



I.1 ธรรมชาติของความไม่เป็นระเบียบ (The Nature of Disorder)

ทฤษฎีของบลอค (Bloch's theory) เป็นทฤษฎีพื้นฐานในฟิสิกส์ยุคใหม่แขนงฟิสิกส์ของของแข็ง (Solid State Physics) ที่เกี่ยวกับอิเล็กตรอนในโครงผลึก (Crystal Lattice) ที่สมบูรณ์ ลักษณะทั่วไปของผลึกที่สมบูรณ์ คือ มีความเป็นคาบ (Periodicity) ของมัน อะตอมที่เป็นระเบียบสมบูรณ์ย่อมค้ำึงถึงตำแหน่งและส่วนประกอบของมันด้วย ความสมมาตร (Symmetry) ของไอเกนฟังก์ชัน (Eigenfunction) ตามทฤษฎีของบลอคจะอยู่ในรูป

$$\Psi(\underline{r}) = \Psi_{n\underline{K}}(\underline{r}) = \exp(i\underline{K} \cdot \underline{r}) U_{n\underline{K}}(\underline{r}) \quad (1.1)$$

เมื่อเวกเตอร์คลื่น (Wave Vector) \underline{K} เป็น บริลโลนโซนที่หนึ่ง (First Brillouin Zone)

$U_{n\underline{K}}$ คือฟังก์ชันที่มีความเป็นคาบของโครงผลึก

$n = 1, 2, 3, \dots$ เรียกว่า ดัชนีของแถบ (Band Index)

สมการ (1.1) ความหมายไอเกนฟังก์ชัน คือ โอกาสที่จะพบอิเล็กตรอนในทุก ๆ หน่วยเซลล์มีค่าเท่ากันหมด ตลอดทั้งโครงผลึก ไอเกนฟังก์ชันประกอบด้วยแฟลคเตอร์ $U_{n\underline{K}}$ ที่มีความเป็นคาบตลอดทั่วทั้งผลึก และมีระนาบคลื่น (Plane Wave) $\exp(i\underline{K} \cdot \underline{r})$ เป็นกรณีของอิเล็กตรอนอิสระ ถ้าสารที่เป็นผลึกไม่มีความเป็นคาบก็ไม่อาจใช้สมการ (1.1) กรณีเช่นนี้ เราเรียกระบบนี้ว่า ระบบไม่เป็นระเบียบ (Disordered System)

เมื่อเร็ว ๆ นี้ ใ้มีการเบนความสนใจกับระบบที่ไม่เป็นระเบียบ เพื่อศึกษา โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์¹ ลักษณะสำคัญของระบบนี้ จะมีบทบาททางเทคโนโลยีทางวิทยาศาสตร์ประยุกต์ เช่น นำไปทำเลเซอร์ เครื่อง อักสำเนา และ อื่น ๆ เพราะสารที่ประกอบนั้นไม่ต้องกำจัดสุทธิ (Impurity) เหตุที่สารไม่เป็นระเบียบได้รับความสนใจนั้น ก็มีเหตุผลหลายประการด้วยกัน ประการแรกเป็นปัญหาทางทฤษฎี ประการที่สอง เกี่ยวกับความก้าวหน้าที่น่าสนใจของความเข้าใจสารที่ไม่เป็นระเบียบ ซึ่งจะมีการพัฒนาอีกในเวลาไม่ช้านัก ปัจจุบันนี้สารที่ไม่เป็นระเบียบหลายชนิดด้วยกันได้นำไปประยุกต์ในทางอิเล็กทรอนิกส์ ถึงตัวนำ² (Semiconductor) เช่น พิลมอสัญฐาน แถวบางชนิด ฯลฯ

ก่อนที่จะเข้าใจปัญหาในระบบที่ไม่เป็นระเบียบ เราควรจะทำ ความเข้าใจกับปัญหา ในระบบที่เป็นระเบียบที่ใช้แบบจำลองต่าง ๆ อธิบาย ตัวอย่าง แบบจำลองอิเล็กตรอนเกือบอิสระ³ (Nearly Free Electron Model) ซึ่งเป็นแบบจำลองที่สคัญของผลึกเป็นสคัญอนที่อิเล็กตรอนประพฤติคล้ายกับอนุภาคอิสระ ผลของสคัญนี้เองนำไปใช้กับ วิธีรบกวน (Perturbation Method)

1 E.N. Economou, and others (Comp.), Amorphous and Liquid Semiconductors (J. Taue, ed; Plenum Press 1971)

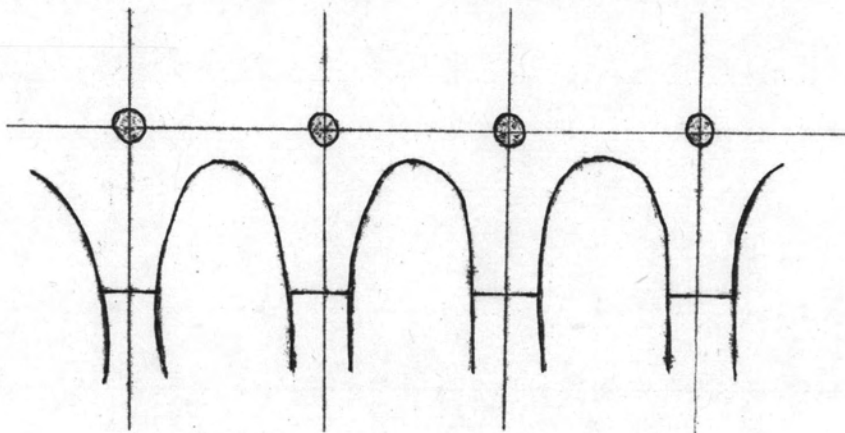
2 N.F. Mott, "Conduction and Switching in Non - crystalline Materials", Contemporary Physics, 10 (1969) 125.

3 J.M. Ziman, "Principles of the Theory of Solids" 2nd ed., Cambridge University Press (1972)

แบบจำลองอีกแบบหนึ่งที่จะกล่าวถึง คือ แบบจำลองยึดแน่น (Tight Binding Model) เป็นแบบจำลองที่ผลึกต้องเป็นศักย์แรง ถ้าอิเล็กตรอนถูกดึงดูค้ายไอออนระหว่างเคลื่อนที่ผ่านโครงผลึก อิเล็กตรอนยังคงอยู่ที่นั้น เป็นระยะเวลานานพอควรก่อนที่จะร่วออกหรือทะลุออกไปอยู่ไอออนถัดไป ดังแสดงไว้ในรูปที่ 1.1

แบบจำลองต่าง ๆ ในผลึกของของแข็งอาจนำไปใช้ในระบบที่ไม่เป็นระเบียบ เช่น แบบจำลองอิเล็กตรอนเกือบอิสระ แบบจำลองยึดแน่น เป็นต้น แบบจำลองหนึ่งในระบบที่ไม่เป็นระเบียบ คือ แบบจำลองแอนเดอร์สัน⁴ (Anderson Model) ซึ่งมีฐานะเทียบเท่ากับแบบจำลองยึดแน่นที่มีระดับพลังงานแถบเกิดจาก วงโคจรของ S อะตอม (S - Atomic Orbital) มีความกว้างของแถบ $2JZ$ โดยที่ Z เป็นจำนวนโคออร์ดิเนชัน (Coordination) และ J เป็นพลังงานอินทิกรัลเหลื่อม (Overlap Energy Integral) แอนเดอร์สันได้เสนอว่าพลังงานศักย์ V ในแต่ละอะตอมแปรตามอะตอมหนึ่งไปยังอีกอะตอมหนึ่งอย่างไม่เป็นระเบียบดังแสดงในรูปที่ 1.2. เป็นหลุมที่มีระดับต่าง ๆ กัน พลังงานศักย์ V มีค่าเท่ากับ V_0 ซึ่งพบว่า ถ้าอิเล็กตรอนอยู่ในอะตอมใดอะตอมหนึ่งมีโอกาสพบอิเล็กตรอนที่อุดมหมู่ศูนย์สมบูรณ์ โดยมีเงื่อนไขว่าอิเล็กตรอนจะพุ่งกระจายออกจากหลุมเมื่อ $V_0 / J < 5$ และอิเล็กตรอนจะอยู่เฉพาะที่ (Localized) หลุมเมื่อ $V_0 / J > 5$

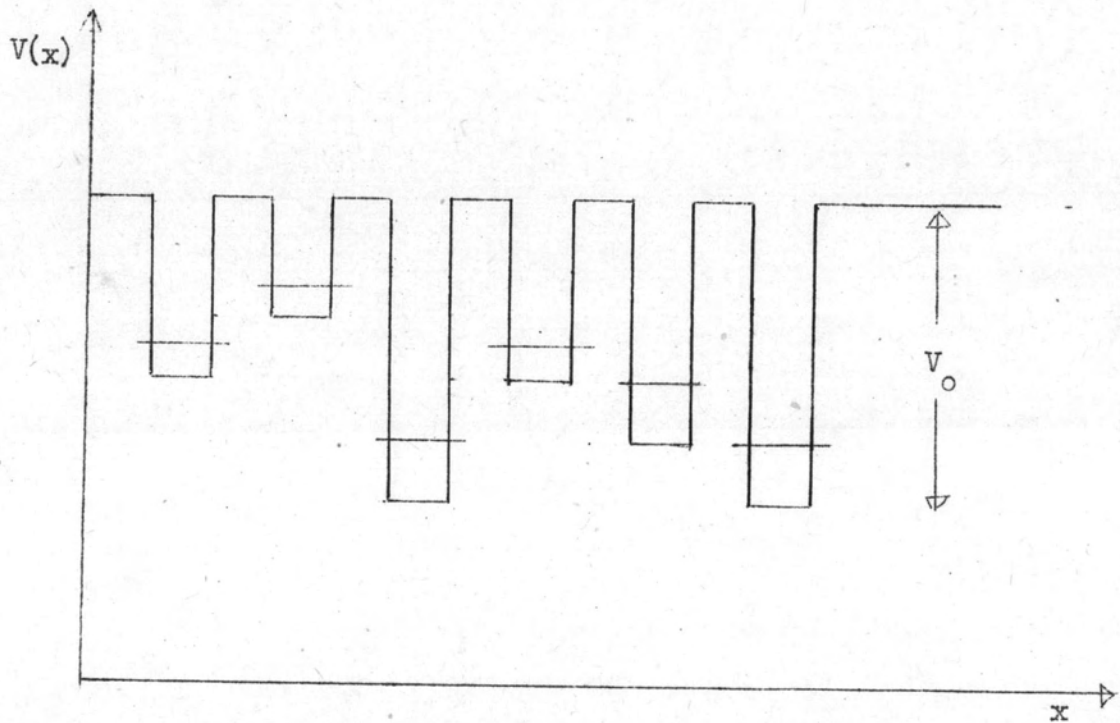
⁴ P.W. Anderson, " Absence of Diffusion in Certain Random Lattices, Physical Review, 109,(1958) 1492.



รูปที่ 1.1 แสดงถึงลักษณะของแบบจำลองปิดแน่น

— แขนระดับพลังงาน





รูปที่ 1.2 แสดงถึงพลังงานศักย์ของอิเล็กตรอนตัวหนึ่งในแบบจำลอง
แอนเงอร์สตัน เส้นในแนวนอนแสดงถึงระดับพลังงานแต่ละ
หลุมของพลังงานศักย์ และ V_0 เป็นความลึกของระดับพลังงานต่าง ๆ

แบบจำลองอีกแบบหนึ่งของระบบที่ไม่เป็นระเบียบที่มีฐานะเทียบเท่ากับแบบจำลองอิเล็กตรอนเกือบอิสระ ก็คือ แบบจำลองของเอควาร์ด⁵ ซึ่งกล่าวถึงอิเล็กตรอนตัวหนึ่ง เคลื่อนที่อยู่ภายในระบบของตัวกระจุกที่มีความหนาแน่นสูง ศักย์อ่อน และ อยู่กันอย่างไม่เป็นระเบียบ การวิจัยนี้เราอาศัยแบบจำลองนี้ เพื่อหาความหนาแน่นของสถานะโดยเฉพาะที่บริเวณทาง และจะไม่พิจารณาถึง อิเล็กตรอนในสถานะเฉพาะที่ (Localized States) ความหมายของสถานะเฉพาะที่ก็คือ คลื่นฟังก์ชัน (Wave Function) ที่ทางไกลจะประพฤติคล้ายเอกซ์โปเนนต์ (Exponential) มอทท์ และ ทวอส⁶ (Mott and Twose) เป็นผู้เสนอครั้งแรกเกี่ยวกับค่าคอมของสถานะอิเล็กตรอน ในหนึ่งมิติโดยอาศัยแบบจำลองโครนิกเพนนี่ (Kronig Penny Model) ในระบบที่ไม่เป็นระเบียบคือ สถานะเฉพาะที่ มอทท์⁷ (Mott) เป็นอีกผู้หนึ่งที่ได้ เสนอถึงเงื่อนไขเฉพาะที่ของอิเล็กตรอนในระบบไม่เป็นระเบียบ

5 S.F. Edwards, "The Localization of Electrons in Disordered Systems", Journal of Noncrystalline Solids, 4 (1970) 417.

6 N.F. Mott, and W.D. Twose, "The Theory of Impurity Conduction"; Advances in Physics, 10 (1961) 107.

7 N.F. Mott, "Electrons in Disordered Structures", Advances in Physics, 16 (1967) 49.

นอกจากนี้ อับราม และ เอ็ดวาร์ด⁸ (Abram and Edwards) ได้ให้ความเห็นเกี่ยวกับอิเล็กทรอนิกส์ในสถานะเฉพาะที่ และ สถานะเขตขยาย (Extended States) ของระบบไม่เป็นระเบียบที่บริเวณหางของแถบพลังงานโดยใช้เทคนิคการรวมเส้นทาง (Path Integral)

ในระยะไม่กี่ปีมานี้เอง ได้มีผู้พยายามศึกษาความหนาแน่นของสถานะไม่เป็นระเบียบ สำหรับสารที่เป็นระเบียบนั้นอาศัยสมการ (1.1) เราอาจหาความหนาแน่นของสถานะได้อย่างแม่นยำ แต่เนื่องจากในสารที่ไม่เป็นระเบียบไม่อาจใช้สมการ (1.1) การคำนวณหาความหนาแน่นของสถานะจึงมีความยุ่งยาก อย่างไรก็ตาม การแก้ปัญหานี้ทำได้โดยใช้ทางกายภาพและใช้การประมาณค่าทางคณิตศาสตร์ โลฟชิตซ์ (Lifshitz) เป็นผู้หนึ่งที่ให้ความสนใจกับการศึกษาความหนาแน่นของสถานะที่ไม่เป็นระเบียบโดยเฉพาะบริเวณหาง

⁸ R.A. Abram, and S.F. Edwards, "The Nature of the Electronic States of a Disordered System : I - II Localized States, Extended States", Journal of Physics C : Solid State Physics, 5, (1972) 1183.

⁹ I.M. Lifshitz, "The Spectrum of Disordered Systems", Advances in Physics, 13, (1964) 483.

เอควาร์คส์ และ กัลเยว ¹⁰ (Edwards and Gulyaev) ได้ใช้แบบจำลอง
 เอควาร์คส์ อภิปราย ปัญหาความหนาแน่นของสถานะในกิ่งค่านำที่มีคุณสมบัติ
 การหาความหนาแน่นของสถานะที่ไม่เป็นระเบียบใ้มีผู้คำนวณไว้หลายท่าน
 ด้วยกัน อาทิเช่น โจนส์ และ ลุกส์ ¹¹ (Jones and Lukes) บีบายและ
 เอควาร์คส์ ¹² (Beeby and Edwards) สามัคถิยภณิก ¹³ (Samathiyakanit)
 การทดลองเกี่ยวกับการหาความหนาแน่นของสถานะ โดยหลักการ
 อาจทำได้หลายวิธีด้วยกัน อาทิเช่น โดยวิธี โฟโตอิมิสชัน ¹⁴ (Photo -
 emission) เป็นต้น

-
- ¹⁰ S.F. Edwards, and Y.B. Gulyaev, "The Density of States of a Highly Impure Semiconductors", Proceedings of the Physical Society, 83, (1964) 495.
- ¹¹ R. Jones, and T. Lukes, "A Path Integral Approach to Disordered Systems" Proceedings of the Royal Society A, 309, (1969) 457.
- ¹² J.L. Beeby and S.F. Edwards, "The Electronic Structure of Liquid Insulators", Proceedings of the Royal Society A, 274, (1963) 395.
- ¹³ V. Samathiyakanit, "Path Integral Theory of a Model Disordered Systems," Journal of Physics C; Solid State Physics 7, (1974) 2849.
- ¹⁴ N.F. Mott, and E.A. Davis, "Electronic Process in Non - Crystalline Material", Clarendon Press, (1971)

1.2 การคำนวณหาความหนาแน่นของสถานะที่เป็นระเบียบ

(The Density of States of Ordered Systems)

ก่อนที่จะเข้าใจปัญหา การหาความหนาแน่นของสถานะที่ไม่เป็นระเบียบ เราควรเข้าใจปัญหาของสารเชิงผลึก กรณีอิเล็กตรอนอิสระที่อยู่นอกสารเชิงผลึก คลื่นฟังก์ชัน $\Psi_{\underline{k}} = \exp(i\underline{k} \cdot \underline{r})$ ตามตำแหน่ง นำไปแทนลงในสมการชโรดิงเงอร์ (Schrödinger Equation) คือ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = E \Psi_{\underline{k}}$$

จะได้ว่าพลังงาน $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

m เป็นมวลอิเล็กตรอน

แต่ถ้าอิเล็กตรอนอยู่ในสารเชิงผลึก คลื่นฟังก์ชันจะเป็นไปตามสมการ (1.1) กล่าวคือพลังงานศักย์มีความเป็นคาบภัย เมื่ออิเล็กตรอนเข้าไปอันตรกิริยา (Interaction) กับโครงผลึกหรือแกนไอออน (Ion Core) ถูกด้วยกับมวลยังผล (Effective Mass) ของอิเล็กตรอนเป็นไปตามดังสมการ

$$E_{\underline{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

เมื่อ มวลยังผล

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{d k^2}}$$

สังกัป (Concept) ที่ใช้ได้ ทั้งระบบที่เป็นระเบียบกับระบบที่ไม่
 เป็นระเบียบ ก็คือ ความหนาแน่นของสถานะ ซึ่งใช้สัญลักษณ์ $N(E)$ โดย
 นิยามว่า $N(E)dE$ คือจำนวนสถานะของทางวงโคจรอิเล็กตรอน
 (Orbital State) $g(E)$ ในหนึ่งหน่วยปริมาตร ที่มีพลังงานอยู่
 ระหว่าง E กับ $E+dE$ โดยทิศทางสปิน (Spin) หรือ การ
 หมุนของอิเล็กตรอนด้วย การที่ทิศทางการหมุนของอิเล็กตรอนนั้น เรา
 อาศัยหลักเกณฑ์ทางควอนตัม (Quantum Principle) ที่เรียกว่าหลัก
 การกีดกันของเพาลี (Pauli Exclusion Principle) ซึ่งกล่าวว่า
 ในระดับพลังงานหนึ่ง จะต้องมีอิเล็กตรอนอย่างมากที่สุดไม่เกินสอง เช่น
 ในระดับพลังงานต่ำสุดมีอิเล็กตรอนอยู่แล้วสองตัว ถ้ามีอิเล็กตรอนอีกสองตัว
 จะต้องอยู่ในระดับพลังงานที่ถัดขึ้นไปเป็นเช่นนี้เรื่อย ๆ จนกว่าอิเล็กตรอนทั้ง
 หมดยุติในระบบที่มีอยู่จนครบ ในระดับพลังงานที่ต่างกัน

จากนิยามข้างต้น เราอาจเขียนสถานะของวงโคจรอิเล็กตรอน
 $g(E)$ มีพลังงานน้อยกว่า E ในรูป

$$g(E) = \int_0^E N(E) dE \quad (1.2)$$

เมื่อ

$$N(E) = \frac{dg(E)}{dE} \quad (1.3)$$

พิจารณาการหาความหนาแน่นของสถานะ ในระบบที่เป็นระเบียบ กรณีของ
 อิเล็กตรอนอิสระที่บรรจุในกล่องลูกบาศก์ ยาวด้านละ L ทั้งสามการ

โพรบิเนเยอร์ อิลเลคตรอนอิสระ มีรูปดังนี้คือ.--

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(x,y,z) = E \Psi(x,y,z) \quad (1.4)$$

เมื่อ $\Psi(x,y,z)$ เป็นคลื่นฟังก์ชัน (Wave Function)
E เป็นพลังงานอิลเลคตรอนอิสระ

เงื่อนไขขอบเขต (Boundary Condition) ในกรณีนี้คือ

$$\Psi(x,y,z) = 0 \quad (1.5)$$

ที่ผิวของกล่อง

คำตอบของสมการ (1.4) หาโดยวิธีแยกตัวแปรสมการดิฟเฟอเรนเชียล
บางส่วน (Partial Differential Equation) และ ใช้เงื่อนไข
สมการ (1.5) ผลลัพธ์ที่ได้ของคลื่นฟังก์ชันและพลังงานคือ

$$\Psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin \frac{n_x x}{L} \sin \frac{n_y y}{L} \sin \frac{n_z z}{L} \quad (1.6)$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (1.7)$$

ในที่นี้ n_x, n_y และ n_z คือ ตัวเลขเต็ม (Integer) ที่เริ่มจาก
1, 2,

ข้อสังเกต ในกรณีของลูกบาศก์ ถ้าค่าต่าง ๆ ของ n_x, n_y, n_z
ที่มีพลังงานเท่ากัน เช่น 211, 121 และ 122 ค่าของ
พลังงานนี้ไม่อาจบอกคุณลักษณะของสถานะได้ เราเรียกวาระดับที่เจิน
เนอเรท (Degenerate Level)

จากสมการ (1.4) พลังงาน E เป็นฟังก์ชัน $\frac{\hbar^2 k^2}{2mL^2}$ จะมีค่าน้อย
เมื่อพิจารณาจากกล่องที่มีมิติมหภาค (Macroscopic Dimension) ดังนั้น
 $g(E)$ สถานะที่มีพลังงานน้อยกว่า E มีจำนวนมาก เมื่อพลังงาน
 E มีหลายค่า อาจคำนวณฟังก์ชัน $g(E)$ โดยตรวจสอบจุดต่างๆ ใน
อวกาศที่มี n มิติ (n - space) ที่แทนสถานะ ความที่แสดงดังใน
รูป 1.3 แต่ละลูกบาศก์ในปริมาตรของระบบที่มีก้านยาวหนึ่งหน่วย แทน
ควยหนึ่งสถานะ ที่ทำให้จำนวน $g(E)$ ของสถานะที่มีพลังงานน้อยกว่า
 E เท่ากับจำนวนปริมาตรลูกบาศก์ ดังสมการ

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{2m^*L^2}{\hbar^2 \pi^2} E$$



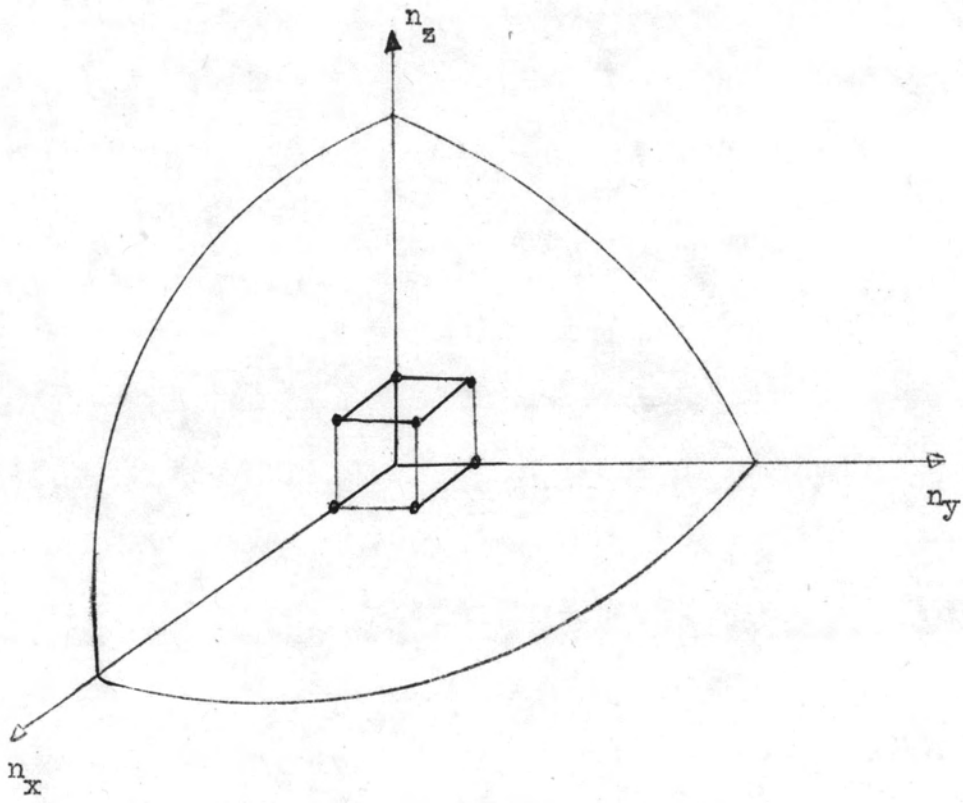
จำกัดค่าที่โคออร์ดิเนตบวกเท่านั้น ดังนั้นเราอาจคำนวณหนึ่งในแปดของ
ปริมาตรทรงกลมที่มีรัศมี $\left(\frac{2m^*L^2E}{\hbar^2\pi^2}\right)^{1/2}$ จะได้

$$\begin{aligned} g(E) &= \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2m^*L^2E}{\hbar^2\pi^2}\right)^{3/2} \\ &= \frac{\Omega}{6\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{3/2} \\ \text{เมื่อ } \Omega &= L^3 \end{aligned}$$

คือฟเฟอร์มิอิก $g(E)$ เทียบกับ E จะได้ความหนาแน่นของสถานะ

$$N(E) = \frac{\Omega}{4\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$$

ตามกฎการกีดกันของเพาลี แต่ละสถานะ มีอิเล็กตรอนอยู่ได้ 2 ตัวที่มี



รูปที่ 1.3 จุดต่าง ๆ แทนสถานะของอนุภาคตัวหนึ่ง
ในกล่อง 3 มิติ บนแกน n_x , n_y และ n_z

การหมุนต่างกัน ดังนั้นจึงคงสมการข้างบนด้วยสอง จะได้ความหนาแน่น
ของสถานะเป็น

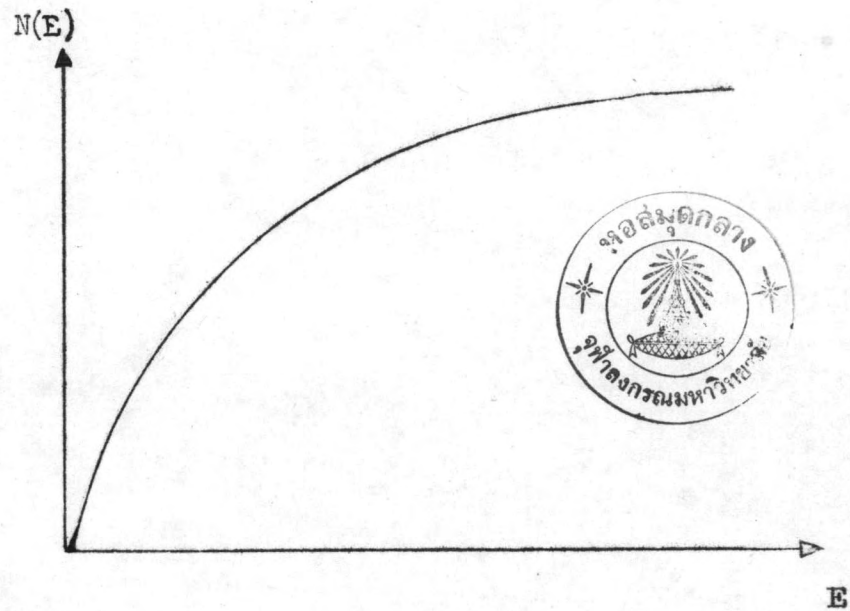
$$N(E) = \frac{\Omega}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad (1.8)$$

สมการนี้แสดงให้เห็นว่า $N(E)$ เป็นปฏิภาคโดยตรงกับกรณที่สองของ E
ซึ่งหมายถึง $N(E)$ เป็นรูปพาราโบลา (Parabolic Shape) ดังแสดง
ในรูปที่ 1.4

จะเห็นได้ว่าวิธีดำเนินการหาความหนาแน่นของสถานะนั้น เราเริ่ม
ค้นหาค่าสมการโซร์กินเยอร์ (1.4) เพื่อคำนวณหาคลื่นฟังก์ชัน กับพลังงาน
โดยใช้นิยาม (1.2) ผลที่ได้ก็คือ ความหนาแน่นของสถานะ ในระบบของ
สารเชิงผลึก สำหรับการหาความหนาแน่นของสถานะที่ไม่เป็นระเบียบนั้นเรา
จะใช้วิธีของสารเชิงผลึกไม่ได้ เนื่องจากสารที่ไม่เป็นระเบียบมีโครงสร้าง
เกี่ยว แต่ทว่ามีได้หลายสถานะ ดังนั้นจึงต้องคิดค่าเฉลี่ยทุก ๆ รูปลักษณะ
(Configuration) ของระบบ เพื่อความเข้าใจ เราจะศึกษาสถานะ
ของระบบที่ไม่เป็นระเบียบโดยอาศัยวิธี ซึ่งแบบฉบับคือ กิ่งแบบฉบับผสมกิ่ง
ควอนตัม วิธีนี้บางครั้งเรียกว่า วิธีของโทมัสกับเฟอร์มี¹⁵ (Thomas-
Fermi Method)

15

E.O. Kane, "Thomas-Fermi Approach to Impure Semiconductor
Band Structure", Physical Review, 131, (1963) 79.



รูปที่ 1.4 ความหนาแน่นของสถานะ เป็นฟังก์ชันของพลังงาน
ในระบบอิเล็กตรอนอิสระ

005095

1.3 ความหนาแน่นของสถานะในระบบที่ไม่เป็นระเบียบโดยวิธีกึ่งแบบฉบับ

(The Density of States of Disordered System by Semiclassical Method)

ในตอนนี้ เราจะกล่าวถึงฮามิลโทเนียน (Hamiltonian) ในระบบที่ไม่เป็นระเบียบ และจะพิจารณาหาความหนาแน่นของสถานะกึ่งคำนวณที่มีปริมาณอนุพัทธ์สูง โดยใช้วิธีกึ่งแบบฉบับหรือ วิธีโทมัส - เฟอร์มี¹⁶ พลังงานทั้งหมดหรือฮามิลโทเนียนทั้งในระบบไม่เป็นระเบียบ มีสมการดังรูป

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + \sum_j V(\underline{r}-\underline{r}_j) \quad (1.9)$$

เมื่อ $V(\underline{r}-\underline{r}_j)$ คือ ศักย์ของไอออนเดี่ยวตามตำแหน่ง \underline{r}_j
 V_0 คือ ค่าคงที่ (ซึ่งอาจเลือกเป็นศักย์รบกวนเฉลี่ยเท่ากับศูนย์)
 m^* คือ มวลยังผล

ในวิทยานิพนธ์นี้ เราจะพิจารณาศักย์คูลอมบ์แบบกำบัง (Screened Coulomb Potential) ซึ่งอาจเขียนในเทอมไอออนเดี่ยวโดยมีศักย์ดังรูป

$$V(\underline{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon_d r} \exp(-\Lambda r) \quad (1.10)$$

เมื่อ ϵ_d คือค่าคงที่ของวัสดุฉนวน (Dielectric Constant)
 Λ คือส่วนกลับแห่งความยาวกำบัง (Reciprocal Screening Length)

ความสัมพันธ์ระหว่าง Λ กับค่าเฉลี่ยความหนาแน่นของสสาร ตามแบบ

จำลองโทมัส - เฟอร์มี มีรูปดังนี้คือ

$$\Lambda = 2 \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/6} \rho^{1/6} a_0^{*-1/2} \quad (1.11)$$

เมื่อ

$$a_0^* = \frac{\epsilon_d \hbar^2}{m e^2}$$

ก่อนที่จะกล่าวถึงปัญหาความหนาแน่นของสถานะ ระบบที่ไม่เป็นระเบียบ หาโดยวิธีการรวมเส้นทางเราจะต้องเข้าใจวิธีหาโดยการประมาณค่าโทมัส - เฟอร์มี เสียก่อน ที่ประยุกต์จากความรู้เบื้องต้นในการประมาณค่าอิเล็กตรอนอิสระ ซึ่งคล้ายกับแบบฉบับที่เมื่อค่าไม่คงที่ โดยกำหนดว่าศักย์เป็นฟังก์ชันที่แปรผันอย่างช้า ๆ (Slowly Varying Function) ตามตำแหน่งของ \underline{r} ซึ่งแทนด้วยสัญลักษณ์ $V(\underline{r})$ คุณสมบัติของวิธีนี้ก็คือ พลังงานจลน์ที่จุด \underline{r} จะมีค่าเท่ากับ $E - V(\underline{r})$ เมื่อ E เป็นพลังงานทั้งหมด เช่น พลังงานจลน์ที่ใกล้เคียงบริเวณแถบการนำ ถูกกระทบโดยศักย์ฟลักชูเอชัน (Fluctuation) จากสูตร (1.8) กรณีอิเล็กตรอนอิสระ และ สมมุติฐานข้างบน อาจเขียนความหนาแน่นของสถานะ ในรูปนี้ คือ -

$$N(E) = \frac{(2\pi^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^2} \int \sqrt{E - V(\underline{r})} d\Omega \quad (1.12)$$

เมื่อคิดอินทิกรัลตลอดทั้งปริมาตร Ω ของระบบ และ อินทิกรัลมีค่าเป็นศูนย์ ,
 ที่ $V(\underline{r})$ มากกว่า E ดังนั้นการหาผลรวมตลอดทั้งปริมาตร โดยคิดค่า
 เฉลี่ยทุก ๆ รูปลักษณะ (configuration) ที่ป็นอสุหิ เราจะได้

$$N(E) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^E dV \sqrt{E-V(\underline{r})} F(V) \quad (1.13)$$

เมื่อ $F(V)$ เป็นฟังก์ชันการแจกแจงของพลังงานศักย์ โดยนิยามว่า

$$F(V) = \lim_{m \rightarrow \infty} \int_{\rho\Omega} \delta\{V+V_0 - \sum V(\underline{r}_j)\} \frac{d\underline{r}_1 d\underline{r}_2 \dots \dots \dots d\underline{r}_m}{\Omega^m} \quad (1.14)$$

เมื่อ ρ เป็นค่าเฉลี่ยของความหนาแน่นอสุหิ
 โดยการใช้เอกลักษณ์ (Identity) ของเดลตาฟังก์ชัน (Delta Function)
 ในรูปของอนุกรมฟูเรียร์ (Fourier Series) คือ

$$\delta\{V+V_0 - \sum_{j=1}^m V(\underline{r}_j)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \exp\{i\alpha[V+V_0 - \sum_{j=1}^m V(\underline{r}_j)]\} \quad (1.15)$$

แทนสมการ (1.15) ลงในสมการ (1.14) เราจะได้อา

$$F(V) = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{\rho\Omega} d\alpha \exp\{i\alpha[V+V_0 - \sum_{j=1}^m V(\underline{r}_j)]\} \times \frac{d\underline{r}_1 d\underline{r}_2 \dots \dots \dots d\underline{r}_m}{\Omega^m}$$

$$F(V) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha P(\alpha) \exp \{ i(V + V_0)\alpha \} \quad (1.16)$$

เมื่อ

$$P(\alpha) = \left[\int \frac{d^m r}{\Omega^m} \exp \left\{ -i \sum_j^m V(r_j) \alpha \right\} \right]^m$$

$$= \left[1 + \frac{f(\alpha)}{\Omega} \right]^m \quad (1.17)$$

$$f(\alpha) = \int d r [\exp(-i V(r) \alpha) - 1] \quad (1.18)$$

โดยการใส่ $\lim_{\Omega \rightarrow \infty} \left[1 + \frac{f(\alpha)}{\Omega} \right]^{\rho \Omega} = \exp[f(\alpha) \rho]$ ในสมการ (1.17) จะได

$$F(V) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \exp \{ i\alpha(V + V_0) + \rho \int [\exp(-i\alpha V(r)) - 1] d\underline{r} \} \quad (1.19)$$

เราอาจหาค่าอินทิกรัลในสมการ (1.19) ที่ลิมิต ρ มีค่ามากโดยวิธีการหาค่าเฟสคงที่ (Method of Stationary Phase) ทั้งนี้คือ ตั้งสมการ

$$\Psi = i\alpha(V + V_0) + \rho \int [\exp(-i\alpha V(\underline{r})) - 1] d\underline{r} \quad (1.20)$$

ดิฟเฟอเรนเชียลสมการ (1.20) เทียบกับ α จะได้

$$\frac{d\Psi}{d\alpha} = i(V + V_0) - i\rho \int V(\underline{r}) \exp\{-i\alpha V(\underline{r})\} d\underline{r} \quad (1.21)$$

ดิฟเฟอเรนเชียลสมการ (1.21) เทียบกับ α จะได้

$$\frac{d^2\Psi}{d\alpha^2} = -\rho \int V^2(\underline{r}) \exp\{-i\alpha V(\underline{r})\} d\underline{r} \quad (1.22)$$

ถ้า α เป็นค่าของ $\frac{d\Psi_i}{d\alpha} = 0$

$$\begin{aligned} \Psi_i &= \Psi(\alpha_i) \\ \text{และ } \Psi_i'' &= \left(\frac{d^2\Psi}{d\alpha^2} \right)_{\alpha_i} \end{aligned}$$

วิธีการหาค่าเฟสคงที่อาจหาได้ง่าย โดยคิด α มีค่าน้อย และกระจายเอกซ์โปเนนต์ กำหนด α ได้ ดังนี้คือ

$$\begin{aligned} F(V) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \exp(\Psi) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \exp\left[\Psi(\alpha_i) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\Psi}{d\alpha^2} \right)_{\alpha_i} (\Delta\alpha)^2 + \dots\right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum \exp[\Psi(\alpha_i)] \sqrt{\frac{-2\pi}{\Psi_i''}} \\ &= \sum_i \frac{\exp[\Psi(\alpha_i)]}{\sqrt{-2\pi\Psi_i''}} \quad (1.23) \end{aligned}$$

จากสมการ (1.20) โดยให้ α มีค่าน้อย เราอาจกระจายเอกซ์โปเนนต์กำลัง α ได้ ดังนี้คือ.-

$$\begin{aligned}\Psi_i &= i\alpha(v + v_0) - i\alpha\rho \int v d\underline{r} - \rho \int \frac{\alpha^2 v^2}{2} d\underline{r} + \dots \\ &= i\alpha v - \rho \int \frac{\alpha^2 v^2}{2} d\underline{r} + \dots \quad (1.24)\end{aligned}$$

$$\text{โดยที่ } v_0 = \rho \int v(\underline{r}) d\underline{r}$$

ดิฟเฟอเรนเชียล สมการ (1.24) เทียบกับ α และให้ผลที่ได้เท่ากับศูนย์ เราจะได้ว่า

$$\begin{aligned}\frac{d\Psi_i}{d\alpha} &= i v(\underline{r}) - i\rho \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-i\alpha)^m}{m!} \int v^{m+1}(\underline{r}) d\underline{r} \\ &= 0 \quad (1.25)\end{aligned}$$

จากสมการ (1.25) หากนำ $v(\underline{r})$ ได้และนำไปแทนลงในสมการ (1.24) จะได้

$$\Psi_i = -\rho \sum_{m=2}^{\infty} \frac{(-i\alpha)^m (m-1)}{m!} \int v^m(\underline{r}) d\underline{r} \quad (1.26)$$

ดิฟเฟอเรนเชียลสมการ (1.24) เทียบกับ α สองครั้ง จะได้

$$\frac{d^2\Psi}{d\alpha^2} = -\rho \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i\alpha)^m}{m!} \int v^{m+2}(\underline{r}) d\underline{r} \quad (1.27)$$

การกระจายอนุกรมของ α ในสมการ (1.25) โดยคิดแก้อันดับหนึ่งของ α จะหา α ในเทอมของศักย์ $v(\underline{r})$ ได้ดังสมการ

$$\alpha = \frac{i v(\underline{r})}{\rho \int v^2(\underline{r}) d\underline{r}} \quad (1.28)$$

แทนสมการ (1.28) ลงในสมการ (1.26) ผลที่ได้คือ

$$\begin{aligned} \Psi_i = & -\rho \left[\frac{v^2(\underline{r})}{2\rho^2 \int v^2(\underline{r}) d\underline{r}} - \frac{2v^3(\underline{r}) \int v^3(\underline{r}) d\underline{r}}{6\rho^3 \left(\int v^2(\underline{r}) d\underline{r} \right)^3} \right. \\ & + \frac{v^4(\underline{r})}{\rho^4} \left(-\frac{3}{24} \frac{\int v^4(\underline{r}) d\underline{r}}{\left(\int v^2(\underline{r}) d\underline{r} \right)^4} + \frac{\left(\int v^3(\underline{r}) d\underline{r} \right)^2}{8 \left(\int v^2(\underline{r}) d\underline{r} \right)^5} \right) \\ & + \dots \dots \dots \left. \right] \quad (1.29) \end{aligned}$$

$$\text{และ } \Psi_i'' = -\rho \int v^2(\underline{r}) d\underline{r} \quad (1.30)$$

เราอาจหาศักย์คูลอมบ์แบบก้ำกึ่ง ใน 3 มิติได้ ดังนั้นก็ โดยใส่สมการ (1.10) จะได้

$$\begin{aligned} \int v^2(\underline{r}) d\underline{r} &= \frac{e^4}{\epsilon_d} \int \exp(-2Ar) r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi \\ &= \frac{e^4}{\epsilon_d^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi -d\cos\theta \int_0^\infty \exp(-2Ar) r^2 dr \\ &= \frac{2\pi e^4}{\Delta \epsilon_d^2} \quad (1.31) \end{aligned}$$

แทนเฉพาะเทอมแรกจากสมการ (1.29) และสมการ (1.30) ลงในสมการ (1.23) กับใช้ผลของสมการ (1.31)

จะโค่งฟังก์ชันการกระจาย ดังนี้คือ.-

$$F(V) = \frac{\sum \exp[-\rho[V^2/2 - \rho^2 \int V^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r}]]}{(2\pi\rho)^{3/2} (2\pi e^4/\epsilon_d^2 \Lambda)^{1/2}}$$

$$= \frac{\exp(-V^2/\eta^2)}{\sqrt{\pi}^{1/2} \eta} \quad (1.32)$$

$$\text{เมื่อ } \eta = \frac{e^2}{\epsilon_d} (4\pi\rho/\Lambda)^{1/2} \quad (1.33)$$

แทนสมการ (1.32) ลงในสมการ (1.13) จะได้ความหนาแน่นของสถานะ โดยวิธีแบบกึ่งฉบับคือ

$$N(E) = \frac{\sqrt{2m^*}^{3/2} \Omega}{\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^E (E-V)^{1/2} \frac{\exp(-V^2/\eta^2)}{\sqrt{\pi}^{1/2} \eta} dV$$

$$= \frac{(2m^*)^{3/2} \Omega}{2\pi^2 \hbar^3 \eta^{1/2}} y(E/\eta) \quad (1.34)$$

$$\text{เมื่อ } y(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}^{1/2}} \int_{-\infty}^x (x-\xi)^{1/2} \exp(-\xi^2) d\xi \quad (1.35)$$

$$\text{ในที่นี้ } x = E/\eta$$

เราจะพิจารณาดังกรณีพลังงาน E มีค่ามาก คือ $x \rightarrow \infty$ จะได้ว่า

$$y(x) = \frac{-1/2}{\sqrt{\pi}^{1/2}} x^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2) d\xi$$

$$= \frac{-1/2}{\sqrt{\pi}^{1/2}} x^{1/2} \sqrt{\pi}$$

$$= -x^{1/2} \quad (1.36)$$

แทนสมการ (1.36) ลงในสมการ (1.34) และแทน x ด้วย E/η ดังนั้น ความหนาแน่นของสถานะที่พลังงานสูง ๆ คือ

$$N(E) = c_1 \left(\frac{E}{\eta} \right)^{1/2} \quad (1.37)$$

$$\text{เมื่อ } c_1 = \frac{m^{3/2} \sqrt{2\eta} \Omega}{\sqrt{2} h^3}$$

จากสมการ (1.35) เปลี่ยนตัวแปรโดยให้ $x - \xi = z$ และพิจารณาถึงพลังงานน้อยจะได้

$$\begin{aligned} y(x) &= -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{z=\infty}^{z=0} \sqrt{z} \exp[-(x-z)^2] dz \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \sqrt{z} \exp(-x^2) \exp(2xz - z^2) dz \quad (1.38) \end{aligned}$$

อินทิกรัลทางขวาของสมการ (1.38) อาจหาทำได้โดยใช้สูตร¹⁷ ดังนี้คือ

$$\int_0^{\infty} z^{n-1} \exp(-pz^2 + qz) dz = (2p)^{-n/2} \Gamma(n) \exp\left(\frac{q^2}{8p^2}\right) D_{-n}\left(-\frac{q}{\sqrt{2p}}\right) \quad (1.39)$$

17

I.S. Gradshteyn, and I.M. Ryzhik, "Table of Integrals, Series and Products", Academic Press, (1965).

โดยมีเงื่อนไขว่า $\operatorname{Re} p > 0, \operatorname{Re} q > -1$

เมื่อ $D_{-n}\left(\frac{-q}{\sqrt{2p}}\right)$ คือ พาราโบลิกซิลินเดอร์ฟังก์ชัน (Parabolic Cylinder Function)

$\Gamma(n)$ คือ แกมมาฟังก์ชัน (Gamma Function)

เราอาจเขียนสมการ (1.38) ในเทอมของ $D_{-n}\left(\frac{-q}{\sqrt{2p}}\right)$ ได้ดังนี้คือ

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) \left\{ (2)^{-3/4} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) D_{-3/2}(-\sqrt{2}x) \right\} \quad (1.40)$$

พฤติกรรมอะซิมป์โทติก (Asymptotic Behavior) ของพาราโบลิกซิลินเดอร์ฟังก์ชัน คือ.-

$$D_n\left(-\frac{q}{\sqrt{2p}}\right) = \exp\left[-\left(\frac{-q}{2p}\right)^2/4\right] \left(-\frac{q}{\sqrt{2p}}\right)^n \left[1 - \frac{n(n-1)}{2\left(\frac{-q}{\sqrt{2p}}\right)^2} + \dots\right]$$

$$\text{โดยที่ } \left|\arg\left(-\frac{q}{\sqrt{2p}}\right)\right| < \frac{3}{4}\pi, \left|\frac{q}{\sqrt{2p}}\right| \gg 1, \left|\frac{q}{\sqrt{2p}}\right| \gg n \quad (1.41)$$

ใช้พฤติกรรมอะซิมป์โทติก สมการ (1.41) ลงในสมการ (1.40) จะได้ว่า

$$\begin{aligned} y(x) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) \left[\sqrt{\pi} \frac{1}{x^{3/2} 2^{5/2}} \right] \\ &= \frac{\exp(-x^2)}{x^{3/2} 2^{5/2}} \end{aligned} \quad (1.42)$$

โดยแทน x ด้วย E/η ลงในสมการ (1.42) และนำผลที่ได้ไปแทนลงในสมการ (1.34) จะได้อัตราความหนาแน่นของสถานะที่พลังงานค่า E ดังนี้คือ.

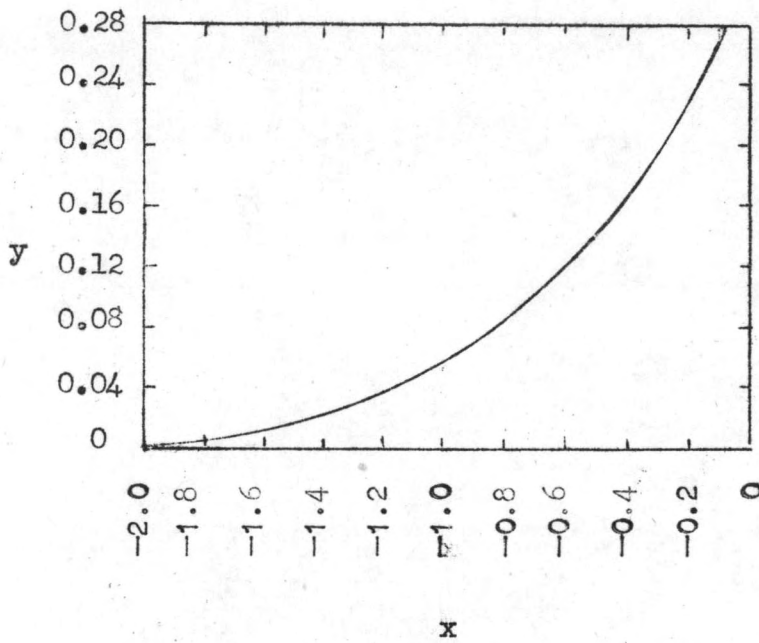
$$N(E) = c_2 \left(\frac{|E|}{\eta} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{E^2}{\eta^2} \right) \quad (1.43)$$

$$\text{เมื่อ } c_2 = \frac{m^{3/2} \eta^{1/2} \Omega}{4\pi^2 \hbar^3}$$

1.4 วิธีดำเนินการวิจัย

ในวิทยานิพนธ์นี้ เรามุ่งศึกษาการหาความหนาแน่นของสถานะที่ไม่เป็นระเบียบของกึ่งตัวนำที่มีตัวต่อสุทธิตาม โดยเฉพาะความหนาแน่นของอิเล็กตรอนในบริเวณหาง อาศัยเทคนิคต่าง ๆ กันที่ใช้ในการคำนวณอะซิมป์โทติก ความหนาแน่นของสถานะ โดยนำไปประยุกต์เข้ากับศักย์แบบกุ่มลอมบีที่ถูกก้ำกั้ว สังกัที่ใช้ทั้งในระบบที่เป็นระเบียบและระบบที่ไม่เป็นระเบียบ ก็คือ ความหนาแน่นของสถานะ ซึ่งได้นำไปใช้ในการหาความหนาแน่นของสถานะในสารเชิงผลึก (Crystalline Solid) ดังได้แสดงให้เห็นในตอน 1.2 แล้ว โดยวิธีการประมาณความมวลยังผล (Effective Mass Approximation) และในบทนี้เองตอน 1.3 ได้แสดงวิธีหาความหนาแน่นของสถานะในกึ่งตัวนำที่มีปริมาณของสุทธิสูง โดยวิธีกึ่งแบบฉบับหรือของเคน (Kane) เป็นตัวอย่างที่ใช้อย่างถึง ในการคำนวณหาความหนาแน่นของสถานะโดยวิธีการรวมเส้นทาง

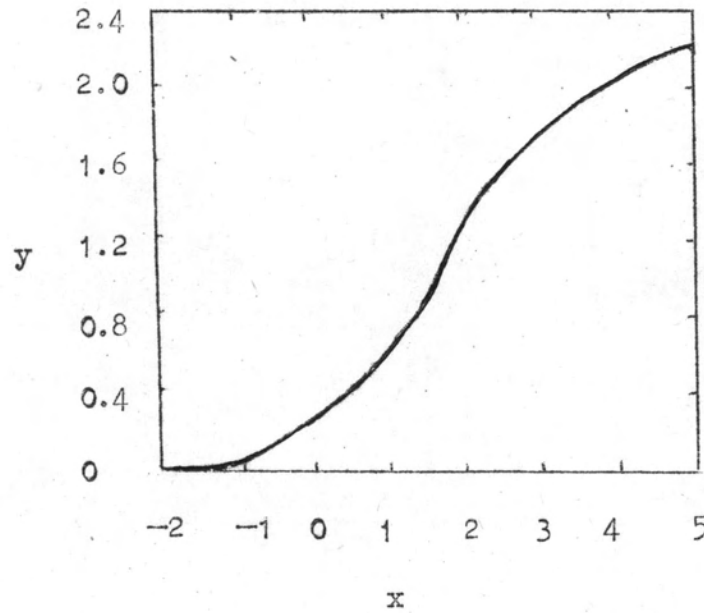
ในบทที่ 2 เราจะเสนอทฤษฎีการรวมเส้นทางของฟายน์แมน (Feynman Path Integral) ซึ่งเป็นพื้นฐานทางคณิตศาสตร์ที่จะต้องนำไป



รูปที่ 1.5 กราฟที่เขียนจากฟังก์ชัน

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^x (x-\xi)^{1/2} \exp(-\xi^2) d\xi$$

ความหนาแน่นของสถานะของโหนด-เฟอร์มิ ที่พลังงานค่า



รูปที่ 1.6 กราฟที่เขียนจากฟังก์ชัน

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^x (x-\xi)^{1/2} \exp(-\xi)^2 d\xi$$

ความหนาแน่นของสถานะของโหนด-เฟอร์มิ

ที่ พลังงานต่ำ - พลังงานสูง

ใช้ในการวิจัยบัญญัติโดยฟายน์แมนและฮิบส์¹⁸ (Feynman and Hibbs) ในบทนี้จะแสดงวิธีสร้างการรวมเส้นทางของฟายน์แมน กับวิธีเขียนตัวแพร่กระจาย (Propagator) ในรูปของการรวมเส้นทาง โดยนำไปประยุกต์เข้ากับฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์ (Harmonic Oscillator)

ในบทที่ 3 เป็นบทที่เสนอแบบจำลองเอควาร์คส์ ที่กล่าวถึง อิเล็กตรอนตัวหนึ่งเคลื่อนที่อยู่ที่อยู่ในระบบของตัวกระตุ้นที่มีความหนาแน่นสูงสักก้อน และ อยู่กันอย่างไม่เป็นระเบียบ ในการคำนวณนี้ เราใช้เทคนิคการประมาณค่าเฉลี่ยของตัวแพร่กระจาย และ แสดงวิธีหาความหนาแน่นที่เขียนในเทอมของตัวแพร่กระจาย แล้วนำเอาวิธีการรวมเส้นทางในรูปของการแพร่กระจาย ไปพิจารณาในการคำนวณหาความหนาแน่นของสถานะโดยวิธีไม่รบกวน¹⁹ (Nonperturbative Method)

18

R.P. Feynman, and A.R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals", New York : Mc Graw-Hill, (1965).

19

R. Jones, "One Particle Green Function for a Completely Disordered Systems.", Journal of Physics C, Solid State Physics, 2 (1969) 1187.

และวิธีรบกวน²⁰ (Perturbative Method) สำหรับรายละเอียดจะกล่าวถึงในบทที่ 3
 ในบทที่ 4 เป็นบทสรุปผล การคำนวณหาความหนาแน่นของสถานะ

- 1) โดยวิธีกึ่งแบบฉบับ
- 2) โดยวิธีไม่รบกวน
- 3) โดยวิธีรบกวน

และข้อเสนอแนะต่าง ๆ ที่จะกล่าวรายละเอียดไว้ในบทนี้