

掺施主杂质半导体中 LO 声子的反对称 光电导响应的 Monte Carlo 模拟

陈张海 陈忠辉 刘普霖 石晓红 史国良 胡灿明 沈学础

(中国科学院上海技术物理研究所 红外物理国家重点实验室 上海 200083)

摘要 本文基于一个伴随 LO 声子发射的光激发电子被重新俘获的物理模型, 采用 Monte Carlo 方法, 对掺施主杂质的半导体光电导谱中与 LO 声子相对应的反对称谱峰结构进行了理论模拟, 并与 Si 掺杂的 GaAs 及 InP 的实验结果作了比较

PACC: 7240, 7155, 6320, 0270

1 引言

在过去的几十年中, 人们对掺杂半导体中光激发载流子与 LO 声子相互作用而引入的非本征光电导响应进行了广泛的研究^[1-4]. Stocker 等人曾指出, 在掺杂半导体的光电导测量中, 从杂质能级上被入射光子激发到导带而引入的过剩热载流子, 可通过级联地发射 LO 声子而弛豫到导带底, 并在所施加的电场方向上引起净动量损失^[1-3]. 他们的这个模型可以用来解释或预言光电导谱中发生在入射光子能量 $h\nu = E_i + n\hbar\omega_0$ (其中, E_i 为杂质电离能, $\hbar\omega_0$ 为 LO 声子能量, n 为正整数) 附近的“负微分(光)电导”(negative differential conductance) 或所谓“完全的负电导”(total negative conductance) 现象^[1,3]. 他们通过解 Boltzmann 输运方程计算了这样的振荡光电导响应^[2,3]. 不久, Mears 等人在 CdTe 光电导谱中的 $n\hbar\omega_0$ 能量处也观察到电导极小值^[4], 他们认为, 在这种情形下, 光激发电子最终并不是弛豫到导带底, 而是重新被杂质俘获. 另一个与 LO 声子直接相关的实验现象是出现在 GaAs 和 InP 的低温光电导谱中的一个 LO 声子能量处的反对称峰^[5-7]; 结合 Stocker 等人动量损失模型和 Mears 等人的杂质俘获模型, 这样的反对称光电导结构的物理起源可以得到定性的说明^[6,7].

在本文中, 我们将采用 Monte Carlo 方法, 对这一定性模型进行理论计算, 进而直接获得 LO 声子反对称光电导峰的模拟线形, 并与实验结果进行了比较

2 物理模型

一般来说, 在一个LO 声子能量 $\hbar\omega_0$ 附近引入光电响应的物理机制可以由图 1 示意给出. 在低温下, 当能量略高于 $\hbar\omega_0$ 的入射光子将杂质基态电子激发到导带而成为初始动能接近于 $\hbar\omega_0 - E_i$ (E_i 为杂质电离能) 的热载流子, x 方向的电场力将使具有 $-k_x$ 波矢的电子减速. 一旦其能量等于 $\hbar\omega_0 - E_i$, 该电子将发射一个LO 声子而重新被杂质基态俘获. 而具有 k_x 波矢的电子将在电场的作用下加速, 从而更远离共振条件, 它被杂质重新俘获的几率较小. 这样的机制将导致如图 1(a) 下半部分所示的导带电子分布. 可以看出, 由于这些光激发电子在电场力的反方向上有一净动量损失, 这时将检测到正的光电导信号. 而当处于杂质基态的电子被能量略低于 $\hbar\omega_0$ 的入射光子激发到导带时, 同样地, x 方向的电场力将使具有 $-k_x$ 波矢的电子减速而使具有 k_x 波矢的电子加速, 当其能量等于 $\hbar\omega_0 - E_i$, 该电子将发射一个LO 声子而重新被杂质基态俘获. 这也将导致光激发电子沿 x 方向的不对称分布(图 1(b)), 并使得光激发电子在电场力方向上有一净动量损失, 这样的机制将导致LO 声子低能侧负光电导的出现.

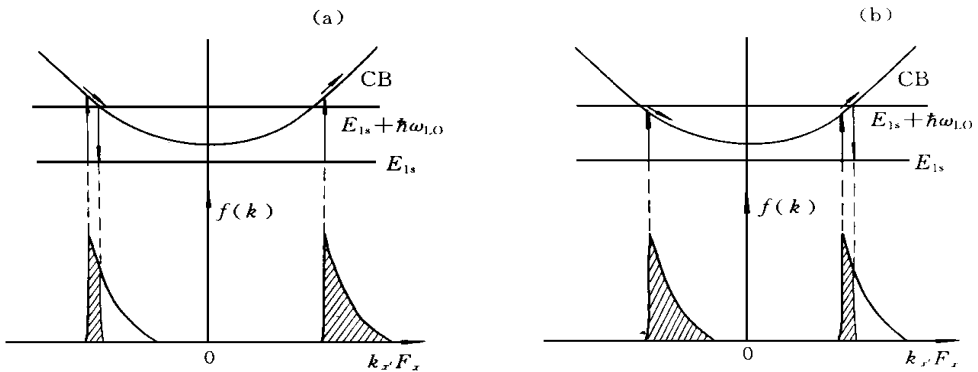


图 1 在LO 声子能量处产生正、负光电导响应机制的示意图

3 Monte Carlo 模拟

上述物理过程可以由 Boltzmann 输运方程定量描述, 然而直接求解这种光激发电子体系的 Boltzmann 方程是十分困难的事情, 并且很难得到精确解. 因此, 我们采用 Monte Carlo 方法, 对处于外电场下电子的随机运动直接进行模拟. 在 Monte Carlo 模拟过程中, 一些物理量和物理过程, 如电子的自由飞行时间、散射机制、散射后的电子状态等, 需要进行随机确定或选择^[8,9]. 由于我们要处理的是类似于与时间或空间分布有关的大量粒子的随机运动过程^[8-11], 因此, 必须对多个独立电子的运动进行模拟, 而某个感兴趣的物理量 A 的平均值可以方便地由下式求得^[10,11],

$$\bar{A}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i(t) \quad (1)$$

这里 N 为粒子的个数

在计算过程中, 我们以 Si 掺杂的 GaAs 作为模拟对象, 并认为其位于布里渊区 Γ 点的

导带能谷具有球形等能面,同时考虑了能带非抛物性的修正^[8],即导带电子的动能 $E(\vec{k})$ 和波矢 \vec{k} 的关系满足

$$\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} = E(\vec{k}) [1 + \alpha E(\vec{k})] \quad (2)$$

这里 $\alpha = [1 - (m^*/m_0)]/E_g$, m^* 和 m_0 分别为导带电子有效质量和电子的静质量, E_g 为 GaAs 的禁带宽度。在模拟程序中,我们考虑了电子的三种散射机制,即声学声子散射, LO 声子散射和电离杂质散射,并直接引用文献[8]和文献[9]中给出的有关这几种散射机制的散射率公式及主要模拟参数。由于光激发产生的电子浓度很小,同时考虑到光电导测量是在低温下进行,并且施加在半导体两端的电压也不高,因此,电子-电子散射和谷间散射可以忽略不计。导带电子的复合与产生均以一定的概率发生,在模拟过程中它们被当作两种特殊的散射机制。电子于两次散射之间在外电场作用下的自由运动由 $\hbar \vec{k} = e\vec{E}t$ (e 为电子电荷, \vec{E} 为电场强度) 确定。但是,一旦光激发电子的能量达到 $\hbar\omega_0 - E_i$, 则停止对该电子的模拟,并记录它最后的状态。这对应于电子被杂质基态重新俘获的过程。

由上述的 Monte Carlo 模拟过程可以直接得电子的分布函数。图 2 给出了导带中光激发电子沿 $-k_x$ 方向稳态分布的计算结果的两个例子,它们分别描述不存在外电场(实线)和存在沿 $-k_x$ 方向外电场(虚线)情形下初始

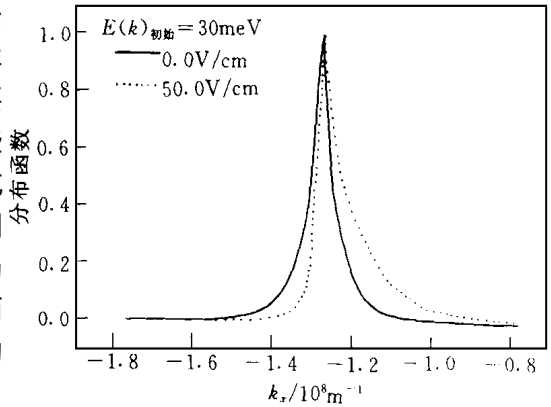


图 2 存在外电场(虚线)和没有外电场下(实线)导带中光激发电子稳态分布的模拟结果

动能 $E_0 = \hbar\nu - E_i$ 小于 LO 声子能量时的非平衡电子分布。由于在低温下,电子受到主要散射机制是与电离杂质的弹性碰撞,在这些非平衡载流子的存在期间,由声学声子或 LO 声子散射引起的电子动能损失很小,因此,可以近似认为构成如图 4 所示的无外场情况下对称分布的电子具有相同的动能。而一旦沿 $-k_x$ 方向加上电场,具有 $-k_x$ 方向动量的电子将在电场力的作用下而降低动能,此时的电子分布将呈现不对称性。图 3 给出了电场强度为 50V/cm 时,初始动能在 $\hbar\omega_0 - E_i$ 附近(即入射光子能量 $\hbar\nu$ 接近于一个 LO 声子能量 $\hbar\omega_0$) 的光激发电子沿 k_x 坐标轴分布的模拟结果,图中的实线和虚线分别对应于考虑了和不考虑杂质俘获机制的情形;在模拟过程中,我们仍然假设外电场施加在 $-x$ 方向上。可以看出,图 3(a)和图 3(b)分别对应于图 1 所示的两种情形。

有了电子的分布函数,根据公式(1),我们可以求得具有一定初始动能的光激发电子的平均速度

$$\bar{v} = \frac{\hbar \int \vec{k} f(\vec{k}) d\vec{k}}{m^* \int f(\vec{k}) d\vec{k}} \quad (3)$$

自于光电流大小正比于光激发载流子的平均速度,因此,根据这个公式可以直接得到光电导光谱响应的线形

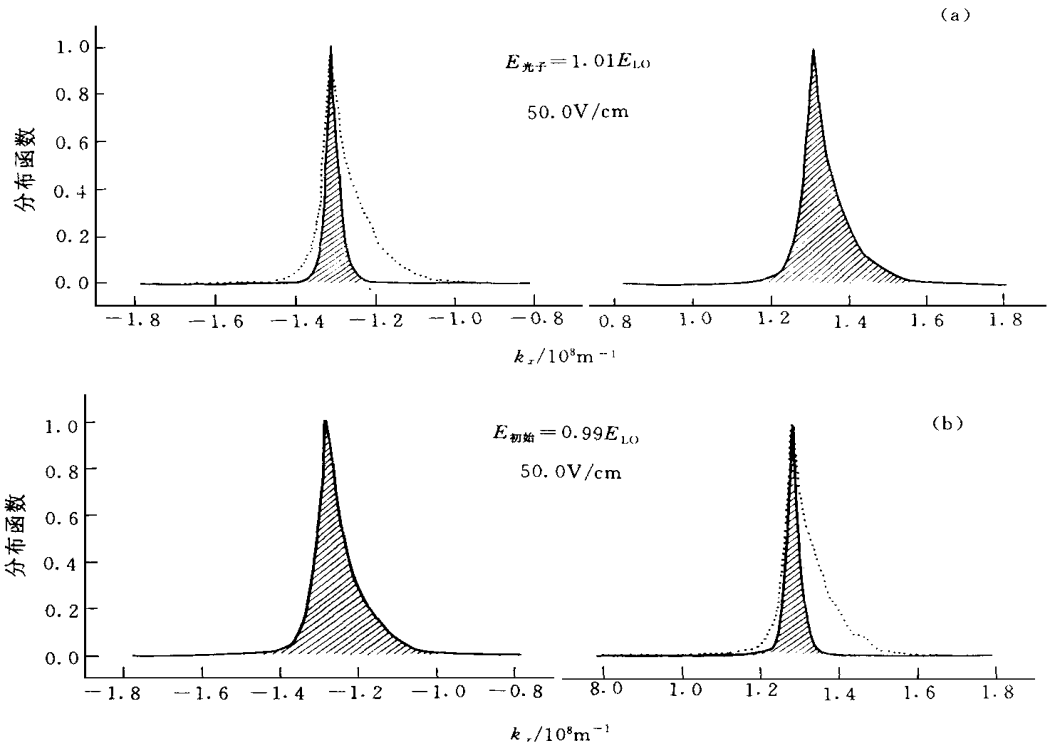


图 3 初始动能在 $\hbar\omega_0 - E_i$ 附近的光激发电子沿 k_x 坐标轴分布的模拟结果

4 线形比较和讨论

图 4 为 Si 掺杂 GaAs 体材料中 LO 声子光电导响应的模拟线形与实验结果的比较; 图中还同时给出了 Si 掺杂 InP

的实验结果 光电导的测量是在 4.2K 温度下进行的, 其它具体的实验条件和参数见文献[6]和文献[7] 图 4 表明理论模拟结果与实验线形在高于 LO 声子能量 $\hbar\omega_0$ 的光谱区符合得很好, 而在能量低于 $\hbar\omega_0$ 谱区, 由于图 1(b) 所示的机制, 理论曲线出现一个深的负峰, 这在 GaAs 实验结果中则很难分辨 尽管对 InP 而言, 这样的负光电导现象表现得较为明显, 其幅度仍远小于理论预期的值 导致理论模拟和实验结果在这个光谱区明显差别的主要原因是: 在极性

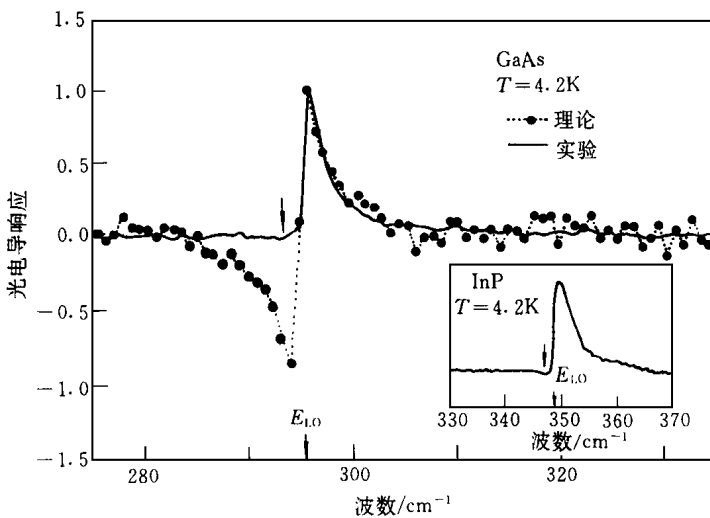


图 4 Si 掺杂 GaAs 中 LO 声子光电导响应的模拟线形与实验结果的比较 其中插图为 Si 掺杂 InP 的实验结果

半导体LO 声子和TO 声子之间的能量区域为强的光反射带,即剩余射线带,在这个能量范围内实验上很难观测到任何光谱结构

5 结束语

我们采用Monte Carlo 方法,首次对具有反对称线形的LO 声子光电导峰进行了理论模拟,理论计算与实验结果的符合表明关于该光电导结构起源的物理模型是可靠的、合理的。

参 考 文 献

- [1] H. J. Stocker, H. Levinstein and C. R. Stannard, *Phys. Rev.*, 1996, **150**: 613
- [2] H. J. Stocker and H. Kaplan, *Phys. Rev.*, 1966, **150**: 619
- [3] H. J. Stocker, *Phys. Rev. Lett.*, 1967, **18**: 1197
- [4] A. L. Mears, A. R. L. Spray and R. A. Strading, *J. Phys.*, 1968, **C1**: 1412
- [5] J. P. Cheng, B. D. McCombe, G. Brozak *et al.*, *Phys. Rev.*, 1993, **B48**: 17243
- [6] 陈张海, 陈忠辉, 刘普霖, 等, *物理学报*, 1997, **46**(3): 556
- [7] X. H. Shi, P. L. Liu, S. C. Shen *et al.*, *J. Appl. Phys.*, 1996, **80**: 4491
- [8] W. Fawcett, A. D. Boardman and S. Swain, *J. Phys. Chem. Solids*, 1970, **31**: 1963
- [9] C. Jacoboni and L. Reggiani, *Rev. Mod. Phys.*, 1983, **55**: 645
- [10] G. M. Wysin, D. L. Smith and A. Redondo, *Phys. Rev.*, 1988, **B38**: 12514
- [11] F. Rossi, P. Poli and C. Jacoboni, *Semicond. Sci. Technol.*, 1992, **7**: 1017

Monte Carlo Simulation for Photoconductivity Response of LO Phonon in Shallow Donor Doped Semiconductors

Chen Zhanghai, Chen Zhonghui, Liu Pulin, Shi Xiaohong,
Shi Guoliang, Hu Canming, S. C. Shen

*(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,
The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083)*

Received 9 April 1997, revised manuscript received 13 February 1998

Abstract Based on the physical model of the photoexcited electrons being recaptured by the ground state of the hydrogenic donors when a LO phonon is emitted, Monte Carlo simulation of the asymmetric photoconductivity structure situated at the energy position of LO phonon in shallow donor doped semiconductors is reported in this paper. The good agreement between the theoretical result and the experimental data of Si doped GaAs and InP indicates that our model is reliable.

PACC: 7240, 7155, 6320, 0270