

非晶态半导体超晶格中载流子的 随机输运过程

熊 诗 杰

(南京大学固体物理研究所)

1985年5月7日收到

提 要

对非晶态半导体超晶格中载流子的输运过程,本文提出并严格求解了超晶格形式下载流子的连续时间分布无规行走(CTRW)模型,在此基础上得到了这种物质中 Fick 定律的推广形式,并且分别对高斯型及非高斯型的时间分布函数计算了迁移率随频率及调制周期变化的特性曲线.发现长时尾行为(非高斯型分布),将部分地抵消由于结构调制所引起的尺寸效应.

一、引 言

近年来,由非晶态半导体薄膜交替叠合组成的超晶格,由于制备条件简单以及在光学和电学方面的特异性质,已经引起了人们广泛的兴趣^[1-3].从结构上来说,一方面,这种材料具有一维的组分调制并且具有清晰的界面;另一方面,在每层薄膜内部其结构又是完全无序的.这种无序性引起载流子的输运机制从“带型”输运向“跳跃型”输运的过渡^[4].而众多的界面将给这种输运过程带来一定的尺寸效应.

本文试图从理论上阐明这种材料载流子随机输运过程的物理特点.鉴于连续时间分布无规行走(CTRW)模型在描述均匀非晶态半导体的载流子扩散动力学方面已经取得很大的成功^[5-10],我们将在这种模型的基础上计入超晶格的非均匀性和界面效应,提出一种超晶格形式下的 CTRW 模型并给出其严格解,在此基础上我们得到了这种物质中载流子运动所遵循的 Fick 定律的推广形式,并且分别就高斯型和非高斯型的时间分布函数,计算了载流子迁移率随频率及调制周期变化的特性曲线.我们看到,在高斯型时间分布函数下,由于界面的尺寸效应,迁移率的频率特性曲线出现明显的振荡.反之,如考虑具有长时尾的非高斯型随机分布,这种尺寸效应引起的振荡将被抑制.这样的长时尾效应和尺寸效应的相互竞争,是非晶态半导体超晶格所特有的有趣的现象,值得进一步的实验和理论研究.

二、超晶格的 CTRW 模型

为了描述非晶态半导体中载流子的扩散过程, Scher 及 Lax 等人提出了一种所谓“连

续时间分布无规行走模型^[9] (continuous-time random walk)^[9]. 按照这种模型, 载流子在规则的三维晶格上作无规行走, 而把系统的无规性用一个滞留时间分布函数 $\phi(t)$ 来模拟, $\phi(t)\Delta t$ 是指在 $t = 0$ 时到达某一格点上的粒子在 $t-t + \Delta t$ 时间内发生一次跳跃的几率. 而载流子的某次跳跃的空间位移是 $\mathbf{s}$ 的几率则用 $p(\mathbf{s})$ 来表达. 这样, 只要在 CTRW 模型下求出无规行走粒子的时空分布几率, 就可以了解在非平衡条件下的载流子动力学过程. 这种模型广泛地应用到各种非晶半导体材料上, 并获得相当大的成功.

对于由两种不同的非晶态半导体组成的超晶格, 如果界面是清晰的且每个层内部是均匀的, 我们可以用 $\phi_a(t)$ 和 $\phi_b(t)$ 分别表示粒子处在 A 和 B 层内的滞留时间分布函数. 另一方面, 界面将影响 $p(\mathbf{s})$ 的空间分布, 如果只考虑界面对紧靠界面的格点之间的跳跃的影响, 而且只计及最近邻格点间的跳跃, 那末载流子在经过从 $\mathbf{i}$ 点出发的一次跳跃后到达最近邻的 $\mathbf{j}$ 点的几率可表达为

$$p_{ij} = \begin{cases} 1/Z_{a(b)} & i, j \text{ 同属于 } A(B), \text{ 不在界面上;} \\ (1 - \eta_{A(B)})/Z_{A(B)} & i \in A(B), j \in B(A); \\ (1 - \eta'_{A(B)})/Z_{A(B)} & i, j \text{ 同属于 } A(B), \text{ 处在界面上.} \end{cases} \quad (1)$$

上式中 $Z_{a(b)}$ 为 $A(B)$ 层内部的最近邻数, $\eta_{A(B)}$, $\eta'_{A(B)}$ 则用来表达界面对跳跃几率的影响. $\eta_{A(B)}$ 和 $\eta'_{A(B)}$ 应满足如下的归一化条件:

$$\sum_j p_{ij} = 1. \quad (2)$$

这里 j 对于 i 的所有最近邻格点求和.

在上述模型给定后, $t = 0$ 时从 $\mathbf{s}_0$ 出发的载流子在 t 时刻处于 $\mathbf{s}$ 的几率 $P(\mathbf{s}, t | \mathbf{s}_0)$ 将可唯一地解出. 下面我们将利用特殊的表象变换来进行严格的求解.

三、超晶格的 CTRW 模型的严格解

从统计系综的意义上讲, 系统满足超晶格对称性, 因此可类似于文献 [11], 将系统划分为若干在统计系综意义上是等价的超原胞, 每个超原胞内包含 $l = l_a + l_b$ 个格点 (这里 $l_{a(b)}$ 为 $A(B)$ 层内包含的格子平面数), 这样每个格点的坐标可分解为两个参数

$$\mathbf{s} \equiv (\mathbf{n}, \mathbf{i}).$$

这里 $\mathbf{n}$ 为超原胞标号, $\mathbf{i}$ 为超原胞内格点的标号. 而每个与格点有关的量都可以表示成 $l \times l$ 阶矩阵, 例如对应于几率 $P(\mathbf{s}, t | \mathbf{s}_0)$ 的矩阵 $\hat{P}^{(\mathbf{n})}(t)$ 的矩阵元为

$$P_{ij}^{(\mathbf{n})}(t) \equiv P(\mathbf{s}, t | \mathbf{s}_0), \quad (3)$$

其中 $\mathbf{s} = (\mathbf{n}, \mathbf{j})$, $\mathbf{s}_0 = (0, \mathbf{i})$. 类似地, $\hat{\phi}(t)$ 和 $\hat{p}^{(\mathbf{n})}$ 的矩阵元亦可由上节的模型中方便地求出.

定义一个辅助量 $\hat{R}^{(\mathbf{n})}(l, t)$, 使矩阵元 $\hat{R}_{ij}^{(\mathbf{n})}(l, t)\Delta t$ 是 $t = 0$ 时处在 $(0, \mathbf{i})$ 点的载流子经过 l 次跳跃在 $t-t + \Delta t$ 的时间内正好到达 $(\mathbf{n}, \mathbf{j})$ 点的几率. $\hat{R}^{(\mathbf{n})}(l, t)$ 应满足如下递推关系:

$$\hat{R}^{(\mathbf{n})}(l+1, t) = \sum_{\mathbf{n}'} \int_0^t d\tau \hat{R}^{(\mathbf{n})}(l, \tau) \hat{\phi}(t-\tau) \hat{p}^{(\mathbf{n}-\mathbf{n}')}. \quad (4)$$

再令

$$\hat{R}^{(n)}(t) \equiv \sum_{l=0}^{\infty} \hat{R}^{(n)}(l, t). \quad (5)$$

由(4)式得

$$\hat{R}^{(n)}(t) - \sum_{n'} \int_0^t d\tau \hat{R}^{(n')}(\tau) \hat{\phi}(t - \tau) \hat{\rho}^{(n-n')} = \delta_{n,0} \delta(t - 0^+) \hat{I}. \quad (6)$$

其中 $\hat{I}$ 为单位矩阵. 对各量作时间 Laplace 变换

$$\hat{O}(u) = \int_0^{\infty} dt \exp(-ut) \hat{O}(t). \quad (7)$$

这里 $\hat{O}$ 可以是 $\hat{R}$ 或 $\hat{\phi}$, 可得

$$\hat{R}^{(n)}(u) - \sum_{n'} \hat{R}^{(n')}(u) \hat{\phi}(u) \hat{\rho}^{(n-n')} = \delta_{n,0} \hat{I} e^{-0^+ u}. \quad (8)$$

再对各量作超晶格的 Fourier 变换

$$\hat{O}_{ij}(u, \mathbf{k}) = \sum_n \hat{O}_{ij}^{(n)}(u) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{n} + \mathbf{j} - \mathbf{i})}. \quad (9)$$

这里 $\hat{O}$ 可以是 $\hat{R}$ 或 $\hat{\rho}$, 由于 $\hat{\phi}(u)$ 只有对角元素, 因此其 Fourier 变换就是它本身. (8) 式可化成

$$\hat{R}(u, \mathbf{k})(\hat{I} - \hat{\phi}(u)\hat{\rho}(\mathbf{k})) = \hat{I} e^{-0^+ u}. \quad (10)$$

这是一个关于 $\hat{R}(u, \mathbf{k})$ 的 $l \times l$ 阶矩阵方程. 令 $\hat{\phi}(u, \mathbf{k}) \equiv \hat{\phi}(u)\hat{\rho}(\mathbf{k})$, 则由(1), (2), (9) 式, 对于简单立方格子, 界面垂直于 (001) 方向, $\hat{\phi}(u, \mathbf{k})$ 的不为零的矩阵元可由下列各式表达:

$$\begin{aligned} \phi_{ii(i=2a(b), 3a(b), \dots, l_a(b)-1)} &= \phi_{a(b)}(u)(\cos k_1 a + \cos k_2 a)/3 \equiv W_{a(b)}; \\ \phi_{i, i+1(i=1a(b), 2a(b), \dots, l_a(b)-1)} &= \phi_{a(b)}(u) e^{ik_3 a}/6 \equiv T_{a(b)} e^{ik_3 a}; \\ \phi_{i, i-1(i=2a(b), 3a(b), \dots, l_a(b))} &= T_{a(b)} e^{-ik_3 a}; \\ \phi_{l_a(b), 1b(a)} &= \phi_{a(b)}(u)(1 - \eta_{a(b)}) e^{ik_3 a}/6 \equiv t_{a(b)} e^{ik_3 a}; \\ \phi_{1a(b), l_b(a)} &= t_{a(b)} e^{-ik_3 a}; \\ \phi_{l_a(b), 1a(b)} &= \phi_{l_a(b), l_a(b)} = W_{a(b)} + \eta_{a(b)} \phi_{a(b)}(u) \cdot (\cos k_1 a + \cos k_2 a)/12 \\ &\equiv W_{a(b)} + U_{a(b)}. \end{aligned} \quad (11)$$

上式中 a 为简单立方的晶格常数, 而 $W_{a(b)}$, $T_{a(b)}$, $t_{a(b)}$ 则为书写方便所定义的量, k_1, k_2 为平行于界面的 Bloch 波矢, k_3 为垂直于界面的 Bloch 波矢.

从(10)及(11)式可以看出, 求解 $\hat{R}(u, \mathbf{k})$ 的方程与文献[11]中在紧束缚近似下求解超晶格的单电子格林函数的方程十分类似, 因此亦可采用类似的表象变换求出其严格的解析解, 详细步骤不再列出, 可参看文献[11], 现把所得结果列下:

$$R_{mn}(u, \mathbf{k}) = F_{mn}/D. \quad (12)$$

对 $l_a \geq m \geq 1_a$, $l_a \geq n \geq 1_a$,

$$\begin{aligned} F_{mn} &= e^{ik_3 a(n-m)} T_a^{-1} \{ t_a t_b (T_a C_1 - 2U_a C_2) [T_b B_b(l_b) - U_b B_b(l_b - 1)] \\ &\quad + t_a t_b T_a T_b B_a(|m - n|) e^{i \operatorname{sgn}(m-n) k_3 a} - t_a^2 t_b^2 B_b(l_b - 1) C_2 \\ &\quad - \Delta_{Fb} (T_a^2 C_3 - T_a U_a C_1 + U_a^2 C_2) \}, \end{aligned} \quad (13)$$

式中

$$\begin{aligned}
 B_{a(b)}(j) &= (A_{a(b)}^j - A_{a(b)}^{-j}) / (A_{a(b)} - A_{a(b)}^{-1}), \\
 A_{a(b)} &= [1 - W_{a(b)} - \sqrt{(1 - W_{a(b)})^2 - 4T_{a(b)}^2}] / 2T_{a(b)}, \\
 C_1 &= \begin{cases} -B_a(n-1)B_a(l_a-m+1) - B_a(n)B_a(l_a-m) & m > n; \\ -B_a(m-1)B_a(l_a-n+1) - B_a(m)B_a(l_a-n) & n > m, \end{cases} \\
 C_2 &= \begin{cases} B_a(n-1)B_a(l_a-m) & m > n; \\ B_a(m-1)B_a(l_a-n) & n > m, \end{cases} \\
 C_3 &= \begin{cases} -B_a(n)B_a(l_a+1-m) & m > n; \\ -B_a(m)B_a(l_a+1-n) & n > m, \end{cases} \\
 \Delta_{Fa(b)} &= T_{a(b)}^2 B_{a(b)}(l_{a(b)}+1) - 2T_{a(b)} U_{a(b)} B_{a(b)}(l_{a(b)}) \\
 &\quad + U_{a(b)}^2 B_{a(b)}(l_{a(b)}-1), \\
 \lambda &= (l_a + l_b)a.
 \end{aligned}$$

将(13)式中的下标 a 和 b 互换, 就得到在 $l_b \geq m \geq 1_b$, $l_b \geq n \geq 1_b$ 时的 F_{mn} 的表达式.

对 $l_a \geq m \geq 1_a$, $l_b \geq n \geq 1_b$,

$$\begin{aligned}
 F_{mn} &= t_a e^{ik_3 a(n+l_a-m)} \{ [T_a B_a(m) - U_a B_a(m-1)] [T_b B_b(l_b-n+1) \\
 &\quad - U_b B_b(l_b-n)] + e^{-ik_3 \lambda} [T_a B_a(l_a-m+1) \\
 &\quad - U_a B_a(l_a-m)] [T_b B_b(n) - U_b B_b(n-1)] \\
 &\quad - t_a t_b [B_a(m-1)B_b(l_b-n) + e^{-ik_3 \lambda} B_a(l_a-m)B_b(n-1)] \}. \quad (14)
 \end{aligned}$$

将上式中的下标 a 和 b 互换, 就得到在 $l_b \geq m \geq 1_b$, $l_a \geq n \geq 1_a$ 时的 F_{mn} 的表达式.

(12) 式中的分母

$$\begin{aligned}
 D &= \Delta_{Fa} \Delta_{Fb} - t_a t_b [T_a B_a(l_a) - U_a B_a(l_a-1)] \\
 &\quad \cdot [T_b B_b(l_b) - U_b B_b(l_b-1)] + t_a^2 t_b^2 B_a(l_a-1) B_b(l_b-1) \\
 &\quad - 2t_a t_b T_a T_b \cos(k_3 \lambda). \quad (15)
 \end{aligned}$$

根据前面对矩阵 $\hat{P}^{(n)}(t)$ 和 $\hat{R}^{(n)}(t)$ 所做的定义, 它们应满足如下关系:

$$\hat{P}^{(n)}(t) = \int_0^t \hat{R}^{(n)}(\tau) \left[\hat{I} - \int_0^{t-\tau} \hat{\phi}(\tau') d\tau' \right] d\tau. \quad (16)$$

对上式作 Fourier 变换和 Laplace 变换, 可得

$$\hat{P}(u, \mathbf{k}) = \hat{R}(u, \mathbf{k}) [\hat{I} - \hat{\phi}(u)] / u. \quad (17)$$

至此, 我们已完全求出了随机行走粒子分布几率的对时间 Laplace 变换和对空间的 Fourier 变换的解析表达式, 下面我们将以此为基础对非晶态半导体超晶格中的载流子的随机输运过程作理论上的探讨.

四、超晶格中 Fick 定律的推广形式

从前面的讨论可以看出, 超晶格中同一超原胞内的不同格点对于载流子的扩散过程所起的作用是不等价的. 实际上, 它们是分属于不同的统计系综. 因此, 尽管进行系综平

均(例如对某一包含多个超原胞的宏观“微小”区域做结构平均),这种不等价性仍不能消除.因此有必要对描述宏观扩散过程的 Fick 定律的表述形式做必要的修正.

假设每个超原胞包含 l 个格点,而且分属于 l 个不同的统计系综,那末对某一个宏观的“点” $\mathbf{r}$ (从微观的角度看,这个“点”应该大到包含许多个超原胞)在时刻 t 的载流子浓度应由 l 个独立的量来表示,可写成行向量

$$f(\mathbf{r}, t) \equiv (f_1(\mathbf{r}, t), f_2(\mathbf{r}, t), \dots, f_l(\mathbf{r}, t)). \quad (18)$$

这样,可将 Fick 定律推广为

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 f(\mathbf{r}, t)}{\partial x_i \partial x_j} \hat{D}^{ij}. \quad (19)$$

这里 i, j 取 1, 2, 3, 对应于空间的三个方向,等式右边对重复的 i, j 指标求和, $\hat{D}^{ij}$ 为一个 $l \times l$ 阶矩阵,它对应于推广的扩散系数.如果暂不考虑载流子的产生消灭过程,那末 $f(\mathbf{r}, t)$ 可由上两节所定义的几率矩阵 $\hat{P}^{(r)}(t)$ 所决定,

$$f(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{r}_0} f(\mathbf{r}_0, t_0) \hat{P}^{(r-r_0)}(t - t_0). \quad (20)$$

以此式代入(19)式,可得到几率 $\hat{P}$ 本身满足的扩散方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{P}^{(r)}(t) = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \hat{P}^{(r)}(t) \hat{D}^{ij}, \quad (21)$$

如果仅考虑具有立方对称的点阵,则当 $i \neq j$ 时 $\hat{D}^{ij} = 0$. 设 $\hat{P}$ 的初始条件为

$$\hat{P}^{(r)}(t = 0) = \hat{I} \delta(\mathbf{r}), \quad (22)$$

则可写出方程(21)的解为

$$\hat{P}^{(r)}(t) = \prod_{i=1}^3 \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} (\hat{D}^{ii})^{-1/2} \exp \left\{ \frac{-x_i^2}{4t} (\hat{D}^{ii})^{-1} \right\}. \quad (23)$$

上式中有关矩阵的函数应理解为其级数展开式,对同一个 i , 参加运算的矩阵是同一个,因此其顺序是不重要的.

由(23)式很容易得到如下关系:

$$\hat{D}^{ii} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \sum_r \{x_i^2 \hat{P}^{(r)}(t)\} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle [x_i(t)]^2 \rangle. \quad (24)$$

上式中平均值 $\langle \dots \rangle$ 的定义为

$$\langle F \rangle = \sum_r \{F \hat{P}^{(r)}(t)\}. \quad (25)$$

这些平均值也都是矩阵.

对于非晶态半导体超晶格,扩散过程的记忆效应是重要的,如此,可将 Fick 定律进一步推广为^[12]

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \int_0^t dt' \frac{\partial^2 f(\mathbf{r}, t')}{\partial x_i \partial x_j} \hat{\phi}^{ij}(t - t'). \quad (26)$$

这时的扩散系数应是时间的函数

$$\hat{D}^{ii}(t) = \int_0^t dt' \hat{\phi}^{ii}(t') = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle [x_i(t) - x_i(0)]^2 \rangle. \quad (27)$$

根据空间 Fourier 变换的定义(9)式及平均值的定义(25)式,容易推得

$$\hat{D}^{ii}(t) = -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial^2}{\partial k_i^2} \hat{P}(k, t) \right]_{k=0}. \quad (28)$$

对 $\hat{D}$ 作时间的 Fourier-Laplace 变换以转换到频率空间,

$$\hat{D}^{ii}(\omega) = \int_0^\infty e^{-i\omega t} \hat{D}^{ii}(t) dt. \quad (29)$$

对比 (7) 式,并用到 (17) 及 (28) 式,有

$$\hat{D}^{ii}(\omega) = -\frac{i\omega}{2} \left[\frac{\partial^2 \hat{R}(k, i\omega)}{\partial k_i^2} \right]_{k=0} \cdot [\hat{I} - \hat{\phi}(i\omega)], \quad (30)$$

其中 $\left[\frac{\partial^2 \hat{R}(k, i\omega)}{\partial k_i^2} \right]_{k=0}$ 的表达式可由 (12), (13), (14) 式方便地求得.

根据 Einstein 关系,载流子的迁移率

$$\bar{\mu}^{ii}(\omega) = \hat{D}^{ii}(\omega) / k_B T. \quad (31)$$

如果在某一定态下载流子的浓度为

$$f_0 = (f_{01}, f_{02}, \dots, f_{0l}),$$

则载流子的平均迁移率可表示为

$$\bar{\mu}^{ii}(\omega) = (l f_0 k_B T)^{-1} \sum_{m,n} f_{0m} [\hat{D}^{ii}(\omega)]_{mn}. \quad (32)$$

其中平均载流子浓度为

$$\bar{f}_0 = l^{-1} \sum_m f_{0m}.$$

五、长时尾行为和尺寸效应

前面已经说到,CTRW 模型在物理上实际是以滞留时间分布函数 $\phi(t)$ 来模拟非晶态半导体中由于格点距离、势垒等的不一致所引起的载流子跳跃几率的无规涨落,因此 $\phi(t)$ 所取的形式应能恰如其分地反映出非晶态物质的结构无序的物理形态. 从以前的大量计算实践来看, $\phi(t)$ 的形式大体有以下两种类型:

1) 高斯型分布函数,如

$$\phi = b e^{-bt}, \quad (33)$$

其 Laplace 变换式为

$$\phi(u) = b/(u + b). \quad (34)$$

从统计物理的角度来看,如果忽略载流子运动过程中各次跳跃之间的统计关联,高斯型分布似乎是中心极限定理的自然推论. 这种分布函数随时间作迅速的指数衰减,没有“长时尾”行为. 但有相当一部分非晶态半导体,其载流子运动的速度自关联函数有明显的长时尾,因此往往需要用下面的非高斯型分布来描述.

2) 非高斯型的分布函数. 在已有的文献中这一类分布有多种多样具体的形式,但其共同特点是有“长时尾”, $t \rightarrow \infty$ 时有如下渐近行为:

$$\phi(t) \sim [At^{1+\alpha} T(1-\alpha)]^{-1} \quad 0 < \alpha < 1. \quad (35)$$

从物理角度来看,这种分布函数的长时尾行为是来源于载流子运动的非马尔可夫行为.

这种形式的分布函数在非晶态物质的载流子动力学的计算中获得很大的成功, 得到广泛的应用.

作为这种类型的分布函数的一个例子, 我们取

$$\phi_n(t) = c_n b^2 [\exp(b^2 t)] i^n \operatorname{erfc}(bt^{1/2}). \quad (36)$$

这里的 $i^n \operatorname{erfc}$ 为误差函数的 n 阶重复积分. 尤其是当 $n = 2$ 时, 其长时渐近行为

$$\phi_2(t) \sim At^{-3/2}, \quad (37)$$

它的 Laplace 变换具有很简单的形式

$$\phi_2(u) = (1 + u^{1/2}/b)^{-2}. \quad (38)$$

对于由非晶态半导体组成的超晶格, 由于两种薄膜功函数不一致引起的电荷转移, 使得界面附近产生内电场, 引起两侧载流子跳跃几率的不一致, 这种尺寸效应必然会在宏观的输运行为上表现出来.

首先我们看一下基于高斯型的时间分布函数所计算出来的非晶态半导体超晶格的随机输运性质. 图 1 和图 2 分别给出了平均迁移率随频率和随调制周期变化的关系曲线. 参数值已在图中给出, 这里载流子密度 f_a 和 f_b 分别对应处于定态下的 a 膜和 b 膜上的载流子密度. 从图中可看出这时的随机输运性质有如下的物理特点:

(1) 各向异性. 平行于界面与垂直于界面的迁移率是不相同的, 这种各向异性的程

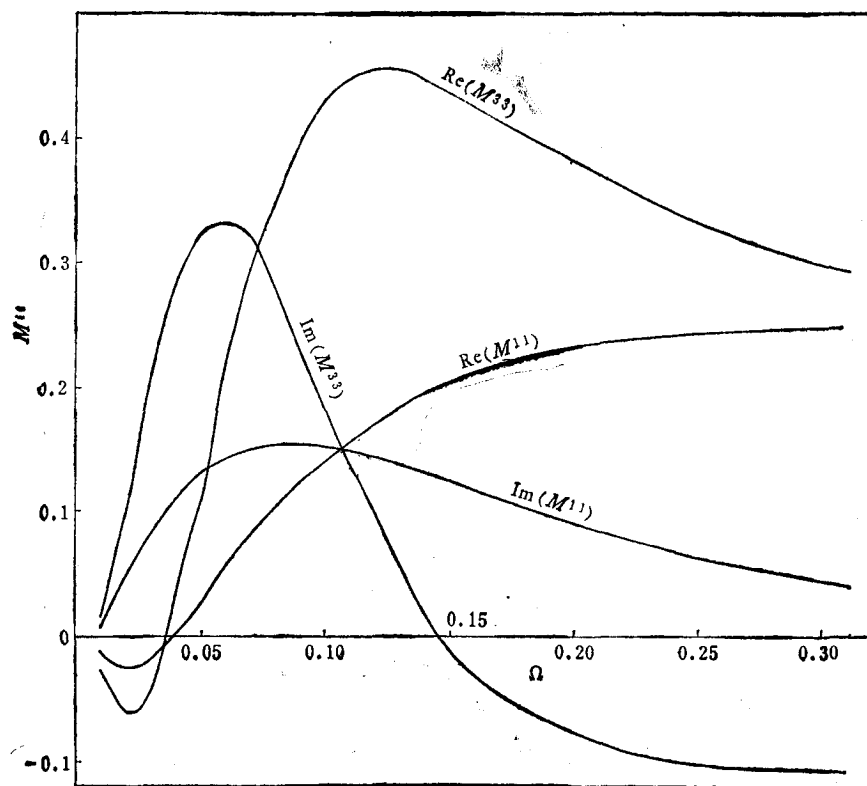


图 1 对应于高斯型分布的非晶态半导体超晶格的载流子平均迁移率随频率变化的关系曲线
 $l_a = l_b = 5$, $\eta_a = 0.4$, $\eta_b = -0.4$, $b_b/b_a = 2$, $f_b/f_a = 0.5$, $\Omega \equiv \omega/b_a$, $M^{ii} \equiv (j_a k_B T) \cdot \bar{\mu}^{ii}$

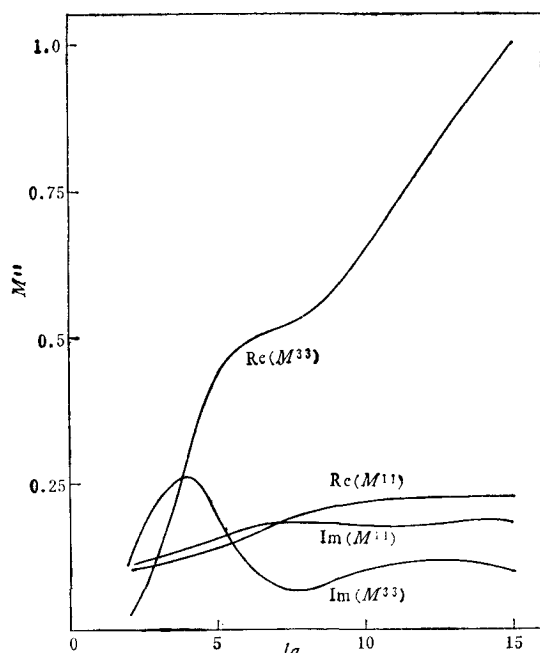


图2 对应于高斯型分布的非晶态半导体超晶格的载流子平均迁移率随调制周期变化的关系曲线

$Q = 0.1, l_a = l_b$, 其余参数同图1

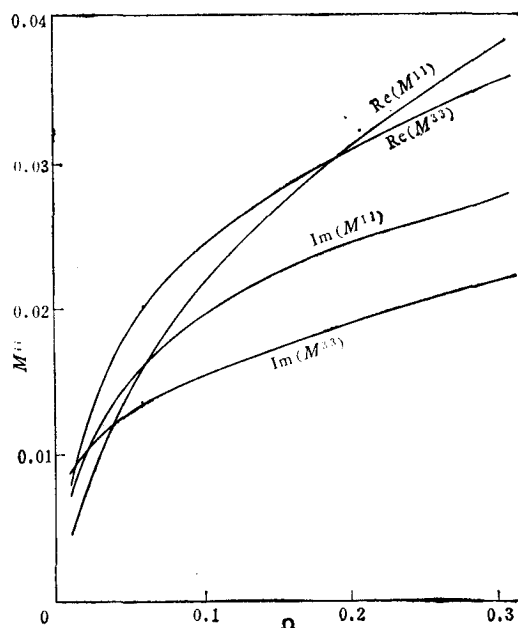


图3 对应于非高斯型分布的非晶态半导体超晶格的载流子平均迁移率随频率变化的关系曲线

$l_a = l_b = 4, \eta_a = 0.4, \eta_b = -0.4, b_b/b_a = 2, f_b/f_a = 0.5, Q = \omega/b_a^2, M^{ii} = (\bar{f}_e k_B T) \cdot \bar{\mu}^{ii}$

度亦随频率、调制周期等因素变化而改变。

(2) 从图中可以看出,无论是迁移率的实部或虚部,随频率的变化都不是单调的,有较明显的振荡行为,从物理上说,这种振荡行为是由界面的尺寸效应引起的。从图2的关系曲线亦可看出这种尺寸效应的影响。

(3) 从图1可以看出在低频端,迁移率的实部变负,由于电导率 $\sigma \propto \mu$, 因此这实际上对应于某种负阻效应。这类类似于一般多层半导体器件中的负阻效应,也是由界面及非均匀的载流子密度分布造成的。

然后,我们采用(38)式所示的非高斯型时间分布函数,进行类似的计算,将所得的结果在图3和图4中示出。将这些曲线与图1及图2中的对应的结果进行比较,可以看到,长时尾行为明显地抑制了超晶格中的尺寸效应,在图1及图2中看到的振荡行为与负阻效应都不再

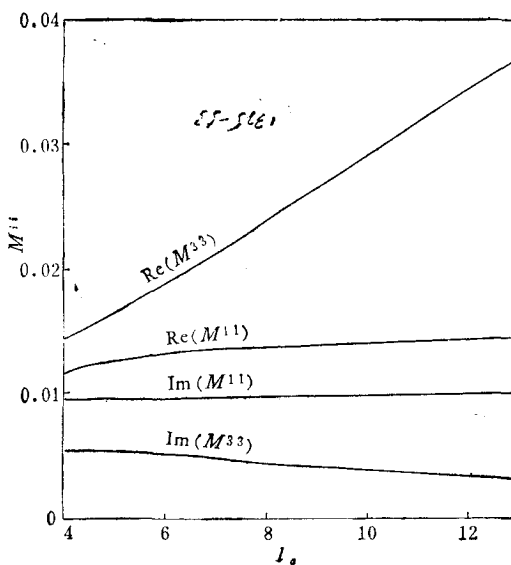


图4 对应于非高斯型分布的非晶态半导体超晶格的载流子平均迁移率随调制周期变化的关系曲线

$Q = 0.1, l_a = l_b$, 其余参数同图3

出现,而代之以单调的变化.应该说,高斯型分布及非高斯型分布的载流子输运性质的这种明显的差别,来源于前者仅仅反映了载流子迁移的马尔可夫过程,而后者却能体现出非马尔可夫过程的结果.在马尔可夫过程中,每个载流子只能“感受”到它当时的状态,而“忘记”了它先前运动的历史情况,这样宏观的输运性质就会对超晶格的非均匀性及界面的尺寸效应比较“敏感”.反之,在非马尔可夫过程中,迁移着的载流子是一直“记着”它先前的运动历史的,既然载流子在运动中有可能经历非均匀介质中所有的不等价的部分,那末总的“历史”的效果有可能“抹平”超晶格中的尺寸效应,这样我们所看到的就是与高斯型分布很不相同的宏观输运行为.

参 考 文 献

- [1] B. Abeles and T. Tiedje, *Phys. Rev. Lett.*, **51** (1983), 2003.
- [2] J. Kakalios, H. Fritzsche and N. Ibaraki, *J. Non-Cryst. Solids*, **66** (1984), 339.
- [3] T. Tiedje, B. Abeles, P. D. Persans, B. G. Brooks and G. D. Cody, *J. Non-Cryst. Solids*, **66** (1984), 345.
- [4] N. F. Mott, *Phil. Mag.*, **17**(1968), 1259.
- [5] H. Scher and M. Lax, *Phys. Rev.* B7(1973), 4491; 4502.
- [6] H. Scher and E. W. Montroll, *Phys. Rev.* B12 (1975), 2455.
- [7] A. Blumen, J. Klafter and R. Silbey, *J. Chem. Phys.*, **72**(1980), 5320.
- [8] J. Klafter and R. Silbey, *Phys. Rev. Lett.*, **44** (1980), 55.
- [9] A. Blumen *et al.*, *Phys. Rev.* B27 (1983), 3429.
- [10] A. Blumen, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 1301.
- [11] 熊诗杰、蔡建华, *物理学报*, **31**(1982), 474.
- [12] W. E. Alley and B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **43** (1979), 653.

STOCHASTIC TRANSPORT PROCESSES OF CARRIERS IN AMORPHOUS SEMICONDUCTOR SUPERLATTICES

XIONG SHI-JIE

(Institute of Solid State Physics, Nanjing University)

ABSTRACT

In order to investigate the transport processes of carriers in the amorphous semiconductor superlattices, we have proposed and rigorously solved the continuous-time random walk model in the form of superlattice for the migration of carriers. Being based upon this, the generalized form of the Fick's law in these materials has been obtained, and the mobility of carriers, varying with the frequency and the modulation wavelength, has been calculated for the Gaussian and non-Gaussian time-distribution functions respectively. It has been shown that the long-time-tail behaviour (for the non-Gaussian distribution) may partly cancel the size-effect due to the structural modulation.