

## СПЕКТРАЛЬНІ ПАРАМЕТРИ І ПРОВІДНІСТЬ ТРИБАР'ЄРНИХ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИХ СТРУКТУР ЗІ ЗМІЩЕНИМИ ОСНОВАМИ КВАНТОВИХ ЯМ

Побудована теорія активної провідності у відкритій плоскій трибар'єрній резонансно-тунельній наносистемі. Проаналізовано провідність монохроматичного пучка електронів, який взаємодіє з електромагнітним полем. Знайдено такі оптимальні геометричні параметри системи, при яких досягається максимум величини провідності та максимальна густина вихідного струму при мінімальній густині струму збудження.

**Ключові слова:** наносистема, активна провідність, квантові каскадні лазери.

Построена теория активной проводимости в открытой плоской трибарьерной резонансно-тунельной наносистеме. Выполнен анализ проводимости монохроматического пучка электронов, который взаимодействует с электромагнитным полем. Найдены такие оптимальные геометрические параметры системы, при которых достигается максимум величины проводимости и максимальная плотность исходящего тока при минимальной плотности тока возбуждения.

**Ключевые слова:** наносистема, активная проводимость, квантовые каскадные лазеры.

The theory of conductance in an open plane three-barrier resonance tunnel nano-systems is developed. The conductivity of monochromatic electronic beam interacting with electromagnetic field is analyzed. The optimal geometric parameters of the system providing the maximal magnitude of the conductivity and maximal density of the outgoing current with a minimal density of the excited current are obtained.

**Keywords:** nano-system, active conductivity, quantum cascade lasers.

Уже досить давно трибар'єрні резонансно-тунельні наноструктури використовуються як активні елементи квантових каскадних лазерів і детекторів. За цей час, хоча й досягнуто значних успіхів у покращенні робочих характеристик квантових каскадних лазерів і детекторів, повної теорії, яка б описала фізичні характеристики цих систем немає навіть у межах грубих моделей з постійною ефективною масою у всіх шарах і з  $\delta$ -подібними потенціальними бар'єрами. Отримані у працях [1-4] результати хоча й пояснюють деякі загальні характеристики провідності відкритих наносистем, але через використання моделі  $\delta$ -подібних бар'єрів і постійної ефективною маси дають, як показано в роботі [5], завищені значення спектральних параметрів у порівнянні з більш реалістичною моделлю прямокутних потенціалів і різних ефективних мас.

Метою пропонованої праці є побудова, в

межах моделі прямокутних потенціальних ям і бар'єрів та різних ефективних мас електрона у різних елементах наносистеми, теорії активної провідності у несиметричній (по бар'єрах) відкритій плоскій трибар'єрній резонансно-тунельній наносистемі (ТБРТС) з однаково зміщеними основами обох квантових ям.

На прикладі наносистеми з  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ -ямами і  $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ -бар'єрами буде знайдено такі оптимальні геометричні параметри системи, при яких досягається максимум величини провідності та максимальна густина вихідного струму при мінімальній густині струму збудження.

**Теорія активної провідності ТБРТС зі зміщеними основами квантових ям**

Розглядалась відкрита ТБРТС (рис.1), де вісь  $Oz$  декартової системи координат направлена перпендикулярно до площини системи.

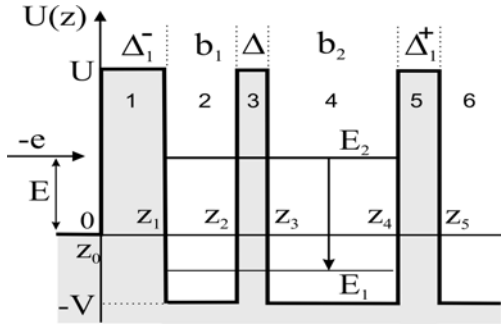


Рис. 1. Енергетична і геометрична схема ТБРТС.

Використовується модель ефективних мас і прямокутних потенціалів

$$\begin{aligned}
 m(z) &= m_0\theta(-z) + \\
 &+ m_1 \sum_{i=0}^2 (\theta(z - z_{2i}) - \theta(z - z_{2i+1})) + \\
 &+ m_2 \sum_{i=1}^3 (\theta(z - z_{2i-1}) - \theta(z - z_{2i})), \\
 U(z) &= U \sum_{i=0}^2 (\theta(z - z_{2i}) - \theta(z - z_{2i+1})) + \\
 &+ V \sum_{i=1}^3 (\theta(z - z_{2i-1}) - \theta(z - z_{2i})).
 \end{aligned} \quad (1)$$

Тут  $\theta(z)$  – одинична функція Хевісайда;  $z_{-1} = -\infty$ ;  $z_6 = \infty$ .

Вважалося, що моноенергетичний потік електронів з енергією  $E$  і концентрацією  $n_0$ , падає зліва перпендикулярно до площини ТБРТС. Тоді рух електрона можна вважати одномірним ( $\vec{k}_{\parallel} = 0$ ) і тому хвильова функція  $\Psi(z, t)$  задовольняє повному рівнянню Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z, t)}{\partial t} = (H_0(z) + H(z, t))\Psi(z, t), \quad (3)$$

$$\text{де } H_0(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) \quad (4)$$

– гамільтоніан електрона у стаціонарній задачі, розв'язки якої  $\Psi_0(z)$  відомі [5,7]. Це дозволяє точно розрахувати функцію розподілу густини ймовірності знаходження електрона в ТБРТС

$$W(E) = \frac{1}{z_5} \int_0^{z_5} |\Psi_0(z)|^2 dz \quad (5)$$

і з неї визначити спектральні параметри (резонансні енергії і ширини) квазістаціонарних станів електрона в усій області енергій.

Другий доданок у (3)

$$H(z, t) = -e\mathcal{E}[z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] \times (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (6)$$

– гамільтоніан взаємодії електрона зі змінним у часі електромагнітним полем частотою  $\omega$  і з амплітудою напруженості електричного поля  $\mathcal{E}$ .

Враховуючи, що під дією електромагнітного поля найбільш інтенсивні квантові переходи відбуваються лише між сусідніми квазістаціонарними станами електрона, то розв'язок рівняння (3), у наближенні слабкого сигналу в першому порядку теорії збурень, шукаємо у вигляді:

$$\begin{aligned}
 \Psi(z, t) &= \sum_{n=-1}^{+1} \Psi_n(z) e^{-i(\omega_0 + n\omega)t}, \\
 (\omega_0 &= E/\hbar).
 \end{aligned} \quad (7)$$

З урахуванням (7) і зберігаючи величини першого порядку малості у (3) для визначення функцій  $\Psi_{\pm 1}(z)$  отримуються неоднорідні рівняння

$$\begin{aligned}
 (H_0(z) - \hbar(\omega_0 \pm \omega))\Psi_{\pm 1}(z) - \\
 - e\mathcal{E}[z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] \times \\
 \times (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) = 0,
 \end{aligned} \quad (8)$$

розв'язками яких є суперпозиції функцій:

$$\Psi_{\pm 1}(z) = \Psi_{\pm}(z) + \Phi_{\pm}(z). \quad (9)$$

Розв'язки  $\Psi_{\pm}(z)$  однорідних рівнянь (8) шукаються у вигляді

$$\Psi_{\pm}(z) = \sum_{p=0}^6 \left[ B_{\pm}^{(p)} e^{-ik_{\pm}^{(p)}z} + A_{\pm}^{(p)} e^{ik_{\pm}^{(p)}z} \right] \times \quad (10)$$

$$\times [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)], \quad A_{\pm}^{(0)} = B_{\pm}^{(6)} = 0,$$

$$\text{де } k_{\pm}^{(0)} = \sqrt{\frac{2m_0(E \pm \hbar\omega)}{\hbar^2}},$$

$$k_{\pm}^{(2,4,6)} = \sqrt{\frac{2m_2(E + V \pm \hbar\omega)}{\hbar^2}}, \quad (11)$$

$$k_{\pm}^{(1,3,5)} = \sqrt{\frac{2m_1((E - U) \pm \hbar\omega)}{\hbar^2}}.$$

Точні частинні розв'язки  $\Phi_{\pm}(z)$  системи

неоднорідних рівнянь (8) відомі

$$\begin{aligned} \Phi_{\pm}(z) = & \sum_{p=1}^5 \left[ \mp \frac{e\mathcal{E}}{\hbar\omega} z \Psi_0^{(p)}(z) + \right. \\ & \left. + \frac{e\mathcal{E}}{m_p \omega^2} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} \right] [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] \mp \\ & \mp \frac{e\mathcal{E}}{\hbar\omega} z_5 \Psi_0^{(6)}(z_5) \theta(z - z_5). \end{aligned} \quad (12)$$

Усі невідомі коефіцієнти  $B_{\pm}^{(0)}, A_{\pm}^{(6)}, B_{\pm}^{(p)}, A_{\pm}^{(p)}$  ( $p = 0 \div 5$ ) визначаються з умов неперервності хвильових функцій  $\Psi_{\pm 1}(z)$  і відповідних потоків на всіх гетеромежах наносистеми. Отже, повна хвильова функція  $\Psi(z, t)$  однозначно визначена. Враховуючи незначні розміри ТБРТС, у порівнянні з довжиною електромагнітної хвилі, далі (у квазікласичному наближенні) відомим методом [8] виконується розрахунок густини наведеного струму, який і визначає дійсну частину активної провідності наносистеми:

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &= \sigma^+(\omega) + \sigma^-(\omega), \quad (13) \\ \sigma^+(\omega) &= \frac{\hbar^2 \omega n_0}{2m_2 z_5 \mathcal{E}^2} \left( k_+^{(6)} |B_+^{(0)}|^2 - k_-^{(6)} |B_-^{(0)}|^2 \right), \\ \sigma^-(\omega) &= \frac{\hbar^2 \omega n_0}{2m_0 z_5 \mathcal{E}^2} \left( k_+^{(0)} |A_+^{(6)}|^2 - k_-^{(0)} |A_-^{(6)}|^2 \right). \end{aligned}$$

– парціальні складові провідності, які визначаються потоками, взаємодіючих з електромагнітним полем, електронів: вперед  $\sigma^+$  і назад  $\sigma^-$  по відношенню до початкового напрямку потоку, який падає на ТБРТС.

### Аналіз результатів

Метою оптимізації основних характеристик балістичного нанолазера або квантового каскадного лазера є мінімізація струму збудження при максимальній потужності випромінювання, а у випадку квантового каскадного лазера – створення максимального потоку електронів крізь кожний окремий робочий елемент. Для цього потрібно підібрати геометричний дизайн і відповідні фізичні параметри активного елемента квантового каскадного лазера, яким і є ТБРТС.

Для цього досліджувались властивості

провідності  $\sigma$ , як функції енергії  $E$  і частоти  $\omega$ , які, в свою чергу, визначаються властивостями спектральних параметрів електронних квазістаціонарних станів (КСС) досліджуваної ТБРТС у залежності від її фізичних і геометричних параметрів. Досліджувалася від'ємна активна провідність, яка формується квантовими переходами тільки між другим і першим КСС електронів у ТБРТС. Розрахунок виконувався на прикладі часто експериментально досліджуваної наносистеми [9-13] з фізичними параметрами:  $m_0 = 0,046m_e$ ,  $m_1 = 0,089m_e$ ,  $m_2 = (0,067 - 0,045x)m_e$ ,  $V = (390 - 830x)$  меВ,  $U = 516$  меВ.

На рис.2 наведені результати розрахунку залежностей резонансних енергій  $E_1, E_2$ , логарифмів повних часів життя ( $\tau = \tau_1 + \tau_2$ ) та їх парціальних складових  $\tau_1, \tau_2$  в обох робочих КСС електрона, а також логарифмів абсолютних величин максимумів активної провідності ( $\sigma = \max|\sigma_{21}|$ ) і її складових  $|\sigma^{\pm}|$  у залежності від положення внутрішнього потенціального бар'єра між зовнішніми і від концентрації Ga в  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  (в областях 2, 4, 6 на рис.1).

Спочатку проаналізуємо еволюцію резонансних енергій  $E_n$  електрона в залежності від концентрації ( $x$ ) Ga (рис.2). Із рис.2 видно, що величини резонансних енергій КСС практично не залежать від ширин зовнішніх бар'єрів  $\Delta^{\pm}$ . Незалежно від концентрації  $x$  резонансна енергія  $n$ -го КСС  $E_n$ , як функція положення  $b_1$  внутрішнього бар'єра між зовнішніми, має  $n$  максимумів і  $(n+1)$  мінімум. Видно, що зменшення концентрації Ga зміщує весь спектр в область менших енергій.

Із залежностей логарифмів повних часів життя ( $\tau = \tau_1 + \tau_2$ ) і їх парціальних складових  $\tau_1, \tau_2$  в обох робочих КСС електрона видно, що завжди виконується нерівність  $\tau_1 \gg \tau_2$  при будь-яких значеннях  $b_1$  і  $x$ , окрім околів антикросингів.

На рис.2 також наведені результати розрахунку величини провідності  $\sigma$  і її складових компонент  $|\sigma^{\pm}|$  у залежності від концентрації Ga і від положення  $b_1$  внутрішнього

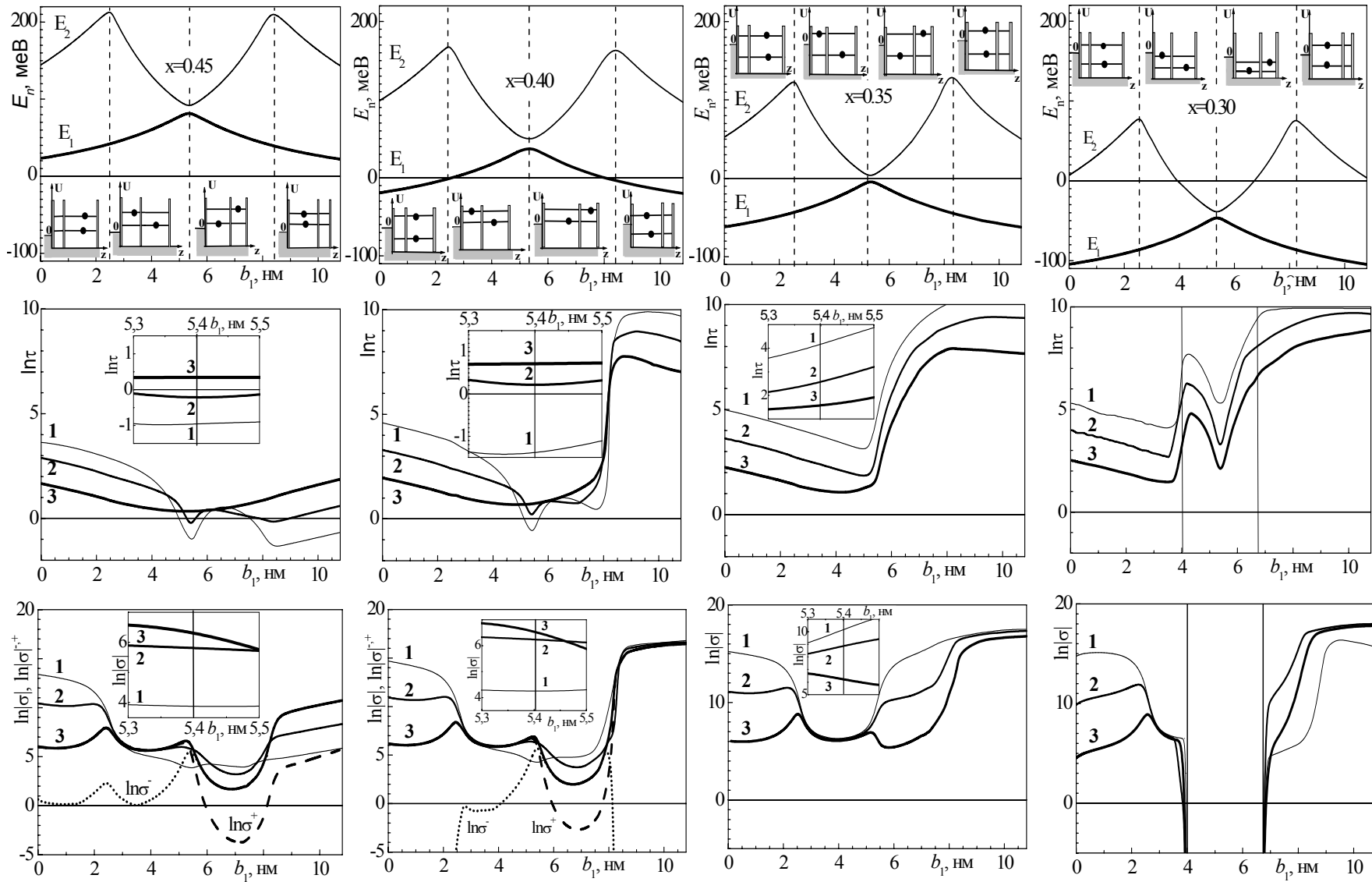


Рис. 2. Еволюція енергетичного спектра, часів життя і провідностей у залежності від положення внутрішнього потенціального бар'єра при різних концентраціях ( $x$ ) Ga. На графіках: 1 -  $\Delta^+ = 1,2$  нм,  $\Delta^- = 3,6$  нм,  $\Delta = 2,4$  нм; 2 -  $\Delta^+ = 1,8$  нм,  $\Delta^- = 3,0$  нм,  $\Delta = 2,4$  нм; 3 -  $\Delta^+ = 2,4$  нм,  $\Delta^- = 2,4$  нм,  $\Delta = 2,4$  нм.

бар'єра. Видно, що квантовий перехід між другим і першим КСС існує лише при тих значеннях концентрації, при яких виконується умова  $E_2 > 0$  (у нас всюди, крім  $x=0,30$ ;  $4 \text{ нм} \leq b_1 \leq 5,5 \text{ нм}$ ). Видно, що в залежності від положення внутрішнього бар'єра відносно зовнішніх, провідність  $\sigma$  формується тією чи іншою парціальними складовими.

### Висновки

Отримані результати дозволяють підібрати оптимальні геометричні параметри досліджуваної наносистеми. Зокрема, встановлено: 1) потрібно використовувати наносистему з достатньо тонкими (1-3 нм) зовнішніми потенціальними бар'єрами, що дозволяє зменшити час життя електрона в робочих квазістаціонарних станах до рівня (або й менше) часу релаксації енергії електронів за рахунок дисипативних процесів (фонони, домішки); 2) сумарна ширина ям  $b$  у грубому наближенні визначається з формули

$$E_n = (n\pi\hbar)^2 (2m_0b^2)^{-1},$$

тоді  $b = \pi [3\hbar / (2m_0\omega_{21})]^{1/2}$ , потім відповідним підбором розміру першої ями  $b_1$  досягається точна величина потрібної частоти  $\omega_{21}$  лазерного випромінювання; 3) зменшення концентрації Ga в ямах зміщує весь енергетичний спектр в область менших енергій, а так як  $J_0^+ \sim (E_2)^{1/2}$ , то й струм збудження зменшується е декілька разів.

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Голант Е.И., Паиковский А.Б. Двухуровневые волновые функции электронов в двухбарьерных квантово-размерных структурах в электрическом поле конечной амплитуды // ФТП. – 2000. – **34**. – С.334-339.
2. Паиковский А.Б. Четность и резкое расширение резонансных уровней в трехбарьерных структурах // Письма в ЖЭТФ. – 2005. – **82** - С.228-233.
3. Елесин В.Ф. Высоочастотный отклик двухбарьерных наноструктур // ЖЭТФ. – 2002. – **121** – С.925-933.
4. Елесин В.Ф. Высоочастотный отклик двухъямных наноструктур // ЖЭТФ. – 2005. – **127** – С.131-141.
5. Tkach N.V., Seti Yu.A. Evolution and collapse of quasi-stationary states of an electron in planar symmetric three-barrier resonance-tunneling structures // Low Temperature Physics. – 2009. – **35**. – P.556-565.

6. Tkach N.V., Seti Yu.A. Оптимизация конфигурации симметричной трехбарьерной резонансно-туннельной структуры как активного элемента квантового каскадного детектора // ФТП. – 2011. – **45**. – С.387-396.
7. Tkach N.V., Seti Yu.A. Evolution of the spectral parameters of quasiparticles in an open symmetrical three-barrier resonant tunneling nanostructure // Phys. Sol. State. – 2011. – **53**. – P.590-598.
8. Голант Е.И., Паиковский А.Б., Тазер А.С. Прохождение электронов через потенциальные барьеры в высокочастотных полях // ФТП. – 1994. – **28**. – С.740-751.
9. Faist J., Capasso F., Sivco D.L. et al. Quantum Cascade Laser // Science. – 1994. – **264**. – P.553-556.
10. Faist J., Capasso F., Sirtori C. et al. Vertical transition quantum cascade laser with Bragg confined excited state // Appl. Phys. Lett. – 1995. – **66**. – P.538-540.
11. Diehl L., Bour D., Corzine S. et al. High-power quantum cascade lasers grown by low-pressure metal organic vapor-phase epitaxy operating in continuous wave above 400K // Appl. Phys. Lett. – 2006. – **88**. – P.201115-201117.
12. Wang Qi Jie, Pflug C., Diehl L. et al. High performance quantum cascade lasers based on three-phononresonance design // Appl. Phys. Lett. – 2009. – **94**. – P.011103-011106.
13. Gmachl C., Capasso F., Sivco D.L., Cho A.Y. Recent progress in quantum cascade lasers and applications // Rep.Prog.Phys. – 2001. – **64**. – P.1533-1601.