บทที่ 3

สมบัติเชิงแสงของสารกึ่งตัวนำ

3.1 สมบัติการดูดกลืนแสงของสารกึ่งตัวนำ

สมบัติเชิงแสง (optical properties) ของสารกึ่งตัวนำ อาทิเช่น การดูดกลืนแสงซึ่งมีหลายชนิด เช่นการดูดกลืนแสงด้วยพาหะอิสระ การดูดกลืนแสงแบบตรง และ แบบไม่ตรง

การใส่สนามไฟฟ้าหรือสนามแม่เหล็กให้กับสารกึ่งตัวนำ จะทำให้เราได้ข้อมูลเกี่ยวกับพฤติกรรมของพาหะ และ สมบัติเชิงไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำนั้นๆ ในสารกึ่งตัวนำนั้นมีขนาดของแถบช่องว่างพลังงานอยู่ค่าหนึ่ง (band gap) และ ภายในแถบช่องว่างพลังงานนั้นอาจมีระดับพลังงานของสารเจือปน (impurity level) หรือ จุดบกพร่อง (defect level) ต่างๆ ซึ่งจัดว่าเป็นพวก localized state วิธีการที่จะศึกษาถึงขนาด หรือ ลักษณะของแถบช่องว่างของพลังงาน และ ระดับพลังงาน ของ localized state ให้ได้ผลดีที่สุด ได้แก่ การศึกษาสมบัติเชิงแสงของสารกึ่งตัวนำ ถ้าเราวัดวิเคราะห์สเปกตรัมของการดูดกลืน การสะท้อน หรือ การเปล่งแสงจากสารกึ่งตัวนำ เราจะสามารถทราบค่าระดับพลังงาน ของ localized state และ ได้ข้อมูลเกี่ยวกับแถบช่องว่างของพลังงาน ทั้งนี้เพราะว่าการดูดกลืนแสงก็ดี การเปล่งแสงก็ดี เกิดจากการที่อิเล็กตรอนที่อยู่ในแถบชั้นพลังงานใดๆ หรือ อยู่ที่ localized state ดูดกลืนแล้วคายแสงออกแล้วเกิดการเปลี่ยนแปลง (transitions) ระดับพลังงาน ซึ่งค่าความแตกต่างของพลังงานที่เปลี่ยนแปลงนั้นจะเท่ากับพลังงานโฟตอน ที่อิเล็กตรอนดูดกลืนหรือคายออกมา นอกจากนี้ถ้าเราฉายแสงลงที่สารกึ่งตัวนำ จะทำให้เกิดพาหะใหม่ขึ้นมาทำให้ค่าสภาพนำไฟฟ้าสูงขึ้น ดังนั้น จากปรากฏการณ์นำไฟฟ้าด้วยแสงจะทำให้เราได้ข้อมูลเกี่ยวกับการเกิด หรือ การสูญเสียของพาหะ ยิ่งไปกว่านี้การกระตุ้นด้วยแสงอาจทำให้เกิดเป็น exciton ซึ่งได้แก่ คู่อิเล็กตรอน – โฮล ที่จับคู่กันแล้วเคลื่อนที่ไปด้วยกัน การสังเกตดู exciton ไม่สามารถทำด้วยวิธีทางไฟฟ้า แต่ต้องสังเกตด้วยวิธีทางแสง จึงจะเห็น

3.2 ทฤษฎีการดูดกลืนแสงของสารกึ่งตัวนำ (theory of optical absorption)

สำหรับปรากฏการณ์การดูดกลืนแสงในสารกึ่งตัวนำเป็นอันตรกิริยาระหว่างคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า กับ สารกึ่งตัวนำโดยตรง โดยทั่วไปในการศึกษาเราใช้แสงเอกรงค์ (monochromatic light) และ กรณีที่ คลื่นแม่เหล็กไฟฟ้ามีโพลาไรเซชัน เป็นแบบระนาบ สนามไฟฟ้า และ สนามแม่เหล็กสามารถเขียนอยู่ในรูป [16]

$$\vec{E} = E_0 \exp\{i(k \cdot r - \omega t)\} \tag{3.1}$$

$$\vec{H} = H_0 \exp\{i(k \cdot r - \omega t)\} \tag{3.2}$$

เมื่อ $\vec{E}$ คือสนามไฟฟ้า (electric field) มีอัมปลิจูด $|E_0|$

$\vec{H}$ คือสนามแม่เหล็ก (magnetic field) มีอัมปลิจูด $|H_0|$

k คือเวกเตอร์คลื่น (wave vector) มีทิศทางตั้งฉากกับ E และ H

ω คือความถี่เชิงมุม (angular frequency)

t คือเวลา

สมการที่ 3.1 และ 3.2 ได้จากผลของสมการของ แมกซ์เวล สำหรับตัวกลางที่มีค่าสภาพซึมผ่านได้ของแม่เหล็ก (magnetic permeability) $\mu = 1$ ถ้า

$$k \cdot k = \mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon \omega^2 = \frac{\varepsilon \omega^2}{c^2} \tag{3.3}$$

โดย ε คือ ค่าคงที่ไดอิเล็กตริกเชิงซ้อน (complex dielectric constant) และ เวกเตอร์คลื่น k คือ เวกเตอร์เชิงซ้อน (complex vector) เขียนได้เป็น

$$k = k_1 + i\,k_2 \tag{3.4}$$

สำหรับคลื่นที่ผ่านตัวกลางที่มีดัชนีหักเหเป็นปริมาณเชิงซ้อน คือ

$$N = n + i\,\kappa \tag{3.5}$$

$$|k_1| = \frac{n\omega}{c}$$

$$|k_2| = \frac{\kappa\omega}{c}$$

เมื่อ c คือ ความเร็วแสง

n คือ จำนวนจริงของดัชนีหักเหของตัวกลาง

κ คือ จำนวนจินตภาพหรือ extinction coefficient ของดัชนีหักเหของตัวกลาง

ในกรณีการส่งผ่านพลังงานเฉลี่ยต่อเวลา (time average energy flow) คือ

$$\bar{s} = \frac{n}{2} c \varepsilon_0 (E^* \cdot E) k_E \tag{3.6}$$

โดย k_E คือ เวกเตอร์หนึ่งหน่วย ของ k_1 และ k_2

ถ้าพิจารณาโดยแทนสมการ 3.1 ใน 3.6 จะได้

$$\bar{s} = \frac{n}{2} c\varepsilon_0 (E_0^* \cdot E_0) \mathrm{k}_E e^{-2\mathrm{k}_2 \cdot \mathrm{r}} \tag{3.7}$$

จากสมการที่3.7 จะพบว่าค่าการส่งผ่านพลังงานเฉลี่ยจะลดลงด้วยแฟคเตอร์ $e^{-2|\mathrm{k}_2|d}$ ตลอดระยะทาง d

ในระดับมหาภาค (macroscopic) สัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง α คือ สัดส่วนของความเข้มแสงที่ลดลงต่อหนึ่งหน่วยระยะทางของตัวกลาง ดังสมการ [17]

$$\alpha = -\frac{1}{I}\frac{dI}{dx} \tag{3.8}$$

เมื่อ I คือ ความเข้มแสงที่ระยะทาง x ใดๆ ในตัวกลาง

ดังนั้น เมื่อแสงที่มีความเข้ม I_0 เคลื่อนที่ไปตามทิศทาง x ความเข้มของแสง I ณ ตำแหน่ง x จะมีค่าเท่ากับ

$$I = I_0 \exp(-\alpha x) \tag{3.9}$$

การส่งผ่านพลังงานเฉลี่ยต่อเวลาแปรผันตรงกับความเข้มแสง ดังนั้น จากสมการที่ 3.7 และ 3.9 จะได้สัมประสิทธิ์การดูดกลืนของตัวกลางคือ

$$\alpha = 2|\mathrm{k}_2|$$

$$\alpha = 2\kappa\frac{\omega}{c}$$

$$\alpha = 4\pi\frac{\kappa}{\lambda} \tag{3.10}$$

เมื่อ λ คือ ความยาวคลื่นในสุญญากาศ

จะเห็นว่าค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงขึ้นอยู่กับความยาวคลื่น และจำนวนจินตภาพของดัชนีหักเหของตัวกลาง เมื่อฉายแสงเข้าไปในตัวกลางความเข้มแสงที่ผ่านตัวกลางจะลดลงเนื่องจากแสงถูกดูดกลืนโดยตัวกลาง โดยที่ความถี่ของแสงค่าเดียวกันในตัวกลางต่างชนิดกันจะดูดกลืนแสงต่างกัน เพราะการดูดกลืนแสงเป็นสมบัติเฉพาะของสารกึ่งตัวนำแต่ละชนิด

3.3 กฎการเลือกในการดูดกลืนแสงระหว่างแถบพลังงาน [18]

การเปลี่ยนแปลงระดับพลังงานของอิเล็กตรอน จากแถบพลังงานหนึ่งไปสู่แถบพลังงานหนึ่ง ในลักษณะที่ค่าพลังงานเพิ่มขึ้นจะก่อให้เกิดการดูดกลืนแสง และ ค่าความแตกต่างของระดับชั้นของพลังงานก่อน และ หลังการเปลี่ยนแปลงนั้นจะต้องเท่ากับพลังงานโฟตอนของแสงที่เป็นตัวกระตุ้น เรียกว่า กฎการอนุรักษ์พลังงาน และยังมีกฎการอนุรักษ์โมเมนตัม ซึ่งจะกล่าวต่อไป

จากฮามิลโตเนียม H ซึ่งแสดงพฤติกรรมของอิเล็กตรอนที่อยู่ในสนามแม่เหล็กไฟฟ้า

$$H = \frac{1}{2m}(\mathrm{P} + e\mathrm{A})^2 + V_{(r)} \tag{3.11}$$

เมื่อ P คือ โมเมนตัม

r คือ เวกเตอร์แสดงตำแหน่งของอิเล็กตรอน

A คือ เวกเตอร์โพเทนเชียลของสนามแม่เหล็กไฟฟ้า

$$H = \frac{1}{2m}\mathrm{P}^2 + \frac{e}{2m}(\mathrm{P}\cdot\mathrm{A} + \mathrm{A}\cdot\mathrm{P}) + \frac{1}{2m}(e\mathrm{A})^2 + V_{(r)} \tag{3.12}$$

จาก $[\mathrm{A},\mathrm{P}] = \frac{ih}{2\pi}\nabla\cdot\mathrm{A}$

และใช้ radiation gauge $\nabla\cdot\mathrm{A} = 0$ จะได้

$$H = \frac{-h^2\nabla^2}{8\pi^2 m} + V_{(r)} - \frac{ieh}{2\pi m}\mathrm{A}\cdot\nabla$$

$$H = H_0 + H' \tag{3.13}$$

เมื่อ $H_0 = -\frac{h^2\nabla^2}{8\pi^2 m} + V_{(r)}$

$H' = -\frac{ieh}{2\pi m}\mathrm{A}\cdot\nabla$

จาก $H_0\varphi = \varepsilon\varphi$ คำตอบที่ได้จะเป็นรูปของฟังก์ชันของ Bloch คือ $\varphi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{N}}\exp(k\cdot \mathrm{r})U_k(r)$ เมื่อมีสนามแม่เหล็กไฟฟ้าเข้ามา ความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะ W_{12} ของอิเล็กตรอนจาก wave number ที่มีค่า k_1 ไปสู่ค่า k_2 ต่อหนึ่งหน่วยเวลาจะเป็น

$$W_{12} = \frac{4\pi^2}{h}\left|\int \varphi^*_{k_2(r)} H' \varphi_{k_1(r)} dr\right|^2 \quad (3.14)$$

เมื่อแทนค่าต่างๆใน 3.14 แล้วจะได้ว่าความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะนั้นจะมีเทอม $\sum_{r_n} \exp\{i(k_1 - k_2 + j)r_n\}$ เป็นแฟกเตอร์สำคัญ ถ้า

$$\left(k_1 - k_2 \pm j\right) = 0 \quad (3.15)$$

เมื่อ j แสดงเวกเตอร์จำนวนคลื่น (wave number vector) ความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนแปลงสถานะจะไม่เป็นศูนย์ นอกจากนี้ถ้าเราเปรียบเทียบว่าค่าคงที่ของระยะห่างของโครงผลึกมีค่าน้อยกว่าค่าความยาวคลื่นแสงมาก เนื่องจากแสงมีความยาวคลื่นที่ยาวกว่าระยะห่างของโครงผลึกมาก ดังนั้น เมื่อเปลี่ยนแปลงหน่วยเป็น wave number และ เวกเตอร์ wave number ของแสง จะมีค่าน้อยกว่า $\left|k_1 - k_2\right|$ มาก ดังนั้นสมการ 3.15 เขียนใหม่ได้ว่า $\left|k_1 - k_2\right| = 0$ ซึ่งหมายความว่าในการเปลี่ยนสถานะระดับพลังงานของอิเล็กตรอนนั้น ค่า wave number (k) ก่อนและหลังการเปลี่ยนสถานะจะไม่มีการเปลี่ยนแปลง กล่าวคือ ในกระบวนการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอน อันเนื่องจากการดูดกลืนแสง ค่าโมเมนตัม $\frac{hk}{2\pi}$ ของอิเล็กตรอนทั้งก่อน และหลังการเปลี่ยนสถานะจะต้องคงที่เสมอ เรียกว่า กฎแห่งการอนุรักษ์โมเมนตัม

3.4 การดูดกลืนแสงแบบตรง [17,18]

การดูดกลืนแสงของสารกึ่งตัวนำสามารถอธิบายได้ด้วยทฤษฎีแถบพลังงานของของแข็ง พลังงานแสงที่สูญหายไปในขบวนการดูดกลืนแสงนั้นถูกนำไปใช้ในการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบนำ ซึ่งการดูดกลืนแสงนี้จะขึ้นอยู่กับโอกาสในการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอน หรือ ความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนต่อหนึ่งหน่วยปริมาตร และหนึ่งหน่วยเวลา ดังนั้นในการย้ายสถานะพลังงานอิเล็กตรอนนี้จะขึ้นอยู่กับโครงสร้างแถบพลังงานของสารกึ่งตัวนำ ถ้าโครงสร้างแถบพลังงานเป็นแบบตรงจะได้

$$\alpha = -\frac{1}{I}\frac{dI}{dx} \quad (3.16)$$

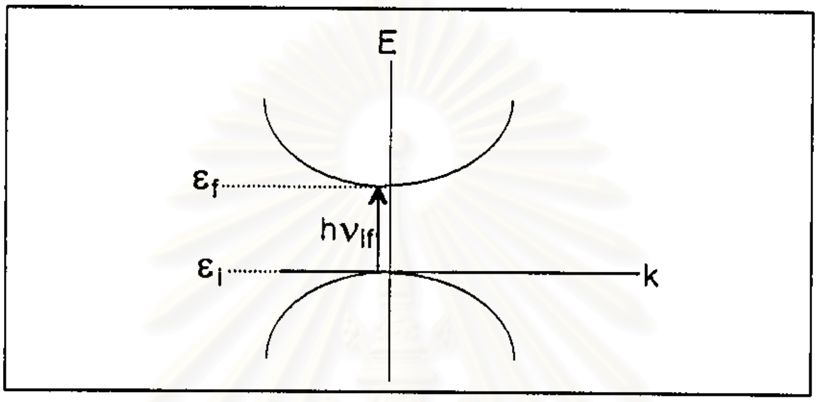
$$\alpha = W_{if}\frac{h\nu}{I} \quad (3.17)$$

เมื่อ W_{if} คือ ความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนจากระดับพลังงาน ε_i ไปสู่ ε_f

$h\nu$ คือ พลังงานแสง

I คือ ความเข้มแสงที่ระยะทาง x ใดๆ ในตัวกลาง

เมื่ออิเล็กตรอนดูดกลืนพลังงานโฟตอนนั้นจะทำให้สถานะระดับพลังงานของอิเล็กตรอนสูงขึ้น จากกฎของการอนุรักษ์โมเมนตัม แผนภาพการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนอันเนื่องจากการดูดกลืนแสงจะได้ดังนี้



รูปที่ 3.1 ภาพการดูดกลืนแสงแบบตรง

โคออร์ดิเนตของแถบพลังงานในรูป คือ wave number k ของอิเล็กตรอน อิเล็กตรอนจะต้องกระโดดขึ้นสู่ระดับพลังงานที่สูงในลักษณะแนวดิ่งเสมอ พลังงานของอิเล็กตรอนในโครงสร้างแบบนี้ว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานแบบตรง (direct transition) โดยยังสามารถแบ่งต่อได้อีกเป็น

1. การย้ายสถานะพลังงานชนิดยอมรับได้ (allowed transition)

$$\alpha(cm^{-1}) = \frac{A}{h\nu}(h\nu - Eg)^{1/2} \tag{3.18}$$

2. การย้ายสถานะพลังงานชนิดต้องห้าม (forbidden transition)

$$\alpha(cm^{-1}) = \frac{B}{h\nu}(h\nu - Eg)^{3/2} \tag{3.19}$$

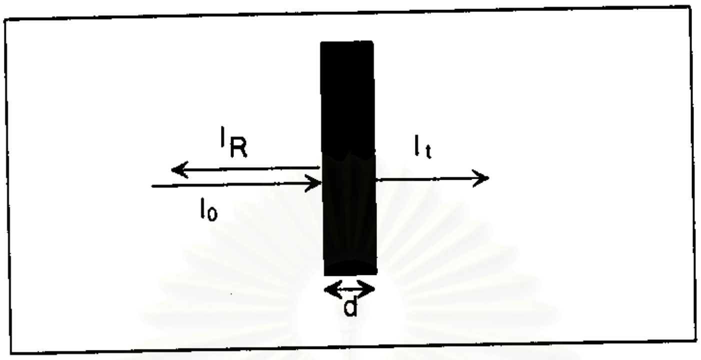
เมื่อ A คือ ค่าคงที่ มีหน่วยเป็น($cm^{-1}eV^{1/2}$)

B คือ ค่าคงที่ มีหน่วยเป็น($cm^{-1}eV^{-1/2}$)

$h\nu$ คือ พลังงานของแสง และ Eg คือ ช่องว่างแถบพลังงาน มีหน่วยเป็น eV โดยการย้ายสถานะพลังงานทั้ง 2 ชนิด พิจารณาจากค่า ออฟติคอลเมตริกอิลิเมนต์ (optical matrix element) ว่าค่าเป็นศูนย์หรือไม่ ในการประมาณครั้งที่หนึ่ง (first approximation)

3.5 หลักการวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง [16]

เมื่อมีพลังงานโฟตอนกระทบสารตัวอย่างดังรูป



รูปที่ 3.2 ภาพแสดงการทดลองวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง

ถ้าให้ความเข้มของแสงตกกระทบ I_0 ความเข้มของแสงที่ทะลุผ่านเป็น I_t และความเข้มของแสงที่สะท้อนออกมาเป็น I_R เมื่อพิจารณาในกรณีที่แสงตกกระทบในแนวตั้งฉากกับสารตัวอย่างเราจะได้ความสัมพันธ์ของความเข้มแสงดังกล่าวในรูปของสัมประสิทธิ์ การสะท้อน R (reflection coefficient) และความสามารถในการส่งผ่าน T (transmission) ดังสมการ

$$R = \frac{I_R}{I_0} = \frac{(n-1)^2+K^2}{(n+1)^2+K^2} \tag{3.20}$$

$$T = \frac{I_t}{I_0} = \frac{(1-R)^2 e^{-\alpha d}}{1+R^2 e^{-\alpha d}} \tag{3.21}$$

จากสมการที่ 3.21 จะได้

$$TR^2 e^{-2\alpha d} + (1-R)^2 e^{-\alpha d} - T = 0 \tag{3.22}$$

$$e^{-\alpha d} = \frac{-(1-R)^2 \pm \sqrt{(1-R)^4 + 4T^2R^2}}{2TR^2} \tag{3.23}$$

ซึ่ง $e^{-\alpha d}$ มีค่าเป็นบวกเสมอดังนั้นจะได้

$$e^{-\alpha d} = \frac{-(1-R)^2 + \sqrt{(1-R)^4 + 4T^2R^2}}{2TR^2} \tag{3.24}$$

$$\alpha = -\frac{1}{d}\ln\left[\frac{-(1-R)^2 + \sqrt{(1-R)^4 + 4T^2R^2}}{2TR^2}\right] \tag{3.25}$$