

แบบพลังงานส่วนหางในลักรกึ่งตัวนำที่มี

ปริมาณอคูทริสูง : วีธีเชิงตัวเลข



นายรังสรรค์ เจริญศรี

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

ภาควิชาฟิสิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. ๒๕๖๔

002541

i 17086681

ENERGY BAND TAILS IN HEAVILY DOPED
SEMICONDUCTORS : NUMERICAL METHOD

Mr. Rongsan Chalurmsri

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1981

Thesis Title Energy Band Tails in Heavily Doped Semiconductors :
 Numerical Method.
By Mr. Rangsan Chalurmsri
Department Physics
Thesis Adviser Professor Virulh Sa - yakanit

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in partial
fulfilment of the requirements for the Master's degree.

..... *S. Bunnag* Dean of Graduate School
(Associate Professor Supradit Bunnag, Ph.D.)

Thesis Committee

..... *Somphong Chatraphorn* Chairman
(Assistant Professor Somphong Chatraphorn, M.Sc.)

..... *I. Ming Tang* Member
(I Ming Tang, Ph.D)

..... *Pisistha Ratanavararaksa* Member
(Assistant Professor Pisistha Ratanavararaksa, Ph.D.)

..... *Virulh Sa-yakanit* Member
(Professor Virulh Sa - yakanit, F.D.)

Copyright of the Graduate School, Chulalongkorn University

Thesis Title Energy Band Tails in Heavily Doped Semiconductors:
 Numerical Method

Name Mr. Rangsan Chalurmsri

Thesis Advisor Professor Virulh Sa-yakanit

Department Physics

Academic Year 1980

ABSTRACT

The density of states in the band tail region of heavily doped semiconductors has been studied by using three different methods; the semiclassical approximation introduced by Kane, the minimum counting method by Halperin and Lax and the Feynman Path Integral technique applied to disorder systems by Sa-yakanit. The third method gives an analytical form of density of states in the band tail region as

$$\rho_1(v,Z) = a(v,Z) \exp(-b(v,Z)/2\xi'),$$

where Z is a variational parameter. Three methods for determining the Z parameter have been considered; minimizing $b(v,Z)$, maximizing $\rho_1(v,Z)$ and maximizing the function

$$P(v,Z) = E_Q^2 \int_v^{\infty} (v' - v) \rho(v',Z) dv'.$$

In this thesis, the numerical values of density of states and other related quantities, i.e., $a(v,Z)$ and $b(v,Z)$, are calculated for fluctuation parameter $\xi' = 50, 5, 0.5$ and 0.05 . It is found that numerical results evaluated by using the maximization condition of $P(v,Z)$ and of

$\rho_1(v, Z)$ are almost the same for large ξ' , but slightly different for small ξ' . For $b(v, Z)/2\xi' < 1$, the results calculated by minimizing $b(v, Z)$ are considerably different from those given by other two methods. However at very deep tail region, $b(v, Z)/2\xi' \gg 1$, three methods give approximately the same results.

หัวข้อวิทยานิพนธ์	แถบพลังงานส่วนหางในสารกึ่งตัวนำที่มีปริมาณเอลูทริ่งสูง : วิธีเชิงตัวเลข
ชื่อผู้ผลิต	นาย รังสรรค์ เฉลิมศรี
อาจารย์ที่ปรึกษา	ศาสตราจารย์ ดร. วิรุฬห์ สายคณิต
ภาควิชา	ฟิสิกส์
ปีการศึกษา	๒๕๒๓

บทคัดย่อ



การศึกษาความหนาแน่นสถานะส่วนหางในสารกึ่งตัวนำที่มีปริมาณเอลูทริ่งสูงสามารถกระทำได้จาก 3 แนวทางใหญ่ ๆ ที่แตกต่างกัน คือ วิธีประมาณค่าแบบเขมิกดาลลิกซึ่งเสนอโดยเคน หรือ วิธีกลศาสตร์เชิงคลื่นที่ฮิลเปอรินกับแลกนามาไฮ้ หรือวิธีอินทิเกรตตามเส้นทางที่ ศาสตราจารย์ ดร. วิรุฬห์ สายคณิต นำมาประยุกต์ใช้ในปัญหาของระบบที่ไร้ระเบียบ

วิทยานิพนธ์นี้ ได้คำนวณค่าความหนาแน่นสถานะบริเวณส่วนหางจากฟังก์ชันเชิงวิเคราะห์ที่หามาได้จากการใช้ทฤษฎีอินทิเกรตตามเส้นทางคือ

$$\rho_1(v, Z) \approx a(v, Z) \exp(-b(v, Z)/2\xi')$$

โดยมี Z เป็น พารามิเตอร์ ค่าของ Z นี้ สามารถหาได้จากการการพิจารณาเงื่อนไขแบบใดแบบหนึ่งใน 3 แบบ ต่อไปนี้คือ พารามิเตอร์ Z จะต้องมีความพอดีที่ทำให้ $b(v, Z)$ มีค่าต่ำสุด หรือทำให้ $\rho_1(v, Z)$ มีค่าสูงสุด หรือทำให้ ฟังก์ชัน

$$P(v, Z) = E_Q^2 \int_v^\infty (v' - v) p(v', Z) dv'$$

มีค่าสูงสุด

จากค่าความหนาแน่นสถานะส่วนหางที่คำนวณได้ โดยกำหนดค่า $\xi' = 50, 5, 0.5$ และ 0.05 ปรากฏว่า ถ้าเลือกค่า Z จนทำให้ $\rho_1(v, Z)$ หรือ $P(v, Z)$ มีค่าสูงสุดแล้ว ค่าความหนาแน่นสถานะจากวิธีทั้งสองนี้ เกือบจะเท่ากัน เมื่อ ξ' มีค่ามาก แต่จะมีค่าแตกต่างกันจนสามารถสังเกตเห็นได้บ้าง เมื่อ ξ' มีค่าน้อย ๆ และในกรณีที่ $b(v, Z)/2\xi' < 1$ ผลที่ได้จากการคำนวณเมื่อทำให้ $b(v, Z)$ มีค่าต่ำสุดจะแตกต่างจากค่าที่คำนวณได้จาก 2 วิธีการที่กล่าวมาแล้วอย่างชัดเจน อย่างไรก็ตาม เมื่อพิจารณาที่บริเวณส่วนหางมาก ๆ คือ $b(v, Z)/2\xi' \gg 1$ แล้ว วิธีการเลือกค่า Z ทั้ง 3 วิธีจะให้ผลออกมาเกือบจะตรงกัน



ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to express his appreciation to Dr. Virulh Sa - yakanit for his advice, guidance and encouragement given throughout the course of investigation.

He would like to express his sincere thanks to Dr. I - Ming Tang for assistance in suggestion the thesis outline and correcting the English manuscript.

Finally, he would like to thank all colleagues at the department of Physics for their helps in various ways.

TABLE OF CONTENTS

	Page
ABSTRACT	i
ACKNOWLEDGEMENT	iv
LIST OF ILLUSTRATIONS	viii
LIST OF TABLES	ix
CHAPTER I HEAVILY DOPED SEMICONDUCTORS	1
1.1 Introduction	1
1.2 Disordered Systems.	1
1.3 Heavily Doped Semiconductors.	6
CHAPTER II THE CALCULATION OF BAND TAILS IN HEAVILY DOPED SEMICONDUCTORS	12
2.1 General Procedure.....	12
2.2 Semiclassical Approach	12
2.3 Wave Mechanics Method.....	19
2.4 Path Integral Approach.	29
CHAPTER III NUMERICAL RESULTS.....	38
3.1 General Description	38
3.2 Minimizing $b(v,Z)$	40
3.3 Maximizing $\rho_1(v,Z)$	42
3.4 Maximizing $P(v,Z)$	43
CHAPTER IV CONCLUSION AND DISCUSSION	61
4.1 Conclusion	61
4.2 Validity Limit of $\rho_1(v,Z)$ at Deep Tail Region ...	63



4.3	Numerical Results.	64
4.3.1	Density of States.....	64
4.3.2	The Variational Condition and Variational Parameter Z.	64
4.3.3	The Quantity $n(\nu, Z)$	65
4.4	Suggestion	66
APPENDIX A	COMPUTER PROGRAMS	67
A.1	Main Programs.....	67
A.2	Subprograms.....	72
A.2.1	Roots of Nonlinear Equations.	72
A.2.2	Integration.	81
A.2.3	Parabolic Cylinder Function.	86
A.2.4	Incomplete Gamma Function	91
A.2.5	Variational Condition (Equation).....	96
A.2.6	Density of States.....	99
APPENDIX B	NUMERICAL METHODS	100
B.1	Numerical Integration	100
B.1.1	Legendre-Gauss Quadrature.....	101
B.1.2	Composite Legendre- Gauss Quadrature Formula.....	102
B.2	Solving Roots of Nonlinear Equation.	103
B.2.1	First Procedure for Iterative Method.....	103
B.2.2	Regula Falsi and Modified Regula Falsi Methods.....	103

Page

B.2.3 Functional Iteration or Multiple Points	
Iteration.	104
REFERENCES	107

LIST OF ILLUSTRATIONS

Figure		Page
1.1	Energy Band Scheme of Perfect Crystals.....	3
1.2	Density of States $\rho(E)$ as a Function of Energy E.....	4
1.3	Density of States of an Isolated Energy Band in Disordered Material	5
1.4	Dependence of the Ionization Energy of Donors in Germanium, and of Donors and Acceptors in Silicon on Their Concentration	8
2.1	The Logarithmic Derivative of the Exponent $b(v,Z)$ in the Density of States	29
3.1	The Density of States, $\rho_1(v,Z)$, for $\xi' = 50$	58
3.2	The Density of States, $\rho_1(v,Z)$, for $\xi' = 5$	58
3.3	The Density of States, $\rho_1(v,Z)$ for $\xi' = 0.5$	59
3.4	The Density of States, $\rho_1(v,Z)$ for $\xi' = 0.05$	59
3.5	The Logarithmic Derivative of the Exponent $b(v,Z)$ in the Density of States for Case 1	60
3.6	The Logarithmic Derivative of the Exponent $b(v,Z)$ in the Density of States for Case 2 and 3	60

LIST OF TABLES

Table	Page
2.1 Numerical Results Calculated by Halperin and Lax	28
3.1 Numerical Values of Density of States and Other Related Functions Obtained by Minimizing $b(v,Z)$	45
3.2 Numerical Values of Density of States and Other Related Functions Obtained by Maximizing $\rho_1(v,Z)$ for $\xi' = 50$	50
3.3 Numerical Values of Density of States and Other Related Functions Obtained by Maximizing $\rho_1(v,Z)$ for $\xi' = 5$	51
3.4 Numerical Values of Density of States and Other Related Functions Obtained by Maximizing $\rho_1(v,Z)$, for $\xi' = 0.5$	52
3.5 Numerical Values of Density of States and Other Related Functions Obtained by Maximizing $\rho_1(v,Z)$, for $\xi' = 0.05$...	53
3.6 Numerical Values of Density of States and Other Related Functions Obtained by Maximizing $P(v,Z)$, for $\xi' = 50$	54
3.7 Numerical Values of Density of States and Other Related Functions Obtained by Maximizing $P(v,Z)$, for $\xi' = 5$	55
3.8 Numerical Values of Density of States and Other Related Functions Obtained by Maximizing $P(v,Z)$, for $\xi' = 0.5$...	56
3.9 Numerical Values of Density of States and Other Related Functions Obtained by Maximizing $P(v,Z)$, for $\xi' = 0.05$...	57
B.1 Abscissas and Weight Factors for Legendre-Gauss Quadrature Formula	106