

Universidad Nacional Autónoma de México
FACULTAD DE CIENCIAS

TEORIA DE LA CONDUCTIVIDAD
NO-OHMICA
ENFRIAMIENTO ELECTRONICO

TESIS DOCTORAL
QUE PARA OPTAR POR EL TITULO DE
DOCTOR EN FISICA
P R E S E N T A

Edmundo de Alba Alcaraz



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

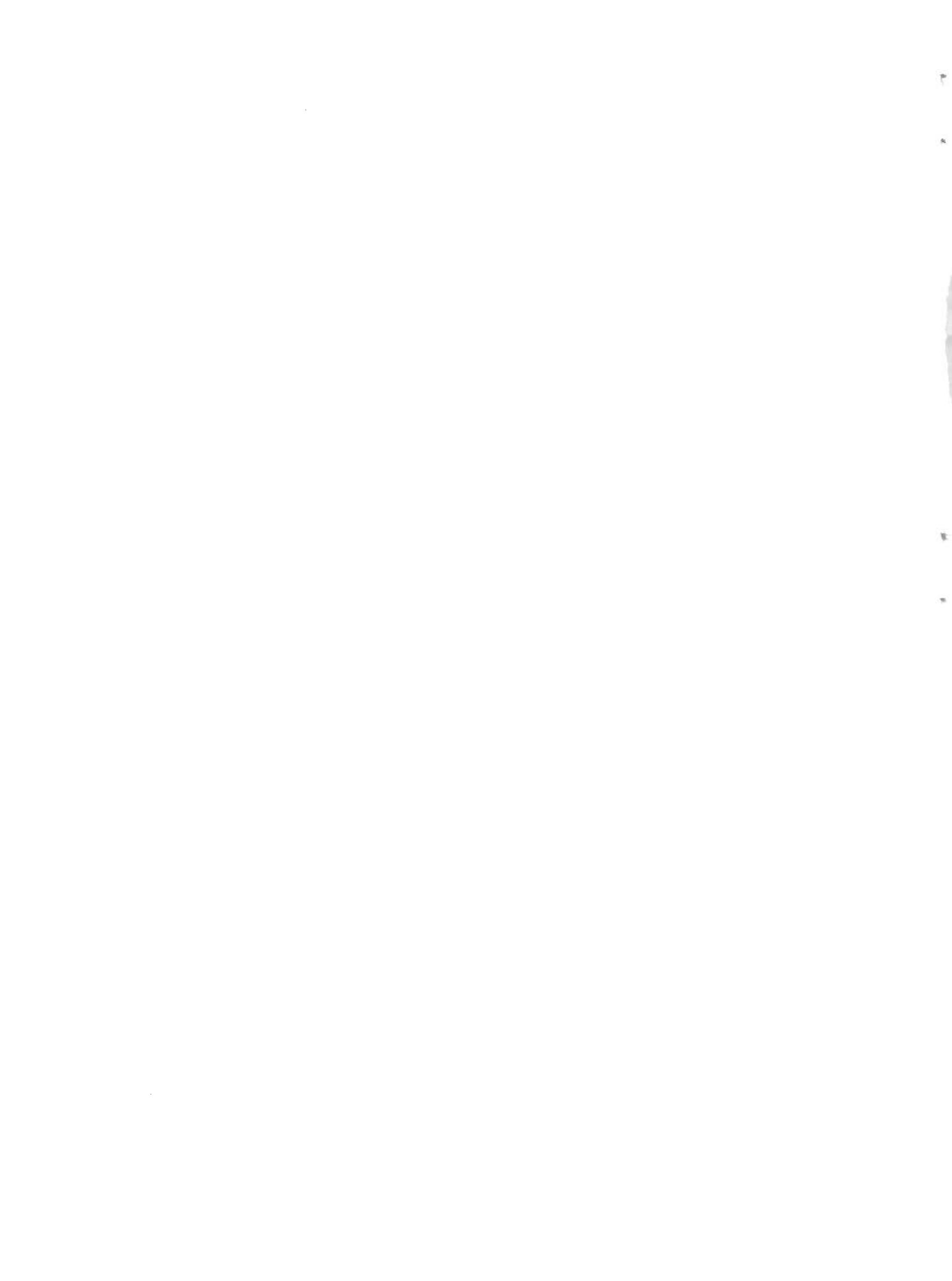
El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

A mi compañera y esposa

Agradezco profundamente la dirección y consejos del Prof. Fröhlich y del Dr. Paranjape, los cuales hicieron posible la realización de esta tesis.

INDICE

- I. - INTRODUCCION.
- II. - ECUACION DE BOLTZMANN EN SOLIDOS.
 - 1) Aproximaciones en el estado sólido.
 - 2) Consideraciones generales sobre la ecuación de Boltzmann.
 - 3) Términos en la ecuación.
 - 4) Otros tipos de solución.
 - 5) Ecuaciones para fonones.
- III. - PROBLEMAS DE TRANSPORTE.
 - 1) Conductividad eléctrica.
 - 2) Otros fenómenos.
- IV. - TEORIA DE LA TEMPERATURA ELECTRONICA.
 - 1) Calentamiento electrónico.
 - 2) Enfriamiento electrónico.
- V. - CONCLUSIONES.
- VI. - REFERENCIAS.



CAPITULO I

INTRODUCCION

El propósito de esta tesis, es el mostrar que la hipótesis usual en la teoría de la conductividad eléctrica, de que la velocidad de arrastre del sistema electrónico es siempre suficientemente pequeña como para tomarla en cuenta únicamente a primer orden, no sólo no es necesariamente justificable, sino que aparecen nuevos fenómenos no-ohmicos en semiconductores. El cálculo de la conductividad eléctrica a campos altos es normalmente tratada mediante la hipótesis de la temperatura electrónica (Hot electron theory), haciendo uso de ésta es como mostraremos que la contribución a segundo orden no es, en ciertas regiones de temperaturas, solamente un refinamiento que de una pequeña contribución, sino un término sumamente importante, que puede llegar a cambiar el signo de la desigualdad entre la temperatura electrónica y la de la malla cristalina.

Los siguientes dos capítulos están dedicados a hacer un breve resumen de las técnicas y aproximaciones (Cap. II) que son normalmente utilizadas en los fenómenos de transporte en sólidos (Cap. III), mientras que en el capítulo IV se hacen los cálculos que dieron origen a esta tesis, -



reservándose para el último capítulo las conclusiones obtenidas, así como las posibilidades de extensión del tratamiento y su observabilidad experimental.

CAPITULO II

ECUACION DE BOLTZMANN EN SOLIDOS. (1)-(3).*

En este capítulo trataremos en forma muy breve, las - - aproximaciones involucradas en el planeamiento de la ecuación de Boltzmann que después nos ocupará. También se hará un comentario acerca de otras técnicas en solución en uso.

1) Aproximaciones en el Estado Sólido. (4).

Normalmente, partir de primeros principios en un problema de Estado Sólido significa escribir un Hamiltoniano no-relativista (en descripción de Pauli-espín incluido), en el que se toman como "partículas elementales" a los núcleos y los electrones del sistema, en general el espín electrónico no es tomado en cuenta más que para cálculos que involucren campos magnéticos o algunos casos en los que intervienen directamente en la configuración energética electrónica (5), restringiéndonos entonces a electrones sin espín (excepto por sus consecuencias en la degeneración y la posible estadística), podremos partir de un hamiltoniano de la forma:

*Las referencias se denotarán () dándose las fórmulas como números sin paréntesis II-1 (Segundo capítulo, primera fórmula).

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_\alpha \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \nabla_\alpha^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(r_i - r_j)$$

II-1

$$+ \sum_{i,\alpha} V_\alpha(r_i - R_\alpha) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} U_{\alpha,\beta}(R_\alpha - R_\beta)$$

donde los índices latinos denotan coordenadas electrónicas y los griegos nucleares. Hemos considerado explícitamente la posibilidad de tener varios tipos de núcleos, aunque en general, en un estado tan fundamental como este, nunca se toman en cuenta núcleos que no pertenezcan a los elementos bases del sistema (esto es: impurezas). El tercer término en II-1, representa la interacción interelectrónica, el cuarto la electrón-núcleo y el quinto la núcleo-núcleo.

La información introducida Hamiltoniano, si bien es básica, sin embargo no define adecuadamente el problema, pues es igualmente aplicable a gases, líquidos, sólidos amorfos, etc. y describiría mejor que a nuestro sólido, a un gas totalmente ionizado de densidad arbitraria. Si queremos describir a un sólido y en particular a un semiconductor, entonces debemos utilizar información adicional. Podemos partir del hecho de que a bajas temperaturas un semiconductor presenta una corriente eléctrica casi nula (a campos moderados), entonces utilizaremos como hipótesis que el sistema electrónico debe formar parte de estructuras saturadas o casi saturadas, esto es, una buena parte (al menos) de los electrones estarán fuertemente ligados a los núcleos.

Fijémonos por el momento en estos electrones fuertemente ligados, esperamos que sigan con cierta fidelidad el movimiento de los núcleos, esto es, los podemos considerar en estados energéticos fijos, que si bien resultan función de la posición instantánea de los núcleos, una variación en estas posiciones no altera el nivel parametrizado que está ocupando el sistema electrónico en consideración, en otras palabras, tratamos de encontrar soluciones de la ecuación de Schrödinger, con la separabilidad - - - - -

$$\Psi(\underline{\sigma}, \underline{R}) = \phi(\underline{R}) \psi_n(\underline{\sigma}; \underline{R})$$

Si tal separabilidad es válida, obtendremos un Hamiltoniano electrónico efectivo $H_e(\underline{\sigma}; \underline{R})$ parametrizado por \underline{R}_α y que presenta estados estacionarios $\psi_n(\underline{\sigma}; \underline{R})$ con energía $E_n(\underline{R})$.

Esta es la llamada aproximación adiabática o de Born-Oppenheimer. Lo adiabático le viene de suponer que el movimiento nuclear, si bien altera la energía del sistema no lo hace cambiando de nivel (esta es la presentación ortodoxa, ver por ejemplo, Ziman (2), o la ligeramente más general de Dresden (4)). La validez de este esquema que separa el movimiento en dos ecuaciones estacionarias:

$$H_e(\underline{\sigma}; \underline{R}) \psi_n(\underline{\sigma}; \underline{R}) = E_n(\underline{R}) \psi_n(\underline{\sigma}; \underline{R})$$

II-2

$$H_N(\underline{R}) \phi(\underline{R}) = E \phi(\underline{R})$$

(con E la energía total del sistema (6)), depende de que los términos "cruzados" en ψ y ϕ contribuyan poco a la energía, esto se muestra usualmente evidenciando que son proporcionales a $\frac{m}{M_\alpha}$, sin embargo, es más importante el que resulten casi independientes de \underline{R} y no dan en consecuen-

cia más que una pequeña corrección a la energía (Ver Ziman (6)).

Hemos separado el sistema electrónico en dos partes, - - aquellos fuertemente ligados y los que no lo están y procedido después como si todos fuesen del primer tipo; para el caso de semiconductores podemos - esperar que en el estado base del sistema (temperatura cero) esto sea váli - do (a pesar de que los núcleos estén en movimiento) para saber si la aproxi - mación es adecuada podemos utilizar el siguiente razonamiento: la energía asociada a un núcleo que se mueve con velocidad v_N una distancia l es del orden de $\frac{\hbar v_N}{l}$ (para sólidos tendrá sentido l) y podemos consi - derar que ésta es la energía capaz de entregar el núcleo al electrón; si la distancia entre niveles electrónicos satisface

$$\Delta E \gg \frac{\hbar v_N}{l}$$

II-3

entonces la aproximación será útil (7). A temperaturas no nulas, aparecen complicaciones que después trataremos.

Con el sistema II-2 podemos tratar un líquido. Para res - tringirnos realmente a sólidos haremos una aproximación más. Los núcleos se mueven alrededor de posiciones de equilibrio $R_\alpha^{(0)}$ (red perfecta), de tal modo que su desviación $R_\alpha - R_\alpha^{(0)}$ en el curso del movimiento es pe - queña (en comparación con los períodos de translación de la red), esta hipó - tesis está plenamente justificada para todos los sólidos aún a temperaturas vecinas al punto de fusión, como es fácil ver usando un tratamiento semi - cuántico (con esto evitamos fenómenos de transporte iónico o atómico).

En la mayoría de los sólidos (si no en todos) las desviacio

nes son lo suficientemente pequeñas como para permitir un desarrollo en la separación $\underline{R} - \underline{R}^{(0)}$ pudiéndose considerar términos de segundo orden como los importantes (Sin embargo, véase el comentario que haremos al final del inciso 5 de este capítulo). Esta nueva aproximación conduce (en segunda cuantización) al concepto de fonón, que es una de las herramientas básicas en el estado sólido.

Aunque el Hamiltoniano reducido de la malla tenga una estructura simple (reducible a osciladores independientes), trae involucrados problemas complicados, como los de la clasificación de vibraciones con respecto a la simetría translacional de la malla, el cálculo de la relación $\omega = \omega(k)$ entre la frecuencia del modo y su vector de onda. Nosotros nos restringiremos a considerar el modelo más simple posible para estas relaciones, tomando de la teoría general solamente el hecho de que para mallas con dos átomos por celda es posible clasificar a las vibraciones en ópticas y acústicas, considerando en no muy mala aproximación

$\omega = \omega_0 = c s r,$	RAMA OPTICA	
$\omega = \frac{1}{\hbar} \varphi S$	RAMA ACUSTICA	II-4

siendo φ el pseudo-momento del fonón y S la velocidad del sonido en el sólido (esta última relación es adecuada para fonones de gran longitud de onda en un modelo isótropo continuista) (8).

De hecho, en el cálculo de los elementos de matriz de las transiciones, así como en la solución real de la ecuación de transporte se tiene que tomar en cuenta más finamente el esquema fonónico, sin embargo, no añadiremos más por razones de espacio, haciéndose referencia a los lu-

gares donde se puede ver el cálculo detallado, cuando se traten los temas que directamente lo requieren.

Usando el mismo tipo de aproximación en el hamiltoniano electrónico, los términos de interacción con los núcleos dan origen en aproximación cero a un potencial periódico. El siguiente término es proporcional al desplazamiento $\underline{R} - \underline{R}^{(0)}$ y nos daría una interacción electrón-fonón, sin embargo, nosotros nos hemos restringido a situaciones en las que este término no contribuye (temperatura cero). En consecuencia el hamiltoniano electrónico es ahora el de un sistema de electrones fuertemente ligados a núcleos estacionarios e interaccionando entre sí. Este es el punto de partida de la teoría de bandas. La técnica normal aquí es la de substituir el hamiltoniano resultante por una serie de hamiltonianos de una sola partícula (9) con un potencial efectivo periódico, es claro que el término que origina las dificultades es la interacción interelectrónica, sin embargo, normalmente se pretende que ésta es incluida mediante una aproximación de campo auto consistente; es de hacerse notar que tal cálculo no existe para un sólido hasta la fecha (10). El problema ahora puede ser tratado sobre la base de acercar átomos (o iones) desde infinito y hacer ver que el efecto del principio de exclusión es abrir los niveles atómicos en bandas de energía por efecto del traslapamiento de las funciones de onda atómicas. Extendiendo el hamiltoniano hasta infinito para hacerlo realmente periódico y utilizando condiciones periódicas a la frontera (o a infinito) se desprecian los efectos de superficie (lo mismo se hace en el caso fonónico), esto hace que se pueda utilizar plenamente la invariancia ante translaciones, clasificándose las funciones de onda mediante el índice \underline{k} , además del índice de nivel n :

$$H_{\text{ef}} \Psi_{n, \underline{k}}(\underline{r}) = E_n(\underline{k}) \Psi_{n, \underline{k}}(\underline{r}) \quad \text{II-5}$$

$$\Psi_{n, \underline{k}}(\underline{r}) = U_{n, \underline{k}}(\underline{r}) e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} \quad \text{II-6}$$

siendo $U_{n, \underline{k}}(\underline{r})$ periódica con el mismo período del hamiltoniano. Las funciones de Bloch II-6 forman un sistema completo solo si se toman funciones de TODAS las bandas (denotadas por n). Si el problema considerado es el de un cristal de volumen V continuado periódicamente a todo el espacio, el índice \underline{k} resulta de la forma:

$$\underline{k} = \frac{2\pi}{L} (n_1, n_2, n_3) \quad (V = L^3) \quad \text{II-7}$$

donde (n_1, n_2, n_3) es un vector de componentes enteras en el espacio recíproco; obteniéndose una estructura del espacio \underline{k} a base de celdas unidad repetidas (o zonas de Brillouin). Sin embargo, la variación de \underline{k} dentro de cada banda de punto a punto es tan pequeña que se puede tratar como una cuasi-continuo (V lo suficientemente grande). Nosotros utilizaremos el espacio de pseudomomento \underline{p} del electrón definido mediante:

$$\underline{p} = \hbar \underline{k} \quad \text{II-8}$$

Los resultados que más nos interesan de esta teoría son:

- (1) Los niveles energéticos están sumamente cercanos entre si (la distancia más grande -tope de la banda- es del orden 10^{-7} ev, -

mientras que en el fondo es 10^{-8} veces menor!).

(2) La relación $E_n(\rho)$ define la estructura energética de la banda n en el espacio ρ .

(3) La acción de la malla sobre el electrón, incluyendo el campo autoconsistente puede expresarse en términos de una masa efectiva (11).

(4) El electrón se mueve libremente dentro del cristal (su función de onda es una onda plana modulada, no habiendo posibilidad de corriente aún con campo eléctrico, gracias al principio de exclusión).

(5) Haciendo uso de la relación $E_n(\rho)$ se puede encontrar la densidad de estados energéticos $g_n(E) dE$ (número del volumen V con energías entre E y $E + dE$ en la banda n) (1).

(6) Normalmente, aunque no siempre, se supone que los elementos de matriz importantes son los que conectan estados de la misma banda (intrabanda).

Aquí llegamos a un punto algado de la teoría del estado sólido, pues considerando que la distancia entre niveles dentro de una banda resulta sumamente pequeña, no será posible satisfacer la relación II-3 que limita la validez de la aproximación adiabática, pero como estamos considerando semiconductores a temperatura cero, este problema no aparecerá sino hasta que consideremos temperaturas finitas (a diferencia del caso metálico), pues la última banda llena se encuentra absolutamente llena y el principio de exclusión impide posibles transiciones energéticas, sin embargo, al elevar la temperatura, en cuanto algún electrón cambia de banda, nuestro tratamiento deja de ser matemáticamente válido, aunque no esperemos mayores cambios desde el punto de vista físico. Ahora es un sistema con un

electrón excitado a la banda de conducción y un agujero positivo en la de valencia, existiendo la posibilidad (que de hecho se realiza) de que cambie el esquema de bandas. La aproximación adiabática deja de ser aplicable no sólo al electrón de conducción sino también a la casi totalidad de los de valencia.

Frente a esta complicación matemática tenemos ahora la ventaja de que el electrón de conducción, así como la banda de valencia, pueden alterar su energía por acción de la malla o de un campo externo, constituyéndose en los elementos de nuestra teoría de conductividad eléctrica.

Aunque el sistema aparenta no ser mucho más complejo que el anterior, no ha sido resuelto satisfactoriamente, sino se le trata de modo aproximado, mediante la llamada teoría del excitón. El tratamiento se hace sobre la misma base que la teoría simple de bandas excitadas que expondremos enseguida.

A pesar del elevado número de aproximaciones que hemos tenido que hacer, no podremos tratar el problema de conducción ordinaria sin hacer una serie de suposiciones.

Replantearemos el problema en su forma final.

Trataremos con una malla que puede tener desviaciones a la periodicidad consistentes en impurezas o algún otro efecto puntual. Suponemos que la existencia de electrones en la banda de conducción o de agujeros en la de valencia, no evita el que sea aplicable el esquema de bandas (sean estas excitaciones provenientes del material mismo o de sus impurezas). Además, se supone que sigue siendo válido el esquema de Bloch, pudiéndose

tratar como perturbaciones tanto los defectos de la malla como el acoplamiento electrón-fonón que ahora puede trabajar (esto hace que pasemos de una resistividad nula a una finita).

Los electrones o agujeros a los que no se aplica la aproximación adiabática son los que contribuyen al fenómeno de conducción, siendo su número dependiente de las condiciones del cristal, como su temperatura (fuera de la región exhausta), el número y características de los defectos puntuales e incluso del campo externo aplicado (véase lo referente a la ecuación de número en el capítulo II).

La justificación básica de estos supuestos radica en su utilidad para describir adecuadamente los resultados experimentales, esto, claro está, no es aplicable a todos los sólidos conocidos, sino solo a aquellos que muestran pocas variaciones en los parámetros esenciales (distancia y amplitud de banda, masa efectiva, etc.) con el número de excitaciones. Por otra parte, los valores para los parámetros usados en la teoría son el general obtenidos de los experimentos y éstos, por supuesto, son no ideales.

Situaciones en las que el acoplamiento electrón-malla es muy alto (halogenuros alcalinos) no pueden ser descritas en términos de teoría de bandas, esto resulta particularmente importante en cristales polares, dando origen a la teoría del polarón, es por ello que nosotros nos restringimos a aquella clase de semiconductores polares en que el acoplamiento es débil (12).

La justificación teórica plena de la aproximación aún no se ha dado, pero un esfuerzo exitoso en esta dirección lo constituye el proble-

ma de $N+1$ cuerpos (aislante más un electrón) que es revisado en (13), problema que por cierto muestra la necesidad de tomar en cuenta la polarizabilidad de la malla cuando se considera la dinámica electrónica ante un campo externo.

En resumen, consideraremos a las cargas conductoras en presencia de campos externos como partículas que se mueven sin cambiar de banda, siguiendo en su movimiento promedio la ecuación clásica con una masa efectiva (véase el punto $2a$) del párrafo siguiente), y colidiendo entre sí y con los defectos, puntuales y térmicos, con un acoplamiento tal que permita un tratamiento perturbativo.

2) Consideraciones generales acerca de la ecuación de Boltzmann (14).

En este inciso al igual que en el anterior, vamos a hacer una discusión cualitativa de los métodos que podríamos seguir para llegar de primeros principios a la situación aproximada que será de interés. Los cálculos detallados, serán dejados a las referencias.

Partir de primeros principios en la deducción de la ecuación de transporte significa estudiar el desarrollo en el tiempo de la matriz de densidad del sistema. Esta se define del modo siguiente: considérese un sistema cuántico descrito por el hamiltoniano H , con función de onda total $\Psi(q, t)$, que expresada en términos de cualquier conjunto completo toma la forma:

$$\Psi(q, t) = \sum_k a(k, t) u(k, q)$$

La matriz de densidad se define:

$$\rho_{nm} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N a_{(\alpha)}^*(m, t) a_{(\alpha)}(n, t)$$

sumándose sobre los N miembros de un conjunto (ensemble) de sistemas con hamiltoniano idéntico al del sistema original. Esta definición nos permite interpretar de inmediato a ρ_{mm} como la probabilidad de encontrar a algún miembro del conjunto en el estado con función de onda $\psi(m, \mathcal{Q})$ al tiempo t (15). La matriz de densidad permite obtener la información contenida en II-9, promediada al conjunto.

El hamiltoniano a tratar en nuestro caso, sería el del conjunto electrones-fonones interaccionando entre sí y los electrones además con la malla. Este hamiltoniano origina la evolución de ρ en el tiempo a través de la ecuación de Liouville cuántica:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho] \quad \text{II-10}$$

Resolver esta ecuación para nuestro conjunto de sistemas es una tarea formidable, por lo que es necesario hacer una serie de aproximaciones, que nos permitan pasar del problema exacto II-10 a uno soluble. La idea básica es que la información contenida en II-10 corresponde a situaciones mucho más generales que las de interés, por ejemplo, no se ha introducido una fuente de irreversibilidad en la descripción, por lo que no corresponde directamente a un tratamiento de los procesos irreversibles que nos interesan. Además, no es posible tratar al sistema acoplado de manera exacta, por lo que siempre se muestra necesario hacer un desarrollo, perturbativo o no, en términos de un parámetro que describa la interacción o

los efectos del campo externo aplicado.

Por el momento, pensemos como elementos básicos a un conjunto de electrones independientes en estados de Bloch, nos interesaría encontrar la ecuación que satisface la población de estos estados, si los electrones están bajo la influencia de un campo eléctrico F y de colisiones tanto interelectrónicas, como con un gas de fonones que supondremos se mantiene en equilibrio térmico con el ambiente, a pesar de su interacción con la nube electrónica (véase el párrafo 5 de este capítulo). El modo normal de proceder, sería el considerar las interacciones mediante un método perturbativo a segundo orden en el potencial de interacción (16), utilizando después la hipótesis de fases al azar, para llegar a la ecuación de transporte estacionaria:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_F + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_M + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{e-e} = 0 \quad \text{II-11}$$

Donde el primer término describe el cambio en la población $f(\rho)$ del estado ρ debido a la interacción con el campo externo F , el segundo la variación debida a colisiones con fonones y el último la debida a colisiones interelectrónicas. La aproximación perturbativa permitiría escribir los términos de colisión en función de probabilidades de transición. La hipótesis de fases al azar, cancelaría los términos no diagonales de ρ . La primera hipótesis puede ser evitada considerando términos de orden superior en el desarrollo perturbativo (17), lo que será discutido con más detalle en el párrafo siguiente.

La hipótesis de fases al azar podemos describirla del modo siguiente: al tiempo $t = 0$, utilizando una "representación natural" de ρ ,

promediar sobre las fases cancela los términos no diagonales, a partir de ese momento, la perturbación conecta distintos estados, correlacionándolos, y es necesario hacer a un tiempo Δt (orden del tiempo medio entre colisiones) - de nuevo, la hipótesis de fases al azar. Esto es difícil de justificar, pues lo tenemos que hacer cada vez que hay una colisión y además, si suponemos que es válida en $t + \Delta t$ no podemos hacerlo para $t - \Delta t$ (18). La dificultad estriba en que los resultados obtenidos con esta hipótesis dependen del conjunto de funciones $u(\mathcal{R}, \mathcal{Y})$ que se utiliza como la "representación natural" de ρ y en términos de la cual es posible considerar a ρ como diagonal en ausencia de perturbación (19).

Estas dificultades en la obtención de la ecuación de transporte han obligado a buscar métodos que eviten el uso de la hipótesis de fases al azar, habiéndose obtenido éxitos en los casos de colisiones elásticas, en aproximación lineal en el campo y pudiéndose extender la ecuación a situaciones en las que no es válida la teoría de perturbaciones o cuando hay que tomar en cuenta más términos en los desarrollos en potencias de la interacción (16, 18, 19).

Es de hacerse notar que estas extensiones no han permitido obtener las condiciones necesarias para la validez de la ecuación de Boltzmann en el caso que a nosotros nos interesa (colisiones inelásticas, efectos no-ohmicos), pero condiciones suficientes sí han sido obtenidas (20) para los términos de campo y colisión con fonón.

Las hipótesis son básicamente tres:

- a) Es válido el teorema de masa efectiva.
- b) ρ para $t=0$ contiene fases al azar
- c) Es posible, a todo tiempo, considerar al primer térmi-

no en un desarrollo en potencias de la interacción, como el más importante.

Los puntos a) y c) serán discutidos con más detalle en el inciso siguiente:

3) Términos en la ecuación de transporte.

En este inciso detallaremos el contenido de los tres términos (campo, colisiones con la red e interelectrónicas) que aparecen en la ecuación de transporte que es de nuestro interés.

Hablaremos en el resto de la tesis de electrones en la banda de conducción, teniendo en cuenta que todo lo que digamos es aplicable a los agujeros de la banda de valencia, si los parámetros involucrados toman los valores correspondientes a estos últimos.

Nuestro punto de partida es una descripción de Bloch para los electrones de conducción, pudiéndose hablar de niveles de energías individuales $E(\mathbf{p})$ funciones del Pseudomomento \mathbf{p} electrónico y considerando exclusivamente transiciones de interbanda, de modo que el número de electrones en consideración será constante. Usaremos campos aplicados homogéneos de modo que al no aparecer gradientes de densidad en el espacio de configuración, podremos evitar el tener que hacer uso de paquetes electrónicos. Nuestro problema se reduce a encontrar la densidad de electrones $f(\mathbf{p})$ en el espacio del pseudomomento, bajo el efecto de un campo eléctrico homogéneo (apuntando en dirección \mathbf{z}) y colidiendo, los electrones, entre sí y con un gas fonónico.

a) Variación debida al campo eléctrico (20).

El esquema físico que se adopta generalmente, es el de con

siderar que el campo eléctrico no afecta el esquema de bandas, produciendo solamente una variación en el número de electrones en los estados \underline{p} en consideración, siendo

$$f(\underline{p}, t) d^3p \equiv f(\underline{p}, t) \frac{2V}{h^3} d^3p_x d^3p_y d^3p_z \quad \text{II-12}$$

este número al tiempo t (el factor 2 toma en cuenta la degeneración de espín).

El campo produce un aumento en la energía electrónica, variando su pseudo momento \underline{p} de acuerdo con el teorema de masa efectiva:

$$\frac{d\underline{p}}{dt} = e\underline{F} \quad \text{II-13}$$

Siendo e la carga (algebraica) electrónica y \underline{F} el campo aplicado. Como el campo no produce variación en el número de electrones, sino sólo su corrimiento a nuevos estados, entonces $f(\underline{p} + e\underline{F}dt, t + dt) = f(\underline{p}, t)$

lo cual nos permite escribir

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_F = -eF \frac{\partial f}{\partial p_z} \quad \text{II-14}$$

que dá la variación originada por un campo homogéneo en la dirección Z .

El punto débil de la expresión II-14 al ser aplicada a fenómenos no-óhmicos, esto es, cuando se quiere calcular f a ordenes superiores al primero en la acción del campo, radica en que ha sido usado el teorema de masa efectiva, que toma en cuenta al campo solamente a primer orden (21). Todas las teorías de transporte a alto campo, incluyendo la pre

sente, suponen que las variaciones de la masa efectiva con el campo (términos superiores en el teorema son despreciables, pues hay muy poca evidencia experimental de su falla (22).

Es de notarse, que una vez aceptada la hipótesis de masa efectiva, ninguna otra suposición es necesaria (20), así que el término II-14 puede considerarse como el más "exacto" en la ecuación de Boltzmann que estamos planeando.

b) Término de colisión con fonones (20).

Aquí trataremos el problema en general, dejando los modelos de interacción particulares para el capítulo IV.

La expresión que utilizaremos será:

$$\left(\frac{\partial f(\underline{p})}{\partial t}\right)_M = \sum_{\underline{p}'} \left\{ P_a(\underline{p}', \underline{p}) f(\underline{p}') - P_e(\underline{p}, \underline{p}') f(\underline{p}) - P_a(\underline{p}, \underline{p}') f(\underline{p}) + P_e(\underline{p}', \underline{p}) f(\underline{p}') \right\} \quad \text{II-15}$$

donde $P_a(\underline{p}, \underline{p}')$ y $P_e(\underline{p}, \underline{p}')$ representan las probabilidades de transición por unidad de tiempo del estado \underline{p} al estado \underline{p}' , absorbiendo y emitiendo un fonón respectivamente. Los términos negativos se refieren a pérdidas sufridas por el estado \underline{p} y los que los acompañan al proceso inverso. Hemos supuesto que el principio de exclusión no da una contribución significativa, de modo que nos restringiremos a sistemas electrónicos no degenerados.

Utilizaremos las probabilidades de transición por unidad de tiempo obtenidas en la aproximación más baja de la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo:

$$P_a(\underline{p}_i, \underline{p}_f) = \frac{2\pi}{\hbar} B(\underline{q}) n_{\underline{q}} \delta(\epsilon_a) \quad \text{II-16}$$

$$P_e(\underline{p}_i, \underline{p}_f) = \frac{2\pi}{\hbar} B(\underline{q}) (n_{\underline{q}} + 1) \delta(\epsilon_e) \quad \text{II-17}$$

donde
$$\epsilon_{\pm} = E_f - E_i \pm \hbar \omega(\underline{q})$$

siendo E_f y E_i las energías del electrón en sus estados final e inicial, \underline{q} el pseudomomento de un fonón de frecuencia $\omega(\underline{q})$; $B(\underline{q})$ el cuadrado del elemento de matriz de interacción y $n_{\underline{q}}$ la densidad de fonones con pseudo-momento \underline{q} .

Los modelos de interacción utilizados serán tales que, además de la energía, habrá conservación de pseudomomento

$$\underline{p}' = \underline{p} \pm \underline{q} \quad \begin{pmatrix} + \text{ ABSORCIÓN} \\ - \text{ EMISIÓN} \end{pmatrix} \quad \text{II-18}$$

La forma adoptada para los coeficientes P_a y P_e involucra varias hipótesis: en primer lugar, toma en cuenta al potencial perturbativo al orden más bajo, por lo que éste debe ser el más importante en el desarrollo (17) (véase (20) con respecto a este punto y al comentario que hace respecto de la aparición de dificultades, aún con esta hipótesis, en el caso de superconducción). Además, hemos supuesto que el tiempo transcurrido al calcular la probabilidad de transición es mayor que el tiempo de duración de una colisión (23):

$$t > \frac{\hbar}{kT}$$

pues solo de este modo es posible dejar de tomar en cuenta la energía de interacción y considerar el balance energético en términos de estados finales e iniciales, a través de las funciones δ que aparecen en II-16 y 17. Por otra parte, el tiempo transcurrido no debe ser tan grande que se haya realizado una segunda colisión. Si τ es el tiempo medio entre colisiones, la restricción a satisfacer es:

$$kT > \hbar / \tau \quad \text{II-20}$$

que resulta el mismo criterio obtenible al tratar de justificar el uso de una distribución $f(\rho)$ sobre estados estacionarios, cuando existen, en realidad transiciones entre estos estados. El criterio para la validez de la aproximación ha sido puesto en duda (24-25).

c) Colisiones interelectrónicas (26).

Hasta ahora hemos supuesto que podemos tratar a los electrones como cuasilibres en la banda de conducción, sin embargo, al considerar colisiones interelectrónicas debemos justificar el tomar en cuenta interacción solamente entre estos electrones, pues existe la posibilidad de interacción entre los de conducción y los de valencia. La manera como los electrones de valencia podrían mezclarse con los de conducción impidiendo su distinción (y con ello el uso de teoría de bandas), sería que los primeros formarían parte de las oscilaciones colectivas de los segundos esto es, si la energía $\hbar\omega_p$ de un plasmón fuese suficiente para provocar transiciones de interbanda. Ahora bien, en nuestro caso (semiconductores no-degenerados) la energía del plasmón es muy baja ($\sim 10^{-3}$ e.v.) satisfaciéndose la relación

$$E_p \gg \hbar \omega_p$$

II-21

siendo E_p el ancho de la banda prohibida. Esto hace que el comportamiento de los electrones de conducción sea independiente del de los de valencia y podemos aplicar el teorema de masa efectiva (27).

El expresar explícitamente el término de interés presenta ciertas dificultades, pues aún suponiendo potencial coulombiano apantallado no aparece ser aplicable la aproximación de Born (ver Ziman (2) pág. 171). Sin embargo, a nosotros no nos interesará la forma explícita, sino exclusivamente el que pueda escribirse en términos de colisiones entre dos partículas, pues entonces (ya que es válido el balance detallado) la solución más general de:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{e-e} = 0$$

II-22

será

$$f(p) = A e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2mkT}}$$

II-23

siendo p_0 y T constantes. El que ésta sea la solución más general, se ve fácilmente de considerar que II-22 representa un sistema cerrado en interacción débil, que en ausencia de campos externos, no está en contacto térmico con el exterior, esto es, estará en equilibrio térmico (función de Maxwell) a cualquier temperatura (T arbitraria) y dado que la interacción es un invariante galileano y el momento total del sistema una integral de movimiento, el sistema puede tener un momento lineal constante arbitrario.

Estas serán las propiedades que utilizaremos (además de conservar momento y energía en la colisión) de este término, así que no daremos de él una forma explícita.

4) Otros tipos de soluciones (2-3).

En este inciso reseñaremos brevemente los métodos utilizados para resolver la ecuación de Boltzmann en los casos en que no hay involucrada una temperatura electrónica, tratando este último caso en el capítulo IV.

De aquí en adelante, por simplicidad, nos restringiremos a sólidos isótropos: $E(\underline{p})=E(p)$ y tensor de masa efectiva independiente de los ángulos y la energía (de hecho esta hipótesis está incluida implícitamente en II-23 al suponer la solución de II-22).

El efecto de las colisiones interelectrónicas, es el de repartir entre todos los electrones la energía y el momento recibidos del campo o de las colisiones con fonones, pudiéndose en ciertas condiciones (ver capítulo IV) introducir el concepto de temperatura electrónica.

En ausencia de colisiones interelectrónicas, la ecuación a tratar es.

$$eF \frac{\partial f}{\partial p_z} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M \quad \text{II-24}$$

El efecto de las colisiones es tratar de establecer el equilibrio térmico entre el sistema fonónico (supuesto en equilibrio térmico permanente con los alrededores) y el sistema electrónico. La acción del campo es acelerar este sistema electrónico. Así que sólo se logrará un estado

estacionario (II-24 válida), cuando el desplazamiento respecto del estado de equilibrio $f(\underline{\rho}) - f^{(0)}(\underline{\rho})$ sea tal que la energía y el momento total medios adquiridos del campo se pierdan en las colisiones, resultando una distribución con energía y momento lineal medios constantes (no función del tiempo). El estado de equilibrio está descrito por la distribución:

$$f^{(0)}(\underline{\rho}) = A e^{-E/kT_0} \quad \text{II-25}$$

siendo E la energía $E(\underline{\rho})$ y T_0 la temperatura del sistema fonónico (que algunas veces designaremos como temperatura de la malla).

La aproximación usual en la teoría del transporte, es hacer un desarrollo de $f(\underline{\rho})$ en armónicos esféricos, considerando solamente los términos:

$$f(\underline{\rho}) \approx f_0(\rho) + f_1(\rho) \cos\theta \quad \text{II-26}$$

siendo θ el ángulo entre $\underline{\rho}$ y el eje z (dirección del campo). Además de esta hipótesis, en las teorías óhmicas (primer orden en campo), se considera que la diferencia entre $f_0(\rho)$ y $f^{(0)}(\rho)$ es de segundo orden, por lo que

$$f(\underline{\rho}) = f^{(0)}(E) + f_1(E) \cos\theta \quad \text{II-27}$$

es la aproximación usada. $f_1(\rho)$ es de primer orden en F , por lo que $f(\underline{\rho})$ se sustituye por $f^{(0)}(E)$ en el miembro izquierdo de II-24; esto hace que la ecuación a resolver sea:

$$eF \frac{\partial f^{(0)}}{\partial p_z} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M \quad \text{II-28}$$

El término de colisiones es lineal en f_i dando $f^{(0)}$ contribución nula (equilibrio).

Este es el punto de partida de dos técnicas distintas.

Una de ellas (aproximación τ), supone (28):

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M = \frac{f - f^{(0)}}{\tau(E)} \quad \text{II-29}$$

siendo $\tau(E)$ el tiempo de relajamiento del sistema, pues la idea motriz de la aproximación es el considerar que en ausencia de campo, la distribución retorna al equilibrio en un tiempo del orden de τ promedio. Esta aproximación debe ser justificada y $\tau(E)$ encontrada considerando modelos particulares de interacción (sólo para modelos muy especiales resulta realmente justificable).

Otra técnica (29), consiste en mostrar que la ecuación integral II-28, presenta como solución f_i a una función que hace extrema una cierta integral, pudiéndose en consecuencia, usar una técnica de variación de parámetros para aproximar la solución (este esquema no ha sido extendido, hasta ahora, a fenómenos no-ohmicos).

5) Ecuación para fonones (30).

Hasta ahora hemos considerado exclusivamente las variaciones en la densidad electrónica $f(\underline{p})$ y su ecuación estacionaria, sin embargo, uno de los terminos en esta ecuación es la colisión con fonones que

en presencia de campo eléctrico, es el único mecanismo mediante el cual el sistema electrónico pierde energía (la cedida por el campo). En estado estacionario emitirá más fonones de los que absorbe, produciendo un desequilibrio en el sistema fonónico. La inmensa mayoría de los electrones se mueven con velocidad mucho mayor que la del sonido en el sólido ($ms^2 \sim 10^3$) así que el término de emisión espontánea resulta en un fenómeno similar al del frenamiento de Cherenkov pues el electrón viaja a mayor velocidad que los fonones que emite; ésto se puede describir como un "acarreo fonónico" (Phonon drag) originado por la nube electrónica en su movimiento.

Los fonones creados transportarán energía con mayor o menor facilidad, dependiendo de su acoplamiento con otros fonones. Se podría construir otra ecuación de Boltzmann para fonones, considerando las variaciones en la densidad $n(q)$ mediante los términos $(\partial n / \partial t)_{e-f} \equiv (\partial f / \partial t)_{M}$ de creación de fonones y $(\partial n / \partial t)_{f-f}$ que describe la resistencia térmica proveniente de las colisiones interfonónicas (31) (aquí debemos salirnos de la aproximación armónica en el potencial de malla para tener acoplamiento). Sin embargo, estos dos términos, por sí solos, no darían soluciones estacionarias, pues representan absorción de energía del campo (vía electrones) y distribución de ella entre los distintos modos, pues al no incluir un término disipativo, se acumularía energía indefinidamente. Es por ello que para tratar al sistema completo debemos salirnos de la cómoda aproximación de cristales infinitos, tomando en cuenta la superficie del cristal y su relación térmica con los alrededores. Esto representaría trabajar con un sistema acoplado de ecuaciones integrales cuyos términos no son bien conocidos

o que pueden depender notablemente de las condiciones particulares en las que se encuentre el espécimen estudiado.

Debido a la enorme complejidad de este problema y a los éxitos solamente parciales obtenidos hasta la fecha, es usual tomar la posición que nosotros adoptaremos:

Se considera que la resistividad térmica y el contacto del cristal con el ambiente son tales que es posible considerar al sistema fonónico en equilibrio a temperatura T_0 independientemente del campo eléctrico aplicado. Esto es:

$$\bar{n}_q = \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega(q)}{k T_0}\right) - 1 \right]^{-1}$$

II-30

11 51
17 x 11 001

III SOBRESERVIADO

CAPITULO III

81-III

APLICACION A PROBLEMAS DE TRANSPORTE. (2-3).

En este capítulo haremos un breve resumen de como se utiliza la solución $f(\underline{p})$ de la ecuación de Boltzmann en el cálculo de la conductividad eléctrica y mencionaremos otros fenómenos relacionados.

1) Conductividad Eléctrica (2-3).

Hemos definido a $f(\underline{p})$ como la densidad de electrones en la banda de conducción. Las propiedades eléctricas del cristal dependerán del número total N de electrones de ese tipo en el material, así que es necesario normalizar a f en la forma

$$\int f(\underline{p}) d^3p = N$$

III-1

(véase II-12). Por ejemplo, si la distribución es la II-23:

$$f(\underline{p}) = A \exp \left\{ -(\underline{p} - \underline{p}_0)^2 / 2m kT \right\}$$

II-23

para bandas de tipo parabólico se encuentra:

$$A = \frac{h^3 n}{2(2m\pi kT)^{3/2}} \quad \text{III-2}$$

siendo: $n = N/V$

Con esta normalización III-1 vemos que la densidad de corriente \underline{J} está dada por:

$$\underline{J} = \frac{e}{V} \int \underline{v} f(\underline{p}) d^3p \quad \text{III-3}$$

Si hay simetría axial, alrededor del eje \underline{Z} (dirección del campo), III-3 se reduce a:

$$J = \frac{e}{V} \int v_z f(\underline{p}) d^3p \quad \text{III-4}$$

y vemos que es solamente el primer armónico esférico f_1 , el que contribuye a la corriente

$$J = \frac{e}{V} \int v_z f_1(\underline{p}) P_1(\cos\theta) d^3p \quad \text{III-5}$$

siendo P_1 el primer polinomio de Legendre.

Si usamos aproximación lineal en el campo (ver párrafo II-3), f_1 es proporcional al campo y tendremos:

$$J = e n \mu F \quad \text{III-6}$$

donde

$$\mu \equiv \int v_z \frac{f_1(\rho)}{NF} P_1(\cos\theta) d^3\rho \quad \text{III-7}$$

La movilidad μ (definida como la velocidad media por unidad de campo, resulta, en esta aproximación, independiente del campo.

La conductividad ($J = \sigma F$) estará dada por:

$$\sigma = en\mu \quad \text{III-8}$$

La utilidad de μ es manifiesta, pues nos dá una medida de la facilidad con la que los electrones son arrastrados por el campo eléctrico, medida independiente del número de electrones que participan en el fenómeno y en consecuencia está directamente conectada con los procesos microscópicos que limitan la velocidad electrónica en el cristal. μ es el parámetro generalmente utilizado para realizar las comparaciones entre teoría y experimento.

En el caso no-ohmico, f_1 es una función compleja del campo, así que μ resulta dependiente de F , pudiéndose escribir:

$$\sigma = en\mu(F) \quad \text{III-9}$$

siendo aún válida III-7.

Cuando σ no es constante respecto de F , puede existir una complicación adicional, el que n sea función del campo F . Para entender este fenómeno daremos como ejemplo un caso en el que es particularmente notable, el del llamado rompimiento reversible a baja temperatura (32).

A muy baja temperatura ($\sim 4^{\circ}\text{K}$) el número de impurezas ionizadas es pequeño y una elevación de temperatura de unos cuantos grados hace que todos los donantes se ionizen (material tipo-n), sin embargo, manteniendo la temperatura del cristal constante, es posible pasar a la mayoría de los electrones a la banda de conducción aplicando un campo eléctrico, ésto hace que la conductividad crezca considerablemente con el campo y este proceso se analoga a uno de rompimiento. Es la energía adicional de los electrones en la banda de conducción la que permite que se altere el estado de equilibrio, ionizando impurezas y aumentando el número de electrones en la banda de conducción.

La ecuación que rige este proceso es la "ecuación de número" o de "balance", que dá la variación de n , la densidad de electrones de conducción en el cristal, por efecto de los distintos procesos que la pueden alterar: $(n \ll N_D - N_A)$

$$\frac{dn}{dt} = (A_P + A_O + n A_I)(N_D - N_A) - (B_P + B_O + n B_I) N_A n$$

III-10

donde N_D es la concentración de donantes, N_A la de aceptantes (N_A dá también la concentración de donantes ionizados). A_P es la probabilidad de ionización térmica, A_O la de fotoionización y A_I la de ionización por impacto, siendo las B_i las probabilidades de los procesos inversos. En estado de equilibrio $dn/dt=0$ y es posible calcular n en términos de los coeficientes. A_I es particularmente dependiente del campo a través de

la acción de éste sobre la distribución electrónica.

Una vez elevada la temperatura de la malla hasta estar en la región exhausta, en los semiconductores normales con impurezas de nivel no profundo, n toma aproximadamente el valor $N_D - N_A$ y permanece constante hasta altas temperaturas (región intrínseca), nosotros nos restringiremos a la región exhausta, por lo que podremos tomar a n como constante.

El número n dependen de las impurezas ionizadas, por lo que para un espécimen dado es difícil conocerlo con exactitud por análisis químicos ordinarios, sin embargo, si se quiere hacer una comparación con la teoría de la movilidad es necesario obtenerlo con precisión, pues el observable es la conductividad y en ella aparece el producto $n\mu$, requiriéndose una medida independiente. Esto se logra estudiando situaciones de transporte que involucran campos magnéticos, lo que constituirá el tema del inciso siguiente.

2) Otros fenómenos (2-3).

Cuando existen campos magnéticos aplicados o (y) gradientes térmicos, la posibilidad de combinarlos con campos eléctricos variando las orientaciones relativas es enorme, ésto se traduce en una gran variedad de posibles efectos y parámetros que los miden. Una lista parcial, mostrando la variedad, es dada en (33).

A nosotros nos interesarán solamente dos de estos efectos, el efecto hall y la magnetoresistencia.

El efecto Hall usualmente se mide en condiciones isotérmicas, así que se cataloga como un efecto isotérmico transversal (corriente perpendicular a campo magnético). Se coloca el material en un campo mag-

nético homogéneo H_z y sometido a un campo eléctrico transversal E_x que produce una corriente. El campo magnético defleca a los electrones, creando una sobrecarga en una carga perpendicular al eje Y y un desequilibrio de signo contrario en la carga de la cara opuesta, ésto crea un campo eléctrico en dirección E_y que se opone a la deflexión. En el equilibrio estacionario - la corriente en dirección Y es nula, definiéndose el coeficiente Hall mediante:

$$R = \frac{E_y}{J_x H_z} \quad \text{III-11}$$

Este coeficiente depende de la densidad electrónica de una manera distinta a la que aparece en σ , tomando expresiones muy simples en los casos óhmicos a campo magnético o muy alto o muy bajo (34), pudiéndose obtener R directamente de R .

En el caso de la magnetoresistencia se estudia la variación de la corriente J_x con el campo magnético, ésto es, se observa el cambio $\Delta\rho/\rho_0 \equiv (\rho - \rho_0)/\rho_0$ cuando se pasa de campo magnético nulo (resistividad ρ_0) a campo finito (ρ).

El coeficiente de magnetoresistencia se define:

$$B = \frac{\Delta\rho}{\rho_0 H_z^2} \quad \text{III-12}$$

bajo la condición $J_y = 0$, por lo que en las medidas normales de él, da un efecto isotérmico transversal.

Este parámetro es muy sensible a los detalles de la estructura de la banda, por lo que resulta de suma utilidad para entender tanto a esta estructura como a la interacción microscópica.

CAPITULO IV

TEORIA DE LA TEMPERATURA ELECTRONICA. (35).

En este capítulo haremos una revisión de la teoría de la temperatura electrónica, las hipótesis que involucra, su región de aplicabilidad, los cálculos que con ella se han realizado y por último, las modificaciones que se proponen.

1) Temperatura electrónica: calentamiento.

La ecuación inicial es la de Boltzmann II-11:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_F + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_M + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{e-e} = 0 \quad \text{IV-1}$$

Esta es una ecuación integro-diferencial no-lineal en f , cuya solución completa no ha sido obtenida hasta la fecha, es en consecuencia, necesario hacer aproximaciones para resolverla, aproximaciones que serán válidas en ciertas regiones de los parámetros involucrados (densidad electrónica en la banda, temperatura de la malla, etc.).

Examinando los términos de IV-1 respecto de su dependencia con el número N de electrones involucrados, vemos que los términos primero y segundo son proporcionales a N , pues involucran interacciones de

electrones con el campo o con el gas fonónico, el tercer término en cambio, describe colisiones entre dos partículas y es proporcional a N^2 . Esto hace pensar que para densidades electrónicas suficientemente altas el último término será el dominante. En estas condiciones, Froehlich en 1948 ideó el describir el sistema mediante una temperatura electrónica (36).

Las condiciones en las que el término tercero es el dominante las podemos analizar con el argumento siguiente:

El número de electrones debe ser suficiente para que la rapidez de intercambio interelectrónico de energía sea mayor que la de intercambio con la malla (que a su vez es igual a la entregada por el campo, bajo la hipótesis de estado estacionario). Esto es,

$$\left. \frac{dE}{dt} \right|_{e-e} > \left. \frac{dE}{dt} \right|_M \quad \text{IV-2}$$

donde E es la energía del electrón y los subíndices $e-e$ y M se refieren a intercambio con otro electrón y con la malla, respectivamente.

La energía intercambiada por un electrón con energía E (que supondremos del orden, pero mayor que la media) puede ser estimada mediante la fórmula de Pines (37) para la pérdida de energía por unidad de tiempo de un electrón incidiendo con momento ρ sobre un gas electrónico, ésta es:

$$\left. \frac{dE}{dt} \right|_{e-e} = \frac{4\pi n e^4}{\rho} \ln \chi \quad \text{IV-3}$$

donde n es la densidad electrónica, e la carga y χ es una función comple

ja de ρ , que conduce a un valor de $\ln \gamma$ del orden de la unidad, esto es:

$$\left. \frac{dE}{dt} \right|_{e-e} \approx \frac{4\pi n e^4}{\rho} \quad \text{IV-4}$$

En esta expresión no está tomado en cuenta el que los electrones se encuentren sumergidos en una malla polarizable, que afectará la interacción interelectrónica. Esto lo podemos tomar en cuenta, en nuestro cálculo de orden de magnitud mediante una constante dieléctrica $\bar{\epsilon}$, que en general será dependiente de la velocidad electrónica, pero cuyo valor será algún promedio sobre las constantes dieléctricas óptica y estática del material. Esto se traduce en una interacción con carga electrónica efectiva e^* , relacionada con $\bar{\epsilon}$ mediante: $e^{*2} = e^2 / \bar{\epsilon}$ obteniéndose:

$$\left. \frac{dE}{dt} \right|_{e-e} \approx \frac{4\pi n e^4}{\rho \bar{\epsilon}^2} \quad \text{IV-5}$$

Para tener una idea del orden de magnitud de $(dE/dt)_M$ consideraremos colisiones con fonones acústicos. Realizando el cálculo aproximadamente podemos utilizar el siguiente argumento:

Sea $\tau(E, T_0)$ el tiempo medio entre colisiones para un electrón con energía E a la temperatura de malla T_0 ; el número de colisiones en las que pierde energía está en relación con el número en que gana en la forma $\bar{n}+1/\bar{n}$ siendo \bar{n} la población fonónica media a temperatura T_0 (ver II-16, 17, 30), de modo que en cada $2\bar{n}+1$ colisiones habrá una pérdida efectiva de una energía igual a la media perdida

en una colisión. Si $\overline{\Delta E}$ es esta última, tendremos:

$$\left. \frac{dE}{dt} \right|_M \approx \frac{\overline{\Delta E}}{\tau(E, T_0)} \frac{1}{2\bar{n}+1} \quad \text{IV-6}$$

$\overline{\Delta E}$ la energía media de un fonón acústico está dada por (conservación de energía y momento): $\overline{\Delta E} \approx (E m s^2)^{1/2}$

de modo que

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\overline{\Delta E}}{kT_0}\right) - 1} \approx \frac{kT_0}{(E m s^2)^{1/2}} \quad \text{IV-7}$$

si $E < (kT_0)^2/m s^2$ que es una cantidad considerablemente grande (recordar $T_0 \gg 10^4 K$).

Con esto:

$$\left. \frac{dE}{dt} \right|_M \approx \frac{E m s^2}{\tau(E, T_0) k T_0} \quad \text{IV-8}$$

La densidad crítica n_E en la que la rapidez IV-8

se iguala a la IV-5 es:

$$\begin{aligned} n_E &= \frac{\rho \bar{E}^2}{4\pi e^4} \frac{E m s^2}{\tau(E, T_0) k T_0} \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{E^{3/2} m^{3/2} s^2}{k T_0 e^4 \tau} \bar{E}^2 \quad \text{IV-9} \end{aligned}$$

Si n es mayor que n_E , las colisiones interelectrónicas comandarán el proceso. Para tener una idea del valor de n_E , consideremos $E \approx kT_0$ (pero mayor), y valores típicos: $\bar{E}^2 \approx 10$ y a temperatura ambiente $\tau \sim 10^{-14}$ segs obteniéndose: $n_E \sim 10^{15}$ electrones/cm³.

El valor anterior muestra que existe una región de aproximadamente tres órdenes de magnitud ($n \approx 10^{15} - 10^{18}$) en las que la aproximación es aplicable. El límite superior aparece al considerar sistemas electrónicos no-degenerados. La región coincide con la de los sólidos moderadamente impuros, así que es de gran interés.

La hipótesis básica en IV-9 es que la interacción dominante es realizada con fonones acústicos; si se considera otros tipos de interacción o combinaciones de ellas, las expresiones son mucho menos manejables, especialmente para los casos no óhmicos, pues la energía electrónica promedio, así como el tiempo medio entre colisiones, son funciones del campo.

Vemos, sin embargo, que el criterio general a usar será:

$$n > n_E \approx \frac{\rho \bar{E}^2}{4\pi e^2} \left(\frac{\partial E}{\partial t} \right)_M \quad \text{IV-10}$$

pudiéndose calcular $(\partial E / \partial t)_M$ mediante:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial t} \right)_M = \left[\frac{1}{4\pi} \int E(\rho) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M d\Omega \right]_{E \approx \bar{E}} \quad \text{IV-11}$$

realizándose un promedio a los ángulos Ω y tomándose la expresión para $E \simeq \bar{E}$ la energía media resultante de la distribución calculada. En el caso lineal estos cálculos han sido realizados por Stratton (38 y 39).

Un estudio sistemático de n_E para distintos materiales a campo arbitrario aún no ha sido dado, pero se puede realizar utilizando directamente las fórmulas que obtendremos. El trabajo numérico involucrado sería considerable.

El criterio $n > n_E$ determina cuando la distribución energética es debida principalmente al término electrónico. Se debe buscar un criterio adicional si se desea que éste sea el término más importante en la determinación de la distribución momental, sin embargo, nosotros estamos interesados en buscar las condiciones en las que aparece un nuevo fenómeno (disminución de la temperatura electrónica) y éstas nos restringen a bajas temperaturas ($T_0 < \theta$ temperatura Debye del cristal), siendo posible mostrar (39) que en esta región n_p la densidad crítica momental es menor que n_E , resultando $n > n_E$ un criterio suficiente.

Restringiéndonos a la región de aplicabilidad del criterio

$$n > n_E \quad \text{IV-12}$$

podemos aproximar adecuadamente a IV-1 mediante:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{e-e} = 0 \quad \text{IV-13}$$

que hemos visto (párrafo II-3, inciso C) tiene como solución:

$$f(\underline{p}) = A \exp \left\{ -(\underline{p} - \underline{p}_0)^2 / 2m kT \right\} \quad \text{IV-14}$$

con (ver III-2):

$$A = \frac{h^3 n}{2(2m\pi kT)^{3/2}} \quad \text{IV-15}$$

Sea f la solución exacta o su aproximación IV-14, la energía y momento lineal totales del sistema electrónico se deben conservar en el estado estacionario.

$$\int \underline{p} \left\{ \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_F + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{e-e} \right\} d^3p = 0 \quad \text{IV-16}$$

$$\int E(\underline{p}) \left\{ \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_F + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{e-e} \right\} d^3p = 0 \quad \text{IV-17}$$

Además, las colisiones interelectrónicas conservan momento y energía individualmente, de modo que:

$$\int \underline{p} \left\{ \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_F + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M \right\} d^3p = 0 \quad \text{IV-18}$$

$$\int E(\underline{p}) \left\{ \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_F + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M \right\} d^3p = 0 \quad \text{IV-19}$$

Los términos de campo, son fácilmente calculables utilizando II-14 y la ecuación de normalización III-1:

$$\int \rho_z \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_F d^3\rho = -eF \int \rho_z \frac{\partial f}{\partial p_z} d^3\rho = eFN \quad \text{IV-20}$$

$$\int E \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_F d^3\rho = -\frac{eF}{2m} \int \rho^2 \frac{\partial f}{\partial p_z} d^3\rho = \frac{eF}{m} \int \rho_z d^3\rho \quad \text{IV-21}$$

habiendo supuesto $E = \rho^2/2m$. Utilizando, además, III-4 podemos escribir:

$$\int E \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_F d^3\rho = F J(F) V$$

Las ecuaciones IV-18 y 19 se reducen entonces a:

$$eFN = - \int \rho_z \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M d^3\rho$$

$$FJ(F)V = - \int E(\rho) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M d^3\rho$$

Estas ecuaciones son exactas, en el sentido de que deben ser satisfechas por cualquier distribución f y además lo son por la solución exacta.

Si f está dada por IV-14, se obtiene:

$$eFN = - \int \rho_z \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M d^3\rho \quad \text{IV-22}$$

$$\frac{eF P_0 N}{m} = - \int E(\rho) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_M d^3 \rho \quad \text{IV-23}$$

Este es un sistema de ecuaciones simultaneas para P_0 y T que nos determinarán los valores que en función del campo deben tomar estos parámetros para que sean satisfechas las leyes de conservación de momento y energía.

Para resolver el sistema IV-22, 23, es necesario conocer $(\partial f / \partial t)_M$, que puede ser calculado de la expresión II-15, usando II-16 y 17, esto es:

$$\left(\frac{\partial f(\rho)}{\partial t} \right) = - \sum_{\underline{q}} \left\{ f(\underline{\rho}) P_a(\underline{\rho}, \underline{\rho} + \underline{q}) - f(\underline{\rho} + \underline{q}) P_e(\underline{\rho} + \underline{q}, \underline{\rho}) \right. \\ \left. + f(\underline{\rho}) P_e(\underline{\rho}, \underline{\rho} - \underline{q}) - f(\underline{\rho} - \underline{q}) P_a(\underline{\rho} - \underline{q}, \underline{\rho}) \right\} \quad \text{IV-24}$$

Donde hemos hecho uso de la conservación de pseudomomento II-18 y tenemos:

$$P_{(a)} = \frac{2\pi}{\hbar} B(\underline{q}) \begin{pmatrix} \bar{n}_{\underline{q}} \\ \bar{n}_{\underline{q}+1} \end{pmatrix} \delta(\underline{z}_{(a)}) \quad \text{IV-25}$$

siendo

$$\underline{z}_{(a)} = \frac{|\underline{\rho} \pm \underline{q}|^2}{2m} - \frac{\rho^2}{2m} \mp \hbar \omega(\underline{q}) \quad \text{IV-26}$$

Si T_c es la temperatura del cristal, tendremos:

$$\bar{n}_q = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega(q)}{kT_0}\right) - 1} \quad ; \quad 1 + \bar{n}_q = \bar{n}_q \exp\left(\frac{\hbar\omega(q)}{kT_0}\right) \quad \text{IV-27}$$

Aprovechando la quasicontinuidad de q , en un sistema coordenado polar, con ρ como eje, se tendrá:

$$\sum_q \leftrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3 \hbar^3} \int q^2 dq d(\cos\beta) d\psi$$

siendo β el ángulo polar y ψ el azimut. β y ψ resultan conectadas a través del producto escalar $\underline{\rho} \cdot \underline{q}$ que aparece en IV-26, así que haciendo un cambio de variable de β a ψ se obtiene conservación de energía y la expresión:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_M = - \frac{V}{(2\pi)^2 \hbar^4} \frac{m}{\rho} \int d\psi q dq B(q) \bar{n}_q \left\{ \right.$$

IV-28

$$\left. \left\{ \left[f(\rho) - f(\rho + q) \exp \frac{\hbar\omega(q)}{kT_0} \right]_+ + \left[f(\rho) \exp \frac{\hbar\omega(q)}{kT_0} - f(\rho - q) \right]_- \right\} \right\}$$

donde los índices $+$ y $-$ implican integración entre límites adecuados para absorción o emisión respectivamente. Estos límites están conectados con la conservación de energía y momento, pues usando IV-26 ($\psi=0$), vemos que:

$$\cos(\underline{\rho}, \underline{q})_+ = 1 - \frac{q}{2\rho} + \frac{m \hbar\omega(q)}{\rho q}$$

IV-29

así que φ variará en aquella región (dependiente de ρ) en que

$$|\cos(\rho, \underline{\varphi})_{\pm}| \leq 1$$

Usando IV-14 para f :

$$f(\rho \pm \underline{\varphi}) = f(\rho) \exp\left(\mp \frac{\hbar W(\varphi)}{k T_0}\right) \exp\left(\pm \frac{\rho_0 \cdot \underline{\varphi}}{k T}\right)$$

y desarrollando las expresiones resultantes en potencias de ρ_0 , esto es,

bajo la condición:

$$\frac{\rho_0^2}{2 m k T} \ll 1 \quad \text{IV-30}$$

a primer orden en ρ_0 obtiene (35):

$$-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_M = g_0(\rho) + \rho_0 \cos \theta g_1(\rho) \quad \text{IV-31}$$

siendo θ el ángulo entre $\underline{\rho}$ y $\underline{\rho}_0$. Las funciones $g_0(\rho)$ y $g_1(\rho)$ son expresiones complicadas cuya forma daremos posteriormente. Sustituyendo en IV-22 y 23, resulta:

$$eFN = \frac{\rho_0}{3} \int \rho g_1(\rho) d^3\rho \quad \text{IV-32}$$

$$eFN\rho_0 = \frac{1}{2} \int \rho^2 g_0(\rho) d^3\rho \quad \text{IV-33}$$

g_0 y g_1 contienen a la temperatura electronica así que IV-32 y 33 resultan las ecuaciones a resolver en T y ρ_0 , obteniéndose:

$$\rho_0 = \rho_0(F, T_0) \quad ; \quad T = T(F, T_0) \quad \text{IV-34}$$

La primera dá directamente la movilidad y la segunda nos permite conocer la modificación en la distribución electrónica como función del campo.

La distribución en ausencia de campo está dada por IV-14 con $\rho_0 = 0$ y $T = T_0$, teniendo una energía electrónica media:

$$\langle E_0 \rangle = \frac{3}{2} kT_0 \quad \text{IV-35}$$

en presencia de campo:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} kT + \frac{\rho_0^2}{2m}$$

y entonces:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} kT \left(1 + \frac{2}{3} \frac{\rho_0^2}{2m kT} \right) \quad \text{IV-36}$$

dentro de la aproximación:

$$\frac{\rho_0^2}{2m kT} \ll 1$$

a primer orden en ρ_0 se tendrá:

$$\langle E \rangle \approx \frac{3}{2} kT$$

en consecuencia, como la distribución electrónica debe transmitir energía a la malla para mantenerse en estado estacionario, se tendrá $T > T_0$ y de ahí el nombre de calentamiento electrónico.

La teoría fué desarrollada originalmente para deducir valores del campo crítico de rompimiento, usando que el sistema IV-32 y 33 presenta solución IV-34 únicamente para valores del campo inferiores

a un cierto valor F_c . Si $F > F_c$ no puede existir estado estacionario, creandose una corriente inestable que se piensa como la causante fundamental del proceso de rompimiento. La razón de la inestabilidad radica en que si $F > F_c$ el campo entrega energía al sistema electrónico con una rapidez mayor a la que éste último es capaz de transmitir a la malla.

La teoría de calentamiento electrónico ha sido también utilizada para calcular movilidad no-ohmica (38 y 39). Sin embargo, es de notarse que la ecuación IV-32, implica que ρ_0 es proporcional a F , excepto por un factor de pequeña variación con el campo (a través de la temperatura T). En consecuencia, el miembro izquierdo de IV-33 tendrá una variación cuadrática en el campo, mientras que el miembro derecho en virtud de no haber sido considerados términos cuadráticos en ρ_0 , resulta casi independiente de F . La ecuación IV-33 debe en consecuencia modificarse, introduciendo la contribución del término ρ_0^2 . El efecto de éste último se espera que sea notable en la región de campo intermedio ($10^2 - 10^4$ V/cm), que es donde se presentan los máximos valores de ρ_0 .

El corregir esta situación y examinar los fenómenos nuevos que aparecen es el propósito de esta tesis.

2) Enfriamiento electrónico.

a) Consideraciones generales.

Hemos puesto en evidencia en el párrafo anterior la necesidad de tomar en cuenta órdenes superiores a ρ_0 al hacer el desarrollo del término $(\partial f / \partial t)_M$. Esto conduce al examen más cuidadoso de la aproximación:

$$\frac{p_0^2}{2mkT} \ll 1 \quad \text{IV-30}$$

La interpretación física de esta desigualdad puede darse en términos de velocidad de arrastre y velocidad térmica. El campo eléctrico aplicado, tiene una acción doble sobre la distribución electrónica. - Por un lado, en estado estacionario, produce una asimetría en el espacio - ρ , que da origen a un momento de arrastre p_0 y por otro, produce una - modificación en la dispersión alrededor de la velocidad media, dispersión medida por kT . La corriente eléctrica resultante está conectada con la - velocidad de arrastre, mientras que $T - T_0$ mide la variación de los - procesos isotrópicos en el cristal.

Hemos visto que la energía electrónica media en presencia de campo está dada por:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} kT + \frac{p_0^2}{2m} \quad \text{IV-36}$$

de modo que:

$$\Delta E \equiv \langle E \rangle - \langle E_0 \rangle = \frac{3}{2} k(T - T_0) + \frac{p_0^2}{2m} \quad \text{IV-37}$$

Esta diferencia de energías ΔE , debe ser positiva, - pues el sistema electrónico debe estar en condiciones tales que sea capaz de transmitir la energía y momento que absorbe del campo al sistema fonó

nico, aquí considerado como el único sumidero de E y ρ . Normalmente se considera que la desviación de la condición de equilibrio es pequeña, de modo que la velocidad de arrastre ρ_0/m resulta menor que la velocidad térmica:

$$\frac{\rho_0^2}{2mkT} \ll 1$$

Existen, sin embargo, condiciones en las que la fracción velocidad de arrastre versus velocidad térmica, resulta cercana a la unidad, en este caso el término asimétrico es comparable al término dispersivo y será posible encontrar una situación en la que $T - T_0$ sea negativo, sin que ΔE lo sea.

Físicamente podemos construir una situación en que la dispersión disminuya si logramos un mecanismo de interacción que tienda a reducir la densidad electrónica a alta energía, pues entonces lograremos un apilamiento menos disperso de electrones en la región de energía media, necesitándose una mayor velocidad de arrastre para estabilizar el intercambio energético con la malla. Este mecanismo de interacción aparece de manera natural en los sólidos, bajo la forma de colisiones con fonones ópticos. Estas colisiones se realizan con un intercambio energético $\hbar\omega$, constante independiente del momento fonónico, si además, $kT \ll \hbar\omega$ entonces el electrón promedio no podrá emitir un fonón, mientras que los electrones de alta energía si pueden hacerlo, se produce, en consecuencia, un apilamiento en la región de baja energía, que tiene que ser compensado por un aumento en la velocidad de arrastre, lográndose la condición

b) Dispersión acústica.

El cuadrado del elemento de matriz de interacción toma la forma encontrada por Bloch para metales (40). Para redes simples:

$$B(q) = \frac{2}{q} \frac{C^2 q s}{M s^2 n_i V} \quad \text{IV-43}$$

siendo C una energía constante del orden de un electrón volt, M la masa iónica, n_i el número de iones por unidad de volumen y habiéndose usado $\omega \hbar = q s$.

q resulta acotado (grados de libertad) por:

$$q_0 = \hbar (6\pi^2 n_i)^{1/3} \quad \text{IV-44}$$

sin embargo, son en general, más importantes los límites establecidos por la conservación de energía y pseudomomento, que originan:

$$\begin{aligned} \text{límite inferior} \quad q(\pm) &= \begin{cases} 2ms - 2p & p \leq ms \\ 0 & p \geq ms \end{cases} \\ \text{límite superior} \quad q(\pm) &= \begin{cases} 2p \pm 2ms & q \leq q_0 \\ q_0 & q > q_0 \end{cases} \end{aligned} \quad \text{IV-45}$$

correspondiendo (\pm) a procesos de absorción y emisión respectivamente.

Para campos inferiores al de rompimiento el momento electrónico promedio es mucho menor que q_0 , de modo que nosotros usaremos los límites:

$$\begin{aligned} \text{inferior} \quad q_+ &= \begin{cases} 2ms - 2p & p \leq ms \\ 0 & p \geq ms \end{cases} \\ q_- &= 0 \\ \text{superior} \quad q_r &= 2p + 2ms \end{aligned} \quad \text{IV-46}$$

Además, vemos que los límites superiores son en orden de magnitud iguales a $2\bar{p}$ donde \bar{p} es un momento promedio, así que podemos utilizar la aproximación:

$$\left(\frac{qs}{kT_0}\right)^2 \leq \left(\frac{2\bar{p}s}{kT_0}\right)^2 \approx \frac{kTms^2}{(kT_0)^2} \ll 1 \quad \text{IV-47}$$

pues $ms^2 \approx k \cdot 1^\circ K$, de modo que

$$\bar{n}_q = \frac{1}{\exp\left(\frac{qs}{kT_0}\right) - 1} \approx \frac{kT_0}{qs} \quad \text{IV-48}$$

Si, además, $T \gg 1^\circ K$ entonces:

$$\frac{ms^2}{kT} \ll 1 \quad \text{IV-49}$$

de modo que se puede restringir el cálculo a la primera aproximación en un desarrollo en términos de ms^2/kT y además la aproximación IV-47, es válida en una región sumamente amplia.

Con estas hipótesis después de integrar sobre p , se encuentra:

$$\int \frac{p^2}{2m} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_A d^3p = -\frac{32}{3\pi} \frac{Ne s^2}{\mu_a} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1/2} \left\{ \frac{\Delta T}{T_0} + \frac{p_0^2}{3mkT} + \frac{p_0^2}{2mkT} \frac{\Delta T}{T_0} \right\} \quad \text{IV-50}$$

$$\int p_z \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_A d^3p = -\frac{32}{4\pi} \left(\frac{Ne p_0}{m \mu_a}\right) \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1/2} \quad \text{IV-51}$$

donde Ma es una constante con dimensiones de movilidad:

$$Ma = \frac{3\pi^{1/2}e}{(2m\pi kT_0)^{1/2}} \frac{s^2}{m k T_0} \frac{\hbar^4 M n_i}{m c^2} \quad \text{IV-52}$$

y siendo $\Delta T \equiv T - T_0$ y habiéndose denotado por el subíndice A las cantidades correspondientes a la dispersión acústica.

Para una malla en que ésta sea la interacción dominante, podemos substituir IV-50 y 51 en el sistema IV-22 y 23. Las expresiones resultantes son muy simples, sin embargo, para los otros casos dispersivos no lo serán, así que con objeto de obtener expresiones analíticas cerradas, nos restringiremos a bajos campos, esto es, al caso:

$$\frac{|\Delta T|}{T_0} \ll 1 \quad \text{IV-53}$$

con ello, ΔT como función del campo resulta:

$$\frac{\Delta T}{T_0} = 3 \left(\frac{3\pi}{32} \right)^2 \frac{F^2 Ma^2}{s^2} \left(1 - \frac{ms^2}{kT_0} \right) \quad \text{IV-54}$$

La sola acción de fonones acústicos no permite disminución de temperatura, pues la condición obtenible de IV-54 es $kT_0 < ms^2$ que va en contra de la hipótesis IV-49.

Este resultado es de esperarse en vista de la discusión del inciso 1), pues la interacción acústica es cuasi-elástica, en la región de temperaturas en consideración $kT_0 \gg ms^2$. Para este tipo de interacción en consecuencia, el término cuadrático es despreciable y es

directamente aplicable el cálculo de Frohlich y Paranjape (35).

c) Dispersión Óptica no-Polar.

Este caso ha sido tratado por Stratton (38 y 41) en aproximación lineal.

Aquí seguiremos el procedimiento usual de considerar $\hbar\omega(q)$ independiente de q , esto es, utilizaremos indistintamente:

$$\hbar\omega(q) \equiv \hbar\omega_0 \equiv \hbar\omega_0 \quad \text{IV-55}$$

La variación en q se reduce a una esfera de Debye de radio q_0 , para evitar la anisotropía de la zona de Brillouin, obteniéndose como límites de integración por conservación de energía y momento:

$$\begin{aligned} \text{inferior} \quad q_+ &= \sqrt{\rho^2 + 2m\hbar\omega_0} - \rho \\ q_- &= \begin{cases} \rho - \sqrt{\rho^2 - 2m\hbar\omega_0} & \rho^2 > 2m\hbar\omega_0 \\ 0 & \rho^2 < 2m\hbar\omega_0 \end{cases} \quad \text{IV-56} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{superior} \quad q_+ &= \begin{cases} \sqrt{\rho^2 + 2m\hbar\omega_0} + \rho & \text{si } q_+ < q_0 \\ q_0 & \text{si } q_+ > q_0 \end{cases} \\ q_- &= \begin{cases} \rho + \sqrt{\rho^2 - 2m\hbar\omega_0} & \text{si } q_- < q_0 \\ q_0 & \text{si } q_- > q_0 \end{cases} \end{aligned}$$

Además, como ya hemos indicado, para campos menores que el de rompimiento $\bar{\rho} \ll q_0$ así que los límites funciones de ρ (y no q_0) serán los utilizados. El cuadrado del elemento de matriz para esta interacción, es discutido por Seitz (42) quien encuentra:

$$B(q) = \frac{\hbar^2 D^2 K^2}{2n_i M V K \theta_0} \quad \text{IV-57}$$

donde D es una energía constante (análoga a C) del orden de un electron volt, K/\hbar es un vector de la red recíproca y las otras constantes han sido ya definidas.

Esta interacción es particularmente simple, por ser $B(q)$ independiente de q , sin embargo, las expresiones resultantes no lo son, - pues la dependencia con T es complicada. Haciendo uso del elemento de matriz antes descrito, se obtiene:

$$\begin{aligned} eFN &= - \int \rho_z \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_N d^3p = \\ &= \frac{16}{9\pi} \frac{\bar{n}_q}{2\bar{n}_q + 1} \frac{Ne\rho_0}{m\mu_N} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1/2} \left[(e^{\delta_0 - \delta} + 1)I + \gamma e^{\delta_0 - \delta} J_0 \right] \end{aligned} \quad \text{IV-58}$$

$$\frac{eFN\rho_0}{m} = - \int E \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_N d^3p = \frac{8}{3\pi} \frac{\bar{n}_q}{2\bar{n}_q + 1} \frac{Ne\hbar\omega_0}{m\mu_N} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1/2} \times$$

$$\begin{aligned} &\times \left[(e^{\delta_0 - \delta} - 1)I + \frac{\rho_0^2}{3mkT} \gamma e^{\delta_0 - \delta} J_0 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\rho_0^2}{2mkT} (e^{\delta_0 - \delta} - 1) \left(\frac{2}{3}I - J_0 \right) \right] \end{aligned} \quad \text{IV-59}$$

Donde:

$$\gamma_0 \equiv \frac{\hbar \omega_0}{k T_0} ; \gamma \equiv \frac{\hbar \omega_0}{k T} \quad \text{IV-60}$$

$$J_0 = \int_0^\infty e^{-y} y^{1/2} (y+\gamma)^{1/2} dy ; I = \int_0^\infty e^{-y} y^{3/2} (y+\gamma)^{1/2} dy \quad \text{IV-61}$$

$$\mu_N = \frac{8 \pi^{1/2} e \hbar^2 M n_i \hbar \omega_0}{3 (2 m k T_0)^{1/2} m^2 D^2 K^2 (2 \bar{n}_q + 1)} \quad \text{IV-62}$$

$$\bar{n}_q = [\exp \gamma_0 - 1]^{-1} \quad \text{IV-63}$$

El sistema IV-58 y 59 en ρ_0 y T es extremadamente complicado como para obtener una relación explícita entre estos parámetros y F (nótese que γ depende de T), por ello, nos restringiremos a campos pequeños ($\Delta T / T_0 \ll 1$):

$$\frac{\Delta T}{T_0} = \frac{F^2 \mu_N m}{\hbar \omega_0} \left(\frac{2 \bar{n}_q + 1}{\bar{n}_q} \right)^2 \frac{27 \pi^2}{128} x \quad \text{IV-62}$$

$$x \left[J_0 (2I + J_0 \gamma_0) \right]^{-1} x \left[1 - \gamma_0^2 \frac{J_0}{4I + 2J_0 \gamma_0} \right]$$

donde ahora las integrales I y J_0 se toman con argumento γ_0 en vez de γ . $\Delta T < 0$ se logra, si:

$$\gamma_0^2 \frac{J_0}{4I + 2J_0 \gamma_0} > 1 \quad \text{IV-63}$$

Para $\delta_0 > 1$ ($\theta_0 > T_0$) se pueden aproximar I y J_0 mediante $(9\pi\delta_0/16)^{1/2}$ y $(\pi\delta_0/4)^{1/2}$ respectivamente, obteniéndose enfriamiento en la región:

$$kT_0 < \frac{\hbar\omega_0}{1 + 7^{1/2}} \approx \frac{\theta_0}{3.6} \quad \text{IV-64}$$

Esto es, si la temperatura de malla es menor a $\theta_0/3.6$ el sistema electrónico se enfría. Este resultado fué obtenido por primera vez por Paranjape y Ambrose (43).

d) Dispersión óptica polar.

Aquí tenemos de nuevo:

$$\hbar\omega(q) = \hbar\omega_p \equiv \hbar\theta_p \quad \text{IV-65}$$

El cuadrado del elemento de matriz de interacción ha sido considerado por diversos autores, siendo la expresión más precisa la dada por Frólich (44):

$$B(q) = \frac{2\pi^2 e^2 \hbar^3 \omega_p}{V q^2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \quad \text{IV-66}$$

donde ϵ_∞ y ϵ_s son las constantes dieléctricas óptica y estática respectivamente.

Los límites de interacción, coinciden con los del caso óptico no-polar, si se cambia ω_0 por ω_p .

El sistema se convierte en:

$$eFN = - \int p_z \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_p d^3p = \frac{4}{3\pi^{1/2}} F_0 \bar{n}_q \frac{Ne p_0}{(2m\hbar\omega_p)^{1/2}} \gamma^{1/2} \times \\ \times \left[\frac{1}{2} \gamma (e^{\gamma_0 - \gamma} - 1) J_1 + (e^{\gamma_0 - \gamma} - 1) J_0 \right] \quad \text{IV-67}$$

$$\frac{eFN p_0}{m} = - \int E \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_p d^3p = Ne F_0 \bar{n}_q \left(\frac{2\hbar\omega_p}{\pi m} \right)^{1/2} \gamma^{1/2} \times \\ \times \left[(e^{\gamma_0 - \gamma} - 1) J_1 + \frac{p_0^2}{3mkT} \gamma J_1 + \frac{p_0^2}{3mkT} (e^{\gamma_0 - \gamma} - 1) \left(J_2 + \delta J_1 - \frac{3}{2} J_1 \right) \right] \quad \text{IV-68}$$

donde

$$J_1 = \int_0^\infty e^{-y} \ln \frac{\sqrt{4+y} + \sqrt{y}}{\sqrt{4+y} - \sqrt{y}} dy \quad \text{IV-69}$$

$$J_2 = \int_0^\infty e^{-y} y \ln \frac{\sqrt{4+y} + \sqrt{y}}{\sqrt{4+y} - \sqrt{y}} dy$$

$$eF_0 = \frac{me^2\omega_p}{\hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \quad \text{IV-70}$$

Para bajo campo resulta:

$$\frac{\Delta T}{T_0} = \frac{p_0^2}{3mkT_0} \left\{ \frac{4J_0}{J_1} \left(\frac{kT_0}{\hbar\omega_p} \right)^2 - 1 \right\} \quad \text{IV-71}$$

donde J_0 y J_1 son dependientes de γ_0 (en esta aproximación)

La condición de temperatura disminuída es:

$$\left(\frac{\hbar\omega_p}{kT_0} \right)^2 \frac{J_1}{4J_0} > 1 \quad \text{IV-72}$$

En la figura 1* se ha graficado el miembro izquierdo de esta desigualdad en contra de $\gamma_0 = \frac{50 \mu p}{k T_0}$. La región de baja temperatura - resulta aquella en la que el efecto es posible.

e) Combinaciones.

Substancias no-polares.

En general, este tipo de substancias son importantes tanto la dispersión por fonones acústicos (A) como por ópticos no-polares (N), de modo que podemos escribir.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_M = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_A + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_N \quad \text{IV-73}$$

y obtendremos por substitución en las ecuaciones IV-22 y 23, dan origen al sistema $\left(\frac{\Delta T}{T_0}\right) \ll 1$:

$$F P_0 = \left(\frac{\frac{3}{2} k \Delta T + \frac{P_0^2}{2m}}{\frac{3}{2} k T_0} \right) \left[\frac{8}{3\pi} \frac{\bar{n}_q}{\bar{n}_q + 1} \frac{k B_0}{M_N} \gamma_0 J_0 + \frac{32}{3\pi} \frac{m s^2}{M_a} \right]$$

$$\frac{m F}{P_0} = \frac{1}{M_N} \frac{16}{9\pi} \frac{\bar{n}_q}{2\bar{n}_q + 1} (2I + \gamma_0 J_0) + \frac{32}{9\pi} \frac{1}{M_a} \quad \text{IV-74}$$

siendo I y J_0 dependientes de γ_0 . De aquí la condición para ΔT negativo se expresa

$$\frac{M_N}{M_a} < \frac{1}{4} \frac{\bar{n}_q}{2\bar{n}_q + 1} [\gamma_0^2 J_0 - 2(2I + \gamma_0 J_0)] \quad \text{IV-75}$$

*Las figuras aparecen al final del capítulo V.

Es posible utilizar parámetros independientes de la temperatura para expresar la relación anterior, estos parámetros están definidos por:

$$\left(\frac{\epsilon_{ac}}{\epsilon_{op}} \right)^2 \equiv \frac{u_a}{u_N} \gamma_0 \frac{2\bar{n}_q + 1}{2} \quad \text{IV-76}$$

de la definición de las movilidades vemos que IV-76 es independiente de la temperatura, estando los parámetros ϵ_{ac} y ϵ_{op} conectados con las constantes C y D que aparecen en los elementos de matriz de interacción - IV-43 y 57. Los nuevos parámetros pueden ser interpretados como las energías de deformación de la celda cristalina por efecto del fonón (óptico o acústico).

La condición de enfriamiento se expresa ahora:

$$\left(\frac{\epsilon_{ac}}{\epsilon_{op}} \right)^2 < \frac{1}{8} \gamma_0 \bar{n}_q \left[\gamma_0^2 J_0 - 2(2I + \gamma_0 J_0) \right] \quad \text{IV-77}$$

Substancias Polares.

En estos materiales la componente acústica puede ser de importancia pero en general no lo es. Cuando hay una contribución acústica apreciable se tendrá:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_M = \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_A + \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_P \quad \text{IV-78}$$

En el límite de bajo campo, la movilidad de la sustancia resulta inversamente aditiva (regla de Matthiessen), teniéndose:

$$\frac{1}{\mu} \equiv \frac{mF}{\rho_0} = \frac{1}{\mu_{AO}} + \frac{1}{\mu_{PO}} \quad \text{IV-79}$$

siendo μ_{AO} y μ_{PO} las movilidades acústica y óptica polar a bajo campo:

$$\begin{aligned} \mu_{AO} &= \frac{9\pi}{32} \mu_a \\ \mu_{PO} &= \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \left(\frac{2k\theta_0}{m} \right)^{1/2} \frac{1}{\bar{n}_q F_0} \frac{1}{\gamma_0^{1/2} J_0} \end{aligned} \quad \text{IV-80}$$

En términos de la movilidad a bajo campo del material, podemos obtener como criterio de enfriamiento:

$$\mu \frac{\alpha}{\mu_i} > \frac{3\sqrt{\pi}}{2} \frac{e^{\delta_0} - 1}{\gamma_0^{5/2} J_1} \quad \text{IV-81}$$

donde hemos introducido el parámetro de acoplamiento de la teoría del polarón

$$\alpha \equiv e^2 \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \left(\frac{m}{2\omega \hbar^3} \right)^{1/2} \quad \text{IV-82}$$

y μ_i es una constante de dimensiones de movilidad:

$$\mu_i \equiv \frac{e^2}{m\omega} \quad \text{IV-83}$$

CAPITULO V

CONCLUSIONES

El añadir un término más en el desarrollo en función de la energía de arrastre ha permitido poner de manifiesto que éste puede resultar un término importante en dos sentidos. Primero, permitiendo encontrar regiones en donde aparece un fenómeno nuevo (disminución de temperatura) - y segundo, aún en el caso en que la condición de temperatura no se cumpla, - se logran valores de la energía de arrastre que están por encima de los predichos anteriormente.

En materiales no-polares, la acción de los fonones acústicos es considerable, así que la relación más útil es la IV-77:

$$\left(\frac{\varepsilon_{ac}}{\varepsilon_{op}}\right)^2 < \frac{1}{8} \gamma_0 \bar{n}_q \left[\gamma_0^2 J_0 - 2(2I + \gamma_0 J_0) \right] \quad \text{IV-77}$$

El miembro derecho es una función con propiedades conocidas de la variable γ_0 por poderse reducir las integrales J_i a funciones Bessel de tercera clase. Denotando por $F(\gamma_0)$ al miembro derecho es posible mostrar que presenta un máximo para $\gamma_0 = 5.29$ ($T_0 = \frac{\theta_0}{5.29}$) con valor $F_M = 0.0903$

es en consecuencia suficiente tener:

$$\left(\frac{\epsilon_{op}}{\epsilon_{ac}}\right)^2 > 11.05 \quad V-1$$

para poder afirmar la existencia de disminución de temperatura alrededor de

$T_0 = \frac{\theta_0}{5.29}$ Esto es, si V-1 se satisface, habrá enfriamiento en la región donde:

$$F(\gamma_0) > \left(\frac{\epsilon_{ac}}{\epsilon_{op}}\right)^2 \quad V-2$$

alrededor de $\gamma_0 = 5.29$

La condición V-1 nos muestra que es necesario tener una interacción considerablemente fuerte por parte de los fonones ópticos, de modo que el cuadrado de la energía de deformación óptica sea once veces mayor que el correspondiente acústico.

El fenómeno de disminución de temperaturas no resulta particularmente notable en cristales no-polares, pues materiales como el germanio tipo-p son los que presentan interacción óptica fuerte y sin embargo para este material el valor experimental (45) es $(\epsilon_{op}/\epsilon_{ac})^2 = 3.9$ y en consecuencia, en este caso V-1 no predice enfriamiento.

Sin embargo, consideremos la distribución energética - predicha por la forma IV-14 para la distribución momental. La distribución energética la obtendremos de:

$$\rho(E) = \int f(\mathbf{p}) g(\mathbf{E}) d\Omega \quad V-3$$

donde $g(E)$ es la densidad de estados y la integración se realiza sobre la dependencia angular, para IV-14 obtendremos:

$$\rho(E) = \frac{n}{2(E_0 \pi kT)^{1/2}} \left\{ \exp\left[\frac{(E^{1/2} - E_0^{1/2})^2}{kT} \right] - \exp\left[\frac{(E^{1/2} + E_0^{1/2})^2}{kT} \right] \right\}^{N-4}$$

donde $E_0 \equiv P_0^2 / 2m$

Si se ajusta esta expresión a las curvas experimentales (46), se obtiene una excelente concordancia en una amplia región de energías y campos eléctricos (47). Esta adecuación se logra utilizando valores para la temperatura electrónica inferiores a los de la malla.

Aquí se tiene una paradoja, que puede ser parcialmente explicada si se nota que los valores predichos para P_0 en el ajuste de curvas, resultan superiores a los medidos por conductividad, esto hace pensar que en los casos considerados, la distribución energética es adecuada, pero no así los valores encontrados para la velocidad de arrastre. El valor experimental para el germanio que hemos citado $(E_{op} / E_{ac})^2 = 3.9$ ha sido encontrado ajustando las curvas experimentales para la movilidad a las expresiones teóricas en una teoría con colisión inter-electrónica despreciable. El germanio es un material con banda de valencia degenerada (48), apareciendo agujeros ligeros y pesados. Nosotros hemos procedido en aproximación de banda simple, que al no tomar en cuenta más que a un tipo de agujeros no permite un cálculo adecuado de la velocidad de arrastre y en consecuencia una comparación directa del criterio V-1 con los valores experimentales para germanio tipo-p.

Una reformulación de V-1 que implicara la doble banda tendría que tomar en cuenta la interacción entre agujeros ligeros y pesados, modelo que no ha sido desarrollado hasta el presente.

En otros materiales no-polares no son bien conocidos los parámetros experimentales, así que no es posible una comprobación experimental directa. Por otra parte, es necesario, en los más de los casos, modificar la relación $E(\rho) = \rho^2/2m$ para tomar en cuenta las posibles asimetrías de la banda, esto representa un trabajo numérico intenso y nosotros nos hemos restringido en esta tesis a cálculos analíticos.

Sin embargo, un ejemplo numérico simple resulta la comparación de los resultados de la teoría lineal con la teoría cuadrática, para un material que con banda simple tuviese los mismos parámetros experimentales que la banda pesada del germanio (45). Esto es, $\theta_0 = 427^\circ K$

$$(\epsilon_{op}/\epsilon_{ac})^2 = 3.9; \quad m = 0.35 m_e \quad (\text{masas electrónicas}) -$$
$$\mu_{a0} = 2.60 \times 10^7 T_0^{-3/2} \text{ cm}^2/\text{volt-sec.}$$

En la gráfica 2), se da una comparación entre los valores predichos por las teorías lineal (línea punteada) y cuadrática (línea continua) para la movilidad, la temperatura electrónica y la relación $\rho_0^2/2mkT$. Los cálculos se realizaron para una temperatura de malla de $77^\circ K$. Es de notarse particularmente que la teoría cuadrática a pesar de no predecir temperatura negativa, en este caso, sin embargo, da origen a valores de $\rho_0^2/3mk\Delta T$ que a campo intermedio pueden ser considerablemente cercanos a la unidad. Este tipo de valores han sido encontrados recientemente en forma experimental (49). Ver Fig. 3) para la comparación entre la teoría lineal y la cuadrática.

Materiales Polares.

Este tipo de materiales a pesar de no haber sido estudiados tan intensamente como algunos de los no-polares, presentan muchas ventajas para la comparación de la nueva teoría con el experimento. En particular de consideraciones experimentales se deduce que para las sales de plomo la interacción con fonones acústicos es débil, disponiéndose, en consecuencia de materiales para los que la teoría predice que el efecto de enfriamiento es más acusado.

En materiales con acoplamiento polar puro la condición de enfriamiento es:

$$\gamma_0^2 \frac{J_1}{4J_0} > 1$$

IV-72

siendo el miembro izquierdo una función conocida de γ_0 cuya gráfica aparece en la figura 1) En este tipo de materiales la gráfica nos muestra que si $\gamma_0 > 2.6$ ($T_0 < \frac{G_p}{2.6}$) habrá enfriamiento.

Cuando no es bien conocida la importancia de la componente acústica, es entonces preferible utilizar la forma IV-81 del criterio:

$$\mu \frac{\alpha}{M_i} > \frac{3\sqrt{\pi}}{2} \frac{e^{\gamma_0} - 1}{\gamma_0^{5/2} J_1} \equiv F_p(\gamma_0) \quad \text{IV-81}$$

Substituyéndose el valor experimental de la movilidad μ en el miembro izquierdo. El miembro derecho es una función conocida de γ_0 , que es graficada en la figura 4). La expresión IV-81 es válida para campo muy bajo, de modo que es posible utilizar los valores para la movilidad óhmica al encon

trar si el material presenta enfriamiento o no.

Uno de los materiales de mayor interés a éste respecto es PbS, para el cual con los datos experimentales para la movilidad (49) resulta a 77°K ($\gamma_0 = 2.52$) el valor $M \frac{\alpha}{u_i} = 3.08$, mientras que $F_p = 2.98$

Si bien, este no es un resultado concluyente, da considerables esperanzas de que este sea el material adecuado para el estudio experimental. No se puede tomar como conclusiva esta evidencia pues la inexactitud en los parámetros involucrados es grande, en particular, el valor usado en (50) para la masa efectiva es $m = 0.35 m_e$, mientras que un valor más reciente (51) es $m = 0.175 m_e$. Utilizando el segundo valor no se obtiene enfriamiento, pero es de notarse que **existen otros parámetros** que tampoco son bien conocidos para este material, como sus constantes dieléctricas. Si se utilizan los valores propuestos recientemente para las constantes dieléctricas (52) y además el valor último para la masa, ambos compensan los errores de los cálculos anteriores y es de nuevo aplicable el criterio de enfriamiento.

Resulta en consecuencia deseable la realización de experimentos en éste y otros materiales, dentro de la región de impurezas adecuada.

Otra consecuencia de la teoría en su forma cuadrática es la de que a campos intermedios se tenga una velocidad de arrastre muy cercana a la velocidad térmica. Esta región es precisamente aquella en la cual las teorías de conductividad no-ohmica presentan mayores divergencias con los datos experimentales. Para la comprobación detallada entre la presente

teoría y los valores experimentales para esta región es necesario resolver el sistema en \mathcal{P}_0 y T con mayor exactitud que la cuadrática por esperarse una convergencia débil. La manera de evitar el desarrollo en serie ha sido encontrada y el utilizarla para el tipo de comparación propuesto es el trabajo en progreso.

FIG. 1

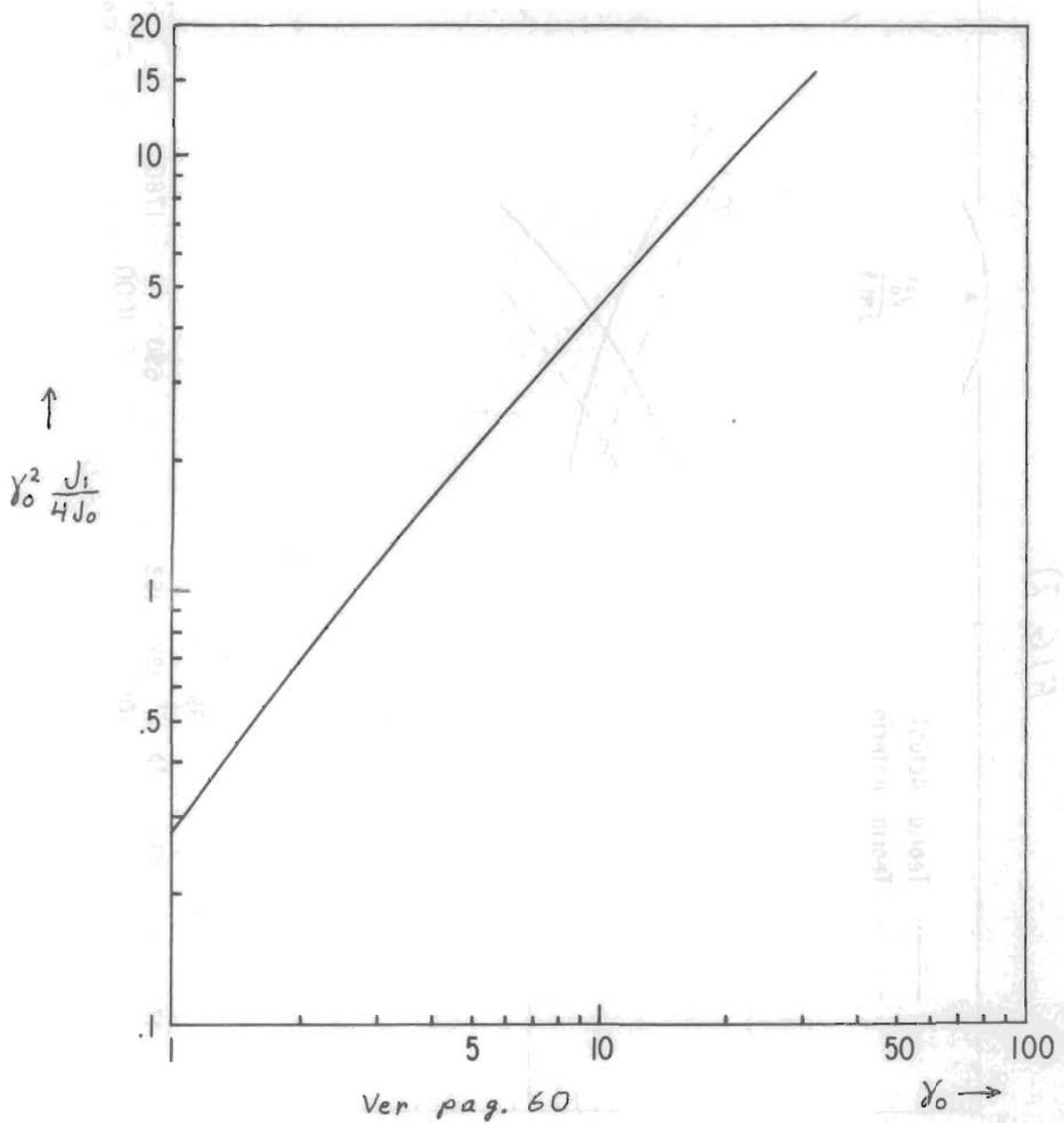


FIG. 2)

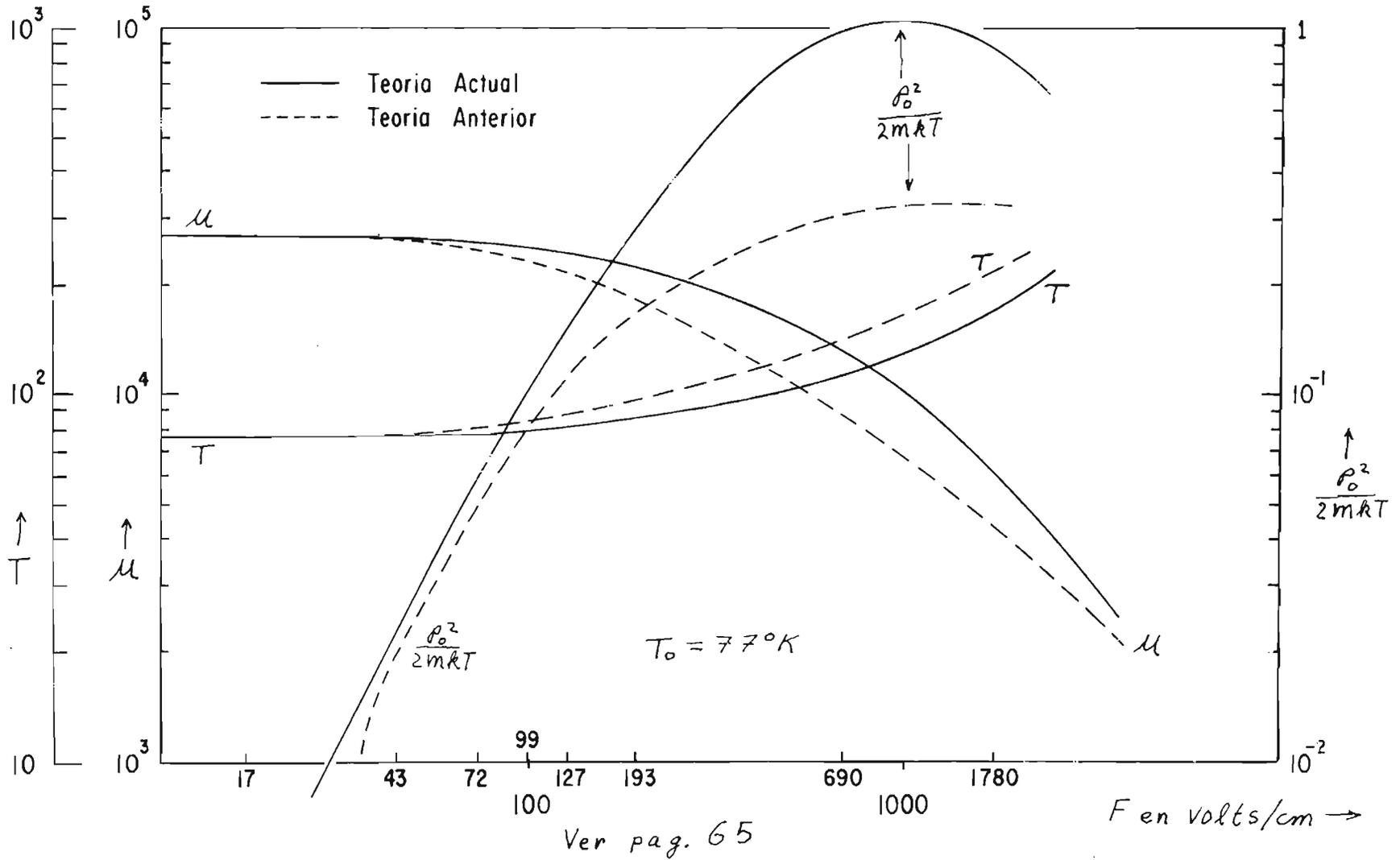


FIG. 3)

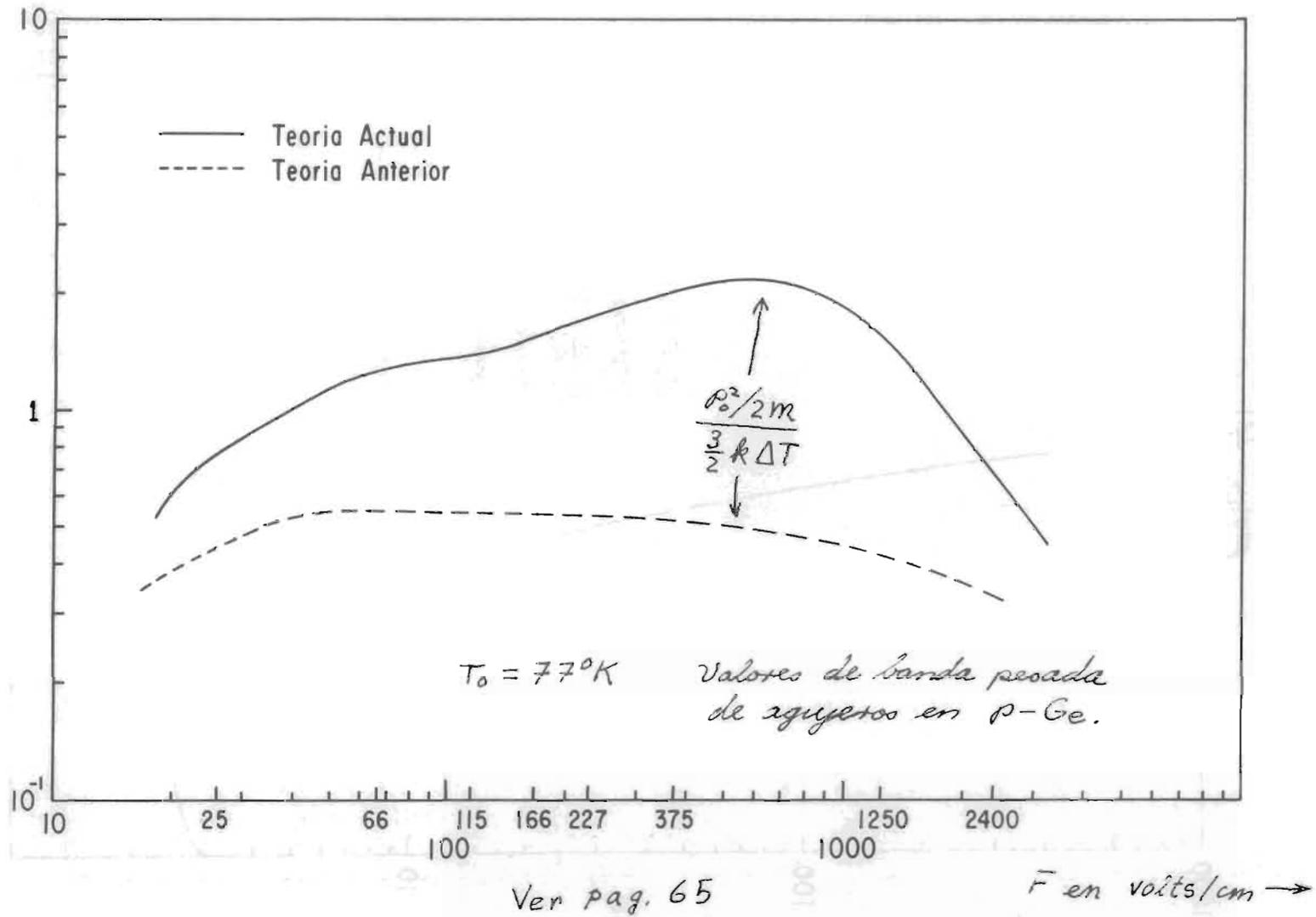
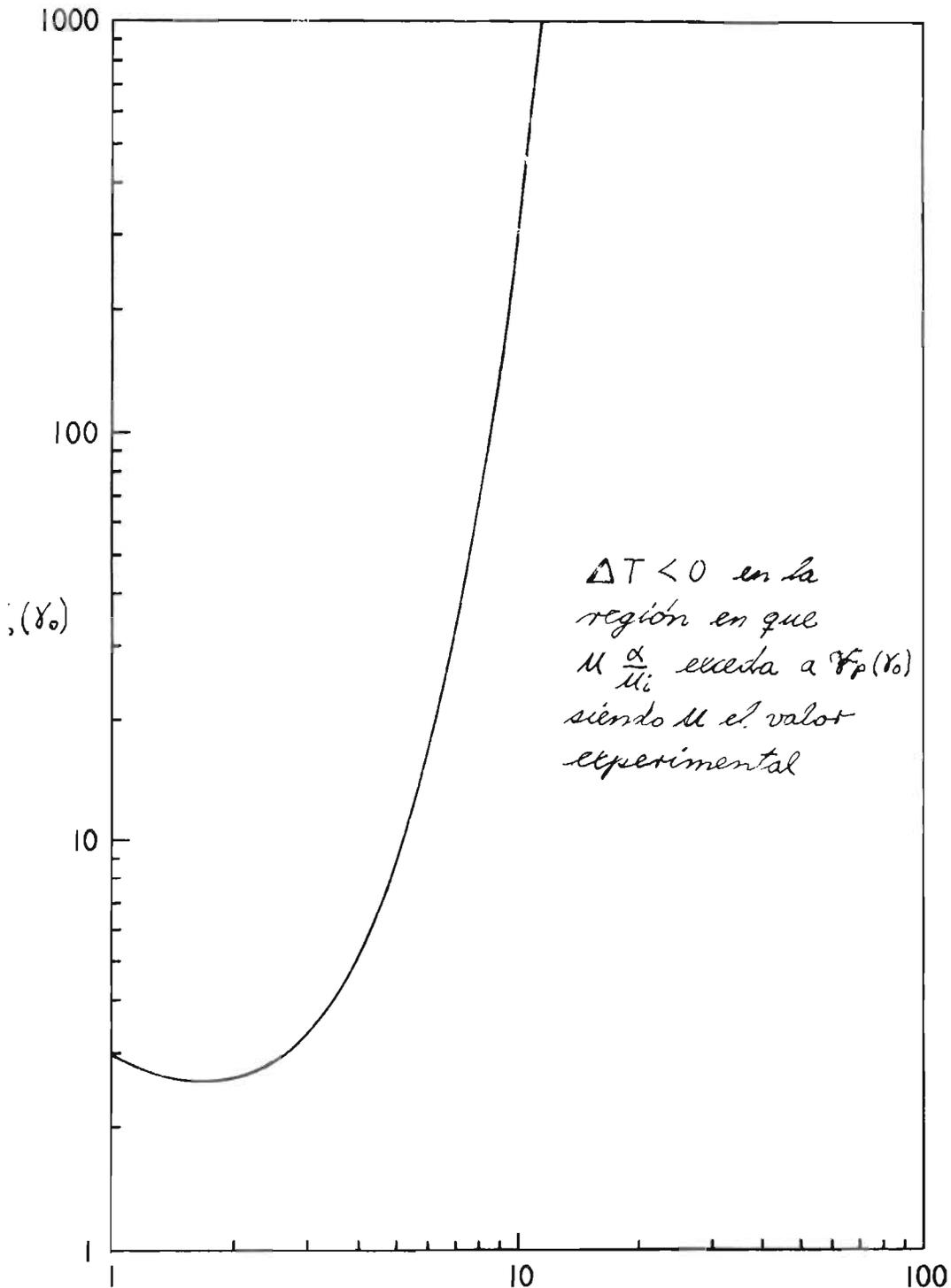


FIG. 4)



Ver pag. 67

γ_0

REFERENCIAS

- (1) M. DRESDEN: Rev. Mod. Phys. 33, 265 (1965).

A mi juicio, una excelente revisión del problema de transporte en sólidos, conteniendo un análisis de las aproximaciones necesarias para llegar a la ecuación "útil" de Boltzmann que es la empleada posteriormente. La mayor parte del material cubierto en este capítulo está contenida en esta revisión.

- (2) J.M. ZIMAN: "Electrons and Phonons", Oxford (1960).

Este libro complementa adecuadamente al artículo anterior por el detalle con que, a nivel no muy sofisticado, son tratados los distintos problemas de transporte, así como sus antecedentes en teoría del estado sólido.

- (3) F.J. BLATT: Sol. State Phys. 4, 199 (1957).

Es un artículo de suma utilidad por su carácter introductorio, su muy completa bibliografía, así como por el detalle con que analiza los resultados experimentales. Son de particular interés sus incisos sobre semiconductores y su capítulo IV sobre anisotropía, pues son pocas las revisiones que los incluyen.

- (4) Ver (1), pag. 284.
- (5) Por ejemplo en cálculo de bandas:
R.J. ELLIOT: Phys. Rev. 96, 280 (1954).
- (6) Ver (2), Pag. 177.
- (7) R.E. PEIERLS: "Quantum Theory of Solids", Oxford (1964), pag. 5.
- (8) Todos los libros de Estado Sólido discuten éste problema a uno u otro nivel, resultando de particular interés las revisiones hechas por:
M. BORN Y K. HUANG: "Dynamical Theory of Crystal Lattices".
Oxford (1954). Ziman Op. Cit. Cap. I.
- (9) Como importante artículo de revisión, se puede citar:
J.R. REITZ; Sol. State Phys. 1, 1 (1955).
- (10) Una breve indicación de los problemas encontrados al tratar de hacer el cálculo, se puede ver en;
P.O. LOWDIN "Quantum Mechanical Fundament of Solid State Theory".
Notas de la Escuela Latino Americana de Física. Universidad de México, (1962). Párrafo 26.
- (11) Ver para su discusión:
E.I. BLOUNT: "Formalism of Band Theory". Sol. State Phys. 13,
305 (1962).

Esta es una de las pocas referencias, que hace una revisión de este problema, considera el esquema de bandas con la ecuación de Dirac y da una discusión del problema de autoconsistencia.

- (12) Una discusión de estos puntos puede encontrarse en Ziman Op. Cit. Cap. V.
- (13) Véase el inciso VI del artículo de Blount (11).
- (14) Véase la revisión de Dresden (1) pág. 281.
- (15) Véase, por ejemplo: TOLMAN "The principles of Statistical Mechanics" Oxford. (1938), Párrafos 78 s.s.
O la revisión de U. FANO. Rev. Mod. Phys. 29, 74 (1957).
- (16) D.A. GREENWOOD: Proc. Phys. Soc. 71, 585 (1958).
En este artículo se da una derivación del tipo usual (aproximación de fases al azar), para un sistema electrónico, bajo campo eléctrico, colidiendo con impurezas fijas distribuidas al azar. Después hace una demostración en la que evita tanto la hipótesis de fases al azar como el uso de teoría de perturbaciones, discutiendo la validez de ésta última a la luz de su nueva demostración.
- (17) J.S. VAN WEERINGEN: Proc. Phys. Soc. A67, 206 (1954).
Considera el problema de metales.
- (18) Este problema es tratado por L. VAN HOVE en conexión con la obtención de la ecuación maestra de Pauli en: "Fundamental Problems in Statistical Mechanics" reunido por E.G.D. COHEN. North-Holland (1962), pág. 157.
Véase también (16).
- (19) W. KOHN y J.M. LUTTINGER. Phys. Rev. 108, 590 (1957); *ibid* 109, 1892 (1958).

(20) H. FROHLICH y A.W.B. TAYLOR: Proc. Phys. Soc. 83, 739 (1964).

Esta es la referencia más completa en cuanto a la obtención de la ecuación de Boltzmann en procesos no-ohmicos, dándose la deducción más exacta del término de campo, considerándose también las aproximaciones involucradas en el término de colisiones.

(21) Ver: E.N. ADAMS y P.N. ARGYRES: Phys. Rev. 102, 605 (1956)

Donde se estudia este problema y las pseudo-paradojas que en otro tiempo originó.

(22) Un comentario y bibliografía sobre este punto puede encontrarse en:

ZIMAN Op. Cit. Pag. 97.

(23) Ver (7), pág. 124.

(24) Para metales, la restricción II-20 es demasiado rígida, pudiéndose substituir por la menos restrictiva $E_F > \hbar/\tau$ siendo E_F la energía de Fermi. (7), (17) y Zimann Cap. V, § 12.

(25) Otra situación que no hemos considerado en el texto para la aplicabilidad de II-15 es la referente a la posible influencia del campo en el término de colisiones, ésta se debe a que el campo al cambiar la energía electrónica entre dos colisiones puede ocasionar correlaciones entre las fases. Para evitar ésta influencia en los términos no diagonales, la energía transmitida por el campo $eF\lambda$ (λ camino libre medio), debe ser mucho menor que la incertidumbre debida a la colisión (20):

$$eF\lambda \ll \hbar/\tau$$

- (26) Ver (2) Caps. IV y IX.
- (27) Este problema es tratado por E.N. ADAMS, Phys. Rev. 98, 947 (1955).
- (28) Ver (3). Pag. 216.
- (29) Ver (2) inciso 7.7.
- (30) Ver (7), § 2.4, 2.5.
y (2) incisos 9.13 y 10.9.
- (31) Ver (7) § 2.5
- (32) B.V. PARANJAPE: Proc. Phys. Soc. 78, 516 (1961).
Resuelve totalmente el problema de rompimiento reversible.
A. ZYLBERSZTEJN: Phys. Rev. 127, 744 (1962).
Donde se considera la importancia relativa de los términos de la ecuación de número y su dependencia con la temperatura electrónica.
- (33) Ver (3), Pág. 230.
- (34) Ver (3), Pág. 242.
- (35) H. FROELICH y B.V. PARANJAPE: Proc. Phys. Soc. B69, 21 (1956).
Donde se considera el formalismo que es usado en esta tesis.
- (36) H. FROELICH: Proc. Roy. Soc. A188, 521 (1947).
- (37) D. PINES: Phys. Rev. 92, 626 (1963).
Ver su fórmula 51.

- (38) R. STRATTON: Proc. Roy. Soc. A242, 355 (1957).
Donde estudia el desarrollo a primer orden en para cristales co
valentes.
- (39) R. STRATTON: Proc. Roy. Soc. A246, 406 (1958).
Hace el estudio para cristales polares. Varias de sus fórmulas nece-
sitan revisión.
- (40) F. BLOCH: Z. Phys. 52, 555 (1928).
- (41) R. STRATTON: "Solid State Physics Electronics and Telecommunicaa
tions". Vol 1, Academic Press p. 343 (1960).
- (42) F. SEITZ: Phys. Rev. 73, 549 (1948).
- (43) B.V. PARANJAPE y T.P. AMBROSE: Phys. Letters 8, 223 (1954).
- (44) H. FROELICH: Adv. in Phys. 3, 325 (1954).
- (45) D. PINSON y R. BRAY: Phys. Rev. 127, 1593 (1962).
- (46) W. PINSON Y R. BRAY: Semiconductor Research Semiannual Report,
Purdue University (1962-3).
- (47) E. DE ALBA y B.V. PARANJAPE: Phys. Letters 11, 12 (1964).
- (48) Ver (3).
- (49) R. BRAY Comunicación privada.

- (50) R.S. ALLGIER y W.W. SCANLON: Phys. Rev. 111, 1029 (1958).
- (51) A.K. WALTON, MOSS y ELLIS: Proc. Phys. Soc. 79, 1065 (1962).
- (52) BURSTEIN y EGLI: Adv. in Electronics and Electron Phys. 7, 56 (1955).