

**В. В. У ч а й к и н, Р. Т. С и б а т о в** (Ульяновск, УлГУ). **Дробно-дифференциальная модель рекомбинации в неупорядоченных полупроводниках.**

Исследования фотопроводимости, фотолюминесценции и электронного парамагнитного резонанса привели к созданию нескольких моделей рекомбинации носителей заряда в твердых телах. Выделяют два основных рекомбинационных механизма в неупорядоченных полупроводниках: безызлучательная туннельная рекомбинация локализованных носителей и излучательный механизм типа «зона–центр» [1]. В первом случае темп рекомбинации определяется вероятностью туннелирования под потенциальными барьерами, разделяющими носители противоположных знаков, во втором — сечением захвата свободных носителей в локализованные состояния. В работах [2], [3] составлены и решены в терминах дробно-устойчивых распределений дробно-дифференциальные уравнения дисперсионной диффузии для двух механизмов переноса: многократного захвата и прыжкового.

В работе, представленной данным сообщением, рассмотрена рекомбинация локализованных носителей, управляемая дисперсионным переносом, в рамках схемы случайных блужданий. Впервые предложенная в [4] модель представляет собой обобщение схемы Шера и Монтролла. Модель справедлива для туннельной рекомбинации и механизма энергетических переходов. Нами составлено дробно-дифференциальное уравнение дисперсионного переноса с учетом рекомбинации в рамках этой модели. Для полученного уравнения найдены фундаментальные решения в терминах устойчивых плотностей распределения.

Время ожидания перед рекомбинацией в отсутствие случайного блуждания задается функцией распределения (обычно полагают, что это распределение является экспоненциальным [4]):  $\Phi(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \varphi(\mathbf{r}, t) dt$ ;  $\varphi(\mathbf{r}, t) = \gamma_{rc}(\mathbf{r}) \exp\{-\gamma_{rc}(\mathbf{r})t\}$ , где  $\gamma_{rc}(\mathbf{r})$  — темп рекомбинации. Для скачкообразного процесса с рекомбинацией плотности распределения времени выхода носителей из ловушки и времени рекомбинации равны  $\psi_{out}(\mathbf{r}, t) = \psi(t)[1 - \Phi(\mathbf{r}, t)]$  и  $\psi_{rc}(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t)[1 - \Psi(t)]$ , соответственно. Выполняется условие нормировки  $\int_0^\infty [\psi_{out}(\mathbf{r}, t) + \psi_{rc}(\mathbf{r}, t)] dt = 1$ . Здесь  $\psi(t)$  — плотность распределения времени пребывания в локализованном состоянии в отсутствие рекомбинации. Связь между концентрациями свободных  $f_{del}(\mathbf{r}, t)$ , локализованных носителей  $f_{loc}(\mathbf{r}, t)$  и полной концентрацией  $f(\mathbf{r}, t)$  имеет вид:

$$f_{loc}(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \theta^{-1} f_{del}(\mathbf{r}, t') [1 - \Psi_{out}(\mathbf{r}, t - t') - \Psi_{rc}(\mathbf{r}, t - t')] dt', \quad (1)$$

$$f(\mathbf{r}, t) = f_{loc}(\mathbf{r}, t) + f_{del}(\mathbf{r}, t).$$

Здесь введены обозначения:  $\Psi_{out}(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \psi_{out}(\mathbf{r}, t) dt$ ;  $\Psi_{rc}(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \psi_{rc}(\mathbf{r}, t) dt$ . Учитывая, что  $\Psi_{out}(\mathbf{r}, t) + \Psi_{rc}(\mathbf{r}, t) = \Psi(t) + \Phi(\mathbf{r}, t) - \Phi(\mathbf{r}, t)\Psi(t)$ , перепишем связь между концентрациями  $f_{del}(\mathbf{r}, t)$  и  $f_{loc}(\mathbf{r}, t)$  из (1) в виде

$$f_{loc}(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \tau_0^{-1} f_{del}(\mathbf{r}, t') [1 - \Psi(t - t')] [1 - \Phi(\mathbf{r}, t - t')] dt'.$$

Здесь  $\tau_0$  — среднее время движения между двумя актами захвата в локализованные состояния. Время пребывания носителя в локализованном состоянии при дисперсионном переносе в случае отсутствия рекомбинации распределено по закону со степенной асимптотикой:  $\Psi(t) \sim 1 - (ct)^{-\alpha}/\Gamma(1 - \alpha)$ , где  $0 < \alpha < 1$  — дисперсионный параметр. В случае экспоненциального распределения времени ожидания перед рекомбинацией:  $1 - \Phi(\mathbf{r}, t) = \exp\{-\gamma_{rc}(\mathbf{r})t\}$  и

$$\frac{\partial f_{loc}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (\tau_0 c^\alpha)^{-1} \frac{1}{\Gamma(1 - \alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{f_{del}(\mathbf{r}, t')}{(t - t')^\alpha} \exp\{-\gamma_{rc}(\mathbf{r})(t - t')\} dt'. \quad (2)$$

Подставив в уравнение непрерывности, учитывающее рекомбинацию

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} [\mu \mathbf{E} f_{\text{del}}(\mathbf{r}, t) - D \nabla f_{\text{del}}(\mathbf{r}, t)] + \varphi(\mathbf{r}, 0) f_{\text{loc}}(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, 0) \delta(t)$$

в соотношении (2) приходим к уравнению для концентрации делокализованных носителей

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{\text{del}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + (\tau_0 c^\alpha)^{-1} \exp\{-\gamma_{\text{rc}} t\} \frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} \exp\{\gamma_{\text{rc}} t\} f_{\text{del}}(\mathbf{r}, t) \\ + \operatorname{div} [\mu \mathbf{E} f_{\text{del}}(\mathbf{r}, t) - D \nabla f_{\text{del}}(\mathbf{r}, t)] = \delta(t) f(\mathbf{r}, 0). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь

$$\frac{\partial^\alpha f(\mathbf{r}, t)}{\partial t^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t f(\mathbf{r}, \tau) (t-\tau)^{-\alpha} d\tau$$

есть дробная производная Римана–Лиувилля. При дисперсионном переносе основная часть носителей пребывает в локализованных состояниях  $f(\mathbf{r}, t) \approx f_{\text{loc}}(\mathbf{r}, t)$  и первой производной по времени в уравнении (3) можно пренебречь. Решив полученное уравнение с учетом соотношения (2), приходим к выражению для полной концентрации:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}, t) = \exp\{-\gamma_{\text{rc}}(\mathbf{r})t\} \int_0^\infty \frac{1}{(4\pi D\tau)^{3/2}} \exp\left\{-\frac{(\mathbf{r} - \mu \mathbf{E}\tau)^2}{4D\tau}\right\} \\ \times \frac{ct}{\alpha\tau_0(\tau/\tau_0)^{1+1/\alpha}} g^{(\alpha)}(ct(\tau/\tau_0)^{-1/\alpha}) d\tau, \end{aligned}$$

где  $g^{(\alpha)}(t)$  — односторонняя устойчивая плотность с характеристическим показателем  $\alpha$ . Трансформанта Лапласа функции  $g^{(\alpha)}(t)$  имеет вид:  $\exp\{-s^\alpha\}$ .

Зависимость темпа рекомбинации  $\gamma_{\text{rc}}(\mathbf{r})$  от пространственной координаты  $\mathbf{r}$  определяется распределением рекомбинационных центров и типом рекомбинации. В случае туннельного механизма:  $\gamma_{\text{rc}}(\mathbf{r}) \propto e^{-2\beta r}$ , в случае модели энергетических переходов:  $\gamma_{\text{rc}}(\mathbf{r}) \propto r^{-6}$  (подробнее см. [4]). На рис. представлены результаты расчета концентрации носителей заряда по полученной формуле для случая туннельного механизма. Рекомбинационные центры находятся в решетке с периодом  $a = 1$ . Вблизи рекомбинационных центров возникают области обеднения носителями. Процесс рекомбинации ограничивается дисперсионной диффузией.

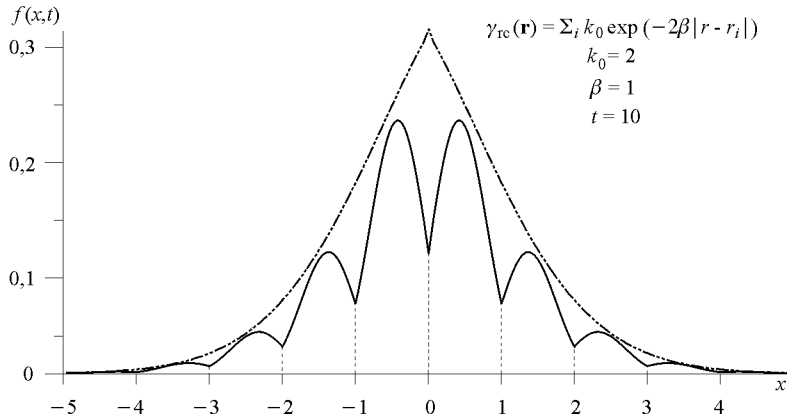


Рис. Суммарная концентрация носителей  $f(x, t)$  при дисперсионной диффузии ( $\alpha = 0,8$ ). Сплошная линия — с учетом туннельной рекомбинации, пунктирная — без учета рекомбинации

---

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 07–01–00517.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Коугия К. В., Теруков Е. И., Фус. В.* Рекомбинация в аморфном гидрогенизированном кремнии. — ФТП, 1998, т. 32, с. 923–930.
2. *Учайкин В. В., Сибаков Р. Т.* Дробные производные в теории полупроводников. — Обозрение прикл. и пром. матем., 2005, т. 12, в. 2, с. 540–542.
3. *Сибаков Р. Т., Учайкин В. В.* Дробно-устойчивые распределения в теории дисперсионного переноса заряда в неупорядоченных полупроводниках. — Обозрение прикл. и пром. матем., 2005, т. 12, в. 4, с. 1085–1087.
4. *Seki K., Wojcik M., Tachiya M.* Dispersive-diffusion-controlled distance-dependent recombination in amorphous semiconductors. — J. Chem. Phys., 2006, v. 124, p. 044702-1-044702-9.