

Pokročilé disperzní modely v optice tenkých vrstev

Lekce 7: Disperzní modely krystalických látek – přímé elektronové excitace mezi valenčním a vodivostním pásem c-Si

Daniel Franta

Ústav fyzikální elektroniky, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita

jaro 2014

Obsah

1 Teorie

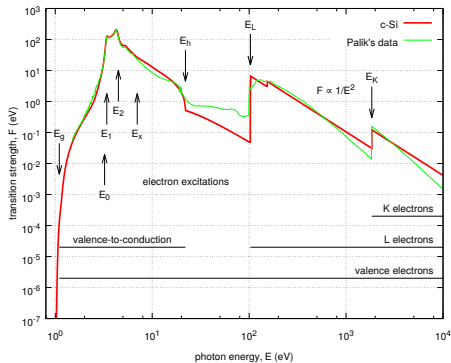
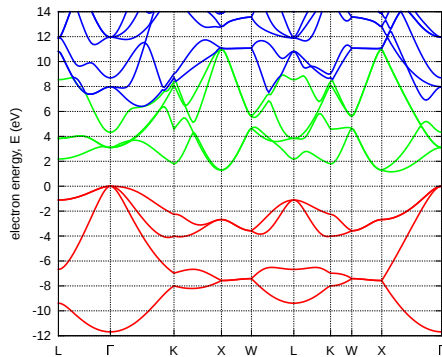
2 Konstrukce modelu

3 Experiment

4 Shrnutí

Teorie

Elektronové disperzní relace krystalického křemíku počítané z prvních principů pomocí DFT:



Teorie

Funkce síly přechodu systému při konečné teplotě (stejně jako u dvoufonové absorpce)

$$F(E, T) = \frac{\pi}{\epsilon_0 V} \left(\frac{e\hbar}{m_e} \right)^2 \sum_{i \neq f} \exp \left(\frac{\Omega - E_i}{k_B T} \right) \frac{|\langle f | \hat{p}_x | i \rangle|^2}{E_f - E_i} [\delta(E_f - E_i - E) + \delta(E_i - E_f - E)],$$

- $e, \hbar, \epsilon_0, m_e, k_B$: elementární náboj, redukovaná Planckova konstanta, permitivita vakua, hmotnost elektronu, Boltzmannova konstanta
- V : objem systému
- $|i\rangle, |f\rangle, E_i, E_f$: vlastní stavy a odpovídající vlastní energie systému
- T, Ω : termodynamická teplota a termodynamický potenciál

$$\sum_i \exp \left(\frac{\Omega - E_i}{k_B T} \right) = 1$$

- Efektivní operátor hybnosti získaný s celkového dipólového operátoru

$$\hat{p}_x = \frac{im_e}{e\hbar} [\hat{H}_0, \hat{d}_x] = \hat{p}_{xe} - \frac{Z_{Si} m_e}{m_{Si}} \hat{p}_{xSi},$$

Teorie

Rozdělíme systém na stavy elektron/díra v pásích (v, \mathbf{k}) a (c, \mathbf{k}) a zbytek systému:

$$|i, n_{v,\mathbf{k}}, n_{c,\mathbf{k}}\rangle$$

$$F_{\text{dt}}(E, T) = \frac{\pi}{\epsilon_0 V |E|} \left(\frac{e\hbar}{m_e} \right)^2 \sum_{v,c} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \\ \times \left\{ f^{\text{FD}}[E_v(\mathbf{k})] |\langle i, 0, 1 | \hat{p}_x | i, 1, 0 \rangle|^2 - f^{\text{FD}}[E_c(\mathbf{k})] |\langle i, 0, 1 | \hat{p}_x | i, 1, 0 \rangle|^2 \right\} \delta [E_{vc}(\mathbf{k}) - |E|]$$

kde

$$f^{\text{FD}}(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1}$$

$$E_{vc}(\mathbf{k}) = E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k})$$

Při pokojové teplotě $k_B T \approx 25 \text{ meV}$. \implies

$$f^{\text{FD}}[E_v(\mathbf{k})] \approx 1 \quad \text{a} \quad f^{\text{FD}}[E_c(\mathbf{k})] \approx 0$$

Teorie

Fermi-Diracova statistika způsobí přesun síly mezipásových přechodů do příspěvku od vnitropásových přechodů, tj. do příspěvků od volných elektronů a děr, které jsou z hlediska sumy zanedbatelné. Mnohem větší pokles přímých mezipásových přechodů jde na vrub nepřímých přechodů, což v kvazičásticovém přístupu znamená teplotní závislost maticového elementu na stavu i , tedy na teplotě T .¹

Table 1

Effective numbers of electrons corresponding to the individual absorption processes for selected temperatures. Note that $n_{ve} = n_{vx} + n_{vc}$, $n_{vc} = n_{idt} + n_{dt}$ and $n_{mph} = n_{2ph} + n_{3ph} + n_{4ph}$. The last column describes the approximate temperature dependence.

	300 K	400 K	500 K	600 K	
<i>Above E_g</i>					
n_K	1.55				Const.
n_L	8.33				Const.
n_{ve}	4.12				Const.
n_{vx}	0.24				Const.
n_{vc}	3.88				Const.
n_{idt}	0.50	0.61	0.72	0.84	Lin.
n_{dt}	3.38	3.27	3.16	3.04	Lin.
<i>below E_g</i>					
n_{fc}	3.23×10^{-12}	1.01×10^{-9}	3.42×10^{-8}	3.76×10^{-7}	Exp.
n_{mph}	1.16×10^{-7}	1.48×10^{-7}	1.84×10^{-7}	2.22×10^{-7}	Lin.
n_{2ph}	1.00×10^{-7}	1.26×10^{-7}	1.52×10^{-7}	1.79×10^{-7}	Lin.
n_{3ph}	1.51×10^{-8}	2.08×10^{-8}	2.84×10^{-8}	3.78×10^{-8}	Quad.
n_{4ph}	1.09×10^{-9}	1.91×10^{-9}	3.17×10^{-9}	5.01×10^{-9}	Cubic

¹D. Franta, D. Nečas, L. Zajíčková, I. Ohlídal, Utilization of the Sum Rule for Construction of Advanced Dispersion Model of Crystalline Silicon Containing Interstitial Oxygen, Thin Solid Films (in print)

Teorie

Závislost síly nepřímých přechodů je dána Bose-Einsteinovou statistikou. Předpokládáme procesy, kde s excitací elektronu se zároveň jeden fonon přibude nebo zmizí:²

$$F_{\text{idt}}(E, T) = [f^{\text{BE}}(E_{\text{ph}}) + 1] F_{\text{idt}}^{(0)}(E + E_{\text{ph}}) + f^{\text{BE}}(E_{\text{ph}}) F_{\text{idt}}^{(0)}(E - E_{\text{ph}})$$

kde E_{ph} je efektivní hodnota fononu přispívajícího do nepřímých přechodů (ve skutečnosti bychom museli integrovat přes individuální procesy a E_{ph} by nebyla konstanta, tj. $E_{\text{ph}}(\Delta\mathbf{k})$).

Potom pro síly přímých mezipásových přechodů můžeme psát:

$$N_{\text{dt}} = N - N_{\text{K}} - N_{\text{L}} - N_{\text{vx}} - N_{\text{idt}} - N_{\text{fc}} - N_{\text{ph}}$$

Nebo lépe v efektivních počtech elektronů (podělíme \mathcal{N}_{a}):

$$n_{\text{dt}} = 14.00 \dots - \underbrace{n_{\text{K}} - n_{\text{L}} - n_{\text{vx}}}_{\text{nezávislé na } T} - n_{\text{idt}} - \underbrace{n_{\text{fc}} - n_{\text{ph}}}_{\approx 10^{-7}}$$

²D. Franta, D. Nečas, L. Zajíčková, Application of Thomas–Reiche–Kuhn sum rule to construction of advanced dispersion models, Thin Solid Films 534 (2013) 432–441

Obsah

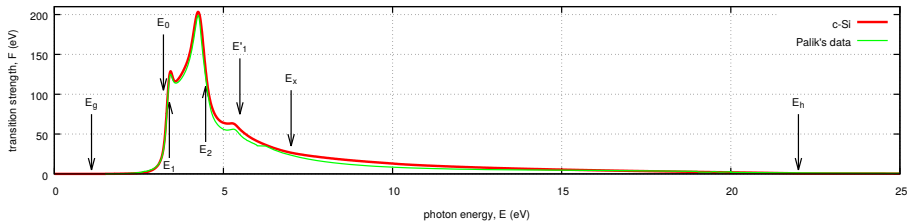
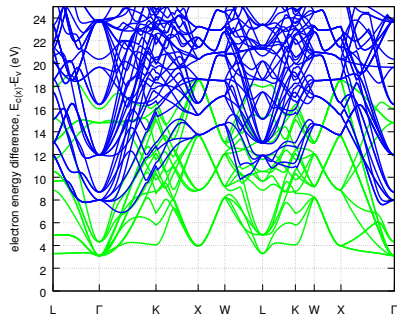
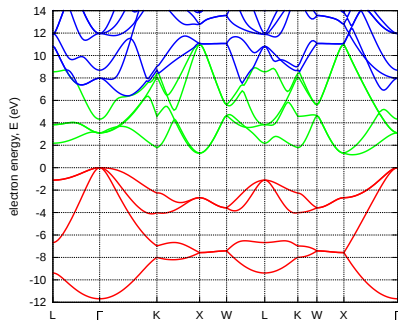
1 Teorie

2 Konstrukce modelu

3 Experiment

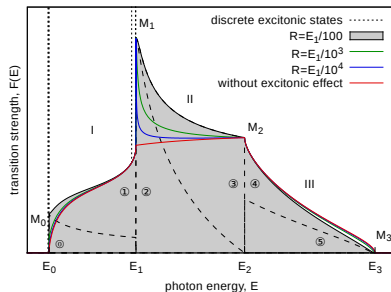
4 Shrnutí

Konstrukce modelu



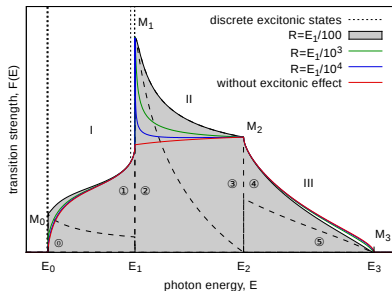
Konstrukce modelu

Pro modelování přímých mezipásových přechodů bylo použito 7 následujících pásů (integračních cest):



Každý pás je modelován pomocí 6 příspěvků.

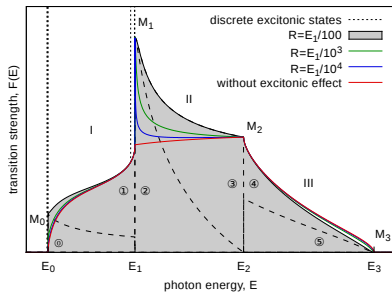
Konstrukce modelu



$$J_0(E) = A_0 R_1(E_1) \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2R}{n^3} \delta\left(|E| - E_0 + \frac{R}{n^2}\right) + \frac{1}{R_1(E)} \right]$$

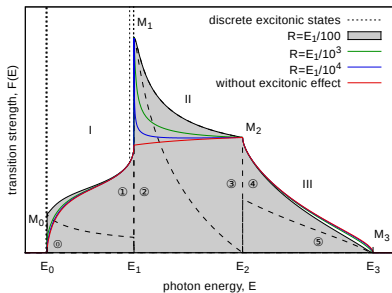
$$R_1(E) = 1 - \exp\left(-2\pi\sqrt{\frac{R}{E - E_0}}\right), \quad \lim_{R \rightarrow 0} \frac{R_1(E_1)}{R_1(E)} = \sqrt{X_1(E)}$$

Konstrukce modelu



$$J_1(E) = A_1 \left[1 - \sqrt{Y_1(E)} \right]$$

Konstrukce modelu

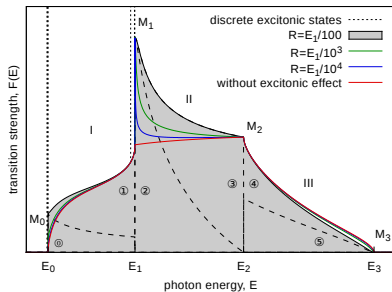


$$J_2(E) = (A_0 + A_1) \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{32R}{(2n-1)^3} \delta\left(\left|E\right| - E_1 + \frac{4R}{(2n-1)^2}\right) + \frac{2}{R_{\text{II}}(E)} - \frac{2X_{\text{II}}(E)}{R_{\text{II}}(E_2)} \right]$$

$$R_{\text{II}}(E) = 1 + \exp\left(-2\pi\sqrt{\frac{R}{E-E_1}}\right)$$

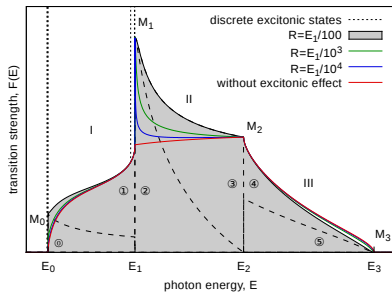
$$\lim_{R \rightarrow 0} \left(\frac{2}{R_{\text{II}}(E)} - \frac{2X_{\text{II}}(E)}{R_{\text{II}}(E_2)} \right) = Y_{\text{II}}(E)$$

Konstrukce modelu



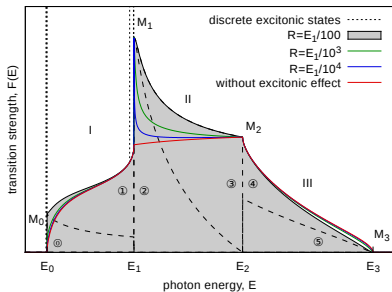
$$J_3(E) = (A_2 + A_3)X_{II}(E)$$

Konstrukce modelu



$$J_4(E) = A_2 \left[1 - \sqrt{X_{\text{III}}(E)} \right]$$

Konstrukce modelu



$$J_5(E) = A_3 \frac{R_{\text{III}}(E_2)}{R_{\text{III}}(E)}$$

$$R_{\text{III}}(E) = \exp\left(2\pi\sqrt{\frac{R}{E_3 - E}}\right) - 1, \quad \lim_{R \rightarrow 0} \frac{R_{\text{III}}(E_2)}{R_{\text{III}}(E)} = \sqrt{Y_{\text{III}}(E)}$$

Obsah

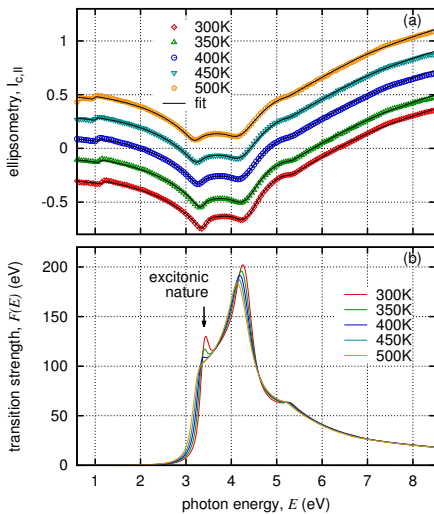
1 Teorie

2 Konstrukce modelu

3 Experiment

4 Shrnutí

Experiment



Experiment

Zajímavé je to, že teplotně závislé veličiny jsou Rydbergova konstanta vyjadřující energii elektron-děrového páru v základním stavu a energie kritického bodu:

$$R_1 = R_1^{(0)} \exp\left(-\frac{T - 300}{R_1^{(1)}}\right) = 2.03 \exp\left(-\frac{T - 300}{128}\right) \text{ meV}$$

$$E_1 = E_1^{(0)} \left[1 + E_1^{(1)}(T - 300)\right] = 3.402 \left[1 - 2.5 \times 10^{-4}(T - 300)\right] \text{ eV}$$

zatímco rozšiřovací konstanta byla na teplotě nezávislá:

$$B_1(T) = B_1 = 68 \text{ meV}$$

Obsah

1 Teorie

2 Konstrukce modelu

3 Experiment

4 Shrnutí

Shrnutí

- 1 Experimentálně bylo ověřeno, že celková síla mezipásových přechodů prakticky nezávisí na teplotě. Ve skutečnosti na teplotě slabě závisí \mathcal{N}_a a příspěvky N_{ph} a N_{fc} , které na teplotě závisí, jsou z hlediska sumy zanedbatelné.
- 2 Rozdělení mezipásových přechodů na přímé a nepřímé poté závisí na teplotě pomocí Bose-Einsteinovy závislosti, která ovlivňuje pravděpodobnost krece/anihilace fononů přispívající do nepřímých přechodů.
- 3 Závislost přímých přechodů na teplotě potom spočívá ve změně distribuce síly přechodů a to tak, že s vyšší teplotou vymizí excitonové efekty a posunou se energie kritických bodů. Bylo ukázáno, že rozšiřovací faktor příliš na teplotě nezávisí, což je v rozporu s tím co se obecně traduje.