

OPTOELECTRONICS (2)

Lecture 5: Linear Optical Properties of Semiconductors

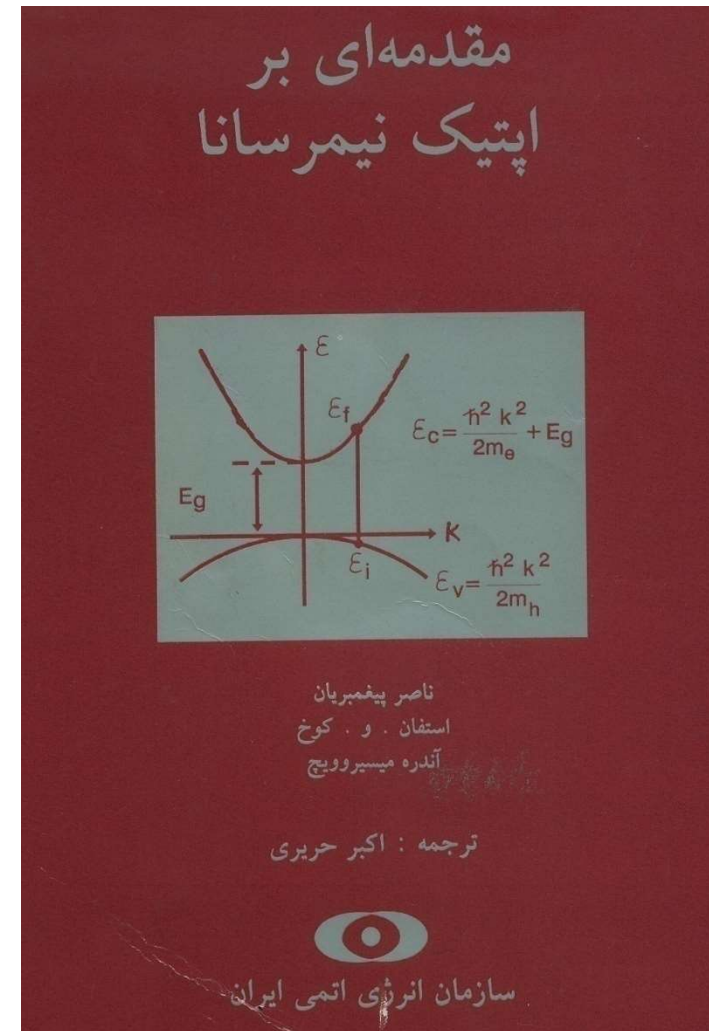
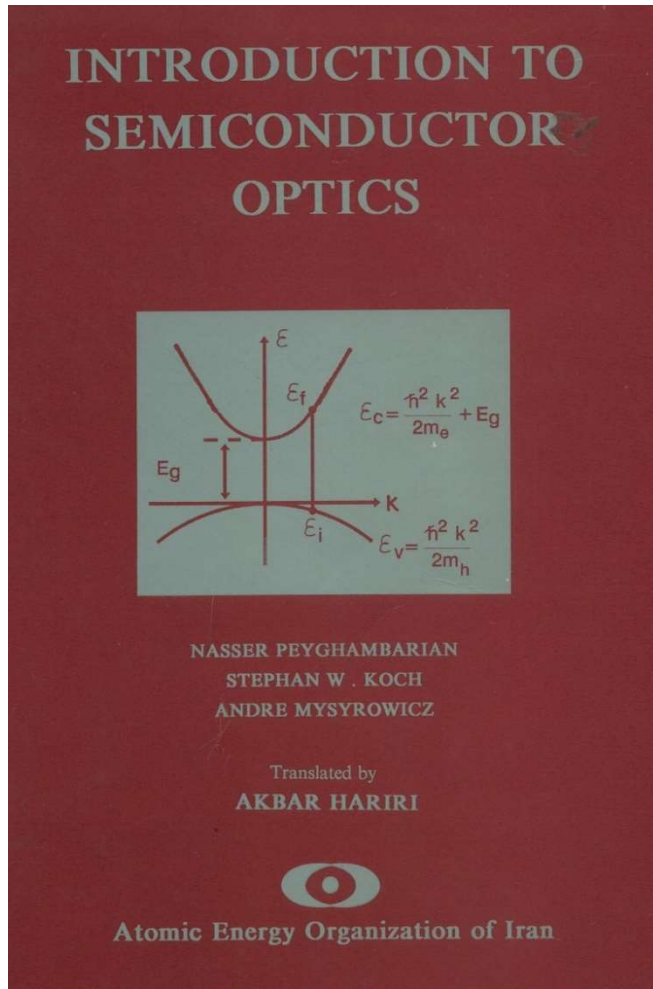
Mohammad Ali Mansouri-Birjandi

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

mansouri@ece.usb.ac.ir

mamansouri@yahoo.com

مرجع



فهرست مطالب

۰- مقدمه

۱- نیمرسانای گاف مستقیم و غیرمستقیم (Direct and Indirect-Gap Semiconductors)

۲- جذب جفت الکترون-حفره آزاد (Free Electron-Hole-Pair Absorption)

۳- گذارهای مستقیم (Direct Transitions)

۴- گذارهای غیرمستقیم (Indirect Transitions)

۵- بستگی گاف نوار به فشار و دما

مقدمه

❖ **حالت پایه:** حالتی که ماده به وسیله اپتیکی، الکتریکی، حرارتی یا سایر ساز و کارهای برانگیختگی، **تحریک نشده** باشد.

❖ **عایق یا نیمه هادی:** اگر نوار ظرفیت حالت پایه مواد بلورین **پر از الکترون**، و نوار رسانایی آن **تهی از الکترون** (در $T=0$) باشد.

❖ نیمرسانا \equiv عایق با گاف نوار، E_g ، نسبتاً کوچک

➤ **جذب نوری** وقتی تحقق می یابد که **انرژی فوتون بزرگتر** از انرژی **گاف نوار** ماده نیمرسانا باشد.

➤ الکترون در نوار رسانایی، با **بار منفی**، با حفره در نوار ظرفیت با **بار مثبت**، توسط پتانسیل کولنی که از نوع جاذبه است، وارد **برهمکنش** می شود.

□ این اثرات کولنی به تغییرات بسیار مهمی در جذب لبه نوار منجر می شود که به آن **اثرات اکسیتونی** می گویند. (در فصل ۶ تشریح خواهد شد)

➤ در این فصل، خواص اپتیکی و جذب لبه نوار را در **غیاب برهمکنش کولنی** بررسی خواهیم کرد.

Direct and Indirect - Gap semiconductors

۱-۵. نیم رساناهای گاف مستقیم و غیر مستقیم

متداول است که دو گروه اصلی نیم رساناها را که دارای گافهای مستقیم و غیر مستقیم هستند از هم متمایز سازیم. وقتی در فضای k می نیموم نوار رسانایی منطبق با ماکسیمم نوار ظرفیت گردد نیم رسانا را نیم رسانای گاف مستقیم می گویند. در این مورد InSb ، CdS ، GaAs و بسیاری دیگر از ترکیبات $\text{III} - \text{V}$ یا $\text{II} - \text{VI}$ که ناشی از ترکیب عناصر گروههای سه و پنج یا دو و شش جدول تناوبی عناصر هستند را می توان نام برد [شکلهای ۱.۵ (الف) و ۲.۵ (الف)]. از جهت دیگر، وقتی می نیموم نوار رسانایی در فضای k منطبق با ماکسیمم نوار ظرفیت نباشد دارای نیم رسانای گاف غیر مستقیم هستیم. عناصر نیم رسانای Si و Ge مثالهای مهمی از نیم رساناهای غیر مستقیم هستند [شکلهای ۱.۵ (ب) و ۲.۵ (ب)].

جذب یا گسیل فوتون همراه با بقای اندازه حرکت و انرژی است. برای گذار مستقیم، قوانین بقا از روابط

Transition

انرژی فوتون

$$E_i + \hbar\omega = E_f$$

بقای انرژی energy conservation (۱.۵)

اندازه حرکت فوتون

$$\hbar k_i + \hbar q = \hbar k_f$$

بقای اندازه حرکت momentum conservation (۲.۵)

به دست می آیند [به شکل ۱.۵ (الف) مراجعه شود]، که E_i و E_f به ترتیب انرژیهای اولیه و نهایی الکترون، k_i و k_f به ترتیب بردارهای موج اولیه و نهایی الکترون و $\hbar\omega$ و q انرژی و بردار موج فوتون هستند. نظر به اینکه q در مقایسه با عدد موج الکترون در منطقه بریلوئن کوچک است ($\sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$) اغلب (ولی نه همیشه) می توان اندازه

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\vec{k} = k_x \vec{i} + k_y \vec{j} + k_z \vec{k}$$

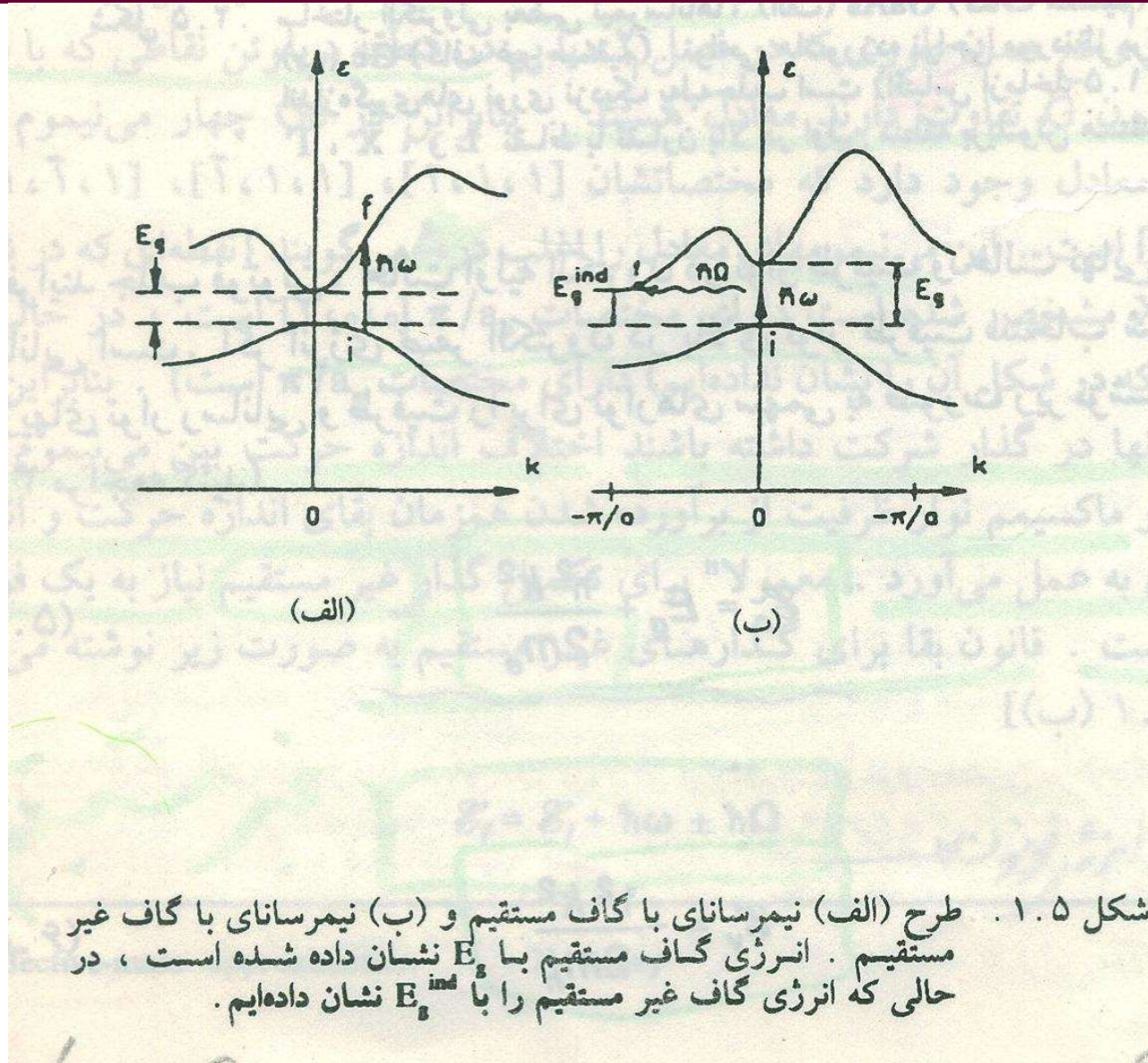
حرکت فوتون $\hbar q$ را در مقایسه با اندازه حرکت الکترون $\hbar k_i$ نادیده گرفت. در این مورد قانون بقا خواهد شد

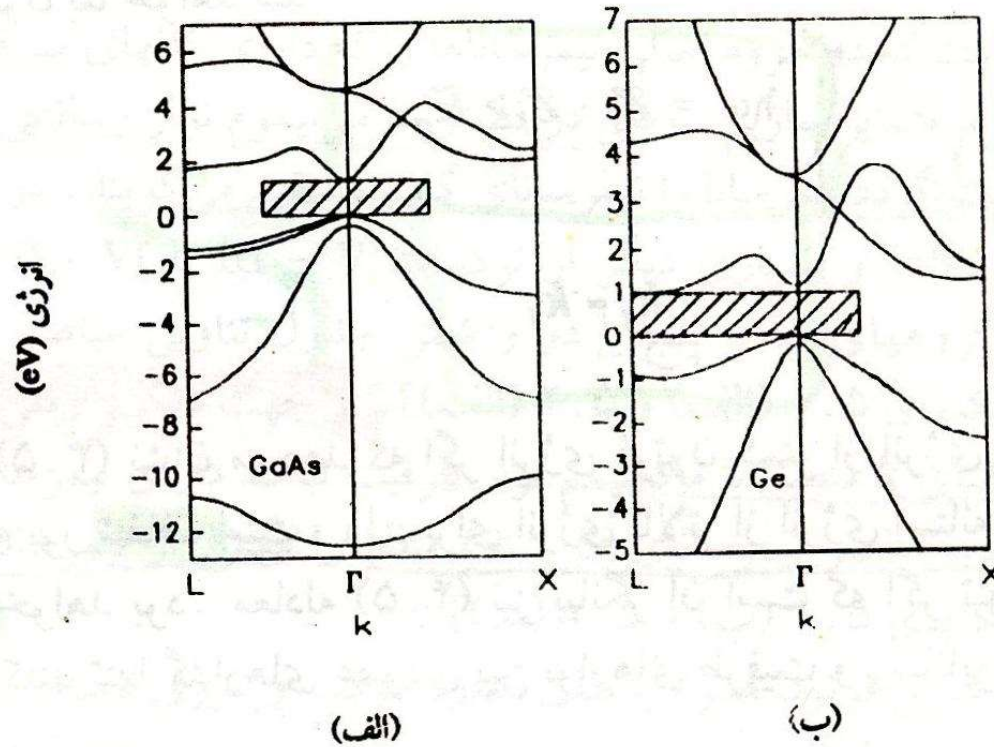
$$\hbar\omega = \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i > E_g \quad (۳.۵)$$

برای direct Transition

$$k_f = k_i \quad (۴.۵)$$

معادله (۳.۵) نشان می‌دهد که اگر انرژی فوتون کمتر از انرژی گاف باشد نیمرسانا نسبت به نور شفاف است، ولی برای انرژی بالاتر از انرژی آستانه گاف E_g ، نیمرسانا جاذب خواهد بود. معادله (۴.۵) نیز بیانگر آن است که اگر تنها فوتون‌ها در گذار شرکت کنند تنها گذارهای عمودی بین نوارهای ظرفیت و رسانایی مجاز هستند.





شکل ۲.۵. ساختار الکترونی بعضی نیم رساناها، (الف) GaAs (گاف مستقیم) و (ب) Ge (گاف غیر مستقیم). نواحی هاشورزده نواحی موردنظر برای اندازه گیری های نوری نزدیک به لبه جذب است (اقتباس از ماخذ ۱.۵). Γ ، X ، و L نقاط با تقارن بالا در اولین منطقه بریلوئن هستند.

در فرایند جذب فوتونی، حالت اولیه الکترون در نوار ظرفیت و حالت نهایی آن در نوار رسانایی است. اگر انرژی صفر الکترون در بالای نوار ظرفیت انتخاب شود می توان انرژیهای نوار رسانایی و ظرفیت را برای نوارهای سهمی به صورت زیر نوشت (به شکل ۳.۵ مراجعه کنید)

$$\mathcal{E}_c = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (5.5)$$

و

$$\mathcal{E}_v = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \quad (6.5)$$

که $m_e = m_e^*$ جرم موثر الکترون، $m_h = m_h^*$ جرم موثر حفره، و $k_e = k_h = k$ طبق معادله (۴.۵) بقای اندازه حرکت را بیان می‌کنند. تقریب سهمی برای نوارها را غالباً "تقریب جرم موثر" می‌نامند. بقای انرژی برای این گذار مستقیم خواهد شد

$$\hbar\omega = \mathcal{E}_c - \mathcal{E}_v = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} \quad (۷.۵)$$

که m_r را به عنوان جرم تقلیل یافته الکترون - حفره معرفی نمودیم

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \quad (۸.۵)$$

در نیم رسانای گاف مستقیم Ge می نیموم نوار رسانایی که در شکل ۲.۵ (ب) آن را با L معرفی کردیم دارای مختصات $\pi/a_0 [1, 1, 1]$ است، در حالی که ماکسیمم نوار ظرفیت در شکل ۲.۵ (ب) دارای مختصات $[0, 0, 0]$ است، a_0 طول یاخته واحد است. در واقع همان طوری که در فصل ۲ دیدیم در منطقه بریلوئن نقاطی که با بردار شبکه وارون G تفاوت دارند معادل هستند. بنابراین در Ge چهار می نیموم نوار رسانایی معادل وجود دارد که مختصاتشان $[1, 1, 1]$ ، $[1, 1, \bar{1}]$ ، $[1, \bar{1}, 1]$ و $[1, \bar{1}, \bar{1}]$ است. این می نیمومهای معادل را اغلب دره می گویند {نقطه ای که در شکل ۲.۵ با X مشخص شده است دارای مختصات $\pi/a_0 [2, 0, 0]$ است، در حالی که نقطه K (که در شکل آن را نشان نداده ایم) دارای مختصات π/a_0 است}. بنابراین اگر تنها فوتونها در گذار شرکت داشته باشند اختلاف اندازه حرکت بین می نیموم نوار رسانایی و ماکسیمم نوار ظرفیت از برآورده شدن همزمان بقای اندازه حرکت و انرژی جلوگیری به عمل می آورد. معمولاً برای تکمیل گذار غیر مستقیم نیاز به یک فونون اضافی است. قانون بقا برای گذارهای غیر مستقیم به صورت زیر نوشته می شود [شکل ۱.۵ (ب)]

$$\mathcal{E}_f = \mathcal{E}_i + \hbar\omega \pm \hbar\Omega \quad (9.5)$$

$$k_f = k_i \pm k$$

(۱۰.۵)

که k و $\hbar\Omega$ به ترتیب انرژی فونون و بردار موج هستند. فونون، انتقال اندازه حرکت مورد نیاز $\hbar k$ را برای گذار بین می نیموم و ماکسیمم نوار فراهم می سازد. برای $E_f - E_i = E_g^{ind}$ ، که انرژی گاف غیر مستقیم است، بقای انرژی خواهد شد

$$\hbar\omega \pm \hbar\Omega = E_g^{ind}$$

(۱۱.۵)

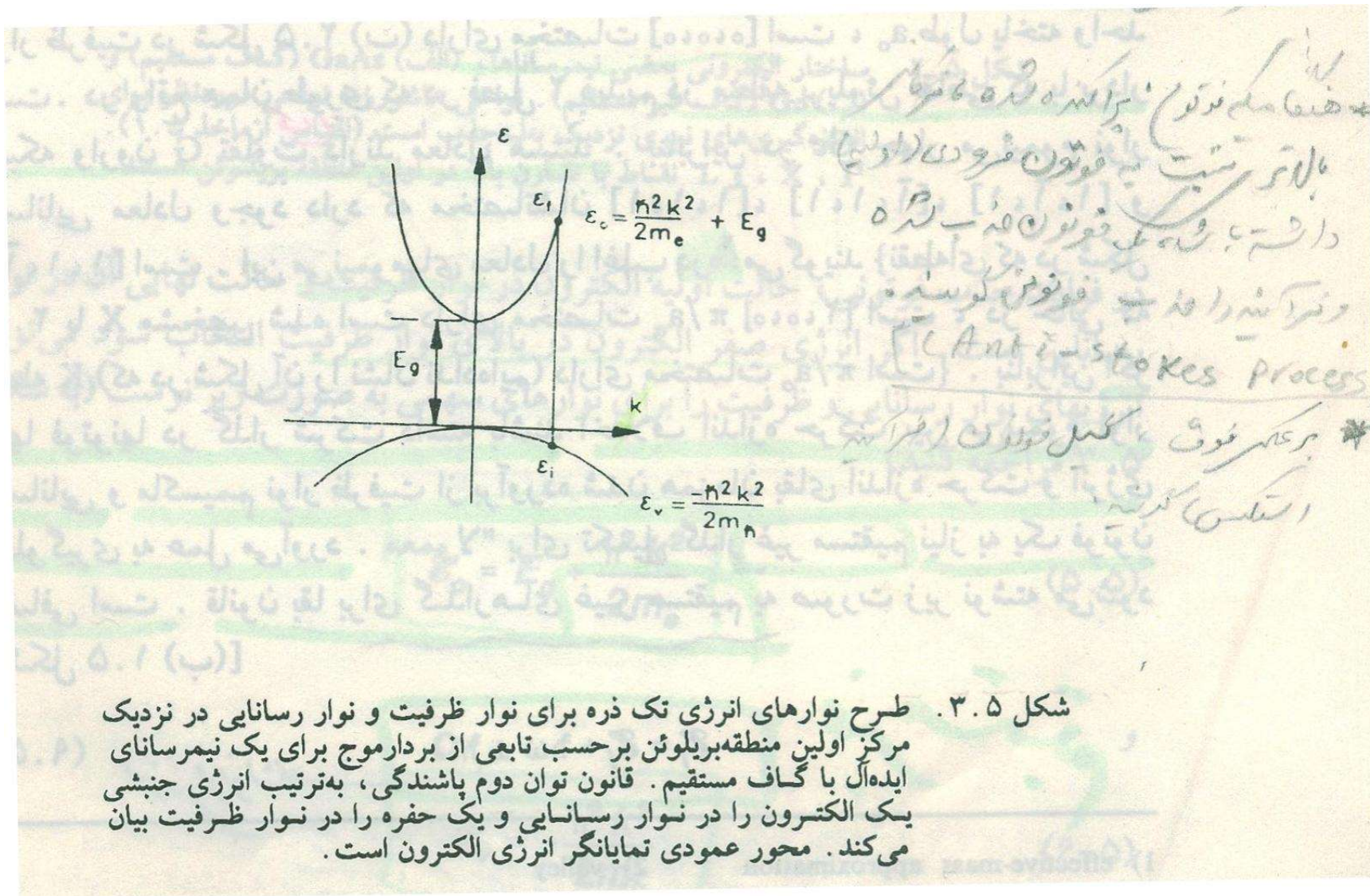
absorption

که علامت + برای جذب فونون (نابودی) و علامت - برای گسیل فونون (آفرینش) به کار برده می شود. (آنتی استکس)

Creation

emission

annihilation



قابل توجه است که بدانیم در انرژیهای زیادتر فوتون در نیمرساناهای گاف غیر مستقیم، امکان دارد که دارای گذارهای مستقیم باشیم تا گذارهای غیر مستقیم. این گذارها معمولاً "بین ماکسیمم نوار ظرفیت و در نوار رسانایی در طرف $k = 0$ یعنی در نقطه Γ منطقه بریلوئن رخ می دهند [شکل ۱.۵ (ب)].

ضریب جذب مرتبط با لبه جذب اساسی در یک نیمرسانا با گاف مستقیم غالباً بزرگ است و مقدار آن حدود 10^4 cm^{-1} تا 10^5 cm^{-1} است. بنابراین نیمرسانایی با ضخامت چند میکرون نسبت به انرژیهای فوتون در نزدیک یا بالای گاف نوار کدر خواهد بود، ولی برای انرژیهای فوتون کمتر از گاف نوار شفاف است.

۵-۲. جذب جفت الکترون - حفره آزاد (Free electron-Hole-pair Absorption)

در فصول ۳ و ۴ وقتی خواص نوری مرتبط با الکترونهاي آزاد به جرم m_0 را در فلزات و ارتعاشات شبکه مورد بحث قرار دادیم برهمکنش نور و ماده را به طور کلاسیک با نوشتن معادله حرکت به صورت

$$m_0 \frac{d^2 x}{dt^2} + m_0 \gamma \frac{dx}{dt} + m_0 \omega_0^2 x = -eE \quad (12.5)$$

و در نظر گرفتن میدان الکتریکی E به صورت زیر

$$E = E_0 e^{-i(\omega t - \varphi x)} \quad (13.5)$$

مدنظر قرار دادیم. سپس با حل معادله نسبت به x و محاسبه تابع دی الکتریکی از قطبش القایی، جذب نوری و بازتابش را با استفاده از تابع دی الکتریکی به دست آوردیم. برای آنکه خواص مکانیک کوانتومی برانگیزشهای محیط را بررسی کنیم رهیافت کلاسیکی را در این فصل کنار گذاشته و از رهیافت مکانیک کوانتومی به منظور محاسبه خواص نوری نیمرساناها استفاده می کنیم. ولی در اینجا فقط محیط را کوانتومی در نظر گرفته و نور را به صورت کلاسیک به کار می بریم. این روش نیمه کلاسیک غالباً "خواص جذب و گسیل القایی را به طور صحیح به دست می دهد، ولی برای توصیف خواصی نظیر گسیل خودبه خود که می باید از مشخصه کوانتومی میدان نوری بهره گرفته شود مناسب نیست.

(Spontaneous)

در این فصل و فصل ۶ رژیم خطی را به کار می‌بریم. فرض می‌کنیم شدت نور فرودی به اندازه کافی ضعیف است به طوری که باسخ محیط (ضریب جذب و بازتاب) از شدت نور فرودی مستقل است. این امر معمولاً "برای شدتهای نوری تا چند وات بر سانتیمتر مربع معتبر است".

در یک میدان الکترو مغناطیسی الکترون تحت تاثیر نیروی لورنتسی^۱ $F = -eE - e/c \mathbf{v} \times \mathbf{B}$ قرار می‌گیرد. همان طوری که در مسئله ۱.۵ بحث شده است، هامیلتونی سیستم متناظر از رابطه

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + W(r) + e\phi$$

(۱۴.۵)

*

به دست می آید که $\mathbf{p} = m_e \mathbf{v}$ اندازه حرکت الکترون، m_e جرم موثر الکترون و $W(\mathbf{r})$ پتانسیل تناوبی شبکه است. شدت میدان الکتریکی \mathbf{E} و القای مغناطیسی \mathbf{B} از پتانسیل اسکالر $\phi(\mathbf{r}, t)$ و پتانسیل برداری میدان تابش $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ طبق روابط زیر به دست می آیند

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (15.5)$$

و

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (16.5)$$

ولی، برای \mathbf{E} و \mathbf{B} مفروض، \mathbf{A} و ϕ به طور یکتا تعیین نمی شوند. یک شرط اضافی (یعنی، پیمانه کولن، $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$) را یکتا می سازد. معادله (14.5) را می توان به صورت زیر نوشت

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{e}{2m_e c} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{e^2}{2m_e c^2} \mathbf{A}^2 + W(\mathbf{r}) + e\phi \quad (17.5)$$

گذار به مکانیک کوانتومی با قراردادن عملگر $\frac{\hbar}{i} \nabla$ به جای \mathbf{p} و استفاده از روابط

روابط
جا به جایی

$$[x, p_x] \equiv xp_x - p_x x = i\hbar \quad (18.5)$$

حاصل می شود . برای هر تابع $f(\mathbf{r})$ با استفاده از قانون حاکم بر مشتق گیری زنجیره ای ، داریم

$$[f(\mathbf{r}), \mathbf{p}] = i\hbar \nabla \cdot f(\mathbf{r}) \quad (19.5)$$

که نتیجه زیر را برای حالت خاص $f(\mathbf{r}) = \mathbf{A}$ به دست می دهد

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} - i\hbar \nabla \cdot \mathbf{A} \quad (20.5)$$

با جایگزینی $p \cdot A$ از معادله (۲۰.۵) در معادله (۱۷.۵) داریم

$$H = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e}{m_e c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{ie\hbar}{2m_e c} \nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{e^2}{2m_e c^2} \mathbf{A}^2 + W(r) + e\phi \quad (21.5)$$

در این کتاب همواره از پیمانه کولن که $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ است استفاده می‌کنیم و در غیاب هر گونه بار آزاد یا جریان، $\phi = 0$ قرار می‌دهیم که منجر به هامیلتونی ساده شده زیر می‌گردد

$$H = \frac{p^2}{2m_e} + W(r) - \frac{e}{m_e c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{2m_e c^2} \mathbf{A}^2 \quad (22.5)$$

در دنباله بحث از آخرین جمله در رابطه (۲۲.۵) صرف نظر می‌کنیم، این جمله در رژیم خطی غالباً بسیار کوچکتر از سایر جملات است، چون A^2 شدت نور را به دست می‌دهد و فرض ما مبتنی بر برهمکنش نور با شدتهای ضعیف است

(مسئله ۴.۵ را ببینید). همچنین توجه کنید که این جمله فاقد عملگر p اندازه حرکت الکترون است، لذا قادر به تغییر حالت الکترون در پایینترین مرتبه نیست و در نتیجه در جذب خطی نور مشارکت ندارد. به این ترتیب داریم

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + W(r) - \frac{e}{m_0 c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$$

(۲۳.۵) *

که می‌تواند به صورت

$$H = H_0 + H_{int}$$

(۲۴.۵)

نوشته شود، که

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + W(r)$$

(۲۵.۵)

این جمله فاقد عملگر p است

را به عنوان هامیلتونی سیستم در غیاب میدان تابش در نظر گرفته‌ایم و

$$H_{int} = -\frac{e}{m_e c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \quad (26.5)$$

interaction

به عنوان هامیلتونی برهمکنش در نمایش اندازه حرکت است. بعضی مواقع ترجیح داده می شود که هامیلتونی برهمکنش را به جای نمایش اندازه حرکت در نمایش فضایی بیان کنیم. این امر با توجه به اینکه بردار میدان الکتریکی \mathbf{E} و بردار پتانسیل که با رابطه $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ با یکدیگر مرتبط اند حاصل می شود. از سوی دیگر، اندازه حرکت \mathbf{p} و بردار جا به جایی \mathbf{r} با رابطه $\mathbf{p} = m_e \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t}$ به یکدیگر مرتبط اند. از آنجایی که میدانهای

\mathbf{E} و \mathbf{A} و در نتیجه بردار جا به جایی الکترون القا شده \mathbf{r} نسبت به زمان با $e^{-i\omega t}$ تغییر می کنند، هامیلتونی برهمکنش معادل در رابطه (26.5) در نمایش فضایی به صورت زیر نوشته می شود

$$H_{int} = e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E} \quad (27.5)$$

که $\mathbf{d} = -e\mathbf{r}$ گشتاور دو قطبی الکتریکی القا شده به وسیله نور است .
 اکنون هامیلیونی برهمکنش معادلات (26.5) یا (27.5) را به منظور محاسبه
 احتمال برای گذار القا شده میدان بین ویژه تابعهای سیستم، یعنی آهنگ جذب یا گسیل
 به کار می‌بریم.
 معادله شرودینگر برای تابع موج ψ' خواهد شد

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = (H_0 + H_{int})\psi' \quad (28.5)$$

هامیلتونی H_0 دارای ویژه توابع ψ_n و ویژه مقادیر انرژی $\mathcal{E}_n = \hbar\omega_n$ است، به نحوی که
 در غیاب میدان تابشی، معادله شرودینگر

$$H_0 \psi_n = \mathcal{E}_n \psi_n = i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \quad (29.5)$$

معادله شرودینگر
 در غیاب میدان تابشی

در عین حال میدان تابش

$$H_0 \psi_n = \mathcal{E}_n \psi_n = i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \quad (29.5)$$

دارای جوابی به صورت

در عین حال میدان تابش

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \phi_n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathcal{E}_n t / \hbar) = \phi_n(\mathbf{r}) e^{-i\omega_n t} \quad (30.5)$$

perturbation

است. در اینجا نظریه پرتurbation وابسته به زمان را در تقریب مرتبه اول برای محاسبه آهنگهای گذار ناشی از میدان اعمال شده به کار می‌بریم. به این منظور، تابع موج کلی $\psi'(\mathbf{r}, t)$ را بر حسب $\psi_n(\mathbf{r}, t)$ بسط می‌دهیم

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \phi_n(\mathbf{r}) e^{-i\omega_n t} \quad (31.5)$$

ضرایب بسط $a_n(t)$ مرتبط با احتمال گذار هستند و در نتیجه آهنگهای جذب یا گسیل را به دست می‌دهند. توابع موج $\psi'(\mathbf{r}, t)$ بهنجار هستند، یعنی normalized

$$1 = \int dr \psi^*(r, t) \psi(r, t) \quad (32.5)$$

$$= \sum_{n,m} a_n^*(t) a_m(t) e^{i(\omega_n - \omega_m)t} \int dr \phi_n^*(r) \phi_m(r)$$

با استفاده از تعامد بهنجار ϕ_n ، داریم

$$\int dr \phi_n^*(r) \phi_m(r) = \delta_{n,m} \quad (33.5)$$

در این صورت رابطه (32.5) خواهد شد

$$1 = \sum_n a_n^*(t) a_n(t) = \sum_n |a_n(t)|^2 \quad (34.5)$$

و بیانگر آن است که جمع تمامی احتمالات باید برابر با واحد باشد. فرض می‌کنیم الکترون در لحظه $t = 0$ در حالت 1 است، به طوری که

حالت‌های الکترونی: ۱- اعداد کوانتومی اسپین (s, m_s) ۲- گشتاور زاویه ای مداری (L, m_L)

گشتاور زاویه ای کل: (J, m_J) بطوری که $J = L + s$ اعداد کوانتومی: L, m_L, s, m_s

و بیانگر آن است که جمع تمامی احتمالات باید برابر با واحد باشد. فرض می‌کنیم که الکترون در لحظه $t = 0$ در حالت 1 است، به طوری که

$$a_n(0) = \delta_{n,1} = \begin{cases} 0 & (n \neq 1) \\ 1 & (n = 1) \end{cases} \quad (35.5)$$

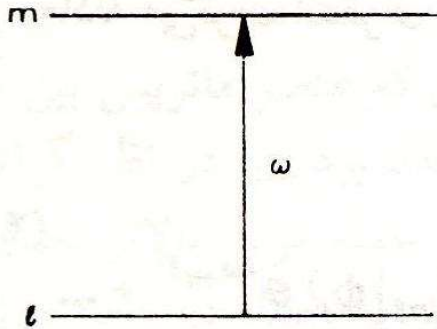
و در لحظه t میدان فرودی موجب می‌شود که الکترون، گذاری به حالت m داشته باشد [شکل ۴.۵ (الف)] و می‌باید آهنگ گذار $[a_m^*(t)a_m(t)]/t$ را محاسبه کرد. با قراردادن معادله (۳۱.۵) در معادله (۲۸.۵) خواهیم داشت

$$\sum_n i\hbar \frac{da_n(t)}{dt} \phi_n(r) e^{-i\omega_n t} + \sum_n a_n(t) \hbar\omega_n \phi_n(r) e^{-i\omega_n t} \quad (36.5)$$

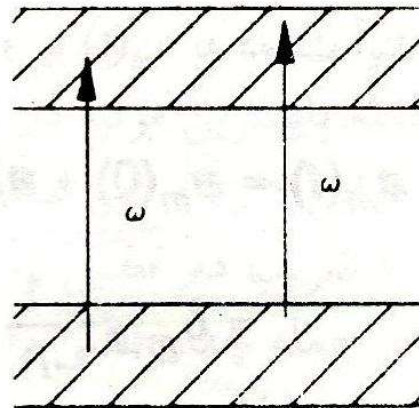
$$= \sum_n a_n(t) (H_0 + H_{int}) \phi_n(r) e^{-i\omega_n t}$$

با ضرب رابطه فوق در $\phi_m^*(r)$ و با انتگرال گیری در تمام فضا و نیز با توجه به تعامد بهنجار بودن ویژه توابع $\phi_n(r)$ ، معادله (۳۳.۵)، و همچنین اینکه $H_0\phi_n = \hbar\omega_n \phi_n$ برقرار است، داریم

$$i\hbar \frac{da_m(t)}{dt} e^{-i\omega_m t} = \sum_n a_n(t) e^{-i\omega_n t} \langle \phi_m | H_{int} | \phi_n \rangle \quad (37.5)$$



(الف)



(ب)

شکل ۴.۵ . (الف) گذار بین دو تراز انرژی منفصل . (ب) گذار بین دو نوار .

که از نظر خلاصه نویسی :

$$\int dr \phi_m^*(r) H_{int} \phi_n(r) = \langle \phi_m | H_{int} | \phi_n \rangle \quad (38.5)$$

را به کار بردیم. با محاسبه $\frac{da_m(t)}{dt}$ ، می یابیم که

$$\frac{da_m(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n e^{-i\omega_{mn}t} a_n(t) \langle \phi_m | H_{int} | \phi_n \rangle \quad (39.5)$$

که $\omega_{mn} = \omega_m - \omega_n$ قرار داده ایم. برای حل معادله (39.5) روش تکرار پذیری را تا مرتبه اول به کار می بریم. به این منظور شرط اولیه [یعنی رابطه (35.5)] را در طرف راست معادله (39.5) قرار می دهیم تا رابطه زیر حاصل شود

$$\frac{da_m^{(1)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} e^{-i\omega_m t} \langle \phi_m | \mathbf{H}_{int} | \phi_l \rangle \quad (40.5)$$

از این معادله می‌توان انتگرال گرفت تا $a_m^{(1)}(t)$ و یا $a_m(t)$ به دست آیند

$$\begin{aligned} a_m(t) &= a_m(0) + a_m^{(1)}(t) + \dots \\ &= \delta_{m,l} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle \phi_m | \mathbf{H}_{int} | \phi_l \rangle e^{i\omega_m t'} + \dots \end{aligned} \quad (41.5)$$

Perturbation

که جملات حذف شده مرتبط با مراتب بالاتر پیرشیدگی هستند. احتمال W_{ml} آنکه الکترون گذاری از حالت اولیه 1 به حالت نهایی m داشته باشد ($m \neq 1$) خواهد شد

$$W_{ml} = |a_m|^2 = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle \phi_m | \mathbf{H}_{int} | \phi_l \rangle e^{i\omega_m t'} \right|^2 \quad (42.5)$$

احتمال انتقال الکترون از حالت اولی

برای تعیین مقدار این رابطه، هامیلتونی برهمکنش یعنی معادله (۲۷.۵) را به کار می‌بریم و فرض می‌کنیم که موج فرودی موجی تکفام و تخت است،

$$H_{int} = -E_0 \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \mathbf{e}_q \cdot \mathbf{d} \quad (43.5)$$

$$= -\frac{E_0}{2} (e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}) \mathbf{e}_q \cdot \mathbf{d}$$

که بردار واحدی است که قطبش میدان فرودی را در جهت میدان الکتریکی تعیین می‌کند. برای میدان عرضی خالص (پیمانه کولن)، داریم

$$\mathbf{e}_q \cdot \mathbf{q} = 0 \quad (44.5)$$

طول موج نور، $\lambda = \pi/q$ در مقایسه با طول a_0 یاخته واحد شبکه در نیمرسانا بزرگ

است (معمولا" $a_0 \sim 5 \text{ \AA}$ و $\lambda \sim 5000 \text{ \AA}$). بنابراین برای تغییرات r در مقیاسهای اتمی، $q.r \ll 1$ ، بسط زیر را می‌توانیم به کار ببریم

$$e^{iq \cdot r} = 1 + iq \cdot r + \dots \quad (45.5)$$

اغلب حفظ جمله پایینترین مرتبه در این بسط به نحوی که عنصر ماتریس بین حالت‌های اولی $|\phi_0\rangle$ و نهایی $|\phi_m\rangle$ غیر صفر باشند کافی خواهد بود. با در نظر گرفتن ۱ در معادله (45.5) تقریب دو قطبی را خواهیم داشت. جمله مرتبه بالاتر بعدی با $q.r$ متناسب است و جمله چهار قطبی را به دست می‌دهد و این جمله در ناحیه مرئی طیف غالباً از اهمیت چندانی برخوردار نیست. ولی، در فرابنفش دور که $q^{-1} \sim a_0$ است گذارهای چهار قطبی حائز اهمیت خواهند بود. با محدود ساختن خود به تقریب دو قطبی، داریم

$$\begin{aligned} \langle \phi_m | H_{int} | \phi_l \rangle &= -\frac{E_0}{2} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \langle \phi_m | \mathbf{e}_q \cdot \mathbf{d} | \phi_l \rangle \\ &= -\frac{E_0}{2} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) d_{ml} \end{aligned} \quad (46.5)$$


$$\langle \phi_m | \mathbf{H}_{int} | \phi_l \rangle = -\frac{E_0}{2} (\mathbf{e}^{-i\omega t} + \mathbf{e}^{i\omega t}) \langle \phi_m | \mathbf{e}_q \cdot \mathbf{d} | \phi_l \rangle \quad (46.5)$$

$$= -\frac{E_0}{2} (\mathbf{e}^{-i\omega t} + \mathbf{e}^{i\omega t}) d_{ml}$$

که $d_{ml} \triangleq \langle \phi_m | \mathbf{e}_q \cdot \mathbf{d} | \phi_l \rangle$ عنصر ماتریس دو قطبی برای گذار بین حالت‌های l و m است. با قراردادن معادله (46.5) در معادل (42.5) خواهیم داشت

$$W_{ml} = \left| \frac{d_{ml} E_0}{2\hbar} \int_0^t dt' (\mathbf{e}^{-i\omega t'} + \mathbf{e}^{i\omega t'}) \mathbf{e}^{i\omega_{ml} t'} \right|^2 \quad (47.5)$$

$$= \left| \frac{d_{ml} E_0}{2\hbar} \left[\frac{\mathbf{e}^{i(\omega_{ml} - \omega)t} - 1}{i(\omega_{ml} - \omega)} + \frac{\mathbf{e}^{i(\omega_{ml} + \omega)t} - 1}{i(\omega_{ml} + \omega)} \right] \right|^2$$

در رابطه بالا وقتی مخرج کسر نزدیک به صفر شود اولین جمله حائز اهمیت می‌شود، $\omega_{ml} = \omega$ یا $\omega_m - \omega = \omega$ ، یعنی برای $\omega_m > \omega$ که فرایند جذب را اقناع می‌سازد. در اینجا یادآور می‌شویم که محاسبات احتمال گذار برای $\omega_{ml} = \pm \omega$ به نمودی غیر فیزیکی 

منجر می شود، زیرا هیچ سازوکار میرایی (پهن شدگی) را منظور نکردیم. با منظور کردن پهن شدگی، جمله پهنای خط، γ ، در مخرج کسر وارد می شود، یعنی $\frac{1}{i\omega} \rightarrow \frac{1}{i\omega + \gamma}$ که منجر به حذف تمامی نمودهای غیر فیزیکی خواهد شد. با در نظر

گرفتن این تصحیح، توجه داریم که جمله دوم در معادله (۴۷.۵) وقتی $\omega_m = -\omega$ یا $\omega_m < \omega$ است حائز اهمیت می شود، زیرا توصیف کننده فرایند گسیل است. برای جذب نور، از جمله دوم در مقابل جمله اول صرف نظر می کنیم و لذا احتمال گذار خواهد شد

$$W_{m\lambda} = \left| \frac{d_{m\lambda} E_0}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{m\lambda} - \omega)t} - 1}{i(\omega_{m\lambda} - \omega)} \right] \right|^2 \quad (48.5)$$

و اکنون با استفاده از رابطه

$$e^{ix} - 1 = e^{ix/2} (e^{ix/2} - e^{-ix/2}) = 2ie^{ix/2} \sin(x/2) \quad (49.5)$$

احتمال گذار جذب نور
بین دو تراز m و λ
(نه دو بانده)

و اکنون با استفاده از رابطه

(نیم دو بانده)

$$e^{ix} - 1 = e^{ix/2} (e^{ix/2} - e^{-ix/2}) = 2ie^{ix/2} \sin(x/2) \quad (49.5)$$

به طوری که

$$W_{ml} = a_m a_m^* = \left| \frac{d_{ml} E_0}{\hbar} \right|^2 \frac{\sin^2 [(\omega_{ml} - \omega) t/2]}{(\omega_{ml} - \omega)^2} \quad (50.5)$$

انتقال گذار فریب نور
بین دو تراز m و l
(نیم دو بانده)

اگر $\omega_m < \omega$ در نظر گرفته شود و از جمله دوم (47.5) استفاده گردد رابطه مشابهی برای فرایند گسیل به دست می آید. اکنون همان طوری که در شکل 4.5 (ب) نشان داده ایم این امر را در نظر می گیریم که گذارها در نیمرسانا بین ترازهای منفصل صورت نگرفته بلکه بین نوارهای انرژی رخ می دهند. بنابراین باید روی کلیه حالت های نوار ظرفیت و نوار رسانایی با استفاده از مفهوم چگالی توام حالتها، انتگرال بگیریم.

مفهوم چگالی توام حالتها در فصل 2 مورد بحث قرار گرفت. با استفاده از معادله (82.2) می توان چگالی حالتها را در فضای k در واحد حجم فضای واقعی نوشت

$$\Delta k = \Delta k_x \cdot \Delta k_y \cdot \Delta k_z = (2\pi/L_x)(2\pi/L_y)(2\pi/L_z) = (8\pi^3/V) \Rightarrow (1/V) = (\Delta k/8\pi^3) \Rightarrow g(k)dk = (2dk/8\pi^3)$$

$$g(k) dk = \frac{2}{8\pi^3} dk \quad (51.5)$$

که سازه ۲ در صورت کسر به علت واگنی اسپین برای هر مقدار k و $dk = 4\pi k^2 dk$ است. همچنین احتمال اشغال هر نوار توسط الکترونها را که از آمار فرمی به دست می‌آید، باید در نظر بگیریم. در اینجا مورد نیم‌رسانای تحریک نشده که نوار ظرفیت کاملاً پر و نوار رسانایی در ابتدا تهی در نظر گرفته شده است را بررسی می‌کنیم. مورد نوارهای با پرشدگی جزئی را در فصل ۱۲ مورد بحث قرار خواهیم داد. به این ترتیب، احتمال گذار در واحد حجم خواهد شد

$$W_{m\ell} = \frac{2}{8\pi^3} \left| \frac{d_{m\ell} E_0}{\hbar} \right|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\sin^2[(\omega_{m\ell} - \omega)t/2]}{(\omega_{m\ell} - \omega)^2} \quad (52.5)$$

دقت کنید که برای $\omega_{m\ell} = \omega$ تابع زیر انتگرال معادله (۵۲.۵) خیلی بزرگ می‌شود و نیز می‌توان نشان داد که تابع زیر انتگرال را در زمانهای کاملاً طولانی (ωt بزرگ) می‌توان با یک تابع δ تقریب زد (مسئله ۶.۵ را ببینید)، یعنی

دقت کنید که برای $\omega_{m1} = \omega$ تابع زیر انتگرال معادله (۵۲.۵) خیلی بزرگ می‌شود و نیز می‌توان نشان داد که تابع زیر انتگرال را در زمانهای کاملاً طولانی (ωt بزرگ) می‌توان با یک تابع δ تقریب زد (مسئله ۶.۵ را ببینید)، یعنی

$$\frac{\sin^2 [(\omega_{m1} - \omega) t / 2]}{(\omega_{m1} - \omega)^2} \approx \frac{\pi t}{2} \delta(\omega_{m1} - \omega) \quad (53.5)$$

با قرار دادن معادله (۵۳.۵) در معادله (۵۲.۵) داریم

$$W_{m1} = \frac{2}{8\pi^3} \left| \frac{d_{m1} E_0}{\hbar} \right|^2 \frac{\pi t}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk \delta(\omega_{m1} - \omega) \quad (54.5)$$

به این ترتیب احتمال گذار در واحد زمان در واحد حجم به دست خواهد آمد

$$\frac{W_{m1}}{t} = \frac{2}{8\pi^3} \left| \frac{d_{m1} E_0}{\hbar} \right|^2 \frac{\pi \hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk \delta(\hbar \omega_{m1} - \hbar \omega) \quad (55.5)$$

که از رابطه $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$ استفاده شده است. اکنون ضریب جذب نیمرسانا را (با توجه به این که ضریب جذب از ضرب احتمال گذار در واحد حجم در $\hbar\omega$ ، که بتوان انرژی جذب شده در واحد زمان در واحد حجم را به دست دهد و سپس با تقسیم انرژی فرودی در واحد زمان در واحد سطح حاصل می شود) می توان از معادله (۵۵.۵) به دست آورد. انرژی فرودی از مقدار متوسط زمانی بردار پوینتینگ

$$S = \frac{n_b c}{8\pi} |E_0|^2 \quad (56.5)$$

به دست می آید که n_b ضریب شکست ماده زمینه است که در فصل ۳ آن را مورد بحث قرار دادیم. بدین ترتیب ضریب جذب خواهد شد

ضریب جذب

$$\alpha = \frac{W_{ml}}{t} \frac{\hbar\omega}{S} = \frac{\omega}{\pi n_b c} |d_{ml}|^2 \int dk \delta(\hbar\omega_{ml} - \hbar\omega) \quad (57.5)$$

$$= \frac{\omega}{\pi n_b c} |d_{ml}|^2 \int_0^\infty dk k^2 4\pi \delta(\hbar\omega_{ml} - \hbar\omega)$$

توجه کنید که حدود انتگرال در (۵۷.۵) از ۰ است تا ∞ است، زیرا مقدار k در مختصات کروی از صفر تا بی نهایت تغییر می کند. از آنجایی که $dk = \left[\frac{dk}{d(\hbar\omega_{ml})} \right] d(\hbar\omega_{ml})$ ، می توان معادله (۵۷.۵) را به صورت زیر بازنویسی کرد

$$\alpha = \frac{\omega}{\pi n_b c} |d_{ml}|^2 \int_0^{\infty} d(\hbar\omega_{ml}) \frac{4\pi k^2 dk}{d(\hbar\omega_{ml})} \delta(\hbar\omega_{ml} - \hbar\omega) \quad (58.5)$$

معادله (۵۸.۵) ضریب جذب را بر حسب چگالی حالتها، $4\pi k^2 dk / d\omega_{ml}$ ، و عنصر ماتریس گذار بین نواری، d_{ml} ، به دست می دهد. در دو بخشی که دنبال می شود جذب را برای گذارهای مستقیم و غیر مستقیم با جزئیات بیشتری محاسبه خواهیم کرد.

[Direct Transitions]

۳-۵. گذارهای مستقیم

برای گذار مستقیم، حالت ابتدایی l در نوار ظرفیت $(l=v)$ و حالت نهایی m در نوار رسانایی $(m=c)$ تقریباً دارای یک عدد موج هستند، یعنی $k_v = k_c = k$. اکنون گذارهایی را در نظر می‌گیریم که نزدیک ماکسیمم و می‌نیمومهای منطقه بریلوتن صورت می‌پذیرند (تقریب جرم موثر دارای اعتبار است). با استفاده از معادله (۵۸.۵) ضریب جذب خواهد شد

$$\alpha = \frac{\omega}{\pi n_b c} |d_{ov}|^2 \int_0^\infty d(\hbar\omega_{ov}) \frac{4\pi k^2 dk}{d(\hbar\omega_{ov})} \delta(\hbar\omega_{ov} - \hbar\omega) \quad (59.5)$$

توابع موج نوارهای ظرفیت و رسانایی به صورت زیر نوشته می‌شوند

$$\phi_{vk}(r) = u_{vk}(r) \frac{e^{ik \cdot r}}{\sqrt{V}}$$

و

$$\phi_{ck}(r) = u_{ck}(r) \frac{e^{ik \cdot r}}{\sqrt{V}} \quad (60.5)$$

با استفاده از معادله (۴۶.۵)، عناصر ماتریس دو قطبی در معادل (۵۹.۵) به صورت

$$\begin{aligned} d_{cv}(k) &= \langle \phi_{ck} | \mathbf{e}_q \cdot \mathbf{d} | \phi_{vk} \rangle \\ &= \int d\mathbf{r} \phi_{ck}^*(\mathbf{r}) \mathbf{e}_q \cdot \mathbf{d} \phi_{vk}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (۶۱.۵)$$

محاسبه می‌شوند. برای $\mathbf{d} = \left(\frac{e}{im_0\omega}\right)\mathbf{p}$ ، که $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$ ، و با قرار دادن $\phi_{\alpha k}(\mathbf{r})$ و

$\phi_{vk}(\mathbf{r})$ از معادلات (۶۰.۵)، (مسئله ۷.۵ را ببینید)، داریم

$$p_{cv}(0) = \langle u_{c0} | \mathbf{e}_q \cdot \mathbf{p} | u_{v0} \rangle \quad (66.5)$$

قرار داده‌ایم. با استفاده از معادله (۷.۵)

$$\hbar \omega_{cv} = \mathcal{E}_c - \mathcal{E}_v = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} \quad (67.5)$$

خواهیم داشت

$$\frac{1}{4\pi k^2} \frac{d\hbar \omega_{cv}}{dk} = \frac{\hbar^2}{4\pi k m_r} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\hbar^2}{2m_r} \right)^{3/2} (\hbar \omega_{cv} - E_g)^{-1/2} \quad (68.5)$$

با قرار دادن معادلات (۶۵.۵) و (۶۸.۵) در معادله (۵۹.۵) به دست می آوریم که

$$\alpha = \alpha_{free} = \frac{2\theta^2}{n_b c m_0^2 \omega} |p_{cv}(0)|^2 \left(\frac{2m_r}{\hbar^2}\right)^{3/2} \theta (\hbar\omega - E_g) (\hbar\omega - E_g)^{1/2}$$

ضریب جذب برای گذار مستقیم مجاز دره $k = 0$ متضمن جفت الکترون - حفره آزاد (۶۹.۵)

مقدار $d_{cv}(0)/e$ در مرتبه چند آنگسترم است (فاصله بین اتمها در جامدات). به عنوان مثال در GaAs، $d_{cv}(0)/e = 3 \text{ \AA}$ ، در معادله (۶۹.۵) تابع θ را به صورت زیر در نظر می گیریم

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \quad (70.5)$$

زیرا چگالی حالتها در زیر گاف نوار صفر است. معادله (۶۹.۵) ضریب جذب در واحد

فریب فریب در
در غنای
کولن بین الکترون
تلفوف
Coulomb interaction

طول برای گذارهای مستقیم در نیمرسانا در غیاب برهمکنش کولنی بین الکترونها و حفرهها را به دست می دهد. زیر نویس "free" (آزاد) در معادله (۶۹.۵) نمایانگر عدم حضور برهمکنش کولنی است. گذارهایی که در آنها عناصر ماتریس بین نواری $P_{cv}(0)$ غیر صفراند را گذارهای دو قطبی مجاز رده اول می گویند. ^۱ در بلوری با مرکز وارونی که بتوان پارته حالت های بلاک در $k=0$ را تعریف کرد، گذارهای بین نوارهای با پارته مخالف (یعنی، گذار بین نوار ظرفیت با مشخصه شبه p و نوار ظرفیت با مشخصه شبه s برای قسمت اتمی، $u_{k=0}(r)$ ، توابع بلاک) مجاز هستند. ^۲ برای جذب نزدیک لبه نوار می توان پیش سازه ω را در معادله (۶۹.۵) به صورت $\omega = E_g / \hbar$ تقریب زده و قانون ریشه دوم برای α را به صورت $\alpha \sim (\hbar\omega - E_g)^{1/2}$ به دست آورد. این بستگی فرکانس α مستقیماً از چگالی حالت های نزدیک گاف نوار پیروی می کند و هنگامی که عناصر ماتریس با فرکانس تغییر نکنند برقرار است. ^۳ وقتی عنصر ماتریس بین نواری $P_{cv}(0)$ صفر باشد (نظیر مورد گذار بین نوارهای با یک نوع پارته، یعنی بین توابع بلاک شبه s و شبه d) می باید دومین جمله در طرف راست معادله (۶۴.۵) را به کار برد. این گذارها را گذارهای دو قطبی رده دوم می گویند. سازه k در معادله (۶۴.۵) بستگی فرکانس جدیدی را ارائه می دارد که نشان می دهد α به صورت $(\hbar\omega - E_g)^{3/2}$ تغییر می کند (به مسئله ۸.۵ مراجعه شود).

۴-۵. گذارهای غیر مستقیم

در نیم رساناهای غیر مستقیم اختلاف اندازه حرکت بین می نیموم نوار رسانایی و ماکسیمم نوار ظرفیت برای برقراری بقای اندازه حرکت در فرایند جذب توسط فوتون بسیار بزرگ است. برای آنکه گذار بین نواری تحقق یابد، همان طوری که در شکل ۵.۵ نشان داده شده است نیاز به آن است که جذب یا گسیل اضافی یک فوتون صورت پذیرد. به علت آنکه دو کوانتا یعنی یک فوتون و یک فوتون به طور همزمان درگیر هستند، گذار از مرتبه دوم است و حداقل نظریه پریشیدگی مرتبه دوم را به منظور محاسبه احتمال گذار باید به کار برد. بنابراین آهنگ گذار می باید خیلی ضعیفتر از گذارهای مستقیم دو قطبی مجاز باشند (معمولاً "چندین مرتبه بزرگی کوچکترند). در دنباله بحث یک استنتاج ساده نمود شناختی ضریب جذب را برای گذارهای غیر مستقیم معرفی می کنیم. بدین منظور روی آن حالتی از هر دو نوار رسانایی و

ظرفیت که در گذار شرکت می‌کنند می‌باید انتگرال گرفته شود ، چه برخلاف مورد گذارهای مستقیم ، اندازه حرکت در حالت اولیه و نهایی یکسان نیستند . همان طوری که در شکل ۵.۵ نشان داده شده است انرژیهای حالت اولیه و نهایی از

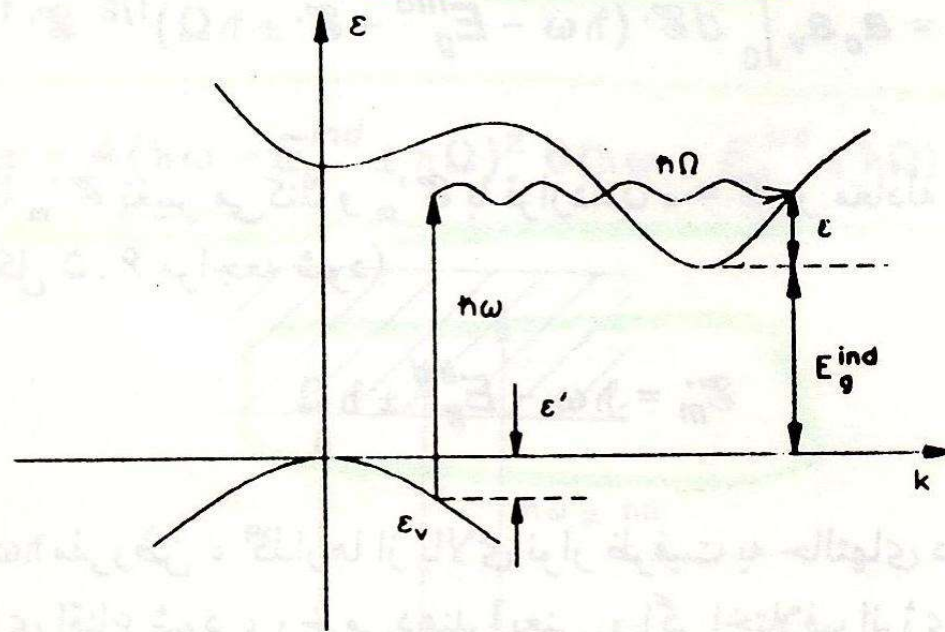
$$\mathcal{E}_c = E_g^{ind} + \mathcal{E} \quad (71.5)$$

و

$$\mathcal{E}_v = -\mathcal{E}' \quad (72.5)$$

به دست می‌آیند که E_g^{ind} انرژی گاف غیرمستقیم است و فرض می‌کنیم که \mathcal{E} و \mathcal{E}' کمیت‌های مثبت می‌باشند . بقای انرژی الزام می‌دارد که

$$\mathcal{E}_v + \hbar\omega \pm \hbar\Omega = \mathcal{E}_c \quad (73.5)$$



شکل ۵.۵. نمایش طرح وار یک گذار غیرمستقیم. در اینجا فوتون (پیکان مستقیم) اکثر انرژی را تامین می‌کند، در حالی که فوتون (پیکان لرزان) اندازه حرکت مورد نیاز را برقرار می‌سازد.

که $h\Omega$ انرژی فوتون درگیر در گذار است، علامت + برای جذب فوتون و علامت - برای گسیل فوتون است. با قراردادن \mathcal{E}_v و \mathcal{E}_c از معادلات (۷۱.۵) و (۷۲.۵)، خواهیم داشت

$$g(\mathcal{E}) = a_c a_v \int_0^{\mathcal{E}'_m} d\mathcal{E}' (\mathcal{E}'_m - \mathcal{E}')^{1/2} \mathcal{E}'^{1/2}$$

(۷۸.۵)

$$= \frac{a_c a_v \pi}{8} \mathcal{E}'_m{}^2 \theta(\mathcal{E}'_m)$$

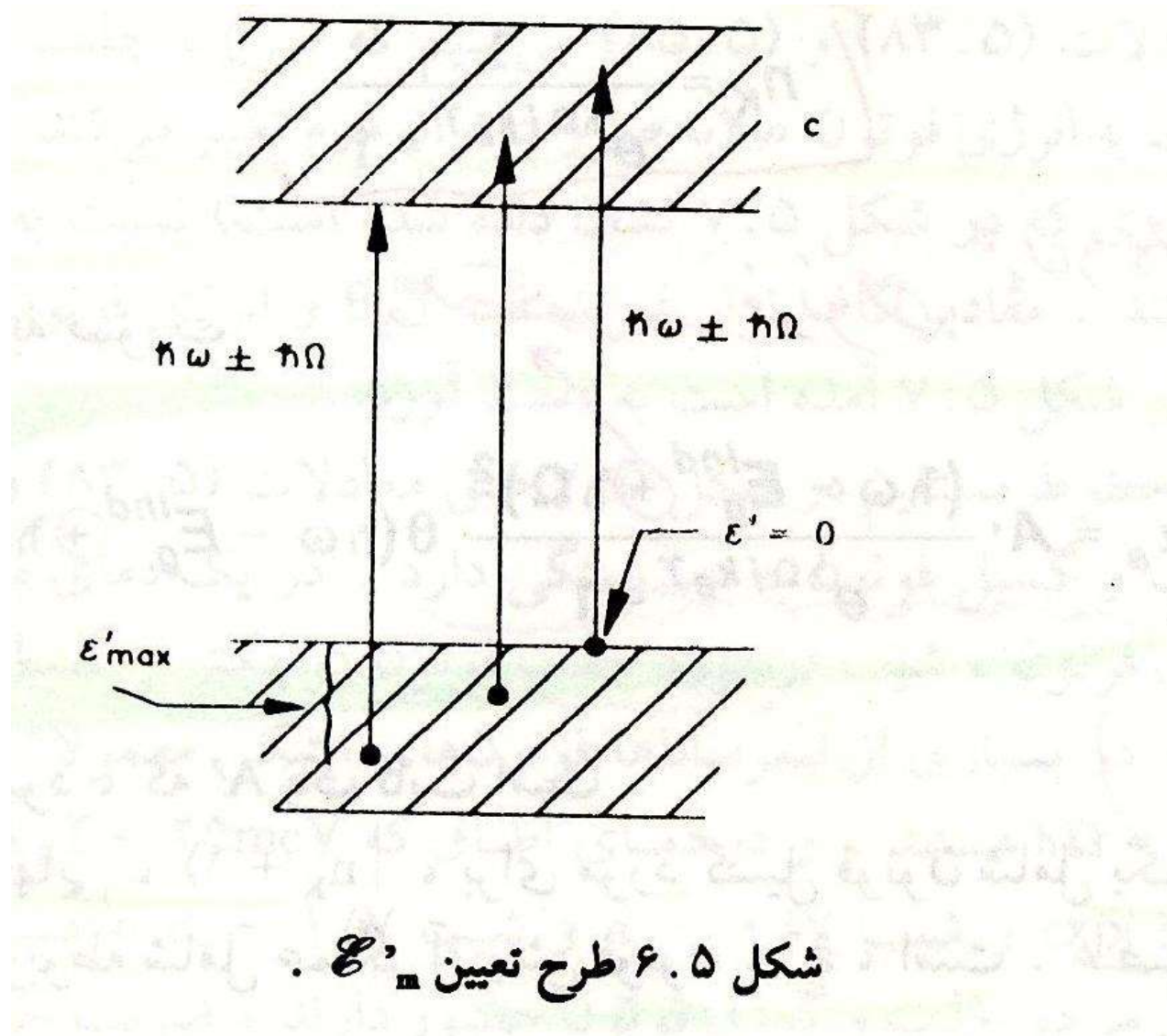
که تابع θ بیانگر آن است که انتگرال فقط برای $\mathcal{E}'_m > 0$ داری یک جواب حقیقی است. به علاوه از انتگرال $\int_0^y dx (y-x)^{1/2} x^{1/2} = \pi y^2/8$ استفاده کرده‌ایم. از این رو داریم

$$g(\mathcal{E}) = \frac{a_c a_v \pi}{8} (\hbar\omega - E_g^{ind} \pm \hbar\Omega)^2 \theta(\hbar\omega - E_g^{ind} \pm \hbar\Omega)$$

(۷۹.۵)

بنابراین، بستگی فرکانس ضریب جذب نزدیک به گاف نوار که از چگالی حالتها پیروی می‌کند از

$$\alpha = A (\hbar\omega - E_g^{ind} \pm \hbar\Omega)^2 \theta(\hbar\omega - E_g^{ind} \pm \hbar\Omega) \quad (۸۰.۵)$$



به دست می‌آید ، که علامت + برای جذب فوتون ، علامت - برای گسیل فوتون است .
 ثابت A شامل عنصر ماتریس گذار است که فرض می‌شود از k مستقل و بستگی به دما
 دارد و این به خاطر فاکتورهای جمعیت فوتون درگیر است . قانون توان دوم جذب برای
 گذارهای غیر مستقیم به طور تجربی مشاهده شده است ، مثلاً در Ge .
 بستگی ضریب جذب به دما را می‌توان با استدلال ساده مکانیک کوانتومی
 محاسبه کرد . بدین منظور فرایندهای جذب و گسیل فوتون را به طور مجزا بررسی
 می‌کنیم . جذب فوتون ، یک فوتون را از سیستم حذف می‌کند . اگر حالت اولیه
 سیستم را با $|n_K\rangle$ (که شامل n_K فوتون است) نشان دهیم حالت نهایی ، یک فوتون
 کمتر خواهد داشت (یعنی $|n_K - 1\rangle$) . بنابراین عملگر کل گذار می‌باید شامل عملگر
 نابودی فوتون ، یعنی \hat{a} که از معادله (۲۹.۴) به دست می‌آید ، باشد و شدت کل گذار
 به عنصر ماتریس مرتبط است ،

$$|\langle n_K - 1 | \hat{a} | n_K \rangle|^2 = |\langle n_K - 1 | \sqrt{n_K} | n_K - 1 \rangle|^2 = n_K \quad (۸۱.۵)$$

$$|\langle n_K - 1 | \hat{a} | n_K \rangle|^2 = |\langle n_K - 1 | \sqrt{n_K} | n_K - 1 \rangle|^2 = n_K \quad (81.5)$$

که از $\hat{a} | n_K \rangle = \sqrt{n_K} | n_K - 1 \rangle$ ، معادله (۲۹.۴) و تعامد بهنجاری حالتها ، یعنی $\langle n_K - 1 | n_K - 1 \rangle = 1$ استفاده کرده‌ایم . در معادله (۸۱.۵) n_K معرف شمار اشغال برای فونونهاست که از آمار بوز-اینشتن پیروی می‌کند

$$n_K = \frac{1}{e^{\hbar\Omega/k_B T} - 1} \quad (82.5)$$

و ضریب جذب به صورت

$$\alpha_a = A \cdot \frac{(\hbar\omega - E_g^{ind} + \hbar\Omega)^2}{e^{\hbar\Omega/k_B T} - 1} \theta(\hbar\omega - E_g^{ind} + \hbar\Omega) \quad (83.5)$$

می‌تواند نوشته شود ، که A' یک ثابت است .

حالت نهایی ، $| n_K + 1 \rangle$ ، برای مورد گسیل فونون شامل یک فونون اضافی است و عملگر مربوطه شامل عملگر آفرینش فونون ، \hat{a}^+ ، است . عنصر ماتریس گذار

خواهد شد

$$|\langle n_K + 1 | \hat{a}^+ | n_K \rangle|^2 = n_K + 1 = \frac{1}{e^{\hbar\Omega/k_B T} - 1} + 1 \quad (14.5)$$
$$= \frac{1}{1 - e^{-\hbar\Omega/k_B T}}$$

که از معادله (۲۸.۴) رابطه $\hat{a}^+ | n_K \rangle = \sqrt{n_K + 1} | n_K + 1 \rangle$ را به کار برده ایم. در نتیجه، ضریب جذب برای مورد گسیل فونون می شود

گسیل فونون

$$\alpha_\theta = \frac{A' (\hbar\omega - E_g^{ind} - \hbar\Omega)^2}{1 - e^{-\hbar\Omega/k_B T}} \theta(\hbar\omega - E_g^{ind} - \hbar\Omega) \quad (15.5)$$

رابطه فرسپینز
که در آن در اینجورانی نیز اتفاق
آید (رابطه فرسپینز)

سازه $n_K + 1$ را می توان تفسیر کرد که ناشی از گسیل برانگیخته و خود به خود فونون است، که سهم گسیل برانگیخته را نشان می دهد (که به دما بستگی دارد)، و ۱ نشان دهنده سهم گسیل خود به خود است.

از معادلات (۸۳.۵) و (۸۵.۵) می بینیم که ضریب جذب برای فرایندهای غیر مستقیم نسبت به انرژی فوتون $\hbar\omega$ به صورت توان دوم تغییر می کند. بنابراین ترسیم $\alpha^{1/2}$ (همان طوری که در شکل ۷.۵ نشان داده شده است) نسبت به $\hbar\omega$ به صورت خطی تغییر می کند. مقادیر گاف نوار غیر مستقیم E_g^{ind} و انرژی فونون $\hbar\Omega$ را می توان از ترسیمی که در شکل ۷.۵ آمده است به دست آورد.

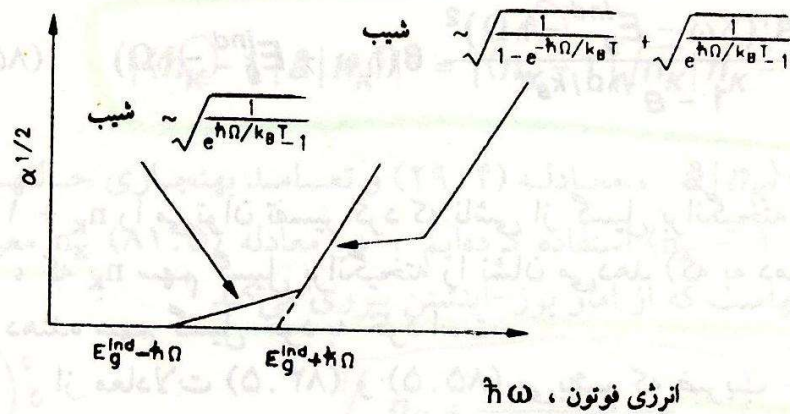
شیب خطوط مستقیم در شکل ۷.۵ طبق معادلات (۸۳.۵) و (۸۵.۵) برای فرایندهای جذب و گسیل فونون به دما بستگی دارد. در یک دمای مفروض به علت شمارهای اشغال فونون، شیب در مورد جذب فونون کوچکتر از گسیل فونون است. به عنوان مثال، در بسیاری از نیم رساناها فونونهای اپتیکی معمولاً دارای انرژی از مرتبه $\hbar\Omega = 30 \text{ meV}$ هستند، و در دمای اتاق که $k_B T = 25 \text{ meV}$ است، داریم $\exp(\hbar\Omega/k_B T) \sim 3$ و شیب $\alpha_a \sim 0/7$ و شیب $\alpha_e \sim 1/7$ به دست می آیند. در حالت کلی وقتی هر دو جذب و گسیل فوتون حضور دارند، ضریب جذب از رابطه زیر

به دست می آید

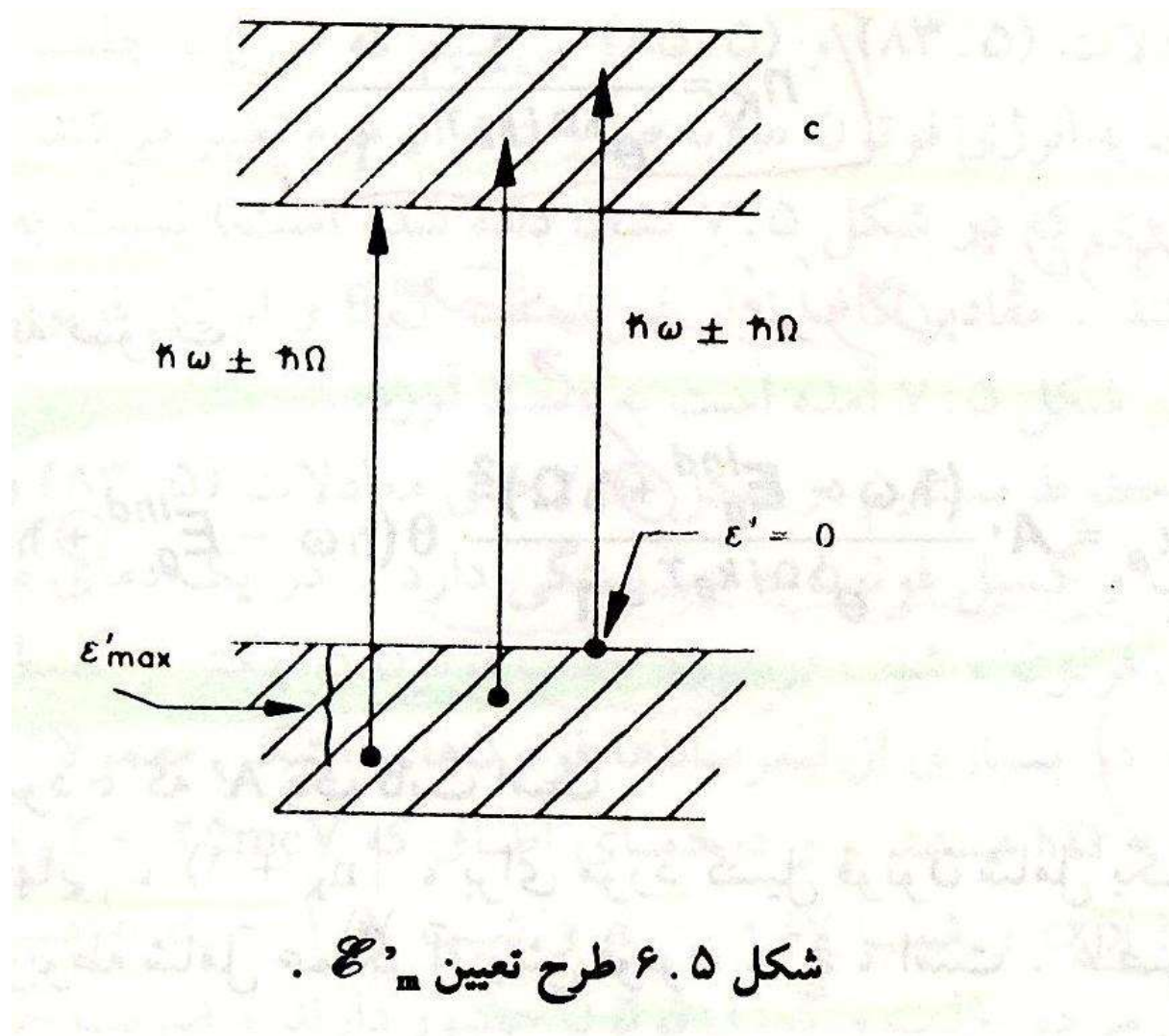
$$\alpha = A \cdot \left\{ \frac{(\hbar\omega - E_g^{ind} + \hbar\Omega)^2}{e^{\hbar\Omega/k_B T} - 1} + \frac{(\hbar\omega - E_g^{ind} - \hbar\Omega)^2}{1 - e^{-\hbar\Omega/k_B T}} \right\} \times \theta(\hbar\omega - E_g^{ind} \pm \hbar\Omega)$$

ضریب جذب برای گذارهای غیرمستقیم

(۸۶.۵)



شکل ۷.۵. بستگی طرح وار $\alpha^{1/2}$ به انرژی برای مواد با گاف غیرمستقیم.



۵-۵. بستگی گاف نوار به فشار و دما

گافهای انرژی در نیمرساناها با فشار و هم با دما تغییر می کنند. ترازهای انرژی بلور توابعی از فواصل بین اتمی هستند به طوری که هرگاه دما یا فشار تغییر کند فواصل بین اتمی، تراز انرژی، و E_g هم تغییر می کند. انرژی گاف نوار را می توان به صورت زیر نوشت

$$E_g = E_g^0 + \left(\frac{\partial E_g}{\partial P}\right)_T \Delta P + \left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_P \Delta T \quad (۸۷.۵)$$

که E_g^0 انرژی گاف نوار در $T = 0$ در غیاب هر فشار خارجی است. تغییرات E_g نسبت به دما در مرتبه meV/K و تغییرات نسبت به فشار در مرتبه $10^{-9} meV/dyn\ cm^{-2}$ است. این اعداد برای نیمرساناهای مختلف مثبت یا منفی اند.

$$E_g = E_g^0 + \left(\frac{\partial E_g}{\partial P}\right)_T \Delta P + \left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_P \Delta T \quad (۸۷.۵)$$

که E_g^0 انرژی گاف نوار در $T = 0$ در غیاب هر فشار خارجی است. تغییرات E_g نسبت به دما در مرتبه $۰/۱ \text{ meV/K}$ و تغییرات نسبت به فشار در مرتبه $۱۰^{-۹} \text{ meV/dyn cm}^{-۲}$ است. این اعداد برای نیمرساناهای مختلف مثبت یا منفی اند.

معمولاً با افزایش دما گاف نوار منقبض می‌شود. مثلاً، $\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_P$ برای GaAs

مقداری است منفی $(-۵ \times ۱۰^{-۴} \text{ eV/K})$. ولی نیمرساناهایی نظیر CuCl وجود دارند

که انرژی گاف نوار آنها با افزایش دما افزایش می‌یابند. مقدار $\left(\frac{\partial E_g}{\partial P}\right)_T$ برای GaAs،

$۱۱ \times ۱۰^{-۶} \text{ eV/bar}$ با علامت مثبت است که حاکی از آن است که با اعمال فشار بر

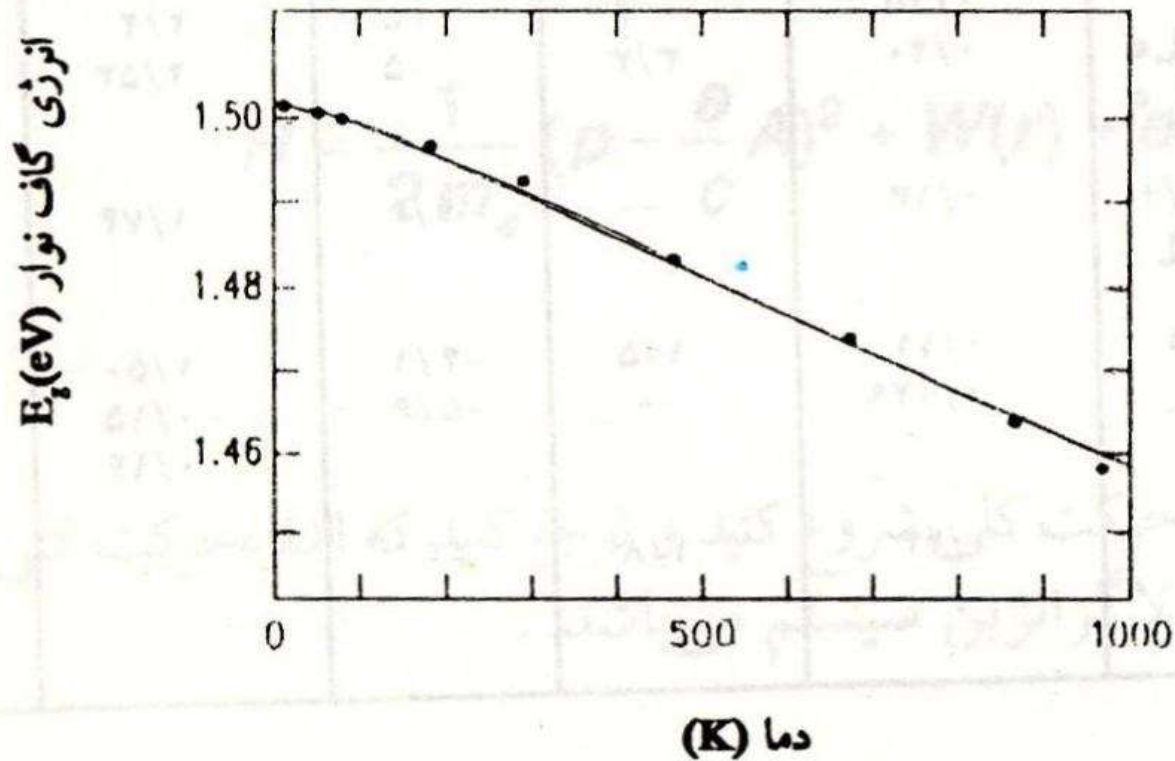
GaAs گاف نوار پهن می‌شود. شکل ۸.۵ بستگی دما گاف نوار GaAs را به دست

می‌دهد. در جدول ۱.۵ مقادیر $\left(\frac{\partial E_g}{\partial P}\right)_T$ ، $\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_P$ و سایر پارامترها برای چند

نوع نیمرسانا خلاصه شده‌اند.

جدول ۱.۵. پارامترهای متداول در بعضی نیمرساناها. توجه کنید که بعضی از پارامترها در گزارشهای مختلف متفاوت است. در جدول تنهایی از مقادیر اندازه گیری شده منظور شده است.

ثابت شبکه Å	ثابت دی الکتریک استاتیک	ضریب شکست	جرم مؤثر m_h^*	جرم مؤثر m_e^*	$\left[\frac{dE_g}{dP}\right]_T$ $\times 10^6$ eV/bar	$\left[\frac{dE_g}{dT}\right]$ $\times 10^2$ (°oK) eV/K	E_g (°oK) eV	E_g (oK) eV	نمونه
۵/۴۳	۱۱/۷	۳/۴۴	۰/۵۲	$m_h^*/۹۸$ $m_e^*/۱۹$	-۱/۵	-۲/۳	۱/۱۱	۱/۱۶۶	Si
۵/۶۶	۱۶/۳	۴	۰/۳	$m_h^*/۵۸$ $m_e^*/۰.۸$	۵/۰	-۳/۷	۰/۶۷	۰/۷۴	Ge
$۳۳/۱۸$ $۵۵/۱۶$	۱۲	۲/۴	۰/۸	۰/۲	۴/۲	-۴/۸	۳/۴	۳/۵	GaN
۵/۴۵۰	۱۰	۳/۳۷	۰/۶۷	۰/۱۳	-۱/۷	-۵/۴	۲/۲۵	۲/۴	GaP
۵/۶۵۲	۱۲	۳/۴	۰/۵	۰/۰۷	۱۱	-۵/۰	۱/۴۳	۱/۵۲۰	GaAs
۶/۰۹۵	۱۵	۳/۹	۰/۳۹	۰/۰۴۵	۱۲	-۴/۱	۰/۶۹	۰/۸۱	GaSb
۵/۸۶۸۷	۱۲/۱	۳/۳۷	۰/۴۰	۰/۰۷	۴/۶	-۴/۶	۱/۲۸	۱/۴۲	InP
۶/۰۵۸	۱۲/۵	۳/۴۲	۰/۳۳	۰/۰۲۸	۵	-۳/۳	۰/۳۶	۰/۴۳	InAs
۶/۴۷۸۷	۱۸	۳/۷۵	۰/۱۸	۰/۰۱۳۳	۱۵	-۲/۹	۰/۱۷	۰/۲۳۵	InSb
$۳۳/۲۴۹۶$ $۵۵/۲۰۶۵$	۷/۹	۲/۰۲	۰/۲۷	۰/۳۲	۰/۶	-۹/۵	۳/۲	--	ZnO
۵/۶۶۷	۸/۱	۲/۸۹	--	۰/۱۷	۶	-۷/۲	۲/۵۸	۲/۸۰	ZnSe
۶/۱۰۱	۹/۷	۳/۵۶	--	۰/۱۵	۶	-۵	۲/۲	۲/۳۹	ZnTe
$۳۴/۱۳۶$ $۵۶/۷۱۳$	۸/۹	۲/۵	۰/۷۱c ۵//c	۰/۲۰	۳/۳	-۵	۲/۵۳	۲/۵۸	CdS
$۳۴/۲۹۹$ $۵۷/۰۱۰$	۱۰/۶	--	۲/۵//+ ۰/۴⊥	۰/۱۳	--	-۴/۶	۱/۷۴	۱/۸۵	CdSe
۶/۴۷۷ ۶/۴۲	۱۰/۹ ۲۰	۲/۷۵ ۳/۷	۰/۳۵ -۰/۳	۰/۱۱ ۰/۰۲۹	۱/۵ --	-۴/۱ +۵/۶	۱/۵۰ -۰/۱۵ ۰/۱۴	۱/۶ -۰/۲۸	CdTe HgTe
۵/۴	۷/۹	۲/۱	۴/۲	۰/۴۳	۱/۸	--	--	۳/۴	CuCl



شکل ۸.۵. بستگی دمایی گاف نوار GaAs.

