

VILNIAUS UNIVERSITETAS
FIZIKOS FAKULTETAS
TEORINĖS FIZIKOS KATEDRA

Ignas Mataitis

Krūvininkų difuzijos modeliavimas AlGaN epitaksiniuose sluoksniuose

Pagrindinių studijų baigiamasis darbas
Taikomosios fizikos studijų programa

Studentas
Darbo vadovas
Recenzentas
Katedros vedėjas

Ignas Mataitis
prof. dr. Darius Abramavičius
dr. Mindaugas Ramonas
prof. habil. dr. Leonas Valkūnas

Vilnius
2016

Turinys

Įvadas	3
1. Anomalioji difuzija ir trupmeninės difuzijos lygties sprendimas	4
1.1 Klasikinė ir anomalioji difuzija	4
1.2 Trupmeninės difuzijos lygties sprendimas	6
2. Mikroskopinis netvarkios gardelės modelis	10
3. Dalelių judėjimo gardelėje modeliavimo rezultatai	14
4. Krūvininkų dinamika AlGaN epitaksinuose sluoksniuose	17
5. Gardelės modelio pritaikymas AlGaN epitaksiniam sluoksniui	21
Išvados	26
PRIEDAS. Trupmeninis integralinis ir diferencialinis skaičiavimas. Integralinės transformacijos.	27
Literatūros sąrašas	30
Santrauka	31
Summary	32

Ivadas

Difuziniai procesai, vykstantys energetiškai netvarkingose medžiagose, dažnai yra anomalūs – jiems negalioja klasikinę difuziją aprašančios lygtys ir statistiniai dėsniai. Dėl netvarkingos medžiagos struktūros ir įvairių defektų krūvininkų judėjimas tokioje medžiagoje yra apribotas – vyksta subdifuzija, kuriai būdingas lėtas krūvininkų koncentracijos plitimas erdvėje laikui bėgant. Subdifuzija aprašoma trupmenine difuzijos lygtimi, kurią išsprendus galima gauti koncentracijos pasiskirstymo funkcijas. Norint įsitinkinti, kad trupmeninės difuzijos lygties sprendiniai tikrai apibūdina subdifuzinius reiškinius, galima sukurti mikroskopinį modelį, kuriame vyktų subdifuzija. Toks paprasčiausias mikroskopinis modelis gali būti energetiškai netvarki vienmatė gardelė, kurios mazgais juda dalėlės. Ištyrus dalelių judėjimą vienmatėje gardelėje, gardelę galima perdaryti į trimatę ir taikyti konkreitiems eksperimentiniams rezultatams paaiškinti. Šiame darbe sukurtas netvarkios gardelės modelis taikomas siekiant paaiškinti AlGaIn epitaksiniuose sluoksniuose stebėtą krūvininkų gyvavimo trukmės mažėjimą mažėjant jų energijai.

Tad šio darbo tikslas yra sukurti mikroskopinį netvarkios gardelės modelį, kuriame būtų modeliuojamas subdifuzinis dalelių judėjimas, statistiškai gautus rezultatus palyginti su trupmeninės difuzijos lygties sprendiniu ir šį modelį pritaikyti krūvininkų dinamikos AlGaIn epitaksiniuose sluoksniuose modeliavimui.

1. Anomalioji difuzija ir trupmeninės difuzijos lygties sprendimas

1.1 Klasikinė ir anomalioji difuzija

Įvairiose dinaminėse sistemose vyksta tam tikrų dalelių pernašos reiškiniai. Pavyzdžiui, žiedadulkių judėjimas vandenyje, kvapų molekulių sklidimas ore, krūvininkų judėjimas medžiagoje. Toks dalelių judėjimas, vadinamas Brauno (Brown) judėjimu, vyksta, nes sistemoje yra tam tikras energijos kiekis (paprastai tai temperatūra), kuris pasiskirsto tarp visų sistemą sudarančių dalelių kinetinių energijų. Laisvos dalelės juda atsitiktinai ir šis jų judėjimas yra aprašomas statistiškai, tai yra, tikimybėmis.

Tarkime konkrečiu laiko momentu t yra tam tikras dalelių išsidėstymas, kurį apibūdina koncentracijos funkcija $\rho(\vec{r}, t)$ – dalelių skaičius tūrio vienetu. Paprasčiausiame modelyje šios funkcijos evoliuciją laike apibūdina difuzijos lygtis:

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 \rho(\vec{r}, t); \quad (1.1)$$

čia D yra difuzijos koeficientas, kurio dimensija $\left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right]$. Lygtis (1.1) apibūdina atsitiktinį (šiluminį) dalelių judėjimą, kai nėra jokių išorinių daleles veikiančių jėgų. Jei sistemą dar veikia tam tikra pastovi jėga, tai dalelių difuziją apibūdina Fokerio–Planko (Fokker–Planck) lygtis. Šiame darbe nagrinėjama difuzija be pastovios jėgos, todėl Fokerio–Planko lygtis plačiau neaptariama.

Vienmačiu atveju difuzijos lygtį galima gan lengvai išvesti tariant, kad kiekvienu laiko intervalu Δt dalelė pajuda žingsniu Δx į kairę arba į dešinę su vienoda tikimybe $\frac{1}{2}$. Pagal šį modelį difuzijos koeficientas yra

$$D = \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t}. \quad (1.2)$$

Bendresniu atveju dalelės žingsnio ilgis yra atsitiktinis dydis, aprašomas pasiskirstymo funkcija $p(x)$. Šuolio trukmė taip pat yra atsitiktinė, parenkama iš pasiskirstymo funkcijos $\psi(t)$. Tada difuzijos koeficiento išraiškoje (1.2) esantis dydis $(\Delta x)^2$ yra funkcijos $p(x)$ dispersija:

$$(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(x) dx; \quad (1.3)$$

o, dydis Δt – funkcijos $\psi(t)$ vidurkis:

$$\Delta t = \int_0^{\infty} t \psi(t) dt. \quad (1.4)$$

Jei pradinio laiko momentu dalelių koncentracija yra Dirako (Dirac) delta funkcija, $\rho_0(x) = \delta(x)$, tai difuzijos lygties sprendinys yra Gauso (Gauss) pavidalo funkcija:

$$\rho(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{D\pi t}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}. \quad (1.5)$$

Galime suskaičiuoti dalelės vidutinį kvadratinį nuokrypį, kuris yra pasiskirstymo funkcijos (1.5) dispersija:

$$\langle x^2(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \rho(x,t) dx = 2Dt. \quad (1.6)$$

Matyti, kad dalelės vidutinis kvadratinis nuokrypis yra tiesiogiai proporcingas laikui. Iš tiesų tai tiesiogiai plaukia iš pačios difuzijos lygties, nes koordinatės atžvilgiu tai antros eilės diferencialinė lygtis, o laiko atžvilgiu – pirmos eilės. Tad nesvarbu, kokia pradinė dalelių koncentracija, jei dalelių difuziją aprašoma difuzijos lygtimi (1.1), visada galioja sąryšis

$$\langle x^2(t) \rangle \sim t. \quad (1.7)$$

Tokią difuziją vadinsime klasikine arba gausine difuzija.

Tačiau kai kuriose sudėtingose, netvarkiose fizikinėse, biologinėse, geologinėse sistemose sąryšis (1.7) negalioja [1]. Vietoj to vidutinis kvadratinis nuokrypis yra laipsninė laiko funkcija:

$$\langle x^2(t) \rangle \sim t^\alpha. \quad (1.8)$$

Tokia difuzija, kuriai būdingas sąryšis (1.8), yra anomali: jei $\alpha < 1$, procesas vadinamas subdifuzija, jei $\alpha > 1$ – superdifuzija.

Viena iš fizikinių sistemų, kuriai būdinga subdifuzija, yra krūvininkų pernaša medžiagose, turinčiose netvarkingą kristalinę struktūrą (amorfiniuose puslaidininkiuose, puslaidininkiuose su daug defektų, polikristaluose) [2]. Akivaizdu, jog klasikinės difuzijos lygtis netinka anomalousios difuzijos aprašymui, kuriai būdingas sąryšis (1.8). Tačiau lygtis, kuri gali apibūdinti anomalią difuziją, iš tiesų yra ta pati difuzijos lygtis, kurioje laiko išvestinė pakeista trupmenine išvestine:

$$\frac{\partial^\alpha \rho(x,t)}{\partial t^\alpha} = D \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2}; \quad (1.9)$$

čia α yra realus teigiamas skaičius – trupmeninės išvestinės eilė. Trupmeninė išvestinė yra įprastinės išvestinės apibendrinimas. Tokių išvestinių, taip pat ir trupmeninių integralų savybes

nagrinėja trupmeninis integralinis ir diferencialinis skaičiavimas (angl. *fractional calculus*), kurio esminiai principai pateikti priede.

Lygtyje (1.9) esantis dydis D dabar jau yra trupmeninis difuzijos koeficientas, kurio dimensija $\left[\frac{m^2}{s^\alpha}\right]$. Norėdami įsitikinti, ar lygtimi (1.9) aprašomai difuzijai galioja sąryšis (1.8), turime šią lygtį išspręsti esant konkrečiai pradinei funkcijai $\rho_0(x)$ (pradinei dalelių koncentracijai). Turėdami sprendinį – funkciją $\rho(x)$, galime apskaičiuoti dispersiją ir patikrinti jos priklausomybę nuo laiko.

1.2 Trupmeninės difuzijos lygties sprendimas

Kaip jau buvo minėta, klasikinės difuzijos lygties sprendinys, kai pradinė sąlyga $\rho_0(x) = \delta(x)$, yra plintanti Gauso pavidalo funkcija (1.5), kurios dispersija tiesiogiai proporcinga laikui. Kyla klausimas, kokį sprendinį gautume sprenddami trupmeninę difuzijos lygtį (1.9). Kadangi šiame darbe nagrinėjame subdifuziją, tai laikome, kad šioje lygtyje trupmeniškumo parametras $0 < \alpha \leq 1$.

Ši lygtis buvo išspręsta esant dviem skirtingoms pradinėms sąlygoms [3]. Pirmiausia lygčiai pritaikyta Laplaso transformacija, tada Furjė transformacija ir tada atvirkštinė Furjė transformacija. Analitiškai atvirkštinė Laplaso transformacija nebuvo skaičiuojama. Tam tikslui buvo naudojamas skaitmeninis algoritmas, kuris tiksliai sugeneruoja difuzijos lygties sprendinį $\rho(x, t)$ iš turimos analitinės šio sprendinio Laplaso transformacijos (Laplaso vaizdo) išraiškos $R(x, s)$. Šis skaitmeninis algoritmas ir minėtos integralinės transformacijos bei jų taikymas funkcijos išvestinėms aprašyti priede.

Taigi lygčiai (1.9) pritaikę Laplaso transformaciją pagal laiką ir Furjė transformaciją pagal koordinatę gauname ieškomos funkcijos $\rho(x, t)$ Furjė-Laplaso transformacijos (vaizdo) išraišką:

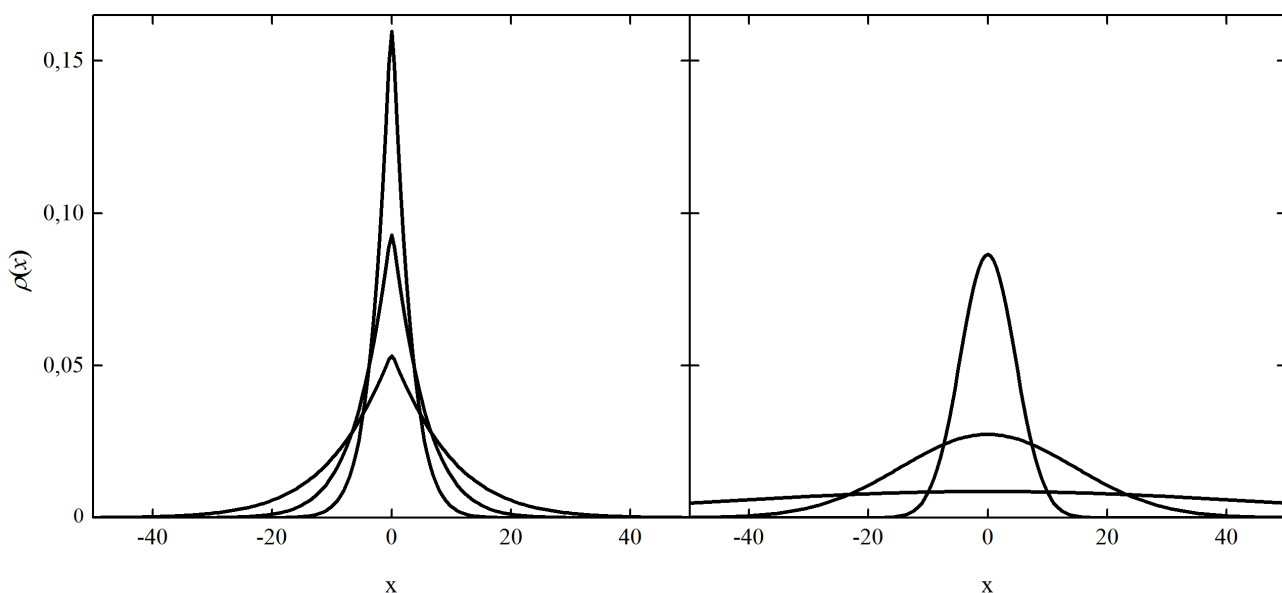
$$\tilde{R}(k, s) = \frac{s^{\alpha-1} \tilde{\rho}_0(k)}{Dk^2 + s^\alpha}; \quad (1.10)$$

čia $\tilde{\rho}_0(k)$ – pradinės sąlygos $\rho_0(x)$ Furjė transformacija.

Jei pradinė sąlyga yra Dirako delta funkcija – $\rho_0(x) = \delta(x)$, tai $\tilde{\rho}_0(k) = 1$. Išraiškai (1.10) pritaikę atvirkštinę Furjė transformaciją ir gautą integralą suintegravę pasinaudodami rezidijų teorema gauname:

$$R(x, s) = \frac{e^{-\sqrt{\frac{\alpha}{D}}|x|}}{2\sqrt{Ds}^{1-\alpha/2}}. \quad (1.11)$$

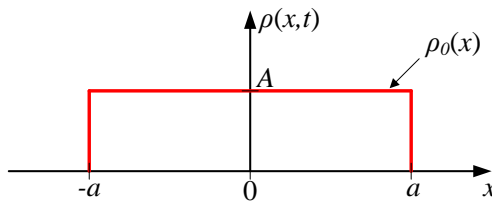
Tai yra trupmeninės difuzijos lygties sprendinio Laplaso transformacija. Turėdami šią išraišką galime sugeneruoti tikrąjį sprendinį $\rho(x, t)$ pasinaudodami minėtu skaitmeniu atvirkštinės Laplaso transformacijos algoritmu. 1.1 pav. kairėje pavaizduota tokiu būdu suskaičiuota funkcija $\rho(x, t)$ trimis skirtingais laiko momentais, kai trupmeniškumo parametras $\alpha = 0,5$. Palyginimui, dešinėje pavaizduotas klasikinės difuzijos lygties sprendinys (t. y., kai $\alpha = 1$) tais pačiais laiko momentais.



1.1 pav. *Trupmeninės ($\alpha = 0,5$) difuzijos lygties sprendinys (kairėje) trimis skirtingais laiko momentais bei klasikinės ($\alpha = 1$) difuzijos lygties sprendinys (dešinėje) tais pačiais laiko momentais, $t_1 = 0,3$, $t_2 = 3$, $t_3 = 30$ (sąlyginiai matavimo vienetai), ir esant tam pačiam difuzijos koeficientui $D = 3$, kai pradinė sąlyga $\rho_0(x) = \delta(x)$.*

Iš 1.1 pav. matyti, kad klasikinės difuzijos lygties sprendinys yra plintanti Gauso funkcija. Tačiau pažvelgus į trupmeninės lygties sprendinį akivaizdu, jog tai nėra Gauso funkcija. Taške $x = 0$ šiai funkcijai būdinga smailuma. Be to, ši funkcija laikui bėgant erdvėje plinta gerokai lėčiau. Šios dvi savybės ir yra būdingos subdifuzijai.

Panagrinėkime kitą atvejį – pradiniu laiko momentu dalelių koncentracija yra tokios formos, kaip pavaizduota 1.2 pav.



1.2 pav. Pradinė dalelių koncentracija antrajam nagrinėjamam atvejui.

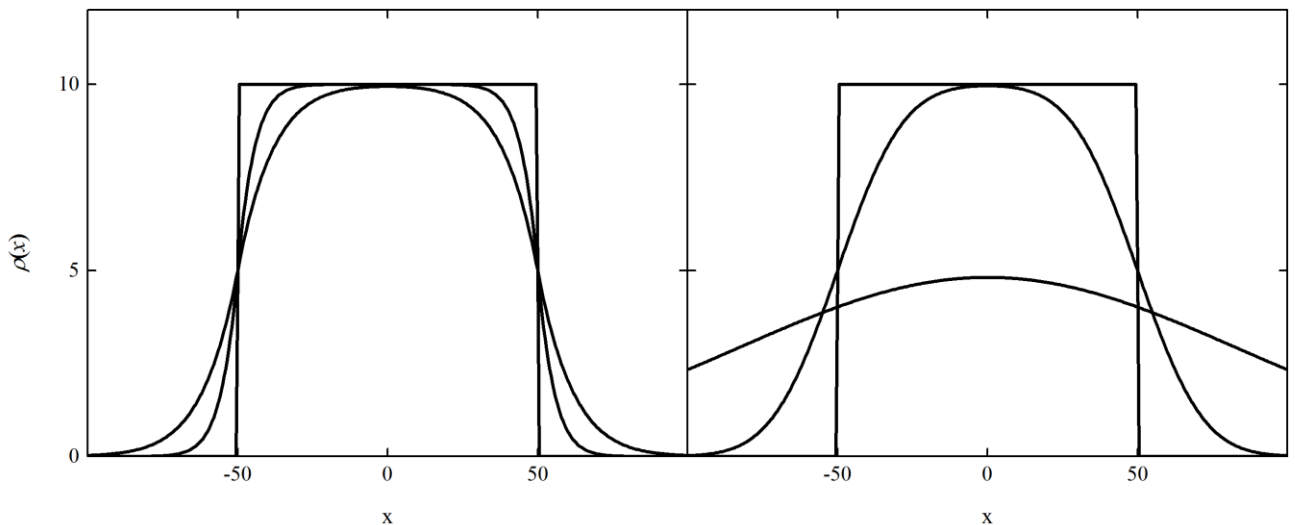
Matematiškai ši pradinė sąlyga užrašoma Hevisaido (Heaviside) funkcijomis:

$$\rho_0(x) = A[H(x+a) - H(x-a)]. \quad (1.12)$$

Šiuo atveju trupmeninė difuzijos lygtis sprendžiama analogiškai ankstesniam atvejui. Su šia pradine sąlyga gauname tokį sprendinį:

$$\begin{aligned} R_1(x, s) &= A \left[\frac{e^{\sqrt{\frac{s\alpha}{D}}(x+a)}}{2s} - \frac{e^{\sqrt{\frac{s\alpha}{D}}(x-a)}}{2s} \right], & x < -a; \\ R_2(x, s) &= A \left[-\frac{e^{-\sqrt{\frac{s\alpha}{D}}(x+a)}}{2s} - \frac{e^{\sqrt{\frac{s\alpha}{D}}(x-a)}}{2s} + \frac{1}{s} \right], & -a < x < a; \\ R_3(x, s) &= A \left[-\frac{e^{-\sqrt{\frac{s\alpha}{D}}(x+a)}}{2s} + \frac{e^{-\sqrt{\frac{s\alpha}{D}}(x-a)}}{2s} \right], & x > a. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Vėlgi, pritaikę skaitmeninį atvirkštinės Laplaso transformacijos algoritmą, galime suskaičiuoti funkciją $\rho(x, t)$. 1.3 pav. kairėje pavaizduota ši funkcija trimis skirtingais laiko momentais. Tuo tarpu dešinėje tais pačiais laiko momentais ir esant tai pačiai pradinei sąlygai pavaizduotas klasikinės difuzijos lygties sprendinys (kuris išreiškiamas Erfc funkcijomis). Kaip ir ankstesniu atveju, trupmeninės lygties sprendinys savo forma skiriasi nuo klasikinės lygties sprendinio, tačiau šiuo atveju tas skirtumas ne toks akivaizdus. Daug akivaizdesnis yra lėtas šios funkcijos plitimas erdvėje.



1.3 pav. Trupmeninės ($\alpha = 0,5$) difuzijos lygties sprendinys (kairėje) trimis skirtingais laiko momentais bei klasikinės ($\alpha = 1$) difuzijos lygties sprendinys (dešinėje) tais pačiais laiko momentais, $t_1 = 0$, $t_2 = 50$, $t_3 = 1000$ (sąlyginiai matavimo vienetai), ir esant tam pačiam difuzijos koeficientui $D = 3$, kai pradinė sąlyga $\rho_0(x) = 10[H(x+50) - H(x-50)]$.

Abiem atvejais skaitmeniškai apskaičiavę trupmeninės lygties sprendinio – funkcijos $\rho(x,t)$ dispersiją įsitikintume, kad galioja sąryšis $\langle x^2(t) \rangle \sim t^\alpha$. Tuo tarpu klasikinės difuzijos lygties sprendiniams $\langle x^2(t) \rangle \sim t$. Taigi postuluota trupmeninė difuzijos lygtis (1.9), kurioje $\alpha < 1$, tikrai aprašo anomalius difuzijos reiškinius, kuriuose atsitiktinai judančių dalelių vidutinis kvadratinis nuokrypis yra laipsninė laiko funkcija.

2. Mikroskopinis netvarkios gardelės modelis

Ankstesniame skyriuje buvo pristatyta trupmeninė difuzijos lygtis ir pateikti jos sprendiniai esant skirtingoms pradinėms sąlygoms. Šie sprendiniai aprašo subdifuziją, kuri vyksta energetiškai netvarkingose medžiagose. Tad šiame skyriuje aprašyti du primityvūs tokios medžiagos mikroskopiniai modeliai – vienmatės gardelės – ir aprašyti dalelių judėjimo tokiose gardelėse ypatumai. Sukūrus netvarkios gardelės modelį galima modeliuoti atsitiktinį dalelių judėjimą. Statistiškai gautos dalelių koncentracijos evoliuciją galima palyginti su trupmeninės difuzijos lygties sprendiniu.

Tvarkingą struktūrą turinčiose medžiagose (pavyzdžiui, kristaliniuose puslaidininkiuose) vyksta krūvininkų pernašos reiškiniai, kuriems galioja gausinės difuzijos dėsniai. Tačiau netvarkingose ar pažeistos struktūros medžiagose (tokiose kaip amorfiniai puslaidininkiai, smarkiai legiruoti kristaliniai puslaidininkiai ar puslaidininkiai, turintys daug defektų, polikristalai) krūvininkų pernašos reiškiniai yra anomalūs ir minėtieji klasikiniai statistiniai dėsniai negalioja [2]. Galime laikyti, kad neturinčiose reguliarios struktūros medžiagose krūvininkai juda energetiniu paviršiumi, kuriame yra daug „kalnų“ ir „duobių“, dėl to krūvininkų judėjimas yra gan ribotas [4]. Netvarkiuose puslaidininkiuose esantys įvairūs defektai ir priemaišos sukuria lokalizuotas būsenas, todėl šiuo atveju galime laikyti, kad krūvininkai juda tomis lokalizuotomis būsenomis praleisdami jose tam tikrą laiko kiekį, kuris priklauso nuo įvairių veiksnių, pavyzdžiui, nuo atstumo iki kitos lokalizuotos būsenos [5].

Įprastai dinaminėse sistemose tokių šuolių tarp būsenų bei relaksacinių procesų trukmės pasiskirsčiusios eksponentiškai:

$$\psi(t) = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right). \quad (2.1)$$

Ši pasiskirstymo funkcija turi vidurkį τ (charakteringąją trukmę). Tokie šuolių trukmių pasiskirstymai, kurie turi baigtinį vidurkį (pirmąjį momentą), visada lemia gausinę difuziją, kuriai galioja sąryšis (1.7) [6]. Tačiau šuolių trukmių pasiskirstymo funkcija $\psi(t)$ gali ir neturėti vidurkio, pavyzdžiui,

$$\psi(t) = \frac{\alpha}{\tau} \frac{1}{(1+t/\tau)^{1+\alpha}}; \quad (2.2)$$

čia $0 < \alpha \leq 1$. Asimptotiškai šią išraišką galime užrašyti taip:

$$\psi(t) \sim \frac{1}{t^{(1+\alpha)}}. \quad (2.3)$$

Tokiems pasiskirstymams, kurie asimptotiškai elgiasi pagal dėsnį (2.3), būdingos taip vadinamos ilgos „uodegos“, t. y., lėtas slopimas laikui artėjant į begalybę. Kai kurios trukmių vertės, paimitos iš tokio pasiskirstymo, bus labai didelės – tai atitinka procesą, kai krūvininkai pagaunami tam tikruose centruose ir juose imobilizuojami. Statistikoje eksponentinis trukmių pasiskirstymas (2.1) išvedamas iš prielaidos, kad atsitiktiniai šuoliai vyksta pastoviu vidutiniu dažniu ir nepriklauso vienas nuo kito. Jei šuolių trukmės pasiskirsčius pagal dėsnį (2.3), tai proceso prigimtis yra kitokia. Laikui bėgant didėja tikimybė, kad iš pasiskirstymo funkcijos parinkta trukmė bus labai didelė (dalelė įstrigs). Tai reiškia, kad sistema „atsimena“ prieš tai buvusius vyksmus [1].

Jei šuolių trukmės pasiskirto pagal dėsnį (2.3), tai tokioje sistemoje vyksta subdifuzija. Konkreti sistemos energetinė struktūra nėra esminė, svarbu tai, kad ši struktūra yra netvarkinga [5]. Išraiškoje (2.3) esantis parametras α gali būti laikomas sistemos netvarkumo matu: kuo jis mažesnis, tuo sistema energetiškai netvarkingesnė. Iš tiesų tai tas pats trupmeniško parametras, esantis trupmeninės difuzijos lygtyje. Šioje darbo dalyje buvo modeliuojama energetiškai netvarki sistema, kuri turėtų lemti būtent tokį ilgą „uodegą“ turintį šuolių trukmių pasiskirstymą.

Buvo sukurti du vienmatės gardelės modeliai. Abiejuose modeliuose gardelės mazgai išdėstyti vienodu atstumu vienas nuo kito. Dalelė, esanti konkrečiame mazge, gali peršokti tik į gretimą mazgą. Toliau aprašomas kiekvienas modelis atskirai.

I modelis. Šį modelį galima įsivaizduoti taip: kol dalelė, tarkim, elektronas yra puslaidininkio laidumo juostoje, jis yra delokaliziuotas ir jo pozicija nežinoma, tačiau pažeistose puslaidininkio vietose jis lokalizuojasi, t. y., patenka į lokalizuotą energijos E gylio potencinę duobę (2.1 pav. a). Galima laikyti, kad elektronas juda tik per tas duobes – lokalizuotas būsenas. Laikas, kurį jis praleidžia potencinėje duobėje, yra gerokai didesnis už laiką, kurį praleidžia laidumo juostoje, todėl į pastarąjį galime neatsižvelgti. Pagal šį modelį potencinėje duobėje praleistas laikas pasiskirstęs eksponentiškai [6]:

$$\psi(t) = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right). \quad (2.4)$$

Tačiau charakteringoji trukmė τ priklauso nuo potencinės duobės gylio:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{E}{k_B T}\right); \quad (2.5)$$

čia τ_0 yra tam tikras pastovus parametras. Charakteringoji trukmė τ nėra konstanta, nes potencinių duobių gyliai irgi pasiskirstę eksponentiškai:

$$p(E) = \frac{1}{E_0} \exp\left(-\frac{E}{E_0}\right). \quad (2.6)$$

Pagal tokį modelį iš pirmo žvilgsnio eksponentinis šuolių trukmių skirstinys (2.4) įgauna asimptotinį skirstinio (2.3) pavidalą, kuriame

$$\alpha = \frac{k_B T}{E_0}. \quad (2.7)$$

Pritaikius šį modelį gardelei, kiekvienas gardelės mazgas yra laikomas potencine duobe, į kurią pateko dalelė. Praleidusi viename mazge tam tikrą laiką, kuri apibūdina skirstinys (2.4), ji pereina į gretimą mazgą dešinėje arba kairėje su vienoda tikimybe $\frac{1}{2}$. Šis modelis atitiktų krūvininkų judėjimą puslaidininkuose su defektais.

II modelis. Šiame modelyje krūvininkai juda per lokalizuotas būsenas, tarytum šiurkščiu energetiniu paviršiumi, kuriame yra daug potencinių duobių ir kalnų (2.1 pav. b). Kiekvienai lokalizuotai būsenai priskiriama tam tikra energija E , pasiskirsčiusi pagal tą patį eksponentinį dėsnį (2.6) [7]. Gardelėje kiekviena lokalizuota būsena atitinka skirtingus gardelės mazgus. Tačiau čia tikimybė pereiti į gretimą mazgą priklauso nuo to mazgo, kuriame yra dalelė, bei gretimų mazgų energijų tarpusavio skirtumo [8]. Jei dalelė yra konkrečiame gardelės mazge, kurio energija E_i , tai šuolio tikimybę į gretimą mazgą (tarkim, į dešinįjį), kurio energija E_d , apibūdina šuolio sparta v_{id} , kuri apibrėžiama taip:

$$v_{id} = v_0 \times \begin{cases} \exp\left(-\frac{E_d - E_i}{k_B T}\right), & E_d > E_i; \\ 1, & E_d \leq E_i \end{cases} \quad (2.8)$$

čia v_0 yra tam tikras pastovus parametras. Tada šuolio tikimybė į šį gretimą mazgą yra

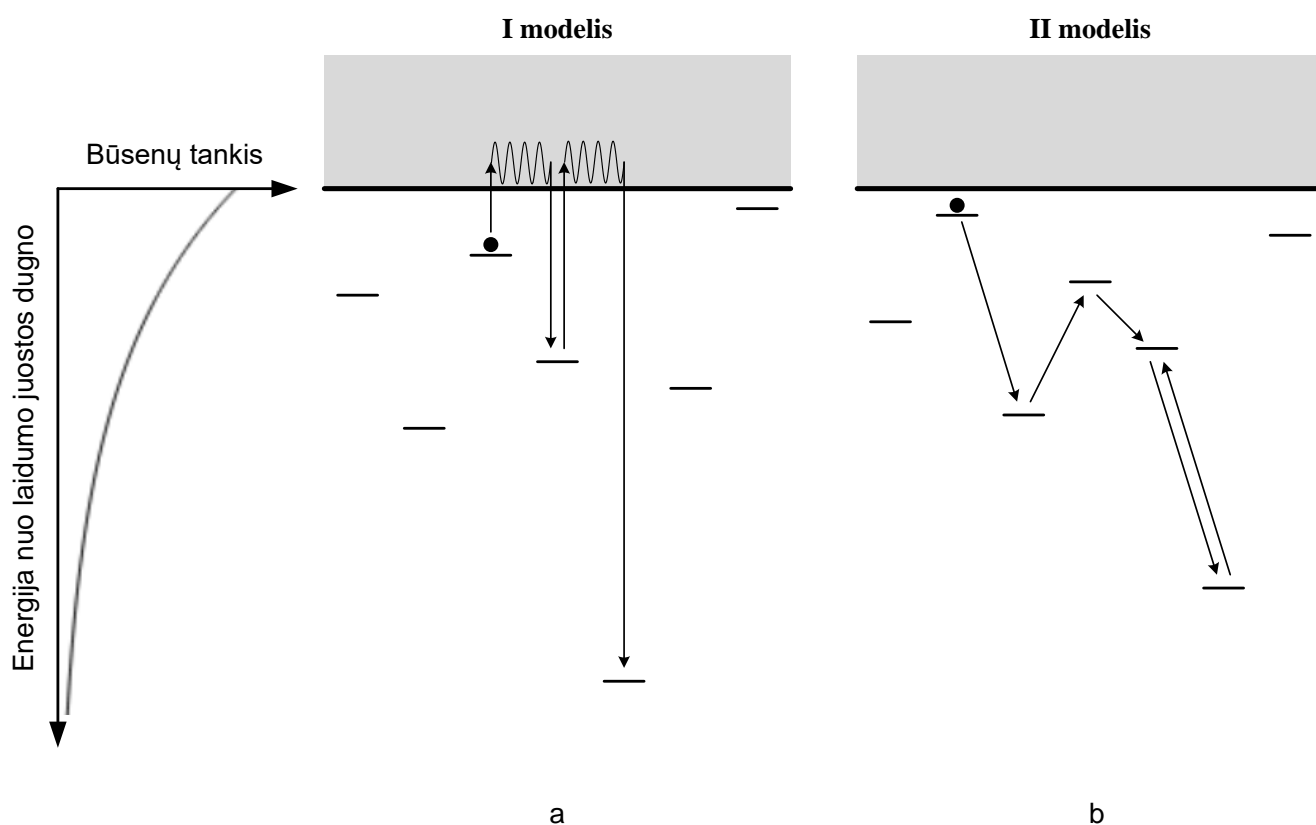
$$p_{id} = \frac{v_{id}}{v_{id} + v_{ik}}; \quad (2.9)$$

čia v_{ik} – šuolio sparta į kitą gretimą mazgą (esantį kairėje). Šuolio sparta yra atvirkščias dydis šuolio trukmei. Kaip ir pirmajame modelyje, laikome, kad šuolių trukmės taip pat pasiskirsčiusios pagal dėsnį (2.4), tačiau charakteringoji trukmė τ yra apibrėžiama taip:

$$\tau = \frac{1}{v_{id} + v_{ik}}. \quad (2.10)$$

Vėlgi charakteringoji trukmė nėra konstanta, o kiekviename gardelės mazge priklauso nuo to mazgo energijos, šiame modelyje – ir nuo gretimų mazgų energijų. Todėl ir šiame modelyje eksponentinis šuolių trukmių pasiskirstymas (2.4) pavirsta į ilgą „uodegą“ turintį pasiskirstymą, kuriam būdinga (2.3) asimptotika. Šis modelis labiau tinka jokios reguliarios struktūros neturinčioms medžiagoms, pavyzdžiui, amorfiniams puslaidininkiams.

Svarbu pabrėžti, kad esminis dalykas, lemiantis tokią asimptotiką abiejuose modeliuose, yra eksponentinis gardelės mazgų energijų pasiskirstymas (2.6). Jei energijos būtų pasiskirsčiusios pagal Gauso (normalųjį) skirstinį, tai šuolių trukmių pasiskirstymas turėtų baigtinį vidurkį. O tai reiškia, kad modeliuojama difuzija būtų gausinė t. y., jai galiojūt tiesinis sąryšis $\langle x^2(t) \rangle \sim t$. Tai patvirtina modeliavimo rezultatai, aprašyti kitame skyriuje.



2.1 pav. Schematinis elektrono judėjimo puslaidininkinėje medžiagoje pavaizdavimas. a) Elektronas iš lokalizuotos būsenos, t. y., potencinės duobės, patenka į laidumo juostą ir ten tampa delokalizuotas, jo banginė funkcija abejomis kryptimis plinta tuo pačiu greičiu, kol elektronas vėl tampa lokalizuotas gretimose potencinėse duobėse; tikimybės patekti į gretimą kairiąją arba dešiniąją būseną yra lygios. b) Elektronas juda per lokalizuotas būsenas nepatekdamas į laidumo juostą; tikimybė pereiti į gretimą būseną priklauso nuo gretimų būsenų tarpusavio energijų skirtumų.

3. Dalelių judėjimo gardelėje modeliavimo rezultatai

Ankstesniame skyriuje buvo aprašyti du netvarkios gardelės modeliai. Aprašius šiuos modelius kompiuteriu, galima modeliuoti atsitiktinį dalelių judėjimą tokiose gardelėse ir gautus statistinius suvidurkintus pasiskirstymus palyginti su trupmeninės lygties sprendiniais. Šio darbo metu modeliuojama buvo MATLAB programine įranga.

Dalelių judėjimas buvo modeliuojamas esant toms pačioms dviem skirtingoms pradinėms sąlygoms, kurios buvo naudojamos sprendžiant difuzijos lygtį. Pirmu atveju tai Dirako delta funkcija – visos dalelės pradeda judėjimą nuo mazgo, kurio koordinatė $x = 0$. Antru atveju pradinis dalelių pasiskirstymas gardelės mazguose yra stačiakampio formos (žr. 1.2 pav.). Dalelės juda per mazgus, išdėstytus $\Delta x = 1$ intervalu, laikas konkrečiame mazge parenkamas iš skirstinio (2.4).

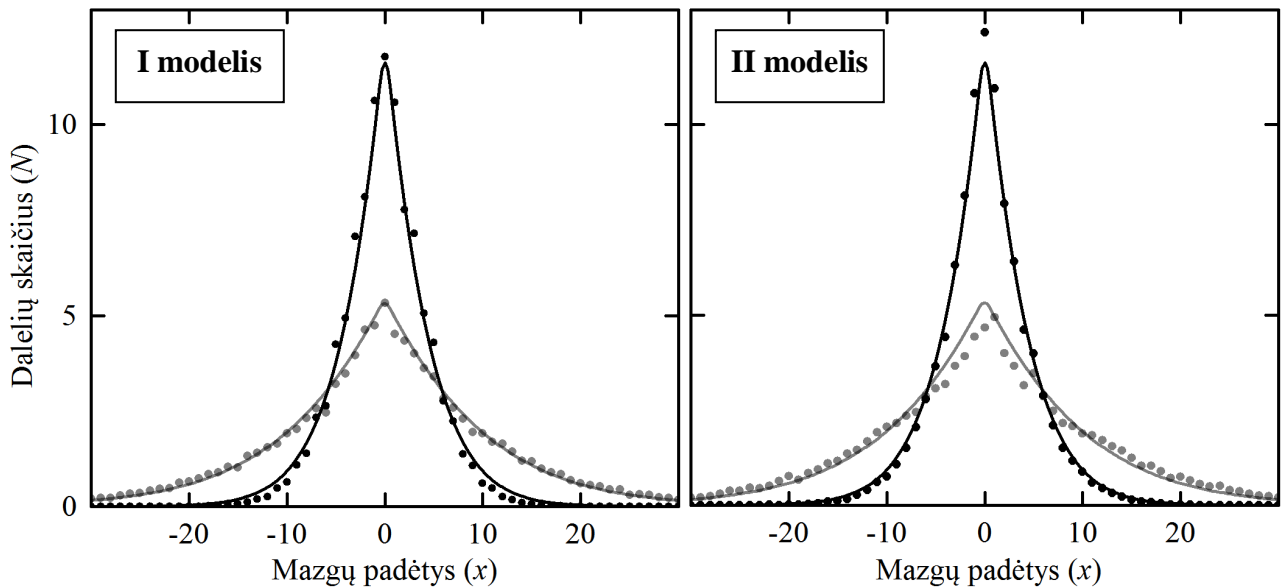
Norėdami taikyti aprašytus gardelės modelius, turime pasirinkti $k_B T$ ir E_0 vertes. Kadangi jos susietos sąryšiu (2.7) tai parenkame jas taip, kad $\alpha < 1$. Kuo α mažesnis, tuo modeliujama difuzija turėtų būti labiau anomali ir lėta.

Abiejuose modeliuose yra dar vienas parametras $\nu_0 = 1/\tau_0$ (žr. (2.5) ir (2.8)). Pavadinkime jį pirmine šuolių sparta. Ji lemia, kaip plačiai bus pasiskirsčiusios šuolių trukmės, sugeneruotos iš pasiskirstymo (2.4). Šį parametą parenkame taip, kad kompiuterinio modelio laiko skalė sutaptų su analitinio difuzijos lygties sprendinio laiko skale.

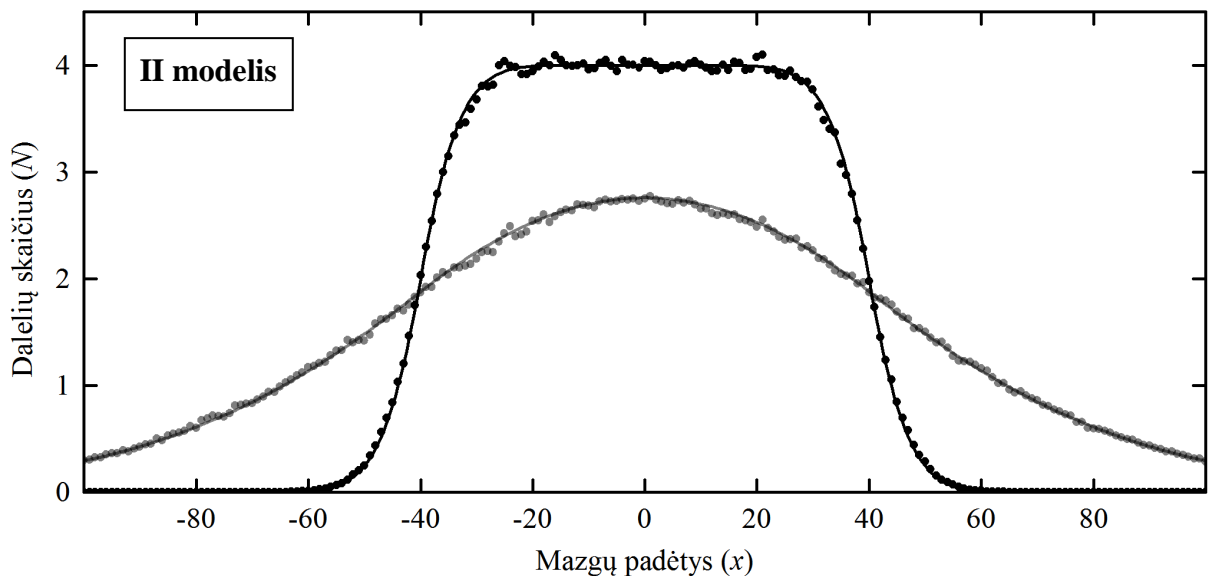
3.1 pav. pavaizduoti modeliavimo rezultatai, kai pradinė sąlyga yra Dirako delta funkcija. Abiejuose modeliuose visi parametrai tie patys, tik skiriasi pirminės šuolių spartos vertė. Trupmeniškumo parametro vertė $\alpha = 0,5$. Matyti, kad abiejų modelių atveju dalelių koncentracijos evoliuciją galima gan tiksliai aproksimuoti trupmeninės lygties sprendiniu.

3.2 pav. pavaizduoti modeliavimo rezultatai, kai pradinis laiku dalelių pasiskirstymas mazguose yra stačiakampio pavidalo. Pavaizduotas tik antrojo modelio atvejis, nes taikant pirmąjį modelį rezultatas analogiškas. Šį kartą parinkta kita trupmeniškumo parametro vertė: $\alpha = 0,8$.

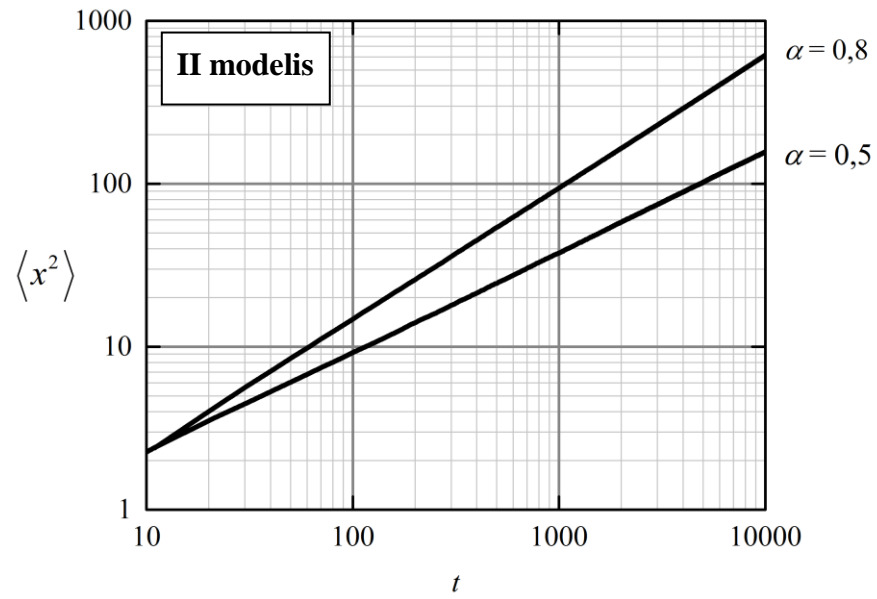
Kokią įtaką difuzijos vyksmui daro parametras α , galime matyti 3.3 pav. Čia dviguboje logaritminėje skalėje pavaizduota dalelių vidutinio kvadratinio nuokrypio $\langle x^2 \rangle$ priklausomybė nuo laiko esant dviem skirtingoms α vertėms. Matyti, kad kuo šis trupmeniškumo parametras mažesnis, tuo $\langle x^2 \rangle$ laikui bėgant didėja lėčiau – difuzijos vyksmas lėtėja.



3.1 pav. Statistiškai sumodeliuoti ir suvidurkinti dalelių pasiskirstymai gardelės mazguose ir tų pasiskirstymų aproksimacija trupmeninės difuzijos lygties sprendiniu, kai pradinė sąlyga $\rho_0(x) = 100\delta(x)$ ir trupmeniškumo parametras $\alpha = 0,5$. Funkcijos pavaizduotos dviem skirtingais laiko momentais $t_1 = 40\Delta t$ ir $t_2 = 1000\Delta t$.



3.2 pav. Statistiskai sumodeliuotas ir suvidurkintas dalelių pasiskirstymas gardelės mazguose ir to pasiskirstymo aproksimacija trupmeninės difuzijos lygties sprendiniu, kai pradinė sąlyga $\rho_0(x) = 4[H(x+40) - H(x-40)]$ ir trupmeniškumo parametras $\alpha = 0,8$. Funkcijos pavaizduotos dviem skirtingais laiko momentais $t_1 = 100\Delta t$ ir $t_2 = 10000\Delta t$.



3.3 pav. Dalelių vidutinio kvadratinio nuokrypio priklausomybė nuo laiko dviguboje logaritminėje skalėje esant dviem skirtingoms α vertėms.

4. Krūvininkų dinamika AlGaN epitaksiniuose sluoksniuose

Ankstesniuose skyriuose buvo aprašyti du mikroskopiniai netvarkios vienmatės gardelės modeliai, tarpusavyje besiskiriantys šuolių tarp mazgų mechanizmu, ir patekti dalelių judėjimo tokiose gardelėse modeliavimo rezultatai, kurie palyginti su trupmeninės difuzijos lygties sprendiniais. Įsitikinta, kad abu modeliai yra ekvivalentūs, nes konkretus šuolių mechanizmas iš vieno gardelės mazgo į kitą neturi įtakos statistinio dalelių pasiskirstymo evoliucijai. Esminė abiejų modelių ypatybė yra ta, kad gardelės mazgų energijos yra pasiskirsčiusios pagal eksponentinį dėsnį, tada tokioje gardelėje vyksta subdifuzija, aprašoma trupmenine difuzijos lygtimi.

Vienmatės gardelės modelį pakeitus trimačiu modeliu, galima modeliuoti krūvininkų judėjimą realiose medžiagose. Tačiau reikia atsižvelgti į tai, kad realiose medžiagose krūvininkų gyvavimo trukmė yra baigtinė, nes vyksta krūvininkų rekombinacija. Modeliavimo rezultatus galima palyginti su eksperimentiniais rezultatais, kuriuose krūvininkų judėjimo ir rekombinavimo ypatybės atsiskleidžia taikant fotoluminescencijos spektroskopiją.

Šioje darbo dalyje yra pristatyti aliuminio galio nitrido (AlGaN) fotoluminescencijos tyrimo eksperimentiniai rezultatai, kurie aprašyti straipsnyje „*Spectral dependence of carrier lifetime in high aluminum content AlGaN epitaxial layers*“ [9]. Taikant netvarkios gardelės modelį bandoma paaiškinti krūvininkų gyvavimo trukmės spektrines priklausomybes.

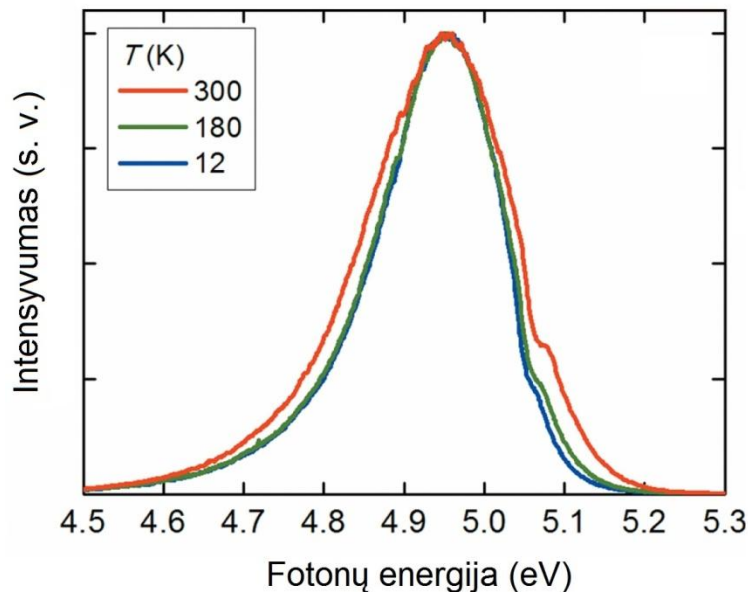
Eksperimente buvo tiriamas puslaidininkinis aliuminio galio nitrido (AlGaN) bandinys, kuris yra sudarytas iš aliuminio nitrido (AlN) ir galio nitrido (GaN) lydinio epitaksinio sluoksnio. Toks kristalinis sluoksnis yra užauginamas ant tam tikros medžiagos – šiuo atveju ant safyro – kristalinio padėklo ir atkartoja to padėklo gardelės struktūrą. Dėl plačios draustinės juostos AlGaN yra naudojamas gaminat ultravioletinius šviesos diodus, ultravioletinius puslaidininkinius lazerius ir kitus elektroninius prietaisus. Norint tobulinti šias technologijas, svarbu suprasti šios medžiagos krūvininkų dinamiką ir rekombinaciją lemiančius veiksnius.

AlN draustinės juostos plotis yra 6,28 eV, o GaN – 3,44 eV, tad AlGaN lydinio draustinės juostos plotis gali turėti bet kurią vertę, esančią tarp šių dviejų, priklausomai nuo aliuminio ir galio santykio lydinyje. Eksperimente naudoto bandinio tiksli empirinė formulė yra $Al_{0,6}Ga_{0,4}N$, tad šios medžiagos draustinės juostos plotis yra apie 4,95 eV [10]. Kadangi AlGaN yra lydinys, jame neišvengiami įvairūs kristalografiniai defektai, kurie sukuria lokalizuotas būsenas draustinėje juostoje. Todėl galima įtarti, jog AlGaN epitaksiniame sluoksnyje krūvininkų judėjimas yra

suvaržytas ir jam būdinga anomalioji difuzija. Krūvininkai, kurie juda per tas lokalizuotas būsenas, yra elektronų ir skylių poros (eksitonai). Laidumo juostoje yra ir laisvų delokaluotų elektronų.

Ekspimento metu AlGa_{0,6}N epitaksinio sluoksnio bandinys buvo sužadintas 213 nm bangos ilgio lazerio spinduliuote. Gautas bandinio fotoluminescencijos spektras pavaizduotas 4.1 pav. Didėjant temperatūrai, spektrų maksimumai šiek tiek slenka į mažesnių energijų pusę (kadangi siaurėja draustinė juosta), tačiau 4.1 pav. geresniam palyginimui visi spektrų maksimumai paslinkti taip, kad sutaptu su 12 K spektru. Matyti, kad temperatūra didelės įtakos spektro formai neturi, tik šiek tiek jį paplatina.

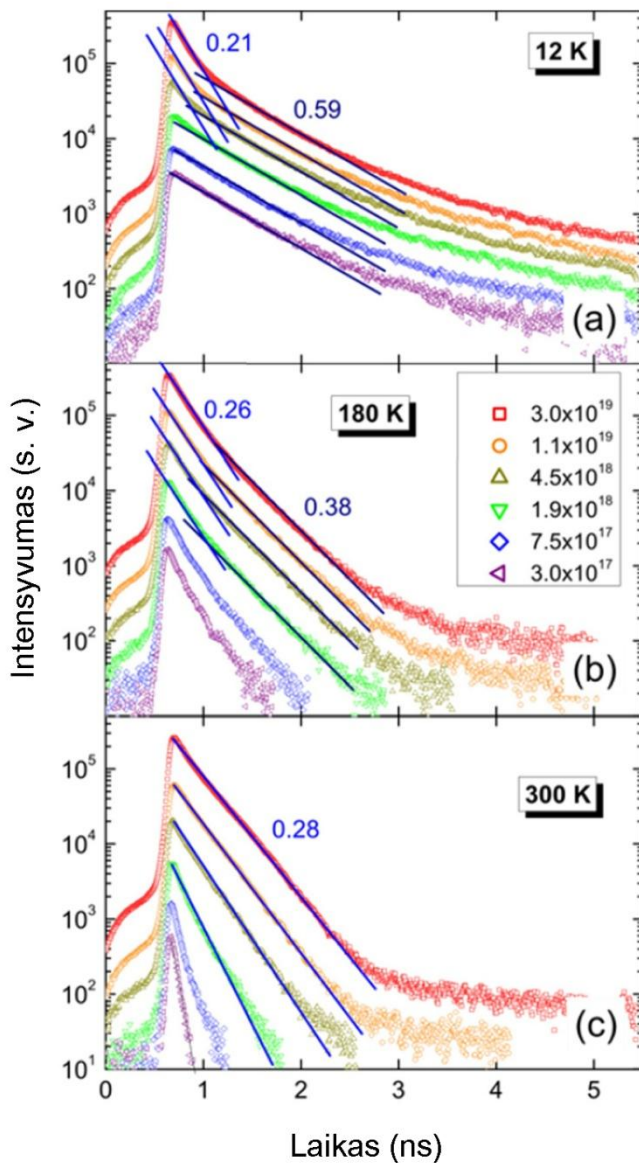
Fotoluminescencijos spektro maksimumas 12 K temperatūroje yra ties 4,95 eV. Ši vertė sutampa su žadinto Al_{0,6}Ga_{0,4}N epitaksinio sluoksnio draustinės juostos pločiu šioje temperatūroje. Taigi galima teigti, kad dauguma krūvininkų rekombinuoja iš laidumo juostos dugno. Žemesnių energijų srityje fotoluminescenciją sukelia rekombinuojantys lokalizuoti krūvininkai, tuo tarpu aukštesnių energijų srityje – tiesiai iš laidumo juostos rekombinuojantys laisvieji krūvininkai.



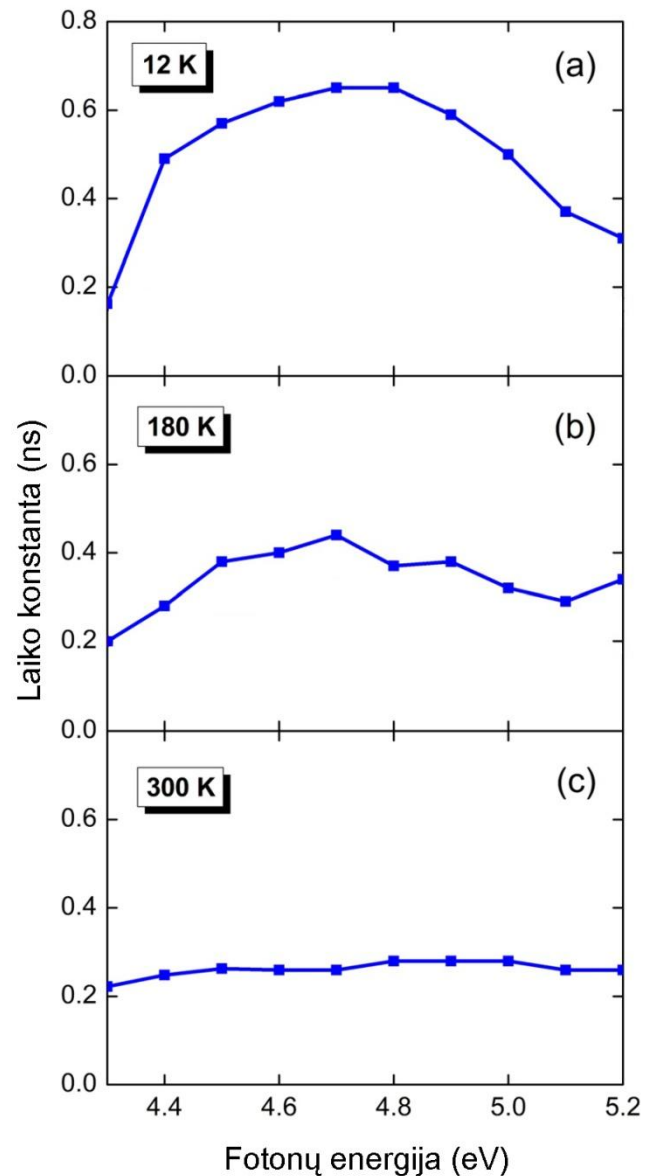
4.1 pav. AlGa_{0,6}N epitaksinio sluoksnio normalizuotas fotoluminescencijos spektras esant trimis skirtingoms temperatūros vertėms. Geresniam palyginimui, 180 K ir 300 K spektrai horizontaliai pastumti, kad jų maksimumai sutaptų su 12 K spektro maksimumu. Intensyvumas matuojamas sutartiniais vienetais. Iš [9].

4.2 pav. pavaizduotos fotoluminescencijos gesimo kreivės esant skirtingoms temperatūroms, kai fotonų energija yra 4,9 eV. Galima pastebėti tris gesimo komponentes, dvi iš jų – greitojo gesimo ir vidutiniojo gesimo komponentės – 4.2 pav. aproksimuotos tiesėmis. Šalia jų

parašytos atitinkamos gesimo laiko konstantos. Trečioji – lėtojo gesimo – komponentė neaprosimuota, nes viršija tirtą fotoluminescencijos laiko intervalą.



4.2 pav. AlGaIn epitaksinio sluoksnio fotoluminescencijos intensyvumo ties 4,9 eV priklausomybė nuo laiko esant trims skirtingoms temperatūroms. Skirtingos kreivės vaizduoja skirtingas pradines krūvininkų koncentracijas. Tiesėmis aproksimuotos greitojo ir vidutiniojo gesimo komponentės. Iš [9].



4.3 pav. Fotoluminescencijos vidutiniojo gesimo laiko konstantos (krūvininkų gyvavimo trukmės) priklausomybė nuo fotonų energijos esant trims skirtingoms temperatūroms. Iš [9].

Interpretuojant fotoluminescencijos gesimo kreives, galima teigti, kad greitąją komponentę lemia laisvųjų krūvininkų rekombinacija, vidutiniją komponentę – lokalizuotų krūvininkų

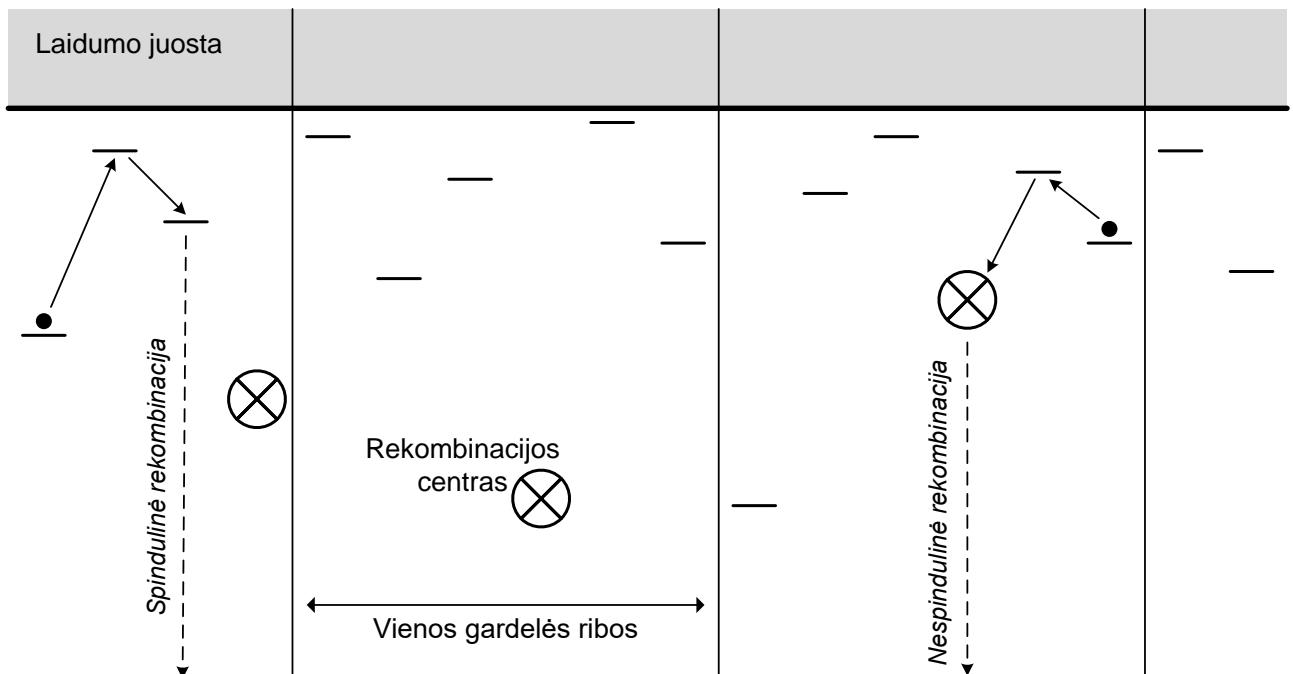
(eksitonų) rekombinacija, o lėtąją – krūvininkų, patekusių į galias lokalizuotas būsenas, lėta rekombinacija. Konkrečiu laiko momentu intensyvumas spektro vietoje, atitinkančioje tam tikrą energiją, priklauso nuo krūvininkų kiekio, kurie tuo laiko momentu užima tos energijos būsenas. Kuo krūvininkų, užimančių vienodos energijos būsenas, daugiau, tuo fotoluminescencijos intensyvumas toje spektro dalyje didesnis, nes spindulinė rekombinacija vyksta pastoviu dažniu. Krūvininkų kiekis sistemoje mažėja dėl jų patekimo į nespindulinės rekombinacijos centrus ir tai lemia fotoluminescencijos intensyvumo mažėjimą laikui bėgant. Tad vidutiniojo gesimo trukmės konstantą galima laikyti krūvininkų gyvavimo trukme.

4.3 pav. pavaizduota fotoluminescencijos vidutiniojo gesimo laiko konstantos priklausomybė nuo fotonų energijos esant skirtingoms temperatūroms. Kitaip tariant, tai krūvininkų gyvavimo trukmės spektras. Matyti, kad kambario temperatūroje krūvininkų gyvavimo trukmė nepriklauso nuo energijos ir yra pastovi (apie 0,2–0,3 ns). Tačiau žemoje temperatūroje viduriniojoje spektro dalyje krūvininkų gyvavimo trukmė pailgėja iki 0,6 ns, tuo tarpu spektro kraštuose lieka trumpesnė. Tai, jog didelės energijos krūvininkų gyvavimo trukmė yra trumpa, aiškinama tuo, kad laisvieji ir mažai lokalizuoti krūvininkai gali greičiau relaksuoti į žemesnės energijos lokalizuotas būsenas bei pasiekti nespindulinės rekombinacijos centrus. Tad mažėjant energijai, gyvavimo trukmė didėja. Intuityviai mąstant, kuo mažesnė krūvininkų energija, tuo ilgesnė turėtų būti jų gyvavimo trukmė. Tačiau, kaip matyti iš 4.3 pav. a, toliau mažėjant krūvininkų energijai, jų gyvavimo trukmė vėl pradeda mažėti. Kodėl taip yra, kokybiško paaiškinimo nėra. Norint suprasti šį reiškinį, galima sistemai pritaikyti kompiuterinį krūvininkų dinamikos modelį ir stebėti, ar gaunami panašūs dėsningumai.

5. Gardelės modelio pritaikymas AlGaIn epitaksiniam sluoksniui

Ankstesniame skyriuje buvo aprašyti aliuminio galio nitrido (AlGaIn) epitaksinio sluoksnio fotoluminescencijos tyrimo rezultatai. Iš gautų spektrų ir intensyvumo gesimo kreivių paaiškėjo, kad sužadinus bandinį žemoje temperatūroje didelės ir mažos energijos krūvininkų gyvavimo trukmė yra maža – apie 0,2 ns (žr. 4.3 pav.). Šių krūvininkų rekombinacija atsakinga už fotoluminescencijos spektro kraštus. Krūvininkų, kurių energijos atitinka spektro maksimumą, gyvavimo trukmė yra didesnė (apie 0,6 ns). Didelės energijos krūvininkų gyvavimo trukmė yra trumpa, nes jie gali greičiau pasiekti nespindulinės rekombinacijos centrus, tačiau nėra suprasta, kodėl krūvininkų, turinčių žemesnes energijas, gyvavimo trukmė sumažėja.

Šiame skyriuje aprašyta, kaip AlGaIn sluoksniui buvo pritaikytas kompiuterinis trimatės netvarkios gardelės modelis ir kokie rezultatai gauti modeliuojant dalelių judėjimą tokioje gardelėje. Vienmatės gardelės modeliai, aprašyti 2-ajame skyriuje, buvo perdaryti į trimačius modelius. Kadangi buvo įsitikinta, jog abu modeliai ekvivalentūs, tai skaičiavimams naudotas tik vienas (pirmasis).



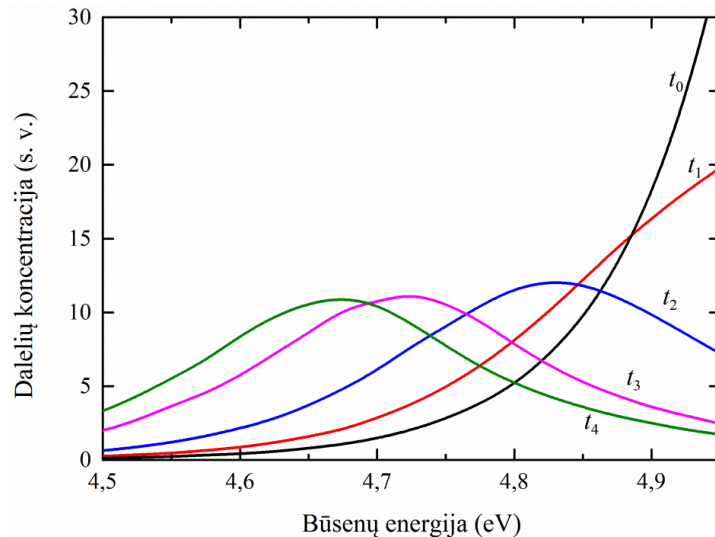
5.1 pav. Schematinis krūvininkų judėjimo per lokalizuotas būsenas ir rekombinavimo vaizdavimas. Gardelės modelyje kiekviena lokalizuota būsena atitinka skirtingą gardelės mazgą. Vienoje gardelėje yra vienas nespindulinės rekombinacijos centras.

5.1 pav. schematiškai pavaizduota, kaip krūvininkai juda per lokalizuotas būsenas. Krūvininkas gali rekombinuoti iš bet kurios būsenos, tada jis išspinduliuoja fotoną, kurio energija lygi tos būsenos, kurioje buvo krūvininkas, energijai. Jei krūvininkas patenka į tam tikrą centrą, jis rekombinuoja nespinduliniu būdu.

Pritaikius gardelės modelį, kiekviena lokalizuota būsena atitinka skirtingą gardelės mazgą. Gardelės mazgų energijos pasiskirsčiusios eksponentiškai nuo laidumo juostos dugno, kuris yra ties 4,95 eV. Pasiskirstymo vidurkis E_0 parenkamas atsižvelgiant į fotoluminescencijos spektrą: intensyvumas didžiausias ties 4,95 eV ir po to eksponentiškai mažėja mažėjant fotonų energijai, ties 4,5 eV tapdamas artimu nuliui (žr. 4.1 pav.). Tad galima daryti prielaidą, kad būsenų tankis taip pat eksponentiškai mažėja ir žemiau 4,5 eV būsenų praktiškai nebėra.

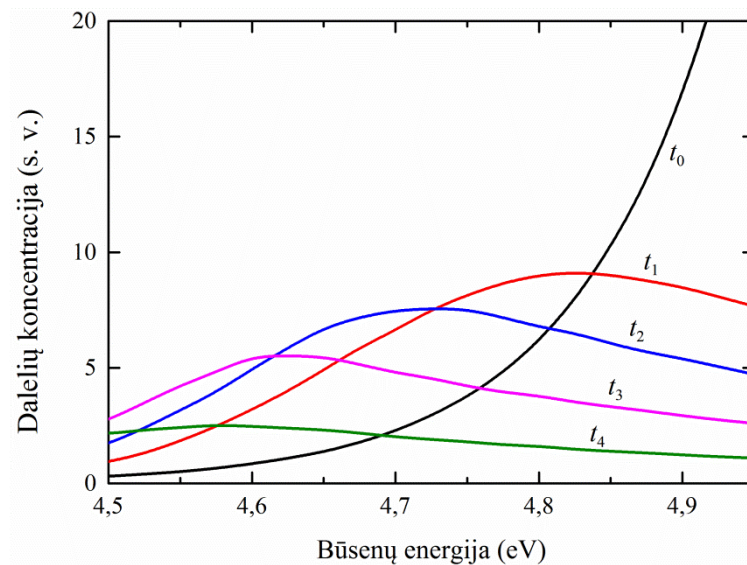
Modeliuojant dalelių judėjimą pradinio laiko momentu kiekviename gardelės mazge patalpinama po dalelę. Vienas iš gardelės mazgų yra rekombinacijos centras. Vienu metu modeliuojamas tik vienos dalelės judėjimas – ji juda per mazgus, kol patenka į rekombinacijos centrą ir ten išnyksta. Gardelė turi periodines kraštines sąlygas, t. y., jei dalelė išeina iš gardelės ribų, ji judėjimą tęsia kitoje gardelės pusėje.

5.2 pav. pavaizduota, kaip ilgainiui dalelės pasiskirsto per mazgų energijas (skirtingas būsenas) nesant rekombinacijos centro, t. y., dalelių skaičiui nemažėjant. Kadangi mazgų energijos pasiskirsčiusios eksponentiškai, o pradžioje kiekviename mazge yra po dalelę, tai pradinio laiko momentu dalelių pasiskirstymas irgi yra eksponentinis. Tačiau laikui bėgant ir dalelėms judant per mazgus šis pasiskirstymas įgauna tam tikrą formą ir galiausiai nusistovi.

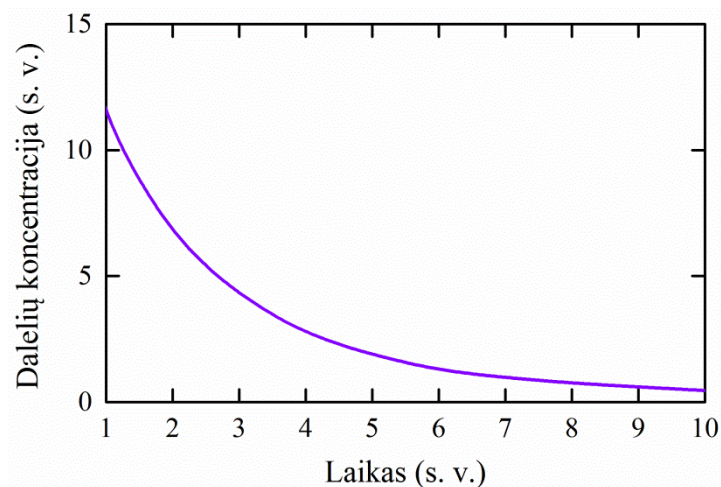


5.2 pav. Statistiškai sumodeliuotas dalelių pasiskirstymas per būsenas skirtingais laiko momentais nesant rekombinacijos centro, kai $k_B T / E_0 = 0,8$.

5.3 pav. pavaizduotas dalelių pasiskirstymas per būsenas esant rekombinacijos centrai. Matyti, kad pilnutinis dalelių kiekis ilgainiui mažėja. Galima teigti, kad ties konkrečia energija dalelių koncentracijos kitimą lemia du veiksniai – bendras dalelių mažėjimas dėl rekombinacijos ir pačio pasiskirstymo per būsenas kitimas laikui bėgant. Pastarasis gretai nusistovi, tad koncentracijos kitimą daugiausia lemia rekombinacija. 5.4 pav. pavaizduotas dalelių koncentracijos mažėjimas ties viena konkrečia energijos verte (4,8 eV). Tokią gesimo kreivę galime aproksimuote eksponente ir tokiu būdu suskaičiuoti gesimo konstantą, kuri yra krūvininkų gyvavimo trukmė.



5.3 pav. Statistiškai sumodeliuotas dalelių pasiskirstymas per būsenas skirtingais laiko momentais esant rekombinacijos centrai, kai $k_B T / E_0 = 0,8$.

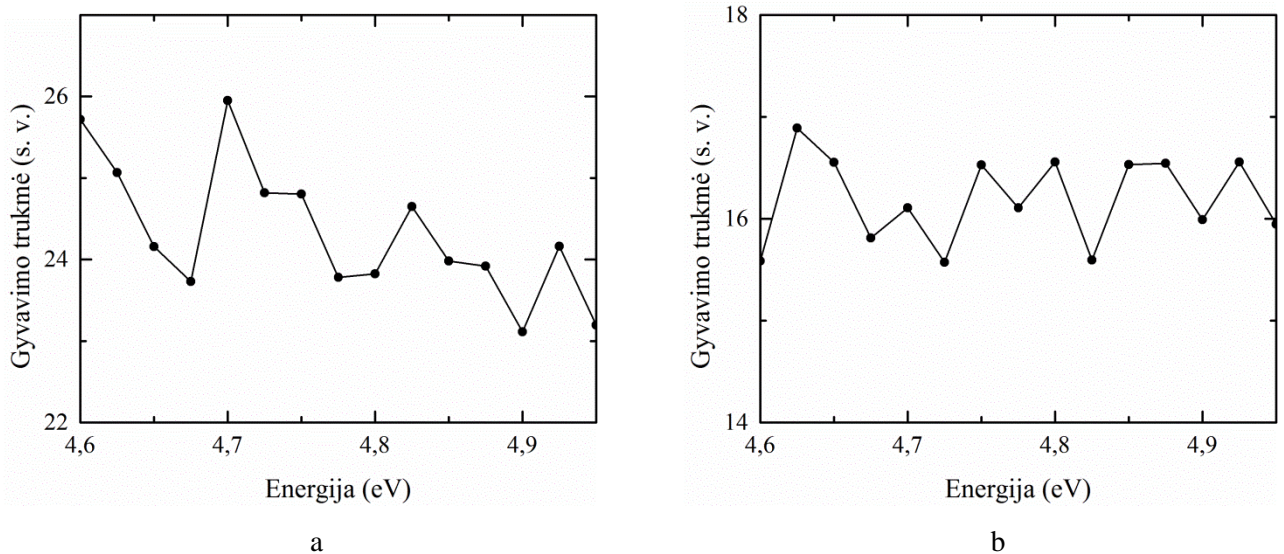


5.4 pav. Tipinė dalelių koncentracijos laikinė priklausomybė ties konkrečia dalelių energijos verte (4,8 eV).

Gardelės mazgas, kuris atitinka rekombinacijos centrą, gali būti parinktas dviem būdais:

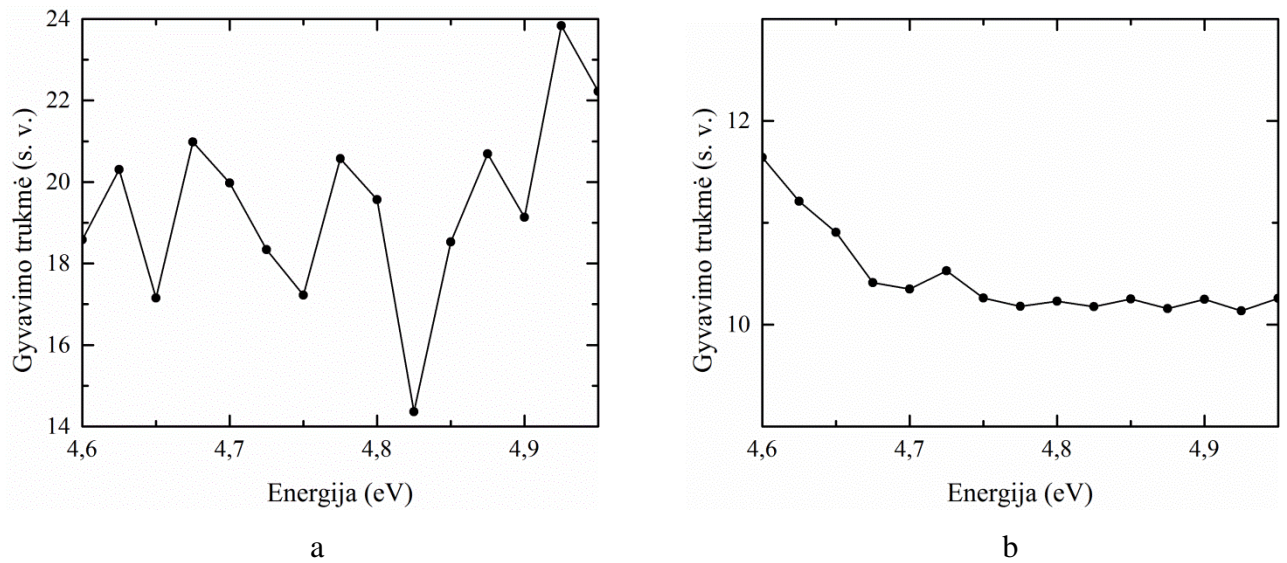
- atsitiktinai (tada rekombinacijos centrų energijos taip pat pasiskirsčiusios eksponentiškai) arba
- taip, kad kuo mazgo energija mažesnė, tuo didesnė tikimybė, jog jis bus rekombinacijos centras.

5.5 pav. abiem šiais atvejais pavaizduota krūvininkų gyvavimo trukmės priklausomybė ties kiekviena energija. Matyti, kad konkretus rekombinacijos centrų pasiskirstymas didelės įtakos gyvavimo trukmių pasiskirstymo formai neturi, tik b) atveju trukmės yra mažesnės lyginant su a). Vis dėlto, galima pastebėti, kad a) atveju trukmės nežymiai didėja mažėjant energijai (tai yra priešingas rezultatas nei stebėta eksperimentiškai), o b) atveju trukmės ties visomis energijos daugmaž pastovios. Tad toliau aprašyti tik tie rezultatai, kurie buvo gauti b) atveju.



5.5 pav. Statistiškai suskaičiuota krūvininkų gyvavimo trukmės priklausomybė nuo jų energijos, kai $k_B T / E_0 = 0,8$. a) Rekombinacijos centrų energijos parenkamos iš to paties skirstinio kaip ir mazgų energijos. b) Rekombinacijos centrų energijos parenkamos taip, kad kuo mazgo energija mažesnė, tuo didesnė tikimybė, jog jis bus rekombinacijos centras.

Kaip krūvininkų gyvavimo trukmės pasiskirstymas per energijas priklauso nuo trupmeniškumo parametro $\alpha = k_B T / E_0$, pavaizduota 5.6 pav. (tiksliau, tai priklausomybė nuo temperatūros, nes E_0 pastovus). Pirmiausia į akis krenta tai, jog mažas trupmeniškumo parametras $\alpha = 0,5$ lemia daug statistinių fluktuacijų (5.6 pav. a), tuo tarpu, kai $\alpha = 1$, šių fluktuacijų daug mažiau ir kreivė glotnesnė (5.6 pav. b). Kaip ir galima tikėtis, esant didesniam α (t. y., didesnei temperatūrai), krūvininkų gyvavimo trukmė yra trumpesnė, nes jie greičiau pasiekia rekombinacijos centrus.



5.6 pav. Statistiškai suskaičiuota krūvininkų gyvavimo trukmės priklausomybė nuo jų energijos esant skirtingoms trupmeniškumo parametro vertėms: a) $k_B T / E_0 = 0,5$, b) $k_B T / E_0 = 1$.

Kai trupmeniškumo parametras $\alpha = 0,5$ (5.6 pav. a), galima pastebėti, kad krūvininkų gyvavimo trukmė mažėja mažėjant jų energijai. Nors šis mažėjimas yra labai nežymus, tačiau ši tendencija atitinka eksperimentinius rezultatus žemų energijų srityje (4.3 pav. a). 5.6 pav. b atveju didėjant energijai gyvavimo trukmė irgi mažėja, o tai atitinka 4.3 pav. a didelių energijų sritį (nors konkrečios energijos vertės ir nesutampa).

Šie modeliavimo rezultatai neaprašo visų krūvininkų dinamikos ALGaN epitaksiniuose sluoksniuose ypatumų. Keičiant parametru vertes nepavyko gauti pastovios, eksperimentiškai nustatytos tendencijos, kad krūvininkų gyvavimo trukmė mažėtų mažėjant jų energijai, išskyrus vienu atveju, kai $E_0 = 0,16$ eV, $k_B T = 0,08$ eV ir trupmeniškumo parametras $\alpha = 0,5$. Tačiau eksperimento metu minėta tendencija pastebėta, kai temperatūra yra 12 K, o tai reiškia, kad $k_B T = 0,001$ eV. Tokią temperatūros vertę įvedus į gardelės modelį, trupmeniškumo parametras tampa labai mažas, dėl to generuojamos šuolių trukmės yra labai didelės ir dalelių judėjimas praktiškai nevyksta. Galima būtų mažinti ir parametru E_0 iki tokios vertės, kad dalelių judėjimas vyktų (bent $\alpha > 0,1$), tačiau tada didžioji lokalizuotų būsenų dalis būtų energijų intervale nuo 4,9 eV iki 4,95 eV. O iš fotoluminescencijos spektro (4.1 pav.) galima spręsti, kad krūvininkai rekombinuoja ir iš daug mažesnės energijos būsenų.

Išvados

1. Dinaminėje sistemoje vyksta subdifuzija, jei lokalizuotų būsenų energijos pasiskirsčiusios pagal eksponentinį dėsnį.
2. Konkretus šuolių mechanizmas iš vienos būsenos į kitą neturi įtakos anomaliosios difuzijos charakteristikoms.
3. Nors sukurtas anomaliosios difuzijos modelis nepaaiškina visų krūvininkų dinamikos ypatumų AlGaN epitaksiniuose sluoksniuose, tačiau parinkus konkrečias parametrų vertes galima gauti eksperimentiškai stebėtą krūvininkų gyvavimo trukmės mažėjimą mažėjant jų energijai.

PRIEDAS

Trupmeninis integralinis ir diferencialinis skaičiavimas. Integralinės transformacijos.

Įprasta, jog funkcijos išvestinės $d^n f/dx^n$ eilė n yra sveikas skaičius. Jei tarsime, kad parametras n gali įgyti ir realias reikšmes, tada tokią išvestinę vadinsime trupmenine. Egzistuoja keletas trupmeninės išvestinės apibrėžimų, kai kurie iš jų tinka tik tam tikroms funkcijų klasėms, taip pat ne visi apibrėžimai yra ekvivalentūs – pritaikius skirtingai apibrėžtas trupmenines išvestines tai pačiai funkcijai gaunami skirtingi rezultatai [11].

Vienas paprasčiausių būdų apibrėžti trupmeninę išvestinę $d^\alpha f/dx^\alpha$ (čia α – realus skaičius) yra pritaikyti n -tąją išvestinę tam tikrai funkcijai ir gautoje išraiškoje visas funkcijas su parametru n apibendrinti realiems α . Pavyzdžiui, žinome, kad laipsninės funkcijos n -toji išvestinė atrodo taip:

$$\frac{d^n}{dx^n} x^k = \frac{k!}{(k-n)!} x^{k-n}. \quad (\text{P.1})$$

Faktorialą pakeitę Gama funkcija, gauname trupmeninės išvestinės apibrėžimą laipsninei funkcijai:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} x^k = \frac{\Gamma(k+1)}{\Gamma(k-\alpha+1)} x^{k-\alpha}, \quad k \geq 0. \quad (\text{P.2})$$

Taip apibrėžtą trupmeninę išvestinę galima taikyti funkcijoms, kurios skleidžiamos Teiloro (Taylor) eilute.

Panašiu principu galime apibendrinti ir integravimą, tik šiuo atveju net nereikia konkrečios funkcijos. Integravimo operatorių apibrėžiame taip:

$${}_a I f = \int_a^x f(x_1) dx_1; \quad (\text{P.3})$$

čia $x > a$. Šį operatorių funkcijai pritaikę n kartų gauname išraišką

$${}_a I^n f = \int_a^x \int_a^{x_1} \dots \int_a^{x_{n-1}} f(x_n) dx_n \dots dx_2 dx_1 = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-y)^{n-1} f(y) dy, \quad (\text{P.4})$$

kurią galime apibendrinti realiems α :

$${}_a I^\alpha f = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-y)^{\alpha-1} f(y) dy. \quad (\text{P.5})$$

Kadangi diferencijavimas yra atvirkščias veiksmas integravimui, trupmeninį diferencijavimo operatorių galima išreikšti taip:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} = \frac{d^m}{dx^m} \frac{d^{\alpha-m}}{dx^{\alpha-m}} = \frac{d^m}{dx^m} I^{m-\alpha} ; \quad (\text{P.6})$$

čia m – sveikasis skaičius. Kaip matyti, trupmeninę išvestinę galime apibrėžti per trupmeninį integralą ir įprastą m -tosios eilės išvestinę. Taip apibrėžta išvestinė vadinama Rymano–Liuvilio (Riemann–Liouville) trupmenine išvestine. Bet kokios eilės išvestinei m galime parinkti taip, kad $\alpha - m$ būtų skaičius tarp 0 ir 1.

Sprendžiant diferencialines lygtis paranku taikyti Laplaso (Laplace) transformaciją:

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = F(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt . \quad (\text{P.7})$$

Šią transformaciją galime taikyti funkcijoms išvestinėms, pavyzdžiui,

$$\mathcal{L}\left\{\frac{df}{dt}\right\} = sF - f(0) ; \quad (\text{P.8})$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{d^2f}{dt^2}\right\} = s^2F - sf(0) - \frac{df}{dt}(0) . \quad (\text{P.9})$$

Apibrėžkime Laplaso transformaciją trupmeninėms išvestinėms. Nagrinėjame tik išvestinę, kurios eilė $0 < \alpha \leq 1$. Postuluojame, kad tokios išvestinės Laplaso transformacija yra tokia:

$$\mathcal{L}\left\{\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha}\right\} = s^\alpha F - s^{\alpha-1} f(0) . \quad (\text{P.10})$$

Kai $\alpha = 1$, ši išraiška tampa išraiška (P.8). Taip apibrėžta trupmeninės išvestinės Laplaso transformacija šiame darbe taikoma sprendžiant trupmeninę difuzijos lygtį.

Atvirkštinė Laplaso transformacija apibrėžiama taip:

$$\mathcal{L}^{-1}\{F(s)\} = f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} e^{st} F(s) ds ; \quad (\text{P.11})$$

čia integruojama pagal vertikalią liniją $\text{Re}(s) = \sigma$ kompleksinėje plokštumoje taip, kad visi ypatingieji funkcijos $F(s)$ taškai būtų kairėje linijos pusėje. Paprastai tokį integralą suskaičiuoti gan sunku. Šiame darbe atvirkštinei Laplaso transformacijai skaičiuoti taikomas skaitmeninis Gaverio–Štėfesto (Gaver-Stehfest) algoritmas [12]. Pagal šį algoritmą, turint funkciją $F(s)$ galima suskaičiuoti funkcijos $f(t)$ vertę konkrečiame taške t_0 :

$$f(t_0) = \frac{\ln 2}{t_0} \sum_{k=1}^{2n} a_k(n) F\left(\frac{k \ln 2}{t_0}\right); \quad (\text{P.12})$$

čia $t_0 > 0$, $n \geq 1$, o koeficientai $a_k(n)$ apibrėžiami taip:

$$a_k(n) = \frac{(-1)^{n+k}}{n!} \sum_{j=\lfloor (k+1)/2 \rfloor}^{\min(k,n)} j^{n+1} C_n^j C_{2j}^j C_j^{k-j}. \quad (\text{P.13})$$

Šiame darbe taikoma ir Furjė transformacija:

$$\mathcal{F}\{f(x)\} = \tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx. \quad (\text{P.14})$$

Jos atvirkštinė išreiškiama daug paprasčiau (priešingai atvirkštinei Laplaso transformacijai):

$$\mathcal{F}^{-1}\{\tilde{f}(k)\} = f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk. \quad (\text{P.15})$$

Kaip ir Laplaso transformaciją, Furjė transformaciją taip pat galime taikyti funkcijos išvestinei:

$$\mathcal{F}\left\{\frac{d^n f}{dx^n}\right\} = (ik)^n \tilde{f}(k), \quad (\text{P.16})$$

čia n – sveikasis teigiamas skaičius. Išraišką (P.16) nesunku apibendrinti ir trupmeninėms išvestinėms:

$$\mathcal{F}\left\{\frac{d^\alpha f}{dx^\alpha}\right\} = (ik)^\alpha \tilde{f}(k), \quad (\text{P.17})$$

čia α – realusis teigiamas skaičius.

Literatūros sąrašas

- [1] I. M. Sokolov, J. Klafter, and A. Blumen. Fractional kinetics. *Physics Today*, 55(11), 48-54 (2002).
- [2] R. Metzler, J. Klafter. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Physics Reports*, 339, 1-77 (2000).
- [3] I. Maitaitis. Statistinis difuzijos vyksmo modeliavimas netvarkioje gardelėje. Vilniaus universitetas, Vilnius, 2016.
- [4] E. Aydiner. Non-exponential relaxation in disordered complex systems. arXiv:cond-mat/0602461v2 [cond-mat.stat-mech] (2014).
- [5] R. T. Sibatov, V. V. Uchaikin. Truncated Lévy statistics for transport in disordered semiconductors. arXiv:1008.3969v1 [cond-mat.dis-nn] (2010).
- [6] J. Klafter, I. M. Sokolov. *First Steps in Random Walks: From Tools to Applications*. Oxford University Press, New York, 2011.
- [7] G. Juška, K. Arlauskas, J. Kočka, M. Hoheisel, and P. Chabloz. Hot Electrons in Amorphous Silicon. *Physical Review Letters*, 75(16), 2984-2987 (1995).
- [8] S. D. Baranovskii. Temperature-dependent exciton luminescence in quantum wells by computer simulation. *Physical Review B*, 55(19), 13081-13087 (1998).
- [9] T. Saxena¹, S. Nargelas, J. Mickevičius, O. Kravcov, G. Tamulaitis, M. Shur, M. Shatalov, J. Yang and R. Gaska. Spectral dependence of carrier lifetime in high aluminum content AlGaIn epitaxial layers. *Journal of Applied Physics*, 118, 085705 (2015).
- [10] R. R. Pelá, C. Caetano, M. Marques, L. G. Ferreira, J. Furthmüller. Accurate band gaps of AlGaIn, InGaIn, and AlInIn alloys calculations based on LDA-1/2 approach. *Applied Physics Letters*, 98(15), 151907 (2011).
- [11] R. Herrmann. *Fractional Calculus: An Introduction for Physicists*. World Scientific Publishing Company, Singapore, 2011.
- [12] A. M. Cohen. *Numerical Methods for Laplace Transform Inversion*. Springer, New York, 2007.

Ignas Mataitis

Krūvininkų difuzijos modeliavimas AlGaN epitaksiniuose sluoksniuose

Santrauka

Difuziniai procesai netvarkingose medžiagose, tokiose kaip amorfiniai puslaidininkiai ar turintys daug defektų kristaliniai puslaidininkiai, dažnai yra anomalūs – jiems negalioja klasikinės difuzijos dėsniai, aprašantys tvarkingos struktūros medžiagose vykstančius difuzinius procesus. Vykstant klasikinei dalelių difuzijai dalelės vidutinis kvadratinis nuokrypis proporcingas laikui pirmuoju laipsniu, tuo tarpu vykstant anomaliajai difuzijai, arba subdifuzijai, dalelės vidutinis kvadratinis nuokrypis proporcingas laikui tam tikru realiuoju laipsniu $\alpha < 1$. Tokia subdifuzija aprašoma trupmenine difuzijos lygtimi, kurią išsprendus galima gauti koncentracijos evoliuciją apibūdinančius sprendinius.

Norint įsitinkinti, kad trupmeninė difuzijos lygties sprendiniai tikrai apibūdina subdifuzinius reiškinius, galima sukurti mikroskopinį modelį, kuriame vyktų subdifuzija. Toks mikroskopinis modelis gali būti energetiškai netvarki vienmatė gardelė, kurios mazgais juda dalėlės. Šiame darbe aprašyti du tokie modeliai, tarpusavyje besiskiriantys judėjimo per gardelės mazgus mechanizmais.

Ištyrus dalelių judėjimą vienmatėje gardelėje, gardelę galima perdaryti į trimatę ir taikyti konkreitiems eksperimentiniams rezultatams paaiškinti. Šiame darbe sukurtas netvarkios gardelės modelis taikomas siekiant paaiškinti AlGaN epitaksiniuose sluoksniuose nustatytą krūvininkų gyvavimo trukmės mažėjimą mažėjant jų energijai.

Apibendrinant statistinio modeliavimo rezultatus galima teigti, kad jei dinaminėje sistemoje lokalizuotų būsenų energijos pasiskirsčiusios pagal eksponentinį dėsnį, tai tokioje sistemoje vyksta subdifuzija, aprašoma trupmenine difuzijos lygtimi. Kadangi taikant abu modelius gaunami rezultatai yra analogiški, galima daryti išvadą, kad konkretus šuolių mechanizmas iš vienos būsenos į kitą neturi įtakos statistinio dalelių pasiskirstymo evoliucijai. Trimatis anomaliosios difuzijos modelis nepaaiškina visų krūvininkų dinamikos ypatumų AlGaN epitaksiniuose sluoksniuose, tačiau parinkus konkrečias parametrų vertes galima gauti eksperimentiškai nustatytą krūvininkų gyvavimo trukmės mažėjimą mažėjant jų energijai.

Ignas Mataitis

Simulation of charge carrier diffusion in AlGa_N epitaxial layers

Summary

Diffusion in disordered systems, such as amorphous or disordered semiconductors, does not follow classical laws which describe particle transport in ordered crystalline media, and this leads to anomalous subdiffusive transport properties. While in classical diffusion the mean square displacement of a particle is proportional to time to the first power, in subdiffusion the mean square displacement is proportional to time to some real power $\alpha < 1$. Subdiffusion is described by fractional diffusion equation whose solution gives the evolution of particle concentration.

Subdiffusive process can be simulated in computer assuming that particles move in energetically irregular lattice. Two one-dimensional lattice models are presented, each with different hopping mechanisms from one node to another. Statistically generated distributions of particle concentration are compared to the solutions of fractional diffusion equation.

After analysing characteristics of subdiffusion in one dimension, the lattice model is upgraded to three dimensions and is used for simulating charge carrier dynamics in real materials. Particularly, in this work the lattice model is used for trying to explain the decrease of charge carrier lifetimes at lower energies in AlGa_N epitaxial layers which was observed by using photoluminescence spectroscopy.

We conclude that in order for a system to undergo subdiffusive process described by fractional diffusion equation, the energies of localized states (which in our models are the energies of the nodes of the lattice) have to be distributed according to the exponential law. Since both models produce same results, we also conclude that a particular mechanism of random walk has no influence to overall evolution of particle concentration. By simulating charge carrier dynamics and recombination in the upgraded three-dimensional lattice we can achieve the desired decrease of charge carrier lifetimes at lower energies with a particular set of parameters. However, the model cannot explain all experimentally observed characteristics and we conclude that there are more complicated mechanisms of charge carrier transport and recombination in AlGa_N epitaxial layers.