

АНАЛИЗ СТАТИСТИЧЕСКОГО УШИРЕНИЯ УРОВНЕЙ ПРИМЕСИ В КВАНТОВО-КАСКАДНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Ан. А. Афоненко, А. А. Афоненко, Д. В. Ушаков

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

E-mail: rct.afonenko@bsu.by

На основе расчетов двумерных волновых функций заряженных примесей квантово-каскадных лазерных гетероструктур ТГц диапазона проведен анализ спектрального уширения примесных уровней из-за случайных пространственных флуктуаций в расположении атомов примеси. Найдено, что среднеквадратичное уширение энергии перехода между соседними уровнями меньше уширения отдельных уровней и составляет 1.1–3.2 мэВ, что значительно меньше, чем при классическом усреднении флуктуаций. Разброс энергий уровней примеси в зависимости от положения значительно превышает величину среднеквадратичного уширения уровней.

Ключевые слова: *квантово-каскадный лазер, примесные состояния, энергия активации, спектральное уширение.*

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время ведутся интенсивные исследования по разработке квантово-каскадных лазеров ТГц диапазона, которые могут быть востребованы в спектроскопических приложениях, оптической связи и локализации, телекоммуникациях и т. д. [1]. Актуальными являются исследования по совершенствованию физических и математических моделей квантово-каскадных лазеров, которые позволяют повысить надежность и обоснованность проектируемых технических устройств [2]. Одним из недостатков недостаточно изученных вопросов физики квантово-каскадных гетероструктур является влияние легирования на энергетическую структуру и процессы переноса заряда.

В работе [3] показано, что волновые функции примеси локализуются в самой широкой квантовой яме, энергия активации примесей варьируется в широких диапазонах в зависимости от положения примеси, что приводит к появлению значительных хвостов плотности состояний. Учет переноса заряда по примесным состояниям приводит к сглаживанию первого резонансного пика вольт-амперной характеристики, связанного с туннелированием электронов с уровня инжектора на нижний лазерный уровень [4]. В настоящей работе проведен анализ спектрального уширения примесных зон квантово-каскадной сверхрешетки из-за случайных пространственных флуктуаций в расположении атомов примеси.

ДИЗАЙН КВАНТОВО-КАСКАДНОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ

Квантово-каскадные лазеры терагерцового диапазона обычно основаны на дизайне, который использует резонансное испускание оптических фононов для опустошения нижнего лазерного уровня. В работе анализировалась структура лазера $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As} / \text{GaAs}$ с периодом из 4-х слоев 3.26/7.99/1.90/16.46 нм, генерирующего излучение с частотой около 3.9 ТГц [1, 5]. Базисные волновые функции, полученные при решении одномерного уравнения Шредингера с последующей процедурой локализации [2], приведены на рис. 1. Работа лазера обеспечивается переносом заряда по трем нижним подзонам, которые дублируются в каждом периоде.

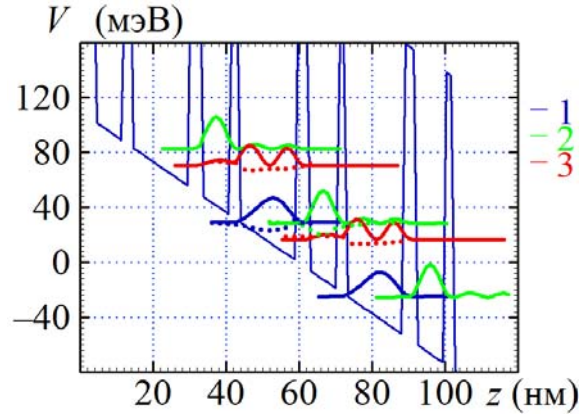


Рис. 1. Зонная диаграмма и координатные зависимости квадратов волновых функций сверхрешетки при внешнем напряжении 18 кВ/см

РАСЧЕТ ПРИМЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ

Задача нахождения нижних состояний заряженной примеси сводится к двумерной задаче на собственные значения и собственные вектора. В цилиндрической системе координат уравнение Шредингера можно записать как:

$$E\varphi(\rho, z) = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_c(z)} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\hbar^2}{2m_c(z)} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \varphi(\rho, z) + \left(V(z) - eE_e z - \frac{e^2 \exp(-q_{scr} \sqrt{\rho^2 + (z-z_0)^2})}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z-z_0)^2}} \right) \varphi(\rho, z). \quad (1)$$

Здесь $\varphi(\rho, z)$ – волновая функция, зависящая от координат ρ и z , E – собственная энергия, $m_c(z)$ – эффективная масса электрона, зависящая от материала слоя, $V(z)$ – потенциал, образованный гетерослоями структуры, E_e – напряженность внешнего электрического поля, ϵ – диэлектрическая проницаемость материала, q_{scr} – обратная длина экранирования, z_0 – координата примеси. Заменой $\varphi(\rho, z) \rightarrow \varphi(\rho, z)/\sqrt{\rho}$ можно преобразовать уравнение (1) к эрмитовой форме. Одномерное приближение получается из двумерного уравнения (1) исключением кулоновского потенциала заряженной примеси и зависимости волновой функции от координаты ρ .

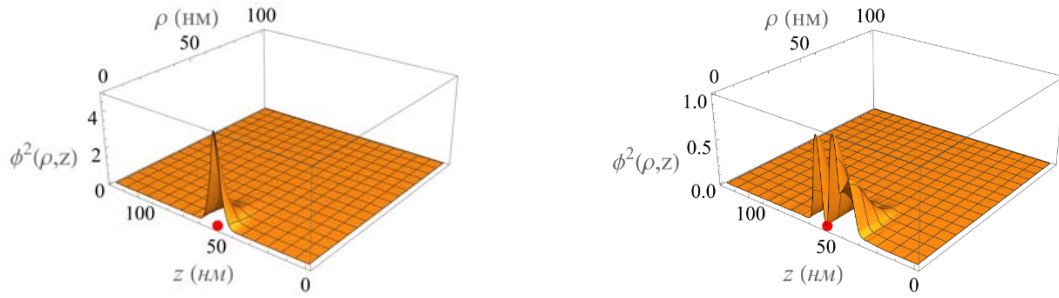


Рис. 2. Координатные зависимости квадратов волновых функций 1-го уровня примеси 1-й и 2-й подзоны сверхрешетки при расположении примеси в центре широкой квантовой ямы (показана кружком).

Локализованные примесные состояния возникают в каждой подзоне сверхрешетки (рис. 2). Квадраты двумерных волновых функций, приведенные к одномерным путем интегрирования по радиальной плоскости, близки к зависимостям, полученным для соответствующих подзон в одномерном приближении (см. рис.1).

АНАЛИЗ ФЛУКУТАЦИЙ ПОЛОЖЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ

Задача нахождения среднеквадратичных флуктуаций потенциала примеси сводится к нахождению среднего значения энергии выбранного квантового состояния в поле соседней примеси с координатой \vec{r}_i (рис. 3)

$$V(\vec{r}_i) = -\int \frac{e^2 \exp(-q_{scr}|\vec{r}-\vec{r}_i|)}{4\pi\epsilon\epsilon_0|\vec{r}-\vec{r}_i|} \varphi^2(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (2)$$

и последующего усреднения квадрата полученной энергии по координатам соседней примеси \vec{r}_i

$$\sigma = \sqrt{N_{3D} \int V^2(\vec{r}_i) d^3\vec{r}_i}, \quad (3)$$

где N_{3D} – объемная концентрация примесей.

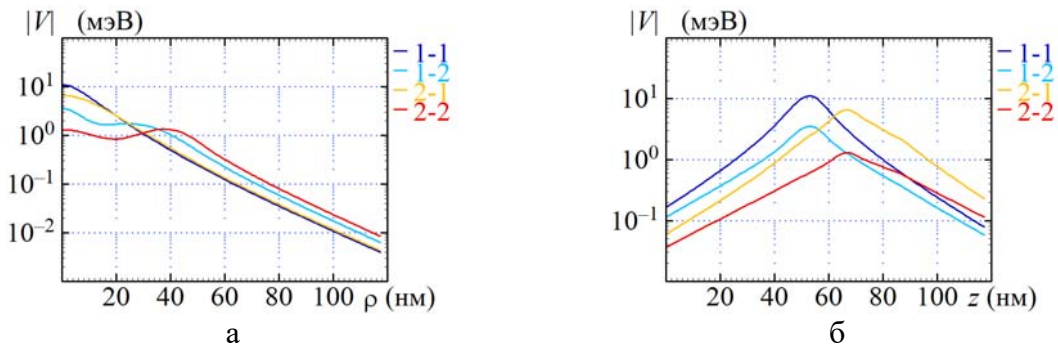


Рис. 3. Энергия взаимодействия в зависимости от положения соседней примеси, смещенной по радиальной координате (а) и по координате z (б). Цифрами обозначены подзона и номер уровня. Температура 77 К, концентрация доноров $1.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

Энергии примесных состояний и их среднеквадратичные флуктуации

Положение примеси	Подзона	Уровень	E_i , мэВ	E_{i+1} , мэВ	σ , мэВ	$\sigma_{i, i+1}$, мэВ
В центре широкой квантовой ямы	1	1	22.9	28.9	3.55	2.42
	1	2	31.3	33.8	2.36	1.55
	2	1	28.9	18.0	3.11	2.01
	2	2	33.8	21.9	1.99	2.49
В центре узкой квантовой ямы	1	1	28.6	18.6	2.72	2.71
	1	2	33.7	30.9	2.53	1.74
	2	1	18.6	19.1	3.87	3.21
	2	2	30.9	27.4	2.09	1.05

Разброс энергий уровней примеси в зависимости от положения составляет 5.7–10.3 мэВ (табл. 1). Среднеквадратичное уширение уровней составляет 2.0–3.9 мэВ, что меньше, чем при классическом усреднении флуктуаций (4.6 мэВ). Среднеквадратичное уширение энергии перехода между уровнями 1→2 и 2→3 меньше уширения отдельных уровней из-за корреляции флуктуаций потенциала и составляет 1.1–3.2 мэВ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен численный анализ энергетического спектра примесных состояний в квантово-каскадных структурах и получены количественные характеристики спектрального уширения.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Bosco M., Frankie M., Scali G., et al. Thermoelectrically cooled THz quantum cascade laser operating up to 210 K // *Appl. Phys. Lett.* 2019. V. 115, N. 1. P. 010601.
2. Ушаков Д. В., Афоненко А. А., Дубинов А. А. и др. Моделирование квантово-каскадных лазеров терагерцового диапазона частот методом балансных уравнений на основе базиса волновых функций со сниженными дипольными моментами туннельно-связанных состояний // *Квантовая электроника*. 2019. Т. 49, № 10. С. 913–918.
3. Афоненко Ан. А., Афоненко А. А., Ушаков Д. В. Моделирование донорных состояний в квантово-каскадных гетероструктурах // *Квантовая электроника: материалы XIII Междунар. науч.-техн. конференции*, Минск, 22–26 ноября 2021 г.– Минск: БГУ, 2021. – С. 249–254.
4. Афоненко Ан. А., Афоненко А. А., Ушаков Д. В. и др. Перенос носителей заряда в квантово-каскадных гетероструктурах с участием локализованных донорных состояний // *Труды XXVI Международного симпозиума «Нанопизика и наноэлектроника»* (Нижний Новгород, 14–17 марта 2022 г.) в 2 т. Том 2. – Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2022. С. 693–694.
5. Khabibullin R. A., Ponomarev D. S., Ushakov D. V., Afonenko A. A. Optimization of THz quantum cascade lasers with an active module based on two-quantum wells for high-temperature operation // *IOP Journal of physics: Conference series*. 2021. V. 2086, No 1. P. 012086 (1–4).