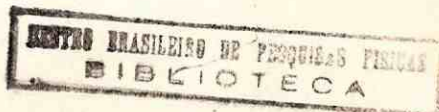


EMIÇÃO ESPONTÂNEA DE FÔNOS POR PORTADORES

NUMA REDE CRISTALINA PERFEITA A 0° K



TESE DE MESTRADO

defendida por:

JORGE SILVIO HELMAN

no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Orientador: W. Baltensperger

em 23 de fevereiro de 1965

perante a banca integrada pelos senhores professores:

John Sullivan

A. M. de Graff

Jacques Danon

A. A. Lopes Zamith

Emissão Espontânea de Fônons por Portadores numa
Rêde Cristalina Perfeita a 0°K.

J. S. Helman

(Orientador : W. Baitensperger)

Um portador de carga num semiconductor perfeito a 0°K emitirá espontaneamente fônons quando sua velocidade ultrapassar a velocidade do som. A força média devida à emissão espontânea é calculada para processos normais e Umklapp. Uma solução aproximada da equação de Boltzmann mostra que, na vizinhança da velocidade do som, o excesso de velocidade é proporcional à raiz quarta do campo elétrico aplicado.

INTRODUÇÃO

PARA um eletrão num semiconductor perfeito, a mobilidade devida ao espalhamento por fônons é geralmente considerada depender da temperatura na forma $\mu \sim T^{3/2}$. Na dedução desta lei¹ as variações da energia do eletrão durante o processo de espalhamento são desprezadas. Os processos de emissão e absorção, portanto, entram na equação de Boltzmann de um modo simétrico, e a contribuição da emissão espontânea, que domina a muito baixas temperaturas, é perdida. No presente trabalho é estudado o efeito de somente a emissão espontânea sobre a dinâmica do eletrão, na ausência de fônons.

Nos metais a resistividade devida à interação com fônons depende da temperatura como T^5 . Esta lei toma em consideração a emissão espontânea; a baixas temperaturas os processos de emissão espontânea na distribuição de Fermi perturbada são suprimidos pelo princípio de exclusão para pequenas correntes.

O MODELO

Consideremos um elétron de Bloch numa rede perfeita. Ele está acoplado às vibrações da rede; o elemento de matriz da transição do elétron de um estado k a um estado k' devido à emissão de um fônon de vetor de onda q é dado por²

$$M(k; k') = (n_q + 1)^{\frac{1}{2}} (2\pi\hbar/2\rho V\omega_q)^{\frac{1}{2}} q \cdot \delta_{k, k' - q} \quad (1)$$

onde ρ é a densidade do cristal, n_q o número inicial de fônons no estado q , V o volume do cristal, ω_q a frequência do fônon, q um vetor da rede recíproca, e δ a constante de acoplamento.

A temperatura é mantida igual a zero. Portanto, $n_q = 0$, e somente os processos de emissão espontânea contribuem. Para evitar dificuldades provenientes do princípio de exclusão, será considerado somente um elétron.

A suposição de elétrons em movimento exclui os isoladores nos quais os portadores são aprisionados pela deformação da rede³. Ela se aplica aos semicondutores usuais com portadores de alta mobilidade. Ademais, a suposição de que $n_q = 0$ em qualquer instante limita a descrição de amplificação de fônons, a qual já foi realizada pela aceleração de um grande número de portadores de carga^{4, 5}.

TRATAMENTO COM UMA FORÇA MÉDIA

Para uma estimativa do campo elétrico necessário para manter um elétron num estado k fazemos uma soma sobre as perdas de quantidade de movimento por unidade de tempo que, em média, ocorrem por emissão espontânea de fônons. A probabilidade por unidade de tempo para a transição de k a k' é dada pela seguinte fórmula da mecânica quântica

$$P(k; k') = (2\pi/\hbar) |M(k; k')|^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'} - \hbar\omega_q)$$

Para o cálculo suporemos que o eletrón tem uma massa efetiva em calar, i.é., $\xi_k = \hbar^2 k^2 / 2m^*$, que a lei de dispersão dos fônons é linear, $\omega_q = Cq$, e que existem $p = 3$ polarizações de fônons. A força sobre o eletrón é a perda de quantidade de movimento por unidade de tempo.

$$F_k = \sum_{k'} p P(k; k') \hbar (q + \underline{\ell})$$

Com (1) e a substituição $\sum_{k'} = \sum_{\underline{q}, \underline{\ell}} = [V/(2\pi)^3] \int d^3q \sum_{\underline{\ell}}$ temos que

$$F_k = A \hbar \sum_{\underline{\ell}} \int q (\underline{\ell} + \underline{q}) \delta \left[\hbar^2 k^2 / 2m^* - (\hbar^2 / 2m^*) (\underline{k} - \underline{q} - \underline{\ell})^2 - \hbar C q \right] d^3q, \quad (2)$$

onde $A = p \epsilon^2 / 4\pi \rho c$ reúne as constantes que não dependem de \underline{q} .

A. Processos normais, $\underline{\ell} = 0$

Introduzindo o ângulo θ entre os vetores \underline{k} e \underline{q} , e o vetor de onda de de Broglie de um eletrón que se desloca com a velocidade do som $\gamma = m^* c / \hbar$, a força é

$$F_k = (2\pi A m^* / \hbar k) \int_0^\infty q^3 dq \int_{-1}^1 \cos\theta \delta [\cos\theta - (q + 2\gamma) / 2k] d(\cos\theta). \quad (3)$$

Das propriedades da função δ temos que uma das integrações consiste na substituição

$$\cos\theta = (q + 2\gamma) / 2k$$

que é possível dentro dos limites

$$q_{\text{H}} = 2(k-\gamma) \quad \text{para} \quad \cos\theta = +1$$

$$q_{\text{m}} = 0 \quad \text{para} \quad \cos\theta = \gamma/k = v/c$$

Emissão espontânea somente ocorre quando $\gamma/k < 1$, isto é, quando a velocidade do eletrón $\hbar k/m^*$ é maior do que a velocidade do som C . A emissão é limitada a um cone dado no sistema de coordenadas do laboratório pelos ângulos

$$\theta_{\text{M}} = \cos^{-1} 1 = 0 \quad \text{e} \quad \theta_{\text{m}} = \cos^{-1} (v/c)$$

e no sistema solidário com o eletrón pelos ângulos

$$\alpha_{\text{M}} = \pi \quad \text{e} \quad \alpha_{\text{m}} = \pi/2 + \theta_{\text{m}}$$

Esta emissão de fônons por um eletrón supersônico é análoga à radiação de Čerenkov. (Fig.1)

A expressão (3) pode ser integrada

$$F_{\text{k}} = (2\pi A m^* / \hbar k) \int_0^{2(k-\gamma)} q^3 (q+2\gamma) / 2k \, dq$$

$$F_{\text{k}} = (8\pi A m^* / 5 \hbar k^2) (k-\gamma)^4 (4k+\gamma) \quad \text{para} \quad \gamma/k < 1$$

$$\text{e} \quad F_{\text{k}} = 0 \quad \text{para} \quad \gamma/k > 1.$$

B. Processos UMKLAPP, $\underline{l} \neq 0$.

Estas contribuições dependem de detalhes da estrutura cristalina. Calcularemos o caso em que o processo Umklapp é mais eficiente, a saber, quando o vetor \underline{l} é na direção de \underline{k} . (Fig. 2).

A equação (2) toma a forma

$$F_{\underline{k}}^{\underline{l}} = [2\pi A m^* / \hbar (\ell - k)] \int q^2 dq \int (\ell + q \cos \theta) \delta[\cos \theta + (q^2 + 2q\delta + (\ell^2 - 2\ell k) / 2q(\ell - k))] d(\cos \theta)$$

ou, depois de integrar sobre $\cos \theta$

$$F_{\underline{k}}^{\underline{l}} = [\pi A m^* / \hbar (\ell - k)^2] \int_{q_-}^{q_+} q^2 (\ell^2 - q^2 - 2q\delta) dq = [\pi A m^* / \hbar (\ell - k)^2] \left[\frac{1}{3} \ell q^3 - \frac{1}{5} q^5 - \frac{1}{2} \delta q^4 \right]_{q_-}^{q_+}$$

Os limites de integração $q_{\pm} = \ell - k - \delta \pm [(k + \delta)^2 - 2\ell\delta]^{1/2}$ correspondem às emissões possíveis com $\cos \theta = -1$. A transição só pode ocorrer quando estes limites são reais, isto é, quando $k \geq (2\ell\delta)^{1/2} - \delta$.

A razão $F_{\underline{k}}^{\underline{l}} / F_{\underline{k}}$ é representada graficamente na Fig. 3 para o valor $(10^5 \text{ cm}^{-1} / 10^8 \text{ cm}^{-1}) = 10^{-3}$. Pode-se ver que os processos Umklapp neste caso só ocorrem para elétrons com 44 vezes a velocidade de son., que, como será visto mais tarde, exigiria um campo de ordem de 10^3 Volt/cm. A emissão espontânea de fônons óticos inicia-se em energias eletrônicas que, usualmente, são ainda mais elevadas.

FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO

O tratamento acima é inconsistente. O elétron não permanece no estado \underline{k} , mas faz transições. É, portanto, necessário introduzir uma distribuição estatística $f(\underline{k})$, que é a probabilidade de que um elétron ocupe um estado \underline{k} . Ela satisfaz uma equação de Boltzmann. Uma vez que $f(\underline{k})$ é conhecida, a velocidade média do elétron pode ser calculada em função do campo aplicado.

A equação de Boltzmann para uma distribuição estacionária

$$\begin{aligned}
 (eE/\hbar) \partial f(k)/\partial k_x &= A \int q f(k+q) \delta \left[\hbar^2 (k+q)^2 / 2m^* - \hbar^2 k^2 / 2m^* - \hbar c q \right] d^3 q \\
 &- A \int q f(k) \delta \left[\hbar^2 k^2 / 2m^* - \hbar^2 (k-q)^2 / 2m^* - \hbar c q \right] d^3 q
 \end{aligned} \tag{5}$$

indica que a variação de $f(k)$ por unidade de tempo devido a um campo elétrico E na direção x é compensada pelas transições para dentro e fora de um estado k .

Transições para um dado k são possíveis a partir de pontos de uma superfície de simetria rotacional no espaço- k . A expressão analítica correspondente segue da primeira função- δ em (5):

$$q = z(\gamma - k \cos \theta).$$

Analogamente, a superfície para a qual um dado k pode irradiar é dado por

$$q = z(k \cos \theta - \gamma)$$

Note na Fig. 4 que no limite quando $k \rightarrow \gamma$, as transições ocorrem radialmente. Para um elétron num estado k que está perto da esfera $k=\gamma$ na direção da aceleração elétrica, tanto esta aceleração como as transições espontâneas correspondem a movimentos radiais. Desde que a distribuição tenha uma pequena abertura angular, tal que $\cos \nu \approx 1$, onde $\nu = \angle(k, eE)$, é a combinação destes dois movimentos radiais o que determina a corrente.

Limitaremos o problema à região perto da esfera γ . Contanto que $\cos \nu \approx 1$, a função de distribuição será um produto de uma função radial e uma função angular, onde somente a função radial é importante para a corrente. É, portanto, suficiente obter a abertura angular.

Para isto assumiremos que a emissão espontânea a partir de k muda o ângulo ν de $\pm \eta$, onde efetivamente $\eta = [(k-\gamma)/\gamma]^{\frac{3}{2}}$, e também que a aceleração elétrica subsequente contribui para ν com $-\nu(k-\gamma)/\gamma$. Tal sequência reduz ν quando $|\nu| > \eta\gamma/(k-\gamma) = [(k-\gamma)/\gamma]^{\frac{3}{2}}$. Para $(k-\gamma)/\gamma = 0.1$ o ângulo estará dentro de 0.3 de tal modo que $\cos 0.3 = 0.94$ não difere muito de 1.

EQUAÇÃO DE BOLZMANN PROJETADA

Introduzimos as variáveis dimensionais da Fig. 5, onde γ tem sido usado como unidade no espaço- k , e desprezamos no que se segue os termos de ordem ξ^4 . A probabilidade de transição por unidade de tempo projetada é obtida integrando $P(\xi; \sigma, \eta)$ sobre o plano $\sigma = \text{const.}$:

$$P(\xi; \sigma) = 2\pi \int P(\xi; \sigma, \eta) \eta d\eta.$$

Usando para isto a relação

$$\eta = (\xi - \sigma)(\xi + \sigma)^{\frac{1}{2}}$$

a equação de Boltzmann projetada é obtida:

$$df(\sigma)/d\sigma = \frac{1}{4} B \int_{\sigma}^{\infty} (\sigma - \xi)^2 f(\xi) d\xi - \frac{2}{3} B \sigma^3 f(\sigma) \quad \sigma > 0$$

(6)

$$df(\sigma)/d\sigma = \frac{1}{4} B \int_{-\sigma}^{\infty} (\sigma - \xi)^2 f(\xi) d\xi \quad \sigma < 0$$

onde $B = 8\pi A m^* \gamma^3 / \hbar e E$

é dimensional.

É importante notar que B desaparece da equação (6) com a transformação $s = B^{\frac{1}{4}} \sigma$, $x = B^{\frac{1}{4}} \xi$.

$$df(s)/ds = \frac{1}{4} \int_s^{\infty} (s-x)^2 f(x) dx - \frac{2}{3} s^3 f(s) \quad s > 0 \quad (7)$$

$$df(s)/ds = \frac{1}{4} \int_{-s}^{\infty} (s-x)^2 f(x) dx \quad s < 0$$

A velocidade média

$$\langle v \rangle = c(1 + \langle \sigma \rangle) = c(1 + \langle s \rangle B^{-\frac{1}{4}}) \quad (8)$$

mostra novamente, portanto, a dependência $E^{\frac{1}{4}}$ implícita na eq. (4) para $k \rightarrow 0$.

Uma solução assintótica de (7), para grandes s é $f(s) = \exp[-s^4/5]$, que mostra um decaimento muito rápido. Para $s = 0$ a eq. (7) indica que $[df(s)/ds]_{s=0} > 0$ e $[d^2f(s)/ds^2]_{s=0} < 0$. Mais informação sobre $f(s)$ pode ser obtida por processos de iteração. Começando com $f(x) = 1/a$ para $0 < x < a$ e $f(x) = 0$ para $x < 0, x > a$, obtém-se depois de uma etapa,

$$f(s) = \left[\frac{1}{6}(a^4 - s^4) - \frac{1}{48}(a-s)^4 \right] \frac{5}{a^5} \quad 0 < s < a \quad (9)$$

$$f(s) = \left[\frac{1}{6}(a^4 + s^4) - \frac{1}{48}(a-s)^4 \right] \frac{5}{a^5} \quad -a < s < 0$$

$$f(s) = 0 \quad |s| > a$$

onde as constantes de integração foram escolhidas de tal modo que $f(s)$ é contínua para $s = 0$ e se anula em pontos simétricos

$s = \pm a$. Note que com a solução aproximada (9) $df(s)/ds$, $d^2f(s)/ds^2$ e $d^3f(s)/ds^3$ são contínuas em $s = 0$, como exigido por (7) para a solução exata.

O parâmetro a pode ser determinado por uma condição adicional.

Uma condição física é que a quantidade de movimento total irradiada pela distribuição por unidade de tempo seja igual à força sobre a carga. De (4) isto é dado por

$$\frac{B}{5\gamma^3} \int_{k>\gamma} k^{-2} (k-\gamma)^4 (1+k+\gamma) f(k) \cos\varphi d^3k = 1$$

onde $\varphi = \chi(k, eE)$. Analogamente, a energia total irradiada por unidade de tempo é igual à energia dissipada pelo campo elétrico, ou

$$\frac{B}{\gamma^2} \int_{k>\gamma} k^{-1} (k-\gamma)^4 f(k) d^3k = \int k f(k) \cos\varphi d^3k$$

No caso unidimensional ambas as equações se reduzem à menor ordem em ξ a

$$\int_0^a f(s) s^4 ds = \int_{-a}^a f(s) ds$$

que é satisfeita com (9) e $a = 2.32$. Isto determina o valor médio de S

$$\langle S \rangle = \int_{-a}^a s f(s) ds = \frac{a}{6} = 0.38$$

Em virtude do cálculo grosseiro este valor pode ter um erro da ordem de 20%. A velocidade do eletrão por (1) é

$$\langle v \rangle = c \left(1 + 0.38 B^{-\frac{1}{4}} \right)$$

CONDIÇÕES PARA UMA MEDIDA

Embora este tratamento melhorado altere o resultado anterior (4) muito pouco, o efeito sobre o campo elétrico é considerável em virtude da dependência $E^{\frac{1}{4}}$. Para uma estimativa da ordem de grandeza inserimos valores numéricos, que podem ser típicos para Germânio, embora o emprêgo de uma massa efetiva escalar seja uma fonte considerável de erro. Seja $E_g = 4.8$ ev, $C = 3.9 \cdot 10^5$ cm/seg, $m^* = 0.3$ m, $\rho = 5.46$ g/cm³. Então $\gamma = 10^5$ cm⁻¹, $A = 0.66 \cdot 10^{-29}$ erg cm⁴/seg, $B = 2.7 \cdot 10^{-2}$ Volt cm⁻¹/E. Uma velocidade média $\langle v \rangle = 1.1 C$ é mantida por um campo elétrico $E = 1.3 \cdot 10^{-4}$ Volt/cm. Fônons típicos emitidos têm então vetor de onda $q = 0.1 \gamma = 10^4$ cm⁻¹. Portanto, um tempo de relaxação entre emissões τ é dado por $e E \tau = \hbar q$, do qual tiramos $\tau = 4.5 \cdot 10^{-8}$ seg. Isto corresponde a um caminho livre médio para emissão espontânea de fônons $\lambda = 1.1 C \tau = 2 \cdot 10^{-2}$ cm. Isto requer que a amostra usada para a observação seja suficientemente pura, de modo que a densidade N de centros de espalhamento com seção de choque S satisfaça $NS \ll \lambda^{-1}$. A fim de que fônons com vetor de onda q não sejam termicamente excitados a temperatura deve ser menor do que $\hbar c q / k_B = 3 \cdot 10^{-2}$ °K.

Para um campo dez vezes maior, $E = 1.3 \cdot 10^{-3}$ Volt/cm obtemos $\langle v \rangle = 1.18 C$, $\tau = 8.0 \cdot 10^{-9}$ seg, $\lambda = 3.7 \cdot 10^{-3}$ cm, $T < 5 \cdot 10^{-2}$ °K, onde entretanto, a velocidade pode já exceder a região de validade desta aproximação.

Os valores mostram que uma observação seria bem delicada.

AGRADECIMENTOS

O autor agradece ao Professor Walter Baltensperger a orientação dada no decorrer do trabalho de tese e à Comisión de Investigación Científica de la Provincia de Buenos Aires e ao Centro Latino Americano de Física pelas bolsas que permitiram a realização do trabalho. Agradece também ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas pela acolhida que lhe foi dispensada.



REFERÊNCIAS

1. J. M. Ziman, Electrons and Phonons (Oxford, 1960), pag. 432
2. Id., pag. 181.
3. C. Kittel, Quantum Theory of Solids (John Wiley & Sons, 1963), Chap. 7
4. H. N. Spector, Phys. Rev. 127, 1084 (1962)
5. S. G. Eckstein, Phys. Rev. 131, 1087 (1963)

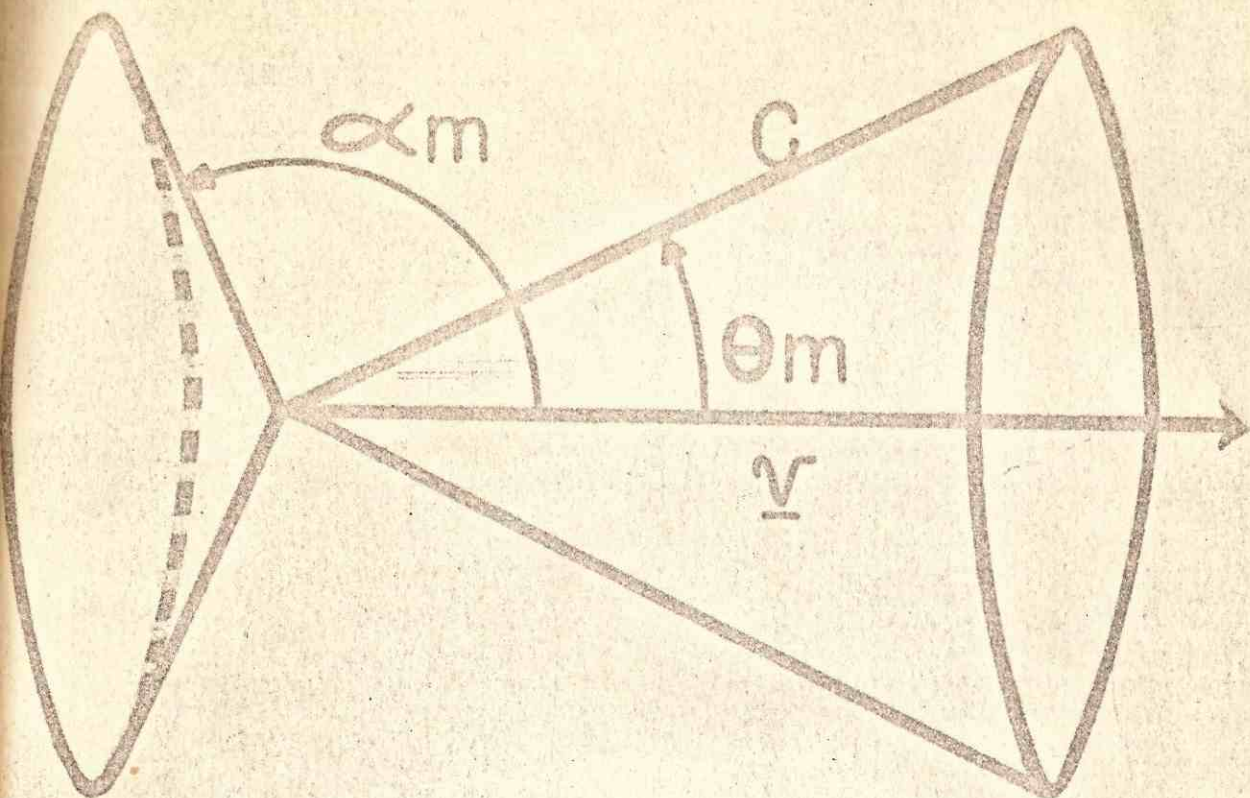


Fig . 1. Ângulo do cone de Cerenkov no sistema do laboratório (θ_m) e no sistema de coordenadas solidário com o eletrôn (α_m).

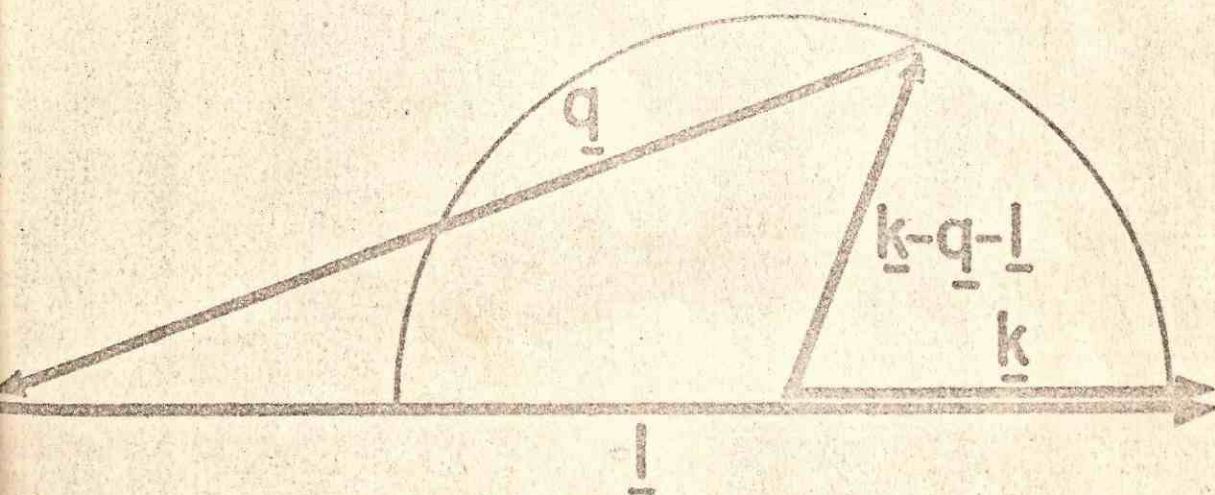


Fig. 2. Conservação de quantidade de movimento num processo Umklapp.

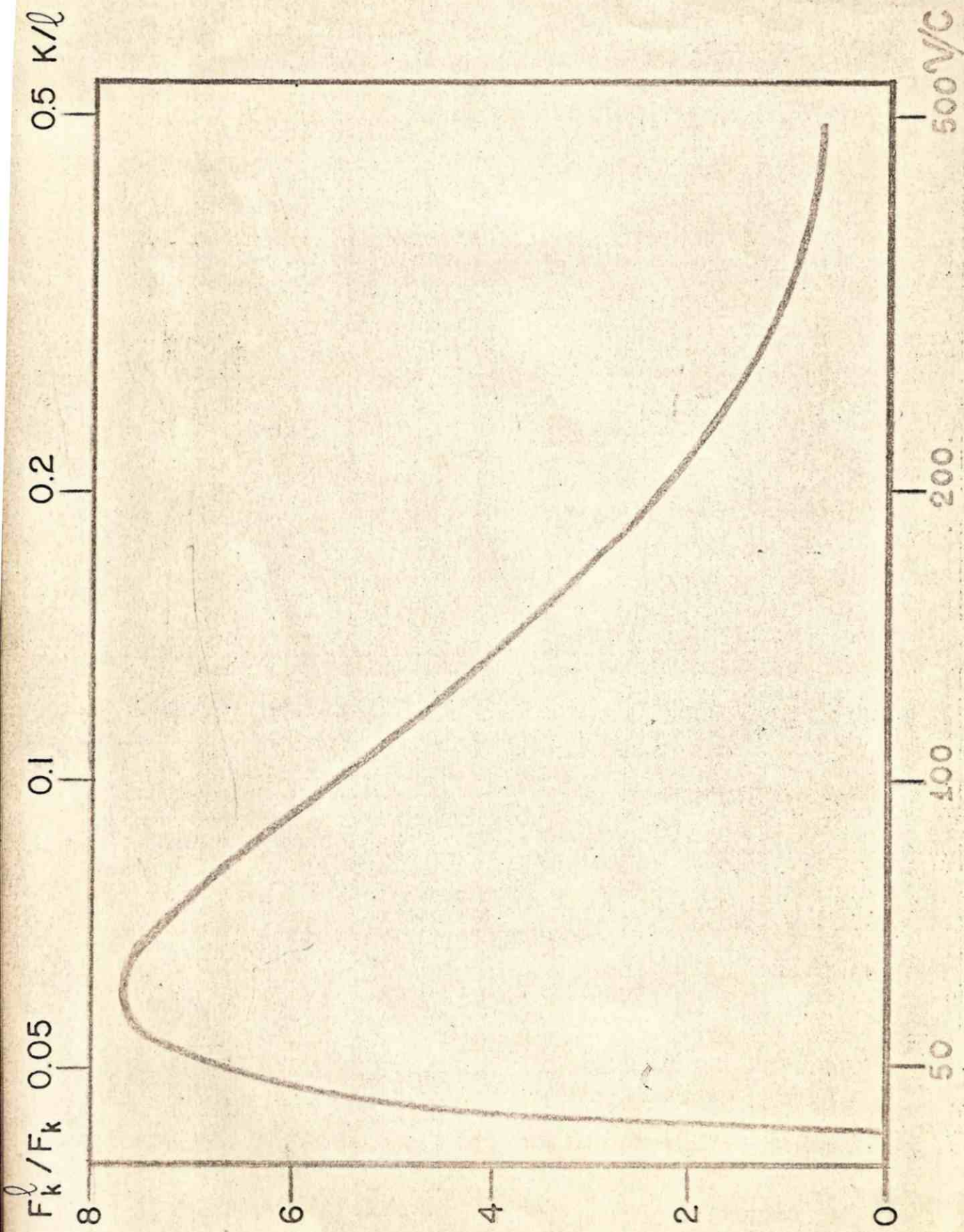


Fig. 3. Razão entre a força média devida a processos Umklapp e a força média devida a processos normais

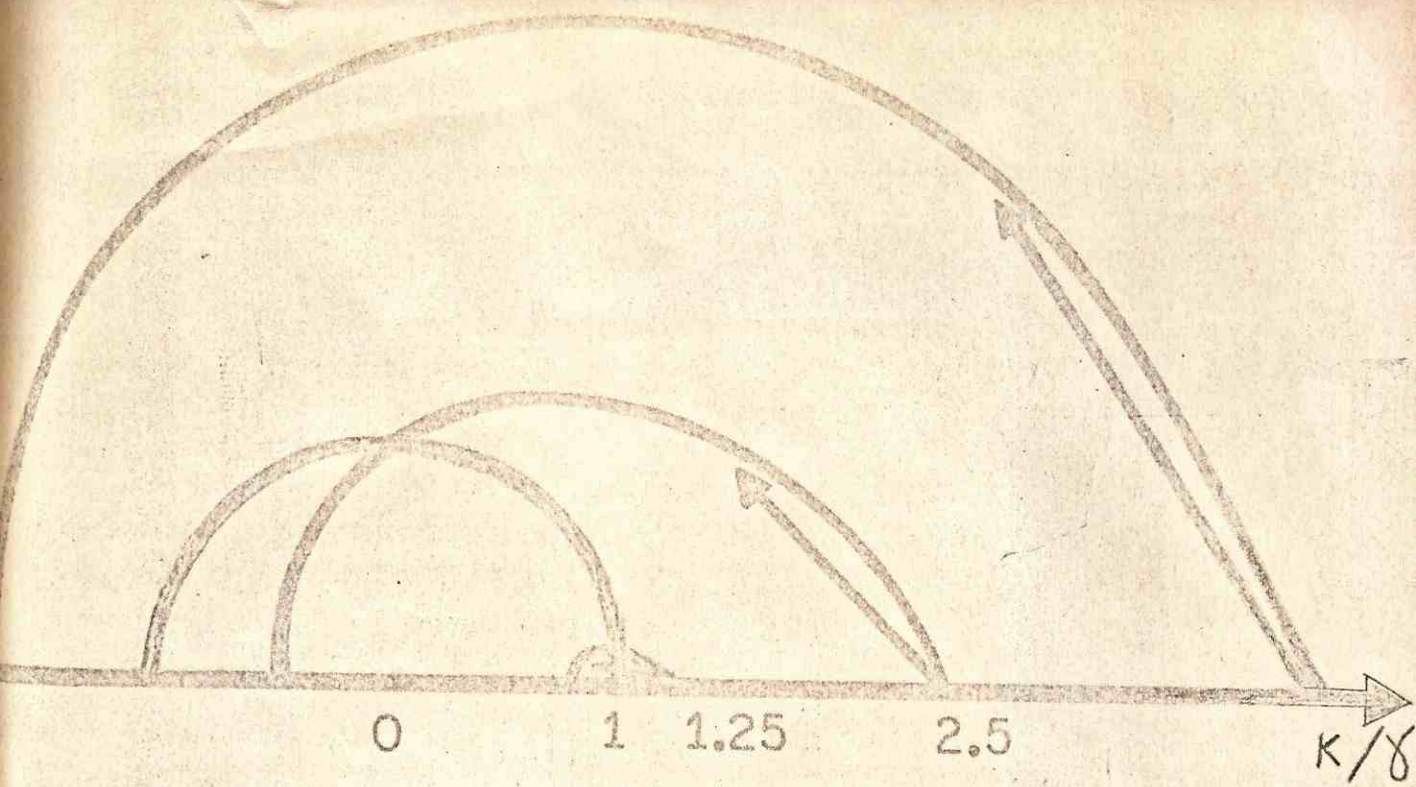


Fig. 4. Transições ocorrem de qualquer ponto k , onde $k > \gamma$, para a superfície rotacionalmente simétrica correspondente indicada.

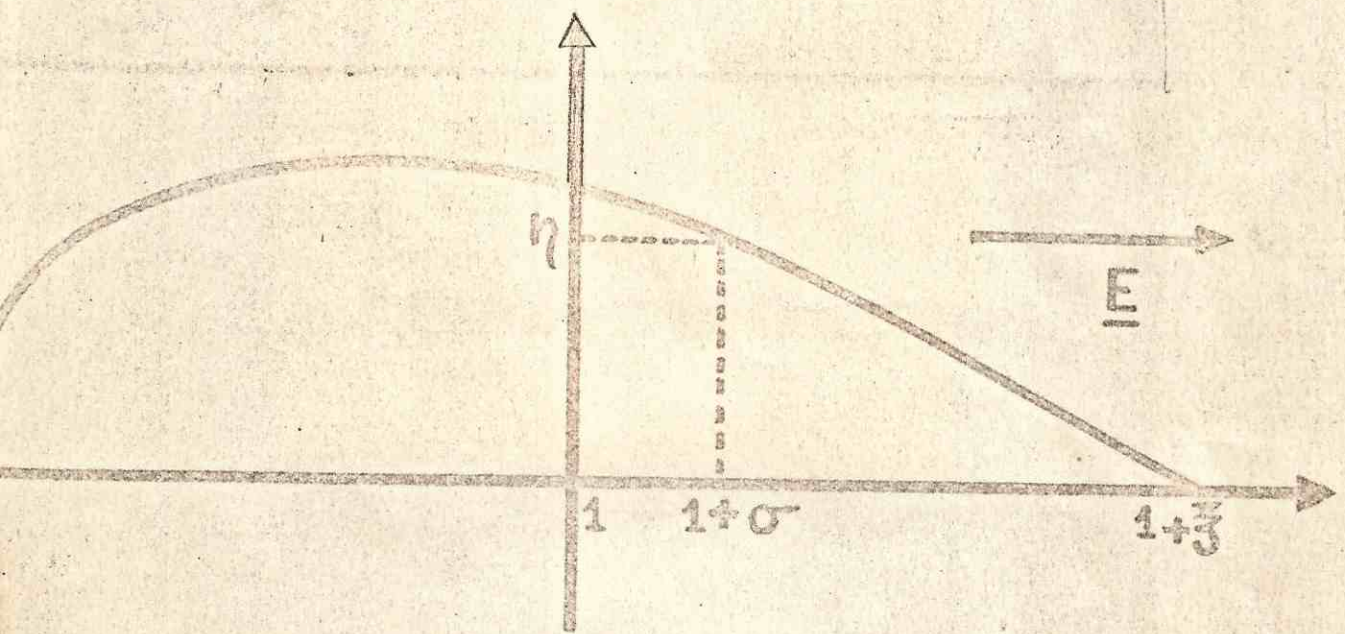
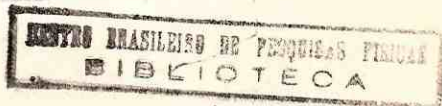


Fig.5. Unidades adimensionais no espaço-k.

EMISSÃO ESPONTÂNEA DE FÔNOS POR PORTADORES

NUMA REDE CRISTALINA PERFEITA A Oº K



TESE DE MESTRADO

defendida por:

JORGE SILVIO HELMAN

no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Orientador: W. Baltensperger

em 23 de fevereiro de 1965

perante a banca integrada pelos senhores professôres:

John Sullivan

A. M. de Graff

Jacques Danon

A. A. Lopes Zamith