

Material zum Versuch Festkörperoptik

I.	Optik von Schichtsystemen	2
	1. Maxwell-Gleichungen und Materialgleichungen	2
	2. Wellengleichung und Wellendispersion	3
	3. Komplexe Dielektrizitätsfunktion und komplexer Brechungsindex	4
	4. Halbraumgeometrie - Transmission und Reflexion	4
	5. Planparallele Schicht - Betrachtung der Wellenintensitäten	7
	6. Planparallele Schicht – Einbeziehung der Wellenphasen	9
II.	Absorption und Dispersion	12
	1. Der Lorentz Oszillator	12
	2. Kramers-Kronig-Relationen	14
	3. Die dielektrische Funktion: Beispiele	14
	3.1 Absorption freier Ladungsträger – Drude Modell	14
	3.2 Gitterpolarisation	16
	3.3 Interbandanregungen	17
	3.4 Übergänge zwischen Störstellen und Bändern und Störstellen	20
	3.5 Urbach tail	22
	3.6 Exzitonen	23
III.	Aufbau und Funktionsweise eines Fourier-Spektrometers	25
	1. Das Grundprinzip der Fourier-Transformationsspektroskopie	25
	2. Das Fourier-Transformationsspektrometer Vector 33	29
	3. Zu beachtende Besonderheiten bei der Messung optischer Konstanten	31
IV.	Literaturliste	33
V.	Messwertanalyse mit Mathematica	35
	1. Direkter Halbleiter	35
	2. Indirekter Halbleiter	79
	3. Indirekter hochdotierter Halbleiter	98

I. Optik von Schichtsystemen

In dem Versuch *Festkörperoptik: Optische Konstanten und Bandparameter* werden die Transmission und die Reflexion von planparallelen Schichten verschiedener Halbleitermaterialien vom infraroten- bis zum optischen Wellenlängenbereich untersucht, um Informationen über die optischen Konstanten und die Parameter der elektronischen Bandstruktur zu gewinnen. Im Folgenden wollen wir diskutieren, wie die optischen Konstanten die Transmission und die Reflexion bestimmen und wie sie von den Parametern der Bandstruktur abhängen. Grundsätzlich geht es hier um Fragestellungen, die die Wechselwirkungen elektromagnetischer Strahlung mit Materie betreffen. Die Grundlage aller Betrachtungen, die im Zusammenhang mit der Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Materie stehen, sind die Maxwell-Gleichungen.

1. Maxwell-Gleichungen und Materialgleichungen

Die Maxwell-Gleichungen werden durch dielektrische Verschiebung \mathbf{D} , magnetische Induktion \mathbf{B} , elektrische \mathbf{E} und magnetische Feldstärke \mathbf{H} bestimmt. Im Folgenden sind die vier Fundamentalgleichungen und die Einheiten der Größen in MKSA-Notation angegeben.

$$\nabla \mathbf{D} = \rho \quad (\mathbf{D}) = \text{C/m}^2; \rho = \text{Raumladungsdichte} (\rho) = \text{C/m}^3 \quad (1.1a)$$

$$\nabla \mathbf{B} = 0 \quad (\mathbf{B}) = \text{T} \quad (1.1b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t \quad (\mathbf{E}) = \text{V/m} \quad (1.1c)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \partial \mathbf{D} / \partial t \quad (\mathbf{H}) = \text{A/m}; \mathbf{j} = \text{Stromdichte}, (j) = \text{A/m}^2; \partial \mathbf{D} / \partial t = \text{Verschiebungsstrom}, (\partial \mathbf{D} / \partial t) = \text{A/m}^2 \quad (1.1d)$$

Elektrische bzw. magnetische Felder können Ladungen im Festkörper verschieben bzw. Ströme induzieren, so dass eine Polarisation

$$\mathbf{P}(\mathbf{E}) = \chi_{\text{el}} \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (1.2)$$

bzw. eine Magnetisierung

$$\mathbf{M}(\mathbf{H}) = \chi_{\text{mag}} \mathbf{H} \quad (1.3)$$

auftritt. Im allgemeinsten Fall sind die elektrische χ_{el} und magnetische Suszeptibilität χ_{mag} Tensoren 2.ten Grades mit maximal 6 unabhängigen Komponenten. Die Polarisation und die Magnetisierung beeinflussen die dielektrische Verschiebung bzw. die magnetische Induktion und bedingen die Materialgleichungen.

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0 (1 + \chi_{\text{el}}) \mathbf{E} = \boldsymbol{\epsilon} \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (1.4)$$

bzw.

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu_0 (1 + \chi_{\text{mag}}) \mathbf{H} = \boldsymbol{\mu} \mu_0 \mathbf{H}. \quad (1.5)$$

Die Gleichung (1.4) definiert die dielektrische Funktion ϵ und Gleichung (1.5) die Permeabilität μ . ϵ , χ_{el} , χ_{mag} und μ sind makroskopische Hilfsgrößen, da sie selbst von makroskopischen Größen abhängen. Sie können aufgrund von Plausibilitätsüberlegungen eingeführt werden, sie müssen aber zu mikroskopischen Größen in Relation gestellt werden, um Einblick in die physikalischen Grundlagen der Problemstellung gewinnen zu können.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit werden wir die folgenden Betrachtungen auf neutrale ($\rho = 0$) Medien reduziert, die sich in ihren elektrischen Eigenschaften isotrop verhalten. Wir setzen weiterhin voraus, dass es sich um nicht magnetische ($\chi_{\text{mag}} = 0$) Festkörper handelt, und die Stromdichte durch das ohmsche Gesetz

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} \quad (1.6)$$

mit einer skalaren Leitfähigkeit σ beschrieben wird. Unter diesen Voraussetzungen lassen sich die Maxwell-Gleichungen dann auf die Form

$$\nabla \mathbf{E} = 0 \quad (1.7a)$$

$$\nabla \mathbf{H} = 0 \quad (1.7b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \partial \mathbf{H} / \partial t \quad (1.7c)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \sigma \mathbf{E} + \epsilon \epsilon_0 \partial \mathbf{E} / \partial t \quad (1.7d)$$

bringen.

2. Wellengleichung und Wellendispersion

Die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in Materie wird durch eine entsprechende Wellengleichung beschrieben, die wir durch geeignete Verknüpfungen der Gleichungen (1.7a-d) gewinnen können. Durch Differenzieren von Gleichung (1.7d) nach der Zeit und Einsetzen von Gleichung (1.7c) in (1.7d) erhält man

$$\mu_0 [\sigma \partial \mathbf{E} / \partial t + \epsilon \epsilon_0 \partial^2 \mathbf{E} / \partial t^2] = \Delta \mathbf{E}. \quad (1.8)$$

Analoge Betrachtungen ergeben für die magnetische Feldkomponente der Welle

$$\mu_0 [\sigma \partial \mathbf{H} / \partial t + \epsilon \epsilon_0 \partial^2 \mathbf{H} / \partial t^2] = \Delta \mathbf{H}. \quad (1.9)$$

Die Gleichungen (1.8) und (1.9) bezeichnet man auch als Telegraphengleichungen, wobei die den ersten Ableitungen proportionalen Terme Dämpfungsglieder sind. Die Telegraphengleichungen beschreiben also die Ausbreitung gedämpfter elektromagnetischer Wellen in Materie. An dieser Stelle sei angemerkt, dass σ und ϵ im allgemeinen Fall komplexe Größen sind, so dass in gewissem Grad immer mit einer Wellendämpfung zu rechnen ist. Im Falle von Isolatoren gilt $\sigma = 0$, da keine freien Ladungsträger existieren. Für Metalle ist der Beitrag der freien Ladungsträger $\sigma \neq 0$, und wir können den Beitrag gebundener Ladungsträger bzw. des Gitters über $\epsilon = \epsilon_g$ beschreiben.

Im Folgenden wollen wir den Zusammenhang zwischen der Frequenz ω und der Wellenlänge λ bzw. der Wellenzahl $q = 2\pi/\lambda$ untersuchen. Wir gehen von einer ebenen elektromagneti-

schen Welle mit den Feldkomponenten $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t)}$ und $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t)}$ aus. Durch Einsetzen der Feldkomponenten in die Telegraphengleichungen erhalten wir die Dispersionsbeziehung

$$\mathbf{q}^2 = \omega^2 [\epsilon_g + i\sigma/\omega\epsilon_0]/c^2, \quad (1.10)$$

wobei $c = 1/(\epsilon_0\mu_0)^{1/2}$ die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist. Die Amplituden \mathbf{E}_0 und \mathbf{H}_0 sind nicht unabhängig voneinander, und es gilt z.B. im Vakuum nach Gleichung (1.7c) $\mathbf{E}_0 = \mathbf{H}_0/(\mu_0 c)$.

3. Komplexe Dielektrizitätsfunktion und komplexer Brechungsindex

In Gleichung (1.10) wird eine Unterscheidung zwischen den Beiträgen freier und gebundener Ladungsträger und des Gitters vorgenommen. Diese Aufspaltung ist nicht wirklich notwendig und kann durch Definition einer allgemeinen komplexen Dielektrizitätsfunktion $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) - i\epsilon''(\omega)$, die den Beitrag der gebundenen und freien Ladungsträger beschreibt, zusammengefasst werden.

$$\mathbf{q}^2 = \omega^2 \epsilon(\omega)/c^2 = \omega^2 [\epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)]/c^2 \quad (1.11)$$

Durch Einführung des komplexen Brechungsindex $N(\omega) = (\epsilon(\omega))^{1/2} = n + i\kappa$ kann Gleichung (1.11) linearisiert werden.

$$\mathbf{q} = \omega N(\omega)/c = \omega [n(\omega) + i\kappa(\omega)]/c \quad (1.12)$$

Die Größen $n(\omega)$ und $\kappa(\omega)$ werden als Brechzahl bzw. als Extinktionskoeffizient bezeichnet. Da sowohl die komplexe Dielektrizitätsfunktion als auch der komplexe Brechungsindex bei der Beschreibung optischer Phänomene eingesetzt werden, ist es häufiger notwendig, die Real- und Imaginärteile der Größen ineinander umzurechnen. Bei Kenntnis von n und κ gilt

$$\epsilon'(\omega) = n^2 - \kappa^2 \quad (1.13)$$

und

$$\epsilon''(\omega) = 2n\kappa. \quad (1.14)$$

Sind ϵ' und ϵ'' bekannt, folgt die Brechzahl aus

$$n = \text{Re}[\epsilon(\omega)^{1/2}] = \{[\epsilon' + (\epsilon'^2 + \epsilon''^2)^{1/2}]/2\}^{1/2} \quad (1.15)$$

und der Extinktionskoeffizient aus

$$\kappa = \text{Im}[\epsilon(\omega)^{1/2}] = \{[-\epsilon' + (\epsilon'^2 + \epsilon''^2)^{1/2}]/2\}^{1/2}. \quad (1.16)$$

4. Die Halbraumgeometrie - Transmission und Reflexion

Der sprunghafte Übergang von einem Medium 1 mit Brechungsindex N_1 in ein Medium 2 mit Brechungsindex N_2 ist als Halbraumgeometrie bekannt. Das Verständnis für die Wellenausbreitung von dem einen in das andere Medium ist fundamental für die Interpretation auch komplexerer Geometrien, wo mehr als eine Grenzfläche eine Rolle spielen. Im Folgenden

wollen wir die Verhältnisse für den Wellenübergang vom Vakuum in einen homogenen und isotropen Festkörper untersuchen (siehe Abb. 1.1).

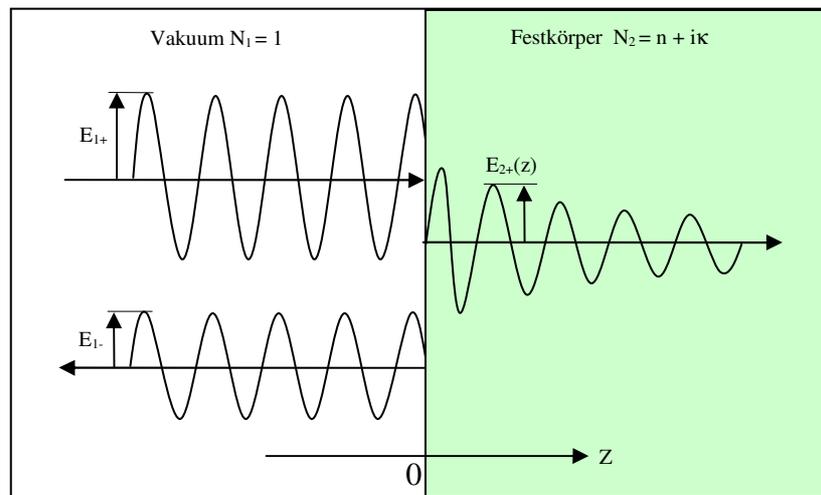


Abb.1.1: Der linke Halbraum ($z < 0$) sei Vakuum (Brechungsindex $N_1 = 1$), der rechte Halbraum ($z > 0$) ist mit einem isotropen und homogenen Medium (Brechungsindex $N_2 = n + ik$) gefüllt. Die Festkörperoberfläche falle mit der (x,y) -Ebene zusammen. Eine in der x - y -Ebene linear polarisierte elektromagnetische Welle, die sich in positiver z -Richtung ausbreitet, fällt senkrecht auf die Festkörperoberfläche ein, und es entsteht eine reflektierte und eine in das Material eindringende Welle.

Wir wollen annehmen, dass der elektrische Feldvektor \mathbf{E} in x -Richtung und der magnetische Feldvektor in y -Richtung schwingt. Außerdem benutzen wir die Notation $\mathbf{E}_{m\pm}$ bzw. $\mathbf{H}_{m\pm}$ für die Feldkomponenten, wobei m das Medium und \pm die Ausbreitungsrichtung der Welle angibt. Für die in positiver z -Richtung einlaufende Welle gilt damit für die elektrische

$$\mathbf{E}_{1+}(\omega, z) = (E_{1+}, 0, 0)e^{-i\omega(t - z/c)} \quad (1.17a)$$

und magnetische Feldkomponente

$$\mathbf{H}_{1+}(\omega, z) = (0, H_{1+}, 0)e^{-i\omega(t - z/c)}. \quad (1.17b)$$

Für die in negativer z -Richtung laufende reflektierte Welle erhalten wir

$$\mathbf{E}_{1-}(\omega, z) = (E_{1-}, 0, 0)e^{-i\omega(t + z/c)} \quad (1.18a)$$

für das elektrische und

$$\mathbf{H}_{1-}(\omega, z) = (0, H_{1-}, 0)e^{-i\omega(t + z/c)} \quad (1.18b)$$

für das magnetische Feld

Die in den Festkörper eindringende Welle hat die Komponenten

$$\mathbf{E}_{2+}(\omega, z) = (E_{2+}, 0, 0)e^{-i\omega(t - z N_2/c)} = (E_{2+}, 0, 0)e^{-k\omega z/c} e^{-i\omega(t - z/c)} \quad (1.19a)$$

und

$$\mathbf{H}_{2+}(\omega, z) = (0, H_{2+}, 0)e^{-i\omega(t - z N_2/c)} = (0, H_{2+}, 0)e^{-\kappa\omega z/c} e^{-i\omega(t - z n/c)}. \quad (1.19b)$$

Die Amplituden E_{1-} , H_{1-} , E_{2+} , und H_{2+} sind zunächst noch unbekannt, können aber aus der Forderung nach Stetigkeit der Tangentialkomponenten der Felder bei $z = 0$ berechnet werden. Aus der Stetigkeit der Tangentialkomponenten ergeben sich die Amplitudengleichungen

$$E_{1+} = E_{1-} + E_{2+} \quad (1.20)$$

und

$$H_{1+} = H_{1-} + H_{2+}. \quad (1.21)$$

Mit Hilfe der Maxwell-Gleichung (1.7c) kann der Zusammenhang zwischen elektrischer und magnetischer Feldkomponente $H_y = E_x N / (c\mu_0)$ hergestellt werden, und man erhält für das Medium 1

$$H_{1\pm} = \pm E_{1\pm} / (\mu_0 c) \quad (1.22)$$

bzw. Medium 2

$$H_{2+} = \pm N_2 E_{2+} / (\mu_0 c). \quad (1.23)$$

Aus den Gleichungen (1.20-1.23) können die Amplituden der reflektierten und in das Material eindringenden Welle in Abhängigkeit von der Amplitude der einlaufenden Welle ermittelt werden. Eine einfache Rechnung ergibt für den Amplitudenreflexionskoeffizienten

$$r = E_{1-} / E_{1+} = (1 - N_2) / (1 + N_2) \quad (1.24)$$

und für den Amplitudentransmissionskoeffizienten am Ort $z = 0$

$$t = E_{2+} / E_{1+} = 2 / (1 + N_2). \quad (1.25)$$

Die Amplitudenkoeffizienten können nicht in einfacher Weise experimentell bestimmt werden. Leicht zu messen sind hingegen die Wellenintensitäten

$$I = (\epsilon\epsilon_0/\mu_0)^{1/2} E^2/2 = N(\epsilon_0/\mu_0)^{1/2} E^2/2, \quad (1.26)$$

d.h. die Amplitudenquadrate. Für den Intensitätsreflexionskoeffizient gilt deshalb

$$R = |(1 - N_2) / (1 + N_2)|^2. \quad (1.27)$$

Die in das Material eindringende Welle ist nach den Gleichungen (1.19) eine gedämpfte Welle. Die Wellenamplitude ist hier eine Funktion des Ortes z . Der Transmissionskoeffizient für die Amplituden am Ort z ergibt sich damit zu

$$t(z) = \frac{2}{1 + N_2} e^{-\frac{\kappa\omega}{c}z} \quad (1.28)$$

Unter Beachtung von Gleichung (1.26) erhalten wir die am Ort z gegebene transmittierte Intensität

$$T(z) = \frac{4|N_2|}{|1 + N_2|^2} e^{-\frac{2\omega\kappa}{c}z} \quad (1.29)$$

Mit der Definition des Absorptionskoeffizienten

$$\beta = 2\kappa\omega/c \quad (1.30)$$

kann die Gleichung (1.28) auch in der Form

$$T(z) = \frac{4|N_2|}{|1 + N_2|^2} e^{-\beta z} \quad (1.31)$$

geschrieben werden.

5. Planparallele Schicht – Betrachtung der Wellenintensitäten

Eine planparallele dielektrische Schicht, die in einem Medium (Umgebung, häufig Atmosphäre) eingebettet ist, entspricht meist der üblichen experimentellen Messgeometrie (siehe Abb. 1.2). Fällt eine elektromagnetische Welle von einer Seite ein, wird ein Anteil der Welle R_1 reflektiert und ein Teil T_1 durchgelassen, sofern die Probe bei der relevanten Wellenlänge transparent ist. Durch Vielfachreflexionen in der Schicht ergeben sich weitere Anteile zur Reflexion R_2, R_3, \dots und Transmission T_2, T_3, \dots . Die gesamte Reflexion R bzw. Transmission T ist die Summe aller einzelnen Anteile, wobei die Summation unter Beachtung der relativen Phasenlage der einzelnen Strahlen durchzuführen ist. Ist die Auflösung im Experiment hinreichend klein, kann bei der Summation die Phasenlage der Strahlen vernachlässigt und mit den Intensitäten der Strahlen gearbeitet werden. Im Folgenden wollen wir die Transmission und Reflexion einer planparallelen Schicht unter dieser Voraussetzung ableiten.

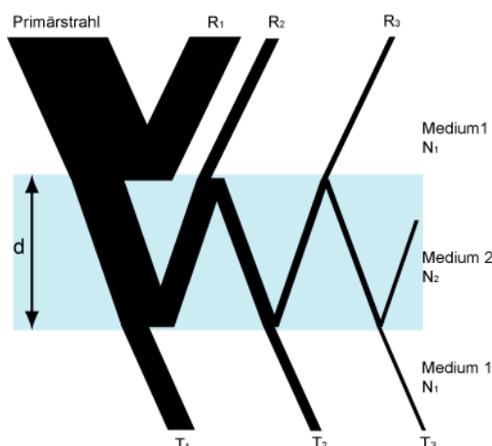


Abb. 1.2: Schematisches Bild einer planparallelen Schicht (Medium 2, Brechungsindex N_2 , Dicke d), die in einem Medium 1 (Brechungsindex N_1) eingebettet ist mit dem Strahlverlauf einer einfallenden elektromagnetischen Welle (Primärstrahl). Mit R_1, R_2, R_3, \dots und T_1, T_2, T_3, \dots sind Reflexions- bzw. Transmissionsanteile gekennzeichnet. T_1 und R_1 sind die direkt transmittiert bzw. reflektierten Anteile. Die Anteile R_n (T_n) mit $n \geq 2$ sind durch Mehrfachreflexionen in der Schicht bedingt.

Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurde in Abb. 1.2 schräge Inzidenz des Primärstrahls gewählt. Die folgenden Betrachtungen gelten allerdings nur für senkrechten Einfall des Primärstrahls. Das Medium 1 sei Luft (Brechungsindex $N_1 = 1$), das Medium 2 sei eine dielektrische Schicht mit komplexem Brechungsindex $N_2 = n + i\kappa$. Ohne Berücksichtigung der Phasenlage der Strahlen gilt mit

$$R_1 = \left| \frac{N_2 - 1}{N_2 + 1} \right|^2 \quad (1.32)$$

$$\begin{aligned} R_2 &= \underbrace{(1 - R_1)}_{\text{Reflexionsverlust der vorderen Grenzfläche}} \underbrace{(e^{-\beta d})}_{\text{Absorption in der Schicht}} \underbrace{(R_1)}_{\text{Reflexion der hinteren Grenzfläche}} \underbrace{(e^{-\beta d})}_{\text{Absorption in der Schicht}} \underbrace{(1 - R_1)}_{\text{Reflexionsverlust der vorderen Grenzfläche}} \\ &= R_1 (1 - R_1)^2 e^{-2\beta d} \end{aligned} \quad (1.33)$$

bzw.

$$R_{n+1} = R_n (1 - R_1)^2 e^{-2\beta d} \quad . \quad (1.34)$$

Aus Gleichung (1.34) folgt für die Gesamtreflexion (geometrische Reihe)

$$R = \sum_{n=1}^{\infty} R_n = R_1 \frac{1 + (1 - 2R_1)e^{-2\beta d}}{1 - R_1^2 e^{-2\beta d}} \quad (1.35)$$

Für die Anteile der Transmission erhält man

$$T_1 = \underbrace{(1 - R_1)}_{\text{Reflexionsverlust vordere Grenzfläche}} \underbrace{(e^{-\beta d})}_{\text{Absorption in der Schicht}} \underbrace{(1 - R_1)}_{\text{Reflexionsverlust hintere Grenzfläche}} \quad (1.36)$$

und

$$\begin{aligned} T_2 &= \underbrace{(1 - R_1)}_{\text{Reflexionsverlust vordere Grenzfläche}} \underbrace{(e^{-\beta d})}_{\text{Absorption in der Schicht}} \underbrace{(R_1)}_{\text{Reflexion an hinterer Grenzfläche}} \underbrace{(e^{-\beta d})}_{\text{Absorption in der Schicht}} \underbrace{(R_1)}_{\text{Reflexion an vorderer Grenzfläche}} \underbrace{(e^{-\beta d})}_{\text{Absorption in der Schicht}} \underbrace{(1 - R_1)}_{\text{Reflexionsverlust hintere Grenzfläche}} \\ &= T_1 (R_1 e^{-\beta d})^2 \end{aligned} \quad (1.37)$$

bzw.

$$T_{n+1} = T_n (R_1 e^{-\beta d})^2 \quad . \quad (1.38)$$

Addiert man die einzelnen Transmissionsanteile (geometrische Reihe) ergibt sich

$$T = \sum_{n=1}^{\infty} T_n = \frac{(1 - R_1)^2 e^{-\beta d}}{1 - R_1^2 e^{-2\beta d}}. \quad (1.39)$$

Aus Gründen der Energieerhaltung muss die Summe aus Reflexion, Transmission und Absorption (A) die Gleichung

$$T + R + A = 1 \quad (1.40)$$

erfüllen. Wenn die Transmission der Schicht verschwindet (starke Absorption) gilt

$$R = R_1 \quad (1.41)$$

und

$$A = 1 - R_1. \quad (1.42)$$

Bei den bisherigen Überlegungen sind wir davon ausgegangen, dass die Reflexionseigenschaften der vorderen und hinteren Grenzfläche identische sind. In einem realen Experiment wird diese Bedingung z.B. wegen Streuung aufgrund unterschiedlicher Rauigkeiten der Oberflächen nur näherungsweise oder gar nicht erfüllt sein. Eine analoge Betrachtung unter der Annahme, dass der vorderen Grenzfläche die Reflexion R_{11} und der hinteren Grenzfläche die Reflexion R_{12} zugeordnet werden kann, folgt für die Reflexion

$$R = R_{11} + \frac{(1 - R_{11})^2 R_{12} e^{-2\beta d}}{1 - R_{11} R_{12} e^{-2\beta d}} \quad (1.43)$$

und die Transmission

$$T = \frac{(1 - R_{11})(1 - R_{12}) e^{-\beta d}}{1 - R_{11} R_{12} e^{-2\beta d}} \quad (1.44)$$

der Schicht.

6. Planparallele Schicht - Einbeziehung der Wellenphasen

Bisher haben wir die relativen Phasen der Strahlen in Abb. 1.2 vernachlässigt und die Diskussion auf die Intensitäten der Wellenanteile beschränkt. Diese Betrachtung hat zu den Gleichungen (1.34), (1.38) bzw. (1.43) und (1.44) für die Reflexion und Transmission geführt. Diese Gleichungen gelten nur näherungsweise. Wird das Experiment mit hinreichend hoher Auflösung durchgeführt, ist eine nahezu periodische Modulation der Transmission oder Reflexion in Abhängigkeit von der Wellenzahl zu erwarten, die durch die relative Phasenlage der Strahlen aufgrund von konstruktiver und destruktiver Interferenz verursacht wird. Um die Interferenz in die Betrachtung mit einzubeziehen, müssen wir das Randwertproblem für die elektromagnetische Welle an der vorderen und hinteren Grenzfläche lösen.

Im Medium 1 (siehe Abb. 1.2) wird die einlaufende Welle (Ausbreitung in positiver z-Richtung) durch die Feldkomponenten

$$\mathbf{E}_{1+} = (E_{1+}, 0, 0) e^{-i\omega \left(t - \frac{z}{c} \right)} \quad (1.45)$$

$$\mathbf{H}_{1+} = (0, H_{1+}, 0) e^{-i\omega\left(t-\frac{z}{c}\right)} = \left(0, \frac{E_{1+}}{\mu_0 c}, 0\right) e^{-i\omega\left(t-\frac{z}{c}\right)} \quad (1.46)$$

beschrieben. Für die an der vorderen Grenzfläche reflektierte Welle (Ausbreitung in negativer z-Richtung) gilt:

$$\mathbf{E}_{1-} = (E_{1-}, 0, 0) e^{-i\omega\left(t+\frac{z}{c}\right)} \quad (1.47)$$

$$\mathbf{H}_{1-} = (0, H_{1-}, 0) e^{-i\omega\left(t+\frac{z}{c}\right)} = \left(0, -\frac{E_{1-}}{\mu_0 c}, 0\right) e^{-i\omega\left(t+\frac{z}{c}\right)}. \quad (1.48)$$

Für die im Festkörper nach rechts laufende Welle setzen wir an:

$$\mathbf{E}_{2+} = (E_{2+}, 0, 0) e^{-i\omega\left(t-\frac{N_2 z}{c}\right)} \quad (1.49)$$

$$\mathbf{H}_{2+} = (0, H_{2+}, 0) e^{-i\omega\left(t-\frac{N_2 z}{c}\right)} = \left(0, \frac{N_2 E_{2+}}{\mu_0 c}, 0\right) e^{-i\omega\left(t-\frac{N_2 z}{c}\right)} \quad (1.50)$$

Für die im Festkörper nach links laufende Welle gilt:

$$\mathbf{E}_{2-} = (E_{2-}, 0, 0) e^{-i\omega\left(t+\frac{N_2 z}{c}\right)} \quad (1.51)$$

$$\mathbf{H}_{2-} = (0, H_{2-}, 0) e^{-i\omega\left(t+\frac{N_2 z}{c}\right)} = \left(0, -\frac{N_2 E_{2-}}{\mu_0 c}, 0\right) e^{-i\omega\left(t+\frac{N_2 z}{c}\right)}. \quad (1.52)$$

Hinter der Schicht gilt für die nach rechts laufende transmittierte Welle im Medium 1:

$$\mathbf{E}_{3+} = (E_{3+}, 0, 0) e^{-i\omega\left(t-\frac{z}{c}\right)} \quad (1.53)$$

$$\mathbf{H}_{3+} = (0, H_{3+}, 0) e^{-i\omega\left(t-\frac{z}{c}\right)} = \left(0, \frac{E_{3+}}{\mu_0 c}, 0\right) e^{-i\omega\left(t-\frac{z}{c}\right)}. \quad (1.54)$$

Aus der Stetigkeit der tangentialen Komponenten der elektrischen und magnetischen Felder an den Grenzflächen $z = 0$ und $z = d$ erhält man das Gleichungssystem für die Feldamplituden:

$$E_{2-} + E_{2+} = E_{1+} + E_{1-} \quad (1.55)$$

$$-N_2 E_{2-} + N_2 E_{2+} = E_{1+} - E_{1-} \quad (1.56)$$

$$E_{2-} e^{-i\frac{\omega}{c}N_2d} + E_{2+} e^{i\frac{\omega}{c}N_2d} = E_{3+} e^{i\frac{\omega}{c}d} \quad (1.57)$$

$$-N_2 E_{2-} e^{-i\frac{\omega}{c}N_2d} + N_2 E_{2+} e^{i\frac{\omega}{c}N_2d} = E_{3+} e^{i\frac{\omega}{c}d} \quad (1.58)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann man für die Amplitude der einlaufenden Welle $E_{1+} = 1$ setzen und das Gleichungssystem (1.55 - 1.58) als Matrixgleichung

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & N_2 & -N_2 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\omega}{c}N_2d} & e^{-i\frac{\omega}{c}N_2d} & -e^{i\frac{\omega}{c}d} \\ 0 & N_2 e^{i\frac{\omega}{c}N_2d} & -N_2 e^{-i\frac{\omega}{c}N_2d} & -e^{i\frac{\omega}{c}d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{1-} \\ E_{2+} \\ E_{2-} \\ E_{3+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.60)$$

schreiben. Die Matrixgleichung für die Feldamplituden E_{1-} , E_{2+} , E_{2-} und E_{3+} kann vorteilhaft mit *Mathematica* gelöst werden. Da $E_{1+} = 1$ gilt, folgt für die Amplitudenkoeffizienten für die Reflexion $r = E_{1-}$ bzw. für die Transmission $t = E_{3+}$. Die Lösung des Gleichungssystems mit *Mathematica* liefert als Ergebnis für die Intensitäten

$$R = |r|^2 = \left| \frac{\begin{pmatrix} e^{i\frac{2\omega}{c}N_2d} & -1 \end{pmatrix} (1 - N_2)}{e^{i\frac{2\omega}{c}N_2d} (1 - N_2) - (1 + N_2)} \right|^2 \quad (1.60)$$

$$T = |t|^2 = \left| \frac{4N_2 e^{i\frac{\omega}{c}(1+N_2)d}}{e^{i\frac{2\omega}{c}N_2d} (1 - N_2)^2 - (1 + N_2)^2} \right|^2 \quad (1.61)$$

Die Gleichungen (1.60) und (1.61) zeigen im Gegensatz zu den Gleichungen (1.34), (1.38) bzw. (1.43) und (1.44) eine nahezu periodische Modulation der Signale aufgrund von Interferenz der Strahlen in der planparallelen Schicht. Der Abstand der Interferenzmaxima oder Minima kann genutzt werden, um die Brechzahl der Schicht zu ermitteln. Bei senkrechter Inzidenz entspricht die Weglängendifferenz zwischen der vorderen und hinteren Grenzfläche $2d$. Da die Wellenlänge in der Schicht λ/n von der Brechzahl n abhängt, gilt für konstruktive Interferenz

$$2d = m \frac{\lambda}{n} = m \frac{1}{nv} \quad m = 1, 2, \dots \quad (1.62)$$

Damit ergibt sich für den Abstand der Interferenzmaxima in Wellenzahlen

$$\Delta v = v_{m+1} - v_m = \left(\frac{m+1}{n} - \frac{m}{n} \right) \frac{1}{2d} = \frac{1}{2dn} \quad (1.63)$$

II. Absorption und Dispersion

Die klassische Theorie zur Absorption und Dispersion wurde von Lorentz und Drude entwickelt. Das Lorentz-Modell gilt für gebundene Elektronen (direkte Interbandübergänge), während das Drude Modell auf freie Ladungsträger in einem Festkörper (Intrabandabsorption) angewendet werden kann. Die klassischen Ansätze bilden eine gute Grundlage zum Verständnis auch der quantenmechanischen Ergebnisse.

1. Der Lorentz Oszillator

Nach Lorentz kann ein Elektron, das an ein Atom gebunden ist, in Gegenwart eines elektrischen Feldes, das eine Ladungstrennung bewirkt, in qualitativ ähnlicher Weise beschrieben werden wie eine kleine Masse, die an eine große Masse durch eine Feder gebunden ist. Die Bewegung des Elektrons wird dann durch die klassische Bewegungsgleichung

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} + m\Gamma \frac{d\mathbf{r}}{dt} + m\omega_0^2 \mathbf{r} = -e \mathbf{E}_{\text{loc}} \quad (2.1)$$

beschrieben, wobei m die Masse und $-e$ die Ladung des Elektrons sind. Das Feld \mathbf{E}_{loc} ist ein lokales mikroskopisches elektrisches Feld, das am Ort des Elektrons angreift. Der zweite Ausdruck auf der linken Seite der Gleichung (2.1) repräsentiert einen Reibungsterm und ermöglicht eine Dämpfung der Bewegung. Die Dämpfung hängt von dem Parameter Γ ab, der auch in Form einer Streuzeit $\tau = \Gamma^{-1}$ angegeben werden kann. Der dritte Term auf der linken Seite der Gleichung repräsentiert eine Rückstellkraft nach Hooke.

Unter der Annahme, dass die Auslenkungen und Felder in Gleichung (2.1) eine harmonische Zeitabhängigkeit $e^{-i\omega t}$ haben folgt für die Auslenkung

$$\mathbf{r} = -\frac{e \mathbf{E}_{\text{loc}}}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega}, \quad (2.2)$$

und für das daraus resultierende induzierte Dipolmoment ergibt sich

$$\mathbf{p}_{\text{dip}} = -e \mathbf{r} = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \mathbf{E}_{\text{loc}} = \alpha(\omega) \mathbf{E}_{\text{loc}}, \quad (3.3)$$

wobei $\alpha(\omega)$ die atomare Polarisierbarkeit des Einelektronenatoms ist. Wenn wir eine Dichte der Atome pro Volumeneinheit N haben, ist die makroskopische Polarisierung durch

$$\mathbf{P} = N \mathbf{p}_{\text{dip}} = N\alpha(\omega) \mathbf{E}_{\text{loc}} = \epsilon_0 \chi_e \mathbf{E} \quad (2.4)$$

gegeben.

Um die elektrische Suszeptibilität χ_e ableiten zu können, muss der Zusammenhang zwischen dem makroskopischen Feld \mathbf{E} und dem mikroskopischen Feld \mathbf{E}_{loc} bekannt sein. Im Allgemeinen sind beide Felder nicht gleich (siehe auch Clausius-Mosotti), nur im Grenzfall $\chi_e \ll 1$ einer hinreichend geringen Dichte der polarisierbaren Spezies kann man die vereinfachende Annahme $\mathbf{E} \cong \mathbf{E}_{\text{loc}}$ machen. Im Folgenden wollen wir von dieser vereinfachenden Annahme ausgehen, man sollte sich aber bewusst sein, dass einer detaillierten Analyse eines spezifi-

schen Festkörpers immer eine detaillierte Analyse der relevanten Feldzusammenhänge vorausgehen muss. Mit Gleichung (2.4) erhalten wir für die komplexe dielektrische Funktion

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega}. \quad (2.5)$$

Eine Zerlegung in Real- und Imaginärteil liefert

$$\varepsilon'(\omega) = n^2 - \kappa^2 = 1 + \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2\omega^2} \quad (2.6)$$

und

$$\varepsilon''(\omega) = 2n\kappa = \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \frac{\Gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2\omega^2}. \quad (2.7)$$

Im Falle eines klassischen Atoms mit mehr als einem Elektron pro Atom, lassen sich die vorausgegangenen Überlegungen verallgemeinern. Wenn wir von Elektronen mit Dichten N_j und Resonanzfrequenzen ω_j ausgehen, folgt für die dielektrische Funktion

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{e^2}{m\varepsilon_0} \sum_j \frac{N_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\Gamma_j\omega}, \quad (2.8)$$

wobei für die Gesamtdichte gilt

$$N = \sum_j N_j. \quad (2.9)$$

Im Rahmen einer quantenmechanischen Betrachtung für die dielektrische Funktion, erhält man einen sehr ähnlichen Ausdruck

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{e^2}{m\varepsilon_0} \sum_j \frac{N f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\Gamma_j\omega}. \quad (2.10)$$

Obwohl die Gleichungen (2.8) und (2.10) die gleiche Frequenzabhängigkeit haben, ist die Bedeutung der Terme unterschiedlich. In der Gleichung (2.8) ist ω_j die Resonanzfrequenz eines gebundenen Elektrons, wohingegen in Gleichung (2.10) ω_j eine Übergangsfrequenz zwischen zwei atomaren Zuständen repräsentiert. Der Parameter f_j ist die Oszillatorstärke, die ein Maß für die quantenmechanische Übergangswahrscheinlichkeit ist. Die Oszillatorstärke für ein freies Atom erfüllt die Summenregel

$$\sum_j f_j = 1 \quad (2.11)$$

und stellt das quantenmechanische Analogon zu Gleichung (2.9) dar.

2. Kramers-Kronig-Relationen

Die dielektrische Funktion gehört zu einer Klasse von Funktionen die auch als Antwortfunktionen bekannt sind. Charakteristisch für Antwortfunktionen ist, dass der Real- und der Imaginärteil über Integraltransformationen in Beziehung stehen. Im Prinzip ist eine Antwortfunktion bereits vollständig bestimmt, wenn nur der Real- oder nur der Imaginärteil bekannt sind. Ist nur eine Größe bekannt, kann die andere durch die Kramers-Kronig-Transformation ermittelt werden. Die Kramers-Kronig-Relationen für den Real- und den Imaginärteil der dielektrischen Funktion lauten [Kli. 1997]:

$$\varepsilon'(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \text{P} \int_0^{\infty} \frac{s \varepsilon''(s)}{s^2 - \omega^2} ds \quad (2.12a)$$

$$\varepsilon''(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \text{P} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon'(s)}{s^2 - \omega^2} ds \quad (2.12b)$$

Ähnliche Beziehungen gelten auch für den Real- und den Imaginärteil des komplexen Brechungsindex:

$$n(\omega) - 1 = \frac{1}{\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\kappa(s)}{s - \omega} ds \quad (2.13a)$$

$$\kappa(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n(s) - 1}{s - \omega} ds \quad (2.13b)$$

In den Gleichungen (2.12) und (2.13) bezeichnet P den Hauptwert des Integrals. Bitte beachten Sie, dass die Kramers-Kronig-Relationen nur genutzt werden können, wenn der Real- oder der Imaginärteil in einem hinreichend weiten Frequenzbereich bekannt sind.

3. Die dielektrische Funktion: Beispiele

3.1 Absorption freier Ladungsträger - Drude Modell

Das Drude-Modell für freie Elektronen in einem Metall erhält man direkt aus dem Lorentz-Modell, indem man die Rückstellkraft verschwinden lässt. Die Elektronen in einem Metall sind nicht gebunden und das elektrische Feld, das an den Elektronen angreift, ist identisch mit dem makroskopischen Feld. Abbildung 2.1 zeigt schematisch die Anregung eines Elektrons von einem besetzten Zustand 1 unterhalb in einen freien Zustand 2 oberhalb der Fermi-Energie. Mit $\omega_j = 0$ und Ersetzen von Γ durch eine reziproke Streuzeit τ^{-1} folgt aus Gleichung (2.10) [Gro. 1979, Her. 1979, Hor. 1991]

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \frac{1}{-\omega^2 - i\omega\tau^{-1}} = 1 - \frac{\omega_p^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} + i \frac{\omega_p^2 \tau}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)}, \quad (2.14)$$

wobei

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0} \quad (2.15)$$

die Plasmafrequenz des Elektronensystems ist.

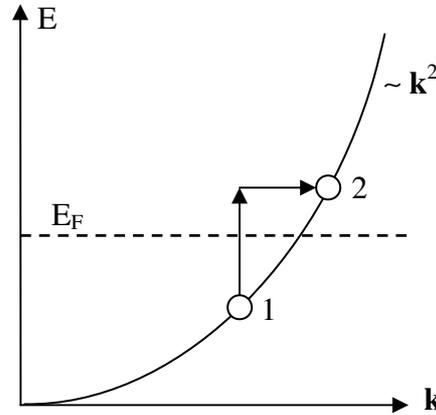


Abb. 2.1: Schematisches Bild eines Absorptionsprozesses für freie Ladungsträger an der Fermi-Energie E_F . Streuung durch ein Phonon oder eine Verunreinigung (horizontaler Pfeil) ist erforderlich, um Energie- und Wellenvektor-Erhaltung zu gewährleisten.

Bei der Plasmafrequenz gilt für den Brechungsindex $n(\omega_p) \approx 0$, d.h. die Phasengeschwindigkeit $v_p = c/n(\omega_p)$ und die Wellenlänge im Medium $\lambda/n(\omega_p)$ wachsen über alle Grenzen. Die große Wellenlänge bedeutet, dass alle Elektronen in Phase oszillieren. Eine Polarisationsladung wie im Falle einer kollektiven longitudinalen Plasmonenanregung, deren Eigenfrequenz identisch mit der von Gleichung (2.15) ist, wird hier aber nicht aufgebaut. Plasmonen sind kollektive Oszillationen der Ladungsdichte, die nicht durch divergenzfreie transversale elektromagnetische Wellen angeregt werden können. Die Gleichung (2.14) kann durch Einführung einer Hochfrequenzleitfähigkeit nach Drude [Wei. 1981]

$$\sigma(\omega) = \frac{Ne^2\tau}{m_L} \frac{1}{1 - i\omega\tau} \quad (2.16)$$

mit $\epsilon_g = 1$ auch in der Form

$$\epsilon(\omega) = 1 + i \frac{\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} \quad (2.17)$$

(siehe auch Gleichung (1.10)) geschrieben werden.

Die Hochfrequenzleitfähigkeit hängt von der Leitfähigkeitsmasse m_L ab. Für ein Metall kann näherungsweise die freie Elektronenmasse eingesetzt werden. Für Festkörper mit isotroper und parabolischer Energiedispersion $E(\mathbf{k}) = \hbar^2\mathbf{k}^2/(2m^*)$, die von der effektiven Masse m^* abhängt, gilt in guter Näherung $m = m^*$. Indirekte Halbleiter (z.B. Si) haben an der Leitungsbandkante häufig eine näherungsweise parabolische aber anisotrope Energiedispersion mit mehreren besetzten Tälern (valleys). Für Si mit einem Valley-Entartungsfaktor $g_V = 6$ gilt

z.B. für die reziproke Leitfähigkeitsmasse [Sze 1981] an der Leitungsbandkante $1/m_L = (1/m_x + 1/m_y + 1/m_z)/3$, wobei m_x , m_y und m_z die effektiven Hauptmassen in drei zueinander senkrechten Richtungen im \mathbf{k} -Raum darstellen.

Sind die freien Ladungsträger in einem Dielektrikum mit dielektrischer Konstanten $\epsilon_g > 1$ gebunden (eine solche Situation entsteht z.B. durch einen Beitrag von Interbandanregungen), muss in Gleichung (2.14) die Eins durch ϵ_g und in Gleichung (2.15) ϵ_0 durch $\epsilon_g \epsilon_0$ ersetzt werden, d.h. durch den Hintergrundbeitrag ϵ_g wird die Plasmafrequenz kleiner. In schwach dotierten polaren Halbleitern kann auch der Beitrag des polarisierbaren Gitters den Hintergrundbeitrag beeinflussen.

3.2 Gitterpolarisation

Wenn die Bindung der Atome im Festkörper einen ionischen Beitrag hat, ist das Gitter durch eine transversale elektromagnetische Welle polarisierbar. Die Abb. 2.2 illustriert diesen Vorgang am Beispiel einer linearen Kette aus Ionen.

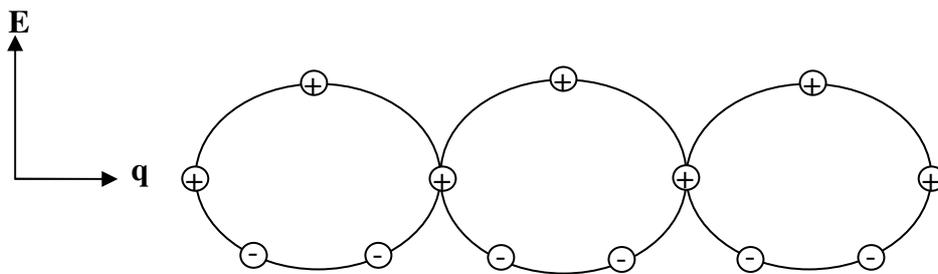


Abb. 2.2: Lineare Kette aus Ionen, die durch eine elektromagnetische Welle mit Wellenvektor \mathbf{q} aus ihren Gleichgewichtspositionen ausgelenkt werden.

Die Bewegung des Gitters wird durch die Gleichung (2.1) beschrieben. Es muss lediglich die Masse m durch die Ionenmasse M und die Ladung $-e$ durch die Ionenladung Q ersetzt werden. Die Eigenfrequenz des Gitters für transversale Anregungen ist identisch mit der transversalen optischen Phononenfrequenz ω_{TO} . Unter Berücksichtigung von Gleichung (2.4) gilt für eine kubische Elementarzelle mit zwei Atomen

$$\epsilon(\omega) - 1 = \frac{1}{3\epsilon_0 V_{\text{EZ}}} (\alpha_{\text{el}}(\omega) + \alpha_{\text{ion}}(\omega)). \quad (2.18)$$

$\alpha_{\text{el}}(\omega)$ und $\alpha_{\text{ion}}(\omega)$ sind die elektronischen und ionischen Polarisierbarkeiten des Systems. Da die Massen für die freien Ladungsträger in der Regel sehr viel kleiner als die Ionenmassen sind, liegen die Eigenfrequenzen ω_j des elektronischen Beitrags bei sehr viel höheren Frequenzen als die des ionischen Beitrags, d.h. wir können für hinreichend kleine Frequenzen $\omega \ll \omega_j$ den elektronischen Beitrag durch seinen statischen Grenzfall $\alpha_{\text{el}}(0)$ annähern. Unter Vernachlässigung von Dämpfung gilt dann

$$\varepsilon(\omega) - 1 = \frac{1}{3\varepsilon_0 V_{EZ}} \left(\alpha_{el}(0) + \frac{e^2}{M} \frac{1}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} \right). \quad (2.19)$$

Im strengen statischen Grenzfall $\omega \ll \omega_{TO}$ erhält man

$$\varepsilon(0) - 1 \approx \frac{1}{3\varepsilon_0 V_{EZ}} \left(\alpha_{el}(0) + \frac{e^2}{M} \frac{1}{\omega_{TO}^2} \right) \quad (2.20)$$

und im Grenzfall hoher Frequenzen $\omega_{TO} \ll \omega \ll \omega_j$

$$\varepsilon(\infty) - 1 \approx \frac{1}{3\varepsilon_0 V_{EZ}} \alpha_{el}(0). \quad (2.21)$$

Mit den in (2.20) und (2.21) definierten Grenzwerten für die dielektrische Funktion $\varepsilon(0)$ und $\varepsilon(\infty)$ und der Lyddane-Sachs-Teller-Relation [Kit. 1996]

$$\frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)} = \frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2}, \quad (2.22)$$

wobei ω_{LO} die longitudinal optische Phononenfrequenz ist, kann Gleichung (2.19) auf die Form

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \left(1 + \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} \right) = \varepsilon(\infty) \frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} \quad (2.23)$$

gebracht werden. Unter Einbeziehung der Phonondämpfung erhält man schließlich für den Gitterbeitrag zur dielektrischen Funktion

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \left(1 + \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \right). \quad (2.24)$$

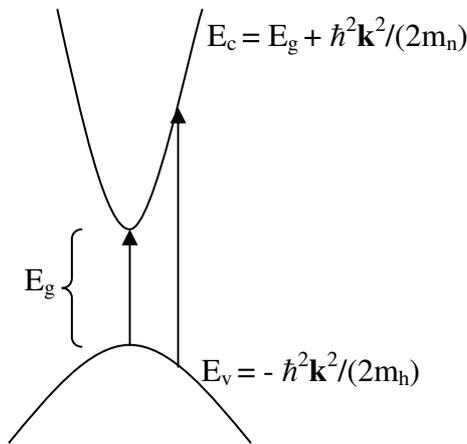
3.3 Interbandanregungen

Bei vergleichsweise hohen Frequenzen ($\hbar\omega$ von der Größenordnung eV) tragen Übergänge zwischen besetzten und unbesetzten Bändern zur dielektrischen Funktion bei. Man unterscheidet zwischen direkten und indirekten Interbandübergängen, letztere sind nur durch Phononenbeteiligung möglich. Für alle Übergänge gilt Energie- und Impulserhaltung. Eine häufig vorkommende Situation für Übergänge zwischen der Valenz- und Leitungsbandkante ist in Abb. 2.3 schematisch skizziert.

Nach Gleichung (3.10) kann der elektronische Beitrag zur dielektrischen Funktion für einen direkten Interbandübergang in der Form [Woo. 1972]

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{e^2}{m\varepsilon_0 V} \sum_{\substack{k \text{ in Band } i \text{ besetzt} \\ k \text{ in Band } j \text{ unbesetzt}}} \frac{f_{ij}}{\omega_{ij} - \omega^2 - i\Gamma_{ij}\omega} \quad (2.25)$$

a) direkter Interbandübergang



b) indirekter Interbandübergang

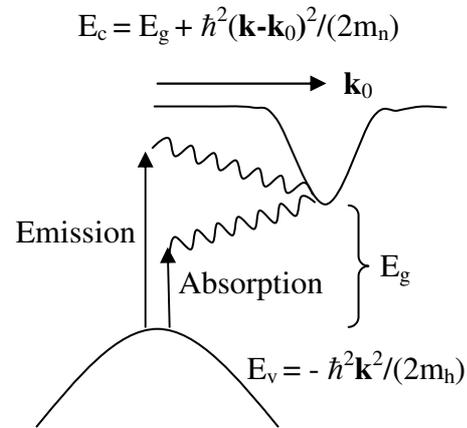


Abb. 2.3: a) Direkter und b) indirekter Interbandübergang zwischen Valenz- und Leitungsbandkante. Der indirekte Übergang erfordert die Beteiligung eines Phonons um Energie- und Impulserhaltung zu gewährleisten und kann von Phononenemission oder Phononenabsorption begleitet sein.

geschrieben werden. Für die Auswertung der Oszillatorstärke eines speziellen Übergangs beim Wellenvektor \mathbf{k} benötigen wir den Störoperator, der das System in einen angeregten Zustand versetzt. Nehmen wir an, dass am Ort des Atoms ein in x -Richtung polarisiertes elektromagnetisches Feld existiere, so dass

$$E_{\text{loc}} = E_x \cos \omega t = \frac{1}{2} E_x (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}). \quad (2.26)$$

Der Störoperator, der die Polarisation des Systems beschreibt, ist dann durch

$$H' = \frac{1}{2} e E_x x (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (2.27)$$

gegeben. Aus Gleichung (2.27) erhalten wir das Matrix-Element

$$H'_{ij} = \frac{1}{2} e E_x x_{ij} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (2.28)$$

mit dem Übergangsmatrix-Element

$$x_{ij} = \int \Phi_j^* x \Phi_i dV, \quad (2.29)$$

das von den Wellenfunktionen im Ausgangs- (Φ_i) und Endzustand (Φ_j) abhängt. Die Oszillatorstärke des Übergangs ist definiert als [Woo. 1972]

$$f_{if} = \frac{2m\hbar\omega_{ij}}{\hbar^2} |x_{ij}|^2. \quad (2.30)$$

In Gleichung (2.30) wird die Oszillatorstärke über das Matrix-Element des Dipoloperators definiert. Manchmal ist es aber günstiger mit dem Matrix-Element des Impulsoperators zu arbeiten. In diesem Fall ist die Oszillatorstärke definiert als [Woo. 1972]

$$f_{if} = \frac{2}{m\hbar\omega_{ij}} |p_{ij}|^2, \quad (2.31)$$

wobei

$$p_{ij} = \int \Phi_j^* (-i\hbar\nabla) \Phi_i dV. \quad (2.32)$$

Für eine isotrope und parabolische Energiedispersion, wie in der Abb. 2.3 für den Fall des direkten Interbandübergangs angenommen, nimmt die Zustandsdichte im Leitungs- und Valenzband mit der Wurzel aus der Energie zu. Welche Folgerungen ergeben sich daraus für die spektrale Abhängigkeit des Interbandübergangs? Die Übergangsenergie nimmt entsprechend

$$\hbar\omega(\mathbf{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2\mu}, \quad (2.33)$$

wobei

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_n} + \frac{1}{m_h} \quad (2.34)$$

die reduzierte Masse aus den effektiven Massen im Leitungs- und Valenzband ist. Allgemein hängt die Zustandsdichte von der Dimensionalität des Problems und der Form der Energiedispersion ab. Gleichung (2.33) beschreibt eine isotrope und parabolische Abhängigkeit für die Übergangsenergien, die Zustandsdichte für die Übergänge (kombinierte Zustandsdichte) sollte deshalb proportional der Wurzel aus $(\hbar\omega - E_g)$ für einen direkten Interbandübergang zunehmen. Eine genaue Auswertung von Gleichung (2.25) unter Vernachlässigung von Dämpfung liefert das Ergebnis für den Imaginärteil der dielektrischen Funktion [Yu 1996]

$$\varepsilon''_{\text{direkt}}(\omega) = \frac{e^2 (2\mu)^{3/2} |p_{cv}|^2 \sqrt{\hbar\omega - E_g}}{\hbar\varepsilon_0 m_e^2 (\hbar\omega)^2}. \quad (2.35)$$

In Gleichung (2.35) ist p_{cv} das Impulsmatrixelement für den Übergang von der Valenz- zur Leitungsbandkante. Die Frequenzabhängigkeit für einen indirekten Halbleiter an der Leitungs- und Valenzbandkante unterscheidet sich stark von der Abhängigkeit in Gleichung (2.35). Für erlaubte indirekte Interbandübergänge gilt für den Imaginärteil der dielektrischen Funktion

$$\varepsilon''_{\text{indirekt}}(\omega) \propto \begin{cases} (\hbar\omega \mp \hbar\Omega_{\text{ph}} - E_g)^2 & \text{für } \hbar\omega \geq E_g \pm \hbar\Omega_{\text{ph}} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.36)$$

Bei $T = 0$ ist nur der Phononenemissionsprozess möglich, da keine angeregten Phononen für den Absorptionsprozess zur Verfügung stehen. Mit steigender Temperatur müssen beide Übergangskanäle berücksichtigt werden. Der Phononenabsorptionsprozess nimmt mit steigender Temperatur entsprechend der Phononenbesetzungszahl

$$N_{\text{ph}} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\Omega_{\text{ph}}}{k_{\text{B}}T}} - 1} \quad (2.37)$$

zu, während der Emissionsprozess mit

$$N_{\text{ph}} + 1 = \frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar\Omega_{\text{ph}}}{k_{\text{B}}T}}} \quad (2.38)$$

skaliert. Unter Berücksichtigung der Phononenemission und Phononabsorption erhält man für den Absorptionskoeffizienten die Abhängigkeit [Mac. 1955]

$$\begin{aligned} \beta_{\text{indirekt}}(\omega) &= \beta_{\text{Emission}} + \beta_{\text{Absorption}} \\ &= \frac{A}{(\hbar\omega)^2} \left[(N_{\text{ph}} + 1)(\hbar\omega - \hbar\Omega_{\text{ph}} - E_{\text{g}})^2 + N_{\text{ph}}(\hbar\omega + \hbar\Omega_{\text{ph}} - E_{\text{g}})^2 \right], \end{aligned} \quad (2.39)$$

wobei A ein dimensionsloser Skalierungsfaktor ist.

Soll die Energielücke E_{g} bestimmt werden, ist im Falle eines direkten Interbandübergangs eine Auftragung von $[\varepsilon''_{\text{exp}}(\omega)\omega^2]^2$ und im Falle eines indirekten Interbandübergangs z.B. eine Auftragung von $\sqrt{\beta(\omega)\omega^2}$ gegen die Energie (Wellenzahl) sinnvoll [Heu. 1993, Pfe. 1979]. In beiden Fällen erwartet man Geraden, die auf die Energieachse extrapoliert, die Größe der Lücke ergeben sollten. Bei dieser Vorgehensweise hat man allerdings zu überprüfen, inwieweit Band-Störstellen- bzw. Störstellen-Störstellen-Übergänge, Störungen in der kristallinen Struktur (Urbach tail) oder Exzitonenanregungen die Genauigkeit des Experimentes einschränken.

3.4 Übergänge zwischen Störstellen und Bändern und Störstellen

Ein perfekter Halbleiter ist praktisch nicht zu realisieren. Eine Störung des kristallinen Aufbaus ist allein aus thermodynamischen Gründen nicht zu vermeiden. Bei endlicher Temperatur besteht immer eine gewisse Wahrscheinlichkeit, dass ein Teil der Atome, die in ihren Gleichgewichtspositionen nur eine endliche Bindungsenergie besitzen, ihre Positionen verlassen und Zwischengitterplätze besetzen oder sogar zur Oberfläche diffundieren. Andererseits ist beim Kristallwachstum nie zu vermeiden, dass eine gewisse Verunreinigung des Materials aus technologischen Gründen in Kauf genommen werden muss. Bei endlichen Temperaturen breiten sich Phononen im Kristall aus, die eine lokale zeitabhängige Störung der Periodizität im Kristall bedeuten können. Verunreinigungen wie Fremdatome führen meist zu lokalisierten Zuständen in der Energielücke wie in Abb. 2.4 skizziert. Bei hoher Konzentration der lokalisierten Zustände können sich sogar Störstellenbänder bilden, die mit den elektronischen Bändern des Kristalls überlappen können.

Verunreinigungen sind nicht immer unerwünscht, wenn sie gezielt eingebracht werden können um die Leitungseigenschaften eines Festkörpers zu beeinflussen, kommt ihnen eine große technologische Bedeutung zu. Bestimmte Verunreinigungen (insbesondere Substitutionsstörstellen) bilden lokalisierte Zustände aus, die nahe an den Bandkanten liegen. Hier spricht man

von flachen Störstellen, die sowohl als Donatoren (können Elektronen abgeben) als auch als

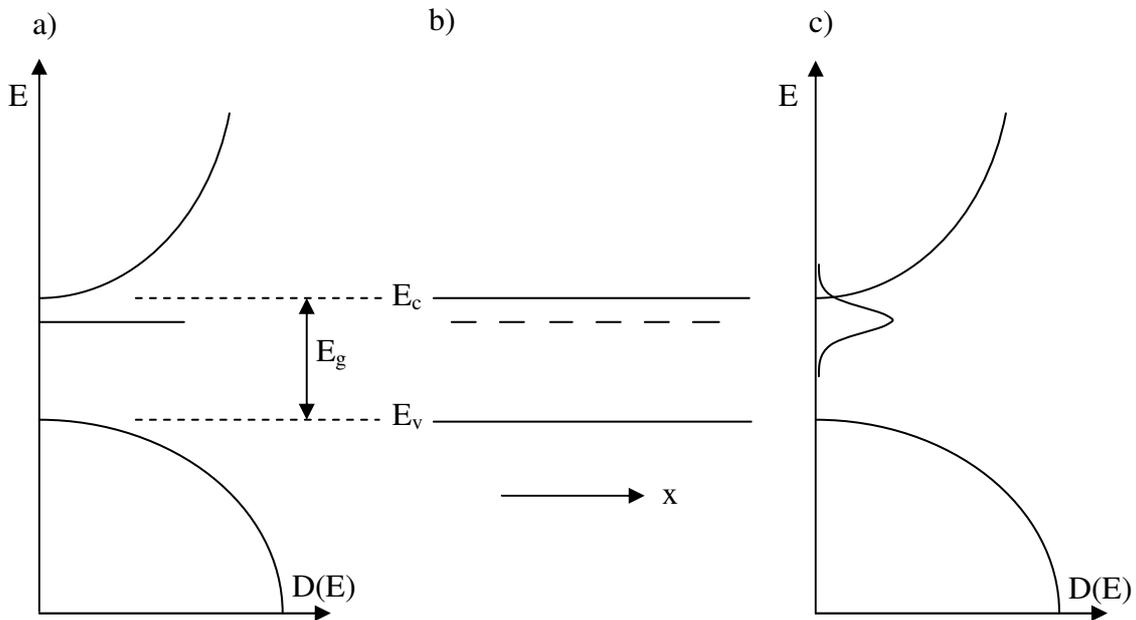


Abb. 2.4: Schematische Darstellung eines lokalisierten Zustands in a) der Zustandsdichte $D(E)$ und b) in der Ortsraumdarstellung der Bandstruktur. E_c und E_v markieren die Leitungs- und Valenzbandkante. c) Darstellung eines Störstellenbands für den Grenzfall einer hohen Verunreinigungskonzentration.

Akzeptoren (können Elektronen aufnehmen) agieren können. Eine gute näherungsweise Beschreibung flacher Störstellen ist im Rahmen des Wasserstoff-Modells möglich. Für einen flachen Donator gilt

$$E_D = E_c - \frac{13,6\text{eV}}{j^2} \frac{m_{L,n}}{m_e} \frac{1}{\epsilon^2}, \quad (2.40)$$

wobei $j = 1, 2, 3, \dots$ die übliche Hauptquantenzahl des Wasserstoffatoms ist. Da sich das am Donatorion gebundene Elektron in einem Medium bewegt, spürt es eine um den Faktor ϵ abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung und hat eine andere Masse ($m_{L,n}$ = Leitfähigkeitsmasse im Leitungsband) als im Vakuum. Analog erhält man für einen flachen Akzeptor

$$E_A = E_v + \frac{13,6\text{eV}}{j^2} \frac{m_{L,h}}{m_e} \frac{1}{\epsilon^2}. \quad (2.41)$$

In der Gegenwart von Störstellen wird die dielektrische Funktion durch Störstellen-Störstellen- oder Band-Störstellen-Übergänge beeinflusst. Liegen diese Übergänge energetisch nahe an der Lückenenergie können solche Übergänge die Genauigkeit der Bestimmung der Energielücke begrenzen. Die dielektrische Funktion für Störstellen-Störstellen-Übergänge kann entsprechend Gleichung (2.5) modelliert werden. Im Falle von Übergängen zwischen besetzten Akzeptor- und unbesetzten Donatorzuständen ist in (2.5) N durch $N_A^- - N_D^+$ zu ersetzen, wobei N_A^- die Konzentration der ionisierten Akzeptoren und N_D^+ die Konzentration der

ionisierten Donatoren wiedergibt [Sti. 1985]. Die Übergangsfrequenz ist durch $(E_g - E_A - E_D)/\hbar$ gegeben. Band-Störstellen-Übergänge liefern einen qualitativ ähnlichen Beitrag zur dielektrischen Funktion wie Störstellen-Störstellen-Übergänge. Unter Vernachlässigung von Dämpfung gilt für den Absorptionskoeffizienten im Falle eines Übergangs vom Valenzband in einen lokalisierten freien Donatorzustand [Dum. 1963]

$$\beta(\omega) = \frac{64e^2 |p_{cv}|^2}{nc\epsilon_0 m_e^2 E_D^{3/2}} \left(\frac{m_v}{m_c}\right)^{3/2} \frac{\sqrt{\hbar\omega + E_D - E_g}}{\omega} \left(1 + \frac{m_v}{m_c} \frac{\hbar\omega + E_D - E_g}{E_D}\right)^{-4} N_D^+ \quad (2.42)$$

Das größte Gewicht des Absorptionskoeffizienten liegt bei der Energie $(E_g - E_D)/\hbar$, für größere Energien nimmt der Absorptionskoeffizient durch den Ausdruck in Klammern sehr stark ab. Dieses Verhalten rechtfertigt eine Modellierung der dielektrischen Funktion entsprechend Gleichung (2.5).

3.5 Urbach tail

Das experimentelle Absorptionsspektrum sogar der reinsten Halbleitermaterialien weicht von dem erwarteten theoretischen Absorptionsspektrum im Bandkantenbereich ab. Für direkte Interbandübergänge sagt die Theorie eine steil ansteigende Absorptionskante voraus, die mit der Wurzel aus $(\hbar\omega - E_g)$ skalieren sollte. Unterhalb der Bandkante $\hbar\omega < E_g$ sollte es deshalb keine Absorption geben. In der Regel zeigt die Absorptionskante aber ein exponentielles Anwachsen, wobei auch für Energien $\hbar\omega < E_g$ eine Absorption beobachtet werden kann. Die exponentielle Abhängigkeit der Absorptionskante mit der Energie wird auch als Urbach-Gesetz bezeichnet [Dow 1972]. Die Urbach-Kante wird zum Teil auf so genannte „tail“-Zustände zurückgeführt, die aufgrund einer Störung der Periodizität im Kristallaufbau entstehen können. Mögliche Prozesse für die Bildung von derartigen Zuständen sind in der Abb. 2.5 illustriert.

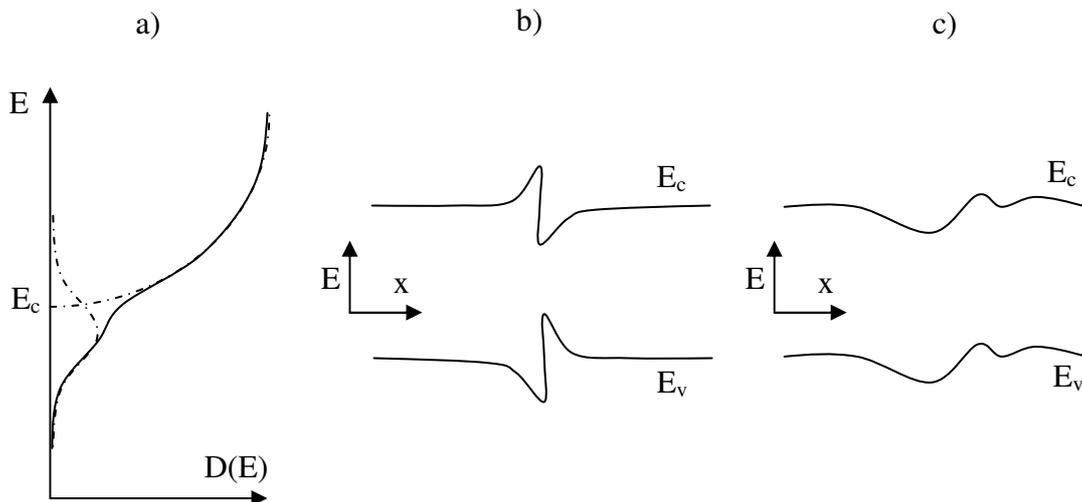


Abb. 2.5: Bildung von „tail“-Zuständen durch a) Überlapp eines Störstellenbandes mit dem Leitungsband, b) Deformationspotential-Wechselwirkung infolge eines longitudinalen Phonons (lokale Kompression oder Dehnung des Kristalls) und c) Einfluss elektrischer Felder infolge der Wechselwirkung von Störstellenionen mit freien Ladungsträgern.

Die Urbach-Absorptionskante wird durch die empirische Abhängigkeit

$$\beta_{\text{ur}}(\omega) = \beta_0 e^{\frac{\omega - \omega_0}{\Delta\omega(T)}} \quad (2.43)$$

beschrieben. Die Frequenz ω_0 liegt meist nahe bei der Frequenz der Energielücke E_g/\hbar und $\Delta\omega(T)$ gibt die Breite des „tails“ an. β_0 , ω_0 und $\Delta\omega(T)$ sind Anpassparameter, die aus dem Experiment zu bestimmen sind

3.6 Exzitonen

Interbandübergänge sind mit der Generation von Elektron-Loch-Paaren durch elektromagnetische Strahlung verbunden. Die Eigenschaften des angeregten Elektrons im Leitungsband und des im Valenzband entstehenden Lochs wurden bisher im Rahmen des Einelektronenmodells interpretiert, wobei man den angeregten Ladungsträgern Eigenschaften zuweist, die aus der Bandstruktur des Grundzustands abgeleitet werden. Mit der Bildung eines Elektron-Loch-Paares geht das elektronische System aber in einem angeregten Zustand über, und die Beschreibung im Rahmen des Grundzustandes wird fragwürdig. Zur Beschreibung des angeregten Zustandes müssen Vielteilcheneinflüsse berücksichtigt werden, da das Entfernen eines Elektrons aus dem Valenzband zu einer kollektiven Reaktion des Elektronenensembles führt. In einfachster Näherung können bei der Elektron-Loch-Generation Vielteilcheneffekte berücksichtigt werden, indem man die Bindung zwischen dem angeregten Elektron im Leitungsband und dem zurückbleibenden Loch im Valenzband durch die Coulomb-Wechselwirkung in die Betrachtung einbezieht. Im kollektiven Bild werden gebundene Elektron-Loch-Paare auch als Exzitonen bezeichnet [Ell. 1957, Kit. 1996, Kli., 1997, Yu 1996]. In den meisten Halbleitern bilden sich so genannte Wannier-Mott-Exzitonen aus, die verhältnismäßig schwach gebunden sind. Der Grund hierfür ist die relativ großen dielektrischen Konstanten in diesen Materialien, die die Coulomb-Wechselwirkung abschirmen.

Das gebundene Elektron-Loch-Paar bildet einen Wasserstoff-artigen Komplex mit stationären Zuständen und einem Kontinuumspektrum. Wenn man die Bewegung des Komplexes vernachlässigt, ergibt sich für das stationäre Energiespektrum des Exzitons

$$E_{\text{exc}} = E_c - \frac{13,6\text{eV}}{j^2} \frac{\mu}{m_e} \frac{1}{\epsilon^2}, \quad (2.44)$$

wobei μ die reduzierte Masse aus den effektiven Massen des Leitungs- und Valenzbandes ist (siehe Gleichung (2.34)). Im Rahmen des Exzitonenbildes sollte im Bereich der Bandkante eine Serie von diskreten Linien für Energien $\hbar\omega < E_g$ und für $\hbar\omega > E_g$ der Beitrag des Kontinuumspektrums beobachtbar sein. Infolge von Dämpfungs- oder Ionisationsprozessen werden charakteristische Exzitonenlinien für Volumenproben bei Raumtemperatur nicht beobachtet, dennoch sind Exzitoneninflüsse auf die Interbandprozesse generell nicht vernachlässigbar [Stu. 1962].

Eine Betrachtung über den Beitrag der Kontinuumszustände zum Imaginärteil der dielektrischen Funktion liefert das Ergebnis

$$\epsilon''_{\text{exc}}(\omega) = A \frac{\sqrt{\hbar\omega - E_g}}{(\hbar\omega)^2} \frac{\alpha e^\alpha}{\sinh\alpha}, \quad (2.45)$$

wobei

$$\alpha = \pi \sqrt{\left| \frac{R^*}{\hbar\omega - E_g} \right|}. \quad (2.46)$$

A ist ein Skalierungsparameter und $R^* = 13,6eV\mu/\epsilon^2$ ist die Rydberg-Konstante des Exzitons. Im Grenzfall $\alpha \rightarrow 0$ geht Gleichung (2.45) in

$$\epsilon''_{\text{direkt}}(\omega) = A \frac{\sqrt{\hbar\omega - E_g}}{(\hbar\omega)^2} \quad (2.47)$$

über, dies entspricht dem Grenzfall (Gleichung (2.35)) eines direkten Interbandübergangs in Einteilchennäherung.

III. Aufbau und Funktionsweise eines Fourier-Spektrometers

1. Das Grundprinzip der Fourier-Transformationspektroskopie

Die Fourier-Transformationspektroskopie ist eine interferometrische Methode zur spektralen Analyse von elektromagnetischen Wellen, die in einem weiten Spektralbereich vom fernen Infrarot bis zum Ultravioletten eingesetzt werden kann. Die Grundlage aller Fourier-Spektrometer bildet das Zweistrahlinterferometer vom Michelson-Typ (Abb. 4.1).

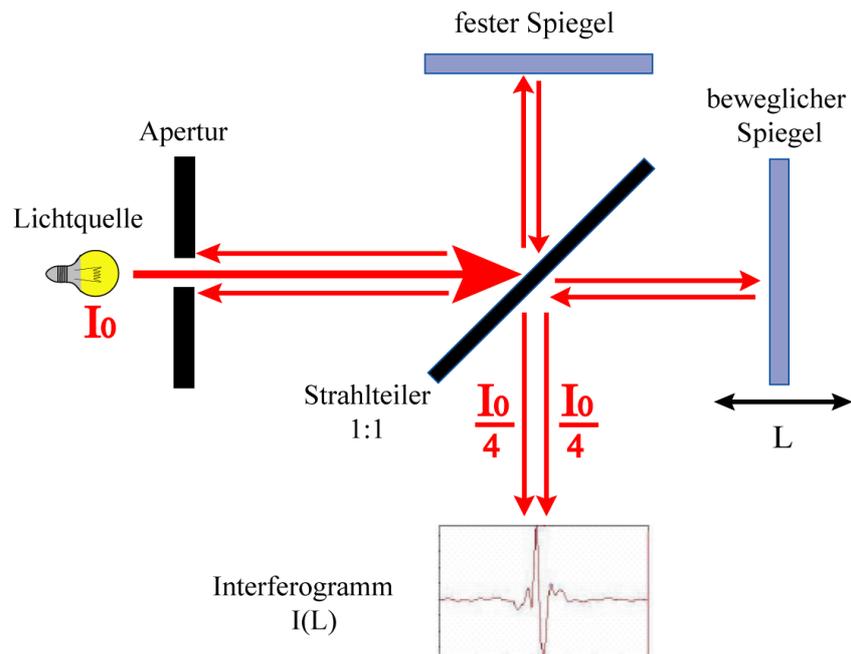


Abb. 4.1: Zweistrahlinterferometer nach Michelson mit Lichtquelle, Blende, Strahlteiler und einem festen und einem beweglichen Spiegel. Im Falle eines idealen Strahlteilers (Teilverhältnis 1:1) wird die von der Lichtquelle abgestrahlte Intensität I_0 in zwei Teilstrahlen mit gleichen Intensitäten $I_0/4$ aufspalten. Die beiden Teilstrahlen interferieren, wobei die Phasenverschiebung durch den optischen Wegunterschied L über den beweglichen Spiegel eingestellt wird.

Mit dem Zweistrahlinterferometer wird ein Interferogramm des zu untersuchenden Lichtes erzeugt und mit einem Detektor aufgenommen. Das Interferogramm beinhaltet alle spektralen Informationen des Lichtes. Durch eine Fourier-Transformation kann aus dem Interferogramm das Spektrum des Lichtes berechnet werden. Im Folgenden wird kurz das Grundprinzip der Fourier-Transformationspektroskopie skizziert. Für tiefere Betrachtungen wird auf entsprechende Spezialliteratur verwiesen [Bel. 1972, Brig. 1974].

Die Superposition zweier kohärenter, monochromatischer Lichtbündel gleicher Intensität führt an einem festen Ort zu einem elektrischen Feldvektor

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{E}_0}{2} [\cos(\omega t - 2\pi\nu L) + \cos(\omega t)] = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t - \pi\nu L) \cos(\pi\nu L), \quad (4.1)$$

wobei $E_0/2$ die Amplitude des elektrischen Feldvektors eines Teilbündels, ω die Lichtfrequenz, t die Zeit, L der optische Wegunterschied der Teilstrahlen, und ν die Wellenzahl ($1/\text{Wellenlänge}$) ist. Für die Lichtintensität folgt mit $I_0 = \sqrt{\epsilon_0/\mu_0} E_0^2/2$

$$I(L) = I_0 \cos^2(\pi \nu L) = \frac{1}{2} I_0 [1 + \cos(2\pi \nu L)]. \quad (4.2)$$

Bei einer polychromatischen Lichtwelle erweitert sich Gleichung (4.2) auf

$$I(L) = \frac{1}{2} \int_0^\infty S(\nu) [1 + \cos(2\pi \nu L)] d\nu. \quad (4.3)$$

Hierbei ist $S(\nu)$ die spektrale Intensitätsverteilung der Lichtquelle. Die Gleichung (4.3) beschreibt die am Detektor auftretende Intensität als Funktion des optischen Wegunterschiedes L der interferierenden Strahlen. Man nennt $I(L)$ auch „Interferogrammfunktion“. Ihr globales Maximum bei $L = 0$ wird auch als „Weißlicht-Peak“ bezeichnet. Aus der gemessenen Interferogrammfunktion $I(L)$ kann durch eine Fourier-Transformation die gesuchte spektrale Verteilung der Lichtquelle $S(\nu)$ berechnet werden:

$$S(\nu_0) = \frac{4}{\pi} \int_0^\infty I(L) e^{-i2\pi\nu_0 L} dL = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\nu S(\nu) \left[\underbrace{\int_0^\infty e^{-i2\pi\nu_0 L} dL}_{\pi\delta(\nu_0)} + \underbrace{\int_0^\infty \cos(2\pi\nu L) e^{-i2\pi\nu_0 L} dL}_{\frac{\pi}{2}(\delta(\nu-\nu_0) + \delta(\nu+\nu_0))} \right], \quad (\nu_0 \neq 0). \quad (4.4)$$

Aus dem dargestellten Grundprinzip ergeben sich zwei wichtige Vorteile der Fourier-Transformationspektroskopie:

- Es kann nahezu die gesamte Lichtintensität auf den Detektor treffen, da für die Messung nicht einzelne spektrale Bereiche über einen Spalt ausgeblendet werden müssen (Energievorteil).
- Mit einem Messvorgang wird (theoretisch) der gesamte spektrale Bereich erfasst (Multiplexvorteil). Bei gleicher Messzeit T entfällt in der dispersiven Spektroskopie auf jeden der N Messpunkte nur die Zeit von $T' = T/N$. Das Signal-Rauschverhältnis der Fourierspektroskopie ist entsprechend um den Faktor \sqrt{N} besser.

In der Praxis ergeben sich für die Fourier-Transformationspektroskopie folgende Einschränkungen:

- Das Interferogramm kann nur bis zu einem endlichen L_{\max} gemessen werden.
- Durch die Digitalisierung des Interferogramms sind nur diskrete Stützstellen der Interferogrammfunktion bekannt.
- Das reale Interferogramm besitzt im Gegensatz zu Gleichung (4.3) eine gewisse Asymmetrie.
- Die Linearität des Detektors ist auf einen kleinen Aussteuerbereich beschränkt, so dass leicht Abweichungen zwischen dem erfassten Interferogramm und dem tatsächlichen Interferogramm auftreten können.

Da die Interferogrammfunction nur bis zu einem L_{\max} bekannt ist, kann der Grenzübergang zur δ -Funktion in Gleichung (4.4) nicht vollzogen werden. Für eine monochromatische Welle erhält man aus der (unvollständigen) Fourier-Transformation

$$S(\nu) \propto \int_0^{L_{\max}} \cos(2\pi L) \cdot \cos(2\pi\nu_o L) dL = \frac{\sin[2\pi(\nu_o - \nu)L_{\max}]}{2\pi(\nu_o - \nu)}. \quad (4.5)$$

Um zwei monochromatische Linien im Spektrum trennen zu können, müssen sie mindestens einen Abstand von

$$\Delta\nu = |\nu_o - \nu| = \frac{3}{4L_{\max}} \approx \frac{1}{L_{\max}} \quad (4.6)$$

besitzen. Das Auflösungsvermögen eines Fourier-Transformationspektrometers ist also umgekehrt proportional zur maximal erreichbaren optischen Wegdifferenz der interferierenden Strahlen.

Die nur endliche Integration über die Interferogrammfunction bringt nicht nur eine eingeschränkte Auflösung mit sich. Wie die Gleichung (4.5) zeigt, treten im berechneten Spektrum einer monochromatischen Welle auch unphysikalische Nebenmaxima („Leakages“) auf. Die Ursache liegt im abrupten Abbruch der Interferogrammfunction an der Integrationsgrenze. Der Effekt kann durch *Apodisation* unterdrückt werden. Darunter versteht man, dass die Interferogrammfunction vor der Fourier-Transformation mit einer weiteren Funktion (der Apodisationsfunktion) multipliziert wird (dies entspricht mathematisch einer Faltung). Diese ist so gestaltet, dass an den Integrationsgrenzen ein möglichst „weicher“ Übergang zu Null erfolgt. Durch Apodisation wird aber das Auflösungsvermögen weiter reduziert.

Die diskrete Abtastung des Interferogramms ermöglicht keine eindeutige Abbildung auf die digitalisierte Interferogrammfunction. Ist ΔL das Abtastintervall, so wird lediglich der Bereich von $\nu = 0$ bis

$$\nu_{\max} = \frac{1}{2\Delta L} \quad (4.7)$$

eindeutig digitalisiert. Interferogramme höherer Frequenzen als ν_{\max} werden bei der Digitalisierung auf Interferogramme aus dem genannten Frequenzintervall abgebildet. Spektrale Anteile, die oberhalb ν_{\max} liegen, werden also nach der Digitalisierung dem Spektrum unterhalb von ν_{\max} aufaddiert („Aliasing“). Um den Aliasing-Effekt verlässlich zu unterdrücken, muss durch entsprechende Filter sichergestellt sein, dass oberhalb von ν_{\max} keine Intensitäten vom Detektor erfasst werden.

Da die Fourier-Transformation nur diskret durchgeführt wird, ist das errechnete Frequenzspektrum ebenfalls von diskreter Natur. Dies kann sich negativ auswirken, wenn das Maximum schmalbandiger Spektrallinien genau zwischen zwei Stützpunkten des Frequenzspektrums liegt. Im berechneten Spektrum erscheint die Frequenzbande „gekappt“ („Picket-fence-Effekt“). Dieser Effekt lässt sich durch eine Steigerung der Auflösung beheben. Ist dies nicht möglich, da die maximale apparative Auflösung bereits erreicht ist oder die für eine höhere Auflösung erforderliche höhere Messzeit nicht in Kauf genommen werden kann, lässt sich der Effekt durch eine spezielle Interpolationsmethode kompensieren. Zu diesem Zweck wird dem gemessenen Interferogramm eine Folge von Nullen angehängt („Zerofilling“). Das so vergröß-

Berte Interferogramm besitzt zwar keine zusätzliche physikalische Information, die erhöhte Anzahl an Punkten führt aber zu einer entsprechend höheren Punktdichte im berechneten Spektrum nach der Fourier-Transformation. Das Zerofilling ist herkömmlichen Interpolationsmethoden im Frequenzspektrum durch Polynome überlegen, da es keine unphysikalischen Nebenmaxima erzeugt.

Die ideale Interferogrammfunktion aus Gleichung (4.3) ist eine gerade Funktion, das heißt, sie ist gegenüber der y-Achse durch den Punkt $L = 0$ spiegelsymmetrisch. Durch folgende Ursachen besitzt die reale Interferogrammfunktion jedoch nie die genannte Symmetrie:

- Bei der Digitalisierung des Interferogramms fällt praktisch nie eine Stützstelle genau auf den „Weißlicht-Peak“. Dies führt zu einem asymmetrischen Verlauf der digitalisierten Interferogrammfunktion.
- Durch Phasenverschiebungen im optischen System ist das Interferogramm selbst geringfügig asymmetrisch.

Die Asymmetrie führt bei einer Fourier-Transformation zu einem komplexwertigen Spektrum:

$$C(\nu) = S(\nu) + i Q(\nu). \quad (4.8)$$

Der frequenzabhängige Phasenwinkel

$$\psi(\nu) = \arctan\left(\frac{Q(\nu)}{S(\nu)}\right) \quad (4.9)$$

bildet das *Phasenspektrum*. Mit dem bekannten Phasenwinkel kann man das Spektrum korrigieren und erhält:

$$S'(\nu) = \operatorname{Re}\left[C(\nu)e^{-i\psi(\nu)}\right]. \quad (4.10)$$

Diese Art der Phasenkorrektur wird *Mertz-Methode* genannt. Das korrigierte Spektrum $S'(\nu)$ ist in diesem Fall gleichwertig zum einfacher zu berechnenden Leistungsspektrum

$$P(\nu) = \sqrt{C(\nu) \cdot C^*(\nu)}. \quad (4.11)$$

Um die Zeit zum Abtasten des Interferogramms und für die numerische Integration minimal zu halten, beschränkt man sich in der Praxis für die Spektrenberechnung auf eine einseitige Interferogrammfunktion, das heißt, nur auf Werte für $L \geq 0$. Die Fourier-Transformation in Gleichung (4.4) ist bereits für ein solches einseitiges Interferogramm geschrieben. Für die Berechnung des Phasenspektrums nach Gleichung (4.9) wird hingegen auf ein kurzes zweiseitiges Interferogramm zurückgegriffen. Zu diesem Zweck tastet man auch einige hundert Punkte vor dem Weißlicht-Peak (also für $L < 0$) ab. Ein kleiner Bereich um den Weißlicht-Peak beinhaltet folglich ein kurzes zweiseitiges Interferogramm (Abb. 4. 2).

Das durch Fourier-Transformation aus dem einseitigen Interferogramm berechnete Spektrum kann nun nach der Mertz-Methode [Gleichung (4.10)] phasenkorrigiert werden. Dabei wird auf das vorher aus dem zweiseitigen Anteil des Interferogramms berechnete Phasenspektrum zurückgegriffen. Das nach der Mertz-Methode korrigierte Spektrum ist nun nicht mehr gleichwertig zum Leistungsspektrum $P(\nu)$ [Gleichung (4.11)] (siehe Abb. 4.2).

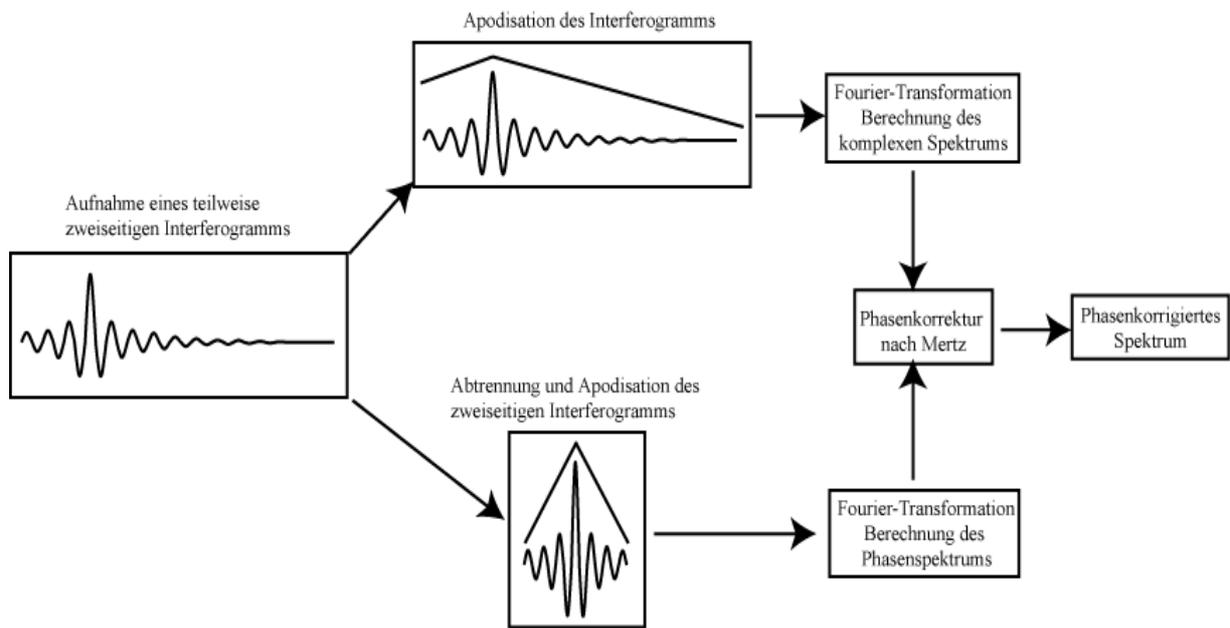


Abb. 4.2: Schema der Spektrenberechnung einschließlich Phasenkorrektur und Apodisation.

Nichtlinearitäten des Detektors führen zu einer falschen Wiedergabe des Intensitätsverhältnisses der einzelnen spektralen Komponenten des Spektrums. Bei einer starken Nichtlinearität treten auch harmonische Vielfache einer spektralen Komponente im errechneten Spektrum auf. Der Einfluss der Nichtlinearität des Detektors muss durch eine genaue Einstellung der Intensität auf den linearen Wirkungsbereich des Detektors verringert werden.

2. Das Fourier-Transformationspektrometer Vector 33

Im Praktikum steht ein FT-Spektrometer Vector 33 der Firma BRUKER zur Verfügung. Dieses Spektrometer ermöglicht mit der derzeitigen Ausstattung Messungen im Wellenzahlbereich $\nu = 300 - 15.000 \text{ cm}^{-1}$ bei einer maximalen Auflösung von $\Delta\nu = 0,3 \text{ cm}^{-1}$. Die Abb. 4.3 zeigt den optischen Aufbau des Spektrometers. Der Innenraum des Spektrometers kann mit Schutzgas gespült werden. Dadurch ist es möglich, den Einfluss der Atmosphäre mit ihren CO_2 - und H_2O -Absorptionsbanden auf die Spektren zu minimieren.

Zusätzlich zur Quellenstrahlung durchläuft auch das monochromatische Licht eines He-Ne-Lasers das Interferometer. Das Interferogramm des Lasers (eine fast reine \cos -Funktion) dient als Skalierung für die mechanische Position des Scanner-Spiegels. Die Nulldurchgänge des Laser-Interferogramms definieren die Punkte, an denen das gemessene Interferogramm der Probe digitalisiert wird. Da die Genauigkeit der Stützstellen bei der Digitalisierung sich nach der Fourier-Transformation in der Genauigkeit der Stützstellen im Frequenzspektrum widerspiegelt, besitzt das Vector 33 einen sehr präzisen Kalibrierungsmechanismus. Den Vorteil einer so genauen Kalibrierung nennt man auch *Connes-Vorteil*.

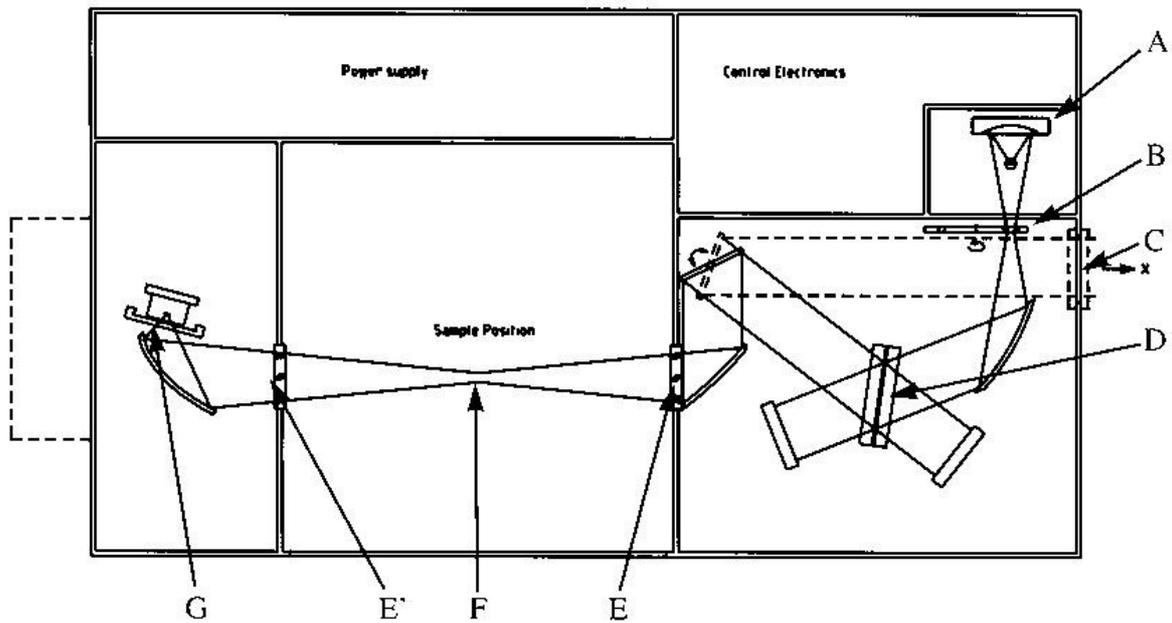


Figure 31: Optical Path (–) for Routine Operation and Using Exit Port (---)

	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. 4.3: Schematischer Aufbau und Strahlengang im Spektrometer Vector 33. Im Gegensatz zum Michelson-Interferometer sind Strahlteiler und Spiegel hier anders zueinander orientiert.

Für Messungen in unterschiedlichen Frequenzbereichen stehen insgesamt zwei Lichtquellen und zwei Strahlteiler zur Verfügung:

- Ein Globar-Stab (Siliziumcarbid) dient als Lichtquelle im mittleren Infrarot (MIR; $\nu = 300 \dots 8.000 \text{ cm}^{-1}$). Die Lichtemission basiert hier auf der thermischen Eigenstrahlung.
- Eine Wolframlampe dient als Lichtquelle im nahen Infrarot (NIR; $\nu = 1.000 \dots 15.000 \text{ cm}^{-1}$). Auch hier basiert die Lichtemission auf der thermischen Strahlung.
- KBr-Strahlteiler für das mittlere Infrarot ($\nu = 300 \dots 8.000 \text{ cm}^{-1}$).
- Quarz-Strahlteiler für das nahe Infrarot ($\nu = 1.000 \dots 15.000 \text{ cm}^{-1}$).

Das Spektrometer verfügt zurzeit nur über einen pyroelektrischen Detektor (DTGS) für das mittlere und das nahe Infrarot. Die Empfindlichkeit des DTGS-Detektors ist vergleichsweise gering, da er aber nicht gekühlt werden muss und einen weiten Spektralbereich bietet, eignet er sich insbesondere gut für schnelle Kontrollmessungen.

3. Zu beachtende Besonderheiten bei der Messung optischer Konstanten

Eine genaue Messung der optischen Konstanten von Halbleitermaterialien, die generell einen großen Brechungsindex haben, macht es erforderlich, die zwei folgenden Einflüsse zu berücksichtigen:

1. Änderung des Strahlverlaufs durch ein stark brechendes Material und damit einhergehend eine Änderung der vom Detektor registrierten Strahlintensität (Fokusverschiebung).
2. Durch die starke Reflexion der Probe bedingte Rückkopplung von Strahlung in das Interferometer (Streulichteffect).

Die Abb. 4.4 illustriert den Einfluss der Fokusverschiebung durch ein stark brechendes Material in der Probenkammer für eine Transmissionsmessung.

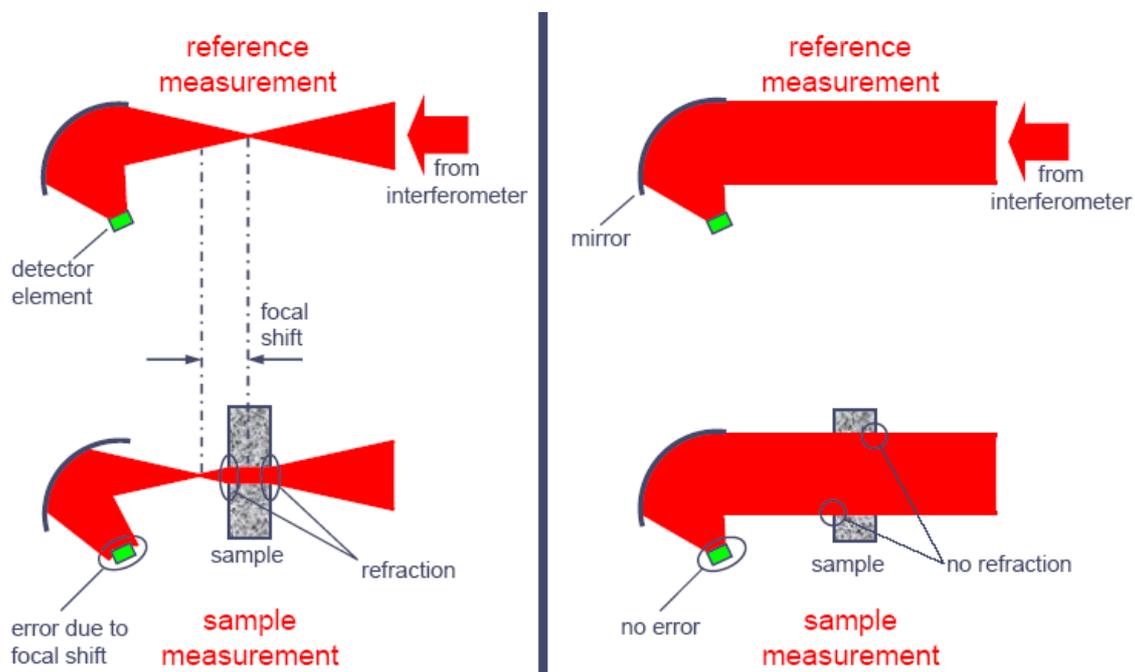
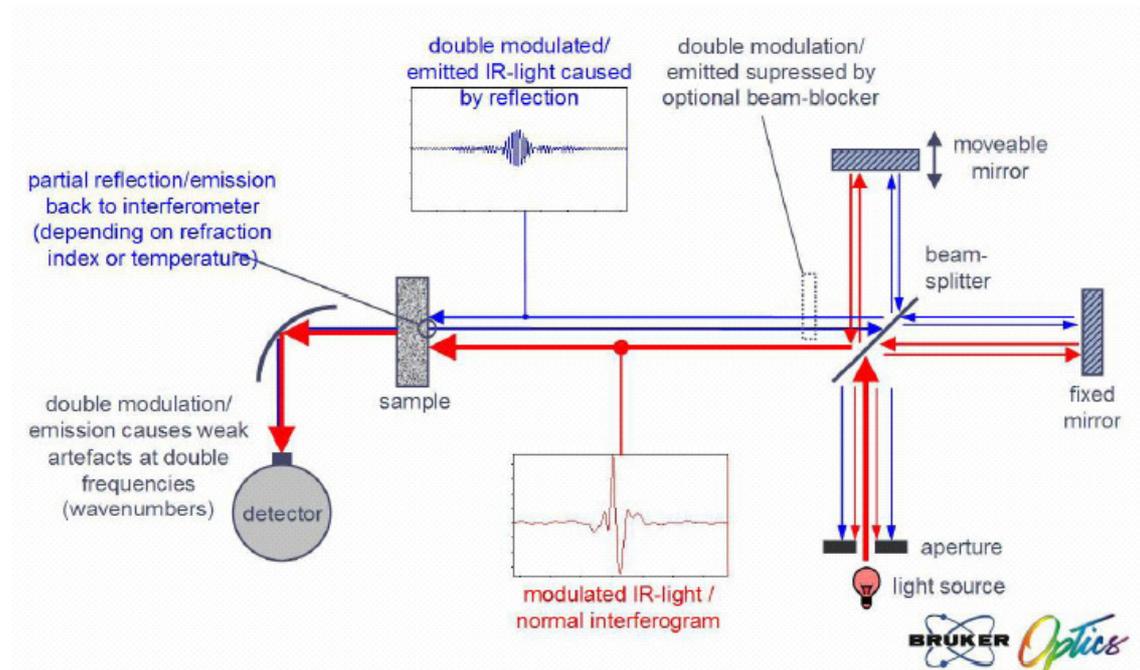


Abb. 4.4: a) Standard Transmissionsspektroskopie mit Probe im Fokus des Strahlengangs. b) Transmissionsspektroskopie mit Probe in einem parallelen Strahl.

Die Abb. 4.4 a) zeigt den üblichen Strahlverlauf einer fokussierenden Optik in der Probenkammer des Spektrometers. Wird eine stark brechende Probe in den Fokus eingebracht, kommt es durch das Material zu einer Fokusverschiebung. Die Abbildung des Strahlverlaufs auf den Detektor ändert sich dadurch. Werden normierte Messungen durchgeführt, d.h. vergleicht man die Transmissionen mit und ohne Probe, ist mit einem falschen Ergebnis für die normierte Transmission zu rechnen. Die Fokusverschiebung kann vermieden werden, wenn wie in b) mit einem Parallelstrahl gearbeitet wird.



Die Abb. 4.5 illustriert den Einfluss von Streulicht durch eine stark reflektierende Probe.

Abb. 4.5: Strahlverlauf in einem Fourier-Spektrometer mit stark reflektierender Probe. Die roten Pfeile markieren den Strahlverlauf ohne Probe, die blauen Pfeile zeigen die von der Probe rückreflektierten Anteile, die in das Spektrometer eingekoppelt werden.

Aufgrund der starken Reflexion $R \approx (n-1)^2/(n+1)^2$ der Probe wird ein Teil der auftreffenden Strahlung in das Interferometer rückgekoppelt. Dieser Anteil wird im Interferometer ein zweites Mal moduliert. Auch diese doppelt modulierten Anteile gelangen zum Detektor und werden registriert. Nach der Fourier-Transformation tauchen diese Strahlungsanteile als Artefakte bei der doppelten Energie auf (siehe Abb. 4.6).

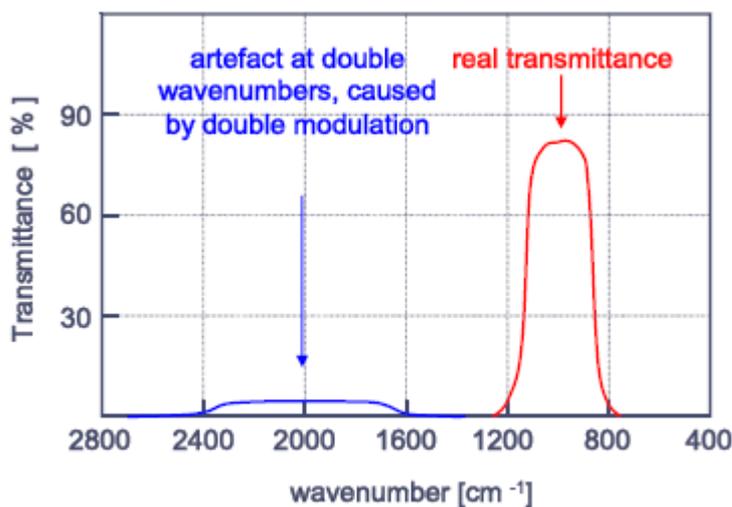


Abb. 4.6: Beispiel einer Transmissionsmessung für ein Bandpass-Filter ($800-1.200 \text{ cm}^{-1}$). Durch Rückreflexion von Strahlung in das Spektrometer entsteht ein Artefakt bei der doppelten Frequenz. Die Intensität des Artefakts hängt von dem Reflexionsvermögen der Probe ab.

Die Artefakte können durch geeignete Blenden (beam-blocker, siehe Abb. 4.5) weitestgehend vermieden werden.

IV. Literaturliste

Bell, R. J., 1972, *Introductory Fourier Transform Spectroscopy*, Academic Press.

Brigham, E. O., 1974, *The Fast Fourier Transform*, Prentice-Hall.

Dash, W. C., and R. Newman, 1955, *Intrinsic Optical Absorption in Single-Crystal Germanium and Silicon at 77 K and 300 K*, Phys. Rev. 99, 1151.

Dow, J. D., and D. Redfield, 1972, *Toward a Unified Theory of Urbach's Rule and Exponential Absorption Edges*, Phys. Rev. B 5, 594.

Dumke, W. P., 1963, *Optical Transitions Involving Impurities in Semiconductors*, Phys. Rev. 132, 1998.

Elliott, R. J., 1957, *Intensity of Optical Absorption by Excitons*, Phys. Rev. 108, 1384.

Grosse, P., 1979, *Freie Elektronen in Festkörpern*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.

Herrmann, R., und U. Preppernau, 1979, *Elektronen im Kristall*, Springer-Verlag, Wien, New York.

Heuer, Ute, 1993, *Computerunterstützte Messung von optisch angeregten Interbandübergängen*, Staatsexamensarbeit, Würzburg.

Horn, Claus-Peter, 1991, *Computerunterstützte Auswertung optischer Reflexionsspektren von Halbleitern zur Bestimmung optischer Parameter*, Diplomarbeit, Würzburg.

Kittel, C., 1996, *Einführung in die Festkörperphysik*, R. Oldenbourg Verlag, München, Wien.

Klingshirn, C. F., 1997, *Semiconductor Optics*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.

Macfarlane, G. G., and V. Roberts, 1955, *Infrared Absorption of Silicon Near the Lattice Edge*, Phys. Rev. 98, 1865.

Pankove, J. I., 1965, *Absorption Edge of Impure Gallium Arsenide*, Phys. Rev. 140, A2059.

Pfeiffer, Heinrich, 1979, *Optische Anregung von Interbandübergängen in den Halbleitern Silizium und Galliumarsenid*, Staatsexamensarbeit, Würzburg.

Weißmantel, Ch. und C. Hamann, 1981, *Grundlagen der Festkörperphysik*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften.

Wooten, S., 1972, *Optical Properties of Solids*, Academic Press, New York and London.

Spitzer, W. G., and H. Y. Fan, 1957, *Determination of Optical Constants and Carrier Effective Mass of Semiconductors*, Phys. Rev. 106, 882.

Stillman, G. E., T. S. Low, and B. Lee, 1985, *Photothermal Ionization Fourier Transform Spektroskopy of Shallow Donor States in III-V Semiconductors*, Solid State Commun. 53, 1041.

Sturge, M. D., 1962, *Optical Absorption of Gallium Arsenide between 0.6 and 2.75 eV*, Phys. Rev. 127, 768.

Sze, S. M., 1981, *Semiconductor Devices - Physics and Technology*, John Wiley & Sons, New York.

Yu, P. Y., and Manuel Cardona, 1996, *Fundamentals of Semiconductors - Physics and Materials Properties*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.

V. Messwertanalyse mit Mathematica

