บทที่ 6

สมบัติการดูดกลืนแสงของสารกึ่งตัวนำ

การศึกษาสมบัติเชิงทัศนศาสตร์ (optical properties) ของสารกึ่งตัวนำ ทำให้รู้ลักษณะโครงสร้างแถบพลังงานของอิเล็กตรอนในสารกึ่งตัวนำนั้น ผลจากการศึกษานี้ประกอบกับทฤษฎีแถบพลังงานของของแข็ง (band theory of solids) ทำให้เราสามารถอธิบายสมบัติเชิงไฟฟ้า (electrical properties) ของสารกึ่งตัวนำ และยังทำนายถึงความเป็นไปได้ของอุปกรณ์กึ่งตัวนำ (semiconductor devices) บางอย่างก่อนที่จะมีการประดิษฐ์ขึ้นใช้งานจริง ๆ ดังนั้นลักษณะโครงสร้างแถบพลังงาน และขนาดของช่องว่างแถบพลังงานซึ่งเป็นผลที่ได้จากทฤษฎีดังกล่าวนี้จึงเป็นสมบัติพื้นฐานของสารกึ่งตัวนำที่มีการวิจัยกันทั้งเชิงทฤษฎีและการทดลองอย่างแพร่หลาย

ในบทนี้จะกล่าวถึงทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับการย้ายสถานะพลังงาน (interband transitions) ของอิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบนำ และการวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงของสารกึ่งตัวนำเมื่อถูกกระตุ้นด้วยแสงที่มีค่าพลังงานใกล้เคียงกับขนาดของช่องว่างแถบพลังงานเพื่อที่จะหาขนาดของช่องว่างและลักษณะโครงสร้างแถบพลังงานดังกล่าว

6.1 <u>ทฤษฎีการดูดกลืนแสง</u> (theory of optical absorption)

ทฤษฎีคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าของ Maxwell (45,46,47) ประสบความสำเร็จในการอธิบายธรรมชาติของแสงที่สัมพันธ์กับตัวกลางใด ๆ จากทฤษฎีนี้ทำให้เราสามารถอธิบายได้ว่าสมบัติเชิงทัศนศาสตร์ของตัวกลางเป็นสมบัติที่จะบอกถึงการหน่วง การยินยอม หรือการดูดกลืนคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ผ่านเข้ามาในเนื้อสารนั้น สมบัติดังกล่าวคือ ดัชนีหักเห (reflective index) หรือค่าคงที่ไดอิเลกตริก (dielectric constant) โดยที่เมื่อรู้สมบัติอย่างหนึ่งจะสามารถรู้สมบัติอีกอย่างหนึ่งได้ ผลจากทฤษฎีคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้านี้เราสามารถเขียนฟังค์ชันคลื่นแบบระนาบ (plane wave) ของคลื่นที่เคลื่อนที่ในของแข็งได้ในเทอมของค่าจริงของศักย์เวกเตอร์ (vector potnetial) คือ

$$\vec{A} = A_o \hat{a}\, e^{i(\omega t - N\vec{k}.\vec{r})} \qquad (6.1)$$

A_o คืออัมปลิจูดของศักย์เวกเตอร์

$\hat{a}$ คือหน่วยเวกเตอร์ (unit vector) ในทิศทางโพลาไรเซชัน

$\vec{k}$ คือเวกเตอร์คลื่น (wave vector)

$\vec{r}$ คือระยะขจัด (displacement)

N คือปริมาณเชิงซ้อน (complex number) ของดัชนีหักเห

โดยที่ N อยู่ในรูป

$$N = n - iK$$

ในที่นี้ n คือค่าจริง (real part) ของดัชนีหักเห

K คือค่าจินตภาพ (imaginary part) ของดัชนีหักเหหรือสัมประสิทธิ์เอ็กซ์ทิงค์ชัน (extinction coefficient)

นิยามของสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง ในระดับมหภาค (macroscopic) คือ สัดส่วนของความเข้มแสงที่ลดลงต่อหนึ่งระยะทางของตัวกลาง (fractional decrease in intensity with distance) ดังสมการ

$$\alpha = -\frac{1}{I}\frac{dI}{dr} \qquad (6.2)$$

โดยที่ I คือ ความเข้มแสงที่ระยะทาง r ใด ๆ ในตัวกลาง

เนื่องจากความเข้มแสงเป็นปฏิภาคโดยตรงกับกำลังสองของอัมปลิจูดของศักย์เวกเตอร์ $\vec{A}$ ดังนั้นเราจะพบว่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง (α) สัมพันธ์กับสัมประสิทธิ์เอกซ์ทิงค์ชัน ดังสมการ

$$\alpha = \frac{4\pi K}{\lambda} \qquad (6.3)$$

โดยที่ λ คือความยาวคลื่นของแสงในสุญญากาศ

เมื่อฉายแสงเข้าไปในตัวกลางใด ๆ ความเข้มแสงที่ผ่านเข้าไปในตัวกลางดังกล่าวจะลดลงเนื่องจากแสงถูกดูดกลืนโดยตัวกลาง ที่ความถี่ของแสงค่าเดียวกันตัวกลางแต่ละชนิดจะดูดกลืนแสงได้ต่างกัน การดูดกลืนแสงของตัวกลางดังกล่าวจะเป็นสมบัติเฉพาะของตัวกลางแต่ละชนิด

การดูดกลืนแสงของสารกึ่งตัวนำสามารถอธิบายได้ด้วยทฤษฎีแถบพลังงานของของแข็ง (band theory of solids) ขอบการดูดกลืนพื้นฐาน (fundamental absorption edge) จะตรงกับพลังงานที่น้อยที่สุดของแสงที่สามารถทำให้อิเล็กตรอนย้ายสถานะพลังงานจากจุดสูงสุดของแถบวาเลนซ์ (top of the valence band) ไปยังจุดต่ำสุดของแถบนำ (bottom of the conduction band) ซึ่งการดูดกลืนแสงนี้ขึ้นอยู่กับโอกาสในการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอน (transition propbability, W) โอกาสในการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนคือจำนวนครั้งในการย้ายสถานะพลังงานต่อหนึ่งหน่วยปริมาตรต่อหนึ่งหน่วยเวลา ในขบวนการการดูดกลืนพลังงานโฟตอน (one photon process) โอกาสในการย้ายสถานะพลังงานดังกล่าวจะเท่ากับจำนวนโฟตอนที่ถูกดูดกลืนต่อหนึ่งหน่วยปริมาตรต่อหนึ่งหน่วยเวลา ถ้าโฟตอนหนึ่งตัวมีพลังงาน $h\nu$ ดังนั้นพลังงานที่สอดคล้องกับการดูดกลืนจะเท่ากับ $Wh\nu$

พลังงานของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าถูกกำหนดอยู่ในรูปของเวกเตอร์พอยท์ติง (Poynting vector, $\vec{S}$) จากกฎการอนุรักษ์พลังงานจะได้ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานที่ถูกดูดกลืนกับพลังงานของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าดังนี้

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{S} = -Wh\nu \qquad (6.4)$$

จากสมการที่ (6.1),(6.3) และ (6.44)จะได้ความสัมพันธ์ระหว่างสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงกับโอกาสในการย้ายสถานะของอิเล็กตรอนดังสมการ

$$\alpha = 2\pi ch^2 \frac{1}{nh\nu} \frac{W}{A_o}^2$$

ค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงนี้ขึ้นกับลักษณะโครงสร้างแถบพลังงานผ่านทางค่าโอกาส

ในการย้ายสถานะพลังงาน จากการพิจารณาขอบการดูดกลืนพื้นฐานถ้าจุดสูงสุดของแถบวาเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำอยู่ที่เวกเตอร์คลื่น (wave vector, $\vec{k}$) ค่าเดียวกันในบริลลันโซน (Brillouin zone) จะเรียกการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนแบบนี้ว่าเป็นแบบตรง (direct transition) การย้ายสถานะพลังงานแบบตรงนี้ยังแบ่งออกเป็นการย้ายสถานะพลังงานชนิดยอมรับได้ (allowed transitions) และชนิดต้องห้าม (forbidden transitions) ซึ่งจะขึ้นอยู่กับออฟติคอล เมตริก อิลิเมนต์ (optical matrix element) ว่าจะมีค่าไม่เป็นศูนย์หรือเป็นศูนย์ในการประมาณครั้งที่หนึ่ง (9,46) (first approximation) ตามลำดับ แต่ถ้าจุดสูงสุดของแถบวาเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำดังกล่าวอยู่ที่เวกเตอร์คลื่น ($\vec{k}$) ต่างกัน จะเรียกว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานแบบเฉียง (indirect transitions)

สำหรับกรณีที่แถบพลังงานเป็นรูปพาราโบลาอย่างง่าย (simple parabolic band) สัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงเนื่องจากการย้ายสถานะพลังงานแบบตรงชนิดยอมรับได้และชนิดต้องห้ามจะเป็นไปตามสมการที่ (6.6) และ (6.7) ตามลำดับดังนี้ (45,47)

$$(\alpha h\nu)^2 = A(h\nu - Eg) \qquad (6.6)$$

และ $$(\alpha h\nu)^{2/3} = B(h\nu - Eg) \qquad (6.7)$$

โดยที่ Eg คือขนาดช่องว่างแถบพลังงานพื้นฐาน (fundamental energy gap)

A และ B คือค่าคงที่

ในกรณีการย้ายสถานะพลังงานแบบเฉียงจะเป็นขบวนการการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนแบบตรงที่รวมกับการดูดกลืนหรือปลดปล่อยโฟนอน (phonon) ดังสมการ

$$(\alpha h\nu)^{\frac{1}{2}} = C(h\nu - Eg) \qquad (6.8)$$

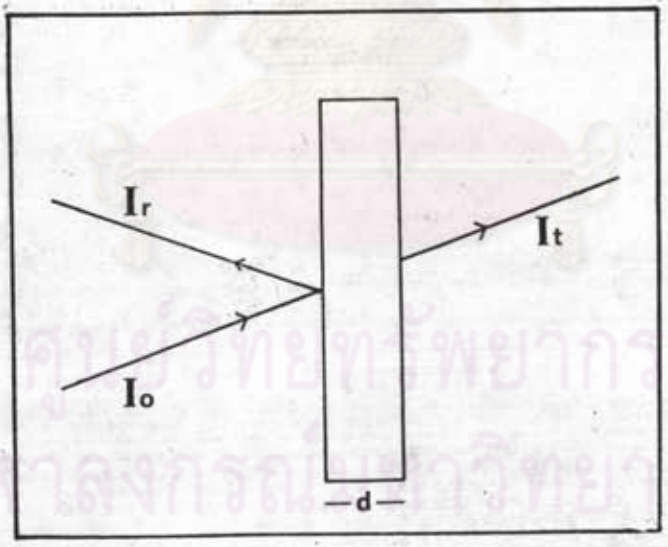
เมื่อ C คือค่าคงที่

6.2 การวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืน

เราสามารถที่จะหาขอบการดูดกลืนพื้นฐาน (fundamental absorption edge) ได้จากการพิจารณาสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงที่ขึ้นกับพลังงานของโฟตอนที่ตกกระทบสารตัวอย่าง จากรูปที่ 6.1 ถ้าให้ความเข้มแสงตกกระทบสารตัวอย่างเป็น I_o, ความเข้มแสงที่ทะลุผ่านเป็น I_t และความเข้มแสงที่สะท้อนออกมาเป็น I_r ในกรณีที่แสงตกกระทบตั้งฉากกับสารตัวอย่าง เราจะได้ความสัมพันธ์ของความเข้มแสงดังกล่าวรวมทั้งสมบัติของตัวกลางอยู่ในรูปของสัมประสิทธิ์การสะท้อน (Reflection coefficient, R) และความสามารถในการส่งผ่าน (Transmissison, T) ดังสมการ

$$R = \frac{I_r}{I_o} = \frac{(n-1)^2 + K^2}{(n+1)^2 + K^2} \qquad (6.9)$$

$$T = \frac{I_t}{I_o} = \frac{(1-R)^2 e^{-\alpha d}}{1+R^2 e^{-2\alpha d}} \qquad (6.10)$$



รูปที่ 6.1 แสดงการทดลองวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง

ถ้าความหนาแน่นของสารตัวอย่าง (d) มีค่าเหมาะสม ที่ทำให้ปริมาณ αd $R^2 e^{-2\alpha d}$ มีค่าน้อยกว่า 1 สมการที่ (6.10) จะกลายเป็น

$$\frac{I_t}{I_o} = (1-R^2)\, e^{-\alpha d} \qquad (6.11)$$

แต่โดยทั่วไปค่าสัมประสิทธิ์การสะท้อน (R) จะเปลี่ยนแปลงไปน้อยมากเมื่อเทียบกับค่าพลังงานของโฟตอนที่เปลี่ยนไปในช่วงพลังงานที่ใกล้เคียงกับขอบการดูดกลืนพื้นฐาน ดังนั้นเราจะถือว่าเทอม $(1-R^2)$ เป็นค่าคงที่ สมการที่ (6.11) จะกลายเป็น

$$\alpha' = \frac{1}{d} \ln\left(\frac{I_o}{I_t}\right) = \alpha + \text{constant} \qquad (6.12)$$

นั่นคือการคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงจากอัตราส่วนความเข้มแสงที่ตกกระทบต่อความเข้มแสงที่ทะลุผ่าน (I_t) โดยไม่คิดความเข้มแสงที่สะท้อนออกมาจะได้ค่ามากกว่าความเป็นจริงเท่ากับค่าคงที่ (constant) ที่เกิดขึ้น แต่อย่างไรก็ตามในการทดลองนั้นจะต้องนำค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนพื้นหลัง (background absorption coeffient, α_o) ซึ่งเกิดจากความบกพร่องของผลึกเองมาหักออกจาก α' จึงจะได้ค่า α ที่แท้จริง ซึ่งรายละเอียดในการวัดรวมทั้งการคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงและขนาดของช่องว่างแถบพลังงานของสารกึ่งตัวนำ $CuInSe_2$ ที่เตรียมได้จะกล่าวโดยละเอียดในบทที่ 9 ถัดไป

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย