การปรับปรุงวิธีอินทิเกรตตามวิถีสำหรับสารกึ่งตัวนำที่ถูกโดปอย่างหนัก

นายวรากร พิพัฒน์ชลธี

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาฟิสิกส์ ภาควิชาฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2539

ISBN 974-636-430-8

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

I15867396

IMPROVEMENT OF THE PATH-INTEGRAL APPROACH TO HEAVILY DOPED SEMICONDUCTORS

Mr. Varagorn Piputnchonlathee

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science in Physics

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

Academic Year 1996

ISBN 974-636-430-8

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Thesis Title	Improvement of The Path-Integral Approach to Heavily Doped Semiconductors
By	Mr. Varagorn Piputnchonlathee
Department	Physics
Thesis Advisor	Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree

..... Dean of Graduate School

(Professor Supawat Chutivongse, M.D.)

Thesis Committee

..... Chairman

(Associate Professor Wichit Sritrakool, Ph.D.)

..... Thesis Advisor

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

..... Member

(Assistant Professor Kajornyod Yoodee, Ph.D.)

..... Member

(Associate Professor Dusit Kruangam, Ph.D.)

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแผ่นเดียว

วรากร พิพัฒน์ชลชี : การปรับปรุงวิธีอินทิเกรตตามวิถีสำหรับสารกึ่งตัวนำที่ถูกโดปอย่างหนัก (IMPROVEMENT OF THE PATH-INTEGRAL APPROACH TO HEAVILY DOPED SEMICONDUCTORS) อ.ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร. วิรุฬห์ สายคณิต, 70 หน้า. ISBN 974-636-430-8.

เริ่มด้วยการจำลองสารกึ่งตัวนำที่ถูกโดปอย่างหนักให้เป็นเสมือนระบบของอิเล็กตรอนที่เคลื่อนที่ในกลุ่มสารเจือปนที่มีกำลังอ่อนแต่อยู่กันอย่างหนาแน่นจำนวนมาก หรือก็คือศักย์ที่มีการแจกแจงแบบเกาส์-เซียนนั่นเอง โดยนำศักย์ทั้งชนิดเกาส์เซียนและคูลอมบ์ที่ถูกกำบังมาพิจารณา เราใช้วิธีอินทิเกรตตามวิถีที่ปรับปรุงซึ่งใช้วิธีการแปรผันแบบสองพารามิเตอร์ในการหาความหนาแน่นสถานะ จากการประมาณแบบ-สถานะพื้นเต็มที่กับแบบหางส่วนลึก เราจะได้นิพจน์ที่บรรยายความหนาแน่นสถานะในรูปปิด เช่นเดียวกับวิธีหนึ่งพารามิเตอร์และวิธีของฮาลเปอร์รินกับแลกช์ ในการหาค่าพารามิเตอร์หลักการแห่งการแปรผันสองหลักการได้ถูกนำมาใช้อธิบาย ทั้งนี้ได้แสดงผลเชิงตัวเลขพร้อมทั้งการเปรียบเทียบกับวิธีอื่นๆ

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่อนิสิต .....
สาขาวิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....
ปีการศึกษา 2539 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแผ่นเดียว

C725845 : MAJOR PHYSICS
KEY WORD: PATH INTEGRALS / HEAVILY DOPED SEMICONDUCTORS / DENSITY OF STATES
VARAGORN PIPUTNCHONLATHEE : IMPROVEMENT OF THE PATH-INTEGRAL APPROACH TO HEAVILY DOPED SEMICONDUCTORS. THESIS ADVISOR : PROFESSOR VIRUTH SA-YAKANIT, F.D. 70pp. ISBN 974-636-430-8

The heavily doped semiconductor is modelled as a system of an electron moving in a large number of dense and weak impurities, or in a Gaussian distributed potential. Both Gaussian and screened Coulomb potentials are considered. The improved path-integral approach, using the two-parameter variational method, is applied to find the density of states. The full-ground-state and deep-tail approximations are used to obtain the expressions for the density of states in closed forms, similar to those obtained by the one-parameter theory and Halperin and Lax' method. To evaluate the parameter values, two variational principles are taking into account. Numerical results are presented and compared with those of others.

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่อนิสิต .....

สาขาวิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....

ปีการศึกษา 2539 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ACKNOWLEDGEMENTS

The author would like to express his deep gratitude to his advisor Professor Virulh Sa-yakanit for his valuable advice, discussion and help to this thesis. Thanks are also due to Associate Professor Jong-orn Berananda for warm kindness. He is greatly indebted to Associated Professor Wichit Sritakool for his advice and computer preparation.

He is grateful to Dr. Pornthep Nisamaneephong and Dr. Chaisingh Poo-rakkiat for their suggestions. Special thanks go to Miss Patcharee Pratumpong for her careful typing and help in numerical solving. Thanks also go to Miss Sivinee Sawatdiaree, Mr. Kobchai Tayanasanti, Mr. Jessada Sukpitak, Mr. Porncharoen Palotaidamkerng and Mr. Udom Robkob for their discussions.

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

TABLE OF CONTENTS

PAGE

ABSTRACT IN THAI.....iv

ABSTRACT IN ENGLISH.....v

ACKNOWLEDGEMENTS.....vi

LIST OF FIGURES.....ix

LIST OF TABLES.....x

CHAPTER I INTRODUCTION.....1

ABOUT THE PROBLEM.....1

DEVELOPMENT OF THE THEORY.....3

OUR PURPOSES AND METHODS.....5

CHAPTER II A HEAVILY DOPED SEMICONDUCTOR MODEL.....7

A MODELLED HAMILTONIAN.....7

A PATH-INTEGRAL FORMALISM.....9

THE DENSITY OF STATES.....14

CHAPTER III A VARIATIONAL METHOD.....17

OVERVIEW.....17

CONSTRUCTING A TRIAL ACTION.....18

THE TRIAL PROPAGATOR.....22

CHAPTER IV THE APPROXIMATE DENSITY OF STATES.....27

THE APPROXIMATE PROPAGATOR.....27

DETAILED CALCULATIONS.....31

EVALUATING THE APPROXIMATE DENSITY OF STATES.....35

CHAPTER V THE VARIATIONAL EQUATIONS.....41

THE VARIATIONAL PRINCIPLES.....41

DERIVING THE VARIATIONAL EQUATIONS.....42

NUMERICAL RESULTS.....50

CHAPTER VI DISCUSSIONS AND CONCLUSIONS.....59

REFERENCES.....66

CURRICULUM VITAE.....70

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

LIST OF FIGURES

PAGE

FIGURE 6.1 The logarithm of the density of states (Log DOS) versus η when ξ_Q'=0.5. The *one-parameter* and *two-parameter* are in the full-ground-state approximation.....61

FIGURE 6.2 The logarithm of the density of states (Log DOS) versus η when ξ_Q'=0.5. The *one-parameter* and *two-parameter* are in the deep-tail approximation.....62

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

LIST OF TABLES

PAGE

TABLE 5.1 The density of states for the screened Coulomb potential using the one-parameter theory by maximizing the density of states and by maximizing the exponent when ξ_Q'=50.....51

TABLE 5.2 The density of states for the screened Coulomb potential using the two-parameter theory by maximizing the density of states when ξ_Q'=50.....52

TABLE 5.3 The density of states for the screened Coulomb potential using the one-parameter theory by maximizing the density of states and by maximizing the exponent when ξ_Q'=5.0.....53

TABLE 5.4 The density of states for the screened Coulomb potential using the two-parameter theory by maximizing the density of states when ξ_Q'=5.0.....54

TABLE 5.5 The density of states for the screened Coulomb potential using the one-parameter theory by maximizing the density of states and by maximizing the exponent when ξ_Q'=0.5.....55

TABLE 5.6 The density of states for the screened Coulomb potential using the two-parameter theory by maximizing the density of states when ξ_Q'=0.5.....56

TABLE 5.7 The density of states for the screened Coulomb potential using the one-parameter theory by maximizing the density of states and by maximizing the exponent when ξ_Q'=0.05.....57

TABLE 5.8 The density of states for the screened Coulomb potential using the two-parameter theory by maximizing the density of states when ξ_Q'=0.05.....58

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย