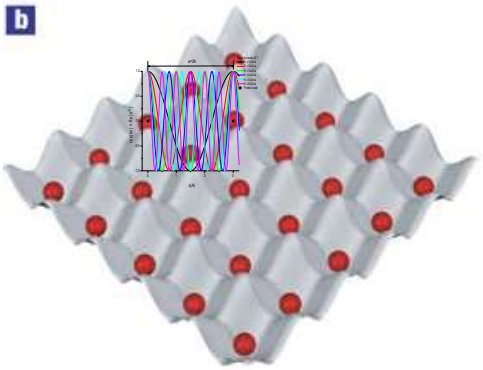
3 Absorção Interbandas

3.0 Teoria de Bandas (Apêndice D)

3.1 Transições Interbandas
3.2 Taxa de transição para absorção direta
3.3 Absorção na borda da banda
em semicondutores de gap direto
3.4 Absorção na borda da banda
em semicondutores de gap indireto
3.5 Absorção Interbandas acima das bordas das bandas
3.6 Medidas de espectros de absorção
3.7 Fotodetectores Semicondutores

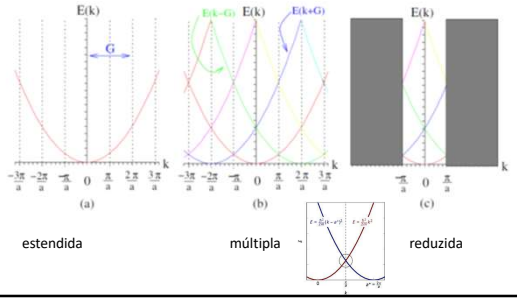
3 Absorção Interbandas

Ainda nas preliminaries (figuras, apêndice D com reforços)



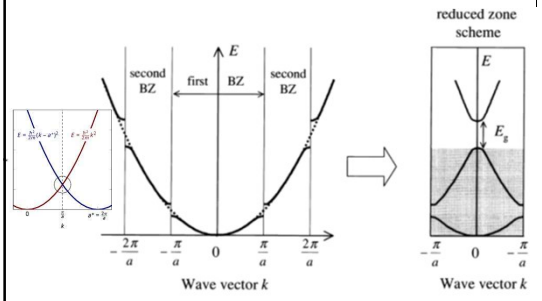
dispersão $E(\vec{k})$

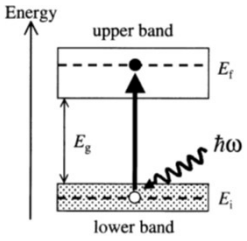
$$E_{\boldsymbol{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$ elétron livre



estendida múltipla reduzida

Modelo Elétrons Quase Livres





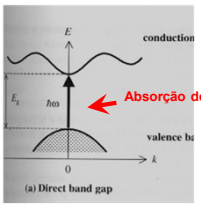
conservação da energia

$$E_f - E_i = \hbar\omega$$

criação de par **elétron - buraco**

3 Absorção Interbandas

3.1 Transições Interbandas
3.2 Taxa de transição para absorção direta
3.3 Absorção na borda da banda em semicondutores de gap direto
3.4 Absorção na borda da banda em semicondutores de gap indireto
3.5 Absorção Interbandas acima das bordas das bandas
3.6 Medidas de espectros de absorção
3.7 Fotodetectores Semicondutores



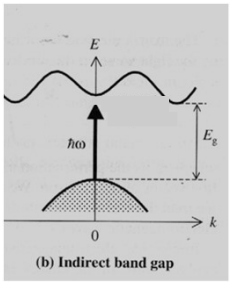
Transições diretas

conservação do momento cristalino:
$\hbar\vec{k}$ - momento linear (elétron livre/fóton)

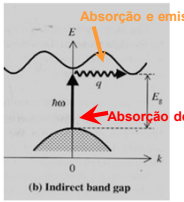
$$\hbar\vec{k_i} - \hbar\vec{k_f} = \hbar\vec{k_{fóton}} \approx \vec{0}$$

$\Rightarrow$ Transições verticais

$$\Rightarrow \vec{k_i} = \vec{k_f}$$



3.1 Transições interbandas



Transições *in*diretas

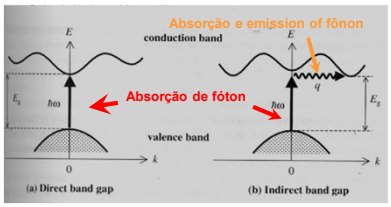
conservação do momento cristalino:

$$\hbar\vec{k}_i - \hbar\vec{k}_f = \hbar\vec{q}_{fônon} \gg \vec{0}$$

⇒ Transições oblíquas

⇒ $necessitam\ \boldsymbol{q}_{fônon}$

3.1 Transições interbandas



3.2 Taxa de transição para absorção direta

coeficiente de absorção $\alpha \propto W_{i->f}$ taxa de transição

$$W_{i\to f} = \frac{2\pi}{h}|M|^2\, g(h\omega).$$ **(Regra de Ouro de Fermi)**

Onde
- Elemento de matriz ***M,***
- Densidade de estados $g(\hbar\omega)$.

$$M = \langle f|H'|i\rangle = \int \psi_f^*(\vec{r})H'\psi_i(\vec{r})d^3\vec{r}$$

$$H' = -\vec{p}_e\vec{E}_{foton}$$

Momento de dipolo elétrico $\vec{p}_e = -e\vec{r}$ x campo $\vec{E}_{foton}$

Elemento de Matriz

$$M$$

Hamiltoniana de perturbação

$$H'(\vec{r}) = e\vec{E}_o.\vec{r}.e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

$$\psi_i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}u_i(\vec{r})e^{i\vec{k}_i.\vec{r}}$$

$$\psi_f(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}u_f(\vec{r})e^{i\vec{k}_f.\vec{r}}$$

$$M = \frac{e}{V}\int_{cristal} u_f^*(\vec{r})e^{-i\vec{k}_f.\vec{r}}\vec{E}_o.\vec{r}.e^{i\vec{k}.\vec{r}}u_i(\vec{r})e^{i\vec{k}_i.\vec{r}}d^3\vec{r}$$

Se o fator de fase na integral não for zero, as diferentes células unitárias estarão fora de fase, e a integral dará zero.

$$M \neq 0$$
$$\Rightarrow$$
$$\hbar\vec{k}_f - \hbar\vec{k}_i = \hbar\vec{k} \quad \text{(conservação de momento)}$$

$$\hbar\vec{k} \cong 0$$
$$\hbar\vec{k}_f \cong \hbar\vec{k}_i \quad \text{(transições verticais)}$$

Bloch => u_i e u_f - periodicidade da rede

$$|M| \propto \int_{célula\ unit} u_f^*(\vec{r})xu_i(\vec{r})d^3\vec{r}$$

X => onda polarizada ao longo do eixo x.

Densidade de Estados

$$g(\hbar\omega)$$

densidade conjunta de estados eletrônicos associada com a energia de fóton $\hbar\omega$

Densidade de estados

- Átomos isolados: níveis de energia discretos
- Sólidos: número grande de níveis de energia em um determinado intervalo (densidade de estados).

$$g(E)dE = núm\ de\ estados\ entre\ E\ e\ E + dE$$

$$g(E)dE = 2g(k)dk$$

spin

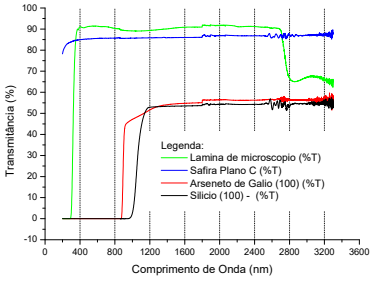
$$g(k)dk = \frac{1}{2\pi^3} 4\pi k^2 dk$$

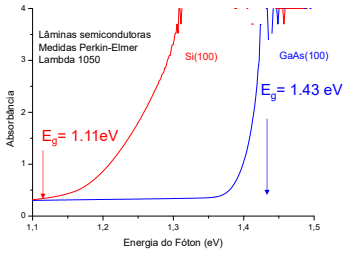
$$g(k) = \frac{k^2}{2\pi^2}$$

$$g(E) = \frac{2g(k)}{dE/dk}$$

Gradiente da curva de dispersão E-k

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)E^{1/2}$$





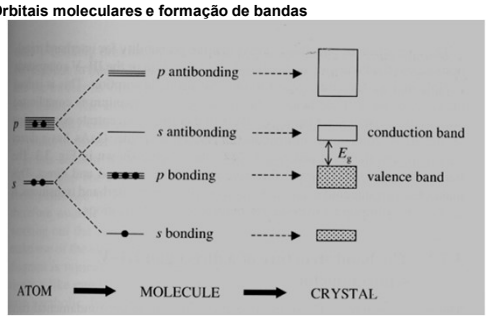
Continuação, Cap.3....

3 Absorção Interbandas

3.1 Transições Interbandas
3.2 Taxa de transição para absorção direta
3.3 Absorção na borda da banda em semicondutores de gap direto
3.4 Absorção na borda da banda em semicondutores de gap indireto
3.5 Absorção Interbandas acima das bordas das bandas
3.6 Medidas de espectros de absorção
3.7 Fotodetectores Semicondutores

3.3 Absorção fundamental em semicondutores de gap direto

Orbitais moleculares e formação de bandas

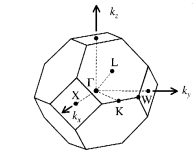


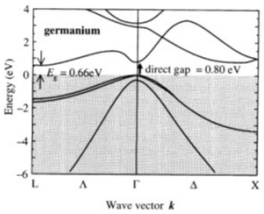
Ge: $4s^2 4p^2$ → $4sp^3$ *anti-lig. (s dominante)* → *banda de condução*

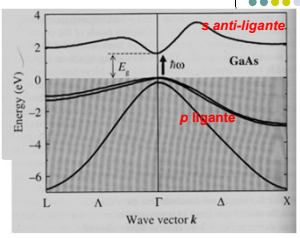
$4sp^3$ *ligantes (p dominante)* → *banda de valência*

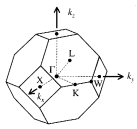
3.3 Absorção no limite das bandas em semicondutores de gap direto

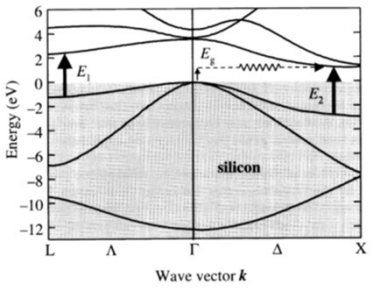
Estrutura de bandas de um semicondutor III-V de gap direto



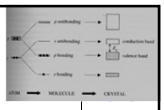








3.3 Absorção fundamental em semicondutores de gap direto



Regras de seleção (transições de dipolo elétrico):

(1) estados inicial => paridade diferente

(2) Δj = -1, 0 or +1. (momento angular total => muda uma unidade)

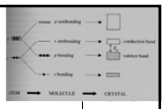
(3) $\Delta l = \pm 1$. (momento angular orbital => muda uma unidade)

(4) $\Delta m_s = 0$. (números quânticos de spin => não muda).

Transições permitidas de dipolo elétrico:

altas taxas de transição, tempos radiativos curtos (10^{-9}– 10^{-8} s)– **fluorescência.**

3.3 Absorção fundamental em semicondutores de gap direto



Regras de seleção (transições de dipolo elétrico):

(1) estados inicial => paridade diferente

(2) Δj = -1, 0 or +1. (momento angular total => muda uma unidade)

(3) $\Delta l = \pm 1$. (momento angular orbital => muda uma unidade)

(4) $\Delta m_s = 0$. (números quânticos de spin => não muda).

Transições proibidas de dipolo elétrico:

Dipolo magnético ou quadrupolo elétrico:

taxas de transição menores e tempos radiativos mais longos (10^{-6} s para acima) – a emissão lenta das transições proibidas de dipolo elétrico são chamadas de **fosforescência.**

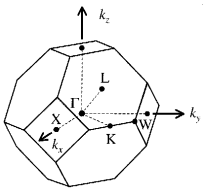
Aula de 19/06/2017

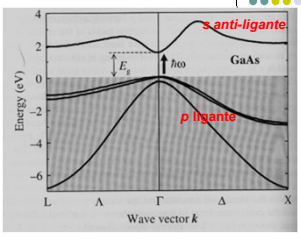
Dispersão de Energia próxima do bandgap
– Gap Direto
– Gap Indireto
Efeito da aplicação de um campo elétrico (Franz-Keldysh)
Efeito da aplicação de um campo magnético (Níveis de Landau)

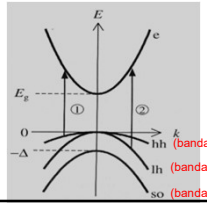
Transições interbandas acima do BandGap (pontos críticos)

3.3 Absorção no limite das bandas em semicondutores de gap direto

Estrutura de bandas de um semicondutor III-V de gap direto







Modelo de 4 bandas (k.p)

hh (banda de buracos pesados)

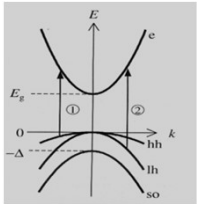
lh (banda de buracos leves)

so (banda split-off, efeito spin - órbita)

Massas efetivas

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2E}{dk^2} \right)^{-1}$$

Relação ***E*— *k*** nas proximidades de k ~ 0



Elétron

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

Buraco

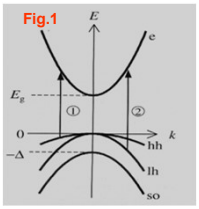
$$E_{hh}(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}^*}$$

$$E_{lh}(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}^*}$$

$$E_{so}(k) = -\Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}^*}$$

Densidade conjunta de estados

Fig.1



$$g(E)=\frac{2g(k)}{dE/dk} \qquad g(k)=\frac{k^2}{2\pi^2}$$

Conservação de energia em transições envolvendo formação de buracos leves ou buracos pesados

$$\hbar\omega = E_C(k)-E_V(k)$$
$$= E_g+\frac{\hbar^2k^2}{2m_e^*}+\frac{\hbar^2k^2}{2m^*_{h(l)h}}$$
$$= E_g+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}$$
$$onde\ \ \frac{1}{\mu}=\frac{1}{m_e^*}+\frac{1}{m^*_{h(l)h}}$$

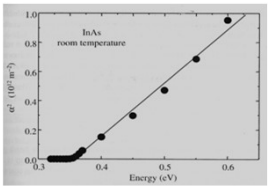
Semicondutor de gap direto

$$g(\hbar\omega)=0 \qquad para\ \ \hbar\omega<E_g,$$
$$g(\hbar\omega)=\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2\mu}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}(\hbar\omega-E_g)^{\frac{1}{2}} \qquad para\ \ \hbar\omega\geq E_g.$$

3.3.4 The frequency dependence of the band edge absorption

$$\alpha(\hbar\omega)\propto W_{i\to f}=\frac{2\pi}{\hbar}|M|^2 g(\hbar\omega).$$

$$g(\hbar\omega)=0 \qquad for\ \ \hbar\omega<E_g,$$
$$g(\hbar\omega)=\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2\mu}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}(\hbar\omega-E_g)^{\frac{1}{2}} \qquad for\ \ \hbar\omega\geq E_g.$$



$$For\ \ \hbar\omega<E_g,\ \ \alpha(\hbar\omega)=0.$$
$$For\ \ \hbar\omega>E_g,\ \ \alpha(\hbar\omega)\propto(\hbar\omega-E_g)^{\frac{1}{2}}.$$

Frequency dependence approximately obeyed
- The coulomb attraction of excitons neglected;
- Impurity or defect states within gap neglected;
- The parabolic band approximation only valid near k = 0.

3.4 Semicondutor de Gap Indireto

The indirect transition involve both photons and phonons ($\hbar\omega$, $\hbar\mathbf{q}$):

$$E_f=E_i+\hbar\omega\pm\hbar\Omega,$$
$$\hbar\vec{k}_f=\hbar\vec{k}_i\pm\hbar\vec{q}.$$

Processo de segunda ordem $P_{fônon}$ x $P_{i=>f\ (elétron\text{-}fóton)}$
Diferente dependência em frequência (mais fraca)

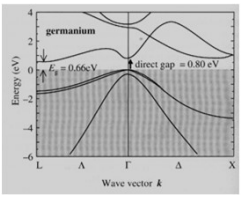
$$gap\ \ indireto,\ \ \alpha^i(\hbar\omega)\propto(\hbar\omega-E_g\mp\hbar\Omega)^2.$$

$$f_{BE}(E)=\frac{1}{\exp(E/k_BT)-1}$$

Dependência de α com T

Bose-Einstein Formula

3.4 Band edge absorption in indirect gap semiconductor



The absorption coefficient of germanium

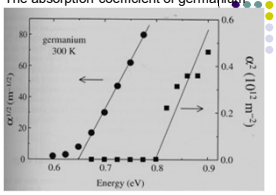


Table 3.1 Phonon energies for germanium at the L point where $\mathbf{q}=\frac{\pi}{a}(1,1,1)$, a being the unit cell size. After [6].

Mode	$\hbar\Omega$ (eV)
Longitudinal acoustic (LA)	0.027
Transverse acoustic (TA)	0.008
Longitudinal optic (LO)	0.030
Transverse optic (TO)	0.035

1. The lowest conduction band minimum occurs at the L point (**k**=π/a(1,1,1), not at Γ (k=0);
2. Indirect gap=0.66eV, direct gap (Γ)= 0.8eV;

$$f_{BE}(E)=\frac{1}{\exp(E/k_BT)-1}$$

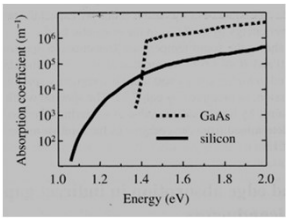
$$300K\Rightarrow k_BT=0.025\ eV$$

3.4 Absorção: gap direto vs indireto

Coeficiente de absorção :

$$gap\ \ indireto,\ \ \alpha^{i}(\hbar\omega) \propto (\hbar\omega - E_g \mp \hbar\Omega)^2.$$

$$gap\ \ direto,\ \ \alpha^{d}(\hbar\omega) \propto (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}.$$



3.3.5 Efeito Eletro-Óptico (Franz-Keldysh)

Dois efeitos principais devidos à aplicação de um campo elétrico externo *E a um semiconductor/isolante*:

$$i)\ para\ \ \hbar\omega < E_g,\ \ \alpha(\hbar\omega) \propto \left(-\frac{4\sqrt{2m_e^*}}{3|e|\hbar E}(E_g - \hbar\omega)^{3/2}\right)$$

$$ii)\ para\ \ \hbar\omega > E_g,\ \ \alpha(\hbar\omega)\ \ \rightarrow oscilações$$

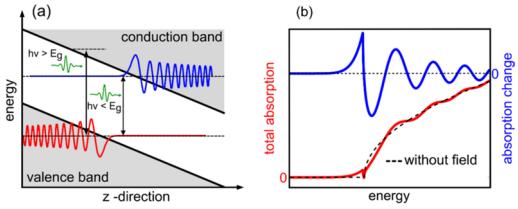
Consequências do efeito F-K

Efeito eletro-óptico:

O campo elétrico modula as constants ópticas (n,κ).

Eletro-refletância:

A refletividade pode mudar devido a modulações nas constants ópticas (n,κ).



3.3.6 Band edge absorption in a magnetic field

The electrons in magnetic field:

$$\omega_c = \frac{eB}{m_0} \quad \text{(cyclotron frequency)}$$

The quantized energy (**Landau levels**):

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_C \qquad (n = 0,1,2\cdots)$$

The energies electrons and holes within the bands are given by:

$$E_n(k_z) = (n+\frac{1}{2})\frac{ehB_z}{m^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$$

Quantized motion in the (x, y) plane, free motion in the z direction. *E*=0 at the top of the valence band:

$$E_n^e(k_z) = E_g + (n+\frac{1}{2})\frac{e\hbar B_z}{m_e^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*}$$

$$E_n^h(k_z) = -(n'+\frac{1}{2})\frac{e\hbar B_z}{m_h^*} - \frac{\hbar^2 k_z'^2}{2m_h^*}$$

The interband transition creates an electron in the conduction band and a hole in valence band

Selection rule: $n = n',\ \ k_z = k'_z$.
(the momentum is negligible)

The transition energy:

$$\hbar\omega = E_n^e(k_z) - E_n^h(k_z)$$

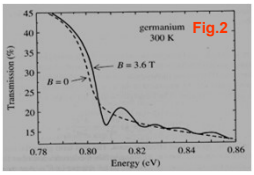
$$= E_g + (n+\frac{1}{2})\frac{ehB_z}{\mu} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu}$$

The absorption spectrum with k_z=0 given by:

$$\hbar\omega = E_g + (n+\frac{1}{2})\frac{ehB_z}{\mu}; \qquad n = 0,1,2\cdots.$$

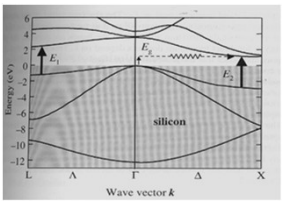
Two consequences:

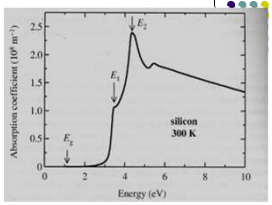
1. **The absorption edge shifts by $heB_z/2\mu$;**
2. **Equally spaced peaks in the spectrum.**



Transmission spectrum of germanium of germanium for B=0 and B=3.6T at 300 K. The electron effective mass can be determined from the energies of minima.

3.5 Absorção Interbandas, acima do bangap

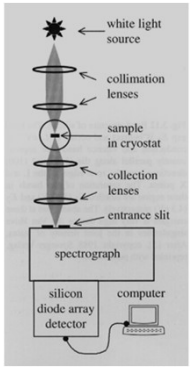




$$g(E) = \frac{2g(k)}{dE/dk}$$

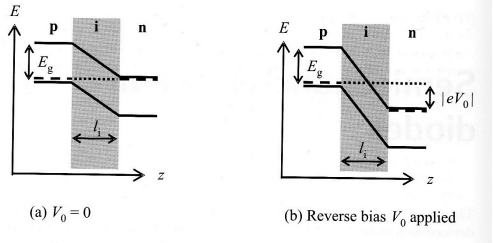
Singularidades de Van Hove dE/dk =0, g(E) diverge (ponto critico)

3.6 Measurement of absorption spectra



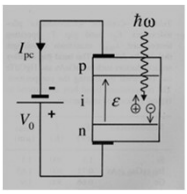
T, R => n, α

Junções p – i – n (apêndice E)



3.7 Semiconductor photodectors

The operating principles:
Light with photon energy greater than the band gap is absorbed in the semiconductor, and this create free electrons in the conduction band and free hole in the valence band. The presence of the light can therefore be detected either by measuring a change in resistance of the sample or by measuring an electrical current in an external circuit.



The p-i-n photodiode is operated in reverse bias with a positive voltage V_o applied to the n-region. This generates of a strong DC electric field E across the i-region. Absorption of photons in the i-region creates free electron – and hole ⊕ that are attracted to the n-region and p-regions respectively then flow into the circuit by the field, generating the **photocurrent I_{pc}**

3.7.1 Photodiodes

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha z}$$

The fraction of light absorbed in a length l :

$$I^{ab} = I_0(1 - e^{-\alpha(\omega)l})$$

Photocurrent I_{pc}

$$I_{pc} = e\eta\frac{P}{\hbar\omega}(1 - e^{-\alpha(\omega)l}).$$

η: quantum efficiency,
$P/\hbar\omega$: the flux of photons per unit time

$$\therefore responsivity = \frac{I_{pc}}{P} = \frac{\eta e}{\hbar\omega}(1 - e^{-\alpha(\omega)l}) \quad (A/W)$$

If $\eta \approx (1 - e^{-\alpha l}) \approx 1$

$$responsivity \approx \frac{I_{pc}}{P} \approx \frac{e}{\hbar\omega}.$$

3.7 Semiconductor photdectors

Table Common semiconductor photodetectors. E_g: band gap, T: operating temperature, λ_{max}: maximum wavelength that can be detected. The band gap of alloy semiconductors such as InGaAs and HgCdTe can be varied by altering the composition. The compositions listed here correspond to typical values used in detectors.

Semiconductor	E_g (eV)	T (K)	λ_{max} (μm)
Si	1.1	300	1.1
$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	0.75	300	1.65
Ge	0.66	300	1.9
Ge	0.73	77	1.7
InAs	0.42	77	3.0
InSb	0.23	77	5.2
$Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te$	0.09	77	14

3.7.2 Photoconductive devices

The device relies on the change of the conductivity of material when illuminated by light. The conductivity increase due to the generation of free carriers after absorption of photons by interband transitions.

Compared with photodiodes, the detectors are simpler, but tend to have slow response times.

3.7.3 Photovoltaic devices (solar cell)

The device generates a photovoltage when irradiated by light. This in turn can be used to generate electrical power in an external power.

Próximos Capítulos

- Cap.4 - Éxcitons
- Cap. 5 – Luminescência
- Cap.6 – Confinamento Quântico
- Cap. 7 – Elétrons livres
- Cap. 8 – Materiais Moleculares
- Cap. 9 – Centros Luminescentes
- Cap. 10 - Fônons