

# Obliczenia parametrów transportowych kwantowego lasera kaskadowego z wykorzystaniem sond Büttikera

**Streszczenie.** W pracy zaprezentowano nowy, efektywny sposób obliczeń parametrów transportowych, kwantowych laserów kaskadowych, z wykorzystaniem sond Büttikera. Obliczenia przeprowadzono dla modelu nieskończonego supersieci półprzewodnikowej, wykorzystującego właściwości funkcji Wanniera. Zastosowanie formalizmu nierównowagowych funkcji Greena oraz dwóch baz stanów kwantowych: bazy Wanniera i bazy Wanniera – Starka pozwoliło na dokładną ocenę poprawności i efektywności uzyskiwanych rezultatów w odniesieniu do publikowanych wcześniej prac prezentujących inne metody symulacji laserów kaskadowych.

**Abstract.** In the paper an efficient method of quantum cascade laser (QCL) simulation is presented. The calculations of selected QCL parameters are realized by using Büttiker probes. The numerical study were made for the infinite model of semiconductor superlattices using properties of Wannier functions. Formalism of non-equilibrium Green's functions (NEGF) is used in order to determine the transport parameters in the researched device. The density of states and occupation functions as well as the current-voltage characteristic are presented, as the results of simulations for the typical structure of terahertz laser. **Calculations of the QCL transport parameters using Büttiker probes**

**Słowa kluczowe:** Kwantowy laser kaskadowy, formalizm NEGF, sondy Büttikera, funkcje Wanniera.

**Keywords:** Quantum cascade laser, NEGF formalism, Büttiker probes, Wannier functions.

## Wstęp

Kwantowe lasery kaskadowe to jedne z najnowszych, a jednocześnie jedne z najbardziej dynamicznie rozwijających się kwantowych przyrządów półprzewodnikowych. Swoją dużą popularność wśród naukowców i inżynierów zawdzięczają możliwości emitowania spójnej wiązki światła w szerokim spektrum częstotliwości w połączeniu z jej stosunkowo dużą mocą. Dlatego choć od czasu jak po raz pierwszy zaprezentowano działający laser tego typu, minęło dwadzieścia lat [1], to przeglądając czasopisma naukowo-techniczne możemy znaleźć wiele prac na ich temat. Przeważają wśród nich pozycje poświęcone problemom zwiększania zakresu częstotliwości i mocy promieniowania emitowanej wiązki światła [2-6], chociaż można też trafić na artykuły pokazujące możliwości ich zastosowania [7-8].

Bardzo istotną rolę w procesach poznawczych opisywanych tu przyrządów odgrywają symulacje i modelowanie [9]. Prace naukowe z tego zakresu można podzielić na dwie zasadnicze grupy: pierwsza z nich bazuje na metodzie Monte Carlo [10]; druga natomiast, o potencjalnie większych możliwościach, wykorzystuje formalizm nierównowagowych funkcji Greena w reprezentacji energetycznej [11-12] oraz położeniowej [13-15].

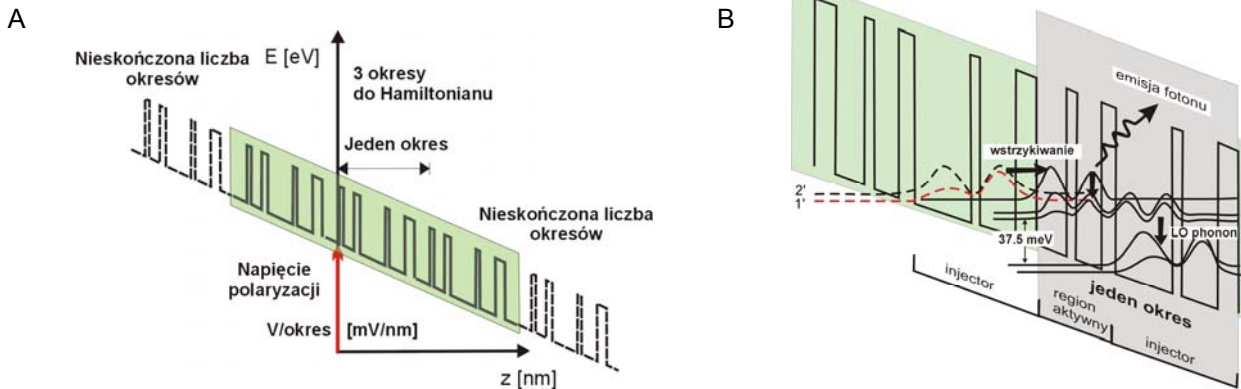
Niniejsza praca przedstawia wybrane wyniki badań numerycznych, idących w kierunku stworzenia efektywnego symulatora kwantowych laserów kaskadowych [16-19] i koncentruje się na zastosowaniu sond Büttikera w procesie obliczania parametrów transportowych tych przyrządów. Symulacje parametrów transportowych dla opisywanego tu podejścia, wymagają wdrożenia formalizmu nierównowagowych funkcji Greena oraz procedury samouzgodnionego rozwiązania równań Daysona i Keldysha, co w pewnych warunkach może być bardzo złożone i czasochłonne. Zastosowanie sond Büttikera jest pewną alternatywą, która upraszcza ten proces i znacznie przyspiesza obliczenia. W celu potwierdzenia efektywności ww. podejścia, przeprowadzono obliczenia funkcji gęstości stanów, funkcji obsadzeń tych stanów przez elektrony, a także symulację charakterystyki prądowo-napięciowej dla badanej struktury lasera. Bardzo szybkie działanie stworzonej w ramach pracy aplikacji było możliwe dzięki implementacji sond Büttikera w ramach nieskończonego modelu supersieci półprzewodnikowej, który wykorzystuje właściwości funkcji Wanniera. Polega to na transformacji Hamiltonianu badanego przyrządu z reprezentacji położeniowej do reprezentacji energetycznej, w efekcie

czego otrzymujemy dużo mniejsze rozmiary przetwarzanych w ramach symulacji macierzy.

## Model numeryczny

Jak wcześniej wspomniano, proponowana metoda obliczeniowa, została oparta na modelu nieskończonym supersieci półprzewodnikowej, która traktuje strukturę lasera jako nieskończony ciąg periodycznego potencjału, ukształtowanego przez odpowiedni układ bardzo cienkich warstw heterostruktury. Specyfika działania opisywanego tu przyrządu polega na tym, że wszystkie najważniejsze z punktu widzenia jego działania procesy fizyczne mają miejsce w obrębie pasma przewodnictwa. Dlatego obliczenia i symulacje koncentrują się wokół tego zakresu energii. Na rysunku 1A pokazano przebieg dna pasma przewodnictwa dla symulowanej w pracy struktury lasera kaskadowego [21], wraz z elementami jego nieskończonego modelu numerycznego. Zakłada on nieskończone rozmiary supersieci w kierunku transportu nośników. Jest to uproszczenie, które pozwala obliczyć okresowe funkcje Blocha w badanym obszarze, a w konsekwencji, umożliwi wyznaczenie maksymalnie zlokalizowanych stanów Wanniera, które są niezbędne do określenia Hamiltonianu przyrządu. Rozmiar macierzy Hamiltonianu w opisywanej metodzie, jest zdeterminowany przez ilość uwzględnionych w nim stanów kwantowych, co w praktyce oznacza rozpatrywanie wszystkich stanów podstawowych oraz w zależności od planowanej dokładności obliczeń, ustalonej liczby stanów wzbudzonych. Obszar ich występowania ograniczany jest do trzech sąsiadujących ze sobą okresów supersieci, co daje w naszym przypadku w sumie piętnaście stanów - po pięć na każdy okres struktury. Moduł prezentowanej supersieci składa się z ośmiu naprzemiennych warstw GaAs/Al<sub>0.15</sub>Ga<sub>0.85</sub>As o grubościach odpowiednio: 7.8/2.4/6.4/3.8/14.8/2.4/9.4/5.4 nm; co pozwala na wytworzenie czterech studni kwantowych w miejscach występowania GaAs oraz czterech barier potencjału o wysokości 150 meV w miejscach występowania Al<sub>0.15</sub>Ga<sub>0.85</sub>As.

W części opisywanego tu rysunku 1 oznaczonej jako B) zilustrowano podstawowe zjawiska kwantowe, obserwowane w trakcie działania kwantowego lasera kaskadowego. W ramach każdego modułu supersieci można wyróżnić dwa obszary: pierwszy z nich to obszar aktywny, w którym następuje emisja fotonów, drugi natomiast to obszar wstrzykiwania (ang. injector), gdzie obserwujemy tunelowe przejścia nośników przez bariery potencjału do następnego okresu supersieci oraz przejścia pomiędzy stanami połączone z emisją fononów.



Rys. 1. A) Przebieg dna pasma przewodnictwa dla badanej struktury kwantowego lasera kaskadowego, z uwzględnieniem elementów jego nieskończonego modelu numerycznego. B) Ilustracja podstawowych zjawisk kwantowych zachodzących w strukturze lasera, strzałki wskazują kierunek przejść pomiędzy stanami kwantowymi.

Aby opisać w przybliżeniu mechanizm transportu nośników w spolaryzowanej strukturze prezentowanego tu lasera, rozważamy pięć najniższych położonych w dziedzinie energii stanów kwantowych, dla każdego okresu struktury. Elektron, który jest wstrzykiwany z podstawowego poziomu 1' poprzedniego okresu, lokuje się na poziomie 5 (najwyższym) kolejnego okresu, skąd następuje emisja fotonu połączona z przejściem na poziomy niższe (3, 4). Po tym fakcie, rozważany nośnik emituje fonon, przechodząc na poziom podstawowy 1, skąd pole elektryczne wymusza na nim tunelowe przejście do następnego okresu, na najwyższy poziom 5". Przedstawiony powyżej schemat przypomina kaskadę, stąd nazwa opisywanych tu przyrządów, zaś fakt wielokrotnej emisji fotonów przez jeden elektron wiąże się z ich stosunkowo dużą mocą.

#### Zastosowana teoria oraz metody obliczeniowe

Symulacje działania kwantowego lasera kaskadowego z użyciem opisywanej tu metody, to proces złożony zarówno od strony teoretycznej, jak i praktycznej. Świadczy o tym fakt, iż wymaga on rozwiązania niejednego problemu z zakresu fizyki kwantowej, a realizowane w jego trakcie obliczenia, to układ wielu różnych współdziałających ze sobą metod numerycznych. Mając to na uwadze, w niniejszej pracy skoncentrowano się na opisie tylko tego fragmentu teorii, który bezpośrednio odnosi się do jej tematu oraz prezentowanych rezultatów. Pozostałą część metody zaprezentowano skrótowo, korzystając z faktu naszych wcześniejszych publikacji, w których można znaleźć pominięte szczegóły. Pierwszym z etapów, niezbędnym podczas wszystkich obliczeń, mających na celu wyznaczenie parametrów lasera, to opisany w pracy [16], proces wyznaczenia stanów kwantowych wewnątrz badanego przyrządu]. Rozpoczyna go rozwiązywanie równania Schrödingera ze zmienną masą efektywną  $m_e(z)$  [17]:

$$(1) \quad \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e(z)} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \Psi(z) = E\Psi(z),$$

gdzie  $V(z)$  oznacza periodyczny potencjał, wytworzony przez warstwy supersieci półprzewodnikowej, wchodzące w skład struktury badanego lasera. Wynikami tego rozwiązania są funkcje Blocha w postaci:

$$(2) \quad \psi_j(z) = A_j e^{ik_j(E)(z-z_j)} + B_j e^{-ik_j(E)(z-z_j)},$$

gdzie  $z_j$  jest współrzędną przestrzenną w kierunku transportu nośników ładunku dla  $j$ -tej warstwy supersieci,  $k_j(E)$  - to wektor falowy liczony zgodnie z zależnością:

$\sqrt{2m_j(E-V_j)/\hbar^2}$ , w której  $m_j$  i  $V_j$  to odpowiednio masa efektywna elektronu oraz potencjał w  $j$ -tym obszarze heterostruktury. Dla modelu nieskończonego supersieci, funkcje w postaci (2) zwane stanami Blocha mają charakter okresowy i są zgrupowane w obrębie dozwolonych minipasm energetycznych. Dlatego w literaturze [11-12] często oznacza się je jako funkcje z dwoma indeksami  $\phi_q^v(z)$ , gdzie indeks  $v$  oznacza numer minipasma, natomiast  $q$  to wektor Blocha zmieniający się w zakresie  $\langle -\pi/d, \pi/d \rangle$ , w którym  $d$  jest określone przez długość okresu supersieci.

Jednym z głównych elementów prezentowanego modelu obliczeniowego lasera jest transformacja stanów kwantowych z reprezentacji energetyczno-położeniowej (stany Blocha -  $\phi_q^v(z)$ ) do reprezentacji czysto energetycznej (stany Wanniera-  $W^v(z)$ ), która następuje zgodnie z zależnością [11]:

$$(3) \quad W^v(z-nd) = \sqrt{\frac{d}{2\pi}} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} \phi_q^v(z) \cdot e^{-inqd} dq$$

Otrzymane w wyniku powyższej transformacji stany Wanniera muszą być jednak maksymalnie zlokalizowane, co uzyskujemy poprzez zastosowanie procedury numerycznej, polegającej na ciągłej zmianie fazy początkowej zespolonych funkcji Blocha, aż do momentu uzyskania maksymalnie zlokalizowanej funkcji Wanniera dla danego minipasma. Zostało to przez nas szczegółowo opisane w pracach [18-19].

Baza maksymalnie zlokalizowanych stanów kwantowych Wanniera jest niezbędna do określenia Hamiltonianu spolaryzowanej struktury lasera, którego macierzową postać można zapisać jako [12]:

$$(4) \quad \mathbf{H}_\xi = \sum_{n,v} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ -e\xi R_0^{\mu\nu} \hat{a}_{n,\mathbf{k}}^{\nu\dagger} \hat{a}_{n,\mathbf{k}}^\nu - ne\xi d \delta_{\mu\nu} \hat{a}_{n,\mathbf{k}}^{\nu\dagger} \hat{a}_{n,\mathbf{k}}^\nu - \right. \\ \left. + e\xi R_1^{\mu\nu} [\hat{a}_{n+1,\mathbf{k}}^{\nu\dagger} \hat{a}_{n,\mathbf{k}}^\nu + \hat{a}_{n-1,\mathbf{k}}^{\nu\dagger} \hat{a}_{n,\mathbf{k}}^\nu] \right\},$$

gdzie  $e$  to ładunek elektronu,  $\xi$  oznacza wartość natężenia pola elektrycznego,  $n$  określa numer rozpatrywanego okresu supersieci o długości  $d$ ,  $\mathbf{k}$  jest wektorem falowym, natomiast parametry  $\hat{a}_{n,\mathbf{k}}^{\nu\dagger}$  i  $\hat{a}_{n,\mathbf{k}}^\nu$  to operatory stanów odpowiednio: kreacji i anihilacji. Występująca w wyrażeniu (4) zmienna  $R_j^{\mu\nu}$  obliczana jest na podstawie zależności:

$$(5) \quad R_i^{\mu\nu} = \int dz W^{\mu*}(z - ld) z W^\nu(z),$$

zwanej całką nakładania stanów. Relacja ta uwzględnia oddziaływanie zarówno pomiędzy dozwolonymi minipasmami (indeksy  $\mu, \nu$ ) jak i okresami (indeks  $l$ ) supersieci. Opisywana tu metoda pozwala na traktowanie macierzy Hamiltonianu jako sumę macierzy reprezentujących określone stany lub efekty kwantowe zachodzące w badanym przyrządzie. Możemy więc zapisać:  $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_R$  [11], gdzie macierz  $\mathbf{H}_0$  reprezentuje sumę stanów dla niespolaryzowanej ( $\mathbf{H}_{SL}$ ) oraz spolaryzowanej ( $\mathbf{H}_\varepsilon$ ) supersieci, natomiast macierz  $\mathbf{H}_R$  zawiera wszystkie efekty związane z rozpraszaniem elektronów. Szczegóły dotyczące sposobu określania Hamiltonianu oraz związanych z tym rezultatów numerycznych przedstawiłmy w artykule [19].

Przeprowadzone obliczenia pokazały, że opisywana tu metoda umożliwia wybór optyki otrzymywanych wyników poprzez zastosowanie różnych baz stanów kwantowych. W pewnych sytuacjach wygodniej jest stosować bazę stanów Wanniera i to właśnie w tej bazie prezentowane są wyniki naszych poprzednich publikacjach [19-20]. W niniejszej pracy pokazano zaś przypadek, gdy lepsze efekty uzyskujemy poprzez zamianę bazy stanów kwantowych Wanniera na bazę stanów Wanniera-Starka. Jest kilka sposobów aby tego dokonać. W opisywanym tu przypadku cel ten osiągnięto poprzez diagonalizację Hamiltonianu, wyznaczonego w bazie Wanniera. Dla tak przygotowanej bazy stanów zrealizowano obliczenia parametrów transportowych badanej struktury, stosując formalizm nierównowagowych funkcji Greena. Implementacja ww. teorii w ramach opracowanego przez nas modelu numerycznego została zaprezentowana w pracy [19], w tym miejscu jedynie nadmienię, że bazuje ona na samouzgodnionym rozwiązywaniu równań kinetycznych Dysona i Keldysha [23]. Pierwsze z tych równań możemy zapisać w postaci macierzowej jako [22]:

$$(6) \quad (E\mathbf{I} - \mathbf{H} - \Sigma^R)\mathbf{G}^R = \mathbf{I},$$

gdzie:  $E$  oznacza energię,  $\mathbf{H}$  to macierz Hamiltonianu badanej struktury,  $\mathbf{I}$  jest macierzą jednostkową,  $\Sigma^R$  to macierz energii własnych, natomiast  $\mathbf{G}^R$  oznacza macierz opóźnionych funkcji Greena, definiowanych zgodnie z zależnością [23]:

$$(7) \quad G^R(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(Z = E + i\eta),$$

gdzie  $\eta = \hbar / \tau$  jest interpretowane jako rozproszenie nieelastyczne z czasem rozpraszania określonym przez parametr  $\tau$ . Równanie Keldysha ma natomiast postać [24]:

$$(8) \quad \mathbf{G}^< = \mathbf{G}^R \Sigma^< \mathbf{G}^{R\dagger},$$

gdzie  $\mathbf{G}^<$  oznacza macierz nierównowagowych funkcji Greena, zwanych też funkcjami gęstości lub korelacji, które dają nam informację o obsadzeniu stanów określonych przez funkcje  $\mathbf{G}^R$ , w warunkach nierównowagi termodynamicznej. Elementy macierzy energii własnych  $\Sigma^R$  i  $\Sigma^<$  są wyznaczane w procedurze samouzgodnienia wraz z elementami macierzy  $\mathbf{G}^<$  i  $\mathbf{G}^R$ , odpowiednio dla poszczególnych mechanizmów rozpraszania i zgodnie z relacjami, które są często bardzo skomplikowane. Dla przykładu, elementy diagonalne macierzy  $\Sigma^R$ , w przypadku uwzględniania rozpraszania elektronów na fononach optycznych (ang. LO-phonon), są obliczane według wzoru [12]:

$$(9) \quad \sum_{\alpha, \mathbf{k}}^{R, ph} (E) = \sum_{\beta, \mathbf{k}'} \left| V_{\alpha\beta}^{ph}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right|^2 \times \left\{ -[f_B(E_{ph}) + 1] \cdot G_{\beta\beta, \mathbf{k}}^R(E - E_{ph}) + f_B(E_{ph}) G_{\beta\beta, \mathbf{k}}^R(E + E_{ph}) + \frac{1}{2} [G_{\beta\beta, \mathbf{k}}^<(E - E_{ph}) - G_{\beta\beta, \mathbf{k}}^<(E + E_{ph})] \right\},$$

gdzie indeksy  $\alpha$  i  $\beta$  określają stany kwantowe Wanniera, zarówno w odniesieniu do ich położenia (w różnych okresach supersieci), jak też ich energii (odpowiadają różnym minipasmom). Widoczna w opisywanym wzorze funkcja  $f_B(E) = 1/[\exp(E - E_F / k_B T) - 1]$ , gdzie  $E_F$  oznacza poziom Fermiego, a  $T$  jest temperaturą otoczenia, natomiast występujący w tym samym wyrażeniu parametr  $V_{\alpha\beta}^{ph}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  jest określony zależnością:

$$(10) \quad \left| V_{\alpha\beta}^{ph}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right|^2 = 2\pi C \int_{-\infty}^{+\infty} dq_z \left| M_{\alpha\beta}(q_z) \right|^2 \cdot \left\{ \frac{1}{\sqrt{B \cdot 4kk'}} - \frac{q_0 B}{\sqrt{B \cdot 4kk'}} \right\},$$

w której  $C = E_{I_0} e^2 [n(\omega_{I_0}) + 1/2 \pm 1/2] / 4\pi \varepsilon_p$ , gdzie  $E_{I_0}$  to energia fononu (36.7 meV),  $e$  jest oznaczeniem ładunku,  $\varepsilon_p$  odnosi się do współczynnika przenikalności elektrycznej, natomiast  $n(\omega_{I_0})$  jest reprezentowane przez funkcję  $f_B(E)$ . Parametr  $B = (q_z^2 + k^2 + k'^2 + q_0^2)$ , gdzie  $q_0$  to tzw. długość Debye a  $q_z$  to składowa wektora Blocha w kierunku prostopadłym do heterozłącza. Z kolei występujący opisywanym tu wyrażeniu (10) składnik  $M_{\alpha\beta}(q_z)$  określa relacja:

$$(11) \quad M_{\alpha\beta}(q_z) = \int_0^{L_w} dz e^{\mp i q_z z} W_\alpha^*(z) \cdot W_\beta(z).$$

Elementy diagonalne macierzy energii własnych  $\Sigma^<$  można natomiast zapisać jako:

$$(12) \quad \sum_{\alpha, \mathbf{k}}^{<, ph} (E) = \sum_{\beta, \mathbf{k}'} \left| V_{\alpha\beta}^{ph}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right|^2 \times \left\{ f_B(E_{ph}) \cdot G_{\beta\beta, \mathbf{k}}^<(E - E_{ph}) + [f_B(E_{ph}) + 1] G_{\beta\beta, \mathbf{k}}^<(E + E_{ph}) \right\}.$$

To wszystko decyduje o numerycznej złożoności zagadnienia i sprawia, że w badaniach numerycznych rzeczywistych struktur nanoelektronicznych, w których oprócz opisanego powyżej zjawiska, występują jeszcze inne efekty kwantowe (rozpraszanie na fononach akustycznych, rozpraszanie na jonach domieszek), formalizm nierównowagowych funkcji Greena stosowany jest zazwyczaj z pewnymi uproszczeniami. Przykładowo w pracy [12], procedury wyznaczania funkcji  $\mathbf{G}^R$  i  $\mathbf{G}^<$  działają niezależnie, przy jednoczesnym uproszczeniu obliczeń energii własnych. Całkowania w równaniu (10) zastępuje się wtedy „typowymi” wartościami wektora  $\mathbf{k}$ , co znacznie przyspiesza obliczenia.

Proponowane w ramach niniejszej pracy podejście, polega na innym niż wyżej opisane sposobie ustalenia funkcji  $\mathbf{G}^R$  i  $\mathbf{G}^<$  oraz macierzy energii własnych. Wprowadzana jest wielkość  $\Gamma_b = i(\Sigma_b - \Sigma_b^+)$  [25], która opisuje wymianę elektronów pomiędzy każdym stanem kwantowym modu  $b$  i każdym rezerwuarem elektronów aktywnego urządzenia, uwzględniając przy tym rozważane

efekty rozpraszania. Definicja macierzy funkcji spektralnych dla takiego podejścia przyjmuje wówczas postać [25]:

$$(13) \quad \mathbf{A}_b^N = \mathbf{G}_b^R \Gamma_b^N \mathbf{G}_b^{R+},$$

gdzie  $N$  indeksuje wszystkie rezerwuary elektronów. Należy tu wspomnieć, że elementy diagonalne opisywanej tu macierzy  $\mathbf{A}$  dają informację o lokalnej gęstości stanów, którą definiujemy jako:

$$(14) \quad \mathbf{D}_b = \frac{1}{2\pi} (\mathbf{A}_b^N) = \frac{1}{2\pi} |\mathbf{G}_b^R|^2 \Gamma_b^N.$$

Współczynnik transmisji pomiędzy dwoma rezerwuarami elektronów  $m$  i  $n$  jest określony zależnością [25]:

$$(15) \quad \mathbf{T}_b^{mn} = \text{Trace} [\Gamma_b^m \mathbf{G}_b^R \Gamma_b^n \mathbf{G}_b^{R+}] = \Gamma_b^m |\mathbf{G}_b^R|^2 \Gamma_b^n.$$

Znając lokalną gęstość stanów, uwzględniając efekty rozpraszania reprezentowane przez wielkość  $\Gamma$ , możemy określić lokalną koncentrację elektronów:

$$(16) \quad n_b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m_{e,b}^* k_B T}{2\pi^3}} \sum_N (\mathbf{A}_b^N) \times F_{-1/2}(\mu_N - E_z),$$

gdzie  $F$  jest funkcją rozkładu obsadzeń, określoną przez poziomy Fermiego sond Büttikera  $\mu_N$  i normalizowaną przez czynnik  $k_B T$ . Podobnie prąd płynący przez daną sondę do stanu kwantowego  $b$  można wyrazić jako [25]:

$$(17) \quad I_{sB} = \frac{e}{\hbar^2} \sum_b \sqrt{\frac{m_{e,b}^* k_B T}{2\pi^3}} \sum_N \mathbf{T}_b^{mn} [F_{-1/2}(\mu_m - E_z) - F_{-1/2}(\mu_n - E_z)],$$

gdzie poziomy Fermiego dla sond Büttikera  $\mu_m$  oraz  $\mu_n$  są wyznaczone z warunku ciągłości prądu:

$$(18) \quad I_{sB} = \int_{-\infty}^{\infty} I_{sB}(E_z) dE_z = 0,$$

Prowadzi to do iteracyjnego rozwiązywania zależności [25]:

$$(19) \quad \mathbf{J}^{mm} = \frac{\partial I_{sB}}{\partial \mu_m} = \frac{e}{\hbar^2} \int \sum_b \sqrt{\frac{m_{e,b}^* k_B T}{\pi^3}} \times \left\{ \frac{\partial F_{-1/2}(\mu_m - E_z)}{\partial \mu_m} \sum_n \mathbf{T}_b^{mn} \right\} dE_z,$$

$$(20) \quad \mathbf{J}^{mn} = \frac{\partial I_{sB}}{\partial \mu_n} = \frac{e}{\hbar^2} \int \sum_b \sqrt{\frac{m_{e,b}^* k_B T}{\pi^3}} \times \left\{ \mathbf{T}_b^{mn} \frac{\partial F_{-1/2}(\mu_n - E_z)}{\partial \mu_n} \right\} dE_z,$$

i korekcji w każdej iteracji wartości potencjałów chemicznych każdej z sond Büttikera zgodnie z relacją:

$$(21) \quad \Delta \mu^{sB} = -\mathbf{J}^{-1} I_{sB},$$

aż do zaniku zmian  $\mu^{sB}$ . Mając uzgodnione wartości potencjałów chemicznych sond Büttikera, można określić energie własne  $\Sigma^R$  i  $\Sigma^<$  jako macierze diagonalne z elementami odpowiednio w postaci  $i\eta$  oraz  $i\eta f_{Bt}(E)$ , gdzie  $f_{Bt}(E) = 1/[\exp(E - \mu_{zB}/k_B T) - 1]$ . Korzystając następnie z równania Dysona (6) i Keldysha (8), można wyliczyć wartości funkcji  $\mathbf{G}^R$  i  $\mathbf{G}^<$ , niezbędne w dalszych obliczeniach parametrów transportowych. Procedura dochodzenia do tych wartości jest więc ostatecznie o wiele

szybsza, niż w przypadku stosowania aproksymacji Borna, wymagającej uzgadniania równań (6-12). Fakt ten jest szczególnie istotny w przypadku symulacji charakterystyki prądowo-napięciowej przyrządu, gdzie każdy jej punkt wymaga samouzgodnienia funkcji Greena.

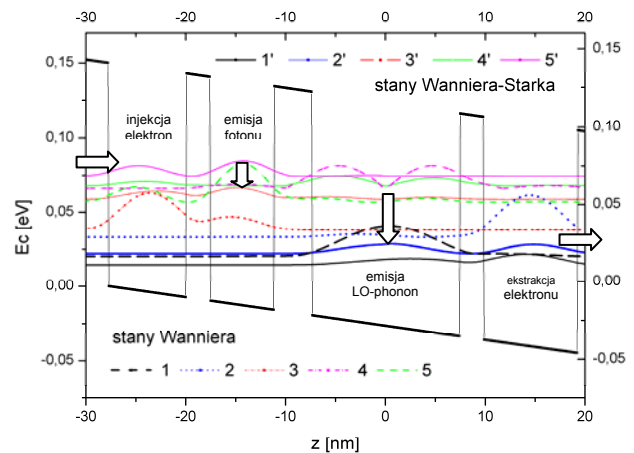
Zgodnie z założeniami wykorzystywanej tu metody, gęstość prądu w spolaryzowanej strukturze lasera możemy zapisać podobnie jak miało to miejsce w przypadku Hamiltonianu jako:  $J = J_0 + J_R$  [11], gdzie  $J_0$  jest prądem balistycznym nie uwzględniającym efektów rozpraszania elektronów, natomiast  $J_R$  jest składową, która je uwzględnia. Jak pokazują autorzy publikacji [26] dla rozpatrywanej tu struktury  $J_R$  zanika i wówczas całkowita gęstość prądu może być przybliżona wartością  $J_0$  definiowaną jako [12]:

$$(22) \quad J_0 = \frac{2e}{\hbar g} \sum_{\alpha,\beta,k} \int \frac{dE}{2\pi} [\hat{H}_0, \hat{z}]_{\alpha,\beta} G_{\alpha,\beta,k}^<(E),$$

gdzie macierz  $[\hat{H}_0, \hat{z}]$  może być tworzona w bazie stanów Wanniera lub Wanniera-Starka, natomiast zmienna  $g$  oznacza objętość spolaryzowanej struktury. Korzystając z tej zależności dokonano obliczeń, których wyniki opisano w kolejnym rozdziale.

### Wyniki symulacji

Prezentację wyników symulacji rozpoczyna rysunek 2. Ilustrujący transformację stanów kwantowych z bazy Wanniera do bazy Wanniera-Starka. Baza Wanniera składa się z maksymalnie zlokalizowanych funkcji Wanniera i jest tworzona dla niespolaryzowanej struktury badanego lasera. Poszczególne stany kwantowe tej bazy wykresiono przy pomocy linii przerywanych na poziomach energetycznych, odpowiadających energiom środka dozwolonych minipasm.



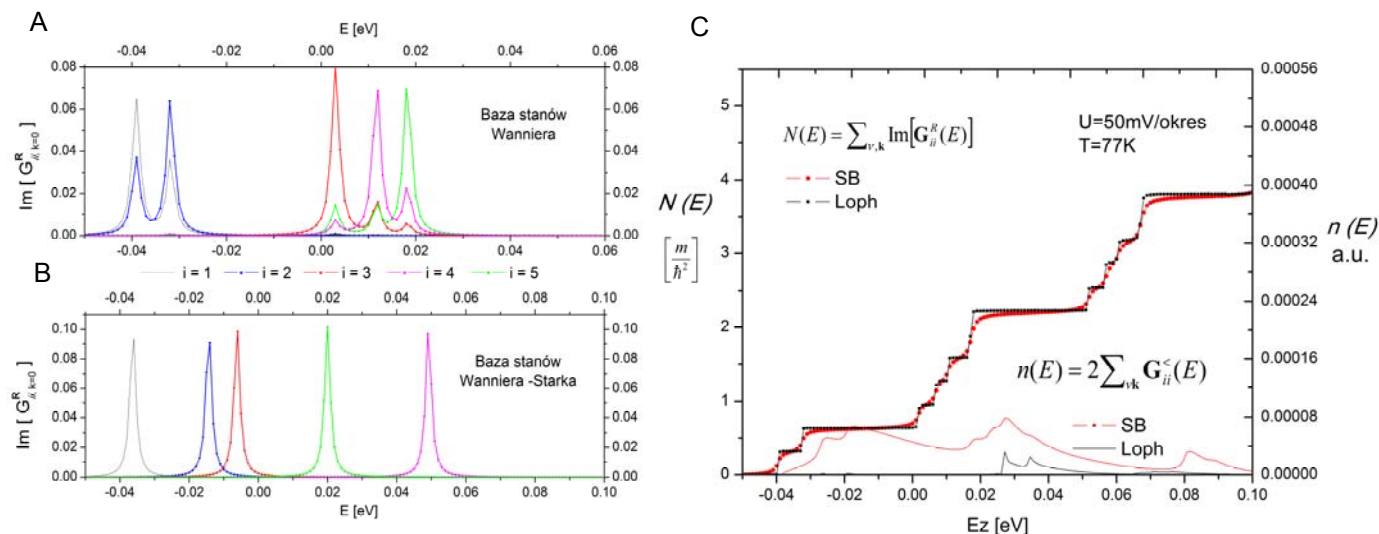
Rys. 2. Ilustracja transformacji stanów kwantowych z bazy Wanniera do bazy Wanniera-Starka dla napięcia polaryzacji struktury o wartości 50 mV/okres.

Taki sposób prezentacji układu, pomaga zilustrować zjawiska kwantowe, występujące w strukturze. Należy jednak pamiętać, że stany Wanniera nie są stanami własnymi układu, a więc nie reprezentują pojedynczego poziomu energetycznego, a całe minipasma. Druga prezentowana tu baza stanów, to stany Wanniera-Starka, które otrzymano po diagonalizacji Hamiltonianu w bazie Wanniera, określonego dla struktury spolaryzowanej napięciem 50 mV na okres.

Widoczne na opisywanym tu rysunku 2 różnice w rozkładzie przestrzennym i poziomach energetycznych dla odpowiednich stanów obu baz, można wyjaśnić jako efekt działania pola elektrycznego. Poszczególne stany przemieszczają się częściowo lub w całości do sąsiednich

studni kwantowych, zmieniając przy tym swoje położenie w dziedzinie energii. Dzięki temu, regulując napięciem polaryzacji, mamy wpływ na wzajemne dopasowywanie się

poziomów kwantowych z sąsiednich okresów supersieci, co umożliwiła z kolei, opisany wcześniej kaskadowy transport elektronów, połączone z emisją fotonów i fononów



Rys. 3. Wykresy funkcji gęstości stanów oraz funkcji obsadzeń tych stanów przez elektrony, obliczone dla napięcia polaryzacji 50 mV/okres, z wykorzystaniem dwóch baz stanów kwantowych: A) zależność  $\text{Im}[G_{ii,k=0}^R(E)]$  (jednowymiarowa funkcja gęstości stanów) obliczona dla bazy stanów Wanniera; B) funkcja  $\text{Im}[G_{ii,k=0}^R(E)]$  obliczona dla bazy stanów Wanniera-Starka; C) funkcje gęstości stanów  $N(E)$  oraz funkcje obsadzeń tych stanów  $n(E)$ , sporządzone z uwzględnieniem trzech wymiarów geometrycznych, dla przypadków zastosowania aproksymacji Borna, z uwzględnieniem rozprożeń LO-phonon (oznaczenie Loph) oraz wykorzystania sond Büttikera (oznaczenie SB).

Mając określoną bazę stanów kwantowych, można przy użyciu formalizmu nierównowagowych funkcji Greena, wyznaczyć parametry transportowe badanego przyrządu. W ramach niniejszej pracy, parametry te obliczono dla obu prezentowanych wcześniej baz stanów kwantowych, a pierwsze wyniki z tego zakresu przedstawiono na rysunku 3, gdzie widać funkcje  $\text{Im}[G_{ii,k=0}^R(E)]$ , nazywane jednowymiarowymi funkcjami gęstości stanów (ang. 1DOS). Funkcje te można analizować, albo jako superpozycje wszystkich stanów kwantowych układu, bądź też jak zostało to zilustrowane na opisywanym tu rysunku 3 - wzajemnie niezależne części, związane z odpowiadającymi im stanami kwantowymi. W przypadku drugiego z wymienionych podejść, otrzymujemy nie tylko ogólną informację o ilości i zakresie dostępnych poziomów energetycznych dla danego napięcia polaryzacji, ale także umiejscowienie w dziedzinie energii poszczególnych stanów kwantowych. Z tego punktu widzenia baza stanów Wanniera-Starka (patrz Rys. 3B.) wydaje się być lepsza do oceny stanu układu od bazy Wanniera, gdyż w wyniku jej zastosowania dostajemy wyraźnie wyodrębnione, związane z poszczególnymi stanami, pojedyncze piki funkcji 1DOS. Zastosowanie bazy Wanniera (Rys. 3A.) sprawia, że przebiegi pików tej funkcji, pochodzące od poszczególnych stanów kwantowych są skomplikowane i wzajemnie się pokrywają, uniemożliwiając w zasadzie lokalizację poszczególnych stanów w dziedzinie energii.

Jeśli zsumujemy jednowymiarowe funkcje gęstości stanów po wszystkich stanach i w całym zakresie wektora falowego  $\mathbf{k}$ , otrzymamy funkcję gęstości stanów dla trzech wymiarów geometrycznych (ang. 3DOS). Funkcję tą możemy zapisać jako  $N(E) = \sum_{\nu, \mathbf{k}} \text{Im}[G_{ii}^R(E)]$ . Na rysunku 3.C przedstawiono wykresy takich funkcji dla dwóch sposobów przeprowadzania symulacji. W pierwszym przypadku zastosowano aproksymację Borna z

uwzględnieniem rozprożeń LO-phonon, w drugim natomiast wykorzystano procedurę z zastosowaniem sond Büttikera.

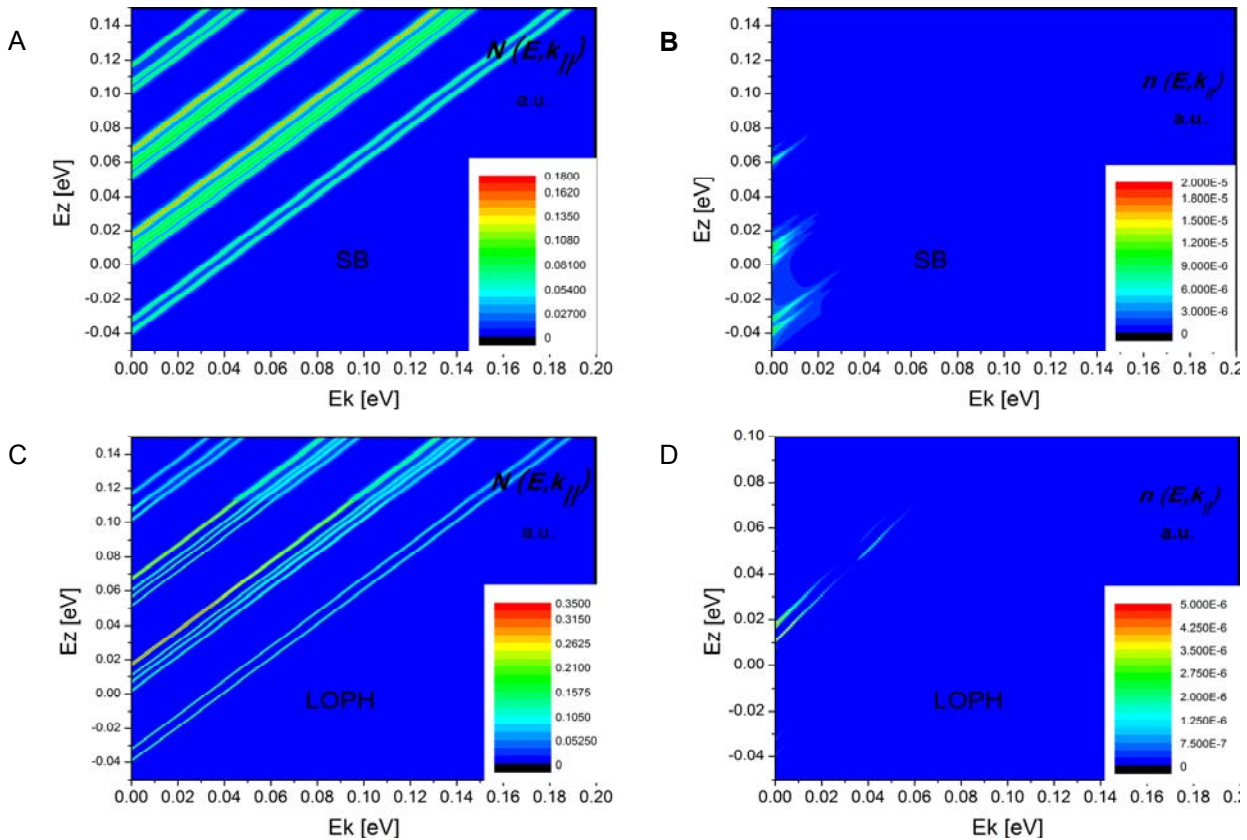
Jak widać na opisywanym tu rysunku 3, przebiegi funkcji gęstości stanów dla obu przedstawionych tu przypadków są zbliżone, a bardziej ostre krawędzie „schodków” funkcji uwzględniającej proces Lo-phonon wynikają z małych czasów rozprożeń dla tego zjawiska, które generują bardzo wąskie piki funkcji Greena. Znaczące różnice widać natomiast w przebiegach funkcji obsadzeń ( $n(E) = 2 \sum_{\nu, \mathbf{k}} G_{ii}^<(E)$ ), gdzie dużo mniejsze wartości dla przypadku Lo-phonon zdają się potwierdzać tezę o mniejszym udziale tego zjawiska w ogólnym procesie transportu nośników, w rozpatrywanej strukturze [26].

Rozszerzeniem wyników prezentowanych na rysunku 3 są mapy widoczne na rysunku 4, które ilustrują funkcje gęstości stanów oraz funkcje obsadzeń definiowane

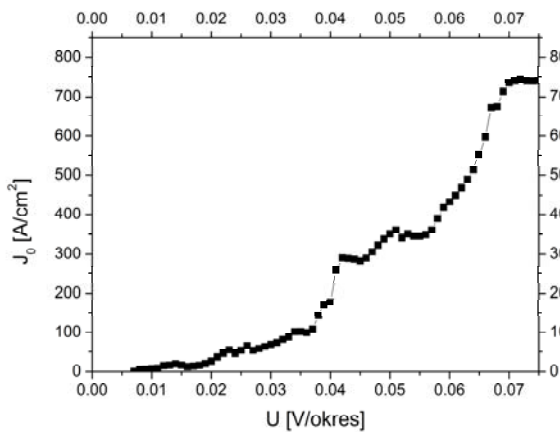
odpowiednio jako:  $N(E, k_{\parallel}) = \frac{1}{\pi} \sum_{\nu} \text{Im}(\text{Tr}([G^R]))$  oraz

$n(E, k_{\parallel}) = \frac{2}{\pi} \sum_{\nu} \text{Im}(\text{Tr}([G^<]))$  dla obu przedstawionych

na rysunku 3.C przypadków. Prezentacja wyników symulacji w takiej formie dużo dokładniej uwidacznia różnice jakie występują dla prezentowanych tu podejść oraz umożliwia ocenę warunków transportu dla obu przypadków. Końcowym efektem symulacji badanego lasera była jego charakterystyka prądowo-napięciowa. Została ona zilustrowana na rysunku 5 w postaci zależności gęstości prądu  $J_0$  od napięcia polaryzacji przeliczanego na jeden okres supersieci i dla powierzchni próbki o wymiarach  $1180 \times 150 \mu\text{m}^2$  [21].



Rys. 4. Wykresy funkcji gęstości stanów  $N(E, k_{\parallel})$  oraz funkcji obsadzeń tych stanów przez elektrony  $n(E, k_{\parallel})$  obliczone dla napięcia polaryzacji 50 mV/okres z wykorzystaniem sond Büttikera (ilustracje A i B) oraz za pomocą aproksymacji Borna z uwzględnieniem rozproszeń Lo-phonon (ilustracje C i D)



Rys. 5. Charakterystyka prądowo-napięciowa badanej struktury lasera terahercowego [21], uzyskana przy użyciu sond Büttikera

Uzyskana charakterystyka wykazuje dużą zbieżność z wynikami prezentowanymi w pracach [26] i [21], co zdaje się potwierdzać możliwość zastosowania sond Büttikera w symulacjach laserów terahercowych, a zgodnie z tym co napisano wcześniej, stosowanie tego podejścia znacznie upraszcza i przyspiesza te symulacje.

#### Podsumowanie

W ramach pracy zastosowano teorię sond Büttikera do efektywnych obliczeń parametrów transportowych kwantowego lasera kaskadowego, w oparciu o model nieskończony supersieci, z wykorzystaniem właściwości funkcji Wanniera. Jak pokazała praktyka, proponowane podejście daje zbieżne rezultaty z innymi, stosowanymi do

tej pory metodami, opisanymi w literaturze. Zaletą opracowanej procedury jest jej znacznie szybsze i prostsze działanie w odniesieniu do wspomnianych w artykule sposobów obliczania parametrów lasera, co sprawia że będzie ona w dalszym ciągu przez nas rozwijana.

*Autor dziękuje prof. A. Kolkowi za rzeczową i pomocną dyskusję w zakresie teorii sond Büttikera.*

*Praca realizowana w ramach umowy nr U-596/DS.*

**Autor:** dr inż. Mariusz Mączka, Politechnika Rzeszowska, Zakład Podstaw Elektroniki, ul. W. Pola 2a, 35-959 Rzeszów, E-mail: mmaczka@prz.edu.pl

#### LITERATURA

- [1] Faist J., Capasso F., Sivco D. L., Hutchinson A. L., Chu S-N. G., Cho A. Y.: "Short wavelength ( $\lambda \sim 3.4 \mu\text{m}$ ) quantum cascade laser based on strained compensated InGaAs/AlInAs." Appl. Phys. Lett. 72, pp. 680-684, (1998).
- [2] Colombelli R., Capasso F., Gmachl C., Hutchinson A. L., Sivco D. L., Tredicucci A., Wanke M. C., Sergent A. M., Cho A. Y.: "Far infrared surface-plasmon quantum-cascade lasers at 21.5  $\mu\text{m}$  and 24  $\mu\text{m}$  wavelengths", Appl. Phys. Lett., vol. 78: pp. 2620 - 2622, (2001).
- [3] Kosiel K., Bugajski M., Szerling A., Kubacka-Traczyk J., Karbownik P., Pruszyńska-Karbownik E., Muszalski J., Łaszcz A., Romanowski P., Wasiak M., Nakwaski W., Makarowa I., Perlin P.: "77 K Operation of AlGaAs/GaAs Quantum Cascade Laser at 9  $\mu\text{m}$ ", Photonics Letters of Poland, vol.1, no. 1, pp. 16-18, (2009).
- [4] Bugajski M., Pierściński K., Pierścińska D., Szerling A., Kosiel K.: "Multimode Instabilities in Mid-Infrared Quantum Cascade Lasers", Photonics Letters of Poland, vol. 5, nr. 3, str. 85-87 (2013).

- [5] Karbownik P., Trajnerowicz A., Szerling A., Wójcik-Jedlińska A., Wasiak M., Pruszyńska-Karbownik E., Kosiel K., Gronowska I., Sarzała R.P., Bugajski M.: "Direct Au-Au Bonding Technology for High Performance GaAs/AlGaAs Quantum Cascade Lasers", *Optical and Quantum Electronics*, vol. 47, nr. 4, str. 893-899 (2015).
- [6] Sarzała R., Wasiak M., Nakwaski W., "Temperature increase within quantum-cascade lasers originating from their incomplete soldering", *Photonics Letters of Poland*, vol. 3, no. 2, pp. 52-54, June 2011.
- [7] Bielecki Z., Wojtas J., Stacewicz T., "Zastosowanie laserów kaskadowych w układach do detekcji śladowych ilości gazów", *Elektronika-Konstrukcje-Technologie-Zastosowania*, nr.11-2014, str. 44.
- [8] Miczuga M, Kopczyński K., Pietrzak J., "Wysokoczuły system wykrywania i monitorowania zanieczyszczeń gazowych atmosfery", *Elektronika-Konstrukcje-Technologie-Zastosowania*, nr. 11-2014, str. 47.
- [9] Kolek A., "Modelowanie transportu elektronów w kwantowych laserach kaskadowych", *Elektronika-Konstrukcje-Technologie-Zastosowania*, nr. 11-2014, str. 18.
- [10] Bellotti E., Driscoll K., Moustakas T. D. and Paiella R., "Monte Carlo Simulation of Terahertz Quantum Cascade Laser Structures Based on Wide-Bandgap Semiconductors," *Journal of Applied Physics*, vol. 105, no. 11, (2009).
- [11] Wacker A., "Semiconductor superlattices: a model system for nonlinear transport", *Physics Reports*, vol. 357, pp. 1-111, (2002).
- [12] Lee S.-C. and Wacker A., "Nonequilibrium Green's function theory for transport and gain properties of quantum cascade structures", *Phys. Rev. B*, vol. 66, 245314 (2002).
- [13] Kubis T., Yeh C., and Vogl P., "Theory of nonequilibrium quantum transport and energy dissipation in terahertz quantum cascade lasers," *Phys. Rev. B*, vol. 79, no. 19, pp. 195323-1-195323-10, May 2009.
- [14] Haldaś G., Kolek A., and Tralle I., "Modeling of Mid-Infrared Quantum Cascade Laser by Means of Nonequilibrium Green's Functions", *Journal of Quantum Electronics*, vol. 47, no. 6, (2011).
- [15] Kolek A., Haldaś G., Bugajski M.: "Nonthermal Carrier Distributions in the Subbands of 2-Phonon Resonance Mid-Infrared Quantum Cascade Laser", *Appl. Phys. Lett.*, vol. 101, 061110, (2012).
- [16] Mączka M., Pawłowski S., Plewako J.: "Comparative analysis of selected models of semiconductor superlattices", *Przeegląd Elektrotechniczny*, nr 8, str. 93, (2011).
- [17] Machowska-Podsiadło E., Mączka M., Bugajski M., "3D self-consistent solution of Poisson and Schrodinger equations for electrostatically formed quantum dot", *Bulletin of the Polish Academy of Sciences-Technical Sciences*, vol. 55, No. 2, pp. 245-249, 2007.
- [18] Mączka M., Pawłowski S.: "Wannier function applied to quantum cascade lasers modelling", *Przeegląd Elektrotechniczny*, nr 12, str. 245, (2013).
- [19] Pawłowski S., Mączka M.: "Konstruowanie stanów kwantowych w strukturze lasera kaskadowego z wykorzystaniem skończonego i nieskończonego modelu supersieci półprzewodnikowych", *Przeegląd Elektrotechniczny*, nr 11/2013, str. 322-327.
- [20] Mączka M., Pawłowski S., " Modelowanie wybranych właściwości lasera kaskadowego w oparciu o formalizm NEGF w reprezentacji energetycznej", *Elektronika-Konstrukcje-Technologie-Zastosowania*, nr. 11-2014, str. 187.
- [21] Callebaut H. and Hu Q., *J. Appl. Phys.*, vol. 98, 104505 (2005).
- [22] Datta S., *Phys. Rev. B*, vol. 40, 5830, (1989).
- [23] Datta S., *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 2, 8023, (1990).
- [24] Keldysh L. V., "Diagram technique for non-equilibrium processes," *Sov. Phys. JETP*, vol. 20, no. 4, pp. 1018-1026, 1965.
- [25] Venugopal R., M. Paulsson, S. Goasguen, S. Datta, and M. Lundstrom, "A simple quantum mechanical treatment of scattering in nanoscale transistors", *J. Appl. Phys.*, vol. 93, pp.5613 2003.
- [26] Lee S.-C., Banit F., Woerner M., and Wacker A., "Quantum-mechanical wavepacket transport in quantum cascade laser structures", *Phys. Rev. B*, vol. 73, 245320, (2006).