



การคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานโลหะผสมของ $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ Band Structure Calculation of $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ Ternary Alloy

พิชิตพล เพ่งพิศ¹, ไพโรจน์ มุลตระกูล^{1*} และสันติ แม้นศิริ²

Pichitpon Pengpit¹, Pairot Moontragoon^{1*} and Santi Maensiri²

¹ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น จ. ขอนแก่น 40002

²สาขาวิชาฟิสิกส์ สำนักวิชาวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี จ. นครราชสีมา 30000

*Correspondent author: mpairo@kku.ac.th

Received June 29, 2011

Accepted August 16, 2011

บทคัดย่อ

บทความนี้ได้ทำการพัฒนาโปรแกรมขึ้นเพื่อคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานของโลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ โดยใช้ระเบียบวิธีแบบ Empirical pseudo potential plan wave method และใช้แบบจำลอง Virtual Crystal Approximation (VCA) เพื่อที่จะจำลองลักษณะความเป็นโลหะผสม ผลการคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานที่เป็นแบบพลังงานตรงของโลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ มีค่าตั้งแต่ 0 - 1.3 eV ขึ้นกับปริมาณของซิลิคอน เจอร์เมเนียม และดีบุก ที่อยู่ในโลหะผสม แสดงให้เห็นว่าสามารถนำโลหะผสมนี้ไปประยุกต์ใช้ในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ได้หลายด้านขึ้นกับค่าช่องว่างแถบพลังงานที่ต้องการ เช่น เซลล์สุริยะ

Abstract

The code was developed to calculate the energy band structure of $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ ternary alloy by using the empirical pseudo potential plan wave method. The Virtual Crystal Approximation (VCA) was adopted to model the alloy. The results show that the direct energy band gap of $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ alloy are in the range of 0-1.3 eV, depending on the amount of Si, Ge and Sn doped. Therefore, the alloy can be used as material for many electronic applications, such as solar cell.

คำสำคัญ: สารกึ่งตัวนำแบบแถบพลังงานตรง โลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$

Keywords: direct band gap semiconductor, $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ ternary alloy

1. บทนำ

ในปัจจุบันนี้จะเห็นว่าการพัฒนาเทคโนโลยีทางด้านอิเล็กทรอนิกส์อย่างมาก และมีหลักฐานแน่ชัดว่ามีการพัฒนาและใช้อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เชิงแสง (optoelectronic devices) อย่างแพร่หลายในด้านการสื่อสารและ

คอมพิวเตอร์ เพื่อที่จะนำไปถึงการส่งผ่านข้อมูลด้วยความเร็วสูงระหว่างอุปกรณ์ในวงจรอิเล็กทรอนิกส์ จึงเกิดแนวคิดที่จะผสมผสานระหว่างอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เชิงแสงซึ่งใช้แสงเป็นตัวนำสัญญาณหรือข้อมูล และอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์แบบดั้งเดิมที่ใช้อิเล็กทรอนิกส์เป็น

ตัวนำสัญญาณหรือข้อมูล บนพื้นฐานเทคโนโลยีที่พัฒนาอย่างยาวนานของสารกึ่งตัวนำในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ซึ่งใช้ซิลิคอนเป็นส่วนใหญ่ ดังนั้นผู้จัดทำโครงการนี้ได้เล็งเห็นความสำคัญจึงมุ่งศึกษาทางด้านทฤษฎีเพื่อที่จะนำแนวคิดนี้ไปสู่ความสำเร็จ แต่อย่างไรก็ตามเทคโนโลยียังคงต้องพึ่งพาสารกึ่งตัวนำที่มีแถบพลังงานตรง (direct band gap) เพราะจะทำให้ได้อุปกรณ์ที่มีประสิทธิภาพของแหล่งกำเนิดแสงที่สูงกว่า ซึ่งในตอนนี้มี GaAs และ copper indium gallium selenide (CIGS) เป็นสารกึ่งตัวนำที่มีแถบพลังงานตรง แต่สารดังกล่าวมีราคาแพงและเป็นอันตรายต่อสิ่งแวดล้อม ดังนั้นจึงเกิดแนวคิดที่จะค้นคว้าหาสารกึ่งตัวนำใหม่ๆ แนวคิดที่เป็นไปได้ก็คือโลหะผสมของธาตุหมู่ 4 ได้แก่ C, Si, Ge และ Sn รวมไปถึงโลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ และ $\text{Ge}_{(1-x)}\text{Sn}_x$ (1-2) ซึ่งมีราคาที่ไม่แพง ไม่เป็นพิษ หาได้ง่ายในประเทศไทย เข้ากันได้กับเทคโนโลยีของซิลิคอนปัจจุบัน และที่สำคัญสามารถเป็นสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแถบพลังงานตรงได้เมื่อปรับปริมาณองค์ประกอบในโลหะผสมอย่างเหมาะสม (3)

ดังนั้นบทความนี้จึงมุ่งเน้นไปที่การคำนวณและวิเคราะห์โครงสร้างแถบพลังงานของสารกึ่งตัวนำที่เป็นโลหะผสมของ $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ และศึกษาเงื่อนไขที่ใช้ในการกำหนดค่าความกว้างของแถบพลังงานของสารกึ่งตัวนำชนิดนี้

2. วิธีการวิจัย

2.1 ระเบียบวิธีการคำนวณแบบ empirical pseudo-potential plan wave Method (EPM)

เป็นระเบียบวิธีที่มีการปรับค่าตัวแปรบางตัวในพลังงานศักย์เพื่อให้ผลการคำนวณที่ได้ตรงกับ

ผลการทดลอง ดังนั้นจึงเริ่มการคำนวณหาโครงสร้างแถบพลังงานของสารโดยหาพลังงานศักย์ยังผลของอะตอมชนิด α ที่ตำแหน่ง R ซึ่งสามารถเขียนในปริภูมิของเวกเตอร์คลื่น (4) ได้ดังสมการ

เมื่อ q คือเวกเตอร์คลื่น และ a_1, a_2, a_3, a_4, a_5

$$V_{\alpha,k}(q) = \frac{a_1(q^2 - a_2)}{1 + \exp[a_3(q^2 - a_4)]} \cdot \frac{1}{2} \left[\tanh\left(\frac{a_5 - q^2}{a_6}\right) + 1 \right] \quad (1)$$

และ a_6 คือตัวแปรที่ใช้ในการปรับค่าในพลังงานศักย์ ซึ่งสารแต่ละธาตุนั้นจะมีค่าตัวแปรที่ควบคุมที่แตกต่างกัน ซึ่งธาตุแต่ละธาตุมีค่าตัวแปรต่างๆที่ได้จากการคำนวณเพื่อให้โครงสร้างแถบพลังงานตรงกับผลการทดลอง ดังแสดงในตารางที่ 1

ดังนั้นเพื่อที่จะแก้สมการชโรดิงเงอร์เพื่อที่จะคำนวณหาฟังก์ชันคลื่น $\psi_{n,k}$ และพลังงานของอิเล็กตรอน $\epsilon_{n,k}$ จากสมการ

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right\} \psi_{n,k}(\mathbf{r}) = \epsilon_{n,k} \psi_{n,k}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

ฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนจึงถูกเขียนให้อยู่ในรูปของผลบวกเชิงเส้นของเซตของคลื่นระนาบที่มีคุณสมบัติเป็นออร์โธนอนอร์มอล (linear combination of the complete orthonormal set of plane waves) ฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนจะเป็นดังสมการที่ 3 แล้วสถานะของอิเล็กตรอนในโครงสร้างที่เป็นผลึกจะอธิบายสถานะด้วยเวกเตอร์คลื่น (Wave vector) k และแถบพลังงานที่ n (Band n)

เมื่อ G คือเวกเตอร์หน่วยพื้นฐานส่วนกลับ

$$\psi_{n,k}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_{n,k,G} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad (3)$$

(Primitive reciprocal lattice vector) จำนวน

ตารางที่ 1. ค่าตัวแปรต่างๆในซูโดโพเทนเชียลฟอร์มแฟคเตอร์ของอะตอมของธาตุ Si, Ge และ α -Sn

Parameter	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
Si	0.3969	2.2286	0.6120	-1.9620	5.0	0.3
Ge	0.4229	2.4682	0.6060	-2.6260	5.0	0.3
Sn	0.4199	2.1600	0.6407	-2.9820	5.0	0.3

ฟังก์ชันคลื่นระนาบที่ใช้เป็นฟังก์ชันฐาน (Basis function) ทั้งหมดจะขึ้นกับตัวแปรที่เรียกว่า พลังงานคutoff E_{cutoff} โดยที่

$$E_{\text{cutoff}} \leq \frac{\hbar^2 |\mathbf{G}|^2}{2m} \quad (4)$$

เมื่อ m คือมวลของอิเล็กตรอนอิสระ และ Ω คือ ปริมาตรของหน่วยเซลล์พื้นฐาน ดังนั้น เมื่อนำฟังก์ชันคลื่นนี้เข้าไปแทนที่ในสมการชโรดิงเงอร์ แล้วทำการหาค่าคาดหวังของพลังงาน ดังสมการ

$$\left\langle \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right| \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right\rangle = \langle \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) | \epsilon_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rangle \quad (5)$$

จะได้สมการเมทริกซ์ $\mathbf{H}\mathbf{C}=\mathbf{E}\mathbf{C}$ เมื่อเมทริกซ์ของแฮมิลโทเนียน (Hamiltonian matrix) ที่มีสมาชิกของเมทริกซ์เป็นดังนี้ (5)

$$H_{\mathbf{G},\mathbf{G}'} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{G}+\mathbf{k}|^2}{2m} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{R}_i} \int V_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$$H_{\mathbf{G},\mathbf{G}'} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{G}+\mathbf{k}|^2}{2m} + \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{R}_i} V_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{q}) \quad (6)$$

เมื่อพจน์ $\sum_{\mathbf{R}_i} e^{i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{R}_i}$ คือตัวแปรโครงสร้างเรขาคณิต (geometrical structure factor) สำหรับ Si Ge และ α -Sn ที่มีโครงสร้างแบบเพชร (diamond structure) ซึ่งมีสองจุดแลตทิซที่ตำแหน่ง (0,0,0) และ $(1/4,1/4,1/4)a$ ดังนั้นในที่นี้ $\mathbf{R}_i$ คือเวกเตอร์ (0,0,0) และ $(i+j+k)a/4$ เมื่อ a คือค่าคงที่แลตทิซ (lattice constant)

เมื่อ $\mathbf{C} = \mathbf{C}_{ij}$ คือเมทริกซ์ของสัมประสิทธิ์ของการกระจายของฟังก์ชันคลื่นไปบนฟังก์ชันฐาน ซึ่ง i เป็นดัชนีสำหรับแถบพลังงานที่ n ขณะที่ j เป็นดัชนีที่สอดคล้องกับฟังก์ชันฐาน 1,2,3,...,N และ $\mathbf{E} = \{\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \dots, \epsilon_N\}$ คือ พลังงานของอิเล็กตรอนในแต่ละแถบพลังงาน n มีเวกเตอร์คลื่นเป็น $\mathbf{k}$ สมการเมทริกซ์นี้สามารถแก้ได้โดยการหาค่าเฉพาะ (Eigen value) ของเมทริกซ์ $\mathbf{H}$

หลังจากนั้นจะได้ พลังงานของอิเล็กตรอนที่เวกเตอร์คลื่น $\mathbf{k}$ แถบพลังงานที่ n เป็น ϵ_n ที่มีฟังก์ชันคลื่นเป็น ดังนี้

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \left[C_{n1} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_1)\cdot\mathbf{r}} + C_{n2} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_2)\cdot\mathbf{r}} + C_{n3} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_3)\cdot\mathbf{r}} + \dots + C_{nN} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_N)\cdot\mathbf{r}} \right] \quad (7)$$

เมื่อได้ฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของอิเล็กตรอนทุกสถานะ สามารถนำฟังก์ชันคลื่นที่ได้มาคำนวณหาความหนาแน่นของอิเล็กตรอน $\rho(\mathbf{r})$ ได้ดังสมการ

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\epsilon_{n,\mathbf{k}} < E_{\text{fermi}}} |\psi_{n,\mathbf{k}}|^2$$

เมื่อ E_{fermi} คือพลังงานเฟอร์มิ และนำพลังงานมาคำนวณหาความหนาแน่นสถานะ (density of states, DOS) โดยการอินทิเกรตทางคอมพิวเตอร์ด้วยวิธีเตระโกนอล (tetragonal method) โดยอาศัยทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่น (Density functional theory, DFT) พลังงานศักย์ฮาร์ตรี (Hartree potential) (V_H) สามารถคำนวณได้จากความสัมพันธ์ และ พลังงานศักย์ฮาร์ตรีในปริภูมิเวกเตอร์คลื่นสามารถคำนวณได้จากความสัมพันธ์

$$V_H(\mathbf{q}) = \frac{e^2 \rho(\mathbf{q})}{\epsilon_0 q^2} \quad (8)$$

เมื่อ $\rho(\mathbf{q})$ คือความหนาแน่นของอิเล็กตรอนในปริภูมิเวกเตอร์คลื่น และ ϵ_0 คือค่าสภาพยอมของสุญญากาศ ซึ่งคำนวณได้โดยตรงจากการแปลงฟูเรียร์ของความหนาแน่นอิเล็กตรอนในปริภูมิตำแหน่ง $\rho(\mathbf{r})$ การคำนวณทางคอมพิวเตอร์ทำได้โดยการแบ่งซอยปริภูมิตำแหน่งเป็นช่วงเล็กๆ หลังจากนั้นทำการคำนวณหาความหนาแน่นของอิเล็กตรอนในแต่ละจุดแล้วทำการแปลงฟูเรียร์โดยใช้เทคนิคการคำนวณทางคอมพิวเตอร์ที่เรียกว่า การแปลงฟูเรียร์แบบเร็ว (Fast Fourier Transform) ส่วนพลังงานศักย์เอกซ์เชง-คอร์เรชัน (Exchange correlation energy) (V_{xc}) ในรูปแบบของสเลเตอร์สามารถคำนวณได้จาก

สมการ

$$V_{xc}(q) = -\beta \frac{3}{2} e^2 \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} [\rho^{\frac{1}{3}}(q)] \quad (9)$$

เมื่อ β คือ Fudge factor ซึ่งมีค่าเท่ากับ 0.7 และ $[\rho^{\frac{1}{3}}(q)]$ คือการแปลงฟูเรียร์ของรากที่สามของความหนาแน่นของอิเล็กตรอนในปริภูมิตำแหน่ง การคำนวณในส่วนนี้จะเหมือนกับการคำนวณ $\rho(q)$ ยกเว้นในกรณีนี้รากที่สามของ $\rho(r)$ ของแต่ละช่วงย่อยจะถูกคำนวณก่อน หลังจากนั้นจึงทำการแปลงฟูเรียร์

2.2 การคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานของโลหะผสมโดยใช้แบบจำลอง virtual crystal approximation

การคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานของ $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ โดยใช้แบบจำลอง Virtual Crystal Approximation (VCA) จะใช้หลักการเดียวกันกับการคำนวณโครงสร้างของธาตุ Si Ge และ Sn ตามที่ได้กล่าวมาข้างต้น การคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานของโลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ จะใช้กฎของเวการ์ด (6) ในการเฉลี่ยของพลังงานศักย์และพารามิเตอร์ที่สำคัญในการ

คำนวณ เช่น ค่าคงที่แลตทิซ (lattice constant) ซึ่งจะแปรผันตามปริมาณของซิลิคอนและเจอร์เมเนียมที่ใส่ลงไป โลหะผสมนี้ ซึ่งสามารถคำนวณค่าคงที่แลตทิซในปริมาณต่างๆของโลหะผสมได้จากสมการ

$$a_{\text{GeSiSn}} = a_{\text{Ge}}(1-x-y) + a_{\text{Si}}(x) + a_{\text{Sn}}(y) \quad (10)$$

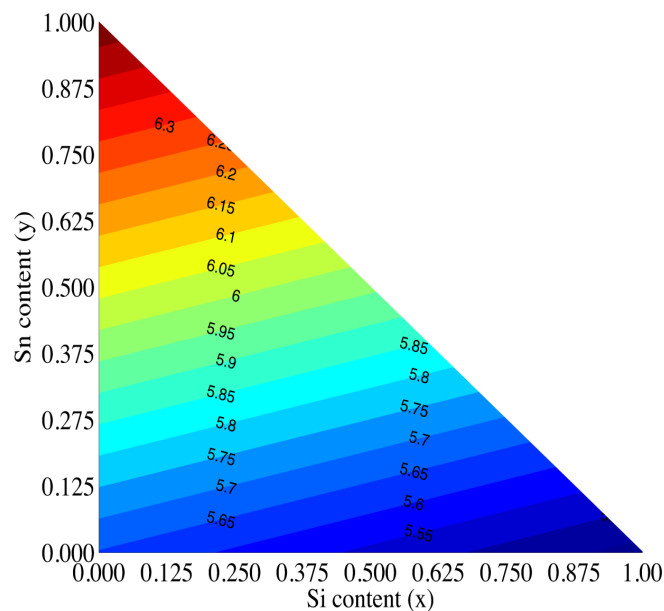
เมื่อ a_{Ge} a_{Si} และ a_{Sn} คือค่าคงที่แลตทิซของ Si, Ge และ Sn ตามลำดับ ดังแสดงในรูปที่ 1 และค่า empirical pseudo-potential ของโลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ สามารถคำนวณได้จากสมการ

$$V_{\text{GeSiSn}} = V_{\text{Ge}}(1-x-y) + V_{\text{Si}}(x) + V_{\text{Sn}}(y) \quad (11)$$

เมื่อ V_{Ge} V_{Si} และ V_{Sn} คือ empirical pseudo-potential ของ Si Ge และ Sn ตามลำดับ

3. ผลการวิจัยและอภิปราย

เพื่อให้ได้สารโลหะผสมที่มีคุณสมบัติเป็นสารกึ่งตัวนำแบบแถบพลังงานตรง โครงสร้างแถบพลังงานของ $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ จะถูกแยกพิจารณาที่แต่ละจุดต่างๆบนเวกเตอร์คลื่น ซึ่งเราสนใจสามจุดบนเวกเตอร์คลื่นคือ จุด L มีค่า



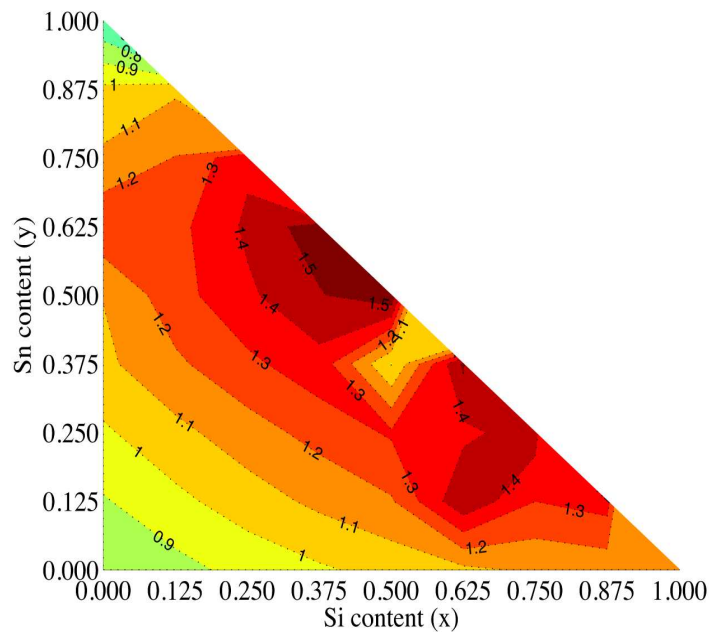
รูปที่ 1. ค่าคงที่แลตทิซของ $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ โดยใช้แบบจำลอง VCA

$k=(0.5,0.5,0.5)2\pi/a$ จุด Γ มีค่า $k=(0,0,0)$ และ จุด X มีค่า $k=(1,0,0)2\pi/a$ ผลการศึกษาแนวโน้มของช่องว่างแถบพลังงานในแต่ละจุดได้แสดงดังรูปที่ 2, 3 และ 4 ตามลำดับ

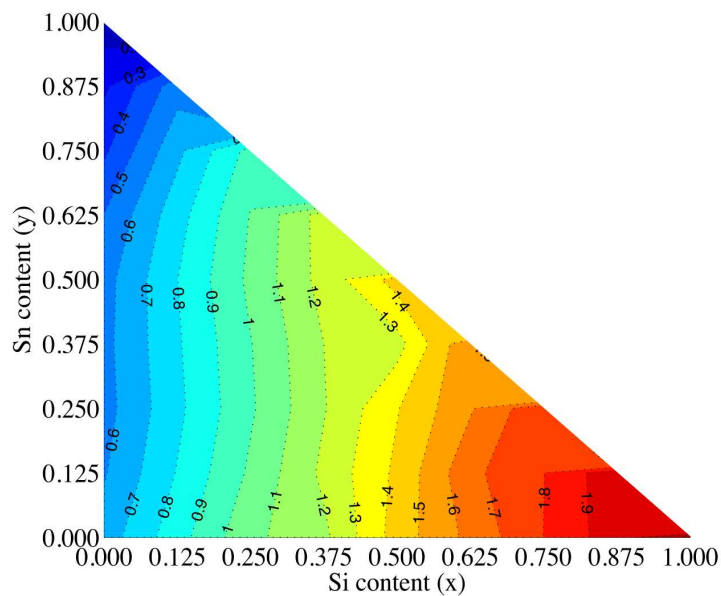
ตัวแปรที่จะควบคุมปริมาณของสารที่เติมลงไปคือ (x) สำหรับซิลิคอนและ (y) สำหรับดีบุก

แนวโน้มของช่องว่างแถบพลังงานโลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ ก่อนที่จะทำการเติมปริมาณซิลิคอนและดีบุกลงไปเมื่อ $x=0$ และ $y=0$ จะเห็นว่าโลหะผสมจะเป็นเจอร์เมเนียมเป็นสารตั้งต้น

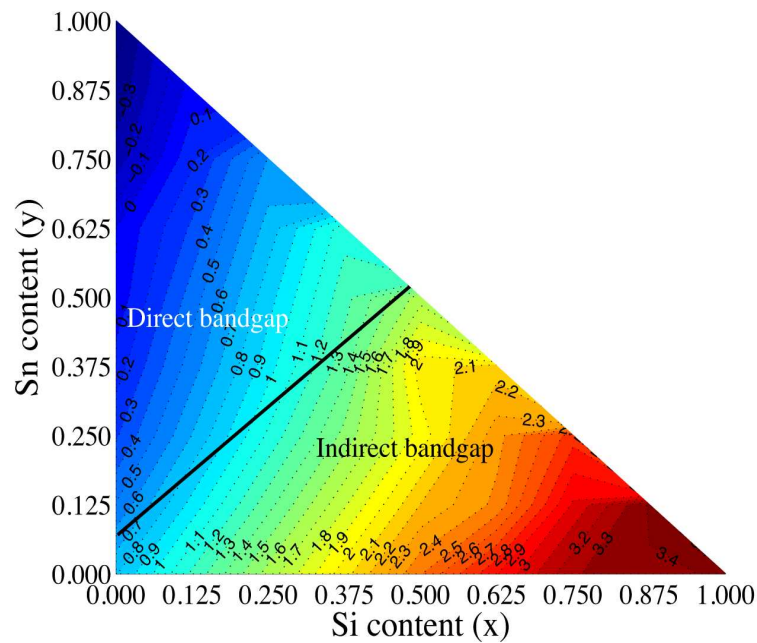
จากรูปที่ 2 ที่ตำแหน่ง X ช่องว่างแถบพลังงานของ $\text{Si}<\text{Sn}<\text{Ge}$ เมื่อเราเติมซิลิคอน



รูปที่ 2. ช่องว่างแถบพลังงานของ $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ ที่ตำแหน่ง X โดยใช้แบบจำลอง VCA



รูปที่ 3. ช่องว่างแถบพลังงานของ $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ ที่ตำแหน่ง L โดยใช้แบบจำลอง VCA



รูปที่ 4. ช่องว่างแถบพลังงานของ $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ ที่ตำแหน่ง Γ โดยใช้แบบจำลอง VCA

ลงไป โลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ จะมีช่องว่างแถบพลังงานเพิ่มขึ้นเนื่องจากสารตั้งต้นของเรามีช่องว่างแถบพลังงานน้อยที่สุดในทำนองเดียวกันเมื่อเติมดีบุกลงไปก็จะทำให้ช่องว่างแถบพลังงานที่ตำแหน่งนี้เพิ่มขึ้นตามด้วย ที่ตำแหน่ง L (รูปที่ 3) ช่องว่างแถบพลังงานของ $\text{Si} > \text{Ge} > \text{Sn}$ เมื่อเติมซิลิคอนลงไป โลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ จะทำให้ช่องว่างแถบพลังงานเพิ่มขึ้นเนื่องจากช่องว่างแถบพลังงานของเจอร์เมเนียม ต่อมาเติมดีบุกลงไปช่องว่างแถบพลังงานจะลดลงเมื่อโลหะผสมมีความเป็นดีบุกในโลหะผสมมากขึ้นเนื่องจากดีบุกเป็นสาร direct band gap ไม่มีช่องว่างแถบพลังงานทำให้เมื่อเติมดีบุกลงไปจะทำช่องว่างแถบพลังงานที่ตำแหน่งนี้ลดลงตามไปด้วย และในรูปที่ 4 ตำแหน่ง Γ ช่องว่างแถบพลังงานของ $\text{Si} > \text{Ge} > \text{Sn}$ เมื่อเติมซิลิคอนลงไป โลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ จะทำให้ช่องว่างแถบพลังงานที่ตำแหน่งนี้เพิ่มขึ้น เนื่องจากซิลิคอนมีช่องว่างแถบพลังงานที่ตำแหน่งนี้มากกว่าทำให้เพิ่มค่าช่องว่างแถบพลังงานของเจอร์เมเนียม และเมื่อเติม

ดีบุกลงไป โลหะผสม ช่องว่างแถบพลังงานจะลดลงเพราะดีบุกเป็นสารที่มีลักษณะแถบพลังงานแบบตรงและไม่มีช่องว่างแถบพลังงานทำให้เมื่อเติมดีบุกลงไปจะทำช่องว่างแถบพลังงานของโลหะผสมที่ตำแหน่งนี้ลดลงตามไปด้วย

ความเป็นสารกึ่งตัวนำแบบแถบพลังงานตรงของโลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ สามารถพิจารณาได้จากการเปรียบเทียบแถบสัช่องว่างแถบพลังงานที่ตำแหน่ง L ตำแหน่ง Γ และตำแหน่ง X ว่าถ้าค่าปริมาณ x และ y ใดบ้างที่ทำให้ค่าช่องว่างแถบพลังงานที่ตำแหน่ง Γ มีค่าน้อยกว่าที่ตำแหน่ง L และ X ถือว่าค่า x และ y นั้นทำให้โลหะผสมที่ได้มีความเป็นสารกึ่งตัวนำแบบแถบพลังงานตรง ซึ่งจากการพิจารณาจะได้ว่าความเป็นสารกึ่งตัวนำแบบแถบพลังงานตรง ของโลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ ในบริเวณที่เป็นแถบสีแดงแสดงในรูปที่ 4 มีค่าช่องว่างแถบพลังงานตั้งแต่ 0-1.3 eV ค่าช่องว่างแถบพลังงานของโลหะผสมนี้สามารถปรับค่าได้ขึ้นอยู่กับปริมาณของซิลิคอนเจอร์เมเนียม และดีบุก ที่อยู่ในโลหะผสม ซึ่งสามารถที่จะนำไปประยุกต์ใช้ในอุปกรณ์

อิเล็กทรอนิกส์ได้หลายด้านขึ้นกับค่าช่องว่างแถบพลังงานที่ต้องการ (7)

4. สรุป

จากการคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานของโลหะผสม $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ ที่แสดงคุณสมบัติเป็นสารกึ่งตัวนำแบบแถบพลังงานตรง ด้วยโปรแกรมที่พัฒนาขึ้นซึ่งสามารถคำนวณคุณสมบัติต่างๆทั้งโครงสร้างแถบพลังงาน ความหนาแน่นอิเล็กตรอน ความหนาแน่นสถานะและจำนวนสถานะ ที่มีค่าใกล้เคียงกับผลการทดลองและมีความน่าเชื่อถือ (8) และจากผลการคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานที่เป็น direct band gap ของ $\text{Ge}_{(1-x-y)}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ ใช้แบบจำลองแบบ Virtual Crystal Approximation (VCA) มีค่าตั้งแต่ 0 – 1.3 eV ขึ้นกับปริมาณของซิลิคอน เจอร์เมเนียม และดีบุก ที่อยู่ในโลหะผสม และสามารถนำไปประยุกต์ใช้ในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ได้หลายด้านขึ้นกับค่าช่องว่างแถบพลังงานที่ต้องการ เช่นนำไปผลิตเซลล์สุริยะที่มีประสิทธิภาพที่ดีกว่า เพราะว่าโลหะผสมที่ได้มีลักษณะเป็นสารกึ่งตัวนำแบบแถบพลังงานตรง

5. กิตติกรรมประกาศ

คณะผู้ทำการวิจัยขอขอบคุณมหาวิทยาลัยขอนแก่นที่ให้ทุนสนับสนุนการวิจัยในครั้งนี้

6. เอกสารอ้างอิง

- (1) Moontragoon P, et al. Band structure calculation of SiGeSn alloy: achieving direct band gap materials, Semicond Sci Technol. 2007; 22: 742.
- (2) Ragan R. Direct energy band gap group IV Alloys and nanostructure [Dissertation]. Pasadena, CA: California Institute of Technology; 2005.
- (3) He G, Atwater HA. Interband transitions in $\text{Sn}_x\text{Ge}_{1-x}$ alloys. Phys. Rev. Lett. 1997; 79: 1937.

- (4) Fischetti MV, Laux SE. Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys. J App Phys. 1996; 80: 2234.
- (5) Harrison P. Quantum walls wires and dots: theoretical computational physics. Chichester: John Wiley & Sons; 2005.
- (6) Denton AR, Ashcroft NW. Vegard's law. Phys Rev A. 1991; 43:3161.
- (7) Sun G, et al. Strain-free Ge/GeSiSn quantum cascade lasers based on L-valley intersubband transitions. App Phys Lett. 2007; 90: 251105.
- (8) Chilikowsky JR, Cohen ML. Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blend semiconductors. Phys Rev B. 1976; 14: 556.