

调制掺杂非晶半导体超晶格中的瞬变电流 (I)——稳恒电场中载流子的运动

熊诗杰

(南京大学物理系、固体物理研究所)

1986年7月7日收到

本文讨论了在纵向偏置电压下非晶态半导体超晶格中载流子的运动情况。从具有稳恒偏置电场的层状 CTRW 模型出发,我们导出了单个载流子在不同时刻及不同位置上出现的几率的表达式,并得到由于载流子运动所引起的瞬变电流的公式,从而为进一步研究这种材料的光电导性质提供了一种计算手段。

一、引言

近来,在若干实验室中制备出一种新型的多层非晶半导体材料^[1-4],这类材料是由两种不同的层状非晶半导体,或者是一种半导体和一种绝缘体,交替地叠合起来而组成的,层的厚度可以从 10 \AA 到 1000 \AA 。类似于晶态的半导体超晶格^[5-6],这种非晶态的半导体超晶格既可以通过交替生长异质的层状非晶半导体材料而得到^[7-9],也可以用对非晶半导体材料进行调制掺杂的方法来制备^[9-10]。后者得到的就是 n-p 型或者 n-i-p-i 型的调制掺杂的非晶态半导体超晶格。

对于非晶态半导体超晶格的光电导性质,在实验上已经进行了较多的研究,获得了一系列实验结果^[9-11]。从理论上来说,由于非晶态材料结构的复杂性,完全从第一性原理出发研究其载流子的运动是困难的,在描述非晶态物质中载流子的扩散动力学的理论模型中,连续时间分布无规行走模型 (CTRW) 是相当成功的^[12-17]。作者曾在没有电压偏置的情况下,采用层状的 CTRW 模型,来研究非晶态半导体超晶格中载流子的随机迁移过程^[18]。本文将这种层状的 CTRW 模型进一步推广到有电压偏置的情况,不但考虑到由于调制掺杂所形成的周期型势阱对载流子的作用,也考虑到外加电场对载流子的作用。在这种模型下,我们导出了在纵向(即平行于超晶格的调制方向)稳恒电场下某一作无规行走的载流子在不同的时刻到达空间不同位置的几率的表达式,在此基础上得到了瞬变光电流的计算公式,为进一步研究瞬变光电流与材料的微结构的关系提供了一种计算手段。

在第二节中,我们将对这种具有电压偏置的层状 CTRW 模型作详细的描述;在第三节中,我们将借助这一模型严格地求解出无规行走的载流子的出现几率的拉普拉斯变换式;在此基础上,在第四节中将详细考察对不同的样品处于稳恒的纵向电场下载流子的运动情况,并给出了瞬变光电流的计算公式,最后,将对所得到的结果进行物理上的讨论。

二、描述在偏置电压下载流子运动的层状 CTRW 模型

我们考虑 n-p 型调制掺杂非晶态半导体超晶格, 它是由 n 型掺杂和 p 型掺杂的层状非晶半导体 (如 a-Si:H) 交替叠合而成. 它与晶态的调制掺杂半导体超晶格^[6]的主要区别, 在于前者是以非晶半导体为基, 而后者是以晶态半导体为基构成的. 但对二者来说, 掺杂类型的有规则的交替, 都引起了带边在垂直于层的界面的方向 (如 x 方向) 上的空间周期性的调制. 于是, 载流子在 x 方向受到周期势场的作用, 我们把势垒层记作 A, 把势阱层记作 B. 另一方面, 对于非晶态半导体来说, 载流子的运动可以看作是随机的跳跃过程, 可以用连续时间分布无规行走模型来描述^[12-15]. 在这个模型中, 把系统用规则的格点点阵来模拟, 而处在格点上的载流子发生跳跃却是随机事件, 其滞留时间分布函数^[12] $\psi(t)$ 反映了系统的非晶性对载流子的跳跃几率的影响, $\psi(t)\Delta t$ 是指在 $t=0$ 时到达某一格点的载流子在 $t \sim t + \Delta t$ 的时间间隔内从该格点发生一次跳跃的几率. 下面我们将用 $\psi_a(t)$ 和 $\psi_b(t)$ 来标记 A 层和 B 层内的滞留时间分布函数, 用以区别 A 层和 B 层可能出现的不同拓扑结构. 很显然, 由于周期势的作用, 在 A 和 B 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, 在只考虑最近邻格点间跳跃的情况下, 我们有

$$p(i, j) = \begin{cases} 1/Z_{\alpha(b)}, & i, j \text{ 为 A(B) 层内最近邻格点, 且至少有一个格点不邻近界面;} \\ (1 - \eta_{\alpha(b)})/Z_{\alpha(b)}, & i \in \text{A(B)} \text{ 且 } j \in \text{B(A)}, i, j \text{ 为最近邻格点;} \\ [z_{\alpha(b)}(2 - \eta_{\alpha(b)}) + \eta_{\alpha(b)}Z_{\alpha(b)}] / (2Z_{\alpha(b)}z_{\alpha(b)}), & i, j \text{ 为 A(B) 层内邻近界面的最近邻格点;} \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \quad (1)$$

式中, $Z_{\alpha(b)}$ 是 A(B) 层内部的配位数, 而 $z_{\alpha(b)}$ 是 A(B) 层的平行于界面的原子平面上的二维配位数, $\eta_{\alpha(b)}$ 是用来描述周期势对处于界面上的载流子的运动的影响的参数.

如果沿某个方向加上电场 E , 则很显然, 顺着电场方向和逆着电场方向的跳跃几率是不同的. 一般, 空间跳跃几率应作如下修正

$$p'(i, j) = p(i, j) + \eta(E, i - j) \quad (2)$$

修正量 η 与电场 E 的大小及 E 和 $i - j$ 之间的夹角有关. 如果我们选取的模拟点阵是简立方的, 而电场 E 沿着某一主轴方向, 则

$$\eta(E, i - j) = \begin{cases} \eta(E), & j - i \text{ 沿着电场力的方向;} \\ -\eta(E), & j - i \text{ 逆着电场力的方向;} \\ 0, & j - i \text{ 与 } E \text{ 垂直.} \end{cases} \quad (3)$$

$\eta(E)$ 只与电场 E 的大小有关, 是 E 的单调上升函数^[12]. 由于本文只考虑稳恒电场的情况, 因此不需仔细考虑 $\eta(E)$ 的具体函数形式, 只把它作为一个反映电场存在的参数来对待.

至此, 我们已经构造出一个具有电压偏置的层状 CTRW 模型, 用以描述非晶半导体

超晶格中的载流子在电场作用下的扩散运动。一方面, 我们用滞留时间分布函数 $\psi_a(t)$ 和 $\psi_b(t)$ 描述层状介质内部的非晶性; 另一方面, 我们用参数 η_a 和 η_b 描述周期势场对载流子运动的影响, 用参数 $\eta(E)$ 描述外加偏置电场的影响。下面我们将根据这样的模型, 求得某一特定的载流子在不同时刻在空间不同位置上出现的几率, 进而求得由此而产生的瞬态电流。

三、具有纵向偏置电压的层状 CTRW 模型的严格解

我们考虑一个简立方的层状 CTRW 模型, A 层和 B 层的界面与 (001) 主轴垂直, A 层和 B 层分别由 l_a 及 l_b 个格点平面组成, 最近邻格点间的间距为 d , 而超晶格的周期为 $\lambda = (l_a + l_b)d$ 。外加电场沿着 (001) 主轴方向 (即 z 方向), 因此整个系统是非均匀的且各向异性的。

类似于 [18], 系统可分成在统计平均意义上完全等价的超原胞, 每个超原胞内包含 $l_a + l_b$ 个格点, 与此相对应, 我们将格点的指标 i 分解成两个指标

$$i \equiv (s, m), \quad (4)$$

这里 s 是超原胞的标号, 而 m 则是每个超原胞内格点的标号。这样, 每个与格点有关的量 $O(i)$ 都可以改写成矢量

$$O(s) \equiv (O(s, 1), O(s, 2), \dots, O(s, m), \dots, O(s, l_a + l_b)), \quad (5)$$

矢量的各个分量对应于超原胞内不同的格点。而每个跟双格点有关的量 $O(i_1, i_2)$ 可以改写成 $(l_a + l_b) \times (l_a + l_b)$ 阶矩阵 $O(s_1, s_2)$, 其矩阵元是

$$[O(s_1, s_2)]_{m_1 m_2} \equiv O(i_1, i_2), \quad (6)$$

而

$$i_1 = (s_1, m_1), \quad i_2 = (s_2, m_2).$$

根据这样的原则, 上节提到的量 ϕ 和 ρ' 都可写成 $(l_a + l_b) \times (l_a + l_b)$ 阶矩阵 $\hat{\phi}$ 和 ρ' 。 $\hat{\phi}$ 可看作对应于同一格点的双格点量, 因此它只有对角矩阵元

$$[\hat{\phi}(t)]_{mn} = \begin{cases} \phi_a(t)\delta_{mn}, & m, n \in A; \\ \phi_b(t)\delta_{mn}, & m, n \in B. \end{cases} \quad (7)$$

而 ρ' 的矩阵元可由 (1), (2), (3), (6) 式确定。

在这样的模型中, 载流子的运动是一个随机的过程, 我们所关心的是在 $t = 0$ 时从一个格点 i 出发的载流子在某一时刻 t 处于某一格点 j 的几率 $P(i, j; t)$, 它也可以写成矩阵的形式, 其矩阵元是

$$[\hat{P}(s_2 - s_1, t)]_{m_1 m_2} \equiv P(i_1, i_2; t) \quad (8)$$

其中

$$i_1 = (s_1, m_1), \quad i_2 = (s_2, m_2).$$

这里我们已考虑到 \hat{P} 对于出发点的超原胞指标的平移不变性, 下面为方便计, 我们将把这个指标取为 0。

为求出 \hat{P} , 我们定义一个量 $\hat{R}(s, t)$, 其矩阵元与时间间隔的乘积 $[\hat{R}(s, t)]_{mn} dt$ 为 $t = 0$ 时从格点 $(0, m)$ 出发的载流子在时间间隔 $t \sim t + dt$ 内正好到达格点 (s, n)

的几率,很明显, \hat{P} 与 \hat{R} 满足如下关系

$$\hat{P}(\mathbf{s}, t) = \int_0^t \hat{R}(\mathbf{s}, \tau) \left[\hat{I} - \int_0^{\tau} \hat{\phi}(\tau') d\tau' \right] d\tau \quad (9)$$

式中 \hat{I} 是 $(l_a + l_b) \times (l_a + l_b)$ 阶单位矩阵.

再定义一个辅助量 $\hat{R}^{(L)}(\mathbf{s}, t)$, 其矩阵元与时间间隔的乘积 $[\hat{R}^{(L)}(\mathbf{s}, t)]_{mn} dt$ 是在 $t=0$ 时从格点 $(0, m)$ 出发的载流子经过 L 次跳跃在时间间隔 $t \sim t + dt$ 内正好到达格点 (\mathbf{s}, n) 的几率, 它与 R 应有如下关系

$$\hat{R}(\mathbf{s}, t) = \sum_{L=0}^{\infty} \hat{R}^{(L)}(\mathbf{s}, t). \quad (10)$$

根据 $\hat{R}^{(L)}$ 的定义, 它应满足如下的递推关系

$$\hat{R}^{(L+1)}(\mathbf{s}, t) = \sum_{\mathbf{s}'} \int_0^t d\tau \hat{R}^{(L)}(\mathbf{s}', \tau) \hat{\phi}(t-\tau) \beta'(\mathbf{s}', \mathbf{s}). \quad (11)$$

将上式两边对 L 求和, 可得到 \hat{R} 所满足的积分方程

$$\hat{R}(\mathbf{s}, t) = \sum_{\mathbf{s}'} \int_0^t d\tau \hat{R}(\mathbf{s}', \tau) \hat{\phi}(t-\tau) \beta'(\mathbf{s}', \mathbf{s}) + \delta_{\mathbf{s},0} \delta(t-0) \hat{I}, \quad (12)$$

对 \hat{R} 及 $\hat{\phi}$ 作时间的拉普拉斯变换

$$\hat{R}(\mathbf{s}, u) = \int_0^{\infty} dt \hat{R}(\mathbf{s}, t) e^{-ut}, \quad (13)$$

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

于是(12)式可写成

$$\hat{R}(\mathbf{s}, u) = \sum_{\mathbf{s}'} \hat{R}(\mathbf{s}', u) \hat{\phi}(u) \beta'(\mathbf{s}', \mathbf{s}) - \delta_{\mathbf{s},0} \hat{I}. \quad (15)$$

由于 \hat{R} 及 β' 满足超晶格的周期性, 因此可以对它们作空间的傅里叶变换

$$[\hat{R}(\mathbf{k}, u)]_{mn} = \sum_{\mathbf{s}} [\hat{R}(\mathbf{s}, u)]_{mn} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{s} + (\mathbf{s}-m)\mathbf{d})}, \quad (16)$$

$$[\beta'(\mathbf{k})]_{mn} = \sum_{\mathbf{s}} [\beta'(\mathbf{s}', \mathbf{s})]_{mn} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{s} - \mathbf{s}' + (\mathbf{s}-m)\mathbf{d})}, \quad (17)$$

这里 \mathbf{d} 沿 x 方向. 于是(15)式可写成

$$\hat{R}(\mathbf{k}, u) = (\hat{I} - \hat{H})^{-1}, \quad (18)$$

其中

$$\hat{H} = \hat{\phi}(u) \beta'(\mathbf{k}), \quad (19)$$

据(1), (2), (3), (6), (7), (17)式, 可写出 \hat{H} 的矩阵元如下:

对于 $l_a - 1 \geq m \geq 2$, 即 $m \in A$ 且不邻近界面, 有

$$H_{mm} = \phi_a(u) (\cos k_1 d + \cos k_2 d) / 3 \equiv W_a. \quad (20)$$

对于 $l_a + l_b - 1 \geq m \geq l_a + 2$, 即 $m \in B$ 且不邻近界面, 有

$$H_{mm} = \phi_b(u) (\cos k_1 d + \cos k_2 d) / 3 \equiv W_b. \quad (21)$$

对于 $l_a - 1 \geq m \geq 1$, 有

$$\begin{aligned} H_{m, m+1} &= \phi_a(u) (1 + \eta(E)) e^{ik_2 d} / 6, \\ H_{m+1, m} &= \phi_a(u) (1 - \eta(E)) e^{-ik_2 d} / 6. \end{aligned} \quad (22)$$

对于 $l_a + l_b - 1 \geq m \geq l_a + 1$, 有

$$\begin{aligned} H_{m,m+1} &= \phi_b(u)(1 + \eta(E))e^{ik_3d}/6, \\ H_{m+1,m} &= \phi_b(u)(1 - \eta(E))e^{-ik_3d}/6. \end{aligned} \quad (23)$$

而

$$\begin{aligned} H_{l_a, l_a+1} &= \phi_a(u)(1 - \eta_a + \eta(E))e^{ik_3d}/6, \\ H_{l_a+1, l_a} &= \phi_b(u)(1 - \eta_b - \eta(E))e^{-ik_3d}/6, \\ H_{l_a+l_b, l_a} &= \phi_b(u)(1 - \eta_b + \eta(E))e^{ik_3d}/6, \\ H_{l_a+l_b, l_b} &= \phi_a(u)(1 - \eta_a - \eta(E))e^{-ik_3d}/6, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} H_{1,1} &= H_{l_a, l_a} = W_a + U_a, \\ H_{l_a+1, l_a+1} &= H_{l_a+l_b, l_a+l_b} = W_b + U_b, \end{aligned} \quad (25)$$

其中

$$U_{\alpha(b)} = \eta_{\alpha(b)}\phi_{\alpha(b)}(u)(\cos k_1d + \cos k_3d)/12. \quad (26)$$

以上的 k_1, k_2, k_3 分别是波矢 k 在 x, y, z 方向上的分量.

(18)式是有限阶的矩阵代数方程, 可以用类似于文献[18]的方法严格求解. 但由于外加电场破坏了系统的反射对称性, 使问题变得较为复杂. 注意到这一点, 经过有限的代数运算, 我们得到

$$[\hat{R}(k, u)]_{mn} = e^{ik_3d(n-m)}(q_{1mn} + q_{2mn}e^{i\text{sign}(m-n)k_3d})/[f - g \cos(k_3d + \gamma)]. \quad (27)$$

式中

$$\begin{aligned} f &= \Delta_{F\alpha(b)}\Delta_{F\beta} - (\mu_a\mu_b^{-1} + \mu_a^{-1}\mu_b)t_a t_b [T_a B_a(l_a) - U_a B_a(l_a - 1)] \\ &\quad \times [T_b B_b(l_b) - U_b B_b(l_b - 1)] + t_a^2 t_b^2 B_a(l_a - 1)B_b(l_b - 1); \\ g &= 2t_a t_b T_a T_b. \end{aligned} \quad (28)$$

$$\Delta_{F\alpha(b)} = T_{\alpha(b)}^2 B_{\alpha(b)}(l_{\alpha(b)} + 1) - 2T_{\alpha(b)} U_{\alpha(b)} B_{\alpha(b)}(l_{\alpha(b)}) + U_{\alpha(b)}^2 B_{\alpha(b)}(l_{\alpha(b)} - 1). \quad (29)$$

$$\begin{aligned} T_{\alpha(b)} &= [(1 + \eta(E))(1 - \eta(E))]^{1/2} \phi_{\alpha(b)}(u)/6; \\ t_{\alpha(b)} &= [(1 - \eta_{\alpha(b)} + \eta(E))(1 - \eta_{\alpha(b)} - \eta(E))]^{1/2} \phi_{\alpha(b)}(u)/6. \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \mu_a &= [(1 - \eta_a + \eta(E))/(1 - \eta_a - \eta(E))]^{1/2}, \\ \mu_b &= [(1 - \eta_b + \eta(E))/(1 - \eta_b - \eta(E))]^{1/2}. \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} B_{\alpha(b)}(j) &= (A_{\alpha(b)}^j - A_{\alpha(b)}^{-j})/(A_{\alpha(b)} - A_{\alpha(b)}^{-1}), \\ A_{\alpha(b)} &= \{1 - W_{\alpha(b)} - [(1 - W_{\alpha(b)})^2 - 4T_{\alpha(b)}^2]^{1/2}\}/(2T_{\alpha(b)}), \\ c^{i\gamma} &= \mu_a \mu_b [(1 + \eta(E))/(1 - \eta(E))]^{(l_a+l_b)/2-1}. \end{aligned} \quad (32)$$

对于 $l_a \geq m \geq 1, l_a \geq n \geq 1$, 有

$$\begin{aligned} q_{1mn} &= T_a^{-1} \mu_0^{n-m} \{t_a t_b [T_a C_1 - (\mu_a \mu_b^{-1} + \mu_a^{-1} \mu_b) C_2] \\ &\quad \times [T_b B_b(l_b) - U_b B_b(l_b - 1)] - t_a^2 t_b^2 B_b(l_b - 1) C_2 \\ &\quad - \Delta_{Fb}(T_a^2 C_3 - T_a U_a C_4 + U_a^2 C_2)\}, \\ q_{2mn} &= T_a^{-1} \mu_0^{n-m+(l_a+l_b-2) \cdot \text{sign}(m-n)} (\mu_a \mu_b)^{\text{sign}(m-n)} \cdot t_a t_b T_a T_b B_a(|m-n|), \end{aligned} \quad (33)$$

这里

$$\begin{aligned} C_1 &= \{\mu_a \mu_b^{-1} (A_a^{-l_a+m+n} + A_a^{l_a-m-n} - A_a^{l_a-1-m-n} - A_a^{-l_a+1+m-n}) \\ &\quad + \mu_a^{-1} \mu_b (A_a^{l_a-m-n+2} + A_a^{-l_a+m+n-2} - A_a^{l_a-1-m-n} - A_a^{-l_a+1+m-n})\} / \\ &\quad (A_a - A_a^{-1})^2; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C_2 &= \begin{cases} -B_a(n-1)B_a(l_a-m), & \text{对 } m \geq n; \\ -B_a(m-1)B_a(l_a-n), & \text{对 } m < n. \end{cases} \\
 C_3 &= \begin{cases} -B_a(n)B_a(l_a+1-m), & \text{对 } m \geq n; \\ -B_a(m)B_a(l_a+1-n), & \text{对 } n > m; \end{cases} \\
 C_4 &= \begin{cases} -B_a(n-1)B_a(l_a-m+1) - B_a(n)B_a(l_a-m), & m \geq n; \\ -B_a(m-1)B_a(l_a-n+1) - B_a(m)B_a(l_a-n), & m < n. \end{cases} \quad (34)
 \end{aligned}$$

$$\mu_0 = [(1 + \eta(E))/(1 - \eta(E))]^{1/2}. \quad (35)$$

对于 $l_a + l_b \geq m \geq l_a + 1$, $l_a + l_b \geq n \geq l_a + 1$, 只要将(33)及(34)式中的下标 a 与 b 互换, 就得到对应的 q_{1mn} 及 q_{2mn} 的表达式.

对于 $l_a \geq m \geq 1$ 及 $l_a + l_b \geq n \geq l_a + 1$, 有

$$\begin{aligned}
 q_{1mn} &= t_a \mu_0^{n-m-1} \mu_a \{ [T_a B_a(m) - U_a B_a(m-1)] \\
 &\quad \times [T_b B_b(l_a + l_b - n + 1) - U_b B_b(l_a + l_b - n)] \\
 &\quad - \mu_b \mu_a^{-1} t_a t_b B_a(m-1) B_b(l_a + l_b - n) \}, \\
 q_{2mn} &= t_a \mu_0^{n-m+1-l_a-l_b} \mu_a^{-1} \{ [T_a B_a(l_a - m + 1) - U_a B_a(l_a - m)] \\
 &\quad \times [T_b B_b(n - l_a) - U_b B_b(n - l_a - 1)] \\
 &\quad - \mu_a \mu_b^{-1} t_a t_b B_a(l_a - m) B_b(n - l_a - 1) \}. \quad (36)
 \end{aligned}$$

对于 $l_a + l_b \geq m \geq l_a + 1$ 及 $l_a \geq n \geq 1$, 有

$$\begin{aligned}
 q_{1mn} &= t_b \mu_0^{n-m+1} \mu_b^{-1} \{ [T_a B_a(n) - U_a B_a(n-1)] \\
 &\quad \times [T_b B_b(l_a + l_b - m + 1) - U_b B_b(l_a + l_b - m)] \\
 &\quad - \mu_a^{-1} \mu_b t_a t_b B_a(n-1) B_b(l_a + l_b - m) \}, \\
 q_{2mn} &= t_b \mu_0^{l_b-m+n-1} \mu_b \{ [T_a B_a(l_a - n + 1) - U_a B_a(l_a - n)] \\
 &\quad \times [T_b B_b(m - l_a) - U_b B_b(m - l_a - 1)] \\
 &\quad - \mu_b^{-1} \mu_a t_a t_b B_a(l_a - n) B_b(m - l_a - 1) \}. \quad (37)
 \end{aligned}$$

这样, 我们得到了 $\hat{R}(k, u)$ 的矩阵元(包括对角和非对角)的严格的解析表达式. 根据(9)式, 几率 \hat{P} 的拉普拉斯变换式可以写成

$$\hat{P}(s, u) = \hat{R}(s, u)[\hat{I} - \hat{\phi}(u)]/u. \quad (38)$$

由于掺杂调制及电场的方向都是沿着 z 轴, 因此我们更关心沿 z 轴的载流子分布几率, 如果我们记 s_1, s_2, s_3 为 s 沿 x, y, z 方向的分量, 那末这样的分布几率是

$$\hat{P}(s_3, u) = \sum_{s_1, s_2} \hat{P}(s, u). \quad (39)$$

由(16)式, 我们可得到

$$\begin{aligned}
 [\hat{P}(s_3, u)]_{mn} &= \frac{\lambda}{2\pi} \int_0^{2\pi/\lambda} dk_3 \left\{ e^{-ik_3(s_3 + (n-m)d)} [\hat{R}(k, u)]_{mn} \Big|_{\substack{k_1=0 \\ k_2=0}} \right\} \\
 &\quad \times [\hat{I} - \hat{\phi}(u)]_{nn}/u. \quad (40)
 \end{aligned}$$

将(27)式代入, 并完成对 k_3 的积分, 得到

$$\begin{aligned}
 [\hat{R}(s_3, u)]_{mn} &= [-v_1 v_1^{l_a/\lambda} (q_{1mn} + q_{2mn} v_1^{\text{sign}(n-m)}) \\
 &\quad + v_2 v_2^{l_a/\lambda} (q_{1mn} + q_{2mn} v_2^{\text{sign}(n-m)})] / \{ g[(f/g)^2 - 1]^{1/2} \} \Big|_{\substack{k_1=0 \\ k_2=0}} \quad (41)
 \end{aligned}$$

其中,

$$\begin{aligned} v_1 &= \rho \{ f/g + [(f/g)^2 - 1]^{1/2} \}, \\ v_2 &= \rho \{ f/g - [(f/g)^2 - 1]^{1/2} \}, \\ \rho &= \begin{cases} e^{i\tau}, & s_3 + (n-m)d \geq 0; \\ e^{-i\tau}, & s_3 + (n-m)d < 0. \end{cases} \\ v_1 &= \begin{cases} 0, & |v_1| \geq 1; \\ 1, & |v_1| < 1. \end{cases} \quad v_2 = \begin{cases} 0, & |v_2| \geq 1; \\ 1, & |v_2| < 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (42)$$

载流子的空间分布几率为

$$\begin{aligned} [\hat{P}(s_3, t)]_{mn} &= \mathcal{L}^{-1} \{ [-v_1 v_1^{|s_3|/\lambda} (q_{1mn} + q_{2mn} v_1^{\text{sign}(n-m)}) \\ &\quad + v_2 v_2^{|s_3|/\lambda} (q_{1mn} + q_{2mn} v_2^{\text{sign}(n-m)})] \cdot [f - \hat{\phi}(u)]_{mn} / \\ &\quad \{ u g [(f/g)^2 - 1]^{1/2} \} \Big|_{k_3=0} \end{aligned} \quad (43)$$

这里 \mathcal{L}^{-1} 代表对时间的反拉普拉斯变换。

四、纵向电场中载流子的运动和瞬变电流

根据(43)式, 就能计算出在 $t=0$ 时在格点 $(0, m)$ 上产生的载流子在电场的作用下在 t 时刻到达 z 坐标为 $z = s_3 + nd$ 的格点的几率

$$P(m; z, t) \equiv [\hat{P}(s_3, t)]_{mn}. \quad (44)$$

载流子在 z 方向的平均扩散距离可由下式计算

$$l_z(m, t) = \sum_z z P(m; z, t), \quad (45)$$

这里 $l_z(m, t)$ 指的是从某个超原胞的第 m 个格点出发的载流子经过时间 t 后的平均位移在 z 方向的分量。据(16)、(40)及(44)式, 我们得到

$$\mathcal{L}[l_z(m, t)] = i^{-1} \sum_n \left\{ \frac{\partial [\hat{R}(\mathbf{k}, u)]_{mn}}{\partial k_3} \Big|_{k=0} \cdot [f - \hat{\phi}(u)]_{nn} / u \right\} \quad (46)$$

这里 \mathcal{L} 代表对时间作拉普拉斯变换。由此而产生的瞬变电流是

$$\begin{aligned} I(m; t) &= e \frac{d l_z(m, t)}{dt} \\ &= e i^{-1} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \sum_n \left\{ \frac{\partial [\hat{R}(\mathbf{k}, u)]_{mn}}{\partial k_3} \Big|_{k=0} \cdot [f - \hat{\phi}(u)]_{nn} \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (47)$$

将(27)式代入, 并完成对 k_3 的微商, 我们得到

$$\begin{aligned} I(m; t) &= e \mathcal{L}^{-1} \left\{ \sum_n [f - \hat{\phi}(u)]_{nn} \cdot \left[\frac{d(n-m)(q_{1mn} + q_{2mn}) + \text{sign}(m-n) \lambda q_{2mn}}{f - g \cos \gamma} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{g \lambda i (q_{1mn} + q_{2mn}) \sin \gamma}{(f - g \cos \gamma)^2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (48)$$

我们将对不同类型的超晶格计算载流子在纵向电场下的扩散运动及其瞬变电流。电场的作用由参数 $\eta(E)$ 表述, 而超晶格中的周期势则由参数 η_a 和 η_b 反映出来, 滞留时间分布函数 $\phi_a(t)$ 和 $\phi_b(t)$ 体现了系统的非晶性。如同文献[12]所指出的, 如果忽略载流

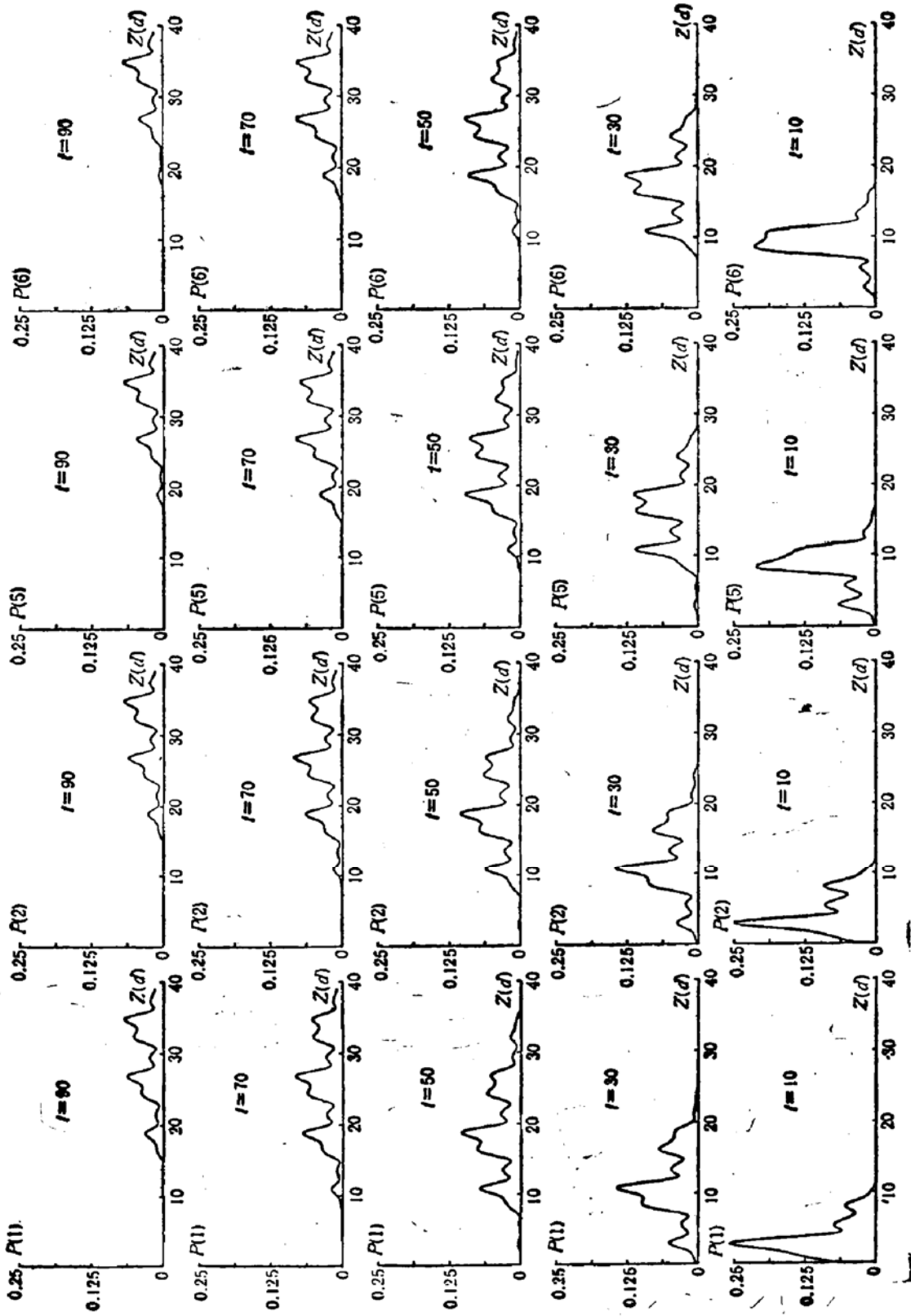


图1 载流子在电场中的运动
 时间分布函数为(49)式, $b_{m,t}$ 与 t 均取相对单位使 $b_{m,0}, t$ 为无量纲的量. $l_a = l_b = 4$, $\eta_a = -\eta_b = 0.3$, $\eta(E) = 0.6$, $b_a = 5$, $b_b = 10$.
 $P(m)$ 是 $t=0$ 时从格点 $(0, m)$ 出发的载流子在不同时刻的空间分布几率

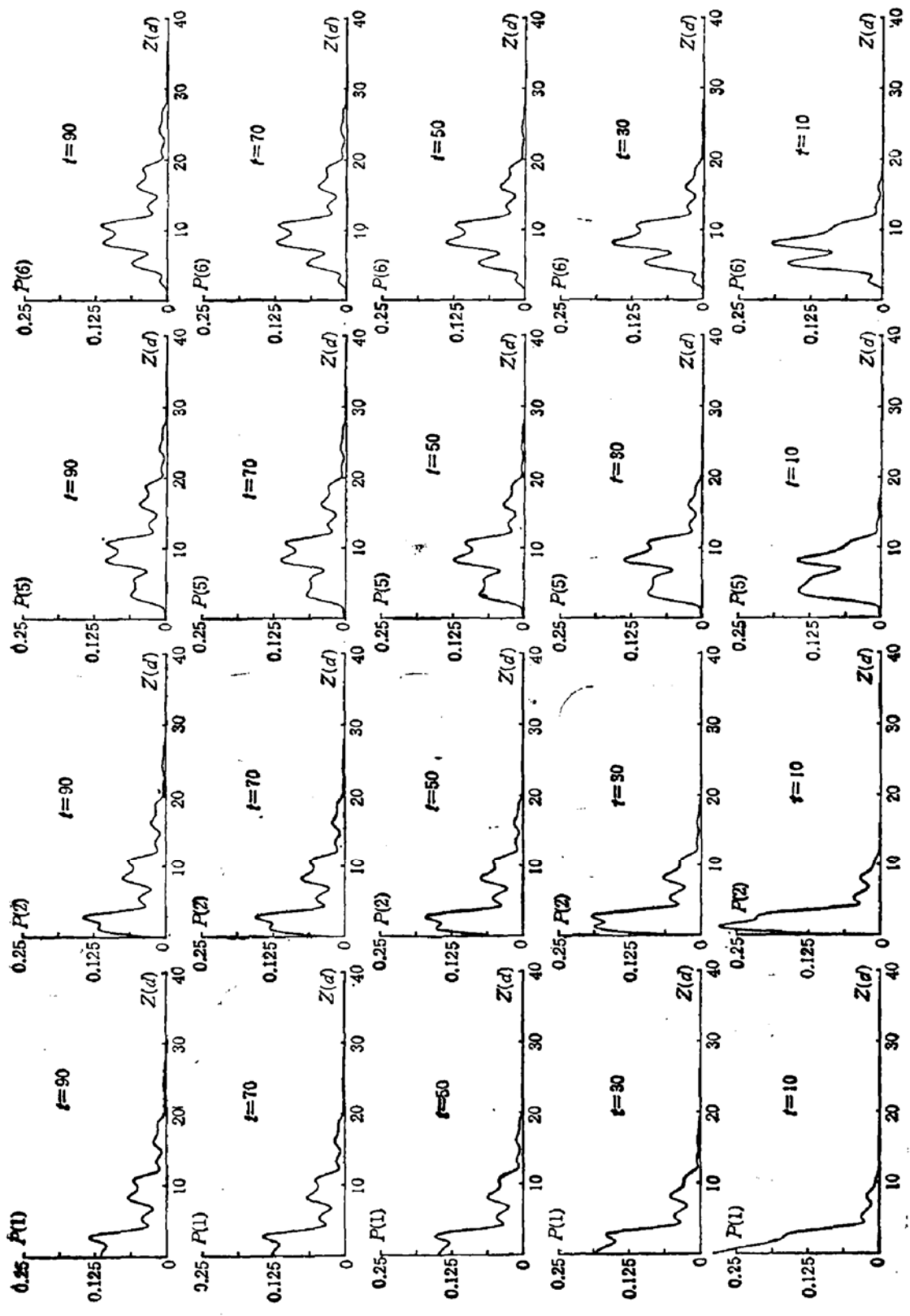


图2 载流子在电场中的运动
 时间分布函数为(51)式, b_{10}^* 与 t 均取相对单位使 $b_{10}^* t = 10$, 其余参数同图1

子运动过程中各次跳跃之间的统计关联,我们可以选用如下的高斯型的时间分布函数

$$\phi_{\alpha(b)}(t) = b_{\alpha(b)} e^{-b_{\alpha(b)} t}, \quad (49)$$

其拉普拉斯变换式是

$$\phi_{\alpha(b)}(u) = b_{\alpha(b)} / (u + b_{\alpha(b)}). \quad (50)$$

如果这种统计关联不能忽略,载流子的运动将表现出非马尔科夫行为,我们必须采用具有长时尾的时间分布函数,下式是这种分布函数的一个例子:

$$\phi_{\alpha(b)}(t) = c b_{\alpha(b)}^2 [\exp(b_{\alpha(b)}^2 t)] t^2 \operatorname{erfc}(b_{\alpha(b)} t^{1/2}), \quad (51)$$

其长时渐近行为是

$$\phi_{\alpha(b)}(t) \propto t^{-3/2}, \quad (52)$$

它的拉普拉斯变换式较为简单

$$\phi_{\alpha(b)}(u) = (1 + u^{3/2} / b_{\alpha(b)})^{-1}. \quad (53)$$

在图 1—图 4 中, 我们给出了在这两种分布函数下载流子在纵向电场中扩散运动的情况和瞬变电流的变化情况, 对应的参数在图中给出. 从图 1 和图 2 可以看出, 随着时间的推移, 载流子一面在电场的作用下向右运动, 一面作无规的扩散, 但它落在势阱区的几率总是更大一些. 从图 3 可以看出, 如果采用高斯型的分布函数, 瞬变电流曲线将略有上

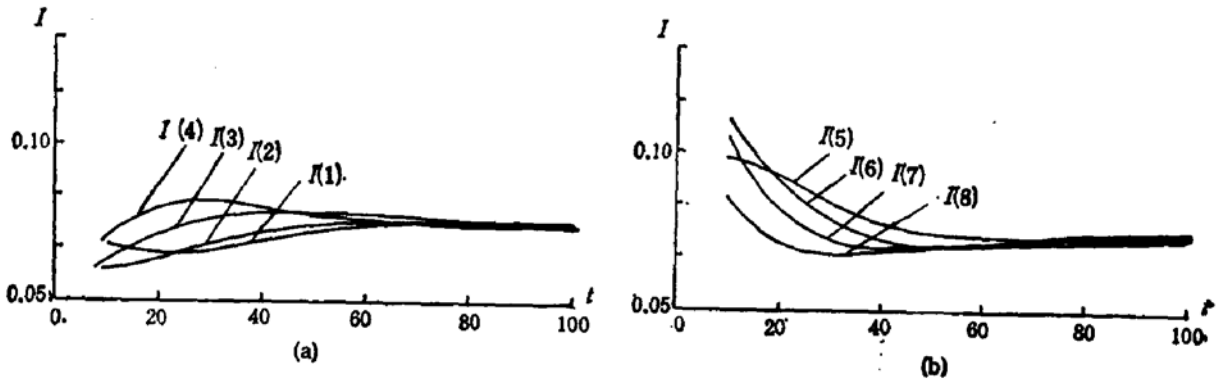


图 3 瞬变电流曲线

$I(m)$ 是指 $t=0$ 时从格点 $(0, m)$ 出发的一个载流子在电场下运动所形成的电流, 其单位为 $(ed/\text{时间单位})$. 时间分布函数为(49)式, $b_a = 0.3$, $b_b = 0.6$, 其单位为 $(\text{时间单位})^{-1}$. 其余参数同图 1

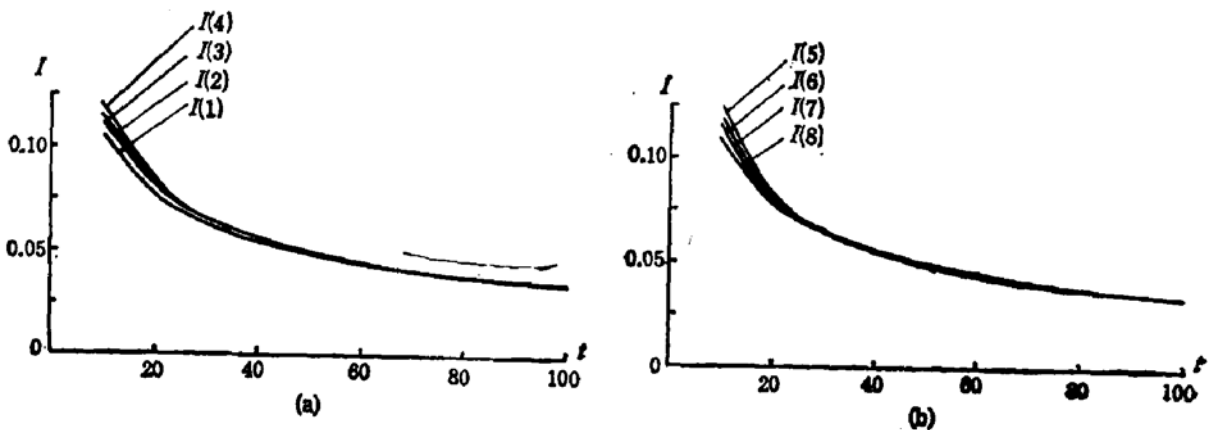


图 4 瞬变电流曲线
时间分布函数为(51)式, 参数同图 2

下振荡, 这应归结于周期势的影响。但如计及长时尾行为, 这种振荡将消失, 而代之以长时的衰减行为, 这可以从图 4 看出。

本文提供了非晶半导体超晶格中单个载流子在电场中运动过程的计算公式, 这样就有可能进一步从理论上研究这种材料中最令人感兴趣的一系列性质, 诸如光电导, 电流频率响应, 等等。在本文的计算中, 未计及在多个载流子同时存在时载流子间的关联效应, 这种关联效应可通过引入有效自洽势来处理。在[19]中, 我们将考虑载流子之间的库仑相互作用对周期性内电场的屏蔽作用。

参 考 文 献

- [1] B. Abeles and T. Tiedje, *Phys. Rev. Lett.*, **51**, 2003(1983).
- [2] M. Hirose and S. Miyazaki, *J. Non-Cryst. Solids*, **66**, 327(1984).
- [3] H. Mune-kata and H. Kukimoto, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **22**, 6544(1983); H. Mune-kata, M. Mizuta and H. Kukimoto, *J. Non-Cryst. Solids*, **59 & 60**, 345(1983).
- [4] 陈治明、王建农、梅向阳、孔光临, *半导体学报*, **7**, 331(1986).
- [5] L. Esaki, *J. Cryst. Growth*, **52**, 227(1981).
- [6] G. H. Dohler, H. Kunzel and K. Ploog, *Phys. Rev.*, **B25**, 2616(1982).
- [7] T. Tiedje, B. Abeles, P. D. Persans, B. G. Brooks and G. D. Cody, *J. Non-Cryst. Solids*, **66**, 345(1984).
- [8] B. Abeles, T. Tiedje, K. S. Liang, H. W. Deckman, H. C. Stasiewski and J. C. Scanlon, *J. Non-Cryst. Solids*, **66**, 351(1984).
- [9] M. Hundhausen and L. Ley and R. Carius, *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 1598(1984).
- [10] J. Kakalios and H. Fritzsche, *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 1602(1984).
- [11] M. Hundhausen and L. Ley, *Phys. Rev.*, **B32**, 6655(1985).
- [12] H. Scher and E. W. Montroll, *Phys. Rev.*, **B12**, 2455(1975).
- [13] J. Klafter and R. Silbey, *Phys. Rev. Lett.*, **44**, 55(1980).
- [14] K. L. Ngai and F. S. Liu, *Phys. Rev.*, **B24**, 1049(1981).
- [15] A. Blumen and G. Zumofen, *J. Chem. Phys.*, **75**, 892(1981).
- [16] A. Blumen, J. Klafter and G. Zmofen, *Phys. Rev.*, **B27**, 3429(1983).
- [17] A. Blumen, *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 1301(1984).
- [18] 熊诗杰, *物理学报*, **35**, 1010(1986).
- [19] 熊诗杰, 调制掺杂非晶半导体超晶格中的瞬变电流 (II).

Transient Current in Doping-Modulated Amorphous Semiconductor Super-Lattices (I)——Motion of Carriers under Static Electric Field

Xiong Shijie

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

Abstract

The motion of carriers in amorphous semiconductor superlattices under longitudinal bias voltage is discussed. By use of a layered CTRW model with static bias field the expression for the time dependent probability of carrier distribution and the formula of transient current owing to the motion of carrier are obtained. These may serve the purpose of further investigation of the photoconductivity in such materials.