

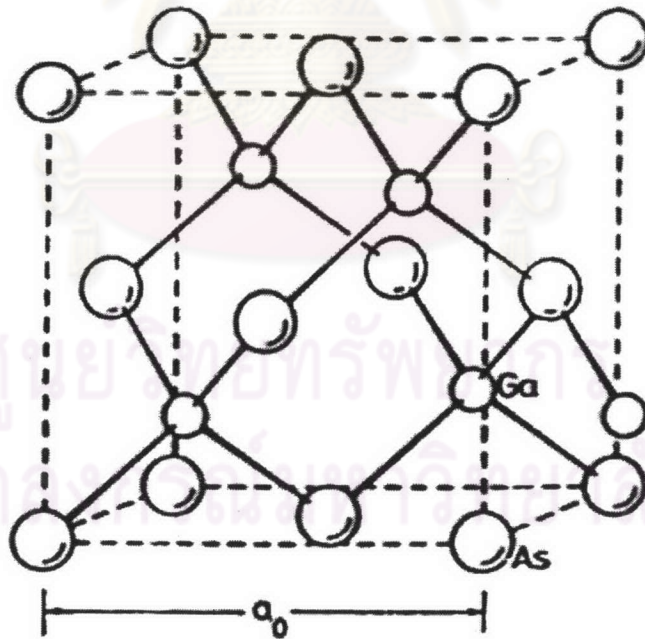
บทที่ 2

สมบัติของแกเลียมอาร์เซไนด์ สมบัติทางแสงและฟังก์ชันค่าคงที่ไดอิเล็กตริก

2.1 สมบัติของแกเลียมอาร์เซไนด์

2.1.1 โครงสร้างผลึก (crystal structure)

Goldschmidt ได้ทำการสังเคราะห์ GaAs เป็นครั้งแรกในช่วงคริสต์ศตวรรษที่ 1920 [5] และพบว่าโครงสร้างแบบซิงค์เบลนด์ (zinc blende) ที่ประกอบด้วยโครงสร้าง faced-centered-cubic (fcc) 2 ชุดซ้อนกันอยู่ในลักษณะที่เหลื่อมต่อกันเป็นระยะ $1/4$ ของเส้นทแยงมุมโดยมีพันธะแบบเตตระฮีดรอน (tetrahedral bond) คือ มีอะตอมหนึ่งอยู่ที่ตำแหน่ง $(0,0,0)$ และอีกอะตอมอยู่ที่ตำแหน่ง $(1/4,1/4,1/4)$ โดยมีมุมระหว่างพันธะเป็น $\phi = \cos^{-1}(-1/3) = 109.47^\circ$ รูปที่ 2.1 แสดงเซลล์ปฐมฐาน (primitive cell) ของโครงสร้างแบบซิงค์เบลนด์ของ GaAs ซึ่งจะพบว่าอะตอมที่อยู่ใกล้ที่สุดจะมีระยะห่างเป็น $\sqrt{3}a_0/4$



รูปที่ 2.1 แสดงเซลล์ปฐมฐาน (primitive cell) ของโครงสร้างแบบซิงค์เบลนด์ของ GaAs โดยมีอะตอมของอาร์เซนิกอยู่ที่ตำแหน่ง $(0,0,0)$ และมีอะตอมแกเลียมอยู่ที่ตำแหน่ง $(1/4,1/4,1/4)$ [6]

2.1.1.1 แกลเลียมอาร์เซไนต์ที่ไม่มีการเจือ (Undoped GaAs)

ค่าคงที่โครงผลึก (a_0) ในโครงสร้างแบบซิงค์เบลนด์นิยามเป็นระยะห่างระหว่างขอบรูปลูกบาศก์ตามที่ได้แสดงในรูปที่ 2.1 โดยค่าคงที่โครงผลึกของ GaAs ได้มีการศึกษาอย่างกว้างขวางโดยใช้เทคนิคการแทรกสอดของรังสีเอกซ์ (x-ray diffraction techniques) พบว่ามีค่าคงที่โครงผลึกขึ้นกับอุณหภูมิและความดัน โดยค่า a_0 ขึ้นอยู่กับอุณหภูมิตามสัมประสิทธิ์การขยายตัวทางความร้อน (thermal expansion coefficient) และมีค่าแปรผันกับความดันตาม สมการของ Murnaghan [6] โดยค่าคงที่โครงผลึกยังขึ้นกับความสมบูรณ์ของผลึก (crystalline perfection) อีกด้วย ค่าคงที่โครงผลึกเฉลี่ยสำหรับผลึก GaAs ที่ไม่มีการเจือและพารามิเตอร์อื่นๆ ซึ่งรายงานโดย Blakemore [5] ได้แสดงในตารางที่ 2.1

ตารางที่ 2.1 แสดงพารามิเตอร์ต่างๆของ GaAs ที่อุณหภูมิ 300 K ซึ่งรายงานโดย Blakemore [5]

Length of side of unit cube	5.65325	\AA
Nearest-neighbor distance	2.44793	\AA
Unit cube volume	1.80674×10^{-22}	cm^{-3}
Primitive cell volume	4.51684×10^{-23}	cm^{-3}
Molecular density	2.2139×10^{22}	cm^{-3}
Atomic density	4.4279×10^{22}	cm^{-3}
Molecular weight	144.642	amu
Calculated crystal density	5.3174	g/cm^3

2.1.1.2 แกลเลียมอาร์เซไนต์ที่มีการเจือ (Doped GaAs)

ค่าคงที่โครงผลึกสามารถขยายหรือหดได้เมื่อมีอะตอมสารเจือเข้าไปอยู่ภายในผลึก ความยาวพันธะ (bond length, $d_{A \rightarrow B}$) คือระยะห่างระหว่างอะตอมที่ใกล้ที่สุดสามารถหาได้จากผลรวมของรัศมีโควาเลนต์ (covalent radii) ของอะตอม A (r_A) และอะตอม B (r_B) มีค่าเป็น

$$d_{A \rightarrow B} = r_A + r_B \quad (2.1)$$

รัศมีอะตอมของ Ga และ As หาโดย Phillips [6] มีค่าเป็น

$$r_{Ga} = 1.26 \text{ \AA} \text{ และ } r_{As} = 1.18 \text{ \AA}$$

สมการที่ (2.1) ให้ค่าความยาวพันธะของ GaAs เท่ากับ 2.44 \AA ซึ่งจากการทดลองพบว่ามีความยาวพันธะ 2.44795 \AA [6] ซึ่งสอดคล้องกับค่าที่คาดไว้ สำหรับ GaAs ที่ถูกเจือด้วย Be ซึ่งมีค่ารัศมีอะตอมเท่ากับ 1.06 \AA พบว่ามีอัตราการเปลี่ยนแปลงของค่าคงที่โครงผลึกต่อความเข้มข้นของสารเจือ ($\frac{da_0}{dc}$) เป็น $-1.6 \times 10^{-6} \text{ \AA/atomic ppm}$ โดย $1 \text{ atomic ppm} = 4.4 \times 10^{16} \text{ atom/cm}^{-3}$ และสำหรับ GaAs ที่ถูกเจือด้วยคาร์บอนซึ่งมีรัศมีอะตอมเท่ากับ 0.77 \AA มีอัตราการเปลี่ยนแปลงของค่าคงที่โครงผลึกน้อยกว่า $-0.7 \times 10^{-6} \text{ \AA/atomic ppm}$ [6]

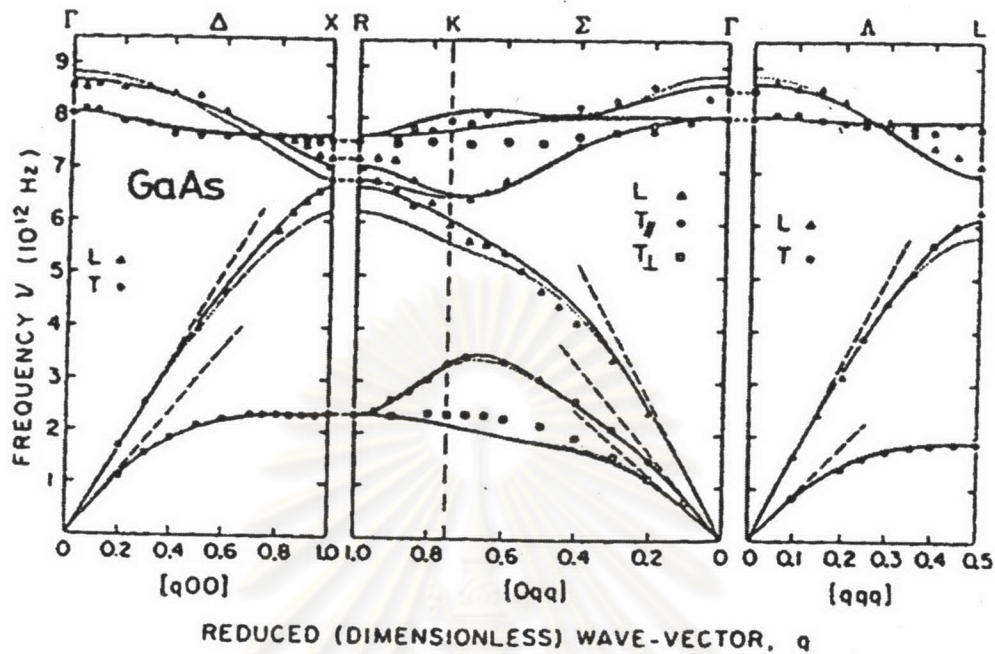
2.1.2 โฟนอนและสมบัติการสั่นในโครงผลึก

2.1.2.1 การกระจายของโฟนอน (phonon dispersion relations)

อิเล็กตรอนในผลึกภายใต้อิทธิพลของแรงภายนอกเช่นจากสนามไฟฟ้า จะมีการพาพลังงานระหว่างที่เกิดการเร่ง การเปลี่ยนแปลงพลังงาน และ/หรือ โมเมนตัม โดยกระบวนการกระเจิงจะเกิดขึ้นเนื่องจากการสั่นของโครงผลึกหรือพาหะอื่นๆที่อยู่ในบริเวณข้างเคียง การสั่นของโครงผลึกสามารถอธิบายได้โดยการวิเคราะห์การสั่นของอิเล็กตรอนและสถานะของอิเล็กตรอนในปริภูมิส่วนกลับ

โฟนอนแสดงถึงกลุ่มการสั่นของโครงผลึกที่เกิดขึ้นที่ความถี่ ω และมีพลังงาน $\hbar\omega$ และโมเมนตัม $\hbar\vec{k}$ เมื่อ \vec{k} คือเวกเตอร์คลื่น (wave vector) ถ้าในเซลล์ปฐมฐาน (primitive cell) ประกอบด้วยอะตอมที่แตกต่างกัน N ตัว จะมีรูปแบบการสั่น $3N$ รูปแบบโดยทั่วไปสามแบบแรกจะเรียกว่า acoustic branch ซึ่งจะไม่พบที่จุดศูนย์กลางส่วนที่เหลือ $3(N-1)$ แบบเรียกว่า optical branch ใน GaAs มี $N=2$ จึงมี acoustic branch 3 แบบ และ optical branch 3 แบบโดยแต่ละ branch จะประกอบด้วย การสั่นตามยาว 1 แบบ และการสั่นตามขวาง 2 แบบ

Waugh และ Dolling [5] ได้ทำการทดลองการกระเจิงของนิวตรอน (neutron scattering) ของ GaAs บริสุทธิ์ที่ 296 K ผลที่ได้แสดงในรูปที่ 2.2 โดยแสดงความถี่โฟนอน (ν) กับ reduce wave vector (q) สำหรับ q ตามทิศความสมมาตรหลัก (principal symmetry directions) $[100](\Delta)$, $[110](\Sigma)$ และ $[111](\Lambda)$ ของ GaAs



รูปที่ 2.2 แสดงการกระจายของโฟนอนใน GaAs ที่อุณหภูมิห้องจากการทดลองการกระเจิงของนิวตรอนแบบไม่ยืดหยุ่นโดย Waugh และ Dolling [5]

2.1.2.2 ความถี่โฟนอน (phonon frequencies)

ความถี่โฟนอนสามารถหาได้โดยการใช้เทคนิคที่แตกต่างกันไปเช่นการกระเจิงของนิวตรอน, การกระเจิงแบบรามาน และการสะท้อนของรังสีอินฟราเรด ข้อมูลของการกระเจิงแบบรามานในลำดับแรก (first-order Raman scattering) จะให้ข้อมูลในสถานะโฟนอนที่ $k=0$ (long wavelength phonon) ซึ่งข้อจำกัดนี้ยังรวมถึงการใช้สเปกตรัมรามานอันดับสอง (second-order Raman spectra) โดยโฟนอน $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 \approx 0$ จากการทดลอง[6] พบว่าสเปกตรัมรามานอันดับสอง ที่สังเกตที่ 300 K ให้ความถี่โฟนอน $2TA(X) = 160.3 \text{ cm}^{-1}$ ซึ่งสอดคล้องกับผลจากการกระเจิงของนิวตรอนที่ $TA(X) = 79 \text{ cm}^{-1}$ ผลการวัดความถี่โฟนอนที่ตำแหน่งต่างๆแสดงในตารางที่ 2.2 โดยเป็นข้อมูลที่ได้จากการทดลองการกระเจิงของนิวตรอนของ Waugh และ Dolling [6] ที่อุณหภูมิ 296 K และจากการทดลองของ Strauch และ Dorner ที่อุณหภูมิ 12 K

ตารางที่ 2.2 แสดงความถี่โฟนอนซึ่งวัดจากการกระเจิงของนิวตรอนจากจุด Γ , X และ L

Critical point	phonon	at 296 K ^a (cm ⁻¹)	at 12 K ^b (cm ⁻¹)
Γ	TO	267	271
	LO	285	293
X	TA	79	82
	LA	227	225
	TO	252	257
	LO	241	240
L	TA	62	63
	LA	209	207
	TO	261	264
	LO	238	242

^aข้อมูลจากการกระเจิงของนิวตรอน (J. L. T. Wanugh and G. Dolling [6])

^bข้อมูลการกระเจิงของนิวตรอน (D. Strauch and B. Dorner [6])

2.1.3 โครงสร้างแถบพลังงาน

2.1.3.1 โครงสร้างแถบพลังงานและความหนาแน่นสถานะ

ฟังก์ชันคลื่น $\Psi(\vec{r})$ ของอิเล็กตรอนแสดงโดยทฤษฎีของบลอค (Bloch's theorem)

$$\Psi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) U(\vec{r}) \quad (2.2)$$

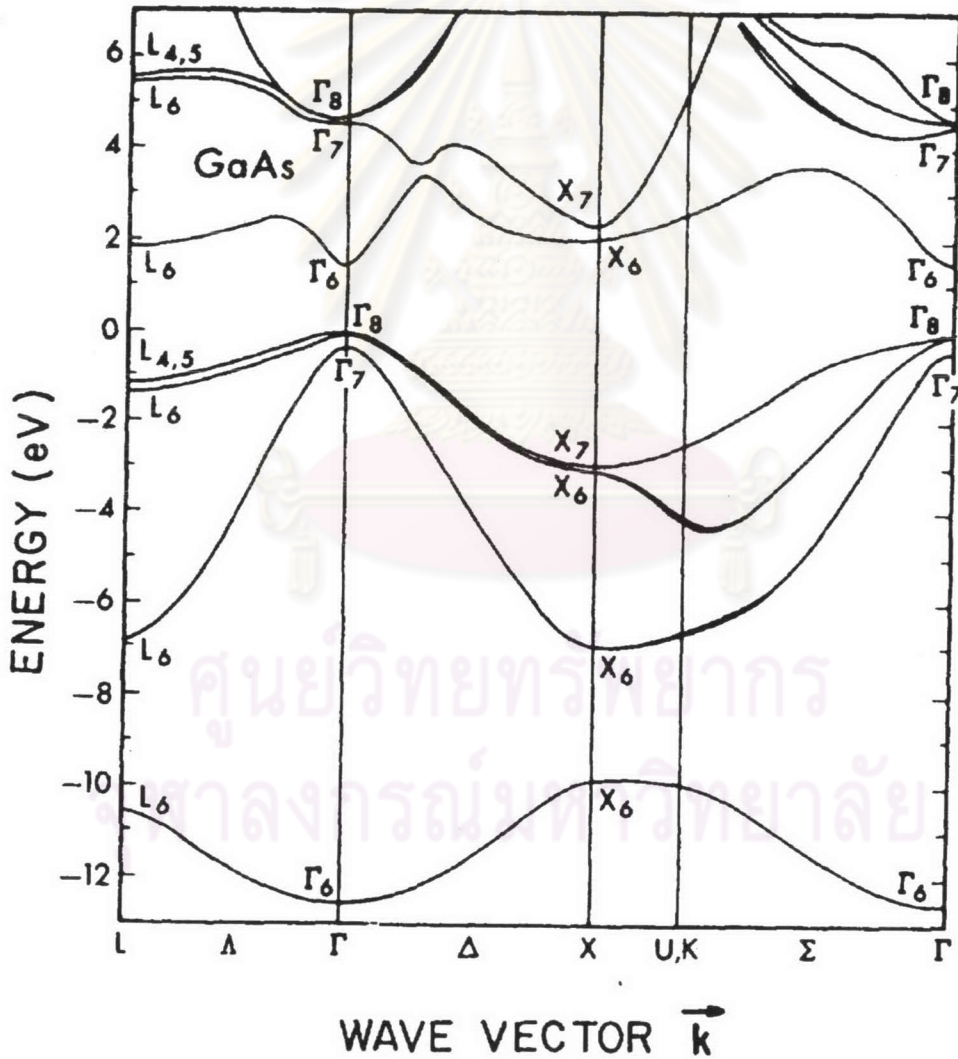
โดย $U(\vec{r})$ เป็นฟังก์ชันคาบของโครงผลึก

การประมาณอิเล็กตรอนเกือบอิสระ (nearly free-electron approximation) เป็นการประมาณที่ดีในการที่จะอธิบายถึงทฤษฎีแถบพลังงานซึ่งจะอธิบายถึงจุดเริ่มต้นของแถบพลังงานและมวลงผล ฟังก์ชันนี้จะขึ้นอยู่กัพลังงาน (E) ที่แปรตามเวกเตอร์คลื่น (\vec{k}) ในแต่ละแถบซึ่งอธิบายโดยสมการชโรดิงเจอร์ (Schrödinger equation)

$$H\Psi(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m^*} + V(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \tag{2.3}$$

เมื่อ $p^2/2m^*$ คือพลังงานจลน์ $V(r)$ เป็นพลังงานศักย์ และ E เป็นค่าไอเกนพลังงาน

เพื่อความสะดวกเราใช้ปริภูมิส่วนกลับ (reciprocal space) ในการอธิบายสถานะการสั่น (vibration state) และสถานะของอิเล็กตรอน (electronics state) แถบพิกัดของปริภูมิส่วนกลับเป็นเวกเตอร์คลื่นของคลื่นระนาบที่สอดคล้องกับรูปแบบการสั่นหรือ Bloch states โดยรูปที่ 2.3 แสดงแถบพลังงานของ GaAs ที่คำนวณโดย Chelikowsky และ Cohen [7]



รูปที่ 2.3 แสดงแถบพลังงานของ GaAs ที่คำนวณโดย Chelikowsky และ Cohen [7]

2.1.3.2 อุณหภูมิ ความดัน และการเจือ

อุณหภูมิ

อุณหภูมิมิผลต่อการเปลี่ยนแปลงช่องว่างแถบพลังงาน สมการของ Varshni [6] ถูกใช้ในการอธิบายการเปลี่ยนแปลง โดยมีสมการเป็น

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (2.4)$$

เมื่อ $E_g(0)$ คือช่องว่างแถบพลังงานที่ 0 K, α มีหน่วย eV/K และ β เป็นสัดส่วนกับอุณหภูมิเดอบาย Thurmond [5] ได้เสนอว่า ค่า $E_g(0) = 1.519$ eV, $\alpha = 5.409 \times 10^{-4}$ eV/K และ $\beta = 204$ K ซึ่งใช้กับอุณหภูมิในช่วง $0 < T < 1000$ K ฉะนั้นจะได้

$$E_g(T) = 1.519 - \frac{5.409 \times 10^{-4} T^2}{T + 204} \text{ eV} \quad (2.5)$$

ความดัน

การเพิ่มความดัน (P) จะเป็นการลดค่าคงที่โครงสร้างผลึกโดยปกติจะเป็นการเพิ่มช่องว่างแถบพลังงาน Welber และคณะ [8] ได้ทำการวัดช่องว่างแถบพลังงานที่เปลี่ยนแปลงตามความดันถึง 180 kbar ที่อุณหภูมิห้อง ให้ผลของช่องว่างแถบพลังงานตรง (direct band gap) เป็น

$$E_g^\Gamma(P) = 1.45 + 0.0126P - 3.77 \times 10^{-5} P^2 \quad (2.6)$$

โดยที่ความดันมีหน่วยเป็น kbar และช่องว่างแถบพลังงานมีหน่วย eV

การเจือ

การเติมอะตอมเจือปนในสารกึ่งตัวนำเป็นการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างแถบพลังงานของสาร โดยทั่วไปการเติมปริมาณสารเจือปนในปริมาณสูงจะทำให้ช่องว่างแถบพลังงานมีค่าลดลง [9] ในวิทยานิพนธ์นี้ได้ทำการศึกษาผลการแคบลงของช่องว่างแถบพลังงานเมื่อทำการการเติมอะตอมเจือปนในปริมาณสูงในบทที่ 5 ด้วย

2.2 สมบัติทางแสงและฟังก์ชันค่าคงที่ไดอิเล็กตริก (optical properties and dielectric)

2.2.1 สมบัติทางแสง (Optical properties)

ให้ฟังก์ชันค่าคงที่ไดอิเล็กตริกเชิงซ้อน (complex dielectric function) ที่ความถี่ ω มีสมการเป็น $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ และดัชนีหักเหเชิงซ้อน (complex refractive index) มีสมการเป็น $n^*(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$ ซึ่งมีความสัมพันธ์กับฟังก์ชันค่าไดอิเล็กตริกเป็น

$$n^*(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) = \sqrt{\epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)} \quad (2.7)$$

เมื่อ $n(\omega)$ คือดัชนีหักเห (refractive index)

$k(\omega)$ คือดัชนีลดทอน (attenuation index)

โดยจะได้ว่า

$$\epsilon_1 = n^2 - k^2, \quad \epsilon_2 = 2nk \quad (2.8)$$

หรือ

$$n = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} + \epsilon_1}{2}} \quad (2.9a)$$

$$k = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} - \epsilon_1}{2}} \quad (2.9b)$$

สัมประสิทธิ์การสะท้อน (Reflection coefficient, R) ในกรณีที่สะท้อนจากแผ่นวัสดุหนาๆ (semi infinite slab) ในสุญญากาศสามารถหาได้จาก

$$R = \left| \frac{n^* - 1}{n^* + 1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (2.10)$$

แสงที่เคลื่อนที่ผ่านตัวกลางจะถูกตัวกลางดูดกลืนไว้ โดยถ้าคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าเคลื่อนที่จากตำแหน่ง r_1 ไปยังตำแหน่ง r_2 นิยามสัมประสิทธิ์การดูดกลืน (absorption coefficient, α) ในตัวกลางเป็น

$$I(r_2) = I(r_1)e^{-\alpha|r_2-r_1|} \quad (2.11)$$

เมื่อ $I(r)$ คือความเข้มที่ตำแหน่ง r สัมประสิทธิ์การดูดกลืนสัมพันธ์กับดัชนีลดทอนโดย

$$\alpha = \frac{4\pi}{\lambda} k \quad (2.12)$$

โดย λ เป็นความยาวคลื่นของแสงในสุญญากาศ

2.2.2 ฟังก์ชันค่าคงที่ไดอิเล็กตริกในสารแกแลเลียมอาร์เซไนด์

ฟังก์ชันค่าคงที่ไดอิเล็กตริกในสารแกแลเลียมอาร์เซไนด์ที่ไม่มีการเจือปนผลบวกของค่าคงที่ไดอิเล็กตริกที่ความถี่สูง (high frequency dielectric constant, ϵ_∞) และเทอมที่เกิดจากการสั่นของโฟนอนในโครงผลึก มีฟังก์ชันเป็น

$$\epsilon = \epsilon_\infty + 4\pi\chi_{ph} \quad (2.13a)$$

$$4\pi\chi_{ph} = \epsilon_\infty \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} \quad (2.13b)$$

หรือ

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty \left(1 + \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} \right) \quad (2.14)$$

เมื่อ ϵ_∞ คือค่าคงที่ไดอิเล็กตริกที่ความถี่สูง

ω_{LO} คือความถี่ของโฟนอนทรานส์เวอร์ซัลตามยาว (Longitudinal Optical phonon frequency)

ω_{TO} คือความถี่ของโฟนอนทรานส์เวอร์ซัลตามขวาง (Transverse Optical phonon frequency)

γ คือค่าคงที่การหน่วงของโฟนอน (phonon damping constant)

ค่าคงที่ไดอิเล็กตริกที่ความถี่ต่ำหรือค่าคงที่ไดอิเล็กตริกสถิต (static dielectric constant, ϵ_s) ได้มีการศึกษาอย่างกว้างขวาง[5]โดย

- Stillman และคณะได้ทำการทดลองและเสนอว่าค่า $\epsilon_s(300) \approx 12.9$
- Rode เสนอว่า $\epsilon_s(300) = 12.9$
- Hambleton และคณะ เสนอว่า $\epsilon_s(300) = 12.5$
- Neidert พบว่า $\epsilon_s(300) = 12.90 \pm 0.07$ ในช่วง 4-18 GHz และเสนอว่าค่านี้ควรใช้ได้กับทุกความถี่ที่ต่ำกว่านี้ด้วย

ตารางที่ 2.3 ได้สรุปค่าคงที่ไดอิเล็กตริกและพารามิเตอร์อื่นๆที่สำคัญของ GaAs ไว้ซึ่งมีที่มาจาก Blakemore[5]

ตารางที่ 2.3 สรุปค่าพารามิเตอร์ต่างๆของ GaAs [5]

Parameter	Linearized form	300 K value
ค่าคงที่ไดอิเล็กตริกสถิต	$\epsilon_s = 12.40(1 + 1.20 \times 10^{-4} T)$	12.85
ค่าคงที่ไดอิเล็กตริกที่ความถี่สูง	$\epsilon_\infty = 10.60(1 + 9.0 \times 10^{-5} T)$	10.88
ดัชนีหักเห	$n = 3.255(1 + 4.5 \times 10^{-5} T)$	3.299
พลังงานของโฟนอนทรานส์คอนสตรัคตามขวาง	$\hbar\omega_{TO} = 33.81(1 - 5.5 \times 10^{-5} T) \text{ meV}$	33.25 meV
พลังงานของโฟนอนทรานส์คอนสตรัคตามยาว	$\hbar\omega_{LO} = 36.57(1 - 4.0 \times 10^{-5} T) \text{ meV}$	36.13 meV
อัตราส่วนค่าคงที่ไดอิเล็กตริก	$(\epsilon_s/\epsilon_\infty) = 1.170(1 + 3.0 \times 10^{-5} T)$	1.181

ศูนย์วิทยพัชกร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย