CORRIENTE DE ZENER EN SEMICONDUCTORES DE BANDA ESTRECHA

Melquiades de Dios L.
Dpto. de Física Teórica.
Facultad Física-Matemática. Universidad de la Habana

S. D. Beneslaski
Cátedra de bajas temperaturas
Facultad de Física
Universidad Estatal de Moscú

ABSTRACT

The Zener current in narrow-gap semiconductors is studied using the two band Abrikosov-Falkoski model. The exact transition probability through the forbidden band and the number η of electrons per sec per cm^3 leaking from the valence band to the conduction band are obtained. It is shown that η is a complicated function of electric field E. In the classical limit the obtained result becomes the Keldysh's and Kane's result, and in the opposite limit is established that $\eta \sim E^{9/4}$.

RESUMEN

Utilizando el modelo de dos bandas de Abrikosov-Falkoski, se estudia la corriente de Zener en semiconductores de gap-estrecho. Se calcula exactamente la probabilidad de transmisión a través de la banda prohibida y, el número de pares electrón-hueco η generados por el campo eléctrico E por unidad de tiempo en la unidad de volumen. Se demuestra que η depende en forma complicada de E. No obstante esto, en el límite clásico la expresión obtenida coincide con los resultados de Keldysh y Kane y en el límite opuesto se demuestra que $\eta \sim E^{9/4}$

INTRODUCCION

Después de la aparición del diodo-túnel en 1957 [1], al estudio del mismo se ha dedicado una gran cantidad de trabajos teóricos [1-9]. En esencia dos han sido las direcciones de investigación teórica. En una de ellas se utiliza el modelo de Zener del campo uniforme [10-13] y, en la otra, el modelo de Fredkin-Wannier [5-7].

En general, el modelo de Zener se caracteriza por la sencillez y, en el mismo es fundamental el cálculo de la probabilidad de transmisión a través de la banda prohibida. Una de las diferencias entre los análisis de la corriente de Zener está basada en el modelo de banda utilizado. Por ejemplo, frecuentemente utilizado es el modelo de dos bandas de Kane [14].

Por otro lado, en los últimos años ha provocado gran interés la obtención de junturas p-n sobre la base de los semiconductores de banda estrecha $Pb_{1-x}Sn_xTe$, $Pb_{1-x}Sn_xSe$ y PbS, así como el estudio del comportamiento de estos materiales y las aleaciones semiconductoras $Bi_{1-x}Sb_x$ bajo la acción de campos eléctricos uniformes. Este hecho y, los avances logrados en los últimos años en el estudio de las estructuras de banda de tales materiales, hacen actual el estudio de la corriente de Zener en los mismos.

El objetivo fundamental del presente trabajo es el estudio de dicha corriente utilizando el modelo de dos bandas de Abrikosov-Falkoski (AF) [15-16] . Tal modelo, elaborado por dichos autores para explicar el espectro energético de los cuasielipsoides asociados a los electrones en el Bi, también puede ser utilizado para describir satisfactoriamente los espectros energéticos de los semiconductores especificados arriba [17] .

En el epígrafe 2 del presente trabajo se considera la resolución de la ecuación de masa efectiva del electrón en presencia de un campo eléctrico uniforme. En el epígrafe 3 se calcula el coeficiente de transmisión a través de la banda prohibida y, el número de pares electrón-hueco generados por el campo eléctrico en la unidad de volumen y por unidad de tiempo. En el epígrafe 4 se hace un breve resumen de los resultados obtenidos y se expresan las conclusiones del trabajo.

2. RESOLUCION EXACTA DE LA ECUACION DE MASA EFECTIVA

Es bien conocido [18-19] que en los materiales considerados en este trabajo la superficie de Fermi de los mismos está formada por

más de una superficie cerrada (cuasielipsoides), obteniéndose una de otra por transformaciones de simetría. Así, cada uno de estos cuasielipsoides dará su contribución a la corriente de Zener. En las aleaciones $Pb_{1-x}Sn_xTe$ y $Bi_{1-x}Sb_x$ las masas efectivas en una dirección, que escogeremos a lo largo del eje Z, son varios órdenes de magnitud mayores que en las restantes direcciones. Esto significa que si el campo eléctrico en uno de los cuasielipsoides se escoge perpendicular a dicha dirección, la contribución a la corriente de Zener de los restantes cuasielipsoides se puede despreciar frente a la contribución del primero. Aunque en los otros dos materiales hay que tener en cuenta la contribución de todos sus cuasielipsoides, en este trabajo sólo calcularemos la contribución de uno de ellos.

De esta forma, en presencia de un campo eléctrico uniforme E a lo largo del eje X, la ecuación de movimiento del electrón en la aproximación de masa efectiva y, en los marcos del modelo de dos bandas de AF tienen la forma:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}\mathcal{E}_g + \frac{1}{2M_1}\hat{k}_z^2 + V(x) & i v_x \hat{k}_x + v_y \hat{k}_y \\ -i v_x \hat{k}_x + v_y \hat{k}_y & -\frac{1}{2}\mathcal{E}_g - \frac{1}{2M_2}\hat{k}_z^2 + V(x) \end{bmatrix} F(\vec{r}) = E\, F(\vec{r}) \qquad (1)$$

donde E es la energía del electrón, V(x)=eEX=FX, Eg- el ancho de la banda prohibida; M_1 y M_2 masas efectivas, las cuales por orden de magnitud son próximas a la masa del electrón libre; V_x y V_y velocidades características de los electrones del orden de 10^8 cm/seg; $\hat{\vec{k}} = -i\partial/\partial\vec{r}$ con $\hbar = 1$; $F(\vec{r})$ la función de onda del electrón, la cual tiene dos componentes F_1 y F_2 .

En el caso considerado los componentes del cuasi-impulso K_y y K_z se conservan y, la función de onda del electrón se puede buscar de la forma $f(x)\exp i[yk_y+Zk_z]$. Sustituyendo esta función en (1) se obtiene una ecuación para $f(x)$, la cual ante la transformación unitaria $\phi = 1/\sqrt{2}\begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1\end{pmatrix} F$ y el cambio de variable $\xi = x - (E - k_z^2/2\mu)/F$ toma la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} \hat{k}_\xi + \lambda\xi & V_0/v_x \\ V_0^*/v_x & -\hat{k}_\xi + \lambda\xi \end{bmatrix} \phi(\xi) = 0$$

donde

$$\hat{k}_\xi = -i\frac{d}{d\xi}\ ;\ \lambda = F/v_x\ ;\ V_0 = v_y k_y - i\left(\tfrac{1}{2}\varepsilon_g + \frac{k_z^2}{2M}\right) \tag{2}$$

$$\mu^{-1} = M_1^{-1} - M_2^{-1}\ ;\quad M^{-1} = M_1^{-1} + M_2^{-1}$$

Analizando un modelo simple de semiconductor unidimensional en presencia de un campo eléctrico uniforme, Kane [20] resolvió exactamente una ecuación análoga a (2) en la representación del cuasi-impulso. Para resolver (2) seguiremos el método de Kane, pero en la

representación de coordenada.

Del sistema de ecuaciones (2) no es difícil excluir la segunda componente ϕ_2, obteniéndose para ϕ_1, la siguiente ecuación.

$$\frac{d^2\phi_1}{d\tau^2} + \left[\frac{1}{2} + i\alpha - \frac{\tau^2}{4}\right]\phi_1 = 0$$

donde $\tau = \xi\sqrt{2\lambda i}$ y $\alpha = |V_0|^2/2\lambda v_x^2$ (3)

La solución general de esta ecuación se puede escribir a través de las funciones de Weber [21] $D_n(\tau)$

$$\phi_1(\tau) = a\,D_{i\alpha}(\tau) + b\,D_{i\alpha}(-\tau) \tag{4}$$

siendo a y b consonantes arbitrarias.

Con ayuda de una de las ecuaciones del sistema (2) y de la fórmula (4) no es difícil demostrar que:

$$\phi_2(\tau) = -\frac{v_x}{V_0}\alpha\sqrt{2\lambda i}\left[a\,D_{i\alpha-1}(\tau) - b\,D_{i\alpha-1}(-\tau)\right] \tag{5}$$

Así, hemos encontrado las soluciones exactas de la ecuación (1). Las constantes a y b se determinan por las condiciones físicas del problema.

3.- COEFICIENTE DE TRANSMISION Y CORRIENTE DE ZENER

Para el cálculo del coeficiente de transmisión D a través de la banda prohibida, es necesario calcular la densidad de corriente de probabilidad $j(\xi)$ para $\xi \to \pm\infty$ y suponer, por ejemplo, que el electrón incidente se mueve de derecha a izquierda. Bajo tal suposición, para $\xi \to \infty$ hay dos densidades de corriente de probabilidad, correspondientes a las ondas incidente y reflejada y, para $\xi \to -\infty$ hay una corriente, correspondiente a la onda transmitida.

La expresión general para $j(\xi)$ puede ser obtenida de la ecuación (2) derivando la ley de conservación de la densidad de corriente de probabilidad. Dicha ley tiene la forma:

$$v_x \phi^+ \sigma_z \phi = v_x \phi^+ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \phi = cte \qquad (6)$$

y, permite definir a $j(\xi)$ por la fórmula

$$j(\xi) = v_x \phi^+ \sigma_z \phi \qquad (7)$$

Para el cálculo de $j(\xi)$ para $\xi \to \pm\infty$ es necesario conocer a ϕ_1 y ϕ_2 para $\xi \to \pm\infty$. Utilizando las fórmulas para el comportamiento de las funciones de Weber [21] no es difícil demostrar que para $\xi \to \infty$

$$\phi_1(\xi) \approx h(\xi)\left[a \exp\left(-\frac{\pi\alpha}{4}\right) + b \exp\left(\frac{3\pi\alpha}{4}\right)\right]$$

$$\phi_2(\xi) \approx \frac{b v_x}{V_0} \frac{\alpha\sqrt{2\lambda i}\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1-i\alpha)} \exp\left(\frac{\pi\alpha}{4}\right) h^*(\xi) \qquad (8)$$

y para $\xi \to -\infty$

$$\phi_1(\xi) \approx h(|\xi|)\left[a \exp\left(\frac{3\pi\alpha}{4}\right) + b \exp\left(-\frac{\pi\alpha}{4}\right)\right]$$

$$\phi_2(\xi) \approx -a \frac{v_x}{V_0} \alpha \sqrt{2\lambda i}\sqrt{2\pi} \exp\left(\frac{\pi\alpha}{4}\right) h^*(|\xi|) / \Gamma(1-i\alpha) \qquad (9)$$

donde $\Gamma(1-i\alpha)$ es la función gamma y

$$h(\xi) = \exp i\left\{\alpha \ln\left(\xi\sqrt{2\lambda}\right) - \frac{\lambda}{2}\xi^2\right\} \qquad (10)$$

sustituyendo (8), (9) y (10) en (7) se obtiene:

$$j(+\infty) = 2v_x \left| a e^{-\frac{\pi\alpha}{4}} + b e^{\frac{3\pi\alpha}{4}} \right| - 2v_x |b|^2 |r|^2 \qquad (11)$$

y

$$j(-\infty) = 2v_x \left| a e^{\frac{3\pi\alpha}{4}} + b e^{-\frac{\pi\alpha}{4}} \right| - 2v_x |a|^2 |r|^2 \qquad (12)$$

donde

$$r = \frac{v_x}{V_0} \alpha \sqrt{2\lambda i} \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1-i\alpha)} \exp\left(\frac{\pi\alpha}{4}\right) \qquad (13)$$

Teniendo ahora en cuenta que para $\xi \to -\infty$ sólo puede haber una onda que se mueva hacia la izquierda, de (12) sigue que $a \exp\left(\frac{3\pi\alpha}{4}\right) + b \exp\left(-\frac{\pi\alpha}{4}\right) = 0$. De aquí sigue $a/b = \exp(-\pi\alpha)$. Si j_i y j_t representan las ondas incidente y transmitida respectivamente, de (11) y (12) se obtiene

$$j_i = -2 v_x |b|^2 |\tau|^2 ; \quad j_t = -2 v_x |a|^2 |\tau|^2 \qquad (15)$$

Por tanto
$$D = \left|\frac{j_i}{j_t}\right| = \left|\frac{a}{b}\right|^2 = \exp(-2\pi\alpha) \qquad (16)$$

donde

$$\alpha = \frac{\hbar^2 v_y^2 k_y^2 + \left(\frac{1}{2}\varepsilon_g + \hbar^2 k_z^2/2M\right)^2}{2\hbar v_x F} \qquad (17)$$

Como se observa en (16) y (17), D se expresa explícitamente a través de los componentes transversales del cuasi-impulso. En [20] Kane obtuvo una fórmula análoga a (16), pero en tal fórmula D no depende de K_y y K_z debido a que en ese trabajo se consideró el caso de un semiconductor unidimensional.

Es interesante señalar que el coeficiente de transmisión exacto (16) coincide con el cuasiclásico [17] .

Así, ahora es posible calcular el número n de electrones que pasa a la zona de conductividad en la unidad de volumen por unidad de tiempo. Para ello supondremos que la zona de valencia está llena y la zona de conductividad vacía, entonces n se calcula por medio de la fórmula [12] .

$$n = \frac{2F}{(2\pi\hbar)} \int_{-\infty}^{\infty} D(k_y, k_z) \frac{dk_y\, dk_z}{(2\pi)^2} \qquad (18)$$

Sustituyendo (16) y (17) en (18) se obtiene:

$$n = \frac{4F}{\hbar(2\pi)^3} \sqrt{\frac{v_x F}{\hbar v_y^2}} \sqrt[4]{\frac{16 M^2 v_x F}{\pi \hbar^3}}\, I(\gamma) \qquad (19)$$

donde

$$I(\gamma) = 2^{-3/2}\, \gamma\, e^{-\frac{1}{2}\gamma^4} K_{1/4}\left(\tfrac{1}{2}\gamma^4\right) \qquad (20)$$

y $\gamma^2 = \frac{1}{2}\varepsilon_g \sqrt{\pi/\hbar v_x F}$, además $K_{1/4}$ $(\frac{1}{2}\gamma^4)$ es la función de Mac Donald de orden 1/4.

Como se observa en (19) y (20) el número n de electrones de una forma complicada depende del campo eléctrico E y del ancho de la banda prohibida Eg. Este es un resultado interesante y nuevo, pues es válido para todos los posibles valores de E. En la fórmula (19) es importante considerar los siguientes casos límites: (1) $\frac{1}{2}\gamma^4 \gg 1$, es decir, el caso cuasiclásico y (2) $\frac{1}{2}\gamma^4 \ll 1$.

En el primer caso $K_{1/4}\left(\frac{1}{2}\gamma^4\right) \approx \sqrt{\frac{\pi}{\gamma^4}}\, \exp\left(-\frac{\gamma^4}{2}\right)$ y n en (19) toma la forma:

$$\eta=\left(\frac{v_x}{v_y}\right)\sqrt{\frac{M}{\mathcal{E}_g}}\,\frac{F^2}{2\pi^3\hbar^2}\,e^{-\frac{\pi\mathcal{E}_g^2}{4\hbar v_x F}} \qquad (21)$$

esto es, si obtiene el mismo resultado de Keldysh [12] y Kane [13].

Si se define $\tilde{F}=\pi\mathcal{E}_g^2/4\hbar v_x$, la fórmula (21) es válida para $F\ll\tilde{F}$. Para $Eg=10^{-2}$eV y $V_x\approx10^8$ cm/seg., $\tilde{F}\approx10^3$ eV/cm., para $Eg=10^{-3}$eV, $\tilde{F}\approx 10$ eV/cm

Lo cual señala que en los semiconductores de banda estrecha la aproximación cuasiclásica se puede aplicar en su amplio rango de valores del campo eléctrico.

Estimemos ahora el orden de magnitud de la corriente asociada a la fórmula (21) cuando la longitud de la muestra es $L\approx10^{-1}$cm y Eg. toma los valores 10^{-2}eV y 10^{-3}eV respectivamente. Si en esta fórmula $V_x\approx V_y\approx10^8$ cm/seg. $M\approx\frac{m_e}{2}$, donde m_e es la masa del electrón libre y $Eg=10^{-2}$eV, entonces para $F=10^2$ eV/cm se obtiene $j\approx100$ A/cm^2, para $F=80$ eV/cm $j\approx10$ A/cm^2 y para $F=50$ eV/cm $j\approx10^{-3}$ A/cm^2. Para $Eg=10^{-3}$ eV y $F=2$ eV/cm $j\approx10$ A/cm^2; para $F=1$ eV/cm $j\approx(10^{-1}-10^{-2})$ A/cm^2.

Más adelante, en el segundo caso $K_{1/4}\left(\frac{1}{2}\gamma^4\right)\approx\pi/\gamma\,\Gamma(3/4)$ y n en (19) toma la forma;

$$\eta=\frac{2\Gamma(1/4)}{(2\pi)^3\hbar^2}\left(\frac{v_x}{v_y}\right)\sqrt[4]{\frac{M^2}{\pi\hbar v_x}}\,F^{7/4} \qquad (22)$$

Esta fórmula es válida para $F\gg\tilde{F}$, no depende de Eg y se aplica también a los semiconductores de gap nulo.

Para una muestra de longitud $L\approx10^{-1}$cm.

$$j\approx10^2F^{7/4}\ A/cm^2 \qquad (23)$$

En esta fórmula F se expresa en eV/cm. Como esta fórmula se aplica para $F\gg\tilde{F}=\pi\mathcal{E}_g^2/4\hbar v_x$, mientras más pequeño es el gap, más pequeño puede ser escogido F. Para el caso en que Eg=0 la fórmula (23) se puede aplicar para casi todos los valores posibles del campo eléctrico. En particular, para $F=1$ eV/cm^2 $j\approx10^2$ A/cm^2.

Por tanto, en semiconductores de gap nulo la corriente de Esaki es importante para campos eléctricos muy pequeños.

4. RESUMEN Y CONCLUSIONES

El problema del comportamiento de semiconductores de banda estrecha en presencia de un campo eléctrico uniforme se ha considerado en la aproximación de masa efectiva y, en los marcos del modelo de AF. Supusimos que el campo eléctrico estaba aplicado en la dirección X donde la masa efectiva era pequeña. Idénticos resultados, por tanto, se obtiene a lo largo del eje y. En la dirección X se obtuvo una expresión exacta para el coeficiente de transmisión que, como se demostró en [17], coincide con la cuasiclásica.

Después se calculó una expresión exacta para la corriente de Zener, válida para todos los valores posibles del campo eléctrico y del gap. En cuanto nos es conocido, tal expresión no ha sido obtenida antes. Se demuestra que el resultado clásico de Keldysh y Kane es válido en la aproximación cuasiclásica. Se obtiene la corriente de Zener para semiconductores de gap muy pequeño y, se demuestra que es importante para valores muy pequeños del campo eléctrico.

Es importante señalar lo siguiente: el modelo de Kane [14] conduce, en la aproximación cuasiclásica, al resultado clásico de Keldysh y Kane, en el límite opuesto a que el número de electrones n es proporcional a F^2. Es decir, aunque en la aproximación cuasiclásica los dos modelos conducen al mismo resultado, para el caso de semiconductores de gap nulo conducen a resultados diferentes.

BIBLIOGRAFIA

1. L. Esaki, Phys Rev. 109, 603 (1957)
2. I. I. Ivanchik, Fiz Tverd. Tela 3,103 (1961)
3. E. O. Kane, J. Appl Phys 32,83 (1961)
4. E. O. Kane, Phys Rev. 131,79 (1963)
5. D. R. Fredkin and G. Wannier, Phys Rev. 128, 2054 (1962)
6. R. T. Shuey, Phys Rev. 137, A. 1268 (1965)
7. Y. Takenti, H. Funada, J. Phys Soc. Japan 20, 1854 (1965)

8. C. B. Duke, Solid State Phys, Suppl, 10 Academic Press, NY 1969
9. H. J. Wunsche, K. Henneberger Phys Stat. Sol. (b) 73,245 (1976)
10. C. Zener, Proc. Roy Soc. A 145, 523 (1934)
11. W. V. Houston, Phys Rev. 57, 184 (1940)
12. L. W. Keldysh, Zh Eksper. Teor. Fiz 33,994 (1957)
13. E. O. Kane, J. Phys Chem Solids 12, 181 (1959)
14. E. O. Kane, Phys Chem. Solids 1,249 (1957)
15. A. A. Abrikosov, J. Low Temp. Phys 8,315 (1972)
16. S. D. Beneslaski, L. A. Falkoski, Fiz Tverd Tela 16,1360 (1974)
17. Melquiades de Dios L., Tesis de Candidatura, Universidad Estatal de Moscú
18. L. A. Falkoski, Usp. Fiz Nauk 94,3 (1968)
19. I. M. Tsidilkovski, "Zonnaia Structura poluprovodnikov", Nauka Moscú, 1978.
20. E. O. Kane, E. I. Blount, Tunnelnie Iavleniia V. Tverdyx Telax, Mir, Moscú, 1973 (traducción del inglés al ruso)
21. E. T. Whittaker, G. N. Watson, "A Course of Modern Analysis", Cambridge, 1962