

LECCION 9

PROPIEDADES OPTICAS DE LOS SEMICONDUCTORES

1) PARÁMETROS ÓPTICOS Y CONSTANTE DIELECTRICA

La interacción entre una onda electromagnética y un medio material puede describirse, desde un punto de vista macroscópico, mediante los llamados parámetros ópticos, relacionados con la función dieléctrica del material. Supongamos que una onda electromagnética incide sobre la superficie de un medio material semiinfinito (figura 1).

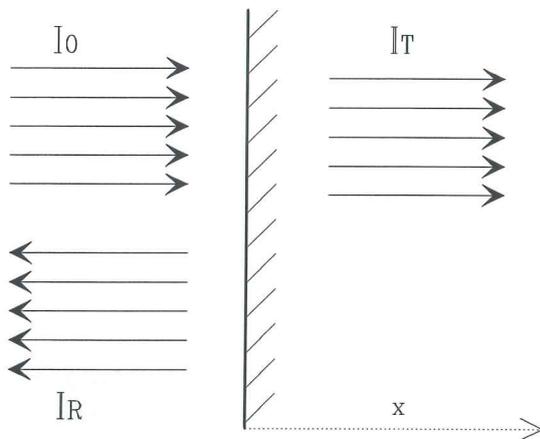


Figura 1

Si llamamos I_0 al flujo luminoso incidente e I_R al flujo luminoso reflejado, se define la reflectividad R del material como:

$$R = \frac{I_R}{I_0} \quad (1)$$

Si llamamos I_T al flujo transmitido, y α al coeficiente de absorción del material para dicha radiación, tendremos:

$$I_T = I_0 (1 - R) e^{-\alpha x} \quad (2)$$

Estos parámetros fenomenológicos están relacionados con la constante dieléctrica del material, que será, en general, una magnitud compleja: $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$. Dada la

definición del índice de refracción complejo, tenemos:

$$\begin{aligned} \epsilon &= \epsilon_1 + i\epsilon_2 = (n + i\kappa)^2 = n^2 - \kappa^2 + i2n\kappa \\ \epsilon_1 &= n^2 - \kappa^2 \\ \epsilon_2 &= 2n\kappa \end{aligned} \quad (3)$$

donde n es el índice de refracción y κ el índice de extinción. Recordemos la ecuación del campo eléctrico de la onda electromagnética en el medio material:

$$\vec{E}(x, t) = \vec{E}_0 e^{i(n - i\kappa)k_0 x - i\omega t} = \vec{E}_0 e^{-\kappa k_0 x} e^{i(nk_0 x - \omega t)} \quad (4)$$

Dado que el flujo luminoso es proporcional al cuadrado del módulo del campo eléctrico, tenemos:

$$I(x, t) = I(0) e^{-2\kappa k_0 x} = I(0) e^{-\frac{4\pi\kappa k_0}{\lambda_0} x} \quad (5)$$

Si comparamos esta ecuación con la del flujo transmitido (ecuación 2), obtenemos: $\alpha = 4\pi\kappa/\lambda_0$ donde λ_0 es la longitud de onda de la radiación electromagnética en el vacío. En cuanto a la reflectividad R , las ecuaciones de Fresnel para ondas con incidencia normal permiten obtener:

$$R = \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2} \quad (6)$$

Recordemos, por otra parte, que la constante dieléctrica de un medio material depende de su susceptibilidad eléctrica χ , a través de la relación $\epsilon = \epsilon_0(1 + \chi)$, y que χ no es más que la relación entre la polarización y el campo eléctrico: $\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E}$. Dado que la relación entre campo eléctrico y polarización es lineal y causal, de acuerdo con la teoría de la respuesta lineal, las partes real e imaginaria de la susceptibilidad eléctrica, y por tanto de la constante dieléctrica, no son independientes entre sí, sino que están relacionadas a través de las relaciones de Kramers-Krönig:

$$\epsilon_1(\omega) - 1 = \frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad \epsilon_2(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' [\epsilon_1(\omega') - 1]}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (7)$$

Esto significa que, en muchos casos, basta con medir uno de los parámetros ópticos de un material en un rango espectral suficientemente amplio, y a través de las ecuaciones 7, determinar los demás.

2) MECANISMOS DE ABSORCIÓN DE LA RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA EN UN SEMICONDUCTOR

En los semiconductores, debido al hecho de que muchas de sus propiedades pueden controlarse mediante impurezas, y variar de manera continua entre los valores típicos de los aislantes y valores próximos a los de los metales, existe una gran riqueza de fenómenos de absorción óptica, en los que están implicados diferentes mecanismos, según la naturaleza de las transiciones internas excitadas por la radiación electromagnética:

- Absorción intrínseca: transición de electrones desde la banda (o bandas) de valencia a la banda (o bandas) de conducción. En esta categoría hay que incluir también la absorción por estados ligados electrón hueco (excitones).
- Absorción extrínseca: transiciones entre los niveles internos de las impurezas y defectos o entre ellos y las bandas (o viceversa).
- Absorción por portadores libres, o por excitaciones colectivas de éstos (transiciones intrabanda).
- Absorción por vibraciones de la red (fonones).

3) CONSTANTE DIELECTRICA PARA UN MECANISMO DE ABSORCIÓN RESONANTE

Muchos de los mecanismos mencionados pueden describirse con suficiente precisión mediante un modelo sencillo de absorción resonante en un oscilador armónico, formado por una partícula de masa m y carga e , ligada mediante una fuerza elástica de constante $m\omega_0^2$, con cierto amortiguamiento Γ . La ecuación del movimiento que describe su interacción con un campo eléctrico de frecuencia ω será:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -m\omega_0^2 x - m\Gamma \frac{dx}{dt} - eE_0 e^{-i\omega t} \quad (8)$$

Si buscamos soluciones armónicas para el desplazamiento, $x = x_0 e^{-i\omega t}$:

$$\begin{aligned} -m\omega^2 x_0 &= -m\omega_0^2 x_0 + m\Gamma i\omega x_0 + eE_0 \\ x_0 &= \frac{e}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} E_0 \end{aligned} \quad (9)$$

El momento dipolar inducido será $p = e x_0$ y, si tenemos N dipolos por unidad de volumen, la polarización del medio será $P = N e x_0 = \epsilon_0 \chi E_0$, y, por tanto, la susceptibilidad eléctrica será:

$$\chi = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} = \frac{\epsilon}{\epsilon_0} - 1 \quad (10)$$

A partir de la ecuación 10 es fácil deducir las expresiones para la constante dieléctrica y para sus partes real e imaginaria:

$$\begin{aligned} \epsilon &= \epsilon_0 + \frac{Ne^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \\ \epsilon_1 = \epsilon_0 + \frac{Ne^2}{m} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} & \quad \epsilon_2 = \frac{Ne^2}{m} \frac{\Gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \end{aligned} \quad (11)$$

Las ecuaciones 11 son aplicables a muchos mecanismos de absorción de luz e ilustran tanto la contribución de un mecanismo dado a la constante dieléctrica, como la relación existente entre sus partes real e imaginaria. Si representamos ϵ_1 y ϵ_2 en función de la frecuencia, obtenemos las curvas que muestra la figura 2. Dichas curvas indican que la absorción resonante se reflejará en la parte imaginaria de la constante dieléctrica como un pico de absorción centrado en la frecuencia de resonancia y con una anchura proporcional al amortiguamiento.

La contribución a la parte real es más complicada. Para bajas frecuencias (inferiores a la de resonancia), la parte real tiende a una constante que refleja el hecho de que el mecanismo en cuestión es capaz de responder al campo y contribuir a la polarización del medio. Al acercarnos a la frecuencia de resonancia la parte real tiene un máximo que refleja el aumento resonante del desplazamiento. Inmediatamente por encima de la frecuencia de resonancia aparece una zona negativa (para la que el índice de

refracción sería imaginario puro y, por tanto, una onda de esa frecuencia no podría propagarse en el medio. A frecuencias mucho más altas, la constante dieléctrica tiende a la permitividad del vacío, indicando que el mecanismo en cuestión no puede responder a esas frecuencias, y, por tanto, no contribuye a la polarización del medio. Hay que subrayar, además, que para frecuencias bajas y altas la parte real de la constante dieléctrica (y, por tanto, el índice de

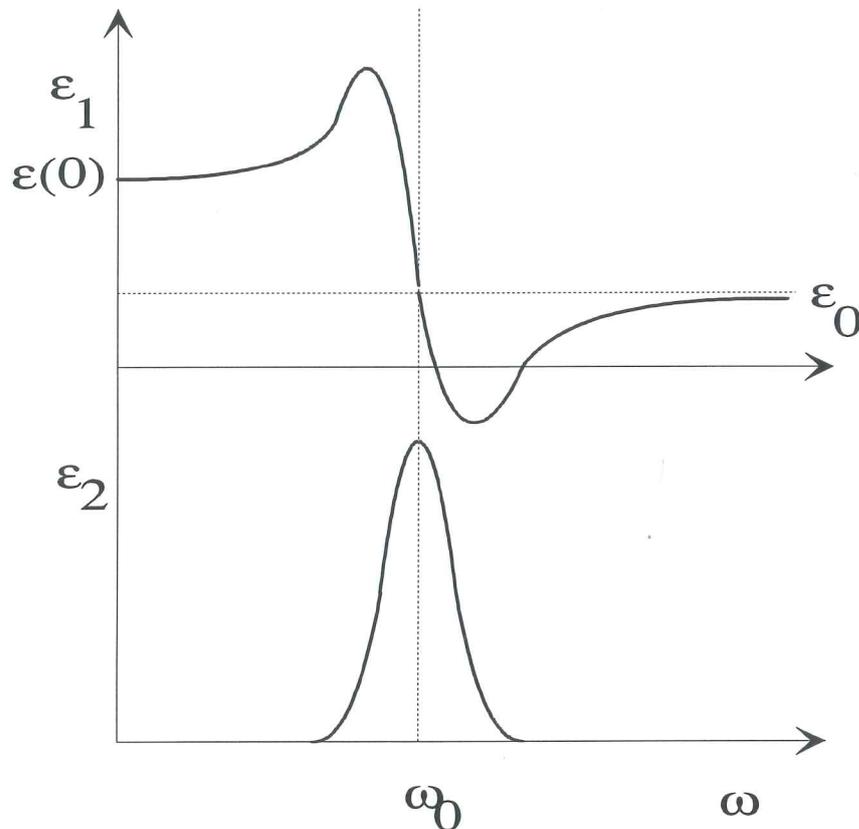


Fig. 2 : Partes real e imaginaria de la constante dieléctrica para una absorción resonante.

refracción) crece con la frecuencia. A estas zonas se les llama zonas de dispersión normal. Solo en torno a la frecuencia de resonancia existe una zona de dispersión anómala en la que la derivada de la parte real de la constante dieléctrica respecto a la frecuencia es negativa.

4) CONTRIBUCIÓN DE LAS VIBRACIONES DE LA RED A LA CONSTANTE DIELECTRICA DE UN SEMICONDUCTOR

El modelo descrito en la sección anterior es directamente aplicable al estudio de la absorción de luz por las vibraciones de los cristales polares. Existen muchos semiconductores (en particular los III-V y, en mayor medida, los II-VI) en los que el enlace es parcialmente iónico, es decir la carga electrónica no está distribuida simétricamente en el enlace, por lo que las vibraciones de la red tienen carácter polar, es decir, llevan asociada una onda de momento dipolar eléctrico, y responden a campos eléctricos de frecuencia inferior a la suya, lo que significa que contribuyen a la constante dieléctrica del material. Cuando una onda electromagnética se propaga por el cristal, dado que se trata de una onda transversal, excitará modos de vibración transversales, produciéndose una absorción resonante cuando la frecuencia de la onda electromagnética coincida

con la del modo. Las ecuaciones 11 son directamente aplicables con las siguientes modificaciones:

- La masa es, en este caso, la masa reducida anión-cación
- N es el número de celdas por unidad de volumen en el cristal
- La frecuencia de resonancia es la frecuencia del modo transversal óptico ω_{TO}
- A frecuencias mucho mayores que ω_{TO} , cuando las vibraciones de la red ya no contribuyen a la polarización del material, la constante dieléctrica está determinada por la contribución electrónica, y se representa como ϵ_e o $\epsilon(\infty)$.
- La carga asociada a cada ión depende de la ionicidad del material. Para cada material se define la llamada carga efectiva transversal, e_T^* , que será tanto mayor cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividad entre anión y catión.

Las partes real e imaginaria de la constante dieléctrica vienen entonces dadas por las ecuaciones 11, con las modificaciones que acabamos de comentar:

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= \epsilon(\infty) + \frac{Ne_T^{*2}}{M} \frac{\omega_{TO}^2 - \omega^2}{(\omega_{TO}^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \\ \epsilon_2 &= \frac{Ne_T^{*2}}{M} \frac{\Gamma \omega}{(\omega_{TO}^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2}\end{aligned}\tag{12}$$

Es fácil ver que el valor de la parte real para frecuencias mucho menores que la de resonancia es:

$$\epsilon_1(0) = \epsilon(\infty) + \frac{Ne_T^{*2}}{M\omega_{TO}^2}\tag{13}$$

Utilizando el valor de la parte real dado por la ecuación 13, es posible modificar las expresiones de la ecuación 12. Nos limitaremos al caso en que el amortiguamiento es despreciable:

$$\epsilon_1 = \epsilon(\infty) + \omega_{TO}^2 \frac{\epsilon_1(0) - \epsilon_1(\infty)}{\omega_{TO}^2 - \omega^2}\tag{14}$$

Se define ω_{LO} como la frecuencia a la cual la constante dieléctrica se anula. Es fácil ver que, con esa definición, se obtiene la siguiente relación:

$$\frac{\epsilon(0)}{\epsilon(\infty)} = \frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2}\tag{15}$$

que es la llamada relación de Lyddane-Sachs-Teller.

Veamos a continuación cual es la relación de dispersión, $\omega(k)$, de las ondas electromagnéticas en el semiconductor en el rango de frecuencias que estamos estudiando. Dicha relación viene dada por $k = n\omega/c$, o, lo que es lo mismo: $k^2 = n^2 \omega^2 / c^2 = \epsilon \omega^2 / c^2$. Sustituyendo el valor de la constante dieléctrica dado por la ecuación 14, obtenemos:

$$k^2 = \varepsilon(\infty) \frac{\omega^2}{c^2} + \omega_{TO}^2 \frac{\varepsilon_1(0) - \varepsilon_1(\infty)}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} \frac{\omega^2}{c^2} \quad (16)$$

Es fácil ver que para frecuencias pequeñas se obtiene una recta $\omega = ck / [\varepsilon(\infty)]^{1/2}$, y para frecuencias altas, una recta $\omega = ck / [\varepsilon(0)]^{1/2}$, lo que corresponde a la relación de dispersión para ondas electromagnéticas propagándose en un medio, con velocidades determinadas por los índices de refracción de baja y alta frecuencia respectivamente. Por otra parte, dada la definición de ω_{LO} , es obvio que, para dicha frecuencia, el vector de ondas se anula. Por el contrario, para ω_{TO} , el vector de ondas se hace infinito. Recordemos también que entre ambas frecuencias la constante dieléctrica se hace negativa, por lo que el índice de refracción es imaginario puro y no puede haber propagación de las ondas electromagnéticas, lo que significa que en ese intervalo el medio es opaco. Representando la ecuación 16 obtenemos:

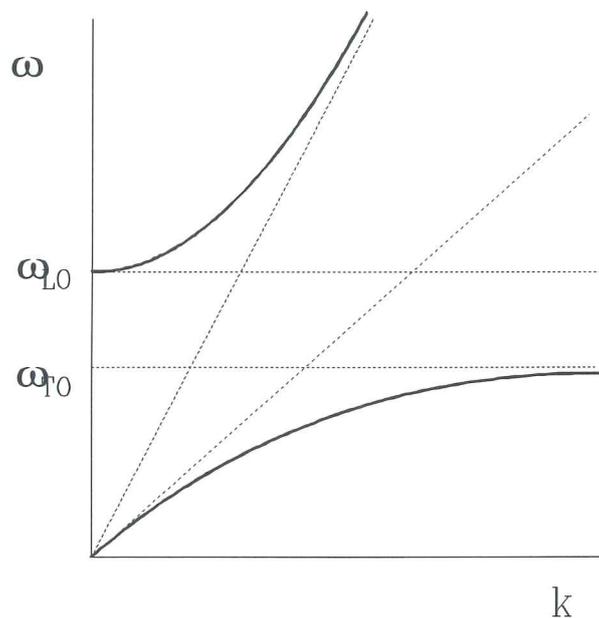


Figura3: relaciones de dispersión del polaritón

Vemos que, para frecuencias alejadas de la de resonancia (muy altas o tendentes a cero), la relación de dispersión corresponde a una onda electromagnética. Por el contrario, en la proximidades de la zona de opacidad, la velocidad de grupo $d\omega/dk$ tiende a cero, lo que significa que la excitación tiene carácter de fonón óptico. En realidad, la propagación de una onda, acoplada a las vibraciones de la red debe considerarse como una excitación con propiedades intermedias entre el fotón y el fonón, excitación que recibe el nombre de polaritón.

¿Cual es el significado de la frecuencia ω_{LO} , anteriormente definida? Ya hemos visto que, en principio, la onda electromagnética se acopla con las vibraciones transversales ópticas. Ahora bien, en el medio existen también vibraciones longitudinales ópticas. En principio, en un medio no polar, ambos modos tienen la misma frecuencia. Ahora bien, en un medio polar, al plantear las ecuaciones del movimiento, hemos de tener en cuenta que los fonones llevan asociada una onda

de polarización, $\mathbf{P} = \mathbf{P}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, la carga asociada a dicha onda será: $\rho = \nabla \cdot \mathbf{P} = i\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}$. Por tanto las ondas transversales no llevan asociada carga de polarización, pero sí las ondas longitudinales, lo que significa que aparecerá un campo eléctrico que dará origen a fuerzas eléctricas recuperadoras que habrá que añadir a las fuerzas elásticas. Dado que el vector desplazamiento en ausencia de cargas exteriores debe anularse, $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}_T = 0$. Donde hemos puesto \mathbf{P}_T para tener en cuenta el hecho de que la polarización tiene dos componentes, la electrónica y la iónica $\mathbf{P}_T = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_i = \epsilon_0 \chi_e \mathbf{E} + \mathbf{P}$. La condición de anulación del vector desplazamiento puede, pues, escribirse como $\mathbf{D} = \epsilon(\infty) \mathbf{E} + \mathbf{P} = 0$, de donde $\mathbf{E} = -\mathbf{P} / \epsilon(\infty)$. Podemos pues plantear la ecuación del movimiento para las vibraciones longitudinales ópticas, en ausencia de campos exteriores, pero en presencia del campo de polarización:

$$\frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -\omega_{TO}^2 \mathbf{x} + \frac{e_T^* \mathbf{E}}{M} = -\omega_{TO}^2 \mathbf{x} - \frac{e_T^* \mathbf{P}}{M \epsilon(\infty)} = -\left(\omega_{TO}^2 + \frac{N e_T^{*2}}{M \epsilon(\infty)}\right) \mathbf{x} = -\omega_{LO}^2 \mathbf{x} \quad (17)$$

Así pues, en los medios polares, el desdoblamiento entre los modos TO y LO es debido a las fuerzas recuperadoras eléctricas que aparecen como consecuencia del campo de polarización asociado al modo LO.

5) CONTRIBUCIÓN ELECTRÓNICA AL ÍNDICE DE REFRACCIÓN DE UN SEMICONDUCTOR

En la zona del espectro visible e infrarrojo próximo, el índice de refracción de los semiconductores está determinado principalmente por las transiciones de la banda de valencia a la banda de conducción. En casi todos los semiconductores las transiciones más intensas se observan en el ultravioleta, a energías en torno a 5 o 6 eV. En general, es siempre posible definir una energía de transición, llamada gap (o banda prohibida) de Penn, E_0 , y describir la interacción del medio con las ondas electromagnéticas como debida a una absorción resonante en dicha energía. No hay que confundir el **gap de Penn** E_0 con la **banda prohibida** E_g del material. Esta última corresponde a la diferencia entre el borde inferior de las bandas de conducción y el borde superior de las bandas de valencia, y determina el **frente de absorción** del semiconductor. El gap de Penn corresponde al pico más intenso que se observa en el espectro de reflectividad en el ultravioleta, y determina el **índice de refracción del material**.

Aplicando un modelo elemental de absorción resonante a los electrones de valencia, a cuya densidad llamamos N , con frecuencia de resonancia $\omega_0 = E_0/\hbar$ y sin amortiguamiento, se obtiene fácilmente que la constante dieléctrica del sistema viene dada por la expresión :

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{e^2 N}{m^* \epsilon_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \quad \omega_0 = \frac{E_0}{\hbar} \quad \omega_p = \sqrt{\frac{e^2 N}{m^* \epsilon_0}} \quad (18)$$

donde ω_p es la frecuencia del plasma del gas de electrones de valencia. De la ecuación 18 se obtiene fácilmente el índice de refracción del material y, para frecuencias mucho menores que las de resonancia, se obtiene, por desarrollo en serie, la fórmula de Cauchy.

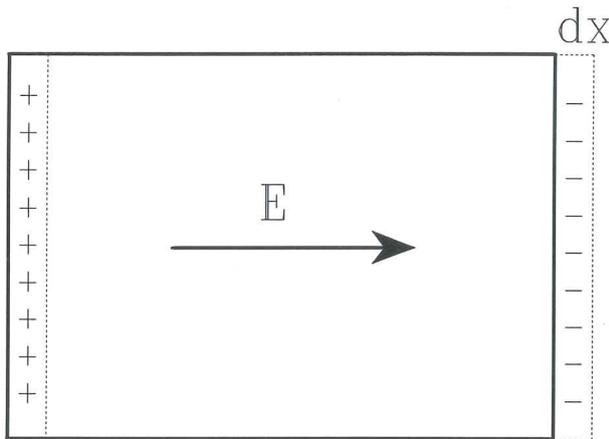
$$n(\omega) = \sqrt{\epsilon(\omega)} = \sqrt{1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2} \left(1 + \frac{\omega^2}{\omega_0^2}\right)} = n(0) + Cte \times \omega^2 = n(0) + \frac{Cte}{\lambda^2} \quad (19)$$

6) CONTRIBUCIÓN DE LOS PORTADORES LIBRES A LAS PROPIEDADES ÓPTICAS

Cuando existe una concentración suficientemente alta de portadores libres en una banda, el semiconductor puede llegar a tener un comportamiento metálico, lo que debe reflejarse en sus propiedades ópticas. Cuando los portadores en una banda son excitados mediante un campo eléctrico periódico, se producirá una disipación de energía debida a la resistencia eléctrica del material, lo que dará lugar a un fenómeno específico de absorción. En principio no es necesario cambiar el modelo que hemos venido usando hasta ahora. Basta con recordar que los portadores libres, precisamente por serlo, no están ligados por ninguna fuerza recuperadora, por lo que basta con anular la constante elástica, haciendo $\omega_0=0$ en las ecuaciones 11:

$$\epsilon = \epsilon_e + \frac{ne^2}{m^*} \frac{1}{-\omega^2 - i\Gamma} = \epsilon_e \left[1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\Gamma\omega)} \right]$$

$$\epsilon_1 = \epsilon_e \left[1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \Gamma^2} \right] \quad \epsilon_2 = \epsilon_e \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} \quad \omega_p^2 = \frac{ne^2}{m^* \epsilon_e} \quad (20)$$



Donde hemos introducido la frecuencia del plasma del gas de electrones libres. Es fácil ver que dicha frecuencia no es más que la frecuencia a que oscilaría el gas de electrones si fuese desplazado en bloque respecto al fondo de carga positiva que los compensa. Si el desplazamiento del gas electrónico fuese dx , ello daría lugar a una lámina cargada negativamente en la dirección del desplazamiento y, en consecuencia, aparecería una carga positiva no compensada en el otro extremo de la muestra tal como muestra la figura 4. El campo eléctrico así creado originaría una fuerza recuperadora. la ecuación

del movimiento de los electrones sería:

$$\frac{d^2(dx)}{dt^2} = \frac{F}{m^*} = -\frac{eE}{m^*} = -\frac{e^2 n}{\epsilon_e m^*} dx = -\omega_p^2 dx \quad (21)$$

Donde se ha utilizado la expresión del campo eléctrico entre dos láminas cargadas con densidad superficial $\sigma=en$. Hay que subrayar que en la expresión la frecuencia del plasma de los electrones libres aparece la constante dieléctrica electrónica. Ello es debido a que las oscilaciones del gas de electrones libres se produce en el seno del conjunto de los electrones de valencia. Para mayor simplicidad, si hacemos tender el amortiguamiento a cero, la parte imaginaria se anula (como era de esperar, ya que anulamos la disipación de energía). En cuanto a la parte real, las ecuaciones 20 muestran que para frecuencias inferiores a la del plasma, se hace negativa, lo que indica que el índice de refracción será imaginario puro y que, por tanto, dichas ondas no pueden propagarse en

el semiconductor, que pasa a tener comportamiento metálico (muy alta reflectividad) para esas frecuencias. Por el contrario, a frecuencias superiores a la del plasma, el semiconductor vuelve a ser transparente, siempre que la energía correspondiente a la frecuencia del plasma sea inferior a la banda prohibida. Esto significa que el dominio de transparencia de un semiconductor viene limitado por la concentración de electrones libres. Un semiconductor intrínseco es transparente en la región comprendida entre el modo LO y la banda prohibida. Al aumentar la concentración de portadores, la frecuencia del plasma va aumentando y acercándose al valor de la banda prohibida. La presencia de una concentración elevada de portadores libres conlleva, pues, la aparición de un frente de absorción hacia las longitudes de onda largas. Para calcular la forma característica de la absorción debida a los portadores libres, volvamos a considerar un amortiguamiento no nulo y calculemos el coeficiente de absorción, a partir del índice de extinción:

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{\epsilon_2}{2n\epsilon_0} = \frac{\epsilon_e}{2n\epsilon_0} \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3 + \Gamma^2 \omega^2} \\ \alpha &= \frac{4\pi\kappa}{\lambda} = \frac{2\omega n}{c} \frac{\epsilon_e}{2n\epsilon_0} \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3 + \Gamma^2 \omega^2} = \frac{\epsilon_e}{c\epsilon_0} \frac{\omega_p^2 \Gamma \omega}{\omega^3 + \Gamma^2 \omega^2} \end{aligned} \quad (22)$$

Resulta inmediato comprobar que para frecuencias altas, el coeficiente de absorción es inversamente proporcional al cuadrado de la frecuencia ω , lo que es lo mismo, proporcional al cuadrado de la longitud de onda. Es importante resaltar que la absorción sólo es no nula cuando el amortiguamiento es diferente de cero. Si identificamos el amortiguamiento con la inversa del tiempo de relajación, podemos relacionar el coeficiente de absorción por portadores libres con la conductividad del material:

$$\alpha = \frac{\epsilon_e}{c\epsilon_0} \frac{\omega_p^2}{\omega^2 \tau} = \frac{\epsilon_e}{c\epsilon_0} \frac{e^2 n}{\epsilon_e m^*} \frac{\lambda^2}{4\pi^2 \tau} = \frac{\sigma}{4\pi^2 c \epsilon_0 \tau^2} \lambda^2 \quad (23)$$

Esta ecuación muestra que la absorción por portadores libres está estrechamente relacionada con la presencia de mecanismos de relajación, es decir, de disipación de la energía cedida por el campo a los portadores. Desde un punto de vista cuántico, lo que ocurre es que la interacción entre fotones y electrones no puede dar lugar a **transiciones intrabanda**, ya que no se pueden cumplir simultáneamente las condiciones de **conservación de la cantidad de movimiento y la energía**. Cuánticamente, la absorción por portadores libres sólo es posible como proceso de segundo orden en el que debe intervenir además un fonón, para asegurar la conservación del momento y la energía, o una dispersión por impurezas (para relajar la condición de conservación de la cantidad de movimiento).

APÉNDICE A

TEORÍA DE LA RESPUESTA LINEAL

A-1) RESPUESTA LINEAL

En muchos fenómenos físicos en los que aparece implicada la interacción entre un sistema físico y un campo exterior, dicha interacción puede tratarse introduciendo en el hamiltoniano un término perturbativo del tipo $V = -A f(t)$, donde A representa cierta magnitud física del sistema y $f(t)$ es el campo exterior. En muchos casos el valor medio de A se ve modificado por la acción del campo. La teoría de la respuesta lineal permite sacar conclusiones generales en aquellos casos en los que el efecto del campo sobre el sistema es **lineal** y **causal**, de modo que puede representarse mediante una expresión del tipo:

$$A(t) = \int_{-\infty}^t \kappa(t-t') f(t') dt' \quad (1)$$

es decir que el valor de A en el instante t depende **linealmente** de los valores del campo en los instantes anteriores (**causalidad**). Para simplificar supondremos que en ausencia de campo el valor medio de A es cero. La ecuación 1 puede transformarse haciendo $t - t' = \tau$ $dt' = -d\tau$.

$$A(t) = \int_0^{\infty} \kappa(\tau) f(t-\tau) d\tau \quad (2)$$

Estas ecuaciones conducen a una relación lineal simple entre las transformadas de Fourier. Siempre es posible describir el campo como superposición de señales armónicas

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad (3)$$

Entonces la ecuación 2 queda:

$$A(t) = \int_0^{\infty} \kappa(\tau) \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{-i\omega(t-\tau)} d\omega d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \left[F(\omega) \int_0^{\infty} \kappa(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \right] e^{-i\omega t} d\omega \quad (4)$$

la expresión entre corchetes es la transformada de Fourier de $A(t)$, luego podemos escribir:

$$A(\omega) = F(\omega) \int_0^{\infty} \kappa(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau e^{-i\omega t} = \chi(\omega) F(\omega)$$
$$\chi(\omega) = \int_0^{\infty} \kappa(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (5)$$

A-2) SUSCEPTIBILIDADES GENERALIZADAS

La función $\chi(\omega)$, que determina totalmente la respuesta del sistema frente al campo exterior, recibe el nombre de susceptibilidad generalizada. $\chi(\omega)$ es, en general una función compleja, lo que refleja el hecho de que puede existir un desfase entre la causa y el efecto. Así, podemos expresarla en función de sus partes real e imaginaria: $\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega)$. De la propia definición de $\chi(\omega)$ (ecuación 5) se deduce:

$$\chi'(-\omega) = \chi'(\omega) \quad \chi''(-\omega) = -\chi''(\omega). \quad (6)$$

La acción de la fuerza exterior irá acompañada de absorción de energía por parte del sistema. Llamemos Q a la energía absorbida por unidad de tiempo:

$$Q = \frac{dE}{dT} = \frac{dV}{dt} = -A \frac{df}{dt} - \frac{dA}{dt} f \quad (7)$$

Supongamos que la fuerza exterior sea de la forma:

$$f(t) = \frac{1}{2} (f_0 e^{-i\omega t} + f_0^* e^{i\omega t}) \quad (8)$$

y, por tanto:

$$\frac{df}{dt} = \frac{1}{2} (-i\omega f_0 e^{-i\omega t} + i\omega f_0^* e^{i\omega t}) \quad (9)$$

La respuesta del sistema será:

$$A(t) = \frac{1}{2} (\chi(\omega) f_0 e^{-i\omega t} + \chi(-\omega) f_0^* e^{i\omega t}) \quad (10)$$

y:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{2} (-i\omega \chi(\omega) f_0 e^{-i\omega t} + i\omega \chi(-\omega) f_0^* e^{i\omega t}) \quad (11)$$

Por tanto:

$$Q = -\frac{i\omega}{2} [-\chi(\omega) f_0^2 e^{-i2\omega t} - \chi(-\omega) |f_0|^2 + \chi(-\omega) f_0^{*2} e^{i2\omega t} + \chi(\omega) |f_0|^2] \quad (12)$$

Si calculamos el valor medio en un periodo, los términos en los que aparece la exponencial se anulan al promediar, de manera que:

$$Q = -\frac{i\omega}{2} [\chi(\omega) - \chi(-\omega)] |f_0|^2 = \omega |f_0|^2 \chi''(\omega) \quad (13)$$

de manera que, la absorción de energía por parte del sistema y su posterior conversión en agitación térmica es proporcional a la parte imaginaria de la susceptibilidad generalizada, por lo que a dicha parte se la conoce como parte disipativa. Si hay disipación, es decir, absorción de energía, la parte imaginaria debe ser diferente de cero y positiva.

A-3) RELACIONES DE KRAMERS -KRONIG

Consideremos ahora $\chi(\omega)$ como función de variable compleja, siendo la variable $\omega = \omega' + i\omega''$. Si $\kappa(t)$ es finita para todo valor positivo de t , $\chi(\omega)$ no tendrá puntos singulares (polos) en el semiplano superior del plano complejo. Es fácil ver que, siendo $\omega'' > 0$, tendríamos un factor $\exp(-\omega''\tau)$, decreciente y, siendo $\kappa(t)$ finita la integral sería convergente. Esto es una consecuencia del principio de causalidad que impone que la integral se extienda solo a $\tau > 0$ ($t' < t$).

La condición de ausencia de polos en el semiplano superior implica que las partes real e imaginaria de la susceptibilidad generalizada están relacionadas entre sí. Para demostrarlo, consideremos cierto valor de la frecuencia sobre el eje real, ω_0 y calculemos la siguiente integral a lo largo del contorno definido por la figura 1A:

$$I = \oint_C \frac{\chi(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega \quad (15)$$

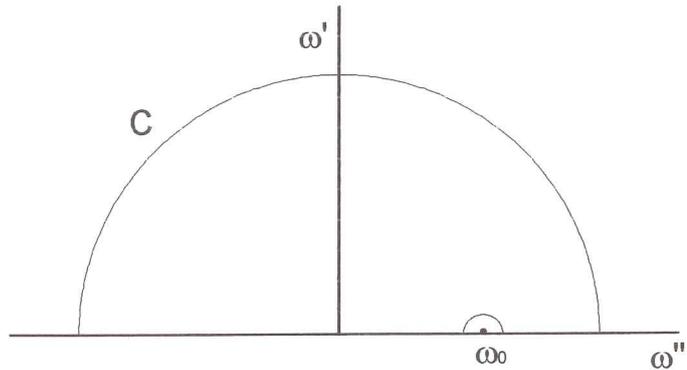


Figura A1: contorno de integración en el plano complejo.

Dado que $\chi(\omega)$ no tiene polos en el semiplano inferior, el único polo del integrando se da para $\omega = \omega_0$, que queda excluido del contorno de integración, por lo que la integral a lo largo del contorno C debe anularse, de acuerdo con el teorema de Cauchy. Ahora bien, al hacer tender a infinito el radio del semicírculo, la integral se anula, por la definición de $\chi(\omega)$. Por otra parte, la integral a lo largo del semicírculo que rodea a ω_0 , de acuerdo con las ecuaciones de Cauchy, vale $-i\pi \chi(\omega_0)$. Por tanto, si hacemos tender el radio del semicírculo a cero, podemos escribir:

$$\oint_C \frac{\chi(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega = 0 = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega - i\pi \chi(\omega_0) \quad (16)$$

Por tanto:

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi'(\omega) + i\chi''(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega = i\pi (\chi'(\omega_0) + i\chi''(\omega_0)) \quad (17)$$

de donde se obtienen las relaciones de Kramers-Kronig, también llamadas relaciones de dispersión:

$$\chi'(\omega_0) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega \quad \chi''(\omega_0) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi'(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega \quad (18)$$

Dichas ecuaciones pueden modificarse teniendo en cuenta las ecuaciones 6:

$$\chi'(\omega_0) = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega \chi''(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega \quad \chi''(\omega_0) = -\frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega_0 \chi'(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega$$

(19)

LECCIÓN 10

PROPIEDADES ÓPTICAS DE LOS SEMICONDUCTORES (II)

1) ABSORCIÓN FUNDAMENTAL: TRANSICIONES DIRECTAS E INDIRECTAS

Se llama absorción fundamental en un semiconductor a aquella que provoca la transición de los electrones del borde superior de la banda de valencia a los estados vacío del borde inferior de la banda de conducción. Obviamente se produce para fotones de energías superiores al valor de la banda prohibida (o ligeramente inferiores, si interviene un fonón). La forma del frente de absorción, es decir, la dependencia espectral del coeficiente de absorción para valores de la

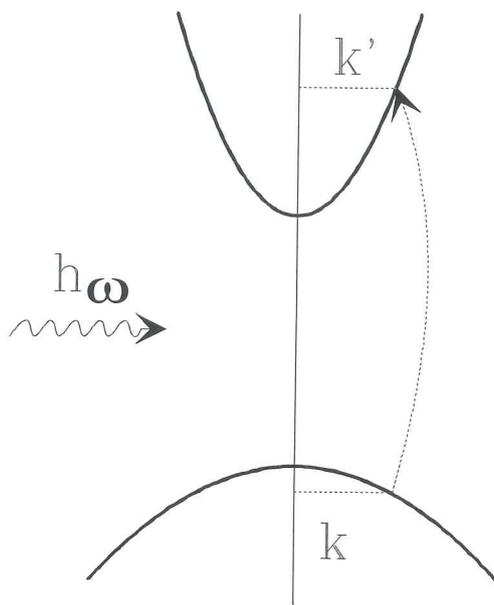


Figura 1: Transiciones directas.

energía del fotón próximos al valor de la banda prohibida, depende únicamente de la estructura de bandas del material en torno al máximo de la banda de valencia y al mínimo de la banda de conducción. Pueden darse dos situaciones:

- **Transiciones directas:** El máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción se dan para el mismo valor del cuasi-impulso \mathbf{k} . Las leyes de conservación del cuasi-impulso y la energía exigen:

$$E_c(\mathbf{k}') = E_v(\mathbf{k}) + \hbar\omega$$

$$\hbar\mathbf{k}' = \hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{k}_{\text{fot}}$$

Ahora bien, para valores típicos de la banda prohibida E_g en torno a 1 eV, la longitud de onda del fonón es del orden de $1\mu\text{m}$, y \mathbf{k}_{fot} es del orden de 10^4 cm^{-1} , es decir, dos órdenes de magnitud mas pequeño que los valores típicos del cuasi-impulso de los electrones, por lo que la condición de conservación del cuasi-impulso en una transición directa puede aproximarse a $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, de ahí que se llame también transiciones verticales a las transiciones directas.

- **Transiciones indirectas:** El máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción no se dan para el mismo valor del cuasi-impulso \mathbf{k} . En este caso, las leyes de conservación del cuasi-impulso y la energía no pueden cumplirse si no interviene una tercera partícula capaz de aportar la diferencia de cuasi-impulso entre los estados inicial y final. En un sólido, tales partículas existen: son los cuantos de vibración de la red o fonones, que transportan

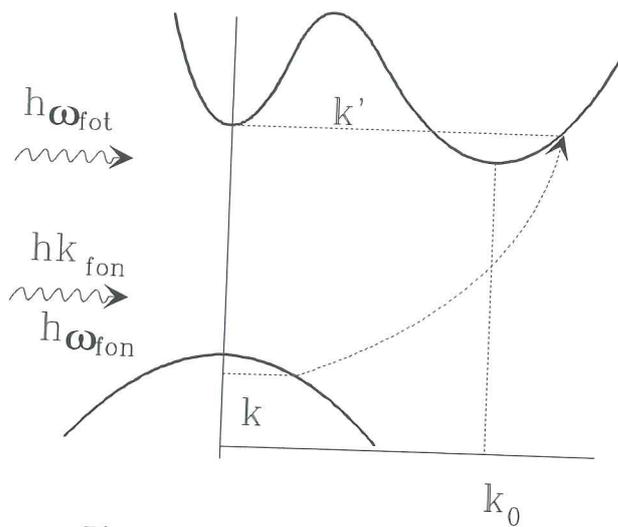


Figura 2: Transiciones indirectas

una energía $\hbar\omega_{\text{fon}}$ y una cantidad de movimiento $\hbar\mathbf{k}_{\text{fon}}$. Las ecuaciones de conservación serán, en este caso:

$$E_C(\mathbf{k}') = E_V(\mathbf{k}) + \hbar\omega \pm \hbar\omega_{\text{fon}}$$

$$\hbar\mathbf{k}' = \hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{k}_{\text{fon}} \pm \hbar\mathbf{k}_{\text{fon}}$$

Al tratarse de un proceso en el que intervienen tres partículas, resulta obvio que su probabilidad será inferior, por lo que en las transiciones indirectas, los valores del coeficiente de absorción son dos o tres órdenes de magnitud inferiores a los de las transiciones directas. El símbolo \pm en las ecuaciones de conservación indica que las condiciones pueden cumplirse también mediante emisión de un fonón.

2) COEFICIENTE DE ABSORCIÓN Y PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN

El modelo de absorción resonante no es directamente aplicable al estudio de la absorción fundamental en un semiconductor, por tratarse de transiciones entre bandas anchas. Calcularemos la dependencia espectral del coeficiente de absorción a partir de la teoría cuántica de las transiciones inducidas por una perturbación dependiente del tiempo. Dicho cálculo nos permitirá obtener la probabilidad de transición por unidad de tiempo, por lo que obtendremos previamente la relación entre esta y el coeficiente de absorción. Si un flujo de fotones Φ incide sobre un elemento del semiconductor de grosor dx y superficie S , el número de fotones absorbido por unidad de tiempo será:

$$dN = \alpha S \Phi dx \quad (1)$$

Por otra parte, la velocidad de la luz en el medio es $v=c/n$ y el flujo de fotones puede expresarse como $\Phi = N_v c/n$, donde N_v es la densidad de fotones. El número de fotones absorbido por unidad de tiempo y unidad de volumen debe corresponder al número de transiciones electrónicas que se produce por unidad de tiempo y unidad de volumen:

$$R = dN / S dx = \alpha \Phi = \alpha N_v c / n \quad (2)$$

Por otra parte, debemos relacionar el flujo de fotones con el flujo energético expresado en función de los campos o potenciales clásicos asociados a la onda electromagnética, es decir, con el vector de Poynting $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$:

$$R = dN / S dx = \alpha \Phi = \alpha N_v c / n \quad (3)$$

Por otra parte, debemos relacionar el flujo de fotones con el flujo energético expresado en función de los campos o potenciales clásicos asociados a la onda electromagnética, es decir, con el vector de Poynting $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$:

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \vec{A}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} & \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = i\omega \vec{A}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ \vec{H} &= \frac{\vec{B}}{\mu_0} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \vec{A} = \frac{1}{\mu_0} i\vec{k} \times \vec{A}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} & \vec{S} &= \frac{\vec{E} \times \vec{H}^*}{2} = \frac{\omega A_0^2}{2\mu_0} \vec{k} \end{aligned} \quad (4)$$

El coeficiente de absorción, en función de la probabilidad de transición vendrá, pues, dado por la expresión:

$$\alpha = \frac{R}{\frac{S}{\hbar\omega}} = \frac{2\mu_0 \hbar\omega}{k\omega A_0^2} R = \frac{2\mu_0 c \hbar}{n\omega A_0^2} R \quad (5)$$

donde se ha utilizado la relación: $\omega = ck/n$.

3) COEFICIENTE DE ABSORCIÓN PARA TRANSICIONES DIRECTAS

Para calcular el número de transiciones por unidad de tiempo y de volumen, planteemos el problema del electrón en el sólido, en presencia de una onda electromagnética. El hamiltoniano será:

$$H = \frac{1}{2m^*} (-i\hbar\nabla - q\vec{A})^2 = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + \frac{q^2 A^2}{2m^*} + \frac{i q \hbar}{2m^*} (\vec{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \vec{A}) \quad (6)$$

Recordemos, por otra parte que, para una función dada Ψ siempre se cumple que:

$$\nabla \cdot (\vec{A}\Psi) = (\nabla \cdot \vec{A})\Psi + \vec{A} \cdot (\nabla\Psi)$$

con lo que, si elegimos un contraste en el que la divergencia del potencial vector se anule y despreciamos el término de segundo orden en \mathbf{A} , obtenemos:

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + \frac{i q \hbar \vec{A} \cdot \nabla}{m^*} = H_0 + H' \quad (7)$$

El hamiltoniano de perturbación es el llamado hamiltoniano de interacción electromagnética dipolar. La probabilidad de las transiciones provocadas por esa perturbación van a depender de los elementos de matriz del hamiltoniano de perturbación para las funciones de onda no perturbadas, es decir, de las funciones de Bloch en las bandas de valencia y conducción del semiconductor:

$$H_{\vec{k}\vec{k}'} = \int \Psi_{c\vec{k}'} \frac{i q \hbar}{m^*} \vec{A} \cdot \nabla \Psi_{v\vec{k}} dV \quad (8)$$

El gradiente de la función de Bloch de la banda de valencia tendrá dos términos:

$$\nabla \Psi_{v\vec{k}} = \nabla (u_{v\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}) = (i\vec{k} u_{v\vec{k}} + \nabla u_{v\vec{k}}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (10)$$

Y el elemento de matriz quedará:

$$\begin{aligned}
H_{\vec{k}\vec{k}'} &= \frac{i q \hbar}{m^*} \int u_{c\vec{k}'}^* e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} (i\vec{k} \cdot \vec{A} u_{v\vec{k}} + \vec{A} \cdot \nabla u_{v\vec{k}}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} dV = \\
&= \frac{i q \hbar}{m^*} (\vec{k} \cdot \vec{A}_0) \int u_{c\vec{k}'}^* u_{v\vec{k}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}'+\vec{k}) \cdot \vec{r}} dV + \frac{i q \hbar}{m^*} A_0 \int u_{c\vec{k}'}^* \vec{a} \cdot \nabla u_{v\vec{k}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}'+\vec{k}) \cdot \vec{r}} dV
\end{aligned} \tag{11}$$

donde hemos llamado κ al vector de ondas de la radiación electromagnética y \mathbf{a} al vector unitario en la dirección del potencial vector. Dada la periodicidad de las funciones $u_{c\mathbf{k}}$ y $u_{v\mathbf{k}}$ y el carácter periódicamente progresivo de las ondas planas, ambas integrales se reducen a una integral extendida a una celda unidad, multiplicada por un término de la forma:

$$\sum_n e^{i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{\kappa}) \cdot \vec{R}_n}$$

donde \mathbf{R}_n son los vectores de la red de Bravais y la suma se extiende a todas las celdas unidad del cristal. Ese término solo es diferente de cero cuando $\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\boldsymbol{\kappa}$ es un vector de la red recíproca y, puesto que \mathbf{k} y \mathbf{k}' pertenecen a la primera zona de Brillouin y $\boldsymbol{\kappa}$ es muy pequeño, dicha condición es en realidad la condición de conservación de la cantidad de movimiento en la transición. Despreciando el vector de ondas del fotón, podemos considerar $k=k'$. El elemento de matriz quedará:

$$H_{\vec{k}\vec{k}} = \frac{i q \hbar}{m^*} (\vec{k} \cdot \vec{A}_0) \int u_{c\vec{k}}^* u_{v\vec{k}} dV + \frac{i q \hbar}{m^*} A_0 \int u_{c\vec{k}}^* \vec{a} \cdot \nabla u_{v\vec{k}} dV \tag{12}$$

El primer término es despreciable (en realidad sería nulo, por la ortogonalidad de las funciones de Bloch para un mismo \mathbf{k} en bandas diferentes, si \mathbf{k} y \mathbf{k}' fuesen exactamente iguales). El elemento de matriz de la transición resulta ser proporcional al elemento de matriz del operador impulso:

$$P_{\vec{k}\vec{k}} = \hbar \int u_{c\vec{k}}^* \vec{a} \cdot \nabla u_{v\vec{k}} dV \tag{13}$$

Aquellas transiciones en las que dicho elemento de matriz es diferente de cero se llaman transiciones directas permitidas.

La probabilidad de transición por unidad de tiempo vendrá dada por la regla de oro de Fermi:

$$W_{\vec{k}\vec{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{\vec{k}\vec{k}}|^2 \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{Q^2 A_0^2}{m^{*2}} |P_{\vec{k}\vec{k}}|^2 \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega) \tag{14}$$

Para obtener el número de transiciones por unidad de tiempo y unidad de volumen habrá que integrar en el espacio k^3 , de modo que:

$$R = \int \frac{d\tau_k}{4\pi^3} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{Q^2 A_0^2}{m^{*2}} |P_{\vec{k}\vec{k}}|^2 \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega) \tag{15}$$

Aproximando $P_{\vec{k}\vec{k}}$ a su valor para $k=0$, podemos sacarlo fuera de la integral y definir una cantidad adimensional que mide la intensidad de la transición a la que se llama fuerza de oscilador de la transición:

$$f_{vc} = \frac{2 |P_{00}|^2}{m^* \hbar \omega} \tag{16}$$

La ecuación 15 queda:

$$R = \frac{\pi Q^2 A_0^2 \omega}{m^*} f_{vc} \int \frac{d\tau_k}{4\pi^3} \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega) \quad (17)$$

Es fácil ver que el argumento de la función delta puede expresarse en la forma:

$$E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega = E_c(0) - E_v(0) - \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c^*} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v^*} = E_g - \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r^*}$$

donde E_g es la banda prohibida del semiconductor y m_r^* la masa reducida entre de las bandas de valencia y conducción. La integral no es, entonces, mas que la densidad de estados de una banda parabólica cuyo mínimo fuese $E_g - \hbar\omega$ y cuya masa efectiva fuese m_r^* . Recordando la expresión de la densidad de estados en una banda parabólica (lección 2), obtenemos:

$$R = \frac{\pi Q^2 A_0^2 \omega}{m^*} f_{vc} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_r^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\hbar\omega - E_g} \quad (18)$$

y, sustituyendo en la ecuación 5:

$$\alpha = \frac{\mu_0 Q^2 c \hbar}{\pi n m^*} f_{vc} \left(\frac{2m_r^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\hbar\omega - E_g} \quad (19)$$

Así pues, el coeficiente de absorción para transiciones directas permitidas resulta ser proporcional a $(\hbar\omega - E_g)^{1/2}$. Si la transición hubiese sido prohibida en primer orden, el segundo término de la ecuación 12 se habría anulado. Al quedar solo el primero, habría aparecido una dependencia suplementaria en k^2 , lo que, al integrar, habría conducido a un coeficiente de absorción proporcional a $(\hbar\omega - E_g)^{3/2}$.

4) COEFICIENTE DE ABSORCIÓN PARA TRANSICIONES INDIRECTAS

Para transiciones indirectas, al no poder cumplirse la conservación del cuasiimpulso únicamente con la cantidad de movimiento del fotón, es necesaria la intervención de un fonón. En el proceso intervienen tres partículas, lo que implica necesariamente un coeficiente de absorción mas bajo, al ser un proceso de segundo orden. Para calcular dicho coeficiente de absorción hay que utilizar la teoría de perturbaciones de segundo orden, con un estado virtual intermedio. La probabilidad de transición se calcula mediante la teoría de perturbaciones de segundo orden,

$$W_{if} = \sum_m \frac{|\langle f | H_{e-fon} | m \rangle \langle m | H_{e-fot} | i \rangle|^2}{(\hbar\omega)^2} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega \pm \hbar\omega_{fon}) \quad (20)$$

donde la suma se realiza sobre todos los estados intermedios m . Como, además, en este tipo de transiciones los cuasiimpulsos de los estados inicial y final no coinciden, para calcular el número de transiciones por unidad de tiempo, hay que integrar la expresión 20 para todos los valores de k_i y k_f . Si incluimos los elementos de matriz en una constante C_{if} la expresión final para el coeficiente de absorción se calculará mediante una integral de la forma:

$$\begin{aligned}
\alpha &= \sum \frac{C_{if}}{\omega^2} \int dE_i \int dE_f \sqrt{(E_v - E_i)(E_f - E_c)} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega \pm \hbar\omega_{fon}) = \\
&= \sum \frac{C_{if}}{\omega^2} \int_{E_c}^{E_v + \hbar\omega \pm \hbar\omega_{fon}} dE_f \sqrt{(E_v + \hbar\omega \pm \hbar\omega_{fon} - E_f)(E_f - E_c)} = \\
&= \frac{C_{abs}}{\omega^2} (\hbar\omega - E_g + \hbar\omega_{fon})^2 + \frac{C_{em}}{\omega^2} (\hbar\omega - E_g - \hbar\omega_{fon})^2
\end{aligned}$$

donde el primer término corresponde al proceso en el que la transición se realiza mediante la absorción de un fotón (la constante será proporcional a la población de fotones $N = (\exp(\hbar\omega/kT) - 1)^{-1}$) y el segundo término al proceso con emisión de un fonón (la constante será proporcional a $N+1$). Obviamente el primer término debe tender a cero a bajas temperaturas, ya que no habrá fonones excitados.

5) INTERACCIÓN ELECTRÓN-HUECO: EXCITONES

En las deducciones anteriores del coeficiente de absorción, hemos supuesto que el electrón y el hueco creados cuando el semiconductor absorbe un fotón no interactúan entre sí. Esto no es cierto en realidad, ya que, al tratarse de partículas cargadas, existe entre ellas una interacción electrostática, que, en determinadas condiciones puede dar lugar a estados ligados en los que el electrón y el hueco forman un estado hidrogenoide, similar a los estados que crean las impurezas, pero que puede propagarse libremente por el cristal. En la aproximación de la masa efectiva, la ecuación de Schrödinger para el electrón y el hueco interactuando mediante un potencial coulombiano será:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_e^2}{2m_e^*} - \frac{\hbar^2 \nabla_h^2}{2m_h^*} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right] \Phi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = (E - E_g) \Phi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \quad (2)$$

Hagamos un cambio de variable para pasar a unas nuevas coordenadas: la distancia entre el electrón y el hueco, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$, y la posición del centro de masas $\mathbf{R} = (m_e^* \mathbf{r}_e + m_h^* \mathbf{r}_h) / (m_e^* + m_h^*)$. Con esas nuevas coordenadas, las laplacianas de la ecuación 43 quedarán:

$$\begin{aligned}
\nabla_e^2 &= \left(\frac{m_e^*}{M} \right)^2 \nabla_{\vec{R}}^2 + \nabla_{\vec{r}}^2 + 2 \frac{m_e^*}{M} \nabla_{\vec{r}} \nabla_{\vec{R}} \\
\nabla_h^2 &= \left(\frac{m_h^*}{M} \right)^2 \nabla_{\vec{R}}^2 + \nabla_{\vec{r}}^2 + 2 \frac{m_h^*}{M} \nabla_{\vec{r}} \nabla_{\vec{R}}
\end{aligned} \quad (23)$$

donde M es la suma de ambas masas. Al sustituir en la ecuación 43, se obtiene:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{R}}^2}{2M} - \frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{r}}^2}{2m_r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \right] \Phi(\vec{r}, \vec{R}) = (E - E_g) \Phi(\vec{r}, \vec{R}) \quad (24)$$

donde m_r es la masa reducida electrón hueco. La ecuación es ahora separable y la función de ondas puede expresarse como el producto de dos funciones: $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \Phi_1(\mathbf{R}) \Phi_2(\mathbf{r})$. Para $\Phi_1(\mathbf{R})$ el hamiltoniano contiene únicamente el término de energía cinética, por lo que podemos dicha función será una onda plana, $\Phi_1(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}$ que describe el movimiento del centro de masas de ambas partículas, siendo \mathbf{K} al vector de ondas correspondiente. Al sustituir en la ecuación 46 y pasar al segundo miembro la energía cinética, obtenemos la ecuación para $\Phi_2(\mathbf{r})$, que no es mas que la

ecuación de ondas de un átomo hidrogenoide

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{r}}^2}{2m_r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \right] \Phi_2(\vec{r}) = (E - E_G + \frac{\hbar^2 K^2}{2M}) \Phi_2(\vec{r}) \quad (25)$$

Los estados ligados correspondientes vendrán dados por:

$$E = E_G - \frac{RY^*}{n^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} \quad RY^* = \frac{m_r}{m_0} \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right)^2 RY \quad (26)$$

Dichos estados constituyen el espectro discreto de los estados excitónicos que, para valores pequeños de la energía cinética, se sitúan en la banda prohibida. Los estados no ligados serán los correspondientes al espectro continuo de la interacción coulombiana, en los que las funciones de ondas se ven también modificadas.

El coeficiente de absorción debe pues calcularse con las nuevas funciones de ondas. Recordemos que las soluciones de la ecuación de la masa efectiva son aproximadas. Las funciones de ondas reales son combinaciones lineales de las funciones de onda electrónicas en los extremos de la estructura de bandas, cuyas envolventes, si aproximamos la parte periódica de las funciones de onda para k pequeño mediante las funciones para $k=0$, son las soluciones de la ecuación de la masa efectiva:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} u_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \left| \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right| u_0 = \Phi_2(\vec{r}) \Psi_0(\vec{r}) \quad (27)$$

La teoría del coeficiente de absorción en presencia de interacción electrón-hueco fue desarrollada por Elliot. En una versión muy simplificada de dicha teoría, los elementos de matriz de la transición serían ahora los elementos de matriz para la interacción dipolar entre las funciones de onda de la banda de valencia y las funciones de onda del excitón:

$$M_1 = \int \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \Psi_{c\vec{k}} \vec{a} \cdot \vec{p} \Psi_{v\vec{k}} dV \approx \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} M_{cv}(\vec{k}) \approx \Psi_2(0) M_0 \quad (28)$$

Donde hemos aproximado los elementos de matriz en ausencia de interacción coulombiana con su valor para $k=0$. El nuevo coeficiente de absorción vendrá dado por: $\alpha_1 = \alpha_0 |\Phi_2(0)|^2$, donde α_0 es el coeficiente de absorción en ausencia de interacción coulombiana. Para los estados del espectro discreto aparecerán una serie de picos de absorción con intensidades dadas por la relación $|\Phi_2(0)|^2 = 1/\pi a_0^3 n^3$. Para el espectro continuo del átomo hidrogenoide:

$$|\Phi_2(0)|^2 = \frac{\gamma e^\gamma}{Sh \gamma} \quad \gamma = \sqrt{\frac{\pi^2 R^*}{E - E_g}} \quad (29)$$

luego el frente de absorción se modifica según la siguiente expresión

$$\alpha_1 = \alpha_0 \frac{\gamma e^\gamma}{Sh \gamma} = \alpha_0 \frac{2\gamma}{1 - e^{-2\gamma}} \quad (30)$$

Es fácil ver que para energía mucho mayores que el gap, el coeficiente de absorción en presencia de interacción electrón-hueco, tiende a la ley $(\hbar\omega - E_g)^{1/2}$. La figura 3 muestra la

modificación del espectro de absorción debida a la interacción electrón-hueco. Los picos de absorción correspondientes a los estados discretos del excitón, así como la discontinuidad en E_g , aparecen con cierta anchura, dependiente de la temperatura, debido a la interacción con las vibraciones de la red.

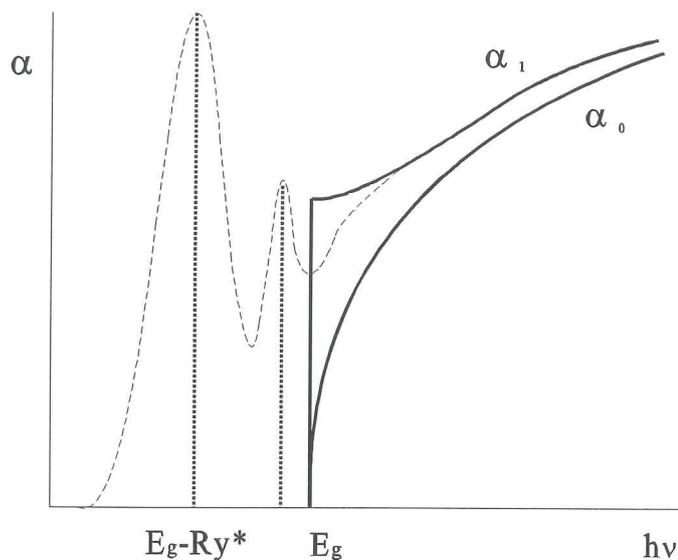


Figura 3: coeficiente de absorción en presencia de interacción electrón-hueco.

6) ACCIÓN DEL CAMPO MAGNÉTICO: NIVELES DE LANDAU

Tal como vimos anteriormente, en presencia de un campo electromagnético, el hamiltoniano del sólido viene dado por:

$$H = \frac{1}{2m^*} (-i\hbar\nabla - q\vec{A})^2 = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*} + \frac{q^2 A^2}{2m^*} + \frac{iq\hbar}{m^*} \vec{A} \cdot \nabla \quad (31)$$

Supongamos que se aplica un campo magnético uniforme dirigido en la dirección del eje z. Se puede elegir un potencial vector de la forma $\mathbf{A} = Bx\mathbf{j}$, con lo que el hamiltoniano queda:

$$H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*} + \frac{q^2 B^2 x^2}{2m^*} + \frac{iq\hbar Bx}{m^*} \frac{\partial}{\partial y} \quad (32)$$

Este hamiltoniano se diferencia del hamiltoniano en ausencia de campos exteriores en aparece un término dependiente de la coordenada x, por lo que buscaremos soluciones de la forma:

$$\Psi = e^{ik_y y} e^{ik_z z} \phi(x)$$

La ecuación de Schrödinger quedará:

$$\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \phi + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \phi - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{q^2 B^2 x^2}{2m^*} \phi - \frac{\hbar q B x k_y}{2m^*} \phi = E \phi \quad (33)$$

Podemos eliminar algunos términos haciendo un cambio de variable consistente en desplazar el origen de la coordenada $x = x_0 + x'$. Si elegimos $x_0 = \hbar k_y / eB$, es fácil ver que la ecuación se simplifica enormemente, quedando:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} + \frac{q^2 B^2}{2m^*} x'^2 \phi = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \right) \phi \quad (34)$$

Dicha ecuación corresponde a la de un oscilador armónico de frecuencia angular $\omega_c = qB/m^*$, que es la llamada frecuencia de resonancia ciclotrónica (frecuencia a la que giran los electrones en las órbitas circulares clásicas de un ciclotrón). El espectro energético de los electrones en el sólido, en presencia de un campo magnético vendrá pues dado por:

$$E = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \quad (35)$$

El efecto del campo magnético convierte el espectro cuasicontinuo en el plano XY en un espectro discreto de niveles energéticos equidistantes en energía, llamados niveles de Landau. En la dirección del campo magnético, el espectro sigue siendo el espectro cuasicontinuo de los electrones libres. Obviamente, la modificación del espectro energético conlleva una modificación de la densidad de estados. Para cada uno de los niveles de Landau, la dependencia en k_z conduce a una densidad de estados de la forma:

$$\frac{dN}{dE} = \frac{dN}{dk_z} \frac{dk_z}{dE} \quad \frac{dN}{dk_z} = \frac{L_z}{2\pi}$$

$$\frac{dk_z}{dE} = \frac{1}{2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} E_z^{-\frac{1}{2}} \quad \frac{dN}{dE} = \frac{L_z}{4\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} E_z^{-\frac{1}{2}}$$

Por otra parte, dado que el valor máximo de k_y debe ser eBL_x/\hbar , el número de valores posibles de k_y será $eBL_x L_y / 2\pi\hbar$, por lo que el número de estados por cada nivel de Landau será, teniendo en cuenta la degeneración de spin:

$$\frac{dN}{dE} = 2 \frac{qBL_x L_y}{2\pi\hbar} \frac{L_z}{4\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} E_z^{-\frac{1}{2}} \quad (37)$$

Si dividimos por el volumen del cristal y ponemos E_z en función de E , obtenemos la densidad de estados:

$$g(E) = \sum_n \frac{qB}{4\pi^2 \hbar} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{E - \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)}} \quad (38)$$

Es fácil ver que el número total de estados no cambia por la aplicación del campo magnético. En efecto, hemos visto que el número total de valores de k_y por cada nivel de Landau sería $eBL_x L_y / 2\pi\hbar = (eB/m^*) L_x L_y m^* / 2\pi \hbar = (\hbar \omega_c) L_x L_y m^* / 2\pi \hbar^2$, lo que corresponde al número total de valores de k que habría en el plano $K_x K_y$, en ausencia de campo, entre dos círculos de energía constante correspondientes a dos niveles de Landau contiguos. La figura 4 muestra la

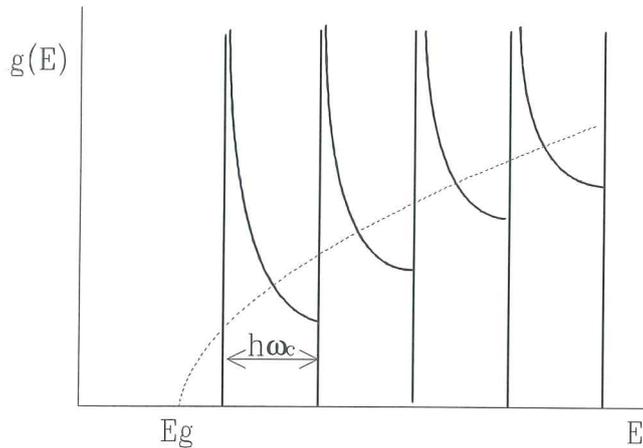


Figura 4: densidad de estados en presencia de campo magnético

de Landau (efecto Shubnikov-de Haas) : $E_F = n \hbar \omega_c = n \hbar e B / m^*$, o, lo que es lo mismo $1/B = n (e \hbar / m^* E_F)$. La resistividad presenta un comportamiento periódico en $1/B$. Igual sucede con la susceptibilidad (efecto de Haas- van Alphen). Otro fenómeno de gran importancia es la absorción resonante de radiación electromagnética debida a transiciones entre niveles de Landau (resonancia ciclotrónica), que permite una determinación muy precisa de la masa efectiva de los portadores. Cuando una radiación de frecuencia conocida ω incide sobre un sólido, se produce una absorción resonante cuando su frecuencia coincide con la frecuencia ciclotrónica: $\omega = eB/m^*$, $m^* = eB/\omega$.

densidad de estados en presencia de un campo magnético. La característica más relevante es la aparición de singularidades en la densidad de estados, que coinciden con los niveles de Landau. En todas las propiedades del sólido en las que intervenga la densidad de estados se observarán fenómenos oscilatorios, debido a dichas singularidades. Así, la resistividad de un semiconductor degenerado o de un metal presenta oscilaciones, ya que habrá un máximo de conductividad para aquellos valores del campo magnético para los que el nivel de Fermi coincide con un nivel