



Tài liệu do thành viên Jam bond gửi vào 4/4/2009

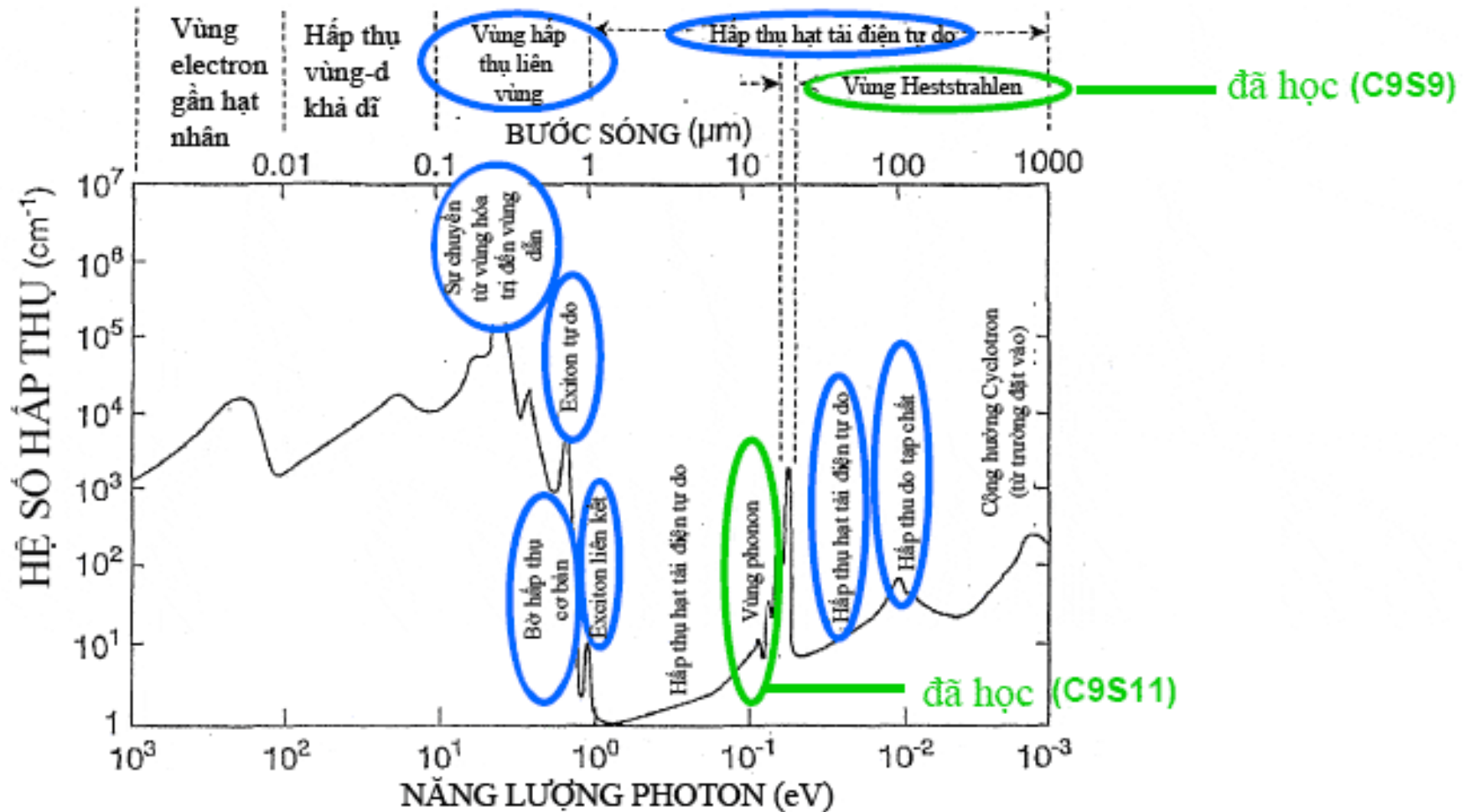
www.mientay.vn.com

Bạn có xin xem t i:

<http://nlo.optics.ucf.edu/hagan/OSE5312spring2008/OSE5312%20slides%20class%2012%20-%20Optical%20properties%20of%20semiconductors%201.ppt>



Chức năng nay: tương tác của ánh sáng với những trạng thái điện tử trong bán dẫn





mô tả tương tác của ánh sáng với các electron, cần phải mô tả trạng thái của electron

Phương trình Schrödinger mô tả chuyển động của vi hạt bằng hàm sóng Ψ

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$

Hamilton, cho biết mức năng lượng của hàm sóng

Chú ý rằng 'cao l'ần' năng lượng cao (nhất là với ánh sáng) và số photon chiếm giữ năng lượng của hàm sóng

Trong không gian tự do $V=0$ chúng ta tìm kiếm hàm sóng có dạng

$$\psi_k(\mathbf{r}) = A e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Đây xác suất tìm thấy hạt tại vị trí \mathbf{r} là $|\Psi|^2$ hoặc $\Psi \times \Psi^*$

So sánh: xác suất phát hiện ánh sáng là $|E(x,t)|^2$ hoặc $E \times E^*$



ng l ng và n ng l ng

H th c c i n:

N ng l ng $E = \frac{1}{2} mv^2$

ng l ng $p = mv = \sqrt{2mE}$

C h c l ng t :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) \quad \Psi_k(r) = Ae^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

N ng l ng $E = V + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m}$ ho c $E = \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m}$ khi $V=0$

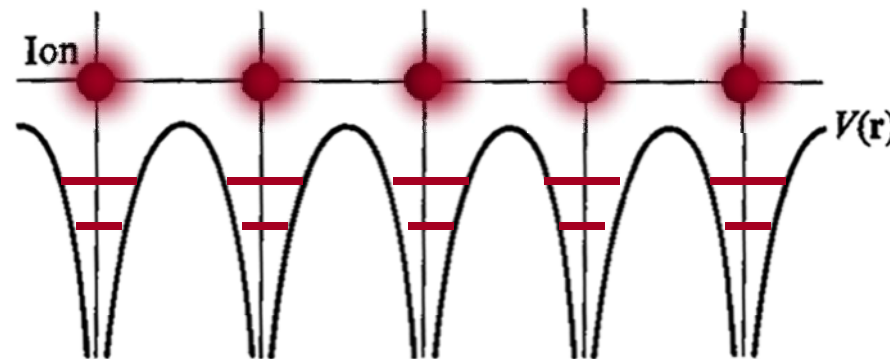
ng l ng $p = \sqrt{2mE} = \hbar k_e$

Chúng ta s nh n th y r ng vecto sóng c a photon th ng nh h n vecto sóng c a electron (λ_e vào c kho ng cách gi a các nguyên t)



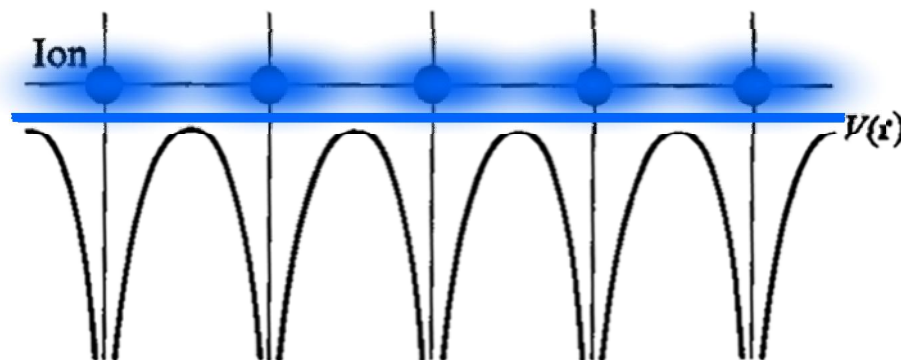
Bên trong chất rắn, các electron chuyển động trong thế năng tuần hoàn: $V(r) = V(r + a)$

E thấp \Rightarrow **Nghiệm liên kết** với xác suất thấp trong các nguyên tử



Những electron hóa trị

E cao \Rightarrow **Nghiệm truyền** với xác suất đáng kể trong các nguyên tử

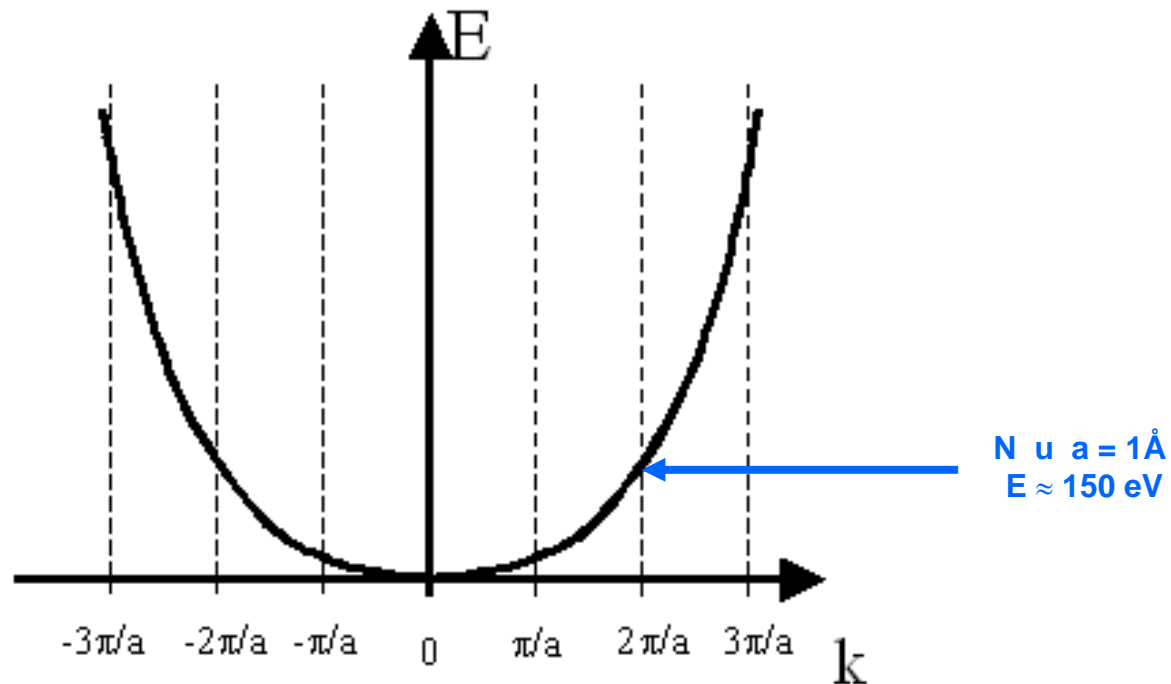


Những electron dẫn



Electron có bước sóng ngắn hơn nhiều so với ánh sáng khả kiến: $E = \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m}$

Những electron trong tinh thể (điều kiện cho 'thăng giáng liên kết r tự do')



Năng lượng của electron với bước sóng 1 Åstrom ≈ 150 eV

Năng lượng của photon với bước sóng 1 Åstrom ≈ 12 keV

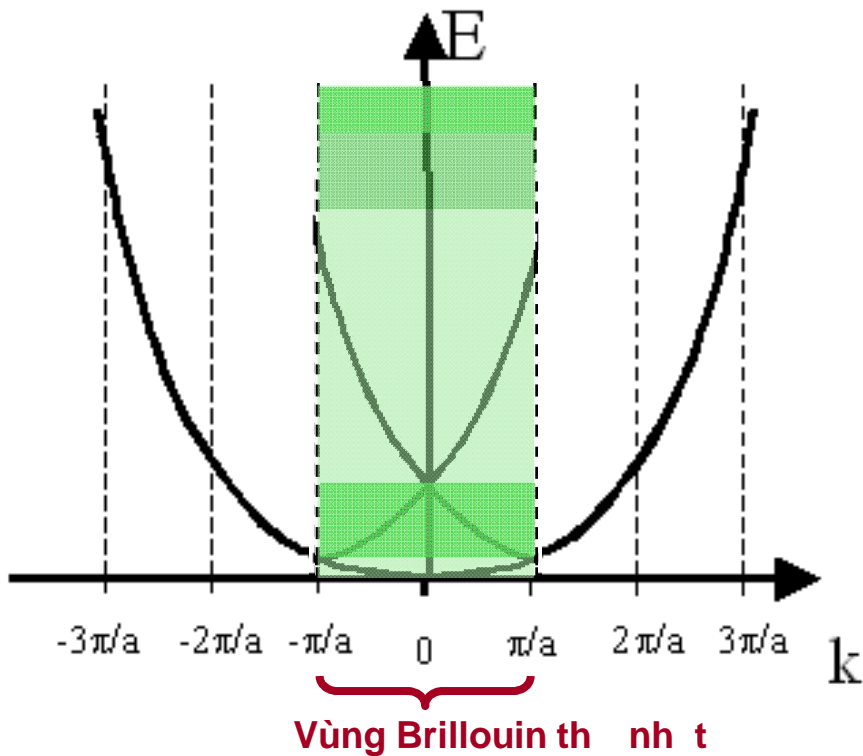
Giải vùng rụt gọn và giải vùng mở rộng



Nghiệm của phương trình Schrödinger có thể viết dưới dạng hàm Bloch:

$$\psi_k(r) = u_k(r)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Phương trình này có thể dùng để mô tả hành vi của electron có năng lượng cao (bước sóng ngắn) theo sự lan truyền pha của nguyên tử lân cận (có thể mô tả bởi k) và đóng góp của hàm sóng trong ô đơn vị [có thể mô tả bởi hàm $u_k(r)$]

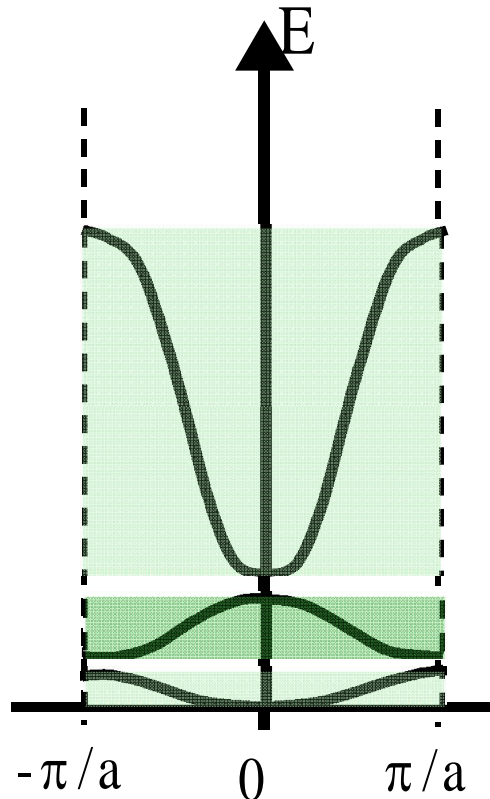


Trạng thái của hạt trong ô đơn vị làm nảy sinh **những vùng năng lượng**

Chúng ta có thể mô tả trạng thái của electron bằng những vectơ sóng k trong **vùng Brillouin** thực tế



Trong trường hợp bán dẫn hoàn toàn, 'lực' tại biên vùng dẫn là:



Nhưng vùng năng lượng không còn tuần hoàn nữa, nhưng có thể xem chúng có dạng parabol gần $k=0$. Có thể mô tả năng lượng theo vectơ sóng k như thể chúng dùng khối lượng hiệu dụng m^* :

$$E = \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m^*}$$

Chú ý: cong cao $\Rightarrow m^*$ nhỏ

'Parabol nhỏ = khối lượng hiệu dụng nhỏ'

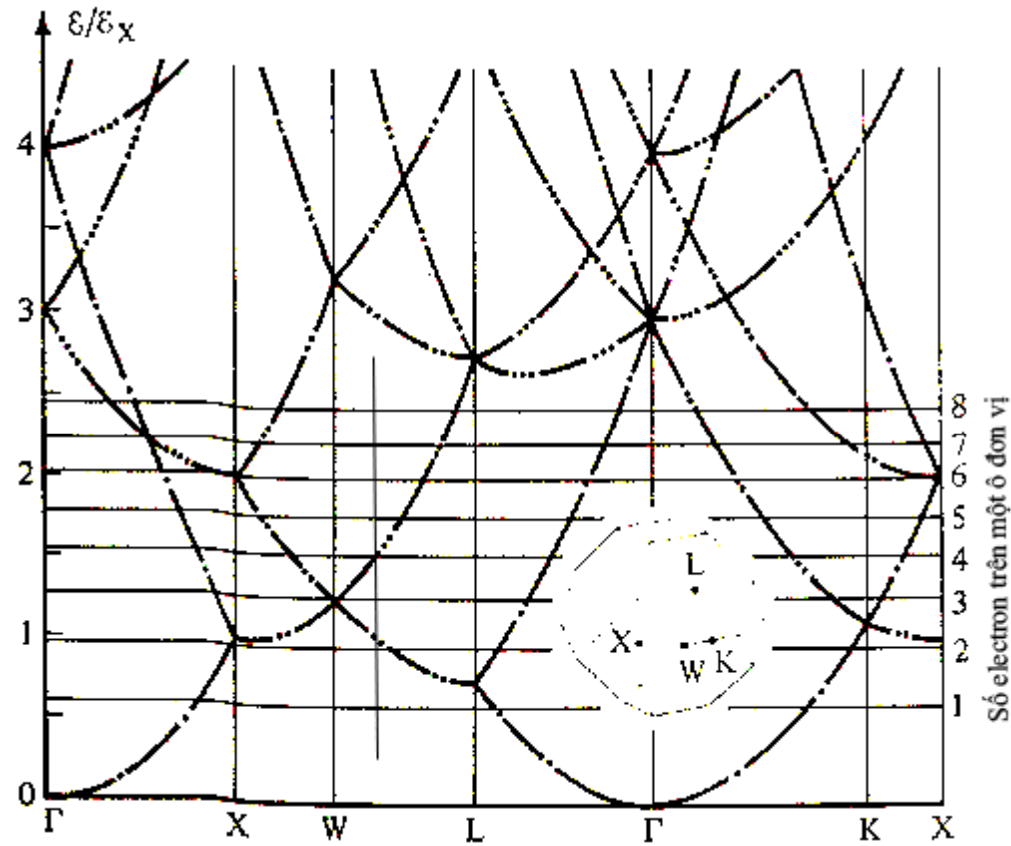
Điểm then chốt: cho dù năng lượng electron lớn, sẽ chênh lệch năng lượng do 'tác động' của các electron lân cận' chỉ vào bậc vài eV

Chú ý: th c t m i th không n gi n



Theo các h ãng khác nhau c a tinh th , th tu n hoàn s khác nhau

Ch ãng h ãn theo Ashcroft và Mermin (trang 161): i v i electron trong m ãng l p ph ãng tâm m t

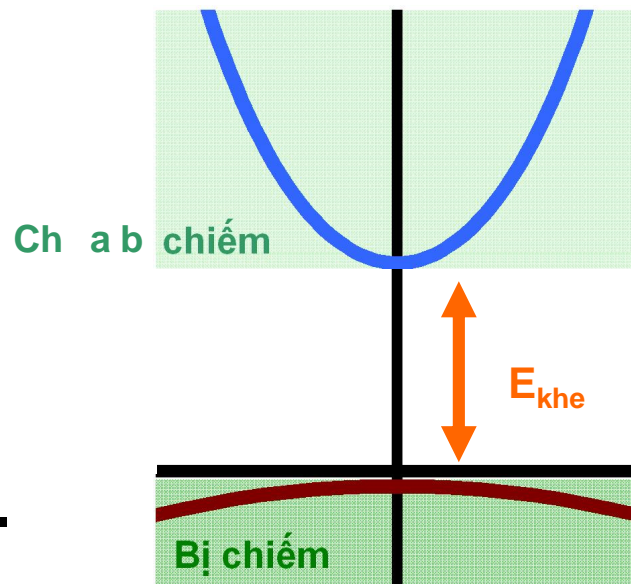
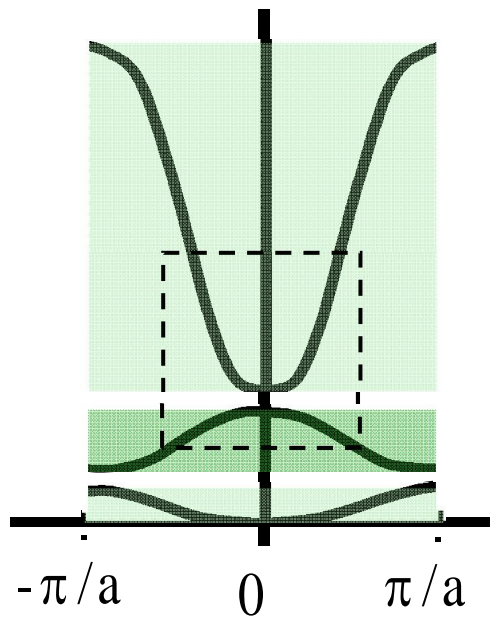


Nh ãng kí hi u d i tr c n m ãng bi u di n h ãng và l n c a k

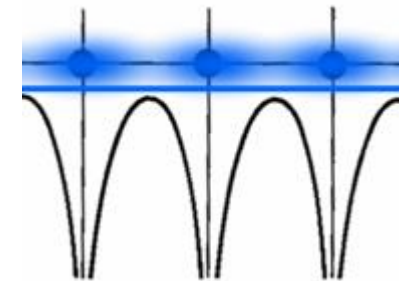
H p th vùng-vùng (i v i bán d n khe n ng l ng tr c ti p)



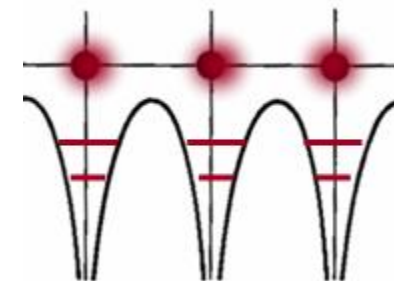
M t l ng electron xác nh làm n y sinh nh ng tr ng thái **b chi m** và nh ng tr ng thái **ch a b chi m**. Trong bán d n, nh ng tr ng thái b chi m n m các m c n ng l ng cao nh t **trong vùng hóa tr**. Nh ng tr ng thái ch a b chi m n m trong **vùng d n**.



Nh ng electron vùng d n



Nh ng electron vùng hóa tr



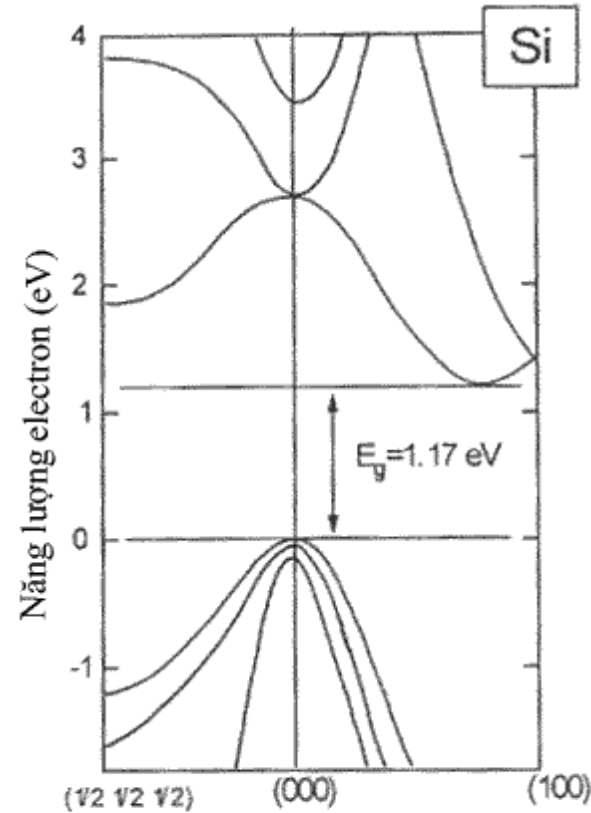
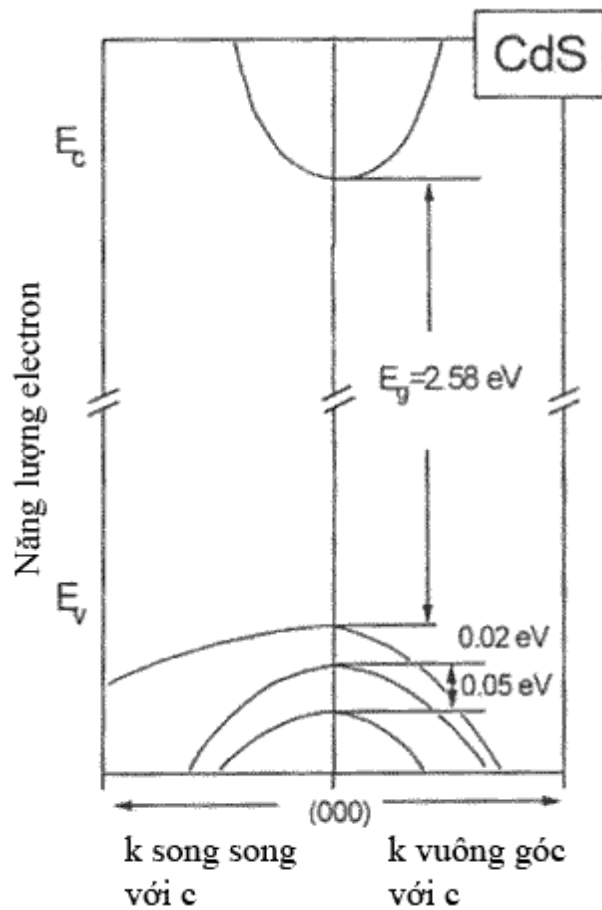
c g i là r ng khe

S chên h l ch n ng l ng gi a vùng d n và vùng hóa tr
n ng l ng c a bán d n

V t li u bán d n th ng có $E_{khe} < 4eV$, và i n môi th ng có $E_{khe} > 4eV$



Trong trường hợp ba chiều, giá trị E-k phụ thuộc vào hướng trong tinh thể



Nguồn: Tính chất quang học của tinh thể nano bán dẫn, Gaponenko

Tóm tắt những trạng thái



Một nguyên tử gồm hạt nhân ở trung tâm bao quanh bởi các electron

Trong chất rắn: những electron của các nguyên tử lân cận nhau có thể tương tác:

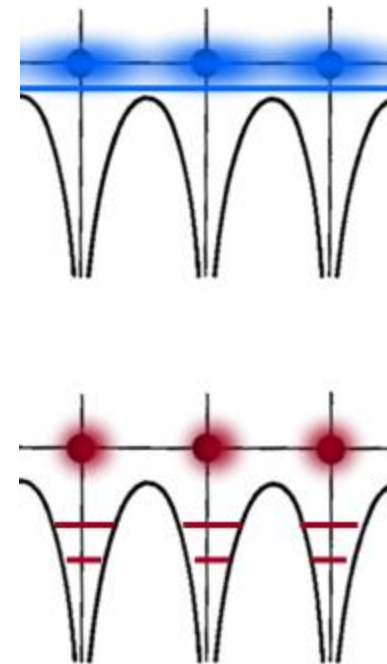
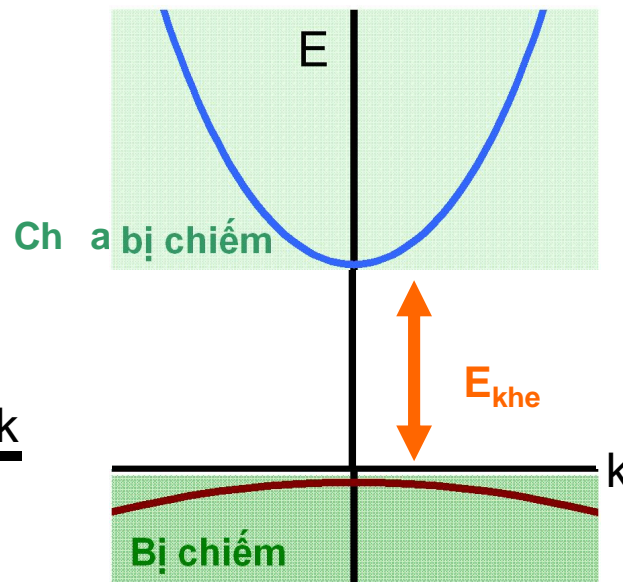
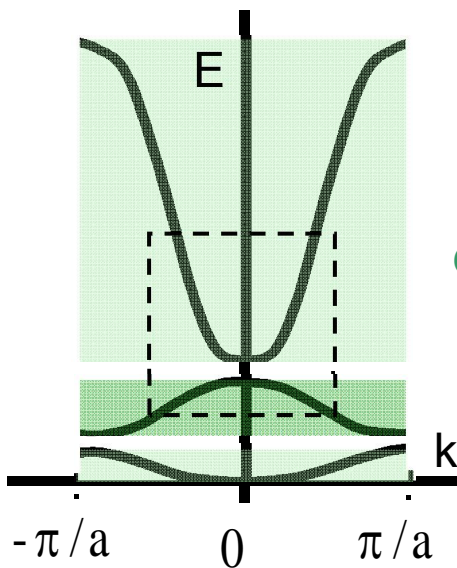
⇒ những mức năng lượng của electron biến đổi, dần dần hình thành **những**

vùng năng lượng

Trong bán dẫn, những trạng thái biến đổi như **vùng hóa trị**, và **vùng dẫn** của

những trạng thái của biến đổi.

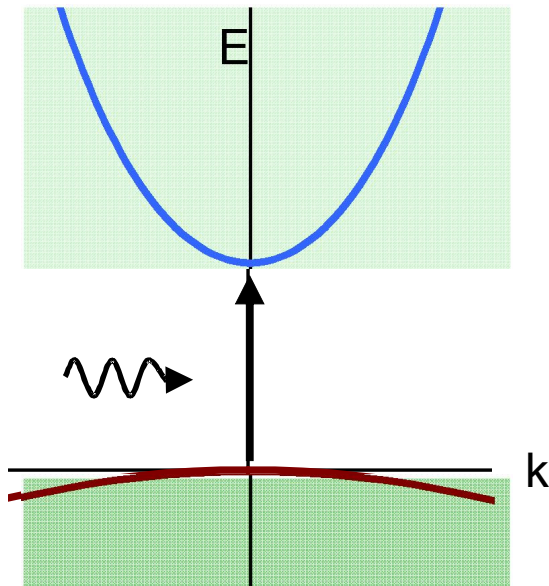
Những trạng thái theo: áp dụng quang học mô tả những tính chất của electron của chất rắn



Hấp thụ vùng-vùng trong bán dẫn khe năng lượng trực tiếp



Bán dẫn khe năng lượng trực tiếp có: Năng lượng vùng dẫn và vùng hóa trị cùng tại $k=0$



Ánh sáng có thể làm i n t d ch chuyển. Quá trình này ph i tuân theo nh luật bảo toàn năng lượng và năng lượng:

$$E_{\text{cui}} - E_{\text{u}} = E_{\text{phot}} \text{ và } \Delta k = \hbar k_{\text{phot}} \approx 0$$

(Photon: bước sóng dài cách xa các nguyên tử $\Rightarrow k_{\text{phot}} \ll \pi/a$)

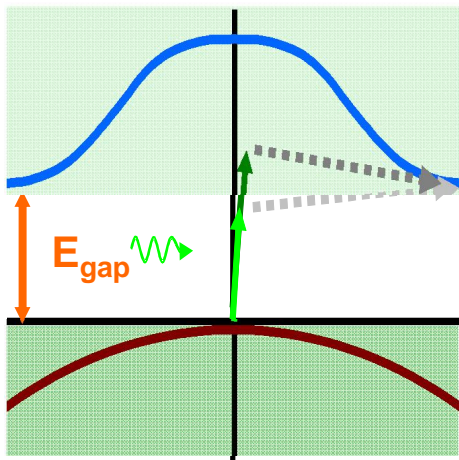
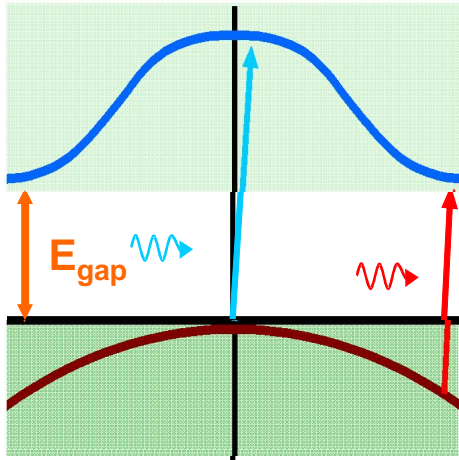
Bán dẫn khe năng lượng trực tiếp

Nhưng photon với năng lượng $E < E_{\text{khe}}$ không thể làm cho electron hóa trị nhảy lên vùng dẫn \Rightarrow hấp thụ bất lợi với $E_{\text{phot}} = E_{\text{khe}}$

Hấp thụ vùng-vùng trong bán dẫn khe năng lượng gián tiếp



Bán dẫn khe năng lượng gián tiếp có: các vùng dẫn và vùng hóa trị không xuất hiện cùng giá trị k



Nhận chuyển dịch trực tiếp có thể xảy ra khi $\Delta k \approx 0 \Rightarrow$ Sự hấp thụ vùng-vùng một cách trực tiếp xảy ra nhiều khi $E > E_{\text{khe}}$

Khả năng khác: năng lượng và năng lượng có thể được bảo toàn bằng cách hấp thụ photon và *ng* *th* *i* *h* *p* *th* *h* *o* *c* *phát* *ra* *m* *t* *phonon*:

Nhận chuyển dịch gián tiếp có thể xảy ra với 'sự tham gia của một phonon'

Chỉ số di n này là nhận chuyển dịch trực tiếp quang học.

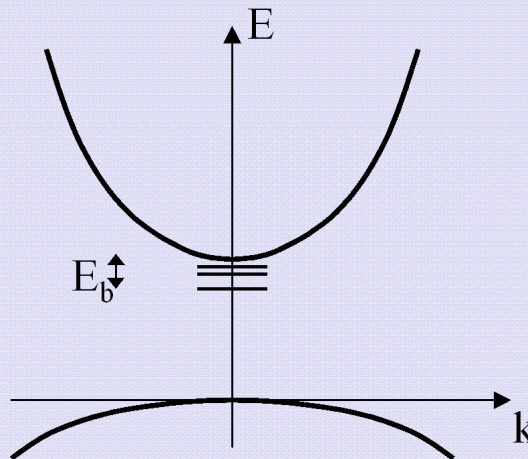
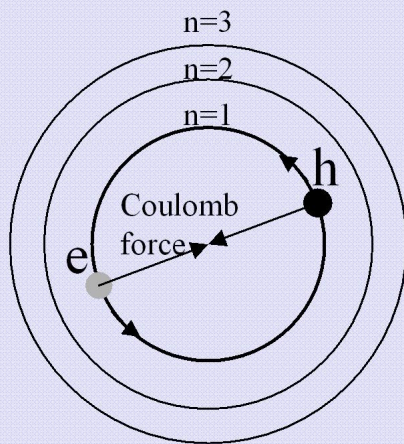
- Trong quá trình phát phonon một phonon có thể ra
- Trong quá trình hấp thụ phonon một phonon bị mất đi



Excitons là nh ng tr ng th ai electron-l tr ng k t h p:

M t electron t do v l tr ng t do (tr ng th ai tr ng trong v ng h a tr)
t c d ng l c Coulomb v i nhau:

nh ng tr ng th ai li n k t gi ng hidro c th x y ra: nh ng tr ng th ai exciton



E_b là năng lượng liên kết
exciton = năng lượng
đ ược gi ai ph ng trong s u
h nh th nh exciton, ho c
n ng l ng c n đ ể phá v i
exciton

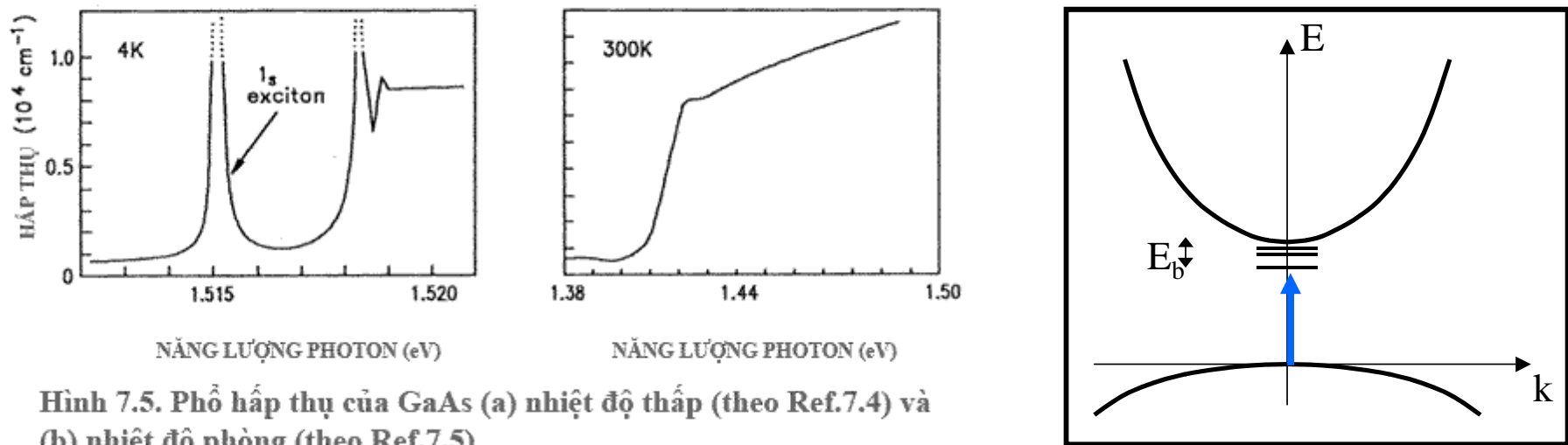
H m s ng c a electron v l tr ng gi ng nh c a electron t do v l tr ng t do

Chú ý: exciton c th di chuy n trong tinh th , t c là *không li n k t v i nguy n t ri ng bi t n o!*



Ánh sáng có thể kích thích một electron từ vùng hóa trị và tạo ra một exciton với năng lượng nhỏ hơn một chút so với khe năng lượng

$$\Rightarrow \text{Xét h p th t i } E_{\text{phot}} = E_{\text{khe}} - E_b \text{ (h p th nh d i } E_{\text{khe}})$$



Hình 7.5. Phổ hấp thụ của GaAs (a) nhiệt độ thấp (theo Ref.7.4) và (b) nhiệt độ phòng (theo Ref.7.5)

Năng lượng liên kết Exciton có thể nằm vào cỡ vài meV

Năng lượng chuyển động nhiệt tại nhiệt độ phòng: $kT \sim 25 \text{ meV}$

\Rightarrow exciton nhanh chóng tách ra tại nhiệt độ phòng

\Rightarrow Phổ hấp thụ mờ nhạt/biến mất nhiệt độ cao hơn



Ga: 3 electron hóa trị

Si: 4 electron hóa trị

As: 5 electron hóa trị

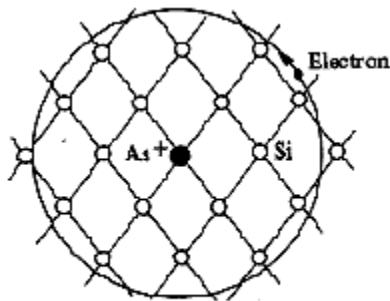
IA																		0
1 H 1.00794	IIA																2 He 4.00260	
3 Li 6.941	4 Be 9.01218											5 B 10.81	6 C 12.011	7 N 14.0067	8 O 15.9994	9 F 18.998403	10 Ne 20.179	
11 Na 22.98977	12 Mg 24.305	IIIB		IVB	VB	VIB	VII B	VIII		IB		IIB	13 Al 26.98154	14 Si 28.0855	15 P 30.97376	16 S 32.06	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.0983	20 Ca 40.08	21 Sc 44.9559	22 Ti 47.88	23 V 50.9415	24 Cr 51.996	25 Mn 54.9380	26 Fe 55.847	27 Co 58.9332	28 Ni 58.69	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.9216	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80	
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.9059	40 Zr 91.22	41 Nb 92.9064	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.9055	46 Pd 106.42	47 Ag 107.8682	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.9045	54 Xe 131.29	
55 Cs 132.9054	56 Ba 137.33	57-71 Rare Earths	72 Hf 178.49	73 Ta 180.9479	74 W 183.85	75 Re 186.207	76 Os 190.2	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.9665	80 Hg 200.59	81 Tl 204.383	82 Pb 207.2	83 Bi 208.9804	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)	
87 Fr (223)	88 Ra 226.0254	89-103 Acti- nides	104 Rf (261)	105 Ha (260)	106 (263)	107 (262)	108 (265)	109 (266)										

Rare Earths (Lanthanides)	57 La 138.9055	58 Ce 140.12	59 Pr 140.9077	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.9254	66 Dy 162.50	67 Ho 164.9304	68 Er 167.26	69 Tm 168.9342	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967
------------------------------	----------------------	--------------------	----------------------	--------------------	-------------------	--------------------	--------------------	--------------------	----------------------	--------------------	----------------------	--------------------	----------------------	--------------------	---------------------

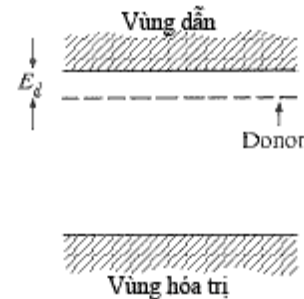
Actinides	89 Ac 227.0278	90 Th 232.0381	91 Pa 231.0359	92 U 238.0289	93 Np 237.0482	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)
-----------	----------------------	----------------------	----------------------	---------------------	----------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------



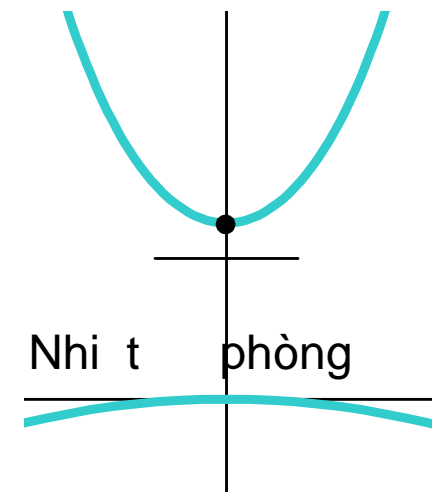
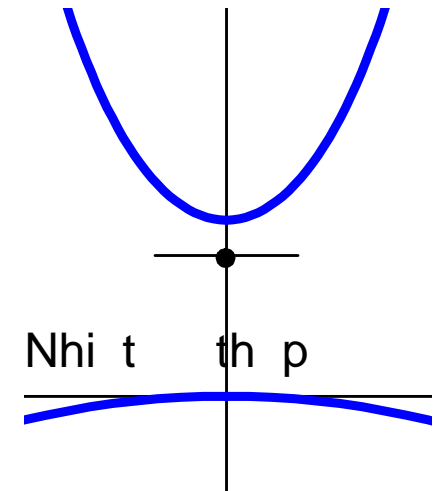
Pha t p ch t As vào Si: electron hóa tr đ ra liên k t r t y u



Hình 6.8 Quỹ đạo của electron quanh một nguyên tử donor



Hình 6.9 Mức donor trong bán dẫn



Nhiệt độ p: electron liên k t y u v i donor. Ánh sáng n ng l ã ng th p c ã ng có th ã kích thích electron donor nh y vào vùng d ã n

N ã ng l ã ng liên k t E_d có ã l ã n c k T t i nhi t ã phòng ('RT'):

T i nhi t ã phòng h u nh ã nh ã ng electron liên k t ã c ã a vào vùng d ã n

⇒ t p ch t **b ion hóa hoàn toàn t i nhi t ã phòng**: As là m t **donor** trong Si

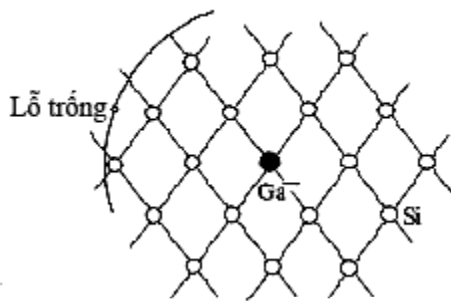
T i nhi t ã phòng nh ã ng d ch chuy ã n nh ã th ã th ã ng quá r ã ng, không th ã quan sát ã c

Mức Acceptor

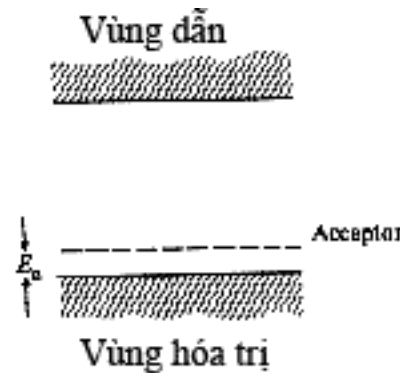


Pha nh ng nguyên t t p ch t Ga vào Si : tr ng thái tr ng i n t ngay trên vùng hóa tr: t i nhi t xác nh, electron hóa tr c a Si có th nh y vào l p m c acceptor

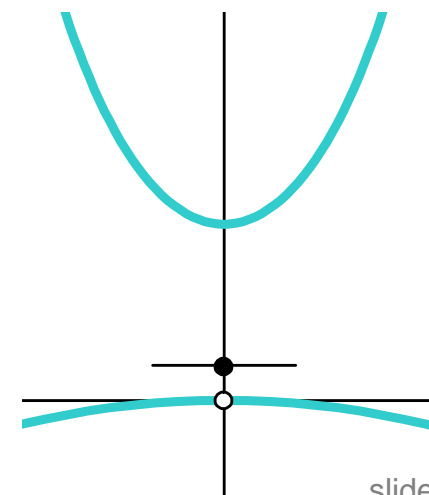
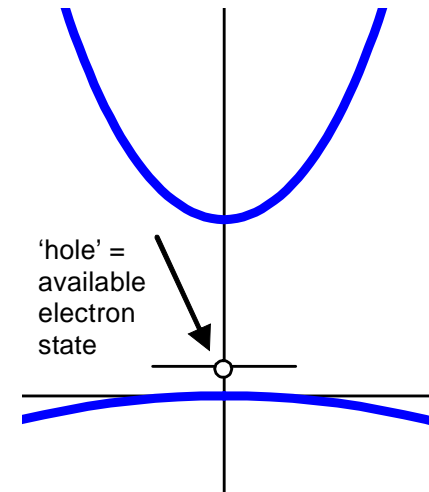
⇒ L tr ng (tr ng thái hóa tr ch a b chi m) quay quanh lon t p ch t Ga



Hình 6.10 Tạp chất Ga trong tinh thể Si
Lỗ trống dư định cư trong tinh thể



Hình 6.11 mức acceptor trong bán dẫn



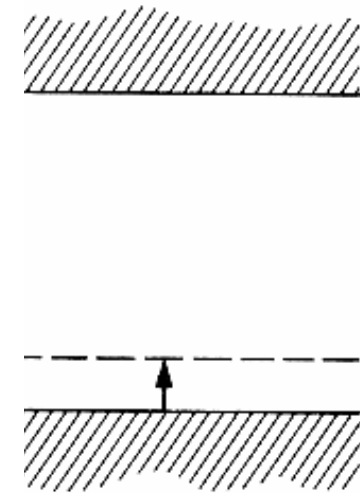
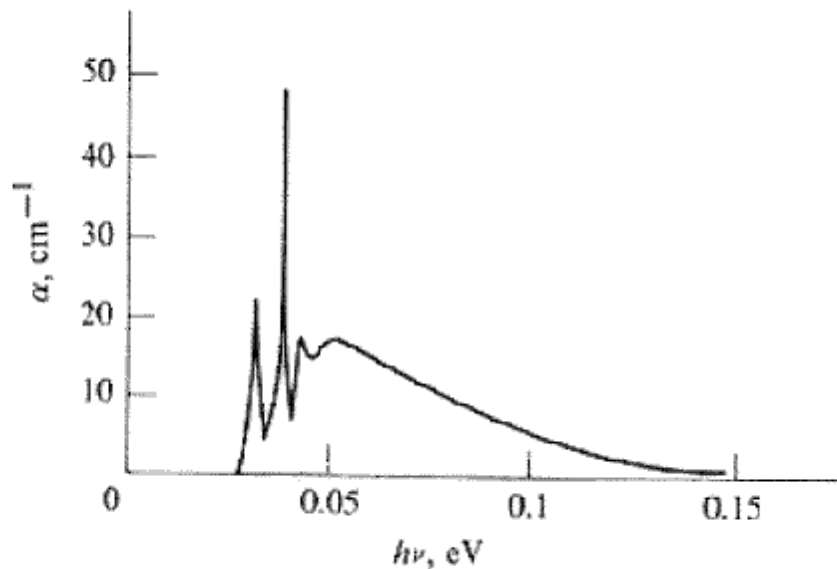
N ng l ng liên k t E_a có l n vào c kT t i nhi t phòng: T i nhi t phòng, l tr ng có th r i kh i các ion t p ch t t o ra 'h t t i i n t do'

Hấp thụ quang học gián tiếp



Năng lượng liên kết tiếp xúc tạp chất: mức donor liên quan đến các quá trình hấp thụ trực tiếp không nhìn thấy nhiệt phòng và hấp thụ các bức xạ có thể nhìn thấy nhiệt thấp

Ví dụ: sự hấp thụ trực tiếp vùng hóa trị mức acceptor trong Si ở pha Bo



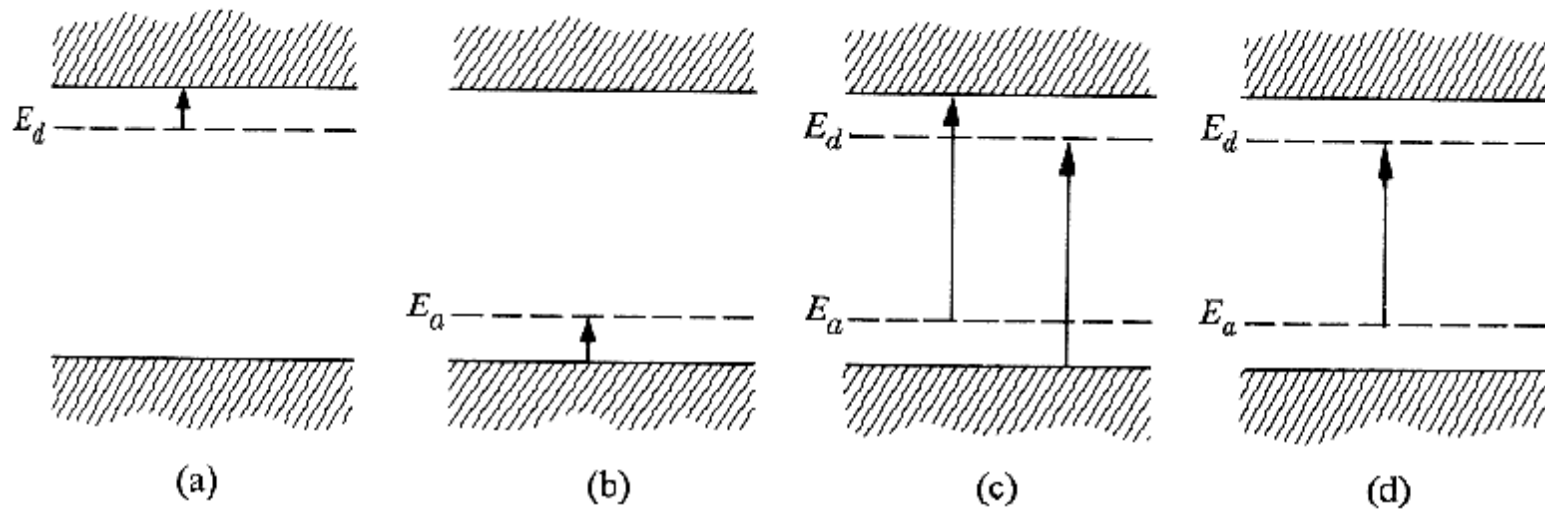
Hình 6.35 Hệ số hấp thụ của mẫu Si được pha Bo theo năng lượng photon $h\nu$.
[after Burstein, et al., Proc. Photoconductivity Conference, New York: Wiley, 1956]

Chuyển dịch vị năng lượng photon ~ 40 meV \Rightarrow năng lượng

bức xạ $\lambda \approx 30 \mu\text{m}$: **hấp thụ quang học gián tiếp**



Những đặc trưng có thể xảy ra liên quan tới tính chất:



Hình 6.34 Những quá trình hấp thụ khác nhau liên quan đến tạp chất

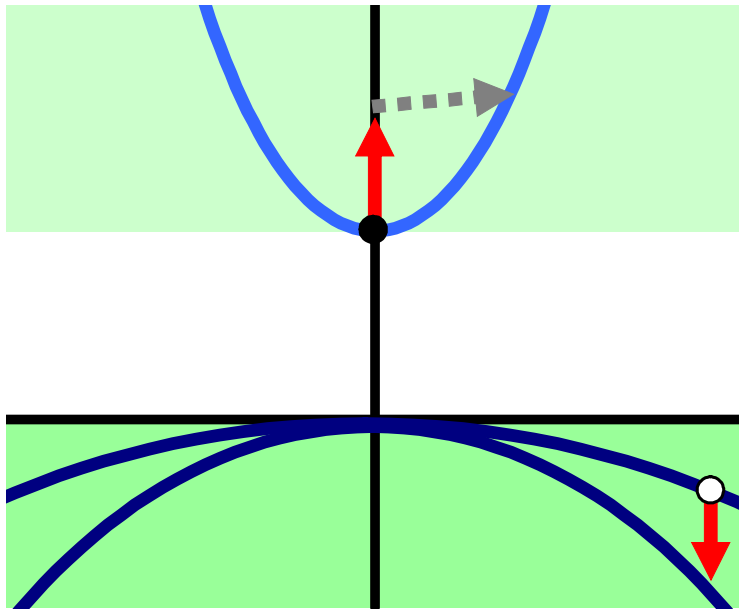
Thông thường có thể nhìn thấy tính chất, nhưng *không quan sát rõ tính chất phòng*

H p th c a các h t t i i n t do (1/2)



T i n h i t phòng, quá trình h p th liên quan n t p ch t n i b t là *quá trình h p th do các h t t i i n t* trong ó m t photon kích thích m t electron nh y lên tr ng thái n ng l ng cao h n.

Ví d : Xét bán d n lo i p, nh ng tr ng thái b chi m trong vùng d n: d ch chuy n quang h c có th x y ra v i $E_{\text{phot}} < E_{\text{khe}}$!



Electron t do: quá trình h p th th ng là chuy n d ch gián ti p **có s tham gia c a phonon**

L tr ng t do có th d ch chuy n tr c ti p t vùng l tr ng n ng sang vùng l tr ng nh \Rightarrow Quá trình h p th do l tr ng x y ra nhi u h n quá trình h p th do electron



Hệ phương trình do electron tải điện có thể được mô tả bằng mô hình Drude

Nhưng mật độ hạt tải trong bán dẫn thường có nồng độ khoảng $10^{14} - 10^{18} / \text{cm}^3$ tức là thấp hơn khoảng $10^8 - 10^6$ lần mật độ electron tải điện trong kim loại

Tần số Plasma của bán dẫn thấp hơn khoảng $10^4 - 10^3$ lần của kim loại: **IR**

Tỉ lệ số linh kiện plasma, r và α có dạng

$$\epsilon_r'(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad \epsilon_r''(\omega) \approx \frac{\omega_p^2}{\omega^3 \tau} = \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3}$$

$$\alpha(\omega) \cong \frac{\omega}{c} \epsilon_r''(\omega) \cong \frac{\omega_p^2 \Gamma}{c \omega^2} = \frac{\Gamma \lambda^2}{c \lambda_p^2}$$

Hệ phương trình electron tải điện khi nồng độ

lớn gấp m

