

УДК 532.529

РАСПРОСТРАНЕНИЕ СВЕРХКОРОТКОГО ТЕРАГЕРЦЕВОГО ИМПУЛЬСА С ВЫСОКОЙ АМПЛИТУДОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ОБРАЗЦЕ КРЕМНИЯ

© 2021 г. А. А. Юркевич¹ *, А. В. Овчинников², М. Б. Агранат²¹ООО “Инрегмед”, Москва, Россия²Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: aayurk12@gmail.com

Поступило в редакцию 29.06.2021 г.

После доработки 29.06.2021 г.

Принято к публикации 23.11.2021 г.

Представлена расчетная модель динамики ТГц-импульса, падающего на образец беспримесного кремния, с амплитудой электрического поля до 23 МВ/см. Показано, что движении двухпериодного ТГц-импульса будет сопровождаться в результате ударной ионизации резким ростом концентрации свободных носителей до уровня $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ на входной поверхности и медленным спадом по глубине до $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ на выходе из образца. Показана необходимость подтверждения расчетной модели экспериментальными измерениями скорости ударной ионизации при заданных параметрах ТГц-импульса.

DOI: 10.31857/S0040364421060193

ВВЕДЕНИЕ

Генерация свободных носителей заряда в полупроводниках, происходящая при воздействии субпикосекундными ТГц-импульсами с высокой амплитудой электрического поля, представляет значительный интерес в области физики полупроводников, а также в прикладных задачах создания сверхбыстрых электронных и оптоэлектронных устройств [1–5].

Основным механизмом генерации свободных носителей является ударная ионизация. Исследования механизма ударной ионизации в кремнии, вызванной электрическими полями ТГц-импульса до 3.6 МВ/см, проводились в работах [2, 3], где было показано, что скорость ионизации сильно зависит от начальной концентрации свободных носителей и уменьшается с увеличением начальной концентрации. В [4] с помощью метода Монте-Карло исследуется механизм ударной ионизации в InAs, вызванной однопериодным ТГц-импульсом. Рассмотрена зависимость порога ударной ионизации от частоты и длительности импульса. В работе [5] исследовались процессы, связанные с ударной ионизацией в кристалле GaAs, вызванные воздействием ТГц-импульсами с напряженностью электрического поля до 1 МВ/см.

В связи с возникновением новых методов генерации малопериодных ТГц-импульсов с напряженностью поля, достигающей максимальных значений 25–30 МВ/см [1], представляет интерес проведение численного анализа задачи

движения ТГц-импульса в полупроводниковом материале (кремнии) и происходящих при этом процессов генерации свободных носителей.

В данной работе представлены результаты численного моделирования динамики процесса образования электрон-дырочных пар в кремнии при воздействии на него ТГц-импульса с максимальной напряженностью электрического поля до 23 МВ/см.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ИМПУЛЬСА ТЕРАГЕРЦЕВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ОБРАЗЦЕ КРЕМНИЯ

Для анализа процессов, происходящих в кремнии под действием ТГц-импульса, проведены расчеты динамики заполнения зоны проводимости свободными электронами. Для расчета зависимости от времени концентрации электронов проводимости N_e использованы дифференциальные уравнения для скорости изменения концентраций с использованием модели ударной ионизации Келдыша [6] для электронов зоны проводимости:

$$\dot{N}_e = C_e(\varepsilon - \varepsilon_{th})^n \varepsilon_{th}^{-2} N_e \Theta(\varepsilon - \varepsilon_{th}), \quad (1)$$

где $\Theta(\varepsilon - \varepsilon_{th})$ – функция Хевисайда с пороговой энергией $\varepsilon_{th} = 1.1 \text{ эВ}$ и $n = 2$ [7].

Для расчета дополнительной энергии свободных носителей используется дифференциальное уравнение

$$\dot{\epsilon} = -C_e(\epsilon - \epsilon_{th})^n \epsilon_{th}^{-2} N_e \Theta(\epsilon - \epsilon_{th}) - \epsilon/\tau_e + f(E_{ins}), \quad (2)$$

где первое слагаемое выражает скорость потери энергии, идущей на ударную ионизацию дополнительных носителей, второе слагаемое – скорость релаксации дополнительной энергии за счет процессов, не связанных с ударной ионизацией, и $f(E_{ins})$ с соответствующим индексом представляет скорость увеличения энергии свободных носителей под действием поля ТГц-импульса, E_{ins} – мгновенное значение амплитуды электрического поля импульса. Скорость увеличения энергии, следуя [8], рассматривается в виде

$$f(E_{ins}) = \frac{e^2}{2m} E_{ins}^2 \tau_\gamma,$$

где m – эффективная масса соответствующего носителя, τ_γ – среднее время между последовательными столкновениями электрона с решеткой, обеспечивающими акт ударной ионизации при его движении в кристалле под действием внешнего поля. Такой выбор $f(E_{ins})$ обосновывается тем, что частота γ электрон-фононного взаимодействия в образце кремния, находящемся под действием поля ТГц-импульса, для свободных носителей с высокими значениями дополнительной энергии (1.5–5 эВ) значительно превышает частоту ω ТГц-импульса и, следовательно, в каждый момент времени скорость электронов равна дрейфовой скорости

$$v_d = eE_{ins}/(m\gamma), \quad f(E_{ins}) = e^2 E_{ins}^2 / (2m_{eff} \gamma).$$

Подобная модель для электронов зоны проводимости использовалась в работе [9] при исследовании динамики генерации свободных носителей в InSb за счет механизма ударной ионизации.

Численное моделирование осуществлялось в пространственно-временной области переменных t и z (ось z направлена по глубине пластины). Для численного решения используемых в модели дифференциальных уравнений применялся конечно-разностный метод в пространственно-временной области на сетке с шагом дискретизации по времени $\Delta t = 0.05$ пс и шагом по пространственной координате $\Delta z = \frac{c}{n_{Si}} \Delta t = 4.5$ нм, где c – скорость света, $n_{Si} = 3.32$ – показатель преломления кремния на частоте ТГц-импульса.

Концентрация свободных носителей $N_e(t_i, z_j)$ в каждой точке (t_i, z_j) пространственно-временной сетки может быть получена в результате решения системы конечно-разностных уравнений

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}(t_i, z_j) &= \epsilon(t_{i-1}, z_j) + \Delta t f(E_*(t_i, z_j)), \\ N_e(t_i, z_j) &= N_e(t_{i-1}, z_j) + \\ &+ \left\{ \exp \left[C_e (\tilde{\epsilon}(t_i, z_j) - \epsilon_{th})^2 \epsilon_{th}^{-2} \Theta(\tilde{\epsilon}(t_i, z_j) - \epsilon_{th}) \Delta t \right] - 1 \right\} \times \\ &\quad \times N_e(t_{i-1}, z_j), \\ \epsilon(t_i, z_j) &= \tilde{\epsilon}(t_i, z_j) - \left\{ \exp \left[C_e (\tilde{\epsilon}(t_i, z_j) - \epsilon_{th})^2 \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \epsilon_{th}^{-2} \Theta(\tilde{\epsilon}(t_i, z_j) - \epsilon_{th}) \Delta t \right] - 1 \right\} N_e(t_{i-1}, z_j) + \tilde{\epsilon}(t_i, z_j) / \tau_e. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\epsilon(t_i, z_j)$ – значения средней дополнительной энергии электронов проводимости и дырок соответственно, полученные в результате воздействия ТГц-импульсом на i -м шаге по времени в j -м слое образца; τ_e – феноменологический параметр времени релаксации энергии электронов зоны проводимости. Начальные условия для дополнительной энергии свободных носителей – $\epsilon(t_0, z_j) = 0$ для всех слоев в образце.

Напряженность поля $E(t, z)$ ТГц-импульса, проходящего j -й слой, считается постоянной в слое, но, поскольку, в соответствии с законом Бугера, в начале и в конце слоя с показателем поглощения α поле изменяется, в расчетах берется среднее интегральное значение $(E_*(t, z) = E(t, z) (1 - e^{-0.5\alpha\Delta z}) (0.5\alpha\Delta z)^{-1}$, где $E(t, z)$ – напряженность поля в начале слоя.

Таким образом, считая, что на текущем i -м шаге расчета по времени в j -й слой входит поле $E(t_i, z_j)$, получаем значение $E_*(t_i, z_j)$ для расчетов по (3). На текущем i -м шаге расчета по времени в j -м слое создается повышенная концентрация свободных носителей и изменяется показатель поглощения материала α , который будет учитываться в расчете на следующем шаге по времени для следующего значения амплитуды поля, входящего в слой. Поле $E(t_i, z_j)$, входящее в слой, на выходе будет ослаблено текущим значением показателя поглощения $\alpha_{i,j}$, т.е. в следующий слой будет входить поле $E(t_i, z_j) e^{-0.5\alpha_{i,j}\Delta z}$.

Известно [10, 11], что при возрастании энергии свободных носителей в кремнии растет частота столкновений носителей. В области образца, где происходит воздействие ТГц-импульсом, частота столкновений, включающая в себя все возможные виды $e-e$, $e-ph$, $e-h$ взаимодействий, принималась равной $\gamma = 2.0 \times 10^{14}$ Гц [10, 11]. После прекращения воздействия электрического поля ТГц-импульса на среду энергия носителей рассеивается и частота столкновений релаксирует к значениям, определяемым достигнутым уровнем концентрации свободных носителей [12].

Рассмотрим образец беспримесного кремния толщиной 235 мкм. Временная форма возбуждающего ТГц-импульса показана на рис. 1 с макси-

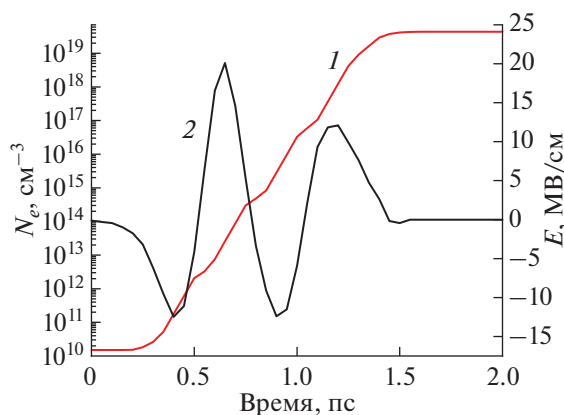


Рис. 1. Зависимость изменения концентрации свободных электронов (I) от времени в зоне проводимости в поверхностном слое глубиной 4.5 мкм пластины кремния; временная форма падающего на образец ТГц-импульса (2).

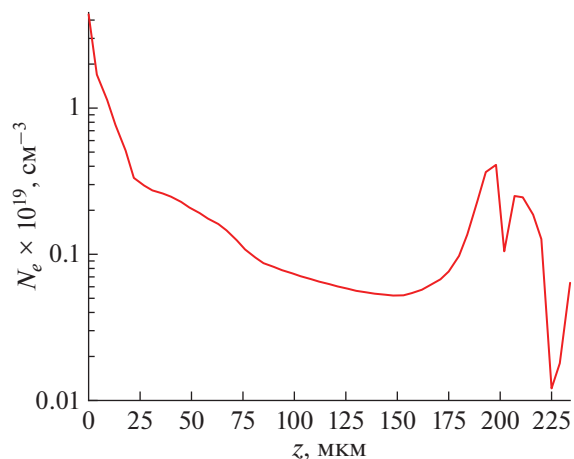


Рис. 2. Распределение концентрации носителей по глубине образца после выхода ТГц-импульса из образца кремния.

мальной амплитудой электрического поля до 23 МВ/см [13].

Одновременно с рассчитанными значениями концентрации носителей $N_e(t_i, z_j)$ и частоты столкновений $\gamma(t_i, z_j)$ по формулам Друде [14] рассчитываются компоненты диэлектрической проницаемости $\epsilon_1(t_i, z_j)$, $\epsilon_2(t_i, z_j)$ и показатель поглощения $\alpha(t_i, z_j)$, а также коэффициент поглощения Бугера в текущем слое толщиной Δz : $b_{ij} = \exp(-\alpha_{ij}\Delta z)$.

На рис. 1 представлены полученные в результате расчетов зависимости от времени концентрации электронов проводимости N_e во входном слое пластины кремния глубиной 4.5 мкм и временной профиль напряженности электрического поля ТГц-импульса с максимальной амплитудой $E_{\max} = 20$ МВ/см на входе в образец.

Для беспримесного кремния рост концентрации свободных носителей начинается в районе 200 фс, и концентрации достигают максимума к концу действия ТГц-импульса в слое. Концентрация свободных носителей к концу действия ТГц-импульса в слое достигает уровня $(4 \pm 0.1) \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

В расчете константа C_e полагалась равной 10^{12} с^{-1} , и, таким образом, среднее значение показателя $K_{IMI} = \ln(N_{\max}/N_0)/\Delta T$ скорости роста концентрации N_e за период действия ТГц-импульса ΔT составляет $K_{IMI} = 1.6 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$. Уточнить значение константы C_e будет возможно после проведения экспериментальных исследований пропускания кремния под действием ТГц-излучения. Вместе с тем рассчитанное значение показателя K_{IMI} находится в хорошем соответствии с теоретическими исследованиями [15, 16] скорости

ударной ионизации в кремнии в зависимости от дополнительной энергии свободных носителей.

Распределение концентрации носителей по глубине после выхода ТГц-импульса из образца представлено на рис. 2. В начальных слоях глубиной ~20 мкм концентрация свободных носителей резко падает до уровня $\sim 3 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, и в дальнейшем происходит плавное уменьшение концентрации до уровня $\sim 6 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Небольшой подъем и колебания концентрации до значений $(2.5 \pm 1.5) \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ на противоположном краю образца в слое толщиной ~60 нм обусловлен воздействием отраженного ТГц-импульса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленная расчетная модель динамики ТГц-импульса с высокой амплитудой электрического поля в образце кремния показывает, что движение ТГц-импульса сопровождается резким ростом концентрации свободных носителей в результате ударной ионизации под действием квазистационарного электрического поля ТГц-импульса. Показано, что концентрация свободных носителей имеет существенно неоднородный характер, начиная с $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ на входной и до $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ на противоположной поверхности образца.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание № 075-00892-20-00). Эксперименты проводились на уникальной научной установке “Лазерный тераваттный фемтосекундный комплекс”, входящей в состав ЦКП “Лазерный фемтосекундный комплекс” ОИВТ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Romashevskiy S.A., Ovchinnikov A.V., Chefonov O.V., Agranat M.B.* Subpicosecond Terahertz Radiation with an Electric Field Above 1 MV/cm: Interaction with Condensed Matter and Its Applications // *High Temp.* 2017. V. 55. № 6. P. 859.
2. *Tarekegne A.T., Iwaszczuk K., Zalkovskij M., Strikwerda A.C., Jepsen P.U.* Impact Ionization in High Resistivity Silicon Induced by an Intense Terahertz Field Enhanced by an Antenna Array // *New J. Phys.* 2015. V. 17. 043002.
3. *Tarekegne A.T., Hirori H., Tanaka K., Iwaszczuk K., Jepsen P.U.* Impact Ionization Dynamics in Silicon by MV/cm THz Fields // *New J. Phys.* 2017. V. 19. 123018.
4. *Ašmontas S., Raguotis R., Bumelienė S.* Monte Carlo Study of Impact Ionization in *n*-type InAs Induced by Intense Ultrashort Terahertz Pulses // *Opt. Quantum Electron.* 2018. V. 50. 264.
5. *Hirori H., Shinokita K., Shirai M., Tani S., Kadoya Y., Tanaka K.* Extraordinary Carrier Multiplication Gated by a Picosecond Electric Field Pulse // *Nat. Commun.* 2011. V. 2. P. 594.
6. *Келдыш Л.В.* К теории ударной ионизации в полупроводниках // *ЖЭТФ.* 1965. Т. 48. № 6. С. 1692.
7. *Sano N., Yoshii A.* Impact-ionization Model Consistent with the Band Structure of Semiconductors // *J. Appl. Phys.* 1995. V. 77. № 5. P. 2020.
8. *Boyd R.* *Nonlinear Optics.* Elsevier Science. 2nd ed. Acad. Press, 2003.
9. *Hoffmann M.C., Hebling J., Hwang H.Y., Yeh K.Lo, Nelson K.A.* Impact Ionization in InSb Probed by Terahertz Pump-terahertz Probe Spectroscopy // *Phys. Rev. B.* 2009. V. 79. № 16. 161201(R).
10. *Sano N., Aoki T., Tomizawa M., Yoshii A.* Electron Transport and Impact Ionization in Si // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 41. № 17. P. 12122.
11. *Restrepo O.D., Varga K., Pantelides S.T.* First-principles Calculations of Electron Mobilities in Silicon: Phonon and Coulomb Scattering // *Appl. Phys. Lett.* 2009. V. 94. 212103.
12. *Meng F., Thomson M.D., Sernelius B.E., Jörger M., Roskos H.G.* Ultrafast Dynamic Conductivity and Scattering Rate Saturation of Photoexcited Charge Carriers in Silicon Investigated with a Midinfrared Continuum Probe // *Phys. Rev. B.* 2015. V. 91. № 7. 075201.
13. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Agranat M.B., Fortov V.E., Efimenko E.S., Stepanov A.N., Savel'ev A.B.* Nonlinear Transfer of an Intense Few-cycle Terahertz Pulse Through Opaque *n*-doped Si // *Phys. Rev. B.* V. 94. № 16. 165206.
14. *Ashcroft N.W., Mermin N.D.* *Solid State Physics.* 1st ed. Philadelphia: Saunders College Publ., 1976.
15. *Cartier E., Fischetti M.V., Eklund E.A., McFeely F.R.* Impact Ionization in Silicon // *Appl. Phys. Lett.* 1993. V. 62. P. 3339.
16. *Redmer R., Madureira J.R., Fitzer N., Goodnick S.M., Schattke W., Schöll E.* Field Effect on the Impact Ionization Rate in Semiconductors // *J. Appl. Phys.* 2000. V. 87. № 2. P. 781.