

光泵调制掺杂阶梯量子阱 THz 激光器瞬态动力学的 Monte Carlo 模拟

刘东峰, 林奕新, 马彩虹

(广东工业大学信息工程学院电子信息系, 广东广州 510006)

摘要: 采用系综 Monte Carlo (EMC) 方法首次对光泵量子阱 THz 激光器的载流子瞬态动力学进行了分析. 提出的器件原型为三能级调制掺杂 GaAs/GaxAl(1-x)As 系列非对称阶梯量子阱, 激励频率为 6.1 THz. 模拟中包括了电子-电子、电子-光学声子和电子-声学声子等散射机制, 采用调制掺杂以得到较高电子密度可以忽略电子-电离杂质散射. 已报道的研究工作都是在量子阱中掺杂, 而对于这种器件原型能否得到电子布居反转, 报道的结果也是相互矛盾. 器件原型在温度为 77K, 光泵强度达到一定值时可以得到电子布居反转, 所得到的研究结果对相关的实验研究具有一定的指导意义.

关键词: THz 激光; 调制掺杂; 非对称阶梯量子阱; Monte Carlo 方法

中图分类号: TN248.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2010) 03-0710-04

Monte Carlo Simulation of Transient Dynamics in Optically Pumped Terahertz Laser Based on Stepped Modulation Doped Quantum Well

LIU Dong-feng, LIN Yi-xin, MA Cai-hong

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

Abstract: Transient dynamics is a key issue for optically pumped quantum well THz laser, which is analyzed for the first time in this paper based on an ensemble Monte Carlo simulation (EMC). The prototype designed is a 3-level stepped modulation doped GaAs/GaxAl(1-x)As quantum well. In this EMC there are electron-electron (e-e), electron-optical phonon and electron-acoustic phonon scatterings included, and the electron-ionized impurity scattering can be ignored due to modulation doping. The reported THz prototypes of 3-level stepped quantum well were all based on doping in the deepest quantum well, and inconsistent conclusions were drawn about the population inversion. We find that population inversion is found in our designed device prototype with temperature 77K and at certain pumping flux.

Key words: THz laser; modulation doping; asymmetrical stepped quantum well; Monte Carlo method

1 引言

基于量子阱子能带电子跃迁实现太赫兹 (terahertz: THz) 激励是近年来 THz 研究领域的一个研究热点. 目前主要有两种设计方案: 电注入激发方式的量子级联激光器 (THz-QCL)^[1] 和光泵量子阱 THz 激光器 (THz-OQWL)^[2]. THz-OQWL 由于使用光泵进行选择性激发, 其结构相对 THz-QCL 要简单些.

已报道的 THz-OQWL 基本上是在最低量子阱所在的半导体层进行掺杂. 在这种结构中, 电子与杂质相处在同一半导体层中, 电子与杂质间的相互作用不可忽略, 而相关模拟研究只是考虑了电子-光学声子、电子-声学声子和电子-电子等无辐射散射机制, 没有考虑电

子-杂质散射^[3,4]. 同时, M. Dur 等人^[5] 在研究均匀掺杂的单量子阱电子弛豫动力学过程中发现, 子能带间电离杂质散射是电子分布加热的重要机制, 所以我们认为相关研究得到的子能带电子加热机制并不准确. 另外, 在 THz-OQWL 的多种量子阱结构^[3-10] 当中, 阶梯量子阱由于其结构的非对称性, 光泵不受量子选择定则的限制, 并且研究发现阶梯量子阱可以提供较低的光泵功率阈值^[8]. 最后, 基于速率方程近似的方法和 EMC 方法研究三能级阶梯 THz-OQWL 得出的结论也不一致, 前者研究发现能得到电子数反转^[11], 而后者发现反转无法实现^[6].

基于以上考虑, 本文对 THz-OQWL 的阶梯量子阱的外层势垒层进行掺杂, 这样在量子阱中得到的准二维电

子气远离了杂质中心,电子-电离杂质散射可以忽略,有利于我们分析 THz-OQWL 中电子在子能带上的非平衡分布和相关的能量弛豫过程.对 THz-OQWL 来说,量子阱的各子能带上电子的能量弛豫过程以及相关的电子寿命是一个非常关键的问题,已有的研究^[12]表明 THz-OQWL 的增益受限与子能带电子的非平衡分布密切相关.

2 理论模型

对于 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs 量子阱,我们可以通过调节量子阱几何尺寸和 x 的值来裁剪量子阱中子能带的分布,而量子阱中电子的本征能量和波函数通过求解单粒子 Schrodinger 方程和 Poisson 方程的自洽解得到.设坐标 z 轴方向为垂直量子阱界面方向,则量子阱 z 向波函数及本征能量的计算公式, Schrodinger-Poisson 耦合方程组,如下所示:

$$-\frac{\eta^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \xi_i(z) + V(z) \xi_i(z) = \epsilon_i \xi_i(z) \quad (1)$$

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon_s(z) \frac{d}{dz} \right) \phi_e(z) = \frac{-e(N_f(z) - n(z))}{\epsilon_0} \quad (2)$$

$$V(z) = -e\phi_e(z) + \Delta E_c(z) \quad (3)$$

$$n(z) = \sum_i \frac{m^*(z)}{\pi \eta^2} |\xi_i(z)|^2 \int_{\epsilon_i}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp((E - E_f)/K_B T)} dE \quad (4)$$

其中 η 为约合普朗克常数, e 为电子电量, k_B 为波尔兹曼常数, ϕ_e 是静电势, $m^*(z)$ 为空间有关的有效质量, $N_f(z)$ 为空间有关的掺杂离子密度, $\Delta E_c(z)$ 为量子阱中的各个异质结导带边缘的能量差, E_f 为费米能级, ϵ_i 和 ξ_i 分别为子能带 i 的本征能量和 z 向波函数, T 为器件温度, $n(z)$ 为空间有关的电子密度. 方程(1)~(4)相互耦合,在求解之前,我们根据量子阱结构估算费米能级的初始值,在求解过程中当 E_f 收敛于一个定值时,计算结束. 所得结果作为系综 Monte Carlo 模拟的初始输入.

图 1 是我们设计的一种 THz 激光器原型(包括子能带分布和相应的 z 向波函数), Ga_{0.55}Al_{0.45}As 层的厚度为 25nm, 形成量子阱的势垒区, 量子阱的较深部分是厚度为 7nm 的 GaAs 层, 量子阱中的阶梯部分为 Ga_{0.97}Al_{0.03}As. 这种阶梯量子阱结构使得电子从子能带 0 到子能带 2 的跃迁为允许跃迁. 我们采用亚皮秒脉冲激光进行泵浦, 其脉冲的中心波长为 10.6 μ m, 对应光子能量为 117meV, 将基带 0 的电子共振激发至上能带 2, 从而在 2 和 1 子能带间形成电子数反转. 在器件原型的设计中, 我们适当选择器件的几何参数和 Ga_xAl_{1-x}As 中 Al 组成的比例, 可以使得 3-2 能级间隔小于 41meV (约 10THz), 从而实现 THz 激光输出. 图 1 的量子阱结构的

太赫兹输出频率是 6.1THz. 在量子阱的两边势垒层掺杂浓度为 $1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. 可以看出当对两边势垒层进行掺杂后, 量子阱导带边及 z 向波函数与文献中的在中间量子阱掺杂所得到的结果^[3]有很大的不同.

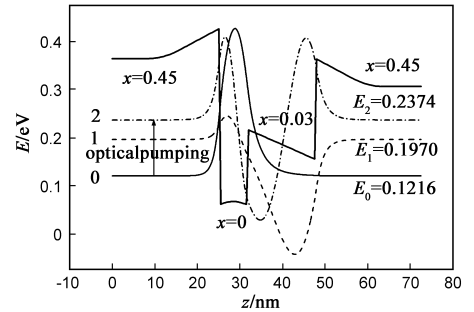


图 1 在两边势垒层掺杂的量子阱电子结构. 0和2的能级间隔都是115.8meV, 对激光光子(117meV)形成共振吸收, 太赫兹激光在能级2和1之间形成, 相应的频率为6.1THz

EMC 算法最耗时的步骤主要是计算电子的各种散射率. 为了提高模拟速度, 一般在这个步骤中采用查表的方法^[3]. 我们所开发的 EMC 模拟器对上述算法作了两个方面的修改: (1) 每个电子的每次散射前都作一次散射速率的计算. 这样虽然进一步增加了计算量, 但使得散射率的计算具有了“实时性”, 即根据实时变化的电子散射前的状态精确计算; (2) 将上述的串行计算进行了并行设计, 即开发了并行 EMC 模拟器^[13].

并行模拟器主要包括如下几个功能模块: (1) Schrodinger-Poisson 自洽求解模块; (2) 模拟泵浦激光的模拟; (3) 计算电子散射率的模块. 模块 1 在前面已经做了介绍, 在模块 2 中我们是模拟中心波长为 10.6 μ m 的亚皮秒激光, 采用的算法是在我们模拟超快激光脉冲的基础上^[14]并参照文献^[15]修改而来. 电子从基态随机地被激发至激发态, 其时域过程由下面的公式确定:

$$I(t) = I_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \quad (5)$$

其中 I_0 为泵浦激光的最大光强, τ 为激光脉冲的半高宽. 激光脉冲的中心 $t_0 = 0$.

模块 3 中我们包括了电子-光学声子散射、电子-声学声子散射和电子-电子散射, 声子模型采用体材料声子模型, 相应的计算公式参见了文献^[16].

3 模拟结果及分析

利用上面介绍的计算模型, 我们首先给出了三能级 THz-OQWL 中各个能级上电子面密度随时间的变化, 如图 2 所示, 光泵强度为 $1.0 \times 10^{25} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, 能级 2 和 1 之间出现了电子布居反转. 基态能级 (0 能级) 上的电子密度在激光脉冲的作用时间内有明显的减少, 相应的电子被激发到能级 2 上. 能级 2 上的电子寿命 (由子带间电子-电子和电子-光学声子散射率之和决定, 取值为

$5 \times 10^{12} \text{s}^{-1}$ 至 $1 \times 10^{13} \text{s}^{-1}$ 量级) 约为 0.2ps . 从图中我们可以看到, 能级 1 上电子分布的增加滞后能级 2 上的电子增加大约 0.25ps , 这个时间与能级 2 上电子寿命是一致的. 当 $T = 77 \text{K}$ 时, 能级 1 上的初始电子密度为 10^9cm^{-2} , 此时电子数的增加来源于能级 2 上的电子向能级 1 的无辐射跃迁. 激光脉冲之后, 能级 2 上的电子逐渐减少, 而能级 0 上的电子有一个非常缓慢的增加, 能级 1 上的电子数基本保持不变.

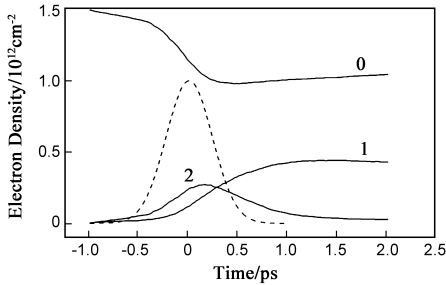
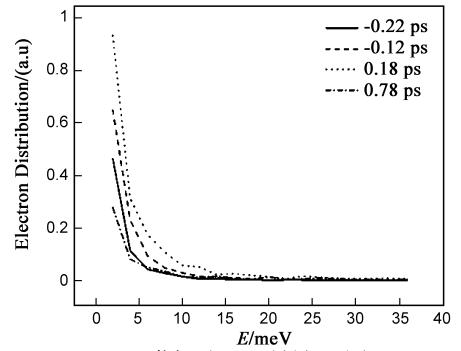


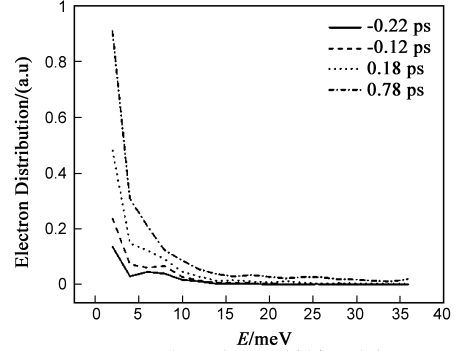
图2 THz-QQWL中0、1和2能级上电子面密度随时间的变化情况, 虚线表示泵浦激光脉冲

另外, 从图 2 我们发现, 能级 2 上电子分布的最大值与激光脉冲峰值也不是同步的, 前者延后后者大约 0.25ps . 这种滞后的原因与前面提到的滞后的原因有所不同: 源于能级 2 上电子的有限总散射率(子带内和子带间散射). 可以设想, 如果该散射率非常大(寿命非常短), 电子从能级 0 激发至能级 2 后会立刻逃离, 相应的电子布居最大值必定与激光脉冲峰值是同步的. 如果该散射率非常小, 电子布居在有限的模拟时间内不会出现减少. 从这个滞后时间可以估算出能级 2 上的电子寿命(或总散射率), 由此得到的这个值与文献[11]中的计算值是一致的.

图 3(a) 给出了能级 2 上不同时刻的电子分布, 可以看出它们的分布是近似费米-狄拉克分布的. 而对于能级 1 上(见图 3(b)) 的电子分布情况有明显的不同, 在初始时期(0.18ps 之前) 电子分布明显偏离 e 指数衰减规律. 这是由于能级 2 上的电子初期主要向能级 1 驰豫^[6], 而通过光学声子发射向能级 1 跃迁而得到额外动能的缘故. 从图 1 可以知道, 能级 2 和能级 0 的能级差约为 115meV , 激光光子能量为 117meV , 所以电子激发到能级 2 上时将会有 2meV 的富余能量. 能级 2 上的电子将主要经历带内电子-电子散射(这种散射使得电子分布趋向于费米-狄拉克分布), 子带间光学声子和电子-电子散射, 当通过光学声子(能量为 35meV) 发射跃迁到能级 1 上时, 由于能级 2 和能级 1 的能级差约为 40meV , 所以结果会得到约 5meV 的富余能量, 所以我们看到了图 3(b) 所示的: 在 7meV 附近电子分布出现一个平台. 由于电子-电子散射, 能量在电子之间重新分布, 所以到 0.78ps 后, 电子分布趋向于费米-狄拉克分布.



(a) 能级 2 上不同时刻电子分布



(b) 能级 1 上不同时刻电子分布

图3

由于电子散射引起的各子能带间能量交换, 电子动能在各个子能带重新分配. 图 4 给出了温度为 5K 时各能级上的电子平均能量随时间的变化情况. 激光脉冲到达前, 系统处于平衡状态, 电子分布在能级 0 上, 平均能量约为 3.2meV . 激光脉冲到达后, 能级 0 上一部分电子被抽运到能级 2 上. 由于高能级电子返回能级 0 和 1 时, 富余的能量引起本能级电子变“热”, 平均能量逐渐升高. 随着时间的推移, 能级 1 和 0 上的电子平均能量趋于相同. 由于 0.5ps 后能级 2 上的电子减少, 计算得到的电子平均能量波动较大, 但其变化趋势是逐渐减少. 由于光激发, 各能级上的电子处于非平衡状态, 相应的温度也不相同. 在激光脉冲过后, 即大约 0.5ps 之后, 能级 0 上的电子平均能量最大, 意味着这个能级电子“最热”. 由于电子的各种散射机制引起能量弛豫, 电子能量逐渐减少, 并最终趋于一个相同的值, 即电子处于相同的温度, 但这时电子比光激发前电子温度要

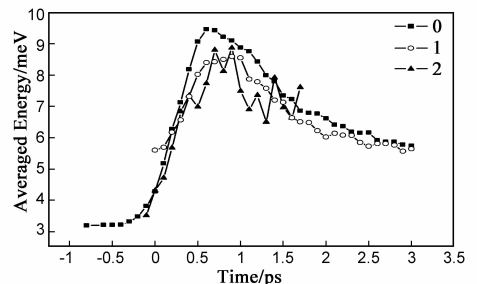


图4 随时间变化的电子平均能量, 器件温度为 5K , 泵浦激光脉冲峰值位于 0 时刻位置

高.

4 结论

本文提出了一种调制掺杂的三能级阶梯量子阱 THz 激光器原型,在第 2 和第 3 子能带间实现太赫兹激光输出.采用系综 Monte Carlo 的方法详细研究了电子布居的瞬态变化过程,并给出了变化过程的内在机理,在所有的三个能级当中,能级 1 的电子分布受光激发而偏离费米-狄拉克分布最大,而能级的电子温度最高.同时更为重要的是,我们所提出的这种器件原型在 77K 温度和 $1.0 \times 10^{25} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 光泵强度的条件下能够得到 6.1THz 的激射,这对相关实验研究具有一定的指导意义,因为已有研究关于三能级阶梯量子阱(量子阱中掺杂)能否实现电子布居反转没有一致的结论.

参考文献:

- [1] R Kohler, A Tredicucci, F Beltram, et al. Terahertz semiconductor-heterostructure laser [J]. *Nature*, 2002, 417(5): 156 – 159.
- [2] V Berger. Three-level laser based on intersubband transitions in asymmetric quantum wells: a theoretical study [J]. *Semicond Sci Technol*, 1994, 9(8): 1493 – 1499.
- [3] P Kinsler, R W Kelsall, P Harrison. Nonequilibrium electron heating in inter-subband terahertz lasers [J]. *J Appl Phys*, 2002, 91(3): 904 – 913.
- [4] P Kinsler, et al. Intersubband terahertz lasers using four-level asymmetric quantum wells [J]. *J Appl Phys*, 1999, 85(1): 23 – 28.
- [5] M Dur, S M Goodnick, P Lugli. Monte Carlo simulation of intersubband relaxation in wide, uniformly doped GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells [J]. *Physical Review B*, 1996, 54(24): 17794 – 17804.
- [6] H N Rutt, Z-J Xin, H A Tan. Design optimization of optically pumped terahertz lasers in stepped quantum wells [J]. *J Phys D: Appl Phys*, 2002, 35(16): 1907 – 1913.
- [7] P Kinsler, P Harrison, R W Kelsall. Intersubband electron-electron scattering in asymmetric quantum wells designed for far-infrared emission [J]. *Physical Review B*, 1998, 58(8): 4771 – 4778.
- [8] N Vukmirovic, V D Jovanovic, D Indjin, Z Ikonic, P Harrison,

et al. Optically pumped terahertz laser based on intersubband transitions in a GaN/AlGaIn double quantum well [J]. *J Appl Phys*, 2005, 97(10): 103 – 106.

- [9] M Popadic, V Milanovic, Z Ikonic, et al. Simulation of a tunable optically pumped terahertz intersubband laser with diluted magnetic semiconductors [J]. *J Appl Phys*, 2006, 100(7): 073709(1 – 6).
- [10] A Liu, C Z Ning. Near-infrared laser pumped intersubband THz laser gain in InGaAs AlAsSb InP quantum wells [J]. *Appl Phys Lett*, 2000, 76(15): 1984 – 1986.
- [11] P Harrison, R W Kelsall. Population inversion in optically pumped asymmetric quantum well terahertz lasers [J]. *J Appl Phys*, 1997, 81(11): 7135 – 7140.
- [12] A Liu, C Z Ning. Terahertz optical gain based on intersubband transitions in optically pumped semiconductor quantum wells: Coherent pump-probe interactions [J]. *Appl Phys Lett*, 1999, 75(9): 1207 – 1209.
- [13] Dong-Feng Liu, Y Lin, C Hong. A simple parallel algorithm for the simulation of optically pumped quantum well THz lasers [A]. *Proceeding of SPIE*, 2008 [C]. Wuhan: SPIE, 2008. 72770I – 72770I – 6.
- [14] Dongfeng Liu, J Qin. The effects of optical pump parameters on THz temporal waveforms from large-aperture photoconductive antenna [J]. *Journal of Luminescence* 2006, 116(1-2): 28 – 34.
- [15] J Wang, J Leburton, Z Moussa, . Simulation of optically pumped mid-infrared intersubband semiconductor laser structures [J]. *J Appl Phys*, 1996, 80(4): 1970 – 1978.
- [16] S M Goodnick, P Lugli. Effect of electron-electron scattering on nonequilibrium transport in quantum-well systems [J]. *Physical Review B*, 1988, 37(5): 2578 – 2588.

作者简介:

刘东峰 男, 1969 年出生于江西省安福县, 博士, 广东工业大学信息工程学院教授, 研究方向为计算电子学、计算几何.

E-mail: dong_feng_liu@yahoo.com.cn

林奕新 男, 1983 年出生于广东省海丰县, 硕士研究生, 研究方向为计算电子学.

马彩虹 女, 1983 年出生于河南省焦作市, 硕士研究生, 研究方向为计算几何.