

PROCESOS DE RELAJAMIENTO EN SEMICONDUCTORES ALTAMENTE EXCITADOS. PARTE I. ESTADO DE EQUILIBRIO Y MECANISMOS DE DISPERSION[†]

P. Hernández y A. Zehe*

Departamento de Física, Instituto de Ciencias
Universidad Autónoma de Puebla
Apartado Postal J-48.72570 - Puebla, Pue. México

(recibido agosto 21, 1981; aceptado marzo 10, 1982)

RESUMEN

En este trabajo se presenta un tratamiento teórico del sistema electrónico en desequilibrio, creado por una excitación intensa de un semiconductor con fotones de energía $h\nu$ mayor que la energía de brecha E_g . Damos una breve descripción del estado de no-equilibrio tratado como una perturbación del equilibrio y analizamos los diferentes procesos de relajamiento que llevan a los electrones excitados desde su posición inicial en la banda de conducción hacia el fondo de la banda.

ABSTRACT

A theoretical treatment of the electronic subsystem in semiconductors is made, which, by a strong laser excitation, is pushed out of equilibrium in respect to the lattice. Departing from a short description of the non-equilibrium state, different relaxation processes are included which may be effective in the equilibration process.

[†] Trabajo parcialmente apoyado por la Secretaría de Educación Pública.

* Actualmente en Techn. Univ. Dresden, Sektion Physik, Mommsenstrasse 13, 8027, R.D.A.

1. INTRODUCCION

Los estudios de sistemas en desequilibrio electrónico se remontan aproximadamente a los años treintas, en los cuales se hicieron los primeros trabajos sobre efectos de campos eléctricos fuertes en sólidos, relacionados con el rompimiento dieléctrico en aislantes.

También en estos años se realizaron estudios teóricos, principalmente por investigadores soviéticos^(1,2), sobre la influencia de campos eléctricos fuertes en la función de distribución y en la movilidad de electrones en semiconductores.

Los semiconductores son materiales que tienen ventaja sobre los aislantes para este tipo de estudios, ya que en ellos sí puede haber portadores en campos eléctricos pequeños y, por lo tanto, es posible observar los cambios en su comportamiento cuando su energía promedio es aumentada por el campo.

Frohlich⁽³⁾ fue el primero en introducir la idea de una temperatura electrónica dependiente del campo eléctrico y el concepto de "electrones calientes", al estudiar el rompimiento dieléctrico en cristales iónicos.

Mucho del progreso realizado en este campo tiene su base en el trabajo experimental realizado por Shockley^(4,5,6), Ryder⁽⁷⁾ y Pearson⁽⁸⁾, el cual fue decisivo en la invención del transistor, junto con los trabajos de Bardeen⁽⁹⁾. Dicho progreso también radica en el interés que despertaron las oscilaciones de la resistencia en dependencia del campo eléctrico, estudiadas por Ridley⁽¹⁰⁾ y Gunn⁽¹¹⁾ principalmente.

Aunado a estos trabajos, en 1958, Stratton⁽¹²⁾ elaboró una teoría para explicar el transporte eléctrico en presencia de campos eléctricos fuertes en materiales polares.

Actualmente observamos un gran desarrollo de este campo, debido principalmente al avance de la ciencia en general y de la física del estado sólido en particular. Este avance ha permitido mejorar sustancialmente las técnicas y equipos de laboratorio de manera tal, que se pueden crear cristales semiconductores de alta pureza y con características bien definidas; se cuenta además con sofisticados equipos de excitación y detección. Este último punto es muy importante porque ha permitido diversi-

ficar los métodos de estudio de electrones calientes y en general de portadores de carga altamente excitados.

La ventaja del uso de semiconductores sobre los metales para el estudio de procesos de desequilibrio, se debe a que en los semiconductores la concentración de los portadores de carga es variable, y además el incremento de energía E del sistema de electrones debido, por ejemplo, a un campo eléctrico F es proporcional a la movilidad μ de los portadores:

$$n \cdot \frac{dE}{dt} = e\mu F^2 n \quad . \quad (1.1)$$

La movilidad es usualmente más alta en semiconductores que en metales; debido a esto la energía promedio de los portadores se puede controlar más fácilmente en semiconductores.

Como veremos posteriormente, existe un requisito adicional de una interacción térmica deficiente entre los electrones y la red; este requisito también se cumple para metales. En realidad también se observa en ellos un aumento de la temperatura electrónica cuando se agrega energía al sistema.

A pesar de lo anterior existe una gran diferencia entre semiconductores y metales: la energía promedio \bar{E} de los electrones en semiconductores a temperatura ambiente tiene el valor de Boltzmann $3kT/2$, que es del orden de unos 35 meV; en cambio, para metales la energía promedio de los electrones es del orden de magnitud de la energía de Fermi, es decir, de algunos electronvoltios en metales típicos. Si se agrega una energía cinética de este orden al sistema electrónico del metal, éste se evapora.

Entre los primeros trabajos en los que se aplica una excitación óptica fuerte al semiconductor (en lugar de un campo eléctrico para producir el sistema de electrones calientes) y se estudia su influencia en las propiedades de algunos semiconductores, se encuentran los de Gillaume y Lavallard⁽¹³⁾, Shah y Leite⁽¹⁴⁾, Ulbrich^(15,16), Permogorov⁽¹⁷⁾ y Zehe y Roepke⁽¹⁸⁾, entre otros.

En estos trabajos y en algunos más, se hace uso de semiconductores con estructura de banda directa como InSb^(13,19), CdTe⁽¹⁷⁾, CdS⁽²⁰⁾, GaN^(21,22) y principalmente en GaAs^(13,14,15,23). Esto se debe a que la participación de estados de desequilibrio en la recombinación radiativa

generalmente es débil respecto a los del cuasi-equilibrio. Por otra parte, en materiales con estructura de banda indirecta el coeficiente de recombinación radiativa es menor por dos órdenes de magnitud y, además, la necesaria participación de fonones para la conservación del momentum en la transición óptica, puede oscurecer el efecto de los electrones calientes. Otro factor que interviene es que los electrones en la banda de conducción "indirecta" tienen una masa efectiva relativamente grande, lo cual impide un calentamiento fuerte.

El objetivo de este trabajo es presentar una breve revisión de los conceptos teóricos necesarios para el estudio de la luminiscencia producida por un semiconductor en desequilibrio. Esto se debe a que en un trabajo posterior efectuaremos un estudio de la dinámica de portadores altamente excitados en GaAs y GaN, con la técnica de espectroscopía óptica que ha probado ser una herramienta poderosa para el estudio de la estructura y propiedades de materiales semiconductores.

La sección dos contiene una breve descripción acerca de la formación de la excitación y de la caracterización de este estado. Los principales procesos de relajamiento de los portadores en la banda de conducción y los posteriores procesos de recombinación están descritos en las secciones tres y cuatro respectivamente.

2. GENERACION Y CARACTERIZACION DEL ESTADO EXCITADO

Debido a la existencia de electrones y hoyos en los semiconductores, se puede alterar de manera importante la concentración de portadores en equilibrio sin cambiar significativamente su densidad de carga. Estas desviaciones son responsables del cambio de conductividad volumétrica de los semiconductores, base de muchos dispositivos electrónicos.

De manera general, la situación energética de los sistemas en desequilibrio se describe por la forma de agregación de energía y por los procesos de disipación de la misma.

2.1 *Generación del Estado Excitado*

Las desviaciones del estado de equilibrio en semiconductores pueden provocarse por distintos métodos: por aplicación de un campo eléc-

trico, por bombardeo electrónico, por inyección de portadores en uniones p-n y por excitación óptica, principalmente. De éstos mencionaremos con detalle la excitación óptica, por ser el método utilizado en la parte experimental de este trabajo; sobre los demás ya existe bastante literatura⁽²⁴⁾.

En la excitación por campo eléctrico se pueden consultar los trabajos de Conwell⁽²⁵⁾, Pankove⁽²⁶⁾ y Genzow y Herrmann⁽²⁷⁾, entre otros. Tratamientos detallados de la excitación por haz de electrones están dados por Maknov⁽²⁸⁾, Radford⁽²⁹⁾, Zehe^(18,30) y Zylbertztein⁽³¹⁾.

El método de excitación por radiación óptica es sencillo y conveniente porque permite mayor libertad en la posición de la muestra y en la configuración del cristal respecto a la geometría de excitación. También puede usarse en materiales para los que no se ha desarrollado suficientemente la tecnología de uniones y contactos, o bien en aquéllos de alta resistividad, y por lo tanto de deficiente electroluminiscencia.

Con este modo de excitación, el semiconductor absorbe un fotón creando un par electrón-hoyo, el cual después de un cierto tiempo recombinan. Dependiendo de la estructura de bandas del semiconductor, se pueden presentar transiciones directas o indirectas entre las bandas del mismo (ver Fig.1).

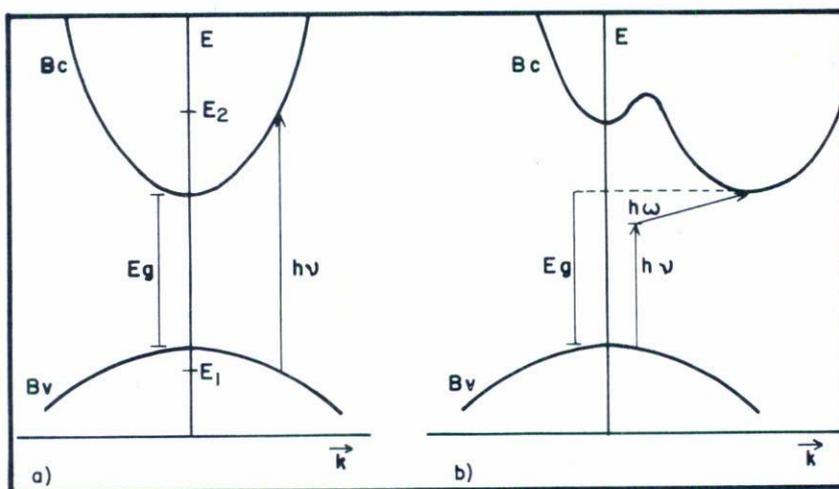


Fig.1 Transiciones interbandas: a)directa, b)indirecta

En transiciones indirectas se requiere un cambio tanto en energía como en momento, y se necesita entonces un proceso de dos pasos ya que el fotón no puede provocar el cambio en momento. El momento se conserva por la participación de un fonón de energía apropiada.

Como los semiconductores que estudiaremos en la parte experimental (parte II) son el GaN y GaAs, que tienen una estructura de bandas directa (coinciden el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia en $k=0$), únicamente nos interesan las transiciones directas.

En transiciones ópticas directas la absorción de un cuanto de luz de energía $h\nu$ causa la transición de un electrón entre estados de energía E_1 y E_2 bien definidas. Para bandas estándar estas energías están dadas por

$$E_1(k) = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p}, \quad E_2(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n}, \quad (2.1)$$

de donde

$$E_2 - E_1 = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{12}}, \quad \text{con } m_{12}^{-1} = m_n^{-1} + m_p^{-1}. \quad (2.2)$$

En este tipo de materiales frecuentemente $m_n \ll m_p$, por lo que los fotoelectrones generados alcanzan una energía esencialmente mayor que la energía de los fotohoyos generados, entonces se tienen fotoelectrones calientes y fotohoyos fríos.

2.2 Caracterización del Estado Excitado

El estado de excitación del sistema electrónico se describe en forma completa dando la función de distribución del sistema cuando se han considerado la influencia de la perturbación externa, las nuevas concentraciones de portadores en las bandas y en los niveles locales y los niveles cuasi-Fermi para electrones y para hoyos.

Simultáneamente con la generación de portadores libres, tiene lugar el proceso de recombinación en el cual los electrones en un estado excitado hacen una transición a estados de menor energía.

En situación estacionaria los dos procesos se equilibran entre

sí. Designando por g_o el número de pares electrón-hoyo generados y por r_o el número de pares recombinados en la unidad de tiempo en el volumen unitario, tenemos

$$r_o = c_n n_o p_o \quad , \quad (2.3)$$

donde c_n es el coeficiente de recombinación y n_o y p_o las concentraciones de equilibrio de electrones y hoyos, respectivamente. Por el principio de equilibrio tenemos

$$g_o = r_o \quad . \quad (2.4)$$

Al excitar el semiconductor tendremos una nueva concentración de portadores en exceso, δn y δp , por lo que las nuevas concentraciones serán

$$n = n_o + \delta n \quad \text{y} \quad p = p_o + \delta p \quad . \quad (2.5)$$

Calculamos estas concentraciones (por ejemplo n) mediante la expresión⁽³²⁾

$$n = n_o + \delta n = \int_{E_c}^{\infty} f_1(E) N(E) dE \quad (2.6)$$

en donde $f_1(E)$ es la función de distribución para los electrones y tiende a la distribución de equilibrio $f_o(E)$ cuando el sistema se aproxima al equilibrio termodinámico y $N(E)$ es la densidad de estados cuánticos en las bandas.

Introducimos ahora el pseudo-nivel de Fermi para los electrones E_{Fn} y al desarrollar (2.6) hacemos uso de la integral de Fermi de orden 1/2 dada por

$$F_{1/2}(\phi_n) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\phi_p^{1/2} d\phi_p}{\exp(\phi_p - \phi_n) + 1} \quad , \quad (2.7)$$

y definimos la densidad efectiva de estados en la banda de conducción como

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_n k_o T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (2.8)$$

Haciendo un desarrollo análogo para p obtenemos las expresiones

$$n = N_c F_{1/2}(\phi_n) \quad \text{y} \quad p = N_c F_{1/2}(-\phi_p - \theta_i) \quad (2.9)$$

donde

$$\theta_i = \frac{E_c - E_v}{k_o T} \quad \text{y} \quad (2.10)$$

$$\phi_n = (E_{Fn} - E_c)/k_o T \quad \text{y} \quad \phi_p = (E_{Fp} - E_c)/k_o T \quad (2.11)$$

determinan los niveles cuasi-Fermi para los electrones y hoyos.

Considerando un semiconductor no degenerado, la expresión que relaciona las concentraciones de portadores en equilibrio es

$$np = n_o p_o \exp(\phi_n - \phi_p) = n_o p_o \exp\{(E_{Fn} - E_{Fp})/k_o T\} \quad (2.12)$$

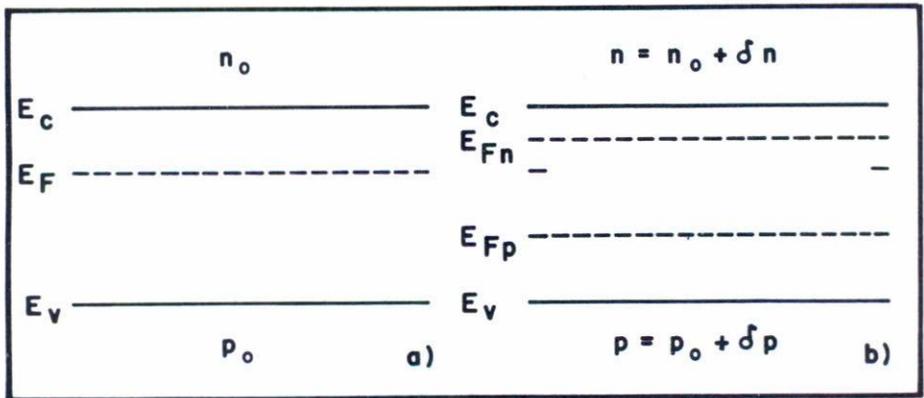


Fig. 2 (a) Estado de equilibrio. (b) Estado de desequilibrio

Como se puede ver en la Ec. (2.12), la diferencia $\phi_n - \phi_p$ da una medida de la desviación del producto np de su valor de equilibrio, tal y como se muestra en la Fig. 2.

Al excitar ópticamente se genera el mismo número de electrones y hoyos, es decir $n=p$. Una vez que cesa la excitación, las concentraciones n y p disminuirán a causa de la recombinación, estando determinada la velocidad de disminución de portadores por la velocidad de recombinación y generación:

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{rec}} = \left(\frac{dp}{dt}\right)_{\text{rec}} = g_o - c_n np \quad . \quad (2.13)$$

De aquí se obtiene, utilizando (2.3), (2.4) y (2.5),

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{rec}} = -c_n (n_o + p_o) (n - n_o) \quad , \quad (2.14)$$

y se define

$$\tau = \{c_n (n_o + p_o)\}^{-1} \quad , \quad (2.15)$$

como el tiempo de vida de los portadores en desequilibrio. Por lo tanto,

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{rec}} = -\delta n / \tau \quad , \quad (2.16)$$

que es válida para intensidades de excitación bajas.

2.3 Función de Distribución

La forma más simple para la función de distribución de los electrones calientes es una función de distribución maxwelliana desplazada, caracterizada por una temperatura electrónica mayor que la temperatura de la red^(25,33,34), es decir,

$$f = a \exp\{-(hk - mv_d)^2 / 2mk_o T_e\} \quad , \quad (2.17)$$

donde v_d es la velocidad de arrastre de los portadores.

Esta forma es válida si la interacción electrón-electrón es tan fuerte que el intercambio de energía y momento de los portadores debido a

este proceso es dominante sobre cualquier otra interacción.

Debido a la sencillez de este enfoque, la distribución anterior ha sido ampliamente aplicada para diferentes casos, pero cuando no se puede establecer que la interacción electrón-electrón es dominante, es necesario derivar la función de distribución de la solución de la ecuación de transporte de Boltzmann dada por

$$df/dt = (\partial f/\partial t) - \vec{r} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \vec{k} \cdot \nabla_{\vec{k}} f - (\partial f/\partial t)_{\text{choque}} \quad (2.18)$$

Una formulación muy utilizada es la basada en el método de "aproximación de difusión" en la cual se supone que la distribución de portadores calientes es isotrópica y que está adecuadamente representada por los primeros términos de la expansión de la función de distribución en polinomios de Legendre:

$$f(\vec{k}) = \sum_{\nu=0} f_{\nu}(E) P_{\nu}(\cos\theta) \quad (2.19)$$

Existen otros métodos aproximativos para el cálculo de la función de distribución de los cuales no nos ocupamos aquí.

La función de distribución de los electrones excitados en la banda de conducción depende de los posibles procesos de dispersión, de recombinación y de su eficiencia.

Quando la interacción electrón-electrón es fuerte, resulta la formación de una función de distribución Maxwell-Boltzmann para los electrones calientes con una temperatura propia T_e mayor que la temperatura T_r del sistema fonónico. El modo de excitación, sea por campo eléctrico, haz electrónico, luz blanca o fotones monocromáticos, tiene considerable influencia en la formación de la función de distribución.

3. MECANISMOS DE DISPERSION DE PORTADORES DE CARGA

Los procesos de dispersión para los electrones en desequilibrio que ocurren en semiconductores pueden ser clasificados de manera muy general en: procesos de dispersión electrón-red, electrón-impureza y electrón-electrón; pero dentro de esto es necesario considerar por separado los diferentes mecanismos que se presentan, como son: dispersión acústica,

dispersión piezoeléctrica, dispersión por potencial de deformación, por impurezas ionizadas, por dispersión polar-óptica, etcétera; además de que también pueden presentarse dentro de una banda o entre sub-bandas.

Según el material y las condiciones experimentales, uno u otro proceso domina sobre los demás.

En los planteamientos aquí presentados para el relajamiento del sistema electrónico, seguimos básicamente el formalismo desarrollado por Frohlich y Paranjape⁽³⁵⁾, Stratton⁽¹²⁾, Conwell⁽²⁵⁾, Pinson y Bray⁽³⁴⁾, para la interacción de los portadores con la red, y damos los resultados de Hearn⁽³⁶⁾ para la dispersión electrón-electrón, que es importante en nuestro caso debido a las altas densidades de electrones fotoexcitados. En cuanto a la dispersión de los portadores con impurezas, no nos ocupamos de ella en este trabajo, pero los tratamientos pueden verse en los trabajos de Hasegawa y Yamashita⁽³⁷⁾, y de Dykman y Fomchuk⁽³⁸⁾.

3.1 Tiempo de Relajamiento

Consideraremos aquí el tiempo de relajamiento para la interacción de los electrones con la red. Supongamos que un portador de carga con vector de onda \vec{k} se encuentra en el estado de energía E y puede efectuar una transición al estado de energía E' , ya sea por la absorción o emisión de un fonón de vector de onda \vec{q} , de manera que su vector de onda es $\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q}$.

Por otra parte, tenemos que la probabilidad de que el portador efectúe una transición del estado de energía E al estado de energía E' , en presencia del potencial perturbador H' , está dada por⁽³⁹⁾

$$P_{12}(t) = (2\pi t/h^2) |H'_{12}|^2 \left| \frac{\text{sen}^2\{(E - E')t/2h\}}{\{(E - E')t/2h\}^2} \right|, \quad (3.1)$$

donde H'_{12} es el elemento de matriz del potencial de perturbación para la transición correspondiente. Tenemos además que la función $\text{sen}^2\alpha/\alpha^2$ puede ser sustituida por una función δ cuando el tiempo libre medio entre transiciones es grande ($\sim 10^{-9}$ s), y esto es lo que sucede en los materiales de movilidad grande como los que estudiaremos aquí. Tomando en cuenta esto, la Ec. (3.1) se escribe como

$$P_{12}(t) = (2\pi t/\hbar) H'_{12} \delta(E - E') \quad (3.2)$$

Ahora, a partir de esta expresión, la probabilidad por tiempo unitario para la dispersión de los portadores permite expresar el tiempo de relajamiento como

$$\tau^{-1} = (2\pi/\hbar) \sum_{\vec{q}} \{ |\vec{k} \pm \vec{q}, N_{\vec{q}} \mp 1 | H' | \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle |^2 \delta(E_{\vec{k} \pm \vec{q}} - E_{\vec{k}}) \}, \quad (3.3)$$

en donde los signos superiores corresponden a la probabilidad de transición debido a absorción de fonones y los signos inferiores a la emisión, $N_{\vec{q}}$ representa el número de fonones con vector de onda \vec{q} .

Si consideramos superficies esféricas de energía constante y portadores de masa efectiva m , tenemos para el cambio de energía en la transición, por ejemplo, debida a la absorción

$$E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}} = (\hbar^2/2m)(2\vec{k} \cdot \vec{q} + q^2) - \hbar\omega_{\vec{q}}, \quad (3.4)$$

donde $\hbar\omega_{\vec{q}}$ es la energía del fonón del vector de onda \vec{q} . Podemos ahora transformar la sumatoria sobre \vec{q} de (3.3) en una integración, considerando coordenadas esféricas en el espacio \vec{q} , tomando el eje z en la dirección de \vec{k} y suponiendo que los modos normales que intervienen en el proceso se encuentran dentro de una esfera de radio q_0 . De esta manera

$$\sum_{\vec{q}} |\vec{k}+\vec{q}, N_{\vec{q}} - 1 | H' | \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle |^2 \delta(E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}}) \longrightarrow \int_{q=0}^{q_0} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} (V/8\pi^3) |(\vec{k}+\vec{q}, N_{\vec{q}}-1 | H' | \vec{k}, N_{\vec{q}}) |^2 \delta(E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}}) q^2 \sin\theta d\theta d\phi dq \quad (3.5)$$

Observando que el elemento de matriz depende solamente de la magnitud de \vec{q} , podemos efectuar la integral sobre ϕ que nos da un factor 2π y la integral sobre θ utilizando (3.4)

$$I_{\theta} = \int_0^{\pi} \delta(\hbar^2 k q \cos\theta/m + \hbar^2 q^2/2m - \hbar\omega_{\vec{q}}) \sin\theta d\theta \quad ; \quad (3.6)$$

llamando x al argumento de la función δ tenemos $dx = -\hbar^2 k q/m \sin\theta$ y así

$$I_{\theta} = m/\hbar^2 kq \int_{-(\hbar^2 kq/m) + (\hbar^2 q^2/2m) - \hbar\omega_q}^{(\hbar^2 kq/m) + (\hbar^2 q^2/2m) - \hbar\omega_q} \delta(x) dx = m/\hbar^2 kq \quad , \quad (3.7)$$

en donde hemos hecho uso de la propiedad de la función delta:

$$\int_{-a}^b \delta(x) dx = 1 \quad , \quad \text{para } a, b > 0 \quad .$$

Esta última condición es la que nos da el rango de valores permitidos de \vec{q} para emisión y absorción en los diferentes mecanismos de dispersión.

Siguiendo un desarrollo análogo, se encuentra para el caso de emisión de fonones:

$$I_{\theta} = m/\hbar^2 kq \quad . \quad (3.7a)$$

Por lo tanto, al sustituir los resultados de la integración sobre θ y sobre ϕ en la expresión para τ , y separando ésta en sus partes correspondientes a la absorción y emisión de fonones se tiene que

$$\tau^{-1} = (mV/2\pi\hbar^3\vec{k}) \left\{ \int_{\vec{q}} |(\vec{k}+\vec{q}|H'|\vec{k})|^2 q dq + \int_{\vec{q}} |(\vec{k}-\vec{q}|H'|\vec{k})|^2 q dq \right\} \quad , \quad (3.8)$$

en donde los límites de integración dependen del mecanismo de dispersión.

3.2 Pérdida de Energía del Ensamble Electrónico

Entre los diferentes métodos que hay para calcular la razón promedio a la cual pierden energía los portadores de carga por dispersión, empleamos aquí un método bastante sencillo que consiste en calcular el cambio en el número de fonones con vector de onda \vec{q} , multiplicar esta expresión por la energía con un fonón de este vector de onda, integrar para toda \vec{q} permitida y dividir entre el número de portadores.

En la Ec. (3.1) tenemos la expresión para la probabilidad de transición de portadores debida a la emisión o absorción de un fonón. Es-

ta expresión multiplicada por la probabilidad de ocupación de los portadores y sumada para \vec{k} nos da el número total de fonones con vector de onda \vec{q} emitidos en un tiempo t . Restando los fonones absorbidos en este mismo intervalo tenemos

$$\begin{aligned}
 (\partial N_{\vec{q}}/\partial t)_e &= (2\pi/\hbar) \sum_{\vec{k}} \{ | \vec{k}-\vec{q}, N_{\vec{q}}+1 | H' | \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle|^2 \delta(E_{\vec{k}}-E_{\vec{k}-\vec{q}}) f(\vec{k}-\vec{q}) \\
 &\quad - | (\vec{k}+\vec{q}, N_{\vec{q}}-1 | H' | \vec{k}, N_{\vec{q}}) \rangle|^2 \delta(E_{\vec{k}+\vec{q}}-E_{\vec{k}}) f(\vec{k}+\vec{q}) \} . \quad (3.9)
 \end{aligned}$$

El cálculo de esta expresión se lleva a cabo en forma análoga al desarrollo para τ en la sección anterior. Pasamos de la suma sobre \vec{k} a una integración en el espacio \vec{k} en coordenadas esféricas, eligiendo el eje z a lo largo de \vec{q} y tomando el límite superior para \vec{k} como ∞ ya que $f(\vec{k})$ cae muy rápidamente con \vec{k} . Siguiendo este procedimiento se llega a

$$(\partial N_{\vec{q}}/\partial t)_e = (vm/h^3q) \int_{k=q/2-n\hbar\omega_{\vec{q}}/qh^2}^{\infty} \{ | (\vec{k}-\vec{q} | H' | \vec{k}) \rangle|^2 f(\vec{k}-\vec{q}) - | (\vec{k}+\vec{q} | H' | \vec{k}) \rangle|^2 f(\vec{k}+\vec{q}) \} k dk \quad (3.10)$$

Por tanto, de acuerdo con lo definido en el inicio de esta sección, tenemos para la pérdida de energía promedio de los portadores

$$\langle dE/dt \rangle_{\text{disp}} = -(1/nV) \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q}} (\partial N_{\vec{q}}/\partial t)_e \quad (3.11)$$

3.3 Resultados para los Diferentes Mecanismos de Dispersión

Como puede verse de las expresiones generales para el tiempo de relajamiento y el cambio en la concentración de fonones, debemos dar el elemento de matriz para la transición en cada caso particular.

3.3.1 Dispersión por Modos Acústicos

Para la dispersión por modos acústicos, el elemento de matriz está dado por

$$| (\vec{k}+\vec{q} | H' | \vec{k}) \rangle_a^2 = (i\hbar\omega_a/2V\rho u^2) (N_{\vec{q}}+1/2+\Delta N_{\vec{q}}/2) \quad , \quad (3.12)$$

donde ρ es la densidad del cristal, u es la velocidad de las ondas longitudinales que son las que intervienen en la dispersión, $\Delta N_{\vec{q}}$ es igual a 1 para la emisión y a-1 para la absorción e I es la intensidad de excitación. Utilizando esta expresión y para $N_{\vec{q}}$, $N(\hbar\omega_{\vec{q}}) \approx k_0 T / \hbar\omega_{\vec{q}}$, resulta para el tiempo de relajamiento:

$$\tau_a^{-1} = E^{1/2} (\sqrt{2} m^3 / 2 k_0 T) / (\hbar^4 u \rho \pi) \quad . \quad (3.13)$$

Por otra parte, suponiendo para la función de distribución de los portadores una distribución maxwelliana del tipo (2.17), se tiene que

$$\langle dE/dt \rangle_{ac} = (2m^5 k_0^3 T_e / \pi^3)^{1/2} (8I / \hbar^4 \rho) (1 - T/T_e) \quad , \quad (3.14)$$

donde T es la temperatura de la red y T_e es la del sistema electrónico.

3.3.2 Dispersión Piezoeléctrica

Quando una onda acústica se propaga en un material piezoeléctrico, aparece un campo eléctrico paralelo a la dirección de propagación dado por

$$E_i = p_{ijk} e_{jk} / \epsilon \quad , \quad (3.15)$$

siendo i la dirección de propagación, p_{ijk} una componente del tensor de tensión y ϵ la constante dieléctrica. Debido a este campo, los electrones adquieren una energía potencial adicional expresada como

$$eV = e p_{ijk} e_{jk} / q \epsilon \quad . \quad (3.16)$$

Tomando este potencial como el de perturbación se tiene para el elemento de matriz en esta dispersión

$$| \langle \vec{k}' | H'_{pz} | \vec{k} \rangle |^2 = e^2 p^2 k_0 T / 2 \epsilon \rho \omega_{pz}^2 V \quad , \quad (3.17)$$

y entonces el tiempo de relajamiento resulta

$$\tau_{pz}^{-1} = (m/8)^{1/2} (p q e / \hbar \epsilon \omega_{pz})^2 (k_0 T / \pi \rho) E^{-1/2} \quad . \quad (3.18)$$

Finalmente, se obtiene que la pérdida de energía del sistema electrónico por dispersión piezoeléctrica es

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{pz} = -(\pi/4\rho)(peq/\epsilon)^2(m/2)^{1/2}E^{-1/2} \quad (3.19)$$

3.3.3 Dispersión Polar-Optica

Este tipo de dispersión se presenta en cristales polares, en los que, debido a la vibración de la rama óptica-longitudinal, aparece una polarización que origina la interacción de los portadores con estos fonones. Para este caso el elemento de matriz de la transición está dado por

$$|(\vec{k}\pm\vec{q}|H'_{po}|\vec{k})|^2 = (2\pi\hbar^2eF_o/Vmq^2)(N_{\vec{q}}+1/2+\Delta N_{\vec{q}}/2) \quad (3.20)$$

donde F_o es un campo eléctrico efectivo definido por

$$eF_o = (me^2\omega_o/\hbar)(\epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_o^{-1}) \quad (3.21)$$

y donde $\hbar\omega_o$ es la energía del fonón polar-óptico, $\Delta N_{\vec{q}} = \pm 1$ para la emisión y absorción, respectivamente, ϵ_o es la constante dieléctrica estática y ϵ_∞ la constante dieléctrica para altas frecuencias.

Con este elemento de matriz, calculamos τ para la dispersión polar-óptica resultando

$$\tau_{po}^{-1} = 2eF_o \left\{ N_{\vec{q}} \sinh^{-1}(E/\hbar\omega_o)^{1/2} + (N_{\vec{q}}+1) \sinh^{-1}(E/\hbar\omega_o - 1)^{1/2} \right\} (2mE)^{1/2} \quad (3.22)$$

Aunque en este caso τ_{po} no es exactamente un tiempo de relajamiento, nos permite calcular la razón de cambio de energía del sistema electrónico debido a este mecanismo, a partir de la diferencia de las probabilidades de absorción y emisión de fonones ópticos, resultando

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{po} = 2eF_o \hbar\omega_o \left\{ N_{\vec{q}} \sinh^{-1}(E/\hbar\omega_o)^{1/2} - (N_{\vec{q}}+1) \sinh^{-1}(E/\hbar\omega_o - 1)^{1/2} \right\} (2mE)^{-1/2} \quad (3.23)$$

Cuando podemos suponer una distribución maxwelliana con una temperatura T_e para el sistema electrónico, podemos promediar la expresión (3.23) para

obtener la razón promedio de pérdida de energía de los portadores. Encontramos que

$$\left\langle \frac{dE}{dt} \right\rangle_{po} = 2 \left(\frac{\hbar\omega_o}{m\pi} \right)^{1/2} eF_o \left| \frac{\exp(x_o - x_e) - 1}{\exp x_o - 1} \right| \left(\frac{x_e}{2} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{x_e}{2}\right) K_o\left(\frac{x_e}{2}\right), \quad (3.24)$$

en donde $x_o = \hbar\omega_o/k_o T$ y $x_e = \hbar\omega_e/k_o T_e$ y K_o es la función de Bessel modificada de orden 0.

3.3.4 Dispersión Electrón-Electrón

El tratamiento para la dispersión interelectrónica es diferente del efectuado para las interacciones de los portadores con la red.

La expresión que a continuación damos para la pérdida de energía de los portadores por interacción electrón-electrón se obtuvo estudiando el frenado de electrones rápidos en metales^(12,35)

$$\langle dE/dt \rangle \approx -4\pi n e^*{}^4 (2mE)^{-1/2}, \quad (3.25)$$

donde n es la concentración electrónica y e^* es una carga electrónica efectiva que toma en cuenta la polarización dieléctrica del medio, y está definida por $(e^*/e)^2 = 1/\epsilon$, siendo ϵ una constante dieléctrica que depende de la velocidad de los electrones.

Una vez que hemos visto cuáles son los principales mecanismos de pérdida de energía del sistema electrónico, es interesante revisar bajo qué condiciones uno u otro de éstos domina a los demás. Desde luego, el que un mecanismo domine depende entre otras cosas del material.

Como estamos interesados en semiconductores $A^3 - B^5$ haremos algunas consideraciones válidas para estos compuestos. Cuando la densidad de excitación es baja y la energía fotónica pequeña, de manera tal que la energía en exceso de los electrones fotoexcitados es menor que la energía de los fonones ópticos, los electrones se relajan por interacción con la rama fonónica acústica y por interacción con el mar de electrones en el mínimo de la banda de conducción.

Aun cuando la densidad de excitación sea pequeña, la distribución inicial se aleatoriza aumentando el sistema electrónico su temperatura, aunque su diferencia con la temperatura de la red sea pequeña. Si la

densidad de excitación es baja, pero la energía $h\nu$ de los fotones excitantes es bastante mayor que la energía de la brecha, entonces la posición energética de los electrones fotoexcitados permite que inicialmente sea emitido un número entero de fonones ópticos, y que al llegar los electrones relajados al fondo de la banda de conducción se repita el primer caso descrito.

Cuando la densidad de excitación sobrepasa un número crítico n_c que discutiremos en la segunda parte de este trabajo, la interacción electrón-electrón ya es importante y compite fuertemente con la dispersión polar-óptica.

Aquí, a modo de ejemplo presentamos en la Fig. 3 las curvas teóricas calculadas por Ulbrich⁽¹⁶⁾ usando parámetros para GaAs. En tales curvas considera que el mecanismo de dispersión dominante es la interacción electrón-electrón, y suponiendo esto calcula la contribución de la dispersión polar-óptica, acústica y piezoeléctrica de manera independiente, graficando en forma separada la suma de las contribuciones de estos tres mecanismos.

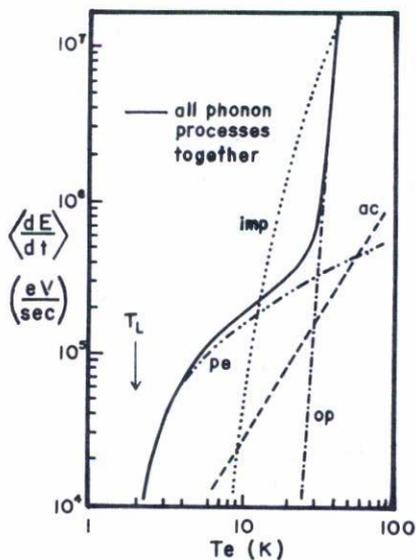


Fig. 3 Pérdida de energía promedio de los electrones suponiendo una distribución electrónica Maxwell-Boltzmann con una temperatura T_e .

4. RECOMBINACION RADIATIVA

Vimos en la sección anterior los mecanismos mediante los cuales una concentración de portadores en desequilibrio se relaja al fondo de la banda de conducción, llegando a una situación de cuasiequilibrio. Para regresar a la situación inicial de equilibrio, los electrones fotoexcitados aún tienen que pasar a la banda de valencia eliminándose de este modo el par electrón-hoyo; este es el proceso de recombinación.

De los diferentes procesos de recombinación, nos restringimos al de recombinación radiativa, debido a que nuestro estudio experimental se realiza con la técnica de espectroscopía óptica. La recombinación radiativa es el proceso en el cual al pasar el electrón de la banda de conducción a la banda de valencia, la energía liberada se consume en emisión de radiación. El espectro así obtenido contiene información acerca del comportamiento de los portadores en el semiconductor.

La emisión de radiación puede ser causada por la recombinación directa de un electrón en la banda de conducción con un hoyo de la banda de valencia; otro posible camino es la transición llamada libre-ligado, en la cual el electrón puede pasar primero a un nivel donador o aceptor y de ahí a la banda de valencia⁽⁴⁰⁾, también puede aparecer en el espectro la recombinación entre parejas en la cual el electrón pasa de un nivel donador a un nivel aceptor^(41,42). Otro caso que se puede presentar es que el electrón forme primero un excitón con un hoyo, decayendo después el excitón por radiación con una energía poco menor a la diferencia ΔE ⁽⁴³⁾.

La intensidad de luminiscencia para la recombinación banda-banda está dada por⁽⁴⁴⁾

$$I(h\nu) \propto (h\nu)^2 \exp \left[\frac{h\nu - E_g}{k_0 T} \right], \quad (4.1)$$

en donde $h\nu$ es la energía del fotón emitido, E_g la energía del gap, k_0 la constante de Boltzmann y T , como veremos más adelante, corresponde a la temperatura del sistema electrónico.

Para el caso de transiciones libre-ligado⁽⁴⁴⁾, la intensidad de luminiscencia se expresa como

$$I(h\nu) \sim (h\nu - E_g + E_i)^{1/2} \cdot \exp \left\{ - \frac{h\nu - E_g + E_i}{k_0 T} \right\},$$

donde E_i representa la energía de ionización de impurezas.

5. CONCLUSIONES

Hemos presentado en este trabajo una revisión de los conceptos teóricos necesarios para poder aplicar la técnica de fotoluminiscencia al estudio de la dinámica de portadores de carga fuertemente excitados. De esta manera, presentamos la caracterización del sistema de portadores en desequilibrio, su camino hacia una situación de cuasi-equilibrio mediante los diferentes procesos de dispersión y su posterior regreso a la situación de equilibrio original.

Estos conceptos los aplicaremos, en un trabajo posterior, al estudio del calentamiento del sistema electrónico en dos semiconductores polares: el GaAs y el GaN. Para esto aplicaremos la técnica de fotoluminiscencia, y así, del análisis de los espectros de la recombinación radiativa, determinaremos si es posible o no representar al sistema electrónico por una distribución Maxwell-Boltzmann, así como los mecanismos de relajamiento dominantes.

REFERENCIAS

1. L. Landau y A. Komanejez, *Physik Z. Sowjetunion*, 6 (1934) 163.
2. B. Davydov, *Physik Z. Sowjetunion*, 9 (1936) 433.
3. H. Frölich y F. Seitz, *Phys. Rev.*, 79 (1950) 526.
4. W. Shockley, *Bell. Sistem. Tech. J.*, 30 (1951) 990.
5. W. Shockley, *Electrons and Holes in Semiconductors*, Van Nostrand (1950).
6. W. Shockley, G.L. Pearson y J.R. Haynes, *Bell. Sistem. Tech. J.*, 28 (1949) 344.
7. E.J. Ryder, *Phys. Rev.*, 90 (1950) 766.
8. G.L. Pearson, *Phys. Rev.*, 74 (1948) 223.
9. J. Bardeen et al., *Phys. Rev.*, 74 (1949) 1208.
10. B.K. Ridley, *Solid State Commun.*, 1 (1963) 88.
11. J.B. Gunn, *I.B.M. J. Res. Devel.*, 8 (1964) 141.
12. R. Stratton, *Proc. Roy. Soc.*, A242 (1957) 355; *ibid.* A246 (1958) 406.
13. C.B. A la Gillaume y P.H. Lavaillard, en *Proceedings of the Seventh International Conference on the Physics of Semiconductors*, París (1964).
14. J. Shah y R.C.C. Leite, *Phys. Rev. Letters*, 22 (1969) 1304.
15. R. Ulbrich, *Phys. Rev. Letters*, 27 (1971) 1512.
16. R. Ulbrich, *Phys. Rev.*, B8 (1973) 5719.

17. S. Permogorov, Phys. Stat. Sol., b68 (1975) 9.
18. A. Zehe y G. Röpke, Phys. Stat. Sol., b67 (1975) 169.
19. T.W. Nee, C.D. Cantrell, J.F. Scott y S.G. Bishop, Phys. Rev., B17 (1978) 3936.
20. E. Gross, S. Permogorov, Y.A. Morosenko y B. Kharlomov, Phys. Stat. Sol., b59 (1973) 554.
21. R. Schwabe, A. Zehe y T. Haensel, Kristall und Technik., 11 (1976) 543.
22. H.G. Grimmeiss y B. Monemar, J. Appl. Phys., 41 (1970) 4054.
23. R.C.C. Leite, Solid-State Elect., 21 (1978) 177.
24. Ver por ejemplo J.I. Pankove, Optical processes in semiconductors, Dover (1971).
25. E.M. Conwell, Solid State Physics, suplemento 9 (1967).
26. J.I. Pankove, Topics in Applied Physics, 17 (1977) 1.
27. D. Genzov y K.H. Herrmann, en Grundlagen aktiver elektronischer Bauelemente, S.195, Leipzig (1972).
28. A.F. Makhov, Soviet Physics-Solid State (English transl.), 2 (1960) 1934.
29. C.I. Radford et al., Journal Phys., C5 (1972) 511.
30. A. Zehe, Revista Mexicana de Física, 26 (1979) 189.
31. A. Zylbersztejn, Phys. Rev., 127 (1962) 744.
32. K.V. Shalimova, Física de los semiconductores, MIR (1975).
33. R. Ulbrich, Solid State Elect., 21 (1978) 51.
34. W.E. Pinson y R. Bray, Phys. Rev., 136 (1964) 1449.
35. H. Frölich y B.C. Paranjape, Proc. Phys. Soc., B69 (1956) 21.
36. C.J. Hearn, Proc. Phys. Soc., 86 (1965) 881.
37. A. Hasegawa y J. Yamashita, J. Phys. Soc. Japan, 17 (1962) 1751.
38. I.M. Dykman y P.M. Tomchuck, Soviet Phys. Solid State (English transl.), 2 (1961) 1988; ibid. 3 (1962) 1393.
39. L.I. Schiff, Quantum mechanics, McGraw Hill (1968).
40. J.A. Rossi, C.M. Wolfe y J.O. Dimmock, Phys. Rev. Letters, 25 (1970) 1614.
41. P.B. Klein, J. Comas y S.J. Bishop, J. Appl. Phys., 50 (1979) 4327.
42. E. Kartheuser y R. Evrard, Phys. Rev., B21 (1980) 648.
43. M.A. Gilileo, P.T. Bailey y D.E. Hill, Phys. Rev., 174 (1968) 898.
44. A. Mooradian y H.Y. Fan, Phys. Rev., 148 (1966) 873.