

**ДВУХПЕРИОДНАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА НАСЕЛЕННОСТЕЙ УРОВНЕЙ ПОДЗОН
МНОГОПЕРИОДНЫХ КВАНТОВО-КАСКАДНЫХ СВЕРХРЕШЕТОЧНЫХ СТРУКТУР****Д. В. Ушаков, И. С. Манах**

УДК 535.374:621.375.8

Белорусский государственный университет,
220030, Минск, просп. Независимости, 4; e-mail: UshakovDV@bsu.by

(Поступила 7 мая 2007)

Для двух периодов квантово-каскадных лазерных структур предложена система замкнутых балансных уравнений, позволяющая рассчитать степень населенности уровней энергии, квазиуровни Ферми, а также плотность токов инжекции с учетом различных механизмов рассеяния носителей заряда.

Ключевые слова: квантово-каскадный лазер, населенность уровней энергии, рассеяние носителей заряда, система замкнутых балансных уравнений.

For two periods of quantum cascade laser structures, a system is suggested of closed rate equations, which enables one to calculate the degree of the population of energy levels, quasi Fermi levels, as well as the injection current densities with allowance for different mechanisms of scattering of charge carriers.

Keywords: quantum cascade laser, population of energy levels, scattering of charge carriers, system of closed rate equations.

Введение. Разработка лазеров на основе квантово-каскадных сверхрешеточных структур — перспективное направление создания компактных и надежных источников излучения среднего [1—5] и дальнего [6, 7] ИК диапазонов. Идея создания квантово-каскадного лазера (ККЛ) высказана в работе [8], а первая практическая реализация описана в [1]. Современные ККЛ выращиваются с использованием метода молекулярно-лучевой эпитаксии и представляют собой сложные структуры с несколькими десятками повторяющихся каскадов, состоящих из системы потенциальных ям и барьеров. Расчет населенностей энергетических подзон осуществляется на основе решения балансных уравнений в приближении двух или трех [4, 9, 10] миниподзон либо в многоподзонном самосогласованном приближении [11, 12]. При этом для расчетов скоростей рассеяния применяется метод Монте-Карло [13], а также метод функций Грина [14], что требует значительных компьютерных затрат. В настоящей работе предложена система замкнутых балансных уравнений для нахождения населенностей уровней энергии только двух периодов ККЛ, что позволяет учесть всевозможные переходы между уровнями и связь между каскадами, а также снизить компьютерные затраты и уменьшить время расчета.

Расчет. Алгоритм расчета оптоэлектронных свойств ККЛ включает в себя следующие этапы: решение уравнения Шредингера и определение уровней энергии и волновых функций; расчет матричных элементов дипольных переходов; вычисление скоростей рассеяния на оптических фонах и электрон-электронного рассеяния; определение поверхностных концентраций носителей заряда и квазиуровней Ферми для соответствующих энергетических подзон из системы замкнутых балансных уравнений; расчет пороговых токов и спектральных характеристик.

На рис. 1, а представлены результаты численного расчета диаграммы зоны проводимости $E_c(z)$ и квадратов модулей волновых функций электронов для двух периодов ККЛ. Параметры зонной структуры и толщины слоев взяты из работы [2]. Квадраты модулей волновых функций, соответствующие N -му периоду, пронумерованы. Для удобства расчета населенностей уровней подзон под периодом ККЛ следует понимать период повторения системы волновых функций, который может быть больше толщины одного каскада (периода повторения потенциальных ям и барьеров), так как волновые функции простираются через несколько каскадов. Как видно, два периода квадратов волновых функций соответствуют примерно трем каскадам структуры.

TWO-PERIOD MODEL OF CALCULATING THE POPULATIONS OF SUBBANDS LEVELS OF THE MANY PERIODS QUANTUM CASCADE SUPERLATTICE STRUCTURES

D. V. Ushakov and I. S. Manak (Belarusian State University, 4 Nezavisimosti Ave., Minsk, 220030, Belarus; e-mail: UshakovDV@bsu.by)

Оптические переходы происходят между уровнями энергии в каждом периоде и между периодами. Для рассчитанной на рис. 1, *а* квантово-каскадной структуры основная частота излучения ККЛ (~134 мэВ) соответствует оптическому переходу электрона с первого уровня ($N - 1$)-го периода на 11-й уровень N -го периода, т. е. 1, ($N - 1$) — 11, N . При этом, как видно из рис. 1, *б*, дипольный матричный элемент составляет 5.7 нм.

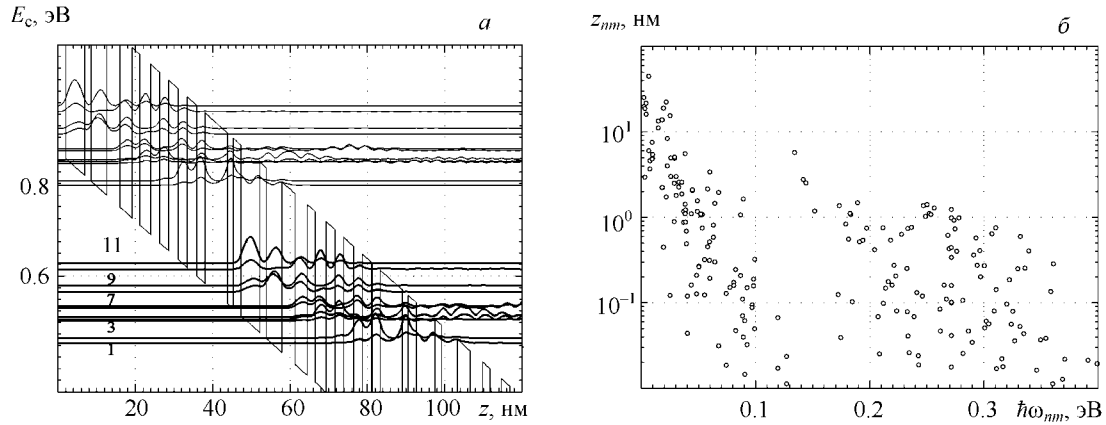


Рис. 1. Распределение $E_c(z)$ в зоне проводимости и квадрата модуля волновых функций электронов (*а*), а также дипольные матричные элементы переходов z_{nm} с энергией $\hbar\omega_{nm}$ (*б*) для двух каскадов сверхрешеточной структуры $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$ — GaAs в электрическом поле напряженностью $E = 6 \cdot 10^6 \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$. Толщины (в нм) слоев структуры последовательно слева направо: /2.0/4.9/1.7/4.0/3.4/3.2/2.0/2.8/2.3/2.3/2.5/2.3/2.5/2.1/5.8/1.5/, квантовые ямы GaAs выделены жирным шрифтом

При нахождении степени заполнения подзон полагаем, что каждому энергетическому уровню E_n соответствует квазиуровень Ферми F_n и поверхностная концентрация электронов n_{sn} , которые определяются из следующей системы балансных уравнений:

$$\frac{dn_{iN}}{dt} = \sum_{jN \neq iN} (R_{jNiN} - R_{iNjN}) + \sum_{jN-1} (R_{jN-1iN} - R_{iNjN-1}) + \sum_{jN+1} (R_{jN+1iN} - R_{iNjN+1}), \quad iN = 1 \dots n_{\max} - 1, \quad (1)$$

$$\sum_{iN=1}^{n_{\max}} n_{siN} = n_{st}.$$

Здесь первая сумма соответствует разности скоростей прихода R_{jNiN} на уровень i со всех j и ухода R_{iNjN} с i на все уровни j в N -м периоде. Вторая сумма определяет разность скоростей прихода и ухода электронов на уровень i N -го периода со всех уровней j ($N - 1$)-го периода, третья сумма — разность скоростей прихода и ухода электронов на уровень i N -го периода со всех уровней j ($N + 1$)-го периода. Последнее уравнение включает в себя сумму поверхностных концентраций электронов n_{siN} на всех уровнях N -го периода, равную n_{st} . Отметим, что величина n_{st} индуцируется примесями и определяется легированием эмиттеров. Так как уровни энергии и волновые функции во всех периодах ККЛ идентичны, степени их заполнения можно считать также одинаковыми. При этом переходы электронов из N -го в ($N + 1$)-й период эквивалентны переходам электронов из ($N - 1$)-го в N -й период, что позволяет рассчитывать волновые функции только для двух периодов ККЛ. Система уравнений (1) решалась для стационарного случая, когда $\frac{dn_{iN}}{dt} = 0$.

Квазиуровни Ферми и поверхностные концентрации электронов связаны между собой соотношением

$$n_{sn} = \frac{m_c kT}{\pi \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \left[\frac{F_n - E_n}{kT} \right] \right). \quad (2)$$

Суммарная плотность тока инжекции J определяется как

$$J = \sum_{iN} J_{iN} = e \sum_{iN} \sum_{jN-1} (R_{jN-1iN} - R_{iNjN-1}), \quad (3)$$

где $J_{iN} = \eta_{iN} J$ — плотность тока инжекции на i -й уровень N -го периода, η_{iN} — соответствующий ему

коэффициент инжекции, определяющий долю инжектируемых электронов. Интегральные скорости переходов R_{ij} находятся суммированием переходов с учетом всех возможных механизмов рассеяния. В ККЛ основным механизмом рассеяния является рассеяние на полярных оптических фононах со скоростью

$$S_{if}^{\text{oph}\pm}(E_i) = \frac{e^2 \omega_q}{8\pi \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dq_z \left| \int_0^d e^{-iq_z z} \psi_i(z) \psi_f^*(z) dz \right|^2 \times$$

$$\times \frac{1}{\left((E_i - E_{in} + (E_i \mp \hbar \omega_q - E_{fm}) + E_{qz})^2 - 4(E_i - E_{in})(E_i \mp \hbar \omega_q - E_{fm}) \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (4)$$

где $E_{qz} = \frac{\hbar^2 q_z^2}{2m_c}$; $\hbar \omega_q$ — энергия полярного оптического фонона; $N_q = \left(\exp \left[\frac{\hbar \omega_q}{kT} \right] - 1 \right)^{-1}$ — число заполнения фононов; ϵ_∞ и ϵ — оптическая и статическая диэлектрические проницаемости. Интегральная скорость перехода определяется как

$$R_{if}^{\text{oph}\pm} = \frac{m_c}{\pi \hbar^2} \int dE H(E - E_n) f(E - F_n) \left(1 - f(E \mp \hbar \omega_q - F_m) \right) S_{if}^{\text{oph}\pm}(E). \quad (5)$$

Здесь $H(E)$ — ступенчатая функция Хевисайда; $f(E) = \left(\exp \left[\frac{E}{kT} \right] + 1 \right)^{-1}$ — функция распределения Ферми—Дирака.

Для ККЛ, работающих в дальнем ИК диапазоне, необходимо учитывать также электрон-электронное рассеяние со скоростью перехода [15]

$$R_{ijfm}^{\text{ee}} = (2\pi)^2 \text{Ry} \hbar \frac{n_i n_j}{m_0 \epsilon^2} \frac{|F_{ijfm}(g_0/2)|^2}{E_S}, \quad (6)$$

где n_i — поверхностные концентрации электронов на i -м уровне энергии; $\text{Ry} \approx 13.6$ эВ; $g_0^2 = 8m_r E_S / \hbar^2$, $E_S = E_i + E_j - E_f - E_m$; m_r — приведенная эффективная масса. Форм-фактор перекрытия огибающих волновых функций $F_{ijfm}(q)$ определяется согласно [13]:

$$F_{ijfm}(q) = \iint dz_1 dz_2 \psi_f^*(z_1) \psi_m^*(z_2) e^{-q|z_1 - z_2|} \psi_i(z_1) \psi_j(z_2). \quad (7)$$

Обсуждение результатов. В табл. 1 и на рис. 2 представлены результаты численного решения системы замкнутых балансных уравнений при различных пороговых поверхностных концентрациях электронов в одном периоде n_{st} при фиксированной напряженности электрического поля $E = 6 \cdot 10^6$ В · м⁻¹. Как показывают расчеты, уровни 1 и 2 заполнены сильнее остальных с поверхностными концентрациями электронов $\sim 10^{10} - 10^{11}$ см⁻² в зависимости от уровня возбуждения, что согласуется с экспериментальными данными [2]. Токи инжекции и, соответственно, коэффициенты инжекции максимальны для уровней 11 и 8.

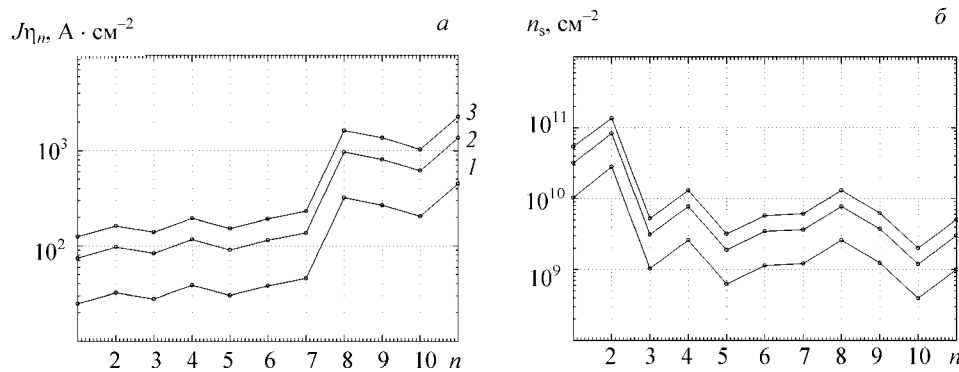


Рис. 2. Распределение плотностей токов J_n (а) и поверхностных концентраций электронов n_s по энергетическим уровням n (б) при различных суммарных поверхностных концентрациях электронов в одном каскаде $n_{st} = 5 \cdot 10^{10}$ (1), $1.5 \cdot 10^{11}$ (2) и $2.5 \cdot 10^{11}$ см⁻² (3); $T = 77$ К

Т а б л и ц а 1. Параметры квантово-каскадного лазера при различных уровнях накачки

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
E_n , мЭВ	485	493	523	525	530	545	548	573	583	612	622
$\eta_n(10^{-3})$	16.7	21.7	18.7	26.1	20.4	25.7	30.8	21.7	181.0	137.9	304.4
$n_{st} = 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}; J = 1.48 \text{ кА} \cdot \text{см}^{-2}$											
F_n , мЭВ	465	479	487	496	490	509	513	544	549	570	587
$n_{st} = 1.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}; J = 4.46 \text{ кА} \cdot \text{см}^{-2}$											
F_n , мЭВ	472	488	494	503	498	517	521	552	556	578	594
$n_{st} = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}; J = 7.48 \text{ кА} \cdot \text{см}^{-2}$											
F_n , мЭВ	476	492	498	507	501	520	524	555	560	581	598

Примечание. $E = 6 \cdot 10^6 \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$, $T = 77 \text{ К}$.

Так, для уровня 11 с ростом суммарных поверхностных концентраций электронов $n_{st} = 5 \cdot 10^{10}$, $1.5 \cdot 10^{11}$ и $2.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ плотности токов инжекции увеличиваются и составляют $J_{11} = 451$, 1359 и 2280 $\text{А} \cdot \text{см}^{-2}$ соответственно. Следует отметить, что коэффициенты инжекции η , практически не изменяются с ростом накачки ККЛ. Это можно использовать для упрощения численных расчетов системы балансных уравнений (1).

Заключение. Предложена эффективная методика для моделирования оптоэлектронных свойств квантово-каскадных сверхрешеточных структур. Проведено численное решение системы замкнутых балансных уравнений для двух периодов ККЛ. Рассчитаны степени населенности и квазиуровни Ферми для соответствующих энергетических подзон, а также проанализирован характер изменения плотностей токов инжекции.

Авторы выражают благодарность А. А. Афоненко за обсуждение результатов.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований.

- [1] J.Faist, F.Capasso, D.L.Sivco, C.Sirtori, A.L.Hutchinson, A.Y.Cho. Science, **264** (1994) 553—556
- [2] C.Sirtori, P.Kruck, S.Barbieri, P.Collot, J.Nagle, M.Beck, J.Faist, U.Oesterle. Appl. Phys. Lett., **73**, N 24 (1998) 3486—3488
- [3] C.Sirtori, P.Kruck, S.Barbieri, H.Page, J.Nagle, M.Beck, J.Faist, U.Oesterle. Appl. Phys. Lett., **75**, N 25 (1999) 3911—3913
- [4] F.Capasso, A.Tredicucci, C.Gmachl, D.L.Sivco, A.L.Hutchinson, A.Y.Cho, G.Scarmacio. IEEE J. Select. Top. Quantum Electron., **5**, N 3 (1999) 792—807
- [5] R.Teissier, D.Barate, A.Vicet, C.Alibert, A.N.Baranov, X.Marcadet, C.Renard, M.Garcia, C.Sirtori, D.Revin, J.Cockburn. Appl. Phys. Lett., **85**, N 2 (2004) 167—169
- [6] L.Ajili, G.Scalari, N.Hoyler, M.Giovannini, J.Faist. Appl. Phys. Lett., **87** (2005) 141107-1—141107-3
- [7] G.Scalaria, N.Hoyler, M.Giovannini, J.Faist. Appl. Phys. Lett., **86** (2005) 181101-1—181101-3
- [8] Р.А.Казаринов, Р.А.Сурис. ФТП, **6**, № 1 (1972) 148—162
- [9] V.B.Gorfinkel, S.Luryi, B.Gelmont. IEEE J. Quantum Electron., **32**, N 11 (1996), 1995—2003
- [10] Д.В.Ушаков, А.А.Афоненко. В сб. “Низкоразмерные системы”, под ред. С.А.Маскевича, В.Ф.Стельмаха, А.К.Федотова, вып. 3, Гродно, изд-во Гродн. гос. ун-та (2003) 29—34
- [11] J.Faist, D.Hofstetter, M.Beck, T.Aellen, M.Rochat, S.Blaser. IEEE J. Quantum Electron., **38**, N 6 (2002) 533—546
- [12] D.Indjin, P.Harrison, R.W.Kelsall, Z.Ikonić. J. Appl. Phys., **91**, N 11 (2002) 9019—9026
- [13] M.Dür, S.M.Goodnick, P.Lugli. Phys. Rev. B, **54**, N 24 (1996) 17794—17804
- [14] S.-C.Lee, A.Wacker. Phys. Rev. B, **66**, N 24 (2002) 245314-1—245314-18
- [15] А.Н.Дрозд, А.А.Афоненко. Журн. прикл. спектр., **72**, № 6 (2005) 782—787