

ФАКУЛЬТЕТ РАДИОФИЗИКИ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ ПРИМЕСНЫХ ПОДЗОН В КВАНТОВО-КАСКАДНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

А. А. Афоненко

Белорусский государственный университет, г. Минск;

anatolii92111@gmail.com;

науч. рук. – Д. В. Ушаков, канд. физ.-мат. наук

На основе расчетов двумерных волновых функций заряженных примесей квантово-каскадных лазерных гетероструктур ТГц диапазона проведен анализ энергетического спектра примесных уровней. Найдено, что локализованные состояния возникают у каждой подзоны размерного квантования в сверхрешетке. Глубина залегания примесных состояний увеличивается с уменьшением размера локализации волновых функций.

Ключевые слова: квантово-каскадная гетероструктура; примесные состояния; энергия активации.

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. [1]. Актуальными являются исследования по совершенствованию физических и математических моделей квантово-каскадных лазеров, которые позволяют повысить надежность и обоснованность проектируемых технических устройств [2]. Одним 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 плотности состояний примесных зон для различных подзон размерного квантования квантово-каскадной сверхрешетки.

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.

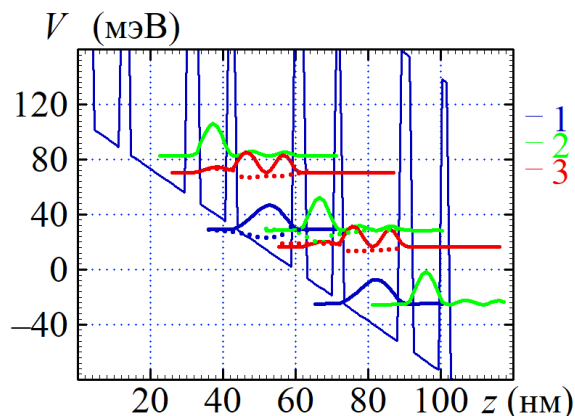


Рис. 1. Зонная диаграмма и координатные зависимости квадратов волновых функций сверхрешетки при внешнем напряжении 18 кВ/см

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:

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

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 двухмерного уравнения (1) исключением кулоновского потенциала заряженной примеси и зависимости волновой функции от координаты ρ .

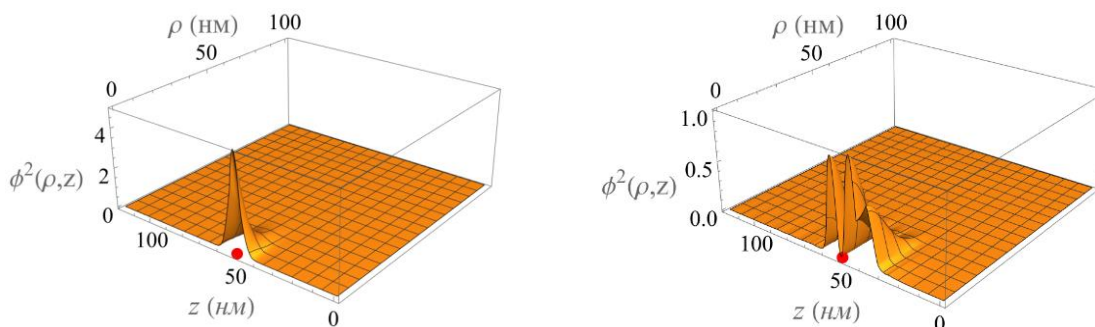


Рис. 2. Координатные зависимости квадратов волновых функций 1-го уровня примеси 1-й и 2-й подзоны сверхрешетки при расположении примеси в центре широкой квантовой ямы (показана кружком)

Локализованные примесные состояния возникают в каждой подзоне сверхрешетки (рис. 2). Квадраты двухмерных волновых функций, приведенные к одномерным путем интегрирования по радиальной плоскости, близки к зависимостям, полученным для соответствующих подзон в одномерном приближении (см. рис.1). Энергии залегания примесных состояний существенно зависят от положения примеси (Табл.). Первое значение в таблице рассчитано как разность энергий края подзоны и первого уровня примеси, второе – как разность энергий второго и первого уровней примеси. Глубина залегания максимальна при расположении примесного центра вблизи “центра тяжести” электронных плотностей соответствующих подзон. С уменьшением размера локализации волновых функций глубина залегания примесных состояний увеличивается.

Энергии примесных состояний, мэВ

Номер подзоны	Положение примеси	
	В центре широкой квантовой ямы	В центре узкой квантовой ямы
1	6.1 / 7.3	–0.7 / 1.4
2	–0.8 / 0.4	10.8 / 12.3
3	2.5 / 5.1	–2.2 / 2.6

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ ПРИМЕСНЫХ ПОДЗОН

Большой разброс энергий активации примеси приводит к появлению широкой примесной зоны (рис. 3). Рассчитанный в работе [6] параметр статистического уширения из-за взаимодействия с соседними примесями составил 3–4 мэВ.

Перенос заряда с участием примесной зоны можно учесть с использованием значительных хвостов плотности состояний (для лоренцевской формы основного уровня параметр уширения ~ 5 мэВ), либо вводя в балансные уравнения дополнительную зону. При этом может возникать значительный канал переноса заряда с инжектора в примесную зону и далее на нижний лазерный уровень.

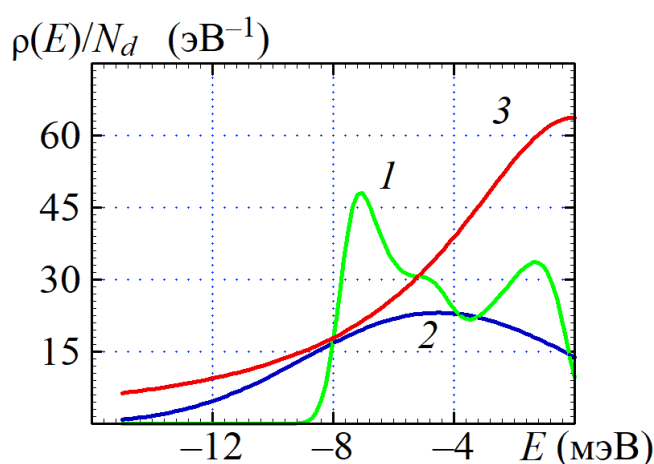


Рис. 3. Нормированная плотность заполненных состояний примесной зоны без учета (1) и с учетом (2) статистического усреднения энергий активации для 1-й подзоны сверхрешетки. Также приведена нормированная плотность заполненных состояний основного уровня квантовой ямы при лоренцевском уширении с полушириной 5 мэВ

Библиографические ссылки

1. Bosco M., Franckie M., Scarlari G., et al. Thermoelectrically cooled THz quantum cascade laser operating up to 210 K // Appl. Phys. Lett. 2019. Vol. 115, No. 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

- нанoeлектроника» (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. Vol. 2086, No 1. P. 012086 (1–4).
 6. Афоненко, Ан.А. Анализ статистического уширения уровней примеси в квантово-каскадных гетероструктурах / Ан.А. Афоненко, А.А. Афоненко, Д.В. Ушаков // Компьютерные технологии и анализ данных (CTDA'2022): материалы III Междунар. науч.-практ. конф., Минск, 21–22 апр. 2022 г. С. 151–154.