Optická odezva legovaného SiGe v infračerveném oboru

Martin Bureš

vedoucí práce: Dominik Munzar

Masarykova univerzita v Brně

Brno, květen 2004

Zde bych rád poděkoval vedoucímu mé bakalářské práce doc. Mgr. Dominikovi Munzarovi, Dr. za jeho čas a úsilí, které mi věnoval, a za trpělivost, kterou se mnou měl. Můj druhý dík patří Mgr. Adamovi Dubrokovi, který mi velmi ochotně pomáhal s experimentální částí projektu.

Obsah

1 Úvod **1**

2 Makroskopická teorie optických vlastností pevných látek **2**
2.1 Maxwellovy rovnice . . . 2
2.2 Laplaceova transformace Maxwellových rovnic . . . 2
2.3 Dielektrická funkce . . . 4
2.4 Index lomu . . . 4
2.5 Chování vlny na rozhraní dvou prostředí . . . 4
2.6 Kramers-Kronigovy relace . . . 5

3 Mikroskopické mechanismy určující dielektrickou funkci **6**
3.1 Lorentzův model . . . 6
3.2 Drudeův model . . . 9
3.3 Semiklasická teorie dielektrické funkce . . . 9
3.4 Pásová struktura křemíku a germania . . . 14
3.5 Hustota stavů . . . 16
3.6 Koncentrace nositelů náboje a Fermiova energie . . . 17
3.7 Poloha Fermiovy hladiny, posouzení příspěvku intervalenčních přechodů . . . 17

4 Experiment, použité vzorky **19**
4.1 Fourierovská spektroskopie . . . 19
4.2 Měřící aparatura . . . 21
4.3 Použité vzorky . . . 22

5 Výsledky a diskuse **22**
5.1 Naměřená spektra . . . 22
5.2 Analýza spekter, dielektrická funkce . . . 22

6 Shrnutí **29**

Seznam použité literatury **30**

1 Úvod

Se stále větší integrací a zmenšováním mikroelektronických součástek začíná dosahovat křemíková technologie hranice svých možností. Závažným problémem je rychlost přesunu náboje. Ukazuje se, že jedním z možných řešení je používání epitaxních vrstev SiGe na křemíkovém substrátu. V takto připravené heterostruktuře dochází ke vzniku mechanických napětí v důsledku rozdílných mřížkových konstant křemíku a germania. Díky těmto napětím a různé šířce zakázaného pásu v SiGe je možné docílit významě vyšší rychlosti pohybu nositelů náboje než ve standardních Si strukturách. Podrobněji pojednává o tomto tématu např. článek [12].

V této práci se zabýváme optickými vlastnostmi krystalického Si a SiGe dopovaného borem. Cílem bylo určení dielektrické funkce v infračerveném oboru spektra. Zajímali jsme se mimo jiné o příspěvek intervalenčních přechodů v oblasti hrany valenčního pásu. K dispozici jsme měli vzorek Si s koncentrací akceptorové příměsi $3,1 \cdot 10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$ a několik vzorků SiGe s přibližně stejným zastoupením Si (84%) a s různou koncentrací příměsi, měnící se v rozsahu od $8 \cdot 10^{17}\mathrm{cm}^{-3}$ do $5 \cdot 10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$.

V první části uvádíme některé výsledky makroskopické teorie optických vlastností pevných látek a zavádíme základní veličiny pro fenomenologický popis interakce záření s pevnou látkou. V další části budujeme teorii pro mikroskopický popis. Nejprve uvádíme dva klasické modely interakce látky a záření - Lorentzův a Drudeův model. Poté odvozujeme, pomocí semiklasické teorie, vztah pro příspěvek mezipásových přechodů do dielektrické funkce. Uvádíme pásovou strukturu křemíku a germania, především v oblasti hrany valenčního pásu, což posléze využijeme pro výpočet posunu Fermiovy hladiny v dopovaném polovodiči. V následující kapitole popisujeme použité experimentální zařízení a jeho principy a uvádíme přehled vzorků, na kterých byla prováděna měření. V části Výsledky a diskuse objasňujeme průběh naměřených spekter, vliv koncentrace dopantů na jejich profil a příspěvek intervalenčních přechodů do dielektrické funkce.

2 Makroskopická teorie optických vlastností pevných látek

V této kapitole vyjdeme z Maxwellových rovnic pro materiálové prostředí a vybudujeme pojem dielektrické funkce. Dále zavedeme některé další optické konstanty a uvedeme tzv. Kramers-Kronigovy relace, což jsou integrální vztahy mezi reálnou a imaginární částí veličin souvisejících s problematikou optické odezvy.

2.1 Maxwellovy rovnice

Maxwellovy rovnice pro elektromagnetické pole v látce mají tvar

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t) = \rho(\boldsymbol{r},t) \ , \tag{2.1}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = 0 \ , \tag{2.2}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\partial \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} \ , \tag{2.3}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) + \frac{\partial \boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} \ , \tag{2.4}$$

kde $\boldsymbol{E}$ a $\boldsymbol{H}$ je intenzita elektrického resp. magnetického pole, $\boldsymbol{D}$ a $\boldsymbol{B}$ indukce elektrického resp. magnetického pole, $\boldsymbol{j}$ hustota elektrického proudu spojeného s volnými nositely náboje, ρ hustota volných nositelů náboje, $\boldsymbol{r}$ polohový vektor a t čas.

Tuto soustavu rovnic je třeba doplnit o tzv. materiálové vztahy, vyjadřující odezvu prostředí na příslušný podnět. Následující výrazy představují velmi obecnou situaci, kdy jsou hodnoty odezvy v jistém čase a bodě prostoru určeny velikostí podnětu a odezvové funkce ve všech minulých okamžicích[1] a všech bodech prostoru.

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\boldsymbol{r'} f_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r'},t,t')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r'},t') \ , \tag{2.5}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\boldsymbol{r'} f_\mu(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r'},t,t')\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r'},t') \ , \tag{2.6}$$

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\boldsymbol{r'} f_\sigma(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r'},t,t')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r'},t') \ . \tag{2.7}$$

Zde $f_\varepsilon, f_\mu, f_\sigma$ jsou reálné odezvové funkce prostředí na příslušný podnět. Uvedené vztahy jsou lineární, což je pro slabá pole oprávněná aproximace. Velmi často se využívá předpokladu homogenity času a prostoru, kdy máme

$$f_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r'},t,t') = f_\varepsilon(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'},t-t') \tag{2.8}$$

a podobně pro odezvové funkce f_μ, f_σ.

2.2 Laplaceova transformace Maxwellových rovnic

Při řešení problémů je často výhodné použití Laplaceovy transformace. Laplaceovou transformací $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ dostaneme

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\boldsymbol{r}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)e^{\mathrm{i}(\boldsymbol{kr}-\omega t)} \ . \tag{2.9}$$

Inverzní transformace má tvar

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\boldsymbol{k}\, \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k},\omega)e^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{kr}-\omega t)} \ . \tag{2.10}$$

[1] Integrační meze ponecháváme z formálních důvodů $(-\infty,\infty)$.

Zde $\boldsymbol{k}, \omega$ jsou nové, obecně komplexní, proměnné. Analogickým způsobem transformujeme i veličiny $\boldsymbol{H}, \boldsymbol{D}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{j}$.
Laplaceova transformace odezvové funkce $f_\varepsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}, t, t')$ dává

$$\varepsilon_\omega(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k'}, \omega, \omega') = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\boldsymbol{r'} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t' f_\varepsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}, t, t') e^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}+\boldsymbol{k'}\boldsymbol{r'}-\omega t+\omega' t')} \ . \tag{2.11}$$

Inverzní transformace je

$$f_\varepsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}, t, t') = \frac{1}{(2\pi)^8} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\boldsymbol{k} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\boldsymbol{k'} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \varepsilon_\omega(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k'}, \omega, \omega') e^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}+\boldsymbol{k'}\boldsymbol{r'}-\omega t+\omega' t')} \ . \tag{2.12}$$

Obdobné vztahy platí pro odezvové funkce $f_\mu(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}, t, t')$, $f_\sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}, t, t')$.

Za předpokladu homogenity času a prostoru - rovnice (2.8) - mají Laplaceovy transformace materiálových odezvových vztahů (2.5), (2.6) a (2.7) velmi jednoduchý tvar. S využitím teorému o konvoluci dostáváme

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}, \omega) = \varepsilon_\omega(\boldsymbol{k}, \omega)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, \omega) \ , \tag{2.13}$$
$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{k}, \omega) = \mu_\omega(\boldsymbol{k}, \omega)\boldsymbol{H}(\boldsymbol{k}, \omega) \ , \tag{2.14}$$
$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{k}, \omega) = \sigma_\omega(\boldsymbol{k}, \omega)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, \omega) \ , \tag{2.15}$$

kde $\varepsilon_\omega(\boldsymbol{k}, \omega)$, $\mu_\omega(\boldsymbol{k}, \omega)$, $\sigma_\omega(\boldsymbol{k}, \omega)$ jsou obecně komplexní funkce nazývané po řadě permitivita, permeabilita a elektrická vodivost. Jsou to tedy Laplaceovy transformace příslušných odezvových funkcí. Například $\varepsilon_\omega(\boldsymbol{k}, \omega)$ je Laplaceova transformace funkce $f_\varepsilon(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}, t-t')$. Často se využívá tzv. relativních materiálových funkcí $\varepsilon_r(\boldsymbol{k}, \omega)$ a $\mu_r(\boldsymbol{k}, \omega)$ definovaných vztahy

$$\varepsilon_\omega(\boldsymbol{k}, \omega) = \varepsilon_0\varepsilon_r(\boldsymbol{k}, \omega) \ , \tag{2.16}$$
$$\mu_\omega(\boldsymbol{k}, \omega) = \mu_0\mu_r(\boldsymbol{k}, \omega) \ , \tag{2.17}$$

kde ε_0 a μ_0 je po řadě permitivita a permeabilita vakua,

$$\varepsilon_0 = \frac{10^7}{4\pi c^2}\mathrm{Fm}^{-1} \ , \tag{2.18}$$
$$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}\mathrm{Hm}^{-1} \ , \tag{2.19}$$

kde c je rychlost světla ve vakuu. Pro úplnost dodejme, že můžeme zavést tzv. relativní dielektrickou susceptibilitu $\chi_r(\boldsymbol{k}, \omega)$ vztahem

$$\varepsilon_\omega(\boldsymbol{k}, \omega) = \varepsilon_0 \left[1 + \chi_r(\boldsymbol{k}, \omega)\right] \ . \tag{2.20}$$

Potom lze přepsat výraz (2.13) do tvaru

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}, \omega) = \varepsilon_0[1 + \chi_r(\boldsymbol{k}, \omega)]\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, \omega) = \varepsilon_0\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, \omega) + \boldsymbol{P}(\boldsymbol{k}, \omega) \ , \tag{2.21}$$

kde $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{k}, \omega)$ je polarizace.

Pomocí Laplaceovy transformace operátoru ∇ lze rovněž formálně zjednodušit zápis Maxwellových rovnic

$$-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}, \omega) = \rho_\omega(\boldsymbol{k}, \omega) \tag{2.22}$$
$$-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{k}, \omega) = 0 \tag{2.23}$$
$$-\mathrm{i}\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}, \omega) = \mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{k}, \omega) \tag{2.24}$$
$$-\mathrm{i}\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{H}(\boldsymbol{k}, \omega) = \boldsymbol{j}(\boldsymbol{k}, \omega) - \mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{D}(\boldsymbol{k}, \omega) \ . \tag{2.25}$$

Z experimentálních výsledků vyplývá, že vliv prostorové disperze (tedy závislost funkcí na $\boldsymbol{k}$) lze při zkoumání většiny jevů zanedbat. Frekvenční závislost je však velmi výrazná, a budeme proto v dalším uvažovat pouze závislost materiálových funkcí na frekvenci, tj. $\varepsilon_\omega = \varepsilon_\omega(\omega)$, $\mu_\omega = \mu_\omega(\omega)$, $\sigma_\omega = \sigma_\omega(\omega)$. Dále v oblasti frekvencí, kterými se při studiu optických vlastností zabýváme, lze položit $\mu_r(\omega) = 1$.

2.3 Dielektrická funkce

Pomocí odezvových vztahů (2.13), (2.15) a výrazu (2.16) můžeme rovnici (2.25) upravit do tvaru

$$\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{H}(\omega) = \varepsilon_0 \omega \left[\varepsilon_r(\omega) + \mathrm{i} \frac{1}{\varepsilon_0 \omega} \sigma_\omega(\omega) \right] \boldsymbol{E}(\omega) \tag{2.26}$$

a zavést tak dielektrickou funkci $\varepsilon_d(\omega)$

$$\varepsilon_d(\omega) = \varepsilon_r(\omega) + \mathrm{i} \frac{1}{\varepsilon_0 \omega} \sigma_\omega(\omega) \ . \tag{2.27}$$

Za předpokladu, že v látce nejsou jiné náboje a proudy než polarizační, tj. $\rho \equiv 0$ a $\boldsymbol{j} \equiv 0$, splývá dielektrická funkce $\varepsilon_d(\omega)$ s relativní permitivitou $\varepsilon_r(\omega)$. V dalším budeme dielektrickou funkci označovat symbolem $\varepsilon(\omega)$. V tomto případě můžeme také zapsat, porovnáním vztahů (2.13), (2.21) a využitím (2.16), dielektrickou funkci ve tvaru

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\boldsymbol{P}(\omega)}{\varepsilon_0 \boldsymbol{E}(\omega)} \ . \tag{2.28}$$

Pro popis látky používáme také vodivost, která souvisí s dielektrickou funkcí vztahem

$$\sigma(\omega) = -\mathrm{i}\omega\varepsilon_0 \varepsilon(\omega) \ . \tag{2.29}$$

2.4 Index lomu

Komplexní index lomu $N(\omega)$ zavádíme rovnicí

$$N^2(\omega) = \varepsilon(\omega) \ . \tag{2.30}$$

Vyjádříme-li veličiny vystupující v předchozím vztahu jako

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + \mathrm{i}\varepsilon_2(\omega) \tag{2.31}$$

$$N(\omega) = n(\omega) + \mathrm{i}\kappa(\omega) \ , \tag{2.32}$$

kde $n(\omega)$ a $\kappa(\omega)$ je po řadě index lomu a extinkční koeficient, můžeme z rovnice (2.30) vyjádřit reálnou a imaginární část dielektrické funkce $\varepsilon_1(\omega)$ a $\varepsilon_2(\omega)$ pomocí optických konstant $n(\omega)$ a $\kappa(\omega)$:

$$\varepsilon_1 = n^2 - \kappa^2 \tag{2.33}$$

$$\varepsilon_2 = 2n\kappa \tag{2.34}$$

nebo naopak

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varepsilon_1 + \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.35}$$

$$\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\varepsilon_1 + \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \right)^{\frac{1}{2}} \ . \tag{2.36}$$

Mezi extinkčním koeficientem κ a absorpčním koeficientem α vystupujícím v Beerově zákoně platí vztah

$$\alpha = \frac{2\kappa\omega}{c} \ . \tag{2.37}$$

2.5 Chování vlny na rozhraní dvou prostředí

Komplexní koeficient odrazivosti, tzv. Fresnelův koeficient, můžeme zapsat v exponenciálním tvaru

$$r(\omega) = \rho(\omega) e^{\mathrm{i}\Phi(\omega)} \ , \tag{2.38}$$

kde $\rho(\omega)$ je amplituda a $\Phi(\omega)$ fázový člen. Odrazivost, definovaná jako poměr intenzity záření odraženého a intenzity záření dopadajícího, souvisí s koeficientem odrazivosti $r(\omega)$:

$$R(\omega) = |r(\omega)|^2 = r(\omega) r^*(\omega) = \rho^2(\omega) \ . \tag{2.39}$$

Dosazením (2.39) do (2.38) přejde vztah pro koeficient odrazivosti do tvaru

$$r(\omega) = \sqrt{R(\omega)}e^{\mathrm{i}\Phi(\omega)} \ . \tag{2.40}$$

Abychom mohli vyhodnocovat optická měření, je nutné znát změny chování elektromagnetické vlny na rozhraní dvou prostředí. Budeme předpokládat, že toto rozhraní tvoří nekonečnou hladkou rovinu a obě prostředí jsou homogenní, izotropní a absorbující. Fresnelovy koeficienty (2.38) pro s a p polarizaci jsou v tomto případě

$$r_s = \frac{N_1 \cos\tilde{\Theta}_1 - N_2 \cos\tilde{\Theta}_2}{N_1 \cos\tilde{\Theta}_1 + N_2 \cos\tilde{\Theta}_2} \tag{2.41}$$

$$r_p = \frac{N_1 \cos\tilde{\Theta}_2 - N_2 \cos\tilde{\Theta}_1}{N_1 \cos\tilde{\Theta}_2 + N_2 \cos\tilde{\Theta}_1} \ , \tag{2.42}$$

kde N_1, N_2 jsou komplexní indexy lomu jednotlivých prostředí a $\tilde{\Theta}_1$, $\tilde{\Theta}_2$ jsou po řadě komplexní úhly dopadu a lomu. Odvození výše uvedených vztahů a přesný význam těchto veličin je uveden v [2]. Pro kolmý dopad, kdy $\tilde{\Theta}_1 = \tilde{\Theta}_2$, mají Fresnelovy vztahy jednoduchý tvar

$$r = r_s = r_p = \frac{N_1 - N_2}{N_1 + N_2} \ . \tag{2.43}$$

Odrazivost R je potom

$$R = \left|\frac{N_1 - N_2}{N_1 + N_2}\right|^2 \ . \tag{2.44}$$

Pokud je navíc jedním prostředím vakuum, mají tyto výrazy tvar

$$r = \frac{1 - n - \mathrm{i}\kappa}{1 + n + \mathrm{i}\kappa} \ , \qquad R = \frac{(1-n)^2 + \kappa^2}{(1+n)^2 + \kappa^2} \ , \tag{2.45}$$

kde jsme dosadili $N_1 = 1$ a $N_2 = n + \mathrm{i}\kappa$.

2.6 Kramers-Kronigovy relace

Kramers-Kronigovými relacemi rozumíme integrální vztahy mezi reálnou a imaginární částí veličin souvisejících s problematikou optické odezvy. Tyto relace lze odvodit[2] pomocí výsledků teorie funkcí komplexní proměnné a s použitím principu kauzality (tj. že příčina předchází následek). Mezi reálnou a imaginární částí dielektrické funkce platí následující vztahy:

$$\varepsilon_1(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi}\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{x\varepsilon_2(x)}{x^2 - \omega^2}\mathrm{d}x \ , \quad \omega > 0 \ , \tag{2.46}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi}\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(x)}{x^2 - \omega^2}\mathrm{d}x \ . \tag{2.47}$$

kde $\mathcal{P}$ značí Cauchyovu hlavní hodnotu. Obdobné relace platí dále mezi reálnou a imaginární části komplexního indexu lomu

$$n(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi}\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{xk(x)}{x^2 - \omega^2}\mathrm{d}x \ , \quad \omega > 0 \ , \tag{2.48}$$

$$k(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi}\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{n(x)}{x^2 - \omega^2}\mathrm{d}x \ . \tag{2.49}$$

Při studiu optických vlastností látek je nejčastěji měřenou veličinou spektrální závislost odrazivosti $R(\omega)$. Pokud máme tuto závislost naměřenu v dostatečně[3] širokém rozmezí frekvencí, můžeme použít Kramers-Kronigovu relaci mezi $R(\omega)$ a fází $\Phi(\omega)$:

$$\Phi(\omega) = -\frac{\omega}{\pi}\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{\ln\left[R(x)/R(\omega)\right]}{x^2 - \omega^2}\mathrm{d}x \ . \tag{2.50}$$

[2] Podrobně je odvození provedeno v [2].

[3] V principu je zapotřebí rozsah od milimetrových vln až do daleké UV oblasti.

Předchozí vztah vyplývá z relací

$$\Phi(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi}\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{\ln\rho(x)}{x^2-\omega^2}\mathrm{d}x \ , \tag{2.51}$$

$$\ln\rho(\omega) = -\frac{2}{\pi}\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{x\Phi(x)}{x^2-\omega^2}\mathrm{d}x \ , \quad \omega > 0 \ . \tag{2.52}$$

Pokud tedy známe z experimentu závislost $R(\omega)$, můžeme díky Kramers-Kronigovým relacím (2.50) určit dielektrickou funkci $\varepsilon(\omega)$ ze vztahů (2.45) a (2.30), aniž bychom znali spektrální závislost fáze $\Phi(\omega)$, kterou je velmi obtížné měřit.

3 Mikroskopické mechanismy určující dielektrickou funkci

Pro použití Kramers-Kronigových relací je, jak bylo zmíněno v odstavci 2.6, zapotřebí znalost odrazivosti v širokém rozsahu spektra. Proto nebývá jejich použití vždy možné. Jiný způsob spočívá v tom, že předpokládáme nějaký průběh dielektrické funkce (vyplývající např. z vhodného mikroskopického modelu) a hodnoty volných parametrů získáme prokládáním naměřených dat.

V odstavcích 3.1 a 3.2 uvádíme dva klasické modely. Prvním je Lorentzův model, který dobře popisuje interakci elektromagnetického záření s fonony. Dalším je model Drudeův, který zase dobře popisuje příspěvek volných nositelů náboje. Dále odvozujeme, pomocí semiklasické teorie, vztah pro příspěvek mezipásových přechodů do dielektrické funkce. Popisujeme pásovou strukturu křemíku a germania a odvozujeme vztah pro posun Fermiovy hladiny v p-dopovaném polovodiči. Intervalenční přechody jsou totiž důsledkem právě tohoto posuvu.

3.1 Lorentzův model

Klasický Lorentzův model vychází z představy nabité částice vázané ke své rovnovážné poloze přitažlivou silou $\boldsymbol{F_p}$ úměrnou výchylce. Označíme-li symbolem $\boldsymbol{r}$ výchylku, m hmotnost a ω_0 vlastní kruhovou frekvenci částice, je tato síla rovna

$$\boldsymbol{F} = -m\omega_0^2\boldsymbol{r} \ . \tag{3.1}$$

Tlumení částice $\boldsymbol{F_t}$, úměrné rychlosti, můžeme zapsat ve tvaru

$$\boldsymbol{F_t} = -m\gamma\dot{\boldsymbol{r}} \ , \tag{3.2}$$

kde γ je konstanta určující tlumení. Elektromagnetická vlna působí na částici s nábojem q silou $\boldsymbol{F_e} = q\boldsymbol{E}$, kde

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E_0}e^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{3.3}$$

je intenzita elektrického pole. Při zanedbání Lorentzovy síly, která je pro malé rychlosti $\dot{\boldsymbol{r}}$ malá, dostáváme pohybovou rovnici

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = -m\omega_0^2\boldsymbol{r} - m\gamma\dot{\boldsymbol{r}} + q\boldsymbol{E_0}e^{-\mathrm{i}\omega t} \ , \tag{3.4}$$

jejímž řešením je závislost výchylky na čase

$$\boldsymbol{r} = \frac{q}{m}\frac{1}{\omega_0^2-\omega^2-\mathrm{i}\omega\gamma}\boldsymbol{E_0}e^{-\mathrm{i}\omega t} \ . \tag{3.5}$$

Abychom získali hledanou dielektrickou funkci (2.28), musíme nejprve vyjádřit polarizaci $\boldsymbol{P}$, což je objemová hustota dipólových momentů. Platí

$$\boldsymbol{P} = nq\boldsymbol{r} \ , \tag{3.6}$$

kde n je koncentrace kmitajících částic. Po dosazení (3.6) a (3.5) do (2.28) máme

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{nq^2}{\varepsilon_0 m}\frac{1}{\omega_0^2-\omega^2-\mathrm{i}\omega\gamma} \ . \tag{3.7}$$

Výraz $nq^2/(\varepsilon_0 m)$ značíme písmenem F a nazýváme oscilátorová síla. Potom platí

$$\varepsilon(\omega) = 1 + F\frac{1}{\omega_0^2-\omega^2-\mathrm{i}\omega\gamma} \ . \tag{3.8}$$

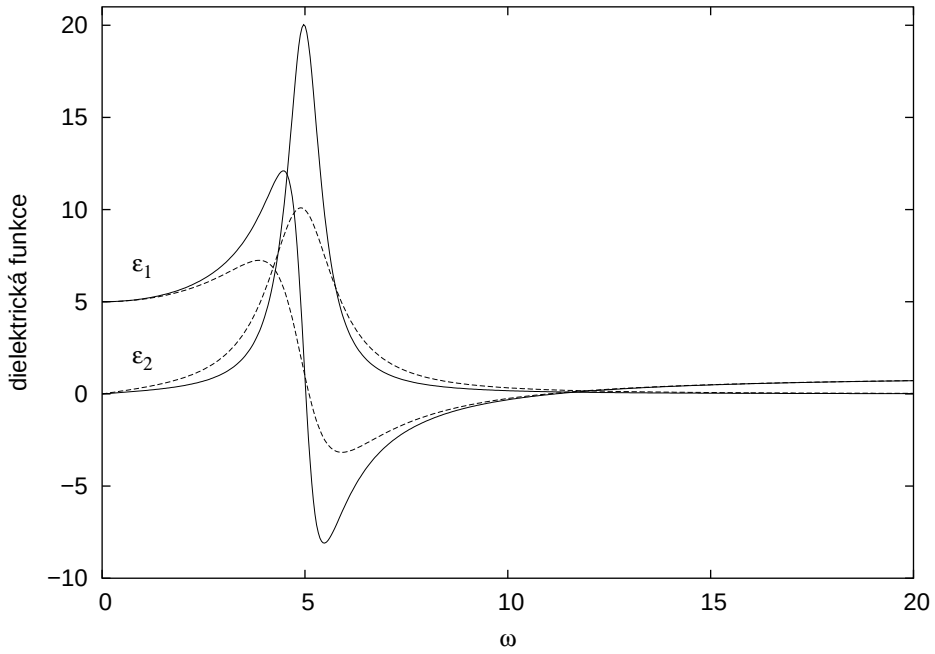
Pokud dále oddělíme reálnou a imaginární část, obdržíme

$$\varepsilon = 1 + F\frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma^2} + \mathrm{i}F\frac{\omega\gamma}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma^2} \ . \tag{3.9}$$

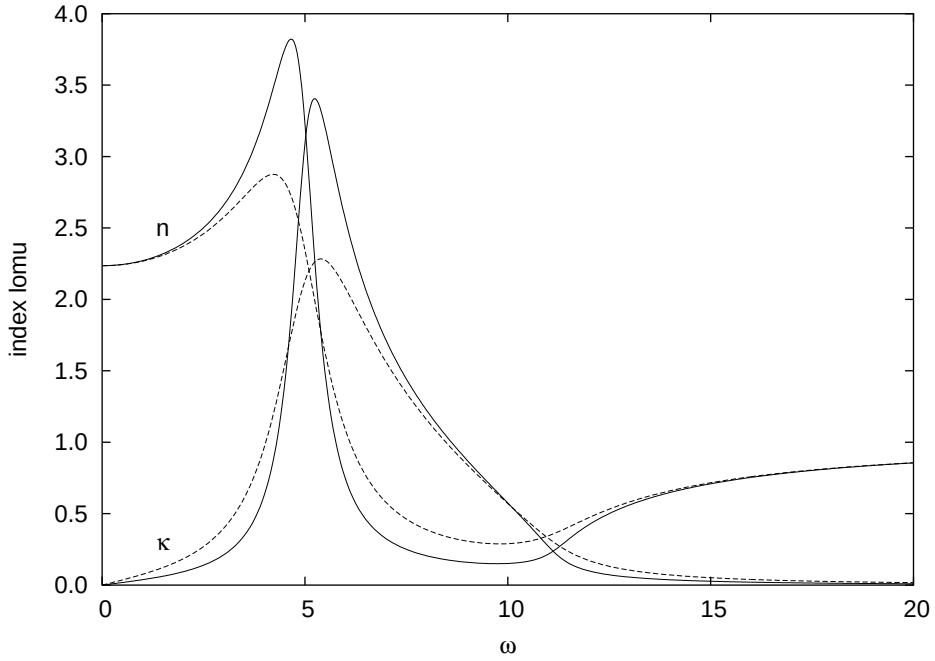
Pro látku s jedním kmitovým módem dostáváme vztah pro dielektrickou funkci se třemi volnými parametry - oscilátorovou silou F, frekvencí vlastních kmitů ω_0 a konstantou γ určující tlumení. Spektrální závislost dielektrické funkce je pro vhodnou volbu těchto parametrů vynesena na obrázku 1. Frekvence ω je, stejně jako na následujících obrázcích, vynesena v relativních jednotkách. Je zde patrné, že vrchol závislosti $\varepsilon_2(\omega)$ je spojen s poklesem $\varepsilon_1(\omega)$, což je obecné pravidlo plynoucí z Kramers-Kronigových relací. Všimněme si rovněž vlivu parametru tlumení γ. Zmenšení tohoto parametru se projeví zúžením struktury a má rovněž významný vliv na její velikost.

Na obrázku 2 je potom vynesena spektrální závislost komplexního indexu lomu vypočteného ze vztahů (2.35) a (2.36). Maximum extinkčního koeficientu κ je blízko frekvence ω_0. Bezprostředně za touto frekvencí začíná klesat index lomu. Konečně na obrázku 3 je vynesena odrazivost a fázový úhel pro kolmý dopad světa. Tyto veličiny byly určeny ze vztahů (2.40) a (2.45). Odrazivost je zvětšená v oblasti frekvencí, kde je extinkční koeficient κ větší než index lomu n.

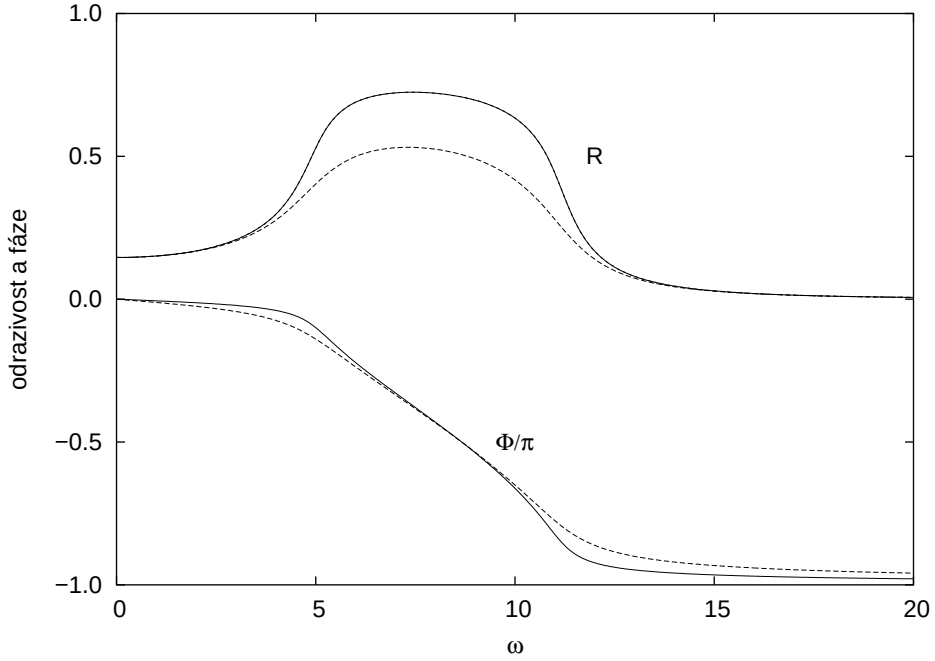
Pro popis interakce elektronů v pevných látkách s elektromagnetickou vlnou je Lorentzův model příliš hrubý. Jak se však ukazuje, velmi dobře se osvědčuje při popisu interakce kmitů mříže s elektromagnetickou vlnou. V odstavci 3.3 je nastíněna přesnější teorie, respektující kvantovou stavbu hmoty. Než však přistoupíme k jejímu výkladu, uvedeme ještě jeden klasický model, který velmi dobře popisuje příspěvek plazmy volných nositelů náboje do dielektrické funkce.



Obrázek 1: Spektrální závislost reálné a imaginární části dielektrické funkce pro Lorentzův model. Hodnoty parametrů modelu jsou $F = 100$ a $\omega_0 = 5$. Plnou čarou jsou ukázána spektra pro $\gamma = 1$, čárkovaně pro $\gamma = 2$. Frekvence oscilátoru ω_0 určuje polohu struktury, parametr γ určuje její šířku a konstanta F její velikost.



Obrázek 2: Spektrální závislost reálné a imaginární části indexu lomu pro Lorentzův model. Hodnoty parametrů modelu jsou stejné jako na obrázku 1. Maximum extinkčního koeficientu κ je blízko frekvence ω_0. Bezprostředně za touto frekvencí začíná klesat index lomu.



Obrázek 3: Spektrální závislost odrazivosti a fáze pro Lorentzův model. Hodnoty parametrů modelu jsou stejné jako na obrázku 1. Povšimněme si, že odrazivost je zvětšená v oblasti frekvencí, kde je extinkční koeficient κ větší než index lomu n.

3.2 Drudeův model

Klasický Drudeův model je pouze speciálním případem Lorentzova modelu. Popisuje odezvu volných nositelů náboje na vnější elektromagnetické pole. Pohybová rovnice (3.4) už neobsahuje člen vyjadřující pružnou vazbu, zůstává pouze tlumení úměrné rychlosti. Znamená to, že můžeme použít výraz (3.8) pro dielektrickou funkci, pokud položíme $\omega_0 = 0$. Dielektrická funkce je potom dána Drudeovou formulí

$$\varepsilon = 1 - F\frac{1}{\omega^2 + \mathrm{i}\omega\gamma} = 1 - F\frac{1}{\omega^2+\gamma^2} + \mathrm{i}F\frac{\gamma}{\omega(\omega^2+\gamma^2)} \ . \tag{3.10}$$

Místo parametru $F = nq^2/(\varepsilon_0 m)$ se obvykle používá veličina

$$\omega_p = \sqrt{\frac{nq^2}{\varepsilon_0 m}} \tag{3.11}$$

nazývaná plazmová frekvence. Při tomto značení má Drudeho formule tvar

$$\varepsilon = 1 - \omega_p^2\frac{1}{\omega^2+\gamma^2} + \mathrm{i}\omega_p^2\frac{\gamma}{\omega(\omega^2+\gamma^2)} \ . \tag{3.12}$$

Na obrázku 4 je ukázána spektrální závislost reálné a imaginární části dielektrické funkce. Reálná část monotonně roste z minimální hodnoty $\varepsilon_1(0) = 1 - (\omega_p/\gamma)^2$ k jedničce, naproti tomu imaginární část má v počátku singularitu a s rostoucí frekvencí rychle klesá k nule.

Na obrázku 5 je potom ukázána spektrální závislost indexu lomu. Nápadným rysem je pokles imaginární části indexu lomu k a vzrůst reálné části n v okolí plazmové frekvence ω_p. Tato skutečnost souvisí s průchodem reálné části dielektrické funkce nulou v okolí ω_p. Pod plazmovou frekvencí je tedy index lomu téměř imaginární, zatímco nad frekvencí ω_p se blíží reálné hodnotě 1.

Spektrální závislost odrazivosti a změny fáze pro kolmý dopad, určená ze vztahů (2.38) a (2.45), je vynesena na obrázku 6. Pro frekvence pod ω_p je odrazivost blízká jedné, což je patrné z druhého ze vztahů (2.45), jehož pravá strana je blízká jedničce, pokud je splněna některá z relací $n \ll 1$, $k \gg n$, $n \gg 1$. Pro frekvence nad ω_p už elektrony nestačí sledovat vnější elektromagnetické pole a rozhraní přestává odrážet. Hodnoty dielektrické funkce a indexu lomu jsou potom reálné a blízké jedničce. Na strmost zlomu v okolí plazmové frekvence má výrazný vliv parametr tlumení γ. Na obrázku 7 je proto uvedena závislost odrazivosti pro několik hodnot tohoto parametru.

3.3 Semiklasická teorie dielektrické funkce

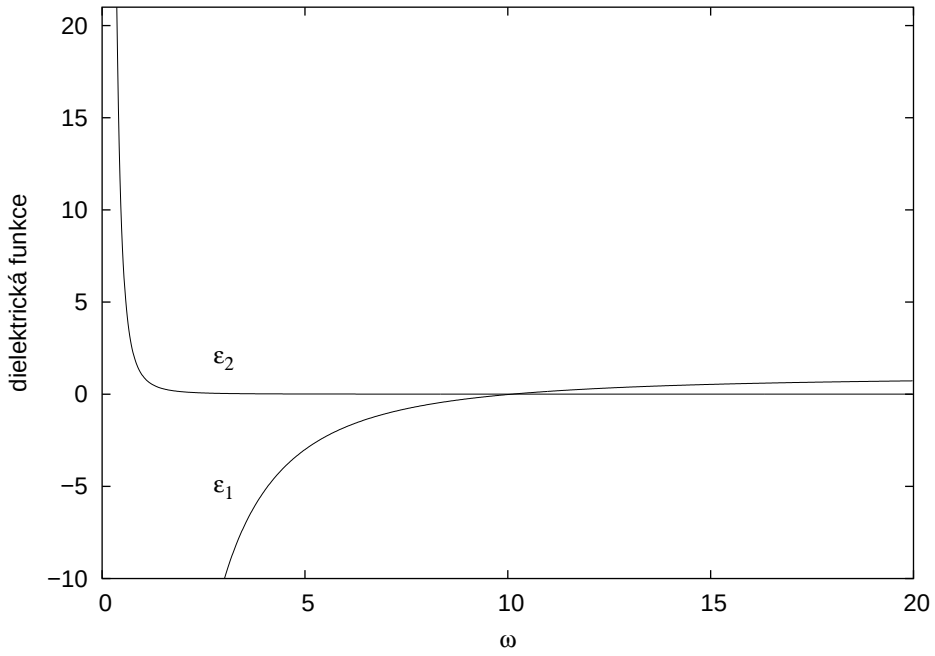
V tomto odstavci použijeme k vysvětlení interakce elektromagnetického záření s pevnou látkou semiklasickou aproximaci, tj. světelnou vlnu budeme popisovat klasicky, avšak pro pevnou látku použijeme kvantovou teorii. Důsledně kvantový popis, kde je i elektromagnetické pole popisováno kvantově, není zapotřebí, neboť studujeme jevy reprezentované v makroskopické fenomenologii dielektrickou funkcí, popřípadě komplexním indexem lomu. Dále se omezíme pouze na přiblížení slabého pole, budeme tedy moci použít poruchovou teorii.

Při vyjádření dielektrické funkce budeme vycházet z fyzikální interpretace její imaginární části. Světelná vlna ztrácí v absorbujícím prostředí energii, která se makroskopicky projeví především jako teplo. Imaginární část dielektrické funkce je však této ztrátě přímo úměrná. Stačí tedy spočítat vzrůst střední energie pevné látky v jednotce objemu za jednotku času a to lze provést právě pomocí poruchové teorie. Reálnou část dielektrické funkce už potom snadno obdržíme pomocí Kramers-Kronigových relací. Nyní tedy odvodíme vztah pro imaginární část dielektrické funkce. Se všemi podrobnostmi je teorie uvedena v [2] nebo v [4].

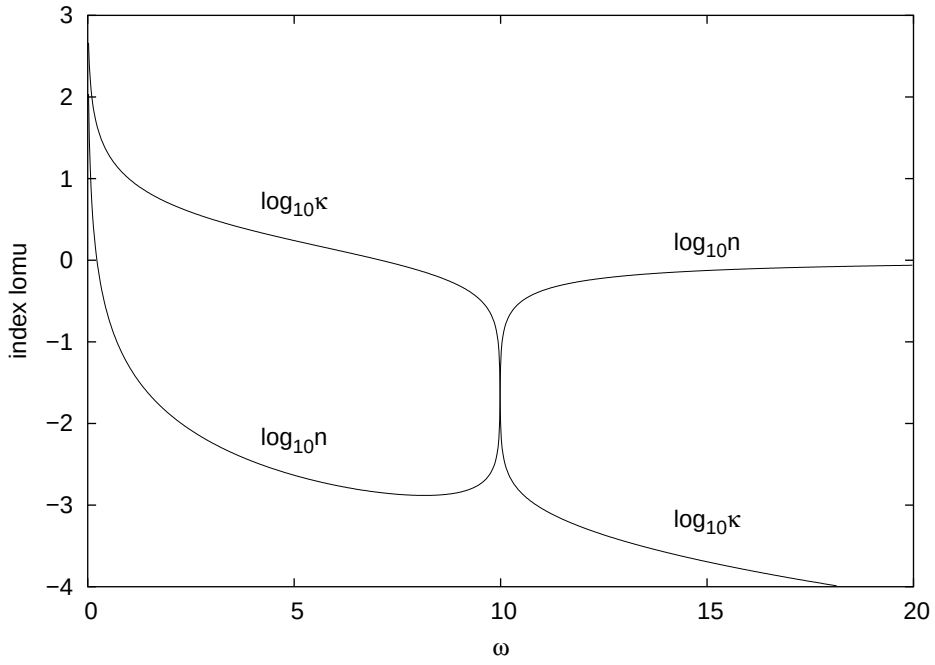
Začněme odvozením výrazu pro hamiltonián popisující interakci vnějšího elektromagnetického pole s Blochovskými elektrony v polovodiči[4]. Jak už bylo zmíněno, elektromagnetické pole je popisováno klasicky, zatímco s elektrony spojujeme Blochovské vlny. Neporušený jednoelektronový hamiltonián má tvar

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) \ . \tag{3.13}$$

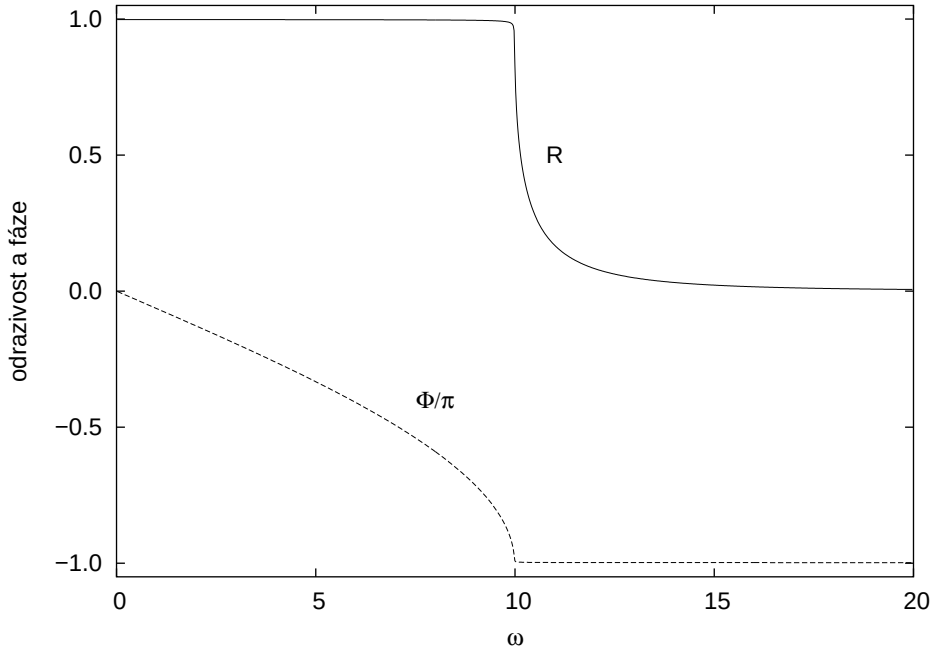
[4]Pro jednoduchost neprovádíme výpočty pro obecný krystal ale pro polovodič, kde uvažujeme jeden valenční a jeden vodivostní pás.



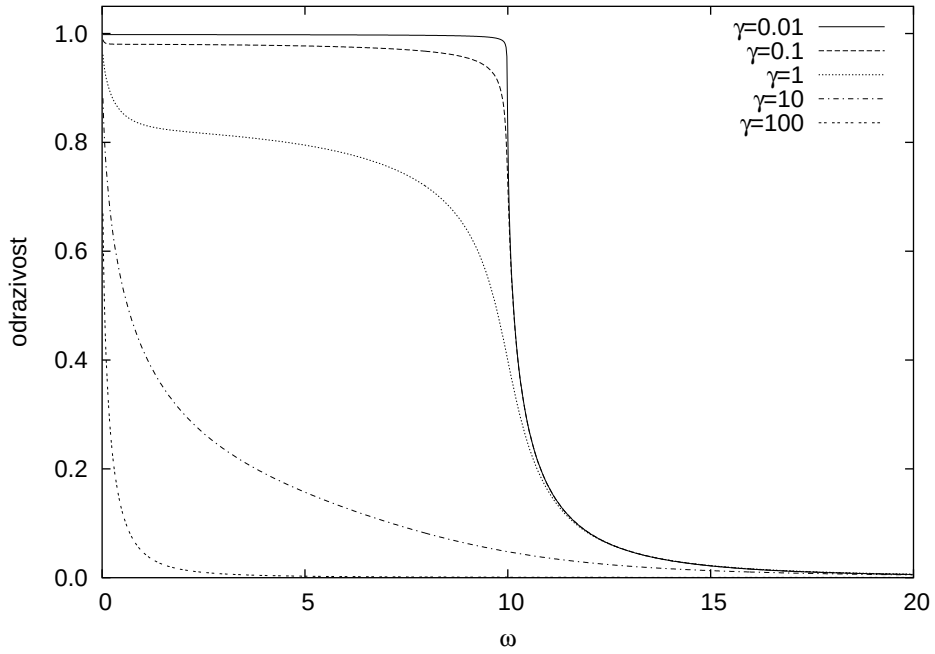
Obrázek 4: Spektrální závislost reálné a imaginární části dielektrické funkce pro Drudeův model. Závislost je uvedena pro $\omega_p = 10$ a $\gamma = 1$.



Obrázek 5: Spektrální závislost dekadického logaritmu reálné a imaginární části indexu lomu pro Drudeův model. Parametry modelu jsou stejné jako na obrázku 4. Povšimněme si poklesu k a vzrůstu n v okolí plazmové frekvence ω_p.



Obrázek 6: Spektrální závislost odrazivosti R a fázového úhlu Φ pro Drudeův model. Hodnoty parametrů modelu jsou stejné jako na obrázku 4.



Obrázek 7: Spektrální závislost odrazivosti pro Drudeův model. Závislost je uvedena pro $\omega_p = 10$ a několik hodnot konstanty γ určující tlumení.

Pro popis elektromagnetického pole zaveďme skalární a vektorový potenciál $\Phi(\boldsymbol{r},t)$, resp. $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$. Zavedení potenciálů není jednoznačné. Pro zjednodušení výpočtů je vhodné použít tzv. Coulombovu kalibraci:

$$\Phi = 0 \quad \text{a} \quad \nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0 \; . \tag{3.14}$$

V tomto případě jsou intenzity $\boldsymbol{E}$ a $\boldsymbol{B}$ dány vztahy

$$\boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \; , \quad \boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} \; , \tag{3.15}$$

Hamiltonián pro částici s nábojem $-e$, která se nachází ve vnějším elektromagnetickém poli, získáme z neporušeného hamiltoniánu (3.13) záměnou operátoru hybnosti $\boldsymbol{p}$ výrazem[5] $\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}$, čímž obdržíme

$$H = \frac{1}{2m} \left[\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}\right]^2 + V(\boldsymbol{r}) \; . \tag{3.16}$$

Tento výraz nyní upravíme do jednodušší podoby. Roznásobením závorky dostaneme

$$\frac{1}{2m} \left(\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}\right)^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{2m} \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{p} + \frac{e}{2m} \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{A} + \frac{e^2 A^2}{2m} \; . \tag{3.17}$$

Nyní využijeme vyjádření operátoru $\boldsymbol{p}$ v souřadnicové reprezentaci $\boldsymbol{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$ a druhou z podmínek (3.14). Dále budeme předpokládat, že elektromagnetické pole je slabé, pak můžeme zanedbat člen obsahující druhou mocninu $\boldsymbol{A}$. Po úpravě dostaneme

$$H = H_0 + H_{eR} \; , \tag{3.18}$$

kde $H_{eR} = (e/m)\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{p}$.

Zapišme nyní vektorový potenciál $\boldsymbol{A}$ jako $A\hat{\boldsymbol{e}}$, kde $\hat{\boldsymbol{e}}$ je jednotkový vektor ve směru $\boldsymbol{A}$. Potom můžeme vyjádřit amplitudu A pomocí amplitudy E intenzity elektrického pole $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{q},t) = E\hat{\boldsymbol{e}} \cos\left(\boldsymbol{q}\boldsymbol{r} - \omega t\right)$ s využitím prvního ze vztahů (3.15):

$$A = -\mathrm{i}\frac{E}{2\omega} \left(e^{\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\boldsymbol{r} - \omega t)} - e^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\boldsymbol{r} - \omega t)}\right) \; . \tag{3.19}$$

K určení dielektrické funkce použijeme časovou poruchovou teorii - ve formě Fermiova zlatého pravidla. Pro jednoduchost uvažujeme pouze o jednom valenčním pásu (stav $|v\rangle$ s energií E_v a vlnovým vektorem $\boldsymbol{k}_v$) a jednom vodivostním pásu (stav $|c\rangle$ s energií E_c a vlnovým vektorem $\boldsymbol{k}_c$). Pravděpodobnost přechodu z valenčního do vodivostního pásu je dána vztahem (viz. např. [10]):

$$R = \frac{1}{V} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\boldsymbol{k}_c, \boldsymbol{k}_v} \left|\langle c \left| H'_{eR} \right| v \rangle\right|^2 \delta(E_c(\boldsymbol{k}_c) - E_v(\boldsymbol{k}_v) - \hbar\omega) \; . \tag{3.20}$$

Zde V je objem krystalu a H'_{eR} je část interakčního hamiltoniánu H_{eR} nezávislá na čase,

$$H'_{eR} = -\mathrm{i}\frac{e}{m}\frac{E}{2\omega} e^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}} (\hat{\boldsymbol{e}} \cdot \boldsymbol{p}) \; . \tag{3.21}$$

Při dosazování ze vztahu (3.19) jsme vynechali člen obsahující faktor $e^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\boldsymbol{r} - \omega t)}$, který popisuje emisi.[6] Je tedy zapotřebí nejprve stanovit výraz

$$\left|\langle c \left| H'_{eR} \right| v \rangle\right|^2 = \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{|E|^2}{4\omega^2} \left|\langle c \left| e^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}} (\hat{\boldsymbol{e}} \cdot \boldsymbol{p}) \right| v \rangle\right|^2 \; , \tag{3.22}$$

kde $|c\rangle$ a $|v\rangle$ jsou po řadě vlnové funkce elektronu ve vodivostním a valenčním pásu dané výrazy

$$|c\rangle = u_{c,\boldsymbol{k}_c}(\boldsymbol{r}) e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_c \cdot \boldsymbol{r}} \qquad |v\rangle = u_{v,\boldsymbol{k}_v}(\boldsymbol{r}) e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_v \cdot \boldsymbol{r}} \; . \tag{3.23}$$

S využitím vztahu (3.23) pak můžeme výraz $\left|\langle c \left| e^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}} (\hat{\boldsymbol{e}} \cdot \boldsymbol{p}) \right| v \rangle\right|^2$ psát jako

$$\left|\langle c \left| e^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}} (\hat{\boldsymbol{e}} \cdot \boldsymbol{p}) \right| v \rangle\right|^2 = \left| \int u^*_{c,\boldsymbol{k}_c}(\boldsymbol{r}) e^{\mathrm{i}(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{k}_c) \cdot \boldsymbol{r}} (\hat{\boldsymbol{e}} \cdot \boldsymbol{p}) u_{v,\boldsymbol{k}_v}(\boldsymbol{r}) e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_v \cdot \boldsymbol{r}} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \right|^2 \; . \tag{3.24}$$

[5] Klasický hamiltonián pro částici s nábojem Q nacházející se ve vnějším elektromagnetickém poli získáme z neporušeného hamiltoniánu záměnou hybnosti $\boldsymbol{P}$ výrazem $\boldsymbol{P} - Q\boldsymbol{A}$.

[6] Důvod je uveden v [4].

Upravme nyní integrál v (3.24) do jednoduššího tvaru. Za předpokladu, že $\boldsymbol{q}$ je mnohem menší než mřížový parametr reciproké mřížky, což je pro optické fotony splněno, můžeme položit $\boldsymbol{q} = 0$ (tzv. dipólová aproximace). Dále působení operátoru $\boldsymbol{p}$ na výraz $u_{v,\boldsymbol{k}_v}(\boldsymbol{r})e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_v\cdot\boldsymbol{r}}$ dává

$$\boldsymbol{p}u_{v,\boldsymbol{k}_v}(\boldsymbol{r})e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_v\cdot\boldsymbol{r}} = e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_v\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}u_{v,\boldsymbol{k}_v}(\boldsymbol{r}) + \hbar\boldsymbol{k}_v u_{v,\boldsymbol{k}_v}(\boldsymbol{r})e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_v\cdot\boldsymbol{r}} \ . \tag{3.25}$$

Integrál z druhého členu v rovnici (3.25) násobeného $u^*_{c,\boldsymbol{k}_c}$ je nulový[7], neboť stavy $|c\rangle$ a $|v\rangle$ jsou ortogonální. Integrál v rovnici (3.24) se tedy redukuje na

$$\int u^*_{c,\boldsymbol{k}_c}(\boldsymbol{r})e^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_v-\boldsymbol{k}_c)\cdot\boldsymbol{r}}(\hat{\boldsymbol{e}}\cdot\boldsymbol{p})u_{v,\boldsymbol{k}_v}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} \ . \tag{3.26}$$

Zaveďme substituci $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{R_j} + \boldsymbol{r'}$, kde $\boldsymbol{R_j}$ je translační vektor mřížky a $\boldsymbol{r'}$ probíhá přes zvolenou primitivní buňku (p. b.). Výraz (3.26) tak přejde do tvaru

$$\int \sum_j e^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_v-\boldsymbol{k}_c)\cdot\boldsymbol{R_j}} \int_{\mathrm{p.}b.} u^*_{c,\boldsymbol{k}_c}e^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_v-\boldsymbol{k}_c)\cdot\boldsymbol{r'}}(\hat{\boldsymbol{e}}\cdot\boldsymbol{p})u_{v,\boldsymbol{k}_v}\mathrm{d}\boldsymbol{r'} \tag{3.27}$$

Součet členů $e^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_v-\boldsymbol{k}_c)\cdot\boldsymbol{R_j}}$ přes všechny mřížkové vektory $\boldsymbol{R_j}$ dává Kroneckerovo delta $N\delta(\boldsymbol{k}_v - \boldsymbol{k}_c)$, kde N je počet primitivních buněk ve vzorku. Odtud vyplývá, že se ve zkoumaném procesu zachovává vlnový vektor

$$\boldsymbol{k}_v = \boldsymbol{k}_c \ . \tag{3.28}$$

Použitím (3.28) získá výraz (3.27) podobu

$$N\int_{\mathrm{p.}b.} u^*_{c,\boldsymbol{k}}(\hat{\boldsymbol{e}}\cdot\boldsymbol{p})u_{v,\boldsymbol{k}}\mathrm{d}\boldsymbol{r'} \ , \tag{3.29}$$

kde jsme vynechali indexy u vlnových vektorů $\boldsymbol{k}_v$ a $\boldsymbol{k}_c$, neboť jsou podle (3.28) stejné. Dosadíme-li takto upravený integrál (3.29) zpět do vztahu pro kvadrát modulu maticového elementu (3.24), obdržíme

$$\left|\langle c\left|\hat{\boldsymbol{e}}\cdot\boldsymbol{p}\right|v\rangle\right|^2 = N\left|\int_{p.b.} u^*_{c,\boldsymbol{k}}(\hat{\boldsymbol{e}}\cdot\boldsymbol{p})u_{v,\boldsymbol{k}}\mathrm{d}\boldsymbol{r'}\right|^2 \ , \tag{3.30}$$

Ve většině případů nezávisí maticový element (3.30) příliš na vlnovém vektoru $\boldsymbol{k}$, takže ho můžeme nahradit konstantou $|P_{cv}|^2/N$. Rovnice (3.22) se potom zjednodušší na tvar

$$\left|\langle c\left|H'_{eR}\right|v\rangle\right|^2 = \left(\frac{e}{m}\right)^2\frac{|E|^2}{4\omega^2}\left|P_{cv}\right|^2 \tag{3.31}$$

Pravděpodobnost R absorpce fotonu za jednotku času obdržíme dosazením (3.31) do Fermiova zlatého pravidla (3.20)

$$R = \frac{1}{V}\frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{e}{m\omega}\right)^2\left|\frac{E(\omega)}{2}\right|^2\sum_{\boldsymbol{k}}\left|P_{cv}\right|^2\delta(E_c(\boldsymbol{k}) - E_v(\boldsymbol{k}) - \hbar\omega) \ . \tag{3.32}$$

Ztráta energie pole v jednotkovém objemu je potom

$$-\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t} = R\hbar\omega \ . \tag{3.33}$$

Tuto veličinu však můžeme vyjádřit rovněž pomocí absorpčního koeficientu α a imaginární části dielektrické funkce ε_2. S využitím vztahů (2.34) a (2.37) totiž můžeme psát

$$-\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{c}{n}\alpha I = \frac{\varepsilon_2\omega}{n^2}I \ . \tag{3.34}$$

Hustota energie I souvisí s amplitudou intenzity pole E vztahem

$$I = \frac{\varepsilon_0 n^2}{2}\left|E(\omega)\right|^2 \ . \tag{3.35}$$

[7] Pouze v aproximaci $\boldsymbol{q} = 0$.

Porovnáním pravých stran rovnic (3.33) a (3.34) s využitím (3.35) získáme vztah pro imaginární část dielektrické funkce ve tvaru

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{V}\left(\frac{2\pi e}{m\omega}\right)^2 \sum_{\boldsymbol{k}} |P_{cv}|^2\, \delta(E_c(\boldsymbol{k}) - E_v(\boldsymbol{k}) - \hbar\omega)\ . \tag{3.36}$$

Reálnou část dielektrické funkce dostaneme použitím Kramers-Kronigovy relace (2.46):

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{e^2}{\varepsilon_0 m}\frac{1}{V}\left[\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{2}{m\omega_{cv}}\right)\frac{|P_{cv}|^2}{\omega_{cv}^2 - \omega^2}\right]\ , \tag{3.37}$$

kde $\hbar\omega_{cv} = E_c(\boldsymbol{k}) - E_v(\boldsymbol{k})$.

3.4 Pásová struktura křemíku a germania

Abychom mohli popsat příspěvek intervalenčních přechodů do dielektrické funkce, musíme znát průběh pásů v křemíku a germaniu. Na obrázcích 8 a 9 je ukázána pásová struktura Si a Ge podél několika spojnic bodů vysoké symetrie v Brillouinově zóně. Závislosti byly vypočteny metodou nelokálního pseudopotenciálu, u germania se započtením spin-orbitální interakce.

My se zajíme o strukturu hrany valenčního pásu, v případě křemíku a germania se jedná o oblast v okolí bodu Γ. U obou látek existují v oblasti hrany valenčního pásu dva pásy degenerované v bodě Γ a jeden spin-orbitálně odštěpený pás. V jednoduché aproximaci lze oblast kolem středu Brillouinovy zóny popsat disperzními závislostmi (viz. [4]):

$$E_{hh}(\boldsymbol{k}) = -Ak^2 + [B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)]^{\frac{1}{2}} \tag{3.38}$$

$$E_{lh}(\boldsymbol{k}) = -Ak^2 - [B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)]^{\frac{1}{2}} \tag{3.39}$$

$$E_{soh}(k) = -\Delta - Ak^2\ , \tag{3.40}$$

kde $E_{hh}(\boldsymbol{k})$, $E_{lh}(\boldsymbol{k})$ jsou po řadě disperzní relace pásu tzv. těžkých a lehkých děr a $E_{soh}(k)$ je disperzní relace spin-orbitálně odštěpeného pásu, kterým se však dále nebudeme zabývat. A, B, C a Δ jsou konstanty, které lze určit experimentálně pomocí cyklotronové rezonance. Jejich hodnoty jsou uvedeny v tabulce 1. Je vidět, že disperzní závislosti (3.38) a (3.39) pro pásy lehkých a těžkých děr jsou různé pro různé směry v Brillouinově zóně. Často se však pro jednoduchost tyto neizotropní disperzní závislosti

	$A\,[\hbar^2/2m]$	$\lvert B\rvert\,[\hbar^2/2m]$	$\lvert C\rvert\,[\hbar^2/2m]$	Δ [eV]
Si	4,29	0,68	4,87	0,044
Ge	13,38	8,48	13,15	0,29

Tabulka 1: Experimentální hodnoty parametrů vystupujících v rovnicích (3.38), (3.39) a (3.40) získané metodou cyklotronové rezonance. Hodnoty konstant A, B a C jsou uvedeny v jednotkách $\hbar^2/2m$, kde m je hmotnost elektronu, vzdálenost Δ spin-orbitálně odštěpeného pásu od maxima v bodě Γ je uvedena v elektronvoltech. Převzato z [4].

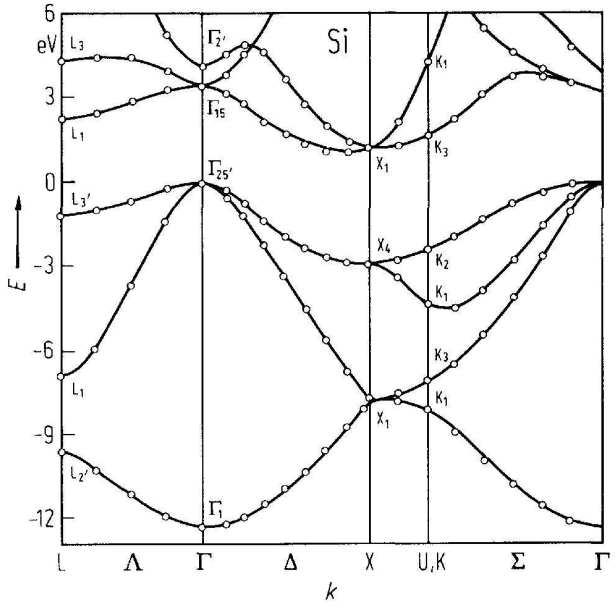
nahrazují přibližnými izotropními vztahy, kde efektivní hmotnosti nezávisí na směru v Brillouinově zóně. Pro průměrné efektivní hmotnosti těžkých a lehkých děr pak platí (viz. [11]):

$$\frac{1}{m_{hh}} = \frac{1}{m_e}\left(|A| - \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}\right)\ , \tag{3.41}$$

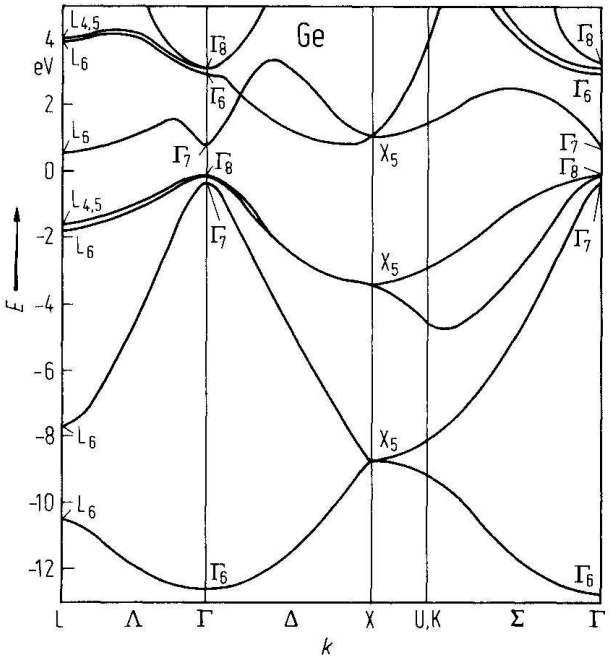
$$\frac{1}{m_{lh}} = \frac{1}{m_e}\left(|A| + \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}\right)\ , \tag{3.42}$$

kde m_e je hmotnost elekronu. Dosazením hodnot z tabulky 1 dostaneme pro vystředované efektivní hmotnosti lehkých a těžkých děr v křemíku a germaniu hodnoty uvedené v tabulce 2. Na obrázku 10 jsou vyneseny zprůměrované disperzní závislosti pro křemík a germanium určené ze vztahů

$$E_{hh}(k) = -\frac{\hbar^2k^2}{2m_{hh}}\ , \qquad E_{lh}(k) = -\frac{\hbar^2k^2}{2m_{lh}}\ . \tag{3.43}$$



Obrázek 8: Pásová struktura Si vypočtená metodou nelokálního pseudopotenciálu. Převzato z [9].



Obrázek 9: Pásová struktura Ge vypočtená metodou nelokálního pseudopotenciálu se započtením spin-orbitální interakce. Převzato z [9].

	m_{hh}/m_e	m_{lh}/m_e
Si	0,50	0,15
Ge	0,33	0,042

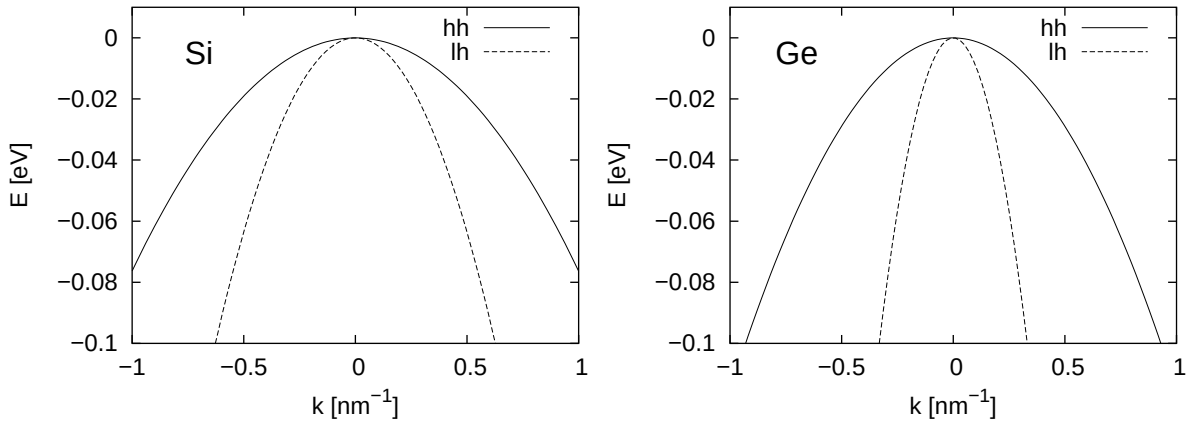
Tabulka 2: Vystředované efektivní hmotnosti lehkých a těžkých děr v křemíku a germaniu získané dosazením hodnot z tabulky 1 do vztahů (3.41) a (3.42).

Pro SiGe je zapotřebí efektivní hmotnosti těžkých a lehkých děr nějakým způsobem zprůměrovat. Jedna z možností je:

$$\frac{1}{m_{hh}} = \frac{x}{m_{hh}(\mathrm{Si})} + \frac{1-x}{m_{hh}(\mathrm{Ge})} , \tag{3.44}$$

$$\frac{1}{m_{lh}} = \frac{x}{m_{lh}(\mathrm{Si})} + \frac{1-x}{m_{lh}(\mathrm{Ge})} , \tag{3.45}$$

kde x je relativní zastoupení Germania ve vzorku.



Obrázek 10: Pásová struktura Si a Ge v oblasti hrany valenčního pásu. Spin-orbitálně odštěpený pás není ukázán.

3.5 Hustota stavů

Elektronové stavy v atomech a molekulách mají diskrétní energiové spektrum. V pevné látkce je však energiové spektrum spojité. Pokud je energiový pás izotropní, lze pro hustotu stavů $D(E)$ ve třech dimenzích odvodit vztah[8]

$$D(E) = \frac{k^2}{\pi^2} \frac{1}{\mathrm{d}E/\mathrm{d}k} , \tag{3.46}$$

kde $E(k)$ je disperzní relace elektronu. Pro parabolický pás s efektivní hmotností m_{ef} má disperzní relace tvar

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{ef}} \tag{3.47}$$

a hustota stavů (3.46) je

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{ef}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} = \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3} m_{ef}^{3/2} \sqrt{E} . \tag{3.48}$$

[8] Viz. například [1] nebo [6].

3.6 Koncentrace nositelů náboje a Fermiova energie

Koncentrace nositelů náboje v polovodiči je určena hustotou stavů, chemickým potenciálem a teplotou. Pravděpodobnost obsazení daného stavu je dána tzv. Fermi-Diracovou rozdělovací funkcí $f(E)$,

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT}+1} \ , \tag{3.49}$$

kde E je energie stavu, μ chemický potenciál, k Botzmannova konstanta a T teplota. Chemický potenciál je funkcí teploty a je třeba jej v konkrétním případě zvolit tak, aby vyšel správný počet částic. Při nulové teplotě jsou stavy zcela zaplněny až po tzv. Fermiovu energii E_F.[9]

Hustota obsazených stavů na jednotku objemu a energie je rovna součinu hustoty stavů $D(E)$ a Fermi-Diracovy rozdělovací funkce $f(E)$,

$$n(E) = D(E)f(E) \ . \tag{3.50}$$

Protože díry přísluší prázdným stavům ve valenčním pásu, je hustota děr rovna hustotě neobsazených stavů, tedy

$$p(E) = D(E)[1-f(E)] \ . \tag{3.51}$$

Koncentraci volných nositelů náboje potom získáme integrací vztahů (3.50) a (3.51) přes daný pás:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} D_e(E)f(E)\mathrm{d}E \quad = \quad \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3}m_e^{3/2}\int_{E_c}^{\infty}\mathrm{d}E\frac{(E-E_c)^{\frac{1}{2}}}{e^{(E-\mu)/kT}+1} \ , \tag{3.52}$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} D_h(E)[1-f(E)]\mathrm{d}E \quad = \quad \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3}m_h^{3/2}\int_{-\infty}^{E_v}\mathrm{d}E\frac{(E_v-E)^{\frac{1}{2}}}{e^{(\mu-E)/kT}+1} \ , \tag{3.53}$$

kde m_e a m_h jsou efektivní hmotnosti elektronů resp. děr. Tyto integrály nelze vypočítat analyticky, je tedy nutné přistoupit k numerickému řešení nebo použít aproximativních rozvojů.

3.7 Poloha Fermiovy hladiny, posouzení příspěvku intervalenčních přechodů

Abychom mohli odhadnout spektrální umístění příspěvku vnitropásových přechodů, vypočetli jsme nejprve polohu Fermiovy hladiny E_F v závislosti na koncentraci děr p. Přitom předpokládáme, že tato koncentrace je rovna koncentraci dopantů p_A.

Hustotu stavů pro pás lehkých a těžkých děr obdržíme dosazením příslušných efektivních hmotností do vztahu (3.48)

$$D_{hh}(E) \quad = \quad \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3}m_{hh}^{3/2}\sqrt{E_v-E} \qquad \text{pro} \quad E \le E_v \ , \tag{3.54}$$

$$D_{lh}(E) \quad = \quad \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3}m_{lh}^{3/2}\sqrt{E_v-E} \qquad \text{pro} \quad E \le E_v \ . \tag{3.55}$$

Z normovací podmínky, tzn. že $p = p_A$ dostáváme vztah analogický (3.53):

$$p_A = \int_{-\infty}^{E_v}\left[D_{hh}(E)+D_{lh}(E)\right]\left(1-f(E)\right)\mathrm{d}E \ . \tag{3.56}$$

Po dosazení z (3.54), (3.55) a (3.49) obdržíme výraz

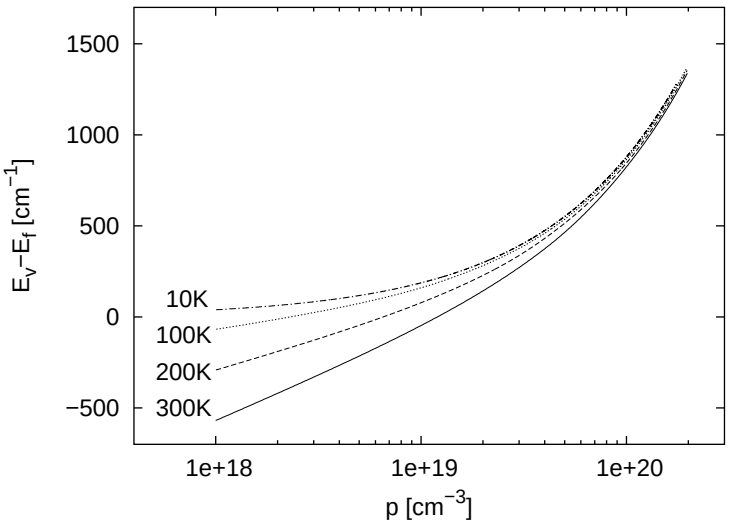
$$p_A = \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3}\left(m_{hh}^{3/2}+m_{lh}^{3/2}\right)\int_{-\infty}^{E_v}\mathrm{d}E\frac{(E_v-E)^{\frac{1}{2}}}{e^{(\mu-E)/kT}+1} \ . \tag{3.57}$$

Využijeme-li definice tzv. Fermi-Diracova integrálu j-tého řádu

$$F_j(x) = \frac{1}{\Gamma(j+1)}\int_0^{\infty}\mathrm{d}u\frac{u^j}{e^{u-x}+1} \ , \tag{3.58}$$

můžeme zapsat vztah (3.57) v přehlednějším tvaru

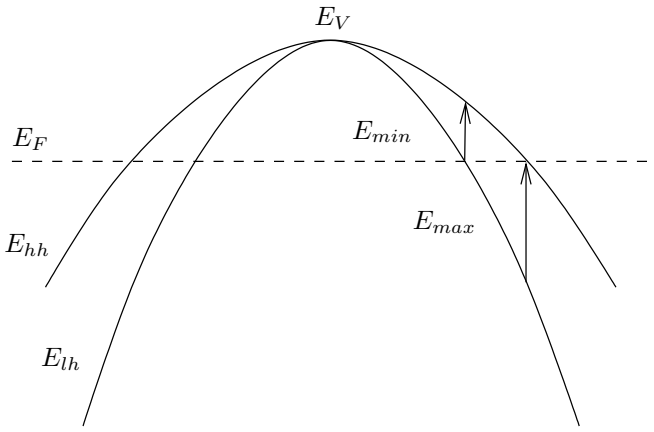
$$p_A = 2\left(\frac{2\pi kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}\left(m_{hh}^{3/2}+m_{lh}^{3/2}\right)F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_v-\mu}{kT}\right) \ . \tag{3.59}$$



Obrázek 11: Poloha Fermiovy energie pro různé teploty v závislosti na koncentraci p dopantů. Předpokládány jsou dva parabolické pásy degenerované ve středu Brillouinovy zóny.

Odtud však nemůžeme vyjádřit polohu Fermiovy hladiny E_F explicitně. Integrál byl tedy vypočten numericky pomocí aproximace uvedené v [8]. Výsledek je nakreslen na obrázku 11.

Za přítomnosti volných děr se Fermiova hladina nachází uvnitř valenčního pásu. Může tak docházet k přechodům elektronů mezi obsazenými a neobsazenými valenčními stavy, tzv. intervalenčním přechodům. Tyto procesy jsou znázorněny na obrázku 12.

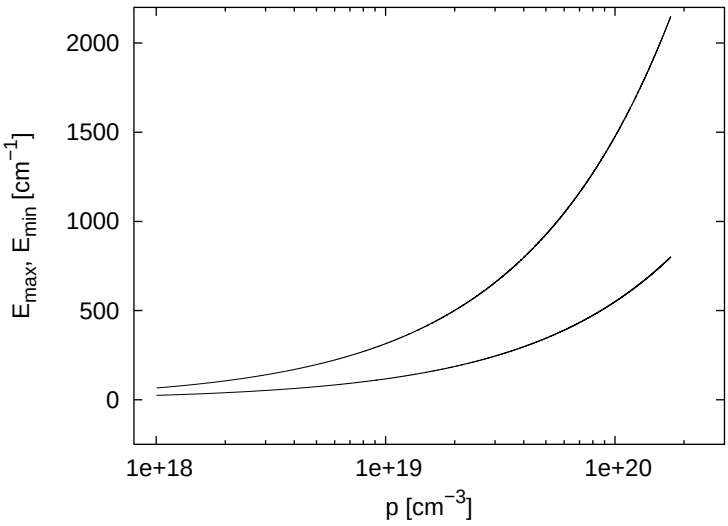


Obrázek 12: Schematické znázornění intervalenčních přechodů mezi pásem lehkých děr a pásem těžkých děr v p-dopovaném polovodiči.

Na obrázku 13 jsou potom uvedeny, v závislosti na koncentraci p, minimální a maximální hodnoty energie pro přechody mezi pásem lehkých a těžkých děr. Byly vypočteny ze vztahů:

$$E_{min} = \left(1 - \frac{m_{lh}}{m_{hh}}\right) E_F \ , \qquad E_{max} = \left(\frac{m_{hh}}{m_{lh}} - 1\right) E_F \ . \tag{3.60}$$

[9] Ve fyzice polovodičů se chemický potenciál často nazývá Fermiovu energií.



Obrázek 13: Minimální a maximální energie $E_{min} = E_{hh} - E_F$ resp. $E_{max} = E_F - E_{lh}$ (viz. obrázek 12) pro přechody mezi pásem lehkých a pásem těžkých děr v závislosti na koncentraci dopantů. Graf je uveden pro nulovou teplotu.

4 Experiment, použité vzorky

V následujícím odstavci popíšeme hlavní principy použitého experimentálního zařízení a měřicí metody. Dále uvedeme přehled vzorků, na kterých byla měření prováděna.

4.1 Fourierovská spektroskopie

Fourierovská spektroskopie (FTIR = Fourier Transform Infrared Spectroscopy) nedávno nahradila, především ve vzdáleném a středním infračerveném oboru, klasickou spektroskopii využívající difrakčních mřížek a hranolů. Výrazně zvýšila možnosti infračervené spektroskopie a může být aplikována i v oblastech, kde bychom s klasickými metodami neuspěli.

Hlavní výhody FTIR spektroskopie:

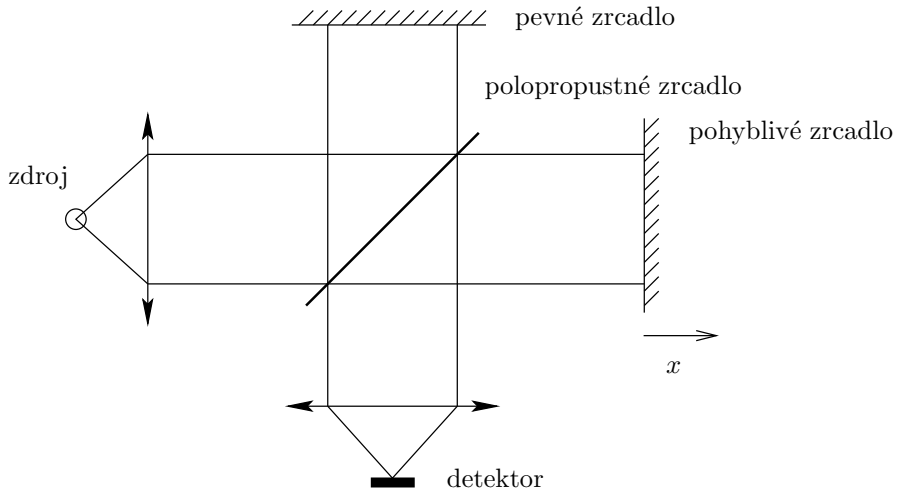
- FTIR spektrometry využívají celou energii záření zdroje. Nejsou potřeba disperzní členy ani filtry. Jsou výrazně rychlejší, celé spektrum je získáno během jediného skenu pohyblivého zrcadla. FTIR spektrometr může dosáhnout stejného poměru signál-šum jako klasický spektrometr za nesrovnatelně kratší dobu (1s nebo méně, oproti 10-ti nebo 15-ti minutám).
- Není zapotřebí manuálně kalibrovat. Spektrometr obsahuje laser, pomocí kterého se přístroj automaticky kalibruje.

Popišme nyní stručně princip Fourierovského spektrometru. Základní součástí je Michelsonův interferometr (viz. obrázek 14). Předpokládejme, že ze zdroje vychází koherentní monochromatické záření. Za spojnou čočkou můžeme záření popsat jako rovinnou monochromatickou vlnu,

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{E}_0 e^{\mathrm{i}(\boldsymbol{kr} - \omega t)} \ . \tag{4.1}$$

Do detektoru se může vlna dostat dvěma způsoby. Buď se nejdříve odrazí na polopropustném zrcadle, pak na pevném zrcadle a potom přes polopropustné zrcadlo projde, nebo přes něj nejdříve projde a pak se odrazí na pohyblivém a znovu na polopropustném zrcadle. Protože v obou případech došlo k jednomu průchodu a odrazu na polopropustném zrcadle a jednomu odrazu na pevném nebo pohyblivém zrcadle, mají obě vlny stejné amplitudy. Označíme-li x výchylku pohyblivého zrcadla z polohy, ve které jsou optické dráhy obou paprsků stejné, dostaneme pro intenzitu elektrického pole v místě detektoru vztah

$$E(x, t) = \frac{E_0}{2} \left[\cos \omega t + \cos \left(\omega t - 2kx\right)\right] \ . \tag{4.2}$$



Obrázek 14: Schéma Michelsonova interferometru.

Intenzita světla na detektoru je potom úměrná její časové střední hodnotě

$$I(x) = c\varepsilon_0 \langle E^2 \rangle \ , \tag{4.3}$$

kde c je rychlost světla ve vakuu a ε_0 permitivita vakua. Zavedeme-li veličinu $\nu_0 = k_0/2\pi$, tzv. vlnočet, obdržíme po dosazení do uvedeného výrazu

$$I(x) = c\varepsilon_0 \frac{E_0^2}{4} \left[1 + \cos\left(4\pi\nu_0 x\right)\right] \ . \tag{4.4}$$

Tuto rovnici dále přepíšeme s použitím spektrální intenzity

$$I(\nu) = c\varepsilon_0 \frac{E_0^2}{2} \delta(\nu - \nu_0) \ . \tag{4.5}$$

Pro intenzitu na detektoru potom platí

$$I(x) = \frac{1}{2} \int_0^\infty I(\nu) \left[1 + \cos\left(4\pi\nu x\right)\right] \mathrm{d}\nu \ . \tag{4.6}$$

Tento vztah lze zobecnit na libovolnou spektrální intenzitu $I(\nu)$. Maximální hodnoty I_0 nabývá $I(x)$ pro $x = 0$. Zaveďme novou veličinu $I'(x)$

$$I'(x) = I(x) - \frac{1}{2} I_0 \ . \tag{4.7}$$

Po dosazení z (4.6) obdržíme

$$I'(x) = I(x) - \frac{1}{2} \int_0^\infty I(\nu) \mathrm{d}\nu = \frac{1}{2} \int_0^\infty I(\nu) \cos\left(4\pi\nu x\right) \mathrm{d}\nu \ , \tag{4.8}$$

což je kosinová Fourierova transformace spektrální intenzity $I(\nu)$. Veličina $I'(x)$, nazývaná interferogram, je získána experimentem. Spektrální intenzitu potom obdržíme provedením inverzní transformace:

$$I(\nu) = 2 \int I'(x) \cos\left(4\pi\nu x\right) \mathrm{d}x \ . \tag{4.9}$$

Vzhledem k tomu, že zrcadlo v interferometru má omezený rozsah pohybu, jsou meze integrálu konečné. Tím je dána maximální rozlišovací schopnost zařízení. Označíme-li x_{max} maximální výchylku zrcadla, platí pro rozlišovací schopnost $\delta\nu$ přibližný vztah:[10]

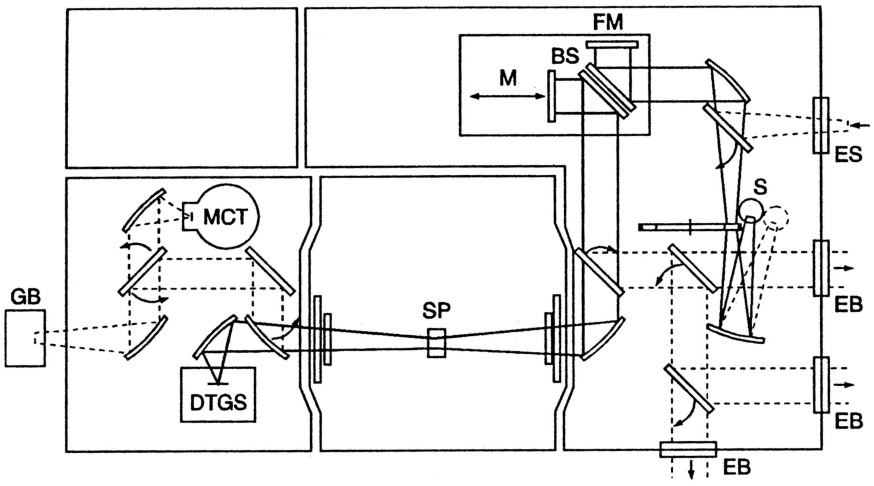
$$\delta\nu \approx \frac{0,7}{2x_{max}} \ . \tag{4.10}$$

[10] Odvození je uvedeno v [7].

4.2 Měřící aparatura

Pro měření byl využit FTIR spektrometr Bruker IFS 66v/S. Schéma přístroje je uvedeno na obrázku 15. Zdrojem záření S je globar, což je SiC tyčinka žhavená proudem na teplotu okolo 1450 °C. Pomocí zrcadel je záření přivedeno do Michelsonova interferometru, jehož jádrem je polopropustné zrcadlo BS, tzv. beam splitter, který záření rozdělí na paprsky dopadající na zrcadla M a FM. Zrcadlo M je pohyblivé a umožňuje tak měnit rozdíl fází mezi paprsky. Poté záření dopadá na vzorek SP, umístěný v oddělené části - vzorkové komoře. Na obrázku je vzorek vyobrazen v konfiguraci na měření transmise, do vzorkové komory však lze vložit reflexní přístavek a měřit tak odrazivost. Po průchodu či odrazu je záření fokusováno na detektor - DTGS fotodiodu (TGS = Tri Glycin Sulfát) nebo InGaAs. Řídící elektronika je umístěna v levém horním rohu přístroje a je napojena na počítač. Veškerá měření lze ovládat pomocí programu OPUS, pracujícího pod operačním systémem WINDOWS NT.

Při měření je snímána závislost intenzity na poloze zrcadla M. Závislost intenzity na frekvenci pak získáme Fourierovou transformací tohoto signálu (viz. odstavec 4.1). Protože atmosféra silně a selektivně absorbuje infračervené záření, je celá aparatura evakuováná rotační vývěvou na tlak přibližně 1 mbar.



Obrázek 15: Schéma Fourierovského spektrometru. Převzato z [7].

Před vlastním měřením je třeba nechat aparaturu se zapnutým zdrojem několik hodin vyčerpanou, čímž se stabilizuje měřený signál. Vzorková komora je od zbytku spektrometru oddělena přepážkou, výměna vzorku tedy nijak významně nenaruší vytvořené vakuum. Při určování odrazivosti postupujeme tak, že nejdříve provedeme měření na referenčním zlatém vzorku, u něhož předpokládáme v infračervené oblasti odrazivost rovnu jedné. Poté měříme zkoumaný vzorek a hledané spektrum získáme jako podíl obou spekter.

V tabulce 3 jsou uvedeny obory spektra, ve kterých přístroj umožňuje měření. Pro jednotlivé oblasti je nutné použít různé děliče svazku, zdroje záření a rovněž detektory.

oblast infračerveného spektra		rozsah vlnočtů	beamsplitter	zdroj záření	detektor
FIR	vzdálená	50-600 cm^{-1}	mylar	globar	DTGS
MIR	střední	400-6500 cm^{-1}	KBr	globar	DTGS
NIR	blízká	6000-12000 cm^{-1}	křemen	halogenová žárovka	InGaAs

Tabulka 3: Spektrální rozsahy měření spektrometru Bruker IFS 66v/S. FIR = Far InfraRed, MIR = Mid InfraRed, NIR = Near InfraRed.

4.3 Použité vzorky

Naše měření byla prováděna na vzorcích krystalického SiGe, připravených Czochralského metodou a vyleštěných chemicko-mechanickou cestou. Vzorky byly připraveny v ústavu IMET gruzínské akademie věd ve Tbilisi. K dispozici jsme měli vzorky SiGe s přibližně stejným zastoupením Si (84%) a s různými hodnotami koncentrace akceptorové příměsi, měnící se v rozsahu od $8 \cdot 10^{17}\mathrm{cm}^{-3}$ do $5 \cdot 10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$. Dále jsme měřili na vzorku Si s velkou koncentrací dopantů. Parametry použitých vzorků jsou uvedeny v tabulce 4.

vzorek	zastoupení Si	koncentrace B	rozměry vzorku [cm]
N6/77	83%	$8 \cdot 10^{17}\mathrm{cm}^{-3}$	1,6 × 0,75 × 0,65
N7/77	84%	$5 \cdot 10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$	1,2 × 0,4 × 0,4
N8/77	84%	$2 \cdot 10^{19}\mathrm{cm}^{-3}$	1,4 × 0,55 × 0,55
N9/77	84%	$2 \cdot 10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$	1,45 × 0,7 × 0,7
N10/77	84%	$5 \cdot 10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$	1,22 × 0,6 × 0,6
9/79	100%	$3{,}1 \cdot 10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$	1,55 × 0,6 × 0,2

Tabulka 4: Parametry použitých vzorků SiGe dopovaných B. Vzorky byly vyleštěny pouze na jedné straně.

Při zkušebních měřeních bylo zjištěno, že koncentrace dopantů není ve všech částech vzorku stejná, což se projevilo změnami odrazivosti o několik procent. Všechna měření (v oblastech FIR a MIR) byla proto prováděna vždy ve stejné části povrchu vzorku.

5 Výsledky a diskuse

Nyní uvedeme naměřená data a pokusíme se diskutovat jednotlivé příspěvky do dielektrické funkce.

5.1 Naměřená spektra

Měřena byla spektrální závislost odrazivosti při úhlu dopadu 10°, tj. téměř kolmý dopad. Spektra v oblasti FIR a MIR byla akumulována po dobu jedné hodiny, čímž se podařilo výrazně snížit šum dat. Spetrální rozlišení bylo 2 cm^{-1} a měření probíhala při laboratorní teplotě. Naměřená data jsou ukázána na obrázku 16. Je vidět, že profil spektra je výrazně ovlivněn zastoupením příměsi ve vzorku. Čím vyšší je koncentrace dopantů, tím širší je oblast zvýšené reflektivity a tím více je minimum odrazivosti posunuto směrem k vyšším vlnočtům. Z tohoto pravidla však vybočuje spektrum vzorku 9/79, který neobsahuje germanium. O této skutečnosti se zmíníme dále.

Ve výřezu je ukázán detail spektra. Na vlnočtu zhruba 500 cm^{-1} je dobře patrná tzv. Fanova rezonance (viz. článek [3]), která svědčí o tom, že ve spektrech jsou zastoupeny intervalenční přechody. Existence Fanovy rezonance je totiž důsledkem interakce mezi intervalenčními přechody a optickými fonony.

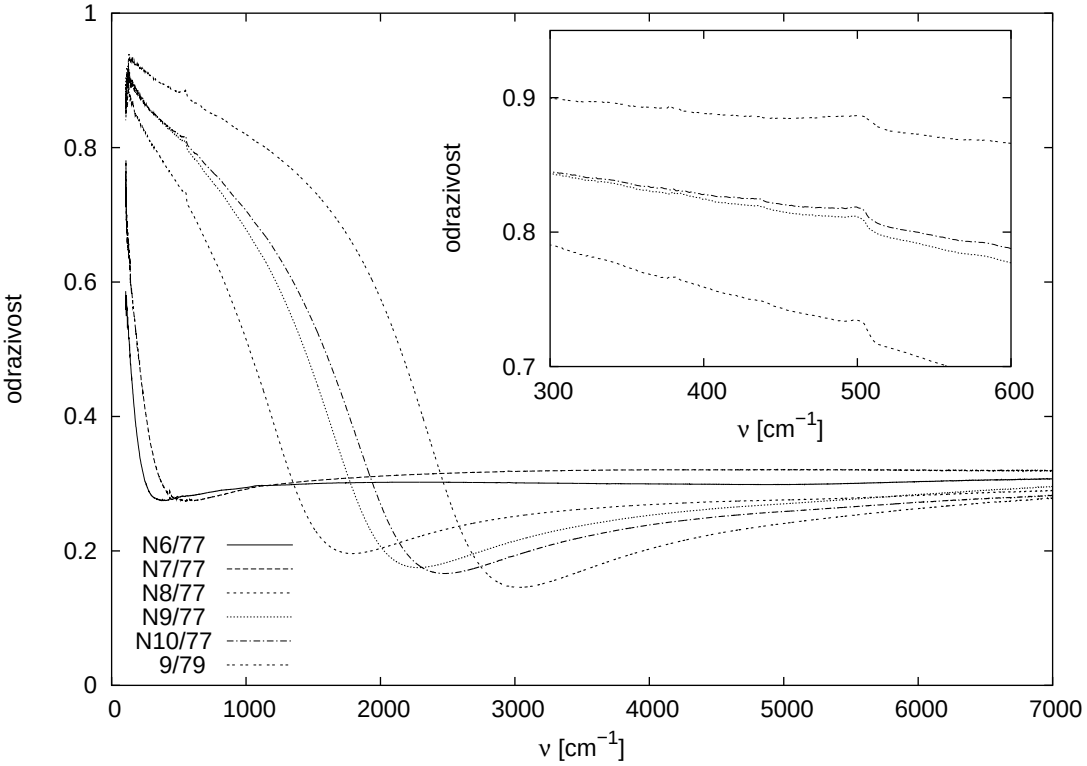
5.2 Analýza spekter, dielektrická funkce

Naměřená data byla nejprve proložena Drudeovou formulí

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty - \omega_p^2 \frac{1}{\omega^2 + \mathrm{i}\omega\gamma} \ , \tag{5.1}$$

kde místo jedničky vystupuje veličina ε_∞, která zahrnuje konstantní příspěvek mezipásových přechodů ve viditelné a ultrafialové oblasti spektra. Fity byly prováděny v oblasti od 100 cm^{-1} do 7000 cm^{-1}, tj. v celém oboru FIR a MIR. Hodnoty parametrů vyplývající z fitu jsou uvedeny v tabulce 5. Naměřená spektra jsou pak spolu s nafitovanými závislostmi ukázána na obrázku 17, dielektrická funkce určená z fitu na obrázku 18.

Drudeova formule velmi dobře popisuje chování plazmy volných nositelů náboje. Průběh odrazivosti je velmi podobný závislosti na obrázku 6, ovšem s tím rozdílem, že odrazivost neklesá k nule, což je dáno právě konstantním příspěvkem mezipásových přechodů ve viditelné a ultrafialové oblasti spektra



Obrázek 16: Naměřená spektra odrazivosti. Spektra byla změřena zvlášť v oboru FIR a MIR. Ve výřezu je vyobrazen detail FIR části spektra s velmi dobře patrnou Fanovou rezonancí na vlnočtu zhruba 500 cm^{-1}. Výběžek na vlnočtu 380 cm^{-1} je způsobený ostrou spektrální strukturou děliče svazku pro FIR - mylaru.

vzorek	ε_∞	$f[10^6\mathrm{cm}^{-2}]$	$\gamma[\mathrm{cm}^{-1}]$	suma čtverců
N6/77	$11,88 \pm 0,02$	$0,59 \pm 0,02$	350 ± 9	114
N7/77	$12,92 \pm 0,02$	$1,36 \pm 0,02$	418 ± 7	328
N8/77	$11,45 \pm 0,02$	$23,3 \pm 0,1$	802 ± 4	744
N9/77	$11,74 \pm 0,02$	$41,2 \pm 0,1$	857 ± 3	1232
N10/77	$11,38 \pm 0,02$	$48,3 \pm 0,1$	918 ± 3	784
9/79	$11,84 \pm 0,02$	$79,8 \pm 0,2$	824 ± 2	2015

Tabulka 5: Hodnoty parametrů vystupujících ve vztahu (5.1) získané fitováním experimentálních dat, $f = \omega_p^2$. Uvedené chyby a sumy čtverců odchylek jsou obsaženy ve výstupu fitovacího programu.

- viz vztah (5.1). Ve výřezech na obrázku 17 jsou ukázány rozdíly mezi naměřenými daty a proloženými závislostmi. Je zde odchylka, struktura v rozdílovém spektru se s rostoucí koncentrací příměsí zvětšuje a druhé maximum se posouvá k vyšším frekvencím. Tento nesoulad by mohl souviset s intervalenčními přechody. Možné vylepšení použité fitovací formule, které by tuto skutečnost respektovalo, budeme diskutovat dále.

Významný vliv má na profil spekter parametr ω_p, ke kterému se ještě podrobněji vrátíme. Hodnota parametru γ soustavně roste s rostoucí koncentrací příměsi a zhruba odpovídá údajům získaným z elipsometrických měření (viz [13]). Tabulková hodnota ε_∞ je pro křemík $\varepsilon_\infty = 11.7$ a pro germanium $\varepsilon_\infty = 16.2$. Hodnoty uvedené v tabulce 5 zhruba odpovídají údaji pro křemík. Nejlepší shodu bylo možné očekávat u vzorku 9/79, což je křemík bez germania. U vzorku N7/77 je hodnota ε_∞ poněkud vyšší. Důvod této odchylky není znám.

Dále si všimněme průběhu dielektrické funkce vynesené na obrázku 18. Jak bylo diskutováno v odstavci 3.2, reálná část monotonně roste z minimální hodnoty $\varepsilon_1(0) = \varepsilon_\infty - (\omega_p/\gamma)^2$ k hodnotě

ε_∞, naproti tomu imaginární část má v počátku singularitu a s rostoucí frekvencí rychle klesá k nule.

Věnujme se nyní podrobněji plazmové frekvenci. Její hodnotu se pokusíme odhadnout v rámci jednoduchého modelu. V našem případě máme dva typy děr s různými efektivními hmotnostmi, použijeme proto zobecněný vztah pro plazmovou frekvenci

$$\omega_p^2 = \frac{p_{hh}e^2}{m_{hh}\varepsilon_0} + \frac{p_{lh}e^2}{m_{lh}\varepsilon_0} \,, \tag{5.2}$$

kde m_{hh} a m_{lh} jsou průměrné efektivní hmotnosti těžkých resp. lehkých děr v SiGe, vypočtené ze vztahů (3.44) a (3.45), do kterých byly dosazeny za x hodnoty relativních koncentrací Ge ve vzorku (viz. tabulka 4). Veličiny p_{hh} a p_{lh} jsou koncentrace těžkých resp. lehkých děr ve vzorku. Jejich součet musí dát celkovou koncentraci děr:

$$p_{hh} + p_{lh} = p_A \,. \tag{5.3}$$

Pro zjednodušení dalších výpočtů položme $T = 0$. Ze vztahu (3.56), po vypočtení integrálu, který má nyní spodní mez rovnu $-E_F$, dostaneme:

$$p_{hh} = \frac{2}{3}\frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3} m_{hh}^{3/2} E_F^{3/2} \,, \qquad p_{lh} = \frac{2}{3}\frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3} m_{lh}^{3/2} E_F^{3/2} \tag{5.4}$$

a také

$$p_A = \frac{2}{3}\frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3}\left(m_{hh}^{3/2} + m_{lh}^{3/2}\right) E_F^{3/2} \,. \tag{5.5}$$

Vyjádřením Fermiovy energie E_F z (5.5) a dosazením do (5.4) obdržíme:

$$p_{hh} = \frac{m_{hh}^{3/2}}{m_{hh}^{3/2} + m_{lh}^{3/2}} p_A \,, \qquad p_{lh} = \frac{m_{lh}^{3/2}}{m_{hh}^{3/2} + m_{lh}^{3/2}} p_A \,. \tag{5.6}$$

Pomocí vztahů (5.6) dostaneme konečnou podobu vztahu pro plazmovou frekvenci (5.2):

$$\omega_p^2 = \frac{m_{hh}^{1/2} + m_{lh}^{1/2}}{m_{hh}^{3/2} + m_{lh}^{3/2}} \frac{p_A e^2}{\varepsilon_0} \,, \tag{5.7}$$

Obvykle se zavádí tzv. stíněná plazmová frekvence ω_p':

$$\omega_p' = \omega_p / \sqrt{\varepsilon_\infty} \,, \tag{5.8}$$

která vyjadřuje přibližně polohu plazmové hrany v prostředí, které má vysokofrekvenční dielektrickou konstantu ε_∞. V tabulce 6 jsou uvedeny hodnoty stíněné plazmové frekvence určené z fitu a vypočtené z (5.8), kde jsme ovšem dosadili za ε_∞ hodnotu získanou prokládáním naměřenených dat. Povšimněme si, že fitem určená plazmová frekvence pro vzorek 9/79, což je čistý křemík, je vyšší než u vzorku N10/77, třebaže má vzorek 9/79 nižší koncentraci dopantů. Tuto skutečnosti se zatím nepodařilo objasnit.

vzorek	ε_∞	$\omega_p'[\mathrm{cm}^{-1}]$	
	z fitu	vypočtená	z fitu
N6/77	11,88	131	271
N7/77	12,92	316	324
N8/77	11,45	672	1427
N9/77	11,74	2094	1873
N10/77	11,38	3371	2060
9/79	11,84	2498	2596

Tabulka 6: Hodnoty stíněné plazmové frekvence získané fitováním a dále vypočtené z (5.8), kde jsme dosadili za ε_∞ hodnotu získanou z fitu.

U vzorku 9/79 je také nejlepší shoda s experimentálně zjištěnou plazmovou frekvencí. Nesoulad mezi vypočtenými a naměřenými hodnotami plazmové frekvence u ostatních vzorků je způsoben především použitými aproximacemi. Pro nízké koncentrace dopantů je to mimo jiné skutečnost, že jsme při výpočtech uvažovali nulovou teplotu. Na druhé straně pro vyšší koncentrace je pravděpodobně

nevhodný předpoklad, že jsou pásy parabolické. Pro větší vzdálenosti od bodu Γ už přestává parabolická aproximace dostatečně dobře vystihovat skutečný průběh pásů. Další nepřesnost je do srovnání vnesena tím, že uváděné hodnoty koncentrace příměsi nejsou zřejmě příliš přesné.

Jak už bylo zmíněno (a jak je vidět z obrázku 17), Drudeův fit vykazuje nedostatečný souhlas s experimentem v oblasti zhruba do 1500 cm^{-1} a to zejména pro vzorky s vysokou mírou legování. Tato neshoda patrně souvisí s intervalenčními přechody. Jednou z možností, jak napravit tento nesouhlas je přidání jedné Lorentzovy křivky k závislosti (5.1):

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty - \omega_p^2 \frac{1}{\omega^2 + \mathrm{i}\omega\gamma} + F\frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - \mathrm{i}\omega\gamma'} \ . \tag{5.9}$$

Drudeova složka by popisovala příspěvek plazmy volných nositelů, Lorentzova křivka by zase mohla aproximovat příspěvek intervalenčních přechodů. Ukazuje se však, že tento postup dává nefyzikální chování dielektrické funkce v oblasti malých vlnočtů. Proto byl další fit proveden pomocí modelu se dvěma Drudeovými členy:

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty - f_1\frac{1}{\omega^2 + \mathrm{i}\omega\gamma_1} - f_2\frac{1}{\omega^2 + \mathrm{i}\omega\gamma_2} \ . \tag{5.10}$$

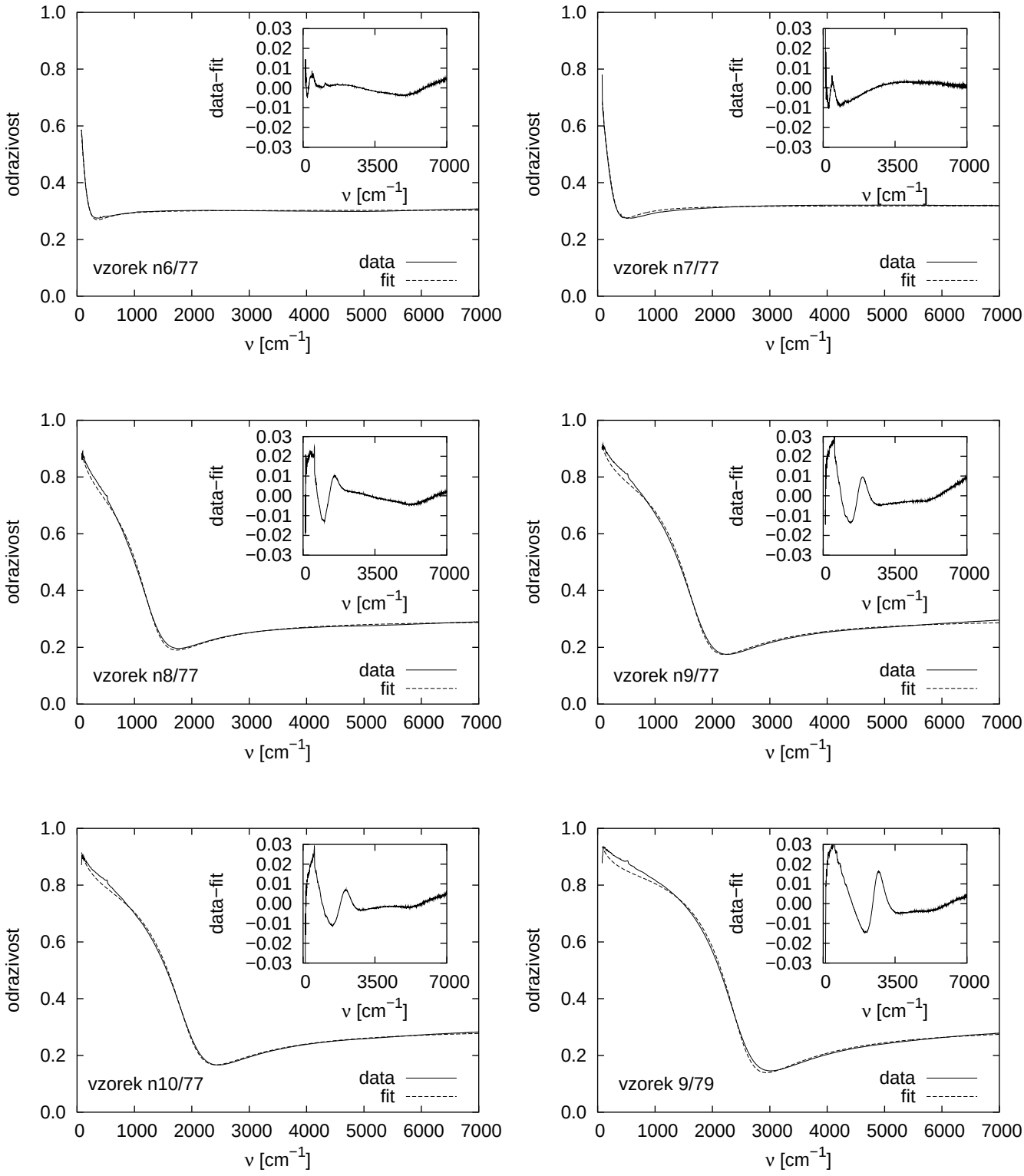
Výsledky jsou ukázány na obrázku 19. Hodnoty parametrů získané fitováním jsou uvedeny v tabulce 7. Prokládání dat bylo provedeno pouze pro čtyři vzorky s vyššími koncentracemi přímesi, kde je také největší odchylka experimentálních dat od fitu daného jedním Drudeovým členem. Je zřejmé, že tento model vykazuje výrazně lepší shodu s experimentem. To je vidět i při porovnání sum čtverců odchylek v tabulkách 5 a 7. Dielektrická funkce je ukázána na obrázku 21. Odlišnost od dielektrické funkce dané pouze jedním Drudeovým členem (obrázek 18) je zejména v oblastí malých frekvencí. To je však lépe vidět ze spektra vodivosti, jejíž reálná část je pro vzorek 9/79 vynesena na obrázku 20. Kromě reálné části vodivosti σ_1 jsou na obrázku ukázány příspěvky Drudeových členů a pro srovnání i vodivost daná modelovou závislostí (5.1), tj. s jedním Drudeovým členem. Je vidět, že nový model vykazuje oproti předchozímu vyšší hodnotu stejnosměrné vodivosti $\sigma_1(0)$, pro vyšší vlnočty se však rychle sbližují.

vzorek	1. Drudeův člen			2. Drudeův člen		suma
	ε_∞	$f_1[10^6\mathrm{cm}^{-2}]$	$\gamma_1[\mathrm{cm}^{-1}]$	$f_2[10^6\mathrm{cm}^{-2}]$	$\gamma_2[\mathrm{cm}^{-1}]$	čtverců
N8/77	$11,43 \pm 0,02$	$18,8 \pm 0,6$	1138 ± 33	$6,2 \pm 0,7$	337 ± 24	81
N9/77	$11,72 \pm 0,02$	$34,1 \pm 0,6$	1143 ± 20	$9,1 \pm 0,7$	268 ± 20	260
N10/77	$11,37 \pm 0,02$	$40,0 \pm 1,0$	1167 ± 23	$10,0 \pm 0,1$	327 ± 28	144
9/79	$11,81 \pm 0,02$	$48,3 \pm 1,4$	1414 ± 33	$35,9 \pm 1,5$	343 ± 15	85

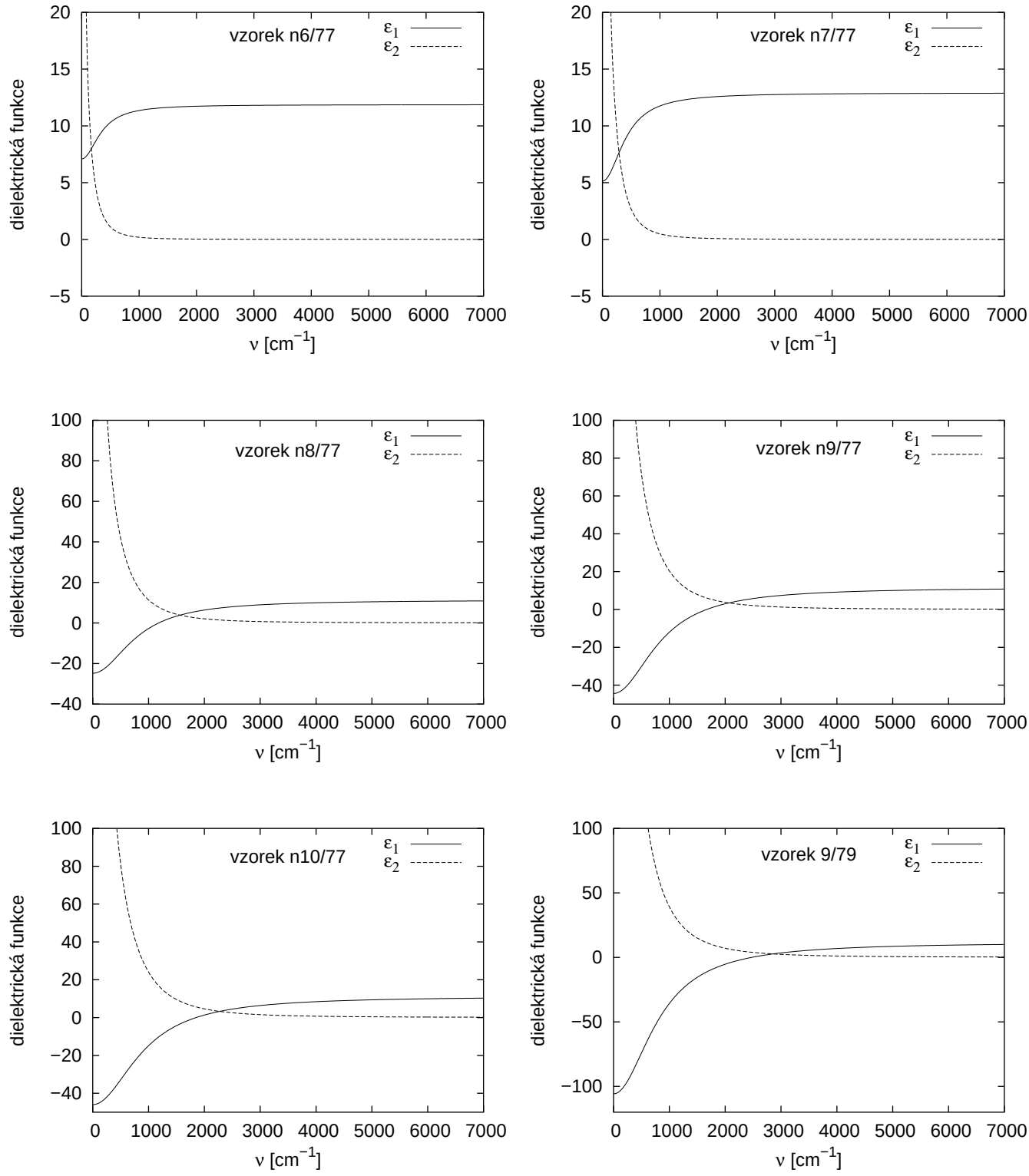
Tabulka 7: Hodnoty parametrů vystupujících ve vztahu (5.10) získané fitováním experimentálních dat. U vzorků N6/77 a N7/77 je odchylka od Drudeova fitu (viz. obrázek 17) příliš malá a fit nebyl proveden.

Hodnoty dielektrické konstanty ε_∞ se oproti fitu s pouze jedním Drudeovým členem (tabulka 5) pouze mírně snížily. Větší změna však nastala u oscilátorové síly f, která je nižší, a u parametru tlumení γ, který má naopak vyšší hodnotu. Druhý Drudeův člen tedy ubral značnou část spektrální váhy prvnímu členu. Jak je také vidět z tabulky 7, čím vyšší je koncentrace dopantů, tím větších hodnot parametr f_2 nabývá.

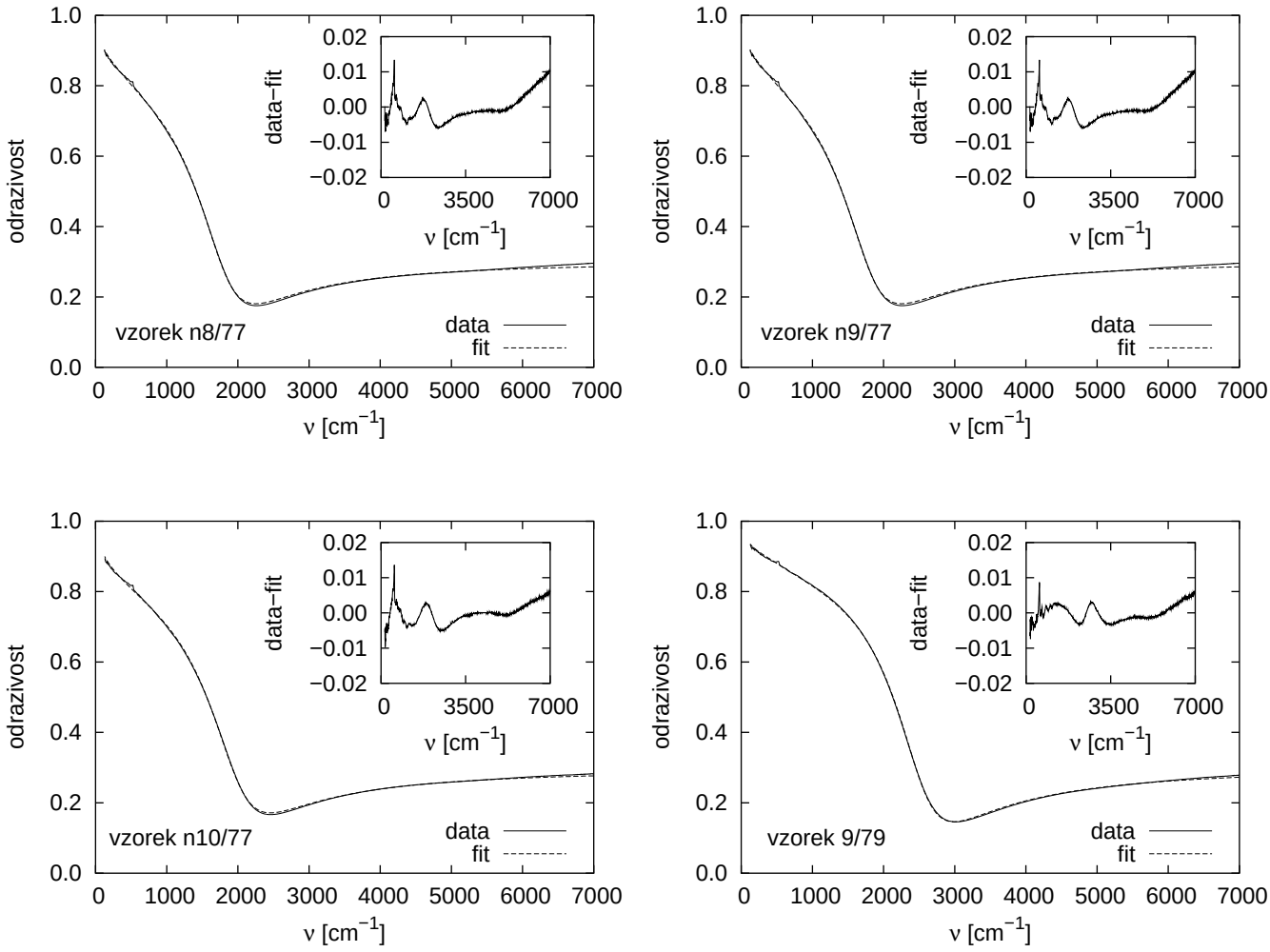
Povšimněme si nyní blíže rozdílových grafů ve výřezu obrázku 19. Je vidět, že oproti fitu s jedním Drudeovým členem se rozdíly mezi naměřenými spektry a fity výrazně snížily. Zůstává zde však stále systematická odchylka, zejména pro vzorky s vyšší koncentrací příměsi, na vlnočtu asi 500 cm^{-1} a dále zhruba kolem vlnočtu 2000 cm^{-1}. O první z nich už jsme se zmínili, jde o Fanovu rezonanci, která nebyla nijak modelována. Eliminace druhé odchylky by byla patrně možná, kdybychom použili pro fit formuli s několika Lorentzovými křivkami. Podařilo by se tak lépe vystihnout předpokládanou asymetrii příspěvku intervalenčních přechodů do dielektrické funkce než u modelu s jedním Lorentzovým oscilátorem, který nevedl k rozumným výsledkům. Takový postup by také zřejmě do značné míry zachoval hodnoty parametrů Drudeova členu získané z modelové závislosti (5.1) - viz. tabuka 5. Tyto hodnoty více odpovídají údajům získaným z elipsometrických měření (viz [13]) než hodnoty parametrů přídavného Drudeova členu uvedené v tabulce 7. Tato úloha je však obtížnější a přesahuje rámec naší práce.



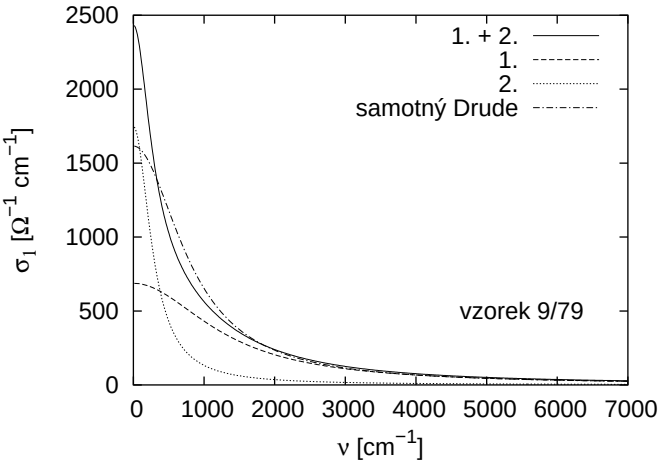
Obrázek 17: Naměřená spektra odrazivosti (plné čáry) a fity založené na Drudeově formuli (5.1) (přerušované čáry). Hodnoty parametrů Drudeova modelu jsou uvedeny v tabulce 5.



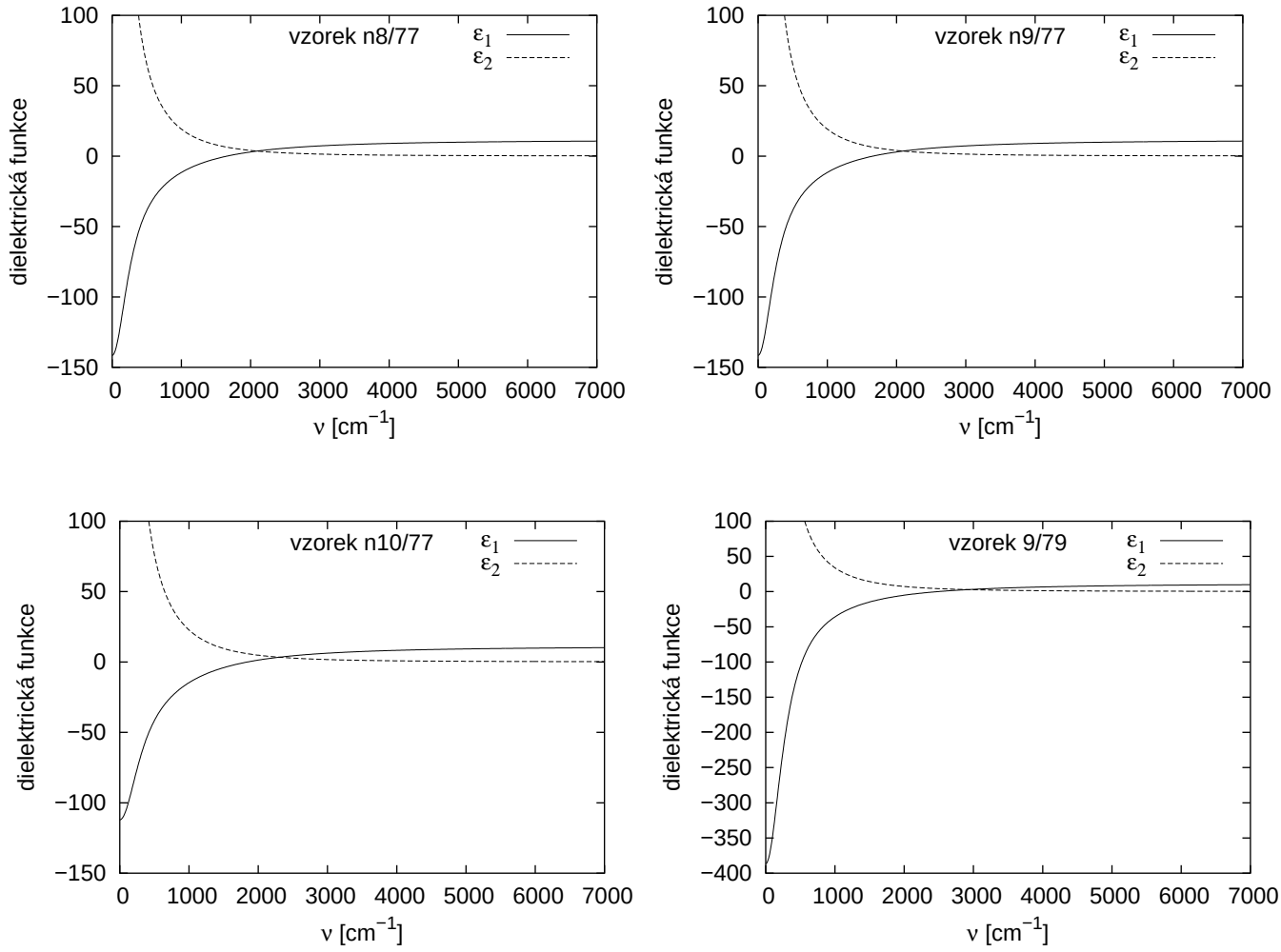
Obrázek 18: Reálná a imaginární část dielektrické funkce získaná s využitím Drudeovy formule (5.1) s hodnotami parametrů uvedenými v tabulce 5.



Obrázek 19: Naměřená spektra odrazivosti (plné čáry) a fity založené na formuli (5.10), tj. 2 Drudeovy členy (přerušované čáry). Hodnoty parametrů jsou uvedeny v tabulce 7.



Obrázek 20: Reálná část vodivosti σ_1 pro vzorek 9/79 (1. + 2.). Ukázány jsou také příspěvky jednotlivých Drudeových členů (1., 2.) a pro srovnání i vodivost daná modelovou závislostí (5.1), tj. s jedním Drudeovým členem („samotný Drude“). Nový model vykazuje oproti předchozímu vyšší hodnotu stejnosměrné vodivosti $\sigma_1(0)$, pro vyšší vlnočty se však modelové závislosti rychle sbližují.



Obrázek 21: Reálná a imaginární část dielektrické funkce ε_1 resp. ε_2 získaná s využitím formule (5.10) s hodnotami parametrů uvedenými v tabulce 7.

6 Shrnutí

Naměřili jsme spektrální závislost odrazivosti pro několik vzorků krystalického SiGe s různými hodnotami koncentrace přímesi. Měření byla provedena v oblastech FIR a MIR. Naměřená data byla nejprve prokládána Drudeovou formulí. Byly porovnány naměřené a vypočtené hodnoty plazmové frekvence. Výsledky si vcelku odpovídají, zejména pro vzorek 9/79, ve kterém není obsaženo germanium, je shoda velmi dobrá.

Spektrální závislost dielektrické funkce daná Drudeovou formulí však, podle očekávání, zcela nevystihovala naměřená data, zejména pro vlnočty menší než asi 1500 cm^{-1}. Proto byl do fitovací formule přidán ještě další Drudeův člen. Kombinace „úzkého“ a „širokého“ Drudeova členu může přibližně zahrnout příspěvek volných nositelů i intervalenčních přechodů. Přidáním tohoto členu se řádově zlepší soulad s experimentem a dostáváme tedy podstatně lepší aproximaci dielektrické funkce než v postupu obsahujícím Drudeovu formuli s jediným členem. Z rozdílových spekter ukázaných na obrázku 19 (vykazujících stále zřetelnou strukturu) je však patrné, že by bylo možné pokusit se o proložení dat výstižnějším profilem.

Seznam použité literatury

[1] Kittel, Ch. *Úvod do fyziky pevných látek*, Academia, Praha, 1985

[2] Schmidt, E., Humlíček, J., Lukeš, F., Musilová, J. *Optické vlastnosti pevných látek*, Státní pedagogické nakladatelství, Praha 1986

[3] Humlíček, J. *Ellipsometric study of Fano resonance in heavily doped p-type Si and SiGe alloys*, Thin Solid Films 313-314 (1998) 656-660

[4] Cardona, M., Yu P. Y. *Fundamentals of Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin 2001

[5] Ashcroft, N. W., Mermin, N. D. *Solid state physics*, Saunders College, Philadelphia, 1976

[6] Fox, M. *Optical Properties of Solids*, Oxford University Press, New York, 2001

[7] Kuzmany, H. *Solid State Spectroscopy*, Springer, Berlin, 1998

[8] Aymerich-Humet, X., Serra-Mestres, F., Millán, J. *A generalized approximation of the FermiDirac integrals*, J. Appl. Phys. 54(5) 2850 (01 May 1983)

[9] Madelung, 0. *Semiconductors: Data Handbook*, Springer, Berlin 2003

[10] Davydov, A. S. *Kvantová mechanika*, Státní pedagogické nakladatelství, n. p., Praha 1978

[11] Frank, H. *Fyzika a technika polovodičů*, SNTL, Praha 1990

[12] Schäffler, F. *High-mobility Si and Ge structures*, Semicond. Sci. Technol. 12 (1997) 1515-1549

[13] Humlíček, J. *Nezveřejněná data*