

Моделирование донорных состояний в квантово-каскадных гетероструктурах

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

*Белорусский государственный университет, Минск,
e-mail: afonenko@bsu.by*

Разработана двумерная модель расчета энергий и волновых функций квантово-каскадных гетероструктур с учетом заряженных примесей. Для численной локализации волновых функций примеси в структуре при наличии напряжения смещения использован метод минимизации дипольных моментов туннельно-связанных состояний. Показано, что волновые функции примеси в основном локализируются в самой широкой квантовой яме сверхрешетки, а энергия активации примесей варьируется в широких пределах в зависимости от положения заряженных центров. Это приводит к появлению значительных хвостов плотности состояний и существенному уширению нижнего уровня сверхрешетки.

Ключевые слова: квантово-каскадный лазер, энергия активации, волновая функция, хвосты плотности состояний.

Введение

В последнее время ведутся интенсивные исследования по разработке квантово-каскадных лазеров ТГц диапазона, которые могут быть востребованы в спектроскопических приложениях, оптической связи и локации, телекоммуникациях и т.д. Актуальными являются исследования по совершенствованию физических и математических моделей квантово-каскадных лазеров, которые позволяют повысить надежность и обоснованность проектируемых технических устройств.

В настоящей работе проведен анализ влияния донорных примесей на энергетическую структуру и волновые функции квантово-каскадной сверхрешетки.

1. Математическая модель

Типичное легирование квантово-каскадных гетероструктур составляет $\sim 10^{10} \text{ см}^{-2}$. При этом на каждую примесь в среднем приходится площадка с размерами $\sim 100 \times 100 \text{ нм}$. Рассмотрим сверхрешетку с одним заряженным центром. Для уменьшения вычислительных затрат используем цилиндрическую систему координат с максимальным радиусом 100 нм.

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

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

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, z_0 – координата примеси.

Одномерное приближение получается из уравнения (1) исключением кулоновского потенциала заряженной примеси и зависимости волновой функции от координаты ρ .

Как показано в работе [1], для учета эффекта дефазировки необходимо преобразовать образованный собственными волновыми функциями уравнения Шредингера базис так, чтобы уменьшить дипольные матричные элементы туннельно-связанных состояний:

$$[\varphi'] = [U][\varphi]. \quad (2)$$

Здесь $[\varphi]$ и $[\varphi']$ – вектор столбец исходных и преобразованных волновых функций, $[U]$ – унитарная матрица преобразования, строки которой находились как собственные вектора (столбцы) взвешенной матрицы оператора дипольного момента:

$$[eZ \otimes L][U] = \zeta[U], \quad (3)$$

где знак \otimes обозначает поэлементное умножение матриц. Матричные элементы координаты z рассчитываются как:

$$z_{fi} = \int \varphi_f(\rho, z) z \varphi_i(\rho, z) \rho d\rho dz, \quad (4)$$

а матричные элементы функции локализации отличны от нуля только для состояний с близкими энергиями (порядка величине уширения уровня):

$$l_{fi} = f(|E_i - E_f|). \quad (5)$$

В новом базисе гамильтониан системы

$$[H_{\varphi'}] = [U]^+ [E_{\varphi}] [U], \quad (6)$$

теряет диагональный вид, при этом недиагональные элементы описывают процесс туннелирования между состояниями.

Для сравнения пространственного распределения двумерных волновых функций с волновыми функциями, полученными в одномерном приближении без учета примесей, использовалось преобразование

$$\varphi_i^2(z) = \int \varphi_i^2(\rho, z) \rho d\rho. \quad (7)$$

2. Результаты расчетов

В работе анализировалась структура квантово-каскадного лазера $Al_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs$ с периодом из 4-х слоев 3.26/7.99/1.90/16.46 нм [2, 3]. При отсутствии внешнего электрического поля одномерные волновые функции одного периода без учета влияния примесей имеют вид, показанный на рис. 1, а. На этом же рисунке показана энергия примесного состояния, полученная в двумерной модели. Видно, что энергия активации примеси (относительно основного уровня широкой квантовой ямы) составляет 8–16 мэВ в зависимости от положения. Заряд в центре широкой квантовой ямы дает наибольшую энергию активации, а в узкой квантовой яме вблизи барьера – наименьшую. При этом вне зависимости от положения примеси приведенный к одномерному профиль ее волновой функции близок к профилю волновой функции основного состояния широкой квантовой ямы (рис. 1, б). При расположении примеси в узкой квантовой яме плотность вероятности нахождения в ней электрона имеет небольшой горб, в то время как основной максимум распределения находится в широкой квантовой яме предыдущего каскада.

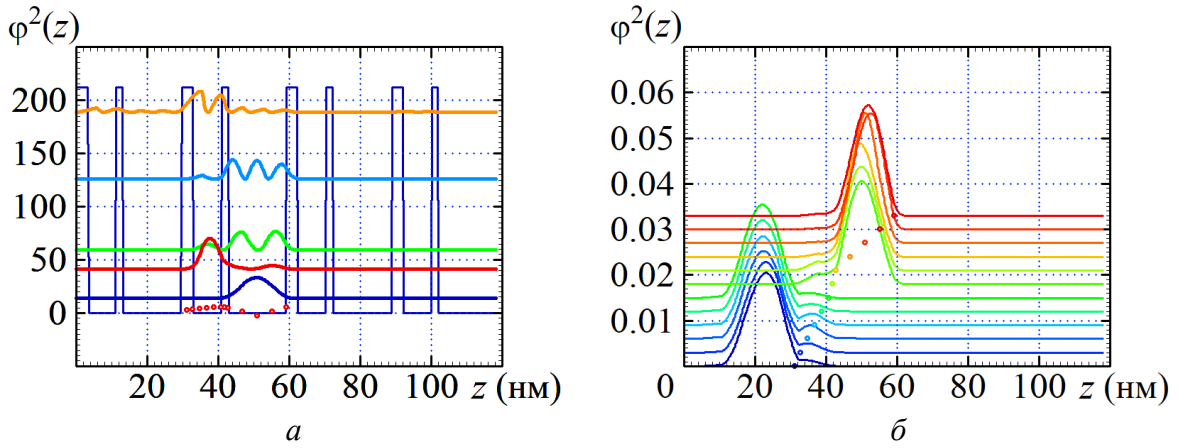


Рис. 1. – Координатные зависимости квадратов волновых функций одного периода сверхрешетки при отсутствии внешнего напряжения (точками показаны энергии основного уровня примеси в зависимости от положения заряда) (*a*). Координатные зависимости квадратов волновой функции заряженной примеси при разных положениях заряда (показаны точками) (*б*).

Двухмерное распределение основного состояния примеси в узкой и широкой квантовой яме показано на рис. 2. Видно, что при расположении примеси в области узкой квантовой ямы волновая функция имеет два максимума: один (узкий) – возле примеси, другой (широкий) – в широкой квантовой яме (рис. 2, *a*). При расположении примеси в широкой квантовой яме квадрат волновой функции имеет один максимум (рис. 2, *б*).

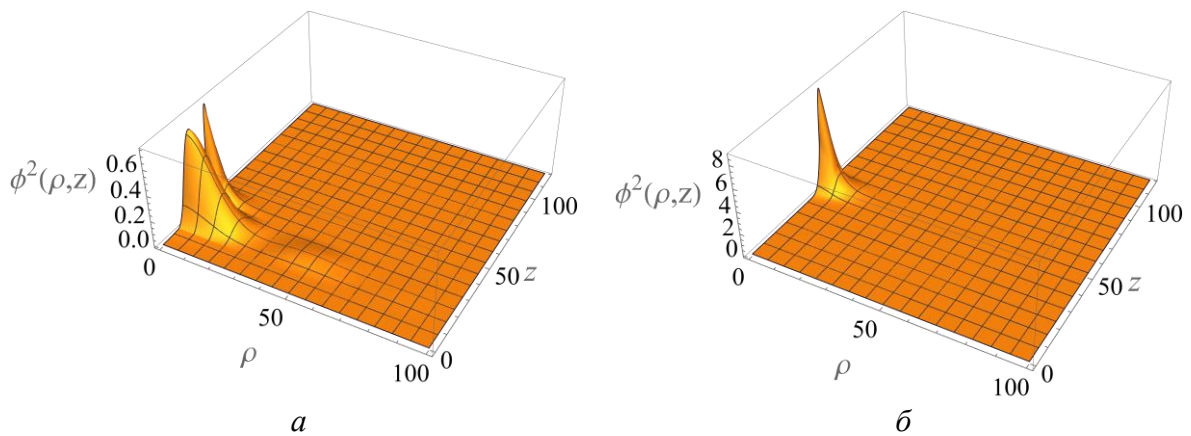


Рис. 2. – Координатные зависимости квадратов волновых функций основного уровня примеси при отсутствии внешнего напряжения при расположении примеси в центре узкой (*a*) и широкой квантовой ямы (*б*).

Аналогичная ситуация наблюдается в структуре при приложении внешнего напряжения (рис. 3). Энергия активации примеси (относительно основного уровня широкой квантовой ямы) составляет 4–16 мэВ в зависимости от положения заряженного центра (рис. 3, *a*). Заряд в центре широкой квантовой ямы дает наибольшую глубину залегания примеси. При этом электронные облака примесей из узкой квантовой ямы смещаются в широкую квантовую яму с меньшим потенциалом (справа от узкой квантовой ямы, рис. 3, *б*).

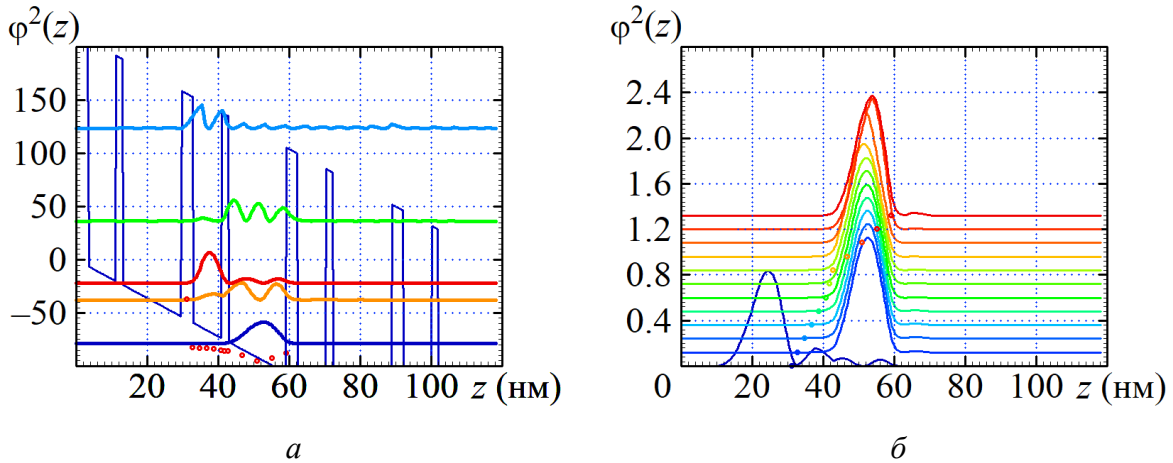


Рис. 3. – Координатные зависимости квадратов волновых функций одного периода сверхрешетки при внешнем напряжении 18 кВ/см (точками показаны энергии основного уровня примеси в зависимости от положения заряда) (а). Координатные зависимости квадратов волновой функции заряженной примеси при разных положениях заряда (показаны точками) (б).

При расположении примеси в узкой квантовой яме энергия активации невелика, и волновая функция слабо локализована по координате ρ (рис. 4, а). При расположении примеси в широкой квантовой яме волновая функция примеси сильно локализована вблизи заряженного центра (рис. 4, б). Следует заметить, что прямое решение уравнения Шредингера в структуре при внешнем напряжении может не давать локализованных вблизи примеси решений, так как потенциал на одной границе неограниченно уменьшается. Напротив, описанная выше процедура локализации всегда позволяет сформировать локализованное решение как суперпозицию волновых функций, осциллирующих в области континуума.

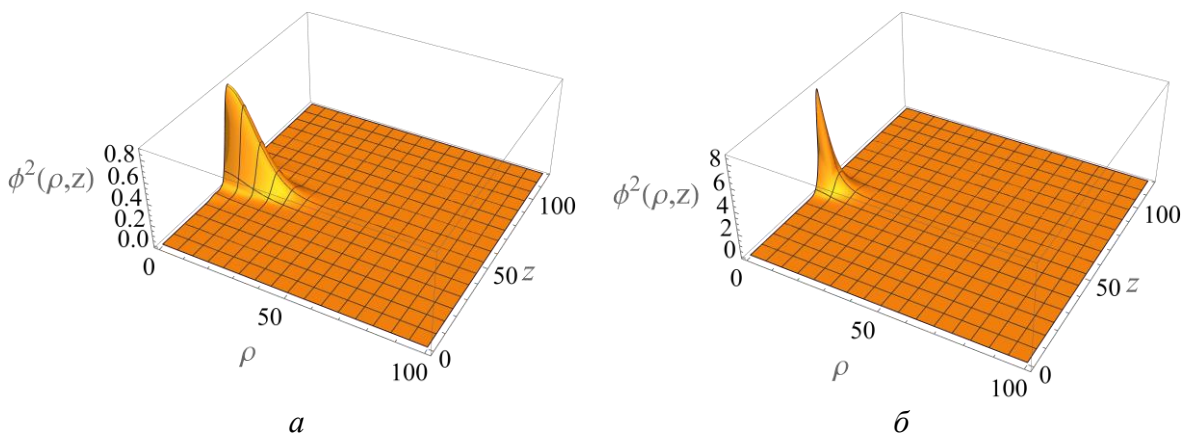


Рис. 4. – Координатные зависимости квадратов волновых функций основного уровня примеси при внешнем напряжении 18 кВ при расположении примеси в центре узкой (а) и широкой квантовой ямы (б).

3. Обсуждение результатов

Волновые функции примесных состояний и нижних уровней подзон сверхрешетки имеют сходное распределение вдоль координаты z , и, соответственно, большую величину интеграла перекрытия. Это должно способствовать большой скорости

электрон-электронного рассеяния и термализации. Поэтому статистика распределения электронов между этими состояниями должна быть близка к термодинамической. Числа заполнения одновалентной примеси рассчитываются как

$$f = \frac{2}{2 + \exp\left(-\frac{F - E_d}{kT}\right)}. \quad (8)$$

где F – энергия уровня Ферми, E_d – энергия основного уровня примеси, T – температура. В основном концентрация легирования N_d распределяется по локализованным уровням примеси и нижней подзоне сверхрешетки:

$$N_d = N_d f + N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{kT}\right). \quad (9)$$

Здесь N_c – двумерная эффективная плотность состояний, E_c – энергия края нижней подзоны сверхрешетки.

Как видно на рис. 5, при легировании $3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ и температуре 77 К вероятность заполнения локализованного уровня примеси составляет 0.3–0.6 в зависимости от энергии активации $E_a = E_c - E_d$. При уменьшении температуры или при увеличении уровня легирования эта вероятность возрастает. Большое число заполненных локализованных состояний и большой разброс их энергий активации должны приводить к появлению значительных хвостов плотности состояний и существенному уширению нижнего уровня сверхрешетки. Возможно, это является причиной того, что практически все разработанные квантово-каскадные лазеры не используют основной уровень сверхрешетки в качестве верхнего лазерного уровня. Лазеры на основе сверхрешеток Ванье–Штарка с основным уровнем сверхрешетки в качестве верхнего лазерного уровня, демонстрируют генерацию только при температуре 4.2 К [4], хотя теоретические расчеты показывают возможность генерации и при более высоких температурах [5]. Наличие хвоста плотности состояний основного уровня сверхрешетки также должно приводить к сглаживанию первого фоновонного резонанса на вольтамперных характеристиках квантово-каскадных лазеров и уменьшению диапазона токов, в которых возникает отрицательное дифференциальное сопротивление структуры.

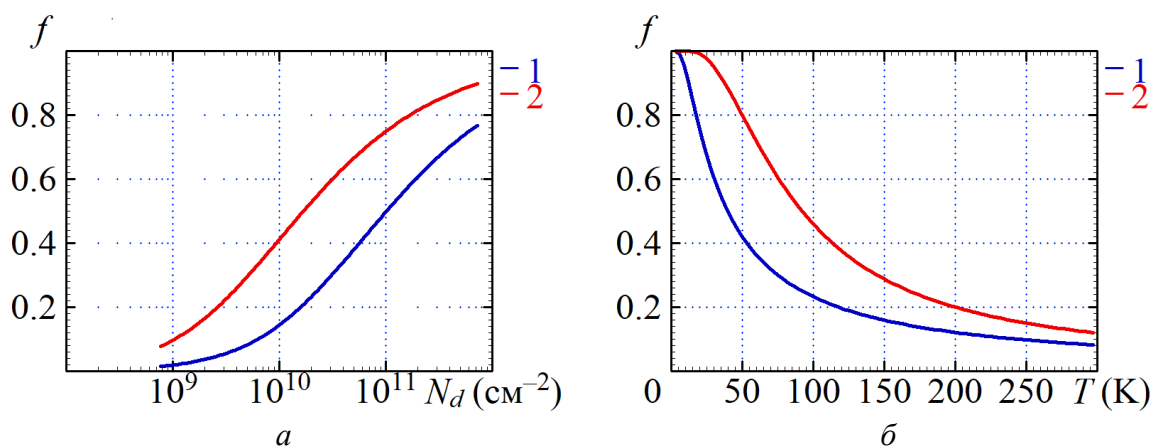


Рис. 5. – Вероятность заполнения основного состояния примеси в зависимости от уровня легирования одного каскада при температуре 77 К (а) и от температуры при уровне легирования $3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ (б) для энергии активации примеси 4 (1) и 16 мэВ (2).

Заключение

Таким образом, в работе разработана двухмерная модель расчета энергий и волновых функций квантово-каскадных гетероструктур с учетом заряженных примесей. Показано, что волновые функции примеси в основном локализуются в самой широкой квантовой яме. При приложении прямого смещения энергия активации примесей составляет 4–16 мэВ в зависимости от положения примеси. Найденные особенности залегания примесей свидетельствуют о наличии значительных хвостов плотности состояний и существенном уширении нижнего уровня сверхрешетки.

Литература

1. 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.
2. Bosco M., Frankie M., Scalfari G., et al. Thermoelectrically cooled THz quantum cascade laser operating up to 210 K. Appl. Phys. Lett. 2019. Vol. 115, No. 1. P. 010601 (1–5).
3. 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. (in press).
4. Андронов А.А., Додин Е.П., Зинченко Д.И. и др. Стимулированные излучения при переходах между лестницами Ванье–Штарка в полупроводниковых сверхрешетках. Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 102, № 4. С. 235–239.
5. Афоненко А.А. Ушаков Д.В., Хабибуллин Р.А. Неустойчивость режима генерации и пространственные домены в квантово-каскадных лазерах на основе сверхрешеток с лестницами Ванье–Штарка. Труды XXV Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника» (Нижний Новгород, 9–12 марта 2021 г.) в 2 т. Том 2. – Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2021. С. 564–565.

Modeling of donor states in quantum cascade heterostructures

An.A. Afonenko, A.A. Afonenko, D.V. Ushakov

Belarusian State University, Minsk;

e-mail: afonenko@bsu.by

A two-dimensional model for calculating the energies and wave functions in quantum-cascade heterostructures taking into account charged impurities has been developed in the paper. The method of minimizing the dipole moments of tunnel-bound states has been used to numerically localize the wave functions of the impurity in the structure in the presence of a bias voltage. It has been shown that the wave functions of the impurity are mainly localized in the widest quantum well of the superlattice, and the activation energy of the impurities varies widely depending on the position of the charged centers. This leads to the appearance of significant tail of the density of states and broadening of the lowest level of the superlattice.

Keywords: quantum cascade laser, activation energy, wave function, state density tails.