

## Festkörperoptik-Optische Konstanten und Bandparameter

### Zielsetzung:

Die Zielsetzung dieses Versuches ist es, die Grundlagen der Wechselwirkung von elektromagnetischen Wellen mit Materie kennen zu lernen und zu verstehen, wie durch spektroskopische Transmissions- und Reflexionsexperimente Rückschlüsse auf die elektronische Bandstruktur des Festkörpers gezogen werden können.

### Experimentelle Ausstattung:

Der Messplatz ist mit einem kommerziellen Fourier-Spektrometer und Zubehör ausgestattet. Die Datenaufnahme erfolgt mit einem Computer, der die Spektrometereinheit steuert. Einen Einblick in den Messplatz mit seinen Komponenten gibt die Abb. 1.

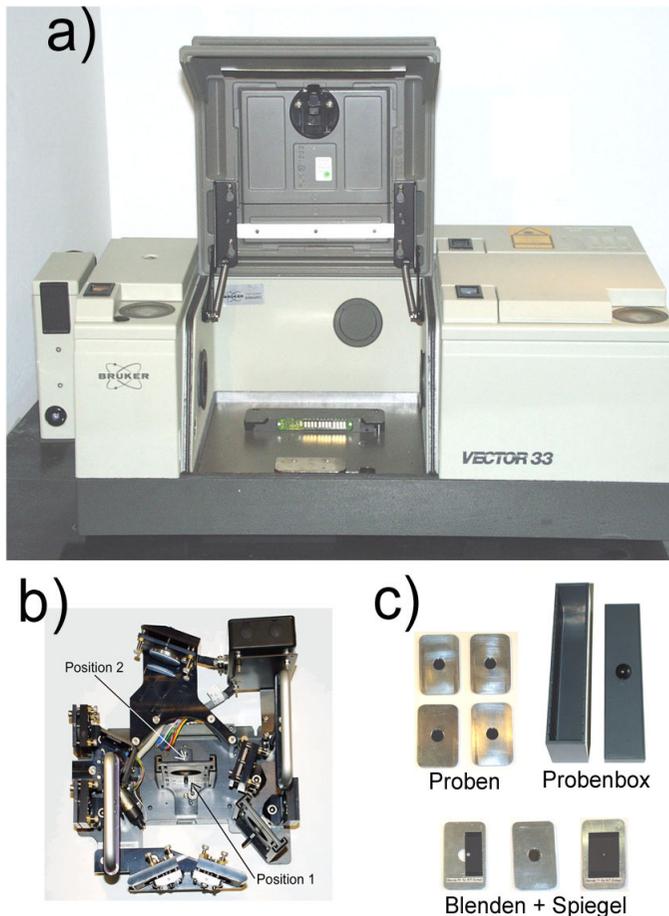


Abb. 1: Messplatz für spektroskopische Untersuchungen mit den Komponenten: a) „Rapid-Scan“ Fourier Transformationsspektrometer Vector 33 der Firma Bruker mit geöffneter Probenkammer. b) Transmissions-Reflexionseinheit (in Probenkammer einzusetzen) mit Aufnahmen 1 (vordere Position) bzw. 2 (hintere Position) für Proben, Blenden oder Spiegel. c) Probenbox mit vier Halbleiterproben, zwei Blenden und einem Metallspiegel.

Nummer	Material	Dicke
1	Galliumarsenid (GaAs) undotiert	470 $\mu\text{m}$
2	GaAs n-dotiert	440 $\mu\text{m}$
3	Silizium (Si) undotiert	530 $\mu\text{m}$
4	Si hochdotiert	
5	Blende für Transmission T1	
9	Blende für Reflexion R1	
13	Goldspiegel	

Weitere Komponenten des Messplatzes (nicht im Bild gezeigt):  
 1 Rack mit Personalcomputer zur Steuerung des Spektrometers  
 1 optischer Tisch

### Versuchsdurchführung:

Im Versuch werden die Transmission und die Reflexion mehrerer Halbleiterproben in einem Spektralbereich vom mittleren bis zum nahen Infrarot gemessen und analysiert, um effektive Bändermassen, Relaxationszeiten, Dotierkonzentrationen und Bandabstände zu ermitteln.

Die Experimente werden mit einem Computer-unterstützten kommerziellen Fourier-Spektrometer Vector 33 der Firma Bruker durchgeführt. Die Abb. 2 zeigt den Strahlengang im Spektrometer Vector 33.

Das Modell Vector 33 ist ein FT-Spektrometer vom „Rapid-Scan“-Typ, d.h. der bewegliche Spiegel fährt während einer Messung kontinuierlich mit definierter Geschwindigkeit von seiner Ausgangs- bis zu der eingestellten Endstellung durch. Dadurch wird im Interferometer der optische Wegunterschied der zwei Teilstrahlen kontinuierlich variiert. Andere Spektrometer arbeiten zum Teil im „Step-Scan“-Modus. Hier wird das Interferogramm punktuell aufgezeichnet, indem der bewegliche Spiegel an eine feste Position fährt, wo dann der Interferogrammpeak aufgezeichnet wird. Diese Vorgehensweise erfordert allerdings einen Zerhacker (Chopper) für das Licht und den Einsatz eines Lock-in Verstärkers. Die „Rapid-Scan“-Methode ist im Vergleich vorteilhaft, da sie die Wiedergabe eines Spektrums in Echtzeit erlaubt. Zur Funktionsweise eines Fourier-Spektrometers sei auf die Anleitung *Aufbau und Funktionsweise eines Fourier-Spektrometers* verwiesen.

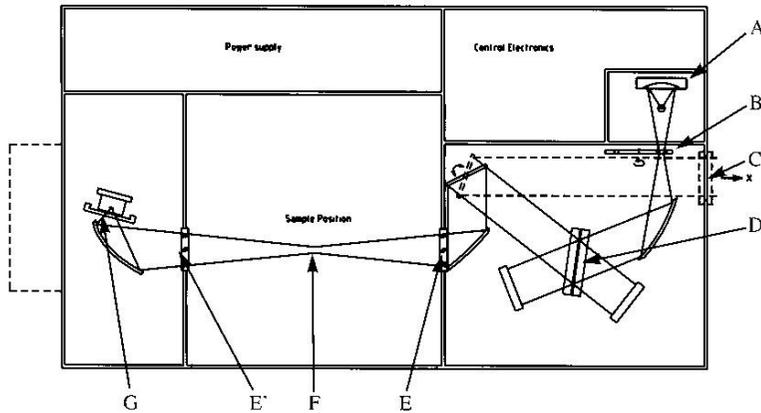


Figure 31: Optical Path (—) for Routine Operation and Using Exit Port (---)

	Component		Component
A	IR-Source	E	Chamber Window
B	Aperture/Film Wheel	E'	Chamber Window
C	Exit Port	F	Sample Holder
D	Beamsplitter	G	Detector

Abb. 2: Strahlengang im Spektrometer Vector 33. Das Licht einer Strahlenquelle A wird durch ein Zweistrahlinterferometer vom Michelson-Typ geführt und in die Probenkammer fokussiert. An die Probenkammer schließt die Detektorkammer an.

Der Spektralbereich eines FT-Spektrometers hängt wesentlich vom Strahlteiler (beamsplitter), der Quelle (light source) und dem Detektor ab. In der derzeitigen Ausstattung hat das Spektrometer nur einen pyroelektrischen (DTGS) Detektor, der bei Raumtemperatur arbeitet. Gekühlte Detektoren haben meist eine deutlich höhere Empfindlichkeit, der DTGS-Detektor kann aber in einem weiten Spektralbereich vom fernen bis zum nahen Infrarot eingesetzt werden. Durch den Wechsel des Strahlteilers (Quarz oder KBr) und der Quelle (Global-Stab oder Wolfram-Lampe) kann der gewünschte Spektralbereich eingestellt werden. Die Kombination Global-KBr (GK) deckt einen Wellenzahlbereich  $300-8.000\text{ cm}^{-1}$  und die Kombination Wolfram(Tungsten)-Quarz (TQ) einen Bereich  $1.000-15.000\text{ cm}^{-1}$  ab.

Da die spektrale Antwort eines FT-Spektrometers stark von seinen Komponenten (Lichtquelle, Strahlteiler und Spiegel) abhängt, werden in der Praxis meist normierte Messungen durchgeführt, d.h. es wird nicht nur das Proben- (sample S) sondern auch ein geeignetes Referenzspektrum (reference R) aufgenommen. Der Quotient  $S/R$  bildet das normierte

Spektrum. Im Falle der Reflexion verwenden wir als Referenz einen Metallspiegel aus Gold, bei der Transmission wird die Normierung mit Hilfe einer Messung ohne Probe (offener Strahlengang mit Blende) durchgeführt.

Die Abb. 3 zeigt den Strahlenverlauf in der Transmissions-Reflexionseinheit (TR-Einheit). Diese Einheit wird in den Probenraum eingesetzt und erlaubt die Messung der Transmission und der Reflexion, ohne dass Umbauarbeiten notwendig sind. Durch einen motorisierten Spiegel in der Einheit wird zwischen Transmissions- und Reflexionsmessung umgeschaltet. Der Motor wird über die Steuersoftware *OPUS* des Spektrometers angesprochen. Zur Steuerung des Spektrometers über *OPUS* sei auf die Kurzanleitung *Spektrometersteuerung mit OPUS* verwiesen. In die Position 1 der TR-Einheit wird bei Transmissionsmessungen (Reflexionsmessungen) die Probe (Blende) und in Position 2 die Blende (Probe bzw. Spiegel) eingesetzt. Bitte die Probe immer so einsetzen, dass eine Beschädigung oder ein Abscheren der Probe vom Träger vermieden wird.

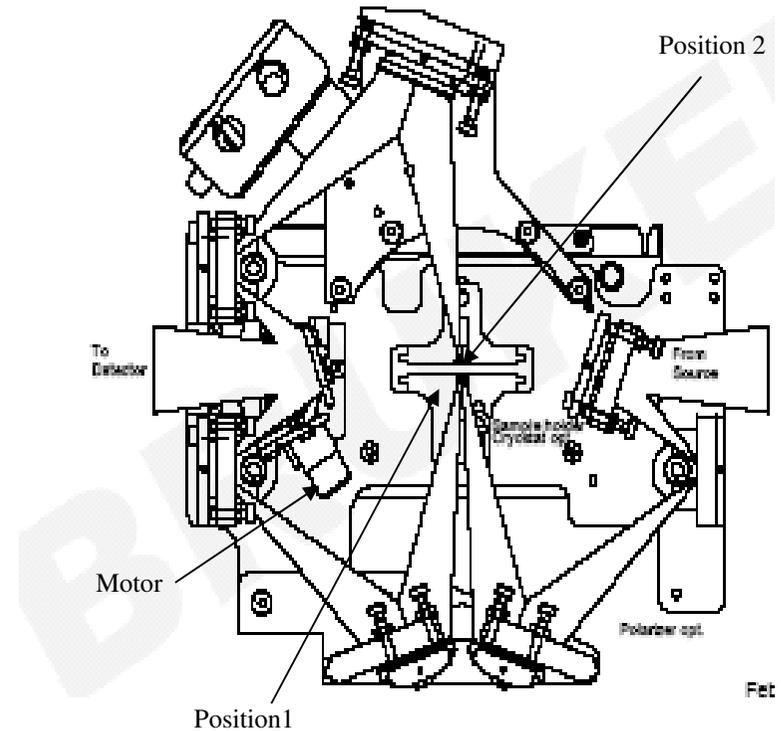


Abb. 3: Strahlenverlauf in der TR-Einheit. Der Umschaltspiegel (Auswahl Transmission oder Reflexion) wird über den Motor bewegt.

Bei der Messung von Materialien mit hohem Brechungsindex ist zu beachten, dass es durch Brechung zu einer Verschiebung des Fokus im Strahlverlauf und zur Rückreflexion von Strahlung in das Interferometer kommen kann. Durch die Verschiebung des Fokus wird der Strahl nicht mehr optimal auf den Detektor abgebildet, so dass dadurch verursachte Signaländerungen die Präzision der Normierung beeinträchtigen. Die normierten Spektren geben dann nicht mehr die wahre Transmission oder Reflexion wieder. Durch Reflexion in das Interferometer durchläuft eingekoppelte Strahlung dieses zweimal, so dass es zu einer Doppelmodulation kommt. Nach der Fourier-Transformation tauchen diese Strahlungsanteile als Artefakte bei der doppelten Energie auf. So können spektrale Anteile in Frequenzbereichen entstehen, wo sie aufgrund der Eigenschaften der Proben nicht zu erwarten sind. Der Einfluss der Doppelmodulation kann durch den Einsatz geeigneter Blenden, die die Rückreflexion weitestgehend unterdrücken, reduziert werden. Bitte beachten Sie, dass die Justierung der TR-Einheit und die Blenden aufeinander abgestimmt sind. Nehmen Sie deshalb keine Änderungen an der Justierung der TR-Einheit und den Blenden vor.

### **Aufgabenstellung:**

1. Messen Sie mit hoher Auflösung ( $0,3 \text{ cm}^{-1}$ ) bei offenem Strahlengang (freier Probenraum) und der Quelle-Strahlteiler-Kombination GK (Wellenzahlbereich von  $300\text{-}8.000 \text{ cm}^{-1}$ ) die Gasabsorption der Umgebungsluft. Identifizieren Sie die Spektralbereiche starker Gasabsorption.
2. Messen Sie mit geringerer Auflösung ( $8 \text{ cm}^{-1}$ ) und offenem Strahlengang in der Kombination GK (Wellenzahlbereich  $300\text{-}8.000 \text{ cm}^{-1}$ ) Proben- (Luft) und Referenzspektren (Luft) für  $N = 10, 50$  und  $100$  Spiegeldurchläufe (Scans). Überzeugen Sie sich, ob das Signal-Rausch-Verhältnis der normierten Spektren sich entsprechend  $\sqrt{N}$  verbessert. Ist mit zunehmendem  $N$  generell immer ein besseres Signal-Rausch-Verhältnis zu erwarten?
3. Nehmen Sie die normierte Reflexion im Wellenzahlbereich  $300\text{-}8.000 \text{ cm}^{-1}$  (Kombination GK) mit Auflösung  $0,3 \text{ cm}^{-1}$  für die Proben 1 (GaAs undotiert), 2 (GaAs dotiert) und 3 (Si undotiert) auf. Bestimmen Sie aus dem Abstand der Vielfachinterferenzen die Dielektrizitätskonstanten und die Brechzahlen für die Wellenzahlen  $500, 1000, 1500, \dots$  etc. Mitteln Sie über mindestens  $50$  Perioden.
4. Messen Sie die normierten Reflexionen und Transmissionen im Wellenzahlbereich  $300\text{-}15.000 \text{ cm}^{-1}$  für alle vier Halbleiterproben mit einer Auflösung von  $8 \text{ cm}^{-1}$ . Führen Sie die Messungen zunächst in der Kombination GK ( $300\text{-}8.000 \text{ cm}^{-1}$ ) und dann in der Kombination TQ ( $1.000\text{-}15.000 \text{ cm}^{-1}$ ) durch. Fügen Sie anschließend beide Spektren an einer geeigneten Position zusammen. Für die hochdotierte Si-Probe kann nur die normierte Reflexion bestimmt werden. Warum?
5. Bestimmen Sie aus den experimentellen Spektren durch Vergleich mit theoretisch zu erwarteten Transmissionen  $T(n, \kappa)$  und Reflexionen  $R(n, \kappa)$  für eine planparallele Schicht die Brechzahlen  $n$  und die Extinktionskoeffizienten  $\kappa$  für die Proben 1 (GaAs undotiert), 2 (GaAs dotiert) und 3 (Si undotiert). Bestimmen Sie auch den Absorptionskoeffizienten.
6. Bestimmen Sie die Bandlücken und die Impulsmatrixelemente für die dotierte und undotierte GaAs Probe. Welche Einflüsse und Einschränkungen bestimmen die Auswertung der Bandlücke?
7. Bestimmen Sie die Bandlücke und die charakteristische Phononenfrequenz für die undotierte Si Probe.
8. Diskutieren Sie im Rahmen des Drude-Modells den Beitrag der freien Ladungsträger zur Reflexion für ein Metall und einen Halbleiter. Vergleichen Sie die Reflexion in Abhängigkeit von der Energie (Wellenzahl) für die Halbraumgeometrie. Variieren Sie die Stromrelaxationszeit.
9. Fitten Sie für die dotierten GaAs und Si Proben den Beitrag der Intradbandabsorption, im Rahmen des Drude-Modells und bestimmen Sie daraus die Leitfähigkeitsmassen, die Stromrelaxationszeiten und die Dotierkonzentrationen.