

1.5. Studiul experimental al structurilor de benzi energetice

Vom prezenta – pe scurt – metodele experimentale de determinare a maselor efective și a lărgimii benzii interzise în semiconductori: rezonanța ciclotronică, metode optice și electrice pentru măsurarea lui E_g .

a. Rezonanța ciclotronică; determinarea masei efective

Principiul metodei este următorul: fie un purtător de sarcină q plasat într-un câmp magnetic static \vec{B} și un câmp electric alternativ de pulsație ω . Presupunem că masa sa efectivă m^* este izotropă. Ecuația de mișcare a sarcinii electrice q va fi

$$m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (4.102)$$

În absența câmpului electric, mișcarea este circulară într-un plan perpendicular pe direcția câmpului magnetic sau elicoidală în jurul lui \vec{B} , cu o pulsație

$$\omega_c = \frac{qB}{m^*} \quad (4.103)$$

numită *pulsație ciclotronică*. Orbitale în această mișcare de *precesie ciclotronică* sunt spirale în jurul câmpului magnetic. În prezența unui câmp electric și ținând seama și de ciocnirile cu imperfecțiunile rețelei, pe care într-un model simplu le introducem printr-o forță de frecare (frânare) de forma $-m^* \vec{v} / \tau$, unde τ este timpul de relaxare, ecuația de mișcare devine

$$m^* \left(\frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{\vec{v}}{\tau} \right) = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (4.104)$$

Dacă presupunem un câmp magnetic static de componente $B_x = B_y = 0$; $B_z = B$ și un câmp electric perpendicular pe acesta și variabil în timp $E_y = E_z = 0$; $E_x = E_0 \exp(i\omega t)$, vom căuta soluții de forma $\vec{v} = \vec{v}_0 \exp(-i\omega t)$, așa încât din ecuația (4.104) rezultă

$$\begin{cases} v_{ox}(-i\omega + \frac{1}{\tau}) = \frac{qE_0}{m^*} + v_{oy} \cdot \omega_c \\ v_{oy}(-i\omega + \frac{1}{\tau}) = -v_{ox} \cdot \omega_c \end{cases} \quad (4.105)$$

Atunci, conductivitatea σ_{xx} pe direcția câmpului electric aplicat este

$$\tilde{\sigma}_{xx} = \frac{j_x}{E_x} = \frac{nq v_x}{E_x} = \frac{nq v_{ox}}{E_0} = \frac{nq^2 \tau}{m^*} \cdot \frac{1 - i\omega\tau}{1 + \tau^2(\omega_c^2 - \omega^2) - 2i\omega\tau} \quad (4.106)$$

Puterea medie absorbită în semiconductor, $\langle P \rangle \sim \text{Re} \tilde{\sigma}$, este maximă pentru $\omega = \omega_c$. Aceasta corespunde unei absorbții rezonante de energie de către purtători, dacă frecvența de rotație pe orbită coincide cu cea a câmpului electric exterior. Prin urmare, determinând frecvența pentru care se produce acest fenomen și utilizând relația (4.103), se poate găsi masa efectivă a purtătorilor de sarcină (în practică se lucrează cu o frecvență fixă și se variază inducția câmpului magnetic).

Condiția pentru o rezonanță “bine definită” este ca perioada ciclotronică $T_c \leq \tau$ (între două ciocniri consecutive să se producă cel puțin o rotație completă în câmp magnetic). Echivalent putem scrie $\omega_c \tau > 1$, deci trebuie lucrat cu materiale pure și la temperaturi scăzute (temperatura He lichid, 4,2 K), pentru ca numărul de ciocniri ($\sim \frac{1}{\tau}$) să fie mic. Un câmp magnetic intens, care ar duce la creșterea lui ω_c , modifică dependența $E(\vec{k})$ și prin urmare, masa efectivă a purtătorilor; în experiențe se utilizează câmpuri magnetice cu $B \leq 1$ T. Pentru $\omega_c \tau < 1$, nu se observă fenomenul de absorbție rezonantă (figura 1...).

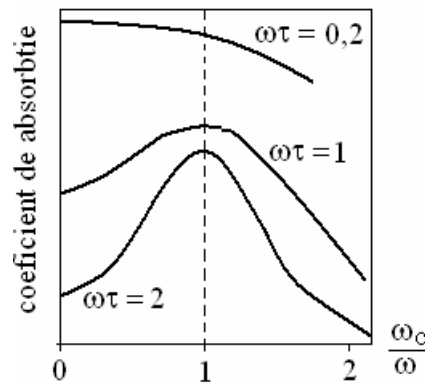
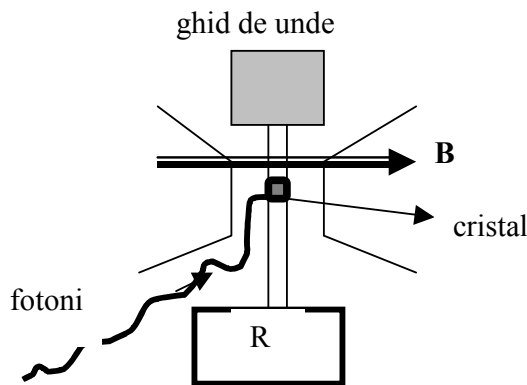


Fig.1...

Ordin de mărime. La temperatura de 4,2 K : $\tau \cong 10^{-11}$ s așa încât condiția de rezonanță este satisfăcută pentru $\omega > 10^{11}$ rad/s; alegând $\omega = 1,5 \cdot 10^{11}$ rad/s, pentru $m^* = 0,1m_e$, se obține $B = 0,086$ T. La temperatura camerei, timpii de relaxare a purtătorilor în cristale sunt intervalul ($10^{-15} \div 10^{-13}$) s.

Schema unei instalații experimentale utilizată pentru determinarea



maselor efective ale purtătorilor de sarcină într-un semiconductor este prezentată în figura 4.16. Cristalul, plasat între polii unui electromagnet, este iradiat cu unde electromagnetice de

frecvență $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$, produse de un ghid de unde. În cazul în care câmpul magnetic (static) are o valoare B care verifică condiția de rezonanță

$$\omega = \omega_c = \frac{eB}{m^*}, \text{ unde } m^* \text{ este o}$$

masă efectivă, cristalul prezintă o creștere a conductivității electrice, care se traduce printr-o absorbție puternică a undei. Această absorbție este observată cu ajutorul unui receptor R care măsoară puterea transmisă.

Se lucrează la temperaturi foarte scăzute (pentru ca să fie îndeplinită condiția $\omega_c \tau > 1$), dar, pentru a observa fenomenul de variație a conductivității, cristalul este iradiat cu lumină având energia mai mare decât banda interzisă. (Acest lucru este necesar deoarece la temperaturi scăzute banda de conducție a semiconductorului este practic neocupată. Pentru a observa rezonanța, sunt necesari electroni liberi și (sau) goluri libere, care sunt creați în acest caz prin excitare cu lumină).

b. Metode optice: determinarea benzii interzise la semiconductori

Așa cum spectroscopia atomică permite determinarea nivelelor în atomi, spectroscopia semiconductorilor permite determinarea mărimii benzii interzise în semiconductori și dă informații despre tipul de structură de benzi (directă sau indirectă). Să analizăm întâi efectul unui fascicul de lumină de frecvență ν asupra unui semiconductor. Dacă energia fotonilor $h\nu < E_g$, fasciculul va traversa cristalul fără să fie atenuat. Dacă $h\nu > E_g$, fotonii pot fi absorbiți, excitând electronii din banda de valență în banda de conducție. Intensitatea unei luminoase variază atunci cu distanța z parcursă în semiconductor după legea

$$I = I_0 \exp(-\alpha z) \quad (4.123)$$

unde α este *coeficientul de absorbție*. Expresia lui α depinde de natura tranzițiilor electronice induse de radiație, dar indiferent de tipul procesului de absorbție se verifică legile de conservare a energiei

$$E_f - E_i = E_{foton} \quad (4.124)$$

și a impulsului

$$\vec{k}_f - \vec{k}_i = \vec{k}_{foton}. \quad (4.125)$$

(Indicele i (f) se referă la starea inițială (finală) a electronului).

Evaluăm vectorul de undă al fotonului comparativ cu cel al unui electron în rețeaua cristalină. Pentru fotoni cu energii de aproximativ 1 eV (lățimea benzii interzise pentru semiconductorii uzuali), lungimea de undă este de ordinul $1 \mu\text{m}$, prin urmare $k_{foton} = \frac{2\pi}{\lambda} \cong 6 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}$. Pentru electronii în

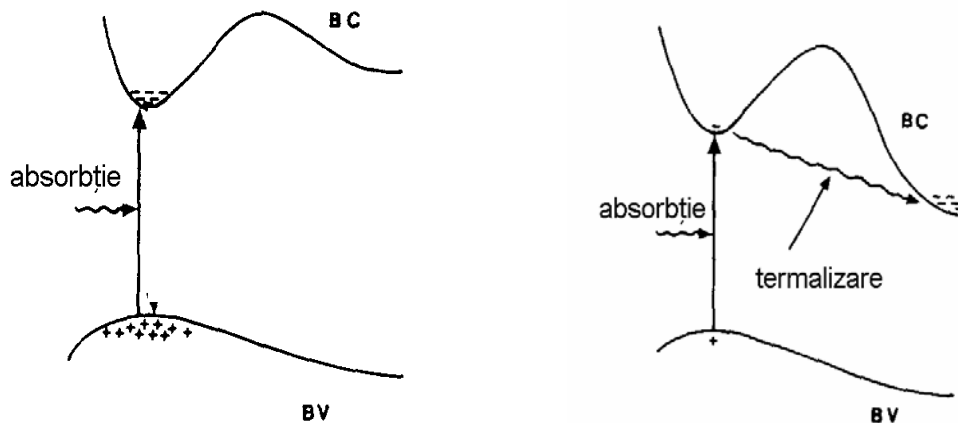
echilibru termic cu rețeaua, la $T = 300 \text{ K}$ și cu $m^* \cong m_e$, impulsul

$$P = \sqrt{2m^* k_B T} \cong 10^{-25} \text{ kg} \cdot \text{m/s}, \text{ iar vectorul de undă } k = \frac{P}{h} \cong 10^9 \text{ m}^{-1}.$$

Se observă că impulsul fotonului este neglijabil, așa încât condiția de conservare a impulsului se scrie simplu

$$\vec{k}_i = \vec{k}_f = \vec{k}_0. \quad (4.126)$$

Se spune că *tranzițiile radiative* (însoțite de absorbția sau de emisia unui foton), *sunt verticale* în spațiul \vec{k} . Din acest motiv, procesele de absorbție de fotoni în semiconductori sunt mult mai probabile în materiale cu bandă interzisă directă decât în materiale cu bandă interzisă indirectă. Figura 4.20 prezintă două tipuri de tranziții bandă-bandă induse de fotoni.



a)

Fig. 4.20

b)

Într-un semiconductor cu bandă interzisă directă (fig. 4.20 a), tranzițiile între extremele benzilor sunt verticale, verificând legea de conservare a lui \vec{k} . În semiconductorul cu bandă interzisă indirectă (fig. 4.20 b) se pot excita vertical, deci optic, electroni din maximum benzii de valență în minimum central al benzii de conducție. Electronii astfel excitați termalizează rapid în minimum absolut al benzii de conducție și pot participa la conducție.

În cazul solidelor cu bandă interzisă directă, coeficientul de absorbție (§5.3) este dat de

$$\alpha = \frac{\pi e^2 \hbar}{m_r^2 c n \epsilon_0} \frac{1}{\hbar \omega} |(\vec{a} \cdot \vec{p})_{if}|^2 N_{cv}(\hbar \omega)$$

unde c este viteza luminii în vid, n , indicele de refracție al mediului, ϵ_0 permitivitatea dielectrică a vidului, $|(\vec{a} \cdot \vec{p})|^2$ este elementul de matrice al dipolului, care poate fi aproximat cu $\left(\frac{2}{3}\right) p_{cv}^2$ iar

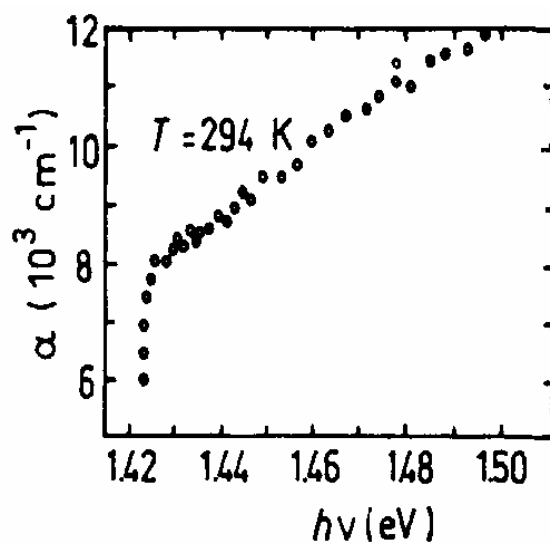
$$N_{cv}(\hbar \omega) = \frac{\sqrt{2} (m_r^*)^{3/2} (\hbar \omega - E_g)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3}$$

este densitatea reunita de stări, cu

$$\hbar \omega = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left[\frac{1}{m_c^*} + \frac{1}{m_v^*} \right] = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \frac{1}{m_r^*}$$

unde m_r^* este masa optica efectiva sau masa redusa a sistemului electron-gol. Se observa ca

$$\alpha = \frac{A}{\hbar \omega} (\hbar \omega - E_g)^{1/2} \quad (4.127)$$



Formula (4.127) este bine verificată experimental pentru substanțele cu benzi parabolice în vecinătatea minimelor din \vec{k}_0 . O astfel de curbă experimentală (fig. 1...pt GaAs.) permite determinarea lărgimii benzii interzise (pragul curbei de absorbție) și a dependenței acestei mărimi de temperatură.

În cazul solidelor cu bandă interzisă indirectă, la care extremele benzilor sunt situate la valori diferite ale lui \vec{k} , pot avea loc tranziții optice care nu respectă regula (4.126). În astfel de procese, simultan cu absorbția fotonului, are loc o absorbție (emisie) de fonon, cu vector de undă $\vec{q} = \pm(\vec{k}_f - \vec{k}_i)$, așa încât să fie satisfăcută legea conservării impulsului. Astfel de tranziții cu participarea fononilor au loc cu condiția de conservare a energiei

$$E_f - E_i = \hbar\omega \pm \hbar\omega_{\vec{q}} \quad (4.128)$$

$\pm \hbar\omega_{\vec{q}}$ fiind energia fononului absorbit (emis). Pragul absorbției este situat la energia

$$\hbar\omega_{prag} = E_g \mp \hbar\omega_{\vec{q}} \quad (4.129)$$

iar calculul pentru coeficientul de absorbție (§5.3) în cazul *tranzițiilor indirecte* (cu $\vec{k}_i \neq \vec{k}_f$), conduce la expresia

$$\alpha = \frac{B}{\hbar\omega} \left[\frac{(\hbar\omega - E_g + \hbar\omega_{\vec{q}})^2}{e^{\hbar\omega_{\vec{q}}/kT} - 1} + \frac{(\hbar\omega - E_g - \hbar\omega_{\vec{q}})^2}{1 - e^{-\hbar\omega_{\vec{q}}/kT}} \right] = \alpha_{abs.} + \alpha_{em.} \quad (4.130)$$

De observat că

$$\frac{1}{e^{\hbar\omega_{\vec{q}}/kT} - 1} = n_{\vec{q}}$$

este numărul mediu de fononi în starea \vec{q} la temperatura T , iar

$$\frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega_{\vec{q}}/kT}} = n_{\vec{q}} + 1.$$

La temperaturi mai mari decât temperatura Debye

$$kT > \hbar\omega_{\vec{q}} \Rightarrow n_{\vec{q}} \cong n_{\vec{q}} + 1 \cong \frac{kT}{\hbar\omega_{\vec{q}}},$$

iar pentru $T \rightarrow 0\text{K}$, $n_{\bar{q}} \rightarrow 0$, $n_{\bar{q}} + 1 \rightarrow 1$. Se observă că la temperaturi foarte scăzute, când numărul de fononi este foarte mic, tranzițiile cu absorbție de fononi nu mai sunt posibile, absorbția radiației producându-se numai cu emisie de fononi.

În figura 4.22 se reprezintă $\left(\frac{\alpha_{abs.} \hbar\omega}{B}\right)^{1/2} = K_{abs.}$ și respectiv

$\left(\frac{\alpha_{em.} \hbar\omega}{B}\right)^{1/2} = K_{em.}$ în funcție de $\hbar\omega$, pentru două temperaturi $T_1 > T_2$.

Curbele pline se obțin prin racordarea celor două drepte.

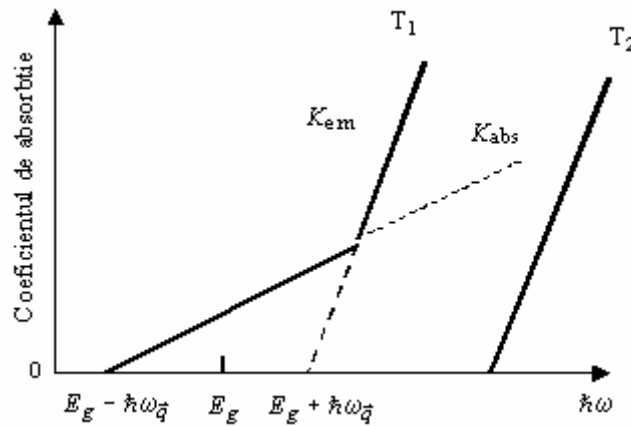
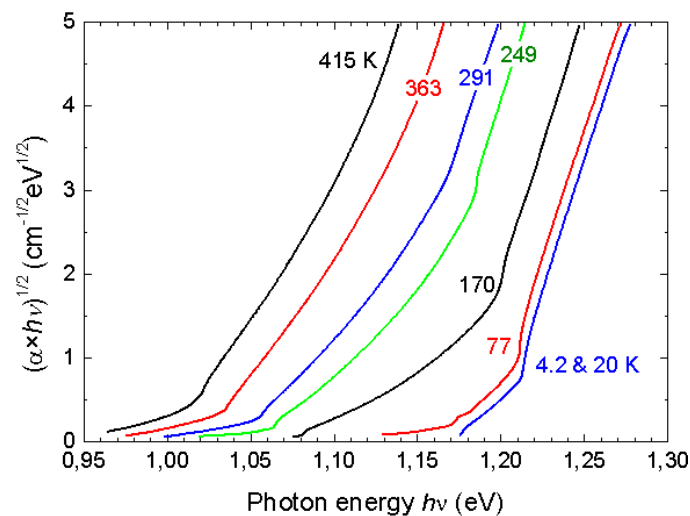


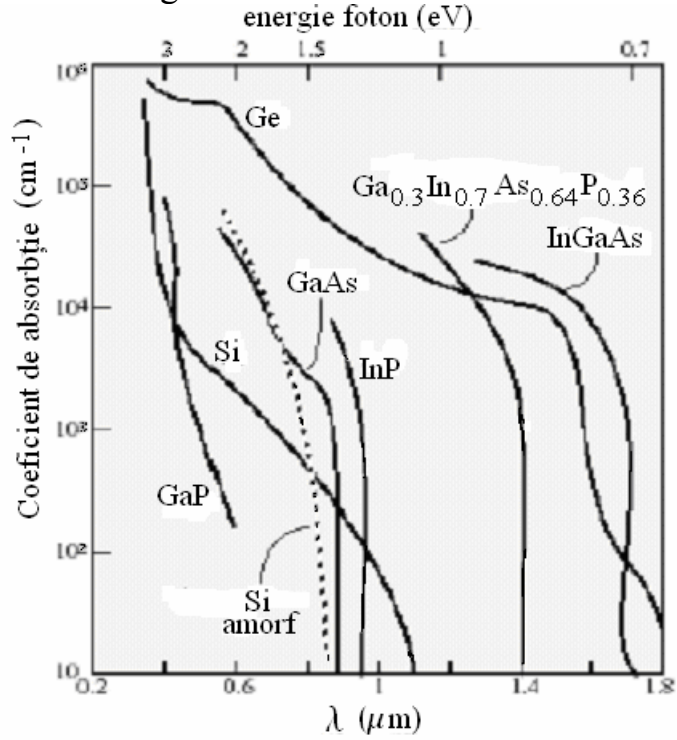
Fig. 4.22

Așa cum se vede din figură, studiul acestui tip de absorbție permite determinarea lărgimii benzii interzise indirecte, precum și energia fononilor care participă la proces.



Experimental Si pentru diferite temperaturi

O prezentare comparativa a curbelor de absorbtie pentru semiconductorii uzuali e prezentata in figura



c) Metoda electrică de determinare a lărgimii benzii interzise