

# CHƯƠNG 5. TÍNH CHẤT QUANG

## Optical properties

Giảng viên: Nguyễn Đức Cường

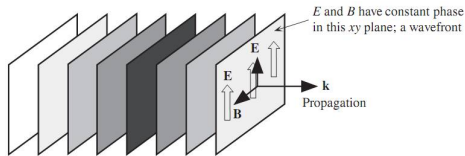
Trường Đại học Công nghệ - ĐHQGHN

*Email: cuongnd@vnu.edu.vn*

Ngày 27 tháng 9 năm 2021

## 1 CHƯƠNG 5. TÍNH CHẤT QUANG

# Phương trình sóng phẳng đơn sắc



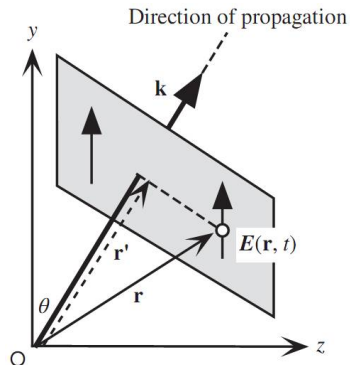
- Cường độ điện trường tại điểm  $\vec{r}$  trên mặt phẳng vuông góc với  $\vec{k}$ :

$$E(\vec{r}, t) = E_0 \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} + \phi_0)$$

$\vec{k}$  được gọi là **hằng số lan truyền** hay **số sóng**.

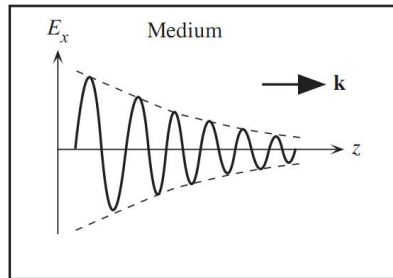
- Khi sóng truyền theo phương  $z$  thì  $\vec{k} \cdot \vec{r} = kz$  và vận tốc pha là:

$$v = \frac{dz}{dt} = \frac{\omega}{k} = f\lambda$$



# Chiết suất phức và sự hấp thụ ánh sáng

- Khi ánh sáng truyền đi trong một vật liệu, nó bị tắt dần theo phương truyền. Có 2 hiện tượng xảy ra:
  - +) **Hấp thụ**: phần năng lượng sóng điện từ mất đi được chuyển thành các dạng năng lượng khác, ví dụ: dao động mạng tinh thể (nhiệt) trong quá trình phân cực của các phân tử trong môi trường, dao động cục bộ của các ion tạp chất, và sự kích thích điện tử từ vùng hóa trị lên vùng dẫn.
  - +) **Tán xạ**: năng lượng của sóng điện từ ban đầu được chuyển thành năng lượng của các sóng điện từ thứ cấp truyền đi theo mọi hướng, khác với hướng truyền ban đầu.



# Chiết suất phức và sự hấp thụ ánh sáng

- Khi sóng phẳng đơn sắc  $E = E_0 \exp[i(\omega t - kz)]$  truyền đi trong một môi trường điện môi, nó gây ra hiệu ứng phân cực, được đặc trưng bằng hằng số điện môi  $\epsilon_r$ . Nếu không có mất mát trong quá trình phân cực thì chiết suất  $n = \sqrt{\epsilon_r}$  là số thực. Trong thực tế, luôn có mất mát trong tất cả các quá trình phân cực (ví dụ điện trường thay đổi khiến cho một ion trong tinh thể dao động xung quanh vị trí cân bằng và năng lượng điện trường được chuyển thành dao động mạng tinh thể). Sự mất mát đó được mô tả cho toàn bộ môi trường bằng **hằng số điện môi phức**  $\epsilon_r = \epsilon'_r - i\epsilon''_r$ , trong đó phần thực  $\epsilon'_r$  mô tả sự phân cực không mất mát, còn phần ảo  $\epsilon''_r$  mô tả sự mất mát trong môi trường.
- Một sóng điện từ truyền trong một môi trường và chịu sự tắt dần do hấp thụ có thể được mô tả tổng quát bằng **hằng số lan truyền phức**  $k = k' - ik''$ . Khi đó phương trình sóng phẳng trở thành:

$$E = E_0 \exp(-k''z) \exp[i(\omega t - k'z)]$$

# Chiết suất phức và sự hấp thụ ánh sáng

- Phần thực  $k'$  mô tả các đặc trưng lan truyền, ví dụ vận tốc pha  $v = \omega/k'$ . Phần ảo  $k''$  mô tả tốc độ tắt dần theo phương  $z$ . Cường độ sóng tại tọa độ  $z$  là:

$$I \propto |E|^2 \propto \exp(-2k''z)$$

vì vận tốc độ thay đổi cường độ sóng theo khoảng cách là:

$$\frac{dI}{dz} = -2k''I, \text{ trong đó dấu trừ thể hiện sự tắt dần (xem thêm Hệ số hấp thụ)}$$

- Gọi  $k_0$  là hằng số lan truyền trong chân không. **Chiết suất phức  $N$**  với phần thực  $n$  và phần ảo  $\kappa$ :

$$N = n - i\kappa = \frac{k}{k_0} = \left(\frac{1}{k_0}\right)[k' - ik'']$$

$n = k'/k_0$  được gọi đơn giản là **chiết suất**, còn  $\kappa = k''/k_0$  được gọi là **hệ số dập tắt (extinction coefficient)**. Vận tốc pha khi đó là  $v = c/n$ , tức chỉ phụ thuộc  $n$ .

# Chiết suất phức và sự hấp thụ ánh sáng

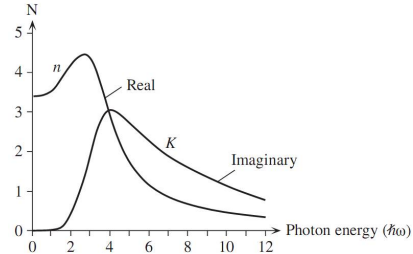
- Hệ thức  $N = \sqrt{\epsilon_r}$  vẫn nghiệm đúng ở dạng số phức:

$$N = n - i\kappa = \sqrt{\epsilon_r} = \sqrt{\epsilon'_r - i\epsilon''_r}$$

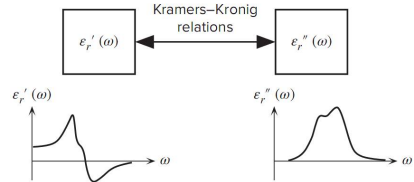
Khi đó  $n^2 - \kappa^2 = \epsilon'_r$ , và  $2n\kappa = \epsilon''_r$

- $\epsilon'_r$  và  $\epsilon''_r$  được liên hệ với nhau qua **liên hệ Kramers–Kronig** (đọc thêm).
- Với góc tới  $\theta_i = 90^\circ$ , hệ số phản xạ từ bề mặt của vật liệu là (đọc thêm **phương trình Fresnel**):

$$\begin{aligned} R &= \left| -\frac{N-1}{N+1} \right|^2 = \left| \frac{n-i\kappa-1}{n-i\kappa+1} \right|^2 \\ &= \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2} \end{aligned}$$

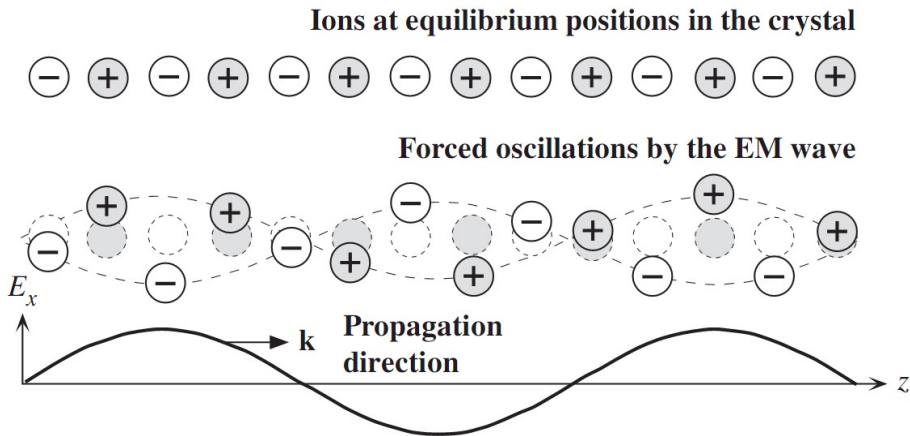


Phần thực  $n$  và phần ảo  $\kappa$  của chiết suất phức đối với Si.



Liên hệ Kramers–Kronig

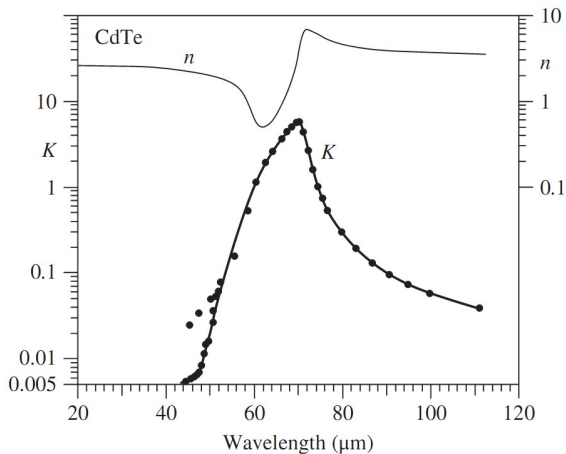
# Hấp thụ của mạng tinh thể (hấp thụ Reststrahlen)



Năng lượng của sóng điện từ được truyền cho các ion trong mạng tinh thể và tạo ra **dao động mạng**.

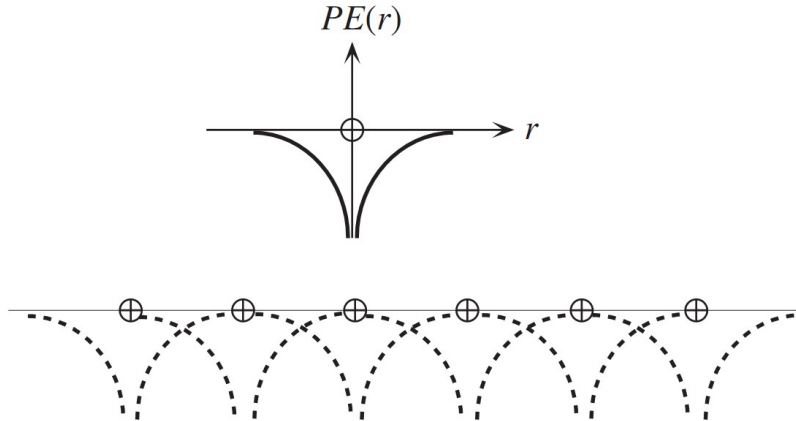


# Hấp thụ của mạng tinh thể (hấp thụ Reststrahlen)



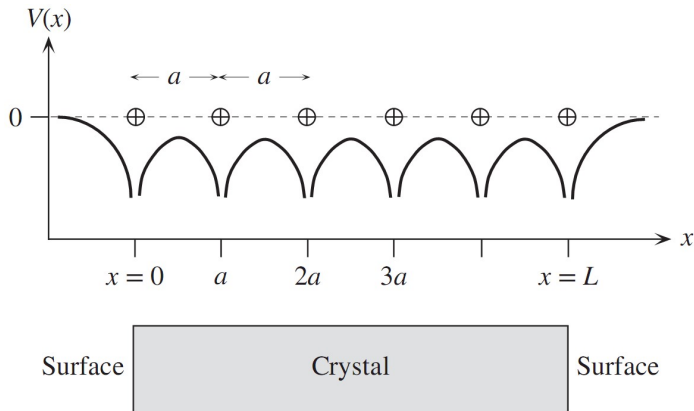
Hấp thụ mạng tinh thể trong CdTe, biểu diễn dưới dạng phụ thuộc của **hệ số dập tắt (extinction coefficient)  $\kappa$**  và **chiết suất  $n$**  vào bước sóng.

# Bán dẫn vùng cấm thẳng và vùng cấm xiên



**Thế năng (potential energy,  $PE$ )** của điện tử xung quanh một nguyên tử cô lập. Khi  $N$  nguyên tử được đặt cạnh nhau để tạo thành tinh thể, các hàm thế năng sẽ chồng chập lên nhau.

# Bán dẫn vùng cấm thẳng và vùng cấm xiên



Hàm thế năng  $V(x)$  của điện tử trong tinh thể là hàm tuần hoàn với chu kỳ  $a$ :

$$V(x) = V(x + ma), \text{ với } m = 1, 2, 3, \dots$$

# Bán dẫn vùng cấm thẳng và vùng cấm xiên

- Phương trình Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi = 0$$

- Nghiệm của phương trình Schrödinger với hàm thế năng tuần hoàn được gọi là **hàm sóng Bloch**:

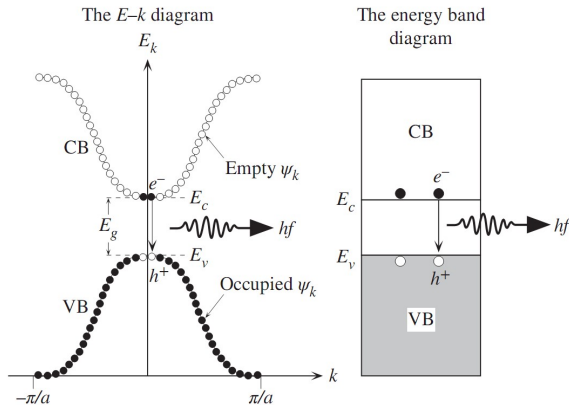
$$\psi_k(x) = U_k(x) \exp(ikx)$$

với  $U_k(x)$  là một hàm tuần hoàn phụ thuộc vào  $V(x)$  và có cùng chu kỳ  $a$  như  $V(x)$ . Thừa số  $\exp(ikx)$  biểu diễn một sóng chạy với  $k$  là số sóng.

- Hàm sóng toàn phần:

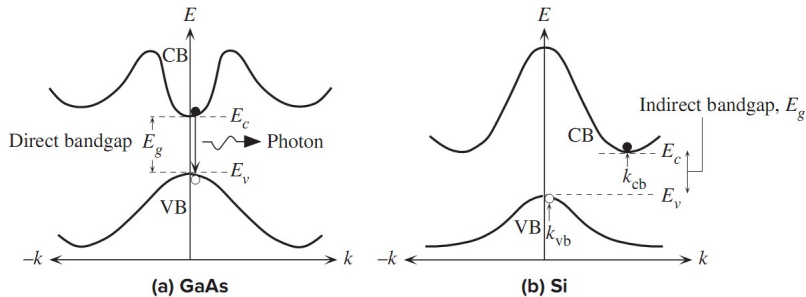
$$\Psi(x, t) = \psi_k(x) \exp(-iEt/\hbar), \text{ với } E \text{ là năng lượng}$$

# Bán dẫn vùng cấm thẳng và vùng cấm xiên



Giản đồ  $E$ - $k$  của một bán dẫn vùng cấm thẳng như GaAs. Đường cong  $E$ - $k$  bao gồm các điểm rời rạc, mỗi điểm đó tương ứng với một trạng thái khả dĩ (hàm sóng  $\psi(x)$ ) được phép tồn tại trong tinh thể. Không có trạng thái nào tồn tại giữa hai mức năng lượng  $E_c$  và  $E_v$ .

# Bán dẫn vùng cấm thẳng và vùng cấm xiên



(a) GaAs là bán dẫn **vùng cấm thẳng (direct)** do có cực tiểu của vùng dẫn nằm ngay trên cực đại vùng hóa trị (cùng giá trị  $k$ ) trong giản đồ  $E-k$ . Cặp điện tử-lỗ trống tái hợp trực tiếp sinh ra photon và bán dẫn loại này thường được dùng cho các linh kiện phát sáng.

(b) Si là bán dẫn **vùng cấm xiên (indirect)** do có cực tiểu của vùng dẫn và cực đại vùng hóa trị không đạt được tại cùng một giá trị  $k$  trong giản đồ  $E-k$ . Sự tái hợp trực tiếp giữa điện tử và lỗ trống không thể xảy ra.

# Hấp thụ liên vùng (band-to-band absorption)

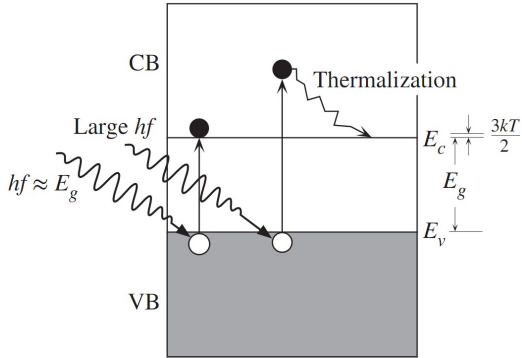
- Quá trình hấp thụ liên vùng sinh ra cặp điện tử-lỗ trống và đòi hỏi năng lượng photon  $E_{ph}$  tối thiểu bằng năng lượng vùng cấm  $E_g$  của vật liệu. Bước sóng của ngưỡng hấp thụ:

$$\lambda_g \text{ (nm)} = \frac{1239.84}{E_g \text{ (eV)}}, \text{ tức chỉ những bước sóng nhỏ hơn giá trị này mới bị hấp thụ.}$$

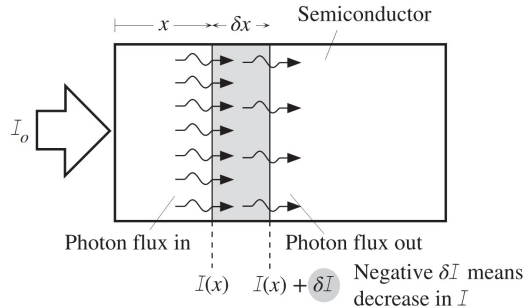
**Bảng:** Năng lượng vùng cấm  $E_g$  ở 300 K, bước sóng ngưỡng hấp thụ  $\lambda_g$  và loại vùng cấm: Thẳng (Direct) và Xiên (Indirect) của một số vật liệu sử dụng trong cảm biến quang.

| Chất bán dẫn | $E_g$ (eV) | $\lambda_g$ (nm) | Loại vùng cấm |
|--------------|------------|------------------|---------------|
| InP          | 1.35       | 918.4            | Thẳng         |
| Si           | 1.12       | 1107             | Xiên          |
| Ge           | 0.66       | 1878.5           | Xiên          |
| InAs         | 0.35       | 3542.4           | Thẳng         |
| InSb         | 0.18       | 6888             | Thẳng         |

# Hấp thụ liên vùng (band-to-band absorption)



Hấp thụ quang học sinh ra các cặp điện tử-lỗ trống. Điện tử năng lượng cao sẽ mất dần năng lượng cho dao động của mạng tinh thể cho đến khi năng lượng dư trung bình của chúng ở vùng dẫn là  $\frac{3}{2}k_B T$ .



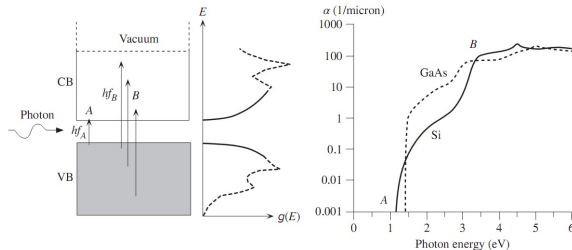
- $I_0$  là cường độ chùm photon tới. Sự thay đổi cường độ sau khi qua thể tích có độ dày  $\delta x$ :

$$\delta I = -\alpha I \delta x$$

với  $\alpha$  ( $\text{m}^{-1}$ ) là **hệ số hấp thụ**.



# Hấp thụ liên vùng (band-to-band absorption)



Sự phụ thuộc của hệ số hấp thụ  $\alpha$  vào năng lượng photon.

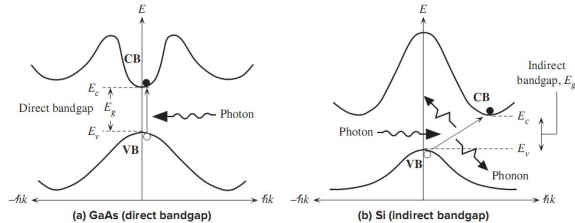
- Định luật Beer-Lambert:

$$I(x) = I_0 \exp(-\alpha x) \text{ với } \alpha = 2k'' = 2k_0\kappa = 2\frac{2\pi}{\lambda}\kappa = \frac{4\pi\kappa}{\lambda} \text{ (xem lại [Hằng số lan truyền phức](#))}$$

- Độ sâu xâm nhập (penetration depth, nơi cường độ sáng còn lại 37%):

$$\delta_0 = \frac{1}{\alpha}$$

# Hấp thụ liên vùng (band-to-band absorption)



- Trong bán dẫn vùng cấm thẳng, không có sự tham gia của dao động mạng trong quá trình hấp thụ:

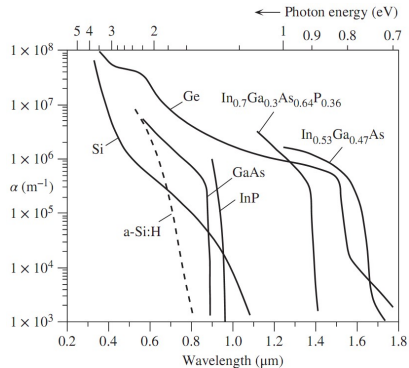
$$\hbar k_{CB} - \hbar k_{VB} = \text{động lượng photon} \approx 0$$

- Trong bán dẫn vùng cấm xiên, cần có sự tham gia của dao động mạng (hấp thụ và phát xạ **phonon, lượng tử dao động mạng**) trong quá trình hấp thụ photon với năng lượng gần  $E_g$ :

+ ) Bảo toàn động lượng:  $\hbar k_{CB} - \hbar k_{VB} = \text{động lượng phonon} = \hbar K_{pn}$

+ ) Bảo toàn năng lượng:  $hf = E_g \pm hf_{pn}$

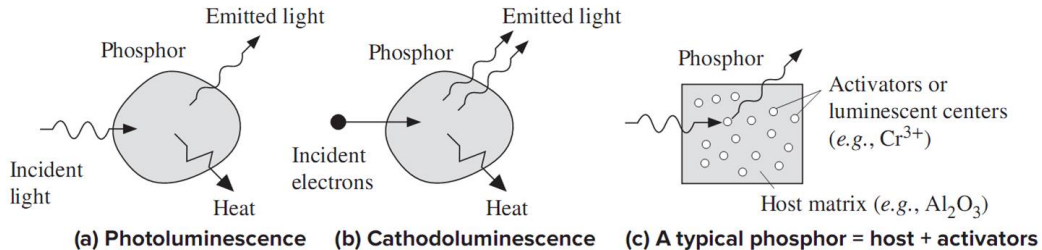
# Hấp thụ liên vùng (band-to-band absorption)



Đặc điểm hấp thụ của bán dẫn vùng cấm gián đoạn:

- Hệ số hấp thụ nhỏ do có sự tham gia của dao động mạng (phonon) làm giảm xác suất hấp thụ photon.
- Ngưỡng hấp thụ không rõ nét (hệ số hấp thụ tăng chậm khi bước sóng giảm).

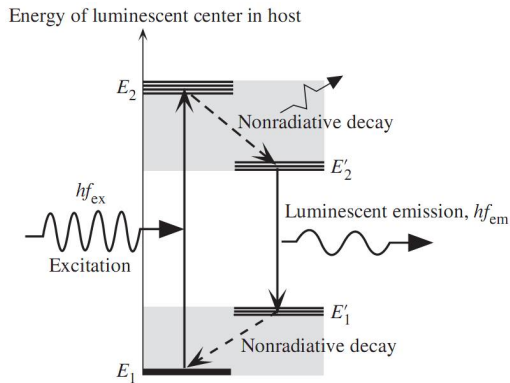
# Các cơ chế phát quang



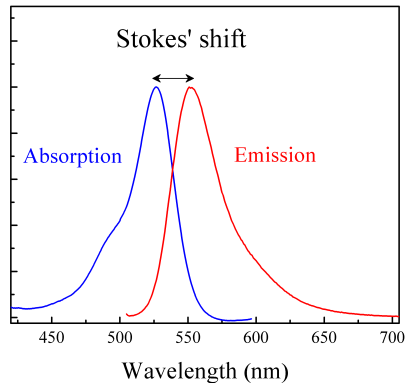
- **Sự phát quang (Luminescence)** là sự phát ra ánh sáng của một vật liệu do sự hấp thụ và chuyển đổi năng lượng thành bức xạ điện từ.
- **Quang-phát quang (Photoluminescence)** xảy ra do sự kích thích bởi photons. **Tia X-phát quang (X-ray luminescence)** xảy ra do sự kích thích bởi tia X.
- **Tia âm cực-phát quang (Cathodoluminescence)** xảy ra do sự kích thích thông qua sự bắn phá của các điện tử năng lượng cao.
- **Điện-phát quang (Electroluminescence)** xảy ra do sự kích thích bởi dòng điện.

# Các cơ chế phát quang

- Quá trình quang-phát quang: hấp thụ ánh sáng  $\rightarrow$  kích thích điện tử từ vùng hóa trị lên vùng dẫn  $\rightarrow$  phân rã không bức xạ  $\rightarrow$  phát quang  $\rightarrow$  trở lại trạng thái cơ bản  $E_1$ .



Cơ chế quang-phát quang.



Dịch chuyển Stoke.

## Ví dụ 2

Một mẫu GaAs được chiếu bằng một chùm tia laser HeNe có công suất 50 mW và bước sóng 632.8 nm. Hãy tính công suất mất mát do chuyển thành nhiệt. Cho độ rộng vùng cấm  $E_g$  của GaAs là 1.42 eV.

*Lời giải*

Gọi  $P_L$  là công suất của laser,  $A$  là diện tích của vùng được chiếu sáng. Cường độ ánh sáng là  $I = P/A$ . Mật độ thông lượng photon (số photon đến trong một đơn vị diện tích, trong một đơn vị thời gian) là:

$$\Gamma_{\text{ph}} = \frac{I}{hf} = \frac{P_L}{Ahf}$$

Số cặp điện tử-lỗ trống sinh ra trong một đơn vị thời gian là:

$$\frac{dN}{dt} = \Gamma_{\text{ph}}A = \frac{P_L}{hf}$$

Với photon có năng lượng lớn hơn  $E_g$ , phần năng lượng dư của chúng sẽ chuyển thành năng lượng dao động của mạng tinh thể.

## Lời giải (tiếp)

Điện tử ở vùng dẫn được coi là tự do và tuân theo thuyết động học và sẽ có động năng trung bình cuối cùng là  $\frac{3}{2}k_B T$ . Vậy phần năng lượng dư chuyển thành nhiệt là:

$$\Delta E = hf - \left( E_g + \frac{3}{2}k_B T \right)$$

Công suất nhiệt tỏa ra là:

$$P_H = \left( \frac{dN}{dt} \right) \Delta E = \left( \frac{P_L}{hf} \right) \Delta E$$

Photon trong chùm tia tới có năng lượng  $hf = hc/\lambda = 1.96 \text{ eV}$ . Vì vậy:

$$P_H = \frac{(50 \text{ mW})(1.96 \text{ eV} - 1.46 \text{ eV})}{1.96 \text{ eV}} = 12.76 \text{ mW}$$

## Ví dụ 3

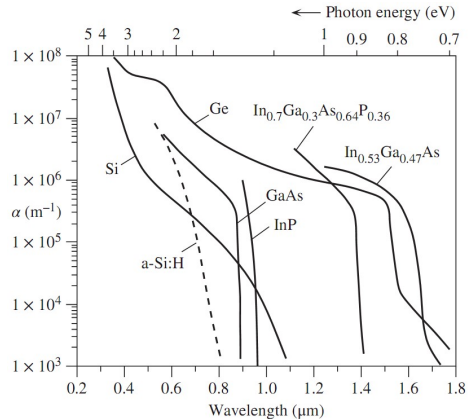
Một đi-ốt phát sáng (LED) hồng ngoại GaAs có đỉnh phát xạ tại 860 nm. Một cảm biến quang Si được dùng để đo sự phát xạ đó. Tìm chiều dày cần thiết của Si để có thể hấp thụ được hầu hết bức xạ từ LED trên.

*Lời giải*

Theo đồ thị hình bên, hệ số hấp thụ của Si tại 860 nm là  $\alpha \approx 6 \times 10^4 \text{ m}^{-1}$ , vì vậy độ sâu hấp thụ là:

$$\delta_0 = \frac{1}{\alpha} = \frac{1}{6 \times 10^4 \text{ m}^{-1}} = 1.7 \times 10^{-5} \text{ m} = 17 \text{ } \mu\text{m}$$

Với độ dày tinh thể Si là  $\delta_0$ ,  $2\delta_0$  và  $3\delta_0$  thì phần bức xạ bị hấp thụ tương ứng là 63.2%, 86.5% và 95%.





# The End