

Анализ фононных мод и электрон-фононного взаимодействия в квантово-каскадных лазерных гетероструктурах

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

Белорусский государственный университет, пр. Независимости 4, Минск, 220030 Беларусь.

*afonenko@bsu.by

Проведено моделирование фононных мод квантово-каскадных гетероструктур на основе двойных и тройных полупроводниковых соединений. Рассчитаны зависимости частот фононных мод структуры от волнового вектора в плоскости слоев и от набега фазы на периоде сверхрешетки. Показано, что диапазон вариации энергий квантов фононных мод GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As структуры составляет ~ 1 мэВ. Учет зависимости матричных элементов электрон-фононного взаимодействия от волнового вектора и набега фазы может быть существенным при анализе характеристик ККЛ.

Введение

Распространенный дизайн квантово-каскадных структур терагерцового диапазона основан на быстром опустошении нижнего рабочего уровня за счет резонансного испускания продольных оптических фононов [1]. Информация о частотах оптических фононов и скоростей электрон-фононного рассеяния необходима для проектирования и оптимизации квантово-каскадных лазеров. Целью данной работы является анализ фононных мод в полупроводниковых сверхрешетках, в которых происходит смешение колебаний атомных решеток двойных и тройных соединений.

Теоретическая модель

Пространственное распределение потенциала продольных колебаний ϕ находилось из уравнения Максвелла для индукции электрического поля \vec{D} :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = -\vec{\nabla} \varepsilon(z, \omega) \vec{\nabla} \phi = 0. \quad (1)$$

Спектральная зависимость диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega)$ находилась в модели Фрелиха:

$$\varepsilon_{\text{GaAs}}(\omega) = \varepsilon_{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{\text{LO}}^2}{\omega^2 - \omega_{\text{TO}}^2},$$

$$\varepsilon_{\text{AlGaAs}}(\omega) = \varepsilon_{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{\text{LO1}}^2}{\omega^2 - \omega_{\text{TO1}}^2} \frac{\omega^2 - \omega_{\text{LO2}}^2}{\omega^2 - \omega_{\text{TO2}}^2}. \quad (2)$$

Частоты собственных колебаний поперечных ω_{TO} и продольных ω_{LO} фононов в тройных соединениях Al_xGa_{1-x}As в зависимости от состава x соединения брались из работы [2]. Индексами 1 и 2 отмечены частоты AlAs- и GaAs-подобных колебаний кристаллической решетки. Отметим, что при $x = 0$ ча-

стоты ω_{LO2} и ω_{TO2} совпадают и $\varepsilon_{\text{GaAs}}(\omega) \equiv \varepsilon_{\text{AlGaAs}}(\omega)$.

Потенциал фононов, распространяющихся в плоскости слоев с волновым вектором q , в каждом слое n предоставлялся в виде

$$\phi(x, z) = [A_n \exp(qz) + B_n \exp(-qz)] \exp(iqx). \quad (3)$$

На границах слоев сшивались величины ϕ и $\varepsilon d\phi/dz$. Использовались периодические граничные условия на одном каскаде структуры с дополнительным фазовым множителем: $\phi(x, L) = \exp(iq_z L) \phi(x, 0)$, где L – период структуры, q_z – аналог z -компоненты волнового вектора.

Для частного случая $q = q_z = 0$ собственные частоты фононных мод находятся из следующих уравнений:

$$\sum_n \varepsilon_n(\omega) d_n = 0, \quad \sum_n \frac{d_n}{\varepsilon_n(\omega)} = 0, \quad (4)$$

где d_n – толщины слоев, суммирование ведется по периоду структуры. Первое уравнение описывает моды с постоянной амплитудой $\phi(x, z) = \text{const}$, а второе – моды с кусочно-постоянной производной $d\phi(x, z)/dz = \text{const}$.

Для случая $q = 0$, $q_z \neq 0$ собственные частоты фононных мод совпадают с частотами ω_{TO} и ω_{LO} всех полупроводниковых материалов структуры.

Нормировка фононных мод для расчета матричных элементов проводилась с использованием условия

$$\int_{\varepsilon_0} \frac{\partial(\omega \varepsilon)}{\partial \omega} \frac{(\vec{\nabla} \phi)^2}{2} dV = \hbar \omega. \quad (5)$$

Результаты расчетов

В расчетах анализировалась структура квантово-каскадного лазера GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As [3, 4]. Толщины барьерных слоев/квантовых ям составляли соответственно 5.7/8.2/3.1/7.1/4.2/16.1/3.4/9.6 нм, где GaAs КЯ выделены жирным шрифтом.

В анализируемой структуре выделяются три типа продольных фононных мод, которые соответствуют собственным колебаниям в исходных материалах GaAs и Al_{0.15}Ga_{0.85}As (рис. 1). Диапазон вариации энергий квантов фононных мод в зависимости от волнового вектора q_z составил 1.2 мэВ для AlAs-подобных мод, 0.8 и 0.2 мэВ для GaAs-подобных мод. Дисперсия в зависимости от волнового вектора q оказалась приблизительно в два раза меньше.

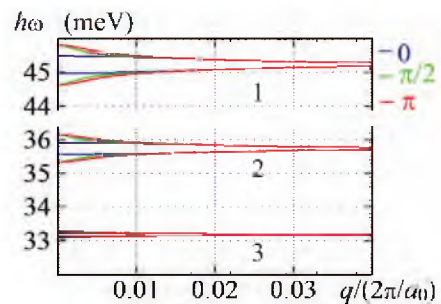


Рис. 1. Зависимость энергии продольных оптических фононов $\hbar\omega$ от нормированного волнового вектора q (a_0 – постоянная решетки кристалла) при различных набегах фаз $q_z L = 0, \pi/2$ и π :

1 – AlAs подобная мода, 2, 3 – GaAs подобные моды

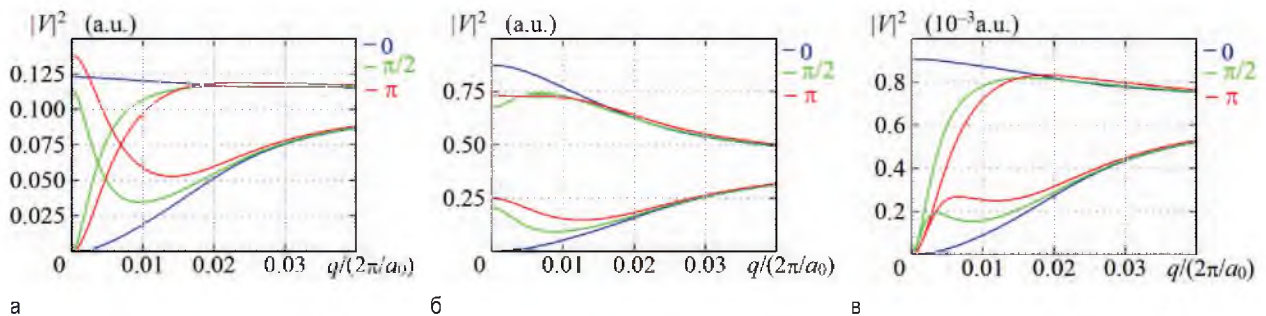


Рис. 2. Нормированные матричные элементы электрон-фононного взаимодействия в зависимости от волнового вектора q для AlAs-подобных мод (а), GaAs-подобных мод (б, в) при различных набегах фаз $q_z L = 0, \pi/2$ и π

На рис. 2 представлены матричные элементы электрон-фононного взаимодействия, которые нормированы на величину матричных элементов в объемном кристалле с усредненными диэлектрическими проницаемостями:

$$|V^{3D}|^2 = \frac{e^2}{2\epsilon_0 V} \left(\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right) \frac{\hbar\omega}{q^2 + q_z^2} \quad (6)$$

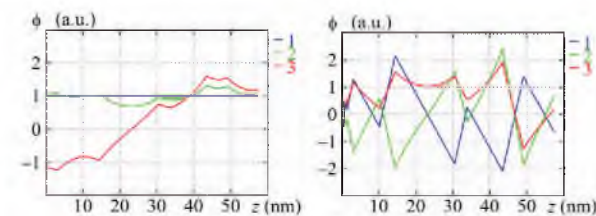


Рис. 3. Пространственное распределение потенциала фононных мод для $q = 0, q_z = 0$ (1), $q = 0.01 \cdot 2\pi/a_0, q_z = 0$ (2) и $q = 0.01 \cdot 2\pi/a_0, q_z = \pi/L$ (3)

Для статистически значимых величин волнового вектора электрона $q < \sqrt{2m_c kT}/\hbar \approx 0.02 \cdot 2\pi/a_0$ ($T = 300$ К, $m_c = 0.067 m_0$) зависимость матричных элементов от q и q_z является существенной.

Это обстоятельство, а также отличие пространственных распределений потенциалов фононных мод от гармонических функций (рис. 3) может быть существенным при анализе генерационных характеристик квантово-каскадных лазеров терагерцового диапазона.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта БРФФИ № Ф18Р-107.

Литература

1. B.S. Williams, H. Callebaut, S. Kumar *et al.* // Appl. Phys. Lett., V. 82, 1015 (2003).
2. S.J. Adachi // Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors. 2009.
3. Д.В. Ушаков, А.А. Афоненко, А.А. Дубинов *и др.* // Квантовая электроника, Т. 49, № 10, 913 (2019).
4. R.A. Khabibullin, N.V. Shchavruk, D.S. Ponomarev *et al.* // Opto-electronics Review, V. 49, № 10, 913 (2019).