

Спектроскопия поглощения света для исследования электронных свойств твердых тел.

Влияние размеров тел на их оптические свойства



Тимошенко Виктор Юрьевич

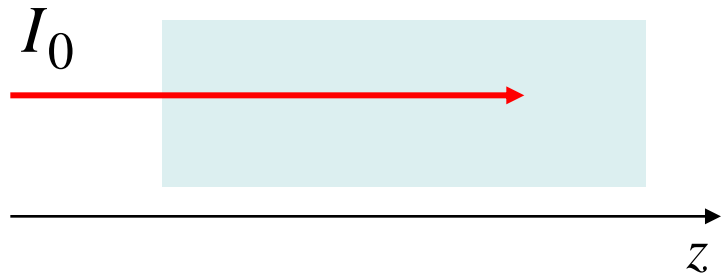
*Московский Государственный Университет
им. М. В. Ломоносова*

Научно-Образовательный Центр по нанотехнологиям

Содержание

1. Поглощение света.
2. Отражение света.
3. Классификация твердых тел по их электронным свойствам, квазичастицы в твердых телах.
4. Оптические свойства металлов и диэлектриков. Модель Друде-Лоренца. Плазменная частота. Фактор локального поля. Уравнение Клаузиуса-Моссоти.
5. Оптические свойства полупроводников. Поглощение света в прямозонных и непрямоzonных полупроводниках. Экситоны. Примесное поглощение.
6. Квантовый размерный эффект. Квантовые ямы, нити и точки. Реальные нанокристаллы гетероструктуры, пористые материалы.

Поглощение света в однородной и изотропной среде



$$dI = -I_0 \cdot \alpha \cdot dz$$

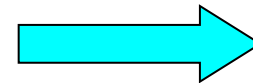
Закон Бугера - Ламберта-Бера: $I = I_0 \exp(-\alpha z)$

Коэффициент поглощения света: $\alpha = \alpha(\omega)$

Комплексное представление для электрического поля в э/м волне:

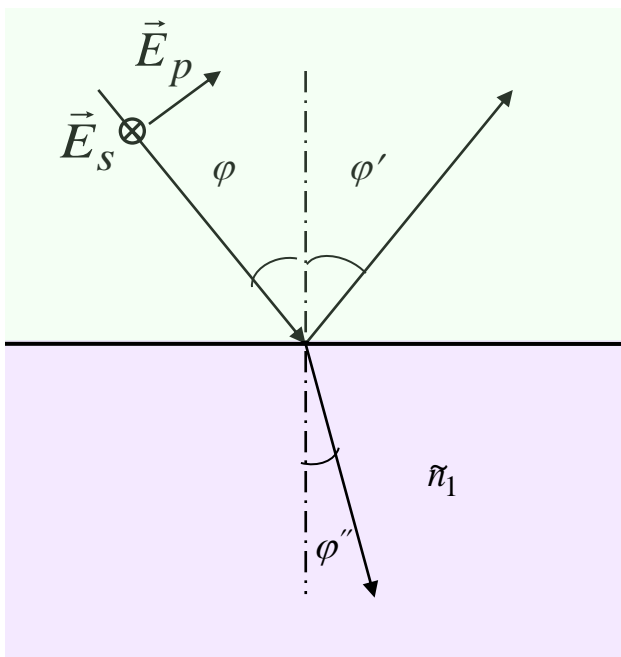
$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp\left[-i\omega\left(t - \frac{\tilde{n}}{c}z\right)\right] = \vec{E}_0 \exp\left[-i\omega t + i\omega\frac{\tilde{n}}{c}z\right] = \vec{E}_0 \exp\left[-i\omega\left(t - \frac{n}{c}z\right)\right] \exp\left(-\frac{\omega\kappa}{c}z\right)$$

Комплексный показатель преломления: $\tilde{n} \equiv n + i\kappa$



$$\alpha = \frac{2\omega\kappa}{c}$$

Отражение света на границе однородных и изотропных сред



$$\vec{E} = \vec{E}_p + \vec{E}_s$$

Интенсивность света : $I \propto |\vec{E}|^2$

Закон отражения:

$$\varphi = \varphi'$$

Закон преломления:

$$n_1 \sin \varphi = n_2 \sin \varphi''$$

Для электрического поля отраженной волны справедливы формулы Френеля:

$$E'_s = -\frac{\sin(\varphi - \varphi'')}{\sin(\varphi + \varphi'')} E_s \quad E'_p = -\frac{\text{tg}(\varphi - \varphi'')}{\text{tg}(\varphi + \varphi'')} E_p$$

Коэффициенты пропускания T и отражения R :

$$T = \frac{I''}{I}, \quad R = \frac{I'}{I}, \quad \text{где } T + R = 1, \quad I' + I'' = I$$

$$R_s = \left| \frac{E'_s}{E_s} \right|^2 = \left| \frac{\sin(\varphi - \varphi'')}{\sin(\varphi + \varphi'')} \right|^2,$$

$$R_p = \left| \frac{E'_p}{E_p} \right|^2 = \left| \frac{\text{tg}(\varphi - \varphi'')}{\text{tg}(\varphi + \varphi'')} \right|^2$$

Отражение света при нормальном падении

$$\varphi = \varphi' = 0 \quad \vec{E} = \vec{E}_p = \vec{E}_s$$

$$\begin{aligned} R_s = R_p = R &= \left| \frac{\sin(\varphi - \varphi'')}{\sin(\varphi + \varphi'')} \right|^2 = \left| \frac{\sin \varphi \cos \varphi'' - \sin \varphi'' \cos \varphi}{\sin \varphi \cos \varphi'' + \sin \varphi'' \cos \varphi} \right|^2 = \\ &= \left| \frac{\sin \varphi - \sin \varphi''}{\sin \varphi + \sin \varphi''} \right|^2 = \left| \frac{\tilde{n}_2 / \tilde{n}_1 - 1}{\tilde{n}_2 / \tilde{n}_1 + 1} \right|^2 = \left| \frac{\tilde{n}_2 - \tilde{n}_1}{\tilde{n}_2 + \tilde{n}_1} \right|^2 = \left| \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2 + \kappa^2}{(n + 1)^2 + \kappa^2}, \end{aligned}$$

Относительный комплексный показатель преломления:

$$\tilde{n} \equiv \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1} \quad \tilde{n} = n + i\kappa$$

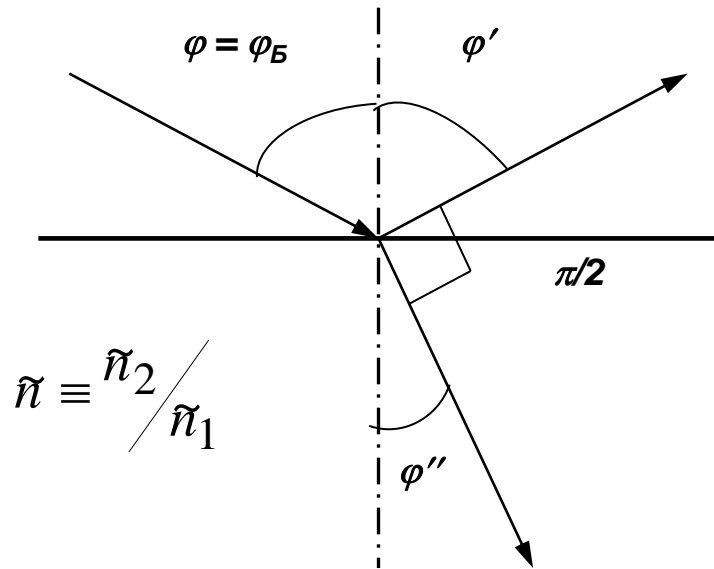
При достаточно слабом поглощении:

$$\tilde{n} \approx n \quad \Rightarrow \quad R \approx \left(\frac{n - 1}{n + 1} \right)^2$$

Можно выразить n через R :

$$n - 1 = (n + 1)\sqrt{R}, \quad n(1 - \sqrt{R}) = \sqrt{R} + 1 \quad \Rightarrow \quad n = \frac{1 + \sqrt{R}}{1 - \sqrt{R}}$$

Падение под углом Брюстера

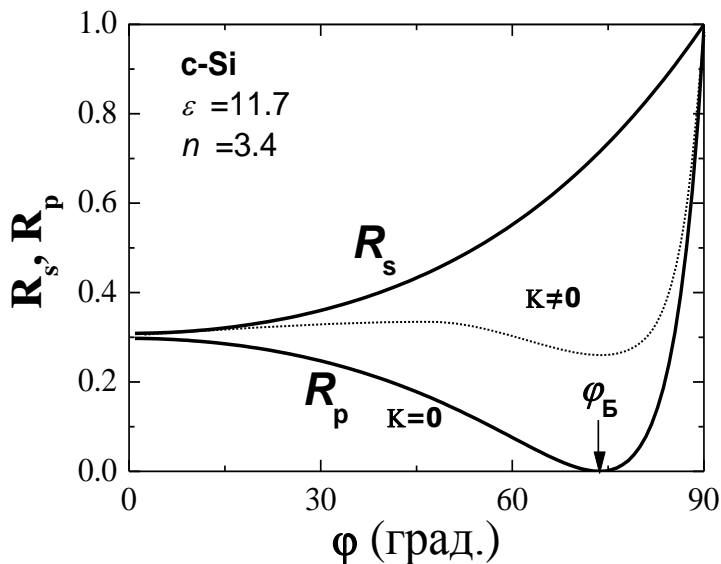


$$\varphi' + \varphi'' = \pi/2$$

$$\operatorname{tg}(\varphi_B + \varphi'') \rightarrow \infty$$

$$R_p = \left| \frac{\operatorname{tg}(\varphi - \varphi'')}{\operatorname{tg}(\varphi + \varphi'')} \right|^2 \rightarrow 0$$

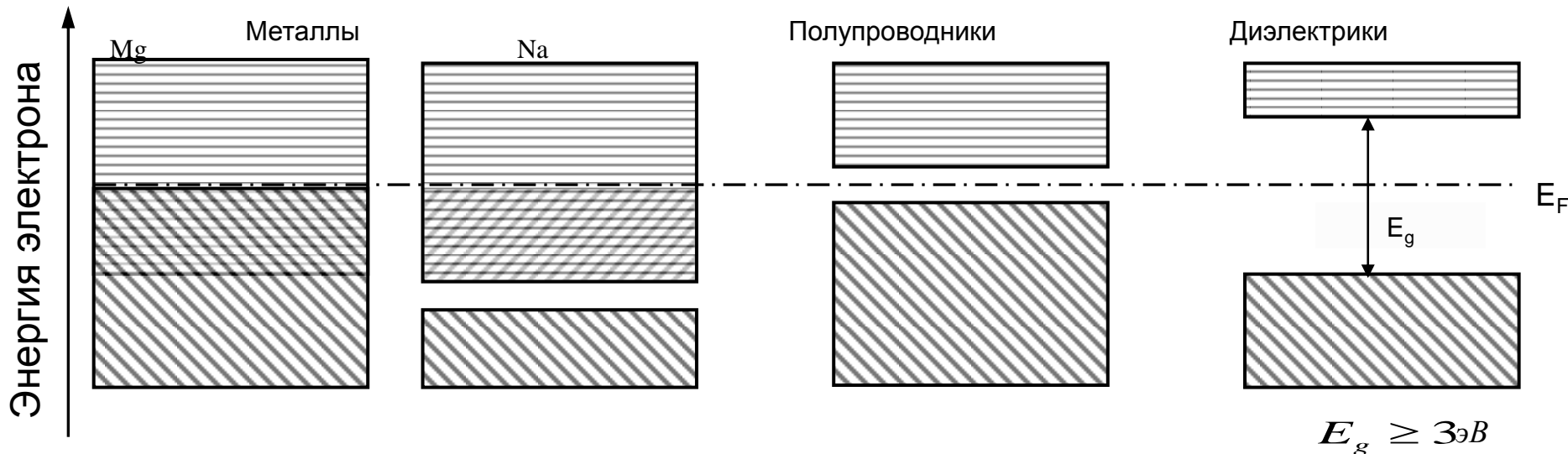
$$\operatorname{tg}\varphi_B = \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1} = \tilde{n}$$



На высокой чувствительности величины R_p к поглощению вблизи значения $\varphi \approx \varphi_B$ основан метод регистрации дефектов и примесей в полупроводниках, который носит название **брюстеровской спектроскопии глубоких уровней**. В данном методе появление поглощения на дефектных или примесных состояниях приводит к возрастанию R_p , измеряемому при углах падения близких к φ_B .

Модельные представления об электронных свойствах веществ

По своим электронным свойствам твердые тела подразделяются на **металлы, полупроводники и диэлектрики**, что схематично можно представить на упрощенной **зонной схеме**:



Вследствие взаимодействий с большим числом атомов в твердом теле существуют не изолированные свободные электроны, а квазичастицы: **электроны проводимости** ($q_e = -e = -1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл) и незаполненные места в валентной зоне - **дырки** ($q_h = e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл).

Эффективные массы **электронов и дырок**: $m^* = (0.1 - 2)m_0$

Колебания атомов в твердом теле соответствует квазичастицы – **фононы**.

Оптические свойства металлов и диэлектриков

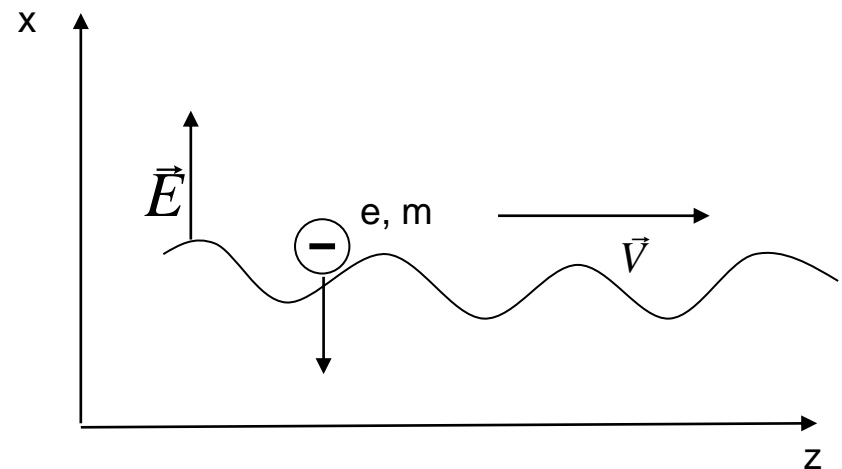
Концентрация электронов в металле $\sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$

В диэлектриках ($E_g > 3 \text{ эВ}$) даже при температурах близких к плавлению практически нет свободных носителей заряда, который, однако, могут возникать при инжекции электрическим током, электронным пучком или при оптическом возбуждении.

Несмотря на столь значительные различия в электронных свойствах металлов и диэлектриков, для описания их оптических свойств допустимым оказывается *квазиклассический подход*.

При поглощении и отражении света металлами основную роль играет взаимодействие электрического поля световой волны со свободными электронами. Такое взаимодействие может быть описано классической моделью Друде-Лоренца:

$$m\ddot{x} + \frac{m}{\tau}\dot{x} = -eE_{0x} \exp(-i\omega t)$$



Модель Друде и оптические параметры вещества с электронами проводимости

Поляризация единицы объема среды :

$$P_x = -N_e e x = -\frac{e^2 N_e E_x}{m\omega^2 + i\omega m\tau^{-1}}$$

Материальное уравнение (система единиц СИ):

$$\vec{D} = \vec{E}\epsilon_0 + \vec{P} = \epsilon_0 \tilde{\epsilon} \vec{E}$$

Комплексная диэлектрическая проницаемость:

$$\tilde{\epsilon} \equiv \epsilon_1 + i\epsilon_2 = 1 + \frac{P_x}{\epsilon_0 E_x} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\tau^{-1}}$$

Плазменная частота:

$$\omega_p^2 = \frac{e^2 N_e}{m\epsilon_0}$$

$$\epsilon_1 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \tau^{-2}} = n^2 - \kappa^2$$

$$\epsilon_2 = \frac{\omega_p^2 \tau^{-1}}{\omega(\omega^2 + \tau^{-2})} = 2n\kappa$$

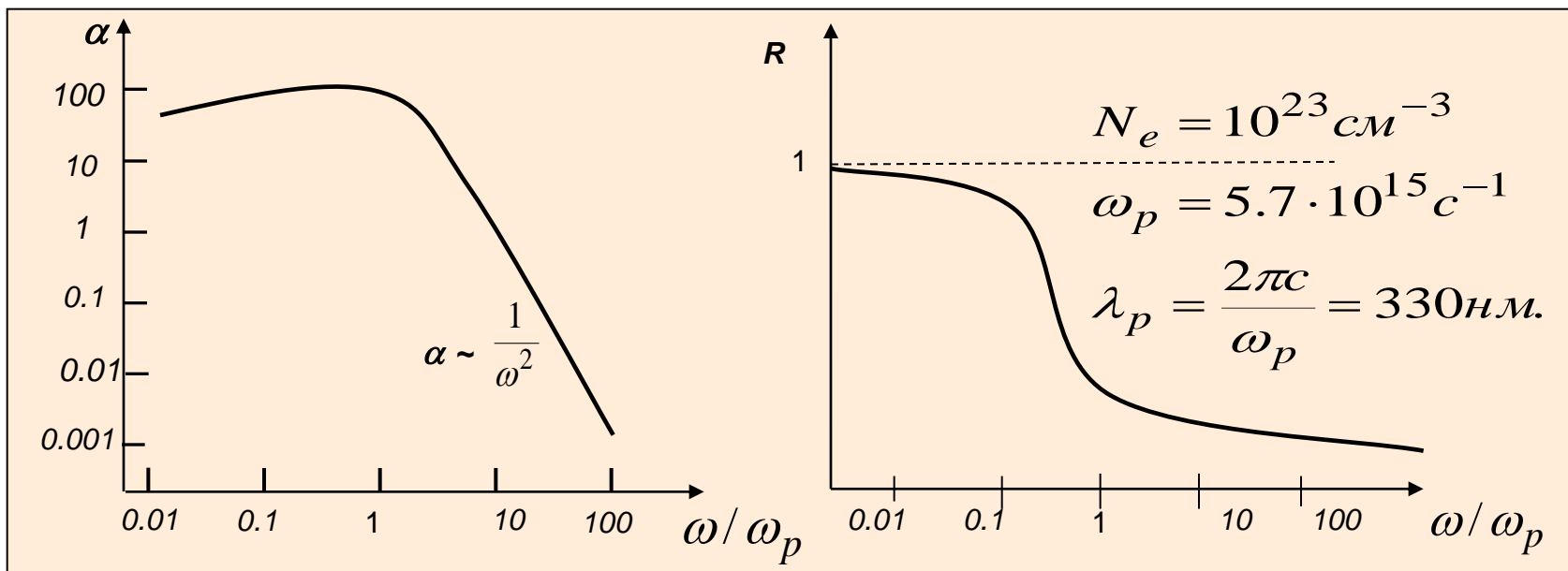
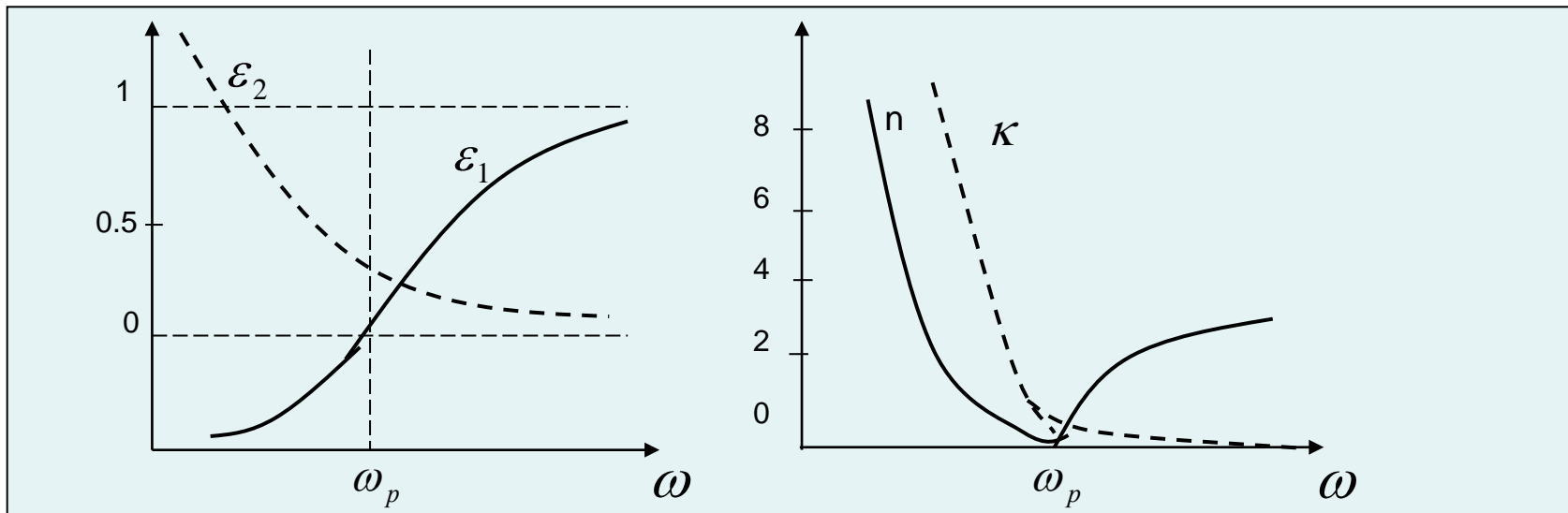
Комплексный показатель преломления:

$$\tilde{n} \equiv n + i\kappa$$

Коэффициент поглощения света:

$$\alpha = \frac{2\omega\kappa}{c}$$

Модель Друде и спектральные зависимости оптических характеристик



Модель Друде-Лоренца и оптические свойства диэлектриков

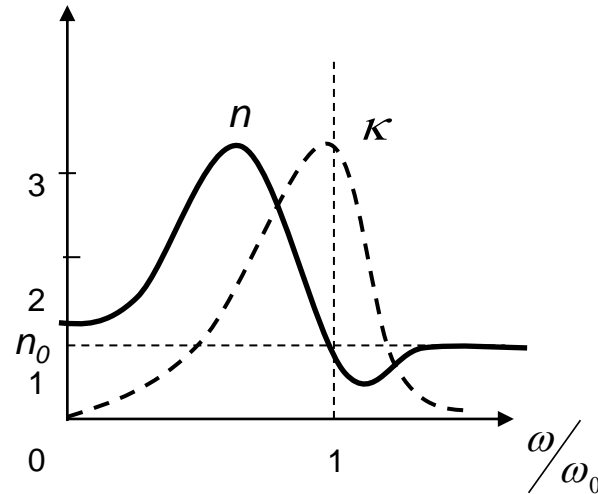
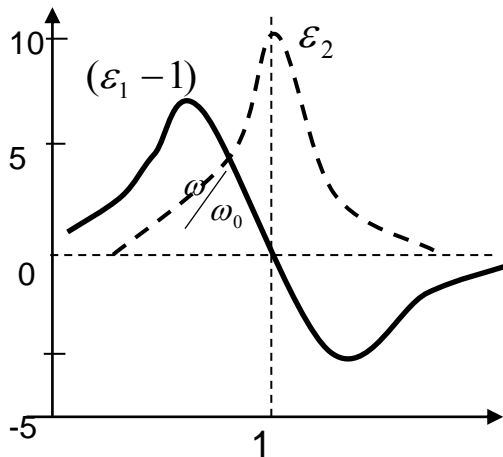
$$\ddot{x} + \tau^{-1}\dot{x} + \omega_0^2 x = -\frac{eE_{0x}}{m} \exp(-i\omega t)$$



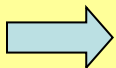
$$P = N_M P_M = -N_M e x_0 = -\frac{e^2 N_M E_{0x} / m}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\omega\tau^{-1}}$$

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon_1 + i\epsilon_2 = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E_{0x}} = 1 + \frac{e^2 N_M}{m\epsilon_0 [(\omega_0^2 - \omega^2) - i\omega\tau^{-1}]}$$

$$\tilde{n} = \sqrt{\tilde{\epsilon}}$$



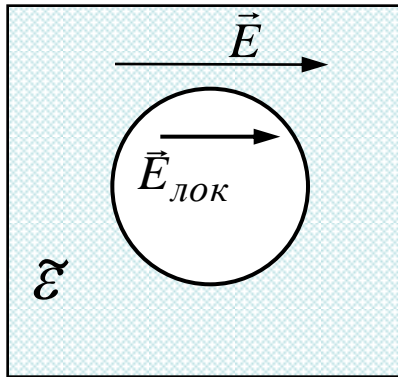
$$\omega \ll \omega_0$$



Значение показателя преломления в области прозрачности:

$$n^2(\omega/\omega_0 \rightarrow 0) \approx 1 + \frac{N_M e^2}{m\epsilon\omega_0^2} \equiv n_0^2$$

Локальное поле. Уравнение Клаузиуса-Моссоти.



$$\vec{E}_{\text{лок}} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}$$

$$P = \epsilon_0 E (\epsilon - 1)$$

$$E_{\text{лок}} = E \left(1 + \frac{\epsilon - 1}{3} \right) = E \frac{\epsilon + 2}{3}$$

$$P = \chi \epsilon_0 N_m E_{\text{лок}} = \chi \epsilon_0 N_m E \frac{\epsilon + 2}{3}$$

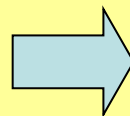
χ – поляризуемость молекулы

Уравнение Клаузиуса-Моссоти:

N_m – концентрация молекул

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{1}{3} \chi N_m$$

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{N_m e^2}{3m\epsilon_0} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega\tau^{-1}}$$

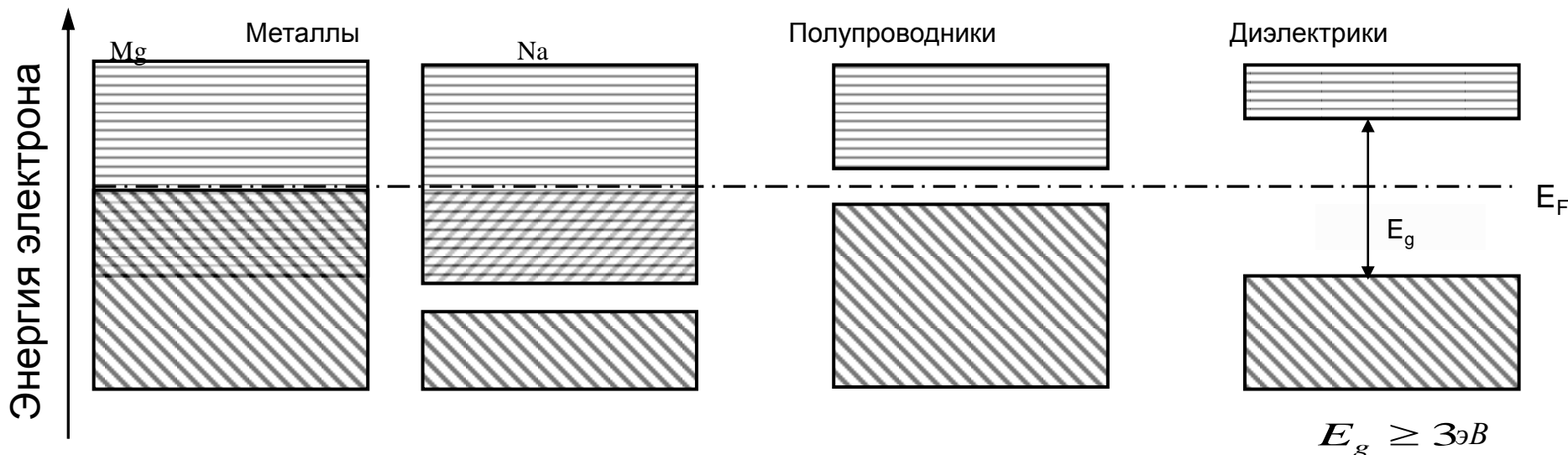


В условиях резонанса поляризуемость молекул среды резко возрастает, что приводит вследствие фактора локального поля к значениям $\epsilon \approx -2$

Элементы квантовой теории твердых тел

Виды твердых тел и квазичастиц

По своим электронным свойствам твердые тела подразделяются на **металлы, полупроводники и диэлектрики**, что схематично можно представить на упрощенной **зонной схеме**:



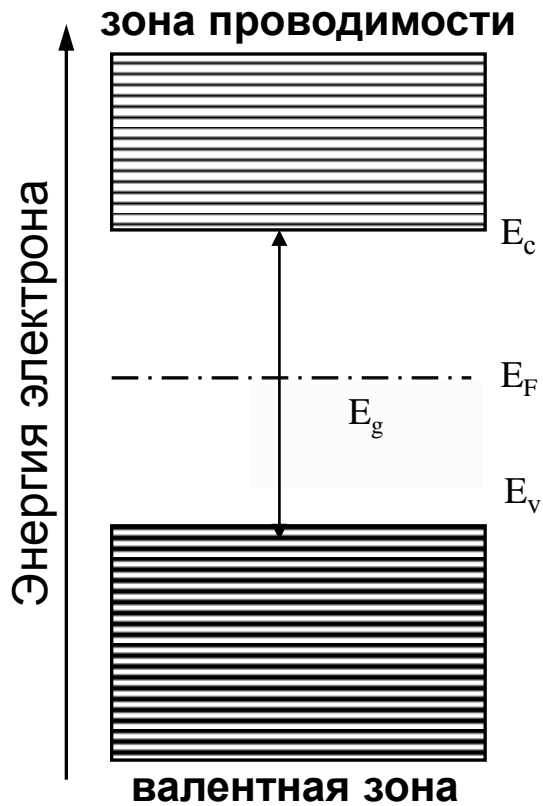
Вследствие взаимодействий с большим числом атомов в твердом теле существуют не изолированные свободные электроны, а квазичастицы: **электроны проводимости** ($q_e = -e = -1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл) и незаполненные места в валентной зоне - **дырки** ($q_h = e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл).

Эффективные массы **электронов и дырок**: $m^* = (0.1 - 2)m_0$

Колебания атомов в твердом теле соответствует квазичастицы – **фононы**.

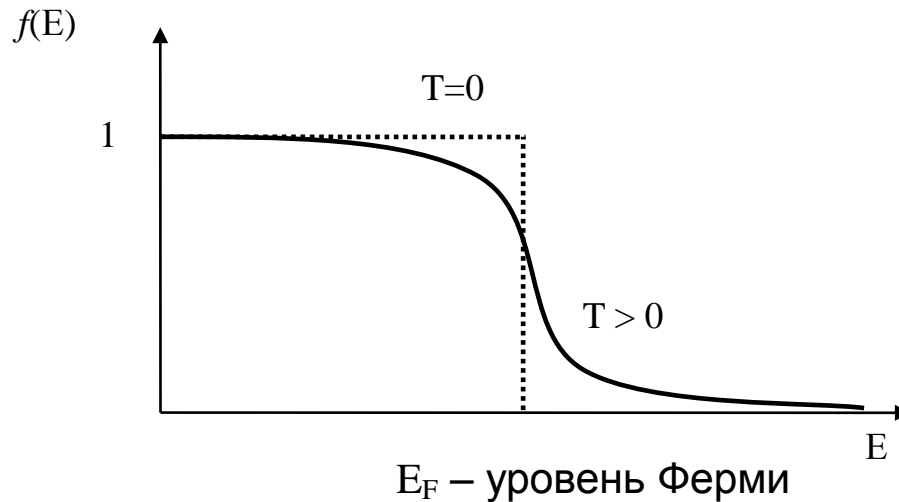
Элементы квантовой теории твердых тел

Упрощенная зонная диаграмма полупроводника и функция заполнения состояний



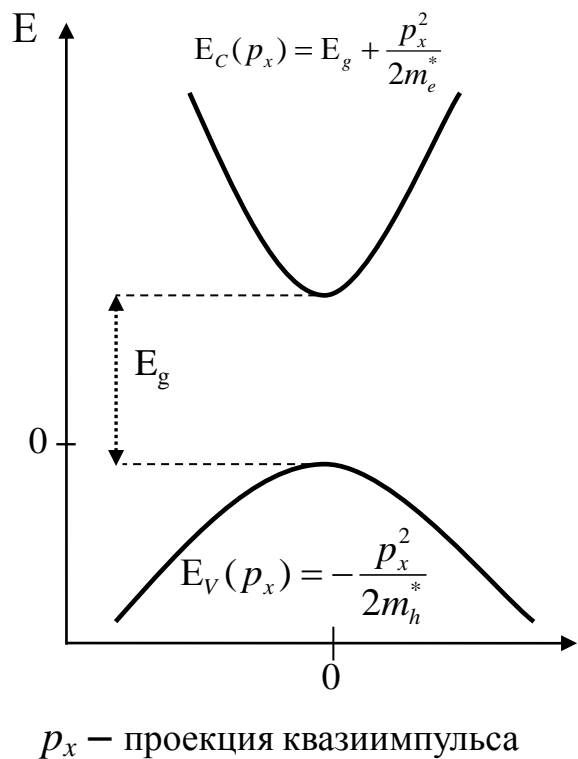
Статистика Ферми-Дирака:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1}$$



Электроны имеют полуцелый спин, они подчиняются статистике Ферми-Дирака.

Зависимость энергии электрона от квазиимпульса вблизи краев зон в полупроводниковом кристалле (законы дисперсии для прямозонного полупроводника)



$$E_C(\vec{p}) = E_g + \frac{p^2}{2m_e^*} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

$$E_V(\vec{p}) = -\frac{p^2}{2m_h^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*}$$

Квазиимпульс : $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

Квазиволновой вектор: \vec{k}

$$k = \frac{2\pi}{\lambda_e} \Rightarrow p = \hbar \frac{2\pi}{\lambda_e} = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda_e} = \frac{h}{\lambda_e}$$

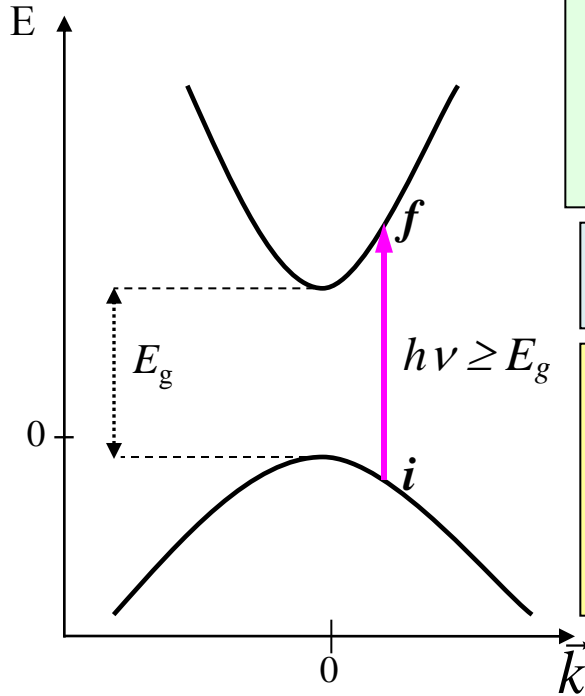
$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u(\vec{r})$$

$$\lambda_e \rightarrow \lambda_{DB}$$

Электроны в кристалле – квазичастицы-волны, которые иногда называются блоховскими волнами, по имени ученого Ф.Блоха.

Поглощение света в прямозонном полупроводнике

GaAs, InP, CdTe, ...



Закон сохранения энергии:

$$h\nu = E_f - E_i$$

Закон сохранения квазиимпульса:

$$\hbar\vec{k}_{phot} = \hbar\vec{k}_f - \hbar\vec{k}_i$$

$$k_{phot} \ll k_f, k_i \Rightarrow$$

$$\vec{k}_f \approx \vec{k}_i \equiv \vec{k}$$

Вертикальный переход

$$h\nu = E_f - E_i = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}$$

Приведенная масса:

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$$

$$\alpha(h\nu) = A \int_{E_i} \int_{E_f} w(E_i, E_f) n(E_i) n(E_f) dE_i dE_f$$

$$n(E_i) = N_V(E_i) f(E_i) \approx N_V(E_i) = \frac{(2m_h^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{-E_i}$$

$$n(E_f) = N_C(E_f) (1 - f(E_f)) \approx N_C(E_f) = \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_f - E_C}$$



$$\alpha(h\nu) = A_1 \sqrt{h\nu - E_g}$$

$$A_1 = \frac{2\pi e^2 (2m_r)^{3/2} |p_0|^2}{3m_0^2 n(h\nu) \epsilon_0 c h^3 \nu}$$

Спектральная зависимость коэффициента поглощения света при прямых переходах

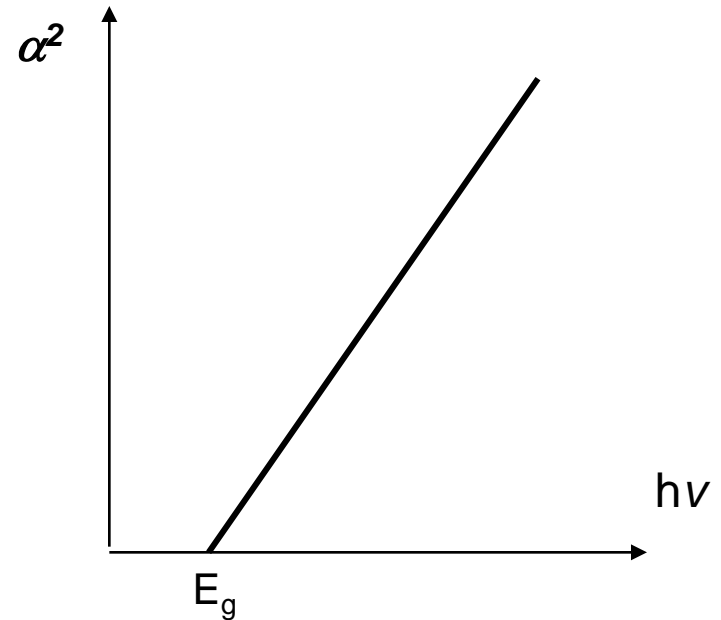
Для дипольно-разрешенного перехода (CaAs, InP, InAs, CdTe,.....) имеем :

$$\alpha(h\nu) = A_1 \sqrt{h\nu - E_g} \propto \frac{\sqrt{h\nu - E_g}}{\nu}$$

$$A_1 = \frac{2\pi e^2 (2m_r)^{3/2} |p_0|^2}{3m_0^2 n(h\nu) \varepsilon_0 c h^3 \nu}$$

Вблизи края зоны спектр коэффициента поглощения спрямляется в координатах $\alpha^2(h\nu)$:

$$(\alpha(h\nu))^2 \propto h\nu - E_g$$



Для дипольно-запрещенного перехода, которым, например, является переход из *s*-состояния в *d*-состояние в **Cu₂O** :

$$\alpha(h\nu) = A_2 (h\nu - E_g)^{3/2}$$

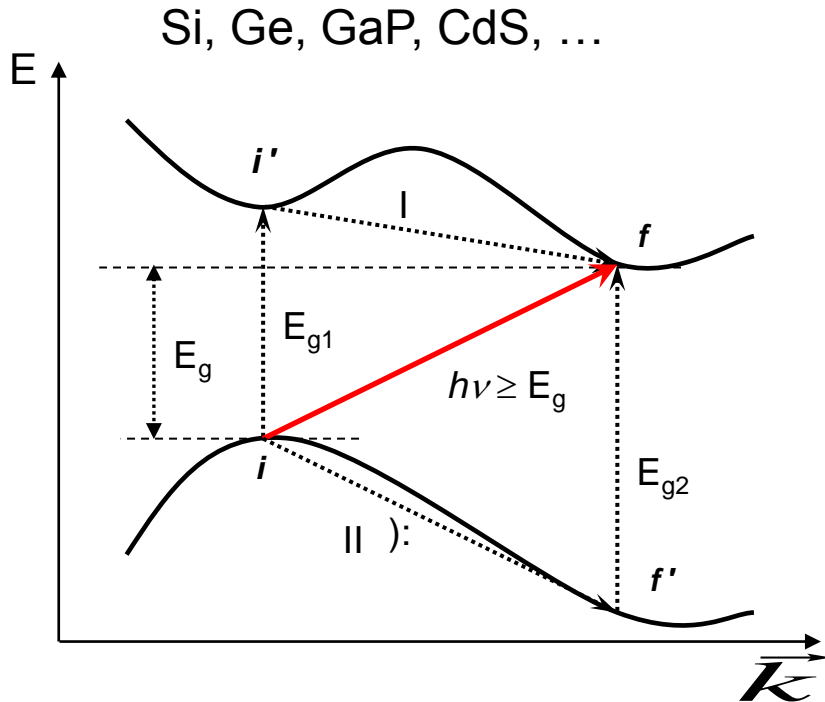
$$|\bar{p}_{if}(0)| \approx 0$$

$$|\bar{p}_{if}(\vec{k} \approx 0)|^2 \approx k^2 p_1^2 \propto (h\nu - E_g)$$

$$A_2 \propto \frac{p_1^2}{\nu}$$

$$p_1^2 = \left. \frac{\partial^2 \bar{p}_{if}}{\partial \vec{k}^2} \right|_{\vec{k}=0}$$

Поглощение света при не прямых переходах в полупроводниках



Сохранение энергии и квазиимпульса:

$$h\nu = E_f - E_i \pm E_{phon}$$

$$\vec{k}_f = \vec{k}_i + \vec{k}_{phon}$$

Вероятность перехода:

$$w_{if} \propto |H_{ii'}|^2 \cdot |H_{i'f}|^2 \frac{1}{(\omega - \omega_{ii'})^2}$$

$$|H_{i'f}^-|^2 = BN_{phon}, \quad |H_{i'f}^+|^2 = B(N_{phon} + 1)$$

Статистика Бозе-Эйнштейна:

$$N_{phon} = \left(\exp\left(\frac{E_{phon}}{k_B T}\right) - 1 \right)^{-1}$$

Коэффициент поглощения света при поглощении фонона $h\nu \geq E_g - E_{phon}$

и испускании фонона $h\nu \geq E_g + E_{phon}$

$$\alpha^-(h\nu) \propto B_1 \frac{(h\nu - E_g + E_{phon})^2}{\exp\left(\frac{E_{phon}}{k_B T}\right) - 1}$$

$$\alpha^+(h\nu) \propto B_1 \frac{(h\nu - E_g - E_{phon})^2}{1 - \exp\left(-\frac{E_{phon}}{k_B T}\right)}$$

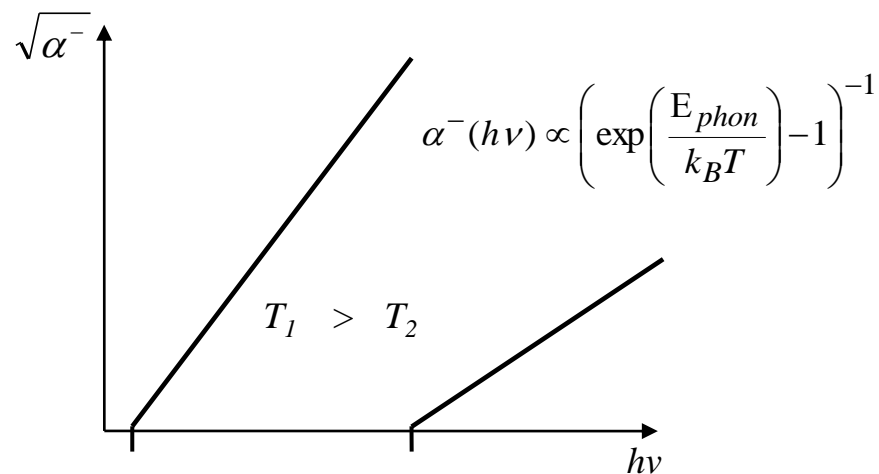
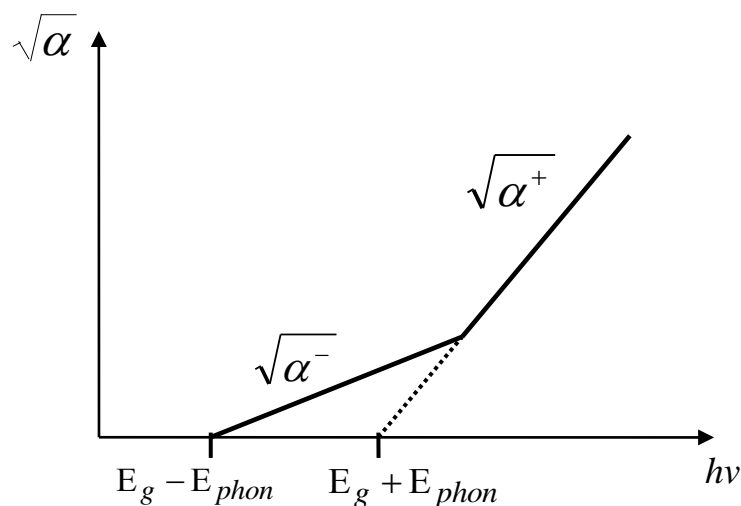
Температурная зависимость коэффициента поглощения в непрямозонном полупроводнике

$E_g + E_{phon} > h\nu \geq E_g - E_{phon}$ - процесс поглощения фононов доминирует: $\alpha(h\nu) = \alpha^-(h\nu)$

$$h\nu \geq E_g + E_{phon}$$

коэффициент поглощения есть сумма вкладов процессов с поглощением и испусканием фононов:

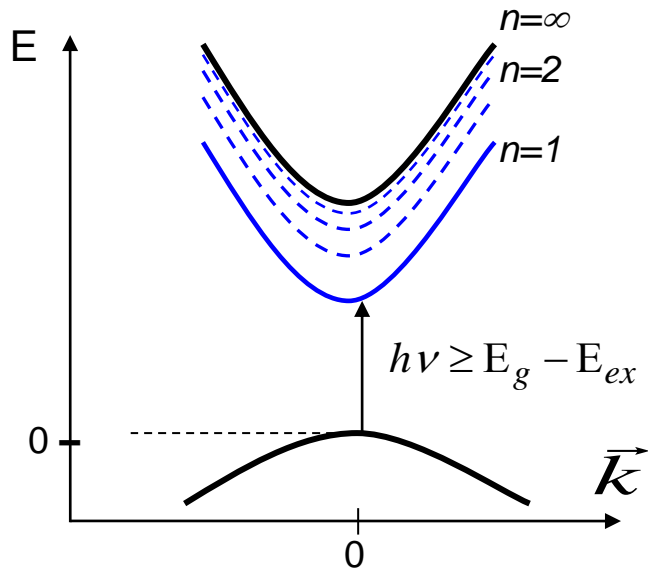
$$\alpha(h\nu) = \alpha^-(h\nu) + \alpha^+(h\nu)$$



Вблизи не прямой запрещенной зоны спектральная зависимость коэффициента поглощения при не прямых переходах спрямляется в координатах $\sqrt{\alpha}$ и $h\nu$.

Угол наклона зависимости $\sqrt{\alpha^-(h\nu)}$ уменьшается с понижением температуры.

Экситоны в полупроводниках



В полупроводниках и диэлектриках возможно поглощение света, которое не сопровождается появлением свободных носителей заряда. Возникающее возбуждение является электрически нейтральным и может быть рассмотрено как квазичастица, состоящая из электрона и дырки и называемая *экситоном* (от “excitation”). Понятие «экситон» было введено Я.И.Френкелем в 1931 г. В полупроводниках экситон был обнаружен в 1951 г. Е.Ф.Гроссом с сотрудниками.

Известны **экситоны Френкеля**, или экситоны малого радиуса $r_{ex} \leq a_0$ – постоянной решетки кристалла; и **экситоны Ванье-Мотта**, или экситоны большого радиуса $r_{ex} \gg a_0$.

Для полупроводников наблюдаются экситоны Ванье-Мотта.

Полная энергия экситона:

$$G_n(\vec{k}_{ex}) = W(\vec{k}_{ex}) + E_n = E_g + \frac{\hbar^2 k_{ex}^2}{2M} - \frac{E_{ex}}{n^2}$$

$$M = m_e + m_h$$

$$m_r^{-1} = m_e^{-1} + m_h^{-1}$$

Энергия связи экситона:

$$E_{ex} \equiv E_1 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon r_{ex}}$$

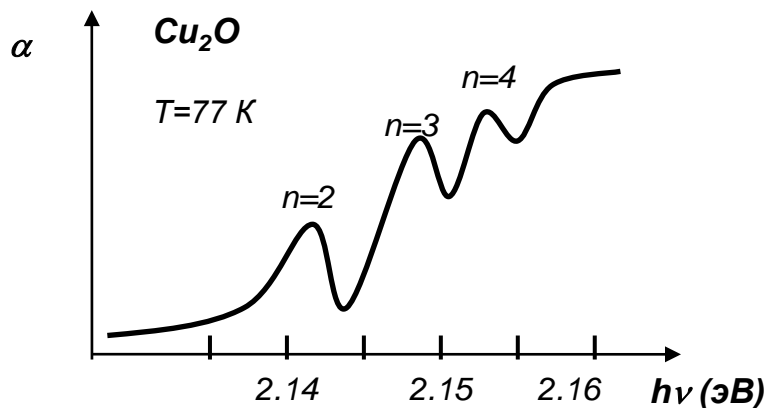
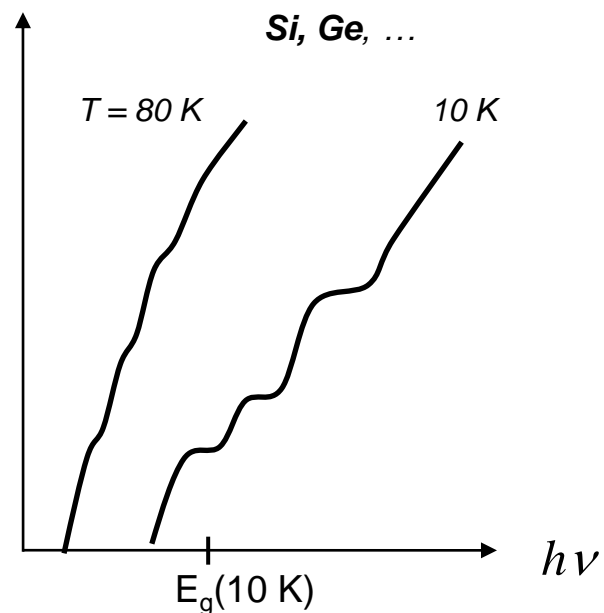
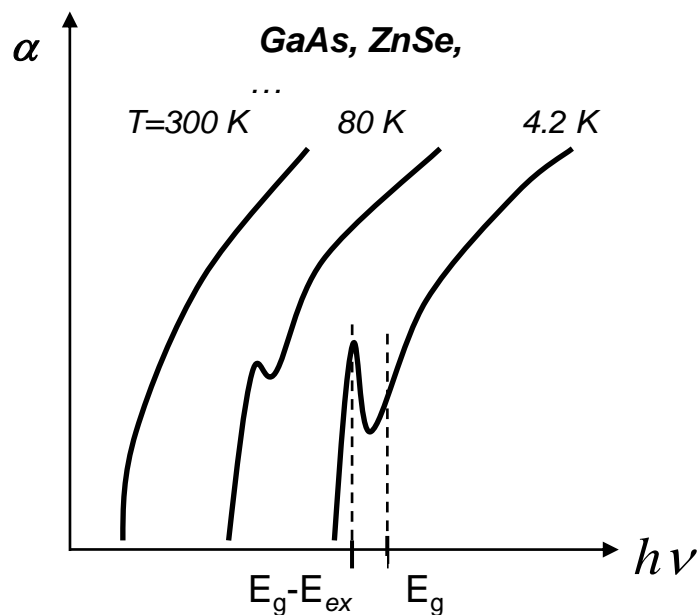
$$n=1,2,3,\dots$$

Радиус экситона:

$$r_{ex} = \frac{\eta\epsilon\hbar^2}{m_r e^2} = a_B \epsilon \frac{m_0}{m_r}$$

$a_B = 0.053$ нм – это боровский радиус в атоме водорода

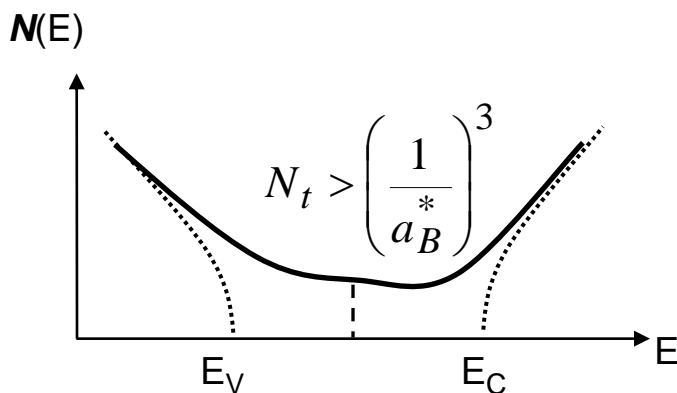
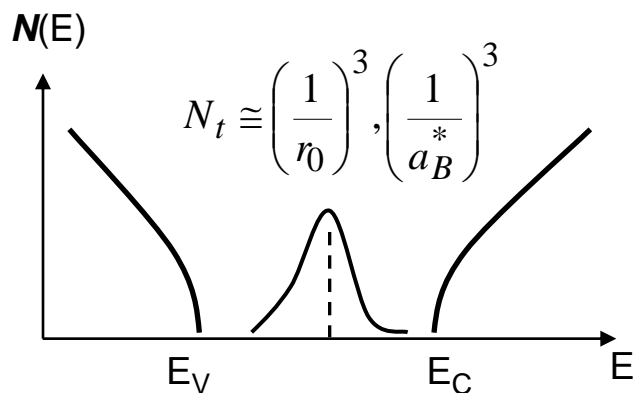
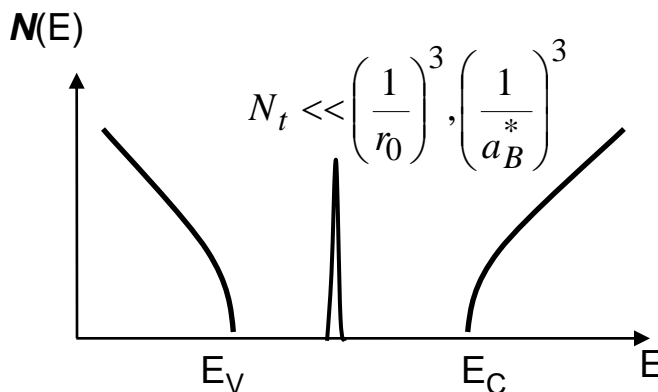
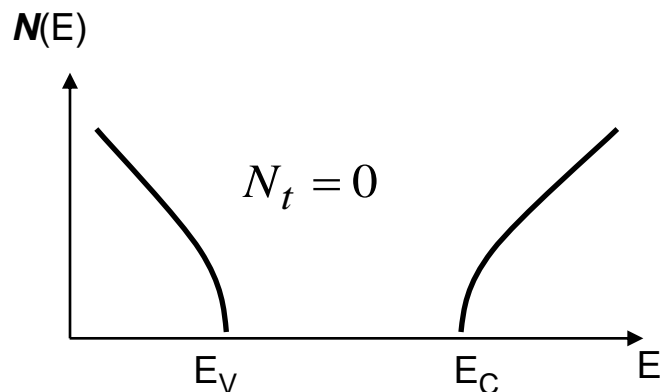
Примеры спектров экситонного поглощения



$E_{ex}=2-16$ мэВ, что меньше, чем энергия теплового движения при комнатной температуре (26 мэВ).

Наблюдение экситонных пиков поглощения в объеме полупроводника возможно при низких температурах. В полупроводниковых наноструктурах энергия связи возрастает и экситоны стабильны даже при комнатной температуре.

Влияние примесей на плотность электронных состояний полупроводника

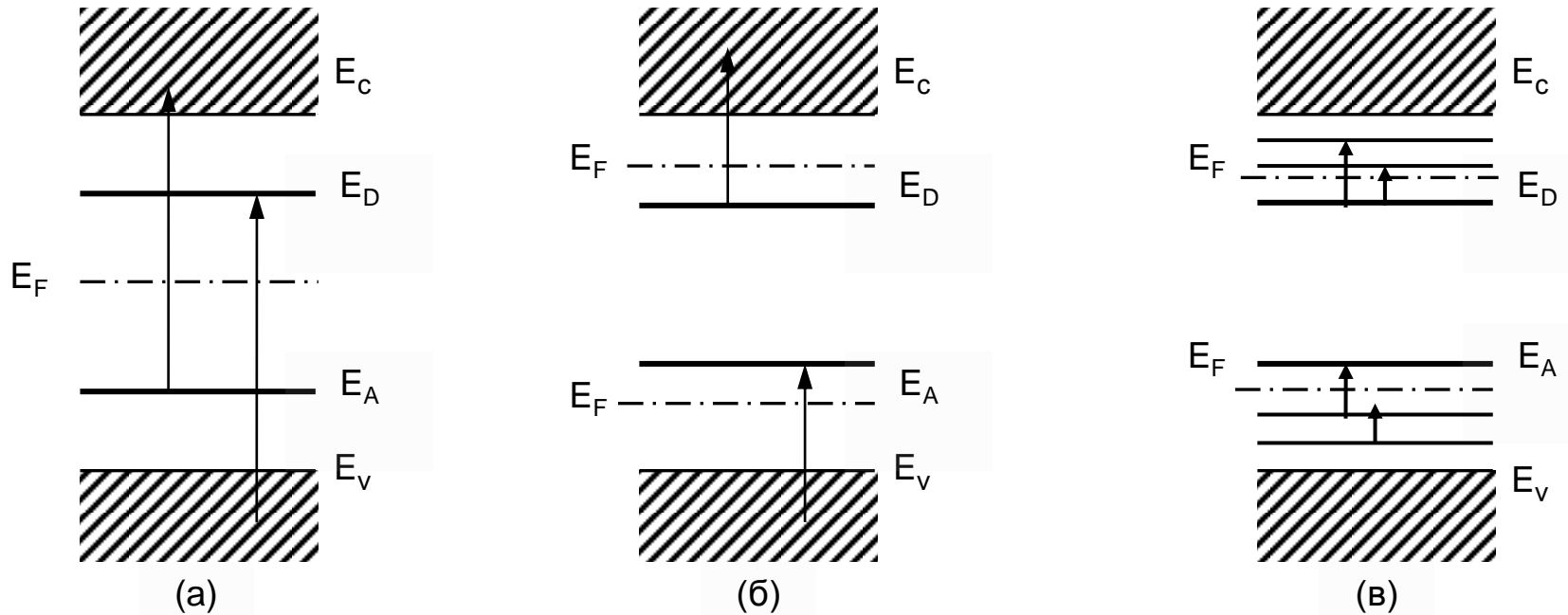


r_0 и a_B^* – радиус экранирования и боровский радиус примеси в полупроводнике

В простейшем случае коэффициент поглощения света определяется плотностями состояний в начальном и конечном состоянии электрона:

$$\alpha(h\nu) \propto \int_{E_i} \int_{E_f} w(E_i, E_f) N(E_i) N(E_f) dE_i dE_f$$

Примесное поглощение света в полупроводниках при малых концентрациях примеси



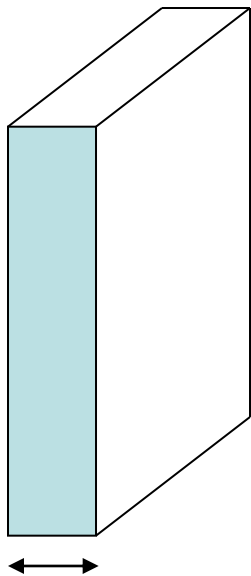
Переходы примесь-зона (а)-(б) приводят к появлению ступеней поглощения ниже края зоны полупроводника.

Внутрипримесные переходы (в) проявляются как набор узких линий вдали от края межзонного поглощения.

Основные типы идеальных твердотельных наноструктур

2D

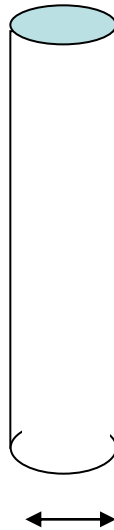
Квантовая
яма



d

1D

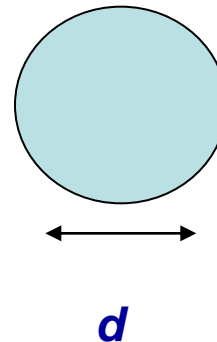
Квантовая
нить



d

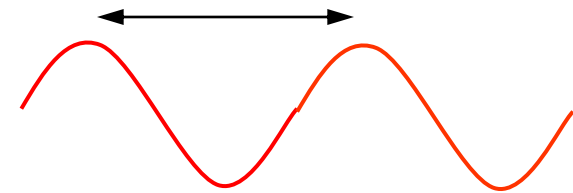
0D

Квантовая
точка



d

λ_{DB}



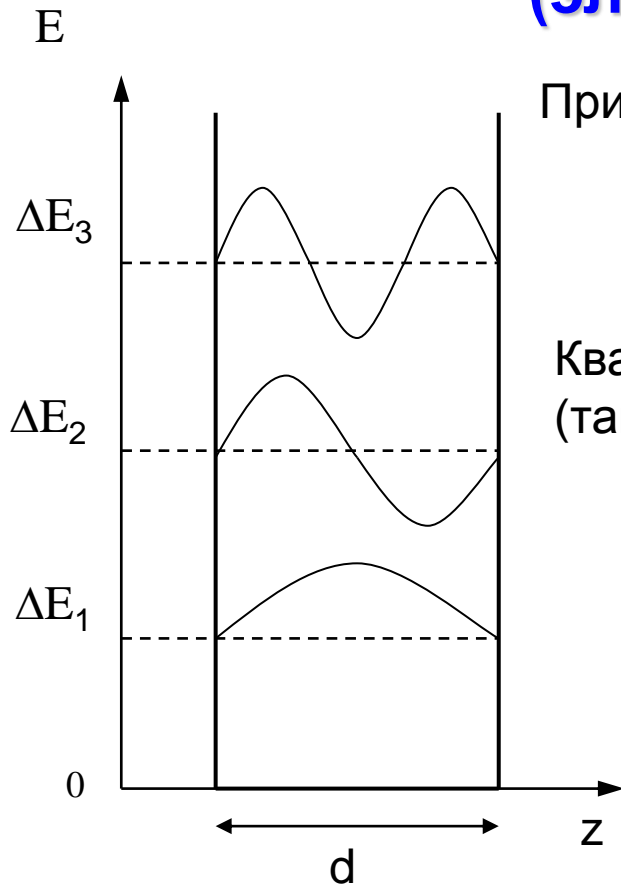
$$d \sim \lambda_{DB} = h / p$$

p – квазиимпульс
электрона или
дырки в кристалле

Для электрона в полупроводнике с $m_e^* = (0.1-1) m_0$: $3 \text{ нм} < \lambda_{DB} < 30 \text{ нм}$

В наноструктурах с минимальными размерами 1 -100 нм электроны, дырки и другие квазичастицы будут испытывать ограничения при движении, что приводит к квантовому размерному эффекту.

Квантовый размерный эффект для электронов в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (электрон в квантовой яме)



При отражении от стенок ямы возникают стоячие волны:

$$\frac{1}{2} n \lambda_e = d \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Квазиимпульс p_e в направлении z квантуется (так называемое **вторичное квантование**)

$$p_{ez} = \frac{h}{\lambda_e} = \frac{h}{2d} n$$

Квантово-размерная добавка к энергии частицы:

$$\Delta E_{en} = \frac{p_{ez}^2}{2m_e^*} = \frac{h^2}{8m_e^* d^2} n^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* d^2} n^2$$

Уровни размерного квантования $n = 1, 2, 3, \dots$ с энергиями : ΔE_1 , ΔE_2 , $\Delta E_2, \dots$

Квантовый размерный эффект в квантовой яме (прямозонный полупроводник)

Полная энергия электрона: $E_e(\vec{p}) = E_e(\hbar\vec{k})$

$$E_e(\vec{p}) = E_c(p_x, p_y) + \Delta E_e = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_e^*} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* d^2} n^2$$

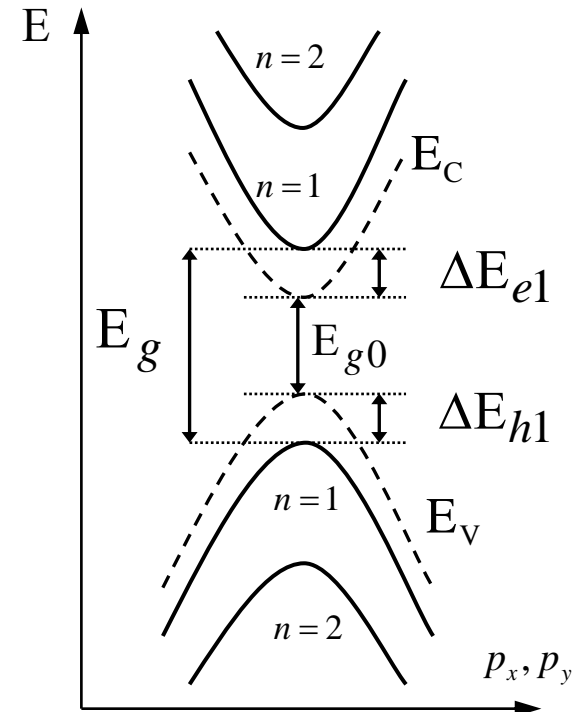
Полная энергия дырки:

$$E_h(\vec{p}) = E_v(p_x, p_y) + \Delta E_h = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_h^*} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_h^* d^2} n^2$$

Квантово-размерное увеличение ширины запрещенной зоны (n=1):

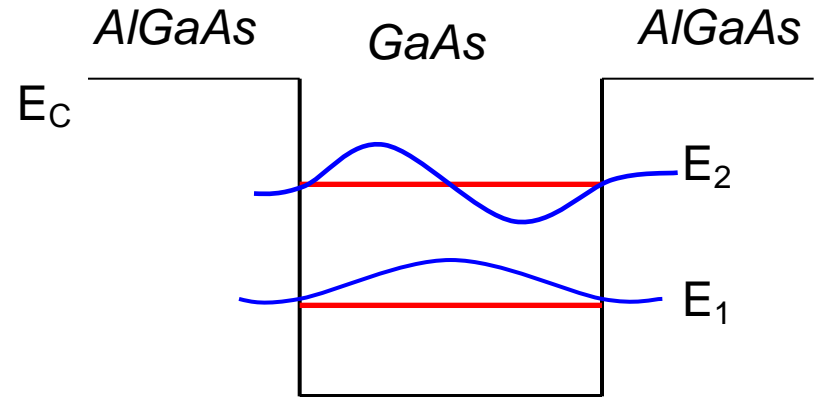
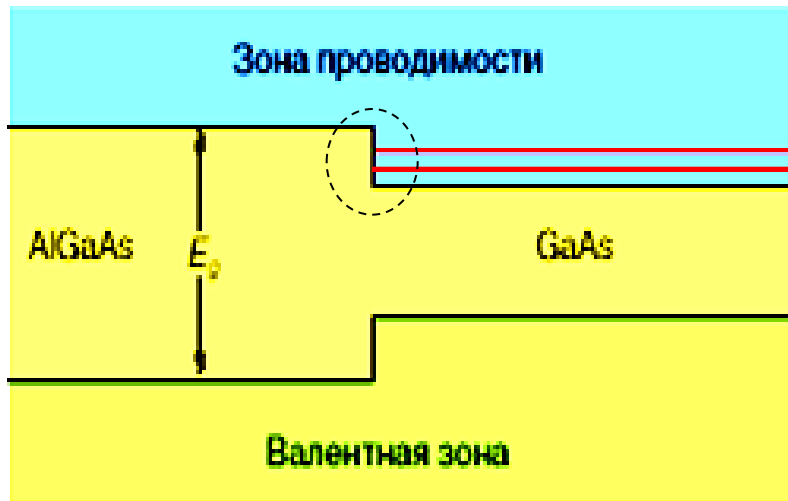
$$E_g = E_{g0} + \Delta E_g = E_{g0} + \frac{\pi \hbar^2}{2d^2 m_r^*}$$

Приведенная масса: $\frac{1}{m_r^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$



Квантово-размерная добавка к ширине запрещенной зоны возрастает обратно пропорционально квадрату ширины квантовой ямы d .

Квантовые ямы в полупроводниковых гетероструктурах



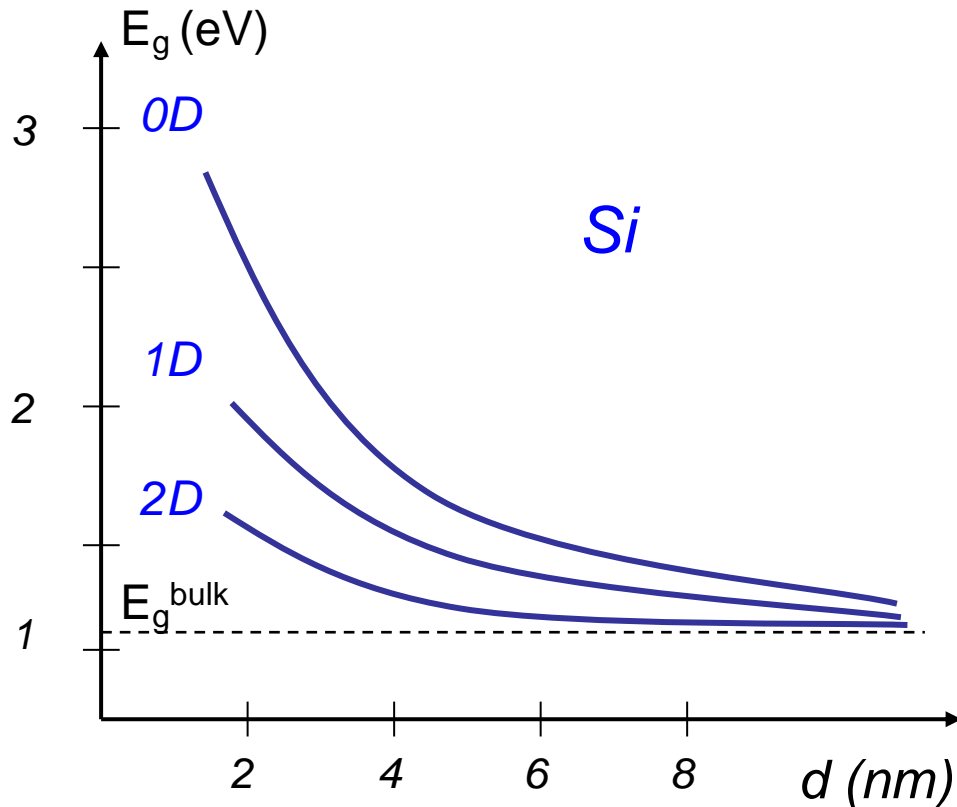
Структура из двух различных полупроводников (с разными ширинами запрещенной зоны) называется **гетероструктурой**,

Квантовая яма образуется в слое полупроводника с узкой запрещенной зоной, заключенном между двумя полупроводниками, обладающими более широкой запрещенной зоной.

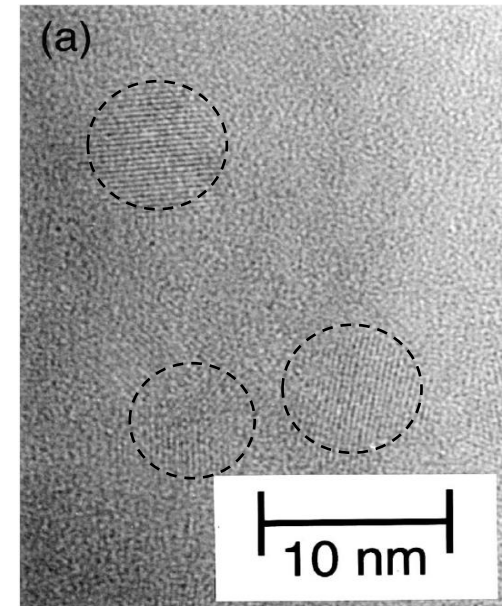
Гетероструктуры используются для создания **эффективных светоизлучающих устройств** (светодиоды, лазеры) и **фотодетекторов** (фотодиоды, солнечные элементы) с к.п.д. достигающим **50%**.

Квантовый размерный эффект в кремниевых нанокристаллах

Расчет методом эффективной массы



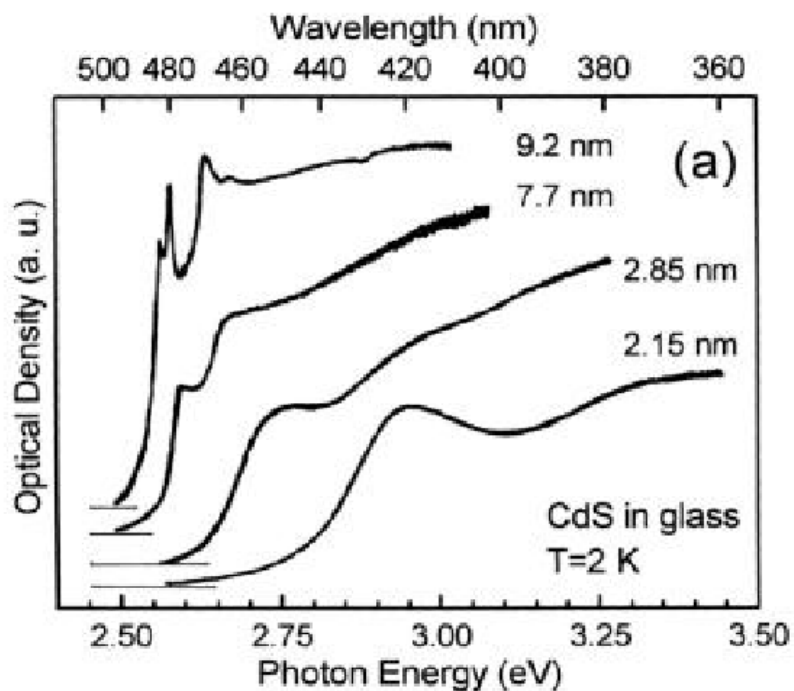
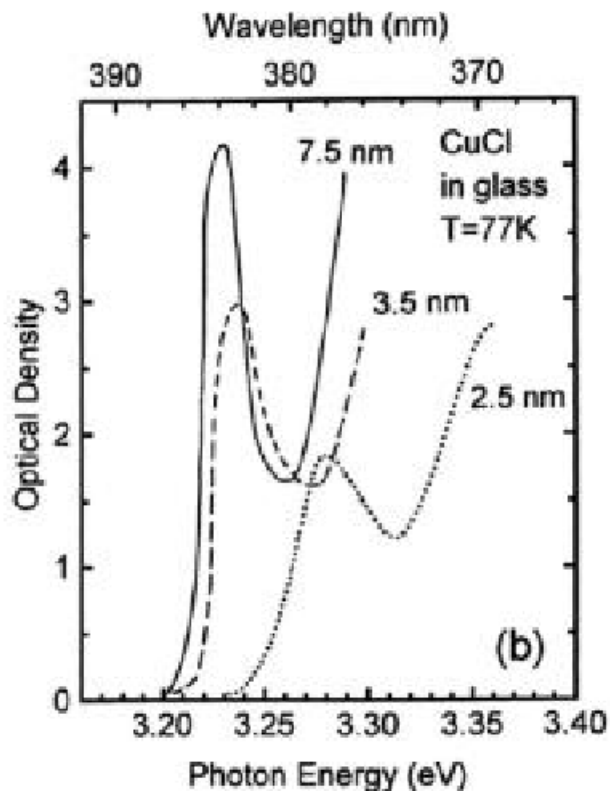
Нанокристаллы Si в SiO₂



M. Fujii et al., J. Appl. Phys. (1998).

Квантово-размерный эффект для запрещенной зоны усиливается при переходе от 2D к 0D (понижении размерности наноструктуры)

Примеры спектров поглощения полупроводниковых нанокристаллов



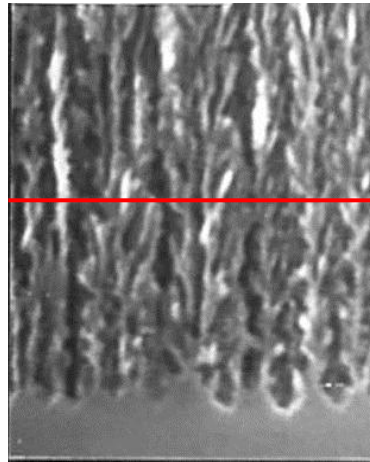
S. V. Gaponenko. Optical Properties of Semiconductor Nanocrystals. Cambridge, 1998.

Пористые кремниевые наноструктуры

4" c-Si



10 см



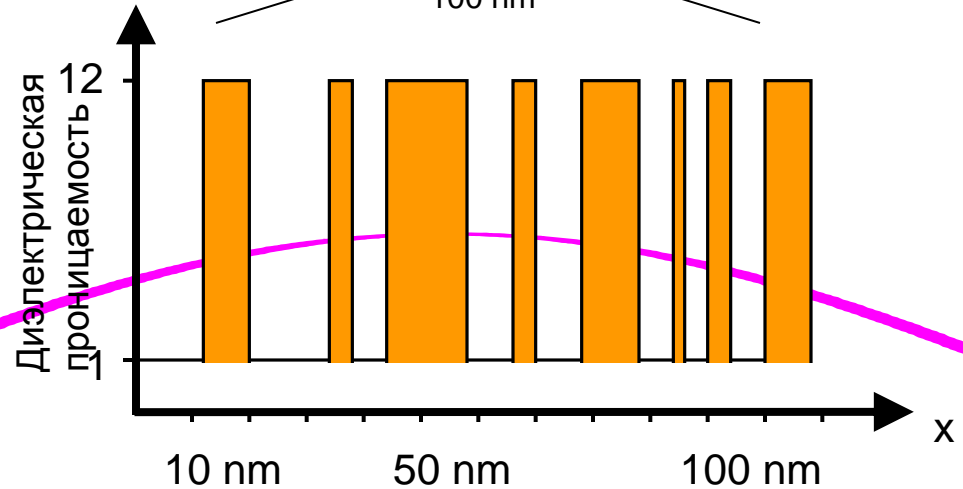
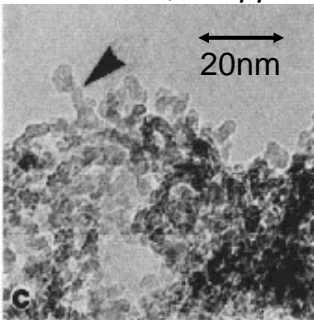
V. Lehmann, *Mat. Sci. & Engineering B69-70* (2000)

Мезопористый Si в сканирующем электронном микроскопе

X

Микропористый Si в просвечивающем электронном микроскопе

A. G. Cullis et al., *J. Appl. Phys.* 82 (1997)

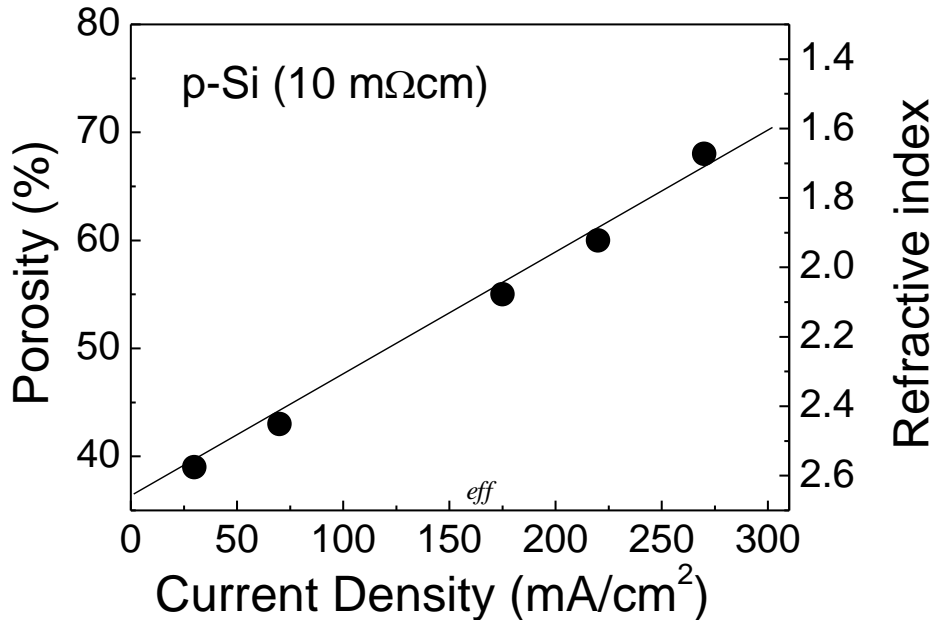


$\lambda_{\text{visible light}}$

$$\epsilon_{\text{eff}} (\epsilon_{\text{Si}}, \epsilon_{\text{Pores}}, P)$$

Эффективный показатель преломления и коэффициент поглощения пористого кремния

Приближение эффективной среды (модель Бругемана)



W.Theiss, Surf. Sci. Rep. (1997).

В случае изотропных по форме включений функция ϵ_{eff} эффективной диэлектрической проницаемости (вообще говоря комплексной) дается выражением :

$$P \frac{\epsilon_d - \epsilon_{eff}}{\epsilon_d + 2\epsilon_{eff}} + (1 - P) \frac{\epsilon_{Si} - \epsilon_{eff}}{\epsilon_{Si} + 2\epsilon_{eff}} = 0$$

где P - пористость ($0 < P < 1$)

Комплексный эффективный показатель преломления:

$$\tilde{n}_{eff} = \sqrt{\epsilon_{eff}}$$

Эффективный показатель преломления:

$$n_{eff} = \text{Re} \tilde{n}_{eff}$$

Эффективный коэффициент поглощения:

$$\alpha_{eff} = \frac{2\omega \text{Im} \tilde{n}_{eff}}{c} = \frac{\omega \text{Im} \epsilon_{eff}}{c \text{Re} \tilde{n}_{eff}}$$

Пример изменения оптических свойств полупроводника после формирования пористых наноструктурированных областей



Эффективные оптические свойства слоев мезопористого кремния (цветные круглые области) определяются упорядоченной структурой пор и кремниевых нанокристаллов. В результате чего они значительно отличаются от свойств кристаллического кремния $c\text{-Si}$, из которого изготовлены.

Выводы

- **Оптические свойства конденсированных фаз вещества можно описывать используя комплексную диэлектрическую проницаемость и комплексный показатель преломления, из которых можно получить коэффициенты поглощения, отражения и другие оптические характеристики, измеряемые в эксперименте.**
- **Для описания оптических свойств металлов и диэлектриков можно использовать классические модели Друде-Лоренца, которые хорошо объясняют как коэффициент отражения, так и поглощение света в отдельных спектральных областях.**
- **Для объяснения оптических свойств полупроводников необходимо использовать квантовую теорию твердых тел и учитывать взаимодействие фотонов с квазичастицами (электронами, дырками, фононами).**
- **Свойства твердотельных наноструктур зависят от состояния находящихся в них квазичастиц (электронов проводимости и дырок, фононов и их комбинаций), которые испытывают вторичное квантование по отношению к их характеристикам в объемных фазах веществ.**
- **Оптические свойства реальных наноструктур следует описывать с учетом теории эффективной среды.**