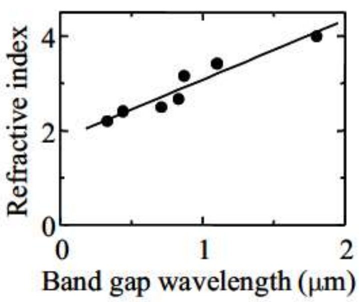
INSTITUTO DE FÍSICA
FACULTAD DE INGENIERÍA
PROPIEDADES ÓPTICAS DE MATERIALES
Curso 2022

Práctico VI – Semiconductores.

Fecha de Entrega: 25 de Noviembre de 2022. [1]

Ejercicio N° 1 (*) – Propiedades Ópticas Infrarrojas de los Semiconductores.

a) La figura muestra el valor del índice de refracción de diferentes materiales semiconductores, medido a 10 μm, en función de la longitud de onda correspondiente a la energía del gap (E_g) de dicho semiconductor: $\lambda_g = hc/E_g$. Utilice las relaciones de Kramers-Krönig para obtener una relación aproximada que justifique esa dependencia.



b) Los electrones de conducción en semiconductores tipo n se comportan en forma similar que los de un electrón salvo por poseer una frecuencia de plasma menor (típicamente en el infrarrojo). Utilizando el modelo de Drude-Lorentz para la constante dieléctrica para estos electrones libres y asumiendo pocas pérdidas ($\gamma << \omega$), encuentre una expresión para el coeficiente de absorción α. Verifique que el mismo es inversamente proporcional a la masa efectiva m^* y el índice de refracción n (supuesto constante), mientras que es directamente proporcional a dichas pérdidas γ, la densidad de portadores N, y el cuadrado de la longitud de onda.

Ejercicio N° 2 – Pozo cuántico (Quantum Well).

Considere un electrón de masa m que solo puede moverse en una dirección (coordenada x) entre dos paredes impenetrables separadas una distancia L. Las funciones de onda estarán dadas por:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\, sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \qquad \text{con } n = 1, 2, 3, \ldots \text{ y } 0 < x < L$$

y autovalores:

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}.$$

[1] - La entrega mínima debe contener los ejercicios marcados con asterisco, que en este repartido son: Ejercicios N° 1, 3 y 4.

Calcule el elemento de matriz d_{ml} para el momento dipolar para una transición entre dos niveles arbitrarios l y m. ¿Qué transiciones son permitidas y cuáles prohibidas?

Ejercicio N° 3 (*) – Borde de Absorción de GaP.

La tabla da los valores del coeficiente de absorción α de GaP a 300 K. ¿Qué puede decir del borde de absorción del GaP de estos datos?

E(eV)	α (cm^{-1})	E(eV)	α (cm^{-1})	E(eV)	α (cm^{-1})
2.2	3.12×10^{1}	2.3	7.79×10^{3}	2.4	2.72×10^{4}
2.5	6.43×10^{4}	2.6	1.44×10^{5}	2.7	7.39×10^{5}
2.8	3.35×10^{6}	2.9	5.38×10^{6}	3.0	6.31×10^{6}
3.1	8.64×10^{6}				

Ejercicio N° 4 (*) – Índice de Refracción de Transiciones Directas e Indirectas.

I) Transiciones Directas:

a) A partir de las relaciones de Kramers-Krönig encuentre la contribución a la parte real de la constante dieléctrica $\in' \equiv \mathrm{Re} \in$ para una transición directa del tipo:

$$\in'' \equiv \mathrm{Im} \in = \begin{cases} A_d \dfrac{\sqrt{\omega - \omega_g}}{\omega^2} & si \quad \omega > \omega_g \\ 0 \quad si \quad \omega < \omega_g \end{cases}$$

donde ω es la frecuencia del campo eléctrico, $\omega_g = \dfrac{E_g}{\hbar}$ con E_g la energía del gap y A_d una constante independiente de ω.

SUGERENCIA: Para realizar la integral correspondiente haga el cambio de variable $x = \sqrt{\omega - \omega_g}$, discutiendo el caso si la integral tiene o no polos (es decir, si $\omega > \omega_g$ u $\omega < \omega_g$).

b) Verifique que a bajas frecuencias $\in'(0)$ tiende a un valor constante finito, que se hallará.

c) De la expresión obtenida para $\omega < \omega_g$ estudie el valor límite en $\omega = \omega_g$. Verifique que el mismo es mayor que el obtenido en la parte anterior.

d) De la expresión obtenida para $\omega > \omega_g$, estudiando el valor límite en $\omega = \omega_g$, verifique que $\in'(\omega)$ es una función continuo, pero que sin embargo su derivada $\dfrac{d\in'}{d\omega}$ es discontinua.

e) (Numérico) Realice una gráfica de $\in'$ en función de ω/ω_g (desde 0 a 10), verificando que existe un máximo de $\in'$ en $\omega=\omega_g$.

II) Transiciones Indirectas:

a) Si se desea repetir el cálculo de la parte a anterior, pero en el caso de una transición indirecta del tipo $\in'' \propto \frac{(\omega-\omega_g)^2}{\omega^2}$ para $\omega > \omega_g$ sucederá que la integral diverge ya que $\in''$ tiende a una constante a alta frecuencia (absorción infinita). De esta forma la contribución de las bandas a alta energía se torna más importante que en las cercanías del gap. Si se limitas la contribución a alta frecuencia, cortando abruptamente esta contribución, y se supone que:

$$\in'' \equiv \mathrm{Im} \in = \begin{cases} A_i \dfrac{(\omega-\omega_g)^2}{\omega^2} & si \quad \omega_g < \omega < \omega_{\max} \\ 0 \quad si \quad \omega < \omega_g \; u \; \omega > \omega_{\max} \end{cases}$$

donde A_i es ahora la constante independiente de ω, encuentre la contribución a la parte real de la constante dieléctrica $\in' \equiv \mathrm{Re} \in$ en este caso.

b) Simplifique el resultado de la parte anterior suponiendo que $\omega_{\max} >> \omega$ y dejándolo expresado en función de $x = \omega/\omega_g$.

c) Verifique que la contribución a bajas frecuencias $\in'(0)$ está acotada pero depende fuertemente del valor de $\omega_{\max}$.

d) (Numérico) Realice una gráfica de $\in'$ en función de ω/ω_g (desde 0 a 10), verificando que la función es continua en $\omega=\omega_g$ y existe un máximo de $\in'$ por encima de este valor.

Ejercicio N° 5 – Gap de Tauc.

Asuma que la transmitancia T de una capa de espesor d de una material amorfo sobre un sustrato transparente, en incidencia normal, en la región de baja transmitancia es:

$T = f(n, n_0)\exp(-\alpha d)$

donde n y n_0 son el índice de refracción del material amorfo y el substrato respectivamente, f una función cuya dependencia no importa, y α el coeficiente de absorción del material amorfo.

a) Verifique el gap de Tauc E_0, que surge de asumir:

$$\alpha = A\frac{(\hbar\omega - E_0)^2}{\omega}$$

con A constante, se puede calcular como:

$$E_0 = \approx \frac{hc}{\sqrt{\lambda_1\lambda_2}} \frac{\sqrt{-\lambda_2 \ln T(\lambda_2)} - \sqrt{-\lambda_1 \ln T(\lambda_1)}}{\sqrt{-\lambda_1 \ln T(\lambda_2)} - \sqrt{-\lambda_2 \ln T(\lambda_1)}}$$

donde λ_1 y λ_2 son dos longitudes de ondas diferentes por encima del gap.

b) Aplique para una película de carbono amorfo hidrogenado para la cual la transmitancia a 640 nm es de 11 % y a 586 nm es de 5 %.

NOTA: El ajuste de una recta en el gráfico de Tauc de $\sqrt{\hbar\omega\alpha}$ contra $\hbar\omega$ para esta muestra da un gap en 1.14 eV.

Ejercicio N° 6 – Materiales amorfos.

Verifique que un material que posee una densidad de estados de la banda de valencia lineal con la energía (asumiendo como origen de energía el máximo de la banda de valencia) y una banda de conducción con una densidad de estados constante (a partir de un borde de valor E_c), obedece la misma ley de dispersión para el coeficiente de absorción α que la ley de Tauc que obedecen las transiciones indirectas.

Ejercicio N° 7 – Cola de Urbach.

La expresión del coeficiente de absorción de Urbach $\alpha = \alpha_1 \exp(h\nu/E_0)$, donde $h\nu$ es la energía de los fotones, α_1 es una absorción constante y E_0 es el denominado parámetro de Urbach, tiene la dificultad que crece infinitamente para altas energías (cuando otros bordes de absorción empiezan a ser importantes). Por esa razón conviene trabajar con una función sigmoidal:

$$\alpha = \frac{\alpha_0}{1 + \exp\left(\dfrac{E_U - h\nu}{E_0}\right)}$$

donde E_U es el denominado gap o foco de Urbach y α_0 es otra absorción constante.

a) Verifique que si $h\nu << E_U$ se recupera la expresión exponencial de Urbach.

b) Verifique que si $h\nu >> E_U$ la exponencial satura (y por lo tanto quedará limitada frente a bordes de absorción tanto directos como indirectos).

Ejercicio N° 8 – Excitones.

a) Calcule la energía de ligación y el radio de un éxciton libre en ZnS, que tiene masas efectivas para la banda de conducción y valencia de m_c= 0.28 m_0 y m_v = 0.5 m_0, respectivamente, (donde m_0 es la masa del electrón libre en reposo) y constante dieléctrica $\in$ = 7.9. ¿Espera que este éxciton sea estable a temperatura ambiente?

b) Calcule la diferencia de longitudes de onda de los estados de éxciton con n = 1 y n = 2 de InP, que tiene energía del gap E_g = 1.424 eV, m_c= 0.077 m_0, m_v = 0.2 m_0 y $\in$ = 12.4.

c) A 4 K el estado fundamental de éxciton en GaAs tiene un pico de absorción de $3\text{x}10^6$ m^{-1} a 1.5149 eV, con un ancho completo a media altura de 0.6 meV. Aplicando el modelo de oscilador armónico amortiguado al éxciton, determine la magnitud y energía del máximo en el índice de refracción justo debajo de la línea de absorción. El índice de refracción no resonante de GaAs a energías por debajo del gap es de 3.5.

d) Los excitones pueden absorber fotones haciendo transiciones a estados excitados en la misma forma que el átomo de hidrógeno. Calcule la longitud de onda de los fotones requeridos para promover un éxciton en GaAs ($\mu = 0.05\ m_0$, $\in = 12.8$) del estado fundamental al primer estado excitado.