Неоднородное уширение энергетических уровней при флуктуации концентрации легирования в квантово-каскадных лазерах

© Ан.А. Афоненко [1], А.А. Афоненко [1], Д.В. Ушаков [1], Р.А. Хабибуллин [2]

[1] Белорусский государственный университет,
220030 Минск, Беларусь
[2] НИЦ „Курчатовский институт“,
117105 Москва, Россия
E-mail: afonenko@bsu.by

Поступила в Редакцию 26 марта 2025 г.
В окончательной редакции 23 июня 2025 г.
Принята к публикации 23 июня 2025 г.

Проведен анализ влияния флуктуаций концентрации заряженных примесей на вольт-амперные характеристики квантово-каскадных лазеров при длине когерентности электронных волновых функций, превышающих длину экранирования кулоновского потенциала. Найдено, что величина неоднородного уширения линий перехода может превышать значения для однородного уширения для соответствующих уровней. Величина неоднородного уширения оказывается больше для волновых функций, которые дальше разнесены в пространстве.

Ключевые слова: квантово-каскадные гетероструктуры, ионизованные примеси, неоднородное спектральное уширение.

DOI: 10.61011/FTP.2025.02.60980.7737

1. Введение

Квантово-каскадные лазеры (ККЛ), основанные на межподзонных переходах электронов, являются компактными, эффективными полупроводниковыми источниками излучения в среднем ИК и терагерцовом диапазонах. В терагерцовой области частот (~ 4 ТГц) наибольшие достигнутые рабочие температуры составляют 261 K при импульсной накачке [1]. Мощность излучения ККЛ в диапазоне частот 3 ТГц достигает 230 мВт в непрерывном режиме [2] и несколько Вт в импульсном режиме [3]. Важным этапом создания лазеров является численное моделирование и оптимизация характеристик. Моделирование ККЛ терагерцового диапазона частот методом балансных уравнений на основе базиса волновых функций со сниженными дипольными моментами туннельно-связанных состояний [4] продемонстрировало свою эффективность при изготовлении первых образцов методом молекулярно-лучевой эпитаксии [5], позволило подобрать дизайн, пригодный для выращивания методом металлоорганической газофазной эпитаксии [6], а также эффективный двухфотонный дизайн [7], в котором продемонстрированы рекордно низкие пороговые плотности тока (~ 100 А/см^2) в непрерывном режиме [8]. Совершенствование теоретических моделей ККЛ продолжает оставаться актуальной задачей, так как полного количественного соответствия расчетных и экспериментальных результатов пока не достигнуто.

В методе балансных уравнений [4] в качестве базиса выбираются комбинации собственных состояний с близкими энергиями так, что протяженность волновых функций в направлении нормали к плоскости слоев уменьшается. При этом уменьшается перекрытие волновых функций и, соответственно, снижается суммарная вероятность переходов, хотя возникающие недиагональные матричные элементы гамильтониана дополнительно приводят к процессам туннелирования. Цель настоящей работы — анализ влияния локализации электронов в плоскости слоев применительно к легированию.

2. Модель

Из-за конечного времени жизни электрона в заданной подзоне протяженность волновых функций в плоскости слоев также должна быть ограничена. Занимая ограниченную площадь, определенные квантовые состояния электрона взаимодействуют с ограниченным количеством примесей. Из-за пространственных флуктуаций концентрации примесей должна возникать флуктуация собственной энергии электрона и, соответственно, уширение спектральных линий.

Для количественного анализа этого явления определим протяженность волновых функций, т. е. длину когерентности. Считаем, что из-за конечного времени жизни электронов в подзонах τ средняя длина когерентности их волновых функций в плоскости слоя составляет

$$L = \tau \bar{v}_x = \tau \sqrt{\frac{k_B T}{m_c}}, \qquad (1)$$

где в качестве средней проекции скорости используем среднюю квадратичную проекцию тепловой скорости $\sqrt{\langle v_x^2 \rangle}$.

Такое же выражение для длины когерентности получается при рассмотрении энергетической структуры

уровней с учетом спектрального уширения. Размер области, при которой энергетический зазор между соседними уровнями равен параметру уширения, $\gamma = \hbar/\tau$ определяется соотношением

$$\frac{dE}{dk}\Delta k = \gamma, \tag{2}$$

где E и k — энергия и волновой вектор электрона. Далее используем приближение эффективной массы $E = \hbar^2 k^2/2m_c$ и шаг дискретизации для нулевых граничных условий $\Delta k = \pi/L$, а также рассматриваем состояния со средней энергией, близкой к тепловой энергии. Для одной степени свободы $E = k_{\mathrm{B}}T/2$. После вычисления $dE/dk = \hbar^2 k/m_c$ и подстановки $\hbar k = \sqrt{m_c k_{\mathrm{B}} T}$ получаем выражение (1).

Количество примесей, которые попадают на площадку $L \times L$, определяется распределением Пуассона. Дисперсия этого распределения равна среднему числу примесей на выбранной площади, так что среднеквадратичная величина флуктуации числа примесей составляет

$$\Delta N = \sqrt{N_{2d} L^2}, \tag{3}$$

где N_{2d} — слоевая концентрация легирования.

Взаимодействие электрона с заряженной примесью описывается экранированным кулоновским потенциалом

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2 \exp(-q_{\mathrm{scr}} r)}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 r}, \tag{4}$$

где $q_{\mathrm{scr}} = \sqrt{e^2 N_{3d}/\varepsilon\varepsilon_0 k_{\mathrm{B}} T}$ — обратная длина экранирования, ε — диэлектрическая проницаемость, N_{3d} — объемная концентрация легирования, T — температура.

Далее рассмотрим два случая. Первый случай, когда длина когерентности L намного больше длины экранирования $1/q_{\mathrm{scr}}$. В этом случае можно считать, что электронное состояние взаимодействует только с примесями, попадающими на площадку $L \times L$. Изменение энергии состояния $\varphi_i(\mathbf{k}, z)$ с волновым вектором $\mathbf{k}$ из-за взаимодействия с примесью описывается матричным элементом

$$V_{ii}(z_0) = \int \varphi_i^*(\mathbf{k}, z) V(z - z_0) \varphi_i(\mathbf{k}, z) dz. \tag{5}$$

Здесь нулевая фурье-компонента кулоновского потенциала плоской волны в плоскости слоя

$$V(z) = -\frac{e^2}{2\varepsilon\varepsilon_0 q_{\mathrm{scr}} L^2} \exp(-q_{\mathrm{scr}}|z|). \tag{6}$$

С учетом выражений (3) и (5) среднеквадратичная флуктуация энергии состояния при флуктуации числа примесей в области, ограниченной когерентностью волновых функций, составляет

$$\sigma_i = \sqrt{N_{2d} L^2 \langle V_{ii}^2(z_0) \rangle}. \tag{7}$$

Здесь скобки обозначают усреднение по положению примеси z_0. При рассмотрении переходов между уровнями для уширения используем разность энергий конечного и начального состояний:

$$\sigma_{fi} = \sqrt{N_{2d} L^2 \left\langle \left(V_{ff}(z_0) - V_{ii}(z_0) \right)^2 \right\rangle}. \tag{8}$$

С учетом выражения (6) неоднородное уширение из-за флуктуации концентрации примесей (8) обратно пропорционально длине когерентности и прямо пропорционально квадратному корню из концентрации примесей.

Второй случай, когда длина когерентности L намного меньше длины экранирования $1/q_{\mathrm{scr}}$. В этом случае электронное состояние взаимодействует со всеми соседними примесями, а не только попадающими на площадку $L \times L$. В области существования волновой функции экранированный кулоновский потенциал (4) в зависимости от полярной координаты $\boldsymbol{\rho}$ можно считать постоянным и вынести его за знак интегрирования. Тогда энергия взаимодействия вычисляется как

$$V_{ii}(\boldsymbol{\rho}, z_0) = \int \varphi_i(z) V(\boldsymbol{\rho}, z - z_0) \varphi_i(z) dz. \tag{9}$$

Здесь радиус-вектор $\mathbf{r}$ представлен в полярных координатах как $\boldsymbol{\rho}$ и z. Среднеквадратичная флуктуация энергии состояния при флуктуации потенциала примесей составляет

$$\sigma_i = \sqrt{N_d \left\langle \int V_{ii}^2(\boldsymbol{\rho}, z_0) d\boldsymbol{\rho} \right\rangle}. \tag{10}$$

Для предельного двухмерного случая интеграл в выражении (10) расходится. Для объемного полупроводника для среднеквадратичной флуктуации энергии получилось бы выражение

$$\sigma_{3d} = \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \sqrt{\frac{N_{3d}}{8\pi q_{\mathrm{scr}}}}. \tag{11}$$

Следует отметить, что рассмотренное неоднородное уширение описывается распределением Пуассона, в то время как однородное уширение, определяемое конечным временем жизни электронов в подзонах, имеет лоренцевый вид. Если взаимодействующих с когерентной волновой функцией примесей несколько, то распределение Пуассона близко к нормальному распределению. Поэтому далее в расчетах форма спектральных линий приближенно описывалась профилем Фойгта, который получается путем свертки лоренцева и гауссова формфакторов. Полуширина спектральной линии для неоднородного уширения находилась из соотношения

$$\gamma = \sigma\sqrt{2\ln 2}. \tag{12}$$

3. Результаты расчетов

В работе анализировалась структура квантово-каскадного лазера $Al_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs$ с периодом из 4-х слоев 1.90/**16.46**/3.26/**7.99** нм [9]. Здесь жирным шрифтом выделены широкая и узкая квантовые ямы

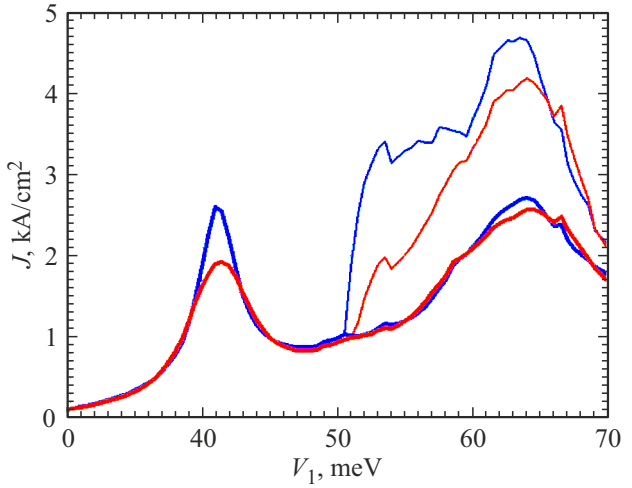

Рис. 1. Зависимость плотности тока от напряжения на одном каскаде без учета (синяя кривая) и с учетом (красная кривая) неоднородного уширения энергетических уровней при флуктуации концентрации легирования. Тонкими линиями показаны характеристики в режиме генерации.

(КЯ). Центральная часть широкой КЯ протяженностью 3.38 нм легирована донорами до концентрации $1.3 \cdot 10^{17}$ см$^{-3}$. Координатные волновые функции и профиль электростатического потенциала находились самосогласованно путем последовательного решения уравнения Шредингера в трехзонном $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$-приближении и уравнения Пуассона. Уширение уровней и скорости переходов учитывали процессы туннелирования, рассеяния на оптических фононах, ионизованных примесях и шероховатостях гетерограниц. Однородное уширение перехода считалось равным среднему от уширения начального и конечного состояний.

При температуре 77 K длина экранирования составила 17.6 нм. Для однородного уширения уровней 2 мэВ длина когерентности получается равной 43 нм и более чем в 2 раза превышает длину экранирования. Поэтому для расчета уширения применялось соотношение (8). Среднее число примесей на площадку $L \times L$ в одном периоде составляет 0.85. Усреднение по положению примеси выполнялось по 9 периодам, и, соответственно, во столько же раз было увеличено число примесей на площадку. Среднеквадратичное уширение в приближении объемного полупроводника (11) равно 5.4 мэВ. С ростом температуры величины однородного уширения увеличиваются пропорционально скорости рассеяния, а величины неоднородного уширения (8) уменьшаются из-за увеличения длины когерентности (1).

Расчетная вольт-амперная характеристика приведена на рис. 1. Основные максимумы плотности тока наблюдаются вблизи 42 и 63 мВ. Первый максимум соответствует резонансному туннелированию основного состояния *1* широкой КЯ в возбужденное состояние *3* широкой КЯ следующего каскада (рис. 2, *a*). Второй максимум соответствует резонансному туннелированию основного состояния *1* широкой КЯ в основное состояние *2* соседней узкой КЯ (рис. 2, *b*).

Величина неоднородного уширения линий перехода может превышать значения для однородного уширения (рис. 3). Для заданного напряжения на каскаде неоднородное уширение увеличивается с увеличением разнесения электронной плотности состояний в пространстве. Наименьшее уширение у перехода *3–1′*, для которого волновые функции находятся в одной и той же широкой КЯ. Далее следуют параметры уширения для переходов *1–2* и *2–3* между волновыми функциями в соседних широкой и узкой квантовых ямах. Наибольшее уширение у перехода *1–3*, для которого волновые функции находятся у широких КЯ через период.

Для напряжения на каскаде 42 мВ перенос носителей тока ограничивается скоростью резонансного туннелирования *1–3*, так как вероятность переходов *3–1′* с

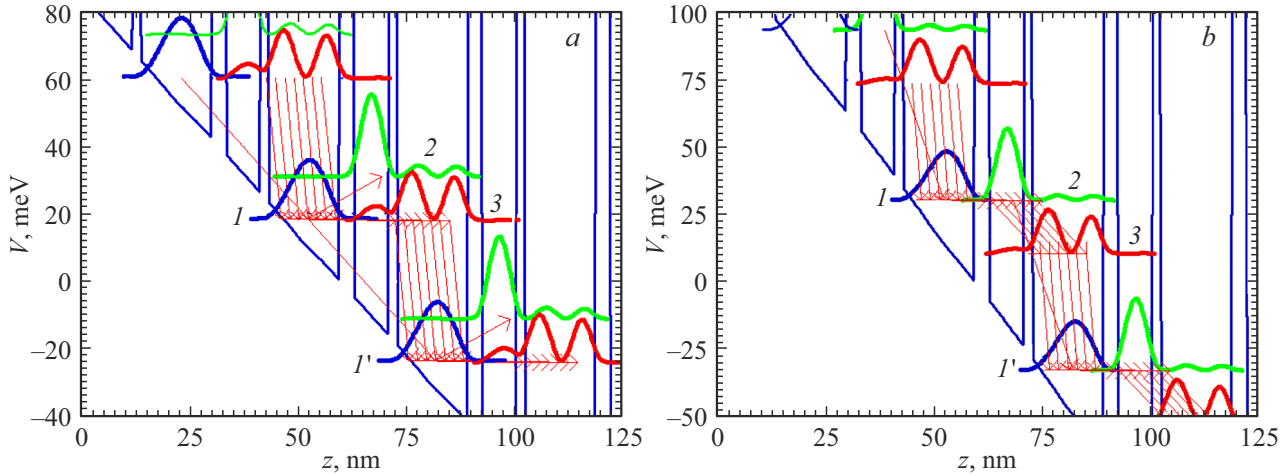

Рис. 2. Профиль дна зоны проводимости и квадраты волновых функций при напряжении на каскаде 42 (*a*) и 63 (*b*) мВ. Стрелками показан перенос электронов.

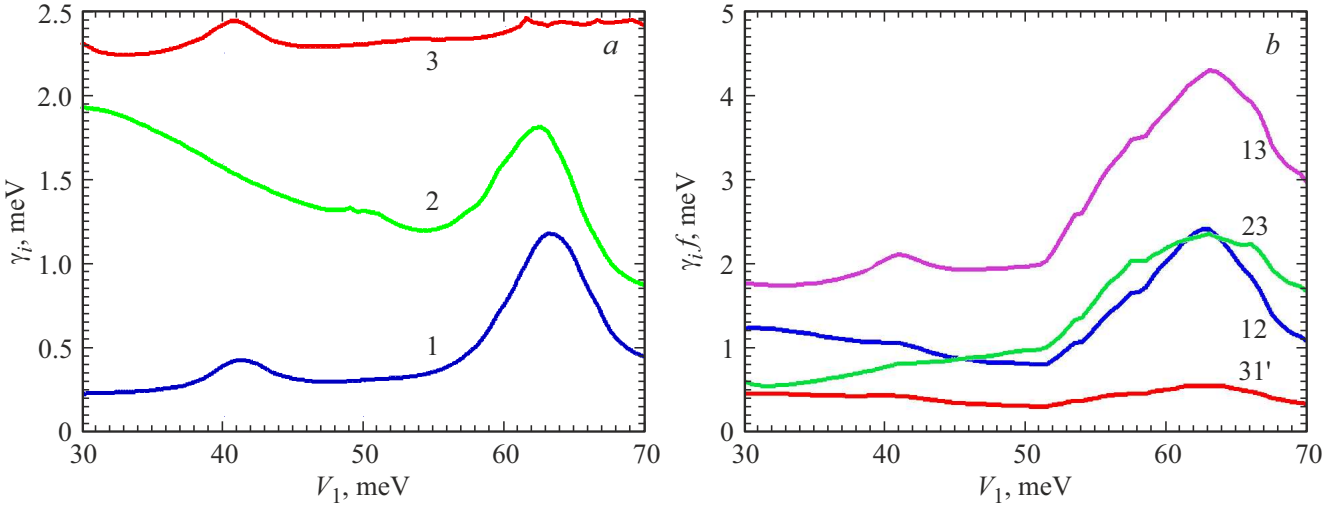

Рис. 3. Зависимость полуширины однородного уширения для уровней *1, 2, 3* (*a*) и неоднородного уширения для переходов *1–2*, *2–3*, *3–1′* (*b*) от напряжения на одном каскаде.

испусканием оптических фононов велика. Полуширины однородного и неоднородного форм-факторов составили 1.4 и 2.1 мэВ соответственно. Полуширина результирующего форм-фактора составила 2.9 мэВ — в ~ 2 раза больше величины однородного уширения. Это снизило вероятность перехода и привело к частичному сглаживанию первого туннельного резонанса (переход *1–3*) (см. рис. 1). Слабая выраженность первого туннельного резонанса лучше согласуется с экспериментальными данными [9]. Для второго резонансного пика при $V_1 = 63$ мэВ перенос носителей тока ограничивается скоростью переходов *2–3*. Полуширины однородного, неоднородного и результирующего форм-факторов составили 2.1, 2.3 и 3.6 мэВ соответственно. Однако из-за нерезонансного характера упругого рассеяния (отстройка ~ 16 мэВ) величина форм-фактора Фойгта мало отличается от величины исходного форм-фактора Лоренца, и плотность тока с учетом и без учета неоднородного уширения практически совпадают (см. рис. 1). Для вынужденного излучения переход *2–3* является резонансным, поэтому неоднородное уширение приводит к уменьшению усиления, снижению мощности генерации и снижению соответствующей плотности тока (см. рис. 1).

4. Заключение

Проведен анализ неоднородного уширения в квантово-каскадных лазерных гетероструктурах из-за флуктуации концентрации примесей при длине когерентности волновых функций, превышающих длину экранирования кулоновского потенциала. Показано, что учет неоднородного уширения приводит к снижению вероятности резонансных переходов и практически не влияет на вероятности нерезонансных переходов. Величина неоднородного уширения оказывается больше для волновых функций, разнесенных в пространстве. Найдено, что для квантово-каскадных лазеров с периодом из двух квантовых ям величина однородного уширения трех базовых уровней, рассчитанная с учетом процессов туннелирования, рассеяния на оптических фононах, ионизованных примесях и шероховатостях гетерограниц, находится в диапазоне 0.3–2.5 мэВ, а величина неоднородного уширения линий перехода — в диапазоне 0.3–4.3 мэВ в зависимости от приложенного напряжения.

Финансирование работы

Расчет неоднородного уширения энергетических уровней выполнен при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, грант № 23РНФМ-064. Экспериментальные данные для верификации используемых моделей были получены при финансовой поддержке государственного задания НИЦ „Курчатовский институт“.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов

Список литературы

[1] A. Khalatpour, M.Ch. Tam, S.J. Addamane, J. Reno, Z. Wasilewski, Q. Hu. Appl. Phys. Lett., **122**, 161101 (2023).
[2] X. Wang, C. Shen, T. Jiang, Z. Zhan, Q. Deng, W. Li, W. Wu, N. Yang, W. Chu, S. Duan. AIP Advances, **6**, 075210 (2016).
[3] Y. Jin, J.L. Reno, S. Kumar. Optica, **7**, 708 (2020).
[4] Д.В. Ушаков, А.А. Афоненко, А.А. Дубинов, В.И. Гавриленко, О.Ю. Волков, Н.В. Щаврук, Д.С. Пономарев, Р.А. Хабибуллин. Квант. электрон., **49** (10), 913 (2019).

[5] Р.А. Хабибуллин, К.В. Маремьянин, Д.С. Пономарев, Р.Р. Галиев, А.А. Зайцев, А.И. Данилов, И.С. Васильевский, А.Н. Виниченко, А.Н. Клочков, А.А. Афоненко, Д.В. Ушаков, С.В. Морозов, В.И. Гавриленко. ФТП, **55** (11), 989 (2021).
[6] Т.А. Багаев, М.А. Ладугин, А.А. Мармалюк, А.И. Данилов, Д.В. Ушаков, А.А. Афоненко, А.А. Зайцев, К.В. Маремьянин, С.В. Морозов, В.И. Гавриленко, Р.Р. Галиев, А.Ю. Павлов, С.С. Пушкарев, Д.С. Пономарев, Р.А. Хабибуллин. Письма ЖТФ, **48** (10), 16 (2022).
[7] Д.В. Ушаков, А.А. Афоненко, Р.А. Хабибуллин, В.К. Кононенко, И.С. Манак. Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук, **58** (2), 237 (2022).
[8] R.A. Khabibullin, D.V. Ushakov, A.A. Afonenko, A.Yu. Pavlov, R.R. Galiev, D.S. Ponomarev, A.P. Vasilyev, A.G. Kuzmenkov, N.A. Maleev, F.I. Zubov, M.V. Maksimov, D.A. Belov, A.V. Ikonnikov, D.I. Kuritsyn, R.Kh. Zhukavin, K.A. Kovalevsky, V.A. Anfertev, V.L. Vaks, A.V. Antonov, A.A. Dubinov, S.V. Morozov, V.I. Gavrilenko. J. Appl. Phys., **136** (19), 194504 (2024).
[9] M. Bosco, M. Franckie, G. Scalari, M. Beck, A. Wacker, J. Faist. Appl. Phys. Lett., **115** (1), 010601 (2019).

Редактор Г.А. Оганесян

Inhomogeneous broadening of energy levels due to fluctuations of doping concentration in quantum-cascade lasers

An.A. Afonenko[1], *A.A. Afonenko*[1], *D.V. Ushakov*[1], *R.A. Khabibullin*[2]

[1] Belarusian State University,
220030 Minsk, Belarus
[2] NRC „Kurchatov Institute“,
117105 Moscow, Russia

Abstract The influence of fluctuations of the concentration of charged impurities on the current-voltage characteristics of quantum-cascade lasers at the coherence length of electron wave functions exceeding the screening length of the Coulomb potential is analyzed. It is found that the value of inhomogeneous broadening of the transition lines can exceed the values for the homogeneous broadening for the corresponding levels. The value of inhomogeneous broadening appears to be larger for the wave functions, which are more separated in space.