

# 半导体 THz 辐射的 Monte Carlo 模拟

刘东峰, 秦家银

(中山大学电子与通信工程系, 光电材料与技术国家重点实验室, 广东广州 510275)

**摘 要:** 本文介绍了作者开发的基于面向对象语言 C++ 和统一建模语言 UML 的半导体输运及 THz 辐射的蒙特卡罗模拟软件, 并用该软件模拟了在强超短脉冲激光 (光生载流子密度  $10^{19} \text{cm}^{-3}$ ) 及强电场 ( $100 \text{kV/cm}$ ) 作用下 GaAs 的 THz 时域波形和相应的半导体表面局域场. 通过分析 THz 时域波形, 我们发现强外加电场下的载流子速度过冲、载流子屏蔽 (或器件反应过冲) 是形成 THz 时域波形双极结构的原因. 功率谱的分析表明增加外加电场有益于提高 THz 的低频成份的辐射, 但对高频部分 ( $> 6 \text{THz}$ ) 影响不大.

**关键词:** 蒙特卡罗方法; THz 辐射; C++ ; UML; GaAs

**中图分类号:** TN201 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2004) 08-1314-04

## Monte Carlo Simulation of THz Pulse Generation from Semiconductor Surface

LIU Dongfeng, QIN Jia2yin

(Department of Electronics and Communication Engineering, the State Key Laboratory of  
Optoelectronic Materials and Technologies, Zhongshan University, Guangzhou, Guangdong 510275, China)

**Abstract:** An ensemble Monte Carlo simulator, which is developed with the object-oriented programming language C++ and unified modeling language UML, has been introduced in this paper. Using this simulator, we have simulated the local fields on the GaAs surfaces and the temporal waveforms of THz pulses when the GaAs surface is illuminated by intense sub-picosecond optical pulses (the corresponding photogenerated carrier density  $10^{19} \text{cm}^{-3}$ ) and biased in a high applied external electrical field ( $100 \text{kV/cm}$ ). The power spectra show that the higher bias electric field may generate the higher power output within the range of 6 THz, and beyond this range the effect of high bias fields is not obvious.

**Key words:** Monte Carlo method; THz radiation; C++ ; UML; GaAs

## 1 引言

八十年代中期以来, 随着超快激光技术的发展, 利用飞秒激光脉冲在半导体表面或界面得到了宽带 THz 辐射, 其频谱从接近直流一直到数个甚至数十个 THz. 与此同时, 快速、无接触的电光取样探测方法随后研制成功, 从而使光致半导体 THz 辐射和检测技术取得了重大进展, 其应用研究也正蓬勃开展. 光致固体 THz 辐射的物理机制包含光生电流效应和光整流效应. 在理论描绘上, 人们一般用麦克斯韦电磁理论分析载流子中的自由电子在半导体 THz 辐射中的行为和作用, 作者曾对偏置电场作用下低温生长砷化镓 (LT2GaAs) 的光生电子的动力学过程进行了研究, 发现 LT2GaAs 所具有的亚皮秒载流子寿命对 THz 时域波形有重要影响<sup>[1]</sup>, 文献<sup>[2]</sup>结合漂移-扩散方法, 研究了超快场屏蔽效应对 THz 辐射的影响, J. C. Cao 等人在理论上对 THz 辐射的一些过程进行了分析和模拟<sup>[3]</sup>. 但上述方法都存在一定的局限性. 例如, 用电磁理论进

一步分析空穴的运动时, 将面临几乎无法克服的困难, 而外加电场作用下, 空穴的运动对半导体 THz 辐射的影响将不可忽略<sup>[4]</sup>; 漂移-扩散方法只适合处理屏蔽时间大于载流子驰豫时间的情形. 半导体的 THz 辐射实际上包含了载流子隧穿、加速、屏蔽以及散射等复杂的动力学过程, 这些极其复杂的瞬态过程很难直接通过电磁理论建立严格的数学模型进行精确求解而揭示其动力学过程. Monte Carlo 模拟方法以随机数的选取为基础, 通过随机试验, 对只身具有统计特性的系统和非常复杂的物理过程进行直接的模拟, 是一种非常有效的研究方法. 因此, 对亚皮秒时间尺度的光生载流子和场动力学进行较为深入的描绘时, 系综蒙特卡罗模拟方法是比较理想的研究手段. V. L. Malevich<sup>[5]</sup> 用 EMC 的方法分析了 n2GaAs 的 THz 辐射的载流子动力学, E. Staiikov et al<sup>[6]</sup> 则用这种方法研究了 GaN, InN and AlN 等材料的 THz 辐射. 已有的这方面的工作, 都没有考虑空穴的输运.

大多数已有的蒙特卡罗模拟软件都是为某一特定的问

收稿日期: 2003-07-08; 修回日期: 2003-11-17

基金项目: 教育部/高等学校博士学科点专项科研基金(No. 20020558037); 跨世纪优秀人才培养计划基金; 高等学校优秀青年教师教学科研奖励计划基金; 广东省自然科学基金重点项目基金(No. 021753); 广东省/千百十人才工程基金(No. Q02012)

题, 采用面向过程的 C 或 Fortran 语言书写的, 缺乏灵活性, 不易扩展。为此, 我们采用面向对象(Object oriented)方法并利用 C++ 和统一建模语言(UML)开发了一套较为完整的系综蒙特卡罗模拟软件。为了方便, 我们将该软件命名为 MCSZU (Monte Carlo simulator at zhongshan university), 其目标和功能包括: (1) 进行材料的超快现象的研究, 包括半导体材料的 THz 辐射; (2) 软件能比较方便地扩展, 便于灵活的处理不同半导体材料; (3) 进行基于 Si 和 GaAs 技术的半导体器件模拟。本文主要报道我们在半导体 THz 辐射的蒙特卡罗模拟方面的部分研究结果。

## 2 计算模型和模拟方法

在模拟过程中, 假设照射到半导体样品 GaAs 表面的超短脉冲激光的中心波长为 800nm、脉冲的半高宽(FWHM)是 100fs。

当模拟碰撞和自由飞行时, 每个载流子看成是一个真实的粒子, 由它的波矢和所处的能谷来标识。连续的两次碰撞之间的自由飞行按经典的牛顿力学处理。自由飞行时间、散射机制和载流子终态按蒙特卡罗方法进行选取, 各种散射的几率根据有关散射机制及其计算方法进行计算。半导体的导带采用三能谷模型, 相应的非抛物性系数, 谷间间隔和有效质量(对于 L 和 X 能谷沿纵向和横向有效质量)取自<sup>[7]</sup>。电子所经历的碰撞包括: 电子-电子、电子-光学声子、声学声子和谷间声子等碰撞。既然空穴主要分布在重空穴能谷, 我们模拟空穴的输运时采用的价带模型是一个 warped 等能面能谷。光激发半导体表面前的初始电场假设是均匀分布并等于外加的电场。光激发后半导体表面的电场通过有限差分法解一维的泊松方程并根据 EMO 方法在每次取样时进行更新。在实际进行蒙特卡罗计算时, 不可能将所有的光生载流子都包括进来进行模拟。但在解泊松方程和计算光生电流时又必须是实际的电荷密度, 为了解决此问题我们要用到所谓的超粒子概念。本文用到的超粒子数目是 45000。光生载流子数目按下面的产生率确定<sup>[8]</sup>,

$$G(t) = I_0 \left[ \cosh\left(\frac{2I_0 634t}{t_p}\right) \right]^{-1} \quad (1)$$

其中  $t_p$  是超短脉冲的半高宽,  $I_0$  入射光强。在时间  $T = j\Delta t$  时, 超粒子的数目按下面的式子进行更新:

$$N_q(T) = N_q(T - \Delta t) + \Delta t G(T) \quad (2)$$

其中  $\Delta t$  是取样时间间隔。与时间有关的半导体表面电流密度由下面的公式进行计算<sup>[9]</sup>:

$$j(t) = j_e(t) + j_h(t) = \frac{1}{Vd} \left[ Q_e \sum_i V_i(t) + Q_h \sum_j V_j(t) \right] \quad (3)$$

其中  $Q_e$  和  $Q_h$  分别表示电子和空穴超粒子的电量,  $Vd$  是半导体样品的体积,  $N_e$  和  $N_h$  是样品中的超粒子数,  $V(t)$  是相应速度。电子的漂移速度可以按下面的式子计算:

$$V_e = \frac{J_e(t)}{e n(t)} \quad (4)$$

其中  $e$ 、 $n(t)$  分别指电子和电子数密度。瞬态电流密度将产生 THz 辐射。远场时辐射场由下面的式子确定:

$$E_{rad} W \frac{d}{dt} j(t) \quad (5)$$

其中  $j(t)$  是光生电流密度。

按照上述模型开发的模拟软件 MCSZU 的类图(Class Diagram)及其不同对象(Objects)的功能描述如图 1 所示。其中方框表示的是类, 类名在方框中标出, 其中斜体表示的是抽象基类。图中涉及的三种线段表示类之间的联系, 两端不带标号的线段表示类之间的关联(association)关系; 一端带三角形的线段表示继承(inheritance), 箭头所指的是父类, 另一端所指的是子类; 一端带菱形的线段表示聚合(aggregation)。

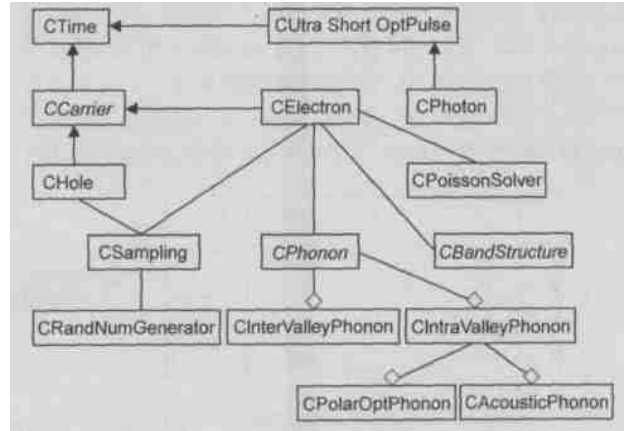


图 1 MCSZU 的类图(Class Diagram)

为了能方便地进行半导体超快现象的研究并为半导体器件模拟预留接口(interface), 我们专门定义了一个时间类 CTime 和超短脉冲光源类 CUltraShortOptPulse。CTime 确定 MCSZU 中涉及的时间, 包括载流子的自由飞行时间和发生散射的时刻以及取样时刻, 而这些量的确定与载流子的总散射率等有密切的关系; CUltraShortOptPulse 提供进行超快现象研究时的泵浦光, 但在器件模拟时不起作用。半导体的能带结构由抽象基类 CBandModel 类所指的子类 CParabolicConductBand 或 CWarpedConductBand 确定, 并由它们计算载流子与各种声子的散射率以及实现能谷坐标和空间固定坐标之间的相互转换。对载流子的取样由 CSampling 类完成。随机数由 CRandomGenerator 类得到, CPoissonSolver 类对半导体中电场的时间和空间的分布进行求解。模拟中所涉及的声子计数和分布由 CPhonon 整体类及其部件类 CPolarOptPhonon、CAcousticPhonon、COP2Phonon 和 CInterValleyPhonon 等实现。

## 3 模拟结果和分析

我们以单晶体材料 GaAs 为例进行了模拟和计算。图 2 是在激光强度较低, 即光生载流子密度为  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  时, 不同的外加电场下得到的 THz 时域波形。我们可以看到随着外加电场强度的增加, THz 脉冲的时域波形从单极(即整个波形只有一个正的波峰), 逐渐演化为双极, 出现了紧随正的主峰之后

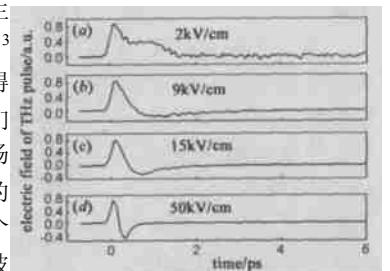


图 2 THz 脉冲的时域波形随外加电场的变化(相应的电场强度在图中标出)

的负值部分. 这种波形从低电场的单极形状到强电场的双极形状变化很明显, 与文献<sup>[4]</sup>中的实验结果一致, 但到目前为止还没有从理论上得到解释, 其主要原因是随着电场的增加, 光生载流子将会出现强场输运现象, 已有的基于欧姆定律的电磁理论几乎无法处理. 在模拟过程中, 由于使用的光生载流子数密度很小, 这样就排除了载流子对外加电场的屏蔽效应, 亦所谓的器件反应过冲 (Device response overshoot). 因此 THz 时域波形的上述变化规律是源于载流子的速度过程 (Velocity overshoot) 现象. 我们相应地计算了上面四种条件下的载流子的平均漂移速率 (图 3), 结果表明电场较低时 (2kV/cm) 没有出现速度过冲, 此时对应光生载流子只是局限在能谷中运动和弛豫. 随着电场的增加, 电子从电场中得到的动量远大于由

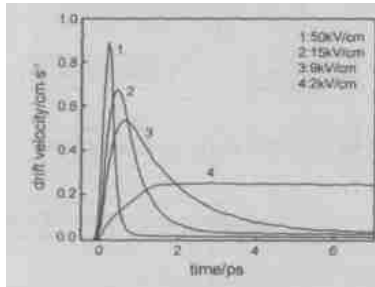


图 3 漂移速度随时间的关系 (光生载流子密度  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ )

另外, 已有的实验结果<sup>[4]</sup>表明超快激光脉冲作用下 GaAs 中电流增加的持续时间与外加电场有密切关系. 对此我们也

进行了模拟, 其结果如图 5 所示, 其中实线来自其文献<sup>[4]</sup>, 虚线是我们的模拟结果. 从图 5 中可看出电场大于约 15kV/cm 时二者符合得很好. 但在较低电场下, 我们的模拟结果偏大, 其根源是实验中在低电场条件下, 电子在达到其最大速度时就已经离开了 p2n 二极管的本征区, 从而使得电流在较早的时间内下降.

为了分析载流子屏蔽对时域 THz 波形的影响, 我们模拟和计算了外加电场为 2kV/cm 的条件下, 不同光生载流子密度下的时域波形和超快变化的半导体表面局域场 (local field), 其结果如图 6

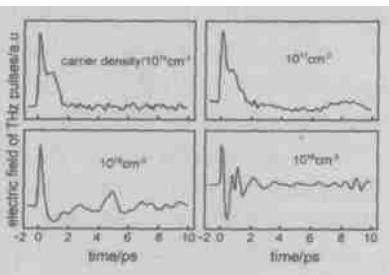


图 6 不同光生载流子密度下的 THz 时域波形 (加电场为 2kV/cm, 相应的光生载流子密度在图中标出)

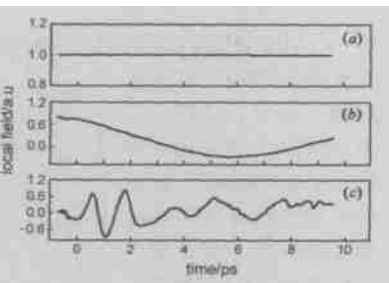


图 7 不同光生载流子密度 (a)  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ; (b)  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ; (c)  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  下半导体表面局域场 (外加电场为 2kV/cm)

于碰撞而失去的动量, 所以其速度可达到大于其平衡时的速度, 即出现了速度过冲. 而这种速度的下降最终达到稳定, 是由于电子从电场中得到足够的能量后发生了谷间转移, 从中心能谷跃迁到了侧能谷 (或卫星能谷), 电子的有效质量增加, 所以速度下降.

图 4 给出了与图 2 对应的 THz 时域波形的功率谱. 我们看到, 不同的外加电场对于高于 6THz 的频率范围的电磁辐射没有影响, 也就是说, 通过提高外加电场的方法无法改善较高频段的 THz 辐射输出. 但对于低于 6THz 频段, 提高外加电场可以得到较强的 THz 辐射. 同时, 我们从图 4 也可以看到在不同的外加电场下, THz 脉冲的频谱宽度几乎不变.

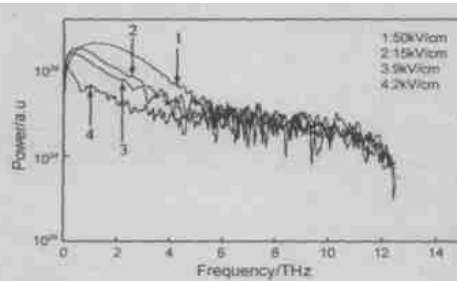


图 4 与图 2 中的时域波形相对应的功率谱

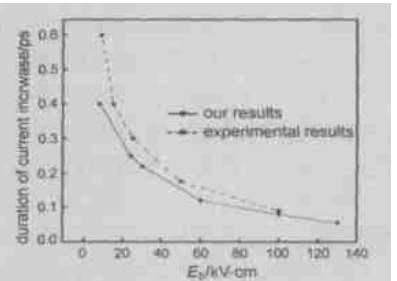


图 5 超快激光脉冲作用下 GaAs 中电流增加的持续时间与外加电场的关系

和图 7 所示. 此时电场的取值之所以为 2kV/cm, 是为了在 THz 的时域波形中排除速度过冲的效应 (根据我们前面的分析, 2kV/cm 的外加电场不会导致速度过冲的出现). 随着载流子密度的增加, THz 波形也出现了从单极到双极的过渡. 这种现象 Gl Rodriguez 等人<sup>[9]</sup>曾用电磁理论进行过分析, 但他们没有得到半导体表面的局域场的时间变化规律. 图 7 给出了入射激光光斑在半导体表面的中心位置的局域场随时间的变化. 我们知道, 局域场是载流子屏蔽场, 它起源于光生载流子 (电子和空穴) 在外加电场中的分离, 与外加电场迭加的结果. 从图 7 中我们发现低载流子密度时, 局域场基本上不变. 这是因为载流子密度较低时, 其屏蔽场很小, 它对外场的抵消作用可忽略, 所以半导体表面的局域场基本不变. 但随着载流子密度的增加, 屏蔽场也逐渐增加, 它们之间的这种相互作用产生了局域场的超快波动. 正是半导体表面场的这种超快波动导致了 THz 脉冲的双极的出现和随后的抖动 (见图 6).

## 4 结论

本文介绍了我们采用面向对象语言 C++ 和统一建模语言 UML 开发的用于研究半导体 THz 辐射的蒙特卡罗模拟软件的一些进展. 用该软件我们模拟了 GaAs 在强外加电场和强激光作用下的 THz 辐射. 通过分析 THz 时域波形, 我们发现强外加电场下的载流子速度过冲、载流子屏蔽 (或器件反应过冲) 是形成 THz 时域波形双极结构的原因. 功率谱的分析表明增加外加电场有益于提高 THz 的低频成分的辐射, 但对高频部分的影响不大. 同时, 外加电场的改变不会影响到 THz 脉冲的频谱宽度. 研究结果表明, 蒙特卡罗方法对于模拟半导体的

THz 时域波形、对研究外加强电场和强激光场作用下半导体 THz 辐射的机理和载流子的超快动力学过程是一种非常有效的手段和方法。另外,值得一提的是,面向对象语言 C++ 具有较为严格的数据封装技术和接口技术,为我们将来对软件的维护和扩展带来了很大的便利。

#### 参考文献:

- [ 1 ] Dongfeng Liu, Jiayin Qin. Carrier dynamics of THz emission from the low-temperature grown GaAs[J]. Appl. Opt. 2003, 42(18): 3678.
- [ 2 ] Rosenwaks Y, Thachker B R, Ahrenkiel R K, Nozik A J. photogenerated carrier dynamics under the influence of electric field in  $\text{GaAs}$  semiconductors[J]. Phys. Rev. B, 1994, 50: 1746.
- [ 3 ] J C Cao, H C Liu, X L Lei. Simulation of negative effective mass terahertz oscillators under terahertz radiation[J]. Appl. Phys. Lett. 2001, 78: 2524.
- [ 4 ] A Leitenstorfer, S Hunsche, J Shah, M C Nuss, W H Knox. Femtosecond charge transport in polar semiconductors[J]. 1999, 82: 5140.
- [ 5 ] V L Malevich. Monte Carlo simulation of THz pulse generation from semiconductor surface[J]. Semicond. Sci. Technol, 2002, 17: 551.
- [ 6 ] E Sarikov, P Shiktorov, V Gruzinskis, L Reggiani, L Varani, J C Vaissiere, Jian H Zhao. Monte Carlo calculations of THz generation in wide gap semiconductors[J]. Physica B. 2002, 314: 171.
- [ 7 ] M A Littlejohn, J R Hauser, T H Glisson. Velocity-field characteristic of GaAs with  $\text{GaAs}$  conduction band ordering[J]. J Appl. Phys. 1977, 48: 4587.

- [ 8 ] P Lugli, P Bordone, L Reggiani, M Rieger, P Kocevar, S M Goodnick. Monte Carlo studies of nonequilibrium phonon effects in polar semiconductors and quantum wells. I. Laser photoexcitation[J]. Phys. Rev. B. 1989, 39: 7852.
- [ 9 ] G Rodriguez, A J Taylor. Screening of the bias field in terahertz generation from photoconductors[J]. Opt. Lett. 1996, 21: 1046.

#### 作者简介:



**刘东峰** 男, 1969 年出生于江西安福县, 1996 年获吉林大学硕士学位, 2004 年 6 月获中山大学无线电物理专业博士学位, 主要研究方向为半导体 THz 技术及半导体器件模拟。



**秦家银** 男, 1961 年出生于湖北荆门市, 博士, 现任中山大学信息科学与技术学院副院长, 电子与通信工程系教授, 博士生导师, 目前主要从事 THz 技术和无线通信技术方面的研究工作。