

М.В. ТКАЧ, Ю.О. СЕТИ, Ю.Б. ГРИНИШИН

Чернівецький національний університет ім. Ю.Федьковича
(вул. Коцюбинського, 2, Чернівці 58012, Україна; e-mail: ktf@chnu.edu.ua)

ВПЛИВ ОБМЕЖЕНИХ ПОЛЯРИЗАЦІЙНИХ ФОНОНІВ НА ЕЛЕКТРОННИЙ СПЕКТР ТРИБАР'ЄРНОЇ АКТИВНОЇ ЗОНИ КВАНТОВОГО КАСКАДНОГО ДЕТЕКТОРА

УДК 538.958

У моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів для електронів та в моделі поляризаційного континууму для обмежених фононів у трибар'єрній резонансно-тунельній наноструктурі отримано гамільтоніан електрон-фононної системи у зображенні чисел заповнення за всіма змінними. Методом функцій Гріна розраховано перенормований спектр електронів у трибар'єрній резонансно-тунельній наноструктурі на основі GaAs-ям і $Al_xGa_{1-x}As$ -бар'єрів при різних значеннях концентрації (x) Al. Встановлено, що при зміні температури від 0 до 300 K, незалежно від концентрації Al, зі зміною геометричної конфігурації трибар'єрної резонансно-тунельної наноструктури ширини обох нижніх (робочих) квазістаціонарних станів збільшуються, а енергії зміщуються у низькоенергетичну область. Ширини і зміщення виявилися сильно нелінійними функціями у залежності від положення внутрішнього бар'єра в трибар'єрній резонансно-тунельній наноструктурі.

Ключові слова: резонансно-тунельна наноструктура, квантовий каскадний детектор, електрон-фононна взаємодія.

1. Вступ

Нанорозмірні гетероструктури інтенсивно досліджуються останнім часом, оскільки вони є базовими елементами унікальних наноприладів (квантові каскадні лазери (ККЛ), квантові каскадні детектори (ККД) і т.п.), робота яких здійснюється на основі нових фізичних ефектів, що виникають у багатопарових наноструктурах взагалі і резонансно-тунельних зокрема.

Саме електронний транспорт крізь відкриті багатопарові резонансно-тунельні структури (РТС) забезпечує функціонування ККЛ і ККД, які детально досліджуються експериментально [1–7] й теоретично [8–12]. Що стосується ККД, то з тих пір, як вони були створені й працювали, в основному при криогенних температурах, досягнуто значний прогрес у розумінні фізичних процесів у на-

ноРТС, що дало можливість значно розширити область температур, при яких успішно функціонують ці наноприлади [13].

Температурні залежності фізичних параметрів будь-яких систем, значною мірою, формуються взаємодією основних квазічастинок (зокрема електронів) з фононами. Тому й теоретичним дослідженням електрон-фононної взаємодії у наногетеросистемах різної розмірності й геометричних форм приділяється значна увага [14–16]. Стосовно плоских наноструктур, то у переважній більшості теоретичних робіт вивчалася електрон-фононна взаємодія у закритих дво- і трибар'єрних РТС (ТБРТС) при фіксованих геометричних параметрах системи. Різними методами досліджувалися вольт-амперні характеристики та ймовірності квантових переходів під дією електромагнітного поля з урахуванням електрон-фононної взаємодії [17, 18].

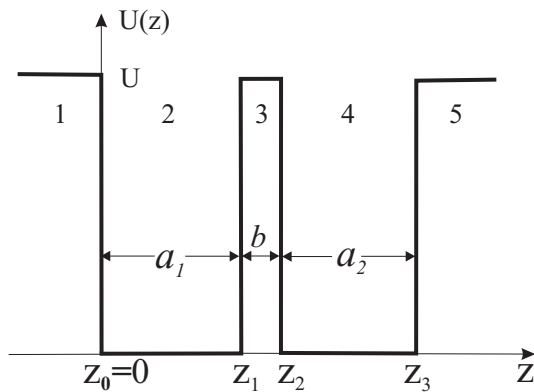


Рис. 1. Потенціальний профіль ТБРТС

Основною моделлю електрон-фононої взаємодії у таких роботах була модель діелектричного континууму, яка вперше детально розроблена в роботі Морі й Андо [19], в якій гамільтоніан взаємодії записувався у координатному зображенні за електронними змінними й у зображенні чисел заповнення за фононними для, так званих, бінарних гетеросистем. Пізніше цей підхід був розширений на трикомпонентні системи [20, 21]. Основні теоретичні дослідження виконувались з використанням золотого правила Фермі. Це давало можливість розраховувати й аналізувати температурну еволюцію параметрів, що характеризують міжзонні квантові переходи [17, 18, 21], однак не дозволяло установити як електрон-фононна взаємодія змінює величини енергій та затухання квазістаціонарних станів електронів у квантово-ямних РТС.

Метою пропонованої роботи є встановлення явного вигляду гамільтоніана системи електронів, які взаємодіють з обмеженими поляризаційними фонами у зображенні вторинного квантування за всіма змінними системи. Це дає можливість застосувати метод температурних функцій Гріна електронів для розрахунку перенормування спектральних параметрів (зміщень і затухання) квазістаціонарних станів у відкритих ТБРТС з достатньо потужними зовнішніми бар'єрами, які слугують активними зонами експериментальних ККД [22, 23], та проаналізувати еволюцію цих параметрів у залежності від геометричного дизайну, концентрації (x) Al, та температури системи на прикладі типових РТС на основі GaAs-ям і $Al_xGa_{1-x}As$ -бар'єрів.

2. Теорія взаємодії електронів з обмеженими поляризаційними фонами у ТБРТС

2.1. Енергетичний спектр, хвильові функції та гамільтоніан електронів у зображенні чисел заповнення

Оскільки товщини зовнішніх шарів трибар'єрних РТС як активних зон експериментальних ККД є досить великими (3–6 нм) [13], то для побудови теорії електрон-фононої взаємодії будемо використовувати модель закритої ТБРТС (рис. 1) з відомими ефективними масами і потенціальним рельєфом:

$$m(z) = \begin{cases} m_w, & U(z) = \begin{cases} 0, & \text{рег. 2, 4,} \\ U, & \text{рег. 1, 3, 5.} \end{cases} \end{cases} \quad (1)$$

Подаючи електронну хвильову функцію у вигляді

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{k}\rho} \Psi_n(z), \quad (2)$$

де \mathbf{k} і ρ – квазіімпульс і радіус-вектор електрона в площині xOy ; S – площа основної області у цій площині, для z -ї компоненти цієї функції отримується рівняння Шредінгера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + U(z) \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z). \quad (3)$$

Повна енергія електрона (E) визначається сумою енергій

$$E_{nk} = E_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_n^*}. \quad (4)$$

Тут складова енергії у площині, перпендикулярній до осі Oz , визначається як у роботі [17] скорельованою по РТС ефективною масою n -ї електронної підзони

$$\frac{1}{m_n^*} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\Psi_n(z)|^2}{m(z)} dz, \quad (5)$$

де $\Psi_n(z)$, як і E_n , визначаються розв'язками рівняння (3). При цьому

$$\begin{aligned} \Psi_n(z) &= \sum_{j=1}^5 \Psi_{jn}(z) = \\ &= \begin{cases} \sum_{j=2,4} (A_{jn} \cos k_n z + B_{jn} \sin k_n z); \\ \sum_{j=1,3,5} (A_{jn} e^{\chi_n z} + B_{jn} e^{-\chi_n z}); \end{cases} \end{aligned} \quad (6)$$

$$k_n = \hbar^{-1} \sqrt{2m_w E_n}; \chi_n = \hbar^{-1} \sqrt{2m_b(U - E_n)} = \sqrt{2m_b U \hbar^{-2} - k_n^2 m_b / m_w}. \quad (7)$$

За умови зникнення хвильової функції при $z \rightarrow \pm\infty$ $B_{1n} = A_{5n} = 0$, решта коефіцієнтів A_{jn}, B_{jn} та енергетичний спектр E_n однозначно визначаються граничними умовами

$$\Psi_{jn}(z)|_{z=z_j} = \Psi_{j+1n}(z)|_{z=z_j}; \quad j = 1-4; \quad (8)$$

$$\frac{1}{m_j} \frac{d\Psi_{jn}(z)}{dz} \Big|_{z=z_j} = \frac{1}{m_{j+1}} \frac{d\Psi_{j+1n}(z)}{dz} \Big|_{z=z_j},$$

та умовою нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(z) \Psi_{n'}(z) dz = \delta_{nn'}. \quad (9)$$

Здійснивши в електронному гамільтоніані перехід до зображення вторинного квантування на квантованій хвильовій функції

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{n,\mathbf{k}} \Psi_{n\mathbf{k}}(\boldsymbol{\rho}, z) a_{n\mathbf{k}}, \quad (10)$$

отримується гамільтоніан незваємодіючих електронів у зображенні чисел заповнення

$$\hat{H}_e = \sum_{n,\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} a_{n\mathbf{k}}^+ a_{n\mathbf{k}} \quad (11)$$

з визначенням (4) електронним спектром $E_{n\mathbf{k}}$ та ферміонними операторами народження ($a_{n\mathbf{k}}^+$) і знищення ($a_{n\mathbf{k}}$) електронних станів, що задовольняють антикомутаційні співвідношення.

2.2. Гамільтоніани обмежених фононів та електрон-фононної взаємодії

Як відомо [17, 21], у моделі діелектричного континууму спектри інтерфейсних та обмежених фононів і потенціали їх полів поляризації визначаються рівняннями

$$\varepsilon_j(\omega) \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) = 0, \quad (12)$$

де $\varepsilon_j(\omega)$ – діелектрична проникливість j -го шару системи подвійного чи потрійного матеріалу відповідно

$$\varepsilon_j(\omega) = \varepsilon_{j\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{Lj}^2}{\omega^2 - \omega_{Tj}^2}; \quad (13)$$

$$\varepsilon_j(\omega) = \varepsilon_{j\infty} \frac{(\omega^2 - \omega_{Lj1}^2)(\omega^2 - \omega_{Lj2}^2)}{(\omega^2 - \omega_{Tj1}^2)(\omega^2 - \omega_{Tj2}^2)}.$$

Тут $\varepsilon_{j\infty}$ – високочастотна проникливість; $\omega_{Lj}, \omega_{Lj1}, \omega_{Lj2}, \omega_{Tj}, \omega_{Tj1}, \omega_{Tj2}$ – частоти поздовжніх (L) та поперечних (T) коливань j -го середовища.

Рівняння (12) має два типи розв'язків, які для неоднорідних наногетеросистем доповнюються граничними умовами на всіх її межах. А) Якщо $\varepsilon_j(\omega) \neq 0$, то $\nabla^2 \Phi_I(\mathbf{r}) = 0$ і тоді з урахуванням граничних умов, що пов'язані з неперервністю потенціалу Φ_I й індукції цього поля на всіх межах гетеросистеми знаходиться поле поляризації інтерфейсних фононів (I -фононів), квантування якого визначає енергетичний спектр цих фононів [21]. В) Якщо $\nabla^2 \Phi_L(\mathbf{r}) \neq 0$, то $\varepsilon_j(\omega) = 0$ і з урахуванням відомих ще з роботи [19] граничних умов зникнення потенціалу поля поляризації обмежених фононів ($\Phi_{jL}(\boldsymbol{\rho}, z_j) = 0$) на всіх межах наногетеросистеми незалежно від того чи середовища обмежені, чи напівобмежені, та чи вони є дво- чи трикомпонентними матеріалами, енергії обмежених фононів у них визначаються тими ж частотами, що й у масивних матеріалах

$$\Omega_j = \hbar\omega_{Lj}, \quad \Omega_{j\ell} = \hbar\omega_{Lj\ell}, \quad (\ell = 1, 2). \quad (14)$$

Розклад потенціалу поля поляризації j -го середовища у двовимірний ряд Фур'є:

$$\Phi_j(\boldsymbol{\rho}, z) = \sum_{\lambda, \ell, \mathbf{q}} \Phi_{j\ell\lambda}(\mathbf{q}, z) e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}}, \quad (15)$$

з наступним переходом від фур'є-компонент спочатку до нормальних узагальнених координат і імпульсів, а потім до операторів чисел заповнення за відомою квантово-механічною схемою [16] визначає гамільтоніан обмежених фононів у моделі трикомпонентного матеріалу

$$\hat{H}_L = \sum_{j, \ell, \lambda, \mathbf{q}} \Omega_{j\ell} (b_{j\ell\lambda\mathbf{q}}^+ b_{j\ell\lambda\mathbf{q}} + 1/2). \quad (16)$$

Зауважимо, що тут і далі математичні викладки приводяться для більш загальної трикомпонентної моделі, в якій індекс ℓ набуває значення 1 і 2. Усі формули справедливі й для двокомпонентної моделі при $\ell = 1$. Оператори $b_{j\ell\lambda\mathbf{q}}^+, b_{j\ell\lambda\mathbf{q}}$ задовольняють бозонні комутаційні співвідношення.

Нормалізацію мод і квантування поля L -фононів у моделі діелектричного континууму виконано Морі й Андо [19] для бінарних гетеросистем, а

для потрійних – у роботах [17, 20]. Отже, з урахуванням відомих з робіт [17, 20] потенціалів полів поляризації окремих j -х середовищ, гамільтоніан взаємодії ($\hat{H}_{e-L} = -e\Phi(\mathbf{r})$) електронів зі всіма гілками (λ) обмежених і напівобмежених фононів всієї гетеросистеми у зображенні вторинного квантування за фононними змінними можна подати у вигляді

$$\begin{aligned} \hat{H}_{e-L} &= \\ &= - \sum_{j,\ell,\lambda,\mathbf{q}} \sqrt{\frac{8\pi\hbar e^2 d_j \left(\frac{\partial \varepsilon_j(\omega)}{\partial \omega}\bigg|_{\omega=\omega_{Lj\ell}}\right)^{-1}}{S(\pi^2 \lambda^2 + q^2 d_j^2)}} \times \\ &\times \left\{ \begin{array}{l} \cos \left[\pi \lambda \left(\frac{z - z_{j-1}}{d_j} - \frac{1}{2} \right) \right], \lambda = 1, 3, 5, \dots \\ \sin \left[\pi \lambda \left(\frac{z - z_{j-1}}{d_j} - \frac{1}{2} \right) \right], \lambda = 2, 4, 6, \dots \end{array} \right\} \times \\ &\times H_j(z) e^{i\mathbf{q}\rho} (b_{j\ell\lambda\mathbf{q}} + b_{j\ell\lambda\mathbf{q}}^+). \end{aligned} \quad (17)$$

Тут $H_j(z)$ – уведена в роботі [19] функція

$$H_j(z) = \begin{cases} 1, & \text{якщо } z \text{ належить до } j\text{-го шару,} \\ 0, & \text{в інших випадках,} \end{cases} \quad (18)$$

\mathbf{q} – двовимірний квазіімпульс фононів; d_j – товщина j -ї області гетеросистеми.

Здійснивши в гамільтоніані (17) перехід до зображення вторинного квантування на квантованій хвильовій функції електронів (10), отримується гамільтоніан $e-L$ взаємодії у зображенні чисел заповнення за електронними і фононними змінними

$$\begin{aligned} \hat{H}_{e-L} &= \sum_{n,n'} \sum_{j,\ell} \sum_{\lambda,\mathbf{q}} F_{n'n}^{j\lambda}(\ell, \mathbf{q}) \times \\ &\times a_{n'\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{n\mathbf{k}} (b_{j\ell\lambda\mathbf{q}} + b_{j\ell\lambda\mathbf{q}}^+). \end{aligned} \quad (19)$$

Тут функції зв'язку мають вигляд

$$F_{n'n}^{j\lambda}(\ell, \mathbf{q}) = f_{n'n}^{j\lambda}(\ell) \frac{d_j}{\sqrt{S}} (\pi^2 \lambda^2 + q^2 d_j^2)^{-1/2}, \quad (20)$$

де величини

$$\begin{aligned} f_{n'n}^{j\lambda}(\ell) &= - \sqrt{\frac{8\pi\hbar e^2}{d_j} \left(\frac{\partial \varepsilon_j(\omega)}{\partial \omega}\bigg|_{\omega=\omega_{Lj\ell}}\right)^{-1}} \times \\ &\times \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \Psi_{jn'}^*(z) \Psi_{jn}(z) \times \\ &\times \left\{ \begin{array}{l} \cos \left[\pi \lambda \left(\frac{z - z_{j-1}}{d_j} - \frac{1}{2} \right) \right], \lambda = 1, 3, 5, \dots \\ \sin \left[\pi \lambda \left(\frac{z - z_{j-1}}{d_j} - \frac{1}{2} \right) \right], \lambda = 2, 4, 6, \dots \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (21)$$

1194

характеризують силу електрон-фононної взаємодії.

Інтеграл в (21), як видно з (6), містить прості тригонометричні й експоненційні функції, тому хоча він визначається точно аналітично, але не приводиться через громіздкість. Зауважимо, що електрон- I -фононна взаємодія тут не розглядається, оскільки ця важлива теоретична задача, поперше, вимагає значного збільшення об'єму роботи, що виходить за межі цієї статті, по-друге, добре відомо, що взаємодія електронів з I -фононами є нехтовно малою у широких квантових ямах, а отже для таких наносистем викладена тут теорія має самостійне значення.

2.3. Гамільтоніан електрон-фононної системи та електронна функція Гріна в ТБРТС

Отриманий гамільтоніан електрон-фононної системи в ТБРТС

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_L + \hat{H}_{e-L} \quad (22)$$

дозволяє аналітично розрахувати фур'є-образ електронної функції Гріна за правилами діаграмної техніки Фейнмана–Пайнса [16, 25] при довільній температурі (T) системи за умови, що середні числа заповнення електронних станів ($n_{\mathbf{k}} \ll 1$) малі, а фононних – визначаються розподілом Бозе–Ейнштейна

$$\nu_{j\ell} = \left(e^{\frac{\Omega_{j\ell}}{k_B T}} - 1 \right)^{-1}. \quad (23)$$

У цьому випадку фур'є-образ електронної функції Гріна визначається рівнянням Дайсона [16, 24]:

$$G_n(\mathbf{k}, E) = \{E - E_{n\mathbf{k}} - M_n(\mathbf{k}, E)\}^{-1}, \quad (24)$$

де внаслідок слабкості електрон-фононного зв'язку в масовому операторі $M_n(\mathbf{k}, E)$ достатньо обмежитись діаграмою однофононного наближення

$$\begin{aligned} M_n(\mathbf{k}, E) &= \sum_{j=1}^5 \sum_{n'=1}^N \sum_{\ell,\lambda,\mathbf{q}} f_{nn'}^{j\lambda*}(\ell) f_{n'n}^{j\lambda}(\ell) \times \\ &\times d_j^2 S^{-1} \left\{ \frac{1 + \nu_{j\ell}}{E - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \Omega_{j\ell} + i\eta} + \right. \\ &\left. + \frac{\nu_{j\ell}}{E - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \Omega_{j\ell} + i\eta} \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

Тут N – кількість енергетичних зон (рівнів) у потенціальних ямах наносистеми. Перехід від суми по двовимірному квазіімпульсу \mathbf{q} до інтегралів ($\sum_{\mathbf{q}} \Rightarrow (2\pi)^{-2} S \int \int d^2\mathbf{q}$) у полярній системі координат дозволяє виконати точний аналітичний розрахунок масового оператора (25) при $\mathbf{k} = 0$, що відповідає типовій експериментальній ситуації, коли електрони рухаються перпендикулярно до поверхні гетеросистеми. У результаті для $M_n(\mathbf{k} = 0, E)$ отримується

$$M_n(\mathbf{k}, E) = - \sum_{j=1}^5 \sum_{n'=1}^N \sum_{\lambda, \ell} \left(\frac{2\hbar^2}{m_n^* d_j^2} \right)^{-1} d_j^2 S^{-1} \times \\ \times f_{nn'}^{j\lambda*}(\ell) f_{n'n}^{j\lambda}(\ell) \int_0^\infty \frac{dx}{\pi^2 \lambda^2 + \left(\frac{\hbar^2}{2m_n^* d_j^2} \right)^{-1} x} \times \\ \times \left\{ \frac{1 + \nu_{j\ell}}{x + E_{n'} + \Omega_{j\ell} - E + i\eta} + \frac{\nu_{j\ell}}{x + E_{n'} - \Omega_{j\ell} - E + i\eta} \right\}, \quad (\eta \rightarrow +0). \quad (26)$$

З урахуванням слабкості електрон-фононного зв'язку, покладаючи у масовому операторі $E = E_n$, та виділяючи в ньому дійсну

$$\Delta_n = \Delta_{nn} + \sum_{n' \neq n} \Delta_{nn'} = \\ = \text{Re} M_{nn}(E_n) + \sum_{n' \neq n} \text{Re} M_{nn'}(E_n), \quad (27)$$

й уявну

$$\Gamma_n = \Gamma_{nn} + \sum_{n' \neq n} \Gamma_{nn'} = \\ = 2\text{Im} M_{nn}(E_n) + 2 \sum_{n' \neq n} \text{Im} M_{nn'}(E_n), \quad (28)$$

частини, які описують відповідно повні (Δ_n, Γ_n) зміщення й затухання n -ї зони та їх парціальні внутрішньозонні (Δ_{nn}, Γ_{nn}) та міжзонні ($\Delta_{nn' \neq n}, \Gamma_{nn' \neq n}$) складові, внаслідок точного аналітичного інтегрування отримується

$$\Delta_n = \Delta_n^+ + \Delta_n^- = \\ = (\Delta_{nn}^+ + \sum_{n' \neq n} \Delta_{nn'}^+) + (\Delta_{nn}^- + \sum_{n' \neq n} \Delta_{nn'}^-), \quad (29)$$

$$\Gamma_n = \Gamma_n^+ + \Gamma_n^- = \\ = (\Gamma_{nn}^+ + \sum_{n' \neq n} \Gamma_{nn'}^+) + (\Gamma_{nn}^- + \sum_{n' \neq n} \Gamma_{nn'}^-), \quad (30)$$

де

$$\Delta_n^\pm = - \sum_{n'=1}^N \sum_{j, \lambda, \ell} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_n^* d_j^2} \right)^{-1} f_{nn'}^{j\lambda*}(\ell) f_{n'n}^{j\lambda}(\ell) \times \\ \times \ln \left[\frac{(\pi\lambda\hbar)^2}{2m_n^* d_j^2 |E_{n'} - E_n \pm \Omega_{j\ell}|} \right] \left\{ \frac{1 + \nu_{j\ell}}{\nu_{j\ell}} \right\} \times \\ \times \left\{ \frac{\Theta(E_{n'} - E_n \pm \Omega_{j\ell})}{(\pi\lambda)^2 - |E_{n'} - E_n \pm \Omega_{j\ell}| \left(\frac{\hbar^2}{2m_n^* d_j^2} \right)^{-1}} + \frac{\Theta(E_n - E_{n'} \pm \Omega_{j\ell})}{(\pi\lambda)^2 + |E_{n'} - E_n \pm \Omega_{j\ell}| \left(\frac{\hbar^2}{2m_n^* d_j^2} \right)^{-1}} \right\}, \quad (31)$$

$$\Gamma_n^\pm = \sum_{n'=1}^N \sum_{j, \lambda, \ell} \left(\frac{4\hbar^2}{m_n^* d_j^2} \right)^{-1} f_{nn'}^{j\lambda*}(\ell) f_{n'n}^{j\lambda}(\ell) \times \\ \times \frac{\Theta(E_n - E_{n'} \pm \Omega_{j\ell}) \left\{ \frac{1 + \nu_{j\ell}}{\nu_{j\ell}} \right\}}{(\pi\lambda)^2 + |E_{n'} - E_n \pm \Omega_{j\ell}| \left(\frac{\hbar^2}{2m_n^* d_j^2} \right)^{-1}}. \quad (32)$$

Розвинена тут теорія дозволяє виконувати розрахунок і аналіз перенормованих взаємодією з обмеженими L -фононами параметрів електронного спектра в ТБРТС при заданих фізичних і геометричних параметрах системи.

3. Аналіз температурної і концентраційної залежностей параметрів електронного спектра на прикладі ТБРТС з GaAs-ямами і Al_xGa_{1-x}As-бар'єрами

Розрахунок зміщень і затухання, як параметрів електронного спектра, виконувався на прикладі ТБРТС GaAs/Al_xGa_{1-x}As, яка є активною зоною експериментально досліджуваних ККД [21, 22]. Фізичні параметри складових елементів системи наведено в таблиці.

На рис. 2, a - e наведено залежності спектральних параметрів електронів від положення (a_1) внутрішнього бар'єра між зовнішніми для двох ТБРТС з однаковими сумарними розмірами обох ям ($a = a_1 + a_2 = 13,9$ нм) та при фіксованих розмірах внутрішнього бар'єра ($b = 1,13$ нм), але з різними концентраціями Al в усіх бар'єрах: A) $x = 0,15$, з малим потенціальним бар'єром $U = 120$ меВ, B) $x = 0,45$, з великим бар'єром $U = 320$ меВ при $T = 0$ К.

З рис. 2 видно, що незалежно від концентрації (x) Al у шарах-бар'єрах РТС залежність усіх спектральних параметрів електронів від розміру (a_1)

Фізичні параметри складових елементів наносистеми

	ε_∞	$\hbar\omega_{L1}$, меВ	$\hbar\omega_{T1}$, меВ	$\hbar\omega_{L2}$, меВ	$\hbar\omega_{T2}$, меВ	m, m_e	U , меВ
GaAs	10,89	36,25	33,29			0,067	0,6 (1266x + 260x ²)
Al _x Ga _{1-x} As	10,89 - 2,73x	36,25 - 6,553x + 1,793x ²	33,29 - 0,643x - 1,163x ²	44,63 + 8,783x - 3,323x ²	44,63 + 0,553x - 0,303x ²	0,067 + 0,083x	

першого шару-ями якісно подібні й симетричні відносно середини $a_1 = a/2$ ТБРТС. У ТБРТС (А) з мілкими ямами ($x = 0,15$) є три квазістаціонарних стани, з яких енергії (E_1, E_2) двох робочих станів розташовані нижче, ніж відповідні енергії у ТБРТС (В) з глибокими ямами ($x = 0,45$) з чотирма квазістаціонарними станами (рис. 2 а, е).

Енергія квантового переходу між двома найнижчими рівнями ($E_{21} = E_2 - E_1$) з поглинанням електромагнітного поля нелінійно залежить від розміру першої ями a_1 . При збільшенні a_1 від нуля до величини порядку $a/4$ величина E_{21} збільшується, досягаючи максимального значення: А) $\max E_{21} = 48$ меВ, В) $\max E_{21} = 76$ меВ. З подальшим збільшенням a_1 величина E_{21} зменшується, досягаючи мінімального значення: А) $\min E_{21} = 29$ меВ, В) $\min E_{21} = 20$ меВ при $a_1 = a/2$.

Повне від'ємне зміщення (Δ_1) першого робочого рівня (рис. 2, б, д) за рахунок взаємодії електронів з віртуальними фононами зі збільшенням a_1 в інтервалі $0 \leq a_1 \leq a/2$ зменшується. При цьому його величина майже при всіх значеннях a_1 , в основному, формується внутрішньозонною взаємодією (Δ_{11}), а парціальні внески електронної взаємодії з фононами через інші зони є досить малими, і лише в околі $a_1 \approx a/2$ їх сумарний внесок у зміщення ($\Delta_{1\Sigma} = \sum_{n' \neq n} \Delta_{1n'}$) сумірний з величиною Δ_{11} .

Повне від'ємне зміщення (Δ_2) другого робочого рівня (рис. 2, в, з) зі збільшенням a_1 в інтервалі $0 \leq a_1 \leq a/4$ зменшується, в інтервалі $a/4 \leq a_1 \leq a/3$ збільшується, а в інтервалі $a/3 \leq a_1 \leq a/2$ є слабо нелінійним. При цьому в інтервалі $0 \leq a_1 \leq a/3$ для системи А (рис. 2, в) сумарний внесок ($\Delta_{2\Sigma}$) міжзонної взаємодії у зміщення Δ_2 порівняний з внеском Δ_{22} внутрішньозонної взаємодії, а в інтервалі $a/3 \leq a_1 \leq a/2$ зміщення $\Delta_{2\Sigma}$ майже вдвічі переважає Δ_{22} . Для системи В (рис. 2, з) внески Δ_{22} і $\Delta_{2\Sigma}$ у величину Δ_2 сумірні для всіх значень a_1 .

Що ж до затухання Γ_2 (рис. 2, в, з), то при $T = 0$ К воно виникає лише в другому робочому стані ($\Gamma_2 = \Gamma_{21}$) внаслідок міжзонної взаємодії електронів цього стану через віртуальні фонони з електронами першого (основного) стану за умови $E_2 > E_1 + \Omega_{j\ell}$. Звичайно, внутрішньозонна й міжзонна взаємодії електронів нижніх (зокрема основного) станів через фонони з електронами вищих збуджених станів не приводять до затухання у відповідності з фізичними міркуваннями.

Температурна залежність спектральних параметрів, як видно з масового оператора (26), визначається середніми значеннями чисел заповнення (ν) фононних станів у процесах електрон-фононної взаємодії з випромінюванням (перший доданок масового оператора) і поглинанням (другий доданок масового оператора) фононів. На рис. 3, а-е наведено еволюцію повних $\Delta_n^T = \Delta_n + \Delta_n(T)$ та парціальних $\Delta_{nn}^T = \Delta_{nn} + \Delta_{nn}(T)$, $\Delta_{n\Sigma}^T = \Delta_{n\Sigma} + \Delta_{n\Sigma}(T)$ зміщень і повних $\Gamma_n^T = \Gamma_n + \Gamma_n(T)$ та парціальних $\Gamma_{nn}^T = \Gamma_{nn} + \Gamma_{nn}(T)$, $\Gamma_{n\Sigma}^T = \Gamma_{n\Sigma} + \Gamma_{n\Sigma}(T)$ ширин зі змінною положення (a_1) внутрішнього бар'єра відносно зовнішніх бар'єрів ТБРТС при температурі $T = 300$ К.

З рис. 3, а-е видно, що внески реальних фононів у величини повних (Δ_n^T) і парціальних зміщень та повних (Γ_n^T) і парціальних ширин при $T = 300$ К сумірні з внесками (Δ_n) віртуальних фононів при $T = 0$ К. Якісна залежність цих величин від положення внутрішнього бар'єра (a_1) також залишається подібною до тієї, що й при $T = 0$ К. При цьому, незалежно від концентрації (x) та величини a_1 , зі збільшенням температури до 300 К абсолютні величини усіх перенормуючих спектральних параметрів зросли по абсолютній величині: у системі А трохи менше, ніж у системі В. Варто ще зазначити, що при відмінній від нуля температурі за рахунок процесів поглинання реальних фотонів (оскільки $\nu \neq 0$) виникло затухання не лише у збудженому, а й в основному електронному стані (рис. 3, в, з).

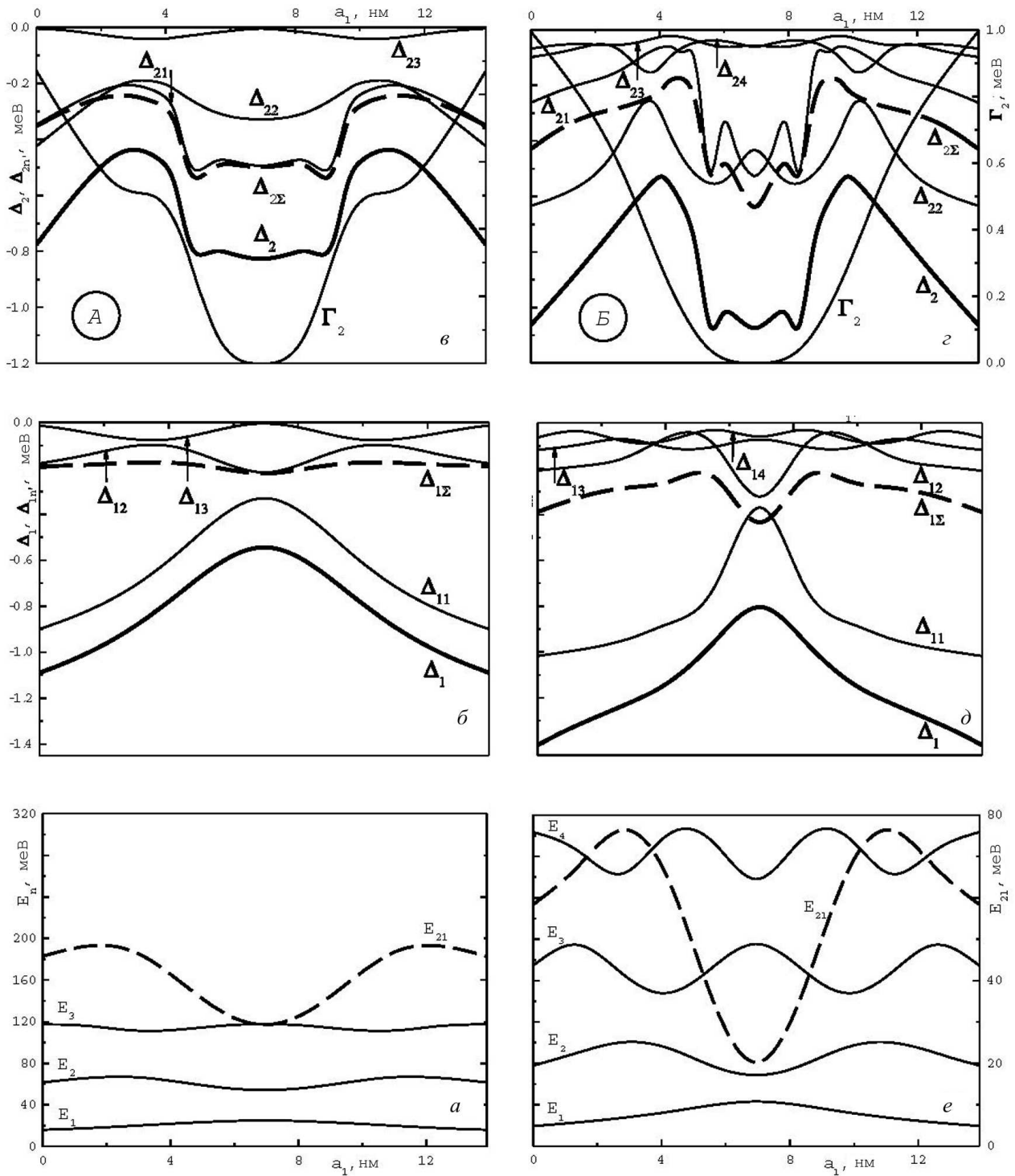


Рис. 2. Залежності спектральних параметрів електронів від положення (a_1) внутрішнього бар'єра між зовнішніми бар'єрами ТБРС при $T = 0$ К

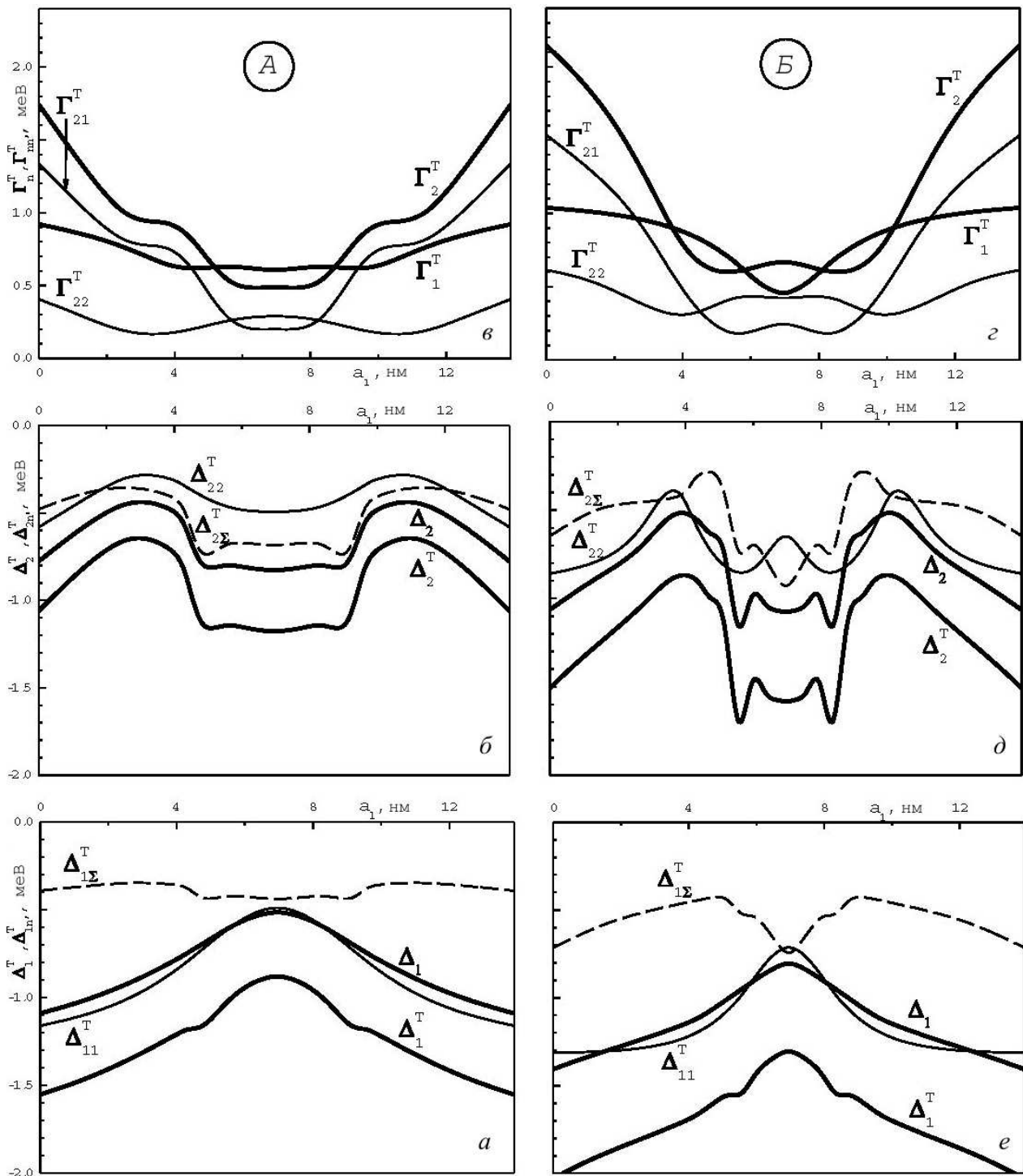


Рис. 3. Залежності спектральних параметрів електронів від положення (a_1) внутрішнього бар'єра між зовнішніми бар'єрами ТБРТС при $T = 300$ К

4. Основні результати і висновки

1. Вперше отримано гамільтоніан системи електронів, що взаємодіють з обмеженими поляризаційними фононами у наноТБРТС з трикомпонентними бар'єрами у зображенні вторинного квантування за всіма змінними.

2. Методом температурних функцій Гріна розраховано й проаналізовано перенормовані фононами зміщення й затухання двох найнижчих (робочих) електронних станів у ТБРТС GaAs/Al_xGa_{1-x}As при $T = 0$ К, $T = 300$ К.

3. Показано, що незалежно від температури та концентрації Al у бар'єрах зі зміною конфігурації положення внутрішнього бар'єра еволюція затухання та від'ємні зміщення електронних станів є нелінійними.

4. Розвинений підхід дозволяє врахувати й інші механізми взаємодії електронів (міжелектронну, з інтерфейсними поляризаційними та акустичними фононами, з постійними електричними та високочастотними електромагнітними полями). Побудована теорія з урахуванням основних механізмів взаємодії електронів при їх тунелюванні крізь відкриті багатопарові РТС дозволить не лише детально вивчити фізичні явища у наногетеростемах, а й оптимізувати робочі характеристики ККД, ККЛ та інших наноприладів.

1. J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtori, A.L. Hutchinson, and A.Y. Cho, *Science* **264**, 533 (1994).
2. J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, D.L. Sivco, A.L. Hutchinson, and A.Y. Cho, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 538 (1995).
3. C. Gmachl, F. Capasso, D.L. Sivco, and A.Y. Cho, *Rep. Prog. Phys.* **64**, 1533 (2001).
4. D. Hofstetter, M. Beck, and J. Faist, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 2683 (2002).
5. L. Gendron, M. Carras, A. Huynh, V. Ortiz, C. Koeniguer, and V. Berger, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 2824 (2004).
6. F.R. Giorgetta, E. Baumann, D. Hofstetter, C. Manz, Q. Yang, K. Köhler, and M. Graf, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 111115 (2007).
7. K. Ning, Q-U. Liu, L. Lu *et al.*, *Chin. Phys. Lett.* **27**, 12850 (2010).
8. В.Ф. Елєсин, Ю.В. Копаєв, *ЖЭТФ* **123**, 1308 (2003).
9. А.Б. Пашковский, *Письма ЖЭТФ* **89**, 32 (2009).
10. М.В. Ткач, Ю.О. Сети, *Укр. Фіз. Журн.* **58**, 182 (2013).
11. Г.Г. Зегря, Н.В. Ткач, И.В. Бойко, Ю.А. Сети, *ФТТ* **55**, 2067 (2013).
12. M.V. Tkach, Ju.O. Seti, I.V. Boyko, and O.M. Voitsekhivska, *Rom. Rep. Phys.* **65**, 1443 (2013).

13. F.R. Giorgetta *et al.*, *IEEE J. Quant. Electr.* **45**, 1039 (2009).
14. S. Yarlagadda, *Int. J. Mod. Phys. B* **15**, 3529 (2001).
15. М. Ткач, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mykhalyova, and R. Fartushynsky, *Phys. Status Solidi B* **225**, 331 (2001).
16. М.В. Ткач, *Квазічастинки у наногетеростемах. Квантові точки та дроти* (Рута, Чернівці, 2003).
17. X. Gao, D. Botez, and I. Knezevic, *J. Appl. Phys.* **103**, 073101 (2008).
18. J.G. Zhu and S.L. Ban, *Eur. Phys. J. B* **85**, 140 (2012).
19. N. Mori and T. Ando, *Phys.Rev. B* **40**, 6175 (1989).
20. K.W. Kim and M.A. Stroschio, *Appl. Phys. J.* **68**, 6289 (1990).
21. В.Н. Wu, J.C. Cao, G.Q. Xia, and H.C. Liu, *Eur. Phys. J. B* **33**, 9 (2003).
22. H. Luo, H.C. Liu, C.Y. Song, and Z.R. Wasilewski, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 231103 (2005).
23. C.H. Yu *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 022102 (2010).
24. А.С. Давыдов, *Квантовая механика* (Наука, Москва, 1973).
25. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (ГИФМЛ, Москва, 1962).

Одержано 16.02.14

Н.В. Ткач, Ю.А. Сети, Ю.Б. Гринишин

ВЛИЯНИЕ ОГРАНИЧЕННЫХ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ФОНОНОВ НА ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ТРЕХБАРЬЕРНОЙ АКТИВНОЙ ЗОНЫ КВАНТОВОГО КАСКАДНОГО ДЕТЕКТОРА

Резюме

В модели эффективных масс и прямоугольных потенциалов для электронов и в модели поляризационного континуума для ограниченных фононов в трехбарьерной резонансно-туннельной наноструктуре получен гамільтоніан електрон-фононної системи в представленні чисел заповнення по всім перемінним. Методом функцій Гріна розраховано перенормований спектр електронів в трехбарьерной резонансно-туннельной наноструктуре на основе GaAs-ям и Al_xGa_{1-x}As-барьеров при разных значениях концентрации (x) Al. Установлено, что при изменении температуры от 0 до 300 К, независимо от концентрации Al, с изменением геометрической конфигурации трехбарьерной резонансно-туннельной наноструктуры ширины обоих нижних (робочих) квазистационарных состояний увеличиваются, а энергии смещаются в низкоэнергетическую область. Ширины и смещения оказались сильно нелинейными функциями в зависимости от расположения внутреннего барьера в трехбарьерной резонансно-туннельной наноструктуре.

M. V. Tkach, Ju. O. Seti, Ju. V. Grinyshyn

INFLUENCE OF CONFINED
POLARIZATION PHONONS ON THE ELECTRON
SPECTRUM IN THE THREE-BARRIER ACTIVE
ZONE OF A QUANTUM CASCADE DETECTOR

S u m m a r y

The Hamiltonian of an electron-phonon system in the second-quantization representation for all variables has been obtained. The models of effective mass and rectangular potentials for electrons and the polarization continuum model for confined phonons in a three-barrier resonant tunneling nanostructure

are used. In the framework of the Green's function method, the phonon-renormalized electron spectra are calculated for a three-barrier resonant tunneling nanostructure composed of GaAs wells and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ barriers with various Al contents x 's. Irrespective of the Al content, the temperature-induced variations in the geometrical configuration of the three-barrier resonant tunneling nanostructure within the temperature interval from 0 to 300 K are found to increase the widths of both lower (working) quasi-stationary states and decrease their energies. The widths and the shifts of the states turned out to be strongly nonlinear functions depending on the position of the internal barrier in the three-barrier resonant tunneling nanostructure.