

Festkörperoptik

Guilherme Stein & Ulrich Müller

FKO abstract ...

Betreuer: Dr. Christoph Brüne

Experimentdurchführung: 10. October 2013

1 Einleitung

Halbleiter spielen heutzutage eine wichtige Rolle in vielen technischen Anwendungen. Die Bandlücke, ein Energiebereich in dem es keine quantenmechanischen Zustände gibt, macht diese Materialklasse interessant für viele Anwendungen in der Elektronik und der Optoelektronik. Silizium zählt dabei zu den indirekten Halbleitern und ist ein wichtiger Bestandteil vieler Metall-Oxid-Halbleiter Bauelemente. Für optisch aktive Halbleiterbauelemente werden in der Regel Halbleiter mit einem direkten Bandübergang verwendet, um eine hohe Wechselwirkung der Elektronen mit Licht zu ermöglichen. Genau diese Wechselwirkung ist für viele Bereiche der Physik von großem Interesse. Ein etabliertes Werkzeug zur Charakterisierung von Halbleitern ist das Fourier-Transform-Infrarotspektrometers (FTIR). In diesem können Reflexions- und Transmissionsspektren einer Probe mit hoher Auflösung analysiert werden. Daraus lassen sich anschließend die Materialeigenschaften der Probe, wie komplexer Brechungsindex, Dotierkonzentrationen und Bandlücken berechnen.

2 Theorie

- 6. Bandlücke und Impulsmatrixelemente
- 7. Bandlücke und charakteristische Phononenfrequenz für Si
- 8. Beitrag der freien Ladungsträger zur Reflexion
- 9. Leitfähigkeitsmassen, Stromrelaxationszeiten und Dotierkonzentrationen

- Zusammenhang Dielektrizitätskonstante und komplexer Brechungsindex
- Impulsmatrixelement

In diesem Abschnitt werden die wichtigsten Zusammenhänge die für die spätere Betrachtung nötig sind vorstellen. Dabei orientieren wir uns, soweit nicht anders angegeben, an ??.

2.1 Dispersionsrelation und Brechungsindex

Aus den Maxwellgleichungen lässt sich die Wellengleichung herleiten, welche für einen Ansatz ebener Wellen uns folgende Dispersionsrelation liefert:

$$q^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) \quad (2.1)$$

mit dem Wellenvektor q , der Frequenz ω und c , der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum. $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$ beschreibt dabei die komplexe Dielektrizitätsfunktion. Diese hängt mit dem komplexen Brechungsindex zusammen:

$$\sqrt{\epsilon} = n + i\kappa \epsilon' = n^2 - \kappa^2 \epsilon'' = 2n\kappa \quad (2.2)$$

2.2 Reflexion und Transmission

Trifft Licht auf die Grenzfläche zwischen zwei unterschiedlichen Materialien, so wird ein gewisser Anteil der Intensität reflektiert. Ein anderer Teil des Lichtes gelangt in die Probe und kann dort absorbiert werden. Licht was nicht reflektiert oder absorbiert wird, verlässt

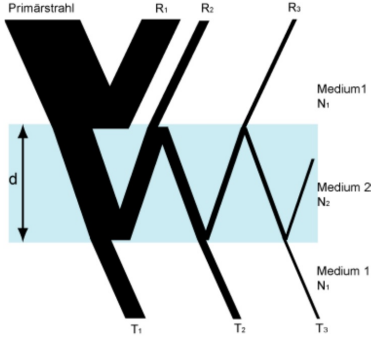


Abbildung 1: Mehrfachreflexion und -transmission an einer planparallelen Schicht

die Probe als transmittiertes Licht wieder. Für die drei Koeffizienten diese drei Prozesse gilt deshalb

$$R + A + T = 1. \quad (2.3)$$

Dabei sind die Koeffizienten eindeutig durch den komplexen Brechungsindex der Materialien festgelegt. Luft besitzt einen Brechungsindex von annähernd 1. Die Fresnelschen Formeln, die den Übergang des Lichtes von einem Medium in ein anderes beschreiben, vereinfachen sich bei senkrechtem Einfall deutlich. Man erhält für den Reflexionskoeffizienten

$$R = \left(\frac{1 - N_2}{1 + N_2} \right)^2. \quad (2.4)$$

und für den Transmissionskoeffizienten

$$T = \left(\frac{2}{1 + N_2} \right)^2. \quad (2.5)$$

Für eine planparallele Schicht muss man die wiederholte Reflexion und Transmission berücksichtigen, wie in figure 1 illustriert und erhält dabei dabei folgenden Ausdruck:

$$T_v = \frac{(1 - \rho)^2 \exp(-d\beta\nu)}{1 - \rho^2 \exp(-2d\beta\nu)} \quad (2.6)$$

$$R_v = \rho + \frac{\rho(1 - \rho)^2 \exp(-2d\beta\nu)}{1 - \rho^2 \exp(-2d\beta\nu)} \quad (2.7)$$

$$\text{wobei } \beta = 4\pi\nu |\kappa| \text{ und } \rho = \frac{\kappa^2 + (n - 1)^2}{\kappa^2 + (n + 1)^2} \quad (2.8)$$

Für den Übergang von Luft in ein anderes Medium werden die Koeffizienten

2.3 Lorentz Oszillator & Drude Modell

Aus dem Lorentz-Modell eines Elektrons als Oszillator erhält man eine dielektrische Funktion, die sich, obwohl durch klassische Überlegungen begründet, dem quantenmechanischen Modell sehr nahe kommt. Dieses wird durch die Übergangsfrequenzen ω_j , den Oszillatorstärken f_j sowie den inversen der Lebensdauer der Zustände Γ_j :

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{e^2}{m\epsilon_0} \sum_j \frac{N f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\Gamma_j \omega} \quad (2.9)$$

wobei die Summe aller Oszillatorstärken sich zu eins summiert.

In der Impulsdarstellung lassen sich diese als Matrixelemente des Impulsoperators darstellen:

$$f_{ij} = \frac{2}{m\hbar\omega_{ij}} |p_{ij}|^2 \quad (2.10)$$

Das Drude Modell betrachtet nun freie Ladungsträger mit verschwindenden Resonanzfrequenzen. Mit der sog. Plasmafrequenz $\omega_p = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0}$ lässt equation (2.9) umformulieren zu:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} + i \frac{\omega_p \tau}{\omega + \omega^3 \tau^2} \quad (2.11)$$

3 Experimenteller Aufbau

Alle Reflexions und Transmissionsmessungen finden in einem FTIR statt, das schematisch in figure 2 dargestellt ist. Dabei wird das Licht, von einer Infrarot-Lichtquelle (Globar-Stab oder Wolfram-Lampe) durch ein Interferometer geleitet und interferiert in Abhängigkeit der Position des beweglichen Spiegels. Das Frequenzspektrum wird dadurch auf eine neue Funktion $I(L)$ abgebildet. Diese Funktion beschreibt die Abhängigkeit der detektierten Intensität von der Spiegelposition und ist mathematisch eine Fouriertransformation des Frequenzspektrums. Im optischen Strahlengang kann nun der Teil der Intensität gemessen werden, der reflektiert bzw. transmittiert wird. Nach der Messung führt das FTIR die inverse Fouriertransformation aus und man erhält wieder die Intensität in

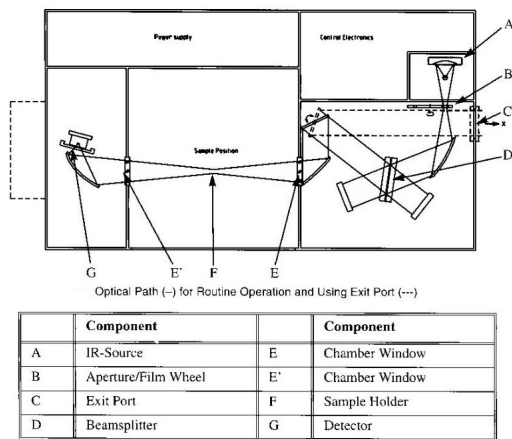


Abbildung 2: Aufbau des FTIR. Hauptbestandteile sind Lichtquelle, Interferometer, Probenhalter und Detektor.

Abhängigkeit der Frequenz. Um den Einfluss der Probenreflexion und -transmission zu isolieren, wird zu jeder Messung eine Referenzmessung durchgeführt. Dies wird im Fall der Transmissionsmessung mit leerem Probenraum und im Fall der Reflexionsmessung mit einem Goldspiegel durchgeführt, der im untersuchten Frequenzbereich nahezu perfekt reflektiert. Untersucht werden verschiedene Proben, die Gasabsorption an Luft und das Rauschen des Spektrometers.

Folgende Proben standen uns zur Verfügung:

Probe	Material	Schichtdicke
Sample ①	GaAs undotiert	470 μm
Sample ②	GaAs dotiert	440 μm
Sample ③	Si undotiert	530 μm
Sample ④	Si dotiert	530 μm

4 Versuchsdurchführung

- Versuchsdurchführung

5 Auswertung

5.1 Gasabsorption in Luft

Am Anfang soll die Gasabsorption der Umgebungsluft untersucht werden. Dazu verwenden wir die Globalquelle, die ein kontinuierliches Spektrum von $500 \frac{1}{\text{cm}}$ bis zu $5000 \frac{1}{\text{cm}}$ aussendet. Dieses Spektrum wird auf dem Weg zum Detektor von der Umgebungsluft an manchen

Stellen absorbiert, was uns die Spektralbereiche starker Gasabsorption identifizieren lässt. In ?? ist das gesamte aufgenommene Spektrum gezeigt. Wir können jeweils zwei Bereiche der Absorption von Wasser (??,??) und Kohlenstoffdioxid (??,??) zuordnen. Deutlich zu erkennen sind dabei auch die im Fall von Kohlenstoffdioxid die P- und R-Zweige der Rotations-Schwingungs-Spektren.

5.2 Signal Rausch Verhältnis

Mit geringer Auflösung messen wir ohne eingebaute Probe das Spektrum der Global-Quelle und normieren es auf eine zweite Messung mit gleichen Einstellungen. Diese Messung wiederholen wir mit 10, 50 und 100 Spiegeldurchläufe (Scans) und untersuchen, wie das Rauschen mit zunehmender Anzahl an Scans abnimmt. Zur Auswertung wählen wir einen Bereich in dem die Intensität der einzelnen Spektren ausreichend hoch ist. Das heißt einen Bereich ohne Absorptionslinien in der Nähe der maximalen Intensität ($1000 \frac{1}{\text{cm}}$ bis $2200 \frac{1}{\text{cm}}$). In diesem Bereich erhalten wir vom FTIR normierte Intensitätswerte, die um die 1 schwanken. Aus diesen Intensitätswerten, bestimmen wir die Standardabweichung vom Mittelwert und interpretieren diese als Rauschen der Daten. Um zu untersuchen, ob das Rauschen einem $1/\sqrt{N}$ -Zusammenhang folgt, plotten wir in ?? das Rauschen über $1/\sqrt{N}$. Den Fehler der Standardabweichungen erhalten wir mit Gaußscher Fehlerfortpflanzung aus den Fehlern der einzelnen normierten Intensitätswerten, für die wir wiederum die Größe des Rauschens annehmen.

5.3 Brechzahl von GaAs und Si

Die untersuchten Proben bestehen aus mehreren hundert Nanometer dicken Schichten. Untersucht man das Reflexionsspektrum dieser Schichten, so kommt es zwischen den Grenzflächen dieser Schichten zur Interferenz, die sich als Modulation im Reflexionsspektrum bemerkbar machen. Wir bestimmen an verschiedenen Stellen im Spektrum jeweils den Abstand von 50 Interferenzmaxima. Die Ablesegenauigkeit der Peaks nehmen wir mit $\pm 1 \text{ cm}^{-1}$ an. Mit Hilfe der Probendicken (GaAs undotiert: 470 μm , GaAs dotiert: 440 μm , Si undotiert: 530 μm) lässt sich nun der Realteil des Brechungsindex der verschiedenen Materialien an verschiedenen Stellen im Spektrum bestimmen.

Wellenzahl	n GaAs undotiert	n GaAs dotiert	n Si undotiert
500	3.452(32)	-	3.343(34)
1000	3.245(28)	-	3.348(34)
1500	3.243(28)	-	3.369(34)
2000	3.224(28)	3.303(27)	3.363(34)
2500	3.243(28)	3.303(27)	3.370(34)
3000	3.263(28)	3.284(27)	3.394(35)

Die entsprechenden Dielektrizitätskonstanten ergeben sich aus dem Quadrat der komplexen Brechungsindizes, zu deren Berechnung uns aber noch die Auswertung der Absorptionsmessung fehlt.

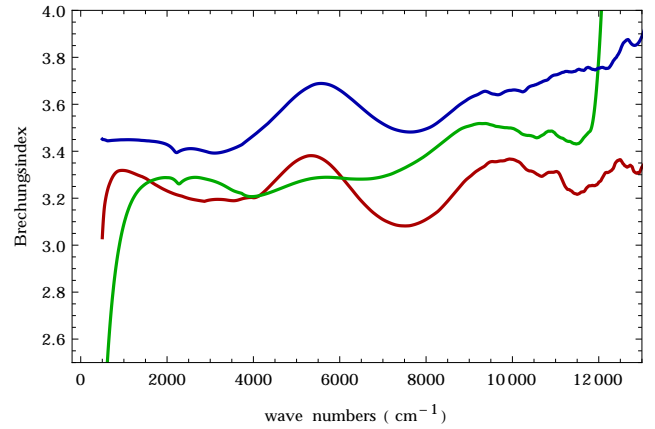
5.4 Reflexion und Transmission der Proben

5.5 Brechzahlen, Extinktions- und Absorptionskoeffizienten

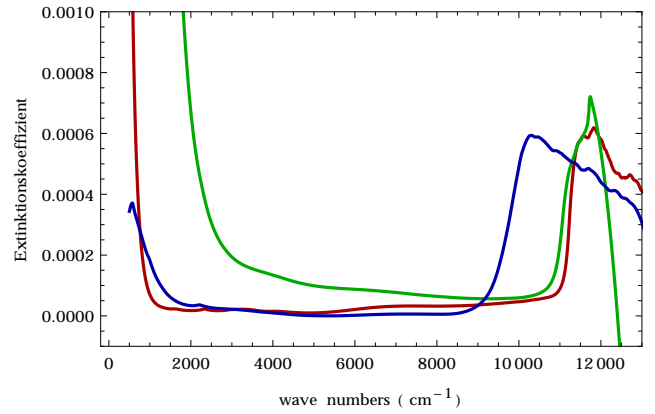
Das OPUS Programm liefert uns eine Tabelle indem für die einzelnen Messungen das Spektrum als 2-Tupel von Intensität und Wellenzahl repräsentiert wird. Um einen größeren Frequenzbereich abzudecken, wurde bei der Messung jeweils ein Spektrum mit einem Global-Stab und einer Wolfram Lampe durchgeführt. Aus den beiden Spektren der jeweiligen Probe, wird das Spektrum, welches zur weiteren Untersuchung benutzt wird, zusammengesetzt. Dabei wurden versucht, starke Oszillationen zu vermeiden. Diese treten auf, wenn die Intensität der Lampe in einem Frequenzbereich gering ist, und bei der Normierung das Rauschen einen erheblichen Beitrag zum Signal leistet. Auch wurde versucht die Stetigkeit des Spektrums zu erhalten. Um das Rauschen zu minimieren wurde eine Glättung durchgeführt und die resultierenden Punkte zu einer Funktion interpoliert. Diese wurden dann mit den theoretischen Werten aus equation (2.8) verglichen. Es wurde für die jeweilige Wellenzahl ein n und κ gefittet, welche die Differenz aus Theorie und experimentellen Daten verschwinden ließ. Somit erhält man $\kappa(\nu)$, $n(\nu)$ und $\beta(\nu)$ welche in figure 3 aufgetragen sind.

5.6 Bandlücke und Impulsmatrixelemente

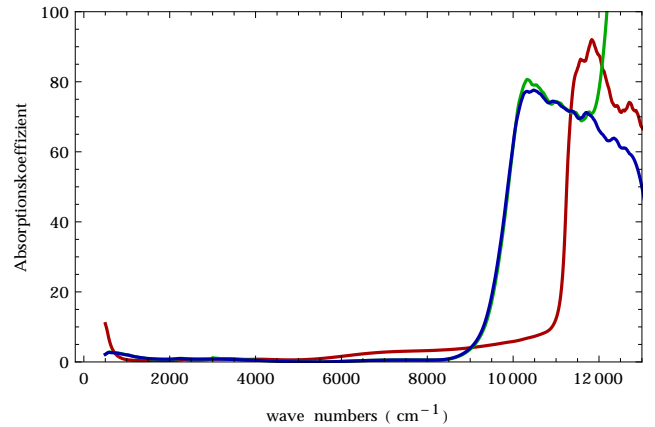
Erhöht man die Energie, ausgehend von einer Wellenzahl unterhalb der Bandlücke, über die Energie der



(a) Realteil vom Brechungsindex n



(b) Imaginärteil vom Brechungsindex κ



(c) Absorptionskoeffizient β

Abbildung 3: Die verschiedenen Koeffizienten unserer untersuchten Proben. **Sample 1** → rot, **Sample 2** → grün, **Sample 3** → blau

Material	Bandlücke/ eV	Impulsmatrixelement	Material	Bandlücke/eV	Phononenenergie/meV
GaAs undotiert	1.384(1)	1.73(1)	Si undotiert	1.108(3)	48(2)
GaAs dotiert	1.3591(5)	1.59(3)			

Tabelle 1: Ermittelte Werte für die Bandlücke von Galliumarsenid und entsprechende Impulsmatrixelement.

Tabelle 2: Ermittelte Werte für die Bandlücke von undotiertem Silizium und der Phononenenergie der bei Übergang beteiligten Phononen.

Bandlücke, so findet man, dass der Absorptionskoeffizient stark zunimmt. Der Grund dafür liegt in der Anzahl der Zustände, die oberhalb der Bandlücke einen Übergang ermöglichen. Im idealisierten Modell nimmt dabei die Zustandsdichte im dreidimensionalen System wurzelförmig zu und immer mehr Lorentzoszillatoren tragen zur Erhöhung des Absorptionskoeffizienten bei.

Um die Bandlücke und das Impulsmatrixelement der Übergänge zu bestimmen berechnen wir zunächst aus ?? den Imaginärteil ϵ'' des undotierten und dotierten GaAs. Nun tragen wir $(\epsilon'' \cdot \omega^2)^2$ über die Anregungswellenzahl in Tabelle ?? auf. Der theoretische Verlauf dieser Funktion oberhalb der Bandlücke entspricht dabei

$$(\epsilon'' \cdot \omega^2)^2 = \frac{e^4 (2\mu)^3 |p_{cv}|^4}{\epsilon_0^2 m_e^4 \hbar^2} \cdot (\hbar\omega - E_g) \quad (5.1)$$

Wir plotten zu den Messpunkten eine theoretische Kurve, die unserer Meinung nach die Steigung nach dem Knick am besten wiedergibt und die Messpunkte etwa am steilsten Punkt tangiert. Zu dieser Kurve plotten wir zwei Hilfsfunktionen, die die Messdaten etwas weiter oben und unten tangieren, um eine Abschätzung der Unsicherheit von Bandlücke und Impulsmatrixelement zu erhalten. Die Ergebnisse sind in Tabelle 1 dargestellt.

Die von uns bestimmte Bandlücke von GaAs liegt mit 1.384 eV um 50 meV unterhalb des Literaturwertes von 1.43 eV (bei 300 K). Der Grund liegt in der Aufweichung der Bandkante, dem sogenannten Urbachtail, der die Einflüsse von Exzitonen, Phononen, Verunreinigungen und Defekte sowie die Dotierungen im Material berücksichtigt.

5.7 Bandlücke und charakteristische Phononenfrequenz für Silizium

Bei Silizium handelt es sich um einen indirekten Halbleiter. Daher werden die Übergänge vom Valenz- zum Leitungsband maßgeblich von den Phononen im Material beeinflusst. Wir nutzen den Zusammenhang

$$\beta_{em} = (n_{ph} + 1) \frac{(\hbar\omega - \hbar\omega_{ph} - E_g)^2}{(\hbar\omega)^2} \quad (5.2)$$

und

$$\beta_{abs} = < n_{ph} > \frac{(\hbar\omega + \hbar\omega_{ph} - E_g)^2}{(\hbar\omega)^2} \quad (5.3)$$

der den Beitrag der Phononenabsorption und -emission beschreibt. Die theoretische Absorption wird dann zusammen mit den experimentellen Daten, als $\sqrt{\beta_{em} + \beta_{abs}}\nu$ linearisiert, über der Wellenzahl in ?? geplottet. Der theoretische Verlauf wurde dabei durch Variation der Bandlücke und der Phononenenergie möglichst gut den experimentellen Daten angepasst. Die Werte für den besten Fit sind in table 2 aufgelistet.

Um den Fehler der ermittelten Werte abzuschätzen, haben wir wie in vorherigen Abschnitt die Parameter der Bandlücke und der Phononenenergie variiert und so einen Bereich ermittelt, in dem die theoretische Absorption noch gut das Experiment beschreibt. Die Ermittelte Bandlücke von Silizium stimmt gut mit dem Literaturwert von 1.11 eV [4] (bei 300 K) überein.

- 8. Beitrag der freien Ladungsträger zur Reflexion
- 9. Leitfähigkeitsmassen, Stromrelaxationszeiten und Dotierkonzentrationen

5.8 Drude Modell und charakteristische Parameter

In den dotierten Proben wurde die Stromrelaxationszeit τ , die Dotierkonzentration η sowie die effektive Masse m

bestimmt. Die gemessenen Reflektionsspektren wurden an ein theoretisches Model mit entsprechenden freien Parametern angefitet. Der Fit berücksichtigt die Hochfrequenzleitfähigkeit nach Drude:

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 \tau n_e}{1 - i\omega \tau m_L} \frac{1}{m_L}, \quad (5.4)$$

sowie die Beiträge der verschiedenen optischen Phononfrequenzen ($\nu_{LO} = 292 \frac{1}{\text{cm}}$, $\nu_{TO} = 268 \frac{1}{\text{cm}}$) sowie die Phononendämpfung ($\Gamma = 2.5 \frac{1}{\text{cm}}$). Für die relative dielektrische Konstante wurde der Wert $\epsilon_\infty = 10.37$ verwendet.

Probe	τ in 10^{-15}s	η in $10^{18} \frac{1}{\text{cm}}$	m in m_e
②	100 ± 5	0.9 ± 0.1	0.060 ± 0.005
④	9.5 ± 1.0	1.10 ± 0.05	0.0055 ± 0.0005

5.9 Zusammenfassung

- Zusammenfassung

Literatur

- [1] <http://www.ansyco.de/CMS>
- [2] Anleitung Festkörperoptik, Homepage Universität Würzburg
- [3] <http://chriscolose.wordpress.com/2010/03/02/global-warming-mapsgraphs-2/>
- [4] Kittel, C., Introduction to Solid State Physics, 6th Ed., New York:John Wiley, 1986, p. 185.
- [5] Murray, Lee M.; Yildirim, Asli; Provence, Sydney R.; Norton, Dennis T.; Boggess, Thomas F.; Prineas, John P. (2013): Causes and elimination of pyramidal defects in GaSb-based epitaxial layers. In: J. Vac. Sci. Technol. B 31 (3), S. 03C108. DOI: 10.1116/1.4792515.
- [6] J. Merikoski; S.C. Ying (1997): Collective diffusion on a stepped substrate. In: surface science letters.
- [7] <http://www.nanotec.es/products/wsxm/download.php>.