แถบอสุทธิบริเวณหางในสารกึ่งตัวนำที่ถูกโดป.

อย่างหนัก โดยวิธีนับต่ำสุด

นาย เผชิญชัย ไชยสิทธิ์

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

ภาควิชา เคมี

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. ๒๕๒๕

IMPURITY-BAND TAILS IN HEAVILY DOPED

SEMICONDUCTORS : MINIMUM COUNTING METHODS

Mr. Pachernchai Chaiyasith

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Chemistry

Graduate School

Chulalongkorn University

1982

Thesis Title	Impurity-Band Tails in Heavily Doped Semiconductors : Minimum Counting Methods.
By	Mr. Pachernchai Chaiyasith
Department	Chemistry
Thesis Advisor	Assistant Professor Sirirat Kokpol, Ph.D.
	Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.

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 Supradit Bunnag, Ph.D.)

Thesis Committee

Pirawan Bhanthumnavin ....Chairman

(Associate Professor Pirawan Bhanthumnavin, Ph.D.)

Sunt Techakumpuch .... Member

(Associate Professor Sunt Techakumpuch, Ph.D.)

Korbratna Indaratna .... Member

(Dr. Korbratna Indaratna, Ph.D.)

Sirirat Kokpol .... Member

(Assistant Professor Sirirat Kokpol, Ph.D.)

Virulh Sayakanit .... Member

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

หัวข้อวิทยานิพนธ์ แถบอสุทธิบริเวณหางในสารกึ่งตัวนำที่ถูกโดปอย่างหนักโดยวิธีนับต่ำสุด

ชื่อนิสิต นายเผชิญชัย ไชยสิทธิ์

อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ศิริรัตน์ ก๊กผล

ศาสตราจารย์ ดร.วิรุฬห์ สายคณิต

ภาควิชา เคมี

ปีการศึกษา ๒๕๒๔

บทคัดย่อ

ในการศึกษานี้ได้เสนอวิธีนับต่ำสุด (ทฤษฎีของฮัลเปอรินกับลักซ์) แบบง่ายที่ใช้หาความหนาแน่นสถานะส่วนหาง ในสารกึ่งตัวนำที่ถูกโดปอย่างหนัก

สำหรับศักย์คูลอมบ์แบบกำบัง ฟังก์ชันเชิงทดลองที่ใช้สมมุติว่าเป็น $\phi(r) = (2\beta^4/3\pi)^{1/2} r^{1/2} \exp(-\beta r)$ ซึ่งทำให้สามารถเขียนความหนาแน่นสถานะส่วนหาง อยู่ในนิพจน์เชิงวิเคราะห์ได้ ดังนี้

$$\rho(E) = [(E_Q Q)^3/\xi^2]\, a(\nu) \exp[-E_Q^2\, b(\nu)/2\xi]$$

เมื่อ
$$a(\nu) = \frac{546(2\nu+y^2)^3(2y+1)^{14}(264y^3+60y^2+14y+1)^{3/2}}{(27)^{3/2}\pi^2 y^3(1152y^4+728y^3+244y^2+42y+3)^{7/2}}$$

และ
$$b(\nu) = \frac{9(2\nu+y^2)^2(2y+1)^7}{4y^3(1152y^4+728y^3+244y^2+42y+3)}$$

เมื่อ $y = \beta/\Omega$ และ ν ซึ่งเขียนอยู่ในหน่วยของ $E_{\Omega} = \hbar^2\Omega^2/2m$ คือพลังงานส่วนที่อยู่ต่ำกว่าศักย์มัชฌิม E_o นอกจากนี้ยังคำนวณและเปรียบเทียบผลเชิงตัวเลขที่ได้กับผลของฮัลเปอรินกับลักซ์และผลของอิมารคกับอูราฟอร์ก ซึ่งพบว่า ผลที่ได้สอดคล้องกับผลการคำนวณของฮัลเปอรินกับลักซ์ดีกว่าผลของอิมารคกับอูราฟอร์ก

สำหรับศักย์อสุทธิแบบเกาส์ ฟังก์ชันเชิงทดลองที่ใช้ สมมุติว่าเป็นฟังก์ชันคลื่นสถานะพื้นแบบเกาส์ $f(\vec{x}) = (2\xi_o/\pi)^{3/4}\exp(-\xi_o x^2)$ เมื่อ $\xi_o = m\omega/2\hbar$ ซึ่งทำให้ความหนาแน่นสถานะส่วนหาง เขียนอยู่ในนิพจน์เชิงวิเคราะห์ได้ และเหมือนกันทุกประการ กับที่ได้จากทฤษฎีของศาสตราจารย์ ดร.วิรุฬห์ สายคณิต ที่ใช้วิธีอินทิเกรตตามทางของฟายน์แมน นั่นคือ

$$\rho(E) = [(E_L/L)^3/\xi_L^2]\,a(\nu)\,\exp[-E_L^2\,b(\nu)/2\xi_L]$$

เมื่อ $$a(\nu) = [(1+16\nu)^{1/2}-1]^{3/2}\,[(1+16\nu)^{1/2}+7]^{9/2}/2^{12}2^{1/2}\pi^2$$

และ $$b(\nu) = [(1+16\nu)^{1/2}-1]^{1/2}\,[(1+16\nu)^{1/2}+7]^{7/2}/2^8$$

เมื่อ ν ซึ่งเขียนอยู่ในหน่วยของ $E_L = \hbar^2/2mL^2$ คือพลังงานส่วนที่อยู่ต่ำกว่าศักย์มัชฌิม E_o

Thesis Title	Impurity-Band Tails in Heavily Doped Semiconductors : Minimum Counting Methods
Name	Mr. Pachernchai Chaiyasith
Thesis Advisor	Assistant Professor Sirirat Kokpol, Ph.D.
	Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.
Department	Chemistry
Academic Year	1981

ABSTRACT

A simplified approach of minimum counting method (Halperin and Lax Theory) of the density of states tail in heavily doped semiconductors is presented.

For a screened Coulomb potential the trial wave function is assumed to be in the form $\phi(r) = (2\beta^4/3\pi)^{1/2} r^{1/2} \exp(-\beta r)$. The density of states tail can be expressed in analytical form

$$\rho(E) = [(E_\Omega \Omega)^3/\xi^2]\, a(\nu) \exp[-E_\Omega^2 b(\nu)/2\xi]$$

where $$a(\nu) = \frac{546(2\nu+y^2)^3(2y+1)^{14}(264y^3+60y^2+14y+1)^{3/2}}{(27)^{3/2}\pi^2 y^3(1152y^4+728y^3+244y^2+42y+3)^{7/2}}$$

and $$b(\nu) = \frac{9(2\nu+y^2)^2(2y+1)^7}{4y^3(1152y^4+728y^3+244y^2+42y+3)}$$

with $y = \beta/\Omega$ and ν being the energy below the mean potential E_o in units of $E_\Omega = \hbar^2\Omega^2/2m$. Numerical results are calculated and compared with Halperin and Lax and with Eymard and Duraffourg results. It is found that, the results are in better agreement with computed Halperin and Lax results than Eymard and Duraffourg results.

For a Gaussian impurity potential, the trial wave function is assumed to be the ground state Gaussian wave function, $f(\vec{x}) = (2\xi_o/\pi)^{3/4}\exp(-\xi_o x^2)$ where $\xi_o = m\omega/2\hbar$. An analytical expression of the density of states tail is obtained, identically with Sa-yakanit theory using Feynman path integral method, i.e.

$$\rho(E) = [(E_L/L)^3/\xi_L^2]\, a(\nu)\, \exp[-E_L^2\, b(\nu)/2\xi_L]$$

where $a(\nu) = [(1 + 16\nu)^{1/2} - 1]^{3/2}[(1 + 16\nu)^{1/2} + 7]^{9/2}/2^{12}2^{1/2}\pi^2$

and $b(\nu) = [(1 + 16\nu)^{1/2} - 1]^{1/2}[(1 + 16\nu)^{1/2} + 7]^{7/2}/2^8$, with ν being the energy below the mean potential E_o in units of $E_L = \hbar^2/2mL^2$.

ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to express his deep gratitude to Assistant Professor Dr. Sirirat Kokpol and Professor Dr. Virulh Sa-yakanit for their helpful guiding, advising and encouraging throughout the course of this research. He is grateful to Archan Chai Hok Eab and Archan Noppadon Suttisiri for their valuable suggestions. Grateful acknowledgement is also accorded to Archan Rangsan Chalurmsri for his advising in writing computer program. Finally, the author also wishes to thank the University Development Commission for granting a scholarship.

CONTENTS

PAGE

ABSTRACT (in Thai) iv

ABSTRACT vi

ACKNOWLEDGEMENTS viii

LIST OF TABLES xi

LIST OF FIGURES xiv

CHAPTER

I. INTRODUCTION

1.1 Perfect Crystals 2

1.2 Imperfect Crystals 7

1.3 Heavily Doped Semiconductors 9

II QUANTUM THEORY OF IMPURITY-BAND TAILS

2.1 Halperin and Lax Theory (Minimum Counting Method) 15

2.1.1 Minimum Counting Method 15

2.1.2 Density of States 19

2.1.3 Screened Coulomb Potential 28

2.2 Sa-yakanit Theory 33

2.2.1 Density of States 33

2.2.2 Gaussian Potential 37

PAGE

2.2.3 Screened Coulomb Potential 42

III THE SIMPLIFIED APPROACH OF THE HALPERIN AND LAX THEORY

3.1 Screened Coulomb Potential...................... 48

3.1.1 Eymard and Duraffourg Method............ 49

3.1.2 Present Method.......................... 61

3.2 Gaussian Potential.............................. 72

3.2.1 Present Method.......................... 72

IV CONCLUSION AND DISCUSSION

4.1 Conclusion.................................. 84

4.2 Comparison of Results......................... 87

4.2.1 Screened Coulomb Potential.............. 87

4.2.2 Gaussian Potential...................... 98

4.2.3 The Application of The Impurity Potential Models........................ 103

REFERENCES 104

APPENDIX A FORTRAN IV PROGRAM FOR CALCULATING THE DENSITY OF STATES IN EYMARD AND DURAFFOURG METHOD......... 110

APPENDIX B FORTRAN IV PROGRAM FOR CALCULATING THE DENSITY OF STATES IN PRESENT METHOD..................... 116

APPENDIX C FORTRAN IV PROGRAM FOR CALCULATING THE DENSITY OF STATES FOR THE CASE OF GAUSSIAN IMPURITY POTENTIAL IN PRESENT METHOD.............................. 120

VITA.. 122

LIST OF TABLES

TABLE		PAGE
2.1	The limiting values of $a(\nu)$, $b(\nu)$, and $n(\nu)$ for a screened Coulomb potential obtained from Halperin and Lax Theory..........................	32
3.1	Numerical results of the functions $T(\nu)$, $n(\nu)$ and of the adjustable parameter x obtained from Eymard and Duraffourg method..........................	57
3.2	Numerical results of the dimensionless functions, $a(\nu)$ and $b(\nu)$ obtained from Eymard and Duraffourg method..	58
3.3	Numerical results of the functions, σ_o^2, σ_1^2, and μ obtained from Eymard and Duraffourg method......	59
3.4	Numerical results of the density of states for $\xi' = 0.05, 0.5, 5,$ and 50 obtained from Eymard and Duraffourg method.......................	60
3.5	The limiting values of $a(\nu)$, $b(\nu)$, $n(\nu)$, and $T(\nu)/\nu$ obtained from Eymard and Duraffourg method..	67
3.6	Numerical results of the functions $T(\nu)$, $n(\nu)$, and the adjustable parameter y obtained from present method....................................	68

LIST OF TABLES (continue)

TABLE		PAGE
3.7	Numerical results of the dimensionless functions $a(\nu)$ and $b(\nu)$ obtained from present method......	69
3.8	Numerical results of the functions σ_o^2, σ_1^2 and μ obtained from present method..................	70
3.9	Numerical results of the density of states for ξ' = 0.05, 0.5, 5, and 50 obtained from present method................................	71
3.10	The limiting values of the function $a(\nu)$, $b(\nu)$ $n(\nu)$, and $T(\nu)/\nu$ obtained from present method..	81
3.11	Numerical results of the functions $T(\nu)$, $n(\nu)$ and of the adjustable parameter z (for Gaussian potential) obtained from present method..........	82
3.12	Numerical results of the dimensionless functions, $a(\nu)$ and $b(\nu)$ (for Gaussian potential) obtained from present method...............................	83
4.1	Comparison between the values of $a(\nu)$ obtained from four methods for a screened Coulomb potential....	89

LIST OF TABLES (continue)

TABLE PAGE

4.2 Comparison between the values of $b(\nu)$ obtained from four methods for a screened Coulomb potential.. 91

4.3 Comparison between the limiting values of $a(\nu)$, $b(\nu)$, and $T(\nu)/\nu$ obtained from four methods for a screened Coulomb potential...................... 93

LIST OF FIGURES

FIGURE		PAGE
1.1	The one-dimensional perfect crystal potential $V(x)$ as a function of position x	3
1.2	Energy band scheme of perfect crystal	5
1.3	The density of states $\rho(E)$ as a function of energy E	10
2.1	Potential wells in heavily doped semiconductor	19
3.1	The wave function $S(r)$ as a function of r in dimensionless unit $S(r) = 0.1$	62
4.1	The density of states for $2\xi' = 0.1$	94
4.2	The density of states for $2\xi' = 1$	94
4.3	The density of states for $2\xi' = 10$	95
4.4	The density of states for $2\xi' = 100$	95
4.5	The logarithmic derivative $n(\nu)$ of the exponent $b(\nu)$ as a function of energy ν	96
4.6	The density of states for $2\xi_L' = 0.1$	100

LIST OF FIGURES (continue)

FIGURE PAGE

4.7 The density of states for $2\xi_L' = 1$ 100

4.8 The density of states for $2\xi_L' = 10$ 101

4.9 The density of states for $2\xi_L' = 100$ 101

4.10 The logarithmic derivative $n(\nu)$ of the exponent $b(\nu)$ as a function of ν 102