

Ю.О. СЕТІ, М.В. ТКАЧ, М.В. ПАНЬКІВ

Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича
(Вул. Коцюбинського, 2, Чернівці 58021; e-mail: ktf@chnu.edu.ua)

РОЛЬ ІНТЕРФЕЙСНИХ ФОНОНІВ У ФУНКЦІОНУВАННІ БЕЗІНЖЕКТОРНОГО КВАНТОВОГО КАСКАДНОГО ЛАЗЕРА

УДК 538.958

У моделі прямокутного потенціального профілю та ефективної маси електрона і в моделі діелектричного континууму для інтерфейсних фононів отримано гамільтоніан електрон-фононної системи у двоямній резонансно-тунельній структурі у постійному електричному полі. Ця система відіграє роль окремого каскаду безінжекторного квантового каскадного лазера [1]. Методом температурних функцій Гріна розраховано перенормування параметрів електронного спектра при довільній температурі та показано, що, у відповідності з експериментом, смуга лазерного випромінювання зазнає розширення, але слабо змінюється зі збільшенням температури.

Ключові слова: резонансно-тунельна наноструктура, квантовий каскадний лазер, інтерфейсні фонони, електрон-фононна взаємодія, функція Гріна.

1. Вступ

З часу створення перших квантових каскадних лазерів (ККЛ) [2, 3] не припиняється інтенсивна робота дослідників, спрямована на вдосконалення робочих характеристик цих наноприладів. Уже створені й успішно функціонують ККЛ на основі різних напівпровідникових матеріалів (InGaAs/AlInAs, GaAs/AlGaAs, InAs/AlSb, InGaAs/AlAsSb, InGaAs/GaAsSb) і з різним геометричним дизайном. У результаті вдосконалення параметрів сучасних ККЛ загальна ідея їх роботи, в основному, не змінилася і залишилася такою ж як і найперших ККЛ. Вона полягає у тому, що наноприлад складається з певного числа однотипних каскадів (активна зона з інжектором), якими є багатопарові плоскі резонансно-тунельні структури (РТС). Електрони, тунелюючи крізь активну зону окремого каскаду, здійснюють квантові переходи між двома збудженими робочими рівнями з випромінюванням квантів електромагнітного поля. Для забезпечення інверсної заселеності, зазвичай, використовується трирівнева схема, в якій електрони з першого збудженого рівня, з народженням фонона у безвипромінювальному переході потрапляють в основний стан. Тунелюючи далі крізь інжектор вони потрапляють у наступний каскад ККЛ з енергією, яка відповідає дру-

гому збудженому стану вже цього каскаду. Належно підібрана величина напруженості постійного електричного поля здійснює синхронізацію роботи всіх каскадів.

У останні роки значна увага науковців приділяється експериментальному дослідженню так званих безінжекторних ККЛ [1, 4–7], які мають низку переваг перед ККЛ з інжекторами. Це – компактніші розміри, менші струми збудження, порівняна або іноді вища ефективність та ін. Робочі частоти цих наноприладів здатні охоплювати актуальну терагерцову область, яка перебиває як вікна прозорості атмосфери, так і частоти випромінювання багатьох молекул. Унікальні характеристики безінжекторних ККЛ роблять їх привабливими для різноманітних прикладних застосувань у військовій сфері, медицині, засобах комунікації, моніторингу навколишнього середовища та ін. Існуючі безінжекторні ККЛ уже функціонують у широкому температурному діапазоні, навіть трохи перевищуючи кімнатну температуру ($T \approx 300$ K), де суттєвими стають дисипативні процеси. Зокрема можна було б очікувати, що через залежність чисел заповнення фононів від температури, роль електрон-фононної взаємодії зростатиме з підвищенням температури середовища. Тому необхідно дослідити вплив фононної підсистеми на робочі параметри ККЛ, а отже й на смугу лазерного випромінювання.

© Ю.О. СЕТІ, М.В. ТКАЧ, М.В. ПАНЬКІВ, 2016

790

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2016. Т. 61, № 9

Як відомо, перші інжекторні [2, 3, 8] й безінжекторні [7, 9] ККЛ працювали при низьких температурах. Тому прикладні й фундаментальні дослідження були спрямовані на вивчення і покращення робочих параметрів цих наноприладів від їх фізичних і геометричних характеристик [7–17] безакцентування уваги на електрон-фононну взаємодію. З появою ККЛ, здатних функціонувати при високих температурах, значно зросла кількість робіт, присвячених дослідженню електрон-фононної взаємодії в РТС [10, 18–23]. Основою переважної більшість цих робіт була модель ефективних мас для електронів та діелектричного континууму для оптичних фононів, які, як показано ще Морі й Андо [24], поділяються на два типи: обмежені (L) та інтерфейсні (I). Гамільтоніан електрон-фононної системи у зображенні фононних чисел заповнення і в координатному за електронними змінними використовувався для дослідження ймовірностей квантових переходів між електронними станами за допомогою золотого правила Фермі. Перенормування електрон-фононної взаємодією спектральних параметрів (зміщення та розширення) смуги випромінювання ККЛ практично не вивчалось.

У пропонуваній роботі отримано гамільтоніан електрон-І-фононної системи у зображенні чисел заповнення за всіма змінними для двоямної РТС у постійному електричному полі. Це дозволило, застосовуючи метод температурних функцій Гріна, дослідити не лише затухання, а й зміщення трьох робочих електронних станів двоямного каскаду безінжекторного ККЛ. Детально вивчено вплив різних механізмів електрон-І-фононної взаємодії на спектральні параметри електронних станів та смугу випромінювання у залежності від геометричної конфігурації двоямної РТС та напруженості постійного електричного поля при криогенній і скінченній температурах.

2. Гамільтоніан та функція Гріна системи електронів, що взаємодіють з інтерфейсними фононами у двоямній РТС у електричному полі

У декартовій системі координат розглядається плоска двоямна РТС у однорідному електричному полі напруженості F (рис. 1), як окремий каскад безінжекторного ККЛ [1]. Теорія взаємодії електронів з оптичними інтерфейсними фононами

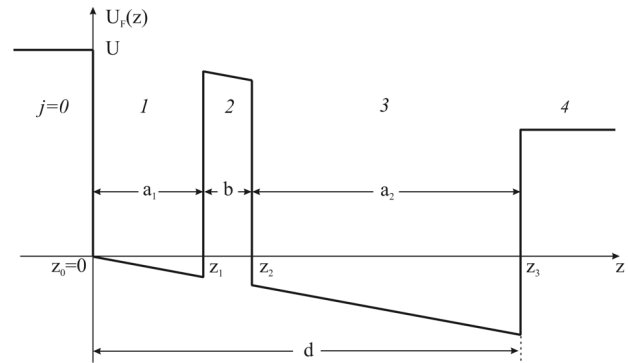


Рис. 1. Енергетичний профіль двоямної РТС у постійному електричному полі

будується у моделі закритої РТС, де для електрона існує повна система ортонормованих хвильових функцій, та у моделі прямокутних потенціалів і ефективних мас електрона, з урахуванням непараболічного закону дисперсії зони провідності:

$$U(z) = \begin{cases} U, & \text{в області } j = 0, 2, 4; \\ 0, & \text{в області } j = 1, 3; \end{cases} \quad (1)$$

$$m(z, E) = \begin{cases} m_b(E) = m_b \left(1 - \frac{U-E}{E_{gb}}\right), & j = 0, 2, 4; \\ m_w(E) = m_w \left(1 + \frac{E}{E_{gw}}\right), & j = 1, 3. \end{cases} \quad (2)$$

Тут E – енергія електрона; m_w, m_b – ефективні маси електрона у ямах та бар'єрах наносистеми без урахування непараболічності; E_{gw}, E_{gb} – ширини заборонених зон напівпровідникових матеріалів ям і бар'єрів.

Унаслідок дії постійного електричного поля напруженості F на двоямну РТС (з лінійним розміром d) прямокутний потенціальний рельєф деформується так, що в кожній області наносистеми він лінійно спадає вздовж осі oz :

$$U_F(z) = U(z) - eF\{z[\Theta(z) - \Theta(z-d)] + d\Theta(z-d)\}. \quad (3)$$

Для знаходження енергетичного спектра та хвильових функцій електрона у досліджуваній РТС розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m(z, E)} \nabla + U_F(z)\right] \Psi_{nk}(\mathbf{r}) = E_{nk} \Psi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (4)$$

шукається у вигляді

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ik\rho_e}}{\sqrt{S}} \Psi_n(z) \quad (\mathbf{r} = \rho_e + z\mathbf{n}_z), \quad (5)$$

де \mathbf{k} і ρ_e – квазіімпульс і радіус-вектор електрона в площині xOy , S – площа основної області у цій площині, \mathbf{n}_z – одиничний вектор вздовж осі Oz .

У результаті отримується повна енергія електрона:

$$E_{n\mathbf{k}} = E_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_n}, \quad (6)$$

як сума енергії поздовжнього руху (E_n) та кінетичної енергії у площині xOy зі скорельованою по РТС ефективною масою електрона, як в роботі [25],

$$\frac{1}{m_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\Psi_n(z)|^2}{m(z, E_n)} dz. \quad (7)$$

Спектр енергій E_n і хвильові функції $\Psi_n(z)$ визначаються одномірним рівнянням Шредінгера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, E)} \frac{d}{dz} + U_F(z) \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z). \quad (8)$$

точними розв'язками якого в кожній області (j) РТС є функції

$$\Psi_n(z) = \begin{cases} \Psi_n^{(j)}(z) = A_n^{(j)} e^{\chi_n^{(j)} z}, & j = 0, \\ \Psi_n^{(j)}(z) = A_n^{(j)} \text{Ai}[\xi_n^{(j)}(z)] + \\ + B_n^{(j)} \text{Bi}[\xi_n^{(j)}(z)], & j = 1, 2, 3, \\ \Psi_n^{(j)}(z) = A_n^{(j)} e^{-\chi_n^{(j)} z}, & j = 4, \end{cases} \quad (9)$$

де

$$\begin{aligned} \chi_n^{(0)} &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_b(E_n)(U - E_n)}; \\ \chi_n^{(4)} &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_b(E_n)(U - E_n - V)}; \end{aligned} \quad (10)$$

$$V = eFd;$$

$$\xi_n^{(j)}(z) = \begin{cases} -\left(\frac{2m_w(E_n)Vd^2}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(\frac{E_n}{V} + \frac{z}{d}\right), & j = 1, 3; \\ -\left(\frac{2m_b(E_n)Vd^2}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(\frac{E_n - U}{V} + \frac{z}{d}\right), & j = 2; \end{cases}$$

$\text{Ai}(\xi)$, $\text{Bi}(\xi)$ – функції Ейрі першого та другого роду відповідно.

Умови неперервності хвильової функції та потоку її густини на всіх межах поділу середовищ:

$$\Psi_n^{(j)}(z_j) = \Psi_n^{(j+1)}(z_j); \quad (11)$$

$$\frac{1}{m_j(E_n)} \frac{d\Psi_n^{(j)}(z)}{dz} \Big|_{z=z_j} = \frac{1}{m_{j+1}(E_n)} \frac{d\Psi_n^{(j+1)}(z)}{dz} \Big|_{z=z_j}$$

разом з умовою нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(z) \Psi_{n'}(z) dz = \delta_{nn'} \quad (12)$$

однозначно визначають усі невідомі коефіцієнти $A_n^{(j)}$, $B_n^{(j)}$, функції $\Psi_n^{(j)}$, енергії E_n , а отже і повний енергетичний спектр $E_{n\mathbf{k}}$ та повну ортонормовану систему хвильових функцій $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.

Здійснивши перехід від координатного представлення гамільтоніана електронів до представлення вторинного квантування на квантованій хвильовій функції:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{n, \mathbf{k}} \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \hat{a}_{n\mathbf{k}} \quad (13)$$

з ферміонними операторами знищення $\hat{a}_{n\mathbf{k}}$ (народження $\hat{a}_{n\mathbf{k}}^+$) електронних станів, гамільтоніан електронів у зображенні чисел заповнення отримується у вигляді

$$\hat{H}_e = \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) H_e(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{n\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} \hat{a}_{n\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{n\mathbf{k}}. \quad (14)$$

У моделі діелектричного континууму [18–22, 24, 26, 27] потенціал поля поляризації $\Phi(\mathbf{r})$ та спектр інтерфейсних фононів визначаються рівнянням

$$\varepsilon_j(\omega) \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{при} \quad \varepsilon_j(\omega) \neq 0, \quad (15)$$

де $\varepsilon_j(\omega)$ – діелектрична проникність j -го середовища наносистеми, яка задається співвідношенням Лідейна–Сакса–Теллера

$$\varepsilon_j(\omega) = \varepsilon_{j\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{Lj}^2}{\omega^2 - \omega_{Tj}^2}. \quad (16)$$

Тут $\varepsilon_{j\infty}$ – високочастотна діелектрична проникність, ω_{Lj} , ω_{Tj} – частоти поздовжніх (L) та поперечних (T) коливань масивного матеріалу, з якого утворений j -й шар наносистеми.

Розв'язок рівняння (15) шукається у вигляді

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{j=0}^4 \sum_{\mathbf{q}} C(\mathbf{q}) \varphi_j(\mathbf{q}, z) e^{i\mathbf{q}\rho}, \quad (17)$$

де

$$\varphi_j(\mathbf{q}, z) = \alpha_j e^{-qz} + \beta_j e^{qz}, \quad (18)$$

\mathbf{q} , ρ – двовимірні вектори.

Функції φ_j задовольняють систему рівнянь,

$$\begin{cases} \varphi_j(q, z_j) = \varphi_{j+1}(q, z_j); \\ \varepsilon_j(\omega) \frac{\partial \varphi_j(q, z)}{\partial z} \Big|_{z=z_j} = \varepsilon_{j+1}(\omega) \frac{\partial \varphi_{j+1}(q, z)}{\partial z} \Big|_{z=z_j}, \end{cases} \quad (19)$$

які отримуються з умов неперервності напруженості й індукції поля поляризації на межах ($j = 0-3$) поділу РТС та з вимоги зникнення фононного поля на безмежності

$$\varphi_0(q, z)|_{z \rightarrow -\infty} = \varphi_4(q, z)|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \quad (20)$$

З системи рівнянь (19), (20) однозначно знаходяться коефіцієнти (α_j, β_j) , а отже відомий і потенціал поля поляризації $\Phi(\mathbf{r})$ інтерфейсних фононів.

Умова нетривіальності розв'язку системи (19) методом трансфер-матриці [28] визначає дисперсійне рівняння

$$\prod_{j=0}^3 \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{\varepsilon_b(\Omega)}{\varepsilon_\omega(\Omega)}\right) & \left(1 - \frac{\varepsilon_b(\Omega)}{\varepsilon_\omega(\Omega)}\right) e^{-2qz_j} \\ \left(1 - \frac{\varepsilon_b(\Omega)}{\varepsilon_\omega(\Omega)}\right) e^{2qz_j} & \left(1 + \frac{\varepsilon_b(\Omega)}{\varepsilon_\omega(\Omega)}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

з якого знаходиться спектр енергій ($\Omega_{\lambda\mathbf{q}} = \hbar\omega_{\lambda\mathbf{q}}$) інтерфейсних фононів гілки λ з квазіімпульсом \mathbf{q} . У невиродженому випадку кількість гілок фононних енергій збігається з подвоєним числом усіх меж між середовищами наносистеми.

Здійснивши квантування поля поляризації за допомогою квантово-механічною схемою з переходом від фур'є-компонент до нормальних узагальнених координат і імпульсів [24, 26, 27], а потім до бозонних операторів народження ($b_{\lambda\mathbf{q}}^+$) і знищення ($b_{\lambda\mathbf{q}}$), отримується гамільтоніан інтерфейсних фононів:

$$\hat{H}_I = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \Omega_{\lambda\mathbf{q}} (\hat{b}_{\lambda\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\lambda\mathbf{q}} + 1/2) \quad (\lambda = 1-8). \quad (22)$$

Гамільтоніан електрон-фононної взаємодії у координатному представленні за електронними змінними визначається потенціалом поля поляризації інтерфейсних фононів:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{e-I} &= -e\Phi(\boldsymbol{\rho}, z) = \\ &= - \sum_{j=0}^4 \sum_{\lambda\mathbf{q}} eC_\lambda(q) \varphi_{\lambda j}(q, z) e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}} (\hat{b}_{\lambda\mathbf{q}} + \hat{b}_{\lambda-\mathbf{q}}^+). \end{aligned} \quad (23)$$

Перехід до представлення електронних чисел заповнення здійснюється за допомогою квантованої хвильової функції (13). У результаті отримується гамільтоніан електрон-фононної взаємодії у представленні чисел заповнення за електронними і фононними змінними системи:

$$\hat{H}_{e-I} = \sum_{\substack{n', n \\ \lambda, \mathbf{q}}} F_{n'n}(\lambda, \mathbf{q}) \hat{a}_{n'\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{n\mathbf{k}} (\hat{b}_{\lambda\mathbf{q}} + \hat{b}_{\lambda-\mathbf{q}}^+), \quad (24)$$

де функції зв'язку мають вигляд

$$\begin{aligned} F_{n'n}(\lambda, q) &= - \sqrt{\frac{4\pi e^2 \hbar}{qSN(s, q)}} \sum_{j=0}^4 \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \Psi_{n'}^{(j)*}(z) \Psi_n^{(j)}(z) \times \\ &\times [\alpha_j(\lambda, q) e^{-qz} + \beta_j(\lambda, q) e^{qz}] \end{aligned} \quad (25)$$

і містять нормувальний коефіцієнт

$$\begin{aligned} N(s, q) &= \sum_{j=0}^4 \frac{\partial \varepsilon_j(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_{\lambda\mathbf{q}}} [\beta_j^2(\lambda, q) (e^{2qz_j} - \\ &- e^{2qz_{j-1}}) - \alpha_j^2(\lambda, q) (e^{-2qz_j} - e^{-2qz_{j-1}})]. \end{aligned} \quad (26)$$

Отриманий гамільтоніан електрон-фононної системи

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_I + \hat{H}_{e-I} \quad (27)$$

дозволяє розрахувати фур'є-образ електронної функції Гріна за правилами діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса [27, 29] при скінченній температурі.

При малих концентраціях електронів та слабкому їх зв'язку з інтерфейсними фононами фур'є-образ функції Гріна визначається рівнянням Дайсона:

$$G_n(\mathbf{k}, \hbar\omega) = [\hbar\omega - E_{n\mathbf{k}} - M_n(\hbar\omega, \mathbf{k})]^{-1} \quad (28)$$

з масовим оператором $M_n(\hbar\omega, \mathbf{k})$, розрахованим у однофононному наближенні ($\eta \rightarrow +0$):

$$\begin{aligned} M_n(\hbar\omega, \mathbf{k}) &= \sum_{n'\lambda\mathbf{q}} F_{nn'}^*(\lambda, \mathbf{q}) F_{n'n}(\lambda, \mathbf{q}) \times \\ &\times \left[\frac{1 + \nu_j}{\hbar\omega - E_{n'}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \Omega_j + i\eta} + \right. \\ &\left. + \frac{\nu_j}{\hbar\omega - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \Omega_j + i\eta} \right]. \end{aligned} \quad (29)$$

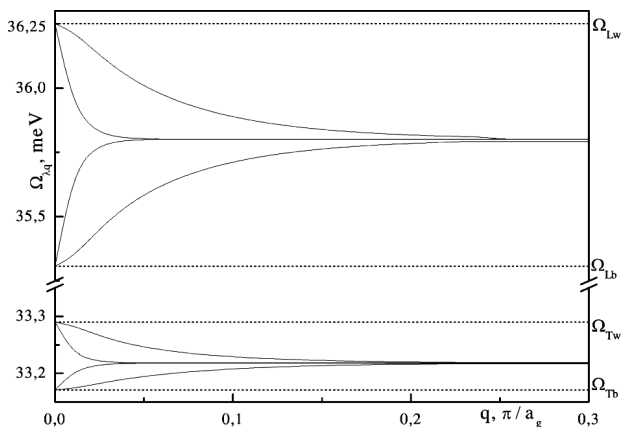


Рис. 2. Залежність енергій ($\Omega_{\lambda q}$) інтерфейсних фононів від квазіімпульсу q (в одиницях π/a_g , a_g – величина постійної ґратки середовища-яма) у РТС [1]

Тут перший доданок у дужках описує процеси з народженням фононів з середніми значеннями чисел заповнення $\nu_{\lambda q} = (e^{\Omega_{\lambda q}/kT} - 1)^{-1}$, а другий – з їх знищенням.

Отриманий масовий оператор (29) дозволяє розрахувати і дослідити внески різних механізмів електрон-І-фононної взаємодії у перенормування спектральних параметрів (енергетичних зміщень Δ_n і затухань Γ_n) електронних станів у двоямній РТС. Вважаючи, що електрони потрапляють у наносистему перпендикулярно до її площин і характеризуються слабкою взаємодією з фононами, в (29) можна покласти $\mathbf{k} = 0$ та знехтувати частотною залежністю масового оператора в околі енергій електрона E_n . Тоді дійсна й уявна частини масового оператора визначають зміщення ($\Delta_n = \text{Re}M_n (\hbar\omega = E_n, \mathbf{k} = 0)$) й затухання ($\Gamma_n = -2\text{Im}M_n (\hbar\omega = E_n, \mathbf{k} = 0)$) n -ї електронної зони.

Для подальшого аналізу внесків різних механізмів електрон-фононної взаємодії в повні зміщення енергій і затухання їх доцільно подати у вигляді

$$\Delta_n = \Delta_{nn} + \sum_{n' \neq n} \Delta_{nn'}, \quad (30)$$

$$\Gamma_n = \Gamma_{nn} + \sum_{n' \neq n} \Gamma_{nn'}, \quad (31)$$

де Δ_{nn}, Γ_{nn} – парціальні внески внутрішньозонної електрон-фононної взаємодії у повне зміщення і затухання n -го стану; $\Delta_{nn'}, \Gamma_{nn'}$ – парціальні

внески у Δ_n і Γ_n міжзонної взаємодії електронів з І-фононами.

Отже, розвинена теорія дозволяє виконати розрахунок перенормованих інтерфейсними фононами енергетичних рівнів $\tilde{E}_n = E_n + \Delta_n$ і затухань Γ_n електронних станів двоямної РТС у електричному полі, як каскаду безінжекторного ККЛ [1].

3. Аналіз перенормування інтерфейсними фононами параметрів електронного спектра у двоямному каскаді ККЛ при скінченній температурі

На основі розвиненої у попередньому параграфі теорії електрон-фононної взаємодії досліджувався вплив інтерфейсних фононів на електронний спектр двоямної РТС у постійному електричному полі, як окремому каскаді безінжекторного ККЛ [1] з GaAs ямами і $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ бар'єрами. Фізичні характеристики досліджуваної наноструктури відомі: $\epsilon_{\infty w} = 10,89$, $\epsilon_{\infty b} = 10,48$, $\hbar\omega_{Lw} = 36,25$ меВ, $\hbar\omega_{Lb} = 35,31$ меВ, $\hbar\omega_{Tw} = 33,29$ меВ, $\hbar\omega_{Tb} = 33,17$ меВ, $m_w = 0,067 m_e$, $m_b = 0,080 m_e$, $E_{gw}^{T=0\text{K}} = 1520$ меВ, $E_{gb}^{T=0\text{K}} = 1626,5$ меВ, $E_{gw}^{T=121\text{K}} = 1481,3$ меВ, $E_{gb}^{T=121\text{K}} = 1589$ меВ, $U^{T=0\text{K}} = 130$ меВ, $U^{T=121\text{K}} = 125$ меВ, а геометричні параметри вибиралися такими ж, як і в експериментальній роботі [1]: $a_1 = 7,1$ нм, $a_2 = 16,7$ нм, $b = 3,1$ нм.

Для того, щоб дослідити перенормування електронного спектра інтерфейсними фононами спочатку виконувався розрахунок спектра енергій ($\Omega_{\lambda q}$) І-фононів у РТС з такими самими геометричними параметрами, як і каскаду експериментального ККЛ [1]. Результати розрахунку залежності $\Omega_{\lambda q}$ від квазіімпульсу q наведені на рис. 2, з якого видно, що в системі існують вісім гілок енергій І-фононів. Чотири гілки утворюють низькоенергетичну групу, розташовану між енергіями ($\Omega_{Tw} = 33,29$ меВ, $\Omega_{Tb} = 33,17$ меВ) поперечних оптичних фононів масивних аналогів середовищ ям і бар'єрів РТС, а інші чотири утворюють високоенергетичну групу між енергіями ($\Omega_{Lw} = 36,25$ меВ, $\Omega_{Lb} = 35,31$ меВ) поздовжніх оптичних фононів. Кожна група в околі малих значень квазіімпульсу q містить по дві гілки з додатною та від'ємною дисперсіями, які зі зростанням q вироджуються у мінізону. Відзначимо, що постійне

електричне поле не впливає на спектр і потенціал фононного поля.

Згідно з ідеєю експериментальної роботи [1] лазерне випромінювання окремого каскаду безінжекторного ККЛ відбувається при квантовому переході електронів зі стану $|3\rangle$ у стан $|2\rangle$ з генерацією електромагнітної хвилі з енергією кванту $E_{32} \approx 19$ меВ. Наступний безвипромінювальний перехід електронів з другого $|2\rangle$ на основний рівень $|1\rangle$, різниця енергій між якими відповідає енергії оптичного фонона, забезпечує виконання важливої умови інверсної заселеності. Узгоджена робота всіх каскадів ККЛ забезпечується прикладеним постійним електричним полем напруженості $F = 17$ кВ/см.

Щоб з'ясувати роль різних механізмів електрон-І-фононної взаємодії у перенормуванні параметрів електронного спектра виконувався розрахунок енергій (E_n) трьох найнижчих (робочих) електронних станів без урахування електрон-фононної взаємодії, а також повних зміщень (Δ_n) і затухань (Γ_n) та їх парціальних складових, зумовлених взаємодією електронів з І-фононами через внутрішньозонні стани (Δ_{nn}, Γ_{nn}) та міжзонною взаємодією ($\Delta_{nn' \neq n}, \Gamma_{nn' \neq n}$). Результат розрахунку зазначених величин у залежності від конфігурації РТС, тобто від ширини вхідної ями (a_1) при фіксованій ширині загальної потенціальної ями ($a = a_1 + a_2 = 23,8$ нм), у постійному електричному полі ($F = 17$ кВ/см та без нього ($F = 0$) при $T = 0$ К наведено на рис. 3.

З рис. 3 видно, що з появою постійного електричного поля та зі зростанням його напруженості (F) енергії всіх електронних станів майже лінійно зміщуються у низькочастотну область так, що починаючи з найнижчого стану вони потрапляють в область від'ємних енергій. За відсутності електричного поля залежності енергій (E_n) всіх трьох станів електрона від положення внутрішнього бар'єра між зовнішніми бар'єрами наносистеми симетричні відносно середини загальної потенціальної ями ($a_1 = a/2$). Поява електричного поля порушує цю симетрію тим сильніше, чим більша напруженість поля.

Перенормування спектральних параметрів електронних станів взаємодією з фононами при криогенній температурі ($T = 0$ К, $\nu_{\lambda q} = 0$) формально відбувається лише з народженням віртуальних

фононів, через що електронні енергії можуть лише зменшуватися. Тому, як видно з рис. 3, енергетичні зміщення (Δ_n) всіх трьох робочих станів електрона від'ємні. Їх еволюція зі зміною геометричної конфігурації РТС за відсутності електричного поля, подібно до енергетичного спектра, проявляє симетричну залежність відносно положення бар'єра посередині загальної ями ($a_1 = a/2$). З рис. 3 видно, що зміщення енергетичних рівнів (Δ_1, Δ_2) двох найнижчих станів електрона у всьому інтервалі зміни a_1 переважно формуються внутрішньозонною взаємодією. Що ж до зміщення енергії третього робочого стану (Δ_3), то внутрішньозонна взаємодія суттєва всюди, окрім тих геометричних конфігураціях РТС, де відбувається антикросінг третього і четвертого рівнів. У таких конфігураціях РТС міжзонна взаємодія переважає внутрішньозонну ($\Delta_{3n'} > \Delta_{33}$).

Оскільки поява постійного електричного поля через зміну ймовірностей перебування електрона у обох потенціальних ямах РТС значно змінює функції електрон-фононного зв'язку, то це приводить до зміни залежностей від a_1 загальних зміщень (Δ_n) та їх парціальних складових ($\Delta_{nn'}$) для всіх трьох електронних рівнів. Як видно з рис. 3, електричне поле хоч і деформує залежності Δ_n від a_1 , зміщуючи положення максимумів і мінімумів в область більших значень a_1 , однак величини зміщень електронних рівнів змінює не суттєво.

Затухання електронних станів (Γ_n) при криогенній температурі ($T = 0$ К, $\nu_{\lambda q} = 0$) визначаються уявною частиною масового оператора (29) через δ -функцією $\delta(E_n - E_{n'} - \Omega_{\lambda q} - \hbar^2 q^2 / 2m)$. Очевидно, що при $n \leq n'$ затухання n -го стану відсутнє ($\Gamma_n = 0$) оскільки $\delta(-|E_n - E_{n'}| - \Omega_{\lambda q} - \hbar^2 q^2 / 2m) = 0$. Це означає, що при $T = 0$ К внутрішньозонна взаємодія електрона у n -му стані, а також міжзонна взаємодія через вищі стани ($n' \geq n$) з віртуальними інтерфейсними фононами відбувається без затухання. З цієї причини затухання основного стану при $T = 0$ К відсутнє ($\Gamma_1 = 0$). Затухання збуджених станів ($\Gamma_{n \geq 2}$) виникатиме лише у результаті міжзонної взаємодії з низькоенергетичними станами ($n' < n$) за умови, що $E_n - E_{n'} < \Omega_{\lambda q}$, коли $\delta(E_n - E_{n'} - \Omega_{\lambda q} - \hbar^2 q^2 / 2m)$. Основні властивості Γ_n при криогенній температурі подібні до тих, які характерні для затухань Γ_n^T електронних станів при скінченних температурах ($T \neq 0$ К), і

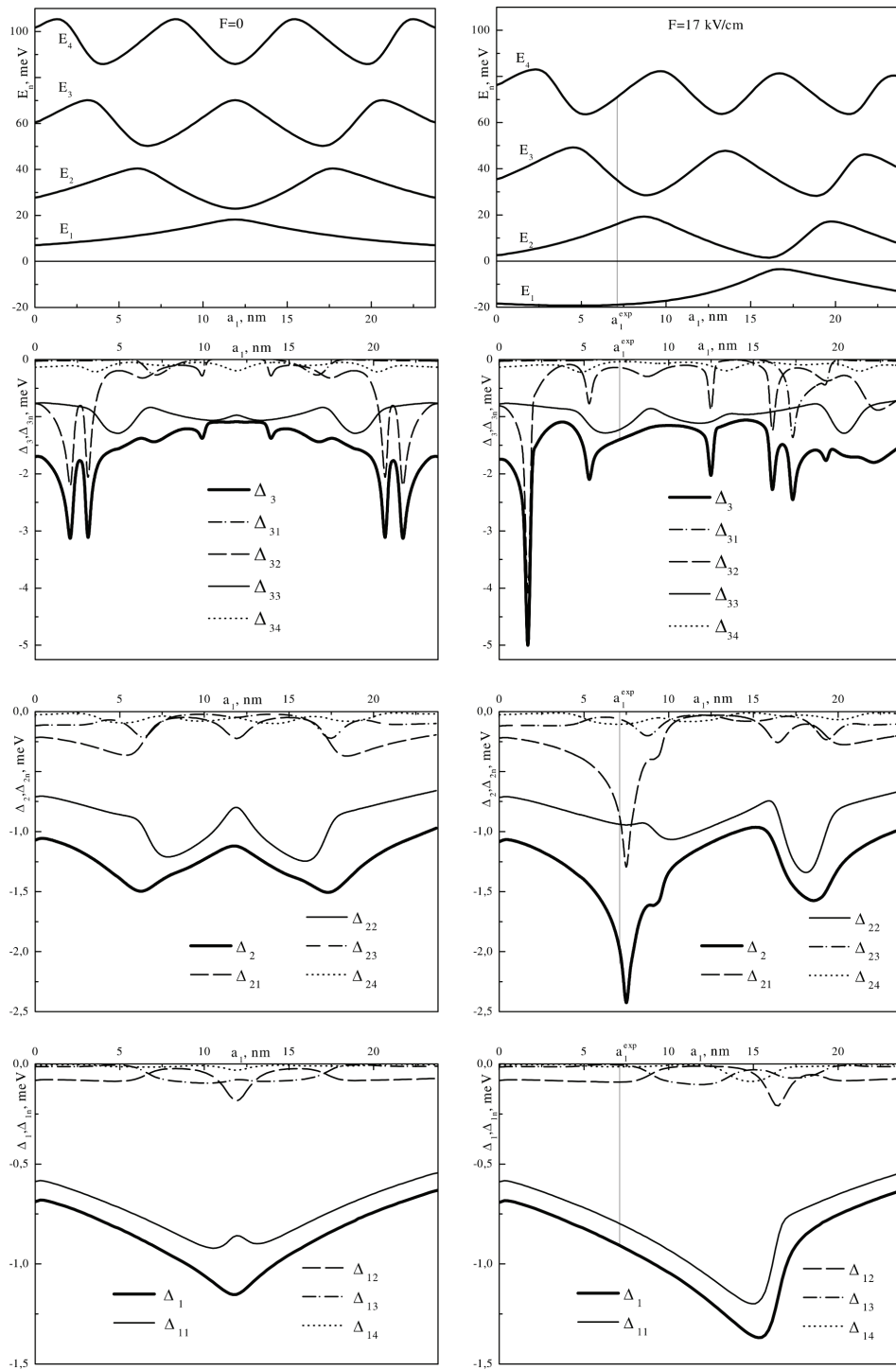


Рис. 3. Залежності енергетичного спектра електрона, повних (Δ_n) і парціальних ($\Delta_{nn'}$) зміщень енергетичних рівнів трьох робочих станів ($n = 1, 2, 3$) при криогенній температурі ($T = 0$ К) від конфігурації двоямної РТС у електричному полі ($F = 17$ кВ/см) і без нього ($F = 0$)

тому тут не наведені. Властивості затухань Γ_n^T будуть проаналізовані нижче.

Отже розрахунки показали, що при криогенній температурі взаємодія електронів у робочих станах з енергіями $E_1 = -18,9$ меВ, $E_2 = 16,0$ меВ, $E_3 = 35,1$ меВ з віртуальними інтерфейсними фононами у двомній РТС з геометричними параметрами експериментального каскаду ККЛ [1] ($a_1^{\text{exp}} = 7,1$ нм, $a_2^{\text{exp}} = 16,7$ нм, $F = 17$ кВ/см) приводить до від'ємних зміщень ($\Delta_1 = -0,91$ меВ, $\Delta_2 = -1,97$ меВ, $\Delta_3 = -1,40$ меВ) енергетичних рівнів усіх трьох станів, а також до слабого затухання обох збуджених станів ($\Gamma_2 = 0,0003$ меВ, $\Gamma_3 = 0,0018$ меВ).

Аналогічно виконувалися розрахунки енергій електронних станів, їх зміщень і затухань при температурі ($T = 121$ К) функціонування безінжекторного ККЛ [1]. Виявилося, що через залежність висот потенціальних бар'єрів та величин ефективних мас електрона від ширин заборонених зон напівпровідникових середовищ ям і бар'єрів, які, у свою чергу, залежні від температури, енергії всіх електронних станів (без урахування електрон-фононної взаємодії) зі зростанням температури слабо зміщуються в область менших енергій ($E_1^T = -19,0$ меВ, $E_2^T = 15,5$ меВ, $E_3^T = 34,5$ меВ). Загальні властивості залежностей E_n^T від геометричної конфігурації РТС та напруженості електричного поля не приводяться, оскільки вони залишаються такими самими, як і проаналізовані раніше відповідні залежності при криогенній температурі.

При скінченних температурах у системі вже існують реальні фонони, а тому можливі процеси не лише з народженням фононів, а й з їх поглинанням. Отже при $T \neq 0$ К електрон-фононна взаємодія приводить до перенормування енергій та затухання всіх станів електрона, включно з основним.

На рис. 4 наведені залежності від a_1 повних і парціальних зміщень ($\Delta_n^T, \Delta_{nn'}^T$) та затухань ($\Gamma_n^T, \Gamma_{nn'}^T$) трьох ($n = 1, 2, 3$) робочих станів електронів у двоямній РТС у постійному електричному полі напруженості $F = 17$ кВ/см при $T = 121$ К. З цього рисунка видно, що залежності Δ_n^T від геометричної конфігурації РТС й ієрархія парціальних внесків у них внутрішньо- та міжзонної взаємодії якісно подібні до тих, які мали місце при $T = 0$ К.

Що ж до затухань електронних станів при скінченних температурах, то, як видно з рис. 4, при $T = 121$ К вони є складними нелінійними функціями від a_1 . Так, у затуханні основного стану (Γ_1^T) внесок внутрішньозонної взаємодії Γ_{11}^T є переважаючим лише в околі антикросінгу E_1 та E_2 . В усіх інших областях зміни a_1 суттєвішою є міжзонна взаємодія. Затухання збуджених станів в основному формуються міжзонною електрон-фононною взаємодією через нижчі стани. Зауважимо, що парціальні складові Γ_{14} і Γ_{24} на стільки малі, що на рис. 4 не видні.

Розрахунок показав, що в експериментальній конфігурації РТС зміщення енергетичних рівнів та затухання електронних станів при $T = 121$ К такі: $\Delta_1^T = -0,93$ меВ, $\Delta_2^T = -1,92$ меВ, $\Delta_3^T = -1,41$ меВ, $\Gamma_1^T = 0,044$ меВ, $\Gamma_2^T = 0,028$ меВ, $\Gamma_3^T = 0,077$ меВ. Аналіз приведених величин Δ_n та Δ_n^T показує, що електрон-І-фононна взаємодія зі зростанням температури зміщує перший та третій енергетичні рівні в область менших енергій на величини $\tilde{\Delta}_1^T = \Delta_1^T - \Delta_1 = -0,02$ меВ, $\tilde{\Delta}_3^T = \Delta_3^T - \Delta_3 = -0,01$ меВ відповідно, а другий рівень навпаки – в область більших енергій ($\tilde{\Delta}_2^T = \Delta_2^T - \Delta_2 = 0,05$ меВ). Затухання всіх трьох станів зростають з підвищенням температури системи.

На рис. 5 наведено залежності Δ_n^T (а) та Γ_n^T (б) від температури РТС з експериментальними геометричними параметрами у постійному електричному полі ($F = 17$ кВ/см). З рис. 5, а видно, що абсолютна величина зміщення енергії основного стану (Δ_1^T) слабо немонотонно зростає з підвищенням температури системи, змінюючись в межах від $\Delta_1 = -0,91$ меВ при $T = 0$ К до $\Delta_1^T = -1,03$ меВ при кімнатній температурі $T = 300$ К. Зміщення третього рівня майже незалежить від T ($\Delta_3^T \approx -1,40$ меВ). Зміщення другого енергетичного рівня, як функція температури T , зростає зі збільшенням T , досягаючи максимального значення $\Delta_2^T = -1,911$ меВ при $T = 90$ К. Подальше збільшення температури приводить до зменшення величини Δ_2^T . Аномальна залежність Δ_2 від температури зумовлена конкурентними внесками електрон-фононної взаємодії у процесах поглинання та випромінювання фононів.

Як видно з рис. 5, б, величини затухань всіх станів слабо нелінійно зростають з температурою.

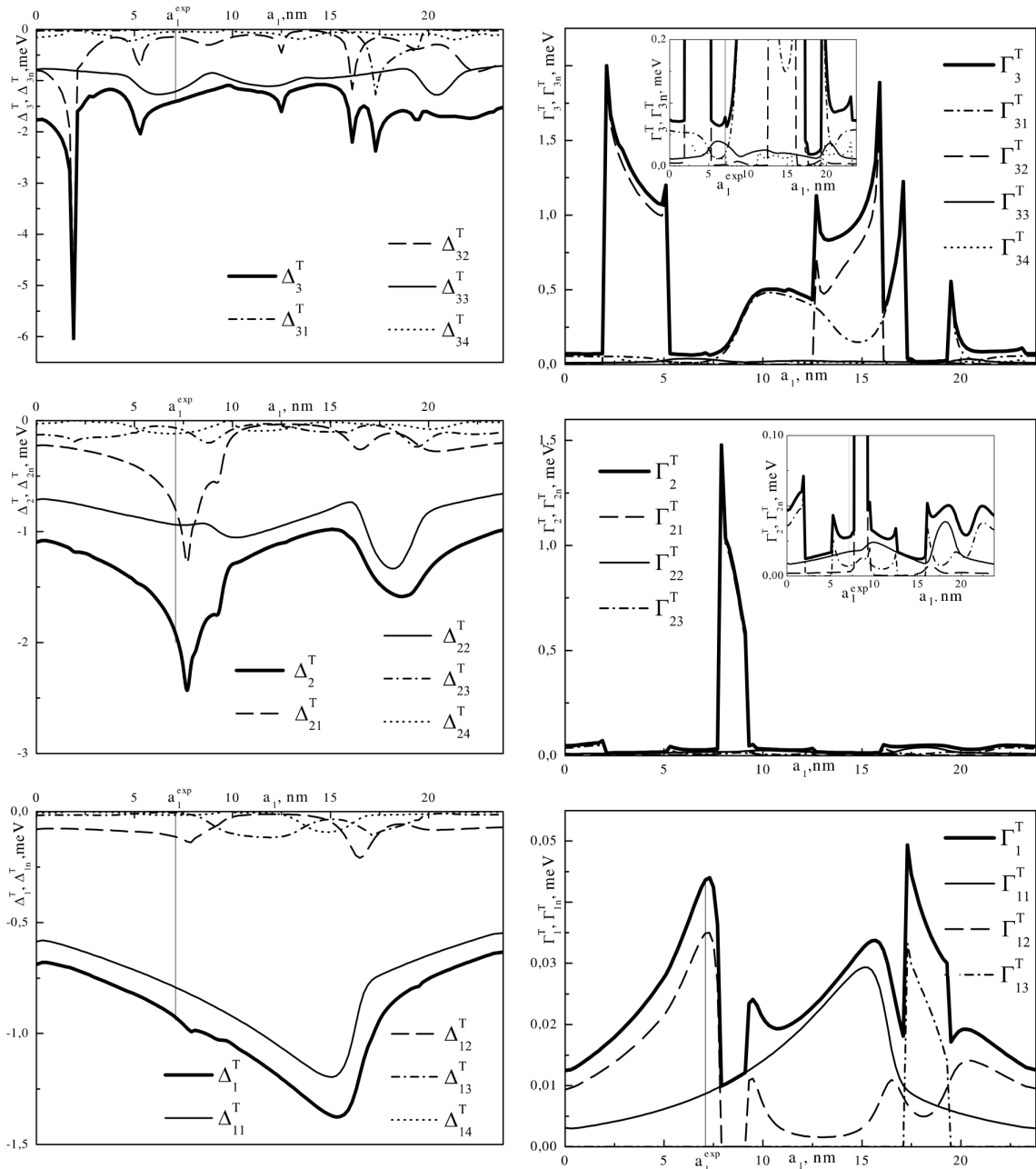


Рис. 4. Залежності повних (Δ_n^T , Γ_n^T) і парціальних ($\Delta_{nn'}^T$, $\Gamma_{nn'}^T$) зміщень і затухань енергетичних рівнів трьох робочих станів електрона ($n = 1, 2, 3$) від конфігурації РТС у електричному полі ($F = 17$ кВ/см) при температурі $T = 121$ К

Отримані величини перенормованих енергій $\tilde{E}_n = E_n + \Delta_n$ та затухань $\tilde{\Gamma}_n$ електронних станів дозволяють визначити температурну зміну енергії $\Delta E_{32} = (\tilde{E}_3^T - \tilde{E}_2^T) - (\tilde{E}_3 - \tilde{E}_2)$ та розши-

рення $\Delta\Gamma_{32} = (\tilde{\Gamma}_3^T + \tilde{\Gamma}_2^T) - (\tilde{\Gamma}_3 + \tilde{\Gamma}_2)$ смуги лазерного випромінювання. Розрахунок показав, що в експериментальній конфігурації двоного каскаду ККЛ [1] температурне зміщення за раху-

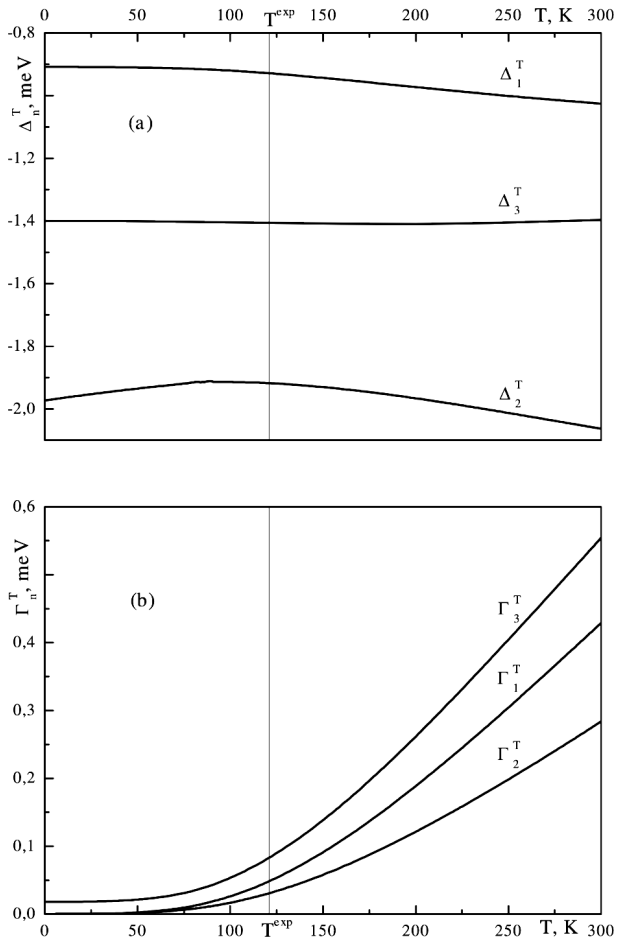


Рис. 5. Залежності від температури (T) повних зміщень (Δ_n^T) і затухань (Γ_n^T) енергетичних рівнів трьох робочих станів електрона у РТС в електричному полі ($F = 17$ кВ/см) з геометричними параметрами двоямного каскаду безінжекторного ККЛ [1]

нок взаємодії електронів з І-фононами практично відсутнє, а розширення становить 0,1 меВ. Отже, теоретичне значення енергії лазерного випромінювання $E_{32} = 18,8$ меВ добре узгоджується з експериментальним $E_{32}^{exp} = 19$ меВ.

4. Основні результати та висновки

1. На основі моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів для електронів і в моделі діелектричного континууму для інтерфейсних фононів розвинено теорію електрон-фононної взаємодії у двоямній плоскій резонансно-тунельній наноструктурі в постійному електричному полі як в окремому каскаді безінжекторного ККЛ.

2. Досліджено внески внутрішньо- та міжзонної електрон-фононної взаємодії у перенормування спектральних параметрів (зміщень і затухань) електронних станів у залежності від геометричної конфігурації РТС, величини напруженості постійного електричного поля та температури.

3. Показано, що взаємодія електронів з інтерфейсними фононами у широкому інтервалі зміни температури (від криогенної до кімнатної) майже не змінює енергію лазерного випромінювання, хоча й приводить до слабкого розширення смуги випромінювання.

1. S. Kumar, C.W.I. Chan, C. Qing, and J.L. Reno, Two-well terahertz quantum-cascade laser with direct intrawell-phonon depopulation, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 141110 (2009) [DOI: 10.1063/1.3243459].
2. J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco *et al.*, Quantum cascade laser, *Science* **264**, 553 (1994) [DOI: 10.1126/science.264.5158.553].
3. J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori *et al.*, Vertical transition quantum cascade laser with Bragg confined excited state, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 538 (1995) [DOI: 10.1063/1.114005].
4. S. Katz, A. Fridrich, G. Boehm, and M.C. Amann, Continuous wave operation of injectorless quantum cascade lasers at low temperatures, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 181103 (2008) [DOI: 10.1063/1.2841704].
5. D. Dey, W Wu, O. Memis, and H. Mohseni, Injectorless quantum cascade laser with low voltage defect and improved thermal performance grown by metal-organic chemical-vapor deposition, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 081109 (2009) [DOI: 10.1063/1.3089362].
6. A. Fridrich, G. Boehm, and M.C. Amann, Short-wavelength intersubband staircase lasers, with and without AlAs-blocking barriers, *Semicond. Sci. Technol.* **22**, 218 (2007) [DOI: 10.1088/0268-1242/22/3/008].
7. S. Katz, A. Vizbaras, R. Meyer, and M.-C. Amann, Injectorless quantum cascade lasers, *J. Appl. Phys.* **109**, 081101 (2011) [DOI: 10.1063/1.3566072].
8. C. Gmachl, F. Capasso, D.L. Sivco, and A.Y. Cho, Recent progress in quantum cascade lasers and applications, *Rep. Prog. Phys.* **64**, 1533 (2001) [DOI: 10.1088/0034-4885/64/11/204].
9. M. Wanke, F. Capasso, C. Gmachl, A. Tredicucci, D. Sivco, A. Hutchinson, G. Chu, and A. Cho, Injectorless quantum-cascade lasers, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 3950 (2001) [DOI: 10.1063/1.1378805].
10. J. Faist, *Quantum Cascade Lasers* (Oxford Univ. Press, Oxford, 2013).
11. G.G. Zegrya, N.V. Tkach, I.V. Boiko, and Yu.A. Seti, Quasi-stationary electron states in a multilayered structure in longitudinal electric and transverse magnetic fields, *Phys. Solid State* **55**, 2182 (2013). [DOI: 10.1134/S106378341310034X].

12. M.V. Tkach, Ju.O. Seti, I.V. Boyko, and O.M. Voitsekhi-vska, Dynamic conductivity of resonance tunnel structures in the model of open cascade in nanolasers, *Rom. Rep. Phys.* **65**, 1443 (2013).
13. M.V. Tkach, Ju.O. Seti, I.V. Boyko, and O.M. Voitsekhi-vska, Optimization of quantum cascade laser operation by geometric design of cascade active band in open and closed models, *Condens. Matter Phys.* **16**, 33701 (2013) [DOI: 10.5488/CMP.16.33701].
14. A. Gaji, J. Radovanovi, V. Milanovi, D. Indjin, and Z. Iko-ni, Optimizing optical nonlinearities in GaInAs/AlInAs quantum cascade lasers, *J. Appl. Phys.* **115**, 05712 (2014) [DOI: 10.2298/NTRP1401010G].
15. M. Lindskog, J. M. Wolf, V. Trinite *et al.*, Comparative analysis of quantum cascade laser modeling based on density matrices and non-equilibrium Green's functions, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 103106 (2014) [DOI: 10.1063/1.4895123].
16. C. Jirauschek and T. Kubis, Modeling techniques for quantum cascade lasers, *Appl. Phys. Rev.* **1**, 011307 (2014) [DOI: 10.1063/1.4863665].
17. A. Jiang, A. Matyas, V. Vijayraghavan, C. Jirauschek, Z.R. Wasilewski, and M.A. Belkin, Experimental investigation of terahertz quantum cascade laser with variable barrier heights, *J. Appl. Phys.* **115**, 163103 (2014) [DOI: 10.1063/1.4873461].
18. Z.W. Yan, S.L. Ban, and X.X. Liang, Pressure dependence of electron-IO-phonon interaction in multi-interface heterostructure systems, *Int. J. Mod. Phys. B* **17**, 6085 (2003) [DOI: 10.1142/S0217979203023653].
19. B.H. Wu, J.C. Cao, G.Q. Xio, and H.C. Lio, Interface phonon assisted transition in double quantum well, *Eur. Phys. J. B* **33**, 9 (2003) [DOI: 10.1140/epjb/e2003-00135-2].
20. X. Gao, D. Botez, and I. Knezevic, Phonon confinement and electron transport in GaAs-based quantum cascade structures, *J. Appl. Phys.* **103**, 073101 (2008) [DOI: 10.1063/1.2899963].
21. J.G. Zhu and S.L. Ban, Effect of electron-optical phonon interaction on resonant tunneling in coupled quantum wells, *Eur. Phys. J. B* **85**, 140 (2012) [DOI: 10.1140/epjb/e2012-20981-9].
22. R. Aggarwal, A.A. Ingale, S. Pal, V.K. Dixit, T.K. Sharma, and S.M. Oak, Intersubband plasmon-phonon coupling in GaAsP/AlGaAs near surface quantum well, *Appl. Phys. Lett.* **102**, 181120 (2013) [DOI: 10.1063/1.4804360].
23. Y.B. Shi and I. Knezevic, Nonequilibrium phonon effects in midinfrared quantum cascade lasers, *J. Appl. Phys.* **116**, 123105 (2014) [DOI: 10.1063/1.4896400].
24. N. Mori and T. Ando, Electron-optical-phonon interaction in single and double heterostructures, *Phys. Rev. B* **40**, 6175 (1989) [DOI: 10.1103/PhysRevB.40.6175].
25. X. Gao, D. Botez, and J.I. Knezevic, X-valley leakage in GaAs-based mid-infrared quantum cascade lasers: a Monte Carlo study, *Appl. Phys.* **101**, 063101 (2007) [DOI: 10.1063/1.2711153].
26. M.A. Stroscio and M. Dutta, *Phonons in Nanostructures* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK, 2001) [ISBN: 0521792797].
27. М.В. Ткач, Ю.О. Сеті, О.М. Войцехівська *Квазічастинки у наносистемах. Квантові точки, дроти і плівки* (Книги – XXI, Чернівці, 2015).
28. Y.Z. Wei and X.X. Liang, Transfer matrix method for electron-IO-phonon interaction in asymmetric double-barrier structures, *Int. J. Mod. Phys. B* **15**, 3539 (2001) [DOI: 10.1142/S0217979201007804].
29. A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, and I.E. Dzyaloshinsky, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover, New York, 2012) [ISBN-13: 978-0486632285].

Одержано 31.07.15

Ю.О. Сеті, М.В. Ткач, М.В. Паньків

ROLE OF INTERFACE PHONONS IN THE FUNCTIONING OF AN INJECTORLESS QUANTUM CASCADE LASER

S u m m a r y

A Hamiltonian for the electron-phonon system in the double-well resonant tunneling structure in the dc electric field has been obtained, by using the models of rectangular potential profile and effective mass for electrons and the dielectric continuum model for phonons. This structure is a separate cascade of the injectorless quantum cascade laser. The renormalized parameters of the electron spectrum are calculated for an arbitrary temperature, by using the method of thermodynamic Green's functions. It is shown that, in accordance with the experiment, the laser radiation band broadens out and weakly shifts with the temperature growth.