

การทดลองและผลการทดลอง

ในการศึกษาวิจัยครั้งนี้ได้ทำการศึกษาสมบัติการดูดกลืนแสงของผลึกเดี่ยวสารกึ่งตัวนำคอปเปอร์อินเดียมไดซัลไฟด์ ซึ่งมีโครงสร้างผลึกเป็นแบบซาลโคไฟไรต์ และมีโครงสร้างแถบพลังงานเป็นแบบตรง ผลึกเดี่ยวที่ใช้ในการทดลองได้เตรียมขึ้นโดยวิธีไดเรกชันนัลฟรีซิง (directional freezing) จากธาตุทองแดง, อินเดียม, และ ซัลเฟเนียมที่มีความบริสุทธิ์สูงถึง 99.9999 % ภายในหลอดแก้วสุญญากาศ [23] นำมาตัด, ชัด และกัดให้ได้เป็นแผ่นบาง ๆ มีความหนาน้อยกว่า 100 μm . จากนั้นนำไปวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่น 10500 ถึง 13500 \AA ที่อุณหภูมิตั้งแต่ 11 ถึง 300 K เพื่อศึกษาการเปลี่ยนแปลงขนาดช่องว่างแถบพลังงาน และส่วนหางของเอออบาคของสารกึ่งตัวนำคอปเปอร์อินเดียมไดซัลไฟด์

6.1 การเตรียมชิ้นสาร

6.1.1 การตัดผลึกเดี่ยวด้วยเครื่องตัดรีดซอ (string saw)

นำผลึกเดี่ยวสารกึ่งตัวนำคอปเปอร์อินเดียมไดซัลไฟด์ที่ได้จากการเตรียมโดยวิธีไดเรกชันนัลฟรีซิง ซึ่งมีลักษณะเป็นแท่งยาวประมาณ 5 ถึง 7 cm. มาทำการตัดในแนวขวางกับแท่งผลึกให้ได้ชิ้นผลึกหนาประมาณ 1 mm. ด้วยเครื่องตัดรีดซอ ในขณะที่ทำการตัดแท่งผลึกอยู่นั้นได้ใช้ผงซิลิกอนคาร์ไบด์ผสมกับน้ำมันเครื่องซีโลมลงบนแท่งผลึกในส่วนที่ทำการตัด เพื่อทำหน้าที่เป็นตัวกัดกร่อนเนื้อผลึก ชิ้นผลึกที่ตัดแล้วจะมีเศษซิลิกอนคาร์ไบด์ติดกับแท่งตัดและผงซิลิกอนคาร์ไบด์ผสมน้ำมันเครื่องเกาะติดอยู่ด้วย ซึ่งจะต้องทำการล้างออกให้หมด โดยมีขั้นตอนการล้างดังต่อไปนี้

1. แช่ชิ้นผลึกในทินเนอร์เดือดประมาณ 5 นาที
2. แช่อะซิโตนเดือดประมาณ 5 นาที
3. แช่เมทธานอลเดือดประมาณ 5 นาที
4. ล้างด้วยน้ำกลั่นหลาย ๆ ครั้ง

ทั้งชิ้นผลึกไว้ให้แห้ง เพื่อที่จะได้นำไปขัดให้ผิวของชิ้นผลึกเรียบ และให้ได้ชิ้นผลึกที่บางต่อไป

6.1.2 การขัดชิ้นผลึกด้วยเครื่องขัด (polishing machine)

นำชิ้นผลึกที่ตัดและล้างเรียบร้อยแล้วมาขัดด้วยกระดาษทรายละเอียดเบอร์ 600 หรือมากกว่าเพื่อให้ได้ชิ้นผลึกที่บางและมีผิวหน้าที่เรียบขึ้น ซึ่งควรที่จะขัดทั้งสองด้านของผิวผลึก ในระหว่างที่ทำการขัดด้วยกระดาษทรายควรระมัดระวังชิ้นผลึกอาจจะแตกได้เนื่องจากแรงกดบนชิ้นผลึกไม่เท่ากันหรือมากเกินไป จากนั้นนำชิ้นผลึกมาขัดต่อด้วยเครื่องขัดให้ได้ผิวหน้าของชิ้นผลึกที่เรียบเป็นมันวาวมีรอยขีดข่วนน้อยที่สุด เพื่อลดข้อบกพร่อง (defects) ที่ผิวหน้าของชิ้นผลึก โดยใช้ผ้าสักหลาดเป็นผ้าสำหรับคลุมแท่นหมุนของเครื่องขัดและใช้ผงขัดอลูมินาขนาด $1 \mu\text{m}$. ผสมน้ำเป็นตัวกัดกร่อนและลดแรงเสียดทานบนผิวผลึกซึ่งอาจจะมีมากจนเกินไปจนทำให้ชิ้นผลึกแตกได้ เมื่อได้ผิวหน้าของชิ้นผลึกเรียบสม่ำเสมอแล้วทั้งสองด้านและมีความหนาของชิ้นผลึกไม่เกินโดยประมาณ $100 \mu\text{m}$. นำชิ้นผลึกออกมาล้างสะอาดด้วยขั้นตอนต่อไปนี้

1. แช่ในไตรคลอโรเอทхіลีน (C_2HCl_3) เดือดนานประมาณ 5 นาทีจำนวน 2 ครั้ง
2. แช่ในอะซิโตนเดือดนานประมาณ 5 นาที จำนวน 2 ครั้ง
3. แช่ในเมทธานอล เดือดนานประมาณ 5 นาที จำนวน 2 ครั้ง
4. ล้างด้วยน้ำดีไอออไนซ์ (deionized water) หลาย ๆ ครั้งจน

สะอาด

5. เป่าด้วยแก๊สไนโตรเจนบริสุทธิ์ให้แห้ง

จากนั้นนำชิ้นผลึก ไปกัดด้วยสารละลายเคมีต่อไป

6.1.3 การกัดผิวหน้าของชิ้นผลึกด้วยสารละลายเคมี (chemical etching solution)

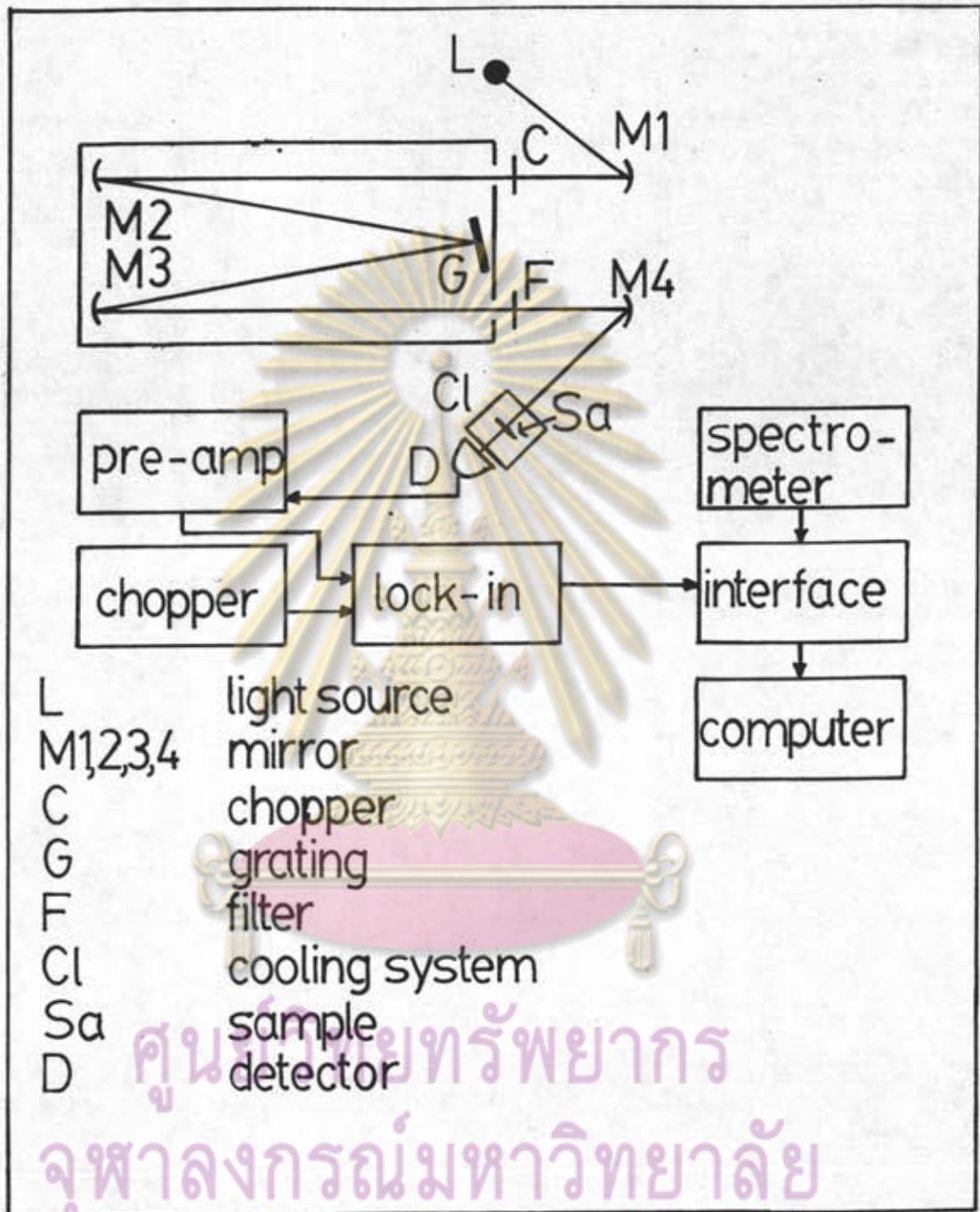
การกัดผิวหน้าชิ้นผลึกด้วยสารละลายเคมีเป็นการทำให้ผิวหน้าชิ้นผลึกเรียบ สะอาด และขจัดผิวหน้าส่วนที่ชำรุดเสียหายเนื่องจากการขัด ในงานวิจัยนี้ได้ใช้สารละลายของกรดไฮโดรคลอริก (HCl) และกรดไนตริก (HNO₃) โดยมีส่วนผสมของกรดไฮโดรคลอริก และกรดไนตริก อย่างละ 20 % โดยน้ำหนัก เป็นตัวกัดผิวหน้าของชิ้นผลึกคอปเปอร์อินเดียมโคบอลต์ และใช้สารละลายโบรมีน 0.1 % ในเมทานอล โดยปริมาตร เพื่อขจัดสิ่งที่ยังอาจจะหลงเหลือจากการกัดผิวหน้า ดังมีรายละเอียดของขั้นตอนดังนี้

1. จุ่มชิ้นผลึกคอปเปอร์อินเดียมโคบอลต์ ลงในสารละลายของกรดไฮโดรคลอริก และกรดไนตริก นานประมาณ 15 นาที โดยให้ผิวหน้าเอียงทำมุม 45 องศา กับแนวระดับ
2. จุ่มชิ้นผลึกลงในสารละลาย โบรมีน ในเมทานอลนานประมาณ 20

วินาที

3. จุ่มชิ้นผลึกลงในเมทานอลนานประมาณ 5 วินาที
4. ล้างด้วยน้ำดีไอออไนซ์หลาย ๆ ครั้ง ให้สะอาด
5. ทำขั้นตอนที่ 1 ถึง 4 ซ้ำอีกครั้งหนึ่ง
6. เป่าให้แห้งด้วยแก๊สไนโตรเจนบริสุทธิ์

ในระหว่างที่ทำการกัดผิวหน้าชิ้นผลึกด้วยสารละลาย ในแต่ละขั้นตอนควรที่จะให้ชิ้นผลึกจุ่มอยู่ในสารละลายหนึ่ง ๆ และควรให้ถูกอากาศน้อยที่สุด เพื่อป้องกันไม่ให้ผิวหน้าของชิ้นผลึกทำปฏิกิริยากับอากาศเกิดเป็นชั้นออกไซด์ขึ้น เสร็จแล้วรีบนำชิ้นผลึก เข้าสู่ห้องสุญญากาศของเครื่องลดอุณหภูมิ เพื่อรอการวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงต่อไป



รูปที่ 6.1 แสดงระบบการวัดสเปกตรัมการดูดกลืน

6.2 ระบบการทดลองและวิธีการวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง

การวัดค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงของผลึกเดี่ยวคอปเปอร์อินเดียม ไดซัลไฟด์ ในงานนี้ได้จัดเครื่องมือดังรูปที่ 6.1 แสงจากแหล่งกำเนิดแสง L จะถูกส่งไปยังกระจกเว้า M1 เพื่อสะท้อนและรวมแสงไปยังเกรตติง (grating) G ภายในเครื่องกำเนิดแสงเอกรงค์ โดยผ่านตัวตัดแสง (chopper) C, ช่องแคบเดี่ยว (single slit) S1, และกระจกเว้า M2 เกรตติงจะแยกแสงออกเป็นความยาวคลื่นต่าง ๆ ตกกระทบลงบนกระจกเว้า M3 สะท้อนไปยังชั้นผลึก โดยผ่านช่องแคบเดี่ยว S2, แผ่นกรองแสง F, และกระจกเว้า M4 หัววัดแสง D จะคอยวัดแสงที่ผ่านชั้นผลึก S ออกมา สัญญาณที่ได้จากหัววัดจะถูกขยายให้ได้สัญญาณโตขึ้นด้วยเครื่องขยายสัญญาณขั้นต้น (pre-amplifier) และเครื่องล็อกอินแอมพลิไฟเออร์ (lock-in amplifier) เครื่องล็อกอินแอมพลิไฟเออร์จะคัดเลือกแต่สัญญาณที่มีความถี่เดียวกับตัวตัดแสงเท่านั้น และขยายสัญญาณให้อยู่ในช่วง 0 - 1 V สัญญาณนี้จะถูกส่งต่อไปให้เครื่องแปลงสัญญาณไฟฟ้าแบบอนาลอกเป็นดิจิตอล (ต่อไปจะขอเรียกแต่เพียงว่าเครื่องแปลงสัญญาณ) เพื่อแปลงสัญญาณอนาลอกเป็นดิจิตอลให้แก่เครื่องคอมพิวเตอร์แบบแอปเปิลทู (apple II) เก็บรวบรวมข้อมูลและนำไปวิเคราะห์ต่อไป ชุดคำสั่งที่ใช้ในการควบคุมเครื่องคอมพิวเตอร์ให้เก็บรวบรวมข้อมูลสามารถดูได้จากภาคผนวก ก

ชั้นผลึกที่ทำการศึกษาจะทำการกัดด้วยสารละลายเคมีเสร็จแล้ว จะนำมาติดกับแผ่นทองแดงที่เจาะช่องไว้ตรงกลางด้วยกรีสสุญญากาศ (vacuum grease) โดยให้ชั้นผลึกบังช่องนี้ไว้เพื่อให้แสงผ่านมาตกกระทบลงบนชั้นผลึกได้ แผ่นทองแดงจะถูกยึดติดอยู่กับตัวยึดสาร (sample holder) ที่อยู่ภายในห้องสุญญากาศของเครื่องลดอุณหภูมิ ซึ่งสามารถควบคุมอุณหภูมิได้ในช่วง 11 ถึง 300 K

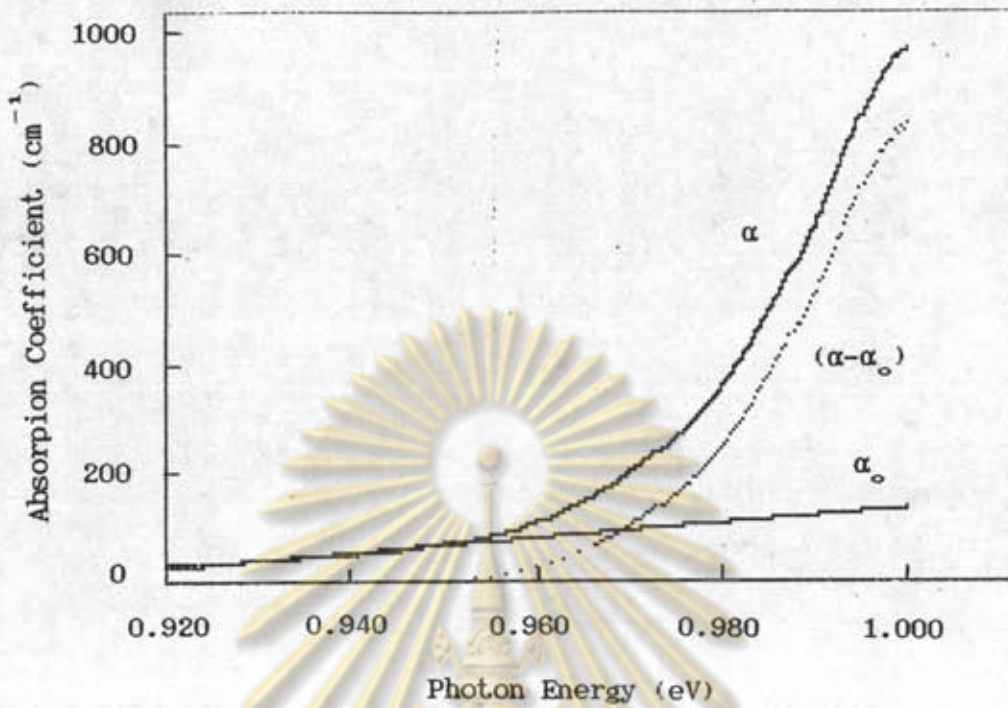
การวัดค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงของผลึกเดี่ยวคอปเปอร์อินเดียม ไดซัลไฟด์ได้ทำการวัดในช่วงความยาวคลื่น 10500 ถึง 13500 Å ตั้งแต่อุณหภูมิ 11 ถึง 300 K โดยใช้หัววัดแบบเจอร์มาเนียม (Ge) ซึ่งสามารถตอบสนองได้เป็นอย่างดีในช่วงความยาวคลื่นใกล้แสงใต้แดง (near infrared) เครื่องกำเนิดแสงเอกรงค์ของ "SPEX" โดยควบคุม

คมให้เปลี่ยนความยาวคลื่น 1 Å ต่อวินาที และส่งสัญญาณควบคุมการเก็บข้อมูลทุก ๆ 4 Å เครื่องขยายสัญญาณขั้นต้นของ "PAR" โมเดล 113 ใช้อัตราขยาย 1000 เท่า เครื่องลดอินแอมพลิไฟเออร์ที่ใช้ในการวัดเป็นของ "PAR" โมเดล 5101 เครื่องแปลงสัญญาณที่ให้สัญญาณดิจิทัลขนาด 8 บิต (bits) ซึ่งสามารถให้สัญญาณได้ในช่วง 0 - 255 ขึ้นอยู่กับขนาดของสัญญาณอนาลอกจากลดอินแอมพลิไฟเออร์ ในที่นี้ค่าสัญญาณอนาลอกขนาด 1 V จะถูกแปลงเป็นสัญญาณดิจิทัลมีค่าเท่ากับ 250 แอมป์รองแสงที่ใช้สามารถจัดแสงที่มีความยาวคลื่นต่ำกว่า 10500 Å และหลอดทั้งสแตนด์บายไลน์ขนาด 250 W ถูกใช้เป็นแหล่งกำเนิดแสง

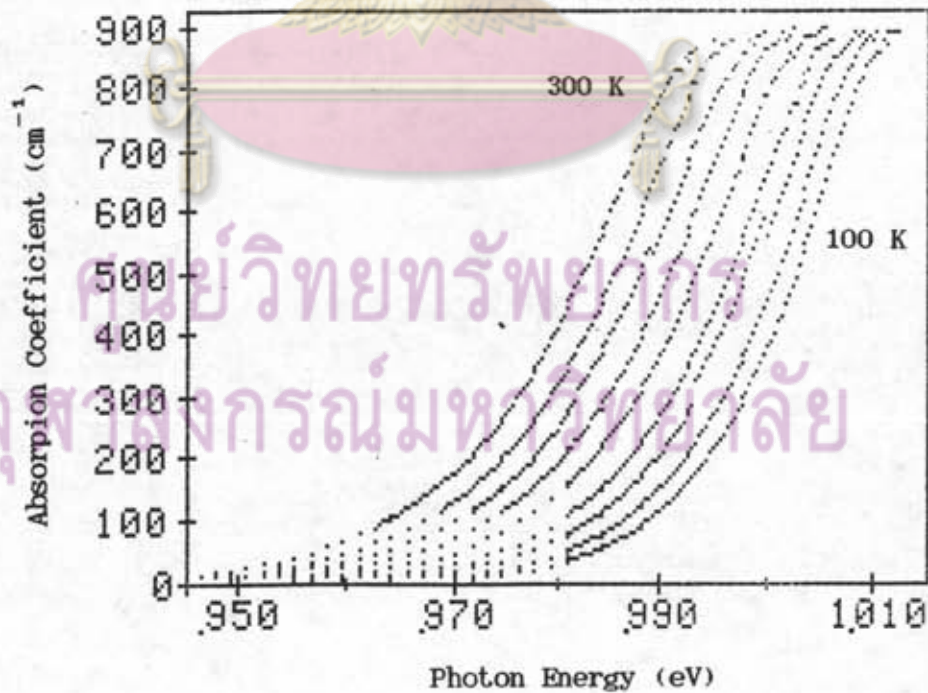
สัญญาณความเข้มแสงที่ผ่านชั้นผลึก (I_c) ที่อุณหภูมิต่าง ๆ และสัญญาณความเข้มแสงที่วัดโดยไม่มีชั้นผลึก (I_o) จะถูกนำมาคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนตามสมการ

$$\alpha = (1/d) \ln \left\{ (1 - R)^z - I_o / I_c \right\} \quad (6.1)$$

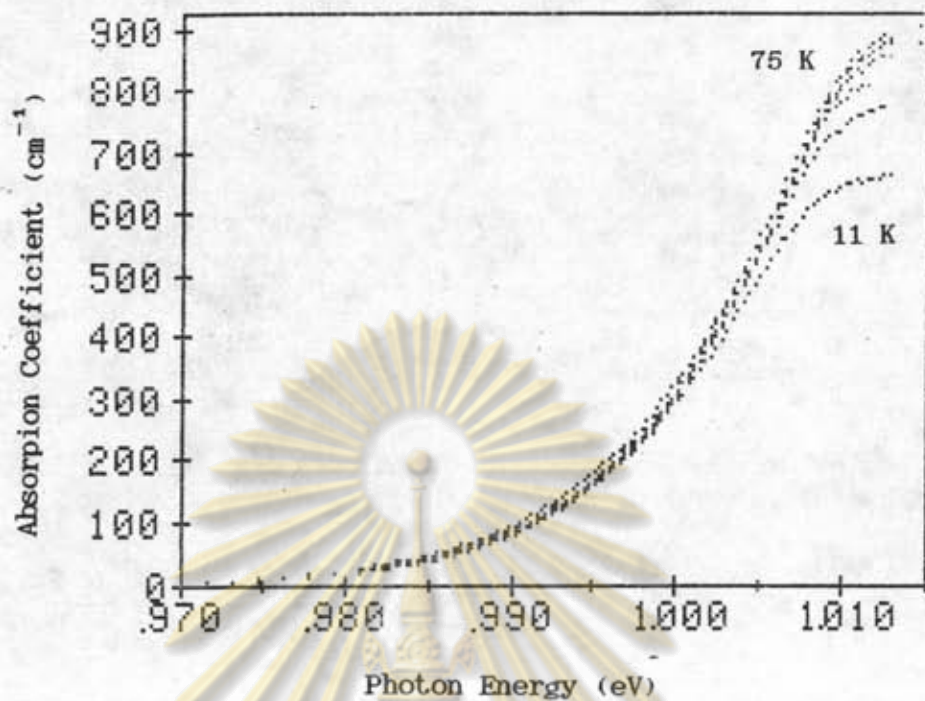
โดยที่ชั้นผลึกที่นำมาวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนนี้มีความหนา d เท่ากับ 68 μm . สัมประสิทธิ์การสะท้อนในช่วงความยาวคลื่นแสงที่ใช้ในการทดลองครั้งนี้มีค่า R เท่ากับ 0.25 [24] สัมประสิทธิ์การดูดกลืนที่คำนวณได้จะต้องถูกหักออกด้วยค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงพื้นหลัง (α_o) ซึ่งสามารถหาได้จากการเอ็กซ์ตราโพล (extrapolation) สัมประสิทธิ์การดูดกลืนในช่วงที่เกิดจากการย้ายสถานะภายในแถบพลังงานเดียวกัน จึงจะได้ค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืน ($\alpha - \alpha_o$) เฉพาะส่วนที่มีความเกี่ยวข้องกับการย้ายสถานะพลังงานข้ามช่องว่างแถบพลังงาน ดังรูปที่ 6.2 จากการทดลองวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนของผลึกเดี่ยวคอปเปอร์อินเดียม ไดซิลิไซด์ พบว่าค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนที่วัดได้มีค่าสูงสุด 920 cm^{-1} ที่อุณหภูมิ 300 K



รูปที่ 6.2 แสดงการหาค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงพื้นหลัง (α_0) และค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเฉพาะที่เกี่ยวข้องกับการย้ายสถานะพลังงานข้ามช่องว่างแถบพลังงาน ($\alpha - \alpha_0$) ของผลึกเดี่ยวคอปเปอร์อินเดียมไดซัลไฟด์ที่อุณหภูมิ 300 K



รูปที่ 6.3 แสดงค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืน ($\alpha - \alpha_0$) ของผลึกเดี่ยวคอปเปอร์อินเดียมไดซัลไฟด์ ที่อุณหภูมิ 100, 125, 150, 175, 200, 225, 250, 275, 300 K



รูปที่ 6.4 แสดงค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืน ($\alpha - \alpha_0$) ของพอลิเอทิลีนอะซิไนด์ ที่อุณหภูมิ 11, 20, 30, 40, 50, 75 K

6.3 การวิเคราะห์หาค่าขนาดช่องว่างแถบพลังงาน

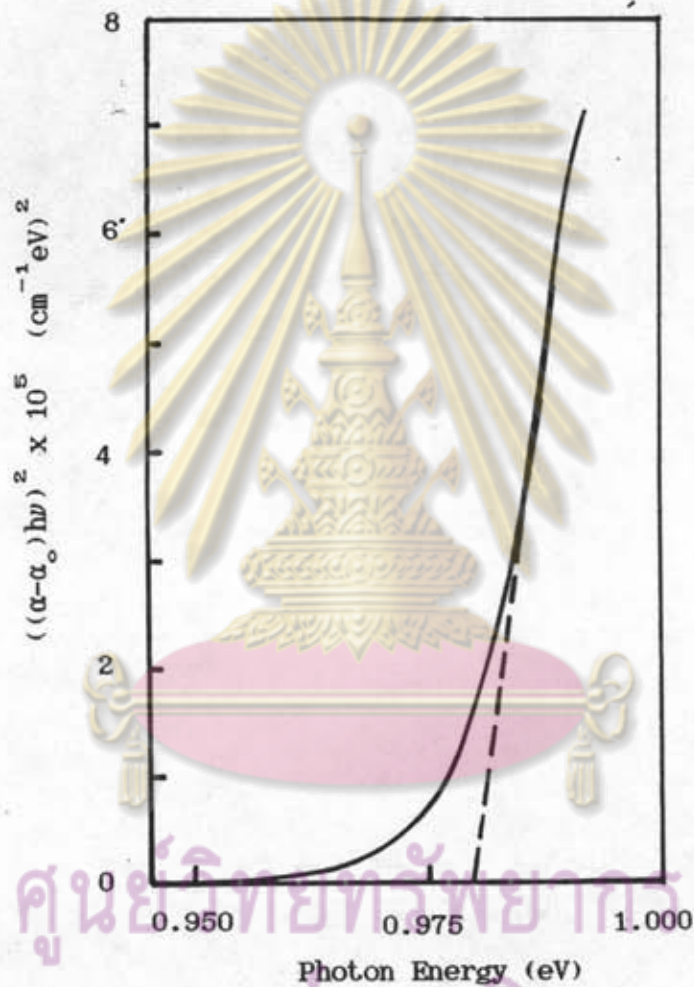
ในบทที่ 3 เราได้ทราบถึงความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืน บริเวณขอบเขตการดูดกลืนแสงพื้นฐานกับขนาดช่องว่างแถบพลังงาน คือ

$$\{(\alpha - \alpha_0)h\nu\}^2 = A^2(h\nu - E_g) \quad (6.2)$$

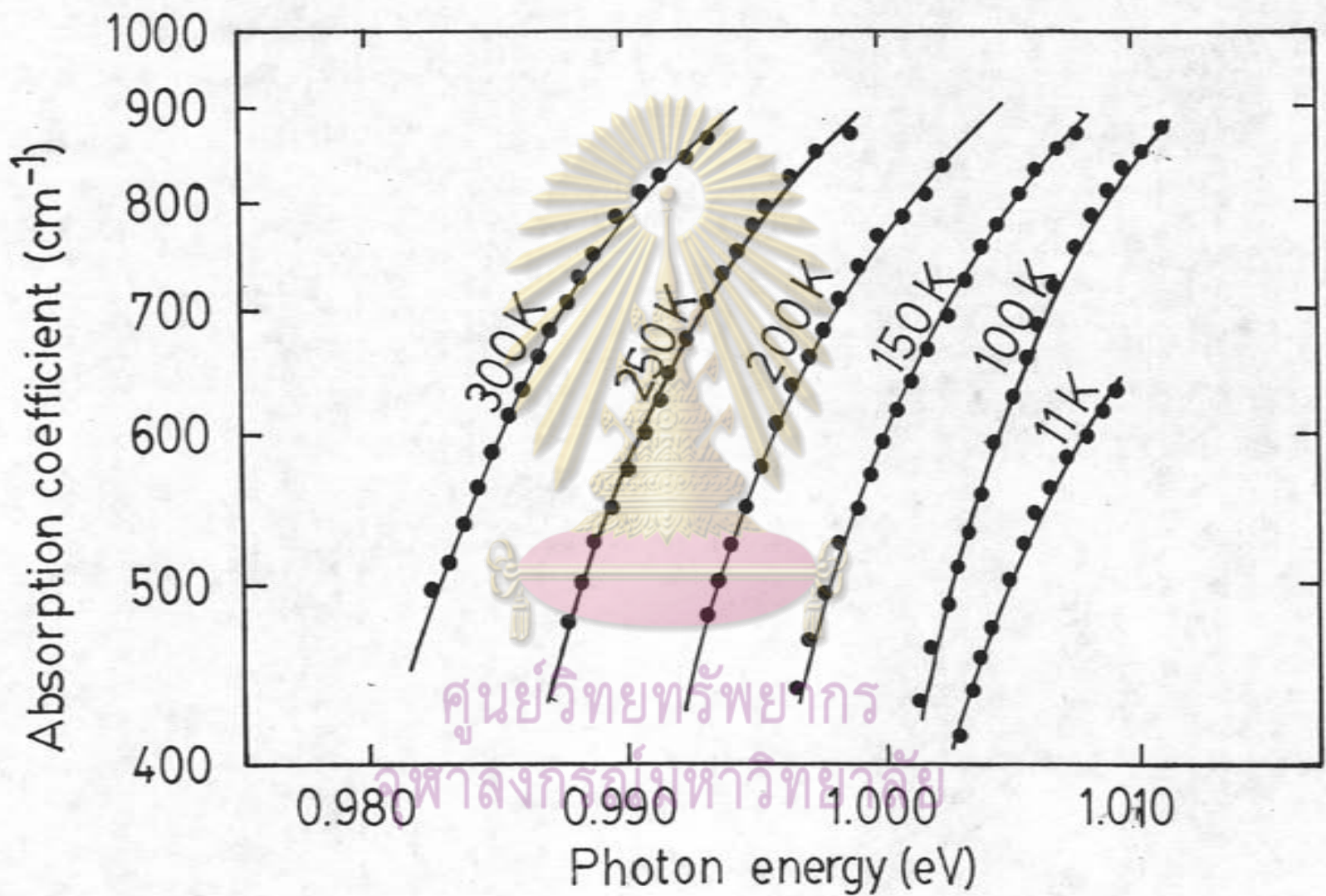
$$\text{และ } \{(\alpha - \alpha_0)h\nu\}^{1/2} = C^{1/2}(h\nu - E_g) \quad (6.3)$$

ในการย้ายสถานะพลังงานแบบตรงและแบบเฉียงตามลำดับ ซึ่งสามารถวิเคราะห์หาขนาดช่องว่างแถบพลังงานได้จากกราฟระหว่าง $\{(\alpha - \alpha_0)h\nu\}^2$ หรือ $\{(\alpha - \alpha_0)h\nu\}^{1/2}$ กับ $h\nu$ สำหรับการย้ายสถานะในแต่ละแบบ เราจะเห็นได้ว่าคุณสมบัติการดูดกลืนที่สอดคล้องกับการย้ายสถานะแบบตรงเส้นกราฟระหว่าง $\{(\alpha - \alpha_0)h\nu\}^2$ กับ $h\nu$ ในช่วงที่เกี่ยวข้องกับการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบนำจะมีลักษณะเป็น

เส้นตรงตัดแกน $h\nu$ ที่จุด E_{ν} ในทำนองเดียวกันค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนที่สอดคล้องกับการย้ายสถานะแบบเฉียงเส้นกราฟระหว่าง $((\alpha - \alpha_0)h\nu)^{1/2}$ กับ $h\nu$ ในช่วงที่เกี่ยวข้องกับการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบนำ จะมีลักษณะเป็นเส้นตรงเช่นกัน โดยมีจุดตัดแกน $h\nu$ ที่ $E_{\nu} - k\omega$ และ $E_{\nu} + k\omega$ เมื่อ ω คือ ความถี่เชิงมุมของโฟนอนที่เกี่ยวข้องกับกระบวนการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอน



รูปที่ 6.5 กราฟระหว่าง $h\nu$ กับ $((\alpha - \alpha_0)h\nu)^2$ ของผลึกเดี่ยวคอปเปอร์อินเดียมไดซัลไฟด์ที่อุณหภูมิ 300 K โดยมีขนาดช่องว่างแถบพลังงานเท่ากับ 0.978 eV แสดงว่าคอปเปอร์อินเดียมไดซัลไฟด์มีโครงสร้างแถบพลังงานเป็นแบบตรง



รูปที่ 6.6 เปรียบเทียบค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนบริเวณขอบเขตการดูดกลืนแสงพื้นฐานที่ได้จากการวัด (●) กับการคำนวณ (—) ตามสมการ (6.2) แสดงให้เห็นว่าคอปเปอร์อินเดียมไดเทลลูไรด์มีโครงสร้างแถบพลังงานเป็นแบบตรง ที่อุณหภูมิ 11, 100, 150, 200, 250 และ 300 K

จากการทดลองวัดสัมประสิทธิ์การดูดกลืนของผลึกเดี่ยวคอปเปอร์อินเดียมไดซัลไฟด์ สอดคล้องกับการย้ายสถานะพลังงานแบบตรง ดังรูปที่ 6.3 และมีขนาดช่องว่างแถบพลังงาน อยู่ในช่องว่าง 1.000 ถึง 0.978 eV ในช่วงอุณหภูมิ 11 ถึง 300 K ดังตารางที่ 6.1

ตารางที่ 6.1 แสดงขนาดช่องว่างแถบพลังงานในช่วงอุณหภูมิ 11 ถึง 300 K

อุณหภูมิ (K)	ขนาดช่องว่างแถบพลังงาน (eV)
11	1.000
20	1.000
30	1.000
40	1.000
50	1.000
75	1.000
100	0.999
125	0.997
150	0.994
175	0.992
200	0.988
225	0.986
250	0.983
275	0.981
300	0.978

6.4 การเปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงขนาดช่องว่างแถบพลังงานตามอุณหภูมิกับแบบจำลองเชิงทฤษฎี

ในการเปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงขนาดช่องว่างแถบพลังงานตามอุณหภูมิกับแบบจำลองเชิงทฤษฎีในส่วนที่เกี่ยวข้องกับกระบวนการขยายตัวของโครงสร้างผลึก และอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับโฟนอน ได้ทำการเปรียบเทียบผลการทดลองกับแบบจำลองอย่างง่ายสามแบบจำลองด้วยกัน คือ

1 แบบจำลองของวาร์ชัน [1] ซึ่งมีความสัมพันธ์ระหว่างขนาดช่องว่างแถบพลังงานกับอุณหภูมิ คือ

$$\Delta E_g(T) = - aT^2 / (b + T) \quad (6.4)$$

2 แบบจำลองของมานูเกียน [16] ซึ่งมีความสัมพันธ์ระหว่างขนาดช่องว่างแถบพลังงานกับอุณหภูมิ คือ

$$\Delta E_g(T) = cT^m + d\theta / [2 / (\exp(\theta/T) - 1)] \quad (6.5)$$

ซึ่งมานูเกียนได้แสดงให้เห็นว่า $\theta = b \times 2$ เมื่อ b คือค่าคงที่ในแบบจำลองวาร์ชัน

3 แบบจำลองบนรากฐานของแบบจำลองไอน์สไตน์ [17] ซึ่งมีความสัมพันธ์ระหว่างขนาดช่องว่างแถบพลังงานกับอุณหภูมิ คือ

$$E_g(T) = e + f [1 + 2 / (\exp(\theta/T) - 1)] \quad (6.6)$$

ดังนั้น $E_g(0) = e + f \quad (6.7)$

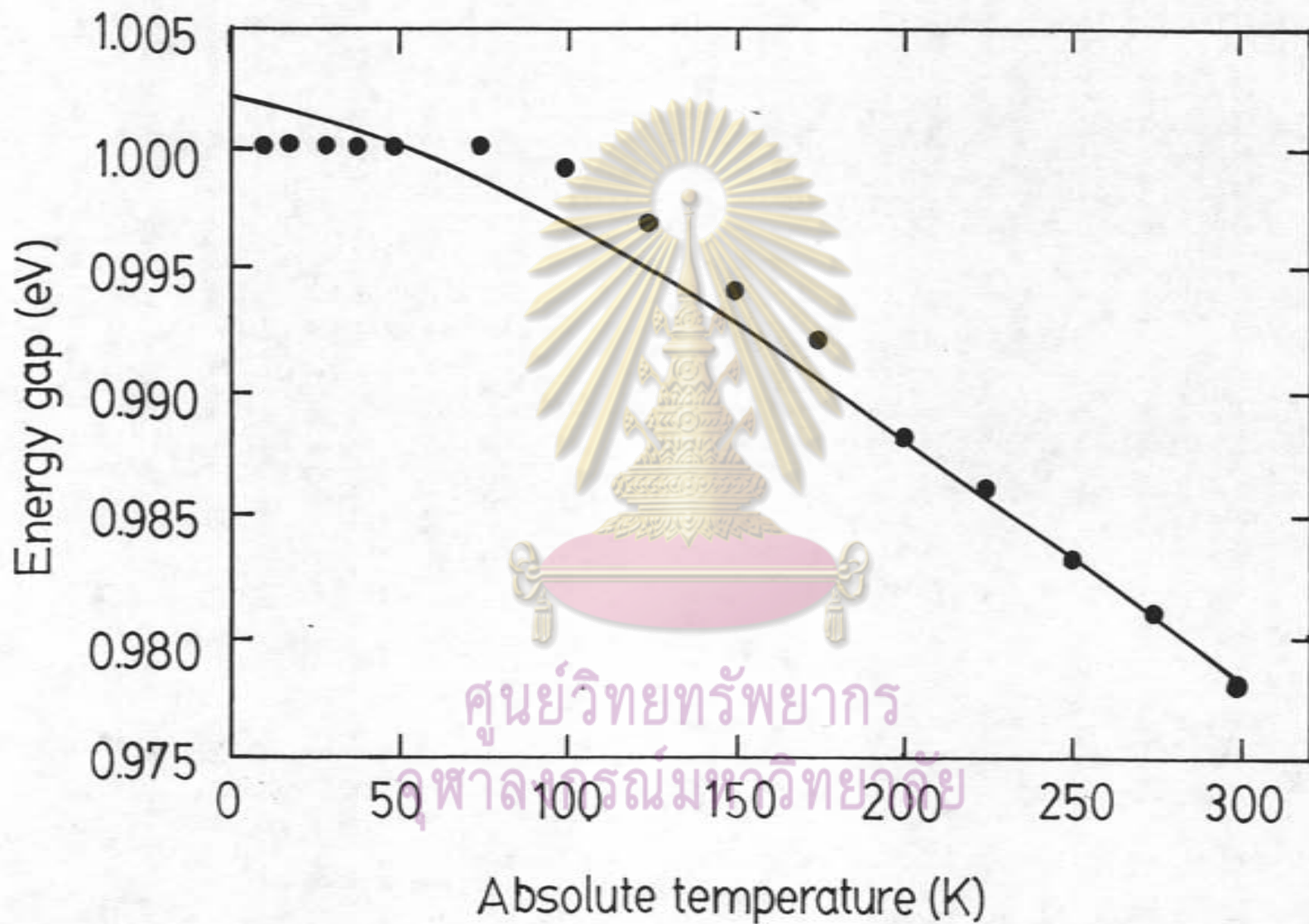
สำหรับการเปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงขนาดช่องว่างแถบพลังงานตามอุณหภูมิในแบบที่สามนี้

ได้ทำการเปรียบเทียบสองครั้ง โดยในครั้งที่หนึ่ง ได้ทำการเปรียบเทียบผลการทดลองกับแบบจำลองในช่วงอุณหภูมิ 11 ถึง 300 K และเนื่องผลการเปรียบเทียบไม่เป็นที่น่าพอใจจึงได้ทำการเปรียบเทียบครั้งที่สอง โดยทำการเปรียบเทียบเฉพาะในช่วงอุณหภูมิ 11 ถึง 225 K เท่านั้น ในขณะที่การเปรียบเทียบกับแบบจำลองในสองแบบแรกได้กระทำการเปรียบเทียบเพียงครั้งเดียวคือ ในช่วงอุณหภูมิ 11 ถึง 300 K

โดยการใช้ทฤษฎีกำลังสองน้อยสุดวิเคราะห์การเปลี่ยนแปลงขนาดช่องว่างแถบพลังงานตามอุณหภูมิตามรากฐานของแบบจำลองทั้งสามแบบดังกล่าว พบว่าสำหรับแบบจำลองของวาร์ชันี มี $E_g(0) = 1.002$ eV และมีค่าคงที่ a และ b เท่ากับ 1.08×10^{-4} eV/K และ 113 K ตามลำดับ ส่วนแบบจำลองของมานูเกียน มี $E_g(0) = 1.000$ eV $\theta = 365$ K และมีค่าคงที่ c, d, และ s เท่ากับ 2.39×10^{-8} eV/K^{-2.38}, -1.32×10^{-4} eV/K และ 2.38 ตามลำดับ และในการเปรียบเทียบกับแบบจำลองบนรากฐานของแบบจำลองอินส์ไตน์ในช่วงอุณหภูมิ 11 ถึง 300 K มี $\theta = 306$ K, $e = 1.02$ eV และ $f = -0.02$ eV และในการเปรียบเทียบในช่วงอุณหภูมิ 11 ถึง 225 K มี $\theta = 372$ K, $e = 1.03$ eV และ $f = -0.03$ eV และมี $E_g(0) = 1.000$ eV ทั้งสองครั้ง

ตารางที่ 6.2 เปรียบเทียบพารามิเตอร์ที่สำคัญที่ได้จากการเปรียบเทียบขนาดช่องว่างแถบพลังงานกับแบบจำลองแบบต่าง ๆ

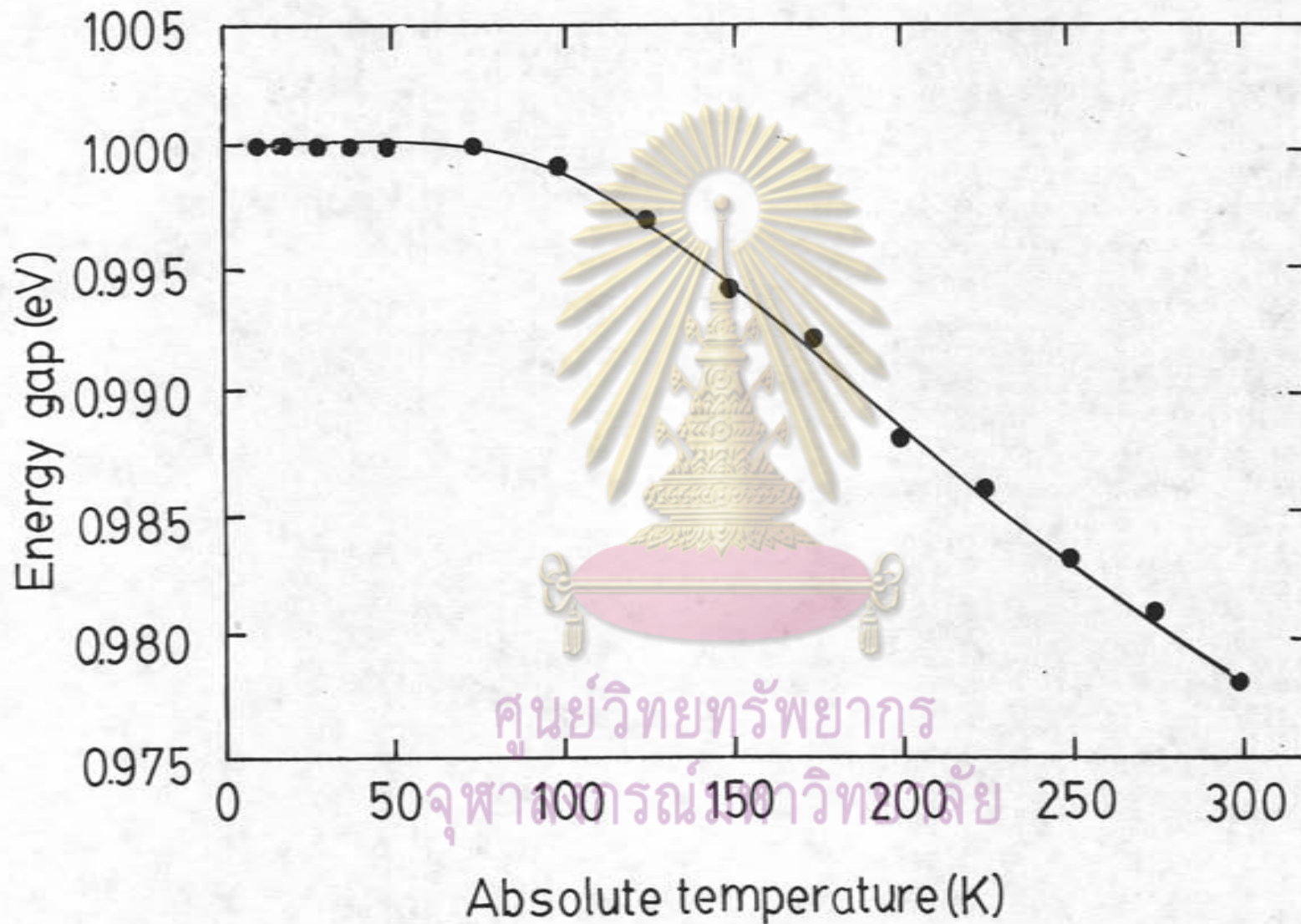
แบบจำลอง	ช่วงอุณหภูมิ	$E_g(0)$ (eV)	θ (K)	dE_g/dT (eV/K)
วาร์ชันี	11 - 300	1.002	226	-0.97×10^{-4}
มานูเกียน	11 - 300	1.000	365	-1.12×10^{-4}
อินส์ไตน์	11 - 300	1.000	306	-1.14×10^{-4}
	11 - 225	1.000	372	-1.31×10^{-4}



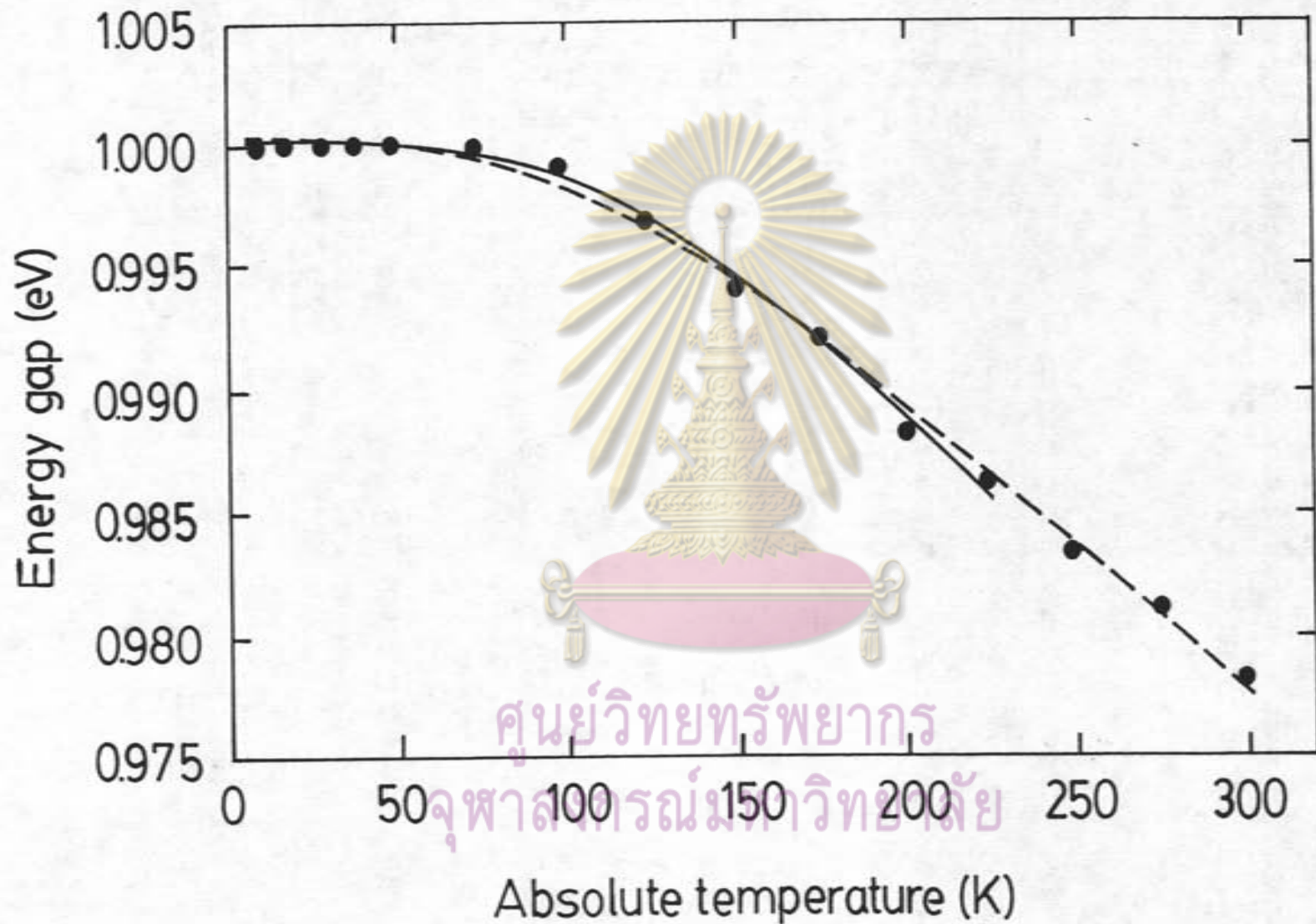
รูปที่ 6.7 เปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงขนาดช่องว่างแถบพลังงานตามอุณหภูมิของคอป

เปอร์อินเดียมไดซัลไฟด์กับแบบจำลองวารันนี่ โดยมี $E_g(0) = 1.002 \text{ eV}$, $a = 1.08 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$

และ $b = 133 \text{ K}$



รูปที่ 6.8 เปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงขนาดช่องว่างแถบพลังงานตามอุณหภูมิของคอปเปอร์อินเดียมไดไซด์ในเคิลวินกับแบบจำลองมาทเทียส โดยมี $E_g(0) = 1.000 \text{ eV}$, $c = 2.39 \times 10^{-8} \text{ eV/K}^2$, $d = -1.32 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$ และ $s = 2.38$



รูปที่ 6.9 เปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงขนาดช่องว่างแถบพลังงานตามอุณหภูมิของคอป

เปอร์ลิตเนียม ไดซิลไซด์ ไรต์กับแบบจำลองบรอกฐานของแบบจำลองไฮร์สไตน์ จากข้อมูลในช่วงอุณหภูมิ 11

- 225 K (—) และจากข้อมูลในช่วงอุณหภูมิ 11 - 300 K (- - -)

6.5 การวิเคราะห์หาความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียลของส่วนหางของเอออบาค

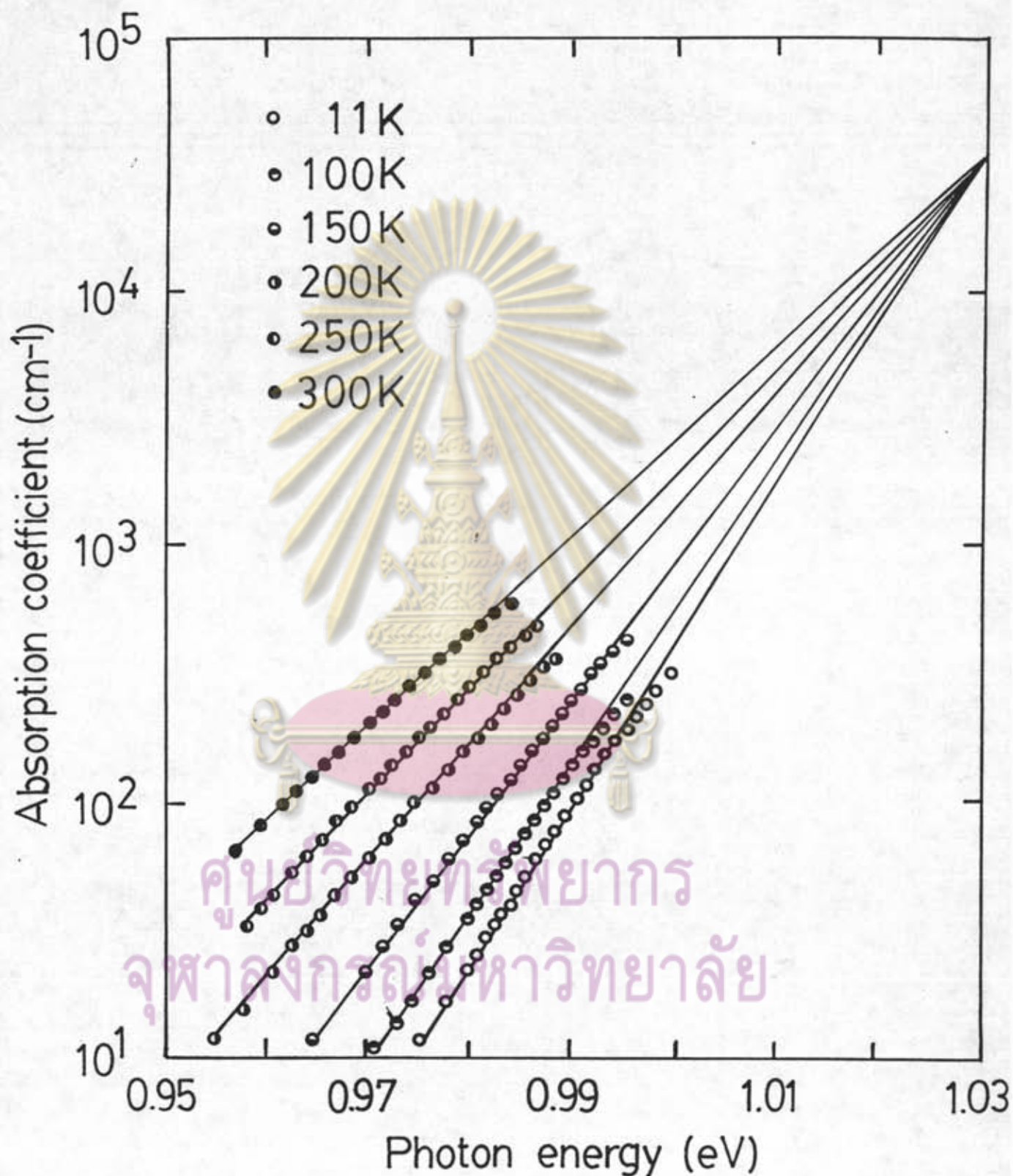
สัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงในส่วนที่เรียกว่าส่วนหางของเอออบาค คือสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงในส่วนที่เกี่ยวข้องกับการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังส่วนหางของแถบนำ ซึ่งจะอยู่ในบริเวณที่พลังงานต่ำกว่า ขนาดช่องว่างแถบพลังงานเล็กน้อย และมีความสัมพันธ์กับพลังงานตามสมการ

$$\alpha = \alpha_1 \exp[(h\nu - E_1)/E_0] \quad (6.8)$$

การวิเคราะห์หาขนาดของความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียล (E_0) สามารถหาได้จากกราฟระหว่าง $\ln\alpha$ กับ $h\nu$ ซึ่งจะมีลักษณะเป็นเส้นตรงมีความชันเท่ากับ $1/E_0$ และมีตัดแกน $\ln\alpha$ ที่ $\ln\alpha_1 - E_1/E_0$ สำหรับค่า α_1 และ E_1 สามารถหาได้จากจุดตัดของเส้นกราฟระหว่าง $\ln\alpha$ กับ $h\nu$ ที่สอดคล้องกับสมการ 6.9 ที่อุณหภูมิต่าง ๆ ดังรูปที่ 6.10 หรือจากกราฟระหว่างจุดตัดแกน $\ln\alpha$ ($\ln\alpha_1 - E_1/E_0$) กับ $1/E_0$ ที่อุณหภูมิต่าง ๆ ซึ่งจะมีลักษณะเป็นกราฟเส้นตรงมีความชันเท่ากับ $-E_1$ และตัดแกนของจุดตัดแกน $\ln\alpha$ เท่ากับ $\ln\alpha_1$ ดังรูปที่ 6.11

จากการทดลองพบว่าความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียล (E_0) มีค่าอยู่ระหว่าง 7.4 ถึง 11.8 meV ในช่วงอุณหภูมิ 11 ถึง 300 K ดังตารางที่ 6.3 และมีค่าคงที่ α_1 และ E_1 เท่ากับ $3.6 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ และ 1.03 eV ตามลำดับ ทั้งจากการพิจารณาจุดตัดของเส้นกราฟระหว่าง $\ln\alpha$ กับ $h\nu$ ที่สอดคล้องกับสมการ 6.9 ที่อุณหภูมิต่าง ๆ หรือจากกราฟระหว่างจุดตัดแกน $\ln\alpha$ กับ $1/E_0$

ศูนย์วิจัยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

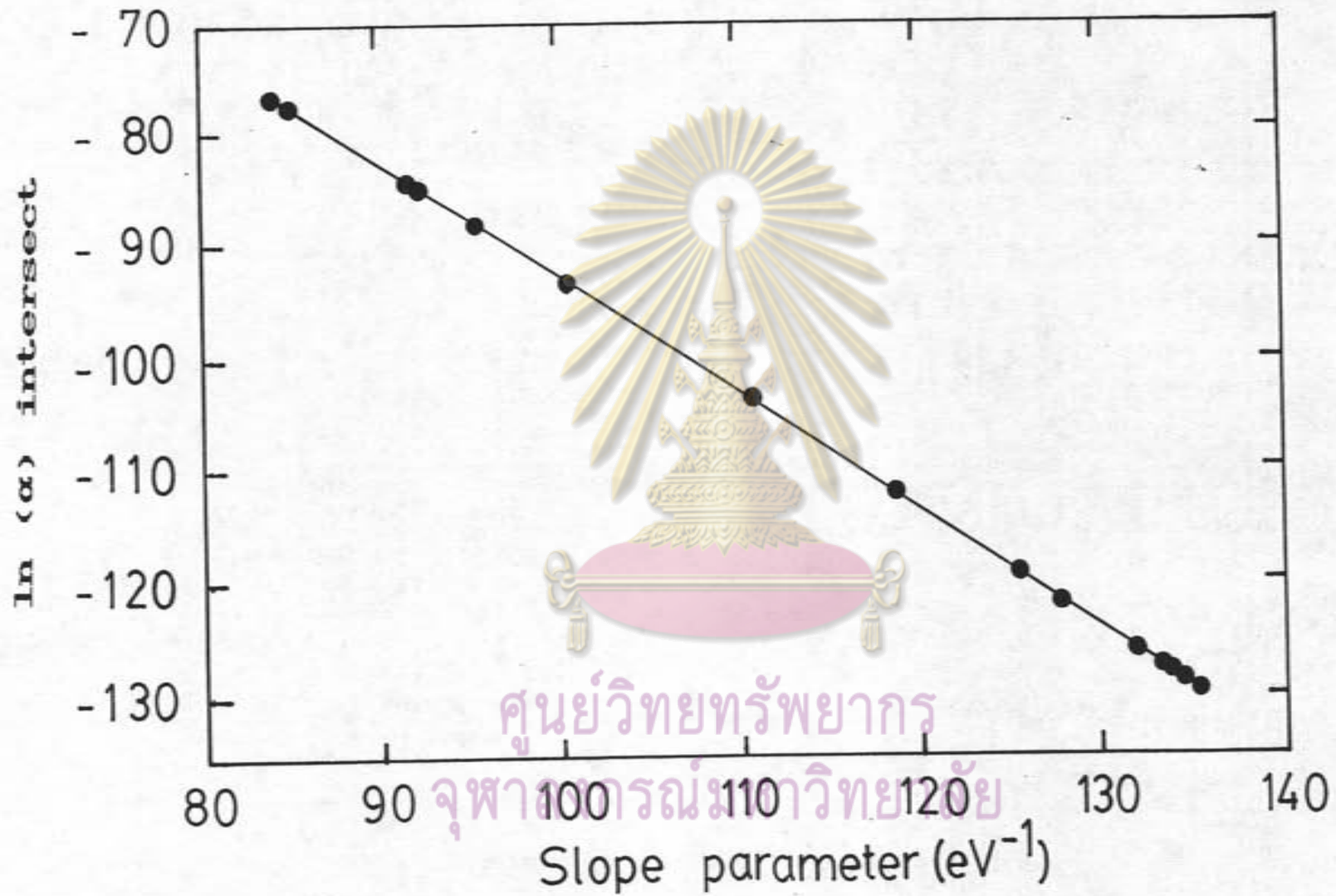


รูปที่ 6.10 แสดงกราฟระหว่าง $\ln \alpha$ กับ $h\nu$ บริเวณส่วนหางของเออเบาคที่บางอุณหภูมิ โดยมีค่า $\alpha_1 = 3.6 \times 10^4 \text{ cm.}^{-1}$ และ $E_1 = 1.03 \text{ eV}$

ตารางที่ 6.3 แสดงความกว้างเอ็กซ์โพเนนเชียลในช่วงอุณหภูมิ 11 ถึง 300 K

อุณหภูมิ (K)	ความกว้างเอ็กซ์โพเนนเชียลใน (meV)
11	7.4
20	7.4
30	7.5
40	7.5
50	7.6
75	7.8
100	8.0
125	8.4
150	9.0
175	10.0
200	10.5
225	10.9
250	10.8
275	11.8
300	11.8

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



รูปที่ 6.11 กราฟระหว่างจุดตัดแกน $\ln \alpha$ ($\ln \alpha_1 - E_1/E_0$) กับพารามิเตอร์ความชัน ($1/E_0$) โดยมีค่า $\alpha_1 = 3.6 \times 10^4 \text{ cm.}^{-1}$ และ $E_1 = 1.03 \text{ eV}$

6.6 การพิจารณาการเกิดส่วนหางของเออบาค

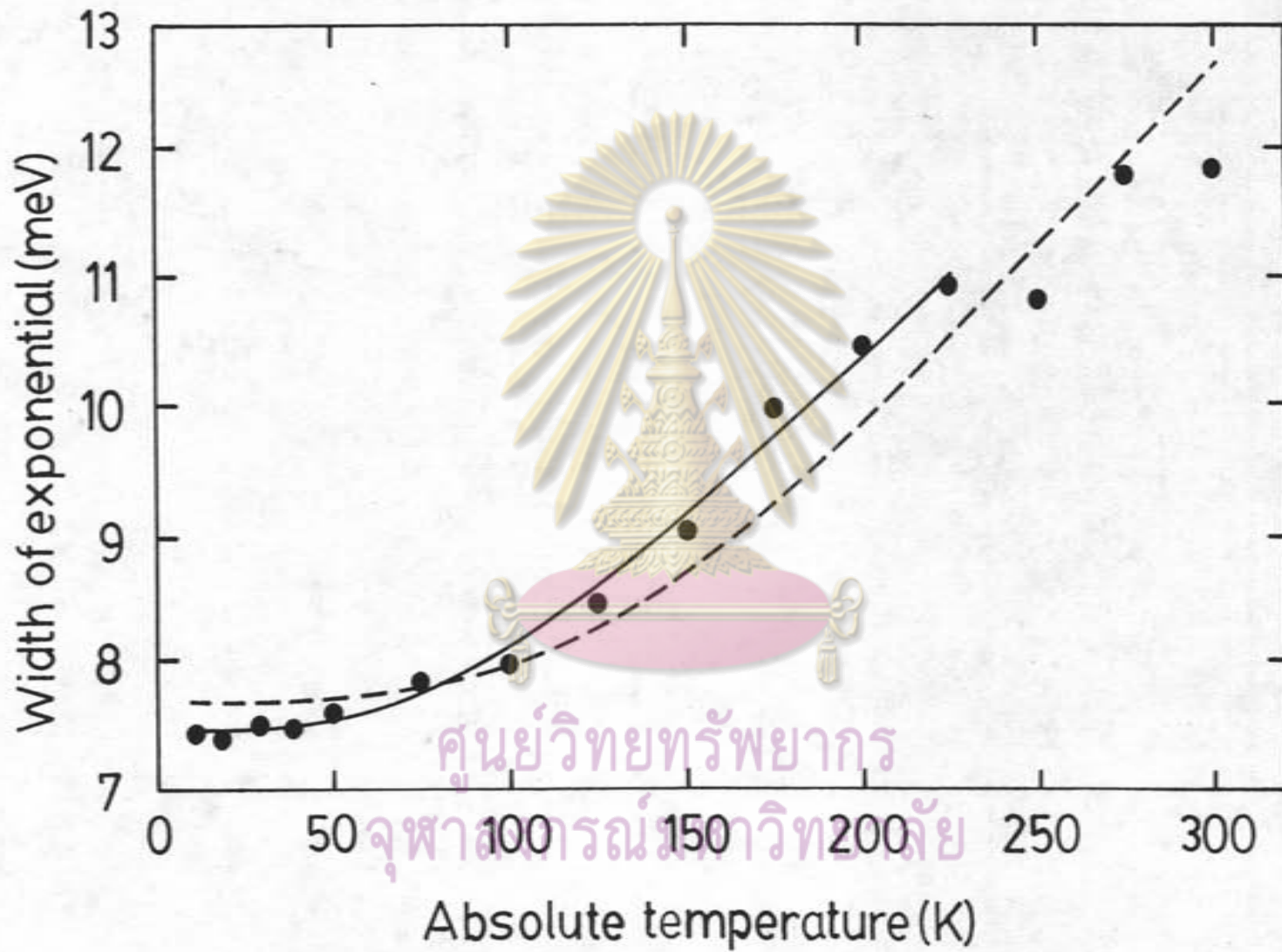
ในการพิจารณาการเกิดส่วนหางของเออบาคได้ใช้แบบจำลองของโคดี [22] ซึ่งแสดงถึงการเกิดส่วนหางของเออบาคเนื่องจากความไม่เป็นระเบียบของโครงสร้างผลึก และความไม่เป็นระเบียบเนื่องจากการสั่นของแลตทิซ ความไม่เป็นระเบียบเหล่านี้จะส่งผลทำให้ส่วนหางของเออบาคแผ่กว้างออกไปขึ้นอยู่กับปริมาณของความไม่เป็นระเบียบ ดังนั้นความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียลจึงขึ้นอยู่กับปริมาณของความไม่เป็นระเบียบด้วย การพิจารณาความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียลของส่วนหางของเออบาคจึงเป็นวิธีการโดยตรงที่จะศึกษาความไม่เป็นระเบียบที่ทำให้ส่วนหางของเออบาค หรือส่วนหางในแถบพลังงาน จากแบบจำลองของโคดีคือ

$$E_o(T, X) = \frac{k_B \theta}{\sigma_o} \left| \frac{1 + X + \frac{1}{\exp(\theta/T) - 1}}{2} \right| \quad (6.9)$$

ซึ่งสามารถแยกออกได้สองส่วน คือส่วนที่มีการเปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิ และส่วนที่ไม่เปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิ

$$E_o(T, X) = E_o(0, X) + E_o(T, 0) \quad (6.10)$$

จากการพิจารณาความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียลตามแบบจำลองของโคดีโดยได้ทำการพิจารณาสองครั้งด้วยกัน คือพิจารณาเฉพาะผลการทดลองในช่วงอุณหภูมิ 11 ถึง 225 K ครั้งหนึ่ง และพิจารณาผลการทดลองทั้งหมดในช่วงอุณหภูมิ 11 ถึง 300 K อีกครั้งหนึ่งดังแสดงตามตารางที่ 6.4 และรูปที่ 6.12



รูปที่ 6.12 เปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียลตามอุณหภูมิกับแบบ

จำลองของโคดีจากข้อมูลในช่วงอุณหภูมิ 11 - 225 K (—) และจากข้อมูลในช่วงอุณหภูมิ 11

- 300 K (- - -)

ตารางที่ 6.4 แสดงพารามิเตอร์ที่ได้จากการพิจารณาความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียลเปรียบเทียบกับแบบจำลองของโคดี

ช่วงอุณหภูมิ	θ (K)	X	σ_0
11 - 300	426	0	2.4
11 - 225	367	0	2.1

6.7 ความสัมพันธ์ระหว่างขนาดช่องว่างแถบพลังงานกับความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียล

จากการพิจารณาลักษณะการเปลี่ยนแปลงขนาดช่องว่างแถบพลังงานตามอุณหภูมิกับลักษณะการเปลี่ยนแปลงความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียลตามอุณหภูมิพบว่ามีการเปลี่ยนแปลงที่เหมือนกัน ดังรูปที่ 6.13 ซึ่งจากการที่ขนาดช่องว่างแถบพลังงานของผลึกของสารกึ่งตัวนำสามารถเขียนได้อยู่ในรูปของดีฟอรัมเมชันโพเทนเชียลลำดับที่สอง และการจัดเฉลี่ยกำลังสองของไอออนคือ [22]

$$E_g(T) = E_g(0) - D(\langle u^2 \rangle_T - \langle u^2 \rangle_0) \quad (6.11)$$

เมื่อเปรียบเทียบกับขนาดช่องว่างแถบพลังงานกับความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียลในแบบจำลองของโคดีซึ่งรวมถึงความไม่เป็นระเบียบจากโครงสร้างผลึก ดังนั้นทอมการเฉลี่ยกำลังสองของไอออนสามารถกระจายอยู่ในเทอมของความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียล $E_0(T, X)$ ได้ว่า

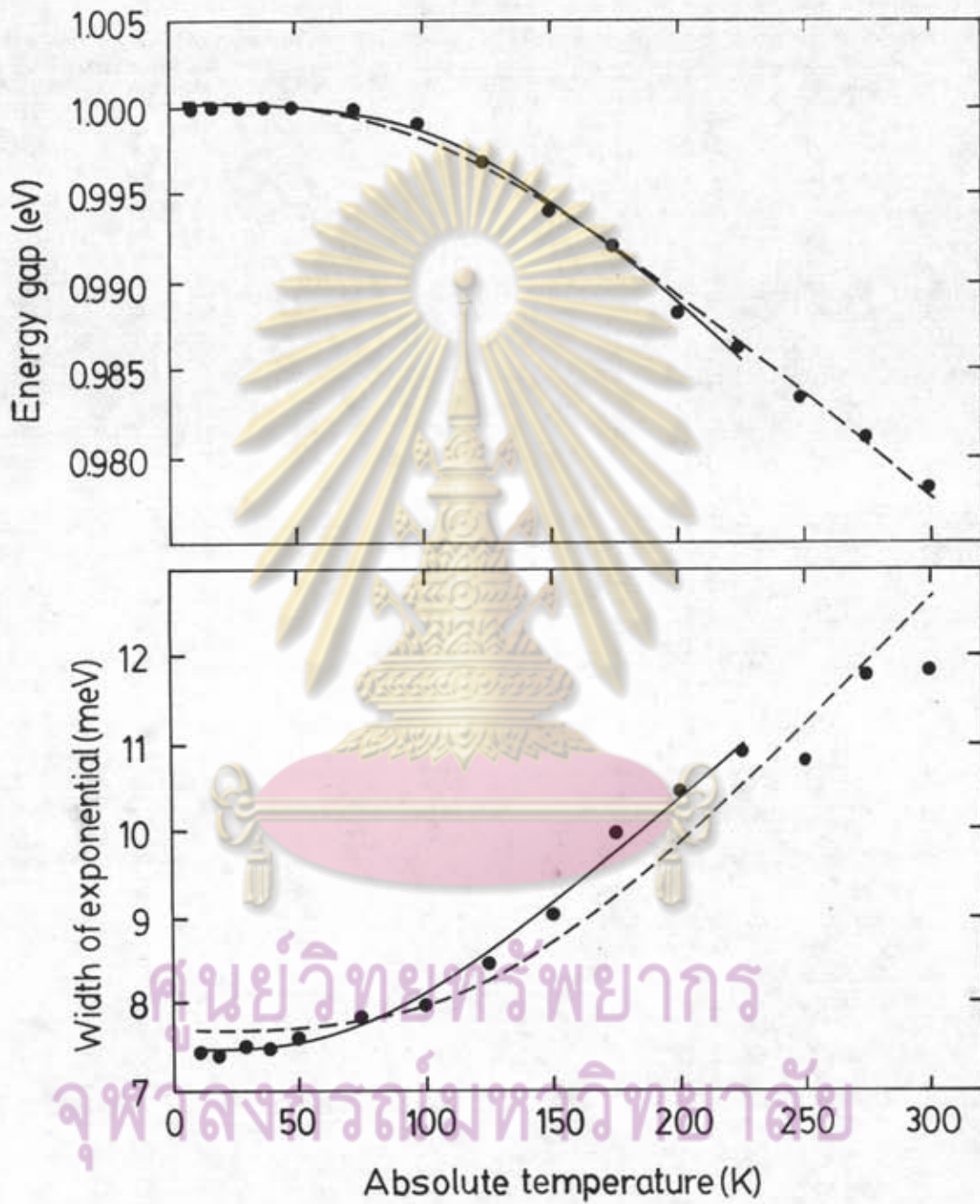
$$E_g(T) = E_g(0) - \langle u^2 \rangle_0 D [E_g(T)/E_g(0) - 1] \quad (6.12)$$

ซึ่งพบว่าปริมาณทั้งสองมีความสัมพันธ์เป็นแบบเชิงเส้น

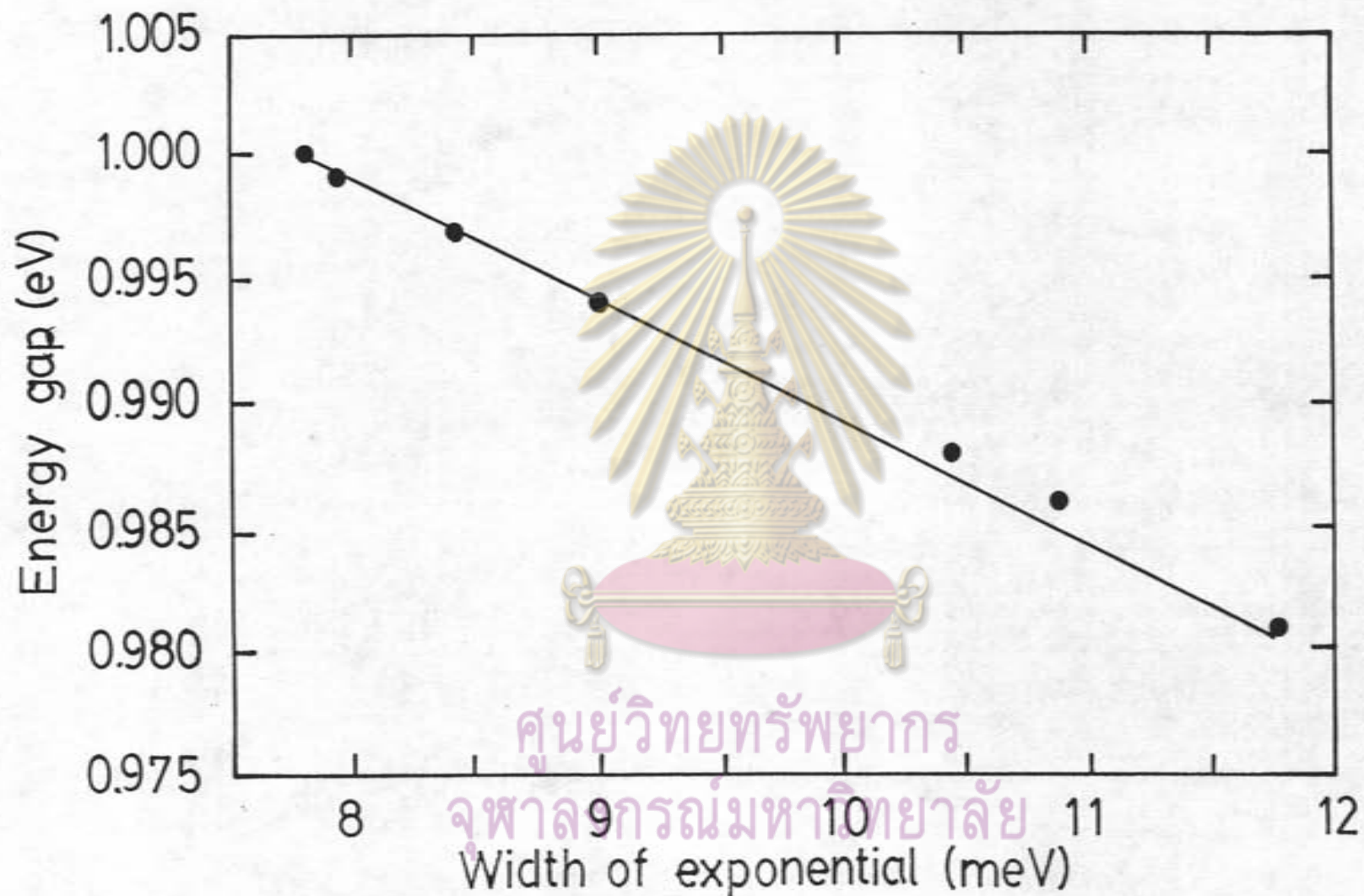
จากการพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างขนาดช่องว่างแถบพลังงานกับความกว้าง
 เอ็กซ์โปเนนเชียลที่ได้จากการทดลองในงานวิจัยนี้พบว่าปริมาณทั้งสองมีความสัมพันธ์กันเป็น
 แบบเชิงเส้นสอดคล้องกับสมการที่ (6.12) ในช่วงอุณหภูมิ 75 - 275 K ดังรูปที่
 (6.14) โดยมีความสัมพันธ์ระหว่างขนาดช่องว่างแถบพลังงานกับความกว้างเอ็กซ์โปเนน
 เชียลของคอปเปอร์อินเดียม ไดซิลินั้นคือ $E_g(T) = 1.039 - 4.95 E_0(T)$



ศูนย์วิทยทรัพยากร
 จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



รูปที่ 6.13 เปรียบเทียบลักษณะการเปลี่ยนแปลงขนาดช่องว่างแถบพลังงานและความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียลตามอุณหภูมิ เห็นได้ว่าลักษณะการเปลี่ยนแปลงของทั้งสองมีลักษณะที่เหมือนกัน



รูปที่ 6.14 กราฟระหว่างขนาดช่องว่างแถบพลังงานกับความกว้างเอ็กซ์โปเนนเชียล แสดงให้เห็นว่าทั้งสองส่วนมีความสัมพันธ์กันเป็นแบบเชิงเส้น