

Дефазировка электронных состояний в квантово-каскадных структурах из-за шероховатости гетероинтерфейсов

А. Н. Дрозд*, А. А. Афоненко

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, Минск, 220030, Беларусь
*drozdan@bsu.by

Для численного моделирования квантово-каскадных лазеров [1, 2] наиболее эффективным с точки зрения вычислительных затрат является метод скоростных уравнений [3]. В этом подходе используются релевантные уровни энергии свободных электронов в квантово-каскадной гетероструктуре и скорости переходов между ними, которые находятся как скорости рассеяния свободных электронов на возмущающем потенциале. Для расчета скорости переходов важно учитывать эффекты спектрального уширения. Обычно ограничиваются рассмотрением однородного уширения из-за конечного времени жизни состояний. Строгий квантовомеханический расчет процессов переноса электронов с учетом дефазировки достигается в методе неравновесных функций Грина, в рамках которого каждый механизм рассеяния учитывается добавлением к невозмущенному гамильтониану соответствующей собственно-энергетической функции $\Sigma(E, k)$, которая не только является функцией независимого энергетического параметра E и волнового вектора k , но и функционалом от искомой величины: функции Грина $G(E, k)$. В результате приходится решать нелинейные самосогласованные функциональные уравнения, что требует больших вычислительных ресурсов.

Поправку к невозмущенной энергии электрона в подзоне a с волновым вектором k при взаимодействии с подзоной b можно представить в виде комплексной величины $\Sigma_{ak} = \Delta_{ak} - \frac{i}{2}\Gamma_{ak}$. Действительные энергии Δ_{ak} и Γ_{ak} есть сдвиг и величина лоренцевского уширения невозмущенного уровня соответственно:

Амплитуда вероятности выживания электронного состояния есть $a_k(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Sigma_{ak}t\right)$. Среднюю по волновому вектору амплитуду с учетом статистики заполнения подзоны можно снова представить в экспоненциальной форме с помощью кумулянтного разложения:

$$\langle a_k(t) \rangle \approx \exp\left(-\frac{i\Delta t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{\Gamma t}{2\hbar}\right) \exp\left(-\frac{\gamma^2 t^2}{2\hbar^2}\right),$$

где $\Delta = \langle \Delta_{ak} \rangle$, $\Gamma = \langle \Gamma_{ak} \rangle$, $\gamma^2 = \langle \Delta_{ak}^2 \rangle - \langle \Delta_{ak} \rangle^2$. Таким образом, помимо лоренцевского уширения Γ , имеет место также гауссовское уширение γ . Последнее связано с чистой дефазировкой.

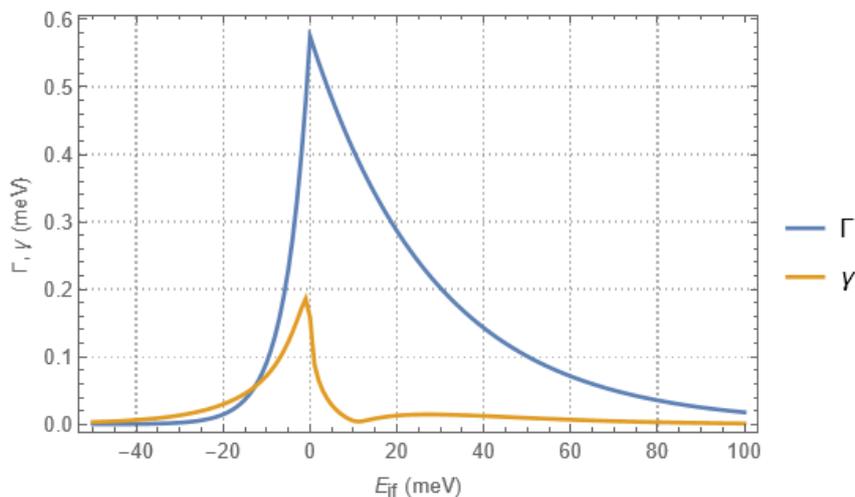


Рис. 1. Рассчитанная зависимость параметра лоренцевского уширения (Γ) и среднеквадратичного уширения (γ) уровня i из-за рассеяния на уровень f от разности краев подзон $E_{if} = E_i - E_f$ при температуре $T = 77$ К

Оценка величины дефазировочного уширения для структуры GaAs/AlGaAs в результате рассеяния на шероховатостях гетерограниц показывает (рис. 1), что при межподзонном рассеянии электрона сверху вниз доминирующий вклад в уширение начального уровня вносит Γ . При выравнивании начальной и конечной подзон величина уширения γ составляет $\sim 0,3$ Г. При рассеянии с нижнего уровня на верхний преобладает эффект дефазировки. Таким образом, учет данного эффекта может быть важен при количественном моделировании квантово-каскадных лазеров методом скоростных уравнений.

1. Р.Ф. Казаринов, Р.А. Суриц // ФТП. 1971. Т. 5, № 4. С. 797–800.
2. J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtori, et al. // Science. 1994. Vol. 264. P. 553–556.
3. Д.В. Ушаков, А.А. Афоненко, А.А. Дубинов и др. // Квантовая электроника. 2019. Т. 49, № 10. С. 913–918.