

บทที่ 3

วิธีการคำนวณ

ในบทนี้จะกล่าวถึง วิธีการคำนวณผลของมิติต่อสมบัติทางไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำที่คำนวณจากความหนาแน่นของสถานะ สมบัติทางไฟฟ้าที่สนใจในการศึกษาครั้งนี้ คือ ความหนาแน่นประจุพาหะในตัวเองและความนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ ซึ่งมีรายละเอียด ดังนี้

3.1 วิธีการคำนวณความหนาแน่นประจุพาหะในตัวเองของสารกึ่งตัวนำ

ในการหาค่าความหนาแน่นของประจุพาหะในตัวเองของสารกึ่งตัวนำใน 2, 1 และ 0 มิติ นั้น มีพื้นฐานการคำนวณมาจากการแจกแจงของเฟอร์มี-ดิแรกและความหนาแน่นของสถานะใน 2, 1 และ 0 มิติ ซึ่งการคำนวณคล้ายกับใน 3 มิติ โดยใช้สมการ

$$n = \int_{E_C}^{\infty} D_e(\varepsilon) f_e(\varepsilon) d\varepsilon \quad \text{และ} \quad p = \int_{-\infty}^{E_V} D_h(\varepsilon) f_h(\varepsilon) d\varepsilon \quad \dots\dots\dots(3.1)$$

การแจกแจงของเฟอร์มี-ดิแรก บ่งบอกถึงโอกาสในการเข้าครอบครองสถานะของอนุภาคเฟอร์มิออนที่มีพลังงาน ε ณ อุณหภูมิ T โดยค่า μ คือระดับพลังงานที่ทำให้ค่าของฟังก์ชันเฟอร์มี $f(\varepsilon)$ มีค่าเป็น 0.5 หรือเป็นจุดสมดุลระหว่างสถานะที่มีอนุภาคเฟอร์มิออนเข้าครอบครองและสถานะที่ไม่มีอนุภาคเฟอร์มิออนเข้าครอบครองนั่นเอง ซึ่งที่อุณหภูมิศูนย์สัมบูรณ์ค่าของ μ จะมีค่าเท่ากับ ε_F ซึ่งคือระดับพลังงานสูงสุดที่อิเล็กตรอนสามารถอยู่ในอะตอมได้นั่นเอง สำหรับความหนาแน่นของสถานะนั้นจะเห็นว่าเป็นฟังก์ชันของพลังงานอย่างเดียวไม่ได้ขึ้นกับอุณหภูมิ ความหนาแน่นของสถานะบ่งบอกเกี่ยวกับว่าแต่ละระดับพลังงานมีสถานะหรือที่อยู่ให้อนุภาคมากน้อยเพียงใด ระดับพลังงานใดบ้างที่อนุภาคสามารถอยู่ได้เยอะและระดับพลังงานใดบ้างที่อนุภาคไม่สามารถอยู่ได้ นั่นก็คือในแบบจำลองที่เราจะศึกษานี้เราสนใจว่าในแต่ละมิติอนุภาคเฟอร์มิออนมีความหนาแน่นของสถานะหรือลักษณะของที่อยู่แตกต่างกันในแต่ละมิติ แต่ทุกมิติอนุภาคเฟอร์มิออนมีโอกาสเข้าครอบครองสถานะเหมือนกัน ซึ่งโอกาสการเข้าครอบครองสถานะจะเปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิด้วย ดังนั้นความหนาแน่นประจุพาหะของสารกึ่งตัวนำจึงเกิดจากความหนาแน่นของสถานะและการแจกแจงของเฟอร์มี-ดิแรกนั่นเอง

ประจุพาหะของสารกึ่งตัวนำมี 2 ชนิด คือ อิเล็กตรอนที่มีพลังงานสูงกว่าระดับพลังงานนำ (n) และโฮลที่มีพลังงานต่ำกว่าระดับพลังงานเวเลนซ์ (p) ในการคำนวณความหนาแน่นประจุพาหะในตัวของสารกึ่งตัวนำ (n_i) มีเงื่อนไขกำหนดในการศึกษา คือ

1. ประจุพาหะมีการแจกแจงแบบเฟอร์มี-ดิแรกเหมือนกันในทุกมิติ
2. ในทุกมิติมีระดับพลังงานนำและระดับพลังงานเวเลนซ์
3. ศักยภาพกึ่งตัวนำที่อุณหภูมิห้อง โดยที่ $\epsilon - \mu \gg k_B T$
4. ในทุกมิติสารกึ่งตัวนำมีค่าความหนาแน่นประจุพาหะซึ่งสอดคล้องกับสมการ $n_i^2 = np$

ในมิติที่ลดลงนั้น สิ่งที่ประจุพาหะได้รับผลกระทบคือที่อยู่หรือความหนาแน่นของสถานะมีรูปแบบเปลี่ยนแปลงไป แต่ประจุพาหะยังคงมีโอกาสในการเข้าครอบครองสถานะเหมือนเดิม ซึ่งได้เงื่อนไขที่ว่าประจุพาหะมีการแจกแจงแบบเฟอร์มี-ดิแรกเหมือนกันในทุกมิติ และประจุพาหะในสารกึ่งตัวนำที่เกิดจากอิเล็กตรอนอิสระนั้นจะต้องมีพลังงานต่ำสุด นั่นคือ E_c และประจุพาหะที่เป็นโฮลก็เป็นผลเนื่องมาจากการเกิดอิเล็กตรอนอิสระซึ่งโฮลก็จะต้องมีระดับพลังงานสูงสุด คือ E_v เช่นกันในการศึกษาที่อุณหภูมิห้อง เช่น ที่อุณหภูมิ 300 เคลวิน สารประกอบซิงค์ออกไซด์ซึ่งเป็นสารกึ่งตัวนำมีค่าช่องว่างแถบพลังงาน (Energy Gap) ประมาณ 3.3 อิเล็กตรอนโวลต์ และค่า $k_B T$ มีค่าประมาณ 0.0259 อิเล็กตรอนโวลต์ ซึ่งทำให้ได้ว่า $\epsilon - \mu \approx E_g / 2 \gg k_B T$ ซึ่งเงื่อนไขนี้จะใช้ในการประมาณการแจกแจงของเฟอร์มี-ดิแรกให้คำนวณง่ายขึ้น ซึ่งจากกรณีของสารกึ่งตัวนำที่อุณหภูมิห้องนั้น $\epsilon - \mu \gg k_B T$ จะได้ว่า

$$f_e(\epsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1} \approx \exp\left(\frac{\mu - \epsilon}{k_B T}\right) \dots\dots\dots(3.2)$$

$$f_h(\epsilon) = 1 - f_e(\epsilon) = 1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1} \approx \exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right) \dots\dots\dots(3.3)$$

โดยที่ $f_e(\epsilon)$ คือ การแจกแจงของอิเล็กตรอนที่มีพลังงานสูงกว่าระดับพลังงานนำ และ $f_h(\epsilon)$ คือ การแจกแจงของโฮลที่มีพลังงานต่ำกว่าระดับพลังงานเวเลนซ์

สำหรับเงื่อนไขที่ว่าในทุกมิติสารกึ่งตัวนำมีค่าความหนาแน่นประจุพาหะซึ่งสอดคล้องกับสมการ $n_i^2 = np$ (Law of Mass Action) ประจุพาหะของสารกึ่งตัวนำจะต้องเกิดจาก

อิเล็กตรอนอิสระที่มีพลังงานสูงกว่าระดับพลังงานนำและโฮลอิสระที่มีพลังงานต่ำกว่าระดับพลังงานเวเลนซ์จะขาดอย่างใดอย่างหนึ่งไม่ได้ ซึ่งนี่คือลักษณะเด่นของสารกึ่งตัวนำที่มีทั้งโฮลและอิเล็กตรอนในการนำไฟฟ้า

3.1.1 วิธีการคำนวณความหนาแน่นประจุพาหะในตัวของสารกึ่งตัวนำใน 2 มิติ

ใน 2 มิตินั้น ความหนาแน่นของสถานะของอิเล็กตรอนและโฮลเป็นฟังก์ชันของพลังงาน ซึ่งมีค่าดังนี้

$$D_{2D,e}(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{m_e}{\pi\hbar^2} \sum_i H(\varepsilon - \varepsilon_i)d\varepsilon \dots\dots\dots(3.4)$$

$$D_{2D,h}(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{m_h}{\pi\hbar^2} \sum_i H(\varepsilon - \varepsilon_i)d\varepsilon \dots\dots\dots(3.5)$$

จากสมการ (3.1) ถึงสมการ (3.5) จะได้ว่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนและโฮลใน 2 มิติ สามารถเขียนได้ดังนี้

$$n_{2D} = \frac{m_e}{\pi\hbar^2} \exp(\mu / k_B T) \int_{E_c}^{\infty} \exp(-\varepsilon / k_B T) \sum_i H(\varepsilon - \varepsilon_i)d\varepsilon \dots\dots\dots(3.6)$$

$$p_{2D} = \frac{m_h}{\pi\hbar^2} \exp(-\mu / k_B T) \int_{-\infty}^{E_v} \exp(\varepsilon / k_B T) \sum_i H(\varepsilon - \varepsilon_i)d\varepsilon \dots\dots\dots(3.7)$$

โดยที่ n_{2D} คือ ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระที่มีพลังงานสูงกว่าระดับพลังงานนำในสารกึ่งตัวนำ 2 มิติ

p_{2D} คือ ความหนาแน่นของโฮลอิสระที่มีพลังงานสูงกว่าระดับพลังงานนำในสารกึ่งตัวนำ 2 มิติ

m_e คือ มวลยังผล (Effective mass) ของอิเล็กตรอน

m_h คือ มวลยังผล (Effective mass) ของโฮล

E_c คือ ระดับพลังงานนำ (Conduction level)

E_v คือ ระดับพลังงานเวเลนซ์ (Valence level)

และจากเงื่อนไขของสมการ $n_i^2 = np$ จะได้ว่า

$$n_{2D} p_{2D} = \frac{m_e m_h}{\pi^2 \hbar^4} \int_{E_C}^{\infty} \exp(-\varepsilon / k_B T) \sum_i H(\varepsilon - \varepsilon_i) d\varepsilon \int_{-\infty}^{E_V} \exp(-\varepsilon / k_B T) \sum_i H(\varepsilon - \varepsilon_i) d\varepsilon \dots\dots\dots(3.8)$$

3.1.2 วิธีการคำนวณความหนาแน่นประจุพาหะในตัวของสารกึ่งตัวนำใน 1 มิติ

ใน 1 มิตินั้น ความหนาแน่นของสถานะของอิเล็กตรอนและโฮลเป็นฟังก์ชันของพลังงานซึ่งมีค่าดังนี้

$$D_{1D,e}(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{1/2} \sum_i \frac{n_i H(\varepsilon - \varepsilon_i)}{(\varepsilon - \varepsilon_i)^{1/2}} d\varepsilon \dots\dots\dots(3.9)$$

$$D_{1D,h}(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2m_h}{\hbar^2} \right)^{1/2} \sum_i \frac{n_i H(\varepsilon - \varepsilon_i)}{(\varepsilon_i - \varepsilon)^{1/2}} d\varepsilon \dots\dots\dots(3.10)$$

ดังนั้น จะได้ว่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนและโฮลใน 1 มิติ สามารถเขียนได้ดังนี้

$$n_{1D} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{1/2} \exp(\mu / k_B T) \int_{E_C}^{\infty} \exp(-\varepsilon / k_B T) \sum_i \frac{n_i H(\varepsilon - \varepsilon_i)}{(\varepsilon - \varepsilon_i)^{1/2}} d\varepsilon \dots\dots\dots(3.11)$$

$$p_{1D} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2m_h}{\hbar^2} \right)^{1/2} \exp(-\mu / k_B T) \int_{-\infty}^{E_V} \exp(\varepsilon / k_B T) \sum_i \frac{n_i H(\varepsilon - \varepsilon_i)}{(\varepsilon_i - \varepsilon)^{1/2}} d\varepsilon \dots\dots\dots(3.12)$$

และจากเงื่อนไขของสมการ $n_i^2 = np$ จะได้ว่า

$$n_{1D} p_{1D} = \frac{2(m_e m_h)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^2} \int_{E_C}^{\infty} \exp(-\varepsilon / k_B T) \sum_i \frac{n_i H(\varepsilon - \varepsilon_i)}{(\varepsilon - \varepsilon_i)^{1/2}} d\varepsilon \int_{-\infty}^{E_V} \exp(\varepsilon / k_B T) \sum_i \frac{n_i H(\varepsilon - \varepsilon_i)}{(\varepsilon_i - \varepsilon)^{1/2}} d\varepsilon \dots\dots\dots(3.13)$$

3.1.3 วิธีการคำนวณความหนาแน่นประจุพาหะในตัวของสารกึ่งตัวนำใน 0 มิติ

สำหรับใน 0 มิตินั้น ความหนาแน่นของสถานะของอิเล็กตรอนและโฮลเป็นฟังก์ชันของพลังงาน ซึ่งมีค่าดังนี้

$$D_{0D,e}(\varepsilon)d\varepsilon = D_{0D,h}(\varepsilon)d\varepsilon = A \sum_i n_i \delta(\varepsilon - \varepsilon_i) d\varepsilon \quad ; A \text{ is constant} \quad \dots\dots\dots(3.14)$$

ดังนั้น จะได้ว่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนและโฮลใน 0 มิติ สามารถเขียนได้ดังนี้

$$n_{0D} = \exp(\mu / k_B T) \int_{E_C}^{\infty} A \sum_i n_i \delta(\varepsilon - \varepsilon_i) \exp(-\varepsilon / k_B T) d\varepsilon \quad \dots\dots\dots(3.15)$$

$$p_{0D} = \exp(-\mu / k_B T) \int_{-\infty}^{E_V} A \sum_j n_j \delta(\varepsilon - \varepsilon_j) \exp(\varepsilon / k_B T) d\varepsilon \quad \dots\dots\dots(3.16)$$

และจากเงื่อนไขของสมการ $n_i^2 = np$ จะได้ว่า

$$n_{0D} p_{0D} = \int_{E_C}^{\infty} A \sum_i n_i \delta(\varepsilon - \varepsilon_i) \exp(-\varepsilon / k_B T) d\varepsilon \int_{-\infty}^{E_V} A \sum_j n_j \delta(\varepsilon - \varepsilon_j) \exp(\varepsilon / k_B T) d\varepsilon \quad \dots\dots\dots(3.17)$$

จะเห็นว่าการหาค่าของความหนาแน่นประจุพาหะในตัวของ 2, 1 และ 0 มิติ จากสมการ $n_i^2 = np$ จะไม่มีค่า μ ซึ่งแสดงถึงระดับพลังงานศักย์อ้างอิงในสารกึ่งตัวนำเข้ามาเกี่ยวข้องกับเลย ซึ่งค่าของความหนาแน่นประจุพาหะในตัวนั้น เป็นฟังก์ชันของค่าของพลังงานในแต่ละระดับชั้นพลังงานย่อยและอุณหภูมิเท่านั้น

3.2 วิธีการคำนวณความนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ

การคำนวณหาความนำไฟฟ้าใน 2, 1 และ 0 มิติของสารกึ่งตัวนำนั้น ได้แบ่งกรณีศึกษาออกเป็น 2 แบบ คือ วิธีการคำนวณตามแบบจำลองของอิเล็กตรอนอิสระ และความนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำนอกเหนือจากแบบจำลองของอิเล็กตรอนอิสระ ซึ่งมีรายละเอียดดังนี้

3.2.1 การคำนวณความนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำตามแบบจำลองของอิเล็กตรอนอิสระ

ในแบบจำลองของอิสระได้ศึกษาถึงสภาพนำไฟฟ้า (Electrical Conductivity) ของอิเล็กตรอนอิสระในสารโลหะ ซึ่งต่อมาได้มีการนำไปใช้ในการหาสภาพนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำใน 3 มิติ ซึ่งมีสมการดังนี้

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_{m,e}}{m_e} + \frac{pe^2\tau_{m,h}}{m_h} \dots\dots\dots (3.18)$$

โดยที่ σ คือ สภาพนำไฟฟ้า (Electrical Conductivity) ของสารกึ่งตัวนำใน 3 มิติ
 $\tau_{m,e}$ คือ Relaxation Time ของอิเล็กตรอนในสารกึ่งตัวนำ
 $\tau_{m,h}$ คือ Relaxation Time ของโฮลในสารกึ่งตัวนำ

สมการ 3.18 มาจาก

$$\vec{j} = \sigma\vec{E} \quad \text{และ} \quad \vec{j}_e = -nev_e \dots\dots\dots (3.19)$$

และจาก $\Delta\vec{P}/\Delta t = \vec{F}$ ทำให้ได้ว่า

$$\frac{m\vec{v}_e}{\tau_{m,e}} = -e\vec{E} \dots\dots\dots (3.20)$$

แทนสมการ 3.20 ลงในสมการ 3.19 จะได้

$$\vec{j} = -ne(-e\vec{E}\tau/m) = ne^2\vec{E}\tau/m \dots\dots\dots (3.21)$$

$$\sigma_e = \frac{ne^2\tau_{m,e}}{m_e} \dots\dots\dots (3.22)$$

ทำนองเดียวกัน

$$\sigma_h = \frac{ne^2\tau_{m,h}}{m_h} \dots\dots\dots (3.23)$$

ในแบบจำลองนี้มีเงื่อนไขในการคำนวณหาค่าความนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ ดังนี้

1. สารกึ่งตัวนำทั้งก้อนสารมีลักษณะเหมือนกัน (Uniform)
2. การนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำในทุกมิติเป็นแบบทิศทางเดียว (Ballistic) และแต่ละระดับพลังงานของประจุพาหะเป็นอิสระต่อกัน

สำหรับการนำไฟฟ้าใน 1 มิติของสารกึ่งตัวนำ มีสมการของความนำไฟฟ้างี้

$$G \equiv \frac{\sigma}{L} = \frac{ne^2\tau_{m,e}}{m_e L} + \frac{pe^2\tau_{m,h}}{m_h L} = \frac{ne^2 T_{KG,e}}{2\bar{v}_e m_e} + \frac{pe^2 T_{KG,h}}{2\bar{v}_h m_h} \quad \dots\dots\dots (3.24)$$

ซึ่งสัมประสิทธิ์การทะลุผ่าน (Transmission coefficient) $T_{KG} = 2\bar{v}\tau_m / L$ คือ อัตราส่วนของ Mean free path ต่อระยะความยาว L

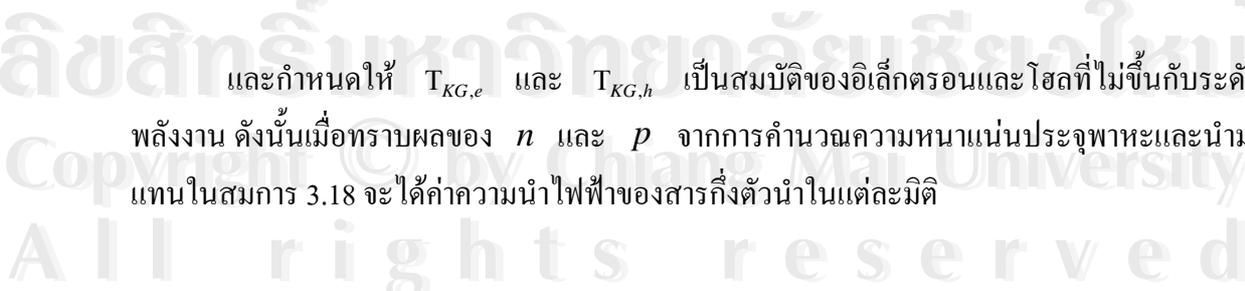
- โดยที่
- G คือ ความนำไฟฟ้า (Electrical Conductance) ของสารกึ่งตัวนำใน 1 มิติ
 - $T_{KG,e}$ คือ สัมประสิทธิ์การทะลุผ่านของอิเล็กตรอน
 - $T_{KG,h}$ คือ สัมประสิทธิ์การทะลุผ่านของโฮล
 - L คือ ระยะความยาวในแนวที่ขนานกับการเคลื่อนที่ของประจุพาหะ
 - \bar{v} คือ ความเร็วเฉลี่ยของทั้งระบบ
 - \bar{v}_e คือ ความเร็วเฉลี่ยของอิเล็กตรอนอิสระ
 - \bar{v}_h คือ ความเร็วเฉลี่ยของโฮลอิสระ

สำหรับค่าของ \bar{v}_e และ \bar{v}_h นั้น ในแบบจำลองนี้จะกำหนดว่าความเร็วเฉลี่ยมีค่าคงที่และไม่ขึ้นกับระดับพลังงาน ซึ่งจะได้ว่า

$$\bar{v}_e = v_{F,e} = \hbar k_F / m_e = \sqrt{(\hbar k_{F,e})^2 / 2m_e} \sqrt{2/m_e} \approx \sqrt{E_g / m_e} \quad \dots\dots\dots (3.25)$$

$$\bar{v}_h = v_{F,h} = \hbar k_F / m_h = \sqrt{(\hbar k_{F,h})^2 / 2m_h} \sqrt{2/m_h} \approx \sqrt{E_g / m_h} \quad \dots\dots\dots (3.26)$$

และกำหนดให้ $T_{KG,e}$ และ $T_{KG,h}$ เป็นสมบัติของอิเล็กตรอนและโฮลที่ไม่ขึ้นกับระดับพลังงาน ดังนั้นเมื่อทราบผลของ n และ p จากการคำนวณความหนาแน่นประจุพาหะและนำมาแทนในสมการ 3.18 จะได้ค่าความนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำในแต่ละมิติ



3.2.2 การคำนวณความนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำนอกเหนือจากแบบจำลองของอิเล็กตรอนอิสระ

ผลกระทบจาก Nonequilibrium Distribution Function ที่มีต่อค่าความนำไฟฟ้า

จากแบบจำลองของอิเล็กตรอนอิสระการแจกแจงของเฟอร์มี-ดิแรคกบ่งบอกถึงโอกาสในการเข้าครอบครองสถานะของอนุภาคเฟอร์มิออนซึ่งเป็นฟังก์ชันของพลังงานเพียงอย่างเดียว แต่ในความเป็นจริงแล้วฟังก์ชันการแจกแจงของโอกาสนั้นเป็นฟังก์ชันของตำแหน่ง (\vec{r}) และเวลา (t) ด้วย ซึ่งเขียนฟังก์ชันการแจกแจงของประจุพาหะ (ในที่นี้พิจารณาเฉพาะอิเล็กตรอนก่อน) ขึ้นใหม่ได้เป็น $g_n(\vec{r}, \vec{k}, t)$ เรียกว่า ฟังก์ชันการแจกแจงในสภาวะไม่สมดุล⁽²³⁾ (Nonequilibrium Distribution Function) และที่สภาวะสมดุล นิยามว่า

$$g_n^{eq}(\vec{r}, \vec{k}, t) \equiv f(\epsilon_n(\vec{k})) = \frac{1}{\exp[(\epsilon - \mu) / k_B T] + 1} \dots\dots\dots (3.27)$$

เมื่อ $g_n^{eq}(\vec{r}, \vec{k}, t)$ ฟังก์ชันการแจกแจงในสภาวะที่สมดุลในระดับพลังงานที่ n พิจารณาฟังก์ชัน $g_n(\vec{r}, \vec{k}, t)$ ซึ่งมี Total Differential ดังนี้

$$dg_n(\vec{r}, \vec{k}, t) = \left(\frac{\partial g_n(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \vec{r}} \right)_{\vec{k}, t} d\vec{r} + \left(\frac{\partial g_n(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \vec{k}} \right)_{\vec{r}, t} d\vec{k} + \left(\frac{\partial g_n(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{\vec{r}, \vec{k}} dt \dots\dots\dots (3.28)$$

ในที่นี้ให้ Relaxation Time คือ ช่วงเวลาเฉลี่ยในการชนของอิเล็กตรอน 1 ครั้ง ซึ่งเป็นฟังก์ชันของ $\tau = \tau_n(\vec{r}, \vec{k})$ และกำหนดให้โอกาสในการชนของอิเล็กตรอนในช่วงเวลา dt มีค่าเป็น dt/τ โดยฟังก์ชัน $g_n(\vec{r}, \vec{k}, t)$ มีเงื่อนไขกำหนดว่า

1. การแจกแจงของอิเล็กตรอนเกิดขึ้นจากการชนในทุกช่วงเวลา และไม่ขึ้นกับฟังก์ชันการแจกแจงในสภาวะไม่สมดุล แต่ขึ้นกับการชนในครั้งที่ผ่านมา
2. อิเล็กตรอนที่ตำแหน่งบริเวณ \vec{r} หนึ่งๆ จะมีฟังก์ชันการแจกแจงที่สมดุลในบริเวณใกล้ๆ \vec{r} โดยมีอุณหภูมิเป็น $T(\vec{r})$

จากเงื่อนไขข้อที่ 1 และ 2 สามารถแยกได้เป็น

$$g_n(\vec{r}, \vec{k}, t) = g_n^0(\vec{r}, \vec{k})T(t) \text{ เมื่อ } g_n^0(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{1}{\exp((\epsilon_n(\vec{k}) - \mu(\vec{r})) / k_B T(\vec{r})) + 1} \dots\dots\dots (3.29)$$

และ $g_n^0(\vec{r}, \vec{k})$ แสดงให้เห็นว่าค่าของ $g_n(\vec{r}, \vec{k}, t)$ อยู่ในสถานะสมดุลบริเวณพื้นที่เล็กๆรอบ \vec{r}, \vec{k} ทำให้สมการ 3.28 ลดรูปได้เป็น

$$dg_n(\vec{r}, \vec{k}, t) = g_n^0(\vec{r}, \vec{k}) \frac{dt}{\tau_n(\vec{r}, \vec{k})} \dots\dots\dots (3.30)$$

เริ่มจากจำนวนของอิเล็กตรอนในระดับพลังงานที่ n ณ เวลา t ในปริมาตร $d\vec{r}d\vec{k}$ สัมพันธ์กับ Nonequilibrium Distribution Function ดังนี้

$$dN = g_n(\vec{r}, \vec{k}, t) \frac{d\vec{r}d\vec{k}}{4\pi^3} \dots\dots\dots (3.31)$$

และ $g_n(\vec{r}, \vec{k}, t)$ เกิดจากการชนกันระหว่างพิกัด $(\vec{r}(t'), \vec{k}(t'), t')$ กับ $(\vec{r}(t), \vec{k}(t), t)$ ทำให้ได้ว่า

$$g_n(\vec{r}, \vec{k}, t) = \frac{dt'}{\tau_n(\vec{r}_n(t'), \vec{k}_n(t'))} g_n^0(\vec{r}_n(t'), \vec{k}_n(t')) \dots\dots\dots (3.32)$$

กำหนดให้ $P_n(\vec{r}, \vec{k}, t:t')$ เป็นฟังก์ชันที่เกี่ยวข้องกับโอกาสที่จะไม่เกิดการชนกัน ณ ช่วงเวลา t' ไปยัง t ซึ่งมีผลรวมเป็น ดังนี้

$$dN = \frac{d\vec{r}d\vec{k}}{4\pi^3} \int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau_n(\vec{r}_n(t'), \vec{k}_n(t'))} g_n^0(\vec{r}_n(t'), \vec{k}_n(t')) P_n(\vec{r}, \vec{k}, t:t') \dots\dots\dots (3.33)$$

โดยที่ $d\vec{r}d\vec{k} = d\vec{r}'d\vec{k}'$

เปรียบเทียบระหว่างสมการ 3.33 กับ สมการ 3.30 จะได้ว่า

$$g_n(\vec{r}, \vec{k}, t) = \int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau_n(\vec{r}_n(t'), \vec{k}_n(t'))} g_n^0(\vec{r}_n(t'), \vec{k}_n(t')) P_n(\vec{r}, \vec{k}, t:t') \dots\dots\dots (3.34)$$

เพื่อให้ดูง่ายจะลดรูปตัวแปร ดังนี้

$$g_n(\vec{r}, \vec{k}, t) \rightarrow g(t) , \quad g_n^0(\vec{r}_n(t'), \vec{k}_n(t'), t') \rightarrow g^0(t') \dots\dots\dots (3.35)$$

$$\tau_n(\vec{r}_n(t'), \vec{k}_n(t'), t') \rightarrow \tau(t') , \quad P_n(\vec{r}, \vec{k}, t:t') \rightarrow P(t, t') \dots\dots\dots (3.36)$$

ทำให้เขียนสมการ 3.34 ได้ใหม่ว่า

$$g(t) = \int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau_n(t')} g_n^0(t') P(t, t') \tag{3.37}$$

ต่อไปจะหาฟังก์ชันของ $P(t, t')$ ว่ามีรูปแบบเป็นอย่างไร พิจารณา $P(t, t' + dt')$ สามารถเขียนให้อยู่ในรูป $P(t, t')$ ดังนี้

$$P(t, t') = P(t, t' + dt') \left[1 - \frac{dt'}{\tau(t')} \right] \tag{3.38}$$

ซึ่ง $1 - \frac{dt'}{\tau(t')}$ ก็คือ โอกาสที่อนุภาคจะไม่ชนกันในช่วงเวลา dt' สมการ 3.38 มีความหมายว่าโอกาสที่อนุภาคจะไม่ชนกันในช่วงเวลา $t' \rightarrow t$ จะมีค่าเท่ากับโอกาสที่อนุภาคจะไม่ชนกันในช่วงเวลา $t' \rightarrow t' + dt'$ คูณกับโอกาสที่อนุภาคจะไม่ชนกันในช่วงเวลา $t' + dt' \rightarrow t$ นั่นเอง และเมื่อ $dt' \rightarrow 0$ จะได้อนุพันธ์ย่อยมีค่าเป็น

$$\frac{\partial}{\partial t'} P(t, t') = -\frac{P(t, t')}{\tau(t')} \tag{3.39}$$

ในความจริงที่ว่า $P(t, t) = 1$ ทำให้ได้

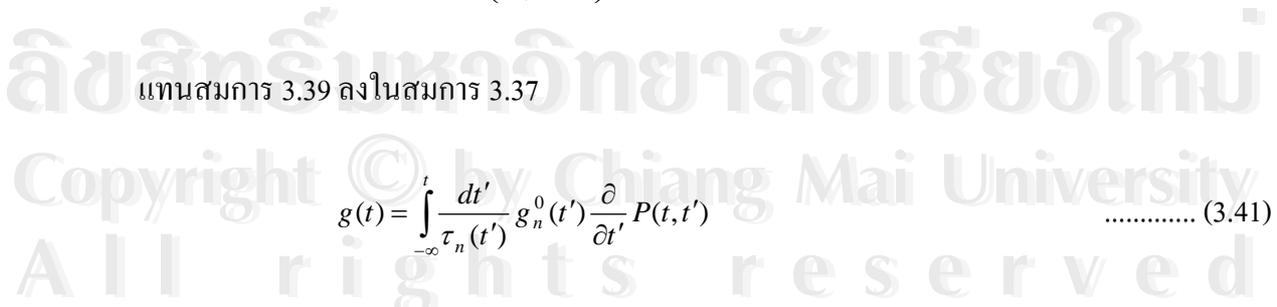
$$P(t, t') = \exp\left(-\int_{t'}^t \frac{d\bar{t}}{\tau(\bar{t})}\right) \tag{3.40}$$

แทนสมการ 3.39 ลงในสมการ 3.37

$$g(t) = \int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau_n(t')} g_n^0(t') \frac{\partial}{\partial t'} P(t, t') \tag{3.41}$$

แทน 3.40 ลงใน 3.41 โดยที่ $P(t, -\infty) = 0$ จะได้

$$g(t) = g^0(t) - \int_{-\infty}^t dt' P(t, t') g_n^0(t') \frac{d}{dt'} g^0(t') \tag{3.42}$$



พิจารณาอนุพันธ์ของ g^0 ดังสมการ 3.35 $g_n^0(\vec{r}_n(t'), \vec{k}_n(t'), t') \rightarrow g^0(t')$ ซึ่งเปลี่ยนชุดใหม่ที่เป็นอิสระเชิงเส้นได้เป็น $\varepsilon_n(\vec{k}_n, t'), T(\vec{r}_n(t'))$ และ $\mu(\vec{r}_n(t'))$ ทำให้ได้ว่า

$$\frac{dg^0(t')}{dt'} = \frac{\partial g^0}{\partial \varepsilon_n} \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \vec{k}} \cdot \frac{\partial \vec{k}_n}{\partial t'} + \frac{\partial g^0}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial \vec{r}_n}{\partial t'} + \frac{\partial g^0}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial \vec{r}_n}{\partial t'} \quad \text{..... (3.43)}$$

จากสมการการเคลื่อนที่และสมการ 3.42 และ 3.43 จะได้

$$g(t) = g^0 + \int_{-\infty}^t dt' P(t, t') \left[\left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \vec{v} \cdot \left(-e\vec{E} - \nabla\mu - \left(\frac{\varepsilon - \mu}{T} \right) \nabla T \right) \right] \quad \text{..... (3.44)}$$

พิจารณา กรณีพิเศษที่ \vec{E} และ ∇T มีค่าน้อยๆ และ $\tau_n(\vec{r}_n(t'), \vec{k}_n(t'), t') \rightarrow \tau_n(\vec{k})$ ไม่ขึ้นกับเวลา จะทำให้สมการ 3.40 กลายเป็น

$$P(t, t') = \exp\left(- (t - t') / \tau_n(\vec{k})\right) \quad \text{..... (3.45)}$$

และสมการ 3.44 เขียนได้ว่า

$$g(\vec{k}, t) = g^0(\vec{k}) + \int_{-\infty}^t dt' e^{-(t-t')/\tau_n(\vec{k})} \left[\left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \vec{v}(\vec{k}(t')) \cdot \left(-e\vec{E}(t') \right) \right] \quad \text{..... (3.46)}$$

นั่นคือ ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนและโฮลในสารกึ่งตัวนำจากสมการ 3.1 กลายเป็น

$$n^{(n)} = \int D_e(\varepsilon(\vec{k})) g_e(\vec{k}, t) \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} d\vec{k} \quad \text{..... (3.47)}$$

$$p^{(n)} = \int D_h(\varepsilon(\vec{k})) (1 - g_h(\vec{k}, t)) \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} d\vec{k} \quad \text{..... (3.48)}$$

โดยที่ $n^{(n)}$ คือ ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนในระดับพลังงานที่ n

$p^{(n)}$ คือ ความหนาแน่นของโฮลในระดับพลังงานที่ n

พิจารณา Current Density ของอิเล็กตรอน แทนด้วย \vec{j}_e จะได้ว่า

$$\vec{j}_e = -e \int D_e(\varepsilon(\vec{k})) g_e(\vec{k}, t) \vec{v}(\vec{k}) \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} d\vec{k} \quad \dots\dots\dots (3.49)$$

แทนสมการ 3.46 ลงในสมการ 3.49 และเปรียบเทียบกับ $\vec{j}_e = \sigma_e \vec{E}$ ซึ่ง σ_e เกิดจากผลรวมของสภาพนำไฟฟ้าแต่ละระดับพลังงาน คือ $\sigma_e^{(n)}$ จะได้ว่า

$$\sigma_e = \sum_n \sigma_e^{(n)} \quad \dots\dots\dots (3.50)$$

$$\sigma_e^{(n)} = e^2 \int D_e(\varepsilon_n(\vec{k})) \tau_n(\varepsilon(\vec{k})) \vec{v}_n(\vec{k}) \cdot \vec{v}_n(\vec{k}) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_n(\vec{k})} \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} d\vec{k} \quad \dots\dots\dots (3.51)$$

พิจารณาสมการ 3.51 จะได้ว่า

$$\vec{v}_n(\vec{k}) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_n(\vec{k})} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} f(\varepsilon(\vec{k})) \quad \dots\dots\dots (3.52)$$

และสามารถเขียนสมการ 3.51 ในรูปแบบของ Tensor ได้เป็น

$$\sigma_{\mu\nu}^{(n)} = e^2 \int D_e(\varepsilon_n(\vec{k})) f(\varepsilon_n(\vec{k})) \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\vec{k})}{\partial k_\mu \partial k_\nu} \tau_n(\varepsilon(\vec{k})) \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} d\vec{k} \quad \dots\dots\dots (3.53)$$

จะเห็นว่าสมการ 3.53 คือ รูปแบบอย่างง่ายของสภาพนำไฟฟ้าที่คำนวณจาก Nonequilibrium Distribution Function และสอดคล้องกับสมการ 3.22 ด้วย

พิจารณา $\frac{\partial \varepsilon_n(\vec{k})}{\partial k_\mu}$ และ $\frac{\partial^2 \varepsilon_n(\vec{k})}{\partial k_\mu \partial k_\nu}$ โดยอาศัยการกระจายสัมประสิทธิ์ของพลังงาน ดังนี้

$$\varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q}) = \varepsilon_n(\vec{k}) + \sum_i \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k_i} q_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j + O(q^3) \quad \dots\dots\dots (3.54)$$

เมื่อ $\varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q})$ คือ Eigenvalues ของ $H_{\vec{k}+\vec{q}}$ ซึ่งจากสมการ 2.78 จะได้ว่า

$$H_{\vec{k}+\vec{q}} = H_{\vec{k}} + \frac{\hbar^2}{m} \vec{q} \cdot (-i\nabla + \vec{k}) + \frac{\hbar^2}{2m} q^2 \quad \dots\dots\dots (3.55)$$

และพิจารณา Perturbation Theory ที่มี $H = H_0 + V$ เมื่อสามารถหา Eigenvalues ของ H_0 ได้ เป็น

$$H_0 \psi_n = E_n^0 \psi_n \quad \dots\dots\dots (3.56)$$

แล้วค่า E_n ซึ่งเป็น Eigenvalues ของ H คือ

$$E_n = E_n^0 + \langle n|V|n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n|V|m\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} + \dots\dots\dots (3.57)$$

เมื่อเปรียบเทียบสมการ 3.54 กับสมการ 3.57 จะได้ว่า

$$\sum_i \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k_i} q_i = \sum_i \langle n | \frac{\hbar^2}{m} q_i (-i\nabla + \vec{k}) | n \rangle \quad \dots\dots\dots (3.58)$$

ทำให้ได้ว่า

$$\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k_i} = \langle n | \frac{\hbar^2}{m} (-i\nabla + \vec{k}) | n \rangle = \frac{\hbar^2}{m} \langle n | -i\nabla | n \rangle \quad \dots\dots\dots (3.59)$$

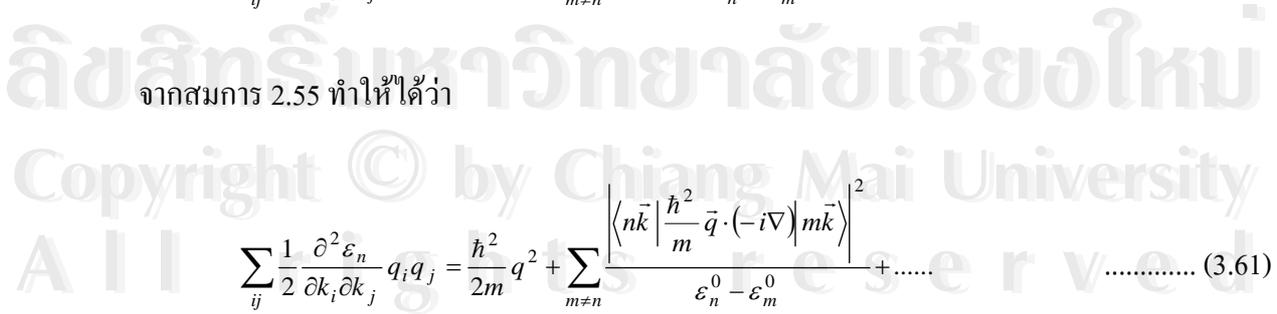
และพิจารณาเทอมอันดับ 2 จะได้ว่า

$$\sum_{ij} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n\vec{k} | \frac{\hbar^2}{m} \vec{q} \cdot (-i\nabla + \vec{k}) m\vec{k} \rangle|^2}{\varepsilon_n^0 - \varepsilon_m^0} + \dots\dots\dots (3.60)$$

จากสมการ 2.55 ทำให้ได้ว่า

$$\sum_{ij} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n\vec{k} | \frac{\hbar^2}{m} \vec{q} \cdot (-i\nabla) m\vec{k} \rangle|^2}{\varepsilon_n^0 - \varepsilon_m^0} + \dots\dots\dots (3.61)$$

และจากการเทียบสัมประสิทธิ์ในสมการ 3.61 จะได้ว่า



$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{1}{m} \delta_{ij} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n\vec{k} | -i\nabla_i | m\vec{k} \rangle \langle m\vec{k} | -i\nabla_j | n\vec{k} \rangle + \langle m\vec{k} | -i\nabla_j | n\vec{k} \rangle \langle n\vec{k} | -i\nabla_i | m\vec{k} \rangle}{\varepsilon_n(\vec{k}) - \varepsilon_m(\vec{k})} \dots\dots\dots(3.62)$$

ผลของการกระเจิงของอิเล็กตรอนที่มีต่อ Relaxation Time

พิจารณาอิเล็กตรอนอยู่ในสารกึ่งตัวนำระดับพลังงาน E_n เราจะพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับสิ่งที่ผิดปกติในผลึก เช่น อะตอมที่หายไป อะตอมอื่นที่อยู่ในผลึก โดยให้โอกาสที่อิเล็กตรอนซึ่งมีเลขคลื่น \vec{k} กระเจิงไปอยู่ในเลขคลื่น \vec{k}' ซึ่งไม่มีอิเล็กตรอนครอบครองอยู่ก่อน อยู่ในเทอมของ $W_{\vec{k},\vec{k}'}$ เมื่อพิจารณาในปริมาตร $d\vec{k}'$ ในช่วงเวลา dt จะได้ว่า

$$\frac{W_{\vec{k},\vec{k}'} dt d\vec{k}'}{(2\pi)^3} \dots\dots\dots (3.63)$$

เราทราบว่าโอกาสที่อิเล็กตรอนที่มีเลขคลื่น \vec{k} จะชนกันต่อหน่วยเวลามีค่าเป็น $1/\tau(\vec{k})$ และโอกาสที่สถานะที่มีเลขคลื่น \vec{k}' ไม่มีอิเล็กตรอนอยู่ก่อน มีค่าเป็น $1-g(\vec{k}')$ ทำให้โอกาสทั้งหมดต่อหน่วยเวลาโดยรวมทุกเลขคลื่น \vec{k}' มีค่าเป็น

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} W_{\vec{k},\vec{k}'} [1-g(\vec{k}')] \dots\dots\dots (3.64)$$

ค่าของ $W_{\vec{k},\vec{k}'}$ คือ อันตรกิริยาผ่านปอพลังงานศักย์ $U(\vec{r})$ ของสารเจือหรือความผิดปกติในผลึก มีค่าดังนี้^(23, 8)

$$W_{\vec{k},\vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} n_{im} \delta(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k}')) \langle \vec{k} | U | \vec{k}' \rangle^2 \dots\dots\dots (3.65)$$

เมื่อ n_{im} คือ จำนวนของ Impurities ต่อปริมาตร และกำหนดให้

$$\langle \vec{k} | U | \vec{k}' \rangle = \int d\vec{r} \psi_{n\vec{k}'}^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \dots\dots\dots (3.66)$$

ซึ่งจะเห็นว่าสมการ 3.65 สนใจอันตรกิริยาที่ระดับพลังงานเดียวกันเท่านั้น และกรณีที่เป็น Isotropic Materials สมการ 3.64 จะเขียนใหม่ได้ว่า

$$\frac{1}{\tau(\bar{k})} = \int \frac{d\bar{k}'}{(2\pi)^3} W_{\bar{k},\bar{k}'} [1 - \hat{k} \cdot \hat{k}'] \quad \dots\dots\dots (3.67)$$

เมื่อ \hat{k} คือ เวกเตอร์หนึ่งหน่วยของ \bar{k}
 สมการ 3.66 คือ Inelastic Scattering ในรูปแบบอย่างง่าย ซึ่งสนใจอันตรกิริยาในระดับพลังงานเดียวกัน ในสารที่เหมือนกันในทุกมุม (Isotropic Materials)

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
 Copyright © by Chiang Mai University
 All rights reserved