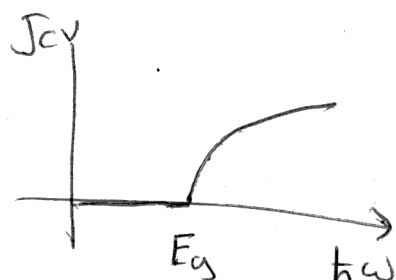


La J_{cv} se comporta así

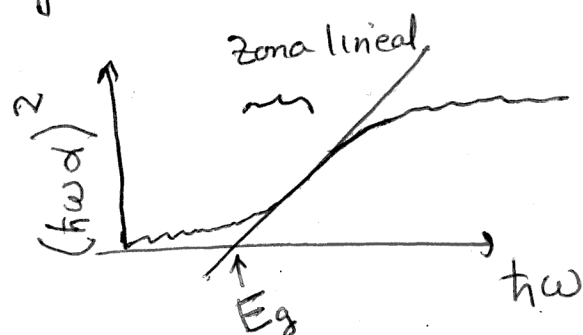


Característica del punto crítico M_0

Para determinar el bandgap experimentalmente, se usa el comportamiento

$$|h\omega \alpha(\omega)|^2 \propto C(h\omega - E_g)$$

Se hace el "grafico de Tauc"



Aunque teóricamente $\alpha = 0$ para $h\omega < E_g$, esto es en condiciones ideales: periodicidad perfecta, $T=0$, $\eta \rightarrow 0$, excitones!

Los defectos rompen la periodicidad, aparecen estados localizados bajo el gap.

Las vibraciones también, dependen de T .

Jan Tauc inventó "su gráfico" para estudiar **amorfos**. En sólidos amorfos $h\omega \alpha \sim (h\omega - E_g)^2$, entonces graficaba $(h\omega \alpha)^{1/2}$ vs $h\omega$ y obtenía el "gap de Tauc".

Transiciones prohibidas en punto Mo

$$\vec{P}_{cv}(\vec{k}_0) = 0$$

$$\vec{P}_{cv}(\vec{k}) \approx \nabla_{\vec{k}} \vec{P}_{cv}(\vec{k}_0) \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) \quad \text{Desarrollo de Taylor en primer orden}$$

$$P_{cv}(\vec{k})_{\alpha} = \frac{\partial P_{cv\alpha}}{\partial k_{\beta}} (\vec{k} - \vec{k}_0)_{\beta}$$

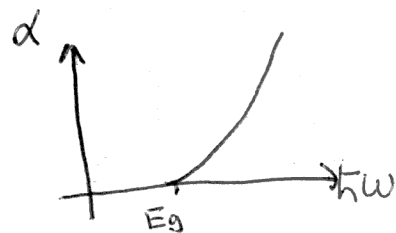
$$\epsilon_2(\omega) \approx \frac{8\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{cv} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left| \vec{e} \cdot \nabla_{\vec{k}} \vec{P}_{cv}(\vec{k}_0) \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) \right|^2 \times \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega)$$

$$\vec{e} \cdot \nabla_{\vec{k}} \vec{P}_{cv}(\vec{k}_0) = e_a \frac{\partial}{\partial k_{\beta}} P_{cv}(\vec{k}_0)_{\alpha} (\vec{k} - \vec{k}_0)_{\beta}$$

En el caso $m_1 = m_2 = m_3$ se obtiene

$$\epsilon_2(\omega) \propto \frac{1}{\omega^2} (\hbar\omega - E_g)^{3/2}$$

$$\alpha = \frac{\omega \epsilon_2}{nc} \propto \frac{1}{\omega} (\hbar\omega - E_g)^{3/2}$$



True plot

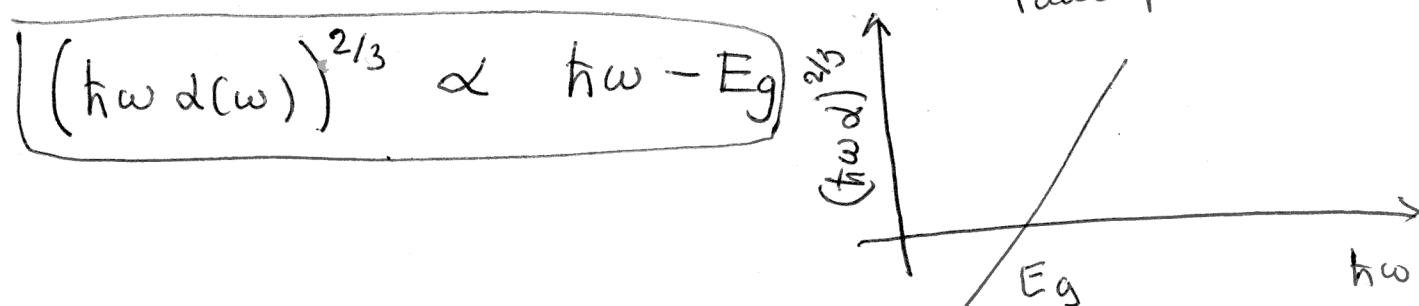
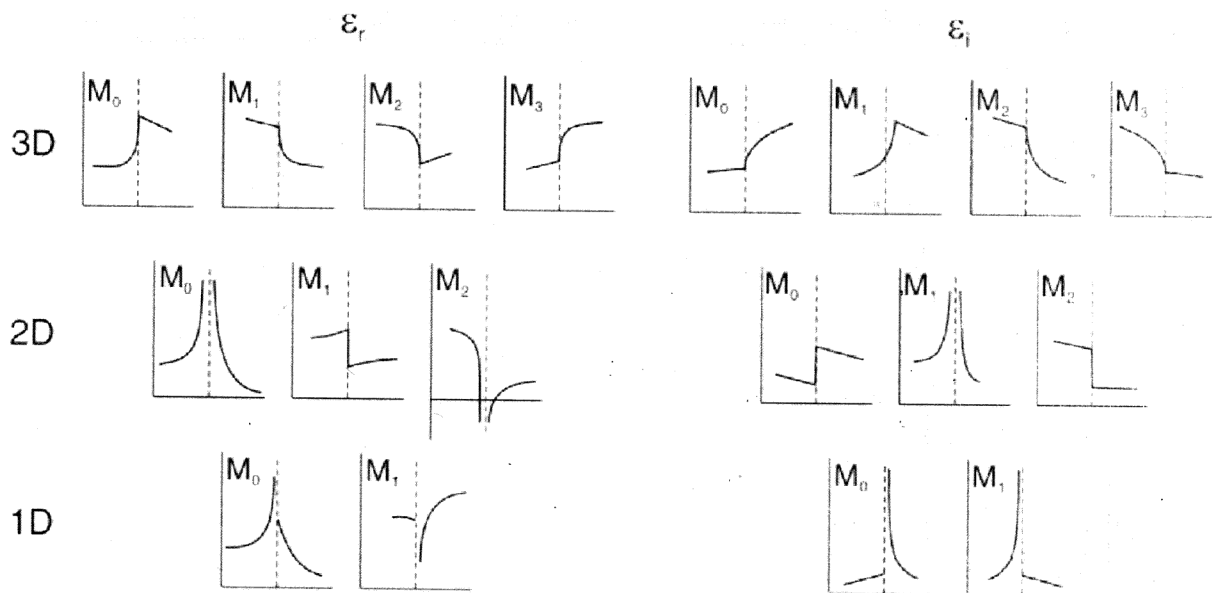


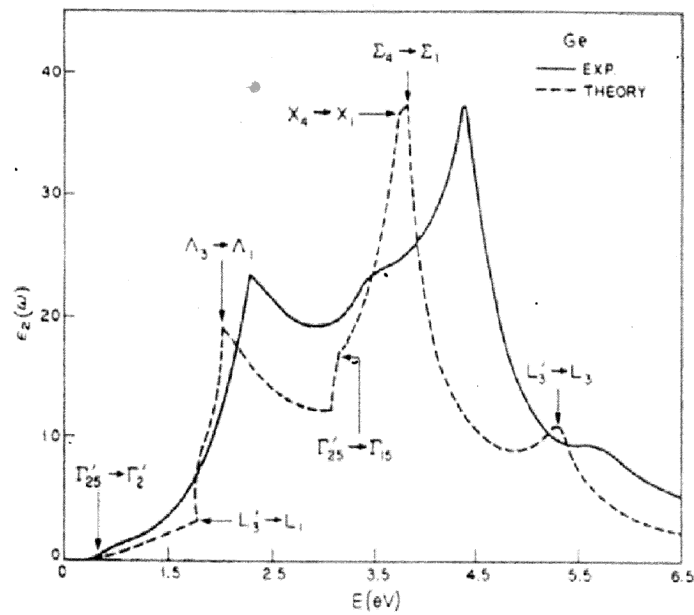
Table 9.3 Functional dependence of the joint density of states for critical points in 3, 2 and 1 dimensions

Dim.	Label	Type	D_j for $E < E_0$	D_j for $E > E_0$
3D	M_0	Min.	0	$\sqrt{E - E_0}$
	M_1	Saddle	$C - \sqrt{E_0 - E}$	C
	M_2	Saddle	C	$C - \sqrt{E - E_0}$
	M_3	Max.	$\sqrt{E_0 - E}$	0
2D	M_0	Min.	0	C
	M_1	Saddle	$-\ln(E_0 - E)$	$-\ln(E - E_0)$
	M_2	Max.	C	0
1D	M_0	Min.	0	$\sqrt{E - E_0}$
	M_1	Max.	$\sqrt{E_0 - E}$	0

E_0 denotes the energy (band separation) at the critical point, C stands for a constant value. The type of critical point is given (min.: minimum, saddle: saddle point, max.: maximum)



Fuente: M. Grundmann, The physics of semiconductors, 3ra ed., Springer (2016)



Fuente: Grosso and Pastori & Parravicini, Solid State Physics

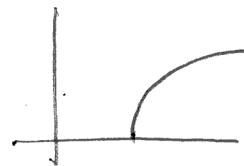
Puntos criticos en 3D

$$E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) \equiv E_g + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\tilde{k}_x^2}{m_x} + \frac{\tilde{k}_y^2}{m_y} + \frac{\tilde{k}_z^2}{m_z} \right)$$

donde $\tilde{k}_i = k - k_0 i$, $\tilde{\vec{k}} = \vec{k} - \vec{k}_0$

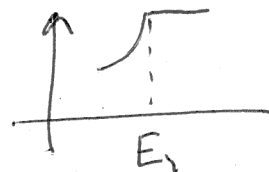
M_0 : Si $m_x, m_y, m_z > 0$

$$J_{cv} = A \sqrt{\hbar\omega - E_0}$$



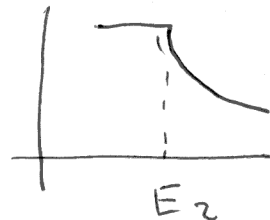
M_1 : Una de las masas tiene signo negativo. Es un punto de ensilladura

$$J_{cv}(\hbar\omega) = C_1 + A_1 \sqrt{E_1 - \hbar\omega}$$



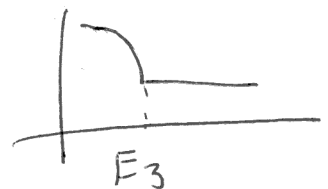
M_2 : Dos masas son negativas

$$J_{cv}(\hbar\omega) = C_2 - A_2 \sqrt{\hbar\omega - E_2}$$



M_3 : Tres masas negativas. Es un maximo

$$J_{cv}(\hbar\omega) = C_3 + A_3 \sqrt{E_3 - E}$$



Puntos críticos 2D.

Ocurren en cristales bidimensionales o quasibidimensionales.

$$E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\tilde{k}_x^2}{m_x} + \frac{\tilde{k}_y^2}{m_y} \right)$$

Puede ocurrir en cristales 3D, si, por ejemplo $m_z \gg m_x, m_y$.

$$J_{cv}(\hbar\omega) = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \int \delta(E_0 + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} \right) - \hbar\omega) d^2k$$

$$\text{Haciendo } \frac{\hbar^2}{2} \frac{k_x^2}{m_x} = q_x^2, \quad \frac{\hbar^2}{2} \frac{k_y^2}{m_y} = q_y^2$$

$$d^2k = dk_x dk_y = \frac{\sqrt{4m_x m_y}}{\hbar^2} dq_x dq_y = \frac{\sqrt{4m_x m_y}}{\hbar^2} d^2q$$

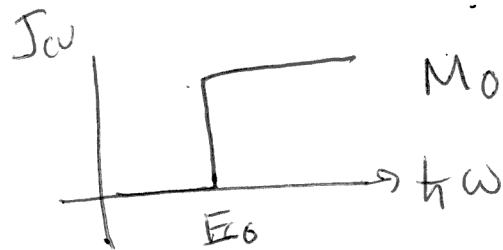
$$J_{cv}(\hbar\omega) = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \frac{\sqrt{4m_x m_y}}{\hbar^2} \int \delta(E_0 + q^2 - \hbar\omega) d^2q$$

$$\text{por la delta: } q = \sqrt{\hbar\omega - E_0}, \quad \nabla_q(E_0 + q^2) = 2q$$

$$J_{cv}(\hbar\omega) = \frac{\sqrt{m_x m_y}}{\pi^2 \hbar^2} \int \frac{\delta(q - \sqrt{\hbar\omega - E_0})}{2q} q dq d\theta_q$$

$$\int d\theta_q = 2\pi,$$

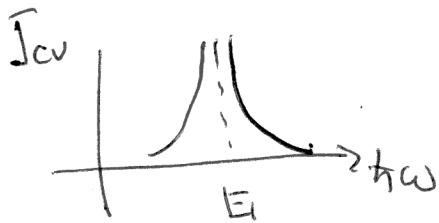
$$J_{cv}(\hbar\omega) = \frac{S \sqrt{\mu_x \mu_y}}{\pi^2 \hbar} \cdot 2\pi \times \begin{cases} 1 & \text{si } \hbar\omega > E_0 \\ 0 & \text{si } \hbar\omega < E_0 \end{cases}$$



Nota: Los excitones en Mo^{3D} hacen un efecto parecido. Se discrimina viendo la variación con la temperatura

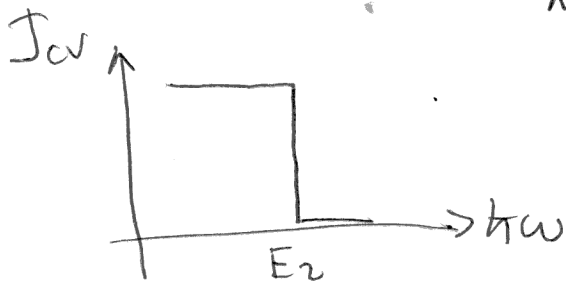
M_1 : Si $\mu_x < 0, \mu_y > 0$ ó $\mu_x > 0, \mu_y < 0$ tenemos un punto de ensilladura

$$J_{cv}(\hbar\omega) = \frac{S \sqrt{|\mu_x \mu_y|}}{\pi^2 \hbar^2} \ln \frac{4\epsilon_c^2}{|E - E_1|}$$



M_2 : $\mu_x < 0, \mu_y < 0$. Es un máximo

$$J_{cv}(\hbar\omega) = \frac{2S \sqrt{|\mu_x \mu_y|}}{\pi \hbar^2} \times \begin{cases} 1 & \text{si } \hbar\omega < E_2 \\ 0 & \text{si } \hbar\omega > E_2 \end{cases}$$

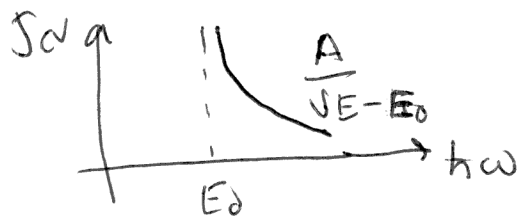


Puntos críticos 1D.

$$M_0: E_c(k) - E_v(k) = E_0 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x}$$

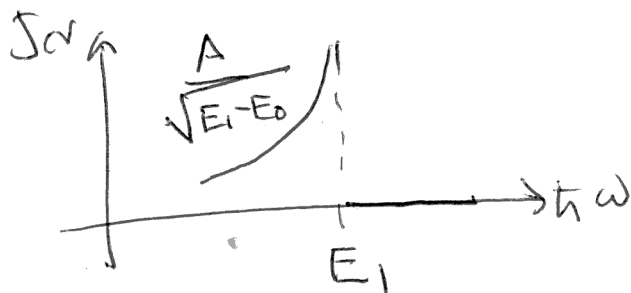
$$J_{cv}(\hbar\omega) = \frac{L_x}{2\pi} \int \delta(E_0 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} - \hbar\omega) dk_x$$

$$= \frac{L_x}{2\pi\hbar} \sqrt{2m_x} \cdot \frac{1}{\sqrt{E - E_0}}, \text{ si } E > E_0$$



$$M_1: E_c(k) - E_v(k) = E_1 - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x}$$

$$J_{cv}(\hbar\omega) = \frac{L_x \sqrt{2m_x}}{2\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{E_1 - E}}$$



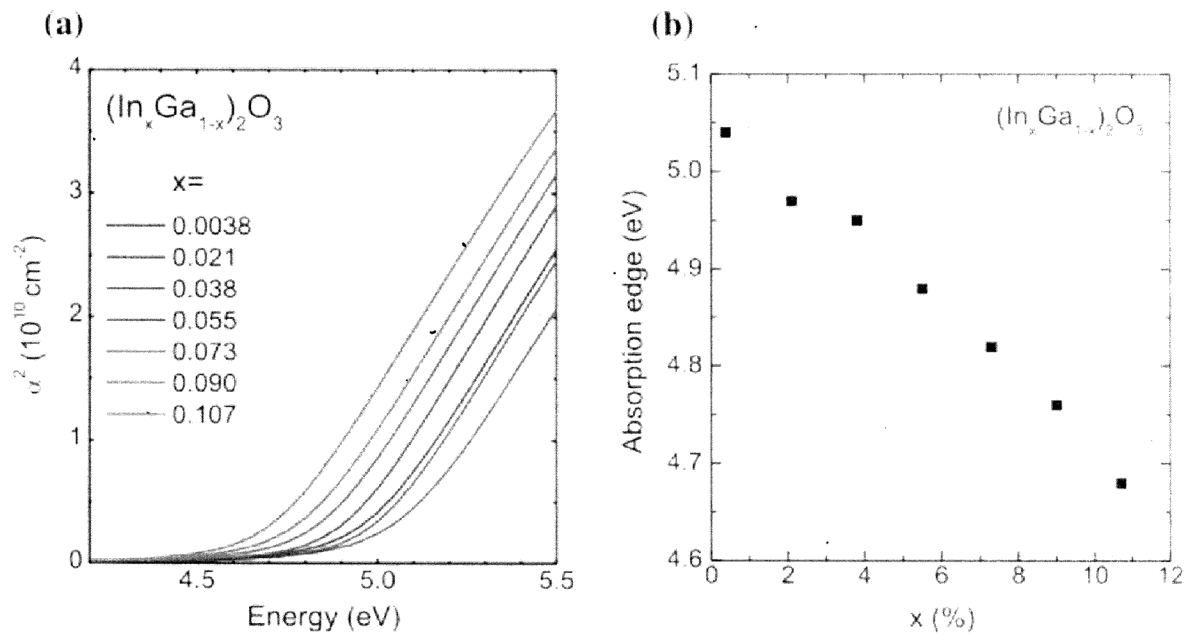
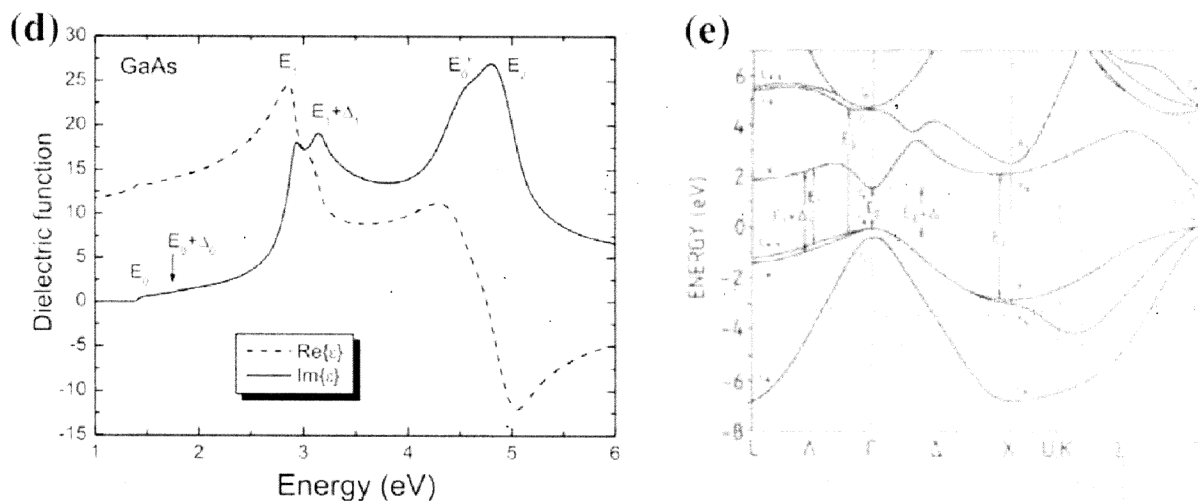
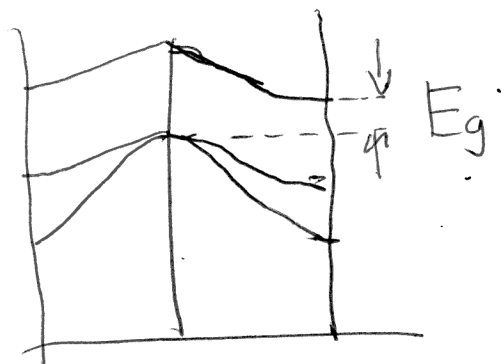


Fig. 9.7 (a) Absorption spectra of $(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ alloy thin films on Al_2O_3 , plotted as α^2 versus photon energy. (b) Band edge determined from extrapolation of linear parts
Fuente: M. Grundmann, The physics of semiconductors.



T=300 K. A la derecha se indican las bandas y las energías de puntos críticos.
Fuente: M. Grundmann, The physics of semiconductors, 3ra ed., Springer (2016)

Transiciones indirectas. Gap indirecto
 Materiales como el silicio tienen una estructura de bandas con gap indirecto.



Hay absorción desde $\hbar\omega \geq E_g$
 Estas transiciones cambian el $\vec{k}$ electrónico.

Este $\Delta\vec{k}$ se logra por absorción o emisión de fonones.

Las transiciones verticales ocurren para energías mayores.

Se explica mediante teoría de perturbaciones dependiente del tiempo de 2do orden

$$W = H_{em} + H_{ep}$$

$$= \frac{eA_0}{mc} \vec{e} \cdot \vec{p} e^{-i\omega t} + c.c. + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} \overbrace{V_p(\vec{q}, \vec{r})}^{12B} e^{-i\omega_{\vec{q}} t} \hat{a}_{\vec{q}}$$

Aquí para la luz: $\vec{q} = 0$ + A.C.

$\vec{q}$ es el del fonón. A diferencia de la luz, $\vec{q}$ de fonón está en toda la 1ra Zona de Brillouin.
 $\hat{a}_{\vec{q}}$ es operador de aniquilación de fonón.

La transición indirecta (con cambio de $\vec{k}$)
se hace posible en 2do orden de perturbaciones

$$P_{v\vec{k}_1 \rightarrow c\vec{k}_2} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{v\vec{k}_1 \rightarrow c\vec{k}_2}|^2 \delta(E_{c\vec{k}_2} - E_{v\vec{k}_1} - \hbar\omega_g - \hbar\omega)$$

donde, en 2do orden, para absorción de un fotón y absorción en fonón.

$$W_{v\vec{k}_1 \rightarrow c\vec{k}_2} = \frac{eA_0}{mc} \sqrt{n_g} \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\frac{\langle \psi_{c\vec{k}_2} | V_p(\vec{q}, \vec{r}) | \psi_{v\vec{k}_1} \rangle \langle \psi_{v\vec{k}_1} | \vec{e} \cdot \vec{p} | \psi_{\alpha\vec{k}_1} \rangle}{E_{c\vec{k}_2} - E_{\alpha\vec{k}_1} + \hbar\omega} \right. \\ \left. + \sum_{\beta} \frac{\langle \psi_{c\vec{k}_2} | \vec{e} \cdot \vec{p} | \psi_{\beta\vec{k}_2} \rangle \langle \psi_{\beta\vec{k}_2} | V_p(\vec{q}, \vec{r}) | \psi_{v\vec{k}_1} \rangle}{E_{c\vec{k}_2} - E_{\beta\vec{k}_2} + \hbar\omega_g} \right]$$

donde $n_g = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_g} - 1}$

Las 2 sumatorias se pueden representar así:



+



Además hay procesos de emisión de fonón

Haciendo aproximaciones similares a las vistas para transiciones directas, se obtiene una densidad de estados conjunta.

$$J_{CV, \text{phonon}}(\omega) = \frac{(m_v^* m_c^*)^{3/2}}{6 \pi^3 \hbar^6} (\hbar\omega - E_g + k_B \theta)$$

donde $k_B \theta_0 = \hbar\omega_{q_0}$, $\vec{q}_0$ del fonón que hace la transición
 $q_0 = k_j - k_i$

también hay que considerar la emisión de fonones

La contribución total es

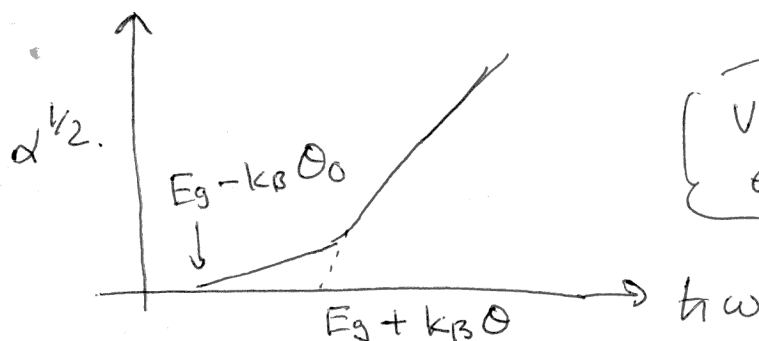
$$\alpha(\omega) = C \left[\frac{(\hbar\omega - E_g + k_B \theta)^2}{e^{\theta/T} - 1} + \frac{(\hbar\omega - E_g - k_B \theta)^2}{1 - e^{-\theta/T}} \right]$$

$\nearrow$
 n_q
 aniquilación (absorción) de fonón.

desaparece a
 baja T

$\nearrow$
 $n_q + 1$, creación
 (emisión) de fonones

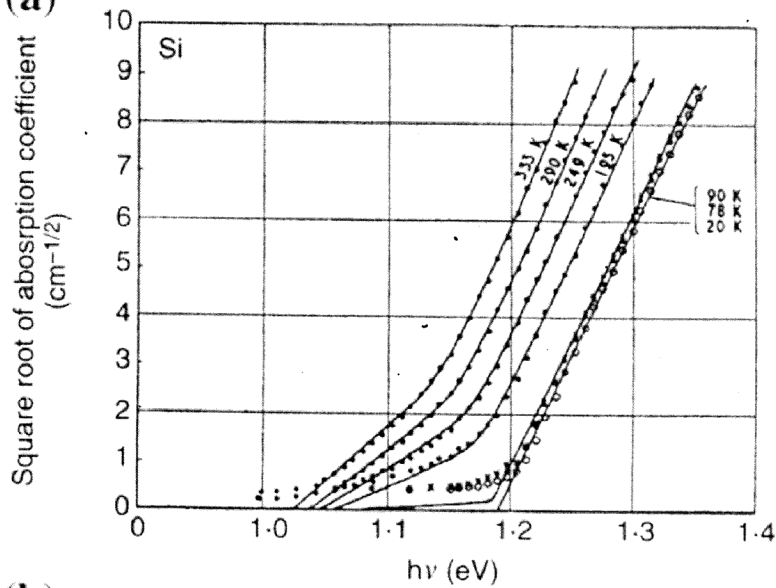
Este proceso existe a
 cualquier T.



Ver gráficos
 en slide

Transiciones indirectas

(a)



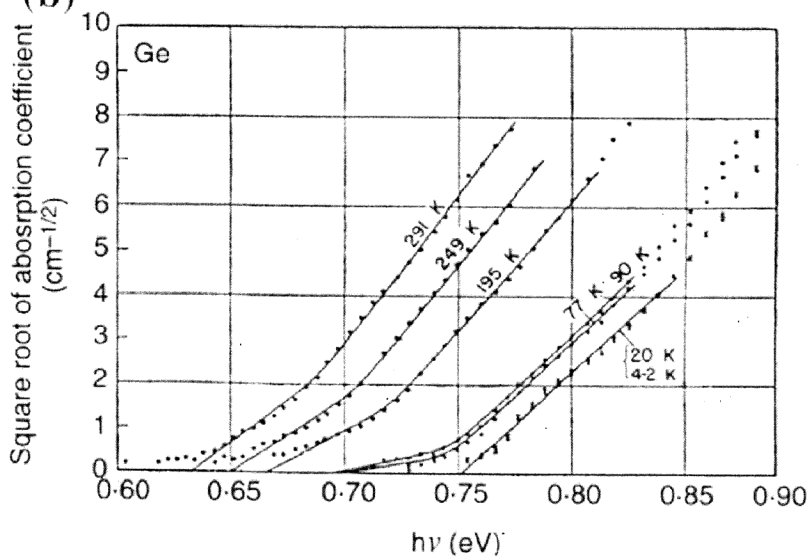
Hay dos líneas rectas:
para creación y para
aniquilación de fonón

La de menor umbral es
la de aniquilación.

A bajas temperaturas no
hay fonones para
aniquilar. Esta línea se
refuerza al aumentar T.

Hay una zona no
explicada para baja
energía. Se debe a
impurezas y defectos.

(b)



Idem.

Note los valores del
coeficiente de absorción

$\alpha \sim 10^1 - 10^2 \text{ cm}^{-1}$
compare con el caso de
transiciones directas en
GaAs

$\alpha \sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$

Figure 12.8 (a) Indirect transitions in silicon; dots indicate experimental measurements; the full lines are calculated using Eq. (12.22) of the text. (b) Indirect transitions in germanium [With permission from Fig. 1, Phys. Rev. 98, 1865 (1955) and Fig. 1, Phys. Rev. 97, 1714 (1955)].

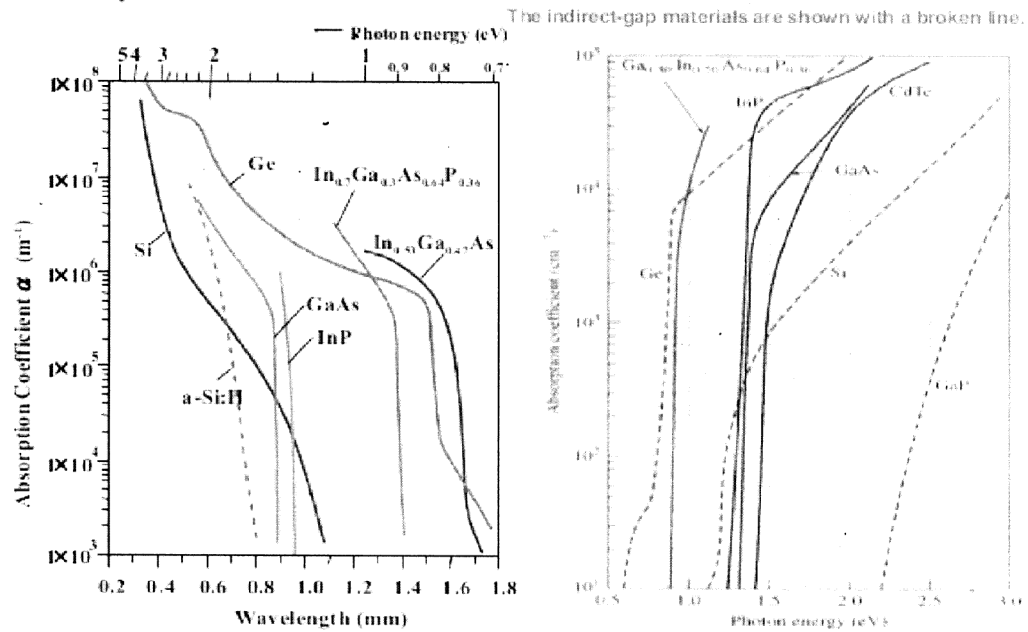
Fuente: Grosso & Pastori Parravicini, Solid State Physics

En escala logaritmica se aprecia mejor. Identifique los distintos regimenes.

Photodetectors

Absorption Coefficient and Photodiode Materials

□ Absorption

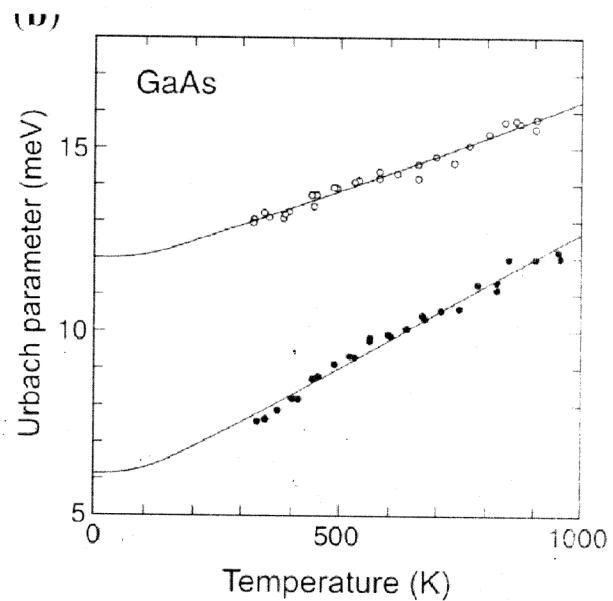
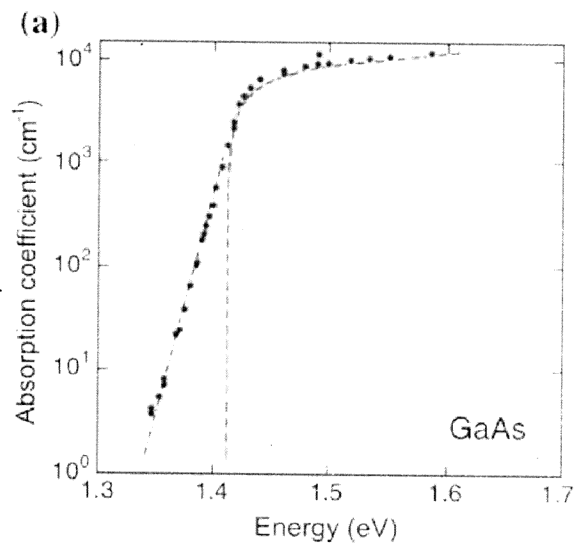


Colas de Urbach

$$\alpha(E) \propto \exp\left(\frac{E - E_g}{E_0}\right), \text{ si } E < E_g$$

E_0 es llamado parámetro de Urbach

La cola de Urbach se debe a transiciones desde o hacia estados localizados en el gap, cerca de los bordes de banda. Se originan por desorden, defectos, impurezas, y fluctuaciones térmicas.



Fuente: M. Grundmann, The physics of semiconductors, 3ra ed., Springer (2016)

Anisotropía.

ϵ es un tensor de rango 2.

Se representa por matrices

Para cristales cúbicos es diagonal.

Ver transparencia resumen.

La anisotropía se obtiene de $|\vec{e} \cdot \vec{p}_{cv}|^2$ y

de la simetría de las bandas, o mas

bien de las $\psi_{v\vec{k}}$, $\psi_{c\vec{k}}$, las cuales, a su vez,

reflejan la simetría de la estructura

cristalina. Técnicamente, la forma del

tensor ϵ depende del grupo puntual del cristal.

Anisotropía

Table 9.2 General form of the dielectric tensor for various crystals

crystal system	optical symmetry	examples
cubic	isotropic	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix}$ Si, GaAs, MgO, ZnSe, CuI
tetragonal hexagonal trigonal	uniaxial	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$ CuGaSe ₂ , GaN, Bi ₂ Se ₃
orthorhombic	biaxial	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$ Sb ₂ Se ₃
monoclinic	biaxial	$\begin{pmatrix} a & d & 0 \\ d & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$ β-Ga ₂ O ₃ , anthracene
triclinic	biaxial	$\begin{pmatrix} a & d & e \\ d & b & f \\ e & f & c \end{pmatrix}$ tetracene

Fuente: M. Grundmann, The physics of semiconductors, 3ra ed., Springer (2016)

Excitones

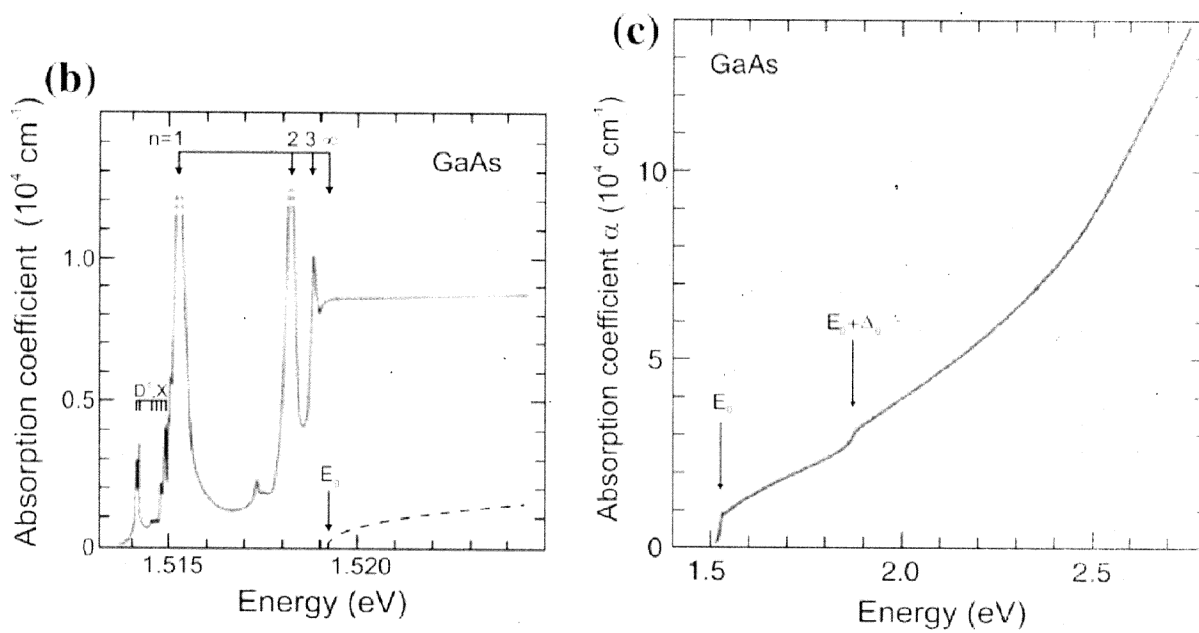
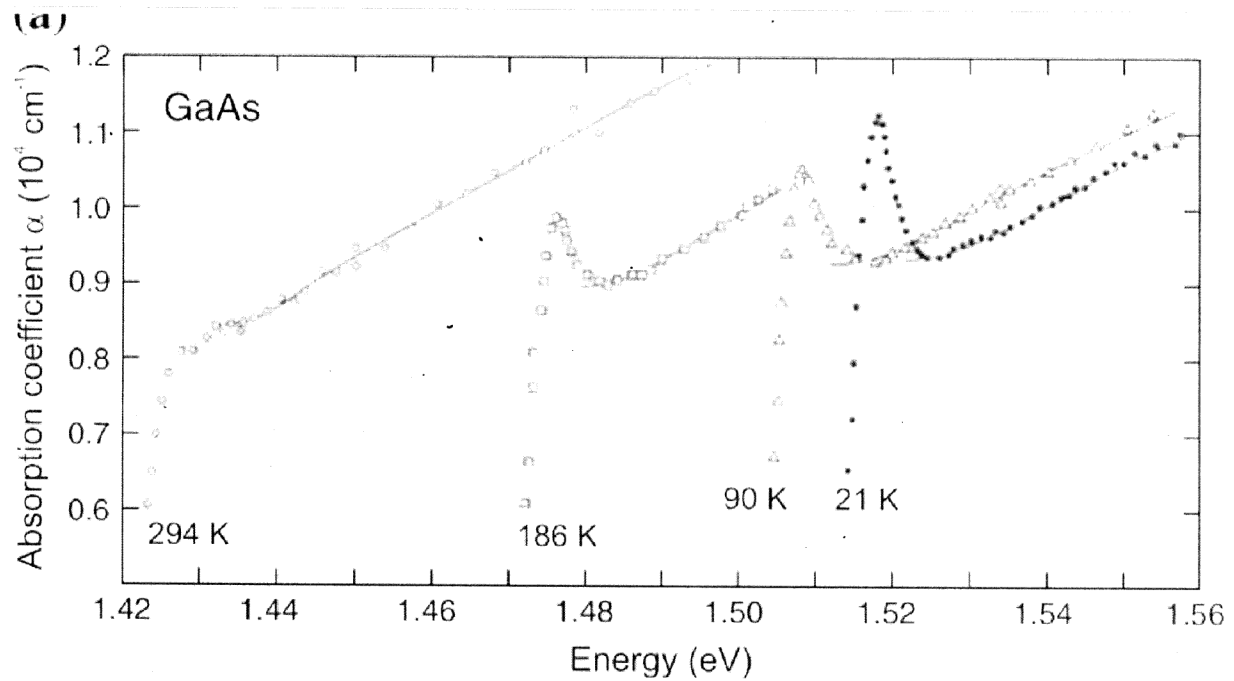
Mostrar espectros de absorción de GaAs para varias temperaturas. Se observa la aparición de un fuerte pico de absorción a baja T .

Medido con alta resolución, es una serie de picos. Aunque existe una teoría rigurosa (vease § 7.1 del texto de Grosso & Pastorello), consideraremos un modelo simple.

Cuando la absorción de luz produce transiciones valencia $\rightarrow$ conducción, los pares electron-hueco se acoplan, similar a un átomo de hidrógeno. El movimiento relativo del par $e-h$ se describe por una función $F(\vec{r})$ que satisfaga

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} \right] F(\vec{r}) = (E - E_g) F(\vec{r})$$

Excitones



La línea discontinua muestra la teoría sin exciton.

Los picos con $E < E_g$ se deben a interacciones de pares. No se predicen con la teoría de electrones independientes.

Fuente: M. Grundmann, The physics of semiconductors, 3ra ed., Springer (2016)

Esta ecuación es similar a la del hidrógeno,

la energía de enlace es

$$R_{ex} = \frac{\mu e^4}{2 \hbar^2 \epsilon^2} = (13.6 \text{ eV}) \frac{(\mu/m_0)}{\epsilon^2} = R \frac{(\mu/m_0)}{\epsilon^2}$$

→ $E_n = E_g - R_{ex}/n^2$
el radio de Bohr del excitón es

$$a_{ex} = \frac{\hbar \epsilon}{\mu e^2} = a_B \frac{m}{\mu} \epsilon, \quad a_B = 0.529177 \text{ \AA}$$

Si $A(\vec{k})$ es la transformada de Fourier de $F(\vec{r})$

$$F(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

entonces el estado multielectrónico se expresa

$$\Psi_{ex} = \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) \Psi_{\vec{k}\vec{k}, \nu\vec{k}}$$

Con respecto a la aproximación de electrones independientes, se reemplaza

$$|\langle \Psi_{\vec{k}\vec{k}} | \vec{e} \cdot \hat{p} | \Psi_{\nu\vec{k}} \rangle|^2 \rightarrow \left| \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) \langle \Psi_{\vec{k}\vec{k}} | \vec{e} \cdot \hat{p} | \Psi_{\nu\vec{k}} \rangle \right|^2$$

Se aproxima $\langle \psi_{ck} | \vec{e} \cdot \vec{p} | \psi_{vE} \rangle = Q = cte$

$$P_{\psi_{ex} \rightarrow \psi_{ex}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eA_0}{mc} \right)^2 2|c|^2 V |F(0)|^2 \delta(E_{ex} - E_0 - \hbar\omega)$$

R) Igual que para el hidrogeno,

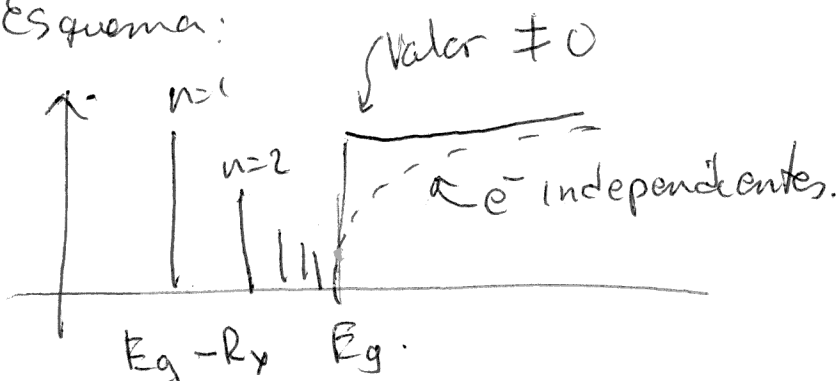
$F(0) \neq 0$ para estado S.

Ademas, $F_n(0) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_{ex}^3 n^3}$

Para $\hbar\omega > E_g$ tambien se modifica el espectro de absorcion

$$\epsilon_2^{ex}(\omega) = \epsilon_2(\omega) \frac{\pi \chi e^{\pi \chi}}{\sinh \pi \chi}, \text{ con } \chi = \sqrt{\frac{R_{ex}}{\hbar\omega - E_g}}$$

Esquema:



Si $\hbar\omega - E_g \gg R_{ex}$
Se recupera el resultado de e^- independientes

En caso que en el punto critico M_0 , ocurre

$$\langle \psi_{c\vec{k}} | \vec{p} | \psi_{v\vec{k}} \rangle = C_2 \vec{k}$$

$$P_{\psi_0 \rightarrow \psi_{ex}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eA_0}{mc} \right)^2 2|C_2|^2 v |\vec{e} \cdot \nabla F|_{\vec{r}=0}^2 \delta(E_x - E_0 - \hbar\omega)$$

$\nabla F(\vec{r}=0) \neq 0$ sólo para estados p. Las

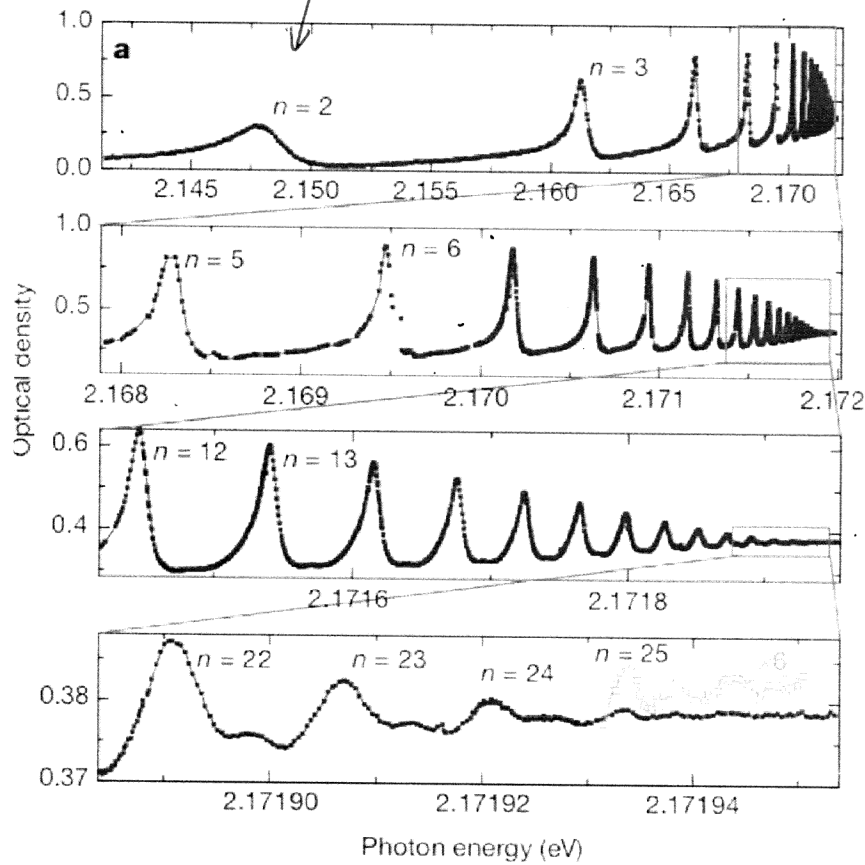
líneas de absorción ocurren a

$$E_n = E_g - \frac{R_{ex}}{n^2} \quad , \quad n=2, 3, \dots$$

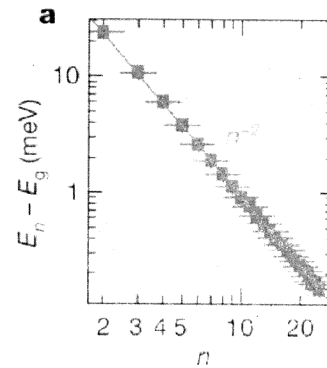
El Cu_2O es un ejemplo donde esto ocurre.

Vea que comienza con $n=2$

Excitón en Cu_2O



Cortaron piezas de $34 \mu\text{m}$

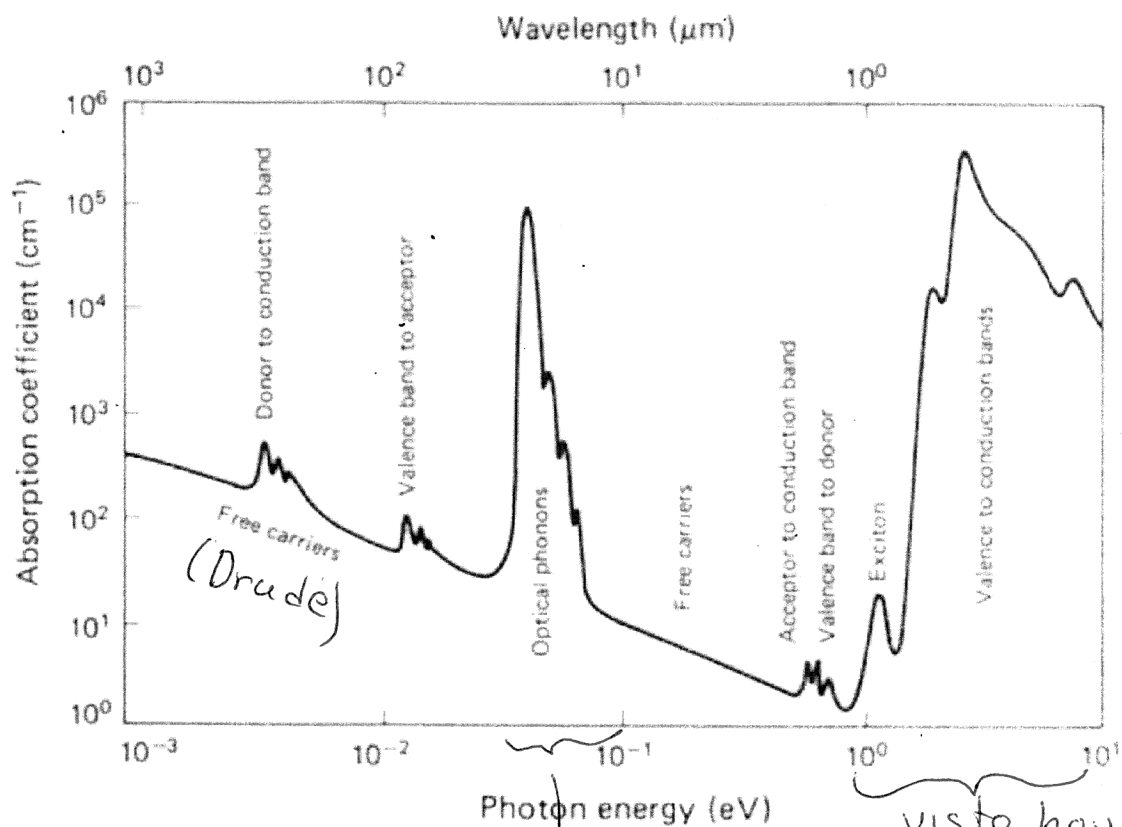


$$E_n = E_g - \frac{R_{ex}}{n^2}$$

Serie del Cu_2O a $T=1.2 \text{ K}$. Se ha medido en una piedra natural muy pura de Cu_2O .

Fuente: T.Kazimierzczuk et al., Giant Rydberg excitons in the copper oxide Cu_2O . Nature 514, 343–347 (2014).

Espectro de absorción típico.



Fuente: Fig 9.3, M. Grundmann, The physics of semiconductors, 3ra ed., Springer (2016)