Optische Absorption der Festkörper

Praktikumsversuch Nr. 14

19. November 1991

Zusammenfassung

Im Experiment werden die Reflexion der Metalle Cu und Au und die Transmission der Halbleiter GaAs und amorphes Si im Sichtbaren und im nahen Infrarot gemessen. Ziel des Versuchs ist es, aus den Reflexions- und Transmissionsspektren die optischen Konstanten zu bestimmen und den Zusammenhang mit der Bandstruktur zu verdeutlichen.

1 Einleitung und Grundlagen

Die augenfälligste äußere Erscheinung eines Festkörpers ist seine Farbe. Sie drückt die Wechselwirkung der Materie mit dem sichtbaren Teil des elektromagnetischen Spektrums aus. Daneben interessiert aber auch das Verhalten in weiteren Spektralbereichen, z.B. im Infraroten (IR) und Ultravioletten (UV). Die elektromagnetische Wechselwirkung ist an die elektrische Ladung gekoppelt. Wegen ihrer geringen Masse spielen meistens die Elektronen die entscheidende Rolle. Sie können in Form des freien Elektronengases (modifiziert durch Wechselwirkung mit dem Gitter) oder in Form von Elektronen des Atomrumpfes (gekoppelt an schwingungsfähige Kristallbausteine) auftreten. Die energetisch unterschiedlichen Bindungszustände des Elektrons bestimmen also im wesentlichen die Wellenlängenabhängigkeit der optischen Eigenschaften. Im folgenden werden wir das klassische Lorentz-Modell für die Absorption sowie seinen Zusammenhang mit dem Bändermodell diskutieren. Daraus wird die Klassifizierung der Festkörper in Metalle, Halbleiter und Isolatoren ersichtlich.

1.1 Klassisches Modell

Der Lorentz-Oszillator wird als einfaches Modell für das Elektronensystem angenommen. Dieser Oszillator besteht aus dem Atomrumpf mit Masse M und

Abbildung 1: Oszillatormodell.

einem Elektron mit Masse m. Die Bindung zwischen Elektron und Atomrumpf wird durch eine Feder mit Kraftkonstante $m\omega_0^2$ dargestellt (Abb. 1). Nehmen wir zur Vereinfachung an, daß die Masse M unendlich ist, so können wir die Bewegungsgleichung für das Elektron einfach schreiben:

$$m\frac{\mathrm{d}^2\vec{r}}{\mathrm{d}t^2} + m\Gamma\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t} + m\omega_0^2\vec{r} = -e\vec{E}_{\mathrm{lok}} \tag{1}$$

Der Term $m\Gamma d\vec{r}/dt$ beschreibt die Dämpfung des Oszillators, die im Festkörper von verschiedenen Streumechanismen herrührt. Die Antriebskraft $-e\vec{E}_{\mathrm{lok}}$ beschreibt die Wechselwirkung des Elektrons (Ladung $-e$) mit dem äußeren elektrischen Wechselfeld des Lichtes, das ein mikroskopisches, lokales Feld $\vec{E}_{\mathrm{lok}}$ am Ort des Elektrons produziert. Wenn für das elektrische Feld die Zeitabhängigkeit $e^{-i\omega t}$ angenommen wird, kann die Bewegungsgleichung (1) gelöst werden mit dem Ergebnis:

$$\vec{r} = \frac{-e\vec{E}_{\mathrm{lok}}/m}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\Gamma\omega} \tag{2}$$

Das induzierte Dipolmoment wird dann gegeben durch

$$\vec{p} = \frac{e^2\vec{E}_{\mathrm{lok}}}{m}\frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\Gamma\omega} = \alpha(\omega)\vec{E}_{\mathrm{lok}} \tag{3}$$

wobei $\alpha(\omega)$ die Polarisierbarkeit ist. Der Festkörper wird nun als eine Ansammlung von N solchen Oszillatoren pro Volumeneinheit betrachtet. Die Polarisation ist dann gegeben durch

$$\vec{P}_{\mathrm{makro}} = N\langle\vec{p}\rangle = N\alpha(\omega)\langle E_{\mathrm{lok}}\rangle \tag{4}$$

Hier deuten die Klammern einen geeigneten Mittelwert an. Die Antwort des Systems auf das äußere Feld $\vec{E}$ wird durch die makroskopische Suszeptibilität

χ_e beschrieben:

$$\vec{P}_{\text{makro}} = \chi_e \vec{E} \tag{5}$$

Wir brauchen also eine Beziehung zwischen dem makroskopischen Feld $\vec{E}$ und $\langle\vec{E}_{\text{lok}}\rangle$. Obwohl dies im allgemeinen kein einfaches Problem ist, kann die wesentliche Form der Resultate für die optischen Eigenschaften durch die Annahme $\vec{E} = \langle\vec{E}_{\text{lok}}\rangle$ erhalten werden. Diese Annahme ist nur in verdünnten Gasen gut erfüllt. Für kubische Festkörper erhält man aus der Clausius-Mosotti-Gleichung jedoch formal äquivalente Formeln ($\omega_0^2 \to \omega_0^2 - \frac{1}{3}\omega_p^2$). Aus der Definition

$$\epsilon = 1 + 4\pi\chi_e \tag{6}$$

bekommen wir dann die komplexe Dielektizitätskonstante

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi N e^2}{m} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\Gamma\omega} \tag{7}$$

Diese Dielektizitätskonstante können wir wiederum durch Real- und Imaginärteil ϵ_1 bzw ϵ_2 (vgl. Abb. 10) ausdrücken:

$$\epsilon_1 = 1 + \frac{4\pi N e^2}{m} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2\omega^2} \tag{8}$$

und

$$\epsilon_2 = \frac{4\pi N e^2}{m} \frac{\Gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2\omega^2} \tag{9}$$

Betrachten wir klassische Atome mit mehr als einem Elektron pro Atom, so können wir die obigen Ausdrücke auf einfache Weise erweitern. N_j sei die Anzahl der Elektronen pro Volumeneinheit mit Resonanzfrequenz ω_j. Dann bekommt man

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \sum_j \frac{N_j}{(\omega_j^2 - \omega^2) - i\Gamma_j\omega} \tag{10}$$

mit der Summenregel

$$\sum_j N_j = N \tag{11}$$

wobei N die Gesamtzahl der Elektronen pro Volumeneinheit ist.

Eine quantenmechanische Rechnung für eine Ansammlung von freien Atomen führt auf eine sehr ähnliche Dielektrizitätskonstante [1]:

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \sum_j \frac{N f_j}{(\omega_j^2 - \omega^2) - i\Gamma_j\omega} \tag{12}$$

ω_j ist hier die Übergangsfrequenz zwischen zwei quantenmechanischen Niveaus, deren Energieabstand $\hbar\omega_j$ beträgt. Die Oszillatorstärke f_j ist ein Maß für die zugehörige Übergangswahrscheinlichkeit. Die Oszillatorstärke entspricht der Anzahl der korrespondierenden klassischen Oszillatoren mit Frequenz ω_j. Für die Oszillatorstärke gilt ebenfalls eine Summenregel

$$\sum_j f_j = 1 \tag{13}$$

Die Dielektizitätskonstante und die Leitfähigkeit sind durch die 4. Maxwellgleichung miteinander verknüpft:

$$\begin{aligned} \text{rot}\vec{H} &= \dot{\vec{D}} + \vec{j} && (14)\\ &= (i\omega\epsilon + \sigma)\cdot\vec{E} && (15)\\ &= i\omega(\epsilon + \frac{\sigma}{i\omega})\cdot\vec{E} && (16) \end{aligned}$$

Interpretiert man den Klammerausdruck in (16) als verallgemeinerte Dielektizitätskonstante $\tilde{\epsilon}$ dann ergibt der Vergleich mit Gl. (7) für niedrige Frequenzen im wesentlichen die Drude-Formel:

$$\sigma = \frac{4\pi N e^2}{m(\Gamma - i\omega)} \tag{17}$$

1.2 Das Bändermodell

Betrachten wir zunächst den Festkörper als eine Ansammlung von N Atomen. Wenn der Abstand zwischen den Atomen sehr groß ist, sind die möglichen Energieniveaus eines Elektrons im Kristall einfach die des Elektrons im einzelnen Atom. Nur hat jedes Niveau einen Entartungsgrad gleich dem Entartungsgrad des atomaren Niveaus multipliziert mit der Anzahl der Atome. Die Entartung ist also sehr hoch.

Was passiert, wenn der Abstand zwischen den Atomen verringert wird? Genau wie im Falle des zweiatomigen Moleküls wird die Entartung der atomaren Niveaus durch die Wechselwirkung der Atome aufgehoben. Folglich wird jedes hochentartete Niveau aufgespalten in eine sehr große Anzahl verschiedener Niveaus. Sie liegen so dicht, daß man sie als kontinuierlich über den Energiebereich zwischen dem niedrigsten und höchsten Niveau einer Gruppe verteilt betrachtet. Jedes ursprünglich atomare Niveau wird also mit kleiner werdendem interatomarem Abstand r in ein Energieband ausgeschmiert. Dieses Konzept ist in Abb. 2 schematisch dargestellt (r_0 ist der Gleichgewichtsabstand).

Diese Betrachtung der elektronischen Zustände eines Festkörpers ausgehend von den atomaren Niveaus ist eine qualitative Beschreibung der „Tight binding"-

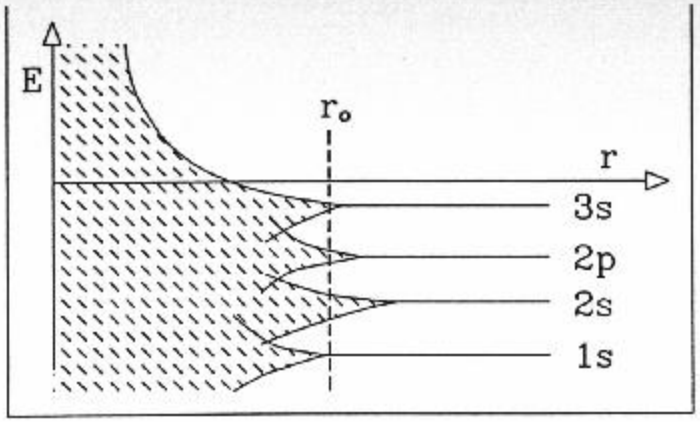

Abbildung 2: Energie der elektronischen Zustände als Funktion des atomaren Abstandes.

Methode. Hier wird die Wechselwirkung zwischen Atomen als Störung der atomaren Niveaus angesehen. Diese Methode wird für Energiebänder benützt, die vorwiegend atomaren Charakter besitzen. Wenn andererseits die Elektronen recht wenig von den atomaren Potentialen beeinflußt werden, ist es sinnvoll, vom freien Elektronenmodell auszugehen und die atomaren Potentiale als Störung zu betrachten. Im folgenden wird dieses Modell kurz beschrieben; außerdem wird skizziert, wie durch Einführung der Wechselwirkung die Bandstruktur entsteht.

Grundlegend für die Bändertheorie ist die Ein-Elektronen-Näherung, d.h. das Elektron bewegt sich unter dem Einfluß des Gitters (fixierte Ionen) und eines gemittelten Feldes, das von allen anderen Elektronen erzeugt wird. Der Festkörper wird als perfektes Gitter angesehen, so daß das gesamte Potential $V(\vec{r})$ die Periodizität des Gitters aufweist. Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + [E - V(\vec{r})]\Psi = 0 \tag{18}$$

sind Blochsche Funktionen:

$$\Psi(\vec{k},\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}} \tag{19}$$

wobei $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ die Periodizität des Gitters hat.

Wenn $V(\vec{r})$ konstant ist, hat man den Fall des freien Elektrons: die Wellenfunktionen sind dann ebene Wellen $e^{i\vec{k}\vec{r}}$, und die Energie eines Elektrons ist gegeben durch

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{20}$$

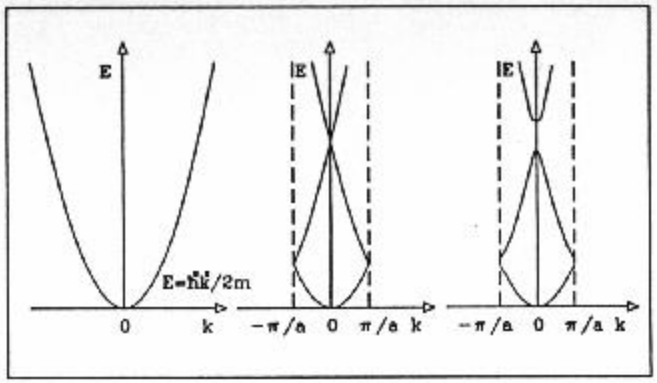

Abbildung 3: Dispersion für ein freies Elektron (a), ein freies Elektron im Gitter (b) und für ein Elektron unter Berücksichtigung der Wechselwirkung mit dem Gitter (c).

Im Falle des eindimensionalen Gitters gibt es nur eine Möglichkeit für die Richtung des $\vec{k}$-Vektors und die möglichen Zustände liegen auf einer Parabel, der „Dispersionskurve" in Abb. 3 a. Im Grundzustand sind alle Zustände bis zur Fermienergie E_F besetzt. Die Fermienergie ist durch die Anzahl der Elektronen unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips bestimmt.

Wegen der Periodizität des Systems kann man (20) schreiben als

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} + \vec{G})^2 \tag{21}$$

wobei $\vec{k}$ in der ersten Brillouin-Zone liegt ($-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$; a ist der Abstand der Gitterpunkte) und $\vec{G}$ ein reziproker Gittervektor ($G = \pm\frac{2\pi n}{a}$; $n = 0, 1, \ldots$) ist. In diesem reduzierten Zonenschema ergibt sich dann die Dispersionskurve in Abb. 3 b.

Berücksichtigt man nun das Gitterpotential $V(\vec{k})$, so entstehen Energielücken bei den Entartungspunkten an der Brillouin-Zonengrenze und für $\vec{G} \neq 0$ bei $\vec{k} = 0$ (Abb. 3 c).

In drei Dimensionen muß man die Dispersionskurve für jede $\vec{k}$-Richtung bestimmen. Die resultierende Bandstruktur für das freie Elektron im fcc-Gitter ist in Abb. 4 für die wichtigsten Symmetrierichtungen gezeigt. In Abb. 5 ist die Bandstruktur von GaAs (gerechnet mit Gitterpotential) zum Vergleich gezeigt. Man erkennt noch viele Aspekte der freien Elektronen-Bandstruktur.

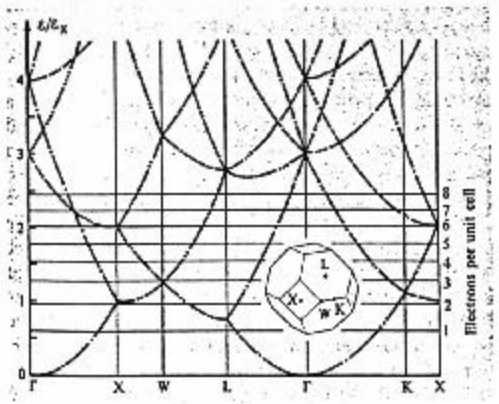

Abbildung 4: Bandstruktur für freie Elektronen im reduzierten Zonenschema für fcc-Gitter (z.B. Al, Cu, Ag, Au und GaAs) [4].

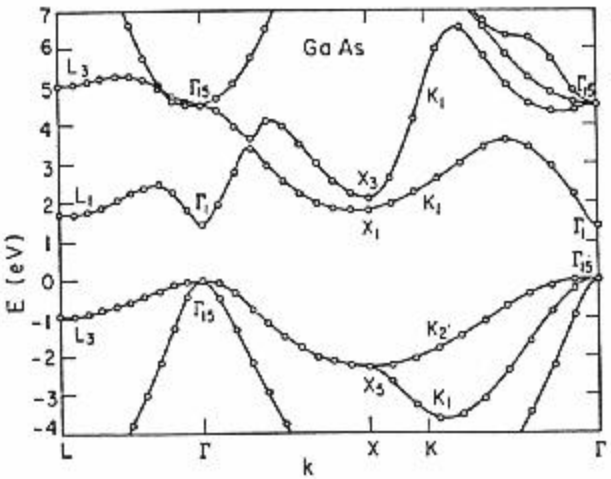

Abbildung 5: Bandstruktur für GaAs [5].

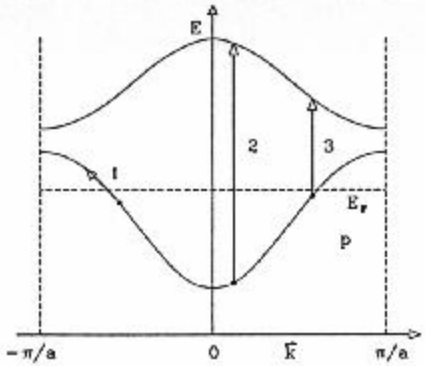

Abbildung 6: Schematische Bandstruktur eines Metalls. Mögliche Intraband-(1) und Interband-(2,3) Übergänge sind angedeutet.

1.3 Metalle, Halbleiter und Isolatoren im Bild der Bandstruktur; Anwendbarkeitsgrenzen des Oszillatormodells

1.3.1 Metalle

Ein Metall unterscheidet sich vom Halbleiter bzw. Isolator dadurch, daß die Fermienergie sich innerhalb eines Bandes befindet (Abb. 6). Dies hat zur Folge, daß auch bei $T = 0$ das Metall leitet und daß optische Übergänge stattfinden, auch wenn die Anregungsfrequenz nicht hoch genug ist, um Übergänge zwischen Bändern (Interband-Übergänge) zu erzeugen. Solche Übergänge heißen Intraband-Übergänge. Sie werden mit Hilfe des Drude-Modells beschrieben. Dieses Modell setzt freie Elektronen voraus, die eine Streuzeit τ haben. Die Dielektrizitätskonstante für das Drude-Modell kann sehr einfach aus den Ergebnissen des Lorentz-Modells erhalten werden, indem in (1) der Dämpfungskoeffizient Γ ersetzt wird durch $1/\tau$ und die Bindungskraft gleich Null gesetzt wird, d.h. $\omega_0 = 0$. Statt Gleichung (8) und (9) bekommt man:

$$\epsilon_1 = 1 - \frac{\omega_p^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \tag{22}$$

$$\epsilon_2 = \frac{\omega_p^2 \tau}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)} \tag{23}$$

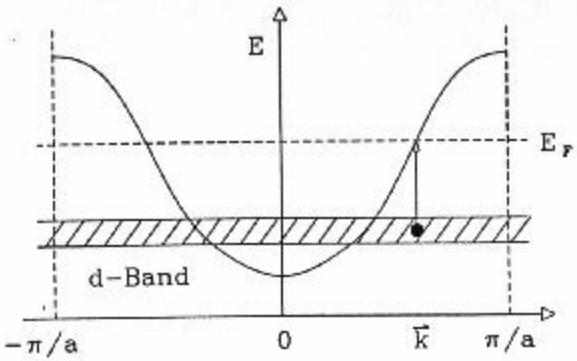

Abbildung 7: Schematische Bandstruktur der Edelmetalle.

Die Plasmafrequenz ω_p^2 ist gegeben durch

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi N e^2}{m} \tag{24}$$

Typische gemessene Streuzeiten τ liegen bei $\sim 10^{-14}s$. Für Metalle ergibt eine Abschätzung nach Gl. (24) $\omega_p \sim 10^{16}s^{-1}$. Der Wellenlängenbereich in diesem Experiment ist $0.3\mu m \rightarrow 1\mu m$, d.h. $2 \cdot 10^{15}s^{-1} \leq \omega \leq 6 \cdot 10^{15}s^{-1}$. In unserem Frequenzbereich gilt also: $\omega\tau \gg 1$ und $\omega \ll \omega_p$. Die Drudereflexion ist dann gegeben durch

$$R \cong 1 - \frac{2}{\omega_p \tau} \tag{25}$$

Das Metall reflektiert fast 100% des Lichtes! Außer Intraband-Übergängen können in Metallen auch Interband-Übergänge auftreten. Mögliche Interband-Übergänge sind in Abb. 6 angedeutet. Besonders wichtig sind in den Edelmetallen (Cu, Ag, Au) die Übergänge von dem relativ schmalen d-Band, das unterhalb der Fermienergie liegt, zur Fermienergie (Abb. 7). Für Cu und Au liegen die Übergangsfrequenzen im Sichtbaren. Bei diesen Frequenzen erwartet man eine erhöhte Absorption, d.h. auch eine reduzierte Reflexion. Außerdem ist zu erwarten, daß der Verlauf der Dielektrizitätskonstanten in diesem Bereich qualitativ durch das Oszillatormodell beschrieben werden kann.

1.3.2 Halbleiter

In Halbleitern und Isolatoren liegt die Fermienergie in der Bandlücke. Der Bandabstand (E_G) eines Halbleiters ist relativ zu demjenigen von Isolatoren

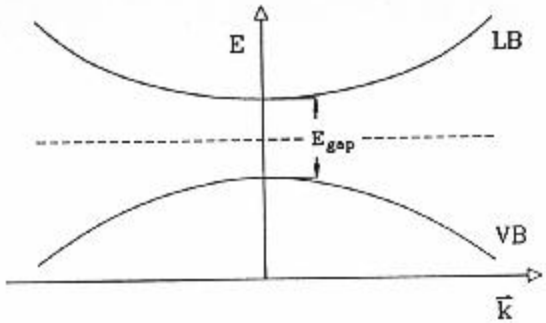

Abbildung 8: Schematische Bandstruktur von Isolatoren und Halbleitern.

klein (GaAs: $E_G \approx 1.4eV$). Bei $T = 0$ ist das Valenzband (VB) mit Elektronen gefüllt und das Leitungsband (LB) leer (Abb. 8). Wechselwirkungen einer elektromagnetischen Welle mit dem idealen Kristallgitter können nur dann auftreten, wenn die Energie $\hbar\omega$ eines Photons ausreicht, um ein Elektron vom VB in das LB zu heben. Man erwartet ein scharfes Ansteigen der Absorption, wenn $\hbar\omega > E_G$ wird. Da sich die Elektronen im Festkörper in erster Näherung in einem parabolischen Potential befinden, verläuft die Zustandsdichte proportional zu $\sqrt{E}$. In Analogie zu dem bisher diskutierten Oszillatormodell lassen sich die optischen Eigenschaften eines Halbleiters in der Nähe der Energielücke durch eine Überlagerung vieler Oszillatoren verstehen (vgl. (12)).

1.3.3 Isolatoren

Reine, kristalline Isolatoren sind im allgemeinen durchsichtig, d.h. sie absorbieren im Sichtbaren nicht, da die Energielücke E_G größer ist als die Photonenenergie $\hbar\omega$ im Sichtbaren. Abgesehen von möglicher Absorption durch optische Phononen (im mittleren Infrarot) können auch Farbzentren absorbieren: Elektronen bzw Löcher werden an Defekten im Kristall gebunden. Optische Übergänge zwischen den resultierenden Energieniveaus sind für die Farbe des Kristalls verantwortlich. Verschiedene Farbzentren, je nach Defekt- bzw. Fremdatomart sind möglich.

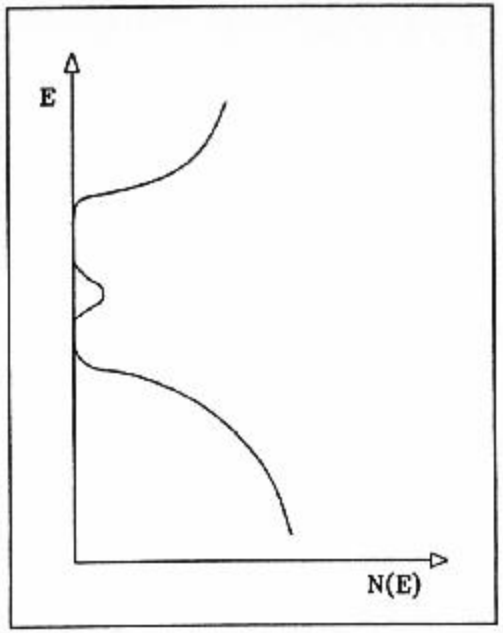

Abbildung 9: Schematische Zustandsdichte $N(E)$ eines amorphen Materials.

1.3.4 amorphe Halbleiter

Amorphe Halbleiter besitzen kein periodisches Gitter. Durch Schwankungen im Bindungswinkel und im Bindungsabstand geht die Fernordnung im amorphen Material verloren. Die Lage von Energieniveaus wird allerdings hauptsächlich durch die nächsten Nachbarn (vgl. „Tight binding"-Methode) bestimmt, so daß sich auch für amorphe Halbleiter ein Bänderschema ergibt. Wegen der fehlenden Translationssymmetrie ist allerdings die Definition eines $\vec{k}$-Vektors und damit einer Dispersion $E(\vec{k})$ nicht sinnvoll. Man benutzt deshalb meist Diagramme, die die Abhängigkeit der Zustandsdichte von der Energie darstellen (Abb. 9).

1.3.5 Optik

Gedämpfte ebene Welle im Medium

$$I = I_0 e^{-\alpha z} \tag{26}$$

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-\frac{1}{2}\alpha z} e^{i(nkz-\omega t)} \tag{27}$$

Einführung komplexer Brechungsindex

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\tilde{n}kz-\omega t)} \tag{28}$$

$$\tilde{n} = n + i\kappa \tag{29}$$

$$\alpha = 2\kappa k = 4\pi\frac{\kappa}{\lambda} \tag{30}$$

Beziehung zwischen ϵ und $\tilde{n}$:

$$\epsilon = \tilde{n}^2 = (n^2 - \kappa^2) + i(2n\kappa) = \epsilon_1 + i\epsilon_2 \tag{31}$$

$$\epsilon_1 = n^2 - \kappa^2 \tag{32}$$

$$\epsilon_2 = 2n\kappa \tag{33}$$

oder umgekehrt (vgl. Spezialfall Lorentz-Oszillator Abb.11)

$$n = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\sqrt{\epsilon_1^2+\epsilon_2^2}+\epsilon_1\right)} \tag{34}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\sqrt{\epsilon_1^2+\epsilon_2^2}-\epsilon_1\right)} \tag{35}$$

Die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten für eine ebene Welle an einer Grenzfläche werden durch die Fresnelschen Gleichungen beschrieben ($\mu = 1$):

$\vec{E}$ senkrecht zur Einfallsebene

$$\frac{E_0^t}{E_0} = \frac{2n_1\cos\alpha}{n_1\cos\alpha + \sqrt{n_2^2 - n_1^2\sin^2\alpha}} \tag{36}$$

$$\frac{E_0^r}{E_0} = \frac{n_1\cos\alpha - \sqrt{n_2^2 - n_1^2\sin^2\alpha}}{n_1\cos\alpha + \sqrt{n_2^2 - n_1^2\sin^2\alpha}} \tag{37}$$

$\vec{E}$ parallel zur Einfallsebene

$$\frac{E_0^t}{E_0} = \frac{2n_1 n_2\cos\alpha}{n_2^2\cos\alpha + n_1\sqrt{n_2^2 - n_1^2\sin^2\alpha}} \tag{38}$$

$$\frac{E_0^r}{E_0} = \frac{n_2^2 \cos\alpha - n_1\sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2\alpha}}{n_2^2 \cos\alpha + n_1\sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2\alpha}} \tag{39}$$

Für senkrechten Lichteinfall errechnet sich R bzw. T zu

$$R = \left|\frac{n-1}{n+1}\right|^2, T = 1 - R \tag{40}$$

Für ein Medium mit endlicher Dicke d und mehreren Schichten ergeben sich durch vielfache Reflexion und Interferenz schnell sehr unübersichtliche Formeln [3]. Für eine dicke Schicht liegen dabei die Interferenzen so dicht, daß sie mit dem verwendeten Spektrometer nicht mehr aufgelöst werden können. In diesem Fall ist nur ein Mittelwert zu beobachten.

Bei senkrechter Transmission ergibt sich bei Vernachlässigung von Vielfachreflexionen für ein Medium der Dicke d und Brechungsindex $\tilde{n} = n + i\kappa$ folgender Transmisionskoeffizient (Vakuum → Medium → Vakuum):

$$T \cong \frac{16(n^2+\kappa^2)}{[(n+1)^2+\kappa^2]^2} e^{-\frac{2\omega\kappa d}{c}} \tag{41}$$

Häufig wird in einem Transmissionsexperiment der Begriff optische Dichte (OD) benutzt. Sie ist definiert als:

$$OD = \ln\left(\frac{I_0}{I(d)}\right) \tag{42}$$

wobei I_0 die einfallende Intensität und $I(d)$ die transmittierte Intensität ist.

1.4 Vorbereitung auf den Versuchstag

Zur Verdeutlichung der Überlegungen zum Lorentzoszillator, soll im folgenden ein konkretes Beispiel betrachtet werden:

$$\begin{aligned} \hbar\omega_0 &= 4eV \\ \hbar\Gamma &= 0.25eV \\ \hbar^2\frac{4\pi N e^2}{m} &= 60(eV)^2 \end{aligned}$$

1. Diskutieren Sie ϵ_1 und ϵ_2 (Abb. 10). Wie verändert sich die Dielektrizitätskonstante, wenn man die Modellparameter des Lorentz-Oszillators

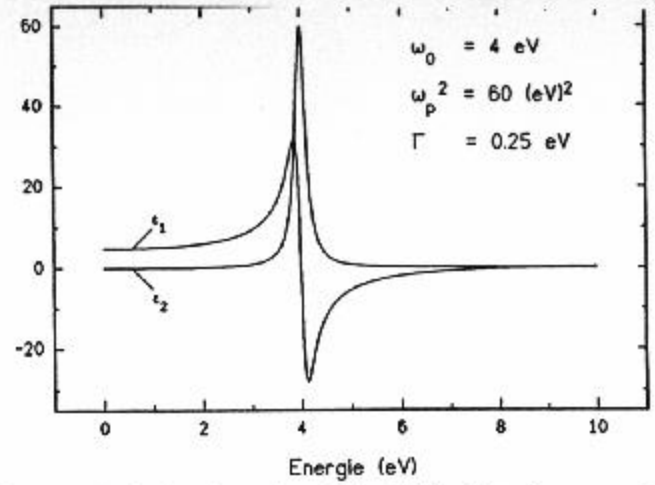

Abbildung 10: Realteil und Imaginärteil der Dielektrizitätskonstanten für einen Lorentzoszillator mit $\hbar\omega_0 = 4eV$, $\hbar\Gamma = 0.25eV$ und $\hbar\omega_p^2 = 60(eV)^2$.

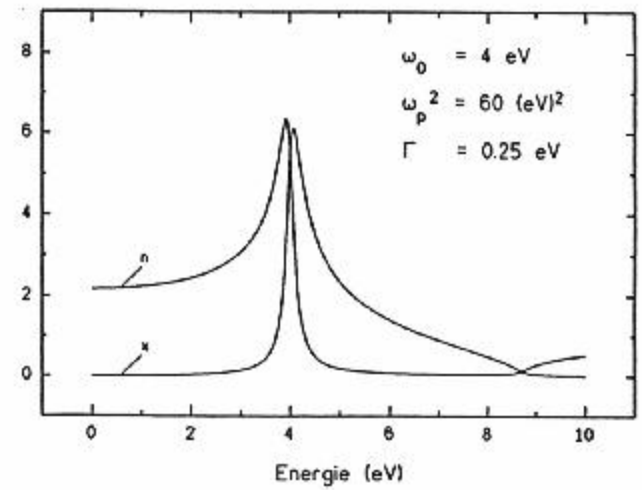

Abbildung 11: Realteil und Imaginärteil des Brechungsindexes für den oben beschriebenen Lorentzoszillator.

(Masse m, ...) verändert?
Wie ändern sich dabei Real- und Imaginärteil des Brechungsindizes n und κ (Abb. 11)?

2. Leiten Sie die Formel (41) ab und stellen Sie R und T graphisch dar.

3. Skizzieren Sie die Verläufe von $\epsilon_1, \epsilon_2, n, \kappa, R$ und T für ein Metall.

4. Wie muß Gl. (41) modifiziert werden, wenn die Dickeninterferenz berücksichtigt wird?

2 Experiment

Messen Sie die Reflexion von Cu, Au und a-Si und die Transmission aller Halbleiterproben. Zur Bestimmung der Reflexion bzw. Transmission als Funktion der Wellenlänge zerlegt man weißes Licht spektral mit einem Gitterspektrometer. Eine Siliziumphotodiode weist die direkte Intensität bzw. die von der Probe reflektierte oder transmittierte Intensität nach. Durch Drehen des Gitters kann der Spektralbereich vom Blauen bis ins nahe Infrarot durchgefahren werden. Im langwelligen Bereich muß das blaue Licht der 2. Beugungsordnung weggefiltert werden.

2.1 Aufbau des Experiments

Der Strahlengang und die Anordnung der Komponenten sind schematisch in Abb. 12 dargestellt. Hierbei bedeuten:

- LQ : Lichtquelle
- L : Linsen
- Monochromator:
  - SE,SA: Eintritts- und Austrittsspalt
  - FS: Fokussierende Spiegel
  - G: Gitter
- CH: Chopper
- PR: Probe
- D : Detektorsystem

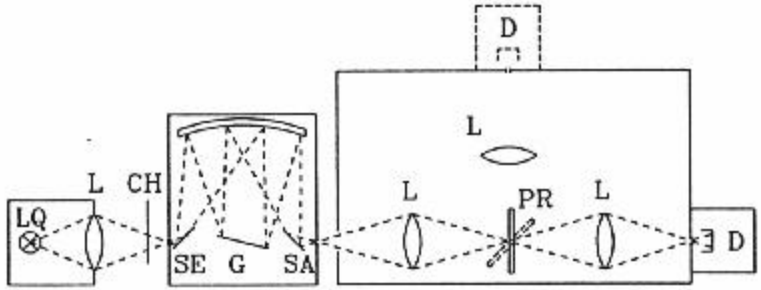

Abbildung 12: Experimenteller Aufbau.

2.2 Versuchsdurchführung

2.2.1 Eichung

Die Eichung des Monochromators soll mit Hilfe einer LED durchgeführt werden, deren Emmissionsspektrum bekannt ist. Dazu wird die Leuchtdiode unmittelbar vor den Eintrittsspalt gestellt. Die Modulation der Lichtquelle erfolgt deshalb nicht mit einem mechanischen Chopper sondern über die Modulation der angelegten Spannung mit einem Funktionsgenerator.

Im weiteren Verlauf soll direkt mit Wellenlängen gearbeitet werden. Das Meßprogramm kann eine lineare Eichung der Wellenlängenskala nach folgender Formel durchführen:

$$i(\lambda) = \frac{\mathrm{d}i}{\mathrm{d}\lambda}\lambda + i_0 \tag{43}$$

Berechnen Sie die beiden Konstanten und geben Sie diese in das Meßprogramm ein.

2.2.2 Filter

Da das Licht zweiter Ordung des kurzwelligen Bereichs das langwellige Licht in der ersten Ordung überlagert, ist es notwendig, im Bereich oberhalb von etwa

800 nm einen Filter einzusetzen. Bestimmen Sie mit Ihren gemessenen Daten die Spektrometerposition, bei der Sie den Filter einsetzen müssen.

2.2.3 Messung der Reflexion und Transmission

Die Intensität der Lichtquelle ist wellenlängenabhängig. Es muß deshalb zunächst die Intensität I_0 ohne Probe gemessen werden. Danach werden die reflektierten bzw transmittierten Intensitätskurven $I(\lambda)$ mit den Proben gemessen. Die Reflexion bzw Transmission erhält man durch punktweises Dividieren der beiden Spektren. Das Meßprogramm führt diese Normierung nach der Eingabe des Lichtquellenspektrums automatisch durch.

2.3 Auswertung

Bei der Diskussion der Daten sollen folgende Punkte erwähnt werden:

1. Ordnungsfilter, Eichung
   Erfüllt der verwendete Ordnungsfilter die an ihn gestellten Anforderungen? Welche Fehler können bei der Eichung auftreten?

2. a-Si
   Bestimmen Sie aus der Amplitude der Interferenzen den Brechungsindex n an einer Stelle, an der Absorption vernachlässigt werden kann. Leiten Sie dazu zuerst eine Formel für das Verhältnis der Intensitäten bei konstruktiver bzw. destruktiver Interferenz her,

   $$\frac{I_{\max}}{I_{\min}} = f(n, \kappa = 0); \tag{44}$$

   und lösen Sie diese dann nach n auf. Berücksichtigen Sie dabei, daß das amorphe Silizium nicht freitragend ist, sondern auf Glas abgeschieden wurde ($n_{\text{Glas}} = 1.4$).

   Aus den Positionen der Maxima bestimmen Sie $nd(\lambda)$, bzw. mit dem zuvor errechneten n den Verlauf von $n(\lambda)$ und d.

   Berechnen Sie $\alpha(E)$. Gehen Sie von einer frequenzunabhängigen Reflexion aus. Tragen Sie $\sqrt{\alpha E}$ über E auf und bestimmen Sie die optische Energielücke von a-Si!

   Was können Sie anhand der Interferenzen über den Brechungsindex aussagen?

3. GaAs, GaP, CdTe
   Diskutieren Sie die gemessenen Werte für die Energielücke im Zusammenhang mit Literaturwerten.

4. Cu und Au
   Vergleichen Sie Ihre Daten mit Literaturwerten. Diskutieren Sie Ihre Reflexionsmessungen im Zusammenhang mit der gerechneten Bandstruktur [9] [10]. Erklären Sie die Farbe der beiden Metalle.

Literatur

[1] F.Wooten, „Optical Properties of Solids", Academic Press, N.Y. 1972

[2] C. Kittel, „Einführung in die Festkörperphysik"

[3] M. Born, „Principles of Optics"

[4] F. Herman, Atomic Structure, in „An Atomic Approach to the Nature and Properties of Materials" (J.A. Pask, ed.) Wiley, N.Y. 1967

[5] M.L. Cohen and T.K. Bergstresser, Phys. Rev. **141**, 789 (1966)

[6] H.R. Philipp und H. Ehrenreich, Phys. Rev. **129**, 1550 (1963)

[7] M.L. Cohen in Proceedings of the 11th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors (Warschau 1972, Elsevier) S. 731

[8] M.D. Sturge, Phys. Rev. **127**, 768 (1962)

[9] H. Ehrenreich und H.R. Philipp, Phys. Rev. **128**, 1622 (1962)

[10] N. Egede Christensen und B.O. Seraphin, Phys. Rev. **B4**, 3321 (1971)

Safery Instructions for Fopra Experiment 14

In this experiment the students will investigate samples containing Gallium Arsenide (GaAs) and Gallium Phosphide (GaP). Avoid touching, inhalation and ingestion. In general: wash hands after leaving the lab.