

具有调制分布复合中心的非晶半导体超晶格中载流子的弛豫过程

熊 诗 杰

(南京大学物理系, 固体物理研究所)

1986 年 3 月 21 日收到

提 要

本文提出一种具有调制分布的复合中心的连续时间无规行走(以下称 CTRW)模型,用以求解非晶半导体超晶格中载流子被复合的动力学过程。对不同类型的时间分布函数,我们得到了载流子的存活几率,从中可以分析周期型势阱和调制型掺杂等因素对这种材料的宏观输运性质的影响。

一、引 言

近年来非晶态半导体超晶格已引起研究工作者广泛的兴趣^[1-3]。这种由层状的非晶半导体交替叠合起来的超晶格材料较易制备,还具有一些特殊的光电性质。因此有必要从理论上研究这种材料中载流子的弛豫过程。对于描述非晶态物质中的载流子的扩散动力学,CTRW 模型是相当成功的^[4-9]。在早先的文献中^[10],我们提出了一种层状的 CTRW 模型,用以研究非晶半导体超晶格中载流子的随机输运过程,推导出这种物质中 Fick 定律的推广形式,并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。结果表明,长时尾行为(非高斯型分布)将部分地抵消由于结构调制引起的尺寸效应。

本文提出一种具有调制分布的复合中心的 CTRW 模型,用以处理非晶半导体超晶格中载流子的弛豫过程。实际上,对于半导体超晶格来说,一维的周期型势阱的存在及调制型的掺杂是影响它的宏观输运过程的两个重要因素^[11-14]。因此,在我们的模型中,一方面要考虑到周期势阱造成的界面对载流子运动过程的影响,另一方面要考虑到复合中心的非均匀的空间分布。在下节中,我们将对这种模型作细致的描述。以此为出发点,我们对不同类型的时间分布函数(高斯型的和非高斯型的),求解出从层状介质的不同原子平面出发的载流子的存活几率,从而可以从理论上分析周期势阱和调制掺杂对超晶格宏观性质的影响。

二、具有调制分布复合中心的层状 CTRW 模型

考虑三维的超晶格,它是由不同的层状介质沿 z 方向交替叠合而成。载流子在 z 方

向受到周期性势场的作用^[4], 我们把势阱层记作 A , 势垒层记作 B . 载流子的运动用 CTRW 模型来描述, 其停留时间分布函数^[5] $\phi_a(t)$ 和 $\phi_b(t)$ 反映了 A 层和 B 层内的无规性对载流子跳跃几率的影响. $\phi_{a(b)}(t)\Delta t$ 是指在 $t=0$ 时到达 $A(B)$ 层内的某一格点上的载流子在 $t \sim t + \Delta t$ 的时间内发生一次跳跃的几率. 在势阱和势垒的分界面上, 载流子向不同方向跳动的几率是不同的. 如果用 $p(i, j)$ 代表载流子从格点 i 出发经过一次跳跃到达格点 j 的几率, 那末, 在只考虑最近邻跳跃的情况下, $p(i, j)$ 应满足如下的归一化条件:

$$\sum_j p(i, j) = 1, \quad (1)$$

式中 j 对 i 的所有最近邻的格点求和. 考虑到周期势场的影响, 可将 $p(i, j)$ 写成

$$p(i, j) = \begin{cases} 1/Z_{A(B)}, & i, j \text{ 同属于 } A(B), \text{ 且不邻近界面;} \\ (1 - \eta_{A(B)})/Z_{A(B)}, & i \in A(B), j \in B(A); \\ [z_{A(B)}(2 - \eta_{A(B)}) + \eta_{A(B)}Z_{A(B)}]/(2Z_{A(B)}Z_{A(B)}), & i, j \text{ 同属于 } A(B), \text{ 且邻近界面.} \end{cases} \quad (2)$$

式中 $\eta_{A(B)}$ 用来描述界面上的载流子向不同方向跳跃的几率的不同, $Z_{A(B)}$ 是 $A(B)$ 层内部的配位数, 而 $Z_{A(B)}$ 是 $A(B)$ 层的平行于界面的原子平面上的二维配位数.

由于陷阱态的存在, 载流子在运动过程中可能被复合中心所俘获^[7]

$$C + R \rightarrow F, \quad (3)$$

式中 C 代表载流子, R 代表静止的复合中心, F 代表二者的复合体. 一般, 复合中心在晶格中随机分布, 但对于调制掺杂的半导体超晶格来说, 复合中心的空间分布是不均匀的, 某一格点是复合中心的几率依该格点所处的原子平面的不同而不同. 我们把这个几率记作 $\rho(m)$, m 是原子平面的标号. 如果调制掺杂的周期包含 l 个原子平面, 那末有 l 个不同的几率 $\rho(m)$, $m = 1, 2, \dots, l$, 以反映不同的掺杂浓度. 本文中我们把载流子的复合过程简化为一次途径问题^[7], 即假设从某一格点生成开始作无规行走的载流子在遇到第一个复合中心时即被复合. 令 $Q_{mn}(t)$ 表示在 $t=0$ 时从原子平面 m 上的某一格点出发的载流子在时间 t 内经过复合中心的浓度是 $\rho(n)$ 的原子平面的不同格点的数目, 那末它的存活几率就是

$$\phi_m(t) = \langle (1 - \rho(m))^{Q_{mm}(t)-1} \cdot \prod_{n \neq m} (1 - \rho(n))^{Q_{mn}(t)} \rangle, \quad (4)$$

这里 $\langle \dots \rangle$ 代表对所有可能的路径取平均. 在下节中我们将对上式作累积展开. 在掺杂浓度很低时, $\rho(n) \ll 1$, 上式可近似写成

$$\phi_m(t) = (1 - \rho(m))^{S_{mm}(t)-1} \cdot \prod_{n \neq m} (1 - \rho(n))^{S_{mn}(t)}, \quad (5)$$

式中

$$S_{mn}(t) = \langle Q_{mn}(t) \rangle. \quad (6)$$

这样, 只要我们能计算出 $S_{mn}(t)$, 就可以解决我们所感兴趣的存活几率问题.

三、载流子存活几率的计算

类似于文献[15],我们的系统在统计平均的意义上具有超晶格的对称性,因此可以把它划分成许多等价的超原胞,每个超原胞内包含 $l = l_a + l_b$ 个格点,这里 l_a 与 l_b 分别是 A 层与 B 层所包含的原子平面数. 坐标 i 可分解成两个参数

$$i \equiv (s, m), \quad (7)$$

这里 s 是超原胞的标号, m 是超原胞内的格点标号, m 的取值范围是: $(1_a, 2_a, \dots, l_a, 1_b, 2_b, \dots, l_b)$, 下标 a, b 代表 A 层或 B 层. 每个与格点坐标有关的量都可表示成 $l \times l$ 阶矩阵, 其矩阵元 $[O]_{mn}$ 的指标 m, n 对应着超原胞内的不同格点. 例如, 上节提及的滞留时间分布函数及空间跳跃几率可分别用矩阵 $\hat{\phi}$ 及 $\hat{p}$ 来表达, 对应的矩阵元是

$$[\hat{\phi}(t)]_{mn} = \begin{cases} \phi_a(t)\delta_{mn}, & m, n \in A; \\ \phi_b(t)\delta_{mn}, & m, n \in B. \end{cases} \quad (8)$$

$$[\hat{p}(s' - s)]_{mn} = p(i, j), \quad i \equiv (s, m), \quad j \equiv (s', n). \quad (9)$$

从(5),(6)式可看出, 为了求出 $\phi_m(t)$, 必须求出 $Q_{mn}(t)$ 的平均值, 它也可写成 $l \times l$ 阶的矩阵 $\hat{S}(t)$, 其矩阵元 $[\hat{S}(t)]_{mn}$ 就是(6)式的 $S_{mn}(t)$. 我们再定义一个 $l \times l$ 阶矩阵 $\hat{F}(s, t)$, 它的矩阵元 $[\hat{F}(s, t)]_{mn}dt$ 为 $t=0$ 时从格点 $(0, m)$ 出发在时间间隔 $t-t+dt$ 内正好第一次到达格点 (s, n) 的几率, 很明显

$$\hat{S}(t) = \sum_s \int_0^t d\tau \hat{F}(s, \tau). \quad (10)$$

在掺杂浓度不是很小时, 必须计算(4)式的累积展开式和相应的高阶矩 $\langle Q_{mn_1}(t) \rangle$, $\langle Q_{mn_1}(t)Q_{mn_2}(t)Q_{mn_3}(t) \rangle, \dots, \langle Q_{mn_1}(t)Q_{mn_2}(t) \cdots Q_{mn_i}(t) \rangle$, 这些量也都可用 $\hat{F}(s, t)$ 表示出, 例如

$$\begin{aligned} & \langle Q_{mn_1}(t)Q_{mn_2}(t) \cdots Q_{mn_i}(t) \rangle \\ &= \int_0^t d\tau \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{i-1}} [\hat{F}(s_1, \tau)]_{mn_1} [\hat{F}(s_2, \tau)]_{mn_2} \\ & \quad \times \cdots [\hat{F}(s_i, \tau)]_{mn_i}. \end{aligned} \quad (11)$$

再定义一个矩阵 $\hat{R}(s, t)$, 其矩阵元 $[\hat{R}(s, t)]_{mn}dt$ 为 $t=0$ 时从格点 $(0, m)$ 出发在时间间隔 $t-t+dt$ 内正好到达 (s, n) 点的几率, 于是, $\hat{R}$ 与 $\hat{F}$ 的关系是

$$\begin{aligned} [\hat{R}(s, t)]_{mn} &= \delta(t)\delta_{s,0}\delta_{mn} + \int_0^t d\tau [\hat{F}(s, \tau)]_{mn} \\ & \quad \times [\hat{R}(0, t-\tau)]_{nn}, \end{aligned} \quad (12)$$

对时间作 Laplace 变换,

$$[\hat{R}(s, u)]_{mn} = \delta_{s,0}\delta_{mn} + [\hat{F}(s, u)]_{mn}[\hat{R}(0, u)]_{nn}, \quad (13)$$

其中 $\hat{R}(s, u)$, $\hat{F}(s, u)$ 分别是 $\hat{R}(s, t)$, $\hat{F}(s, t)$ 的 Laplace 变换式

$$\hat{R}(s, u) = \int_0^\infty dt \hat{R}(s, t)e^{-ut}, \quad (14)$$

$$\hat{F}(s, u) = \int_0^\infty dt \hat{F}(s, t)e^{-ut}. \quad (15)$$

于是 $\hat{F}(\mathbf{s}, u)$ 可用 $\hat{R}(\mathbf{s}, u)$ 表出

$$[\hat{F}(\mathbf{s}, u)]_{mn} = \frac{[\hat{R}(\mathbf{s}, u)]_{mn} - \delta_{s,0}\delta_{mn}}{[\hat{R}(0, u)]_{su}}. \quad (16)$$

定义一个辅助量 $\hat{R}^{(L)}(\mathbf{s}, t)$, 使其矩阵元 $[\hat{R}^{(L)}(\mathbf{s}, t)]_{mn}dt$ 是在无复合中心的情况下, 于 $t=0$ 时从格点 $(0, m)$ 出发的载流子经过 L 次跳跃, 在时间间隔 $t-t+dt$ 内正好到达 $(\mathbf{s}, n)$ 格点的几率. $\hat{R}^{(L)}(\mathbf{s}, t)$ 应满足如下的递推关系:

$$\hat{R}^{(L+1)}(\mathbf{s}, t) = \sum_{\mathbf{s}'} \int_0^t d\tau \hat{R}^{(L)}(\mathbf{s}, \tau) \hat{\phi}(t-\tau) \hat{p}(\mathbf{s}-\mathbf{s}'). \quad (17)$$

由 $\hat{R}$ 及 $\hat{R}^{(L)}$ 的定义, 有

$$\hat{R}(\mathbf{s}, t) = \sum_{L=0}^{\infty} \hat{R}^{(L)}(\mathbf{s}, t), \quad (18)$$

将(17)式两边对 L 求和, 得到 $\hat{R}$ 所满足的积分方程

$$\begin{aligned} \hat{R}(\mathbf{s}, t) - \sum_{\mathbf{s}'} \int_0^t d\tau \hat{R}(\mathbf{s}', \tau) \hat{\phi}(t-\tau) \hat{p}(\mathbf{s}-\mathbf{s}') \\ = \delta_{s,0} \delta(t-0^+) \hat{I}, \end{aligned} \quad (19)$$

式中 $\hat{I}$ 是 $l \times l$ 阶单位矩阵. 对(19)式中的各量作时间的 Laplace 变换, 并对 $\hat{R}$ 及 $\hat{p}$ 作超晶格意义下的空间的 Fourier 变换

$$[\hat{R}(u, \mathbf{k})]_{mn} = \sum_{\mathbf{s}} [\hat{R}(u, \mathbf{s})]_{mn} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{s} + \mathbf{n} - \mathbf{m})}, \quad (20)$$

$$[\hat{p}(\mathbf{k})]_{mn} = \sum_{\mathbf{s}} [p(\mathbf{s})]_{mn} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{s} + \mathbf{n} - \mathbf{m})}, \quad (21)$$

则积分方程(19)可化成如下的矩阵代数方程式:

$$\hat{R}(u, \mathbf{k})(\hat{I} - \hat{\phi}(u)\hat{p}(\mathbf{k})) = \hat{I}e^{-0^+u}. \quad (22)$$

这个方程十分类似于在紧束缚近似下求解超晶格的电子格林函数的矩阵方程^[16], 因此可以方便地利用文献[16]中所提出的超晶格的格林函数技术来求解, 这里不再写出求解的详细步骤, 只把所得的结果列举如下:

$$[\hat{R}(u, \mathbf{k})]_{mn} = V_{mn}/D. \quad (23)$$

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

$$\begin{aligned} V_{mn} = & e^{ik_3 a(n-m)} T_a^{-1} \{ t_a t_b (T_a C_1 - 2U_a C_2) \\ & \times [T_b B_b(l_b) - U_b B_b(l_b - 1)] + t_a t_b T_a T_b B_a(|m-n|) \\ & \times e^{i \text{sign}(m-n) k_3 \lambda} - t_a^2 t_b^2 B_b(l_b - 1) C_1 \\ & - \Delta_{F_b} (T_a^2 C_3 - T_a U_a C_1 + U_a^2 C_2) \}, \end{aligned} \quad (24)$$

式中 a 是原子平面的间距, $\lambda = (l_a + l_b)a$, 且

$$B_{a(b)}(j) = (A_{a(b)}^j - A_{a(b)}^{-j}) / (A_{a(b)} - A_{a(b)}^{-1}), \quad (25)$$

$$A_{a(b)} = [1 - W_{a(b)} - \sqrt{(1 - W_{a(b)})^2 - 4T_{a(b)}^2}] / 2T_{a(b)}, \quad (26)$$

如果点阵是简立方, 界面平行于(001)方向, 则 W, T, t 等量可表示为

$$W_{a(b)} = \phi_{a(b)}(u)(\cos k_1 a + \cos k_2 a)/3, \quad (27)$$

$$T_{a(b)} = \phi_{a(b)}(u)/6, \quad (28)$$

$$t_{a(b)} = \phi_{a(b)}(u)(1 - \eta_{a(b)})/6, \quad (29)$$

$$U_{a(b)} = \eta_{a(b)} \phi_{a(b)}(u) (\cos k_1 a + \cos k_2 a) / 12, \quad (30)$$

而 C_1, C_2, C_3 及 Δ_F 等量为

$$C_1 = \begin{cases} -B_a(n-1)B_a(l_a-m+1) - B_a(n)B_a(l_a-m), & m \geq n; \\ -B_a(m-1)B_a(l_a-n+1) - B_a(m)B_a(l_a-n), & n > m, \end{cases} \quad (31)$$

$$C_2 = \begin{cases} -B_a(n-1)B_a(l_a-m), & m \geq u; \\ -B_a(m-1)B_a(l_a-n), & n > m, \end{cases} \quad (32)$$

$$C_3 = \begin{cases} -B_a(n)B_a(l_a+1-m), & m \geq n; \\ -B_a(m)B_a(l_a+1-n), & n > m, \end{cases} \quad (33)$$

$$\Delta_{F_{a(b)}} = T_{a(b)}^2 B_{a(b)}(l_{a(b)} + 1) - 2T_{a(b)} U_{a(b)} B_{a(b)}(l_{a(b)}) + U_{a(b)}^2 B_{a(b)}(l_{a(b)} - 1). \quad (34)$$

对 $l_b \geq m \geq 1_b, l_b \geq n \geq 1_b$, 只要将 (24) 式及 (31)–(33) 式中的下标 a 和 b 互换, 就得到对应的 V_{mn} 的表达式.

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

$$\begin{aligned} V_{m,n} = & t_a e^{ik_3 a(n+l_a-m)} \{ [T_a B_a(m) - U_a B_a(m-1)] \\ & \times [T_b B_b(l_b-n+1) - U_b B_b(l_b-n)] + e^{-ik_3 \lambda} \\ & \times [T_a B_a(l_a-m+1) - U_a B_a(l_a-m)] \\ & \times [T_b B_b(n) - U_b B_b(n-1)] - t_a t_b \\ & \times [B_a(m-1)B_b(l_b-n) + e^{-ik_3 \lambda} B_a(l_a-m)B_b(n-1)] \}. \end{aligned} \quad (35)$$

对于 $l_b \geq m \geq 1_b, l_a \geq n \geq 1_a$, 只要将 (35) 式中的下标 a, b 互换, 就得到对应的 V_{mn} 的表达式.

(23) 式中的分母为

$$\begin{aligned} D = & f - g \cos(k_3 \lambda), \\ f = & \Delta_{F_a} \Delta_{F_b} - t_a t_b [T_a B_a(l_a) - U_a B_a(l_a-1)] \\ & \times [T_b B_b(l_b) - U_b B_b(l_b-1)] + t_a^2 t_b^2 B_a(l_a-1)B_b(l_b-1), \\ g = & 2t_a t_b T_a T_b. \end{aligned} \quad (36)$$

在得到 $\hat{R}$ 的表达式后, 代入 (16) 式, 即可得到 $\hat{F}$ 的表达式. 将 (16) 式代入 (10) 及 (11) 式, 并考虑到 (14), (15) 及 (20) 式, 可得到 $\hat{F}$ 的关于 $\hat{Q}$ 的各阶矩的 Laplace 变换式, 其中一阶矩为

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[(\hat{S}(t))_{mn}] & \equiv [\hat{S}(u)]_{mn} \\ & = \{[\hat{R}(u, \mathbf{k} = 0)]_{mn} - \delta_{mn}\} / (J_n u), \end{aligned} \quad (37)$$

式中

$$J_n = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \iiint dk_1 dk_2 dk_3 [\hat{R}(u, \mathbf{k})]_{nn}.$$

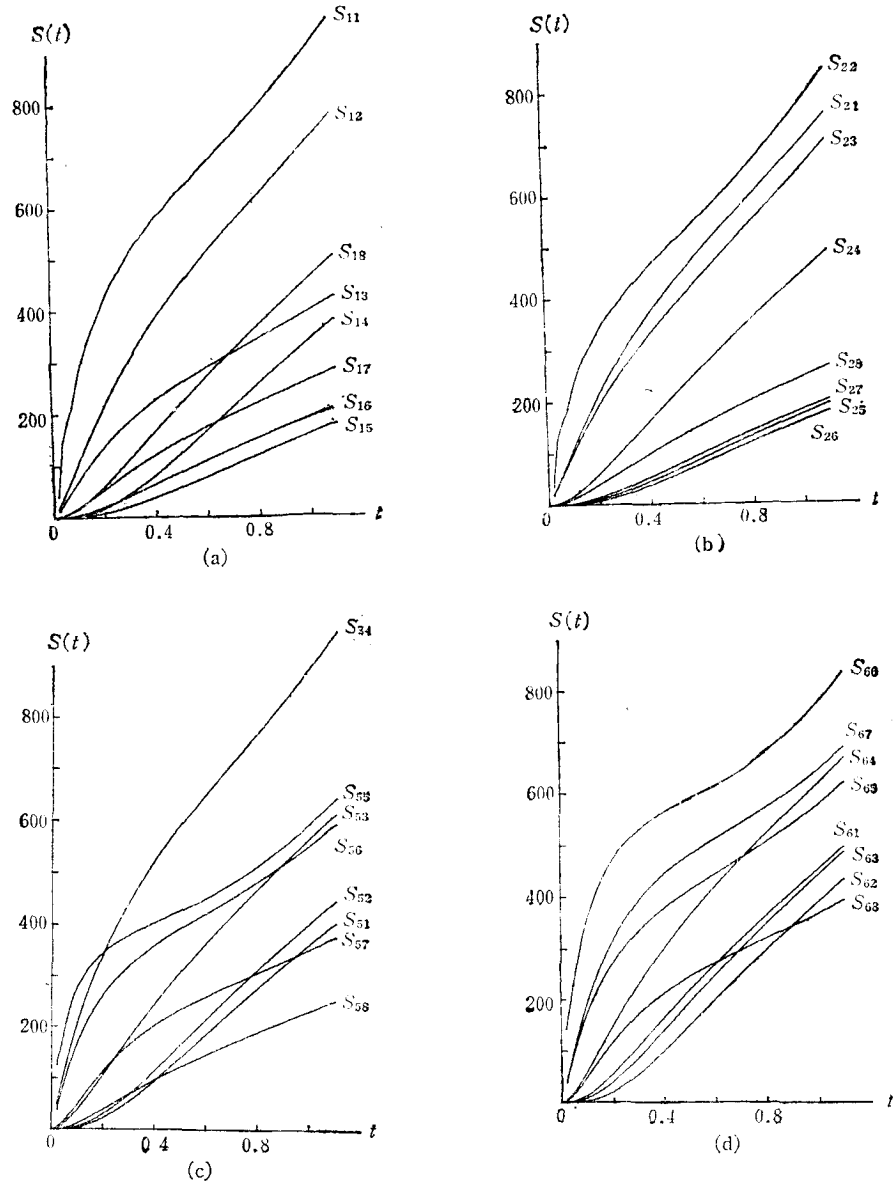
这里的积分对第一布里渊区进行, Ω 是超原胞的体积. 如将 $\hat{R}$ 的表达式 (23), (36) 式代入上式, 则对 k_3 的积分可方便地求得, J_n 化为二重积分

$$J_n = \frac{\Omega_{\parallel}}{(2\pi)^2} \iint dk_1 dk_2 \frac{V_{nn} \cdot \text{sign}(f)}{\sqrt{f^2 - g^2}}, \quad (38)$$

这里的积分对原子平面上的二维布里渊区进行, 而 $\Omega_{\parallel}$ 是原子平面上的原胞面积.

第 j 阶矩的 Laplace 变换式是

$$\begin{aligned}
& \mathcal{L}[\langle Q_{mn_1}(t)Q_{mn_2}(t)\cdots Q_{mn_i}(t)\rangle] \\
&= \{[\hat{R}(u, \mathbf{k}=0)]_{mn_1} - \delta_{mn_1}\} \{[\hat{R}(u, \mathbf{k}=0)]_{mn_2} - \delta_{mn_2}\} \\
&\quad \times \cdots \{[\hat{R}(u, \mathbf{k}=0)]_{mn_i} - \delta_{mn_i}\} / (uJ_{n_1} \cdot J_{n_2} \cdots J_{n_i}).
\end{aligned} \quad (39)$$

图1 $[\hat{S}(t)]_{m,n}-t$ 曲线

滞留时间分布函数是高斯型, $\phi_a(t) = b_a \times e^{-b_a t}$, $\phi_b(t) = b_b e^{-b_b t}$. 势阱层及势垒层所包含的原子平面数分别是: $l_a = 4$, $l_b = 4$. 取 $b_a = 20$, $b_b = 40$, 时间 t 的单位是相对于 b_a 及 b_b 的单位而定. 图中只画出 $m = 1, 2, 5, 6$ 时的 $[\hat{S}(t)]_{m,n}$ 的曲线. 由对称性易知, 对于 $m = 3, 4, 7, 8$, 有 $[\hat{S}(t)]_{13-m, 13-n} = [\hat{S}(t)]_{m,n}$ 对于 $m \leq 4$ 及 $n \leq 4$ 成立; $[\hat{S}(t)]_{13-m, 13-n} = [\hat{S}(t)]_{m,n}$ 对于 $8 \geq m \geq 5$ 及 $8 \geq n \geq 5$ 成立; $[\hat{S}(t)]_{3-m, 13-n} = [\hat{S}(t)]_{m,n}$ 对于 $m \leq 4$ 及 $8 \geq n \geq 5$ 成立; 以及 $[\hat{S}(t)]_{13-m, 3-n} = [\hat{S}(t)]_{m,n}$ 对于 $8 \geq m \geq 5$ 及 $n \leq 4$ 成立.

周期势参数 $\eta_a = 0.4$, $\eta_b = -0.4$

由于各阶矩的 Laplace 变换式 (37)–(39) 式相当复杂, 难以直接求得它们的反 Laplace 变换的解析表达式, 我们将采用文献[17]所介绍的方法进行数值的反 Laplace 变换。

在具有复合中心的情况下, 我们可用(4)式求出从第 m 个原子平面出发的载流子的存活几率 $\phi_m(t)$ 。在复合中心的浓度很低时, 我们可采用近似表达式(5)进行计算, 如果复合中心的浓度不是很低, 则必须作如下的累积展开^[18]:

$$\phi_m(t) = e^{\Psi(t)} / (1 - \rho(m)), \quad (40)$$

这里

$$\Psi(t) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j!} \chi_c^{(j)}, \quad (41)$$

$\chi_c^{(j)}$ 是第 j 阶累积子, 写到第三阶的表达式

$$\chi_c^{(1)} = \sum_n \ln [1 - \rho(n)] S_{mn}(t), \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \chi_c^{(2)} = & \sum_{n_1, n_2} \ln [1 - \rho(n_1)] \ln [1 - \rho(n_2)] \\ & \times (\langle Q_{mn_1}(t) Q_{mn_2}(t) \rangle - S_{mn_1}(t) S_{mn_2}(t)), \end{aligned} \quad (43)$$

$$\chi_c^{(3)} = \sum_{n_1, n_2, n_3} \ln [1 - \rho(n_1)] \ln [1 - \rho(n_2)]$$

$$\begin{aligned} & - \rho(n_3)] \ln [1 - \rho(n_3)] \\ & \times \{ \langle Q_{mn_1}(t) Q_{mn_2}(t) Q_{mn_3}(t) \rangle \\ & - 3 \langle Q_{mn_1}(t) Q_{mn_2}(t) \rangle S_{mn_3}(t) \\ & + 2 S_{mn_1}(t) S_{mn_2}(t) S_{mn_3}(t) \}. \end{aligned} \quad (44)$$

四、数值计算的结果

根据上节所得到的公式, 我们对以下两种类型的时间分布函数进行了数值计算:

1. 高斯型的时间分布函数, 如

$$\psi_{a(b)}(t) = b_{a(b)} e^{-b_{a(b)} t}, \quad (45)$$

其 Laplace 变换式是

$$\phi_{a(b)}(u) = b_{a(b)} / (u + b_{a(b)}). \quad (46)$$

这种分布函数是在忽略了载流子运动过程中各次跳跃之间的统计关联后的自然结果。它是指数衰减型的, 没有“长时尾”。图 1 给出了在这种分布函数下, 从超晶格的不同原子平面出发的载流子在不同时间内访问各个不等价的原子平面的平均格点数。图 2 给出了在一定的调制型复合中心的分布下, 从不同原子平面出发的载流子的存活几率。

2. 非高斯型的时间分布函数, 这是具有长时尾行为的分布函数。它来源于非晶态物质中载流子运动的非马尔科夫行为^[4]。作为这种类型的分布函数的一个例子, 我们取

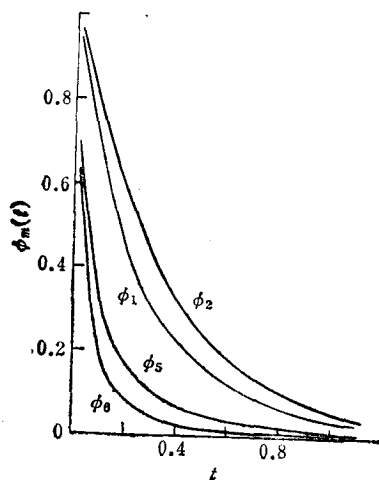
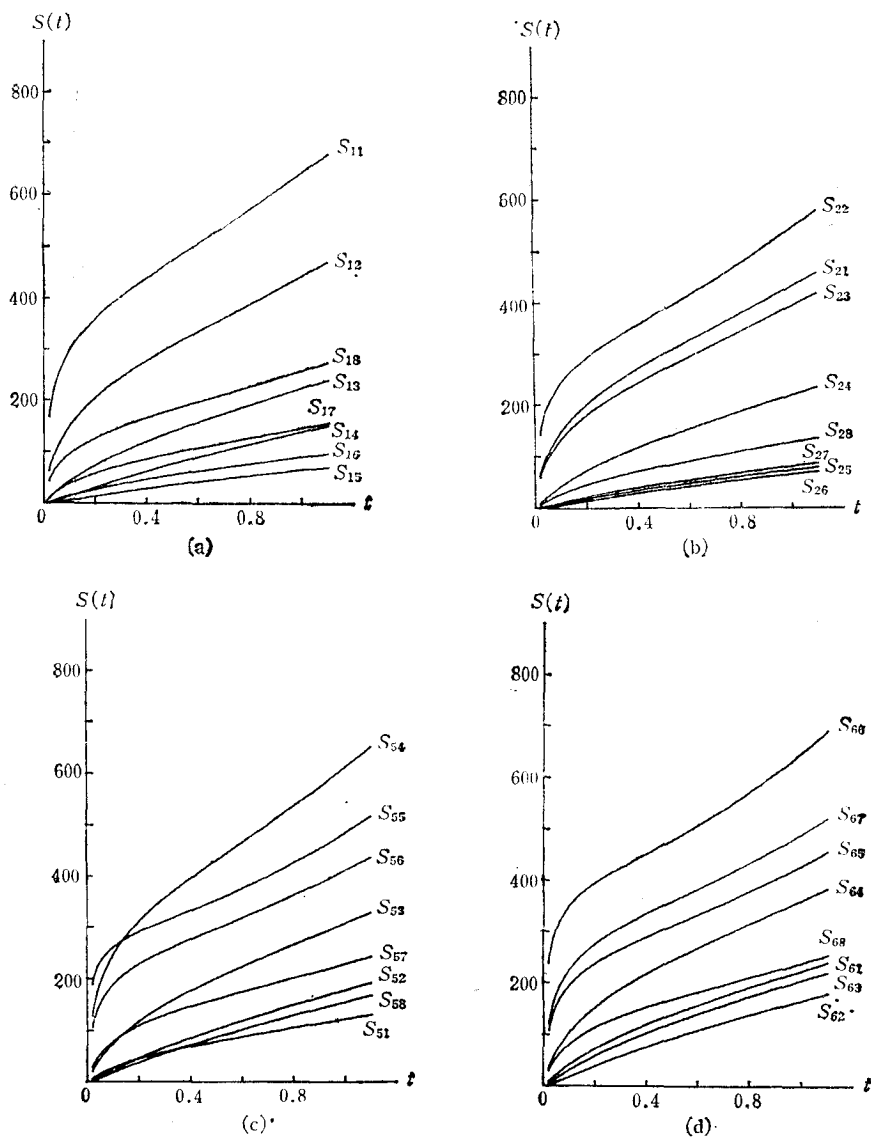


图 2 $\phi_m(t)-t$ 曲线

滞留时间分布函数是高斯型, 参数同图 1. 图中只画出 $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4$. 由对称性有 $\phi_3 = \phi_2, \phi_4 = \phi_1, \phi_5 = \phi_6, \phi_6 = \phi_5$. 复合中心不均匀地在势阱区内及势垒区内分布, 在势阱层, 其浓度 $\rho_a = 0.0005$, 在势垒层, 其浓度 $\rho_b = 0.002$

图3 $[\hat{S}(t)]_{m \times t}$ 曲线

滞留时间分布函数是非高斯型, $\phi_a(t) = b_a^2 [\exp(b_a^2 t)] i^2 \text{erfc}(b_a t^{1/2})$, $\phi_b(t) = b_b^2 [\exp(b_b^2 t)] \times i^2 \text{erfc}(b_b t^{1/2})$, 这里取 $b_a = 20, b_b = 40$, 其它参数以及关于对称性的考虑同图1

$$\phi_{a(b)}^{(n)}(t) = C_n b_{a(b)}^2 [\exp(b_{a(b)}^2 t)] i^n \text{erfc}(b_{a(b)} t^{1/2}), \quad (47)$$

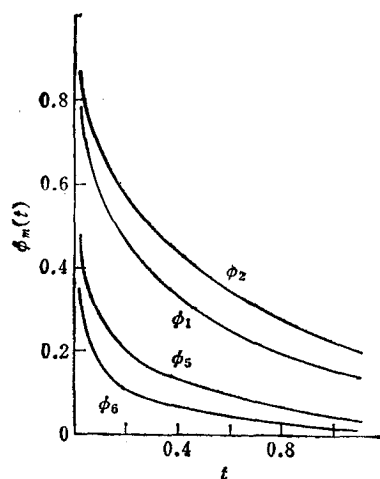
这里的 $i^n \text{erfc}$ 是误差函数的 n 阶重复积分, 当 $n = 2$ 时, 其长时渐近行为是

$$\phi_{a(b)}^{(2)}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} A t^{-3/2}, \quad (48)$$

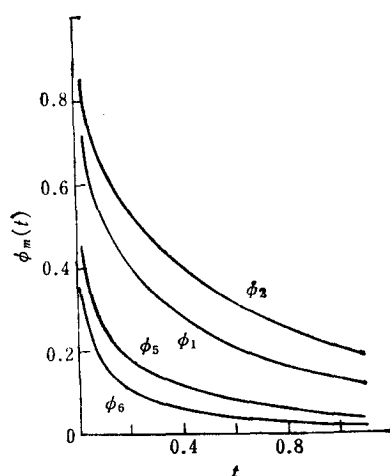
它的 Laplace 变换具有很简单的形式

$$\phi_{a(b)}^{(2)}(u) = (1 + u^{1/2}/b_{a(b)})^{-2}. \quad (49)$$

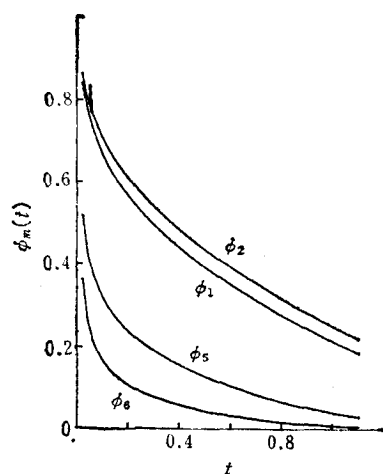
图3给出了在这种分布函数下, 从超晶格的不同原子平面出发的载流子在不同时间

图 4 $\phi_m(t)-t$ 曲线

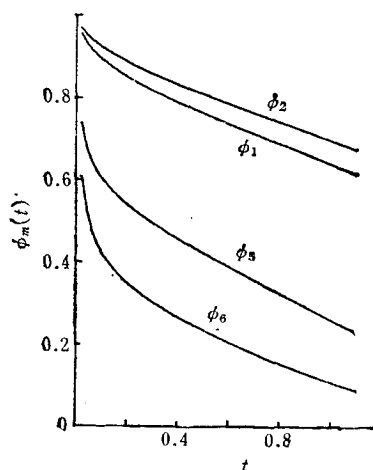
参数同图3,关于对称性的考虑同图2,复合中心的浓度为 $\rho_a = 0.0005$, $\rho_b = 0.002$

图 5 $\phi_m(t)-t$ 曲线

周期势的参数变为 $\eta_a = 0.2, \eta_b = -0.2$, 其余参数同图4

图 6 $\phi_m(t)-t$ 曲线

周期势的参数变为 $\eta_a = 0.8, \eta_b = -0.8$, 其余参数同图4

图 7 $\phi_m(t)-t$ 曲线

复合中心的浓度变为 $\rho_a = 0.0001$, $\rho_b = 0.001$, 其余参数同图6

内所访问的不等价原子平面的格点数。图4至图7则给出了在不同的势阱参数及不同的调制型复合中心分布下载流子的存活几率。

从这些计算结果可以看出,从不同的原子平面出发的载流子的存活几率是不同的,而且存活几率还与周期势及调制掺杂等设计参数有关,因此,改变这些参数,有可能设计出具有不同宏观性质的超晶格材料。

参 考 文 献

- [1] H. Munekata, M. Mizuta and H. Kukimoto, *J. Non-Cryst. Solids*, **59—60**(1983), 1167.
- [2] B. Abeles and T. Tiedje, *Phys. Rev. Lett.*, **51**(1983), 2003.

- [3] J. Kahaliotis and H. Fritzsche, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 1602.
- [4] H. Scher and E. W. Montroll, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 2455.
- [5] J. Klafter and R. Silbey, *Phys. Rev. Lett.*, **44**(1980), 55.
- [6] A. Blumen, J. Klafter and R. Silbey, *J. Chem. Phys.*, **72**(1980), 5320.
- [7] A. Blumen and G. Zumofen, *J. Chem. Phys.*, **75**(1981), 892; A. Blumen *et al.*, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 3429.
- [8] K. L. Ngai and F. S. Liu, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 1049.
- [9] A. Blumen, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 1301.
- [10] 熊诗杰, 物理学报, 待发表.
- [11] L. L. Chang, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 69 Suppl. A(1980), 997.
- [12] K. Ploog and G. H. Dohler, *Adv. Phys.*, **32**(1983), 285.
- [13] I. Chen, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 879.
- [14] I. Chen, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 885.
- [15] 熊诗杰, 物理学报, **34**(1985), 774.
- [16] 熊诗杰、蔡建华, 物理学报, **31**(1982), 474.
- [17] D. P. Gaver, *Oper. Res.*, **14**(1966), 457.
- [18] 户田盛和、久保亮五, 统计物理学, 岩波书店, 东京, (1978), 198 页.

RELAXATION PROCESSES OF CARRIERS IN AMORPHOUS SEMICONDUCTOR SUPERLATTICES WITH MODULATEDLY DISTRIBUTED RECOMBINATION CENTERS

XIONG SHI-JIE

(Department of Physics and Institute of Solid State Physics, Nanjing University)

ABSTRACT

We propose a continuous-time-random-walk model for a medium with modulatedly distributed recombination centers to describe dynamical recombination processes of carriers in amorphous semiconductor superlattices. The survival probabilities of carriers are obtained in cases of different types of time distribution functions. Analysis of the results yields informations on the influences of the periodic potential wells and of the modulated doping on the macroscopic transport properties in this kind of artificial materials.