

ПЕРЕНОРМУВАННЯ ЕЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА ОБМЕЖЕНИМИ ФОНОНАМИ У ДВОЯМНІЙ ПЛОСКІЙ НАНОСТРУКТУРІ В ПОСТІЙНОМУ ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ ЗА ДОВІЛЬНОЇ ТЕМПЕРАТУРИ

Ю. О. Сеті, М. В. Ткач, М. В. Паньків

*Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012, Україна*

(Отримано 12 червня 2015 р.; в остаточному вигляді — 23 вересня 2015 р.)

У моделі ефективних мас електрона й поляризаційного континууму для обмежених фононів побудовано теорію перенормованих спектральних параметрів електрона у двоямній резонансно-тунельній наногетероструктурі в постійному електричному полі за довільної температури.

Показано, що частота лазерної генерації двоямної резонансно-тунельної структури як окремого каскаду квантового каскадного лазера практично не залежить від температури, а ширина смуги випромінювання слабо збільшується (~ 1 meV) зі зміною температури від криогенної до кімнатної.

Ключові слова: обмежені фонони, спектр електрона, квантовий каскадний лазер, резонансно-тунельна структура.

PACS number(s): 78.67.De, 63.20.Kr, 72.10.Di

I. ВСТУП

Від часу створення перших квантових каскадних лазерів (ККЛ) [1, 2] минуло вже двадцять років, однак ще досі триває інтенсивне експериментальне [3–5] і теоретичне [6–8] дослідження фізичних процесів, що відбуваються в цих наноприладах. Унаслідок вдосконалення параметрів сучасних ККЛ загальна ідея їх роботи, в основному, не змінилась і залишилась такою ж як і найперших ККЛ. Вона полягає в тому, що цей наноприлад складається з певної кількості (від декількох десятків до сотень) однотипних каскадів, якими є багатопарові плоскі наносистеми. Електрони, тунелюючи крізь активну зону окремого каскаду, здійснюють квантові переходи між двома робочими рівнями (другим і першим збудженими) з випромінюванням квантів електромагнітного поля. Для забезпечення інверсної заселеності зазвичай використовують трирівневу схему, в якій електрони з першого збудженого рівня, випромінюючи фонони, потрапляють в основний стан. Далі крізь інжектор вони переходять у наступний каскад ККЛ з енергією, що відповідає другому збудженому стану вже цього каскаду. Належно підібрана величина постійного електричного поля синхронізує роботу всіх каскадів.

Функціонуючі ККЛ базуються на кількох групах напівпровідникових матеріалів: InGaAs/AlInAs, GaAs/AlGaAs, InAs/AlSb, InGaAs/AlAsSb, InGaAs/GaAsSb. Природні фізичні параметри (ефективна маса електрона, висота потенціального бар'єра між контактуючими середовищами, показник заломлення та ін.) цих наносистем дають змогу створювати ККЛ, які працюють у всіх інтервалах частот актуальної інфрачервоної та терагерцової областей. Варіація геометричної конфігурації каскаду та добір фізичних параметрів активної зони й інжектора дозволяють

установити потрібну робочу частоту наноприладу.

Перші експериментально створені ККЛ працювали за низьких температур ($T \approx 0$ K), тому вплив фононів вважали несуттєвим, а увагу теоретичних досліджень, в основному, зосереджували на вивченні залежностей спектральних і транспортних властивостей від фізичних параметрів і геометричної структури РТС [6–14].

Із розширенням температурного інтервалу функціонування ККЛ, а особливо з появою безінжекторних ККЛ [15, 16], виникла суттєва потреба вивчити роль електрон-фононної взаємодії в перенормуванні електронного спектра. Справді, оскільки збільшення температури приводить до збільшення середніх значень фононних чисел заповнення, а від них залежить зміщення й розширення електронних рівнів, то це може змінювати як енергію лазерного випромінювання, так і величину енергії безвипромінювальних переходів. Такі процеси можуть погіршувати або припиняти роботу ККЛ.

Теорію електрон-фононної взаємодії в плоских наногетеросистемах розвивали в багатьох роботах на основі моделі ефективних мас електронів і моделі діелектричного континууму для фононів [6, 17–23]. Гамільтоніан електрон-фононної системи зазвичай записували в зображенні вторинного квантування лише за фононними змінними і в координатному за електронними. Це давало змогу, використовуючи золоте правило Фермі, виконати розрахунок імовірностей квантових переходів між електронними станами. Однак у переважній більшості цитованих праць не достатньо досліджено електрон-фононні механізми, які викликають зміни з температурою електронних енергій у РТС.

У пропонованій статті на основі моделі різних ефективних мас електрона та непараболічного закону дис-

персії в зоні провідності двоємної РТС, а також у моделі діелектричного континууму для фононів отримано в зображенні вторинного квантування за всіма змінними гамільтоніан електронів, які взаємодіють з обмеженими оптичними фононами. Із використанням апарату температурних функцій Гріна досліджено перенормування спектральних параметрів електронних станів та смуги випромінювання двоємної РТС як окремого каскаду ККЛ.

II. ТЕОРІЯ ВЗАЄМОДІЇ ЕЛЕКТРОНІВ З ОПТИЧНИМИ ОБМЕЖЕНИМИ ФОНОНАМИ У ТРИБАР'ЄРНІЙ РТС З ПОСТІЙНИМ ЕЛЕКТРИЧНИМ ПОЛЕМ

Теорію електрон-фононої взаємодії будуватимемо в моделі закритої РТС із безмежно широкими зовнішніми потенціальними бар'єрами, оскільки саме в такій системі для електрона є повна система локалізованих ортонормованих хвильових функції, що дозволяє застосувати метод температурних функцій Гріна для дослідження перенормування взаємодією з фононами спектра та загасань електронних станів.

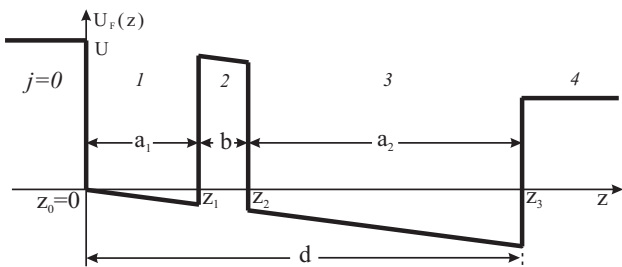


Рис. 1. Енергетичний профіль двоємної РТС в постійному електричному полі.

Отже, у декартовій системі координат розглядаємо двоємну РТС як окремий каскад ККЛ [15] в однорідному електричному полі напруженості F (див. рис. 1). Беручи до уваги незначну різницю величин сталих ґраток контактуючих середовищ-ям і середовищ-бар'єрів, розраховуємо енергетичний спектр та хвильові функції електрона в такій наносистемі в моделі ефективної маси з урахуванням непараболічності зони провідності та прямокутного потенціального ре-

льефу

$$m(z, E) = \begin{cases} m_w(1 + \frac{E}{E_{gw}}), \\ m_b(1 - \frac{U-E}{E_{gb}}), \end{cases} \quad U(z) = \begin{cases} 0, \text{ ями} \\ U, \text{ бар'єри} \end{cases}, \quad (1)$$

який унаслідок дії електричного поля в кожній області РТС лінійно спадає вздовж осі z

$$U_F(z) = U(z) - eF\{z[\Theta(z) - \Theta(z-d)] + d\Theta(z-d)\}. \quad (2)$$

Тут E , e — енергія та заряд електрона; m_w , m_b — ефективні маси електрона в ямах та бар'єрах наносистеми без урахування непараболічності; E_{gw} , E_{gb} — ширини заборонених зон напівпровідникових матеріалів ям і бар'єрів; F — напруженість електричного поля; $d = a_1 + a_2 + b$ — лінійний розмір двоємної РТС.

Розв'язок тримірної рівняння Шредингера для електрона

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m(z, E)} \nabla + U_F(z) \right\} \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}} \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3)$$

шукаємо у вигляді

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{S}} \Psi_n(z). \quad (\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho} + z\mathbf{n}_z). \quad (4)$$

У результаті отримуємо повну енергію електрона

$$E_{n\mathbf{k}} = E_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_n} \quad (5)$$

як суму енергії поздовжнього руху та кінетичної енергії у площині xOy із скорельованою за РТС ефективною масою електрона

$$\frac{1}{m_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\Psi_n(z)|^2}{m(z, E_n)} dz. \quad (6)$$

Тут \mathbf{k} і $\boldsymbol{\rho}$ — квазіімпульс і радіус-вектор електрона в площині xOy , S — площа основної області в цій площині. Спектр енергій E_n і хвильові функції $\Psi_n(z)$ визначаємо одномірним рівнянням Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + U_F(z) \right\} \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z), \quad (7)$$

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

$$\Psi_n(z) = \begin{cases} \Psi_n^{(j)}(z) = A_n^{(j)} e^{\chi_n^{(j)} z}, & j = 0, \\ \Psi_n^{(j)}(z) = A_n^{(j)} \text{Ai}(\xi_n^{(j)}(z)) + B_n^{(j)} \text{Bi}(\xi_n^{(j)}(z)), & j = 1, 2, 3, \\ \Psi_n^{(j)}(z) = A_n^{(j)} e^{-\chi_n^{(j)} z}, & j = 4 \end{cases} \quad (8)$$

$$\text{де } \chi_n^{(0)} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_b(E_n)(U - E_n)}; \quad \chi_n^{(4)} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_b(E_n)(U - E_n - V)};$$

$$V = eFd; \quad \xi_n^{(j)}(z) = \begin{cases} - \left(\frac{2m_b(E_n)Vd^2}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{E_n - U}{V} + \frac{z}{d} \right), & j = 2; \\ - \left(\frac{2m_w(E_n)Vd^2}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{E_n}{V} + \frac{z}{d} \right), & j = 1, 3; \end{cases} \quad (9)$$

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

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

$$\begin{cases} \Psi_n^{(j)}(z_j) = \Psi_n^{(j+1)}(z_j); \\ \frac{1}{m_j(E_n)} \frac{d\Psi_n^{(j)}(z)}{dz} \Big|_{z=z_j} = \frac{1}{m_{j+1}(E_n)} \frac{d\Psi_n^{(j+1)}(z)}{dz} \Big|_{z=z_j}, \end{cases} \quad (10)$$

разом з умовою нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(z) \Psi_{n'}(z) dz = \delta_{nn'} \quad (11)$$

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 електрона з рівняння (3) до представлення вторинного квантування на квантованій хвильовій функції

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{n,\mathbf{k}} \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \hat{a}_{n\mathbf{k}} \quad (12)$$

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

$$\hat{H}_e = \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) H_e(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{n\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} \hat{a}_{n\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{n\mathbf{k}}. \quad (13)$$

Потенціал поляризації (Φ) та енергетичний спектр (Ω) обмежених фонових у моделі діелектричного континууму, як відомо [17–23], визначаємо рівнянням

$$\varepsilon_j(\omega) \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) = 0 \quad (14)$$

за умови, що

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

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

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

з відомими величинами частот поздовжніх (ω_{Lj}) і поперечних (ω_{Tj}) коливань у масивних аналогах цього

середовища та високочастотних діелектричних проникностей ($\varepsilon_{\infty j}$). Із (15) видно, що енергії обмежених фонових визначаються тими ж частотами (ω_{Lj}), як і у відповідних масивних матеріалах

$$\Omega_j = \hbar \omega_{Lj}. \quad (17)$$

Щоб отримати гамільтоніан обмежених фонових у представленні вторинного квантування потенціал поля поляризації j -го середовища розкладаємо у двовимірний ряд Фур'є

$$\Phi_j(\boldsymbol{\rho}, z) = \sum_{\lambda \mathbf{q}} \Phi_{j\lambda}(\mathbf{q}, z) e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}} \quad (18)$$

з коефіцієнтами ($\Phi_{j\lambda}(\mathbf{q}, z)$), що містять усі можливі гармоніки ($\lambda = 1, 2, \dots, \infty$). Подальшим переходом від фур'є-компонент до нормальних узагальнених координат і імпульсів, а потім до операторів чисел заповнення за відомою квантово-механічною системою [20] визначаємо гамільтоніан обмежених фонових у представленні їх чисел заповнення

$$\hat{H}_L = \sum_{j\lambda \mathbf{q}} \Omega_j (\hat{b}_{j\lambda \mathbf{q}}^+ \hat{b}_{j\lambda \mathbf{q}} + 1/2), \quad (19)$$

де $\hat{b}_{j\lambda \mathbf{q}}^+$, $\hat{b}_{j\lambda \mathbf{q}}$ — бозонні оператори народження і знищення.

Гамільтоніан електрон-фонових взаємодій

$$H_{e-L}(\mathbf{r}) = -e\Phi(\mathbf{r}) = -e \sum_{j=0}^4 \Phi_j(\boldsymbol{\rho}, z) \quad (20)$$

унаслідок нормалізації та квантування поля обмежених фонових та переходу від координатного до зображення чисел заповнення на квантованій хвильовій функції (12) отримуємо в зображенні вторинного квантування за всіма змінними системи

$$\begin{aligned} \hat{H}_{e-L} = & \sum_{j=0}^4 \sum_{\lambda \mathbf{q}} \sum_{n_1 n \mathbf{k}} f_{n_1 n}^{(j)}(\lambda, \mathbf{q}) \\ & \times \hat{a}_{n_1 \mathbf{k} + \mathbf{q}}^+ \hat{a}_{n \mathbf{k}} (\hat{b}_{j\lambda \mathbf{q}} + \hat{b}_{j\lambda - \mathbf{q}}^+), \end{aligned} \quad (21)$$

де

$$f_{n_1 n}^{(j)}(\lambda, q) = -\sqrt{\frac{8\pi e^2 \hbar}{S[\pi^2 \lambda^2 + q^2(z_j - z_{j-1})^2]} \left[\frac{\partial \varepsilon_j(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_{jL}} \right]^{-1}} \times \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \Psi_{n_1}^{(j)*}(z) \Psi_n^{(j)}(z) \begin{cases} \cos \left[\pi \lambda \left(\frac{z - z_{j-1}}{z_j - z_{j-1}} - 1/2 \right) \right], & \lambda = 1, 3, 5 \dots \\ \sin \left[\pi \lambda \left(\frac{z - z_{j-1}}{z_j - z_{j-1}} - 1/2 \right) \right], & \lambda = 2, 4, 6 \dots \end{cases} \quad (22)$$

— функції зв'язку електронів у станах n_1, n з обмеженими фононами j -го середовища РТС; $z_{-1} \rightarrow -\infty$, $z_4 \rightarrow \infty$.

Знайдений гамільтоніан електрон-фононої системи у представленні вторинного квантування за всіма змінними

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_L + \hat{H}_{e-L} \quad (23)$$

дає змогу розрахувати фур'є-образи електронних функцій Гріна.

За скінченної температури ($T \neq 0\text{K}$) і малих концентрацій електронів, згідно з діаграмною технікою Фейнмана-Пайнса [24], при слабкому зв'язку електронів з обмеженими фононами фур'є-образ електронної функції Гріна визначаємо рівнянням Дайсона

$$G_n(\mathbf{k}, \hbar\omega) = [\hbar\omega - E_{n\mathbf{k}} - M_n(\hbar\omega, \mathbf{k})]^{-1}. \quad (24)$$

Тут масовий оператор $M_n(\hbar\omega, \mathbf{k})$ розраховано в однофононному наближенні

$$M_n(\hbar\omega, \mathbf{k}) = \sum_{j=0}^4 \sum_{n_1} \sum_{\lambda, \mathbf{q}} f_{n_1 n}^{(j)}(\lambda, \mathbf{q}) f_{nn_1}^{(j)*}(\lambda, \mathbf{q}) \times \left[\frac{1 + \nu_j}{\hbar\omega - E_{n_1}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \Omega_j + i\eta} + \frac{\nu_j}{\hbar\omega - E_{n_1}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \Omega_j + i\eta} \right], \quad (25)$$

обидва доданки якого мають очевидний фізичний зміст: перший описує процеси з народженням обмежених фононів, що характеризуються середніми значеннями чисел заповнення $\nu_j = (e^{\Omega_j/k_B T} - 1)^{-1}$, а другий — зі знищенням фононів.

Перехід у (25) від суми за двовірним квазіімпульсом \mathbf{q} до інтеграла ($\sum_{\mathbf{q}} \Rightarrow (2\pi)^{-2} S \int \int d^2\mathbf{q} \dots$) у полярній системі координат із подальшим використанням відомого співвідношення Дірака

$$\int \int \frac{d^2\mathbf{q}}{g(\mathbf{q}) + i\eta} \Rightarrow \mathcal{P} \int \int \frac{d^2\mathbf{q}}{g(\mathbf{q})} - i\pi \int \int \delta[g(\mathbf{q})] d^2\mathbf{q} \quad (26)$$

дає змогу розрахувати масовий оператор. Згідно з теорією функцій Гріна, враховуючи слабкість електрон-фононного зв'язку, дійсна та уявна частини МО визначають, відповідно, зміщення ($\Delta_n = \text{Re} M_n(\hbar\omega = E_n, \mathbf{k} = 0)$) і загасання ($\Gamma_n = -2\text{Im} M_n(\hbar\omega = E_n, \mathbf{k} = 0)$) n -го електронного стану.

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

$$\Delta_n = \Delta_{nn} + \sum_{n_1 \neq n} \Delta_{nn_1}, \quad (27)$$

$$\Gamma_n = \Gamma_{nn} + \sum_{n_1 \neq n} \Gamma_{nn_1}, \quad (28)$$

де Δ_{nn}, Γ_{nn} — парціальні внески внутрішньозонної електрон-фононої взаємодії в повний зсув і загасання n -го стану; $\Delta_{nn_1}, \Gamma_{nn_1}$ — парціальні внески в Δ_n і Γ_n міжзонної взаємодії електронів з L-фононами.

III. ВПЛИВ ЕЛЕКТРОН-ФОНОНОЇ ВЗАЄМОДІЇ НА ТЕМПЕРАТУРНУ ЗАЛЕЖНІСТЬ СПЕКТРАЛЬНИХ ПАРАМЕТРІВ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ

Розвинути в попередньому параграфі теорію електронних станів та електрон-фононої взаємодії застосуємо для дослідження перенормованого спектра електронів у двоямному каскаді ККЛ [15] з GaAs ямами і $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ бар'єрами залежно від напруженості електричного поля (F) та температури наносистеми. Фізичні параметри складників досліджуваної РТС відомі: $\varepsilon_{\infty w} = 10.89$, $\varepsilon_{\infty b} = 10.48$, $\hbar\omega_{Lw} =$

36.25 meV, $\hbar\omega_{Lb} = 35.31$ meV, $\hbar\omega_{Tw} = 33.29$ meV, $\hbar\omega_{Tb} = 33.17$ meV, $m_w = 0.067 m_e$, $m_b = 0.08 m_e$, $E_{gw}^{T=0K} = 1520$ meV, $E_{gb}^{T=0K} = 1626.5$ meV, $E_{gw}^{T=300K} = 1424$ meV, $E_{gb}^{T=300K} = 1533.5$ meV, $U^{T=0K} = 130$ meV, $U^{T=300K} = 117.45$ meV. Геометричні параметри РТС вибирали такими ж, як і в експериментальній роботі [15]: $a_1 = 7.1$ nm, $a_2 = 16.7$ nm, $b = 3.1$ nm.

Згідно з основною ідеєю роботи [15] функціонування ККЛ реалізовано у процесі квантових переходів електронів зі стану $|3\rangle$ у стан $|2\rangle$ з випромінюванням електромагнітної хвилі частотою $\omega_{32}^{\text{exp}} = 4.6$ THz

і з наступним безвипромінювальним переходом з другого на основний рівень, різниця енергій між якими відповідає енергії фонона ($\hbar\omega_{21} \approx 36$ meV). Узгоджена робота каскадів ККЛ забезпечувалася прикладеним постійним електричним полем напруженістю $F = 17$ kV/cm.

Щоб вивчити вплив електрон-фононої взаємодії на температурну еволюцію спектральних параметрів смуги випромінювання ККЛ, виконано розрахунки енергетичних рівнів (при $\mathbf{k} = 0$), їх зміщень та загасань для трьох робочих електронних станів.

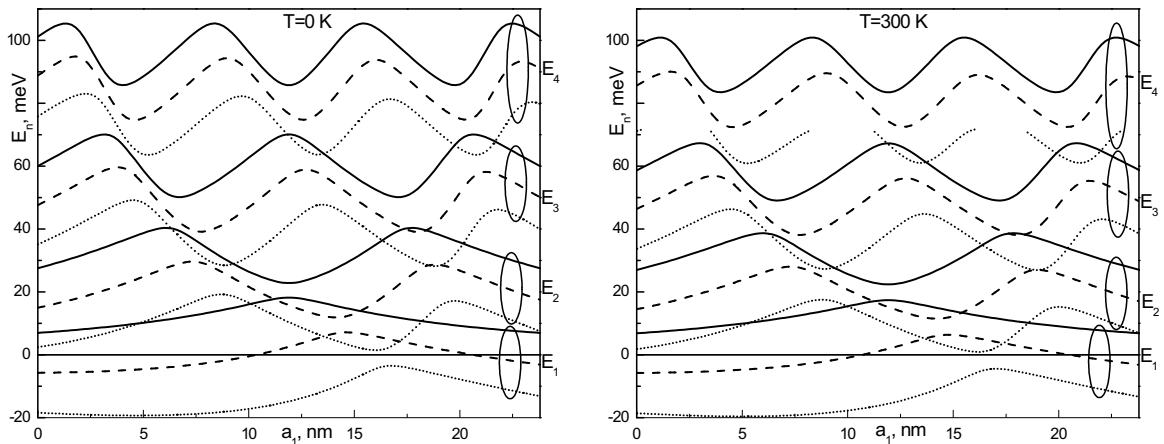


Рис. 2. Еволюція енергетичного спектра електрона залежно від конфігурації РТС (a_1) у електричному полі ($F = 17$ kV/cm — пунктирна крива, $F = 8.5$ kV/cm — штрихова крива) і без нього ($F = 0$ — суцільна крива) за криогенної ($T = 0$ K) та кімнатної ($T = 300$ K) температур.

На рис. 2 показано еволюцію спектра електронів залежно від конфігурації РТС, тобто від ширини ями a_1 за фіксованої ширини загальної ями ($a = a_1 + a_2 = 23.8$ nm), при $T = 0$ K та $T = 300$ K при двох значеннях напруженості постійного електричного поля ($F = 8.5$ kV/cm; 17 kV/cm) і без нього ($F = 0$).

Із рис. 2 видно, що еволюція енергетичного спектра (E_n) від a_1 та F слабо залежить від температури в усій області її зміни від криогенної до кімнатної.

За відсутності електричного поля залежності енергій усіх трьох станів електрона від положення внутрішнього бар'єра між зовнішніми бар'єрами наносистеми симетричні щодо середини загальної потенціальної ями ($a_1 = a/2$). Поява електричного поля порушує цю симетрію тим сильніше, чим більша напруженість поля (F). Хоча збільшення F приводить до майже лінійного низькоенергетичного зміщення всіх електронних станів так, що їх енергії поступово потрапляють у від'ємну область, однак загальні властивості залежностей E_n від a_1 не змінюються зі зміною напруженості поля. Видно, що на кривих $E_n(a_1)$ кожний енергетичний рівень n -го стану має n максимумів та $(n+1)$ мінімумів, які виникають (крім мінімумів при $a_1 = 0$ та $a_1 = a$) унаслідок антикросингу. Відстань між енергетичними рівнями в антикросингу, як відомо [11], визначається товщиною (b) внутрішнього потенціального бар'єра: зі збільшенням b ширина антикросингу зменшується аж до повного колапсу станів.

Звернімо увагу на специфічну поведінку четвертого енергетичного рівня. Унаслідок залежності висот потенціальних бар'єрів від температури та напруженості поля F електронні стани, енергії яких задовольняють умову $E \geq (U - eFd)$, виявляються квазістаціонарними зі скінченною тривалістю життя. Тому на рис. 2 за $T = 300$ K та $F = 17$ kV/cm у деяких областях зміни a_1 у дискретному спектрі четвертий енергетичний рівень (E_4) зникає.

Взаємодія з фононами в РТС приводить до перенормування всіх спектральних параметрів електронних станів, унаслідок чого виникають зміщення енергетичних рівнів та загасання. Розрахунок зміщень і загасань виконано згідно з теорією, розвинутою в попередньому параграфі. Результати розрахунку зміщень трьох найнижчих робочих рівнів за $T = 0$ K наведені на рис. 3. Оскільки за криогенної температури ($T = 0$ K) відбуваються лише процеси з народженням віртуальних фононів, то енергії електронних станів унаслідок такої взаємодії можуть тільки зменшуватися, тобто зміщення від'ємні, що й видно з рис. 3. Із цього ж рисунка також видно, що за відсутності електричного поля залежності зміщень (Δ_n) всіх трьох енергетичних рівнів ($n = 1, 2, 3$), подібно до енергетичного спектра, симетричні щодо середини загальної потенціальної ями ($a_1 = a/2$). Кількість максимумів і мінімумів на залежностях Δ_n від a_1 збігається з їх кількістю на відповідних залежностях $E_n(a_1)$.

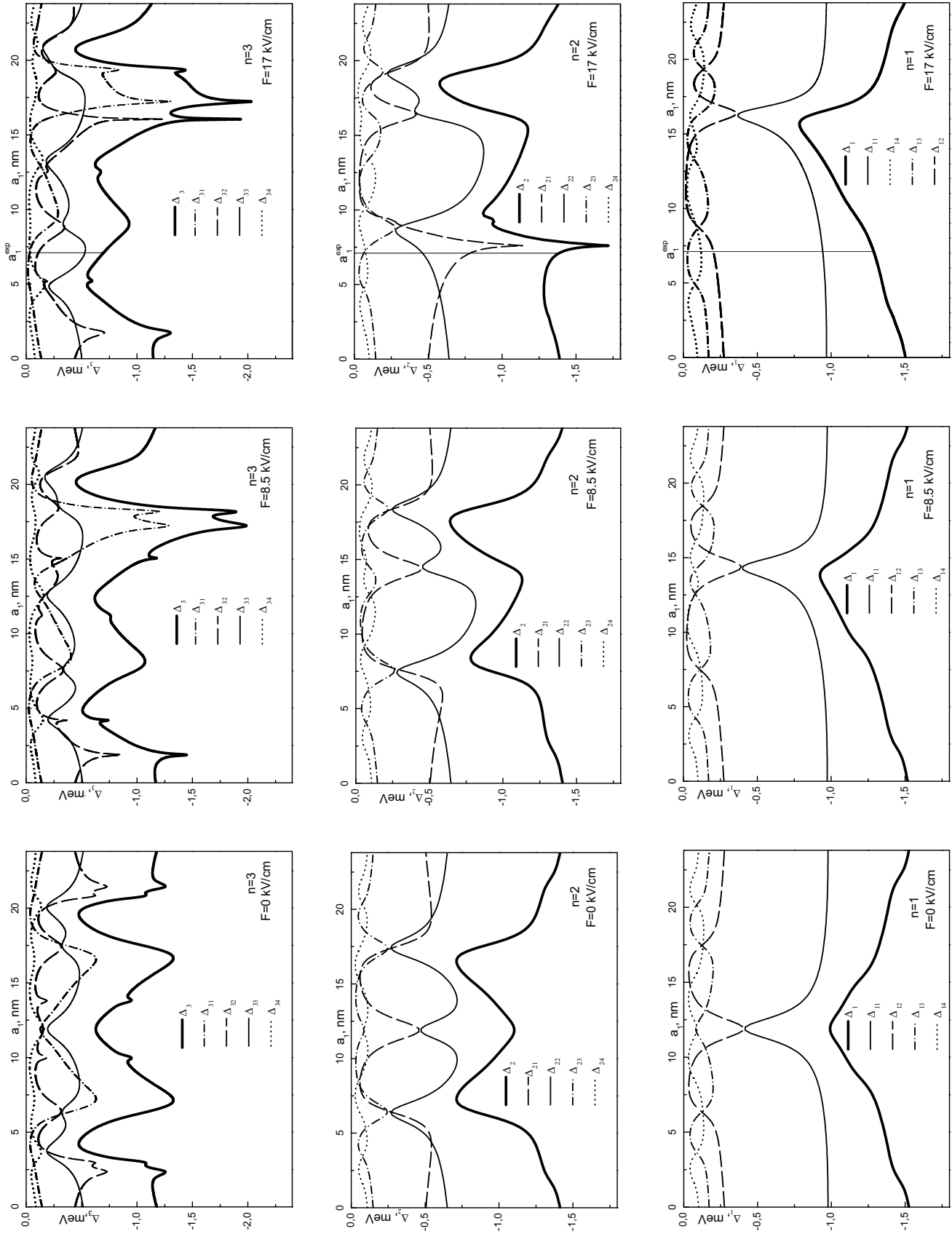


Рис. 3. Залежності від конфігурації РТС повних (Δ_n) і парціальних ($\Delta_{nn'}$) зміщень енергетичних рівнів трьох робочих станів електрона ($n = 1, 2, 3$) за $T = 0\text{ K}$ та при двох значеннях напруженості постійного електричного поля ($F = 8.5\text{ kV/cm}$; 17 kV/cm) і без нього ($F = 0$).

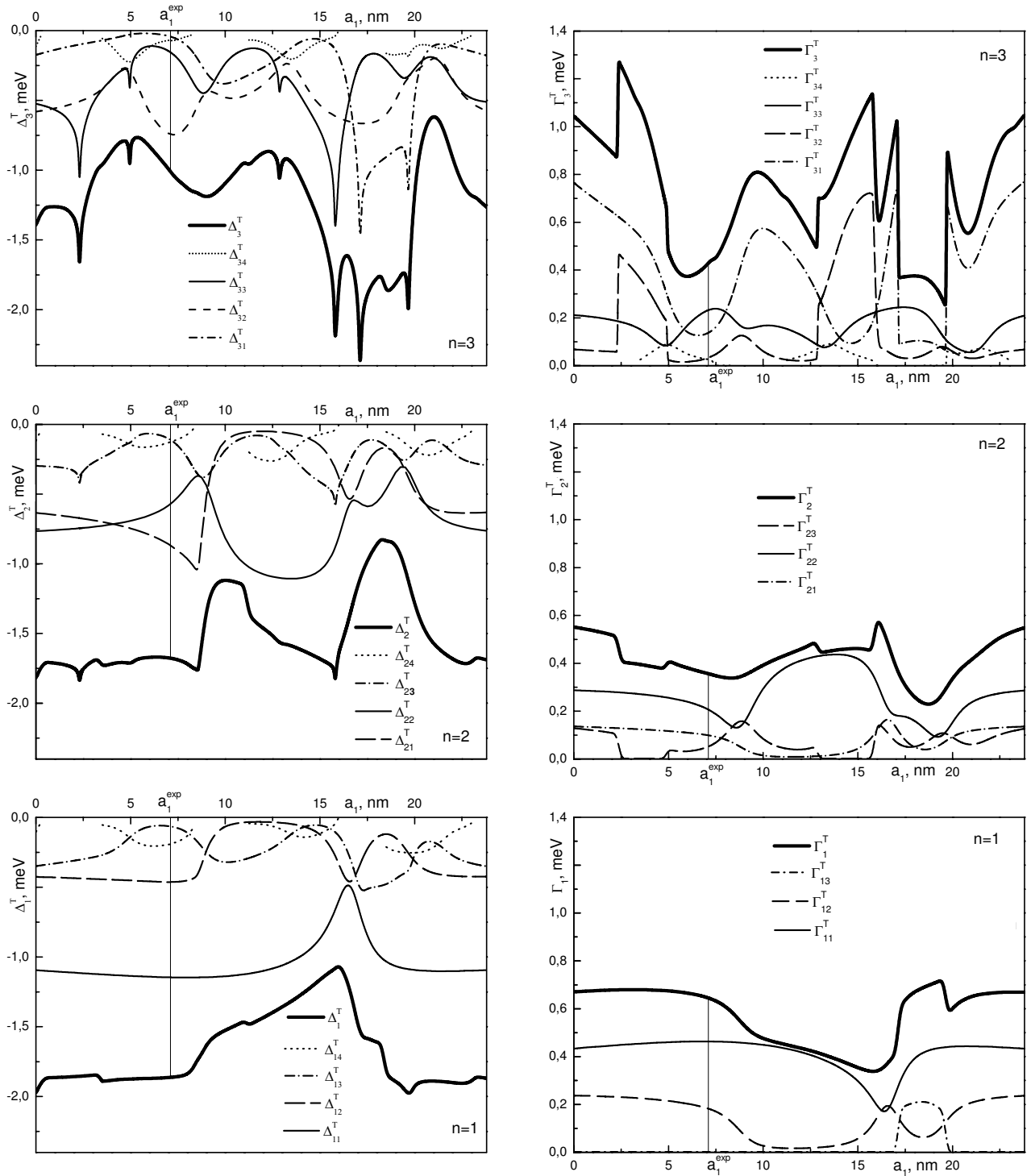


Рис. 4. Залежності повних (Δ_n^T, Γ_n^T) і парціальних ($\Delta_{nn'}^T, \Gamma_{nn'}^T$) зміщень і загасань енергетичних рівнів трьох робочих станів електрона ($n = 1, 2, 3$) від конфігурації РТС в електричному полі ($F = 17 \text{ kV/cm}$) за кімнатної температури ($T = 300 \text{ K}$).

Зазначимо, що при $F = 0$ майже у всьому інтервалі зміни a_1 ієрархія величин парціальних внесків у зміщення основного стану (Δ_1) така, що внутрішньозонна взаємодія через обмежені фонони (Δ_{11}) переважає міжзонну ($\Delta_{1n \neq 1}$). У тих геометричних конфігураціях РТС, де відбуваються антикросинги двох рівнів E_1 та E_2 , величини парціальних внесків обох станів, які зумовлені внутрішньозонною та міжзонною

взаємодіями, стають близькими. Із рис. 3 видно, що зміщення дубо і третього рівнів також переважно формуються внутрішньозонною взаємодією і сумірно з нею міжзонною в антикросингах. Крім цього, у тих конфігураціях РТС, де відбувається зміна ймовірностей перебування електрона в обох потенціальних ямах, через значну зміну функцій зв'язку збільшуються внески відповідної міжзонної взаємодії.

Із появою електричного поля ($F \neq 0$) ці закономірності дещо порушуються. Зі збільшенням поля F зсуви енергетичних рівнів (Δ_n), як функції a_1 деформуються зі зміщенням їх мінімумів і максимумів в області більших значень a_1 із проявом складної структури, зумовленої зміною парціальних внесків міжзонної взаємодії.

Що ж до загасань (Γ_n) електронних станів при криогенній температурі, то оскільки вони визначаються уявною частиною масового оператора (25), а вона відмінна від нуля для n -их станів лише за умови, що $E_n - E_{n'} > \hbar\omega_L$, тому при $T = 0$ К загасання основного стану відсутнє ($\Gamma_1 = 0$), у всьому інтервалі зміни a_1 та F , а загасання збуджених станів ($\Gamma_{n \geq 2}$) виникають лише тоді, коли зазначена умова виконується. Їх властивості подібні до тих, які характерні для Γ_n при $T \neq 0$ К, що будуть проаналізовані далі.

За температури відмінної від нуля в системі, крім віртуальних, уже існують і реальні фонони, тому в ній відбуваються процеси як з випромінюванням (перший доданок в масовому операторі) так і з поглинанням фононів (другий доданок в масовому операторі). Це приводить до виникнення температурних зміщень (Δ_n^T) і загасань (Γ_n^T) всіх станів електрона, включно з основним.

На рис. 4 наведені результати розрахунку зміщень (Δ_n^T) і загасань (Γ_n^T) та їх парціальних складників залежно від конфігурації РТС за кімнатної температури ($T = 300$ К) і за напруженості поля ($F = 17$ кВ/см) як у роботі [15]. Із рис. 4 видно, що залежності (Δ_n^T) від a_1 й ієрархія парціальних внесків у них внутрішньо- та міжзонної взаємодій при $T = 300$ К якісно подібні до тих, які були за $T = 0$ К. Так, при експериментальній конфігурації РТС ($a_1 = 7.1$ нм) і напруженості поля $F = 17$ кВ/см зміщення рівнів за $T = 0$ К і $T = 300$ К такі: $\Delta_1 = -1.3$ меВ, $\Delta_2 = -1.4$ меВ, $\Delta_3 = -0.7$ меВ; $\Delta_1^T = -1.9$ меВ; $\Delta_2^T = -1.7$ меВ; $\Delta_3^T = -1.0$ меВ. Отже, з підвищенням температури абсолютні величини повних зміщень усіх рівнів слабо зростають.

Аналіз загасань (Γ_n^T) показує, що вони є складними нелінійними функціями від a_1 . Як видно з рис. 4 існує повна кореляція між ієрархіями парціальних внесків у Γ_n^T і Δ_n^T . Так, у загасанні основного стану головним

є внесок міжзонної взаємодії і лише в околі антикросингу E_1 і E_2 він є сумірним з Γ_{12}^T . Щодо загасань другого і третього рівнів, то вони, крім внутрішньозонної взаємодії, формуються міжзонною в тих конфігураціях РТС, де виникають антикросинги відповідних рівнів або відбувається тунелювання електрона з однієї ями РТС в іншу.

Розрахунок показав, що при експериментальній конфігурації РТС ($a_1 = 7.1$ нм, $F = 17$ кВ/см) загасання за $T = 0$ К та $T = 300$ К такі: $\Gamma_3 = 0.08$ меВ, $\Gamma_1^T = 0.65$ меВ, $\Gamma_2^T = 0.36$ меВ, $\Gamma_3^T = 0.43$ меВ.

Отримані величини перенормованих енергій $\tilde{E}_n = E_n + \Delta_n$ та загасань Γ_n електронних станів дають змогу визначити температурну зміну енергії $\Delta E_{32} = (\tilde{E}_3^T - \tilde{E}_2^T) - (\tilde{E}_3 - \tilde{E}_2)$ та розширення $\Delta\Gamma_{32} = (\Gamma_3^T + \Gamma_2^T) - (\Gamma_3 + \Gamma_2)$ смуги лазерного випромінювання. Розрахунок показав, що в експериментальній конфігурації двоямного каскаду ККЛ [15] температурне зміщення за рахунок взаємодії електронів з L-фононами практично відсутнє, а розширення становить 0.71 меВ. Отже, теоретичне значення енергії лазерного випромінювання $E_{32} = 18.8$ меВ добре узгоджується з експериментальним $E_{32}^{\text{exp}} = 19$ меВ.

IV. ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ

1. Розвинено теорію електрон-фононної взаємодії у двоямній наносистемі в постійному електричному полі як окремому каскаді безінжекторного ККЛ.

2. Досліджено внески внутрішньо- та міжзонної електрон-фононної взаємодії в перенормування спектральних параметрів (зміщень і загасань) електронних станів залежно від конфігурації, величини напруженості електричного поля та температури РТС.

3. Установлено, що основний внесок у перенормування спектральних параметрів електронних станів у РТС дає внутрішньозонна взаємодія електронів з обмеженими фононами в інтервалі зміни температури від криогенної до кімнатної.

4. Показано, що L-фонони в інтервалі від криогенної до кімнатної температур не змінюють енергію лазерного випромінювання, хоча й приводять до слабкого (~ 0.7 меВ) розширення смуги випромінювання.

[1] J. Faist *et al.*, Science **264**, 533 (1994).
 [2] C. Gmachl, F. Capasso, D. L. Sivco, A.Y. Cho, Rep. Prog. Phys. **64**, 1533 (2001).
 [3] A. Bismuto, M. Beck, J. Faist, Appl. Phys. Lett. **98**, 191104 (2011).
 [4] L. Tombez *et al.*, Opt. Lett. **36**, 3109 (2011).
 [5] A. Jiang *et al.*, J. Appl. Phys. **115**, 163103 (2014).
 [6] J. Faist, *Quantum Cascade Lasers* (Oxford University Press, 2013).
 [7] C. Jirauschek, T. Kubis, Appl. Phys. Rev. **1**, 011307 (2014).
 [8] M. Lindskog *et al.*, Appl. Phys. Lett. **105**, 103106 (2014).

[9] E. Saczuk, J. Z. Kaminski, Phys. Status Solidi (b) **240**, 603 (2003).
 [10] F. H. M. Faisal, J. Z. Kaminski, E. Saczuk, Phys. Rev. A **72**, 023412 (2005).
 [11] N. V. Tkach, Yu. A. Seti, Low Temp. Phys. **35**, 556 (2009).
 [12] M. V. Tkach, Ju. O. Seti, O. M. Voitsekhivska, Condens. Matter Phys. **14**, 43702 (2011).
 [13] M. V. Tkach, Ju. O. Seti, O. M. Voitsekhivska, Acta Phys. Pol. A **124**, 94 (2013).
 [14] M. V. Tkach, Ju. O. Seti, I. V. Boyko, O. M. Voitsekhivska, Rom. Rep. Phys. **65**, 1443 (2013).

- [15] S. Kumar, C. W. I. Chan, C. Qing, J. L. Reno, Appl. Phys. Lett. **95**, 141110 (2009).
 [16] S. Katz, A. Vizbaras, R. Meyer, M.-C. Amann, J. Appl. Phys. **109**, 081101 (2011).
 [17] N. Mori, T. Ando, Phys. Rev. B **40**, 6175 (1989).
 [18] J.-J. Shi, B.C. Sanders, S.-H. Pan, Eur. Phys. J. B **4**, 113 (1998).
 [19] Yan Zu Wei, X.X. Liang, Int. J. Mod. Phys. B **15(27)**, 3539 (2001).
 [20] M. A. Stroscio, M. Dutta, *Phonons in Nanostructures* (Cambridge University Press, 2001).
 [21] Z. W. Yan, S. L. Ban, X. X. Liang. Int. J. Mod. Phys. B **17**, 6085 (2003).
 [22] B. H. Wu, J. C. Cao, G. Q. Xio, H. C. Lio, Eur. Phys. J. B **33**, 9 (2003).
 [23] J. G. Zhu, S. L. Ban, Eur. Phys. J. B **85(140)**, (2012).
 [24] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1963).

**THE ELECTRON SPECTRUM RENORMALIZED DUE TO CONFINED PHONONS
 IN A TWO-WELL PLANE NANOSTRUCTURE DRIVEN BY THE CONSTANT ELECTRIC
 FIELD AT AN ARBITRARY TEMPERATURE**

Ju. O. Seti, M. V. Tkach, M. V. Pan'kiv
Fedkovych Chernivtsi National University,
2, Kotsyubynsky St., Chernivtsi, UA-58012, Ukraine
e-mail: ktj@chnu.edu.ua

The Hamiltonian of electron-phonon interaction is obtained in the representation of the second quantization over all variables using an approximation of the effective mass for the electron taking into account the non-parabolicity of the conductive band and the model of polarizational continuum for the confined optical phonons in a double-well plane resonant tunneling nanostructure placed into the constant electric field. The renormalized magnitudes of spectral parameters (shifts and decays) of the electron states in a double-well cascade of the injectorless quantum cascade laser are calculated in the terahertz range of frequencies within the method of temperature Green's functions taking into account the weak electron-phonon binding in a one-phonon approximation. The diverse mechanisms of the electron-phonon interaction are studied in the formation of shifts and decays of electron states and the radiation band of a cascade of the quantum cascade laser depending on the geometrical configuration of the resonant tunneling nanostructure, the magnitude of a constant homogeneous electric field and temperature. The shifts and decays of electron states are very nonlinear functions of the position of the inner potential barrier in the common potential well of a double-well cascade of the quantum cascade laser and are mainly formed by the intraband interaction, except for those configurations where the anticrossings of electron energies happen. It is established that irrespective of the geometrical design of a cascade of the quantum cascade laser the variance from cryogenic to room temperature brings about an increasing low-energy shift of electron energy states as well as their broadening. It is shown that the frequency of laser generation of a double-well resonant tunneling nanostructure being a separate cascade of the quantum cascade laser basically does not depend on the temperature and width of the radiation band weakly increasing (till 1 meV) when the temperature varies from the cryogenic to room values.