

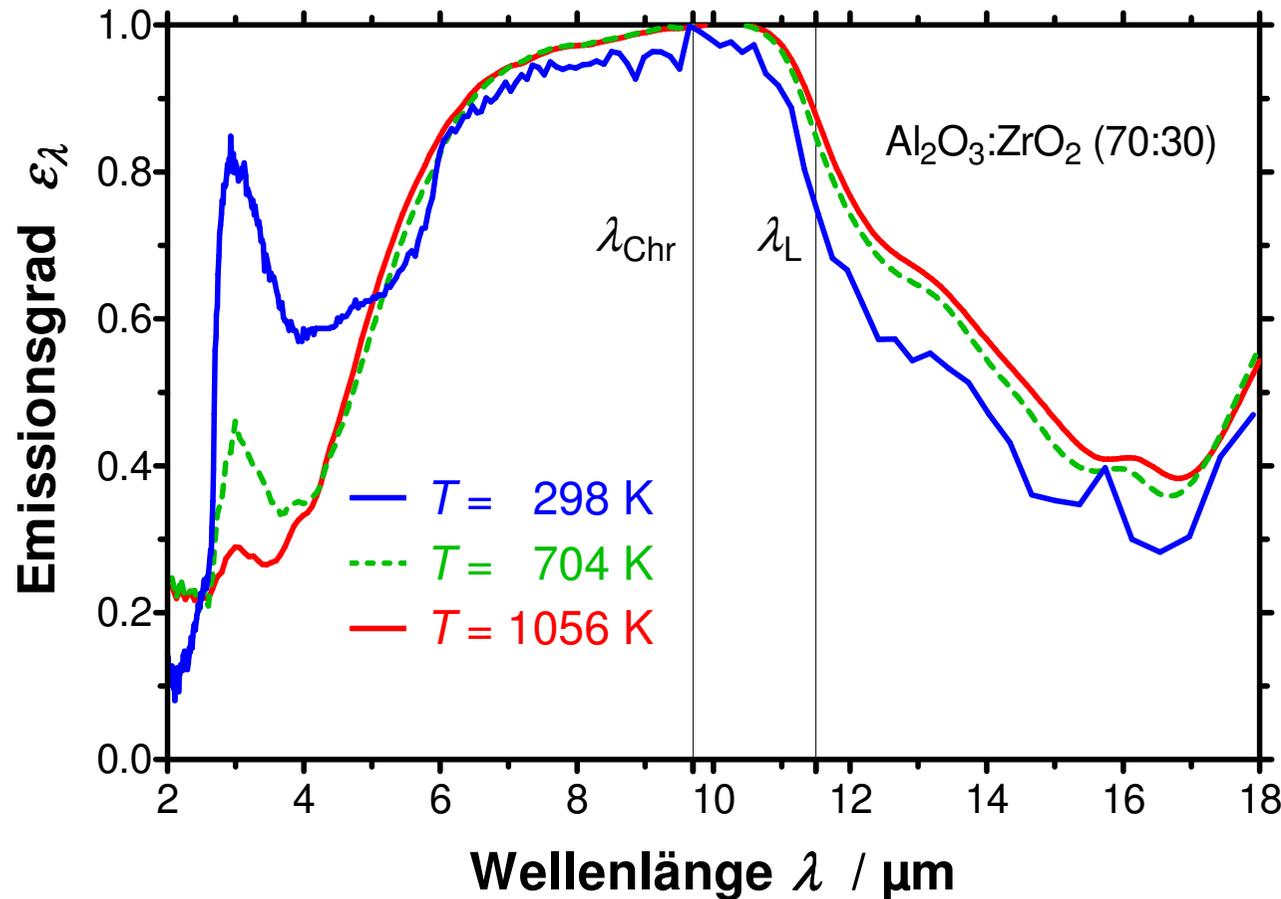
## **Theoretische Modellierung von experimentell ermittelten Infrarot-Spektren**

**M. Manara, M. Arduini-Schuster, N. Wolf, M.H. Keller, M. Rydzek**

**Bayerisches Zentrum für Angewandte Energieforschung (ZAE Bayern)**

- Spektroskopische Charakterisierung von Materialien und Oberflächen  
→ Infrarot-Spektren
  - Interpretation von IR-Spektren zur Erfassung von Materialzusammensetzung, Analyse von chemischen Prozessen, etc.
  - Bestimmung infrarot-optischer und elektronischer Eigenschaften von Dielektrika (z.B. Keramiken), Halbleitern und Metallen sowie Schichtsystemen.
  - Dielektrische Eigenschaften eines Festkörpers → Lorentz-Oszillator-Modell  
Korrelation dielektrische Eigenschaften - Brechungsindex → Maxwell-Relation  
Zusammenhang Brechungsindex - Reflexion/Transmission → Fresnel-Formeln
- ⇒ Theoretische Modellierung von IR-Spektren zur Ermittlung wichtiger Kenngrößen

# Spektraler und temperaturabhängiger Emissionsgrad



Zunahme der Temperatur:

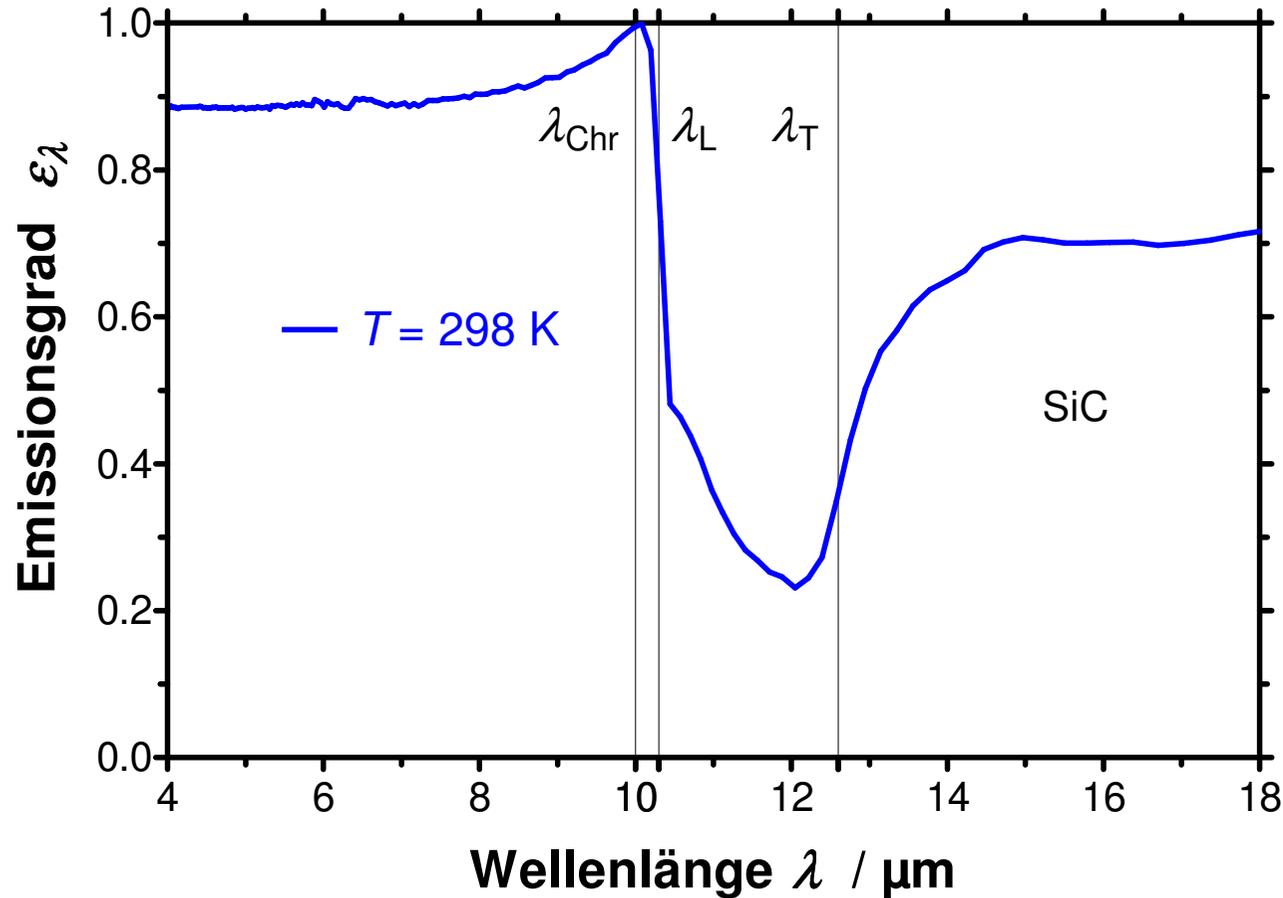
- Desorption von Wasser bei höheren Temperaturen
- Verbreiterung des des zentralen Emissionspeaks

Charakteristische Wellenlängen:

$\lambda_{Chr}$ : Christiansen-Wellenlänge

$\lambda_L$ : Lage der Eigenfrequenz der longitudinalen optischen Schwingung

# Spektraler Emissionsgrad von SiC



Charakteristische Wellenlängen:

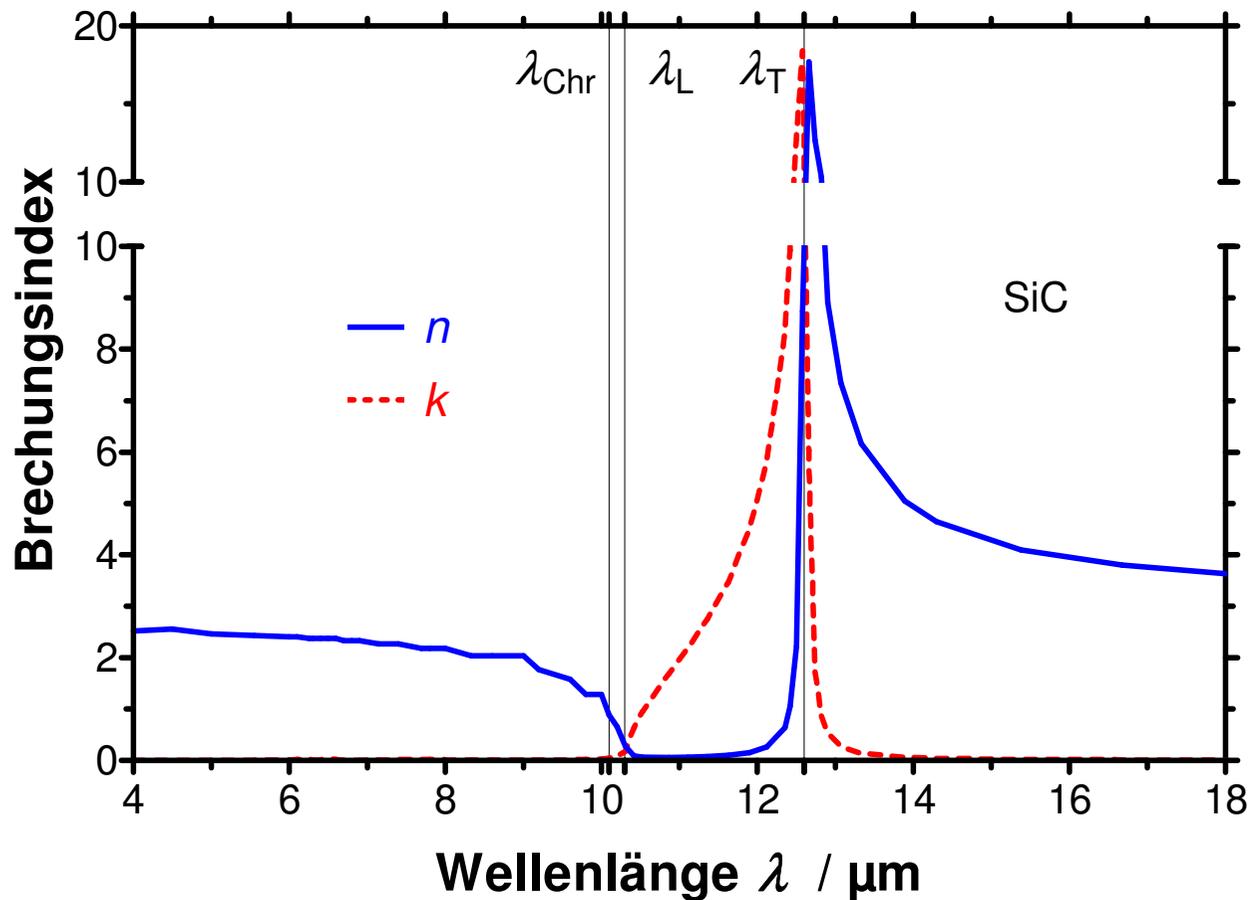
$\lambda_{\text{Chr}}$ : Christiansen-Wellenlänge

$\lambda_L$ : Lage der longitudinalen optischen Eigenschwingung

$\lambda_T$ : Lage der transversalen optischen Eigenschwingung

# Spektraler Brechungsindex von SiC

$$\text{Reflexionsgrad} = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} = 1 - \text{Emissionsgrad}$$



## Charakteristische Wellenlängen:

$\lambda_{\text{Chr}}$ : Christiansen-Wellenlänge

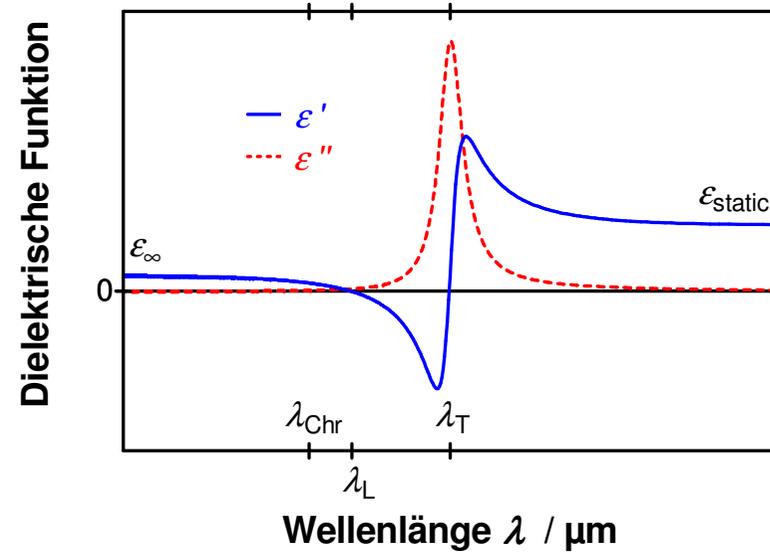
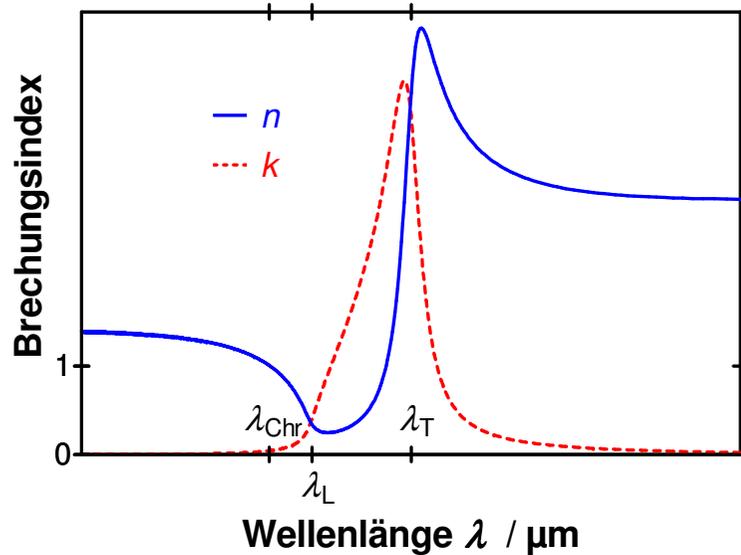
$\lambda_{\text{L}}$ : Lage der longitudinalen optischen Eigenschwingung

$\lambda_{\text{T}}$ : Lage der transversalen optischen Eigenschwingung

# Typischer Verlauf für keramische Materialien



ZAE BAYERN



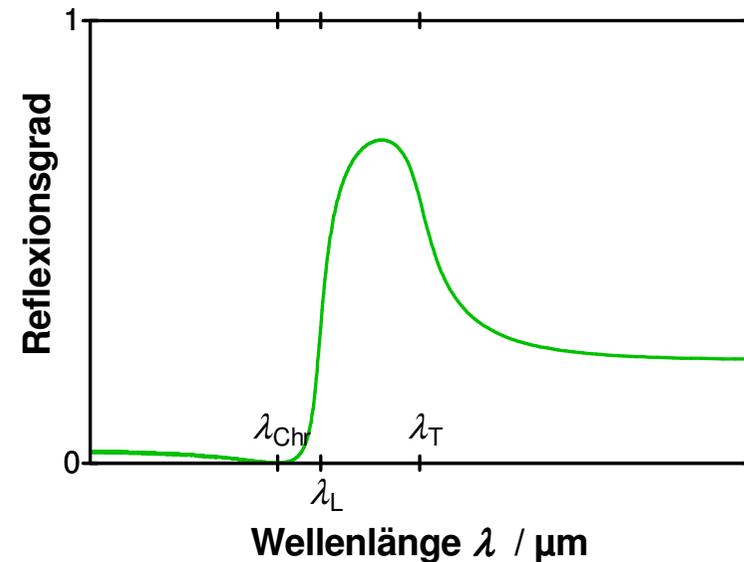
**Brechungsindex:**

→ infrarot-optische Eigenschaften

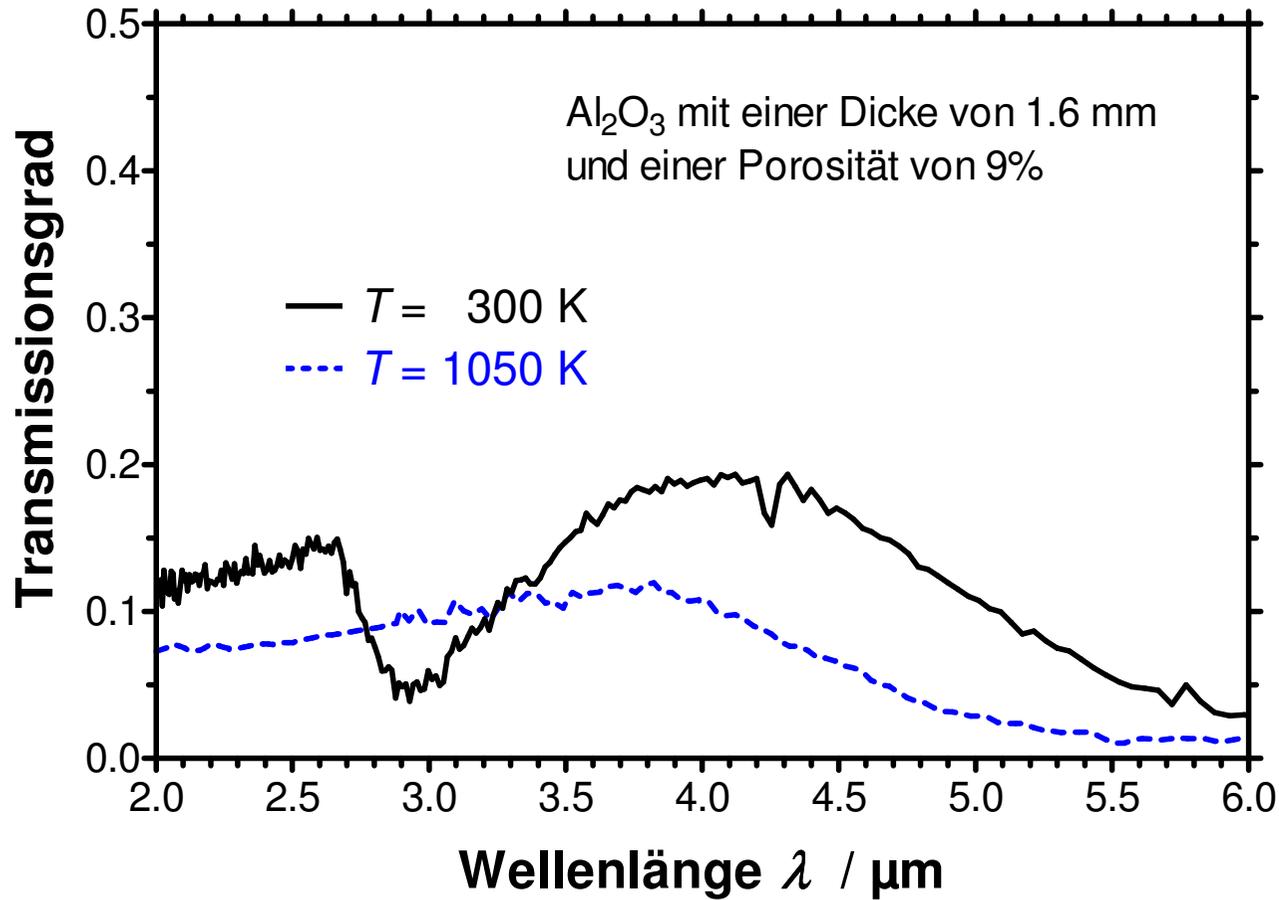
**Dielektrische Funktion:**

→ elektronische Eigenschaften

**verknüpft über Maxwell-Relation**



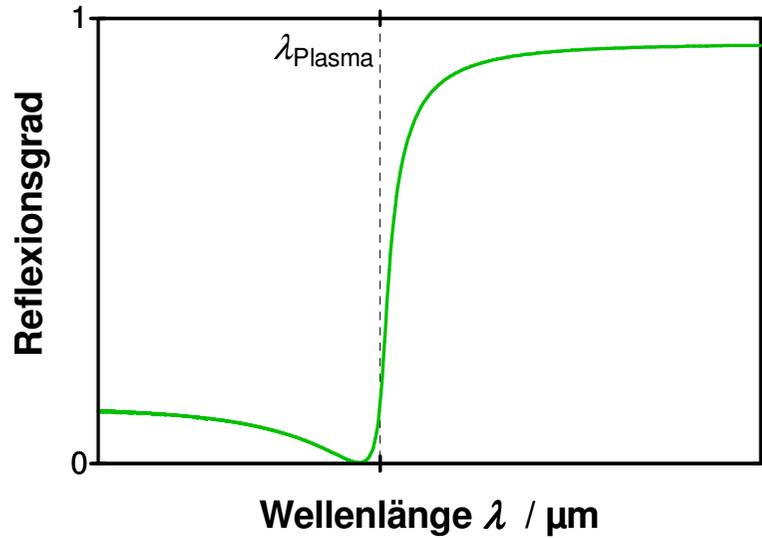
# Spektraler Transmissionsgrad von Aluminiumoxid



**Transmissionsgrad  
im semitransparenten  
Bereich nimmt  
mit zunehmender  
Temperatur ab.**

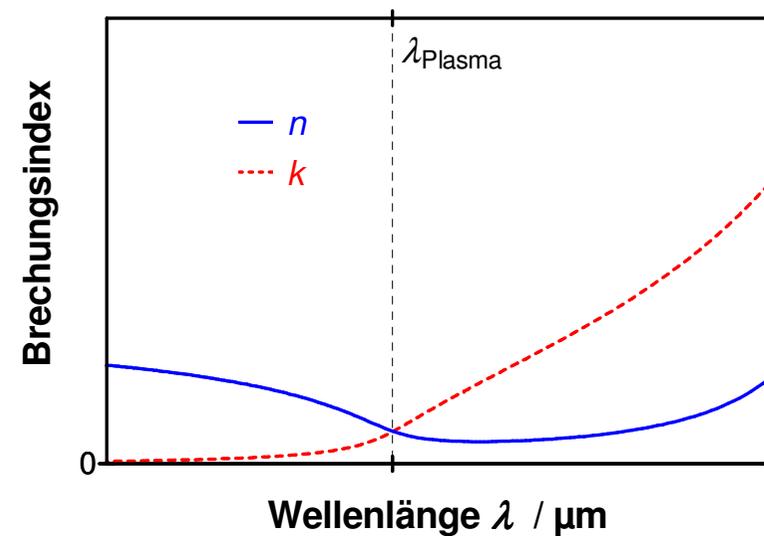
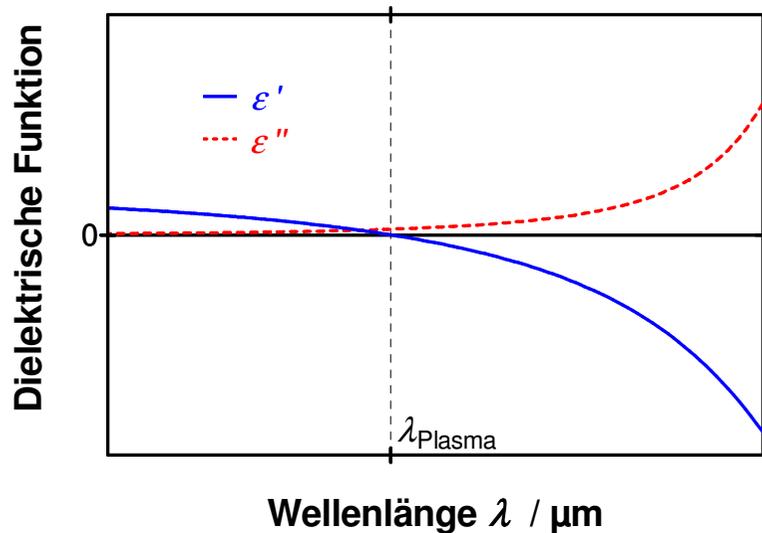
**Reduktion der  
Absorption von  
OH-Gruppen.**

# Infrarot-Spektren von dotierten Halbleitern

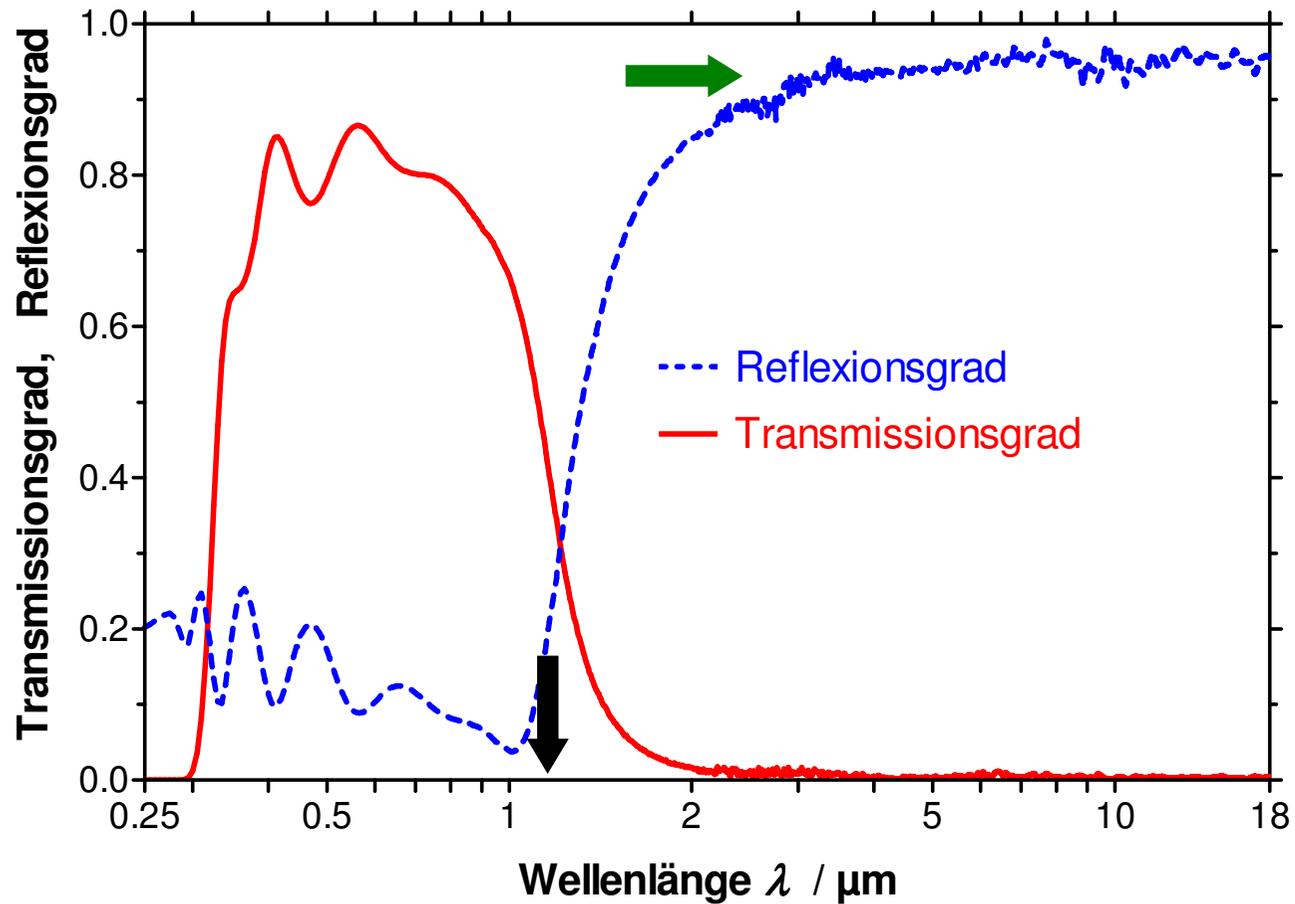


Plasmawellenlänge  $\lambda_{\text{Plasma}}$ :

- hohe Reflexion für  $\lambda > \lambda_{\text{Plasma}}$
- hohe Transmission für  $\lambda < \lambda_{\text{Plasma}}$



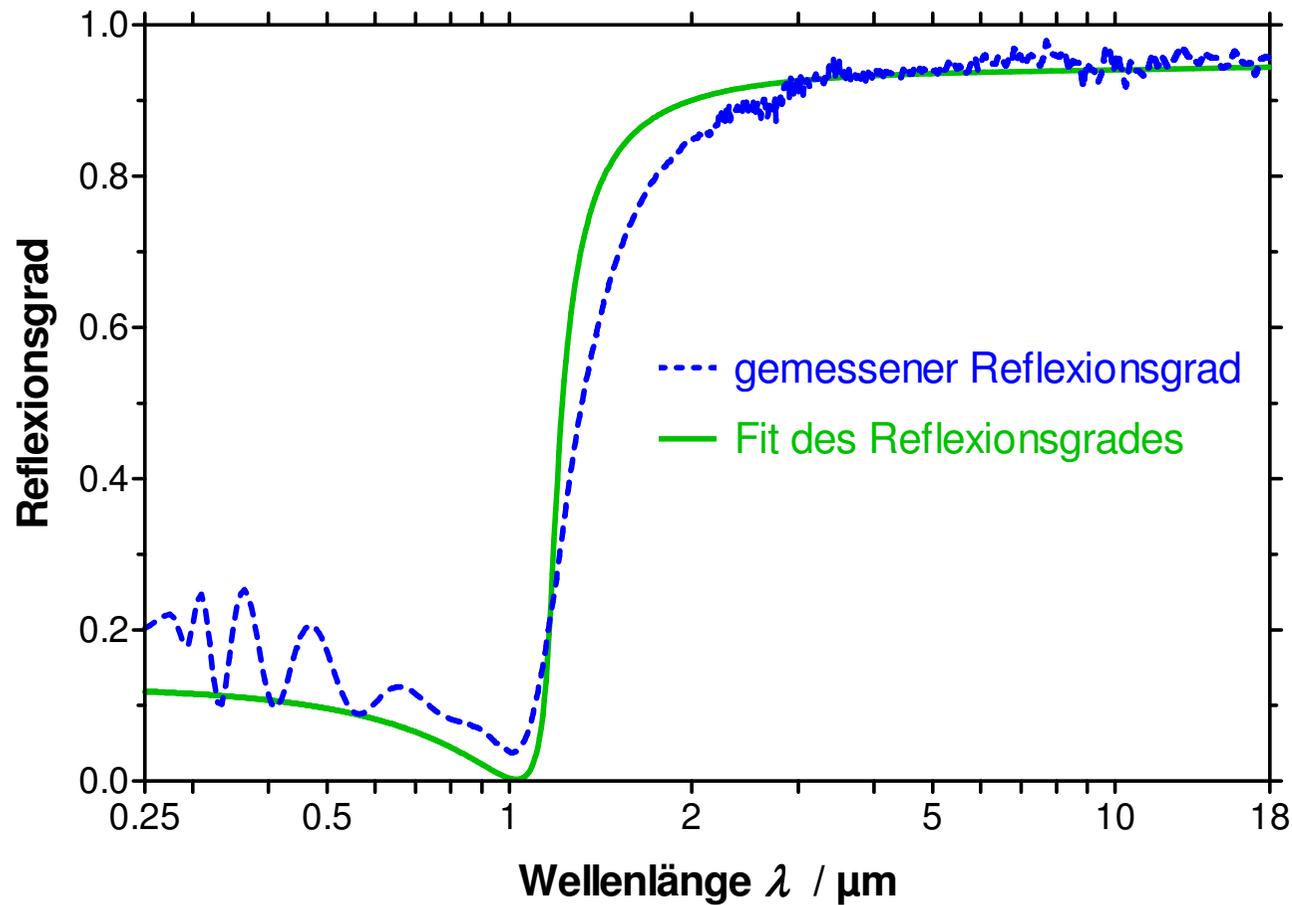
# Zinn-dotierte Indiumoxid-Schicht (ITO) auf Glas



Reflexionsgrad  $\propto$   
el. Leitfähigkeit

$$\lambda_{\text{Plasma}} \propto \frac{1}{\sqrt{N_L}}$$

# Fit des Reflexionsgrades der ITO-Schicht



**Ladungsträgerdichte**

$$N_L = 1 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$$

**Beweglichkeit der  
Ladungsträger**

$$\mu = 47 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$$

**elektrische Leitfähigkeit**

$$\sigma = 7500 \text{ S/cm}$$

**Schichtdicke**

$$d = 0.3 \text{ } \mu\text{m}$$

**Schichtwiderstand**

$$R = 4.4 \text{ } \Omega/\text{sq}$$

- Experimentelle Ermittlung von IR-Spektren
- Theoretische Modellierung der IR-Spektren
- Bestimmung von dielektrischer Funktion und Brechungsindex
- Erfassung charakteristischer Wellenlängen (z.B. Christiansenwellenlänge), elektronischer Kenngrößen (z.B. Ladungsträgerdichte), Schichtparameter (z.B. Dicke der Schicht), etc.
- Weitere Möglichkeiten, wie Analyse von Materialzusammensetzung, etc.



**Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit**

**[manara@zae.uni-wuerzburg.de](mailto:manara@zae.uni-wuerzburg.de)**