



# Espectroscopia terahertz no domínio do tempo para caracterização da condutividade óptica em semicondutores

**Palavras-Chave:** TeraHertz, semicondutores, laser de femtossegundo, condutividade óptica

Victor Teixeira Carneiro Reginato – UNICAMP

Prof. Dr. Jonathas de Paula Siqueira DEQ- UNICAMP

## Introdução e aparato experimental

A espectroscopia de teraHertz no domínio do tempo é uma técnica de espectroscopia que usufrui de lasers de pulso ultra-curto para gerar pulsos de radiação terahertz, que são ondas eletromagnéticas na região aproximada entre 0.1THz e 10THz de frequência, é uma região com grande potencial de aplicação, já é usada na medicina, telecomunicações, imageamento e também para estudos espectroscópicos de materiais, como no foco deste trabalho. Na figura 1 é representada a banda aproximada do terahertz, destaca-se o fato de ser a transição entre as micro-ondas e o infravermelho, em algumas literaturas são ondas chamadas de infravermelho distante, é também a região de transição entre o domínio óptico e elétrico em termos de detecção e geração.

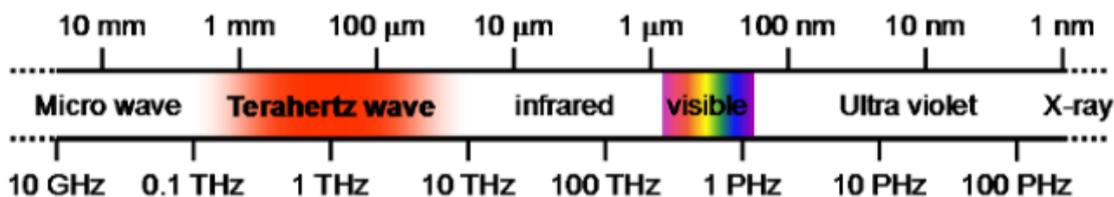


Figura 1: Representação do espectro eletromagnético com destaque para a região do terahertz fonte: [PdqWeb](#)

Durante boa parte da história recente, geração e detecção nesta faixa não era algo tão prático, só nos vinte anos que houve um bom avanço e agora existem inúmeros jeitos de gerar e detectar terahertz, durante o período de iniciação alguns métodos foram testados, com destaque para a antena fotocondutiva. Tal região espectral é extremamente apropriada para caracterização da mobilidade de portadores de carga em semicondutores na escala bulk ou nanoescala devido a estes refletirem e absorverem fortemente a radiação terahertz. Devido a sua baixa energia por fóton também tem sido amplamente utilizada na caracterização de excitações de baixa energia em materiais complexos tal como o gap supercondutor em filmes finos.

O objetivo do projeto foi compreender, manipular, estudar os aspectos teóricos e gerar/interpretar resultados provenientes do aparato experimental de espectroscopia, mais especificamente obtenção dos parâmetros de condutividade óptica de dois tipos diferentes de semicondutores, o silício(Si) e o Arseneto de Gálio (GaAs) dois materias de suma importância na indústria de eletrônicos moderna e também o vidro “BK7” bastante usado para fabricação de lentes. O espectrômetro é representado de maneira simplificada na figura 2, onde primeiro, seguindo o caminho do feixe temos o chamado laser de pulso ultracurto que no caso se trata de um laser pulsado de

Titânio-Safira (Ti-Safira), logo em seguida temos um *Beam splitter* que divide o feixe em dois, um segue para gerar uma *diferença de caminho óptico*, fundamental para obter o perfil temporal, e o outro vai em direção à antena fotocondutiva que gera o pulso de TeraHertz a partir de um gap semiconductor, a partir daí o feixe incide na amostra e depois é captado por uma antena receptora com sua “marca” proveniente da passagem pela amostra, e depois é captado por um amplificador (Lock-in) calibrado para amplificar certa frequência escolhida para modulação do feixe, este amplificador é responsável por aferir os valores de amplitude de tensão resultado da amplitude de campo elétrico correspondente.

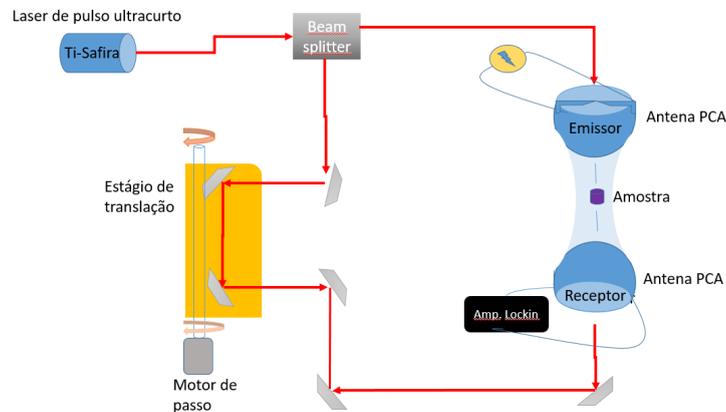


Figura 2: Representação simplificada do aparato de espectroscopia de terahertz no domínio do tempo

A técnica experimental é denominada no domínio do tempo pois gera como resultado amplitude do potencial elétrico (campo elétrico) do pulso de terahertz no domínio tempo com precisão de aproximadamente 16.6 fs. O perfil do pulso é o ponto de partida para o tratamento de dados que é iniciado pela aplicação da transformada de Fourier (FFT).

## Relações importantes e o modelo físico/matemático

Para um conjunto completo de dados para aplicação do modelo para uma amostra de semiconductor específica, são necessárias duas varreduras da espectroscopia, uma chamada de **referência** proveniente da execução de uma medida *sem* a amostra, que representa 100% de transmissão, depois a rotina é feita novamente com a amostra presente. O próximo passo é a aplicação da transformada de Fourier para os dois perfis temporais obtidos, onde é obtido a distribuição espectral do pulso temporal correspondente:

$$E(t) \rightarrow FFT \rightarrow \tilde{E}(\omega) \quad (1)$$

Com as transformadas, é estabelecido o chamado coeficiente de transmissão complexo  $t(\omega)$  dado pela relação entre campo com a amostra e referência:

$$t(\omega) = \tilde{E}_a(\omega) / \tilde{E}_{ref}(\omega) \quad (2)$$

A partir desta grandeza é possível obter algumas das chamadas constantes ópticas sendo elas: índice de refração complexo,  $\tilde{n}(\omega)$ , condutividade complexa,  $\tilde{\sigma}(\omega)$  e também a constante dielétrica complexa,  $\tilde{\epsilon}(\omega)$ , todas no domínio espectral delimitado pela capacidade do espectrômetro. É usado o modelo de Drude juntamente com relações do eletromagnetismo relacionadas a reflexão e transmissão em interfaces para estabelecer as equações que ligam o coeficiente de transmissão aos parâmetros citados.

Por exemplo, para uma amostra de comprimento  $d$ , e com duas interfaces é possível mostrar que podemos associar diretamente o coeficiente de transmissão ao índice de refração através da relação dada na equação

$$t(\omega) = \frac{2}{(1+\tilde{n}(\omega))} \frac{2\tilde{n}(\omega)}{(1+\tilde{n}(\omega))} e^{i\frac{\omega}{c}(\tilde{n}(\omega)-1)d} \quad (3)$$

De maneira mais geral, usando um software de método numérico chamado Nelly (Ref 1) para realizar a computação, conhecendo a geometria das interfaces ópticas envolvidas é possível obter informação de módulo e fase dos parâmetros citados, desta forma, o índice de refração complexo também fornece informações a respeito da capacidade de absorção (coeficiente de extinção) da luz, através de sua parte imaginária.

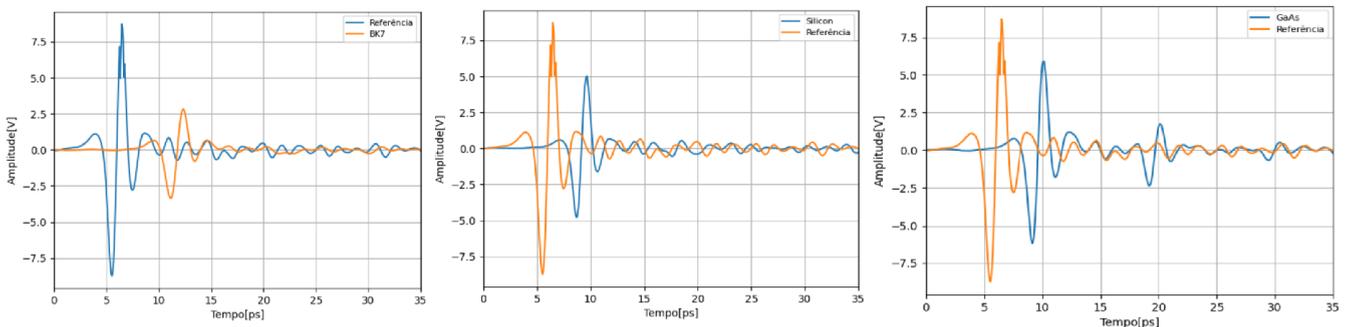
$$\tilde{n}(\omega) = n_r(\omega) + i * n_i(\omega) \quad (4)$$

A partir do coeficiente de extinção podemos obter o coeficiente de absorção que é a taxa de decaimento da intensidade do pulso ao adentrar na amostra, que para uma amostra uniforme de comprimento d temos:

$$\alpha = \frac{2*\omega*n_i(\omega)}{c} \quad (5)$$

## Resultados

Os dados referentes aos pulsos temporais estão mostrados na figura 3 onde vemos o pulso de referência com maior amplitude outras amostras com defasagem proveniente do atraso de passar por um meio com índice de refração maior que o valor quase unitário do ar. É também possível observar o eco de reflexão proveniente da amostra de GaAs.



**Figura 4:** Pulsos temporais de espectroscopia de Terahertz no domínio do tempo para vidro BK7, silício e do arseneto de Gálio.

Os índices de refração estão apresentados na figura 4, os resultados apontam índices de refração coerentes com valores medidos por terceiros, o vidro BK7 possui um índice de refração em torno de 2.5 para boa parte do intervalo medido, valor condizente com o que se encontrou na literatura (Ref 5). Para o silício, elemento amplamente utilizado para fabricação de semicondutores, temos 3.4 aproximadamente, valor este próximo aos já encontrados antes (Ref 3), mesmo para o Arseneto de Gálio, que é um composto também muito usado em dispositivos optoeletrônicos como optoacopladores, LEDs e lasers; para qual é aferido um valor de aproximadamente 3.35 em média.

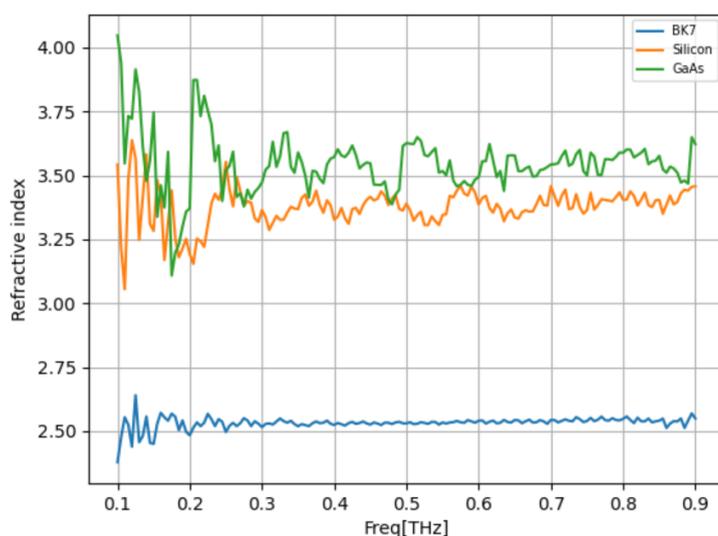


Figura 3 : Índice de refração (parte real) do vidro BK7, do silício e do arseneto de Gálio

A dependência espectral dos coeficientes de absorção serão apresentadas no relatório final.

## Conclusão

A técnica de espectroscopia de Terahertz no domínio do tempo com lasers de femtossegundo se mostrou promissora para prever os parâmetros de mobilidade dos materiais estudados já que houve boa correspondência entre o que se mediu e o que encontrou de fontes externas. O modelo físico se mostrou coerente para modelar o fenômenos físicos descritos

## Referência

- 1 - Uriel Tayvah, Jacob A. Spies, Jens Neu, Charles A. Schmuttenmaer. **Nelly: A User-Friendly and Open-Source Implementation of Tree- Based Complex Refractive Index Analysis for Terahertz Spectroscopy**. Analytical Chemistry, 2021
- 2 - M. S. Dresselhaus. **Optical Properties of Solids, Solid State Physics part II**
- 3 - **D. Grischkowsky, S. Keiding, M. van Exter, and C. Fattinger**, J. Opt. Soc. Am. B 7, 2006 (1990)
- 4 - Jens Neua and Charles A. Schmuttenmaer. **Tutorial: An introduction to terahertz time domain spectroscopy (THz-TDS)**
- 5 - M. Naftaly , R.E. Miles. **Terahertz time-domain spectroscopy: A new tool for the study of glasses in the far infrared**. Em: Journal of Non-Crystalline Solids 351 (2005), pp. 3341–3346.