

# 1 Absorpční hrana

## 1.1 Úvod

K přechodu elektronu z valenčního pásu do pásu vodivostního je zapotřebí energie větší nebo rovné šířce zakázaného pásu  $E_g$ . Jednou z forem energie, která může tento přechodu vyvolat, je záření (fotony). Oblast nástupu mezipásové absorpce v závislosti na energii fotonů nazýváme absorpční hranou.

Jeden ze základních typů mezipásových přechodů jsou přechody přímé, kdy se energie fotonu předá pouze do excitace elektronu z valemního do vodivostního pásu. Jelikož foton má zanedbatelný impuls, finální stav elektronu má ten samý kvaziimpuls jako před excitací. Dalším typem jsou tzv. nepřímé přechody, kdy kromě této excitace se navíc absorbuje nebo emituje fonon. Absorbovaný (emitovaný) fonon změní kvazihybnost elektronu, který se tak ocitne v jiném bodě Brillouinovy zóny než před excitací. Jedná se o přechody s účastí většího počtu částic u přímých přechodů, tzn. jedná se o interakci vyššího řádu. Absorpce na nepřímých přechodech je typicky o několik řádů slabší než na přímých přechodech.

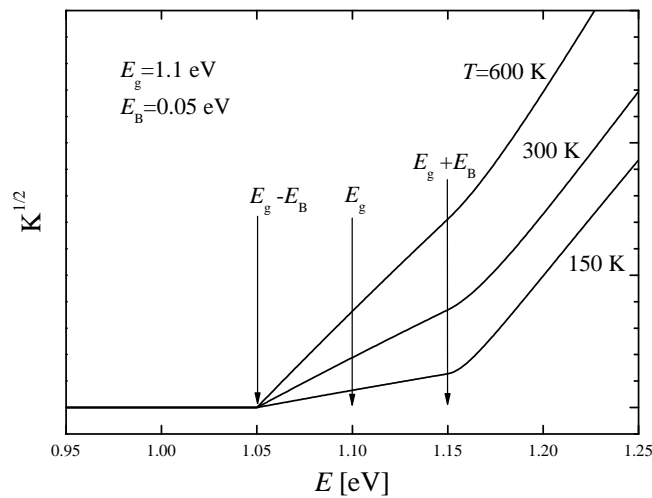
Přímé a nepřímé přechody mají kromě intenzity jinou energiovou závislost absorbovaného záření. Pomocí jednoelektronové teorie v aproximaci parabolických pásů lze odvodit [1], že v případě přímých přechodů platí pro imaginární část dielektrické funkce energiová závislost

$$\epsilon_2(E) = \frac{D}{E^2} \sqrt{E - E_g}, \quad (1)$$

kde  $D$  je konstanta. Pro dvě větve nepřímých přechodů (absorpce "+" a emise "-" fononu) lze odvodit

$$\epsilon_2^+(E) = \frac{D^+}{E^2} (1 + n_B) (E - E_g - E_B)^2, \quad (2)$$

$$\epsilon_2^-(E) = \frac{D^-}{E^2} n_B (E - E_g + E_B)^2, \quad (3)$$



Obrázek 1: Absorpce nepřímými přechody při třech různých teplotách.

kde  $D^+$  a  $D^-$  jsou konstanty a  $n_B = (\epsilon^{E_B/kT} - 1)^{-1}$  je Bose-Einsteinovo rozdělení vyjadřující koncentrace fononů. Faktory  $1 + n_B$  resp.  $n_B$  vyjadřují faktory stimulované emise resp. absorpce bosonových částic. Jsou odpovědné za teplotní závislost absorpce nepřímých přechodů. S klesající teplotou jejich absorpce klesá tak, že v limitě k nulové teplotě větev odpovídající absorpci fononu zcela mizí (nejsou žádné fonony k absorpci).

Protože nepřímé přechody můžeme sledovat jen v oblasti relativně malé absorpce mimo interval silnějších přímých přechodů, používá se většinou transmisní měření. Jako výsledek se pak obvykle udává spektrum absorpčního koeficientu  $K = \omega\epsilon_2/(2nc)$ , kde  $\omega$  je frekvence dopadajícího záření a  $c$  je rychlost světla. Součet příspěvků obou větví pak dává

$$K(E) = \frac{E}{\hbar} \frac{\epsilon_2^+(E) + \epsilon_2^-(E)}{2nc}, \quad (4)$$

kde  $n$  je index lomu,  $c$  rychlost světla. V malém okolí  $E_g$  rozhodují o spektrálním průběhu  $K$  kvadratické funkce v (2) a (3). Výrazněji se neuplatní ani faktor  $E^{-1}$ , ani závislost indexu lomu na energii; samotné nepřímé přechody index lomu zpravidla příliš neovlivňují. Proto se často setkáváme s grafickým zobrazením funkce  $\sqrt{K}$ , která je pro  $E > E_g - E_B$  složena ze dvou téměř přímkových závislostí v intervalech  $(E_g - E_B, E_g + E_B)$  a  $E > E_g + E_B$ . Tuto situaci znázorňuje obr. 1.

## 1.2 Metoda měření

K určení slabého absorpčního koeficientu díky nepřímým přechodům použijeme měření propustnosti záření vzorku tvaru planoparalelní destky tloušťky  $d$ . Propustnost je dána poměrem prošlé a dopadající intenzity záření  $T = I_t/I_0$ . Je-li tloušťka vzorku řádově větší než vlnová délka světla a příspěvky díky vícenásobným odrazům jsou již nekoherentní, je výsledek propustnosti dán geometrickou řadou intenzit záření. Po sečtení příspěvků obdržíme

$$T = \frac{(1 - R)^2 \epsilon^{-Kd}}{1 - R^2 \epsilon^{-2Kd}}, \quad (5)$$

kde  $R$  je kolmá odrazivost rozhraní vzduch-vzorek

$$R = \left| \frac{1 - N}{1 + N} \right|^2, \quad (6)$$

kde  $N$  je index lomu,  $N = n + ik$ . Pro kompletnost, odrazivost takového vzorku by byla

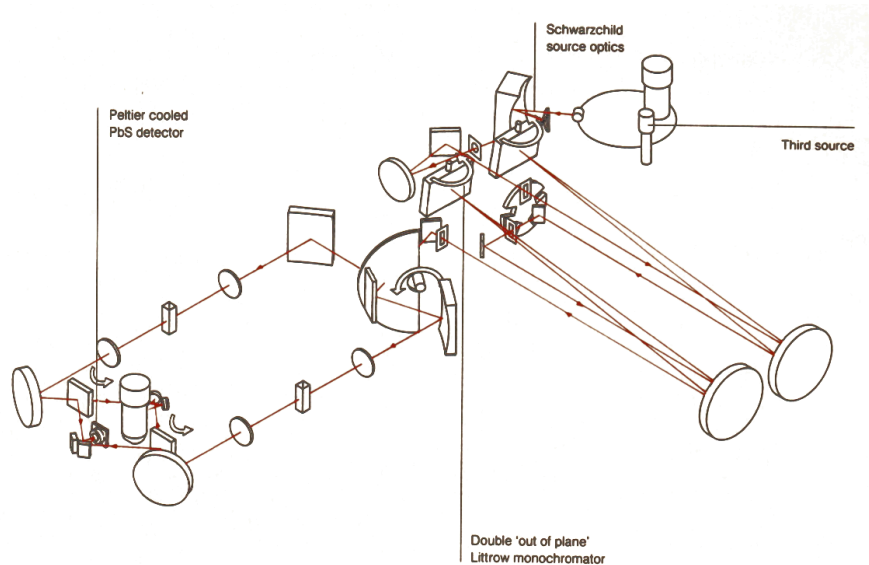
$$R_d = R \left( 1 + \frac{(1 - R)^2 \epsilon^{-2Kd}}{1 - R^2 \epsilon^{-2Kd}} \right). \quad (7)$$

Pokud známe odrazivost  $R$  např. z nezávislého měření na vzorku s drsnou zadní stranou (záření přichází jen z prvního rozhraní), pak ze vztahu (5) lze vypočítat  $K$ . Použijeme zde substituci  $X = e^{-Kd}$ , při které lze rovnici (5) přepsat na kvadratickou, jejíž řešení je

$$X = \frac{-(1 - R)^2 + \sqrt{(1 - R)^4 + 4T^2 R^2}}{2TR^2}, \quad (8)$$

z kterého pak  $K = -1/d \ln X$ . Pokud odrazivost  $R$  nelze změřit, pak ji vypočítáme pomocí tabelovaných hodnot indexu lomu.

Je vidět, že propustnost (5) je exponenciálně utlumená s exponentem  $-Kd$ . Největší citlivost zpětného výpočtu  $K$  bude tedy pro hodnoty, kdy  $Kd \approx 1$ . Naopak hodnoty  $K$  o řád vyšší nebo nižší budou díky exponenciálnímu faktoru již špatně rozlišeny. Při měření propustnosti je tedy třeba vždy přizpůsobit tloušťku vzorku měřeným hodnotám  $K$ . V případě většího rozsahu hodnot  $K$  je potřeba měřit více vzorků s různou tloušťkou.



Obrázek 2: Schéma dvoukanálového spektrometru Varian Cary 5E

### 1.3 Experimentální vybavení

Měření proběhne na dvoukanálovém spektrometru Varian Cary 5E. Schéma tohoto přístroje je na obrázku 2. Tento spektrometr je vybaven dvoumřížkovým monochromátorem. Dvoumřížkové monochromátory dosahují násobně vyššího frekvenčního rozlišení než jednomřížkové. Tento přístroj má v závislosti na šířce štěrbin rozlišení rošlení 0.05–5 nm. Spektrometr má dva zdroje a dva detektory a dvě mřížky, které automaticky přepíná podle měřeného rozsahu. V infračervené oblasti 3000–800 nm spektrometr používá jako zdroj halogenovou žárovku, mřížku optimalizovanou pro infračervený rozsah a PbS detektorem chlazený Peltierovým efektem. PbS je polovodič s relativně malou hodnotou zakázaného pásu 0.37 eV, který se v detektorech pro snížení temného proudu chladí. Pro viditelný a ultrafialový obor 800–185 nm přístroj používá druhou mřížku s větší hustotou vrypů a pro detekci fotonásobič. V oblasti 350–185 nm spektrometr používá jako zdroj deuteriovou lampu.

Jelikož tento spektrometr měří různé vlnové délky postupně, měření trvá typicky minuty až hodiny podle délky akumulace a zvoleného rozlišení. Během této doby již nelze předpokládat, že by zdroje a detektory byly dostatečně stabilní. K zlepšení stability slouží dvoukanálové měření. Přístroj neustále přepíná mezi kanálem se vzorkem a referenčním kanálem a tyto dva signály dělí. Jelikož oba kanály používají ten samý zdroj i detektor, potom se tímto způsobem případná nestabilita do značné míry odstraňuje.

Z výroby je přístroj uzpůsoben k transmisnímu měření, kde paprsek je fokusován do středu vzorkového prostoru. Pro reflexní měření je potřeba použít reflexní přístavek, který přeměruje záření vzhůru na vzorek ložený optickou stranou dolů a opět zpátky do detektoru.

### 1.4 Cíle měření

1. Změřte propustnost vzorků Si a Ge v oblasti absorpční hrany. Změřte pro každý materiál dva vzorky různé tloušťky, které vám umožní získat absorpční koeficient v oblasti slabé a silnější absorpce. Proveďte prvně časově kratší měření, které vám umožní lokalizovat

absorpční hranu. Posléze proveďte delší měření s lepším poměrem signál/šum. Diskutujte reprodukovatelnost měření - typická reprodukovatelnost by měl být asi 1%.

2. Změřte odrazivost vzorků Si a Ge od oblasti absorpční hrany až do ultrafialové oblasti, kde budete moci pozorovat přímé mezipásové přechody. Jako referenční vzorek použijte hliníkovou vrstvu. Odrazivost hliníku naleznete v přiloženém souboru Al\_Normal.txt. Srovnajte hodnotu odrazivosti a propustnosti pod absorpční hranou s tabelovanými hodnotami vypočtenými pro index lomu  $n_{\text{Si}}(0.95 \text{ eV}) = 3.51$  a  $n_{\text{Ge}}(0.6 \text{ eV}) = 4.10$ .
3. Vyneste spektrální závislost odmocniny z absorpčního koeficientu pro vzorky obou tloušťek do společného grafu. Lokalizujte energii odpovídající  $E_g - E_B$  a  $E_g + E_B$  a určete z ní hodnoty  $E_g$  a  $E_B$ .
4. Získejte hodnoty  $E_g$  a  $E_B$  také proložení spektrální závislosti absorpčního koeficientu jeho teoretickou závislostí.
5. Hodnotu  $E_g$  srovnajte s hodnotou z literatury a hodnotu  $E_g$  s frekvencí fononu pozorovaného Ramanskou spektroskopií,  $\nu_{\text{Si}} = 520 \text{ cm}^{-1}$  a  $\nu_{\text{Ge}} = 297 \text{ cm}^{-1}$ .

## Reference

- [1] Optické vlastnosti pevných látek, E. Schmidt a kol., SPN Praha 1986. Skriptum je k dispozici v knihovně Př. F.