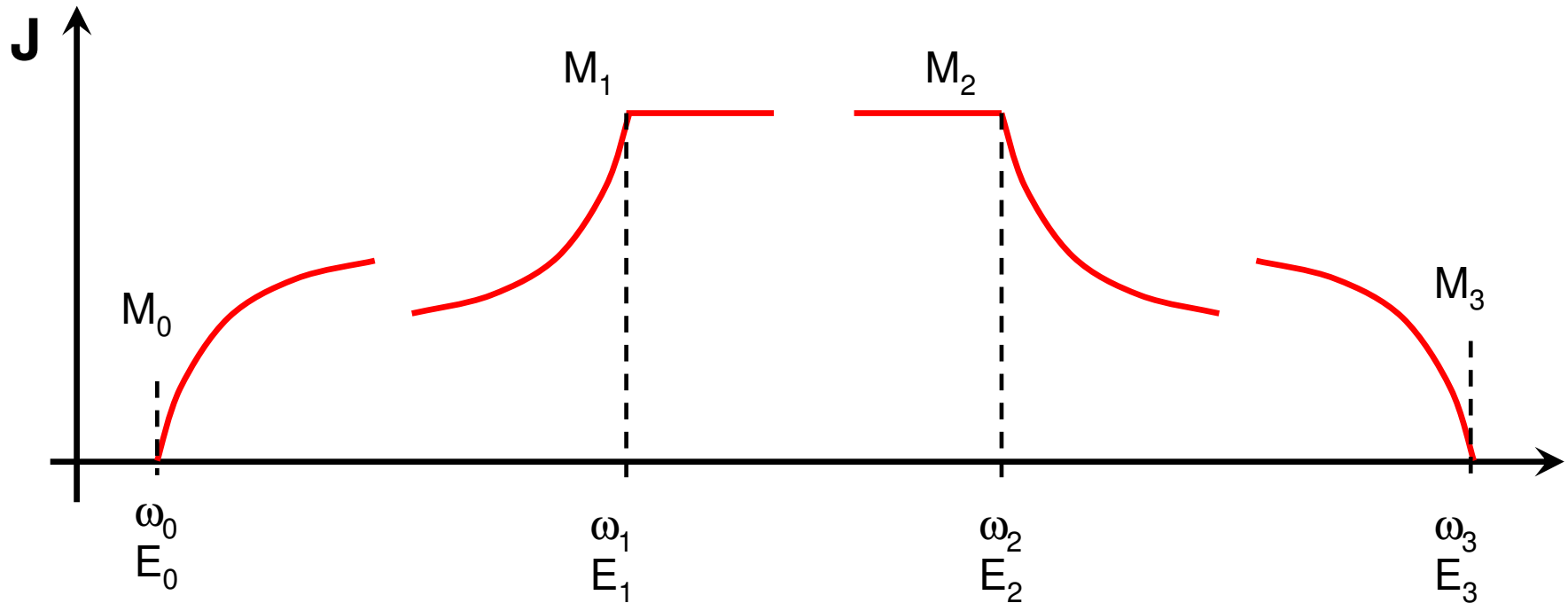


Łączna gęstość stanów w pobliżu punktów krytycznych (3D)



Można pokazać że najniższym energetycznym punktem osobliwym jest M_0
(podstawowa krawędź absorpcji)

Metody badań punktów osobliwych

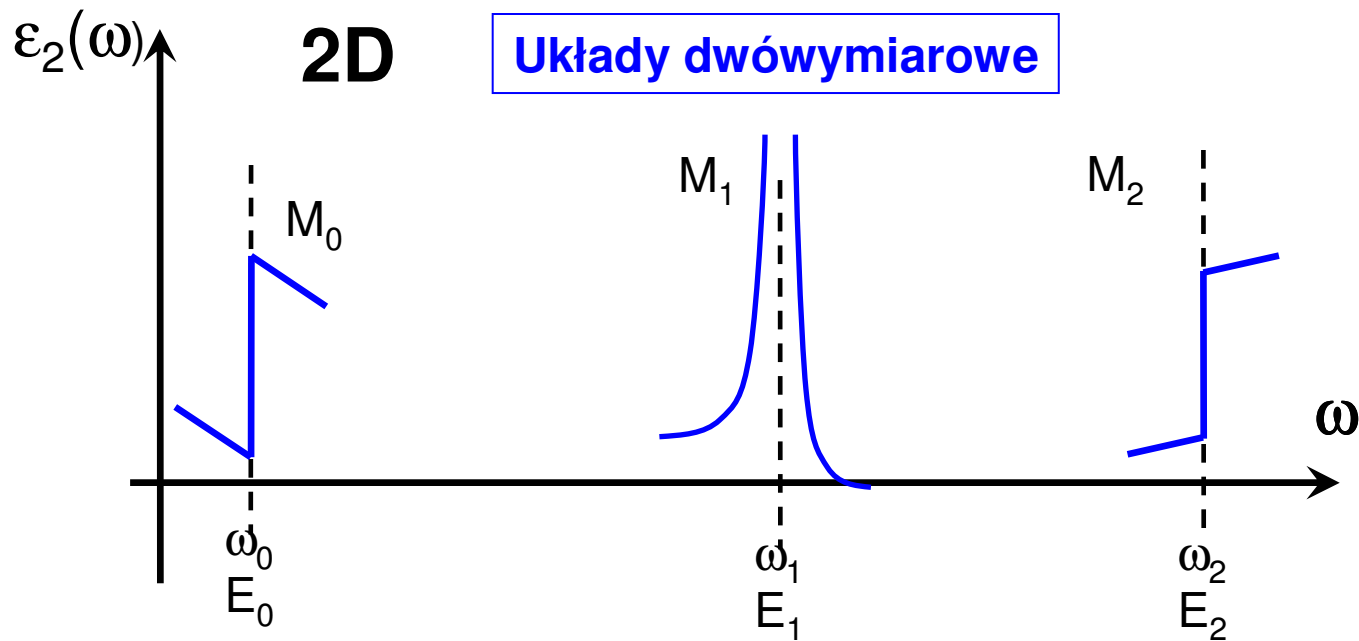
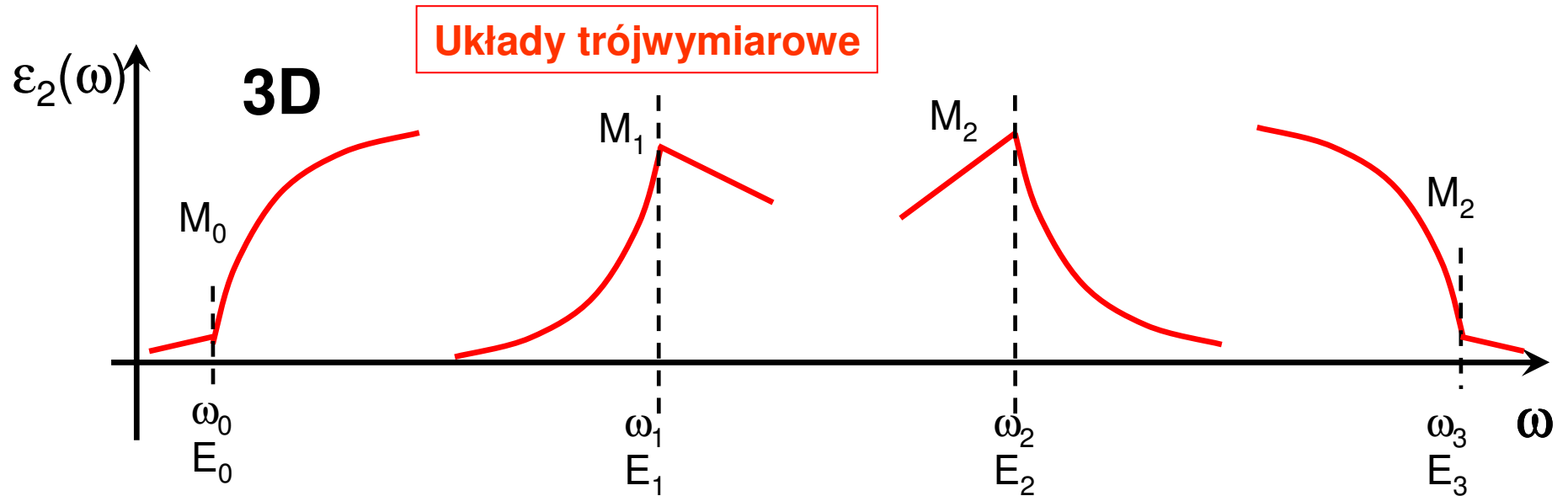
M_0 – np. absorpcja, fotoprzewodnictwo, odbicie, luminescencja,...

M_1, M_2, M_3 – metody odbiciowe

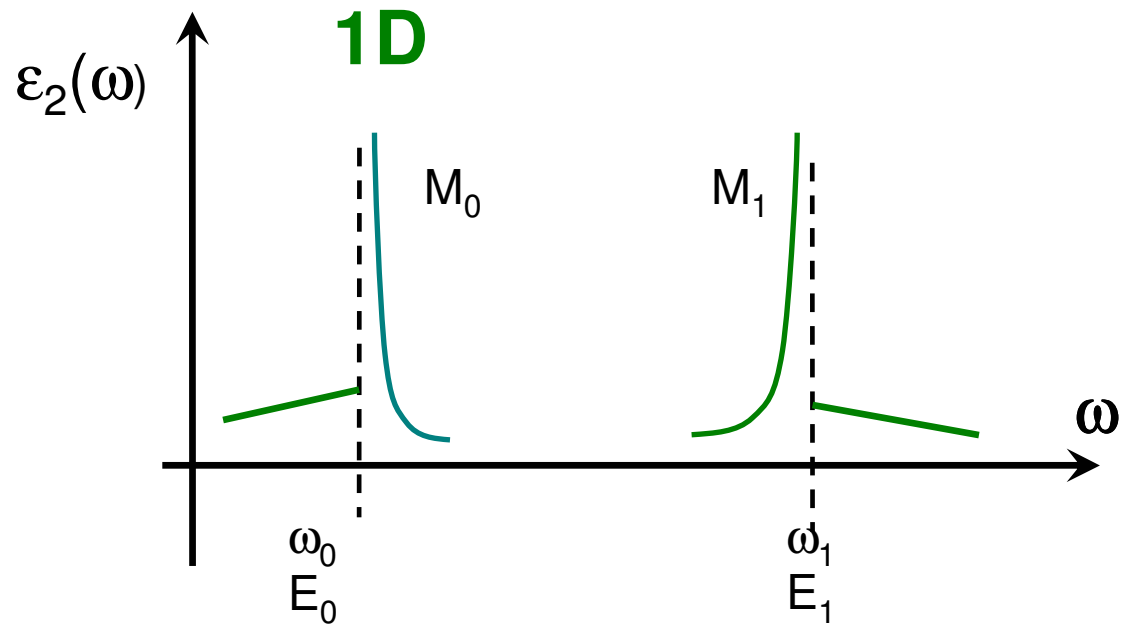
Kształt zależność gęstości stanów od częstości

| Wymiarowość | | $J_{\mu\nu}$ | |
|-------------|-------|------------------------|------------------------|
| | | $E < E_0$ | $E > E_0$ |
| 3D | M_0 | 0 | $C(E-E_0)^{1/2}$ |
| | M_1 | $D_0 - C(E-E_0)^{1/2}$ | D_0 |
| | M_2 | D_0 | $D_0 - C(E-E_0)^{1/2}$ |
| | M_3 | $C(E-E_0)^{1/2}$ | 0 |
| 2D | M_0 | 0 | D_0 |
| | M_1 | $-\ln(E_0-E)$ | $-\ln(E-E_0)$ |
| | M_2 | D_0 | 0 |
| 1D | M_0 | 0 | $C_1(E-E_0)^{-1/2}$ |
| | M_1 | $C_1(E-E_0)^{-1/2}$ | 0 |

Urojona część funkcji dielektrycznej w pobliżu punktów krytyc



Urojona część funkcji dielektrycznej w pobliżu punktów krytycznych – układy jednowymiarowe



Łączna gęstość stanów dla struktury jednowymiarowej rozbiega się do nieskończoności choć całka z niej pozostaje skończona.

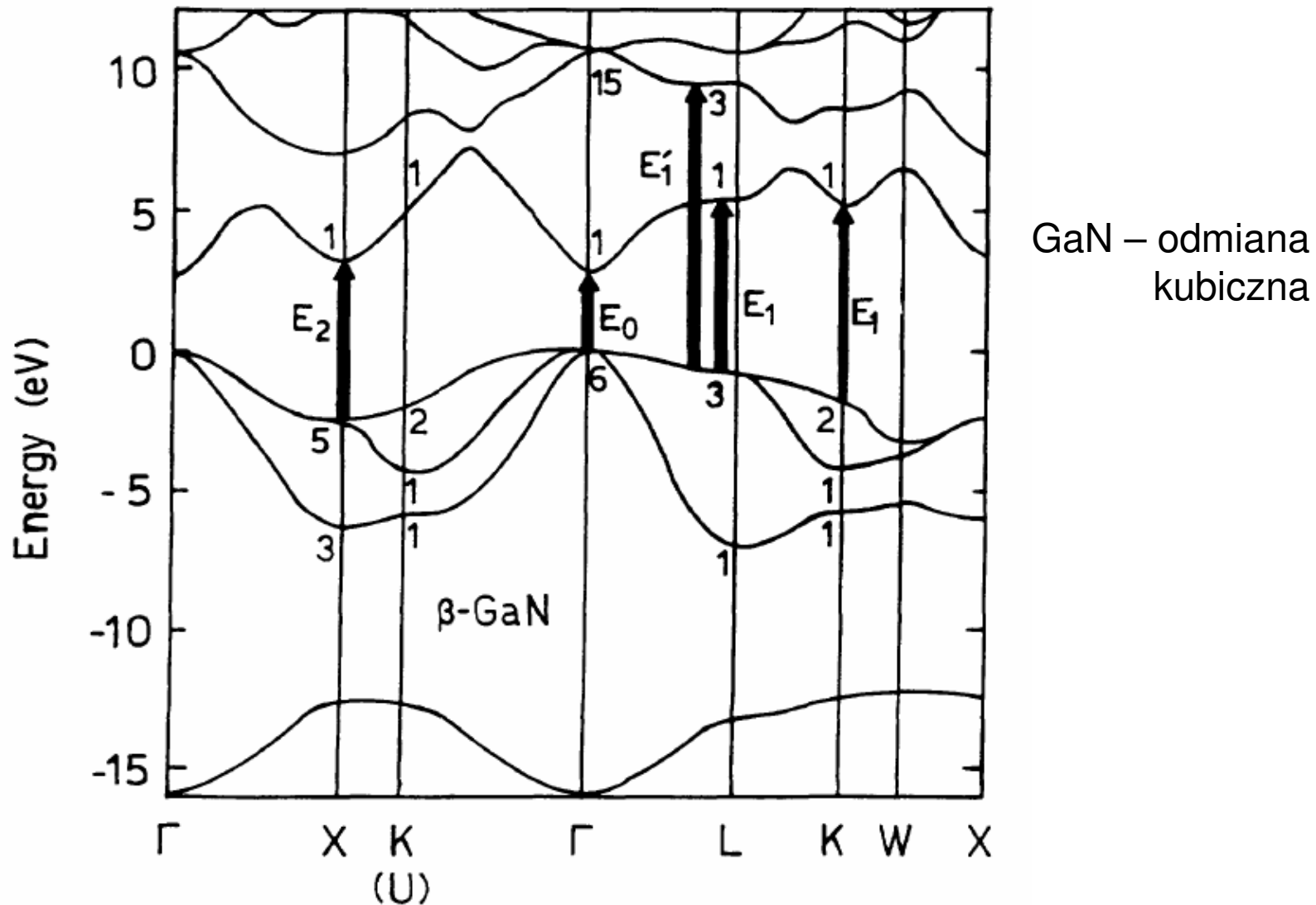
(Dobry opis dla jednowymiarowych półprzewodników organicznych.)

Półprzewodniki o wiązaniach tetraedrycznych

- diament, Ge, Si (grupa IV)
- GaN, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb (grupa III-V)
- CdTe, CdS, ZnS (II-VI)

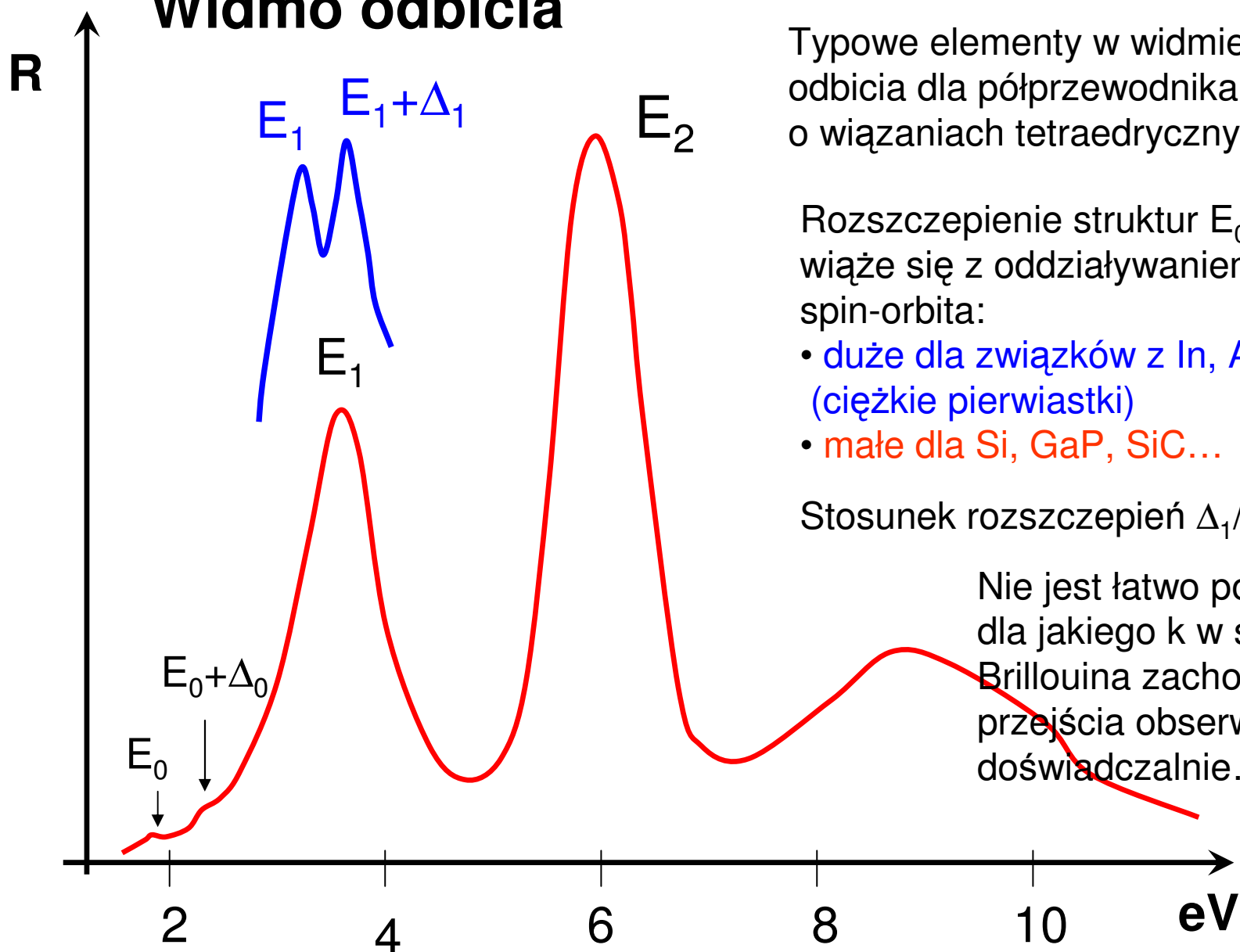
Istnieje wiele podobieństw w zachowaniu urojonej funkcji dielektrycznej dla półprzewodników o wiązaniach tetraedrycznych!

Typowa struktura pasmowa dla związku III-V



Logothetidis et al. PRB 50, 1870 (1994)

Widmo odbicia



Typowe elementy w widmie odbicia dla półprzewodnika o wiązaniach tetraedrycznych

Rozszczepienie struktur E_0 oraz E_1 wiąże się z oddziaływaniem spin-orbita:

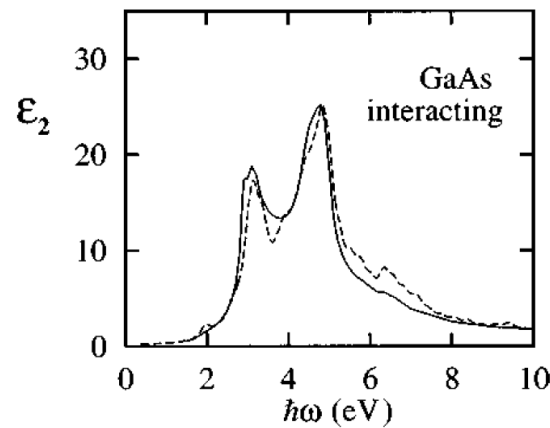
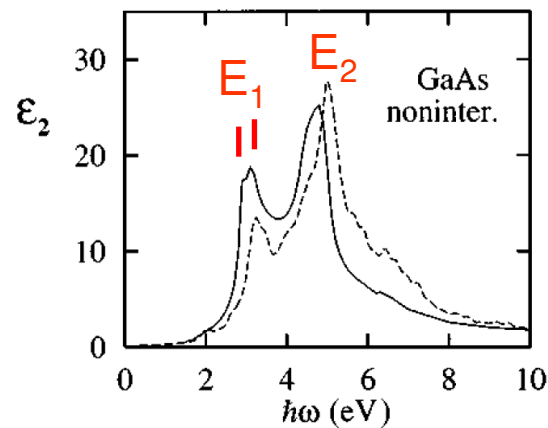
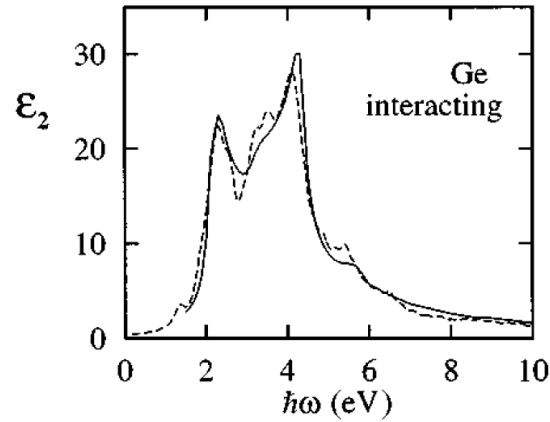
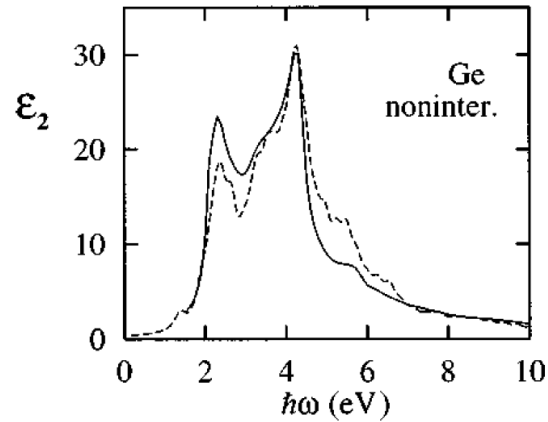
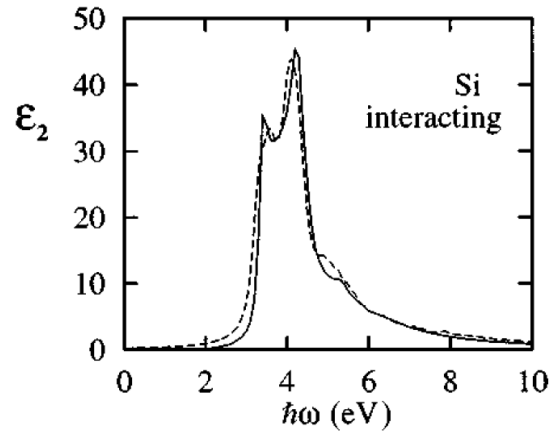
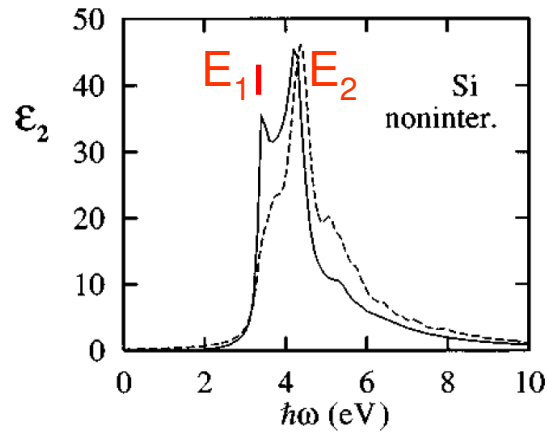
- duże dla związków z In, As, Sb (ciężkie pierwiastki)
- małe dla Si, GaP, SiC...

Stosunek rozszczepień $\Delta_1/\Delta_0 \cong 2/3$

Nie jest łatwo powiedzieć dla jakiego k w strefie Brillouina zachodzą przejścia obserwowane doświadczalnie...

Badając widma odbicia można uzyskać informacje o funkcji $\epsilon_2(\omega)$

Badania w UV próżniowym – wygodnie przy użyciu synchrotronu



Bardzo ważne jest porównanie wyników doświadczalnych z teorią!

(linia ciągła - doświadczenie)

E_0 – bardzo słabo widoczne!

L.X. Benedict et al.
PRB 57 R9385 (1998)

Odbicie światła i relacje Kramersa-Kroniga...

Przy odbiciu od granicy ośrodków następuje także zmiana fazy fali odbitej.

Dla fali padającej w kierunku prostopadłym do granicy ośrodków, amplitudowy współczynnik odbicia wynosi:

$$r = \frac{E^{(R)}}{E^{(I)}} = \frac{1 - \tilde{n}}{1 + \tilde{n}} = \frac{1 - (n + i\kappa)}{1 + (n + i\kappa)} = \rho e^{i\Phi}$$

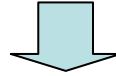
$E^{(I)}$ – pole elektryczne fali padającej, $E^{(R)}$ – pole elektryczne fali odbitej

W pomiarze wyznaczamy zależność współczynnika odbicia R od częstości (energii) fotonów:

$$R = (r \cdot r^*) = \frac{(1 - n)^2 + \kappa^2}{(1 + n)^2 + \kappa^2}$$

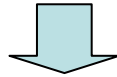
(Szczęśliwie) wielkości ρ , Φ są powiązane ze sobą relacjami Kramersa-Kroniga

**Zasada przyczynowości
(skutek następuje po przyczynie).**



Związek pomiędzy rzeczywistą i urojoną funkcji liniowej odpowiedzi ośrodka na działanie zaburzenia - relacje **Kramersa-Kroniga**

W przypadku fali elektromagnetycznej, liniową reakcję ośrodka opisuje funkcja dielektryczna $\epsilon(\omega)$



Części rzeczywista i urojona funkcji dielektrycznej $\epsilon(\omega)$ spełniają relacje:

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \epsilon_2(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$$

$$\epsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\epsilon_1(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$$

$$\epsilon_2(\omega) = \text{Im}(\epsilon) \equiv \epsilon_i$$

$$\epsilon_1(\omega) = \text{Re}(\epsilon) \equiv \epsilon_r$$

W przypadku współczynnika odbicia dla

$$r = \rho e^{i\Phi}, \rho(\omega) \text{ i } \Phi(\omega)$$

mamy relacje

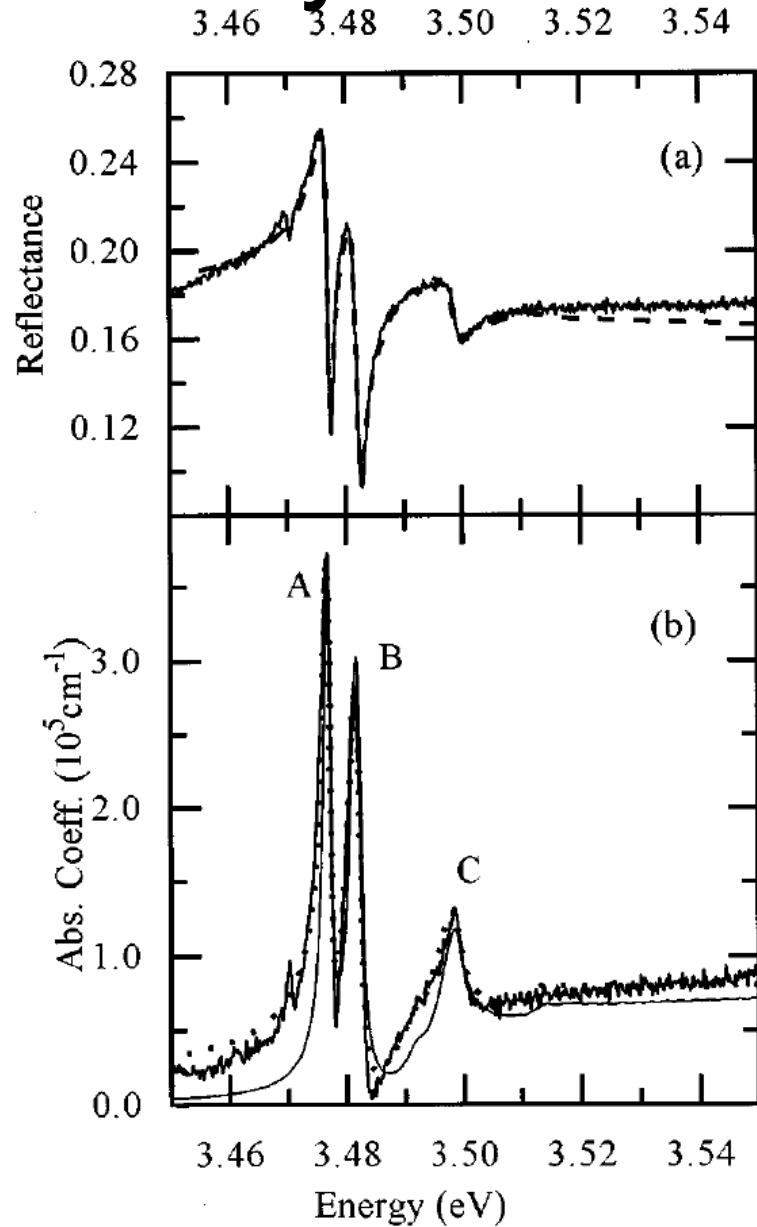
$$\Phi(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln \rho(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$$

Mierząc zależność $R(\omega)$ a więc $\rho(\omega)$ możemy wyliczyć z relacji KK $\Phi(\omega)$, a następnie \tilde{n} uzyskując informacje o współczynniku załamania i absorpcji.

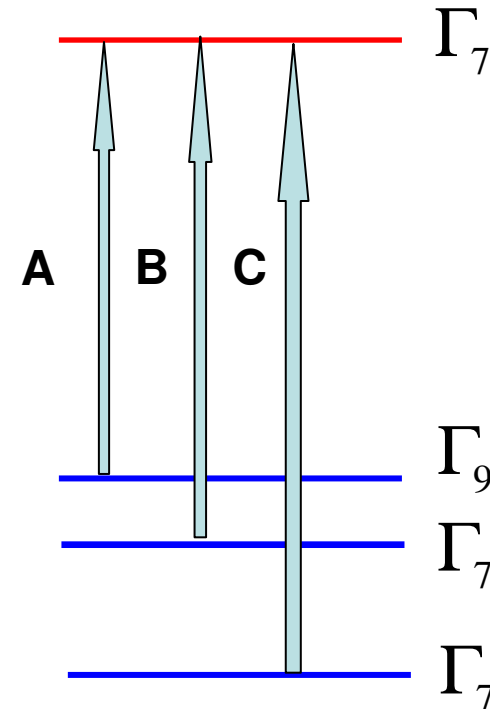
Konieczna jest znajomość $R(\omega)$ w szerokim zakresie energetycznym!

Bardziej wyrafinowana metoda pomiaru odbicia - elipsometria...

Przykład - odbicie w GaN



W widmie odbiciowym pojawiły się struktury odpowiadające trzem rodzajom ekscytonów swobodnych w GaN



Podstawowa krawędź absorpcji, punkt M_0

Przejścia proste dozwolone

Energia fotonu w okolicy punktu M_0 :

$$\hbar\omega_{\mu\nu} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r^*}$$

Obliczamy

m_r^* - masa zredukowana

$$\nabla_k \omega_{\mu\nu} = \frac{\hbar k}{m_r^*} \quad k = \sqrt{\frac{2m_r^* \omega'}{\hbar}}, \text{ gdzie } \omega' = \omega_{\mu\nu} - \frac{E_g}{\hbar}$$

Stąd

$$J_{\mu\nu}(\omega) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{\omega=\omega_{\mu\nu}} \frac{ds}{|\nabla_k \omega_{\mu\nu}(k)|} = \frac{1}{4\pi^3} \frac{4\pi k^2 m_r^*}{\hbar k} \Big|_{\omega_{\mu\nu}=\omega} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{2m_r^*}{\hbar} \sqrt{\frac{2m_r^* \omega'}{\hbar}} \Big|_{\omega_{\mu\nu}=\omega}$$

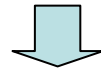
$$J_{\mu\nu}(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{(2m_r^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

Jeśli przyjmiemy, że $|M_{\mu\nu}| = \text{const}$



Dla przejść pomiędzy pasmami μ , ν część urojona funkcji dielektrycznej:

$$\varepsilon_2(\omega) = \text{Im}(\varepsilon(\omega)) = \frac{\pi e^2 \hbar}{\varepsilon_0 m^2 \omega^2} |M_{\mu\nu}|^2 \frac{1}{2\pi^2} \frac{(2m_r^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$



$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{e^2 (2m_r^*)^{\frac{3}{2}}}{2\pi\varepsilon_0 \hbar m^2 \omega^2} |M_{\mu\nu}|^2 (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

Przy założeniu, że współczynnik załamania n (w pierwszym przybliżeniu) nie zależy od częstotliwości współczynnik absorpcji:

$$\alpha(\omega) \approx \frac{\omega}{cn} \varepsilon_2(\omega)$$

Pamiętamy, że :

$$\varepsilon_2(\omega) = 2n\kappa \Rightarrow 2\kappa = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{n}$$
$$\alpha(\omega) = \frac{2\kappa\omega}{c} = \frac{\varepsilon_2\omega}{nc}$$

Po podstawieniu mamy:

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2 (2m_r^*)^{\frac{3}{2}}}{2\pi\epsilon_0 \hbar m^2 n c \omega} |M_{\mu\nu}|^2 (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

Wykorzystując pojęcie siły oscylatora:

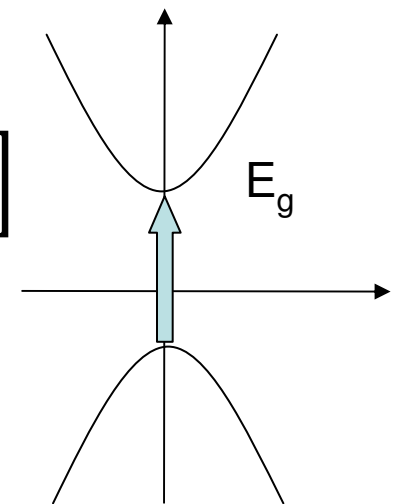
$$f_{\mu\nu} = \frac{2 \hbar |M_{\mu\nu}|^2}{m \omega_{\mu\nu}}$$

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2 (2m_r^*)^{\frac{3}{2}} f_{\mu\nu}}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 m n c} (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

Wstawiając współczynniki liczbowe

$$\alpha(\omega) = \frac{2.7 \times 10^5}{n} \left(\frac{2m_r^*}{m} \right)^{\frac{3}{2}} f_{\mu\nu} (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}} [cm^{-1}]$$

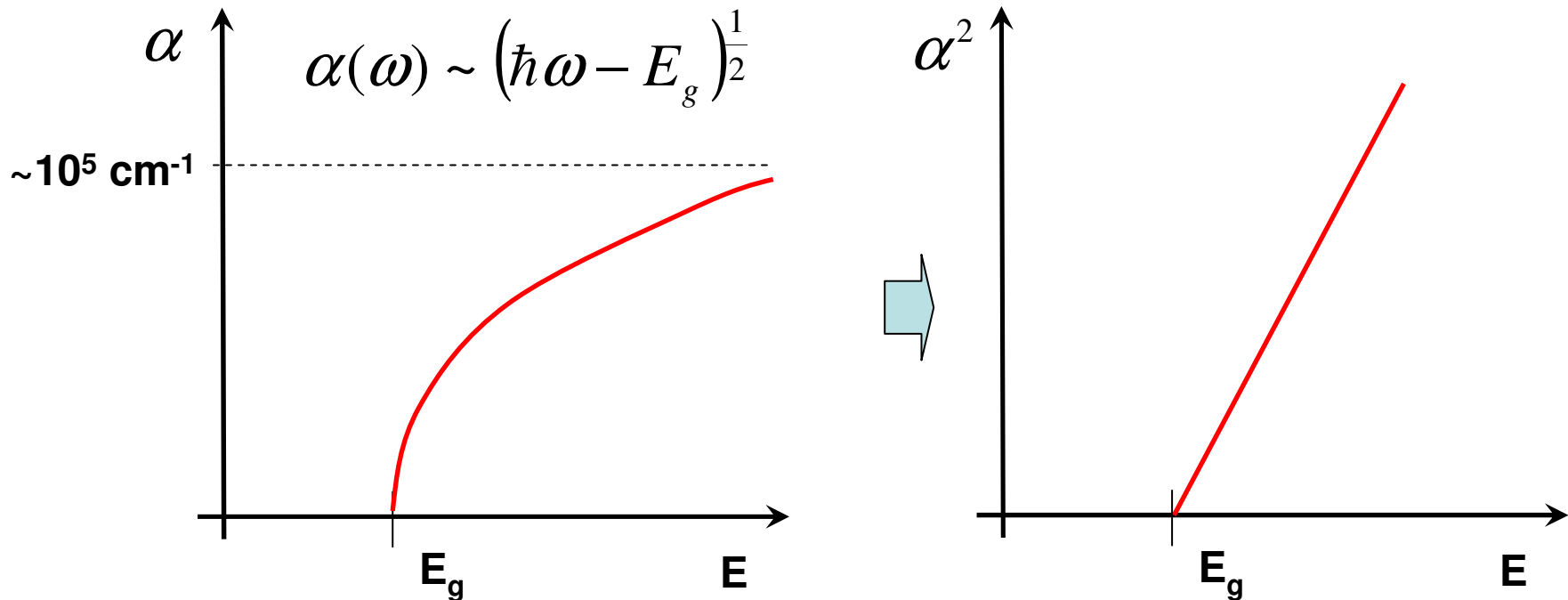
gdzie $(\hbar\omega - E_g)$ w eV



Przejścia proste dozwolone w obszarze podstawowej krawędzi absorpcji (M_0)



Rysując zależność kwadratu współczynnika absorpcji od energii powinniśmy dostać prostą:



Krawędź pierwiastkowa bardzo rzadko występuje, zwykle jest zaburzana przez efekty ekscytonowe...

Do eksperymentów konieczne są bardzo cienkie próbki najlepsze warunki dla badań $\alpha d \approx 1$ \Rightarrow próbki o grubości $\sim 1 \mu\text{m}$!

W kryształach domieszkowanych przeszkadza też efekt Burstina – wypełnianie pasm nośnikami...

Wpływ swobodnych nośników efekt Burstina-Mossa

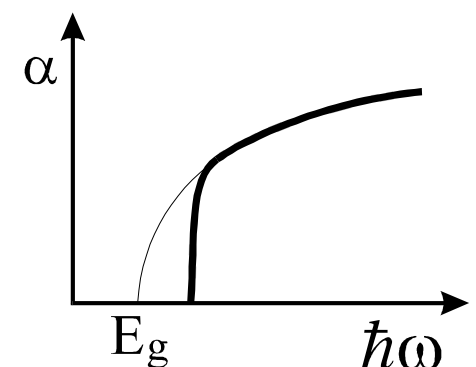
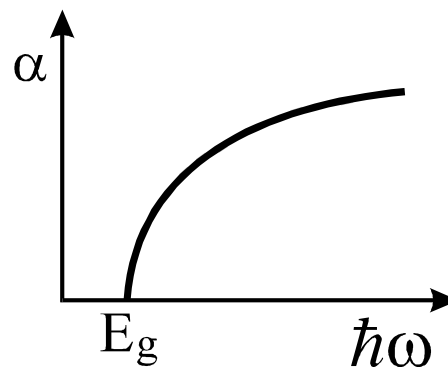
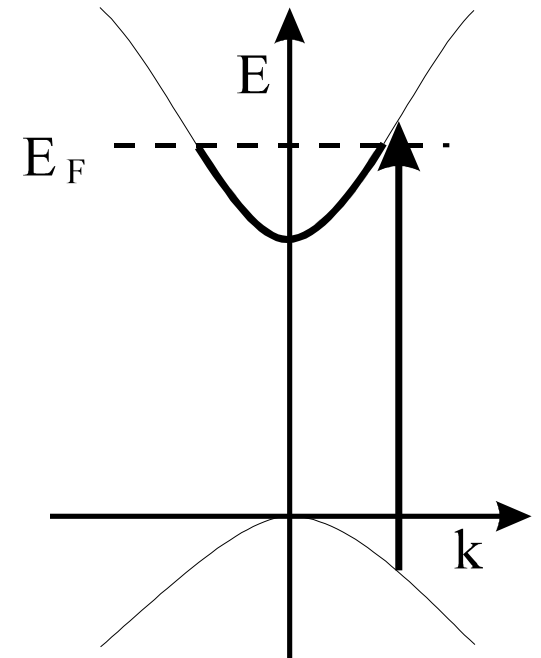
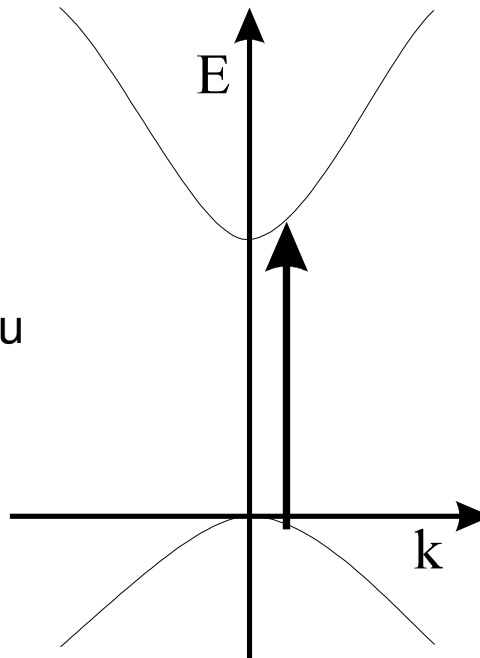
Przejścia optyczne mogą zachodzić pomiędzy stanami obsadzonymi i pustymi. Dla półprzewodników domieszkowanych musimy uwzględnić efekty wynikające z obsadzenia stanów w pobliżu dna pasma



Przesunięcie krawędzi absorpcji:

$$E_{\min} = E_g + \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_h^*}$$

„blue shift” – przesunięcie w kierunku wyższych energii, zależne od koncentracji nośników...



Przejścia proste wzbronione

$$M_{\mu\nu} = \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \nabla | u_{\nu\mathbf{k}} \rangle_{k=0} = 0$$

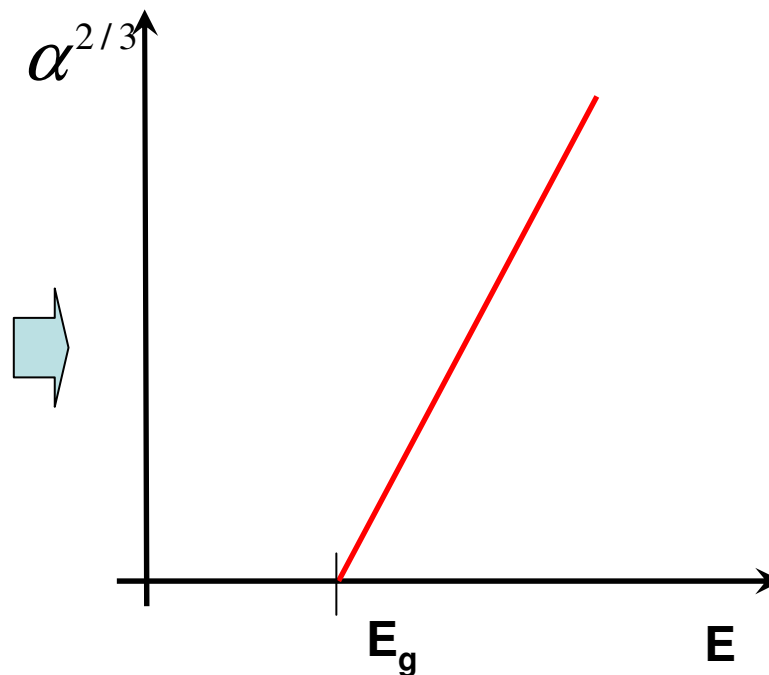
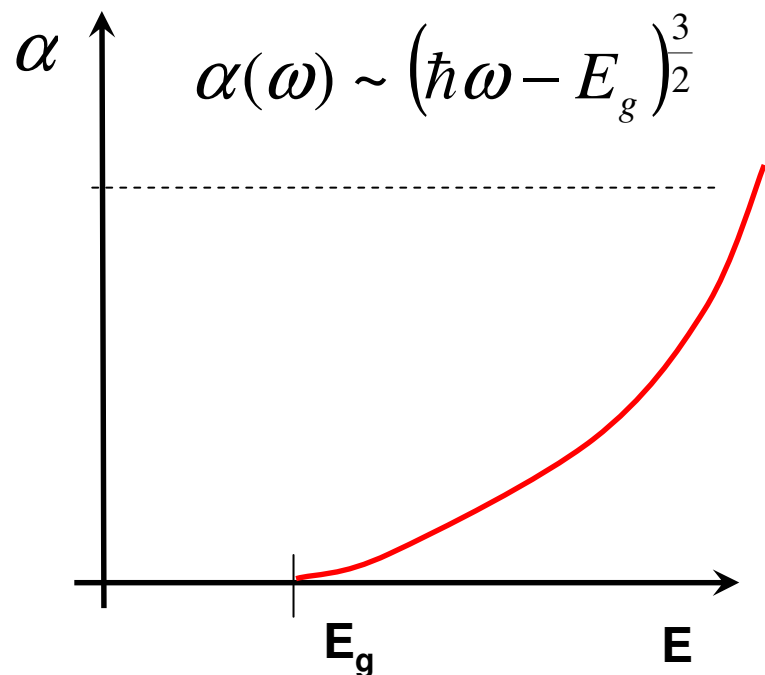
Jeśli dla $k \neq 0$ $M_{\mu\nu} \neq 0$ i $M_{\mu\nu} \sim k$

$$f_{\mu\nu} = \frac{2 \hbar |M_{\mu\nu}|^2}{m \omega_{\mu\nu}} \sim k^2$$



$$\alpha \sim (\hbar\omega - E_g)^{3/2}$$

Przejścia proste wzbronione



Zauważmy:

dla przejść prostych dozwolonych

dla przejść prostych dozwolonych

$$\left. \frac{d\alpha}{dE} \right|_{E_e}$$

$\rightarrow \infty$

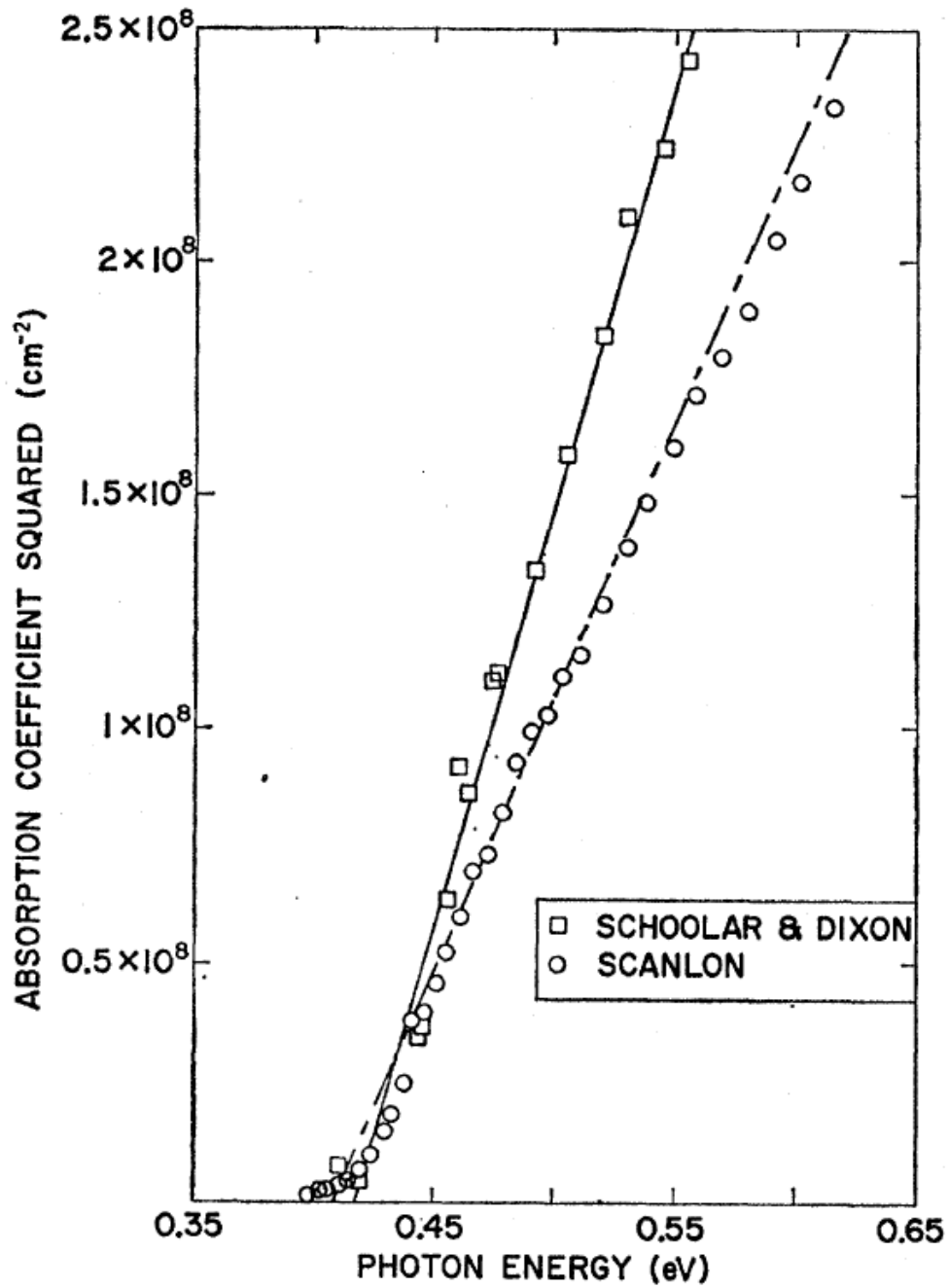
$$\left. \frac{d\alpha}{dE} \right|_{E_e}$$

$\rightarrow 0$

Czyli badając absorpcję możemy stwierdzić czy mamy do czynienia z przejściami dozwolonymi czy też wzbronionymi...

Krawędź pierwiastkowa

PbS




Schoolar&Dixon Phys. Rev 137, A667 (1964)

Realny kształt krawędzi absorpcji dla przejść prostych w kryształach dużej przerwie energetycznej

- Istnienie stanów związanych elektron-dziura (efekty ekscytonowe) dla energii niższych niż E_g (wybiega poza przybliżenie jednoelektronowe)
- Istnienie pól elektrycznych związanych ze stanami lokalnymi i defektami w kryształach (perforacja dna pasma przewodnictwa)

p. p. 

p. w. 



W niskich temperaturach obserwuje się tzw. krawędź Elliota.

W wyższych temperaturach obserwuje się tzw. krawędź Urbacha (o kształcie wykładniczym).

