

Исследование способов уменьшения частоты генерации терагерцового квантово-каскадного лазера с каскадом, состоящим из двух квантовых ям

© Д.В. Ушаков[†], Ю.Г. Садофьев*, N. Samal[‡]

[†] Белорусский государственный университет,
220030 Минск, Белоруссия

* Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,
119991 Москва, Россия

[‡] Trion Technology,
85281 Tempe, AZ, USA

(Получена 25 апреля 2012 г. Принята к печати 25 апреля 2012 г.)

Предложено два механизма достижения меньших частот терагерцового диапазона в квантово-каскадных структурах с 2 квантовыми ямами на основе соединений GaAs/AlGaAs. Первый механизм основан на введении составных квантовых ям, представляющих собой узкую (~ 2 нм) квантовую яму с низким потенциальным барьером, находящуюся внутри основной широкой квантовой ямы. Второй механизм базируется на использовании барьеров неравной высоты, расположенных перед и после составной квантовой ямы. Рассчитаны оптимизированные квантово-каскадные лазерные структуры, излучающие в области ~ 2.15 и ~ 1.35 ТГц.

1. Введение

В последнее время интенсивно исследуются межподзонные оптические переходы в терагерцовом (ТГц) диапазоне в полупроводниковых многопериодных квантово-каскадных лазерах (ККЛ) ввиду огромных перспектив их практического применения. Все реализованные в настоящее время ККЛ ТГц диапазона созданы преимущественно на структурах GaAs/AlGaAs, работающих на принципе „резонансное испускание оптического фонона“ [1–4], в основе которого лежит быстрое опустошение нижнего рабочего уровня за счет резонансного испускания оптического фонона. Единичный каскад структуры может включать в себя 4 [1], 3 [2] или 2 [4] квантовых ямы (КЯ) различной ширины, разделенные туннельно-прозрачными барьерами. Соответственно ККЛ работают по 5- [1], 4- [2] и 3-уровневым [4] схемам. Наибольшие достигнутые рабочие температуры ТГц ККЛ составляют 117 К в непрерывном режиме [3], 186 К при импульсной накачке [5] и 225 К при дополнительном использовании магнитного поля [6]. Мощность излучения ККЛ в диапазоне частот 3–4.5 ТГц достигает 100 мВт, однако при продвижении от 3 к 1 ТГц выходные мощности снижаются до ~ 10 мВт.

В работе [4] предложены квантово-каскадные структуры GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As с 2 КЯ, работающие по 3-уровневой схеме. Как показано на рис. 1, инверсия населенностей достигается между уровнями 3–2, а также 1'–2 при опустошении уровня 2 за счет резонансного испускания оптического фонона, при этом уровень 3 туннельно связан с уровнем 1' предыдущего каскада [4]. В таких структурах генерация излучения получена на частоте 4.6 ТГц и достигнута наибольшая рабочая температура 121 К. Продвижение в область меньших частот

в ККЛ с 2 КЯ ограничивается недостаточной возможностью варьирования толщин квантовых ям и барьерных слоев (их всего 4) из-за необходимости одновременного выполнения условий резонансного испускания оптического фонона и резонансного туннелирования.

Настоящая работа посвящена численным расчетам энергетических и спектральных характеристик ККЛ с 2 КЯ, а также поиску путей продвижения в область меньших частот ТГц диапазона за счет варьирования компонентного состава квантовых ям и барьерных слоев.

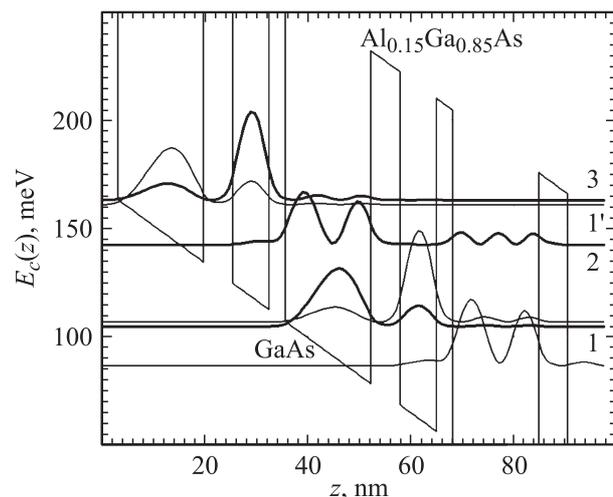


Рис. 1. Диаграмма зоны проводимости $E_c(z)$ и квадраты модулей волновых функций электронов в электрическом поле $E = 17.3$ кВ/см. Толщины слоев структуры последовательно слева направо имеют следующие значения в нм: 3.1/16.7/5.6/7.1 (в последовательности слоев квантовая яма GaAs выделена жирным, а подчеркнутый слой легирован примесью Si со слоевой концентрацией $2.17 \cdot 10^{10}$ см⁻²).

[†] E-mail: ushakovdv@bsu.by

2. Теоретическая модель расчета уровней энергии и спектров усиления

Значения энергии и волновые функции находились в расширенной модели Бастарда из решения уравнений Шредингера [7,8]

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m_c(z, E_f)} \frac{d\psi_f(z)}{dz} \right] - [E_f - E_c(z)]\psi_f(z) = 0, \quad (1)$$

где E_f — уровни размерного квантования, $\psi_f(z)$ — огибающие волновых функций, $E_c(z)$ — профиль потенциальной энергии зоны проводимости в электрическом поле. Энергетическая и координатная зависимость эффективной массы $m_c(E, z)$ определялась согласно [7]:

$$\frac{m_e}{m_c(E, z)} = 1 + 2F(z) + \frac{E_p}{3} \left[\frac{2}{E + E_c(z)} + \frac{1}{E + E_c(z) + \Delta S_0(z)} \right]. \quad (2)$$

Параметры зонной структуры для тройных соединений $A_xB_{1-x}C$ аппроксимировались по экспериментальным и теоретическим данным бинарных соединений AB , AC , BC [9] с использованием параметра квадратичной аппроксимации b_{ABC} :

$$G_{ABC}(x) = xG_{AC} + (1-x)G_{BC} - x(1-x)b_{ABC}. \quad (3)$$

Здесь вместо G следует подставлять параметры Латтинджера ($\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$), энергию, связанную с матричным элементом межзонных переходов Кейна E_p , энергию спин-орбитального отщепления ΔS_0 , ширину запрещенной зоны E_{g0} , параметры Варшны α и β для расчета температурной зависимости ширины запрещенной зоны, а также параметр, характеризующий взаимодействие зоны проводимости с вышележащими энергетическими зонами F . Интерполированные характеристики, необходимые для расчета зонной структуры соединений $Al_{1-x}Ga_xAs$, представлены в таблице. Параметр квадратичной аппроксимации b_{ABC} был выбран равным 0.7165 при расчете E_{g0} и 0 при расчете других параметров.

Степень заполнения уровней энергии и соответствующие квазиуровни Ферми для стационарного случая находились путем численного решения системы балансных уравнений [10]

$$\frac{dn_{iN}}{dt} = \sum_{jN \neq iN} (R_{jNiN} - R_{iNjN}) + \sum_{jN-1} (R_{jN-1iN} - R_{iNjN-1}) + \sum_{jN+1} (R_{jN+1iN} - R_{iNjN+1}), \quad \sum_{iN=1}^{n_{max}} n_{iN} = n_{stot}. \quad (4)$$

В систему балансных уравнений (4) включены слагаемые, которые соответствуют скоростям переходов внутри N -го каскада, а также между каскадами $(N-1)-N$

и $N-(N+1)$. Последнее уравнение включает в себя сумму концентраций электронов n_{iN} на всех уровнях N -го каскада, равную n_{stot} и определяемую степенью легирования слоев. При расчетах результирующих скоростей переходов учитывались рассеяние на оптических фононах и электрон-электронное рассеяние [10].

Коэффициент усиления g для внутриволноводных переходов в зависимости от частоты света ν находился в многоуровневом приближении [11]:

$$g(\nu) = \sum_n \sum_m g_{nm}(\nu) = \frac{e^2}{\hbar^3 \epsilon_0 c n_r d} \sum_n \sum_m m_{fm} |z_{nm}|^2 \times \int_{E_{fm}}^{\infty} dE_f(E_i - E_j) F(\hbar\nu - (E_i - E_f), \gamma) \times [f(E_i - F_n) - f(E_f - F_m)], \quad (5)$$

где $E_i = (E_f - E_{fm})(m_{fm}/m_{in}) + E_{in}$; $z_{nm} = \int \psi_n^* z \psi_m dz$ — матричный элемент дипольных переходов; F_n и F_m — квазиуровни Ферми в мини-зонах n и m с энергиями E_{in} , E_{fm} и эффективными массами m_{in} , m_{fm} ; d — толщина квантово-каскадной структуры; n_r — показатель преломления; $F(\Delta E)$ — функция, описывающая контур уширения линии излучения [11]. Суммирование в (5) проводится по всем квантовым числам начальных (n) и конечных (m) состояний, для которых $E_{in} - E_{fm} > 0$.

Ранее данная методика успешно использовалась для предварительных численных расчетов ККЛ с 4 и 3 КЯ, впоследствии выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии фирмой Trion Technology (г. Темпе, Аризона, США) [12]. На рис. 1 приведены также тестовые расчеты зонной структуры, уровней энергии, волновых функций ККЛ на основе $GaAs-Al_{0.15}Ga_{0.85}As$ с 2 КЯ, предложенные в работе [4]. При вычислениях высота потенциальных барьеров в зоне проводимости полагалась равной $\Delta E_c = 153.7$ мэВ. Как показывают численные расчеты, основные переходы происходят между уровнями 3–2 и 1'–2 в области ~ 4.6 ТГц, что хорошо согласуется с экспериментальными данными работы [4].

3. Обсуждение путей продвижения в область меньших частот терагерцового диапазона

Одним из путей получения дополнительных степеней свободы для продвижения в область меньших частот ТГц диапазона может выступать незначительное изменение молярного состава КЯ, а также введение составных КЯ с узкими КЯ (~ 2 нм), ограниченными низким потенциальным барьером, располагающимися внутри широкой КЯ. Последнее позволяет эффективно управлять энергетическим положением основного состояния размерного квантования составной КЯ.

Параметры зонной структуры полупроводников

Соединение	m_c/m_e	γ_1	γ_2	γ_3	$E_p, \text{эВ}$	$\Delta S_0, \text{мэВ}$	$E_{g0}, \text{эВ}$	$\alpha, \text{мэВ/К}$	$\beta, \text{К}$	$-F$
GaAs	0.067	6.98	2.06	2.93	28.8	341	1.519	0.5405	204	1.938
AlAs	0.15	3.76	0.82	1.42	21.1	280	3.099	0.885	530	0.477
$\text{Al}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{As}$	0.069	6.96	2.04	2.90	28.6	340	1.553	0.547	211	1.909
$\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$	0.079	6.50	1.87	2.70	27.6	332	1.747	0.592	253	1.719
$\text{Al}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}$	0.083	6.37	1.82	2.64	27.3	329	1.800	0.606	265.9	1.660

Примечание. m_c — эффективная масса электронов, m_e — масса свободного электрона.

На рис. 2, *a* представлена оптимизированная конструкция такого варианта ККЛ. В структуру широкой КЯ $\text{Al}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{As}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ глубиной $\Delta E_c = 133.7$ мэВ встроена узкая КЯ $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{As}$ глубиной $\Delta E_c = 20.5$ мэВ. Толщины слоев структуры, выраженные в монослоях, слева направо имеют следующие значения: /14/22/7/25/23/23/. В последовательности слоев

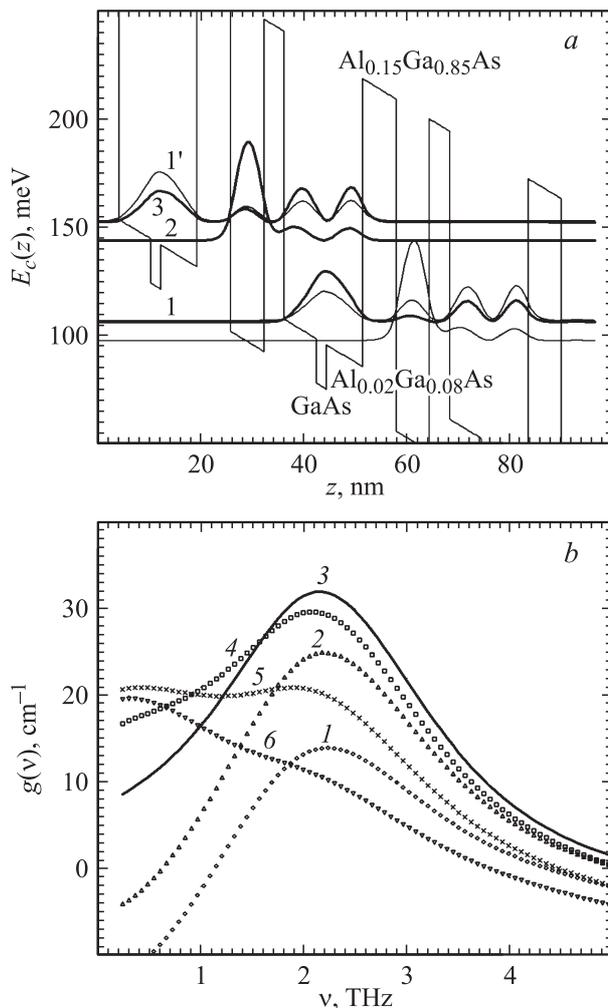


Рис. 2. Диаграмма зоны проводимости $E_c(z)$ и квадраты модулей волновых функций электронов для структуры с одинаковыми барьерными слоями $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ в электрическом поле $E = 14.35$ кВ/см (*a*) и спектры усиления при $E = 14.15$ (1), 14.25 (2), 14.35 (3), 14.45 (4), 14.55 (5) и 14.65 кВ/см (6) (*b*).

квантовые ямы GaAs выделены жирным прямым, а $\text{Al}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{As}$ — жирным курсивом. Подчеркнутые слои легированы примесями Si со слоевой концентрацией $2.17 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Отметим, что все толщины слоев ККЛ кратны толщине монослоя GaAs и AlGaAs (0.2825 нм), что обеспечивает лучшее качество гетерограниц, высокую скорость роста структур и более высокие ожидаемые рабочие температуры [13].

Введение узкой КЯ внутри широкой ямы позволяет уменьшить энергию излучения за счет изменения положения состояний размерного квантования составной КЯ относительно основного состояния более узкой (23 монослоя) КЯ $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$. Отметим, что в варианте структуры работы [4] (рис. 1) переходы 3–2 и 1'–2 осуществляются между уровнем энергии 3 (основной уровень) узкой КЯ и уровнем энергии 2 (возбужденный уровень) широкой КЯ и между первым уровнем энергии 1' (основной уровень) широкой КЯ предыдущего каскада и уровнем энергии 2 широкой КЯ следующего каскада. В предложенной нами конструкции (рис. 2, *a*) переходы 3–2 и 1'–2 осуществляются между уровнем энергии 3 (возбужденный уровень) составной КЯ и уровнем энергии 2 (основной уровень) узкой КЯ и между уровнем энергии 1' (основной уровень) составной КЯ предыдущего каскада и уровнем энергии 2 узкой КЯ следующего каскада.

Введение узкой КЯ внутри широкой ямы центрирует волновую функцию, а также позволяет управлять матричным элементом дипольных переходов между рабочими уровнями 3–2 при фиксированной напряженности электрического поля $E = 14.5$ кВ/см и неизменной толщине составной широкой КЯ. При смещении узкой КЯ толщиной 7 монослоев к левому краю составной КЯ переходы между рабочими уровнями становятся более прямыми и матричные элементы дипольных переходов возрастают от $z_{32} = 4.82$ нм для составной КЯ (22/7/25) до значения $z_{32} = 5.54$ нм при смещении на 5 монослоев левее (17/7/30). При смещении к правому краю составной КЯ переходы становятся более диагональными и матричные элементы дипольных переходов уменьшаются: $z_{32} = 2.94$ нм для составной КЯ (30/7/17).

На рис. 2, *b* представлены рассчитанные спектры усиления таких структур. С ростом напряженности электрического поля наблюдается рост максимума коэффициента усиления и его сдвиг в область меньших частот. При напряженности электрического поля

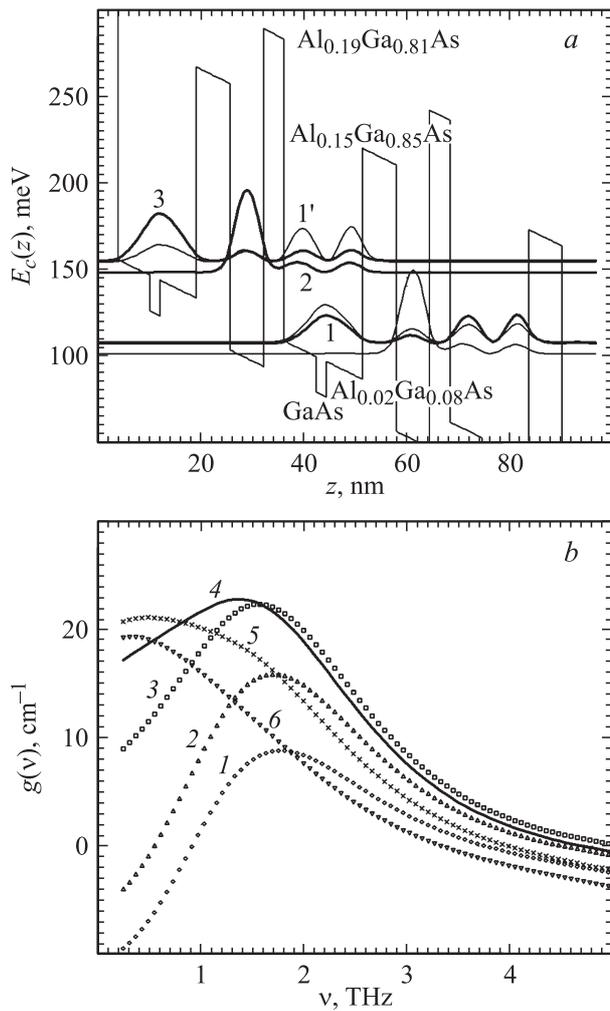


Рис. 3. Диаграмма зоны проводимости $E_c(z)$ и квадраты модулей волновых функций электронов для структуры с разными барьерными слоями, $\text{Al}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}$ перед широкой составной квантовой ямой и $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ после нее, в электрическом поле $E = 14.55$ кВ/см (а) и спектры усиления при $E = 14.25$ (1), 14.35 (2), 14.45 (3), 14.55 (4), 14.65 (5) и 14.75 кВ/см (6) (b).

$E = 14.35$ кВ/см достигаются наилучшие условия для резонансного туннелирования (уровни 3 и 1' совпадают). При этом коэффициент усиления составляет 32 см^{-1} на частоте ~ 2.15 ТГц, что значительно меньше, чем в работе [4].

Интересно исследовать при неизменных толщинах слоев влияние на спектры усиления высоты узкого барьерного слоя перед широкой составной КЯ, что возможно за счет изменения его молярного состава. Проведены расчеты характеристик ККЛ для барьерного слоя $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ толщиной 3.955 нм (14 монослоев) при значениях x от 0.09 до 0.19, что соответствует высотам потенциальных барьеров от 92.2 до 194.7 эВ. Как показывают вычисления, при неизменных толщинах слоев структуры и $x < 0.15$ расстояние между уровнями 2–1 уменьшается и становится меньше частоты оптического фонона, что приводит к срыву генерации. При $x > 0.15$

расстояние между уровнями 2–1 увеличивается, но регулируется электрическим полем и незначительно отличается от частоты оптического фонона. На рис. 3 представлены результаты расчета для барьерного слоя $\text{Al}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}$. Как видно из рис. 3, b, при росте напряженности электрического поля наблюдается аналогичное представленному на рис. 2, b поведению максимума коэффициента усиления, но уже при больших значениях E . Наилучшие условия для резонансного туннелирования достигаются при напряженности электрического поля $E = 14.55$ кВ/см. При этом коэффициент усиления составляет 23 см^{-1} на частоте ~ 1.35 ТГц. Меньшие значения коэффициента усиления обусловлены небольшим отклонением от условия резонансного испускания оптического фонона.

4. Заключение

Таким образом, предложена конструкция ККЛ с 2 КЯ, в которой в структуру широкой КЯ $\text{Al}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{As}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ встроена узкая КЯ из GaAs. Максимум коэффициента усиления получен на частоте ~ 2.15 ТГц. Варьирование местоположения узкой КЯ внутри широкой КЯ позволяет управлять матричным элементом дипольных переходов для рабочих уровней 3–2. Увеличение высоты барьерного слоя перед широкой составной КЯ приводит к уменьшению частоты излучения до значения ~ 1.35 ТГц. Предложенные пути как вместе, так и по отдельности позволяют ввести дополнительные степени свободы для продвижения в область меньших частот ТГц диапазона.

Работа одного из авторов (Д.В. Ушакова) выполнена при поддержке программы 1.2.04 ГПНИ „Электроника и фотоника“, а также Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований по проекту БРФФИ № Ф10Р-091.

Список литературы

- [1] B.S. Williams, S. Kumar, Q. Hu, J.L. Reno. Electron. Lett., **42** (2), 89 (2006).
- [2] H. Luo, S.R. Laframboise, Z.R. Wasilewski, G.C. Aers, H.C. Liu. Appl. Phys. Lett., **90**, 041 112 (2007).
- [3] B.S. Williams. Nature Photonics, **1**, 517 (2007).
- [4] S. Kumar, C.W.I. Chan, Q. Hu, J. Reno. Appl. Phys. Lett., **95**, 141 110 (2009).
- [5] S. Kumar, Q. Hu, J. Reno. Appl. Phys. Lett., **94**, 131 105 (2009).
- [6] A. Wade, G. Fedorov, D. Smirnov, S. Kumar, B.S. Williams, Q. Hu, J.L. Reno. Nature Photonics, **3**, 41 (2009).
- [7] K.H. Yoo, L.R. Ram-Mohan, D.F. Nelson. Phys. Rev. B, **39** (17), 12 808 (1989).
- [8] Д.В. Ушаков, И.С. Манак. Опт. и спектр., **104** (5), 847 (2008).
- [9] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. J. Appl. Phys., **89**, 5815 (2001).

- [10] Д.В. Ушаков, И.С. Манак. Журн. прикл. спектроскопии, **74** (6), 801 (2007).
- [11] Д.В. Ушаков, В.К. Кононенко, И.С. Манак. Квант. электрон., **40** (3), 195 (2010).
- [12] А.В. Антонов, В.И. Гавриленко, А.В. Иконников, К.В. Маремьянин, А.А. Ластовкин, С.В. Морозов, Д.В. Ушаков, Ю.Г. Садофьев, Н. Самал. Изв. вузов. Радиофизика, **52** (7), 550 (2009).
- [13] Ю.Г. Садофьев. Матер. Всеросс. симп. „Нанофизика и нанoeлектроника“. (Н. Новгород, 2011) т. 1, с. 244.

Редактор Л.В. Шаронова

Investigation of the mechanisms for a frequency reduce of terahertz quantum-cascade laser based on two quantum wells

D.V. Ushakov⁺, Y.G. Sadof'ev, N. Samal[‡]*

⁺ Belarusian State University,
220030 Minsk, Belarus

^{*} P.N. Lebedev Physical Institute,
Russian Academy of Sciences,
119991 Moscow, Russia

[‡] Trion Technology,
85281 Tempe, AZ, USA

Abstract Two mechanisms to achieve lower frequencies in the terahertz quantum-cascade structures with two quantum wells based on GaAs/AlGaAs are proposed. The first mechanism is based on the introduction of composite quantum well consisting of a narrow (2 nm) quantum well with a low potential barrier, located inside the main wide quantum well. The second mechanism is based on an unequal barrier heights for the barrier layers placed before and after the composite quantum well. Optimized design of quantum cascade laser structures emitting in the region ~ 2.15 and ~ 1.35 THz is calculated.