ค่าคงที่ของโครงผลึกและช่องว่างแถบพลังงาน ของโลหะผสมกึ่งตัวนำ $AgGaTe_{2(1-z)}Se_{2z}$

นายธงชัย พันธ์เมธาฤทธิ์

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
พ.ศ. 2526

ISBN 974-561-956-6

010345

I15816692

Lattice Constant and Band Gap of Semiconductor Alloy $AgGaTe_{2(1-z)}Se_{2z}$

Mr. Tongchai Panmatarite

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1983

หัวข้อวิทยานิพนธ์ ค่าคงที่ของโครงผลึกและช่องว่างแถบพลังงานของโลหะผสมกึ่งตัวนำ $AgGaTe_{2(1-z)}Se_{2z}$

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

โดย นายธงชัย พันธ์เมธาฤทธิ์

ภาควิชา ฟิสิกส์

อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ สมพงศ์ ฉัตราภรณ์

บัณฑิตวิทยาลัยจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้นับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

.....คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย
(รองศาสตราจารย์ ดร.สุประดิษฐ์ บุนนาค)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

.....ประธานกรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.วิจิตร เส็งทะพันธุ์)

.....กรรมการ
(ศาสตราจารย์ ดร.วิรุฬห์ สายคณิต)

.....กรรมการ
(อาจารย์ ดร.ประไพพรรณ ฉันธิกุล)

.....กรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์สมพงศ์ ฉัตราภรณ์)

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หัวข้อวิทยานิพนธ์ ค่าคงที่ของโครงผลึกและช่องว่างแถบพลังงานของโลหะผสมกึ่งตัวนำ $AgGaTe_{2(1-z)}Se_{2z}$

ชื่อนิสิต นายธงชัย พันธ์เมธาฤทธิ์

อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ สมพงศ์ ฉัตราภรณ์

ภาควิชา ฟิสิกส์

ปีการศึกษา 2525

พอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อ

ในการวิจัยนี้ใช้วิธีการหลอมโดยตรงและแอนนีลเพื่อเตรียมโลหะผสมกึ่งตัวนำชาลโคไพไรท์ $AgGaTe_{2(1-z)}Se_{2z}$ ที่สัดส่วนอะตอม (z) ค่าต่าง ๆ จากการศึกษาการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์พบว่าสารซึ่งได้แอนนีลในช่วง $1\frac{1}{2}$ ถึง $4\frac{1}{2}$ เดือน จะอยู่ในรูปเฟสเดี่ยวและมีตำแหน่งอะตอมอยู่ในภาวะสมดุล การวิเคราะห์เกี่ยวกับแพทเทิร์นการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ได้ค่าคงที่ของโครงผลึก a ในช่วง 5.9883 ถึง 6.3260 Å และ c ในช่วง 10.8823 ถึง 11.9937 Å การศึกษาโครงสร้างแถบพลังงานโดยวิธีการดูดกลืนทางแสงพบว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอนแบบตรง ซึ่งได้ช่องว่างของแถบพลังงานในช่วง 1.13 ถึง 1.75 eV การผันแปรของค่าคงที่ของโครงผลึก (a) และ (c) รวมทั้ง ช่องว่างของแถบพลังงาน (Eg) กับสัดส่วนอะตอม (z) สามารถปรับเข้ากับสมการกำลังสอง ดังต่อไปนี้

$$a = 0.0174z^2 - 0.3637\,z + 6.3259$$

$$c = 0.1424\,z^2 - 1.2446\,z + 11.9968$$

และ $$Eg = 0.3839\,z^2 + 0.1772\,z + 1.1490$$

ในการวิจัยต่อไปสามารถใช้ความสัมพันธ์ข้างบนหาโลหะผสมที่มีค่าคงที่ของโครงผลึกและช่องว่างแถบพลังงานที่ต้องการได้

Thesis Title	Lattice Constant and Band Gap of Semiconductor Alloy $AgGaTe_{2(1-z)}Se_{2z}$
Name	Mr. Tongchai Panmatarite
Thesis Advisor	Assistant Professor Somphong Chatraphorn, M.S.
Department	Physics
Academic Year	1982

ABSTRACT

In this investigation, chalcopyrite semiconductor alloy $AgGaTe_{2(1-z)}Se_{2z}$ with different atomic fraction; z; have been prepared by direct melt and anneal technique. X-ray diffraction shows that single phase and equilibrium sample can be obtained by annealing period from $1\frac{1}{2}$ to $4\frac{1}{2}$ months. Analysis of x-ray diffraction patterns yield lattice constant a; ranging from 5.9883 to 6.3260 Å and c; ranging from 10.8823 to 11.9937 Å. Electronic band structure studied by optical absorption method shows agreement with direct electronic transition with band gap; Eg; of 1.13 to 1.75 eV. Variation of lattice constant a and c, as well as the energy band gap Eg with atomic fraction z can be fitted to quadratic equations as follows

$$a = 0.0174\ z^2 - 0.3637\ z + 6.3259$$

$$c = 0.1424\ z^2 - 1.2446\ z + 11.9968$$

and $$Eg = 0.3839\ z^2 + 0.1772\ z + 1.1490$$

Further investigations of any alloy with specific lattice constant and band gap within the range given above can be obtained from the above relations.

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลงได้ด้วยความช่วยเหลือของผู้ช่วยศาสตราจารย์ สมพงศ์ ฉัตราภรณ์ อาจารย์ที่ปรึกษา ที่กรุณาให้คำแนะนำปรึกษาเกี่ยวกับวิธีการทดลองวิชาการทางด้านฟิสิกส์สารกึ่งตัวนำและวิธีเขียนวิทยานิพนธ์ ตลอดจนจัดหาเครื่องมือและอุปกรณ์ต่าง ๆ ผู้เขียนขอกราบขอบพระคุณไว้ ณ ที่นี้ ขอขอบพระคุณศาสตราจารย์ ดร.วิรุฬห์ สายคณิต ที่กรุณาให้คำแนะนำปรึกษาเกี่ยวกับวิชาการทางด้านฟิสิกส์สารกึ่งตัวนำจนกระทั่งประสพผลสำเร็จ ขอขอบพระคุณคณะผู้วิจัยสารกึ่งตัวนำ ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัยที่มีส่วนทำให้เกิดโครงการร่วมมือทางวิชาการระหว่างภาควิชาฟิสิกส์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัยกับภาควิชาฟิสิกส์ มหาวิทยาลัยออตตาวา ประเทศคานาดา โดยได้รับความช่วยเหลือจากองค์การ CIDA (Canadian International Development Agency) จนกระทั่งตั้งห้องทดลองวิจัยสารกึ่งตัวนำขึ้นได้ ขอขอบพระคุณผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.วสันต์ พงศาพิชญ์ หน่วยผลึกวิทยารังสีเอ็กซ์ของแผนกธรณีวิทยา และรองศาสตราจารย์ ดร.สุพนิจ พราหมทัศ และรองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์ หน่วยผลึกวิทยารังสีเอ็กซ์ของภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ในการให้คำแนะนำตลอดจนเครื่องมือเครื่องใช้ต่าง ๆ จนงานทดลองได้ประสพผลสำเร็จ

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย ..... ง

บทคัดย่อภาษาอังกฤษ ..... จ

กิตติกรรมประกาศ ..... ฉ

สารบัญตาราง ..... ญ

สารบัญภาพ ..... ฏ

บทที่ 1 บทนำ 1

บทที่ 2 สารกึ่งตัวนำและวิธีการเตรียม 6

2.1 โครงสร้างพันธะ 7

2.2 โครงสร้างผลึก 12

2.2.1 โครงสร้างผลึกแบบเพชร 12

2.2.2 โครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์ 13

2.2.3 โครงสร้างผลึกแบบเวอร์ทไซท์ 14

2.2.4 โครงสร้างผลึกแบบซาลโคไพไรท์ 15

2.3 โครงสร้างแถบพลังงาน 16

2.3.1 โครงสร้างแถบพลังงานแบบสารกึ่งตัวนำ Si 17

2.3.2 โครงสร้างแถบพลังงานแบบสารกึ่งตัวนำ Ge 18

2.3.3 โครงสร้างแถบพลังงานแบบสารกึ่งตัวนำ GaAs ... 19

2.3.4 โครงสร้างแถบพลังงานของสารประกอบกึ่งตัวนำ ซาลโคไพไรท์ 21

2.4 วิธีการเตรียมผลึก 21

2.4.1 วิธีที่ 1 เทคนิคการหลอมโดยตรงและแอนนีล 23

2.4.2 วิธีที่ 2 วิธีการพาสารประกอบด้วยไอของสารเคมี .. 24

2.4.3 วิธีที่ 3 เทคนิคของบริดจ์แมน 25

หน้า

บทที่ 3 การศึกษาค่าคงที่ของโครงผลึกโดยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอ๊กซ์ 27

3.1 กฎของแบรกก์ 27

3.2 ความเข้มสัมพัทธ์ของเส้นการเลี้ยวเบนของระนาบต่าง ๆ ในผลึก .. 29

3.3 ระยะระหว่างระนาบของผลึก 30

บทที่ 4 การศึกษาช่องว่างของแถบพลังงานโดยวิธีการดูดกลืนแสง 33

4.1 การย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบการนำแบบตรง 33

4.2 การย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบการนำแบบเฉียง 35

4.3 การวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง 36

4.4 การวัดช่องว่างของแถบพลังงาน 38

บทที่ 5 วิธีการทดลองและผลการทดลอง 41

5.1 การเตรียมโลหะผสมกึ่งตัวนำ 41

5.1.1 การคำนวณน้ำหนักของธาตุต่าง ๆ 42

5.1.2 การชั่งและการบรรจุธาตุต่าง ๆ ลงในหลอด 42

5.1.3 การดูดอากาศภายในหลอดออกและการหลอมปิดหลอด 43

5.1.4 การหลอมสาร 45

5.1.5 การแอนนีลสาร 46

5.2 ค่าคงที่ของโครงผลึก 47

5.2.1 การเตรียมสาร 48

5.2.2 การถ่ายภาพการเลี้ยวเบนของรังสีเอ๊กซ์ของผลึกผง 49

5.2.3 การพิจารณาลักษณะของผลึกที่ได้หลังจากการถ่ายภาพ 50

5.2.4 การหาตำแหน่งของระนาบต่าง ๆ 53

5.2.5 การคำนวณค่าคงที่ของโครงผลึก 53

5.2.5.1 การคำนวณค่าคลาดเคลื่อนเกี่ยวกับมุมของแบรกก์จากพีคของซิลิกอน 54

5.2.5.2 การคำนวณค่าคงที่ของโครงผลึกของสารที่ทดลอง 54

หน้า

5.3 ช่องว่างของแถบพลังงาน 57

5.3.1 การเตรียมสาร 57

5.3.2 การวัดความเข้มของแสงตกกระทบและทะลุผ่านผลึกที่ความยาวคลื่นแสงค่าต่าง ๆ 57

5.3.3 การคำนวณสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง 59

5.3.4 การหาช่องว่างของแถบพลังงาน 61

บทที่ 6 สรุปและวิจารณ์ผลการทดลอง 75

เอกสารอ้างอิง 82

ภาคผนวก .....

ภาคผนวก ก. 84

ภาคผนวก ข. 88

ภาคผนวก ค. 90

ประวัติผู้เขียน 93

สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
1-1	แสดงตารางคาบของธาตุต่าง ๆ	8
5-1	แสดงน้ำหนักของธาตุต่าง ๆ ที่คำนวณได้และพารามิเตอร์ที่เกี่ยวข้องกับการหลอมสาร $AgGaTe_{0.4}Se_{1.6}$ ซึ่งหนัก 2 กรัม	42
5-2	แสดงผลการเตรียมและพารามิเตอร์ต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้องกับการเตรียมโลหะผสมกึ่งตัวนำ $AgGaTe_{2(1-z)}Se_{2z}$	47
5-3	แสดงผลค่าคงที่ของโครงผลึกของโลหะผสมกึ่งตัวนำ $AgGaTe_{2(1-z)}Se_{2z}$ ที่ทดลองได้	56
5-4	แสดงผลช่องว่างของแถบพลังงานของโลหะผสมกึ่งตัวนำ $AgGaTe_{2(1-z)}Se_{2z}$ ที่ทดลองได้	74
6-1	แสดงการเปรียบเทียบค่าคงที่ของโครงผลึก	76
6-2	แสดงการเปรียบเทียบช่องว่างของแถบพลังงาน	77

สารบัญภาพ

รูปที่		หน้า
2.1	แสดงพันธะเชิงสี่ของสารกึ่งตัวนำ Si หรือ Ge ที่แต่ละอะตอมจะมีอะตอมอื่น ๆ อีกสี่อะตอมล้อมรอบ.....	7
2.2	แสดงการเกิดโลหะผสมกึ่งตัวนำ $AgGaTe_{2(1-z)}Se_{2z}$ จากธาตุกลุ่ม IV โดยการแทนที่ธาตุและให้สัดส่วนอะตอม x, y เป็น 1 แล้วยังคงรักษากฎอิเลคตรอนวาเลนซ์สี่ตัวต่อตำแหน่งอะตอม	11
2.3	แสดงโครงสร้างผลึกแบบเพชร	12
2.4	แสดงโครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์.....	13
2.5	แสดงโครงสร้างผลึกแบบเวอร์ทไซท์.....	14
2.6	แสดงโครงสร้างผลึกแบบชาลโคไพไรท์.....	16
2.7	แสดงโครงสร้างแถบพลังงานแบบ Si	17
2.8	แสดงโครงสร้างแถบพลังงานแบบ Ge	18
2.9	แสดงโครงสร้างแถบพลังงานแบบ GaAs	19
2.10	แสดงโครงสร้างแถบพลังงานของผลึกชาลโคไพไรท์ $ZnGeAs_2$.....	21
3.1	แสดงการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์.....	28
4.1	แสดงการย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบการนำแบบตรง.....	34
4.2	แสดงการย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบการนำแบบเฉียง.....	35
4.3	แสดงการทดลองวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง.....	37
5.1	แสดงหลอดแก้วควอทซ์ที่บรรจุธาตุที่ชั่งแล้ว.....	43
5.2	แสดงหลอดแก้วควอทซ์ที่ได้บรรจุธาตุและทำคอคอดแล้ว.....	44
5.3	แสดงหลอดแก้วควอทซ์ที่บรรจุธาตุและดูดอากาศออกพร้อมทั้งหลอมปิดหลอดแล้ว.	45
5.4	แสดงผลึกผงซึ่งประกอบด้วยสารที่ทดลองกับซิลิกอน.....	49

รูปที่		หน้า
5.5	แสดงแผนผังสำหรับการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์และระบบการตรวจวัด.....	49
5.6	แสดงแพทเทิร์น การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์.....	51
5.7	แสดงแผนผังสำหรับการวัดการดูดกลืนแสงและระบบการตรวจวัด.....	58
5.8	แสดงความเข้มของแสงตกกระทบและทะลุผ่านที่ความยาวคลื่นสสงค่าต่างๆ..	60
5.9	แสดงสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง$AgGaTe_{0.4}Se_{1.6}$.....	64
5.10	แสดงช่องว่างแถบพลังงานของ $AgGaTe_{0.4}Se_{1.6}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้าย สถานะพลังงานของอิเลคตรอนแบบตรง.....	65
5.11	แสดงสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงและช่องว่างของแถบพลังงานของ $AgGaTe_{0.4}Se_{16}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอนแบบตรง.....	66
5.12	แสดงช่องว่างของแถบพลังงานของ $AgGaTe_{0.4}Se_{1.6}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอนแบบเฉียง.....	67
5.13	แสดงสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงและช่องว่างแถบพลังงานของ $AgGaTe_{0.4}Se_{1.6}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอนแบบเฉียง.....	68
5.14	แสดงสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงของ $AgGaTe_{0.8}Se_{1.2}$	69
5.15	แสดงช่องว่างของแถบพลังงานของ $AgGaTe_{0.8}Se_{1.2}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอนแบบตรง.....	70
5.16	แสดงสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงและช่องว่างของแถบพลังงานของ $AgGaTe_{0.8}Se_{1.2}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานแบบตรง.....	71
5.17	แสดงช่องว่างของแถบพลังงานของ $AgGaTe_{0.8}Se_{1.2}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอนแบบเฉียง.....	72
5.18	แสดงสัมประสิทธิ์การดูดกลืนและช่องว่างแถบพลังงานของ $AgGaTe_{0.8}Se_{1.2}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเลคตรอนแบบเฉียง	73
6.1	แสดงค่าคงที่ของโครงผลึก (a) ที่สัดส่วนอะตอมค่าต่าง ๆ.....	78
6.2	แสดงค่าคงที่ของโครงผลึก (c) ที่สัดส่วนอะตอมค่าต่าง ๆ.....	78
6.3	แสดงช่องว่างของแถบพลังงานที่สัดส่วนอะตอมค่าต่าง ๆ	81
1	แสดงการสร้างเตาหลอม.....	85
2	แสดงอุณหภูมิที่ตำแหน่งต่าง ๆ ภายในเตาหลอม.....	87