

Función de distribución de los excitones en los semiconductores

C.Trallero Giner, O.Sotolongo Costa. Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana.

RESUMEN

Se calcula la función de distribución en no equilibrio para el estado excitónico fundamental en el caso de la interacción excitón-fonón acústico. Se demuestra que la ecuación de balance cinético es equivalente a una ecuación de Fokker-Planck. La solución obtenida es normalizada al número de partículas. Se discute la aplicabilidad de los resultados.

ABSTRACT

The non-equilibrium distribution function is calculated for the fundamental excitonic state when interaction exciton-acoustic phonon takes place. It is shown that the kinetic equation is equivalent to a Fokker-Planck one. The obtained solution is normalized to the particle number. The applicability of the results is discussed.

1. INTRODUCCIÓN

El conocimiento de la función de distribución de los excitones (FDE) en los semiconductores tiene una gran importancia en el cálculo de magnitudes físicas tales como la sección eficaz Raman de dispersión, intensidad de luminiscencia, ensachamiento de las líneas de los espectros de excitación, etc. Es conocido que la FDE como función de la temperatura [1] y el tiempo de vida de los excitones [2-3] en semiconductores polares determina en gran medida el comportamiento de las líneas de la radiación dispersada.

En [1], [2] se ha argumentado la posibilidad de conocer la función de distribución a partir del análisis espectral de luminiscencia en el CdS,

lo cual daría información sobre los diferentes mecanismos de relajación de los excitones en el cristal.

La función de distribución energética de los excitones ha sido estudiada en el caso de excitones de Wannier-Mott en semiconductores polares, para energía cinética E superior a la de un fonón óptico longitudinal $\hbar\omega_{LO}$ (generalmente, para energías varias veces superiores a las señaladas), utilizándose este resultado en el cálculo de la sección eficaz de dispersión Raman multifónica como función de la temperatura [4]. En el rango de energía donde $E > \hbar\omega_{LO}$ la interacción predominante en los semiconductores polares es debida a los fonones ópticos longitudinales, lo cual ha sido estudiado en detalle en [4,5]. Sin embargo, cuando los excitones tienen energía cinética inferior a la de un fonón LO ($E < \hbar\omega_{LO}$), y el cristal se encuentra a una temperatura menor que la de Debye, la relajación no puede ser nunca a través de los fonones LO, ya que queda prohibida por la ley de conservación de la energía. En este caso el papel principal lo desempeña la interacción del excitón con los fonones acústicos (potencial de deformación y piezoeléctricos).

La función de distribución de los electrones en no equilibrio se ha calculado en [6,7,8]. Sin embargo, tratándose de excitones un estudio semejante no aparece en la literatura.

El objetivo de este trabajo es hallar la función de distribución de los excitones en no equilibrio en el rango de energía cinética menor que $\hbar\omega_{LO}$.

II. ECUACIÓN DE BALANCE

Consideremos un semiconductor polar en el cual, mediante determinado mecanismo se crean continuamente excitones en el estado con energía cinética $E = E_0 < \hbar\omega_{LO}$ (por ejemplo, mediante la creación indirecta por absorción de la luz. Ver [1-3]) y caracterizados por el tiempo de vida $\tau(E)$. En este caso y para bajas concentraciones excitónicas los procesos de relajación están condicionados fundamentalmente por la interacción excitón-fonón acústico, de aquí que la función de distribución de los excitones $P(E,t)$ esté descrita por la siguiente ecuación del balance cinético:

$$\frac{\partial P(E,t)}{\partial t} = \int W(E',E)P(E',t)dE' - \int W(E,E')P(E,t)dE' - P(E,t)/\tau + W_{ex} \delta(E-E_0) \quad (1)$$

donde $W(E,E')$ es la probabilidad por unidad de tiempo y de energía de la transición $E \rightarrow E'$ debido a la interacción excitón-fonón acústico y W_{ex} es la probabilidad de creación de los excitones con energía cinética E_0 .

Normalizando la función de distribución $P(E,t)$ al número de partículas $N(t)$, o sea

$$\int P(E,t) dE = N(t) \quad (2)$$

y exigiendo la condición $N(0) = 0$, se obtiene directamente de la ecuación (1) que

$$N(t) = W_{ex} \tau [1 - \exp(-t/\tau)] \quad (3)$$

En la obtención de (3) se supuso que el tiempo de vida de los excitones τ es constante. La expresión (3) sugiere que la función de distribución tendrá un estado estacionario (aunque en no equilibrio, ya que los excitones se inyectan continuamente en E_0).

En la determinación de $P(E,t)$ es necesario conocer la dinámica del excitón la cual depende de las condiciones físicas del sistema descrito por el número cuántico principal $n=1$, entonces la probabilidad $W(E,E')$ describirá las transiciones desde el estado $n=1$ a cualquier otro estado, es decir

$$\int W(E,E') dE' = 1/\tau_s + 1/\tau_d + \sum_{n=2}^{\infty} 1/\tau_n \quad (4)$$

Siendo τ_s el tiempo de relajación en el estado $n=1$, τ_d el de desintegración y τ_n el de paso a estados excitados con $n > 1$.

En [9] fue demostrado que en el rango de energías que se analiza las probabilidades $\sum_{n=2}^{\infty} 1/\tau_n$ y $1/\tau_d$, en el caso de interacción con fonones acústicos vía potencial de deformación son despreciables. Por consideraciones análogas puede demostrarse que estas mismas probabilidades son despreciables en el caso de fonones piezoeléctricos.

De este modo

$$\int W(E,E') dE' \approx 1/\tau_s(E). \quad (5)$$

El tiempo de vida total del excitón τ está regido por los procesos radiativos τ_R y no radiativos τ_{NR} [3], por lo que

$$1/\tau = 1/\tau_R + 1/\tau_{NR} \quad (6)$$

En la figura 1 se muestra un esquema energético del proceso aquí considerado.

La probabilidad $W(E,E')$ puede calcularse utilizando la regla de oro de Fermi. En el caso excitónico hay una gran simetría con el resultado del artículo [6] donde se da la expresión de $W(E,E')$ para electrones, obteniéndose igualmente tanto en el modelo de potencial de deformación como en el piezoeléctrico, que: (ver [10])

$$W(E', E) = \sqrt{E/E'} \exp \left[\frac{E' - E}{k_B T} \right] W(E, E') \quad (7)$$

Sustituyendo (7) en (1) queda para la ecuación de balance

$$\partial f(E, t) / \partial t = W(E, E') \{ f(E', t) - f(E, t) \} dE' - f(E, t) / \tau + J(E_0) \delta(E - E_0) \quad (8)$$

siendo

$$f(E, t) = \{ \exp(E/k_B T) / \sqrt{E} \} P(E, t) , \quad (9)$$

$$J(E_0) = W_{ex} \exp(E_0/k_B T) / \sqrt{E_0} \quad (10)$$

Como el intercambio energético en la transición $E \rightarrow E'$ es pequeño, podemos hacer el siguiente desarrollo para f :

$$f(E', t) = \sum_{n=0}^{\infty} d^n f / dE^n (E' - E)^n / n! \quad (11)$$

La expresión anterior es válida siempre que la energía del excitón $E \gg \mu^2$ siendo μ la velocidad del sonido en el medio.

Limitándonos al segundo orden en (11) y sustituyendo en (8) tenemos para la función $f(E, t)$:

$$\partial f(E, t) / \partial t = a_1 \partial f(E, t) / \partial E + a_2 \partial^2 f(E, t) / \partial E^2 - f(E, t) / \tau + J(E_0) \delta(E - E_0) \quad (12)$$

donde

$$a_n = 1/n! \int W(E, E') (E' - E)^n dE' \quad (13)$$

En correspondencia con el hecho de que el proceso que estamos considerando tiene intercambios pequeños de energía, vemos que (12) es una ecuación tipo Fokker-Planck. (ver [11]).

La obtención de una expresión analítica para $f(E, t)$ como solución de (12) es imposible debido a la complejidad que presentan los coeficientes a_1 y a_2 . Por simplicidad supondremos que los mismos son constantes. Una aproximación análoga fue hecha en [12] al resolver la ecuación de Boltzmann para electrones en presencia de un campo eléctrico.

Para obtener $f(E, t)$ en la ecuación (12) se debe imponer la condición de que la función de distribución sea acotada. Además se tiene que cumplir la condición de normalización (3) que en el estado estacionario se expresa por:

$$W_{ex} \int_0^{\infty} P(E) dE \quad (14)$$

Con estas condiciones es fácil demostrar que la función solución $P(E, t)$ en el estado estacionario es igual a.

$$\begin{aligned}
 P(E) = & W_{\text{ex}} \tau \exp[-E(\alpha + 1/k_B T)] \sqrt{E} \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\alpha + 1/k_B T) + \right. \\
 & + \exp[E_0(\alpha + 1/k_B T)] / (2\sqrt{E_0} a_2 \tau \sqrt{(a_1/2a_2)^2 + 1/a_2 \tau}) * \\
 & * \left[\Phi(\sqrt{E_0}(\alpha + 1/k_B T)) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{E_0}(\alpha + 1/k_B T) \exp[-E_0(\alpha + 1/k_B T)] - \right. \\
 & \left. \left. - \Theta(E_0 - E) \right] \right\} \quad (15)
 \end{aligned}$$

donde $\Phi(x)$ es la función error, $\Theta(x)$ la función paso unitario, definida por:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (16)$$

y

$$\alpha = a_1/2a_2 + \sqrt{(a_1/2a_2)^2 + 1/a_2 \tau} \quad (17)$$

Debe señalarse que la fórmula (15) es una aproximación para la FDE de procesos en no equilibrio, válida para temperaturas menores que la temperatura de Debye, pero distinta de 0 K. Si $T=0$ K no es válida la expresión (7).

En (1) se supuso que la creación de excitones es puntual, representándose a través de $W_{\text{ex}} \delta(E-E_0)$. Si en lugar de ello hacemos uso de una representación Lorentziana para la fuente, del tipo:

$$W_{\text{ex}}/\pi \left\{ \Gamma / ((E-E_0)^2 + \Gamma^2) \right\} \quad (18)$$

siendo Γ un parámetro que caracteriza el ensanchamiento del nivel excitónico, se obtiene que:

$$\begin{aligned}
 P(E) = & W_{\text{ex}} \tau \exp[-E(\alpha + 1/k_B T)] \sqrt{E} \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\alpha + 1/k_B T)^{\frac{3}{2}} + \right. \\
 & + \exp[E_0(\alpha + 1/k_B T)] / (2a_2 \tau \sqrt{E_0} \sqrt{(a_1/2a_2)^2 + 1/a_2 \tau}) * \\
 & * \left[\Phi(\sqrt{E_0}(\alpha + 1/k_B T)) - \frac{2(\sqrt{\pi}) \sqrt{E_0}(\alpha + 1/k_B T)}{\Gamma} * \right. \\
 & \left. * \exp[-E_0(\alpha + 1/k_B T)] - 1/2 + 1/\pi \arctan(E-E_0)/\Gamma \right] \left. \right\} \quad (19)
 \end{aligned}$$

La expresión (19) contempla a (15) como caso particular cuando $\Gamma \rightarrow 0$.

III. DISCUSIÓN

Los resultados teóricos obtenidos en el presente artículo pueden ponerse en correspondencia de forma casi inmediata con una buena cantidad

de datos experimentales. Así, por ejemplo, en [1] se reproducen experimentalmente en el CdS las condiciones bajo las cuales se dedujeron las fórmulas (18) y (19), o sea, creación de excitones en un semiconductor polar de gap directo en energías menores que $\hbar\omega_{LO}$. De la observación del espectro de luminiscencia en el CdS dada en [1] se concluyó que la función de distribución que describe a los excitones en el estado fundamental tiene una forma maxwelliana.

Por otro lado, de (18) y (19) se ve que para tiempos de vida grandes, la función de distribución obtenida $P(E,t)$ tiende a la de Maxwell-Boltzmann. De aquí que el ensanchamiento con la temperatura obtenida con estas fórmulas concuerda con los resultados experimentales reportados en [1]. En el caso que los coeficientes a_1 y a_2 se expresen a través de los tiempos de relajación de los excitones debido a la interacción con los fononos acústicos, la función de distribución $P(E,t)$ dada en el presente trabajo permite comparar la intensidad relativa de las líneas de luminiscencia reportadas experimentalmente en [2,3]. La comparación con los resultados experimentales de [1-3] se presenta en [10].

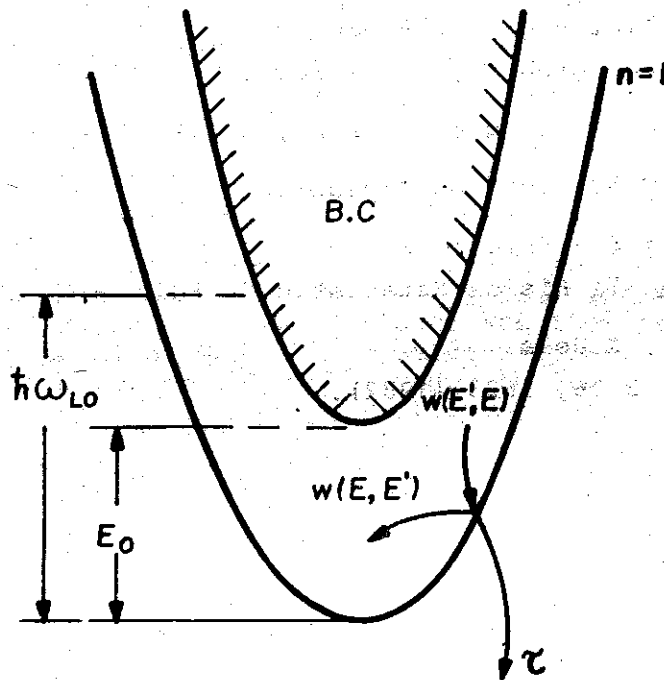


Figura 1.

Esquema energético de los procesos de dispersión del excitón en el estado fundamental $n=1$. Los procesos de "entrada" para la energía E están representados por $W(E', E)$, mientras los de "salida" por $W(E, E')$ y τ .

BIBLIOGRAFÍA

1. Gross, E.; S.Permogorov; B.Razbirin
J.Phys. Chem. Solids 27, 1647 (1966).
2. Permogorov, S.; V.Travnikov
Solid State Communications 29, 615, (1979)
3. Permogorov, S.; V.Travnikov
Fiz. Tiv. Tela 22, 2651 (1980)
4. Trallero, C.; I.G.Lang; S.T.Pavlov
Phys. Stat. Sol. (b) 106, 349 (1981)
5. Trallero, C.; O.Sotolongo; I.G.Lang; S.T.Pavlov
Fiz. Tiv. Tela 24, 2724 (1982).
6. Comas, F.; C.Trallero
Revista Cubana de Física. Vol.II, No.2, pág.9 (1982).
7. Comas, F.; C.Trallero
J.Phys. Chem. Solids. 44, 735 (1983).
8. Calecki, D.; C.Lewiner
J. de Phys. 38, 169 (1977).
9. Trallero, C.; I.G.Lang; S.T.Pavlov
Fiz. Tej. Poluprob 14, 235 (1980).
10. Trallero, C.; O.Sotolongo; I.G.Lang; S.T.Pavlov
Fiz. Tiv. Tela (será publicado).
11. Akhiezer, A.I.; S.V.Peletminski
"Métodos de la Física Estadística". Edit. MIR (1981).
12. Leburton, J.P.; K.Hess
Phys. Rev. B 26, 5623 (1982).