แถบพลังงานส่วนหางในสารกึ่งตัวนำที่มี

ปริมาณอสุทธิสูง : วิธีเชิงวิเคราะห์

นายนพปฏล สุทธิศิริ

004040

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

ภาควิชาฟิสิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. ๒๕๒๓

I 15886996

ENERGY BAND TAILS IN HEAVILY DOPED SEMICONDUCTORS : ANALYTICAL METHOD

Mr. Noppadon Suttisiri

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1980

Thesis Title	Energy Band Tails in Heavily Doped Semiconductors : Analytical Method
By	Mr. Noppadon Suttisiri
Department	Physics
Thesis Advisor	Professor Virulh Sa-yakanit

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in partial fulfillment of the requirements for the Master's degree.

S. Bunnag
..... Dean of Graduate School
(Associate Professor Suprádit Bunnag, Ph.D.)

Thesis Committee

Pisistha Ratanavararaksa
..... Chairman
(Assistant Professor Pisistha Ratanavararaksa, Ph.D.)

I Ming Tang
..... Member
(I Ming Tang, Ph.D.)

Somphong Chatraphorn
..... Member
(Assistant Professor Somphong Chatraphorn, M.Sc.)

Virulh Sa-yakanit
..... Member
(Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.)

Copyright of the Graduate School, Chulalongkorn University

Thesis Title Energy Band Tails in Heavily Doped Semiconductors: Analytical Method

Name Mr. Noppadon Suttisiri

Thesis Advisor Professor Virulh Sa-yakanit

Department Physics

Academic Year 1980

ALSTRACT

A useful physical quantity of heavily doped semiconductors is the band tail density of states which behave as $\exp(-E^{n})$ where n is some number between $\frac{1}{2}$ and 2. An attempt has been made to investigate this behavior by using two methods of calculation ; the perturbative and nonperturbative methods. The perturbative method consists of VCA, CPA and Edwards'formalisms which is found to be inadequate to explain this problem.

In this research the nonperturbative method such as the semiclassical approach and the quantum mechanical approach have been studied in details, particularly the path integral method. Since the density of states can only be solved approximately, the harmonic trial action has been used to model the problem. Consequently the density of states is dependent on trial parameter z. The Lloyd and Best variational principle is used to determine the best choice of z the asymptotic values of z are also studied. It is found that for $\nu \gg 1$, $z \sim \nu^{-1/3}$ and for $\nu \ll 1$, z approaching a constant value.

หัวข้อวิทยานิพนธ์	แถบพลังงานส่วนหางในสารกึ่งตัวนำที่มีปริมาณอสุทธิสูง : วิธีเชิงวิเคราะห์
ชื่อนิสิต	นาย นพปฏล สุทธิศิริ
อาจารย์ที่ปรึกษา	ศาสตราจารย์ วิรุฬห์ สายคณิต
ภาควิชา	ฟิสิกส์
ปีการศึกษา	๒๕๒๓

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อ

ปริมาณสำคัญทางฟิสิกส์ของสารกึ่งตัวนำที่มีปริมาณอสุทธิสูงได้แก่ ความหนาแน่นสถานะบริเวณส่วนหาง ซึ่งพบว่าเขียนได้เป็นฟังค์ชั่นทางคณิตศาสตร์อยู่ในรูป $\exp(-|E|^{n})$ โดย n เป็นจำนวนที่มีค่าอยู่ระหว่าง $\frac{1}{2}$ กับ 2 งานวิจัยนี้เป็นการศึกษาวิธีการที่ใช้อธิบายปรากฏการณ์นี้ด้วย 2 วิธีการ คือ วิธีที่ใช้เทคนิคการรบกวน และวิธีที่ไม่ใช้เทคนิคการรบกวน สำหรับวิธีการแรกประกอบด้วย V.C.A, C.P.A และวิธีการของเอ็ดเวิดส์ วิธีการเหล่านี้ได้ผลไม่ดีเท่าที่ควร

วิธีการที่ไม่ใช้เทคนิคการรบกวนได้แก่วิธีการที่ใช้ทฤษฎีเซมิคลาสสิคและวิธีที่ใช้ทฤษฎีควอนตัมเมคานิคส์ ในงานวิจัยนี้ ได้ศึกษาวิธีอินทิเกรตตามทางอย่างละเอียด เนื่องจากการคำนวณความหนาแน่นสถานะทำได้แต่เพียงประมาณเท่านั้น ดังนั้นจึงต้องอาศัยแอคชั่นของฮาร์โมนิคเข้าช่วยเป็นผลให้ความหนาแน่นสถานะมีค่าขึ้นอยู่กับพารามิเตอร์ z ในการวิจัยได้เน้นการหาค่า z ที่เหมาะสมที่สุด โดยใช้วิธีการแวริเอชั่นของลอยด์และเบสท์ การหาค่าอะซิมโทติกของ z พบว่า เมื่อ $\nu \gg 1$ ได้ค่า $z \sim \nu^{-1/3}$ และสำหรับ $\nu \ll 1$ ได้ค่า z มีค่าเข้าสู่ค่าคงที่

ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to express his appreciation to Dr.Virulh Sa - yakanit for his advice, guidance and encouragement given throughout the course of investigation.

He would like to express his sincere thanks to Dr. I - Ming Tang for assistance in suggestion the thesis outline and correcting the English manuscript.

Finally, he would like to thank all colleagues at the department of Physics for their helps in various ways.

TABLE OF CONTENTS

page

ABSTRACT i

ACKNOWLEDGEMENT iii

LIST OF ILLUSTRATIONS iv

CHAPTER I INTRODUCTION 1

1.1 Energy Band in Pure Semiconductors 1

1.2 The Shift of Band Edge 10

1.3 The Virtual Crystal Approximation..... 16

1.4 The Effect of Second Order Perturbation.... 19

1.5 Coherent Potential Approximation 23

1.6 Edwards' Formalism 27

CHAPTER II SEMICLASSICAL APPROACH 31

2.1 Introduction 31

2.2 The Model Hamiltonian 31

2.3 Thomas - Fermi Assumption 32

2.4 Semiclassical Approximation 33

2.5 The Potential Distribution Function 34

2.6 Density of States 37

CHAPTER III QUANTUM THEORETICAL APPROACH

3.1 Introduction 42

3.2 The Hamiltonian Model 42

3.3 The Low Energy Tail 43

3.4 The Kinetic Energy of Localization 44

page

3.5 The Eigen State..... 45

3.6 The Minimum Counting Method 48

3.7 The Density of States 49

3.8 Screened Coulomb Potential 57

CHAPTER IV PATH INTEGRAL APPROACH..... 65

4.1 Introduction..... 65

4.2 Path Integral Representation of Green's Function..... 66

4.3 The Evaluation of $G_o(\vec{r}_2,\vec{r}_1;t)$ 75

4.4 The Evaluation of $\langle S-S_o\rangle_{S_o}$ 77

4.5 The Density of States 101

4.6 The Density of States at High Energy 109

4.7 The Tail States..... 113

CHAPTER V THE VARIATIONAL PRINCIPLE..... 124

5.1 The Exact Variational Principle 125

5.2 Asymptotic Solutions 134

CHAPTER VI CONCLUSION..... 149

APPENDIX A 153

APPENDIX B 173

REFERENCES..... 178

VITA..... 183

LISTS OF ILLUSTRATIONS

Figure		page
1.1	Potential Energy Function $V(\bar{X})$ of an Electron in a One Dimensional Crystal	1
1.2	Electron Energy in One Dimension	5
1.3	The Highest Fully Occupy Band and the Upper Band Partially Occupied	8
1.4	Energy Band Diagramn in Pure Semiconductors	9
1.5	Density of States of Pure Semiconductors (Schematically)	10
1.6	Substitutional Impurity Alloy Structure.....	10
1.7	Interstitial Impurity Alloy Structure	11
1.8	The Theoretical Fermi Level and the Bottom of 1s Impurity Band	16
1.9	The Density of States Calculated From second order Perturbation Method (Schematically)	23
1.10	Model of C P A.	27
1.11	The Density of States Calculated from C P A.... (Schematically)	27
1.12	Density of States Calculated from Edwards' Formalism (Schematically)	29
2.1	Thomas - Fermi Density of States versus Energy in Dimensionaless Variables.....	41

Figure page

2.2 Density of States versus Energy in Dimensionless Variables(Tail States) 41

3.1 Random Nature of Potential $V(\bar{r})$ against $\bar{r}$ in an Amorphous Material 43

3.2 Schematic Drawing of Potential V(X) (Solid Curve) and Low Lying Energy Levels (Broken Lines)..... 44

3.3 Shows the Different of the Level of the Kinetic Energy of Localization between two Models 45

3.4 The Logarithmic Derivative $n(\nu) = d \log b(\nu)/d \log \nu$ of the $b(\nu)$ in the Density of States 63

3.5 The Density of States in Dimensionless Form $a(\nu) \exp(-b(\nu)/2\xi)$ 64

3.6 The Function $b(\nu)$ Obtained from the Tabulated Values of Halperin and Lax 64

4.1 Density of States in the Tail (Schematically) 65

Table

3.1 The Limiting Values of $a(\nu)$, $b(\nu)$ and $n(\nu)$..... 63

4.1 Comparison Between the Limiting Values of $a(\nu)$, $b(\nu)$, $n(\nu)$ and $T(\nu)/\nu$ 123