

# F22

## Reflexions- und Transmissionspektroskopie an Halbleitern

Skript: Christian Kaspari, mit Beiträgen von Christoph Cobet  
Betreuer: Christian Kaspari

Berlin, 31. Januar 2005

### Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einführung</b>	<b>3</b>
1.1 Motivation . . . . .	3
1.2 Grober Ablaufplan . . . . .	3
<b>2 Theorie</b>	<b>3</b>
2.1 Extinktion und das Beersche Gesetz . . . . .	3
2.2 Dielektrische Funktion und komplexer Brechungsindex . . . . .	4
2.2.1 Isolatoren . . . . .	5
2.2.2 Absorbierende Medien . . . . .	5
2.3 Bestimmung von $n$ und $k$ mittels Transmissionsmessung . . . . .	7
2.4 Bestimmung von $n$ und $k$ mittels Reflexionsmessung . . . . .	8
2.5 Absorptionsmechanismen in Halbleitern . . . . .	10
2.6 Bandstruktur von Halbleitern . . . . .	10
<b>3 Experiment</b>	<b>13</b>
3.1 Das Spektrometer . . . . .	13
3.2 Transmissionsmessungen . . . . .	15
3.3 Reflexionsmessungen . . . . .	15
3.4 Hinweise zum Experimentieren . . . . .	16
<b>4 Auswertung</b>	<b>17</b>
4.1 Transmissionsmessung . . . . .	17
4.2 Reflexionsmessungen . . . . .	17

4.3	Sonstige Hinweise zur Auswertung . . . . .	18
4.3.1	Protokollbuch . . . . .	18
4.3.2	Plotten von Spektren . . . . .	18
<b>5</b>	<b>Kontrollfragen</b>	<b>19</b>
<b>A</b>	<b>Kramers-Kronig-Relationen (KKR)</b>	<b>20</b>
A.1	Allgemeine Formulierung einer Dispersionsbeziehung . . . . .	20
A.2	Übertragung der Dispersionsbeziehung auf Größen der Elektrodynamik	24

# 1 Einführung

## 1.1 Motivation

Reflexions- und Transmissionsspektroskopie ist eine der ältesten optischen Methoden zur Untersuchung von Stoffeigenschaften. Schon das bloße Hindurchschauen durch einen transparenten Gegenstand oder die Beobachtung der Reflexion an einer glatten Oberfläche ist ja im weitesten Sinne bereits Spektroskopie.

In diesem Versuch sollen die optische Eigenschaften einiger ausgewählter Halbleiter im Spektralbereich vom nahen Infrarot bis zum nahen Ultraviolett untersucht werden. Speziell soll es darum gehen, die dielektrische Funktion bzw. den komplexen Brechungsindex zu bestimmen. Aus diesen Messungen können dann Rückschlüsse auf die Bandstruktur des Halbleiters gezogen werden.

Möchte man eine dielektrische Funktion mit hoher Genauigkeit messen, so benutzt man meist ein polarisationsoptisches Verfahren wie die Ellipsometrie. Dieses Verfahren ist allerdings experimentell sehr aufwendig. Hat man gerade kein Ellipsometer für den interessierenden Spektralbereich zur Verfügung, so muß man auf Reflexions- bzw. Transmissionsmessungen zurückgreifen und die sog. Kramers-Kronig-Relationen ausnutzen. Dies war auch die Methode, die vor der Entwicklung von zuverlässig und automatisiert arbeitenden Ellipsometern in den 70er Jahren angewandt wurde. In bestimmten Spektralbereichen wie dem Röntgenbereich ist sie auch heute noch von Belang.

## 1.2 Grober Ablaufplan

- Vermessung einer Probe in Transmission
- Bestimmung des Reflexionsspektrums mehrerer Proben
- kurze Auswertung der Transmissionsmessung (wenig Aufwand)
- Auswertung der Reflexionsspektren unter Zuhilfenahme von Literaturwerten (viel Aufwand)

# 2 Theorie

## 2.1 Extinktion und das Beersche Gesetz

Beim Durchgang einer elektromagnetischen Welle durch ein Medium wird die Energie (in Abhängigkeit von der Wellenlänge) absorbiert. Die differen-

tielle Änderung der einfallende Strahlungsintensität  $I$  mit der durchlaufenen Schichtdicke  $r$  (bei konstanter Wellenlänge) ist proportional zur Intensität:

$$\frac{dI}{dr} = -\alpha I \quad . \quad (1)$$

Die Proportionalitätskonstante  $\alpha$  (Absorptionskoeffizient mit Dimension einer reziproken Länge) ist eine Stoffkonstante. Durch Integration von (1) folgt das Beersche Gesetz

$$I = I_0 e^{-\alpha r} \quad . \quad (2)$$

Die Größe  $\alpha^{-1}$  wird auch als Lichteindringtiefe bezeichnet. Sie gibt an, in welcher Tiefe unter der Oberfläche die Intensität auf  $1/e$  abgeklungen ist. Der Exponentialterm  $\alpha r$  wird auch als Extinktion oder *absorbance*  $A$  bezeichnet:

$$A = \ln \left( \frac{I_0}{I} \right) = \alpha r \quad . \quad (3)$$

## 2.2 Dielektrische Funktion und komplexer Brechungsindex

Alle Phänomene der Elektrodynamik werden durch die Maxwell'schen Gleichungen beschrieben:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

Die darin auftretenden Größen  $\mathbf{E}$  (elektrisches Feld),  $\mathbf{D}$  (dielektrische Verschiebung),  $\mathbf{B}$  (magnetische Induktion),  $\mathbf{H}$  (magnetisches Feld) und  $\mathbf{J}$  (Stromdichte) sind durch die Materialgleichungen bzw. durch das verallgemeinerte Ohmsche Gesetz miteinander verknüpft:

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \mathbf{D}[\mathbf{E}, \mathbf{B}] & \mathbf{J} &= \mathbf{J}[\mathbf{E}, \mathbf{B}] \\ \mathbf{H} &= \mathbf{H}[\mathbf{E}, \mathbf{B}] \end{aligned} \quad (5)$$

In den meisten Materialien können nach einer Multipolentwicklung der Ladungsverteilung die elektrische Quadrupoldichte und alle Beiträge höherer Ordnung vernachlässigt sowie die Permeabilitätszahl  $\mu_r$  zu 1 angenommen werden. Das Feld der Ladungsverteilung wird dann bei Anwesenheit äußerer Felder durch die elektrische Dipoldichte (elektrische Polarisation)  $\mathbf{P}$  be-

stimmt. Die beiden Materialgleichungen (5) erhalten in der Fourierdarstellung üblicherweise die Form:

$$\begin{aligned}\mathbf{D}[\omega] &= \varepsilon_0 \mathbf{E}[\omega] + \mathbf{P}[\mathbf{E}[\omega], \omega] \\ &= \varepsilon_0 (1 + \chi_e[\omega]) \mathbf{E}[\omega] = \varepsilon_0 \varepsilon_r[\omega] \mathbf{E}[\omega] \\ \mathbf{B}[\omega] &= \mu_0 \mu_r[\omega] \mathbf{H}[\omega]\end{aligned}\quad (6)$$

Die dielektrische Funktion  $\varepsilon_r$  und die elektrische Suszeptibilität  $\chi_e$  sind in der Fourierdarstellung Skalare oder in anisotropen Materialien auch Tensoren.

### 2.2.1 Isolatoren

Mit der aus den Maxwell'schen Gleichungen abgeleiteten Wellengleichung für das elektrische Feld in Isolatoren ( $\mathbf{J} = 0$ ),

$$\Delta \mathbf{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}, \quad (7)$$

ergeben sich als Lösungen der Maxwell'schen Gleichungen (Feldgleichungen) transversale elektromagnetische Wellen, die sich z.B. in Richtung der positiven  $x$ -Achse ausbreiten. Die elektrischen Feldkomponenten parallel zur  $y$ - und  $z$ -Achse haben dann die Form:

$$E_y = A_y e^{i\omega(t-ax)}, \quad E_z = A_z e^{i\omega(t-ax)+i\delta}. \quad (8)$$

$A_y$  bzw.  $A_z$  sind die Amplituden der  $y$ - bzw.  $z$ -Komponente und  $\delta$  ist die Phasenverschiebung zwischen diesen Komponenten. Die Phasengeschwindigkeit ist in der oben genannten Dipolnäherung gegeben durch:

$$v = \frac{1}{a} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_r \varepsilon_0 \mu_0}} \quad (9)$$

In der Optik bezeichnet man das Verhältnis der Phasengeschwindigkeit im Vakuum  $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$  zu derjenigen in einem anderen Medium als Brechungsindex  $n$ . Nach (9) gilt dann:

$$n = \frac{c}{v} = ca = \frac{\sqrt{\varepsilon_r \varepsilon_0 \mu_0}}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} = \sqrt{\varepsilon_r} \quad , \quad \Rightarrow \quad n^2 = \varepsilon_r \quad . \quad (10)$$

### 2.2.2 Absorbierende Medien

In Medien mit einer nicht verschwindenden Leitfähigkeit, die sich in erster Näherung aus dem Ohm'schen Gesetz ergibt ( $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ ), hat die Wellengleichung für das elektrische Feld die Form:

$$\Delta \mathbf{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \sigma \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \quad (11)$$

Im Vergleich zu (7) ist hier nun ein Dämpfungsglied enthalten. Die zugehörigen Lösungen sind wieder transversale Wellen:

$$\mathbf{E} = \mathbf{A}e^{i\omega(t-ax)}e^{-\omega bx}, \quad (12)$$

mit  $a = \sqrt{\varepsilon_0\varepsilon_r\mu_0}$  (wie oben) und  $b = \sqrt{\sigma\mu_0/\omega}$ . Dies ist nun eine gedämpfte Welle. Aus dieser Darstellung ist ersichtlich, daß im nicht statischen Fall ( $\omega \neq 0$ ) eine Absorption oder Leitfähigkeit durch einen komplexen Brechungsindex  $\hat{n}$  repräsentiert werden kann:

$$\hat{n} = n - ik = c(a - ib). \quad (13)$$

Die Festlegung des Vorzeichens des Extinktionskoeffizienten<sup>1</sup>  $k$  ist eine reine Konvention, die in der Literatur leider variiert. Die ebene Welle wird dann beschrieben durch:

$$\mathbf{E} = \mathbf{A}e^{i\omega(t-\frac{\hat{n}}{c}x)}e^{-\omega\frac{k}{c}x} = \mathbf{A}e^{i\omega(t-\frac{\hat{n}}{c}x)} \quad (14)$$

Mit der obigen Definition eines komplexen Brechungsindexes ist es naheliegend, auch die dielektrische Funktion in leitenden bzw. absorbierenden Medien als eine komplexe Größe zu definieren. Dies geschieht analog zu (10):

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon_1 - i\varepsilon_2 = \hat{n}^2 = n^2 - k^2 - 2ink. \quad (15)$$

Die erste Materialgleichung (5) erhält damit die Form

$$\begin{aligned} \mathbf{D}[\omega] &= \varepsilon_0\mathbf{E}[\omega] + \mathbf{P}[\mathbf{E}[\omega], \omega] \\ &= \varepsilon_0(1 + \hat{\chi}_e[\omega])\mathbf{E}[\omega] = \varepsilon_0\hat{\varepsilon}[\omega]\mathbf{E}[\omega], \end{aligned} \quad (16)$$

und die Polarisation sowie die elektrische Suszeptibilität  $\hat{\chi}_e$  sind komplexe Skalare bzw. in anisotropen Materialien Tensoren. An dieser Stelle sei noch einmal darauf hingewiesen, daß  $\hat{n}$ ,  $\hat{\varepsilon}$  und  $\sigma$  stark frequenzabhängige Größen sind. Die üblicherweise als Leitfähigkeit bezeichnete Größe  $\sigma_0$  ist die Leitfähigkeit im stationären Grenzfall ( $\omega = 0$ ). So kann ein als guter Leiter bekanntes Medium, wie z.B. eine NaCl-Lösung, durchaus transparent im sichtbaren Spektralbereich sein.

Bei der Vermessung einer Probe (an Luft) sollte man außerdem beachten, daß man nur eine effektive dielektrische Funktion  $\langle\hat{\varepsilon}\rangle$  bzw. einen effektiven komplexen Brechungsindex  $\langle\hat{n}\rangle$  mißt, da sich eine einige nm dicke Oxidschicht auf der Probe befindet, die z.B. für eine Dämpfung von  $\varepsilon_2$  im blauen und UV-Spektralbereich sorgt. Das reflektierte Meßlicht enthält Informationen

---

<sup>1</sup>hat rein gar nichts mit dem Wellenvektor zu tun, wird manchmal auch als  $\kappa$  bezeichnet

über alle Schichten innerhalb der Eindringtiefe des Lichts (daher die spitzen Mittelungsklammern). Solche Mehrschichtsysteme können bei Kenntnis der dielektrischen Funktionen der Materialien und deren Dicken numerisch behandelt werden. Man kann so z.B. in der Ellipsometrie Schichtdicken im nm-Bereich berechnen oder die dielektrische Funktion eines Schichtmaterials (bei Kenntnis aller anderen) bestimmen.

### 2.3 Bestimmung von $n$ und $k$ mittels Transmissionsmessung

Betrachtet man ausgehend von (14) nur den Dämpfungsterm (also die Einhüllende) der ebenen Welle beim Durchgang durch ein absorbierendes Medium, so erhält man

$$|\langle \mathbf{E} \rangle| \sim e^{-\omega \frac{k}{c} x} \quad , \quad (17)$$

wobei die  $\langle \rangle$ -Klammern für die zeitliche Mittelung stehen. Bezogen auf die Intensität (Betragsquadrat der Feldstärke) ergibt sich

$$\langle I \rangle \sim e^{-2\omega \frac{k}{c} x} \quad . \quad (18)$$

Vergleicht man die Exponenten der Dämpfung in (18) und (2), so erhält man

$$\alpha = 2\omega \frac{k}{c} \quad . \quad (19)$$

Mit  $\omega = 2\pi\nu$  und  $c = \lambda\nu$  erhält man

$$\alpha = 4\pi\nu \frac{k}{\lambda\nu} = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad \Leftrightarrow \quad k = \frac{\alpha\lambda}{4\pi} \quad , \quad (20)$$

mit der man  $k$  direkt aus der Transmission  $\frac{I}{I_0}$  und der Probendicke (über (3)) bestimmen kann.

Zur Bestimmung des Brechungsindex  $n$  nutzt man den Umstand, daß  $n$  und  $k$  nicht unabhängig voneinander sind, sondern, da sie ein lineares, zeitunabhängiges und kausales System darstellen, durch eine fundamentale Dispersionsbeziehung (die Kramers-Kronig-Relationen) miteinander verknüpft sind (wie übrigens auch  $\varepsilon_1$  und  $\varepsilon_2$ ). Eine ausführliche Darstellung befindet sich im Anhang A.

Die Kramers-Kronig-Relationen lauten:

$$\begin{aligned} n(\omega) - 1 &= \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\omega' k(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \\ k(\omega) &= -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{n(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad . \end{aligned} \quad (21)$$

Es handelt sich bei diesen Beziehungen um Hauptwertintegrale ( $\mathcal{P}$  steht für *principal value*). Die Integration erfolgt numerisch, wobei  $k$  in einem möglichst großen Spektralbereich bekannt sein sollte, da ja eigentlich über alle Frequenzen integriert werden muß.

Das experimentelle Problem bei dieser Methode besteht darin, daß in den Wellenlängenbereichen, in denen die Probe undurchsichtig ist, eine Bestimmung der Absorptionskoeffizienten sehr schwierig ist. Da die Absorption exponentiell mit der Probendicke ansteigt, ist eine Transmissionsmessung selbst mit Spektrometern mit großem Dynamikbereich nicht realistisch. Die optischen Eigenschaften in diesen Bereichen sind aber meist der Grund für solche Untersuchungen, denn eine Kramers-Kronig-Integration über einen Bereich mit  $k \sim 0$  liefert keine aussagekräftigen Werte für  $n$ .

Ein möglicher Ausweg ist, mit einem Satz von verschiedenen dünnen Proben für verschiedene Wellenlängenbereiche zu arbeiten, deren Dicke immer in der Nähe der Lichteindringtiefe  $\alpha^{-1}$  liegt. Dieses Verfahren ist jedoch in Bezug auf die Probenherstellung sehr aufwendig, so daß man alternativ meist auf Reflexionsmessungen ausweicht.

## 2.4 Bestimmung von $n$ und $k$ mittels Reflexionsmessung

Wird Licht unter senkrechtem Einfall an einer Probe reflektiert, so gilt für den (komplexen) Amplitudenreflexionskoeffizienten

$$\hat{r}(\omega) = \frac{E_{\text{einfallend}}}{E_{\text{reflektiert}}} = \frac{\hat{n} - 1}{\hat{n} + 1} = \frac{n - 1 - ik}{n + 1 - ik} \quad . \quad (22)$$

Eine Zerlegung nach Betrag  $\rho$  und Phase  $\theta$  liefert:

$$\hat{r}(\omega) = \rho(\omega)e^{i\theta(\omega)} = \rho(\omega)(\cos \theta(\omega) + i \sin \theta(\omega)) \quad . \quad (23)$$

Würde man  $\hat{r}$  kennen, so könnte man (22) in Real- und Imaginärteil zerlegen und so  $n$  und  $k$  berechnen. Die durch die Messung gewonnene Größe ist aber die (Intensitäts-)Reflektivität

$$R(\omega) = |\hat{r}(\omega)|^2 = \hat{r}^*(\omega)\hat{r}(\omega) = \rho(\omega)^2 \quad , \quad (24)$$

aus der man zwar  $\rho$  berechnen kann, die aber explizit keinerlei Phaseninformation enthält (implizit schon!). Wie also kommt man an die Phaseninformation?

Dazu bedient man sich eines mathematischen Tricks: man nimmt den Logarithmus von (23)!

$$\ln \hat{r}(\omega) = \ln \rho(\omega) + i\theta(\omega) = \ln \sqrt{R(\omega)} + i\theta(\omega) \quad (25)$$



Damit hat man mit dem (durch Messung zugänglichen) Realteil  $\ln \sqrt{R(\omega)}$  und dem Imaginärteil  $\theta(\omega)$  zwei Größen, die ein lineares, zeitunabhängiges und kausales System bilden, so daß sich eine Dispersionsbeziehung formulieren läßt:

$$\theta(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\ln \left( \sqrt{R(\omega')} \right)}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' = -\frac{\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\ln (R(\omega'))}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad . \quad (26)$$

Damit kann man theoretisch, falls  $R$  über den gesamten Spektralbereich bekannt ist, die Phase berechnen. Numerisch stößt man allerdings noch auf Probleme, die mit der Polstelle bei  $\omega' = \omega$  zu tun haben. Mehr dazu am Ende dieses Abschnitts, zunächst gelte die Phase als vollständig bekannt. Als weiteren Schritt zerlegt man (22) in Real- und Imaginärteil und erhält mit (23) folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} \sqrt{R} \cos \theta &= \frac{n^2 + k^2 - 1}{(n + 1)^2 + k^2} \\ \sqrt{R} \sin \theta &= -\frac{2k}{(n + 1)^2 + k^2} \quad . \end{aligned} \quad (27)$$

Als physikalisch sinnvolle Lösungen erhält man:

$$\begin{aligned} n(\omega) &= \frac{1 - R(\omega)}{1 + R(\omega) - 2\sqrt{R(\omega)} \cos \theta(\omega)} \\ k(\omega) &= \frac{-2\sqrt{R(\omega)} \sin \theta(\omega)}{1 + R(\omega) - 2\sqrt{R(\omega)} \cos \theta(\omega)} \quad . \end{aligned} \quad (28)$$

Mit der gemessenen Reflektivität  $R$  und der daraus berechneten Phase  $\theta$  könnte man also den komplexen Brechungsindex (und daraus die dielektrische Funktion) berechnen.

Die Hauptschwierigkeit ist aber zunächst noch Gleichung (26), die aufgrund der Polstelle Probleme bei der numerischen Integration macht. Wie man in [7] in Anhang G.1 nachlesen kann, behilft man sich mit einer Ersatzfunktion, mit der man schließlich

$$\theta(\omega) = -\frac{\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\ln (R(\omega')/R(\omega))}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (29)$$

erhält. Es muß also kein Hauptwertintegral mehr gebildet werden. Diese Gleichung hat sogar den Vorteil, daß sich ein über den gesamten Frequenzbereich konstanter prozentualer Fehler in der Messung von  $R$  herausdividiert. Die numerische Berechnung von (29) wird durch ein in C geschriebenes und von Origin angesteuertes Programm durchgeführt.

## 2.5 Absorptionsmechanismen in Halbleitern

Die dielektrische Funktion eines Halbleiters wird durch folgende Faktoren beeinflusst:

- der Verlauf der Energiebänder (nahes IR, sichtbarer Bereich, UV),
- optische Phononen (mittleres und fernes IR),
- freie Ladungsträger (gesamter IR-Bereich) und
- Verunreinigungen (*impurities*, fernes IR).

Dieser Versuch beschäftigt sich ausschließlich mit dem ersten Punkt.

Die Absorption an der fundamentalen Bandkante  $E_g$  kann man zunächst durch ein einfaches Modell beschreiben. Man nimmt dazu einen direkten Halbleiter mit parabolischem Valenz- und Leitungsband (*valence band*, VB und *conduction band*, CB) an und erhält in diesem Modell

$$n(\lambda)\alpha(\lambda) = C \frac{1}{\hbar\omega} \sqrt{\hbar\omega - E_g}, \quad (30)$$

wobei  $C$  eine die jeweilige Bandstruktur beschreibende Konstante ist:

$$C = \frac{2e^2}{m_0^2 c} \left( \frac{2m_{cv}^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} |P_{cv}|^2. \quad (31)$$

In (31) ist  $P_{cv}$  das Übergangsmatrixelement, welches die Übergangswahrscheinlichkeit bestimmt.  $m_0$  ist die freie Elektronenmasse und  $m_{cv}^*$  ist die reduzierte effektive Masse für Valenz- und Leitungsband,

$$\frac{1}{m_{cv}^*} = \frac{1}{m_c^*} + \frac{1}{m_v^*}. \quad (32)$$

Nimmt man nun in (30) an, daß sich der Brechungsindex  $n$  nur leicht mit der Wellenlänge ändert, so erwartet man einen wurzelförmigen Verlauf der Absorption, der an der Bandkante einsetzt.

## 2.6 Bandstruktur von Halbleitern

Als Bandstruktur eines Halbleiters wird die Dispersionsrelation  $E(\mathbf{k}) = \hbar\omega(\mathbf{k})$  der elektronischen Wellenfunktionen bezeichnet. Die Bandstruktur von Galliumarsenid ist zusammen mit dem komplexen Brechungsindex in Abbildung 1 dargestellt.

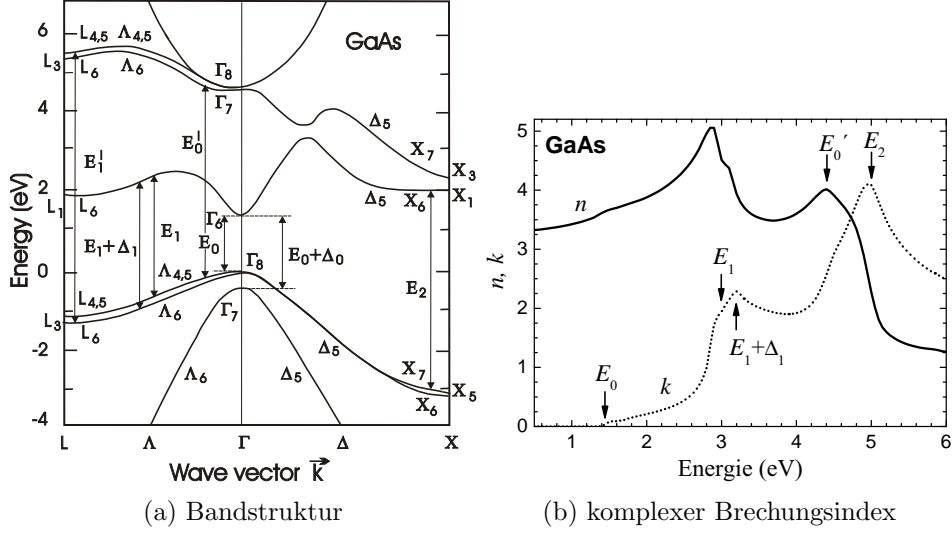


Abbildung 1: Bandstruktur (a) und komplexer Brechungsindex (b) von GaAs. Die direkten optischen Übergänge ( $\mathbf{k}$ -Erhaltung) sind in der Bandstruktur eingezeichnet, beim rechten Graphen sind nur einige Übergänge dargestellt.

*Direkte* optische Übergänge zwischen Bändern (d.h.  $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}_{\text{Photon}} \approx \mathbf{0}$ , also praktisch senkrecht im Bänderschema) sind an solchen Punkten möglich, wo die Bänder parallel verlaufen. Wenn Valenzbandmaximum und Leitungsbandminimum (globale Extrema) bei gleichem  $\mathbf{k}$ -Vektor liegen, so spricht man von einem direkten Halbleiter, da dann der  $E_0$ -Übergang direkt ist. Der Verlauf der dielektrischen Funktion in der Nähe des Bandgaps ist mit  $x := E/E_g$  näherungsweise

$$\varepsilon_1(x) - \text{const} = \begin{cases} \text{const} \cdot (2 - \sqrt{1+x})/x^2, & x > 1 \\ \text{const} \cdot (2 - \sqrt{1+x} - \sqrt{1-x})/x^2, & x < 1 \end{cases} \quad (33)$$

und

$$\varepsilon_2(x) = \begin{cases} \text{const} \cdot \sqrt{x-1}/x^2, & x > 1 \\ 0, & x < 1 \end{cases} \quad (34)$$

Die Verläufe sind in [Abbildung 2](#) dargestellt.

Liegen das globale Valenzbandmaximum und das globale Leitungsbandminimum bei unterschiedlichen  $\mathbf{k}$ , so ist ein optischer Übergang nur mit Beteiligung von Phononen (großes  $\mathbf{k}$  im Gegensatz zu Photonen) möglich. Bei  $T = 0$  sind solche Übergänge verboten. In diesem Fall spricht man von einem *indirekten* Halbleiter. Der Verlauf des Imaginärteils der dielektrischen

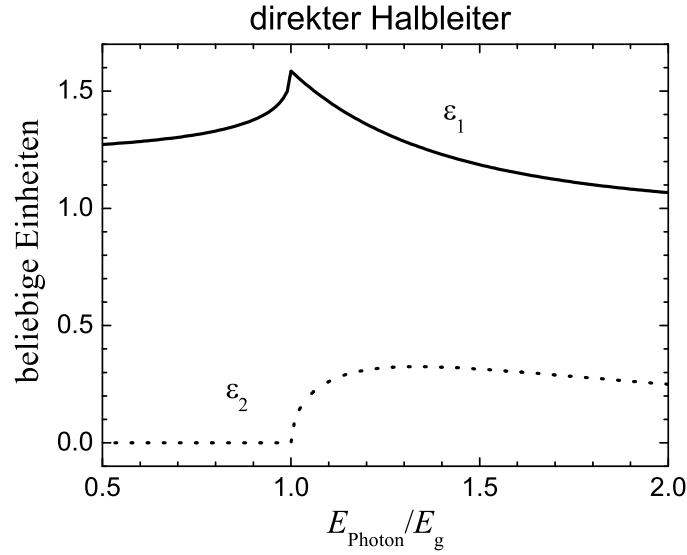


Abbildung 2: Näherungsweise qualitativer Verlauf der dielektrischen Funktion eines direkten Halbleiters in der Umgebung der Bandlücke  $E_g$ .

Funktion folgt der Beziehung

$$\epsilon_2(E) \sim \begin{cases} (E \mp E_p - E_g, & E > E_g \pm E_p \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (35)$$

wobei  $E_p$  der Phononenenergie entspricht. Je nachdem ob die Absorption unter Erzeugung oder Vernichtung eines Phonons erfolgt, ergeben sich unterschiedlich verschobene Parabeläste, siehe Abbildung 3.

Eine Herleitung von (33) – (35) sowie ausführliche Darstellungen z.B. zur Nomenklatur der Übergänge findet man in [2].

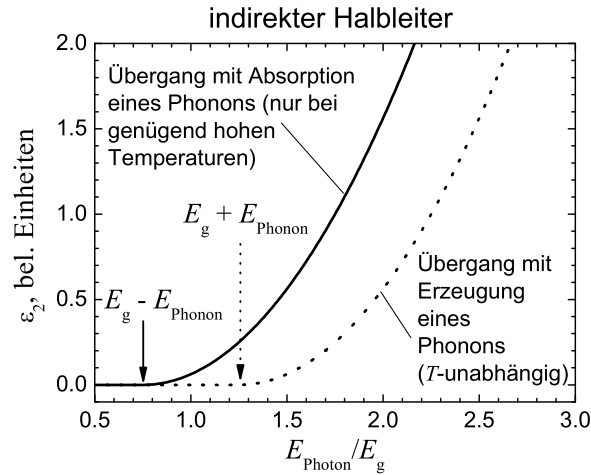


Abbildung 3: Näherungsweise qualitativer Verlauf des Imaginärteils der dielektrischen Funktion eines indirekten Halbleiters in der Umgebung der Bandlücke  $E_g$ .

## 3 Experiment

### 3.1 Das Spektrometer

Für die Untersuchung wird ein kommerzielles Spektrophotometer (Shimadzu UV-260) benutzt. Es handelt sich dabei um ein 2-Strahl-Spektrometer für den Meßbereich von 190 – 900 nm mit integriertem Computer und Thermodrucker.

Der Strahlengang des Spektrometers ist in Abbildung 4 dargestellt. Um den Wellenlängenbereich abzudecken, ist das Gerät mit zwei Lichtquellen ausgestattet: einer Halogenlampe für den Bereich von 900 bis minimal 322 nm und einer Deuteriumlampe für den Bereich 190 bis maximal 392 nm.

Der Licht der jeweiligen Quelle wird durch einen Monochromator in Czerny-Turner-Anordnung monochromatisiert und mit einem halbdurchlässigen Spiegel ( $M_6$ ) in Proben- und Referenzstrahl aufgeteilt. Diese werden mit dem Chopper abwechselnd aus- und eingeblendet. Der Photomultiplier mißt so abwechselnd beide Strahlengänge. Durch die Normierung des Probensignals auf das Referenzsignal wird die spektrale Abhängigkeit der Lichtquelle und aller sonstigen optischen Komponenten eliminiert.

Da die Ausgabe mittels Thermodrucker etwas unzeitgemäß ist, werden die

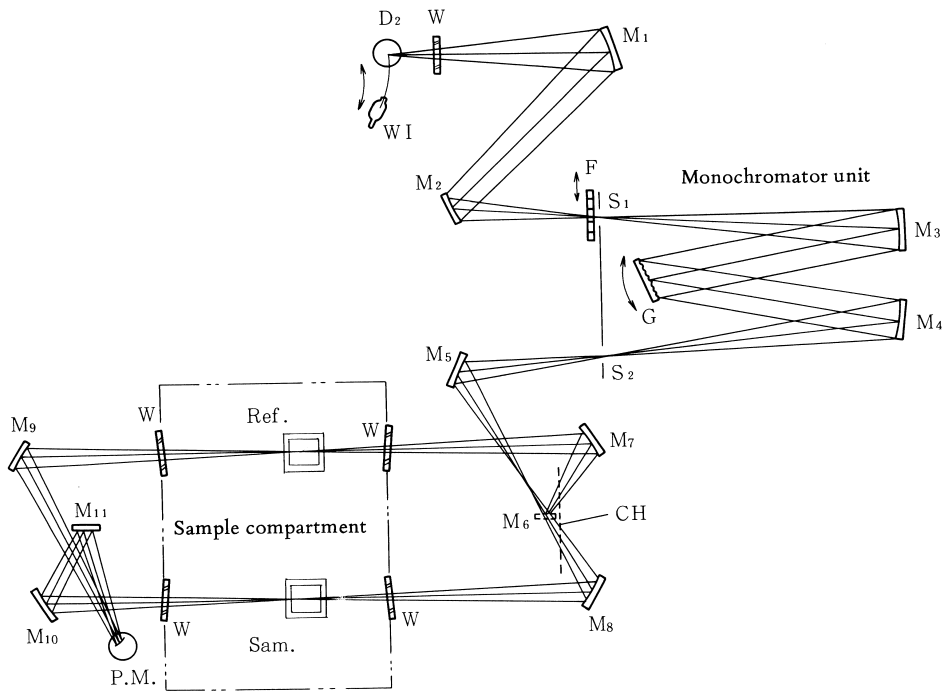


Abbildung 4: Draufsicht des Spektrometerstrahlengangs. WI: Halogenlampe; D<sub>2</sub>: Deuteriumlampe; W: optische Fenster; M<sub>i</sub>: Spiegel (M<sub>6</sub> ist halbdurchlässig); F: Filterrad; S<sub>1,2</sub>: Eintritts- und Austrittsspalt; G: holographisches Gitter; CH: Chopperrad; Sam.: Probenstrahlengang (*sample*); Ref.: Referenzstrahlengang; P.M.: Photomultiplier

Daten über den GPIB(IEEE 488)-Bus von einem in LabView geschriebenen Programm ausgelesen.

Dieses Programm wurde von einer FP-Gruppe (Flunkert/Milde) im WS 03/04 geschrieben, ist aber noch verbesserungsbedürftig. Es sei hiermit allen Studenten empfohlen, sich dieses Programm anzusehen, es zu versuchen zu verstehen und evtl. Verbesserungen vorzunehmen.

## 3.2 Transmissionsmessungen

Für die Untersuchung der Transmission benötigt man eine beidseitig polierte Probe. Viele Halbleitermaterialien in Wafer-Form sind aus Kostengründen auf der Rückseite rau, was zu einer Streuung des Lichts und damit zu einer Verfälschung der Meßwerte führen würde.

Für die Messung sollte man einen Halter benutzen, der

- auf der Bodenplatte fixiert werden kann,
- eine definierte Öffnung besitzt (falls Proben benutzt werden, die kleiner als der Strahlquerschnitt sind) und
- die Probe festhält, ohne sie zu beschädigen.

Weiterhin ist es wichtig, darauf zu achten, daß der Probenstrahl senkrecht auf die Probenoberfläche trifft (der Rückreflex sollte im Probenstrahl zurücklaufen).

## 3.3 Reflexionsmessungen

Für die Vermessung von Proben in Reflexion wurde aus einem alten ATR-Einsatz ein behelfsmäßiger Reflexionseinsatz aufgebaut.

Nach dem Hochfahren des Gerätes wird der Teil mit den beiden großen Spiegeln<sup>2</sup> wieder eingebaut, fixiert und es werden die beiden mit Hebeln versehenen Spiegel auf maximales Signal justiert. Dazu legt man einen aluminiumbedampften Oberflächenspiegel (Achtung: keine Schutzschicht!) vorsichtig mit der verspiegelten Seite nach unten auf den Probenteller.

Zu jeder Messung einer Probe muß eine Messung mit dem Al-Spiegel durchgeführt werden. Die Reflektivität der Probe bestimmt man, indem man zuerst die Apparatfunktion des Reflexionseinsatzes über die als bekannt angenommene Reflektivität<sup>3</sup> von Aluminium (siehe Abbildung 5, ist als ASCII-Datei verfügbar) bestimmt und anschließend die Messung der Probe auf die Apparatfunktion normiert.

---

<sup>2</sup>Der Probenteller mit dem mittleren Spiegel kann dauerhaft eingebaut bleiben.

<sup>3</sup>Berechnung der Amplitudenreflektivität bei gegebenem  $n, k$  über  $R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}$ .

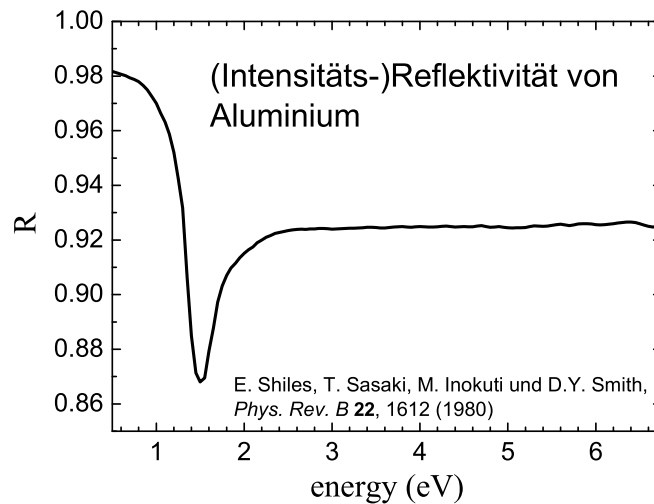


Abbildung 5: Reflektivität von Aluminium. Zu finden in [3].

Es ist auch möglich, die **Baseline**-Funktion des Spektrometers bei aufgelegtem Al-Spiegel zu benutzen. Alle Probenmessungen beziehen sich auf die zu 100% angenommene Reflektivität des Aluminiums, was später ebenfalls mit der tatsächlichen Reflektivität von Aluminium korrigiert werden muß.

### 3.4 Hinweise zum Experimentieren

Hier einige Hinweise, die für eine erfolgreiche Durchführung des Experiments beachtet werden sollten:

1. Vor dem Einschalten des Spektrometers ist unbedingt darauf zu achten, daß in der Probenkammer sowohl der Proben- als auch der Referenzstrahlengang nicht durch Aufbauten (wie z.B. dem Reflexionseinsatz) blockiert ist. Alle den Probenstrahlengang verändernden Komponenten dürfen erst nach Hochfahren des Geräts eingebaut werden. Die Abdeckung des Probenraums muß beim Hochfahren des Geräts geschlossen sein.
2. Bei den im Experiment benutzten Spiegeln handelt es sich um Oberflächenspiegel, die teilweise keine Schutzschicht besitzen. Es ist peinlich genau darauf zu achten, die Oberfläche nicht zu zerkratzen und keine



Fingerabdrücke zu hinterlassen – ggf. sind Handschuhe zu tragen. Auch das Abwischen der Oberfläche ist tabu! Das gilt natürlich auch für alle Halbleiterproben (Plastikpinzette benutzen!).

## 4 Auswertung

### 4.1 Transmissionsmessung

Bei der Transmissionsmessung wird mittels (20) die Absorption  $k$  bestimmt. Theoretisch könnte man über (21) die Brechzahl  $n$  berechnen, aufgrund der Unzulänglichkeiten des Verfahrens und der Ungenauigkeit bei der Bestimmung von  $k$  macht das aber keinen Sinn. Die Transmissionsmessung soll nur motivieren, warum Reflexionsmessungen sehr viel sinnvoller sind.

### 4.2 Reflexionsmessungen

Bei der Berechnung der Gerätefunktion des Reflexionseinsatzes müssen zwei Datensätze durcheinander dividiert werden, deren Datenpunkte für unterschiedliche Wellenlängen gegeben sind: die Literaturwert-Reflektivität von Aluminium und die gemessene Reflektivität des Al-Kalibrierspiegels. Eine Möglichkeit, dies durchzuführen, ist die Funktion `Analysis->Simple Math...` von Origin, die aber nur bei aktiviertem Graph zur Verfügung steht. Dabei werden die Daten der Dividend-Reihe mit dem Ergebnis überschrieben, so daß die Apparatfunktion dann in der Datenpunkt-Frequenz der Messungen vorliegt, was ja auch gewünscht ist.

Da im Experiment ja nur über einen sehr begrenzten Spektralbereich gemessen wird, werden Literaturwerte für die in beide Richtungen anschließenden Spektralbereiche zur Verfügung gestellt. Dabei ist es notwendig, die Übergänge zwischen den selbst gemessenen Daten und den Literaturwerten geeignet zu interpolieren, d.h. es sollen keine spektralen Strukturen durch das „aneinanderkleben“ der Datensätze entstehen. Außerdem kann es notwendig sein, eine Extrapolation der Daten zu hohen Photonenenergien durchzuführen.

Steht nun ein Reflexionsspektrum über einen großen Spektralbereich zur Verfügung, so werden mit dem Befehl `Ref1. (norm. inc.) to n, k (KK)` im Menü `Conversions` von Origin numerisch der komplexe Brechungsindex sowie der Phasenwinkel  $\theta$  berechnet. Dieser Befehl ruft ein in C programmiertes DOS-Programm auf, welches die Werte einliest, die Kramers-Kronig-Transformation durchführt und das Ergebnis in das Origin worksheet zurückschreibt. Das Programm erwartet ein zweiseitiges worksheet mit den

Spaltennamen `energy(X)` und `Ref1(Y)`. Die Werte der Photonenenergien sind dabei aufsteigend zu ordnen und es darf jeder Energiewert nur einmal existieren. Die Berechnung von  $\theta$  erfolgt über (29), die weitere Berechnung über (28) nimmt einem das Programm auch noch ab.

Zum besseren Vergleich mit Beispieldaten soll zu allen Proben auch die dielektrische Funktion berechnet werden. Im weiteren Verlauf geht es darum, aus dem Spektrum von  $\varepsilon_2$  Rückschlüsse auf die energetische Lage von kritischen Punkten zu ziehen und diese mit Literaturwerten zu vergleichen. Außerdem lassen sich eventuell bestimmte Eigenschaften der Halbleiterproben erkennen (direkter/indirekter Halbleiter, Energielücke,...). Die im einzelnen zu untersuchenden Eigenschaften hängen stark von den zur Verfügung stehenden Proben ab und werden während des Experiments festgelegt.

### 4.3 Sonstige Hinweise zur Auswertung

#### 4.3.1 Protokollbuch

Bereits im Rahmen der Vorbereitung auf die Vorsprache empfiehlt es sich, ein paar Gedanken zu Sinn und Zweck des Versuches aufzuschreiben – damit hat man schon mal eine Einleitung/Motivation. Es ist nicht notwendig, das Skript nochmal abzuschreiben!

Während des Experiments sind alle wichtigen Arbeitsschritte, Einstellungen und Aufbauten im Protokollbuch zu notieren. Für die Auswertung sollte aus den Aufzeichnungen klar hervorgehen, welche Berechnungen wie durchgeführt wurden. Eine Diskussion der Ergebnisse und ein Fazit des Versuchs ist selbstverständlich.

Ein separates Protokoll ist nicht erforderlich, es wird jedoch größter Wert auf ein ordentlich geführtes Protokollbuch (eines der wichtigsten Hilfsmittel des Experimentalphysikers) gelegt. Nicht die optisch perfekte Form macht ein Protokollbuch aus, sondern die Nachvollziehbarkeit des Inhalts.

#### 4.3.2 Plotten von Spektren

Es ist empfehlenswert, die Literaturwerte der kritischen Punkte in die Plots der Spektren mit einzutragen (zumindest diejenigen features, die man erkennen kann). Diese Literaturwerte findet man online z.B. im Bereich *Group III Condensed matter* im Landolt-Börnstein Online [4] mit den jeweiligen Verweisen auf die Originalquelle.

Außerdem ist es bei einem Vergleich mit Literatur-Spektren immer gut, diese zusammen mit den Messungen in einem Graphen darzustellen. Es erleichtert den Vergleich ungemein!

## 5 Kontrollfragen

Diese Kontrollfragen sollen helfen, das Gelesene kritisch zu reflektieren.

1. Warum reicht es aus, entweder Real- oder Imaginärteil des komplexen Brechungsindex zu kennen?
2. Wie ist der Hauptwert eines Integrals definiert?
3. Was ist für das durch Kramers-Kronig-Transformation berechnete  $n$  zu erwarten, wenn  $k$  nur in einem Bereich gemessen wird, in dem die Probe durchsichtig ist?
4. Welche Möglichkeiten (außer den hier beschriebenen) gibt es noch, um die dielektrische Funktion eines Festkörpers zu bestimmen?
5. Wozu benötigt man zwei Strahlengänge in der Probenkammer des Spektrometers?
6. Was bedeutet *Czerny-Turner-Anordnung*?
7. Was versteht man allgemein unter einer Dispersionsrelation? Beispiele aus verschiedenen Bereichen der Physik?
8. Was beschreibt die elektronische Bandstruktur?
9. Was bedeuten die seltsamen griechischen und lateinischen Großbuchstaben unter den Bandstrukturdiagrammen?
10. Was sind sog. kritische Punkte? Wo liegen sie im Bandstrukturdiagramm?
11. Nach welcher Terminologie werden kritische Punkte bezeichnet?

# A Kramers-Kronig-Relationen (KKR)

## A.1 Allgemeine Formulierung einer Dispersionsbeziehung

Allgemein läßt sich eine Dispersionsbeziehung zwischen zwei reellen Größen formulieren, die ein lineares, zeitunabhängiges und kausales System bilden. Betrachtet man ein lineares System aus einer, den Systemzustand charakterisierenden Funktion  $Z$  und einer Anregung  $E$ , dann kann man dieses beschreiben durch:

$$Z[r, t] = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G[r, r', t, t'] E[r', t'] dr' dt'. \quad (36)$$

Die Gewichtsfunktion  $G$  muß ebenfalls eine reelle Größe sein und entspricht einer Green'schen Funktion. Fordert man nun, daß die Gewichtsfunktion zeit- und ortsunabhängig ist, dann gilt:

$$Z[r, t] = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G[r - r', t - t'] E[r', t'] dr' dt'. \quad (37)$$

Wird weiter gefordert, daß die Anregung in einem Punkt nicht von seiner Umgebung abhängig ist, also das System lokal im Ort ist, dann erhält man die Beziehung <sup>4</sup>:

$$Z[r, t] = \int_{-\infty}^{+\infty} G[t - t'] E[r, t'] dt'. \quad (38)$$

Ein solches System erfüllt nun auch das Superpositionsprinzip. Der Faltungssatz für Fourier-Integrale besagt, daß (38) in der Fourierdarstellung die folgende Form annimmt, in der die Funktionen  $z[r, \omega]$ ,  $e[r, \omega]$  und  $g[\omega]$  die jeweils fouriertransformierten Größen  $Z[r, t]$ ,  $E[r, t']$  und  $G[t - t']$  sind:

$$\begin{aligned} z[r, \omega] &= g[\omega] e[r, \omega] \\ g[\omega] &= \int_{-\infty}^{+\infty} G[\tau] e^{i\omega\tau} d\tau \end{aligned} \quad (39)$$

Soll es sich um einen physikalischen Zusammenhang handeln, muß zusätzlich noch die Kausalität gefordert werden. Die Gewichtsfunktion  $G[t - t']$  verschwindet also für  $t' > t$  bzw. für  $\tau < 0$ :

$$g[\omega] = \int_0^{+\infty} G[\tau] e^{i\omega\tau} d\tau \quad (40)$$

---

<sup>4</sup>Die Ortsunabhängigkeit und die Lokalität im Ort ist nicht zwingend notwendig, soll an dieser Stelle aber zur Vereinfachung angenommen werden.

Da  $G[\tau]$  eine reelle Größe ist, gilt mit (40):

$$g[\omega] = g^*[-\omega]. \quad (41)$$

Wenn nach weiteren Aussagen über die Eigenschaften von  $g[\omega]$  gesucht wird, ist es zweckmäßig,  $\omega$  als eine komplexe Größe  $\omega = \omega_1 + i\omega_2$  zu betrachten. Für (40) und deren erste Ableitung gilt dann:

$$\begin{aligned} g[\omega_1 + i\omega_2] &= \int_0^{+\infty} G[\tau] e^{i\omega_1\tau} e^{-\omega_2\tau} d\tau \\ \left. \frac{dg}{d\omega} \right|_{\omega_1 + i\omega_2} &= \int_0^{+\infty} i\tau G[\tau] e^{i\omega_1\tau} e^{-\omega_2\tau} d\tau. \end{aligned} \quad (42)$$

Die erste Ableitung von  $g[\omega]$  existiert (ist endlich) für alle  $\omega_2 > 0$ , wenn  $G[\tau] \rightarrow 0$  für  $\tau \rightarrow \infty$ , da  $e^{-\omega_2\tau}$  schneller gegen 0 strebt als der Faktor  $i\tau$ <sup>5</sup>. Die Bedingung „ $G[\tau] \rightarrow 0$  für  $\tau \rightarrow \infty$ “ beinhaltet die Forderung, daß nur endlich lang zurückliegende Anregungen den momentanen Systemzustand beeinflussen können. Es muß sich also um ein stabiles System handeln. Aus dieser Betrachtung folgt, daß  $g[\omega]$  in der gesamten komplexen oberen Halbebene eine analytische Funktion ist. Für eine geschlossene Kurve  $K$  um einen Punkt  $\omega$  in einem einfach zusammenhängenden Gebiet gilt für analytische Funktionen die Cauchysche Integralformel:

$$g[\omega] = \frac{1}{2\pi i} \oint_K \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (43)$$

Wird für einen Punkt  $\omega$  auf der reellen Achse der Integrationsweg wie in Abb. 6 gewählt, dann erhält man für  $g[\omega]$  :

$$\begin{aligned} g[\omega] &= \frac{1}{2\pi i} \oint_K \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega' \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\curvearrowright}} \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega' + \frac{1}{2\pi i} \int_{\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\curvearrowleft}} \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega'. \end{aligned} \quad (44)$$

Das Integral über den oberen Halbkreis verschwindet für  $R \rightarrow \infty$ , wenn  $g[\omega] \rightarrow 0$  für  $\omega \rightarrow \infty$ . Ist dies nicht der Fall und strebt  $g[\omega]$  z.B. gegen  $g_0$  für  $\omega \rightarrow \infty$ , dann kann an Stelle von  $g[\omega]$  auch die Differenz  $g[\omega] - g_0$  betrachtet werden<sup>6</sup>. Dies führt zu den sogenannten subtrahierten Dispersionsbeziehungen [1]. Die Forderung  $g[\omega] \rightarrow 0$  für  $\omega \rightarrow \infty$  ist identisch mit der Bedingung

<sup>5</sup>Das Integral  $\int_0^\infty x[\tau] e^{i\omega_1\tau}$  konvergiert gegen einen endlichen Wert wenn  $x[\tau] \rightarrow 0$  für  $\tau \rightarrow \infty$

<sup>6</sup>Ergibt das Integral über den oberen Halbkreis einen Ausdruck der Form  $g_0 + g_1\omega + \dots$ , dann kann anstatt  $g_0$  auch  $g_0 + g_1\omega + \dots$  subtrahiert werden

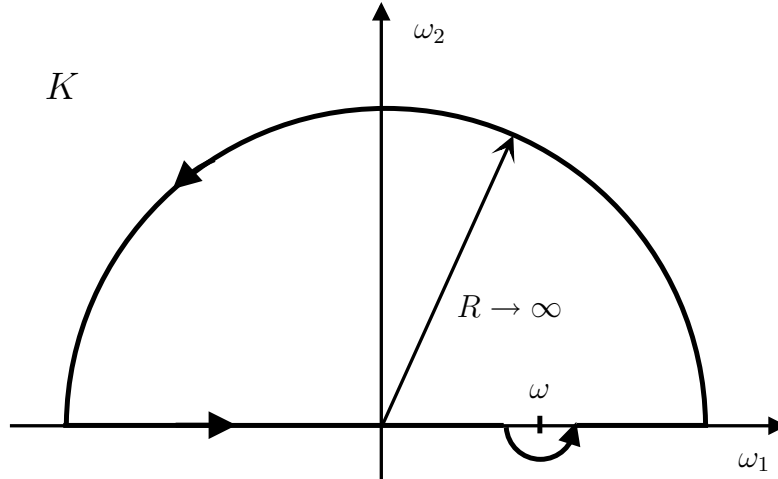


Abbildung 6: Integrationsweg  $K$  zusammengesetzt aus einem Halbkreis im Unendlichen der oberen komplexen Halbebene, der reellen Achse von  $-\infty$  bis  $+\infty$  und einem infinitesimal kleinen Halbkreis um die Polstelle bei  $\omega$

$G[\tau] \rightarrow 0$  für  $\tau \rightarrow 0$  ( $G[\tau] = 0$  für  $\tau = 0$ ) und läßt sich so verstehen, daß das System erst nach einer endlich kleinen Zeit auf eine Anregung reagiert und damit auch nur Anregungen mit einer endlichen Frequenz erfolgen können. Es muß also ein träges System (Inertialsystem) betrachtet werden. Diese Bedingung wird durch physikalische Zusammenhänge erfüllt, da diese allgemein keine Fernwirkung zulassen.

Das Integral entlang der reellen Achse läßt sich zerlegen in ein Hauptwert-Integral und ein Integral über einen infinitesimal kleinen Halbkreis um die Polstelle bei  $\omega$ :

$$\begin{aligned}
 g[\omega] &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega' \\
 &= \frac{1}{2\pi i} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega' + \frac{1}{2\pi i} \int_{\omega+\varepsilon}^{\omega-\varepsilon} \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega'
 \end{aligned} \tag{45}$$

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega' = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{\omega-\varepsilon} \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega' + \int_{\omega+\varepsilon}^{+\infty} \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega' \right\}$$

Der Wert des Integrals über den infinitesimalen Halbkreis um  $\omega$  ergibt sich

durch die Substitution  $\omega' - \omega = \rho e^{i\varphi}$ ,  $d\omega' = i\rho e^{i\varphi} d\varphi$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \int \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega' &= \lim_{\rho \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{\pi}^0 \frac{g[\rho e^{i\varphi} + \omega] i\rho e^{i\varphi}}{\rho e^{i\varphi}} d\varphi \\ &= \frac{g[\omega]}{2\pi} \int_{\pi}^0 d\varphi = \frac{g[\omega]}{2}. \end{aligned} \quad (46)$$

Aus (45) und (46) folgt:

$$g[\omega] = \frac{1}{i\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g[\omega']}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (47)$$

Diese lineare Beziehung verknüpft nun, wie man sich an dem einfachen Beispiel  $z = 1/i$  ( $az + bz$ ) verdeutlichen kann, den Real- und Imaginärteil der fouriertransformierten Gewichtsfunktion:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \{g[\omega]\} &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Im} \{g[\omega']\}}{\omega' - \omega} d\omega' \\ \operatorname{Im} \{g[\omega]\} &= -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Re} \{g[\omega']\}}{\omega' - \omega} d\omega' \end{aligned} \quad (48)$$

Aus Gl: 41 folgt:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \{g[\omega]\} &= \operatorname{Re} \{g[-\omega]\} \\ \operatorname{Im} \{g[\omega]\} &= -\operatorname{Im} \{g[-\omega]\}. \end{aligned} \quad (49)$$

Damit lassen sich die Beziehungen aus (48) als Integrale über ausschließlich positive Frequenzen schreiben, und man erhält eine physikalisch interpretierbare Form:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \{g[\omega]\} &= \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} \frac{\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \operatorname{Im} \{g[\omega']\} d\omega' \\ \operatorname{Im} \{g[\omega]\} &= -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} \frac{1}{\omega'^2 - \omega^2} \operatorname{Re} \{g[\omega']\} d\omega' \end{aligned} \quad (50)$$

Dies sind die sogenannten Dispersionsbeziehungen, die in ihrer allgemeineren Formulierung als subtrahierte Dispersionsbeziehungen lauten:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \{g[\omega] - g_0\} &= \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} \frac{\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \operatorname{Im} \{g[\omega'] - g_0\} d\omega' \\ \operatorname{Im} \{g[\omega] - g_0\} &= -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} \frac{1}{\omega'^2 - \omega^2} \operatorname{Re} \{g[\omega'] - g_0\} d\omega'. \end{aligned} \quad (51)$$

Zur Herleitung der Dispersionsbeziehung wurde schließlich benutzt:

- ein lineares System reeller Größen
- zeitunabhängig (und ortsunabhängig)
- (lokal im Ort)
- kausal,  $G[\tau] = 0$  für  $\tau < 0$
- inertial,  $G[\tau] \rightarrow 0$  für  $\tau \rightarrow 0$
- stabil,  $G[\tau] \rightarrow 0$  für  $\tau \rightarrow \infty$ .

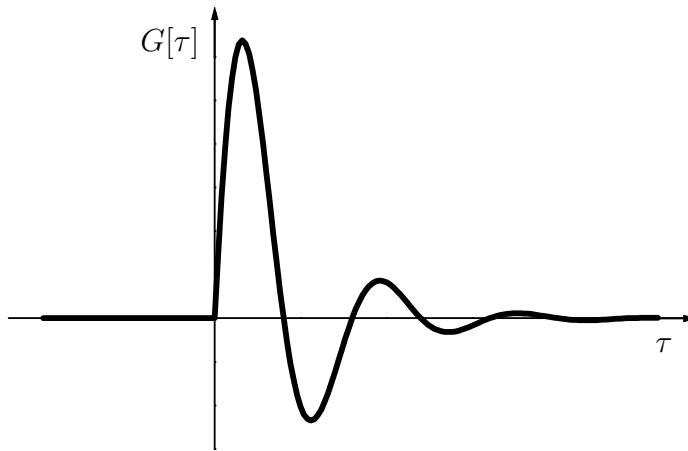


Abbildung 7: Beispiel einer Gewichtsfunktion, die ein reelles, lineares System definiert, das kausal, inertial und stabil ist.

## A.2 Übertragung der Dispersionsbeziehung auf Größen der Elektrodynamik

Die dielektrische Verschiebung  $\mathbf{D}$  ist gemäß (5) und (6) eine lineare Funktion von  $\mathbf{E}$ . Beide Größen sind reell und bilden ein System, das zeitunabhängig, inertial und kausal ist. Wenn keine freien Ladungsträger existieren und die Absorption einen von 0 verschiedenen Wert hat (gedämpftes System), relativiert jede Ladungsverteilung nach dem Verschwinden des äußeren Feldes in



einer endlichen Zeit wieder in die ursprüngliche nach außen neutrale Konfiguration. Das so definierte System aus  $\mathbf{D}$  und  $\mathbf{E}$  erfüllt alle für die Herleitung der Dispersionsbeziehung notwendigen Bedingungen. Der Real- und der Imaginärteil der dielektrischen Funktion sind also durch die im vorherigen Abschnitt hergeleiteten Beziehungen (51) miteinander verknüpft.

$$\begin{aligned}\operatorname{Re}\{\varepsilon[\omega] - \varepsilon_0\} &= \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} \frac{\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \operatorname{Im}\{\varepsilon[\omega'] - \varepsilon_0\} d\omega' \\ \operatorname{Im}\{\varepsilon[\omega] - \varepsilon_0\} &= -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} \frac{1}{\omega'^2 - \omega^2} \operatorname{Re}\{\varepsilon[\omega'] - \varepsilon_0\} d\omega'\end{aligned}\tag{52}$$

Die Struktur von (6) bedingt, daß es sich um eine subtrahierte Dispersionsbeziehung handelt, da  $\varepsilon[\omega] \rightarrow \varepsilon_0$  für  $\omega \rightarrow \infty$ . Üblicherweise wird die dimensionslose Größe  $\hat{\varepsilon}[\omega]$  betrachtet und als (relative) dielektrische Funktion bezeichnet. Wird (52) durch die elektrische Feldkonstante  $\varepsilon_0$  geteilt, dann erhält man mit  $\hat{\varepsilon}[\omega] = \varepsilon_1[\omega] - i\varepsilon_2[\omega]$  die Beziehung:

$$\begin{aligned}\varepsilon_1[\omega] - 1 &= -\frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} \frac{\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \varepsilon_2[\omega'] d\omega' \\ \varepsilon_2[\omega] &= \frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} \frac{1}{\omega'^2 - \omega^2} (\varepsilon_1[\omega'] - 1) d\omega'\end{aligned}\tag{53}$$

Dies sind die von R.L. Kronig (1926) [6] und H.A. Kramers (1927) hergeleiteten Kramers-Kronig-Relationen.

## Literatur

- [1] W. Greiner: *Klassische Elektrodynamik*, Verlag Harri Deutsch 1991
- [2] Peter Y. Yu, Manuel Cardona: *Fundamentals of Semiconductors*, 2nd edition, Springer-Verlag 1999
- [3] Edward D. Palik (ed.): *Handbook of Optical Constants of Solids I+II*, Academic Press, Inc.
- [4] *Landolt-Börnstein Online*,  
<http://www.landolt-boernstein.com/>, Springer Verlag
- [5] D. E. Aspnes and A. A. Studna: *Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV*, Phys. Rev. B **27**, 985 (1983)
- [6] R. L. Kronig: *On the theory of dispersion of X-rays*, J. Opt. Soc. Am. **27**, 547 (1926)
- [7] Frederick Wooten: *Optical properties of solids*, Academic Press 1972