



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΜΕΛΕΤΗ ΟΠΤΙΚΩΝ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΝ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗΣ
ΕΞΑΡΤΗΣΗΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ ΑΜΟΡΦΟΥ ΠΥΡΙΤΙΟΥ
ΓΙΑ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΕ ΗΛΙΑΚΕΣ ΚΥΨΕΛΙΔΕΣ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του
Αγώτη Λεωνίδα

Ερευνητικός Επιβλέπων:	Ακαδημαϊκός Επιβλέπων:

Αθήνα
2011



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΜΕΛΕΤΗ ΟΠΤΙΚΩΝ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΝ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗΣ
ΕΞΑΡΤΗΣΗΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ ΑΜΟΡΦΟΥ ΠΥΡΙΤΙΟΥ
ΓΙΑ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΕ ΗΛΙΑΚΕΣ ΚΥΨΕΛΙΔΕΣ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του
Αγώτη Λεωνίδα

Ερευνητικός Επιβλέπων:

Ακαδημαϊκός Επιβλέπων:

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την

Αθήνα
2011

.....
Όνομα Επώνυμο

© (2006) Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. All rights Reserved. Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς το συγγραφέα. Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σ' αυτό έγγραφο εκφράζουν το συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευτεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Με την ολοκλήρωση αυτής της διπλωματικής εργασίας θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή κ. Ιωάννη Ράπτη για την καθοδήγησή του, το συνεχές ενδιαφέρον και τις συμβουλές που μου παρείχε κατά την διάρκεια των πειραμάτων και της συγγραφής της εργασίας. Θα ήθελα να ευχαριστήσω επίσης τους ερευνητές Δρ. Α. Κοντο και Δρ. Ν. Μπούκο των Ινστιτούτων Φυσικοχημείας και Επιστήμης των Υλικών του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος» αντίστοιχα, για την επιστημονική τους καθοδήγηση κατά την διεξαγωγή φασματοσκοπικών μετρήσεων που πραγματοποιήθηκαν στις εγκαταστάσεις του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος». Ακόμη, θα ήθελα να ευχαριστήσω την εταιρία HelioSphera για τα δείγματα που μας παρείχε για την εκπόνηση των πειραμάτων. Αξίζει να ευχαριστήσω και τους μεταπτυχιακούς φοιτητές Ι. Καλπύρη και Ι. Θεωδοράκο για την συνεργασία τους κατά την πειραματική διαδικασία και το ενδιαφέρον που έδειξαν για τη δουλειά μου. Τέλος οφείλω ένα μεγάλο ευχαριστώ στους γονείς και τα αδέρφια μου για τη συμπαράστασή τους σε όλα αυτά τα χρόνια των σπουδών μου.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα διπλωματική εργασία αφορά τον οπτικό χαρακτηρισμό αμόρφου πυριτίου καθώς και τη θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης, ώστε η πληροφορία αυτή να ενσωματωθεί σε μελέτη για τη κατασκευή φωτοβολταϊκών κυψελίδων τεχνολογίας micromorph μέσω φωτοθερμικών μεθόδων.

Αρχικός στόχος της εργασίας είναι η βαθύτερη κατανόηση των οπτικών διεργασιών που λαμβάνουν χώρα σε ημιαγωγούς, τόσο για εκείνους όπου ο κρύσταλλός τους εμφανίζει περιοδικότητα αλλά και στην ειδική περίπτωση των άμορφων ημιαγωγών όπου το πρόβλημα γίνεται πιο σύνθετο.

Ειδικότερα, χρησιμοποιείται η ακριβής έκφραση για την διαπερατότητα ενός απορροφητικού λεπτού υμενίου (a-Si) εναποθετημένου σε διάφανο υπόστρωμα (γυαλί) ώστε να υπολογιστούν στα πλαίσια ενός κλειστού φορμαλισμού ο δείκτης διάθλασης n και ο συντελεστή εξασθένισης k και το πάχος d του υμενίου. Η μέθοδος που χρησιμοποιείται δεν συνδέεται με το μοτίβο κροσσών συμβολής όπως στο [31] αλλά είναι μία υπολογιστική μέθοδος βελτιστοποίησης παραμέτρων με τη βοήθεια κατάλληλου αλγορίθμου (αλγόριθμος PUMA) [<http://www.ime.usp.br/~egbirgin/puma/>].

Επιπλέον μελετάται η θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης του υλικού στην περιοχή της έντονης απορρόφησης για δύο μήκη κύματος μέσω φορμαλισμών που έχουν προκύψει από μοντέλα πολλαπλών ανακλάσεων ακτινοβολίας σε λεπτά υμένια.

ABSTRACT

In this work, the optical characterization of amorphous silicon and the temperature dependence of its absorption coefficient is studied, in order to incorporate this information to the photothermal calculation simulating real laser annealing methods for the fabrication of micromorph-type solar cells.

Firstly it is established a rigorous study of the optical processes, not only in crystalline semiconductors, but also in amorphous ones where the problem is more complex.

The rigorous expression for the transmission of an absorbing film on a transparent substrate is used to yield a formulation leading to the estimation of the refractive index, the attenuation coefficient and the thickness of the film. In this work, no interference pattern exists in the transmission spectrum of the material. For this reason we used an unconstrained minimization algorithm (PUMA) which is based in an unconstrained optimization method to determine the optical constants of a-Si.

Furthermore, the temperature dependence of the absorption coefficient of amorphous silicon is studied in the high absorbance region for two wavelengths, through formulations that have occurred from both single and multiple reflections in thin films models.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ.....	5
ΠΕΡΙΛΗΨΗ	6
ABSTRACT.....	7
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1.	10
ΟΙ ΟΠΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΩΝ ΚΑΙ ΑΜΟΡΦΩΝ ΗΜΙΑΓΩΓΩΝ.....	10
1.1 ΟΙ ΟΠΤΙΚΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ ΣΤΑ ΣΤΕΡΕΑ	10
1.1.1 ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΚΥΜΑΤΑ	10
1.2 ΠΟΛΛΑΠΛΕΣ ΑΝΑΚΛΑΣΕΙΣ ΣΕ ΛΕΠΤΑ ΥΜΕΝΙΑ.....	13
1.4 ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ ΣΤΟΥΣ ΗΜΙΑΓΩΓΟΥΣ	17
1.4.1 ΖΩΝΕΣ ΣΕ ΑΤΟΜΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ	17
1.4.2 ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΤΟ ΧΩΡΟ ΤΩΝ ΟΡΜΩΝ	19
1.4.3 Η ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ	23
1.4.4 ΟΥΡΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ.....	24
1.5 ΦΑΣΜΑΤΑ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ	26
1.6 ΑΜΕΣΕΣ ΟΠΤΙΚΕΣ ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ.....	28
1.6.1 Η ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑ ΜΕΤΑΒΑΣΗΣ	28
1.6.2 Ο ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ.....	31
1.6.3 ‘ΑΠΑΓΟΡΕΥΜΕΝΕΣ’ ΑΜΕΣΕΣ ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ.....	33
1.7 ΕΜΜΕΣΕΣ ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ.....	33
1.8 ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ ΜΕΤΑΞΥ «ΟΥΡΩΝ» ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ.....	36
1.9 ΤΟ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΟ ΚΑΙ ΤΟ ΑΜΟΡΦΟ ΠΥΡΙΤΙΟ	39
1.9.1 Ο ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΣ ΤΟΥ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΚΑΙ ΤΟ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ ΤΩΝ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΩΝ ΖΩΝΩΝ	39
1.9.2 ΑΜΟΡΦΟΙ ΗΜΙΑΓΩΓΟΙ	42
1.9.3 ΤΟ ΑΜΟΡΦΟ ΠΥΡΙΤΙΟ ΣΕ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΕΣ ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ	47
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2.	49
ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ	49
2.1 ΔΟΜΗ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΑΡΑΣΚΕΥΗΣ ΛΕΠΤΩΝ ΥΜΕΝΙΩΝ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΓΙΑ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΕ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΕΣ ΚΥΨΕΛΙΔΕΣ	49
2.2 ΦΑΣΜΑΤΟΦΩΤΟΜΕΤΡΟ ΑΝΑΚΛΑΣΤΙΚΟΤΗΤΑΣ ΔΙΑΠΕΡΑΤΟΤΗΤΑΣ.....	50
2.3 ΔΙΑΤΑΞΗ ΜΕΛΕΤΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗΣ ΕΞΑΡΤΗΣΗΣ ΔΕΙΚΤΗ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ ΛΕΠΤΩΝ ΥΜΕΝΙΩΝ ΑΜΟΡΦΟΥ ΠΥΡΙΤΙΟΥ.....	53
2.3.1 ΣΥΝΘΗΚΕΣ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ	53
2.3.2 ΣΥΝΘΗΚΕΣ ΥΨΗΛΩΝ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΩΝ.....	54

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3.	56
ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΟΠΤΙΚΩΝ ΣΤΑΘΕΡΩΝ, ΠΑΧΟΥΣ ΚΑΙ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΟΥ ΧΑΣΜΑΤΟΣ ΔΕΙΓΜΑΤΩΝ a-Si ΜΕ ΤΗ ΒΟΗΘΕΙΑ ΜΕΘΟΔΩΝ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ	56
3.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ	56
3.2 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ ΓΙΑ ΔΙΑΦΑΝΟ ΥΠΟΣΤΡΩΜΑ	58
3.3 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΟΥ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ ΕΛΑΧΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΧΩΡΙΣ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ	68
3.4 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	70
3.4.1 ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΟΥ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ RUMA	71
3.4.2 ΤΟ ΣΥΣΤΗΜΑ ΛΕΠΤΟΥ ΥΜΕΝΙΟΥ – ΔΙΑΦΑΝΟΥ ΥΠΟΣΤΡΩΜΑΤΟΣ	77
3.4.3 ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΟΥ ΧΑΣΜΑΤΟΣ ΑΜΟΡΦΟΥ ΠΥΡΙΤΙΟΥ	84
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4.	87
ΜΕΛΕΤΗ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗΣ ΕΞΑΡΤΗΣΗΣ ΔΕΙΚΤΗ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ ΑΜΟΡΦΟΥ ΠΥΡΙΤΟΥ	87
4.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ	87
4.2 ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ	88
4.2.1 ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ ΣΤΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ	88
4.2.2 ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗ ΕΞΑΡΤΗΣΗ	91
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5.	98
ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ - ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ	98
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	100
ΑΝΑΦΟΡΕΣ	101

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1.

ΟΙ ΟΠΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΩΝ ΚΑΙ ΑΜΟΡΦΩΝ ΗΜΙΑΓΩΓΩΝ

1.1 ΟΙ ΟΠΤΙΚΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ ΣΤΑ ΣΤΕΡΕΑ

1.1.1 ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΚΥΜΑΤΑ

Η διαπερατότητα της ορατής και της υπέρυθρης ακτινοβολίας μέσω ενός αγωγίμου μέσου και η συμπεριφορά μίας τέτοιας ακτινοβολίας σε διαχωριστικές επιφάνειες μεταξύ δύο διαφορετικών μέσων διάδοσης είναι κάποιες πτυχές της γενικής συμπεριφοράς των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων η οποία θεμελιώθηκε από τις εξισώσεις Maxwell. Αυτές οι εξισώσεις μπορούν να γραφούν

$$\mathit{curl} \mathbf{E} = - \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.1a)$$

$$\mathit{curl} \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.1b)$$

$$\mathit{div} \mathbf{B} = 0 \quad (1.1c)$$

$$\mathit{div} \mathbf{D} = \rho \quad (1.1d)$$

όπου τα σύμβολα αντιπροσωπεύουν τα γνωστά μεγέθη.

Γενικά, θα υποθέσουμε ότι έχουμε ομογενή και ιστροπικά μέσα [1], έτσι ώστε

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$$

$$\mathbf{B} = \mu \mu_0 \mathbf{H}$$

$$= \mu_0 \mathbf{H}$$

εφόσον η σχετική μαγνητική διαπερατότητα μ είναι ίση με τη μονάδα για όλα τα υλικά σε οπτικά μήκη κύματος.

Επίσης

$$\mathbf{D} = \epsilon \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (1.2a)$$

$$= \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$$

όπου

$$\mathbf{P} = N e \mathbf{s} \quad (1.2b)$$

είναι η πόλωση που δημιουργείται εάν τοποθετήσουμε φορτίο Ne σε απόσταση \mathbf{s} . Εδώ υποθέτουμε επίσης ότι $\rho = 0$, το οποίο ισχύει για οποιοδήποτε μέσο υψηλής αγωγιμότητας και είναι μία ικανοποιητική συνθήκη όταν αναφερόμαστε σε έναν ημιαγωγό.

Οι σχετικές εξισώσεις γίνονται έτσι

$$\text{curl } \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (1.3a)$$

$$\text{curl } \mathbf{H} = \sigma \mathbf{E} + \varepsilon \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1.3b)$$

$$\text{div } \mathbf{H} = 0 \quad (1.3c)$$

$$\text{div } \mathbf{E} = 0 \quad (1.3d)$$

όπου ε_0 και μ_0 είναι η διηλεκτρική σταθερά και η διαπερατότητα του ελεύθερου χώρου, ε είναι η σχετική διηλεκτρική σταθερά του μέσου, και σ η αγωγιμότητά του.

Έτσι

$$\text{curl curl } \mathbf{E} = -\mu_0 \left(\sigma \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \varepsilon \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \right)$$

Το οποίο απλοποιείται στη μορφή

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \sigma \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \mu_0 \varepsilon \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0$$

με μία παρόμοια εξίσωση για το \mathbf{H} .

Μπορούμε να γράψουμε σαν μία λύση για μία από τις συνιστώσες του \mathbf{E}

$$E_x = E_0 \exp i\omega(t - \tilde{n}z/c) \quad (1.4)$$

Αυτή η λύση ικανοποιείται αν και μόνο αν

$$\tilde{n}^2 = c^2 (\varepsilon \varepsilon_0 \mu_0 - i\sigma \mu_0 / \omega) \quad (1.5)$$

Η εξίσωση (1.4) αναπαριστά ένα οδεύον κύμα κατά τη διεύθυνση z με μία σταθερά διάδοσης \tilde{n} , όπου είναι γενικά μιγαδικός αριθμός. Όταν η αγωγιμότητα του μέσου είναι μηδέν, το \tilde{n} είναι πραγματικός αριθμός και c/\tilde{n} είναι η ταχύτητα διάδοσης του κύματος, έτσι ώστε το \tilde{n} να μπορεί να γραφεί ως n και να αναπαριστά το δείκτη διάθλασης του μέσου διάδοσης.

Για την περίπτωση της μη-μηδενικής αγωγιμότητας οδηγούμαστε στον ορισμό του μιγαδικού δείκτη διάθλασης που δίνεται από την εξίσωση

$$\tilde{n}^2 = c^2 \mu_0 \varepsilon_0 (\varepsilon - i\sigma/\omega\varepsilon_0) \quad (1.6a)$$

Επίσης για τον ελεύθερο χώρο όπου $\varepsilon = 1$, $\sigma=0$, και $\tilde{n} = 1$, έχω

$$c^2 \mu_0 \varepsilon_0 = 1 \quad (1.6b)$$

Έτσι ώστε

$$\tilde{n}^2 = \varepsilon - i\sigma/\omega\varepsilon_0 \quad (1.6a)$$

Αν το \tilde{n} γραφεί ως μιγαδικός αριθμός με τη μορφή

$$\tilde{n} = n - ik \quad (1.7)$$

τότε η εξίσωση (1.4) γίνεται

$$E_x = E_0 \exp(-\omega kz/c) \exp[i\omega(t - nz/c)]$$

Αυτή η έκφραση αναπαριστά ένα κύμα συχνότητας $\omega/2\pi$, που διαδίδεται με ταχύτητα c/n , και υφίσταται εξασθένιση ή απορρόφηση κατά ένα βαθμό που καθορίζεται από τον δείκτη απορρόφησης k . Η αντίστοιχη έκφραση για το μαγνητικό πεδίο μπορεί να προκύψει αντικαθιστώντας την παραπάνω λύση στην εξίσωση (1.3a) ώστε να δώσει

$$H_y = \frac{(n - ik)}{\mu_0 c} E_0 \exp(-\omega kz/c) \exp[i\omega(t - nz/c)]$$

Από τις εξισώσεις (1.6a) και (1.7) παίρνουμε

$$n^2 - k^2 = \varepsilon \quad (1.8a)$$

$$2nk = \sigma/\omega\varepsilon_0 \quad (1.8b)$$

και έτσι έχουμε

$$2n^2 = \varepsilon(1 + \sigma^2/\omega^2 \varepsilon^2 \varepsilon_0^2)^{1/2} + \varepsilon \quad (1.9a)$$

$$2k^2 = \varepsilon(1 + \sigma^2/\omega^2 \varepsilon^2 \varepsilon_0^2)^{1/2} - \varepsilon \quad (1.9b)$$

Προφανώς, όταν $\sigma \rightarrow 0$, $\kappa \rightarrow 0$ τότε και το $n^2 \rightarrow \epsilon$. Έχει πιστοποιηθεί πειραματικά ότι η τελευταία σχέση ισχύει δεδομένου ότι οι μετρήσεις για το n και το ϵ έχουν πραγματοποιηθεί για τις ίδιες συχνότητες ή, εάν πραγματοποιήθηκαν σε διαφορετικές συχνότητες, δεδομένου ότι δεν υπάρχουν ζώνες απορρόφησης για οποιαδήποτε ενδιάμεση συχνότητα.

Ο συντελεστής απορρόφησης α του μέσου ορίζεται από τη συνθήκη ότι η ενέργεια του κύματος μειώνεται κατά παράγοντα $1/e$ σε μία απόσταση $1/\alpha$. Εφόσον η ροή ενέργειας δίνεται από το διάνυσμα Poynting, ανάλογα θα είναι και τα μέγιστα των διανυσμάτων ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου. Εφόσον και τα δύο περιέχουν τον όρο $\exp(-\omega kz/c)$, η εξασθένιση θα είναι $\exp(-2\omega kz/c)$ και ο συντελεστής απορρόφησης

$$\alpha = 2\omega\kappa/c = 4\pi\kappa/\lambda \quad (1.10)$$

Όπου το λ είναι το μήκος κύματος της ακτινοβολίας στον ελεύθερο χώρο. Με μετρήσεις διαπερατότητας σε κατάλληλα δείγματα μπορούν να προσδιορίσουν άμεσα οι συντελεστές α και κ .

Εφόσον οι εξισώσεις (1.8) δείχνουν γενικά ότι $n^2 \neq \epsilon$, πρέπει να σημειωθεί ότι η ταχύτητα του κύματος δίνεται από το c/n και όχι από το $c/\epsilon^{1/2}$. Με αυτό το τρόπο μετρήσεις που συνδέονται με την ταχύτητα διάδοσης του κύματος μπορούν να δώσουν άμεσα την τιμή του n . Μία τέτοια μέθοδος είναι εκείνη της μέτρησης κροσσών συμβολής που παράγονται από ανάκλαση ή διάδοση ακτινοβολίας που προσπίπτει κάθετα σε ένα επίπεδο δείγμα.

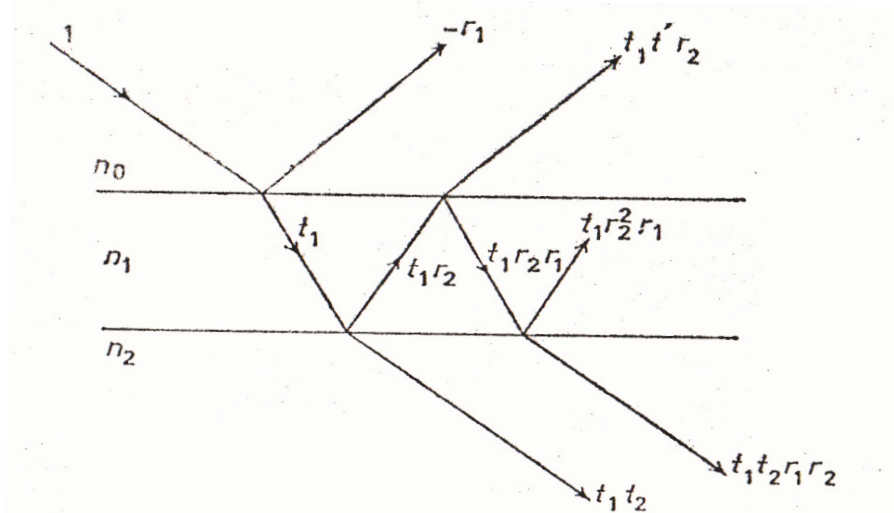
1.2 ΠΟΛΛΑΠΛΕΣ ΑΝΑΚΛΑΣΕΙΣ ΣΕ ΛΕΠΤΑ ΥΜΕΝΙΑ

Για υμένια υλικού τα οποία είναι αρκετά λεπτά σε σχέση με το μήκος διεύθυνσης ($\delta=1/\kappa$, penetration depth) ώστε να έχουν μικρή απορρόφηση, έχουν παράλληλες επιφάνειες και το πάχος τους να κυμένεται σε τιμές της τάξης του μήκους κύματος, οι πολλαπλές ανακλάσεις οι οποίες λαμβάνουν χώρα στις επιφάνειες του υμενίου δίνουν κροσσούς ενίσχυσης ή απόσβεσης σε συγκεκριμένα μήκη κύματος.

Αν πραγματοποιηθούν μετρήσεις διαπερατότητας ή ανακλαστικότητας, θα λάβουμε μία σειρά κροσσών. Μία τέτοια μέτρηση είναι η πιο ακριβής μέθοδος εκτίμησης του δείκτη διάθλασης του υλικού. Επίσης, όπως προαναφέραμε και στη παράγραφο 1.1,

ακόμη και για πολύ απορροφητικά υλικά, τέτοιες μετρήσεις συμβολής δίνουν απευθείας το n , ανεξαρτήτως του k .

Ας δούμε πώς συμπεριφέρεται μία ακτίνα μοναδιαίου πλάτους που διέρχεται από ένα μέσο με δείκτη διάθλασης n_0 (συνήθως αέρας) σε ένα δείγμα με δείκτη διάθλασης n_1 και πάχος d το οποίο έχει εναποθετηθεί σε ένα υπόστρωμα με δείκτη διάθλασης n_2 .



Σχήμα 1.2: Πολλαπλές ανακλάσεις μέσα σε ένα υμένιο υψηλού δείκτη διάθλασης ($n_0 < n_1 < n_2$)

Θεωρώντας ότι ο δείκτης διάθλασης του υμενίου είναι μεγαλύτερος από εκείνον του υποστρώματος, τότε η μόνη αλλαγή φάσης κατά την ανάκλαση θα είναι εκείνη της απευθείας (πρώτης) ανακλώμενης ακτίνας, την οποία προσδιορίζουμε $-r_1$ στο σχήμα 1.2. Οι εσωτερικές ανακλάσεις στην πάνω και την κάτω διαχωριστική επιφάνεια δίνονται από τα r_1 και r_2 αντίστοιχα, η διέλευση από την πάνω διαχωριστική επιφάνεια προς το υμένιο δίνεται από το t_1 , και η διέλευση προς το εξωτερικό του υμενίου, από την πάνω και την κάτω διαχωριστική επιφάνεια δίνεται αντίστοιχα από τα t' και t_2 .

Η αλλαγή φάσης κατά τη διέλευση της δέσμης από την πρώτη διαχωριστική επιφάνεια δίνεται από τη σχέση

$$\delta = (2\pi/\lambda)(n_1 d / \cos \varphi) \quad (1.11)$$

Όπου φ είναι η γωνία διάθλασης μέσα στο υμένιο.

Έτσι το πλάτος της ανακλώμενης δέσμης σε σχέση με την προσπίπτουσα δέσμη μοναδιαίου πλάτους θα δίνεται από τη σχέση

$$\begin{aligned}
r &= -r_1 + t_1 t' r_2 e^{-2i\delta} + t_1 t' r_1 r_2^2 e^{-4i\delta} + t_1 t' r_1^2 r_2^3 e^{-6i\delta} \dots \\
&= -r_1 + t_1 t' r_2 e^{-2i\delta} (1 - r_1 r_2 e^{-2i\delta})^{-1}
\end{aligned} \tag{1.12}$$

Όμοια για την διέλευση

$$\begin{aligned}
t &= t_1 t_2 e^{-i\delta} + t_1 t_2 r_1 r_2 e^{-3i\delta} + t_1 t_2 r_1^2 r_2^2 e^{-5i\delta} \dots \\
&= t_1 t_2 e^{-i\delta} (1 - r_1 r_2 e^{-2i\delta})^{-1}
\end{aligned} \tag{1.13}$$

Οι παραπάνω εξισώσεις απλοποιούνται για ένα υμένιο χωρίς υπόστρωμα όπου $n_2 = n_0$, $t_2 = t'$, και $r_1 = r_2$. Έχοντας $t_1 t' = 1 - r_1^2$ παίρνουμε

$$r = \frac{-r_1 + r_1 (1 - r_1^2) e^{-2i\delta}}{(1 - r_1^2 e^{-2i\delta})} \tag{1.14a}$$

$$t = \frac{(1 - t_1^2) e^{-i\delta}}{(1 - r_1^2 e^{-2i\delta})} \tag{1.14b}$$

Μέγιστη διέλευση πραγματοποιείται όταν η αλλαγή φάσης είναι ακέραιο πολλαπλάσιο M του μισού μήκους κύματος ανά διέλευση, δηλ. $\delta = M\pi$ και $e^{-2i\delta} = 1$. Για αυτό έχω $t_{\max} = e^{-i\delta}$ έτσι ώστε το μέγιστο πλάτος διάδοσης να είναι σαφώς μονάδα, και το αντίστοιχο πλάτος ανάκλασης αντίστοιχα μηδέν. Μέγιστη ανάκλαση πραγματοποιείται όταν $2n_1 d \cos \varphi = (M + \frac{1}{2})\lambda$, δηλ. για $\delta = (M + \frac{1}{2})\pi$ και $e^{-2i\delta} = -1$. Έτσι έχουμε

$$r_{\max} = \frac{-r_1 - r_1 (1 - r_1^2)/(1 + r_1^2)}{-2r_1/(1 + r_1^2)} = \tag{1.15a}$$

$$t_{\min} = \frac{(1 - r_1) e^{-i\delta}}{(1 + r_1^2)} \tag{1.15b}$$

Το πλάτος ενέργειας διάδοσης δίνεται από το γινόμενο του t με το συζυγή μιγαδικό του, και έχουμε λοιπόν

$$\begin{aligned}
T = tt^* &= \left[\frac{(1-r_1^2)e^{-i\delta}}{1-r_1^2 e^{-2i\delta}} \right] \left[\frac{(1-r_1^2)e^{i\delta}}{1-r_1^2 e^{2i\delta}} \right] = \\
&= \frac{(1-r_1^2)^2}{1-2r_1^2 \cos(2\delta)+r_1^4}
\end{aligned} \tag{1.16}$$

Έτσι θα ισχύει $T_{\max} = 1$ και

$$T_{min} = (1 - r_1^2)^2 / (1 + r_1^2)^2 \quad (1.17a)$$

Ομοίως

$$R_{max} = 4r_1^2 / (1 + r_1^2)^2 \quad (1.17b)$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι τα αποτελέσματα αυτά μπορούν να προκύψουν απευθείας τετραγωνίζοντας τις εξισώσεις (1.15a) και (1.15b).

Η διακριτική ικανότητα των κροσσών εξαρτάται από την αντίθεση, δηλ. το λόγο T_{max}/T_{min} για τους κροσσούς διέλευσης. Για ένα τυπικό ημιαγωγό με δείκτη διάθλασης $n = 3$, στον αέρα, $r_1 = (n_1 - 1)/(n_1 + 1) = \frac{1}{2}$ και $T_{max}/T_{min} \approx 3$. Για τους περισσότερους ημιαγωγούς, οι κροσσοί είναι καλά ορισμένοι είτε για την διέλευση είτε για την ανάκλαση, και δεν είναι απαραίτητο να επιστρώσουμε τις επιφάνειες ώστε να αυξήσουμε την ανακλαστικότητα.

Η αντίθεση μεταξύ των κροσσών μεγίστων και ελαχίστων μειώνεται εάν υπάρχει απορρόφηση στο υμένιο. Έστω ότι η διαπερατότητα είναι α για κάθε διέλευση από το υμένιο. Τότε

$$t_{max} = \alpha(1 - r_1^2) / (1 - \alpha^2 r_1^2) \quad (1.18a)$$

$$t_{min} = \alpha(1 - r_1^2) / (1 + \alpha^2 r_1^2) \quad (1.18b)$$

$$r_{max} = -r_1(1 + \alpha^2) / (1 + \alpha^2 r_1^2) \quad (1.18c)$$

$$r_{min} = -r_1(1 - \alpha^2) / (1 - \alpha^2 r_1^2) \quad (1.18d)$$

Η πλήρης έκφραση για τη διαπερατότητα ενός απορροφητικού υλικού μπορεί να εξαχθεί από την εξίσωση (1.13) αντικαθιστώντας το δ με $\delta + i\beta$, όπου για κάθετη πρόσπτωση έχουμε

$$\beta = 2\pi k d / \lambda = \frac{1}{2} \alpha d \quad (1.19)$$

αφού έχουμε απόσβεση $\exp \frac{1}{2} \alpha d$ στο πλάτος ανά διέλευση. Έτσι η διαπερατότητα θα δίνεται από τη σχέση

$$tt^* = \frac{(1 - R)^2 \left(1 + \frac{\kappa^2}{n^2}\right)}{(e^\beta - R e^{-\beta})^2 + 4R \sin^2(\delta + \psi)} \quad (1.20)$$

όπου η φάση δ δίνεται από την εξίσωση (1.11) και

$$\tan \psi = 2\kappa / (n^2 + \kappa^2 - 1) \quad (1.21)$$

Αν το δείγμα έχει ατέλειες ή τα φάσματα που παίρνουμε κατά την διεξαγωγή ενός πειράματος δεν δίνουν διακριτούς κροσσούς συμβολής, τότε η διαπερατότητα που παρατηρείται θα είναι ο μέσος όρος της εξίσωσης (1.20), το οποίο μπορεί να αποδειχθεί (ολοκληρώνοντας ως προς δ) ότι ισούται με

$$\langle T \rangle = \frac{(1 - R)^2 \left(1 + \frac{\kappa^2}{n^2}\right)}{\exp(ad) + R^2 \exp(-ad)} \quad (1.22)$$

Σε κάθε πείραμα διαπερατότητας για ημιαγωγούς, έχουμε $\kappa^2 \ll n^2$. Επίσης, συνήθως ισχύει ότι $\exp 2ad \gg R^2$, έτσι ώστε η μέση τιμή της διαπερατότητας να απλοποιείται στη μορφή

$$\langle T \rangle = (1 - R)^2 \exp(-ad) \quad (1.23)$$

Σαν μία ακόμη παρατήρηση - ή σαν μία εναλλακτική μέθοδος για υλικά με σχετικά χαμηλή απορροφητικότητα - πρέπει να σημειωθεί ότι το δείγμα μπορεί να φτιαχτεί τόσο λεπτό ώστε να ισχύει $ad \ll 1$ ώστε οι απώλειες στο δείγμα να είναι αμελητέες.

Έτσι η εξίσωση (1.22) γίνεται

$$\langle T \rangle = (1 - R)/(1 + R) = 2n/(1 + n^2) \quad (1.24)$$

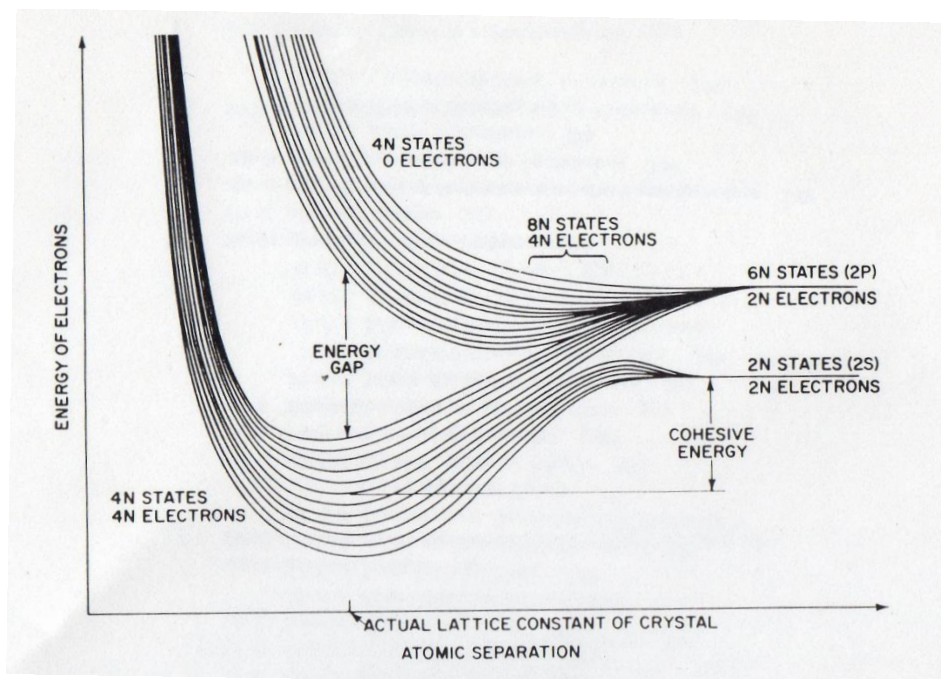
Αυτή η έκφραση μπορεί να χρησιμοποιηθεί ώστε να υπολογιστεί το n .

1.3 ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ ΣΤΟΥΣ ΗΜΙΑΓΩΓΟΥΣ

1.3.1 ΖΩΝΕΣ ΣΕ ΑΤΟΜΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ

Για να κατανοήσουμε τη φύση των ημιαγωγών θα πρέπει να σκεφτούμε τι συμβαίνει όταν δύο όμοια άτομα έρχονται κοντά ώστε να σχηματίσουν ένα στερεό σώμα όπως είναι ένας κρύσταλλος. Όταν δύο όμοια άτομα έρχονται κοντά τότε οι

κυματοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων αρχίζουν να επικαλύπτονται. Για να ικανοποιείται η απαγορευτική αρχή του Pauli, όλες οι καταστάσεις των ηλεκτρονίων με ζευγαρωμένα spin παίρνουν ενέργειες που είναι ελάχιστα διαφορετικές από τις τιμές ενέργειας που θα έπερναν στο απομονωμένο άτομο. Έτσι αν N άτομα είναι ζευγαρωμένα σε ένα εύρος αλληλεπίδρασης, $2N$ ηλεκτρόνια του ίδιου τροχιακού θα καταλαμβάνουν $2N$ διαφορετικές καταστάσεις, σχηματίζοντας μία ζώνη καταστάσεων αντί για ένα διακριτό επίπεδο όπως συμβαίνει σε ένα απομονωμένο άτομο.



Σχήμα 1.3: Διάγραμμα ενεργειακών ζωνών επιτρεπτών τιμών στο διαμάντι ως συνάρτηση των ενδοατομικών αποστάσεων [2].

Η κατανομή ενεργειακών καταστάσεων εξαρτάται έντονα από τη ενδοατομική απόσταση. Αυτό φαίνεται στο σχήμα 1.3 για μία διάταξη ατόμων άνθρακα. Οι χαμηλότερες ενεργειακές καταστάσεις συμπιέζονται σε μία ελάχιστη τιμή όταν σχηματίζεται ο κρύσταλλος του διαμαντιού. Η μέση τιμή κάτω από την οποία πέφτει η δυναμική ενέργεια σχετίζεται με την ενέργεια σύνδεσης του κρυστάλλου. Παρατηρούμε ότι κάποιες από τις υψηλότερες ενεργειακές καταστάσεις (2P) συγχωνεύονται με τη ζώνη των 2S καταστάσεων. Ως αποτέλεσμα της ανάμιξης αυτών των καταστάσεων, η χαμηλότερη ζώνη περιλαμβάνει τόσες καταστάσεις όσες είναι τα ηλεκτρόνια. Αυτή η ζώνη καλείται ζώνη σθένους και χαρακτηρίζεται από το γεγονός ότι είναι πλήρως κατειλημμένη με ηλεκτρόνια. Μία τέτοια ζώνη δεν μπορεί να φέρει φορτίο, όταν είναι πλήρης. Η ανώτερη ζώνη καταστάσεων, η οποία δεν περιλαμβάνει ηλεκτρόνια, καλείται ζώνη αγωγιμότητας. Αν ένα ηλεκτρόνιο τοποθετηθεί σε αυτή τη

ζώνη, τότε μπορεί να κινηθεί απέναντι στην επίδραση ενός εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου.

Προφανώς, εφόσον εντός του ενεργειακού χάσματος δεν υπάρχουν επιτρεπτές καταστάσεις, δεν θα περίμενε κάποιος να βρεί ένα ηλεκτρόνιο εντός αυτού του εύρους ενεργειών.

Το εύρος του ενεργειακού χάσματος καθώς και η σχετική διαθεσιμότητα των ηλεκτρονίων είναι εκείνα που καθορίζουν αν ένα στερεό είναι μέταλλο ή ημιαγωγός, είτε είναι μονωτής. Σε έναν ημιαγωγό το ενεργειακό χάσμα συνήθως εκτείνεται σε ένα εύρος μικρότερο των τριών eV και η πυκνότητα των ηλεκτρονίων στην ανώτερη ζώνη (ή οπών στη χαμηλότερη ζώνη) είναι συνήθως λιγότερη από 10^{20} cm^{-3} . Αντιθέτως, σε ένα μέταλλο η ανώτερη ζώνη είναι κατειλημμένη με ηλεκτρόνια αρκετά πιο πάνω από το ενεργειακό χάσμα και η συγκέντρωση ηλεκτρονίων είναι της τάξης του 10^{23} cm^{-3} . Οι μονωτές, από την άλλη, έχουν ένα μεγάλο ενεργειακό χάσμα – συνήθως μεγαλύτερο των 3 eV – και έχουν αμελητέα συγκέντρωση ηλεκτρονίων στην ανώτερη ζώνη) και πρακτικά καθόλου οπές στη χαμηλότερη ζώνη).

Εφόσον η ενδοδιατομική απόσταση σε ένα κρύσταλλο δεν είναι ισοτροπική αλλά ποικίλει ανάλογα με τη κρυσταλλογραφική διεύθυνση, κάποιος θα περίμενε ότι αυτή η ποικιλία θα είχε επίδραση στις ενεργειακές ζώνες. Για αυτό το λόγο, παρόλο που το ενεργειακό χάσμα το οποίο χαρακτηρίζει έναν ημιαγωγό έχει την ίδια ελάχιστη τιμή σε κάθε μοναδιαία κυψελίδα, η τοπογραφία του στον αντίστροφο χώρο εντός κάθε μοναδιαίας κυψελίδας μπορεί να γίνει πολύ περίπλοκη.

1.3.2 ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΤΟ ΧΩΡΟ ΤΩΝ ΟΡΜΩΝ

Είδαμε μόλις ότι οι επιτρεπόμενες καταστάσεις έχουν καθορισμένες τιμές ενέργειας. Τώρα πρέπει να αναλογιστούμε πώς οι επιτρεπόμενες καταστάσεις κατανέμονται στο χώρο των ορμών. Η σημασία αυτής της θεώρησης θα αποδειχθεί αργότερα όταν θα δούμε ότι σε οπτικές μεταβάσεις πρέπει να διατηρείται τόσο η ενέργεια όσο και η ορμή.

Η κινητική ενέργεια ενός ηλεκτρονίου, κοντά στα ακρότατα των ζωνών, σχετίζεται με την ορμή p με τη κλασική σχέση

$$E = \frac{p^2}{2m^*} \quad (1.25)$$

Όπου m^* είναι η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου (όπου μπορεί να διαφέρει από την τιμή της στο κενό). Από τη κβαντομηχανική έχουμε την ακόλουθη έκφραση

$$p = \hbar k \quad (1.26)$$

Όπου \hbar είναι η σταθερά του Dirac $= h/2\pi$, όπου h είναι η σταθερά του Planck: και k είναι το κυματόνισμα. Λόγω της σχέσης (1.26), και με σκοπό να ταιριάζει με την κλασική προσέγγιση, θα αποκαλούμε το k ως 'διάνυσμα ορμής'. Αν σκεφτούμε τον κρύσταλλο σαν ένα τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού άπειρου βάθους και βάσης πλάτους L , μπορούμε να βρούμε ότι το k μπορεί να πάρει διακριτές τιμές $k = n(\pi/L)$, όπου n είναι ένας οποιοσδήποτε μή μηδενικός ακέραιος. Πρέπει να σημειωθεί ότι το L είναι ένας ακέραιος αριθμός των N μοναδιαίων κυψελίδων του πλέγματος που έχει περιοδικότητα a . Για αυτό, a είναι το μικρότερο πηγάδι δυναμικού που θα μπορούσε να κατασκευαστεί. Έτσι, όταν $n = N$, $k = \pi/a$ είναι η μέγιστη δυνατή τιμή του k . Αυτή η μέγιστη τιμή προκύπτει στο όριο της ζώνης Brillouin. Μία ζώνη Brillouin είναι ο όγκος του k -χώρου που περιλαμβάνει όλες τις τιμές του k μέχρι το π/a , όπου το a εξαρτάται από τη διεύθυνση. Μεγαλύτερες τιμές του διανύσματος της ορμής k' μετακινούν το σύστημα στην επόμενη ζώνη Brillouin, η οποία είναι πανομοιότυπη με την πρώτη ζώνη και, για αυτό το λόγο, το σύστημα μπορεί να θεωρηθεί σαν να έχει διάνυσμα ορμής $k = k' - \pi/a$. Η κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων μπορεί να εκφραστεί ως

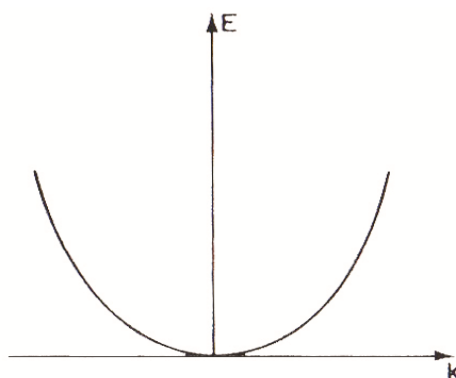
$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m^*} \quad (1.27)$$

Αν ολόκληρος ο κρύσταλλος (ένας κύβος του οποίου οι πλευρές έχουν μήκος L) είναι το πηγάδι δυναμικού, οι επιτρεπόμενες ενέργειες είναι

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (1.28)$$

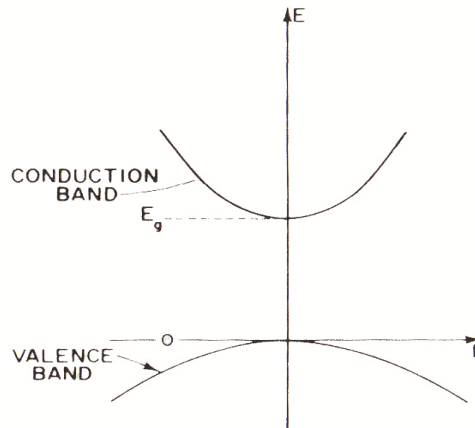
Παρόλο που το E παίρνει διακριτές τιμές, εφόσον οι κβαντικοί αριθμοί n είναι ακέραιοι, τα βήματα είναι τόσο μικρά ($\sim 10^{-18}$ eV για ένα κρύσταλλο 1 cm^3) έτσι ώστε το E να εμφανίζεται ως μερικώς συνεχές.

Ας σκεφτούμε πρώτα πώς η ενέργεια κατανέμεται με την ορμή κατά μήκος μίας διεύθυνσης του χώρου των ορμών. Το σχήμα 1.4 δείχνει μία παραβολική εξάρτηση του E από το k . Έτσι μία τέτοια κατανομή καταστάσεων καλείται παραβολική κοιλάδα – το οπτικό αντίκτυπο είναι περισσότερο έκδηλο σε μία τρισδιάστατη παρουσίαση του E ως προς το k_x και το k_y . Σε ένα τρισδιάστατο χώρο ορμών, μία επιφάνεια σταθερής-ενέργειας σχηματίζει ένα κλειστό κέλυφος και, με κάθε αύξηση στην τιμή της ορμής,



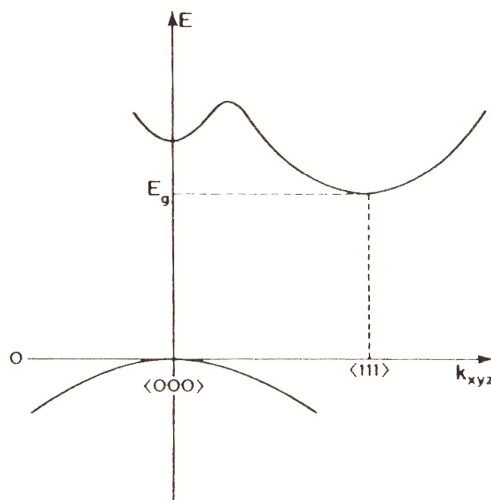
Σχήμα 1.4: Παραβολική εξάρτηση της ενέργειας - ορμής

η ενέργεια αυξάνεται τετραγωνικά. Συνήθως πέρνουμε ως σημείο αναφοράς την κορυφή της ενέργειας στη ζώνη σθένους. Έπειτα ο πυθμένας της ζώνης αγωγιμότητας βρίσκεται σε υψηλότερο δυναμικό σε αντιστοιχία με το ενεργειακό χάσμα (σχήμα 1.5). Η σημασία της προς τα κάτω καμπυλότητας της ζώνης σθένους έγκειται στο ότι αν τα ηλεκτρόνια μπορούσαν να έχουν ένα όριο ολίσθησης όταν βρίσκονται στη ζώνη σθένους (αν δεν ήταν πλήρης), θα επιταχύνονταν προς την αντίθετη κατεύθυνση από αυτή που θα κινούνταν αν βρίσκονταν στη ζώνη αγωγιμότητας, σαν να είχαν αρνητική μάζα.



Σχήμα 1.5: Ενέργεια ως συνάρτηση της ορμής σε ένα σύστημα ενεργειακών ζωνών άμεσου χάσματος.

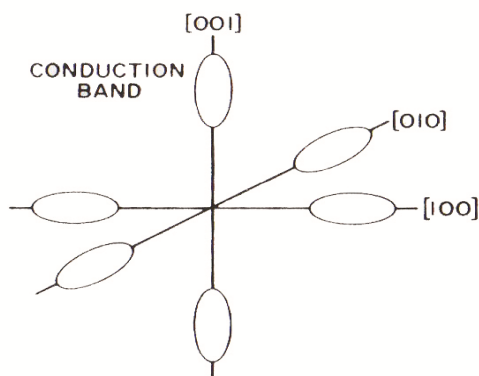
Ο διαχωρισμός μεταξύ δύο γειτονικών ατόμων εξαρτάται από τις διευθύνσεις τους. Για αυτό, το σχήμα μίας επιφάνειας σταθερής-ενέργειας πρέπει να αποκλίνει από εκείνο της τέλει σφαίρας [3] [4]. Επιπλέον εξαιτίας των αλληλεπιδράσεων από γειτονικά άτομα, το ελάχιστο της κοιλάδας στη ζώνη αγωγιμότητας μπορεί να βρίσκεται όχι για $k_x = k_y = k_z = 0$ αλλά σε κάποιο σημείο που ορίζει μία συγκεκριμένη κρυσταλλογραφική διεύθυνση όπως η $[111]$ (σχήμα 1.6).



Σχήμα 1.6: Ενέργεια ως συνάρτηση της ορμής για έναν ημιαγωγό με κοιλάδες αγωγιμότητας για $k=<000>$ και $k=<111>$.

Λόγω της συμμετρίας του κρυστάλλου, η ίδια κατανομή $E(k_x, k_y, k_z)$ πρέπει να επαναλαμβάνεται σε όλες τις ισοδύναμες διευθύνσεις. Με αυτό το τρόπο μπορούν να υπάρχουν τέσσερις ή οκτώ $<111>$ κοιλάδες και τρεις ή έξι $<100>$ κοιλάδες. Ο μικρότερος αριθμός λαμβάνεται όταν οι κοιλάδες βρίσκονται στα όρια της ζώνης

Brillouin (για $k = \pi/a$, όπου a η πλεγματική σταθερά) και μοιράζονται με γειτονικές ζώνες. Για παράδειγμα, στο γερμάνιο οι τέσσερις $\langle 111 \rangle$ κοιλάδες αποτελούνται από ελλειψοειδή των οποίων η παραβολικότητα δεν είναι ισοτροπική, και οι διαμήκεις άξονες είναι προσανατολισμένοι προς τις $[111]$ διευθύνσεις. Ο μεγαλύτερος αριθμός κοιλάδων λαμβάνεται όταν οι κοιλάδες είναι μέσα στη ζώνη Brillouin (για παράδειγμα, οι $\langle 100 \rangle$ κοιλάδες του πυριτίου, όπως φαίνεται στο σχήμα 1.7).



Σχήμα 1.7: Κοιλιάδες σταθερής ενέργειας στο όριο της ζώνης αγωγιμότητας του πυριτίου, που σχηματίζουν έξι ελλειψοειδείς κοιλάδες στις κατευθύνσεις $[100]$.

1.3.3 Η ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ

Στο χώρο των ορμών η πυκνότητα των επιτρεπόμενων σημείων είναι ομοιόμορφη. Οι επιφάνειες σταθερής ενέργειας είναι, σε πρώτη προσέγγιση, σφαιρικές (ισοτροπικό – μέσο): ο όγκος του χώρου- k μεταξύ των σφαιρών ενέργειας E και $E + dE$ είναι $4\pi k^2 dk$. Εδώ το E μετράται ως προς τη κορυφή της παραβολικής ζώνης. Εφόσον μία μεμονωμένη κατάσταση καταλαμβάνει στο χώρο k όγκο $8\pi^3/V$ (V είναι ο όγκος του κρυστάλλου) και υπάρχουν δύο καταστάσεις ανά επίπεδο, μπορούμε να βρούμε τον αριθμό των ενεργειακών καταστάσεων στο ολοκλήρωμα από E έως $E + dE$ ίσο με

$$N(E)dE = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} (2m^*)^{3/2} E^{1/2} dE \quad (1.29)$$

όπου m^* είναι η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου. για ευκολία πέρνουμε το V ως μοναδιαίο όγκο (δηλ. 1 cm^{-3} σε μονάδες cgs). Η ολική πυκνότητα καταστάσεων μέχρι μία ενέργεια E είναι

$$N = \frac{1}{3\pi^2} \frac{1}{\hbar^3} (2m^*E)^{3/2} \quad (1.30)$$

Εφόσον, γενικά, οι κοιλάδες είναι περιστρεφόμενα ελλειψοειδή αντί για σφαιρικές επιφάνειες, η ενεργός μάζα δεν είναι ισοτροπική: για αυτό χρησιμοποιείται μία ενεργός μάζα πυκνότητας καταστάσεων

$$m^* = (m_l^* m_{t_1}^* m_{t_2}^*)^{1/3} \quad (1.31)$$

Όπου m_l^* είναι η διαμήκης ενεργός μάζα και $m_{t_1}^*$ και $m_{t_2}^*$ είναι οι δύο εγκάρσιες μάζες.

Κάθε κοιλάδα συμβάλλει στο δικό της πακέτο καταστάσεων: για αυτό, κάθε διάστημα ενεργειών ($E, E+dE$) περιλαμβάνει καταστάσεις από διαφορετικές κοιλάδες. Με αυτό το τρόπο για να βρούμε την πυκνότητα των καταστάσεων πρέπει να προσθέσουμε τις συνεισφορές όλων των κοιλάδων. Έτσι σε έναν ημιαγωγό με πολλές κοιλάδες ο αριθμός των καταστάσεων μεταξύ, ας πούμε, του ελάχιστου της ζώνης αγωγιμότητας και κάποιας ενέργειας E είναι

$$N = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} \sum_j g_j (2m_j^*)^{3/2} (E - E_j)^{3/2} \quad (1.32)$$

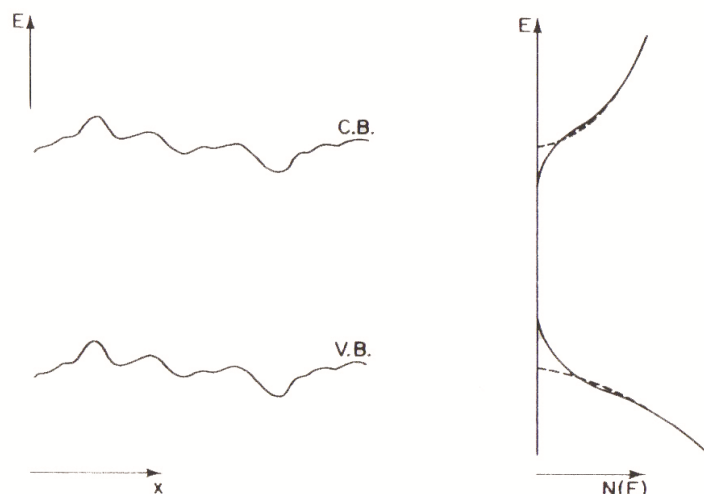
Όπου g_j είναι ο αριθμός των κοιλάδων τύπου j , m_j^* είναι η μέση ενεργός μάζα μία κοιλάδας- j , και E_j είναι η ενέργεια στο ελάχιστο της κοιλάδας- j . Παρόμοια μεταχείριση επιδέχονται και οι καταστάσεις στη ζώνη σθένους.

1.3.4 ΟΥΡΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ

Σε ημιαγωγούς μέσα στους οποίους υπάρχουν προσμίξεις συμβαίνει ένα σημαντικό φαινόμενο: μία διαταραχή στις ενεργειακές ζώνες λόγω του σχηματισμού ‘ουρών’ καταστάσεων οι οποίες επεκτείνουν τις ενεργειακές καταστάσεις μέσα σε ‘απαγορευμένες’ τιμές του ενεργειακού χάσματος. Το πρόβλημα των ουρών καταστάσεων έχει αποσπάσει μεγάλη θεωρητική προσοχή [5]-[12]. Ένας ιονισμένος

δότης ασκεί ελκτική δύναμη στα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας και απωστική δύναμη στις οπές σθένους (οι αποδέκτες δρουν αντίστροφα). Εφόσον οι ατέλειες κατανέμονται τυχαία στον κρύσταλλο, η τοπική αλληλεπίδραση θα είναι περισσότερο ή λιγότερο δυνατή ανάλογα με την τοπική κατανομή των ατελειών (σχήμα). Πρέπει να σημειωθεί ότι το τοπικό ενεργειακό χάσμα – ο διαχωρισμός μεταξύ του μεγίστου της ζώνης σθένους και του ελαχίστου της ζώνης αγωγιμότητας – παραμένει παντού σταθερός. Όμως η κατανομή πυκνότητας καταστάσεων η οποία ενσωματώνει τον αριθμό καταστάσεων κάθε ενέργειας μέσα σε όλο τον όγκο δείχνει ότι υπάρχουν καταστάσεις στη ζώνη αγωγιμότητας σε σχετικά χαμηλό δυναμικό και καταστάσεις στη ζώνη σθένους σε περιοχές υψηλού δυναμικού. Πρέπει να θυμηθούμε ότι, σε αυτό το μοντέλο, οι καταστάσεις κάθε ουράς είναι χωρικά διαχωρισμένες όπως φαίνεται και στην αριστερή εικόνα του σχήματος 1.8.

Καταστάσεις με υψηλό βαθμό ατελειών κινούνται πάνω και κάτω σε σχέση με το δυναμικό της κορυφής της αντίστοιχης ζώνης (π.χ. οι αποδέκτες θα μετακινούνται με την κορυφή της ζώνης σθένους.) Με αυτό τον τρόπο σε υψηλές συγκεντρώσεις, οι καταστάσεις των ατελειών σχηματίζουν μία ζώνη της οποίας η κατανομή θα σχηματίζει ουρά μέσα στο ενεργειακό χάσμα όπως η αντίστοιχη κορυφή της κάθε ζώνης [13].

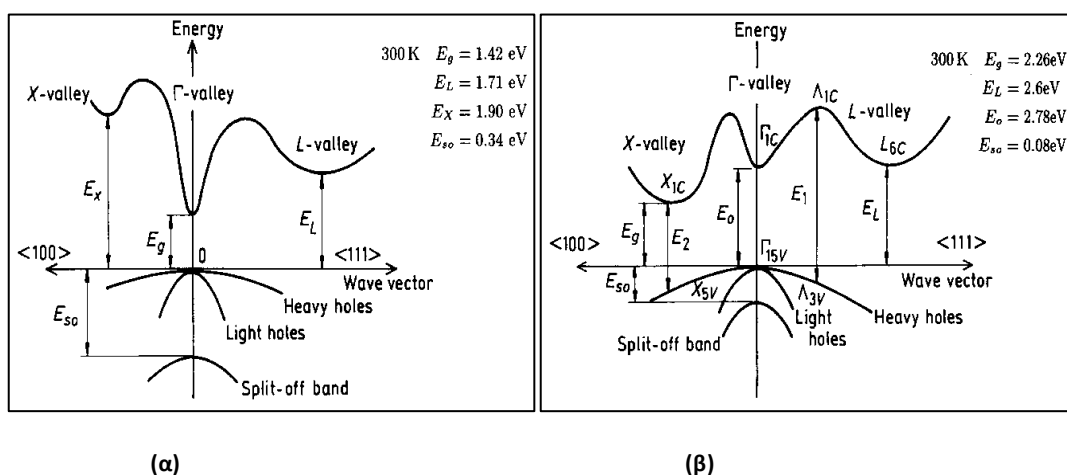


Σχήμα 1.8: Το αριστερό διάγραμμα δείχνει τη διαταραχή των ορίων των ζωνών λόγω της αλληλεπίδρασης Coulomb με τις ανομοιογενώς καταμεμημένες ατέλειες. Αυτό οδηγεί στη δημιουργία «ουρών» καταστάσεων όπως φαίνεται στο δεξί σχήμα. Οι διακεκομμένες γραμμές δείχνουν την κατανομή καταστάσεων στην περίπτωση που δεν υπάρχει η διαταραχή.

1.4 ΦΑΣΜΑΤΑ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ

Η διαδικασία απορρόφησης είναι πολύ σημαντική στη μελέτη των ημιαγωγών, περιλαμβάνει μεταβάσεις από καταστάσεις στην ζώνη σθένους και προκύπτει από την οπτική διέγερση των ηλεκτρονίων ώστε να υπερπηδήσουν το ενεργειακό χάσμα E_G και να μεταβούν στη ζώνη αγωγιμότητας. Σε έναν ιδανικό ημιαγωγό σε μηδενική θερμοκρασία η ζώνη σθένους θα είναι πλήρης, έτσι ώστε κανένα ηλεκτρόνιο να μην μπορεί να διεγερθεί σε μία κατάσταση υψηλότερης ενέργειας μέσα στη ζώνη. Η μόνη πιθανή διαδικασία απορρόφησης είναι εκείνη λόγω των φωτονίων που έχουν αρκετή ενέργεια ώστε να διεγείρουν ηλεκτρόνια πέρα από το ενεργειακό χάσμα, αφήνοντας οπές στη ζώνη σθένους. Αν εφαρμοστεί ένα εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο, τα ηλεκτρόνια και οι οπές θα μετακινηθούν μέσα στον κρύσταλλο και θα παρατηρηθεί φωτοαγωγιμότητα. Στην πράξη το προκύπτον φάσμα απορρόφησης παρουσιάζει έντονη απορρόφηση για μικρά μήκη κύματος, που οριοθετείται εντός μίας περισσότερο ή λιγότερο έντονης κορυφής απορρόφησης (στην περιοχή όπου $h\nu \geq E_G$) πέρα από την οποία το υλικό είναι σχετικά διαφανές. Για τους περισσότερους ημιαγωγούς αυτή η κορυφή προκύπτει στην υπέρυθρη περιοχή του φάσματος και η απορρόφηση μπορεί να είναι αποτέλεσμα 'άμεσης' ή 'έμμεσης' οπτικής μετάβασης, ανάλογα με τη δομή των ενεργειακών ζωνών του ημιαγωγού.

Για την καλύτερη επεξήγηση της διάκρισης μεταξύ άμεσων και έμμεσων μεταβάσεων, ας εξετάσουμε το διάγραμμα ενεργειακών ζωνών ενός τυπικού ημιαγωγού.



Σχήμα 1.9: (α) Ενεργειακό διάγραμμα του GaAs στις διεθύνσεις $\langle 111 \rangle$ και $\langle 100 \rangle$ (β) Ενεργειακό διάγραμμα του GaP στις διεθύνσεις $\langle 111 \rangle$ και $\langle 100 \rangle$

Στο σχήμα 1.9 (α) φαίνεται το ενεργειακό διάγραμμα του GaAs. Αυτό το διάγραμμα, το οποίο αναφέρεται σε κυματόνισμα των ηλεκτρονίων κατά τις διευθύνσεις συμμετρίας $\langle 111 \rangle$ και $\langle 100 \rangle$, δείχνει τις καμπύλες $E-k$ στην περιοχή του ενεργειακού χάσματος του ημιαγωγού. Σε αυτό το υλικό το ελάχιστο στη ζώνη αγωγιμότητας και το μέγιστο στη ζώνη σθένους παρατηρείται στη κοιλάδα-Γ δηλαδή για $k = 0$.

Για έναν ημιαγωγό στον οποίο τα όρια των ενεργειακών ζωνών παρατηρούνται για την ίδια τιμή κυματαριθμού k , η έναρξη της απορρόφησης θα συμβαίνει για $h\nu = E_G$ ως αποτέλεσμα της άμεσης μετάβασης. Ο συντελεστής απορρόφησης α τότε αυξάνεται ραγδαία περίπου στα 10^4 cm^{-1} όπως φαίνεται για παράδειγμα στη λογαριθμική κλίμακα του σχήματος.

Ως αποτέλεσμα μίας οπτικής μετάβασης, ένα ηλεκτρόνιο μεταφέρεται μεταξύ των δύο ζωνών χωρίς μεταβολή στην ορμή hk εφόσον η ορμή του φωτονίου είναι αμελητέα. Σε ένα κβαντομηχανικό υπολογισμό της πιθανότητας μετάβασης, αυτή η συνθήκη για επιτρεπτές μεταβάσεις είναι προφανής ως ένας κανόνας διατήρησης του κυματαριθμού k σύμφωνα με τον οποίο τα ηλεκτρόνια με ένα δεδομένο κυματόνισμα στη ζώνη σθένους μπορούν να πραγματοποιήσουν μόνο 'κάτακόρυφες' μεταβάσεις σε καταστάσεις της ζώνης αγωγιμότητας διατηρώντας το ίδιο κυματόνισμα. Μη-κάτακόρυφες μεταβάσεις θα είναι ρητά απαγορευμένες.

Σε κάποιους ημιαγωγούς το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας παρατηρείται σε μία διαφορετική περιοχή του χώρου k από ότι το μέγιστο της ζώνης σθένους. Το GaP είναι ένα τέτοιο παράδειγμα ημιαγωγού στο οποίο η δομή των ενεργειακών ζωνών του έχει τη γενική μορφή του σχήματος 1.9 (α) αλλά όπως φαίνεται στο σχήμα 1.9 (β), οι σχετικές θέσεις των ζωνών είναι διαφοροποιημένες έτσι ώστε η ελάχιστη ενέργεια της ζώνης αγωγιμότητας να πραγματοποιείται σε σημεία κατά τη διεύθυνση $\langle 100 \rangle$. Η έντονη απορρόφηση λόγω άμεσων μεταβάσεων θα σταματήσει να υπάρχει στο μήκος κύματος που αντιστοιχεί στο ελάχιστο του κατακόρυφου ενεργειακού χάσματος, δηλαδή για $h\nu = 2.78 \text{ eV}$. Οπτικές μεταβάσεις μικρότερης ενέργειας θα απαιτούν και τη συμμετοχή φωνονίων έτσι ώστε να διατηρηθεί η ορμή λόγω της μεταβολής στο κυματόνισμα των ηλεκτρονίων. Δύο πιθανές αλληλεπιδράσεις φωνονίων μπορούν να συμβούν σε διαδικασίες οπτικής απορρόφησης, εξαρτώμενες από το αν το φωνόνιο απορροφάται ή εκπέμπεται. Έτσι η ενέργεια φωτονίων που απαιτείται για τη διέγερση ενός ηλεκτρονίου κατά μήκος του ενεργειακού χάσματος είναι

$h\nu \geq E_G + E_p$ για εκπομπή ενός φωνονίου ενέργειας E_p

και

$h\nu \geq E_G - E_p$ για απορρόφηση φωνονίου.

με την προϋπόθεση ότι διατηρείται η ορμή του συστήματος, δηλαδή:

$$\mathbf{k}_e^{\alpha\rho\chi} \pm \mathbf{k}_p = \mathbf{k}_e^{\tau\epsilon\lambda}.$$

Αυτές οι ‘έμμεσες’ μεταβάσεις παρατηρούνται με μικρότερη πιθανότητα, όπως μπορεί να υπολογιστεί σύμφωνα με τη δεύτερης τάξης θεωρία διαταραχών, και έχει ως αποτέλεσμα μια κορυφή απορρόφησης λιγότερο έντονη σε σχέση με εκείνη της άμεσης μετάβασης.

Δεδομένα για τον συντελεστή απορρόφησης μπορούν να προκύψουν από μετρήσεις διαπερατότητας για ενέργειες φωτονίων έως ίσες και λίγο μεγαλύτερες από ένα άμεσο ενεργειακό χάσμα. Τυπικά για ένα δείγμα πάχους 5μm μπορεί κάποιος να λάβει μετρήσεις συντελεστή απορρόφησης μέχρι και $\alpha \approx 2 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$, αλλά οι μετρήσεις για μεγαλύτερα επίπεδα απορρόφησης γίνονται πολύ δύσκολη υπόθεση λόγω της απαίτησης για λεπτότερα δείγματα. Γι’ αυτό το λόγο τα περισσότερα δεδομένα στην υπεριώδη περιοχή του φάσματος προέρχονται από μετρήσεις ανακλαστικότητας, από τις οποίες υπολογίζονται τα n και k .

1.5 ΑΜΕΣΕΣ ΟΠΤΙΚΕΣ ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ

1.5.1 Η ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑ ΜΕΤΑΒΑΣΗΣ

Ο συντελεστής απορρόφησης που οφείλεται σε άμεσες μεταβάσεις στη κύρια κορυφή απορρόφησης καθορίζεται από τη πιθανότητα μετάβασης ηλεκτρονίων μεταξύ ζευγών ενεργειακών επιπέδων στις δύο ζώνες και από τον αριθμό αυτών των επιπέδων που αλληλεπιδρούν με την προσπίπτουσα ακτινοβολία. Η πιθανότητα μετάβασης $P_{m0}(t)$ από μία πλήρη κατάσταση 0 σε μία κατάσταση m υπό την παρουσία ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας προκύπτει σε γνωστή βιβλιογραφία μέσω της θεωρίας διαταραχών πρώτης τάξης (βλέπε για παράδειγμα, Heitler, και Mott and Sneddon, 1948). Σε όρους έντασης ακτινοβολίας $I(\nu)$ η πιθανότητα να πραγματοποιηθεί μία μετάβαση έπειτα από χρόνο t είναι

$$P_{m_0}(t) = |H_{m_0}|^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{1}{2} (\omega - \omega_{m_0}) t \right]}{\hbar (\omega - \omega_{m_0})^2} \quad (1.33)$$

Όπου τα στοιχεία της μήτρας διαταραχής δίνονται από τη σχέση

$$|H_{m_0}|^2 = \frac{2e^2 I(v) |\mathbf{p}_{m_0}|^2}{3m_0^2 n \epsilon_0 c \omega^2} \quad (1.34)$$

$\hbar\omega_{m_0}$ είναι η διαφορά ενέργειας των δύο επιπέδων, m_0 είναι η μάζα του ελεύθερου ηλεκτρονίου, και ω είναι $2\pi\nu$, η γωνιακή συχνότητα της ακτινοβολίας. Εδώ n είναι ο δείκτης διάθλασης και $|\mathbf{p}_{m_0}|^2$ είναι το τετράγωνο του στοιχείου της μήτρας των ορμών, που δίνεται από τη σχέση

$$|\mathbf{p}_{m_0}|^2 = |(p_x)_{m_0}|^2 + |(p_y)_{m_0}|^2 + |(p_z)_{m_0}|^2 \quad (1.35)$$

όπου

$$(p_x)_{m_0} = -i\hbar \int \psi_n^* \frac{d\psi_0}{dx} dt, \quad \text{κλπ} \quad (1.36)$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι σε αυτή την έκφραση το κυματόνισμα \mathbf{q} της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας έχει παραληφθεί. Η ολοκλήρωση πραγματοποιείται ως προς στο στοιχείο όγκου dt , και ψ_n και ψ_0 είναι οι κατάλληλες κυματοσυναρτήσεις των δύο καταστάσεων. Για έναν ημιαγωγό αυτές είναι οι συναρτήσεις Bloch των ζωνών σθένους και αγωγιμότητας (Bloch, 1928). Αυτές οι συναρτήσεις είναι υπεύθυνες για την ύπαρξη του νόμου διατήρησης του k για άμεσες μεταβάσεις μεταξύ των δύο ζωνών και παίρνουν τη μορφή

$$\psi_0 = u_v(\mathbf{r}, \mathbf{k}_v) \exp i\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{r}, \quad \psi_m = u_c(\mathbf{r}, \mathbf{k}_c) \exp i\mathbf{k}_c \cdot \mathbf{r} \quad (1.37)$$

όπου \mathbf{k}_v , και \mathbf{k}_c είναι τα κατάλληλα κυματόνισμα των δύο καταστάσεων στη ζώνη σθένους και αγωγιμότητας αντίστοιχα, και $u_v(\mathbf{r}, \mathbf{k}_v)$, $u_c(\mathbf{r}, \mathbf{k}_c)$ είναι περιοδικές συναρτήσεις που ακολουθούν την περιοδικότητα του πλέγματος. Εφόσον ένα τέτοιο ζευγάρι ενεργειακών καταστάσεων υπολογίζεται, αυτά τα κυματόνισμα θα πρέπει

να ολοκληρωθούν σε όλο τον όγκο v του κρυστάλλου, έτσι ώστε να είναι συμβατός με την εξίσωση (1.45) πυκνότητας καταστάσεων που περιγράφεται παρακάτω. Αν αντικαταστήσουμε αυτές τις συναρτήσεις στην εξίσωση (1.36) και κάνουμε την ολοκλήρωση σε όλο τον όγκο του κρυστάλλου, τότε βρίσκουμε ότι το \mathbf{p}_{m0} απαλοίφεται εκτός αν οι μεταβάσεις είναι κάθετες στον χώρο \mathbf{k} , δηλαδή εκτός εάν

$$\mathbf{k}_c = \mathbf{k}_v (= \mathbf{k}) \quad (1.38)$$

Κανονικά οι μεταβάσεις ‘επιτρέπονται’ και το $|\mathbf{p}_{m0}|^2$ είναι απλά μία σχεδόν σταθερή συνάρτηση του \mathbf{k} στην περιοχή του ενεργειακού χάσματος ώστε να μπορεί να υπολογισθεί προσεγγιστικά από τη τιμή της κορυφής της ζώνης

$$\mathbf{p}_{m0}(\mathbf{k}_0) \approx -i\hbar \int u_c^*(\mathbf{r}, \mathbf{k}_0) \nabla u_v(\mathbf{r}, \mathbf{k}_0) d\mathbf{r} \quad (1.39)$$

όπου το \mathbf{k}_0 αντιστοιχεί στην ελάχιστη διαφορά μεταξύ των δύο ζωνών. Αυτές οι μεταβάσεις συνήθως αναφέρονται σαν ‘δίπολικες μεταβάσεις’, εφόσον το παραπάνω στοιχείο μήτρας μπορεί να δειχθεί ότι είναι ανάλογο της διπολικής ορμής $\int u_c^* \mathbf{r} u_v d\mathbf{r}$.

Σε κάποιους ημιαγωγούς, εξαιτίας της σχετικής συμμετρίας των κυματοσυναρτήσεων $u_c(\mathbf{r}, \mathbf{k}_0)$ και $u_v(\mathbf{r}, \mathbf{k}_0)$, η παραπάνω εξίσωση μπορεί να δώσει μία απροσδιόριστη τιμή για το στοιχείο της μήτρας $\mathbf{p}_{m0}(\mathbf{k}_0)$. Τότε οι μεταβάσεις είναι απαγορευτικές για $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ (π.χ. όταν $\hbar v = E_G$), αλλά πέρα από το \mathbf{k}_0 οι κυματοσυναρτήσεις τροποποιούνται λόγω της αλληλεπίδρασης μεταξύ των δύο ζωνών και μπορούν να υπολογιστούν μέσω της $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ θεωρίας διαταρακών που περιγράφεται από τον Kane (1956,1957). Για τέτοιες αλλαγές στο κυματόνισμα \mathbf{k} το στοιχείο της μήτρας των ορμών μπορεί να θεωρηθεί ότι μεταβάλλεται γραμμικά σύμφωνα με τη σχέση

$$\mathbf{p}_{m0}(\mathbf{k}) \approx (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \{\nabla_{\mathbf{k}} [\mathbf{p}_{m0}(\mathbf{k})]\}_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \quad (1.40)$$

Παρόλο που αυτές οι μεταβάσεις συνήθως αναφέρονται ως ‘απαγορευμένες’, στη πραγματικότητα γίνονται όλο και ‘πιο επιτρεπτές’ όσο η ενέργεια φωτονίων ξεπερνά τη τιμή E_G . Για το λόγο αυτό παρακάτω αναφορές σε τέτοιου είδους μεταβάσεις θα γίνονται με τη λέξη ‘απαγορευμένες’ μέσα σε εισαγωγικά.

Κατακόρυφες μεταβάσεις ‘απαγορευμένες’ για $\mathbf{k} = 0$ συμβαίνουν μεταξύ των τριών ζωνών σθένους στο Ge και σε άλλους ημιαγωγούς της κρυσταλλικής δομής του Zn. Απορρόφηση λόγω τέτοιου είδους μεταβάσεων παρατηρούνται στο υπέρυθρο σε υλικά p-τύπου και έχουν τη μορφή φάσματος τριών κορυφών. Οι παρατηρούμενες καμπύλες απορρόφησης είναι σε καλή συμφωνία με τη θεωρία ζωνών του Kane (1956) όπου η επιτρεπτικότητα καθορίζει την κατανομή των οπών σε αυτές τις ζώνες. Εφόσον η κατανομή των οπών είναι υπεύθυνη για το σχηματισμό των κορυφών απορρόφησης, αυτές οι καμπύλες ποικίλουν ως προς το σχήμα τους όσο η θερμοκρασία μεταβάλλεται.

1.5.2 Ο ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ

Για να έχει νόημα η πιθανότητα μετάβασης η οποία αυξάνεται με το χρόνο t , είναι απαραίτητο να ολοκληρώσουμε την εξίσωση (1.33) για όλα τα ζεύγη ενεργειακών καταστάσεων στον κρύσταλλο διατηρώντας τις διαφορές των ενεργειών κοντά στη τιμή $\hbar\omega_{m0}$. Η πιθανότητα μετάβασης γίνεται τότε

$$P_{cv}(t) = \frac{2e^2 I(\nu) N(\omega_{m0})}{3m_0^2 n \epsilon_0 c \hbar \omega^2} |\mathbf{p}_{m0}|^2 \int_0^\infty \frac{\sin^2 \left[\frac{1}{2} (\omega - \omega_{m0}) t \right]}{\hbar (\omega - \omega_{m0})^2} d\omega_{m0} \quad (1.41)$$

Όπου $N(\omega_{m0}) \hbar \Delta \omega_{m0}$ είναι ο αριθμός των ζευγών ενεργειακών σταθμών που η διαφορά τους κυμαίνεται σε ένα εύρος τιμών από $\hbar\omega_{m0}$ έως $\hbar\Delta\omega_{m0}$. Έχουμε υποθέσει πως οι παράμετροι που βρίσκονται εκτός του ολοκληρώματος μεταβάλλονται πολύ λίγο σε σχέση με την ολοκληρωθείσα ποσότητα, η οποία έχει μια έντονη κορυφή για $\omega = \omega_{m0}$. Για λογικές τιμές t το ολοκλήρωμα παίρνει την τιμή $\pi t/2$ έτσι ώστε ο συντελεστής απορρόφησης α μπορεί να προκύψει από τη σχέση

$$\alpha = \frac{\hbar \omega P_{cv}(t)}{I(\nu) V t} = \frac{e^2 |\mathbf{p}_{m0}|^2 N(\omega_{m0})}{6m_0^2 n \epsilon_0 c \nu V} \quad (1.42)$$

Αυτή η γενική έκφραση θα χρησιμοποιηθεί για να υπολογίσει το συντελεστή απορρόφησης για την πιο απλή περίπτωση ημιαγωγού άμεσου χάσματος, στον οποίο οι παραβολικές καμπύλες $E-\mathbf{k}$ έχουν το κέντρο τους περίπου για $\mathbf{k} = 0$. Είναι πιο βολικό να θεωρήσουμε ότι για φωτόνια με ενέργειες από $\hbar\nu$ έως $\hbar\nu + \hbar\Delta\nu$ τα οποία

αλληλεπιδρούν με ηλεκτρόνια που βρίσκονται εντός της περιοχής από \mathbf{k} έως $\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}$ στον χώρο \mathbf{k} , υπάρχει μία ίση πυκνότητα ηλεκτρονιακών καταστάσεων στις ζώνες σθένους και αγωγιμότητας για αυτά τα εύρη τιμών. Για κατάκόρυφες μεταβάσεις μία συγκεκριμένη τιμή \mathbf{k} προσδιορίζεται μοναδικά από την ενέργεια φωτονίου

$$h\nu = E_G + \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_r \quad (1.43)$$

Όπου η ανηγμένη μάζα δίνεται από τη σχέση

$$1/m_r = 1/m_e + 1/m_h \quad (1.44)$$

Η πυκνότητα των ηλεκτρονιακών καταστάσεων στον όγκο $\Delta^3\mathbf{k}(=4\pi\mathbf{k}^2\Delta\mathbf{k})$ του χώρου \mathbf{k} είναι $2\Delta^3\mathbf{k}/(2\pi)^3$, επιτρέποντας ένα παράγοντα 2 για το spin. Πρέπει να σημειωθεί ότι, παρόλο που και οι δύο ζώνες είναι διπλά εκφυλισμένες λόγω του spin, μόνο ένας παράγοντας δύο (και όχι τέσσερα) εισέρχεται στην εξίσωση ανηγμένης πυκνότητας καταστάσεων εφόσον το spin διατηρείται σε μία διπολική μετάβαση. Η πυκνότητα δεσμευμένων καταστάσεων μπορεί να προκύψει λοιπόν από την εξίσωση (1.43), δίνοντας

$$N(h\nu) = V4\pi(2m_r)^{3/2}(h\nu - E_G)^{1/2}/h^3 \quad (1.45)$$

Όπου V είναι ο όγκος του κρυστάλλου. Το $N(h\nu)$ μπορεί να αντικατασταθεί στην εξίσωση (1.42) έτσι ώστε ο συντελεστής απορρόφησης να δίνεται από την έκφραση

$$\alpha = A(h\nu - E_G)^{1/2} \quad (1.46)$$

όπου

$$A = \frac{2\pi e^2 (2m_r)^{3/2} |\mathbf{p}_{m0}|^2}{3m_0^2 n \epsilon_0 c h^3 \nu} \quad (1.47)$$

Για επιτρεπές μεταβάσεις, το A μεταβάλλεται αμελητέα σε σχέση με την ενέργεια φωτονίων.

1.5.3 'ΑΠΑΓΟΡΕΥΜΕΝΕΣ' ΑΜΕΣΕΣ ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ

Όπως προαναφέρθηκε, σε κάποια υλικά, οι κανόνες επιλογής απαγορεύουν τις άμεσες μεταβάσεις για $k = 0$ αλλά τις επιτρέπουν για $k \neq 0$, με τη πιθανότητα μετάβασης να αυξάνεται αναλογικά με το k^2 . Αυτό σημαίνει πως η πιθανότητα μετάβασης αυξάνει αναλογικά και με τη ποσότητα $(h\nu - E_G)$. Εφόσον η πυκνότητα καταστάσεων για άμεσες μεταβάσεις είναι ανάλογη του $(h\nu - E_G)^{1/2}$, ο συντελεστής απορρόφησης θα έχει την ακόλουθη έκφραση

$$\alpha = A'(h\nu - E_G)^{3/2} \quad (1.48)$$

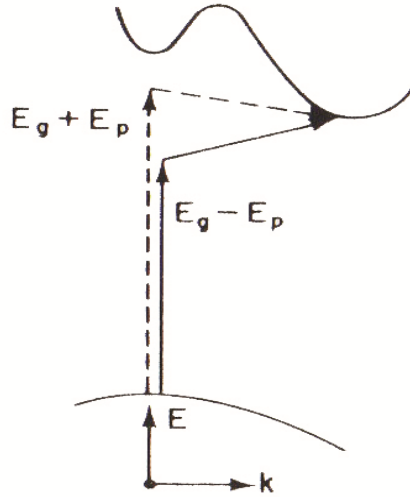
Όπου από τις εξισώσεις (1.40), (1.43), (1.44) και (1.45) προκύπτει

$$A' = \frac{8\pi^3 e^2 (2m_r)^{3/2}}{3m_0^2 n \epsilon_0 c h^5 \nu} \left| \frac{\partial [\mathbf{p}_{m0}(\mathbf{k})]}{\partial k} \right|_{k=k_0}^2 \quad (1.49)$$

1.6 ΕΜΜΕΣΕΣ ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ

Όταν μία μετάβαση απαιτεί αλλαγή και στην ενέργεια αλλά και στην ορμή της αρχικής κατάστασης, τότε απαιτείται μια διπλή, ή δύο σταδίων, διαδικασία επειδή το φωτόνιο δεν μπορεί να υποστεί μεταβολή στην ορμή του. Η ορμή διατηρείται μέσω μιας αλληλεπίδρασης φωνονίου όπως φαίνεται στο σχήμα 1.10. Ένα φωνόνιο είναι μία κβαντική ταλάντωση του πλέγματος. Παρόλο που ένα ευρύ φάσμα φωνονίων είναι διαθέσιμο, μόνο εκείνα με την απαιτούμενη μεταβολή στην ορμή τους είναι χρήσιμα για αυτή τη διαδικασία. Αυτά είναι συνήθως τα διαμήκη- και τα εγκάρσια-ακουστικά φωνόνια. Κάθε ένα από αυτά τα φωνόνια έχει μία χαρακτηριστική ενέργεια E_p . Επομένως για να ολοκληρωθεί η μετάβαση από μία αρχική ενεργειακή κατάσταση E_i σε μία τελική E_f , ένα φωνόνιο είτε εκπέμπεται είτε απορροφάται. Αυτές οι δύο διαδικασίες δίνονται αντίστοιχα από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} h\nu_e &= E_f - E_i + E_p \\ h\nu_\alpha &= E_f - E_i - E_p \end{aligned} \quad (1.50)$$



Σχήμα 1.10: Διάγραμμα έμμεσων μεταβάσεων

Στις έμμεσες μεταβάσεις, όλες οι κατειλημμένες καταστάσεις της ζώνης σθένους μπορούν να συνδεθούν με όλες τις διαθέσιμες καταστάσεις της ζώνης αγωγιμότητας. Η πυκνότητα των αρχικών καταστάσεων για μία ενέργεια E_i είναι

$$N(E_i) = \frac{1}{2\pi^2\hbar^3} (2m_h^*)^{3/2} |E_i|^{1/2} \quad (1.51)$$

Η πυκνότητα καταστάσεων για E_f είναι

$$N(E_f) = \frac{1}{2\pi^2\hbar^3} (2m_e^*)^{3/2} (E_f - E_G)^{1/2} \quad (1.52)$$

Αντικαθιστώντας την εξίσωση (1.50) παίρνω,

$$N(E_f) = \frac{1}{2\pi^2\hbar^3} (2m_e^*)^{3/2} (h\nu - E_G \mp E_p - E_i)^{1/2} \quad (1.53)$$

Ο συντελεστής απορρόφησης είναι ανάλογος του γινομένου της πυκνότητας των αρχικών καταστάσεων που δίνεται από την εξίσωση (1.52) και των τελικών

καταστάσεων που δίνεται από την εξίσωση (1.53) ολοκληρωμένα σε όλες τις δυνατές καταστάσεις που διαφέρουν κατά $h\nu \pm E_p$: ο α είναι επίσης ανάλογος με την πιθανότητα της αλληλεπίδρασης με φωνόνια, η οποία είναι μία συνάρτηση $f(N_p)$ του αριθμού φωνονίων ενέργειας E_p . Ο αριθμός φωνονίων μπορεί να υπολογιστεί σύμφωνα με τη στατιστική Bose – Einstein [14]:

$$N_p = \frac{1}{\exp \frac{E_p}{kT} - 1} \quad (1.54)$$

Και έτσι έχουμε

$$\alpha = Af(N_p) \int_0^{-(h\nu - E_G \mp E_p)} |E_i|^2 (h\nu - E_G \mp E_p + E_i)^{1/2} dE_i \quad (1.55)$$

Μετά την ολοκλήρωση και αντικαθιστώντας την εξίσωση (1.54) στην (1.55), ο συντελεστής απορρόφησης για μία μετάβαση με απορρόφηση φωνονίου θα είναι

$$\alpha_\alpha = \frac{A(h\nu - E_G + E_p)^2}{\exp \frac{E_p}{kT} - 1} \quad (1.56)$$

για $h\nu > E_G - E_p$. Η πιθανότητα εκπομπής φωνονίου είναι ανάλογη του $N_p + 1$: έτσι ο συντελεστής απορρόφησης για μία μετάβαση με εκπομπή φωνονίου θα είναι

$$\alpha_e = \frac{A(h\nu - E_G - E_p)^2}{1 - \exp(-\frac{E_p}{kT})} \quad (1.57)$$

για $h\nu > E_G + E_p$.

Εφόσον τόσο η εκπομπή όσο και απορρόφηση φωνονίου είναι πιθανή όταν $h\nu > E_G + E_p$, ο συντελεστής απορρόφησης είναι τότε

$$a = \alpha_\alpha + \alpha_e \quad (1.58)$$

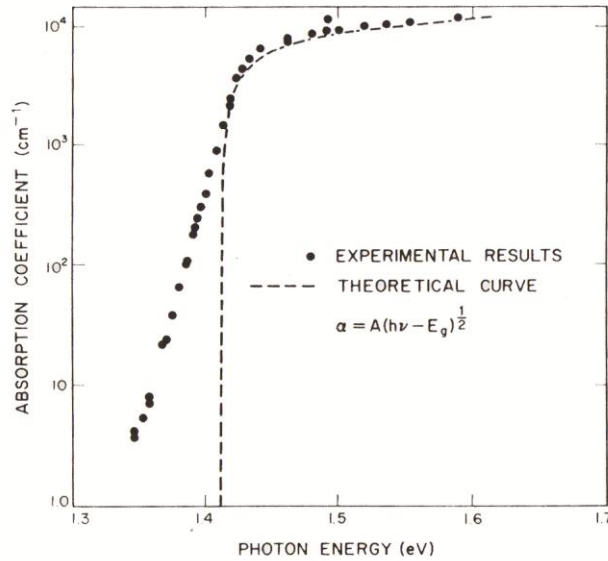
για $h\nu > E_G + E_p$.

Σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες, η πυκνότητα φωνονίων είναι πολύ μικρή (μεγάλος παρονομαστής στην εξίσωση (1.56): για αυτό ο α_α θα είναι επίσης μικρός.

1.7 ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ ΜΕΤΑΞΥ «ΟΥΡΩΝ» ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ

Είδαμε ότι οι μεταβάσεις μεταξύ παραβολικών ζωνών, όπου διατηρείται η ορμή, θα πρέπει να δίνουν ως αποτέλεσμα μία κορυφή απορρόφησης η οποία υπακούει στη σχέση (1.46), όπου η σταθερά απορρόφησης αυξάνεται με τη τετραγωνική ρίζα της ενέργειας φωτονίων σε σχέση με το ενεργειακό χάσμα. Συνήθως φτιάχνουμε τα διαγράμματα της κορυφής απορρόφησης ενός υλικού σε λογαριθμική κλίμακα όπως φαίνεται στο σχήμα (1.11). Για άμεσες οπτικές μεταβάσεις κάποιος θα περίμενε μηδενική απορρόφηση κάτω από το ενεργειακό χάσμα και, για αυτό το λόγο, μία απότομη άνοδο της κορυφής απορρόφησης. Όμως στην πράξη υπάρχει μία εκθετική αύξηση της κορυφής απορρόφησης [15]-[25]. Σε κάποια υλικά, έχει παρατηρηθεί ότι ισχύει η σχέση $d(\ln\alpha)/d(h\nu) = 1/kT$ – γνωστή και ως κανόνας του Urbach [26]. Η εκθετική κορυφή απορρόφησης του GaAs βρέθηκε ότι συσχετίζεται αρκετά καλά με τις μεταβάσεις που σχετίζονται με τις ουρές καταστάσεων.

Αν ένας ημιαγωγός είναι υψηλά νοθευμένος, το επίπεδο Fermi βρίσκεται εντός της ζώνης που επηρεάζεται από τις προσμίξεις (της ζώνης σθένους αν είναι υλικό p-τύπου) κατά μία ποσότητα ξ_p από τη κορυφή της ζώνης. Επομένως τα ηλεκτρόνια δεν μπορούν να βρεθούν σε καταστάσεις ενέργειας μεταξύ της κορυφής της ζώνης σθένους και της κορυφής της ζώνης σθένους μειωμένης κατά ξ_p . Αντίστοιχα ισχύει για υλικά n-τύπου (το επίπεδο Fermi μετατοπίζεται κατά ξ_n πάνω από τη ΖΑ).

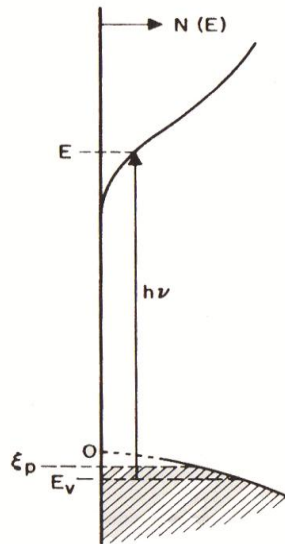


Σχήμα 1.11: Κορυφή απορρόφησης του GaAs σε θερμοκρασία περιβάλλοντος [15].

Ας εξετάσουμε πως μία εκθετική κατανομή καταστάσεων επηρεάζει τον συντελεστή απορρόφησης. Ας εξετάσουμε την περίπτωση ενός υλικού p-τύπου. Το επίπεδο Fermi επιλέγεται ώστε να βρίσκεται στην παραβολική μεριά της ζώνης σθένους, έτσι ώστε το διαταραγμένο κομμάτι της ζώνης σθένους να βρίσκεται πάνω από την ενέργεια Fermi. Τότε η πυκνότητα των αρχικών καταστάσεων, N_i , είναι ανάλογη με το $|E_\nu|^{1/2}$, όπου E_ν είναι η ενέργεια της κατάστασης σε συμφωνία με την τιμή της κορυφής της ζώνης σθένους (σχήμα 1.12). Οι τελικές καταστάσεις σχηματίζουν μία εκθετική «ουρά» στην ζώνη αγωγιμότητας και η πυκνότητά τους για κάποια ενέργεια E δίνεται από τη σχέση

$$N_f = N_0 e^{E/E_0}$$

όπου E_0 είναι μία εμπειρική παράμετρος η οποία έχει διαστάσεις ενέργειας: το E_0 περιγράφει μία κατανομή καταστάσεων αλλά όχι την ενέργειά τους. Ας υποθέσουμε ότι η διατήρηση της ορμής δεν δημιουργεί κάποιο πρόβλημα στις οπτικές μεταβάσεις και ότι το στοιχείο της μήτρας για τις μεταβάσεις είναι σταθερό, δηλαδή, ανεξάρτητο από την ενέργεια φωτονίων $h\nu = E - E_\nu$. Αυτή είναι μία λογική υπόθεση για υλικά με μεγάλο αριθμό προσμίξεων.



Σχήμα 1.12: Ενεργειακό διάγραμμα που απεικονίζει πως γίνεται η απορρόφηση σε μία ζώνη αγωγιμότητας με ουρά καταστάσεων σε έναν ημιαγωγό p-τύπου. Η ουρά στη ζώνη σθένους έχει παραληφθεί εφόσον, όντας άδεια, δεν συμμετέχει στη διαδικασία απορρόφησης.

Ο συντελεστής απορρόφησης είναι ανάλογος του ολοκληρώματος των πυκνοτήτων αρχικών και τελικών καταστάσεων για ενέργειες κάθε δυνατής μετάβασης για ένα δοσμένο $h\nu$:

$$\alpha(h\nu) = A \int_{\xi_p}^{h\nu - \xi_p} |E_v|^{1/2} \exp \frac{E}{E_0} dE \quad (1.59)$$

όπου το A είναι μία σταθερά. Ας αντικαταστήσουμε το $E - h\nu$ με το E_v , και ας κάνουμε την παρακάτω αλλαγή μεταβλητής:

$$x = \frac{h\nu - E}{E_0}$$

Η εξίσωση (1.59) μπορεί να γραφεί

$$\alpha(h\nu) = -Ae^{h\nu/E_0} (E_0)^{3/2} \int_{(h\nu + \xi_p)/E_0}^{\xi_p/E_0} x^{1/2} e^{-x} dx \quad (1.60)$$

Το κάτω όριο το θέτουμε ∞ επειδή $h\nu \gg E_0$: αυτό κάνει το ολοκλήρωμα ανεξάρτητο του $h\nu$ και οδηγεί στη λύση

$$\alpha(h\nu) = Ae^{h\nu/E_0}(E_0)^{3/2} \left[\frac{1}{2}(\pi)^{1/2} - \int_0^{\xi_p/E_0} x^{1/2} e^{-x} dx \right] \quad (1.61)$$

Η κλίση της κορυφής απορρόφησης σε μία λογαριθμική κλίμακα τότε δίνει

$$E_0 = \left[\frac{d(\ln\alpha)}{d(h\nu)} \right]^{-1} \quad (1.62)$$

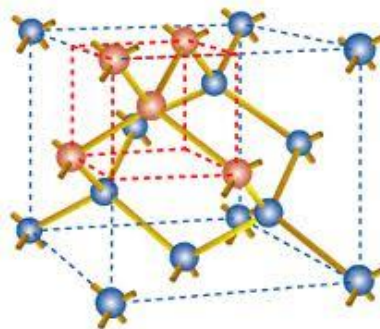
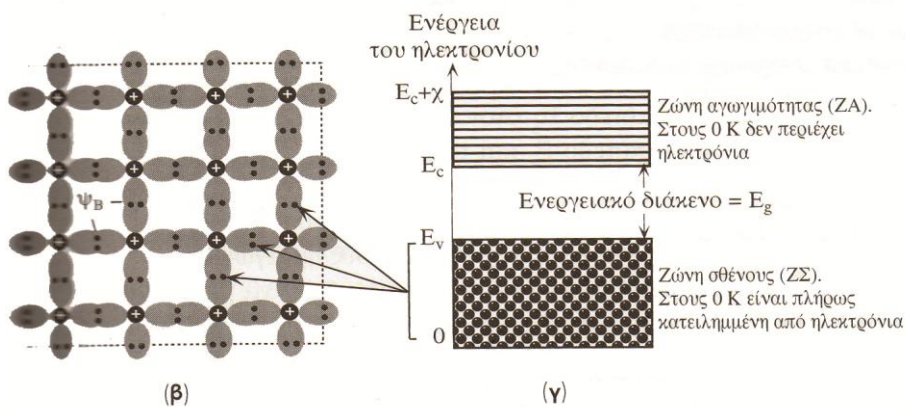
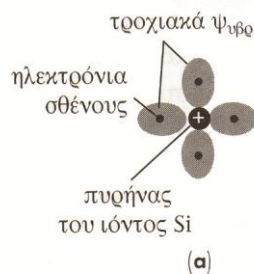
Όπως προαναφέρθηκε, η πειραματικά υπολογισμένη κορυφή απορρόφησης μπορεί να προσαρμοστεί σε μία εκθετική εξάρτηση του $h\nu$. Έτσι η ποσότητα E_0 μπορεί να υπολογιστεί και να συσχετιστεί με την συγκέντρωση ατελειών.

1.8 ΤΟ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΟ ΚΑΙ ΤΟ ΑΜΟΡΦΟ ΠΥΡΙΤΙΟ

1.8.1 Ο ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΣ ΤΟΥ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΚΑΙ ΤΟ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ ΤΩΝ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΩΝ ΖΩΝΩΝ

Η ηλεκτρονική διάταξη ενός απομονωμένου ατόμου Si είναι $[\text{Ne}]3s^2p^2$. Όταν όμως ένα άτομο βρίσκεται κοντά σε άλλα άτομα, τότε τα ενεργειακά επίπεδα 3s και 3p βρίσκονται τόσο κοντά ώστε η αλληλεπίδραση τους να έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία τεσσάρων τροχιακών $\psi(3s)$, $\psi(3p_x)$, $\psi(3p_y)$ και $\psi(3p_z)$, τα οποία συνδυάζονται και δημιουργούν τέσσερα νέα υβριδικά τροχιακά (που ονομάζονται $\psi_{\text{υβριδ}}$), τα οποία διατάσσονται συμμετρικά σε όσο το δυνατόν μεγαλύτερη απόσταση μεταξύ τους (κατευθύνονται από τις γωνίες ενός τετραέδρου). Στο σχήμα 1.13(α) βλέπουμε μία σχηματική αναπαράσταση των τεσσάρων τροχιακών στις δύο διαστάσεις. Τα τέσσερα υβριδικά τροχιακά, $\psi_{\text{υβριδ}}$, έχουν από ένα ηλεκτρόνιο το καθένα και επομένως είναι κατά το ήμισυ κατειληγμένα. Επομένως, ένα τροχιακό $\psi_{\text{υβριδ}}$ ενός ατόμου Si μπορεί να επικαλύπτεται με ένα τροχιακό $\psi_{\text{υβριδ}}$ ενός γειτονικού ατόμου Si και να δημιουργείται έτσι ένα ομοιοπολικός δεσμός με δύο ηλεκτρόνια που έχουν ζευγαρωμένα spin. Έτσι, δια της επικάλυψης των $\psi_{\text{υβριδ}}$ τροχιακών, το κάθε

άτομο Si θα συνδέεται με τέσσερα άλλα άτομα Si (εικόνα 1.13(δ)). Κάθε δεσμός Si-Si αντιστοιχεί σε ένα δέσμιο τροχιακό, ψ_B το οποίο προκύπτει από την υπέρθεση δύο γειτονικών τροχιακών $\psi_{\text{υβριδ}}$. Κάθε δέσμιο τροχιακό (ψ_B) έχει δύο ηλεκτρόνια με ζευγαρωμένο (αντιπαράλληλο) spin και είναι επομένως πλήρες. Δύο άτομα Si που γειτονεύουν μπορούν να συνδεθούν επίσης μέσω ομοιοπολικών δεσμών με άλλα άτομα Si και να σχηματίσουν έτσι ένα τρισδιάστατο πλέγμα ατόμων Si. Η δομή που προκύπτει είναι ο κρύσταλλος του Si όπου κάθε άτομο Si συνδέεται με άλλα τέσσερα άτομα Si σε τετραεδρική διάταξη. Η γεωμετρική δομή είναι η δομή του διαμαντιού. Μπορούμε να φανταζόμαστε ότι, στις δύο διαστάσεις, ο κρύσταλλος του Si θα είναι σαν το σχέδιο της εικόνας 1.13(β). Τα ηλεκτρόνια των ομοιοπολικών δεσμών είναι τα ηλεκτρόνια σθένους.

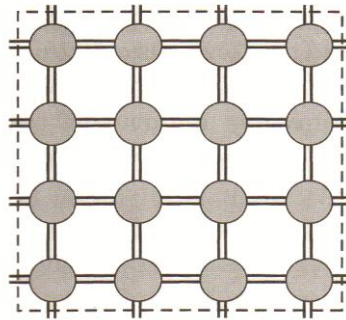


Σχήμα 1.13: (α) Μία απλοποιημένη δισδιάστατη απεικόνιση ενός ατόμου Si που έχει τέσσερα υβριδικά τροχιακά $\psi_{\text{υβρ}}$. Κάθε τροχιακό περιέχει ένα ηλεκτρόνιο. (β) Μία απλοποιημένη δισδιάστατη απεικόνιση μίας περιοχής ενός κρυστάλλου Si. Απεικονίζονται οι ομοιοπολικοί δεσμοί. (γ) Το διάγραμμα ενεργειακών ζωνών σε θερμοκρασία απόλυτου μηδενός. (δ) Η 3-διάστατη απεικόνιση του πραγματικού κρυστάλλου Si.

Στην εικόνα 1.13(γ) απεικονίζεται το διάγραμμα των ενεργειακών ζωνών του κρυσταλλικού πυριτίου. Ο κατακόρυφος άξονας αντιστοιχεί στην ενέργεια ενός ηλεκτρονίου στον κρύσταλλο. Η ζώνη σθένους περιέχει τις ηλεκτρονικές καταστάσεις που αντιστοιχούν στην επικάλυψη των δέσμιων τροχιακών (ψ_B). Αφού όλα τα δέσμια τροχιακά είναι στον κρύσταλλο πλήρη από ηλεκτρόνια σθένους, τότε σε θερμοκρασία απόλυτου μηδενός, η ζώνη σθένους θα είναι επίσης πλήρης. Η ζώνη αγωγιμότητας περιέχει τις ηλεκτρονικές καταστάσεις που αντιστοιχούν σε υψηλότερες ενέργειες, αυτές δηλαδή που προκύπτουν από την επικάλυψη των αντιδέσμιων τροχιακών. Η ζώνη αγωγιμότητας χωρίζεται από τη ζώνη σθένους από το ενεργειακό χάσμα E_G . Το ενεργειακό επίπεδο E_v αντιστοιχεί στην κορυφή της ζώνης σθένους ενώ το ενεργειακό επίπεδο E_c στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας. Η ενεργειακή απόσταση ανάμεσα στο επίπεδο E_c και το επίπεδο του κενού, το πλάτος δηλαδή της ζώνης αγωγιμότητας, ονομάζεται ηλεκτρονική συγγένεια χ . Το ενεργειακό διάγραμμα του σχήματος 1.13(γ), με τις κατάλληλες τροποποιήσεις στις τιμές της ενέργειας, ισχύει για όλους τους κρυσταλλικούς ημιαγωγούς.

Τα ηλεκτρόνια που φαίνονται στο σχήμα 1.13(γ) να βρίσκονται στη ζώνη σθένους είναι τα ηλεκτρόνια που, στην εικόνα 1.13(β) ανήκουν στους ομοιοπολικούς δεσμούς μεταξύ των ατόμων Si. Ένα ηλεκτρόνιο όμως που βρίσκεται στη ζώνη σθένους, δεν είναι εντοπισμένο σε μία ατομική περιοχή αλλά εκτείνεται σε ολόκληρο το στερεό. Στην εικόνα 1.13(β) βέβαια, τα ηλεκτρόνια παρουσιάζονται εντοπισμένα στα δέσμια τροχιακά ανάμεσα στα άτομα Si, κάτι όμως που δεν είναι απόλυτα σωστό. Στον κρύσταλλο, τα ηλεκτρόνια μπορούν χάρη στο φαινόμενο σύραγγας, να μετακινηθούν από τον ένα δεσμό στον άλλο και να αλλάζουν θέση. Αν υπολογίζαμε την κυματοσυνάρτηση ενός ηλεκτρονίου σθένους του κρυσταλλικού πυριτίου, θα βλέπαμε ότι εκτείνεται σε ολόκληρο τον κρύσταλλο. Άρα δεν μπορούμε να διακρίνουμε ανάμεσα στα ηλεκτρόνια των ομοιοπολικών δεσμών. Δεν μπορούμε δηλαδή να ταυτοποιήσουμε ένα ηλεκτρόνιο και να λέμε ότι θα βρίσκεται σε ένα δεσμό μεταξύ δύο συγκεκριμένων ατόμων Si.

Μπορούμε, καταχρηστικά, να αναπαραστήσουμε σχηματικά τον κρύσταλλο του Si στις δύο διαστάσεις μέσω του σχήματος 1.14. Κάθε ομοιοπολικός δεσμός μεταξύ ατόμων Si αναπαριστάται από δύο γραμμές, οι οποίες συμβολίζουν τα δύο ηλεκτρόνια που έχουν αντιπαράλληλα spin. Κάθε γραμμή αναπαριστά ένα ηλεκτρονιο σθένους.



Σχήμα 1.14: Μία διδιάστατη εικονική απεικόνιση ενός κρυστάλλου Si. Οι ομοιοπολικοί δεσμοί απεικονίζονται ως διπλές γραμμές. Κάθε γραμμή αντιστοιχεί σε ένα ηλεκτρονιο σθένους.

1.8.2 ΑΜΟΡΦΟΙ ΗΜΙΑΓΩΓΟΙ

Η μέχρι τώρα συζήτηση περιορίστηκε στα κρυσταλλικά υλικά. Υπάρχει όμως και μία άλλη κατηγορία υλικών, τα άμορφα υλικά, η εντατική μελέτη των οποίων άρχισε τη δεκαετία του 1970 και τα οποία εμφανίζουν ευρεία περιοχή εφαρμογών. Ως άμορφα υλικά ορίζονται αυτά που δεν έχουν κρυσταλλική τάξη δηλαδή ενώ στα κρυσταλλικά υλικά οι ενδοατομικές αποστάσεις και γωνίες μεταξύ των γειτόνων είναι αυστηρά καθορισμένες από τη μικροσκοπική συμμετρία, στα άμορφα υλικά οι τιμές αυτές δεν είναι σταθερές παρά μόνον σε μικροσκοπική κλίμακα (1ης και 2ης τάξης γειτονία). Για παράδειγμα, στο c-Si κάθε άτομο Si είναι συνδεδεμένο με 4 πρώτους και 12 δεύτερους γείτονες (αριθμοί συναρμογής $N_1=4$ και $N_2=12$ αντίστοιχα) σε αποστάσεις $r_1=2.35\text{\AA}$, $r_2=3.86\text{\AA}$, ενώ η γωνία μεταξύ των δεσμών στην 4-εδρική μονάδα είναι $109^\circ 28'$. Στο a-Si, ενώ διατηρούνται τα N_1 , και N_2 , οι γωνίες των δεσμών μπορεί να είναι παραμορφωμένες κατά $\pm 20^\circ$, ενώ δεν διατηρείται ο αριθμός συναρμογής σε 3η γειτονία. Ενώ λοιπόν υπάρχει μικροσκοπική συμμετρία δεν υπάρχει συμμετρία σε μακροσκοπική κλίμακα. Η δομή των αμόρφων υλικών, η οποία μπορεί να περιλαμβάνει και κενά (voids), θα μπορούσε να περιγραφεί σαν ένα τυχαίο, συνεχές πλέγμα ατελώς συνδεδεμένων ατόμων. Επομένως, η περίθλαση ακτίνων X δεν δίνει σαφείς κηλίδες αλλά δακτυλίους ή άλω (halos). Η δομή των αμόρφων υλικών περιγράφεται από μία ακτινική (radial) συνάρτηση κατανομής με

σφαιρική συμμετρία : $F(r) = 4\pi r^2 \rho(r)$, όπου $\rho(r)$ είναι η ηλεκτρονική πυκνότητα σε απόσταση r από ένα τυχαίο άτομο.

Γνωστές εφαρμογές των αμόρφων υλικών περιλαμβάνουν τη χρήση αμόρφου Se (α -Se) στη ξηρογραφία, του αμόρφου Si (α -Si) στα ηλιακά κύτταρα (solar cells) και υάλων των χαλκογενιδίων (chalcogenide glasses) στην κατασκευή ταχύτατων διακοπών με εφαρμογές στους υπολογιστές. Πρέπει να σημειωθεί ότι μία επί πλέον διάκριση γίνεται μεταξύ αμόρφων και πολυκρυσταλλικών υλικών. Τα τελευταία αποτελούνται από πολλούς μικρούς κρυσταλλίτες με τυχαίο μεταξύ τους προσανατολισμό.

Πολλά από τα άμορφα υλικά παρουσιάζουν ημιαγωγική συμπεριφορά αφού δεν είναι ούτε καλοί αγωγοί, ούτε καλοί μονωτές αλλά σχετικά φτωχοί αγωγοί. Η ημιαγωγική συμπεριφορά των αμόρφων υλικών αποδίδεται στο γεγονός ότι, ενώ δεν διατηρείται η μακροσκοπική κρυσταλλική συμμετρία, εν τούτοις εμφανίζουν σημαντική μικροσκοπική συμμετρία και οι απαιτήσεις των δεσμών εν γένει ικανοποιούνται. Οι άμορφοι ημιαγωγοί χαρακτηρίζονται από μεγάλη συγκέντρωση ατελειών δομής, χαμηλή συγκέντρωση ελεύθερων φορέων και πολύ χαμηλή ευκινησία φορέων.

Τα άμορφα υλικά μπορούν να παρασκευαστούν με διάφορες μεθόδους, όπως εναπόθεση από την αέρια φάση ή σε ατμόσφαιρα εκκένωσης αίγλης (glow discharge), με εμφύτευση ιόντων σε κρυσταλλικό υπόβαθρο ή με ταχεία ψύξη από το τήγμα (quenching). Τα υλικά που παρασκευάζονται με την μέθοδο της ταχείας ψύξης (ο ρυθμός ψύξης είναι της τάξης του 10^6 K/sec) από το τήγμα ονομάζονται και ύαλοι.

Υπάρχουν δύο γενικές κατηγορίες αμόρφων υλικών :

- (a) αυτά με τετραεδρικούς δεσμούς, π.χ. Si, Ge, ενώσεις III-V, που χαρακτηρίζονται από μεγάλη συγκέντρωση ελεύθερων δεσμών συγγενείας.
- (b) τα χαλκογενίδια (ή lone-pair ημιαγωγοί) που αποτελούνται από ενώσεις που περιέχουν Se, S ή Te και δεν περιέχουν μετρήσιμη συγκέντρωση μονήρων (unpaired) spins.

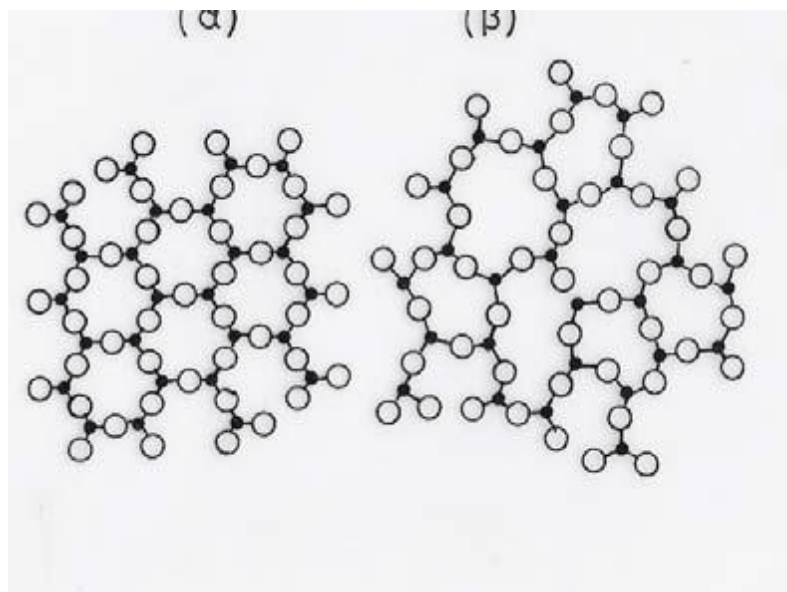
Τέλος υπάρχουν δύο τύποι υάλων :

- (1) Οι ύαλοι με μη-ακέραιο αριθμό συναρμογής, όπως προσδιορίζεται από απορρόφηση ακτίνων X (Extended X-Ray Absorption Fine Structure-EXAFS) ή φασματοσκοπία νετρονίων. Στην κατηγορία αυτή ανήκουν ενώσεις όπως α -Se, α -As₂Se₃ και οι περισσότερες των μεταλλικών υάλων.

(2) Τα υλικά στα οποία διατηρείται ο αριθμός συναρμογής που χαρακτηρίζει και τη κρυσταλλική φάση, π.χ. $a\text{-Si}$, $a\text{-GaAs}$. Σαν παράδειγμα αμόρφου υλικού παρατίθεται το SiO_2 στο οποίο κάθε άτομο Si σχηματίζει δεσμούς με 4 άτομα O και κάθε άτομο O σχηματίζει δεσμούς με 2 άτομα Si. Η διδιάστατη απεικόνιση των θέσεων των ατόμων στο κρυσταλλικό και άμορφο SiO_2 φαίνεται στο Σχήμα 1.15.

Ορισμένοι εκ των ημιαγωγών, όπως το Si και το Ge, μπορούν να παρασκευαστούν και στις τρεις μορφές, κρυσταλλική, άμορφη και πολυκρυσταλλική. Τα υμένα $a\text{-Si}$ ή $a\text{-Ge}$ που εναποτίθενται σε $T < 300^\circ\text{C}$ έχουν πυκνότητα μικρότερη αυτής των κρυσταλλικών υλικών κατά 15-20% περίπου, ενώ οι ιδιότητές τους είναι σταθερές μέχρι τους 425°C . Οι δεσμοί συνεχίζουν να είναι ομοιοπολικοί sp^3 αλλά, λόγω της χαμηλής ευκινησίας των ατόμων στην χαμηλή θερμοκρασία παρασκευής, είναι ατελείς.

Ελεύθεροι δεσμοί συγγενείας (ΕΔΣ) ονομάζονται οι δεσμοί που έχουν ένα μόνον ηλεκτρόνιο, αντί για δύο με αντίθετο spin, και είναι χαρακτηριστικοί των υλικών που περιέχουν “σπασμένους” δεσμούς.



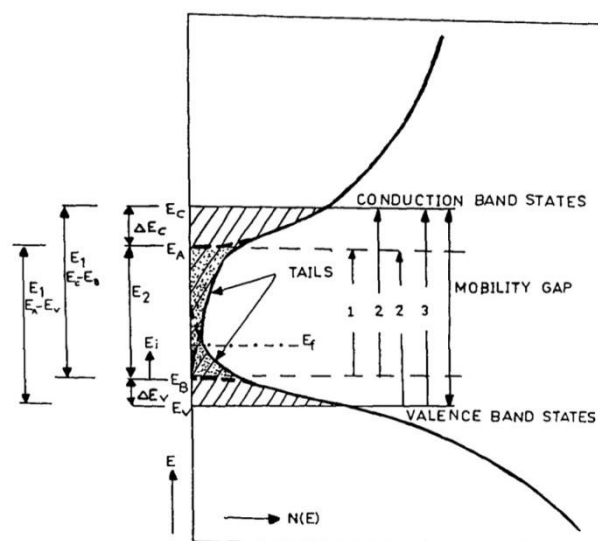
Σχήμα 1.15: Η δομή του SiO_2 στην (α) κρυσταλλική και στην (β) άμορφη κατάσταση

Ηλεκτρονική δομή : Η πυκνότητα καταστάσεων των ημιαγωγών περιλαμβάνει τις εκτεταμένες (extended) και εντοπισμένες (localized) καταστάσεις. Οι εκτεταμένες έχουν πεπερασμένο πλάτος και ευκινησία σε όλη την έκταση του υλικού ενώ οι εντοπισμένες έχουν πεπερασμένο πλάτος σε μία μικρή περιοχή του υλικού και εξαιρετικά μικρή ευκινησία. Παράδειγμα εντοπισμένης κατάστασης σε κρυσταλλικό

ημιαγωγό αποτελούν τα άτομα των δοτών στα οποία τα ηλεκτρόνια είναι εντοπισμένα σε ένα υδρογονοειδές (hydrogen-like) τροχιακό γύρω από το άτομο του δότη. Οι εντοπισμένες καταστάσεις εισάγουν οξείς κορυφές στο διάγραμμα πυκνότητας καταστάσεων. Όταν η συγκέντρωσή τους είναι μεγάλη τότε αυτές οι κορυφές διευρύνονται και σχηματίζουν ζώνες.

Σύμφωνα με το μοντέλλο του Mott το άμορφο πλέγμα εισάγει χωρική διαταραχή στις ΖΣ και ΖΑ που συνεπάγεται την εμφάνιση τοπικών ακροτάτων, ελαχίστων στην ΖΑ και μεγίστων στην ΖΣ, στα οποία (ακρότατα) παγιδεύονται οι φορείς. Στα άμορφα υλικά τα ηλεκτρόνια στις χαμηλότερες στάθμες της ΖΑ, που λειτουργούν σαν παγίδες, είναι “εντοπισμένα” και μπορούν να κινηθούν μόνον εάν πάρουν ενέργεια από το πλέγμα (φωνόνια). Οι εντοπισμένες και μη-εντοπισμένες ηλεκτρονικές καταστάσεις χωρίζονται από το “χάσμα ευκινησίας” (mobility gap) που οριοθετείται μεταξύ των εντοπισμένων και εκτεταμένων καταστάσεων και που είναι σημαντικά μεγαλύτερο από το ενεργειακό χάσμα E_g .

Το σχήμα 1.16 αναπαριστά την κατανομή πυκνότητας καταστάσεων σύμφωνα με το μοντέλο του Mott [27]. Τρεις τύποι οπτικών μεταβάσεων μπορούν να συμβάλλουν στην απορρόφηση μεταξύ των ενεργειακών ζωνών όπως φαίνεται και στο σχήμα: (1) μεταβάσεις μεταξύ αρχικά και τελικά εντοπισμένων καταστάσεων, (2) μεταβάσεις μεταξύ αρχικά εντοπισμένων (ή εκτεταμένων) και τελικά εκτεταμένων (ή εντοπισμένων) καταστάσεων και (3) μεταβάσεις μεταξύ αρχικά και τελικά εκτεταμένων καταστάσεων.



Σχήμα 1.16: Πυκνότητα καταστάσεων $N(E)$ ως συνάρτηση της ενέργειας E σε άμορφους ημιαγωγούς σύμφωνα με το μοντέλο του Mott: 1, 2 και 3 είναι οι τρεις δυνατοί τύποι οπτικών μεταβάσεων, E_1 είναι το ενεργειακό χάσμα όταν τα στοιχεία της μήτρας τοπικών μεταβάσεων

είναι 0, και E_2 είναι το ενεργειακό χάσμα όταν τα στοιχεία της μήτρας τοπικών μεταβάσεων είναι ίσα με εκείνα της μήτρας εκτεταμένων μεταβάσεων, ΔE_c και ΔE_v είναι οι ουρές καταστάσεων λόγω της διαταραχής.

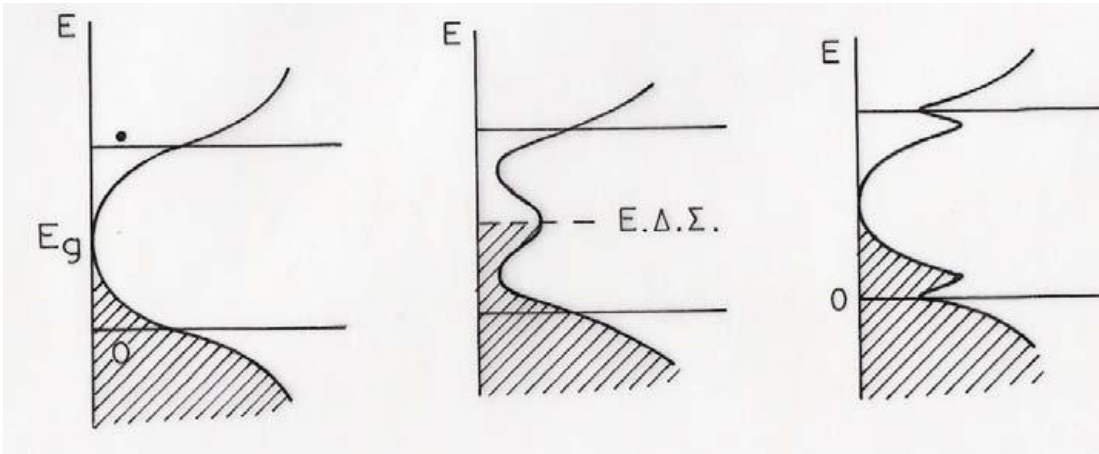
Αν υποθέσουμε έναν άμορφο ημιαγωγό, π.χ. Ge, στον οποίο διατηρείται ο αριθμός συναρμογής $N=4$, τότε αναμένουμε ότι οι ομοιοπολικοί δεσμοί θα δημιουργήσουν δέσμιες και αντιδέσμιες στάθμες (bonding και antibonding) που θα οδηγήσουν στη δημιουργία ζωνών σθένους και αγωγιμότητας (ΖΣ και ΖΑ αντίστοιχα). Οι ζώνες θα συνοδεύονται από “ουρές” (tail) καταστάσεων που εκτείνονται μέσα στο χάσμα (και επομένως θα εμφανίζονται ευρύτερες από ότι στα κρυσταλλικά υλικά), όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.17, και οφείλονται στην διαταραχή της μακροσκοπικής συμμετρίας. Τα ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τις καταστάσεις στις “ουρές” είναι εντοπισμένα λόγω της διαταραχής του δυναμικού και επομένως δεν μπορούν να συμμετέχουν στην αγωγιμότητα.

Η υπόθεση που κάναμε ότι ο αριθμός συναρμογής $N=4$ οδηγεί σε έναν σχεδόν «ιδανικό» άμορφο ημιαγωγό. Στην συνηθέστερη περίπτωση έχουμε μικρότερο αριθμό συναρμογής, π.χ. $N=3$, δηλαδή κάθε άτομο έχει έναν μη-πλήρη “ελεύθερο” (uncompensated) δεσμό συγγενείας (dangling bond), που στα περαιτέρω θα συμβολίζεται με το ακρονωνύμιο ΕΔΣ. Αν και θα περιμέναμε ότι το 4ο διαθέσιμο ηλεκτρόνιο, που δεν συμμετέχει σε δεσμό, θα ήταν φορέας που θα συμμετείχε στην αγωγιμότητα, κατ’ αναλογία προς την συμπεριφορά των επί πλέον ηλεκτρονίων των δοτών, στην πραγματικότητα είναι εντοπισμένο, ουσιαστικά παγιδευμένο, στον ΕΔΣ. Ο εντοπισμένος χαρακτήρας οφείλεται στην απουσία της μακροσκοπικής κρυσταλλικής συμμετρίας που συνεπάγεται ότι δεν υπάρχουν ισοδύναμες γειτονικές θέσεις για το μονήρες ηλεκτρόνιο του ΕΔΣ. Επομένως αυτό χαρακτηρίζεται από περιορισμένο χωρικό εκφυλισμό (degeneracy) και η κίνησή του είναι περιορισμένη.

Οι ΕΔΣ εισάγουν δύο εντοπισμένες ζώνες μέσα στο χάσμα, μία των μονήρων ηλεκτρονίων και μία άδεια, οι οποίες επικαλύπτονται μερικώς, όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.18. Η συγκέντρωση των ΕΔΣ στα άμορφα υλικά είναι τόσο μεγάλη, της τάξης του 10^{25} cm^{-3} , που ουσιαστικά ελέγχουν την θέση της E_F . Επομένως ο έλεγχος της ηλεκτρικής συμπεριφοράς των αμόρφων υλικών μέσω της εισαγωγής προσμείξεων είναι εξαιρετικά δύσκολος.

Η εισαγωγή προσμείξεων στα άμορφα υλικά είναι δυνατή μόνον όταν ελαττωθεί η συγκέντρωση των ΕΔΣ και αυτό επιτυγχάνεται με την εισαγωγή ατομικού υδρογόνου (H) το οποίο είναι εξαιρετικά δραστικό και σχηματίζει δεσμούς με τους ΕΔΣ. Για

παράδειγμα, η εισαγωγή του H στο α-Si γίνεται κατά την ανάπτυξη με την μέθοδο της χημικής εναπόθεσης (LPCVD, PECVD), όταν στην αέριο φάση υπάρχει SiH₄ το οποίο διασπάται και παρέχει Si και H. Με την υδρογόνωση μειώνεται η συγκέντρωση των ΕΔΣ στο μέσον του χάσματος ενώ οι ζώνες που εισάγουν οι ΕΔΣ μετατοπίζονται προς την ΖΑ και ΖΣ και το διάγραμμα ζωνών του ημιαγωγού πλέον προσομοιάζει προς αυτό του κρυσταλλικού ημιαγωγού (Σχήμα 1.19).



Σχήμα 1.17: Η παραμόρφωση της τετραεδρικής δομής σε έναν ημιαγωγό προκαλεί διεύρυνση των ΖΑ και ΖΣ μέσα στο χάσμα. Οι καταστάσεις που εισάγονται στις ουρές των ζωνών είναι εντοπισμένες και μη αγώγιμες.

Σχήμα 1.18: οι ζώνες που εισάγονται από τους ΕΔΣ στο ενεργειακό χάσμα. Η συγκέντρωση των ΕΔΣ είναι πολύ υψηλή και ακινητοποιεί (pins) την E_F στο μέσο του χάσματος.

Σχήμα 1.19: Η αδρανοποίηση των ΕΔΣ από ατομικό υδρογόνο μειώνει την συγκέντρωσή τους στο μέσον του χάσματος και καθιστά την E_F ευαίσθητη στην παρουσία προσμίξεων.

1.8.3 ΤΟ ΑΜΟΡΦΟ ΠΥΡΙΤΙΟ ΣΕ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΕΣ ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ

Το άμορφο πυρίτιο δεν έχει κρυσταλλική μορφή. Τα φωτοβολταϊκά άμορφου πυριτίου κατασκευάζονται μέσω της τεχνολογίας των λεπτών υμενίων (thin film). Μακράν οικονομικότερα από τα υπόλοιπα, χρησιμοποιείται και αυτό στην προσπάθεια μείωσης του κόστους κατασκευής.

Το άμορφο πυρίτιο (α-Si) διαφέρει από το κρυσταλλικό πυρίτιο στο ότι τα άτομα του πυριτίου δεν είναι τοποθετημένα σε πολύ συγκεκριμένες αποστάσεις το ένα από το άλλο και οι γωνίες μεταξύ των δεσμών Si-Si δεν έχουν μια συγκεκριμένη μοναδική τιμή. Οι ενδοατομικές αποστάσεις ποικίλλουν και οι γωνίες δεσμών σε μια περιοχή τιμών αλλά και οποιαδήποτε συγκεκριμένη απόσταση Si-Si ή γωνία δεσμού παίρνει τυχαία οποιαδήποτε τιμή σε αυτή την περιοχή.

Αυτή η ακανόνιστη διάταξη μέσα στην ατομική διευθέτηση έχει μια σημαντική επίδραση πάνω στα ηλεκτρονικά χαρακτηριστικά του υλικού. Αυτό σημαίνει την δημιουργία υλικού με άμεσο (οπτικό) ενεργειακό χάσμα των 1.75 eV περίπου, καθώς μάλιστα οι ενεργειακές του ζώνες παρουσιάζουν μια πολύ υψηλή πυκνότητα καταστάσεων μέσα στο ενεργειακό χάσμα, που οφείλεται σε μεγάλο βαθμό και στις ελλειπείς συνδέσεις. Το 1969 βρέθηκε ότι η ένταξη υδρογόνου μέσα σε άμορφο πυρίτιο θα μπορούσε να απενεργοποιήσει τους ελλειπείς δεσμούς και να ελαττώσει την πυκνότητα των καταστάσεων μέσα στο ενεργειακό χάσμα, σε τέτοιο βαθμό ώστε να μπορεί να κατασκευασθεί υλικό τύπου - n ή τύπου - p από την πρόσμειξη φωσφόρου ή βορίου. Εφ' όσον έγινε δυνατό να δημιουργηθούν επαφές p-n μέσα σε a-Si ο μεγάλος συντελεστής απορρόφησης του και η εύκολη βιομηχανική κατασκευή του το κάνει ελκυστικό υλικό για τα κύτταρα. Τόσο ο τύπος p όσο και ο τύπος n έχουν χαμηλές ιδιότητες μεταφοράς και τα ηλεκτρικά στοιχεία απλής επαφής p-n έχουν χαμηλές αποδόσεις. Η ενσωμάτωση ενδογενούς a-Si βελτιώνει τις ιδιότητες μεταφοράς και η ανάπτυξη των ηλιακών κυττάρων επαφής p-i-n οδηγεί σε ταχεία βελτίωση της λειτουργίας τους. Το στρώμα i δεν είναι στην πραγματικότητα πλήρως ενδογενές αλλά ελαφρώς τύπου-n. Επομένως προτιμάται να έχουμε είσοδο φωτός στο ηλιακό κύτταρο διαμέσου ενός πολύ λεπτού στρώματος τύπου-p έτσι, ώστε η περιοχή της μέγιστης φωτογένεσης μέσα στο στρώμα i να είναι επίσης η περιοχή του υψηλότερου ηλεκτρικού πεδίου, μεταξύ του βαριά ντοπαρισμένου στρώματος-p⁺ και του πολύ ελαφρά ντοπαρισμένου-n στρώματος-i.

Η βέλτιστη δομή του ηλιακού κυττάρου a-Si είναι η p⁺-i-n, έχει μία διαφανή αγώγιμη επιφάνεια στο στρώμα -p⁺ και μία ωμική επαφή στο στρώμα -n. Δυστυχώς ένα οπτικά διαφανές υλικό υψηλής αγωγιμότητας τύπου-p δεν έχει ακόμα ανακαλυφθεί. Το διαφανές αγώγιμο υλικό που χρησιμοποιείται συνήθως είναι οξειδίο κασσιτέρου το οποίο είναι τύπου-n. Εντούτοις οι υψηλά νοθευμένες στοιβάδες διαφανούς αγώγιμου οξειδίου (TCO) σχηματίζουν μία επαφή σήραγγας με στρώμα p⁺ a-Si, έχοντας αντίσταση στην ροή του ρεύματος πολύ μικρή.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2.

ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ

2.1 ΔΟΜΗ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΑΡΑΣΚΕΥΗΣ ΛΕΠΤΩΝ ΥΜΕΝΙΩΝ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΓΙΑ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΕ ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΕΣ ΚΥΨΕΛΙΔΕΣ

Σε αυτή τη διπλωματική εργασία, ο οπτικός χαρακτηρισμός του αμόρφου πυριτίου έγινε σε δείγματα των οποίων η διάταξη αποτελείται από ένα λεπτό υμένιο αμόρφου πυριτίου πάχους 200nm εναποτεθημένο σε γυάλινο διάφανο υπόστρωμα. Η διάταξη αυτή, αποτελεί, την πρώτη μορφή, της τελικής διάταξης μίας τεχνολογίας φωτοβολταϊκής κυψελίδας. Η τελευταία αποκαλείται τεχνολογία micromorph, και έχει την παρακάτω δομή: ένα στοιχείο λεπτών υμενίων, διαθέτει διπλή δομή με ένα στρώμα άμορφου πυριτίου και ένα στρώμα μικροκρυσταλλικού πυριτίου. Τα αρχικά στάδια παραγωγής, η εναπόθεση του TCO (διάφανο αγωγίμο οξείδιο, στην συγκεκριμένη περίπτωση ZnO) στο γυαλί και η δημιουργία του άμορφου στρώματος του πάνω στοιχείου είναι παρόμοια με εκείνα της τεχνολογίας κατασκευής στοιχείων άμορφου πυριτίου. Στη συνέχεια εναποτίθεται ένα δεύτερο στρώμα μικροκρυσταλλικού πυριτίου μετά το στρώμα άμορφου πυριτίου. Η επαφή στην πίσω πλευρά, η στρωματοποίηση και η τοποθέτηση του προστατευτικού γυάλινου καλύμματος γίνονται όπως στη συμβατική διαδικασία παραγωγής.

Η δομή διπλού στρώματος ημιαγωγών εκμεταλλεύεται με τον καλύτερο δυνατό τρόπο το ηλιακό φάσμα διότι τα δύο στρώματα πυριτίου μετατρέπουν μεγαλύτερο μέρος της φωτεινής ενέργειας σε ηλεκτρική. Το στρώμα άμορφου πυριτίου είναι ευαίσθητο στην ορατή περιοχή της ηλιακής ακτινοβολίας, ενώ το στρώμα μικροκρυσταλλικού πυριτίου μετατρέπει το υπέρθυρο τμήμα του φάσματος σε ηλεκτρισμό. Σαν αποτέλεσμα, ένα πλαίσιο που βασίζεται στην τεχνολογία

micromorph είναι κατά 50% αποδοτικότερο απ' ό τι ένα πλαίσιο που βασίζεται στη συμβατική τεχνολογία άμορφου πυριτίου.

Η τεχνολογία Micromorph βασίζεται σε υλικά που είναι φιλικά προς το περιβάλλον, μη τοξικά και υπάρχουν σε αφθονία στη φύση. Απαιτεί επίσης τη μισή ενέργεια απ' όση χρειάζεται για την παραγωγή στοιχείων κρυσταλλικού πυριτίου.

Το άμορφο και το μικροκρυσταλλικό υδρογονωμένο πυρίτιο παρασκευάζονται κυρίως με τη χημική εναπόθεση ενισχυμένη με πλάσμα (RFPECVD, MW-PECVD) καθώς η μέθοδος αυτή παρουσιάζει μια σειρά πλεονεκτημάτων:

- (1) Είναι δυνατή η ομοιόμορφη εναπόθεση σε μεγάλης επιφάνειας υποστρώματα (έως 1 m²).
- (2) Παρέχει τη δυνατότητα εναπόθεσης υμενίων σε χαμηλές θερμοκρασίες και έτσι είναι δυνατή η εφαρμογή φθηνών υποστρωμάτων (γυαλιού ή πολυμερών).
- (3) Απαιτείται μικρότερη κατανάλωση ενέργειας και
- (4) Μικρή κατανάλωση πρώτων υλών.

Επιπρόσθετα, οι υψηλότερες αποδόσεις μέχρι σήμερα έχουν επιτευχθεί για φωτοβολταϊκά κύτταρα τα οποία έχουν παρασκευασθεί με τη μέθοδο PECVD. Οι έρευνες σήμερα έχουν στραφεί στη διερεύνηση τεχνικών οι οποίες βασίζονται σε παραλλαγές της PECVD για την εναπόθεση λεπτών υμενίων κατάλληλων για εφαρμογή σε ιδιοσκευές με υψηλούς ρυθμούς ανάπτυξης. Για παράδειγμα μελετάται η εφαρμογή υψηλότερων συχνοτήτων, η τροποποίηση των ηλεκτροδίων εναπόθεσης καθώς και η εναπόθεση σε υψηλότερες πιέσεις.

2.2 ΦΑΣΜΑΤΟΦΩΤΟΜΕΤΡΟ ΑΝΑΚΛΑΣΤΙΚΟΤΗΤΑΣ ΔΙΑΠΕΡΑΤΟΤΗΤΑΣ

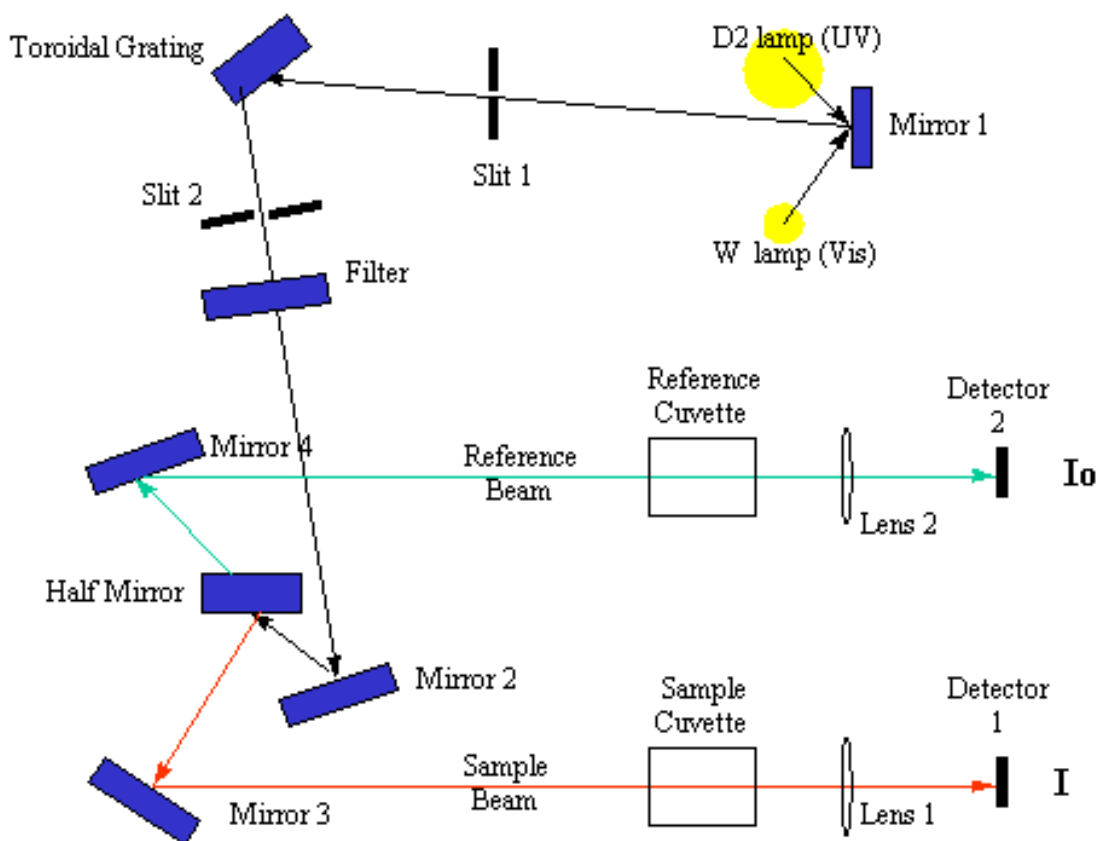
Στο πρώτο πειραματικό μέρος αυτής της εργασίας, το οποίο αφορά την εκτίμηση οπτικών συναρτήσεων αμόρφου πυριτίου από δεδομένα διαπερατότητας, πραγματοποιήθηκαν μετρήσεις με το φασματόμετρο Perkin Elmer Lambda 19 UV/Vis/NIR (Εικόνα 2.1).



Εικόνα 2.1: Φασματοόμετρο Perkin Elmer Lambda 19 UV/Vis/NIR και εξάρτημα μέτρησης της ανακλαστικότητας.

Στο σχήμα 2.1 απεικονίζεται η τυπική διάταξη ενός φασματογράφου UV-vis-NIR. Μία δέσμη φωτός εκπέμπεται από μια λάμπα αλογόνου που εκπέμπει στο ορατό και το NIR (400 ως 2500 nm) ή από μια λάμπα δευτερίου που εκπέμπει υπεριώδες φως (200 ως 400 nm). Για τις δικές μας μετρήσεις η ακτινοβολία γινόταν και με τις 2 πηγές διαδοχικά προκειμένου να εξεταστεί η οπτική συμπεριφορά των δειγμάτων για όσο το δυνατόν μεγαλύτερο κομμάτι του φάσματος. Ύστερα από την ανάκλασή της πάνω σε μια κατοπτρική επιφάνεια (Mirror 1), η αρχική δέσμη διέρχεται από μια λεπτή σχισμή (Slit 1) και προσπίπτει στο φράγμα περίθλασης (Diffraction Grating) στο οποίο πραγματοποιείται η ανάλυση της δέσμης. Το φράγμα έχει την δυνατότητα να περιστρέφεται έτσι ώστε ρυθμίζοντας κατάλληλα τον προσανατολισμό του φράγματος να εξασφαλίζουμε ότι από την επόμενη σχισμή (Slit 2) θα διέρχεται μία στενή ζώνη μηκών κύματος. Έπειτα, το φίλτρο που μεσολαβεί στην πορεία της φωτεινής δέσμης αφαιρεί τους ανεπιθύμητους υψηλότερους όρους περίθλασης. Η μονοχρωματική δέσμη, αφού ανακλαστεί σε ένα κάτοπτρο (Mirror 2), διαχωρίζεται στη συνέχεια σε δύο συνιστώσες ίσης έντασης μετά τη διέλευση από μία ημικατοπτρική επιφάνεια (Half Mirror). Η μία δέσμη (Sample Beam) διέρχεται από μια κυψελίδα μικρών διαστάσεων που περιέχει το μελετούμενο υλικό (Sample Cuvette). Η άλλη συνιστώσα που αποτελεί τη δέσμη αναφοράς (Reference Beam), περνά από μια ίδια κυψελίδα που περιέχει το δείγμα αναφοράς, όπου σε αυτήν την εργασία είναι ο αέρας εφόσον θέλουμε να συμπεριλάβουμε την συνεισφορά του γυάλινου υποστρώματος όπως θα δούμε παρακάτω. Η καταγραφή της έντασης της

δέσμης γίνεται με φωτοπολλαπλασιαστή στη περιοχή UV-vis και ανιχνευτή PbS στο NIR.



Σχήμα 2.1: Απεικόνιση λειτουργίας UV-vis φασματογράφου.

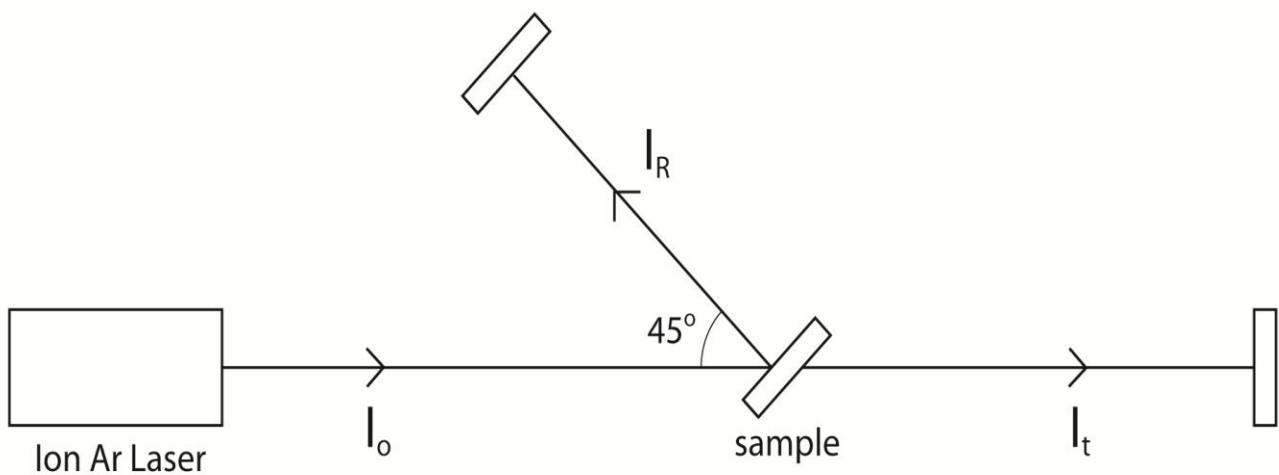
Μετρώντας τις τιμές έντασης των δύο δεσμών I_0 και I σε διαφορετικά μήκη κύματος, μπορούν να υπολογιστούν τα μεγέθη της ποσοστιαίας διαπερατότητας T και της απορροφητικότητας A που προκύπτουν από το νόμο των Lambert – Beer. Η ανακλαστικότητα των δειγμάτων μετράται με την προσθήκη κατάλληλου εξαρτήματος που αντικαθιστά τις κυψελίδες δειγματος και αναφοράς. Το εξάρτημα αυτό αποτελείται από σύστημα καθρεπτών που εκτρέπουν την πορεία της δέσμης ώστε να ανακλαστεί πάνω στην επιφάνεια του δειγμάτων μας. Παρόλα αυτά κάτι τέτοιο δεν θα μας χρησιμεύσει στα πλαίσια αυτής της εργασίας εφόσον η επεξεργασία δεδομένων αφορά μόνο στα δεδομένα της ποσοστιαίας διαπερατότητας T του δείγματος.

2.3 ΔΙΑΤΑΞΗ ΜΕΛΕΤΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗΣ ΕΞΑΡΤΗΣΗΣ ΔΕΙΚΤΗ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ ΛΕΠΤΩΝ ΥΜΕΝΙΩΝ ΑΜΟΡΦΟΥ ΠΥΡΙΤΙΟΥ

Στο δεύτερο πειραματικό μέρος αυτής της εργασίας, πραγματοποιήθηκαν μετρήσεις διαπερατότητας και ανακλαστικότητας του δείγματος a-Si/Glass αρχικά σε συνθήκες περιβάλλοντος και έπειτα σε συνθήκες θερμοκρασιών $27^{\circ} < T < 500^{\circ}$, για μονοχρωματική ακτινοβολία laser 488nm, 647,1nm.

2.3.1 ΣΥΝΘΗΚΕΣ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ

Η πειραματική διάταξη σε συνθήκες περιβάλλοντος έχει ως εξής: μονοχρωματική δέσμη προσπίπτει στο δείγμα a-Si/Glass υπό γωνία $\approx 22^{\circ}$ ώστε να ανακλαστεί σε γωνία $\approx 45^{\circ}$. Σκοπός είναι να μετρήσουμε την ένταση της ακτινοβολίας laser, με τη βοήθεια ενός ενεργόμετρου, αρχικά της απευθείας δέσμης χωρίς να παραμβάλλεται το δείγμα, έπειτα της εξερχόμενης από το δείγμα δέσμης και τέλος της ανακλώμενης από το δείγμα δέσμης. Να αναφέρουμε ότι είναι πολύ σημαντική η διατήρηση της σταθερής αυτής γεωμετρίας του δείγματος ώστε να γίνει η επεξεργασία των δεδομένων όπως περιγράφηκε στην παράγραφο 1.3. Αναλυτικά μπορούμε να διακρίνουμε την πειραματική διάταξη στο σχήμα 2.2.

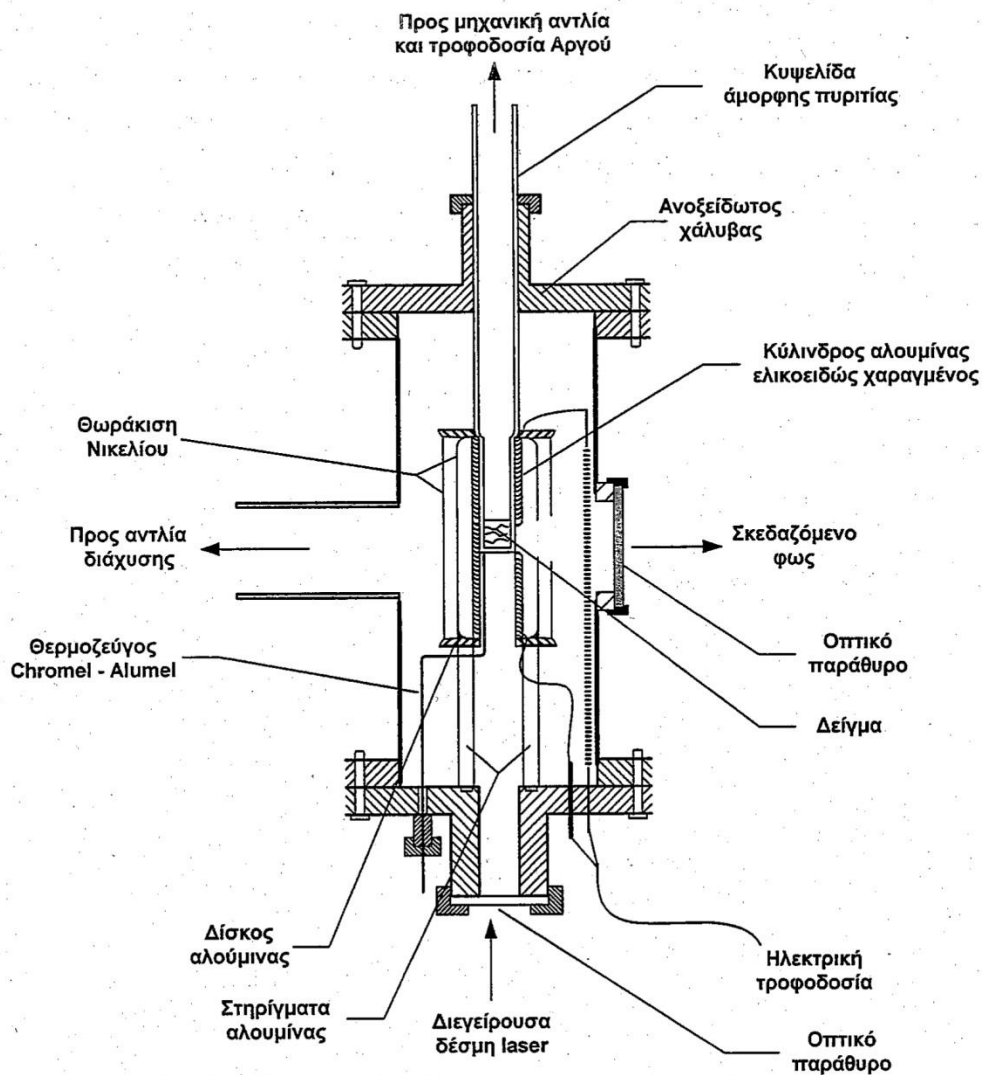


Σχήμα 2.2: Πειραματική διάταξη οπτικών μετρήσεων διαπερατότητας ανακλαστικότητας a-Si σε θερμοκρασία περιβάλλοντος.

2.3.2 ΣΥΝΘΗΚΕΣ ΥΨΗΛΩΝ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΩΝ

Για την ανάκτηση δεδομένων διαπερατότητας και ανακλαστικότητας σε συνάρτηση με τη θερμοκρασίας για μονοχρωματική ακτινοβολία, το δείγμα a-Si τοποθετήθηκε εντός οπτικού φούρνου, και πέραν τούτου, η γεωμετρία της διάταξης παρέμεινε αμετάβλητη.

Η διάταξη του οπτικού φούρνου φαίνεται στο σχήμα 2.3. Στον χώρο θέρμανσης είναι απαραίτητη η ύπαρξη υψηλού κενού για την ελαχιστοποίηση των απωλειών λόγω θερμικής αγωγιμότητας και την αποφυγή της οξειδωσης του θερμαντικού στοιχείου. Το κενό δημιουργείται δύο αντλίες κενού (περιστροφική και διάχυσης).



Σχήμα 2.3: Σχηματική αναπαράσταση του οπτικού φούρνου σε κατακόρυφη τομή.

Το προς μελέτη υλικό τοποθετείται σε μία κυψελίδα άμορφης πυριτίας υψηλής οπτικής ποιότητας. Η κυψελίδα εκκενώνεται αρχικά από τις αντλίες κενού και στη συνέχεια διοχετεύεται με συνεχή τρόπο μέσα σε αυτή αδρανές αέριο (αργό). Η χρησιμότητα του αδρανούς αερίου είναι να συμπιέζει τους ατμούς που δημιουργούνται κατά τη θέρμανση του δείγματος, έτσι ώστε να αποφεύγεται η εξάχνωση και η οξείδωσή του. Ο χώρος που βρίσκεται το δείγμα δεν επικοινωνεί με τον εσωτερικό χώρο του φούρνου.

Η θερμοκρασία του δείγματος προσδιορίζεται με ικανοποιητική ακρίβεια από ένα θερμοζεύγος το οποίο βρίσκεται σε επαφή με το κάτω μέρος της κυψελίδας στο εσωτερικό του φούρνου. Το εξωτερικό μέρος του φούρνου είναι περιτυλιγμένο με έναν ευλίγιστο χαλκοσωλήνα μικρής διατομής, ο οποίος διαρρέεται από νερό ώστε να ψύχεται το μεταλλικό περίβλημά του.

Το θερμαντικό στοιχείο του φούρνου μπορεί να είναι χρωμονικέλιο ($\text{Ni}_{80}\text{(Cr}_{20}\text{)}$) που έχει θερμοκρασία λειτουργίας μέχρι 1100°C ή λεπτά σύρματα W, Mo που έχουν υψηλότερες θερμοκρασίες λειτουργίας. Τα θερμοζεύγη που χρησιμοποιούνται στον οπτικό φούρνο της παρούσας διπλωματικής εργασίας, είναι τύπου Chromel ($\text{Ni}_{90}\text{Cr}_{10}$) – Alumel ($\text{Ni}_{95}/\text{Al}+\text{Mn}+\text{Si}_{5}$). Η ρύθμιση της επιθυμητής θερμοκρασίας του δείγματος γίνεται με την επιλογή της τάσης από μία γεννήτρια συνεχούς (ή και εναλλασσόμενου για πολύ υψηλές θερμοκρασίες) ρεύματος, η οποία συνδέεται με τα θερμοζεύγη του φούρνου.

Ο οπτικός φούρνος έχει 5 οπτικά παράθυρα υψηλής οπτικής ποιότητας έτσι ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί για γεωμετρικές σκέδασης 45° και 90° .

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3.

ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΟΠΤΙΚΩΝ ΣΤΑΘΕΡΩΝ, ΠΑΧΟΥΣ ΚΑΙ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΟΥ ΧΑΣΜΑΤΟΣ ΔΕΙΓΜΑΤΩΝ a-Si ΜΕ ΤΗ ΒΟΗΘΕΙΑ ΜΕΘΟΔΩΝ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ*

3.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Στις περισσότερες σύγχρονες εφαρμογές λεπτών διηλεκτρικών ή ημιαγωγικών υμενίων, το φάσμα των οπτικών συναρτήσεων που έχει ενδιαφέρον καλύπτεται σε ένα εύρος τιμών γύρω από την κύρια κορυφή απορρόφησης του υλικού. Επιπλέον, όσο στις εφαρμογές αυτές γίνεται χρήση πολλαπλών ανακλάσεων στις διαχωριστικές επιφάνειες του υλικού, το πάχος των υμενίων είναι μία σημαντική παράμετρος του σχεδιασμού και του χαρακτηρισμού τους. Η οπτική διαπερατότητα παρέχει ακριβή και γρήγορη πληροφορία για το φασματικό εύρος όπου το υλικό μεταπηδά από τη πλήρη αδιαφάνεια σε μερική διαφάνεια [28, 29]. Ως εκ τούτου, το πρόβλημα υπολογισμού των οπτικών συναρτήσεων ($\tilde{n}(\lambda) = n(\lambda) + ik(\lambda)$) και του πάχους (d) λεπτών υμενίων, αποκλειστικά και μόνο από τα δεδομένα του φάσματος διαπερατότητας, είναι ιδιαίτερα σημαντικό. Κάποιες χρήσιμες προσεγγιστικές λύσεις έχουν είδη υπολογιστεί σε περιπτώσεις όπου το φάσμα διαπερατότητας δείχνει να εμφανίζει ένα μοτίβο κροσσών συμβολής για μία περιοχή όπου το υλικό γίνεται σχεδόν διαφανές [30, 31, 32]. Παρόλα αυτά, η γενική λύση του προβλήματος είναι αμφίβολη, επειδή το σύστημα εξισώσεων του προβλήματος έχει υψηλή απροσδιοριστία. Προσφατά όμως, δημοσιεύτηκε μια νέα μέθοδος βασισμένη σε σημειακή, με φυσικούς περιορισμούς μέθοδο βελτιστοποίησης, η οποία επιτρέπει την επίλυση της γενικής λύσης του προβλήματος [33, 34]. Η μέθοδος αποτελεί ένα μη γραμμικό προγραμματιστικό πρόβλημα, του οποίου οι άγνωστοι είναι οι συντελεστές που υπολογίζονται, με γραμμικούς περιορισμούς οι οποίοι αναπαριστούν εκ των προτέρων γνώση της φυσικής λύσης του προβλήματος. Ο υπολογισμός του σωστού πάχους και των οπτικών συναρτήσεων του υμενίου δεν βασίζεται σε δεδομένα κροσσών συμβολής. Η μέθοδος ήταν αποτελεσματική στον υπολογισμό του d και του $\tilde{n}(\lambda)$ από πολύ διαφορετικά φάσματα διαπερατότητας τόσο από πραγματικά υμένα όσο και σε

* Η θεωρία του παρόντος κεφαλαίου αποτελεί έργο των E. Birgin, I. Chambouleyron, J. M. Martinez και περιγράφεται όπως και στις δημοσιεύσεις τους που αναφέρονται στην βιβλιογραφία.

προσομοιώσεις μέσω υπολογιστή [33, 34]. Η κύρια δυσκολία αυτής της σημειακής, με φυσικούς περιορισμούς μεθόδου βελτιστοποίησης [33, 34] είναι ότι πρόκειται για ένα αρκετά περίπλοκο, υψηλής κλίμακας γραμμικών περιορισμών μη γραμμικό προγραμματιστικό πρόβλημα, του οποίου η λύση μπορεί να προκύψει μόνο μέσω ενός εξεζητημένου και όχι πάντοτε διαθέσιμου κώδικα που μπορεί να διαχειριστεί αποτελεσματικά την μήτρα των φυσικών περιορισμών [35, 36].

Θεωρούμε το πρόβλημα υπολογισμού του συντελεστή απορρόφησης, του δείκτη διάθλασης και του πάχους ενός λεπτού υμενίου, που βρίσκεται πάνω σε υπόστρωμα γνωστών οπτικών ιδιοτήτων, χρησιμοποιώντας μόνο δεδομένα διαπερατότητας. Δεδομένου του μήκους κύματος λ , του δείκτη διάθλασης του υποστρώματος s και των αγνώστων d (πάχος), $n(\lambda)$ (δείκτη διάθλασης) και $\kappa(\lambda)$ (συντελεστή απορρόφησης) του υμενίου, η θεωρητική διαπερατότητα δίνεται από μία γνωστή εξίσωση [29, 31, 32]. Έχοντας μετρήσεις διαπερατότητας για πολλά μήκη κύματος θέλουμε να υπολογίσουμε τους παραπάνω αγνώστους. Με μία πρώτη ματιά, αυτό το πρόβλημα έχει υψηλή απροσδιοριστία εφόσον, για κάθε μήκος κύματος, η εξίσωση

$$\text{Θεωρητική διαπερατότητα} = \text{Πειραματική διαπερατότητα} \quad (2.1)$$

έχει τρεις αγνώστους d , $n(\lambda)$, $\kappa(\lambda)$ και μόνο το d επαναλαμβάνεται για όλες τις τιμές του λ . Η κύρια ιδέα στα [33, 34] ήταν να ενσωματωθεί η εκ των προτέρων γνώση για τη μορφή των συναρτήσεων $n(\lambda)$ και $\kappa(\lambda)$ έτσι ώστε να ελλατωθούν οι βαθμοί ελευθερίας της εξίσωσης (1) σε ένα βαθμό όπου θα είναι αποδεκτές μόνο οι παράμετροι με φυσική σημασία.

Η ιδέα θεώρησης ενός κλειστού φορμαλισμού όπου τα n και κ εξαρτώνται από λίγους συντελεστές έχει ήδη διατυπωθεί [30, 31, 32]. Οι μέθοδοι που προέρχονται από αυτή την ιδέα είναι αποτελεσματικοί όταν η καμπύλη διαπερατότητας παρουσιάζει ένα μοτίβο κροσσών συμβολής που αντιπροσωπεύει μία αρκετά μεγάλη φασματική ζώνη όπου το $\kappa(\lambda)$ είναι σχεδόν μηδενικό. Σε άλλες περιπτώσεις, είναι πολύ δύσκολο να ικανοποιείται η εξίσωση (1) ή οι καμπύλες $n(\lambda)$ και $\kappa(\lambda)$ δεν είναι φυσικά αποδεκτές.

Στα [33, 34], αντί να παρατίθεται μία εκ των προτέρων συναρτησιακή μορφή για τα $n(\lambda)$ και $\kappa(\lambda)$, οι φαινομενολογικοί περιορισμοί οι οποίοι περιορίζουν τη μεταβλητότητα αυτών των παραμέτρων δηλώνονται ρητά έτσι ώστε το πρόβλημα υπολογισμού να παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned} & \text{Ελαχιστοποίησε } \sum_{\lambda} [\text{Θεωρητική διαπερατότητα}(\lambda) - \\ & \text{Πειραματική διαπερατότητα}(\lambda)]^2 \end{aligned} \quad (2.2)$$

Όστε να υπόκειται σε **Φυσικούς Περιορισμούς**

Με αυτό το τρόπο, μπορούν να προκύψουν καλώς ορισμένες συναρτήσεις για τα $n(\lambda)$ και $k(\lambda)$ χωρίς αυστηρούς περιορισμούς που μπορεί να καταστρέψουν την ποιότητα της προσαρμογής (2.1).

Ο κύριος σκοπός αυτής της θεώρησης είναι να κατασκευαστεί μία μέθοδος επίλυσης του προβλήματος υπολογισμού των οπτικών συναρτήσεων όπου το (2.2) αντικαθίσταται από ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Η προσαρμογή του (2.2) σε ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς χρειαζόταν τον υπολογισμό πολύπλοκων παραγώγων των συναρτήσεων, κάτι το οποίο δεν θα ήταν δυνατό χωρίς τη χρήση αυτόματων τεχνικών παραγωγής. Σε αυτή την εργασία χρησιμοποιήθηκαν τεχνικές αυτόματης παραγωγής που περιγράφονται στο [35].

3.2 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ ΓΙΑ ΔΙΑΦΑΝΟ ΥΠΟΣΤΡΩΜΑ

Υποθέτουμε πως έχουμε ένα σύστημα διάταξης πολλαπλών στρωμάτων, τα οποία ορίζονται από τους (μιγαδικούς) δείκτες διάθλασης $\tilde{n}_0, \dots, \tilde{n}_{m-1}$. Γράφουμε για $v = 0, 1, \dots, m-1$,

$$\tilde{n}_v = n_v - ik_v$$

Το πραγματικό μέρος n_v είναι ο δείκτης διάθλασης και το k_v είναι ο συντελεστής εξασθένισης. Υποθέτουμε ότι το πρώτο και το τελευταίο (ημι-άπειρο) στρώμα είναι διάφανα, έτσι ώστε $\tilde{n}_0 = n_0$ και $\tilde{n}_{m-1} = n_{m-1}$. Συνήθως, το πρώτο στρώμα είναι αέρας, έτσι ώστε $\tilde{n}_0 = n_0 = 1$. Στην συγκεκριμένη εφαρμογή θεωρούμε ότι ισχύει επίσης $\tilde{n}_{m-1} = 1$. Οι αποστάσεις ανάμεσα στις διαχωριστικές επιφάνειες μεταξύ των στρωμάτων

(υποθέτουμε ότι είναι εντελώς επίπεδα) δίνονται από τα $x = L_1, \dots, x = L_{m-1}$. Στο πρώτο ημιάπειρο διάφανο στρώμα ($x < L_1$), ένα προσπίπτον κύμα ορίζεται από την εξίσωση

$$u(x, t) = E_T^0 \exp [i(\omega t - kx)],$$

όπου το t αναπαριστά τον χρόνο. Αυτό το κύμα παράγει διαδιδόμενα και ανακλώμενα κύματα σε όλα τα στρώματα. (στο τελευταίο στρώμα το ανακλώμενο κύμα είναι 0.)

Στο στρώμα ν , για $\nu = 0, 1, \dots, m-1$, τα διαδιδόμενα και ανακλώμενα κύματα δίνονται από τις σχέσεις

$$u_T^\nu(x, t) = E_T^\nu \exp [i(\omega t - k_\nu x)],$$

και

$$u_R^\nu(x, t) = E_R^\nu \exp [i(\omega t + k_\nu x)],$$

Το πρώτο μπορεί να μπορεί να μεταφραστεί σαν υπέρθεση απείρως πολλών «διαδιδόμενων μικρών κυμάτων» και το δεύτερο σαν υπέρθεση «ανακλώμενων μικρών κυμάτων». Ο συντελεστής k σχετίζεται με το μήκος κύματος λ μέσω της σχέσης

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}.$$

Επιπλέον,

$$k_0 = k \text{ και } k_\nu = \frac{k \tilde{n}_\nu}{\tilde{n}_0}$$

Για $\nu = 1, \dots, m-1$. Εφόσον δεν υπάρχουν καθόλου ανακλώμενα κύματα στο τελευταίο ημιάπειρο στρώμα, έχουμε ότι

$$E_R^{m-1} = 0.$$

Χρησιμοποιώντας την συνέχεια για τα κύματα και τις παραγώγους τους για κάθε x στις διαχωριστικές επιφάνειες L_1, \dots, L_{m-1} , παίρνουμε για $\nu = 1, 2, \dots, m-1$:

$$E_T^{\nu-1} \exp(-ik_{\nu-1}L_\nu) + E_R^{\nu-1} \exp(ik_{\nu-1}L_\nu) = E_T^\nu \exp(-ik_\nu L_\nu) + E_R^\nu \exp(ik_\nu L_\nu)$$

και

$$\begin{aligned}
& -k_{\nu-1} E_T^{\nu-1} \exp(-ik_{\nu-1} L_\nu) + k_{\nu-1} E_R^{\nu-1} \exp(ik_{\nu-1} L_\nu) \\
& = -k_\nu E_T^\nu \exp(-ik_\nu L_\nu) + k_\nu E_R^\nu \exp(ik_\nu L_\nu).
\end{aligned}$$

Έτσι, χρησιμοποιώντας τη σχέση $k_\nu = k \tilde{n}_\nu / \tilde{n}_0$, παίρνουμε:

$$\begin{aligned}
& \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_{\nu-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(-ik_{\nu-1} L_\nu) & 0 \\ 0 & \exp(ik_{\nu-1} L_\nu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_T^{\nu-1} \\ E_R^{\nu-1} \end{pmatrix} \\
& = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\tilde{n}_\nu & \tilde{n}_\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(-ik_\nu L_\nu) & 0 \\ 0 & \exp(ik_\nu L_\nu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_T^\nu \\ E_R^\nu \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Έτσι,

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} E_T^\nu \\ E_R^\nu \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \exp(ik_\nu L_\nu) & 0 \\ 0 & \exp(-ik_\nu L_\nu) \end{pmatrix} \frac{1}{2\tilde{n}_\nu} \begin{pmatrix} \tilde{n}_\nu + \tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_\nu - \tilde{n}_{\nu-1} \\ \tilde{n}_\nu - \tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_\nu + \tilde{n}_{\nu-1} \end{pmatrix} \\
& \times \begin{pmatrix} \exp(-ik_{\nu-1} L_\nu) & 0 \\ 0 & \exp(ik_{\nu-1} L_\nu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_T^{\nu-1} \\ E_R^{\nu-1} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Ας γράψουμε τώρα για $\nu = 1, \dots, m-1$,

$$A_\nu = \frac{1}{2\tilde{n}_\nu} \begin{pmatrix} \tilde{n}_\nu + \tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_\nu - \tilde{n}_{\nu-1} \\ \tilde{n}_\nu - \tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_\nu + \tilde{n}_{\nu-1} \end{pmatrix}.$$

Τότε,

$$\begin{aligned}
& \begin{pmatrix} E_T^{\nu+1} \\ E_R^{\nu+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(ik_{\nu+1} L_{\nu+1}) & 0 \\ 0 & \exp(-ik_{\nu+1} L_{\nu+1}) \end{pmatrix} \\
& \times A_{\nu+1} \begin{pmatrix} \exp(-ik_\nu [L_{\nu+1} - L_\nu]) & 0 \\ 0 & \exp(ik_\nu [L_{\nu+1} - L_\nu]) \end{pmatrix} \\
& \times A_\nu \begin{pmatrix} \exp(-ik_{\nu-1} L_\nu) & 0 \\ 0 & \exp(ik_{\nu-1} L_\nu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_T^{\nu-1} \\ E_R^{\nu-1} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Ας υποθέσουμε ότι $d_\nu \equiv L_{\nu+1} - L_\nu$ ($\nu = 1, \dots, m-2$) είναι το πάχος του στρώματος ν .

Ορίζουμε, για $\nu = 1, \dots, m-2$,

$$M_\nu = A_{\nu+1} \begin{pmatrix} \exp(-ik_\nu d_\nu) & 0 \\ 0 & \exp(ik_\nu d_\nu) \end{pmatrix}.$$

Τότε, θέτουμε για λόγους απλότητας χωρίς να χάνουμε πληροφορία, $L_1 = 0$,

$$\begin{pmatrix} E_T^{m-1} \\ E_R^{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(ik_{m-1}L_{m-1}) & 0 \\ 0 & \exp(-ik_{m-1}L_{m-1}) \end{pmatrix} M_{m-2} \times \dots \times M_1 A_1 \begin{pmatrix} E_T^0 \\ E_R^0 \end{pmatrix}.$$

Ορίζουμε τώρα,

$$M \equiv \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = M_{m-2} \times \dots \times M_1 A_1.$$

και

$$M' \equiv \begin{pmatrix} M'_{11} & M'_{12} \\ M'_{21} & M'_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(ik_{m-1}L_{m-1}) & 0 \\ 0 & \exp(-ik_{m-1}L_{m-1}) \end{pmatrix} M.$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση $E_R^{m-1} = 0$, παίρνουμε:

$$E_R^0 = -\frac{M'_{21}}{M'_{22}} E_T^0 = -\frac{M_{21}}{M_{22}} E_T^0$$

και

$$E_T^{m-1} = \left(M'_{11} - \frac{M'_{12}M'_{21}}{M'_{22}}\right) E_T^0 = \exp(ik_{m-1}L_{m-1}) \left(M_{11} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{22}}\right) E_T^0.$$

Τέλος, ορίζουμε

$$r_{0,m-1} = -\frac{M_{21}}{M_{22}}$$

και

$$t_{0,m-1} = \exp(ik_{m-1}L_{m-1}) \left(M_{11} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{22}}\right) \quad (2.3)$$

Σύμφωνα με τη σχέση (2.3), το διαδιδόμενο κύμα στο τελευταίο στρώμα θα είναι

$$\left(M_{11} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{22}}\right) E_T^0 \exp[i(\omega t - k_{m-1}(x - L_{m-1}))].$$

Εφόσον $|\exp(ik_{m-1}L_{m-1})| = 1$, η παρουσία του όρου αυτού στον υπολογισμό του $t_{0,m-1}$ δεν επηρεάζει τον υπολογισμό του πλάτους ενέργειας. Η διαδιδόμενη ενέργεια από το στρώμα n_0 έως το στρώμα n_{m-1} ορίζεται από τη σχέση

$$\text{Διαδιδόμενη ενέργεια} = n_{m-1}|E_T^{m-1}|^2$$

και η ανακλώμενη ενέργεια στο στρώμα n_0 είναι:

$$\text{Ανακλώμενη ενέργεια} = n_0|E_R^0|^2$$

Συνεπώς, η διαπερατότητα $T(\lambda)$ και η ανακλαστικότητα $R(\lambda)$ είναι:

$$T(\lambda) = \frac{n_{m-1}}{n_0} \left| M_{11} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{22}} \right|^2 \quad (2.4)$$

και

$$R(\lambda) = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2.$$

Στην πραγματικότητα, σε πολλές περιπτώσεις η διαπερατότητα ενός καθαρού κύματος καθορισμένου μήκους κύματος δεν μπορεί να μετρηθεί. Αντί για αυτό, μετράμε τη μέση τιμή των διαπερατοτήτων που προκύπτουν από ένα μικρό εύρος μηκών κύματος μίας δέσμης. Έτσι, αντί για $T(\lambda)$ μπορούμε να πάρουμε το ολοκλήρωμα το οποίο παρατηρούμε

$$\text{Μέση διαπερατότητα εύρους τιμών } 2\Delta\lambda = \frac{1}{2\Delta\lambda} \int_{\lambda-\Delta\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} T(\lambda)d\lambda,$$

όπου το $\Delta\lambda$ αντιστοιχεί στο μισό του εύρους.

Εάν το τελευταίο πεπερασμένο στρώμα (το οποίο από εδώ και στο εξής θα αποκαλούμε υποστρώμα) είναι διαφανές, και σκεφτούμε ότι το $T(\lambda)$ εξαρτάται μόνο από το πάχος αυτού του στρώματος, λαμβάνουμε μία περιοδική συνάρτηση που έχει περίοδο $\lambda/2n_{m-2}$. Η περίοδος αυτή είναι, συνήθως, πολύ μικρότερη από τα τυπικά πάχη του υποστρώματος που χρησιμοποιούνται σε εφαρμογές. Σε πολλές περιπτώσεις είναι πολύ μικρότερη από το σφάλμα πάχους του υποστρώματος. Για αυτό το λόγο, μία λογική προσέγγιση της παρατηρούμενης διαπερατότητας είναι η μέση τιμή των διαπερατοτήτων εντός αυτής της περιόδου. Αυτό δίνει:

$$\text{Μέση διαπερατότητα πάχους} = \frac{2n_{m-2}}{\lambda} \int_{L_{m-1}}^{L_{m-1} + \lambda/(2n_{m-2})} T(\lambda)dL_{m-1}, \quad (2.5)$$

Προφανώς το ολοκλήρωμα αυτό είναι ανεξάρτητο από το L_{m-1} .

Το ολοκλήρωμα (2.5) (για $m = 4$) μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά. Βλέπετε [36] (σελ. 22-23). Ο Swanepoel [31] (αναφέρεται στα [37] και [38], έδωσε μία πρακτική οργάνωση στον υπολογισμό αυτού του ολοκληρώματος για την περίπτωση 4-στρωμάτων, όπου όλα τα στρώματα εκτός του δεύτερου (το οποίο είναι το λεπτό υμένιο) είναι διαφανή. Υποθέτουμε ότι το πρώτο στρώμα καθώς και το τέταρτο στρώμα είναι αέρας. Η διαπερατότητα T ενός λεπτού απορροφητικού υμενίου εναποθετημένο σε παχύ διάφανο υπόστρωμα, γίνεται από τη σχέση (2.5) μετά από υπολογισμούς:

$$\hat{T} = \text{Μέση διαπερατότητα πάχους} = \frac{Az}{B-Cz+Dz^2} \quad (2.6)$$

Όπου

$$A = 16s(n^2 + \kappa^2) \quad (2.7)$$

$$B = [(n+1)^2 + \kappa^2][(n+1)(n+s^2) + \kappa^2] \quad (2.8)$$

$$C = [(n^2-1 + \kappa^2)(n^2-s^2 + \kappa^2) - 2\kappa^2(s^2+1)]2 \cos\varphi - \kappa[2(n^2-s^2 + \kappa^2) + (s^2+1)(n^2-1 + \kappa^2)]2 \sin\varphi \quad (2.9)$$

$$D = [(n-1)^2 + \kappa^2][(n-1)(n-s^2) + \kappa^2] \quad (2.10)$$

$$\varphi = 4\pi nd/\lambda, \quad z = \exp(-\alpha d), \quad \alpha = 4\pi\kappa/\lambda. \quad (2.11)$$

Στις σχέσεις (2.7) – (2.11) χρησιμοποιείται η παρακάτω σημειογραφία:

(α) λ είναι το μήκος κύματος,

(β) $s = s(\lambda)$ είναι ο δείκτης διάθλασης του διάφανου υποστρώματος (υποθέτουμε ότι είναι γνωστός),

(γ) $n = n(\lambda)$ είναι ο δείκτης διάθλασης του υμενίου,

(δ) $\kappa = \kappa(\lambda)$ είναι ο συντελεστής εξασθένισης του υμενίου (α είναι ο συντελεστής απορρόφησης),

(ε) d είναι το πάχος του υμενίου.

Δίνεται μία σειρά πειραματικών δεδομένων $(\lambda_i, T^{\text{meas}}(\lambda_i))$, $\lambda_{\min} \leq \lambda_i \leq \lambda_{\max}$, για $i = 1, \dots, N$, , και θέλουμε να υπολογίσουμε τα d , $n(\lambda)$, και $\kappa(\lambda)$. Αυτό το πρόβλημα

δείχνει να έχει υψηλή απροσδιοριστία. Για την ακρίβεια, για γνωστό d και δεδομένου του λ , πρέπει να ισχύει η παρακάτω εξίσωση:

$$T(\lambda, s(\lambda), d, n(\lambda), \kappa(\lambda)) = T^{meas}(\lambda) \quad (2.12)$$

Η εξίσωση αυτή έχει δύο αγνώστους τα $n(\lambda)$ και $\kappa(\lambda)$ και, για αυτό το λόγο, γενικά, οι λύσεις της είναι μία καμπύλη στο διδιάστατο $(n(\lambda), \kappa(\lambda))$ χώρο. Έτσι το πακέτο συναρτήσεων (n, κ) που ικανοποιούν τη σχέση (2.6) για δεδομένο d είναι άπειρο και, για την ακρίβεια, έχει πολλαπλότητα διάστασης N στο χώρο \mathbb{R}^{2N} .

Παρόλα αυτά, οι φυσικοί περιορισμοί μειώνουν δραστικά το εύρος της μεταβλητότητας των αγνώστων $n(\lambda)$, $\kappa(\lambda)$. Για παράδειγμα, στην περιοχή της κύριας κορυφής απορρόφησης, ισχύουν οι παρακάτω φυσικοί περιορισμοί:

ΦΠ1: $n(\lambda) \geq 1$ και $\kappa(\lambda) \geq 0$ για κάθε $\lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}]$,

ΦΠ2: τα $n(\lambda)$ και $\kappa(\lambda)$ είναι φθίνουσες συναρτήσεις του λ ,

ΦΠ3: το $n(\lambda)$ είναι κυρτή συνάρτηση,

ΦΠ4: υπάρχει $\lambda_{infl} \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}]$ τέτοιο ώστε το $\kappa(\lambda)$ είναι κυρτή συνάρτηση για $\lambda \geq \lambda_{infl}$ και κοίλη συνάρτηση για $\lambda < \lambda_{infl}$.

Παρατηρούμε ότι, μπορούμε να υποθέσουμε ότι οι **ΦΠ2**, **ΦΠ1** ικανοποιούνται από τη μοναδική συνθήκη $n(\lambda_{max}) \geq 1$ και $\kappa(\lambda_{max}) \geq 0$. Οι περιορισμοί **ΦΠ2**, **ΦΠ3**, **ΦΠ4** μπορούν να γραφούν, αντίστοιχα, ως

$$n'(\lambda) \leq 0 \text{ και } \kappa'(\lambda) \leq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}], \quad (2.13)$$

$$n''(\lambda) \geq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}], \quad (2.14)$$

$$\kappa''(\lambda) \leq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{infl}], \text{ και } \quad (2.15)$$

$$\kappa''(\lambda) \geq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{infl}, \lambda_{max}]. \quad (2.16)$$

Προφανώς, οι περιορισμοί

$$n''(\lambda) \geq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}] \text{ και } n'(\lambda_{max}) \leq 0$$

ικανοποιούν τη συνθήκη

$$n'(\lambda) \leq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}].$$

Επιπλέον, οι

$$\kappa''(\lambda) \geq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{infl}, \lambda_{max}] \text{ και } \kappa'(\lambda_{max}) \leq 0$$

ικανοποιεί τη συνθήκη

$$\kappa'(\lambda) \leq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{infl}, \lambda_{max}].$$

Τέλος, οι

$$\kappa''(\lambda) \leq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{infl}] \text{ και } \kappa'(\lambda_{min}) \leq 0$$

Ικανοποιούν τη συνθήκη

$$\kappa'(\lambda) \leq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{infl}].$$

Έτσι, ο **ΦΠ2** μπορεί να αντικατασταθεί από τη συνθήκη

$$\kappa''(\lambda) \geq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{infl}, \lambda_{max}]. \quad (2.17)$$

Συνοψίζοντας, οι υποθέσεις **ΦΠ1-ΦΠ4** θα ικανοποιούνται αν και μόνο αν,

$$n(\lambda_{max}) \geq 1, \quad \kappa(\lambda_{max}) \geq 0, \quad (2.18)$$

$$n'(\lambda_{max}) \leq 0, \quad \kappa'(\lambda_{max}) \leq 0, \quad (2.19)$$

$$n''(\lambda) \geq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}], \quad (2.20)$$

$$\kappa''(\lambda) \geq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{infl}, \lambda_{max}], \quad (2.21)$$

$$\kappa''(\lambda) \leq 0 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{infl}], \text{ και} \quad (2.22)$$

$$\kappa'(\lambda_{min}) \leq 0. \quad (2.23)$$

Έτσι, η συνεχής λύση ελάχιστων τετραγώνων του προβλήματος υπολογισμού είναι η λύση $(d, n(\lambda), \kappa(\lambda))$ της εξίσωσης

$$\text{Ελαχιστοποίησησε } \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} |T(\lambda, s(\lambda), d, n(\lambda), \kappa(\lambda)) - T^{meas}(\lambda)|^2 d\lambda \quad (2.24)$$

η οποία υπόκειται στους περιορισμούς (2.18)-(2.23).

Η ιδέα είναι να απολοιοφθούν, όσο είναι αυτό δυνατό, οι περιορισμοί του προβλήματος, με τη κατάλληλη αλλαγή μεταβλητών. Για την ακρίβεια, θα θέσουμε την εξίσωση (2.24) έτσι ώστε να εξαρτάται από τις δεύτερες παραγώγους των $n(\lambda)$ και $\kappa(\lambda)$ συν τις τιμές των συναρτήσεων αυτών και των πρώτων παραγώγων τους για την τιμή λ_{max} . Επιπλέον, το θετικό πρόσημο θα εξασφαλίζεται εκφράζοντας τις μεταβλητές ως τα τετράγωνα βοηθητικών αγνώστων. Έτσι γράφουμε

$$n(\lambda_{max}) = 1 + u^2, \quad \kappa(\lambda_{max}) = v^2, \quad (2.25)$$

$$n'(\lambda_{max}) = -u_1^2, \quad \kappa'(\lambda_{max}) = -v_1^2, \quad (2.26)$$

$$n''(\lambda) = w(\lambda)^2 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}], \quad (2.27)$$

$$\kappa''(\lambda) = z(\lambda)^2 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{infl}, \lambda_{max}], \text{ και} \quad (2.28)$$

$$\kappa''(\lambda) = -z(\lambda)^2 \text{ για κάθε } \lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{infl}]. \quad (2.29)$$

Σε αυτό το σημείο, για να αποφύγουμε έναν αρκετά σχολαστικό φορμαλισμό του προβλήματος, θεωρούμε την πραγματική κατάσταση, στην οποία τα δεδομένα δίνονται από ένα πακέτο N ισοδιάστατων σημείων του διαστήματος $[\lambda_{min}, \lambda_{max}]$. Έτσι ορίζουμε

$$h = \frac{\lambda_{max} - \lambda_{min}}{N - 1}, \text{ και}$$

$$\lambda_i = \lambda_{min} + (i - 1)h \text{ για } i = 1, \dots, N.$$

Συνεπώς, η μετρούμενη διαπερατότητα στο λ_i θα αποκαλείται T_i^{meas} . Επιπλέον θα χρησιμοποιήσουμε τη σημειογραφία n_i , κ_i , w_i και z_i για τους υπολογισμούς των $n(\lambda_i)$, $\kappa(\lambda_i)$, $w(\lambda_i)$, και $z(\lambda_i)$, για κάθε $i = 1, \dots, N$. Η διακριτότητα των διαφορικών εξισώσεων (2.25)-(2.29) δίνει:

$$n_N = 1 + u^2, \quad v_N = v^2, \quad (2.30)$$

$$n_{N-1} = n_N + u_1^2 h, \quad \kappa_{N-1} = \kappa_N + v_1^2 h, \quad (2.31)$$

$$n_i = w_i^2 h^2 + 2n_{i+1} - n_{i+2} \text{ για } i = 1, \dots, N - 2, \quad (2.32)$$

$$\kappa_i = z_i^2 h^2 + 2\kappa_{i+1} - \kappa_{i+2}, \quad \text{αν } \lambda_{i+1} \geq \lambda_{infl}, \text{ και} \quad (2.33)$$

$$\kappa_i = -z_i^2 h^2 + 2\kappa_{i+1} - \kappa_{i+2}, \quad \text{αν } \lambda_{i+1} < \lambda_{infl}. \quad (2.34)$$

Τέλος, η συνάρτηση (2.24) θα προσεγγίζεται από το άθροισμα των τετραγώνων, δίνοντας το πρόβλημα βελτιστοποίησης

$$\text{Ελαχιστοποίησησε } \sum_{i=1}^N |T(\lambda_i, s(\lambda_i), d, n_i, \kappa_i) - T_i^{meas}|^2 \quad (2.35)$$

Όστε να υπόκειται στη σχέση

$$\kappa_1 \geq \kappa_2 \quad (2.36)$$

Εφόσον τα n_i και κ_i εξαρτώνται από τα u, u_1, v, v_1, w, z , και λ_{infl} μέσα από τις (2.30)-(2.34), το πρόβλημα (2.35) παίρνει τη μορφή

$$\text{Ελαχιστοποίησε } f(d, \lambda_{infl}, u, u_1, v, v_1, w_1, \dots, w_{N-2}, z_1, \dots, z_{N-2}) \quad (2.37)$$

ώστε να υπόκειται στην (2.36).

Περιμένουμε ότι ο περιορισμός (2.36) θα είναι ανενεργός στην επίλυση της (2.37)-(2.36), για αυτό θα θεωρήσουμε το πρόβλημα (2.37) χωρίς να υπόκειται σε περιορισμούς. Ο περιορισμός (2.36) μπορεί επίσης να ληφθεί υπόψη αναλυτικά στην αριθμητική διαδικασία, προσθέτοντας έναν όρο $\rho_{\max}\{0, \kappa_2 - \kappa_1\}^2$. Παρόλο που ο κώδικας είναι προετοιμασμένος να το κάνει αυτό, δεν ήταν ποτέ απαραίτητο στα πειράματα. Οι άγνωστοι οι οποίοι εμφανίζονται στην (2.37) είναι διαφορετικής φύσεως. Το πάχος d είναι μία διαστατή μεταβλητή (μετρούμενη σε νανόμετρα στο πρόβλημά μας) η οποία μπορεί να καθοριστεί χρησιμοποιώντας τις παρατηρήσεις T_i^{meas} για (ας πούμε) $\lambda_i \geq \lambda_{bound}$, όπου λ_{bound} , είναι ένα άνω φράγμα για το λ_{infl} , το οποίο αντανάκλα την εκ των προτέρων γνώση για το πρόβλημα. Για αυτό το λόγο, το πρώτο βήμα στην υπολογιστική διαδικασία θα είναι να εκτιμήσουμε το d χρησιμοποιώντας δεδομένα τα οποία ανταποκρίνονται στη σχέση $\lambda_i \geq \lambda_{bound}$. Για να επιτύχουμε αυτό το αποτέλεσμα επιλύουμε το πρόβλημα

$$\text{Ελαχιστοποίησε } \bar{f}(u, u_1, v, v_1, w, z) \equiv \sum_{\lambda_i \geq \lambda_{bound}} |T(\lambda_i, s(\lambda_i), d, n_i, \kappa_i) - T_i^{meas}|^2 \quad (2.38)$$

για διαφορετικές τιμές του d και παίρνουμε ως το εκτιμώμενο πάχος εκείνο το οποίο δίνει την ελάχιστη συναρτησιακή τιμή. Σε αυτήν την περίπτωση ο περιορισμός (2.36) είναι άσχετος εφόσον ικανοποιείται αυτόματα από την κυρτότητα του κ και το γεγονός ότι η παράγωγος του κ στο λ_{min} είναι μη-θετική. Απο εδώ και στο εξής το d θα είναι υπολογισμένο, σύμφωνα με την παραπάνω διαδικασία.

Το επόμενο βήμα περιλαμβάνει την εκτίμηση του λ_{infl} , μαζί με τους αγνώστους u, u_1, v, v_1, w, z . Για αυτό το σκοπό παρατηρούμε ότι, δεδομένων των d και λ_{infl} το πρόβλημα

$$\text{Ελαχιστοποίησε } \sum_{i=1}^N |T(\lambda_i, s(\lambda_i), d, n_i, \kappa_i) - T_i^{meas}|^2 \quad (2.39)$$

είναι (αγνοώντας τη σχέση (2.36)) ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης το οποίο δεν υπόκειται σε περιορισμούς, του οποίου οι μεταβλητές είναι u, u_1, v, v_1, w , και z ($2N$ μεταβλητές). Επιλύουμε το πρόβλημα για μερικές δοκιμαστικές τιμές του λ_{infl} και

πέρνουμε ως εκτιμήσεις των n και k τον συνδυασμό των μεταβλητών που δίνουν την ελάχιστη τιμή. Για να ελαχιστοποιήσουμε αυτή τη συνάρτηση και να επιλύσουμε την (2.38) για διάφορα δοκιμαστικά πάχη, χρησιμοποιούμε έναν αλγόριθμο επίλυσης του προβλήματος ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, ο οποίος περιγράφεται στην επόμενη ενότητα.

3.3 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΟΥ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ ΕΛΑΧΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΧΩΡΙΣ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ

Όπως είδαμε στην προηγούμενη ενότητα, τα προβλήματα ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς (2.38) και (2.39) έχουν τη μορφή

$$\text{Ελαχιστοποίησε } f(u, u_1, v, v_1, w_1, \dots, w_{N-2}, z_1, \dots, z_{N-2}). \quad (2.40)$$

Για να απλοποιήσουμε τη σημειογραφία, γράφουμε σε αυτή την ενότητα

$$x = (u, u_1, v, v_1, w_1, \dots, w_{N-2}, z_1, \dots, z_{N-2}). \quad (2.41)$$

Οι μερικές παράγωγοι της f είναι συνήθως απαραίτητες στους αλγόριθμους βελτιστοποίησης, εφόσον παρέχουν την πρώτης-τάξεως πληροφορία για την αντικειμενική συνάρτηση η οποία επιτρέπει στους υπολογιστικούς αλγόριθμους να ακολουθούν κατηφορικές τροχιές καμπύλης. Σε αυτήν την περίπτωση, οι παράγωγοι είναι πολύ δύσκολο να υπολογιστούν. Για αυτό το λόγο, είναι απαραίτητο να χρησιμοποιηθεί μία αυτόματη διαδικασία διαφορίσης ώστε να πραγματοποιηθεί αυτή η μέθοδος. Βλέπετε στο [35] για λεπτομέρειες.

Κατά κανόνα, μπορεί να χρησιμοποιηθεί οποιοσδήποτε αλγόριθμος βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς για να επιλύσει το πρόβλημα (2.40) (βλέπετε [40, 41]). Εφόσον το πρόβλημα έχει, εν δυνάμει, ένα μεγάλο αριθμό μεταβλητών, η επιλογή μας πρέπει να περιοριστεί σε μεθόδους που μπορούν να ανταπεξέλθουν σε αυτή τη περίπτωση. Ένα άρθρο του Raydan [39] ήταν η αιτία να χρησιμοποιηθεί σε αυτόν τον αλγόριθμο η μέθοδος φασματικής βαθμίδας (Spectral Gradient Method SGM), μία εφαρμογή της μεθόδου των Barzilai-Borwein για τα τετράγωνα, η οποία αναφέρεται στο [39]. Για την ακρίβεια, ο Raydan έδειξε ότι, η SGM υπερέρχει στους αλγόριθμους κλίσης βαθμίδας (βλέπετε [41, 42]) για μεγάλης κλίμακας βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς. Η μέθοδος του Raydan είναι εξαιρετικά απλό να

εφαρμοστεί. Η περιγραφή της μεθόδου που θα δώσουμε είναι εκείνη που έδωσε ο Raydan με μία μικρή διαφορά στην επιλογή του βήματος a_k όταν το $b_k \leq 0$.

Έστω ότι $g(x) = \nabla f(x)$. Ο αλγόριθμος ξεκινά με $x_0 \in R^n$ και χρησιμοποιεί έναν ακέραιο $M \geq 0$, μία μικρή παράμετρο $\varepsilon > 0$, μία παράμετρο μείωσης $\gamma \in (0,1)$, και τις παραμέτρους ασφαλείας $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$. Αρχικά, το $a_0 \in [\varepsilon, 1/\varepsilon]$ είναι αυθαίρετο. Δεδομένου ότι $x_k \in R^n$, και $a_k \in [\varepsilon, 1/\varepsilon]$, ο αλγόριθμος 3.1 περιγράφει πως παίρνουμε τα x_{k+1} και a_{k+1} , και πότε τερματίζεται η διαδικασία.

Αλγόριθμος 3.1

Βήμα 1: *Εντόπισε αν το συγκεκριμένο σημείο είναι στάσιμο.*

Αν $\|g(x_k)\| = 0$, τερμάτισε την ακολουθία, ορίζοντας το x_k ως στάσιμο.

Βήμα 2: *Επιστροφή.*

Βήμα 2.1: Θέσε $\lambda \leftarrow a_k$.

Βήμα 2.2: Θέσε $x_+ = x_k - \lambda g(x_k)$.

Βήμα 2.3: Αν

$$f(x_+) \leq \max_{0 \leq j \leq \min\{k, M-1\}} \{f(x_{k-j})\} + \gamma \langle x_+ - x_k, g(x_k) \rangle, \quad (2.42)$$

τότε όρισε $x_k = x_+$, $s_k = x_{k+1} - x_k$, και $y_k = g(x_{k+1}) - g(x_k)$.

Αλλιώς, όρισε

$$\lambda_{new} \in [\sigma_1 \lambda, \sigma_2 \lambda], \quad (2.43)$$

Θέσε $\lambda \leftarrow \lambda_{new}$, και πήγαινε στο Βήμα 2.2.

Βήμα 3: *Υπολόγισε το φασματικό βήμα.*

Υπολόγισε το $b_k = \langle s_k, y_k \rangle$.

Αν $b_k \leq 0$, θέσε $a_{k+1} = a_{max}$,

αλλιώς, υπολόγισε το $a_k = \langle s_k, s_k \rangle$, και

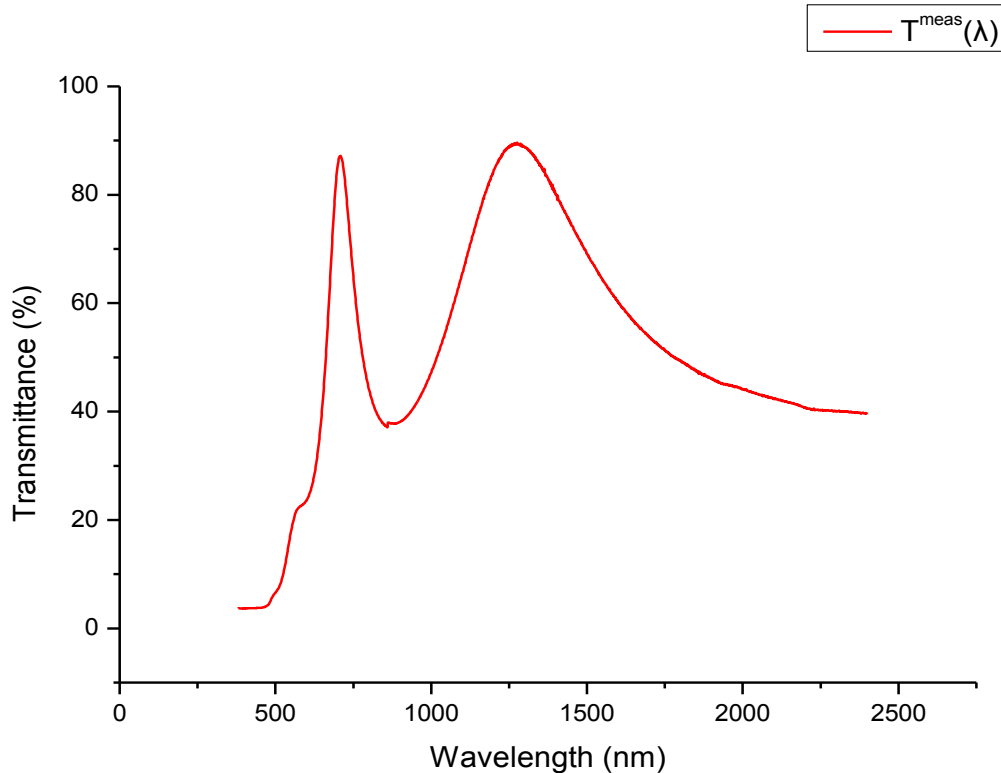
$$a_{k+1} = \min\{a_{max}, \max\{a_{min}, \frac{a_k}{b_k}\}\}.$$

Στην πράξη ο υπολογισμός του λ_{new} χρησιμοποιεί μία μονοδιάστατη τετραγωνική παρεμβολή και ασφαλίζεται μέσω της (2.43).

3.4 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Στα πλαίσια της πειραματικής διαδικασίας πήραμε το φάσμα διαπερατότητας δείγματος λεπτού υμενίου αμόρφου πυριτίου γνωστού πάχους (200nm) εναποτεθημένο σε γυάλινο (διαφανές) υπόστρωμα με τη βοήθεια ενός φασματοφωτόμετρου διαπερατότητας (βλ. Παράγραφο 2.2), σε μία περιοχή του φάσματος ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας από το υπεριώδες έως το κοντινό υπέρυθρο (380 – 2500nm).

Τα αποτελέσματα των μετρήσεων $T(\lambda)$ φαίνονται στο σχήμα 3.1 όπου γίνεται εμφανές πως είναι πολύ δύσκολο να διαχειριστούμε το πρόβλημα υπολογισμού των οπτικών συναρτήσεων, όπως είχε υποδείξει ο Swanepoel [31], εφόσον δεν μπορούμε να παρατηρήσουμε αρκετούς κροσσούς συμβολής (λόγω του λεπτού πάχους του προς χαρακτηρισμό υμενίου που χρησιμοποιήσαμε) στο φάσμα διαπερατότητας. Αυτό το πρόβλημα καλείται να επιλύσει ο σημειακός αλγόριθμος ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς (pointwise unconstrained minimization algorithm - PUMA) για τον οποίο έγινε λόγος στις παραπάνω παραγράφους του κεφαλαίου.



Σχήμα 3.1: Πειραματικό φάσμα διαπερατότητας συναρτήσεως μήκους κύματος α -Si $T(\lambda)$ όπως καταγράφηκε από το φασματοφωτόμετρο διαπερατότητας.

3.4.1 ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΟΥ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ PUMA

Σε αυτήν την ενότητα, θα περιγράψουμε πολύ σύντομα πως χρησιμοποιήσαμε τον αλγόριθμο PUMA ο οποίος θέτει σε εφαρμογή έναν φορμαλισμό χωρίς περιορισμούς ενός μη γραμμικού προγραμματιστικού μοντέλου, ο οποίος επιλύει το πρόβλημα υπολογισμού των οπτικών συναρτήσεων χρησιμοποιώντας την επαναληπτική μέθοδο που περιγράψαμε σε αυτό το κεφάλαιο. Τα αριθμητικά αποτελέσματα, όπως θα δούμε παρακάτω, δείχνουν ότι πρόκειται για μία αξιόπιστη μέθοδο.

Για να μεταφραστεί ο κώδικας του αλγορίθμου PUMA χρειάζεται ένα λογισμικό μετάφρασης της γλώσσας προγραμματισμού C++. Για να θέσουμε σε εφαρμογή τον αλγόριθμο ώστε να υπολογίσουμε το ακριβές πάχος και τις οπτικές σταθερές του συστήματος υμενίου-υποστρώματος που μελετάμε, απλώς πληκτρολογούμε σε έναν οποιοδήποτε τερματικό την παρακάτω ακολουθία, αφού πρώτα έχουμε μεταφράσει τον κώδικα.

```
puma FNAME NLAYERS SLAYER SUBSTRATE DATATYPE NOBS  
LAMBDAmin LAMBDAmax maxIT QUAD INIT THICKNESSmin  
THICKNESSmax THICKNESSstep INFLEmin INFLEmax INFLEstep N0ini  
N0fin N0step NFin NFfin NFstep K0ini K0fin K0step
```

όπου οι λέξεις με κεφαλαία αντιπροσωπεύουν παραμέτρους που περιγράφονται παρακάτω

1. **FNAME** είναι μία μεταβλητή string που αντιπροσωπεύει το όνομα του αρχείου στο οποίο έχουμε αποθηκεύσει τα δεδομένα που αφορούν το δείγμα που μελετάμε. Το αρχείο αυτό πρέπει να έχει τη μορφή **FNAME**-dat.txt και η δομή του πρέπει να είναι η ακόλουθη:
 - α) η πρώτη γραμμή πρέπει να περιέχει τον αριθμό των παρατηρήσεων. Αν για παράδειγμα έχουμε 100 παρατηρήσεις, όλο το αρχείο θα περιέχει 101 σειρές
 - β) από τη δεύτερη έως τη τελευταία σειρά, πρέπει να περιλαμβάνονται σε κάθε σειρά, το μήκος κύματος και η διαπερατότητα (μπορούμε να εισάγουμε και

δεδομένα ανακλαστικότητας ή και των δύο μαζί). Αυτό σημαίνει ότι, από τη δεύτερη έως και την τελευταία σειρά, πρέπει να υπάρχουν ή 2 είτε 3 αριθμοί. γ) τα πειραματικά δεδομένα π.χ. η διαπερατότητα, πρέπει να δίνονται σε δεκαδικούς, με εύρος από το 0 έως το 1. Για το λόγο αυτό, τα πειραματικά δεδομένα πρέπει να διαιρούνται με το 100 εάν δίνονται σε ποσοστά επί τοις εκατό, με εύρος από το 0 έως το 100.

2. **NLAYERS** είναι ο αριθμός των στρωμάτων του συστήματος, τα οποία είναι το υμένιο, το υπόστρωμα και το αρχικό και τελικό στρώμα αέρα.
3. **SLAYER** είναι ο αριθμός του στρώματος που αντιστοιχεί στο υπόστρωμα. Για συστήματα των οποίων τα στρώματα αριθμούνται από πάνω προς τα κάτω (όπως και στο δείγμα μας) έχουμε: πρώτο στρώμα αέρα (στρώμα 0), υμένιο (στρώμα 1), υπόστρωμα (στρώμα 2), τελικό στρώμα αέρα (στρώμα 3). Επομένως θέτουμε **SLAYER** ίσο με 2.
4. **SUBSTRATE** είναι ο αριθμός που περιγράφει το υπόστρωμα. Χρησιμοποιούμε την τιμή **10** για κοινό γυαλί, την τιμή **20** για υπόστρωμα κρυσταλλικού πυριτίου, την τιμή **30** για κρυσταλλικό quartz, την τιμή **40** για γυάλινα σλάντ και την τιμή **50** για βορικό γυαλί.
5. **DATATYPE** είναι μία μεταβλητή που περιγράφει τον τύπο των δεδομένων. Χρησιμοποιούμε την τιμή **T** για δεδομένα διαπερατότητας, την τιμή **R** για δεδομένα ανακλαστικότητας και την τιμή **B** και για τα δύο.
6. **NOBS** είναι ο αριθμός των σημείων που χρησιμοποιούνται στη διαδικασία βελτιστοποίησης. Είναι σημεία που ισαπέχουν, τα οποία παρεμβάλλονται μέσα στο μεσοδιάστημα που δίνεται από τις παραμέτρους **LAMBDAmín** και **LAMBDAmáx** (βλέπετε παρακάτω). Αυτή η παράμετρος είναι ανεξάρτητη από τον αριθμό των σημείων στο αρχείο των δεδομένων (**FNAME-dat.txt**).
7. **LAMBDAmín** είναι το αριστερό φράγμα του μεσοδιαστήματος στο οποίο υπολογίζονται οι οπτικές σταθερές (το **LAMBDAmín** πρέπει να είναι

μεγαλύτερο ή ίσο από την χαμηλότερη τιμή μήκους που δίνεται στο αρχείο των πειραματικών δεδομένων **FNAME-dat.txt**).

8. **LAMBDAmax** είναι το δεξί φράγμα του μεσοδιαστήματος στο οποίο υπολογίζονται οι οπτικές σταθερές (το **LAMBDAmax** πρέπει να είναι μεγαλύτερο ή ίσο από την χαμηλότερη τιμή μήκους που δίνεται στο αρχείο των πειραματικών δεδομένων **FNAME-dat.txt**). Πρέπει να σημειωθεί ότι πρέπει να ισχύει υποχρεωτικά **LAMBDAmax** \geq **LAMBDAmin**.
9. **MAXIT** είναι ο μέγιστος αριθμός επαναλήψεων του αλγορίθμου βελτιστοποίησης. Για κάθε συνδυασμό των παραμέτρων **THICKNESS** και **INFLEPOINT** (όπως καθορίζονται στα στοιχεία 10 και 13) επιλύεται ένα μή γραμμικό πρόβλημα βελτιστοποίησης ώστε να υπολογίσει τις οπτικές σταθερές $n(\lambda)$ και $\kappa(\lambda)$.
10. **QUAD** είναι το τετραγωνικό σφάλμα της καλύτερης προσέγγισης που έχουμε για τις οπτικές σταθερές. Μόνο τιμές τετραγωνικού σφάλματος μικρότερες από τη παράμετρο **QUAD** θα σώζονται.
11. **INIT** είναι ένας ακέραιος ώστε να επιλέξουμε αν θα τρέξουμε τον αλγόριθμο για αρχικές τιμές παραμέτρων (σε αυτή τη περίπτωση χρησιμοποιούμε την τιμή 0) ή αν θα χρησιμοποιήσουμε προηγούμενες εκτιμήσεις σαν αρχική προσέγγιση (σε αυτή τη περίπτωση την τιμή 9). Στην τελευταία περίπτωση, όταν χρησιμοποιούνται προηγούμενοι υπολογισμοί οπτικών σταθερών, οι παράμετροι **NOini**, **NOstep**, **NFin**, **NFfin**, **NFstep**, **KOini**, **KOfin** και **KOstep** αγνοούνται.
12. **THICKNESSmin** είναι το κάτω φράγμα του δοκιμαστικού πάχους. Αυτή η παράμετρος, όπως και η επόμενη πρέπει να ορίζουν ένα διάστημα [**THICKNESSmin**,**THICKNESSmax**] μέσα στο οποίο γνωρίζουμε ότι βρίσκεται το πραγματικό πάχος του δείγματος. Έτσι, κάποια εκ των προτέρων γνώση του πάχους του υμενίου είναι απαραίτητη ώστε να θέσουμε την τιμή αυτής της παραμέτρου.

13. **THICKNESSmax** είναι το άνω φράγμα του δοκιμαστικού πάχους. Πρέπει να σημειωθεί ότι πρέπει να ισχύει υποχρεωτικά **THICKNESSmax** \geq **THICKNESSmin**. Χρησιμοποιώντας την ίδια τιμή για αυτές τις δύο παραμέτρους, δηλαδή **THICKNESSmax** = **THICKNESSmin** σημαίνει ότι γνωρίζουμε την πραγματική τιμή του πάχους και ότι θέλουμε να υπολογίσουμε μόνο τις οπτικές σταθερές. Σε αυτήν την περίπτωση, η τιμή της παραμέτρου **THICKNESSstep** αγνοείται.

14. **THICKNESSstep** είναι το βήμα του δοκιμαστικού πάχους. Όταν προσπαθούμε να υπολογίσουμε το πραγματικό πάχος μέσα στο διάστημα [**THICKNESSmin**,**THICKNESSmax**], όλες οι τιμές πάχους δίνονται από τη σχέση

$$\text{THICKNESS} = \text{THICKNESSmin} + w * \text{THICKNESSstep}, w = 0, 1, 2, \dots$$

15. **INFLEmin** είναι το κάτω φράγμα του σημείου καμπής του συντελεστή εξασθένισης. Στην προσέγγιση του αλγορίθμου PUMA, η συνάρτηση $\kappa(\lambda)$ του συντελεστή εξασθένισης προσεγγίζεται από μία συνάρτηση, η οποία είναι κοίλη στο διάστημα [**LAMBDAmin**,**INFLEPOINT**] και κυρτή στο διάστημα [**INFLEPOINT**,**LAMBDAmax**]. Αυτή η παράμετρος, όπως και η επόμενη πρέπει να ορίζουν ένα διάστημα [**INFLEmin**,**INFLEmax**] μέσα στο οποίο βρίσκεται το πραγματικό σημείο καμπής της συνάρτησης $\kappa(\lambda)$. Αν δεν έχουμε εκ των προτέρων γνώση για το πού βρίσκεται αυτό, θέτουμε **INFLEmin** = **LAMBDAmin**.

16. **INFLEmax** είναι το άνω φράγμα του σημείου καμπής του συντελεστή εξασθένισης. Πρέπει να σημειωθεί ότι πρέπει υποχρεωτικά να ισχύει **INFLEmax** \geq **INFLEmin**. Αν δεν έχουμε εκ των προτέρων γνώση για το πού βρίσκεται αυτό, θέτουμε **INFLEmax** = **LAMBDAmax**. Χρησιμοποιώντας **INFLEmax** = **INFLEmin** σημαίνει ότι γνωρίζουμε που ακριβώς βρίσκεται το σημείο αυτό. Για παράδειγμα, αν ξέρουμε ότι στο διάστημα [**LAMBDAmin**,**LAMBDAmax**] η συνάρτηση $\kappa(\lambda)$ είναι κυρτή, τότε θέτουμε

INFLEmin = **LAMBDAmin** και **INFLEmax** = **LAMBDAmin**. Σε αυτήν την περίπτωση (όπου **INFLEmin** = **INFLEmax**), παράμετρος **INFLEstep** αγνοείται.

17. **INFLEstep** είναι το βήμα εύρεσης του σημείου καμπής της συνάρτησης του συντελεστή εξασθένισης. Όταν προσπαθούμε να υπολογίσουμε το πραγματικό σημείο καμπής μέσα στο διάστημα [**INFLEmin**,**INFLEmax**], όλες οι τιμές δίνονται από τη σχέση

$$\text{INFLEPOINT} = \text{INFLEmin} + w * \text{INFLEstep}, w = 0, 1, 2, \dots$$

18. **NOini**, **NOfin**, **NOstep**, **NFin**, **NFfin**, **NFstep** αναφέρονται στις αρχικές εκτιμήσεις του δείκτη διάθλασης $n(\lambda)$ (βλέπετε το σχήμα 3.2). Οι αρχικές εκτιμήσεις του δείκτη διάθλασης είναι αυστηρά φθίνουσες γραμμικές συναρτήσεις ως προς λ (άρα ο αλγόριθμος δεν δουλεύει σε περιοχές ανώμαλης διασποράς) των οποίων οι τιμές ποικίλουν μεταξύ των **NOini** και **NOfin** με βήμα **NOstep** στο **LAMBDAmin** και μεταξύ των τιμών **NFin** και **NFfin** με βήμα **NOstep** στο **LAMBDAmax**. Έτσι, οι αυστηρά φθίνουσες γραμμικές συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται ως αρχικές εκτιμήσεις του $n(\lambda)$ είναι γραμμικές συναρτήσεις οι οποίες περνούν μέσα από τα ζεύγη τιμών:

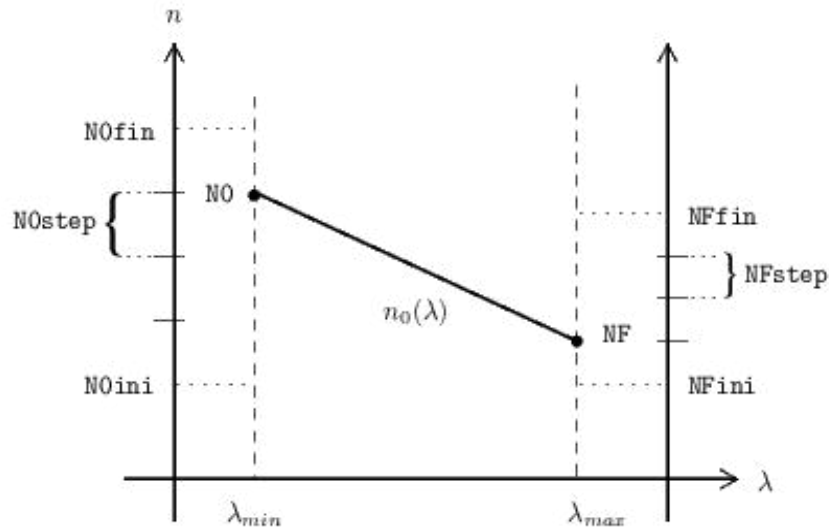
$$(\text{LAMBDAmin}, \text{NO}), (\text{LAMBDAmax}, \text{NF})$$

με

$$\text{NO} = \text{NOini} + u * \text{NOstep}, u = 0, 1, 2, \dots$$

$$\text{NF} = \text{NFin} + v * \text{NFstep}, v = 0, 1, 2, \dots$$

NO στο [**NOini**,**NOfin**], NF στο [**NFin**,**NFfin**], και $\text{NO} > \text{NF}$.

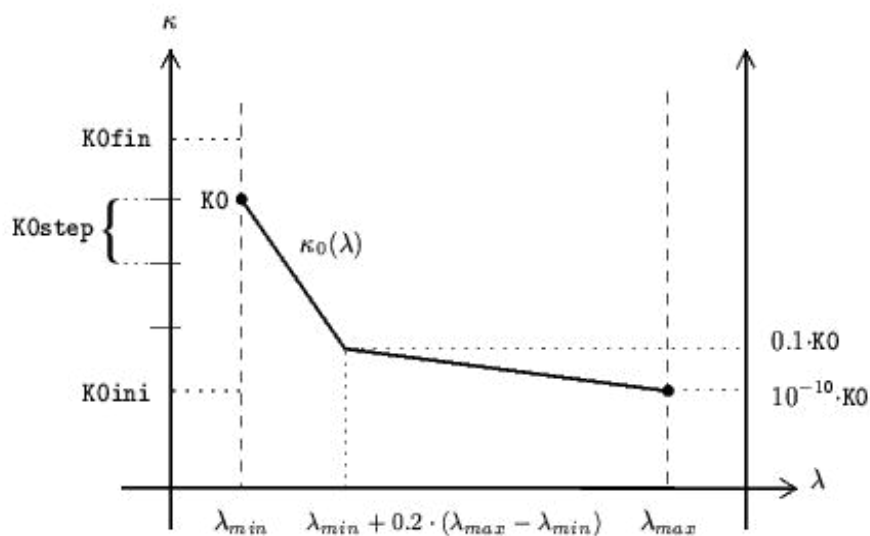


Σχήμα 3.2

19. **K0ini**, **K0fin**, **K0step** αναφέρονται στις αρχικές εκτιμήσεις του συντελεστή εξασθένισης (βλέπετε σχήμα 3.3). Σε αυτήν την περίπτωση, χρησιμοποιούμε μια γραμμική συνάρτηση, της οποίας οι τιμές είναι K0 στο **LAMBDAmin**, $0.1 \cdot K0$ στο **LAMBDAmin** + $0.2 \cdot (\text{LAMBDAmax} - \text{LAMBDAmin})$ και $10^{-10} \cdot K0$ στο **LAMBDAmax**, όπου το K0 παίρνει τις τιμές

$$K0 = \mathbf{K0ini} + z * \mathbf{K0step}, z = 0, 1, 2, \dots$$

μέσα στο διάστημα [**K0ini**, **K0fin**].



Σχήμα 3.3

Σημείωση: Οι παράμετροι που περιγράψαμε στα 18 και 19 έχουν σημασία μόνο αν θέλουμε να πραγματοποιήσουμε μία αρχική εκτίμηση (όταν θέτουμε, δηλαδή, **INIT** = 0): σε αντίθετη περίπτωση, πρέπει να παραλείπονται.

3.4.2 ΤΟ ΣΥΣΤΗΜΑ ΛΕΠΤΟΥ ΥΜΕΝΙΟΥ – ΔΙΑΦΑΝΟΥ ΥΠΟΣΤΡΩΜΑΤΟΣ

Όπως εξηγήσαμε παραπάνω, μπορούμε να καλούμε τον αλγόριθμο PUMA ή για να εκτελέσει τον υπολογισμό των οπτικών σταθερών με μία αρχική εκτίμηση τους για ένα δείγματος, είτε για να εκτελέσει τον υπολογισμό τους χρησιμοποιώντας έναν προηγούμενο ως αρχική εκτίμηση.

Στην περίπτωση που θέλουμε να μελετήσουμε έχουμε ένα σύστημα τεσσάρων στρωμάτων (αέρας – λεπτό υμένιο αμόρφου πυριτίου – γυαλί (υπόστρωμα) – αέρας. Έτσι, με σκοπό να υπολογίσουμε τις οπτικές σταθερές του δείγματος για το οποίο πήραμε το φάσμα $T(\lambda)$, φτιάχνουμε ένα αρχείο FNAME-dat.txt στο οποίο τοποθετούμε τις αριθμητικές τιμές των δεδομένων του φάσματος και προχωρούμε στην πρώτη δοκιμή.

ΠΡΩΤΗ ΔΟΚΙΜΗ

Σε έναν τερματικό πληκτρολογούμε την παρακάτω ακολουθία (πρέπει να σημειωθεί ότι το αρχείο puma.c και το αρχείο FNAME-dat.txt πρέπει να βρίσκονται στον ίδιο φάκελο):

```
puma sigl0200t 4 2 10 T 100 0400 2000 3000 1e+100 0 0010 0250 10  
0400 2000 100 3 5 1 3 5 1 0.10 0.10 0.05
```

Σε αυτήν την ακολουθία χρησιμοποιήσαμε ως:

- **FNAME:** sig10200t. Είναι το όνομα του αρχείου στο οποίο αποθηκεύσαμε τα δεδομένα του πειραματικού φάσματος διαπερατότητας που λάβαμε για το δείγμα a-Si/glass.
- **NLAYERS:** 4 (αρχικό στρώμα αέρα + 1 υμένιο + υπόστρωμα + τελικό στρώμα αέρα)
- **SLAYER:** 2 (το πρώτο στρώμα αέρα καλείται στρώμα 0, το υμένιο στρώμα 1, το υπόστρωμα στρώμα 2, και το τελευταίο στρώμα αέρα στρώμα 3)
- **SUBSTRATE:** 10 (κοινό γυαλί).
- **DATATYPE:** T (διαπερατότητα)
- **NOBS:** 100 (συστήνεται)
- **LAMBDAmin:** 400 και **LAMBDAmax:** 2000. Στο αρχείο δεδομένων το μικρότερο μήκος κύματος είναι 380 και το μεγαλύτερο 2400.
- **MAXIT:** 3000
- **QUAD:** 1e+100
- **INIT:** 0. Αυτό σημαίνει πως τρέχουμε μία αρχική εκτίμηση.
- **THICKNESSmin:** 10, **THICKNESSmax:** 250 και **THICKNESSstep:** 10
- **INFLEmin:** 400, **INFLEmax:** 2000 και **INFLEstep:** 100
- **NOini:** 3, **NOfin:** 5, **NOstep:** 1, **NFin:** 3, **NFfin:** 5, **NFstep:** 1
- **KOini:** 0.10, **KOfin:** 0.10, **KOstep:** 0.05

Το αρχείο των αποτελεσμάτων εμφανίζεται σε ένα αρχείο με το όνομα sig10200t-inf.txt μετά το πέρας της επεξεργασίας των δεδομένων από τον PUMA. Το πάχος υπολογίστηκε ίσο με 180nm, και το σημείο καμπής της συνάρτησης του συντελεστή εξασθένισης ίσο με 400nm.

ΔΕΥΤΕΡΗ ΔΟΚΙΜΗ

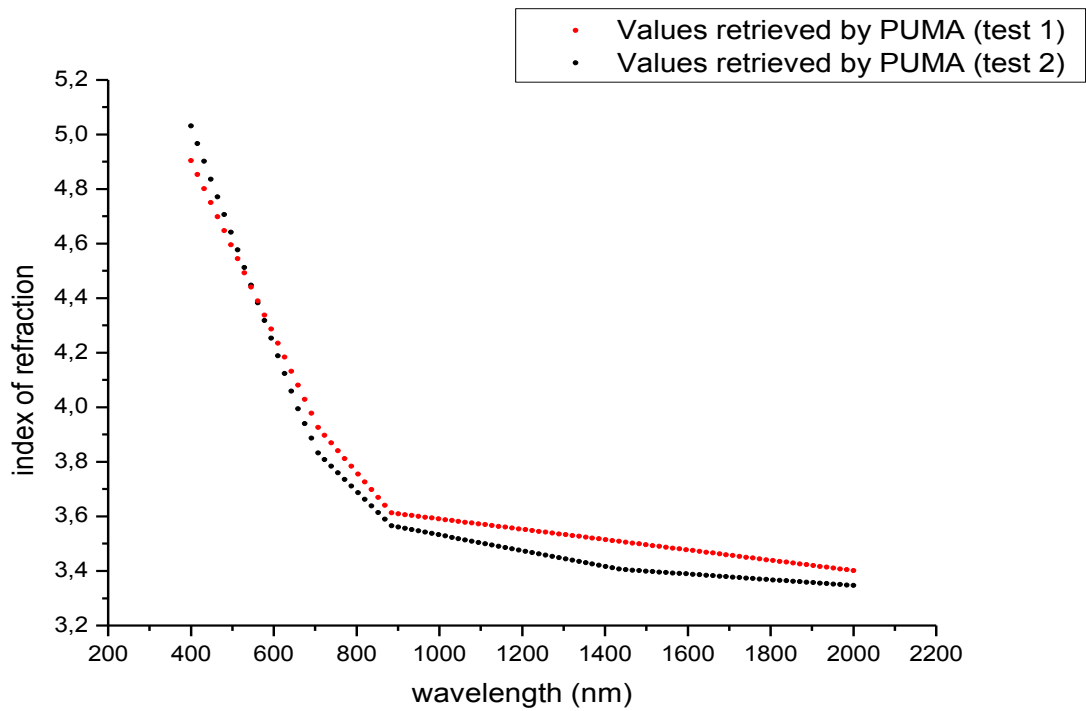
Αφού ολοκληρώσαμε την πρώτη δοκιμή, συνεχίσαμε με μία δεύτερη. Αν κοιτάξουμε στα δεδομένα του αρχείου sig10200t-inf.txt της πρώτης δοκιμής, μπορούμε να δούμε ότι το πάχος του δείγματος υπολογίστηκε ίσο με 180nm, το σαγματικό σημείο του κ(λ) ίσο με 400nm και το τετραγωνικό σφάλμα ίσο με 9.298065e-03. Με αυτά τα δεδομένα μπορούμε να πάμε στη δεύτερη δοκιμή.

```
puma sigl0200t 4 2 10 T 100 0400 2000 5000 9.298065e-03 9 0150  
0250 01 0400 0400 100
```

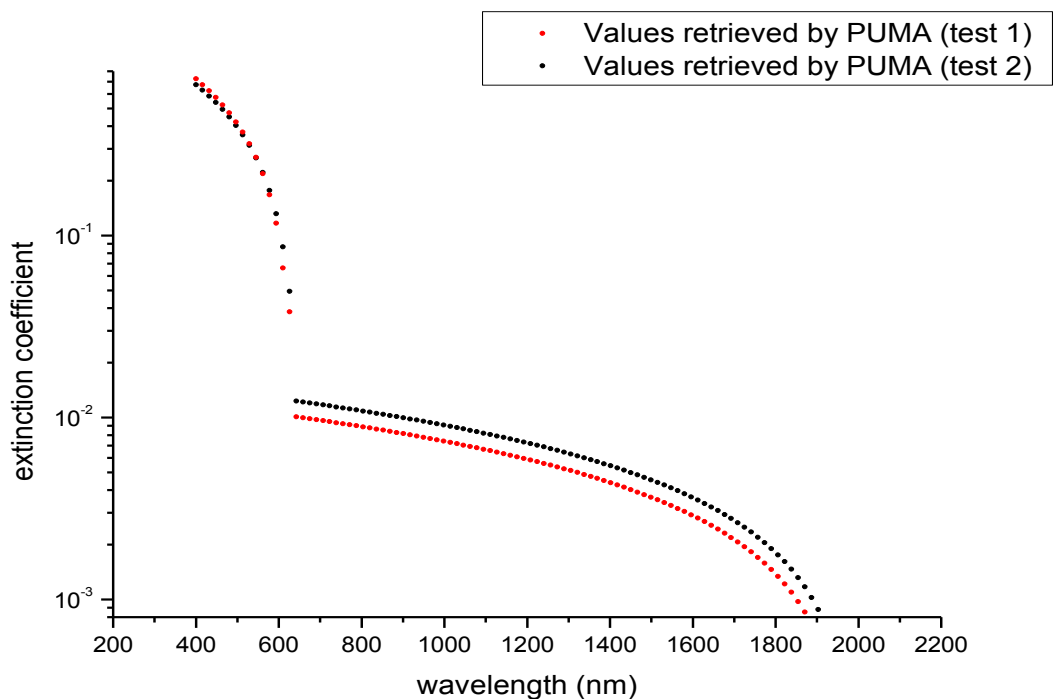
όπου τα έντονα γράμματα σημαίνουν ποιοί παράμετροι άλλαξαν σε σχέση με την πρώτη δοκιμή. Συνοπτικά έχουμε:

- Αυξήσαμε τον αριθμό επαναλήψεων από 3000 σε 5000.
- Θέσαμε QAUD = 'προηγούμενο τετραγωνικό σφάλμα' = 9.298065e-03. Αυτό σημαίνει πως θα αποθηκεύονται μόνο πάχη και εκτιμήσεις οπτικών σταθερών με τετραγωνικό σφάλμα μικρότερο από αυτό.
- Εφόσον σε αυτήν τη δοκιμή χρησιμοποιούμε προηγούμενες εκτιμήσεις οπτικών σταθερών σαν αρχικές, πρέπει να θέσουμε INIT = 9.
- Για το νέο διάστημα εύρεσης πάχους του δείγματος, επιλέγουμε βήμα 1 ώστε να έχουμε μεγαλύτερη ακρίβεια.
- Η τιμή που λάβαμε στην προηγούμενη μέτρηση για το σημείο καμπής του $\kappa(\lambda)$ ήταν 400nm, και από όσο γνωρίζουμε θεωρητικά είναι σωστή εφόσον η κορυφή απορρόφησης του α -Si βρίσκεται σε ακόμη μικρότερο μήκος κύματος και αυτή είναι η πιο μικρή τιμή που διαθέτουμε. Έτσι θέτουμε INFLEmin = INFLEmax = 400. Σε αυτήν την περίπτωση το INFLEstep δεν λαμβάνεται καθόλου υπόψη από τον αλγόριθμο.
- Οι υπόλοιπες παράμετροι **NOini**, **NOfin**, **NOstep**, **NFin**, **NFfin**, **NFstep**, **KOini**, **KOfin**, **KOstep** (οι οποίες χρειάστηκαν μόνο στην πρώτη δοκιμή) πρέπει να παραληφθούν.

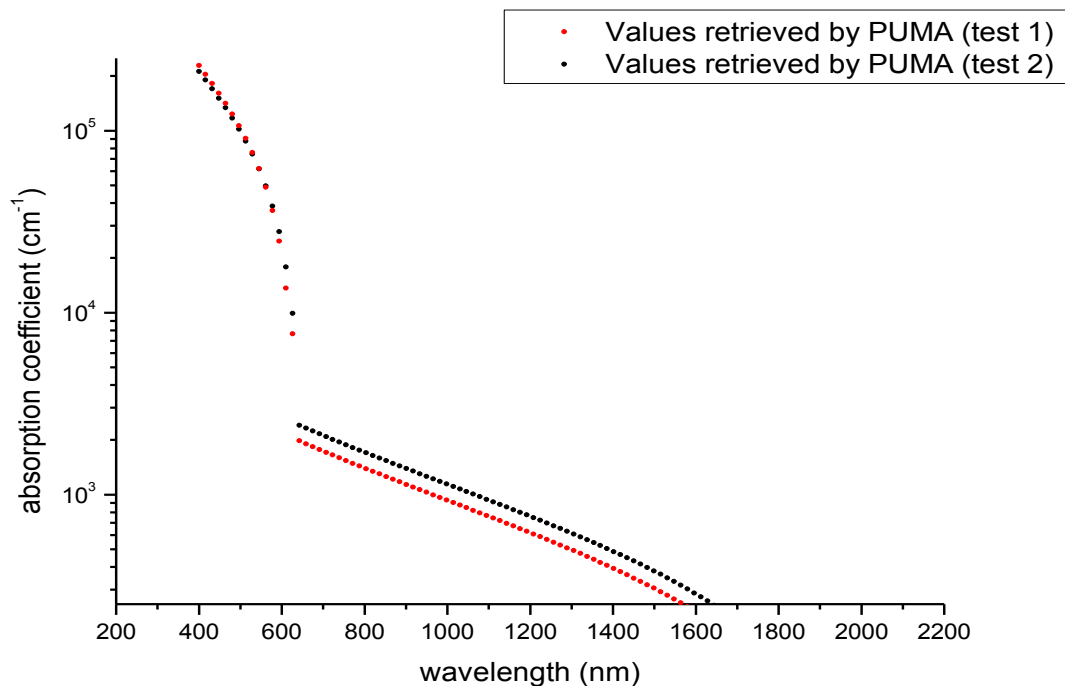
Μπορούμε να δούμε τα αποτελέσματα στο τελευταίο αρχείο δεδομένων sigl0200t-inf.txt μετά το πέρας της επεξεργασίας των δεδομένων από τον PUMA. Το πάχος υπολογίστηκε ίσο με 184nm και στα παρακάτω σχήματα φαίνονται τελικά τα φάσματα των οπτικών συναρτήσεων $n(\lambda)$ και $\kappa(\lambda)$, καθώς και της διαπερατότητας $T(\lambda)$ από τις δύο δοκιμές της μεθόδου:



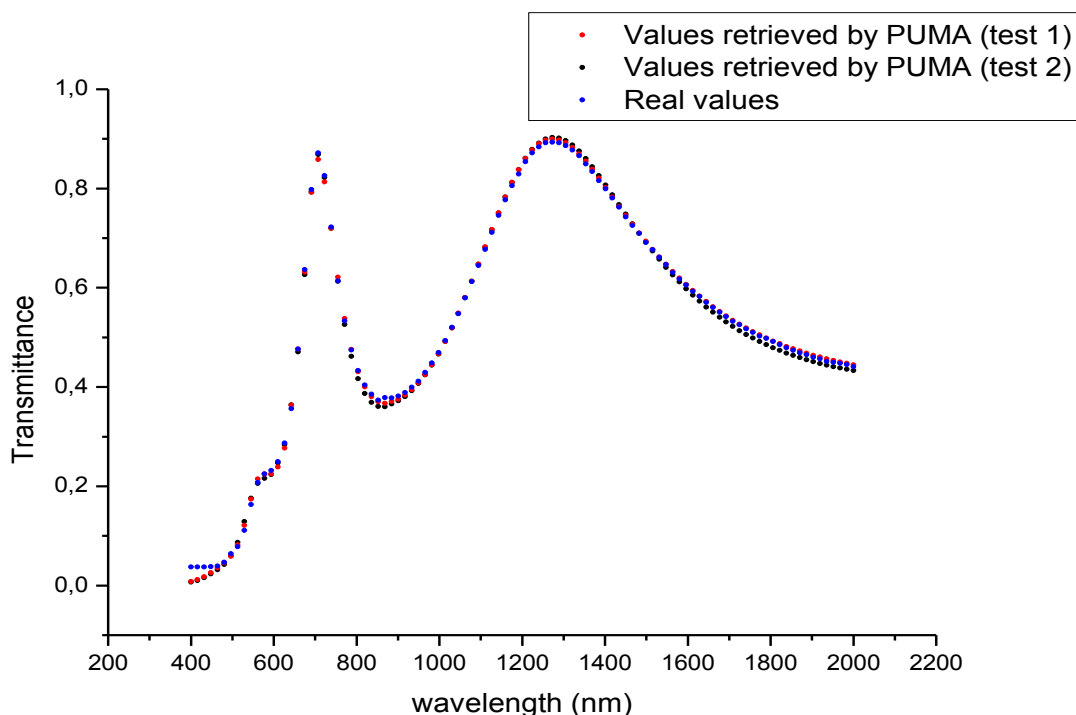
Σχημα 3.5(α): Δείκτης διάθλασης $n(\lambda)$ λεπτού υμενίου αμόρφου πυριτίου ενδεικτικού πάχους 200nm όπως υπολογίστηκε από τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης PUMA.



Σχημα 3.5(β): Συντελεστής εξασθένισης $k(\lambda)$ λεπτού υμενίου αμόρφου πυριτίου ενδεικτικού πάχους 200nm όπως υπολογίστηκε από τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης PUMA.



Σχημα 3.5(γ): Συντελεστής απορρόφησης $\alpha(\lambda)$ λεπτού υμενίου αμόρφου πυριτίου ενδεικτικού πάχους 200nm όπως υπολογίστηκε από τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης PUMA.



Σχημα 3.5(δ): Αναπαραγωγή του φάσματος διαπερατότητας $T(\lambda)$ λεπτού υμενίου αμόρφου πυριτίου ενδεικτικού πάχους 200nm όπως υπολογίστηκε από τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης PUMA, σύμφωνα με τις οπτικές συναρτήσεις των Σχ 3.5(α,β,γ)..

Αρκεί να παρατηρήσουμε το τελικό «output» φάσμα διαπερατότητας που δίνει ο αλγόριθμος για να διαπιστώσουμε την ποιοτική συμφωνία των αποτελεσμάτων με το «input» πειραματικό φάσμα διαπερατότητας.

3.4.3 ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΟΥ ΧΑΣΜΑΤΟΣ ΑΜΟΡΦΟΥ ΠΥΡΙΤΙΟΥ

Σε αυτό το σημείο, έχει πολύ ενδιαφέρον να δούμε πως μπορούμε να εκτιμήσουμε την τιμή του ενεργειακού χάσματος ενός δείγματος αμόρφου πυριτίου μέσω του φάσματος απορρόφησης που προέκυψε μέσω του αλγορίθμου PUMA από το φάσμα διαπερατότητας του υλικού και μόνο.

Όπως είδαμε και στο πρώτο κεφάλαιο, ο συντελεστής απορρόφησης κρυσταλλικών υλικών άμεσου χάσματος αναμένεται να ακολουθεί τη σχέση (1.67) σε σχέση με την ενέργεια φωτονίων. Στους άμορφους ημιαγωγούς η περίπτωση αυτή τίθεται υπό αμφισβήτηση, εφόσον υπάρχει μία σύγχυση στην ερμηνεία των δεδομένων της οπτικής απορρόφησης στην περιοχή της κορυφής απορρόφησης, επειδή δεν έχει καθιερωθεί ένα θεωρητικό μοντέλο, λόγω της πολυπλοκότητας της συμπεριφοράς των ηλεκτρονίων σε μη-περιοδικές διατάξεις.

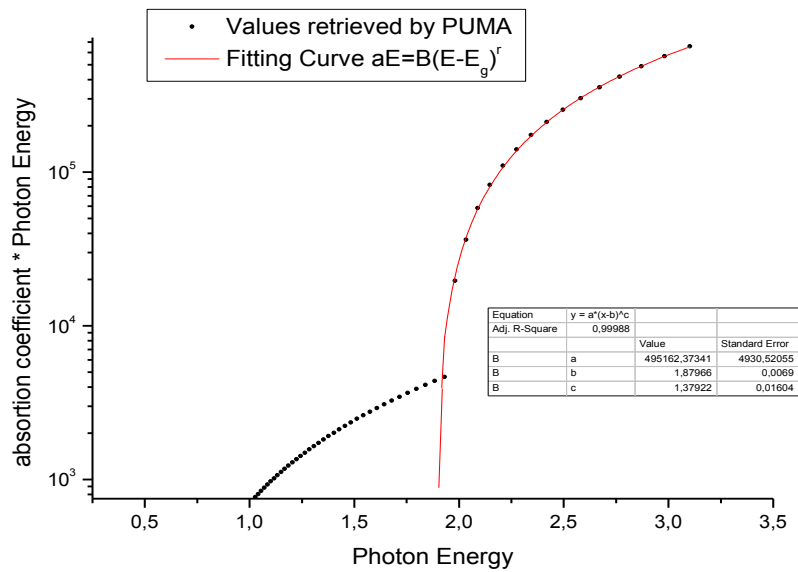
Παρόλα αυτά έχει θεωρηθεί ότι όπως και στους κρυσταλλικούς ημιαγωγούς, ο α υπακούει σε έναν απλό νόμο της μορφής

$$\alpha\hbar\omega = B(\hbar\omega - E_{opt})^r. \quad (2.44)$$

Η (2.44) είναι μία εμπειρική εξίσωση, λόγω του γεγονότος ότι δεν έχει βασιστεί σε ένα τεκμηριωμένο θεωρητικό μοντέλο, και συνεπώς το E_{opt} , το οποίο προκύπτει πειραματικά, είναι μία αυθαίρετη παράμετρος που προκύπτει από προσαρμογή των πειραματικών δεδομένων και δεν έχει σαφή φυσική σημασία, αλλά η ποικιλότητά της σε σχέση με τις συνθήκες παρασκευής, την πίεση, τη θερμοκρασία κ.α. δίνει καλές πληροφορίες για το υλικό.

Εδώ λοιπόν προσπαθήσαμε να δώσουμε μία εκτίμηση αυτής της ακαθόριστης παραμέτρου και να ερμηνεύσουμε την πιθανή φυσική της σημασία βάσει όσων αναφέραμε στην παράγραφο 1.9.2 για τους άμορφους ημιαγωγούς.

Αρχικά δημιουργούμε την γραφική παράσταση του γινομένου του συντελεστή απορρόφησης και της ενέργειας φωτονίων ως συνάρτηση της ενέργειας φωτονίων και κατασκευάζουμε το διάγραμμα του σχήματος 3.6.



Σχήμα 3.6: Συντελεστής απορρόφησης $\alpha(\lambda)$ λεπτού υμενίου αμόρφου πυριτίου ενδεικτικού πάχους 200nm συναρτήσει της ενέργειας προσπίπτοντων φωτονίων, όπως υπολογίστηκε από τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης PUMA.

Στο παραπάνω σχήμα παρατηρούμε ότι η καμπύλη απορρόφησης για ενέργεια φωτονίων κάτω των 1,9 eV εμφανίζει μία αλλαγή στην κλίση της, και ενώ αναμένεται κατακόρυφη μείωση του συντελεστή απορρόφησης, παρατηρούμε εκθετική μείωση. Αυτό, πιθανότατα σημαίνει ότι στα 1,9 eV βρισκόμαστε πολύ κοντά στο ενεργειακό χάσμα του υλικού που σημαίνει ότι η παράμετρος E_{opt} μας δίνει μία καλή εκτίμηση της τιμής του χάσματος ευκινησίας των φορέων του υλικού. Η μικρή απορρόφηση για ενέργειες φωτονίων κάτω από αυτή την τιμή οφείλεται στο φαινόμενο δημιουργίας «ουρών» καταστάσεων μέσα στο ενεργειακό χάσμα του υλικού.

Στο σχήμα 3.6 έχουμε προσαρμόσει τη θεωρητική καμπύλη $\alpha = B(E - E_{opt})^r$ στις πειραματικές τιμές του a για $E > 1,9$ eV, η οποία όπως παρατηρούμε προσαρμόζεται με μεγάλη ακρίβεια στις πειραματικές τιμές, για $r = 1,37$ και $E_{opt} = 1,87$.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4.

ΜΕΛΕΤΗ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗΣ ΕΞΑΡΤΗΣΗΣ ΔΕΙΚΤΗ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ ΑΜΟΡΦΟΥ ΠΥΡΙΤΟΥ

4.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η θερμοκρασιακή εξάρτηση του δείκτη απορρόφησης λεπτού υμενίου αμόρφου πυριτίου (a-Si) πάχους 200 nm μελετήθηκε για μονοχρωματική ακτινοβολία 488nm και 647,1 nm. Ο λόγος επιλογής των συγκεκριμένων μηκών κύματος ακτινοβολίας είναι η απόκτηση εκ των προτέρων γνώσης της θερμοκρασιακής εξάρτησης του δείκτη απορρόφησης α του υλικού, ώστε να διεξαχθούν πειράματα θερμικής ανόπτησης (thermal annealing) με ακτινοβολία μήκους κύματος 532 nm (πολύ κοντά στα 488 nm) με σκοπό τη δημιουργία μικροκρυσταλλικού στρώματος στην επιφάνειά του. Παρατηρήθηκε ότι ο συντελεστής απορρόφησης αυξάνεται σημαντικά σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία στην περιοχή του φάσματος υψηλής απορρόφησης για το υλικό αυτό.

Η θερμοκρασιακή εξάρτηση των οπτικών συναρτήσεων για κρυσταλλικά υλικά έχει μελετηθεί εκτεταμένα [43, 44, 45]. Μία τέτοια μελέτη είναι πολύ σημαντική για κάθε φωτοθερμική επεξεργασία του υλικού, όπως είναι και η θερμική ανόπτηση (thermal annealing). Αντιθέτως, άμορφα υλικά όπως είναι και το άμορφο πυρίτιο έχουν μελετηθεί πολύ λιγότερο από αυτή την πλευρά, παρόλο που υπάρχει μία εκτεταμένη βιβλιογραφία για μετρήσεις σε θερμοκρασία περιβάλλοντος [46] των οπτικών συναρτήσεων σε διάφορα μήκη κύματος. Μελέτες έχουν δείξει ότι δεν υπάρχει σχεδόν καμία θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης για παχιά δείγματα ($\sim 1\mu\text{m}$) αμόρφου πυριτίου για ακτινοβολία laser Nd:YAG (1,06 μm) [47, 48, 49]. Έχει υποθεθεί ότι σε αντίθεση με το κρυσταλλικό πυρίτιο (c-Si), οι οπτικές σταθερές του a-Si μπορούν πράγματι να θεωρηθούν ανεξάρτητες από τη θερμοκρασία.

Σε αυτή την εργασία, παρατίθεται μία μελέτη για την εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης $\alpha(T)$ ως συνάρτηση της θερμοκρασίας T για το a-Si. Θα δούμε ότι μία τέτοια εξάρτηση εκδηλώνεται σημαντικά στην περιοχή της έντονης απορρόφησης του υλικού (488 nm, 647,1 nm).

4.2 ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ

4.2.1 ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ ΣΤΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ

Για την διεξαγωγή του πειράματος χρησιμοποιήσαμε τη διάταξη που περιγράψαμε στην παράγραφο 2.3. Αρχικά προσπαθήσαμε να υπολογίσουμε τον συντελεστή απορρόφησης του δείγματος a-Si/Glass πάχους 200nm σε συνθήκες περιβάλλοντος χωρίς να τοποθετήσουμε το δείγμα στον οπτικό φούρνο (όπως δηλαδή περιγράφεται στην παράγραφο 2.3.1). Ως πηγή μονοχρωματικής ακτινοβολίας χρησιμοποιήσαμε laser ιόντων Αργού μήκους κύματος 488 nm και laser ιόντων Κρυπτού μήκους κύματος ακτινοβολίας 647,1 nm.

Ας σημειωθεί ότι σε παράλληλα πειράματα θερμικής ανόπτησης του δείγματος a-Si/Glass με σκοπό την δημιουργία μικροκρυσταλλικού στρώματος Si, χρησιμοποιήθηκε παλμικό laser Nd:YAG μήκους κύματος 1,06 μm με πυκνότητα ενέργειας δέσμης $\sim 100 \text{ mJ/cm}^2$. Άρα στη διάρκεια παλμού 1ms έχουμε πυκνότητα ισχύος ίση με $\sim 10^4 \text{ W/cm}^2$. Με ακτινοβολία του δείγματος με λίγους μόνο παλμούς, σε αυτήν την πυκνότητα ισχύος, παρατηρήθηκε αλλαγή στην δομή του υλικού, μέσω διάφορων μεθόδων χαρακτηρισμού της δομής του. Στην περίπτωση του laser ιόντων Αργού και Κρυπτού κάτι τέτοιο είναι αδύνατον να συμβεί εφόσον η ισχύς της ακτινοβολίας που χρησιμοποιήθηκε είναι της τάξης των 10 mW. Το ίχνος του laser που ανιχνεύεται πάνω σε μία επιφάνεια μετρήθηκε να έχει εμβαδόν περίπου ίσο με 0,0031 cm². Κάτι τέτοιο λοιπόν σημαίνει πως έχουμε πυκνότητα ισχύος της δέσμης ίση περίπου με 3 W/cm², δηλαδή ισχύς πολύ μικρότερη εκείνης του παλμικού laser εφόσον η πυκνότητα ενέργειας στη διάρκεια του παλμού. Αυτό είναι πολύ σημαντικό να σημειωθεί ώστε να διαπιστωθεί πως η μέθοδος που χρησιμοποιήσαμε είναι μη καταστρεπτική για το υπο μελέτη δείγμα.

Όπως περιγράφεται και στην πειραματική διάταξη, τα δεδομένα του πειράματος είναι η ένταση της ακτινοβολίας της απευθείας δέσμης στο ενεργόμετρο I_0 , η ένταση της διερχόμενης από το υλικό ακτινοβολίας I_T και τέλος η ένταση της ανακλώμενης από το δείγμα ακτινοβολίας I_R .

Η λογική στην επεξεργασία των δεδομένων με σκοπό τον υπολογισμό του συντελεστή απορρόφησης του υλικού είναι η εξής: αν για συγκεκριμένη τιμή ισχύος λειτουργίας του laser καταγράψουμε τις τρεις τιμές I_0 , I_T , I_R , μπορούμε να υπολογίσουμε την τιμή της διαπερατότητας T και της ανακλαστικότητας R του υλικού

μέσω των σχέσεων $T = I_T/I_0$ και $R = I_R/I_0$. Επομένως μπορούμε τώρα να χρησιμοποιήσουμε τα δεδομένα μας στη σχέση (1.23) και να λύσουμε την εξίσωση ως προς τον συντελεστή απορρόφησης α και να πάρουμε τελικά τη σχέση

$$\alpha = -\frac{\ln \frac{T}{(1-R)^2}}{d} \quad (4.1)$$

όπου d είναι το πάχος του δείγματος.

Αξίζει να παρατηρήσουμε πως η παραπάνω θεώρηση δεν μπορεί να εφαρμοστεί στην περίπτωση των 647,1 nm όπου τα μεγέθη $\exp(2\alpha d)$ και R^2 είναι πλέον συγκρίσιμα. Έτσι λοιπόν οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε τη σχέση (1.22) που περιγράφει το πρόβλημα των πολλαπλών ανακλάσεων σε λεπτά υμένα. Η επίλυση της εξίσωσης αυτής ως προς α αποτελεί όμως ένα ιδιαίτερα δύσκολο μαθηματικό πρόβλημα. Για το λόγο αυτό θα χρησιμοποιήσουμε τον νόμο των Beer-Lambert για την απορρόφηση, που αποτελεί μία πολύ απλουστευμένη θεώρηση και δεν λαμβάνει καθόλου υπόψη τα φαινόμενα συμβολής λόγω των πολλαπλών ανακλάσεων μέσα στο υμένιο. Παρόλα αυτά, μπορεί να μας δώσει μία ποιοτική πληροφορία για την θερμοκρασιακή μεταβολή του α στην περιοχή αυτή του φάσματος.

Σύμφωνα λοιπόν με τον νόμο των Beer-Lambert μπορούμε να ορίσουμε την απορροφητικότητα A σύμφωνα με τη σχέση

$$A = -\alpha d \quad (4.2)$$

Τα τρία μεγέθη T , R , A τώρα συνδέονται μέσω της σχέσης

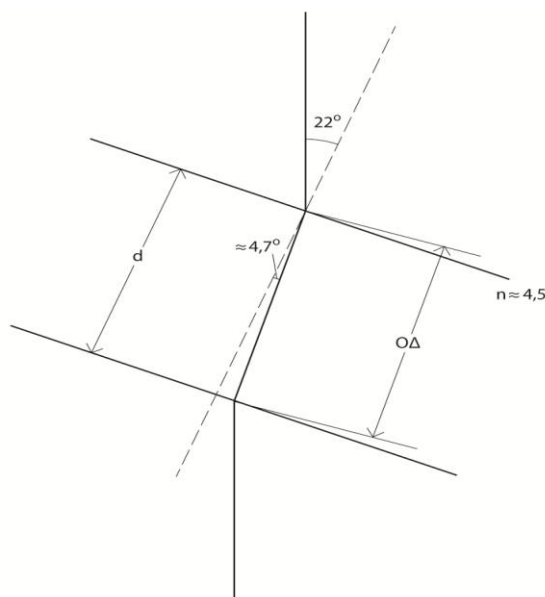
$$T + R + A = 1 \quad (4.3)$$

Επομένως εύκολα προκύπτει από τη σχέση αυτή ότι

$$\alpha = \frac{I_T + I_R - I_0}{dI_0} \quad (4.4)$$

Έτσι λοιπόν από τη σχέση (4.4) θα υπολογίσουμε τον α για την ακτινοβολία των 647,1 nm.

Πρέπει να σημειώσουμε πως αν και γνωρίζουμε πως το πάχος του δείγματος είναι 200 nm, στην ουσία το d είναι ο οπτικός δρόμος της δέσμης. Αυτός δεν διαφοροποιείται από το d σημαντικά για όταν το δείγμα μας έχει περιστραφεί ως προς το επίπεδο πρόσπτωσης $\approx 22^\circ$ για δείκτη διάθλασης του μέσου $n \approx 4,5$ αφού η δέσμη κλίνει προς τη κάθετη προς το επίπεδο πρόσπτωσης της δέσμης σε μία γωνία $\approx 4,7^\circ$. Στο σχήμα 4.1 φαίνεται καθαρά ο οπτικός δρόμος τον οποίο ακολουθεί η δέσμη. Αυτός μπορεί να υπολογιστεί μέσω της σχέσης $O.\Delta. = d \cos 4,7 \approx 200,4 \text{ nm}$.



Σχήμα 4.1: Οπτικός δρόμος δέσμης λόγω περιστροφής του δείγματος.

Μετά από μία στατιστική μετρήσεων, ο συντελεστής απορρόφησης του υλικού σε μήκος κύματος ακτινοβολίας 488 nm υπολογίστηκε ίσος με περίπου $1,33 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. Για το ίδιο δείγμα, μέσω της υπολογιστικής μεθόδου βελτιστοποίησης PUMA, υπολογίσαμε ότι ο συντελεστής απορρόφησης είναι ίσος με περίπου $1,17 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$, κάτι το οποίο σημαίνει ότι έχουμε μία απόκλιση της τάξεως του 12%, το οποίο όμως μπορεί να θεωρηθεί αμελητέο αν σκεφτεί κανείς την τάξη μεγέθους και τα σφάλματα των δύο μεθόδων που υπεισέρχονται στις μετρήσεις διαπερατότητας-ανακλαστικότητας. Επίσης για την ακτινοβολία 647,1 nm υπολογίσαμε μέσω της σχέσης (4.4) τον α ίσο με περίπου $6,0 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$, όπου μέσω της μεθόδου βελτιστοποίησης PUMA υπολογίσαμε για το ίδιο μήκος κύματος το α ίσο με περίπου $2,4 \times 10^4$. Παρατηρούμε ότι οι τιμές αυτές συμφωνούν μόνο στην τάξη μεγέθους αλλά μπορούν να δώσουν μία αίσθηση της γενικής εικόνας που παρουσιάζει η εξάρτηση του α του a-Si από την θερμοκρασία T για την περιοχή αυτή του φάσματος.

4.2.2 ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗ ΕΞΑΡΤΗΣΗ

Στο σημείο αυτό, θέλουμε να μελετήσουμε πώς (και αν τελικά) μεταβάλλεται ο συντελεστής απορρόφησης του υλικού σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία.

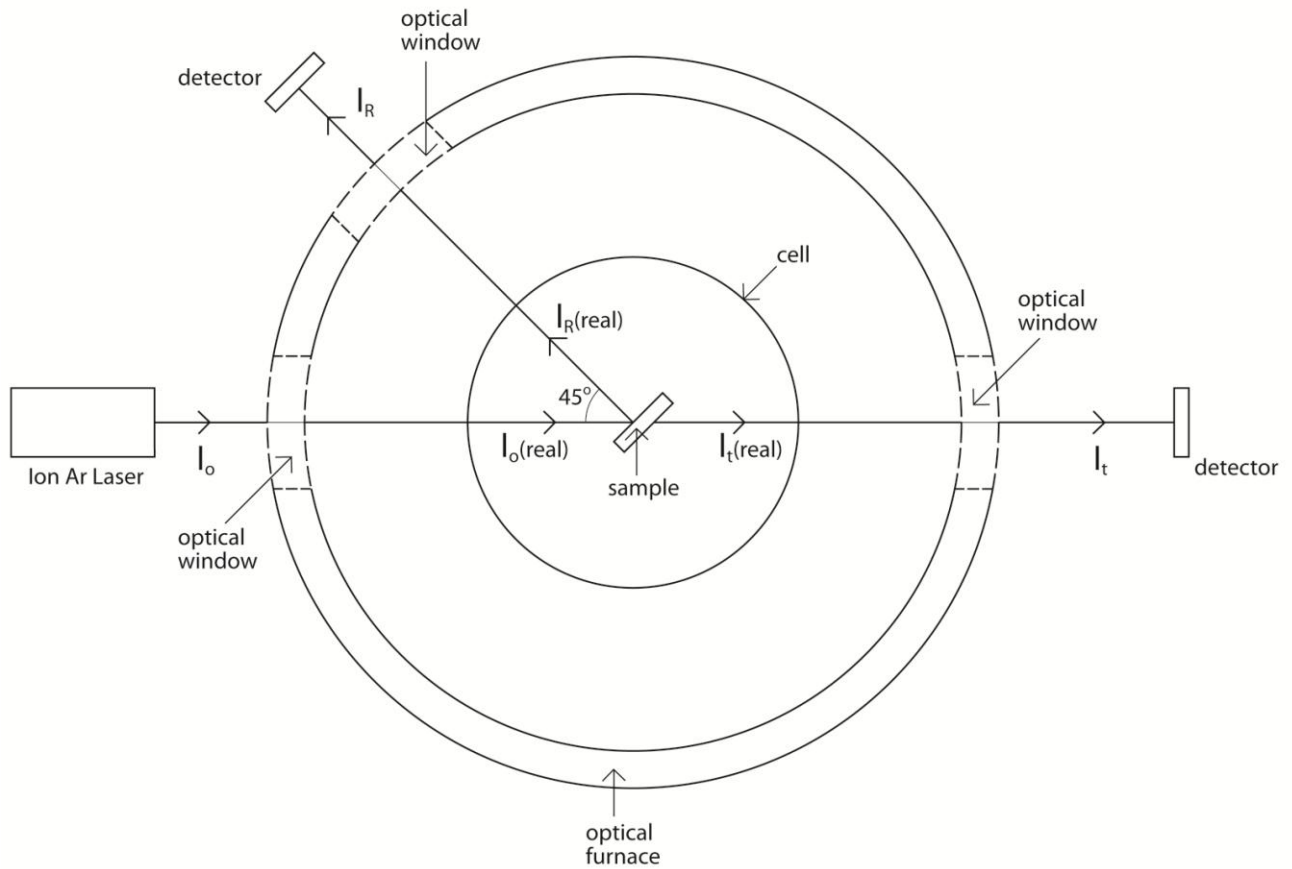
Πρώτο βήμα πριν την έναρξη της διεξαγωγής του πειράματος, είναι ο έλεγχος της διαπερατότητας των οπτικών παραθύρων του οπτικού φούρνου, καθώς και της κυψελίδας (μέσα στην οποία τοποθετούμε το δείγμα), και η εγκαθίδριση ενός γενικότερου φορμαλισμού ώστε να υπολογιστούν τα σφάλματα που επιφέρουν τα οπτικά παράθυρα στα τελικά δεδομένα, και να διαπιστωθεί ότι οι δύο διατάξεις (δείγμα εκτος οπτικού φούρνου, δείγμα εντός οπτικού φούρνου) έρχονται σε ικανοποιητική συμφωνία σε θερμοκρασία περιβάλλοντος.

Έτσι λοιπόν αρχικά, μετρήσαμε την ένταση της απευθείας δέσμης laser, για μία σταθερή ισχύ, για τα τρία οπτικά παράθυρα που μας ενδιαφέρουν ξεχωριστά, δηλαδή για το παράθυρο που παρεμβάλλεται μεταξύ του laser και του δείγματος ($I_0^{\pi\alpha\rho}$), για το παράθυρο που παρεμβάλλεται μεταξύ δείγματος και ενεργομέτρου διερχόμενης δέσμης ($I_T^{\pi\alpha\rho}$) και για το παράθυρο που παρεμβάλλεται μεταξύ δείγματος και ανακλώμενης δέσμης ($I_R^{\pi\alpha\rho}$), και τέλος για την κυψελίδα ($I^{κυψ}$). Για την ίδια ισχύ δέσμης laser μετρήσαμε τις απευθείας ακτινοβολία I_0 . Έτσι λοιπόν μπορούμε να υπολογίσουμε το ποσοστό της ακτινοβολίας που απορροφάται (ή χάνεται με κάποιο άλλο τρόπο) από το κάθε οπτικό παράθυρο και την κυψελίδα ώστε να βγάλουμε ένα συντελεστή απωλειών που θα χαρακτηρίζει το καθένα στοιχείο από αυτά. Έτσι προκύπτουν οι εξής συντελεστές σε αντιστοιχία με τα προηγούμενα:

$$\alpha_0^{\pi\alpha\rho} = \frac{I_0^{\pi\alpha\rho}}{I_0}, \quad \alpha_T^{\pi\alpha\rho} = \frac{I_T^{\pi\alpha\rho}}{I_0}, \quad \alpha_R^{\pi\alpha\rho} = \frac{I_R^{\pi\alpha\rho}}{I_0}, \quad \alpha^{κυψ} = \frac{I^{κυψ}}{I_0} \quad (4.5)$$

Στο σχήμα 4.2 φαίνεται η πειραματική διάταξη με το δείγμα και χωρίς αυτό αναλυτικά.

Στο σχήμα αυτό παρατηρούμε ότι έχουμε εισάγει τα μεγέθη $I_{0(real)}$, $I_{T(real)}$, $I_{R(real)}$, τα οποία είναι αντίστοιχα οι ενέργειες της δέσμης που εισέρχεται στο δείγμα, που εξέρχεται και που ανακλάται από αυτό αντίστοιχα. Παρατηρώντας το σχήμα εύκολα μπορεί κάποιος να διαπιστώσει πως οι σχέσεις που συνδέουν τα $I_{0(real)}$, $I_{T(real)}$, $I_{R(real)}$ με τις μετρούμενες εντάσεις I_0 , I_T , I_R είναι:



Σχήμα 4.2: Πειραματική διάταξη (οπτικός φούρνος σε κάτοψη) οπτικών μετρήσεων a-Si σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία.

$$I_{0(real)} = \alpha_0^{\pi\alpha\rho} \frac{\alpha^{κ\upsilon\psi}}{2} I_0 \quad (4.6)$$

$$I_{T(real)} = 2 \frac{I_T}{\alpha^{κ\upsilon\psi} \alpha_T^{\pi\alpha\rho}} \quad (4.7)$$

$$I_{R(real)} = 2 \frac{I_R}{\alpha^{κ\upsilon\psi} \alpha_R^{\pi\alpha\rho}} \quad (4.8)$$

Έτσι λοιπόν μπορούμε να υπολογίσουμε τους συντελεστές διαπερατότητας T και ανακλαστικότητα R του υλικού για το συγκεκριμένο μήκος κύματος ακτινοβολίας σύμφωνα με τις σχέσεις

$$T = \frac{I_{T(real)}}{I_{0(real)}} \quad (4.9)$$

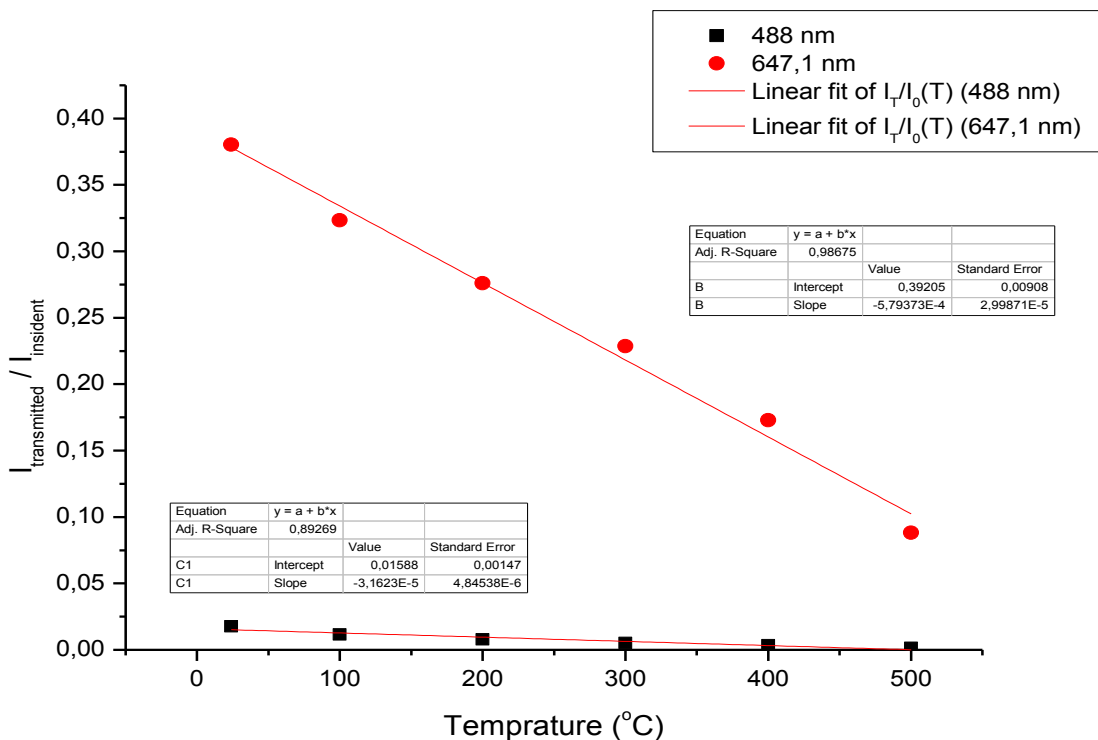
$$R = \frac{I_{R(real)}}{I_{0(real)}} \quad (4.10)$$

Αυτά λοιπόν θα είναι τα T και R που θα εισέρχονται στη σχέση (4.1) ώστε να υπολογίζουμε τον συντελεστή απορρόφησης της ακτινοβολίας για κάθε θερμοκρασία.

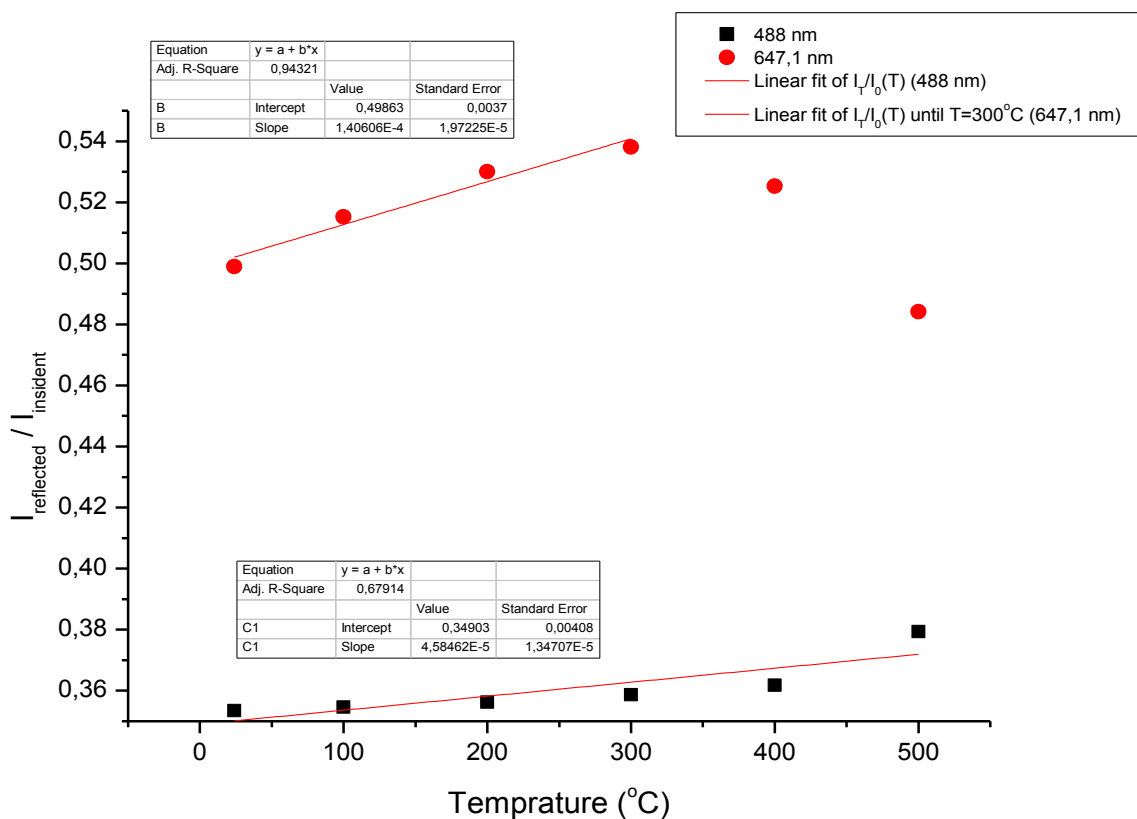
Για να επανέλθουμε λοιπόν στο πρώτο ζητούμενο, ας εξετάσουμε το πόσο συμφωνούν οι διατάξεις με το δείγμα εκτός και εντός φούρνου. Ακολουθώντας τον παραπάνω φορμαλισμό για την διάταξη του δείγματος μέσα στον οπτικό φούρνο και σε θερμοκρασία περιβάλλοντος, υπολογίσαμε τον συντελεστή απορρόφησης του υλικού στα 488nm περίπου ίσο με $1,38 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ τιμή η οποία έρχεται σε πολύ καλή συμφωνία με την αντίστοιχη που είχαμε υπολογίσει για τη διάταξη του δείγματος εκτός οπτικού φούρνου η οποία ήταν ίση με $1,33 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ (έχουμε μόλις 4% απόκλιση). Έτσι λοιπόν μπορούμε να απομφανθούμε ότι είμαστε βέβαιοι για την εγκυρότητα του πειράματος και να προχωρίσουμε στη διαδικασία θέρμανσης του δείγματος.

Αφού τοποθετήσαμε λοιπόν το δείγμα στην ειδική κυψελίδα υπό γωνία 22° ως προς το επίπεδο πρόσπτωσης της δέσμης έτσι ώστε η ανακλώμενη να διέρχεται από το οπτικό παράθυρο των 45° , το επόμενο βήμα είναι να δημιουργηθούν συνθήκες κενού εντός της κυψελίδας ώστε να αποφευχθούν φαινόμενα οξείδωσης σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες. Αυτό επιτυγχάνεται με τη βοήθεια δύο αντλιών κενού (περιστροφική και διάχυσης).

Έπειτα από αυτό είμαστε έτοιμοι να θερμάνουμε το δείγμα μας. Θέτουμε έτσι σε λειτουργία τη γεννήτρια συνεχούς τάσεως, και σύμφωνα με την αντιστοιχία τάσης-θερμοκρασίας οπτικού φούρνου που δίνεται στις προδιαγραφές λειτουργίας του θερμοζεύγους, λαμβάνουμε μετρήσεις για θερμοκρασίες από $100 \text{ }^\circ\text{C}$ έως και $500 \text{ }^\circ\text{C}$ με βήμα $100 \text{ }^\circ\text{C}$. Έτσι για σταθερή ισχύ laser λάβαμε μετρήσεις I_T και I_R για κάθε τιμή θερμοκρασίας. Το I_0 το θεωρούμε σε κάθε περίπτωση ίδιο. Έτσι με αυτά τα δεδομένα και σύμφωνα με τον φορμαλισμό που περιγράψαμε παραπάνω για κάθε μήκος κύματος στην παράγραφο αυτή, προκύπτουν τα παρακάτω διαγράμματα.



Σχήμα 4.3: Διαπερατότητα T δείγματος α -Si πάχους 200nm ως συνάρτηση με τη θερμοκρασία για μήκη κύματος ακτινοβολίας 488nm και 647,1 nm.



Σχήμα 4.4: Ανακλαστικότητα R δείγματος α -Si πάχους 200nm ως συνάρτηση με τη θερμοκρασία για μήκη κύματος ακτινοβολίας 488nm και 647,1 nm.

Τα σχήματα 4.3 και 4.4 δείχνουν τη μεταβολή των πρωτογενών δεδομένων, $T = I_T/I_0$ και $R = I_R/I_0$ αντίστοιχα, σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία για κάθε μήκος κύματος. Πέρα από την ανακλαστικότητα στην ακτινοβολία των 647,1 nm για θερμοκρασία άνω των 300 °C, παρατηρούμε πως οι σχέσεις $\frac{I_T}{I_0}(T)$ και $\frac{I_R}{I_0}(T)$ ακολουθούν μία σχεδόν γραμμική πορεία σε σχέση με το μήκος κύματος. Οι γραμμικές αυτές προσεγγίσεις δίνονται από τις παρακάτω εξισώσεις:

Για $\lambda=488$ nm:

$$\frac{I_T}{I_0}(T) = 1,59 \times 10^{-2} - 3,16 \times 10^{-5}T \quad (4.11)$$

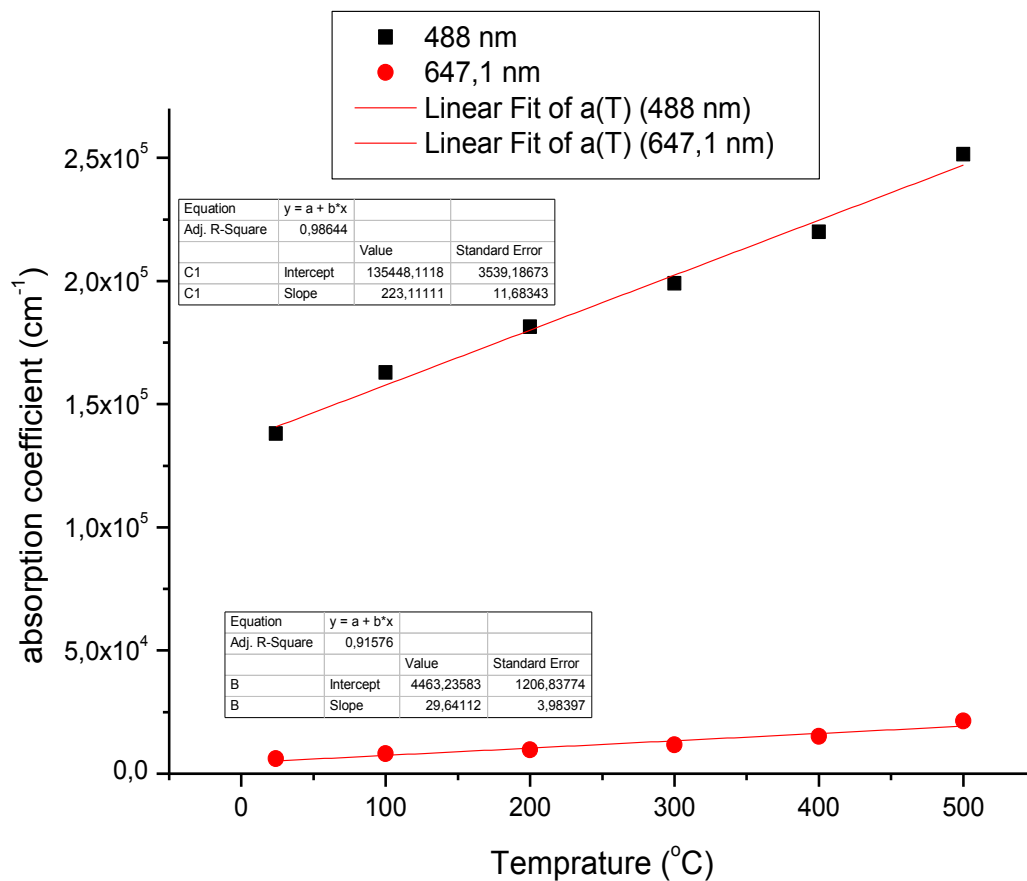
$$\frac{I_R}{I_0}(T) = 0,35 + 4,58 \times 10^{-5}T \quad (4.12)$$

Για $\lambda=647,1$ nm:

$$\frac{I_T}{I_0}(T) = 0,39 - 5,79 \times 10^{-4}T \quad (4.13)$$

$$\frac{I_R}{I_0}(T) = 0,50 + 1,41 \times 10^{-4}T. \quad (4.14)$$

Παρατηρούμε λοιπόν πως και για τα δύο μήκη κύματος μειώνεται σημαντικά το ποσοστό της ακτινοβολίας που διέρχεται από το δείγμα όσο αυξάνει η θερμοκρασία ενώ αντιθέτως το ποσοστό της ακτινοβολίας που ανακλάται αυξάνεται. Παρόλα αυτά η αύξηση του ποσοστού που ανακλάται δεν είναι τόσο έντονη, πράγμα που σημαίνει ότι η απορρόφηση στο υλικό αυξάνεται. Θα μπορούσαμε έτσι να θεωρήσουμε πως η ανακλαστικότητα του υλικού θεωρείται σχεδόν σταθερή για κάθε θερμοκρασία, και να λάβουμε υπόψη μόνον τα αποτελέσματα για τη διαπερατότητα, όπου σχετίζονται εμφανέστερα με το γεγονός της αύξησης της απορρόφησης της ακτινοβολίας, όσο το δείγμα υπόκειται σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες.



Σχήμα 4.5: Συντελεστής απορρόφησης δείγματος a-Si πάχους 200nm ως συνάρτηση με τη θερμοκρασία για μήκος κύματος ακτινοβολίας 488nm και 647,1 nm.

Το σχήμα 4.5 δείχνει μία σημαντική αύξηση του συντελεστή απορρόφησης α με τη θερμοκρασία για $\lambda=488$ nm και μία μικρότερη αύξηση για $\lambda=647,1$ nm. Η αύξηση αυτή μπορεί να θεωρηθεί σχεδόν γραμμική, και όπως φαίνεται και στο σχήμα έγινε ήδη μία προσέγγισή της, όπου υπολογίστηκε πως η κλίση της ευθείας αυτής είναι περίπου ίση με $da/dT = 2,2 \times 10^2 \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ για $\lambda=488$ nm και $dn/dT = 3,0 \times 10^{-5} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$. Η γραμμική προσέγγιση έδωσε την ακόλουθη έκφραση για $\lambda=488$ nm :

$$\alpha(T) = 1,35 \times 10^5 + 2,2 \times 10^2 T \quad (4.15)$$

και για $\lambda=647,1$ nm:

$$\alpha(T) = 4,46 \times 10^4 + 3,0 \times 10 T \quad (4.16)$$

Με τη θερμοκρασία να εκφράζεται σε βαθμούς κελσίου ($^\circ\text{C}$).

Παρατηρούμε ότι, με την μείωση του μήκους κύματος (από τα 647 nm στα 488 nm), ο μέν συντελεστής απορρόφησης αυξάνει κατά ένα παράγοντα ~3, αλλά και ο ρυθμός μεταβολής του συντελεστή απορρόφησης, με την θερμοκρασία, επίσης αυξάνεται, κατά ένα παράγοντα ~7. Τα αποτελέσματα αυτά δείχνουν ότι, κατά τις διαδικασίες ανόπτησης αμόρφου πυριτίου με παλμικά laser, τα φαινόμενα τοπικής θέρμανσης είναι πολύ πιο έντονα στα μικρά μήκη κύματος, όπως αναμένεται. Επιπλέον, τα μη γραμμικά φαινόμενα στη διάχυση της θερμότητας, λόγω εξάρτησης των οπτικών συναρτήσεων από τη θερμοκρασία, είναι επίσης πιο έντονα στα μικρά μήκη κύματος. Για παράδειγμα, χρησιμοποιώντας τις δύο τελευταίες σχέσεις, μπορούμε να υπολογίσουμε ότι, μεταβάλλοντας την θερμοκρασία κατά 500 βαθμούς Κελσίου, η ποσοστιαία μεταβολή του συντελεστή απορρόφησης $\Delta a/a$ είναι ~33%, στα 647 nm, και ~80% στα 488nm. Επομένως, κατά την προσομοίωση αυτών των διαδικασιών, θα πρέπει να ενσωματώνεται, στα σχετικά μοντέλα, η εξάρτηση των οπτικών συναρτήσεων από τη θερμοκρασία, προκειμένου να έχουμε περισσότερο αξιόπιστα αποτελέσματα από την προσομοίωση. Η ενσωμάτωση αυτής της πληροφορίας, όπως φαίνεται, είναι περισσότερο κρίσιμη για μήκη κύματος στην περιοχή απορρόφησης και λιγότερο κρίσιμη στην περιοχή διαπερατότητας. Επειδή, στο πλαίσιο αυτής της διπλωματικής, δεν κατέστη δυνατόν να μετρηθούν οι οπτικές συναρτήσεις του άμορφου πυριτίου, στην περιοχή του υπέρυθρου, θα μπορούσαμε να εκτιμήσουμε την ποσοστιαία μεταβολή του συντελεστή απορρόφησης στο υπέρυθρο, για μεταβολή θερμοκρασίας κατά 500 βαθμούς Κελσίου, κάνοντας μία γραμμική προέκταση, στο αντίστοιχο μήκος κύματος, των δύο ποσοστιαίων μεταβολών που υπολογίσαμε για τα μήκη κύματος 488nm και 647 nm.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ - ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ

Στην παρούσα διπλωματική εργασία πραγματοποιήθηκε η μελέτη των οπτικών συναρτήσεων a-Si, ενός υλικού το οποίο έχει πολύ χαμηλό κόστος παραγωγής και παρέχει μία μεγάλη ποικιλία τεχνολογικών εφαρμογών. Έχει γίνει έτσι επιτακτική ανάγκη ο οπτικός χαρακτηρισμός του.

Αρχικά, στην προσπάθεια προσδιορισμού των οπτικών συναρτήσεων διάταξης αμόρφου πυριτίου πάχους 200nm, εναποτεθημένο σε γυάλινο υπόστρωμα, έγινε χρήση φασμάτων διαπερατότητας. Ο προσδιορισμός αυτός όμως, μέσω του μοτίβου κροσσών συμβολής που εμφανίζονται σε τέτοια φάσματα διαπερατότητας, μία μέθοδος που έχει λάβει εκτεταμένη μελέτη, αποδείχθηκε πολύ δύσκολος καθότι το δείγμα που χρησιμοποιήσαμε είναι πολύ λεπτό με αποτέλεσμα να μην εμφανίζονται έντονα τέτοιοι κροσσοί.

Το πρόβλημα αυτό ξεπεράστηκε με την χρήση μίας υπολογιστικής μεθόδου βελτιστοποίησης, που έχει ως βασική ιδέα τον προσδιορισμό των οπτικών σταθερών μέσω της ταυτοποίησης των πειραματικών δεδομένων διαπερατότητας με έναν κλείστο θεωρητικό φορμαλισμό του T που εμπεριέχει τις οπτικές σταθερές n , k και το πάχος d του δείγματος.

Η μέθοδος αυτή αποδείχθηκε υψηλής αξιοπιστίας για τον υπολογισμό πάχους και οπτικών σταθερών λεπτών υμενίων, καθώς έδωσε τιμές πολύ κοντά σε τιμές που αναφέρονται στη βιβλιογραφία για το a-Si μέσω μίας πολύ γρήγορης και μη καταστρεπτικής πειραματικής διαδικασίας.

Έγινε επίσης προσπάθεια της εκτίμησης του ενεργειακού χάσματος του υλικού, αν και δεν έχει τεκμηριωθεί ένας θεωρητικός φορμαλισμός για τα άμορφα υλικά πέραν του εμπειρικού μοντέλου του Mott. Έτσι έγινε τελικά ο προσδιορισμός του χάσματος ευκινησίας των φορέων, ο οποίος, αν και σημαντικά μεγαλύτερος από το ενεργειακό χάσμα του υλικού, είναι αρκετά κοντά και επιπλέον δίνει ένα άνω φράγμα της τιμής του E_G του υλικού.

Όσον αφορά τις μετρήσεις της θερμοκρασιακής εξάρτησης του συντελεστή απορρόφησης καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι στην περιοχή έντονης απορρόφησης του υλικού, ο συντελεστής απορρόφησης του a-Si έχει σχετικά μεγάλη εξάρτηση από

τη θερμοκρασία. Συμπεραίνουμε επίσης πως κάτι τέτοιο δεν θα ήταν δυνατόν αν εξετάζαμε την εξάρτηση του $\alpha(T)$ σε περιοχή του φάσματος στην οποία το υλικό θεωρείται σχεδόν διαφανές.

Επίσης πρέπει να σημειώσουμε πως σε σχέση με το κρυσταλλικό πυρίτιο το άμορφο έχει αρκετά πιο έντονη εξάρτηση από τη θερμοκρασία του $\alpha(T)$. Αυτό πιθανότατα συμβαίνει λόγω της πολύ χαμηλής κινητικότητας των ηλεκτρονίων τόσο στη ζώνη σθένους όσο και στην ζώνη αγωγιμότητας στο άμορφο πυρίτιο σε σχέση με εκείνης του κρυσταλλικού.

Συμπερασματικά, καταφέραμε να μετρήσουμε τη θερμοκρασιακή εξάρτηση του δείκτη απορρόφησης του $\alpha\text{-Si}$ για θερμοκρασία μέχρι και 500 °C. Και ενώ γνωρίζουμε ότι τα πειραματικά αποτελέσματα για το $\alpha\text{-Si}$ εξαρτώνται γενικά από πολλές παραμέτρους (συνθήκες εναπόθεσης στο υπόστρωμα, πάχος, κ.α.), θεωρούμε πως η ποιοτική θερμοκρασιακή συμπεριφορά για τέτοιες φυσικές παραμέτρους όπως ο συντελεστής απορρόφησης, θα πρέπει να έχουν κάποια γενικότερη αξιοπιστία. Αυτό λοιπόν μπορεί να αποτελέσει ένα ερέθισμα για βαθύτερη θεωρητική κατανόηση μίας τέτοιας συμπεριφοράς.

Όσον αφορά στις περαιτέρω προοπτικές, σχετικά με το αντικείμενο της διπλωματικής, θα μπορούσαμε να χαρακτηρίσουμε οπτικά, μέσω της επεξεργασίας φασμάτων διαπερατότητας με την υπολογιστική μέθοδο PUMA, λεπτά υμένα του οξειδίου μετάλλου (ZnO) που χρησιμοποιείται για τη συγκεκριμένη τεχνολογία φωτοβολταϊκών καθώς και άλλα υλικά που χρησιμοποιούνται ευρύτατα σε διατάξεις μικροηλεκτρονικής (π.χ. $\alpha\text{-Ge}$). Η μέθοδος αυτή θεωρείται πολύ αξιόπιστη και εύκολη στην εφαρμογή της έτσι ώστε να μπορέσει να δώσει γρήγορα αποτελέσματα για τις οπτικές (και κατεπέκταση διηλεκτρικές) ιδιότητες υλικών μικροηλεκτρονικής.

Ένα άλλο ζήτημα προς μελέτη είναι ο ακριβής υπολογισμός του ενεργειακού χάσματος του $\alpha\text{-Si}$ μέσω των εμπειρικών μοντέλων των Mott-Davis που αφορά τους άμορφους ημιαγωγούς.

Τέλος, θα ήταν πολύ ενδιαφέρον να εξεταστεί η περίπτωση της θερμοκρασιακής εξάρτησης του συντελεστή απορρόφησης του υλικού στην περιοχή διαπερατότητας του φάσματος (π.χ. 1064 nm), ώστε να μπορέσουμε να ενσωματώσουμε την πληροφορία αυτή σε σχετικά μοντέλα με σκοπό την μελέτη της συμπεριφοράς του υλικού σε διαδικασίες φωτοθερμικής επεξεργασίας.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

J. I. Pancove, *Optical Processes in Semiconductors*, Dover Publications, Inc. New York, 1971.

T. S. Moss, G. J. Burrell and B. Ellis, *Semiconductors Opto-Electronics*, London Butterworths, 1973.

S. O. Kasap, *Principles of Electronic Materials and Devices Second Edition*, McGraw-Hill, 2001.

E. K. Παλούρα, Σημειώσεις για το μάθημα «Φυσική Στερεάς Κατάστασης» Στοιχεία Θεωρίας Ημιαγωγών, Θεσσαλονίκη, 2008.

A. Ibrahim, S. K. J. Al-Ani, *Models of Optical Absorption in Amorphous Semiconductors at the Absorption Edge-a Review and Re-Evaluation*, Czechoslovak Journal of Physics, Vol. **44** (1994), No.8.

<http://www.sunairpower.gr/component/content/article/46-2010-07-17-06-27-17/123-2010-07-17-20-34-47>.

E. G. Birgin, I. Chambouleyron and J. M. Martinez. *Estimation of the optical constants and the thickness of thin films using unconstrained optimization*. Journal of Computational Physics 151, 862–880 (1999).

E. G. Birgin, I. Chambouleyron and J. M. Martinez. *Optimization problems in the estimation of parameters of thin films and the elimination of the influence of the substrate*, Journal of Computational and Applied Mathematics 152, 35-50 (2003).

<http://www.ime.usp.br/~egbirgin/puma/>.

Nhan Do, Leander Klees, P. T. Leung, Frank Tong, Wing P. Leung et al., *Temperature dependence of optical constants of amorphous silicon*, Appl. Phys. 60, 2186 (1992).

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] Born and Wolf (1964).
- [2] G. E. Kimball, J. Chem. Phys. **3**, 560 (1935).
- [3] F. Hernan, Proc. IRE **43**, 1703 (1955).
- [4] N. Dexter, H. Zeiger, and B. Lax, Phys. Rev. **104**, 637 (1956).
- [5] W. Baltensperger, Phil. Mag, **44**, 1355 (1953).
- [6] P. Aigrain, Physica **20**, 978 (1954).
- [7] R. H. Parmenter, Phys. Rev. **97**, 587 (1955).
- [8] V. I. Bonch-Bruевич, Proc. 1962, Int. Conf Phys. Semiconductors, Exeter, p. 216; Soviet Phys. Solid-State **5**, 1353 (1964); The Electronic Theory of Heavily Doped Semiconductors, American Elsevier (1966).
- [9] P. A. Wolff, Proc. 1962 Int. Conf. Phys. Semiconductors, Exeter p. 220.
- [10] M. Conwell and R. W. Levinger Proc. 1962 Int. Conf. Phys. Semiconductors, Exeter p. 227.
- [11] E. O. Kane, Phys. Rev. **131** 79 (1963).
- [12] B. I. Halperin and M. Lax, Phys. Rev. **148**, 772 (1966).
- [13] T. N. Morgan, Phys. Rev. **139**, A343 (1965).
- [14] S. Wang, Solid State Electronics, McGraw-Hill (1966), p. 46.
- [15] T. S. Moss and T. D. F. Hawkins, Infrared Phys. **1**, 111 (1961).
- [16] T. S. Moss, J. Appl. Phys. **32**, 2136 (1961).
- [17] M. D. Sturge, Phys. Rev. **127**, 768 (1962).
- [18] W. J. Turner and W. E. Reese, J. Appl. Phys. **35**, 350 (1964).
- [19] D. E. Hill, Phys. Rev. **133**, A866 (1964)

- [20] C. M. Chang, Stanford Electronics Laboratories Technical Report No. 5064-2 (Unpublished).
- [21] G. Lucowsky, *Appl. Phys. Letters* **5**, 37 (1964).
- [22] I. Kudman and L. J. Vieland, *J. Phys. Chem. Solids* **24**, 967 (1963).
- [23] W. G. Spitzer and J. M. Whelan, *Phys. Rev.* **114**, 59 (1959).
- [24] D. Redfield, *Phys. Rev.* **140**, A2056 (1965).
- [25] J. I. Pancove, *Phys. Rev.* **140**, A2059 (1965).
- [26] F. Urbach, *Phys. Rev.* **92**, 1324 (1953).
- [27] J. Tauc: in *Amorphous and Liquid Semiconductors* (ed. J. Tauc.). Plenum Press, New York, 1974.
- [28] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, Pergamon, London, 1980.
- [29] O. S. Heavens, *Optical Properties of Thin Films*, Dover, New York, 1991.
- [30] J. C. Manifacier, J. Gasiot, and J. P. Fillard, *A simple method for the determination of the optical constants n , k and the thickness of a weakly absorbing film*, *J. Phys. E: Sci. Instrum.*, 9 (1976), pp. 1002.
- [31] R. Swanepoel, *Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon*, *J. Phys. E: Sci. Instrum.*, 16 (1983), pp. 1214–1222.
- [32] R. Swanepoel, *Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films*, *J. Phys. E: Sci. Instrum.*, 17 (1984), pp. 896–903.
- [33] I. Chambouleyron, J. M. Martinez, A. C. Moretti and M. Mulato, *Retrieval of optical constants and thickness of thin films from transmission spectra*, *Applied Optics*, 36 (1997), pp. 8238–8247.
- [34] I. Chambouleyron, J. M. Martinez, A. C. Moretti and M.

- Mulato, *Optical constants of thin films by means of a pointwise constrained optimization approach*, Thin Solid Films, 317 (1998), pp. 133–136.
- [35] E. G. Birgin, *Computational Differentiation and Applications*, Ph.D. Thesis, Department of Applied Mathematics, IMECC-UNICAMP, 1998.
- [36] H. M. Liddell. *Computer-aided techniques for the design of multilayer filters*, Adam Hilger Ltd, Bristol (1981).
- [37] A. Mini. Thesis. L'Universite Scientifique et Medicale de Grenoble (1982).
- [38] J. Keradec. Thesis. L'Universite Scientifique et Medicale de Grenoble (1973).
- [39] M. Raydan, *The Barzilai and Borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem*, SIAM Journal on Optimization, 7 (1997), pp. 26–33.
- [40] J. E. Dennis, Jr. and R. B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New York, 1983.
- [41] P. E. Gill, W. Murray and M. H. Wright, *Practical Optimization*, Academic Press, London, 1981.
- [42] R. Fletcher, *Practical Methods of Optimization*, (2nd edition), John Wiley and Sons, Chichester, New York, Brisbane, Toronto and Singapore, 1987.
- [43] H. G. Dreehsen, C. Hartwich, J. H. Schaefer, and J. Uhlenbusch, J. Appl. Phys. 56, 238 (1984).
- [44] The review article by G. E. Jellison, Jr., in *Semiconductors and Semi-metals*, edited by R. F. Wood, C. W. White, and R. T. Young (Academic, New York, 1984), p. 95
- [45] M. E. Thomas, in *Handbook of Optical Constants of Solids II*, edited by E. D. Palik (Academic, New York, 1991), p. 177,
- [46] H. Piller, in *Handbook of Optical Constants of Solids I*, edited

by E. D. Palik (Academic, New York, 1985), p. 571,

[47] M. R. T. Siregar, M. von Allmen, and W. Luthy, *Helv. Phys. Acta* 52, 45 (1979).

[48] M. von Allmen, W. Liithy, J. P. Thomas, M. Fallavier, J. M. Mackowski, R. Kirsch, M.-A. Nicolet, and M. E. Roulet, *Appl. Phys. Lett.* 34, 82 (1979).

[49] S. M. Liu, Ph.D. thesis, Harvard University, 1982.