

OPTOELECTRONICS (2)

Lecture 7: Linear Optical Properties of Bulk Semiconductors

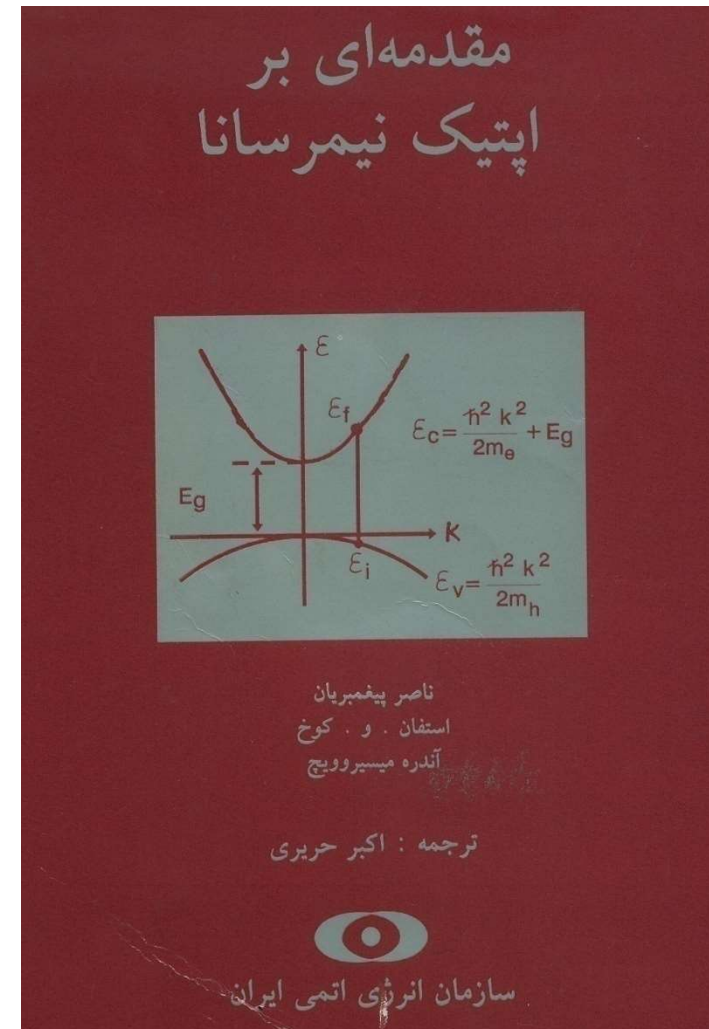
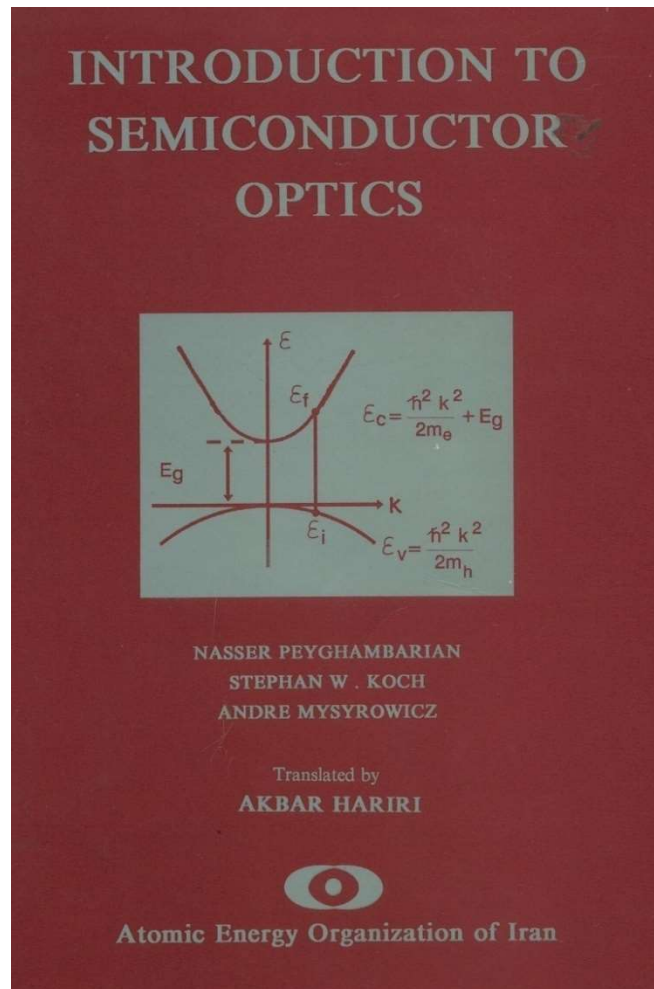
Mohammad Ali Mansouri-Birjandi

Department of Electrical and Computer Engineering
University of Sistan and Baluchestan (USB)

mansouri@ece.usb.ac.ir

mamansouri@yahoo.com

مرجع



Outline

➤ Introduction

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)

7.2 Cuprous Oxide (Cu₂O)

7.3 Cuprous Chloride (CuCl)

7.4 Cadmium Sulfide (CdS)

7.5 Silicon and Germanium (Si & Ge)

فصل ۷: خواص اپتیکی بعضی نیمرساناهای مهم کپه ای

مقدمه:

در این فصل خواص اپتیک خطی بعضی نیمرساناهای کپه ای تشریح می شوند. مطلب را با نیمرسانای گاف مستقیم GaAs آغاز می کنیم ، زیرا این بلور الگویی را برای اکسایتونهای وانیه با ساختار نواری نسبتاً ساده فراهم می سازد . پس از آن Cu_2O را مورد بحث قرار می دهیم زیرا در این نیمرسانا گذارهای اکسایتونی گوناگونی وجود دارند که با نظریه مرتبط با موضوع توافق بسیار خوبی دارند . این امر ، بررسی فرایندها را که اغلب در سایر نیمرساناها به علت پیچیدگی ساختار نواری و انرژی بستگی بسیار ضعیفتر ، غیر قابل تفکیک و یا پوشیده می شوند، امکانپذیر می سازد . اغلب CuCl را به عنوان الگویی برای اکسایتونها مورد توجه قرار می دهیم . این نمونه ترکیب عناصر I - VII ، یعنی شامل یک عنصر از اولین ستون و عنصر دیگر از ستون هفتم جدول تناوبی است . سپس مواد II - VI و در نهایت نیمرساناهای با گاف غیر مستقیم (عناصر Si و Ge) از ستون چهارم جدول تناوبی را بررسی می کنیم .

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)

۱-۷. گالیوم آرسناید^۱ - GaAs

گالیوم آرسناید نیمرسانایی از ترکیب III - V با Ga از ستون سوم و As از ستون پنجم جدول تناوبی است. این مواد در تکنولوژی جدید از اهمیت ویژه‌ای برخوردار هستند. ترانزیستورهای مبتنی بر GaAs نسبت به ترانزیستورهای Si از سرعت‌های بیشتری بهره‌مند هستند. دیودهای لیزری و عناصر فعال اپتیکی غیرخطی با استفاده از GaAs کپه‌ای یا GaAs چاه‌های کوانتومی، در دمای اتاق عمل می‌کنند. انتظار می‌رود که در آینده نزدیک مدارهای مبتنی بر تکنولوژی GaAs ارتباط بین‌الکترونیک معمولی و اپتوالکترونیک را امکانپذیر سازند. GaAs دارای ساختار مکعبی بدون تقارن وارونه^۲ است که به گروه نقطه‌ای T_d که به ساختار ترکیب روی^۳ نیز معروف است،

تعلق دارد.

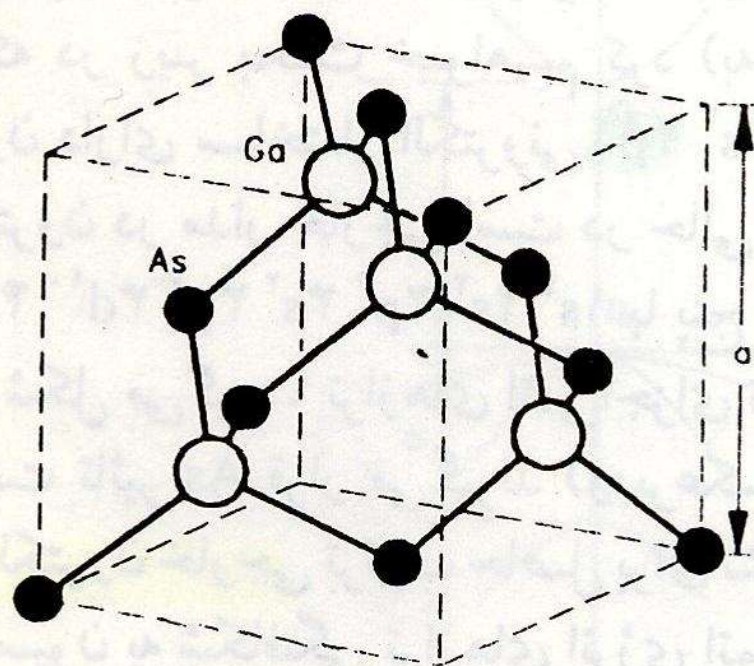
1) Zinc blende 2) face - centered cubic (fcc) lattice 3) Gunn effect

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-2

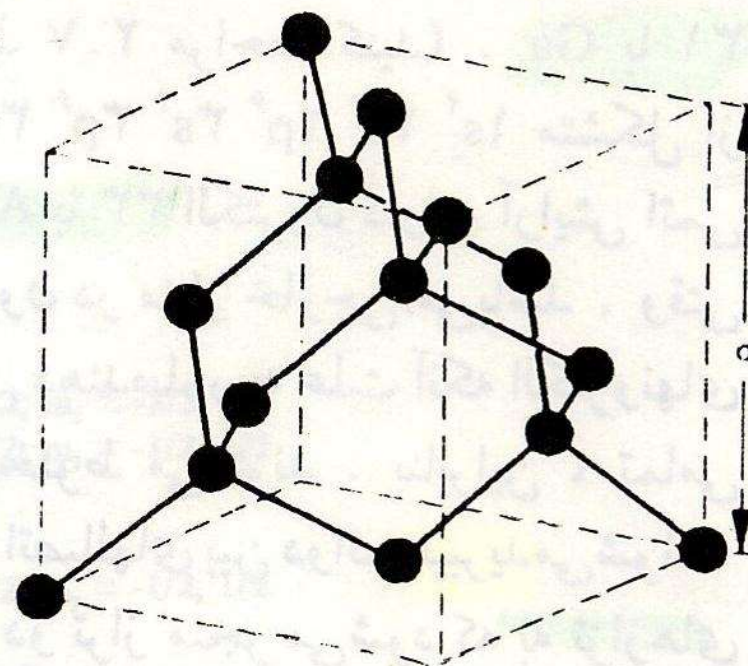
تعلق دارد. آرایش اتمی ساختار ترکیب روی همراه با آرایش الماس در شکل ۱.۷ نشان داده شده است. تفاوت دو ساختار در آن است که در الماس تنها یک نوع اتم وجود دارد. بنابراین، الماس در هر یاخته واحد دارای دو اتم مشابه است، در حالی که GaAs در هر یاخته واحد دارای دو اتم متفاوت [با اتمها در وضعیت (o, o, o) و (۱/۴, ۱/۴, ۱/۴)] است. ساختار شامل دو شبکه مکعبی مرکز سطحی^۲ است که در امتداد محور [۱۱۱] به اندازه یک چهارم طول قطر از یکدیگر فاصله دارند. ثابت شبکه GaAs برابر است با $a = 0.3565 \text{ nm}$. ساختار نوار در شکل ۲.۷ نشان داده شده است. توجه کنید که می‌نیمومهای نوار رسانایی در نقاط L و X منطقه بریلوئن تقریباً دارای همان انرژی ماکسیمم نوار رسانایی در نقطه Γ است. بنابراین، GaAs تقریباً یک نیمرسانای باگاف غیر مستقیم است (در ترکیب مرتبط بلور GaP، می‌نیمومها در X و L بیشتر کاهش می‌یابند که منجر به مواد با گاف غیرمستقیم می‌گردد. اثرات فیزیکی مانند اثر گان^۳، و کاربردهایی مثل گسیلنده‌های میکروموج حالت جامد بستگی به این ویژگی GaAs دارد).

1) Zinc blende 2) face - centered cubic (fcc) lattice 3) Gunn effect

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-3



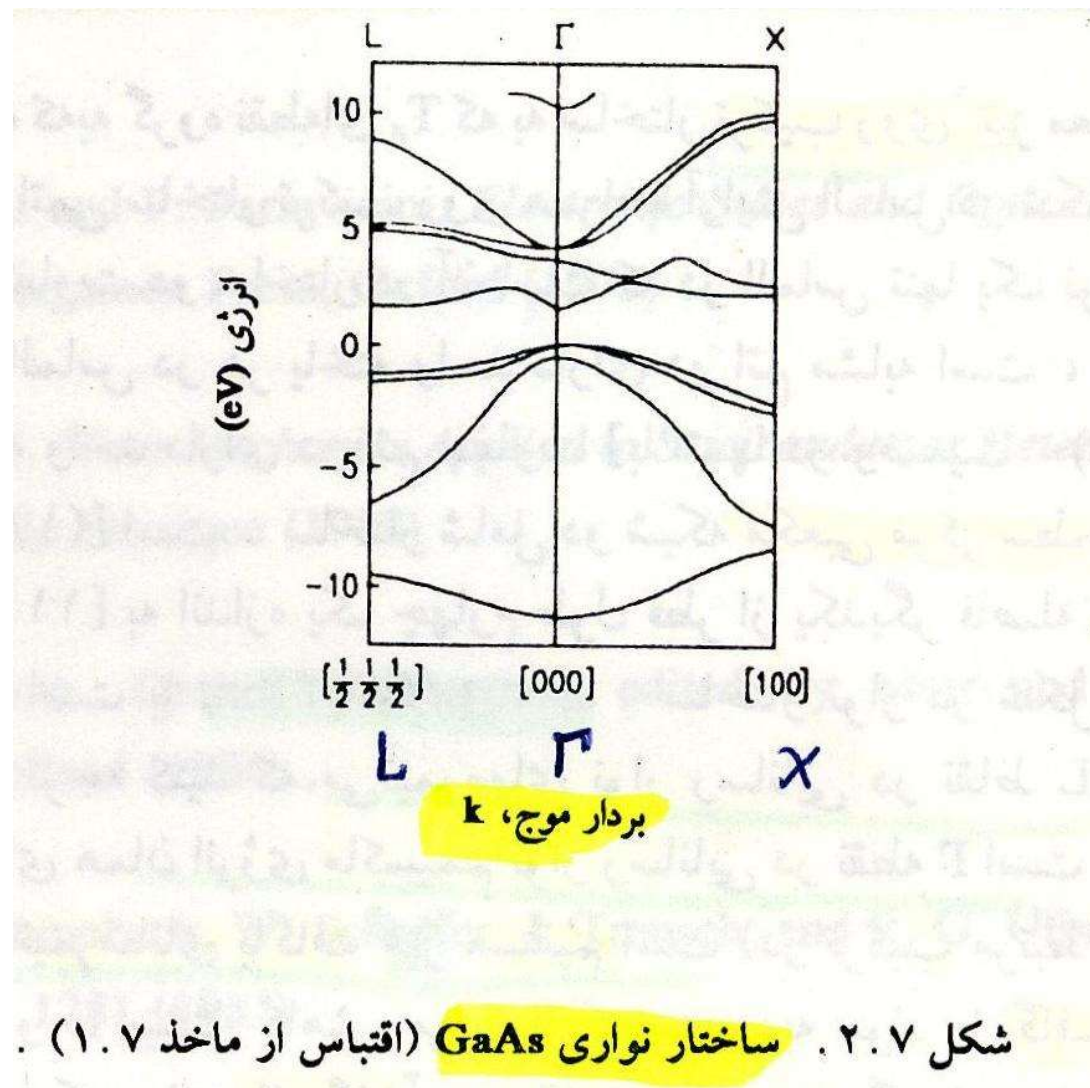
(الف)



(ب)

شکل ۱.۷ . (الف) شبکه ترکیب روی . (ب) شبکه الماس .

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-4



7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-5

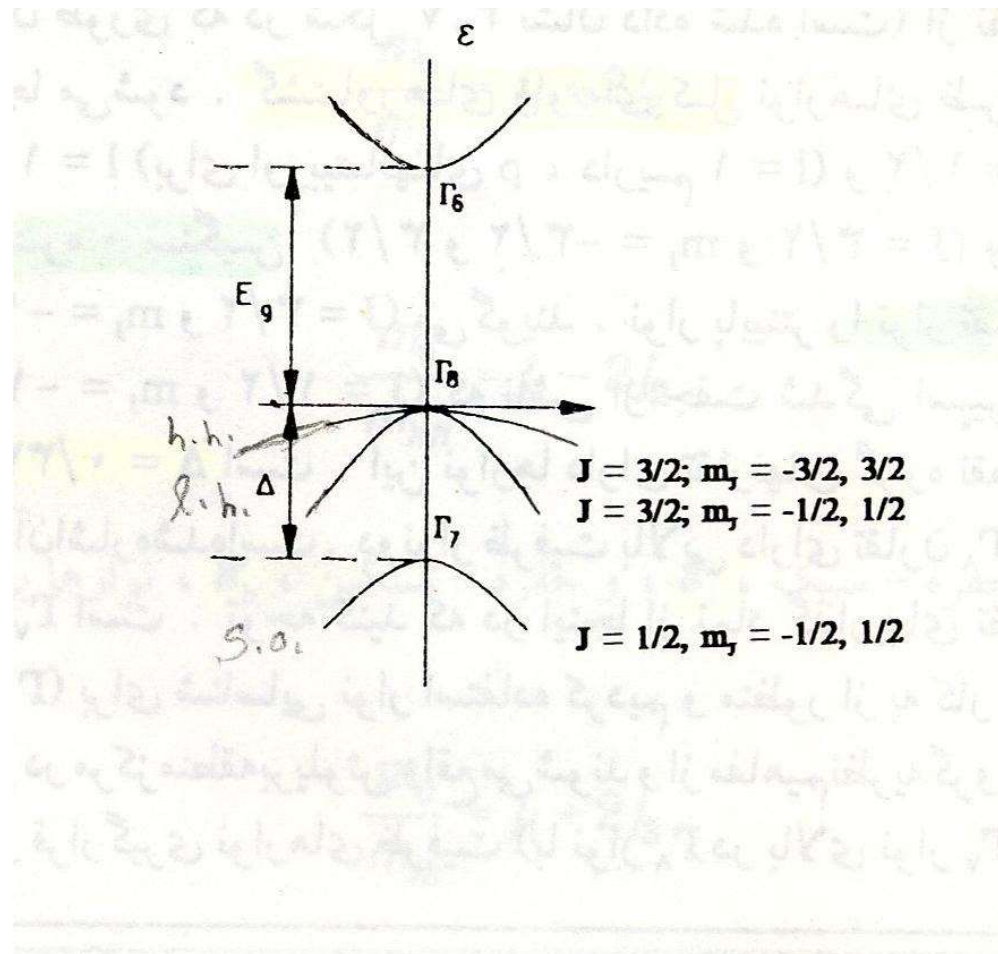
در شکل ۳.۷ نمایی گسترده از ساختار نوار نزدیک $k = 0$ با انرژی گاف نوار در نقطه Γ برابر با $E_g = 1.519 \text{ eV}$ در دماهای پایین، نشان داده شده است. این ساختار نواری برای بسیاری از نیم رساناهای ترکیبی III - V مشابه بوده و دارای مبنایی است که در زیر بحث خواهیم کرد (به ماخذ ۲.۷ مراجعه کنید). Ga با ۳۱ الکترون دارای ساختار الکترونی $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$ متشکل از سه الکترون در مدار خارجی است در حالی که As با ۳۳ الکترون دارای آرایش اتمی $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$ شکل می گیرد، ترازهای اتمی اجزای تشکیل دهنده بلور به علت آنکه الکترونها Ga تحت تاثیر As قرار می گیرند (و برعکس) مخلوط می شوند. بنابراین، تمامی هشت الکترون خارجی ترکیب حاصل برای تشکیل اتصالات بین دواتم هیبریدی می شوند. هیبریداسیون به شکافتگی ترازهای انرژی اتمی به دو تراز منجر می شود که به ترازهای پیوندی^۱ و پادپیوندی^۲ معروف است. شکل ۴.۷ این شکافتگی انرژی که ترازهای الکترونی خارجی $4s$ و $4p$ به ترازهای پیوندی (پایینتر) و پادپیوندی (بالا تر) تقسیم شده است را نشان می دهد. ترازهای پیوندی انرژی پایینتر از الکترون کاملاً پر شده اند، در

- 1) bonding levels 2) antibonding levels

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-6

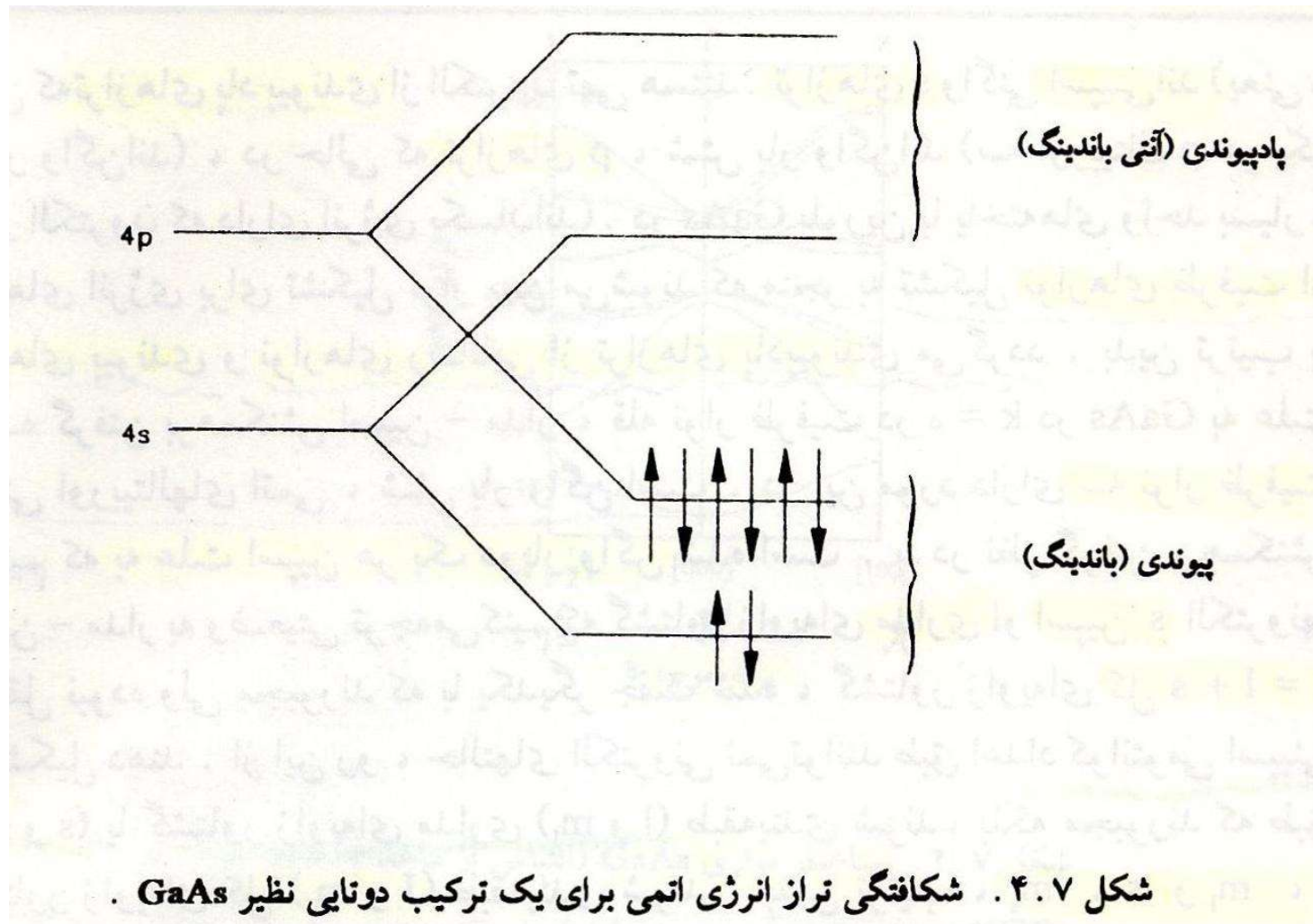
حالی که ترازهای پاد پیوندی از الکترون تهی هستند. ترازهای s واگنی اسپینی اند (یعنی، دوبار واگن اند)، در حالی که ترازهای p، شش بار واگن اند (سه اوربیتال p هر یک با دو الکترون که دارای انرژی یکسان اند). در GaAs بلورین با یاخته های واحد بسیار، ترازهای انرژی برای تشکیل نوار پهن می شوند که منجر به تشکیل نوارهای ظرفیت از ترازهای پیوندی و نوارهای رسانایی از ترازهای پاد پیوندی می گردد. بدین ترتیب با نادیده گرفتن برهمکنش اسپین - مدار، قله نوار ظرفیت در $k = 0$ در GaAs به علت واگنی اوربیتالهای اتمی، شش بار واگن است. در این مورد دارای سه نوار ظرفیت هستیم که به علت اسپین هر یک دوبار واگن شده است. با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین - مدار به وضعیتی توجه می کنیم که گشتاور زاویه ای مداری l و اسپین s الکترونها مستقل نبوده ولی مجبورند که با یکدیگر جفت شده، گشتاور زاویه ای کل $J = l + s$ را تشکیل دهند. از این رو، حالت های الکترونی نمی توانند طبق اعداد کوانتومی اسپینی (m_s و s) یا گشتاور زاویه ای مداری (m_l و l) طبقه بندی شوند، بلکه مجبورند که طبق گشتاور زاویه ای کل (m_J و J) طبقه بندی شوند. بدین ترتیب، m_s ، s و m_l ، l دیگر "اعداد خوب کوانتومی" نخواهند بود. جفت شدگی اسپین و گشتاور زاویه ای

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-7



شکل ۳.۷. ساختار نواری گسترده GaAs نزدیک $k = 0$ ، شامل جفت شدگی اسپین - مدار.

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-8



7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-9

مداری به کاهش بیشتر واگنی نوار ظرفیت منجر می شود . بنابراین ، یکی از نوارهای ظرفیت (همان طوری که در شکل ۳.۷ نشان داده شده است) از نظر انرژی به سمت پایین جا به جا می شود . گشتاورهای زاویه ای کل نوارهای ظرفیت $1/2$ و $3/2$ است ، چون $l = 1$ (برای اوربیتالهای p ، داریم $l = 1$ و $s = 1/2$ است . دو نوار بالایی را حفره - سنگین^۱ ($m_J = 3/2$ و $-3/2$ و $J = 3/2$) و حفره - سبک^۲ ($m_J = 1/2$ و $-1/2$ و $J = 3/2$) می گویند . نوار پایینتر را نوار تقسیم شده^۳ می نامند ($m_J = 1/2$ و $-1/2$ و $J = 1/2$) که ناشی از جفت شدگی اسپین - مدار با فاصله انرژی $\Delta = 0.341 \text{ eV}$ است . این نوارها دارای تقارنهای گروه نقطه ای هستند که در شکل ۳.۷ به آن اشاره شده است . دو نوار ظرفیت بالایی دارای تقارن Γ_8 و نوار تقسیم شده دارای تقارن Γ_6 است . توجه کنید که در اینجا از نماد گذارهای تقارن گروه نقطه ای (نماد گذاری Γ) برای شناسایی نوار استفاده کردیم و منظور از به کار بردن Γ آن است که فرینیه های نوار در مرکز منطقه بریلوئن واقع می شوند و از مفاهیم نظریه گروه صرف نظر کرده ایم . طرز قرارگیری نوارهای ظرفیت (با نوار Γ_8 در بالای نوار Γ_6) یک ردیف بندی

1) heavy - hole 2) light - hole 3) split off

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-10

عادی است . واگنی نوار Γ_8 با حرکت $k = 0$ از بین می‌رود . بستگی انرژی نوارهای حفره - سنگین و حفره - سبک بر حسب k یک ناهمسانگردی را نشان می‌دهد ، یعنی جرم موثر حفره بستگی به سمتگیری k نسبت به محور بلور دارد . این اثر را اغلب اثر پیچشی^۱ می‌گویند . علاوه بر این ، نوارهای حفره از قانون ریشه دوم پاشندگی برای انرژیهای $\Delta \sim \mathcal{E}_h(k)$ (یعنی انرژی جفت شدگی اسپین - مدار) به طرز بارزی انحراف دارند . پاشندگی $\mathcal{E}(k)$ نوارهای ظرفیت بر حسب پارامترهای معروف به لاتینگر^۲ ، j_z ، j_y و j_x بیان می‌شوند . در نزدیک $k = 0$ با تقریب خوبی داریم (ماخذ ۲.۷ را ببینید)

$$\mathcal{E}_l = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}} \quad (1.7)$$

و

$$\mathcal{E}_h = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}} \quad (2.7)$$

1) warping

2) Luttinger Parameters

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-11

با

$$\frac{m_0}{m_{lh}} = j_1 + 2j_2 \quad (3.7)$$

و

$$\frac{m_0}{m_{hh}} = j_1 - 2j_2 \quad (4.7)$$

برای انرژیهای حفره - سبک ، $\mathcal{E}_1$ ، و حفره - سنگین ، $\mathcal{E}_h$ ، نوارها برای k در امتداد $[100]$ ، و

$$\frac{m_0}{m_{lh}} = j_1 + 2j_3 \quad (5.7)$$

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-12

$$\frac{m_0}{m_{hh}} = j_1 - 2j_3 \quad (6.7)$$

و همچنین، برای k در امتداد $[111]$ با مقادیر زیر برای پارامترهای لاتینگر برای GaAs

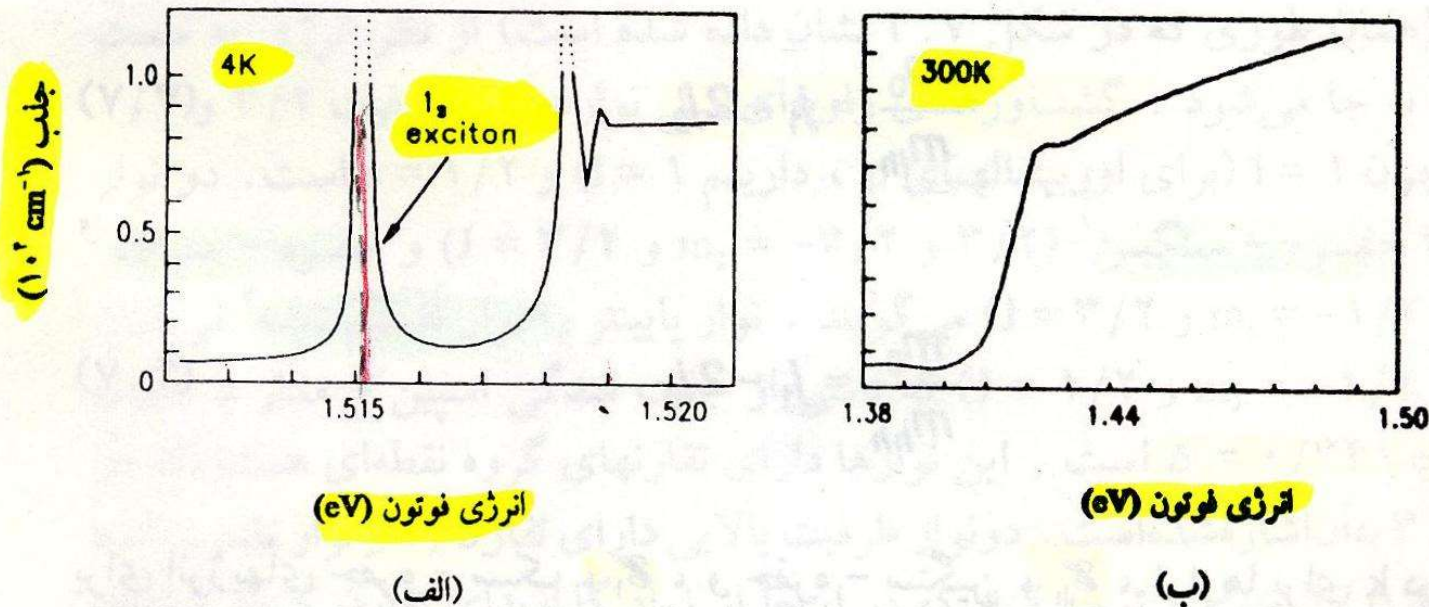
$$j_1 = 6.9 \quad (7.49)$$

$$j_2 = 2.4 \quad (2.41)$$

$$j_3 = 2.6 \quad (3.28) \quad (7.7)$$

هستند، که از ماخذ ۳.۷ اقتباس کرده ایم.

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-13



شکل ۵.۷. طیف جذبی GaAs در (الف) دمای پایین (ماخذ ۴.۷) و دمای اتاق (ماخذ ۵.۷).

شکل ۵.۷ طیف جذبی GaAs را در دمای اتاق و دمای پایین نشان می‌دهد. ضرایب جذب بزرگ $\alpha \sim 10^5 \sim 10^6 \text{ cm}^{-1}$ نشانه‌ای از گذارهای رده‌اول دوقطبی مجاز است. قله در ۱/۵۱۵ الکترون ولت در دماهای پایین متناظر با اکسایتون $n = 1$ است.

7.1 Gallium Arsenide (GaAs)-14

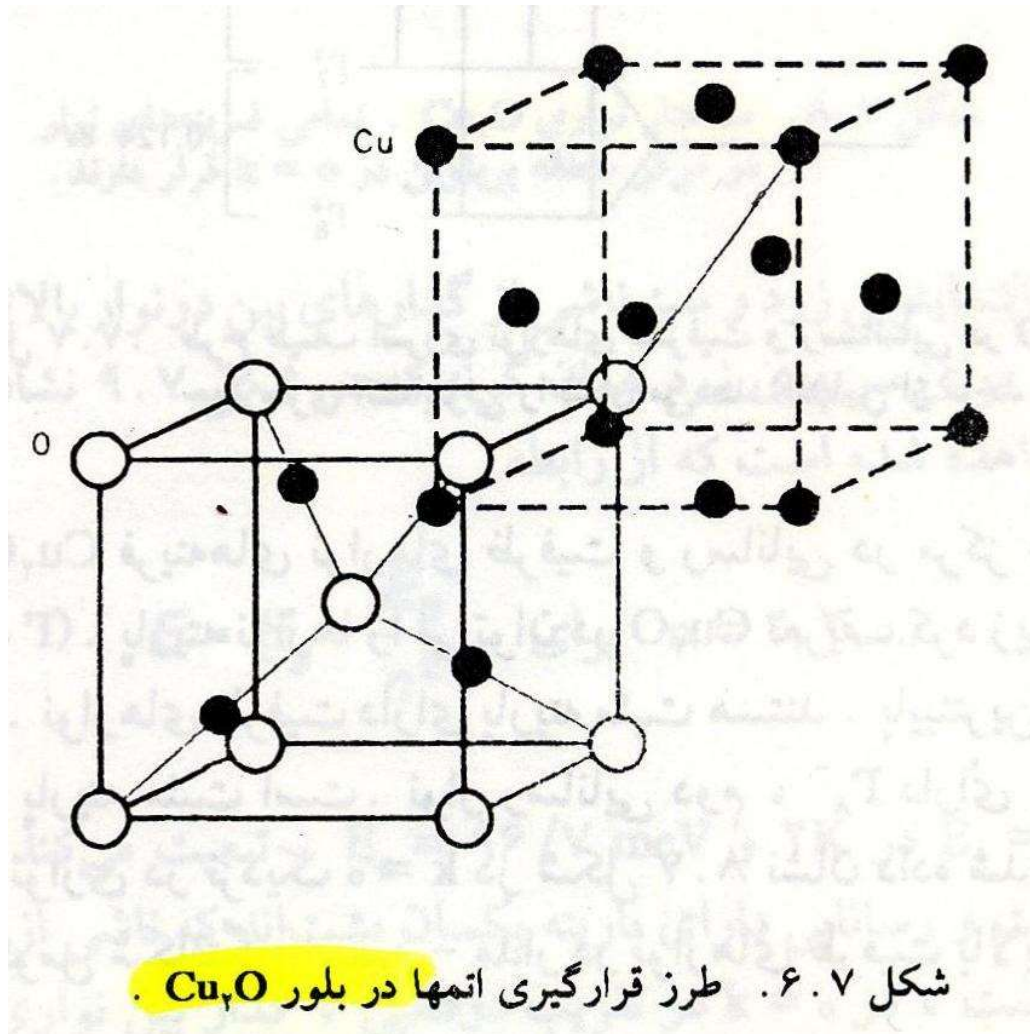
در بلورهای نازک با کیفیت خیلی بالا ، عبارت $n = 2$ نیز مشاهده می شود . انرژی بستگی اکسایتون برابر است با $E_B = 4/2 \text{ meV}$. در دمای اتاق ، با $k_B T > E_B$ ، ساختار اکسایتونی پهن شده و به علت طول عمر فوق العاده کوتاه اکسایتون 10^{-13} s با پیوستگی نوار به نوار یکی شده ، توسط تجزیه گرمایی به جفت الکترون - حفره غیر آزاد محدود می گردد .

7.2 Cuprous Oxide (Cu_2O)

۷-۲. اکسید مس Cu_2O

Cu_2O نیمرسانای قرمز رنگی است که در ساختار مکعبی به صورت بلور در آمده ، دارای تقارن وارون است و به تقارن گروه نقطه‌ای O_h تعلق دارد . با وجودی که در نخستین روزهای فیزیک نیمرسانا Cu_2O به عنوان ماده‌ای برای یکسو کننده الکتریکی مورد نظر قرار گرفته می‌شد ، ولی امروزه از نظر تکنیکی چندان حائز اهمیت نیست . ولی ، به علت حضور گذارهای متنوع اکسایتونی که با نظریه در توافق است ، این ماده به عنوان مدلی برای مطالعه اثرات اکسایتونی به خدمت گرفته می‌شود .

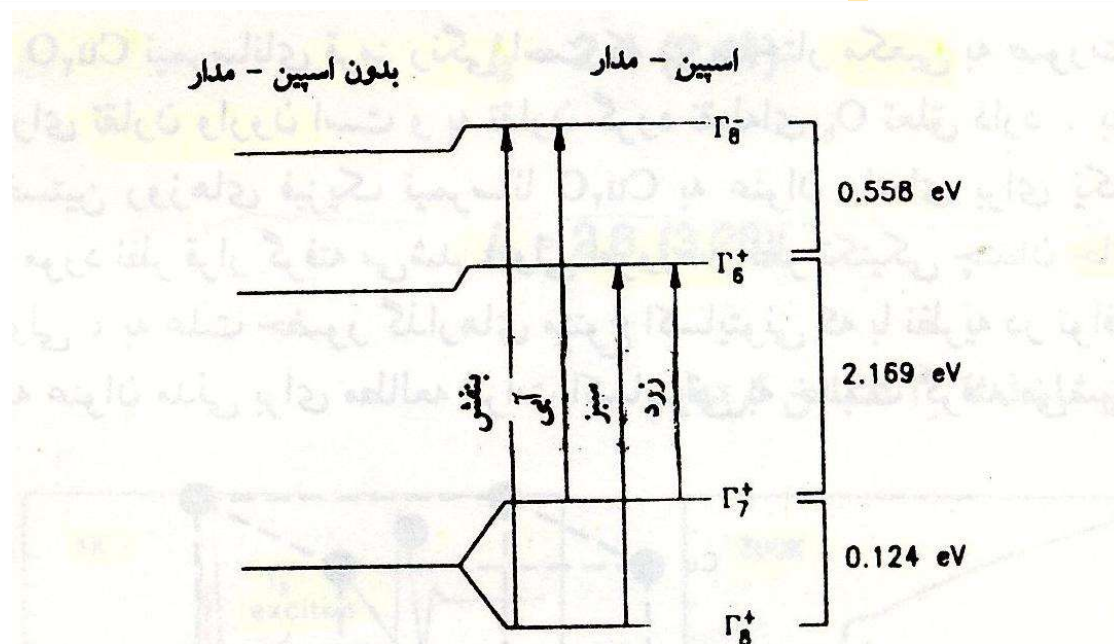
7.2 Cuprous Oxide (Cu_2O)-2



7.2 Cuprous Oxide (Cu_2O)-3

در شکل ۶.۷ ترتیب قرارگیری اتمها را در شبکه مستقیم نشان داده‌ایم . اتمهای اکسیژن گوشه‌های شبکه مکعبی مرکز حجمی را اشغال کرده‌اند، در حالی که اتمهای مس در شبکه مکعبی مرکز سطحی با ثابت شبکه $a = 4/26 \text{ \AA}$ قرار گرفته‌اند . شکل ۷.۷ ، نوارهای الکترونی مسئول گذارهای نوری در ناحیه مرئی و فرابنفش طیف را نشان می‌دهد . نوار رسانایی از اوربیتالهای $4s$ اتم مس تشکیل شده است . نوار ظرفیت از اوربیتالهای $3d$ تشکیل شده است که در اثر برهمکنش اسپین - مدار شکافته شده‌اند .

7.2 Cuprous Oxide (Cu_2O)-4



شکل ۷.۷. طرح طیف انرژی نوارهای ظرفیت و رسانایی در Cu_2O که چهارسری اکسایتونی را نشان می‌دهد (اقتباس از ماخذ ۶.۷).

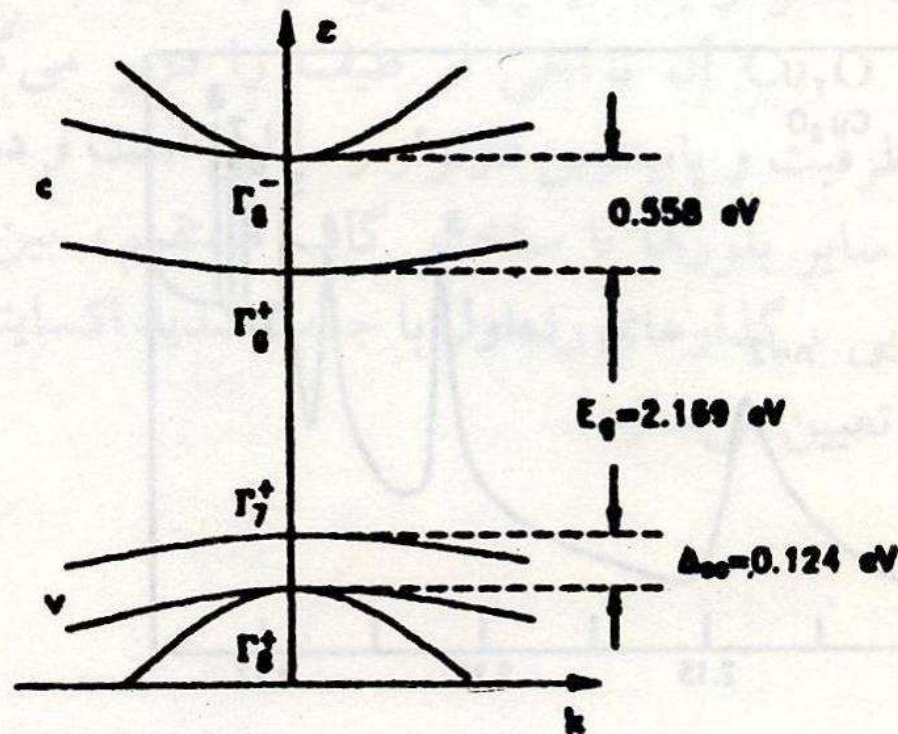
با گذارهای بین نواری بین دونوار ظرفیت و دو نوار رسانایی است. اغلب از آنها به عنوان اکسایتون‌های زرد، سبز، آبی و بنفش یاد می‌شود و این به علت ناحیه طیفی است و همان طوری که در شکل ۷.۷ نشان داده شده است آنها در این نواحی ظاهر می‌گردند.

7.2 Cuprous Oxide (Cu_2O)-5

در Cu_2O فرینه‌های نوارهای ظرفیت و رسانایی در مرکز منطقه بریلوئن قرار گرفته‌اند (نقطه Γ). پاریته نوارها را می‌توان در Cu_2O تعریف کرد زیرا مواد دارای مرکز وارون هستند. نوارهای ظرفیت دارای پاریته مثبت هستند. پایینترین نوار رسانایی یعنی Γ_8^+ نیز دارای پاریته مثبت است. نوار رسانایی دوم، Γ_8^- دارای پاریته منفی است. نتیجه ساختار نواری در نزدیک $k = 0$ در شکل ۸.۷ نشان داده شده است. به ترتیب قرارگیری معکوس شکافتگی اسپین - مدار در نوارهای ظرفیت بالای Γ_8^+ و Γ_7^+ توجه کنید.

در جذب خطی، چهار گروه از خطوط اکسایتونی مشاهده شده‌اند که مرتبط

7.2 Cuprous Oxide (Cu_2O)-6



شکل ۷.۸. ساختار نواری Cu_2O . تمامی فرینمهای نواری در مرکز منطقه بریلوئن در $k = 0$ قرار دارند.

7.2 Cuprous Oxide (Cu_2O)-7

جذب اکسایتونی زرد و سبز ناشی از گذارهای بین دونوار بالاتر و پایستترین نوار رسانایی است . برای سریهای زرد همان گونه که در شکل ۹.۷ نشان داده شده است تا هفت خط مشاهده شده است که از رابطه

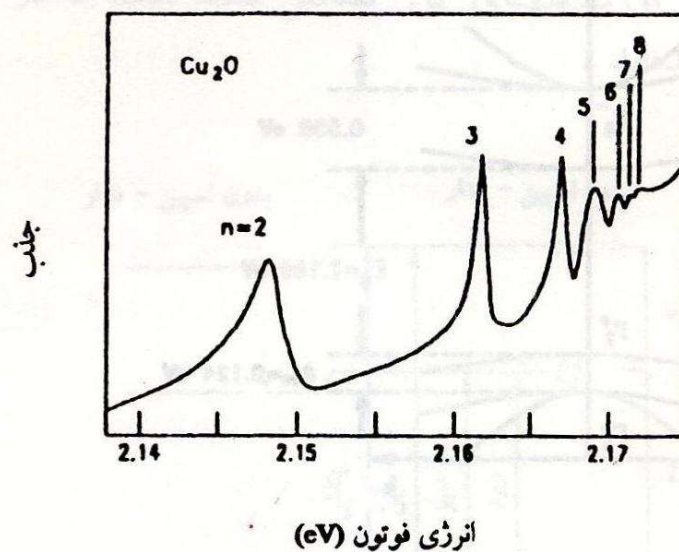
$$E = E_g - \frac{E_B}{n^2} \quad \text{برای } n = 2, 3, \dots \quad (۸.۷)$$

با $E_g = ۲/۱۷۲ \text{ eV}$ در ۲K و $E_g = ۹۶/۷ \text{ meV}$ ، تبعیت می کند . از آنجایی که هر دو نوار ظرفیت و رسانایی دارای پاریته یکسان مثبت اند که ناشی از مشخصه اتمی d و s اصلی شان است ، در $k = 0$ در تقریب دوقطبی ، گذار بین نواری ممنوع می باشد ($\Delta l = ۲$) . بدین ترتیب گذارهای دوقطبی رده دوم با اکسایتونهای نهایی که دارای تابع پوش شبه p - هستند مجاز خواهند بود . تغییر کلی گشتاور زاویه ای خواهد شد

7.2 Cuprous Oxide (Cu_2O)-8

$$(9.7) \quad \Delta I = \pm 1 \quad \text{با} \quad \Delta I_{int} = \pm 2 \quad \text{و} \quad \Delta I_{env} = \pm 1$$

توجه داریم که اکسایتون $n = 1$ که می‌باید دارای تابع پوش s باشد نمی‌تواند قانون انتخاب گذار را اقلان سازد و لذا حذف می‌شود.



شکل ۹.۷. طیف جذبی سریهای اکسایتونی زرد Cu_2O در ۲K (اقتباس از ماخذ ۷.۷).

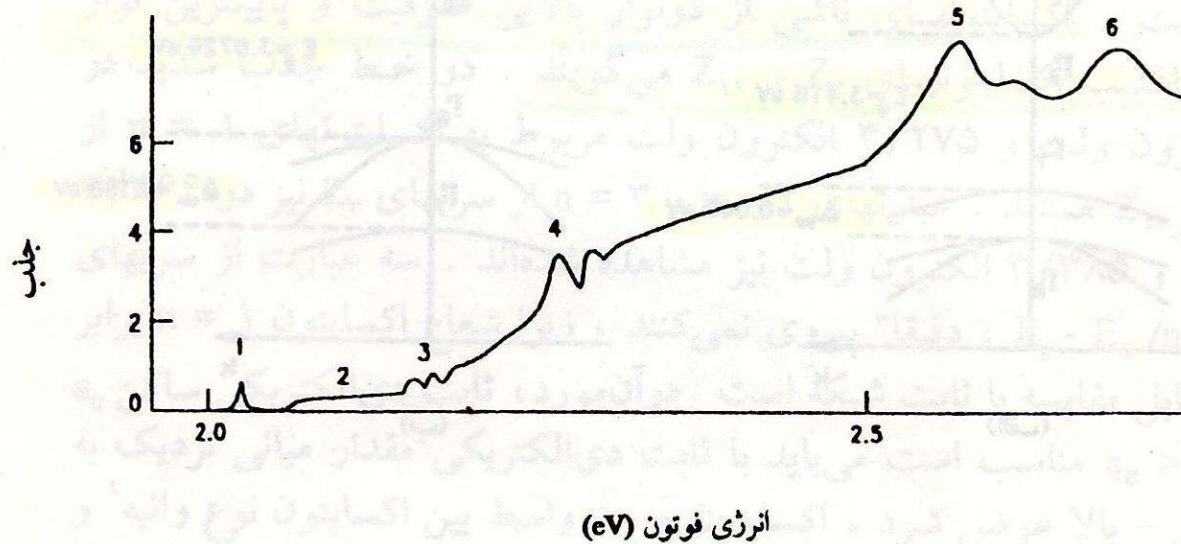
7.2 Cuprous Oxide (Cu_2O)-9

گذارهای دوقطبی رده دوم نسبتاً ضعیف هستند. در Cu_2O ضریب جذب اکسایتونهای زرد که در گستره طیفی $2/2 - 2/1 \text{ eV}$ ظاهر می‌شوند در مرتبه $10^3 - 10^4 \text{ cm}^{-1}$ قرار می‌گیرند. اکسایتون $n = 1$ به صورت یک خط جذبی بسیار ضعیف در نمونه‌هایی با ضخامت چند میلیمتر می‌تواند قابل مشاهده باشد زیرا گذار در تقریب چهارقطبی مجاز است [به معادله (۴۵.۵) مراجعه شود]. گذارهای نوری به تراز اکسایتونی $n = 1$ نیز با همکاری فونونهای اپتیکی نیز می‌تواند به وقوع بپیوندد. مشارکت فونون نوری، پاریته منفی، پاریته و اندازه حرکت مورد نیاز برای تکمیل گذار به حالت‌های مختلف k ی نوار اکسایتونی $n = 1$ را فراهم می‌سازد. بنابراین، علاوه بر خط تیز $n = 1$ که به صورت بسیار ضعیف مشاهده می‌شود، لبه جذب هموار (نمونه‌ای نیمرساناهای با گاف غیرمستقیم) در نیمرسانای Cu_2O با گاف مستقیم مشاهده می‌گردد.

7.2 Cuprous Oxide (Cu_2O)-10

در انرژیهای بالاتر فوتون (بالاتر از $2/5 \text{ eV}$) ، خطوط جذبی شدیدی ظاهر می شود که به گذارهای طبقه اول برای اکسایتونهای s از دو نوار بالای ظرفیت و نوار دوم رسانایی مرتبط می شود . پاریته منفی نوار دوم رسانایی گذارهای رده اول از نوارهای ظرفیت پاریته مثبت را مجاز می سازد . برای مشاهده خط جذبی این اکسایتونهای دوقطبی مجاز نمونه های نازک کمتر از یک میکرون مورد نیاز است . رفتار جذب خطی Cu_2O آن نواحی از طیف را دربر می گیرد که شامل گذارهای بین دونوار بالای ظرفیت و پایینترین دونوار رسانایی است و در شکل ۱۰۷ ترسیم شده است . در اکثر سایر بلورها با ساختار گاف مستقیم ، بین بالاترین نوار ظرفیت و پایینترین نوار رسانایی ، گذارهای رده اول با جذب شدید اکسایتون رخ می دهد که در نتیجه شروع جذب را تعیین می سازد .

7.2 Cuprous Oxide (Cu_2O)-11



طیف جذبی Cu_2O در دمای پایین . با شروع از انرژیهای پایینتر گذارهای اکسایشی بعدی امکانپذیر می شود . (۱) $n = 1$ اکسایشیون زرد که به صورت گذارهای چهار قطبی به طور ضعیفی مشاهده می شود، (۲) $n = 1$ اکسایشیون زرد با گذار به کمک فونون ، (۳) $n = 2, 3, \dots$ اکسایشیونهای زرد با گذار رده دوم ، (۴) $n = 2, 3, \dots$ اکسایشیونهای p سبز با گذار رده دوم ، (۵) $n = 1, 2, \dots$ اکسایشیونهای s آبی با گذار رده اول، و (۶) $n = 1, 2, \dots$ اکسایشیونهای s بنفش با گذار رده اول .

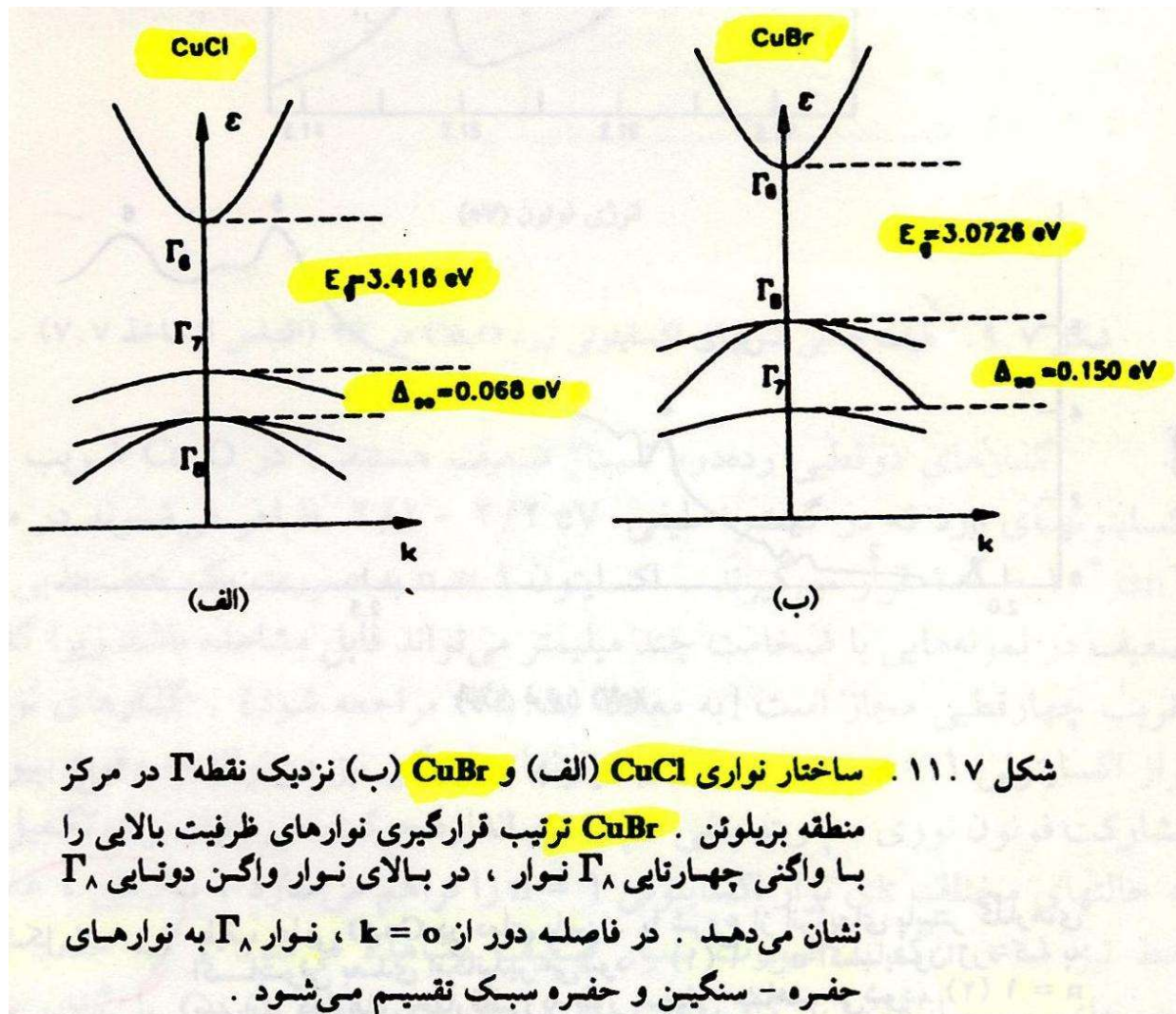
شکل ۷.۱

7.3 Cuprous Chloride (CuCl)

۳-۷. کلرید مس (کاپروس کلرید) CuCl

کلرید مس مثال خوبی از یک نیمرسانای ترکیب I - VII است. عموماً چنین بلورهایی دارای گافهای انرژی بزرگ، $E_g > 3\text{eV}$ ، هستند و برای تابش مرئی شفاف اند. در زیر 400°C ساختار بلور CuCl ترکیب روی^۲ (نظیر GaAs با تقارن گروه نقطه‌ای T_h) است. ثابت شبکه CuCl در دمای اتاق $a = 0.5406\text{ nm}$ است. ساختار طرح گونه نوار در شکل ۱۱.۷ نشان داده شده است. فرینه‌های پایستترین نوار رسانایی و بالاترین نوار ظرفیت در مرکز منطقه بریلوئن در نقطه Γ واقع شده‌اند. به علت فقدان تقارن وارون در $k = 0$ ، پارته‌ای را نمی‌توان به نوارها استناد نمود. نوار رسانایی از اوربیتالهای s از ترازهای $4s$ اتم Cu حاصل می‌شود. اصولاً

7.3 Cuprous Chloride (CuCl)-2



7.3 Cuprous Chloride (CuCl)-3

بالاترین نوارهای ظرفیت Γ_v و Γ_8 ، از اوربیتالهای $3d$ یونهای Cu (با تقریباً ۲۳٪ ترکیب اوربیتالهای p یون کلرید) حاصل می‌شوند . فاصله Δ انرژی بین دو نوار بالای ظرفیت ناشی از جفت شدگی اسپین - مدار 68 meV است . ترتیب قرارگیری نوارهای ظرفیت در CuCl با ترتیب قرارگیری نوارها در مواد اختلاط روی [نظیر ترکیبات مرتبط CuBr یا GaAs (شکل ۱۱.۷) ، با نوار واگن دوتایی Γ_v در بالای نوار چهارتایی Γ_8] اختلاف دارد . این امر ناشی از مشخصه شدید شبه d - نوارهای ظرفیت است که علامت جداشدگی اسپین - مدار را تغییر می‌دهد . بنابراین ساختار نوار CuCl خیلی شبیه به مورد Cu_2O است که در بالا مورد بحث قرار گرفت ، بجز آنکه عنصر ماتریسی تک - فوتون بین نواری $\langle c | p | v \rangle$ در $k = 0$ بین بالاترین نوار ظرفیت و پایتترین نوار رسانایی مجاز می‌باشد و این به علت آن است که نوار ظرفیت دارای مشخصه پاری شبه p - است . این امر به خطوط جذبی اکسایتون (مطابق با شکل ۱۲.۷) منجر می‌گردد . به علت ضریب جذب بالای 10^5 cm^{-1} ، α ، نزدیک به لبه نوار ، برای طیف نگاری تراگسیلی خطی فیلمهای نازک به ضخامت $d < 1/\mu\text{m}$ ،

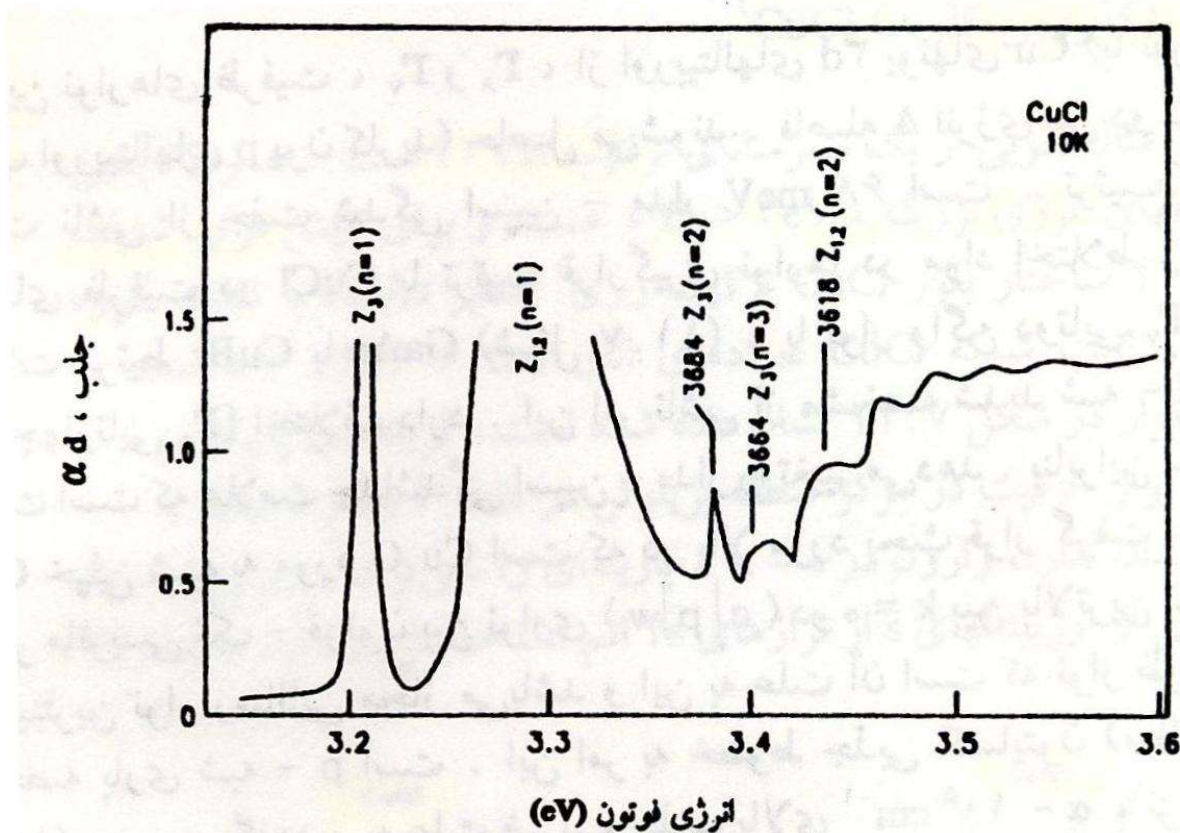
7.3 Cuprous Chloride (CuCl)-4

مورد نیاز است . اکسایتونهای ناشی از دونوار بالایی ظرفیت و پایستترین نوار رسانایی را اغلب اکسایتونهای Z_3 و Z_{12} می‌گویند . دو خط جذب شدید در $3/205$ الکترون ولت و $3/275$ الکترون ولت مربوط به اکسایتونهای $n = 1$ از سریهای Z_3 و Z_{12} هستند . عبارتهای $n = 2$ و $n = 3$ از سریهای Z_3 نیز در $3/366$ الکترون ولت و $3/385$ الکترون ولت نیز مشاهده شده‌اند . سه عبارت از سریهای هیدروژن ، $E_g - E_B / n^2$ ، دقیقاً پیروی نمی‌کنند ، زیرا شعاع اکسایتون $n = 1$ برابر با 0.7 nm قابل مقایسه با ثابت شبکه است . در آن مورد ، ثابت دی‌الکتریکی ساکن ϵ_0 که برای $a \gg a_B$ مناسب است می‌باید با ثابت دی‌الکتریکی مقدار میانی نزدیک به مقدار فرکانس - بالا عوض شود ، اکسایتون ، حد واسط بین اکسایتون نوع وانیه^۱ و نوع فرانکل^۲ خواهد بود . انرژی بستگی $n = 1$ ، اکسایتون نوع Z_3 برابر با 0.210 الکترون ولت است .

به علت جفت شدگی شدید با نور ، اکسایتون $n = 1$ مشخصه پولاریتون قابل ملاحظه‌ای را ارائه می‌دارد . منحنی پاشندگی پولاریتون $n = 1$ ، پولاریتون Z_3 ی CuCl در شکل ۱۳.۷ نشان داده شده است .

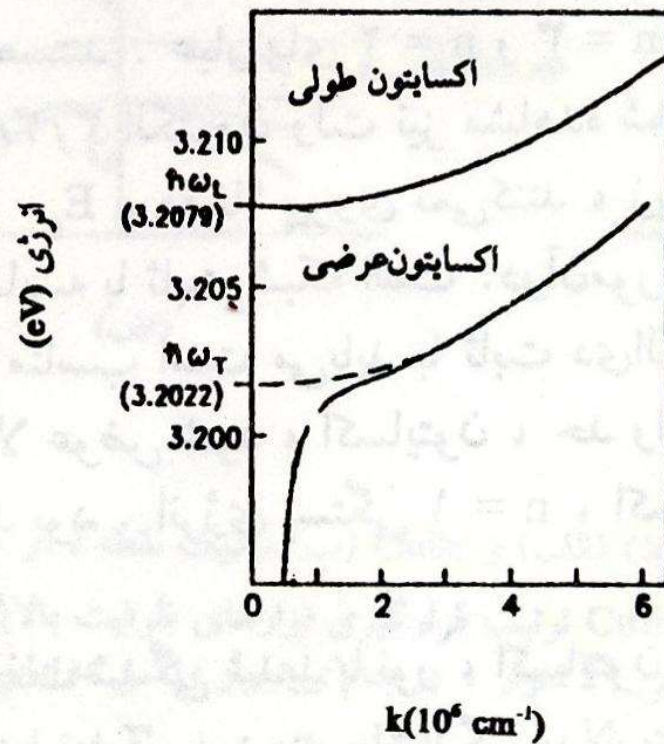
1) Wannier-type 2) Frenkel-type

7.3 Cuprous Chloride (CuCl)-5



شکل ۱۲.۷. طیف جذبی خطی **CuCl** در ۲K (اقتباس از ماخذ ۸.۷). خطوط $n = 1, 2, 3$ از سریهای اکسایتونی Z_3 و همچنین خطوط اکسایتونی $n = 1$ و $n = 2$ از سریهای Z_{12} مشاهده می‌شوند.

7.3 Cuprous Chloride (CuCl)-6



شکل ۱۳.۷. منحنیهای پاشندگی پولاریتون در CuCl (اقتباس از ماخذ ۹.۷).

7.4 Cadmium Sulfide (CdS)

۴-۷. سولفید کادمیوم CdS ^۱

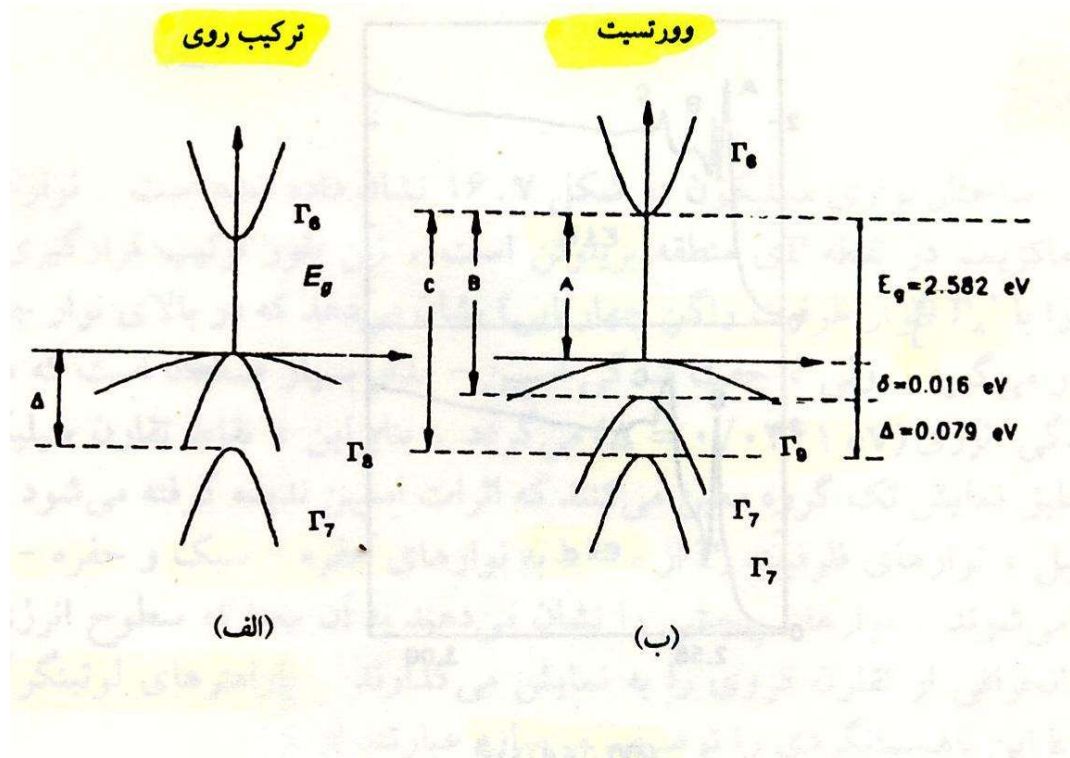
این مواد ترکیب زرد که نمایانگر خانواده $\text{II} - \text{VI}$ هستند برای خواص اکسایتونیشان به طور گسترده‌ای مورد مطالعه قرار گرفته‌اند (ماخذ ۱۰.۷). ساختار بلوری، وورتسیت^۲ با نماد تقارن گروه نقطه‌ای C_{6v} است. این بلور ششگوشی (هگزاگونال)^۳ با یک محور نوری C و تقارن وارون در صفحه xy است. این امر را می‌توان به صورت اعوجاج سه‌وجهی ساختار ترکیب روی در امتداد جهت $[111]$ دانست. با فرض ترتیب قرارگیری عادی جداشدگی اسپین - مدار نوارهای ظرفیت، Γ_v و Γ_8 ، این اعوجاج سه‌وجهی مانند میدان پتانسیلی عمل می‌کند که به میدان بلور دلالت دارد. پایین آوردن تقارن، واگنی نوار Γ_8 را برطرف می‌سازد که به ساختار نواری نشان داده شده در شکل ۱۴.۷ منجر می‌شود.

1) Cadmium Sulfide

2) Wurtzite

3) hexagonal

7.4 Cadmium Sulfide (CdS)-2



شکل ۱۴.۷. ساختار نواری نزدیک $k = 0$ برای (الف) ساختار ترکیب روی با جفت شدگی معمول اسپین - مدار و (ب) ساختار وورتسیت با جداسازی اضافی δ ، ناشی از میدان بلور در نوار ظرفیت بالایی.

1) Cadmium Sulfide

2) Wurtzite

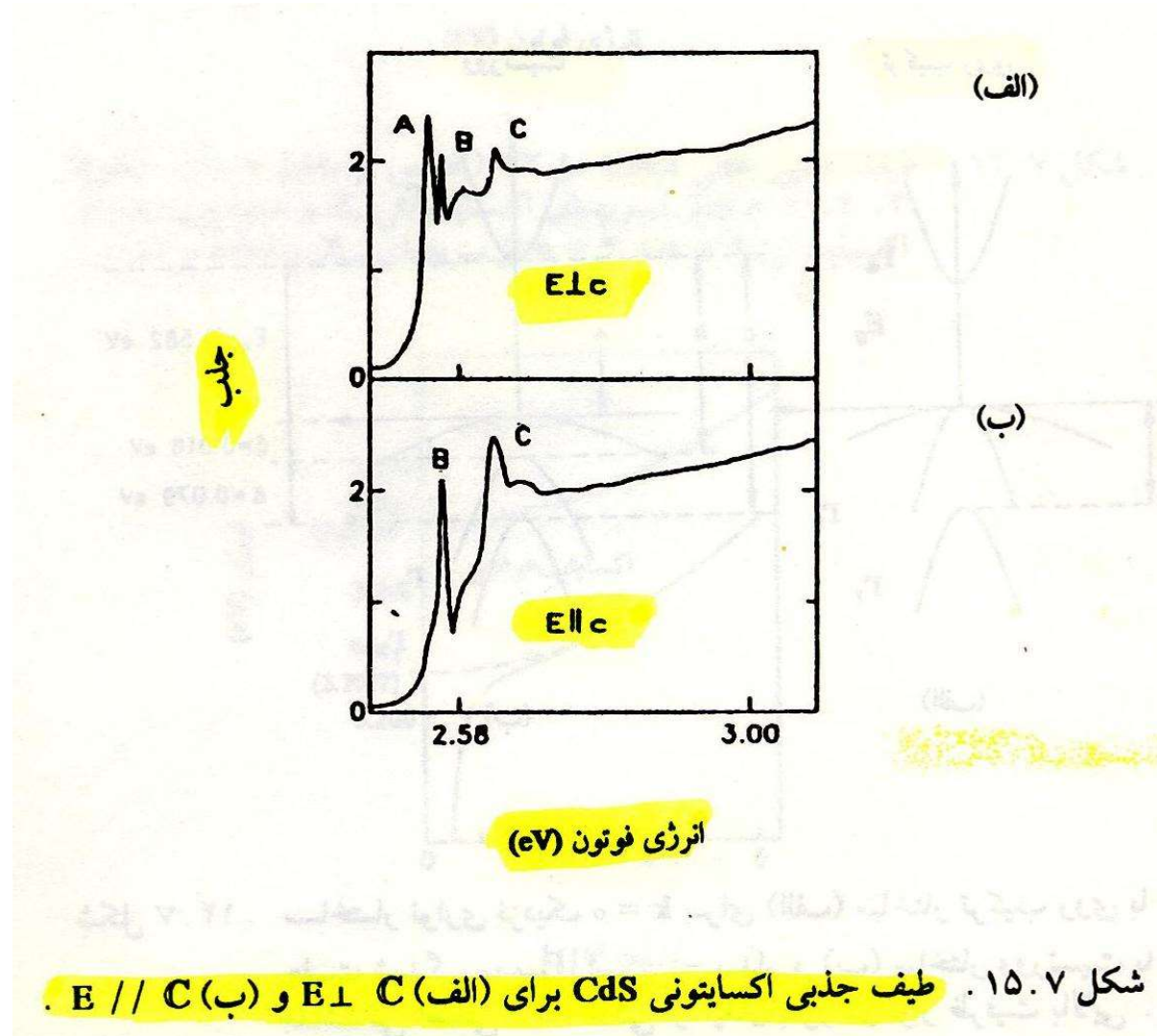
3) hexagonal

7.4 Cadmium Sulfide (CdS)-3

گذارهای بین سه نوار ظرفیت و نوار رسانایی Γ در CdS به صورت مرسوم با A ، B و C نشان داده می شود .

اکسایتون ها از سریهای A ، B و C ، دوقطبی مجاز و مستقل از جهت قطبش در صفحه xy هستند . از طرف دیگر ، برای نوری که عمود بر محور نوری بلور انتشار می یابد ($k \perp C$) ، بلور رفتار ناهمسانگردی^۱ از خود نشان می دهد . اگر میدان الکتریکی فرودی در جهت عمود بر محور C بلور قطبیده باشد ($E \perp C$) ، اکسایتونهای سریهای A ، B و C مانند قبل مجاز هستند . ولی ، برای $E \parallel C$ تنها اکسایتونهای شبه s - سریهای B و C مجاز می باشند . این جذب ناهمسانگردی در شکل ۱۵.۷ نشان داده شده است . انرژی بستگی اکسایتون برای سریهای A و B برابر با meV ۲۷/۴ است .

7.4 Cadmium Sulfide (CdS)-4



7.5 Silicon and Germanium (Si & Ge)

۵-۷. سیلیکون (Si) و ژرمانیوم (Ge)

این بلورها، مخصوصاً Si در قلب الکترونیک امروز جای داشته و جزء تشکیل دهنده اکثر ترانزیستورها و سایر اجزای مدارهای مجتمع محسوب می شوند. این بلورها کلاً نسبت به نور مرئی کدر هستند که به آنها نمود فلزی می بخشد. خواص نوری آنها در نزدیک لبه جذب با ساختار گاف نوار غیر مستقیم تعیین می شود که شروع جذب هموار و نسبتاً ضعیفی را حاصل می سازد. خواص نوری Si و Ge نیز در آشکارسازهای کارآمد نور فروسرخ مورد استفاده قرار می گیرد.

Si و Ge به ساختار الماس تعلق دارند (گروه نقطه ای O_h با مرکز وارونی)، که شبیه به ترکیب روی است بجز آنکه تنها یک نوع اتم توسط چهار نزدیکترین اتمهای مجاور تشکیل یک چهاروجهی را می دهند (شکل ۱.۷ را ببینید). پارامترهای شبکه $a = 0.357 \text{ nm}$ برای Si و $a = 0.357 \text{ nm}$ برای Ge است.

7.5 Silicon (Si)

سیلیکون

ساختار نواری سیلیکون در شکل ۱۶.۷ نشان داده شده است. نوار ظرفیت دارای ماکزیمم در نقطه Γ ی منطقه بریلوئن است. این بلور ترتیب قرارگیری عادی نوارها را با Γ_8^+ (نوار ظرفیت واگن چهارتایی) نشان می‌دهد که در بالای نوار جدا شده Γ_8^+ قرار می‌گیرد. ولی، جفت شدگی اسپین - مدار بسیار ضعیف است که منجر به جداشدگی انرژی ($\Delta = 0.441 \text{ eV}$) می‌گردد. بنابراین، نقاط تقارن سیلیکون را غالباً "طبق نمایش تک گروه معین می‌کنند که اثرات اسپین ندیده گرفته می‌شود. مانند مورد قبل، نوارهای ظرفیت Γ_8 از $k = 0$ به نوارهای حفره - سبک و حفره - سنگین تقسیم می‌شوند. نوارها، پیچشی را نشان می‌دهند به آن معنا که سطوح انرژی ثابت $\mathcal{E}_v(k)$ انحرافی از تقارن کروی را به نمایش می‌گذارند. پارامترهای لوتینگر^۲ که در فضای k این ناهمسانگردی را توصیف می‌سازد عبارتند از:

$$j_1 = 4.285, \quad j_2 = 0.339, \quad j_3 = 1.446, \quad (10.7)$$

1) tetrahedron 2) Luttinger

7.5 Silicon (Si)-2

که به میانگین جرمهای موثر حفره

$$m_{hh} = 0.537 m_0 ,$$

$$m_{lh} = 0.153 m_0 ,$$

و

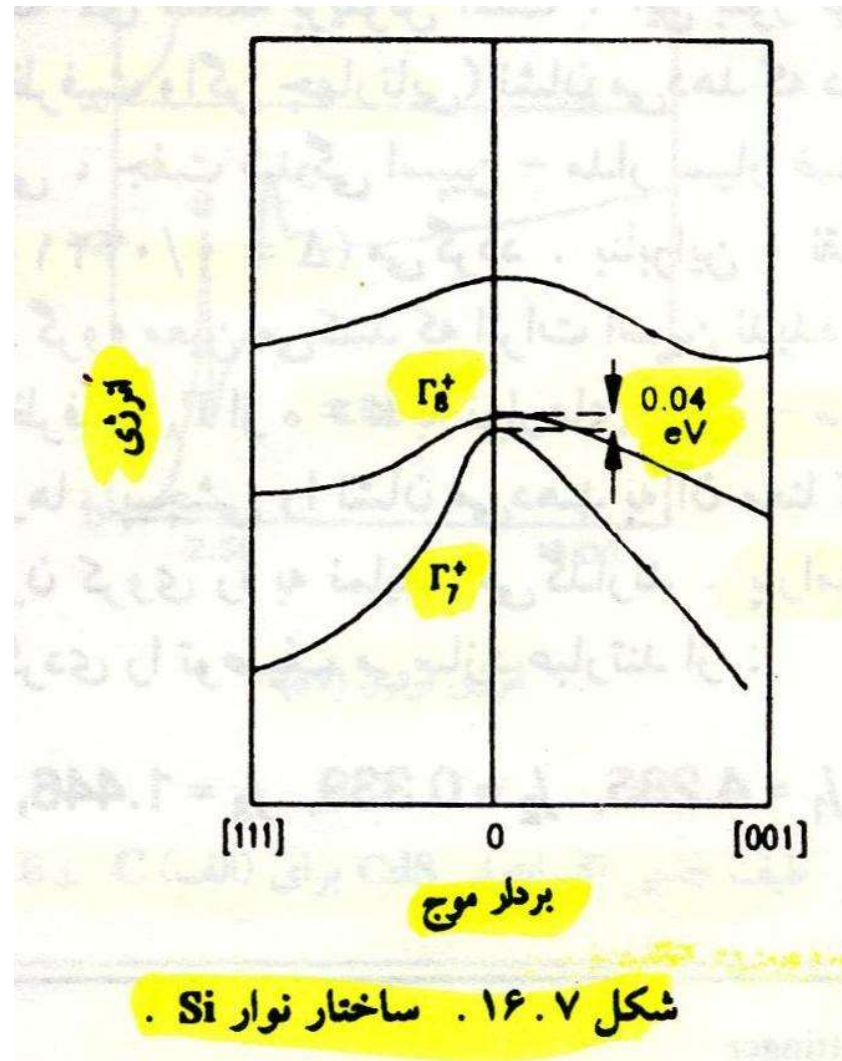
$$m_{so} = 0.234 m_0 \quad (11.7)$$

منجر می شود . می نیمومهای نوار رسانایی در امتداد محور $[100]$ با شش می نیموم معادل قرار دارند که حدود $(2\pi/a) \cdot 0.85$ به سمت نقطه تقارن Δ است . سطوح انرژی ثابت دارای شکل بیضیوارهای کشیده ای است که در جهتهای $[100]$ قرار می گیرند . مقادیر جرم موثر الکترون خواهند شد

$$m_{||} = 0.1905 m_0 \quad \text{جرم طولی}$$

$$m_{\perp} = 0.9163 m_0 \quad \text{جرم عرضی} \quad (12.7)$$

7.5 Silicon (Si)-3



7.5 Germanium (Ge)

ژرمانیوم

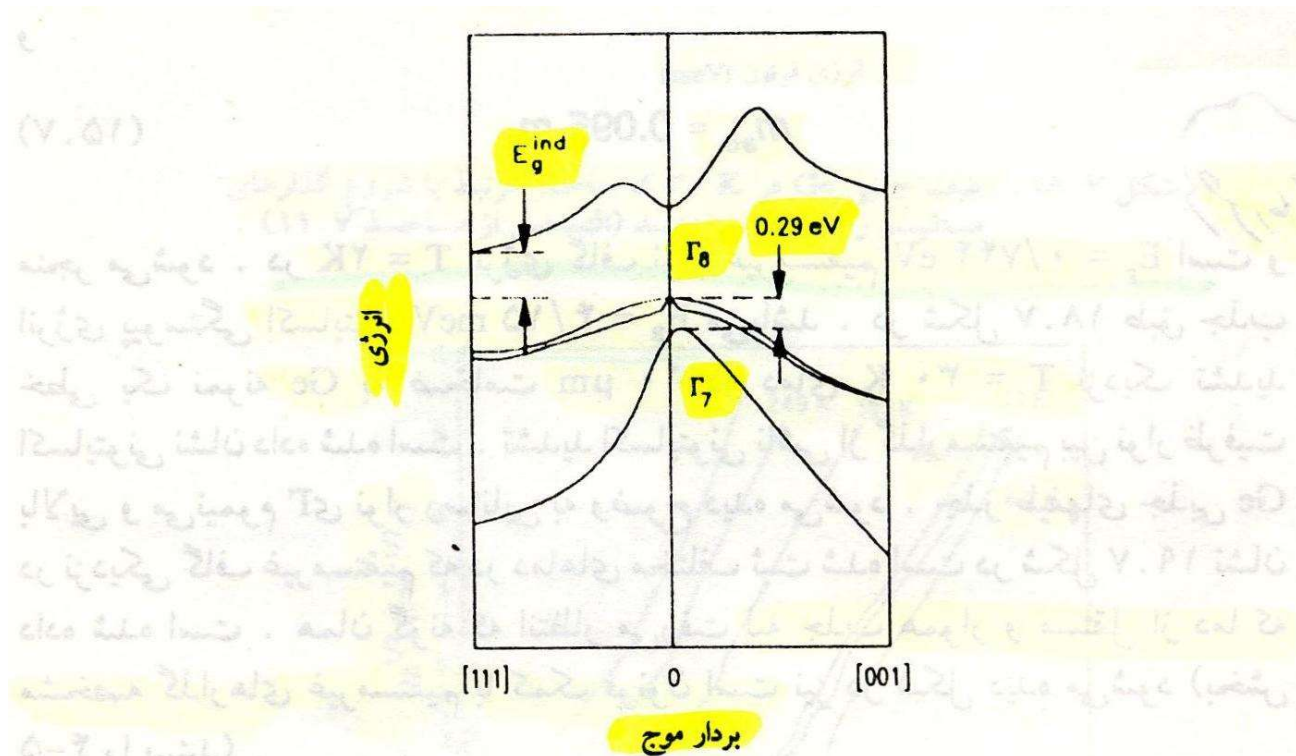
ژرمانیوم نیز یک ماده با گاف غیرمستقیم است (شکل ۱۷.۷ را ببینید). نوار رسانایی دارای چهار می نیموم معادل در انتهای نقاط محور در جهت [۱۱۱] در منطقه بریلوئن است. در اینجا نیز جرم موثر الکترون به شدت ناهمسانگرد می باشد. سطوح انرژی ثابت دارای شکلهای بیضیوار چرخشی است که محور بزرگتر آن در امتداد جهت [۱۱۱] قرار می گیرد. جرمهای موثر الکترون در جهت [۱۱۱] عبارتند از:

$$m_{e\perp} = 0.0815 m_0 ,$$

و

$$m_{e\parallel} = 1.588 m_0 . \quad (۱۳.۷)$$

7.5 Germanium (Ge)-2



شکل ۱۷.۷. ساختار طرح گونه نوار Ge.

نوار ظرفیت شبیه مورد Si است ، به استثنای جداشدگی بزرگتر اسپین - مدار بین نوارهای Γ_8 و Γ_7 ، با $\Delta = 0.29 \text{ eV}$. پارامترهای لوتینگر α_1 ، α_2 و α_3 به قرار زیراند :

7.5 Germanium (Ge)-3

$$j_1 = 13.35$$

$$j_2 = 4.25$$

$$j_3 = 5.69$$

(۱۴.۷)

که به جرمهای موثر حفره

$$m_{hh} = 0.284 m_0$$

$$m_{lh} = 0.0438 m_0$$

$$m_{so} = 0.095 m_0$$

(۱۵.۷)

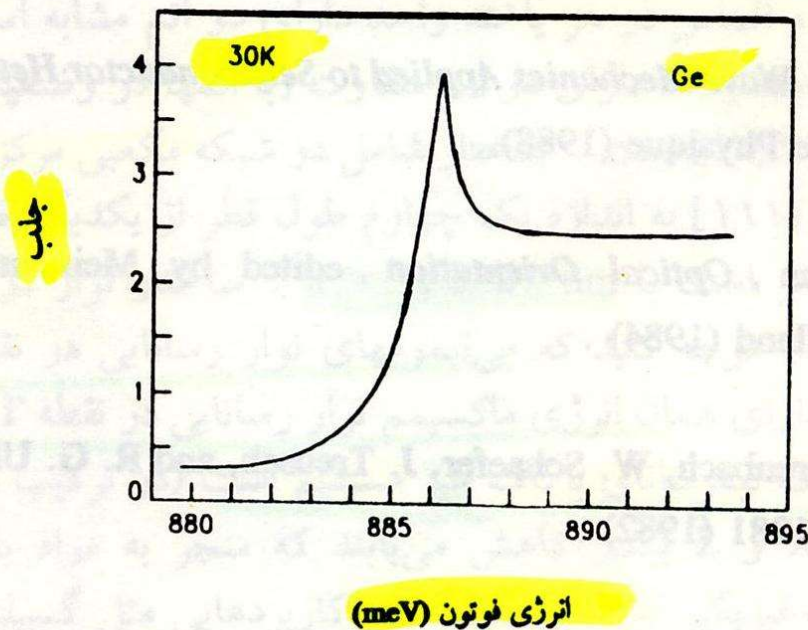
7.5 Germanium (Ge)-4

منجر می شود . در $T = 2\text{ K}$ انرژی گاف نوار غیرمستقیم $E_g = 0.744\text{ eV}$ است و^۱ انرژی پیوستگی اکسایتون $E_B = 4/15\text{ meV}$ می باشد . در شکل ۱۸.۷ طبق جذب خطی یک نمونه Ge به ضخامت $10\text{ }\mu\text{m}$ در دمای $T = 30\text{ K}$ نزدیک تشدید اکسایتونی نشان داده شده است . تشدید اکسایتونی ناشی از گذار مستقیم بین نوار ظرفیت بالایی و می نیموم Γ ی نوار رسانایی به وضوح دیده می شود . جذر طیفهای جذبی Ge در نزدیکی گاف غیرمستقیم که در دماهای مختلف ثبت شده است در شکل ۱۹.۷ نشان داده شده است . همان گونه که انتظار می رفت لبه جذب هموار و مستقل از دما که مشخصه گذارهای غیرمستقیم با کمک فونون است نیز در شکل دیده می شود (بخش ۴-۵ را ببینید) .

بلورهای ژرمانیوم و سیلیکون را می توان به صورت فوق خالص با غلظت عیوب کمتر از 10^{13} cm^{-3} رشد داد . از آنجایی که فرایند ترکیب مجدد تابشی گذاری غیرمستقیم است (جذب معکوس) ، و لذا در تقریب مرتبه اول ممنوع می باشد ، طول عمرهای اکسایتون طولانی و در مرتبه 10^{-5} s در بلورهای فوق خالص می باشد . در چنین نمونه هایی (مانند مورد Cu_2O) می توان انتقال اکسایتون را در فواصل میکروسکوپی

7.5 Germanium (Ge)-5

مشاهده کرد . بنابراین ، اکسایتون‌ها نسبت به مراکز فروافت غیرتابشی ، حتی اگر این مراکز دارای چگالی پایینی باشند ، حساس هستند . اینها دلایلی هستند که Ge و Si در زمره گسیلنده‌های نوری ضعیف قرار می‌گیرند .



شکل ۱۸.۷ . طیف جذبی Ge در ۳۰ K که ساختار مرتبط با شروع گذارهای مستقیم را نشان می‌دهد (اقتباس از ماخذ ۱۱.۷) .

7.5 Germanium (Ge)-6

