

Coeficiente de absorción en el umbral de semiconductores con tiempo de relajación finito y $T \neq 0 \text{ K}$

R. Pérez Álvarez, M. de Dios Leyva, Dpto. de Física Teórica, Universidad de La Habana, Cuba.

RESUMEN

Se obtiene una fórmula analítica para el coeficiente de absorción en la región alrededor del umbral para semiconductores, teniendo en cuenta un tiempo de relajación finito y temperatura no nula. Suponemos que las bandas son isotrópicas y se particulariza la expresión obtenida para el caso de bandas parabólicas. Esta última se reduce a la fórmula conocida $\alpha \sim (\hbar\omega - E_g)^2$ para el caso de tiempo de relajación infinito y $T = 0^\circ\text{K}$.

ABSTRACT

The edge absorption coefficient was analytically obtained for semiconductors. In the analysis a finite relaxation time was considered, as well as non-zero temperature. Isotropic bands was assumed and the expression for the parabolic bands case is given, which coincides with the known $\alpha \sim (\hbar\omega - E_g)^2$ for infinite relaxation time and $T = 0^\circ\text{K}$.

INTRODUCCIÓN

Es conocido que el coeficiente de absorción de los semiconductores está determinado básicamente por la ley de dispersión de las bandas, la distribución de los electrones en estas y los mecanismos de dispersión presentes. Dentro del marco de la aproximación de la fase aleatoria, Ehrenreich y Cohen [1] demostraron esta aseveración y dieron la expresión matemática que la fundamenta.

Si el material tiene la banda de conducción vacía y la de valencia llena, la temperatura $T = 0^\circ\text{K}$ y se pueden despreciar los mecanismos de dispersión, se puede llegar a que el coeficiente de absorción α depende

de la frecuencia ω y del gap E_g de una forma simple: $\alpha(\omega) \sim (\hbar\omega - E_g)^{1/2}$ para el modelo de bandas parabólicas [2], y $\alpha(\omega) \sim [(\hbar\omega)^2 - E_g^2]^{1/2}$ para el modelo de dos bandas de Kane [3,4]. La dependencia de α con la temperatura fue considerada por Anderson [5], coincidiendo su resultado con el de [3,4] para $T = 0^\circ\text{K}$.

Existen experimentos recientes [6] que revelan la necesidad de tomar en cuenta los mecanismos de dispersión, pero hasta el momento no se ha reportado ninguna fórmula analítica para $\alpha(\omega)$ que incluya simultáneamente los efectos de temperatura y de los mecanismos de dispersión. El objetivo del presente trabajo es presentar la obtención de tal fórmula para la absorción por transiciones directas y permitidas interbandas. Fijaremos básicamente nuestra atención al modelo parabólico de bandas.

CONSTANTE DIELECTRICA CON $T \neq 0^\circ\text{K}$ Y $\gamma \neq 0$.

Si siguiendo a Ehrenreich y Cohen [1], partiremos de la fórmula para la constante dieléctrica en la aproximación de la fase aleatoria y con los efectos de relajación incluidos fenomenológicamente

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = \frac{4\pi e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{\ell < \ell'} \int_{\text{ZB}} \frac{2d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} |\vec{P}_{\ell\ell'}|^2 \left\{ f_{\ell}(\vec{k}) - f_{\ell'}(\vec{k}) \right\} \left[\left(E_{\ell',\ell} - \hbar\omega - i\gamma_{\ell\ell'} \right)^{-1} + \left(E_{\ell,\ell} + \hbar\omega + i\gamma_{\ell\ell'} \right)^{-1} \right] \quad (1)$$

donde ω es la frecuencia, e y m son respectivamente la carga y masa del electrón; la integral se efectúa por la zona de Brillouin (ZB); ℓ y ℓ' son índices que numeran las bandas y $\ell < \ell'$ significa que la banda ℓ se encuentra por debajo de la ℓ' ; $E_{\ell',\ell} = E_{\ell'}(\vec{k}) - E_{\ell}(\vec{k})$; $f_{\ell}(\vec{k}) = f(E_{\ell}(\vec{k}))$; $E_{\ell}(\vec{k})$ es la ley de dispersión de la banda ℓ ; $f(E) = [1 + \exp((E - E_F)/k_B T)]^{-1}$ es la función de distribución de Fermi-Dirac con energía de Fermi E_F ; $\gamma_{\ell\ell'} = \hbar/\tau_{\ell\ell'}$, siendo $\tau_{\ell\ell'}$, el tiempo de relajación asociado a la transición entre las bandas ℓ y ℓ' ; por último, $\vec{P}_{\ell\ell'}$, es el elemento matricial del momentum entre las bandas ℓ y ℓ'

$$\vec{P}_{\ell\ell'} = \frac{1}{\Omega} \int_C d^3\vec{r} u_{\vec{k},\ell}^* \hat{p} u_{\vec{k},\ell'} \quad (2)$$

Aquí C representa la celda unitaria, Ω su volumen y $u_{\vec{k},\ell}$ la parte periódica de la función de onda de Bloch.

Como es común hacer, supondremos que $\vec{P}_{\ell\ell'}$, no depende de \vec{k} y pondremos

$$|\vec{P}_{\ell\ell'}|^2 = \frac{1}{3} \frac{m^2 P_{\ell\ell'}^2}{h^2} \quad (3)$$

donde $P_{\ell\ell'} \sim 10^{-8}$ eVcm. Análogamente, supondremos que $\gamma_{\ell\ell'}$, no depende del vector de onda \vec{k} .

Hagamos la suposición central de que las bandas son isotrópicas $E_{\ell}(\vec{k}) = E_{\ell}(k)$.

Teniendo en cuenta las suposiciones anteriores, podemos pasar la integral en (1) a coordenadas esféricas y hacer el cambio de variable $\eta = E_{\ell, \ell}$ (omitimos los índices ℓ y ℓ' en η para no recargar la notación). De este modo obtenemos para la parte imaginaria de $\tilde{\epsilon} = \epsilon_1 + i\epsilon_2$.

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{1}{3} \left(\frac{e}{\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \right)^2 \sum_{\ell < \ell'} P_{\ell\ell'}^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_{E_g}^{\eta_{ZB}(\theta, \varphi)} d\eta \frac{dk}{d\eta} k^2(\eta) \cdot (f_{\ell} - f_{\ell'}) \quad (4)$$

$$\left[\gamma_{\ell\ell'} / ((\hbar\omega - \eta)^2 + \gamma_{\ell\ell'}^2) - \gamma_{\ell\ell'} / ((\hbar\omega + \eta)^2 + \gamma_{\ell\ell'}^2) \right]$$

donde E_g (el gap) y $\eta_{ZB}(\theta, \varphi)$ son respectivamente el valor de $\eta = E_{\ell, \ell}(k)$ en $k=0$, y sobre la frontera de la zona de Brillouin (ZB) en la dirección (θ, φ) .

A partir de la ecuación (4) se pueden hacer las siguientes consideraciones:

- i. Como se puede comprobar fácilmente, en el caso de bandas parabólicas la función $\frac{dk}{d\eta} k^2 \sim \sqrt{\eta - E_g}$ lo que hace que el integrando sea imaginario puro en el intervalo $\eta \in (-\infty, E_g)$. Este hecho nos permite poner $-\infty$ como límite inferior de integración en lugar de E_g , tomando parte real del resultado final.
- ii. La contribución de la segunda lorentziana - correspondiente a los fenómenos de emisión - es despreciable si $\gamma_{\ell\ell'} \ll \hbar\omega, E_g$; esta desigualdad habitualmente se cumple, por lo que obviaremos este término.
- iii. Por consideraciones parecidas podemos extender el límite de integración superior a ∞ , pues estaríamos agregando partes despreciables al resultado. Esto está determinado por lo estrecho del intervalo en que la lorentziana es significativamente distinta de cero, y lo grande de la ZB.

Este conjunto de argumentos permite llegar a

$$\epsilon_2(\omega) \simeq \frac{1}{3} \left(\frac{2e}{\hbar\omega} \right)^2 \sum_{\ell < \ell'} P_{\ell\ell'}^2 \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{dk}{d\eta} k^2 \cdot (f_{\ell} - f_{\ell'}) \cdot \frac{\gamma_{\ell\ell'} / \pi}{(\eta - \hbar\omega)^2 + \gamma_{\ell\ell'}^2} \quad (5)$$

En el plano complejo $\tilde{\eta}$ la lorentziana aporta al integrando de (5) dos polos simples $\tilde{\eta}_{\pm} = \hbar\omega \pm i\gamma_{\ell\ell'}$, mientras que las funciones de Fermi f_{ℓ} y $f_{\ell'}$ tienen sendos conjuntos infinitos y numerables $\{\tilde{\eta}_n\}$ y $\{\tilde{\eta}'_n\}$ de polos simples. Limitándonos al caso de dos bandas parabólicas de masas efectivas m_c y m_v , masa reducida $\mu = m_c m_v / (m_c + m_v)$ y leyes de dispersión

$$E_V = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_V} - \frac{E_G}{2} \quad (6a)$$

$$E_C = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_C} + \frac{E_G}{2} \quad (6b)$$

se obtiene que

$$\tilde{\eta}_n = -\frac{m_V}{\mu} \left[E_F + \frac{E_G}{2} - i(2n+1)\pi k_B T \right] + E_G \quad (7a)$$

$$\tilde{\eta}_{n'} = \frac{m_C}{\mu} \left[E_F - \frac{E_G}{2} + i(2n'+1)\pi k_B T \right] + E_G \quad (7b)$$

donde n y $n' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. En la figura 1 se han representado los polos obtenidos. Por su parte, la función $\frac{dk}{d\tilde{\eta}} k^2(\tilde{\eta}) \sim \sqrt{\tilde{\eta} - E_G}$ sólo tiene un punto de ramificación en $\tilde{\eta} = E_G$.

Hechas estas consideraciones, el cálculo de la integral en (5) se puede llevar a cabo por el contorno indicado en la figura 1. No es difícil demostrar que en el límite $r \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$ las integrales por los segmentos del contorno que rodea al punto de ramificación y por la circunferencia de radio R , se anulan. De esta manera se obtiene la expresión final.

$$\begin{aligned} \epsilon_2(\omega) \approx & \frac{2}{3} \left(\frac{eP}{\hbar\omega} \right)^2 \left(\frac{2\mu}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \text{Re} \left\{ \left[(\tilde{\eta} - E_G)^{\frac{1}{2}} (f_V - f_C) \right] \right. \\ & \left. + i2\pi k_B T \frac{m_V}{\mu} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\tilde{\eta}_n - E_G \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\gamma/\pi}{(\tilde{\eta}_n - \hbar\omega)^2 + \gamma^2} \right. \\ & \left. + i2\pi k_B T \frac{m_C}{\mu} \sum_{n'=0}^{\infty} \left(\tilde{\eta}_{n'} - E_G \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\gamma/\pi}{(\tilde{\eta}_{n'} - \hbar\omega)^2 + \gamma^2} \right\} \quad (8) \end{aligned}$$

donde

$$f_V = f \left(-\frac{\mu}{m_V} \left(\tilde{\eta} - E_G \right) - \frac{E_G}{2} \right) \quad (9a)$$

$$f_C = f \left(\frac{\mu}{m_C} \left(\tilde{\eta} - E_G \right) + \frac{E_G}{2} \right) \quad (9b)$$

y se ha puesto $P_{\ell\ell'} \equiv P$ y $\gamma_{\ell\ell'} \equiv \gamma$ para el par de bandas considerado.

ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS.

Hemos calculado la parte imaginaria de la constante dieléctrica (ϵ_2), la cual está relacionada al coeficiente de absorción por la fórmula:

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{c} \frac{\epsilon_2(\omega)}{n(\omega)} \quad (10)$$

donde c es la velocidad de la luz y $n(\omega)$ el índice de refracción, el cual es prácticamente constante en la región de frecuencias estudiada.

En el caso de que $\gamma = 0$ las fórmulas obtenidas se reducen a la conocida ley para el coeficiente de absorción interbandas para transiciones

directas permitidas

$$\alpha(\omega) = K \operatorname{Re}(\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}} \quad (11)$$

donde

$$K = \frac{\omega}{cn} \frac{2}{3} \left(\frac{eP}{\hbar\omega} \right)^2 \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (f_v - f_c) \quad (12)$$

$$f_v = f \left[- \frac{\mu}{m_v} \left(\hbar\omega - E_g \right) - \frac{E_g}{2} \right] \quad (13a)$$

$$f_c = f \left[\frac{\mu}{m_c} \left(\hbar\omega - E_g \right) + \frac{E_g}{2} \right] \quad (13b)$$

El factor $(f_v - f_c)$ en (12) da cuenta del efecto de población de las bandas. En el caso en que la energía de Fermi esté por debajo del fondo de la banda de conducción y T sea relativamente pequeña $f_v - f_c \approx 1$, se obtiene exactamente la misma expresión que en [2] y [3]. Si la energía de Fermi está por encima del fondo de la banda de conducción, se obtiene un corrimiento del umbral de α hacia las altas energías.

Si $\gamma \neq 0$, aún cuando T sea pequeña, encontraremos que α puede no ser nulo por debajo del borde, $\hbar\omega < E_g$. Estas colas de absorción se observan sistemáticamente en los experimentos [7], y en el marco de las situaciones físicas previstas por nuestro modelo, son debidas al ancho finito de los niveles energéticos $\gamma \neq 0$ producto de los mecanismos dispersivos.

Las dos series en (8) convergen, por supuesto. Por lo tanto basta sumar un número finito de términos para obtener su valor con cierta exactitud. La parte real del término n -ésimo es proporcional a la magnitud.

$$t_n = \frac{\rho n}{2\pi} \left\{ \frac{\cos \theta_n / 2 (\eta_0 + E_g - \hbar\omega) + \sin \theta_n / 2 \Gamma_-}{(\eta_0 + E_g - \hbar\omega)^2 + \Gamma_-^2} - \frac{\cos \theta_n / 2 (\eta_0 + E_g - \hbar\omega) + \sin \theta_n / 2 \Gamma_+}{(\eta_0 + E_g - \hbar\omega)^2 + \Gamma_+^2} \right\}$$

$$\Gamma_{\pm} = \left[\eta_0^2 + (2n+1)^2 \pi^2 k_B^2 T^2 A^2 \right]^{\frac{1}{4}} ; \quad \theta_n = \arctan \frac{(2n+1) \pi k_B T A}{\eta_0} \quad (14)$$

$$\Gamma_{\pm} = (2n+1) \pi k_B T A \pm \gamma$$

Para la primera serie $A = A_v = \frac{m_v}{\mu}$ y $\eta_0 = \eta_{0v} = -A_v \left(E_F + \frac{E_g}{2} \right)$,

mientras que para la segunda $A = A_c = \frac{m_c}{\mu}$ y $\eta_0 = \eta_{0c} = A_c \left(E_F - \frac{E_g}{2} \right)$. Los

denominadores en (14) hacen que a la frecuencia ω , predominen los términos que cumplen la condición

$$- |\Gamma_{\pm}| \leq \hbar\omega - \hbar\omega_0 \leq |\Gamma_{\pm}| \quad (15)$$

donde

$$\hbar\omega_0 = \eta_0 + E_g \quad (16)$$

Para los materiales con el nivel de Fermi en la banda de conducción, $E_F > E_g/2$, $\eta_{0V} < -E_g$, $\eta_{0C} > 0$. En este caso no hay ningún término de la primera serie que satisfaga (15) mientras que en la segunda serie aportan fundamentalmente aquellos que cumplen con

$$n \sim \frac{1}{2} \left[\frac{\mu}{m_C} \frac{\hbar\omega - \hbar\omega_0 \pm \gamma}{\pi k_B T} - 1 \right] \quad (17)$$

(hemos supuesto la situación común $\gamma < \pi k_B T$).

Para los materiales con el nivel de Fermi en la banda de valencia, $E_F < -E_g/2$, $\eta_{0V} > 0$, $\eta_{0C} < -E_g$ y se invierte el peso en ambas series respecto del analizado en el párrafo anterior. Habrá que atender fundamentalmente a los términos de la primera serie con

$$n \sim \frac{1}{2} \left[\frac{\mu}{m_V} \frac{\hbar\omega - \hbar\omega_0 \pm \gamma}{\pi k_B T} - 1 \right] \quad (18)$$

CONCLUSIONES

Como se ha visto, hemos obtenido una expresión analítica para el coeficiente de absorción debido a transiciones interbandas directas y permitidas, cuando la temperatura y el tiempo de relajación toman valores cualesquiera (fórmulas 7-10).

La fórmula a que arribamos sustituye el cálculo de la integral triple en (1) por la suma de una serie (ver fórmula 8), problema éste más fácil de tratar numéricamente. Además, permite encontrar fórmulas analíticas sencillas en ciertos casos límites (γ y/o T pequeños, por ejemplo).

Los resultados obtenidos reproducen estudios anteriores y dan una explicación teórica plausible a los efectos observados experimentalmente de corrimiento del umbral de absorción por impurezas y de aparición de colas de absorción debajo del umbral.

Por métodos de cálculo semejantes a los utilizados se puede evaluar la contribución del término de emisión en (4), así como considerar otros modelos de bandas isotrópicas. Esto último será el objetivo de otro trabajo que será publicado en breve.

BIBLIOGRAFÍA

1. Ehrenreich, H. and M.H. Cohen
Phys. 115, 786, (1959).
2. Bassani, F. and G. Pastori Parravicini
"Electronic States and Optical Transitions in Solids", Pergamon Press, Nueva York, (1975).

3. Vaidyanathan, A., S.S. Mitra, L.M. Narducci and R.A. Shatas
Solid State Communications, 21, 405, (1977).
4. Pérez, R., M. de Dios y O.D. Castaño
Resúmenes del Evento Científico por el 250 Aniversario de la U.H.
(1978)
R. Pérez, M. de Dios y O.D. Castaño, Revista Ciencias Técnicas,
Físicas y Matemáticas, No. 3, (1982).
5. Anderson, W.W.
Infrared Physics, 20, 363, (1980).
6. Summers, C.J. and J.G. Broerman
Phys. Rev. B, 21, 2, 559, (1980).
7. Abeles, F.
Optical Properties of Solids, North Holland Publishing Company
(1972)

Recibido: 23/1/84

