บทที่ 4

คุณสมบัติเชิงทัศนศาสตร์ของสารกึ่งตัวนำ

คุณสมบัติเชิงทัศนศาสตร์ของสาร เป็นคุณสมบัติที่จะบอกถึงการหน่วง การยินยอม หรือการดูดกลืนคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ผ่านเข้าไปในเนื้อของสารนั้น คุณสมบัติที่กล่าวนี้ก็คือ ดัชนีหักเหหรือค่าคงที่ไดอิเลกตริก ซึ่งคุณสมบัติทั้งสองประการนี้จะมีความสัมพันธ์ซึ่งกันและกัน เมื่อรู้คุณสมบัติอย่างหนึ่งก็จะสามารถรู้คุณสมบัติอีกอย่างหนึ่งได้ การศึกษาคุณสมบัติเชิงทัศนศาสตร์ของสารกึ่งตัวนำต้องอาศัยความรู้จากทฤษฎีแถบพลังงานของของแข็ง ผลจากทฤษฎีนี้ทำให้เราสามารถอธิบายคุณสมบัติทางไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ และยังใช้ทำนายถึงความเป็นไปได้ของอุปกรณ์กึ่งตัวนำบางแบบก่อนที่จะมีการประดิษฐ์ขึ้นใช้งานจริงๆ ดังนั้นลักษณะโครงสร้างแถบพลังงาน และช่องว่างแถบพลังงานซึ่งเป็นผลที่ได้จากทฤษฎีแถบพลังงานของของแข็ง จึงเป็นคุณสมบัติพื้นฐานของสารกึ่งตัวนำที่มีการวิจัยกันทั้งเชิงทฤษฎี และการทดลองอย่างแพร่หลาย

ลักษณะของแถบพลังงานและขนาดของช่องว่างแถบพลังงาน ซึ่งเป็นคุณสมบัติระดับจุลภาคจะมีผลโดยตรงต่อค่าดัชนีหักเหและสัมประสิทธิ์การดูดกลืนของสารกึ่งตัวนำ การทดลองเพื่อศึกษาลักษณะของแถบพลังงานและช่องว่างแถบพลังงานโดยอาศัยคุณสมบัติเชิงทัศนศาสตร์ เป็นวิธีหนึ่งที่ให้ข้อมูลได้ถูกต้องและละเอียดมาก

4.1 ทฤษฎีพื้นฐาน

ทฤษฎีเกี่ยวกับแม่เหล็กและไฟฟ้าของแมกซ์เวลล์ (Maxwell) เป็นทฤษฎีที่ประสพความสำเร็จในการอธิบายเกี่ยวกับธรรมชาติของแสง ซึ่งเป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ประกอบด้วยคลื่นขวางในสองระนาบที่ตั้งฉากซึ่งกันและกัน เป็นคลื่นของแม่เหล็กระนาบหนึ่ง และเป็นคลื่นไฟฟ้าอีกระนาบหนึ่ง ผลจากทฤษฎีนี้ทำให้เราสามารถเขียนฟังก์ชั่นคลื่นแบบระนาบ (plane wave) ของคลื่นทั้งสองที่เคลื่อนที่ในของแข็งได้ในเทอมของค่าจริงของเวกเตอร์ศักย์ (vector potential) รูปแบบของเวกเตอร์ศักย์จะเป็นดังนี้ [21]

$$\vec{A} = A_o \hat{a} e^{i(\omega t - N \vec{k}.\vec{r})} \qquad (4.1)$$

ในที่นี้ A_o เป็น อัมปลิจูดของเวกเตอร์ศักย์

$\hat{a}$ เป็น หน่วยเวกเตอร์ในทิศทางโพลาไรเซชั่น

N เป็น ปริมาณเชิงซ้อนของดัชนีหักเห มีรูปแบบดังสมการ

$$N = n - iK \tag{4.2}$$

ในที่นี้ n เป็น ค่าจริงของดัชนีหักเห

K เป็น ค่าเชิงจินตนาการของดัชนีหักเห หรือสัมประสิทธิ์เอ็กซ์ทิงค์ชั่น (extinction - coefficient)

ผลจากการคำนวณพลังงานเฉลี่ยของคลื่นจากเวกเตอร์พอยท์ติ้ง (Poynting vector) [21] ที่เขียนในเทอมของเวกเตอร์ศักย์ในสมการ (4.1) ทำให้ได้ความสัมพันธ์ระหว่างสัมประสิทธิ์เอ็กซ์ทิงค์ชั่นกับสัมประสิทธิ์การดูดกลืนดังสมการ

$$\alpha = 2K\,|\vec{k}| = \frac{4\pi K}{\lambda} \tag{4.3}$$

ในแง่ของการทดลองนั้น สิ่งที่เราสังเกตวัดได้คือ ความเข้มของคลื่นส่วนที่สะท้อนมาจากผิวของสารตัวอย่าง หรืออาจเป็นความเข้มของคลื่นส่วนที่ทะลุผ่านสารตัวอย่างออกมา สำหรับกรณีที่ให้คลื่นแสงตกกระทบแบบตั้งฉากกับผิวสารตัวอย่าง สัมประสิทธิ์การสะท้อน (R) และความสามารถในการส่งผ่าน (T) จะมีค่า

$$R = \frac{I_r}{I_o} = \frac{(n-1)^2 + K^2}{(n+1)^2 + K^2} \tag{4.4}$$

$$T = \frac{I_t}{I_o} = \frac{(1-R)^2\, e^{-\alpha d}}{1+R^2\, e^{-\alpha d}} \tag{4.5}$$

ในที่นี้ I_o เป็น ความเข้มของแสงที่ตกกระทบ

I_r เป็น ความเข้มของแสงส่วนที่สะท้อนจากผิว

I_t เป็น ความเข้มของแสงส่วนที่ทะลุผ่านไป

ถ้าความหนาของสารตัวอย่าง (d) หนากว่าค่า α^{-1} มากๆ และสัมประสิทธิ์การสะท้อนเป็นค่าคงที่โดยประมาณ สมการ (4.5) กลายเป็น

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

$$I_t = I_o e^{-\alpha d} \quad (4.6)$$

โดยทั่วไปแล้วสัมประสิทธิ์การสะท้อนจะเปลี่ยนแปลงอย่างช้าๆ ตามพลังงานของโฟตอน และการเปลี่ยนแปลงของการส่งผ่านก็จะเนื่องมาจากการแปรเปลี่ยนของสัมประสิทธิ์การดูดกลืนที่ขึ้นกับพลังงานโฟตอน ค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนจะเป็นตัวบอกถึงคุณสมบัติต่างๆ ของสารนั้น

ในทัศนะของโครงสร้างแถบพลังงาน เราสนใจว่าภายใต้อิทธิพลของพลังงานคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า โอกาสที่อิเลกตรอนจะย้ายสถานะพลังงานไปสู่สถานะที่มีระดับพลังงานสูงกว่ามีค่าเป็นอย่างไร โอกาสในการย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอน (W) จะเท่ากับจำนวนครั้งในการย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนต่อหนึ่งหน่วยปริมาตรต่อหนึ่งหน่วยเวลา ในกระบวนการดูดกลืนพลังงานโฟตอน (one-photon processes) โอกาสในการย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนจะเท่ากับจำนวนของโฟตอนที่ถูกดูดกลืนต่อหน่วยปริมาตรต่อหน่วยเวลา ถ้าให้โฟตอนหนึ่งตัวมีพลังงานเท่ากับ hν ดังนั้นพลังงานที่สอดคล้องกับการดูดกลืนจะเท่ากับ Whν

ในทฤษฎีแม่เหล็กไฟฟ้ากำหนดให้พลังงานที่สังสรรค์อยู่กับคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า เป็นพลังงานที่ไหลผ่านหนึ่งหน่วยพื้นที่ที่ตั้งฉากกับทิศทางการเคลื่อนที่ของคลื่นต่อหน่วยเวลา และกำหนดให้โดยเวกเตอร์พอยท์ติ้ง (Poynting vector, $\vec{S}$) จากกฎการอนุรักษ์พลังงานจะได้ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานที่ถูกดูดกลืน และพลังงานของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าดังนี้

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{S} = - W h\nu \quad (4.7)$$

เมื่อแทนค่า $\vec{S}$ ในเทอมของเวกเตอร์ศักย์ ($\vec{A}$) จะได้ความสัมพันธ์ระหว่างสัมประสิทธิ์การดูดกลืน และโอกาสในการย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนดังนี้

$$\alpha = 2\pi c \hbar^2 \cdot \frac{1}{nh\nu} \cdot \frac{W}{|A_o|^2} \quad (4.8)$$

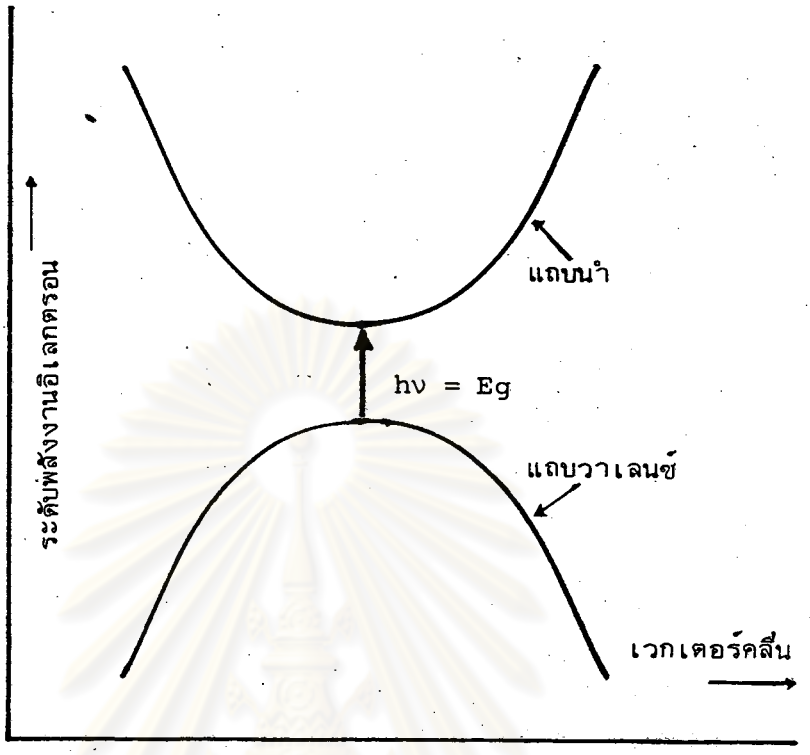
ผลของโครงสร้างแถบพลังงานจะเกี่ยวข้องกับสัมประสิทธิ์การดูดกลืน โดยผ่านทางค่า **W** และค่า W นี้ก็ยังขึ้นกับลักษณะของการย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนอีกด้วย ซึ่งจะได้กล่าวถึงต่อไป

4.2 การย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนระหว่างแถบพลังงานในสารกึ่งตัวนำ

การย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนในสารกึ่งตัวนำ เราจะหมายถึงการย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบนำ ซึ่งจะเกิดจากอิเลกตรอนในแถบวาเลนซ์ถูกกระตุ้นโดยพลังงานโฟตอนของแสง อิเลกตรอนจะดูดกลืนพลังงานโฟตอนไว้ แล้วย้ายสถานะพลังงานไปยังแถบนำ พร้อมกับมีอนุภาคโฮลเหลือทิ้งไว้ในแถบวาเลนซ์ ในกระบวนการดูดกลืนพลังงานโฟตอน เราจะสนใจเฉพาะการดูดกลืนแบบพื้นฐาน (fundamental absorption) เท่านั้น ซึ่งจะคล้องจองกับการย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนจากจุดสูงสุดของแถบวาเลนซ์ไปยังจุดต่ำสุดของแถบนำ ผลต่างของพลังงานระหว่างจุดต่ำสุดของแถบนำกับจุดสูงสุดของแถบวาเลนซ์จะเท่ากับขนาดของช่องว่างแถบพลังงาน ดังนั้นการดูดกลืนพลังงานโฟตอนจะเกิดได้น้อยมาก ถ้าโฟตอนมีพลังงานน้อยกว่าช่องว่างแถบพลังงานมากๆ และจะเกิดได้มากขึ้นเมื่อพลังงานของโฟตอนมีค่ามากขึ้น ลักษณะของการย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนระหว่างแถบพลังงาน จะขึ้นอยู่กับลักษณะโครงสร้างของแถบพลังงานด้วย และจะได้กล่าวในลำดับต่อไป

4.2.1 การย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบนำแบบตรง

ในหัวข้อ 2.7.2.3 เราทราบว่าโครงสร้างแถบพลังงานแบบตรงนั้น จุดสูงสุดของแถบวาเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำ จะอยู่ที่เวกเตอร์คลื่นค่าเดียวกัน ดังนั้นการย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบนำของโครงสร้างแถบพลังงานแบบนี้จะเป็นแบบตรงด้วย กล่าวคือ ถ้าหากมีคลื่นแสงหรือโฟตอนที่มีพลังงานเท่ากับช่องว่างแถบพลังงาน (E_g) ตกกระทบผลึก (เราถือว่าเวกเตอร์คลื่นของโฟตอนมีค่าน้อยมาก) อิเลกตรอนในผลึกที่มีระดับพลังงานอยู่ที่จุดสูงสุดของแถบวาเลนซ์จะดูดกลืนพลังงานของโฟตอนไว้ แล้วย้ายสถานะพลังงานไปยังระดับพลังงานที่จุดต่ำสุดของแถบนำ ซึ่งอยู่ที่เวกเตอร์คลื่นค่าเดียวกัน และมีอนุภาคโฮลเกิดขึ้นแทนที่อยู่ในแถบวาเลนซ์ ดังรูปที่ 4.1



รูปที่ 4.1 แสดงการเคลื่อนย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนแบบตรง

ในกระบวนการดูดกลืนพลังงานที่เกิดขึ้นนี้ ไม่ได้ทำให้เวกเตอร์คลื่นของระบบมีการเปลี่ยนแปลงแต่อย่างไร ซึ่งจากกฎการอนุรักษ์ของเวกเตอร์คลื่น (conservation of wavevector) ทำให้ได้ความสัมพันธ์ระหว่างเวกเตอร์คลื่นของอิเลกตรอน (k_e) และของโฮล (k_h) ดังสมการ

$$k_e + k_h = 0 \qquad (4.9)$$

ความถี่ของพลังงานโฟตอนที่คล้องจองกับขนาดของช่องว่างแถบพลังงาน เรียกว่าเป็น ความถี่ขีดเริ่ม (threshold frequency; ν_g) ของการย้ายสถานะพลังงานระหว่างแถบพลังงาน ความถี่ค่านี้จะเป็นตัวบอกถึงขนาดของช่องว่างแถบพลังงานโดยความสัมพันธ์ $E_g = h\nu_g$ ในทางปฏิบัติแล้วเราไม่สามารถที่จะกำหนดค่า ν_g ได้ถูกต้องโดยตรง การคำนวณหาค่าของ E_g เราสามารถหาได้จากค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนในสมการ (4.8) ผลจากการคำนวณหาโอกาสในการย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอน (W) จากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบนำแบบตรง โดยวิธีการของกลศาสตร์ควอนตัม [22] ทำให้สมการ (4.8) กลายเป็น

$$(\alpha h\nu) \equiv A(h\nu - E_g)^{\frac{1}{2}} \quad (4.10)$$

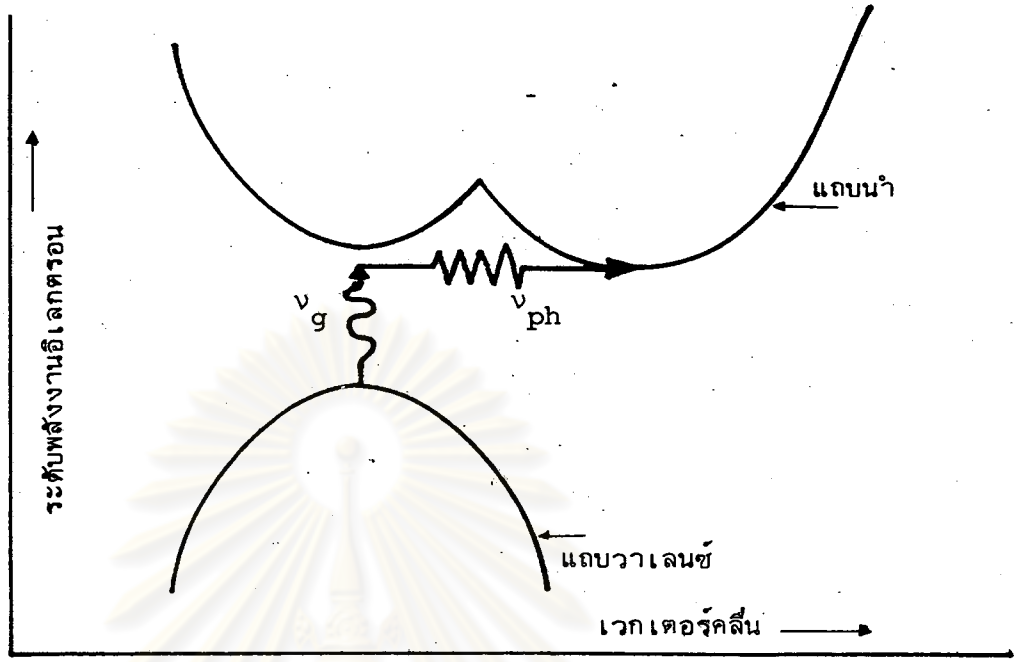
ในที่นี้ A เป็น ค่าคงที่

4.2.2 <u>การย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบนำแบบเฉียง</u>

สำหรับโครงสร้างแถบพลังงานแบบเฉียง การย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนจากจุดสูงสุดของแถบวาเลนซ์ ไปยังจุดต่ำสุดของแถบนำจะเป็นแบบเฉียง เนื่องจากโครงสร้างแถบพลังงานแบบเฉียงจุดสูงสุดของแถบวาเลนซ์ และจุดต่ำสุดของแถบนำไม่ได้อยู่ที่เวกเตอร์คลื่นค่าเดียวกัน ดังนั้นถึงแม้ว่าพลังงานของโฟตอนจะเท่ากับช่องว่างแถบพลังงาน (E_g) แต่ก็ไม่สามารถทำให้อิเลกตรอนย้ายสถานะพลังงานจากจุดสูงสุดของแถบวาเลนซ์ไปยังจุดต่ำสุดของแถบนำได้ เนื่องจากว่าไม่เป็นไปตามกฎการอนุรักษ์ของเวกเตอร์คลื่น (เพราะว่า $k_e + k_h \neq 0$) เพื่อที่จะให้การย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนเกิดขึ้นได้ จะต้องมีเวกเตอร์คลื่นของอนุภาคอย่างใดอย่างหนึ่งเข้ามาเกี่ยวข้องด้วย เพื่อทำให้ผลรวมของเวกเตอร์คลื่นในระบบเท่ากับศูนย์ตามกฎการอนุรักษ์ของเวกเตอร์คลื่น จากทฤษฎีแถบพลังงานของของแข็ง พบว่าจะต้องมีโฟนอน [15] ซึ่งมีเวกเตอร์คลื่น k_{ph} ความถี่ ν_{ph} และพลังงานเท่ากับ $h\nu_{ph}$ เข้ามาร่วมในกระบวนการดูดกลืนพลังงานด้วย เพื่อให้เป็นไปตามกฎการอนุรักษ์ของเวกเตอร์คลื่น และทำให้ได้ความสัมพันธ์ระหว่างเวกเตอร์คลื่นสำหรับกรณีนี้ดังนี้คือ

$$k_e + k_h + k_{ph} = 0 \quad (4.11)$$

ดังนั้นพลังงานของโฟตอนที่จะทำให้อิเลกตรอนเกิดการย้ายสถานะพลังงานได้ต้องเท่ากับ $Eg + h\nu_{ph}$ แสดงว่าการย้ายสถานะพลังงานของอิเลกตรอนแบบเฉียงนั้น พลังงานของโฟตอนจะต้องมากกว่าช่องว่างแถบพลังงานเสมอ แผนผังของการย้ายสถานะพลังงานแบบเฉียงได้แสดงไว้ในรูปที่ 4.2



รูปที่ 4.2 แผนผังแสดงการเคลื่อนย้ายสถานะพลังงานแบบเฉียง

สำหรับสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแถบพลังงานแบบเฉียง พบว่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนมีความสัมพันธ์กับช่องว่างแถบพลังงานดังนี้ [22]

$$(\alpha h\nu) \equiv B(h\nu - E_g)^2 \qquad (4.12)$$

ในที่นี้ B เป็น ค่าคงที่

4.3 สัมประสิทธิ์การดูดกลืนของสารกึ่งตัวนำ

การศึกษาการดูดกลืนพลังงานโฟตอนของสารกึ่งตัวนำในลักษณะแผ่นบาง โดยการวัดความเข้มแสงตกกระทบผิวของสารตัวอย่าง (I_o) และความเข้มแสงส่วนที่ทะลุผ่านเนื้อสารตัวอย่าง (I_t) ที่ความยาวคลื่นแสงค่าต่างๆ (ใช้แสงความยาวคลื่นเดียว) ทำให้เราสามารถหาค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนของสารตัวอย่างที่มีต่อคลื่นแสงความถี่ต่างๆ โดยหาจากความสัมพันธ์

$$I_t = I_o e^{-\alpha d} \qquad (4.6)$$

ในที่นี้ d เป็น ความหนาของแผ่นสารตัวอย่าง

ในทางปฏิบัติจริงๆ แล้ว พบว่าการดูดกลืนพลังงานโฟตอนที่เกิดในเนื้อสารตัวอย่างนั้น ไม่ได้เกิดจากผลของการดูดกลืนพลังงานของอิเลกตรอนอย่างเดียว แต่เกิดจากสาเหตุอื่นได้อีก กล่าวคือ ภายในผลึกของสารกึ่งตัวนำนั้นมักจะมีความบกพร่องของผลึก (crystal defects) เกิดอยู่ด้วยเสมอ ดังนั้นการดูดกลืนพลังงานแสงที่เกิดขึ้น ส่วนหนึ่งจึงมาจากผลของความบกพร่องอันนี้ ทำให้มีสัมประสิทธิ์การดูดกลืนพื้นหลัง (background absorption coefficient; α_o) เกิดขึ้น ดังนั้นค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนที่วัดได้จริงจากการทดลอง จึงเป็นค่ารวมที่เกิดจากผลต่างๆ ที่กล่าวแล้ว ความสัมพันธ์ที่ถูกต้องระหว่างสัมประสิทธิ์การดูดกลืนและช่องว่างแถบพลังงานจากสมการ (4.10) และ (4.12) จึงกลายเป็น [23]

สำหรับสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแถบพลังงานแบบตรง

$$(\alpha - \alpha_o)h\nu \equiv A(h\nu - E_g)^{\frac{1}{2}} \tag{4.13}$$

หรือ

$$h\nu - E_g \propto \{h\nu(\alpha - \alpha_o)\}^2 \tag{4.14}$$

สำหรับสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแถบพลังงานแบบเฉียง

$$(\alpha - \alpha_o)h\nu \equiv B(h\nu - E_g)^2 \tag{4.15}$$

หรือ

$$h\nu - E_g \propto \{h\nu(\alpha - \alpha_o)\}^{\frac{1}{2}} \tag{4.16}$$

รายละเอียดของวิธีการวัด ตลอดจนการคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืน และช่องว่างแถบพลังงานของสารประกอบกึ่งตัวนำซาลโคไพไรท์ที่เตรียมขึ้นเพื่อการศึกษาวิจัยครั้งนี้ จะได้กล่าวโดยละเอียดในบทต่อไป

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย