

# 窄禁带半导体 $n$ -InAs THz 辐射机理的 Monte Carlo 研究

刘东峰

(广东工业大学信息工程学院电子信息系, 广东广州 510006)

**摘要:** 本文采用系综 Monte Carlo 方法模拟了窄禁带  $n$ -InAs 和宽禁带  $n$ -GaAs 的 THz 时域波形, 从理论上证实了  $n$ -InAs 的 THz 辐射机制是光丹培场的作用. 通过定量给出表面电场和光丹培场在半导体中的空间分布, 我们发现导致  $n$ -InAs 的 THz 辐射效率比  $n$ -GaAs 高的一个重要原因是: 在被大多数光生载流子占居的非耗尽层区域,  $n$ -InAs 的电场比  $n$ -GaAs 的大得多. 而以前的研究工作都没有认识到这一点.

**关键词:**  $n$ -InAs;  $n$ -GaAs; THz 辐射; Monte Carlo 模拟

**中图分类号:** TN386 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2007) 08-1458-04

## Monte Carlo Study of the Mechanisms of THz Radiation from Narrow-Gap Semiconductor $n$ -InAs

LIU Dong feng

(Department of Electronic Information, School of Information Engineering, Guangdong University of Technology, Guangzhou, Guangdong 510006, China)

**Abstract:** Using the ensemble Monte Carlo method, we have simulated the THz temporal waveforms from narrow gap semiconductor  $n$ -InAs and wide gap semiconductor  $n$ -GaAs. The radiation mechanism for  $n$ -InAs is confirmed as the photogenerated field, and the reason for the higher radiation efficiency of  $n$ -InAs than that of  $n$ -GaAs is: in the area occupied by the major part of photogenerated carriers, the electric field in  $n$ -GaAs is much smaller than that in  $n$ -InAs. This reason was not mentioned in all previous studies.

**Key words:**  $n$ -InAs;  $n$ -GaAs; THz radiation; Monte Carlo simulation

### 1 引言

太赫兹 (terahertz, 简称 THz) 辐射是指频率在 300GHz~10THz 范围的电磁波, 是人类目前唯一没有得到充分开发和利用的一个电磁波窗口, 在医学诊断、成像、环境检测、雷达探测和高速通信等方面有重要的应用前景. 目前, 常温下最理想的 THz 源是, 利用飞秒激光脉冲激发半导体表面得到 THz 辐射输出. THz 技术最为成熟的应用领域是 THz 时域光谱技术 (THz time domain spectroscopy: THz-TDS). THz-TDS 有望在一些基础科研领域, 如: THz 场诱导二次谐波产生、里德堡原子电离, 中发挥独特的作用. 另外, 在实用技术的开发方面, THz 成像也取得了初步成功. 但上述提到的应用都由于缺少辐射强度足够高的 THz 发射器而受到很大的限制. 发展高强度 THz 辐射源是目前人们共同关注的一个热点问题.

前期研究工作中, 我们开发了一套基于系综 Monte Carlo (EMC) 方法的模拟软件, 并用其分析了基于体材料

半导体的大孔径光电导天线的功率受限<sup>[1]</sup>和器件参数优化<sup>[2]</sup>等问题. 在相关文献中<sup>[2]</sup>对模拟软件的结构框架做了详细介绍. 为了表述的方便, 我们将该软件命名为 MCGUT (Monte Carlo Simulator at Guangdong University of Technology). 非器件形式的半导体晶体的 THz 辐射源与器件形式的光电导天线有很大的不同. 前者是依靠半导体内建电场: 表面电场或光丹培场工作的; 后者是依靠外加电场或磁场. 为了方便, 我们将前者简称为半导体 THz 发射源 (或发射器), 以区分器件形式的 THz 天线. 半导体 THz 源由于不需电极, 结构更为简单.

在已研究的体材料半导体中, 窄禁带半导体 InAs 具有很高的 THz 辐射效率. 相关实验<sup>[3]</sup>和计算机模拟<sup>[4]</sup>表明 InAs 的辐射机理是光丹培效应, GaAs 是表面电场 THz 发射器<sup>[4]</sup>. 但有关它们的辐射细节, 如光丹培场/表面电场在半导体中的分布规律、InAs 的 THz 辐射脉冲为何比 GaAs 的强, 等一系列基本问题并不清楚. 这方面的研究有助于我们找出半导体 THz 辐射功率受限的物理

机制.

为此,采用系综 Monte Carlo (EMC) 方法,来研究掺杂  $\text{InAs}$  (即  $\text{InAs}$ ) 的 THz 辐射动力学过程,并与典型的宽禁带半导体  $\text{GaAs}$  的 THz 辐射进行比较. 本文首先简要介绍了模拟方法,以及对原有模拟软件的相关改进和扩展. 然后,仔细模拟了  $\text{InAs}$  和  $\text{GaAs}$  的 THz 辐射过程.

## 2 模拟方法和软件结构

MCSGUT 采用经典的 Monte Carlo 算法<sup>[5]</sup>. 在文[1]和[2]中,对 MCSGUT 此做了详细的介绍. 对此,本文不再详述,只是对有关改进和扩展作详细的报道. 首先改进了对超快激光束的模拟,并由下式计算光生载流子沿光束方向在半导体中的空间分布:

$$f(z) = \frac{1 - e^{-\alpha}}{1 - e^{-\alpha L}} \quad (1)$$

其中  $z$  表示载流子在半导体中的位置(一维),  $\alpha$  是半导体的光吸收系数,  $L$  是沿光束方向的模拟范围.

超快激光激发半导体之前,半导体内部的光生电流为零,所以我们有如下的表达式:

$$\mu n(z) F(z) - D \nabla n(z) = 0 \quad (2)$$

其中  $\mu$  是电子迁移率,  $n(z)$  是半导体中的电子密度,  $F(z)$  表示表面电场分布,  $D$  是扩散系数. 由式(2)和爱因斯坦关系  $D = \mu \frac{K_B T}{e}$ , 我们可以得到:

$$n(z) = n_0 e^{-\frac{e\varphi(z)}{K_B T}} \quad (3)$$

其中  $n_0$  是半导体表面边界处的电子密度. 由半导体物理的相关知识,我们可以得到初始表面电势分布  $\varphi(z)$  的表达式:

$$\frac{d\varphi}{dz} = \sqrt{\alpha \left[ \frac{e\varphi}{K_B T} + e^{-\frac{e\varphi}{K_B T}} - 1 \right]} \quad (4)$$

其中  $\alpha = \frac{2K_B T n_0}{\varepsilon \varepsilon_0}$ . 由式(4)得到的  $\varphi(z)$ , 我们可以计算出表面电场分布  $F(z)$ . 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:

$$j(t) = j_e(t) + j_h(t) = \frac{1}{Vol} \left[ Q_e \sum_i^{N_e} v_i(t) + Q_h \sum_j^{N_h} v_j(t) \right] \quad (5)$$

其中  $Q_e$  和  $Q_h$  分别表示电子超粒子和空穴超粒子<sup>[5]</sup> 的电量,  $Vol$  是半导体样品的体积.  $N_e$  和  $N_h$  是样品中的电子和空穴的超粒子数,  $v(t)$  是相应的速度. 远场时辐射场由下面的式子确定:

$$E_{\text{me}} \propto \frac{d}{dt} j(t) \quad (6)$$

相对于先前模拟软件的类型<sup>[1]</sup>, MCSGUT 的类型图有两个扩充: (1) 增加了一个 CDeviceModels 类, 用以描述

不同 THz 发射器的几何结构和物理构成. 每个这样的类包含求解 Poisson 方程的方法, 或求 Poisson 方程——Schrödinger 耦合方程组的自洽解的方法(此方法用以求解基于量子阱的太赫兹激光器的子能带和波函数); (2) 扩充了一个 CComputationCenter 类, 包含了各种数值计算方法. 目前, 对开展基于系综 Monte Carlo 模拟方法的半导体 THz 辐射(包括各种量子阱结构的 THz 激光器)动力学研究, MCSGUT 已经较为完备, 因为我们只要修改并扩充 CDeviceModels 类即可.

模拟中使用的超粒子数为 30000, 模拟的空间范围为  $2\mu\text{m}$ , 网格数和网格宽度分别为 1000 和  $2\text{nm}$ .  $\text{InAs}$  和  $\text{GaAs}$  在  $800\text{nm}$  的近红外激光束照射下的吸收深度分别取值为  $0.14\mu\text{m}$  和  $1\mu\text{m}$ <sup>[6]</sup>.  $\text{InAs}$  和  $\text{GaAs}$  的初始表面电势  $V_s$  均为负值, 大小分别为其禁带宽度的一半<sup>[7]</sup>.

## 3 模拟结果和分析

由上述模型我们可以计算得到的  $\text{GaAs}$  和  $\text{InAs}$  在超快激光激发前的初始电场(即表面耗尽电场)和电子密度沿垂直表面方向(即  $z$  方向)的空间分布. 当掺杂浓度为  $10^{17}\text{cm}^{-3}$  时,  $\text{GaAs}$  和  $\text{InAs}$  中的表面耗尽电场分布和电子密度分布分别由图 1(a) 和 (b) 给出. 可以看出,  $\text{GaAs}$  的耗尽层比  $\text{InAs}$  的宽, 表面耗尽电场也比  $\text{InAs}$  的大.

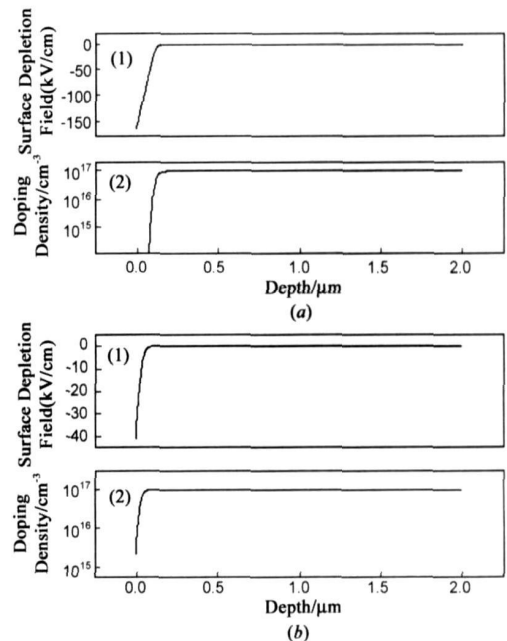


图 1 (a)  $\text{n-GaAs}$  中表面耗尽电场 (1) 和电子密度 (2) 沿垂直表面方向(即  $z$  方向)的分布; (b)  $\text{n-InAs}$  中表面耗尽电场 (1) 和电子密度 (2) 沿垂直表面方向(即  $z$  方向)的分布. 利用上面介绍的模型和方法(模拟所需的半导体参数来源于<sup>[6]</sup>), 我们模拟了掺杂窄禁带半导体  $\text{InAs}$  的 THz 辐射过程, 并与宽禁带掺杂半导体  $\text{GaAs}$  的相关结

果进行比较. 图 2 的 (a) 和 (b) 分别给出了  $\text{rr-InAs}$  和  $\text{rr-GaAs}$  在相同激发条件和掺杂浓度下的 THz 时域波形. 模拟参数: 超快激光脉冲中心波长 800nm, 脉冲宽度 100fs, 掺杂浓度  $10^{17}\text{cm}^{-3}$ , 脉冲强度为  $10^{-6}\text{mJ/cm}^2$ , 其对应的光生载流子浓度比掺杂浓度小约一个数量级. 图中的实线是同时考虑光丹培场和表面电场时模拟得到的  $\text{rr-InAs}$  和  $\text{rr-GaAs}$  的 THz 时域波形, 而虚线是只有光丹培场时这两种半导体的 THz 时域波形. 从图 2(a) 可以看出, 实线和虚线几乎重合, 它们的区别可以忽略. 说明  $\text{rr-InAs}$  的 THz 脉冲发射是由光丹培场控制, 半导体表面电场的作用可以忽略. 图 2(b) 的情形刚好相反, 实线和虚线相差很大. 从图可以看出  $\text{rr-GaAs}$  的 THz 辐射来自于光丹培场的贡献很小, 主要是表面电场的作用. 所以  $\text{rr-GaAs}$  基本上是表面电场 THz 发射器. 上述模拟结果与有关实验分析结果非常一致<sup>[3]</sup>.

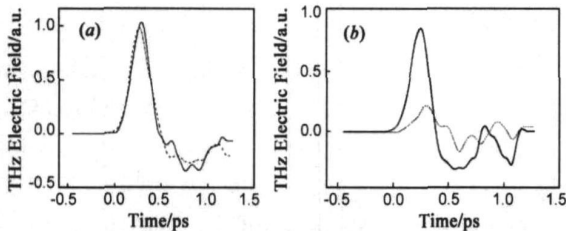


图 2 n-InAs(a)图和 n-GaAs(b)图的 THz 时域波函数. 实线是同时考虑光丹培场和表面电场时模拟得到的 THz 时域波形而虚线是只有光丹培场时的 THz 时域波形

图 3 给出了相同光泵和掺杂浓度下,  $\text{rr-InAs}$  和  $\text{rr-GaAs}$  的 THz 时域波形. 可以看出,  $\text{rr-InAs}$  辐射的 THz 脉冲幅度要比  $\text{rr-GaAs}$  辐射的 THz 脉冲幅度大得多. 不论是实验<sup>[3,8]</sup> 还是计算机模拟<sup>[4]</sup> 都发现这种现象, 但至今人们对其产生的物理机制的认识还很初浅. 已有的分析只是完全基于 InAs 的电子有效质量比 GaAs 的小这个事实<sup>[3,4]</sup>, 来说明 InAs 中的光生电子速度加速更容易, 其表面电流上升快, 从而获得较强的 THz 脉冲输出. 我们认为这种分析并不完全.

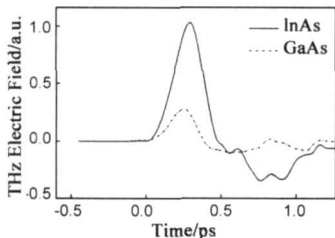


图 3 相同激发条件和掺杂浓度下, n-InAs(实线)和 n-GaAs(虚线)辐射的 THz 时域波形

图 4(a) 和 (b) 给出了  $\text{rr-InAs}$  和  $\text{rr-GaAs}$  中在某一个取样时刻正负电场的空间分布. 从这两个图中我们可以看到这样三个特征: (1)  $\text{rr-InAs}$  和  $\text{rr-GaAs}$  中都存在正电场分布区域(图 4(a)) 和负电场分布区域(图 4(b)). 因为光激发载流子浓度较低, 正电场区域和负电场区域就对应半导体的非耗尽层和耗尽层; (2)  $\text{rr-InAs}$  中的正电场比  $\text{rr-GaAs}$  中的要大得多, 而  $\text{rr-GaAs}$  中的负电场

要比  $\text{rr-InAs}$  中的大得多; (3)  $\text{rr-InAs}$  中正电场分布的宽度远大于  $\text{rr-GaAs}$  的正电场分布宽度(见图 4(a)), 而负电场的分布宽度远小于  $\text{rr-GaAs}$  的负电场分布宽度(见图 4(b)).

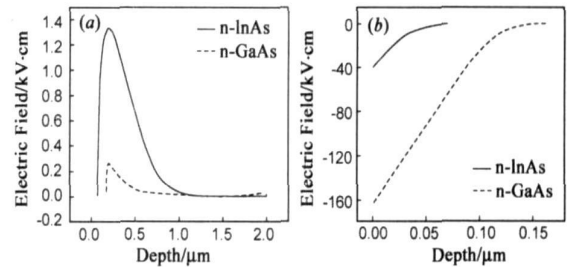


图 4 (实线) n-InAs 和 (虚线) n-GaAs 中正电场 (a) 和负电场 (b) 在半导体中的分布

根据模拟超快激光束的模型, 见式(1), 上述提到的宽度的大小实际上决定了光生载流子在半导体中的分布比例. 我们计算了图 4(a) 所示的  $\text{rr-GaAs}$  中正电场区域内的光生载流子占总数的百分比大约为 70%, 而  $\text{rr-InAs}$  的相应百分比约为 90%. 所以绝大多数的光生载流子分布在半导体的正电场区域, 由这些光生载流子计算得到的  $\text{rr-InAs}$  的 THz 脉冲要比  $\text{rr-GaAs}$  的强(由上面提到的特征(2)可得). 我们知道, 正、负电场对半导体表面光生电流的产生会起相互抵消, 而  $\text{rr-GaAs}$  的这种抵消作用要比  $\text{rr-InAs}$  的大, 因为图 4(b) 中  $\text{rr-GaAs}$  的负电场区域内的光生载流子数比例为 30%,  $\text{rr-InAs}$  的负电场区域内的光生载流子数比例为 10%, 而且  $\text{rr-GaAs}$  中负电场比  $\text{rr-InAs}$  中的负电场大很多. 所以综合起来,  $\text{rr-InAs}$  辐射的 THz 脉冲峰值比  $\text{rr-GaAs}$  的 THz 脉冲峰值大得多.

## 4 结论

本文介绍了我们开发的基于系统 Monte Carlo 模拟软件 MCGUT 的一些最新扩展, MCGUT 基本上能开展半导体 THz 光电导天线的优化设计及其性能仿真、体材料半导体和各种基于异质结的 THz 激光器的辐射动力学问题. 用该软件我们模拟了窄禁带半导体  $\text{rr-InAs}$  和宽禁带半导体  $\text{rr-GaAs}$  的 THz 辐射. 通过比较它们的 THz 时域波形, 我们从理论上验证了  $\text{rr-InAs}$  的 THz 辐射机制是光丹培场的作用, 而  $\text{rr-GaAs}$  的辐射机制是表面电场. 进而我们半定量地深入分析了  $\text{rr-InAs}$  的 THz 辐射效率比  $\text{rr-GaAs}$  高的内在机理: 主要来源于 (1) 在大多数光生载流子占居的非耗尽层区域,  $\text{rr-GaAs}$  的电场比  $\text{rr-InAs}$  的小得多; (2)  $\text{rr-InAs}$  的有效电子质量比  $\text{rr-GaAs}$  的小, 有利于光生载流子的加速. 我们首次指出了第一个原因, 有助于加深我们对半导体 THz 辐射动力学过程的认识.

## 参考文献:

- [1] 刘东峰,秦家银. 半导体 THz 辐射的 Monte Carlo 模拟[J]. 电子学报, 2004, 32(8): 1314– 1317.  
Liu Dongfeng, Qin Jiayin. Monte Carlo simulation of THz pulse generation from semiconductor surface [J]. Acta Electronica Sinica, 2004, 32(8): 1314– 1317. (in Chinese)
- [2] Dongfeng Liu, Jiayin Qin. The effects of optical pump parameters on THz temporal waveforms from Large Aperture Photorefractive Antenna[J]. Journal of Luminescence, 2006, 116: 28– 34.
- [3] Ping Gu, M Tani, S Kono, K Sakai, X-C Zhang. Study of terahertz radiation from InAs and InSb[J]. J. Appl. Phys, 2002, 91(9): 5533– 5537.
- [4] M B Johnston, D M Whittaker, A Corchia, A G Davis, E H Linfield. Simulation of terahertz generation at semiconductor surfaces[J]. Phys. Rev. B, 2002, 65(16): 165301(1– 8).
- [5] C Jacoboni, L Reggiani. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials[J]. Rev. Modern. Phys., 1983, 55(3): 645– 705.
- [6] M P Mikhailova. Handbook Series on Semiconductor Parameters[M]. World Scientific, London, vol. 1, 1996: 147– 168.
- [7] J L Hughes, E C Camus, M D Fraser, H H Tan, C Jagadish, M B Johnston. Carrier dynamics in ion-implanted semiconductors studied by simulation and observation of terahertz emission[J]. Phys. Rev. B, 2004, 70(23): 235330(1– 6).
- [8] M B Johnston, A Dowd, R Driver, E H Linfield, A G Davis, D M Whittaker. Emission of collimated THz pulses from photoexcited semiconductors[J]. Semicond. Sci. Technol., 2004, 19(4): S449– 451.

## 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 年获中山大学无线电物理专业博士学位, 现为广东工业大学信息工程学院副教授. 主要研究方向为计算光电子学、THz 技术和可视化计算. E-mail: dong\_feng\_liu@yahoo.com.cn