

FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE LOS ELECTRONES EN LOS SEMICONDUCTORES

F. Comas y C. Trallero
Dpto. Fís. Teórica
Universidad de la Habana

RESUMEN

Se discute la función de distribución electrónica (FDE) para el desequilibrio en la banda de conducción de un semiconductor, suponiendo que el mecanismo fundamental de relajación es la interacción electrón-fonón LA. Se comprueba que la FDE satisface una ecuación de Fokker-Planck y se hallan soluciones aproximadas de esa ecuación.

ABSTRACT

Non equilibrium electron distribution function (EDF) is discussed for semiconductor conduction band, assuming electron-LA-phonon interaction as the main relaxation mechanism. It is proved that EDF satisfies Fokker-Planck equation and approximate solutions of this equation are found.

INTRODUCCIÓN

Recientemente se ha prestado cierta atención al estudio experimental y teórico de la distribución energética de los electrones en los semiconductores y, en especial, al proceso de relajación de los mismos en la banda de conducción, [1-7]. Por otra parte se ha investigado la evolución temporal de la función de distribución electrónica (FDE) de electrones fotoexcitados mediante un laser de pulsos hacia la banda de conducción de un semiconductor bajo la condición del "límite cuántico" [8-9]. En términos generales la FDE en un semiconductor es una magnitud importante, necesaria para la investigación de diversos efectos, como la dispersión Raman electrónica, el proceso de relajación electrónico, la energía media electrónica en la banda, etc.

ECUACIÓN DE FOKKER-PLANCK PARA $P(\epsilon, t)$

Supongamos los fonones LA dentro del modelo isotrópico cuasicontinuo de Debye con una ley de dispersión dada por $\omega_q = S q$, siendo S la velocidad del sonido y q el vector de onda. Usando la "Regla de Oro" de Fermi se puede demostrar que:

$$\begin{aligned} W'(\epsilon, \epsilon') = & \frac{D}{\epsilon'} \left\{ (\epsilon' - \epsilon)^2 N(\epsilon' - \epsilon) \Theta(\epsilon' - \epsilon) \Theta(\epsilon + - \epsilon) + \right. \\ & \left. + (\epsilon - \epsilon')^2 [N(\epsilon - \epsilon') + 1] \Theta(\epsilon - \epsilon') \Theta(\epsilon' - \epsilon) \right\} \quad (2) \end{aligned}$$

donde $D = \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{E_c^2}{4\pi\rho S^4 k^4}$; $N(\epsilon) = \left(e^{\frac{\epsilon}{k_b T}} - 1 \right)^{-1}$;

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}; \quad \epsilon \pm = \left(\epsilon \pm \sqrt{2ms^2} \right)^2$$

donde ρ es la densidad del material, E_c es la constante del potencial de deformación para la interacción electrón-fonón LA y m la masa efectiva del electrón en la banda de conducción (que se supone isotrópica y parabólica). La correspondiente fórmula para $W'(\epsilon', \epsilon)$ puede obtenerse de (2) por consideraciones de simetría.

Por ejemplo, debe cumplirse que:

$$W'(\epsilon', \epsilon) = \sqrt{\frac{\epsilon'}{\epsilon}} \exp \left[\frac{\epsilon' - \epsilon}{k_b T} \right] W'(\epsilon, \epsilon').$$

En la determinación de la FDE es necesario conocer la dinámica del electrón en la banda, la cual depende a su vez de las condiciones físicas del sistema estudiado. Usualmente se requiere considerar la dispersión de los electrones por impurezas, defectos de la red cristalina, fonones, etc, así como el proceso de recombinación del electrón con el hueco. La complejidad del problema de la determinación de la FDE depende sustancialmente de la situación física concreta que se analice.

Por ejemplo, la presencia de un campo magnético aplicado permite, bajo ciertas condiciones, despreciar la interacción electrón-electrón aún para altas concentraciones electrónicas [10] .

En el presente trabajo se supone una concentración electrónica baja y se usa una aproximación cuasiclásica para la FDE. El semiconductor se supone limpio de impurezas y libre de defectos, de forma tal que la dinámica del electrón en la banda está dada por la interacción electrón-fonón. La FDE no es de equilibrio, ya que se supone que los electrones son continuamente inyectados a la banda con una rapidez W_p , donde W_p es la probabilidad en la unidad de tiempo de creación de electrones en la banda de conducción mediante absorción de fotones u otro mecanismo de excitación. Considerando que el tiempo de recombinación de los electrones es mucho mayor que el

tiempo de relajación en la banda, tendremos que la FDE satisface la ecuación del balance cinético:

$$\frac{\partial P(\epsilon, t)}{\partial t} = \int W(\epsilon', \epsilon) P(\epsilon', t) d\epsilon' - \int W(\epsilon, \epsilon') P(\epsilon, t) d\epsilon' + W_p \delta(\epsilon - \epsilon_0) \quad (1)$$

donde $P(\epsilon, t)$ es la concentración de electrones en la banda en el instante t con energías en el intervalo $(\epsilon, \epsilon + d\epsilon)$, $W(\epsilon', \epsilon)$, es la probabilidad en la unidad de tiempo de las transiciones electrónicas intrabanda del tipo $\epsilon' \rightarrow \epsilon$, inducidas por la interacción electrón-fonón.

Los fonones forman un termostato en equilibrio a la temperatura T y se considera interacción únicamente con los fonones LA en la aproximación del potencial de deformación. La interacción con otro tipo de fonones se supone muy débil y se desprecia. En el caso particular de un semiconductor polar, donde la interacción más fuerte es con los fonones LO, existe un rango de energías y temperaturas $(0 < \epsilon < \hbar \omega_{LO}, k_B T \ll \hbar \omega_{LO})$ para el cual la interacción electrón-fonón LO no interviene y el mecanismo principal de relajación es la interacción electrón-fonón LA.

El objetivo fundamental del presente artículo es obtener la FDE considerando la interacción electrón-fonón LA en la aproximación del potencial de deformación mediante solución de la ecuación de Balance Cinético (1).

La magnitud m_s^2 es usualmente pequeña en comparación con las energías típicas del electrón en la banda y la energía intercambiada en cada acto elemental de interacción electrón-fonón LA puede considerarse pequeña. Ello sugiere que la ecuación (1) sea aproximada mediante una ecuación de Fokker-Planck. Con ese fin se introduce la función de prueba $\phi(\epsilon)$ en todo arbitraria salvo que ella y sus derivadas en los distintos órdenes se anulan para $\epsilon = \pm\infty$. Transformaremos la ecuación (1) en la siguiente ecuación:

$$\int \frac{\partial P(\epsilon, t)}{\partial t} \phi(\epsilon) d\epsilon = \int W(\epsilon', \epsilon) P(\epsilon', t) \phi(\epsilon) d\epsilon d\epsilon' - \int W(\epsilon, \epsilon') P(\epsilon, t) \phi(\epsilon) d\epsilon d\epsilon' + W_E \int \delta(\epsilon - \epsilon_0) \phi(\epsilon) d\epsilon \quad (3)$$

Desarrollando $\phi(\epsilon)$ en serie de Taylor alrededor de ϵ' hasta un segundo orden en la primera integral a la derecha de (3) se obtiene:

$$\int \frac{\partial P}{\partial t} \phi d\epsilon = \iint W(\epsilon', \epsilon) (\epsilon - \epsilon') P(\epsilon', t) \phi(\epsilon) d\epsilon' d\epsilon + \iint W(\epsilon', \epsilon) \frac{(\epsilon - \epsilon')^2}{2} P(\epsilon', t) \phi''(\epsilon) d\epsilon' d\epsilon + W_E \int \delta(\epsilon - \epsilon_0) \phi(\epsilon) d\epsilon \quad (4)$$

Introduciendo los momentos de 1ro. y 2do. orden en la energía:

$$a(\epsilon) = \int W(\epsilon, \epsilon') (\epsilon' - \epsilon) d\epsilon' \quad (5)$$

$$b(\epsilon) = \frac{1}{2} \int W(\epsilon, \epsilon') (\epsilon' - \epsilon)^2 d\epsilon'$$

la ecuación (4) pasa a la forma:

$$\int \frac{\partial P}{\partial t} \phi d\epsilon = \int a P \phi' d\epsilon + \int b P \phi'' d\epsilon + W_E \int \delta(\epsilon - \epsilon_0) \phi d\epsilon \quad (6)$$

Mediante integración por partes en la 1ra. y 2da. integral a la derecha de (6) y usando las propiedades admitidas para $\phi(\epsilon)$ se obtiene la siguiente ecuación de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left\{ a P - \frac{\partial}{\partial \epsilon} (b P) \right\} = W_E \delta(\epsilon - \epsilon_0) \quad (7)$$

Para el sistema de electrones conviene introducir la función $f(\epsilon, t)$ definida por:

$$P(\epsilon, t) = g(\epsilon) f(\epsilon, t) \quad (8)$$

donde

$$g(\epsilon) = \sqrt{\frac{2m^3 \epsilon}{\pi^2 \hbar^3}}$$

es la densidad de estados electrónicos en la banda de conducción.

Usando (8) la ecuación (7) se lleva a la forma:

$$g(\epsilon) \frac{\partial f(\epsilon, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \epsilon} J(\epsilon, t) = W_L \delta(\epsilon - \epsilon_0) \quad (9)$$

donde

$$J(\epsilon, t) = g(\epsilon) a(\epsilon) f(\epsilon, t) - \frac{\partial}{\partial \epsilon} [g(\epsilon) b(\epsilon) f(\epsilon, t)] \quad (10)$$

La ecuación (9) es una típica ecuación de continuidad en el espacio de las energías con una "densidad de corriente" definida por (10).

En el caso estacionario $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ y (9) queda en la forma:

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} J(\epsilon) = W_L \delta(\epsilon - \epsilon_0) \quad (11)$$

En el equilibrio termodinámico a la temperatura T se cumple que:

$$f \rightarrow e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}} \quad \text{y} \quad J(\epsilon) \rightarrow 0$$

De aquí se obtiene que:

$$J(\epsilon) = -B(\epsilon) \left[f(\epsilon) + k_B T \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right] \quad (12)$$

con

$$B(\epsilon) = \frac{\partial}{\partial \epsilon} [g(\epsilon) b(\epsilon)] - g(\epsilon) a(\epsilon) \quad (13)$$

La ecuación (11) con $J(\epsilon)$ dado por (12) es la forma específica de ecuación de Fokker-Planck que resolveremos en nuestro trabajo.

SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE FOKKER-PLANCK

La ecuación (11) admite una integral directa en la forma:

$$J(\epsilon) = \frac{1}{2} W_L [\Theta(\epsilon - \epsilon_0) - \Theta(\epsilon_0 - \epsilon)] + \text{const} \quad (14)$$

La constante en (14) se determina imponiendo la siguiente condición:

$$J(\epsilon) = 0 \quad \text{para} \quad \epsilon > \epsilon_0' > \epsilon_0$$

con lo cual:

$$J(\epsilon) = -W_L \Theta(\epsilon_0 - \epsilon) \quad (15)$$

La condición usada equivale a exigir que los electrones "inyectados" a la banda con energía ϵ_0 tiendan a relajarse hacia las bajas energías. La progresiva acumulación de electrones en el fondo de la banda de conducción en la energía $\epsilon = 0$ puede ignorarse en nuestro análisis limitándonos a energías $\epsilon > 0$. Evidentemente esa acumulación no ocurre en la práctica ya que los electrones tienden a recombinarse con los huecos.

Usando (12) y (15) obtenemos:

$$B(\epsilon) \left[f(\epsilon) + k_B T \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right] = W_L \Theta(\epsilon_0 - \epsilon) \quad (16)$$

Por otra parte, a partir de (13), (5) y (2) para $B(\epsilon)$ se obtiene el siguiente resultado:

$$B(\epsilon) = \frac{4m^4 E_c^2}{\pi^3 \hbar^7} \left[\epsilon^2 + \frac{8}{3} m s^2 k_B T \right], \quad (17)$$

donde el segundo término en (17) es muy pequeño en comparación con el primero.

El caso $T=0K$ se obtiene directamente usando (16) y (17):

$$f_0(\epsilon) \approx \frac{\pi^3 \hbar^7 W_L}{4m^4 E_c^2} \frac{\Theta(\epsilon_0 - \epsilon)}{\epsilon^2} \quad (18)$$

y por ende:

$$P_0(\epsilon) = Q \frac{\Theta(\epsilon_0 - \epsilon)}{\epsilon^{3/2}} \quad (19)$$

donde

$$Q = \frac{\pi^3 \hbar^4 W_L}{2\sqrt{2} m^{5/2} E_c^2}$$

El resultado (19) coincide con el obtenido en 11.

Analizamos el caso $T \neq 0K$. Para $\epsilon < \epsilon_0$ se obtiene la siguiente ecuación diferencial de 1er. orden:

$$\frac{d}{d\epsilon} \left[e^{\frac{\epsilon}{k_B T}} f(\epsilon) \right] = \frac{\frac{R}{k_B T} e^{\frac{\epsilon}{k_B T}}}{\epsilon^2 + \frac{8}{3} m s^2 k_B T}, \quad (20)$$

donde

$$R = \frac{\pi^3 \hbar^7 W_L}{4m^4 E_c^2}$$

cuya solución viene dada por:

$$f(\epsilon) = \frac{R}{k_B T} e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}} \int_{\epsilon}^{\epsilon_0} \frac{e^{\frac{\epsilon'}{k_B T}} d\epsilon'}{\epsilon'^2 + \frac{8}{3} m s^2 k_B T} + c' e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}} \quad (21)$$

válida en el intervalo $0 < \epsilon < \epsilon_0$. Utilizando la expresión (8) la fórmula (21) se expresa en la forma:

$$P(\epsilon) = \frac{Q}{k_B T} \sqrt{\epsilon} e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}} \int_{\epsilon}^{\epsilon_0} \frac{e^{\frac{\epsilon'}{k_B T}} d\epsilon'}{\epsilon'^2 + \frac{8}{3} m s^2 k_B T} + c \sqrt{\epsilon} e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}} \quad (22)$$

La constante C se determina de la condición:

$$\int_0^{\epsilon_0} P(\epsilon) d\epsilon = N \quad (23)$$

donde N es la concentración media de electrones en la banda, dada aproximadamente por:

$$N \approx \frac{W_L}{\gamma(\epsilon_0)} g(\epsilon_0) \quad (24)$$

donde $\gamma(\epsilon_0)$ es el inverso del tiempo de vida del elec-

trón en la energía ϵ_0 .

La expresión (22) para $P(\epsilon)$ sólo admite un tratamiento numérico.

Una solución analítica aproximada de la ecuación (11) puede obtenerse despreciando las derivadas de 2do. orden, lo cual es equivalente a tomar un desarrollo en serie en (1) de $P(\epsilon')$ alrededor de $\epsilon' = \epsilon$ hasta el 1er. orden en $(\epsilon' - \epsilon)$. De este modo se obtiene la ecuación aproximada:

$$(2k_0T + \epsilon) \epsilon \frac{df}{d\epsilon} + 2\epsilon f = -R \delta(\epsilon - \epsilon_0) \quad (25)$$

La expresión (25) admite integración directa imponiendo la condición:

$f(\epsilon) = 0$ para $\epsilon > \epsilon'_0 > \epsilon_0$, resultando que:

$$f(\epsilon) = R \left(1 + \frac{2k_0T}{\epsilon_0}\right) \frac{\Theta(\epsilon_0 - \epsilon)}{(\epsilon + 2k_0T)^2} \quad (26)$$

0, en términos de $P(\epsilon)$,

$$P(\epsilon) = Q \left(1 + \frac{2k_0T}{\epsilon_0}\right) \frac{\sqrt{\epsilon} \Theta(\epsilon_0 - \epsilon)}{(\epsilon + 2k_0T)^2} \quad (27)$$

La fórmula (27) es una aproximación para la FDE del no equilibrio, válida en el rango de temperatura: $m_s^2 \ll k_0T$ y que además contiene de manera correcta el caso $T = 0K$

como un caso particular.

CONCLUSIONES

En el presente trabajo se determinó FDE del no equilibrio en la banda de conducción de un semiconductor partiendo de la ecuación del balance cinético cuando el mecanismo fundamental de relajación es la interacción electrón-fonón LA. Se mostró como la ecuación del balance cinético se transforma, para el caso señalado, en una ecuación de Fokker-Planck. Mediante una solución aproximada de la ecuación de Fokker-Planck se obtuvo una fórmula analítica para la FDE (expresión (27)), así como una fórmula más exacta (expresión (22)) que debe tratarse numéricamente. Las expresiones obtenidas son válidas para $m_s^2 \ll k_0T$ y contienen el caso $T = 0K$ como un caso particular.

Las fórmulas obtenidas para $P(\epsilon)$ son útiles en el cálculo de diferentes magnitudes físicas, como por ejemplo, la sección eficaz de dispersión electrónica de la radiación en los semiconductores.

BIBLIOGRAFÍA

1. I.G. Lang, S.T. Pavlov, Yu. Yashin Pisma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 26, 305, 1977.
2. B.I. Velitsky, A.B. Goltzev. Fiz. Tverd. Tela. 21, 2430, 1979.
3. C. Trallero Giner. Phys. St. Sol. (b), 1982. (Será)

publicado.

4. R.G. Ulbrich, Phys. Rev. B, 8, 5719, 1973; Solid St. Electron, 21, 51, 1978.
5. C.V. Shank, D.Y. Auston, E.P. Ippen, O. Teschke, Solid St. Commun. 26, 567, 1978.
6. D. Van der Linde, R. Lambrich, Phys. Rev. Lett. 42, 1090, 1979.
7. F. Comas, C. Trallero Giner, Fiz. Tverd. Tela. 1982 (será publicado).
8. N. Pottier, D. Calecki, Phys. Rev. B. 22, 3949, 1980.
9. D. Calecki, N. Pottier, Solid St. Electron. 22, 995, 1979.
10. A.M. Zlobin, P.S. Zyrianov. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 58, 952, 1970.
11. V. Abakumov, V. Perel, I. Yassievich, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 72, 674, 1977.

Recibido 11-1-82