# ВЛАСТИВОСТІ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ У ЗАКРИТІЙ БАГАТОКАСКАДНІЙ НАНОСТРУКТУРІ ЯК ЕЛЕМЕНТІ КВАНТОВОГО КАСКАДНОГО ДЕТЕКТОРА

Ю. О. Сеті<sup></sup>, Є. Ю. Верешко<sup></sup>, М. В. Ткач<sup></sup>

Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича,

вул.Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012, Україна

e-mail: j.seti@chnu.edu.ua

(Отримано 03 липня 2022 р.; в остаточному вигляді — 23 вересня 2022 р.; прийнято до друку — 26 вересня 2022 р.; опубліковано онлайн — 22 листопада 2022 р.)

У наближенні ефективних мас і прямокутних потенціалів розвинено теорію електронних станів у багатокаскадній наноструктурі основного елемента експериментального квантового каскадного детектора. Установлено, що на відміну від моделі окремого каскаду в багатокаскадній структурі для електрона виникають дискретні смуги енергій, кількість рівнів у яких дорівнює кількості каскадів. Залежно від кількості каскадів досліджено особливості розподілів імовірностей наявності електрона в каскадах структури в усіх станах та сили осцилятора квантових переходів, які формують смугу поглинання квантового каскадного детектора.

Ключові слова: наноструктура, електрон, квантовий каскадний детектор.

DOI: https://doi.org/10.30970/jps.26.4702

### I. ВСТУП

Швидкий розвиток нанотехнологій, зумовлений удосконаленням прецизійних методів молекулярнопроменевої епітаксії, металоорганічної парофазної епітаксії, нанолітографії та інших, значно інтенсифікував дослідження багатошарових наноструктур як основних елементів сучасних наноприладів — квантових каскадних лазерів (ККЛ) [1, 2] та квантових каскадних детекторів (ККД) [3, 4]. Типові ККЛ і ККД — це уніполярні пристрої, у яких випромінювання/поглинання електромагнітних хвиль відбувається під час квантових переходів між електронними рівнями розмірного квантування, що виникають у квантово-ямних наношарах каскадів. Робочі частоти зазначених приладів охоплюють актуальну інфрачервону (IЧ) ділянку й визначаються глибинами та ширинами квантових ям у каскадах, що дає змогу вибором фізичних та геометричних параметрів каскадів цілеспрямовано досягати потрібних частот. Для підсилення ефективності функціонування ККЛ і ККД зазвичай основний структурний елемент містить декілька десятків однотипних каскадів.

Перший ККЛ [5] середнього IЧ-діапазону створила наукова група під керівництвом Капассо в 1994 році. Відтоді почався етап інтенсивних досліджень ККЛ. Унаслідок на основі різних систем напівпровідникових матеріалів (InGaAs/InAlAs, GaAs/AlGaAs, InGaAs/AlAs, InGaAs/AlSb тощо) створено лазери середнього та далекого IЧ-діапазонів [6–10]. Ближній IЧ-діапазон для ККЛ ще й досі не досяжний.

У 2004 році наукова група Ґендрона продемонструвала перший ККД [11], який об'єднав ідеї функціонування квантово-ямних ІЧ-фотодетекторів [12, 13] та ККЛ [5]. Багато сучасних ККД [14–17], як і найперші [18, 19], створюють на основі структур (GaAs/AlGaAs, InGaAs/AlInAs та інші) з відносно малими глибинами квантових ям (зазвичай не більше

 $(\infty)$ 

600 meV), що обмежує їхні робочі довжини хвиль середнім та далеким ІЧ-діапазонами. Один із підходів до зменшення довжин хвиль ККД до ближнього ІЧ-діапазону полягає у використанні матеріалів із широкою забороненою зоною і, відповідно, глибокими потенціальними ямами. Згідно з цією ідеєю, у 2008 році група під керівництвом Варді [20] створила ККД ближнього ІЧ-діапазону на основі GaN/AlGaN/AlN. Пізніше з'явилися ККД, елементи яких містять інші широкозонні напівпровідникові матеріали (GaN/AlGaN, GaN/InGaN [21–24], InGaAs/AlAsSb, InAs/AlAsSb [25, 26], ZnO/ZnMgO, ZnCdSe/ZnCdMgSe [27, 28]).

Широкий IЧ-діапазон робочих довжин хвиль і температур (до кімнатних включно), малі темнові струми, висока швидкодія та інші важливі характеристики роблять ККД і ККЛ перспективними для багатьох прикладних застосувань [1, 24, 29]. Це пояснює те, що вже понад 20 років не спадає інтерес дослідників до вдосконалення робочих параметрів цих наноприладів.

У переважній більшості теоретичних праць, присвячених дослідженню ККД і ККЛ, та в усіх експериментальних роботах вважалося, що всі каскади основного робочого елементу цих приладів мають однакові властивості. Тому в більшості праць цього напрямку [30-40], обмежуючись моделлю одно- чи двокаскадної структури або їхніх окремих ділянок (активна зона, екстрактор, інжектор), вивчали властивості електронних станів та фотон- і фонон-супровідних квантових переходів, вплив на них класичних (електричне, магнітне) та квантованих (фонони) полів, неоднорідностей гетеромеж тощо. Результати цитованих та інших праць дають змогу зрозуміти основні фізичні властивості окремих каскадів, однак через обмеженість спрощеної моделі та згідно з квантовомеханічними принципами вони не можуть бути поширені на багатокаскадні структури із взаємодійними каскадами.

У пропонованій статті розвинено теорію спектральних характеристик багатокаскадної наноструктури закритого типу як основного структурного елемента експериментального ККД [3]. Виконані дослідження виявили принципову різницю між властивостями електронних станів у багатокаскадній та однокаскадній структурах.

### II. ТЕОРІЯ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ У БАГАТОКАСКАДНІЙ НАНОСТРУКТУРІ

Розглянуто N-каскадну наноструктуру (рис. 1), розташовану в масивному напівпровідниковому середовищібар'єрі. Уважаючи, що величини сталих ґраток напівпровідникових матеріалів ям та бар'єрів розглядуваної структури відрізняються слабо, теорію електронних станів розвиватимемо в моделі ефективних мас та прямокутних потенціалів. У декартовій системі координат із віссю Oz, перпендикулярною до наношарів структури, ефективна маса, що враховує непараболічність зони провідності [41], та потенціальна енергія електрона є координато-залежними функціями й можуть бути записані в такому вигляді:

$$m(E,z) = \sum_{i=1}^{N} \left\{ m_w(E) \sum_{j=1}^{(P-1)/2} \left[ \theta(z-z_{i,2j-1}) - \theta(z-z_{i,2j}) \right] + m_b(E) \sum_{j=0}^{(P-1)/2} \left[ \theta(z-z_{i,2j}) - \theta(z-z_{i,2j+1}) \right] \right\}, \quad (1)$$

$$U(z) = U_0 \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=0}^{(P-1)/2} \left[ \theta(z - z_{i,2j}) - \theta(z - z_{i,2j+1}) \right].$$
(2)



Рис. 1. Потенціальний рельєф багатокаскадної наноструктури Fig. 1. Potential relief of a multi-cascade nanostructure

Тут, згідно з роботою [41], ефективні маси в непараболічній моделі Бастарда [42, 43] мають такий аналітичний вигляд:

$$m_w(E) = m_w (1 + E/E_{gw}),$$
  
$$m_b(E) = m_b [1 - (U_0 - E)/E_{qb}],$$

 $z_{i,j} = z_{1,j} + (i-1)d$  — координати *j*-тої гетеромежі в і-му каскаді;  $z_{i,P} = z_{i+1,0} = (z_{i,P-1} + z_{i+1,1})/2;$  $z_{1,0} = -\infty, z_{N,P} = +\infty; d$  — лінійний розмір окремого каскаду; P — загальна кількість шарів (ям і бар'єрів) в окремому каскаді;  $U_0$  - висоти потенціальних бар'єрів;  $m_w, m_b$  та  $E_{gw}, E_{gb}$  — ефективні маси електрона та ширини заборонених зон у масивних аналогах середовищ ям і бар'єрів.

Як відомо, проблема коректного врахування координатної залежності ефективної маси в операторі кінетичної енерґії гамільтоніана гетерогенної системи тривалий час була в центрі уваги багатьох дослідників [44–46]. У цитованих та інших працях були розроблені підходи коректного впорядкування положення маси в операторі кінетичної енергії. Щодо наногетероструктур, то в працях [47, 48] показано, що найкращу відповідність між теорією й експериментом отримують у підході БенДеніела–Дьюка [49] з оператором кінетичної енергії  $\frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz}$ . Тому для електрона в досліджуваній багатокаскадній структурі використано стаціонарне рівняння Шрединґера [50] у формі

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

Ураховуючи кусково-неперервну залежність ефективної маси та потенціальної енергії від координати z, розв'язок рівняння (3) доцільно шукати також у вигляді кусково-неперервної функції

$$\Psi(z) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{P} \Psi_{i,j}(z) \bigg[ \theta(z - z_{i,j-1}) - \theta(z - z_{i,j}) \bigg].$$
(4)

Тоді рівняння (3) розпадається на систему  $(N \cdot P)$  диференціальних рівнянь

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \begin{array}{l} m_w(E) \\ m_b(E) \end{array} \right\}^{-1} \frac{d^2}{dz^2} + \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ U_0 \end{array} \right\} \right] \Psi_{i,j}(z) = E \Psi_{i,j}(z), \quad j = \left\{ \begin{array}{l} 2, 4, 6, \dots \\ 1, 3, 5, \dots \end{array} \right.$$
(5)  
$$i = 1, \dots N,$$

розв'язки яких знаходять точно

$$\Psi_{i,j}(z) = \begin{cases} A_{i,j}e^{\chi z} + B_{i,j}e^{-\chi z}, & j = 1, 3, 5, \dots, P\\ A_{i,j}\cos(kz) + B_{i,j}\sin(kz), & j = 2, 4, 6, \dots, P - 1 \end{cases}$$
(6)

Тут

$$k = \sqrt{\frac{2m_w(E)E}{\hbar^2}}; \qquad \qquad \chi = \sqrt{\frac{2m_b(E)(U_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

Згідно з квантовою механікою, для хвильових функцій електрона в закритій наноструктурі справедлива умова нормування

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(E_n, z)|^2 \, dz = 1,\tag{7}$$

а вимоги неперервності функцій та потоків їхніх густин приводять до граничних умов на межах між ямами й бар'єрами досліджуваної гетероструктури

$$\begin{cases} \Psi_{i,j}(z_{i,j}) = \Psi_{i,j+1}(z_{i,j}), \quad i = 1, \dots, N, \ j = 1, \dots, P - 1\\ \frac{1}{m(E, z - 0)} \frac{d\Psi_{i,j}(z)}{dz} \bigg|_{z = z_{i,j}} = \frac{1}{m(E, z + 0)} \frac{d\Psi_{i,j+1}(z)}{dz} \bigg|_{z = z_{i,j}} \tag{8}$$

та між її каскадами

$$\begin{cases} \Psi_{i,P}(z_{i,P}) = \Psi_{i+1,1}(z_{i,P}), & i = 1, \dots, N-1 \\ \frac{d\Psi_{i,P}(z)}{dz}\Big|_{z=z_{i,P}} = \frac{d\Psi_{i+1,1}(z)}{dz}\Big|_{z=z_{i,P}} \end{cases}$$
(9)

Ураховуючи вимогу скінченності хвильових функцій у напівбезмежних зовнішніх середовищах

$$\Psi(z \to \pm \infty) \to 0 \tag{10}$$

отримуємо  $B_{1,1} = A_{N,P} = 0$ . Решту коефіцієнтів  $A_{i,j}$ та  $B_{i,j}$  знаходимо з граничних умов (8) і (9), що приводять до системи  $2(P \cdot N - 1)$  лінійних алґебраїчних рівнянь. Нетривіальність розв'язку цієї системи вимагає рівності нулеві її визначника, звідки отримуємо дисперсійне рівняння, з якого чисельним розрахунком визначаємо енергії  $E_n$  (n = 1, 2, ...) електронних станів.

Тепер відомі хвильові функції дають змогу розрахувати сили осцилятора квантових переходів між станами електрона

$$f_{nn'} = \frac{2(E_{n'} - E_n)}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{m(E_n, z)} \Psi_{n'}^*(z) z \Psi_n(z) dz \right|^2,$$
(11)

та виявити ті переходи, що формують смугу поглинання багатокаскадної структури.

#### III. ВЛАСТИВОСТІ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ У БАГАТОКАСКАДНІЙ НАНОСТРУКТУРІ

На основі розвиненої теорії вивчали властивості електронних станів у багатокаскадній наноструктурі. В основу досліджуваної моделі покладено чотириямний каскад з  $In_{0.52}Ga_{0.48}As$ -ямами та  $In_{0.53}Al_{0.47}As$ бар'єрами, як структурний елемент експериментального ККД (зразок N1020) з роботи [3]. Геометричні розміри шарів каскаду вибирали такими ж як і в [3]: **2.05**/10.7/**5.0**/4.05/4.7/4.8/4.5/6.2/2.05 nm, де жирним шрифтом позначені товщини бар'єрів. Фізичні параметри наноструктури також відомі [51]:  $U_0 =$ 516 meV,  $m_w = 0.044 m_e$ ,  $m_b = 0.082 m_e$ ,  $m_e$  — маса вільного електрона.



Рис. 2. Залежності енергетичного спектра  $(E_{ns})$  та ширин зон  $(\Gamma_n)$  від кількості каскадів (N) у наноструктурі Fig. 2. Dependencies of the energy spectrum  $(E_{ns})$  and band widths  $(\Gamma_n)$  on the number of cascades (N) in nanostructures

Експериментальний ККД в цитованій роботі реалізований на основі 30-каскадного основного структурного елемента, що забезпечує поглинання електромагнітних хвиль довжиною 10.5 µm (118 meV) в актуальному далекому ІЧ-діапазоні. Для виявлення основних механізмів формування спектральних характеристик такої 30-каскадної структури ми в реалістичній моделі, що враховує взаємодію між всіма каскадами, послідовно дослідили властивості електронних станів у структурах із різною кількістю каскадів: від найпростішої однокаскадної (N = 1) і до тридцятикаскадної (N = 30).



Рис. 3. Нормовані розподіли густин імовірностей  $|\tilde{\Psi}_{ns}|^2$ при а) N = 1, b) N = 2, c), якщо N = 3 та d) N = 4. Тут  $- n, s = 1; - - n, s = 2; \cdots - n, s = 3; - \cdots - n, s = 4$ Fig. 3. Normalized probability density distributions  $|\tilde{\Psi}_{ns}|^2$ when a) N = 1, b) N = 2, c) if N = 3 and d) N = 4. Here - $- n, s = 1; - - - n, s = 2; \cdots - n, s = 3; - \cdots - n, s = 4$ 

На рис. 2 наведені розраховані дискретні залежності  $E_{ns}$  та  $\Gamma_n$  від N, які з метою кращого візуального сприйняття зображені суцільними лініями. Розрахунки енергетичного спектра (рис. 2,а) показали, що в окремому каскаді  $(N = 1) \in 9$  рівнів енергій. Зі збільшенням N в їхніх малих околах утворюються квазідискретні смуги, кількість рівнів у яких дорівнює кількості каскадів. Із фізичних міркувань очевидно, що зонний характер спектра зумовлений тунельним зв'язком між каскадами й зі збільшенням відстані між ними всі зони вироджуються в дискретні енергетичні рівні ізольованого каскаду. Для зручності подальшого аналізу властивостей електронних станів тут і далі введено подвійну нумерацію енергій  $E_{ns}$ , де індекс n вказує номер смуги, а індекс s — номер рівня в ній.

Із рис. 2,а видно, що в спектрі N-каскадної структури виникають смуги двох типів. Одні смуги (n = 3, 4, 8) сформовані щільними групами (зонами) N рівнів, а інші (n = 1, 2, 5, 6, 7, 9) містять зону з (N-1) рівня та один низько- чи високоенерґетичний відокремлений рівень, енерґія якого практично не залежить від N і збігається з енерґією відповідного n-го стану в однокаскадній структурі (N = 1).

На рис. 2,b зображена еволюція ширин зон ( $\Gamma_n = E_{n,\max(s)} - E_{n,\min(s)}$ ) від N, з якої видно, що зі збільшенням кількості каскадів в інтервалі малих значень ( $N \leq 10$ ) всі  $\Gamma_n$  тільки зростають, а при (N > 10) — змінюються слабо. У граничному випадку  $N \to \infty$ ширини  $\Gamma_n$  збігаються з відповідними ширинами неперервних зон в ідеальній моделі безмежної надиратки Кроніґа–Пенні [50, 51].

Тепер розгляньмо особливості локалізації електронних станів у багатокаскадних наноструктурах, від властивостей яких, як відомо [3, 4], суттєво залежить ефективність функціонування ККД. З цією метою розраховувано розподіли густин імовірностей  $|\Psi_{ns}(z)|^2$ , а також імовірності наявності електрона в каскадах  $W_{ns}^N(i) = \int_{z_{i,0}}^{z_{i,P}} |\Psi_{ns}(z)|^2 dz$ ,  $i = 1, \ldots, N$  та їхніх структурних елементах (активних ділянках, екстракторах) багатокаскадних структур. Приклади отриманих залежностей  $|\Psi_{ns}(z)|^2$ , нормовані на енергії  $E_{ns}$  відповідних станів, та парціальні ймовірності  $W_{ns}^N(i)$  в одно-, дво-, три- та чотирикаскадних наноструктурах наведені на рис. З та в таблиці 1 відповідно. У таблиці 1 ті величини  $W_{ns}^N(i)$ , які менші за 0.001, вважаються нехтовно малими й позначені як 0.

Аналіз рис. З,а показує, що в однокаскадній структурі, як основному структурному елементі експериментального ККД [3], електрон у трьох станах n =1, 5, 7 (тут індекс s, який при N = 1 для всіх n дорівнює 1, тимчасово опущений) локалізований в активній ділянці каскаду, а в усіх інших станах — у потенціальних ямах екстрактора. Поглинання електромагнітних хвиль далекого ІЧ-діапазону відбувається під час квантового переходу між станами n = 1 та n' = 5із силою осцилятора  $f_{1,5} = 0.84$ . Розрахована енергія цього переходу  $\Delta E_{1,5} = E_5 - E_1 = 120.9$  meV узгоджується з експериментальним результатом  $\Delta E^{\exp} =$ 118 meV [3] не гірше, ніж на 2.5%. Збуджені стани n = 2, 3, 4 послідовно локалізовані в активних ямах екстрактора й утворюють так звану "фононну драбинку", по якій у фонон-супровідних переходах із релаксацією енергії відбувається тунелювання електронів. Усіх інших високоенергетичних станів n = 6, 7, 8, 9 у роботі приладу безпосередньо не використовують. Тому далі для багатокаскадних структур (N > 1) основну увагу зосередимо на вивченні властивостей робочих станів (n = 1 - 5, s = 1 - N).

$W_{ns}^{iv}(i)$											
n	s	N = 1	N = 2		N = 3			N = 4			
		i = 1	i = 1	i = 2	i = 1	i = 2	i = 3	i = 1	i = 2	i = 3	i = 4
	4	_	-	-	_	_	-	0	0.26	0.49	0.25
5	3	_	I	-	0.001	0.50	0.49	0.001	0.50	0	0.49
	<b>2</b>		0.003	0.99	0.001	0.49	0.50	0	0.24	0.50	0.25
	1	0.99	0.99	0	0.99	0	0	0.99	0	0	0
	4		Ι		Ι	_	-	0.06	0.34	0.42	0.17
4	3	_	I	-	0.12	0.53	0.33	0.21	0.30	0.06	0.42
	<b>2</b>	_	0.31	0.68	0.39	0.07	0.53	0.37	0.005	0.29	0.33
	1	0.99	0.69	0.31	0.48	0.38	0.13	0.35	0.35	0.22	0.07
	4		Ι		I	_	-	0.03	0.11	0.28	0.58
3	3	_	Ι	—	0.07	0.28	0.65	0.33	0.40	0.02	0.24
Ű	<b>2</b>		0.22	0.78	0.55	0.17	0.26	0.44	0.04	0.37	0.13
	1	0.99	0.78	0.21	0.37	0.54	0.08	0.19	0.44	0.32	0.04
	4		Ι		I	_	-	0	0	0	0.99
2	3		I	Ι	0	0	0.99	0.24	0.49	0.25	0
_	<b>2</b>	_	0	0.99	0.49	0.49	0	0.49	0	0.49	0
	1	0.99	0.99	0.002	0.49	0.49	0	0.25	0.49	0.25	0
	4		Ι		I	_	-	0.99	0	0	0
1	3	_	-	—	0.99	0	0	0	0.25	0.49	0.25
	<b>2</b>	_	0.99	0	0	0.49	0.49	0	0.49	0	0.49
	1	0.99	0	0.99	0	0.49	0.49	0	0.25	0.49	0.25

Табл. 1. Імовірності наявності  $(W_{ns}^{N}(i))$  електрона в станах n, s у каскадах одно-, дво-, три- та чотирикаскадних наноструктур. Тут i – номер каскада в N-каскадній структурі

Table 1. Probabilities of  $(W_{ns}^N(i))$  presence of an electron in states n, s in cascades of one-, two-, three-, and four-cascade nanostructures. Here, i is the cascade number in the N-cascade structure

У двокаскадній структурі (N = 2), як видно з рис. 3, b та табл. 1, електрон із різними ймовірностями може бути в першому та другому каскадах. Зокрема, для станів n = 1, 2, 5, s = 1, 2 величини  $W_{ns}^{N=2}(1)$  та  $W_{ns}^{N=2}(2)$  відрізняються на декілька порядків, унаслідок чого в цих станах електрон локалізований у характерній ділянці (активній ямі, ямах екстрактора) лише одного з каскадів і практично не проникає в інший, а для n = 3, 4, s = 1, 2, навпаки, величини  $W_{ns}^{N=2}(1)$  та  $W_{ns}^{N=2}(2)$  одного порядку. Тому у двокаскадній структурі поглинання ІЧ-випромінювання можливе у двох квантових переходах  $(|1,1\rangle \rightarrow |5,2\rangle$  та  $|1,2\rangle \rightarrow |5,1\rangle),$ кожний із яких реалізується в активній ділянці лише одного з каскадів, де хвильові функції робочих станів максимально перекриваються (рис. 3,b,  $\Psi_{1,2}$  та  $\Psi_{5,1}$ — у першому каскаді;  $\Psi_{1,1}$  та  $\Psi_{5,2}$  — у другому каскаді). Сили осцилятора цих переходів  $f_{1,1:5,2} = 0.83$  та  $f_{1,2:5,1} = 0.84$  сумірні між собою та з силою осцилятора робочого переходу в однокаскадній структурі.

Зі збільшенням кількості каскадів до трьох (N = 3) або чотирьох (N = 4) в кожному стані n, s для електрона з'являється принаймні один каскад, імовірність наявності його в якому нехтовно мала (рис. 3, с, d, табл. 1). З подальшим збільшенням N

кількість каскадів із близькою до нуля ймовірністю наявності електрона тільки зростає, що видно з табл. 2, де для прикладу наведені парціальні ймовірності наявності електрона в робочих станах у каскадах 10-каскадної структури.

Із таблиць 1, 2 та рис. 3 також видно, що в досліджуваних N-каскадних структурах є три стани (n = 1, s = N; n = 2, s = N та n = 5, s = 1), у яких електрон локалізований у ділянках лише першого або останнього каскаду й не потрапляє в інші каскади структури. Згідно з фізичними міркуваннями, виникнення таких приповерхневих станів зумовлене скінченністю розмірів наноструктур. Тому можна очікувати в реальних наноструктурах виявлення ефектів, зумовлених станами аналогічної природи.

Очевидно, що внаслідок суттєво різних властивостей електронних станів у каскадах багатокаскадних структур квантові переходи задовільної інтенсивності можуть виникати лише між тими станами електрона, які мають якісно однакові розподіли ймовірностей наявності  $W_{ns}^{N}(i)$  в каскадах всієї структури та за умови, що симетрія їхніх хвильових функцій забезпечує відмінний від нуля матричний елемент дипольного переходу.

# ВЛАСТИВОСТІ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ У ЗАКРИТІЙ БАГАТОКАСКАДНІЙ НАНОСТРУКТУРІ...

n	s	i = 1	i=2	i = 3	i = 4	i = 5	i = 6	i=7	i = 8	i = 9	i = 10
	10	0	0.02	0.07	0.13	0.18	0.19	0.18	0.13	0.07	0.02
	9	0	0.07	0.18	0.18	0.07	0	0.07	0.18	0.18	0.07
	8	0	0.13	0.18	0.02	0.07	0.19	0.07	0.02	0.18	0.13
	7	0	0.18	0.06	0.07	0.18	0	0.18	0.07	0.07	0.18
5	6	0	0.19	0	0.19	0	0.19	0	0.19	0	0.19
	5	0	0.18	0.07	0.06	0.18	0	0.18	0.07	0.07	0.18
	4	0	0.12	0.18	0.02	0.07	0.19	0.07	0.02	0.18	0.13
	3	0	0.06	0.18	0.18	0.07	0	0.06	0.18	0.18	0.07
	2	0	0.02	0.07	0.13	0.18	0.20	0.18	0.13	0.07	0.02
	1	0.99	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	10	0.005	0.04	0.09	0.14	0.18	0.19	0.16	0.11	0.06	0.02
	9	0.02	0.12	0.19	0.14	0.03	0.005	0.09	0.18	0.16	0.06
	8	0.04	0.18	0.11	0	0.12	0.18	0.03	0.04	0.18	0.12
	7	0.07	0.17	0.002	0.15	0.11	0.02	0.19	0.03	0.09	0.16
4	6	0.10	0.09	0.07	0.13	0.04	0.16	0.02	0.18	0.005	0.19
	5	0.14	0.02	0.18	0.001	0.17	0.04	0.11	0.12	0.03	0.18
	4	0.16	0.004	0.12	0.16	0.002	0.13	0.15	0	0.14	0.14
	3	0.18	0.07	0.002	0.11	0.18	0.08	0	0.09	0.18	0.09
	2	0.17	0.16	0.08	0.01	0.008	0.07	0.15	0.18	0.12	0.04
	1	0.09	0.13	0.15	0.16	0.15	0.13	0.09	0.06	0.03	0.008
	10	0	0.002	0.004	0.009	0.02	0.04	0.07	0.13	0.25	0.47
	9	0.03	0.10	0.18	0.22	0.19	0.12	0.04	0.001	0.02	0.09
	8	0.09	0.19	0.14	0.02	0.03	0.16	0.19	0.06	0.02	0.11
	7	0.14	0.16	0.001	0.13	0.17	0.005	0.11	0.18	0.01	0.09
3	6	0.18	0.04	0.11	0.13	0.02	0.19	0.003	0.17	0.06	0.08
	5	0.19	0.003	0.19	0.01	0.18	0.02	0.16	0.04	0.14	0.06
	4	0.17	0.08	0.04	0.19	0.01	0.13	0.13	0.01	0.19	0.04
	3	0.12	0.18	0.03	0.04	0.18	0.11	0	0.13	0.18	0.03
	2	0.06	0.17	0.18	0.08	0.003	0.04	0.15	0.19	0.11	0.01
	1	0.01	0.06	0.12	0.17	0.19	0.18	0.14	0.08	0.03	0.003
	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.99
	9	0.02	0.06	0.13	0.18	0.19	0.18	0.13	0.07	0.02	0
	8	0.07	0.18	0.18	0.07	0	0.07	0.18	0.18	0.07	0
	7	0.13	0.18	0.02	0.07	0.19	0.07	0.02	0.18	0.13	0
2	6	0.18	0.07	0.07	0.18	0	0.18	0.07	0.07	0.18	0
	5	0.19	0	0.19	0	0.19	0	0.19	0	0.19	0
	4	0.18	0.07	0.07	0.18	0	0.18	0.07	0.07	0.18	0
	3	0.13	0.18	0.02	0.07	0.19	0.07	0.02	0.18	0.13	0
	2	0.07	0.18	0.18	0.07	0	0.07	0.18	0.18	0.07	0
	1	0.02	0.07	0.13	0.18	0.19	0.18	0.13	0.07	0.02	0
Η		-									
	10	0.99	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$\frac{10}{9}$	0.99 0	0	0	0 0.13	0 0.18	0 0,19	0 0.18	0 0.13	0	0
	$\frac{10}{9}$	0.99 0 0	0 0.02 0.07	0 0.07 0.18	0 0.13 0.18	0 0.18 0.07	0 0.19 0	0 0.18 0.07	0 0.13 0.18	0 0.07 0.18	0 0.02 0.07
	$     \begin{array}{c}       10 \\       9 \\       8 \\       7     \end{array} $	0.99 0 0 0	0 0.02 0.07 0.13	0 0.07 0.18 0.18	0 0.13 0.18 0.02	0 0.18 0.07 0.07	0 0.19 0 0.19	0 0.18 0.07 0.07	0 0.13 0.18 0.02	0 0.07 0.18 0.18	0 0.02 0.07 0.13
1	$   \begin{array}{c}     10 \\     9 \\     8 \\     7 \\     6   \end{array} $	0.99 0 0 0	0 0.02 0.07 0.13 0.18	0 0.07 0.18 0.18 0.07	0 0.13 0.18 0.02 0.07	0 0.18 0.07 0.07 0.18	0 0.19 0 0.19 0	0 0.18 0.07 0.07 0.18	0 0.13 0.18 0.02 0.07	0 0.07 0.18 0.18 0.07	0 0.02 0.07 0.13 0.18
1	$   \begin{array}{c}     10 \\     9 \\     8 \\     7 \\     6 \\     5   \end{array} $	0.99 0 0 0 0 0	0 0.02 0.07 0.13 0.18 0.19	0 0.07 0.18 0.18 0.07 0	0 0.13 0.18 0.02 0.07 0.19	0 0.18 0.07 0.07 0.18 0	0.19 0.19 0.19 0.19 0.19	0 0.18 0.07 0.07 0.18 0	0 0.13 0.18 0.02 0.07 0.19	0 0.07 0.18 0.18 0.07 0	0 0.02 0.07 0.13 0.18 0.19
1	$   \begin{array}{c}     10 \\     9 \\     8 \\     7 \\     6 \\     5 \\     4   \end{array} $	0.99 0 0 0 0 0 0 0	0 0.02 0.07 0.13 0.18 0.19 0.18	0 0.07 0.18 0.18 0.07 0 0.07	0 0.13 0.18 0.02 0.07 0.19 0.07	0 0.18 0.07 0.07 0.18 0 0.18	0 0.19 0.19 0.19 0 0.19 0	0 0.18 0.07 0.07 0.18 0 0.18	0 0.13 0.18 0.02 0.07 0.19 0.07	0 0.07 0.18 0.18 0.07 0 0.07	0 0.02 0.07 0.13 0.18 0.19 0.18
1	$   \begin{array}{c c}     10 \\     9 \\     8 \\     7 \\     6 \\     5 \\     4 \\     3   \end{array} $	0.99 0 0 0 0 0 0 0 0	0 0.02 0.07 0.13 0.18 0.19 0.18 0.13	0 0.07 0.18 0.18 0.07 0 0.07 0.07	0 0.13 0.18 0.02 0.07 0.19 0.07 0.02	0 0.18 0.07 0.07 0.18 0 0.18 0.07	0 0.19 0.19 0.19 0.19 0.19 0.19	0 0.18 0.07 0.07 0.18 0 0.18 0.07	0 0.13 0.18 0.02 0.07 0.19 0.07 0.02	0 0.07 0.18 0.18 0.07 0 0.07 0.18	0 0.02 0.13 0.13 0.18 0.19 0.18 0.13
1	$ \begin{array}{c c} 10 \\ 9 \\ 8 \\ 7 \\ 6 \\ 5 \\ 4 \\ 3 \\ 2 \end{array} $	0.99 0 0 0 0 0 0 0 0 0	0 0.02 0.13 0.18 0.19 0.18 0.13 0.13	0 0.07 0.18 0.18 0.07 0.07 0.07 0.18	0 0.13 0.18 0.02 0.07 0.19 0.07 0.02 0.18	0 0.18 0.07 0.07 0.18 0 0.18 0.07 0.07	0 0.19 0.19 0.19 0.19 0.19 0.19	0 0.07 0.07 0.18 0 0.18 0.07	0 0.13 0.18 0.02 0.07 0.19 0.07 0.02 0.18	0 0.07 0.18 0.07 0 0.07 0.18 0.18	0 0.02 0.13 0.13 0.18 0.19 0.18 0.13 0.07

Табл. 2. Імовірності наявності  $(W_{ns}^{N=10}(i))$  електрона в станах n, s у каскадах 10-каскадної наноструктури. Тут і — номер каскада

Table 2. Probabilities of the presence  $(W_{ns}^{N=10}(i))$  of an electron in states n, s in cascades of a 10-cascade nanostructure. Here i is the cascade number



Рис. 4. Сили осцилятора квантових переходів  $f_{1s;5s'}$  залежно від кількості каскадів N та енергії переходу EFig. 4. Oscillator strengths of quantum transitions  $f_{1s;5s'}$  depending on the number of cascades N and transition

energy E

Розрахунки показали, що в *N*-каскадній структурі в далекій ІЧ-ділянці може виникати лише N квантових переходів між станами першої (n = 1, s = $1, \dots, N$ ) та п'ятої  $(n' = 5, s' = 1, \dots, N)$  смуг:  $|1,1\rangle \rightarrow |5,2\rangle, |1,2\rangle \rightarrow |5,3\rangle, \dots, |1,N-1\rangle \rightarrow |5,N\rangle$ та  $|1, N\rangle \rightarrow |5, 1\rangle$ . Сили осцилятора всіх N-переходів із точністю до другого знака збігаються між собою та з силою осцилятора в однокаскадній моделі. Унаслідок, як видно з рис. 4, у спектрі поглинання багатокаскадної структури виникає вузька смуга, сформована переходами  $|1,s\rangle \rightarrow |5,s+1\rangle$ ,  $s = 1,\ldots, N-1$ , та дискретний рівень переходу  $|1, N\rangle \rightarrow |5, 1\rangle$ , близько розташований до неї. Ширина смуги поглинання  $\gamma = \Gamma_1 + \Gamma_5$  визначається ширинами електронних зон  $\Gamma_1$ та <br/>  $\Gamma_5.$ Оскільки  $\Gamma_5 \gg \Gamma_1,$ то ширина <br/>  $\gamma$ залежно від N відтворює поведінку  $\Gamma_5$ , зображену на рис. 2.

Отже, виконаний аналіз показав, що, на відміну від усталених уявлень про однотипне функціонування всіх каскадів ККД, виявлені неоднорідні розподіли ймовірностей наявності електрона в каскадах структури спричиняють різні функціональні властивості каскадів. Як наслідок, це може зумовлювати пониження тунельної прозорості всього багатокаскадного елемента ККД та у висліді неґативно впливати на ефективність роботи приладу.

# **IV.** ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

На основі розвиненої теорії спектральних характеристик багатокаскадної наноструктури досліджено властивості електронних станів та сил осцилятора квантових переходів в основному структурному елементі експериментального ККД [3], що дало змогу виявити особливості смуги поглинання приладу в далекій ІЧ-ділянці.

Установлено, що в багатокаскадній структурі електронний спектр характеризується квазідискретними енерґетичними смугами, кількість рівнів у яких дорівнює кількості каскадів. Електронні стани в смугах мають різні властивості, які суттєво відрізняються від властивостей у поширеної однокаскадної моделі й проявляються в неоднорідних розподілах імовірностей наявності електрона в окремих каскадах багатокаскадної структури.

Показано, що в багатокаскадному елементі ККД для електрона в кожному стані можуть виникати окремі каскади або навіть групи каскадів, у яких імовірність його наявності нехтовно мала. У результаті смуга поглинання наноструктури формується переходами лише між тими станами, ділянки локалізації яких максимально збігаються в усій багатокаскадній структурі. Установлено, що в *N*-каскадній структурі елемента ККД в далекій ІЧ-ділянці виникає *N* квантових переходів, які формують смугу поглинання приладу. Ширина смуги поглинання визначається ширинами електронних зон.

Можна очікувати, що виявлений ефект сильно неоднорідної локалізації електронних станів у багатокаскадній наноструктурі ККД може деструктивно впливати на функціонування приладу. Очевидно, що підвищити ефективність його роботи може добір такого оптимального дизайну каскадів, який для всіх станів забезпечить сумірні ймовірності наявності електрона в усіх каскадах структури.

- M. A. Belkin, F. Capasso, Phys. Scr. 90, 118002 (2015); https://doi.org/10.1088/0031-8949/90/11/118002.
- [2] Y. Matsuoka, M. P. Semtsiv, W. Ted Masselink, Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, p. 131 (2020); https://doi.org/10.1016/B9 78-0-08-102709-7.00004-8.
- [3] F. R. Giorgetta *et al.*, IEEE J. Quantum Electron. 45, 1039 (2009); https://doi.org/10.1109/JQE.2009.201

7929.

- [4] A. Delga, Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, p. 337 (2020); https://doi.org/10.1 016/B978-0-08-102709-7.00008-5.
- J. Faist *et al.*, Science 264, 553 (1994); https://doi.or g/10.1126/science.264.5158.553.
- [6] S. Kumar, B. S. Williams, Q. Hu, Appl. Phys. Lett. 88, 121123 (2006); https://doi.org/10.1063/1.2189671.

- [7] F. Castellano *et al.*, J. Appl. Phys. **109**, 102407 (2011); https://doi.org/10.1063/1.3576153.
- [8] S. Katz, A. Vizbaras, R. Meyer, M.-C. Amann, J. Appl. Phys. 109, 081101 (2011); https://doi.org/10.1063/ 1.3566072.
- [9] D. Heydari, Y. Bai, N. Bandyopadhyay, S. Slivken, M. Razeghi, Appl. Phys. Lett. **106**, 091105 (2015); https: //doi.org/10.1063/1.4914477.
- [10] A. Dunn et al., Nature Commun. 11 (2020); https://do i.org/10.1038/s41467-020-14662-w.
- [11] L. Gendron, M. Carras, A. Huynh, V. Ortiz, Appl. Phys. Lett. 85, 2824 (2004); https://doi.org/10.1063/1.17 81731.
- [12] B. F. Levine, J. Appl. Phys. 74, R1 (1993); https://do i.org/10.1063/1.354252.
- [13] H. Schneider, H. C. Liu, Quantum Well Infrared Photodetectors, p. 1 (2007); https://doi.org/10.1007/ 978-3-540-36324-8.
- [14] P. Reininger et al., Appl. Phys. Lett. 105, 091108 (2014); https://doi.org/10.1063/1.4894767.
- [15] J. Liu et al., Semicond. Sci. Technol. 33 125016 (2018); https://doi.org/10.1088/1361-6641/aaebd4.
- [16] Z. Shen et al., Appl. Phys. Lett. 118, 081102 (2021); https://doi.org/10.1063/5.0038844.
- [17] T. Dougakiuchi, A. Ito, M. Hitaka, K. Fujita, M. Yamanishia, Appl. Phys. Lett. 118, 041101 (2021); https://do i.org/10.1063/5.0038147.
- [18] L. Gendron, C. Koeniguer, V. Berger, X. Marcadet, Appl. Phys. Lett. 86, 121116 (2005); https://doi.or g/10.1063/1.1884257.
- [19] F. R. Giorgetta *et al.*, Appl. Phys. Lett. **90**, 231111 (2007); https://doi.org/10.1063/1.2743955.
- [20] A. Vardi et al., Appl. Phys. Lett. 92, 011112 (2008); https://doi.org/10.1063/1.2830704.
- [21] A. Vardi et al., Appl. Phys. Lett. 93, 193509 (2008); https://doi.org/10.1063/1.3021376.
- [22] S. Sakr et al., Appl. Phys. Lett. 102, 011135 (2013); https://doi.org/10.1063/1.4775374.
- [23] Y. Song et al., Appl. Phys. Lett. 105, 182104 (2014); https://doi.org/10.1063/1.4901220.
- [24] M. Beeler, E. Trichas, E. Monroy, Semicond. Sci. Technol. 28, 074022 (2013); https://doi.org/10.1088/ 0268-1242/28/7/074022.
- [25] F. R. Giorgetta *et al.*, Appl. Phys. Lett. **91**, 111115 (2007); https://doi.org/10.1063/1.2784289.
- [26] M. Giparakis et al., Appl. Phys. Lett. 120, 071104 (2022); https://doi.org/10.1063/5.0076856.
- [27] A. P. Ravikumar, T. A. Garcia, J. De Jesus, M. C. Tamargo, C. F. Gmachl, Appl. Phys. Lett. 105, 061113 (2014); https://doi.org/10.1063/1.4893359.
- [28] A. Jollivet et al., Appl. Phys. Lett. 113, 251104 (2018); https://doi.org/10.1063/1.5058120.
- [29] W. Lei, C. Jagadish, J. Appl. Phys. 104, 091101 (2008); https://doi.org/10.1063/1.3002408.
- [30] C. Koeniguer, G. Dubois, A. Gomez, V. Berger, Phys Rev B 74, 235325 (2006); https://doi.org/10.1103/ PhysRevB.74.235325.

- [31] R. Terazzi, J. Faist, New J. Phys. 12, 033045 (2010); https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/3/033045.
- [32] C. Jirauschek, T. Kubis, Appl. Phys. Rev. 1, 011307 (2014); https://doi.org/10.1063/1.4863665.
- [33] G. G. Zegrya, N. V. Tkach, I. V. Boiko, Yu. A. Seti, Phys. Solid State 55, 218 (2013); https://doi.org/10 .1134/S106378341310034X.
- [34] D. Botez, C.-C. Chang, L. J. Mawst, J. Phys. D: Appl. Phys. 49, 043001 (2016); https://doi.org/10.1088/00 22-3727/49/4/043001.
- [35] J. He et al., Appl. Phys. Express 10, 011101 (2017); ht tps://doi.org/10.7567/APEX.10.011101.
- [36] M. Tĸach, J. Seti, O. Voitsekhivska, Superlattices Microstruct. 109, 905 (2017); https://doi.org/10.1016/ j.spmi.2017.06.013.
- [37] S. Saha, J. Kumar, J. Appl. Phys. **121**, 053104 (2017); https://doi.org/10.1063/1.4975481.
- [38] Z. Li, P. Wang, J. He, H. Chen, J. Cheng, Superlattices Microstruct. (2017); https://doi.org/10.1016/j.spmi .2017.07.046.
- [39] J. G. Rojas-Briseño, A. Del Rio-De Santiago, M. E. Mora-Ramos, J. C. Martínez-Orozco, Optik 201, 163431 (2020); https://doi.org/10.1016/j.ijle o.2019.163431.
- [40] Ju. Seti, O. Voitsekhivska, E. Vereshko, M. Tkach, Appl. Nanosci. 12, 533 (2022); https://doi.org/10.1007/s1 3204-021-01708-8.
- [41] D. F. Nelson, R. C. Miller, D. A. Kleinman, Phys. Rev. B 35, 7770 (1987); https://doi.org/10.1103/PhysRevB .35.7770.
- [42] G. Bastard, Phys. Rev. B 24, 5693 (1981); https://do i.org/10.1103/PhysRevB.24.5693.
- [43] G. Bastard, Phys. Rev. B 25, 7584 (1982); https://do i.org/10.1103/PhysRevB.25.7584.
- [44] C.-S. Jia, L.-Z. Yi, Y. Sun, J. Math. Chem. 43, 435 (2008); https://doi.org/10.1007/s10910-006-9 206-6.
- [45] V. M. Tkachuk, O. O. Voznyak, Eur. Phys. J. Plus. 130, 161 (2015); https://doi.org/10.1140/epjp/i2015-151 61-x.
- [46] H. Hassanabadi, W. S. Chung, S. Zare, M, Alimohammadi, Eur. Phys. J. Plus. 132, 135 (2017); https: //doi.org/10.1140/epjp/i2017-11422-0.
- [47] I. Galbraith, G. Duggan, Phys. Rev. B 38, 10057 (1988); https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.10057.
- [48] G. T. Einevoll, P. C. Hemmer, Semicond. Sci. Technol. 6, 590 (1991); https://doi.org/10.1088/0268-1242/6/7/ 004.
- [49] D. J. BenDaniel, C. B. Duke, Phys. Rev. 152, 683 (1966); https://doi.org/10.1103/PhysRev.152.683.
- [50] P. Harrison, A. Valavanis, Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures, 4th ed. (Wiley, 2016); https: //doi.org/10.1002/9781118923337.
- [51] J. H. Davies, The Physics of Low-dimensional Semiconductors (Cambridge University Press, 1997); https: //doi.org/10.1017/CB09780511819070.

### Ю. О. CETI, Є. Ю. BEPEШКО, М. B. TKAЧ

# PROPERTIES OF ELECTRON STATES IN A CLOSED MULTI-CASCADE NANOSTRUCTURE BEING AN ELEMENT OF A QUANTUM CASCADE DETECTOR

Ju. Seti, E. Vereshko, M. Tkach

Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, 2, Kotsyubynsky St., Chernivtsi, UA-58012, Ukraine e-mail: j.seti@chnu.edu.ua

The study develops the theory of electron states in a multi-cascade nanostructure as the main element of a quantum cascade detector within the effective mass approximation and rectangular potentials model. Using a model with physical and geometric parameters of four-well cascades for the experimental farinfrared quantum cascade detector, the properties of the electron states and oscillator strengths were investigated, which made it possible to establish the peculiarities of the formation of the device absorption band.

It is established that in a multi-cascade structure, unlike a single-cascade model, discrete energy bands appear for the electron, where the number of levels is equal to the number of cascades. If the number of cascades increases within the range of small values ( $\sim 10$  cascades), the bands widths increase, and with a further increase in the number of cascades, they change insignificantly. The properties of the electron states wave functions both for the same band and for different bands are fundamentally different, since the distributions of their probability in the cascades of the structure are also different. It is shown that in a multi-cascade element of a quantum cascade detector, separate cascades or even groups of cascades can occur for each electron state, in which the probability of electron location is negligible. When the total number of cascades in the structure increases, the number of cascades in which the probability of electron location is close to zero only increases.

Calculation of oscillator strengths proves that in the N-cascade structure there are N far-infrared quantum transitions between states, whose localization regions maximally coincide in the multi-cascade element of a quantum cascade detector. The oscillator strengths of all N transitions coincide with each other and with the oscillator strength in the single-cascade model with accuracy to the second sign. As a result, in the absorption spectrum of the multi-cascade structure, a narrow band appears; its width is determined by the widths of the two electronic bands between which transitions occur.

Key words: nanostructure, electron, quantum cascade detector.