บทที่ 2

สารกึ่งตัวนำ

อุปกรณ์สารกึ่งตัวนำได้รับการศึกษาและนำไปใช้งานมาช้านานแล้ว ก่อนที่จะมีทฤษฎีใช้สำหรับอธิบาย สมบัติต่างๆของสารประเภทนี้ ในปัจจุบันนี้ เป็นที่ทราบกันดีแล้วว่าที่อุณหภูมิห้อง สสารโดยทั่วไปมีสภาพต้านทานไฟฟ้าอยู่ในช่วง $10^{-6} - 10^{12}\Omega \cdot \text{cm}$ ส่วนสารกึ่งตัวนำมีสภาพต้านทานไฟฟ้าอยู่ในช่วง $10^{-3} - 10^{6}\Omega \cdot \text{cm}$ ผลจากการศึกษาค้นคว้า ได้ข้อสรุปที่เป็นสมบัติที่สำคัญของสารกึ่งตัวนำ [6] ดังนี้

1. มีสัมประสิทธิ์อุณหภูมิของความต้านทานเป็นลบ (Negative temperature coefficient of resistance) กล่าวคือ เมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นความต้านทานจะลดลง

2. มีสภาพต้านทานไฟฟ้าอยู่ในช่วง $10^{-3} - 10^{6}\Omega \cdot \text{cm}$ ที่อุณหภูมิห้อง

3. มีสมบัติในการแปลงกระแสไฟฟ้าสลับให้เป็นกระแสไฟฟ้าตรง (Rectifying effects)

4. สามารถตอบสนองต่อแสง กล่าวคือ เมื่อมีแสงตกกระทบสารจะมีแรงเคลื่อนไฟฟ้า (Photovoltage) เกิดขึ้น และความต้านทานไฟฟ้าเปลี่ยนแปลงได้

5. ให้กำลังทางไฟฟ้าสูง เนื่องจากความร้อน (High thermoelectric power)

6. สามารถเติมอะตอมสิ่งเจือปนที่เรียกว่า การโด๊ป (Doping) ทำให้ความต้านทานไฟฟ้าเปลี่ยนแปลง

สมบัติเหล่านี้สามารถอธิบายได้ด้วยทฤษฎีแถบพลังงานของอิเล็กตรอนในของแข็งสำหรับสารที่เป็นผลึก อะตอมของสารจะเรียงตัวกันอย่างเป็นระเบียบทำให้สนามศักย์ในผลึกมีลักษณะเป็นคาบ (Periodic potential) พฤติกรรมของอิเล็กตรอนที่เคลื่อนที่อยู่ในผลึกที่มีสนามศักย์ดังกล่าว อธิบายได้ด้วยกลศาสตร์ควอนตัมโดยใช้ทฤษฎีของบลอค (Bloch's theorem) และจากแบบจำลองอย่างง่ายๆของโครนิกและเพนนี (Kronig and Penny model) แสดงให้เห็นถึงการเกิดแถบพลังงานโดยที่อิเล็กตรอนทั้งหมดในผลึกจะมีระดับพลังงานอยู่ในแถบพลังงาน ส่วนช่องว่างระหว่างแถบพลังงาน (Energy band gap) ที่เกิดขึ้น อิเล็กตรอนไม่สามารถมีค่าระดับพลังงานอยู่ในช่วงนี้ได้ การจัดอิเล็กตรอนลงในแถบพลังงานต่างๆจะเริ่มจากแถบพลังงานที่มีค่าพลังงานน้อยก่อน เมื่อเต็มแล้วจึงเลื่อนขึ้นไปในชั้นที่มีค่าพลังงานสูงกว่าจนหมดอิเล็กตรอน แถบพลังงานชั้นบนสุดที่มีอิเล็กตรอนอยู่เรียกว่าแถบเวเลนซ์ ส่วนแถบพลังงานชั้นที่สูงถัดไปเรียกว่าแถบนำ

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ทฤษฎีแถบพลังงานของอิเล็กตรอนมีความสำคัญต่อการเข้าใจสมบัติของสสาร กล่าวคือ สามารถใช้ทฤษฎีแถบพลังงานเพื่อแบ่งชนิดของสสารเป็น โลหะ สารกึ่งตัวนำ และฉนวน ตามทฤษฎีแถบพลังงาน ฉนวน หมายถึง ของแข็งที่แถบเวเลนซ์มีอิเล็กตรอนอยู่เต็ม ส่วนแถบนำจะว่างเปล่าและช่องว่างแถบพลังงานมีขนาดกว้างทำให้อิเล็กตรอนไม่สามารถกระโดดจากแถบเวเลนซ์ไปสู่แถบนำได้ อิเล็กตรอนที่อยู่ในแถบพลังงานที่เต็มนี้จะเฉื่อยต่อแรงกระทำภายนอก เมื่อมีสนามไฟฟ้าผ่านเข้าไปในสาร อิเล็กตรอนเหล่านี้จึงไม่นำไฟฟ้า ส่วนโลหะ แถบพลังงานชั้นบนสุดมีอิเล็กตรอนอยู่เพียงครึ่งหนึ่งเท่านั้น เมื่อมีสนามไฟฟ้าเข้าไปจะทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงสถานะของอิเล็กตรอนในแถบพลังงานนั้นได้ ทำให้มีการนำไฟฟ้าเกิดขึ้น สำหรับสารกึ่งตัวนำนั้น ที่อุณหภูมิศูนย์องศาเคลวิน แถบเวเลนซ์จะมีอิเล็กตรอนอยู่เต็ม แต่มีช่องว่างแถบพลังงานแคบ ขนาดไม่เกิน 3 eV ดังนั้นที่อุณหภูมิสูงขึ้นพลังงานความร้อน (Thermal energy) จะกระตุ้นให้อิเล็กตรอนในแถบเวเลนซ์มีโอกาสกระโดดขึ้นไปยังแถบพลังงานที่อยู่สูงถัดไปได้ ทำให้เกิดที่ว่างขึ้นในแถบเวเลนซ์ เมื่อผ่านสนามไฟฟ้าเข้าไปในสารนี้จะทำให้เกิดการนำไฟฟ้าขึ้นได้ ดังนั้น ในกรณีของสารกึ่งตัวนำ ความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานมีความสำคัญต่อสมบัติของสารกึ่งตัวนำ

2.1 ชนิดของสารกึ่งตัวนำ [6]

สารกึ่งตัวนำอาจประกอบด้วยธาตุเดี่ยวหรือเป็นสารประกอบที่เกิดจากธาตุหลายชนิดก็ได้ สารกึ่งตัวนำที่รู้จักกันอย่างกว้างขวาง คือ Si และ Ge ซึ่งเป็นสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างผลึกคล้ายกับโครงสร้างผลึกของเพชร โครงสร้างผลึกแบบนี้เกิดจากการจับกันของอะตอมเป็นแบบพันธะเชิงสี่หน้า (Tetrahedral bond) เราสามารถจำแนกสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างผลึกคล้ายเพชรได้เป็นประเภทต่างๆ ดังนี้

1. **สารกึ่งตัวนำที่ประกอบด้วยธาตุเดียว** (Monoelements) สารกึ่งตัวนำประเภทนี้ได้แก่ ธาตุในกลุ่ม IV ของตารางธาตุ โดยเฉพาะ Si และ Ge ได้นำมาใช้ทำเป็นอุปกรณ์กึ่งตัวนำกันอย่างแพร่หลาย ส่วนดีบุกที่อยู่ในสภาวะที่เรียกว่า α – Sn มีช่องว่างแถบพลังงานแคบมากเกือบเป็นศูนย์ ในขณะที่เพชรซึ่งเป็นอันยรูปหนึ่งของคาร์บอน ถูกจัดให้เป็นฉนวน เพราะมีช่องว่างแถบพลังงานมากกว่า 5.0 eV

2. **สารกึ่งตัวนำที่ประกอบด้วยธาตุสองชนิด** (Binary compounds) สารกึ่งตัวนำประเภทนี้แยกได้เป็น 2 กลุ่ม คือ

- กลุ่ม II-VI เป็นสารประกอบกลุ่มตัวนำที่เกิดจากการรวมกันของธาตุกลุ่ม II ซึ่งมีเวเลนซ์อิเล็กตรอน 2 ตัว กับธาตุกลุ่ม VI ซึ่งมีเวเลนซ์อิเล็กตรอน 6 ตัว ได้แก่ ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdTe เป็นต้น

- กลุ่ม III-V เป็นสารประกอบกลุ่มตัวนำที่เกิดจากการรวมกันของธาตุกลุ่ม III ซึ่งมีเวเลนซ์อิเล็กตรอน 3 ตัว กับธาตุกลุ่ม V ซึ่งมีเวเลนซ์อิเล็กตรอน 5 ตัว ได้แก่ AlP, AlAs, GaP, GaAs, InP, InAs เป็นต้น

3. สารกึ่งตัวนำที่ประกอบด้วยธาตุสามชนิด (Ternary compounds)

สารกึ่งตัวนำกลุ่มนี้ได้จากการแทนที่ธาตุตัวที่สาม ลงไปในสารกึ่งตัวนำกลุ่ม II-VI หรือ III-V เป็นผลให้ได้สารประกอบกึ่งตัวนำ 2 กลุ่ม ดังนี้

- กลุ่ม $I\text{-}III\text{-}VI_2$ ได้จากการนำสารประกอบกึ่งตัวนำกลุ่ม II-VI มาขยายเป็น 2 เท่า แล้วแทนที่อะตอมทั้งสองของธาตุกลุ่ม II ด้วยธาตุในกลุ่ม I หนึ่งอะตอม และกลุ่ม III หนึ่งอะตอม สารในกลุ่มนี้ประกอบขึ้นจากธาตุกลุ่ม I คือ Cu, Ag กลุ่ม III คือ Al, Ga, In, Tl และกลุ่ม VI คือ S, Se, Te ตัวอย่างของสารกึ่งตัวนำประเภทนี้ ได้แก่ $CuGaS_2$, $AgInTe_2$, $CuInSe_2$, $Cu(In,Ga)Se_2$ เป็นต้น

- กลุ่ม $II\text{-}IV\text{-}V_2$ ได้จากการนำสารประกอบกลุ่มตัวนำกลุ่ม III-V มาขยายเป็น 2 เท่า แล้วแทนที่อะตอมทั้งสองของธาตุกลุ่ม III ด้วยธาตุในกลุ่ม II หนึ่งอะตอม และธาตุในกลุ่ม IV หนึ่งอะตอม สารในกลุ่มนี้ประกอบขึ้นจากธาตุกลุ่ม II คือ Zn, Cd กลุ่ม IV คือ Si, Ge, Sn และกลุ่ม V คือ P, As, Sb ตัวอย่างของสารกึ่งตัวนำประเภทนี้ ได้แก่ $ZnGeP_2$, $CdSiP_2$, $ZnSnAs_2$ เป็นต้น

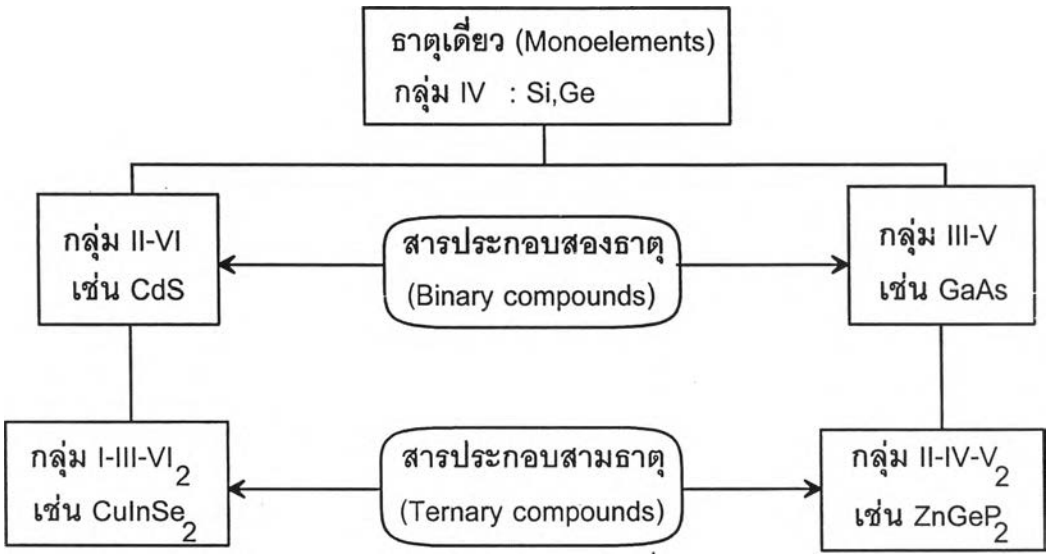
4. โลหะผสมกึ่งตัวนำ สารกึ่งตัวนำทั้งชนิดที่เป็นธาตุและสารประกอบสามารถเตรียมขึ้นได้ในลักษณะของโลหะผสม (Alloys) โดยการนำเอาธาตุในกลุ่มเดียวกันสองธาตุมาแทนที่กันโดยมีสัดส่วนอะตอมต่างๆ กัน ทำให้ชนิดของสารกึ่งตัวนำในลักษณะนี้มีจำนวนไม่จำกัด แต่ละชนิดจะมีสมบัติทางฟิสิกส์แตกต่างกัน ตัวอย่างโลหะผสมกึ่งตัวนำที่จำแนกตามชนิดของสารเริ่มต้น มีดังนี้

- ชนิดเป็นธาตุ ได้แก่ $Si_{(1-x)}Ge_x$

- ชนิดเป็นสารประกอบสองธาตุ ได้แก่ $Ga_{(1-x)}As_x$, $CdS_{(1-y)}Te_y$ เป็นต้น

- ชนิดเป็นสารประกอบสามธาตุ ได้แก่ $Ag_{(1-x)}Cu_xGaTe_2$, $Ag_{(1-x)}Cu_xGa_{(1-y)}In_yTe_2$, $Ag_{(1-x)}Cu_xGa_{(1-y)}In_y(Te_{(1-z)}Se_z)_2$ เป็นต้น

สิ่งที่น่าสนใจเกี่ยวกับสารประกอบกึ่งตัวนำรวมทั้งโลหะผสมกึ่งตัวนำ ที่กล่าวแล้วข้างต้น คือ มันยังคงรักษาโครงสร้างพันธะเป็นแบบพันธะเชิงสี่หน้า แม้ว่าลักษณะของหน่วยเซลล์ของผลึกจะแตกต่างกันไปก็ตาม เราอาจสรุปชนิดของสารกึ่งตัวนำที่กล่าวมาแล้วข้างต้นด้วยรูปที่ 2.1



รูปที่ 2.1 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างสารประกอบกึ่งตัวนำที่ได้จากการแทนที่อะตอมลงในสารกึ่งตัวนำในหมู่ IV

2.2 โครงสร้างผลึกของสารกึ่งตัวนำ

ถ้าแบ่งโครงสร้างผลึกของสารกึ่งตัวนำที่เกิดจากการเรียงตัวของอะตอมที่จับกันแบบพันธะเชิงสี่หน้าจะแบ่งออกได้เป็น 3 ชนิด (เฉพาะที่เกี่ยวกับซาลโคไพไรต์) คือ

1. โครงสร้างผลึกแบบเพชร (Diamond structure)

สารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างนี้ ได้จากการเอาโครงสร้างผลึกแบบ Face Center Cubic (FCC; a=b=c , $\alpha = \beta = \gamma = 90°$) 2 โครงสร้าง มาวางเหลื่อมกันเป็นระยะทาง 1/4 ของเส้นทะแยงมุม โดยอะตอมของโครงสร้างผลึกทั้งสองเป็นอะตอมชนิดเดียวกัน ดังรูปที่ 2.2 หนึ่งหน่วยเซลล์ (Unit cell) ของสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้จะมี 8 อะตอม ซึ่งเป็นอะตอมชนิดเดียวกันอยู่ที่ตำแหน่ง $000, 0\frac{11}{22}, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, \frac{11}{22}0, \frac{111}{444}, \frac{133}{444}, \frac{313}{444}$ และ $\frac{331}{444}$ แต่ละอะตอมมีอะตอมข้างเคียง 4 อะตอม จะเห็นว่า โครงสร้างผลึกแบบนี้เป็นรูปลูกบาศก์ซึ่งบิดเบี้ยวได้ยากมาก เพราะอะตอมที่จับในแต่ละแขนของพันธะเชิงสี่หน้าเป็นอะตอมชนิดเดียวกัน แรงดึงจึงเท่ากันทุกทาง โครงสร้างผลึกจึงสมมาตรมาก สารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้เป็นผลึกที่ประกอบด้วยธาตุกลุ่ม IV ได้แก่ เพชร (C) ซิลิคอน (Si) เยอร์มาเนียม (Ge) และดีบุก (Sn)

2. โครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์ (Zincblende structure)

สารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้ส่วนมากเป็นสารประกอบกึ่งตัวนำกลุ่ม III-V และกลุ่ม II-VI โครงสร้างแบบซิงค์เบลนด์นี้แท้จริงคือ โครงสร้างแบบเพชรนั่นเอง แต่โครงสร้างผลึก FCC สองโครง

สร้างที่เหลื่อมกันนั้น แต่ละโครงสร้างเป็นอะตอมต่างชนิดกัน ดังรูปที่ 2.3 หนึ่งหน่วยเซลล์ของโครงสร้างแบบนี้จะมี 8 อะตอม ซึ่งประกอบด้วยอะตอมของธาตุ 2 ชนิด แต่ละชนิดมี 4 อะตอม สารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้ เช่น ZnS, GaAs เป็นต้น ตำแหน่งอะตอมของ Zn และ S มีดังนี้ Zn มี 4 อะตอม อยู่ที่ $000, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ และ S มี 4 อะตอม อยู่ที่ $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}, \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}, \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}, \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$ ปลายแขนของ Zn จะมี S จับอยู่ 4 อะตอม และที่ปลายแขนของ S จะมี Zn จับอยู่ 4 อะตอม เช่นกัน ดังนั้น โครงสร้างผลึกแบบนี้ยังคงเป็นลูกบาศก์อยู่ แต่จะมีสมมาตรน้อยกว่าโครงสร้างผลึกแบบเพชร

3. โครงสร้างผลึกแบบชาลโคไพไรต์ (Chalcopyrite structure)

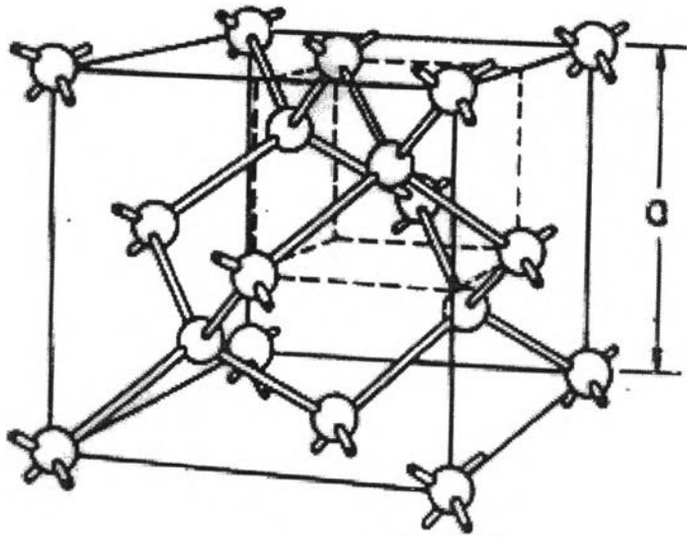
เป็นโครงสร้างที่พบอย่างกว้างขวางในหมู่สารประกอบกึ่งตัวนำกลุ่ม I-III-VI_2 และ II-IV-V_2 หรือที่เขียนเป็นสูตรว่า ABC_2 โครงสร้างผลึกแบบชาลโคไพไรต์ คือ โครงสร้างผลึกแบบเพชรที่เป็นอนุพันธ์ของโครงสร้างกับซิงค์เบลนด์ แต่มีอะตอมแตกต่างกันถึง 3 ชนิด หนึ่งหน่วยเซลล์ของสารประกอบกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้จะมี 16 อะตอม มีขนาดเซลล์เป็น 2 เท่าของแบบซิงค์เบลนด์ ดังรูปที่ 2.4 ตำแหน่งอะตอมของธาตุกลุ่มต่างๆ มีดังนี้

ธาตุกลุ่ม A มี 4 อะตอม อยู่ที่ $000, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}$

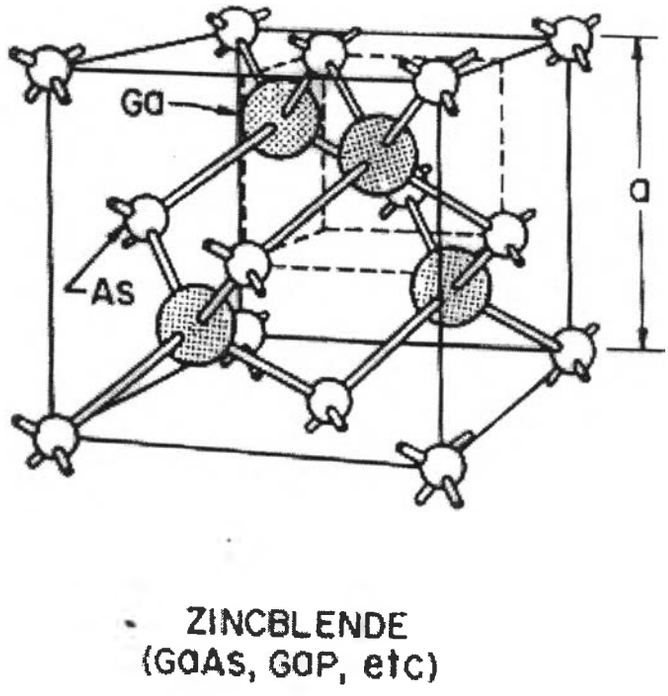
ธาตุกลุ่ม B มี 4 อะตอม อยู่ที่ $00\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}1, \frac{1}{2}\frac{1}{2}1, \frac{1}{2}1\frac{1}{2}$

ธาตุกลุ่ม C มี 8 อะตอม อยู่ที่ $\frac{1}{4}\frac{1}{4}x, \frac{1}{4}\frac{3}{4}x, \frac{3}{4}x\frac{3}{4}, \frac{3}{4}x\frac{1}{4}, (\frac{1}{2}+x)\frac{3}{4}\frac{3}{4}, (\frac{1}{2}+\bar{x})\frac{1}{4}\frac{3}{4}, \frac{1}{4}(\frac{1}{2}+\bar{x})\frac{3}{4}, \frac{3}{4}(\frac{1}{2}+\bar{x})\frac{1}{4}$

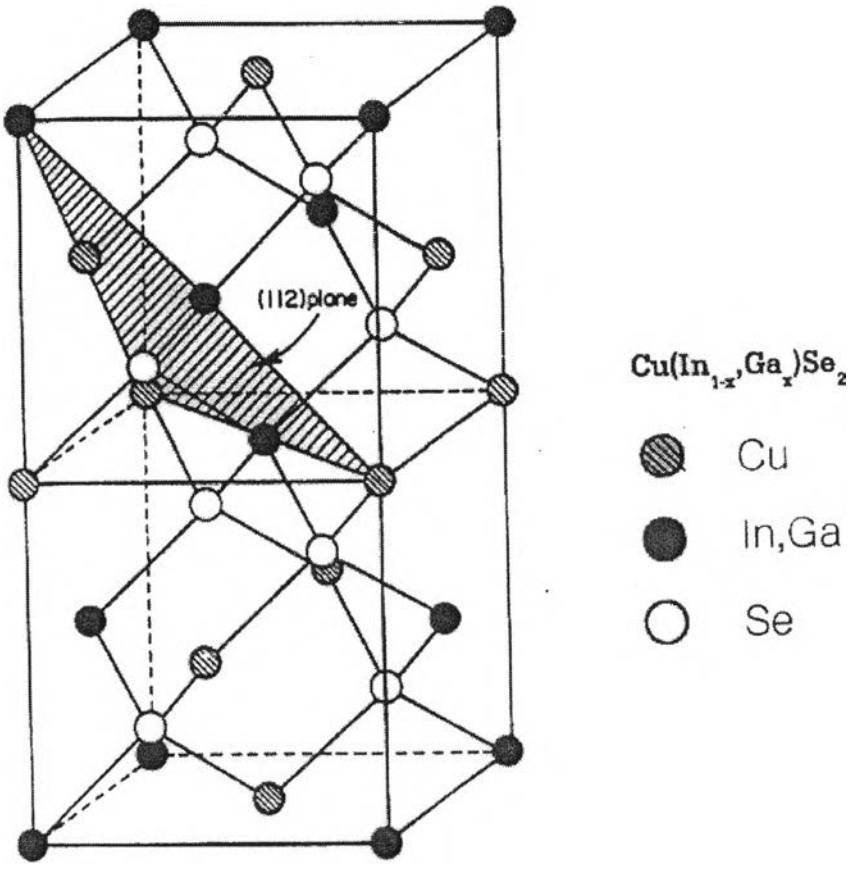
โดยที่ $x = \frac{1}{4} + u$ และ $\bar{x} = \frac{3}{4} + u$ โดย u เป็นค่าการเลื่อนแบบเททระโกนอล (Tetragonal distortion) ซึ่งเกิดจากอะตอมของธาตุกลุ่ม C หนึ่งอะตอมที่เป็นแอนไอออน (Anion) จับอยู่กับแคตไอออน (Cation) 4 อะตอม ซึ่งเป็นธาตุกลุ่ม A และ กลุ่ม B อย่างละ 2 อะตอม ทำให้ความยาวของพันธะ (Bond length) ไม่เท่ากัน จึงเกิดการเลื่อนของตำแหน่งแอนไอออนออกไปจากตำแหน่งอุดมคติ ซึ่งผลจากการเลื่อนแบบเททระโกนอลนี้จะทำให้โครงสร้างผลึกมีลักษณะแตกต่างจากโครงสร้างสมบูรณ์เล็กน้อย หมายความว่า เมื่อเกิดมีการเลื่อนแบบเททระโกนอลขึ้นเป็นผลให้อัตราส่วน $\frac{c}{a} \neq 2$ ทำให้ความสมมาตรของผลึกมีค่าน้อยกว่าโครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์



รูปที่ 2.2 แสดงโครงสร้างผลึกแบบเพชร (Diamond structure)



รูปที่ 2.3 แสดงโครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์ (Zincblende structure)



รูปที่ 2.4 แสดงโครงสร้างผลึกแบบซาลโคไพไรต์ (Chalcopyrite structure)

2.3 โครงสร้างแถบพลังงานของสารประกอบกึ่งตัวนำ I-III-VI_2 [7,8,9]

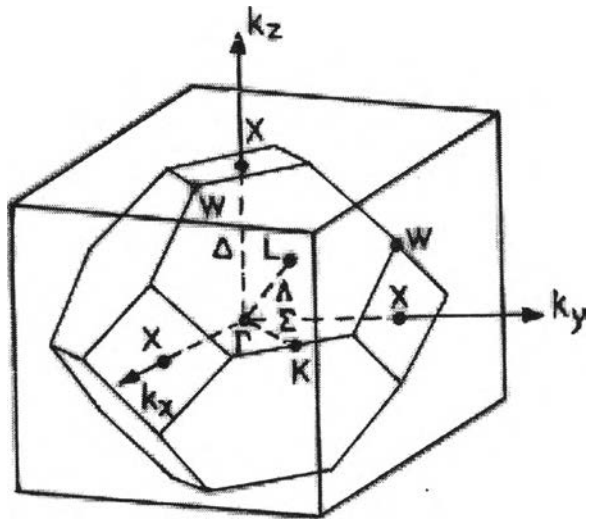
หน่วยเซลล์ของเวกเตอร์แลตติซส่วนกลับ (Reciprocal lattice) สามารถแสดงได้ด้วยเซลล์แบบวิกเนอร์ไซต์ (Wigner-Seitz cell) ซึ่งเกิดจากการลากตัดของระนาบซึ่งจะต้องแบ่งครึ่งตั้งฉากพอดีในเวกเตอร์แลตติซส่วนกลับ ดังรูปที่ 2.5 ซึ่งเป็นตัวอย่างของโครงสร้างแบบ Face Center Cubic (FCC) ถ้าลากเส้นจากจุดศูนย์กลางเซลล์ (Γ) ไปยังมุมทั้งแปดของลูกบาศก์แล้วแบ่งครึ่งด้วยระนาบ ผลลัพธ์ที่ได้มีลักษณะเป็นแบบ Truncated octahedron ที่อยู่ในลูกบาศก์ ซึ่งก็คือ เซลล์แบบวิกเนอร์-ไซต์ นั่นเองแสดงว่า FCC ในแลตติซโดยตรงมีค่าคงตัวแลตติซเท่ากับ a จะมีลักษณะเป็นแบบ Body Center Cubic (BCC) ใน เวกเตอร์แลตติซส่วนกลับ สำหรับโครงสร้างผลึกแบบซาลโคไพไรต์นั้นมีเวกเตอร์อย่างง่าย ดังนี้

$$\vec{a_1} = \frac{1}{2}(a,a,c),\ \vec{a_2} = \frac{1}{2}(-a,a,c),\ \vec{a_3} = \frac{1}{2}(a,-a,c) \qquad (2.1)$$

โดยที่ a และ c คือ ค่าคงที่แลตติซ (Lattice Constant)

เวกเตอร์อย่างง่ายในแลตติซส่วนกลับ (Reciprocal Lattice) สามารถคำนวณได้เป็น

$$\vec{b_1} = 2\pi\left(\frac{1}{a},\frac{1}{a},0\right),\ \vec{b_2} = 2\pi\left(0,\frac{1}{a},\frac{1}{c}\right),\ \vec{b_3} = 2\pi\left(\frac{1}{a},0,\frac{1}{c}\right) \qquad (2.2)$$



รูปที่ 2.5 แสดงบริลลันโซนแรก (First Brillouin zone) ของโครงสร้างผลึกแบบ Face Center Cubic (FCC) [10]

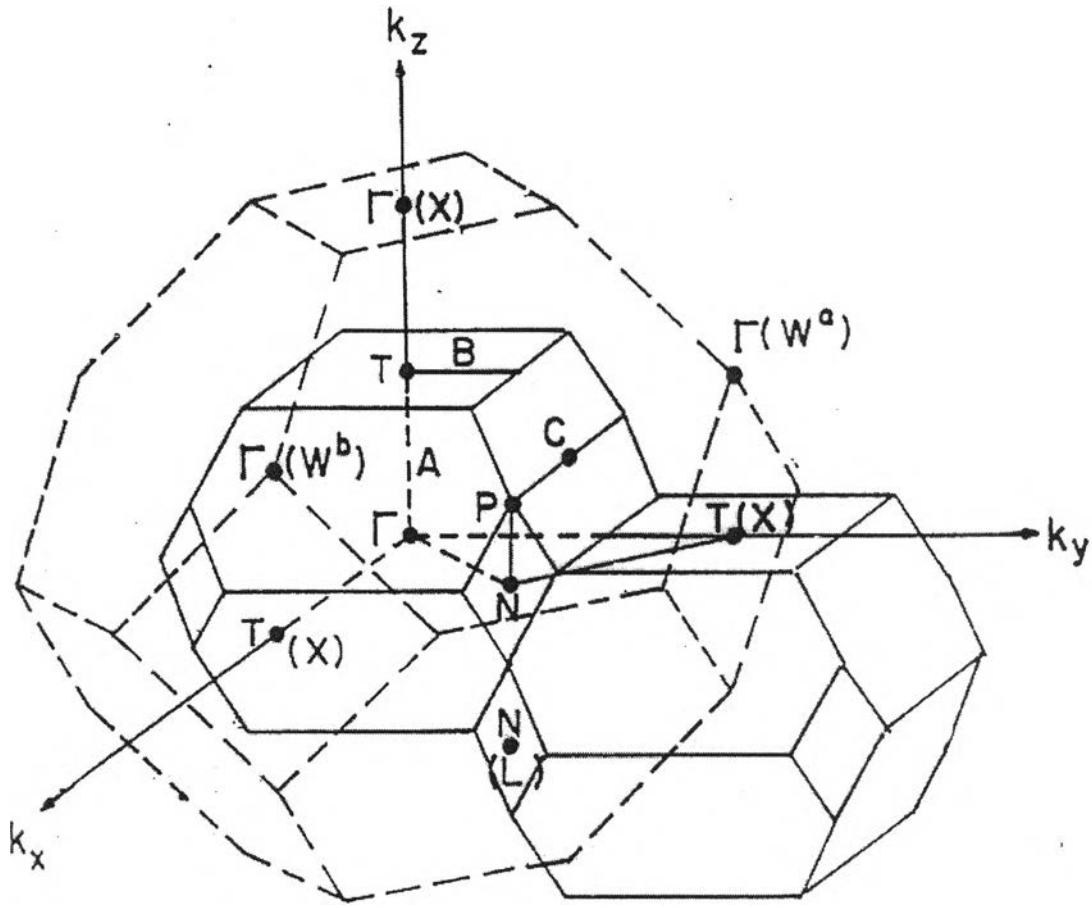
ดังนั้นเวกเตอร์เลื่อน (Translation vectors) ในระบบแลตติซส่วนกลับ จะเขียนอยู่ในรูปของ

$$\vec{g} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\left[(h+l),(h+k),\frac{a}{c}(k+l)\right] \qquad (2.3)$$

โดยที่ h,k และ l คือ ตัวเลขลงตัวใดๆ บริลลันโซนของโครงสร้างผลึกแบบซาลโคไพไรต์ถูกสร้างขึ้นเพื่อเปรียบเทียบกับบริลลันโซนของโครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์ ดังรูปที่ 2.6

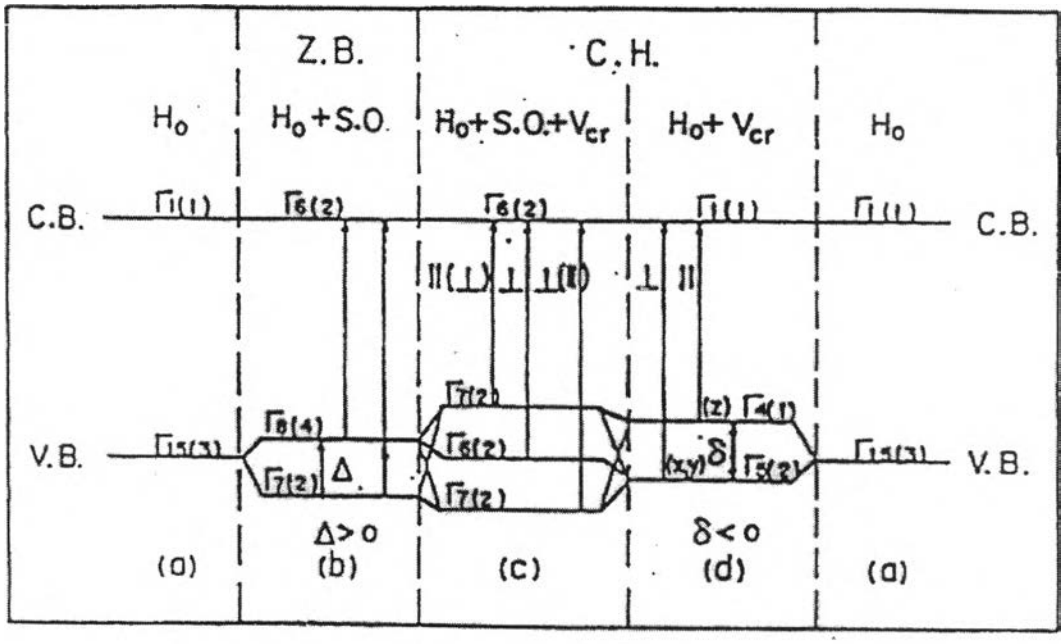
ในกรณีที่ c=2a ขนาดของหนึ่งหน่วยเซลล์ของโครงสร้างผลึกแบบซาลโคไพไรต์จะเป็นสี่เท่าของหนึ่งหน่วยเซลล์ของโครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์ ดังนั้นขนาดของบริลลันโซนของโครงสร้างผลึกแบบซาลโคไพไรต์ จะเล็กกว่าขนาดของบริลลันโซนของโครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์สี่เท่า จากการพิจารณารูปร่างของบริลลันโซนดังกล่าว เราสามารถสรุปความสัมพันธ์ของจุดต่างๆในบริลลันโซนของซิงค์เบลนด์และซาลโคไพไรต์ได้ดังนี้

จุดของซิงค์เบลนด์		กลายเป็นจุดของซาลโคไพไรต์
Γ, X^z, W^a, W^b	===>	Γ
L, ε	===>	N
X^x, X^y, Δ	===>	T

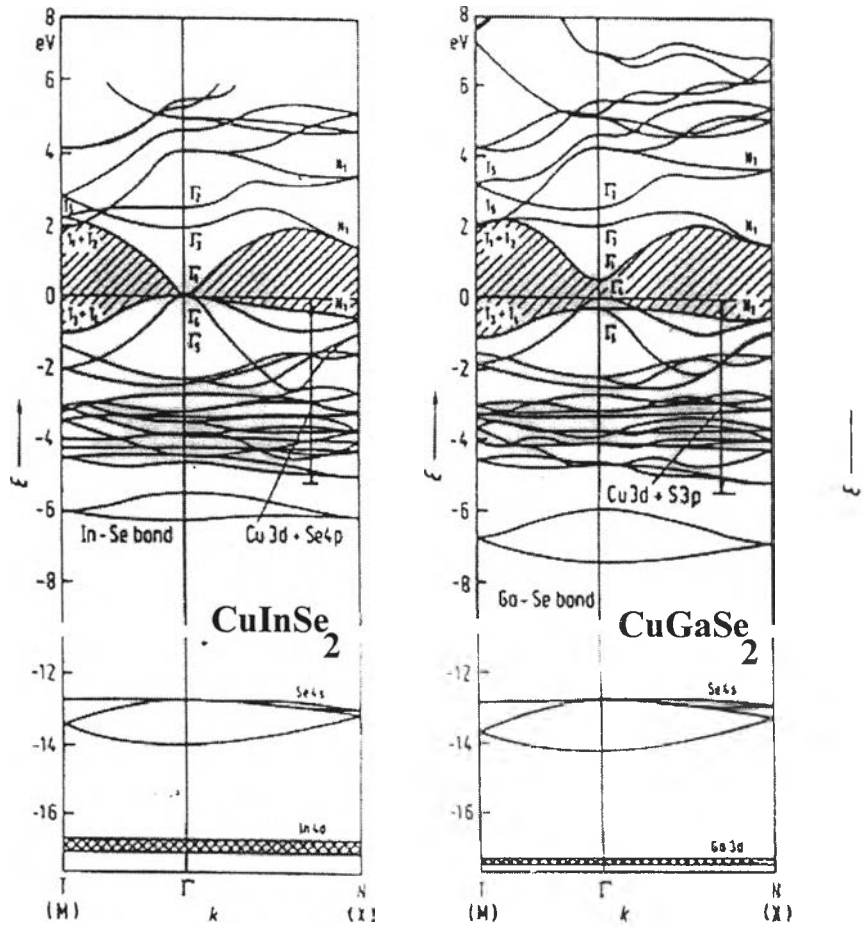


รูปที่ 2.6 แสดงบริลลันโซนของโครงสร้างผลึกแบบซาลโคไพไรต์ (เส้นทึบ) เทียบกับบริลลันโซนของโครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์ (เส้นประ) เมื่อกำหนดค่า c/a = 2 [10]

จากลักษณะของโครงสร้างผลึกแบบซาลโคไพไรต์ในกรณี c/a = 2 ซึ่งคล้ายกับโครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์ที่ได้กล่าวมาแต่ต้นแล้ว ยังพบอีกว่า มีการแยกของแถบเวเลนซ์เนื่องจากอันตรกิริยาของสปินกับออร์บิท แต่ในผลึกแบบซาลโคไพไรต์ ประกอบด้วยอะตอมของธาตุ 3 ชนิด ทำให้เกิดอันตรกิริยาจากสนามของผลึกซึ่งไม่เป็นรูปลูกบาศก์ (Non-cubic crystalline field) ขึ้นอีก จากผลรวมของอันตรกิริยาทั้งสองแบบที่เกิดขึ้นภายในผลึกแบบซาลโคไพไรต์ทำให้แถบเวเลนซ์แยกออก ดังแสดงในรูปที่ 2.7 ส่วนโครงสร้างแถบพลังงานของคอปเปอร์อินเดียมไดซีลีไนด์ เป็นแบบตรง ดังรูปที่ 2.8



รูปที่ 2.7 แสดงการแยกของแถบเวเลนซ์ในผลึกแบบซาลโคไพไรต์ [9]



รูปที่ 2.8 แสดงโครงสร้างแถบพลังงานของ $CuInSe_2$ และ $CuGaSe_2$ ที่มีโครงสร้างผลึกแบบซาลโคไพไรต์ [10]

สำหรับงานวิจัยที่ทำนี้จะเป็นการเตรียมฟิล์มบางคอปเปอร์อินเดียมแกลเลียมไดซีลีไนด์ ($Cu(In_{1-x}Ga_x)Se_2$) ซึ่งมีโครงสร้างเช่นเดียวกับ $CuInSe_2$ โดยเราแทนที่อะตอมของ In ด้วยอะตอมของ Ga ซึ่งมีขนาดเล็กกว่า ด้วยปริมาณ x จากการศึกษาค้นคว้า พบว่า ฟิล์มบาง $Cu(In_{1-x}Ga_x)Se_2$ เป็น Polycrystalline มีสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงสูงมากกว่า 10^5 cm^{-1} และช่องว่างแถบพลังงานเป็นแบบตรง (Direct band gap) มีค่าอยู่ระหว่าง 1.0-1.7 eV ในกรณีของฟิล์มบาง $Cu(In_{1-x}Ga_x)Se_2$ ที่เตรียมขึ้นมีสัดส่วนอะตอมต่างไปจากสตอยคิโอเมตตริเล็กน้อย (Small deviations from stoichiometry) ก็ยังคงรักษาโครงสร้างผลึกแบบชาลโคไพไรต์อยู่ โดยสัดส่วนของอะตอมที่ต่างไปเล็กน้อยนี้จะเกิดเป็นความบกพร่องขึ้นในผลึก (Defects) โดยลักษณะของความบกพร่องจากแบบจำลองมีได้ 4 แบบ

1. Interstitial เป็นความบกพร่องที่เกิดจากอะตอมหรือไอออนชนิดหนึ่งไปปรากฏในตำแหน่งซึ่งปกติไม่เป็นตำแหน่งของอะตอมในโครงสร้างผลึกชนิดนี้ หรือ ตำแหน่งที่อยู่ระหว่างตำแหน่งของอะตอมปกติของอะตอมในโครงผลึก

2. Vacancy เป็นการเกิดที่ว่างในตำแหน่งโครงผลึกซึ่งปกติมีอะตอมอยู่ จึงมีได้ 4 แบบ คือ V_{Cu},V_{In},V_{Ga} และ V_{Se} หมายถึงการเกิดที่ว่างขึ้นในตำแหน่งของ Cu,In,Ga และ Se ตามลำดับ

3. Antisite disorder in cation sublattice ในสารที่มีโครงสร้างแบบชาลโคไพไรต์มีธาตุที่เป็นแคตไอออนอยู่ 2 ชนิด อยู่ที่ sublattice A และ B ลักษณะของความบกพร่องมีได้ 4 รูปแบบ คือ Cu_{In} ,In_{Cu} ,Cu_{Ga} ,Ga_{Cu}หมายความว่า การที่ Cu ไปอยู่ที่ตำแหน่ง sublattice ของ In และ In ไปอยู่ที่ตำแหน่ง sublattice ของ Cu, Cu ไปอยู่ที่ตำแหน่ง sublattice ของ Ga และ Ga ไปอยู่ที่ตำแหน่ง sublattice ของ Cu ตามลำดับ

4. Cation-Anion disorder หมายถึง ในตำแหน่งแลตติซของแคตไอออนมีอะตอมของธาตุที่เป็นแอนไอออนไปปรากฏอยู่ที่ตำแหน่งนั้น หรือในทางกลับกัน มีได้ทั้งหมด 4 ชนิด คือ Se_{In},Se_{Cu}, In_{Se}, และ Cu_{Se} (Se_{In} หมายถึง Se ไปอยู่ที่ตำแหน่งแลตติซของ In สัญลักษณ์ที่เหลือมีความหมายเช่นเดียวกัน)

ความบกพร่องที่ได้กล่าวมาจะมีผลต่อสมบัติทางไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ เช่น ถ้ามี Se มากกว่า (Cu+In) เล็กน้อย จะได้สารกึ่งตัวนำชนิดพี และถ้ามี (Cu+In) มากกว่า Se เล็กน้อย จะได้สารกึ่งตัวนำชนิดเอ็น ในกรณีของ Cu-rich คือ Cu/(In+Ga) มากกว่า1 ค่าสภาพต้านทานไฟฟ้า (Resistivity) จะต่ำ แต่ถ้าในกรณีของ Cu-poor คือ Cu/(In+Ga) น้อยกว่า 1 ค่าสภาพต้านทานไฟฟ้าจะสูง [11]