

14. Absorció òptica i determinació de la banda prohibida de semiconductors

Objectius

1. Determinació de l'amplada de la banda prohibida (*gap*) de dos semiconductors a partir de la mesura d'absorció de llum en l'infraroig proper.
2. Determinació de l'energia dels fonons implicats en transicions en una mostra semiconductora de *gap* indirecte.

Mètode

Els materials que s'estudiaran són una mostra semiconductora de *gap* directe i una altra de *gap* indirecte. De cadascuna se n'estudiarà l'absorció de llum en l'infraroig proper. Utilitzant una font de llum policromàtica excitem cada mostra amb diferents longituds d'ona seleccionades per un monocromador. Usarem un detector per mesurar la llum transmesa i obtenir a partir d'aquesta dada l'absorció òptica. Aquest procés permet obtenir de manera senzilla el valor de l'amplada de la banda d'energia prohibida (*gap*) d'un determinat semiconductor.

Muntatge experimental

El material que utilitzem es mostra a la Figura 1 i consta dels elements següents:

- Dues mostres de material semiconductor.
- Una font d'alimentació doble.
- Dos multímetres.
- Un sistema de mesura que consta de tres parts integrades en un mateix mòdul:
 - Una font de llum.
 - Un monocromador.
 - Un fotodíode amb amplificador.

Com que la font de llum utilitzada no dona una emissió constant en tot l'espectre de mesura, és recomanable fer un primer escombrat per obtenir un espectre de referència. D'altra banda, la intensitat de la font pot fer que el detector se sature. Convé aleshores tancar lleugerament l'iris del monocromador per evitar-ho.

Un cop mesurat l'espectre de referència, procedim a determinar l'espectre d'absorció de cada mostra col·locant-la en el portamostres localitzat dins el mòdul de mesura i tornant a escombrar en funció de la longitud d'ona. No toqueu la mostra amb els dits, ja que això pot afectar-ne la transmissió.

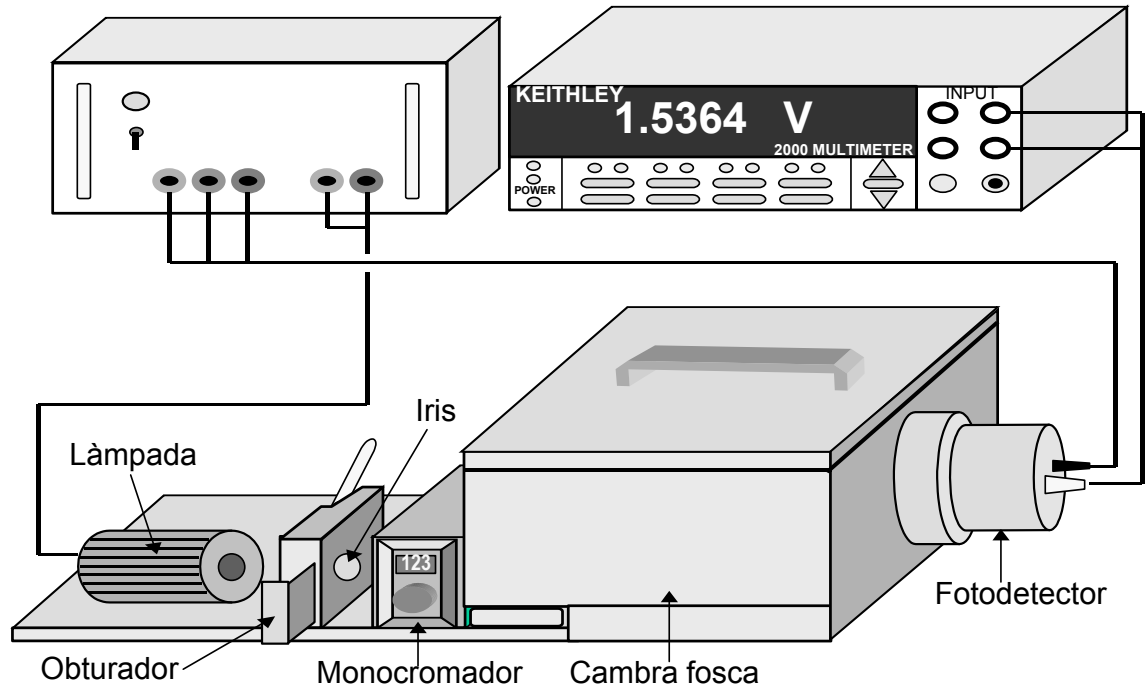


Figura 1. Muntatge experimental.

Teoria i avaluació

Durant el procés d'absorció, un fotó excita un electró d'un nivell baix d'energia a un nivell alt. Si introduïm una mostra semiconductora a la sortida d'un monocromador i estudiem els canvis de la llum transmesa, es podran detectar totes les possibles transicions dels electrons i, per tant, la distribució d'estats. L'absorció fonamental és deguda a transicions d'electrons de la banda de valència a la banda de conducció. Això es manifesta per un ràpid augment en l'absorció, que es pot utilitzar per determinar el *gap* del material semiconductor. Com que les transicions estan subjectes a certes regles de selecció, la determinació de la banda prohibida no és directa.

El coeficient d'absorció en funció de la longitud d'ona es defineix com

$$\alpha = \frac{d \ln I(\lambda)}{dx}, \quad (1)$$

on I es la intensitat de la llum transmesa amb longitud d'ona λ . En un material semiconductor, tenint en compte les regles de selecció, el coeficient d'absorció serà proporcional a la suma de totes les contribucions corresponents a les possibles transicions entre estats amb una diferència energètica igual a $h\nu = hc/\lambda$,

$$\alpha = A \sum P_{if} n_i n_f, \quad (2)$$

on P_{if} és la probabilitat que es produeixi una certa transició i n_i i n_f són les densitats d'estats inicials plens i d'estats finals buits separats per una energia $h\nu$.

Transicions directes

Anomenem *transicions directes* aquelles que tenen lloc entre estats amb el mateix moment, de manera que només és necessari un fotó amb energia igual a la diferència d'energia entre els estats implicats per fer possible la transició [Figura 2(a)].

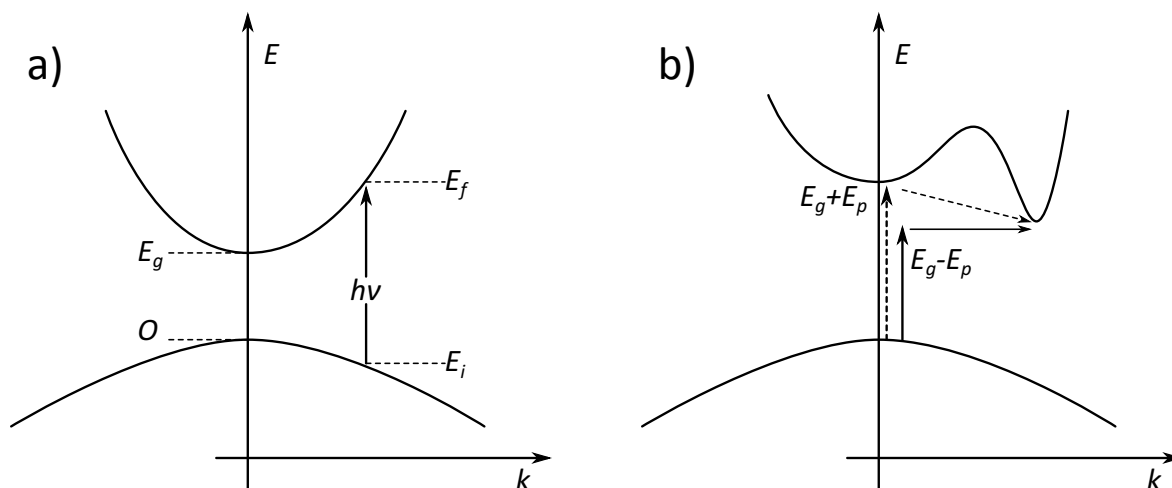


Figura 2. (a) Transició directa. (b) Transició indirecta.

Si suposem que les bandes són parabòliques i tenim en compte la densitat d'estats associats per transicions directes, obtenim que el coeficient d'absorció val

$$\alpha = B\sqrt{h\nu - E_g}. \quad (3)$$

Així, si representem α^2 en funció de $h\nu$ obtindrem que el punt on la corba talla l'eix d'abscisses ens dona directament l'amplada de la banda prohibida, E_g .

Transicions indirectes

Tindrem transicions indirectes quan hi hagi un canvi simultani en l'energia i en el moment dels estats inicials i finals, cosa que no es pot aconseguir només amb fotons i, per tant, cal també la contribució de fonons. Aquests fonons poden ser emesos (creats) o absorbits (anihilats). Per tant, una mateixa transició es pot realitzar per dos camins diferents, tal com es veu a la Figura 2(b). En conseqüència, per a cadascun d'aquests camins tindrem un comportament diferent pel que fa a l'absorció òptica, ja que són dos mecanismes que poden competir entre ells. Tenint en compte que la distribució de fonons es pot descriure per l'estadística de Bose-Einstein i fent el sumatori sobre tots

els possibles estats fonònics, obtenim dues expressions per al coeficient d'absorció, α_e i α_a , associades respectivament a l'emissió i a l'absorció d'un fonó:

$$\begin{aligned}\alpha_a(h\nu) &= \frac{A(h\nu - E_g + E_p)^2}{\exp\left(\frac{E_p}{kT}\right) - 1} \\ \alpha_e(h\nu) &= \frac{A(h\nu - E_g - E_p)^2}{1 - \exp\left(-\frac{E_p}{kT}\right)}\end{aligned}\tag{4}$$

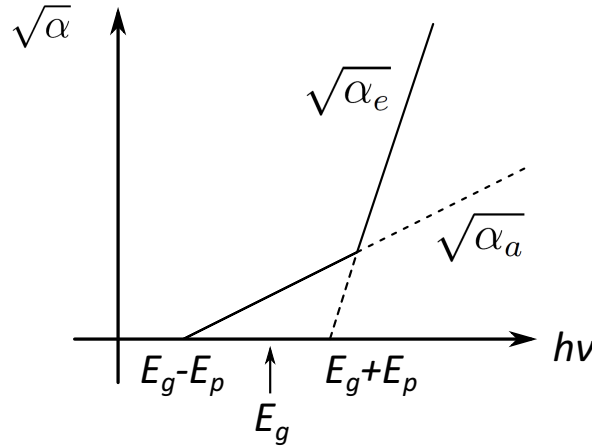


Figura 3. Arrel quadrada del coeficient d'absorció en funció de l'energia de la transició.

Com que tots dos mecanismes són possibles, el coeficient d'absorció que mesurarem serà la suma de tots dos. Així, si representem $\sqrt{\alpha}$ en funció de $h\nu$, obtindrem el resultat de la Figura 3 i podrem determinar l'amplada de la banda prohibida, E_g , i l'energia associada al fonó implicat en la transició, E_p .

Realització pràctica

- i)* Alimenteu el mòdul de mesura amb la font d'alimentació.
- ii)* Sense mostra, mesureu la tensió que dóna el fotodetector per a longituds d'ona entre 800 i 1250 nm (feu les mesures cada 5 nm). Per evitar que el fotodetector se satori feu primer una escombrada ràpida i ajusteu l'iris d'entrada perquè la sortida màxima del fotodetector sigui de 10,5 V (es dóna per a longituds d'ona al voltant de 970 nm).
- iii)* Feu ara una mesura de la tensió del fotodetector a les fosques (tancant l'obturador que està davant de l'iris) per avaluar el fons i el soroll elèctric del detector. Aquest valor és un *offset* que haureu de restar a totes les mesures obtingudes, amb mostra i sense.

- iv)** Repetiu les mesures introduint a la cambra portamostres la mostra semiconductora *A* (mostra de *gap* directe, amb un gruix de 100 μm), posant la cara brillant cap al feix de llum. Per fer aquest procés no toqueu l'iris d'entrada.
- v)** Repetiu les mesures per a la mostra semiconductora *B* (mostra de *gap* indirecte, amb un gruix de 500 μm).
- vi)** Tenint en compte que la transmitància és

$$T = \frac{I_{\text{mostra}}}{I_0}, \quad (5)$$

on I_{mostra} i I_0 són respectivament les intensitats mesurades amb i sense mostra, i que està relacionada amb el coeficient d'absorció α i amb la reflectivitat R a través de l'equació

$$T = (1 - R)^2 \exp(-\alpha x), \quad (6)$$

deduïu el coeficient d'absorció α en funció de la longitud d'ona per a cada mostra. Per fer això, suposeu que la reflectivitat R és constant en tot el rang de mesura i deduïu-la a partir de la zona de longitud d'ona on la transmitància és màxima.

- vii)** Tenint en compte la teoria exposada, representeu α^2 en funció de $h\nu$ per a la mostra *A* i $\sqrt{\alpha}$ en funció de $h\nu$ per a la mostra *B*. Determineu l'amplada de la banda prohibida, E_g , per a cada mostra i digueu, de manera raonada, de quins materials es tracta.
- viii)** Quina és l'energia dels fonons, E_p , en el material *B*?
- ix)** Mirant els gràfics dels coeficients d'absorció dels dos materials, intenteu justificar per què el material *A* té un pendent molt més fort que el material *B*.

Bibliografia

- W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids: the Physics of the Chemical Bond*, W.H. Freeman and Co., San Francisco, 1980.
- C. F. Klingshirn, *Semiconductor Optics*, Springer, Berlín, 1995.
- J. I. Pankove, *Optical Processes in Semiconductores*, Dover, Nova York, 1980.