

Анализ рассеяния на примесях в квантово-каскадном лазере во внешнем магнитном поле

А. И. Дуньчик¹⁾, А. А. Афоненко¹⁾, Д. В. Ушаков¹⁾
А. А. Дубинов²⁾, В. И. Гавриленко²⁾

¹⁾Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь, e-mail: alenadunchik@gmail.com

²⁾Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия

В работе проведены численные расчеты матричных элементов рассеяния на примесях в квантово-каскадных гетероструктурах. Показано, что при увеличении магнитного поля, направленного вдоль нормали к плоскости квантово-размерных слоев, значения матричных элементов рассеяния уменьшаются. Одномерный эффективный потенциал не является экспоненциальной функцией координаты z . Предложено аналитическое выражение для расчета усреднённого квадрата матричного элемента при рассеянии на примесях, полученное в приближении плоских волн. Найдено, что при напряженностях магнитного поля до 6 Тл различие численных и аналитических расчетов не превышает 20 %.

Ключевые слова: квантово-каскадный лазер; магнитное поле; рассеяние на примесях; волновая функция; матричные элементы рассеяния.

Analysis of scattering by impurities in a quantum cascade laser in an external magnetic field

A. I. Dunchyk¹⁾, A. A. Afonenko¹⁾, D. V. Ushakov¹⁾
A. A. Dubinov²⁾, V. I. Gavrilenko²⁾

¹⁾Belarusian State University, Minsk, Belarus, e-mail: alenadunchik@gmail.com

²⁾Institute for Physics of Microstructures RAS, Nizhny Novgorod, Russia

Numerical calculations of matrix elements of scattering on impurities in quantum cascade heterostructures are carried out. It is shown that the values of the scattering matrix elements decrease with increasing magnetic field directed along the normal to the plane of quantum-dimensional layers. The one-dimensional effective potential is not an exponential function of the z coordinate. An analytical expression is proposed for calculating the averaged square of the matrix element of scattering of impurities, obtained in the approximation of plane waves. It is found that at magnetic field strengths up to 6 T, the difference between numerical and analytical calculations does not exceed 20 %.

Keywords: quantum cascade laser; magnetic field; scattering on impurities; wave function; matrix elements of scattering.

Введение

В настоящее время создание эффективных терагерцевых квантово-каскадных лазеров (ТГц ККЛ), работающих при комнатной температуре, представляет собой актуальную задачу. Один из перспективных методов повышения рабочей температуры ТГц ККЛ заключается в их размещении во внешнем магнитном поле. Это связано с возможностью изменения плотности состояний электронов в активной среде, что может привести к повышению эффективности лазера.

Для расчёта характеристик структуры во внешнем магнитном поле необходимо корректно рассчитывать рассеяние. Существует несколько основных механизмов рассеяния в полупроводниках, таких как рассеяние на фононах, рассеяние на шероховатостях гетерограниц и рассеяние на примесях. В данной работе исследуется рассеяние на примесях. С использованием экранированного потенциала взаимодействия между электронами и примесью находятся соответствующие матричные элементы и проводится усреднение квадрата матричных элементов по положениям примеси и волновым векторам электронов. С использованием полученных усреднённых квадратов матричных элементов рассеяния можно найти вероятности переходов электронов между различными подзонами и установить влияние магнитного поля на скорость рассеяния.

1. Математическая модель

В приближении эффективной массы волновая функция электрона в постоянном магнитном поле, направленном вдоль нормали к плоскости квантово-размерных слоев, представляется в виде

$$\psi_{ni}(\mathbf{r}) = \varphi_n(x, y)\varphi_i(z). \quad (1)$$

При использовании гамильтониана с калибровкой Ландау волновая функция в плоскости слоя является решением уравнения Шрёдингера для квантового гармонического осциллятора и имеет вид:

$$\varphi_n(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/2} l_H L_y}} \cdot \exp\left[-\frac{(x - k_y l_H^2)^2}{2l_H^2}\right] H_n\left(\frac{x - k_y l_H^2}{l_H}\right) \exp[ik_y y], \quad (2)$$

где $H_n(x)$ – многочлен Эрмита порядка n , $l_H = \sqrt{\hbar / eB}$ – магнитная длина, k_y – волновой вектор, L_y – размер анализируемой области по оси y [1]. Потенциал взаимодействия с примесью в точке \mathbf{r}_0 есть

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \frac{e \exp[-\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|]}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}, \quad (3)$$

где $\kappa = \sqrt{ne^2 / \epsilon\epsilon_0 k_B T}$ – дебаевская обратная длина экранирования, ϵ – диэлектрическая проницаемость, k_B – постоянная Больцмана, n – концентрация электронов, T – температура. Матричный элемент взаимодействия записывается в виде

$$V_{mf\ ni} = \int \psi_{mf}(\mathbf{r}) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \psi_{ni}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \varphi_f(z) V_{mn}(z - z_0) \varphi_i(z) dz. \quad (4)$$

Здесь

$$V_{mn}(z - z_0) = \int \varphi_m(x, y) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \varphi_i(x, y) dx dy \quad (5)$$

– эффективный одномерный потенциал взаимодействия.

Для расчета вероятности перехода необходимо усреднить квадрат матричного элемента (4) по положениям примеси, что в общем случае требует проведение б

интегрирований. Большое время расчета делает практически невозможным прямое использование определения (4) в программе анализа характеристик квантово-каскадных лазеров.

2. Результаты численного моделирования

В работе анализировалась полупроводниковая структура AlGaAs/GaAs с периодом структуры равным 296,1 Å и легированием до $n = 4.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ на период [2]. Расчёты проводятся при температуре 77 К.

При отсутствии магнитного поля одномерный эффективный потенциал вычисляется аналитически и имеет экспоненциальную зависимость от координаты z . Это позволяет реализовать алгоритм расчета матричного элемента и усреднения по положению примеси в одном цикле интегрирования. При наличии магнитного поля одномерный эффективный потенциал вычисляется только численно и не является экспоненциальной функцией координаты z (рис. 1). Кроме того, для разных положений примеси в плоскости слоя координатные зависимости матричного элемента имеют разное затухание. Поэтому предложить аналогичный алгоритм не представляется возможным.

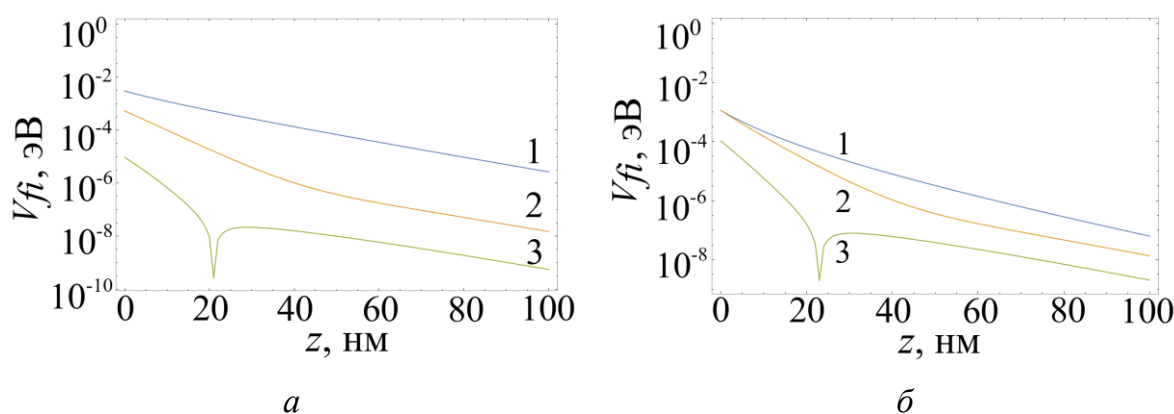


Рис. 1. Зависимость эффективного одномерного потенциала взаимодействия V_{fi} от координаты z при различных комбинациях номеров уровней Ландау $\{n, m\} = \{0, 0\}$ (а), $\{0, 2\}$ (б) при $k_y = 0$ (1), $6\pi/L_y$ (2), $12\pi/L_y$ (3)

Другим способом приближенного расчета усредненного квадрата матричного элемента является использование приближения плоских волн вместо волновых функций в магнитном поле (1). Такой подход полностью оправдан для малых магнитных полей, так как в пределе $B \rightarrow 0$ оба способа должны дать одинаковые результаты. Но для больших величин магнитного поля необходима проверка.

Для оценок приближения плоских волн используем выражение (4) при $\varphi_i(z) = \varphi_a(z) = 1$. В этом случае для усреднённого матричного элемента можно получить выражение

$$\langle V_{mn}^2 \rangle = \left(\frac{e}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{4\pi}{L_y^2} \right)^2 \frac{k_i^2 + k_f^2 + \kappa^2}{\left((k_i - k_f)^2 + \kappa^2 \right)^{3/2} \left((k_i + k_f)^2 + \kappa^2 \right)^{3/2}}, \quad (6)$$

где волновые вектора $k_i = \sqrt{2n+1}/l_H$, $k_f = \sqrt{2m+1}/l_H$, L_y – протяжённость анализируемой квадратной области.

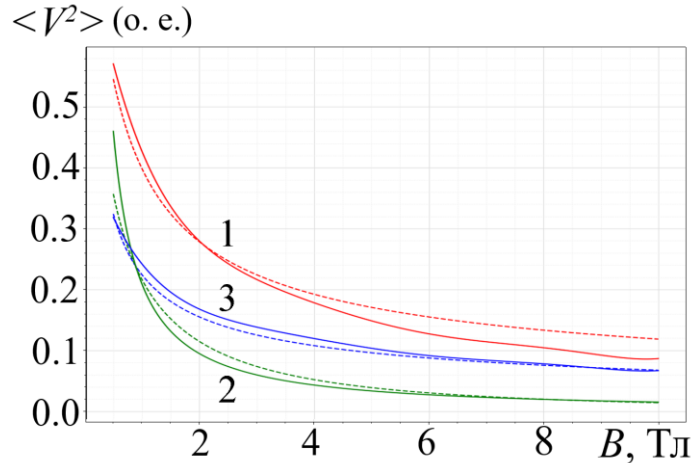


Рис. 2. Зависимость усреднённого квадрата матричного элемента рассеяния на примесях, нормированного на величину при отсутствии магнитного поля, от напряжённости магнитного поля, рассчитанного численно (сплошная линия) и аналитически (пунктирная линия). Цифрами обозначены различные комбинации уровней Ландау начального и конечного состояний: 1 – {0,0}, 2 – {0,1}, 3 – {1,1}

Из рис. 2 видно хорошее соответствие численных расчётов и предложенной аппроксимации (6). В пределе при стремлении напряжённости магнитного поля к 0 все зависимости стремятся к единице. При увеличении магнитного поля значения матричных элементов уменьшаются. При величине $B = 6$ Тл для анализируемой структуры вероятность рассеяния составляет 13 % от своего значения при отсутствии магнитного поля. При этом для уровней Ландау $\{n, m\} = \{0, 0\}$ различие усреднённого квадрата матричного элемента рассчитанного численно и аналитически не превышает 20 %.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, грант № 23-19-00436, <https://rscf.ru/project/23-19-00436/>.

Библиографические ссылки

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Учеб. пособие для вузов. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). 4-е изд., испр. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989, 768 с.
2. Thermoelectrically cooled THz quantum cascade laser operating up to 210 K / L. Bosco [et al.] // Applied Physics Letters. 2019. Vol. 115, № 1. P. 010601.