

Contribución de la banda "split-off" al cálculo de la función dieléctrica en el silicio

M.A. PALOMINO Y H. NAVARRO*

Instituto de Física Luis Rivera Terrazas

Universidad Autónoma de Puebla

Apartado postal J-48, 72520 Puebla, Pue., México

Recibido el 5 de noviembre de 1992; aceptado el 2 de febrero de 1993

RESUMEN. Se calcula la contribución a la función dieléctrica de las transiciones de las bandas dobles de valencia: la de hoyos pesados y hoyos ligeros a la banda "split-off", además de las transiciones ya estudiadas entre las dos primeras bandas, en presencia de radiación incidente del infrarrojo lejano. Con esta función dieléctrica se encuentra la curva de absorción y se obtiene que se ajusta mucho mejor a los resultados experimentales. En dicho ajuste se han parámetros con valores más aceptables de acuerdo con la teoría.

ABSTRACT. The contribution to the dielectric function is calculated from the heavy and light hole-bands to the split-off band, besides the already studied transition bands between the two first bands by interaction of far infrared incidental radiation. The absorption curve is found by this dielectric function which is much better adjusted to experimental results. In the adjustment mentioned above the parameters are found to be with more accurate values according to theory.

PACS: 78.50.Ge

1. INTRODUCCIÓN

El propósito de este artículo es resaltar la importancia de las transiciones de las bandas degeneradas de hoyos pesados y ligeros a la banda "split-off" en el cálculo de la función dieléctrica del silicio, que describe la respuesta a la incidencia de radiación del infrarrojo lejano (aproximadamente entre 20-120 μm , 10 a 60 meV).

En esta región espectral, es de interés el examen de semiconductores fuertemente impurificados con impurezas de carácter aceptor, formando materiales tipo *p*. En este caso si la concentración de aceptores es suficientemente alta el extremo superior de las bandas de valencia es poblado por un gas de hoyos electrónicos que puede estar degenerado o no [1]. Es en este caso que las transiciones entre las diferentes bandas de valencia determinan las propiedades ópticas de un semiconductor como el germanio o el silicio ante la incidencia de radiación de estas energías. Otro problema físico en que este tipo de transiciones es determinante es el de la absorción de la misma radiación por los condensados de hoyos y electrones, que formando auténticas gotas aparecen en diversos semiconductores. A este fenómeno se le denomina "gotas de hoyos y electrones" (GHE) [2]. En estas GHE, tanto los electrones como los hoyos forman "mares" de Fermi, ocupando niveles contiguos en las

*En sabático en el Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

bandas correspondientes hasta una energía máxima (E_{eF} y E_{hF} , respectivamente) definida únicamente por la temperatura. En este trabajo se comparan los cálculos descritos más adelante con resultados experimentales de curvas de absorción de radiación en el infrarrojo lejano producidas por GHE en silicio.

Se han escrito numerosos artículos destacando la inclusión de las transiciones interbanda entre la banda de hoyos pesados y hoyos ligeros, los cuales son degenerados en energía en $k = 0$, en el cálculo de la función dieléctrica en silicio y germanio, para el rango espectral mencionado. Para el germanio se han obtenido resultados satisfactorios al compararlos con los experimentales Murzin *et al.* [3]; y en el silicio, a pesar de haberse encontrado buenos resultados, los parámetros de ajuste, así como algunos efectos que aparecen en los espectros, no son del todo satisfactorios [4]. La razón física de esto estriba en que la banda "split-off" se encuentra a sólo 44 meV en diferencia energética con respecto del fondo de las otras dos bandas de valencia en el silicio, contra 290 meV en el germanio. Es claro entonces que para radiación en la zona espectral considerada, las transiciones a esa banda están dentro del intervalo espectral examinado para el caso del Si, y que esto no es el caso para el Ge.

El objetivo de este trabajo, es el de incluir las transiciones de las bandas de hoyos pesados y hoyos ligeros a la banda "split-off", en el cálculo de la función dieléctrica para el silicio. Y con estos resultados ya completos obtener un mejor ajuste de los espectros de absorción de radiación incidente del infrarrojo lejano en GHE en silicio [4].

Para ello se presenta en la Sec. 2 la teoría de absorción de radiación por gotas de hoyos electrones (GHE), en la región de oscilaciones del plasma incluyendo las transiciones interbanda e intrabanda en el silicio. En la Sec. 3 se hace el cálculo de la función dieléctrica, y con ésta se obtienen las curvas de absorción que se comparan con los espectros de absorción experimentales y se discute el ajuste.

2. ABSORCIÓN DE RADIACIÓN POR GOTAS DE HOYOS ELECTRONES (GHE) EN EL SILICIO

El problema de la atenuación electromagnética para las gotas de hoyos-electrones, puede ser descrita por la teoría general desarrollada por Mie [5], basada sobre una solución formal de las ecuaciones de Maxwell, sujeta a las condiciones de frontera de las superficies en cuestión.

En el límite de pequeñas gotas cuyo radio R satisface la condición $R \ll \lambda/\sqrt{\epsilon_0}$, donde λ es la longitud de onda de la radiación incidente y ϵ_0 es la constante dieléctrica del material, la expansión de Mie, puede ser simplificada, porque en este límite cada gota se encuentra en la presencia de un campo eléctrico uniforme, el cual se acopla al modo dipolar de la gota, y los demás términos de la expansión de Mie incluyen factores de la forma $(\sqrt{\epsilon_0} R/\lambda)^2$ o potencias mayores, que son mucho menores que uno, y que por lo tanto pueden ser despreciados. Con estas consideraciones el primer término para la sección transversal es [6]

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{8\pi^2}{\lambda} \sqrt{\epsilon_0} R^3 \text{Im} \left\{ \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \right\}. \quad (1)$$

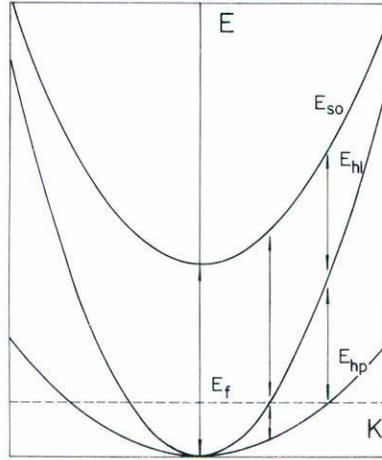


FIGURA 1. Diagrama que muestra las diferentes transiciones interbanda E_F (Energía de Fermi) que está a 14.4 meV para las GHE en el silicio.

Para el silicio, usando $\epsilon_0 = 11.4$, y longitudes de onda de la radiación incidente en el infrarrojo lejano (250 a 25 μm o 5 a 50 meV) y para radios de las gotas de 0.75 μm [7, 8] se cumple muy bien la desigualdad $R \ll \lambda/\sqrt{\epsilon_0}$, y por lo tanto la Ec. (1) nos debe proporcionar un buen valor para la absorción donde ϵ es la función dieléctrica que resta por calcular.

Una gota GHE puede considerarse como un plasma inmerso en una pequeña región del cristal. Este plasma está compuesto de dos tipos de partículas con cargas opuestas que son los hoyos y los electrones. La respuesta a la radiación incidente sobre una de estas gotas, será la misma que la de un plasma, por lo tanto es de esperarse que la función dieléctrica para las GHE contenga un término de tipo Drude que se origina de la excitación de oscilaciones colectivas y amortiguadas del plasma. Adicional a este término Murzin *et al.* [3] fueron los primeros en darse cuenta en las GHE del germanio que deben considerarse las transiciones entre las bandas de hoyos pesados y hoyos ligeros, pues tienen una contribución importante a la función dieléctrica para el cálculo de la absorción.

En este trabajo también se ha incluido las transiciones a la banda "split-off", que se encuentra en el silicio a 44 meV en $k = 0$ de las otras dos, y que por lo tanto deben tener una contribución importante en las transiciones en esta región espectral, a diferencia de la banda "split-off" en el germanio ubicada a 290 meV por abajo de las otras bandas (véase la Fig. 1).

En el caso general la contribución de diferentes transiciones electrónicas a la permisividad del sistema está dada de acuerdo con Ehrenreich y Cohen [9] por

$$\epsilon = -\frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{nn'} \frac{(f_n - f_{n'})(E_n - E_{n'}) |(\rho_{\mathbf{q}})_{nn'}|^2}{(E_n - E_{n'})^2 - (\omega^2 + i\gamma'\omega)}, \quad (2)$$

donde la sumatoria se extiende sobre todos los estados iniciales de energía E_n y finales,

$E_{n'}$, f_n y $f_{n'}$ son las correspondientes funciones de distribución de Fermi, \mathbf{q} es el vector de onda de la radiación incidente, $|(\rho_{\mathbf{q}})_{nn'}|^2$ son los elementos de matriz del operador densidad y γ' es la constante de amortiguación de las transiciones interbanda.

El elemento de matriz del operador de densidad fue calculado para las transiciones entre las bandas de hoyos pesados y hoyos ligeros del Si y Ge en la aproximación esférica por Combescot y Noziers [10] y obtuvieron, en el límite de q pequeñas,

$$|(\rho_{\mathbf{q}})_{nn'}|^2 \simeq \frac{3}{4} \frac{q^2}{k^2} \text{sen}^2 \alpha, \quad (3)$$

donde α es el ángulo entre \mathbf{k} y \mathbf{q} .

Este elemento de matriz del operador densidad puede ser expresado como un desarrollo en series de potencias de q , ya que cuando Ehrenreich y Cohen obtuvieron la expresión para la constante dieléctrica, mostraron que para valores pequeños dicho elemento de matriz coincide con el acoplamiento entre estados de las diferentes bandas:

$$|(\rho_{\mathbf{q}})_{nn'}|^2 = \rho_0^2 + 2\rho_0\rho_1 \frac{q}{k} + \rho_1^2 \frac{q^2}{k^2} + \dots \quad (4)$$

Al sustituir la Ec. (4) en la Ec. (2) y entonces dividir entre q^2 , los primeros dos términos deben cancelarse con el fin de tener un resultado físicamente aceptable en el límite $q \rightarrow 0$. En el mismo límite los términos con potencias mayores que q^2 tenderán a cero, por lo que el único término relevante debe tener la forma

$$|(\rho_{\mathbf{q}})_{nn'}|^2 \approx \eta \frac{q^2}{k^2}, \quad (5)$$

siendo η el factor que nos da la magnitud del acoplamiento entre estados de diferentes bandas y que esperamos, para el cálculo de las transiciones a la banda "split-off", que sea menor que el calculado por Combescot y Noziers para transiciones entre las bandas de hoyos pesados y ligeros.

De lo anterior se desprende que la expresión para la función dieléctrica será la siguiente:

$$\epsilon = \epsilon_0 - \frac{\epsilon_0 \omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} + \epsilon_1 + i\epsilon_2, \quad (6)$$

donde el segundo sumando del lado derecho está asociado con las transiciones interbanda y representa la contribución de tipo Drude con

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0} \left(\frac{n_e}{m_{0e}} + \frac{n_1}{m_1} + \frac{n_2}{m_2} \right), \quad (7)$$

siendo n_e , n_1 y n_2 la densidad de electrones, hoyos pesados y hoyos ligeros dentro de la gota, y m_{0e} , m_1 y m_2 son las masas ópticas del electrón, hoyo pesado y hoyo ligero,

respectivamente. La relación entre la concentración relativa y las masas de los hoyos en la aproximación esférica es

$$\left(\frac{n_2}{n_1}\right) = \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{\frac{3}{2}} = \rho^{\frac{3}{2}}. \tag{8}$$

Considerando que $n_1 + n_2 = n_e$ se obtiene

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 n_0}{\epsilon_0} \left(\frac{1}{m_{0e}} + \frac{1}{m_1} \frac{1}{1 + \rho^{\frac{3}{2}}} + \frac{1}{m_2} \frac{\rho^{\frac{3}{2}}}{1 + \rho^{\frac{3}{2}}} \right). \tag{9}$$

Los dos últimos términos de la Ec. (6) son los que proporcionan la contribución de las transiciones interbanda. Sustituyendo la Ec. (6) en la Ec. (1) se obtiene para la absorción

$$\sigma = \frac{8\pi^2}{\lambda} \sqrt{\epsilon_0} r^3 \frac{-\epsilon'_2 \omega^2 (\gamma^2 + \omega^2) + \omega \gamma \omega_0^2}{(\omega_0^2 - \epsilon'_1 \omega^2 - \epsilon'_2 \gamma \omega - \omega^2)^2 + (\gamma \omega + \epsilon' \gamma \omega - \epsilon'_2 \omega^2)^2}, \tag{10}$$

donde $\epsilon' = \epsilon_1/3$, $\epsilon'_2 = \epsilon_2/3$ y $\omega_0^2 = \omega_p^2/3$.

3. CÁLCULO DE LA FUNCIÓN DIELECTRICA PARA LAS TRANSICIONES INTERBANDA

La parte correspondiente a la permisividad asociada con las transiciones entre las bandas de valencia puede ser calculada usando coordenadas esféricas para el cuasimomento k , de la Ec. (2)

$$\epsilon = -4\pi e^2 \frac{\eta}{(2\pi)^3} \int_k \int_\theta \int_\phi \frac{(f_{1k} - f_{2k})(E_{1k} - E_{2k}) d^3k}{(E_{1k} - E_{2k})^2 - (\omega^2 + i\gamma\omega)}, \tag{11}$$

donde las ecuaciones para las bandas de hoyos pesados y hoyos ligeros son [11]

$$E_{hp,hl} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left\{ A \mp \sqrt{B^2 + C^2 \text{sen}^2 \theta (\text{sen}^2 \theta \text{sen}^2 \phi \cos^2 \phi + \cos^2 \theta)} \right\}, \tag{12}$$

respectivamente, y

$$E_{so} = -\Delta + Ak^2$$

para la banda "split-off" [11] en unidades de $\hbar^2/2m$.

Para una degeneración completa ($T = 0$ K) la contribución a la función dieléctrica de las transiciones entre las bandas de hoyos pesados y hoyos ligeros, usando el elemento de matriz dado por Combescot y Noziers, es

$$\epsilon_{hp,hl} = -\frac{e^2 \eta}{\pi} \int_k^{k_F} \int_\theta \int_\phi \frac{E(k) \text{sen} \theta d\theta d\phi dk}{E^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}; \tag{13}$$

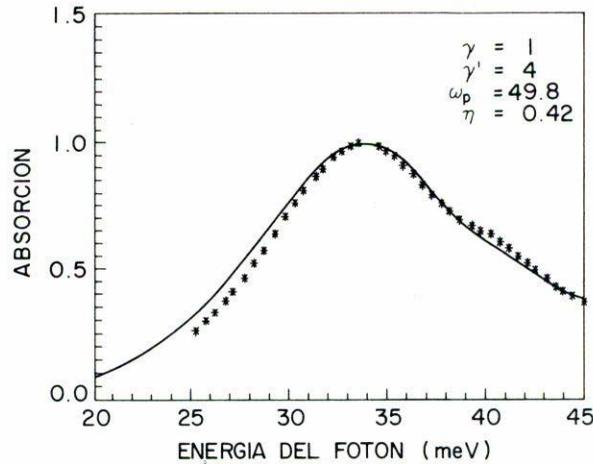


FIGURA 2. Curva de absorción debida a las GHE a $T = 17$ K. Los puntos muestran los valores experimentales.

y para las transiciones de las bandas de hoyos pesados y ligeros a la banda “split-off”

$$\epsilon_{hi,so} = -\frac{e^2\eta}{\pi} \int_k^{k_F} \int_{\theta} \int_{\phi} \frac{E(k) \text{sen } \theta \, d\theta \, d\phi \, dk}{E(k)^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \tag{14}$$

donde hi puede ser hoyos pesados y hoyos ligeros.

Estas integrales se calcularon numéricamente usando una energía de Fermi de los hoyos en las GHE en Si de 14.4 meV [12] y la constante dieléctrica de 11.4, con los parámetros para las bandas del Si de $A = -4.28$, $B = 0.68$, $C = 4.87$ y $\Delta = 44$ meV [8], y se obtuvieron los espectros de absorción mostrados en las Figs. 2 y 3 para diferentes temperaturas, quedando γ , γ' , ω_p y η como parámetros de ajuste.

Las curvas de la contribución a la función dieléctrica de las transiciones interbanda se muestran en las Figs. 4 y 5. En la Fig. 5, la correspondiente a la parte imaginaria de la función dieléctrica dividida, se ve la contribución notoria de la banda “split-off” con un máximo justo alrededor de 44 meV, aun bajo la circunstancia de que $\eta = 0.4$, parámetro que mide la “magnitud” de acoplamiento entre esta banda y las de los hoyos ligeros y pesados y que resulta en consecuencia sólo del orden de un 40 % de la que existe entre estas dos últimas bandas. Una situación similar se observa en la Fig. 4, para la parte real de la misma función dieléctrica aunque un poco menos contrastante.

Los mejores valores obtenidos en el ajuste se muestran en al Tabla I, para las dos temperaturas estudiadas.

El parámetro ω_p está asociado con la densidad de pares hoyo-electrón mediante la Ec. (9). Usando las masas calculadas por Brinkman y Rice [13] se hallan los valores mostrados en la última columna de la Tabla I, en concordancia con estimaciones teóricas y experimentales [4, 12, 2].

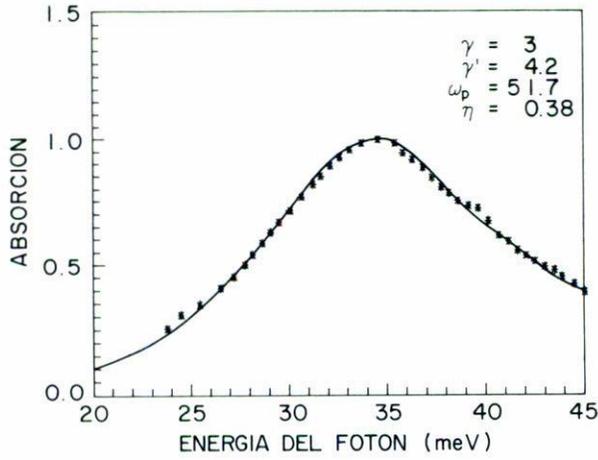


FIGURA 3. Curva de absorción debida a las GHE a $T = 12$ K. Los puntos muestran los valores experimentales.

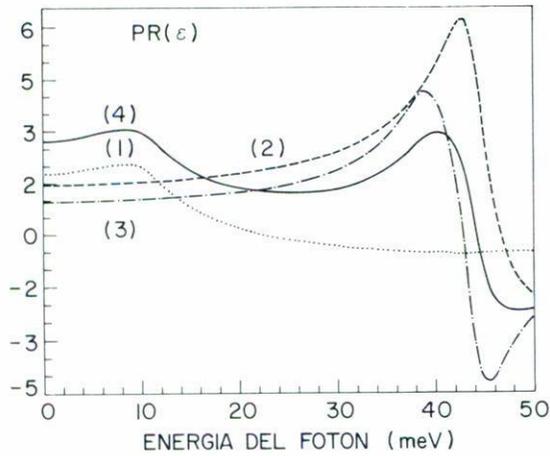


FIGURA 4. Parte real de la función dieléctrica dividida por ϵ_0 , de las diferentes transiciones interbanda: (1) Hoyos pesados a hoyos ligeros. (2) Hoyos pesados a la banda "split-off". (3) Hoyos ligeros a la banda "split-off". (4) La suma de los tres tipos de contribuciones anteriores considerando el factor $\eta = 0.4$

Por otro lado, la concentración de pares hoyo-electrón se encuentra en función de la temperatura de acuerdo con la siguiente relación [2]:

$$n(T) = n_0 [1 - \delta_n (k_B T)^2], \quad (15)$$

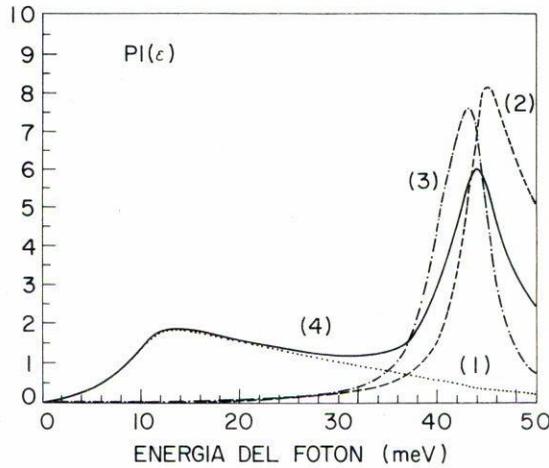


FIGURA 5. Parte imaginaria de la función dieléctrica dividida por ϵ_0 , de las diferentes transiciones interbanda: (1) Hoyos pesados a hoyos ligeros. (2) Hoyos pesados a la banda "split-off". (3) Hoyos ligeros a la banda "split-off". (4) La suma de los tres tipos de contribuciones anteriores considerando el factor $\eta = 0.4$.

TABLA I.

T	ω_p (meV)	γ (meV)	γ' (meV)	η	$n(T)$ cm^{-3}
12 K	51.7	3	4.2	0.38	3.45×10^{18}
17 K	49.8	1	4	0.42	3.2×10^{18}

donde δ_n ha sido calculada experimentalmente [2] y tiene un valor de 0.06 meV de acuerdo con Hammond *et al.* Los resultados obtenidos en este trabajo concuerdan bien con la Ec. (15), pues si se toma como base la concentración de pares hoyo-electrón para $T = 12$ K se obtiene para $T = 17$ K un valor de $n(T) = 3.21 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ en buena concordancia con el valor encontrado en el ajuste.

El valor de γ coincide con el ajuste hecho por los autores de la Ref. [4], quienes consideraron únicamente transiciones entre las bandas de hoyos pesados y ligeros.

No ocurre así para γ' , los mismos autores encontraron en el ajuste un valor de 12 meV, muy superior al esperado, reflejo de lo insuficiente del modelo que ignora la presencia de la banda "split-off" para el silicio. En este trabajo el valor obtenido resulta más adecuado pues se espera que γ y γ' sean del mismo orden de magnitud, ya que ambas describen procesos de dispersión de portadores por mecanismos de interacción análogos, aunque involucrando bandas donde los portadores tienen masas diferentes [16], además del hecho que sus valores disminuyen al incrementar la temperatura. Esto lo podemos atribuir a la disminución de la densidad de portadores en la GHE, y por tanto el aumento de los tiempos de colisión. El valor del parámetro η que se halló en el ajuste nos permite aproximarnos más a las curvas experimentales y explicar el cambio en la forma del descenso

de la absorción alrededor de 40 meV y el pequeño máximo secundario cerca de 44 meV, no justificados anteriormente, que son un reflejo de la presencia de las transiciones a la banda "split-off".

4. SUMARIO Y CONCLUSIONES

Hemos efectuado el cálculo de la función dieléctrica que da la respuesta para regiones espectrales en el infrarrojo lejano, entre $\lambda = 20$ a $100 \mu\text{m}$, incluyendo el conjunto completo de transiciones permisibles para el silicio tipo *p* o para el condensado de hoyos y electrones que se forma en este tipo de semiconductores. Esto consistió en incluir transiciones entre bandas de hoyos pesados a banda de ligeros, banda de hoyos pesados a la banda "split-off", y entre banda de hoyos ligeros a la misma "split-off". Se justifica la necesidad de tomar un elemento de matriz para el acoplamiento entre bandas de primer orden en \mathbf{q} , lo cual permite calcular numéricamente la parte real e imaginaria de la función dieléctrica. Los cálculos fueron aplicados al caso de gotas de hoyos y electrones en el silicio y se obtiene del ajuste un valor para la concentración de pares electrón-hueco igual a $n_0 = 3.4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, a 12 K, en concordancia con estimaciones teóricas y experimentales publicadas en la literatura [4, 12, 2].

REFERENCIAS

1. J.S. Blakemore, *Semiconductor Statistics*, Dover (1987).
2. F. Seitz, H. Ehrenreich, *Solid State Physics* **32**, Academic Press, Nueva York (1977).
3. V.N. Murzin, V.A. Zayats, V.L. Kononenko, *Sov. Phys. Solid* **17** (1976) 1783.
4. H. Navarro, H.G. Zarate and T. Timusk, *Solid State Commun.* **25** (1978) 1045.
5. H.C. Van de Hulst, en *Light Scattering by Small Particles*, Wiley, New York (1957).
6. J.H. Rose, H.B. Shore, T.M. Rice, *Physical Review* **B17** (1978) 752.
7. M. Capizzi, M. Benoit, C. a la Gwillaume, y J.C. Mc Groddy, *Solid State Commun.* **16** (1975) 709.
8. H. Navarro, Tesis Doctoral, McMaster University, Ontario, Canadá (1979).
9. H. Ehrenreich y M.H. Cohen, *Phys. Rev.* **115** (1959) 786.
10. M. Combescot y P. Noziers, *Solid State Commun.* **10** (1972) 301.
11. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 6a ed., Wiley.
12. R.B. Hammond, T.C. McGill y J.W. Mayer, *Phys. Rev.* **13** (1976) 3566.
13. W.F. Brinkman y T.M. Rice, *Phys. Rev.* **7** (1973) 1508.
14. J.C. Hensel, T.G. Phillips y G.A. Thomas, *Solid State Physics* **32**, ¿?F. Seitz, H. Ehrenreich, Academic Press, Nueva York (1977).
15. M.A. Vouk y E.C. Lightowers, *J. Phys. C* **8** (1975) 3695.
16. H.G. Zarate, J.P. Carbotte y T. Timusk, *Physical Review* **21** (1980) 4649.