Октябрь 2009 г. **Том 179, № 10**

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Дробно-дифференциальный подход к описанию дисперсионного переноса в полупроводниках

Р.Т. Сибатов, В.В. Учайкин

В обзоре излагается новый подход к описанию дисперсионного переноса в неупорядоченных полупроводниках, основанный на уравнениях с производными дробного порядка. Установлена связь автомодельности дисперсионного переноса, устойчивых предельных распределений и кинетических уравнений с дробными производными. Показано, что в отличие от известных моделей Шера – Монтролла и Архипова – Руденко, в определённом смысле альтернативных модели нормального переноса, дробно-дифференциальные уравнения описывают нормальный и дисперсионный перенос в рамках единого математического подхода. Дробно-дифференциальный формализм позволяет записать уравнения амбиполярного дисперсионного переноса и описать перенос в средах с распределённым дисперсионным параметром. Связь дробно-дифференциальных уравнений с обобщённой предельной теоремой вскрывает вероятностные аспекты феномена перехода от дисперсионного типа переноса к нормальному во времяпролётном эксперименте при уменьшении внешнего напряжения и/или увеличении толщины образца.

PACS numbers: 05.40.Fb, **72.20.–i**, **73.40.–c** DOI: 10.3367/UFNr.0179.200910c.1079

Содержание

1. **Введение (1079).**
2. **Универсальность кривых переходного тока и автомодельность дисперсионного переноса (1080).**
3. **От автомодельности к устойчивым законам и дробным производным (1082).**
4. **Модель Шера – Монтролла (1084).**
5. **Подход Архипова – Руденко (1086).**
6. **Физические основания степенно́го распределения времён ожидания (1088).**
7. **Дробно-дифференциальные уравнения дисперсионного переноса (1090).**
8. **Решения дробно-дифференциальных уравнений дисперсионного переноса (1091).**
9. **Связь с другими теориями (1092).**
10. **Учёт рекомбинации (1094).**
11. **Амбиполярный дисперсионный перенос (1095).**
12. **От переходного тока к распределению времён ожидания (1096).**
13. **Перенос в структурно неоднородных полупроводниках (1097).**
14. **Усечённые степенные распределения времён ожидания (1098).**
15. **Частотная зависимость проводимости (1100).**
16. **Частотные свойства диода при дисперсионном переносе (1100).**
17. **Заключение (1103).**

Список литературы (1103).

Р.Т. Сибатов, В.В. Учайкин. Ульяновский государственный университет,
ул. Л. Толстого 42, 432970 Ульяновск, Российская Федерация
Тел. (8422) 32-06-12
E-mail: ren_sib@bk.ru, uchaikin@sv.uven.ru

Статья поступила 26 декабря 2008 г.,
после доработки 15 мая 2009 г.

1. Введение

Дисперсионный (негауссов) перенос (ДП) [1, 2] наблюдается во многих неупорядоченных материалах, различающихся своей микроскопической структурой: в аморфном гидрированном кремнии [3, 4], аморфном селене [5, 6], аморфных халькогенидах [7, 8], в органических полупроводниках, полимерах [9 – 11], в пористых твёрдых телах [12 – 14], в наноструктурных материалах [15], в поликристаллических плёнках [16], жидких кристаллах [17] и др. Сопоставление результатов свидетельствует о наличии *универсальных* свойств переноса — свойств, не зависящих от детальной атомной и молекулярной структуры вещества [18]. ДП считается альтернативой гауссова переноса; впрочем, существуют попытки (см., например, [19]) описать дисперсионную диффузию с помощью обычного диффузионного уравнения и гауссовой формы пакета частиц. Излагаемый в настоящем обзоре дробно-дифференциальный подход отражает намечающуюся перспективу развития нормальной и аномальной кинетики в рамках единого математического формализма.

Впервые дробные производные в теории полупроводников использованы в книге Бабенко [20] для нахождения временно́й зависимости концентрации на границе p – n-перехода при нормальном переносе по заданной плотности тока путём факторизации оператора нормальной диффузии:

$$\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \left(\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} - \frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} + \frac{\partial}{\partial x}\right).$$

В теории дисперсионного переноса дробные производные типа Римана – Лиувилля [21],

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_0^t \frac{f(t')}{(t-t')^\alpha}\,, \qquad 0 < \alpha < 1\,,$$

впервые появляются в статье Архипова, Поповой и Руденко [22] в 1982 г.: через интеграл дробного порядка была выражена связь концентраций свободных и локализованных носителей. В их последующих работах (см., например, [23 – 29]) чаще встречается другое приближённое соотношение между концентрациями локализованных и свободных носителей, которое сами авторы иногда называют "основным уравнением ДП". Это соотношение считается справедливым для любой плотности локализованных состояний, а в случае экспоненциальной плотности позволяет выразить результаты через элементарные функции. Основное уравнение ДП Архипова – Руденко приводит к диффузионному уравнению с переменными коэффициентом диффузии и подвижностью [25].

В терминах интегрального преобразования Лапласа из кинетических уравнений захвата – эмиссии, записанных Нуланди [6, 30], Тиджи [31] вывел уравнение переноса в пренебрежении диффузией для концентрации свободных носителей. Обратное преобразование Лапласа этого уравнения представляет собой дробно-дифференциальное уравнение [32].

Баркаи [33] применил дробно-дифференциальное уравнение Фоккера – Планка, предложенное в статье [34] Метцлера, Баркаи и Клафтера, для объяснения релаксации переходного фототока в аморфных полупроводниках. В [33] показана согласованность некоторых результатов, полученных на основе дробно-дифференциального подхода и предсказаний модели Шера и Монтролла [35]. Для оправдания введения дробно-дифференциального уравнения автор [33] приводит следующие слова: "Перенос в упорядоченных средах часто моделируется с помощью диффузионного уравнения. Этот подход наиболее прост и является самым распространённым. ДП типа Шера и Монтролла, экспериментально наблюдаемый в различных неупорядоченных полупроводниках, может быть феноменологически описан с помощью дробного уравнения Фоккера – Планка. Это единственный пример из всех физических явлений, в котором другой тип исчисления (в данном случае интегральное и дифференциальное исчисление дробного порядка) играет центральную роль". Авторы [34] не выводили уравнение строго из каких-то начальных посылок, а обосновали его адекватность аномальному переносу выполнением следующих требований.

1. В отсутствие внешней силы выполняется субдиффузионное соотношение для временно́й зависимости ширины пакета частиц.

2. При наличии внешней, не зависящей от времени нелинейной силы стационарное решение уравнения является больцмановским распределением.

3. Выполняется обобщённое соотношение Эйнштейна.

4. При устремлении дробного показателя к единице уравнение переходит в стандартное уравнение Фоккера – Планка.

Другое дробно-дифференциальное диффузионное уравнение, полученное в [36] простой заменой производной по времени в стандартном уравнении диффузии производной дробного порядка, рассматривает Бискерт [37] в отношении к переносу путём многократного захвата. Функция в этом уравнении с несохраняющейся нормировкой интерпретируется как концентрация делокализованных носителей. В [37, 38] не приводятся решения интерпретируемого уравнения и нет результатов применения уравнения к описанию времяпролётных экспериментов. Автор [38] использует это уравнение для объяснения степенно́го затухания фотопроводимости и степенно́й релаксации люминесценции в полупроводниках с экспоненциальной плотностью локализованных состояний.

Степенно́е затухание фотолюминесценции в аморфных полупроводниках описывается в [39, 40] на основе обобщённой модели случайных блужданий с рекомбинацией путём туннельных излучательных переходов. Рекомбинация ограничивается дисперсионной диффузией носителей. Авторы [40] в рамках предложенной модели составили дробно-дифференциальное уравнение для плотности распределения времени первого достижения. Для нахождения темпа рекомбинации [40] используется интегральное преобразование Лапласа предложенного уравнения.

В [41, 42] было показано, что главные асимптотические члены решений уравнений случайных блужданий модели Шера и Монтролла являются решениями дробно-дифференциальных уравнений. Функциями Грина последних являются дробно-устойчивые плотности. В [43] найдено решение уравнения, предложенного в работе Бискерта [37], в терминах устойчивых плотностей.

В настоящей работе показано, что дробно-дифференциальная кинетика является следствием автомодельности ДП. Об автомодельности свидетельствует универсальное поведение переходного фототока. Продемонстрирована связь дробно-дифференциального подхода с моделью Шера и Монтролла и моделью многократного захвата. Кроме того, показано, что дробно-дифференциальное уравнение Фоккера – Планка, которое применяет Баркаи [33], и уравнение для концентрации делокализованных носителей, используемое в [37] и обобщённое в [32] на случай диффузии со сносом, связаны соотношением, полученным Архиповым, Поповой и Руденко [22]. В дробно-дифференциальных уравнениях произведён учёт мономолекулярной рекомбинации и рекомбинации за счёт туннельных излучательных переходов. Рассмотрен случай распределённого дисперсионного параметра для моделирования неоднородных неупорядоченных сред. Составлены дробно-дифференциальные уравнения амбиполярного ДП. Для проверки адекватности выводимых уравнений и их решений аналитические результаты сравниваются с данными времяпролётного эксперимента. В некоторых случаях используется метод моделирования Монте-Карло в рамках схемы блужданий с непрерывным временем.

2. Универсальность кривых переходного тока и автомодельность дисперсионного переноса

Рассмотрим классический "времяпролётный" эксперимент по определению дрейфовой подвижности носителей заряда. Электроны и дырки обычно генерируются в образце световым импульсом лазера со стороны полупрозрачного электрода. К электродам прикладывается

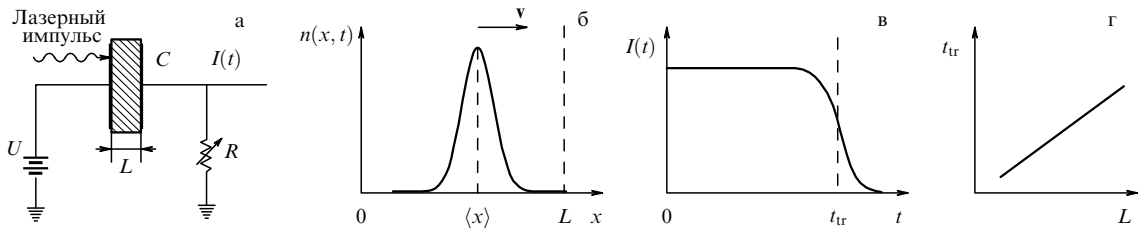

Рис. 1. Методика экспериментов по определению дрейфовой подвижности: (а) электрическая схема эксперимента, (б) распределение носителей заряда при нормальном переносе, (в) кривая переходного тока при нормальном переносе, (г) линейная зависимость времени пролёта от толщины образца.

напряжение такое, что соответствующее электрическое поле внутри образца значительно превышает поле неравновесных носителей заряда. Электроны (или дырки, в зависимости от знака напряжения) после генерации уходят в полупрозрачный электрод, дырки (или, соответственно, электроны) дрейфуют к противоположному электроду. В случае нормального переноса дрейфующие без захвата в поле E носители формируют прямоугольный импульс фототока

$$I(t) \propto \begin{cases} \text{const}\,, & t < t_{\text{tr}}\,, \\ 0\,, & t > t_{\text{tr}}\,, \end{cases} \tag{1}$$

где *время пролёта* t_{tr} определяется скоростью дрейфа v и длиной образца L: $t_{\text{tr}} = L/v$. В действительности рассеяние делокализованных носителей в процессе дрейфа, захват на локализованные состояния и термическое высвобождение носителей приводят к размытию пакета. Этот пакет имеет гауссову форму со средним значением $\langle x(t)\rangle \propto t$ и шириной $\Delta x(t) \propto \sqrt{t}$. В этом случае переходный ток $I(t)$ остаётся постоянным, пока передний фронт гауссова пакета не достигает другого края образца. Спад тока происходит в течение времени $\Delta x/\langle v\rangle$. В результате мы наблюдаем сглаженный правый край импульса фототока (рис. 1). Такая картина наблюдается в большинстве упорядоченных материалов.

Однако при определении дрейфовой подвижности в некоторых неупорядоченных полупроводниках (в аморфных, пористых, неупорядоченных органических, сильно легированных и др.) наблюдается специфический сигнал переходного тока $I(t)$, состоящий из двух областей со степенны́м поведением $I(t)$ и промежуточной области:

$$I(t) \propto \begin{cases} t^{-1+\alpha}\,, & t < t_{\text{tr}}\,, \\ t^{-1-\alpha}\,, & t > t_{\text{tr}}\,, \end{cases} \qquad \alpha < 1\,. \tag{2}$$

Показатель α, называемый *дисперсионным параметром*, зависит от характеристик среды и может зависеть от температуры. По аналогии с нормальными переходными процессами параметр t_{tr} называется временем пролёта, хотя имеет другой физический смысл. Экспериментально установлено, что при дисперсионном переносе

$$t_{\text{tr}} \propto \left(\frac{L}{U}\right)^{1/\alpha}, \tag{3}$$

где U — напряжение.

В работах [35, 44] отмечается, что форма сигнала переходного тока в приведённых координатах $\lg\,[I(t)/I(t_{\text{tr}})] - \lg\,[t/t_{\text{tr}}]$ практически не зависит от величины приложенного напряжения и размеров образца. Это свойство присуще многим материалам (не всем, см. [45]) и названо *свойством универсальности формы кривых переходного тока* (рис. 2). Распространённость этих особенностей для различных неупорядоченных материалов подтверждает *универсальность* свойств переноса. Большое количество экспериментальных наблюдений этой универсальности было представлено как в первых, так и в недавних работах (подробнее см. [1, 2, 35, 46, 47]).

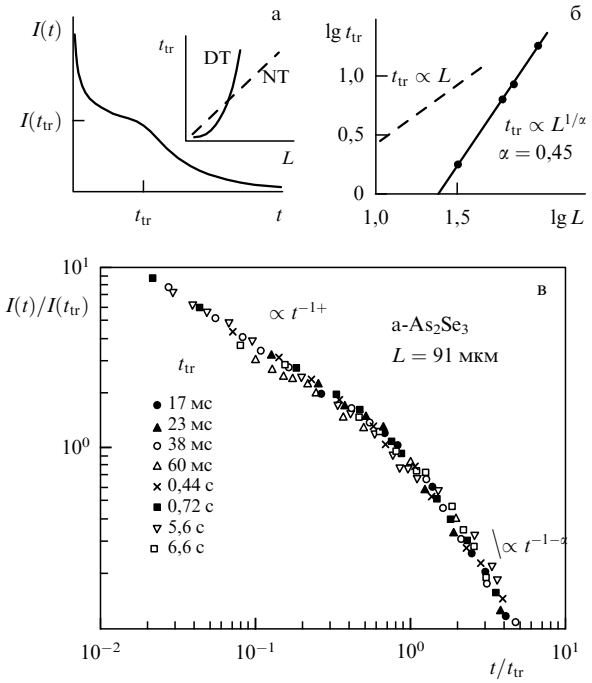

Рис. 2. (а) Кривая релаксации переходного фототока; на вставке — зависимость времени пролёта от толщины в случае дисперсионного переноса (DT) и нормального переноса (NT), (б) зависимость $\lg t_{\text{tr}} - \lg L$, точки — экспериментальные данные для a-As_2Se_3 из [35], сплошная линия — аппроксимация степенно́й зависимостью, (в) приведённые временны́е зависимости переходного фототока в a-As_2Se_3 в двойном логарифмическом масштабе из [35].

Если наблюдаются зависимости (2), (3), то кривые переходного тока автоматически обладают *асимптотическим свойством универсальности*. Действительно, перепишем (2) в виде

$$I(t) \sim \begin{cases} A(L, E, \alpha, \ldots)\, t^{-1+\alpha}\,, & t < t_{\text{tr}}\,, \\ B(L, E, \alpha, \ldots)\, t^{-1-\alpha}\,, & t > t_{\text{tr}}\,, \end{cases} \qquad \alpha < 1\,. \tag{4}$$

Время пролёта $t_{\rm tr}$ определяется по пересечению асимптотик:

$$I_{\rm tr} = A(L, E, \alpha, \ldots)\, t_{\rm tr}^{-1+\alpha} = B(L, E, \alpha, \ldots)\, t_{\rm tr}^{-1-\alpha}\,.$$

Осюда $t_{\rm tr} = (B/A)^{1/2\alpha}$. Свойство асимптотической универсальности означает, что функция $I(\tau t_{\rm tr})/I_{\rm tr}$ не зависит от $t_{\rm tr}$. Нетрудно заметить, что для функций с асимптотиками (3) это свойство справедливо:

$$\frac{I(\tau t_{\rm tr})}{I_{\rm tr}} \sim \begin{cases} \tau^{-1+\alpha}\,, & \tau < 1\,, \\ \tau^{-1-\alpha}\,, & \tau > 1\,, \end{cases} \qquad \alpha < 1\,.$$

Отметим, что значение $I(t_{\rm tr})$ не равно $I_{\rm tr}$ — точка $(t_{\rm tr}, I_{\rm tr})$ определяется по пересечению асимптотик переходного тока при малых и больших временах.

Переходный фототок в образце толщиной L определяется как усреднённая по толщине плотность тока проводимости:

$$I(t) = \frac{1}{L}\int_0^L j(x,t)\,{\rm d}x\,. \tag{5}$$

Очевидно, что на начальном этапе $t \ll t_{\rm tr}$ интеграл в последней формуле не зависит от L. Согласно (3) $t_{\rm tr} \propto L^{1/\alpha}$. Значит, для A, B и $I_{\rm tr}$ можно записать:

$$A \propto L^{-1}\,, \qquad B \propto A t_{\rm tr}^{2\alpha} \propto L\,, \qquad I_{\rm tr} \propto L^{-1/\alpha}\,.$$

Плотность тока $j(x,t)$ пропорциональна потоку вероятности $q(x,t)$:

$$j(x,t) = eNq(x,t)\,,$$

где e — элементарный заряд, N — число фотоинжектированных носителей, приходящееся на единицу площади освещаемого электрода. Поток вероятности эквивалентен плотности распределения времени первого достижения $p(t|x)$:

$$q(x,t) \equiv p(t|x)\,.$$

Произведение $p(t|x)\,{\rm d}t$ представляет собой вероятность того, что блуждающая частица (в нашем случае — носитель заряда) достигнет координаты x за время, лежащее в интервале $(t, t+{\rm d}t)$. Плотность распределения координаты блуждающей частицы $p(x|t)$ и поток вероятности $p(t|x)$ связаны уравнением сохранения вероятности

$$\frac{\partial p(x|t)}{\partial t} + \frac{\partial p(t|x)}{\partial x} = \delta(x)\delta(t)\,. \tag{6}$$

Универсальность формы кривых переходного тока представляет собой в математическом смысле свойство автомодельности (самоподобия) на временны́х масштабах:

$$I(t; L_2) \approx \left(\frac{L_2}{L_1}\right)^{-1/\alpha} I\left(t\left(\frac{L_2}{L_1}\right)^{-1/\alpha}; L_1\right), \tag{7}$$

где $I(t; L_1)$ и $I(t; L_2)$ — временны́е зависимости переходного тока в образцах толщиной L_1 и L_2 соответственно. Согласно (2) асимптотика переходного тока и плотности распределения времени первого достижения на больших временах является степенно́й с показателем α. Заменив плотность тока проводимости в (5) на плотность времени первого достижения, с учётом универсальности кривых переходного тока (7) можно показать, что функции $p(t|x)$ являются самоподобными на временны́х масштабах:

$$p(t|x_2) = \left(\frac{x_2}{x_1}\right)^{-1/\alpha} p\left(t\left(\frac{x_2}{x_1}\right)^{-1/\alpha}\middle| x_1\right).$$

Таким образом, свойство универсальности кривых переходного тока по отношению к изменению толщины образца и внешнего поля представляет собой самоподобие по времени (скейлинг) при изменении параметра $t_{\rm tr}$.

3. От автомодельности к устойчивым законам и дробным производным

Время достижения $\tau(kx)$ координаты kx (k — любое натуральное число) является случайной величиной и представляет собой сумму из k слагаемых — независимых случайных времён, за которые носитель проходит слои $(0,\, x), (x,\, 2x), \ldots, ((k-1)\,x,\, kx)$: $\tau(kx) = \sum_{j=1}^{k} \tau_j(x)$. Соответствующее распределение выражается k-кратной свёрткой распределений времён прохождения каждого слоя:

$$p(t|kx) = k^{-1/\alpha} p(tk^{-1/\alpha}|x) = p^{*k}(t|x)\,,$$

$$p^{*k}(t|x) = \int_0^t {\rm d}t\; p(t-t'|x)\, p^{*(k-1)}(t'|x)\,.$$

Применив преобразование Лапласа

$$\tilde{p}(s|x) = \int_0^\infty {\rm d}t\; p(t|x) \exp(-st)\,,$$

получим

$$\tilde{p}(s|kx) = \tilde{p}(k^{1/\alpha}s|x) = \left[\tilde{p}(s|x)\right]^k.$$

Прологарифмировав последнее соотношение и возведя его в степень $1/\alpha$, приходим к

$$\left[\ln \tilde{p}(s|kx)\right]^{1/\alpha} = \left[\ln \tilde{p}(k^{1/\alpha}s|x)\right]^{1/\alpha} = k^{1/\alpha}\left[\ln \tilde{p}(s|x)\right]^{1/\alpha}.$$

Из последних равенств следует

$$\left[\ln \tilde{p}(s|x)\right]^{1/\alpha} = s\left(-\frac{x}{K}\right)^{1/\alpha},$$

где K — некоторая константа. Для $\tilde{p}(s|x)$ получаем

$$\tilde{p}(s|x) = \exp\left(-\frac{x}{K}\, s^\alpha\right). \tag{8}$$

Эта функция является образом Лапласа односторонней устойчивой плотности с характеристическим показателем α (см., например, [48, 49]):

$$p(t|x) = \frac{1}{2\pi{\rm i}}\int_C {\rm d}s\; p(s|x) \exp(st) = \\ = \left(\frac{x}{K}\right)^{-1/\alpha} g^{(\alpha)}\left(t\left(\frac{x}{K}\right)^{-1/\alpha}\right). \tag{9}$$

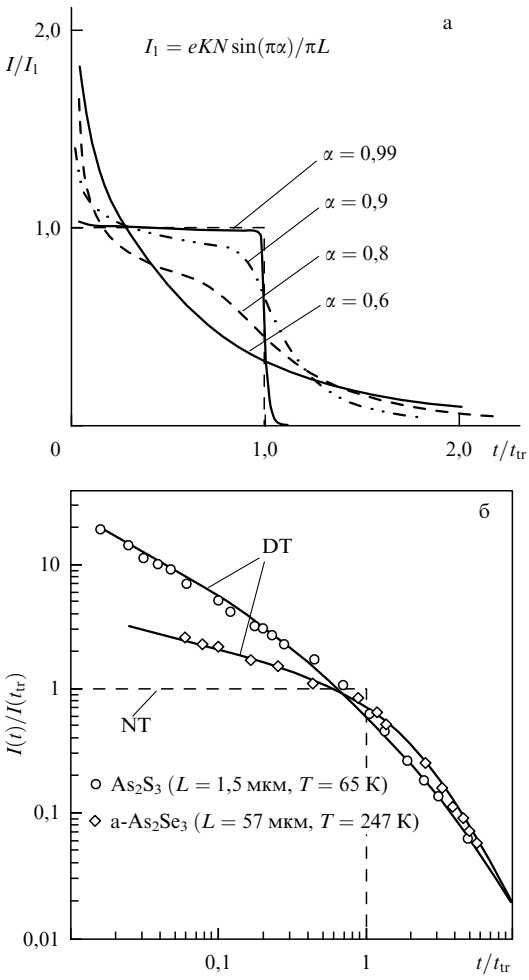

Рис. 3. (а) Теоретические кривые переходного фототока для различных значений дисперсионного параметра. (б) Приведённая плотность переходного тока (кружки — экспериментальные данные для стеклообразного As_2S_3 [8], ромбики — данные для a-As_2Se_3 [50], сплошные линии — расчёт по формуле (11), подгоночные параметры: α и t_{tr}).

Таким образом, плотность распределения времени первого достижения представляет собой одностороннюю устойчивую плотность с характеристическим показателем, равным дисперсионному параметру.

Подставив выражение для плотности тока проводимости

$$j(x,t) = eNp(t|x) = eN\left(\frac{x}{K}\right)^{-1/\alpha} g^{(\alpha)}\left(t\left(\frac{x}{K}\right)^{-1/\alpha}\right) \qquad (10)$$

в формулу (5), приходим к

$$I(t) = \frac{eKN\alpha}{L}\, t^{\alpha-1}\int_{\zeta_0}^{\infty} \zeta^{-\alpha} g^{(\alpha)}(\zeta)\,\mathrm{d}\zeta\,, \qquad \zeta_0 = t\left(\frac{L}{K}\right)^{-1/\alpha}. \quad (11)$$

На рисунке 3а представлены построенные по формуле (11) кривые переходного тока для различных значений дисперсионного параметра. Сравнение с экспериментальными данными из [8] и [50] для стеклообразного As_2S_3 и a-As_2Se_3, для которых наблюдается самоподобный дисперсионный перенос, показано на рис. 3б.

Проведём асимптотический анализ выражения (11). Для достаточно малых времён, когда $t \ll t_{tr}$ (выражение для t_{tr} будет получено ниже), ζ_0 есть малая величина. Используя формулу для моментов односторонних устойчивых распределений [48]

$$\int_0^{\infty} s^{-\alpha} g^{(\alpha)}(s)\,\mathrm{d}s = \frac{1}{\Gamma(1+\alpha)}\,,$$

получаем

$$I(t) \cong \frac{eKN}{L\Gamma(\alpha)}\, t^{\alpha-1}\,, \qquad t < t_{tr}\,. \qquad (12)$$

На больших временах, $t \gg t_{tr}$ и $\zeta_0 \gg 1$, плотность $g^{(\alpha,1)}(s)$ может быть представлена как [48]

$$g^{(\alpha,1)}(s) \cong \frac{\Gamma(1+\alpha)\sin\pi\alpha}{\pi s^{\alpha+1}}\,,$$

что приводит к асимптотике

$$I(t) \cong \frac{eNL}{2K\Gamma(1-\alpha)}\, t^{-\alpha-1}\,, \qquad t > t_{tr}\,. \qquad (13)$$

Приравнивая (12) и (13) между собой, для параметра t_{tr} получаем

$$t_{tr} = \left(\frac{L}{K}\sqrt{\frac{\Gamma(\alpha)}{2\Gamma(1-\alpha)}}\right)^{1/\alpha}. \qquad (14)$$

Из последней формулы видно, что при фиксированной температуре имеет место экспериментально подтверждаемое соотношение [35]: $t_{tr} \propto (L/E)^{1/\alpha}$. Дрейфовая подвижность определяется по формуле

$$\mu_{\mathrm{d}} = \frac{L}{Et_{tr}} = \frac{L}{E}\left(\frac{L}{K}\sqrt{\frac{\Gamma(\alpha)}{2\Gamma(1-\alpha)}}\right)^{-1/\alpha}.$$

Концентрация носителей $n(x,t)$, как следует из (6) и (9), равна

$$n(x,t) = Np(x|t) = -N\frac{\partial}{\partial x}\int_0^t p(t|x)\,\mathrm{d}t = \\ = \frac{Nt}{\alpha K}\left(\frac{x}{K}\right)^{-1/\alpha-1} g^{(\alpha)}\left(t\left(\frac{x}{K}\right)^{-1/\alpha}\right). \qquad (15)$$

Переходный ток выражается через полную концентрацию носителей согласно формуле (подробнее см. [2])

$$I(t) = \frac{e}{L}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^L (x-L)\,n(x,t)\,\mathrm{d}x\,.$$

Подставив для проверки в последнее выражение концентрацию (15), снова приходим к формуле (11).

Приведённая плотность распределения координаты и времени первого достижения носителя при дисперсионном характере движения в электрическом поле представлена на рис. 4. Графики на рис. 4а, б рассчитывались по формулам (15) и (9) соответственно.

Временна́я зависимость заряда, прошедшего через образец, определяемая по формуле

$$Q(t) = \int_0^t j(L,t)\,\mathrm{d}t = eNG^{(\alpha)}\left(t\left(\frac{L}{K}\right)^{-1/\alpha}\right),$$

представлена на рис. 5.

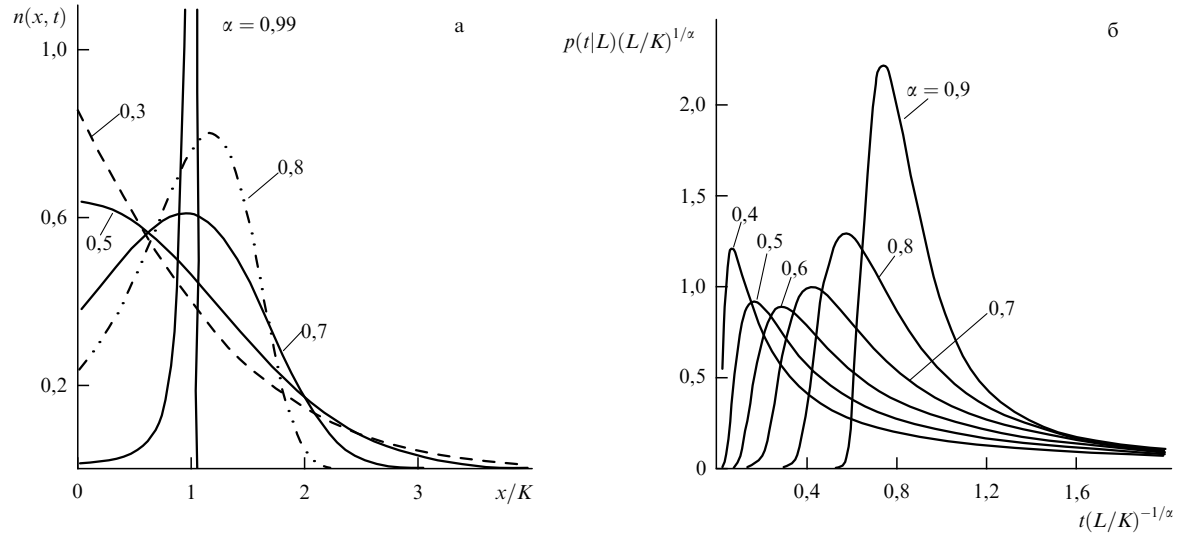

Рис. 4. (а) Плотности распределения координаты при дисперсионном дрейфе для различных значений дисперсионного параметра. (б) Плотность распределения времени первого достижения.

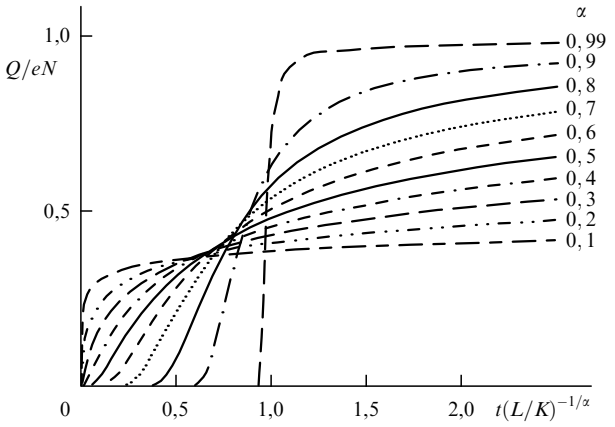

Рис. 5. Временна́я зависимость заряда, прошедшего через образец, для различных значений дисперсионного параметра.

Функции (9) и (15) являются решением уравнений с дробными производными. Покажем это. Трансформанта плотности распределения времени первого достижения (8) удовлетворяет уравнению

$$\frac{s^\alpha}{K}\,\tilde{p}(s|x) + \frac{\partial}{\partial x}\,\tilde{p}(s|x) = \delta(x)\,.$$

Учитывая, что после обратного преобразования Лапласа

$$s^\alpha \tilde{p}(s|x) \mapsto \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\,\frac{\partial}{\partial t}\int_0^t \frac{p(t'|x)}{(t-t')^\alpha}\,\mathrm{d}t' = \frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha}\,p(t|x)\,,$$

получаем дробно-дифференциальное уравнение для плотности $p(t|x)$:

$$K^{-1}\,\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha}\,p(t|x) + \frac{\partial}{\partial x}\,p(t|x) = \delta(x)\delta(t)\,.$$

Ввиду (10) аналогичное уравнение будет справедливо для плотности тока проводимости и концентрации свободных носителей. Здесь $\partial^\alpha/\partial t^\alpha$ — дробная производная Римана – Лиувилля порядка $0 < \alpha < 1$.

Образ Лапласа нормированной полной концентрации носителей (15),

$$\tilde{n}(x,s) = -N\,\frac{\partial}{\partial x}\,\frac{\tilde{p}(s|x)}{s} = -N\,\frac{\partial}{\partial x}\,\frac{1}{s}\,\exp\left(-\frac{x}{K}\,s^\alpha\right) =$$
$$= N\,\frac{s^{\alpha-1}}{K}\,\exp\left(-\frac{x}{K}\,s^\alpha\right) = N\,\frac{s^{\alpha-1}}{K}\,\tilde{p}(s|x)\,, \qquad (16)$$

является решением уравнения

$$s^\alpha \tilde{n}(x,s) + K\,\frac{\partial}{\partial x}\,\tilde{n}(x,s) = N s^{\alpha-1}\delta(x)\,,$$

обратное преобразование которого приводит к дробно-дифференциальному уравнению дисперсионного дрейфа:

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha}\,n(x,t) + K\,\frac{\partial}{\partial x}\,n(x,t) = \frac{N t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}\,\delta(x)\,. \qquad (17)$$

Таким образом, из универсальности кривых переходного тока и степенно́й зависимости времени пролёта от толщины образца без каких-либо дополнительных предположений относительно механизма переноса следует, что время первого достижения распределено по устойчивому закону с характеристическим показателем, равным дисперсионному параметру. Такое распределение времени первого достижения объясняет наличие степенны́х асимптотик переходного тока при больших и малых временах. Кроме того, плотность тока проводимости, концентрация свободных носителей и полная концентрация являются решениями дробно-дифференциальных уравнений. Отметим также, что вид устойчивой плотности тока проводимости согласуется с гипотезой Шера и Монтролла [35] о степенно́м распределении времён пребывания носителей в локализованных состояниях при ДП.

4. Модель Шера – Монтролла

В своей знаменитой работе 1975 г. Шер и Монтролл [35] на основе модели скачкообразных случайных блужданий с непрерывным временем (CTRW — Continuous Time

Random Walk) впервые дали подробное объяснение всех основных закономерностей поведения тока во времяпролётных экспериментах для аморфных полупроводников.

Основные положения модели Шера и Монтролла заключаются в следующем.

1. Перенос носителей заряда представляет собой скачкообразный процесс блуждания, при котором блуждающие частицы меняют свои позиции скачком в случайные моменты времени.

2. Прыжки носителей независимы друг от друга, интервалы времени между прыжками (*времена ожидания*) — независимые, одинаково распределённые случайные величины τ.

3. Времена ожидания имеют широкое распределение степенно́го типа

$$\mathsf{P}\{\tau > t\} \propto t^{-\alpha}, \qquad t \to \infty, \qquad 0 < \alpha < 1. \tag{18}$$

Впервые степенны́е асимптотики переходного тока (2) были объяснены с помощью CTRW-модели в работе Шлезингера [51], а само распределение степенно́го типа для времён ожидания в прыжковой модели переноса было получено из первых принципов в 1972 г. в работах Тунелея [52], Шера и Лакса [18]. В [35] авторы моделировали перенос заряда в неупорядоченных полупроводниках как перескоки носителей в модельной сетке локализованных состояний. Сетка представляет собой регулярную кубическую решётку, состоящую из ячеек, в каждой из которых случайным образом распределены узлы (локализованные состояния). Время ожидания до следующего перескока определяется расстоянием до ближайших соседних узлов. Распределение времени пребывания в ячейке, как показано в [35], может быть степенны́м вследствие пространственной разупорядоченности в ней узлов.

Положение (18) имеет принципиальное значение: именно такое распределение, имеющее бесконечное среднее значение, приводит к результату (2); любое распределение с конечным средним значением времени ожидания, например, экспоненциальное распределение, приводит к нормальному сигналу (1) [41]. Понятное объяснение того, почему бесконечное среднее значение не противоречит физическому смыслу, дано в [52]. В действительности расходимость интеграла

$$\lim_{T\to\infty} \int_0^T \psi(t)\, t\, \mathrm{d}t = \infty$$

означает только то, что мы не можем использовать $\langle\tau\rangle$ для вычислений. Поскольку

$$\lim_{T\to\infty} \int_T^\infty \psi(t)\, \mathrm{d}t = 0,$$

то все наблюдаемые реализации τ конечны и никакого парадокса нет.

Как известно, в основе описания нормального переноса лежит центральная предельная теорема теории вероятностей. Для случайных величин, распределённых по закону (18), расходимость дисперсии при $\alpha < 2$ и расходимость математического ожидания при $\alpha < 1$ делают эту теорему неприменимой, поэтому необходимо привлекать обобщённую предельную теорему.

Обобщённая предельная теорема. Пусть случайные величины X_j независимы, одинаково распределены и удовлетворяют условиям

$$\mathsf{P}(X > x) \sim a_+ x^{-\alpha}, \qquad x \to \infty,$$
$$\mathsf{P}(X < -x) \sim a_- x^{-\alpha}, \qquad x \to \infty,$$

$0 < \alpha \leqslant 2$, $a_+ \geqslant 0$, $a_- \geqslant 0$ и $a_+ + a_- > 0$. Тогда найдутся такие последовательности A_n и $B_n > 0$, что при $n \to \infty$

$$\frac{\sum_{j=1}^n X_j - A_n}{B_n} \overset{d}{\sim} S^{(\alpha,\beta)},$$

где $S^{(\alpha,\beta)}$ — устойчивая случайная величина с показателем α и параметром асимметрии $\beta = (a_+ - a_-)/(a_+ + a_-)$. Устойчивые случайные величины можно определить через характеристические функции, которые имеют вид (форма A) [48]

$$g^{(\alpha,\beta)}(k) = \exp\left\{-|k|^\alpha\left[1 - \mathrm{i}\beta\tan\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)\operatorname{sgn}(k)\right]\right\}, \quad \alpha \neq 1,$$
$$g^{(1,\beta)}(k) = \exp\left(-|k|\right).$$

Разумеется, существует бесконечное множество последовательностей нормирующих коэффициентов A_n, B_n с одним и тем же асимптотическим поведением при $n \to \infty$. В частности, они могут быть определены следующим образом ($a = \langle X\rangle$ и $c = a_+ + a_-$):

при $\alpha = 2$ $\quad A_n = na, \quad B_n = \sqrt{cn\ln n}$,

при $\alpha \in (1,2)$ $\quad A_n = na, \quad B_n = \left(\dfrac{\pi cn}{2\Gamma(\alpha)\sin(\alpha\pi/2)}\right)^{1/\alpha}$,

при $\alpha = 1$ $\quad A_n = \beta cn\ln n, \quad B_n = \dfrac{\pi cn}{2}$,

при $\alpha \in (0,1)$ $\quad A_n = 0, \quad B_n = \left(\dfrac{\pi cn}{2\Gamma(\alpha)\sin(\alpha\pi/2)}\right)^{1/\alpha}$.

В модели Шера и Монтролла времена ожидания τ, которые являются положительными случайными величинами, распределены по асимптотически степенно́му закону. Следовательно, в макроскопических масштабах, значительно превышающих среднее расстояние между локализованными состояниями, распределение времени первого достижения, плотность тока проводимости и концентрация делокализованных носителей, если их рассматривать как функции времени, будут иметь вид устойчивой плотности распределения, что согласуется с результатами (9) и (10), полученными в разделе 3.

Важнейшими характеристиками CTRW-модели являются распределения времён ожидания τ и пробегов λ. Обозначим плотности этих распределений как $\psi(t)$ и $p(\mathbf{r})$. Плотность распределения $p(\mathbf{r}, t)$ координаты частицы, совершающей скачкообразное блуждание и находившейся в начальный момент времени в начале координат, определяется в терминах преобразования Фурье–Лапласа [53]:

$$\hat{\tilde{p}}(\mathbf{k}, s) = \frac{1 - \tilde{\psi}(s)}{s\left[1 - \hat{p}(\mathbf{k})\tilde{\psi}(s)\right]}, \tag{19}$$

где

$$\hat{\tilde{p}}(\mathbf{k}, s) = \int_{\mathbf{R}} \mathrm{d}\mathbf{r}\, \exp(\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}) \int_0^\infty \mathrm{d}t\, \exp(-st)\, p(\mathbf{r}, t)$$

— преобразование Фурье – Лапласа нормированной концентрации частиц, $\hat{p}(\mathbf{k})$ — образ Фурье плотности распределения пробегов и $\tilde{\psi}(s)$ — образ Лапласа плотности распределения времён ожидания. После подстановки в уравнение (19) асимптотического разложения в ряд образа Лапласа плотности распределения времён ожидания со степенны́м хвостом

$$\tilde{\psi}(s) \sim 1 - \frac{s^\alpha}{c^\alpha}\,, \qquad s \ll c\,,$$

асимптотического разложения фурье-образа плотности распределения пробегов

$$\hat{p}(\mathbf{k}) \sim 1 + \mathbf{c}_1 \mathrm{i}\mathbf{k} - c_2 k^2\,, \qquad |\mathbf{k}| \ll \frac{1}{|\mathbf{c}_1|}$$

и, применив тауберову теорему [54], получим

$$\hat{\tilde{p}}(\mathbf{k}, s) = \frac{c^{-\alpha} s^{\alpha-1}}{-\mathbf{c}_1 \mathrm{i}\mathbf{k} + c_2 k^2 + s^\alpha / c^\alpha}\,.$$

Переписав последнее выражение в виде

$$[s^\alpha - \mathbf{c}_1 c^\alpha \mathrm{i}\mathbf{k} + c_2 c^\alpha k^2]\, \hat{\tilde{p}}(\mathbf{k}, s) = s^{\alpha-1}$$

и совершив обратные преобразования Фурье и Лапласа, приходим к

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha}\, p(\mathbf{r}, t) + \mathbf{K}\nabla p(\mathbf{r}, t) - C\nabla^2 p(\mathbf{r}, t) = \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}\, \delta(\mathbf{r})\,. \quad (20)$$

Это уравнение в одномерном случае при $C = 0$ совпадает с уравнением (17), полученным в разделе 3.

Таким образом, дробно-дифференциальные уравнения и их решения согласуются с моделью случайных блужданий Шера и Монтролла.

5. Подход Архипова – Руденко

В рамках теории переноса путём многократного захвата на локализованные состояния Архипов и Руденко в 1982 г. предложили подход, позволяющий получить аналитические результаты для описания дисперсионного переноса [23, 24]. Теория Архипова и Руденко достаточно популярна и используется в современных работах (см., например, [55, 56]). Приведём цитату из их работы [23], кратко описывающую подход: "Носители совершают переходы между локализованными состояниями и состояниями в зоне проводимости. Система в итоге приходит к равновесию между подвижными и захваченными носителями. Но прежде, чем тепловое равновесие установится, энергетический интервал, в котором распределены локализованные состояния, может быть разделен на две области. Первая область — область мелких ловушек, расположенная между краем зоны подвижности и некоторым граничным уровнем $\varepsilon_*(t)$. В этой области равновесие между состояниями зоны подвижности и ловушками устанавливается за некоторое время t... Вторая область — область глубоких ловушек, лежащих ниже граничного уровня $\varepsilon_*(t)$. Нет носителей, которые бы высвободились из этих ловушек до момента времени t. Концентрация носителей, захваченных глубокими ловушками, изменяется только из-за захватов, следовательно, для этой области можно пренебречь термоэмиссией в зону проводимости..." Этот подход является приближённым, тем не менее, он достаточно хорошо описывает основные особенности поведения переходного тока во времяпролётных экспериментах. В частности, объясняет степенны́е асимптотики переходного тока для экспоненциальной плотности состояний, степенну́ю зависимость дрейфовой подвижности от толщины образца и напряжённости электрического поля и др. [24].

С помощью разделения локализованных состояний на мелкие и глубокие получено уравнение неравновесного переноса с зависящими от времени коэффициентом диффузии D и подвижностью μ [23]:

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} + \mu_1(t) E\, \frac{\partial n(x,t)}{\partial x} - D_1(t)\, \frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} = \\ = -\lambda(t)\big[n(x,t) - n(x,0)\big]\,, \quad (21)$$

где функции времени определяются соотношениями

$$\mu_1(t) = \frac{1}{1 + 1/\theta(t)}\, \mu\,, \qquad D_1(t) = \frac{1}{1 + 1/\theta(t)}\, D\,,$$

$$\lambda(t) = \frac{1}{1 + 1/\theta(t)}\, \frac{1}{\tau(t)}\,, \quad (22)$$

$$\frac{1}{\theta(t)} = \int_0^{\varepsilon_*(t)} \mathrm{d}\varepsilon\, \frac{\rho(\varepsilon)}{N_\mathrm{c}} \exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right), \qquad \frac{1}{\tau(t)} = \int_{\varepsilon_*(t)}^\infty \mathrm{d}\varepsilon\, c(\varepsilon)\, \rho(\varepsilon)\,,$$

а положение демаркационного уровня находится путём решения уравнения

$$c(\varepsilon_*) N_\mathrm{c} \exp\left(-\frac{\varepsilon_*}{kT}\right) t = 1\,.$$

В случае слабой зависимости коэффициента захвата от энергии, $c(\varepsilon) \approx c_0$, демаркационный уровень равен $\varepsilon_* = kT \ln(\nu_0 t)$, где $\nu_0 = N_\mathrm{c} c_0$ — средняя частота попыток эмиссии.

В [23, 26] авторы особо выделяют режим сильно неравновесного переноса, когда большинство носителей захвачено на достаточно глубокие ловушки (ниже демаркационного уровня), освобождение с которых к моменту t остаётся маловероятным. Этот режим соответствует значениям дисперсионного параметра $\alpha < 0{,}5$. Соотношение, которое Архипов и Руденко называют основным уравнением ДП, имеет вид

$$n_\mathrm{c}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t}\big[\tau(t)\, n(\mathbf{r}, t)\big]\,, \quad (23)$$

где функция $\tau(t)$ определяется соотношением

$$\tau(t) = \left[\nu_0 \int_{kT\ln(\nu_0 t)}^\infty \mathrm{d}\varepsilon\, \rho(\varepsilon)\right]^{-1}.$$

Здесь $\rho(\varepsilon)$ — плотность локализованных состояний.

В этом режиме можно пренебречь вкладом носителей, находящихся на мелких ловушках, что эквивалентно пренебрежению производной по времени в уравнении (21) (подробнее см. [23]):

$$n(x,t) + \mu E \tau(t)\, \frac{\partial}{\partial x}\, n(x,t) - D\tau(t)\, \frac{\partial^2}{\partial x^2}\, n(x,t) = n(x,0)\,. \quad (24)$$

Уравнение (24) может быть непосредственно получено из уравнения непрерывности с помощью соотношения (23).

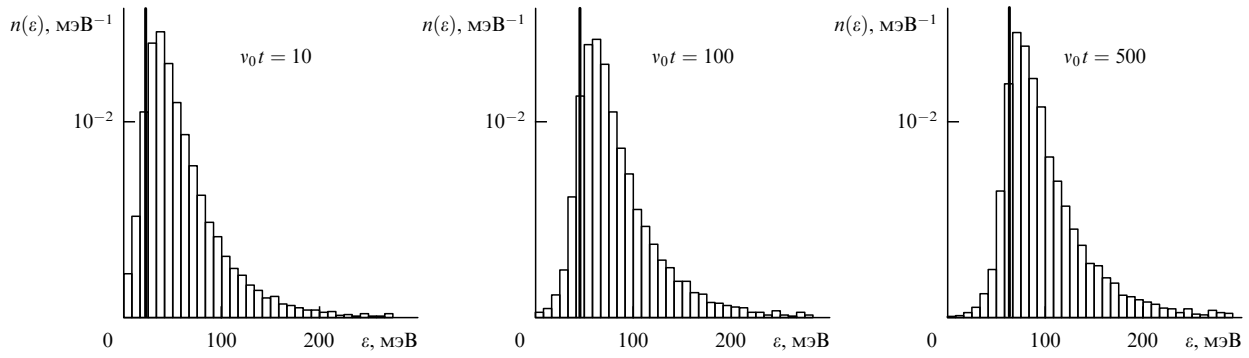

Рис. 6. Изменение со временем энергетического распределения носителей, $\varepsilon_0 = 40$ мэВ, $kT = 10$ мэВ.

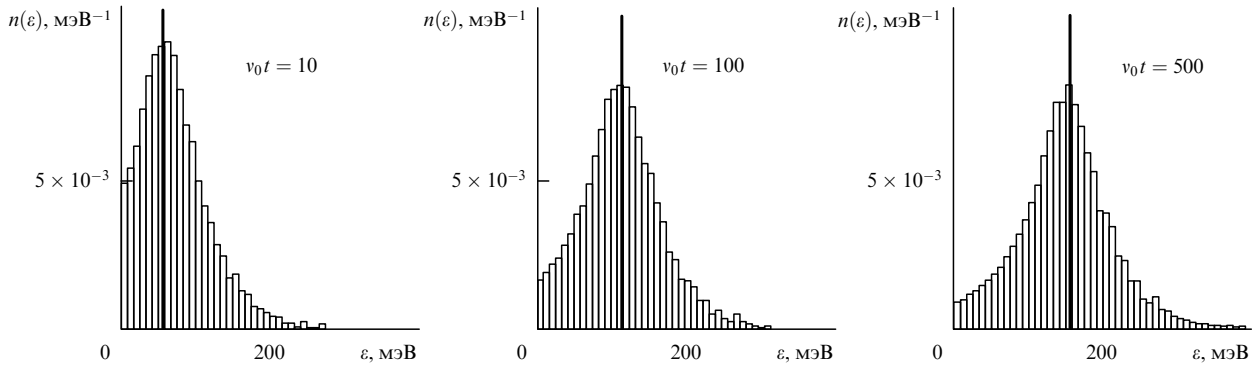

Рис. 7. Изменение со временем энергетического распределения носителей, $\varepsilon_0 = 40$ мэВ, $kT = 25$ мэВ.

При начальном условии $n(x,0) = N\delta(x)$ решением является экспоненциальная функция

$$n(x,t) = \frac{N}{\mu E \tau(t)} \exp\left(-\frac{x}{\mu E \tau(t)}\right). \tag{25}$$

Решения, полученные с помощью соотношения (23), а также сравнение этих решений с найденными нами в рамках дробно-дифференциального подхода будут приведены ниже.

Плотность делокализованных носителей, как следует из (23), имеет вид

$$n_{\mathrm{c}}(x,t) = Nx\,\frac{\tau'(t)}{\left[\mu E \tau(t)\right]^2} \exp\left(-\frac{x}{\mu E \tau(t)}\right). \tag{26}$$

Тогда переходный ток

$$I(t) = \frac{e\mu E}{L}\int_0^L \mathrm{d}x\, n_{\mathrm{c}}(x,t) = \\ = eN\mu E L^{-1}\tau'(t)\left[1 - \left(1 + \frac{L}{\mu E \tau(t)}\right)\exp\left(-\frac{L}{\mu E \tau(t)}\right)\right].$$

В случае экспоненциального энергетического распределения состояний хвоста зоны, при условии слабой зависимости коэффициента захвата от энергии функция $\tau(t)$ имеет вид [26, 29]

$$\tau(t) = \frac{N_{\mathrm{c}}}{N_{\mathrm{t}}}\, v_0^{-1}(v_0 t)^{\alpha}. \tag{27}$$

На рисунках 6 и 7 представлены гистограммы энергетического распределения носителей — результаты численного моделирования методом Монте-Карло процесса заполнения локализованных состояний во время-пролётном эксперименте для двух температур: 115 и 290 К. При моделировании использовалась экспоненциальная плотность состояний $\rho(\varepsilon) = (N_{\mathrm{t}}/\varepsilon_0)\exp(-\varepsilon/\varepsilon_0)$ шириной $\varepsilon_0 = 40$ мэВ. Жирная линия обозначает положение демаркационного уровня $\varepsilon_*(t) = kT\ln(v_0 t)$. Из рисунков видно, что для второго случая, т.е. для $T = 290$ К и $\alpha \approx 0{,}6$, τ-приближение является грубым — доля носителей в мелких ловушках $\varepsilon < \varepsilon_*$ значительна и её следует учитывать в расчётах.

Приближение, основанное на уравнениях (23) и (24), иногда называемое τ-приближением [11, 56], позволяет выразить все результаты в элементарных функциях в случае экспоненциальной плотности локализованных состояний, однако плохо описывает перенос для значений дисперсионного параметра $\alpha > 0{,}5$, в силу того, что нарушается главное положение этого приближения. Для значений $\alpha > 0{,}5$ долей носителей в мелких ловушках пренебрегать нельзя. Безусловно, это понимали и сами авторы [23], выводя τ-приближение для сильно неравновесного переноса. Неудивительно, что уравнение (24) не переходит в уравнение нормального переноса при $\alpha > 1$, где $\alpha = kT/\varepsilon_0$ для экспоненциальной плотности состояний. Но следует отметить, что и более общее уравнение (21) не удовлетворяет принципу соответствия, т.е. не переходит в уравнение нормального переноса при увеличении дисперсионного параметра.

Например, для экспоненциальной плотности состояний из (22) получаем

$$\frac{1}{\theta(t)} = \frac{\alpha N_{\mathrm{t}}}{(1-\alpha)N_{\mathrm{c}}}\left[(v_0 t)^{1-\alpha} - 1\right].$$

Для $\nu_0 t \gg 1$

$$\alpha < 1\,, \qquad \frac{1}{\theta(t)} \approx \frac{\alpha N_{\rm t}}{(1-\alpha)N_{\rm c}}(\nu_0 t)^{1-\alpha}\,,$$

$$\mu_1(t) \propto t^{\alpha-1}\,, \qquad D_1(t) \propto t^{\alpha-1};$$

$$\alpha \geqslant 1\,, \qquad \frac{1}{\theta(t)} \approx \frac{\alpha N_{\rm t}}{(\alpha-1)N_{\rm c}}\,,$$

$$\mu_1(t) \approx \text{const}\,, \quad D_1(t) \approx \text{const}\,.$$

В случае $\alpha = kT/\varepsilon_0 > 1$, как следует из модели Шера–Монтролла [35], численных и аналитических расчётов в рамках модели многократного захвата [31], дробно-дифференциального подхода [33, 32], в асимптотике больших времён должен иметь место режим нормального переноса. Уравнение (21) для $\alpha \geqslant 1$ имеет вид

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} + \mu_1 E\,\frac{\partial n(x,t)}{\partial x} - D_1\,\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} = \\ = -A(\nu_0 t)^{-\alpha}\big[n(x,t) - n(x,0)\big]\,,$$

где μ_1 и D_1 — постоянные, и

$$A = \frac{(\alpha-1)\nu_0 N_{\rm t}}{\alpha(N_{\rm c}+N_{\rm t}) - N_{\rm c}}\,.$$

Функция Грина последнего уравнения не является гауссовой функцией, несмотря на то, что в левой части содержится стандартный оператор Фоккера–Планка с постоянными коэффициентами.

6. Физические основания степенно́го распределения времён ожидания

Физические основания широкого степенно́го распределения времён ожидания (18) обсуждались во многих работах. В работе [57] показано, что такое распределение в случае механизма многократного захвата может быть следствием экспоненциального энергетического распределения локализованных состояний. Экспоненциальная форма плотности состояний хвостов зон широко использовалась в модельных расчётах и при обсуждении результатов экспериментов по переносу и люминесценции в неупорядоченных полупроводниках [57–59]. Однако, как отмечается в работах [25, 26], основные особенности распространения пакета носителей в условиях дисперсионного переноса, контролируемого захватом носителей на локализованные состояния, сохраняются и при других, достаточно широких энергетических распределениях ловушек. В чисто прыжковой модели перенос осуществляется путём туннелирования между соседними ловушками, а степенно́е распределение времён ожидания является следствием разброса расстояний между локализованными состояниями [31]. Дисперсионный перенос наблюдается в разных по своей природе неупорядоченных полупроводниках. Целесообразно исследовать общие математические принципы, которые в различных физических моделях приводят к аномальному переносу.

Случайное время ожидания τ в данном локализованном состоянии характеризуется вероятностью

$$\mathsf{P}\{\tau > t\} = \exp\left(-\frac{t}{\theta}\right), \tag{28}$$

где параметр θ представляет собой среднее время пребывания в выбранной ловушке.

В модели переноса, контролируемого многократным захватом (см., например, [6, 25, 60]),

$$\theta = \omega_\varepsilon^{-1}\exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right), \tag{29}$$

где ω_ε — скорость захвата носителей в ловушку с энергией ε.

В модели переноса путём туннелирования, предложенной в работе [61],

$$\theta = \beta\big[\exp(\gamma d) - 1\big]\,, \tag{30}$$

где d — расстояние до соседнего узла, γ — положительная постоянная, параметр β обратно пропорционален напряжённости приложенного поля.

В модели случайной сетки Миллера–Абрахамса для прыжковой проводимости (см., например, [62])

$$\theta = \left[\nu_0 \sum_j \exp\left(-\frac{2d_{ij}}{a} - \frac{\varepsilon_{ij}}{kT}\right)\right]^{-1}, \tag{31}$$

где ν_0 — характерная частота прыжков носителей, a — радиус локализации, d_{ij} — расстояние между i-м и j-м узлом, ε_{ij} — соответствующая разность энергий.

В неупорядоченных полупроводниках отсутствие дальнего порядка, разброс расстояний между ловушками, флуктуации энергии локализованных состояний приводят к тому, что параметр θ не одинаков для различных локализованных состояний. При усреднении по некоторому объёму образца величина θ выступает в роли случайной. Как следует из формул (29)–(31), небольшой разброс расстояний между ловушками и/или энергии локализованных состояний приводят к широкому распределению параметра θ, которое может иметь "тяжёлый" степенной хвост.

Рассмотрим случай (30). В этой модели предполагается, что носители совершают одномерное движение в положительном направлении оси x, определяемом направлением приложенного поля. На оси случайным образом расположены потенциальные ямы, переход носителей между которыми осуществляется путём туннелирования. В квазиклассическом приближении распределение случайного времени τ пребывания носителя заряда в данном узле даётся вероятностью (28).

В предположении об однородном характере распределения потенциальных ям на прямой

$$\mathsf{P}\{d > x\} = \exp\left(-\frac{x}{d_0}\right),$$

и, следовательно,

$$\mathsf{P}\{\theta > t\} = \mathsf{P}\Big\{\beta\big[\exp(\gamma d) - 1\big] > t\Big\} = \frac{1}{(1+t/\beta)^{\alpha_1}}\,, \tag{32}$$

где

$$\alpha_1 = \frac{1}{\gamma d_0}\,.$$

Согласно (28) условная вероятность при заданном θ

$$\mathsf{P}\{\tau > t|\theta\} = \exp\left(-\frac{t}{\theta}\right),$$

а из (32) следует, что θ имеет плотность распределения

$$p_\theta(t) = \frac{\alpha_1}{\beta(1+t/\beta)^{\alpha_1+1}}\,.$$

Тогда усредненная по θ, т.е. безусловная, вероятность для времени пребывания носителя в узле имеет вид

$$\mathsf{P}\{\tau > t\} = \int_0^\infty \mathsf{P}\{\tau > t\,|\theta = t'\}\,p_\theta(t')\,\mathrm{d}t' \sim$$
$$\sim \alpha_1\Gamma(\alpha_1)\left(\frac{t}{\beta}\right)^{-\alpha_1}, \qquad t \gg \beta. \tag{33}$$

В [35] указывается на то, что дисперсионное поведение может быть следствием многократного захвата на распределённые по энергиям локализованные состояния. В предположении о том, что плотность состояний ниже края подвижности экспоненциально спадает с энергией, можно прийти к (2) с параметром α_1, зависящим от температуры T. В случае экспоненциального хвоста плотности состояний

$$\rho(\varepsilon) \propto \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right),$$

считая, что скорость захвата слабо зависит от энергии ловушки $\omega_\varepsilon \approx \omega_0$, получаем

$$p_\theta(t) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathsf{P}\{\theta > t\} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathsf{P}\left\{\omega_0^{-1}\exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) > t\right\} =$$
$$= -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\omega_0 t)^{-\alpha_1} = \alpha_1\omega_0(\omega_0 t)^{-\alpha_1-1}\,,$$

где

$$\alpha_1 = \frac{kT}{\varepsilon_0}\,.$$

Безусловная вероятность для времени пребывания носителя в локализованном состоянии

$$\mathsf{P}\{\tau > t\} = \int_0^\infty \mathsf{P}\{\tau > t\,|\theta = t'\}\,p_\theta(t')\,\mathrm{d}t' \sim$$
$$\sim \alpha_1\Gamma(\alpha_1)(\omega_0 t)^{-\alpha_1}, \qquad t \gg \omega_0^{-1}\,. \tag{34}$$

Естественно, что энергетическое и пространственное распределения локализованных состояний в большинстве случаев отличаются от экспоненциального. Отметим, что экспоненциальное распределение имеет методический недостаток — оно характеризуется одним параметром: математическое ожидание этого распределения равно среднему квадратическому отклонению. Варьируя этот параметр, нельзя теоретически проследить изменение свойств переноса при переходе от упорядоченного расположения центров захвата к неупорядоченному.

Подробнее рассмотрим механизм многократного захвата. Возьмём вместо экспоненциального гамма-распределение, нормированную плотность которого запишем в виде

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\varepsilon_0}{\sigma_\varepsilon^2\,\Gamma(\varepsilon_0^2/\sigma_\varepsilon^2)}\left(\frac{\varepsilon_0\,\varepsilon}{\sigma_\varepsilon^2}\right)^{-1+\varepsilon_0^2/\sigma_\varepsilon^2}\exp\left(-\frac{\varepsilon_0\,\varepsilon}{\sigma_\varepsilon^2}\right), \tag{35}$$

где ε_0 и σ_ε^2 — средняя глубина залегания и средний квадрат флуктуаций энергии локализованных состояний соответственно. На рисунке 8 представлены графики

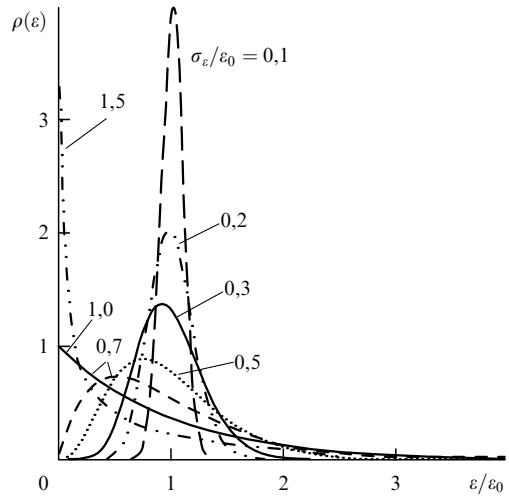

Рис. 8. Плотность гамма-распределения для различных значений отношения $\sigma_\varepsilon/\varepsilon_0$.

плотностей гамма-распределения. Параметр σ_ε представляет собой ширину распределения локализованных состояний, тем самым характеризуя степень неупорядоченности полупроводника. При устремлении σ_ε к нулю приходим к модели кристаллического полупроводника с одним уровнем захвата: $\rho(\varepsilon) \to \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$. Если $\sigma_\varepsilon = \varepsilon_0$, то получаем экспоненциальный хвост плотности локализованных состояний: $\rho(\varepsilon) = \varepsilon_0^{-1}\exp(-\varepsilon/\varepsilon_0)$,

$$p_\theta(t) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathsf{P}\{\theta > t\} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathsf{P}\left\{\omega_0^{-1}\exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) > t\right\} =$$
$$= -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathsf{P}\{\varepsilon > kT\ln\omega_0 t\} = \rho(kT\ln\omega_0 t)\,\frac{kT}{t}\,.$$

Таким образом, для плотности распределения параметра θ имеем

$$p_\theta(t) = \frac{\varepsilon_0 kT}{\omega_0\sigma_\varepsilon^2\,\Gamma(\varepsilon_0^2/\sigma_\varepsilon^2)}\left(\frac{\varepsilon_0 kT}{\sigma_\varepsilon^2}\ln\omega_0 t\right)^{-1+\varepsilon_0^2/\sigma_\varepsilon^2}(\omega_0 t)^{-1-kT\varepsilon_0/\sigma_\varepsilon^2}\,.$$

Тогда вероятность для распределения времени ожидания

$$\mathsf{P}\{\tau > t\} = \int_0^\infty \mathsf{P}\{\tau > t\,|\theta = t'\}\,p_\theta(t')\,\mathrm{d}t' \sim u(t)(\omega_0 t)^{-\alpha_1},$$
$$t \gg \omega_0^{-1}, \qquad \alpha_1 = kT\,\frac{\varepsilon_0}{\sigma_\varepsilon^2}\,, \tag{36}$$

где $u(t)$ — медленно меняющаяся функция.

Связь теории дисперсионного переноса с устойчивыми законами и обобщённой предельной теоремой позволяет нам уточнить условие дисперсионного переноса (18):

$$\mathsf{P}\{\tau > t\} \sim h(t)t^{-\alpha_1}, \qquad t \to \infty, \qquad \alpha_1 < 1\,,$$

где $h(t)$ — медленно меняющаяся функция в смысле Карамата (см. подробнее [54]), т.е. такая заданная на $[0,\infty)$ положительная функция, которая удовлетворяет условию

$$\frac{h(ta)}{h(t)} \to \mathrm{const} < \infty\,, \qquad t \to \infty$$

для любого $a > 0$.

Функция $u(t)$ в выражении (36) является медленно меняющейся. Дисперсионный перенос соответствует значениям $\alpha_1 < 1$. Согласно (36) это условие будет выполняться, если средний квадрат флуктуаций энергии локализованных состояний σ_ε^2, характеризующий неупорядоченность полупроводника, будет превышать произведение $kT\varepsilon_0$.

В модели туннелирования, предложенной в работе [61], для дисперсионного параметра получаем

$$\alpha_1 = \frac{d_0}{\sigma_d^2 \gamma}\,,$$

где d_0 и σ_d^2 — математическое ожидание и среднее квадратическое отклонение случайного расстояния между соседними узлами; и если $\sigma_d^2 > d_0/\gamma$, то полупроводник удовлетворяет условию дисперсионного переноса. Таким образом, в случае туннелирования перенос будет дисперсионным, если квадрат флуктуаций расстояния между ловушками превышает среднюю длину прыжка, умноженную на половину радиуса локализации волновой функции.

7. Дробно-дифференциальные уравнения дисперсионного переноса

В разделе 3 было показано, что дробно-дифференциальные уравнения дисперсионного переноса для времяпролётного эксперимента могут быть получены на основе свойства универсальности кривых переходного тока и степенно́й зависимости времени пролёта от толщины образца. В этом разделе мы составим более общие уравнения для трёхмерного случая с учётом диффузионного члена.

В модели многократного захвата носители разделяются на делокализованные и захваченные в ловушки. Делокализованные носители во внешнем электрическом поле $\mathbf{E}$, претерпевая рассеяние на фононах и неоднородностях, дрейфуют со средней скоростью $\mathbf{v} = \mu\mathbf{E}$, где μ — подвижность. Как отмечается в [31], при дисперсионном переносе подавляющая часть носителей захвачена ловушками, но именно свободные носители ответственны за перенос. В классической теории переноса заряда в кристаллических полупроводниках большинство кинетических уравнений записано для концентрации свободных носителей. В прыжковой модели все носители локализованы, а туннелирование из одной ловушки в другую и/или термоактивированные прыжки происходят практически мгновенно. Концентрация свободных носителей в прыжковой модели равна нулю, поэтому уравнение для свободных носителей имеет смысл только в случае механизма многократного захвата. Чтобы не выводить отдельно для каждого механизма обобщённое диффузионно-дрейфовое уравнение для полной концентрации, прибегнем к математическому приёму. После составления уравнений для делокализованных и захваченных в ловушки носителей, в случае прыжкового механизма переноса устремим число свободных зарядов к нулю, а скорость v к бесконечности. Переход от интегральных уравнений CTRW-модели к обобщённому одномерному дробно-дифференциальному диффузионному уравнению для полной концентрации в предположении об асимптотически степенно́м распределении времён ожидания произведён в работе [42].

Мы считаем, что перенос частиц происходит в регулярной среде, т.е. в одинаковых макроскопических объёмах материала частица испытывает в среднем приблизительно одинаковое число актов захвата. Плотность ловушек много больше, чем плотность носителей, участвующих в переносе. Число переходов в единицу времени в единичном объёме из состояния движения в состояние покоя $w_{\mathrm{M}\to\mathrm{R}}(\mathbf{r}, t)$, т.е. число актов захвата, пропорционально концентрации делокализованных носителей:

$$w_{\mathrm{M}\to\mathrm{R}}(\mathbf{r}, t) = \tau_0^{-1}\, n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t)\,.$$

Здесь τ_0 — среднее время движения между двумя попаданиями в локализованное состояние; в прыжковой модели $\tau_0 \to 0$. Полная концентрация носителей равна сумме концентраций подвижных $n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t)$ и захваченных в ловушки $n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t)$ носителей:

$$n(\mathbf{r}, t) = n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t) + n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t)\,;$$

при этом выполняется соотношение

$$n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \tau_0^{-1} n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t')\big[1 - \Psi(t - t')\big]\,\mathrm{d}t'\,, \tag{37}$$

где $\Psi(t)$ — функция распределения случайного времени пребывания в локализованном состоянии (см. раздел 2).

В качестве $\Psi(t)$ возьмём асимптотически степенну́ю функцию распределения

$$1 - \Psi(t) = \mathsf{P}\{\tau > t\} = \int_t^\infty \psi(t')\,\mathrm{d}t' \sim \frac{(ct)^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}\,, \quad \alpha \leqslant 1\,;$$

тогда соотношение (37) перепишется так:

$$\frac{\partial n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (\tau_0 c^\alpha)^{-1}\,\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\,\frac{\partial}{\partial t}\int_0^t \frac{n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t')}{(t - t')^\alpha}\,\mathrm{d}t'\,. \tag{38}$$

Интегро-дифференциальный оператор в этом выражении представляет собой дробную производную Римана – Лиувилля порядка $\alpha \leqslant 1$ (см., например, [21]):

$$\frac{\partial^\alpha n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\,\frac{\partial}{\partial t}\int_0^t \frac{n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t')}{(t - t')^\alpha}\,\mathrm{d}t'\,.$$

Выражение (38) перепишем в виде

$$\frac{\partial n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{\tau_0 c^\alpha}\,\frac{\partial^\alpha n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^\alpha}\,. \tag{39}$$

Последняя формула связывает концентрации свободных и локализованных носителей. Это соотношение в терминах преобразования Лапласа было записано для модели многократного захвата в [6, 31] и интерпретировано в терминах дробных производных в работе [42]. Выражение (38) с точностью до коэффициентов совпадает с полученным Архиповым, Поповой и Руденко в статье [22].

Поток выражается через концентрацию делокализованных носителей формулой

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{v} n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t) - D\nabla n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t)\,. \tag{40}$$

Здесь $\mathbf{v} = \mu\mathbf{E}$ — средняя скорость направленного движения частиц, D — коэффициент диффузии.

После подстановки (40) в уравнение непрерывности

$$\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{q}(\mathbf{r},t) = n(\mathbf{r},0)\,\delta(t) \tag{41}$$

с учётом (39) получаем *дробно-дифференциальное диффузионно-дрейфовое уравнение* для концентрации *делокализованных* носителей:

$$\frac{\partial n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \frac{l}{\tau_0 K}\frac{\partial^\alpha n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\partial t^\alpha} + \operatorname{div}\big(\mu\mathbf{E}\,n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t) - D\nabla n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)\big) = \\ = n(\mathbf{r},0)\,\delta(t)\,, \qquad K = c^\alpha l\,. \tag{42}$$

Уравнение для полной концентрации получим с учётом того, что подавляющая часть носителей для времён $t \gg c^{-1}$ захвачена в ловушки, т.е.

$$n(\mathbf{r},t) \approx n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r},t)\,.$$

Последнее следует из соотношения (39). Тогда, используя (39)–(41), получаем *дробно-дифференциальное диффузионно-дрейфовое уравнение* для *полной* концентрации:

$$\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}}\operatorname{div}\big(\mathbf{K}n(\mathbf{r},t) - C\nabla n(\mathbf{r},t)\big) = n(\mathbf{r},0)\,\delta(t)\,, \tag{43}$$

где $\mathbf{K} = \tau_0 K\mathbf{v}/l$ и $C = \tau_0 KD/l$.

Применяя к этому уравнению дробный интегральный оператор Римана–Лиувилля порядка $(1-\alpha)$, приходим к

$$\frac{\partial^\alpha n(\mathbf{r},t)}{\partial t^\alpha} + \operatorname{div}\big(\mathbf{K}n(\mathbf{r},t) - C\nabla n(\mathbf{r},t)\big) = \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}\,n(\mathbf{r},0)\,. \tag{44}$$

Концентрация $n(\mathbf{r},t)$ удовлетворяет условию нормировки:

$$\int_\infty n(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}V = N\,,$$

где N — число носителей заряда, участвующих в переносе. Во времяпролётном эксперименте N представляет собой количество фотоинжектированных носителей.

Дробное уравнение симметричной диффузии

$$\frac{\partial^\alpha n(\mathbf{r},t)}{\partial t^\alpha} = C\nabla^2 n(\mathbf{r},t) + \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}\,\delta(\mathbf{r}) \tag{45}$$

было получено Нигматуллиным [63, 64] при рассмотрении диффузии на фрактальных структурах, моделирующих пористые и неупорядоченные среды, и независимо Балакришнаном [65] для одномерного случая при обобщении броуновского движения. Дробно-дифференциальное уравнение Фоккера–Планка, описывающее случайное блуждание частицы во внешнем поле, исследовалось в работах [66–69, 33]. Баркаи [33] впервые показал, что дробное уравнение Фоккера–Планка, записанное для нормированной на единицу полной плотности распределения носителей, описывает аномальное поведение переходного тока (2).

Замена первой производной по времени в уравнении нормальной диффузии производной дробного порядка α приводит к уравнению для плотности с несохраняющейся нормировкой:

$$\frac{\partial^\alpha n(x,t)}{\partial t^\alpha} = C\,\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2}\,,$$

которое исследовал Хилфер [36, 70]. В работах [37, 38, 43] оно интерпретировано как макроскопическое уравнение диффузии для свободных носителей в режиме многократного захвата, т.е. $n(x,t) \equiv n_{\mathrm{c}}(x,t)$. Выражение для переходного фототока, полученное в [42] путём решения аналогичного дробно-дифференциального уравнения дисперсионного дрейфа

$$\frac{\partial^\alpha n_{\mathrm{c}}(x,t)}{\partial t^\alpha} = K\,\frac{\partial n_{\mathrm{c}}(x,t)}{\partial x}\,,$$

совпало с формулой из [71], выведенной в рамках теории многократного рассеяния [72].

8. Решения дробно-дифференциальных уравнений дисперсионного переноса

В рассматриваемой выше модели носитель может находиться в двух динамических состояниях: покой и движение. Если скачок из одной ловушки в другую происходит мгновенно, то будем считать, что в состоянии движения частица находилась бесконечно малое время. Суммарное время блуждания носителя складывается из времени t_{R}, которое носитель провёл в ловушках, и времени движения t_{M}:

$$t = t_{\mathrm{R}} + t_{\mathrm{M}}\,.$$

Для подавляющего большинства частиц, участвующих в дисперсионном переносе, $t_{\mathrm{R}} \gg t_{\mathrm{M}}$. Смещение носителя от своего первоначального положения напрямую зависит от времени движения. Уравнению (44) эквивалентна система из двух уравнений, первое из которых связывает координаты носителя со временем движения, а второе — время движения носителя с полным временем блуждания.

Для нахождения условной плотности распределения $p(t_{\mathrm{M}}|t)$ воспользуемся моделью случайных блужданий. Время t_{M} будем считать координатой процесса. Поскольку при дисперсионном переносе справедливо соотношение $t_{\mathrm{R}} \gg t_{\mathrm{M}}$ и, следовательно, $t \approx t_{\mathrm{R}}$, то плотность $p(t_{\mathrm{M}}|t)$ удовлетворяет уравнению односторонних скачкообразных фрактальных блужданий (подробнее см. [49]):

$$\frac{\partial^\alpha p(t_{\mathrm{M}}|t)}{\partial t^\alpha} + \frac{\tau_0 K}{l}\,\frac{\partial p(t_{\mathrm{M}}|t)}{\partial t_{\mathrm{M}}} = \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}\,\delta(t_{\mathrm{M}})\,, \tag{46}$$

решение которого выражается через одностороннюю устойчивую плотность с характеристическим показателем α:

$$p(t_{\mathrm{M}}|t) = \frac{ct}{\alpha t_{\mathrm{M}}}\left(\frac{t_{\mathrm{M}}}{\tau_0}\right)^{-1/\alpha} g^{(\alpha)}\left(ct\left(\frac{t_{\mathrm{M}}}{\tau_0}\right)^{-1/\alpha}\right). \tag{47}$$

Условная плотность распределения координаты $\mathbf{r}$ носителя при условии, что время движения равно t_{M}, удовлетворяет стандартному уравнению Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial p(\mathbf{r}|t_{\mathrm{M}})}{\partial t_{\mathrm{M}}} + \operatorname{div}\big(\mu\mathbf{E}\,p(\mathbf{r}|t_{\mathrm{M}}) - D\nabla p(\mathbf{r}|t_{\mathrm{M}})\big) = \delta(t)\,p(\mathbf{r}|0)\,. \tag{48}$$

Искомая плотность распределения $n(\mathbf{r}, t)$ находится по формуле

$$n(\mathbf{r}, t) = \int_0^t p(\mathbf{r}|t_{\mathrm{M}})\, p(t_{\mathrm{M}}|t)\, \mathrm{d}t_{\mathrm{M}}\,. \tag{49}$$

Умножив уравнение (46) на $p(\mathbf{r}|t_{\mathrm{M}})$ и проинтегрировав его от 0 до t с учётом (48), приходим к уравнению (44). Таким образом, решение дробно-дифференциального уравнения (44) можно получить путём подстановки решения уравнения в частных производных целых порядков (48) и выражения (47) в формулу (49). Впервые решение дробного уравнения Фоккера – Планка типа (43), которое в свою очередь эквивалентно уравнению (44), найдено в [33].

Решение дробно-дифференциального уравнения (42) для концентрации делокализованных носителей, имеющего смысл только в модели многократного захвата, найдём, используя соотношение (39), переписанное в виде

$$n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t) = \tau_0 c^{\alpha}\, \frac{\partial^{1-\alpha} n(\mathbf{r}, t)}{\partial t^{1-\alpha}}\,.$$

Подставив в последнюю формулу выражение (49) для $n(\mathbf{r}, t)$, приходим к

$$n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t) = \tau_0 c^{\alpha} \int_0^t p(\mathbf{r}|t_{\mathrm{M}})\, \frac{\partial^{1-\alpha} p(t_{\mathrm{M}}|t)}{\partial t^{1-\alpha}}\, \mathrm{d}t_{\mathrm{M}}\,.$$

Функция $\tau_0 c^{\alpha}\, \partial^{1-\alpha} p(t_{\mathrm{M}}|t)/\partial t^{1-\alpha}$ в этом выражении представляет собой условную плотность распределения $p(t|t_{\mathrm{M}})$. Действительно, из закона сохранения вероятности

$$\frac{\partial p(t_{\mathrm{M}}|t)}{\partial t} + \frac{\partial p(t|t_{\mathrm{M}})}{\partial t_{\mathrm{M}}} = \delta(t)\delta(t_{\mathrm{M}})$$

и уравнения (46), которое мы перепишем в виде

$$\frac{\partial p(t_{\mathrm{M}}|t)}{\partial t} + \tau_0 c^{\alpha}\, \frac{\partial}{\partial t_{\mathrm{M}}}\, \frac{\partial^{1-\alpha} p(t_{\mathrm{M}}|t)}{\partial t^{1-\alpha}} = \delta(t)\delta(t_{\mathrm{M}})\,,$$

следует равенство

$$p(t|t_{\mathrm{M}}) = \tau_0 c^{\alpha}\, \frac{\partial^{1-\alpha} p(t_{\mathrm{M}}|t)}{\partial t^{1-\alpha}}\,. \tag{50}$$

Условная плотность распределения $p(t|t_{\mathrm{M}})$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial p(t|t_{\mathrm{M}})}{\partial t_{\mathrm{M}}} + (\tau_0 c^{\alpha})^{-1}\, \frac{\partial^{\alpha} p(t|t_{\mathrm{M}})}{\partial t^{\alpha}} = \delta(t)\delta(t_{\mathrm{M}})\,.$$

Выражая решение последнего уравнения через устойчивые плотности (см. подробнее, например, [49]), имеем

$$p(t|t_{\mathrm{M}}) = c\left(\frac{t_{\mathrm{M}}}{\tau_0}\right)^{-1/\alpha} g^{(\alpha)}\left(ct\left(\frac{t_{\mathrm{M}}}{\tau_0}\right)^{-1/\alpha}\right). \tag{51}$$

Таким образом, концентрация делокализованных носителей равна

$$n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t) = \int_0^t p(\mathbf{r}|t_{\mathrm{M}})\, p(t|t_{\mathrm{M}})\, \mathrm{d}t_{\mathrm{M}}\,, \tag{52}$$

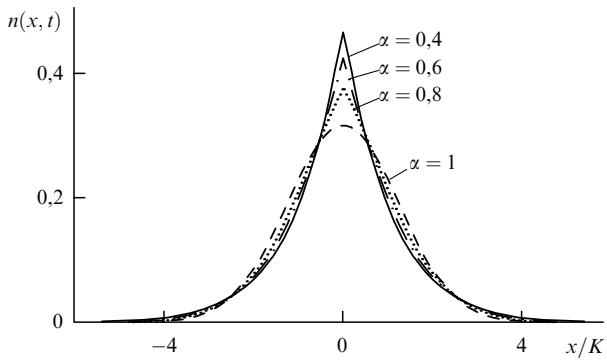

Рис. 9. Плотности распределения координаты при дисперсионной диффузии.

где функция $p(t|t_{\mathrm{M}})$ определена выражением (51), а плотность $p(\mathbf{r}|t_{\mathrm{M}})$ удовлетворяет стандартному уравнению Фоккера – Планка (48).

Профили распределения носителей при дисперсионной диффузии приведены на рис. 9.

9. Связь с другими теориями

Обоснованность дробно-дифференциального подхода заключается в четырёх взаимосвязанных положениях: автомодельность, степенной закон релаксации, устойчивые распределения, дробно-дифференциальные уравнения. Об автомодельности дисперсионного переноса свидетельствует свойство универсальности кривых переходного тока. Устойчивые распределения являются предельными для сумм независимых случайных величин, распределённых по асимптотически степенно́му закону. Устойчивые распределения сами имеют степенны́е "хвосты", удовлетворяют уравнениям с дробными производными и описывают степенну́ю кинетику. Решения этих дробно-дифференциальных уравнений самоподобны (автомодельны).

Согласованность дробно-дифференциального подхода и модели Шера – Монтролла обсуждалась в разделе 4. В частности, показан вывод уравнения дисперсионного переноса с дробной производной Римана – Лиувилля из уравнения Монтролла – Вейса для скачкообразных блужданий.

Рассмотрим связь модели многократного захвата и дробно-дифференциальных уравнений. Модель многократного захвата монополярной проводимости основана на уравнении непрерывности и следующих балансных уравнениях [6, 73, 74]:

$$\frac{\partial n_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \omega_i n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t) - r_i n_i(\mathbf{r}, t)\,, \tag{53}$$

$$n(\mathbf{r}, t) = n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t) + n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t), \qquad n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t) = \sum_i n_i(\mathbf{r}, t)\,,$$

где $n_i(\mathbf{r}, t)$ — концентрация носителей, захваченных ловушками с энергией ε_i. Скорости захвата ω_i и эмиссии r_i связаны условием детального равновесия:

$$\omega_i = r_i \exp\left(\frac{\varepsilon_i}{kT}\right).$$

Скорость захвата будем считать слабо зависящей от энергии ловушки: $\omega_i \approx \omega_0$.

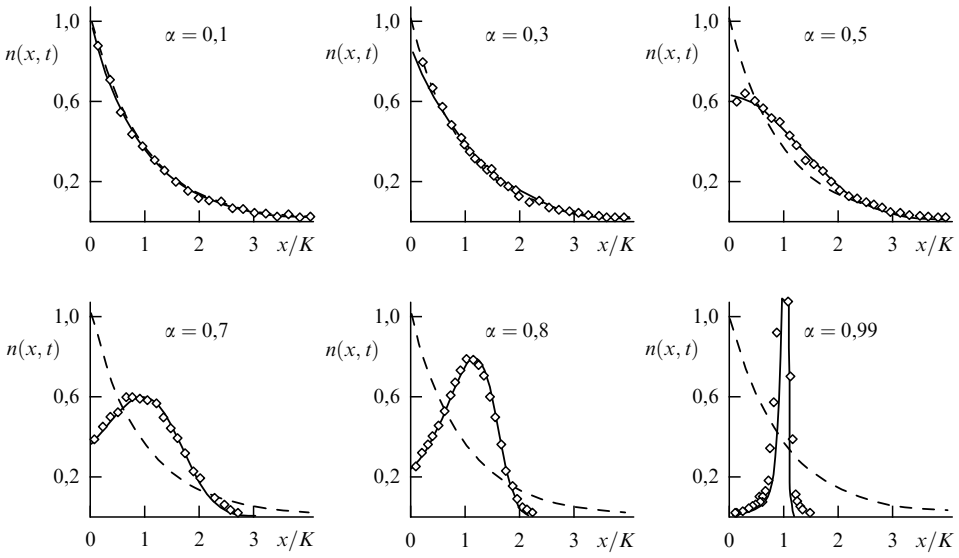

Рис. 10. Нормированная на единицу полная концентрация носителей. Точки — результат моделирования методом Монте-Карло в рамках схемы блужданий Шера – Монтролла, штриховые линии — результат, полученный с помощью основного уравнения ДП Архипова – Руденко [26], сплошные линии — плотности (15).

Решая уравнения (53) методом преобразования Лапласа для экспоненциального распределения хвоста плотности состояний

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon_0} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right),$$

Тиджи получил в работе [31]:

$$\frac{s}{\omega_0}\, \tilde{n}_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, s) = \frac{\pi\alpha}{\sin \pi\alpha}\, \frac{s^{\alpha}}{\omega_0^{\alpha}}\, \tilde{n}_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, s)\,, \tag{54}$$

где

$$\tilde{n}_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, s) = \int_0^{\infty} \mathrm{d}t\, n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t) \exp(-st)\,.$$

В случае, когда диффузией делокализованных носителей можно пренебречь, плотность тока проводимости $j = evn_{\mathrm{c}}(x, t) = eNp(t|x)$. С учётом соотношения (54) уравнение непрерывности для трансформанты концентрации делокализованных носителей имеет вид

$$\omega_0\, \frac{\pi\alpha}{\sin \pi\alpha} \left(\frac{s}{\omega_0}\right)^{\alpha} \tilde{n}_{\mathrm{c}}(x, s) + v\, \frac{\partial}{\partial x}\, \tilde{n}_{\mathrm{c}}(x, s) = N\delta(x)\,. \tag{55}$$

Решение этого уравнения

$$\tilde{n}_{\mathrm{c}}(x, s) = Nv^{-1} \exp\left(-\frac{x}{K}\, s^{\alpha}\right), \qquad c = \omega_0 \left(\frac{\pi\alpha}{\sin \pi\alpha}\right)^{-1/\alpha},$$
$$K = c^{\alpha} l\,, \qquad l = \frac{v}{\omega_0}$$

является трансформантой Лапласа устойчивой плотности

$$n_{\mathrm{c}}(x, t) = Nv^{-1} \left(\frac{x}{K}\right)^{-1/\alpha} g^{(\alpha)} \left(t \left(\frac{x}{K}\right)^{-1/\alpha}\right),$$

что согласуется с (9).

Отметим, что уравнения (53) не учитывают заполняемость состояний хвостов зон. В работе Архипова, Поповой и Руденко [22] с учётом конечности числа ловушек для экспоненциальной модели плотности локализованных состояний получено соотношение

$$n(\mathbf{r}, t) = \Gamma(1 + \alpha) \left(\frac{N_{\mathrm{t}}}{N_{\mathrm{c}}}\right)^{\alpha} \omega_0^{(1-\alpha)} \int_0^t \mathrm{d}t'\, \frac{n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t')}{(t - t')^{\alpha}} \times$$
$$\times \exp\left[-\frac{\omega_0}{N_{\mathrm{t}}} \int_{t'}^{t} \mathrm{d}t''\, n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t'')\right],$$

которое в приближении слабой заселённости ловушек переходит в дробно-дифференциальное соотношение (39). Здесь N_{c} и N_{t} — плотность подвижных состояний и суммарная плотность ловушек соответственно.

Нуланди [30] впервые показал, что модель многократного захвата в асимптотическом пределе математически эквивалентна модели случайных блужданий Шера и Монтролла. Однако некоторые эффекты при переносе путём многократного захвата модель Шера и Монтролла объяснить не в состоянии, например насыщение тока в результате заполнения состояний хвостов зон [22].

Сравнение решений, полученных в рамках дробно-дифференциального подхода, с рассчитанными из основного уравнения ДП (23) Архипова – Руденко представлено на рис. 10. При $\alpha > 0{,}5$ различие между решениями становится значительным. Нельзя не отметить важные особенности решения (25), следующие из уравнения τ-приближения (23), которые соответствуют основным характеристикам ДП. Согласно (27) средняя ширина пакета (т.е. среднеквадратическое отклонение нормированной плотности) и среднее смещение носителей растут со временем пропорционально t^{α}, а плотность переходного тока имеет степенны́е асимптотики, наблюдаемые в эксперименте. Однако при $\alpha \to 1$ перенос должен становиться нормальным, при этом в случае дрейфа концентрации носителей должны трансформироваться в дельта-функции, а сигнал переходного тока в ступеньку. Из формул (10), (15) и рис. 11 следует, что решения дробно-

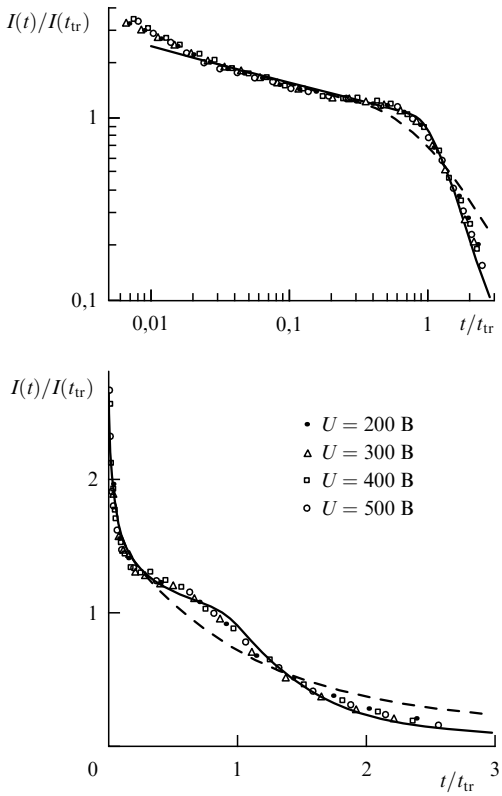

Рис. 11. Кривые переходного тока. Точки (оцифрованы с рисунка из статьи Шера и Монтролла [35]) — экспериментальные данные для органического комплекса тринитрофлуоренон – поливинилкарбазол (ТНФ – ПВК), полученные Гиллом (Gill). Штриховые линии — результат, полученный с помощью основного уравнения ДП Архипова – Руденко [25]. Сплошная линия — переходный ток (11). Дисперсионный параметр $\alpha = 0{,}8$ [35].

дифференциальных уравнений этому принципу (*принципу соответствия*) удовлетворяют, в то время как решения, полученные с помощью основного уравнения ДП Архипова и Руденко хорошо описывают только режим сильного ДП $\alpha \leqslant 0{,}5$. Сравнение фототока (11) с экспериментальными данными и результатом, полученным с помощью основного уравнения ДП [25], представлено на рис. 11.

Отметим также, что решения (10) и (15) подразумевают *вероятностную интерпретацию*. Концентрация свободных носителей (в случае "чистого" дрейфа) пропорциональна плотности тока проводимости и, следовательно, плотности распределения времени пролёта слоя заданной толщины. Если *мысленно* разделить слой на два одинаковых, то случайное время пролёта складывается из времён пролёта каждого из составных слоёв. Тогда должно выполняться соотношение

$$p(t|x) = \frac{\mu E}{N}\, n_{\mathrm{c}}(x,t) = \\ = \left(\frac{\mu E}{N}\right)^2 \int_0^t \mathrm{d}t'\, n_{\mathrm{c}}\left(\frac{x}{2}\,, t-t'\right) n_{\mathrm{c}}\left(\frac{x}{2}\,, t'\right). \qquad (56)$$

Свёртка двух устойчивых плотностей (с одинаковыми характеристическими показателями) будет снова устойчивой, а свёртка по времени функций (26) не приводит к функции того же вида, т.е. условие (56) для этих решений не выполняется.

10. Учёт рекомбинации

Произведём учёт рекомбинации в дробно-дифференциальных уравнениях дисперсионного переноса. Рассмотрим мономолекулярную рекомбинацию свободных носителей [75] и рекомбинацию локализованных носителей за счёт туннельных переходов [40]. Базовые балансные уравнения для модели переноса, контролируемого захватом на локализованные состояния, в случае наличия мономолекулярной рекомбинации имеют вид [76 – 79]

$$\frac{\mathrm{d}n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\mathrm{d}t} = -\sum_i \frac{\mathrm{d}n_i(\mathbf{r},t)}{\mathrm{d}t} - \frac{n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\tau} + N\delta(t)\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}n_i(\mathbf{r},t)}{\mathrm{d}t} = -r_i n_i(\mathbf{r},t) + \omega_i n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)\,.$$

Как следует из этих уравнений, линейная рекомбинация приводит к появлению соответствующего слагаемого в уравнении непрерывности:

$$\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{q}(\mathbf{r},t) = -\frac{n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\tau} + n(\mathbf{r},0)\,\delta(t)\,,$$

где τ — время жизни делокализованных носителей перед мономолекулярной рекомбинацией. Использование этого уравнения вместо (41) приводит к обобщённому диффузионному уравнению для концентрации неравновесных электронов $\delta n_{\mathrm{c}}(x,t)$ с учётом линейной рекомбинации:

$$\frac{\partial n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \frac{1}{\tau_{0\mathrm{n}} c_{\mathrm{n}}^{\alpha}} \frac{\partial^{\alpha} n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\partial t^{\alpha}} + \\ + \operatorname{div}\left(-\mu_n \mathbf{E}\, n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t) - D_n \nabla n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)\right) + \frac{\delta n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\tau_{\mathrm{n}}} = 0\,. \qquad (57)$$

Тогда уравнение для полной концентрации $n(\mathbf{r},t)$, представляющей собой сумму концентраций свободных и локализованных в состояниях хвостов зон носителей,

$$\delta n(\mathbf{r},t) = \delta n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r},t) + \delta n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)\,,$$

с учётом соотношения (39) запишем в виде

$$\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \tau_{0\mathrm{n}} c_{\mathrm{n}}^{\alpha} \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \Bigg[\operatorname{div}\left(-\mu_{\mathrm{n}} \mathbf{E}\, \delta n(\mathbf{r},t) - D_{\mathrm{n}} \nabla n(\mathbf{r},t)\right) + \\ + \frac{\delta n(\mathbf{r},t)}{\tau_{\mathrm{n}}} \Bigg] = \delta n(\mathbf{r},0)\,\delta(t)\,, \qquad (58)$$

или

$$\frac{\partial^{\alpha} n(\mathbf{r},t)}{\partial t^{\alpha}} + \operatorname{div}\left(-\mu_{\mathrm{n}} \tau_{0\mathrm{n}} c_{\mathrm{n}}^{\alpha} \mathbf{E}\, \delta n(\mathbf{r},t) - D_{\mathrm{n}} \tau_{0\mathrm{n}} c_{\mathrm{n}}^{\alpha} \nabla n(\mathbf{r},t)\right) + \\ + \tau_{0\mathrm{n}} K_{\mathrm{n}} \frac{\delta n(\mathbf{r},t)}{\tau_{\mathrm{n}}} = \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}\, \delta n(\mathbf{r},0)\,. \qquad (59)$$

Уравнение дисперсионного переноса для случая туннельных переходов локализованных носителей может быть получено на основе модели, предложенной Секи и др. [39, 40]. Они вывели дробно-дифференциальное уравнение для плотности распределения времени первого достижения. Нами получены уравнения для концентраций носителей и найдены их решения [80].

Время ожидания перед рекомбинацией в отсутствие случайного блуждания задаётся функцией распределения

$$\Phi(\mathbf{r},t)=\int_0^t \phi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}t\,.$$

В [40] рассматривается случай экспоненциального распределения

$$\phi(\mathbf{r},t)=\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})\exp\left[-\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})t\right], \tag{60}$$

где $\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})$ — зависящий от расстояния темп рекомбинации.

Для скачкообразного процесса с рекомбинацией плотность распределения времени выхода носителя из ловушки имеет вид

$$\psi_{\mathrm{out}}(\mathbf{r},t)=\psi(t)\left[1-\Phi(\mathbf{r},t)\right], \tag{61}$$

а плотность распределения времени рекомбинации описывается выражением

$$\psi_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r},t)=\phi(\mathbf{r},t)\left[1-\Psi(t)\right]. \tag{62}$$

Легко показать, что выполняется условие нормировки

$$\int_0^\infty \mathrm{d}t\left[\psi_{\mathrm{out}}(\mathbf{r},t)+\psi_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r},t)\right]=1\,.$$

При наличии рекомбинации вместо соотношения (37) для связи между концентрациями свободных и локализованных носителей получаем

$$n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r},t)=\\ =\int_0^t \tau_0^{-1}n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t')\left[1-\Psi_{\mathrm{out}}(\mathbf{r},t-t')-\Psi_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r},t-t')\right]\mathrm{d}t'\,, \tag{63}$$

где

$$\Psi_{\mathrm{out}}(\mathbf{r},t)=\int_0^t \mathrm{d}t\,\psi_{\mathrm{out}}(\mathbf{r},t)\,,\qquad \Psi_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r},t)=\int_0^t \mathrm{d}t\,\psi_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r},t)\,.$$

Учитывая, что

$$\Psi_{\mathrm{out}}(\mathbf{r},t)+\Psi_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r},t)=\Psi(t)+\Phi(\mathbf{r},t)-\Phi(\mathbf{r},t)\Psi(t)\,,$$

соотношение (63) перепишем в виде

$$n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r},t)=\int_0^t \mathrm{d}t'\,\tau_0^{-1}n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t')\left[1-\Psi(t-t')\right]\left[1-\Phi(\mathbf{r},t-t')\right]. \tag{64}$$

В случае экспоненциального распределения $\phi(t)$ имеем

$$\frac{\partial n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r},t)}{\partial t}=\\ =(\tau_0 c^\alpha)^{-1}\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\frac{\partial}{\partial t}\int_0^t \mathrm{d}t'\,\frac{n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t')}{(t-t')^\alpha}\exp\left[-\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})(t-t')\right]. \tag{65}$$

Подставив в уравнение непрерывности, учитывающее рекомбинацию,

$$\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial t}+\operatorname{div}\mathbf{q}(\mathbf{r},t)+\phi(\mathbf{r},0)n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r},t)=n(\mathbf{r},0)\delta(t)\,, \tag{66}$$

соотношение (64), приходим к уравнению для концентрации делокализованных носителей, которое в случае экспоненциального распределения времени рекомбинации запишется в виде

$$\frac{\partial n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\partial t}+(c^\alpha\tau_0)^{-1}\exp\left[-\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})t\right]\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha}n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)\exp\left[\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})t\right]+\\ +\operatorname{div}\left[\mu\mathbf{E}n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)-D\nabla n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)\right]=\delta(t)n(\mathbf{r},0)\,. \tag{67}$$

Уравнение для полной концентрации

$$\exp\left[-\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})t\right]\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha}n(\mathbf{r},t)\exp\left[\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})t\right]+(c^\alpha\tau_0)\times\\ \times\operatorname{div}\left[\mu\mathbf{E}\,n(\mathbf{r},t)-D\nabla n(\mathbf{r},t)\right]=\\ =\frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}\exp\left[-\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})t\right]n(\mathbf{r},0)\,. \tag{68}$$

Решение последнего уравнения выражается через устойчивую плотность [80]:

$$n(\mathbf{r},t)=\exp\left[-\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})t\right]\int_0^\infty\frac{1}{(4\pi D\tau)^{3/2}}\exp\left[-\frac{(\mathbf{r}-\mu\mathbf{E}\tau)^2}{4D\tau}\right]\times\\ \times\frac{ct}{\alpha\tau_0(\tau/\tau_0)^{1+1/\alpha}}\,g^{(\alpha)}\left(ct\left(\frac{\tau}{\tau_0}\right)^{-1/\alpha}\right)\mathrm{d}\tau\,.$$

Зависимость темпа рекомбинации $\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})$ от пространственной координаты $\mathbf{r}$ определяется распределением рекомбинационных центров и типом рекомбинации. В случае туннельного механизма $\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})\propto\exp(-2\beta r)$, в случае модели энергетических переходов $\gamma_{\mathrm{rc}}(\mathbf{r})\propto r^{-6}$ (подробнее см. [40]).

11. Амбиполярный дисперсионный перенос

Нормальная диффузия и нормальный дрейф носителей заряда в полупроводниках в случае двойной инжекции характеризуютя амбиполярным коэффициентом диффузии и амбиполярной подвижностью. При нормальном переносе в случае, когда $D_{\mathrm{n}}>D_{\mathrm{p}}$, диффузионный пакет электронов расширяется быстрее, чем пакет дырок. Возникает электрическое поле (поле амбиполярной диффузии), которое тормозит электроны и ускоряет дырки. В установившемся режиме потоки дырок и электронов равны друг другу. В случае дрейфа из-за неравенства подвижностей μ_{n} и μ_{p} во внешнем электрическом поле пакеты электронов и дырок приобретают общую, амбиполярную дрейфовую скорость. Дрейфовая подвижность при дисперсионном переносе, как показали времяпролётные эксперименты, зависит от толщины образца и напряжённости электрического поля, поэтому дрейфовую подвижность нельзя использовать в качестве характеристики амбиполярного транспорта. В модели Архипова – Руденко диффузионное уравнение содержит зависящие от времени коэффициент диффузии и подвижность; более того, эти коэффициенты зависят от начальных условий, поэтому тоже не подходят для описания амбиполярного дисперсионного переноса.

Попытаемся применить дробно-дифференциальный подход. Будем считать, что полупроводник однороден: коэффициент диффузии и подвижность не зависят от координат. Пусть выполняется условие квазинейтральности $\delta p=\delta n$. Времена жизни электронов и дырок одинаковы: $\tau_{\mathrm{n}}=\tau_{\mathrm{p}}$. Перепишем уравнение (59) диспер-

сионного переноса с мономолекулярной рекомбинацией для электронов и дырок в виде

$$\frac{\partial^{\alpha_\mathrm{n}} n}{\partial t^{\alpha_\mathrm{n}}} - \mu_\mathrm{n}^* n \operatorname{div}\mathbf{E} - \mu_\mathrm{n}^* \mathbf{E}\nabla n - D_\mathrm{n}^* \nabla^2 n + \frac{\delta n}{\tau^*} = \\ = \frac{t^{-\alpha_\mathrm{n}}}{\Gamma(1-\alpha_\mathrm{n})}\,\delta n(\mathbf{r},0)\,, \tag{69}$$

$$\frac{\partial^{\alpha_\mathrm{p}} p}{\partial t^{\alpha_\mathrm{p}}} + \mu_\mathrm{p}^* p \operatorname{div}\mathbf{E} + \mu_\mathrm{p}^* \mathbf{E}\nabla p - D_\mathrm{p}^* \nabla^2 p + \frac{\delta p}{\tau^*} = \\ = \frac{t^{-\alpha_\mathrm{p}}}{\Gamma(1-\alpha_\mathrm{p})}\,\delta p(\mathbf{r},0)\,, \tag{70}$$

где $D_\mathrm{n}^* = D_\mathrm{n}\tau_{0\mathrm{n}} c_\mathrm{n}^\alpha$ и $\mu_\mathrm{n}^* = \mu_\mathrm{n}\tau_{0\mathrm{n}} c_\mathrm{n}^\alpha$. Исключая из этих уравнений члены с $\operatorname{div}\mathbf{E}$, приходим к

$$\frac{1}{\mu_\mathrm{n}^* n + \mu_\mathrm{p}^* p}\left(\mu_\mathrm{n}^* n\,\frac{\partial^{\alpha_\mathrm{p}}}{\partial t^{\alpha_\mathrm{p}}} + \mu_\mathrm{p}^* p\,\frac{\partial^{\alpha_\mathrm{n}}}{\partial t^{\alpha_\mathrm{n}}}\right) p + \frac{\mu_\mathrm{p}^*\mu_\mathrm{n}^*(n-p)}{\mu_\mathrm{n}^* n + \mu_\mathrm{p}^* p}\,\mathbf{E}\nabla p - \\ - \frac{\mu_\mathrm{n}^* n D_\mathrm{p}^* + \mu_\mathrm{p}^* p D_\mathrm{n}}{\mu_\mathrm{n}^* n + \mu_\mathrm{p}^* p}\,\nabla^2 p + \frac{\delta p}{\tau^*} = \\ = \frac{1}{\mu_\mathrm{n}^* n + \mu_\mathrm{p}^* p}\left[\mu_\mathrm{n}^* n\,\frac{t^{-\alpha_\mathrm{p}}}{\Gamma(1-\alpha_\mathrm{p})} + \mu_\mathrm{p}^* p\,\frac{t^{-\alpha_\mathrm{n}}}{\Gamma(1-\alpha_\mathrm{n})}\right]\delta p(\mathbf{r},0)\,. \tag{71}$$

Вводя обозначения:

$$\sigma_\mathrm{n} = \mu_\mathrm{n} n\,, \qquad \sigma_\mathrm{p} = \mu_\mathrm{p} p\,, \qquad \sigma = \sigma_\mathrm{n} + \sigma_\mathrm{p}$$

— проводимости электронов и дырок и суммарная проводимость соответственно,

$$\mu_\mathrm{amb} = \frac{\mu_\mathrm{p}^*\mu_\mathrm{n}^*(n-p)}{\mu_\mathrm{n}^* n + \mu_\mathrm{p}^* p}$$

— амбиполярная подвижность,

$$D_\mathrm{amb} = \frac{\mu_\mathrm{n}^* n D_\mathrm{p}^* + \mu_\mathrm{p}^* p D_\mathrm{n}}{\mu_\mathrm{n}^* n + \mu_\mathrm{p}^* p}$$

— амбиполярный коэффициент диффузии, перепишем уравнение амбиполярного дисперсионного переноса с мономолекулярной рекомбинацией в виде

$$\frac{\sigma_\mathrm{n}}{\sigma}\,\frac{\partial^{\alpha_\mathrm{p}} p(\mathbf{r},t)}{\partial t^{\alpha_\mathrm{p}}} + \frac{\sigma_\mathrm{p}}{\sigma}\,\frac{\partial^{\alpha_\mathrm{n}} p(\mathbf{r},t)}{\partial t^{\alpha_\mathrm{n}}} + \mu_\mathrm{amb}\mathbf{E}\nabla p(\mathbf{r},t) - \\ - D_\mathrm{amb}\nabla^2 p(\mathbf{r},t) + \frac{\delta p(\mathbf{r},t)}{\tau^*} = \\ = \left[\frac{\sigma_\mathrm{n}}{\sigma}\,\frac{t^{-\alpha_\mathrm{p}}}{\Gamma(1-\alpha_\mathrm{p})} + \frac{\sigma_\mathrm{p}}{\sigma}\,\frac{t^{-\alpha_\mathrm{n}}}{\Gamma(1-\alpha_\mathrm{n})}\right]\delta p(\mathbf{r},0)\,. \tag{72}$$

Последнее уравнение амбиполярного переноса содержит две дробные производные, порядки которых в общем случае различаются.

12. От переходного тока к распределению времён ожидания

С плотностью распределения времён ожидания связаны важные физические харатеристики процесса и среды, в которой осуществляется перенос. В частности, в случае многократного захвата такой характеристикой является энергетическая плотность локализованных состояний, в случае туннелирования — пространственное распределение ловушек. Но даже не зная механизма переноса, а имея лишь плотность распределения времён ожидания при определённых физических условиях, можно с помощью феноменологического интегрального уравнения описать перенос при этих условиях. Возникает вопрос: как восстановить распределение времён ожидания по кривым переходного тока.

Предположения, в рамках которых применим предлагаемый алгоритм для восстановления искомой плотности, являются естественными для стандартных времяпролётных экспериментов.

1. Полупроводник считается однородным, а перенос в нём — макроскопическим.

2. Внешнее электрическое поле велико по сравнению с полем неравновесных носителей.

3. Носители движутся в положительном направлении оси x.

Переходный ток определяется с помощью формул

$$I(t) = \frac{1}{L}\int_0^L j(x,t)\,\mathrm{d}x\,, \qquad j(x,t) = eNp(t|x)\,.$$

Если мысленно разбить образец на одинаковые слои, поперечные электрическому полю, то носитель, преодолев n слоёв, имеет координату, приблизительно равную произведению числа n на ширину элементарного слоя l: $x \approx nl$. Время прохождения координаты x представляет собой сумму n случайных времён пребывания в каждом из слоёв, что в терминах распределений записывается с помощью свертки:

$$p(t|x) = \psi^{*n}(t)\,,$$

где $\psi(t)$ — плотность распределения времени пребывания в элементарном слое. Подставляя последнее выражение в формулу для переходного тока, получаем

$$I(t) = \frac{eN}{L}\int_0^L \psi^{*n}(t)\,\mathrm{d}x\,.$$

Преобразование Фурье превращает свёртку функций в произведение их образов Фурье, и интеграл легко вычисляется:

$$\tilde{I}(\omega) = \frac{eN}{L}\int_0^L \tilde{\psi}^{\,x/l}(\omega)\,\mathrm{d}x = \frac{eN}{L}\int_0^L \exp\left(\frac{x}{l}\ln\tilde{\psi}(\omega)\right)\mathrm{d}x = \\ = \frac{eNl}{L\ln\tilde{\psi}(\omega)}\left[\exp\left(\frac{L}{l}\ln\tilde{\psi}(\omega)\right) - 1\right].$$

Решение последнего уравнения записывается в виде

$$\ln\tilde{\psi}(\omega) = -\frac{l}{L}\,W\!\left(-\frac{eN}{\tilde{I}}\exp\left(-\frac{eN}{\tilde{I}}\right)\right) - \frac{eNl}{L\tilde{I}}\,, \tag{73}$$

где $W(x)$ — функция Ламберта, являющаяся решением трансцендентного уравнения $W\exp W = x$. Находя, таким образом, преобразование Фурье кривой переходного тока, вычисляя по формуле (73) трансформанту $\tilde{\psi}(\omega)$ и обращая её, приходим к плотности распределения времён ожидания.

Зная распределение времён ожидания, можно записать интегральное уравнение переноса в однородной

регулярной среде, контролируемой захватом на локализованные состояния. Как и ранее, предполагаем, что в любой области полупроводника концентрация ловушек значительно превосходит концентрацию носителей, участвующих в переносе. Плотности подвижных и локализованных носителей связаны соотношением

$$n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r},t) = \tau_0^{-1}\int_0^t n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t')\,Q(t-t')\,\mathrm{d}t'\,, \tag{74}$$

где $Q(t) = 1 - \Psi(t) = P(\tau > t)$ — дополнительная функция распределения времён пребывания носителей в ловушках. Концентрация $n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r},t)$ не зависит от энергии локализованных состояний, $Q(t)$ при этом представляет собой усреднённую по энергии функцию распределения времени ожидания в локализованных состояниях:

$$Q(t) = \left\langle \exp\left(-\omega_\varepsilon t\,\exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)\right)\right\rangle = \\ = N_{\mathrm{t}}^{-1}\int_0^{\varepsilon_g}\rho(\varepsilon)\exp\left(-\omega_\varepsilon t\,\exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)\right)\mathrm{d}\varepsilon\,.$$

Плотность делокализованных носителей может быть выражена через плотность захваченных носителей с помощью интегрального уравнения

$$n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t) = \tau_0\int_0^t n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r},t')\,Q^*(t-t')\,\mathrm{d}t'\,, \tag{75}$$

где $Q^*(t)$ — сопряжённое интегральное ядро, которое может быть определено в терминах преобразования Лапласа:

$$\hat{Q}^*(s) = \left[\hat{Q}(s)\right]^{-1}.$$

После подстановки одного из соотношений (74) или (75) в уравнение непрерывности (41) с учётом (40) приходим к уравнениям переноса для концентрации подвижных носителей

$$\frac{\partial n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \tau_0^{-1}\,\frac{\partial}{\partial t}\int_0^t n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t')\,Q(t-t')\,\mathrm{d}t' + \\ + \operatorname{div}\left[\mu\mathbf{E}\,n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t) - D\nabla n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)\right] = 0$$

и полной концентрации неравновесных носителей

$$\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \tau_0\int_0^t \mathrm{d}t'\,Q^*(t-t')\,\times \\ \times\operatorname{div}\left[\mu\mathbf{E}\,n(\mathbf{r},t') - D\nabla n(\mathbf{r},t')\right] = 0\,, \qquad n(r,t)\approx n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r},t)\,.$$

13. Перенос в структурно неоднородных полупроводниках

Релаксация переходного тока в некоторых неупорядоченных полупроводниках, например в пористом кремнии [81], имеет вид

$$I(t) \propto \begin{cases} t^{-1+\alpha_i}\,, & t < t_{\mathrm{tr}}\,, \\ t^{-1-\alpha_f}\,, & t > t_{\mathrm{tr}}\,, \end{cases} \qquad 0 < \alpha_i \neq \alpha_f < 1\,. \tag{76}$$

Модель Шера и Монтролла переноса заряда в неупорядоченных полупроводниках приводит к характеристикам (2), в которых $\alpha_i = \alpha_f = \alpha$. В [82] установлено, что значение α, определённое по зависимости времени пролёта носителей в пористом кремнии от напряжённости поля, отличается от значения, найденного по кривым переходного фототока. Для объяснения этого различия авторы предположили существование дополнительного разброса носителей по подвижностям в структурно неоднородных образцах пористого кремния. Естественно продолжить развитие этой идеи, предположив существование разброса параметра α. Ниже мы покажем, что этого предположения достаточно для обоснования результата (76), по крайней мере, в случае дискретного спектра $\{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m\}$.

Пусть k_j — доля ловушек, захватывающих носители на случайное время τ, распределённое по асимптотически степенно́му закону с показателем α_j. Усреднённая функция распределения времени пребывания носителя в локализованном состоянии имеет вид

$$\Psi(t) \sim 1 - \sum_j k_j\,\frac{(b_j\,t)^{-\alpha_j}}{\Gamma(1-\alpha_j)}\,,$$

где b_j — нормировочные константы. Подставив эту функцию в выражение (37), приходим к соотношению

$$\frac{\partial n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \frac{1}{\tau_0}\sum_j c_j^{-\alpha_j}\,\frac{\partial^{\alpha_j} n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t')}{\partial t^{\alpha_j}}\,, \qquad c_j = b_j\,(k_j)^{-1/\alpha_j}\,, \tag{77}$$

которое вместе с уравнением непрерывности (41) даёт диффузионно-дрейфовое уравнение для концентрации делокализованных носителей в случае дискретно распределённого дисперсионного параметра:

$$\frac{\partial n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \frac{1}{\tau_0}\sum_j c_j^{-\alpha_j}\,\frac{\partial^{\alpha_j} n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t')}{\partial t^{\alpha_j}} + \\ + \operatorname{div}\left(\mu\mathbf{E}\,n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t) - D\nabla n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)\right) = n(\mathbf{r},0)\,\delta(t)\,. \tag{78}$$

Вычислим переходный ток в структуре, перенос в которой описывается последним уравнением. Пренебрежём диффузией, а поле будем считать однородным. Направим ось x вдоль поля $\mathbf{E}$. Тогда уравнение (78) перепишется в виде

$$\frac{\partial n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \frac{1}{\tau_0}\sum_j c_j^{-\alpha_j}\,\frac{\partial^{\alpha_j} n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\partial t^{\alpha_j}} + \mu E\,\frac{\partial n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},t)}{\partial x} = N\delta(x)\,\delta(t)\,.$$

Преобразование Лапласа

$$\tilde{n}_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},s) = \int_0^\infty \mathrm{d}t\,n(\mathbf{r},t)\exp(-st)$$

последнего уравнения даёт

$$s\tilde{n}_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},s) + \frac{1}{\tau_0}\sum_j\left(\frac{s}{c_j}\right)^{\alpha_j}\tilde{n}_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},s) + \mu E\,\frac{\partial\tilde{n}_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},s)}{\partial x} = N\delta(x)\,.$$

Решение для случая $\alpha_j < 1$ имеет вид

$$\tilde{n}_{\mathrm{c}}(\mathbf{r},s) = \frac{N}{\mu ES}\exp\left[-\frac{x}{\mu E\tau_0}\sum_j\left(\frac{s}{c_j}\right)^{\alpha_j}\right], \qquad \mu E\tau_0 = l\,,$$

где S — поперечная полю площадь образца.

Поскольку мы считаем, что ловушки распределены однородно по образцу, то при $x \gg l$ (где l — среднее расстояние между ловушками) трансформанта плотно-

сти носителей заряда по времени равна

$$\tilde{n}(x,s) = \frac{N}{ls}\sum_j \left(\frac{s}{c_j}\right)^{\alpha_j} \exp\left(-\frac{x}{l}\sum_j \left(\frac{s}{c_j}\right)^{\alpha_j}\right). \qquad (79)$$

С учётом (79) для образа Лапласа переходного тока получаем:

$$\tilde{I}(s) = \frac{eNl}{L}\,\frac{1-\exp\left(-L\sum_j (s/c_j)^{\alpha_j}/l\right)}{\sum_j (s/c_j)^{\alpha_j}}. \qquad (80)$$

Если параметр α_j принимает только одно значение, то обратное преобразование Лапласа формулы (80) приводит к выражению (11).

Проведём асимптотический анализ зависимости переходного тока от времени. Согласно тауберовой теореме поведение функции $I(t)$ при $t \gg b_j^{-1}$ определяется поведением функции (80) при $s \ll b_j$:

$$\tilde{I}(s) \sim \frac{eNl}{L}\,\frac{2L\sum_j (s/b_j)^{\alpha_j}/l - \left(-L\sum_j (s/b_j)^{\alpha_j}/l\right)^2}{2\sum_j (s/b_j)^{\alpha_j}} \sim$$
$$\sim eN - \frac{eNL}{2l}\left(\frac{s}{b_{\min}}\right)^{\alpha_{\min}},$$

где $\alpha_{\min}$ — минимальное значение из набора $\{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m\}$, $b_{\min}$ — соответствующее ему значение нормировочной константы. Обратное преобразование Лапласа приводит к

$$I(t) \propto t^{-1-\alpha_{\min}}, \qquad t \gg b_j^{-1}.$$

В случае, если $s/b_j \gg (l/L)^{1/\alpha_j}$ для всех j, то

$$\tilde{I}(s) \sim \frac{eNl}{L\sum_j (s/b_j)^{\alpha_j}} \sim \frac{eNl}{L(s/b_{\max})^{\alpha_{\max}}}, \qquad s \gg b_j,$$

где $\alpha_{\max}$ — максимальное значение из набора $\{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m\}$, $b_{\max}$ — соответствующее ему значение нормировочной константы. Отсюда

$$I(t) \propto t^{-1+\alpha_{\max}}, \qquad t \ll b_j.$$

Таким образом, в случае, если показатель степени в распределении времени пребывания носителей в ловушке может принимать одно из значений упорядоченного набора $\{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m\}$ (дискретный спектр), то на начальном временно́м участке поведение переходного тока определяется максимальным значением $\alpha_{\max} = \alpha_m$, а на конечном — минимальным значением $\alpha_{\min} = \alpha_1 \neq \alpha_m$, что согласуется с упомянутыми выше экспериментами.

14. Усечённые степенные распределения времён ожидания

Если времена ожидания распределены по усечённому степенно́му закону, то они имеют конечную дисперсию. Центральная предельная теорема в этом случае применима, перенос в асимптотике достаточно больших времён должен быть нормальным. При анализе усечённых полётов Леви авторы [83, 84] показали, что вид распределения суммы таких случайных величин переходит от устойчивого закона Леви к гауссову при очень большом числе слагаемых. В данной работе мы рассмотрим влияние усечения степенно́го распределения времён ожидания на свойства дисперсионного переноса и, очевидно, что это влияние должно проявляться в некоторых масштабных эффектах. В частности, мы покажем, что усечённый вид степенно́го закона даёт вероятностную интерпретацию перехода от нормального типа переноса к дисперсионному и обратно в некоторых неупорядоченных полупроводниках при изменении размеров образца и величины электрического поля.

Введение усечения, по сути, модифицирует модель Шера и Монтролла, изменяя закон распределения времён пребывания носителей в ловушках. В качестве одной из причин усечённого степенно́го закона может рассматриваться рекомбинация, модель которой описана в разделе 10. Это случай, когда усечение степенно́й плотности $\psi(t)$ связано с "выбыванием" носителя из процесса переноса — общее число носителей уменьшается со временем. Далее нас будут интересовать случаи, когда число носителей, участвующих в переносе, сохраняется.

Вполне естественно, что степенно́е распределение времён ожидания имеет усечение. Причиной этого в модели многократного захвата может быть ограничение экспоненциального хвоста вследствие конечной величины щели подвижности, а в прыжковой модели — ограниченность максимальной длины перескока. Кроме того, усечение может быть следствием вторичного механизма переноса, действующего наряду с основным.

В работе [84] показано, что для усечённых полётов Леви можно получить аналитические результаты, взяв в качестве ограниченного распределения степенной закон, умноженный на медленно затухающую экспоненту. Пусть времена ожидания распределены согласно закону

$$1 - \Psi(t) = \mathsf{P}\{\tau > t\} \sim \frac{(ct)^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}\exp(-\gamma t), \qquad t \gg c^{-1}. \qquad (81)$$

Соответствующая плотность распределения имеет вид

$$\psi(t) \sim \exp(-\gamma t)\,\frac{(ct)^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}\left(\frac{\alpha}{t} + \gamma\right), \qquad t \gg c^{-1}. \qquad (82)$$

Плотность распределения суммы n слагаемых $\tau = \tau_1 + \tau_2 + \ldots + \tau_n$ выражается через n-кратную свёртку: $q(t|n) = \psi^{*n}(t)$. Совершив интегральное преобразование Лапласа, имеем $\tilde{q}(s|n) = [\tilde{\psi}(s)]^n$. Образ Лапласа плотности (82) имеет вид

$$\tilde{\psi}(s) \sim 1 - c^{-\alpha}\left[(s+\gamma)^{\alpha} - \gamma^{\alpha}\right], \qquad s \ll c.$$

Трансформанта плотности распределения суммы n независимых случайных времён,

$$\tilde{p}(s|n) \sim \exp\left[n\left(\frac{\gamma}{c}\right)^{\alpha} - n\left(\frac{s+\gamma}{c}\right)^{\alpha}\right], \qquad s \ll c, \qquad (83)$$

является образом Лапласа усечённой устойчивой плотности:

$$p(t|n) \sim \exp\left[n\left(\frac{\gamma}{c}\right)^{\alpha} - \gamma t\right] cn^{-1/\alpha} g^{(\alpha)}(ctn^{-1/\alpha}). \qquad (84)$$

Функция (83) удовлетворяет соотношению

$$\frac{\partial \tilde{p}(s|n)}{\partial n} = \gamma^{\alpha} c^{-\alpha}\tilde{p}(s|n) - c^{-\alpha}(s+\gamma)^{\alpha}\tilde{p}(s|n) + \delta(n),$$

обратное преобразование Лапласа которого приводит к дробно-дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial p(t|n)}{\partial n} = \gamma^{\alpha} c^{-\alpha} p(t|n) - \\ - c^{-\alpha} \exp(-\gamma t) \frac{\partial^{\alpha}}{\partial t^{\alpha}} \exp(\gamma t) p(t|n) + \delta(n)\delta(t) . \quad (85)$$

Поскольку у независимых, одинаково распределённых случайных времён ожидания конечны все моменты, то справедлива центральная предельная теорема. Используя формулу для моментов k-го порядка случайной величины τ,

$$m_k = (-1)^k \left[\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}s^k} \tilde{p}(s|n) \right]_{s=0} ,$$

находим математическое ожидание M_n суммы n случайных времён ожидания

$$M_n = \frac{\alpha n}{c} \left(\frac{\gamma}{c} \right)^{\alpha - 1}$$

и соответствующую дисперсию D_n

$$D_n = \frac{\alpha(1-\alpha)n}{c^2} \left(\frac{\gamma}{c} \right)^{\alpha - 2} .$$

Тогда согласно центральной предельной теореме для времён $t \gg \gamma^{-1}$

$$p_{\tau}(t) \sim D_n^{-1/2} \varphi\left(\frac{t - M_n}{\sqrt{D_n}} \right) ,$$

где $\varphi(t) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-t^2/2)$ — нормальная (гауссова) плотность распределения.

Таким образом, устойчивые распределения являются промежуточной асимптотикой для сумм рассматриваемых случайных величин. При достаточно большом числе слагаемых предельное распределение трансформируется из устойчивого с показателем $\alpha < 1$ в гауссово.

Теперь составим уравнение, которое описывает процесс переноса с усечёнными степенны́ми распределениями времён ожидания. Связь между концентрациями свободных и локализованных носителей

$$n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \tau_0^{-1} n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t') \left[1 - \Psi(t - t') \right] \mathrm{d}t' .$$

Переходя к трансформантам Лапласа, получаем

$$\tilde{n}_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, s) = \tau_0^{-1} (s + \gamma)^{\alpha - 1} \tilde{n}_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, s) \mapsto (s + \gamma) \tilde{n}_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, s) = \\ = \tau_0^{-1} (s + \gamma)^{\alpha} \tilde{n}_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, s) .$$

Обратное преобразование Лапласа последнего соотношения приводит к уравнению

$$\frac{\partial n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \gamma n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t) = \tau_0^{-\alpha} \exp(-\gamma t) \frac{\partial^{\alpha}}{\partial t^{\alpha}} \exp(\gamma t) n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t) ,$$

переписав которое в виде

$$n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t) = \tau_0^{\alpha} \exp(-\gamma t) \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \exp(\gamma t) n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t)$$

и подставив в уравнение непрерывности, получаем

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\mu \mathbf{E} n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t) - D \nabla n_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, t) \right) = 0 .$$

При дисперсионном переносе большинство носителей захвачено в ловушки, т.е. $n(\mathbf{r}, t) \approx n_{\mathrm{t}}(\mathbf{r}, t)$, следовательно,

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \left[\exp(-\gamma t) \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \exp(\gamma t) \times \right. \\ \left. \times \left(\mathbf{K} n(\mathbf{r}, t) - C \nabla n(\mathbf{r}, t) \right) \right] = 0 . \quad (86)$$

Константы K и C определяются так же, как и в уравнении (43). При устремлении α к единице полученное уравнение переходит в стандартное уравнение Фоккера – Планка. При $\gamma = 0$ это уравнение совпадает с (43), полученным для неусечённого степенно́го распределения времён ожидания.

Как следует из (84), плотность тока проводимости при импульсной инжекции для случая усечённых степенны́х распределений времён ожидания выражается как

$$j(x, t) = eN \exp \left[\frac{x}{l} \left(\frac{\gamma}{c} \right)^{\alpha} - \gamma t \right] c \left(\frac{x}{l} \right)^{-1/\alpha} g^{(\alpha)} \left(ct \left(\frac{x}{l} \right)^{-1/\alpha} \right) . \quad (87)$$

Плотность переходного тока определяется путём подстановки последнего выражения в формулу (5).

Для случая $\alpha = 1/2$ выражение для переходного тока имеет вид

$$I(t) = \frac{eNl\sqrt{c}}{L} \left\{ \frac{\exp(-\gamma t) - \exp\left[-\left(\sqrt{\gamma t} - 1/(2\sqrt{\tau}) \right)^2 \right]}{\sqrt{\pi t}} + \right. \\ \left. + \sqrt{\gamma} \left[\operatorname{erf}\left(\sqrt{\gamma t} \right) - \operatorname{erf}\left(\sqrt{\gamma t} - \frac{1}{2\sqrt{\tau}} \right) \right] \right\} . \quad (88)$$

Рисунок 12 демонстрирует трансформацию кривых переходного тока при увеличении отношения L/l. Для случая, когда время пролёта носителей значительно меньше времени усечения γ^{-1}, перенос остаётся дисперсионным и не переходит к гауссовой асимптотике. Если t_{tr} сравнимо с γ^{-1}, форма кривых переходного тока видоизменяется и не соответствует кривым ни для нормального, ни для дисперсионного переноса. При

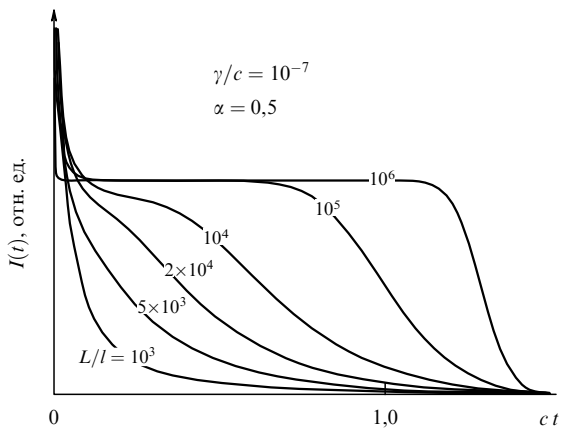

Рис. 12. Переходный фототок в случае усечённых степенны́х распределений времён ожидания для различных значений отношения L/l.

$t_{\rm tr} \gg \gamma^{-1}$ перенос в асимптотике больших времён становится нормальным.

15. Частотная зависимость проводимости

Частотная зависимость вещественной части проводимости неупорядоченных полупроводников часто хорошо описывается степенны́м законом:

$$\operatorname{Re}\sigma(\omega) = A\omega^{\gamma}\,, \tag{89}$$

где показатель степени γ обычно принимает значения от 0,7 до 1 [85]. Как отмечается в [2], зависимость вида (89) "характерна для очень широкого класса материалов".

Проводимость связана с подвижностью соотношением

$$\sigma(\omega) = e\eta\mu(\omega)\,.$$

Здесь η — концентрация эффективных носителей. Формула Найквиста (обобщение соотношения Эйнштейна), связывающая подвижность и коэффициент диффузии при ненулевых частотах, имеет вид

$$\mu(\omega) = \frac{e}{kT}\,D(\omega)\,,$$

где спектр шума по теореме Винера – Хинчина выражается через фурье-преобразование автокорреляционной функции скорости [86]:

$$\operatorname{Re} D(\omega) = \int_0^{\infty} \cos(\omega t)\,\big\langle v(t)v(0)\big\rangle\,\mathrm{d}t\,. \tag{90}$$

В [87] подчёркивается, что формула (90) важна потому, что "знание флуктуаций равновесного ансамбля *в отсутствие электрического поля* позволяет рассчитать линейный отклик системы (подвижность)". Шер и Лакс [87] показали, что соотношение (90) может быть записано так:

$$D(\omega) = -\frac{1}{6}\,\omega^2 \int_0^{\infty} \mathrm{d}t\,\exp(-\mathrm{i}\omega t)\big\langle\big[\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)\big]^2\big\rangle\,. \tag{91}$$

Последнее соотношение можно переписать в виде

$$D(\omega) = -\omega^2 \int_0^{\infty} \mathrm{d}x\,x^2\big[\tilde{n}(x,s)\big]_{s=\mathrm{i}\omega}\,, \tag{92}$$

где $\tilde{n}(x,s)$ — образ Лапласа по времени решения диффузионного уравнения.

Уравнение (86) для одномерного случая в отсутствие поля, при не зависящем от координат коэффициенте C, имеет вид

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = C\exp(-\gamma t)\,\frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}}\,\exp(\gamma t)\,\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2}\,.$$

Преобразование Лапласа последнего уравнения даёт

$$s\,\tilde{n}(x,s) = C\,(s+\gamma)^{1-\alpha}\,\frac{\partial^2\tilde{n}(x,s)}{\partial x^2} + \delta(x)\,.$$

Подставив решение этого уравнения

$$\tilde{n}(x,s) = \frac{s^{-1/2}(s+\gamma)^{(\alpha-1)/2}}{\sqrt{C}}\,\exp\left(-\frac{|x|}{\sqrt{C}}\,\sqrt{s(s+\gamma)^{\alpha-1}}\right)$$

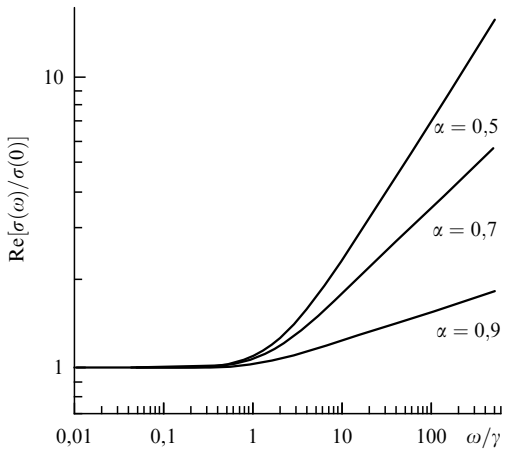

Рис. 13. Частотная зависимость проводимости для различных значений параметра α.

в выражение (92), получаем

$$D(\omega) = 2C\,(\gamma + \mathrm{i}\omega)^{1-\alpha}\,.$$

Отсюда

$$\operatorname{Re}\sigma(\omega) = \frac{e^2\eta}{kT}\,\operatorname{Re} D(\omega) = \\ = 2C\,\frac{e^2\eta}{kT}\,(\gamma^2+\omega^2)^{(1-\alpha)/2}\cos\left((1-\alpha)\arctan\frac{\omega}{\gamma}\right). \tag{93}$$

Для частот $\omega \gg \gamma$ имеем

$$\operatorname{Re}\sigma(\omega) = 2C\,\frac{e^2\eta}{kT}\,\omega^{1-\alpha}\sin\frac{\pi\alpha}{2}\,.$$

На рисунке 13 приведены вычисленные с помощью (93) кривые частотной зависимости проводимости. Формула (93) предсказывает степенну́ю зависимость от ω проводимости на больших частотах при дисперсионном переносе. Показатель степени может принимать значения от нуля до единицы, в случае нормального переноса ($\alpha \to 1$) проводимость вообще не зависит от частоты. В случае переноса, управляемого многократным захватом, показатель α линейно увеличивается с ростом температуры. Следовательно, показатель степени $s = 1-\alpha$ в частотной зависимости проводимости на переменном токе должен уменьшаться линейно по мере увеличения температуры. Такое температурное поведение наблюдается в ряде полупроводников (см., например, [88]).

16. Частотные свойства диода при дисперсионном переносе

В качестве примера применения уравнений с дробными производными приведём расчёт частотной зависимости проводимости диода на основе полупроводников, в которых реализуется дисперсионный перенос. Для решения поставленной задачи получим выражение для плотности переменного тока при подаче на диод с базой n-типа постоянного смещения U в пропускном направлении и малого переменного сигнала $u_1\exp(\mathrm{i}\omega t)$, амплитуда которого $u_1 \ll U$ и $u_1 \ll kT/e$, т.е.

$$u(t) = U + u_1\exp(\mathrm{i}\omega t)\,. \tag{94}$$

Полную концентрацию дырок в базе диода в этом случае можно представить как сумму постоянной $p_c^-(x)$ и переменной $p_c^\sim(x,t)$ составляющих, т.е. $p_c(x,t) = p_c^-(x) + p_c^\sim(x,t)$.

Решение данной задачи для диода на основе кристаллических полупроводников можно найти в [89, 90]. Рассматривается случай малого уровня инжекции, следовательно, плотность переменного тока через p–n-переход $J^\sim = -eD_p\,\partial p_c^\sim/\partial x\big|_{x=0}$. Выражение для $p_c^\sim(x,t)$ получим, решая обобщённое диффузионное уравнение с учётом линейной рекомбинации (см. уравнение (57)):

$$\frac{\partial p_c(x,t)}{\partial t} + \frac{1}{\tau_{0p}c_p^\alpha}\frac{\partial^\alpha p_c(x,t)}{\partial t^\alpha} = D_p\frac{\partial^2 p_c(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\Delta p_c(x,t)}{\tau_p}\,,$$

где $p_c(x,t)$ — концентрация делокализованных неравновесных носителей, τ_0 — среднее время единичного захвата на локализованные состояния в хвосте зоны. Раскладывая полную концентрацию неравновесных дырок на постоянную и переменную составляющие, получим

$$\frac{\partial p_c^\sim(x,t)}{\partial t} + \frac{1}{\tau_{0p}c_p^\alpha}\frac{\partial^\alpha p_c^\sim(x,t)}{\partial t^\alpha} = D_p\frac{\partial^2 p_c^-(x,t)}{\partial x^2} + D_p\frac{\partial^2 p_c^\sim(x,t)}{\partial x^2} - \frac{p_c^-(x) + p_c^\sim(x,t) - p_n}{\tau_p}\,,$$

где p_n — равновесная концентрация делокализованных дырок в n-области.

Поскольку для постоянной составляющей справедливо выражение

$$D_p\frac{\partial^2 p_c^-(x)}{\partial x^2} = \frac{p_c^-(x) - p_n}{\tau_p}\,,$$

то переменная составляющая удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial p_c^\sim(x,t)}{\partial t} + \frac{1}{\tau_{0p}c_p^\alpha}\frac{\partial^\alpha p_c^\sim(x,t)}{\partial t^\alpha} = D_p\frac{\partial^2 p_c^\sim(x,t)}{\partial x^2} - \frac{p_c^\sim(x,t)}{\tau_p}\,. \tag{95}$$

Применив преобразование Лапласа по времени

$$L_{p_c^\sim}(x,s) = \int_0^\infty p_c^\sim(x,t)\exp(-st)\,\mathrm{d}t$$

к диффузионному уравнению (95), приходим к

$$D_p\frac{\partial^2 L_{p_c^\sim}(x,s)}{\partial x^2} = \left(s + \frac{1}{\tau_{0p}c_p^\alpha}s^\alpha + \frac{1}{\tau_p}\right)L_{p_c^\sim}(x,s)\,. \tag{96}$$

Сформулируем граничные условия. Будем рассматривать переменный сигнал с частотами, при которых время пролёта носителей через область пространственного заряда p–n-перехода меньше, чем ω^{-1}. Тогда по аналогии со стационарной задачей запишем

$$p_c^-(0) + p_c^\sim(0,t) = p_n\exp\left(\frac{e}{kT}\big(U + u_1\exp(\mathrm{i}\omega t)\big)\right) \approx$$
$$\approx p_n\exp\left(\frac{eU}{kT}\right) + \frac{ep_n}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right)u_1\exp(\mathrm{i}\omega t)\,.$$

Отсюда

$$p_c^\sim(0,t) = \frac{ep_n}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right)u_1\exp(\mathrm{i}\omega t)\,.$$

Второе граничное условие $p_c^\sim(x\to\infty,t) = 0$. Учитывая граничные условия при решении уравнения (96), получаем

$$L_{p_c^\sim}(x,s) = L_{p_c^\sim}(0,s)\exp\left[-x\sqrt{D_p^{-1}\left(s + \frac{1}{\tau_{0p}c_p^\alpha}s^\alpha + \frac{1}{\tau_p}\right)}\,\right]. \tag{97}$$

Функция $\exp\left\{-x[D_p^{-1}(s + 1/(\tau_{0p}c_p^\alpha)s^\alpha + 1/\tau_p)]^{1/2}\right\}$ является образом Лапласа некоторой функции $y(x,t)$. Из (94), (97) следует, что

$$p_c^\sim(x,t) = \int_0^\infty p_c^\sim(0,t-t')\,y(x,t')\,\mathrm{d}t' =$$
$$= \frac{ep_n}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right)u_1\exp(\mathrm{i}\omega t)\times$$
$$\times\exp\left[-x\sqrt{D_p^{-1}\left(\mathrm{i}\omega + \frac{1}{\tau_{0p}c_p^\alpha}(\mathrm{i}\omega)^\alpha + \frac{1}{\tau_p}\right)}\,\right].$$

Плотность переменного тока через p–n-переход

$$J^\sim = -eD_p\frac{\partial p_c^\sim(x,t)}{\partial x}\bigg|_{x=0} = \frac{e^2p_nD_p}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right)\times$$
$$\times\sqrt{D_p^{-1}\left(\mathrm{i}\omega + \frac{1}{\tau_{0p}c_p^\alpha}(\mathrm{i}\omega)^\alpha + \frac{1}{\tau_p}\right)}\,u_1\exp(\mathrm{i}\omega t)\,.$$

Комплексная проводимость p–n-перехода

$$Y = S_{p-n}\frac{e^2p_nD_p}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right)\sqrt{D_p^{-1}\left(\mathrm{i}\omega + \frac{1}{\tau_{0p}c_p^\alpha}(\mathrm{i}\omega)^\alpha + \frac{1}{\tau_p}\right)}\,,$$

где S_{p-n} — площадь p–n-перехода. Выделяя действительную и мнимую части, приводим Y к виду

$$Y = G_{p-n} + \mathrm{i}\omega C_{\mathrm{dif}}\,,$$

где G_{p-n} — полная проводимость p–n-перехода, C_{dif} — диффузионная ёмкость p–n-перехода.

Для полной проводимости p–n-перехода получаем

$$G_{p-n} = S_{p-n}\sqrt{\frac{D_p}{2}}\,\frac{e^2p_n}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right)\times$$
$$\times\left\{\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_{0p}c_p^\alpha}\cos\frac{\pi\alpha}{2}\,\omega^\alpha + \left[\left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_{0p}c_p^\alpha}\cos\frac{\pi\alpha}{2}\,\omega^\alpha\right)^2 + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \left(\omega + \frac{1}{\tau_{0p}c_p^\alpha}\sin\frac{\pi\alpha}{2}\,\omega^\alpha\right)^2\right]^{1/2}\right\}^{1/2}.$$

Графики частотной зависимости проводимости, построенные по этой формуле, приведены на рис. 14. Здесь $\omega_0 = (\tau_0c^\alpha)^{-1/(1-\alpha)}$ и $A = S_{p-n}\sqrt{D_p/2}(e^2p_n/kT)\times\exp(eU/kT)\omega_0^{-1}$.

Устремляя α к единице ($\alpha\to 1$), приходим к классическому выражению, полученному для диода на основе кристаллических полупроводников (которое, например, приводится в [89, 90]):

$$G_{p-n}^{\mathrm{cryst}} = S_{p-n}\sqrt{\frac{D_p}{2}}\,\frac{e^2p_n}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right)\sqrt{\tau_p^{-1} + \sqrt{\tau_p^{-2} + \omega^2}}\,.$$

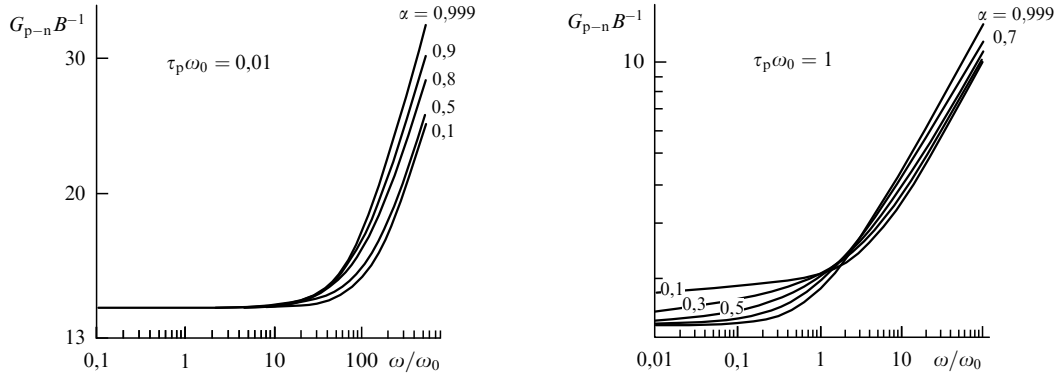

Рис. 14. Частотная зависимость проводимости диода для различных значений α.

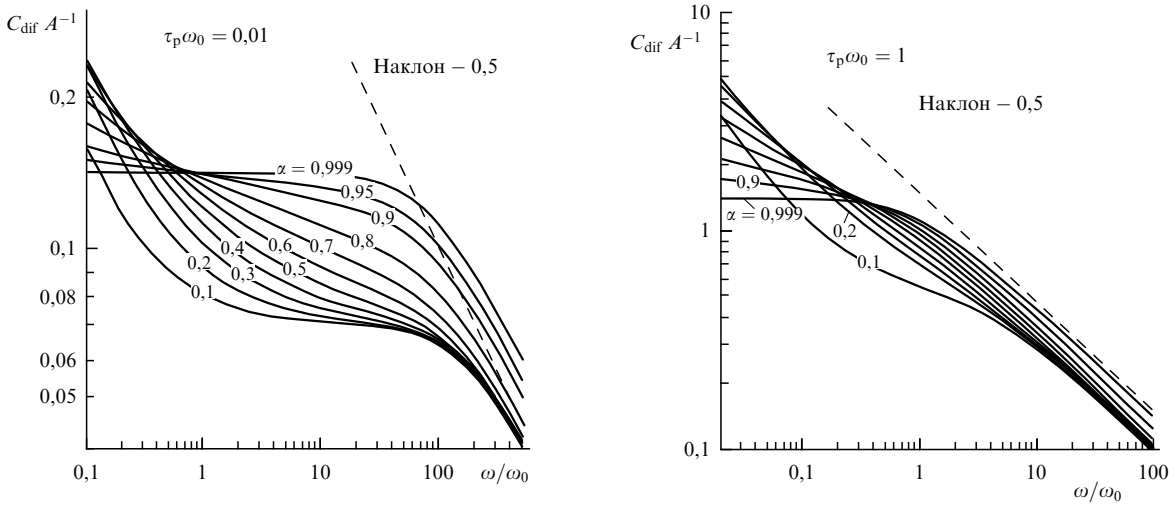

Рис. 15. Частотная зависимость диффузионной ёмкости.

Устремляя $\omega \to 0$, получаем дифференциальную проводимость p–n-перехода на постоянном токе:

$$G^0_{p-n} = S_{p-n}\sqrt{\frac{D_p}{2\tau_p}}\,\frac{e^2 p_n}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right).$$

В области высоких частот, для которых справедливо $\omega \gg (1/(\tau_{0p}c_p^\alpha))\omega^\alpha$ и $\omega \gg 1/\tau_p$, имеем

$$G_{p-n} = S_{p-n}\sqrt{\frac{D_p}{2}}\,\frac{e^2 p_n}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right)\sqrt{\omega},$$

т.е. на проводимость в области высоких частот не влияют ни захват носителей на локализованные состояния в хвостах зон, ни рекомбинация носителей через глубокие центры.

В области средних частот, когда $\omega^{1-\alpha} \ll 1/(\tau_{0p}c_p^\alpha)$, но $\omega^{1-\alpha} \gg 1/\tau_p$, имеем проводимость p–n-перехода на основе неупорядоченных полупроводников при дисперсионном переносе:

$$G_{p-n} = S_{p-n}\sqrt{D_p}\,\frac{e^2 p_n}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right)\frac{1}{\sqrt{\tau_{0p}c_p^\alpha}}\cos\left(\frac{\pi\alpha}{4}\right)\omega^{\alpha/2}.$$

Аналогичное выражение получено для диффузионной ёмкости [91]. Устремляя α к единице ($\alpha \to 1$), приходим к выражению, полученному для диода на основе кристаллических полупроводников (подробнее см. [89, 90]):

$$C_{dif} = S_{p-n}\sqrt{\frac{D_p}{2}}\,\frac{e^2 p_n}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right)\left[\frac{1}{\tau_p} + \sqrt{\frac{1}{\tau_p^2} + \omega^2}\right]^{-1/2}.$$

В области высоких частот, для которых справедливо $\omega \gg (1/(\tau_{0p}c_p^\alpha))\omega^\alpha$ и $\omega \gg 1/\tau_p$,

$$C_{dif} = S_{p-n}\sqrt{\frac{D_p}{2}}\,\frac{e^2 p_n}{kT}\exp\left(\frac{eU}{kT}\right)\frac{1}{\omega}.$$

В приведённых координатах частотные зависимости диффузионной ёмкости диода представлены на рис. 15.

Аналогичные соотношения можно получить и для случая туннельной рекомбинации.

Цель приведённого рассмотрения была в том, чтобы показать удобство дробно-дифференциальных уравнений при анализе частотных свойств приборов на основе неупорядоченных полупроводников по сравнению с уравнением Архипова–Руденко (21). Последнее содержит зависящий от времени коэффициент диффузии и после преобразования Фурье переходит в уравнение, содержащее интегральную свертку образа Фурье временнóй зависимости коэффициента диффузии с трансформантой концентрации носителей. Другими словами, мы приходим к интегральному уравнению, которое решать значительно труднее, чем алгебраическое, кото-

рое мы получаем при преобразовании Фурье дробно-дифференциального уравнения.

17. Заключение

Вернёмся к логическим мотивам, побудившим нас к разработке модели дисперсионного переноса, основанной на уравнениях с дробными производными. Дисперсионный перенос является негауссовым, при этом известно, что гауссово (нормальное) распределение принадлежит классу устойчивых законов Леви, т.е. является частным случаем более общего класса предельных распределений. Связь дисперсионного переноса с устойчивой статистикой Леви продемонстрирована Шером и Монтроллом в 1975 г., в основе этой связи лежит скейлинг, характерный для процессов переноса в неупорядоченных полупроводниках. Устойчивые распределения Леви удовлетворяют уравнениям с дробной производной, в то время как нормальный перенос описывается стандартным уравнением диффузии–дрейфа с производными целого порядка. Хорошо известно, что стандартное уравнение диффузии–дрейфа является частным случаем дробно-дифференциальных уравнений аномальной диффузии [49].

Перечисленные факты говорят о том, что формализм, основанный на уравнениях с дробными производными, позволяет описать нормальный и дисперсионный перенос в неупорядоченных полупроводниках в рамках единого математического подхода, что и явилось главным стимулом для создания дробно-дифференциального подхода.

В заключение перечислим основные результаты работы, чтобы можно было судить, насколько обсуждаемые мотивы были оправданы.

1. Из экспериментально установленных фактов (свойства универсальности кривых переходного тока и степенно́й зависимости времени пролёта от толщины образца) с необходимостью следует, что концентрации неравновесных носителей заряда при дисперсионном переносе выражаются через устойчивые плотности и удовлетворяют диффузионно-дрейфовым уравнениям с производными дробного порядка.

2. Составлена система дробно-дифференциальных уравнений, включающая в себя диффузионно-дрейфовые уравнения униполярного дисперсионного переноса для концентраций локализованных и делокализованных носителей с учётом мономолекулярной рекомбинации и рекомбинации за счёт туннельных переходов; дробно-дифференциальные уравнения амбиполярного дисперсионного переноса; диффузионно-дрейфовые уравнения с распределённым дисперсионным параметром для описания переноса в неоднородно неупорядоченных средах; уравнение для случая усечённых степенны́х распределений времён ожидания. Такая система может служить феноменологической основой для описания дисперсионного переноса в неупорядоченных полупроводниках.

3. Дробно-дифференциальный подход согласуется с теорией Шера и Монтролла и моделью многократного захвата, но при этом дробно-дифференциальная модель позволяет в рамках единого формализма описывать нормальный и дисперсионный перенос. В отличие от решений, полученных с помощью основного уравнения дисперсионного переноса Архипова–Руденко, решения дробно-дифференциальных уравнений удовлетворяют принципу соответствия, т.е. при устремлении дисперсионного параметра к единице переходят в решения для нормального переноса; при этом сами уравнения переходят в стандартное уравнение Фоккера–Планка. Уравнения с дробными производными точнее, чем уравнение неравновесного переноса Архипова–Руденко, описывают кривые переходного тока в неупорядоченных полупроводниках при значениях дисперсионного параметра, близких к единице.

4. При описании дисперсионного переноса в неупорядоченных полупроводниках на основе уравнений с дробными производными требуется меньше подгоночных параметров, чем в модели Шера–Монтролла и в модели многократного захвата.

5. С применением обобщённой предельной теоремы получены условия дисперсионного переноса:

- в случае многократного захвата дисперсионный перенос будет наблюдаться, если средний квадрат флуктуаций энергии локализованных состояний будет превышать среднюю энергетическую глубину залегания ловушек, умноженную на больцмановскую температуру kT;
- в случае прыжковой проводимости перенос будет дисперсионным, если квадрат флуктуаций расстояния между ловушками будет превышать среднюю длину прыжка, умноженную на половину радиуса локализации волновой функции.

6. Для случая усечённых степенны́х распределений времён ожидания дробно-дифференциальные уравнения предсказывают переход от дисперсионного типа переноса к нормальному при увеличении толщины образца и/или уменьшении внешнего электрического поля.

7. Если показатель степени в распределении времени пребывания носителей в ловушке может принимать одно из значений упорядоченного набора (дискретного спектра), то на начальном временно́м участке поведение переходного тока определяется максимальным значением, а на конечном — минимальным значением. Это объясняет различие дисперсионных параметров на начальном и конечном участках кривых переходного тока в некоторых неупорядоченных полупроводниках.

8. Дробно-дифференциальные уравнения оказываются удобными при анализе частотных свойств полупроводниковых приборов, в которых реализуется дисперсионный перенос, поскольку преобразование Фурье этих уравнений приводит к алгебраическим уравнениям, решать которые значительно проще, чем интегральные, получающиеся для уравнений с переменными коэффициентом диффузии и подвижностью.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 07-01-00517) и фонда "Династия".

Список литературы

1. Madan A, Shaw M P *The Physics and Applications of Amorphous Semiconductors* (Boston: Academic Press, 1988) [Меден А, Шо М *Физика и применение аморфных полупроводников* (М.: Мир, 1991)]
2. Звягин И П *Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках* (М.: Изд-во МГУ, 1984)
3. Fuhs W, Milleville M, Stuke J *Phys. Status Solidi B* **89** 495 (1978)
4. Hvam J M, Brodsky M H *Phys. Rev. Lett.* **46** 371 (1981)
5. Pfister G *Phys. Rev. Lett.* **36** 271 (1976)
6. Noolandi J *Phys. Rev. B* **16** 4466 (1977)
7. Коломиец Б Т, Лебедев Э А, Казакова Л П *ФТП* **12** 1771 (1978) [Kolomiets B T, Lebedev E A, Kazakova L P *Sov. Phys. Semicond.* **12** 1049 (1978)]
8. Шутов С Д, Иову М А, Иову М С *ФТП* **13** 956 (1979) [Shutov S D, Iovu M A, Iovu M S *Sov. Phys. Semicond.* **13** 559 (1979)]
9. Тютнев А П и др. *Диэлектрические свойства полимеров в полях ионизирующих излучений* (Диэлектрики и радиация, Кн. 5) (М.: Наука, 2005)
10. Bässler H *Phys. Status Solidi B* **175** 15 (1993)
11. Tyutnev A P et al. *J. Phys. Condens. Matter* **18** 6365 (2006)
12. Аверкиев Н С и др. *ФТП* **34** 757 (2000) [Averkiev N S et al. *Semicond.* **34** 732 (2000)]

13. Аверкиев Н С и др. *ФТП* **37** 1244 (2003) [Averkiev N S et al. *Semicond.* **37** 1214 (2003)]
14. Казакова Л П, Мынбаева М Г, Мынбаев К Д *ФТП* **38** 1118 (2004) [Kazakova L P, Mynbaeva M G, Mynbaev K D *Semicond.* **38** 1081 (2004)]
15. Choudhury K R et al. *Appl. Phys. Lett.* **82** 406 (2003)
16. Ramírez-Bon R et al. *Phys. Rev. B* **48** 2200 (1993)
17. Boden N, Bushby R J, Clements J *J. Chem. Phys.* **98** 5920 (1993)
18. Scher H, Lax M *J. Non-Cryst. Solids* **8 – 10** 497 (1972)
19. Kakalios J, Jackson W B, in *Amorphous Silicon and Related Materials* (Ed. H Fritzsche) (Singapore: World Scientific, 1989) p. 207 [Какалиос Дж, Джексон У, в кн. *Аморфный кремний и родственные материалы* (Под ред. Х Фрицше) (М.: Мир, 1991)]
20. Бабенко Ю И *Тепломассообмен* (Л.: Химия, 1986)
21. Самко С Г, Килбас А А, Маричев О И *Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения* (Минск: Наука и техника, 1987) [Samko S G, Kilbas A A, Marichev O I *Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications* (Philadelphia, Pa.: Gordon and Breach Sci. Publ., 1993)]
22. Архипов В И, Попова Ю А, Руденко А И *ФТП* **17** 1817 (1983) [Arkhipov V I, Popova Yu A, Rudenko A I *Sov. Phys. Semicond.* **17** 1159 (1983)]
23. Arkhipov V I, Rudenko A I *Philos. Mag. B* **45** 189 (1982)
24. Rudenko A I, Arkhipov V I *Philos. Mag. B* **45** 209 (1982)
25. Архипов В И и др. *Нестационарные инжекционные токи в неупорядоченных твердых телах* (Отв. ред. С И Радауцан) (Кишинёв: Штиинца, 1983)
26. Архипов В И и др. *ФТП* **22** 723 (1988) [Arkhipov V I et al. *Sov. Phys. Semicond.* **22** 449 (1988)]
27. Arkhipov V I, Rudenko A I, Sessler G M *J. Phys. D* **26** 1298 (1993)
28. Arkhipov V I, Perova I A *J. Phys. D* **26** 1301 (1993)
29. Емельянова Е В, Архипов В И *ФТП* **32** 995 (1998) [Emel'yanova E V, Arkhipov V I *Semicond.* **32** 891 (1998)]
30. Noolandi O *Phys. Rev. B* **16** 4474 (1977)
31. Tiedje T, in *The Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon* Vol. 2 Electronic and Vibrational Properties (Eds J D Joannopoulos, G Lucovsky) (Berlin: Springer-Verlag, 1984)
32. Сибатов Р Т, Учайкин В В *ФТП* **41** 346 (2007) [Sibatov R T, Uchaikin V V *Semicond.* **41** 335 (2007)]
33. Barkai E *Phys. Rev. E* **63** 046118 (2001)
34. Metzler R, Barkai E, Klafter J *Phys. Rev. Lett.* **82** 3563 (1999)
35. Scher H, Montroll E W *Phys. Rev. B* **12** 2455 (1975)
36. Hilfer R *J. Phys. Chem. B* **104** 3914 (2000)
37. Bisquert J *Phys. Rev. Lett.* **91** 010602 (2003)
38. Bisquert J *Phys. Rev. E* **72** 011109 (2005)
39. Seki K, Wojcik M, Tachiya M *J. Chem. Phys.* **119** 7525 (2003)
40. Seki K, Wojcik M, Tachiya M *J. Chem. Phys.* **124** 044702 (2006)
41. Учайкин В В *ЖЭТФ* **115** 2113 (1999) [Uchaikin V V *JETP* **88** 1155 (1999)]
42. Uchaikin V V, Sibatov R T, in *Nonlinear Science and Complexity* (Eds A C J Luo, L Dai, H R Hamidzadeh) (New Jersey: World Scientific, 2007)
43. Учайкин В В, Сибатов Р Т *Обозрение прикл. и пром. матем.* **12** 540 (2005)
44. Pfister G, Scher H *Phys. Rev. B* **15** 2062 (1977)
45. Van Roosbroeck W *Phys. Rev.* **119** 636 (1960)
46. Jonscher A K *Dielectric Relaxation in Solids* (London: Chelsea Dielectrics Press, 1983)
47. Jonscher A K *Universal Relaxation Law* (London: Chelsea Dielectrics Press, 1995)
48. Uchaikin V V, Zolotarev V M *Chance and Stability* (Ultrech: VSP, 1999)
49. Учайкин В В *УФН* **173** 847 (2003) [Uchaikin V V *Phys. Usp.* **46** 821 (2003)]
50. Enck R G, Pfister G, in *Photoconductivity and Related Phenomena* (Eds J Mort, D M Pai) (Amsterdam: Elsevier, 1976) Ch. 7
51. Montroll E W, Scher H *J. Stat. Phys.* **9** 101 (1973)
52. Tunaley J K E *J. Appl. Phys.* **43** 4777 (1972)
53. Montroll E W, Weiss G H *J. Math. Phys.* **6** 167 (1965)
54. Feller W *An Introduction to Probability Theory and Its Applications* 2nd ed. (New York: Wiley, 1957) [Феллер В *Введение в теорию вероятностей и её приложения* 2-е изд. (М.: Мир, 1967)]
55. Kaczer B et al. *Appl. Phys. Lett.* **86** 143506 (2005)
56. Никитенко В Р, Тютнев А П *ФТП* **41** 1118 (2007) [Nikitenko V R, Tyutnev A P *Semicond.* **41** 1101 (2007)]
57. Silver M, Cohen L *Phys. Rev. B* **15** 3276 (1977)
58. Tiedje T et al. *Phys. Rev. Lett.* **46** 1425 (1981)
59. Spear W E "Transport and tail state interactions in amorphous silicon", in *Amorphous Silicon and Related Materials* (Ed. H Fritzsche) (Singapore: World Scientific, 1989) p. 721 [Спир В "Перенос с участием состояний хвостов зон в аморфном кремнии", в кн. *Аморфный кремний и родственные материалы* (Под ред. Х Фрицше) (М.: Мир, 1991)]
60. Tiedje T, Rose A *Solid State Commun.* **37** 49 (1981)
61. Tunaley J K E *J. Appl. Phys.* **43** 4783 (1972)
62. Шкловский Б И, Эфрос А Л *Электронные свойства легированных полупроводников* (М.: Наука, 1979) [Shklovskii B I, Efros A L *Electronic Properties of Doped Semiconductors* (Berlin: Springer-Verlag, 1984)]
63. Nigmatullin R R *Phys. Status Solidi B* **123** 739 (1984)
64. Nigmatullin R R *Phys. Status Solidi B* **124** 389 (1984)
65. Balakrishnan V *Physica A* **132** 569 (1985)
66. Metzler R, Klafter J, Sokolov I M *Phys. Rev. E* **58** 1621 (1998)
67. Barkai E, Metzler R, Klafter J *Phys. Rev. E* **61** 132 (2000)
68. Sokolov I M, Blumen A, Klafter J *Physica A* **302** 268 (2001)
69. Sokolov I M *Phys. Rev. E* **63** 056111 (2001)
70. Hilfer R *Fractals* **3** 211 (1995)
71. Гусаров Г Г, Коробко Д А, Орлов В А, Учайкин В В *Учёные записки Ульяновского гос. унив. Сер. физ.* (6) 26 (1999)
72. Учайкин В В, Коробко Д А *ЖТФ* **74** (5) 12 (2004) [Uchaikin V V, Korobko D A *Tech. Phys.* **49** 532 (2004)]
73. Rudenko A I *J. Non-Cryst. Solids* **22** 215 (1976)
74. Schmidlin F W *Solid State Commun.* **22** 451 (1977)
75. Orenstein J, Kastner M A, Vaninov V *Philos. Mag. B* **46** 23 (1982)
76. Main C et al. *Solid State Commun.* **83** 401 (1992)
77. Naito H, Ding J, Okuda M *Appl. Phys. Lett.* **64** 1830 (1994)
78. Nagase T, Naito H *J. Non-Cryst. Solids* **227 – 230** 824 (1998)
79. Nagase T, Kishimoto K, Naito H *J. Appl. Phys.* **86** 5026 (1999)
80. Учайкин В В, Сибатов Р Т *Обозрение прикл. и пром. математики* **14** 938 (2007)
81. Bisi O, Ossicini S, Pavesi L *Surf. Sci. Rep.* **38** 1 (2000)
82. Аверкиев Н С, Казакова Л П, Смирнова Н Н *ФТП* **36** 355 (2002) [Averkiev N S, Kazakova L P, Smirnova N N *Semicond.* **36** 336 (2002)]
83. Mantegna R N, Stanley H E *Phys. Rev. Lett.* **73** 2946 (1994)
84. Koponen I *Phys. Rev. E* **52** 1197 (1995)
85. Pollak M, Geballe T H *Phys. Rev.* **122** 1742 (1961)
86. Lax M *Rev. Mod. Phys.* **32** 25 (1960)
87. Scher H, Lax M *Phys. Rev. B* **7** 4491 (1973)
88. Ghosh P et al. *J. Phys. D* **39** 3047 (2006)
89. Гаман В И *Физика полупроводниковых приборов* (Томск: Изд-во науч.-техн. лит., 2000)
90. Бонч-Бруевич В Л, Калашников С Г *Физика полупроводников* (М.: Наука, 1977)
91. Сибатов Р Т, Учайкин В В *Вестн. Воронеж. гос. техн. унив. Сер. Физ.-мат. моделир.* (8) 136 (2006)

Fractional differential approach to dispersive transport in semiconductors

R.T. Sibatov, V.V. Uchaikin
Ulyanovsk State University, ul. L. Tolstogo 42, 432970 Ulyanovsk, Russian Federation
Tel. (7-8422) 32-06 12. E-mail: ren_sib@bk.ru, uchaikin@sv.uven.ru

A novel approach using equations with fractional order derivatives to describe dispersive transport in disordered semiconductors is described. A relationship between the self-similarity of dispersive transport, stable limiting distributions and kinetic equations with fractional derivatives is established. It is shown that unlike the well-known Scher – Montroll and Arkhipov – Rudenko models, which are in a sense alternative to the normal transport model, fractional differential equations provide a unified mathematical framework for describing normal and dispersive transport. The fractional differential formalism allows the equations of bipolar transport to be written down and transport in distributed dispersion systems to be described. The relationship between fractional transport equations and the generalized limit theorem reveals the probabilistic aspects of the phenomenon in which a dispersive to Gaussian transport transition occurs in a time-of-flight experiment as the applied voltage is decreased and/or the sample thickness increased.

PACS numbers: 05.40.Fb, **72.20. –i**, **73.40. – c**
Bibliography — 91 references
Uspekhi Fizicheskikh Nauk **179** (10) 1079 – 1104 (2009)
DOI: 10.3367/UFNr.0179.200910c.1079
Received 26 December 2008, revised 15 May 2009
Physics – Uspekhi **52** (10) (2009)