

XXIV Международный симпозиум „Нанопизика и наноэлектроника“,  
Нижний Новгород, 10–13 марта 2020 г.

## Анализ фононных мод и электрон-фононного взаимодействия в квантово-каскадных лазерных гетероструктурах

© Ан.А. Афоненко<sup>1</sup>, А.А. Афоненко<sup>1,¶</sup>, Д.В. Ушаков<sup>1</sup>, А.А. Дубинов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Белорусский государственный университет,  
220030 Минск, Беларусь

<sup>2</sup> Институт физики микроструктур Российской академии наук,  
607680 Нижний Новгород, Россия

¶ E-mail: afonenko@bsu.by

Поступила в Редакцию 15 апреля 2020 г.

В окончательной редакции 21 апреля 2020 г.

Принята к публикации 21 апреля 2020 г.

Проведено моделирование фононных мод квантово-каскадных гетероструктур на основе двойных и тройных полупроводниковых соединений. Рассчитаны зависимости частот интерфейсных фононных мод структуры от волнового вектора в плоскости слоев и от набега фазы на периоде сверхрешетки. Найдено, что диапазон вариации энергий квантов фононных мод GaAs/Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>As-структуры не превышает 2 мэВ. Рассчитанная результирующая скорость межподзонного рассеяния в структуре с учетом интерфейсных и ограниченных мод практически не отличается от расчетов в приближении объемных фононов структуры.

**Ключевые слова:** квантово-каскадный лазер, интерфейсные фононные моды, вероятность электрон-фононного рассеяния.

DOI: 10.21883/FTP.2020.08.49625.01

### 1. Введение

Распространенный дизайн квантово-каскадных лазеров (ККЛ) терагерцового диапазона основан на быстром опустошении нижнего рабочего уровня за счет резонансного испускания продольных оптических фононов [1]. Информация о частотах оптических фононов и скоростях электрон-фононного рассеяния необходима для проектирования и оптимизации квантово-каскадных лазеров. Моделирование транспорта [2–8] ККЛ, как правило, предполагает, что электроны взаимодействуют с объемными оптическими фононами из-за простоты расчета скорости рассеяния в этом приближении. Согласно правилу сумм для форм-факторов, сумма квадратов матричных элементов электрон-фононного взаимодействия по всем фононным модам не зависит от выбранного базиса фононных мод [9]. Поэтому суммарная скорость рассеяния электронов на оптических фононах гетероструктуры не должна отличаться от скорости рассеяния, рассчитанной в базисе свободных фононов, если можно пренебречь различием их частот.

Влияние пространственного ограничения фононов на скорость рассеяния электронов на LO-фононах в гетероструктурах исследовалось в ряде работ. В работе [10] отмечается важность учета эффектов ограничения фононов для расчета скорости рассеяния в узких одиночных квантовых ямах GaAs/AlGaAs. В работе [11]

найден, что отличие частот интерфейсных фононов от частот полярных оптических фононов в объеме полупроводника позволяет регулировать скорость рассеяния электронов в квантовых ямах путем изменения частоты интерфейсных фононов. Вильямс и Ху [12] получили, что результирующие скорости рассеяния фононов многоямных GaAs/AlGaAs терагерцовых ККЛ, генерирующих в области 2.6 и 4 ТГц, близки к полученным с использованием объемных фононов GaAs. В работе [13] на основе макроскопической модели найдено, что в ККЛ среднего ИК-диапазона ( $\lambda \approx 6.7$  мкм) для температур 77 и 300 К учет интерфейсных и ограниченных фононов незначительно увеличивает скорости рассеяния электронов на LO-фононах и дает небольшие поправки к току и инверсной населенности в сравнении с расчетами, полученными в приближении объемного фонона.

Повышение рабочей температуры терагерцовых ККЛ является актуальной задачей. В настоящее время максимальная рабочая температура составляет 210.5 К [14]. Даже небольшое влияние пространственного ограничения фононов на скорость рассеяния электронов может оказаться важным при оптимизации структур ККЛ. Поэтому имеет смысл проанализировать фононные моды и определить степень влияния дисперсии частоты фононных мод от волнового вектора фононов на результирующую скорость межподзонного рассеяния в структуре [14].

## 2. Интерфейсные фононные моды

В гетероструктурах выделяют ограниченные и интерфейсные состояния фононов [15]. Пространственное распределение потенциала продольных колебаний  $\phi$  находилось из уравнения Максвелла для индукции электрического поля  $\mathbf{D}$ :

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = -\nabla \varepsilon(z, \omega) \nabla \phi = 0. \quad (1)$$

Спектральная зависимость диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(\omega)$  находилась в модели Фрелиха:

$$\varepsilon_{\text{GaAs}}(\omega) = \varepsilon_{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{\text{LO}}^2}{\omega^2 - \omega_{\text{TO}}^2},$$

$$\varepsilon_{\text{AlGaAs}}(\omega) = \varepsilon_{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{\text{LO1}}^2}{\omega^2 - \omega_{\text{TO1}}^2} \frac{\omega^2 - \omega_{\text{LO2}}^2}{\omega^2 - \omega_{\text{TO2}}^2}. \quad (2)$$

Частоты собственных колебаний поперечных  $\omega_{\text{TO}}$ - и продольных  $\omega_{\text{LO}}$ -фононов и высокочастотная диэлектрическая проницаемость в тройных соединениях  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  в зависимости от состава  $x$  соединения аппроксимировались по экспериментальным зависимостям работы [16]:

$$\begin{aligned} \hbar\omega_{\text{LO1}} &= 44.53(1-x) + 50.10x + 3.48x(1-x), \\ \hbar\omega_{\text{LO2}} &= 36.15(1-x) + 31.42x - 0.81x(1-x), \\ \hbar\omega_{\text{TO1}} &= 44.53(1-x) + 44.89x + 0.34x(1-x), \\ \hbar\omega_{\text{TO2}} &= 33.29(1-x) + 31.42x + 0.66x(1-x), \\ \varepsilon_{\infty} &= 10.89 - 2.73x. \end{aligned} \quad (3)$$

Индексами 1 и 2 отмечены частоты AlAs- и GaAs-подобных колебаний кристаллической решетки. Отметим, что при  $x = 0$  частоты  $\omega_{\text{LO1}}$  и  $\omega_{\text{TO1}}$  совпадают и  $\varepsilon_{\text{AlGa}}(\omega) \equiv \varepsilon_{\text{AlGaAs}}(\omega)$ .

Потенциал фононов, распространяющихся в плоскости слоев с волновым вектором  $q$ , в каждом слое  $n$  представлялся в виде

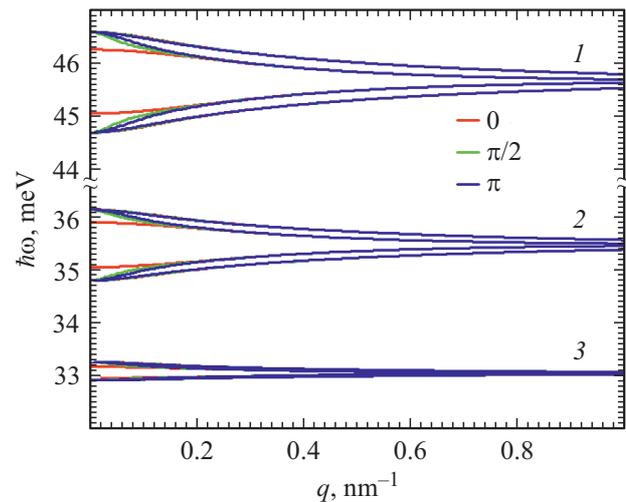
$$\phi(x, z) = [A_n \exp(qz) + B_n \exp(-qz)] \exp(iqx). \quad (4)$$

На границах слоев сшивались величины  $\phi$  и  $\varepsilon d\phi/dz$ . Использовались периодические граничные условия на одном каскаде структуры с дополнительным фазовым множителем:  $\phi(x, L) = \exp(iq_z L) \phi(x, 0)$ , где  $L$  — период структуры,  $q_z$  — аналог  $z$ -компоненты волнового вектора.

Для гетероструктуры с  $m$  слоями в периоде существует  $m$  различных мод вблизи каждого резонанса составляющих диэлектрических проницаемостей. При этом для частного случая  $q = q_z = 0$  собственные частоты фононных двух мод находятся из следующих уравнений:

$$\sum_n \varepsilon_n(\omega) d_n = 0, \quad \sum_n \frac{d_n}{\varepsilon_n(\omega)} = 0, \quad (5)$$

где  $d_n$  — толщины слоев, суммирование ведется по периоду структуры. Первое уравнение описыва-



**Рис. 1.** Зависимость энергии продольных оптических фононов  $\hbar\omega$  от волнового вектора  $q$  при различных набегах фаз  $q_z L = 0, \pi/2$  и  $\pi$ : 1 — AlAs подобная мода, 2, 3 — GaAs подобные моды.

ет моды с постоянной амплитудой  $\phi(x, z) = \text{const}$ , а второе — моды с кусочно-постоянной производной  $d\phi(x, z)/dz = \text{const}$ . Собственные частоты остальных мод совпадают с частотами  $\omega_{\text{TO}}$  и  $\omega_{\text{LO}}$  всех полупроводниковых материалов структуры. Для случая  $q = 0, q_z \neq 0$  собственные частоты всех фононных мод совпадают с частотами  $\omega_{\text{TO}}$  и  $\omega_{\text{LO}}$ .

Нормировка фононных мод для расчета матричных элементов проводилась с использованием условия

$$\int \varepsilon_0 \frac{\partial(\omega\varepsilon)}{\partial\omega} \frac{(\nabla\phi)^2}{2} dV = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (6)$$

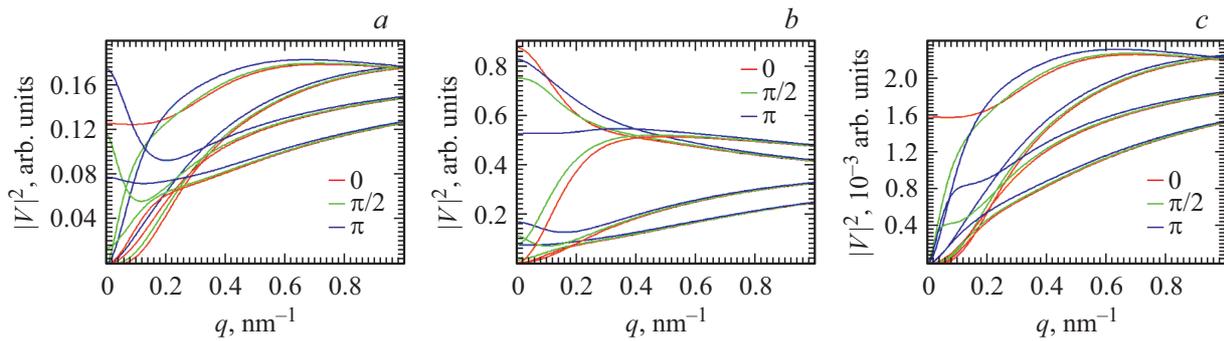
где  $V$  — объем гетероструктуры. Для удобства потенциал моды записывался с помощью безразмерной амплитуды

$$e\phi(\mathbf{r}) = V_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}), \quad \int |u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = V. \quad (7)$$

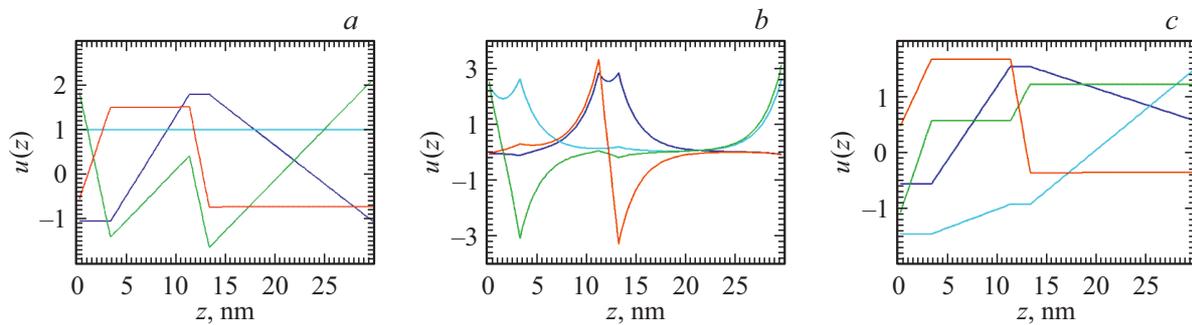
При этом для объемного кристалла  $u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})$ .

В расчетах анализировалась структура квантово-каскадного лазера GaAs/Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>As [14]. Толщины барьерных слоев/квантовых ям составляли соответственно 3.4/7.9/2.0/16.4 нм, где GaAs КЯ выделены жирным шрифтом. В анализируемой структуре выделяются три типа продольных фононных мод, которые соответствуют собственным колебаниям в исходных материалах GaAs и Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>As (рис. 1). Диапазон вариации частот фононных мод в зависимости от волнового вектора  $q, q_z$  равняется разности частот  $\omega_{\text{LO}}$  и  $\omega_{\text{TO}}$  соответствующих типов мод: 1.9 мэВ для AlAs-подобных мод, 1.3 и 0.3 мэВ для GaAs-подобных мод.

На рис. 2 представлены матричные элементы электрон-фононного взаимодействия, которые нормированы на величину матричных элементов в объемном кристал-



**Рис. 2.** Нормированные матричные элементы электрон-фононного взаимодействия в зависимости от волнового вектора  $q$  для AlAs-подобных мод (a), GaAs-подобных мод (b, c) при различных набегах фаз  $q_z L = 0, \pi/2$  и  $\pi$ .



**Рис. 3.** Пространственное распределение потенциала интерфейсных фононных мод для  $q = 0, q_z = 0$  (a),  $q = 0.5 \text{ nm}^{-1}, q_z = 0$  (b) и  $q = 0, q_z = \pi/L$  (c).

ле с усредненными диэлектрическими проницаемостями:

$$|V_{\mathbf{q}}^{3D}|^2 = \frac{e^2}{2\epsilon_0 V} \left( \frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right) \frac{\hbar\omega}{q^2}. \quad (8)$$

Здесь вектор  $\mathbf{q}$  в трехмерном пространстве. Для статистически значимых величин волнового вектора электрона  $q < \sqrt{2m_c kT/\hbar} \approx 0.2 \text{ nm}^{-1}$  ( $T = 300 \text{ K}$ ,  $m_c = 0.067m_e$ ) зависимость матричных элементов от  $q$  и  $q_z$  является существенной. Пространственные распределения потенциалов фононных мод значительно отличаются от гармонических функций (рис. 3).

### 3. Вероятность межподзонных переходов

Вероятность переходов электронов из начального состояния с волновым вектором  $\mathbf{k}_i$  и энергией  $E_i$  в состояние с волновым вектором  $\mathbf{k}_f$  и энергией  $E_f$  при испускании (поглощении) оптического фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$  и энергией  $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$  равна

$$\omega_{fi\mathbf{q}} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\mathbf{q}}|^2 |G_{fi\mathbf{q}}|^2 \left( N_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(E_i - E_f \mp \hbar\omega_{\mathbf{q}}). \quad (9)$$

Здесь  $N_{\mathbf{q}}$  — числа заселения фононной моды,  $G_{fi\mathbf{q}}$  — интеграл перекрытия начальных  $\varphi_i(\mathbf{r})$  и конечных  $\varphi_f(\mathbf{r})$

волновых функций электронов с распределением фононной моды:

$$G_{i\mathbf{q}} = \int \varphi_f^*(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (10)$$

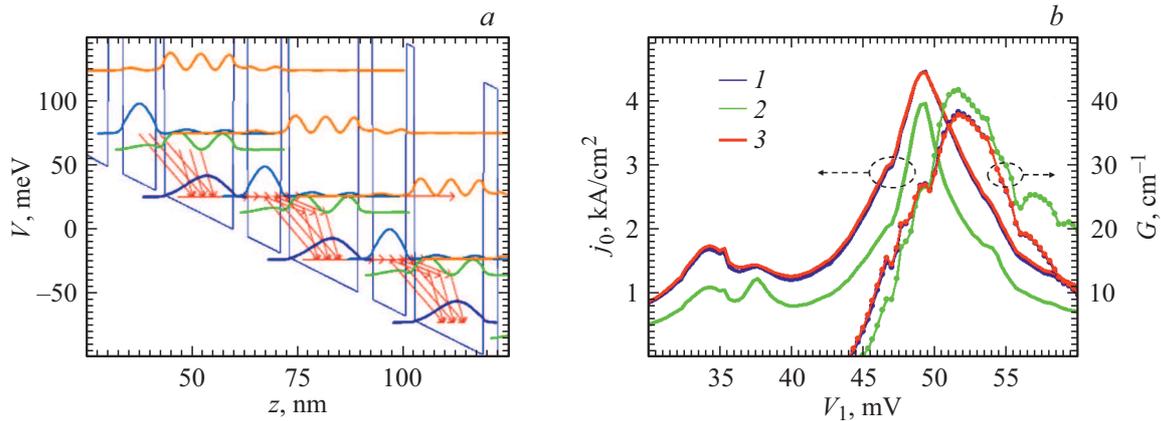
В приближении эффективной массы и бoльцмановского распределения электронов по уровням подзон усредненная вероятность межподзонных переходов электронов с участием оптических фононов с заданной  $z$ -компонентой с волнового вектора фонона  $q_z$  рассчитывается путем интегрирования по компонентам  $\mathbf{k}_i$  и  $\mathbf{q}$  в плоскости слоев гетероструктуры:

$$\langle \omega_{fiq_z} \rangle = \frac{1}{N_c} \iint \omega_{fi\mathbf{q}} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right) \frac{2d^2 k_i}{(2\pi)^2} \frac{S d^2 q}{(2\pi)^2}. \quad (11)$$

Здесь  $N_c$  — эффективная плотность электронов,  $S$  — площадь гетероструктуры,  $T$  — температура,  $\mathbf{q}^2 = q^2 + q_z^2$ .  $E_i$  отсчитывается от края соответствующей подзоны. Результирующая вероятность межподзонных переходов с участием всех фононов определенного типа мод определяется суммированием по набору возможных  $q_z$ :

$$\langle \omega_{fi} \rangle = \sum_{q_z} \langle \omega_{fiq_z} \rangle. \quad (12)$$

Для интерфейсных мод в суммирование также включается полный набор состояний.



**Рис. 4.** (а) Профиль энергии дна зоны проводимости, уровни энергии и волновые функции при напряжении на одном каскаде  $V_1 = 49$  мВ и  $T = 200$  К. Количество стрелок пропорционально плотности тока через каскад. (б) Зависимость плотности тока и усиления на частоте 3.9ТГц от напряжения на одном каскаде при расчете вероятности межподзонных переходов с участием объемных фононов (1), ограниченных фононных мод (2), ограниченных и интерфейсных фононных мод (3).

Выполнение интегрирования в выражении (11) дает следующую формулу для вероятности переходов:

$$\langle \omega_{fiq_z} \rangle = \frac{Sm_c}{\hbar^3 \sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp[-x^2] |V_q|^2 |G_{fiq}|^2 \left( N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) dg, \quad (12)$$

$$g = \frac{\hbar q}{\sqrt{2m_c kT}}, \quad x = \frac{1}{2} \left( g - \frac{E_{0i} - E_{0f} \mp \hbar \omega_q}{gkT} \right). \quad (13)$$

Здесь  $E_{0i}$  и  $E_{0f}$  — начальные уровни подзон электронов,  $m_c$  — эффективная масса электронов,  $g$  — безразмерная переменная интегрирования. Для объемного материала интеграл перекрытия  $z$ -компонент начальных и конечных волновых функций электронов  $\phi_i(z)$  и  $\phi_f(z)$  равен Фурье компоненте их произведения:

$$G_{fiq_z} = \int_0^d \phi_f^*(z) \phi_i(z) \exp(iq_z z) dz, \quad (14)$$

где  $d$  — толщина гетероструктуры. Вычисление интеграла (13) для объемного кристалла с учетом матричного элемента (7) дает

$$\langle \omega_{fiq_z} \rangle = \frac{e^2 \hbar \omega}{2\epsilon_0} \left( \frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right) \left( N_{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \frac{\sqrt{\pi} \exp[x_z^2] \text{erfc}[x_z]}{4kTg_z d} |G_{fiq_z}|^2, \quad (15)$$

$$g_z = \frac{\hbar q_z}{\sqrt{2m_c kT}}, \quad x_z = \frac{1}{2} \left( g_z - \frac{E_{0i} - E_{0f} \mp \hbar \omega}{g_z kT} \right).$$

Результаты расчетов вольт-амперной характеристики и усиления анализируемой структуры представлены на рис. 4. Метод расчета характеристик ККЛ описан в работе [17]. Учитывались только процессы электрон-фононного рассеяния и туннелирования. Кривая 1 получена в приближении объемных фононов структуры (15)

с усредненными параметрами диэлектрических проницаемостей с учетом вкладов от трех типов колебаний оптических фононов с энергиями 46.6, 36.2 и 34.8 мэВ соответственно. В тройном соединении вклад отдельных колебаний в результирующую скорость рассеяния определялся в каждом слое согласно

$$w_1 = \frac{\omega_{LO1}^2 - \omega_{TO2}^2 \epsilon^{-1}(\infty) - \epsilon_1^{-1}(0)}{\omega_{LO1}^2 - \omega_{LO2}^2 \epsilon^{-1}(\infty) - \epsilon^{-1}(0)},$$

$$w_2 = \frac{\omega_{LO2}^2 - \omega_{TO1}^2 \epsilon^{-1}(\infty) - \epsilon_2^{-1}(0)}{\omega_{LO2}^2 - \omega_{LO1}^2 \epsilon^{-1}(\infty) - \epsilon^{-1}(0)}, \quad (16)$$

где  $\epsilon_i(0) = \epsilon(\infty) \omega_{LOi}^2 / \omega_{TO}^2$ . Усредненные по структуре вклады составили 0.09, 0.82 и 0.09 для AlAs-подобных мод, GaAs-подобных мод и GaAs-подобных мод в AlGaAs.

Кривая 2 получена с учетом только фононов, ограниченных в отдельных слоях структуры. В качестве ограниченных мод структуры в каждом слое использовались функции  $\sim \sin(q_z z)$  с нулевыми значениями потенциалов на границах слоя. Частоты ограниченных фононных мод считались равными частотам аналогичных мод объемных кристаллов. Кривая 3 дополнительно учитывает рассеяние на интерфейсных фононах (ф-лы 13). Как видно, вклад интерфейсных фононов в результирующую вероятность переходов составляет до 40%. Однако дисперсия частоты интерфейсных мод от величины волнового вектора фонона ( $< 2$  мэВ) не превышает величину спектрального уширения ( $\sim 3$  мэВ) и рассчитанные зависимости тока и усиления от напряжения практически не различаются.

Следует отметить, что используемая макроскопическая модель нахождения ограниченных и интерфейсных мод не дает ортогональный базис для потенциала фононов. Однако, как показали приведенные здесь расчеты, это обстоятельство не существенно сказывается на конечном результате, который соответствует расчету

с использованием ортогонального базиса плоских волн объемного кристалла. Причина, по-видимому, связана, во-первых, с малой величиной неортогональности между ограниченными и интерфейсными модами из-за малой области их перекрытия. Во-вторых, неортогональность потенциала интерфейсных мод между собой снижается с ростом  $q$  (см. рис. 3), так как моды локализируются вблизи границ слоев. В-третьих, влияние сильной неортогональности потенциала интерфейсных мод между собой при малых  $q$  уменьшается из-за того, что основной вклад в рассеяние вносится преимущественно одной самой „медленной“ в направлении  $z$  модой.

#### 4. Заключение

В работе на основе макроскопической модели проведен анализ фононных мод в полупроводниковых сверхрешетках GaAs/AlGaAs с учетом смещения колебаний атомных решеток двойных и тройных соединений. Рассчитаны ВАХ и усиление одного каскада ККЛ. Найдено, что вклад интерфейсных фононных мод в скорость рассеяния анализируемой структуры достигает 40%, дисперсия энергии фононных мод от волнового вектора составляет 0.3–1.9 мэВ. При этом результирующая скорость межподзонного рассеяния в структуре с учетом интерфейсных и ограниченных мод практически не отличается от расчетов в приближении объемных фононов структуры.

#### Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов БРФФИ № Ф18Р-107, РФФИ № 18-52-00011\_Бел. Расчет вероятности межподзонных переходов выполнен при поддержке гранта РНФ № 18-19-00493.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] B.S. Williams, H. Callebaut, S. Kumar, Q. Hu, J. Reno. Appl. Phys. Lett., **82**, 1015 (2003).
- [2] S.C. Lee, A. Wacker. Appl. Phys. Lett., **83**, 2506 (2003).
- [3] R.C. Iotti, F. Rossi. Semicond. Sci. Technol., **19**, S323 (2004).
- [4] H. Callebaut, S. Kumar, B.S. Williams, Q. Hu, J.L. Reno. Appl. Phys. Lett., **84**, 645 (2004).
- [5] O. Bonno, J.L. Thobel, F. Dessenne. J. Appl. Phys., **97**, 043702 (2005).
- [6] X. Gao, D. Botez, I. Knezevic. Appl. Phys. Lett., **89**, 191119 (2006).
- [7] V.D. Jovanović, S. Höfling, D. Indjin, N. Vukmirovic, Z. Ikonić, P. Harrison, J.P. Reithmaier, A. Forchel. J. Appl. Phys., **99**, 103106 (2006).
- [8] X. Gao, D. Botez, I. Knezevic. J. Appl. Phys., **101**, 063101 (2007).
- [9] L.F. Register. Phys. Rev. B, **45**, 8756 (1992).
- [10] H. Rucker, E. Molinari, P. Lugli. Phys. Rev. B, **45**, 6747 (1992).
- [11] Ю. Пожела, К. Пожела, В. Юцене, А. Сужделлис, А.С. Школьник, С.С. Михрин, В.С. Михрин. ФТП, **43** (12), 1634 (2009).
- [12] B.S. Williams, Q. Hu. J. Appl. Phys., **90**, 5504 (2001).
- [13] X. Gao, D. Botez, I. Knezevic. J. Appl. Phys., **103**, 073101 (2008).
- [14] L. Bosco, M. Franckić, G. Scalan, M. Beck, A. Wacker, J. Faist. Appl. Phys. Lett., **115**, 010601 (2019).
- [15] М. Строчио, М. Дутта. *Фононы в наноструктурах*, пер. с англ. под ред. Г.Н. Жижина (М., Физматлит, 2006).
- [16] S. Adachi. J. Appl. Phys., **58** (3), R1 (1985).
- [17] 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).

Редактор Г.А. Оганесян

#### Analysis of phonon modes and electron-phonon interaction in quantum cascade laser heterostructures

An.A.Afonenko<sup>1</sup>, A.A. Afonenko<sup>1</sup>, D.V. Ushakov<sup>1</sup>, A.A. Dubinov<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Belarusian State University,  
220030 Minsk, Belarus

<sup>2</sup> Institute for Physics of Microstructures,  
Russian Academy of Sciences,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

**Abstract** The phonon modes of quantum cascade heterostructures based on binary and ternary semiconductor compounds are modeled. The dependences of the frequencies of the interface phonon modes of the structure on the wave vector in the plane of the layers and on the phase shift in the period of the superlattice are calculated. It was found that the range of variation of the quantum energy of the phonon modes of the GaAs/Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>As structure does not exceed 2 meV. The calculated resulting interband scattering rate in the structure, taking into account the interface and confined modes, practically does not differ from the calculations in the approximation of bulk phonons of the structure.