

Medición del ancho de banda en Si y Ge mediante un método óptico

Martín G. Bellino

E-mail: colquide@starmedia.com.ar y bellino@cnea.gov.ar

Práctica especial

Laboratorio 5 - Dpto. de Física - FCEyN - UBA Diciembre 2000

En el presente trabajo, utilizando un espectrofotómetro, se midió el coeficiente de transmisión de láminas delgadas de Si y Ge para distintas longitudes de onda de la luz incidente, y a partir de estos datos se calculó el coeficiente de absorción para las diferentes energías de dicha luz. Luego, utilizando el modelo de transición indirecta se determinaron los anchos de banda para ambos materiales, resultando las energías: (1,095 +/- 0,005) eV y (0,673 +/- 0,005) eV para el Si y el Ge respectivamente. Además se determinaron las energías de los fonones involucrados obteniendo los valores de: (0,044 +/- 0,005) eV para el Si y de (0,022 +/- 0,005) eV para el Ge.

INTRODUCCION:

Los valores más precisos de la banda prohibida de energía se obtienen por absorción óptica. En la figura 1 a, el umbral de la absorción óptica continua a la frecuencia ω_g determina el salto de energía $E_g = \hbar\omega_g$. En los procesos de absorción directa el cristal absorbe un fotón y se crea un electrón y un hueco. En los procesos de absorción indirecta, Figura 1b, el mínimo de la banda prohibida de energía de la estructura de bandas lleva consigo electrones y huecos separados por un vector de onda k_c . En este caso, una transición directa de un fotón a la energía de zanja mínima, no puede satisfacer los requisitos de conservación del vector de onda, porque los vectores de onda del fotón son despreciables frente a k_c , en los valores de la energía que interesan (≈ 1 eV). Pero si en el proceso se crea un fonón de vector de onda K y frecuencia Ω , entonces se tiene:

$$k(\text{fotón}) = k_c + K \approx 0 \quad ; \quad \hbar\omega = E_g + \hbar\Omega$$

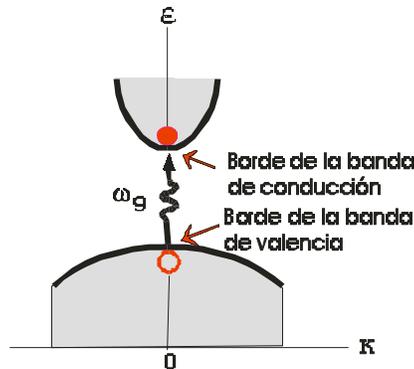


Fig.1a : transición óptica directa

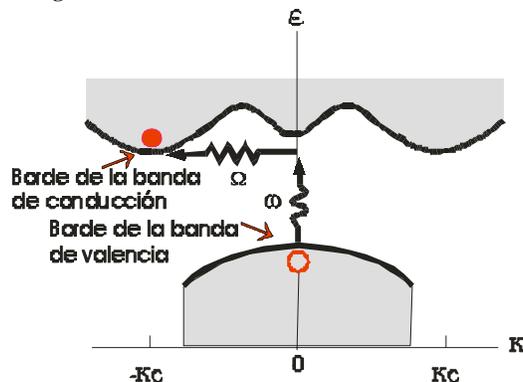


Fig.1b : transición óptica indirecta

como lo exigen las leyes de conservación. La energía del fonón, $\hbar \cdot \Omega$, será en general mucho menor que E_g : Un fonón, aunque tenga un gran vector de onda, es una fuente poco costosa de momento, ya que las energías características de los fonones son pequeñas ($\approx 0,02$ a $0,05$ eV) en relación con la banda prohibida de energía. Si la temperatura es tan elevada que el fonón necesario ya se ha excitado térmicamente en el cristal, es posible que se tenga también un proceso de absorción de fotón en el que se absorba el fonón.

La banda prohibida puede también deducirse de la dependencia de la conductividad con la temperatura o de la concentración de portadores en la zona intrínseca, pero únicamente las medidas ópticas determinan si la banda prohibida es directa o indirecta.

Es sabido que para el Si y Ge los bordes de banda están conectados por una transición indirecta.

DESARROLLO EXPERIMENTAL:

Para un semiconductor, el coeficiente de absorción óptica α , puede ser calculado directamente a partir del coeficiente óptico de transmisión.

Cuando luz de intensidad I_0 y longitud de onda, λ , incide sobre un semiconductor de espesor δ , una intensidad transmitida I , emerge de la otra cara. Contando las múltiples reflexiones que ocurren entre las caras, el coeficiente de transmisión $T = I / I_0$, está dado por:

$$T = (1 - R)^2 \cdot e^{-(\alpha \delta)} \quad (1) \quad T = \% \text{ transmitido} / 100$$

Donde R es el coeficiente de reflexión en la interfase aire-semiconductor.

Para determinar el coeficiente de transmisión de muestras delgadas de Si y Ge de: (0,30 +/- 0,02 y 0,42 +/- 0,02) mm de espesor respectivamente, se utilizó un espectrofotómetro con el cual se obtuvieron los espectros del Si y del Ge, obteniendo el porcentaje de transmisión para distintas longitudes de onda del haz incidente, Figuras 2a y 2b (las distintas longitudes de onda son análogas a distintas energías del haz incidente por la relación: $E = h \cdot c / \lambda$, donde c es la velocidad de la luz)

El espectrofotómetro es de rango infrarrojo cercano-visible para que abarque en el barrido la energía del salto de los materiales utilizados.

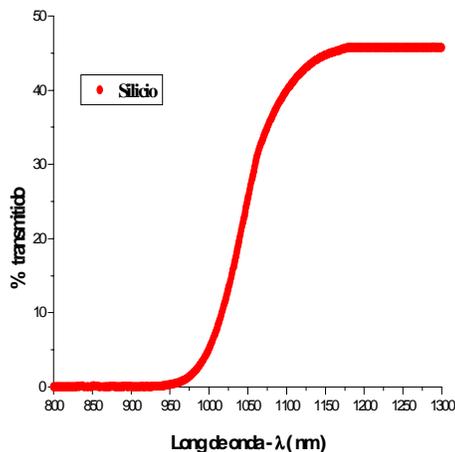


Fig 2a: % de transmisión vs longitud de onda para el germanio

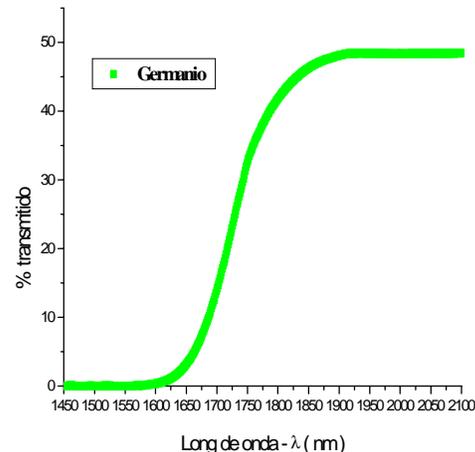


Fig 2b: % de transmisión vs longitud de onda para el silicio

RESULTADOS Y ANALISIS DE RESULTADOS:

El mecanismo dominante para la absorción óptica en un semiconductor de energía de salto E_g es la transición de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción, mediante la incidencia de fotones de energía E .

Si un fonón de energía E_p es requerido para conservar el momento en la producción óptica de un par hueco-electrón (en el caso de un semiconductor con transición indirecta como el Si y el Ge) entonces:

$$\alpha = \alpha_a + \alpha_e \quad (2)$$

Donde α_a es el coeficiente de absorción para el cual la transición involucra la absorción de un fonón.

$$\alpha_a = A.(E - E_g + E_p)^2, \quad E > E_g - E_p \quad (3)$$

Y α_e es el coeficiente de absorción para el cual la transición involucra la emisión de un fonón

$$\alpha_e = B.(E - E_g - E_p)^2, \quad E > E_g + E_p \quad (4)$$

Donde las constantes A y B dependen de las propiedades del material y la temperatura. Cabe destacar que en el proceso α_a , un fotón junto con un fonón de la red, disponible térmicamente, crean un electrón excitado; mientras que en el proceso α_e , un fotón crea ambos: un fonón y un electrón excitado. Entonces el último proceso requiere una más alta energía óptica para que suceda.

Para calcular $\alpha(\lambda)$ a partir de nuestras mediciones requerimos conocer los valores del coeficiente de reflexión R ; entonces deducimos un valor de R de la porción de datos que corresponden a una longitud de onda para la cual el material no absorbe energía por transiciones electrónicas, por lo tanto de la ecuación (1) para $\alpha = 0$ obtenemos:

$$R = 1 - T^{1/2} \quad (5)$$

Los valores calculados para la región transparente de 1300-1200 nm para el Si y 2050-1950 nm para el Ge son:

$R = 0.31 \pm 0.01$ para el Si

$R = 0.30 \pm 0.01$ para el Ge

Estos valores son coincidentes con los publicados, para valores cercanos a la región de absorción, del índice de reflexión del Si y del Ge.

Calculados los valores de \mathbf{R} , a partir de $T(\lambda)$, conocidos los espesores de las muestras y según la ecuación (1):

$$\alpha = -\delta^{-1} \cdot \ln(T / (1 - R)^2) \quad (6)$$

calculamos los valores de α según la longitud de onda del haz incidente y, por lo tanto, de la energía de los fotones incidentes.

Demostraremos que una transición indirecta entre las bandas de energía es la responsable del espectro obtenido para el Si y el Ge por medio del siguiente análisis:

a) **Transición por absorción de un fonón**

Las ecuaciones (2) a (4) predicen que para energías ópticas donde $E < E_g + E_p$, $\alpha = \alpha_a$ solamente. Entonces, para un semiconductor de transición indirecta, aparece una zona lineal en la región de baja energía de la transición en el gráfico de $\alpha^{1/2}$ vs E . Según la ecuación (3), la intersección de la recta que ajuste a la zona antes mencionada con el eje - x es $(E_g - E_p)$.

En las figuras 3a y 3b se identifica el régimen lineal y se ajustaron las rectas correspondientes, obteniendo para la intersección de esta recta con el eje - x los valores:

(1,051 +/- 0,005) eV para el Si y (0,652 +/- 0,005) eV para el Ge.

También, utilizando la intersección de la recta con el eje - y, se obtiene el valor extrapolado de α_a para más altos valores de energías ópticas ($E > E_g + E_p$).

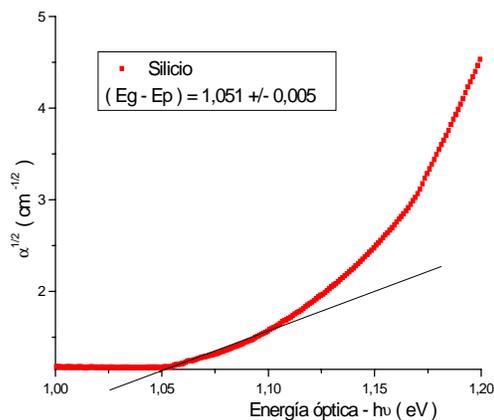


Fig.3a: $\alpha^{1/2}$ vs energía óptica para el Si
Aproximación lineal de la zona de baja energía (absorción de fonón)
y extrapolación de la recta a la intersección del eje - x dando :
 $E_g - E_p = (1,051 \pm 0,005)$

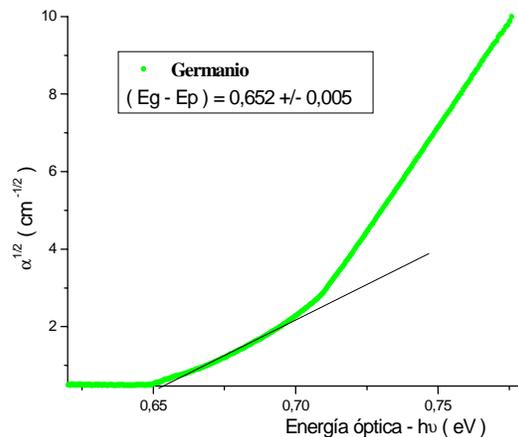


Fig.3a: $\alpha^{1/2}$ vs energía óptica para el Ge
Aproximación lineal de la zona de baja energía (absorción de fonón)
y extrapolación de la recta a la intersección del eje - x dando :
 $E_g - E_p = (0,652 \pm 0,005)$

b) Transición por emisión de un fonón

Para energías ópticas en donde $E > E_g + E_p$, la ecuación (2) indica que α_e puede ser obtenido sustrayendo el valor de α_a extrapolado a los valores de α antes calculados.

La ecuación (4) predice una región lineal en el gráfico $(\alpha - \alpha_a)^{1/2}$ versus E para energías mayores a las anteriores de la zona de transición, en donde la intersección de la recta de ajuste corta al eje - x para el valor de $(E_g + E_p)$.

Las figuras 4a y 4b revelan esta zona lineal, y se ajustaron con las rectas que mejor aproximan, obteniendo de la intersección de las rectas con el eje - x las energías: $(1,140 \pm 0,005)$ eV para el Si y $(0,694 \pm 0,005)$ eV para el Ge.

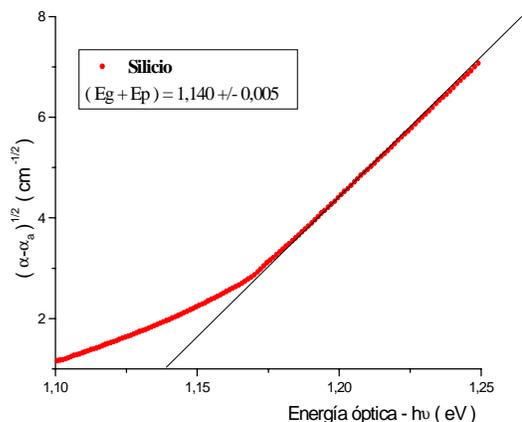


Fig.4a: $\alpha_e = (\alpha - \alpha_a)^{1/2}$ vs energía óptica para el Si
Aproximación lineal de la zona de alta energía (emisión de fonón)
y extrapolación de la recta a la intersección del eje - x dando :
 $E_g + E_p = (1,140 \pm 0,005)$

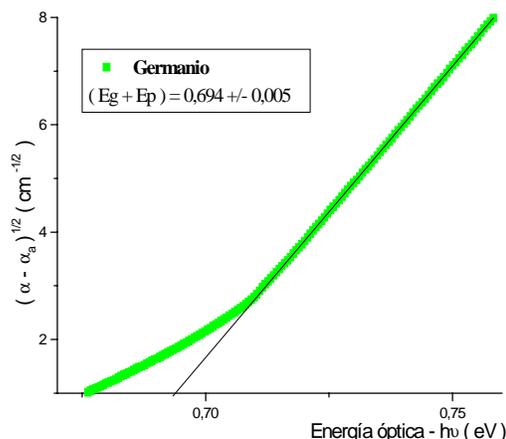


Fig.4b: $\alpha_e = (\alpha - \alpha_a)^{1/2}$ vs energía óptica para el Ge
Aproximación lineal de la zona de alta energía (absorción de fonón)
y extrapolación de la recta a la intersección del eje - x dando :
 $E_g + E_p = (0,694 \pm 0,005)$

Los valores de energía del salto (ancho de banda) , como así también los valores de energía del fonón involucrado para la conservación del momento , en la transición indirecta, tanto para el Si como para el Ge pueden ser fácilmente calculados realizando primero la suma y luego la resta de los valores obtenidos de la intersección de las rectas con los ejes - x.

Dando los siguientes valores:

	Silicio	Germanio
Energía del salto (E_g)	(1,095 +/- 0.005) eV	(0,673 +/- 0,005) eV
Energía del fonón (E_p)	(0,044 +/- 0,005) eV	(0,022 +/- 0,005) eV

Tabla 1 : Energías de salto (ancho de banda) y del fonón en Si y Ge

Estos valores coinciden con los publicados tanto para el Si como para el Ge. Además se puede comprobar que la energía de los fonones intervinientes en las transiciones es característica de los fonones, tanto de la rama acústica como de la rama óptica, de los bordes de la zona de Brillouin para la relación de dispersión del Si y el Ge $-E(\mathbf{k})$. Con lo que se deduce que el mínimo de la banda de valencia ocurre para valores de \mathbf{k} cercanos a los bordes de zona de Brillouin.

CONCLUSIONES :

Resultó interesante poder corroborar la teoría de bandas y la creación de los pares hueco-electrón por la interacción con la luz, como así también verificar el modelo de transición indirecta, tanto para el Si como para el Ge.

Se calculó el ancho de banda de la transición indirecta obteniendo los valores de: 1,10 eV y 0,67 eV aproximadamente para el Si y el Ge respectivamente; y que el mínimo de la banda de valencia ocurre en una región cercana al borde de zona, ya que los fonones involucrados en la transición poseen energías características de esa región (siendo estas energías del orden de los meV. y por lo tanto mucho menores a las del salto).

Sabiendo que la física del estado sólido es una de las aplicaciones más directas de la teoría cuántica, se destaca aún más la importancia de las corroboraciones experimentales, como las de este trabajo.

BIBLIOGRAFIA:

- 1) Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics, 4th ed. (John Wiley & Sons, Inc., New York. 1970)
- 2) John M. Essick and Richard T. Mather, “ Characterization of a bulk semiconductor’s band gap via near-absorption edge optical transmission experiment ” Am.J.Phys. **61** (7) 646-649 (July 1993) .
- 3) I. Mártil and G. Gonzales Días, “ Undergraduate laboratory experiment-Measurements of the complex refractive index and the band gap a thin film semiconductor”. Am.J.Phys.**60** (1), 83-86 (January 1992)
- 4) A. Sconza and G. Torzo, “ Spectroscopic measurements of the semiconductor energy gap” Am.J.Phys.**62** (8), 732-737 (August 1994)