt{f_j E_j}$ ，阻尼常數 Γ_j ：

$$\varepsilon_{III}(\omega) = \sum_{j=2}^4 \frac{F_j^2}{E_j^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_j} \quad (3-22)$$

在間接 transition 的貢獻，介電函數可表達為：

$$\varepsilon_{IV} = \frac{2D}{\pi} \left[\frac{-(E_g^{id})^2}{(\omega + i\Gamma_{id})^2} \ln \left| \frac{E_c}{E_g^{id}} \right| + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{E_g^{id}}{\omega + i\Gamma_{id}} \right)^2 \ln \left| \frac{\omega + i\Gamma_{id} + E_c}{\omega + i\Gamma_{id} + E_g^{id}} \right| \right] \\ + \frac{2D}{\pi} \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{E_g^{id}}{\omega + i\Gamma_{id}} \right)^2 \ln \left| \frac{\omega + i\Gamma_{id} - E_c}{\omega + i\Gamma_{id} - E_g^{id}} \right| \right] \quad (3-23)$$

E_g^{id} ：間接能隙能量，D 與 Γ_{id} 分別為在間接能隙的共振強度與阻尼常數，

E_c ：截止能量，在此假設 $E_c = E_1$ 。

而 Adjustable broadening MDF model 是由 A. B. Djuricic 和 E. H. Li 提出，與 MDF

主要的差別為 broadening function [10-15]，MDF 使用傳統的 Lorentzian broadening，阻尼常數 Γ_j ($j=0,1,..,4,id$) 與光子能量無關，此種 broadening 有較寬的 wing 會造成在能隙以下的吸收譜線變寬，所以並不適合用來計算能隙以下的吸收過程；於是，將 Γ_j 取代為

$$\text{跟光子能量有關的形式：}\Gamma_j(\omega) = \Gamma_j \exp\left(-\alpha_j \left(\frac{\omega - E_j}{\Gamma_j}\right)^2\right) \quad (3-24)$$

但是 A. B. Djuricic 和 E. H. Li 使用 Adjustable broadening MDF model 在計算不同材料時並沒有考慮所有的介電函數的貢獻，例如計算間接能隙材料 Silicon 時，僅使用 (3-13)、(3-17)、(3-22)、(3-23) 式，不考慮任何的 exciton effect，計算直接能隙材料 Gallium Arsenide 時使用 (3-13)、(3-17)、(3-22)，也不考慮任何 exciton 貢獻，另外計算 GaN、InN 時使用 (3-13)、(3-16)、(3-19)、(3-21) 式，考慮了兩種 exciton 貢獻，但是 (3-13) 式只考慮 E_0 critical point 的貢獻，但是沒有將 E_0' , $E_2(X)$, $E_2(\Sigma)$ transition 列入計算。將此種可調的 broadening 帶入每個材料各別列入計算的式子，再將每一項 transition 所貢獻的介電函數總和可得：

For Silicon [10]：

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_{1\infty} + \Re e(\varepsilon_I(\omega)) + \Re e(\varepsilon_{II}(\omega)) + \Re e(\varepsilon_{III}(\omega)) + \Re e(\varepsilon_{IV}(\omega)) \quad (3-25)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \text{Im}(\varepsilon_I(\omega)) + \text{Im}(\varepsilon_{II}(\omega)) + \text{Im}(\varepsilon_{III}(\omega)) + \text{Im}(\varepsilon_{IV}(\omega)) \quad (3-26)$$

For Gallium Arsenide [12]：

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_{1\infty} + \Re e(\varepsilon_I(\omega)) + \Re e(\varepsilon_{II}(\omega)) + \Re e(\varepsilon_{III}(\omega)) \quad (3-27)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \text{Im}(\varepsilon_I(\omega)) + \text{Im}(\varepsilon_{II}(\omega)) + \text{Im}(\varepsilon_{III}(\omega)) \quad (3-28)$$

For Gallium Nitride [15]：

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_{1\infty} + \Re e(\varepsilon_I(\omega)) + \Re e(\varepsilon_{0x}(\omega)) + \Re e(\varepsilon_{II}(\omega)) + \Re e(\varepsilon_{1x}(\omega)) \quad (3-29)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \text{Im}(\varepsilon_I(\omega)) + \text{Im}(\varepsilon_{0x}(\omega)) + \text{Im}(\varepsilon_{II}(\omega)) + \text{Im}(\varepsilon_{1x}(\omega)) \quad (3-30)$$

，其中 $\epsilon_{1\infty}$ 為較高能量的 transition 所貢獻的介電常數。此種修改過的 MDF 模型，改善了傳統 MDF 在吸收帶附近不準確的地方，且有些材料 excitonic effect 並沒有列入計算，對於大範圍的介電函數計算顯得非常困難，且每個材料列入計算的式子又不相同，沒有一個統一的式子來算所有的材料，最重要的缺點是，此種與能量有關的阻尼函數 broadening function 是假設的，並且沒提出任何物理意義。

3.3 Model of Forouhi and Bloomer (MFB)

此模型是由 Forouhi 與 Bloomer 提出[16]，已用在大部分的材料計算，模型的特性與 DHO 模型類似，儘管此模型是以吸收的量子力學理論為基礎，但是在靠近能隙範圍的計算，通常準確率較低，不過使用的參數比 DHO 模型少，在 MFB 模型中，消耗係數可表達為：

$$k(E) = \left(\sum_{i=1}^q \frac{A_i}{E^2 - B_i E + C_i} \right) (E - E_g)^2 \quad (3-31)$$

依 Kramers-Kronig relation 可得折射率：

$$n(E) = n(\infty) + \sum_{i=1}^q \frac{B_{0i} E + C_{0i}}{E^2 - B_i E + C_i} \quad (3-32)$$

與古典色散理論對比，在此 $n(\infty)$ 不假設為 1， A_i, B_i 及 C_i 為可調參數， E ：電磁波能量大小， E_0 ：能隙大小， q ：transition 數量(通常等於 4)，其中

$$B_{0i} = \frac{A_i}{Q_i} \left[\frac{-B_i^2}{2} + E_g B_i - E_g^2 + C_i \right] \quad (3-33)$$

$$C_{0i} = \frac{A_i}{Q_i} \left[(E_g^2 + C_i) \frac{B_i}{2} - 2 E_g C_i \right] \quad (3-34)$$

$$Q_i = \frac{1}{2} \left[4C_i - (B_i)^2 \right]^{1/2} \quad (3-35)$$

當折射率與消耗係數已知，可經由下列公式轉換成介電函數：

$$\epsilon_1(E) = [n(E)]^2 - [k(E)]^2 \quad (3-36)$$

$$\varepsilon_2(E) = 2n(E)k(E) \quad (3-37)$$

這個模型主要的優點，是模型簡單使用的參數比其他模型要少，缺點則是在能隙 E_0 附近的區域，折射率 underestimated 且在能隙之下 k 不為零，且計算的範圍 0~6eV，而且在高能量的計算並不準確。

3.4 Model of Chen

考慮光子在固體裡面傳播，在電偶極的近似下，一階時變的微擾理論可表示為：

$$W(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 \omega I}{3\hbar c} \left| \langle k_{crit}^c | x | k_{crit}^v \rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_0) \quad (3-38)$$

其中 I ：入射光子強度， c ：光速， $W(\omega)$ ：單位時間在固體內部由能量 ω 變化到 $\omega + d\omega$ 的範圍所吸收的能量。若只考慮單一的 transition 及 transition matrix element：

$\left| \langle k_{crit}^c | x | k_{crit}^v \rangle \right|$ 與 transition energy： $\omega_0 = E_c - E_v$ ，則消耗係數可表達為：

$$\kappa(\omega) = \frac{\hbar c \rho(\omega) W(\omega)}{2\omega I} \quad (3-39)$$

$\rho(\omega)$ ：單位體積由能量 ω 變化到 $\omega + d\omega$ 的範圍可能 transition 的數量；另外，定義偶極的震盪強度：

$$f_0 = \frac{8\pi e^2 \omega_0}{3} \left| \langle k_{crit}^c | x | k_{crit}^v \rangle \right|^2 \rho(\omega) \quad (3-40)$$

將(3-40)式分別代入(3-38)及(3-39)式可得：

$$\kappa(\omega) = \frac{\pi f_0 \delta(\omega - \omega_0)}{4\omega_0} \quad (3-41)$$

但上式不滿足對稱關係，將其修正為：

$$\kappa(\omega) = \frac{\pi f_0}{4\omega_0} [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)] \quad (3-42)$$

消耗係數即可滿足對稱關係與 sum rule，考慮 damping effect，使用 Lorentzian line-shape function 取代 delta function：

$$\delta(\omega \pm \omega_0) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_0}{(\omega \pm \omega_0)^2 + \Gamma_0^2} \quad (3-43)$$

Γ_0 ：消耗係數譜線的半高寬也稱阻尼係數，故可得消耗係數為：

$$\kappa(\omega) = \frac{f_0 \Gamma_0 \omega}{\left[(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma_0^2 \right] + \left[(\omega + \omega_0)^2 + \Gamma_0^2 \right]} \quad (3-44)$$

根據 Kramers-Kronig 色散關係式可得折射率：

$$\eta(\omega) = \eta_b - \frac{1}{2} \frac{f_0 (\omega^2 - \omega_0^2 - \Gamma_0^2)}{\left[(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma_0^2 \right] + \left[(\omega + \omega_0)^2 + \Gamma_0^2 \right]} \quad (3-45)$$

η_b ：背景折射率，最後若考慮多個 critical point transition 的作用，可將(3-44)、(3-45)式表達為：

$$\eta(\omega) = \eta_b - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^q \frac{f_i (\omega^2 - \omega_i^2 - \Gamma_i^2)}{\left[(\omega - \omega_i)^2 + \Gamma_i^2 \right] + \left[(\omega + \omega_i)^2 + \Gamma_i^2 \right]} \quad (3-46)$$

$$\kappa(\omega) = \sum_{i=1}^q \frac{f_i \Gamma_i \omega}{\left[(\omega - \omega_i)^2 + \Gamma_i^2 \right] + \left[(\omega + \omega_i)^2 + \Gamma_i^2 \right]} \quad (3-47)$$

q：由價電帶到導電帶 critical-point transition 的總數目。

此模型的優點在於高能量的計算很準確，使用的模型方程式也很簡單，雖然使用的參數比 **MFB** 模型多，但計算的範圍比 **MFB** 模型更廣，**MFB** 模型 7eV 以上不準確；此模型對於 GaAs 材料可計算到 25eV，Si 材料可計算至 36eV，對於絕緣體可計算到更高的能量範圍；缺點則是在靠近能隙附近區域的模擬不準確。

3.5 混合阻尼簡諧震盪模型

在 **DHO** 模型中的運動方程式，為帶電荷質點在一定力下的穩定平衡點附近作小幅度的運動，除此定力之外帶電質點還受外來電磁波的電磁場和自身的輻射阻尼力作用，在未考慮輻射阻尼力的運動方程式為(3-1)式，及其特解為(3-4)式，現在則要同時考慮彈性恢復力、電磁力和輻射阻尼力的作用，故帶電粒子的非相對論運動方程式可寫為：

$$m_0 \frac{d^2 r}{dt^2} + m_0 \omega_0^2 r - m_0 \frac{\Gamma}{\omega_0^2} \frac{d^3 r}{dt^3} = -e \mathcal{E}_0 e^{-i\omega t} \quad (3-48)$$

時變電場依然為：

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \Re(e^{-i\omega t}) \quad (3-49)$$

考慮所解得振幅：

$$r(t) = \xi \Re e(e^{-i\omega t}) \quad (3-50)$$

ξ ：受輻射阻尼力作用引起的振幅，將(3-50)式帶入(3-48)式可得特解振幅為：

$$\xi = \frac{-e\mathcal{E}}{m_0 [\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma'\omega]} \quad (3-51)$$

$\Gamma' = \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \Gamma$ 與能量有關， Γ ：阻尼常數，且經計算可將通解表示為：

$$r(t) = \xi_1 e^{-i\omega_0 t - \frac{\Gamma}{2}t} + \xi_2 e^{i\omega_0 t - \frac{\Gamma}{2}t} + \frac{-e\mathcal{E}_0 e^{-i\omega t}}{m_0 [\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma'\omega]} \quad (3-52)$$

在粒子靜止時 $t=0$ ， $r(0)=0$ ， $\frac{dr}{dt}(0)=0$ ，可得係數分別為：

$$\xi_1 = -\left[\frac{\Gamma}{4\omega_0} - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\omega}{\omega_0} \right) \right] \frac{e\mathcal{E}_0}{m_0 [\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma'\omega]} \quad (3-53)$$

$$\xi_2 = \left[\frac{\Gamma}{4\omega_0} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0} \right) \right] \frac{e\mathcal{E}_0}{m_0 [\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma'\omega]} \quad (3-54)$$

起始時粒子靜止，隨後在強迫力的作用下開始運動，靜止時(3-52)式右邊三項會互相抵消，隨後的運動表現為兩種振動的疊加，前兩項表示以振子固有頻率 ω_0 的振動，第三項表示以強迫力 ω 的振動，前兩項振動緩慢最後會消失，如果強迫力是穩定的，最後只剩下強迫力引起的振動，觀察這一過程的能量平衡，一開始粒子由入射電磁波獲得能量，一方面增加自身振幅，另一方面向周圍輻射電磁波，在振幅達到飽和之前，它以兩種頻率振動，故會發射兩種頻率的電磁波，一是固有振子的頻率 ω_0 ，這種頻率電磁波的振幅稱為振子吸收入射電磁波後的輻射，粒子從入射電磁波獲得能量以增加自己的振幅，並發射自己固有的頻率的電磁波的過程稱為吸收過程，這過程到達飽和振幅為止；另一個是入射電磁波頻率 ω ，這種頻率電磁波的吸收與輻射稱為振子對入射電磁波的散射，一直延續到他達到飽和振幅之後。現在考慮輻射阻尼力引起的電偶極：

$$P_{resonant} = Np = -Ne\xi = \frac{Ne^2\mathcal{E}}{m_0[\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma'\omega]} \quad (3-55)$$

故介質內的電位移:

$$D = \varepsilon_0\mathcal{E} + P_{background} + P_{resonant} = \varepsilon_0\mathcal{E} + \varepsilon_0\chi\mathcal{E} + P_{resonant} \quad (3-56)$$

結合(3-6)、(3-55)、(3-56)式可得與能量有關的相對介電函數：

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \chi + \frac{f}{(\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma'\omega)} \quad (3-57)$$

其中 oscillator strength $f = Ne^2 / m_0$ ，將其分為實部與虛部

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \chi + \frac{f(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\Gamma'\omega)^2} \quad (3-58)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{f\Gamma'\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\Gamma'\omega)^2} \quad (3-59)$$

考慮材料中每個 critical-point transition 的貢獻，將介電函數表示為：

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_b + \sum_j \frac{f_j(\omega_j^2 - \omega^2)}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \left(\left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^N \Gamma \right)^2 \omega^2} \quad (3-60)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \sum_j \frac{f_j \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^N \Gamma \omega}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \left(\left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^N \Gamma \right)^2 \omega^2} \quad (3-61)$$

ε_b 為背景值， $N(0,2,4\dots)$ ， N 為零時即為 DHO 模型， N 不為零時則為 Γ -modified DHO 模型，現在將 DHO 模型與 Γ -modified DHO 介電函數實部(3-9)、(3-58)與虛部(3-10)、(3-59)在相同共振頻率、阻尼常數及振盪強度下比較。

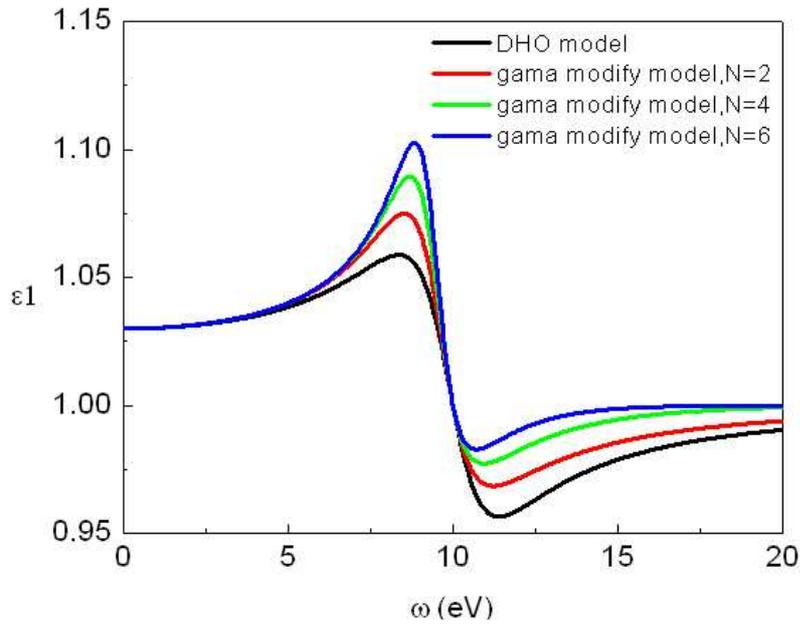


圖. 3.1 DHO 模型與不同 N 值的 Γ -modified DHO 模型介電函數實部

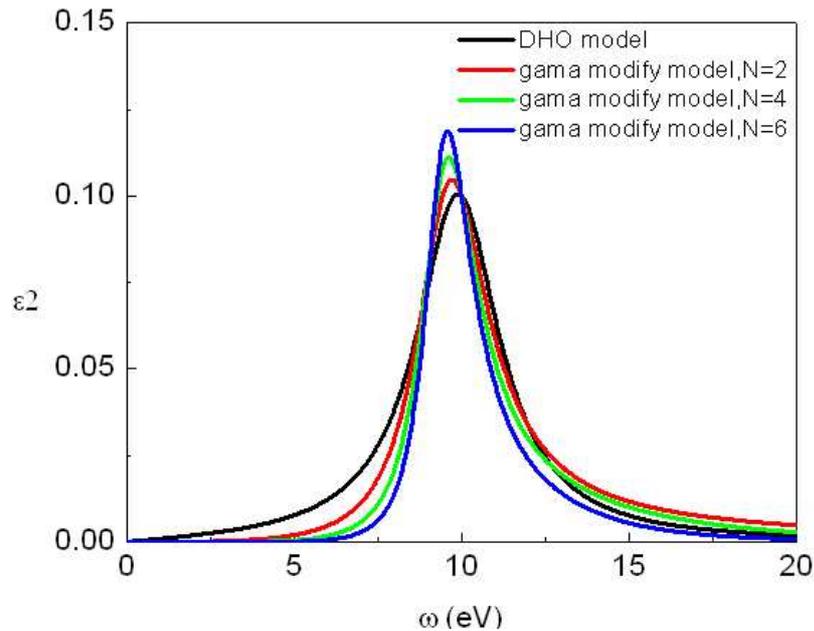


圖. 3.2 DHO 模型與不同 N 值的 Γ -modified DHO 模型介電函數虛部

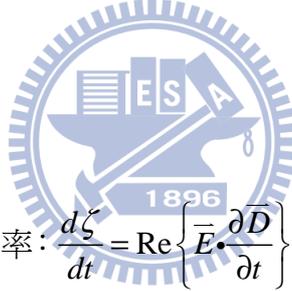
實部曲線 $\varepsilon_1(\omega)$ 左邊 N 值大者 peak 越高，上升越陡峭，反之右邊下降越平緩，虛部曲線 $\varepsilon_2(\omega)$ 左邊, N 值大者 peak 越高，上升時間延遲但上升程度越陡峭，曲線右邊下降則沒有秩序；因此，我們需要一個具有在 absorption edge 附近延遲上升且上升程度陡峭特性的模型，考慮將能隙附近區域的 critical-point transition 貢獻在 Γ -modified DHO 模型上，改善 DHO 模型在能隙範圍計算介電函數 overestimated 的缺點，且已知

DHO 模型在高能量的範圍有高的準確率，故將遠離能隙的 critical-point transition 貢獻在 DHO 模型上，最後可將混合 DHO 模型表達為：

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \sum_{j=1}^k \frac{f_j(\omega_j^2 - \omega^2)}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \left(\left(\frac{\omega}{\omega_j} \right)^N \Gamma_j \right)^2 \omega^2} + \sum_{k+1}^q \frac{f_j(\omega_j^2 - \omega^2)}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + (\Gamma_j \omega)^2} \quad (3-62)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \sum_{j=1}^k \frac{f_j \left(\frac{\omega}{\omega_j} \right)^N \Gamma_j \omega}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \left(\left(\frac{\omega}{\omega_j} \right)^N \Gamma_j \right)^2 \omega^2} + \sum_{k+1}^q \frac{f_j \Gamma_j \omega}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + (\Gamma_j \omega)^2} \quad (3-63)$$

總數 q 個 transitions，k 個靠近能隙的 transitions 依序貢獻在 Γ -modified DHO 模型上，遠離能隙 q-k 個 transitions 依序貢獻在 DHO 模型上。下一章節針對幾個在科學應用上比較重要的半導體材料模擬介電函數，將模擬結果與其他模型比較。



3.6 Sum rule

由單位體積吸收能量的速率： $\frac{d\zeta}{dt} = \text{Re} \left\{ \bar{\mathbf{E}} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right\} = \text{Re} \left\{ \bar{\mathbf{E}} \cdot (\varepsilon_1 + i\varepsilon_2) \frac{\partial \bar{\mathbf{E}}}{\partial t} \right\}$ ，其中 E 電

場與時間相關($e^{-i\omega t}$)，sum rule[18,19]對於分析與能量或頻率相關的光學常數是一個很重要的驗證工具，這個 rule 可以表達成不同形式，例如：包含介電函數虛部 $\varepsilon_2(\omega)$ 、消耗係數 $\kappa(\omega)$ 或是 energy loss function $\text{Im}(-1/\varepsilon(\omega))$ 的形式：

$$\int_0^{\infty} \omega' \varepsilon_2(\omega') d\omega' = \frac{\pi}{2} \omega_p^2 \quad (3-64)$$

$$\int_0^{\infty} \omega' \kappa(\omega') d\omega' = \frac{\pi}{4} \omega_p^2 \quad (3-65)$$

$$\int_0^{\infty} \omega' \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(\omega)} \right) d\omega' = \frac{\pi}{2} \omega_p^2 \quad (3-66)$$

其中 $\omega_p = \hbar(4\pi\rho Ze^2/m)^{1/2}$: free-electron plasma energy, ρ : 原子密度, Z : 每一個原子的總電子數, e : 電子電量, m : 電子質量。且 sum rules 適用於大範圍的能量範圍, 例如包含價電帶激發與內層球殼游離的全部吸收過程的有效電子數。如圖. 3.3 所示, sum rule 的計算範圍可計算所有量測到的實驗數據範圍, 且不同的能量範圍分別反應原子內部不同的球殼能量範圍, 圖. 3.3 中計算 Silicon 至 10^3 eV, 接近 100eV 附近有一急速上升的轉折點為 L-shell edge, 另外 1000eV 左右則為 K-shell edge, 不同的計算範圍即可得到不同的有效電子數(n_{eff}), 故不同的元素或化合物, 在 interband transition 的範圍所計算的 n_{eff} 都理應趨近於最外層價電子數。但一個典型的光學常數分布通常因為不同的吸收過程, 而有不同的峰值, 即使只有一點點的重疊, 所以可將上述三式的積分上限設定在某個截止能量 $\hat{\omega}$, 此截止能量須大於某一個峰值的能量但小於其他峰值的能量, 如此一來 sum rule 即可應用在對個別吸收過程的計算:

$$\int_0^{\hat{\omega}_j} \omega' \varepsilon_2(\omega') d\omega' \approx \frac{\pi}{2} \omega_{p,j}^2 \quad (3-67)$$

$$\int_0^{\hat{\omega}_j} \omega' \kappa(\omega') d\omega' \approx \frac{\pi}{4} \frac{\omega_{p,j}^2}{\varepsilon_b^{1/2}} \quad (3-68)$$

$$\int_0^{\hat{\omega}_j} \omega' \text{Im}\left(\frac{-1}{\varepsilon(\omega')}\right) d\omega' \approx \frac{\pi}{2} \frac{\omega_{p,j}^2}{\varepsilon_b^2} \quad (3-69)$$

$\omega_{p,j}$: 第 j 個吸收過程的 plasmon energy, ε_b : background dielectric constant, 其中(3-68)、(3-69)式由於其他的吸收過程不列入考慮使得 $\kappa(\omega)$ 與 $\text{Im}[-1/\varepsilon(\omega)]$ 所計算的 sum rule 會被 $\varepsilon_b^{1/2}$ 及 ε_b^2 降低。定義一個計算每一個原子(或分子)的有效電子數量:

$$n_{eff}(\omega)|_{\varepsilon_2} = \frac{m}{2\pi^2 e^4 \hbar^2 \rho} \int_0^{\omega} \omega' \varepsilon_2(\omega') d\omega' \quad (3-70)$$

$$n_{eff}(\omega)|_{\kappa} = \frac{m}{\pi^2 e^4 \hbar^2 \rho} \int_0^{\omega} \omega' \kappa(\omega') d\omega' \quad (3-71)$$

$$n_{eff}(\omega)|_{\epsilon^{-1}} = \frac{m}{2\pi^2 e^4 \hbar^2 \rho} \int_0^\omega \omega' \text{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(\omega')} \right] d\omega' \quad (3-72)$$

對每一個吸收過程中，(3-70)、(3-71)及(3-72)式可以驗證在原子內參與 critical point transitions 的價電子數量。

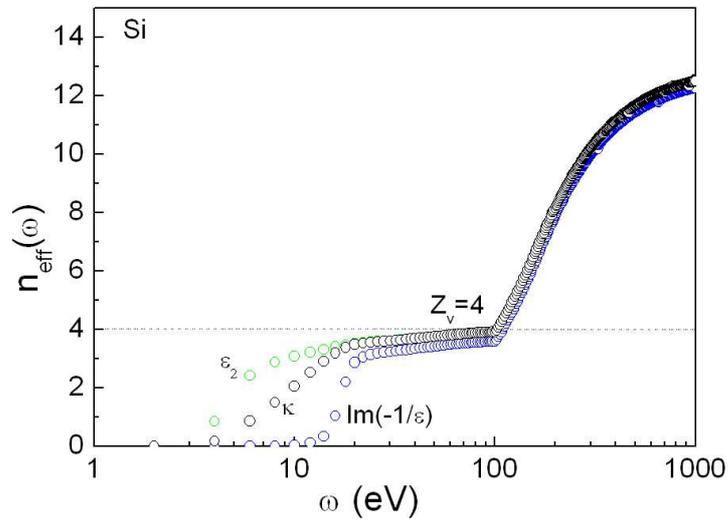


圖. 3.3 Silicon 實驗數據的有效電子數 $n_{eff}(\omega)$

第四章 結果與討論

此章節我們會將每個材料所計算的結果分開討論，第一部分是討論 DHO 模型 (3-11)、(3-12)式與混合 DHO 模型(3-62)、(3-63)式的計算結果，第二部分則由第一部分改善效果較好的模型與 MFB、MDF 及 Chen 的模型比較，在 fitting 的過程中，將藉由 fitting 曲線與實驗曲線的比較，並計算相對方均根誤差(relative RMS)來檢驗每個模型在介電函數 ϵ_1 、 ϵ_2 上與實驗值的誤差程度，在實驗數據夠多的材料中也會討論其 energy loss $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 是否吻合，在最後驗證的部份則會將使用的 fitting 參數帶入 finite-sum rule 計算，並驗證所使用的模型是否會在 interband transition 的能量範圍內收斂至所對應的價電子數目。將每個材料所使用的材料參數列於表. 4.1 [20,21]。且 plasmon energy E_p 可以表示成：

$$E_p = 28.8 \left(\frac{N_v \rho}{M} \right)^{1/2} \quad (4-1)$$

其中 M 為分子量。

表. 4.1 所有材料的特性參數

materials	Bulk density ρ (g/cm ³)	Number of valence electrons N_v	Plasmon energy E_p (eV)	Energy gap E_g (eV) at 300K
Si	2.33	4	16.59	1.1
GaAs	5.31	8	15.6	1.35
Ge	5.32	4	15.59	0.67
InP	4.79	8	14.8	1.27
GaP	4.13	8	16.5	2.24
GaSb	5.61	8	13.942	0.726
GaN	6.15	8	22.077	3.39
InAs	5.67	8	14.1	0.36
InSb	5.78	8	12.7	0.17
InN	6.81	8	18.728	1.9~2.05

4.1 矽 (Silicon, Si)

首先在 fitting 之前必須先建立實驗數值[22-24]的介電函數實部與虛部，如圖. 4.1，觀察實部曲線，在能量值越大時 $\epsilon_{\infty} \rightarrow 1$ ，且虛部曲線在吸收帶附近有一陡峭上升的特性。

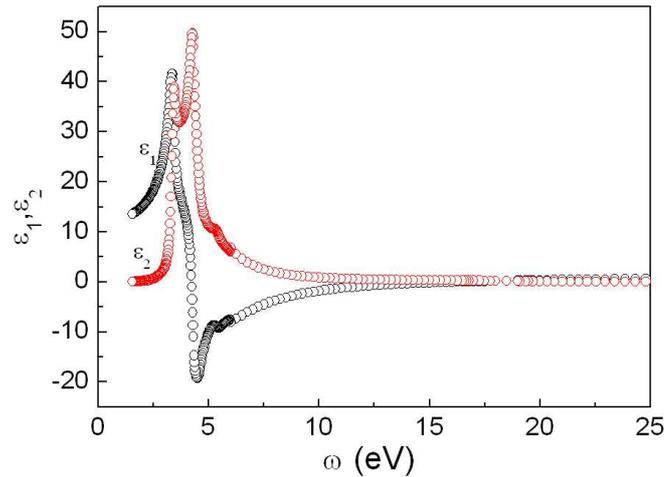


圖. 4.1 實驗數值的介電函數實部(black hallow dot curve)，虛部(red hallow dot curve)

4.1.1 矽材料 DHO 模型與混合 DHO 模型比較

針對矽我們將 fit 的能量範圍擴展到 $\omega = 25$ eV，DHO 模型對矽的 fitting 項數總共 11 項，每一項有不同的共振能量 ω_j 、震盪強度 f_j 及阻尼係數 γ_j 分布在 fitting 的範圍內，如圖. 4.2；而混合 DHO 模型則用 17 項，其中最前面 4 項($j=1\sim 4$)由 N=2 之 Γ -modified DHO 模型貢獻，其他由 DHO 模型貢獻，如圖. 4.3。為配合介電函數的實驗值在吸收帶附近有急速上升的趨勢，兩個模型在吸收帶附近的貢獻組成均使用阻尼係數小的參數；而為了配合能量大於 6eV 以上介電函數的虛部吸收效果顯著下降，則使用阻尼係數大的參數。兩個模型實部、虛部介電函數 fitting 之後的結果比較如圖. 4.4-4.5，在高能量的部份混合 DHO 與 DHO 模型都非常接近實驗值；靠近能隙的部份只有混合 DHO 模型與實驗值匹配，DHO 模型則計算過多，就混合 DHO 模型在吸收帶部分改善效果比 DHO 模型好，接著分別計算兩個模型由 1.54eV-6eV 的相對均方根誤差列於表. 4.2。

表. 4.2 矽相對方均根誤差		
Range:1.54-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	15.2%	14.5%
混合 DHO model	6.2%	3.6%

在矽的實驗數值夠多的情況下畫出其 energy loss $\text{Im}(-1/\epsilon)$ ，將 DHO 與混合 DHO 介電函數實部與虛部帶入(2-31)式計算而得到圖. 4.6，圖中明顯可見混合 DHO 模型計算的能損曲線與實驗值非常接近，但 DHO 模型不符，其原因是 DHO 模型爲了維持 fitting 高能量的實驗數據而使用較大的阻尼係數以及震盪強度造成曲線往右偏移。接下來要計算兩個模型的有效電子數並驗證是否會收斂，我們使用(3-70)、(3-71)及(3-72)式計算兩個模型的 finite-sum rule 以及實驗數值 ϵ_2 形式的有效電子數。如圖. 4.7 所示，DHO 模型計算 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 的 sum rule 雖然會收斂，但是分別在 $\omega > 12.5eV$ 、 $\omega > 18.5eV$ 、 $\omega > 26.5eV$ 時就不滿足甚至超過 4 個價電子數。由混合 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂且滿足最外層 4 個價電子數，其中 ϵ_2 形式的 sum rule 曲線與實驗的曲線非常接近。最後將使用的參數列於表. 4.23- 4.24 。

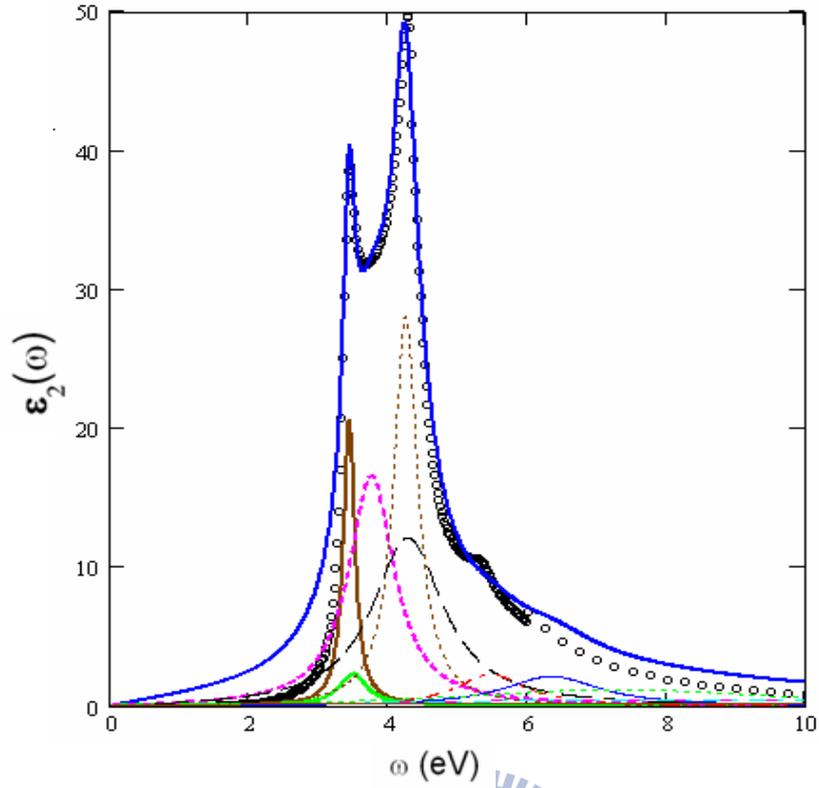


圖. 4.2 由 0 到 10eV DHO 模型每一項參數的分佈位置

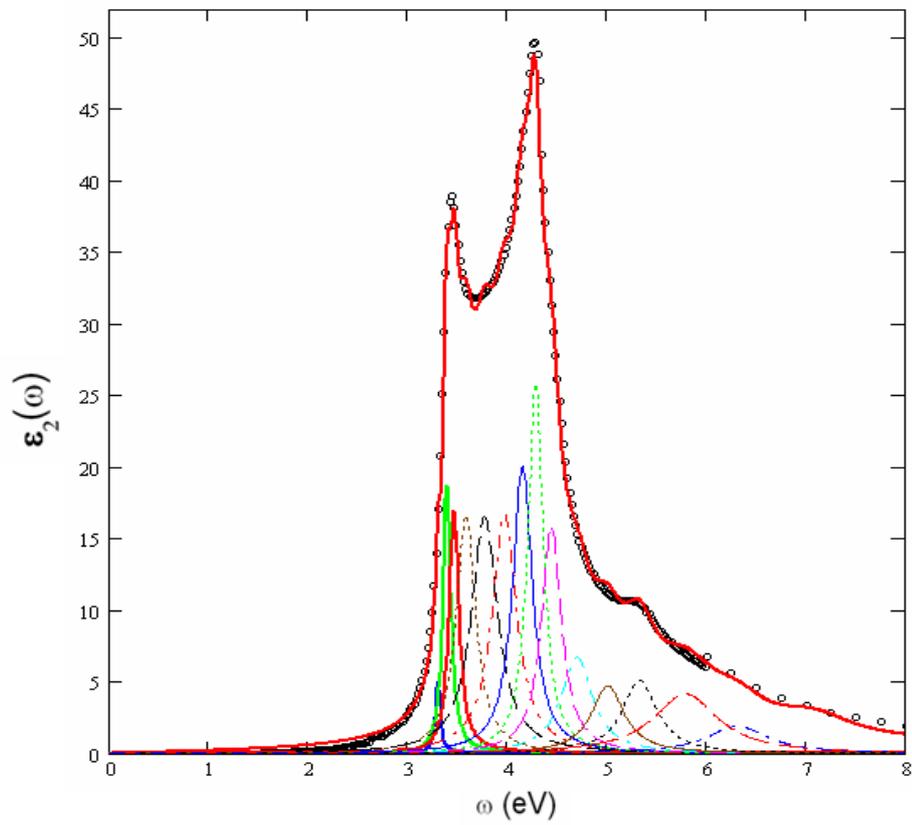


圖. 4.3 由 0 到 8eV 混合 DHO 模型每一項參數的分佈位置

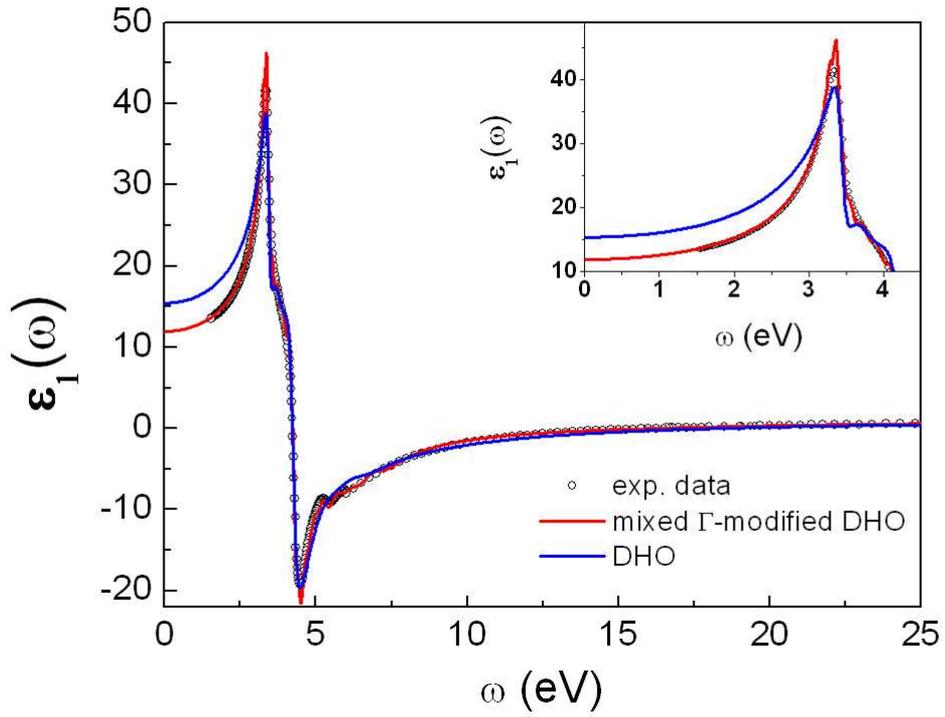


圖. 4.4 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 Si 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較

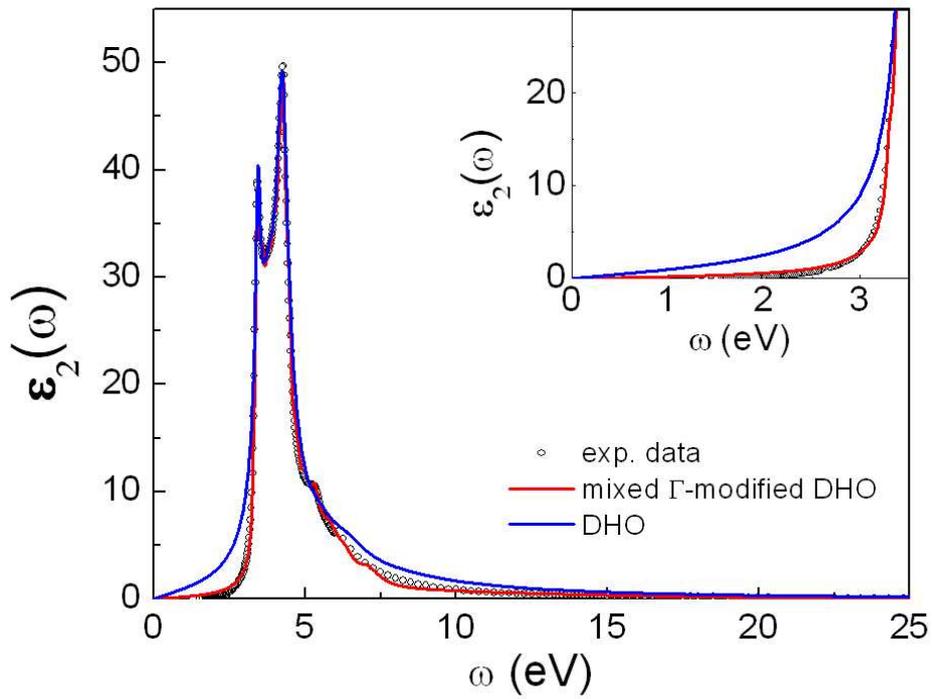


圖. 4.5 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 Si 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較

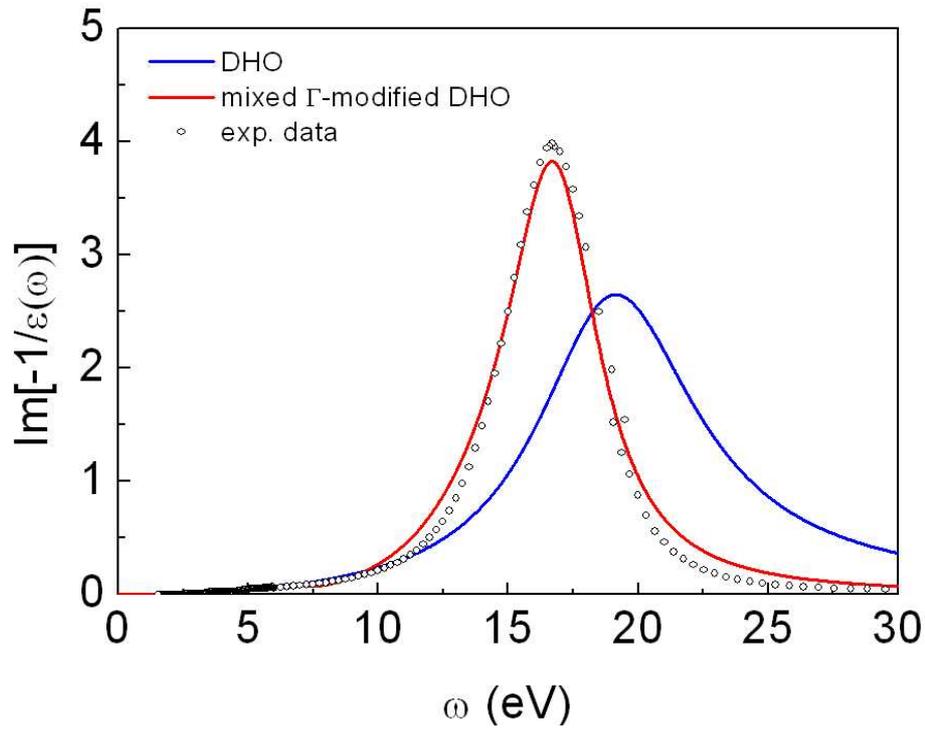


圖. 4.6 混合 DHO 與 DHO 模型計算 Si 的 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 與實驗曲線比較

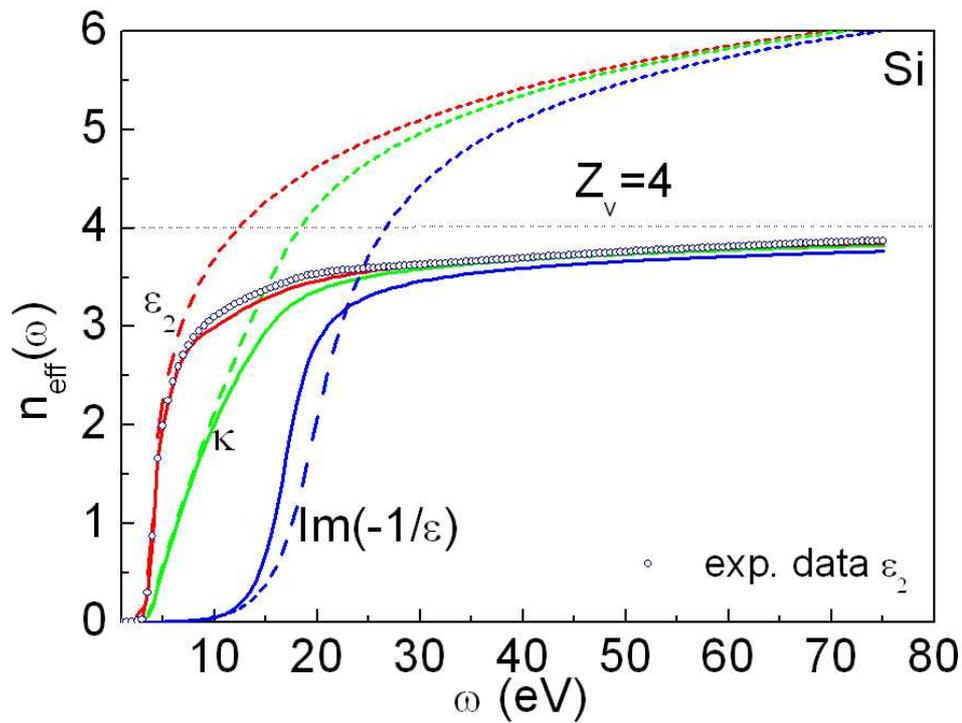


圖. 4.7 混合 DHO (solid curve)與 DHO (dash curve)模型計算 Si 的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 之比較

4.1.2 矽材料混合 DHO 模型與其他模型比較

針對半導體材料矽，現在將混合 DHO 模型與其他模型比較如：MDF model(3-25)、(3-26)式、MFB model (3-36)、(3-37)式及 Chen(3-46)、(3-47)式的模型，對實驗取得的介電函數值模擬，結果列於圖. 4.8-4.9，使用的參數列於表. 4.24-4.27。

以大範圍的角度來看圖. 4.8-4.9，明顯可看出 MFB、MDF 在矽材料中模擬的結果，在實部的部份與實驗的介電函數值偏離很多，不適合用於高能量的計算($\omega > 6eV$)，且 MDF 在 $\omega > 6.6eV$ 虛部出現負值與事實不符，只有 Chen 的模型及混合 DHO 模型適合用於高能量的計算；另外在靠近吸收帶的實部與虛部模擬，Chen 的模型則不準確甚至 $\omega < 3.28eV$ 計算過多。

將在吸收帶 fitting 效果較好的模型一起比較如圖. 4.10(a)，MFB(藍色曲線)模型在實部小於 2.3eV 的範圍數值偏低，2.3eV-3.1eV 的範圍則是過高，表示 MFB 模型在介電函數實部能隙附近的計算曲線的斜率變化較明顯，能量越低偏離實驗值會越多，MDF(粉紅色曲線)模型在實部 0eV-3.3eV 的計算結果都略微比混合 DHO 模型要高，另外在大於 3.5eV 則是混合 DHO 模型最吻合實驗曲線；圖. 4.10(b) MFB 模型在虛部 2.5eV-3.3eV 的範圍則是略為偏高，表示 MFB 模型在介電函數虛部能隙附近的計算曲線的曲線上升較明顯偏離實驗值，MDF 模型在 0eV-3.4eV 的計算結果都與混合 DHO 模型接近，但 4.6eV-6eV 數值明顯下降與實驗值不合，其中在 3.437eV 的波峰到 4.25eV 的波峰此範圍內只有混合 DHO 模型的曲線能達到跟實驗值非常接近。可見混合 DHO 模型在吸收帶 fitting 效果比 MFB、MDF、Chen 模型好，並且也適用於高能量的介電函數計算，將每個模型 1.54eV-6eV 的相對方均根誤差列於表. 4.3。

在矽的實驗數值夠多的情況下畫出其 energy loss $\text{Im}(-1/\epsilon)$ ，將 MFB、MDF、Chen 及混合 DHO 介電函數實部與虛部帶入(2-31)式計算而得到圖. 4.11(a)，圖中明顯可見 Chen 模型與混合 DHO 模型計算的能損曲線與實驗值非常接近。接下來要計算兩個模型的有效電子數並驗證是否會收斂，我們使用(3-70)、(3-71)及(3-72)式計算兩個模型的 finite-sum rule。如圖. 4.11(b)-圖. 4.11(d)所示，MFB 模型計算的 sum rule 完全不會收斂，

以及 MDF 模型的 sum rule 會出現負值與事實不符。由 Chen 與混合 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂且滿足最外層 4 個價電子數。最後將 Chen、MFB、MDF 使用的參數列於表. 4.25-表. 4.27。

表. 4.3 矽所有模型相對方均根誤差		
Range:1.54-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	15.2%	14.5%
MDF model	10.3%	10.5%
MFB model	6.2%	6%
Chen model	16.4%	16.8%
混合 DHO model	6.2%	3.6%

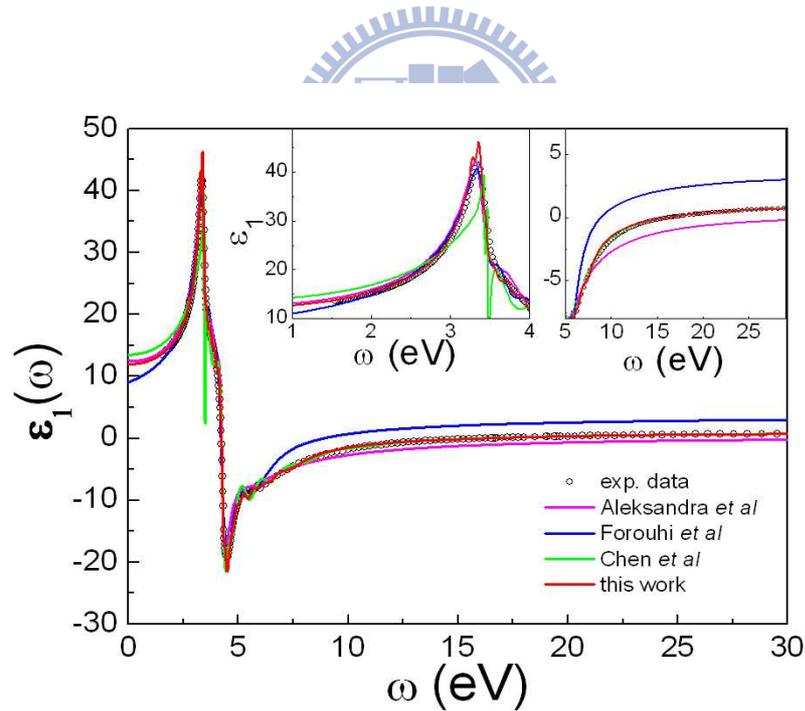


圖. 4.8 MDF (pink solid curve)、MFB (blue solid curve)、Chen (green solid curve)、混合 DHO (red solid curve)對 Si 的 $\epsilon_1(\omega)$ 模擬。

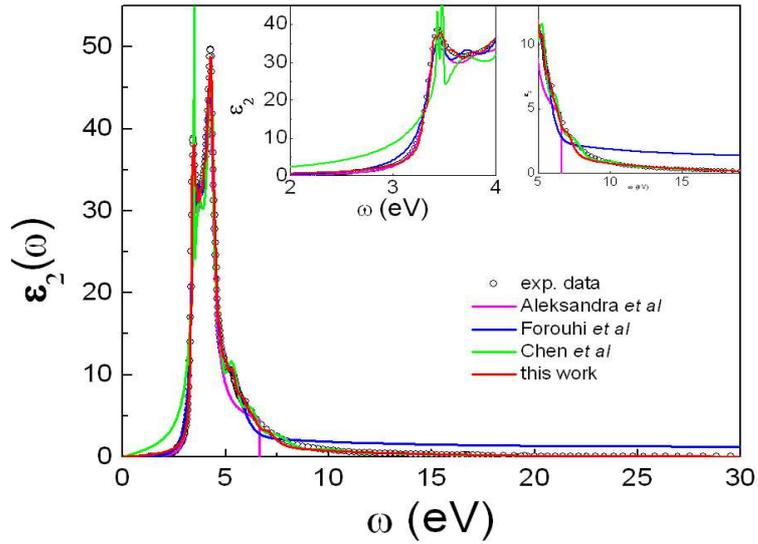


圖. 4.9 MDF (pink solid curve)、MFB (blue solid curve)、Chen (green solid curve)、混合 DHO (red solid curve) 對 Si 的 $\epsilon_2(\omega)$ 模擬。

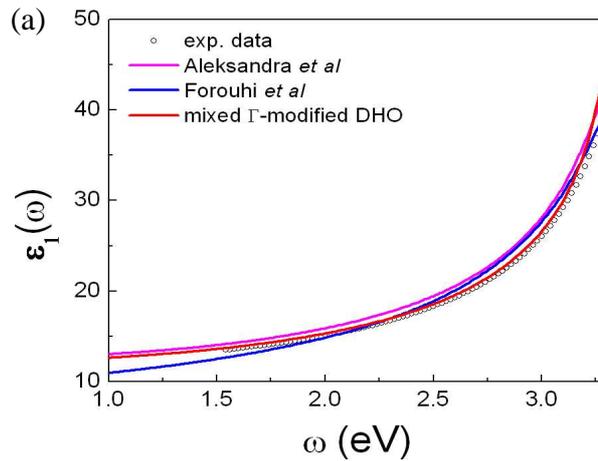


圖. 4.10 (a) 靠近吸收帶 MFB (blue solid curve)、MDF (pink solid curve) 及混合 DHO (red solid curve) 模型對 Si 的 $\epsilon_1(\omega)$ 模擬

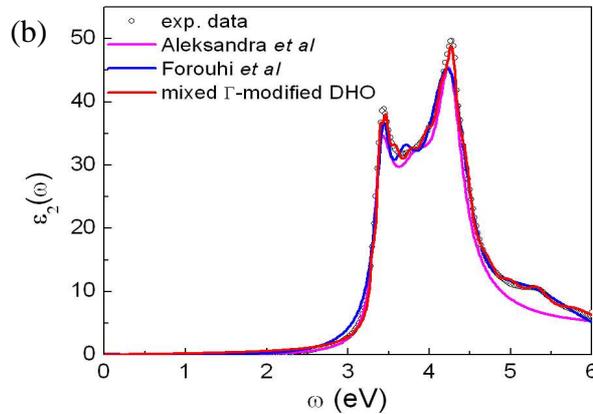


圖. 4.10 (b) 靠近吸收帶 MFB、MDF 及混合 DHO 模型對 Si 的 $\epsilon_2(\omega)$ 模擬

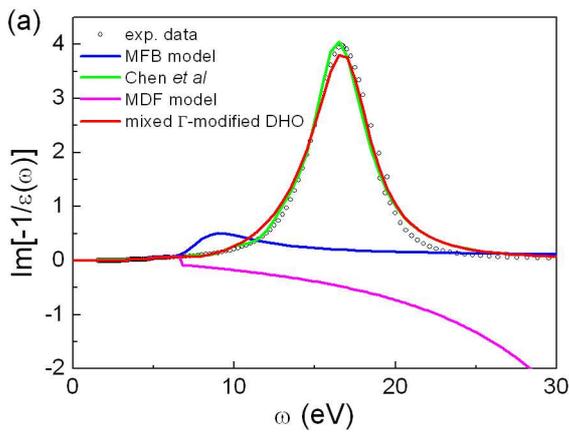


圖. 4.11 (a)MFB、MDF、Chen 及混合 DHO 模型的 energy loss function 比較

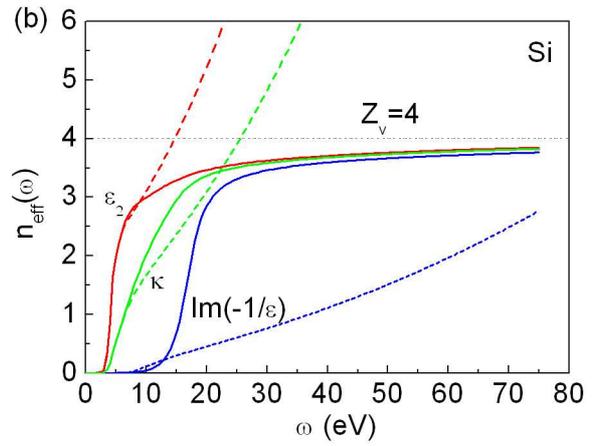


圖. 4.11 (b)MFB (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的有效電子數比較

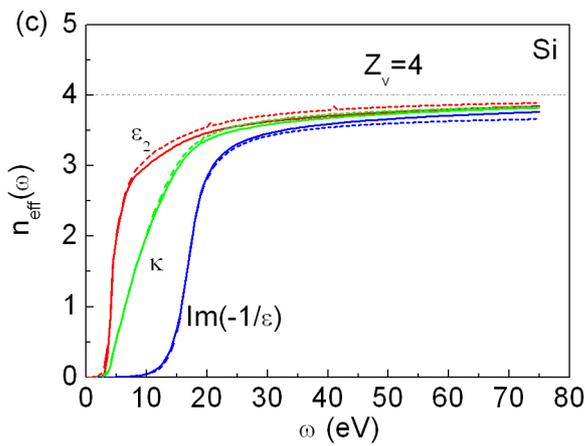


圖. 4.11 (c)Chen (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的有效電子數比較

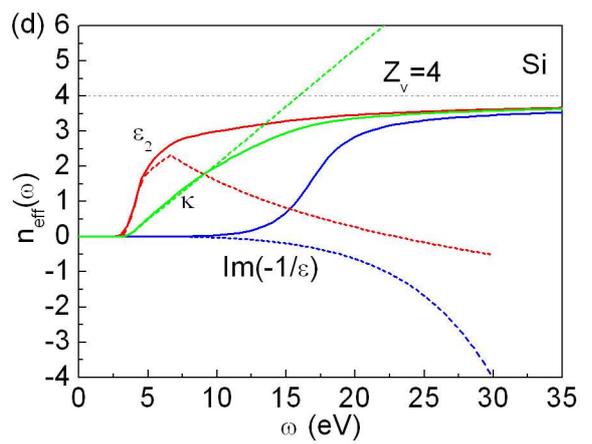


圖. 4.11 (d)MDF (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的有效電子數比較

4.2 砷化鎵 (GaAs)

4.2.1 砷化鎵 DHO 模型與混合 DHO 模型比較

同樣地，針對 GaAs 我們將 fit 的能量範圍擴展到 $\omega = 23 \text{ eV}$ ，DHO 模型對 GaAs 的 fitting 項數總共 11 項，每一項有不同的共振能量 ω_j 、震盪強度 f_j 及阻尼係數 γ_j 分布在 fitting 的範圍內，如圖. 4.12；而混合 DHO 模型則用 15 項，其中最前面 3 項由 N=2 Γ -modified DHO 模型貢獻(j=1~3)，其他由 DHO 模型貢獻，如圖. 4.13。而為了配合能量大於 5.85eV 以上則使用阻尼係數大的參數。圖. 4.14-圖. 4.15 呈現出兩個模型實部、虛部介電函數與實驗值的比較，在高能量的部份($\omega > 15 \text{ eV}$) 混合 DHO 與 DHO 模型都非常接近實驗值，而在 10eV 左右混合 DHO 模型對於 $\epsilon_1(\omega)$ 與 $\epsilon_2(\omega)$ 的計算略為偏低； $\epsilon_1(\omega)$ 靠近能隙的部份(1.4~2.8eV)，混合 DHO 模型與實驗值相比略微偏低，而 DHO 模型則計算過多； $\epsilon_2(\omega)$ 的計算則是 DHO 模型偏高。靠近能隙的部份只有混合 DHO 模型與實驗值匹配，就混合 DHO 模型在虛部吸收帶部分 fitting 效果比 DHO 模型好，接著分別計算兩個模型由 1.5eV-6eV 的相對均方根誤差列於表. 4.4。

Range: 1.5-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	6.6%	7.1%
混合 DHO model	5.2%	3%

在實驗數值夠多的情況下畫出其 energy loss $\text{Im}(-1/\epsilon)$ ，將 DHO 與混合 DHO 介電函數實部與虛部帶入(2-31)式計算而得到圖. 4.16，圖中明顯可見混合 DHO 模型計算的能損曲線與實驗值非常接近，整體而言 DHO 模型震盪強度 f_j 計算過多使得 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 曲線與實驗值不符且曲線往右偏移。計算兩個模型的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ ，如圖. 4.17 所示，由混合 DHO 模型計算的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂且滿足最外層 8 個價電子數；而 DHO 模型計算 ϵ_2 、 κ 、 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 的 sum rule 雖然會收斂，但分別在 $\omega > 14$ 、

$\omega > 19$ 、 $\omega > 28$ eV 時就不滿足甚至超過 8 個價電子數。最後將使用的參數列於表. 4.28-4.29。

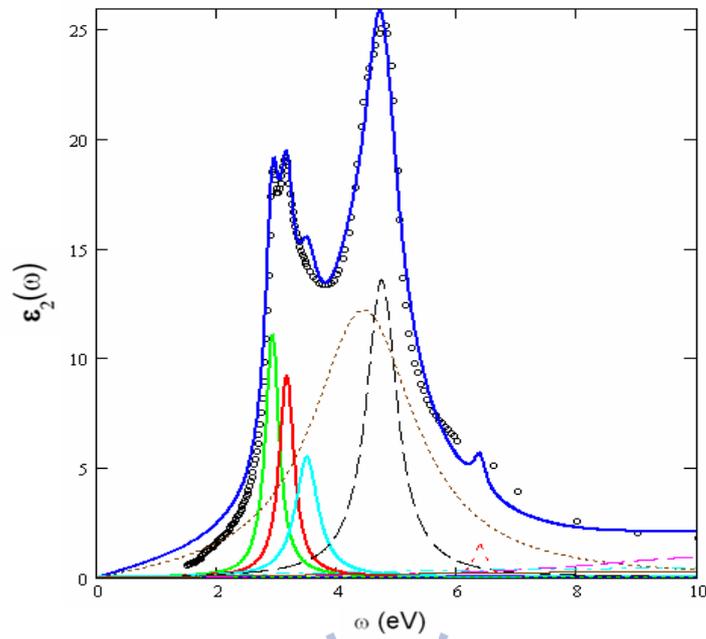


圖. 4.12 由 0 到 10eV DHO 模型每一項參數的分佈位置

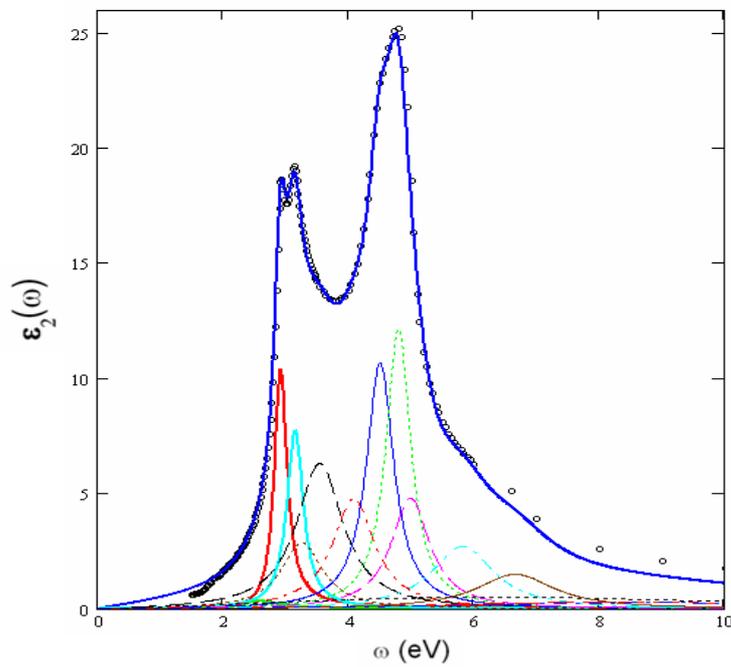


圖. 4.13 由 0 到 10eV 混合 DHO 模型每一項參數的分佈位置

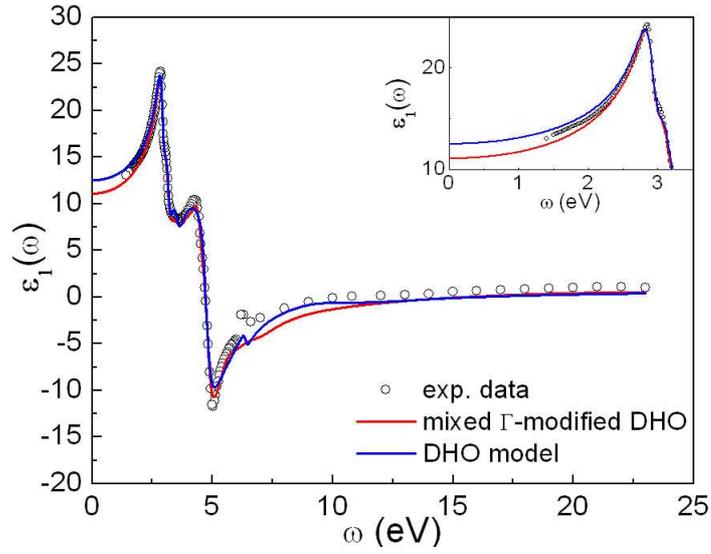


圖. 4.14 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaAs 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較

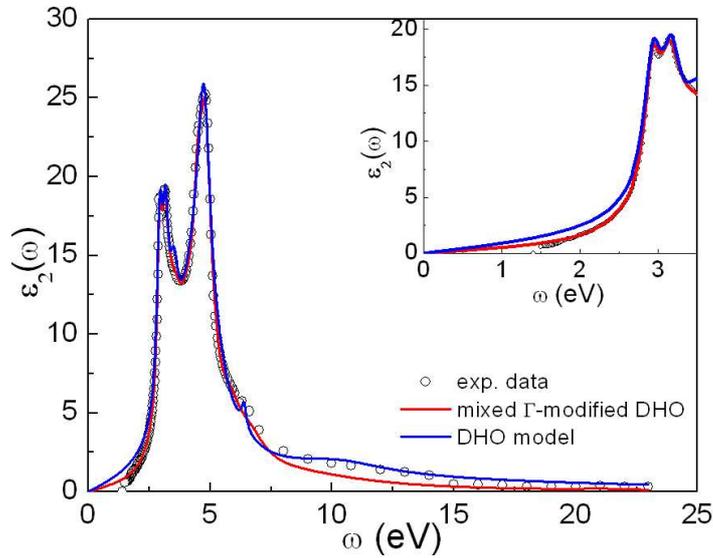


圖. 4.15 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaAs 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較

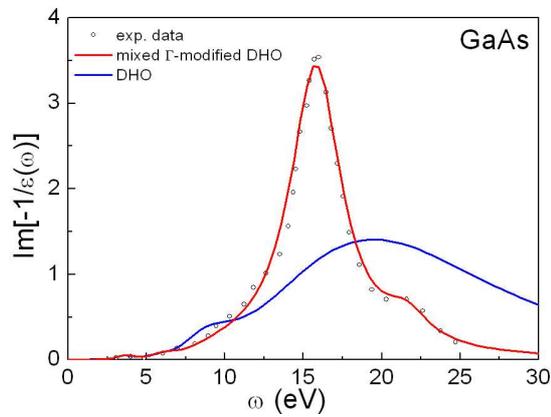


圖. 4.16 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaAs 的 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 與實驗曲線比較

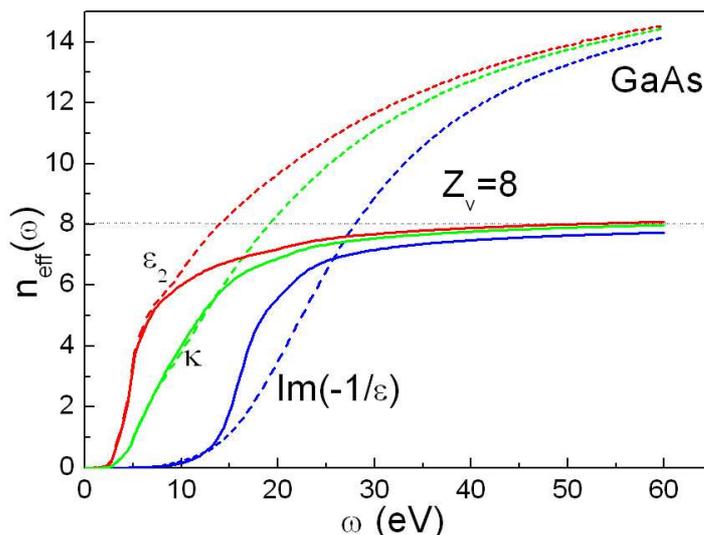


圖. 4.17 混合 DHO (solid curve)與 DHO (dash curve)模型計算 GaAs 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較。

4.2.2 砷化鎵混合 DHO 模型與其他模型比較

針對半導體材料 GaAs，現在將混合 DHO 模型與其他模型比較如：MDF model(3-27)、(3-28)式、MFB model (3-36)、(3-37)式及 Chen(3-46)、(3-47)式的模型，對實驗取得的介電函數值模擬，結果列於圖. 4.18- 4.19，在實部與虛部 6-23eV 明顯可看出 MFB(藍色曲線)在 GaAs 材料中模擬的結果與實驗的數值偏離很多，不適合用於高能量的計算，只有 Chen(綠色曲線)、MDF(粉紅色曲線)及混合 DHO(紅色曲線)模型適合用於高能量的計算。

靠近 GaAs 材料實部吸收帶部分的模擬結果如圖. 4.20，Chen 的模型在 2.8eV 之下計算結果都偏低，而 MFB 模型在 1.9eV 之下的計算結果也是偏低，在 1.9eV-2.6eV 計算結果則是過高，2.2eV 以下混合 DHO 模型數值偏低，MDF 模型的計算結果則是最貼近實驗曲線值。在虛部吸收帶的模擬如圖. 4.21，Chen 的模型在 2.75eV 到 3.1eV 偏低，在 1.75eV 以下則是過高，MFB 模型在能隙範圍計算則最不準確，2.5eV 以下都偏低且能量越低離實驗值越遠，MDF 的情況也與 MFB 相同，2.7eV 以下都偏低且能量越低離實驗值越遠，混合 DHO 模型的計算結果則是最貼近實驗曲線值。可見混合 DHO 模型在吸收帶 fitting 效果比 MFB、MDF、Chen 模型好，並且也適用於高能量的介電

函數計算，將每個模型 1.5eV-6eV 的相對方均根誤差列於表. 4.5。

在 GaAs 的實驗數值夠多的情況下畫出其 energy loss $\text{Im}(-1/\epsilon)$ ，將 MFB、MDF、Chen 及混合 DHO 介電函數實部與虛部帶入(2-31)式計算而得到圖. 4.22(a)，圖中明顯可見 Chen 與混合 DHO 模型計算的能損曲線與實驗值非常接近。接下來要計算兩個模型的有效電子數並驗證是否會收斂，我們使用(3-70)、(3-71)及(3-72)式計算兩個模型的 finite-sum rule。如圖. 4.22(b)- (d)所示，MFB 模型計算的 sum rule 完全不會收斂，以及 MDF 模型的 sum rule 會出現負值與事實不符。由 Chen 與混合 DHO 模型計算的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂且滿足最外層 8 個價電子數。最後將 MFB、Chen、MDF 使用的參數列於表. 4.26、表. 4.30-31。

表. 4.5 砷化鎵所有模型相對方均根誤差

Range:1.5-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	6.6%	7.1%
MFB model	9.6%	6.8%
MDF model	6.6%	9.3%
Chen model	13.1%	10.4%
混合 DHO model	5.2%	3%

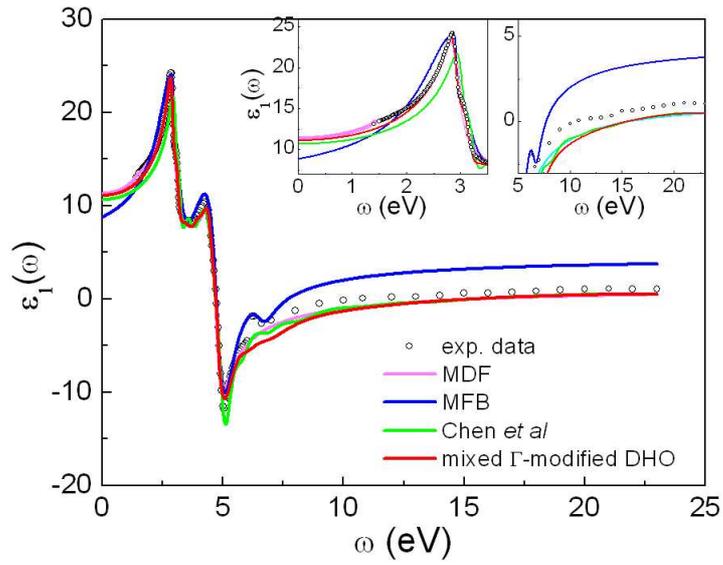


圖. 4.18 MFB、Chen 及混合 DHO 模型對 GaAs 材料介電函數實部模擬

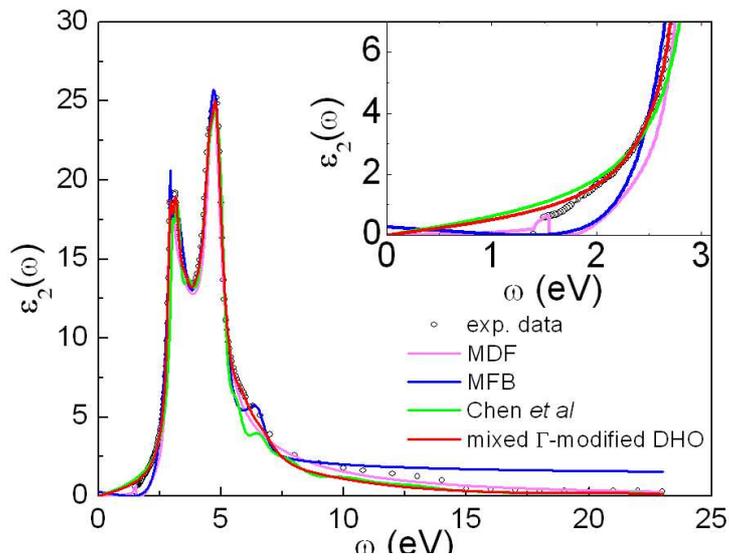


圖. 4.19 MFB、Chen 及混合 DHO 模型對 GaAs 材料介電函數虛部模擬

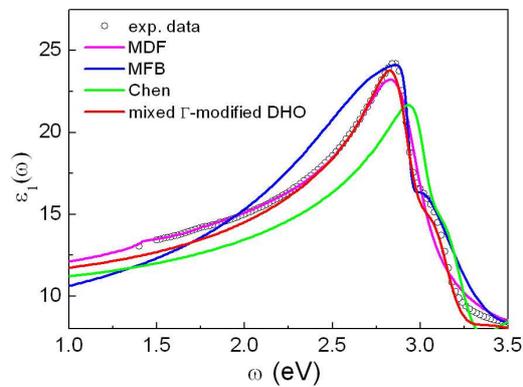


圖. 4.20 靠近吸收帶 MFB、Chen 及混合 DHO 模型對 GaAs 材料實部模擬

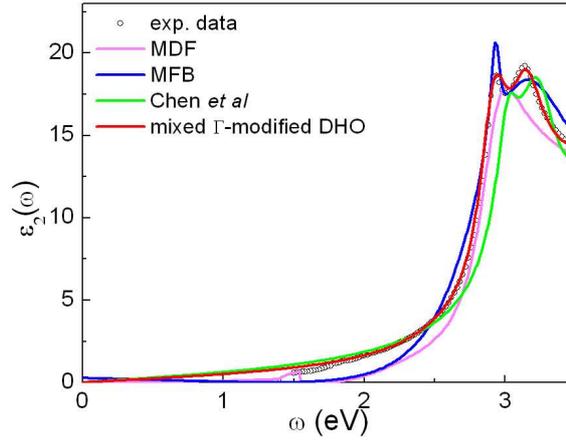


圖. 4.21 靠近吸收帶 MFB、Chen 及混合 DHO 模型對 GaAs 材料虛部模擬

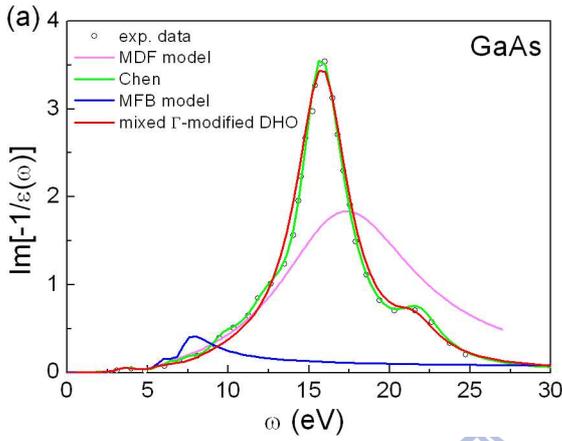


圖. 4.22 (a)MFB、MDF、Chen 及混合 DHO 模型的 energy loss function 比較

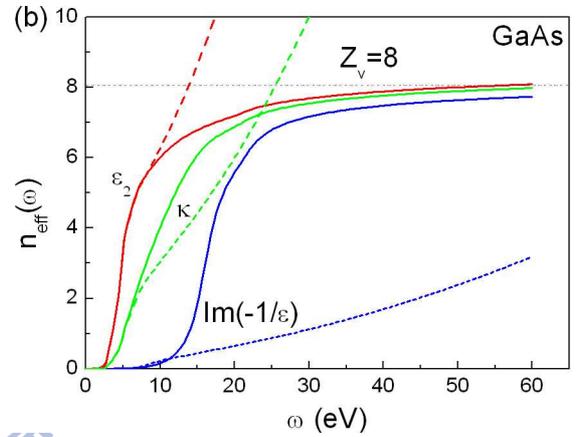


圖. 4.22 (b)MFB (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 比較

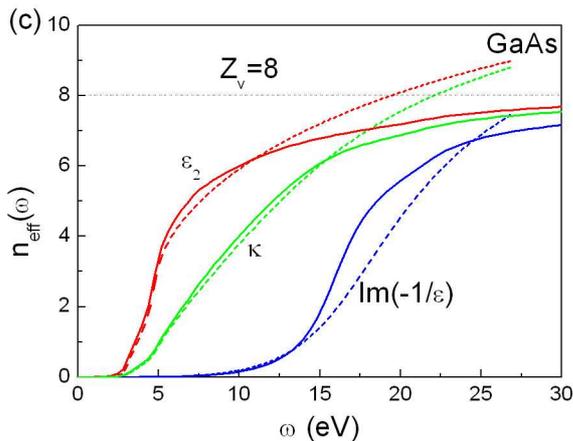


圖. 4.22 (c)MDF (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 比較

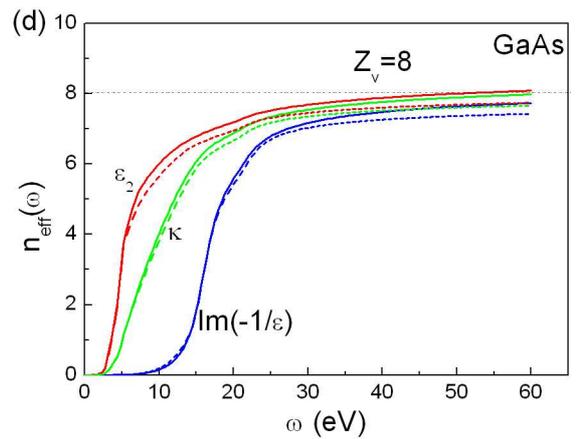


圖. 4.22 (d)Chen (dash curve)與混合 DHO (solid curve)模型的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 比較

4.3 鍺 (Ge)

4.3.1 鍺 DHO 模型與混合 DHO 模型比較

針對 Ge 我們將 fit 的能量範圍擴展到 $\omega = 7 \text{ eV}$ ，DHO 模型對 Ge 的 fitting 項數總共 11 項，每一項有不同的共振能量 ω_j 、震盪強度 f_j 及阻尼係數 γ_j 分布在 fitting 的範圍內，如圖. 4.23；而混合 DHO 模型則用 16 項，其中最前面 3 項由 N=2 Γ -modified DHO 模型貢獻(j=1~3)，其他由 DHO 模型貢獻，如圖圖. 4.24。為配合介電函數的實驗值在吸收帶附近有急速上升的趨勢，兩個模型在吸收帶附近的貢獻組成均使用阻尼係數小的參數；而為了配合能量大於 5eV 以上介電函數的虛部吸收效果顯著下降，則使用阻尼係數大的參數。兩個模型實部、虛部介電函數 fitting 之後的結果比較如圖. 4.25-圖. 4.26，在 $\omega > 5 \text{ eV}$ DHO 模型計算 $\epsilon_1(\omega)$ 的數值偏離實驗值；靠近能隙的部份(0.7-2eV) 只有混合 DHO 模型與實驗值匹配，DHO 模型則計算過多且在 $\omega = 2 \text{ eV}$ 的峰值與實驗值相比落差甚大，而混合 DHO 模型在 $\epsilon_2(\omega)$ 的計算則最接近實驗值，且有準確的峰值，就混合 DHO 模型在吸收帶部分 fitting 效果比 DHO 模型好，接著分別計算兩個模型由 0.7 eV-6eV 的相對均方根誤差列於表. 4.6。計算兩個模型的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ ，由混合 DHO 模型計算的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 在 interband transition 滿足最外層 4 個價電子數；而 DHO 模型計算 ϵ_2 、 κ 、 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 的 sum rule 雖然會收斂，但分別在 $\omega > 12$ 、 $\omega > 17.5$ 、 $\omega > 26 \text{ eV}$ 時就不滿足甚至超過 4 個價電子數。最後將使用的參數列於表. 4.32-33。

表. 4.6 鍺相對方均根誤差

Range:0.7-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	5.7%	5.6%
混合 DHO model	3.9%	2.7%

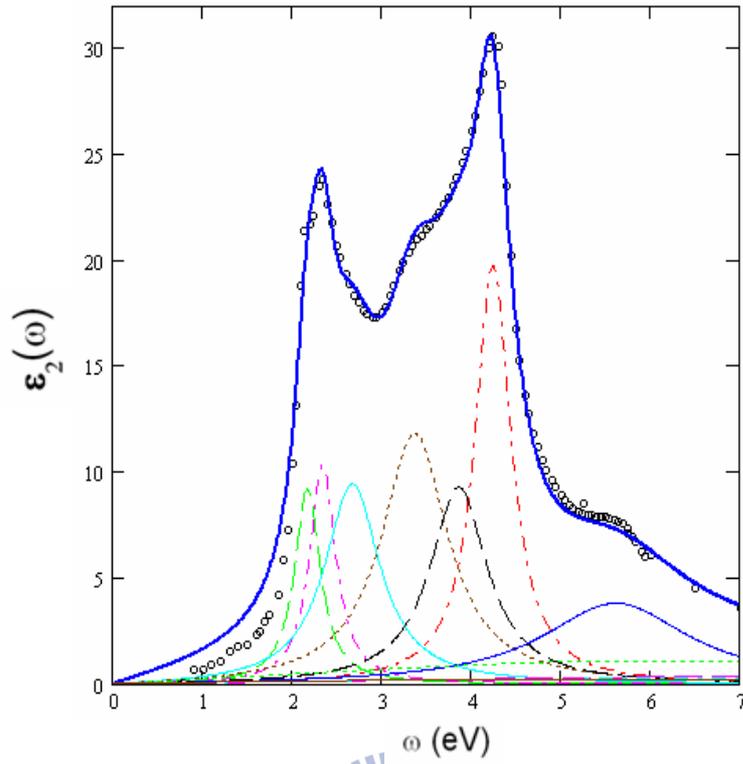


圖. 4.23 由 0eV-7eV DHO 模型每一項參數的分佈位置

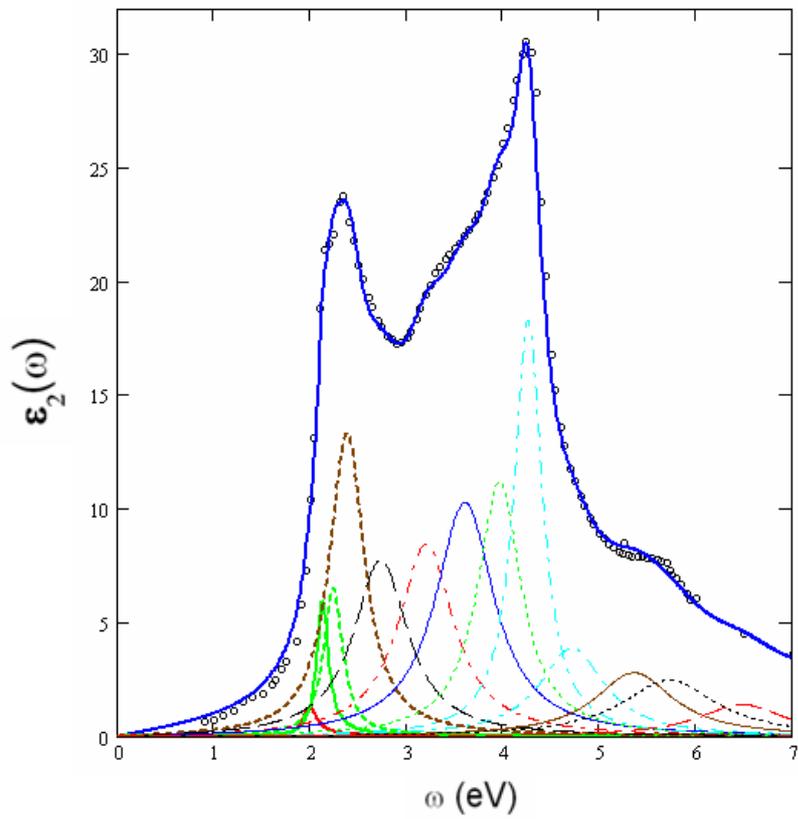


圖. 4.24 由 0eV-7eV 混合 DHO 模型每一項參數的分佈位置

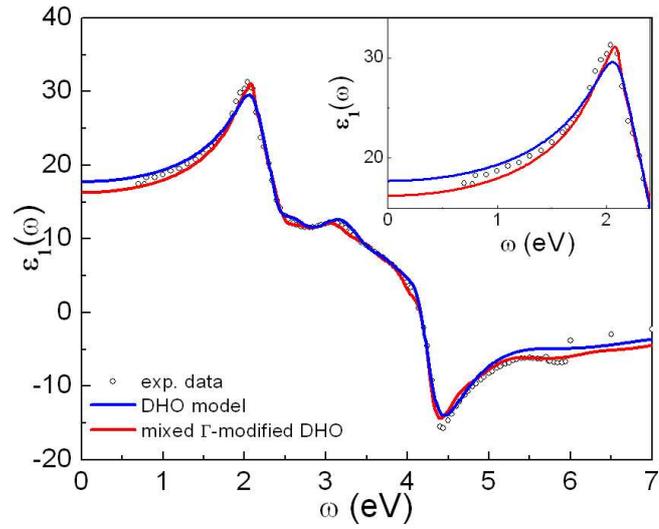


圖. 4.25 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 Ge 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較

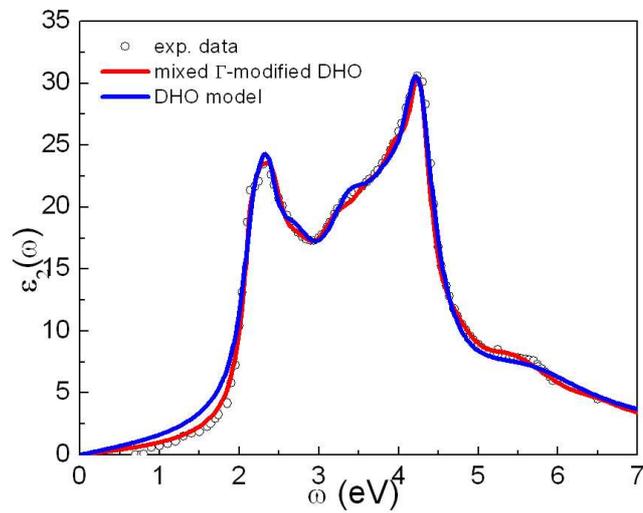


圖. 4.26 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 Ge 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較

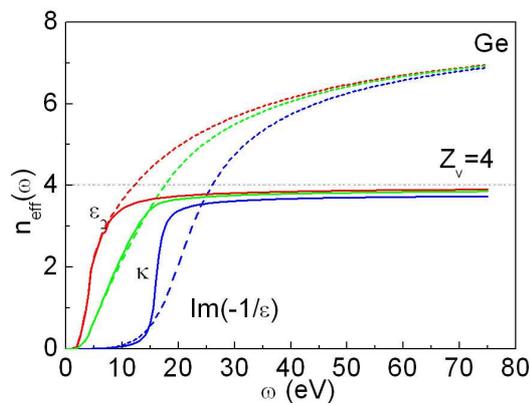


圖. 4.27 混合 DHO (solid curve)與 DHO (dash curve)模型計算 Ge 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較。

4.3.2 銻混合 DHO 模型與 MFB 模型比較

針對半導體材料 Ge，現在將混合 DHO model 與 MFB model 比較，對實驗取得的介電函數值模擬，結果列於圖. 4.28-4.29，在矽材料中已提到 MFB 模型其實不適合用在計算高能量範圍的介電常數，現在用在計算 7eV 以下的範圍與混合 DHO 模型比較，模擬的結果在介電函數實部與虛部在 $\omega > 3eV$ 計算中大致上都還算接近實驗數值。主要差異在吸收帶附近，吸收帶實部 $\omega < 1.65eV$ MFB 模型斜率變化比較明顯，能量越低就越偏離實驗值，混合 DHO 模型則是貼近實驗數值，另外在介電函數虛部的計算，MFB 模型在最接近吸收帶的 critical transition point 波峰計算過高，1.7eV 之下計算結果都偏低，而混合 DHO 模型在計算上皆貼近實驗數值。可見混合 DHO 模型在吸收帶 fitting 效果比 MFB 模型好，將每個模型 0.7eV-6eV 的相對方均根誤差列於表. 4.7。

接下來要計算兩個模型的有效電子數並驗證是否會收斂，我們使用(3-70)、(3-71)及(3-72)式計算兩個模型的 finite-sum rule。如圖. 4.30 所示，MFB 模型計算的 sum rule 完全不會收斂，由混合 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂且滿足最外層 4 個價電子數。將使用的參數列於表. 4.26。

表. 4.7 銻相所有模型對方均根誤差

Range:0.7-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	5.7%	5.7%
MFB model	9.3%	5.2%
混合 DHO model	4.3%	3.7%

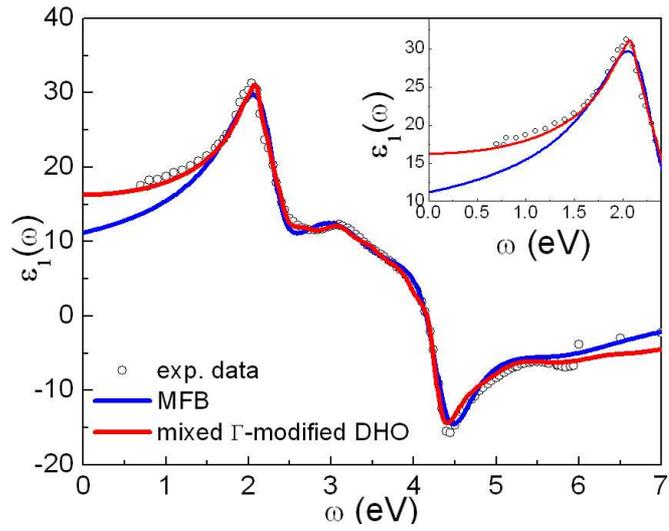


圖. 4.28. MFB 及混合 DHO 模型對 Ge 材料介電函數實部模擬

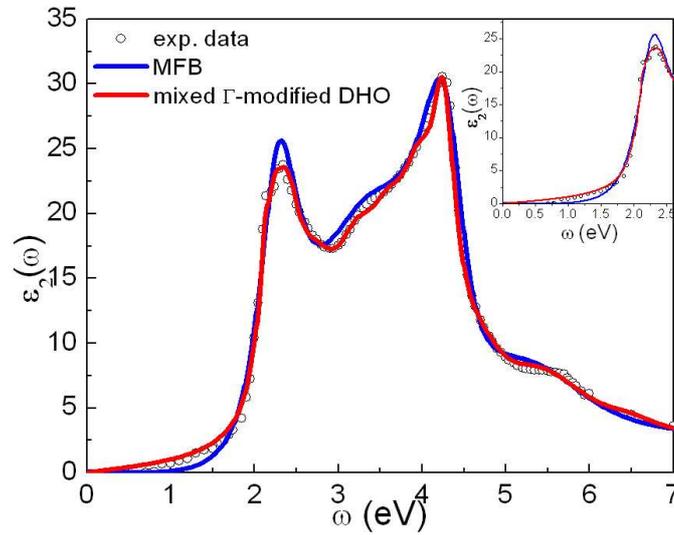


圖. 4.29 MFB 及混合 DHO 模型對 Ge 材料介電函數虛部模擬

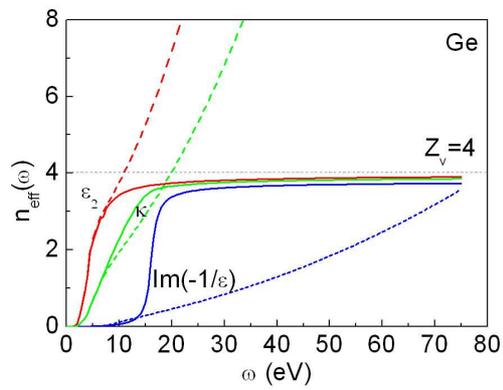


圖. 4.30 混合 DHO (solid curve)與 MFB (dash curve)模型計算 Ge 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較。

4.4 磷化銦 (InP)

4.4.1 磷化銦 DHO 模型與混合 DHO 模型比較

相同地，針對 InP 我們將 fit 的能量範圍擴展到 $\omega = 8 \text{ eV}$ ，DHO 模型對 InP 的 fitting 項數總共 12 項，每一項有不同的共振能量 ω_j 、震盪強度 f_j 及阻尼係數 γ_j 分布在 fitting 的範圍內，如圖. 4.31；而混合 DHO 模型則用 15 項，其中最前面 2 項由 Γ -modified DHO 模型貢獻($j=1\sim 2$)，其他由 DHO 模型貢獻，爲了撐高在吸收帶的 fitting 數值，故在最前兩項使用較小的震盪強度及較大的阻尼係數，所以在圖. 4.32 中可見有兩個明顯的較矮寬的 peak。兩個模型實部、虛部介電函數 fitting 之後的結果比較如圖. 4.33-圖. 4.34，實部 $\epsilon_1(\omega)$ 靠近能隙的部份(1.4~3eV)，DHO 模型則計算過多且在 $\omega = 3 \text{ eV}$ 的峰值與實驗值相比落差甚大，在 $\omega > 6 \text{ eV}$ 虛部 $\epsilon_2(\omega)$ 則偏離實驗值；而混合 DHO 模型在 $\epsilon_2(\omega)$ 的計算則最接近實驗值，且有準確的峰值，就混合 DHO 模型在吸收帶部份 fitting 效果比 DHO 模型好，接著分別計算兩個模型由 1.5eV-6eV 的相對均方根誤差列於表. 4.2。

表. 4.8 磷化銦相對均方根誤差

Range:1.5-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	4.1%	7.2%
混合 DHO model	4.5%	3.7%

計算兩個模型的 $n_{eff}(\omega)$ 如圖. 4.35，由混合 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂且滿足最外層 8 個價電子數；而 DHO 模型計算 ϵ_2 、 κ 、 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 的 sum rule 雖然會收斂，但分別在 $\omega > 14.35$ 、 $\omega > 19$ 、 $\omega > 28 \text{ eV}$ 時就不滿足甚至超過 8 個價電子數。將使用的參數列於表. 4.34-35。

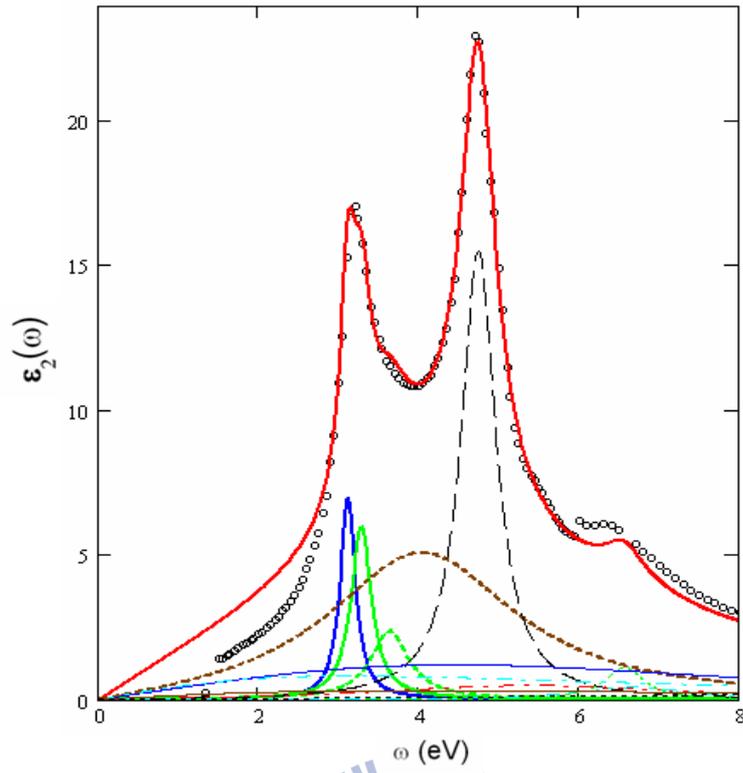


圖. 4.31 由 0eV-8eV DHO 模型每一項參數分佈位置

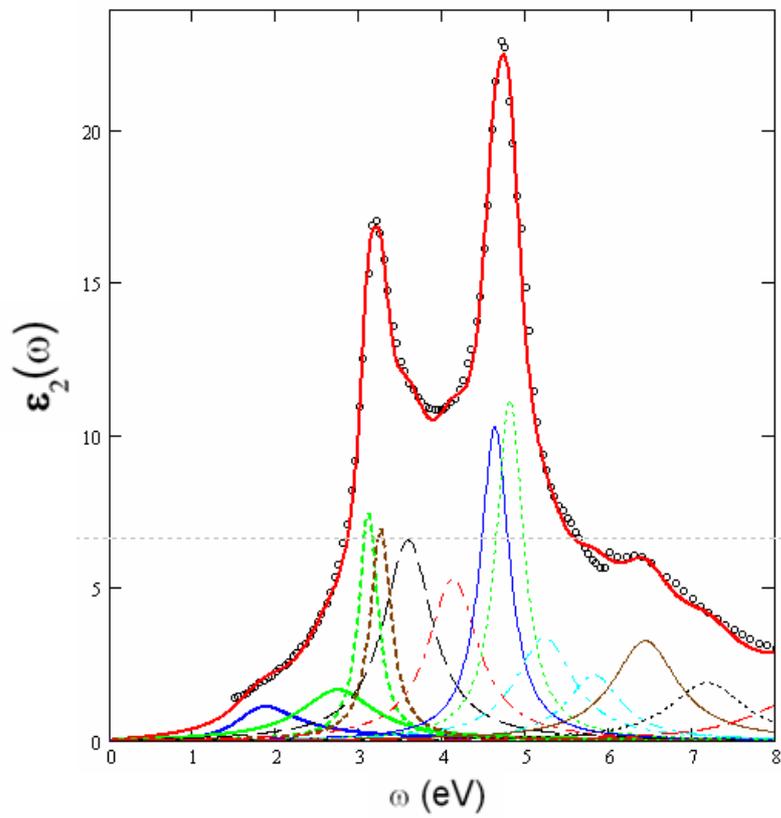


圖. 4.32 由 0eV-8eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置

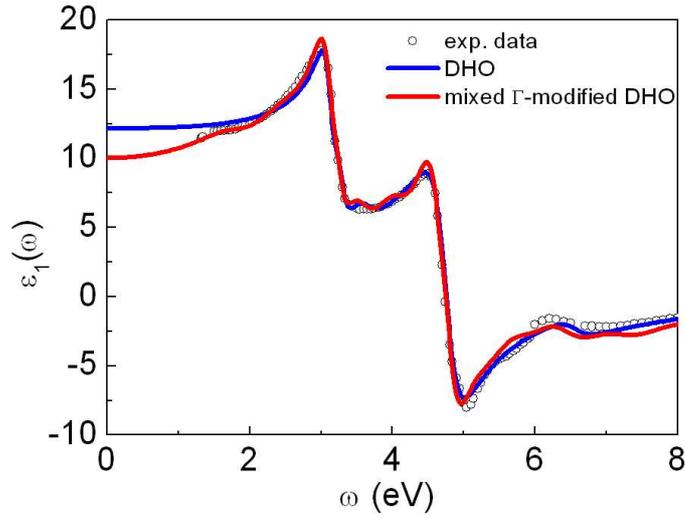


圖. 4.33 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InP 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較

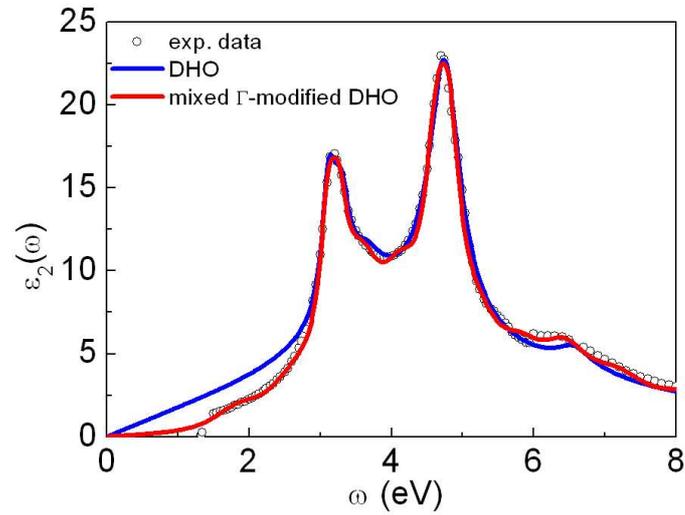


圖. 4.34 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InP 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較

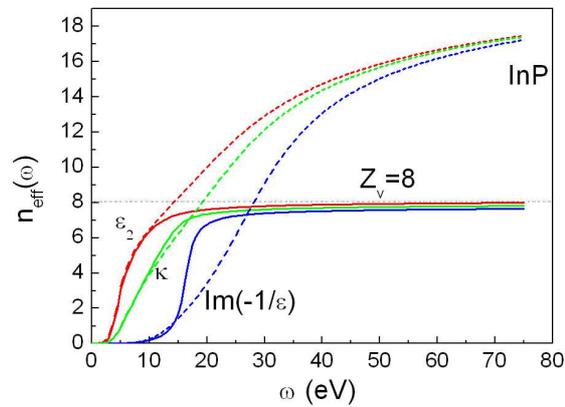


圖. 4.35 混合 DHO (solid curve)與 DHO (dash curve)模型計算 InP 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較。

4.4.2 磷化銦混合 DHO 模型與 MFB 模型比較

針對半導體材料 InP，現在將混合 DHO model 與 MFB model 比較，對實驗取得的介電函數值模擬，結果列於圖. 4.36-圖. 4.37，MFB 模型用在計算 7eV 以下的範圍，整體而言在 $4eV < \omega < 8eV$ 以上的 fitting 還蠻準確。主要差異在吸收帶附近，吸收帶實部 $\omega < 3eV$ MFB 模型斜率變化趨勢與實驗值相差甚遠，在 $2.23eV < \omega < 2.8eV$ 計算過高且 $\omega < 2.23eV$ 則計算過低，能量越低就越偏離實驗值，混合 DHO 模型則是貼近實驗數值，另外在介電函數虛部的計算，MFB 模型在最接近吸收帶的 critical transition point 波峰沒有達到實驗的峰值，2.6eV 之下計算結果都偏低，而混合 DHO 模型在計算上皆貼近實驗數值。可見混合 DHO 模型在吸收帶 fitting 效果比 MFB 模型好，將每個模型 1.5eV-6eV 的相對方均根誤差列於表. 4.9。

表. 4.9 磷化銦所有模型相對方均根誤差

Range:1.5-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	4.1%	7.2%
MFB model	9.9%	9.4%
混合 DHO model	4.5%	3.7%

接下來要計算兩個模型的有效電子數並驗證是否會收斂，我們使用(3-62)、(3-63)及(3-64)式計算兩個模型的 finite-sum rule。如圖. 4.38 所示，MFB 模型計算的 sum rule 完全不會收斂，由混合 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂且滿足最外層 8 個價電子數。最後將 MFB 使用的參數列於表. 4.26。

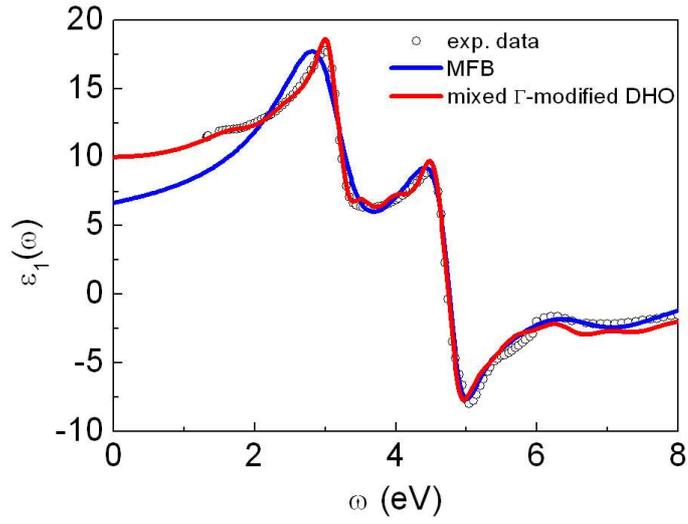


圖. 4.36 MFB 及混合 DHO 模型對 InP 材料介電函數實部模擬

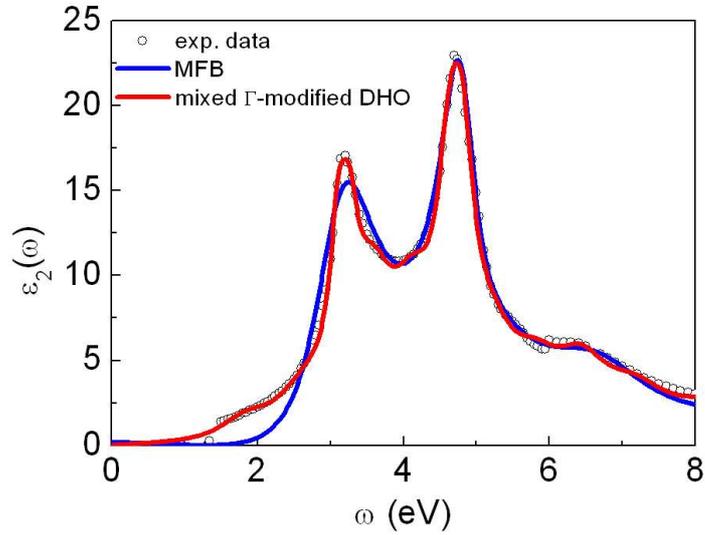


圖. 4.37 MFB 及混合 DHO 模型對 InP 材料介電函數虛部模擬

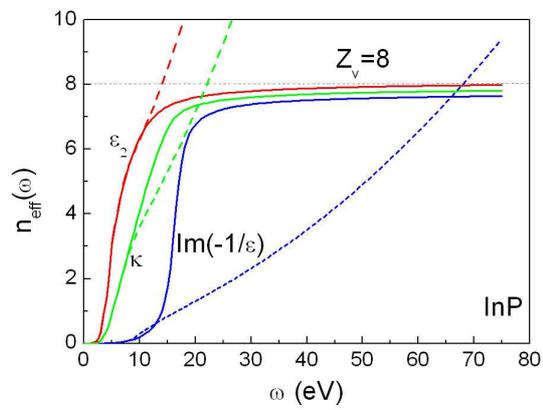


圖. 4.38 混合 DHO (solid curve)與 MFB (dash curve)模型計算 InP 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較

4.5 磷化鎵 (GaP)

4.5.1 磷化鎵 DHO 模型與混合 DHO 模型比較

針對 GaP 我們將 fit 的能量範圍擴展到 $\omega = 10 \text{ eV}$ ，DHO 模型對 GaP 的 fitting 項數總共 11 項，每一項有不同的共振能量 ω_j 、震盪強度 f_j 及阻尼係數 γ_j 分布在 fitting 的範圍內，如圖. 4.39，而混合 DHO 模型則用 14 項，其中最前面 2 項由 N=2 Γ -modified DHO 模型貢獻($j=1\sim 2$)，其他由 DHO 模型貢獻，如圖. 4.40。在第一項使用較小的震盪強度及較大的阻尼係數，所以在圖. 4.40 中可見有一個明顯的較矮寬的 peak，此項的作用可以弭補後面幾像阻尼係數較小的參數在吸收帶不足的地方。兩個模型實部、虛部介電函數 fitting 之後的結果比較如圖. 4.41-4.42，在 $\omega > 6 \text{ eV}$ 混合 DHO 模型計算 $\epsilon_1(\omega)$ 的數值稍微偏離實驗值； $\epsilon_1(\omega)$ 靠近能隙的部份(2.8~3.5eV)，DHO 模型則計算偏低且在 $\omega = 3.5 \text{ eV}$ 的峰值與實驗值相比落差甚大，而混合 DHO 模型在 $\epsilon_2(\omega)$ 的計算則最接近實驗值，且有準確的峰值，就混合 DHO 模型在吸收帶部分 fitting 效果比 DHO 模型好，接著分別計算兩個模型由 2.3eV-6eV 的相對均方根誤差列於表. 4.10。

表. 4.10 磷化鎵相對方均根誤差

Range:2.3-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	6.3%	6.5%
混合 DHO model	4.6%	3.3%

計算兩個模型的 $n_{eff}(\omega)$ 如圖. 4.43，由混合 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂且滿足最外層 8 個價電子數；而 DHO 模型計算 ϵ_2 、 κ 、 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 的 sum rule 雖然會收斂，但分別在 $\omega > 17$ 、 $\omega > 17.5$ 、 $\omega > 26 \text{ eV}$ 時就不滿足甚至超過 8 個價電子數。最後將使用的參數列於表. 4.36-37。

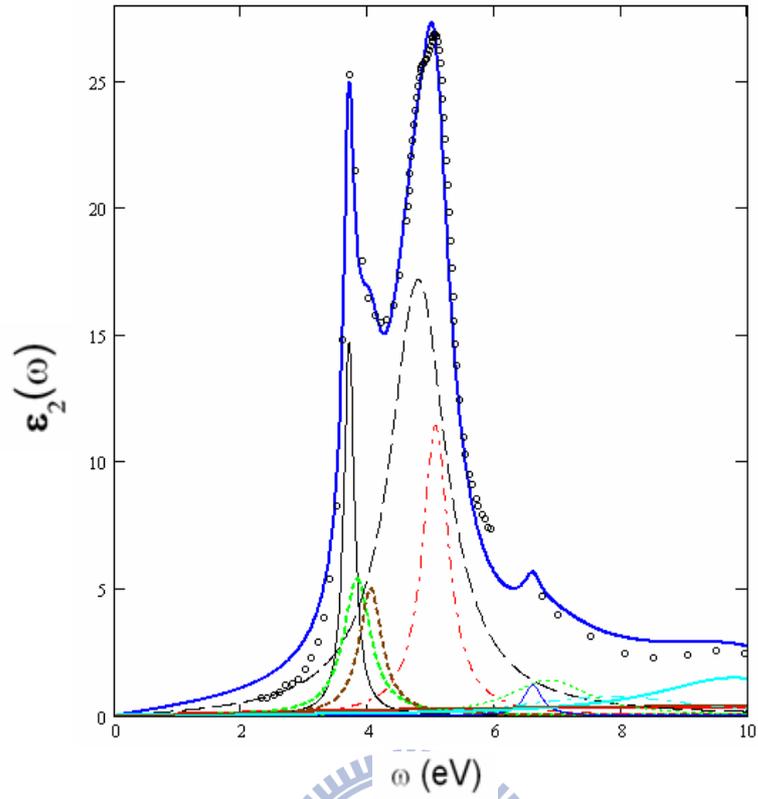


圖. 4.39 由 0eV-10eV DHO 模型每一項參數分佈位置

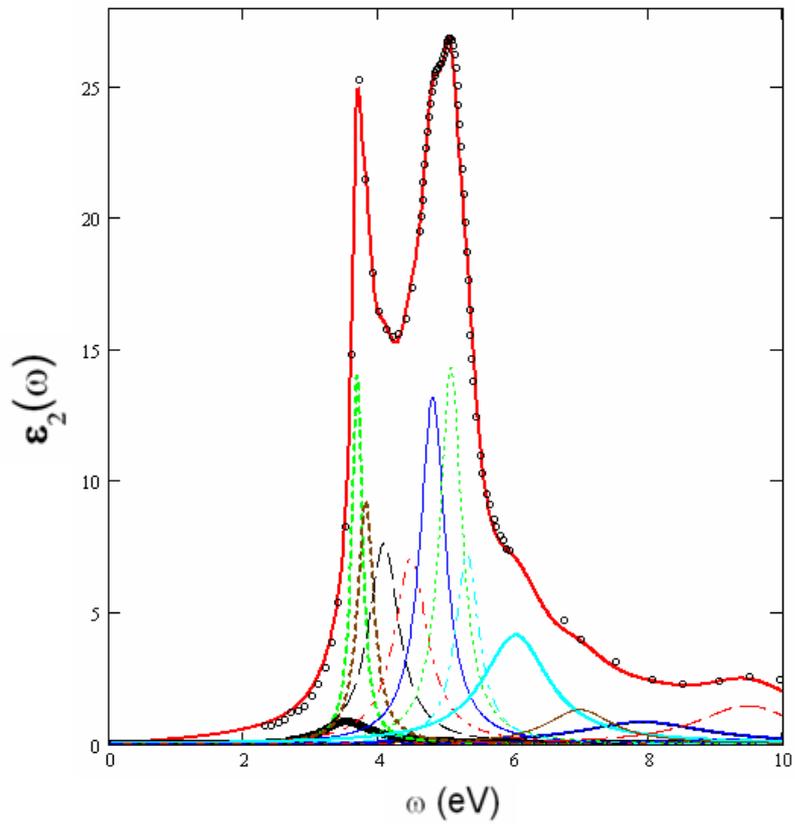


圖. 4.40 由 0eV-10eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置

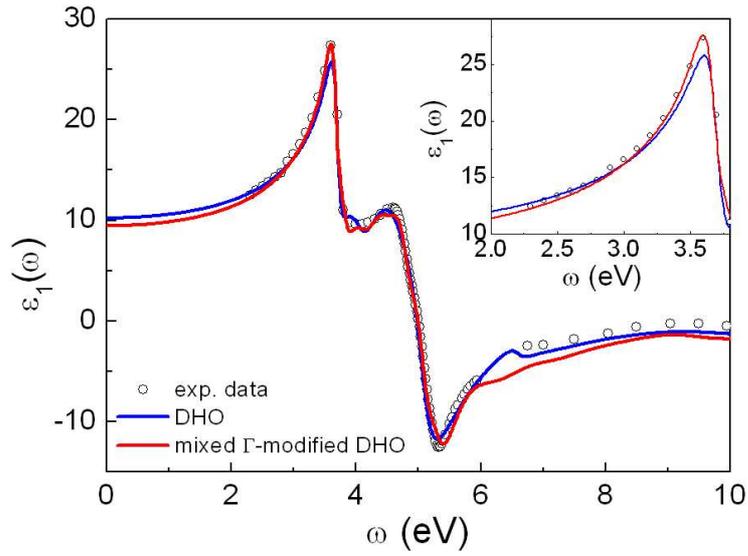


圖. 4.41 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaP 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較

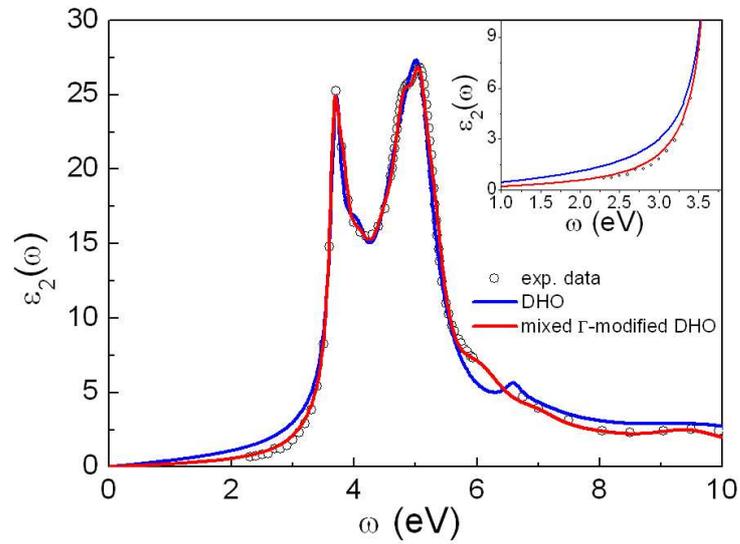


圖. 4.42 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaP 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較

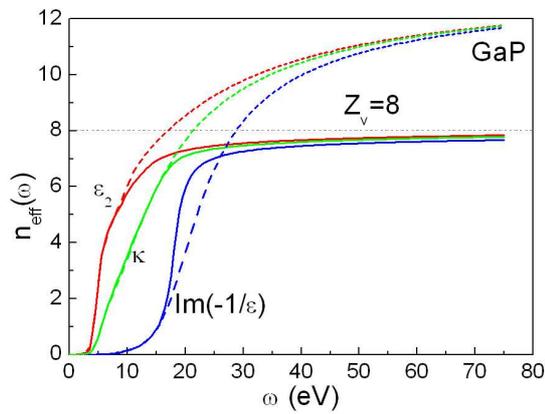


圖. 4.43 混合 DHO (solid curve)與 DHO (dash curve)模型計算 GaP 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較。

4.5.2 磷化鎵混合 DHO 模型與 MFB 模型比較

針對半導體材料 GaP，現在將混合 DHO model 與 MFB model 比較，對實驗取得的介電函數值模擬，結果如圖. 4.44-圖. 4.45，MFB 模型用在計算 7eV 以下的範圍，整體而言在 $3.5eV < \omega < 5.5eV$ 以上的 fitting 還蠻準確。主要差異在吸收帶與高能量附近，吸收帶實部 $\omega < 3.5eV$ MFB 模型斜率變化趨勢與實驗值相差甚遠，在 $2.7eV < \omega < 3.5eV$ 計算過高且 $\omega < 2.7eV$ 則計算過低，能量越低就越偏離實驗值，混合 DHO 模型則是貼近實驗數值，另外在介電函數虛部的計算，MFB 模型 3.3eV 之下計算結果都偏低，而在 $\omega > 6eV$ 部分 MFB 模型偏高而混合 DHO 模型偏低。混合 DHO 模型在吸收帶 fitting 效果比 MFB 模型好，將每個模型 2.3eV-6eV 的相對方均根誤差列於表. 4.11。

表. 4.11 磷化鎵所有模型相對方均根誤差

Range:2.3-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	6.3%	6.5%
MFB model	5%	6.5%
混合 DHO model	4.6%	3.3%

接下來要計算兩個模型的有效電子數並驗證是否會收斂，我們使用(3-70)、(3-71)及(3-72)式計算兩個模型的 finite-sum rule。如圖. 4.46 所示，MFB 模型計算的 sum rule 完全不會收斂，由混合 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂且滿足最外層 8 個價電子數。將 MFB 使用的參數列於表. 4.26。

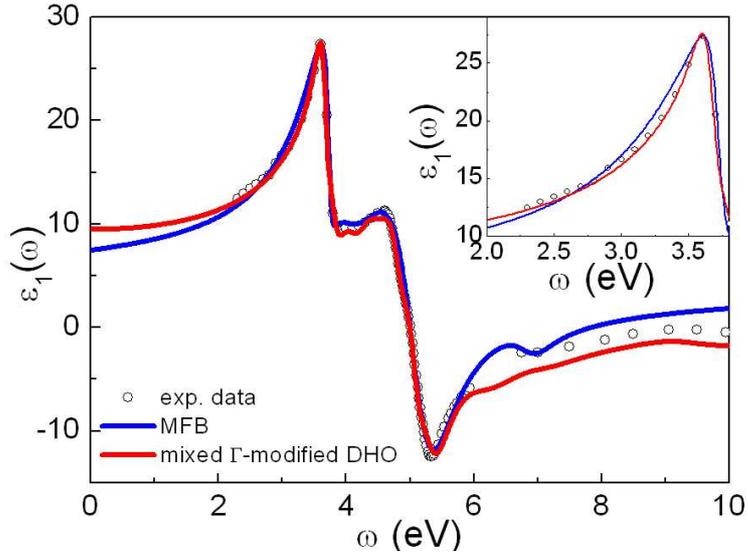


圖. 4.44 MFB 及混合 DHO 模型對 GaP 材料介電函數實部模擬

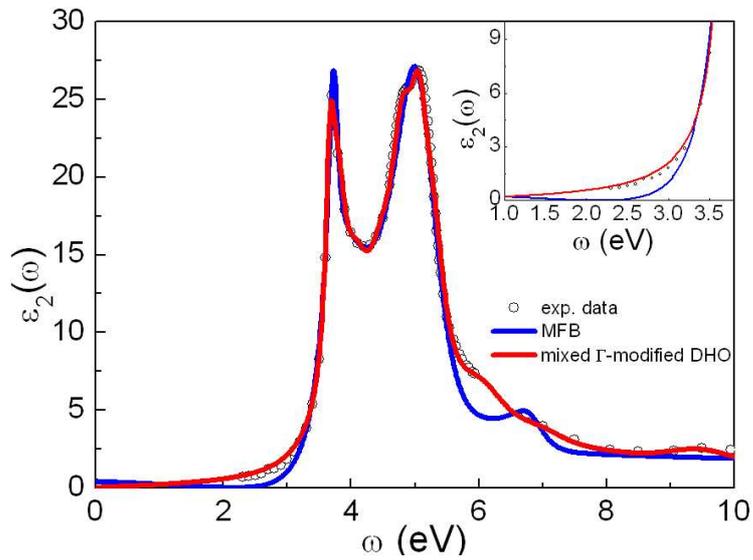


圖. 4.45 MFB 及混合 DHO 模型對 GaP 材料介電函數虛部模擬

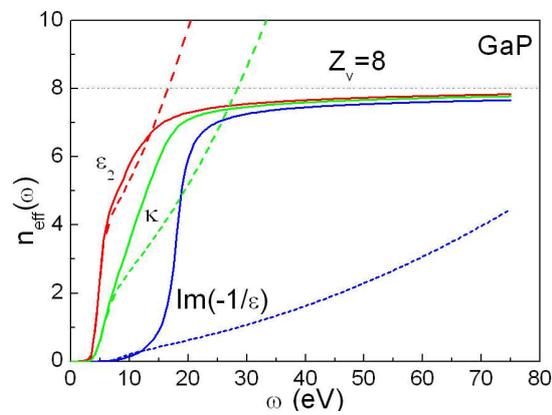


圖. 4.46 混合 DHO (solid curve)與 MFB (dash curve)模型計算 GaP 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較

4.6 銻化鎵 (GaSb)

4.6.1 銻化鎵 DHO 模型與混合 DHO 模型比較

針對 GaSb 我們將 fit 的能量範圍擴展到 $\omega = 7 \text{ eV}$ ，DHO 模型對 GaSb 的 fitting 項數總共 8 項，每一項有不同的共振能量 ω_j 、震盪強度 f_j 及阻尼係數 γ_j 分布在 fitting 的範圍內，如圖. 4.47，而混合 DHO 模型則用 13 項，其中最前面 4 項由 N=2 Γ -modified DHO 模型貢獻(j=1~4)，其他由 DHO 模型貢獻，如圖. 4.48。在前兩項使用較小的震盪強度及較大的阻尼係數，所以在圖. 4.48 中可見有兩個明顯的較矮寬的 peak，此項的作用可以彌補後面幾像阻尼係數較小的參數在吸收帶不足的地方。整體而言兩個模型實部、虛部介電函數 fitting 效果在 $2 \text{ eV} < \omega < 6 \text{ eV}$ 上都還算不錯如圖. 4.49-圖. 4.50，主要的差異在於吸收帶， $\epsilon_1(\omega)$ 靠近能隙的部份，DHO 模型在 $\omega = 2 \text{ eV}$ 的峰值低於實驗值，在 $\epsilon_2(\omega)$ 的部份 DHO 模型則計算過高而混合 DHO 模型在 $\epsilon_2(\omega)$ 的計算則最接近實驗值，就混合 DHO 模型在吸收帶部分 fitting 效果比 DHO 模型好，接著分別計算兩個模型由 1.5eV-6eV 的相對均方根誤差列於表. 4.12。

表. 4.12 銻化鎵相對方均根誤差

Range:1.5-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	4.9%	3.8%
混合 DHO model	2.7%	1.8%

計算兩個模型的 $n_{eff}(\omega)$ 如圖. 4.51，由混合 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂，但參數僅計算到 7eV，故有效電子數未完全計算到 8 個價電子數；而 DHO 模型計算的 sum rule 雖然會收斂，但分別在 $\omega > 14$ 、 $\omega > 17.5$ 、 $\omega > 22.5 \text{ eV}$ 時就不滿足甚至超過 8 個價電子數。最後將使用的參數列於表. 4.38-39。

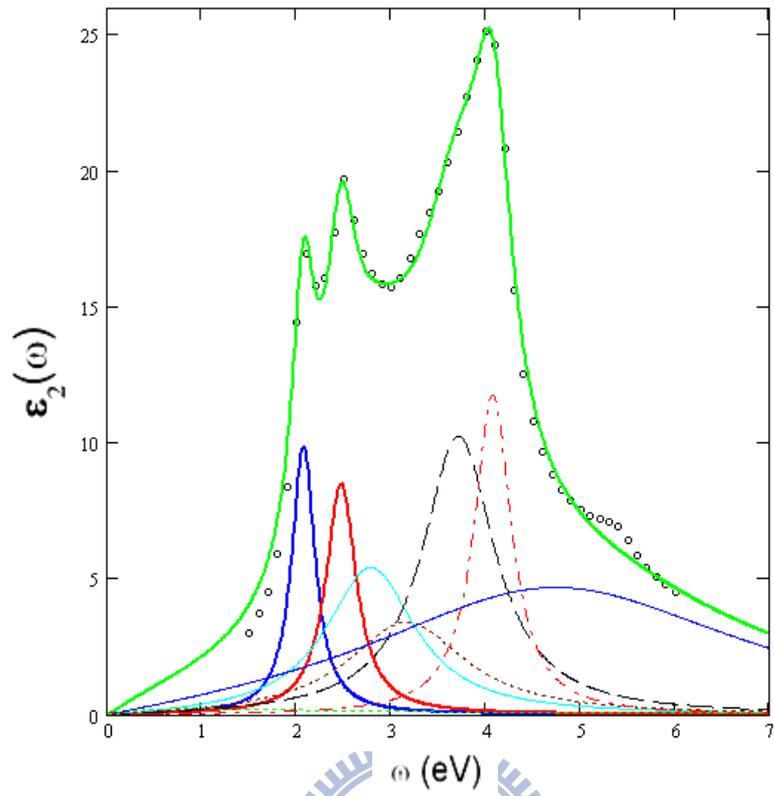


圖. 4.47 由 0eV-7eV DHO 模型每一項參數分佈位置

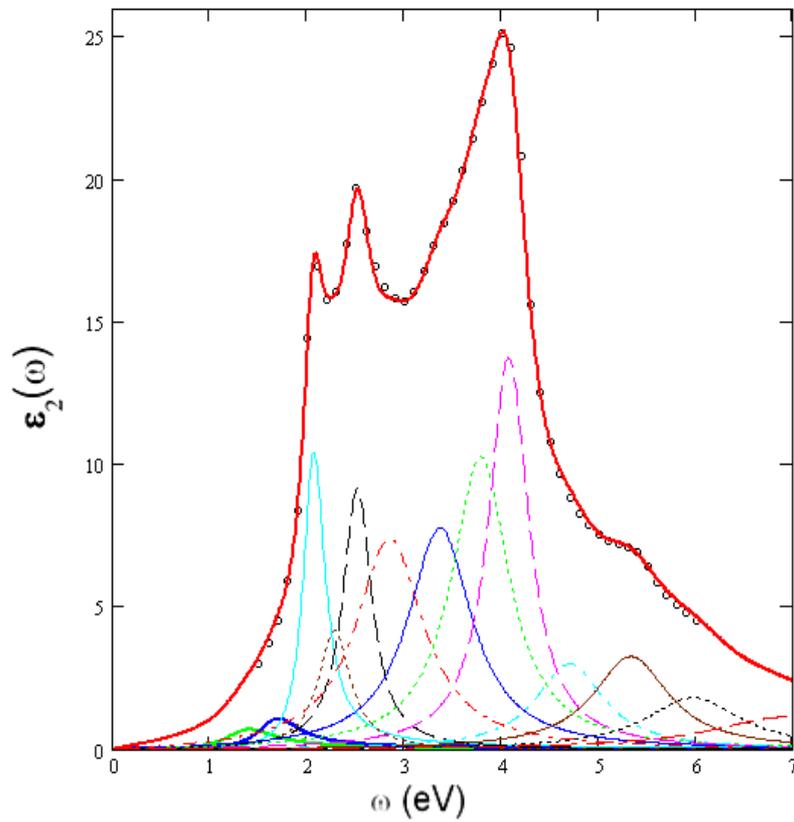


圖. 4.48 由 0eV-7eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置

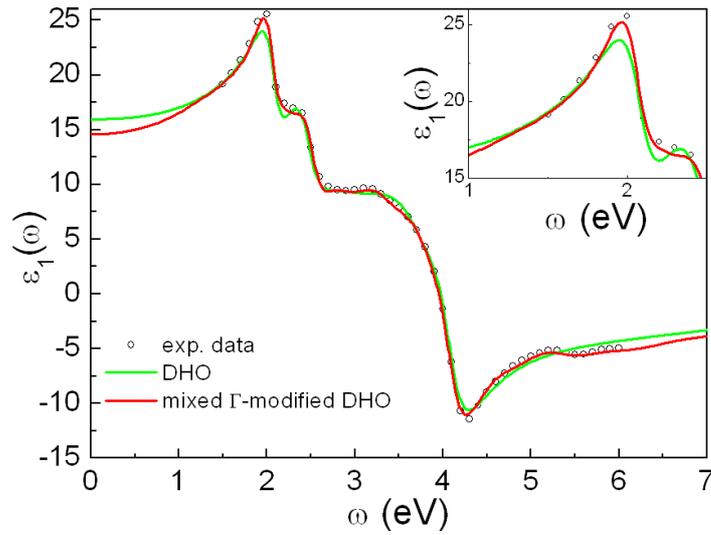


圖. 4.49 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaSb 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較

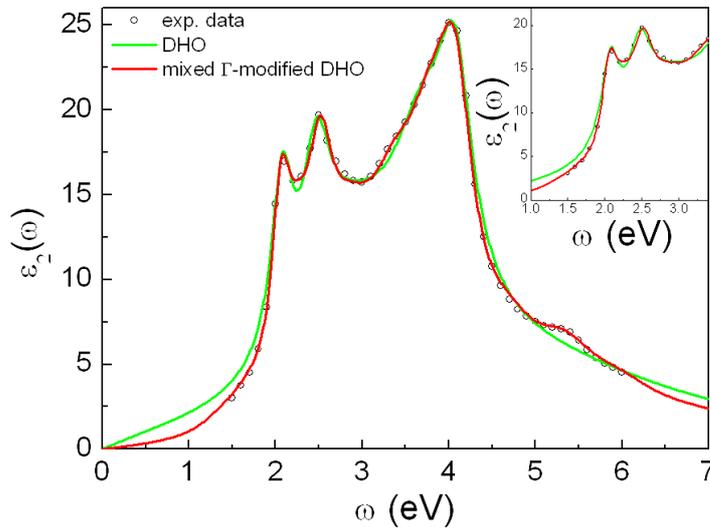


圖. 4.50 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaP 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較

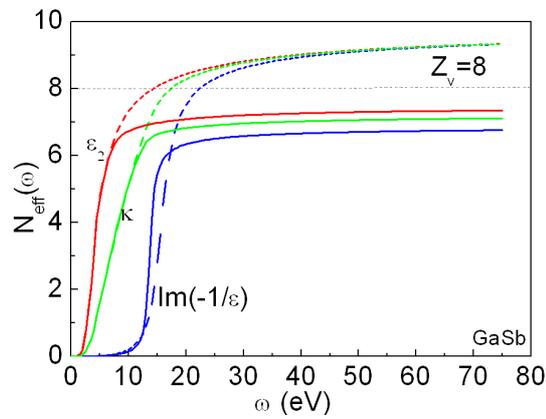


圖. 4.51 混合 DHO (solid curve) 與 DHO (dash curve) 模型計算 GaSb 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較。

4.6.2 銻化鎵混合 DHO 模型與 MFB 模型比較

針對半導體材料 GaSb，現在將混合 DHO model 與 MFB model 比較，對實驗取得的介電函數值模擬，結果如圖. 4.52-圖. 4.53，MFB 模型用在計算 7eV 以下的範圍，整體而言在 $\omega > 4eV$ 以上的 fitting 還蠻準確。MFB 模型在 $2eV < \omega < 4eV$ 附近，實部在 2.52eV 的峰值低於實驗值許多，另外分別在實部與虛部 3eV 附近，實部計算偏低且虛部計算偏高，靠近吸收帶的峰值與 DHO 模型一樣偏低且 $\omega < 1.78eV$ 開始偏離，能量越低越不準確。整體而言混合 DHO 模型 fitting 效果比 MFB 模型好，將每個模型 1.5eV-6eV 的相對方均根誤差列於表. 4.13。

Range:1.5-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	4.9%	3.8%
MFB model	6.4%	5.1%
混合 DHO model	2.7%	1.8%

接下來要計算兩個模型的有效電子數並驗證是否會收斂，我們使用(3-70)、(3-71)及(3-72)式計算兩個模型的 finite-sum rule。如圖. 4.54 所示，MFB 模型計算的 sum rule 完全不會收斂，由混合 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂，但參數僅計算到 7eV，有效電子數未完全計算到 8 個價電子數。最後將 MFB 使用的參數列於表. 4.26。

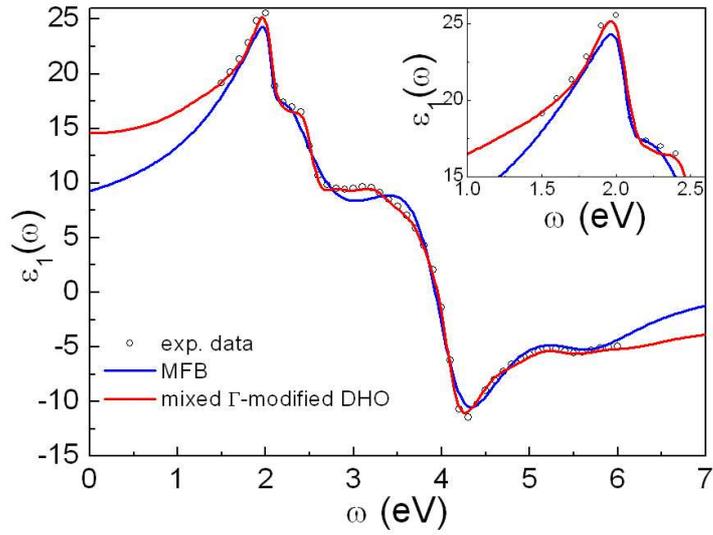


圖. 4.52 MFB 及混合 DHO 模型對 GaSb 材料介電函數實部模擬

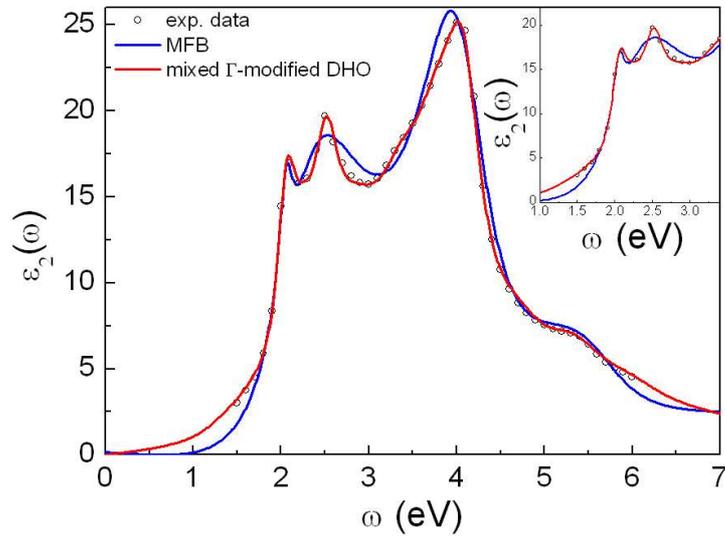


圖. 4.53 MFB 及混合 DHO 模型對 GaSb 材料介電函數虛部模擬

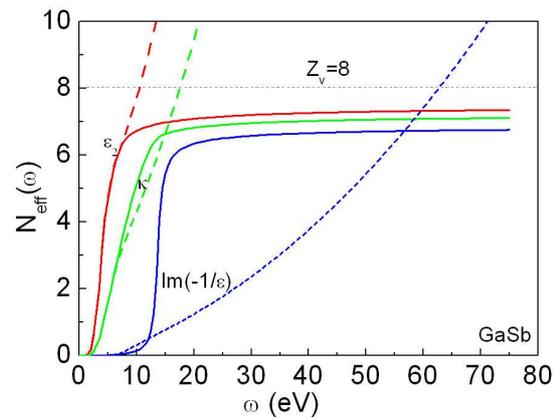


圖. 4.54 混合 DHO (solid curve)與 MFB (dash curve)模型計算 GaSb 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較

4.7 氮化鎵 (GaN)

4.7.1 氮化鎵 DHO 模型與混合 DHO 模型比較

針對 GaN 我們將 fit 的能量範圍擴展到 $\omega = 9\text{eV}$ ，DHO 模型對 GaN 的 fitting 項數總共 15 項，每一項有不同的共振能量 ω_j 、震盪強度 f_j 及阻尼係數 γ_j 分布在 fitting 的範圍內，如圖. 4.55，GaN 最特別的地方是在於虛部能隙 3.4eV 附近有一個非常陡峭的斜率變化，故我們採用 N=4 的 Γ -modified DHO 模型來取代 DHO 在能隙附近的計算，而混合 DHO 模型也用 15 項，其中最後四項由 DHO 模型貢獻，如圖. 4.56。在 GaN 的 fitting 中，由靠近能隙開始使用由小到大的震盪強度 f_j 以及都小於 1 的阻尼係數，改善了 DHO 模型在吸收帶數值過高的情況。整體而言兩個模型實部、虛部介電函數 fitting 效果在能隙 3.4eV 上都還算不錯如圖. 4.57-圖. 4.58，就混合 DHO 模型在吸收帶虛部份 fitting 效果比 DHO 模型好，接著分別計算兩個模型由 3.2eV-8eV 的相對均方根誤差列於表. 4.14，將使用的參數列於表. 4.40-41。

表. 4.14 氮化鎵相對方均根誤差

Range:3.2-8eV	Real part	Imaginary part
DHO model	2.8%	2.2%
混合 DHO model	3.2%	1.7%

因為實驗的數值只到 9eV，故我們只能計算 0-9eV 介電函數虛部曲線下的面積，且 9eV 以後不列入計算的話，我們無法看到有效電子數收斂到 8 的情況，分別計算 ϵ_2 、 κ 、 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 曲線下的定值面積，將計算的結果列於表. 4.15。

表. 4.15 氮化鎵 1.24eV~9eV 有效貢獻的電子數

	$n_{eff}(\omega) \epsilon_2$	$n_{eff}(\omega) \kappa$	$n_{eff}(\omega) \text{Im}(\frac{-1}{\epsilon})$
Exp. data	1.989	0.945	0.043
DHO model	2.018	0.96	0.0434
混合 DHO model	1.982	0.938	0.0429

由表. 4.15 數值判斷，混合 DHO 模型計算的 n_{eff} 最接近實驗值有效電子數。

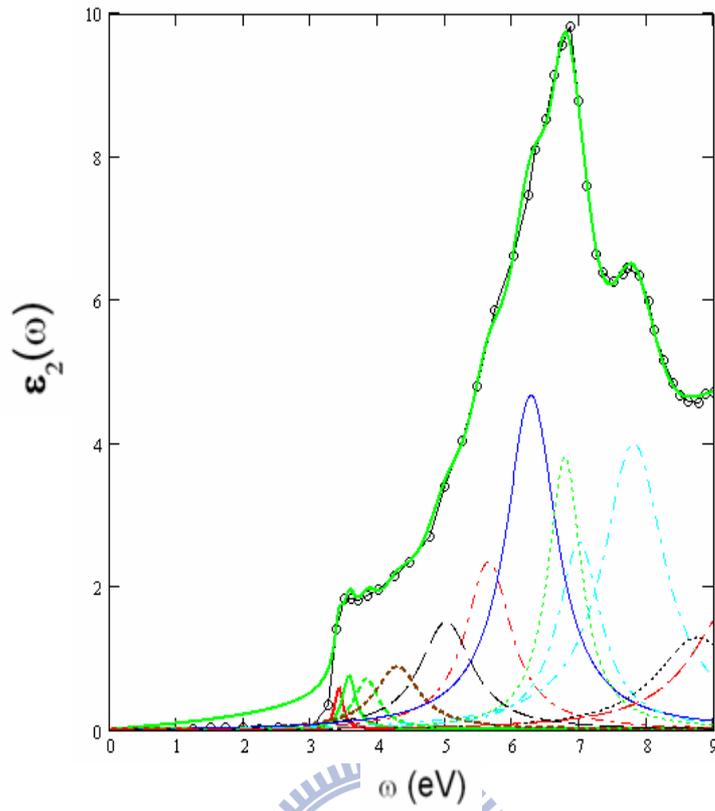


圖. 4.55 由 0eV-9eV DHO 模型每一項參數分佈

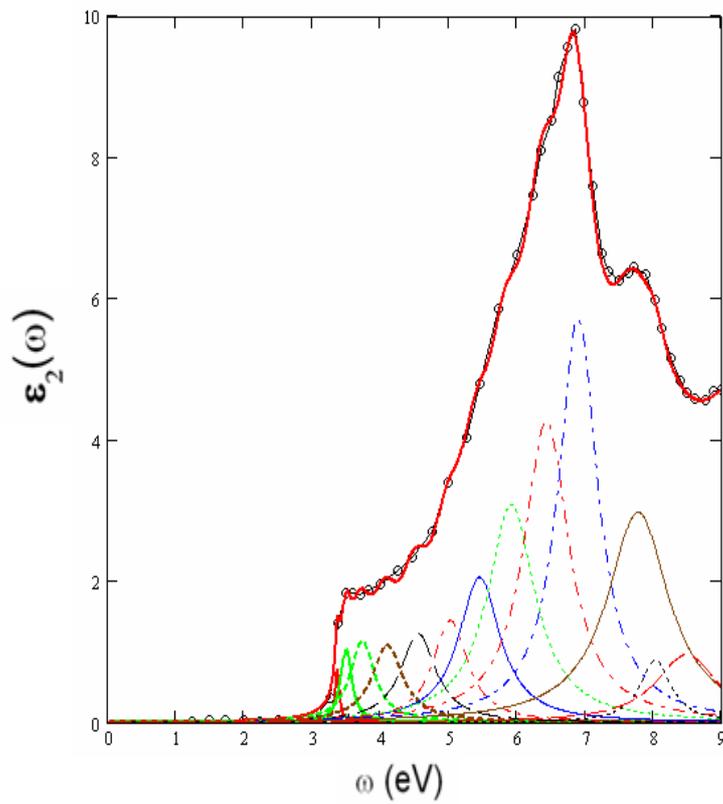


圖. 4.56 由 0eV-9eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈

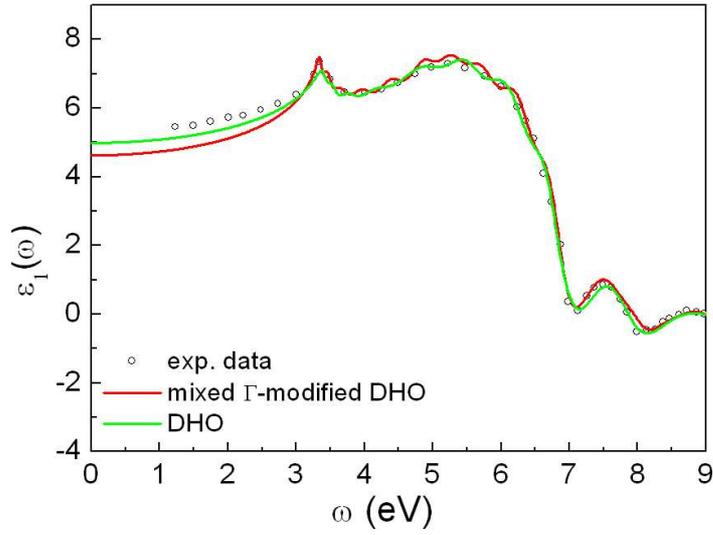


圖. 4.57 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaN 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較

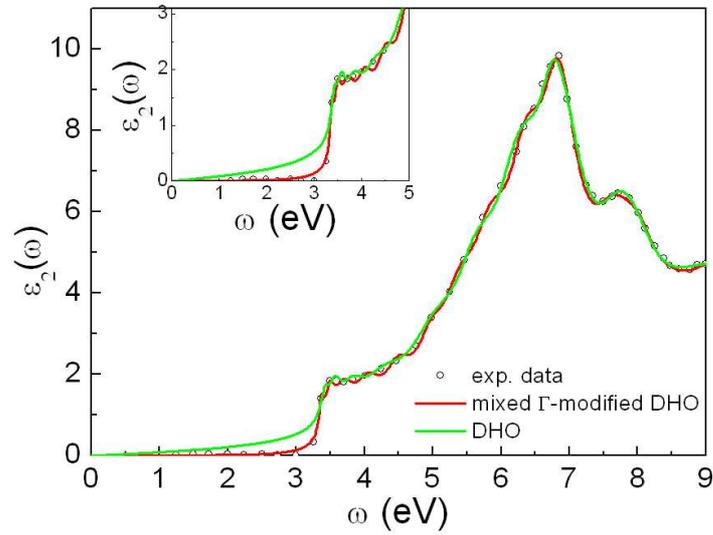


圖. 4.58 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 GaN 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較

4.7.2 氮化鎵混合 DHO 模型與 MDF 模型比較

針對半導體材料 GaN，現在將混合 DHO 模型與 MDF model (3-29)、(3-30)比較，對實驗取得的介電函數值模擬，結果如圖. 4.59-圖. 4.60，整體而言這兩個模型在虛部介電函數的 fitting 還算準確。主要差異在靠近實部能隙附近，在 $\omega < 3.3eV$ 之後兩個模型的計算值都偏離實驗值，然而相較於 Si 與 GaAs 所使用的 MDF 模型，在此材料計算時 GaN 需考慮在 E_0 三維的 exciton 以及在 E_1 二維 Wannier type exciton effect，故 MDF 模型 fitting 需視不同材料採取不同的 transition 做計算，所以計算大量材料時沒有一個統一適用的式子，而且只要超過參數計算的範圍很可能就會出現奇異點，故 MDF 模型不適合更高能量的計算。反觀混合 DHO 模型所用的參數雖然比較多，但是每一項均能針對細節的部份做 fitting，能突顯出強烈的吸收 peak 以及突然上升的吸收帶邊緣，並且計算每一個材料時均有一個統一的式子，使用的方程式也比 MDF 模型更為簡單；另外我們計算介電函數虛部 0-9eV 曲線下的面積，分別可以得到混合 DHO 模型的 $N_{eff} = 1.982$ ，MDF 模型 $N_{eff} = 1.981$ ，兩者與實驗值的 $N_{eff} = 1.989$ 相比，混合 DHO 模型略微接近，最後將每個模型 3.2-8eV 相對方均根誤差列於表. 4.16，MDF 使用的參數列於表. 4.42。

表. 4.16 氮化鎵所有模型相對方均根誤差

Range:3.2-8eV	Real part	Imaginary part
DHO model	2.8%	2.2%
MDF model	3.7%	2%
混合 DHO model	3.2%	1.7%

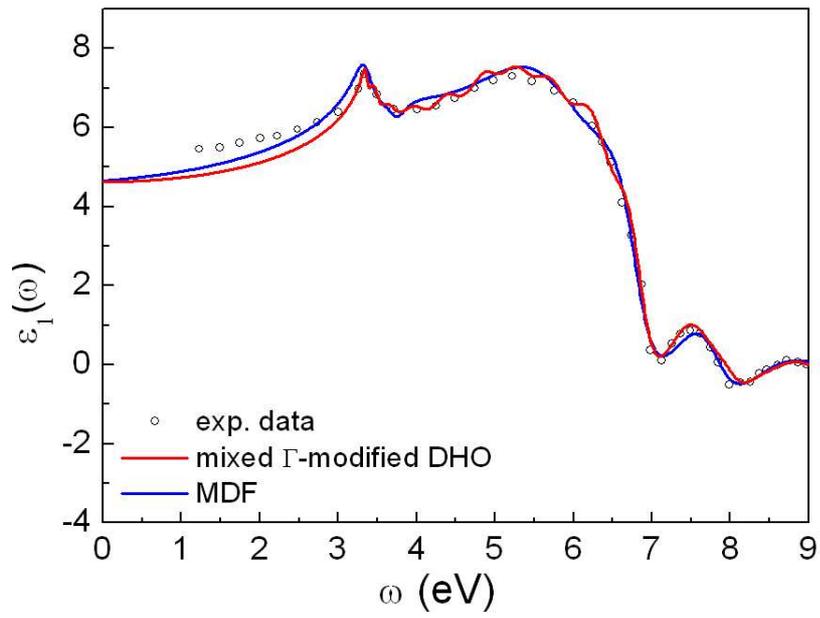


圖. 4.59 MDF 及混合 DHO 模型對 GaN 材料介電函數實部模擬

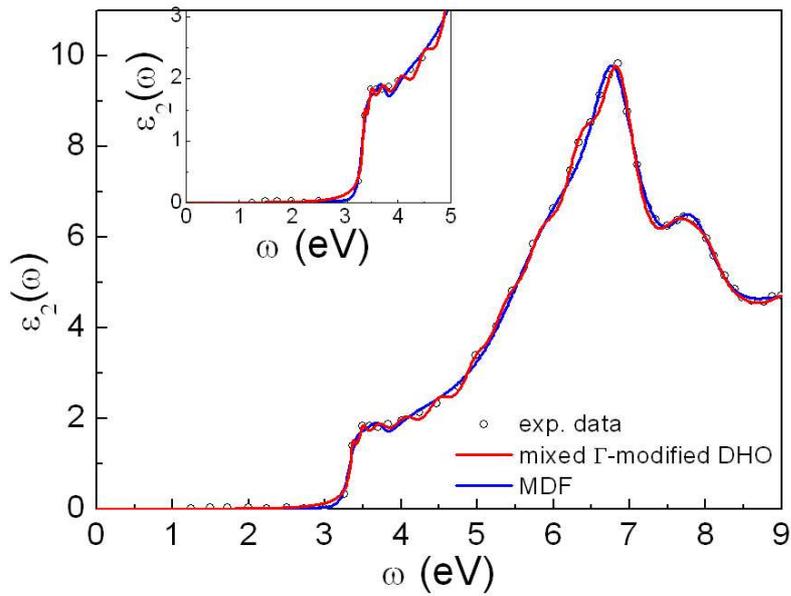


圖. 4.60 MDF 及混合 DHO 模型對 GaN 材料介電函數虛部模擬

4.8 砷化銦 (InAs)

4.8.1 砷化銦 DHO 模型與混合 DHO 模型比較

針對 InAs 我們將 fit 的能量範圍擴展到 $\omega = 6.5 \text{ eV}$ ，DHO 模型對 InAs 的 fitting 項數總共 15 項，每一項有不同的共振能量 ω_j 、震盪強度 f_j 及阻尼係數 γ_j 分布在 fitting 的範圍內，如圖. 4.61，而混合 DHO 模型也用 15 項，其中最前面項由 N=2 Γ -modified DHO 模型貢獻(j=1~2)，其他由 DHO 模型貢獻，如圖. 4.62。兩個模型均在前三項使用較小的震盪強度及較大的阻尼係數，所以在圖. 4.中可見有三個明顯的較矮寬的 peak，此項的作用可以弭補後面幾項阻尼係數較小的參數在吸收帶不足的地方。整體而言兩個模型實部、虛部介電函數 fitting 效果在都還算不錯如圖. 4.63-圖. 4.64，主要的差異在於吸收帶， $\epsilon_1(\omega)$ 靠近能隙的部份，混合 DHO 模型在 $\omega < 2\text{eV}$ 的計算都略高於實驗值；在 $\epsilon_2(\omega)$ 的部份兩個模型的計算都可以接近實驗值，就 DHO 模型在吸收帶部分 fitting 效果比混合 DHO 模型好，接著分別計算兩個模型由 1.5eV-6eV 的相對均方根誤差列於表. 4.17。

表. 4.17 砷化銦相對方均根誤差

Range:1.5-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	2.7%	1.9%
混合 DHO model	4.9%	2.7%

計算兩個模型的 $n_{eff}(\omega)$ 如圖. 4.65，由 DHO、混合 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域均會收斂且滿足最外層 8 個價電子數。在兩個模型針對 InAs fitting 的效果，以及相對方均根誤差來看，選擇誤差小且較為簡單的 DHO 模型就能達到合乎 sum rule 計算又誤差最小。最後將使用的參數列於表. 4.43-44。

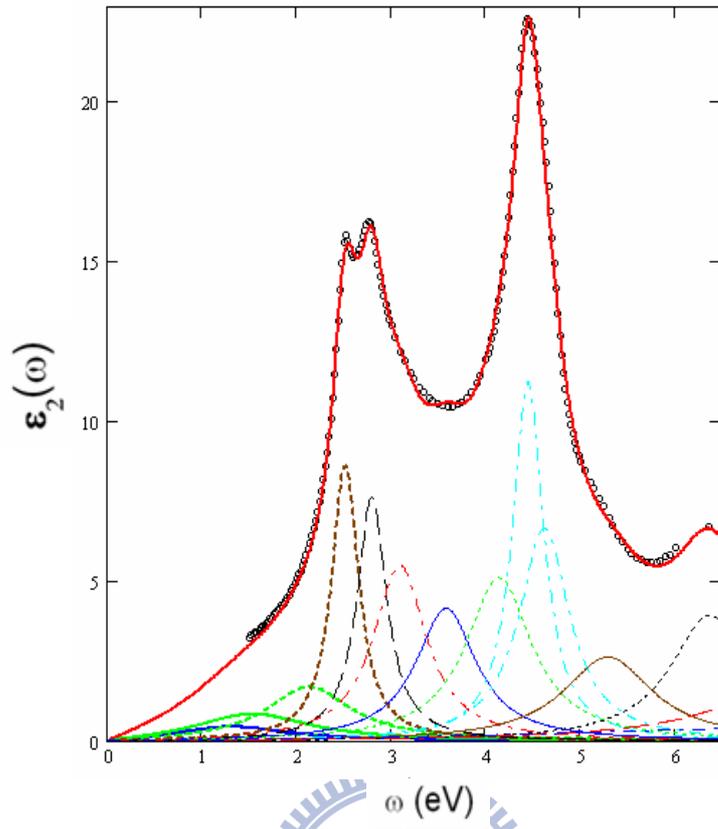


圖. 4.61 由 0eV-6.5eV DHO 模型每一項參數分佈位置

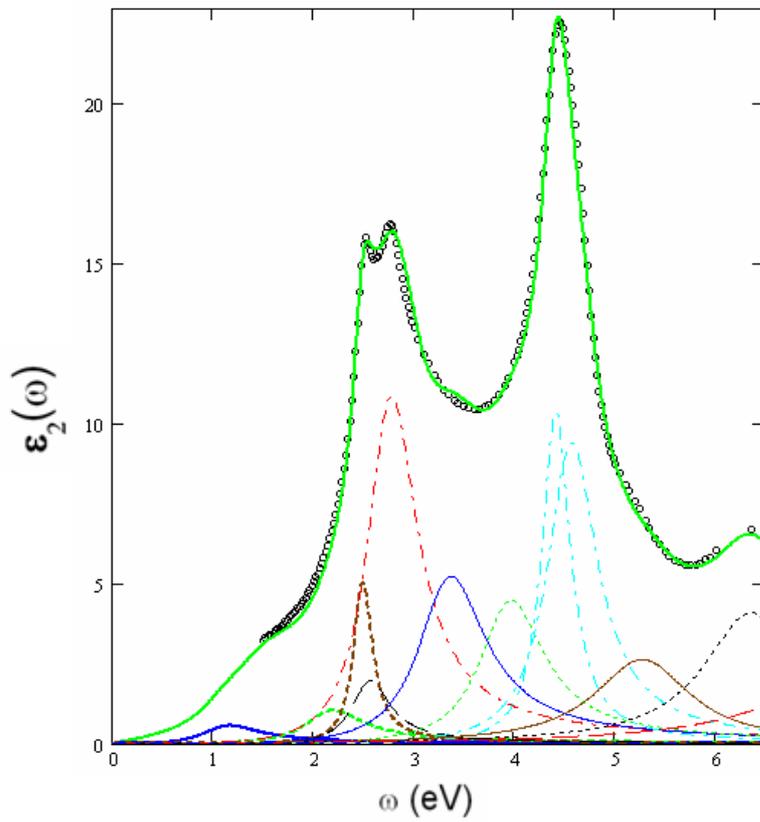


圖. 4.62 由 0eV-6.5eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置

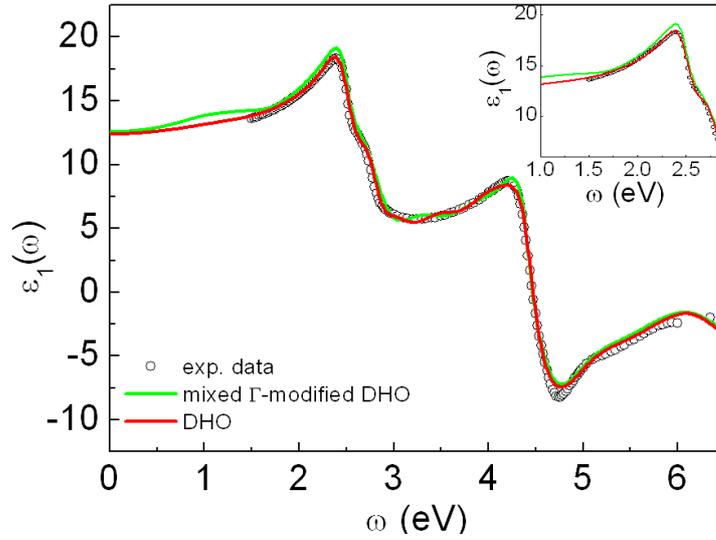


圖. 4.63 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InAs 的 $\epsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較

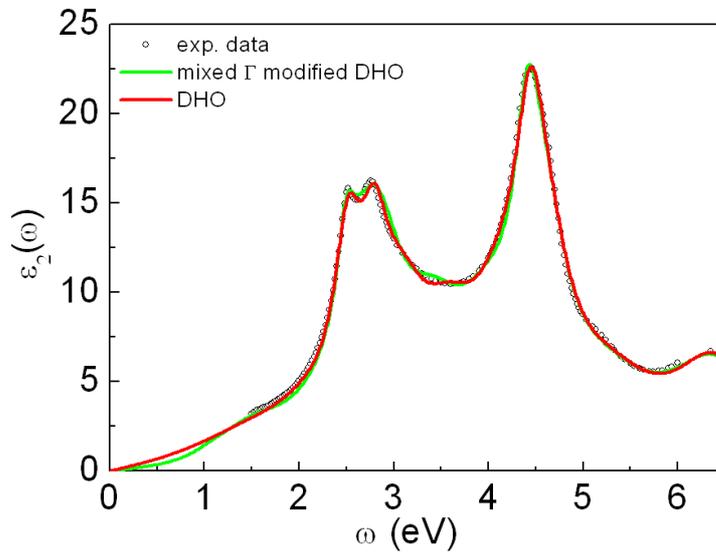


圖. 4.64 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InAs 的 $\epsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較

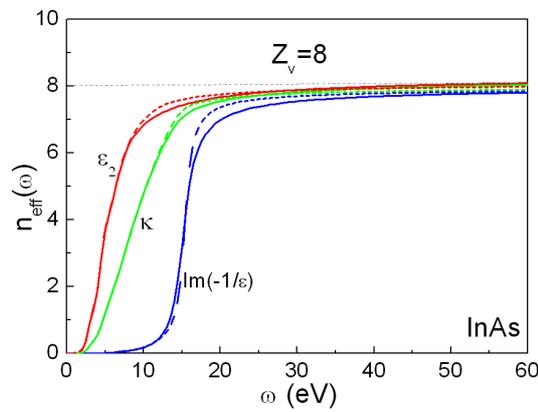


圖. 4.65 混合 DHO (dash curve)與 DHO (solid curve)模型計算 InAs 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較。

4.8.2 砷化銦 DHO 模型與 MFB 模型比較

針對半導體材料 InAs，現在將 DHO model 與 MFB model 比較，對實驗取得的介電函數值模擬，結果如圖. 4.66-圖. 4.67，MFB 與 DHO model 用在計算 7eV 以下的範圍，整體而言 MFB 在 $3.5eV < \omega < 5.5eV$ 以上的 fitting 還算準確。主要差異在吸收帶附近，吸收帶實部 $\omega < 2.5eV$ MFB 模型斜率變化趨勢與實驗值相差甚遠，在 2.38eV 峰值計算過低且能量越低就越偏離實驗值，DHO 模型則是貼近實驗數值，另外在介電函數虛部的計算，MFB 模型 2eV 之下計算結果都過低，而靠近吸收帶的兩個稍微分開的峰值，MFB 模型無法呈現出兩個稍微分開波峰的效果，然而 DHO 模型所用的參數比較多，但是每一項均能針對細節的部份做 fitting，其效果遠比只有 14 項參數的 MFB 模型好。整體而言 DHO 模型 fitting 效果比 MFB 模型好。將每個模型 1.5eV-6eV 的相對方均根誤差列於表. 4.18。

接下來要計算兩個模型的有效電子數並驗證是否會收斂，我們使用(3-70)、(3-71)及(3-72)式計算兩個模型的 finite-sum rule。如圖. 4.68 所示，MFB 模型計算的 sum rule 完全不會收斂，由 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂且滿足最外層 8 個價電子數。將 MFB 使用的參數列於表. 4.26。

Range:1.5-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	2.7%	1.9%
MFB model	5.8%	6.4%
混合 DHO model	4.9%	2.7%

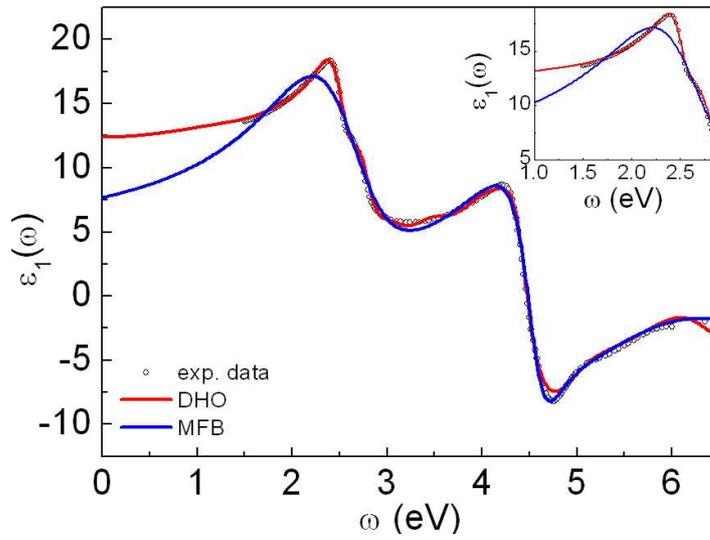


圖. 4.66 MFB 及 DHO 模型對 InAs 材料介電函數實部模擬

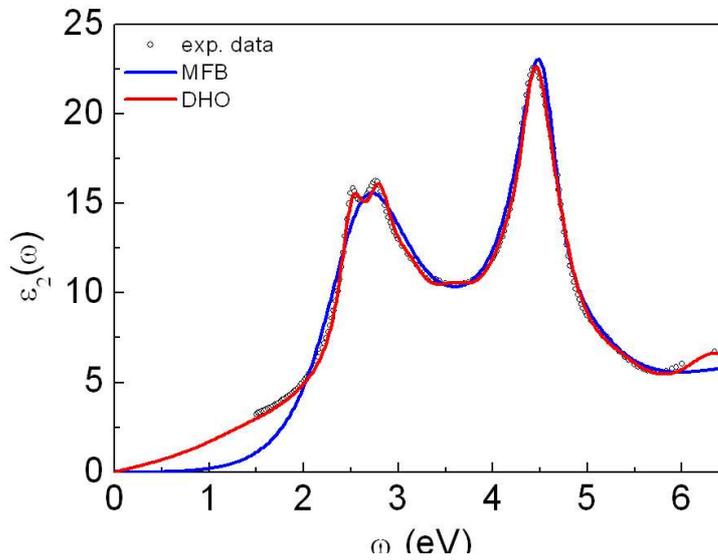


圖. 4.67 MFB 及 DHO 模型對 InAs 材料介電函數虛部模擬

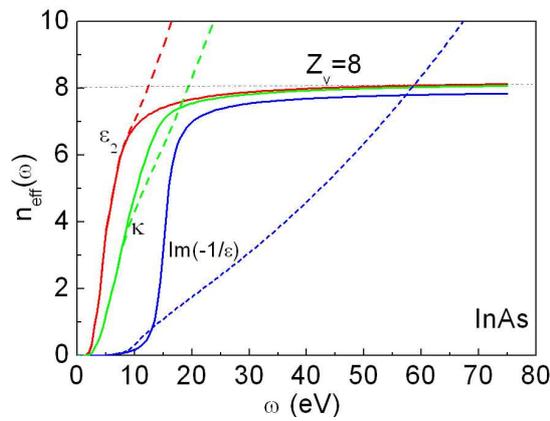


圖. 4.68 DHO model (solid curve)與 MFB model (dash curve)模型計算 InAs 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較

4.9 銻化銮 (InSb)

4.9.1 銻化銮 DHO 模型與混合 DHO 模型比較

針對 InSb 我們將 fit 的能量範圍擴展到 $\omega = 6.5\text{eV}$ ，DHO 模型對 InSb 的 fitting 項數總共 12 項，每一項有不同的共振能量 ω_j 、震盪強度 f_j 及阻尼係數 γ_j 分布在 fitting 的範圍內，如圖. 4.69，而混合 DHO 模型也用 12 項，其中最前面項由 N=2 Γ -modified DHO 模型貢獻(j=1~4)，其他由 DHO 模型貢獻，如圖. 4.70。在第一項項使用較小的震盪強度及較大的阻尼係數，所以在圖. 4.72 中可見有一個明顯的較矮寬的 peak，此項的作用可以弭補後面幾像阻尼係數較小的參數在吸收帶不足的地方。整體而言兩個模型實部、虛部介電函數 fitting 效果在 $2\text{eV} < \omega < 6\text{eV}$ 上都還算不錯如圖. 4.71-圖. 4.72，主要的差異在於吸收帶， $\epsilon_1(\omega)$ 靠近能隙的部份，混合 DHO 模型在 $\omega < 1.76\text{eV}$ eV 的計算過高，在 $\epsilon_2(\omega)$ 的部份 $\omega < 1.66\text{eV}$ 混合 DHO 模型則計算偏低而 DHO 模型在 $\epsilon_2(\omega)$ 的計算則最接近實驗值，就 DHO 模型在吸收帶部分 fitting 效果比混合 DHO 模型好，接著分別計算兩個模型由 1.5eV-6eV 的相對均方根誤差列於表. 4.19。

表. 4.19 銻化銮相對方均根誤差

Range:1.5-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	2.7%	1.4%
混合 DHO model	6.6%	4.3%

計算兩個模型的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 如圖. 4.73，由 DHO、混合 DHO 模型計算的 $n_{\text{eff}}(\omega)$ 在 interband transition 區域均會收斂且滿足最外層 8 個價電子數。在兩個模型針對 InSb fitting 的效果，以及相對方均根誤差來看，選擇誤差小且較為簡單的 DHO 模型就能達到合乎 sum rule 計算又誤差最小。最後將使用的參數列於表. 4.45-46。

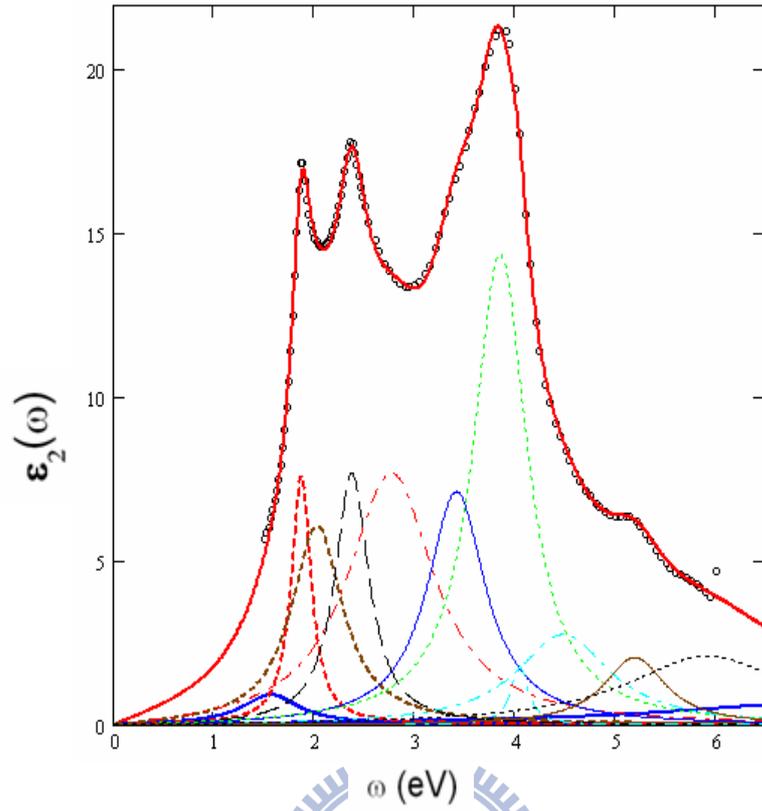


圖. 4.69 由 0eV-6.5eV DHO 模型每一項參數分佈位置

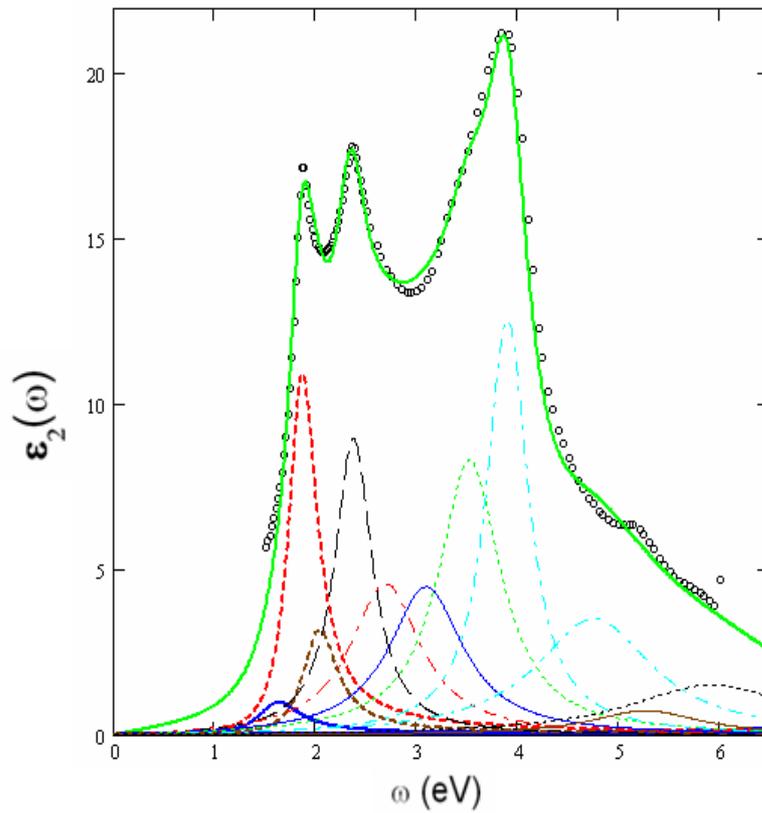


圖. 4.70 由 0eV-6.5eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置

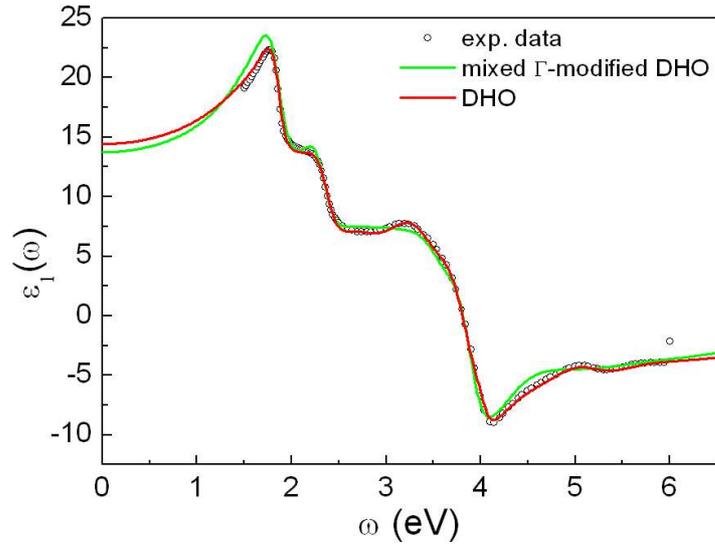


圖. 4.71 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InSb 的 $\varepsilon_1(\omega)$ 與實驗曲線比較

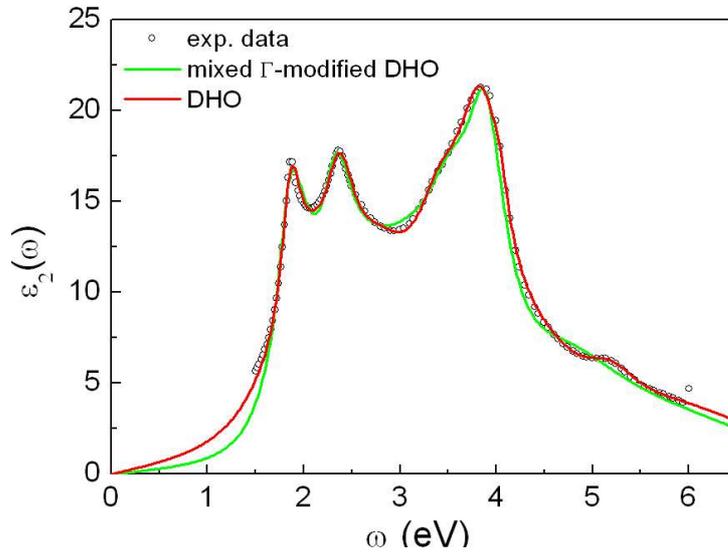


圖. 4.72 混合 DHO 與 DHO 模型模擬 InSb 的 $\varepsilon_2(\omega)$ 與實驗曲線比較

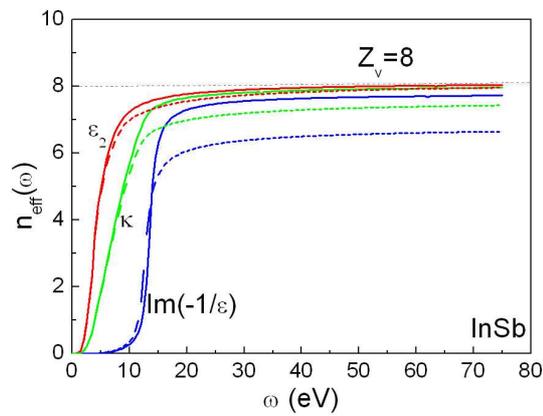


圖. 4.73 混合 DHO (dash curve)與 DHO (solid curve)模型計算 InSb 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較

4.9.2 銻化銦 DHO 模型與 MFB 模型比較

針對半導體材料 InSb，現在將 DHO model 與 MFB model 比較，對實驗取得的介電函數值模擬，結果如圖. 4.74-圖. 4.75。在虛部 $\omega = 3.78eV$ 峰值附近 MFB 模型所計算的值略微偏高以及 $\omega = 2.36eV$ 所呈現的 peak 則太寬且計算過低，另外在吸收帶虛部 $\omega < 1.66eV$ MFB 模型斜率變化趨勢較明顯，能量越低就越偏離實驗值，DHO 模型則是貼近實驗數值，另外在介電函數實部的計算，MFB 模型 $2.65eV < \omega < 3.32eV$ 計算結果都偏低；雖然 DHO 模型所用的參數比較多，但是每一項均能針對細節的部份做 fitting，其效果遠比只有 14 項參數的 MFB 模型好。整體而言 DHO 模型 fitting 效果比 MFB 模型好，將每個模型 1.5eV-6eV 的相對方均根誤差列於表. 4.20。

表. 4.20 銻化銦所有模型相對方均根誤差

Range:1.5-6eV	Real part	Imaginary part
DHO model	2.7%	1.4%
MFB model	5.5%	4.1%
混合 DHO model	6.6%	4.3%

接下來要計算兩個模型的有效電子數並驗證是否會收斂，我們使用(3-70)、(3-71)及(3-72)式計算兩個模型的 finite-sum rule。如圖. 4.76 所示，MFB 模型計算的 sum rule 完全不會收斂，由 DHO 模型計算的 $n_{eff}(\omega)$ 在 interband transition 區域會收斂且滿足最外層 8 個價電子數。最後將 MFB 使用的參數列於表. 4.26。

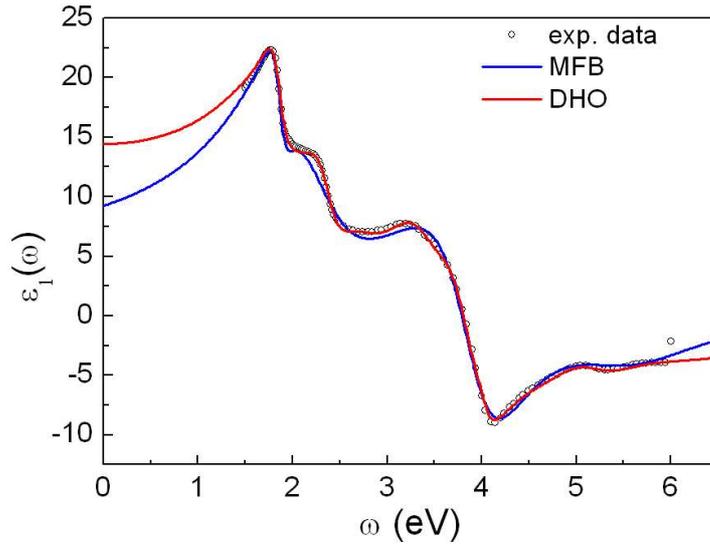


圖. 4.74 MFB 及 DHO 模型對 InSb 材料介電函數實部模擬

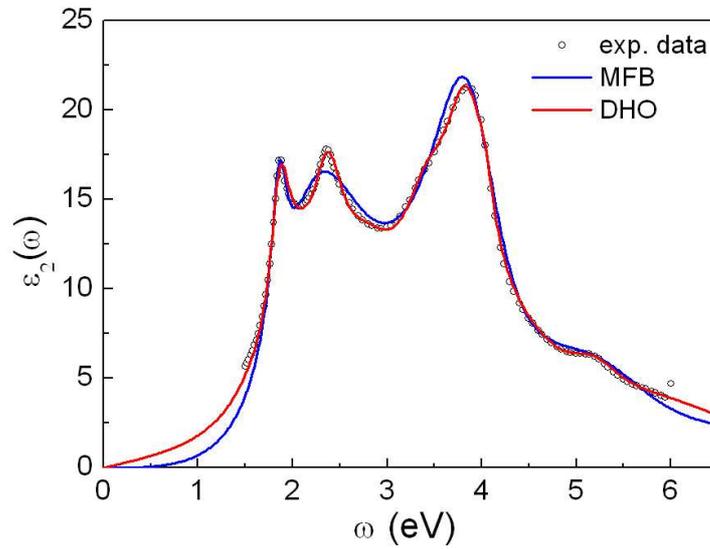


圖. 4.75 MFB 及 DHO 模型對 InSb 材料介電函數虛部模擬

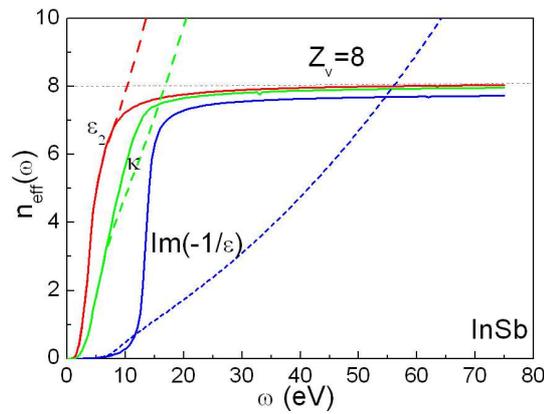


圖. 4.76 DHO (solid curve)與 MFB (dash curve)模型計算 InSb 的 $n_{eff}(\omega)$ 之比較

4.10 氮化銦 (InN)

4.10.1 氮化銦 DHO 模型與混合 DHO 模型比較

針對 InN 我們將 fit 的能量範圍擴展到 $\omega = 9\text{eV}$ ，DHO 模型對 InN 的 fitting 項數總共 15 項，如圖. 4.77，而混合 DHO 模型也用 15 項，其中最前面 3 項由 N=2 Γ -modified DHO 模型貢獻(j=1~3)，其他由 DHO 模型貢獻如圖. 4.78。在兩個模型使用的參數都很接近，整體而言兩個模型實部、虛部介電函數 fitting 效果都還算不錯如圖. 4.79- 4.80，主要的差異在於吸收帶， $\epsilon_1(\omega)$ 靠近能隙 2eV 的部份，兩個模型計算結果都與實驗值略為偏差，在 $\epsilon_2(\omega)$ 的部份兩個模型計算曲線都準確近誤差也很小，接著分別計算兩個模型由 2.3-9eV 的相對均方根誤差、參數列於表. 4.21、表. 4.47-48。

表. 4.21 氮化銦所有模型相對均方根誤差

Range:2.3-9eV	Real part	Imaginary part
DHO model	2.4%	1.2%
混合 DHO model	2.7%	1.4%

接下來要計算兩個模型的有效電子數並驗證是否會收斂，我們使用(3-70)、(3-71)及(3-72)式計算兩個模型的有效電子數，由於我們使用的參數沒有計算到 9eV 以後虛部趨近於零的範圍，故我們無法看到有效電子數收斂到 8 的情況，且因為 fitting 的參數並沒有將 9eV 以後的 oscillator strength 列入計算，所以必須將實部的背景值設為 $\epsilon_b = 1.5$ 用以提高實部數值，現在我們要分別計算 ϵ_2 、 κ 、 $\text{Im}(-1/\epsilon)$ 曲線下的定值面積即為有效貢獻的電子數，將計算的結果列於表. 4.22。

表. 4.22 氮化銦 2.2eV~9eV 有效貢獻的電子數

	$n_{eff}(\omega) _{\epsilon_2}$	$n_{eff}(\omega) _{\kappa}$	$n_{eff}(\omega) _{\text{Im}(\frac{-1}{\epsilon})}$
Exp. data	2.145	1.1223	0.097
DHO model	2.136	1.1235	0.098
混合 DHO model	2.134	1.1244	0.099

由表. 4.22 數值判斷，DHO 模型計算的 n_{eff} 最接近實驗值有效電子數。

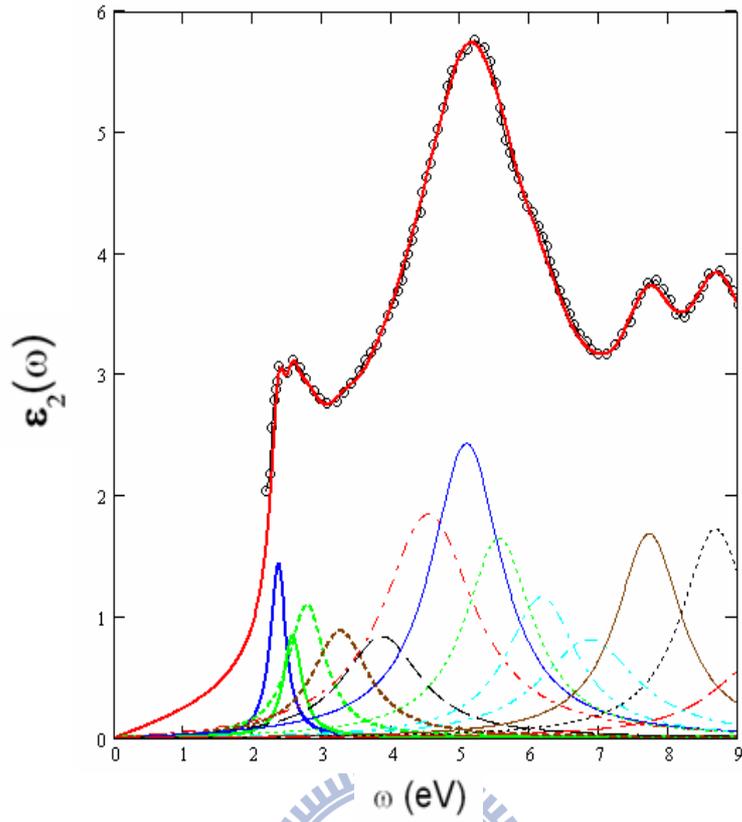


圖. 4.77 由 0eV-9eV DHO 模型每一項參數分佈位置

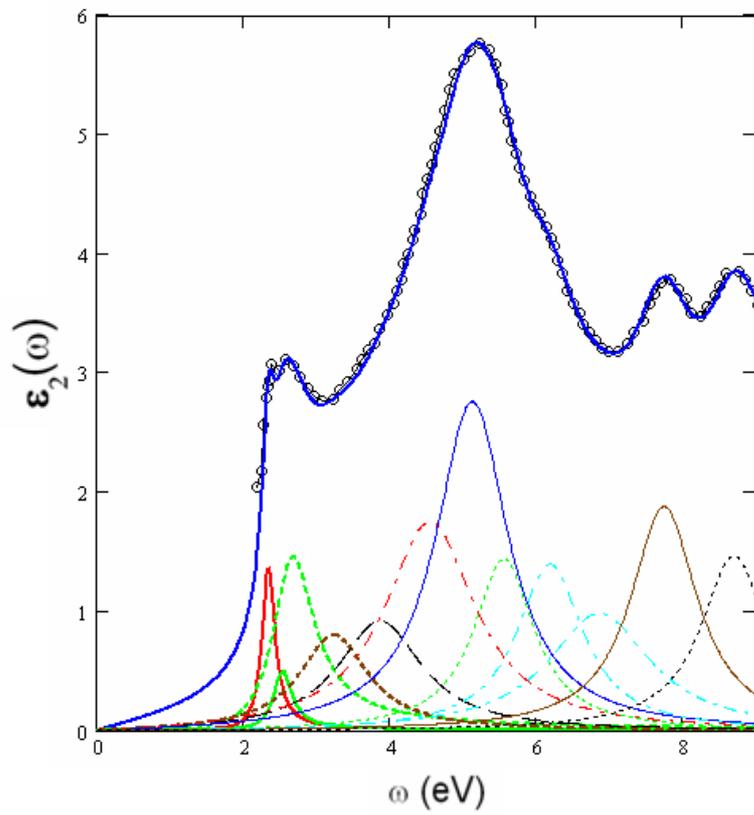


圖. 4.78 由 0eV-9eV 混合 DHO 模型每一項參數分佈位置

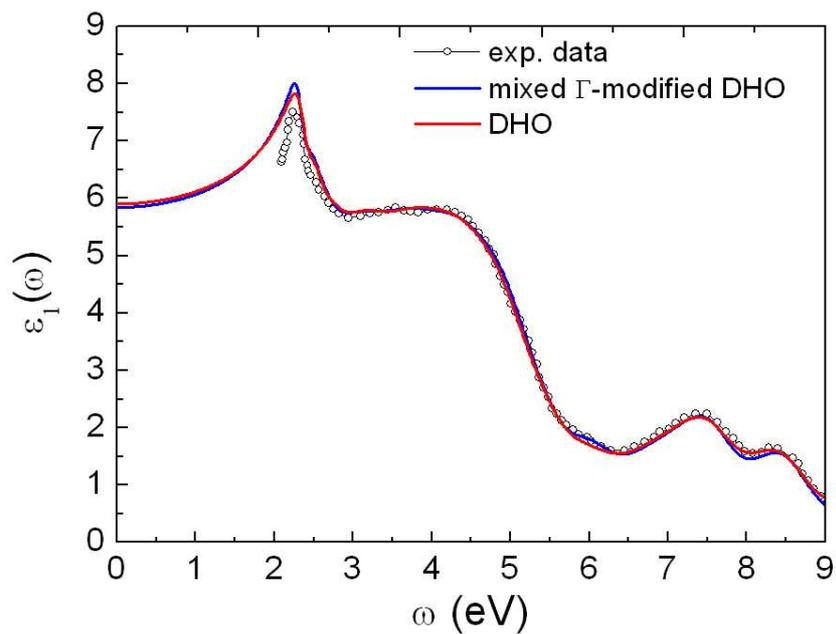


圖. 4.79 混合 DHO 及 DHO 模型對 InN 材料介電函數實部模擬

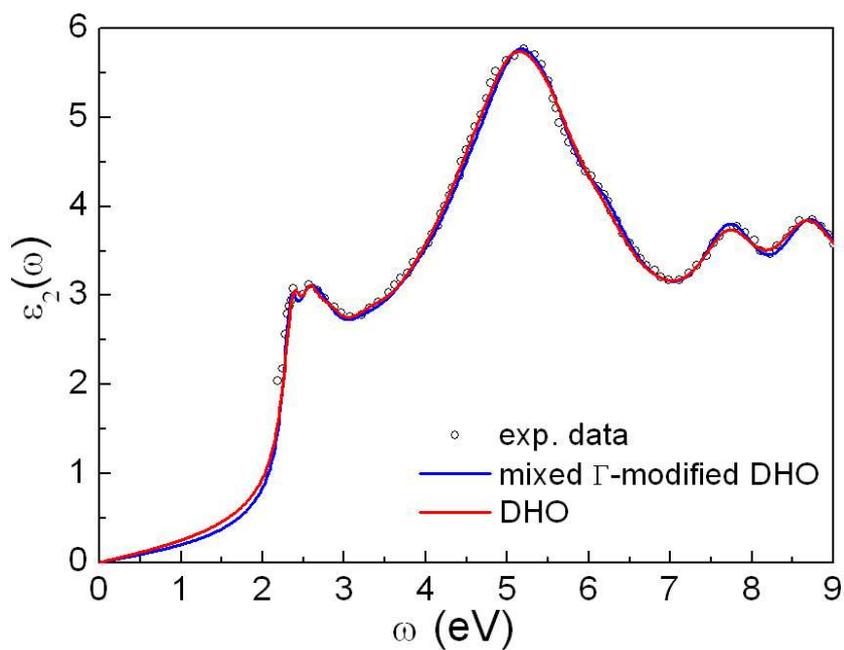


圖. 4.80 混合 DHO 及 DHO 模型對 InN 材料介電函數虛部模擬

表. 4.23 矽 DHO 模型建模使用參數

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
f_j	14.2	4.0	50	50	65	15	23	50	60	70	100
Γ_j	0.2	0.5	0.8	0.42	1.25	1.2	1.7	5.6	13.3	80	45.9
ω_j	3.44	3.5	3.78	4.25	4.32	5.5	6.4	7.8	10.6	14	16

表. 4.24 矽混合 DHO 模型建模使用參數， $k=4$ ， $N=2$

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
f_j	1	6.05	7.05	14	20	20	20	20.5	17	12	9.5	11.5	19	9	10	35	25
Γ_j	0.06	0.095	0.12	0.235	0.32	0.3	0.24	0.185	0.24	0.38	0.4	0.42	0.79	0.75	0.95	8	9.8
ω_j	3.3	3.392	3.464	3.582	3.769	3.97	4.15	4.28	4.44	4.7	5.01	5.33	5.8	6.32	7.1	9.3	14

表. 4.25 矽 Chen 模型建模使用參數， $\eta_b=1.015$ [17]

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
f_j	0.2	0.4	11	16	10	21	23	70	70	50
Γ_j	0.01	0.01	0.36	0.25	0.3	0.5	0.7	1.6	2.3	2.8
ω_j	3.43	3.48	3.72	4.35	4.75	5.45	6.4	7.8	10.6	14
Experimental reflectivity structure	3.4	3.45	3.66	4.3	4.57	5.48				
Theoretical critical-point analysis	3.42	3.48		4.47	4.6	5.56				

表. 4.26 Si GaAs Ge InP GaP GaSb InAs InSb , MFB 模型建模使用參數 [16]

	A_i	B_i (eV)	C_i (eV ²)	$n(\infty)$	E_g (eV)
Si	0.00405	6.885	11.864	1.95	1.06
	0.01427	7.401	13.754		
	0.06830	8.634	18.812		
	0.17488	10.652	29.841		
GaAs	0.00041	5.871	8.649	2.156	1.35
	0.20049	6.154	9.784		
	0.09688	9.679	23.803		
	0.01008	13.232	44.119		
Ge	0.08556	4.589	5.382	2.046	0.60
	0.21882	6.505	11.486		
	0.02563	8.712	19.126		
	0.07754	10.982	31.620		
InP	0.20242	6.311	10.357	1.766	1.27
	0.02339	9.662	23.472		
	0.03073	10.726	29.360		
	0.04404	13.604	47.602		
GaP	0.00652	7.469	13.958	2.070	2.17
	0.14427	7.684	15.041		
	0.13969	10.237	26.567		
	0.00548	13.775	47.612		
GaSb	0.00268	4.127	4.267	1.914	0.65
	0.34046	4.664	5.983		
	0.08611	8.162	17.031		
	0.02692	11.146	31.691		
InAs	0.18463	5.277	7.504	1.691	0.30
	0.00941	9.130	20.934		
	0.05242	9.865	25.172		
	0.03467	13.956	50.062		
InSb	0.00296	3.741	3.510	1.803	0.12
	0.22174	4.429	5.447		
	0.06076	7.881	15.887		
	0.04537	10.765	30.119		

表. 4.27 $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ MDF 模型建模使用參數 [10]

Parameter $x=1$					
$\epsilon_{1\infty}$	0.273	$E_2(\text{eV})$	3.403	$F_2(\text{eV})$	4.011
$A(\text{eV}^{1.5})$	1.898	$F_3(\text{eV})$	6.950	$\Gamma_2(\text{eV})$	0.224
$\Gamma_0(\text{eV})$	0.510	$\Gamma_3(\text{eV})$	0.374	α_2	0.006
α_0	5.318	α_3	0.034	$E_4(\text{eV})$	3.850
B_1	5.447	$E_3(\text{eV})$	4.253	D	67.461
B_{1s}	0.002	$F_4(\text{eV})$	5.380	$\Gamma_{id}(\text{eV})$	23.293
$\Gamma_1(\text{eV})$	0.088	$\Gamma_4(\text{eV})$	0.581	α_{id}	75.80
α_1	0.550	α_4	0.311		

$$E_0(x) = 0.808 + 3.140x \quad (\text{eV})$$

$$E_0 + \Delta_0(x) = 1.096 + 2.844x \quad (\text{eV})$$

$$E_1(x) = 2.108 + 1.287x - 0.153x(1-x) \quad (\text{eV})$$

$$E_1 + \Delta_1(x) = 2.316 + 1.315x - 0.505x(1-x) \quad (\text{eV})$$

$$E_g^{id} = 0.72 + 0.48x + (1.122 - 1.257x)x(1-x) \quad (\text{eV})$$

表. 4.28 砷化鎵 DHO 模型建模使用參數

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
f_j	9.1	8.8	8.9	115	40	2.4	1	2	50	100	208
Γ_j	0.28	0.3	0.46	2.09	0.62	0.25	1.5	8.8	5.2	20.2	35.7
ω_j	2.93	3.17	3.51	4.56	4.75	6.38	6.5	7.9	10.5	13.5	21.5

表. 4.29 砷化鎵混合 DHO 模型建模使用參數， $k=3$ ， $N=2$

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
f_j	0.7	7.6	7.8	7.5	20.2	16	25.5	28	18	19	15	36	18	20	6
Γ_j	0.85	0.25	0.32	0.8	0.9	0.82	0.53	0.48	0.75	1.2	1.5	10	7	8	3.5
ω_j	2.67	2.93	3.16	3.28	3.57	4.1	4.51	4.8	5.0	5.85	6.7	7.85	9	9.8	21.3

表. 4.30 砷化鎵 Chen 模型建模使用參數， $\eta b=1.01$ [17]

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
f_j	0.8	3.4	5.8	13	20	13	20	44	59	49	13
Γ_j	0.1	0.2	0.4	0.5	0.4	0.5	0.79	1.4	2.2	2.2	1.7
ω_j	3.03	3.25	3.7	4.6	5.05	5.76	6.7	8.0	10.5	13.5	21.5
Experimental reflectivity structure	3.02	3.25		4.64	5.11	5.64	6.6				
Theoretical critical-point analysis	3.03	3.25		4.54	5.07	5.76	6.67		9.87	12.55	

表. 4.31 碲化鎂 MDF 模型建模使用參數 [12]

$\varepsilon_{1\infty}$	1.026	$E_2(\text{eV})$	4.706	$F_2(\text{eV}^2)$	57.12
$A(\text{eV}^{1.5})$	2.367	$F_3(\text{eV}^2)$	7.862	$\Gamma_2(\text{eV})$	0.652
$\Gamma_0(\text{eV})$	0.013	$\Gamma_3(\text{eV})$	0.351	α_2	0.008
α_0	6.396	α_3	0.052	$E_4(\text{eV})$	2.494
B_1	5.98	$E_3(\text{eV})$	2.934	$E_0(\text{eV})$	1.41
B_{1s}	0.04	$F_4(\text{eV}^2)$	1.985	$E_{0+\Delta_0}(\text{eV})$	1.746
$\Gamma_1(\text{eV})$	0.122	$\Gamma_4(\text{eV})$	0.927	$E_1(\text{eV})$	2.926
α_1	0.01	α_4	0.97	$E_{1+\Delta_1}(\text{eV})$	3.17

表. 4.32 鋅 DHO 模型建模使用參數

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
f_j	7.0	8.5	19	36	28	41	43	80	50	80	100
Γ_j	0.35	0.35	0.75	0.9	0.78	0.49	2.0	10.6	13.3	30	45.9
ω_j	2.18	2.35	2.7	3.4	3.88	4.25	5.7	7.8	10.6	14	16

表. 4.33 鋅 混合 DHO 模型建模使用參數， $k=3$ ， $\varepsilon_b=1.01$ ， $N=2$

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
f_j	0.5	1.9	3.5	14	14.5	19	27.5	24.4	28	15	15	17	10	20	15	10
Γ_j	0.2	0.15	0.24	0.44	0.68	0.7	0.74	0.55	0.36	0.82	1.0	1.2	1.1	2	7	3
ω_j	2	2.13	2.24	2.39	2.75	3.22	3.62	3.97	4.26	4.73	5.38	5.75	6.5	7.5	8	10

表. 4.34 磷化銻 DHO 模型建模使用參數

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
f_j	5	6.1	5	61	39	13.4	69	4.4	5	75	105	188
Γ_j	0.23	0.31	0.58	2.89	0.53	4.8	10.55	0.6	1.7	19.2	50.2	22.7
ω_j	3.12	3.29	3.65	4.28	4.75	5.9	6.45	6.57	6.765	7.3	13.5	21.5

表. 4.35 磷化銻 混合 DHO 模型建模使用參數，k=2，N=2

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
f_j	3	5	6.5	7	17	16	20	21.5	15	10	20	15	15.5	23	25
Γ_j	1.6	1.1	0.28	0.31	0.72	0.73	0.42	0.4	0.85	0.8	0.95	1.1	1.4	2.5	6
ω_j	2.11	2.79	3.11	3.26	3.6	4.14	4.63	4.81	5.24	5.83	6.45	7.2	8.3	9.8	12

表. 4.36 磷化鎘 DHO 模型建模使用參數

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
f_j	10.9	10.8	8.9	90	29	2.8	15	20	45	99	120
Γ_j	0.2	0.52	0.44	1.09	0.5	0.35	1.55	3.3	3.1	20.9	30.8
ω_j	3.7	3.84	4.05	4.82	5.07	6.6	6.9	8.0	9.9	13.6	15.9

表. 4.37 磷化鎘 混合 DHO 模型建模使用參數，k=2，N=2

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
f_j	0.5	1.9	3.5	14	14.5	19	27.5	24.4	28	15	15	17	10	20	15	10
Γ_j	0.2	0.15	0.24	0.44	0.68	0.7	0.74	0.55	0.36	0.82	1.0	1.2	1.1	2	7	3
ω_j	2	2.13	2.24	2.39	2.75	3.22	3.62	3.97	4.26	4.73	5.38	5.75	6.5	7.5	8	10

表. 4.38 銻化鎵 DHO 模型建模使用參數

j	1	2	3	4	5	6	7	8
f_j	6.15	8.21	17.5	16.5	35.5	23	115	15.2
Γ_j	0.3	0.39	1.15	1.51	0.93	0.48	4.9	38.3
ω_j	2.08	2.48	2.84	3.25	3.74	4.08	5.3	5.8

表. 4.39 銻化鎵 混合 DHO 模型建模使用參數，k=4，N=2

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
f_j	0.9	1.2	6	3.8	8.3	18	21	28	28	12	16.5	13	15
Γ_j	1	0.68	0.28	0.4	0.36	0.85	0.8	0.72	0.5	0.85	0.95	1.2	1.9
ω_j	1.55	1.78	2.08	2.29	2.52	2.88	3.29	3.8	4.08	4.72	5.35	6	7

表. 4.40 氮化鎵 DHO 模型建模使用參數， $\varepsilon_b=1.02$

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
f_j	0.3	0.65	1.22	3.1	7.2	11	27	15.5	14.3	35	17	25	29	39
Γ_j	0.15	0.24	0.45	0.82	0.95	0.83	0.92	0.6	0.78	1.12	1.5	1.5	1.5	1.5
ω_j	3.42	3.57	3.83	4.3	5.03	5.65	6.29	6.78	7.0	7.82	8.78	9.32	10.2	10.7

表. 4.41 氮化鎵 混合 DHO 模型建模使用參數，k=11，N=4

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
f_j	0.2	0.72	1.9	2.5	3.6	4.5	8.3	15.9	22	27.6	25.5	3.9	9	12.8	12.5	18
Γ_j	0.08	0.2	0.44	0.56	0.63	0.62	0.74	0.85	0.8	0.7	1.1	0.55	1.1	1.0	1.1	0.8
ω_j	3.37	3.5	3.74	4.11	4.56	5.03	5.46	5.93	6.44	6.9	7.79	8.0	8.5	9.05	9.5	9.8

表. 4.42 氮化鎵 MDF 模型建模使用參數 [15]

$\epsilon_{1\infty}$	0.426	B_{1B}^x (eV)	1.024	G_{1A}^{2D} (eV)	0.0003
$A(eV^{1.5})$	41.251	B_{1C}^x (eV ²)	1.997	G_{1B}^{2D} (eV)	0.356
Γ_0 (eV)	0.287	Γ_{1A} (eV)	0.743	G_{1C}^{2D} (eV)	1.962
α_0	1.241	Γ_{1B} (eV)	0.428	A_0^{ex} (eV)	0.249
E_0 (eV)	3.55	Γ_{1C} (eV)	0.44	G_0^{3D} (eV)	0.03
B_{1A} (eV)	0.778	α_{1A}	0.24	E_{1A} (eV)	6.01
B_{1B} (eV)	0.103	α_{1B}	0.011	E_{1B} (eV)	8.182
B_{1C} (eV)	0.92	α_{1C}	0.005	E_{1C} (eV)	8.761
B_{1A}^x	2.042				

表. 4.43 砷化鎵 DHO 模型建模使用參數， $\epsilon_b=1.02$

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
f_j	0.9	2	4	7.6	8.1	11.6	11.6	18	20	20	16	25	27	25	10
Γ_j	1.5	1.5	1.1	0.35	0.38	0.68	0.78	0.85	0.4	0.65	1.15	1	2	7	11
ω_j	1.5	1.7	2.2	2.52	2.8	3.11	3.6	4.16	4.45	4.63	5.32	6.38	7.4	8.5	9

表. 4.44 砷化鎵 混合 DHO 模型建模使用參數， $k=2$ ， $N=2$

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
f_j	1	3.2	2	3	2.5	20	16	15	16	27	16	30	30	10	10
Γ_j	1.85	1.8	0.9	0.24	0.5	0.67	0.92	0.85	0.35	0.63	1.15	1.15	2	2	3
ω_j	1.45	1.85	2.3	2.5	2.6	2.83	3.45	4.03	4.42	4.6	5.3	6.38	7.4	9	11

表. 4.45 銻化銑 DHO 模型建模使用參數， $\varepsilon_b=1.02$

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
f_j	1	3.4	7.8	7.5	22.5	17.3	36	1.5	14	8	25	20
Γ_j	0.7	0.24	0.63	0.41	1.05	0.71	0.65	0.21	1.13	0.75	2	4
ω_j	1.6	1.87	2.05	2.38	2.81	3.43	3.86	4.04	4.51	5.2	6	7.5

表. 4.46 銻化銑 混合 DHO 模型建模使用參數， $k=4$

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
f_j	1	7.5	2.9	9.6	10.5	12.5	22	24.5	23.5	5	18	10
Γ_j	0.65	0.37	0.45	0.45	0.85	0.9	0.75	0.5	1.4	1.3	2	2
ω_j	1.7	1.89	2.07	2.38	2.72	3.12	3.54	3.9	4.8	5.3	6	8

表. 4.47 氮化銑 DHO 模型建模使用參數， $\varepsilon_b=1.5$

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
f_j	0.92	0.7	2	2.9	4.5	13.5	15.5	11	9	9.5	15	18	10.5	35	45
Γ_j	0.27	0.32	0.65	1	1.38	1.6	1.25	1.2	1.25	1.7	1.15	1.2	1.7	1.5	5
ω_j	2.37	2.58	2.8	3.3	3.92	4.6	5.12	5.58	6.2	6.9	7.74	8.7	9.4	10.4	11

表. 4.48 氮化銑 混合 DHO 模型建模使用參數， $\varepsilon_b=1.5$ ， $k=2$ ， $N=2$

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
f_j	0.74	0.4	3	3	5	12	17	8	9.5	11.5	16	14	15	15	50
Γ_j	0.22	0.32	0.78	1.15	1.4	1.5	1.2	1.0	1.1	1.7	1.1	1.1	1.62	1.4	2
ω_j	2.35	2.55	2.75	3.28	3.92	4.6	5.15	5.57	6.2	6.9	7.75	8.7	9.06	10	11

第五章 結論與未來工作

結論：

1. 使用 DHO 模型模擬的三個材料 InAs、InSb、InN，在所有比較的模型中最為簡單的模型，能準確的針對吸收帶邊緣模擬不論是介電函數實部或是虛部誤差都是最小，在 1.5eV~9eV 誤差不超過 1.9% 甚至最低可到 1.2%，所計算的有效電子數都可以收斂到理論價電子數，或是最接近實驗值虛部曲線下面積。
2. 使用阻尼常數為 N 次方的混合 DHO 模型模擬的七個材料 Si、GaAs、Ge、InP、GaP、GaSb、GaN，其介電函數虛部誤差是所有模型中最低，並且是唯一一個能在 Si、GaAs 同時有效改善吸收帶邊緣及高能量範圍模擬並且 sum rule 又可以準確收斂到價電子數的模型。
3. 除了 InN 在靠近能隙沒有足夠的數據可以判斷該使用多少 N 值，我們將其他材料依能隙大小由低到高排列，發現能隙較低(0.17~0.36eV)的材料只需使用 DHO 模型即可，而能隙較高的材料(0.67~2.24eV)則使用 N=2 的混合 DHO 模型，甚至能隙最高的 GaN 需使用 N 值為 4，如表. 5.1。

表. 5.1 能隙大小與 N 值的關係

materials	InSb	InAs	Ge	GaSb	Si	InP	GaAs	GaP	GaN
Band gap(eV)	0.17	0.36	0.67	0.726	1.1	1.27	1.35	2.24	3.39
degree	N= 0	N= 0	N= 2	N= 2	N= 2	N= 2	N= 2	N= 2	N= 4

未來工作：

1. 我們已經成功使用簡單的模型來模擬半導體材料，接下來運用這個模型在能隙更高的半導體或是絕緣體，也就是進一步的使用這個簡單的模型來模擬絕緣體的介電函數，讓此解析模型應用的範圍更為廣泛，或是使用不同的 N 值來計算更高能隙的材料，甚至嘗試計算 plasma 以上範圍的介電函數，預期此模型能計算到更多的內部電子貢獻。
2. 使用修改的模型來 fitting 半導體材料在能隙附近 exciton 貢獻的介電函數。

References

- [1] Hiroyuki Fujiwara, Spectroscopic Ellipsometry, Maruzen, Tokyo, 2003
- [2] Williams and Carter, "Transmission Electron Microscopy", Springer, 1996
- [3] R.F. Egerton, Electron Energy-Loss Spectroscopy in the Electron Microscope (Plenum, New York, 1986)
- [4] R. F. Egerton, "Electron energy-loss spectroscopy in the TEM", *Rep. Prog. Phys.* 72 (2009)
- [5] 許瓊姿、蔡增光、潘扶民, 「穿透式電子顯微鏡微區成份分析技術簡介」, 毫微米通訊, 第九卷, 第一期, page 22-31
- [6] Mark Fox, "Optical properties of solids 2ed", Oxford, 2010
- [7] Frederick Wooten, "Optical properties of solids", Academic press, 1972
- [8] Sadao Adachi, "Excitonic effects in the optical spectrum of GaAs", *Phys. Rev. B* 41 ,1003(1990)
- [9] Sadao Adachi, "Effects of indirect transitions on optical dispersion relations", *Phys. Rev. B* 41 ,3504(1990)
- [10] A. B. Djuriscic and E. H. Li, "Modeling the optical constants of $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ alloys in the range 1.7-5.6 eV," *Semicond. Sci. Technol.* 16(2001) 59-65
- [11] A. B. Djuriscic and E. H. Li, "Dielectric function models for describing the optical properties of hexagonal GaN," *J. Appl. Phys.*, Vol. 89, No. 1, 1 January 2001
- [12] A. B. Djuriscic and E. H. Li, "Modeling the optical constants of GaAs: excitonic effects at $E_1, E_1+\Delta_1$ critical points" *Semicond. Sci. Technol.* 14(1999) 958-960
- [13] A. B. Djuriscic, A. D. Rakic, P. C. K. Kwok, E. H. Li, and M. L. Majewski, "Modeling the optical constants of GaP, InP, and InAs", *J. Appl. Phys.*, Vol. 85, No. 7, 1 April 1999
- [14] A. B. Djuriscic, E. H. Li, D. Rakic, M. L. Majewski, "Modeling the optical properties of AlSb, GaSb, and InSb", *Appl. Phys. A* 70, 29–32 (2000)
- [15] A. B. Djuriscic and E. H. Li, "Modeling the optical constants of hexagonal GaN, InN, and AlN," *J. Appl. Phys.*, Vol. 85, No. 5, 1 March 1999
- [16] A. R. Forouhi, I. Bloomer, "Optical properties of crystalline semiconductors and dielectrics", *Phys. Rev. B* 38, 1865–1874 (1988)
- [17] Y. F. Chen, C. M. Kwei, "Optical-constants model for semiconductors and insulators", *Phys. Rev. B* 48, 4373 (1993)
- [18] D. Y. Smith, E. Shiles, "Finite-energy f-sum rules for valence electrons", *Phys. Rev. B* 17 ,4689(1978)

- [19] Handbook of Optical Constant of Solid, Vol.1,page 35-68 edited by E. D. Palik (Academic, New York, 1985)
- [20] S. Tanuma, C. J. Powell, and D. R. Penn, "Calculation of electron inelastic mean free paths. III. Data for 15 inorganic compounds over the 50-2000 eV range", Surf. Interface Anal. 17, 927 (1991)
- [21] S. Tanuma, C. J. Powell, and D. R. Penn, "Calculations of electron inelastic mean free paths. IX. Data for 41 elemental solids over the 50 eV to 30 keV range", Surf. Interface Anal. 43, 689 (2010)
- [22] E. D. Palik. , Handbook of Optical Constant of Solid, Vol.1 ,Academic, New York, 1985
- [23] E. D. Palik. , Handbook of Optical Constant of Solid, Vol.2 ,Academic, New York, 1991
- [24] D. E. Aspnes and A. A. Studna, "Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, Gap, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV," Phys. Rev. B 27 ,985(1983)

