



กลไกการกระเจิงและการขนส่งอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CaZrO₃/SrTiO₃

SCATTERING MECHANISMS AND ELECTRON TRANSPORT IN
CaZrO₃/SrTiO₃ HETEROSTRUCTURE

กิตติภณ สุขกุล

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

กลไกการกระเจิงและการขนส่งอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮทเทอโร $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$



ปริญญานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร

วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์

คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

ปีการศึกษา 2561

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

SCATTERING MECHANISMS AND ELECTRON TRANSPORT IN
 $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ HETEROSTRUCTURE



KITTIPHON SUKKUN

A Thesis Submitted in partial Fulfillment of Requirements
for MASTER OF SCIENCE (Physics)
Faculty of Science Srinakharinwirot University

2018

Copyright of Srinakharinwirot University

ปริญญานิพนธ์
เรื่อง
กลไกการกระเจิงและการขนส่งอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$
ของ
กิตติภณ สุขกุล

ได้รับอนุมัติจากบัณฑิตวิทยาลัยให้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร
ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์
ของมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

..... คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ นายแพทย์ฉัตรชัย เอกปัญญาสกุล)

คณะกรรมการสอบปากเปล่าปริญญานิพนธ์

..... ที่ปรึกษาหลัก	 ประธาน
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.อนุศิษฐ์ ทองน้ำ)	(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.เชษฐา รัตนพันธ์)
	 กรรมการ
	(รองศาสตราจารย์ ดร.สมศักดิ์ พิมาณแพง)
	 กรรมการ
	(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ทรงศักดิ์ พงษ์หิรัญ)

ชื่อเรื่อง	กลไกการกระเจิงและการขนส่งอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$
ผู้วิจัย	กิตติภณ สุขกุล
ปริญญา	วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิต
ปีการศึกษา	2561
อาจารย์ที่ปรึกษา	ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. อนุศิษฐ์ ทองนำ

งานวิจัยนี้ทำการศึกษาเชิงทฤษฎีเกี่ยวกับกลไกการกระเจิงและสมบัติการขนส่งของอิเล็กตรอนแก๊สสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ (CZO/STO) โดยที่มาของอิเล็กตรอนแก๊สสองมิติในระบบเกิดจากการเหนี่ยวนำของความไม่ต่อเนื่องของโพลาริเซชันเนื่องจากความเครียดอัดของชั้นแคลเซียมเซอร์โคเนตและกลไกการให้อิเล็กตรอนจากไอออนบวกที่ผิวรอยต่อและช่องว่างอะตอมออกซิเจนในชั้นสตรอนเทียมไททาเนต ข้อมูลสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนที่แปรผันกับอุณหภูมิจากโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ถูกนำมาวิเคราะห์และสร้างแบบจำลองกลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอน โดยสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนถูกคำนวณภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงแบบต่างๆ ได้แก่ สารเจือปนหลัง ความไม่เรียบของผิวรอยต่อ อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน และโฟนอนเชิงแสง แนวขนาน จากการศึกษาพบว่าสภาพเคลื่อนที่ได้รวมตามหลักของแมทไธเซนให้ผลสอดคล้องกับผลการทดลองเป็นอย่างดีในช่วงอุณหภูมิ 2 ถึง 295 เคลวิน และที่ความหนาของชั้นฟิล์มแคลเซียมเซอร์โคเนตต่างๆ การวิเคราะห์กลไกการกระเจิงพบว่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนที่อุณหภูมิต่ำเกิดจากอิทธิพลการกระเจิงของสารเจือปนหลังและความไม่เรียบของผิวรอยต่อ และยังพบการเปลี่ยนกลไกการกระเจิงจากอิทธิพลของสารเจือปนหลังไปเป็นความไม่เรียบของผิวรอยต่อเมื่อความหนาแน่นอิเล็กตรอนสูงขึ้น สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนที่อุณหภูมิ 10 ถึง 150 เคลวิน พบว่าการกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนเป็นกลไกการกระเจิงหลัก ขณะที่การกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอนเชิงแสงแนวขนานเป็นกลไกการกระเจิงหลักที่อุณหภูมิต่ำ

คำสำคัญ : อิเล็กตรอนแก๊สสองมิติ, สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน, โครงสร้างเฮเทอโร $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$, กลไกการกระเจิง

Title	SCATTERING MECHANISMS AND ELECTRON TRANSPORT IN CaZrO ₃ /SrTiO ₃ HETEROSTRUCTURE
Author	KITTIPHON SUKKUN
Degree	MASTER OF SCIENCE
Academic Year	2018
Thesis Advisor	Assistant Professor ANUSIT THONGNUM

In this study, scattering mechanisms and transport properties of a two-dimensional electron gas (2DEG) in CaZrO₃/SrTiO₃ (CZO/STO) heterostructures were theoretically investigated. The origin of 2DEG in the CZO/STO system mainly comes from a polarization discontinuity due to compressive strain and redox reactions from interface charge donors and oxygen vacancies. The temperature dependent electron mobility data from the CZO/STO heterostructures were analyzed and modeled various electron scattering mechanisms. The electron mobilities were calculated based on the scattering potential models as background impurities, interface roughness, electron-electron and polaron-LO phonon. It was found that the total mobility based on Matthiessen's rule provided good quantitative agreement with experimental data over entire temperature (T=2-295K) and CZO-thicknesses ranges. In terms of the consideration of scattering mechanisms, and low-temperature mobility was limited by background impurities and interface roughness scattering. A crossover between background impurity scattering and interfacial roughness scattering was observed with increasing carrier density. At 10K < T < 150K, electron-electron scattering was the main scattering mechanism, while, electron-electron and polaron-LO phonon scatterings were dominant at room temperature.

Keyword : two-dimensional electron gas, electron mobility, CaZrO₃/SrTiO₃ heterostructure, scattering mechanisms

กิตติกรรมประกาศ

ปริญญานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลงได้ด้วยดีอันเนื่องมาจากความช่วยเหลือของ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.อนุศิษฐ์ ทองนำ อาจารย์ที่ปรึกษาปริญญานิพนธ์ที่ให้คำปรึกษา คอยติดตามและข้อเสนอแนะเพิ่มเติม ตลอดจนช่วยแก้ไขข้อบกพร่องและช่วยเหลือต่าง ๆ จนทำให้ปริญญานิพนธ์ฉบับนี้มีความสมบูรณ์ยิ่งขึ้น ผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณด้วยความเคารพอย่างสูง

ขอกราบขอบพระคุณ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เจริญฐา รัตนพันธ์ ประธานกรรมการ รองศาสตราจารย์ ดร.สมศักดิ์ พิมานแพง และ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ทรงศักดิ์ พงษ์วิทย์ คณะกรรมการที่ให้ความอนุเคราะห์ในการสอบปากเปล่าปริญญานิพนธ์รวมทั้งให้คำแนะนำและแก้ไขเพิ่มเติม ทำให้ปริญญานิพนธ์ฉบับนี้เสร็จสิ้นสมบูรณ์

ขอขอบคุณคณาจารย์ภาควิชาฟิสิกส์ทุกท่านที่ให้คำปรึกษาตลอดระยะเวลาของการศึกษา จนผู้วิจัยสามารถนำความรู้มาใช้ในการทำปริญญานิพนธ์จนสำเร็จ

ขอขอบคุณสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.) มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ และศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ (ThEP) ที่สนับสนุนทุนวิจัย

สุดท้ายนี้ ผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณบิดา มารดา และครอบครัวทุกคน ที่สนับสนุนการศึกษาของผู้วิจัยตลอดมา

กิตติภณ สุขกุล

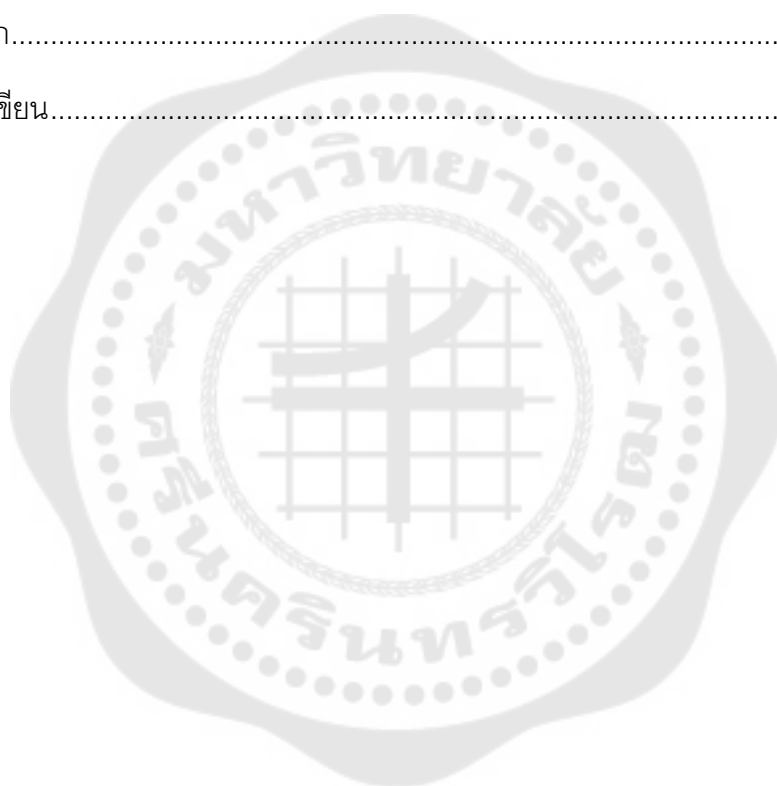
สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ฉ
สารบัญ	ช
สารบัญตาราง.....	ญ
สารบัญภาพประกอบ.....	ฎ
บทที่ 1 บทนำ.....	1
ภูมิหลัง.....	1
ความมุ่งหมายของงานวิจัย	4
ความสำคัญของงานวิจัย.....	4
ขอบเขตของงานวิจัย.....	5
ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากงานวิจัย	5
บทที่ 2 เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	6
โครงสร้างผลึกและโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของ STO และ CZO	6
โครงสร้างเฮเทอโรสตรักเจอร์กึ่งตัวนำ	11
พลังงานของอิเล็กทรอนิกส์.....	12
พลังงานศักย์กักกันและฟังก์ชันคลื่นในโครงสร้างเฮเทอโร	13
อิเล็กทรอนิกส์สองมิติในโครงสร้างเฮเทอโรของระบบสารประกอบออกไซด์โลหะ ทราบชีชัน	16
ระบบ $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ (LAO/STO)	16
ระบบ $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3/\text{SrTiO}_3$ (GAO/STO).....	17
ระบบ $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ (CZO/STO).....	17

สมบัติทางไฟฟ้า	18
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน	19
สมการการขนส่งของโบลซมานต์	19
อัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอน	20
อัตราการกระเจิงของระบบอิเล็กตรอนสองมิติ	23
บทที่ 3 กลไกการกระเจิงและสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน	27
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของสารเจือปนหลัง	29
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ ..	31
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน	34
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน	39
บทที่ 4 ผลการวิจัย	43
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO	43
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลสารเจือปนหลัง	45
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลความไม่เรียบของผิวรอยต่อ	46
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน	48
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน	50
การเปรียบเทียบผลทางทฤษฎีและผลการทดลอง	51
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงของสารเจือ ..	
ปนหลังและพลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ	52
กลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนที่อุณหภูมิและความหนาของชั้น CZO ต่างๆ	59
ความสมเหตุสมผลของตัวแปรที่เหมาะสมที่ได้จากงานวิจัยชิ้นนี้เมื่อเทียบกับงานวิจัยใน ..	
อดีตที่ศึกษาในโครงสร้างใกล้เคียงกัน	63
บทที่ 5 สรุปผลการวิจัย	66

ผลการวิจัย	66
กลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนสองมิติ	66
ความสัมพันธ์ของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติ (μ) และอุณหภูมิ (T)	67
ความสัมพันธ์ของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติ (μ) และความหนาแน่น อิเล็กตรอน (n_g)	68
บรรณานุกรม	70
ภาคผนวก.....	75
ประวัติผู้เขียน.....	84



สารบัญตาราง

	หน้า
ตาราง 1 พารามิเตอร์ของสตรอนเทียมไททาเนต (STO).....	9
ตาราง 2 พารามิเตอร์ของแคลเซียมเซอร์โคเนต (CZO)	11
ตาราง 3 ค่าตัวแปรคงตัวของระบบของโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO.....	44
ตาราง 4 ค่าตัวแปรที่เหมาะสม (fitting parameters) ที่ใช้ในการคำนวณเชิงตัวเลข.....	52
ตาราง 5 ค่าตัวแปรที่เหมาะสมสำหรับการคำนวณเชิงตัวเลขสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน ..	62
ตาราง 6 ตัวแปรที่เหมาะสมที่ได้งานวิจัยชิ้นนี้และงานวิจัยในอดีตที่ใช้ในการคำนวณหา สภาพเคลื่อนที่ได้รวมของอิเล็กตรอน	64
ตาราง 7 กลไกการกระเจิงหลักที่ส่งผลต่อสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้าง CZO/STO ที่อุณหภูมิและความหนาของ CZO ต่างๆ	69

สารบัญภาพประกอบ

	หน้า
ภาพประกอบ 1 หน่วยเซลล์ของโครงผลึกแบบเพอร์รอฟสไกต์ STO	7
ภาพประกอบ 2 หน่วยเซลล์ของโครงผลึกแบบเพอร์รอฟสไกต์ CZO	10
ภาพประกอบ 3 บ่อศักย์รูปสามเหลี่ยมและฟังก์ชันคลื่นของฟาง-ฮาร์เวิร์ด	15
ภาพประกอบ 4 บ่อศักย์อนันต์และฟังก์ชันคลื่น	15
ภาพประกอบ 5 เวกเตอร์คลื่นของอิเล็กตรอนในกระบวนการกระเจิงภายใต้อิทธิพลของศักย์การกระเจิงที่ไม่ขึ้นกับเวลา (ก) การเปลี่ยนแปลงโมเมนตัมเนื่องจากการกระเจิงเมื่อ q เวกเตอร์ที่เปลี่ยนไปเนื่องจากการกระเจิง (ข) ผลรวมของโมเมนตัมที่เกิดจากการกระเจิง	23
ภาพประกอบ 6 ผลการทดลองค่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติซึ่งแปรผันกับอุณหภูมิและค่าความหนาของชั้น CZO โครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO	28
ภาพประกอบ 7 แบบจำลองการเกิดช่องว่างอะตอมของออกซิเจน	29
ภาพประกอบ 8 แบบจำลองการเกิดความไม่เรียบของผิวรอยต่อ	32
ภาพประกอบ 9 แบบจำลองการเกิดโพลาไรซอนในผลึกของสารประกอบไฮออนิก	34
ภาพประกอบ 10 แบบจำลองการเกิดอันตรกิริยาระหว่างโพลาไรซอนและโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน	35
ภาพประกอบ 11 แบบจำลองอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนภายในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO	39
ภาพประกอบ 12 กราฟของความสัมพันธ์ระหว่างสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนและความหนาแน่นอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลสารเจือปนหลัง	46
ภาพประกอบ 13 กราฟของความสัมพันธ์ระหว่างสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนและความหนาแน่นอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลความไม่เรียบของผิวรอยต่อ	48
ภาพประกอบ 14 กราฟของความสัมพันธ์ระหว่างสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนและอุณหภูมิภายใต้อิทธิพลโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน	49

ภาพประกอบ 15 กราฟของความสัมพันธ์ระหว่างสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนและอุณหภูมิภายใต้อิทธิพลอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน.....	51
ภาพประกอบ 16 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 8 uc (Y. Chen et al., 2015)	54
ภาพประกอบ 17 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 10 uc (Y. Chen et al., 2015)	55
ภาพประกอบ 18 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 15 uc (Y. Chen et al., 2015)	56
ภาพประกอบ 19 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 18 uc (Y. Chen et al., 2015)	57
ภาพประกอบ 20 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 26 uc (Y. Chen et al., 2015)	58
ภาพประกอบ 21 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 8 uc (Y. Chen et al., 2015).....	59
ภาพประกอบ 22 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 10 uc (Y. Chen et al., 2015).....	60
ภาพประกอบ 23 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 15,18 และ 26 uc (Y. Chen et al., 2015).....	61

บทที่ 1

บทนำ

ภูมิหลัง

การประยุกต์สารกึ่งตัวนำ (semiconductors) เพื่อใช้ในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์มีบทบาทสำคัญอย่างมากต่อการวิจัยพัฒนาทางด้านวัสดุศาสตร์ ฟิสิกส์ และวิศวกรรมศาสตร์ เนื่องจากสารกึ่งตัวนำเป็นหัวใจของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ที่ใช้กันในชีวิตประจำวัน เช่น คอมพิวเตอร์ และสมาร์ทโฟน โดยมีสารกึ่งตัวนำซิลิคอน (silicon; Si) เป็นวัสดุฐานของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ อย่างไรก็ตามสารกึ่งตัวนำซิลิคอนมีข้อจำกัดที่ต้องมีความบริสุทธิ์สูงและต้องอาศัยกระบวนการเจือสารเพื่อเพิ่มสภาพนำไฟฟ้า ปัจจุบันเกิดแนวคิดใหม่ในการพัฒนาวัสดุฐานชั้นสูงเพื่อใช้งานในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ยุคใหม่ โดยสารประกอบออกไซด์โลหะทรานซิชัน (transition metal oxides) จัดเป็นวัสดุชั้นนำของการศึกษาวิจัย โดยเฉพาะอย่างยิ่งสารประกอบสตรอนเทียมไททาเนต (SrTiO_3 ; STO) เป็นวัสดุฐานชนิดใหม่สำหรับอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ชนิดออกไซด์ (oxide electronics) และสตรอนเทียมไททาเนตเป็นตัวอย่างผลึกที่ดีที่สามารถปลูกผลึกร่วมกับสารประกอบชนิดอื่นได้เป็นอย่างดี (J N Eckstein & Bozovic, 1995); (Rijnders & Blank, 2005); (Schlom, Chen, Pan, Schmehl, & Zurbuchen, 2008) นอกจากนั้นสารประกอบออกไซด์โลหะทรานซิชันยังมีสมบัติทางฟิสิกส์เฉพาะตัวที่สามารถแสดงสมบัติต่างๆ ได้ทั้ง ฉนวน ตัวนำ แม่เหล็ก และตัวนำไฟฟ้ายวดยิ่ง ทำให้กลุ่มวิจัยทั่วโลกให้ความสนใจศึกษาและพัฒนากลุ่มสารประกอบออกไซด์โลหะทรานซิชันอย่างจริงจัง

เมื่อกล่าวถึงการพัฒนาสารประกอบออกไซด์โลหะทรานซิชันเพื่อใช้ในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ ในปี ค.ศ. 2004 โอโตโมะและฮวง ได้ทดลองปลูกผลึกระหว่างฉนวนสองชนิด (Ohtomo & Hwang, 2004) โดยปลูกผลึกแลนทานัมอะลูมินา (LaAlO_3 ; LAO) ลงบนวัสดุฐานรองสตรอนเทียมไททาเนต (STO) การปลูกผลึกระหว่างวัสดุต่างชนิดกันในระดับอะตอมสามารถเรียกอีกอย่างหนึ่งว่าโครงสร้างเฮเทอโร (heterostructure) หรือรอยต่อเฮเทอโร (heterojunction) จากการวิเคราะห์สภาพนำไฟฟ้าของรอยต่อเฮเทอโร $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ (LAO/STO) พบว่ารอยต่อสามารถแสดงสมบัติเป็นตัวนำไฟฟ้าได้ หากพิจารณาสารประกอบเดี่ยวทั้ง LAO และ STO ต่างก็เป็นฉนวนซึ่งไม่มีคุณสมบัติในการนำไฟฟ้า อย่างไรก็ตามเมื่อนำวัสดุทั้งสองมาปลูกผลึกต่อกันกลับพบว่ารอยต่อสามารถแสดงสมบัติเป็นตัวนำไฟฟ้าได้ นับเป็นจุดเริ่มต้นของงานพัฒนาสารประกอบออกไซด์โลหะทรานซิชันเพื่อใช้ในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เนื่องจากรอยต่อ LAO/STO

เป็นโครงสร้างสำคัญของอุปกรณ์ทรานซิสเตอร์ การค้นพบดังกล่าวทำให้เกิดคำถามสำคัญตามมาว่ารอยต่อระหว่างฉนวนสองชนิดสามารถแสดงพฤติกรรมเป็นตัวนำไฟฟ้าได้อย่างไร กลไกใดทำหน้าที่ในการสร้างพาหะนำไฟฟ้า รวมถึงพาหะนำไฟฟ้าเคลื่อนที่อย่างไรและมีกลไกการกระเจิง (scattering mechanisms) แบบใดบ้างที่มีอิทธิพลต่อการเคลื่อนที่

จากการศึกษาของ โอโตโมะและฮวง (Ohtomo & Hwang, 2004) ได้วิเคราะห์โครงสร้างผลึกของ LAO และ STO เป็นแบบเพอร์รอฟสไกต์ (perovskite) มีโครงสร้างทางเคมีในรูปแบบ ABO_3 เกิดจากการเรียงตัวของระนาบผลึก AO และ BO_2 สลับกันเป็นชั้นๆ สำหรับ STO เกิดจากการเรียงตัวสลับกันของระนาบ $(SrO)^0$ และระนาบ $(TiO_2)^0$ มีประจุเป็นศูนย์จัดเป็นวัสดุไม่มีขั้ว (nonpolar material) เนื่องจากไม่มีไดโพลโมเมนต์ในโครงสร้างผลึก สำหรับ LAO จัดเป็นวัสดุมีขั้ว (polar material) เกิดจากการเรียงตัวสลับกันของระนาบ $(LaO)^+$ และระนาบ $(AlO_2)^-$ ซึ่งมีประจุเป็นบวกและลบสลับกันส่งผลให้เกิดไดโพลโมเมนต์ในโครงสร้างผลึก เมื่อพิจารณาในระดับอะตอมจะพบว่ารอยต่อที่สามารถทำให้เกิดการนำไฟฟ้าได้คือ รอยต่อชนิดเอ็น (N-type) เกิดจากการปลูกผลึกให้ระนาบ $(TiO_2)^0$ ต่อกับ $(LaO)^+$ โดยระนาบ $(LaO)^+$ แสดงประจุไฟฟ้าบวกจะเหนี่ยวนำอิเล็กตรอนซึ่งมีประจุลบให้กระจายบนระนาบ $(TiO_2)^0$ ซึ่งอิเล็กตรอนที่กระจายตัวเป็นระนาบดังกล่าวเรียกว่า อิเล็กตรอนแก๊สสองมิติ (two-dimensional electron gas; 2DEG) หรืออิเล็กตรอนสองมิติ และเรียกกลไกในการเหนี่ยวนำอิเล็กตรอนสองมิตินี้ว่า การเคลื่อนย้ายประจุ (electronic reconstruction) เนื่องจากอิเล็กตรอนถูกเหนี่ยวนำมาจากชั้นของสารประกอบ LAO (Ohtomo & Hwang, 2004); (Thiel, Hammerl, Schmehl, Schneider, & Mannhart, 2006) นอกจากนั้นอิเล็กตรอนสองมิตียังถูกเหนี่ยวนำจากการแลกเปลี่ยนไอออนบวกที่ผิวรอยต่อ (cation intermixing) (Huijben et al., 2006); (Willmott et al., 2007) และการเกิดช่องว่างอะตอมออกซิเจน (oxygen vacancy) (Kalabukhov et al., 2007)

ระหว่างการปลูกผลึก LAO ลงบนฐานรองของผลึก STO พบว่ามีการเคลื่อนย้ายของอะตอม 2 รูปแบบ คือ 1) การแพร่ของไอออนบวก La^{3+} และ Sr^{2+} ระหว่างผิวรอยต่อเรียกว่าการแลกเปลี่ยนไอออนบวกที่ผิวรอยต่อ โดยไอออน La^{3+} จะแพร่ข้ามรอยต่อไปแทนที่ไอออน Sr^{2+} และกลับกัน Sr^{2+} จะแพร่ไปแทนที่ La^{3+} ซึ่งระยะทางของการแพร่ประมาณ 1-2 หน่วยเซลล์ (unit cell; uc) จากผิวรอยต่อ 2) การเคลื่อนที่ของอะตอมออกซิเจนออกจากผลึก STO เรียกว่าการเกิดช่องว่างอะตอมออกซิเจน ซึ่งทั้งสองกระบวนการจะแสดงสมบัติเป็นประจุบวกและสามารถเหนี่ยวนำอิเล็กตรอนได้เช่นเดียวกับกระบวนการเคลื่อนย้ายประจุ ดังนั้นทั้งสามกระบวนการสามารถเหนี่ยวนำอิเล็กตรอนสองมิติให้มีความหนาแน่นอิเล็กตรอนระดับ 10^{13} - 10^{14} cm^{-2} และมีค่า

สภาพเคลื่อนที่ได้ (mobility) $\mu \sim 10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ จากการค้นพบสมบัติทางไฟฟ้าของรอยต่อ LAO/STO เป็นจุดเริ่มต้นของการวิจัยสมบัติทางไฟฟ้าของรอยต่อระหว่างฉนวนไฟฟ้าซึ่งมีสารประกอบสตรอนเทียมไททาเนตเป็นฐาน ต่อมา มีการค้นพบรอยต่อรูปแบบอื่นที่สามารถแสดงสมบัติทางไฟฟ้าเพิ่มเติมจากระบบ LAO/STO ได้แก่ ระบบ $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3/\text{SrTiO}_3$ (GAO/STO) (Y. Z. Chen et al., 2013) ระบบ delta-doped SrTiO_3 (Kozuka et al., 2010) และระบบ $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ (CZO/STO) (Y. Chen et al., 2015)

สำหรับงานวิจัยนี้สนใจศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าของโครงสร้างเฮเทอโร $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ (CZO/STO) เนื่องจากค้นพบปรากฏการณ์ฟิสิกส์ใหม่ๆเพิ่มเติม (Y. Chen et al., 2015) สำหรับแคลเซียมเซอร์โคเนต (CaZrO_3 ; CZO) มีโครงสร้างผลึกแบบเพอร์รอฟสไกต์เกิดจากการเรียงตัวเป็นชั้นๆของระนาบ $(\text{CaO})^0$ และระนาบ $(\text{ZrO}_2)^0$ จัดเป็นวัสดุไม่มีขั้วเนื่องจากไม่มีไดโพลโมเมนต์ในโครงสร้างผลึก รอยต่อ CZO/STO เกิดจากการปลูกผลึก CZO ลงบนฐานรอง STO และเป็นครั้งแรกของการค้นพบการนำไฟฟ้าจากระบบรอยต่อระหว่างวัสดุไม่มีขั้วสองชนิด (nonpolar/nonpolar interface) เมื่อพิจารณาสมบัติทางไฟฟ้าพบว่าระบบ CZO/STO ให้ความหนาแน่นอิเล็กตรอนที่ระดับ $10^{12}\text{-}10^{15} \text{ cm}^{-2}$ และสภาพเคลื่อนที่ได้ $\sim 6 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ที่อุณหภูมิ 2 เคลวิน ซึ่งมีค่าสูงกว่าระบบ LAO/STO ($10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) นอกจากนั้นยังพบว่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนยังแปรผันกับอุณหภูมิและความหนาของชั้นแคลเซียมเซอร์โคเนต (t_{CZO}) โดยสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนจะลดลงเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นและสภาพเคลื่อนที่ได้มีค่า $\sim 10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ที่อุณหภูมิห้อง

การค้นพบสมบัติทางไฟฟ้างดังกล่าวทำให้เกิดคำถามต่อพฤติกรรมของอิเล็กตรอนในระบบรอยต่อเฮเทอโร CZO/STO ดังต่อไปนี้ 1) อิเล็กตรอนสองมิติซึ่งเป็นพาหะนำไฟฟ้าถูกเหนี่ยวนำด้วยกระบวนการใด 2) ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนซึ่งแปรผันกับความหนาของชั้นฟิล์มแคลเซียมเซอร์โคเนตเกิดจากสาเหตุใด ($3.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ที่ $t_{\text{CZO}}=8 \text{ uc}$, $1.2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ที่ $t_{\text{CZO}}=10 \text{ uc}$, $7.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ ที่ $t_{\text{CZO}}=15 \text{ uc}$, $1.2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ที่ $t_{\text{CZO}}=18 \text{ uc}$, $8.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ ที่ $t_{\text{CZO}}=26 \text{ uc}$) 3) ทำไมสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนลดลงเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น 4) กลไกการกระเจิงชนิดใดที่มีอิทธิพลต่อสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน คำถามเหล่านี้มีความสำคัญอย่างมากต่อการเข้าใจสมบัติทางไฟฟ้าและการขนส่งอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ตลอดจนสามารถนำความรู้ไปอธิบายสมบัติทางไฟฟ้าของโครงสร้างเฮเทอโรของสารประกอบออกไซด์โลหะทรานซิชันชนิดอื่นที่จะเกิดขึ้นในอนาคตได้

ในงานวิจัยนี้ทำการศึกษาเชิงทฤษฎีของสมบัติทางไฟฟ้าในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO โดยทำการศึกษาแบบจำลองทางทฤษฎีของพลังงานศักย์การกระเจิง (scattering potential energy) ได้แก่ พลังงานศักย์การกระเจิงของสารเจือปนหลัง (background impurity scattering potential energy) พลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (interface roughness scattering potential energy) พลังงานศักย์การกระเจิงของโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน (longitudinal optical phonon scattering potential energy) และพลังงานศักย์การกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (electron-electron scattering potential energy) โดยทำการคำนวณสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติจากแบบจำลองพลังงานศักย์การกระเจิงแบบต่างๆ ทำการเปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้และอธิบายกลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO

ความมุ่งหมายของงานวิจัย

1. ศึกษากลไกการกระเจิงและการขนส่งอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO
2. ศึกษาแบบจำลองทางทฤษฎีของพลังงานศักย์การกระเจิงสำหรับโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO
3. คำนวณสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO จากแบบจำลองของพลังงานศักย์การกระเจิงแบบต่างๆ
4. เปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO

ความสำคัญของงานวิจัย

1. มีความรู้ต่อกลไกการกระเจิงและการขนส่งอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO
2. มีความเข้าใจแบบจำลองทางทฤษฎีของพลังงานศักย์การกระเจิงสำหรับโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO
3. สามารถคำนวณสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO จากแบบจำลองพลังงานศักย์การกระเจิงแบบต่างๆ
4. สามารถอธิบายสมบัติทางไฟฟ้าของโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO

ขอบเขตของงานวิจัย

1. คำนวณสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กทรอนิกส์สองมิติภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงแบบต่างๆ ดังนี้
 - 1.1 พลังงานศักย์การกระเจิงของสารเจือปนหลัง
 - 1.2 พลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ
 - 1.3 พลังงานศักย์การกระเจิงของโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน
 - 1.4 พลังงานศักย์การกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กทรอนิกส์ตรอน
2. เปรียบเทียบผลการคำนวณทางทฤษฎีกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กทรอนิกส์สองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO
3. อธิบายสมบัติทางไฟฟ้าของโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO

ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากงานวิจัย

1. เข้าใจสมบัติทางไฟฟ้าของโครงสร้างเฮเทอโรกลุ่มสารประกอบออกไซด์โลหะทรานซิชัน
2. เข้าใจพฤติกรรมของอิเล็กทรอนิกส์สองมิติของโครงสร้างเฮเทอโรกลุ่มสารประกอบออกไซด์โลหะทรานซิชัน
3. ได้แบบจำลองทางทฤษฎีของพลังงานศักย์การกระเจิงสำหรับโครงสร้างเฮเทอโรกลุ่มสารประกอบออกไซด์โลหะทรานซิชัน

บทที่ 2

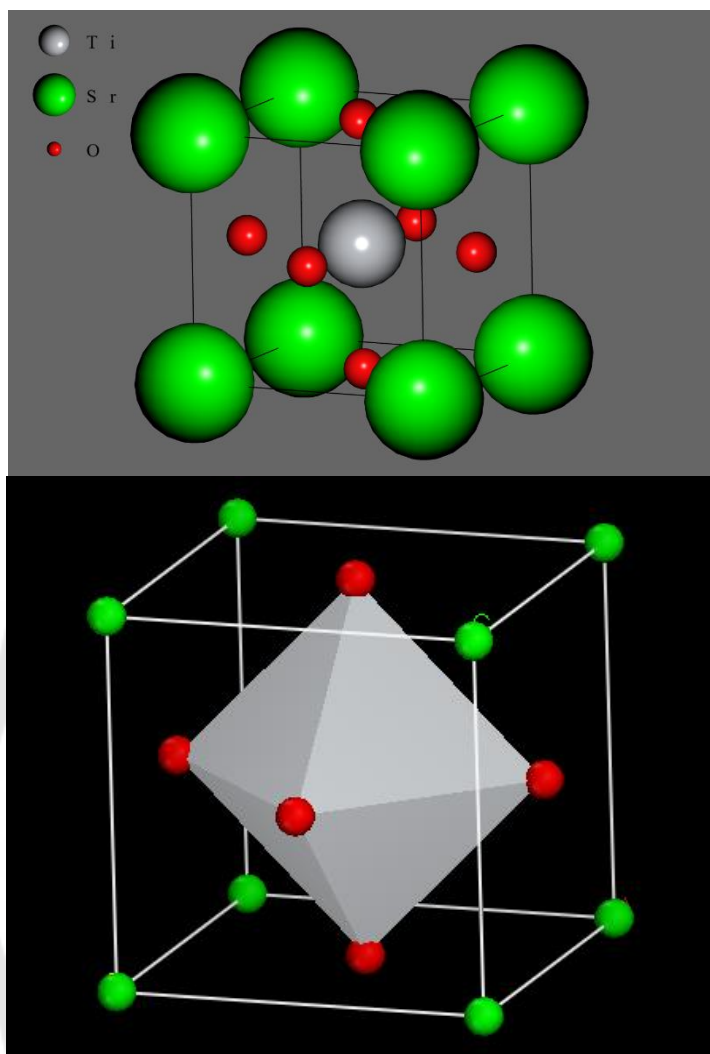
เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในบทนี้เสนอผลการศึกษาเอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ตามลำดับหัวข้อต่อไปนี้ โครงสร้างผลึกและโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของ STO และ CZO โครงสร้างเฮเทอโรสารกึ่งตัวนำ อิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโรของระบบสารประกอบ ออกไซด์โลหะทรานซิชัน สมบัติทางไฟฟ้า การขนส่งอิเล็กตรอน และอัตราการกระเจิงของระบบ อิเล็กตรอนสองมิติ

โครงสร้างผลึกและโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของ STO และ CZO

สตรอนเทียมไททาเนต (STO) และแคลเซียมเซอร์โคเนต (CZO) เป็นสารประกอบ ออกไซด์โลหะทรานซิชันที่มีโครงสร้างผลึกแบบเพอร์รอฟสไกต์ภายใต้สมมาตรแบบลูกบาศก์ (cubic) โดยโครงสร้างทางเคมีของเพอร์รอฟสไกต์คือ ABO_3 เมื่อ A คือไอออนของโลหะ แอลคาไลน์เอิร์ท (alkaline-earth ion) หรือไอออนของโลหะแรร์เอิร์ท (rare-earth ion) และ B คือ ไอออนของธาตุทรานซิชัน โดยโครงสร้างผลึกมีการจัดเรียงตัวของระนาบ (AO) และ (BO_2) สลับกัน เป็นชั้นๆ ในแนวตั้ง มีรูปแบบการจัดเรียงของอะตอมในหน่วยเซลล์ดังนี้ A จะอยู่ที่มุมทั้งแปด B อยู่ ศูนย์กลางของหน่วยเซลล์และ O จะอยู่ตรงกลางในแต่ละหน้าของลูกบาศก์

สำหรับสตรอนเทียมไททาเนตมีค่าคงที่ผลึกเท่ากับ $3.905 \text{ \AA}$ (Ohtomo & Hwang, 2004) โดยสตรอนเทียมไททาเนตมีอะตอมไทเทเนียม Ti^{4+} อยู่ที่ศูนย์กลางของหน่วยเซลล์ อะตอม สตรอนเทียม Sr^{2+} จะอยู่ที่มุมทั้ง 8 ของลูกบาศก์ และอะตอมออกซิเจน O^{2-} วางอยู่ตรงกลางของแต่ละหน้าของลูกบาศก์ อะตอมของไททาเนียมและออกซิเจนจะสร้างพันธะเคมีในรูปแบบ ออกตะฮีดรอล (octahedron; TiO_6) แสดงดังภาพประกอบ 1



ภาพประกอบ 1 หน่วยเซลล์ของโครงผลึกแบบเพอร์รอฟสไกต์ STO

การจัดเรียงตัวของ STO ประกอบด้วยระนาบ $(\text{SrO})^0$ และระนาบ $(\text{TiO}_2)^0$ เป็นชั้นๆ ตามลำดับ โดยการวางตัวของระนาบมีประจุลัพท์เป็นศูนย์ซึ่งทำให้เกิดไดโพลโมเมนต์ในผลึก STO จึงจัดเป็นวัสดุไม่มีขั้ว (nonpolar) โดยมีค่าคงที่ไดอิเล็กทริก (κ_{STO}) อยู่ระหว่าง 300 ที่อุณหภูมิห้องและประมาณ 24,000 ที่อุณหภูมิต่ำ (Neville, Hoeneisen, & Mead, 1972) และผลการทดลองพบว่าช่องว่างพลังงานของ STO มีค่าเท่ากับ 3.2 eV (Ohtomo & Hwang, 2004) แสดงดังตารางที่ 1

เมื่อพิจารณาโครงสร้างแถบพลังงาน (band structure) ของ STO พบว่า STO มีแถบพลังงานแบบไม่ตรง (indirect band) ระดับพลังงานสูงสุดของแถบวาเลนซ์อยู่ในตำแหน่ง R ของโซนบริลลวงซึ่งแทนระดับพลังงานของออกซิเจน (O-2p orbitals) และระดับพลังงานต่ำสุดของ

แถบนำอยู่ที่ตำแหน่ง Γ ซึ่งแทนระดับพลังงานของไทเทเนียม (Ti-3d orbitals) (Zhang & Wei, 2011)

ในปี ค.ศ. 2011 มีการทดลองหามวลยังผลอิเล็กตรอนของ STO (electron effective mass) โดยมีวาสนาและคณะ (Meevasana et al., 2011) พบว่ามีค่าอยู่ระหว่าง $0.5-0.6m_0$ เมื่อ m_0 คือมวลนิ่งของอิเล็กตรอน ซึ่งต่างจากการค้นพบของ ซานตานเดอร์-ไซโรและคณะ (Santander-Syro et al., 2011) ที่พบว่ามีมวลยังผลอิเล็กตรอนมีค่าระหว่าง $10-20m_0$ ค่ามวลยังผลอิเล็กตรอนที่ต่างกันนั้นสามารถอธิบายได้จากโครงสร้างอิเล็กตรอน เมื่อพิจารณาแถบนำซึ่งเป็นระดับพลังงานของไทเทเนียม (Ti-3d) พบว่าที่ตำแหน่ง Γ ประกอบด้วยสองระดับพลังงานย่อย ได้แก่ t_{2g} ซึ่งมีระดับพลังงานต่ำกว่าประกอบด้วย 3 สถานะซ้อนทับ และ e_g ซึ่งมีระดับพลังงานสูงกว่าประกอบด้วย 2 สถานะซ้อนทับ (Yang & Su, 2011) กรณีที่ STO นำไฟฟ้าได้แสดงว่ามีอิเล็กตรอนบางส่วนสามารถครอบครองระดับพลังงาน t_{2g} โดยประกอบด้วย 3 สถานะ Ti-3d_{xy}, Ti-3d_{yz} และ Ti-3d_{xz} นอกจากนั้นพบว่าที่โซน M- Γ -R สถานะ Ti-3d_{xy} และ Ti-3d_{yz} มีความชันใกล้เคียงกันแต่สถานะ Ti-3d_{xz} มีความชันมากกว่าส่งผลทำให้มวลยังผลอิเล็กตรอนมีค่าแตกต่างกัน

ต่อมาในปี ค.ศ. 2012 การศึกษาทางทฤษฎีของ เชิงและคณะ (Shen, Lee, Valenti, & Jeschke, 2012) สรุปว่าสถานะ Ti-3d_{xy} และ Ti-3d_{yz} มีมวลยังผลประมาณ $0.5-0.7m_0$ ซึ่งตรงกับผลการทดลองของมีวาสนาและคณะ (Meevasana et al., 2011) และ Ti-3d_{xz} มีมวลยังผลประมาณ $7.5-9.3m_0$ ซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลองของ ซานตานเดอร์-ไซโร และคณะ (Santander-Syro et al., 2011) ดังนั้นการที่โครงสร้างเขตเทอโรของ STO สามารถนำไฟฟ้าได้ดีเนื่องจากอิเล็กตรอนสามารถครอบครองสถานะ Ti-3d_{xy} และ Ti-3d_{yz} ของไทเทเนียมซึ่งมีค่ามวลยังผลต่ำส่งผลให้สภาพเคลื่อนที่ได้มีค่าสูง

ตาราง 1 พารามิเตอร์ของสตรอนเทียมไททาเนต (STO)

พารามิเตอร์	ปริมาณ
ค่าคงที่ผลึก (a)	$3.905 \times 10^{-10} \text{ m}^*$
พลังงานช่องว่าง (E_g)	3.2 eV^*
มวลยังผลของอิเล็กตรอน (m^*)	$0.2-2m_0^{***}$
ค่าคงที่ไดอิเล็กทริก (κ_{STO})	300^{**}

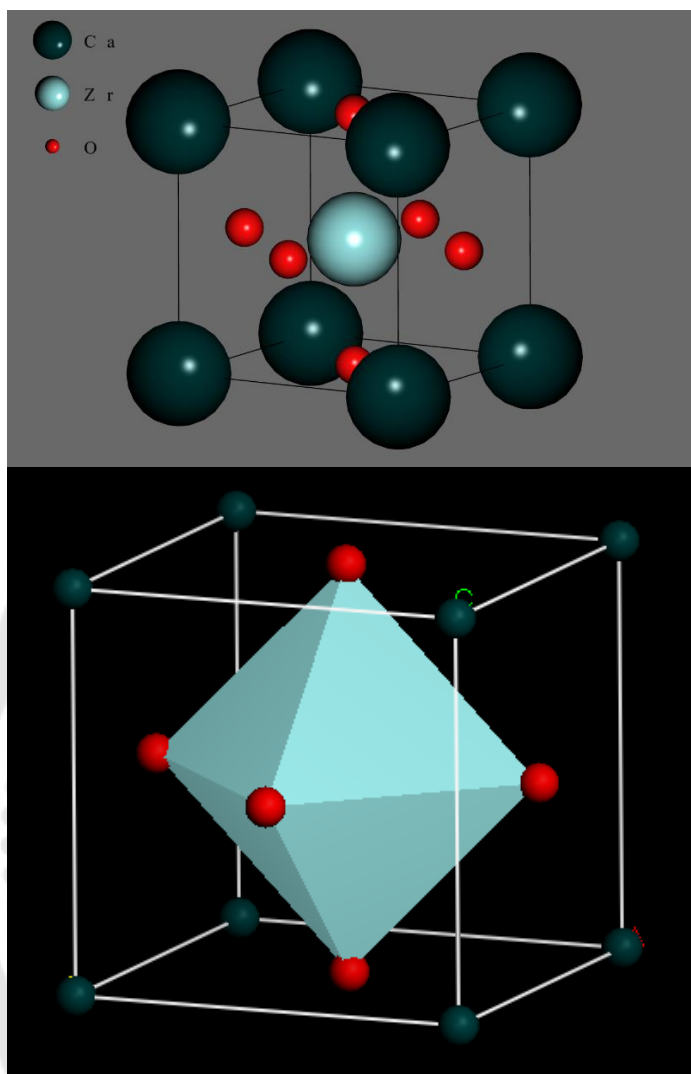
ที่มา: * Ohtomo A, Hwang HY. (2004). A high-mobility electron gas at the LaAlO_3 heterointerface. Nature 427:423-427.

: ** Neville RC, Hoeneisen B, Mead CA. (1972). Permittivity of strontium titanate. Journal of Applied Physics 197;43(5):2124-2131

: *** Meevasana W, King PDC, He RH, Mo SK, Hashimoto M, Tamai A, et al (2011). Creation and Control of a Two-Dimensional Electron Liquid at the Bare SrTiO_3 surface. Nature Materials. 2011;10:114.

: *** Shen J, Lee H, Valentí R, Jeschke HO. (2012). Ab initio study of the two-dimensional metallic state at the surface of SrTiO_3 : Importance of oxygen vacancies. Physical Review B. 86(19): 195119

แคลเซียมเซอร์โคเนต (CZO) มีค่าคงที่ผลึกเท่ากับ $4.02 \text{ \AA}$ (Eglitis, 2015) และมีสมมาตรแบบลูกบาศก์ (Eglitis & Popov, 2017) โดยเซอร์โคเนียม Zr^{4+} อยู่ที่ศูนย์กลางของหน่วยเซลล์แคลเซียม Ca^{2+} จะอยู่ที่มุมทั้ง 8 ของลูกบาศก์ และออกซิเจน O^{2-} วางตัวอยู่ตรงกลางของแต่ละหน้าของลูกบาศก์ ซึ่งอะตอมเซอร์โคเนียมและอะตอมออกซิเจนจะสร้างพันธะเคมีในรูปแบบออกตะฮีดรอล (octahedron; ZrO_6) ดังภาพประกอบ 2



ภาพประกอบ 2 หน่วยเซลล์ของโครงผลึกแบบเพอร์รอฟสไกต์ CZO

แคลเซียมเซอร์โคเนตเกิดจากการเรียงตัวของระนาบ $(\text{CaO})^0$ และระนาบ $(\text{ZrO}_2)^0$ เป็นชั้นๆ ตามลำดับ เนื่องจากการวางตัวของระนาบที่มีประจุลัพท์เป็นศูนย์จึงทำให้ไม่เกิดไดโพลโมเมนต์ ทำให้ CZO ถูกจัดเป็นวัสดุไม่มีขั้วเช่นเดียวกับ STO โดย CZO มีค่าคงที่ไดอิเล็กทริก (κ_{CZO}) เท่ากับ 36 และจากผลการทดลองพบว่าช่องว่างพลังงานของ CZO มีค่าเท่ากับ 3.3 eV (Hou, 2008) แสดงดังตารางที่ 2

พิจารณาโครงสร้างแถบพลังงานของ CZO พบว่า CZO มีแถบพลังงานแบบไม่ตรงระดับพลังงานสูงสุดของแถบวาเลนซ์อยู่ในตำแหน่ง R ของโซนบริลลวงซึ่งแทนระดับพลังงานของ

ออกซิเจน (O-2p orbitals) และระดับพลังงานต่ำสุดของแถบนำอยู่ที่ตำแหน่ง Γ ซึ่งแทนระดับพลังงานของเซอริโคเนียม (Zr-4d orbitals) (Hou, 2008)

ตาราง 2 พารามิเตอร์ของแคลเซียมเซอริโคเนต (CZO)

พารามิเตอร์	ปริมาณ
ค่าคงที่ผลึก (a)	$4.02 \times 10^{-10} \text{ m}^*$
พลังงานช่องว่าง (E_g)	3.3 eV**
มวลยังผลของอิเล็กตรอน (m^*)	$0.2-2m_0^{**}$
ค่าคงที่ไดอิเล็กทริก (κ_{CZO})	36 ***

ที่มา: * Eglitis RI. (2015). Theoretical Modelling of the Energy Surface (001) and Topology of CaZrO_3 Perovskite. *Ferroelectrics*. 483(1):75-85.

: ** Hou ZF. (2008). Ab initio calculations of elastic modulus and electronic structures of cubic CaZrO_3 . *Physica B: Condensed Matter*. 403(17):2624-8.

: *** Prasanth CS, Padma Kumar H, Pazhani R, Solomon S, Thomas JK. (2008). Synthesis, characterization and microwave dielectric properties of nanocrystalline CaZrO_3 ceramics. *Journal of Alloys and Compounds*. 464(1):306-9.

โครงสร้างเฮเทอโรสารกึ่งตัวนำ

โครงสร้างเฮเทอโรสารกึ่งตัวนำคือ รอยต่อที่เกิดจากการปลูกผลึกระหว่างวัสดุต่างชนิดกันที่ชั้นความหนาในระดับอะตอม (ประมาณ 1-200 nm) ซึ่งโครงสร้างเฮเทอโรสารสามารถแบ่งแยกย่อยลงไปตามจำนวนชั้นของการปลูกผลึกได้แก่ รอยต่อเดี่ยว (homojunction) เกิดจากการปลูกผลึกต่อกันของวัสดุสองชนิด (1/2) ควอนตัมเวลล์ (quantum well) เกิดจากการปลูกผลึกให้สองด้านของวัสดุชนิดหนึ่งประกบวัสดุอีกชนิดหนึ่ง (1/2/1) และซูเปอร์แลตทิซ (superlattice) ที่เกิดจากการปลูกผลึกให้วัสดุสองชนิดสลับกันไปเรื่อยๆ (1/2/1/2/1/2...) โดยการปลูกผลึกโครงสร้างเฮเทอโรจำเป็นต้องใช้เครื่องมือที่มีความเที่ยงตรงและละเอียดสูง โดยวิธีการปลูกผลึกทางสุญญากาศที่นิยมใช้ได้แก่ molecular beam epitaxy (MBE) และ pulsed laser deposition (PLD) จากการพัฒนาโครงสร้างเฮเทอโรสารกึ่งตัวนำและการประยุกต์โครงสร้างเฮเทอโร

ไปใช้ในอุปกรณ์ทรานซิสเตอร์ความเร็วสูงและอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เชิงแสง เช่น เลเซอร์ สารกึ่งตัวนำ ตัวตรวจจับทางแสงและไดโอดเปล่งแสง ทำให้ศาสตราจารย์ทางฟิสิกส์สองท่าน ได้แก่ เฮอเบิร์ต โครเมอร์ (Herbert Kroemer) ชาวอเมริกันและซอร์เรส ไอ. อัลเฟรอฟ (Zhores I. Alferov) ชาวรัสเซีย ได้รับรางวัลโนเบลสาขาฟิสิกส์ในปี ค.ศ. 2000

จากการทดลองของ เฉินและคณะ (Y. Chen et al., 2015) ในปี 2015 พบว่ามีอิเล็กตรอนสองมิติถูกกักที่บริเวณผิวรอยต่อของโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ทำให้เกิดข้อสงสัยที่ว่า พลังงานศักย์กักกันรูปแบบใดที่สามารถกักอิเล็กตรอนไว้ที่ผิวรอยต่อ นอกจากนั้นยังต้องการทราบรูปแบบของฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของสถานะอิเล็กตรอนที่ถูกกักในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO

พลังงานของอิเล็กตรอน

การวิเคราะห์พลังงานของอิเล็กตรอนจะอาศัยสมการชโรดิงเงอร์ที่ไม่ขึ้นกับเวลาใน 3 มิติเพื่อพิจารณาหาพลังงานของอิเล็กตรอนตามสมการ

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{R}) \right) \Psi(\vec{R}) = E \Psi(\vec{R}) \quad (2.1)$$

เมื่อ $V(\vec{R})$ คือ พลังงานศักย์ภายนอกในสามมิติ $\Psi(\vec{R})$ คือ ฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนในสามมิติ และ E คือ ค่าพลังงานรวมของอิเล็กตรอนในสามมิติ เนื่องจากในโครงสร้างเฮเทอโรเกิดพลังงานศักย์กักกันเฉพาะในทิศทางการปลูกผลึก $V(z)$ เท่านั้น ดังนั้นสมการชโรดิงเงอร์สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(z) \right) \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z) \quad (2.2)$$

แก้สมการชโรดิงเงอร์ในรูปแบบสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยด้วยวิธีการแยกตัวแปรจะสามารถเขียนฟังก์ชันคลื่นใหม่ได้เป็น

$$\Psi(\vec{R}) = \psi(\vec{r})u(z) \quad (2.3)$$

เมื่อ $\psi(\vec{r}) \equiv \psi(x, y)$ คือฟังก์ชันคลื่นในแนวระนาบ (in-plane wavefunction) ซึ่งฟังก์ชันคลื่นระนาบสามารถแทนด้วย $\psi(x, y) = \frac{e^{(ik_x x + ik_y y)}}{\sqrt{A}}$ แสดงถึงอิเล็กตรอนเคลื่อนที่ได้อย่างอิสระในแนวระนาบ โดย A คือพื้นที่ และ $u(z)$ คือฟังก์ชันคลื่นในแนวแกน z (envelope wavefunction) เมื่อแทนฟังก์ชันคลื่นตามสมการ (2.3) ลงในสมการชโรดิงเงอร์ (2.1) จะได้

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] + V(z)\right) \frac{e^{(ik_x x + ik_y y)}}{\sqrt{A}} u(z) = E \frac{e^{(ik_x x + ik_y y)}}{\sqrt{A}} u(z) \quad (2.4)$$

และ

$$\left(\left[\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right]\right) u(z) = E u(z) \quad (2.5)$$

จัดรูปสมการใหม่ได้เป็น

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right) u(z) = \left(E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}\right) u(z) \quad (2.6)$$

จากสมการ (2.6) พลังงานของสถานะอิเล็กตรอนถูกกัก (confinement energy) เป็นผลต่างระหว่างพลังงานรวมกับพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนในแนวระนาบ ดังนี้

$$\epsilon = E - \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) \quad (2.7)$$

ดังนั้นสามารถลดรูปสมการชโรดิงเงอร์ของโครงสร้างเฮเทอโรให้เหลือเป็นปัญหาของอิเล็กตรอนที่เคลื่อนที่ภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์ 1 มิติ ดังนี้

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right) u(z) = \epsilon u(z) \quad (2.8)$$

เพื่อจะแก้สมการ (2.8) จำเป็นต้องทราบรูปแบบของพลังงานศักย์กักกัน $V(z)$ และฟังก์ชันคลื่น $u(z)$ อย่างไรก็ตามจากสมการ (2.7) จะให้พลังงานรวมของระบบที่แสดงให้เห็นถึงลักษณะการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโรเป็นดังนี้

$$E_{n,k} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) + \epsilon_n \quad (2.9)$$

เมื่อพิจารณาแทนพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนในแนวระนาบซึ่งจะขึ้นกับเลขคลื่น (k_x, k_y) และพจน์ที่สองแทนพลังงานของสถานะอิเล็กตรอนถูกกัก เมื่อ n คือ เลขควอนตัมมีค่าเป็น $1, 2, 3, \dots, n$ แสดงถึงค่าพลังงานไม่ต่อเนื่องของอิเล็กตรอน (quantization) กล่าวคืออิเล็กตรอนสองมิติจะสามารถเคลื่อนที่ได้อย่างอิสระในแนวระนาบแต่ถูกจำกัดการเคลื่อนที่ในแนวตั้ง

พลังงานศักย์กักกันและฟังก์ชันคลื่นในโครงสร้างเฮเทอโร

การศึกษารูปแบบพลังงานศักย์ของระบบเป็นการวิเคราะห์กลไกการกักกันอิเล็กตรอนสองมิติที่ผิวรอยต่อของโครงสร้าง CZO/STO การทราบรูปแบบของพลังงานศักย์กักกันที่เป็นไปได้ทำให้เราสามารถหาพลังงานของอิเล็กตรอนในสถานะกักกันได้ รูปแบบพลังงานศักย์กักกันที่ศึกษาประกอบด้วยบ่อศักย์รูปสามเหลี่ยม (triangular potential well) และบ่อศักย์อนันต์ (infinite square potential well)

เป็นที่ทราบแล้วว่า CZO และ STO จัดเป็นวัสดุไม่มีขั้วทั้งคู่ซึ่งไม่มีโพลาไรเซชันเกิดขึ้นในโครงผลึก อย่างไรก็ตามการปลูกผลึกต่อกันระหว่าง CZO และ STO จะทำให้เกิด

ความเครียดภายในโครงผลึกของ CZO และความเครียดสามารถสร้างเพียโซอิเล็กทริกโพลาริเซชันภายในโครงผลึกของ CZO (Y. Chen et al., 2015); (Y. Chen et al., 2017) ดังนั้น โครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO จะเกิดความไม่ต่อเนื่องของสนามไฟฟ้าภายในโครงผลึกในทิศของการปลูกผลึก

ในปี ค.ศ.1982 อันโดะและคณะ (Ando, Fowler, & Stern, 1982) ได้เสนอแบบจำลองของพลังงานศักย์กักกันกรณีเกิดความไม่ต่อเนื่องของสนามไฟฟ้าภายในของรอยต่อระหว่างสารกึ่งตัวนำสองชนิดอยู่ในรูปแบบ

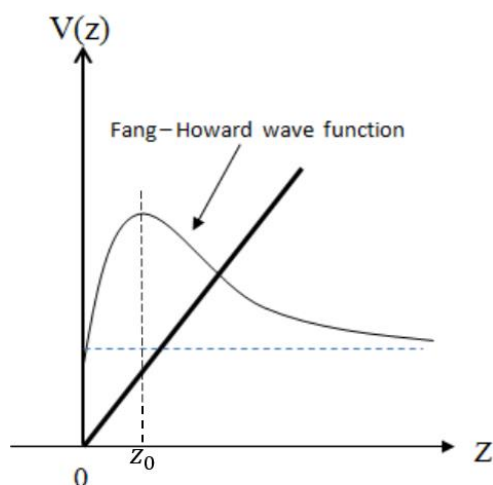
$$V(z) = \infty ; z < 0 \text{ และ } V(z) = eEz ; z > 0 \quad (2.10)$$

เมื่อ e คือประจุของอิเล็กตรอน และ E คือสนามไฟฟ้าภายในของวัสดุซึ่งมีค่าคงตัวจากแบบจำลองพบว่าพลังงานศักย์กักกันจะแปรตามค่าของ z เมื่อ z มีค่ามากขึ้นค่าพลังงานศักย์จะมีค่าสูงขึ้นตามไปด้วย ดังนั้นพลังงานศักย์กักกันจะมีลักษณะเป็นบ่อศักย์รูปสามเหลี่ยมแสดงดังภาพประกอบ 3

ในปี ค.ศ.1966 ฟางและฮาร์เวิร์ด ได้เสนอรูปแบบของฟังก์ชันคลื่นสำหรับพลังงานศักย์กักกันรูปสามเหลี่ยมเป็นไปตามสมการ

$$u(z) = \sqrt{\frac{b^3}{2}} z e^{-bz/2} \quad (2.11)$$

เมื่อ $b = \left(\frac{33me^2n_s}{8\hbar^2\epsilon_0\kappa} \right)^{1/3}$ และ ϵ_0 คือ สภาพยอมทางไฟฟ้าในสุญญากาศ (vacuum permittivity) และเรียกฟังก์ชันคลื่อนดังกล่าวว่าฟังก์ชันคลื่นของฟาง-ฮาร์เวิร์ด (Fang-Howard wavefunction) ภาพประกอบ 3 แสดงให้เห็นพลังงานศักย์กักกันรูปสามเหลี่ยมและฟังก์ชันคลื่นของฟาง-ฮาร์เวิร์ด เมื่อพิจารณาจากภาพจะพบว่าที่ $z=0$ ฟังก์ชันคลื่นจะมีค่าเป็นศูนย์และสูงสุดที่ z_0 และลดลงตามฟังก์ชันเอกซ์โปเนนเชียลเมื่อ z มีค่าเพิ่มขึ้น แสดงว่าสามารถพบอิเล็กตรอนได้มากที่สุดบริเวณใกล้ผิวรอยต่อนั่นเอง



ภาพประกอบ 3 บ่อศักย์รูปสามเหลี่ยมและฟังก์ชันคลื่นของฟาง-ฮาร์เวิร์ด

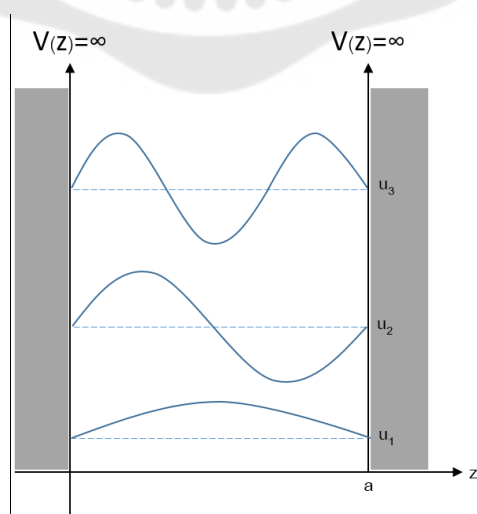
ในปี ค.ศ.1979 เฮส (Hess, 1979) ได้เสนอแบบจำลองของบ่อศักย์อนันต์เพื่ออธิบายพลังงานศักย์กักกันสำหรับโครงสร้างเฮเทอโรสตรักเจอร์กึ่งตัวนำตามสมการ

$$V(z) = \begin{cases} 0, & 0 \leq z \leq a \\ \infty, & z < 0, z > a \end{cases} \quad (2.12)$$

และฟังก์ชันคลื่นในบ่อศักย์อนันต์แทนด้วยฟังก์ชันคลื่นรูปไซน์ตามสมการ

$$u_n(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} z\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.13)$$

โดยพลังงานศักย์กักกันแบบบ่อศักย์อนันต์และฟังก์ชันคลื่นแสดงดังภาพประกอบ 4



ภาพประกอบ 4 บ่อศักย์อนันต์และฟังก์ชันคลื่น

ต่อมาได้มีการนำบอศักย์รูปสามเหลี่ยมและบอศักย์อนันต์ไปใช้ศึกษาโครงสร้างเฮเทอโรของสารกึ่งตัวนำชนิดอื่นๆ พบว่าแบบจำลองดังกล่าวสามารถอธิบายผลการทดลองของสมบัติทางไฟฟ้าได้เป็นอย่างดี สำหรับงานวิจัยนี้จะประยุกต์ใช้แบบจำลองของบอศักย์รูปสามเหลี่ยม และแบบจำลองบอศักย์อนันต์ในการศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าของโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO

อิเล็กทรอนิกส์สองมิติในโครงสร้างเฮเทอโรของระบบสารประกอบออกไซด์โลหะทรานซิชัน

การพบอิเล็กทรอนิกส์สองมิติที่มีสภาพเคลื่อนที่ได้สูงในโครงสร้างเฮเทอโรของระบบสารประกอบออกไซด์โลหะทรานซิชันที่มีวัสดุ STO เป็นฐานรองเป็นการค้นพบที่สำคัญในการพัฒนาอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ชนิดออกไซด์ประกอบด้วยระบบ $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ (LAO/STO) ระบบ $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3/\text{SrTiO}_3$ (GAO/STO) และระบบ $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ (CZO/STO) รายละเอียดเกี่ยวกับอิเล็กทรอนิกส์สองมิติในระบบรอยต่อเฮเทอโรต่างๆจะนำเสนอตามลำดับดังนี้

ระบบ $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ (LAO/STO)

โครงสร้างเฮเทอโร LAO/STO เป็นผิวยรอยต่อที่เกิดจากการปลูกผลึกต่อกันของวัสดุที่มีขั้วและไม่มีขั้ว ในปี ค.ศ. 2004 โอโตโมะและฮวง ได้ทำการปลูกผลึก LAO บน STO พบว่าความไม่ต่อเนื่องของขั้วไฟฟ้าภายในวัสดุทั้งสอง (polar discontinuity) ทำให้เกิดพลังงานศักย์กักกันเป็นสาเหตุทำให้เกิดการเหนี่ยวนำอิเล็กทรอนิกส์สองมิติที่บริเวณผิวยรอยต่อ โดยพบว่ามีสภาพเคลื่อนที่ได้มีค่า $\sim 10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ (Ohtomo & Hwang, 2004) สำหรับการปลูกผลึกชนิดเอ็น (n-type) จะทำการปลูกผลึกให้เกิดระนาบต่อกันระหว่าง $(\text{TiO})^0/(\text{LaO})^+$ ขณะที่การปลูกผลึกชนิดพี (p-type) จะเกิดการต่อกันระหว่างระนาบ $(\text{SrO})^0/(\text{AlO})^-$ ซึ่งพบว่าการปลูกผลึกชนิดเอ็นเท่านั้นที่นำไฟฟ้า

กระบวนการเหนี่ยวนำอิเล็กทรอนิกส์สองมิติเกิดจากความไม่ต่อเนื่องของขั้วไฟฟ้าจะทำให้เกิดบอศักย์ในชั้น STO (Y. Z. Chen, 2018) ส่งผลให้มีอิเล็กทรอนิกส์จากชั้นบนสุดในแถบวาเลนซ์ของ LAO เคลื่อนย้ายมายังแถบนำของ STO และอิเล็กทรอนิกส์เหล่านั้นถูกกักด้วยบอศักย์ในชั้น STO เรียกกลไกนี้ว่าการเคลื่อนย้ายประจุ อย่างไรก็ตามจากการทดลองกลับพบว่าการนำไฟฟ้าบริเวณผิวยรอยต่อ LAO/STO จะเกิดขึ้นเมื่อปลูกผลึกโครงสร้างชนิดเอ็น (n-type) เท่านั้นและยังพบว่าความดันออกซิเจนระหว่างการปลูกผลึกส่งผลต่อสภาพการนำไฟฟ้า โดยการนำไฟฟ้าจะเกิดขึ้นเมื่อปลูกผลึกที่ความดันออกซิเจน 10^{-1} Pa หรือต่ำกว่า ทำให้เกิดช่องว่างอะตอมออกซิเจนที่ชั้น STO (Brinkman et al., 2007); (Herranz et al., 2007); (Kalabukhov et al., 2007)

นอกจากนี้ยังพบหลักฐานว่าบริเวณผิวรอยต่อ LAO/STO เกิดการแพร่และแทนที่ระหว่างไอออน Sr^{2+} และ La^+ (Chambers et al., 2010); (Willmott et al., 2007) ซึ่งการเกิดช่องว่างอะตอมออกซิเจนและการแทนที่ของไอออนบวกนั้นเป็นสาเหตุที่ทำให้การปลูกผลึก LAO/STO ชนิดเอ็นเกิดการนำไฟฟ้า โดยมีความหนาแน่นอิเล็กตรอนอยู่ในช่วง 10^{13} - 10^{14} cm^{-2}

ระบบ $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3/\text{SrTiO}_3$ (GAO/STO)

ในปี ค.ศ. 2013 เฉินและคณะ (Y. Z. Chen et al., 2013) พบว่าอิเล็กตรอนสองมิติสามารถถูกเหนี่ยวนำได้จากการปลูกผลึกระหว่าง $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ (GAO) และ SrTiO_3 โดยระบบ GAO/STO สามารถให้สภาพเคลื่อนที่ได้สูงถึง $1.4 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ที่อุณหภูมิ 2 เคลวิน และความหนาแน่นอิเล็กตรอนอยู่ในช่วง 10^{11} - 10^{13} cm^{-2} เนื่องจากการปลูกผลึกของระบบ GAO/STO จะให้ผลลัพธ์ที่ดีกว่าการปลูกผลึกของระบบ LAO/STO เพราะความแตกต่างระหว่างค่าคงตัวผลึกประมาณ 1.2% ($a_{\text{STO}}=3.905\text{\AA}$, $a_{\text{GAO}}=7.911\text{\AA}$) (S. Zhou & L. Snyder, 1991) เมื่อเทียบกับระบบ LAO/STO ซึ่งมีความแตกต่างอยู่ที่ 3.2% ความแตกต่างระหว่างค่าคงตัวผลึกที่น้อยกว่าแสดงถึงโครงสร้างผลึกมีความสมบูรณ์ของโครงผลึกมากกว่าส่งผลให้สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสูงกว่า แม้ว่าตำแหน่งของไอออนบวกจะต่างกันแต่อะตอมออกซิเจนของ GAO ก็สามารถจับคู่กับอะตอมออกซิเจนของ STO ได้เป็นอย่างดีจึงทำให้การปลูกผลึก GAO บน STO ได้ผลลัพธ์ที่น่าสนใจ (Y. Z. Chen et al., 2013) โดยสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนเป็นค่าสูงสุดในกลุ่มโครงสร้างเฮเทอโรสตรัคเจอร์ออกไซด์โลหะทรานซิชัน

ระบบ $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ (CZO/STO)

ในปี ค.ศ. 2015 มีการค้นพบอิเล็กตรอนสองมิติจากการปลูกผลึกระหว่างวัสดุไม่มีขั้วสองชนิดภายใต้รอยต่อเฮเทอโร $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ (CZO/STO) (Y. Chen et al., 2015) การปลูกผลึกของวัสดุไม่มีขั้ว CZO ลงบนฐานรองของวัสดุไม่มีขั้ว STO ได้ค้นพบปรากฏการณ์ใหม่ได้แก่ การเหนี่ยวนำอิเล็กตรอนสองมิติสามารถเหนี่ยวนำได้จากการปลูกผลึกระหว่างวัสดุไม่มีขั้ว ระบบสามารถเหนี่ยวนำอิเล็กตรอนที่มีความหนาแน่นสูง 10^{12} - 10^{15} cm^{-2} และมีสภาพเคลื่อนที่ได้สูงถึง $6.1 \times 10^4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ที่อุณหภูมิ 2 เคลวิน จากการวิเคราะห์ลักษณะเฉพาะของรอยต่อ CZO/STO พบว่าบริเวณผิวรอยต่อเกิดการแลกเปลี่ยนไอออนบวกซึ่งมีระยะการแพร่ของไอออนบวกประมาณ 1-2 uc ($\Delta \sim 0.4$ - 0.8 nm) และการเปลี่ยนตำแหน่งของไอออนบวกของ Ca และ Zr ภายในโครงผลึกของ CZO บริเวณใกล้ผิวรอยต่อ สำหรับผลึก CZO เกิดการเคลื่อนที่

โดยไอออนบวกของ Ca และ Zr จะเคลื่อนเข้าหาระนาบของ TiO_2 ซึ่งลักษณะดังกล่าวทำให้เกิดความเครียดอัด (compressive strain) ขึ้นในผลึก CZO และความเครียดอัดสามารถสร้างเพียโซอิเล็กทริกโพลาริเซชันขึ้นภายในฟิล์ม CZO ผลการทดลองดังกล่าวได้ถูกยืนยันจากผลการคำนวณทางทฤษฎีว่าโพลาริเซชันชนิดเพียโซอิเล็กทริกสามารถเหนี่ยวนำอิเล็กตรอนสองมิติได้ (Nazir, Cheng, & Yang, 2016) นับเป็นองค์ความรู้ใหม่ที่ทำให้ทราบว่าการเหนี่ยวนำอิเล็กตรอนเกิดจากเพียโซอิเล็กทริกโพลาริเซชันภายในวัสดุได้อีกวิธีหนึ่ง

ลักษณะเด่นอีกประการของระบบ CZO/STO คือความสัมพันธ์อย่างมีนัยยะของความสามารถในการนำไฟฟ้าบริเวณผิวรอยต่อกับความหนาของฟิล์ม CZO (Y. Chen et al., 2015) พบว่าฟิล์ม CZO ที่มีความหนาน้อยกว่าความหนาวิกฤต (critical thickness; t_c) จะไม่มีอิเล็กตรอนสองมิติเกิดขึ้น เนื่องจากระดับพลังงานของผู้ให้ E_D (donor energy) ของ CZO อยู่ต่ำกว่าแถบนำ (conduction band) ของ STO แต่เมื่อความหนาของฟิล์ม CZO เพิ่มขึ้นจนถึงความหนาวิกฤต t_c แถบวาเลนซ์จะสูงขึ้นจนทำให้ระดับ E_D อยู่บนแถบนำของ STO ผลดังกล่าวทำให้อิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์ของ CZO จะสามารถเคลื่อนย้ายไปยังแถบนำของ STO และทำให้เกิดอิเล็กตรอนสองมิติที่บริเวณผิวรอยต่อ อย่างไรก็ตามเมื่อ $t > 15\text{uc}$ ความหนาแน่นอิเล็กตรอนจะเพิ่มขึ้นอย่างมากเป็นผลจากการเกิดช่องว่างอะตอมออกซิเจน (oxygen vacancy) บริเวณผิวรอยต่อและภายในผลึก STO อาจกล่าวได้ว่าการเหนี่ยวนำอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO เกิดจากกระบวนการเกิดช่องว่างอะตอมออกซิเจนและความไม่ต่อเนื่องของข้อไฟฟ้าจากเพียโซอิเล็กทริกโพลาริเซชันของชั้นฟิล์ม CZO นอกจากนั้นสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนพบว่าลดลงเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นอีกด้วย จนถึงปัจจุบันผลการทดลองของสมบัติทางไฟฟ้าที่พบในระบบ CZO/STO ยังไม่มีการอธิบายปรากฏการณ์อย่างชัดเจน

สมบัติทางไฟฟ้า

การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในวัสดุภายใต้อิทธิพลของสนามไฟฟ้าภายนอกหรือความสามารถยอมให้กระแสไฟฟ้าไหลผ่านของวัสดุเป็นหัวข้อที่สำคัญในการศึกษาสมบัติทางไฟฟ้า โดยภายในวัสดุนั้นล้วนมีสิ่งกีดขวางที่มีผลต่อการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน ซึ่งสิ่งกีดขวางภายในวัสดุมีอยู่ด้วยกันหลายชนิด ได้แก่ สารเจือ (impurity) ความไม่สมบูรณ์ของผลึก (lattice imperfections) และการสั่นของโครงผลึก (lattice vibration) เป็นต้น ดังนั้นการศึกษาศักยภาพไฟฟ้าของวัสดุก็คือการศึกษาพฤติกรรมของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของสิ่งกีดขวางภายในวัสดุนั้นเอง

ในหัวข้อนี้ศึกษาปริมาณที่เรียกว่า สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน (electron mobility) ซึ่งเป็นปริมาณที่แสดงความสัมพันธ์ของระบบมหภาคและระบบจุลภาคผ่านการวิเคราะห์สมการการขนส่งของโบลซมานน์ (Boltzmann transport equation) เวลาปลอดการชน (relaxation time) และอัตราการกระเจิงของระบบอิเล็กตรอนสองมิติ (transition rate)

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน

ในการศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าของวัสดุ สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน (μ) เป็นปริมาณทางฟิสิกส์ที่มีบทบาทสำคัญอย่างมากต่อการเข้าใจสมบัติทางไฟฟ้าซึ่งถูกนิยามดังสมการ

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*} \quad (2.14)$$

เมื่อ e คือประจุอิเล็กตรอน τ คือเวลาปลอดการชน และ m^* คือมวลยังผลอิเล็กตรอน สำหรับเวลาปลอดการชน (τ) คือ เวลาการชนสิ่งกีดขวางครั้งแรกไปจนถึงการชนครั้งต่อไป โดยเราศึกษาสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนผ่านสมการการขนส่งของโบลซมานน์และอัตราการเปลี่ยนแปลงสถานะตามกฎหลักของเฟอร์มี (Fermi's golden rule)

สมการการขนส่งของโบลซมานน์

สมการการขนส่งของโบลซมานน์อธิบายระบบด้วยฟังก์ชันการแจกแจงของอนุภาค ซึ่งให้ข้อมูลเกี่ยวกับปรากฏการณ์การขนส่งของอนุภาค สำหรับฟังก์ชันการแจกแจงของอิเล็กตรอนจะมีค่าเปลี่ยนไปเมื่ออนุภาคชนกับสิ่งกีดขวาง (collision) เมื่ออนุภาคถูกเร่งหรือพัดพาด้วยแรงภายนอก (drift) กำหนดให้ฟังก์ชันการแจกแจงคือ $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ เมื่ออนุภาคตำแหน่ง $\vec{r}$ และโมเมนตัม $\vec{p}$ ของระบบที่เวลา t เมื่อเวลาผ่านไป dt ทำให้ตำแหน่งของอนุภาคเปลี่ยนไป $d\vec{r}$ และโมเมนตัมของอนุภาคเปลี่ยนไป $d\vec{p}$ เราเขียนฟังก์ชันการแจกแจงที่เวลาเปลี่ยนไปได้เป็น $f(\vec{r} + d\vec{r}, \vec{p} + d\vec{p}, t + dt)$

เริ่มต้นพิจารณาระบบอนุภาคถูกพัดพาด้วยแรงภายนอก $\vec{F}$ ที่ฟังก์ชันการแจกแจงเวลาเปลี่ยนไปเป็น $t - dt$ คือ $f(\vec{r} - d\vec{r}, \vec{p} - d\vec{p}, t - dt)$ ดังนั้นเราสามารถเขียนฟังก์ชันการแจกแจงที่เวลาเปลี่ยนไปได้เป็น (Hamaguchi, 2001)

$$f(\vec{r} - d\vec{r}, \vec{p} - d\vec{p}, t - dt) = f(\vec{r} - \dot{\vec{r}}dt, \vec{p} - \dot{\vec{p}}dt, t - dt) \quad (2.15)$$

อัตราการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันการแจกแจงต่อหนึ่งหน่วยเวลา คือ

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{drift} = \frac{f(\vec{r} - \dot{\vec{r}}dt, \vec{p} - \dot{\vec{p}}dt, t - dt) - f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{dt} \quad (2.16)$$

เมื่อพิจารณาการกระจายเทย์เลอร์ (Taylor expansion) เฉพาะพจน์แรกของสมการ (2.16) จะสามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{drift} = -\left(\dot{\vec{p}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} f + \dot{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{\partial f}{\partial t}\right) \quad (2.17)$$

กำหนดให้แรงภายนอก $\vec{F} = \dot{\vec{p}}$ และความเร็วพดพา $\vec{v} = \dot{\vec{r}}$ เมื่อ $\vec{\nabla}_{\vec{p}}$ คือเกรเดียนเทียบกับโมเมนตัมจะได้สมการการขนส่งของโบลซมานต์สำหรับการถูกพัดพาด้วยแรงภายนอกเป็น

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{drift} = -\left(\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} f + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{\partial f}{\partial t}\right) \quad (2.18)$$

เมื่อพิจารณาที่สภาวะสมดุลกล่าวคือ ผลรวมของอัตราการเปลี่ยนแปลงฟังก์ชันการแจกแจงกรณีอนุภาคถูกพัดพาและกรณีการชนจะเป็นศูนย์ ทำให้ได้สมการการขนส่งของโบลซมานต์สำหรับการชนของอนุภาคกับสิ่งกีดขวาง (Davies, 1998)

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{drift} + \left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} = 0 \quad (2.19)$$

และ

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} = \left(\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} f + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{\partial f}{\partial t}\right) \quad (2.20)$$

อย่างไรก็ตามสมการการขนส่งของโบลซมานต์เป็นสมการที่อธิบายอัตราการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันการแจกแจงเนื่องจากการชนของอนุภาคในระบบทางกลศาสตร์คลาสสิกเท่านั้น จึงจำเป็นต้องใช้กฎหลักของเฟอร์มี (Fermi's golden rule) ในการอธิบายพฤติกรรมอิเล็กตรอนซึ่งเป็นอนุภาคทางกลศาสตร์ควอนตัม นอกจากนั้นยังจำเป็นต้องพิจารณากลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนภายใต้ระบบควอนตัมผ่านอัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอนอีกด้วย

อัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอน

อัตราการกระเจิง (transition rate) คือ อัตราการเปลี่ยนแปลงสถานะของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงของสิ่งกีดขวางภายในโครงผลึก (scattering potential energy) เป็นปริมาณที่สำคัญที่ทำให้เข้าใจว่าอิเล็กตรอนเคลื่อนที่อย่างไรในระบบกลศาสตร์ควอนตัม โดยพิจารณาการชนของอิเล็กตรอนในรูปแบบกระบวนการกระเจิงของอิเล็กตรอน (scattering process) กับสิ่งกีดขวางภายในโครงผลึกตามกฎหลักของเฟอร์มี โดยทั่วไปสารเจือความไม่สมบูรณ์ของผลึก และการสั่นของโครงผลึก นับเป็นสิ่งกีดขวางภายในผลึก และสิ่งกีดขวางจะสร้างพลังงานศักย์การกระเจิงซึ่งจะมีอันตรกิริยากับอิเล็กตรอน

ในการศึกษาอัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอนจะอาศัยสัญกรณ์ของดิแรก (Dirac notation) เพื่อกำหนดสถานะของอิเล็กตรอนในโครงผลึกด้วยฟังก์ชันคลื่น $|\phi(\vec{k})\rangle$ เมื่อ $\vec{k} \equiv (k_x, k_y)$ คือ เวกเตอร์คลื่นในระนาบสองมิติของอิเล็กตรอนในโครงผลึก จากกฎหลักของ

เฟอร์มีซึ่งพิจารณาอัตราการกระเจิง หรือ ความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอน จากสถานะเริ่มต้น $|\phi(\vec{k})\rangle$ ไปยังสถานะสุดท้าย $|\phi(\vec{k}')\rangle$ ภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงต่อหนึ่งหน่วยเวลาเป็นดังนี้

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\vec{k}, \vec{k}'}|^2 \delta(E(\vec{k}') - E(\vec{k})) \quad (2.21)$$

เมื่อ $V_{\vec{k}, \vec{k}'} \equiv \langle \phi(\vec{k}) | V(\vec{r}) | \phi(\vec{k}') \rangle$ โดย $E(\vec{k})$ คือพลังงานของอิเล็กตรอนในสถานะเริ่มต้น $E(\vec{k}')$ คือพลังงานของอิเล็กตรอนในสถานะสุดท้าย และ $V(\vec{r})$ คือพลังงานศักย์การกระเจิงไม่ขึ้นกับเวลา สำหรับการกระเจิงของอิเล็กตรอนพบว่าสถานะสุดท้ายอาจไม่ได้มีเพียงสถานะเดียว

เมื่อกำหนดให้ฟังก์ชันการแจกแจงของอิเล็กตรอนในโครงผลึกแทนด้วย $f(\vec{k})$ จะสามารถเขียนอัตราการเปลี่ยนแปลงฟังก์ชันการแจกแจงกรณีการชนของอิเล็กตรอนได้ดังนี้ (Hamaguchi, 2001)

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} = \sum_{\vec{k}'} [W(\vec{k}', \vec{k})f(\vec{k}') - W(\vec{k}, \vec{k}')f(\vec{k})] \quad (2.22)$$

เมื่อ $W(\vec{k}', \vec{k})f(\vec{k}')$ คือความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็กตรอนที่สถานะ $|\phi(\vec{k}')\rangle$ และ $W(\vec{k}, \vec{k}')f(\vec{k})$ คือความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็กตรอนที่สถานะ $|\phi(\vec{k})\rangle$ เมื่อเกิดการกระเจิงอิเล็กตรอนตามลำดับ หากพิจารณาการชนแบบยืดหยุ่นจะได้ $W(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k}', \vec{k})$ และพิจารณาระบบอยู่ที่สภาวะสมดุลจะได้ $W(\vec{k}', \vec{k})f_0(\vec{k}') = W(\vec{k}, \vec{k}')f_0(\vec{k})$ เมื่อ $f_0(\vec{k})$ เป็นฟังก์ชันการแจกแจงที่สภาวะสมดุล ดังนั้นสมการ (2.20) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} = -\sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[f(\vec{k}) - \frac{f_0(\vec{k})}{f_0(\vec{k}')} f(\vec{k}') \right] \quad (2.23)$$

สมการ (2.23) เป็นสมการขนส่งโบลซมานต์สำหรับกรณีการชนของอิเล็กตรอน จากการกำหนดเงื่อนไขบางประการและอาศัยนิยามของเวลาปลอดการชนเรียกว่า การประมาณเวลาปลอดการชน (relaxation time approximation) จะสามารถหาผลเฉลยได้ง่ายขึ้น (Hamaguchi, 2001) ดังนี้

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} = -\frac{f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})}{\tau} = -\frac{f_1(\vec{k})}{\tau} \quad (2.24)$$

กำหนดให้ฟังก์ชันการแจกแจงที่เปลี่ยนไปสำหรับกรณีการชนมีค่าน้อยมากเมื่อเทียบกับฟังก์ชันแจกแจงที่สภาวะสมดุลหรือ $f_1(\vec{k}) \ll f_0(\vec{k})$ จะได้ความสัมพันธ์ของสถานะเริ่มต้นและสถานะสุดท้ายตามลำดับดังนี้

$$f(\vec{k}) = f_0(\vec{k}) + f_1(\vec{k}) \text{ และ } f(\vec{k}') = f_0(\vec{k}') + f_1(\vec{k}') \text{ และ } f_0(\vec{k}) = f_0(\vec{k}') \quad (2.25)$$

สามารถเขียนสมการ (2.23) ใหม่ได้เป็น

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} = -f_1(\vec{k}) \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{f_1(\vec{k}')}{f_1(\vec{k})} \right] \quad (2.26)$$

จากสมการ (2.24) และ (2.26) สามารถเขียนอัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอนได้เป็น

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{f_1(\vec{k}')}{f_1(\vec{k})} \right] \quad (2.27)$$

จากสมการ (2.20) และ (2.24) เมื่อพิจารณาการนำไฟฟ้าภายใต้อิทธิพลของแรงภายนอกที่เป็นสนามไฟฟ้า $\vec{E}$ จะได้ $\vec{F} = -e\vec{E}$ และจากการที่ฟังก์ชันการแจกแจง f ไม่ขึ้นกับตำแหน่ง ดังนั้น $\vec{\nabla}_{\vec{r}} f = 0$ และเวลา $\frac{df}{dt} = 0$ จะได้

$$-e\vec{E} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f = -\frac{f_1(\vec{k})}{\tau} \quad (2.28)$$

เมื่อแทนพลังงานของอิเล็กตรอนภายในโครงผลึกที่สถานะ $\vec{k}$ ด้วย $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ และโมเมนตัมของอิเล็กตรอนในโครงผลึกแทนด้วย $\vec{p} = m^* \vec{v} = \hbar \vec{k}$ และ $\frac{\vec{p}}{\hbar} = \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$ สามารถเขียนสมการ (2.28) ใหม่ได้เป็น $f_1(\vec{k}) = e\tau \vec{E} \cdot \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial E(\vec{k})} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$ เมื่อพิจารณา $f_1 \ll f_0$ สมการ (2.28) จะอยู่ในรูป

$$f_1(\vec{k}) = \frac{e\tau}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{v} \frac{\partial f_0(\vec{k})}{\partial E(\vec{k})} \quad (2.29)$$

และสามารถเขียนฟังก์ชันการแจกแจงของอิเล็กตรอนที่สถานะ $\vec{k}'$ ได้ดังนี้

$$f_1(\vec{k}') = \frac{e\tau}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{v}' \frac{\partial f_0(\vec{k}')}{\partial E(\vec{k}')} \quad (2.30)$$

แทนสมการ (2.29) และ (2.30) ลงในสมการ (2.27) และพิจารณาที่สภาวะสมดุล $\frac{\partial f_0(\vec{k}')}{\partial E(\vec{k}')} = \frac{\partial f_0(\vec{k})}{\partial E(\vec{k})}$ จะได้

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{v'}{v} \right] \quad (2.31)$$

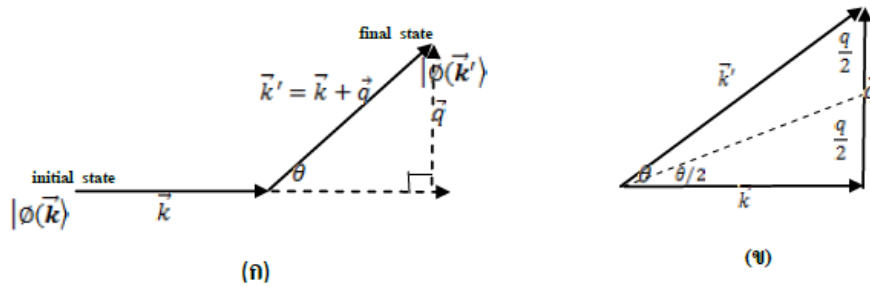
เมื่อ $v' = \frac{\hbar k'}{m^*}$ และ $v = \frac{\hbar k}{m^*}$ ดังนั้นเราสามารถเขียนอัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอนได้เป็น

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{k'}{k} \right] \quad (2.32)$$

เมื่อกำหนดให้มุม θ คือ มุมระหว่างเวกเตอร์ $\vec{k}$ และ $\vec{k}'$ จะได้ $\left| \frac{k'}{k} \right| = \cos \theta$ แสดงดังภาพประกอบ 5(ก) ดังนั้น สมการ (2.32) เขียนใหม่ได้เป็น

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}, \vec{k}') [1 - \cos \theta] \quad (2.33)$$

สมการ (2.33) เป็นสมการอัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอนภายใต้กระบวนการการกระเจิงของอิเล็กตรอนกับสิ่งกีดขวางภายในโครงผลึกตามกฎหลักของเฟอร์มีและการประมาณแบบเวลาปลดการชน สมการ (2.33) แสดงการเปลี่ยนแปลงสถานะของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงเนื่องจากสิ่งกีดขวางภายในโครงผลึก ดังนั้นการศึกษากลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนคือ การศึกษาอัตราการกระเจิงของระบบอิเล็กตรอนสองมิติภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์กระเจิงแบบต่างๆ ที่เกิดขึ้นในโครงสร้างเซมิคอนดักเตอร์นั่นเอง



ภาพประกอบ 5 เวกเตอร์คลื่นของอิเล็กตรอนในกระบวนการกระเจิงภายใต้อิทธิพลของศักย์การกระเจิงที่ไม่ขึ้นกับเวลา (ก) การเปลี่ยนแปลงโมเมนตัมเนื่องจากการกระเจิงเมื่อ q เวกเตอร์ที่เปลี่ยนไปเนื่องจากการกระเจิง (ข) ผลรวมของโมเมนตัมที่เกิดจากการกระเจิง

อัตราการกระเจิงของระบบอิเล็กตรอนสองมิติ

พิจารณาการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนสองมิติภายในโครงผลึกโดยอาศัยการประมาณมวลยังผล (effective mass approximation) เมื่อมวลยังผลอิเล็กตรอนคือมวลของอิเล็กตรอนอิสระรวมกับอันตรกิริยาจากโครงผลึกที่มีผลต่ออิเล็กตรอน ดังนั้นเราสามารถแทนฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนอิสระด้วยฟังก์ชันคลื่นระนาบ เมื่อกำหนดให้อิเล็กตรอนที่สถานะเริ่มต้นมีเวกเตอร์คลื่น $\vec{k}$ แทนด้วยฟังก์ชันคลื่น $|\phi(\vec{k})\rangle = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ และอิเล็กตรอนที่สถานะสุดท้ายซึ่งมีเวกเตอร์คลื่นเป็น $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$ แทนด้วยฟังก์ชันคลื่น $|\phi(\vec{k}')\rangle = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i(\vec{k}+\vec{q})\cdot\vec{r}}$ การคำนวณสามารถเขียน $V_{\vec{k},\vec{k}'} \equiv \langle \phi(\vec{k}') | V(\vec{r}) | \phi(\vec{k}) \rangle$ ได้เป็น

$$V_{\vec{k},\vec{k}'} = \frac{1}{A} \int d^2r e^{-i(\vec{k}+\vec{q})\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{\tilde{V}(\vec{q})}{A} \quad (2.34)$$

เมื่อการแปลงฟูเรียร์ของพลังงานศักย์การกระเจิง $V(\vec{r})$ คือ

$$\tilde{V}(\vec{q}) = \int d^2r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) \quad (2.35)$$

การคำนวณอัตราการกระเจิงของระบบอิเล็กตรอนอาศัยสมการ (2.33) (2.34) และ (2.35) และสมมติฐานดังต่อไปนี้ (Davies, 1998)

1. การกระเจิงของอิเล็กตรอนเป็นผลจากอิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงเนื่องจากสิ่งกีดขวางภายในโครงผลึก ได้แก่ สารเจือ (impurity) ความไม่สมบูรณ์ในผลึกของวัสดุ (imperfections) และ การสั่นของโครงผลึก (lattice vibration) เรียกว่า ศูนย์กลางการกระเจิง (scattering center) ดังนั้นอัตราการกระเจิงจึงเป็นสัดส่วนกับจำนวนของศูนย์กลางการกระเจิงซึ่ง

กระจายตัวในสองมิติ ($N_{imp}^{(2D)}$) และความหนาแน่นเชิงผิวของศูนย์กลางการกระเจิง (sheet density of scattering center) $n_{imp} = \frac{N_{imp}^{(2D)}}{A}$

2. พลังงานศักย์การกระเจิงไม่ขึ้นกับเวลา $V(\vec{r})$
3. การกระเจิงของอิเล็กตรอนที่ศูนย์กลางการกระเจิงแต่ละชนิดจะเป็นอิสระต่อกัน
4. การเปลี่ยนแปลงของโมเมนตัมจากการกระเจิงเป็นไปตามกฎการอนุรักษ์โมเมนตัม ($\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$) แสดงดังภาพประกอบ 5(ก)
5. ความสัมพันธ์ระหว่างขนาดของ k และ q และมุม θ แสดงดังภาพประกอบ 5(ข)

เมื่อพิจารณาเอกลักษณ์ $\frac{q}{2} = k \sin \frac{\theta}{2}$ จะได้ $(1 - \cos \theta) = \frac{q^2}{2k^2}$ และ $\Sigma_{\vec{k}'} = A \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2}$ ดังนั้นอัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงของจำนวนศูนย์กลางการกระเจิงจำนวน $N_{imp}^{(2D)}$ ตามสมการ (2.33) คือ

$$\frac{1}{\tau} = N_{imp}^{(2D)} A \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{1}{A^2} \frac{2\pi}{\hbar} |\tilde{V}(\vec{q})|^2 \delta(E(\vec{k}') - E(\vec{k})) \frac{q^2}{2k^2} \quad (2.36)$$

เพื่อหาอัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอนต้องทำการอินทิเกรตด้วยวิธีการเปลี่ยนตัวแปรการอินทิเกรตจาก q เป็น k' โดย $q = k' - k$ และ $|\vec{k}' - \vec{k}| = q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ และอาศัยความสัมพันธ์ของความหนาแน่นของศูนย์กลางการกระเจิง $n_{imp} = \frac{N_{imp}^{(2D)}}{A}$ จะได้

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= n_{imp} \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2} \frac{|\vec{k}' - \vec{k}|}{2k^2} |\tilde{V}(\vec{k}' - \vec{k})|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) \\ &= \frac{n_{imp}}{2\pi\hbar} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \frac{(2k)^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}{2k^2} |\tilde{V}\left(2k \sin \frac{\theta}{2}\right)|^2 \int_0^\infty dk' k' \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) \end{aligned} \quad (2.37)$$

จาก $\int_0^\infty dk' k' \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) = \frac{m^*}{\hbar^2}$ ดังนั้นสมการ (2.37) สามารถเขียนได้เป็น

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= n_{imp} \frac{m^*}{\pi\hbar^3} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \sin^2 \frac{\theta}{2} \left| \tilde{V}\left(2k \sin \frac{\theta}{2}\right) \right|^2 \\ &= n_{imp} \frac{2m^*}{\pi\hbar^3} \int_0^\pi d\theta \sin^2 \frac{\theta}{2} \left| \tilde{V}\left(2k \sin \frac{\theta}{2}\right) \right|^2 \end{aligned} \quad (2.38)$$

ทำการเปลี่ยนตัวแปรการอินทิเกรตของสมการ (2.38) อีกครั้งจาก θ เป็น q โดย $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ และ $d\theta = dq/k \cos \frac{\theta}{2}$ จะได้

$$\frac{1}{\tau} = n_{imp} \frac{2m^*}{\pi\hbar^3} \int_0^\pi \frac{dq}{k \cos \frac{\theta}{2}} \sin^2 \frac{\theta}{2} |\tilde{V}(q)|^2 \quad (2.39)$$

จากเอกลักษณ์ $\cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} = 1$ จะได้ $\cos \frac{\theta}{2} = \sqrt{1 - \sin^2 \frac{\theta}{2}} = \sqrt{1 - \left(\frac{q}{2k}\right)^2}$ และ $\left(\frac{q}{2k}\right)^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2}$ ดังนั้นอัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอนเพียงตัวเดียว คือ

$$\frac{1}{\tau} = n_{imp} \frac{2m^*}{\pi \hbar^3 k^3} \int_0^{2k} |\tilde{V}(q)|^2 \frac{q^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{q}{2k}\right)^2}} dq \quad (2.40)$$

6. พิจารณาอิทธิพลของระบบอิเล็กตรอนในสองมิติ (Davies, 1998) จากการทดลองพบว่าโครงสร้างเฮเทอโรมีควมหนาแน่นสูง ปัญหาสำคัญของระบบอิเล็กตรอนคือเมื่ออิเล็กตรอนมีความหนาแน่นสูง อิเล็กตรอนแต่ละตัวจะรับรู้ผลของพลังงานศักย์ภายนอกเป็นอย่างไรเมื่อเทียบกับการมีอิเล็กตรอนเพียงตัวเดียวในระบบ สำหรับกรณีที่ศูนย์กลางการกระเจิงเป็นประจุไฟฟ้าพบว่า อิเล็กตรอนจะรับรู้ถึงพลังงานศักย์คูลอมบ์เปลี่ยนไป โดยรับรู้ถึงค่าพลังงานศักย์ลดลงเป็นผลจากการจัดเรียงตัวของอิเล็กตรอนตัวอื่นๆ ในลักษณะเป็นฉากกบังพลังงานศักย์ภายนอกนั่นเอง และเรียกพลังงานศักย์ของระบบอิเล็กตรอนนี้ว่าพลังงานศักย์ก้างคูลอมบ์ (screened Coulomb potential energy) ซึ่งสัมพันธ์กับฟังก์ชันไดอิเล็กทริก $\epsilon(q)$ ตามสมการ (Davies, 1998)

$$\tilde{V}_{sc}(q) = \frac{\tilde{V}(q)}{\epsilon(q)} \quad (2.41)$$

โดยมีค่าฟังก์ชันไดอิเล็กทริก คือ

$$\epsilon(q) = 1 + \left(\frac{m^* e^2}{2\pi \epsilon_0 \hbar^2 q} \right) = 1 + \frac{q_{TF}}{q} \quad (2.42)$$

เมื่อเลขคลื่นก้างโทมัส-เฟอร์มี (Thomas-Fermi screening wave number) แทนด้วย

$$q_{TF} = \frac{m^* e^2}{2\pi \epsilon_0 \hbar^2} \quad (2.43)$$

7. อัตราการกระเจิงของระบบอิเล็กตรอนสองมิติภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงของความหนาแน่นของศูนย์กลางการกระเจิง n_{imp} แทนด้วย

$$\frac{1}{\tau} = n_{imp} \frac{m^*}{2\pi \hbar^3 k^3} \int_0^{2k} |\tilde{V}_{sc}(q)|^2 \frac{q^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{q}{2k}\right)^2}} dq \quad (2.44)$$

$$\text{หรือ} \quad \frac{1}{\tau} = n_{imp} \frac{m^*}{2\pi \hbar^3 k^3} \int_0^{2k} \left| \frac{\tilde{V}(q)}{\epsilon(q)} \right|^2 \frac{q^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{q}{2k}\right)^2}} dq \quad (2.45)$$

อัตราการกระเจิงของระบบอิเล็กตรอนสองมิติตามสมการ (2.45) เป็นสมการสำคัญที่ใช้ในการคำนวณสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน μ ตามสมการ

$$\mu = \frac{e}{m^* \left(\frac{1}{\tau} \right)} \quad (2.46)$$

การคำนวณหาอัตราภาระเงินต้องทราบการแปลงฟูรีเยร์ของพลังงานศักย์การกระเจิงของแต่ละศูนย์กลางการกระเจิง $V_i(q)$ ซึ่งเป็นอิสระแก่กัน ดังนั้นสิ่งแรกที่ต้องทราบคือพลังงานศักย์การกระเจิงเนื่องจากศูนย์กลางการกระเจิงชนิดต่างๆ $V_i(\vec{r})$ ที่เกิดขึ้นในโครงสร้างเฮเทอโร



บทที่ 3

กลไกการกระเจิงและสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน

การศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าของโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO จะศึกษาผ่านกระบวนการขนส่งอิเล็กตรอน จากการวิเคราะห์กลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนและสภาพเคลื่อนที่ได้ในโครงสร้างเฮเทอโร เพื่ออธิบายสมบัติทางไฟฟ้าจำเป็นต้องทำความเข้าใจกลไกการกระเจิงที่เป็นไปได้ทั้งหมดในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO และคำนวณสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงรูปแบบต่างๆ สำหรับงานวิจัยนี้เสนอแบบจำลองของพลังงานศักย์การกระเจิง 4 แบบ ดังนี้ สารเจือพื้นหลัง ความไม่เรียบของผิวรอยต่อ โฟนอนเชิงแสงแนวขนาน และอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน สำหรับขั้นสุดท้ายทำการเปรียบเทียบผลการคำนวณทางทฤษฎีกับผลการทดลองสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน

การเปรียบเทียบผลระหว่างผลการคำนวณและผลการทดลองเป็นกระบวนการเพื่ออธิบายกลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้าง CZO/STO นอกจากนั้นยังเป็นการตรวจสอบความถูกต้องของแบบจำลองพลังงานศักย์การกระเจิงภายในของระบบ การเปรียบเทียบผลจะอาศัยหลักของแมทเทียสเซน (Matthiessen's rule) (Davies, 1998) เพื่อหาสภาพเคลื่อนที่ได้รวมของอิเล็กตรอน (total electron mobility) โดยมีสมมติฐานว่ากลไกการกระเจิงรูปแบบต่างๆ เป็นอิสระต่อกันและสามารถรวมกันได้ตามหลักของพีชคณิตทั่วไปจากสมการสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน

$$\mu = \frac{e}{m^*(1/\tau)} \quad (3.1)$$

และพิจารณาอัตราการกระเจิงรวมตามหลักของแมทเทียสเซนที่ว่าด้วยอัตราการกระเจิงรวมของอิเล็กตรอนเกิดจากผลรวมของอัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอนแต่ละชนิดที่เป็นอิสระต่อกัน

$$\frac{1}{\tau_{tot}} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_3} + \dots \quad (3.2)$$

นำ m^*/e คูณสมการ (3.2) ทั้งสมการจะได้

$$\frac{m^*}{e} \frac{1}{\tau_{tot}} = \frac{m^*}{e} \frac{1}{\tau_1} + \frac{m^*}{e} \frac{1}{\tau_2} + \frac{m^*}{e} \frac{1}{\tau_3} + \dots \quad (3.3)$$

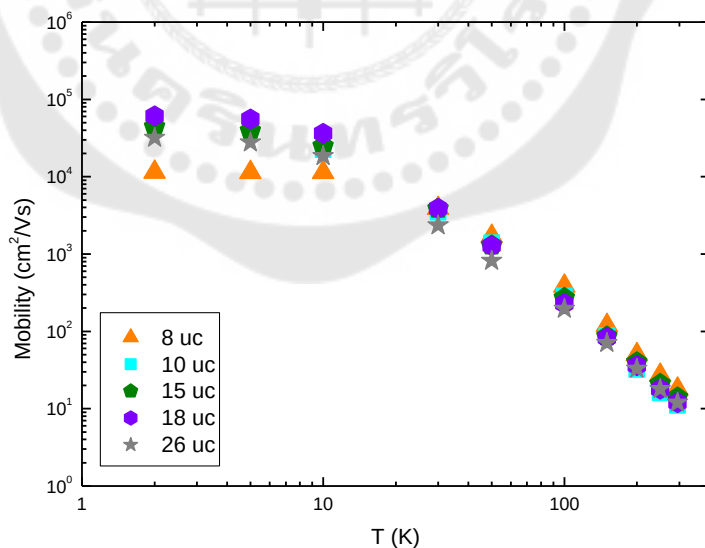
ดังนั้นสภาพเคลื่อนที่ได้รวมของอิเล็กตรอนสามารถเขียนได้ตามสมการ

$$\frac{1}{\mu_{tot}} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} + \frac{1}{\mu_3} + \dots \quad (3.4)$$

หรือ
$$\frac{1}{\mu_{tot}} = \sum_i \frac{1}{\mu_i} \quad (3.5)$$

เมื่อ i คือศูนย์กลางการกระเจิงชนิดที่ 1, 2, 3,...,n จากสภาพเคลื่อนที่ได้รวมของอิเล็กตรอนตามสมการ (3.5) สามารถนำผลการคำนวณไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองซึ่งแปรผันกับทั้งอุณหภูมิสัมบูรณ์ (T) และความหนาของชั้น CZO (Y. Chen et al., 2015) แสดงดังภาพประกอบ 6 โดยใช้ผลการคำนวณเชิงตัวเลขร่วมกับค่าตัวแปรเชิงระบบซึ่งประกอบด้วยตัวแปรคงตัวของระบบ (constant parameters) และตัวแปรที่เหมาะสม (fitting parameters)

สำหรับแบบจำลองของกลไกการกระเจิงที่เป็นไปได้ในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ประกอบด้วยพลังงานศักย์การกระเจิงและสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน เมื่อพิจารณาพลังงานศักย์การกระเจิงพบว่าสมการแปรผันกับตัวแปรคงตัวของระบบและตัวแปรที่เหมาะสมซึ่งเป็นปริมาณที่วัดได้จากการทดลอง โดยการศึกษาสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนเรียงตามลำดับกลไกการกระเจิงดังต่อไปนี้ สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของสารเจือปนหลัง สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน และสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน

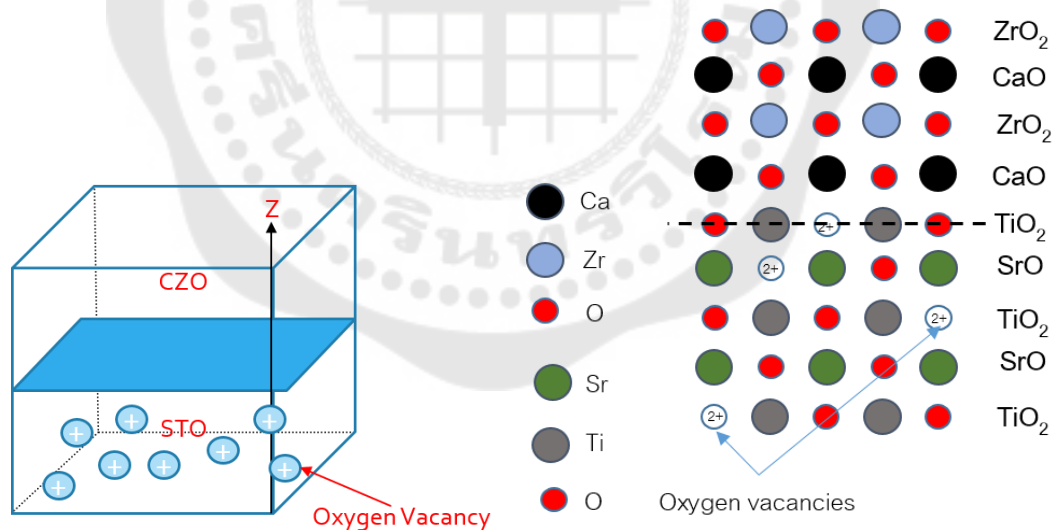


ภาพประกอบ 6 ผลการทดลองค่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติซึ่งแปรผันกับอุณหภูมิและความหนาของชั้น CZO โครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO

ที่มา: Chen Y, Trier F, Kasama T, Christensen DV, Bovet N, Balogh ZI, et al. (2015). Creation of High Mobility Two-Dimensional Electron Gases via Strain Induced Polarization at an Otherwise Nonpolar Complex Oxide Interface. Nano Letters. 15(3):1849-54.

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของสารเจือพื้นหลัง

โครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO เกิดจากการปลูกผลึก CZO ลงบนฐานรอง STO จากกระบวนการปลูกผลึกพบว่าอะตอมของออกซิเจนสามารถหลุดออกจากผลึกของวัสดุเกิดเป็นช่องว่างอะตอมออกซิเจน (oxygen vacancies) ซึ่งส่วนใหญ่จะเกิดที่ผลึกของฐานรอง STO และบริเวณรอยต่อ CZO/STO (Y. Chen et al., 2015) โดยการเกิดช่องว่างอะตอมออกซิเจนจะแสดงสมบัติเป็นจุดประจุไฟฟ้าบวกตามแบบจำลองช่องว่างอะตอมออกซิเจนแสดงดังภาพประกอบ 7 อิเล็กตรอนสองมิติซึ่งถูกกักอยู่ในชั้น STO ที่บริเวณรอยต่อจะเกิดอันตรกิริยากับช่องว่างอะตอมออกซิเจนในรูปแบบของพลังงานศักย์คูลอมบ์ เรียกว่า การกระเจิงของสารเจือพื้นหลัง (BI)



ภาพประกอบ 7 แบบจำลองการเกิดช่องว่างอะตอมของออกซิเจน

จากงานวิจัยของเฮส (Hess, 1979) ได้เสนอแบบจำลองเพื่ออธิบายการกระเจิงของสารเจือพื้นหลังจากการกำหนดให้พลังงานศักย์กักกันมีรูปแบบบ่อศักย์อนันต์และกำหนดฟังก์ชันคลื่นในบ่อศักย์อนันต์เป็นไปตามความสัมพันธ์

$$\psi = \left(\frac{2}{LA}\right)^{1/2} \exp(ikr) \sin \frac{\pi n z}{L} \quad (3.6)$$

โดยที่ n คือเลขควอนตัม k คือเวกเตอร์คลื่นสองมิติ L คือความกว้างของบ่อศักย์และ A คือพื้นที่กำหนดให้ไอออนบวกของช่องว่างอะตอมของออกซิเจนเป็นจุดประจุที่ตำแหน่ง $z = z_0$ ดังนั้นพลังงานศักย์ไฟฟ้าของจุดประจุสามารถหาได้จากสมการปัวซอง (Stern & Howard, 1967) ดังนี้

$$\nabla^2 \phi(r, z) - 2 \sum_n S_n g_n(z) \int_0^L \phi(r, z) g_n(z) = -\frac{e}{\epsilon_0 \kappa_s} \delta(r) \delta(z - z_0) \quad (3.7)$$

เมื่อ $S_1 = e^2 n_s / 2 \epsilon_0 \kappa_s k_B T$ คือค่าคงที่กำบัง (screening constant)

$g_n(z) = 2 \sin^2(\pi z n / L) / L$ คือฟังก์ชันการกระจายตัวของจุดประจุและ z_m เป็นค่าเฉลี่ยที่เหมาะสมของ z ดังนั้นพลังงานศักย์ไฟฟ้าของจุดประจุแทนด้วยสมการ

$$\phi_n(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dz' \frac{\exp(-q|z-z'|)}{2q} \times \left[2 \sum_n L S_n \phi(q, z_m) g_n(z_m) g_n(z') - \frac{e}{\epsilon_0 \kappa_s} \delta(r) \delta(z - z_0) \right] \quad (3.8)$$

การคำนวณเมทริกซ์การกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนและสารเจือพื้นหลังสามารถแทนด้วยสมการ (Hess, 1979)

$$|\tilde{V}(q)|^2 = \frac{e^4}{4A^2 L \epsilon_0^2 \kappa_s^2 (q + q_{TF})^2} \int_0^{\infty} e^{-q|z_0|} N_{BI}(z_0) dz_0 \quad (3.9)$$

และสมการอัตราการกระเจิงตามสมการ

$$\frac{1}{\tau} = \sum_q W(\vec{k}, \vec{k}') (1 - \cos \theta)$$

หรือ

$$\frac{1}{\tau} = \frac{A^2 L}{(2\pi)^2} \int d^2 q \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) |\tilde{V}(q)|^2 (1 - \cos \theta) \delta(E_{k'} - E_k) \quad (3.10)$$

ดังนั้นอัตราการกระเจิงจากอิทธิพลของสารเจือพื้นหลังเป็นไปตามสมการ

$$\frac{1}{\tau} = \frac{e^4}{8\pi \hbar \epsilon_0^2 \kappa_s^2} \int d^2 q \left(\int_0^{\infty} e^{-q|z_0|} N_{BI}(z_0) dz_0 \right) \frac{(1 - \cos \theta)}{(q + q_{TF})^2} \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) \quad (3.11)$$

เมื่อ k' คือเลขคลื่นของอิเล็กตรอนสองมิติที่สถานะสุดท้าย สามารถหาปริพันธ์ของสมการ (3.11)

เมื่อกำหนดให้สารเจือพื้นหลังกระจายตัวอย่างความสม่ำเสมอและความหนาแน่นเชิงปริมาตรของสารเจือพื้นหลังเป็น N_{BI} จะได้ $\int_0^{\infty} e^{-q|z_0|} N_{BI}(z_0) dz_0 = \frac{N_{BI}}{q}$ อาศัยเอกลักษณ์ของปริพันธ์

$$\int_0^{\infty} dk' k' \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) = \frac{m^*}{\hbar^2} \text{ และหาปริพันธ์ในสองมิติของ } q \text{ จะได้สมการ}$$

$$N_{BI} \int d^2 q \frac{(1 - \cos \theta)}{q(q + q_{TF})^2} \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) = \frac{m^*}{\hbar^2} N_{BI} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \frac{(1 - \cos \theta)}{q(q + q_{TF})^2} \text{ ดังนั้นอัตราการ}$$

กระเจิงของสารเจือพื้นหลังสามารถเขียนได้ตามสมการ

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m^* e^4 N_{BI}}{8\pi \epsilon_0^2 \kappa_s^2 \hbar^3} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(1-\cos\theta)}{q(q+q_{TF})^2} d\theta \quad (3.12)$$

เมื่อพิจารณาอินทิกรัลในสมการ (3.12) และอาศัยเอกลักษณ์ $q = 2k \sin(\theta/2)$ และ

$1 - \cos\theta = q^2/2k^2$ อินทิกรัลสามารถเขียนได้เป็น

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(1-\cos\theta)}{q(q+q_{TF})^2} d\theta &= \int_0^{2\pi} \frac{q^2/2k^2}{q(2k\sin(\theta/2)+q_{TF})^2} d\theta \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{\sin(\theta/2)}{k^3(2\sin(\theta/2)+\frac{q_{TF}}{k})^2} d\theta \\ &= 2 \int_0^{\pi} \frac{\sin\theta}{k^3(2\sin\theta+\frac{q_{TF}}{k})^2} d\theta \end{aligned}$$

เมื่อกำหนดให้ $k = k_F$ ดังนั้นอัตราการกระเจิงของสารเจือปนหลังสามารถเขียนได้ตามสมการ

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m^* e^4 N_{BI}}{4\pi \epsilon_0^2 \kappa_s^2 \hbar^3 k_F^3} \int_0^{\pi} \frac{\sin\theta}{(2\sin\theta+\frac{q_{TF}}{k_F})^2} d\theta \quad (3.13)$$

ดังนั้นสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของสารเจือปนหลังแสดงดังสมการ (Hess, 1979)

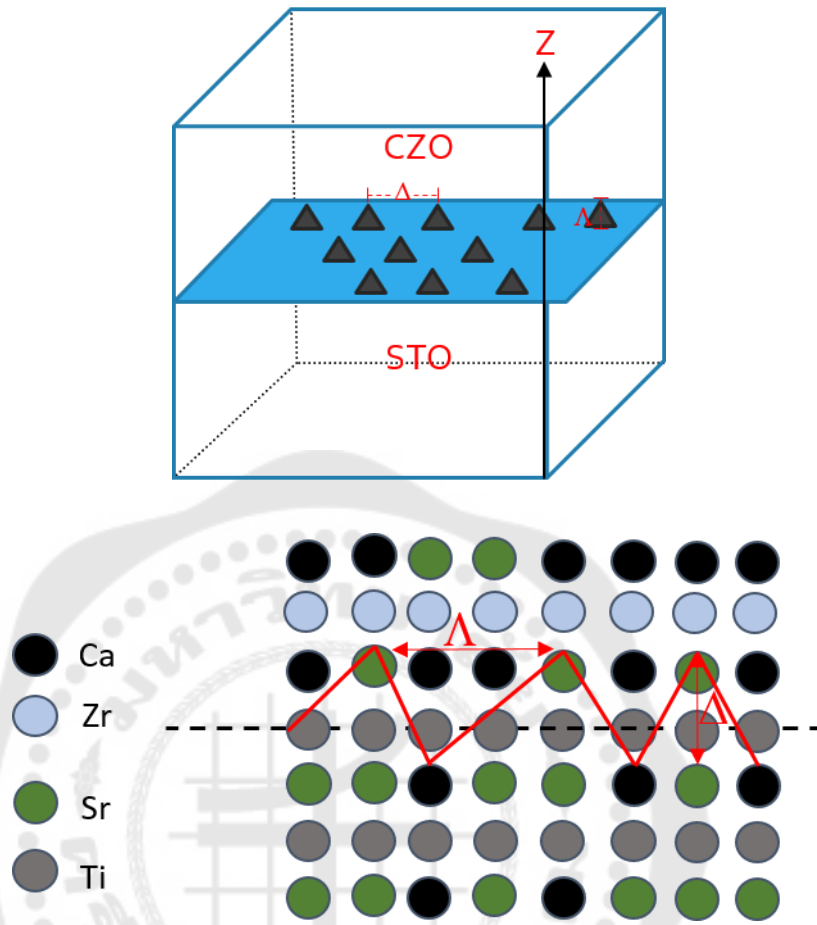
$$\mu_{BI} = \frac{4\pi \epsilon_0^2 \kappa_s^2 \hbar^3 k_F^3}{m^* e^3 N_{BI} I_{BI}} \text{ และ } I_{BI} = \int_0^{\pi} \frac{\sin\theta}{(2\sin\theta+\frac{q_{TF}}{k_F})^2} d\theta \quad (3.14)$$

เมื่อกำหนดให้ $k_F = \sqrt{2\pi n_s}$ คือเวกเตอร์เลขคลื่นเฟอร์มี (Fermi wave vector) และ

$q_{TF} = m^* e^2 / 2\pi \epsilon_0 \kappa_s \hbar^2$ คือเลขคลื่นก้ำบังทอมัส-เฟอร์มี (Thomas-Fermi screening)

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ

จากการทดลองพบว่าขณะกระบวนการปลูกผลึก CZO ลงบน STO เกิดการแพร่ของไอออนบวก Ca^{2+} และ Sr^{2+} ระหว่างผิวรอยต่อ โดยไอออน Ca^{2+} จะแพร่ข้ามรอยต่อไปแทนที่ไอออน Sr^{2+} และกลับกัน Sr^{2+} จะแพร่ไปแทนที่ Ca^{2+} ซึ่งระยะทางของการแพร่ประมาณ 1-2 หน่วยเซลล์ จากผิวรอยต่อเรียกว่า การแลกเปลี่ยนไอออนบวกที่ผิวรอยต่อ จากการวิเคราะห์พบว่าความไม่เรียบของผิวรอยต่อสัมพันธ์กับความสูงเฉลี่ยของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (Δ) และระยะห่างสหสัมพันธ์ของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (Λ) ตามแบบจำลองความไม่เรียบของผิวรอยแสดงดังภาพประกอบ 8



ภาพประกอบ 8 แบบจำลองการเกิดความไม่เรียบของผิวรอยต่อ

จากการศึกษางานวิจัยเกี่ยวกับความไม่เรียบของผิวรอยต่อพบว่าพลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อเป็นไปตามสมการ (Daengprom & Thongnum, 2016)

$$V_{IR}(\vec{r}) = eE_{eff}\Delta(\vec{r}) \quad (3.15)$$

พิจารณาอัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอนตามสมการ $\frac{1}{\tau} = \sum_{\vec{q}} W(\vec{k}, \vec{k}') (1 - \cos \theta)$ ซึ่งเป็นความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนจากสถานะเริ่มต้นไปยังสถานะสุดท้ายตามกฎหลักของเฟอร์มีจะได้

$$\frac{1}{\tau} = \left(\frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2q \right) \left(\frac{2\pi}{\hbar} |\tilde{V}(q)|^2 \delta(E(\vec{k}') - E(\vec{k})) \right) (1 - \cos \theta) \quad (3.16)$$

เมื่อแทนค่าเอกลักษณ์และความสัมพันธ์ดังต่อไปนี้ $(1 - \cos \theta) = \frac{q^2}{2k^2}$, $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$, $dq = dk'$ และ $|\vec{k}' - \vec{k}| = q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ ทำการแปลงอินทิกรัลให้อยู่รูปของมุม θ ($0 < \theta < \pi$) จะได้

$$\frac{1}{\tau} = \frac{A}{2\pi\hbar} \int_0^\pi (2\sin^2 \frac{\theta}{2}) \left| \tilde{V}(2k\sin \frac{\theta}{2}) \right|^2 d\theta \int_0^\infty k' \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) dk' \quad (3.17)$$

จาก $\int_0^\infty dk' k' \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) = \frac{m^*}{\hbar^2}$ และพิจารณาอินทิกรัลจะได้สูตรการกระเจิง

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m^* A}{\pi \hbar^3} \int_0^\pi d\theta (\sin^2 \frac{\theta}{2}) \left| \tilde{V}(2k\sin \frac{\theta}{2}) \right|^2 \quad (3.18)$$

จาก $\sin^2 \frac{\theta}{2} = \left(\frac{q}{2k}\right)^2$ และทำการแปลงอินทิกรัลจาก θ ไปเป็น q จะได้

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m^* A}{\pi \hbar^3} \int_0^{2k} \frac{q^2/4k^2}{k \cos(\theta/2)} |\tilde{V}(q)|^2 dq \quad \text{เมื่อพิจารณาระบบอิเล็กตรอนแนวคิดพลังงานศักย์คูลอมบ์}$$

$\tilde{V}(q)_{sc} = \tilde{V}(q)/\varepsilon(q)$ จะได้

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m^* A}{4\pi \hbar^3 k^3} \int_0^{2k} \frac{|\tilde{V}(q)|^2}{\varepsilon(q)^2} \frac{q^2}{\sqrt{1-(\frac{q}{2k})^2}} dq \quad (3.19)$$

การคำนวณอัตราการกระเจิงตามสมการ (3.19) ต้องอาศัยค่าการแปลงฟูเรียร์ของพลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อตามรูปแบบ (Zanato, Gokden, Balkan, Ridley, & Schaff, 2004)

$$|\tilde{V}(q)|^2 = \frac{\pi(e\Delta E_{eff})^2}{4A} e^{-q^2 \Lambda^2/4} \quad (3.20)$$

เมื่อค่าสนามไฟฟ้ายังผล (effective electric field) ตามสมการ $E_{eff} = en_s/2\varepsilon_0\kappa_s$ และค่าฟังก์ชันไดอิเล็กทริก $\varepsilon(q) = (q + q_{TF})/q$ ดังนั้นอัตราการกระเจิงของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์ของความไม่เรียบของผิวรอยต่อคือ

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m^* e^4 \Delta^2 \Lambda^2 n_s^2}{64 \varepsilon_0^2 \kappa_s^2 \hbar^3 k^3} \int_0^{2k} \frac{q^4 e^{-q^2 \Lambda^2/4}}{(q+q_{TF})^2 \sqrt{1-(\frac{q}{2k})^2}} dq \quad (3.21)$$

ทำการแปลงอินทิกรัลจาก q ไปเป็น u เมื่อ $u = q/2k$ จะได้

$$\int_0^{2k} \frac{q^4 e^{-q^2 \Lambda^2/4}}{(q+q_{TF})^2 \sqrt{1-(\frac{q}{2k})^2}} dq = 8k^3 \int_0^1 \frac{u^4 e^{-k^2 u^2 \Lambda^2}}{(u+\frac{q_{TF}}{2k})^2 \sqrt{1-u^2}} du \quad \text{และกำหนดให้ } k = k_F \text{ ดังนั้นอัตรา}$$

การกระเจิงเป็นไปตามสมการ

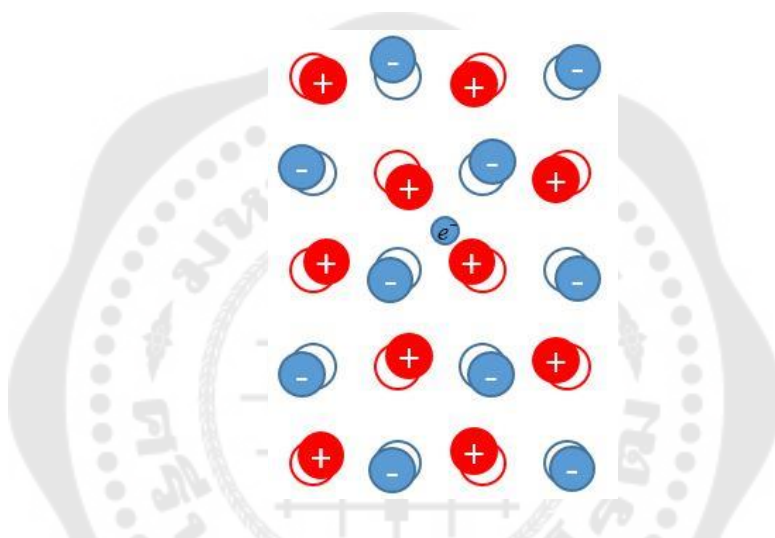
$$\frac{1}{\tau} = \frac{m^* e^4 \Delta^2 \Lambda^2 n_s^2}{8 \varepsilon_0^2 \kappa_s^2 \hbar^3} \int_0^1 \frac{u^4 e^{-k_F^2 u^2 \Lambda^2}}{(u+\frac{q_{TF}}{2k_F})^2 \sqrt{1-u^2}} du \quad (3.22)$$

สมการ (3.22) แสดงอัตราการกระเจิงเนื่องจากกลไกการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนสองมิติและความไม่เรียบของผิวรอยต่อ ดังนั้นสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของความไม่เรียบของผิวรอยต่อสามารถได้ตามสมการ (Zanato et al., 2004)

$$\mu_{IR} = \frac{8 \varepsilon_0^2 \kappa_s^2 \hbar^3}{m^* 2 e^3 \Delta^2 \Lambda^2 n_s^2 I_{IR}} \quad \text{และ } I_{IR} = \int_0^1 \frac{u^4 e^{-k_F^2 u^2 \Lambda^2}}{(u+\frac{q_{TF}}{2k_F})^2 \sqrt{1-u^2}} du \quad (3.23)$$

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของโฟนอนเชิงแสง แนวขนาน

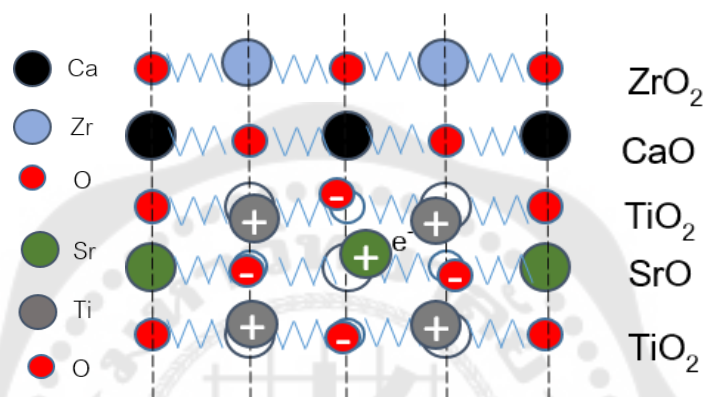
เมื่อพิจารณาที่อุณหภูมิห้องตามทฤษฎีฟิสิกส์สถานะของแข็งพบว่าอะตอมในโครงผลึกได้รับพลังงานความร้อน ($k_B T$) ทำให้เกิดการสั่นของโครงผลึกและสร้างอนุภาคโฟนอน (phonon) ในงานวิจัยสนใจอันตรกิริยาที่เกิดจากอิเล็กตรอนและโฟนอนเชิงแสงในแนวขนาน (longitudinal optical phonon: LO) หรือ โพลารอน (polaron) ว่ามีอิทธิพลต่อสมบัติการขนส่งอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO อย่างไร



ภาพประกอบ 9 แบบจำลองการเกิดโพลารอนในผลึกของสารประกอบไอออนิก

กลไกการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอนเชิงแสงแนวขนานเป็นกลไกการกระเจิงที่สำคัญอย่างมากในสารประกอบไอออนิก เนื่องจากอิเล็กตรอนมีอันตรกิริยากับโฟนอนจากการสั่นของโครงผลึก โดยจำนวนโฟนอนเป็นไปตามฟังก์ชันการแจกแจงของโบส-ไอน์สไตน์ (Bose-Einstein distribution function: $N(\hbar\omega)$) ซึ่งสัมพันธ์กับพลังงานของโฟนอน ($\hbar\omega$) และอุณหภูมิสัมบูรณ์ (T) การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในสารประกอบไอออนิกมีลักษณะเฉพาะตัวเนื่องจากอันตรกิริยาของแรงคูลอมบ์ระหว่างประจุไฟฟ้า เมื่ออิเล็กตรอนเคลื่อนที่ในโครงผลึกจะเหนี่ยวนำไอออนบวก (cations) เข้าใกล้ขณะเดียวกันจะผลักไอออนลบ (anions) ห่างออกไปแสดงดังภาพประกอบ 9 ทำให้เกิดการสูญเสียสมมาตรของพันธะไอออนิกส่งผลให้เกิดไดโพลโมเมนต์ในโครงผลึก โดยไดโพลโมเมนต์ต่อปริมาตร หรือโพลาไรเซชัน (polarization) ที่เกิดขึ้นสามารถส่งอันตรกิริยากลับไปยังอิเล็กตรอนซึ่งมีผลให้พลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนลดลง เราสามารถอธิบายปรากฏการณ์ดังกล่าวจากมวลยังผลของอิเล็กตรอนที่เพิ่มขึ้นและพบว่าแปรผันกับค่าคงตัว

อันตรกิริยาอิเล็กตรอน-โฟนอน (electron-phonon coupling constant: β) เราเรียกอนุภาคเสมือนเนื่องจากอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟลาไรเซชันเหล่านี้ว่า โพลารอน (polaron) และเรียกมวลยังผลที่เปลี่ยนไปนี้ว่า มวลของโพลารอน (polaron mass: m_p) ดังนั้นการขนส่งอิเล็กตรอนในสารประกอบไอออนิกจะมีลักษณะเฉพาะตัวเนื่องจากเป็นอันตรกิริยาระหว่างโพลารอนและโฟนอนเชิงแสงแนวขนานดังภาพประกอบ 10 นั้นเอง



ภาพประกอบ 10 แบบจำลองการเกิดอันตรกิริยาระหว่างโพลารอนและโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน

การศึกษาสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของโฟนอนเชิงแสงแนวขนานเป็นการวิเคราะห์อันตรกิริยาระหว่างโพลารอนกับโฟนอนเชิงแสงแนวขนานตามทฤษฎีของ ลี โลว์ และไพน์ส (Lee, Low, & Pines, 1953) สำหรับสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนจะอาศัยทฤษฎีการขนส่งโพลารอนของโลว์และไพน์ส (Low & Pines, 1955) ภายใต้การกำหนดค่าคงตัวของพลังค์ $\hbar$ และปริมาตรของโครงผลึก V ให้มีค่าเป็น 1 โดยสมมติฐานของทฤษฎีโลว์และไพน์สกล่าวว่าโหมดการสั่นของโฟนอนเชิงแสงแนวขนานเท่านั้นที่มีผลต่อการกระเจิงของอิเล็กตรอน และพลังงานจลน์ของโพลารอนมีค่าน้อยกว่าพลังงานของโฟนอนเชิงแสงแนวขนานมากๆ ($P^2/2m_p \ll \omega_{LO}$) ดังนั้นสามารถประมาณให้โมเมนตัมของโพลารอนมีค่าน้อยๆ ($P \rightarrow 0$) และโมเมนตัมของโพลารอนก่อนการกระเจิงมีค่าใกล้เคียงกับตอนหลังการกระเจิง $P_0 \sim P_f$ โดยสภาพเคลื่อนที่ได้ของโพลารอนสามารถเขียนได้ตามสมการ

$$\mu_{LO} = e\tau/m_p \quad (3.24)$$

เมื่อ $m_p = m^*(1 + \beta/6)$ คือ มวลของโพลารอน (polaron mass) และ $1/\tau$ คือ อัตราการกระเจิงของโพลารอนซึ่งเป็นความน่าจะเป็นของการกระเจิงจากสถานะเริ่มต้นที่มีโมเมนตัม P_0 กับโฟนอนเชิงแสงแนวขนานที่มีเวกเตอร์คลื่น k_0 ไปยังโพลารอนสถานะสุดท้ายที่มีโมเมนตัม P_f

และโฟนอนเชิงแสงแนวขนานที่มีเวกเตอร์คลื่นเปลี่ยนไป k_f เมื่อพิจารณาผลของการกระเจิงจากจำนวนโฟนอนเชิงแสงแนวขนานที่มีเวกเตอร์คลื่น k_0 ทั้งหมดตามความสัมพันธ์ $\rho(E)N(\omega_{LO})d\Omega$ เมื่อ $\rho(E)$ คือ ความหนาแน่นสถานะของโพลารอนสถานะสุดท้ายซึ่งมีค่าเท่ากับ $m_p P_0 / 2\pi^2$ และค่ามุมตันของทรงกลมในพิกัดเวกเตอร์คลื่น $d\Omega = 4\pi k_0^2 dk_0 / (2\pi)^3$

ดังนั้นอัตราการกระเจิงของโพลารอนสามารถเขียนได้ตามสมการ

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi |M|^2 \rho(E) N(\omega_{LO}) d\Omega \quad (3.25)$$

เมื่อ $|M|^2$ คือ ความน่าจะเป็นของการกระเจิงของโพลารอนสามารถคำนวณได้จากเมทริกซ์การกระเจิงของโบซอน-เฟอร์มิออน (Boson-Fermion scattering) (Low & Pines, 1955) ตามสมการ

$$S = 1 - 2\pi i \delta(E_f - E_0) R \quad (3.26)$$

และเมทริกซ์การกระเจิง R สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$R = V_{k_0} V_{k_f}^* \int d^3r \left\{ \langle \Psi_f(\vec{r}) | e^{-i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} \frac{1}{(H - E_f - \omega_{LO}) - i\varepsilon} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} | \Psi_0(\vec{r}) \rangle + \langle \Psi_f(\vec{r}) | e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} \frac{1}{(H - E_0 + \omega_{LO}) - i\varepsilon} e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} | \Psi_0(\vec{r}) \rangle \right\} \quad (3.27)$$

เมื่อ $|\Psi_f(\vec{r})\rangle$ คือฟังก์ชันคลื่นของโพลารอนสถานะสุดท้ายที่มีพลังงานจลน์ $E_f = P_f^2 / 2m_p$ และ $|\Psi_0(\vec{r})\rangle$ คือ ฟังก์ชันคลื่นของโพลารอนสถานะเริ่มต้นที่มีพลังงานจลน์ $E_0 = P_0^2 / 2m_p$

การศึกษาการกระเจิงของโพลารอนจะอาศัยฮามิลโตเนียนของโฟรลิช (Frohlich Hamiltonian) ซึ่งอธิบายอันตรกิริยาของอิเล็กตรอนกับโฟนอนเชิงแสงแนวขนานและสามารถเขียนฮามิลโตเนียนของโฟรลิชได้ตามสมการ

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \sum \omega_{LO} a_k^\dagger a_k + \sum (V_k a_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + V_k^* a_k^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}) \quad (3.28)$$

เมื่อ $\vec{p}$ คือโมเมนตัมของอิเล็กตรอน $V_k = \frac{-i\omega_{LO}(4\pi\beta)^{1/2}}{k(2m^*\omega_{LO})^{1/4}}$ คือ การแปลงฟูเรียร์ของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน และ

$$\beta = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{m^*}{2\omega_{LO}} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_s} \right) \text{ คือค่าคงตัวอันตรกิริยาอิเล็กตรอน-โฟนอนเชิงแสงแนวขนาน จากสมการที่ (3.28) ต้องอาศัยการแปลงแบบบัญญัติ (canonical transformation)}$$

เพื่อกำหนดตัวดำเนินการโมเมนตัมของอนุภาคเสมือนโพลารอนจากอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโพลาริเซชันที่เกิดจากการเหนี่ยวนำของอิเล็กตรอน อีกทั้งยังทำหน้าที่กำจัดตัวดำเนินการของอิเล็กตรอนคงเหลือเฉพาะตัวดำเนินการของโพลารอนและโฟนอนเชิงแสงแนวขนานเท่านั้น โดยการแปลงแบบบัญญัติจำเป็นต้องอาศัยตัวดำเนินการสองชุดประกอบด้วย

$S = \exp[i(\vec{P} - \sum \vec{k} a_k^\dagger a_k)]$ เมื่อ $\vec{P}$ คือตัวดำเนินการของโมเมนตัมของโพลารอนซึ่งเป็นผลรวม

ระหว่างโมเมนตัมของอิเล็กตรอนและโมเมนตัมของโฟนอน $\vec{P} = \vec{p} + \vec{k}a_k^\dagger a_k$ ทำหน้าที่กำจัดตัวดำเนินการของอิเล็กตรอนออกไป และ $U(\vec{P}) = \exp(\sum_k a_k^\dagger f(\vec{k}, \vec{P}) - a_k f^*(\vec{k}, \vec{P}))$ เมื่อ $f(\vec{k}, \vec{P}) = -\frac{V_k^*}{\omega_{LO} + (k^2/2m^*) - (\vec{k} \cdot \vec{P}/m^*)}$ แสดงอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟลาไรเซชันสำหรับฟังก์ชันคลื่นของลี โลว์ และไพนส์ (Lee et al., 1953) ซึ่งสัมพันธ์กับตัวดำเนินการแปลงแบบบัญญัติสามารถเขียนได้ตามสมการ

$$\Psi(\vec{P}) = \exp\{i(\vec{P} - \sum_k \vec{k}a_k^\dagger a_k) \cdot \vec{r}\}U(\vec{P})|\Phi_0\rangle \quad (3.29)$$

เมื่อ $|\Phi_0\rangle$ คือ สถานะพื้นของโพลารอนและมีคุณสมบัติตามสมการ $a_k|\Phi_0\rangle = 0$ และ $\langle\Phi_0|\Phi_0\rangle = 1$

การคำนวณอัตราการกระเจิงตามสมการที่ (3.25) ต้องอาศัยเมทริกซ์การกระเจิง R ตามสมการที่ (3.27) และฟังก์ชันคลื่นของลี โลว์ และไพนส์ บนสมมติฐาน $(P^2/2m_p \ll \omega_{LO})$ และ $E = E_0 = E_f$ ซึ่งสามารถแทนค่าโมเมนตัมของโพลารอน $P \rightarrow 0$ โดยค่าคงตัวอันตรกิริยาอิเล็กตรอน-โฟนอนอยู่ในระดับความแรงปานกลาง (intermediate coupling) $\beta < 6$ เมื่อแทนค่าฟังก์ชันคลื่นตามสมการที่ (3.29) ลงในสมการที่ (3.27) จะพบว่าเทอมที่สอง $H + \omega_{LO} - E_0 - i\varepsilon$ จะไม่สามารถเกิดขึ้นได้เนื่องจาก $H + \omega_{LO} - E_0 \geq \omega_{LO}$ ถ้า E_0 เป็นค่าไอเกนของ H ดังนั้นสมการ (3.27) สามารถเขียนได้เป็น

$$\begin{aligned} R &= V_{k_0}V_{k_f}^* \int d\vec{r} \langle\Phi_0|U^{-1}(\vec{P}_f)e^{[i(\vec{P}_f - \sum_k \vec{k}a_k^\dagger a_k) \cdot \vec{r}]}e^{-i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}[(H - E_f - \omega_{LO} - i\varepsilon)^{-1}]e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}}e^{-[i(\vec{P}_0 - \sum_k \vec{k}a_k^\dagger a_k) \cdot \vec{r}]}U(\vec{P}_0)|\Phi_0\rangle \\ &= V_{k_0}V_{k_f}^* \int d\vec{r} e^{i(\vec{P}_f - \vec{k}_f - \vec{P}_0 - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}} \langle\Phi_0|U^{-1}(\vec{P}_f)[(H - E_f - \omega_{LO} - i\varepsilon)^{-1}]U(\vec{P}_0)|\Phi_0\rangle \\ &= (2\pi)^3 \delta(\vec{P}_f - \vec{k}_f - \vec{P}_0 - \vec{k}_0) V_{k_0}V_{k_f}^* \langle\Phi_0|U^{-1}(\vec{P}_f)[(H - E_f - \omega_{LO} - i\varepsilon)^{-1}]U(\vec{P}_0)|\Phi_0\rangle \end{aligned} \quad (3.30)$$

จากเอกลักษณ์ $U^{-1}(\vec{P}_f)U(\vec{P}_0) = 1$ และ $U^{-1}HU = H_0 + H_1 - \frac{P_0^2}{2m_p}$ เมื่อ

$$H_0 = \frac{P_0^2}{2m^*} + \left[\sum_k a_k^\dagger a_k \left(\omega - \frac{\vec{k} \cdot \vec{k}_0}{m^*} - \frac{\vec{k} \cdot \vec{P}_0}{m_p} \right) + \frac{k_0^2}{2m^*} + \frac{\vec{k} \cdot \vec{P}_0}{m_p} + \frac{(\sum_k a_k^\dagger a_k k)^2}{2m^*} \right] \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_{kk'} \frac{\vec{k} \cdot \vec{k}'}{2m^*} \{ f^*(\vec{k})f(\vec{k}')a_k a_{k'} + 2a_k^\dagger a_{k'} f(\vec{k})f^*(\vec{k}') + a_k^\dagger a_k^\dagger f(\vec{k})f(\vec{k}') + 2a_k^\dagger a_k a_{k'} f^*(\vec{k}') + 2a_k^\dagger a_k^\dagger a_k f(\vec{k}) \} \\ &\quad - \sum_k \frac{\vec{k} \cdot \vec{k}_0}{m^*} \{ f(\vec{k})a_k^\dagger + f^*(\vec{k})a_k \} \end{aligned} \quad (3.32)$$

จากการประมาณพลังงานจลน์ของโพลารอน $E = E_0 = E_f$ ดังนั้นสามารถเขียนความสัมพันธ์ $P = P_0 = P_f$ และ $k = k_0 = k_f$ และเมทริกซ์ M ซึ่งคำนวณได้จากเมทริกซ์การกระเจิง R ดังนี้

$$M = |V_{k_0}|^2 \left\langle \Phi_0 \left| \left(H_0 + H_1 - \frac{P^2}{2m_p} - \omega_{LO} - i\varepsilon \right)^{-1} \right| \Phi_0 \right\rangle \quad (3.33)$$

จากการคำนวณของโลว์และไพน์ (Low & Pines, 1955) พบว่าเมทริกซ์ M สามารถเขียนให้อยู่ใน รูปแบบความสัมพัทธ์

$$M = \frac{|V_{k_0}|^2}{\left[\frac{k_0^2 (1-I)}{2m^*(1+I)} \omega_{LO} \right]} \quad (3.34)$$

$$\text{เมื่อ } I = \frac{1}{m^*} \sum \frac{(\vec{k} \cdot \vec{k}_0)^2 |f(\vec{k})|^2}{k_0^2 \Delta E(\vec{k}, \vec{P}_0)} \text{ และ } \Delta E(\vec{k}, \vec{P}_0) = \frac{(\vec{k} - \vec{k}_0)^2}{2m^*} + \frac{(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{P}_0}{m_P} - i\varepsilon$$

ดังนั้นการคำนวณอัตราการกระเจิงของโฟลารอนสามารถคำนวณได้จากการแทนค่า

สมการ (3.34) ลงในสมการ (3.25) จะได้

$$\frac{1}{\tau} = \left[\frac{m_P \vec{P}_0 N(\omega_{LO})}{8\pi^4} \right] \int \frac{dk_0 k_0^2 |V_{k_0}|^4}{\left[\omega_{LO} - \frac{k_0^2 (1-I)}{2m^* (1+I)} \right]^2} \quad (3.35)$$

การหาปริพันธ์สมการที่ (3.35) ต้องอาศัยการประมาณ $P \rightarrow 0$ และกระจายเทอม $I = I_1 + iI_2$

และสามารถเขียนความสัมพัทธ์ของ $\frac{1-I}{1+I} = \frac{1-I_1}{1+I_1} - \frac{2iI_2}{(1+I_1)^2}$ เมื่อ

$$I_1 = 2 \int \frac{d^3 k_0}{(2\pi)^3} \frac{(\vec{k} \cdot \vec{k}_0)^2 |f(\vec{k})|^2}{k_0^2 (\vec{k} - \vec{k}_0)^2} + O(P) \text{ และ } I_2 = \frac{2P_0 \beta \omega_{LO}^2}{(2m^* \omega_{LO})^{\frac{1}{2}} (\omega_{LO} + k_0^2/2m^*)^2} \left(\frac{m^*}{m_P} \right)$$

ดังนั้นปริพันธ์ตามสมการ (3.35) สามารถเขียนให้อยู่ในรูปแบบ

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m_P P_0 N(\omega_{LO})}{8\pi^4} \int \frac{4\pi^2 k_0^2 |V(k_0)|^4 dk_0}{\left[\omega_{LO} - \frac{k_0^2 (1-I_1)}{2m^* (1+I_1)} \right]^2 + \frac{k_0^4 I_2^2}{m^{*2} (1+I_1)^4}} \quad (3.36)$$

จากความสัมพัทธ์ $I_2 = AP_0$ และ $\lim_{P \rightarrow 0} \frac{P}{B^2 + C^2 P^2} = \frac{\pi}{C} \delta(B)$ จะได้

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m_P N(\omega_{LO})}{2\pi^2} \int \frac{k_0^2 |V(k_0)|^4 \delta(\omega_{LO} - \frac{k_0^2 (1-I_1)}{2m^* (1+I_1)}) dk_0}{\frac{Ak_0^2}{m^* (1+I_1)^2}} \quad (3.37)$$

การคำนวณสมการที่ (3.37) อาศัยเทคนิคของโลว์และไพน์ (Low & Pines, 1955) จะได้อัตราการกระเจิงของโฟลารอนดังนี้

$$\frac{1}{\tau} = \left(\frac{m_P}{m^*} \right)^2 \frac{2\beta_\mu \omega_{LO} N(\omega_{LO})}{f(\beta_\mu)} \quad (3.38)$$

เมื่อ $f(\beta_\mu)$ คือฟังก์ชันที่สัมพันธ์กับค่าคงตัวอันตรกิริยาอิเล็กตรอน-โฟนอน กรณีสารประกอบไฮไดรเจน $1.0 < f(\beta_\mu) < 1.2$ เมื่อ $0 < \beta_\mu < 3$ เมื่อแทนอัตราการกระเจิงของโฟลารอนตามสมการ (3.38) ลงในสมการของสภาพเคลื่อนที่ได้ตามสมการ

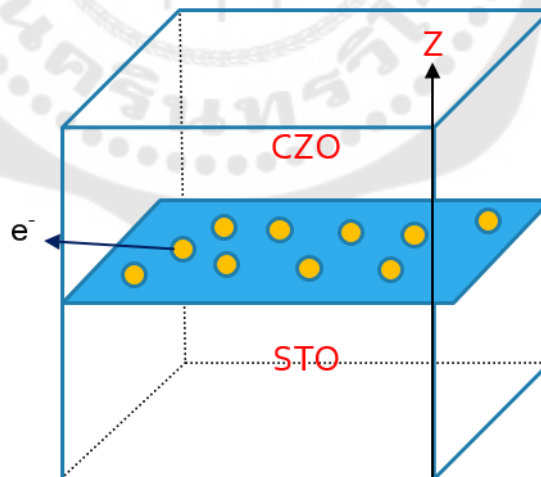
$$\mu_{LO} = \left(\frac{e}{2\beta_\mu \omega_{LO} m_P} \right) \left(\frac{m^*}{m_P} \right)^2 \frac{f(\beta_\mu)}{N(\omega_{LO})} \quad (3.39)$$

จากฟังก์ชันการแจกแจงของโบส-ไอน์สไตน์ $N(\hbar\omega_{LO}) = \frac{1}{\exp(\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T}) - 1}$ และแทนค่าคงตัวของพลังค์จะได้สมการของสภาพเคลื่อนที่ได้ของโฟลารอนภายใต้อิทธิพลของโฟนอนเชิงแสงในแนวขนาน (Frederikse & Hosler, 1967)

$$\mu_{LO} = \left(\frac{e\hbar}{2m_p\beta_\mu(\hbar\omega_{LO})} \right) \left(\frac{m^*}{m_p} \right)^2 f(\beta_\mu) \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T}\right) - 1 \right] \quad (3.40)$$

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลการกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน

สำหรับการศึกษาระบบอิเล็กตรอนที่มีความหนาแน่นสูงระดับ $n_s \sim 10^{12} - 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ อิทธิพลของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนย่อมสูงตามไปด้วย และแบบจำลองอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนแสดงดังภาพประกอบ 11 โดยทั่วไปการวิเคราะห์การนำไฟฟ้าของอิเล็กตรอนสามารถศึกษาผ่านสภาพความต้านทาน (resistivity) ของวัสดุซึ่งแปรผันกับกำลังสองของอุณหภูมิสัมบูรณ์ $\rho = AT^2$ ได้เช่นเดียวกัน จากการศึกษาพบว่ากลุ่มโลหะทรานซิชันมีค่าคงตัว $A \sim 10^{-4} - 10^{-5} \mu\Omega \cdot \text{cm}/K^2$ และกลุ่มโลหะอัลคาไลมีค่า $A \sim 10^{-6} - 10^{-7} \mu\Omega \cdot \text{cm}/K^2$ ดังนั้นเราสามารถคำนวณสภาพนำไฟฟ้า (conductivity) จากการทราบค่าสภาพความต้านทานของวัสดุผ่านความสัมพันธ์ระหว่างสภาพความต้านทานและสภาพนำไฟฟ้า $\rho = 1/\sigma$



ภาพประกอบ 11 แบบจำลองอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนภายในโครงสร้างเฮเทอโร

CZO/STO

ในปี 2017 สวิทซ์และแวนเดวอลล์ (Swift & Van de Walle, 2017) ได้ศึกษาการกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนผ่านการวิเคราะห์สมการการขนส่งของโบลซมานต์กรณีการชนกันระหว่างอิเล็กตรอนตามสมการ

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla} f + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (3.41)$$

เมื่อฟังก์ชันการแจกแจงของเฟอร์มี-ดิแรก (Fermi-Dirac distribution) เป็นไปตามสมการ

$$f(\epsilon_{n,\vec{k}}) = \frac{1}{(\exp(\frac{\epsilon_{n,\vec{k}} - \epsilon_F}{k_B T}) + 1)} \quad (3.42)$$

เมื่อ $\epsilon_{n,\vec{k}}$ คือ พลังงานของอิเล็กตรอน และ ϵ_F คือ พลังงานเฟอร์มี (Fermi energy) จากสมการการขนส่งของโบลซมานต์สำหรับกรณีการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนมีผลให้ฟังก์ชันการแจกแจงของอิเล็กตรอนเปลี่ยนไป เมื่อกำหนดให้ $\Phi_{n,\vec{k}}$ คือการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันการแจกแจงที่สภาวะสมดุล เราสามารถเขียนการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันการแจกแจงของอิเล็กตรอนจากกรณีการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนได้เป็น

$$f_{n,\vec{k}} = f(\epsilon_{n,\vec{k}}) + \Phi_{n,\vec{k}} \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \quad (3.43)$$

อาศัยการคำนวณสภาพความต้านทานกรณีการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนตามสมการ (Swift & Van de Walle, 2017)

$$\rho_{EE} = N \langle \Phi, P\Phi \rangle \quad (3.44)$$

กำหนดให้ P คือ ตัวดำเนินการของการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนสองตัวและ

$$N = \frac{(2\pi)^6}{4e^2} \frac{1}{(\sum_n \int d^3k v_{n,\vec{k}} \Phi_{n,\vec{k}} \frac{\partial f(\epsilon_{n,\vec{k}})}{\partial \epsilon_{n,\vec{k}}})^2} \quad \text{คือ ค่านอร์มอลไฟเคเตอร์}$$

การคำนวณหาสภาพต้านทานตามสมการ (3.44) อาศัยหลักการแปร (variational principle) จากการกำหนดค่าฟังก์ชันเจาะจง (trial function) เพื่อทำการแปรหาค่าผลรวมของการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอน $\langle \Phi, P\Phi \rangle$ ตามสมการ $\rho_{EE} = N \langle \Phi, P\Phi \rangle$ กำหนดให้ฟังก์ชันเจาะจงแทนด้วย $\Phi = \vec{v} \cdot \hat{u}$ เมื่อ $\hat{u}$ คือเวกเตอร์หนึ่งหน่วยในทิศทางของสนามไฟฟ้าและ $\langle A, B \rangle = \sum_n \int d^3k A B$ การหาผลรวมของการชนจากกระบวนการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนสามารถทำได้ด้วยการคำนวณปริมาณ $\langle \Phi, P\Phi \rangle$ (Klimin, Tempere, van der Marel, & Devreese, 2012)

$$\begin{aligned}
\langle \Phi, P\Phi \rangle = & \frac{1}{2k_B T} \frac{1}{(2\pi)^9} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n,n'} \int d\vec{k}_1 d\vec{k}_2 d\vec{k}_3 d\vec{k}_4 \\
& \times \left[(\vec{v}_{n,\vec{k}_1} + \vec{v}_{n',\vec{k}_2} - \vec{v}_{n,\vec{k}_3} - \vec{v}_{n',\vec{k}_4}) \cdot \hat{u} \right]^2 \\
& \times f(\varepsilon_{n,\vec{k}_1}) f(\varepsilon_{n',\vec{k}_2}) [1 - f(\varepsilon_{n,\vec{k}_3})] [1 - f(\varepsilon_{n',\vec{k}_4})] \\
& \times (U_{\vec{k}_1,\vec{k}_3}^{eff}) \delta f(\varepsilon_{n,\vec{k}_1} + \varepsilon_{n',\vec{k}_2} - \varepsilon_{n,\vec{k}_3} - \varepsilon_{n',\vec{k}_4}) \\
& \times \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4)
\end{aligned} \tag{3.45}$$

โดยสมการ (3.45) แสดงถึงการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนสองตัวในแถบนำที่มีระดับพลังงาน n และ n' ที่มีโมเมนตัมเริ่มต้น $\vec{k}_1$ และ $\vec{k}_2$ และมีโมเมนตัมสุดท้ายหลังจากการกระเจิง $\vec{k}_3$ และ $\vec{k}_4$ เมื่อความเร็วของอิเล็กตรอนในแถบนำแทนด้วย $\vec{v}_{n,\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{n,\vec{k}}}{\partial \vec{k}}$ และพลังงานงานศักย์การกระเจิงแทนด้วยสมการ $U_{\vec{k}_1,\vec{k}_3}^{eff}$

การหาสภาพความต้านทานอาศัยสมมติฐาน 3 ข้อ ประกอบด้วย (1) พลังงานเฟอร์มี ε_F เป็นค่าคงที่ซึ่งทำให้การอินทิกรัลได้ผลลัพธ์ที่ไม่ขึ้นกับอุณหภูมิ (2) พังก์ชันที่ไม่ใช่ฟังก์ชันการแจกแจงของอิเล็กตรอนมีค่าคงที่และผลลัพธ์การอินทิกรัลจะสัมพันธ์กับฟังก์ชันการแจกแจงของอิเล็กตรอนอย่างเดียว (3) จากกฎการอนุรักษ์โมเมนตัม $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4$ เราสามารถลดปริพันธ์ให้เหลือเพียงสามเทอมได้ดังนี้

$$\rho_{EE} \propto I = \frac{3}{2\pi^2 k_B^3 T} \int_0^\infty d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 d\varepsilon_3 f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) [1 - f(\varepsilon_3)] [1 - f(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3)] \tag{3.46}$$

และจากฟังก์ชันการแจกแจงของอิเล็กตรอน $f(\varepsilon_{n,\vec{k}}) = (\exp(\frac{\varepsilon_{n,\vec{k}} - \varepsilon_F}{k_B T}) + 1)^{-1}$ ทำการเปลี่ยนตัวแปรการอินทิกรัลโดยกำหนดให้ $x_i = \frac{(\varepsilon_i - \varepsilon_F)}{k_B T}$ ซึ่งเราจะได้ความสัมพันธ์ $d\varepsilon_i = k_B T dx_i$ และ $f(x_i) = (e^{x_i} + 1)^{-1}$ ดังนั้นปริพันธ์ในสมการ (3.46) สามารถเขียนในรูปแบบตามสมการ

$$I = \frac{3}{2\pi^2 k_B^3 T} \int_{-\infty}^\infty (k_B T)^3 dx_1 dx_2 dx_3 f(x_1) f(x_2) [1 - f(x_3)] [1 - f(x_1 + x_2 - x_3)]$$

และ

$$I = \frac{3T^2}{2\pi^2} \int_{-\infty}^\infty dx_1 dx_2 dx_3 \frac{[1 - (e^{x_3} + 1)^{-1}][1 - (e^{x_1 + x_2 - x_3} + 1)^{-1}]}{(e^{x_1} + 1)(e^{x_2} + 1)} \tag{3.47}$$

จากสมมติฐานทั้งสามข้อได้ให้ข้อสรุปสำหรับสภาพต้านทานจากกระบวนการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนสัมพันธ์กับค่าอุณหภูมิสัมบูรณ์กำลังสองตามความสัมพันธ์ $\rho_{EE} \propto \langle \Phi, P\Phi \rangle \propto T^2$

เมื่อพิจารณาสภาพนำไฟฟ้าผ่านการวิเคราะห์สภาพต้านทานจากการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนจะได้ความสัมพันธ์ $\sigma_{EE} \propto T^{-2}$ การวิเคราะห์สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสามารถทำได้จากสมการสภาพนำไฟฟ้า $\sigma = ne\mu$ และ $\sigma \propto \mu$ ดังนั้นเราสามารถสรุปกลไกการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนสัมพันธ์กับค่าผกผันของอุณหภูมิสัมบูรณ์กำลังสอง เมื่อกำหนดให้ α คือ ค่าสัมประสิทธิ์ความแรงของการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอน (the strength of electron-

electron scattering) ดังนั้นสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติภายใต้อิทธิพลของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนเป็นไปตามสมการ (Mikheev et al., 2015)

$$\mu_{EE} = \frac{1}{\alpha T^2} \quad (3.48)$$

จากความซับซ้อนของการคำนวณค่าสัมประสิทธิ์ความแรงของการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอน (α) การศึกษาจึงกำหนดให้ปริมาณ α เป็นตัวแปรที่เหมาะสม (fitting parameters) สำหรับการคำนวณเชิงตัวเลขของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน



บทที่ 4

ผลการวิจัย

การศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าของโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO สามารถแบ่งการวิจัยออกเป็น 2 ส่วน ได้แก่ การศึกษาสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงรูปแบบต่างๆ ได้แก่ สารเจือพื้นหลัง (BI) ความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR) โฟนอนเชิงแสงแนวขนาน (LO) และอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (EE) และการเปรียบเทียบผลการคำนวณสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนกับผลการทดลองของโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO

สำหรับการคำนวณสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงจะอาศัยสมการสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน และทำการคำนวณเชิงตัวเลขจากค่าตัวแปรเชิงระบบซึ่งประกอบไปด้วยตัวแปรคงตัวของระบบ (constant parameters) และตัวแปรที่เหมาะสม (fitting parameters) สำหรับค่าตัวแปรที่เหมาะสมของการคำนวณเชิงตัวเลขประกอบด้วย ความหนาแน่นเชิงปริมาตรของสารเจือพื้นหลัง (N_{BI}) ความสูงเฉลี่ยของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (Δ) ระยะห่างสหสัมพันธ์ของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (Λ) และความแรงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (α)

การเปรียบเทียบผลระหว่างการคำนวณกับการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO จะอาศัยผลการทดลองจากงานวิจัยของเฉินและคณะ (Y. Chen et al., 2015) ที่อุณหภูมิและความหนาของชั้นฟิล์ม CZO ค่าต่างๆ นอกจากนี้ยังทำการศึกษาเชิงเปรียบเทียบผลการคำนวณทางทฤษฎีเพื่อวิเคราะห์การเปลี่ยนแปลงไกการกระเจิงระหว่างพลังงานศักย์การกระเจิงของสารเจือพื้นหลัง (BI) กับพลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR) ซึ่งเป็นการศึกษาครั้งแรกสำหรับโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO

ในหัวข้อนี้จะศึกษาสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ภายใต้อิทธิพลการกระเจิงรูปแบบต่างๆ ซึ่งจะทำให้ทราบพฤติกรรมการขนส่งของอิเล็กตรอนสองมิติและอันตรกิริยาของอิเล็กตรอนสองมิติภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงแบบต่างๆ การศึกษาจะนำผลการคำนวณเชิงตัวเลขของสภาพเคลื่อนที่ได้ร่วมกับค่าตัวแปรเชิงระบบไปวิเคราะห์ร่วมกับผลการทดลอง สำหรับค่าตัวแปรคงตัวของระบบของโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO แสดงดังตารางที่ 3

ตาราง 3 ค่าตัวแปรคงตัวของระบบของโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO

พารามิเตอร์	สัญลักษณ์ (หน่วย)	ปริมาณ
มวลยังผลของอิเล็กตรอน	$m^* (kg)$	$1.8m_0^*$
มวลโพลาไรซัน	$m_p (kg)$	$2.85m_0, 2.01m_0$
สภาพยอมทางไฟฟ้าของสุญญากาศ	$\epsilon_0 (F/m)$	8.85×10^{-12}
ค่าคงที่ไดอิเล็กทริก	κ_s	300^{**}
ค่าคงตัวของพลังค์	$\hbar (Js)$	1.054×10^{-34}
ค่าคงที่โบลซมานน์	$k_B (J/K)$	1.381×10^{-23}
เลขคลื่นกัมบังโทมัส-เฟอร์มี	$q_{TF} (m^{-2})$	2.26×10^8
ความหนาแน่นอิเล็กตรอน	$n_s (m^{-2})$	$3.7 \times 10^{16} (8 \text{ uc})^{***}$
		$1.2 \times 10^{17} (10 \text{ uc})^{***}$
		$7.0 \times 10^{18} (15 \text{ uc})^{***}$
		$1.2 \times 10^{19} (18 \text{ uc})^{***}$
		$8.0 \times 10^{18} (26 \text{ uc})^{***}$
พลังงานโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน	$\hbar\omega_i (eV)$	$0.099 (\hbar\omega_1)^{****}$
		$0.058 (\hbar\omega_2)^{****}$
ค่าคงตัวอันตรกิริยาอิเล็กตรอน-โฟนอน	β_μ	$2.6 (\beta_1)^{*****}$
		$0.7 (\beta_2)^{*****}$

ที่มา: * Verma A, Kajdos AP, Cain TA, Stemmer S, Jena D. (2014) Intrinsic Mobility Limiting Mechanisms in Lanthanum-Doped Strontium Titanate. Physical Review Letters. 112(21):216601

: ** Delugas P, Fiorentini V, Mattoni A, Filippetti A. (2015) Intrinsic origin of two-dimensional electron gas at the (001) surface of SrTiO₃. Physical Review B. 91(11): 115315. Delugas et al. (2015)

: *** Chen Y, Trier F, Kasama T, Christensen DV, Bovet N, Balogh ZI, et al. (2015). Creation of High Mobility Two-Dimensional Electron Gases via Strain Induced Polarization at an Otherwise Nonpolar Complex Oxide Interface. Nano Letters. 15(3):1849-54.

: **** Frederikse HPR, Hosler WR. Hall Mobility in SrTiO₃. (1967) Physical Review. 161(3):822-7.

: ***** Himmetoglu B, Janotti A, Peelaers H, Alkauskas A, Van de Walle CG. (2014) First-principles study of the mobility of SrTiO₃. Physical Review B. 90(24): 241204.

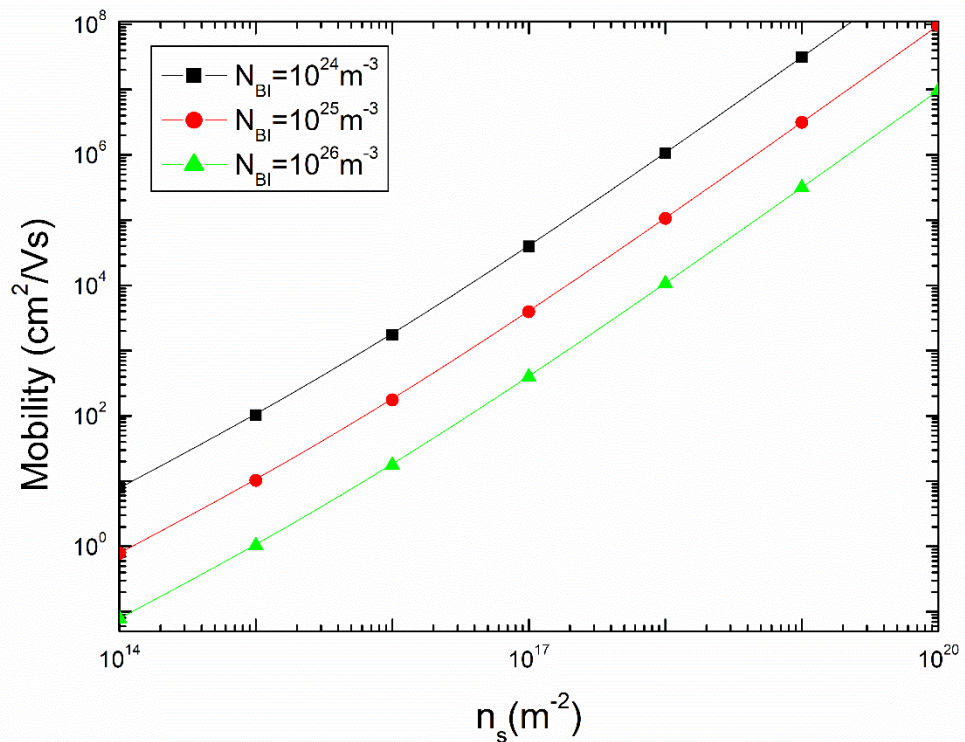
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลสารเจือพื้นหลัง

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลสารเจือพื้นหลัง (BI) เป็นไปตามสมการ

$$\mu_{BI} = \frac{4\pi\epsilon_0^2 k_S^2 \hbar^3 k_F^3}{m^{*2} e^3 N_{BI} I_{BI}} \quad \text{และ} \quad I_{BI} = \int_0^\pi \frac{\sin\theta}{(2\sin\theta + \frac{q_{TF}}{k_F})^2} d\theta \quad (4.1)$$

เมื่อ N_{BI} คือ ความหนาแน่นเชิงปริมาตรของสารเจือพื้นหลัง

ภาพประกอบ 12 แสดงกราฟของความสัมพันธ์ระหว่างค่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลสารเจือพื้นหลัง (μ_{BI}) และความหนาแน่นอิเล็กตรอน (n_s) ที่ความหนาแน่นเชิงปริมาตรของสารเจือพื้นหลังค่าต่างๆ ดังนี้ $N_{BI} = 10^{24} \text{ m}^{-3}$ (กราฟเส้นสีดำ), $N_{BI} = 10^{25} \text{ m}^{-3}$ (กราฟเส้นสีแดง) และ $N_{BI} = 10^{26} \text{ m}^{-3}$ (กราฟเส้นสีเขียว) จากกราฟพบว่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสูงขึ้นเมื่อความหนาแน่นอิเล็กตรอน (n_s) เพิ่มขึ้น และลดลงเมื่อความหนาแน่นเชิงปริมาตรของสารเจือพื้นหลังสูงขึ้น เมื่อพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนกับความหนาแน่นของสารเจือพื้นหลัง พบว่าความหนาแน่นเชิงปริมาตรของสารเจือพื้นหลังที่เพิ่มขึ้นมีความหมายโดยนัยว่าช่องว่างอะตอมออกซิเจนที่ผิวรอยต่อและฐานรอง STO เพิ่มขึ้นนั่นเอง ดังนั้นอันตรกิริยาคุลอมบ์ระหว่างอิเล็กตรอนกับสารเจือพื้นหลังสูงขึ้นส่งผลให้สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนลดลงจากการที่ปริมาณของสารเจือพื้นหลังเพิ่มขึ้นนั่นเอง



ภาพประกอบ 12 กราฟของความสัมพันธ์ระหว่างสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนและความหนาแน่นอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลสารเจือปนหลัง

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลความไม่เรียบของผิวรอยต่อ

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลความไม่เรียบของผิวรอยต่อเป็นอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับความไม่สมบูรณ์ของผลึกบริเวณรอยต่อ ความแรงของอันตรกิริยาสัมพันธ์กับค่าตัวแปรความสูงเฉลี่ยของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (Δ) และระยะห่างสหสัมพันธ์ของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (Λ) เป็นไปตามสมการ

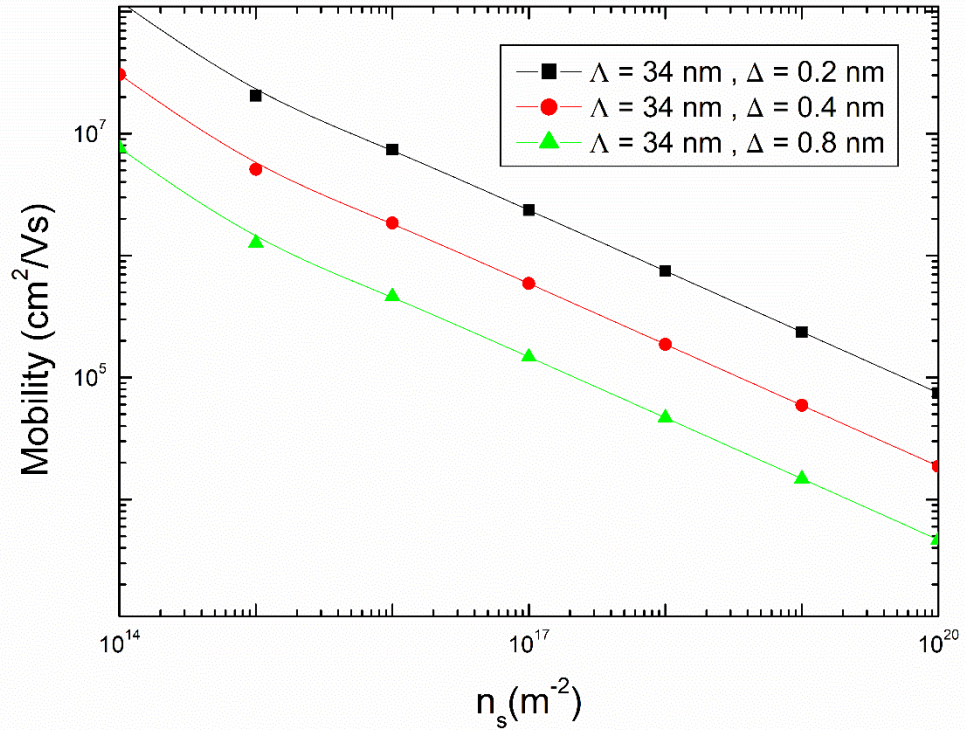
$$\mu_{IR} = \frac{8\epsilon_0^2 \kappa_s^2 \hbar^3}{m^* e^3 \Delta^2 \Lambda^2 n_s^2 I_{IR}} \text{ และ } I_{IR} = \int_0^1 \frac{u^4 e^{-k_F^2 u^2 \Lambda^2}}{(u + \frac{q_{TE}}{2k_F})^2 \sqrt{1-u^2}} du \quad (4.2)$$

ภาพประกอบ 13 แสดงกราฟของความสัมพันธ์ระหว่างค่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (μ_{IR}) และความหนาแน่นอิเล็กตรอน (n_s) ที่ระยะห่างสหสัมพันธ์ของความไม่เรียบของผิวรอยต่อคงตัว $\Lambda = 34 \text{ nm}$ และความสูงเฉลี่ย

ของความไม่เรียบของผิวรอยต่อค่าต่างๆ ดังนี้ $\Delta = 0.2 \text{ nm}$ (กราฟเส้นสีดำ) $\Delta = 0.4 \text{ nm}$ (กราฟเส้นสีแดง) และ $\Delta = 0.8 \text{ nm}$ (กราฟเส้นสีเขียว) จากกราฟพบว่าค่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนจะแปรผันกับความสูงเฉลี่ยของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (Δ) และความหนาแน่นอิเล็กตรอน (n_s)

โดยความสูงเฉลี่ยของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (Δ) บ่งบอกถึงความไม่เรียบของผิวรอยต่อ เนื่องจากผลของการปลูกผลึกเกิดการเคลื่อนย้ายของไอออนบวกระหว่างผิวรอยต่อ (Ca^{2+} และ Sr^{2+}) ดังนั้นความไม่เรียบของผิวรอยต่อเพิ่มขึ้นทำให้เกิดการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนกับความไม่เรียบของผิวรอยต่อสูงขึ้น จากสถานการณ์ดังกล่าวทำให้สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนลดลงและพบว่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนที่ $\Delta = 0.8 \text{ nm}$ มีค่าต่ำที่สุด (กราฟเส้นสีเขียว)

เมื่อศึกษาความสัมพันธ์ของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนกับความหนาแน่นอิเล็กตรอนยังพบอีกว่าอันตรกิริยาเนื่องจากแรงไฟฟ้าคูลอมบ์ระหว่างอิเล็กตรอนจะสูงขึ้นเมื่อความหนาแน่นของอิเล็กตรอนสูงขึ้น โดยแรงไฟฟ้าคูลอมบ์ระหว่างอิเล็กตรอนจะผลักอิเล็กตรอนบางส่วนเข้าใกล้รอยต่อเฮเทอโรมากขึ้น ดังนั้นอิเล็กตรอนสามารถเกิดการกระเจิงกับความไม่เรียบของผิวรอยต่อได้เพิ่มขึ้นมีผลทำให้สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนลดลงเมื่อความหนาแน่นของอิเล็กตรอนสูงขึ้น



ภาพประกอบ 13 กราฟของความสัมพันธ์ระหว่างสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนและความหนาแน่นอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลความไม่เรียบของผิวรอยต่อ

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน

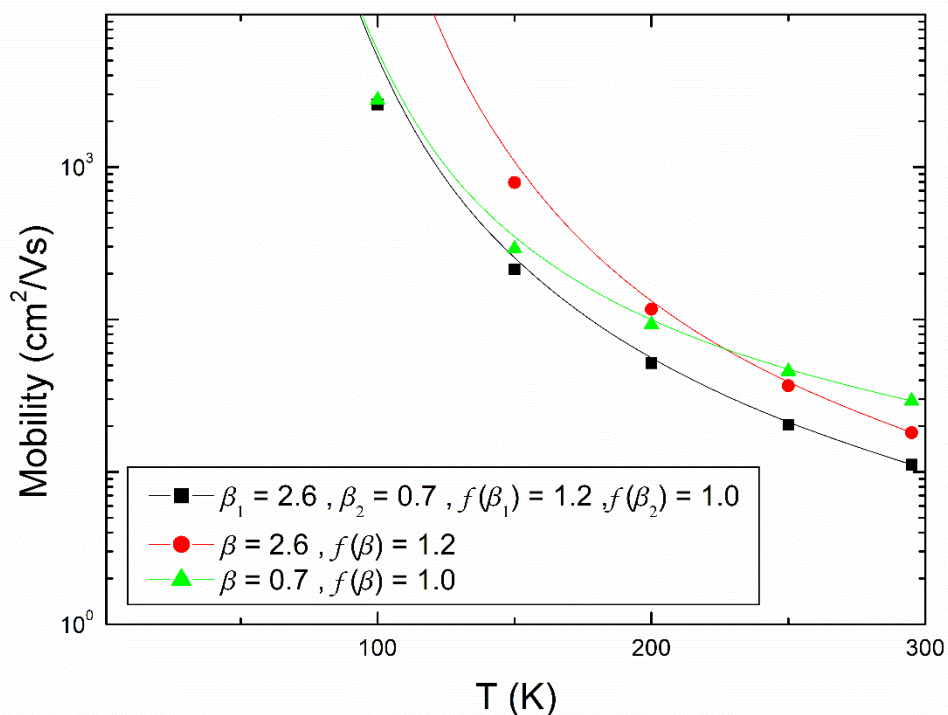
สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลโฟนอนเชิงแสงแนวขนานเป็นการกระเจิงระหว่างโพลารอน (polaron) กับพลังงานศักย์การกระเจิงของโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน (LO phonon) ซึ่งอันตรกิริยาโฟนอนเชิงแสงแนวขนานจะสัมพันธ์กับค่าอุณหภูมิสัมบูรณ์ (T) พลังงานของโฟนอนเชิงแสงแนวขนานของสารประกอบ STO และค่าคงตัวอันตรกิริยาอิเล็กตรอน-โฟนอน (β_μ) ตามสมการสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน

$$\mu_{LO} = \left(\frac{e\hbar}{2m_P\beta_\mu(\hbar\omega_{LO})} \right) \left(\frac{m^*}{m_P} \right)^2 f(\beta_\mu) \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T}\right) - 1 \right] \quad (4.3)$$

ภาพประกอบ 14 แสดงกราฟของความสัมพันธ์ระหว่างค่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน (μ_{LO}) และอุณหภูมิสัมบูรณ์ (T) สำหรับ

อันตรกิริยาระหว่างโฟลารอนและโฟนอนเชิงแสงแนวขนานจะพิจารณาโหมดการสั่นสูงสุดของสารประกอบ STO คือ $\hbar\omega_1 = 0.099$ eV และ $\hbar\omega_2 = 0.058$ eV ดังนั้นสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสำหรับโหมดการสั่น 0.099 eV แทนด้วย $f(\beta_1) = 1.2$ (กราฟเส้นสีแดง) และค่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสำหรับโหมดการสั่น 0.058 eV แทนด้วย $f(\beta_2) = 1.0$ (กราฟเส้นสีเขียว) สำหรับสภาพเคลื่อนที่ได้รวมโฟลารอนภายใต้อิทธิพลโฟนอนเชิงแสงแนวขนานคำนวณจากหลักของแมทไธเซน $\mu^{-1} = \mu_{LO_1}^{-1} + \mu_{LO_2}^{-1}$ (กราฟเส้นสีดำ)

จากการศึกษาพบว่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนจะลดลงเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นสามารถอธิบายได้จากจำนวนโฟนอนเชิงแสงที่เพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นตามการแจกแจงของโบส-ไอน์สไตน์ กล่าวคือการเพิ่มขึ้นของอุณหภูมิทำให้โครงผลึกสั่นมากขึ้นและจำนวนโฟนอนเชิงแสงจะเพิ่มตามไปด้วย ดังนั้นสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนลดลงเมื่ออันตรกิริยาของโฟนอนเชิงแสงแนวขนานเพิ่มขึ้น



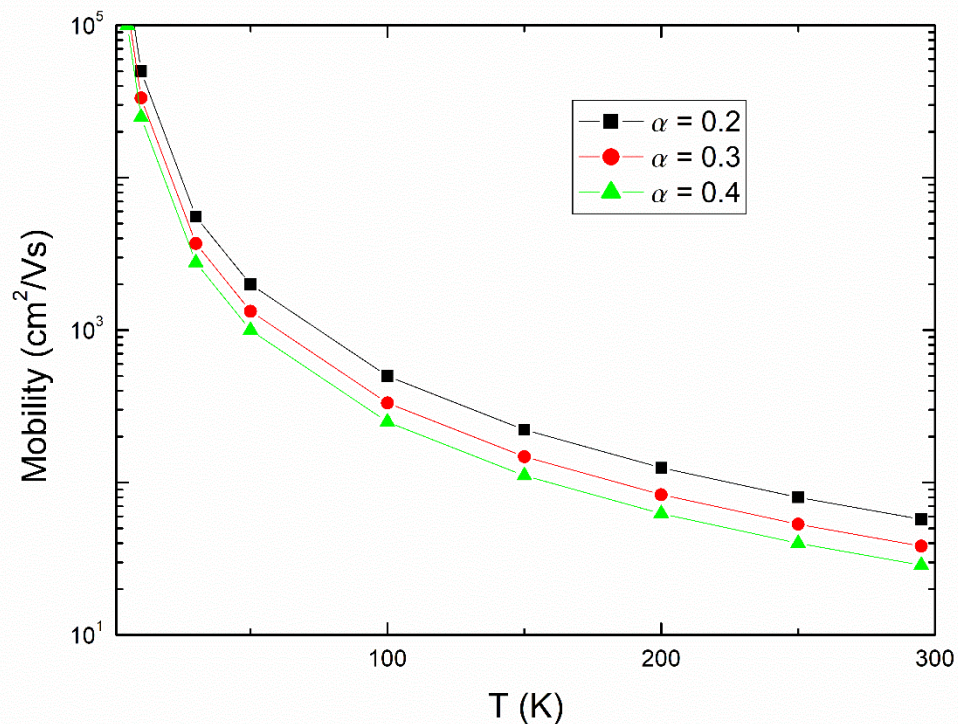
ภาพประกอบ 14 กราฟของความสัมพันธ์ระหว่างสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนและอุณหภูมิภายใต้อิทธิพลโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนเป็นกลไกการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนเนื่องจากความหนาแน่นอิเล็กตรอนสูง จัดเป็นอันตรกิริยาพิสัยใกล้ของแรงคูลอมบ์ (short-range Coulomb interaction) ซึ่งเป็นแรงผลักระยะใกล้ของประจุไฟฟ้าชนิดเดียวกัน สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนจะสัมพันธ์กับความแรงของการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอน (α) และอุณหภูมิสัมบูรณ์ (T) ตามสมการ

$$\mu_{EE} = \frac{1}{\alpha T^2} \quad (4.4)$$

ภาพประกอบ 15 แสดงกราฟของความสัมพันธ์ระหว่างสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (μ_{EE}) และอุณหภูมิสำหรับค่าความแรงของการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนค่าต่างๆ ดังนี้ $\alpha = 0.2 \text{ Vs/cm}^2\text{K}^2$ (กราฟเส้นสีดำ) $\alpha = 0.3 \text{ Vs/cm}^2\text{K}^2$ (กราฟเส้นสีแดง) และ $\alpha = 0.4 \text{ Vs/cm}^2\text{K}^2$ (กราฟเส้นสีเขียว) พบว่าค่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนจะลดลงเมื่ออุณหภูมิและความแรงของการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอนสูงขึ้น โดยสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนจะแปรผกผันกับอุณหภูมิกำลังสอง ($\mu_{LO} \propto T^{-2}$) ซึ่งพลังงานความร้อนจะกระตุ้นอิเล็กตรอนภายในวัสดุทำให้อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนสูงขึ้นตามไปด้วย



ภาพประกอบ 15 กราฟของความสัมพันธ์ระหว่างสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนและอุณหภูมิ ภายใต้อิทธิพลอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน

การเปรียบเทียบผลทางทฤษฎีและผลการทดลอง

การเปรียบเทียบผลการคำนวณทางทฤษฎีกับผลการทดลองมีความสำคัญอย่างมากต่อการวิเคราะห์สมบัติทางไฟฟ้าของโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO เนื่องจากการตรวจสอบความถูกต้องตลอดจนความน่าเชื่อถือของแบบจำลองทางทฤษฎีซึ่งมีความสำคัญต่อการอธิบายและทำนายสมบัติทางไฟฟ้าของวัสดุ เพื่อให้เกิดความมั่นใจในแบบจำลองทางทฤษฎีจำเป็นต้องทำการเปรียบเทียบผลทางทฤษฎีกับผลการทดลองว่ามีความสอดคล้องกันมากน้อยเพียงใด งานวิจัยนี้จะอาศัยผลการทดลองของงานวิจัยของเฉินและคณะ (Y. Chen et al., 2015) การเปรียบเทียบจะอาศัยการคำนวณเชิงตัวเลขของสภาพเคลื่อนที่ได้รวมของอิเล็กตรอน สำหรับวิธีการคำนวณเชิงตัวเลขจะทำการแทนค่าคงตัวเชิงระบบและทำการปรับค่าตัวแปรที่เหมาะสมเพื่อให้ผลการคำนวณทางทฤษฎีสอดคล้องกับผลการทดลอง

การวิเคราะห์จะอาศัยสมการสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้แบบจำลองของพลังงานศักย์การกระเจิงรูปแบบต่างๆ ตามสมการ (4.1) ถึง (4.4) และสภาพเคลื่อนที่ได้รวมของอิเล็กตรอนจากหลักแมททิสเซน (Matthiessen's rule) ตามสมการ $\mu_{tot}^{-1} = \sum_i \mu_i^{-1}$ สำหรับการศึกษาเชิงเปรียบเทียบดังกล่าวได้แบ่งการวิเคราะห์ออกเป็น 2 ส่วน ได้แก่ การอธิบายสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงของสารเจือพื้นหลังและพลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ และการอธิบายกลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนที่อุณหภูมิและความหนาของชั้น CZO ต่างๆ

สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลของพลังงานศักย์การกระเจิงของสารเจือพื้นหลังและพลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ

จากผลการศึกษางานวิจัยพบว่ากลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่ำยังมีความเข้าใจที่ไม่สมบูรณ์ เนื่องจากโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO มีความหนาแน่นอิเล็กตรอน (n_s) สัมพันธ์กับความหนาของชั้น CZO (ข้อมูลในตารางที่ 3) ดังนั้นความหนาแน่นอิเล็กตรอนย่อมส่งผลต่อกลไกการกระเจิงของระบบด้วยเช่นกัน เพื่ออธิบายกลไกการกระเจิงที่ยังไม่สมบูรณ์ของสภาพเคลื่อนที่ได้รวมของอิเล็กตรอนจะแยกพิจารณากลไกการกระเจิงเป็น 3 กรณี ได้แก่ กรณีมีพลังงานศักย์การกระเจิงทั้ง 4 ชนิด กรณีไม่มีพลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ และกรณีไม่มีพลังงานศักย์การกระเจิงของสารเจือพื้นหลัง สำหรับการคำนวณเชิงตัวเลขของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนจะใช้ค่าตัวแปรคงตัวของระบบตามตารางที่ 3 และค่าตัวแปรที่เหมาะสมตามตารางที่ 4 เพื่อเปรียบเทียบผลของอิทธิพลของสารเจือพื้นหลังและความไม่เรียบของผิวรอยต่อ

ตาราง 4 ค่าตัวแปรที่เหมาะสม (fitting parameters) ที่ใช้ในการคำนวณเชิงตัวเลข

ความหนาของ CZO	$N_{BI}(m^{-3})$	$\Delta, \Lambda (nm)$	$\alpha (Vs/cm^2 K^2)$
8 uc	1.3×10^{24}	0.8, 8	0.18×10^{-6}
10 uc	1.0×10^{24}	0.8, 8	0.30×10^{-6}
15 uc	4.0×10^{24}	0.8, 10	0.30×10^{-6}
18 uc	4.0×10^{24}	0.8, 13.5	0.28×10^{-6}
26 uc	4.0×10^{24}	0.8, 9	0.40×10^{-6}

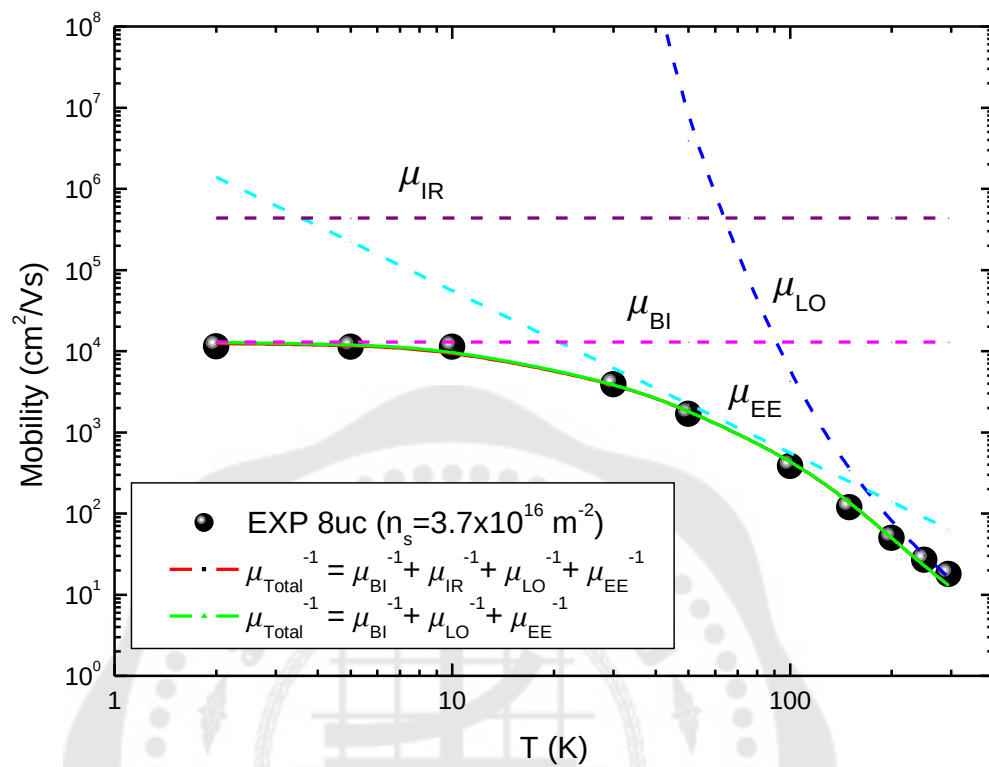
การเปรียบเทียบผลสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนแสดงดังภาพประกอบ 16-20 พบว่า สภาพเคลื่อนที่โดยรวมของอิเล็กตรอนมีความสอดคล้องกับผลการทดลองและสามารถสรุปผลการวิเคราะห์ได้ดังต่อไปนี้

1) ความหนาของชั้น CZO 8 uc (ภาพประกอบ 16) สภาพเคลื่อนที่โดยรวมของอิเล็กตรอนในกรณีมีพลังงานศักย์การกระเจิงทั้ง 4 แบบ ($\mu_{tot}^{-1} = \mu_{BI}^{-1} + \mu_{IR}^{-1} + \mu_{EE}^{-1} + \mu_{LO}^{-1}$) มีค่าใกล้เคียงกับสภาพเคลื่อนที่โดยรวมของอิเล็กตรอนกรณีไม่มีพลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ ($\mu_{tot}^{-1} = \mu_{BI}^{-1} + \mu_{EE}^{-1} + \mu_{LO}^{-1}$) ดังนั้นกลไกการกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR) ไม่มีอิทธิพลต่อการขนส่งอิเล็กตรอนในตัวอย่างความหนา 8 uc

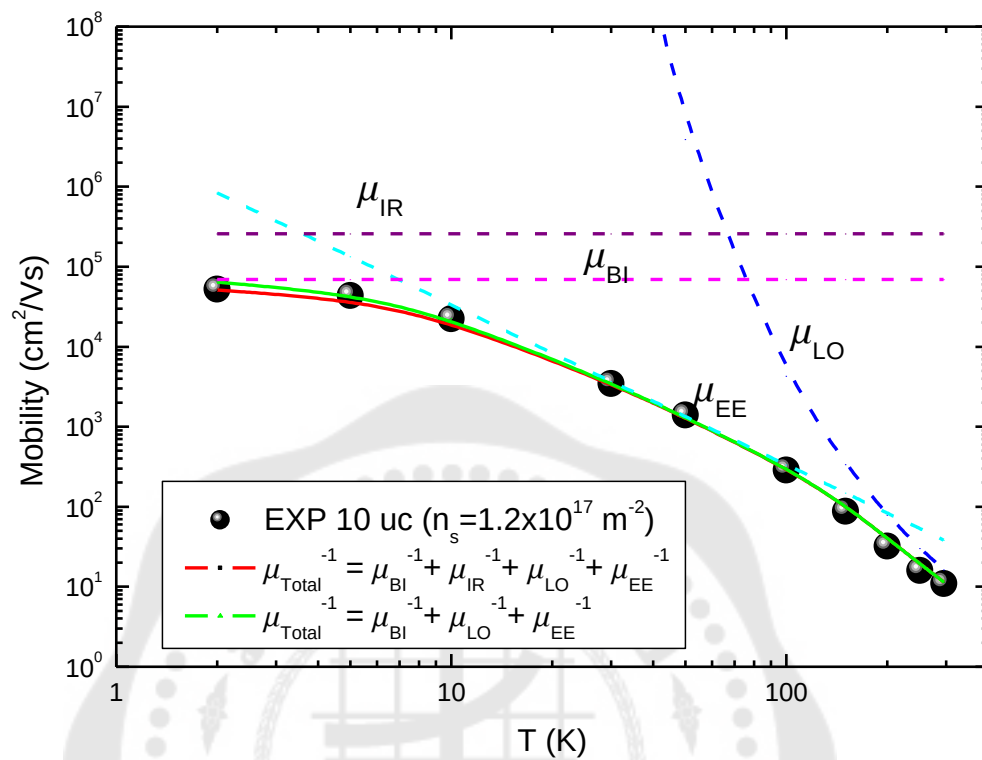
2) ความหนาของชั้น CZO 15, 18 และ 26 uc (ภาพประกอบ 18-20) สภาพเคลื่อนที่โดยรวมของอิเล็กตรอนในกรณีมีพลังงานศักย์การกระเจิงทั้ง 4 แบบมีค่าใกล้เคียงกับสภาพเคลื่อนที่โดยรวมของอิเล็กตรอนกรณีไม่มีพลังงานศักย์การกระเจิงของสารเจือปนหลัง ดังนั้นกลไกการกระเจิงของสารเจือปนหลัง (BI) ไม่มีอิทธิพลต่อการขนส่งอิเล็กตรอนในตัวอย่างความหนา 15, 18 และ 26 uc

3) ความหนาของชั้น CZO 10 uc (ภาพประกอบ 17) สภาพเคลื่อนที่โดยรวมของอิเล็กตรอนในกรณีมีพลังงานศักย์การกระเจิงทั้ง 4 แบบมีค่าแตกต่างจากสภาพเคลื่อนที่โดยรวมของอิเล็กตรอนกรณีไม่มีพลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ จากผลดังกล่าวสามารถสรุปได้ว่ากลไกการกระเจิงของสารเจือปนหลัง (BI) และกลไกการกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR) มีอิทธิพลต่อการขนส่งอิเล็กตรอนในตัวอย่างความหนา 10 uc

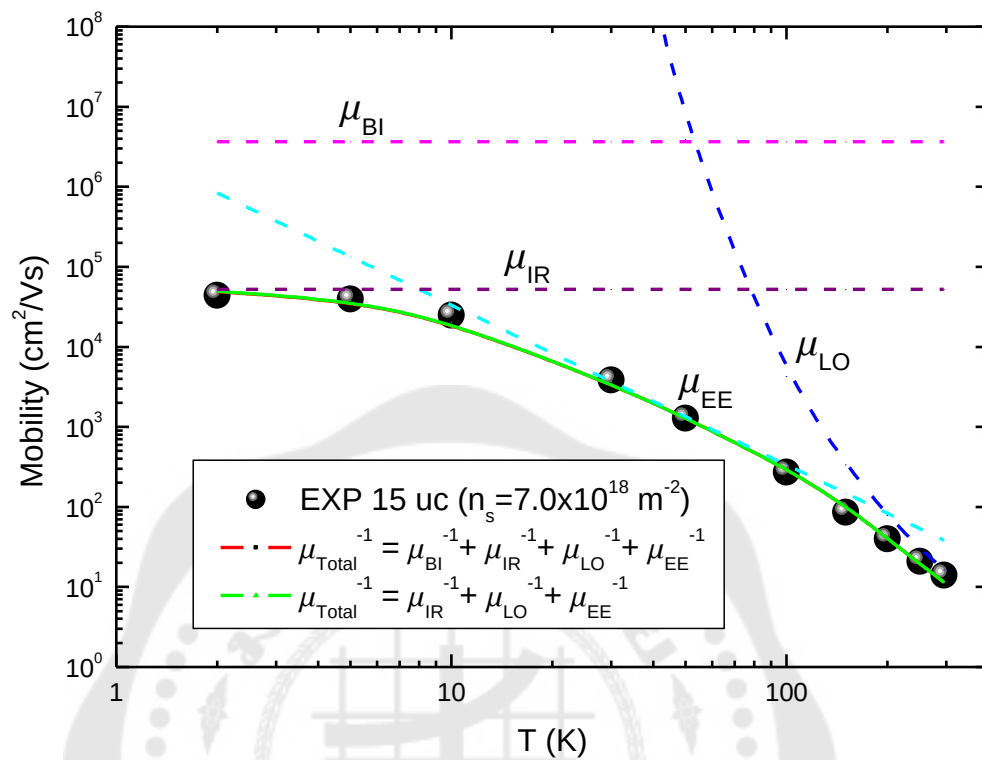
4) สามารถค้นพบปรากฏการณ์เปลี่ยนกลไกการกระเจิงในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่ำจากกลไกการกระเจิงของสารเจือปนหลัง (BI) ไปสู่กลไกการกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR) เมื่อความหนาของชั้น CZO มากกว่า 10 uc



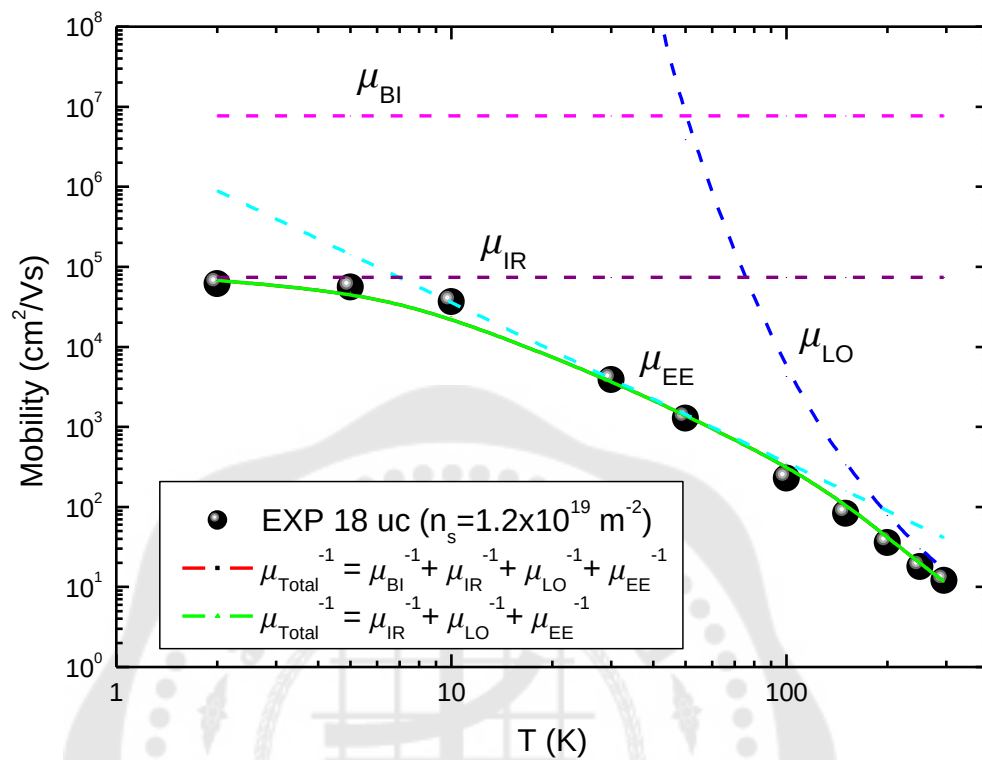
ภาพประกอบ 16 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 8 uc (Y. Chen et al., 2015)



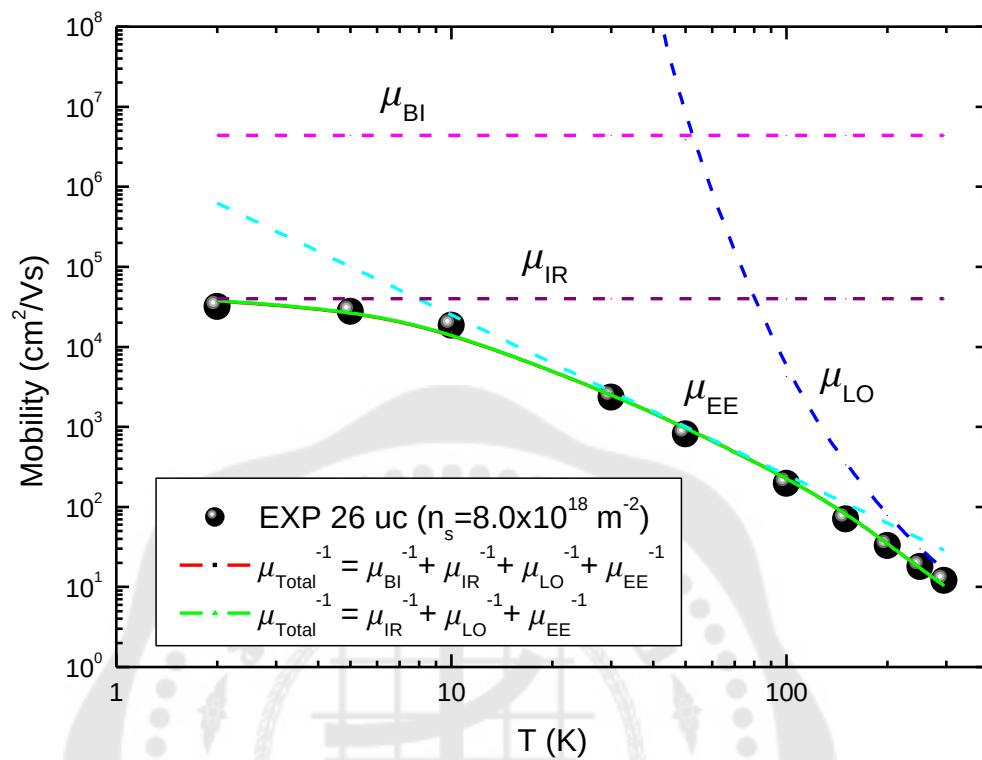
ภาพประกอบ 17 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 10 uc (Y. Chen et al., 2015)



ภาพประกอบ 18 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของ
สภาพเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนา
ของชั้น CZO 15 uc (Y. Chen et al., 2015)



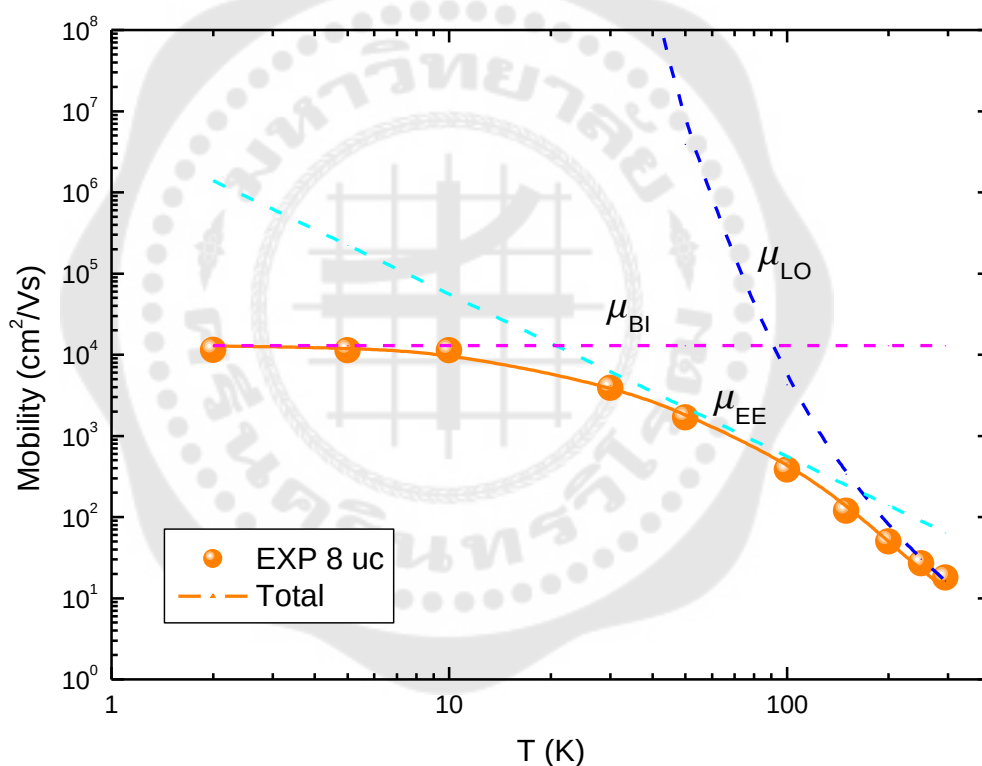
ภาพประกอบ 19 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 18 uc (Y. Chen et al., 2015)



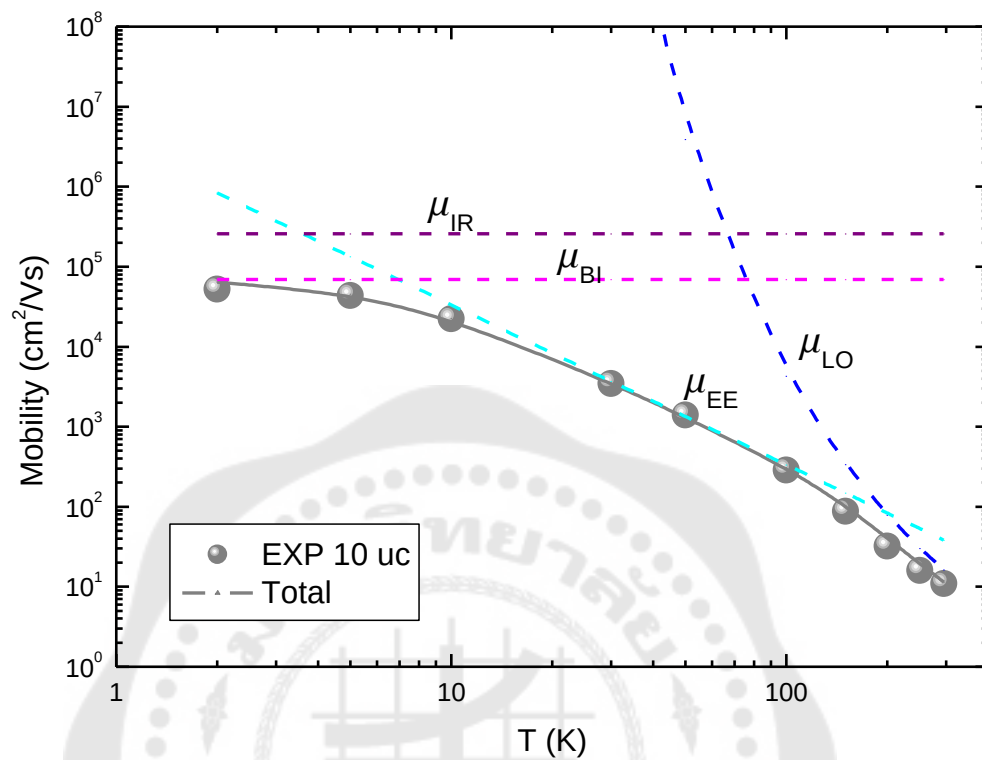
ภาพประกอบ 20 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 26 uc (Y. Chen et al., 2015)

กลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนที่อุณหภูมิและความหนาของชั้น CZO ต่างๆ

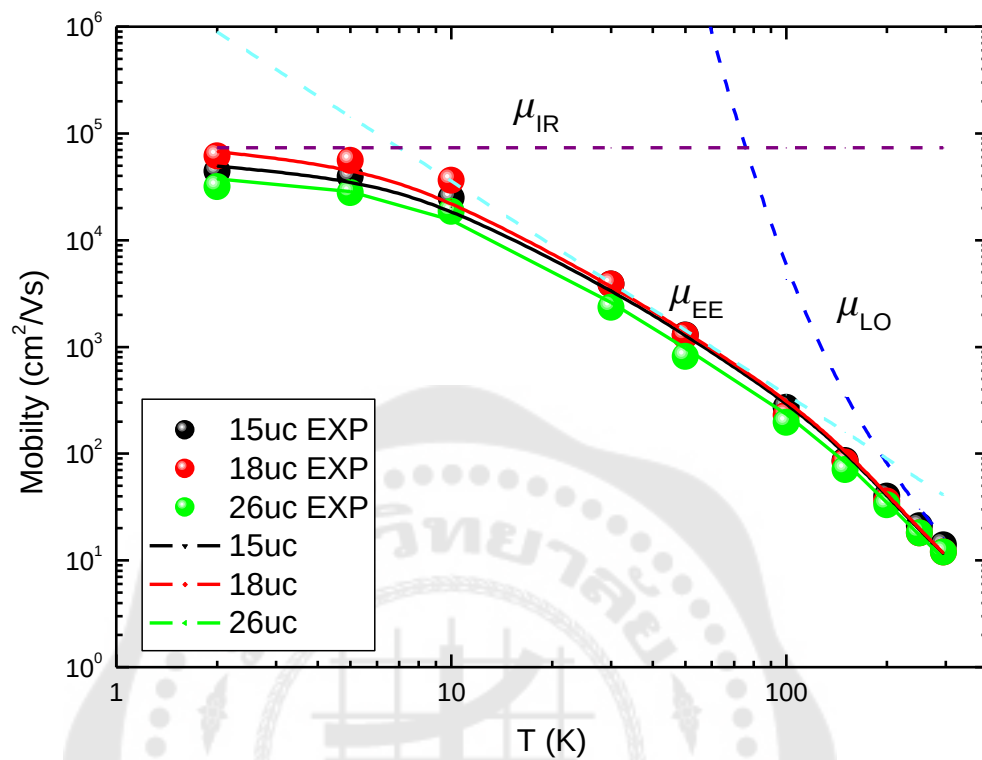
ในหัวข้อนี้ได้ขยายการวิเคราะห์เพื่ออธิบายกลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO และผลการทดลองสภาพเคลื่อนที่ได้ของเงินและคณะ (Y. Chen et al., 2015) ที่อุณหภูมิและความหนาของชั้น CZO ค่าต่างๆ การศึกษายังรวมไปถึงการอธิบายความสัมพันธ์ระหว่างสภาพเคลื่อนที่ได้และความหนาแน่นของอิเล็กตรอน โดยเปรียบเทียบผลการคำนวณเชิงตัวเลขของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนกับผลการทดลองในกรณีต่างๆ แสดงดังภาพประกอบ 21-23



ภาพประกอบ 21 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 8 uc (Y. Chen et al., 2015)



ภาพประกอบ 22 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 10 uc (Y. Chen et al., 2015)



ภาพประกอบ 23 กราฟการเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณกับผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ที่อุณหภูมิต่างๆ และที่ความหนาของชั้น CZO 15,18 และ 26 uc (Y. Chen et al., 2015)

จากภาพประกอบ 21, 22 และ 23 สามารถสรุปผลการวิเคราะห์ได้ดังนี้ (Sukkun & Thongnum, 2018)

1) ผลการคำนวณทางทฤษฎีให้ผลสอดคล้องเป็นอย่างดีกับผลการทดลองโดยค่าตัวแปรที่เหมาะสมสำหรับการคำนวณเชิงตัวเลขแสดงดังตารางที่ 5 แยกตามตัวอย่างความหนาของชั้น CZO 8, 10, 15, 18 และ 26 uc

ตาราง 5 ค่าตัวแปรที่เหมาะสมสำหรับการคำนวณเชิงตัวเลขสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน

ความหนาของ CZO (uc)	$N_{BI} (m^{-3})$	$\Delta, \Lambda (nm)$	$\alpha (Vs/cm^2 K^2)$
8	1.3×10^{24}	-	0.18×10^{-6}
10	1.0×10^{24}	0.8, 8	0.30×10^{-6}
15	-	0.8, 10	0.30×10^{-6}
18	-	0.8, 13.5	0.28×10^{-6}
26	-	0.8, 9	0.40×10^{-6}

2) อุณหภูมิระหว่าง $2 < T < 10$ เคลวิน กลไกการกระเจิงของสารเจือปนหลัง (BI) และกลไกการกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR) มีอิทธิพลต่อการกระเจิงของอิเล็กตรอน และสามารถแยกพิจารณาได้ดังนี้ กลไกการกระเจิงของสารเจือปนหลังเป็นศูนย์กลางการกระเจิงหลักสำหรับตัวอย่างความหนา 8 uc กลไกการกระเจิงของสารเจือปนหลังและกลไกการกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อมีอิทธิพลต่อการขนส่งอิเล็กตรอนสำหรับตัวอย่างความหนา 10 uc และกลไกการกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อเป็นศูนย์กลางการกระเจิงหลักในตัวอย่างความหนา 15, 18 และ 26 uc นอกจากนี้ยังพบการเปลี่ยนกลไกการกระเจิงจากสารเจือปนหลังไปสู่ความไม่เรียบของผิวรอยต่อเมื่อความหนามากกว่า 10 uc ปรากฏการณ์ดังกล่าวสามารถอธิบายได้จากการวิเคราะห์ความสัมพันธ์ระหว่างกลไกการกระเจิงและความหนาแน่นอิเล็กตรอนจากงานวิจัยของเทรียร์และคณะ (Trier et al., 2017) พบว่าความหนาแน่นอิเล็กตรอนวิกฤตของระบบโครงสร้างเฮเทอโรที่มีฐานรองเป็น STO เท่ากับ $1.5 \times 10^{17} m^{-2}$ โดยสารเจือปนหลังสามารถกระเจิงอิเล็กตรอนได้สูงเมื่อความหนาแน่นของอิเล็กตรอนต่ำกว่าความหนาแน่นอิเล็กตรอนวิกฤตเมื่อพิจารณาระบบเฮเทอโร CZO/STO พบว่ากลไกการกระเจิงของสารเจือปนหลังมีบทบาทสูงมากในตัวอย่างความหนา 8 uc เนื่องจากความหนาแน่นของอิเล็กตรอนต่ำกว่าความหนาแน่น

วิกฤต ($3.7 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$) หากวิเคราะห์ตัวอย่างความหนา 10 uc การกระเจิงของสารเจือพื้นหลังและความไม่เรียบของผิวรอยต่อเป็นกลไกการกระเจิงหลักเนื่องจากความหนาแน่นของอิเล็กตรอนใกล้เคียงกับความหนาแน่นวิกฤต ($1.2 \times 10^{17} \text{ m}^{-2}$) สำหรับตัวอย่างความหนา 15, 18 และ 26 uc เนื่องจากความหนาแน่นของอิเล็กตรอนสูงกว่าความหนาแน่นอิเล็กตรอนวิกฤตอย่างมาก ($> 7 \times 10^{18} \text{ m}^{-2}$) ดังนั้นการกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อจึงเป็นกลไกการกระเจิงหลัก

3) อุณหภูมิระหว่าง $10 < T < 150$ เคลวิน พบว่าทุกตัวอย่างความหนาของชั้น CZO มีกลไกการกระเจิงหลักเป็นอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (EE) โดยค่าความแรงของการกระเจิงระหว่างอิเล็กตรอน (α) อยู่ระหว่าง $0.18 \times 10^{-6} - 0.40 \times 10^{-6} \text{ Vs/cm}^2 \text{K}^2$

4) อุณหภูมิระหว่าง $150 < T < 295$ เคลวิน สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนทุกตัวอย่างความหนาของชั้น CZO อยู่ภายใต้อิทธิพลของกลไกการกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (EE) และการกระเจิงของโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน (LO) ที่โหมดการสั่น 0.099 eV และ 0.058 eV ตามลำดับ

ความสมเหตุสมผลของตัวแปรที่เหมาะสมที่ได้จากงานวิจัยชิ้นนี้เมื่อเทียบกับงานวิจัยในอดีตที่ศึกษาในโครงสร้างใกล้เคียงกัน

ในหัวข้อนี้ได้ทำการเปรียบเทียบการใช้ตัวแปรที่เหมาะสมในการคำนวณหาสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนมีความสมเหตุสมผลเพียงใด โดยทำการเปรียบเทียบตัวแปรที่เหมาะสมจากงานวิจัยชิ้นนี้กับตัวแปรที่เหมาะสมที่ได้จากงานวิจัยในอดีตที่ทำการศึกษาคอนกรีตโครงสร้างเฮเทอโรโดยมี STO เป็นฐานรอง โดยตัวแปรที่เหมาะสมจากงานวิจัยในอดีตประกอบด้วย $N_{BI} = 1 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$ เป็นค่าที่ได้ในระบบโครงสร้างเฮเทอโร (Ba,Sr)TiO₃/SrTiO₃ (Rutkowski, McNicholas, Zeng, Tuomisto, & Brillson, 2014) $\Delta = 0.2 \text{ nm}$, $\Lambda = 15 \text{ nm}$ เป็นค่าที่ได้ในโครงสร้างเฮเทอโร GdTiO₃/SrTiO₃ (Moetakef et al., 2012) และ $\alpha = 1.42 \times 10^{-6} \text{ Vs/cm}^2 \text{K}^2$ เป็นค่าที่ได้ในโครงสร้างเฮเทอโร SmTiO₃/SrTiO₃ (Raghavan, Zhang, & Stemmer, 2015) ซึ่งแสดงดังในตาราง 6

ตาราง 6 ตัวแปรที่เหมาะสมที่ได้งานวิจัยชิ้นนี้และงานวิจัยในอดีตที่ใช้ในการคำนวณหา
สภาพเคลื่อนที่ได้รวมของอิเล็กตรอน

ตัวแปรที่เหมาะสม (fitting parameters)	งานวิจัยชิ้นนี้	งานวิจัยในอดีต
$N_{BI} (m^{-3})$	1.3×10^{24} (8 uc) 1.0×10^{24} (10 uc)	$1.0 \times 10^{24*}$
$\Delta (nm)$	0.8 (10,15,18,26 uc)	0.2**
$\Lambda (nm)$	8 (10 uc) 10 (15 uc) 13.5 (18 uc) 9 (26 uc)	15**
$\alpha (Vs/cm^2 K^2)$	0.18×10^{-6} (8 uc) 0.30×10^{-6} (10,15 uc) 0.28×10^{-6} (18 uc) 0.40×10^{-6} (26 uc)	$1.42 \times 10^{-6***}$

ที่มา: * Rutkowski, M. M., McNicholas, K., Zeng, Z. Q., Tuomisto, F., & Brillson, L. J. (2014). Optical identification of oxygen vacancy formation at $SrTiO_3$ –(Ba,Sr) TiO_3 heterostructures. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(25), 255303.

: ** Moetakef, P., Ouellette, D. G., Williams, J. R., Allen, S. J., Balents, L., Goldhaber-Gordon, D., & Stemmer, S. (2012). Quantum oscillations from a two-dimensional electron gas at a Mott/band insulator interface. *Applied Physics Letters*, 101(15), 151604.

: *** Raghavan, S., Zhang, J. Y., & Stemmer, S. (2015). Two-dimensional electron liquid at the (111) $SmTiO_3$ / $SrTiO_3$ interface. *Applied Physics Letters*, 106(13), 132104.

จากตาราง 6 แสดงให้เห็นว่าตัวแปรที่เหมาะสมที่ใช้ในงานวิจัยชิ้นนี้ มีค่าใกล้เคียงและอยู่ในระดับเดียวกันกับค่าที่ได้รับจากงานวิจัยในอดีต จึงสามารถสรุปได้ว่า ตัวแปรที่เหมาะสมที่เรานำมาใช้คำนวณหาสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กทรอนิกส์อนมีความสมเหตุสมผล



บทที่ 5

สรุปผลการวิจัย

งานวิจัยนี้ได้ศึกษากลไกการกระเจิงและการขนส่งอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO ภายใต้ตัวแปรของอุณหภูมิ ความหนาแน่นของอิเล็กตรอน และความหนาแน่นของชั้น CZO การศึกษาได้เสนอแบบจำลองทางทฤษฎีเพื่ออธิบายผลการทดลองของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO โดยแบบจำลองของกลไกการกระเจิงประกอบด้วย สารเจือปนหลัง (BI) ความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR) โฟนอนเชิงแสงแนวขนาน (LO) และอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (EE) ภายใต้การศึกษาได้คำนวณสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอน (μ) เปรียบเทียบผลทางทฤษฎีกับผลการทดลอง และอธิบายพฤติกรรมและสมบัติทางไฟฟ้าของอิเล็กตรอนสองมิติในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO โดยสามารถสรุปการวิจัยออกเป็นส่วนต่างๆ ดังนี้

ผลการวิจัย

โครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO สามารถแสดงสมบัติเป็นตัวนำไฟฟ้าจากการเหนี่ยวนำอิเล็กตรอนสองมิติที่ผิวรอยต่อ การศึกษาอาศัยสมมติฐานที่ว่าสารเจือปนหลัง ความไม่สมบูรณ์ของผลึกที่ผิวรอยต่อ การสั่นโครงผลึก และอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน สามารถประพฤติตัวเป็นศูนย์กลางการกระเจิงของระบบได้ รวมถึงสามารถสร้างพลังงานศักย์การกระเจิง 4 แบบ ได้แก่ พลังงานศักย์การกระเจิงของสารเจือปนหลัง (BI) พลังงานศักย์การกระเจิงของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR) พลังงานศักย์การกระเจิงของโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน (LO) และพลังงานศักย์การกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (EE) โดยกลไกการกระเจิงทั้ง 4 รูปแบบมีลักษณะเฉพาะดังนี้

กลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนสองมิติ

1) สารเจือปนหลัง (BI) เป็นผลจากการมีอะตอมของสารเจือปนบริเวณรอยต่อ (space charge donors) และช่องว่างอะตอมออกซิเจนในผลึกฐานรอง STO (oxygen vacancies) เนื่องจากระหว่างการปลูกผลึก CZO บน STO เกิดอะตอมของสารเจือและช่องว่างอะตอมออกซิเจนซึ่งแสดงสมบัติเป็นจุดประจุบวก อันตรกิริยาระหว่างสารเจือปนหลังและอิเล็กตรอนสองมิติอยู่ในรูปแบบของพลังงานศักย์คูลอมบ์ซึ่งแปรผกผันกับความหนาแน่นเชิงปริมาตรของสารเจือปนหลัง (N_{BI})

2) ความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR) เป็นผลมาจากกระบวนการปลูกผลึก CZO ลงบนฐานรอง STO และเกิดการแพร่ของไอออนบวก Ca^{2+} และ Sr^{2+} ระหว่างผิวรอยต่อ โดยไอออน Ca^{2+} จะแพร่ข้ามรอยต่อไปแทนที่ไอออน Sr^{2+} และกลับกัน Sr^{2+} จะแพร่ไปแทนที่ Ca^{2+} ส่งผลให้เกิดความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (interface roughness) และการกระจายตัวของความไม่เรียบของผิวรอยต่อเป็นรูปแบบเกาส์เซียนซึ่งสามารถอธิบายด้วยค่าความสูงเฉลี่ยของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (Δ) และระยะห่างสหสัมพันธ์ของความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (Λ) โดยอิเล็กตรอนสองมิติสามารถกระเจิงกับความไม่เรียบของผิวรอยต่อเพิ่มขึ้นเมื่อความหนาแน่นของอิเล็กตรอนสูงขึ้น

3) โฟนอนเชิงแสงแนวขนาน (LO) เป็นผลจากการสั่นของโครงผลึกเมื่อได้รับพลังงานความร้อน ($k_B T$) ขณะที่อิเล็กตรอนเคลื่อนที่ในโครงผลึกของ STO ซึ่งประกอบด้วยพันธะไอออนิก จะเกิดการเหนี่ยวนำให้ไอออนบวกเข้ามาใกล้อิเล็กตรอน ขณะเดียวกันจะผลักไอออนลบให้ห่างออกไป การเหนี่ยวนำดังกล่าวทำให้เกิดโพลาไรเซชันจากไดโพลโมเมนต์ (self-induced polarization) เนื่องจากความไม่สมมาตรของพันธะไอออนิก โดยอิเล็กตรอนเกิดอันตรกิริยากับกลุ่มโพลาไรเซชันเหล่านั้นทำให้สมบัติของอิเล็กตรอนเปลี่ยนไป กล่าวคือพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนลดลงเนื่องจากมวลยังผลของอิเล็กตรอนเปลี่ยนไปเป็นมวลของโพลาารอน $m_p = m^*(1 + \beta_\mu/6)$ ซึ่งสัมพันธ์กับอันตรกิริยาของอิเล็กตรอน-โฟนอน และเรียกอนุภาคเสมือนที่เกิดขึ้นใหม่นี้ว่า โพลาารอน (polaron) ดังนั้นกลไกการกระเจิงของโฟนอนเชิงแสงแนวขนานเป็นการอธิบายอันตรกิริยาระหว่างโพลาารอนและโฟนอนเชิงแสงแนวขนานที่มีพลังงานของโหมดการสั่น 0.099 eV และ 0.058 eV นั้นเอง

4) อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (EE) เป็นผลมาจากรอยต่อเฮเทอโร CZO/STO สามารถเหนี่ยวนำความหนาแน่นอิเล็กตรอนสองมิติสูงระดับ 10^{16} - 10^{19} m^{-2} ทำให้อิเล็กตรอนสามารถเกิดอันตรกิริยาระหว่างกันได้ในรูปพลังงานศักย์คูลอมบ์พิสัยใกล้ (short range Coulomb potential) โดยสภาพเคลื่อนที่ได้จะแปรผกผันกับอุณหภูมิกำลังสอง ($\mu_{EE} \propto T^{-2}$)

ความสัมพันธ์ของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติ (μ) และอุณหภูมิ (T)

จากการศึกษาสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในระบบผิวรอยต่อ CZO/STO พบว่าแบบจำลองทางทฤษฎีสามารถอธิบายผลการทดลองได้เป็นอย่างดี และกลไกการกระเจิงของอิเล็กตรอนมีความสัมพันธ์กับอุณหภูมิช่วงต่างๆ ดังนี้

1) อุณหภูมิระหว่าง $2 < T < 10$ เคลวิน อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ภายใต้กลไกการกระเจิงของสารเจือพื้นหลัง (BI) และกลไกการกระเจิงของความไม่เรียบบริเวณรอยต่อ (IR)

2) อุณหภูมิระหว่าง $10 < T < 150$ เคลวิน อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ภายใต้กลไกการกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (EE)

3) อุณหภูมิระหว่าง $150 < T < 295$ เคลวิน อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ภายใต้กลไกการกระเจิงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (EE) และกลไกการกระเจิงของโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน (LO)

ความสัมพันธ์ของสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสองมิติ (μ) และความหนาแน่นอิเล็กตรอน (n_s)

จากผลการศึกษายังพบว่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนสัมพันธ์กับความหนาแน่นของอิเล็กตรอนสองมิติ จากงานวิจัยของเทรียร์และคณะ (Trier et al., 2017) รายงานว่าสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนที่อุณหภูมิต่ำสัมพันธ์กับความหนาแน่นอิเล็กตรอนวิกฤต $n_s^{(c)} \sim 1.5 \times 10^{17} m^{-2}$ และกลไกการกระเจิงของสารเจือปนหลังเป็นอันตรกิริยาสำคัญเมื่อความหนาแน่นอิเล็กตรอนต่ำกว่าความหนาแน่นวิกฤต

สำหรับงานวิจัยนี้ได้ข้อสรุปเกี่ยวกับกลไกการกระเจิงที่อุณหภูมิต่ำ ($0 < T < 10K$) ดังนี้

1) ความหนาแน่นอิเล็กตรอน $n_s < n_s^{(c)}$ สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนได้รับอิทธิพลจากการกระเจิงของสารเจือปนหลัง (BI) ซึ่งพบในตัวอย่างความหนา 8 uc

2) ความหนาแน่นอิเล็กตรอน $n_s \sim n_s^{(c)}$ สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนได้รับอิทธิพลทั้งจากการกระเจิงของสารเจือปนหลัง (BI) และความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR) ซึ่งพบในตัวอย่างความหนา 10 uc

3) ความหนาแน่นอิเล็กตรอน $n_s > n_s^{(c)}$ สภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนได้รับผลจากการกระเจิงของความไม่เรียบบริเวณรอยต่อ (IR) ซึ่งพบในตัวอย่างความหนา 15 18 และ 26 uc

จากผลการศึกษาดังกล่าวสามารถค้นพบปรากฏการณ์การเปลี่ยนกลไกการกระเจิงระหว่างอิทธิพลสารเจือปนหลัง (BI) และความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR) ในโครงสร้างเฮเทอโร CZO/STO เมื่อความหนาแน่นอิเล็กตรอนสูงกว่าความหนาแน่นวิกฤตมาก ($n_s \gg n_s^{(c)}$) เราสามารถสรุปผลการศึกษากลไกการกระเจิงหลักที่ส่งผลต่อสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในแต่ละช่วงอุณหภูมิ ความหนาของชั้น CZO และความหนาแน่นอิเล็กตรอนสองมิติดังตารางที่ 7

ตาราง 7 กลไกการกระเจิงหลักที่ส่งผลต่อสภาพเคลื่อนที่ได้ของอิเล็กตรอนในโครงสร้าง CZO/STO ที่อุณหภูมิและความหนาของ CZO ต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความหนา CZO (uc)	$n_s (m^{-3})$	กลไกการกระเจิงหลัก
2 - 10	8	3.7×10^{16}	สารเจือปนหลัง (BI)
	10	1.2×10^{17}	สารเจือปนหลัง (BI) และความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR)
	15, 18, 26	$> 7.0 \times 10^{18}$	ความไม่เรียบของผิวรอยต่อ (IR)
10 - 150	8, 10, 15, 18, 26	$> 3.7 \times 10^{16}$	อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (EE)
150 - 295	8, 10, 15, 18, 26	$> 3.7 \times 10^{16}$	อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน (EE) และโฟนอนเชิงแสงแนวขนาน (LO)

บรรณานุกรม

- Ando, T., Fowler, A. B., & Stern, F. (1982). Electronic properties of two-dimensional systems. *Reviews of Modern Physics*, 54(2), 437-672.
- Brinkman, A., Huijben, M., van Zalk, M., Huijben, J., Zeitler, U., Maan, J. C., . . . Hilgenkamp, H. (2007). Magnetic effects at the interface between non-magnetic oxides. *Nature Materials*, 6, 493.
- Chambers, S. A., Engelhard, M. H., Shutthanandan, V., Zhu, Z., Droubay, T. C., Qiao, L., . . . Ramasse, Q. M. (2010). Instability, intermixing and electronic structure at the epitaxial $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3(001)$ heterojunction. *Surface Science Reports*, 65(10), 317-352.
- Chen, Y., Trier, F., Kasama, T., Christensen, D. V., Bovet, N., Balogh, Z. I., . . . Linderoth, S. (2015). Creation of High Mobility Two-Dimensional Electron Gases via Strain Induced Polarization at an Otherwise Nonpolar Complex Oxide Interface. *Nano Letters*, 15(3), 1849-1854.
- Chen, Y., Trier, F., Kasama, T., Christensen, D. V., Bovet, N., Balogh, Z. I., . . . Linderoth, S. (2017). Correction to Creation of High Mobility Two-Dimensional Electron Gases via Strain Induced Polarization at an Otherwise Nonpolar Complex Oxide Interface. *Nano Letters*, 17(4), 2738-2738.
- Chen, Y. Z. (2018). 13 - High-mobility two-dimensional electron gases at complex oxide interfaces. In V. Esposito (Ed.), *Metal Oxide-Based Thin Film Structures* (pp. 283-300): Elsevier.
- Chen, Y. Z., Bovet, N., Trier, F., Christensen, D. V., Qu, F. M., Andersen, N. H., . . . Pryds, N. (2013). A high-mobility two-dimensional electron gas at the spinel/perovskite interface of $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3/\text{SrTiO}_3$. *Nature Communications*, 4, 1371.
- Daengprom, T., & Thongnum, A. (2016). Scattering Mechanisms and Electron Transport in the Perovskite $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ Heterostructure at Low Temperature. *Srinakharinwirot Science Journal*, 32, 202-214.

- Davies, J. H. (1998). *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Delugas, P., Fiorentini, V., Mattoni, A., & Filippetti, A. (2015). Intrinsic origin of two-dimensional electron gas at the (001) surface of SrTiO_3 . *Physical Review B*, 91(11), 115315.
- Eglitis, R. I. (2015). Theoretical Modelling of the Energy Surface (001) and Topology of CaZrO_3 Perovskite. *Ferroelectrics*, 483(1), 75-85.
- Eglitis, R. I., & Popov, A. I. (2017). Systematic trends in (001) surface ab initio calculations of ABO_3 perovskites. *Journal of Saudi Chemical Society*.
- Frederikse, H. P. R., & Hosler, W. R. (1967). Hall Mobility in SrTiO_3 . *Physical Review*, 161(3), 822-827.
- Hamaguchi, C. (2001). *Basic Semiconductor Physics*. Berlin: Springer-Verlage.
- Herranz, G., BasletiĆ, M., Bibes, M., Carrétero, C., Tafr, E., Jacquet, E., . . . Fert, A. (2007). High Mobility in $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ Heterostructures: Origin, Dimensionality, and Perspectives. *Physical Review Letters*, 98(21), 216803.
- Hess, K. (1979). Impurity and phonon scattering in layered structures. *Applied Physics Letters*, 35(7), 484-486.
- Himmetoglu, B., Janotti, A., Peelaers, H., Alkauskas, A., & Van de Walle, C. G. (2014). First-principles study of the mobility of SrTiO_3 . *Physical Review B*, 90(24), 241204.
- Hou, Z. F. (2008). Ab initio calculations of elastic modulus and electronic structures of cubic CaZrO_3 . *Physica B: Condensed Matter*, 403(17), 2624-2628.
- Huijben, M., Rijnders, G., Blank, D. H. A., Bals, S., Aert, S. V., Verbeeck, J., . . . Hilgenkamp, H. (2006). Electronically coupled complementary interfaces between perovskite band insulators. *Nature Materials*, 5, 556.
- J N Eckstein, a., & Bozovic, I. (1995). High-Temperature Superconducting Multilayers and Heterostructures Grown by Atomic Layer-By-Layer Molecular Beam Epitaxy. *Annual Review of Materials Science*, 25(1), 679-709.

- Kalabukhov, A., Gunnarsson, R., Börjesson, J., Olsson, E., Claeson, T., & Winkler, D. (2007). Effect of oxygen vacancies in the $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ substrate on the electrical properties of the $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ interface. *Physical Review B*, 75(12), 121404.
- Klimin, S. N., Tempere, J., van der Marel, D., & Devreese, J. T. (2012). Microscopic mechanisms for the Fermi-liquid behavior of Nb-doped strontium titanate. *Physical Review B*, 86(4), 045113.
- Kozuka, Y., Kim, M., Ohta, H., Hikita, Y., Bell, C., & Hwang, H. Y. (2010). Enhancing the electron mobility via delta-doping in SrTiO_3 . *Applied Physics Letters*, 97(22), 222115.
- Lee, T. D., Low, F. E., & Pines, D. (1953). The Motion of Slow Electrons in a Polar Crystal. *Physical Review*, 90(2), 297-302.
- Low, F. E., & Pines, D. (1955). Mobility of Slow Electrons in Polar Crystals. *Physical Review*, 98(2), 414-418.
- Meevasana, W., King, P. D. C., He, R. H., Mo, S. K., Hashimoto, M., Tamai, A., . . . Shen, Z. X. (2011). Creation and control of a two-dimensional electron liquid at the bare SrTiO_3 surface. *Nature Materials*, 10, 114.
- Mikheev, E., Himmetoglu, B., Kajdos, A. P., Moetakef, P., Cain, T. A., Van de Walle, C. G., & Stemmer, S. (2015). Limitations to the room temperature mobility of two- and three-dimensional electron liquids in SrTiO_3 . *Applied Physics Letters*, 106(6), 062102.
- Moetakef, P., Ouellette, D. G., Williams, J. R., Allen, S. J., Balents, L., Goldhaber-Gordon, D., & Stemmer, S. (2012). Quantum oscillations from a two-dimensional electron gas at a Mott/band insulator interface. *Applied Physics Letters*, 101(15), 151604.
- Nazir, S., Cheng, J., & Yang, K. (2016). Creating Two-Dimensional Electron Gas in Nonpolar/Nonpolar Oxide Interface via Polarization Discontinuity: First-Principles Analysis of $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ Heterostructure. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 8(1), 390-399.
- Neville, R. C., Hoeneisen, B., & Mead, C. A. (1972). Permittivity of Strontium Titanate. *Journal of Applied Physics*, 43(5), 2124-2131.

- Ohtomo, A., & Hwang, H. Y. (2004). A high-mobility electron gas at the $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ heterointerface. *Nature*, 427, 423.
- Prasanth, C. S., Padma Kumar, H., Pazhani, R., Solomon, S., & Thomas, J. K. (2008). Synthesis, characterization and microwave dielectric properties of nanocrystalline CaZrO_3 ceramics. *Journal of Alloys and Compounds*, 464(1), 306-309.
- Raghavan, S., Zhang, J. Y., & Stemmer, S. (2015). Two-dimensional electron liquid at the (111) $\text{SmTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ interface. *Applied Physics Letters*, 106(13), 132104.
- Rijnders, G., & Blank, D. H. A. (2005). Build your own superlattice. *Nature*, 433, 369.
- Rutkowski, M. M., McNicholas, K., Zeng, Z. Q., Tuomisto, F., & Brillson, L. J. (2014). Optical identification of oxygen vacancy formation at SrTiO_3 – $(\text{Ba,Sr})\text{TiO}_3$ heterostructures. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(25), 255303.
- S. Zhou, R., & L. Snyder, R. (1991). *Structure and Transformation Mechanisms of The Eta, Gamma and Theta Transition Aluminas* (Vol. 47).
- Santander-Syro, A. F., Copie, O., Kondo, T., Fortuna, F., Pailhès, S., Weht, R., . . . Rozenberg, M. J. (2011). Two-dimensional electron gas with universal subbands at the surface of SrTiO_3 . *Nature*, 469, 189.
- Schlom, D. G., Chen, L.-Q., Pan, X., Schmehl, A., & Zurbuchen, M. A. (2008). A Thin Film Approach to Engineering Functionality into Oxides. *Journal of the American Ceramic Society*, 91(8), 2429-2454.
- Shen, J., Lee, H., Valentí, R., & Jeschke, H. O. (2012). Ab initio study of the two-dimensional metallic state at the surface of SrTiO_3 Importance of oxygen vacancies. *Physical Review B*, 86(19), 195119.
- Stern, F., & Howard, W. E. (1967). Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit. *Physical Review*, 163(3), 816-835.
- Sukkun, K., & Thongnum, A. (2018). Transport properties of nonpolar $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ heterointerfaces from scattering analysis. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 51(40), 405301.
- Swift, M. W., & Van de Walle, C. G. (2017). Conditions for T^2 resistivity from electron-electron scattering. *The European Physical Journal B*, 90(8), 151.

- Thiel, S., Hammerl, G., Schmehl, A., Schneider, C. W., & Mannhart, J. (2006). Tunable Quasi-Two-Dimensional Electron Gases in Oxide Heterostructures. *Science*, 313(5795), 1942.
- Trier, F., Reich, K., Christensen, D., Zhang, Y., L. Tuller, H., Chen, Y., . . . Pryds, N. (2017). *Universality of electron mobility in $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ and bulk SrTiO_3* (Vol. 111).
- Verma, A., Kajdos, A. P., Cain, T. A., Stemmer, S., & Jena, D. (2014). Intrinsic Mobility Limiting Mechanisms in Lanthanum-Doped Strontium Titanate. *Physical Review Letters*, 112(21), 216601.
- Willmott, P. R., Pauli, S. A., Herger, R., Schlepütz, C. M., Martoccia, D., Patterson, B. D., . . . Yacoby, Y. (2007). Structural Basis for the Conducting Interface between LaAlO_3 and SrTiO_3 . *Physical Review Letters*, 99(15), 155502.
- Yang, X., & Su, H. (2011). Polarization and Electric Field Dependence of Electronic Properties in $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ Heterostructures. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 3(10), 3819-3823.
- Zanato, D., Gokden, S., Balkan, N., Ridley, B. K., & Schaff, W. J. (2004). The effect of interface-roughness and dislocation scattering on low temperature mobility of 2D electron gas in GaN/AlGaIn . *Semiconductor Science and Technology*, 19(3), 427.
- Zhang, L., & Wei, S.-H. (2011). Spatial charge distribution and conductivities of the $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ interfaces: A theoretical study. *Solid State Communications*, 151(1), 21-23.



ภาคผนวก



ภาคผนวก ก

งานวิจัยได้นำเสนอแบบปากเปล่าในการประชุมวิชาการระดับชาติ



SIAM PHYSICS CONGRESS 2018 (SPC 2018)

Certificate of Appreciation

This is to certify that

Kittiphon Sukkun

had participated an oral presentation in the Siam Physics Congress 2018 (SPC 2018)
held on 21-23 May 2018 at Phitsanulok, Thailand

A blue ink signature of Assoc. Prof. Boonrucksar Soonthornthum.

Assoc. Prof. Boonrucksar Soonthornthum
President of Thai Physics Society





ภาคผนวก ข

งานวิจัยได้ตีพิมพ์ในวารสารวิชาการระดับนานาชาติ

Transport properties of nonpolar $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ heterointerfaces from scattering analysis

Kittiphon Sukkun¹ and Anusit Thongnum^{1,2} 

¹ Department of Physics, Faculty of Sciences, Srinakharinwirot University, Bangkok 10110, Thailand

² Thailand Center of Excellence in Physics, Commission on Higher Education, Bangkok 10400, Thailand

E-mail: anusit@swu.ac.th

Received 18 May 2018, revised 28 July 2018

Accepted for publication 14 August 2018

Published 29 August 2018



CrossMark

Abstract

Temperature dependent electron mobility data from nonpolar $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ heterostructures were analyzed and modeled considering various electron scattering mechanisms. We found that the total mobility based on Matthiessen's rule provided good quantitative agreement with experimental data over a wide temperature range ($T = 2\text{--}295\text{ K}$). Low-temperature mobility was limited by background impurities and interface roughness scatterings. A crossover between background impurity scattering and interfacial roughness scattering was observed with increasing carrier density. At temperatures of $10 < T < 150$, electron–electron scattering was the main scattering mechanism, while at room temperature, electron–electron and polaron–LO phonon scatterings were dominant.

Keywords: two-dimensional electron gas, electron mobility, $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ heterointerface, scattering mechanisms

 Supplementary material for this article is available online

(Some figures may appear in colour only in the online journal)

1. Introduction

Transition-metal oxide based heterointerfaces (HIs) are of great importance for fundamental study in quantum phenomena [1] and applications in oxide nanoelectronics [2]. In particular, a two-dimensional electron gas (2DEG) formed at the interface of polar/nonpolar $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ (LAO/STO) [3] has been intensively investigated for the last few decades. It was found that 2DEGs exhibit some exotic properties, such as insulator-to-metal transitions [4, 5], two-dimensional magnetism [6], two-dimensional superconductivity [7] and spin-to-charge conversion [8, 9]. There are three main mechanisms to produce metallic states in the LAO/STO system, i.e. electronic reconstruction due to a polarization discontinuity at the interface [4, 10, 11], cation intermixing [12, 13] and oxygen vacancies [14–18].

The discovery of 2DEGs in the LAO/STO HI not only created a significant interest in the fundamentals of this structure,

but also an intensive search for 2DEGs in new transition-metal oxide based HIs [19–23]. Recently, nonpolar/nonpolar HIs based on $\text{CaZrO}_3/\text{SrTiO}_3$ (CZO/STO) were investigated and many unexpected phenomena were explored [24]. First, the sheet electron density (n_s) was nearly temperature independent, in contrast to the LAO/STO system where carrier freezing out was observed at $T \sim 105\text{ K}$ [3]. Second, a critical CZO thickness of $t_c \sim 6$ unit cells (uc) (2.4 nm) exhibited an insulator-to-metal transition. This result was described and confirmed using first principles calculations [25]. Third, piezoelectric polarization from compressive strain in the CZO film affected a polarization discontinuity at the interface, leading to the formation of 2DEGs. Strain-induced polarization created a sheet electron density of around $0.4 \times 10^{13}\text{--}2.0 \times 10^{13}\text{ cm}^{-2}$. Fourth, redox reactions, such as interface charge donors and oxygen vacancies, caused an abrupt jump in the electron density to $0.4 \times 10^{15}\text{--}1.2 \times 10^{15}\text{ cm}^{-2}$ for CZO film thicknesses larger than 15 uc.

Transport properties of CZO/STO HIs were examined using a Van de Pauw method and standard Hall measurements [24]. The mobility data showed dependence on the CZO thickness, sheet electron density and temperature. Carrier mobility strongly decreased in response to increasing temperatures. At 2 K, the magnitude of carrier mobility was of $\sim 1.0 \times 10^4 - 6.0 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, in which the value of $6.0 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ was measured with a sheet density $\sim 1.2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. This is one of highest recorded in the transition-metal oxide based HIs. At room temperature, the mobility value was reduced to $\sim 12 - 18 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, which is higher than the $\sim 2 - 12 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ value observed in $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3/\text{SrTiO}_3$ (GAO/STO) [26] and RTO/STO systems, where $R = \text{Gd}$ or Sm [27, 28]. To clarify these interesting experimental findings, it is crucial to explore the scattering sources in the system and the influence of scattering mechanisms on their interfacial mobilities. However, a clear understanding of scattering limited carrier mobility has not been established.

In this paper, we report a comprehensive study on the transport properties of 2DEGs in CZO/STO HIs. The investigation analyzes both extrinsic and intrinsic transport scatterings from background impurities, interface roughness, longitudinal optical (LO) phonon and electron–electron interactions. The mobilities from all scattering sources were fitted to the experimental data [24] in the temperature range of 2–295 K.

2. Scattering models

According to the effective mass and relaxation time approximations, electron mobility can be expressed as $\mu = e\tau/m^*$, where e is the electric charge, τ is the transport scattering time and m^* is the effective mass of an electron. Generally, the scattering events are independent and Matthiessen's rule with the reciprocal addition of individual scatterings applied to fit experimental data as:

$$\mu_{\text{tot}}^{-1} = \sum_i \mu_i^{-1}. \quad (1)$$

Due to the formation of 2DEG channel nears the heterointerfaces, the extrinsic scattering due to background impurities (BI) and interface roughness (IR) was examined as scattering sources. The first parameter is BI scattering. Background impurities due to the interface charge donors at the heterointerfaces and/or oxygen vacancies in the STO layer are mainly scattering centers at low temperatures. The mobility associated with BI scattering is given by [29]:

$$\mu_{\text{BI}} = \frac{4\pi\epsilon_0^2\kappa_s^2\hbar^3k_F^3}{m^{*2}e^3N_{\text{bi}}I_B}, \quad (2)$$

$$\text{and } I_B = \int_0^\pi \frac{\sin\theta}{\left(2\sin\theta + \frac{q_F}{k_F}\right)^2} d\theta, \quad (3)$$

where ϵ_0 is the permittivity of free space, κ_s is the static dielectric constant, $q_{\text{TF}} = me^2/2\pi\epsilon_0\kappa_s\hbar^2$ is Thomas–Fermi screening, $k_F = (2\pi n_s)^{1/2}$ is the Fermi wave vector and N_{bi} is the background impurity density. The second parameter is IR

scattering. It comes mostly from cation interdiffusion across the heterointerface [24]. This interfacial roughness acts as a fluctuation potential for the motion of 2DEGs. It is characterized by the average height (Δ) and correlation length (Λ) of a Gaussian fluctuation. IR scattering limited mobility can be expressed as [30]:

$$\mu_{\text{IR}} = \frac{8\epsilon_0^2\kappa_s^2\hbar^3}{m^{*2}e^3\Delta^2\Lambda^2n_s^2I_R}, \quad (4)$$

$$\text{and } I_R = \int_0^1 \frac{\exp(-u^2k_F^2\Lambda^2)}{\left(u + \frac{q_F}{2k_F}\right)^2\sqrt{1-u^2}} u^4 du, \quad (5)$$

where $u = q/2k_F$ is dimensionless. The specific choice for Δ is approximately 2 uc ($\sim 0.8 \text{ nm}$), justified by the high-angle annular dark field (HAADF) and scanning transmission electron microscopy (STEM) images across the interface of CZO/STO [24]. The parameter Λ is more difficult to estimate and it is used as a fitting parameter.

In the intrinsic scattering mechanism controlling mobility, we are interested in the scattering due to polaron–LO phonon and electron–electron (EE) interactions. The interaction between electron and LO phonons can be considered a Fröhlich polaron [31], a conduction band electron coupled with an LO phonon cloud created from self-induced polarization. The LO phonon scattering via Fröhlich interactions is a dominant source of carrier scattering near room temperature. Herein, the simplified Low-Pines's polaron formula [31, 32] was adopted to describe the polaron–LO phonon scattering mechanism:

$$\mu_{\text{LO}} = \frac{e\hbar}{2m_P\beta_\mu(\hbar\omega_{\text{LO}\mu})} \left(\frac{m^*}{m_P}\right)^2 f(\beta_\mu) \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega_{\text{LO}\mu}}{k_B T}\right) - 1\right), \quad (6)$$

where $\hbar\omega_{\text{LO}\mu}$ are the energies of the LO phonon modes, β_μ is the electron–phonon coupling constant, $m_P = m^*(1 + \beta_\mu/6)$ is the polaron mass and $f(\beta_\mu)$ is a slowly varying function ranging from 1.0 to 1.2 for $0 < \beta_\mu < 3$ [31]. The effective mobility can be calculated using $\mu_{\text{LO}}^{-1} = \sum_\mu \mu_{\text{LO}\mu}^{-1}$. Due to extreme sheet carrier density in the CZO/STO HI, the EE scattering was expected to become important. This scattering originates from short-range Coulomb interactions related to the electron–electron coupling strength (α) and absolute temperature (T). The mobility governed by EE scattering is given by [27]:

$$\mu_{\text{EE}} = (\alpha T^2)^{-1}. \quad (7)$$

3. Results and discussion

The mobility data [24] were fitted using the individual mobilities in equations (2)–(7) and the total mobility based on Matthiessen's rule was used to analyze transport properties. The constant parameters and averaged sheet densities listed in table 1 were employed for numerical calculations. For all samples, the LO phonon energies of $\hbar\omega_1 = 0.099$ and $\hbar\omega_2 = 0.058 \text{ eV}$, corresponding the coupling constants of

Table 1. The constant parameters used in the calculations (SI units).

Parameter	Symbol (units)	Value
Electron effective mass	m^* (kg)	$1.8m_0$ [33]
Polaron mass	m_p (kg)	$2.85m_0$ and $2.01m_0$
Vacuum permittivity	ϵ_0 (F m ⁻¹)	8.85×10^{-12}
Static dielectric constant	κ_s	300 [34]
Reduced Planck constant	$\hbar$ (Js)	1.054×10^{-34}
Boltzmann constant	k_B (J K ⁻¹)	1.381×10^{-23}
Thomas-Fermi screening length	q_{TF} (m ⁻¹)	2.26×10^8
Average electron density	n_s (m ⁻²)	3.7×10^{16} (8 uc) [24] 1.2×10^{17} (10 uc) [24] 7.0×10^{18} (15 uc) [24] 1.2×10^{19} (18 uc) [24] 8.0×10^{18} (26 uc) [24]

$\beta_1 = 2.6$ and $\beta_2 = 0.7$ [32], were monitored as scattering centers at room temperature, and $f(\beta_1) = 1.2$ and $f(\beta_2) = 1.0$ were used in this evaluation. Figure 1 shows a comparison of the fitted mobilities and the experimental data as a function of temperature for different CZO thicknesses and carrier densities. The results provided good quantitative agreement with the experimental data over the entire temperature range. The fits give the extracted fitting parameters for N_{bi} , Δ , Λ and α , as shown in table 2. Some fitted parameters were comparable with previous results reported for transition-metal oxide based HIs, i.e. an interface charge density of $N_{bi} \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [35], a roughness profile of $\Delta = 0.2\text{--}0.8 \text{ nm}$ and $\Lambda = 15\text{--}17 \text{ nm}$ [36, 37]. The electron-electron coupling strengths were of $0.18 \times 10^{-6}\text{--}0.40 \times 10^{-6} \text{ Vs cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$. These results were weaker than those obtained from the RTO/STO systems ($1.2 \times 10^{-6}\text{--}1.9 \times 10^{-6} \text{ Vs cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$) [27, 28].

It can be seen from figure 1 that the mobility data was limited by individual scattering mechanisms, delivering a dominant scattering mechanism over various temperature ranges. At low temperatures, BI scattering had a major contribution to electron transport in the sample of 8 uc and IR scattering for the samples with 15, 18 and 26 uc. BI and IR scatterings played a dominant role for the sample with 10 uc. These results suggest that BI scattering is initially dominate and then IR scattering becomes stronger with increasing CZO thickness. This is analogous to increased sheet carrier density (see figure S1 in the supporting information) (stacks.iop.org/JPhysD/51/405301/mmedia). For all samples, EE scattering was the dominant scattering mechanism at intermediate temperatures ($10 \text{ K} < T < 150 \text{ K}$), while both polaron-LO phonon and EE scatterings were dominant mechanisms at room temperature.

In our work, the room-temperature electron mobility of CZO/STO system was limited by scatterings from EE and LO phonon. This is in contrast to the scattering mechanisms of 2DEGs in high-mobility STO-based heterointerfaces, such as

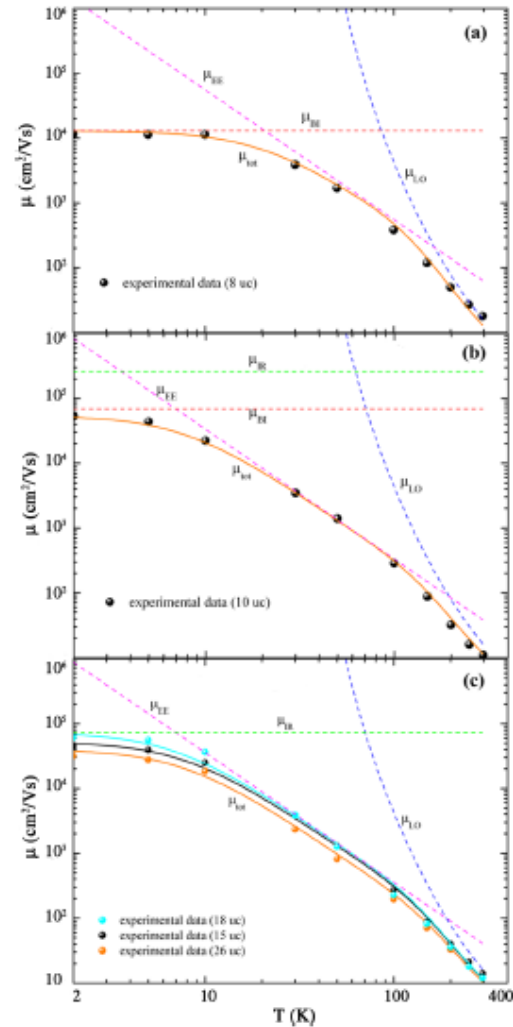


Figure 1. The fitted mobilities and the mobility data [24] as a function of temperature, (a) the total mobility $\mu_{\text{tot}}^{-1} = \mu_{\text{BI}}^{-1} + \mu_{\text{IR}}^{-1} + \mu_{\text{EE}}^{-1} + \mu_{\text{LO}}^{-1}$ (solid line) and the experimental data for the sample of 8 uc. The dashed lines represent the individual mobilities. (b) The total mobility $\mu_{\text{tot}}^{-1} = \mu_{\text{BI}}^{-1} + \mu_{\text{IR}}^{-1} + \mu_{\text{EE}}^{-1} + \mu_{\text{LO}}^{-1}$ (solid line) and the experimental data for the sample of 10 uc. The dashed lines represent the individual mobilities. (c) The total mobilities $\mu_{\text{tot}}^{-1} = \mu_{\text{BI}}^{-1} + \mu_{\text{IR}}^{-1} + \mu_{\text{EE}}^{-1} + \mu_{\text{LO}}^{-1}$ (solid lines) and the experimental data for the samples of 15, 18 and 26 uc. The dashed lines represent the individual mobilities only the sample of 18 uc. Reprinted with permission from [24]. Copyright 2015 American Chemical Society.

GdTiO₃/STO [27] and γ -Al₂O₃/STO [38]. EE scattering was found to be dominating in GdTiO₃/STO [27], and LO phonon scattering dominated in γ -Al₂O₃/STO [38]. At low temperatures, background impurities due to the interface charge donors and interface roughness were examined as scattering sources. The result is consistent with that reported in the literature [27,

Table 2. Fitting parameters for mobility parameters shown in figure 1.

Sample	$N_{\text{H}} (\text{m}^{-3})$	$\Delta, \Lambda (\text{nm})$	$\alpha (\text{Vs cm}^{-2} \text{K}^{-2})$
8 uc	1.3×10^{24}	—	0.18×10^{-6}
10 uc	1.0×10^{24}	0.8, 8	0.30×10^{-6}
15 uc	—	0.8, 10	0.30×10^{-6}
18 uc	—	0.8, 13.5	0.28×10^{-6}
26 uc	—	0.8, 9	0.40×10^{-6}

38]. The highest electron mobility of $1.4 \times 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ observed in $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3/\text{STO}$ HI was caused by a lowering of the electron-donor scattering, because of oxygen vacancies located at the interface whereas electrons extended deeper into STO layer [26, 38]. At intermediate temperatures, the electron mobilities for all systems were described by EE scattering.

The insights provided by this analysis allow us to explain the transport properties of the CZO/STO HIs as follows. First, a crossover between the dominance of BI scattering and the IR scattering can be explained by considering the universality of mobility between bulk STO and STO-based HIs [39] and references therein. The critical 3D electron density near the heterointerface ($n_{3D}^{(c)}$) was related to the critical sheet electron density ($n_s^{(c)}$). In STO-based HIs [39], the critical 3D density of $n_{3D}^{(c)} \sim 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ was equivalent to $n_s^{(c)} \sim 1.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, and BI scattering was found to be the main scattering mechanism for $n_s \ll 1.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. In the CZO/STO system, a scattering source came mainly from BI scattering due to interfacial charge donors for $n_s \ll n_s^{(c)}$ (8 uc) and the IR scattering for $n_s \gg n_s^{(c)}$ (15, 18 and 26 uc). The larger distribution of 2DEGs with increasing sheet carrier density was electrically pushed closer to the interface leading to increased IR scattering strongly enough to screen Coulomb interaction from BI scattering. However, in the sample of 10 uc with $n_s \sim n_s^{(c)}$, both BI and IR scattering limited electron mobility.

Second, EE scattering showed a contribution to carrier mobility over a wide temperature range, from 10–295 K. This is quite similar to the results observed in bulk STO [27]. The explanation for the lower electron–electron coupling strength in comparison to the RTO/STO systems [27, 28] is that the lower density of states at the Fermi surface were due to the larger confinement [40]. It is noteworthy that the coupling strength decreased with increasing confinement or STO thickness. The STO thicknesses of CZO/STO HIs were $\sim 0.5 \text{ nm}$ with the confinements larger than 100 nm [24]. These were larger than the $\sim 5\text{--}100 \text{ nm}$ confinements observed in the RTO/STO systems [27, 28]. Thus, the mobility values of CZO/STO HIs were relatively higher than the RTO/STO systems at the same temperature.

Third, scattering limited room temperature mobility was described by polaron-LO phonon and EE interactions. Considering phonon scattering, LO phonon energies of 0.099 and 0.058 eV, corresponding to the highest frequency modes of 797 and 449 cm^{-1} at the Γ point of STO [41], showed strong correlation, and the calculated room-temperature mobility was $\sim 16 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. These imply that the Fermi

surface covered only a small portion of the Brillouin zone and only conduction electrons near the Γ point could scatter LO phonons [41]. Therefore, LO phonon scattering was still expected to significantly contribute at high carrier densities. With a combination of both substance scatterings, polaron-LO phonon and electron–electron, the room-temperature mobility was reduced to $\sim 11\text{--}14 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, which is in good agreement with the experimental data.

4. Conclusions

We investigated the 2DEG mobilities of CZO/STO HIs using scattering analysis. It was found that all extrinsic and intrinsic scatterings can describe the temperature dependent mobility data. With increasing concentrations of 2DEG, we observed a crossover between BI and IR scattering at low temperatures. Furthermore, large confinement of the CZO/STO HIs leads to a low density of states at the Fermi surface and the LO phonon scattering rate becomes stronger at higher electron densities. A combination of these two mechanisms together with the polaron-LO phonon and EE scatterings determined the electron mobility near room temperatures. We believe that these insights and qualitative results will help in understanding and analyzing transport properties of novel transition-metal oxide based HIs.

Acknowledgments

The authors would like to express their gratitude to Dr Yunzhong Chen for providing the data on mobility and sheet electron density. This work was supported by the Thailand Research Fund (TRF) and Srinakharinwirot University under Grant No. RSA6080038 and Srinakharinwirot University under Grant No. 025/2561.

ORCID iDs

Anusit Thongnum  <https://orcid.org/0000-0003-3272-5797>

References

- [1] Zubko P, Gariglio S, Gabay M, Ghosez P and Triscone J M 2011 *Annu. Rev. Mater. Res.* **2** 141
- [2] Pryds N and Esposito V 2017 *J. Electroceram.* **38** 1
- [3] Ohtomo A and Hwang H Y 2004 *Nature* **427** 423
- [4] Nakagawa N, Hwang H Y and Muller D A 2006 *Nat. Mater.* **5** 204
- [5] Thiel G, Hammerl G, Schmehl A, Schneider C W and Mannhart J 2006 *Science* **313** 1942
- [6] Brinkman A, Huijben M, van Zalk M, Huijben J, Zeitler U, Maan J C, van der Wiel W G, Rijnders G, Blank D H A and Hilgenkamp H 2007 *Nat. Mater.* **6** 493
- [7] Reyren N *et al* 2007 *Science* **317** 1196
- [8] Lesne E *et al* 2016 *Nat. Mater.* **15** 1261
- [9] Song Q, Zhang H, Su T, Yuan W, Chen Y, Xing W, Shi J, Sun J and Han W 2017 *Sci. Adv.* **3** e1602312
- [10] Pentcheva R and Pickett W E 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 107602

- [11] Nazir S, Behtash M and Yang K 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 141602
- [12] Willmott P R *et al* 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 155502
- [13] Chambers S A *et al* 2010 *Surf. Sci. Rep.* **65** 317
- [14] Chen Y Z, Pryds N, Kleibeuker J E, Koster G, Sun J, Stamate E, Shen B, Rijnders G and Linderoth S 2011 *Nano Lett.* **11** 3774
- [15] Herranz G *et al* 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 216803
- [16] Kalabukhov A, Gunnarsson R, Börjesson J, Olsson E, Claeson T and Winkler D 2007 *Phys. Rev. B* **75** 121404
- [17] Liu Z Q *et al* 2013 *Phys. Rev. X* **3** 021010
- [18] Yu L and Zunger A 2014 *Nat. Commun.* **5** 5118
- [19] Wang Y, Tang W, Cheng J, Nazir S and Yang K 2016 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** 31924
- [20] Cheng J, Nazir S and Yang K 2016 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 31959
- [21] Paudel T R and Tsymbal E Y 2017 *Phys. Rev. B* **96** 245423
- [22] Lu Y, Wang F, Chen M, Lan Z, Ren Z, Tian H and Yang K 2018 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **10** 10536
- [23] Cheng J and Yang K 2018 *J. Mater. Chem. C* **6** 6680
- [24] Chen Y Z *et al* 2015 *Nano Lett.* **15** 1849
- [25] Nazir S, Cheng J and Yang K 2016 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 390
- [26] Chen Y Z *et al* 2013 *Nat. Commun.* **4** 1371
- [27] Mikhhev E, Himmetoglu B, Kajdos A P, Moetakef P, Cain T A, Van de Walle C G and Stemmer S 2015 *Appl. Phys. Lett.* **106** 62102
- [28] Raghavan S, Zhang J Y and Stemmer S 2015 *Appl. Phys. Lett.* **106** 132104
- [29] Hess K 1976 *Appl. Phys. Lett.* **35** 484
- [30] Zanato D, Gokden S, Balkan N, Ridley B K and Schaff W J 2004 *Semicond. Sci. Technol.* **19** 427
- [31] Low F E and Pines D 1955 *Phys. Rev.* **98** 414
- [32] Frederikse H P R and Hosler W R 1967 *Phys. Rev.* **161** 822
- [33] Verma A, Kajdos A P, Cain T A, Stemmer S and Jena D 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 216601
- [34] Delugas P, Fiorentini V, Mattoni A and Filippetti A 2015 *Phys. Rev. B* **91** 115315
- [35] Rutkowski M M, McNicholas K, Zeng Z Q, Tuomisto F and Brillson L J 2014 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47** 255303
- [36] Su S, Yu J H and Lee C 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 93709
- [37] Moetakef P, Jackson C A, Hwang J, Balents L, Allen S J and Stemmer S 2012 *Phys. Rev. B* **86** 201102
- [38] Christensen D V, Frenkel Y, Schütz P, Trier F, Wissberg S, Claessen R and Kalisky B, Smith A, Chen Y Z and Pryds N 2018 *Phys. Rev. Appl.* **9** 54004
- [39] Trier F, Reich K V, Valbjørn Christensen D, Zhang Y, Tuller H L, Chen Y Z, Shklovskii B I and Pryds N 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 092106
- [40] Jackson C A and Stemmer S 2013 *Phys. Rev. B* **88** 180403
- [41] Himmetoglu B, Janotti A, Peelaers H, Alkauskas A and Van de Walle C G 2014 *Phys. Rev. B* **90** 241204

ประวัติผู้เขียน

ชื่อ-สกุล	กิตติภณ สุขกุล
วัน เดือน ปี เกิด	23 ตุลาคม 2535
สถานที่เกิด	บุรีรัมย์
วุฒิการศึกษา	พ.ศ. 2558 วิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์ จากมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ
ที่อยู่ปัจจุบัน	หอพักคุณสำราญ 223/1 ซอยสวัสดิ์ ถนนสุขุมวิท31 แขวงคลองเตยเหนือ เขตวัฒนา กรุงเทพฯ 10110

