

ЧЕРНІВЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ЮРІЯ ФЕДЬКОВИЧА
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова праця
на правах рукопису

Верешко Євгенія Юріївна

УДК 538.915+538.958]:539.1.074.5

ДИСЕРТАЦІЯ
ТЕОРІЯ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ ТА ЕЛЕКТРОН-ФОНОННОЇ
ВЗАЄМОДІЇ У СТРУКТУРНИХ ЕЛЕМЕНТАХ КВАНТОВИХ
КАСКАДНИХ ДЕТЕКТОРІВ

104 – Фізика та астрономія

10 – Природничі науки

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело *Vereshko* Є.Ю. Верешко

Науковий керівник: **Сеті Юлія Олександрівна**, доктор фіз.-мат. наук,
професор

Чернівці – 2023

АНОТАЦІЯ

Верешко Є.Ю. Теорія електронних станів та електрон-фононої взаємодії у структурних елементах квантових каскадних детекторів. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія». – Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича МОН України, Чернівці, 2023.

Дисертаційна робота присвячена побудові послідовної теорії електронних станів і електрон-фононої взаємодії у нанорозмірних структурних елементах квантових каскадних детекторів з метою виявлення основних властивостей та оптимізації їх функціональних характеристик. Основна увага зосереджена на дослідженні впливу обмежених та інтерфейсних фононів на енергетичний спектр електрона в окремому каскаді, а також вивченні властивостей електронних станів у багатокаскадних закритих і відкритих наноструктурах елементів квантових каскадних детекторів.

У вступі обґрунтовано актуальність теми дисертаційного дослідження, вказано його зв'язок з науковими програмами, планами та темами, сформульовано мету і завдання дисертації, висвітлено її наукове та практичне значення, наведено інформацію про публікації й особистий внесок здобувача, апробацію результатів роботи, її структуру й обсяг.

У першому розділі здійснено огляд наукової літератури, присвяченої експериментальним і теоретичним дослідженням квантових каскадних детекторів. Детально проаналізовано весь період розвитку експериментально створених квантових каскадних детекторів інфрачервоного та терагерцового діапазонів, обговорено різноманітні механізми вдосконалення їх функціональних характеристик, зокрема оптимізацією геометричного дизайну каскадів, підбором нових систем напівпровідникових матеріалів, поєднанням об'єктів різної просторової симетрії (наприклад, наноплівки, квантові точки, квантові дроти) тощо. Розглянуті основні теоретичні підходи і методи дослідження фотон- і фонон-супровідного тунелювання електронів крізь

структурні елементи квантових каскадних детекторів. Відзначено, що у багатьох теоретичних працях використовується золоте правило Фермі, на основі якого розраховуються швидкості фотон-супровідних оптичних переходів для дослідження коефіцієнта поглинання та визначених ним фізичних величин або часів фонон-супровідних переходів у задачах про розсіювання електронів на фононах. Зауважено, що у працях цього напрямку, як правило, дослідження виконуються або на основі спрощеної моделі окремої області каскаду, або у підході ідеалізованої нескінченної надгратки.

Другий розділ присвячений побудові квантово-механічної теорії електрон-фононної взаємодії у багат шаровій наноструктурі як каскаді квантового каскадного детектора та вивченню малодослідженого одночасного впливу всіх гілок обмежених та інтерфейсних фононів на спектральні характеристики електронних станів.

Для цього у моделі координато-залежних ефективних мас для електрона та діелектричного континууму для обмежених та інтерфейсних фононів здійснено розрахунок енергетичних спектрів і хвильових функцій електрона й спектра енергій та потенціалів полів поляризації всіх гілок фононів, на основі яких отримані функції електрон-фононного зв'язку та з перших принципів визначено гамільтоніан системи у зображенні чисел заповнення за всіма змінними. Методом температурних функцій Гріна в однофононному наближенні точно розраховані масові оператори з урахуванням як внутривісних, так і міжвісних конфігураційних взаємодій. Дійсні та уявні частини відповідних масових операторів дозволили розрахувати параметри (зміщення та затування) перенормування електронних станів взаємодією з фононами.

На прикладі восьмимної наноструктури GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As як каскаду експериментального широкодіапазонального ККД далекого ІЧ-діапазону з двоюмною активною зоною досліджено еволюцію енергій електронних станів, перенормованих взаємодією зі всіма гілками обмежених та інтерфейсних фононів, залежно від товщини потенціального бар'єра в активній зоні при зміні

температури у широкому інтервалі від криогенної до кімнатної. Отримані результати дозволили не лише встановити ступінь узгодження теоретичної моделі з експериментом, але й виявити фізичні ефекти, зумовлені електрон-фононою взаємодією.

На основі розвиненої теорії аналізом енергетичного спектра електрона та сил осциляторів квантових переходів запропоновано оптимізований дизайн каскаду квантового каскадного детектора далекого ІЧ-діапазону. Розміри потенціальних ям і бар'єрів екстрактора оптимізовані так, щоб функціонування наноприладу відбувалося в інтервалі довжин хвиль 8.2-8.7 мкм з ефективним фонон-супровідним тунелюванням електронів крізь екстрактор.

Наукову новизну висновків, зроблених на основі отриманих у другому розділі результатів, розкривають такі положення:

- Установлено, що у каскаді широкосмугового квантового каскадного детектора далекого ІЧ-діапазону з двоямною активною зоною та шестиямним екстрактором за довільних температур основний вклад у перенормування електронних станів зумовлений взаємодією з гілками високоенергетичної смуги інтерфейсних фононів, а вплив обмежених фононів виявляється на порядок меншим.

- Виявлено, що якщо різниця між енергіями двох довільних станів електрона у багат шаровому каскаді квантового каскадного детектора збігається з енергією поздовжнього фонона середовища-ями або середовища-бар'єра, відбувається різке зростання величин і зміщень, і затухань обох станів, зумовлених взаємодією з оптичними фононами.

У третьому розділі розглядається побудова теорії стаціонарних станів електрона і сил осциляторів квантових переходів у закритій багатокаскадній наносистемі як основному структурному елементі квантового каскадного детектора та досліджуються властивості спектральних характеристик наносистеми, сформованих оптичними переходами між електронними станами.

Хвильові функції та енергії електронних станів у багатокаскадній наноструктурі знаходилися у наближенні координато-залежних ефективних мас

та прямокутних потенціалів як розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера з урахуванням умови нормування та умов неперервності функцій і потоків густин їх ймовірностей на всіх гетеромежах структури. На основі отриманих енергій та хвильових функцій здійснено розрахунок функцій густин імовірностей знаходження електрона у каскадах наносистеми та сил осцилятора квантових переходів. Також розв'язана задача про енергетичний спектр і хвильові функції електрона в надгратці з потенціалом типу Кроніга-Пенні з періодом, який дорівнює окремому каскаду, як поширеній у літературі моделі в теорії квантових каскадних детекторів.

На основі розвиненої теорії досліджено властивості електронних станів і сил осцилятора квантових переходів у багатокаскадному основному структурному елементі експериментального квантового каскадного детектора, що дозволило виявити особливості формування смуги поглинання приладу у далекій ІЧ-області. Здійснено порівняльний аналіз еволюції властивостей електронних станів залежно від кількості каскадів і від їх геометричної конфігурації у закритій та надгратковій моделях.

Наукову новизну висновків, зроблених на основі отриманих у третьому розділі результатів, розкривають такі положення:

- На основі розвиненої теорії електронних станів у наноструктурі закритого типу з довільною кількістю каскадів показано, що у багатокаскадній наносистемі енергетичний спектр електрона характеризується квазідискретними смугами, кількість рівнів у яких дорівнює кількості каскадів. Виявлено, що оцінка спектральних характеристик енергетичних зон у закритій багатокаскадній структурі може бути із задовільною точністю здійснена у простій моделі Кроніга-Пенні з двокаскадним періодичним елементом надгратки.

- Показано, що ймовірності знаходження електрона у станах з енергіями з однієї зони можуть суттєво відрізнятися у різних каскадах закритої багатокаскадної наносистеми, через що смуга поглинання N -каскадного квантового каскадного детектора формується N квантовими переходами лише

між тими станами, які характеризуються близькими просторовими розподілами ймовірностей знаходження, а ширина смуги поглинання визначається ширинами відповідних електронних зон, між якими відбуваються робочі переходи.

У четвертому розділі у наближенні ефективних мас і прямокутних потенціалів із застосуванням методу трансфер-матриці отримані точні аналітичні вирази для S -матриці розсіювання, функції розподілу густини ймовірності та коефіцієнта прозорості у відкритій багатокаскадній резонансно-тунельній наноструктурі, що дозволило розвинути у трьох підходах теорію спектральних характеристик (резонансних енергій та резонансних ширин) квазістаціонарних станів електрона у багатокаскадному елементі квантового каскадного детектора.

На прикладі відкритої багатокаскадної резонансно-тунельної наноструктури з трійними каскадами з GaAs-ямами та $Al_{0.33}Ga_{0.67}As$ -бар'єрами досліджено еволюцію резонансних енергій та резонансних ширин квазістаціонарних станів електрона залежно від кількості каскадів у наносистемі, здійснено порівняльний аналіз результатів трьох розвинених підходів. Проаналізовано вплив товщин внутрикаскадних і міжкаскадних потенціальних бар'єрів на спектральні характеристики електронних станів у відкритих резонансно-тунельних наноструктурах з різною кількістю каскадів.

На основі визначених полюсами S -матриці резонансних енергій та ширин аналітично розрахована наближена функція розподілу густини ймовірності знаходження електрона у відкритій N -каскадній наноструктурі як нормована сума N -функцій Лоренца, яка дозволила показати, що виникаючий на залежностях функції густини ймовірності від енергії колапс резонансів зумовлений суперпозицією електронних станів з близькими значеннями резонансних енергій та суттєво різними резонансними ширинами (часами життя).

Наукову новизну висновків, зроблених на основі отриманих у четвертому

розділі результатів, розкривають такі положення:

- Установлено, що у відкритій N -каскадній наносистемі виникають комплекси N -квазістаціонарних станів, резонансні енергії та резонансні ширини яких однозначно визначаються лише комплексними полюсами S -матриці. У тих областях енергій, де на спектральних розподілах функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості виникає колапс резонансів, обидва підходи не дозволяють розрахувати резонансні енергії та ширини електронних станів.

- Досліджено еволюцію резонансних енергій та резонансних ширин квазістаціонарних станів електрона у відкритих багатокаскадних резонансно-тунельних наносистемах від товщин внутрікаскadних і міжкаскадних потенціальних бар'єрів, виявлено такі конфігурації, за яких структуру можна вважати закритою.

Практичне значення отриманих результатів

Розвинена теорія електрон-фононої взаємодії у каскаді квантового каскадного детектора дозволила виявити умови, за яких величини зміщень і затухань електронних станів, зумовлені взаємодією з оптичними фононами, різко зростають. Знайдені геометричні конфігурації двоямної активної зони квантового каскадного детектора далекого ІЧ-діапазону, за яких виявлений ефект найбільше проявляється і може впливати на ефективність функціонування наноприладу.

Запропонована теорія електронних станів у багатокаскадних наносистемах виявила неоднорідні розподіли густин імовірностей знаходження електрона у різних каскадах структури, що може бути однією з причин низької ефективності переважної більшості експериментальних квантових каскадних детекторів.

Розвинені теорії стаціонарних і квазістаціонарних станів електрона у багатокаскадних наносистемах, які дозволяють оцінити енергії та часи життя електронних станів, а також інтенсивності квантових переходів, можуть бути важливі у задачах про оптимізацію дизайнів каскадів квантових каскадних детекторів з метою підвищення їх ефективності.

Ключові слова: електрон, фонон, енергетичний спектр, хвильова функція, ефективна маса, сила осцилятора квантового (оптичного) переходу, коефіцієнт поглинання, стаціонарні та квазістаціонарні стани, часи життя (затухання), наноструктура (система), резонансно-тунельна структура, квантова точка, наноплівка, надгратка, квантовий каскадний детектор (прилад).

ABSTRACT

Vereshko Ye.Yu. Theory of electron states and electron-phonon interaction in structural elements of quantum cascade detectors. – Qualifying scientific project on manuscript rights.

Thesis on search for the Doctor of Philosophy degree in specialty 104 «Physics and Astronomy». - Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Chernivtsi, 2023.

The dissertation is devoted to the development of a consistent theory of electron states and electron-phonon interaction in nanoscale structural elements of quantum cascade detectors with the aim of revealing the main properties and optimizing their functional characteristics. The main focus is paid on the study of the influence of confined and interface phonons on the electron energy spectrum in a separate cascade, as well as the study of the properties of electron states in multi-cascade closed and open nanostructures, being the elements of quantum cascade detectors.

The Introduction substantiates the relevance of the topic of the dissertation research, indicates its connection with scientific programs, plans and topics, formulates the purpose and tasks of the dissertation, highlights its scientific and practical significance, presents information about the publications and personal contribution of the recipient, approbation of project results, its structure and amount.

In the first Section, a review of the scientific literature devoted to experimental and theoretical research of quantum cascade detectors is carried out. The entire period of development of experimentally created quantum cascade detectors in the infrared and terahertz ranges is analyzed in detail. Various

mechanisms for improving their functional characteristics are discussed, in particular, the optimization of geometrical design of cascades, the selection of new systems of semiconductor materials, the combination of objects of different spatial symmetry (for example, nanofilms, quantum dots, quantum wires), etc. The main theoretical approaches and research methods of photon- and phonon-accompanied electron tunneling through the structural elements of quantum cascade detectors are considered. It is noted that Fermi's golden rule is used in many theoretical papers, at the basis of which the velocities of photon-accompanied optical transitions are calculated for the study of the absorption coefficient and the physical quantities or times of phonon-accompanied transitions determined by it in problems of scattering of electrons by phonons. It is mentioned that in the papers of this direction, as a rule, studies are performed either based on a simplified model of a separate region of the cascade, or in the approach of an idealized infinite super-lattice.

The second Section is devoted to the development of a quantum-mechanical theory of electron-phonon interaction in a multilayered nanostructure, being a cascade of a quantum cascade detector, and to the research of the little-studied simultaneous influence of all modes of confined and interface phonons on the spectral characteristics of electron states.

For this sake, in the model of position-dependent effective mass for the electron and the dielectric continuum for the confined and interface phonons, the energy spectrum and wave functions of the electron and the energy spectrum and potentials of polarization fields of all phonon modes were calculated. Based on which, the electron-phonon binding functions were obtained. From the first principles, the Hamiltonian of the system was derived in the representation of second quantization over all variables. Using the method of Green's temperature functions in the one-phonon approximation, mass operators are accurately calculated, taking into account both intra-level and inter-level configurational interactions. The real and imaginary parts of the corresponding mass operators made it possible to calculate the parameters (shift and decay) of electron states renormalized by interaction with phonons.

On the example of an eight-well nanostructure GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As, as a cascade of experimental broadband QCD of the far-IR range with a double-well active region, the evolution of the energies of electron states, renormalized by interaction with all modes of confined and interface phonons, was studied, depending on the thickness of the potential barrier in the active region when the temperature changes in a wide range from cryogenic to room one. The obtained results made it possible not only to establish the degree of agreement between the theoretical model and the experiment, but also to reveal the physical effects caused by the electron-phonon interaction.

Based on the developed theory and the analysis of the energy spectrum of the electron and of the oscillator strengths of quantum transitions, an optimized design of the cascade of the quantum cascade detector operating in the far-IR range is proposed. The dimensions of the potential wells and barriers of the extractor are optimized in such a way that the functioning of the nano device occurs in the wavelength range of 8.2-8.7 μm with efficient phonon-accompanied tunneling of electrons through the extractor.

The scientific novelty of the conclusions drawn at the basis of the results, obtained in the second Section is revealed by the following provisions:

- It was established that in the cascade of a broadband quantum cascade detector of the far IR range with a two-well active region and a six-well extractor at arbitrary temperatures, the main contribution to the renormalization of electron states is made due to the interaction with the modes of the high-energy band of interface phonons, while the influence of confined phonons is an order of magnitude smaller.

- It was found that if the difference between the energies of two arbitrary states of an electron in a multilayered cascade of a quantum cascade detector is the same as the energy of a longitudinal phonon of the medium-well or medium-barrier, there is a sharp increase in the magnitudes and shifts and decays of both states caused by the interaction with optical phonons.

The third Section is devoted to the development of the theory of electron stationary states and its oscillator strengths of quantum transitions in a closed multi-

cascade nanosystem, being the main structural element of a quantum cascade detector, and to the study of the properties of the spectral characteristics of the nanosystem formed by optical transitions between electron states.

Wave functions and energies of electron states in a multi-cascade nanostructure were found in the approximation of position-dependent effective mass and rectangular potentials as a solution of the stationary Schrödinger equation, taking into account the normalization condition and the conditions of continuity of functions and their currents of probability densities at all heterointerfaces of the structure. Based on the obtained energies and wave functions, the functions of the probability densities of an electron location in the cascades of the nanosystem and the oscillator strengths of quantum transitions were calculated. The problem of the energy spectrum and wave functions of an electron in a super lattice with a potential of the Kronig-Penny type with a period equal to a separate cascade, as a model common in the literature in the theory of quantum cascade detectors, is also solved.

Based on the developed theory, the properties of electron states and oscillator strengths of quantum transitions in the multi-cascade main structural element of the experimental quantum cascade detector were investigated. It made possible to reveal the peculiarities of the formation of the absorption band of the device in the far IR range. A comparative analysis of the evolution of the properties of electron states depending on the number of cascades and their geometric configuration in closed and super lattice models was carried out.

The scientific novelty of the conclusions, drawn at the basis of the results obtained in the third Section, is revealed by the following provisions:

- Based on the developed theory of electron states in a closed nanostructure with an arbitrary number of cascades, it is shown that in a multi-cascade nanosystem the energy spectrum of an electron is characterized by quasi-discrete bands, the number of levels in which is equal to the number of cascades. It was found that the estimation of the spectral characteristics of energy bands in a closed multi-cascade structure can be carried out with satisfactory accuracy in a simple Kronig-Penny model with a two-cascade periodical super lattice element.

- It is shown that the probabilities of electron location in the states with the energies from the same band can differ significantly in different cascades of a closed multi-cascade nanosystem. Since, the absorption band of an N-cascade quantum cascade detector is formed by N quantum transitions only between those states, which are characterized by close spatial distributions of location probabilities and the width of the absorption band is determined by the widths of the corresponding electron bands, between which operation transitions occur.

In the fourth Section, in the approximation of effective mass and rectangular potentials model, using the transfer matrix method, the exact analytical expressions were obtained for the S-scattering matrix, the probability density distribution function, and the transmitting coefficient in an open multi-cascade resonant tunneling nanostructure. It made possible to develop the theory of spectral characteristics in three approaches (resonance energies and resonance widths) of quasi-stationary electron states in multi-cascade elements of a quantum cascade detector.

Using the example of an open multi-cascade resonant tunneling nanostructure with three-well cascades with GaAs wells and $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$ barriers, the evolution of resonance energies and resonance widths of quasi-stationary electron states depending on the number of cascades in the nanosystem was investigated. A comparative analysis of the results in three developed approaches was carried out. The influence of intra-cascade and inter-cascade potential barrier thicknesses on the spectral characteristics of electron states in open resonant tunneling nanostructures with different number of cascades was analyzed.

Based on the resonance energies and widths determined by the poles of the S-matrix, an approximate density distribution function of the probability of electron location in an open N-cascade nanostructure was analytically calculated as a normalized sum of N Lorentz functions. It made possible to show that the collapse of resonances arising from the dependence of the probability density function on the energy is due to superposition of electron states with close values of resonance energies and significantly different resonance widths (lifetimes).

The scientific novelty of the conclusions drawn at the basis of the results

obtained in the fourth Section is revealed by the following provisions:

- It was established that in an open N-cascade nanosystem, complexes of N quasi-stationary states arise, the resonance energies and resonance widths of which are uniquely determined only by the complex poles of the S-matrix. In those energy regions where the collapse of resonances occurs on the spectral distributions of the probability density function and the transmitting coefficient, both approaches do not allow the calculation of resonance energies and widths of electron states.

- The evolution of resonance energies and resonance widths of quasi-stationary electron states in open multi-cascade resonant tunneling nanosystems depending on the thicknesses of intra-cascade and inter-cascade potential barriers has been studied. Such configurations have been identified, in which the structure can be considered as the closed one.

Practical significance of the obtained results.

The developed theory of electron-phonon interaction in the cascade of a quantum cascade detector made it possible to identify the conditions under which the magnitudes of shifts and decays of electron states due to interaction with optical phonons increase sharply. The geometric configurations of the double-well active region of the far-IR quantum cascade detector were revealed, in which the detected effect is most pronounced and can affect the efficiency of the nano device functioning.

The proposed theory of electron states in multi-cascade nanosystems revealed non-homogeneous distributions of electron probability densities in different cascades of the structure, which may be one of the reasons for the low efficiency of the majority of experimental quantum cascade detectors.

The developed theories of stationary and quasi-stationary electron states in multi-cascade nanosystems, which allow us to estimate the energies and lifetimes of electron states, as well as the intensities of quantum transitions, can be important in the solution of the problem of optimal the designs of cascades of quantum cascade detectors in order to increase their efficiency.

Keywords: electron, phonon, energy spectrum, wave function, effective mass, oscillator strength quantum (optical) transition, absorption coefficient, stationary and quasi-stationary states, lifetimes (decay rates), nanostructure (system), resonance-tunnel structure, quantum dot, nanofilm, superlattice, quantum cascade detector (device).

Список публікацій за темою дисертації:

Наукові праці у виданнях, включених до переліку наукових фахових видань України та проіндексованих у наукометричних базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus:

1. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju., Voitsekhivska O.M. Modeling of optimized cascade of quantum cascade detector operating in far infrared range. *Mathematical Modeling and Computing*. 2020. Vol. 7. no. 1. P. 186–195.
2. Сеті Ю.О., Верешко Є.Ю., Ткач М.В., Войцехівська О.М. Особливості перенормування оптичними фононами електронного спектра в каскаді квантового каскадного детектора / Peculiarities of electron spectrum renormalized by optical phonons in the cascade of quantum cascade detector. *Журнал фізичних досліджень / Journal of Physical Studies*. 2021. Vol. 25. no. 3. P. 3706.
3. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju. Effect of Confined Phonons on Temperature Renormalization of Spectral Characteristics of Quantum Cascade Detector Operating in Far Infrared Range. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2021. Vol. 13. no. 2. P. 02031.
4. Сеті Ю.О., Верешко Є.Ю., Ткач М.В. Властивості електронних станів у закритій нанокаскадній структурі як елементі квантового каскадного детектора / Properties of electron states in a closed multi-cascade nanostructure being an element of a quantum cascade detector. *Журнал фізичних досліджень / Journal of Physical Studies*. 2022. Vol. 26. no. 4. P. 4702.

Наукові праці у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричних базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus:

5. Tkach M., Seti J., Voitsekhivska O., Gutiv V., Vereshko E. Properties of renormalized spectrum of interacting with polarization phonons localized

quasiparticle with degenerated excited state. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2020. Vol. 701. no. 1. P. 48–58.

6. Seti J., Voitsekhivska O., Vereshko E., Tkach M. Effect of interface phonons on the functioning of quantum cascade detectors operating in the far infrared range. *Applied Nanoscience (Switzerland)*. 2022. Vol. 12. no. 3. P. 533-542.

7. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M. Properties of spectral parameters of multicascade nanostructure being a model of quantum cascade detector. *Springer Proceedings in Physics*. Nanomaterials and Nanocomposites, Nanostructure Surfaces, and Their Applications: 10th International Research and Practice Conference on Nanotechnology and Nanomaterials (NANO 2021). Lviv 25-28 August 2021. 2023. Vol. 279. P. 361 – 376.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. Сеті Ю.О., Ткач М.В., Верешко Є.Ю. Спектральні властивості широкосмугового квантового каскадного детектора далекого ІЧ-діапазону з двоямною активною зоною. Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології (НАНСИС-2019): Тези VI Наук. конф. (Київ, 4–6 грудня 2019 р.) / редкол.: А. Г. Наумовець [та ін.]. Київ, 2019. С. 151.

2. Tkach M., Seti Ju., Voitsekhivska O., Hutiv V., Ivanochko M., Vereshko E. Properties of renormalized spectrum of interacting with polarization phonons localized quasiparticle with degenerated excited state. The International research and practice conference “*Nanotechnology and nanomaterials*” (NANO-2019): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 27 – 30 August 2019) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2019. P. 576.

3. Vereshko E.Ju., Seti Ju.O., Tkach M.V. Effect of interface phonons on the electron spectrum in far infrared range quantum cascade detector at cryogenic temperature. *Proceedings of the 2020 IEEE 10th International Conference on "Nanomaterials: Applications and Properties"* (NAP 2020). 2020. P. 9309532.

4. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju., Voitsekhivska O.M. Effect of interface phonons on the functioning of quantum cascade detectors operating in far

infrared range. The International research and practice conference “*Nanotechnology and nanomaterials*” (NANO-2020): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 26 – 29 August 2020) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2020. P. 469.

5. Seti Ju.O, Vereshko E.Y., Voitsekhivska O.M., Tkach M.V. Spectral properties of open multi-cascade nanostructure as an element of quantum cascade detector. *XVIII International Freik Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems. Materials.* / Ed. by Prof. V.V. Prokopiv. Ivano-Frankivsk: Publisher Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 2021. P. 51.

6. Сеті Ю.О., Ткач М.В., Верешко Є.Ю. Перенормування електронного спектра взаємодією з обмеженими фононами у оптимізованому каскаді квантового каскадного детектора. 9-та Міжнародна науково-технічна конференція “*Сенсорна електроніка та мікросистемні технології*” (СЕМСТ-9): матеріали Міжнар. наук.-техн. конф., Одеса, 20-24 вересня 2021. Одеса, 2021. С. 36.

7. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M., Markin O. Properties of transmission coefficient of multicascade element in quantum cascade detector // The International research and practice conference “*Nanotechnology and nanomaterials*” (NANO-2021): Abstract Book of participants of International research and practice conference (Lviv, 25 – 27 August 2021) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2021. P. 420.

8. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M. Properties of electron states in open multi-cascade nanostructure: S-matrix, transmission coefficient and probability function methods. The International research and practice conference “*Nanotechnology and nanomaterials*” (NANO-2022): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25–27 August 2022) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2022. P. 444.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	19
ВСТУП	20
РОЗДІЛ 1. КВАНТОВІ КАСКАДНІ ДЕТЕКТОРИ: ЕКСПЕРИМЕНТ І ТЕОРІЯ	28
1.1. Розвиток і сучасний стан експериментальних квантових каскадних детекторів.....	28
1.2. Теоретичні основи моделювання фізичних характеристик квантових каскадних детекторів	34
1.3. Теоретичні моделі електрон-фононої взаємодії у наноструктурних елементах квантових каскадних детекторів	42
Висновки до розділу 1.....	51
РОЗДІЛ 2. ВПЛИВ ОПТИЧНИХ ФОНОНІВ НА ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА В ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОМУ Й ОПТИМІЗОВАНОМУ КАСКАДАХ КВАНТОВОГО КАСКАДНОГО ДЕТЕКТОРА	52
2.1. Теорія електрон-фононої взаємодії в каскаді квантового каскадного детектора в однофононному наближенні	53
2.2. Особливості перенормування фононами спектральних характеристик електрона у каскаді квантового каскадного детектора.....	60
2.3. Еволюція перенормованих взаємодією з фононами спектральних характеристик електрона у каскаді широкосмугового квантового каскадного детектора	71
2.4. Оптимізація дизайну каскаду квантового каскадного детектора далекого інфрачервоного діапазону	79
Висновки до розділу 2.....	90
РОЗДІЛ 3. ВЛАСТИВОСТІ СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК БАГАТОКАСКАДНОЇ НАНОСТРУКТУРИ ЗАКРИТОГО ТИПУ ЯК ЕЛЕМЕНТА КВАНТОВОГО КАСКАДНОГО ДЕТЕКТОРА	93
3.1. Теорія електронних станів у багатокаскадній	

наноструктурі закритого типу	94
3.2. Теорія електронних станів у багатокаскадній наноструктурі у моделі Кроніга-Пенні	98
3.3. Еволюція властивостей електронних станів у багатокаскадній наноструктурі у закритій моделі та моделі Кроніга-Пенні.....	102
3.4. Властивості електронних станів у багатокаскадній наноструктурі закритого типу	115
Висновки до розділу 3.....	125
РОЗДІЛ 4. ВЛАСТИВОСТІ КВАЗІСТАЦІОНАРНОГО СПЕКТРА БАГАТОКАСКАДНОЇ НАНОСТРУКТУРИ ВІДКРИТОГО ТИПУ.....	128
4.1. Теорія S-матриці та коефіцієнта прозорості відкритої багатокаскадної наноструктури.....	129
4.2. Теорія функції розподілу густини ймовірності знаходження електрона у відкритій багатокаскадній наноструктурі.....	134
4.3. Властивості спектральних параметрів квазістаціонарних станів електрона у відкритій багатокаскадній наносистемі.....	137
Висновки до розділу 4.....	156
ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ.....	159
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	163
ДОДАТОК.....	183

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ІЧ – інфрачервоний.

ККД – квантовий каскадний детектор.

ККЛ – квантовий каскадний лазер.

ККЛД – квантовий каскадний лазер та детектор.

КСС – квазістаціонарний стан.

КЯІЧД – квантово-ямний інфрачервоний детектор.

РТС – резонансно-тунельна структура.

ВСТУП

Актуальність теми дослідження. Інтенсивний розвиток нанофізики, який розпочався більше ніж 30 років тому і триває до цього часу, привів спочатку до створення наноструктур різних просторових розмірностей та геометричних форм, а пізніше й до появи наноприладів на їх основі – детекторів, лазерів, діодів тощо. Зокрема, з появою у 2004 році перших квантових каскадних детекторів, основними структурними елементами яких є багат шарові напівпровідникові квантово-плівкові наногетеросистеми, відбувся значний прогрес у створенні та вдосконаленні нанодетекторів ІЧ-діапазону частот.

Сучасні ККД створюються на основі різних систем ізотропних (GaAs, AlAs, InGaAs, InAlAs та ін.) та анізотропних (GaN, AlN, AlGaN, InGaN та ін.) напівпровідникових матеріалів і охоплюють весь інфрачервоний діапазон частот до терагерцового включно. Важливі функціональні характеристики ККД, такі як мінімальні темнові струми, широкий діапазон робочих температур, гнучкі механізми керування робочими частотами належним вибором компонентного складу та розмірів наночарів каскадів, актуальний робочий ІЧ-частотний діапазон, який містить вікна прозорості атмосфери, та інші унікальні параметри роблять ці наноприлади перспективними для моніторингу навколишнього середовища, навігації, астрономії, медичної діагностики, військової сфери, наукових досліджень тощо.

Хоча задачі вдосконалення характеристик ККД постійно привертають увагу багатьох дослідників, та через існуючі в теорії фізики багат шарових низьковимірних структур складнощі виникла ситуація, коли експериментальні дослідження випередили теоретичні. У теоретичних працях, спрямованих на дослідження властивостей ККД, через громіздкість і складність квантово-механічного апарату, який застосовується для опису основних фізичних механізмів функціонування цих наноприладів, часто теорія будується на основі спрощених моделей кількочарного або ж безмежного надграткового елемента ККД. У таких підходах, як правило, вивчаються властивості електронних

станів, інтенсивностей квантових переходів, часів розсіювання на фонах та інші фізичні параметри, що дозволять зрозуміти загальні фундаментальні властивості досліджуваних систем, однак без врахування впливу дисипативних систем, зокрема багатогілкових інтерфейсних і обмежених фонів, на спектральні характеристики наноструктури.

Отже, побудова послідовної квантово-механічної теорії електронних станів, перенормованих взаємодією з усіма гілками оптичних фонів, у реалістичних моделях багатокаскадних наноструктур елементів ККД є актуальне завдання для розуміння цілісної картини фізики ККД, що виконується у дисертаційному дослідженні.

Мета дослідження полягає у побудові послідовної квантово-механічної теорії: а) енергетичного спектра електрона, перенормованого взаємодією зі всіма гілками обмежених та інтерфейсних фонів з урахуванням внутривірових і міжвірових конфігураційних взаємодій у багат шаровому каскаді ККД; б) стаціонарних станів електрона та сил осцилятора квантових переходів у багатокаскадній наносистемі закритого типу основного структурного елемента ККД; в) спектральних характеристик квазістаціонарних станів електрона у відкритій багатокаскадній РТС основного структурного елемента ККД.

Завдання, які виконувалися для досягнення сформульованої мети:

1. У моделі багат шарової наноструктури каскаду ККД, щоб отримати гамільтоніан електрон-фононної системи у зображенні чисел заповнення за всіма змінними та на його основі методом функцій Гріна здійснити аналітичний розрахунок масових операторів, що описують взаємодію електрона з обмеженими та інтерфейсними фонами.

2. Дослідити властивості перенормованого взаємодією з фонами енергетичного спектра електрона у каскаді ККД і проаналізувати вплив електрон-фононної взаємодії на спектральні характеристики смуги поглинання приладу.

3. У наближенні координатозалежних ефективних мас та прямокутних потенціалів для електрона у багатокаскадній наноструктурі закритого типу здійснити розрахунок енергій, хвильових функцій та сил осцилятора квантових переходів.

4. Дослідити еволюцію енергетичного спектра, густин імовірностей знаходження електрона та сил осцилятора залежно від кількості каскадів, а також від їх геометричних конфігурацій у багатокаскадному елементі ККД. Здійснити порівняльний аналіз результатів реалістичної моделі багатокаскадної наноструктури з поширеними надгратковою й однокаскадною моделями.

5. На основі точних розв'язків рівняння Шредінгера для електрона у багатокаскадній відкритій резонансно-тунельній наносистемі здійснити аналітичний розрахунок S-матриці розсіювання, функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості.

6. Дослідити властивості резонансних енергій та резонансних ширин квазістаціонарних станів електрона у багатокаскадному елементі ККД відкритого типу, визначені через комплексні полюси S-матриці та зі спектральних розподілів функції густини ймовірності й коефіцієнта прозорості.

Предметом дослідження є енергетичні спектри та хвильові функції стаціонарних станів електрона й сили осцилятора квантових переходів у закритих багатокаскадних наносистемах; резонансні енергії та резонансні ширини квазістаціонарних станів електрона у відкритих багатокаскадних наносистемах; спектри енергій та потенціали полів поляризації обмежених й інтерфейсних фононів у багатошарових наноструктурах.

Об'єктом дослідження є багатошарові наноструктури закритого типу та резонансно-тунельні наносистеми відкритого типу на основі напівпровідникових систем матеріалів $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ та $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$.

Методи дослідження

Теорії стаціонарних електронних станів у закритих багатошарових наносистемах і квазістаціонарних станів у відкритих резонансно-тунельних наноструктурах будувалися у моделі різних ефективних мас у ямах і бар'єрах

структур з прямокутними потенціалами на основі точних аналітичних розв'язків стаціонарних рівнянь Шредінгера за умов неперервності хвильових функцій та потоків густин їх імовірностей на всіх гетеромежах. Енергетичні спектри та потенціали полів поляризації обмежених та інтерфейсних фононів знаходилися у моделі ізотропного діелектричного континууму. Розрахунок перенормованих взаємодією з оптичними фононами електронних спектрів здійснювався у методі функцій Гріна на основі рівняння Дайсона з відомими масовими операторами.

Достовірність отриманих результатів і висновків обґрунтована застосуванням добре апробованих теоретичних методів розрахунку дисперсійних рівнянь для енергій електронів і фононів, сил осцилятора квантових переходів, S-матриці розсіювання, функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості, а також задовільним узгодженням теоретичних та експериментальних результатів.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами

Обраний напрям дослідження відповідає програмі наукової тематики кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича «Дослідження спектрів квазічастинок, перенормованих взаємодіями з електромагнітними та квантованими полями в низько розмірних і 3d системах із метою оптимізації параметрів наноприладів» (номер Держреєстрації 0116U004083, 2016-2020pp.) та «Квантова теорія фізичних явищ і процесів у низьковимірних системах різної симетрії як основних елементах сучасних наноприладів» (номер Держреєстрації 0121U109823, 2021-2025pp.).

Наукова новизна одержаних у роботі результатів полягає в тому, що у моделі координато-залежних ефективних мас і прямокутних потенціалів уперше:

1. Установлено, що у каскаді широкосмугового ККД далекого ІЧ діапазону з двоямною активною зоною та шестиямним екстрактором за довільних температур основний внесок у перенормування електронних станів

зумовлений взаємодією з гілками високоенергетичної смуги інтерфейсних фононів, а вплив обмежених фононів виявляється на порядок меншим.

2. З'ясовано, що якщо різниця між енергіями двох довільних станів електрона у багатошаровому каскаді ККД збігається з енергією поздовжнього фонона середовища-ями або середовища-бар'єра, відбувається різке зростання величин і зміщень, і затухань обох станів, зумовлених взаємодією з оптичними фононами.

3. На основі розвиненої теорії електронних станів у наноструктурі закритого типу з довільною кількістю каскадів показано, що у багатокаскадній наносистемі енергетичний спектр електрона характеризується квазідискретними смугами, кількість рівнів у яких дорівнює кількості каскадів. З'ясовано, що оцінка спектральних характеристик енергетичних зон у закритій багатокаскадній структурі може бути із задовільною точністю здійснена у простій моделі Кроніга-Пенні з двокаскадним періодичним елементом надгратки.

4. Показано, що ймовірності знаходження електрона у станах з енергіями з однієї зони можуть суттєво відрізнятися у різних каскадах закритої багатокаскадної наносистеми, через що смуга поглинання N -каскадного ККД формується N -квантовими переходами лише між тими станами, які характеризуються близькими просторовими розподілами ймовірностей знаходження, а ширина смуги поглинання визначається ширинами відповідних електронних зон, між якими відбуваються робочі переходи.

5. На основі точно аналітично розрахованих S -матриці розсіювання, функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості у трьох підходах розвинено теорію спектральних характеристик квазістаціонарних станів електрона у відкритій резонансно-тунельній наноструктурі з довільною кількістю однакових каскадів. Установлено, що у відкритій N -каскадній наносистемі виникають комплекси N -квазістаціонарних станів, резонансні енергії та резонансні ширини яких однозначно визначаються лише комплексними полюсами S -матриці.

6. Досліджено еволюцію резонансних енергій та резонансних ширин квазістаціонарних станів електрона у відкритих багатокаскадних резонансно-тунельних наносистемах від товщин внутрикаскадних і міжкаскадних потенціальних бар'єрів, виявлено такі конфігурації, за яких структуру можна вважати закритою

Практичне значення отриманих результатів

Розвинена теорія електрон-фононної взаємодії у каскаді ККД дозволила виявити умови, за яких величини зміщень і затухань електронних станів, зумовлені взаємодією з оптичними фононами, різко зростають. Знайдені геометричні конфігурації двоямної активної зони ККД далекого ІЧ-діапазону, за яких виявлений ефект найбільше проявляється і може впливати на ефективність функціонування наноприладу.

Запропонована теорія електронних станів у багатокаскадних наносистемах виявила неоднорідні розподіли густин імовірностей знаходження електрона у різних каскадах структури, що може бути однією з причин низької ефективності переважної більшості експериментальних ККД.

Розвинені теорії стаціонарних і квазістаціонарних станів електрона у багатокаскадних наносистемах, які дозволяють оцінити енергії та часи життя електронних станів, а також інтенсивності квантових переходів, можуть бути важливі у задачах про оптимізацію дизайнів каскадів ККД з метою підвищення їх ефективності.

Особистий внесок здобувача. У всіх працях дисертантка брала участь в обговоренні постановки задачі, визначенні мети роботи, виборі методів досліджень і підготовці матеріалів до публікації у наукових журналах і представленні на наукових конференціях. Основні результати та висновки обговорювалися з науковим керівником - доктором фіз.-мат. наук, професором Сеті Ю.О. (Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича), яка є співавторкою всіх зазначених у переліку робіт.

Зокрема, у [4] дисертантка виконала числовий розрахунок залежностей енергетичного спектра, густин імовірностей та сил осцилятора від кількості

каскадів у закритій наноструктурі. Здійснила аналітичний розрахунок дисперсійного рівняння та хвильових функцій електрона у багатокаскадній структурі з потенціалом типу Кроніга-Пенні, а також виконала всі числові розрахунки у [7]. Виконала у [1] розрахунок і аналіз енергетичних спектрів і сил осцилятора квантових переходів у окремому каскаді ККД. Брала участь у аналітичних і числових розрахунках масових операторів, які враховують взаємодію електрона з обмеженими [3] та інтерфейсними [6] фононами. У [2] була задіяна в усіх етапах дослідження перенормованого фононами спектра електрона у каскаді ККД. У [5] взяла участь в обговоренні комп'ютерного алгоритму аналітичного розрахунку мультиплікативних діаграм масового оператора системи дворівневої квазічастинки з виродженим збудженим рівнем, взаємодіючої з одномодовими поляризаційними фононами.

Апробація матеріалів дисертації

1. VI Наукова конференція «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології» (НАНСИС-2019), м. Київ, 4–6 грудня 2019р.
2. 7th International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials» (NANO-2019), м. Львів, 27 – 30 серпня 2019р.
3. 10th International Conference on «Nanomaterials: Applications and Properties» (NAP 2020), м. Суми, 9-13 листопада 2020р.
4. 8th International research and practice conference «Nanotechnology And Nanomaterials» (NANO–2020), м. Львів, 26–29 серпня 2020р.
5. 9th International Conference «Nanotechnologies and Nanomaterials» (NANO–2021), м. Львів, 25–27 серпня 2021р.
6. XVIII International Freik Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems. Materials, м. Івано-Франківськ, 11-16 жовтня 2021р.
7. 9-та Міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології» (СЕМСТ–9), м. Одеса, 20-24 вересня 2021р.
8. 10th International research and practice conference «Nanotechnology And Nanomaterials» (NANO–2022), м. Львів, 25–27 серпня 2022р.

Структура й обсяг дисертації

Дисертаційне дослідження складається з анотацій двома мовами, списку опублікованих праць автора, переліку умовних позначень, вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел (193 позицій) і Додатку (список публікацій здобувачки за темою дисертації).

Загальний обсяг роботи – 185 сторінки, робота містить 14 таблиць і 43 рисунки.

РОЗДІЛ 1

КВАНТОВІ КАСКАДНІ ДЕТЕКТОРИ: ЕКСПЕРИМЕНТ І ТЕОРІЯ

1.1 Розвиток і сучасний стан експериментальних квантових каскадних детекторів

Швидкий розвиток нанотехнологій, зумовлений удосконаленням методів молекулярно-променевої епітаксії, металоорганічної парофазної епітаксії, нанолітографії та інших високотехнологічних прецизійних методів, значно інтенсифікував дослідження багат шарових наноструктур як основних елементів сучасних уніполярних наноприладів - квантових каскадних лазерів [1-5], квантових каскадних детекторів [6-10] і квантово-ямних інфрачервоних детекторів [11-15], основою функціонування яких є квантові переходи між квантованими електронними станами у нанорозмірних напівпровідникових шарах гетероструктур. Оскільки робочі частоти цих наноприладів визначаються компонентним складом і розмірами наночарів їх структурних елементів, то завдяки методам зонної інженерії були продемонстровані наноприлади різноманітного дизайну [1-14], які охопили діапазони ІЧ-частот від ближнього до далекого.

Принциповою різницею між КЯІЧД і ККД є реалізація схеми проходження електронних потоків крізь основні активні елементи цих наноприладів.

Основний робочий елемент типового КЯІЧД [14] містить ізотропну чи анізотропну надгратку з однаковими квантовими ямами, в яких при поглинанні фотона відбувається перехід електрона з основного у збуджений стан.

В ізотропних КЯІЧД [16, 17] середнього та далекого ІЧ-діапазонів для створення керованого фотоструму прикладається зовнішнє електричне поле, яке спричиняє появу темного струму та шумів, роль яких значно зростає з підвищенням температури. Для мінімізації цих негативних факторів температури функціонування ізотропних КЯІЧД, зазвичай, не перевищують 77 К.

В анізотропних КЯІЧД [18, 19] близького ІЧ-діапазону зовнішнє

електричне поле не використовується, оскільки у нанощарах вюрцитних структур виникають значні внутрішні поля спонтанної та п'єзоелектричної поляризацій, які деформують потенціальні ями та бар'єри, роблячи їх форму трикутною. Хоча анізотропні КЯГЧД можуть працювати не лише при низьких, а й при кімнатних температурах, однак через відомі складнощі створення багатощарових вюрцитних надграток і значну залежність їх робочих параметрів від температури, ефективність роботи таких детекторів ще й досі залишається низькою.

Основна структурна частина типових ККД складається з декількох десятків однакових каскадів, кожний з яких поділяється на активну зону й екстрактор (рис. 1.1), що мають різне функціональне призначення. При поглинанні фотона в активній зоні відбувається перехід електрона з основного у збуджений стан, звідки у процесах розсіювання на оптичних фонах він тунелює механізмом «фононної драбинки» крізь екстрактор в основний стан наступного каскаду. У ККД, на відміну від КЯГЧД, темновий та інші шуми майже відсутні, що робить ці наноприлади привабливими для спектрального аналізу, ІЧ-візуалізації, космічних застосувань тощо.

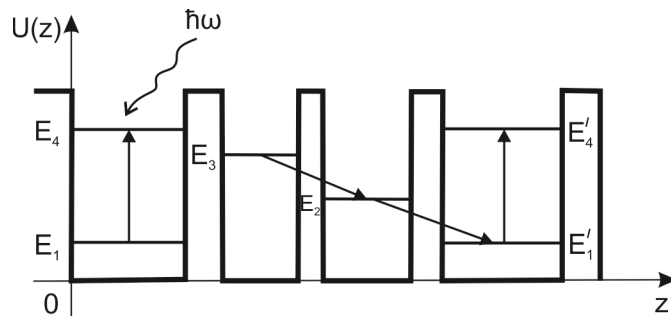


Рис. 1.1. Схематичне зображення потенціальної енергії електрона та його енергетичних рівнів в окремому каскаді ККД

Вибір напівпровідникових матеріалів шарів каскадів ККД має надзвичайно важливе значення, оскільки він не лише визначає енергію робочого переходу, але й впливає на ефективність ККД. Зокрема, ККД на основі матеріалів з меншою ефективною масою електрона [20] мають ліпші шумові характеристики та, відповідно, вищу ефективність функціонування.

Іншими альтернативними методами підвищення квантової ефективності та чутливості ККД є застосування фотонних кристалічних порожнин [21], інтегрованих плазмонних лінз [22], плазмонних поглинавачів [23].

Уперше роботу ККД, створеного на основі надгратки InGaAs/AlInAs, який поєднав ідеї функціонування КЯІЧД [14, 24] і ККЛ [25], продемонстровано в 2002 році у [26]. Квантова ефективність такого приладу була надзвичайно низькою (менше 0.01%), проте його здатність працювати за відсутності електричного поля дозволила вимірювати сигнал до кімнатної температури включно.

У 2004 році науковою групою Гендрона запропоновано ККД [27] з принципово новим дизайном надграткового структурного елементу GaAs/AlGaAs, який забезпечував тунелювання електронів крізь каскади через серію електронних рівнів з релаксацією енергії при випромінюванні оптичних фононів і не потребував прикладання електричного поля. На основі цієї ідеї функціонує переважна більшість сучасних ККД.

Подальший розвиток ККД здійснювався у кількох напрямках: розширення ІЧ діапазону від короткохвильового [28] і до далекого [29-31], розширення функціональних можливостей, таких як ширина смуги детектування [32] та швидкодія [33, 34].

У середньому ІЧ-діапазоні основною причиною розробки та вдосконалення ККД став пошук дешевшої високоякісної альтернативи існуючим HgCdTe-детекторам. А на короткохвильових інфрачервоних, особливо телекомунікаційних довжинах хвиль, де вже були створені хороші міжсмугові фотодіоди Ge та InGaAs, основним фактором стала швидкість міжпідзонних переходів.

Одним із підходів до зменшення довжин хвиль ККД було використання матеріалів групи III–V зі значною шириною забороненої зони, зокрема AlSb та його похідних, які у надгратках ККД забезпечують дуже глибокі потенціальні ями. Так, у 2007 році продемонстровані [35] два зразки ККД, створені на основі InGaAs/AlAsSb, з робочими довжинами хвиль 2.46 мкм і 2.14 мкм відповідно та

зовнішньою квантовою ефективністю, нижчою за 0.1% при кімнатній температурі.

Іншим підходом до зменшення довжин хвиль ККД, який поєднує ідею використання матеріалів з широкою забороненою зоною, а також сильний електрон-фононний зв'язок, що підвищує швидкодію, було використання нітридних матеріалів, зокрема GaN [36]. Після демонстрації КЯІЧД на основі GaN/AlN [18] та їх високошвидкісних характеристик [37] у 2008 році був створений перший ККД (GaN/AlGaN/AlN) [38] ближнього ІЧ діапазону з довжиною хвилі $\lambda = 1.7$ мкм та чутливістю 10 mA/W при кімнатній температурі.

Відзначимо, що, як відомо [12], нітридні гетероструктури з кристалічною ґраткою вюрцитного типу характеризуються дуже сильними внутрішніми полями спонтанної та п'єзоелектричної поляризацій, які при проектуванні ККД необхідно враховувати. Іншим ключовим ускладнюючим аспектом використання нітридних матеріалів є велика кількість дефектів кристалічної ґратки порівняно з арсенідними матеріалами середнього ІЧ-діапазону через невідповідність параметрів ґратки між GaN, AlGaN- та InGaN-шарами гетероструктури [39], що значно ускладнює вирощування екстракторів з необхідною кількістю потенціальних ям. Тому часто [12, 39] в анізотропних ККД на основі GaN спектр «фононної драбинки» виявляється неповним, що зумовлено відсутністю одного або кількох щаблів енергій в ямах екстрактора.

Подвійним переломним моментом у розвитку ККД став 2012 рік. По-перше, фокус багатьох досліджень перемістився до середньохвильового ІЧ діапазону (3–5 мкм), де були продемонстровані нові фотонні архітектури, такі як біфункціональні квантові каскадні лазери та детектори (ККЛД) [40], геометрії хвилеводів [41] і використаний плазмонний резонанс для підсилення ефективності ККД [10, 42]. По-друге, в середньому та короткохвильовому ІЧ-діапазонах були реалізовані ККД з використанням нових систем напівпровідникових матеріалів на основі Sb [21], GaN [43], ZnCdSe та ZnO [44]. Системи на основі ZnO, які поєднують велику заборонену зону з неполярним матеріалом, багатообіцяючі для короткохвильових ІЧ ККД. Наразі

повідомлялося лише про попередні вимірювання струму для таких систем, які підтверджують загальну концепцію функціонування ККД, тому оцінити їх показники швидкості та чутливості все ще важко.

Як видно, результатом пошуку нових фотонних архітектур стала поява біфункціонального приладу [40], який поєднує можливості квантових каскадних лазерів і детекторів, що дозволяють генерувати та детектувати випромінювання середнього ІЧ-діапазону з однаковою довжиною хвилі на одному чіпі з можливістю монолітної інтеграції. Основна складність конструкції ККЛД полягає у необхідності забезпечення перекриття спектрів лазерного випромінювання та відповіді детектора. Ця вимога обмежує досяжну продуктивність ККЛД порівняно зі звичайними ККЛ і ККД. Удосконалення конструкцій ККЛД дозволило підвищити продуктивність наноприладу [45] та розширити температурний діапазон до кімнатного включно [46].

На основі ККЛД реалізовано [47] монолітно-інтегрований датчик для виявлення фракцій концентрацій речовин у хімічному розчині. У цитованій праці для забезпечення ефективного зв'язку між лазером та детектором використовувалися плазмонні хвилеводи, що також забезпечувало взаємодію з навколишнім середовищем завдяки миттєвому характеру поверхневих плазмон-поляритонів. Використання лазерів із розподіленим зворотним зв'язком і вбудованого моніторингу температури дозволило значно знизити мінімально допустиме значення детектованої концентрації [48]. Такий датчик, виготовлений у вигляді масиву блоків лазер/хвилевід/детектор, дозволяє здійснювати вибіркоче виявлення окремих хімічних речовин у складних розчинах.

Оскільки фізичною основою функціонування ККД є квантові переходи між електронними станами, то переважна більшість цих приладів характеризується досить вузькою смугою поглинання, через що вони малопридатні для тих сфер, які потребують детектування випромінювання у широкому діапазоні частот (ІЧ-візуалізація, спектральний аналіз, космічні дослідження та інші).

Для розширення смуги поглинання зазвичай використовувалися різні дизайни структурних елементів ККД. Зокрема, у ККД середнього ІЧ-діапазону на основі InGaAs/InAlAs з узгодженою ґраткою з відносною шириною смуги 27%, розширення смуги досяглося використанням надзвичайно складної структури з 26 каскадів, розділених на 6 груп з різними геометричними дизайнами, що дозволило охопити діапазон довжин хвиль від 4.7 мкм до 7.4 мкм. Також нещодавно в [49, 50] на основі GaAs/AlGaAs тридцятикаскадного структурного елемента з каскадами однакового дизайну реалізований ККД з відносною шириною смуги поглинання 30.7%, який охоплював інтервал довжин хвиль від 7.6 мкм до 10.4 мкм у далекому ІЧ-діапазоні. Широка смуга поглинання такого наноприладу забезпечувалася реалізацією квантових переходів між парами розщеплених станів електрона в двоямних активних зонах каскадів з ямами однакових ширин. У [49, 50] продемонстрована залежність ширини смуги поглинання приладу від товщини потенціального бар'єра між ямами активних зон.

Отже, виконаний аналіз показує, що ККД – багатообіцяюча технологія [6, 12, 51], яка добре працює в широкому діапазоні ІЧ-довжин хвиль (від 1 до 30 мкм і навіть ТГц [52]) та температур (від криогенних до кімнатних) і характеризується високою швидкістю. Сучасні ККД виготовляються з різних систем матеріалів, наприклад ізотропних GaAs/AlGaAs та InGaAs/InAlAs для середнього інфрачервоного та терагерцового діапазонів [6], а також InGaAs/AlAsSb [35] GaN/AlGaN, GaN/InGaN [53, 54] для ближнього інфрачервоного діапазону. Відзначимо, що процес проектування та створення ККД середнього ІЧ діапазону вже вийшов на промисловий рівень.

На жаль, квантові ефективності всіх відомих нам ККД не перевищують 1%. Проте малі значення ефективності не є фатальними для ККД і значно залежать від оптимізації дизайну каскадів їх структурних елементів, яка може бути здійснена, зокрема, на основі послідовної квантово-механічної теорії, що враховує основні механізми функціонування цих наноприладів.

1.2 Теоретичні основи моделювання фізичних характеристик квантових каскадних детекторів

Як відомо [6, 8], функціонування типових ККД забезпечується поглинанням електромагнітного випромінювання при міжпідзонних квантових переходах електронів в активній зоні та з їх подальшим тунелюванням механізмом безвипромінювального розсіювання фононів через фононну драбинку в екстракторі. Тому за фізичними механізмами роботи ККД можна розділити на два основні етапи. Перший етап – квантовий перехід електрона з основного у збуджений енергетичний стан в активній зоні каскаду з поглинанням падаючих на систему фотонів. Другий – тунелювання електронів з активної зони через серію потенціальних ям і бар'єрів екстрактора до активної зони наступного каскаду. При цьому процес тунелювання може мати як резонансний, так і розсіювальний характер. Оскільки повне резонансне тунелювання можливе лише за умови, коли збуджений стан електрона в активній зоні та стан у першій потенціальній ямі екстрактора знаходяться в резонансі і обидва стани мають ефективну заселеність [55], що не завжди виконується в ККД, тому роль резонансного тунелювання не є домінуючою. Якщо ж енергетична різниця між збудженим робочим станом в активній зоні та найвищим станом в екстракторі значна і більша за резонансну, то переважні процеси тунелювання мають характер розсіювання. У цьому випадку в наногетероструктурі тунелювання може здійснюватися різними процесами розсіювання, такими як електрон-фононне, електрон-домішкове та розсіювання на інтерфейсах структури. Зазвичай вважається, що серед електрон-фононних процесів у системах матеріалів полярних напівпровідників домінує електрон-ЛО-фононне розсіювання. Допування шарів ККД приводить до появи іонізований домішок і, отже, до розсіювання електронів на них. Також у багатошарових наноструктурах ефективність тунелювання електронів залежить від якості меж поділу, яка визначається процесами й умовами росту епітаксіальних шарів, і може сильно впливати на транспортні властивості ККД розсіюючи електрони.

Отже, послідовна теорія ККД потребує врахування основних фізичних процесів у їх структурних елементах. Оскільки ККД характеризуються малими струмами, які зазвичай значно менші, ніж у ККЛ, та, відповідно, мають низьку квантову ефективність і чутливість, то це ускладнює пряме моделювання струму на основі стандартних підходів і методів, вдало застосованих для ККЛ [56], таких як ансамбль Монте-Карло або нерівноважних функцій Гріна. Також, як наслідок, теорія ККД не повинна базуватися на емпіричних моделях чи містити підгоночні параметри як вихідні дані, що обмежує можливі теоретичні підходи. Тому, на відміну від великої кількості літератури, яка існує в контексті моделювання ККЛ [56], праць з моделювання ККД не так багато. Більшість з них спрямовані на дослідження фізики ККД і прогнозування характеристик наноприладу та в основному базуються на експериментальних даних, за винятком лише невеликої їх кількості (наприклад [57-64]), виконаних у послідовних моделях.

Показником якості, який часто використовується для характеристики продуктивності детектора, є чутливість, яка визначається як відношення генерованого фотоструму до потужності падаючого світла. Хоча оптимізація чутливості ККД може бути здійснена за умови великих потужностей, проте типовий фотострум у реальних робочих умовах занадто малий і не може бути отриманий з достатньою точністю при числовому моделюванні. Цю проблему можна подолати, якщо використати зв'язок чутливості з ефективністю поглинання [6, 33, 59, 65]

$$R = \frac{e}{\hbar\omega} \eta g_p, \quad (1.1)$$

де коефіцієнт підсилення й ефективність поглинання для N -каскадного ККД визначаються як

$$g_p = \frac{p_e}{p_c N}, \quad (1.2)$$

$$\eta = 1 - e^{-\alpha N}. \quad (1.3)$$

Тут e , \hbar , ω – елементарний заряд, постійна Планка та частота відповідно,

$p_e = \tau_{rel} / (\tau_{rel} + \tau_{esc})$ – імовірність виходу електрона з активної зони в екстрактор, яка визначається швидкістю релаксації $(\tau_{rel})^{-1}$ електрона зі збудженого в основний стан в активній зоні та швидкістю $(\tau_{esc})^{-1}$ переходу електрона зі збудженого стану в активній зоні в основному стан в екстракторі, p_c – імовірність знаходження електрона в основному стані в активній зоні, яка часто [9, 30, 33] вважається такою, що дорівнює одиниці, α – коефіцієнт поглинання активної зони.

Для дослідження робочих характеристик ККД часто важливе знання не стільки абсолютної величини сигналу, скільки співвідношення сигналу до шуму. Відповідним параметром, який враховує таке відношення, є питома детективність D , що задається виразом

$$D = R \sqrt{\frac{SR_d}{4k_B T}}, \quad (1.4)$$

де R_d – опір детектора, T – температура, k_B – постійна Больцмана, S – площа детектора.

Отже, єдиним вхідним параметром, необхідним для моделювання чутливості та дефективності, є коефіцієнт поглинання α , який можна розрахувати на основі золотого правила Фермі [66-68] для швидкості індукованого зовнішнім електромагнітним полем переходу електрона зі стану i у стан j

$$W_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \Psi_j \left| \frac{e}{2m} (\vec{A} \cdot \hat{p} + \hat{p} \cdot \vec{A}) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2 \delta(E_j - E_i - \hbar\omega). \quad (1.5)$$

Тут хвильова функція електрона $\Psi_i(\vec{r})$ у відповідному стані (i) визначається добутком

$$\Psi_i(\vec{r}) = \psi_i(\vec{r}) \cdot U_\nu(\vec{r}), \quad (1.6)$$

де $\psi_i(\vec{r})$ – огибаюча хвильова функція, $U_\nu(\vec{r})$ – функція Блоха для зони ν .

У декартовій системі координат, вісь z якої спрямована перпендикулярно до площин гетерошарів структури, огинаючи хвильову функцію доцільно шукати у вигляді

$$\psi_{n\vec{k}_\perp}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}_\perp \vec{\rho}} \varphi_n(z), \quad (1.7)$$

де \vec{k}_\perp , $\vec{\rho}$ – двовимірні вектори у площині xoy , S – площа основної області у цій же площині, $\varphi_n(z)$ – одновимірна хвильова функція електронного стану n .

Вважаючи, що на структуру падає плоскополяризована електромагнітна хвиля з вектором напруженості

$$\vec{E} = E_0 \vec{e} \cos(\vec{q}\vec{r} - \omega t) \quad (1.8)$$

та векторним потенціалом

$$\vec{A} = \frac{E_0 \vec{e}}{\omega} \sin(\vec{q}\vec{r} - \omega t) \quad (1.9)$$

з (1.5) у дипольному наближенні [69] з урахуванням відомих [66-68] правил відбору для міжпідзонних переходів у двовимірних структурах отримується

$$W_{nn'}(\vec{k}_\perp) = \frac{\pi e^2 E_0^2}{2\hbar m^2 \omega^2} |\langle n | \hat{p}_z | n' \rangle|^2 \delta(E_{n'}(\vec{k}_\perp) - E_n(\vec{k}_\perp) - \hbar\omega), \quad (1.10)$$

де введено позначення матричного елемента оператора імпульсу \hat{p}_z

$$\langle n | \hat{p}_z | n' \rangle = \int \varphi_n^*(z) \hat{p}_z \varphi_{n'}(z) dz. \quad (1.11)$$

Тепер, просумувавши швидкості переходів між усіма можливими початковими та кінцевими станами і з урахуванням заповнення цих станів, розраховується коефіцієнт міжпідзонного поглинання

$$\alpha = \frac{\pi e^2 E_0^2}{2\omega m^2 IS} \sum_{n,n'} \sum_{\vec{k}_\perp} |\langle n | \hat{p}_z | n' \rangle|^2 [f_n(\vec{k}_\perp) - f_{n'}(\vec{k}_\perp)] \delta(E_{n'}(\vec{k}_\perp) - E_n(\vec{k}_\perp) - \hbar\omega). \quad (1.12)$$

Тут

$$f_n(\vec{k}_\perp) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_n(\vec{k}_\perp) - E_F}{k_B T}}} \quad (1.12)$$

– функція Фермі-Дірака, E_F – енергія Фермі,

$$I = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c \rho E_0^2$$

– інтенсивність падаючого випромінювання, ε_0 – діелектрична проникність, ρ – показник заломлення.

Далі, перейшовши в (1.12) від сумування до інтегрування за двовимірним вектором \vec{k}_\perp та вважаючи закон дисперсії параболічним у результаті точного розрахунку інтегралів, вираз для коефіцієнта поглинання приводиться до вигляду

$$\alpha = \frac{e^2 k_B T}{2\pi \varepsilon_0 c \rho \hbar} \sum_{n, n'} f_{nn'} \ln \left[\frac{1 + e^{\frac{E_F - E_n}{k_B T}}}{1 + e^{\frac{E_F - E_{n'}}{k_B T}}} \right] \frac{\Gamma}{(E_{n'} - E_n - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2}, \quad (1.13)$$

де введено позначення сили осцилятора

$$f_{nn'} = \frac{2}{m \hbar \omega_{n'n}} \left| \langle n | \hat{p}_z | n' \rangle \right|^2,$$

а δ -функція апроксимована функцією Лоренца півшириною Γ . У випадку дворівневої системи при кріогенній температурі ($T \rightarrow 0$) отриманий результат (1.13) значно спрощується

$$\alpha(T \rightarrow 0) = \frac{n_0 e^2 \hbar f_{12}}{2 \varepsilon_0 c \rho m} \frac{\Gamma}{(E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2}, \quad (1.14)$$

вираз (1.14) дозволяє здійснювати оцінку пікової сили поглинання ізольованої активної квантової ями каскаду ККД з двома електронними рівнями (E_1, E_2) за відомими концентрацією (n_0) електронів, силою осцилятора f_{12} та шириною Γ .

Одним із підходів до моделювання електронного транспорту у ККД є модель так званого «термалізованого каскаду», запропонована в [70], яка базується на підході єдиного рівня Фермі для окремого каскаду.

У цитованій праці при розрахунках тунельних процесів враховувалося лише розсіювання на LO-фононах. Така модель із задовільною точністю дозволяла пояснити електронний транспорт в окремому каскаді ККД для температур від 90К до 200К. У [71] запропоновано вдосконалену модель «термалізованих підзон», в якій вважалося, що не лише каскад, а й підзони в каскаді квазітермалізовані. Цей підхід дозволив дослідити транспортні властивості ККД у ширшому діапазоні температур (40-300К).

Іншим відомим способом моделювання функціонування ККД є підхід рівнянь швидкості, який враховує швидкості зміни заселеностей електронних підзон і дозволяє дослідити тунелювання електронів через різні розсіювальні механізми (електрон-фотонна, електрон-електронна й електрон-фононна взаємодії, розсіювання на заряджених домішках та інтерфейсах). У цьому підході у наближенні Ваньє-Штарка [72] гамільтоніан системи представляється у вигляді суми точної частини, для якої розв'язки рівняння Шредінгера знаходяться точно, та збурення, що враховує різні механізми розсіювання. Така задача розв'язується самоузгоджено. Підхід рівнянь швидкостей застосований у [57, 58] для дослідження чутливості та детективності ККД середнього ІЧ-діапазону.

Одним з основних недоліків методу рівняння швидкості є використання наближення нескінченної періодичної надграткової структури як елемента ККД, що не дозволяє враховувати ефекти, зумовлені скінченністю розмірів реальних наноприладів. Іншим важливим недоліком є неможливість опису резонансних електронних станів, через що обмежується моделювання резонансного тунелювання електрона з верхнього стану в активній ямі у стан в першій екстракторній ямі.

Іншою альтернативною моделлю для дослідження електронного тунелювання є модель матриці густини, яка успішно застосована для ККЛ [73,

74] і пізніше модернізована для ККД [60]. Також на основі апарату нерівноважних функцій Гріна [75] розроблена теорія транспортних властивостей ККЛ, результати якої широко порівнювалися з експериментальними у середньому ІЧ- та ТГц- [76] діапазонах, проте аналогічних кількісних порівнянь для ККД [77] виявляється на порядок менше через згадані раніше складнощі числових розрахунків, зумовлених малими величинами струмів. Нещодавно у [59] запропоновано підхід до моделювання властивостей структур ККД на основі методу ансамблю Монте-Карло з використанням співвідношень термодинамічної рівноваги для заселеності електронних станів і швидкості розсіювання. Отримані результати показали задовільну збіжність як з експериментальними даними, так і з результатами теоретичного моделювання із застосуванням нерівноважних функцій Гріна для ККД середнього ІЧ- і терагерцового діапазонів.

Ще один відомий в літературі підхід до моделювання властивостей ККД базується на моделі ефективної маси [62, 78-87], в якій на основі знайдених розв'язків рівняння Шредінгера розраховуються енергетичні спектри та хвильові функції електронних станів, сили осциляторів, струм, провідність та інші фізичні величини у багаточарових структурах як елементах ККД. Оскільки у кожному наносередовищі таких структур електрон характеризується різною ефективною масою, то у всій наноструктурі вона виявляється координатозалежною. У результаті в операторі кінетичної енергії гамільтоніана ефективна маса й оператор імпульсу не комутують, що призводить до відомої проблеми коректного запису оператора кінетичної енергії.

Як відомо, проблема врахування координатної залежності ефективної маси в операторі кінетичної енергії гамільтоніана гетерогенної системи тривалий час знаходилася в центрі уваги багатьох дослідників [88-92]. У цитованих та інших працях розроблені підходи коректного впорядкування положення маси в операторі кінетичної енергії. Щодо гетероструктур, то в [93-97] показано, що найбільша відповідність між теорією й експериментом та

іншими теоретичними моделями типу Кроніга-Пенні отримується у підході Бен-Деніела-Дьюка [98] з оператором кінетичної енергії $\frac{-\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz}$.

З метою оптимізації дизайну активної зони каскадів ККД у [61, 62, 79, 99, 100] у моделі координато-залежної ефективної маси електрона розвивалася теорія активної динамічної провідності багатошарової наноструктури відкритого типу [64]. Хвильові функції електронних станів отримувалися з рівняння Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(z,t) = [H(z) + H(z,t)]\Psi(z,t), \quad (1.15)$$

взаємодія електрона з електромагнітним полем, в якому напруженості $\mathcal{E}(t) = 2\mathcal{E} \cos \omega t$, де врахована у дипольному наближенні гамільтоніаном

$$H(z,t) = -e\mathcal{E}(t)\{z[\theta(z) - \theta(z-L)] + L\theta(z-L)\}. \quad (1.16)$$

Тут $H(z)$ – стаціонарний електронний гамільтоніан, L – лінійний розмір наноструктури, $\theta(z)$ – одинична функція Хевісайда.

Розв'язок рівняння (1.15) шукається методом часової теорії збурень.

У випадку слабого електромагнітного поля в одномодовому наближенні він має вигляд

$$\Psi(z,t) = \Psi(z)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{+1}(z)e^{-i(\omega_0 + \omega)t} + \Psi_{-1}(z)e^{-i(\omega_0 - \omega)t}, \quad (1.17)$$

де $\omega_0 = E/\hbar$, ω – частота електромагнітної хвилі, $\Psi(z)$ – відома функція, яка є розв'язком стаціонарного рівняння Шредінгера з гамільтоніаном $H(z)$. Поправки $\Psi_{\pm 1}(z)$ до хвильових функцій знаходяться точно з рівняння (1.15) з урахуванням умов неперервності повної хвильової функції $\Psi(z,t)$ і густини її потоку у довільний момент часу на всіх гетеромежах структури. Знайдені функції $\Psi_{+1}(z)$ та $\Psi_{-1}(z)$ дозволяють розрахувати густини електронних потоків, які виходять з наносистеми у результаті поглинання $(E + \hbar\omega)$ чи випромінювання $(E - \hbar\omega)$ кванта енергії $\hbar\omega$

$$j(E \pm \hbar\omega, z) = \frac{ie\hbar n_0}{2m(z)} \left[\Psi_{\pm 1}(E, z) \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{\pm 1}^*(E, z) - \Psi_{\pm 1}^*(E, z) \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{\pm 1}(E, z) \right]. \quad (1.18)$$

Тепер розрахувавши у квазікласичному наближенні енергію взаємодії електрона з електромагнітним полем за період часу $T = \frac{2\pi}{\omega}$

$$\varepsilon = \frac{\Omega T}{e} \{ [j(E + \hbar\omega, L) - j(E - \hbar\omega, L)] - [j(E + \hbar\omega, 0) - j(E - \hbar\omega, 0)] \} \quad (1.19)$$

та врахувавши її зв'язок з дійсною частиною активної динамічної провідності

$$\varepsilon = 2LTC^2\sigma, \quad (1.20)$$

отримується кінцевий аналітичний вираз для σ як функції, залежної від енергії E електронного потоку та частоти ω електромагнітного поля, який доцільно подати у вигляді суми двох складових, зумовлених прямим і оберненими електронними потоками

$$\sigma(E, \omega) = \sigma^+(E, \omega) + \sigma^-(E, \omega). \quad (1.21)$$

У цитованих працях показано, що аналіз спектральних характеристик (резонансних енергій та ширин) електронних станів і складових (σ^+ , σ^-) динамічної провідності дозволяє оптимізувати геометричний дизайн активної зони окремого каскаду з наперед визначеними робочими характеристиками. Зокрема, встановлено, що ефективність роботи ККД буде найбільш при максимальній величині активної провідності σ^+ і мінімальному часі життя електронів у робочих станах.

1.3 Теоретичні моделі електрон-фононої взаємодії у наноструктурних елементах квантових каскадних детекторів

Незважаючи на інтенсивні експериментальні дослідження ККД, повна і послідовна теорія фізичних процесів у їх структурних елементах ще й досі відсутня, оскільки вимагає побудови реалістичних моделей з урахуванням основних фізичних механізмів їх функціонування, зокрема як електрон-фотонної, так і повної електрон-фононої взаємодій.

Перші праці з теорії спектрів квазічастинок у наногетероструктурах різної симетрії [66, 101-111] в основному мали чисто фундаментальний характер і були присвячені теоретичному дослідженню спектральних параметрів

квазічастинок у найпростіших наноструктурах. Отримані в цих працях результати дозволяли зрозуміти загальні властивості досліджуваних систем і часто через використання спрощених моделей не могли претендувати на кількісне порівняння з експериментом. Пізніше, з появою експериментальних квантових каскадних лазерів і детекторів, з'явилися теоретичні праці [56-58, 60, 73-76, 112-119] з вивчення у більш реалістичних моделях електронного транспорту крізь багат шарові наноструктури. У працях цього напрямку взаємодія з фононами часто не розглядалася. А у тих працях, теоретична модель яких враховувала фонони, як правило, використовувалося спрощене наближення об'ємних поляризаційних фононів.

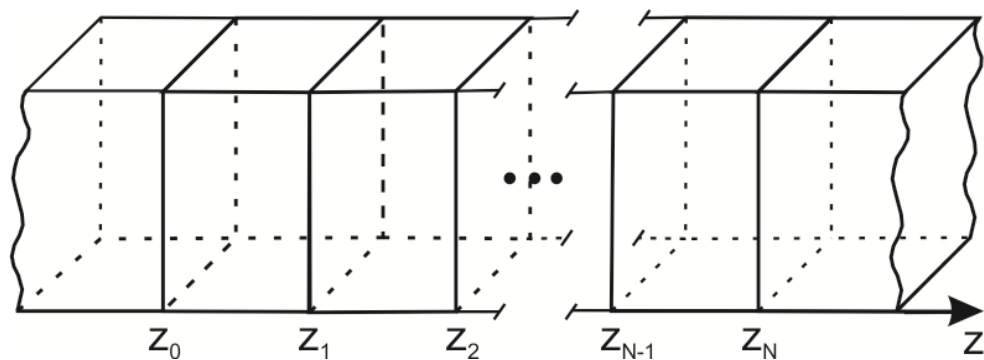


Рис. 1.2. Геометрична схема N -шарової наногетероструктури

Більш послідовну теорію електрон-фононної взаємодії доцільно будувати у моделях [120-128], які враховують вплив просторового обмеження на фононні моди. Найбільш відома з них модель діелектричного континууму [120, 121], яка часто використовувалася, зокрема у [128-131, 133-138], для дослідження на основі золотого правила Фермі ймовірностей електрон-фононного розсіювання та пов'язаних з ними фізичних величин в ізотропних і анізотропних наногетероструктурах.

У моделі діелектричного континууму електростатичний потенціал фононів у середовищах багат шарової наноструктури (рис. 1.2) задовольняє рівняння Лапласа

$$\varepsilon_j(\omega)\bar{\nabla}^2\Phi_j(\vec{r}) = 0, \quad (1.22)$$

де діелектрична проникність у випадку бінарної чи потрійної сполуки матеріалу визначається співвідношенням Ліддейна-Сакса-Теллера [120]:

$$\varepsilon_j(\omega) = \varepsilon_{j\infty} \frac{(\omega^2 - \omega_{LO}^2)}{(\omega^2 - \omega_{TO}^2)}; \quad \varepsilon_j(\omega) = \varepsilon_{j\infty} \frac{(\omega^2 - \omega_{LO_1}^2)(\omega^2 - \omega_{LO_2}^2)}{(\omega^2 - \omega_{TO_1}^2)(\omega^2 - \omega_{TO_2}^2)} \quad (1.23)$$

з відомими значеннями високочастотної (ε_∞) діелектричної сталої та частотами поздовжніх (ω_{LO}) і поперечних (ω_{TO}) фононів масивних аналогів шарів структури. Враховуючи трансляційну інваріантність у площині гетеро шарів, перпендикулярній напрямку Oz , розв'язок (1.22) шукається у вигляді двовимірного перетворення Фур'є

$$\Phi_j(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \sum_{\nu} \Phi_{j\nu}(\vec{q}, z) e^{i\vec{q}\vec{\rho}}, \quad (1.24)$$

тут \vec{q} та $\vec{\rho}$ – двомірні хвильовий вектор і радіус-вектор, ν – номер фононної гілки.

Тоді з (1.22) для $\Phi_{j\nu}$ отримується рівняння

$$\varepsilon_j(\omega) \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q^2 \right) \Phi_{j\nu}(q, z) = 0, \quad (1.25)$$

яке, як відомо [121], має два типи розв'язків: 1) $\varepsilon_j(\omega) = 0$ визначає обмежені (L) фонони, енергії яких, згідно з (1.23), збігаються з енергіями LO-фононів масивних матеріалів структури; 2) $\left(\partial^2 / \partial z^2 - q^2 \right) \Phi_{j\nu}(q, z) = 0$ справедливе для потенціалу інтерфейсних (I) фононів.

У загальному випадку розв'язок рівняння (1.25) шукається у вигляді

$$\Phi_{j\nu}(q, z) = a_{j\nu} e^{qz} + b_{j\nu} e^{-qz}. \quad (1.26)$$

Константи $a_{j\nu}$ та $b_{j\nu}$ знаходяться з умов неперервності двомірного вектора напруженості електричного поля та вектора електричного зміщення

$$\Phi_{j\nu}(q, z_j) = \Phi_{j+1,\nu}(q, z_j), \quad \varepsilon_j(\omega) \frac{\partial \Phi_{j\nu}(q, z)}{\partial z} = \varepsilon_{j+1}(\omega) \frac{\partial \Phi_{j+1,\nu}(q, z)}{\partial z} \quad (1.27)$$

та умови нормування

$$\frac{\hbar}{2\omega} = \sum_{j=0}^{N+1} \frac{\varepsilon_{j0}}{2\omega} \frac{\partial \varepsilon_j(\omega)}{\partial \omega} \int_{z_{j-1}}^{z_{N+1}} \left(q^2 |\Phi_j(q, z)|^2 + \left| \frac{\partial \Phi_j(q, z)}{\partial z} \right|^2 \right) dz \quad (1.28)$$

тут $z_{-1} \rightarrow -\infty$, $z_{N+1} \rightarrow +\infty$, ε_{j0} – низькочастотна діелектрична стала j -го середовища.

Граничні умови (1.27) також дозволяють отримати, наприклад методом трансфер-матриці [139], дисперсійне рівняння для розрахунку спектра енергій І-фононів.

За відомими потенціалами полів поляризації розраховується [121] гамільтоніан електрон-фононної взаємодії як адитивна сума гамільтоніанів е-L та е-I взаємодій

$$H_{e-ph} = H_{e-L} + H_{e-I}, \quad (1.29)$$

що дозволяє [129-131] на основі золотого правила Фермі розрахувати швидкості фонон-супровідних переходів між двома електронними станами $|n, \vec{k}\rangle$ та $|n', \vec{k}'\rangle$ у процесах поглинання або випромінювання фононів

$$W_{n,n'}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle n', \vec{k}', N_q \pm 1 | H_{e-ph} | n, \vec{k}, N_q \rangle \right|^2 \delta(E_{n'}(\vec{k}') - E_n(\vec{k}) \pm \hbar\omega) \quad (1.30)$$

Тут $E_n(\vec{k}) = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ – енергія електрона з хвильовим вектором \vec{k} у n -тій підзоні, E_n – енергія n -го квантованого стану, зумовленого просторовим обмеженням вздовж осі z , \vec{k} – двомірний хвильовий вектор електрона, $N_q = \left(e^{(\hbar\omega(q)/k_B T)} - 1 \right)^{-1}$ – числа заповнення фононів.

Згідно з фізичними міркуваннями, процеси з випромінюванням фононів дозволені, якщо різниця $E_{nn'} = E_n - E_{n'}$ між енергіями електронних станів більша за енергію ($\hbar\omega$) фонона ($E_{nn'} > \hbar\omega$) або, у випадку $E_{nn'} < \hbar\omega$, якщо

електрон володіє достатньою енергією руху у площині xoy ($\frac{\hbar^2 k^2}{2m} > \hbar\omega - E_{nn'}$).

Переходи з поглинанням фононів дозволені лише за умови $E_{nn'} \leq \hbar\omega$.

Здійснивши у (1.30) сумування за всіма дозволеними кінцевими електронними станами у результаті нескладних аналітичних розрахунків, отримуються кінцеві вирази [129-131, 133] для швидкості переходів:

$$W_{nn'}(\vec{k}) = \frac{me^2}{\pi\hbar^3} (N_q + 1) \begin{cases} \int_{-\theta_{\max}}^{\theta_{\max}} \frac{|M_{nn'}(q_+)|^2 q_+ + |M_{nn'}(q_-)|^2 q_-}{|q_+ + q_-|} d\theta, & \hbar\omega > E_{nn'}, \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > \hbar\omega - E_{nn'} \\ \int_0^{2\pi} |M_{nn'}(q_+)|^2 d\theta, & E_{nn'} \geq \hbar\omega \end{cases} \quad (1.31)$$

де

$$M_{nn'}(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(z) \Phi(q, z) \Psi_{n'}(z) dz,$$

$$q_{\pm} = k \cos \theta \pm \sqrt{k^2 \cos^2(\theta) - \frac{2m}{\hbar^2} (\hbar\omega - (E_n - E_{n'}))},$$

$$\theta_{\max} = \cos^{-1} \left(\sqrt{\frac{2m(\hbar\omega - (E_n - E_{n'}))}{\hbar^2 k^2}} \right),$$

θ – кут між хвильовими векторами початкового та кінцевого станів електрона у площині xoy .

У [140-143] у моделі ефективних мас для електрона та діелектричного континууму для обмежених та інтерфейсних фононів на основі діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса в одномодовому наближенні розвивалася теорія електрон-фононної взаємодії, яка, на відміну від описаних вище підходів, дозволяє отримати величини зміщень і затухань електронних станів, зумовлені впливом фононів. У цитованих працях на прикладах простих одно- та двоямних наноструктур, як елементів ККД і ККЛ, досліджувалися властивості перенормованих фононами спектральних характеристик окремих робочих електронних станів.

Як видно, розвиток теорії взаємодії квазічастинок з фононами майже завжди здійснювався на основі моделей, які враховують лише однофононні

процеси, хоча ще з [144-146] відомо, що у простій системі однорівневої квазічастинки, взаємодіючої з поляризаційними фононами, багатохонні процеси приводять до виникнення еквідистантних збуджених станів. На жаль, наскільки нам відомо, повна загальна теорія спектра багатозонних квазічастинок, взаємодіючих з багатомодовими фононами, ще й досі відсутня через відомі проблеми квантової теорії поля.

Водночас значний прогрес у розв'язанні поляронних задач, який відбувся завдяки застосуванню сучасних методів квантового алгоритму Монте-Карло [147-149], діаграмного Монте-Карло [150-153], діаграмного жирного Монте-Карло [154-157] та усередненого імпульсу [158-162], указав на можливість належної модифікації діаграмної техніки для побудови послідовної і повної теорії взаємодії квазічастинок з фононами. Подібний підхід застосований у [163-165], де на основі модифікованої діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса запропонований метод послідовного виділення та підсумовування мультиплікативних діаграм масового оператора системи багаторівневої квазічастинки з поляризаційними фононами.

У цьому ж підході в [166] розвинено теорію перенормованого енергетичного спектра локалізованої квазічастинки з подвійно виродженим збудженим рівнем, що взаємодіє з бездисперсійними поляризаційними фононами. Гамільтоніан такої системи має вигляд

$$\hat{H} = \sum_{\mu=1}^3 E_{\mu} \hat{a}_{\mu}^{\dagger} \hat{a}_{\mu} + \sum_{\bar{q}} \Omega \left(\hat{b}_{\bar{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\bar{q}} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\bar{q}} \sum_{\mu_1, \mu_2=1}^3 \varphi_{\mu_1 \mu_2} \hat{a}_{\mu_1}^{\dagger} \hat{a}_{\mu_2} (\hat{b}_{\bar{q}} + \hat{b}_{-\bar{q}}^{\dagger}), \quad (1.32)$$

де E_{μ} – неперенормовані енергії квазічастинки, Ω – енергія фонона, \hat{a}_{μ}^{\dagger} , \hat{a}_{μ} та $\hat{b}_{\bar{q}}^{\dagger}$, $\hat{b}_{\bar{q}}$ – квазічастинкові та фононні оператори вторинного квантування. Константи зв'язку ($\varphi_{\mu_1 \mu_2}$) вважаються відомими параметрами задачі.

При криогенній температурі (T=0K) перенормований енергетичний спектр системи, з гамільтоніаном (1.32) у діаграмній техніці Фейнмана-Пайнса, як відомо [167, 168], визначається діагональним елементом Фур'є-образу функції

Гріна, для якої справедлива система рівнянь

$$G_{\mu\mu'}(\omega) = (\omega - E_{\mu} + i\eta)^{-1} \left[\delta_{\mu\mu'} + \sum_{\mu_1=1}^3 M_{\mu\mu_1}(\omega) G_{\mu_1\mu'}(\omega) \right], \quad \mu, \mu' = 1, 2, 3; \eta \rightarrow 0, \quad (1.33)$$

де $M_{\mu\mu_1}(\omega)$ – повний масовий оператор.

Перейшовши у (1.33) до знерозмірених змінних за правилами

$$\begin{aligned} g_{\mu}(\xi) = g_{\mu\mu}(\xi) = \Omega G_{\mu\mu}, \quad m_{\mu}(\xi) = M_{\mu} \Omega^{-1}, \quad m_{\mu\mu'}(\xi) = M_{\mu\mu'} \Omega^{-1}, \\ \xi = (\omega - E_1) \Omega^{-1}, \quad \xi_{\mu_1} = (\omega - E_{\mu_1}) \Omega^{-1}, \quad \alpha_{\mu_1\mu_2} = \varphi_{\mu_1\mu_2} \Omega^{-1}, \quad \delta_{\mu=2,3} = \Delta E_{\mu=2,3} \Omega^{-1}. \end{aligned} \quad (1.34)$$

система рівнянь (1.33) розв'язується точно, звідки для функцій $g_{\mu}(\xi)$ розв'язок визначається рівняннями Дайсона

$$g_{\mu}(\xi) = g_{\mu\mu}(\xi) = \{\xi_{\mu} - m_{\mu}(\xi)\}^{-1}. \quad (1.35)$$

Тут повний масовий оператор $m_{\mu}(\xi)$

$$m_{\mu}(\xi) = m_{\mu\mu}(\xi) + m_{\mu\mu}^g(\xi), \quad (1.36)$$

знаходиться як сума діагонального члена $m_{\mu\mu}$, який враховує міжрівневу взаємодію з фононами, але без урахування недіагональних елементів $g_{\mu\mu'}$ і масового оператора $m_{\mu\mu}^g$, обумовленого недіагональними елементами $g_{\mu\mu'}$ [164]

$$m_{11}^{g(2)}(\xi) = \frac{2m_{12}m_{23}m_{31} + (\xi_2 - m_{22})|m_{13}|^2 + (\xi_3 - m_{33})|m_{12}|^2}{(\xi_2 - m_{22})(\xi_3 - m_{33}) - |m_{23}|^2}, \quad (1.37)$$

$m_{22}^g(\xi)$ і $m_{33}^g(\xi)$ отримуються з (1.37) циклічною заміною індексів (1,2,3).

Згідно з правилами діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса [105], масовий оператор $m_{\mu\mu}(\xi)$ отримується у такій діаграмній формі

$$\begin{aligned}
m_{\mu\mu'}(\xi) &= \text{diagram with shaded semi-circle} = \left[\text{diagram with semi-circle and } \mu_1 \right] + \\
&+ 2! \left[\text{diagram with two semi-circles} + 2 \text{diagram with two semi-circles and } \mu_4 \mu_5 \mu'_1 + 2^2 \text{diagram with three semi-circles} + 2^3 \text{diagram with four semi-circles} + \dots \right] \\
&+ 3! \left[\text{diagram with three semi-circles} + 2^2 \text{diagram with three semi-circles and } \mu_5 \mu_6 \mu_7 \mu'_1 + 2^2 \cdot 3 \text{diagram with four semi-circles} + \dots \right. \\
&\quad \left. + 3 \text{diagram with three semi-circles and } \mu_4 \mu_5 \mu_6 \mu_7 \mu'_1 + 3^2 \cdot 2 \text{diagram with four semi-circles} + \dots \right] \\
&+ 4! \left[\text{diagram with four semi-circles} + 2^2 \text{diagram with four semi-circles and } \mu_6 \mu_7 \mu_8 \mu_9 \mu'_1 + \dots \right] + \dots \quad (1.38)
\end{aligned}$$

де всі діаграми у довільному p -му порядку отримуються комп'ютерним розрахунком.

Для здійснення парціального підсумовування діаграм масового оператора їх доцільно згрупувати у безмежні класи (у (1.38) виділені квадратними дужками), які далі будемо називати перенормованими p -фононними масовими операторами $m_{\mu\mu'}^{[p]}(\xi)$. Тоді повний масовий оператор можна записати як безмежну суму

$$m_{\mu\mu'}(\xi) = \sum_{p=1}^{\infty} m_{\mu\mu'}^{[p]}(\xi). \quad (1.39)$$

Оскільки $m_{\mu\mu'}^{[p]}(\xi)$ не є мультиплікативними, то далі виділяючи у кожному перенормованому масовому операторі мультиплікативну (m) та немультіплікативну (nm) складові, повний масовий оператор приводиться до вигляду

$$m_{\mu\mu'}(\xi) = \sum_{p=1}^{\infty} m_{\mu\mu'}^{[p,m]}(\xi) + \sum_{p=2}^{\infty} m_{\mu\mu'}^{[p,nm]}(\xi). \quad (1.40)$$

Здійснивши за описаною процедурою перегрупування та виділення мультиплікативних діаграм до третього порядку включно, масовий оператор отримується у вигляді

$$m_{\mu\mu'}(\xi) = m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi) + m_{\mu\mu'}^{[2],m}(\xi) + m_{\mu\mu'}^{[3],m}(\xi), \quad (1.41)$$

де мультиплікативні масові оператори мають зручні для розрахунків вигляди функціональних рівнянь

$$m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi) = \sum_{\mu_1=1}^3 \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu'}}{\xi_{\mu_1} - 1 - m_{\mu_1\mu_1}^{2,m}(\xi)}, \quad (1.42)$$

$$m_{\mu\mu'}^{2,[m]}(\xi) = \sum_{\substack{\mu_1, \mu_2, \\ \mu_1' \neq \mu_1}}^3 \frac{2\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu_1'} \alpha_{\mu_1'\mu'}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu_1'} - 1)[\xi_{\mu_2} - 2 - m_{\mu_2\mu_2}^{3,m}(\xi)]} \sum_{s=0}^{\infty} \left[\sum_{\mu_2'}^3 \frac{2\alpha_{\mu_1\mu_2'} \alpha_{\mu_2'\mu_1}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu_2} - 2) \left[1 - \frac{m_{\mu_2\mu_2}^{3,m}(\xi)}{(\xi_{\mu_2} - 2)} \right]} \right]^s, \quad (1.43)$$

$$m_{\mu\mu'}^{3,[m]}(\xi) = 2^2 \sum_{\substack{\mu_1, \mu_2, \mu_2', \\ \mu_1', \mu_1' \neq \mu_1}}^3 \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu_1'} \alpha_{\mu_1'\mu_2'} \alpha_{\mu_2'\mu_1''} \alpha_{\mu_1''\mu'}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu_2} - 2)(\xi_{\mu_1'} - 1)(\xi_{\mu_2'} - 2)(\xi_{\mu_1''} - 1)} \left[1 - \frac{2m_{\mu_1\mu_1}^{(1)}(\xi - 1)}{\xi_{\mu_1} - 1} - \frac{m_{\mu_2'\mu_2'}^{3,m}(\xi)}{\xi_{\mu_2'} - 2} \right]^{-2} +$$

$$+ 2 \cdot 3 \sum_{\substack{\mu_1, \mu_2, \mu_3, \\ \mu_1', \mu_2' \neq \mu_2}}^3 \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu_3} \alpha_{\mu_3\mu_2'} \alpha_{\mu_2'\mu_1'} \alpha_{\mu_1'\mu'}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu_2} - 2)(\xi_{\mu_3} - 3)(\xi_{\mu_2'} - 2)(\xi_{\mu_1'} - 1)} \left[1 - \frac{2m_{\mu_1\mu_1}^{(1)}(\xi - 1)}{\xi_{\mu_1} - 1} \right]^{-2} \left[1 - m_{\mu_3\mu_3}^{4,m}(\xi) \right]^{-1}, \quad (1.44)$$

тут для довільного порядку p справедливе співвідношення

$$m_{\mu_{p-1}\mu_{p-1}'}^{p,m}(\xi) = \sum_{\mu_p=1}^3 \frac{p\alpha_{\mu_{p-1}\mu_p} \alpha_{\mu_p\mu_{p-1}'}}{\xi_{\mu_p} - p - m_{\mu_p\mu_p}^{p+1,m}(\xi)}, \quad \text{де } \mu_0 = \mu, \mu_0' = \mu'. \quad (1.45)$$

Нарешті, перенормований фононами спектр квазічастинки отримується з рівняння Дайсона числовим розрахунком.

Отже, у [166] показано, що взаємодія квазічастинки, збуджений рівень якої двічі вироджений, з поляризаційними фононами з урахуванням багатофононних процесів приводить до виникнення у спектрі системи, крім головних, ще й сателітних смуг енергій. Усі сателітні смуги сформовані квазічастинковими резонансними станами, зв'язаними з усіма фононами в областях порогових енергій їх випромінювання.

Можна очікувати, що при належній модифікації розвинений підхід може бути застосований до наноструктурних елементів ККД і ККЛ, де сателітні електрон-фононні смуги можуть розглядатися як додатковий механізм релаксації енергії електронів.

Висновки до розділу 1

1. Здійснено детальний огляд наукової літератури, присвяченої експериментальним дослідженням квантових каскадних детекторів, який дозволив проаналізувати розвиток ККД інфрачервоного та терагерцового діапазонів від найперших і до сучасних зразків. Виконаний аналіз показав, що підвищення функціональних характеристик ККД у заданому діапазоні частот досягається належним підбором систем напівпровідникових матеріалів, оптимізацією геометричного дизайну каскадів та поєднанням нанооб'єктів різної просторової симетрії.

2. Виконано огляд теоретичних робіт, спрямованих на побудову теорії та дослідження властивостей елементів ККД. Встановлено, що переважна більшість теоретичних підходів і методів дослідження фотон- і фонон-супровідного тунелювання електронів крізь структурні елементи ККД розвиваються на основі золотого правила Фермі у структурах закритого типу.

3. Показано, що через складність математичного апарату теоретичні дослідження ККД часто виконуються у спрощених моделях, в основі яких покладено або кількоямну закриту чи відкриту наноструктуру, як область окремого каскаду, або ідеалізовану нескінченну надгратку. Отримані у таких підходах результати дозволяють зрозуміти загальні властивості досліджуваних систем, однак не завжди можуть претендувати на задовільне порівняння з експериментом.

РОЗДІЛ 2

ВПЛИВ ОПТИЧНИХ ФОНОНІВ НА ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА В ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОМУ Й ОПТИМІЗОВАНОМУ КАСКАДАХ КВАНТОВОГО КАСКАДНОГО ДЕТЕКТОРА

Функціональні властивості всіх, від найперших і до сучасних, ККД визначаються властивостями локалізованих електронних станів у шарах їх каскадів. Тому для цілеспрямованої оптимізації робочих параметрів ККД важливу роль відіграють дослідження спектральних характеристик наноструктур у реалістичних моделях. Такі моделі повинні враховувати дисипативні системи, зокрема фонони, які завжди присутні у будь-якій гетероструктурі, і, крім забезпечення фонон-супровідного тунелювання електронів крізь екстрактори каскадів, можуть, переформовуючи електронні спектри, впливати на робочі частоти ККД.

У переважній більшості праць теоретичні дослідження [74, 86, 117-119] спектрів квазічастинок у наноструктурах каскадів наноприладів дозволяли зрозуміти загальні фундаментальні властивості досліджуваних систем, однак часто вплив фононів на електронні стани вони не враховувалися. А у працях, присвячених електрон-фононній взаємодії [129-131], зазвичай на основі золотого правила Фермі розраховувалися ймовірності фонон-супровідних квантових переходів або пов'язаних з ними фізичних величин, однак без урахування перенормування фононами спектральних параметрів наноструктур.

Тому одним із завдань цього розділу є вивчення малодослідженого одночасного впливу всіх гілок обмежених та інтерфейсних фононів на спектральні характеристики електронних станів багат шарової наноструктури, як каскаду квантового каскадного детектора. Вибір фізичних і геометричних параметрів потенціальних ям і бар'єрів каскаду, згідно з експериментальними працями [49, 50], де був реалізований широкосмуговий ККД далекого ІЧ-діапазону, дозволив не лише встановити ступінь узгодження результатів теоретичної моделі з експериментом, але й виявити фізичні ефекти, зумовлені електрон-фононною взаємодією.

Наступне завдання – на основі розвиненої у моделі координатозалежної ефективної маси та прямокутних потенціалів теорії енергетичного спектра електрона та сил осциляторів міжпідзонних квантових переходів запропонувати геометричний дизайн компактного каскаду квантового каскадного детектора далекого інфрачервоного діапазону. Екстрактор каскаду оптимізувати так, щоб енергетичні шаблі його фононної драбинки резонували з енергією оптичного фонона для ефективного фонон-супровідного тунелювання електронів між активними зонами каскадів наноприладу. Основні результати цього розділу представлені в [169-176].

2.1 Теорія електрон-фононної взаємодії в каскаді квантового каскадного детектора в однофононному наближенні

Розглядається N -шарова напівпровідникова наноструктура (рис.2.1) з $(N+1)/2$ потенціальними ямами та $(N-1)/2$ бар'єрами як окремий каскад ККД. Фізичні та геометричні параметри структури вважаються відомими. Теорія електронних станів будується у моделі прямокутних потенціалів і координатозалежної ефективної маси, які у декартовій системі координат з віссю Oz , перпендикулярною до площин поділу між шариками, задаються виразами:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & z_j < z < z_{j+1}, j = 0, 2, 4, \dots, N-1 \\ U, & z_{j-1} < z < z_j, j = 0, 2, 4, \dots, N+1 \end{cases} \quad (2.1)$$

$$m(E, z) = \begin{cases} m_w(E) = m_w \left(1 + \frac{E}{E_{gw}}\right), & z_j < z < z_{j+1}, j = 0, 2, 4, \dots, N \\ m_b(E) = m_b \left(1 - \frac{U - E}{E_{gb}}\right), & z_{j-1} < z < z_j, j = 0, 2, 4, \dots, N+1 \end{cases} \quad (2.2)$$

Тут ефективна маса $m(E, z)$ враховує непараболічність зони провідності згідно з [177], z_j – координати меж між ямами та бар'єрами, $z_{-1} = -\infty$, $z_{N+1} = +\infty$, U – висоти потенціальних бар'єрів, m_w , m_b та E_{gw} , E_{gb} – ефективні маси та ширини заборонених зон у масивних аналогах середовищ ям і бар'єрів відповідно.

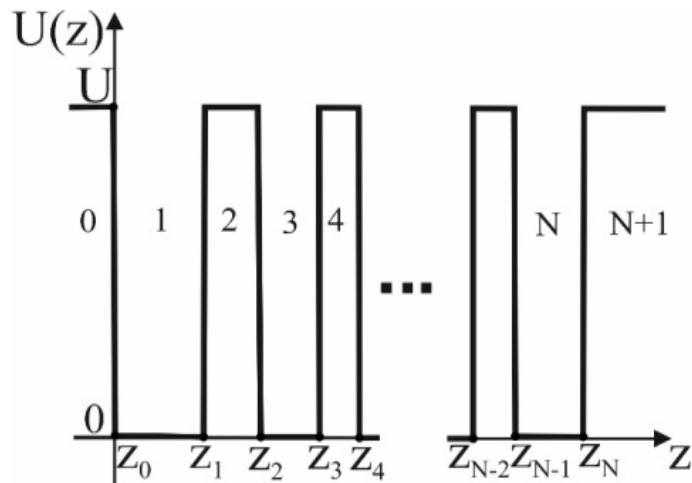


Рис.2.1. Потенціальний профіль багат шарової наногетероструктури каскаду ККД

У досліджуваній наноструктурі, згідно з квантовою механікою [66], для електрона справедливе рівняння Шредінгера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m(z)} \vec{\nabla} + U(z) \right] \Psi(\rho, z) = E \Psi(\rho, z), \quad (2.3)$$

розв'язок якого шукається у вигляді [64, 66]

$$\Psi_{n\vec{k}}(\rho, z) = \frac{e^{i\vec{k}\vec{\rho}}}{\sqrt{L^2}} \Psi_n(z), \quad (2.4)$$

тут L – довжина основної області у площині $хоу$, $\vec{k}, \vec{\rho}$ – квазіімпульс і радіус-вектор електрона у цій же площині. Тоді повна кінетична енергія електрона визначається адитивною сумою $E_{n,\vec{k}} = E_n + \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m_n$ енергій руху електрона у площині $хоу$ та поздовжнього руху вздовж осі z , де m_n – скорельована по структурі ефективна маса.

Для хвильових функцій $\Psi_n(z)$ та енергій E_n квантованих станів електрона отримується одновимірне рівняння

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + U(z) \right] \Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z), \quad (2.5)$$

з якого функції $\Psi_n(z)$ знаходяться точно у вигляді:

$$\Psi_n(z) = \begin{cases} \Psi_n^{(j)}(z) = A_n^{(j)} e^{\chi_n z} + B_n^{(j)} e^{-\chi_n z}, & j=0,2,4,\dots,N+1 \\ & z_{j-1} \leq z < z_j, \\ \Psi_n^{(j)}(z) = A_n^{(j)} \cos k_n z + B_n^{(j)} \sin k_n z, & j=1,3,5,\dots,N \end{cases} \quad (2.6)$$

де

$$k_n = \sqrt{\frac{2m_w(E_n)E_n}{\hbar^2}}; \quad \chi_n = \sqrt{\frac{2m_b(E_n)[U - E_n]}{\hbar^2}}.$$

Умови неперервності хвильових функцій $\Psi_n(z)$ і потоків їх густин імовірностей [66] на гетеромежах структури

$$\begin{aligned} \Psi_n^{(j)}(z_j) &= \Psi_n^{(j+1)}(z_j); \\ \left(\frac{1}{m(E,z)} \frac{d\Psi_n^{(j)}(z)}{dz} \right) \Big|_{z=z_j} &= \left(\frac{1}{m(E,z)} \frac{d\Psi_n^{(j+1)}(z)}{dz} \right) \Big|_{z=z_j}, \quad (j=0,\dots,N) \end{aligned} \quad (2.7)$$

приводять до дисперсійного рівняння, з якого числовим розрахунком отримуються енергії E_n ($n=1,2,\dots$) стаціонарних станів електрона.

Ці ж умови разом з умовою нормування хвильової функції

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{n'}^*(z) \Psi_n(z) dz = \delta_{nn'}, \quad (2.8)$$

та умовою скінченності функцій на безмежностях ($z \rightarrow \pm\infty$) однозначно визначають усі коефіцієнти $A_n^{(j)}$ та $B_n^{(j)}$ ($j=0,\dots,N+1$).

Знайдені енергії та хвильові функції дозволяють дослідити інтенсивності квантових переходів між електронними станами у багат шаровому каскаді ККД, розрахувавши сили осциляторів квантових переходів між станами з енергіями E_n та $E_{n'}$

$$f_{nn'} = \frac{2(E_n - E_{n'})}{\hbar^2} \sum_{j=0}^{N+1} \left| \int_{z_{j-1}}^{z_j} \sqrt{\bar{m}(z)} \Psi_{n'}^{(j)*}(z) z \Psi_n^{(j)}(z) dz \right|^2, \quad (2.9)$$

де $\bar{m}(z)$ – усереднена ефективна маса електрона у станах n і n' .

Тепер за правилами вторинного квантування [64, 167] на квантованій хвильовій функції

$$\widehat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_{n, \vec{k}} \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \alpha_{n\vec{k}} \quad (2.10)$$

отримується гамільтоніан електронів у зображенні чисел заповнення

$$\widehat{H}_e = \sum_{n\vec{k}} E_{n\vec{k}} \alpha_{n\vec{k}}^+ \alpha_{n\vec{k}}, \quad (2.11)$$

де $\alpha_{n\vec{k}}^+$, $\alpha_{n\vec{k}}$ - оператори народження та знищення електронних станів.

Як відомо [64, 120, 121], у моделі ізотропного діелектричного континууму існують два типи оптичних фононів – обмежені (L) та інтерфейсні (I). Потенціали полів поляризації L-фононів на всіх межах гетероструктури дорівнюють нулю, а I-фононів – набувають максимальні за абсолютними величинами. Енергії обмежених фононів $\Omega_{Lj} = \hbar\omega_{Lj}$ збігаються з енергіями поляризаційних поздовжніх фононів у відповідних масивних аналогах ям і бар'єрів структури. Гамільтоніан L-фононів у представленні чисел заповнення має вигляд

$$\widehat{H}_L = \sum_{j=1}^N \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{\vec{q}} \Omega_{Lj} (b_{js\vec{q}}^+ b_{js\vec{q}} + \frac{1}{2}) \quad (2.12)$$

тут $b_{js\vec{q}}^+$, $b_{js\vec{q}}$ - оператори народження та знищення станів L-фононів.

Для інтерфейсних фононів умови неперервності на всіх межах гетероструктури потенціалу поля поляризації

$$\varphi(q, z) = \sum_{j=0}^{N+1} \varphi_j(q, z) = \sum_{j=0}^{N+1} (\alpha_j e^{-qz} + \beta_j e^{qz}) \quad \text{та вектора електричного зміщення}$$

$$\varepsilon(\omega) \frac{\partial}{\partial z} \varphi(\vec{q}, z), \quad (\text{тут } \varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_L^2}{\omega^2 - \omega_T^2} \text{ - діелектрична проникність}) \text{ приводять до}$$

системи $2(N+1)$ лінійних однорідних рівнянь, з умови дорівнюваності нулю визначника якої отримується дисперсійне рівняння для розрахунку енергій $\Omega_{I\lambda} = \hbar\omega_{I\lambda}$ всіх гілок (λ) I-фононів. З цієї ж системи рівнянь сумісно з умовою нормування [64, 120, 121] визначаються всі коефіцієнти α_j і β_j .

Гамільтоніан інтерфейсних фононів також отримується у зображенні чисел заповнення

$$\hat{H}_I = \sum_{\lambda, \bar{q}} \Omega_{\lambda} (q) (b_{\lambda \bar{q}}^+ b_{\lambda \bar{q}} + \frac{1}{2}), \quad (2.13)$$

де $b_{\lambda \bar{q}}^+$, $b_{\lambda \bar{q}}$ - оператори народження та знищення станів І-фононів.

Після здійсненого квантування обох фононних полів (L та I) за відомою процедурою [64, 121, 167] гамільтоніан електрон-фононної взаємодії переводиться з координатного представлення у зображення вторинного квантування за всіма змінними системи

$$\hat{H}_{e-ph} = \hat{H}_{e-L} + \hat{H}_{e-I}. \quad (2.14)$$

Тут

$$\hat{H}_{e-L} = \sum_{j=1}^N \sum_{s, \bar{q}} \sum_{n', n, \bar{k}} F_{n'n}^{L(j)}(s, q) a_{n' \bar{k} + \bar{q}}^+ a_{n \bar{k}} (b_{j s, \bar{q}} + b_{j s, -\bar{q}}^+) \quad (2.15)$$

- гамільтоніан взаємодії електронів з L-фононами з функціями зв'язку

$$F_{n'n}^{L(j)}(s, q) = - \frac{1}{L \sqrt{\frac{(\pi s)^2}{(z_j - z_{j-1})^2} + q^2}} f_{n'n}^{L(j)}(s); \quad (2.16)$$

де

$$f_{n'n}^{L(j)}(s) = (-1)^{\frac{s-\theta(s)}{2}} \sqrt{\frac{4\pi e^2}{(z_j - z_{j-1}) \left. \frac{\partial \varepsilon_j(\Omega)}{\partial \Omega} \right|_{\Omega=\Omega_{Lj}}}} \int_{z_{j-1}}^{z_j} \Psi_{n'}^{(j)*}(z) \sin(\pi s) \Psi_n^{(j)}(z) dz, \quad (2.17)$$

$\theta(s) = 1$ для непарних значень s та $\theta(s) = 0$ для парних s ;

$$\hat{H}_{e-I} = \sum_{\lambda, \bar{q}} \sum_{n, n', \bar{k}} F_{n'n}^I(\lambda, q) a_{n' \bar{k} + \bar{q}}^+ a_{n \bar{k}} (b_{\lambda, \bar{q}} + b_{\lambda, -\bar{q}}^+) \quad (2.18)$$

- гамільтоніан взаємодії електронів з І-фононами з функціями зв'язку

$$F_{n'n}^I(\lambda, q) = - \sqrt{\frac{4\pi e^2}{qL^2}} f_{n'n}^I(\lambda, q), \quad (2.19)$$

де

$$f_{n'n}^I(\lambda, q) = \frac{\sum_{j=0}^{N+1} \int_{z_{j-1}}^{z_j} \Psi_{n'}^{(j)*}(z) \varphi_j(q, z) \Psi_n^{(j)}(z) dz}{\sqrt{\sum_{j=0}^{N+1} [\beta_j^2 (e^{2qz_j} - e^{2qz_{j-1}}) - \alpha_j^2 (e^{-2qz_j} - e^{-2qz_{j-1}})] \left. \frac{\partial \varepsilon_j(\Omega)}{\partial \Omega} \right|_{\Omega=\Omega_{I\lambda}}}}. \quad (2.20)$$

Інтегралі в (2.17) та (2.20) розраховуються точно, однак через значну громіздкість тут не наводяться.

Знайдений повний гамільтоніан електрон-фононої системи ($\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_L + \hat{H}_I + \hat{H}_{e-ph}$) дозволяє розрахувати Фур'є-образи електронних функцій Гріна, які при слабкому електрон-фононному зв'язку, згідно з діаграмною технікою Фейнмана-Пайнса [64, 167], визначаються рівнянням Дайсона

$$G_n(\hbar\omega, \vec{k}) = \frac{1}{\hbar\omega - E_{n\vec{k}} - M_n(\hbar\omega, \vec{k})}, \quad (2.21)$$

де масові оператори, розраховані в однофононному наближенні, задаються виразами

$$M_n^L(\hbar\omega, \vec{k}) = \sum_{n'} \sum_{j=1}^N \sum_{s, \vec{q}} F_{nn'}^{L(j)*}(s, q) F_{n'n}^{L(j)}(s, q) \times \left[\frac{1 + \nu_j}{\hbar\omega - E_{n'}(\vec{k} - \vec{q}) - \Omega_{Lj} + i\eta} + \frac{\nu_j}{\hbar\omega - E_{n'}(\vec{k} + \vec{q}) + \Omega_{Lj} + i\eta} \right] \quad (2.22)$$

$$M_n^I(\hbar\omega, \vec{k}) = \sum_{n'} \sum_{\lambda, \vec{q}} F_{nn'}^{I*}(\lambda, q) F_{n'n}^I(\lambda, q) \times \left[\frac{1 + \nu_\lambda(q)}{\hbar\omega - E_{n'}(\vec{k} - \vec{q}) - \Omega_{I\lambda}(q) + i\eta} + \frac{\nu_\lambda(q)}{\hbar\omega - E_{n'}(\vec{k} + \vec{q}) + \Omega_{I\lambda}(q) + i\eta} \right] \quad (2.23)$$

де $\nu_\lambda(q) = (e^{\Omega_{I\lambda}(q)/k_B T} - 1)^{-1}$, $\nu_j = (e^{\Omega_{Lj}/k_B T} - 1)^{-1}$ - числа заповнення І та L фононів; k_B - постійна Больцмана, T - температура.

Подальший розрахунок масових операторів (2.22) та (2.23) здійснюється переходом від суми по двовимірному фононному квазіімпульсу \vec{q} до інтеграла та з використанням теореми Сохоцького

$$\iint \frac{1}{(f(\bar{q}) + i\eta)} d^2\bar{q} = \text{V.p.} \iint \frac{d^2\bar{q}}{f(\bar{q})} - i\pi \iint \delta(f(\bar{q})) d^2\bar{q},$$

де V.p. означає інтеграл у розумінні головного значення.

Для подальших розрахунків, як і в більшості теоретичних праць [74, 78, 86, 117-121, 129-132], будемо вважати рух електронів одновимірним уздовж наноструктури ($\vec{k} = 0$). Тоді у результаті точного інтегрування за фононним квазіімпульсом \vec{q} для M_n^L отримується вираз

$$M_n^L(\xi, k = 0) = - \sum_{n'} \sum_{j=1}^N \sum_{s=1}^{\infty} \frac{f_{nn'}^{L(j)*}(s) f_{n'n}^{L(j)}(s) l_j}{4\pi\Omega_0} \times$$

$$\left[(1 + \nu_j) \left\{ \begin{array}{l} \zeta_{nn'}^{(j)+}(s, \xi), \\ \mathcal{G}_{nn'}^{(j)+}(s, \xi) + \frac{i\pi}{(\pi s)^2 + l_j \left| \frac{E_{n'} - E_n + \Omega_{Lj}}{\Omega_0} - \xi \right|}, \\ (\pi s)^{-2}, \end{array} \right. \left. \begin{array}{l} \frac{E_{n'} - E_n + \Omega_{Lj}}{\Omega_0} \geq \xi \\ \frac{E_{n'} - E_n + \Omega_{Lj}}{\Omega_0} < \xi \\ (\pi s)^2 = \pm l_j \left(\frac{E_{n'} - E_n + \Omega_{Lj}}{\Omega_0} - \xi \right) \end{array} \right\} + \right.$$

$$\left. + \nu_j \left\{ \begin{array}{l} \zeta_{nn'}^{(j)-}(s, \xi), \\ \mathcal{G}_{nn'}^{(j)-}(s, \xi) + \frac{i\pi}{(\pi s)^2 + l_j \left| \frac{E_{n'} - E_n - \Omega_{Lj}}{\Omega_0} - \xi \right|}, \\ (\pi s)^{-2}, \end{array} \right. \left. \begin{array}{l} \frac{E_{n'} - E_n - \Omega_{Lj}}{\Omega_0} \geq \xi \\ \frac{E_{n'} - E_n - \Omega_{Lj}}{\Omega_0} < \xi \\ (\pi s)^2 = \pm l_j \left(\frac{E_{n'} - E_n - \Omega_{Lj}}{\Omega_0} - \xi \right) \end{array} \right\} \right] . \quad (2.24)$$

Тут уведені позначення

$$\zeta_{nn'}^{(j)\pm}(s, \xi) = \frac{\ln \left[\frac{(\pi s)^2}{l_j \left(\frac{E_{n'} - E_n \pm \Omega_{Lj}}{\Omega_0} - \xi \right)} \right]}{(\pi s)^2 - l_j \left(\frac{E_{n'} - E_n \pm \Omega_{Lj}}{\Omega_0} - \xi \right)},$$

$$\mathcal{G}_{nn'}^{(j)\pm}(s, \xi) = \frac{\ln \left| \frac{(\pi s)^2}{l_j \left(\frac{E_{n'} - E_n \pm \Omega_{Lj}}{\Omega_0} - \xi \right)} \right|}{(\pi s)^2 + l_j \left| \frac{E_{n'} - E_n \pm \Omega_{Lj}}{\Omega_0} - \xi \right|},$$

$$\xi = \frac{\omega - E_n}{\Omega_0}, \quad l_j = \frac{2\Omega_0 m_j(E_n)(z_j - z_{j-1})}{\hbar^2}$$

Ω_0 - стала розмірності енергії.

Щодо І-фононів, то через залежність енергій $\Omega_{I\alpha}$ їх гілок від q інтегрування у (2.23) виконується тільки чисельно при $\vec{k} = 0$.

Згідно з теорією функцій Гріна, зміщення (Δ_n) і затухання (γ_n) n -го електронного стану, що зумовлені взаємодією з фононами, визначаються дійсною та уявною частинами масових операторів:

$$\Delta_n = \Delta_n^L + \Delta_n^I = \text{Re } M_n^L(E_n, 0) + \text{Re } M_n^I(E_n, 0), \quad (2.25)$$

$$\gamma_n = \gamma_n^L + \gamma_n^I = -2[\text{Im } M_n^L(E_n, 0) + \text{Im } M_n^I(E_n, 0)]. \quad (2.26)$$

Тут Δ_n^L, γ_n^L та Δ_n^I, γ_n^I - парціальні складові зміщень і затухань електронних станів, які виникають у результаті взаємодії з L- та І-фононами відповідно.

2.2 Особливості перенормування фононами спектральних характеристик електрона у каскаді квантового каскадного детектора

На основі розробленої у попередньому параграфі теорії дослідимо властивості електронних станів і вивчимо вплив на них обмежених та інтерфейсних фононів у багаточаровій наноструктурі. За вихідну модель гетероструктури оберемо окремих каскад експериментального широкосмугового ККД далекого ІЧ-діапазону, який реалізований у [49, 50]. Фізичні параметри каскаду з GaAs-ямами та $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$ -бар'єрами відомі: $\varepsilon_{\infty w} = 9.99$, $\varepsilon_{\infty b} = 10.89$, $\Omega_{Lw} = 36.25 \text{ meV}$, $\Omega_{Lb} = 40.82 \text{ meV}$, $\Omega_{Tw} = 33.29 \text{ meV}$, $\Omega_{Tb} = 37.12 \text{ meV}$, $m_w = 0.067 m_e$, $m_b = 0.095 m_e$, $E_{gw}^{T=0K} = 1520 \text{ meV}$, $E_{gb}^{T=0K} = 1885 \text{ meV}$, $E_{gw}^{T=300K} = 1420 \text{ meV}$, $E_{gb}^{T=300K} = 1788 \text{ meV}$, $U^{T=0K} = 276 \text{ meV}$, $U^{T=300K} = 256 \text{ meV}$. Геометричні розміри ям і бар'єрів каскаду вибиралися такими ж, як і в зразку А експериментального ККД [49, 50]: **6.8/3/6.8/5.65/2/3.955/2.3/3.1/2.8/3.1/3.4/3.1/3.8/3.1/4.8** (nm), де жирним шрифтом

позначені товщини потенціальних бар'єрів.

Як уже зазначалося у розділі 1, широкосмугові ККД є важливими приладами для прикладних застосувань, що й зумовлює інтерес дослідників до пошуку методів розширення смуги поглинання. Зокрема, в цитованих експериментальних працях [49, 50] запропонований такий двоамний дизайн активної зони каскаду, який забезпечив роботу ККД у далекому ІЧ-діапазоні у широкому інтервалі частот. Для детального вивчення впливу електрон-фононої взаємодії на спектральні характеристики досліджуваного каскаду спочатку розглянемо основні властивості невзаємодіючих електронів та оптичних фононів.

Таблиця 2.1.

Енергії та сили осцилятора переходів з двох нижніх робочих станів електрона в інші збуджені стани каскаду при $T=0\text{K}$ та $T=300\text{K}$

n	T=0K			T=300K		
	E_n, meV	f_{1n}	f_{2n}	E_n, meV	f_{1n}	f_{2n}
1	50.98	-	-	49.28	-	-
2	57.88	-	-	56.71	-	-
3	81.41	$2 \cdot 10^{-6}$	$9 \cdot 10^{-7}$	78.31	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-8}$
4	103.21	$4 \cdot 10^{-7}$	$3 \cdot 10^{-7}$	98.76	$4 \cdot 10^{-7}$	$4 \cdot 10^{-7}$
5	120.40	$6 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-6}$	115.69	$1 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-5}$
6	140.91	$3 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$	134.95	$5 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-4}$
7	166.94	0.01	0.01	159.29	0.02	0.02
8	182.85	0.44	0.42	176.18	0.43	0.41
9	190.67	0.11	0.09	183.59	0.14	0.12
10	209.06	0.31	0.36	203.71	0.32	0.37
11	267.49	$3 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	253.84	$2 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$

У таблиці 2.1 наведені розраховані енергії (E_n) всіх станів електрона та сили осцилятора квантових переходів з робочих станів ($n = 1,2$) при криогенній ($T=0\text{K}$) і кімнатній ($T=300\text{K}$) температурах. Оскільки, як показали розрахунки, температурна зміна енергетичного спектра практично не впливає на еволюцію хвильових функцій електронних станів, то на рис. 2.2 зображені лише при $T=0\text{K}$ розподіли ймовірностей знаходження електрона у каскаді ККД нормовані на величини енергій відповідних станів.

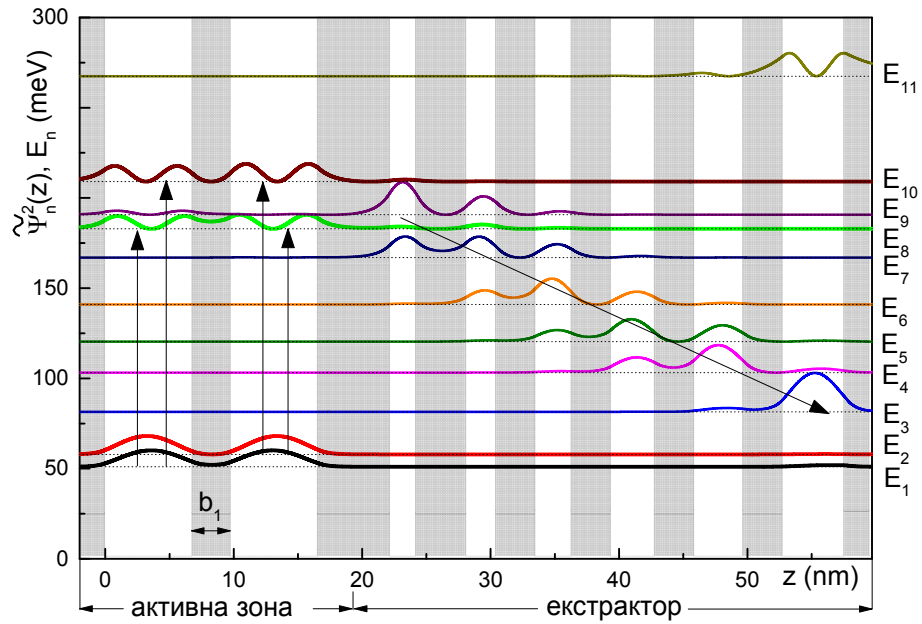


Рис.2.2. Розподіли ймовірностей знаходження електрона у станах з енергіями E_n у каскаді широкосмугового ККД далекого ІЧ-діапазону

З рисунка 2.2 та таблиці 2.1 видно, що у двоямній активній зоні з ямами однакової ширини, на відміну від типової одноямної, поглинання електромагнітного випромінювання відбувається при квантових переходах між двома парами розщеплених електронних станів з енергіями E_1, E_2 та E_8, E_{10} . Робочі енергії каскаду охоплюють далекий ІЧ-діапазон в інтервалах 125 meV - 158 meV при $T=0\text{K}$ та 119 meV - 154 meV при $T=300\text{K}$, що добре узгоджується з результатами експерименту [49, 50]. Стани електрона з енергіями $E_3 \div E_7$ та E_9 утворюють так звану «фононну драбинку», завдяки якій відбувається фонон-супровідне тунелювання електронів між активними зонами сусідніх каскадів з релаксацією енергії при випромінюванні оптичних фононів. Найвищий стан $n = 11$ у роботі приладу безпосередньої участі не бере.

На рис.2.3 наведені залежності енергій (Ω_{λ}) усіх гілок (λ) інтерфейсних фононів від квазіімпульсу q в експериментальному каскаді. На цьому ж рисунку зображені енергії поздовжніх (Ω_{Lw}, Ω_{Lb}) і поперечних (Ω_{Tw}, Ω_{Tb}) фононів масивних кристалів GaAs і $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$.

Оскільки енергії обмежених фононів бездисперсійні та, згідно із

загальною теорією, збігаються з енергіями поздовжніх фононів масивних аналогів кристалів наношарів структури, то у досліджуваному каскаді існує лише дві гілки енергій (Ω_{Lw} , Ω_{Lb}) L-фононів.

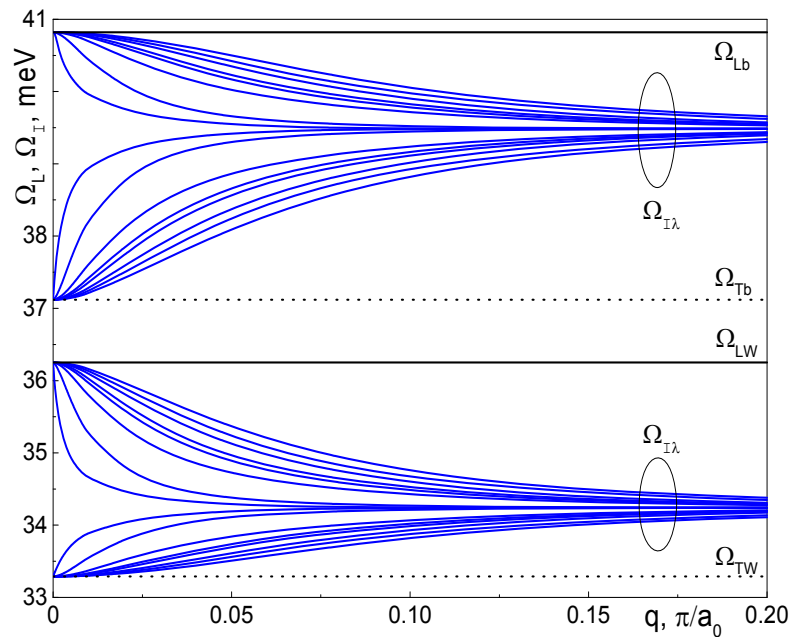


Рис.2.3. Залежності енергій інтерфейсних ($\Omega_{I\lambda}$, $\lambda=1-32$) і обмежених (Ω_{Lw} , Ω_{Lb}) фононів від квазіімпульсу q (a_0 – величина постійної ґратки GaAs)

З рис. 2.3 видно, що спектр I-фононів містить 32 гілки енергій, які утворюють дві підзони в інтервалах між Ω_{Tw} і Ω_{Lw} та Ω_{Tb} і Ω_{Lb} відповідно. Зі збільшенням квазіімпульсу q у кожній з підзон гілки I-фононів швидко збігаються.

Для виявлення ролі різних механізмів електрон-фононної взаємодії у перенормуванні спектральних характеристик ККД досліджувалися величини зміщень і згасання чотирьох робочих станів ($n=1, 2; 8, 10$) електрона, переходи між якими формують піки поглинання каскаду, при внутрі- та міжрівневій (з урахуванням всіх електронних станів каскаду) конфігураційних взаємодіях зі всіма гілками фононів.

Сумарні зміщення Δ_n і згасання γ_n доцільно навести в адитивній формі:
$$\Delta_n = \Delta_n^L + \Delta_n^I = \sum_{P=L,I} \sum_{n'} \Delta_{nn'}^P = \sum_{P=L,I} \sum_{n'} \sum_i \Delta_{nn'}^{(i)P},$$

$$\gamma_n = \gamma_n^L - \gamma_n^I = \sum_{P=L,I} \sum_{n'} \gamma_{nn'}^P = \sum_{P=L,I} \sum_{n'} \sum_i \gamma_{nn'}^{(i)P}, \quad (i = -1, 0, +1). \quad \text{Тут } \Delta_{nn'}^{(i)P} \text{ і } \gamma_{nn'}^{(i)P} -$$

зміщення і згасання внаслідок внутриврівневої ($n' = n$) або міжрівневої ($n' \neq n$) конфігураційних взаємодій з випромінюванням ($i = 0, +1$) чи поглинанням ($i = -1$) обмежених ($P = L$) або інтерфейсних ($P = I$) фононів. Очевидно, що при $T=0\text{K}$: $\Delta_{nn'}^{(+1)L,I} = \Delta_{nn'}^{(-1)L,I} = 0$ і $\gamma_{nn'}^{(+1)L,I} = \gamma_{nn'}^{(-1)L,I} = 0$.

Результати розрахунків парціальних ($\Delta_{nn'}^{(i)P}, \Delta_n^{(i)P}, \gamma_{nn'}^{(i)P}, \gamma_n^{(i)P}$) і повних (Δ_n^P, γ_n^P) зміщень і згасань чотирьох робочих станів електрона, зумовлених взаємодією з обмеженими ($P = L$) та інтерфейсними ($P = I$) фононами при криогенній $T = 0\text{K}$ та кімнатній $T = 300\text{K}$ температурах, наведені у таблицях 2.2, 2.3 та 2.4 відповідно. У цих таблицях індекс n відповідає номерам робочих станів, а n' - усім електронним станам каскаду, конфігураційна взаємодія між якими у процесах з випромінюванням віртуальних ($i = 0$) і реальних ($i = +1$) та поглинанням реальних ($i = -1$) фононів формує перенормовані спектральні параметри каскаду. Зауважимо, що, як показали розрахунки, переважну роль у конфігураційних взаємодіях з L-фононами відіграє гілка з енергією $\hbar\omega = \Omega_{Lw}$, а її внесок у зміщення Δ_n^L та згасання γ_n^L робочих станів електрона становить не менше 90%. Щодо взаємодій з усіма 32 гілками I-фононів, то основний внесок не менше 80% у Δ_n^I та γ_n^I зумовлений гілками ($\lambda=17-32$) високоенергетичної підзони (рис. 2.3), з яких до найбільшого парціального зміщення $\Delta_n^I(\lambda)$ приводить взаємодія лише з однією фононою гілкою $\lambda=25$.

Аналіз таблиць 2.2-2.4 показує, що температурні еволюції зміщень (Δ_n^P) і згасання (γ_n^P), викликаних взаємодією електрона з обмеженими ($P = L$) та інтерфейсними ($P = I$) фононами, та їх парціальних складових ($\Delta_{nn'}^{(0)P}, \Delta_{nn'}^{(+1)P}, \Delta_{nn'}^{(-1)P}, \gamma_{nn'}^{(0)P}, \gamma_{nn'}^{(+1)P}, \gamma_{nn'}^{(-1)P}$), мають такі загальні властивості.

Таблиця 2.2.

Зміщення (Δ_n^P) та затухання (γ_n^P) робочих станів ($n = 1, 2; 8, 10$) електрона та їх парціальні внески зумовлені внутривірневими ($\Delta_{nn}^{(0)P}, \gamma_{nn}^{(0)P}$) та міжвірневими ($\Delta_{n n' \neq n}^{(0)P}, \gamma_{n n' \neq n}^{(0)P}$) конфігураційними взаємодіями з інтерфейсними ($P = I$) та обмеженими ($P = L$) фононами при $T=0\text{K}$. Усі величини наведені в meV

$n \backslash n'$		n				$n \backslash n'$		n			
		1	2	8	10			1	2	8	10
1	$\Delta_{nn'}^{(0)I}$	-1.45	-0.45	0.08	0.04	1	$\Delta_{nn'}^{(0)L}$	-0.18	-0.20	-0.02	-0.02
	$\gamma_{nn'}^{(0)I}$	0	0	0.25	0.17		$\gamma_{nn'}^{(0)L}$	0	0	0.07	0.09
2	$\Delta_{nn'}^{(0)I}$	-0.36	-1.42	0.04	0.08	2	$\Delta_{nn'}^{(0)L}$	-0.19	-0.21	-0.02	-0.02
	$\gamma_{nn'}^{(0)I}$	0	0	0.20	0.19		$\gamma_{nn'}^{(0)L}$	0	0	0.07	0.09
3	$\Delta_{nn'}^{(0)I}$	$-8 \cdot 10^{-12}$	$-1 \cdot 10^{-11}$	$-3 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-8}$	3	$\Delta_{nn'}^{(0)L}$	$-3 \cdot 10^{-9}$	$-2 \cdot 10^{-9}$	$-3 \cdot 10^{-6}$	$-7 \cdot 10^{-8}$
	$\gamma_{nn'}^{(0)I}$	0	0	$5 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$		$\gamma_{nn'}^{(0)L}$	0	0	$8 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-7}$
4	$\Delta_{nn'}^{(0)I}$	$-4 \cdot 10^{-9}$	$-6 \cdot 10^{-9}$	$-2 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-6}$	4	$\Delta_{nn'}^{(0)L}$	$-2 \cdot 10^{-9}$	$-3 \cdot 10^{-9}$	$-2 \cdot 10^{-4}$	$-5 \cdot 10^{-6}$
	$\gamma_{nn'}^{(0)I}$	0	0	$4 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-4}$		$\gamma_{nn'}^{(0)L}$	0	0	$4 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-5}$
5	$\Delta_{nn'}^{(0)I}$	$-1 \cdot 10^{-7}$	$-2 \cdot 10^{-7}$	$-4 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-5}$	5	$\Delta_{nn'}^{(0)L}$	$-8 \cdot 10^{-8}$	$-8 \cdot 10^{-8}$	$-1 \cdot 10^{-3}$	$-4 \cdot 10^{-5}$
	$\gamma_{nn'}^{(0)I}$	0	0	0.03	$9 \cdot 10^{-4}$		$\gamma_{nn'}^{(0)L}$	0	0	$2 \cdot 10^{-3}$	$9 \cdot 10^{-5}$
6	$\Delta_{nn'}^{(0)I}$	$-8 \cdot 10^{-6}$	$-8 \cdot 10^{-6}$	-0.08	$5 \cdot 10^{-4}$	6	$\Delta_{nn'}^{(0)L}$	$-4 \cdot 10^{-6}$	$-4 \cdot 10^{-6}$	$-6 \cdot 10^{-3}$	$-3 \cdot 10^{-4}$
	$\gamma_{nn'}^{(0)I}$	0	0	0.22	$9 \cdot 10^{-3}$		$\gamma_{nn'}^{(0)L}$	0	0	$7 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-4}$
7	$\Delta_{nn'}^{(0)I}$	$-7 \cdot 10^{-4}$	$-7 \cdot 10^{-4}$	-0.12	-0.08	7	$\Delta_{nn'}^{(0)L}$	$-3 \cdot 10^{-4}$	$-3 \cdot 10^{-4}$	$-8 \cdot 10^{-3}$	$-5 \cdot 10^{-3}$
	$\gamma_{nn'}^{(0)I}$	0	0	0	0.16		$\gamma_{nn'}^{(0)L}$	0	0	0	$6 \cdot 10^{-3}$
8	$\Delta_{nn'}^{(0)I}$	-0.05	-0.04	-1.37	-0.70	8	$\Delta_{nn'}^{(0)L}$	-0.02	-0.02	-0.05	-0.09
	$\gamma_{nn'}^{(0)I}$	0	0	0	0		$\gamma_{nn'}^{(0)L}$	0	0	0	0
9	$\Delta_{nn'}^{(0)I}$	$-7 \cdot 10^{-3}$	$-6 \cdot 10^{-3}$	-0.21	-0.18	9	$\Delta_{nn'}^{(0)L}$	$-4 \cdot 10^{-3}$	$-4 \cdot 10^{-3}$	-0.01	-0.02
	$\gamma_{nn'}^{(0)I}$	0	0	0	0		$\gamma_{nn'}^{(0)L}$	0	0	0	0
10	$\Delta_{nn'}^{(0)I}$	-0.03	-0.04	-0.26	-1.47	10	$\Delta_{nn'}^{(0)L}$	-0.03	-0.03	-0.06	-0.09
	$\gamma_{nn'}^{(0)I}$	0	0	0	0		$\gamma_{nn'}^{(0)L}$	0	0	0	0
11	$\Delta_{nn'}^{(0)I}$	$-4 \cdot 10^{-9}$	$-4 \cdot 10^{-9}$	$-1 \cdot 10^{-5}$	$-1 \cdot 10^{-6}$	11	$\Delta_{nn'}^{(0)L}$	$-1 \cdot 10^{-8}$	$-1 \cdot 10^{-8}$	$-3 \cdot 10^{-6}$	$-2 \cdot 10^{-7}$
	$\gamma_{nn'}^{(0)I}$	0	0	0	0		$\gamma_{nn'}^{(0)L}$	0	0	0	0
Δ_n^I		-1.89	-1.96	-1.92	-2.31	Δ_n^L		-0.42	-0.46	-0.18	-0.24
γ_n^I		0	0	0.70	0.53	γ_n^L		0	0	0.15	0.18

Таблиця 2.3.

Зміщення (Δ_n^I) та затухання (γ_n^I) робочих станів ($n = 1, 2; 8, 10$) електрона та їх парціальні внески зумовлені внутривісними ($\Delta_{nn}^{(i)I}, \gamma_{nn}^{(i)I}$) та міжрівневими ($\Delta_{n n' \neq n}^{(i)I}, \gamma_{n n' \neq n}^{(i)I}$) конфігураційними взаємодіями у процесах з випромінюванням ($i = 0, +1$) та поглинанням ($i = -1$) інтерфейсних фононів при $T=300\text{K}$. Усі величини наведені в meV

$n \backslash n'$		1			2			8			10		
		$i=0$	$i=+1$	$i=-1$	$i=0$	$i=+1$	$i=-1$	$i=0$	$i=+1$	$i=-1$	$i=0$	$i=+1$	$i=-1$
1	$\Delta_{nn'}^{(i)I}$	-1.46	-0.42	0.49	-0.46	-0.13	0.12	0.09	0.03	0.03	0.04	0.01	0.02
	$\gamma_{nn'}^{(i)I}$	0	0	0.63	0	0	0.29	0.25	0.08	0.04	0.17	0.05	0.02
2	$\Delta_{nn'}^{(i)I}$	-0.35	-0.09	0.10	-1.42	-0.41	0.47	0.04	0.01	0.01	0.09	0.03	0.02
	$\gamma_{nn'}^{(i)I}$	0	0	0.41	0	0	0.59	0.21	0.06	0.04	0.21	0.06	0.03
3	$\Delta_{nn'}^{(i)I}$	$-3 \cdot 10^{-11}$	$-1 \cdot 10^{-11}$	$6 \cdot 10^{-12}$	$-6 \cdot 10^{-11}$	$-2 \cdot 10^{-11}$	$-3 \cdot 10^{-11}$	$-1 \cdot 10^{-5}$	$-3 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-7}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)I}$	0	0	$1 \cdot 10^{-10}$	0	0	$-1 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$7 \cdot 10^{-7}$
4	$\Delta_{nn'}^{(i)I}$	$-1 \cdot 10^{-8}$	$-4 \cdot 10^{-9}$	$-1 \cdot 10^{-8}$	$-2 \cdot 10^{-8}$	$-5 \cdot 10^{-9}$	$-5 \cdot 10^{-8}$	$-4 \cdot 10^{-4}$	$-1 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$7 \cdot 10^{-6}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)I}$	0	0	0	0	0	0	$7 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$9 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-5}$
5	$\Delta_{nn'}^{(i)I}$	$-4 \cdot 10^{-7}$	$-1 \cdot 10^{-7}$	$-3 \cdot 10^{-7}$	$-5 \cdot 10^{-7}$	$-1 \cdot 10^{-7}$	$-5 \cdot 10^{-7}$	$-8 \cdot 10^{-3}$	$-2 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$7 \cdot 10^{-6}$	$9 \cdot 10^{-5}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)I}$	0	0	0	0	0	0	0.04	0.01	$6 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$
6	$\Delta_{nn'}^{(i)I}$	$-1 \cdot 10^{-5}$	$-4 \cdot 10^{-6}$	$-9 \cdot 10^{-6}$	$-1 \cdot 10^{-5}$	$-5 \cdot 10^{-6}$	$-1 \cdot 10^{-5}$	-0.19	-0.05	$8 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-4}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)I}$	0	0	0	0	0	0	0.30	0.08	0.03	0.01	$3 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$
7	$\Delta_{nn'}^{(i)I}$	$-1 \cdot 10^{-3}$	$-3 \cdot 10^{-4}$	$-5 \cdot 10^{-4}$	$-9 \cdot 10^{-4}$	$-3 \cdot 10^{-4}$	$-5 \cdot 10^{-4}$	-0.16	-0.04	0.02	-0.05	-0.01	$4 \cdot 10^{-3}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)I}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0.07	0.17	0.05	0.01
8	$\Delta_{nn'}^{(i)I}$	-0.05	-0.02	-0.02	-0.04	-0.01	-0.02	-1.32	-0.38	0.40	-0.70	-0.19	0.07
	$\gamma_{nn'}^{(i)I}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0.62	0	0	0.20
9	$\Delta_{nn'}^{(i)I}$	$-9 \cdot 10^{-3}$	$-3 \cdot 10^{-3}$	$-4 \cdot 10^{-3}$	$-8 \cdot 10^{-3}$	$-3 \cdot 10^{-3}$	$-4 \cdot 10^{-3}$	-0.27	-0.08	$3 \cdot 10^{-4}$	-0.21	-0.06	0.03
	$\gamma_{nn'}^{(i)I}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0.25	0	0	0.07
10	$\Delta_{nn'}^{(i)I}$	-0.03	-0.01	-0.01	-0.05	-0.01	-0.02	-0.24	-0.07	0.08	-1.46	-0.42	0.45
	$\gamma_{nn'}^{(i)I}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0.56	0	0	0.63
11	$\Delta_{nn'}^{(i)I}$	$-9 \cdot 10^{-9}$	$-2 \cdot 10^{-9}$	$-3 \cdot 10^{-9}$	$-8 \cdot 10^{-9}$	$-2 \cdot 10^{-9}$	$-3 \cdot 10^{-9}$	$-2 \cdot 10^{-5}$	$-6 \cdot 10^{-6}$	$-1 \cdot 10^{-5}$	$-1 \cdot 10^{-6}$	$-4 \cdot 10^{-7}$	$-1 \cdot 10^{-6}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)I}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\Delta_n^{(i)I}$		-1.90	-0.54	0.55	-1.98	-0.56	0.55	-2.06	-0.58	0.55	-2.29	-0.64	0.59
$\gamma_n^{(i)I}$		0	0	1.04	0	0	0.88	0.81	0.23	1.62	0.56	0.16	0.96
Δ_n^I		-1.89			-1.99			-2.09			-2.34		
γ_n^I		1.04			0.88			2.66			1.68		

Таблиця 2.4.

Зміщення (Δ_n^L) та згасання (γ_n^L) робочих станів ($n = 1, 2; 8, 10$) електрона та їх парціальні внески зумовлені внутривісними ($\Delta_{nn}^{(i)L}, \gamma_{nn}^{(i)L}$) та міжвісними ($\Delta_{n n' \neq n}^{(i)L}, \gamma_{n n' \neq n}^{(i)L}$) конфігураційними взаємодіями у процесах з випромінюванням ($i = 0, +1$) та поглинанням ($i = -1$) обмежених фононів при $T=300\text{K}$. Усі величини наведені в meV

$n \backslash n'$		1			2			8			10		
		$i=0$	$i=+1$	$i=-1$	$i=0$	$i=+1$	$i=-1$	$i=0$	$i=+1$	$i=-1$	$i=0$	$i=+1$	$i=-1$
1	$\Delta_{nn'}^{(i)L}$	-0.18	-0.06	-0.04	-0.20	-0.07	-0.03	-0.02	$-6 \cdot 10^{-3}$	$-3 \cdot 10^{-3}$	-0.02	$-6 \cdot 10^{-3}$	$-3 \cdot 10^{-3}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)L}$	0	0	0.18	0	0	0.16	0.06	0.02	0.02	0.08	0.02	0.02
2	$\Delta_{nn'}^{(i)L}$	-0.18	-0.06	-0.03	-0.21	-0.07	-0.03	-0.02	$-6 \cdot 10^{-3}$	$-3 \cdot 10^{-3}$	-0.02	$-6 \cdot 10^{-3}$	$-4 \cdot 10^{-3}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)L}$	0	0	0.16	0	0	0.18	0.06	0.02	0.02	0.08	0.02	0.02
3	$\Delta_{nn'}^{(i)L}$	$-3 \cdot 10^{-10}$	$-1 \cdot 10^{-10}$	$-2 \cdot 10^{-10}$	$-4 \cdot 10^{-11}$	$-1 \cdot 10^{-11}$	$-2 \cdot 10^{-11}$	$-7 \cdot 10^{-6}$	$-2 \cdot 10^{-6}$	$-1 \cdot 10^{-6}$	$-1 \cdot 10^{-7}$	$-4 \cdot 10^{-8}$	$-2 \cdot 10^{-8}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)L}$	0	0	$3 \cdot 10^{-10}$	0	0	$5 \cdot 10^{-11}$	$2 \cdot 10^{-5}$	$6 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$
4	$\Delta_{nn'}^{(i)L}$	$-6 \cdot 10^{-9}$	$-2 \cdot 10^{-9}$	$-4 \cdot 10^{-9}$	$-7 \cdot 10^{-9}$	$-2 \cdot 10^{-9}$	$-6 \cdot 10^{-9}$	$-4 \cdot 10^{-4}$	$-1 \cdot 10^{-4}$	$-6 \cdot 10^{-5}$	$-8 \cdot 10^{-6}$	$-3 \cdot 10^{-6}$	$-2 \cdot 10^{-6}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)L}$	0	0	0	0	0	0	$8 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-5}$	$6 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-6}$
5	$\Delta_{nn'}^{(i)L}$	$-2 \cdot 10^{-7}$	$-6 \cdot 10^{-8}$	$-1 \cdot 10^{-7}$	$-2 \cdot 10^{-7}$	$-7 \cdot 10^{-8}$	$-1 \cdot 10^{-7}$	$-2 \cdot 10^{-3}$	$-6 \cdot 10^{-4}$	$-3 \cdot 10^{-4}$	$-6 \cdot 10^{-5}$	$-2 \cdot 10^{-5}$	$-1 \cdot 10^{-5}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)L}$	0	0	0	0	0	0	$2 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-5}$	$4 \cdot 10^{-5}$
6	$\Delta_{nn'}^{(i)L}$	$-7 \cdot 10^{-6}$	$-2 \cdot 10^{-6}$	$-3 \cdot 10^{-6}$	$-7 \cdot 10^{-6}$	$-2 \cdot 10^{-6}$	$-4 \cdot 10^{-6}$	$-9 \cdot 10^{-3}$	$-3 \cdot 10^{-3}$	$-1 \cdot 10^{-3}$	$-4 \cdot 10^{-4}$	$-1 \cdot 10^{-4}$	$-7 \cdot 10^{-5}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)L}$	0	0	0	0	0	0	0.01	$2 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$
7	$\Delta_{nn'}^{(i)L}$	$-4 \cdot 10^{-4}$	$-1 \cdot 10^{-4}$	$-2 \cdot 10^{-4}$	$-4 \cdot 10^{-4}$	$-1 \cdot 10^{-4}$	$-2 \cdot 10^{-4}$	-0.01	$-3 \cdot 10^{-3}$	$-2 \cdot 10^{-3}$	$-5 \cdot 10^{-3}$	$-1 \cdot 10^{-3}$	$-5 \cdot 10^{-4}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)L}$	0	0	0	0	0	0	0	0	$5 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-3}$
8	$\Delta_{nn'}^{(i)L}$	-0.02	$-7 \cdot 10^{-3}$	$-9 \cdot 10^{-3}$	-0.02	$-7 \cdot 10^{-3}$	$-9 \cdot 10^{-3}$	-0.05	-0.02	-0.03	-0.08	-0.03	$-7 \cdot 10^{-3}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)L}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0.05	0	0	0.04
9	$\Delta_{nn'}^{(i)L}$	$-5 \cdot 10^{-3}$	$-2 \cdot 10^{-3}$	$-2 \cdot 10^{-3}$	$-5 \cdot 10^{-3}$	$-2 \cdot 10^{-3}$	$-2 \cdot 10^{-3}$	-0.02	$-6 \cdot 10^{-3}$	$-5 \cdot 10^{-3}$	-0.02	$-6 \cdot 10^{-3}$	$-2 \cdot 10^{-3}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)L}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0	$9 \cdot 10^{-3}$
10	$\Delta_{nn'}^{(i)L}$	-0.03	$-9 \cdot 10^{-3}$	-0.01	-0.03	$-9 \cdot 10^{-3}$	-0.01	-0.05	-0.02	-0.01	-0.09	-0.03	-0.02
	$\gamma_{nn'}^{(i)L}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0.04	0	0	0.07
11	$\Delta_{nn'}^{(i)L}$	$-2 \cdot 10^{-8}$	$-6 \cdot 10^{-9}$	$-7 \cdot 10^{-9}$	$-2 \cdot 10^{-8}$	$-6 \cdot 10^{-9}$	$-7 \cdot 10^{-9}$	$-5 \cdot 10^{-6}$	$-1 \cdot 10^{-6}$	$-2 \cdot 10^{-6}$	$-2 \cdot 10^{-7}$	$-7 \cdot 10^{-8}$	$-1 \cdot 10^{-7}$
	$\gamma_{nn'}^{(i)L}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\Delta_n^{(i)L}$		-0.41	-0.13	-0.10	-0.46	-0.15	-0.08	-0.18	-0.05	-0.05	-0.23	-0.07	-0.03
$\gamma_n^{(i)L}$		0	0	0.35	0	0	0.35	0.15	0.04	0.16	0.18	0.05	0.17
Δ_n^L		-0.64			-0.69			-0.28			-0.33		
γ_n^L		0.35			0.35			0.35			0.40		

Величини зміщень ($\Delta_{nn'}^{(0)L,I}$) і затухань ($\gamma_{nn'}^{(0)L,I}$) електронних станів при конфігураційних взаємодіях у процесах з випромінюванням лише віртуальних фононів практично не залежать від температури, а їх незначні зміни при зростанні температури від 0 К до 300 К пов'язані зі зміною енергій електронних станів через температурну залежність ефективних мас і висот потенціальних бар'єрів.

При $T \neq 0$ К перенормування енергій усіх робочих станів електрона переважно відбуваються через конфігураційну взаємодію з народженням віртуальних фононів ($\Delta_n^{(0)L,I}$). При цьому, незалежно від температури, домінуючий внесок у величини парціальних ($\Delta_n^{(i)L,I}$, $i = 0, \pm 1$) і сумарних ($\Delta_n^{L,I}$) зміщень зумовлений внутриврівневою ($n = n'$) взаємодією. Міжривневі взаємодії між двома нижніми ($n=1$, $n'=2$, $n=2$, $n'=1$) або двома верхніми ($n=8$, $n'=10$, $n=10$, $n'=8$) робочими станами, а також з тими станами, з якими забезпечується значне перекриття хвильових функцій (рис.2.2), формують парціальні зміщення $\Delta_{nn'}^{L,I}$, величини яких співвимірні з $\Delta_{nn}^{L,I}$. Величини парціальних зміщень конфігураційних взаємодій зі всіма іншими станами каскаду виявляються нехтовно малими.

Щодо затухань (γ_n^I, γ_n^L), то у досліджуваному однофононному наближенні їх існування регулюється δ -функціями, які містяться в уявних частинах масових операторів (M_n^I s M_n^L). Тому, оскільки при $T=0$ К для двох найнижчих робочих станів ($n = 1, 2$) при $n'=1, \dots, 11$ виконуються нерівності $E_n < E_{n'}(q) + \Omega_P$ ($P = L, I$), то внутриврівневі та міжривневі конфігураційні взаємодії, як з обмеженими, так і з інтерфейсними фононами, відбуваються без затухання. Тобто всі парціальні внески у затухання дорівнюють нулю $\gamma_{1n'}^{(0)L,I} = \gamma_{2n'}^{(0)L,I} = 0$ ($n'=1, \dots, 11$), а отже, і повні затухання двох нижніх станів при $T = 0$ К відсутні $\gamma_1^{L,I} = \gamma_2^{L,I} = 0$.

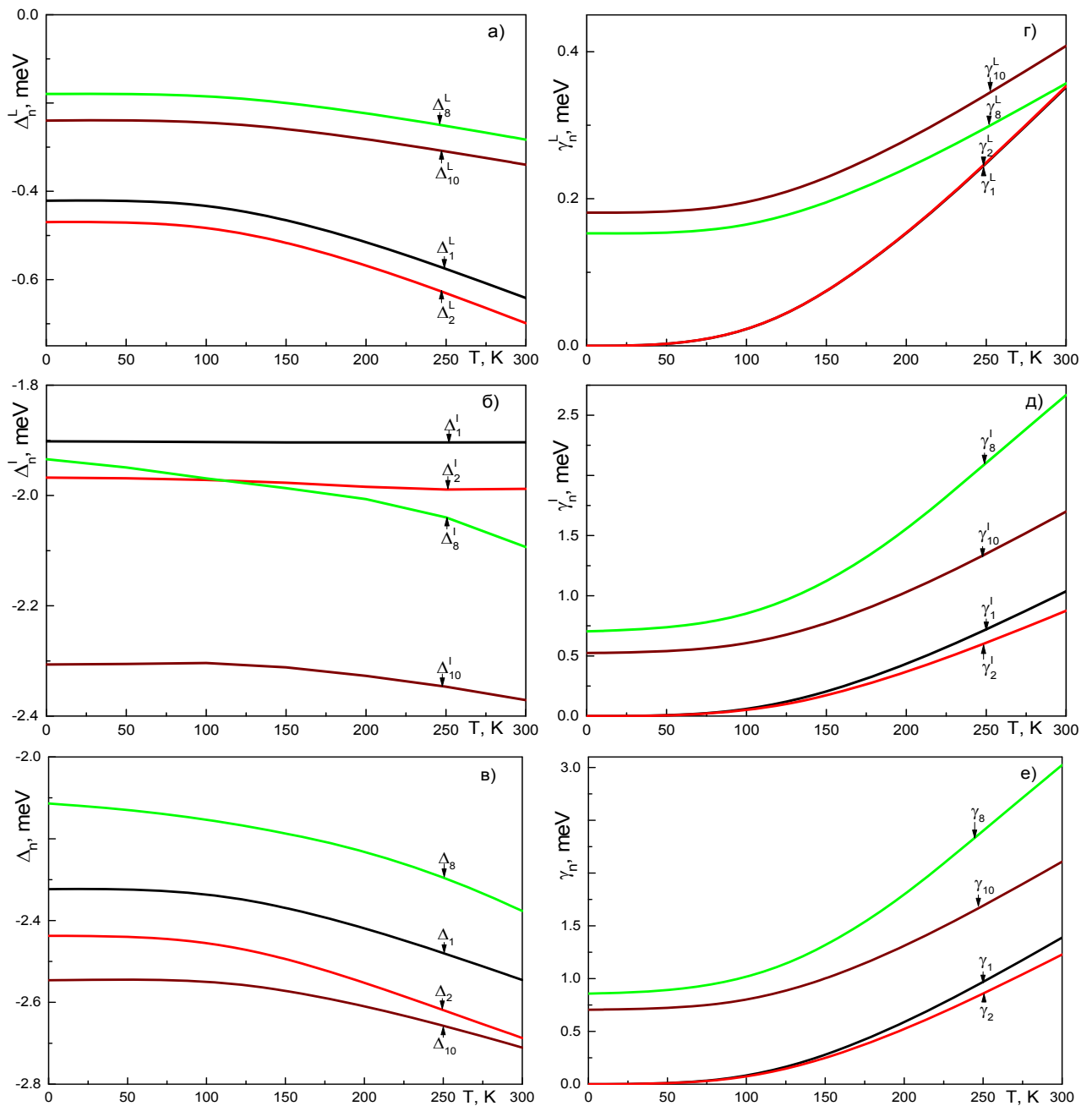


Рис.2.4. Залежності парціальних (Δ_n^L , Δ_n^I , γ_n^L , γ_n^I) і повних (Δ_n , γ_n) зміщень і зтухань робочих станів ($n=1, 2; 8, 10$) від температури (Т)

Щодо високоенергетичних збуджених робочих станів ($n=8, 10$), то навіть при $T = 0$ К їх зтухання виникають за рахунок міжрівневих взаємодій з тими низькоенергетичними ($n > n'$) станами, які задовольняють умову $E_n - E_{n'} > \Omega_P$ ($P = L, I$). Згідно з фізичними міркуваннями, найбільші величини зтухань будуть виникати через взаємодії між станами з максимальним перекриттям хвильових функцій.

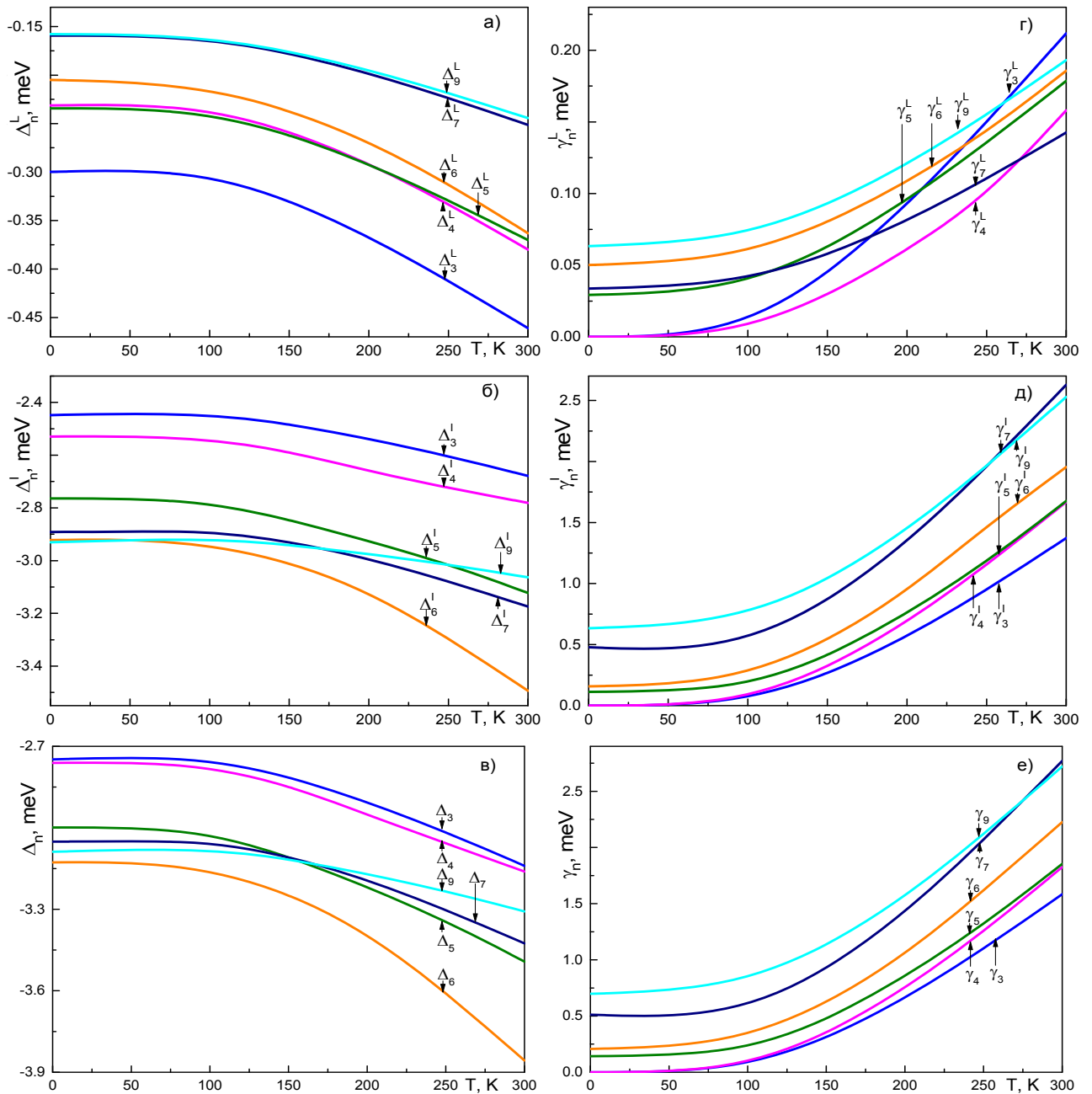


Рис.2.5. Залежності парціальних (Δ_n^L , Δ_n^I , γ_n^L , γ_n^I) і повних (Δ_n , γ_n) зміщень і затухань станів фононної драбинки ($n=3-7, 9$) від температури (T)

При скінченних температурах ($T \neq 0$ К) затухання електронних станів виникають у конфігураційних взаємодіях з випромінюванням і поглинанням L і I фононів. Виникнення чи відсутність затухання у процесах випромінювання та віртуальних ($i = 0$), і реальних ($i = +1$) фононів при $T \neq 0$ К регулюється тим же законом збереження енергії, який щойно аналізувався при $T = 0$ К. Конфігураційні взаємодії з поглинанням реальних фононів ($i = -1$) формують

затухання ($\gamma_{nn'}^{(-1)I,L}$) всіх чотирьох робочих станів ($n = 1, 2, 8, 10$) за умови $E_n > E_{n'} - \Omega_P$ ($P = L, I$), яка виконується як при внутрі-, так і при міжрівневих взаємодіях.

На рис. 2.4 та 2.5 зображені температурні еволюції парціальних ($\Delta_n^L, \Delta_n^I, \gamma_n^L, \gamma_n^I$) і повних (Δ_n, γ_n) зміщень і затухань робочих станів електрона ($n=1, 2, 8, 10$ - рис.2.4) та екстракторних станів «фононої драбинки» ($n=3-7, 9$; рис.2.5). З цих рисунків видно, що зі збільшенням температури величини $|\Delta_n|$ та γ_n всіх станів каскаду лише зростають.

Зауважимо, що, як уже зазначалося, оскільки в рамках розвиненої теоретичної моделі електрон-фононна взаємодія при $T = 0\text{K}$ може приводити до затухання лише тих станів, для яких виконуються нерівності $E_n < E_{n'} - \Omega_{Lj}$ та $E_n < E_{n'} - \Omega_{Ia}(q)$, то, як видно з рис. 2.4 та рис. 2.5, для трьох нижніх ($n=1, 2, 3$) станів при криогенній температурі затухання відсутні. При скінченній температурі $T \neq 0\text{K}$ взаємодія з оптичними фононами викликає затухання всіх електронних станів каскаду.

2.3 Еволюція перенормованих взаємодією з фононами спектральних характеристик електрона у каскаді широкосмугового квантового каскадного детектора

Згідно з результатами експериментальних праць [49, 50], що узгоджуються із загальними висновками досліджень оптичних властивостей двоямних структур [178], одним із факторів, який суттєво впливає на ширину смуги поглинання ККД, є товщина бар'єра між ямами двоямної активної зони. Тому на прикладі розгляненого у попередньому параграфі каскаду детально вивчимо еволюцію спектральних характеристик електронних станів залежно від товщини бар'єра b_1 (рис.2.2) в активній зоні при фіксованих розмірах інших його шарів.

Спочатку проаналізуємо особливості еволюції залежності від товщини

бар'єра b_1 неперенормованих взаємодією з фононами енергій (E_n) електрона та енергій ($E_{n,n'} = |E_n - E_{n'}|$) робочих квантових переходів, що формують смугу поглинання ККД, які зображені на рис. 2.6. З рисунка видно, що, згідно з експериментом [50], зі збільшенням b_1 енергії робочих станів ($n=1, 2; 8, 10$) попарно зближаються (рис.2.6 а), а смуга поглинання звужується (рис.2.6 б). Енергії E_n ($n=3-7, 9$) екстракторних станів, що формують фононну драбинку, практично не змінюються зі збільшенням b_1 . За фіксованої товщини бар'єра b_1 збільшення температури приводить до низькоенергетичних зміщень усіх станів електрона (рис.2.6 а) через зміну ефективних мас і висот потенціальних бар'єрів і, як наслідок, до розширення та низькоенергетичного зміщення смуги поглинання каскаду (рис.2.6 б).

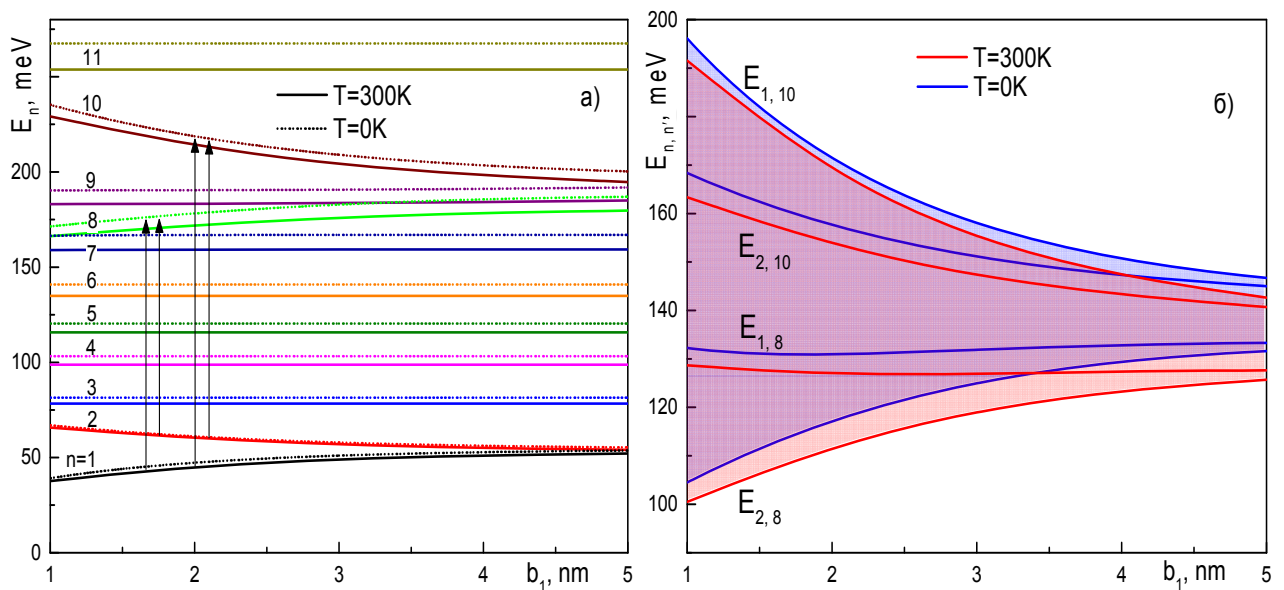


Рис.2.6. Еволюція неперенормованих (а) спектра електронних енергій E_n та (б) енергій квантових переходів $E_{n,n'}$ від товщини потенціального бар'єра b_1 у двоямній активній зоні каскаду при $T = 0\text{ K}$ та $T = 300\text{ K}$

На рис. 2.7 наведені залежності енергій усіх гілок інтерфейсних та обмежених фононів від квазіімпульсу q при $b_1=1, 3, 5\text{ nm}$. Відзначимо, що бездисперсійні енергії обмежених фононів не залежать від b_1 та інших геометричних параметрів каскаду, як і повинно бути згідно з фізичними

міркуваннями. Зміна товщини бар'єра b_1 помітно впливає на дисперсію лише чотирьох ($\lambda=1, 16, 17, 32$) гілок інтерфейсних фононів і практично не змінює всі інші. Загальні властивості енергій усіх 32 гілок інтерфейсних фононів при різних товщинах b_1 виявляються якісно подібними між собою і збігаються з детально проаналізованими у попередньому параграфі на прикладі $b_1=3$ nm.

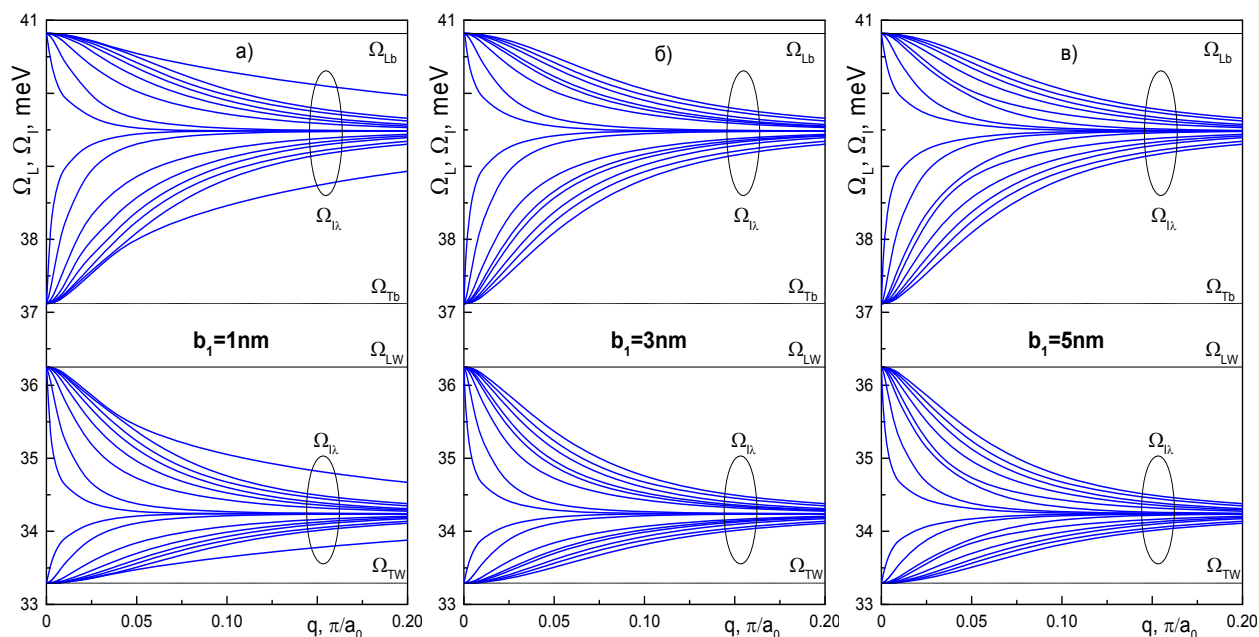


Рис. 2.7. Залежності енергій інтерфейсних ($\Omega_{I\lambda}$, $\lambda=1-32$) та обмежених (Ω_{LW} , Ω_{Lb}) фононів від квазіімпульсу q при $b_1=1$ nm (а), $b_1=3$ nm (б) та $b_1=5$ nm (в).

Тут a_0 – величина постійної ґратки GaAs

Тепер розглянемо особливості перенормування L та I фононами спектральних параметрів електронних станів у каскаді залежно від товщини бар'єра b_1 . Оскільки розраховані залежності зміщень і затухань при різних температурах виявилися якісно подібними, то на рис. 2.8-2.11 наведені еволюції від b_1 парціальних (Δ_n^L , Δ_n^I , γ_n^L , γ_n^I) і повних ($\Delta_n = \Delta_n^L + \Delta_n^I$, $\gamma_n = \gamma_n^L + \gamma_n^I$) зміщень і затухань робочих станів електрона ($n=1, 2; 8, 10$; рис. 2.8, рис. 2.10) та екстракторних станів «фононної драбинки» ($n=3-7, 9$; рис. 2.9, рис. 2.11), зумовлених взаємодією зі всіма гілками L та I фононів, лише при криогенній ($T=0$ К) та кімнатній ($T=300$ К) температурах.

З рис. 2.8-2.11 видно, що в розглядуваному інтервалі зміни товщини бар'єра ($1\text{nm} \leq b_1 \leq 5\text{nm}$) взаємодія з обома типами (L та I) фононів при $T=0\text{K}$ і $T=300\text{K}$ приводить лише до низькоенергетичних зміщень і затухань електронних станів, причому для всіх n величини Δ_n^I та γ_n^I на порядок більші за Δ_n^L та γ_n^L відповідно. Така переважна роль I-фононів у перенормуванні станів електрона, згідно з фізичними міркуваннями, зумовлена малими товщинами ям і бар'єрів багат шарової структури каскаду. З цих рисунків також видно, що взаємодія лише з одним типом фононів (або з L, або з I) приводить до співвимірних величин зміщень і затухань усіх станів ($n=1, \dots, 10$) каскаду.

Аналіз рис. 2.8-2.11 показує, що для робочих станів ($n=1, 2; 8, 10$) і станів «фононної драбинки» ($n=3-7, 9$) залежності зміщень Δ_n^L, Δ_n^I і затухань γ_n^L, γ_n^I від b_1 мають різний характер. Зокрема, для робочих станів $n=1, 2; 8, 10$ (рис. 2.8, 2.10) властивості $\Delta_n^{L,I}$ та $\gamma_n^{L,I}$ такі.

Зі збільшенням товщини бар'єра b_1 величини і зміщень (Δ_1^L, Δ_2^L - рис.2.8а,г; Δ_1^I, Δ_2^I - рис.2.8б,д), і затухань (при $T=300\text{K}$ γ_1^L, γ_2^L - рис.2.10г; γ_1^I, γ_2^I - рис.2.10д), зумовлені взаємодією нижньої пари робочих станів ($n=1, 2$) з L- та I-фононами, лише зближаються між собою через зменшення відстані між енергіями E_1 та E_2 цих станів (рис.2.6а). Оскільки при $T = 0\text{K}$ для найнижчих робочих станів ($n=1, 2$) при всіх енергіях гілок L- та I-фононів і енергіях електронних станів $E_{n' \neq n}$ виконуються нерівності $E_n < E_{n'} + \Omega_{Lj}$ та $E_n < E_{n'} + \Omega_{I\lambda}(q)$, тому взаємодія з фононами не викликає затухань цих станів $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$.

Розрахунки функцій зв'язку та масових операторів виявили, що міжрівневі електрон-фононні конфігураційні взаємодії приводять до виникнення екстремумів функцій Δ_n^L, Δ_n^I та γ_n^L, γ_n^I ($n=8, 10$) при таких

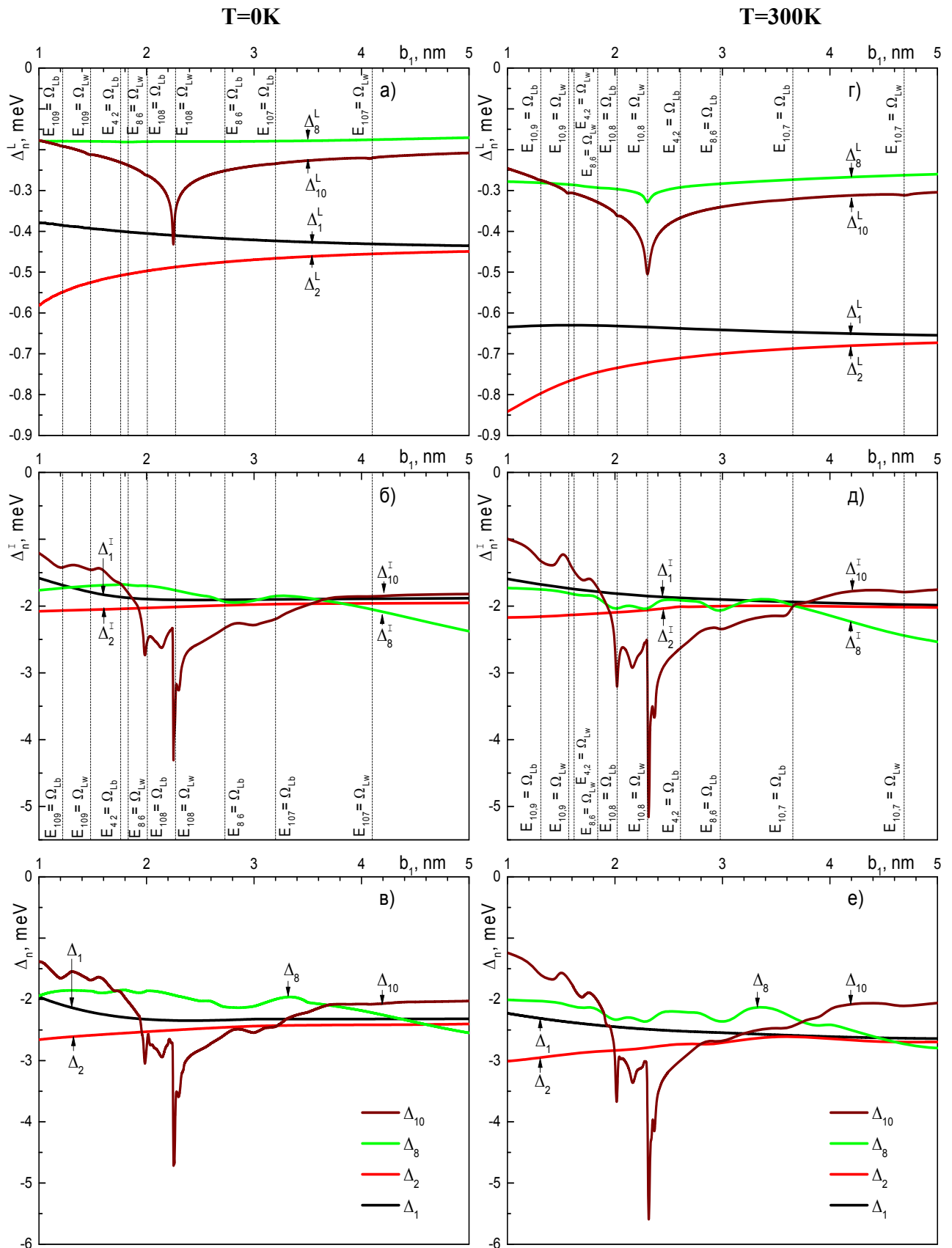


Рис.2.8. Залежності парціальних (Δ_n^L , Δ_n^I) і повних (Δ_n) зміщень електронних робочих станів ($n=1, 2; 8, 10$) від товщини b_1 потенціального бар'єра в активній зоні при $T = 0$ К і $T = 300$ К відповідно

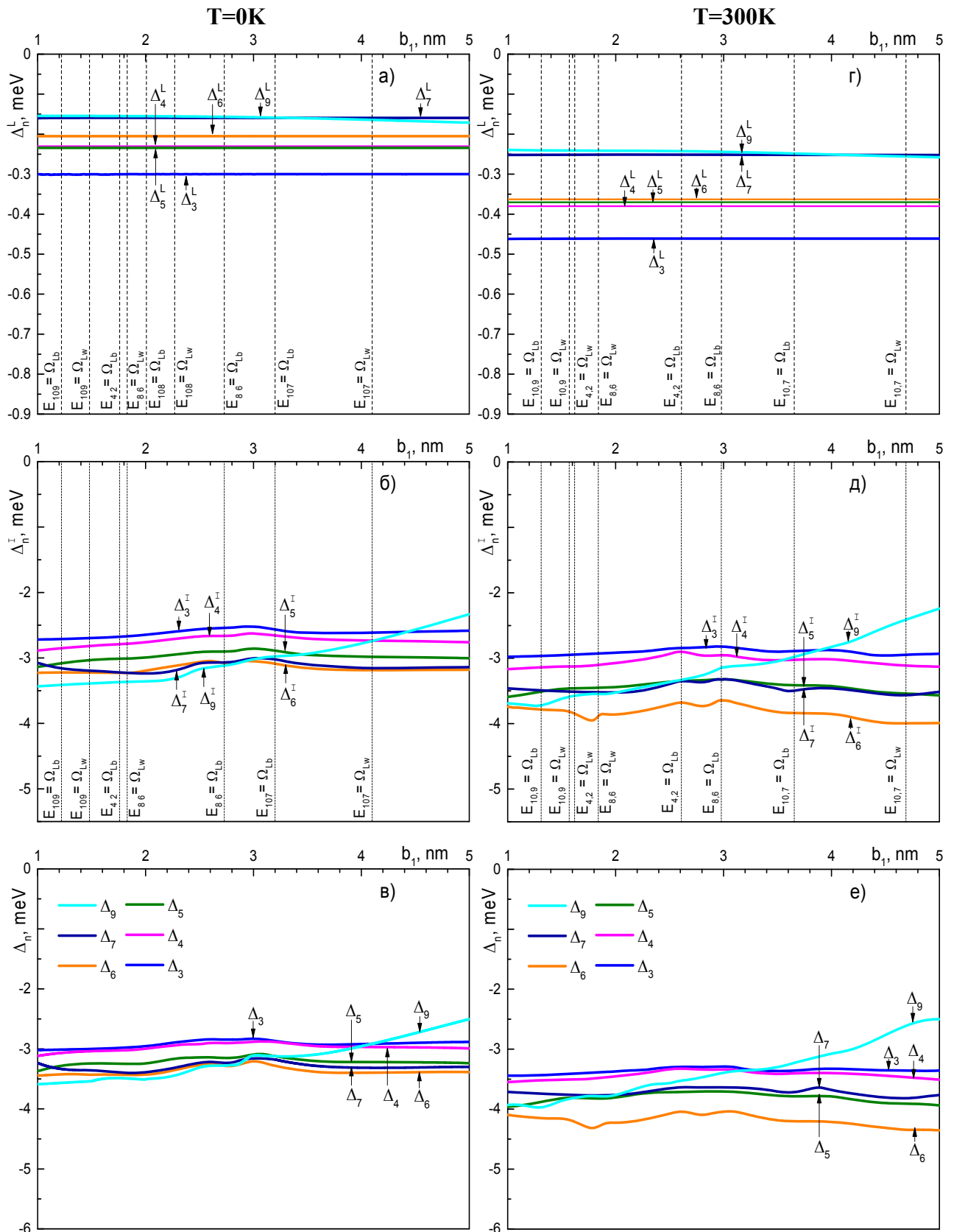


Рис.2.9. Залежності парціальних (Δ_n^L , Δ_n^I) і повних (Δ_n) зміщень електронних станів фононної драбинки ($n=3-7, 9$) від товщини b_1 потенціального бар'єра в активній зоні при $T = 0$ К і $T = 300$ К відповідно

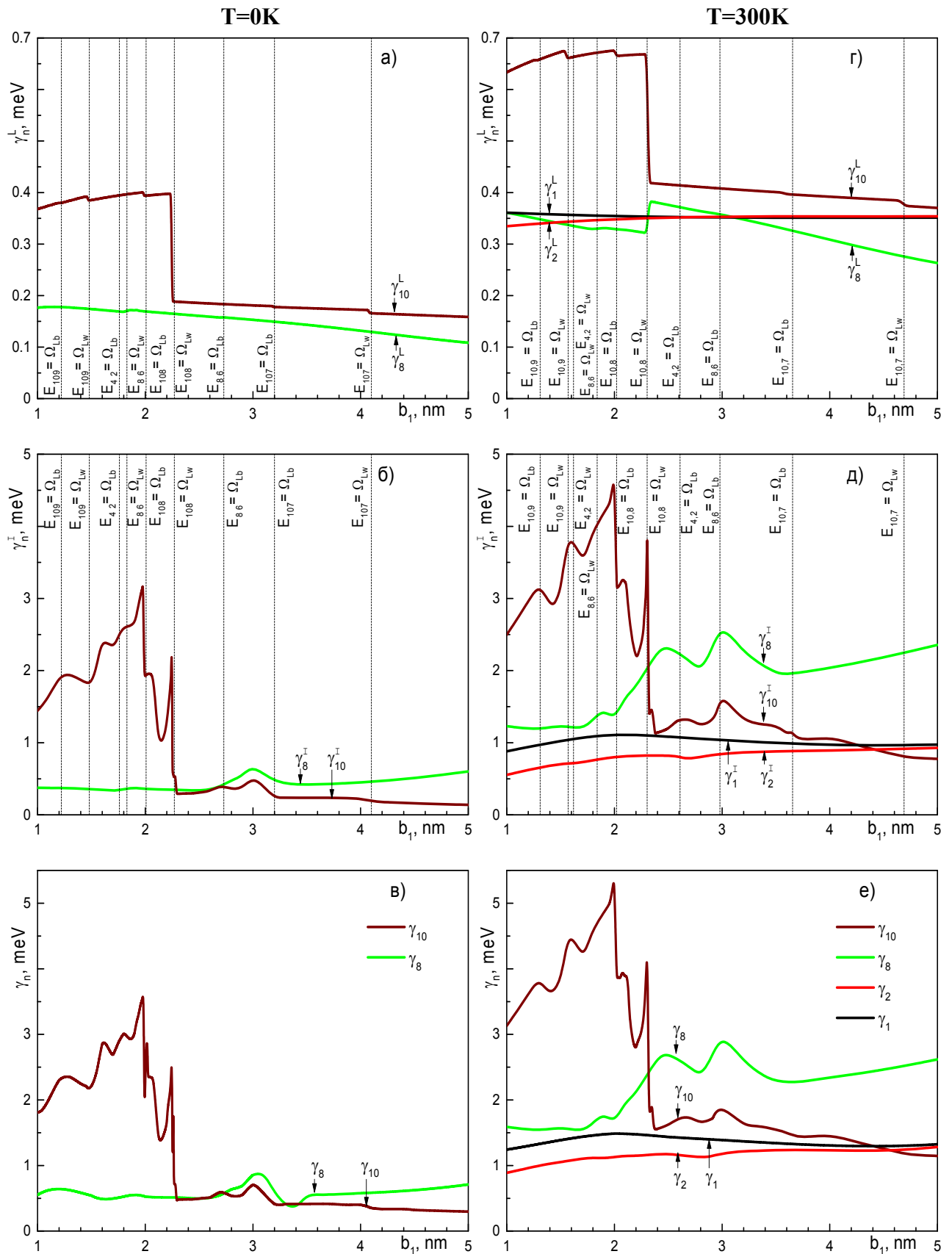


Рис.2.10. Залежності парціальних (γ_n^L , γ_n^I) і повних (γ_n) затухань електронних робочих станів ($n=1, 2; 8, 10$) від товщини b_1 потенціального бар'єра в активній зоні при $T = 0$ К і $T = 300$ К відповідно

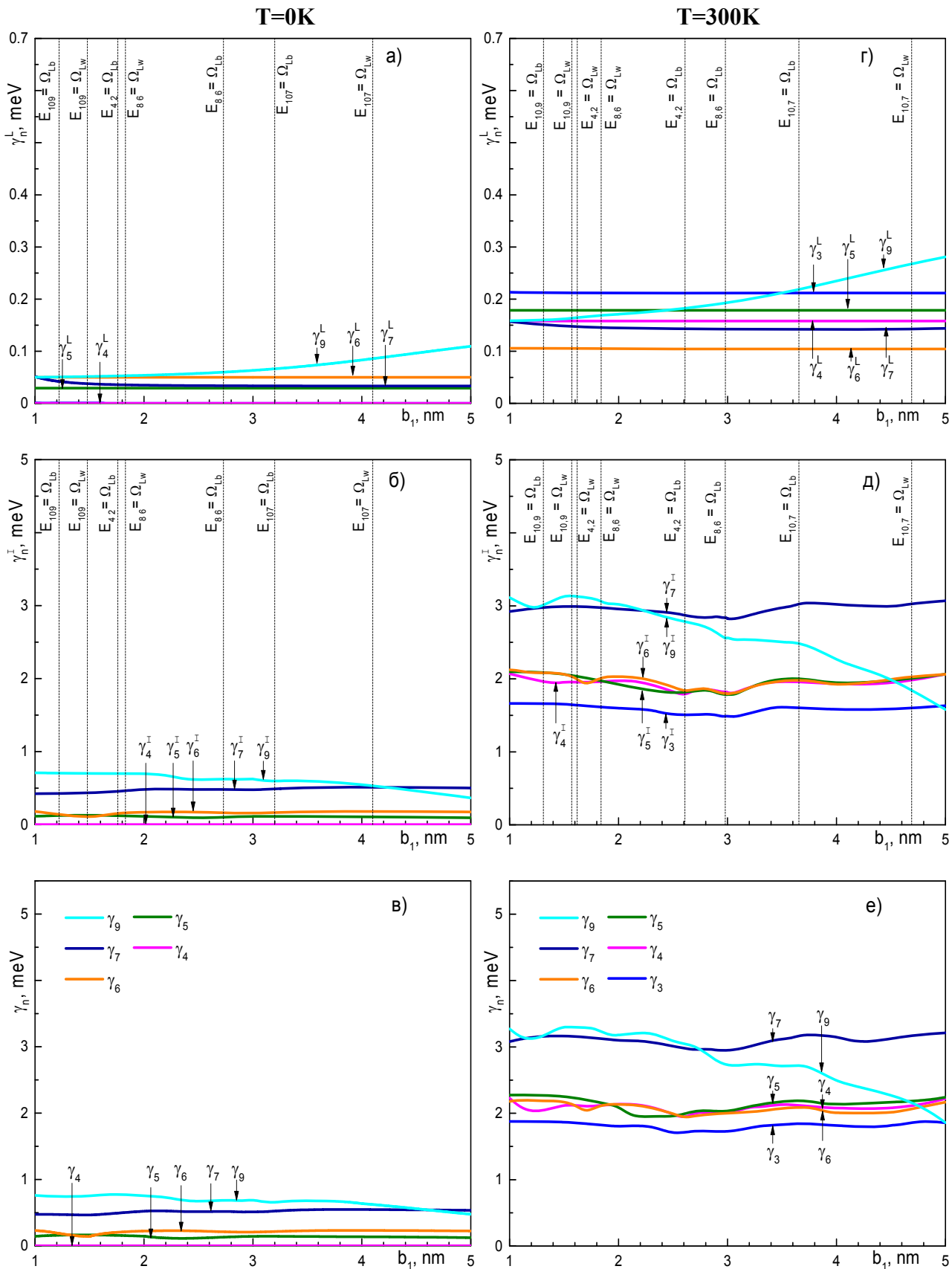


Рис.2.11. Залежності парціальних (γ_n^L, γ_n^I) і повних (γ_n) затухань електронних парціальних станів ($n=3-7, 9$) від товщини b_1 потенціального бар'єра в активній зоні при $T = 0\text{ K}$ і $T = 300\text{ K}$ відповідно

товщинах b_1 , при яких різниця ($E_{nn'} = E_n - E_{n'}$) між енергіями n -го та n' -го станів дорівнює енергії поздовжнього фонона середовища-ями (Ω_{Lw}) або середовища-бар'єра (Ω_{Lb}). Величини екстремумів Δ_n^L , Δ_n^I і γ_n^L , γ_n^I зростають зі збільшенням перекриття хвильових функцій Ψ_n та $\Psi_{n'}$, і при виконанні нерівності $n > n'$ досягають найбільших значень. Також відзначимо, що через бездисперсійність енергій гілок L-фононів і через залежність від q багатогілкового спектра енергій I-фононів (рис. 2.7) поведінка функцій Δ_n^I , γ_n^I та Δ_n^L , γ_n^L в околах екстремумів виявляється принципово різною.

З рис. 2.9 та 2.11 видно, що зміщення Δ_n^L , Δ_n^I (рис. 2.9) і затухання γ_n^L , γ_n^I (рис. 2.11) станів «фононної драбинки» ($n=3-7, 9$) слабо змінюються зі зміною товщини бар'єра в двоямній активній зоні, навіть в околах тих значень b_1 , де $E_{nn'} \approx \Omega_{Lw}$ та $E_{nn'} \approx \Omega_{Lb}$.

Отже, у результаті домінуючої ролі I-фононів у перенормуванні електронних станів на залежностях повних зміщень (Δ_n) та затухань (γ_n) від товщини бар'єра b_1 , в основному, проявляються головні особливості взаємодії електронів з I-фононами. Ієрархія ($\Delta_n^I > \Delta_n^L$, $\gamma_n^I > \gamma_n^L$) парціальних внесків взаємодії з L- та I-фононами у повні зміщення (Δ_n) та затухання (γ_n) електронних станів не порушується зі зміною температури.

2.4 Оптимізація дизайну каскаду квантового каскадного детектора далекого інфрачервоного діапазону

Як відомо [11, 179], в основу функціонування ККД покладено механізм так званої «фононної драбинки», утвореної електронними енергетичними рівнями в екстракторі. Відстані між цими рівнями повинні бути еквідистантними і резонансними з енергією оптичного фонона (Ω_{L0}) середовищ-ям, що може досягатися належним вибором розмірів ям і бар'єрів в екстракторній частині каскаду. Тоді за оптимального геометричного дизайну

екстрактора електрон, тунелюючи з верхнього рівня активної зони попереднього каскаду, буде здійснювати послідовні однофоновні квантові переходи по «фононній драбинці» з відповідною релаксацією енергії, яка дорівнює енергії оптичного фонона, завдяки чому потрапить в активну зону наступного каскаду з енергією основного стану. Зауважимо, що часто у ККД [12, 27, 53, 180] ізотропного й анізотропного типів використовується «фононна драбинка» з пропущеними або неоптимізованими щаблями енергій, через що ефективність наноприладів виявляється низькою.

Розглянемо підхід до оптимізації геометричного дизайну каскаду на основі аналізу енергетичного спектра, хвильових функцій та сил осцилятора квантових переходів. Вихідною моделлю оберемо каскад експериментального ККД (зразок С) із [49] з GaAs-ямами та $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$ -бар'єрами з відомими з цитованої праці геометричними параметрами: ширини ям – $a_1=6.8$ nm, $a_2=2$ nm, $a_3=2.3$ nm, $a_4=2.8$ nm, $a_5=3.4$ nm, $a_6=3.8$ nm, $a_7=4.8$ nm; товщини бар'єрів – $b_1=5.65$ nm, $b_2=3.955$ nm, $b_3=3.1$ nm, $b_4=3.1$ nm, $b_5=3.1$ nm, $b_6=3.1$ nm.

Розрахунки енергій (E_n) електрона, різниць між енергіями ($E_{n\ n-1} = E_n - E_{n-1}$) сусідніх станів, хвильових функцій та сил осциляторів (f_{1n}) квантових переходів з основного ($n=1$) у збуджені стани, результати яких наведені у таблиці 2.5 і на рис. 2.12, показали, що детектування електромагнітного поля відбувається при квантовому переході між станами $n=1$ та $n=8$ в одноямній активній зоні каскаду. Розрахована енергія переходу $\Delta E_{81}=142.2\text{meV}$ знаходиться у далекому ІЧ-діапазоні та добре узгоджується з результатом експерименту $\Delta E_{\text{exp}}=144\text{meV}$. У станах $n=2-7$ електрон послідовно локалізується в ямах екстрактора так, що їх рівні енергій (E_2, \dots, E_7) утворюють «фононну драбинку». Зауважимо, що оскільки відстані ($E_{n\ n-1}$, табл. 2.5) між щаблями «фононної драбинки» значно менші за енергію

оптичного фонона $\Omega_{L0}^{GaAs}=36.2\text{meV}$, то фонон-супровідне тунелювання електронів крізь екстрактор каскаду не матиме резонансного характеру, що може знижувати ефективність роботи ККД.

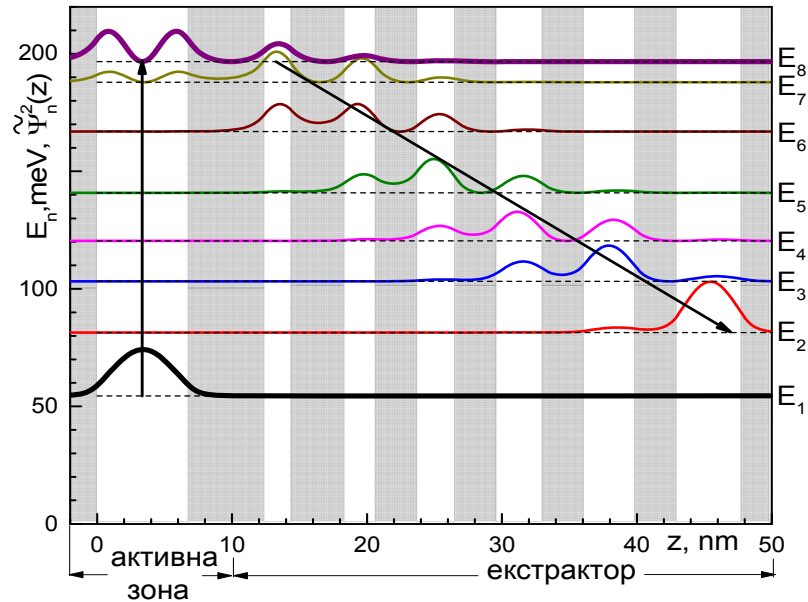


Рис. 2.12. Розподіли ймовірностей знаходження електрона у станах $n=1-8$ в окремому каскаді ККД [49]

Таблиця 2.5.

Енергії електронних станів E_n , різниці $E_n - E_{n-1}$ між енергіями сусідніх станів і сили осциляторів f_{1n} квантових переходів з основного у збуджені стани електрона у каскаді ККД [49]

n	E_n, meV	$E_n - E_{n-1}, \text{meV}$	f_{1n}
1	54.5	—	—
2	81.4	26.9	0.03
3	103.2	21.8	0.02
4	120.4	17.2	$0.36 \cdot 10^{-2}$
5	140.9	20.5	$0.53 \cdot 10^{-4}$
6	166.9	26.1	0.02
7	187.9	20.9	0.27
8	196.7	8.8	0.57

Оптимізуємо геометричний дизайн каскаду так, щоб він забезпечував роботу ККД у далекому ІЧ-діапазоні з ефективним фонон-супровідним тунелюванням електронів.

З фізичних міркувань зрозуміло, що, оскільки енергія (E_{n1}) робочого переходу з основного у збуджений стан в активній зоні каскаду з оптимізованою «фононною драбинкою» повинна бути кратною енергії фонона Ω_{L0}^{GaAs} , а кожний рівень «фононної драбинки» створюється лише однією ямою екстрактора, то загальна кількість (W) потенціальних ям в екстракторі може бути визначена з рівності $W = \text{Round}[E_{n1} / \Omega_{L0}^{GaAs} - 1]$, W - ціле додатне число. Це співвідношення дозволяє за заданою детектованою енергією (E_{n1}) та відомою енергією фонона (Ω_{L0}^{GaAs}) визначити оптимальне для «фононної драбинки» число потенціальних ям у екстракторі. Розрахунки показали, що при енергіях $E_{n1} = 144 \text{ meV}$ та $\Omega_{L0}^{GaAs} = 36.2 \text{ meV}$ оптимізована «фононна драбинка» повинна формуватися трійним ($W=3$) екстрактором з такими геометричними параметрами: ширини ям – 2.3 nm, 3.0 nm та 4.2 nm, товщини бар'єрів – 3.1 nm та 3.1 nm.

Оскільки ККД становлять прикладний інтерес як основні елементи сучасних ПЧ-сенсорів з широкою смугою поглинання, то далі оптимізуємо геометричний дизайн активної зони каскаду так, щоб він забезпечував роботу ККД в ПЧ-діапазоні певної ширини, який охоплює енергію 144 meV. Для цього у першому наближенні розглянемо двоямну активну зону, в якій ширину першої ями ($a_1 = 6.8 \text{ nm}$) та товщину бар'єра ($b_1 = 5.65 \text{ nm}$) виберемо такими ж, як і в експериментальному ККД [49]. Приблизна ширина другої ями підібрана такою ($a_2 = 1.4 \text{ nm}$), щоб створюваний нею єдиний енергетичний рівень був близьким до верхнього рівня в першій (a_1) ямі. Така конструкція активної зони може забезпечити роботу ККД на переходах з основного у два близьких верхніх рівні. Тож і смуга поглинання буде визначатися різницею між енергіями обох робочих переходів.

Для уточнення оптимальних розмірів ям (a_1, a_2) активної зони розраховувалися енергії (E_n) та сили осциляторів квантових переходів (f_{1n}) з основного в усі збуджені стани електрона у каскаді з трійним екстрактором

залежно від ширини (a_1) першої ями при постійній загальній ширині ями $a_1 + a_2 = 8.2$ nm активної зони. Отримані результати наведені на рис. 2.13.

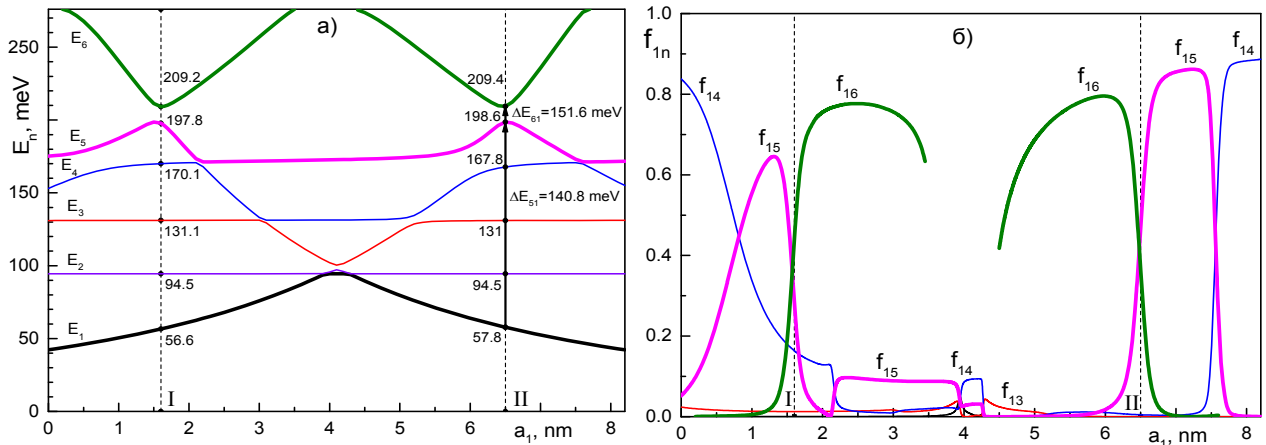


Рис. 2.13. Залежності енергетичного спектра E_n (а) та сил осциляторів

квантових переходів f_{1n} (б) від a_1 при $a_1 + a_2 = 8.2$ nm

З рис. 2.13 а видно, що залежності E_n від a_1 мають немонотонний характер з проявами антикросингів [61]. Причому характер залежності $E_n(a_1)$ дозволяє визначити області локалізації електрона. Так, якщо E_n спадає зі збільшенням a_1 , то електрон у станах n локалізований у першій (a_1) потенціальній ямі активної зони. У станах, енергії яких зростають зі збільшенням a_1 – у другій ямі розміром $a_2 = (8.2 - a_1)$ nm. На горизонтальних ділянках залежностей $E_n(a_1)$ – в екстракторі. При антикросингу енергій E_n та E_{n+1} електрон в обох станах з близькими ймовірностями знаходиться в потенціальних ямах a_1 та a_2 .

З рис. 2.13а видно, що існують дві геометричні конфігурації активної зони (I. $a_1^I = 1.6$ nm, $a_2^I = 6.6$ nm, II. $a_1^{II} = 6.5$ nm, $a_2^{II} = 1.7$ nm), в яких реалізуються квантові переходи з основного стану (E_1) у два збуджені стани, енергії яких (E_5 , E_6) знаходяться в антикросингу. Енергії переходів (I. $\Delta E_{51}^I = 141.2$ meV,

$\Delta E_{61}^I = 152.6 \text{ meV}$, II. $\Delta E_{51}^{II} = 140.8 \text{ meV}$, $\Delta E_{61}^{II} = 151.6 \text{ meV}$) в обох конфігураціях близькі.

Очевидно, що для ефективної роботи детектора у заданому спектральному діапазоні сили осциляторів f_{15} та f_{16} повинні бути близькі між собою та значно переважати сили осциляторів $f_{1n \neq 5, 6}$ усіх інших переходів.

З рис. 2.13 б видно, що цій умові відповідає лише конфігурація II, де $f_{15}^{II} = 0.28$, $f_{16}^{II} = 0.44$ та $f_{15}, f_{16} \gg f_{1n \neq 5, 6}$. У конфігурації I ця умова не виконується, оскільки тут $f_{15}^I = 0.47$, $f_{16}^I = 0.36$ одного порядку з $f_{14}^I = 0.16$.

Отже, ефективна робота ККД далекого ІЧ-діапазону можлива лише в єдиній оптимальній конфігурації активної зони з розмірами ям $\alpha_1 = 6.5 \text{ nm}$, $\alpha_2 = 1.7 \text{ nm}$, де ширина смуги поглинання визначається різницею енергій ($\Delta E_{61} - \Delta E_{51}$).

Для уточнення оптимальних розмірів бар'єрів каскаду розраховувалися залежності енергетичного спектра (E_n) та сил осциляторів (f_{1n}) від товщин потенціальних бар'єрів (b_1, b_2, b_3, b_4) при фіксованих розмірах усіх ям каскаду: $\alpha_1 = 6.5 \text{ nm}$, $\alpha_2 = 1.7 \text{ nm}$, $\alpha_3 = 2.3 \text{ nm}$, $\alpha_4 = 3.0 \text{ nm}$, $\alpha_5 = 4.2 \text{ nm}$. Аналіз отриманих залежностей (рис. 2.14) показав таке.

Збільшення товщини (b_1) першого бар'єра при фіксованих розмірах усіх інших бар'єрів каскаду, вказаних на рис. 2.14а, приводить до зменшення відстані між рівнями E_5 та E_6 і майже не впливає на енергетичні рівні (E_2, E_3, E_4) «фононної драбинки». Це дозволяє вибором b_1 визначити спектральну ширину смуги поглинання ККД. Зауважимо, що, як видно з рис. 2.14б, умовою $f_{15}, f_{16} \gg f_{1n \neq 5, 6}$ визнається мінімально допустима товщина потенціального бар'єра (b_1^{\min}) між ямами активно зони.

З рис. 2.14г видно, що однозначне виконання умови $f_{15} \approx f_{16}$ досягається

вибором товщини ($b_2=4.2$ nm) другого потенціального бар'єра. А вибором товщин третього (b_3) та четвертого (b_4) бар'єрів в інтервалах $3\text{nm} \leq b_3 \leq 4\text{nm}$ (рис.2.14д,е) та $0.5\text{nm} \leq b_4 \leq 4\text{nm}$ (рис. 2.14ж,з), де виконується умова $f_{15}, f_{16} \gg f_{1n \neq 5,6}$, здійснюється остаточна оптимізація енергетичних рівнів (E_2, E_3, E_4) «фононної драбинки» так, щоб відстані між ними були близькими до Ω_{LO}^{GaAs} .

Отже, аналізом енергетичного спектра та сил осциляторів квантових переходів отримано дизайн оптимізованого компактного каскаду ККД далекого ІЧ-діапазону з такими геометричними параметрами: $a_1=6.5$ nm, $a_2=1.7$ nm, $a_3=2.3$ nm, $a_4=3.0$ nm, $a_5=4.2$ nm, $b_1=5.65$ nm, $b_2=4.2$ nm, $b_3=3.1$ nm, $b_4=3.1$ nm.

Як видно з таблиці 2.6 і рисунка 2.15, у запропонованому каскаді можливе поглинання електромагнітного випромінювання далекого ІЧ-діапазону при двох квантових переходах майже однакових інтенсивностей ($f_{15}=0.42$, $f_{16}=0.41$) з енергіями переходів $E_{51}=140$ meV та $E_{61}=150.9$ meV відповідно. Інтенсивності всіх інших переходів з основного стану значно менші за f_{15} і f_{16} . Екстракторні (E_2, E_3, E_4) рівні енергій утворюють «фононну драбинку» з близькими до енергії оптичного фонона ($\Omega_{LO}^{GaAs}=36.2\text{meV}$) щаблями, що може забезпечити резонансне фонон-супровідне тунелюванням електронів і підвищити ефективність роботи ККД.

Для виявлення ролі оптичних фононів у перенормуванні спектральних характеристик каскаду з оптимізованим дизайном виконувався розрахунок зміщень (Δ_n^L, Δ_n^I) і затухань (γ_n^L, γ_n^I) усіх електронних станів, зумовлених взаємодією з обмеженими (L) та інтерфейсними (I) фононами, при криогенній (T=0K) та кімнатній (T=300K) температурах залежно від ширини ями a_1 при $a_1 + a_2 = 8.2$ nm, отримані результати представлені на рис. 2.16 та 2.17.

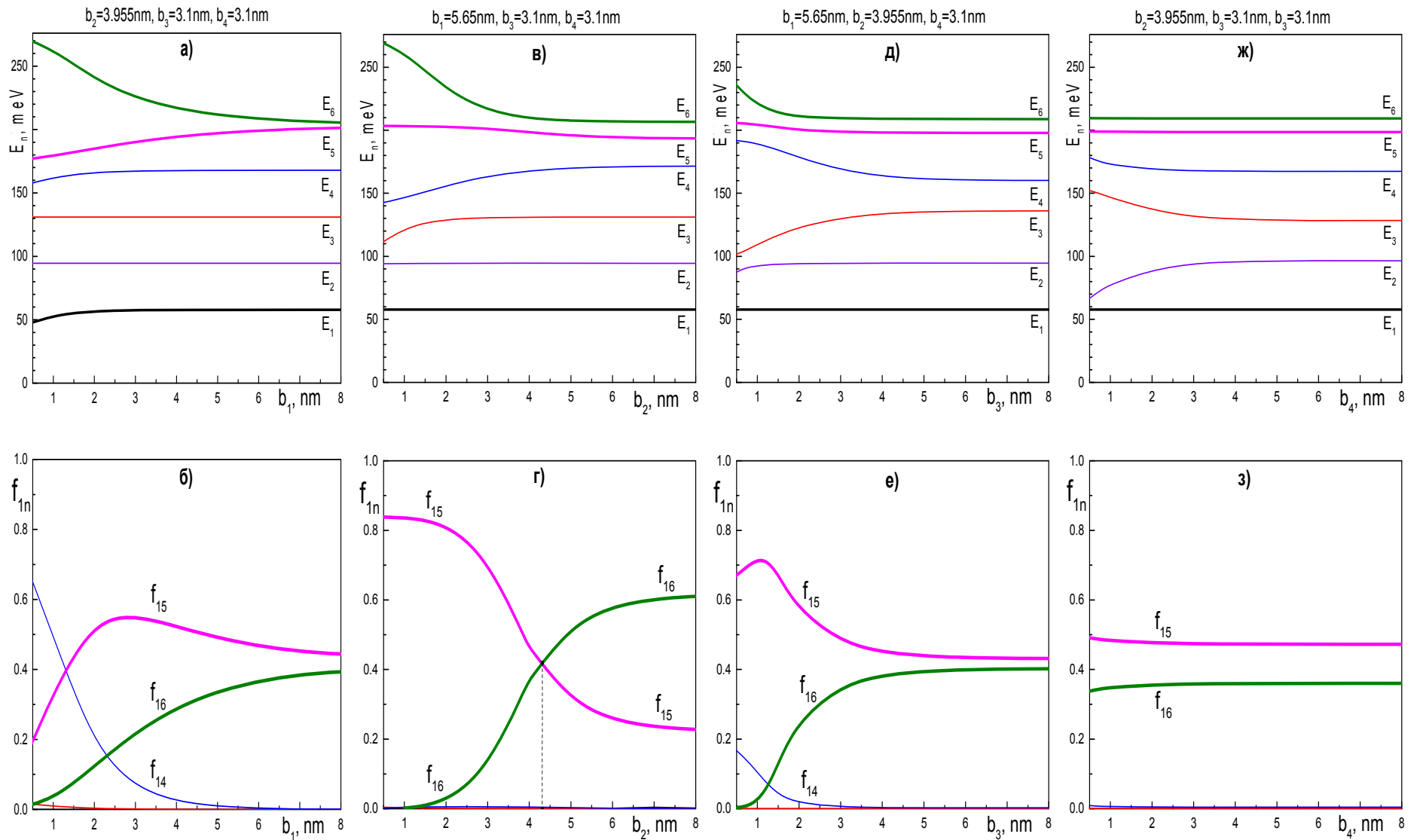


Рис. 2.14. Залежності енергетичного спектра E_n та сил осциляторів квантових переходів f_{1n} від товщин бар'єрів b_i ($i=1-4$) у каскаді ККД

Таблиця 2.6.

Енергії електронних станів E_n , різниці $E_{n n-1}$ між енергіями сусідніх станів і сили осциляторів f_{1n} квантових переходів з основного у збуджені стани електрона у каскаді ККД

n	E_n, meV	$E_{n n-1}, \text{meV}$	f_{1n}
1	57.8	—	—
2	94.5	36.7	$1.94 \cdot 10^{-7}$
3	131.0	36.5	$0.43 \cdot 10^{-4}$
4	167.8	36.8	$0.41 \cdot 10^{-2}$
5	198.6	30.8	0.42
6	209.4	10.8	0.41

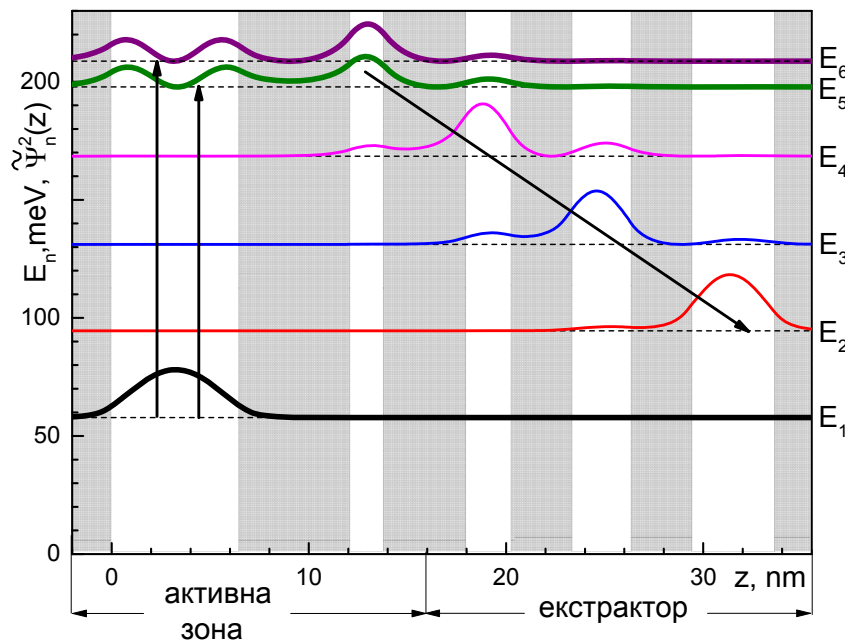


Рис. 2.15. Розподіли ймовірностей знаходження електрона в оптимізованому каскаді ККД

Отже, з рис. 2.16 та 2.17 видно, що для всіх станів Δ_n^L, Δ_n^I та γ_n^L, γ_n^I є сильно нелінійними функціями a_1 , величини яких можуть суттєво змінюватися. Установлено, що різкі перепади зміщень (Δ_n^L, Δ_n^I) і затухань (γ_n^L, γ_n^I) електронного стану (n) виникають в околі тих значень a_1 , де різниця між енергіями (E_n) цього стану та довільного іншого ($E_{n' \neq n}$) збігається з енергією

поздовжнього фонона середовища-ями або середовища-бар'єра. З рис. 2.16 і 2.17 також видно, що у досліджуваній структурі I-фонони на порядок сильніше переформовують спектральні характеристики електрона, ніж L-фонони.

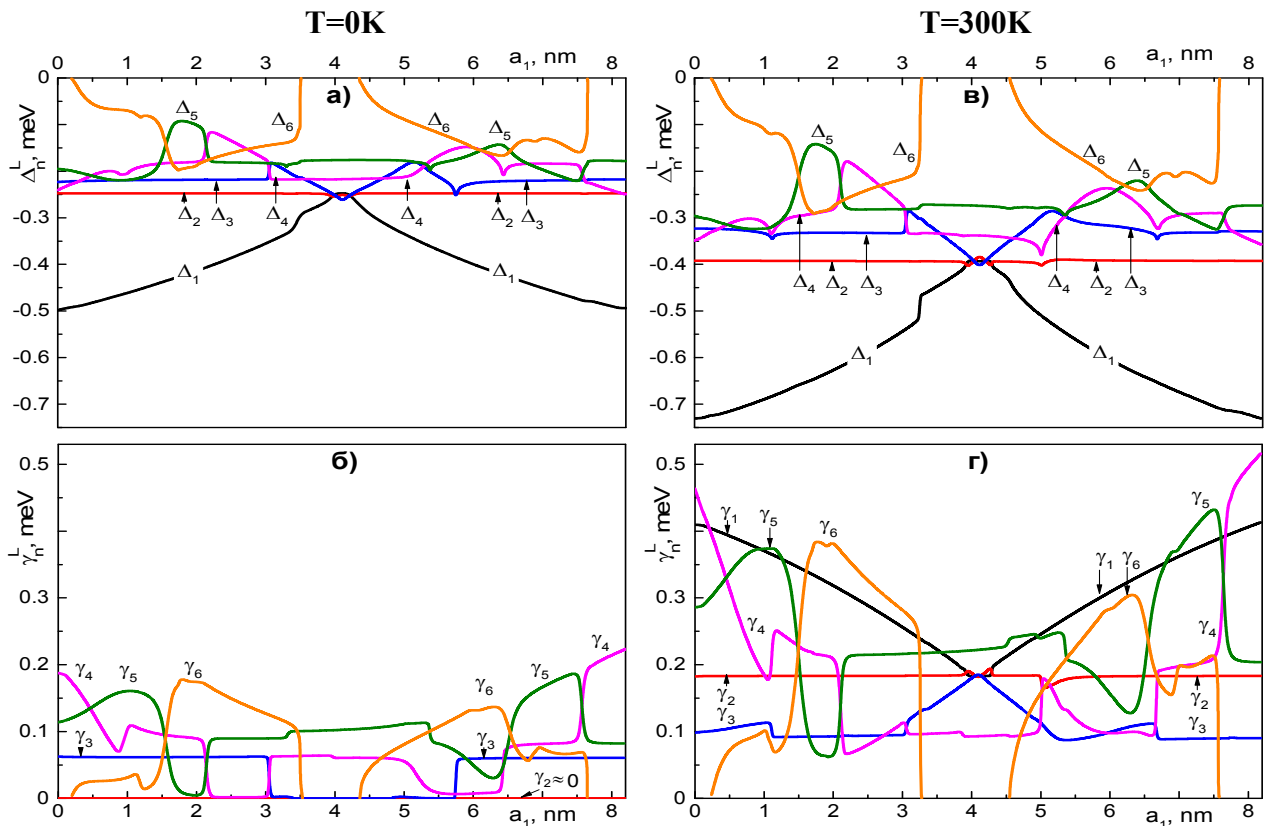


Рис. 2.16. Залежності від a_1 зміщень (Δ_n^L) і затухань (γ_n^L), зумовлених взаємодією з L-фононами

Взаємодія з обома типами фононів (L та I) при $T=0K$ приводить лише до зменшення енергій та до виникнення затухань усіх станів, крім основного, для якого при $T=0K$ $\gamma_1^L = \gamma_1^I = 0$. При скінченних температурах ($T \neq 0K$) усі стани характеризуються і зміщеннями, і затуханнями, абсолютні величини яких зростають зі збільшенням T .

Наведені у таблиці 2.7 величини енергій (E_n), парціальних ($\Delta_n^L, \Delta_n^I, \gamma_n^L, \gamma_n^I$) і повних ($\Delta_n = \Delta_n^L + \Delta_n^I, \gamma_n = \gamma_n^L + \gamma_n^I$) зміщень та затухань дозволяють оцінити внески електрон-фононої взаємодії та температурної зміни фізичних параметрів наносистеми у перенормування спектральних характеристик каскаду.

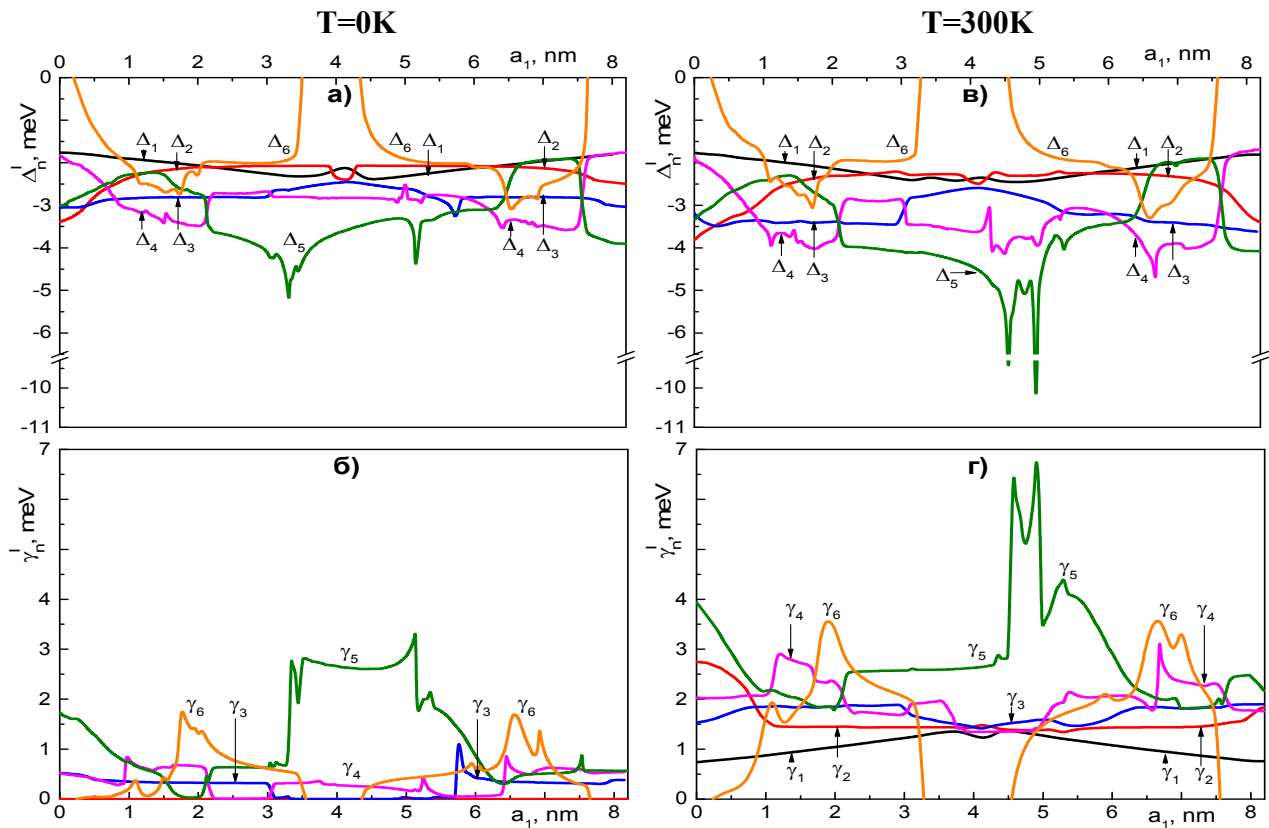


Рис. 2.17. Залежності від a_1 зміщень (Δ_n^I) та затухань (γ_n^I),

зумовлених взаємодією з І-фононами

Розрахунки показали, що при $T = 0\text{K}$ електрон-фононна взаємодія слабо зміщує піки поглинання каскаду, які сформовані переходами $1 \rightarrow 5$ та $1 \rightarrow 6$, в низькоенергетичну область ($\Delta_{15}^{T=0} = \Delta_5^{T=0} - \Delta_1^{T=0} = -0.21\text{ meV}$, $\Delta_{16}^{T=0} = \Delta_6^{T=0} - \Delta_1^{T=0} = -0.68\text{ meV}$) та розширює їх ($\gamma_{15}^{T=0} = \gamma_1^{T=0} + \gamma_5^{T=0} = 0.44\text{ meV}$, $\gamma_{16}^{T=0} = \gamma_1^{T=0} + \gamma_6^{T=0} = 1.63\text{ meV}$). При кімнатній температурі взаємодія з фононами також приводить до зміщення ($\Delta_{15}^{T=300} = -0.31\text{ meV}$, $\Delta_{16}^{T=300} = -0.6\text{ meV}$) в області менших енергій та розширення ($\gamma_{15}^{T=300} = 3.61\text{ meV}$, $\gamma_{16}^{T=300} = 4.76\text{ meV}$) обох піків. У результаті розглядуваний каскад буде характеризуватися такими енергіями поглинання:

$$E_{15}^{T=0} = 140.13\text{ meV}, \quad E_{16}^{T=0} = 151.38\text{ meV} \quad \text{та} \quad E_{15}^{T=300} = 133.43\text{ meV},$$

$$E_{16}^{T=300} = 145.06\text{ meV}.$$

Таблиця 2.7.

Енергії, парціальні та повні зміщення та затування електронних станів у каскаді з оптимізованим дизайном. Усі величини наведені в meV

n	T=0K							T=300K						
	E_n	Δ_n^L	γ_n^L	Δ_n^I	γ_n^I	Δ_n	γ_n	E_n	Δ_n^L	γ_n^L	Δ_n^I	γ_n^I	Δ_n	γ_n
1	57.79	-0.43	0	-2.04	0	-2.47	0	56.21	-0.64	0.34	-2.09	0.98	-2.73	1.32
2	94.51	-0.25	$2 \cdot 10^{-8}$	-2.09	$8 \cdot 10^{-8}$	-2.34	$1 \cdot 10^{-7}$	90.72	-0.39	0.18	-2.28	1.44	-2.67	1.62
3	131.01	-0.22	0.06	-2.81	0.35	-3.03	0.41	125.18	-0.33	0.11	-3.36	1.92	-3.69	2.03
4	167.80	-0.19	0.08	-3.33	0.66	-3.52	0.74	160.26	-0.29	0.09	-3.94	1.87	-4.23	1.96
5	198.60	-0.15	0.08	-2.53	0.36	-2.68	0.44	189.95	-0.23	0.19	-2.81	2.10	-3.04	2.29
6	209.38	-0.16	0.11	-2.99	1.52	-3.15	1.63	201.87	-0.24	0.27	-3.09	3.17	-3.33	3.44

Отже, виконаний аналіз показує, що зі зростанням температури від криогенної до кімнатної спостерігається червоне зміщення обох піків поглинання каскаду та їх розширення, що узгоджується з експериментальними результатами [49]. Основним фактором температурного перенормування спектрального положення смуги поглинання через слабкість електрон-фононої взаємодії є зміна ширин заборонених зон напівпровідникових середовищ і, як наслідок, висот потенціальних бар'єрів наносистеми.

Висновки до розділу 2

1. У моделі координатозалежних ефективних мас для електрона та діелектричного континууму для обмежених та інтерфейсних фононів розвинена квантова теорія електрон-фононої взаємодії у багат шаровій наногетероструктурі. Розрахунком електронних і фононних енергетичних спектрів і функцій електрон-фононного зв'язку з перших принципів визначено гамільтоніан системи у зображенні чисел заповнення за всіма змінними. Методом температурних функцій Гріна в однофононному наближенні розраховані масові оператори з урахуванням як внутривісневих, так і міжрівневих конфігураційних взаємодій з усіма електронними станами наноструктури.

2. На прикладі багат шарової наноструктури GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As як каскаду експериментального широкосмугового ККД далекого ІЧ-діапазону з двоямною активною зоною досліджено еволюцію спектральних характеристик

електрона, перенормованих взаємодією зі всіма гілками обмежених та інтерфейсних фононів.

3. Показано, що взаємодія з фононами у каскаді приводить до низькоенергетичних зміщень і затухань усіх станів електрона, величини яких зростають зі збільшенням температури. З'ясовано, що за довільних температур інтерфейсні фонони на порядок сильніше перенормовують спектральні характеристики електрона, ніж обмежені фонони. Установлено, що основний внесок у зміщення та затухання електронних станів зумовлений взаємодією з 16 високоенергетичними гілками інтерфейсних фононів і з гілкою обмежених фононів, енергія якої збігається з енергією поздовжнього фонона середовища GaAs. Аналіз різних механізмів конфігураційних електрон-фононних взаємодій показав, що при довільних температурах внески внутривісних взаємодій переважають міжвісних, з яких суттєві лише ті, які відбуваються між електронними станами з суттєвим перекриттям хвильових функцій.

4. Досліджено еволюцію електрон-фононної взаємодії від товщини потенціального бар'єра в двоямній активній зоні каскаду. Виявлено, що при таких товщинах бар'єра, при яких різниця між енергіями двох довільних станів електрона збігається з енергіями поздовжніх фононів середовищ-ям або середовищ-бар'єрів наноструктури, за умови суттєвого перекриття їх хвильових функцій відбувається різка зміна величин і зміщень, і затухань обох станів. Для високоенергетичних станів абсолютні величини екстремумів більші. Даний ефект може відігравати важливу роль при функціонуванні ККД з багатоямною активною зоною, перенормовуючи як робочі стани приладу тоді, коли різниці їх енергій близькі до енергій поздовжніх фононів, так і стани «фононної драбинки» екстракторів.

5. Установлено, що у каскаді з двоямною активною зоною ширина смуги поглинання суттєво залежить від розмірів потенціального бар'єра між ямами активної зони і зменшується зі збільшенням товщини бар'єра через зменшення відстані між енергіями тих електронних станів, переходи між якими формують смугу поглинання наноприладу.

6. З'ясовано, що відповідно до результатів експерименту [49, 50], збільшення температури приводить до низькоенергетичного зміщення смуги поглинання та розширення її піків. Через слабкість електрон-фононої взаємодії основним фактором температурного перенормування спектрального положення смуги поглинання є певні температурні зміни висот потенціальних бар'єрів каскаду.

7. На основі розвиненої у моделі координатозалежної ефективної маси та прямокутних потенціалів квантово-механічної теорії енергетичного спектра електрона та сил осциляторів міжпідзонних переходів у багат шаровій наносистем запропоновано оптимізований дизайн каскаду ККД далекого ІЧ-діапазону. Розміри потенціальних ям і бар'єрів екстрактора оптимізовані так, щоб енергетичні шаблі «фононої драбинки» резонували з енергією оптичного фонона середовищ-ям для забезпечення ефективного фонон-супровідного тунелювання електронів між активними зонами каскадів.

РОЗДІЛ 3

ВЛАСТИВОСТІ СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК БАГАТОКАСКАДНОЇ НАНОСТРУКТУРИ ЗАКРИТОГО ТИПУ ЯК ЕЛЕМЕНТА КВАНТОВОГО КАСКАДНОГО ДЕТЕКТОРА

Типові структурні елементи ККД складаються з кількох десятків (10-50) однакових каскадів, ідентичність яких забезпечується прецизійними технологіями молекулярно-променевої епітаксії або металоорганічної парофазової епітаксії, що робить створення і дослідження цих наноприладів не лише складним, але й дорогавартісним. Тому для цілеспрямованого вдосконалення характеристик ККД необхідна послідовна теорія фізичних процесів у їх структурних елементах. Така теорія, на жаль, розроблена не до кінця.

У переважній більшості теоретичних праць, вважаючи, що властивості електронних станів однакові в усіх каскадах наноприладу, часто розглядалася спрощена модель окремої області каскаду (активної зони, екстрактора, або інжектора) або одно- чи двокаскадної структури [39, 56, 74, 86, 181-185].

У таких моделях різними теоретичними методами вивчалися енергетичні спектри квазічастинок, інтенсивності фотон- і фонон-супровідних квантових переходів, вплив на них дисипативних підсистем (фонони, домішки, неоднорідності гетеромеж), електричного та магнітного полів тощо. Отримані в такому підході результати дозволяють зрозуміти основні властивості електронних станів у багат шарових наноструктурах окремих каскадів чи їх складових, проте, згідно з принципами квантової механіки, вони не підлягають узагальненню на випадок складної структури багатьох взаємодіючих каскадів, якими є елементи реальних ККД.

У цьому розділі розвинено теорію та досліджено спектральні характеристики багатокаскадної наноструктури як основного структурного елемента експериментального ККД [6] у закритій моделі системи з безмежно широкими потенціальними бар'єрами зовнішнього середовища та у надгратці з

потенціалом типу Кроніга-Пенні як граничного випадку нескінченної періодичної структури. Основні результати розділу висвітлені у [186, 187].

3.1 Теорія електронних станів у багатокаскадній наноструктурі закритого типу

Розглядається N -каскадна наноструктура (рис.3.1), розташована у зовнішньому масивному напівпровідниковому середовищі-бар'єрі. Вважаючи, що величини постійних ґраток напівпровідникових матеріалів ям і бар'єрів розглядуваної структури відрізняються слабо, теорію електронних станів будемо розвивати у моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів. У декартовій системі координат з віссю oz , перпендикулярною до наношарів структури, ефективна маса та потенціальна енергія електрона є координато-залежними функціями і можуть бути записані у такому вигляді:

$$m(E, z) = \sum_{i=1}^N \left\{ m_w(E) \sum_{j=1}^{(P-1)/2} [\theta(z - z_{i,2j-1}) - \theta(z - z_{i,2j})] + m_b(E) \sum_{j=0}^{(P-1)/2} [\theta(z - z_{i,2j}) - \theta(z - z_{i,2j+1})] \right\}, \quad (3.1)$$

$$U(z) = U \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{(P-1)/2} [\theta(z - z_{i,2j}) - \theta(z - z_{i,2j+1})] \quad (3.2)$$

де, згідно з [177], ефективні маси у непараболічній моделі Бастарда [88, 188] мають такий аналітичний вигляд:

$$m_w(E) = m_w \left(1 + \frac{E}{E_{gw}} \right), \quad m_b(E) = m_b \left(1 - \frac{(U_0 - E)}{E_{gb}} \right) \quad (3.3)$$

Тут $z_{i,j} = z_{1,j} + (i-1)d$ – координати j -тої гетеромежі в i -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 – 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, $\theta(z)$ – функція Хевісайда.

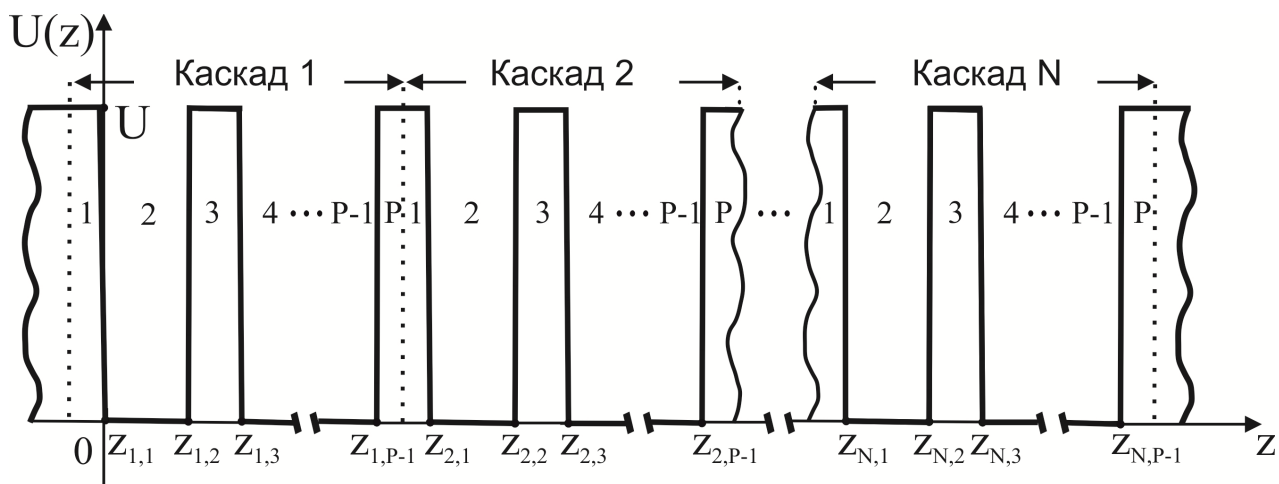


Рис. 3.1. Потенціальний рельєф закритої багатокаскадної наноструктури

Для електрона у досліджуваній багатокаскадній структурі справедливе стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(E, z)} \frac{d}{dz} + U(z) \right] \Psi(z) = E\Psi(z), \quad (3.4)$$

розв'язок якого, враховуючи кусково-неперервну залежність ефективної маси та потенціальної енергії від координати z , доцільно шукати також у вигляді кусково-неперервної функції

$$\Psi(z) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^P \Psi_{i,j}(z) [\theta(z - z_{i,j-1}) - \theta(z - z_{i,j})]. \quad (3.5)$$

Тоді рівняння (3.4) розпадається на систему $(N \cdot P)$ диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{m_w(E)} \frac{d^2}{dz^2} \right] \Psi_{i,j}(z) = E\Psi_{i,j}(z), & j = 2, 4, 6, \dots, P-1 \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{m_b(E)} \frac{d^2}{dz^2} + U \right] \Psi_{i,j}(z) = E\Psi_{i,j}(z), & j = 1, 3, 5, \dots, P \end{cases} \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.6)$$

розв'язки яких знаходяться точно

$$\Psi_{i,j}(z) = \begin{cases} A_{i,j} e^{\chi z} + B_{i,j} e^{-\chi z}, & j = 1, 3, 5, \dots, P \\ A_{i,j} \cos(kz) + B_{i,j} \sin(kz), & j = 2, 4, 6, \dots, P-1 \end{cases} \quad i = 1, \dots, N \quad (3.7)$$

де

$$k = \sqrt{\frac{2m_w(E)E}{\hbar^2}}; \quad \chi = \sqrt{\frac{2m_b(E)(U-E)}{\hbar^2}}. \quad (3.8)$$

Згідно з квантовою механікою [66], для хвильової функції електрона у закритій наноструктурі справедлива умова нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(E_n, z)|^2 dz = 1, \quad (3.9)$$

а вимоги неперервності функцій та потоків їх густин імовірностей приводять до системи граничних умов, записаних на межах між ямами і бар'єрами у кожному з каскадів

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_{i,j}(z_{i,j}) = \Psi_{i,j+1}(z_{i,j}), \\ \frac{1}{m(E, z-0)} \frac{d\Psi_{i,j}(z)}{dz} \Big|_{z=z_{i,j}} = \frac{1}{m(E, z+0)} \frac{d\Psi_{i,j+1}(z)}{dz} \Big|_{z=z_{i,j}} \end{array} \right. \quad i=1, \dots, N, j=1, \dots, P-1 \quad (3.10)$$

і на межах між каскадами досліджуваної наногетероструктури

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_{i,P}(z_{i,P}) = \Psi_{i+1,1}(z_{i,P}), \\ \frac{d\Psi_{i,P}(z)}{dz} \Big|_{z=z_{i,P}} = \frac{d\Psi_{i+1,1}(z)}{dz} \Big|_{z=z_{i,P}} \end{array} \right. \quad i=1, \dots, N-1 \quad (3.11)$$

Вимога скінченності хвильових функцій у напівбезмежних зовнішніх середовищах $\Psi(z \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ дозволяє визначити два коефіцієнти $B_{1,1} = A_{N,P} = 0$.

Для знаходження решти коефіцієнтів $A_{i,j}$ та $B_{i,j}$ з граничних умов (3.10) і (3.11), отримується система $2(P \cdot N - 1)$ лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\begin{pmatrix}
1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{\chi}{m_b(E)} & 0 & -\frac{k}{m_w(E)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \cos(kz_{1,2}) & \sin(kz_{1,2}) & -e^{\chi z_{1,2}} & -e^{-\chi z_{1,2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -\frac{k}{m_w(E)} \sin(kz_{1,2}) & \frac{k}{m_w(E)} \cos(kz_{1,2}) & -\frac{\chi}{m_b(E)} e^{\chi z_{1,2}} & \frac{\chi}{m_b(E)} e^{-\chi z_{1,2}} & \dots & e^{\chi z_{1,p}} & e^{-\chi z_{1,p}} & -e^{\chi z_{1,p}} & -e^{-\chi z_{1,p}} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\chi z_{1,p}} & -e^{-\chi z_{1,p}} & -e^{\chi z_{1,p}} & e^{-\chi z_{1,p}} & e^{-\chi z_{1,p}} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & e^{\chi z_{2,1}} & e^{-\chi z_{2,1}} & -\cos(kz_{2,1}) & -\sin(kz_{2,1}) \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\chi}{m_b(E)} e^{\chi z_{2,1}} & -\frac{\chi}{m_b(E)} e^{-\chi z_{2,1}} & \frac{k}{m_w(E)} \sin(kz_{2,1}) & -\frac{k}{m_w(E)} \cos(kz_{2,1}) \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix} \quad (3.12)$$

$$\begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 \\
\cos(kz_{N,P-1}) & \sin(kz_{N,P-1}) & e^{-\chi z_{N,P-1}} \\
-\frac{k}{m_w(E)} \sin(kz_{N,P-1}) & \frac{k}{m_w(E)} \cos(kz_{N,P-1}) & -\frac{\chi}{m_b(E)} e^{-\chi z_{N,P-1}}
\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}
A_{1,1} \\
A_{1,2} \\
B_{1,2} \\
A_{1,3} \\
B_{1,3} \\
\vdots \\
A_{1,p} \\
B_{1,p} \\
A_{2,1} \\
B_{2,1} \\
\vdots \\
A_{N,p-1} \\
B_{N,p-1} \\
B_{N,p}
\end{pmatrix} = 0.$$

Нетривіальність розв'язку системи (3.12) вимагає дорівнюваності нулю її визначника, що призводить до дисперсійного рівняння, з якого числовим розрахунком визначаються енергії E_n ($n=1, 2, \dots$) електронних станів. Також з системи (3.12) сумісно з умовою нормування (3.9) однозначно отримуються всі коефіцієнти $A_{i,j}$ та $B_{i,j}$ хвильових функцій (3.7).

Тепер відомі хвильові функції дозволяють розрахувати сили осцилятора квантових переходів між електронними станами

$$f_{nn'} = \frac{2(E_{n'} - E_n)}{\hbar^2} \left| \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^P \int_{z_{i,j-1}}^{z_{i,j}} \sqrt{m(E_n, z)} \Psi_{i,j}^*(E_{n'}, z) z \Psi_{i,j}(E_n, z) dz \right|^2, \quad (3.13)$$

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

3.2 Теорія електронних станів у багатокаскадній наноструктурі у моделі Кроніга-Пенні

Розглядається багатокаскадний структурний елемент ККД (рис.3.2), що складається з такої значної кількості каскадів, яку у граничному випадку можна вважати безмежною. Тоді теорію електронних станів у нескінченній періодичній структурі з періодом, що дорівнює розміру окремого каскаду, доцільно розвивати на основі моделі Кроніга-Пенні [66, 67], модифікованої з урахуванням багатоямного потенціального профілю каскадів досліджуваної системи. Вважаючи різницю величин постійних ґраток шарів-ям і бар'єрів незначною, задачу про електронні стани будемо розв'язувати у наближеннях ефективних мас і прямокутних потенціалів.

Отже, у декартовій системі координат з віссю oz , перпендикулярною до площин поділу між шарами безмежної періодичної наноструктури, ефективна маса $m(z)$ та потенціальна енергія $U(z)$ електрона є періодичними функціями координати z з періодом, що дорівнює довжині (d) окремого каскаду

$$m(z + d) = m(z); \quad U(z + d) = U(z). \quad (3.14)$$

А у межах окремого каскаду (i) $m(z)$ та $U(z)$ є координато-залежними функціями

$$m(z_{i,0} < z < z_{i,P}) = \begin{cases} m_b(E), \\ m_w(E), \end{cases} U(z_{i,0} < z < z_{i,P}) = \begin{cases} U, \\ 0, \end{cases} z_{i,j-1} < z < z_{i,j}, j = \begin{cases} 2,4,6,\dots,P \\ 1,3,5,\dots,P-1 \end{cases} \quad (3.15)$$

де

$$m_w(E) = m_w \left(1 + \frac{E}{E_{gw}}\right), m_b(E) = m_b \left(1 - \frac{U-E}{E_{gb}}\right).$$

Тут i - номер каскаду, j - номер шару в i -му каскаді, P - ціле парне число, яке відповідає кількості шарів ($P/2$ ям та $P/2$ бар'єрів) в окремому каскаді, $z_{i,j} = z_{1,j} + (i-1)d$ - координати гетеромеж в i -му каскаді, d - довжина окремого каскаду, U - 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.

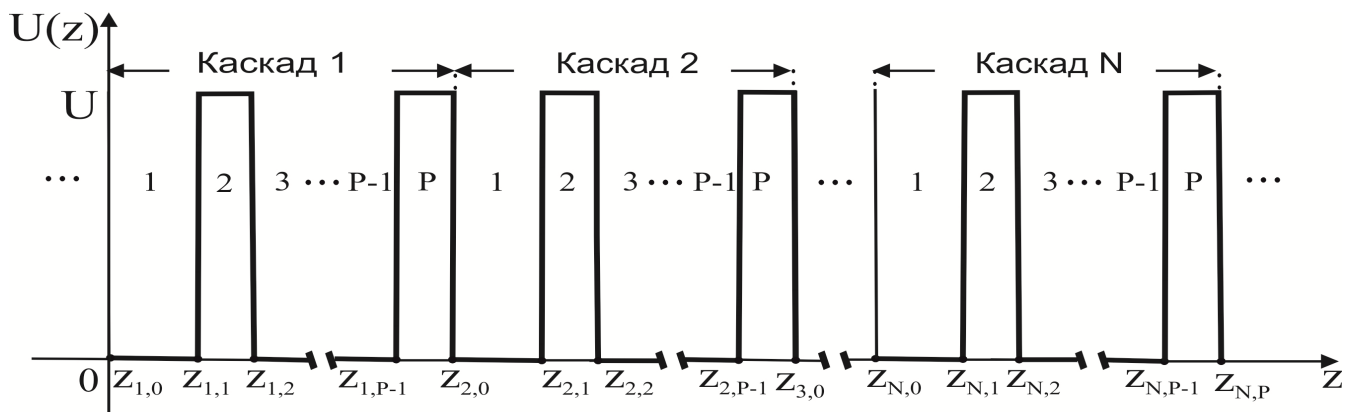


Рис. 3.2. Потенціальний рельєф N -каскадного елемента у безмежній періодичній структурі

Згідно з квантовою механікою, для електрона, який рухається у нескінченному періодичному полі $U(z)$, справедливе рівняння Шредінгера

$$H\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (3.16)$$

з гамільтоніаном

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + U(z). \quad (3.17)$$

З урахуванням умови Борна-Кармана з періодом $L=Nd$ (N – ціле число, яке відповідає кількості каскадів), хвильова функція періодична

$$\Psi(z + L) = \Psi(z) \quad (3.18)$$

і згідно з теоремою Блоха шукається у вигляді

$$\Psi(z + d) = e^{iKd}\Psi(z), \quad K = \frac{2\pi}{L}g, \quad g=0,1,\dots,N-1. \quad (3.19)$$

Розглянемо довільний i -тий каскад структури. Точні розв'язки рівняння Шредінгера (3.16) для електрона у середовищах ($j=1,\dots,P$) каскаду відомі і мають вигляд

$$\Psi_{i,j}(z_{i,j-1} < z < z_{i,j}) = \begin{cases} A_{i,j}e^{\chi(z-z_{i,j-1})} + B_{i,j}e^{-\chi(z-z_{i,j-1})}, & j = \begin{cases} 2,4,6,\dots,P \\ 1,3,5,\dots,P-1 \end{cases} \end{cases} \quad (3.20)$$

де

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

На всіх межах між ямами і бар'єрами розглядуваного довільного i -го каскаду для хвильових функцій і густин потоків їх імовірностей справедливі відомі з квантової механіки умови неперервності:

$$\begin{cases} \Psi_{i,j}(z_{i,j}) = \Psi_{i,j+1}(z_{i,j}), \\ \frac{1}{m(z-0)} \frac{d\Psi_{i,j}(z)}{dz} \Big|_{z=z_{i,j}} = \frac{1}{m(z+0)} \frac{d\Psi_{i,j+1}(z)}{dz} \Big|_{z=z_{i,j}} \end{cases}, \quad j = 1,\dots,P-1. \quad (3.21)$$

На межі $(z_{i,P})$ між сусідніми i -м і $(i+1)$ -м каскадами граничні умови, з урахуванням теореми Блоха (3.19), набувають вигляду

$$\begin{cases} \Psi_{i,P}(z_{i,P}) = \Psi_{i,1}(z_{i,0})e^{iKd}, \\ \frac{1}{m_b(E)} \frac{d\Psi_{i,P}(z)}{dz} \Big|_{z=z_{i,P}} = \frac{1}{m_w(E)} \frac{d\Psi_{i,1}(z)}{dz} \Big|_{z=z_{i,0}} e^{iKd}, \end{cases} \quad (3.22)$$

де $z_{i,P} = z_{i,0} + d$.

З (3.21) та (3.22) отримується система $2P$ лінійних алгебраїчних рівнянь відносно коефіцієнтів $A_{i,j}$ та $B_{i,j}$ ($j=1, \dots, P$) хвильових функцій $\Psi_{i,j}$ в i -му каскаді. З вищої математики відомо, що така система буде мати нетривіальний розв'язок лише за умови дорівнюваності нулю її визначника

$$\begin{vmatrix} \cos(ka_1) & \sin(ka_1) & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{k}{m_w(E)} \sin(ka_1) & \frac{k}{m_w(E)} \cos(ka_1) & -\frac{\chi}{m_b(E)} & \frac{\chi}{m_b(E)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\chi b} & e^{-\chi b} & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\chi}{m_b(E)} e^{\chi b} & -\frac{\chi}{m_b(E)} e^{-\chi b} & 0 & -\frac{k}{m_w(E)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cos(ka_{P/2}) & \sin(ka_{P/2}) & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{k}{m_w(E)} \sin(ka_{P/2}) & \frac{k}{m_w(E)} \cos(ka_{P/2}) & -\frac{\chi}{m_b(E)} & \frac{\chi}{m_b(E)} \\ -e^{iKd} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & e^{\chi b_{P/2}} & e^{-\chi b_{P/2}} \\ 0 & -\frac{k}{m_w(E)} e^{iKd} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\chi}{m_b(E)} e^{\chi b_{P/2}} & -\frac{\chi}{m_b(E)} e^{-\chi b_{P/2}} \end{vmatrix} = 0 \quad (3.23)$$

Тут a_j, b_j – ширини потенціальних ям і бар'єрів у каскаді.

З (3.23) отримується дисперсійне рівняння для розрахунку електронних енергій у періодичній багатокаскадній наногетероструктурі з потенціалом типу Кроніга-Пенні.

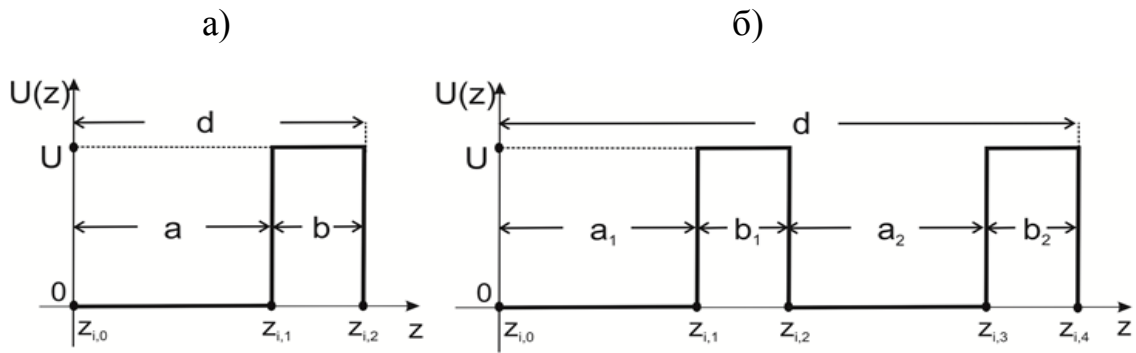


Рис. 3.3. Потенціальні рельєфи одноямного (а) та двоямного (б) елементів у структурі Кроніга-Пенні

Зокрема, у випадку найпростішого одноямного каскаду (рис. 3.3 а) дисперсійне рівняння набуває відомого з квантової механіки [66, 67] вигляду

$$\cos(Kd) = ch(\chi b) \cos(ka) + \frac{1}{2} \left(\frac{m_w(E)\chi}{m_b(E)k} - \frac{m_b(E)k}{m_w(E)\chi} \right) sh(\chi b) \sin(ka) \quad (3.24)$$

де $d = a + b$ – лінійний розмір каскаду.

Для надгратки з двоємним каскадом (рис. 3.3 б) дисперсійне рівняння має вигляд:

$$\begin{aligned} \cos(Kd) = \frac{1}{2} & \left\{ \left(\frac{\chi m_w(E)}{k m_b(E)} - \frac{k m_b(E)}{\chi m_w(E)} \right) \sin(k(a_1 + a_2)) + [ch(\chi b_2)sh(\chi b_1) + sh(\chi b_2)ch(\chi b_1)] + \right. \\ & + \left[2 \cos(ka_1) \cos(ka_2) + \left(\frac{k^2 m_b^2(E)}{\chi^2 m_w^2(E)} + \frac{\chi^2 m_w^2(E)}{k^2 m_b^2(E)} \right) \sin(ka_1) \sin(ka_2) \right] sh(\chi b_1)sh(\chi b_2) + \\ & \left. + \cos(k(a_1 + a_2))ch(\chi b_2)ch(\chi b_1) \right\} \quad (3.25) \end{aligned}$$

тут $d = a_1 + a_2 + b_1 + b_2$.

Усі коефіцієнти $A_{i,j}$ та $B_{i,j}$ ($j=1, \dots, P$) хвильові функції в i -му каскаді однозначно визначаються з системи рівнянь (3.21) та (3.22) з урахуванням умови нормування

$$\int_0^L |\Psi_n(z)|^2 dz = 1 \quad (3.26)$$

Тоді за вже відомою функцією електрона в i -му каскаді, згідно з теоремою Блоха (3.19), знаходяться функції в усіх інших каскадах, що визначає хвильову функцію електрона в усьому просторі ($-\infty < z < +\infty$) надгратки.

3.3 Еволюція властивостей електронних станів у багатокаскадній наноструктурі у закритій моделі та моделі Кроніга-Пенні

На основі розвиненої у попередніх параграфах теорії дослідимо загальні властивості станів електрона у багатокаскадній наноструктурі у закритій моделі (С-модель) та у моделі Кроніга-Пенні (КР-модель). За основу досліджуваних моделей оберемо триямний каскад з GaAs-ямами та $Al_{0.33}Ga_{0.67}As$ -бар'єрами з відомими фізичними параметрами: $m_w = 0.067 m_e$, $m_b = 0.095 m_e$, $U = 276 \text{ meV}$. Геометричні розміри потенціальних ям ($a_1=6.8 \text{ nm}$, $a_2=2.4 \text{ nm}$, $a_3=3.7 \text{ nm}$) та бар'єрів ($b_1=b_2=b_3=3 \text{ nm}$) окремого каскаду виберемо такими, щоб енергетичні рівні електронних станів задовільно моделювали типову енергетичну схему каскадів експериментальних ККД [6] з двома робочими рівнями в активній зоні,

переходи між якими відбуваються з поглинанням електромагнітної хвилі, та рівнями «фононної драбинки» в екстракторі.

Для аналізу еволюції електронних станів в обох моделях спочатку розраховувалися енергії (табл. 3.1) та хвильові функції (рис. 3.4) у найпростішій системі з одним каскадом ($N=1$). З табл. 3.1 видно, що в окремому триямному каскаді виникають чотири стани електрона, величини енергій яких у С (E_n^C) та КР (E_n^{KP}) моделях відрізняються не більше ніж на 1% для $n=1,2,3$ та 3% для $n=4$.

Таблиця 3.1.

Енергії електронних станів у С- і КР-моделях при $N=1$

n	1	2	3	4
E_n^C , meV	53.2	106.2	159.8	212.0
E_n^{KP} , meV	52.8	107.1	157.8	218.9

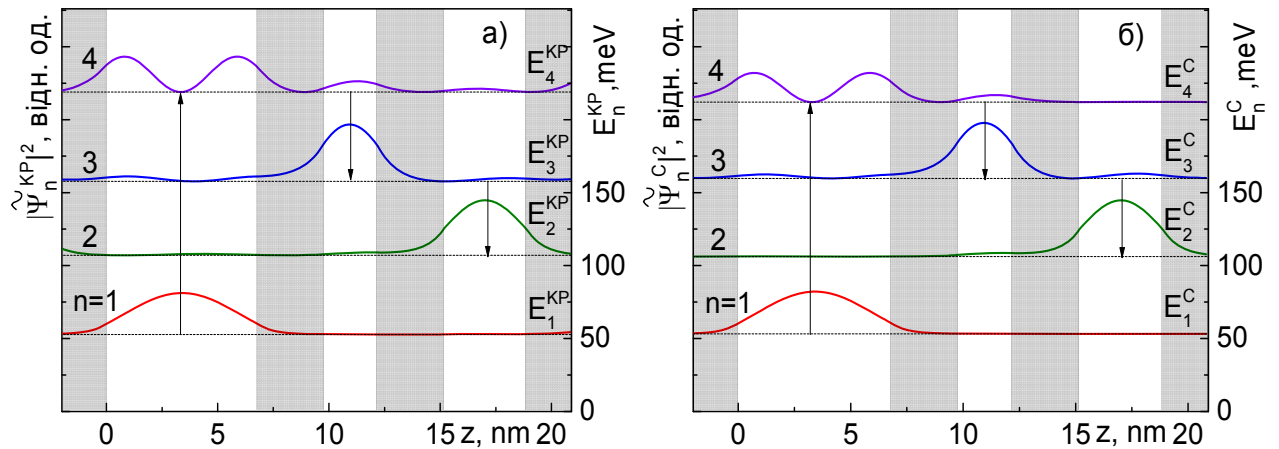


Рис. 3.4. Розподіли густин імовірностей ($|\tilde{\Psi}_n^{KP}|^2$, $|\tilde{\Psi}_n^C|^2$) та енергії (E_n^{KP} , E_n^C) електронних станів $n=1, 2, 3, 4$ триямного каскаду у КР- (а) та С- (б) моделях

Із зображених на рис.3.4 розподілів густин імовірностей ($|\tilde{\Psi}_n^{KP}|^2$, $|\tilde{\Psi}_n^C|^2$) знаходження електрона в каскаді видно, що в обох моделях електрон в основному ($n=1$) та найвищому збудженому ($n=4$) станах локалізований у першій (активній) потенціальній ямі. Енергія переходу $E_{41}^{KP} = 166.1$ meV та $E_{41}^C = 158.8$ meV між цими станами відповідає далекому ІЧ-діапазону.

У збуджених станах $n=2$ та $n=3$ електрон локалізований у третій та другій потенціальних ямах відповідно. Ці стани моделюють «фононну драбинку», яка забезпечує фонон-супровідне тунелювання електронів крізь екстрактор каскаду. Зауважимо, що в масштабі рис. 3.4 кількісної різниці між $|\tilde{\Psi}_n^{KP}|^2$ та $|\tilde{\Psi}_n^C|^2$ практично непомітно.

Тепер проаналізуємо наведену на рис.3.5 еволюцію енергетичного спектра електрона залежно від кількості (N) каскадів у КР- (рис.3.5а) та С- (рис.3.5б) моделях. З рис.3.5 видно, що в обох моделях збільшення кількості каскадів (N) приводить до розщеплення енергій (E_n^{KP} , E_n^C , $n=1, 2, 3, 4$) у відповідній однокаскадній структурі та поступового утворення квазидискретних зон. Тому для зручності подальшого аналізу введемо подвійну нумерацію енергій E_{ns}^{KP} , E_{ns}^C , де індекс n указує номер зони, а індекс s – номер енергетичного рівня у відповідній n -ій зоні. При $N=1$ кожна зона вироджуються в окремий енергетичний рівень однокаскадної структури $E_{n,s=1}^{KP} \equiv E_n^{KP}$, $E_{n,s=1}^C \equiv E_n^C$, $n=1, 2, 3, 4$.

З рис.3.5 також видно, що при фіксованому $N>2$ кількість рівнів (p_n^{KP} , p_n^C) в n -ій зоні С- і КР- моделях виявляється різною ($p_n^{KP} \neq p_n^C$), а у межах однієї моделі (С чи КР) в усіх енергетичних зонах N -каскадної структури однаковою ($p_1^{KP} = p_2^{KP} = p_3^{KP} = p_4^{KP}$, $p_1^C = p_2^C = p_3^C = p_4^C$). У структурі С-типу величини p_n^C дорівнюють кількості каскадів ($p_n^C = N$). А кількість рівнів (p_n^{KP}) у зонах КР-структури залежить від парності N так, що $p_n^{KP} = (N+1)/2$ для непарних N і $p_n^{KP} = N/2$ для парних N .

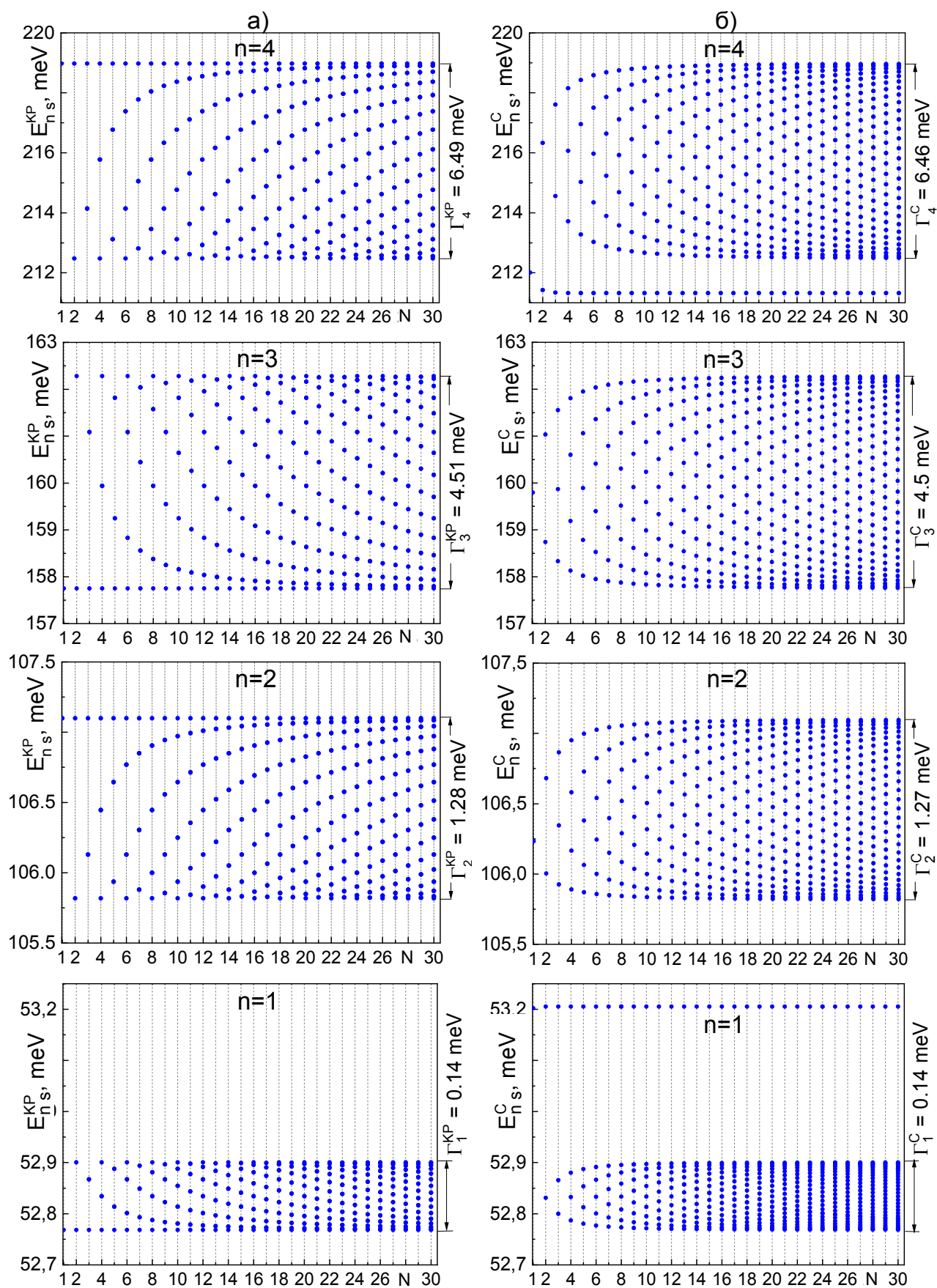


Рис. 3.5. Еволюція енергетичного спектра (E_{ns}^{KP} , E_{ns}^C) електрона залежно від кількості каскадів (N) у KP- (а) та С- (б) моделях багатокаскадної структури

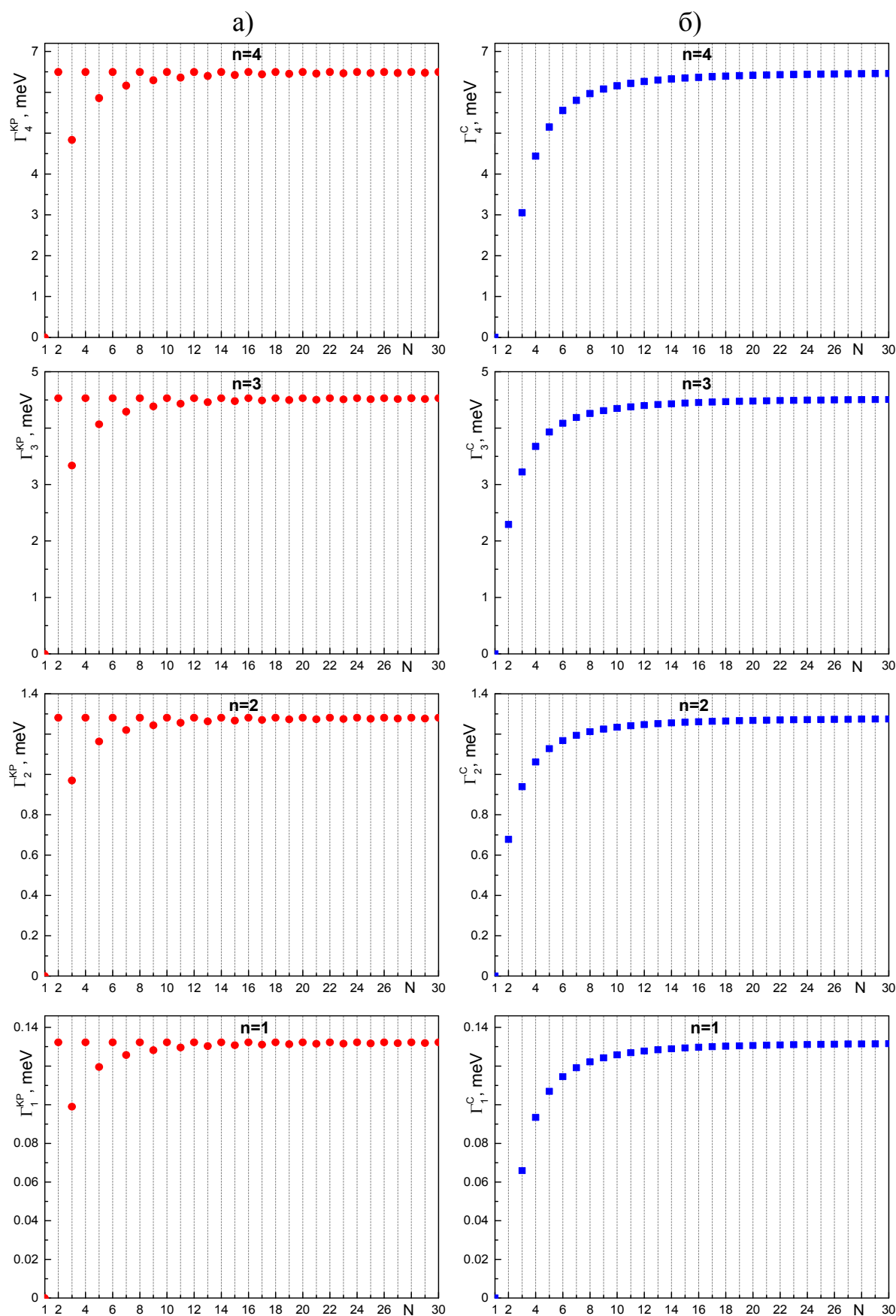


Рис. 3.6. Еволюція ширин зон (Γ_n^{KP} , Γ_n^C) залежно від кількості каскадів (N) у КР- (а) та С- (б) моделях багатокаскадної структури

Як видно з рис.3.5, між спектрами С- і КР-моделей існує ще одна відмінність, крім виявлених, яка полягає у виникненні відокремлених рівнів енергій $E_{n=1,s=N}^C$ та $E_{n=4,s=1}^C$ у високоенергетичному околі першої ($n=1$) та низькоенергетичному околі четвертої ($n=4$) зон С-структури та відсутність таких рівнів у спектрі КР-структури.

Аналіз наведених на рис. 3.6 залежностей ширин зон (Γ_n^{KP} , Γ_n^C) показав, що в обох моделях (С і КР) у наноструктурі з фіксованою кількістю каскадів (N) величини Γ_n^{KP} та Γ_n^C залежать від номера зони (n) і зі збільшенням n зростають. При фіксованому n ширини Γ_n^{KP} та Γ_n^C мають різні залежності від N . Зокрема, у С-структурі зі збільшенням N в інтервалі $1 < N < 10$ ширини Γ_n^C всіх зон швидко зростають і при $N > 10$ виходять на насичення. У КР-моделі ширини зон (Γ_n^{KP}) залежать від парності N так, що в усіх структурах з парною ($N=2, 4, 6, \dots$) кількістю каскадів ширина довільної n -ої зони не змінюється зі збільшенням N і дорівнює ширині відповідної зони у двокаскадній ($N=2$) структурі. При непарному ($N=1, 3, 5, \dots$) числі каскадів ширини зон менші за відповідні величини Γ_n^{KP} при парному ($N-1$) ($\Gamma_n^{KP(odd)} < \Gamma_n^{KP(even)}$). Зі збільшенням N усі $\Gamma_n^{KP(odd)}$ зростають, асимптотично наближаючись до $\Gamma_n^{KP(even)}$. При $N=11$ різниця між величинами $\Gamma_n^{KP(odd)}$ та $\Gamma_n^{KP(even)}$ не перевищує 3%.

Із наведених на рис. 3.5 величин Γ_n^{KP} та Γ_n^C при $N=30$ видно, що різниця між ширинами зон в обох моделях не перевищує 1% при типовій для експериментальних ККД кількості каскадів. Отже, виконаний аналіз показує, що оцінка спектральних характеристик (положення енергетичних зон та їх ширин) багатокаскадної ($N > 10$) структури скінченних розмірів може бути здійснена із задовільною точністю у моделі Кроніга-Пенні з двокаскадним елементом ($N=2$), що значно спрощує аналітичні та числові розрахунки.

На рис.3.7 і 3.8. зображені еволюції розподілів густин імовірностей

($|\tilde{\Psi}_{ns}^{KP}(z)|^2, |\tilde{\Psi}_{ns}^C(z)|^2$), нормовані на величини енергії відповідних станів електрона у 2-, 3-, 4- (рис. 3.7) і 5-каскадних (рис. 3.8).

Як видно з рис.3.7 і 3.8, у надгратці з потенціалом Кроніга-Пенні густини ймовірностей ($|\Psi_{ns}^{KP}(z)|^2$) є періодичними функціями з періодом, що дорівнює розміру (d) окремого каскаду, через що електрон у стані $|n, s\rangle$ з однаковими ймовірностями $W_{ns}^{KP}(i) = \int_{z_{i,0}}^{z_{i,6}} |\Psi_{ns}^{KP}(z)|^2 dz = 1/N$ може знаходитися у різних каскадах ($i=1, \dots, N$) структури.

А у структурі закритого типу густини ймовірностей $|\Psi_{ns}^C|^2$ всіх станів $|n, s\rangle$ мають аперіодичний розподіл у каскадах i , як наслідок, величини ймовірностей ($W_{ns}^C(i) = \int_{z_{i,0}}^{z_{i,6}} |\Psi_{ns}^C(z)|^2 dz$) знаходження електрона у різних каскадах структури виявляються різними. Цей ефект стає більш помітним зі збільшенням кількості каскадів (рис.3.8 а) і призводить до формального поділу каскадів на дві групи: каскади зі значною ймовірністю локалізації електрона у стані $|n, s\rangle$ та каскади, в яких ймовірність перебування електрона у цьому стані нехтовно мала. Цікаво, що, як показали розрахунки, при $N>5$ кількість каскадів з малими ймовірностями локалізації зростає зі збільшенням N . Отже, у багатокаскадних структурних елементах ККД закритого типу властивості електронних станів у різних каскадах можуть суттєво відрізнятися, через що розбалансована взаємодія між каскадами може негативно впливати на ефективність функціонування наноприладу.

Аналіз рис.3.7 і 3.8 також виявив, що у N -каскадній С-структурі, на відміну від КР, завжди існують два стани ($|n=1, s=N\rangle$ та $|n=4, s=1\rangle$), в яких електрон локалізований лише у першому ($i=1$) каскаді і практично не проникає в усі інші каскади структури. З фізичних міркувань очевидно, що виникнення цих станів зумовлено скінченністю розмірів багатокаскадної структури закритого типу. Тому можна очікувати, що стани такої природи можуть проявлятися у реальних наногетероструктурах.

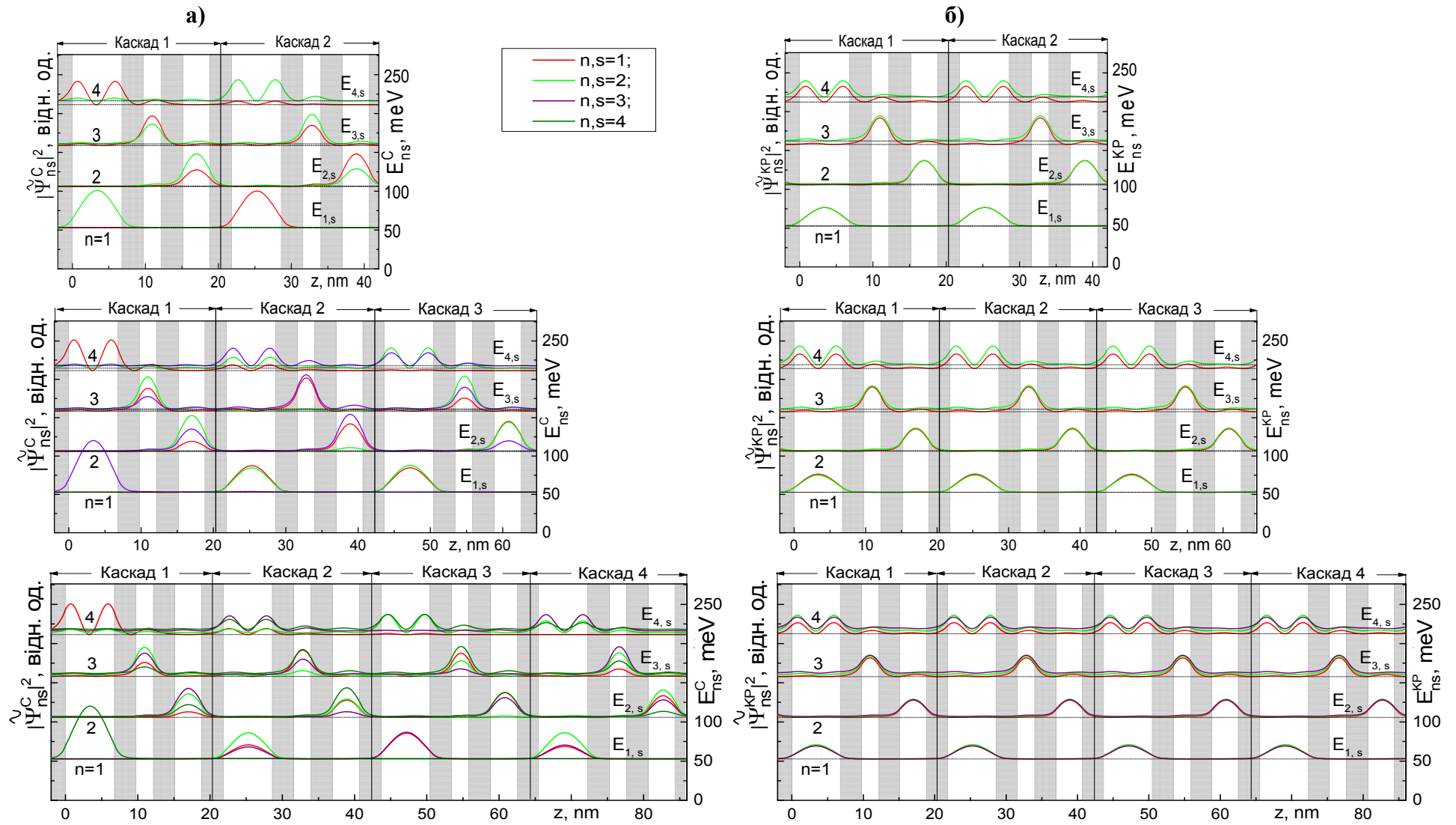


Рис. 3.7. Розподіли густин імовірностей у дво-, три- та чотирікаскадних наноструктурах у а) С- і б) КР-моделях

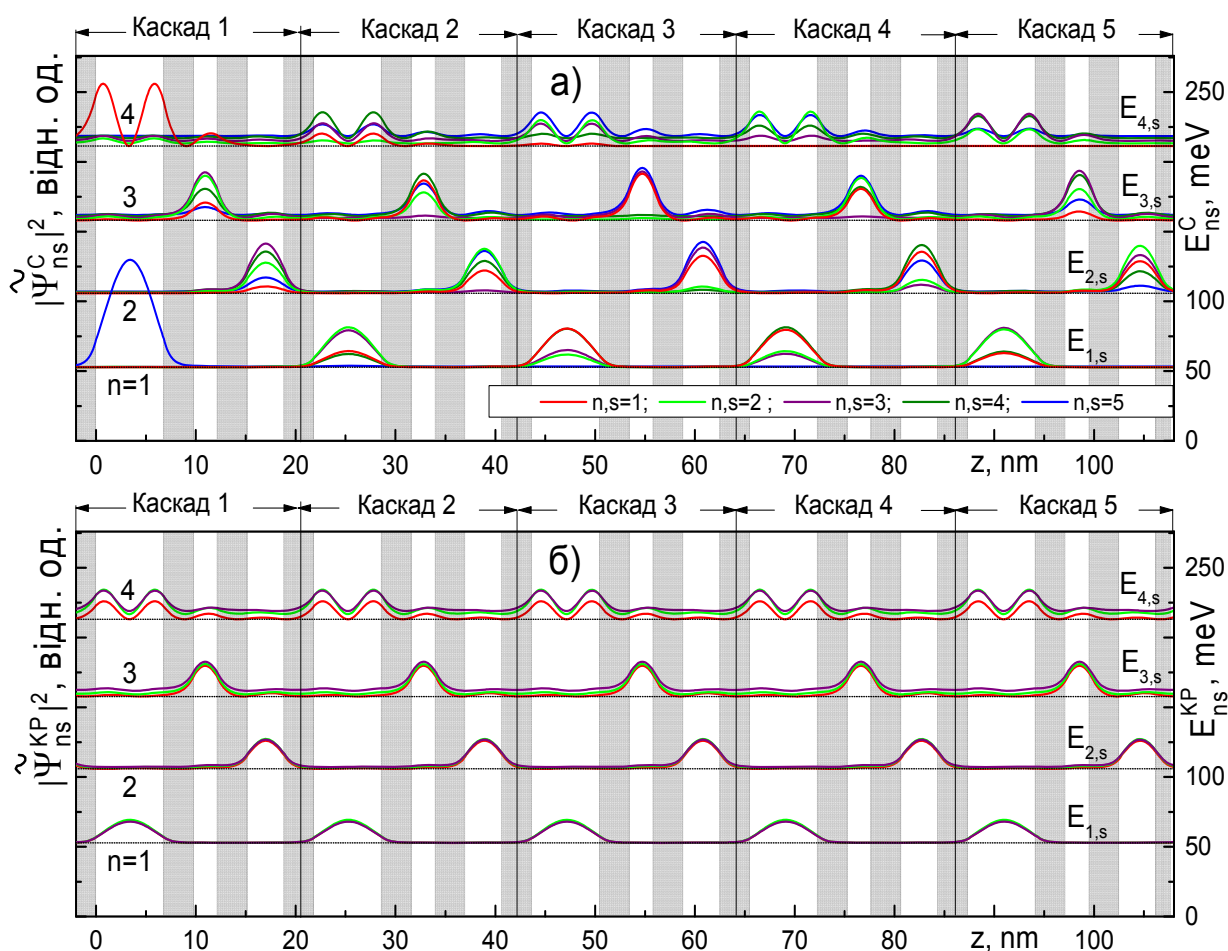


Рис. 3.8. Розподіли густин імовірностей у п'ятикаскадній наноструктурі
в а) С- і б) КР-моделях

Для виявлення впливу геометричних конфігурацій каскадів на спектральні характеристики багатокаскадних наноструктур в обох моделях виконувалися розрахунки залежностей енергій та ширин зон від розмірів ям і бар'єрів каскадів.

Оскільки отримані у С- і КР-моделях результати виявилися якісно подібними між собою, тому для ілюстрації основних властивостей спектральних характеристик на рис. 3.9, 3.10 і 3.11 наведені залежності енергій (E_{ns}^C) та ширин (Γ_n^C) зон десятикаскадної ($N=10$) структури у С-моделі від ширини однієї з потенціальних ям (a_1, a_2, a_3) - рис. 3.9 і товщини одного з потенціальних бар'єрів (b_1, b_2, b_3) - рис.3.10 за фіксованих розмірів (указаних на рисунках) усіх інших складових каскаду та при одночасній однаковій зміні всіх

потенціальних ям ($a = a_1 = a_2 = a_3$) і всіх потенціальних бар'єрів ($b = b_1 = b_2 = b_3$) – рис. 3.11. Враховуючи, що рівні енергій у кожній зоні характеризуються якісно однаковими залежностями від геометричних розмірів шарів каскадів, у подальшому аналізі для спрощення тимчасово опустимо індекс s у позначеннях енергій.

Отже, рис. 3.9 показує, що зі збільшенням ширини однієї з потенціальних ям ($a_i, i=1, 2, 3$) і фіксованих розмірах двох інших енергії E_n^C мають нелінійний спадний характер з проявами антикросингів. В околах антикросингів двох довільних (n та $n+1$) зон їх ширини (Γ_n^C та Γ_{n+1}^C) зростають, а в інших інтервалах збільшення розмірів ям - тільки зменшуються. Ширини антикросингів визначаються товщинами потенціальних бар'єрів і зменшуються при збільшенні товщин b_i .

Збільшення одного з бар'єрів ($b_i, i=1, 2, 3$, рис. 3.10) в інтервалах малих товщин ($0 < b_l < 3\text{nm}$, $l=1, 2, 3$) приводить до високо- чи низькоенергетичного зміщення енергій E_n^C залежно від номера зони n і до зменшення ширин (Γ_n^C) всіх зон, за винятком околу $b_2 \approx 1.5\text{nm}$, де Γ_3^C та Γ_4^C зростають через антикросинг між E_3^C та E_4^C . При потужних бар'єрах ($b_l > 3\text{nm}$) енергії зон змінюються слабо (рис.3.10). У граничному випадку $b_l \rightarrow \infty$, згідно з фізичними міркуваннями, енергетичні зони вироджуються у дискретні рівні ізольованої триямної структури.

Одночасне збільшення ширин всіх потенціальних ям (рис. 3.11а) зміщує енергії E_n^C у низькочастотну область і звужує ширини Γ_n^C усіх зон. Зі збільшенням товщин усіх бар'єрів (рис. 3.11б) ширини зон швидко зменшуються, що й зумовлює відповідні зміни енергій у зонах. При $b > 3\text{nm}$ енергетичне положення зон практично не змінюється.

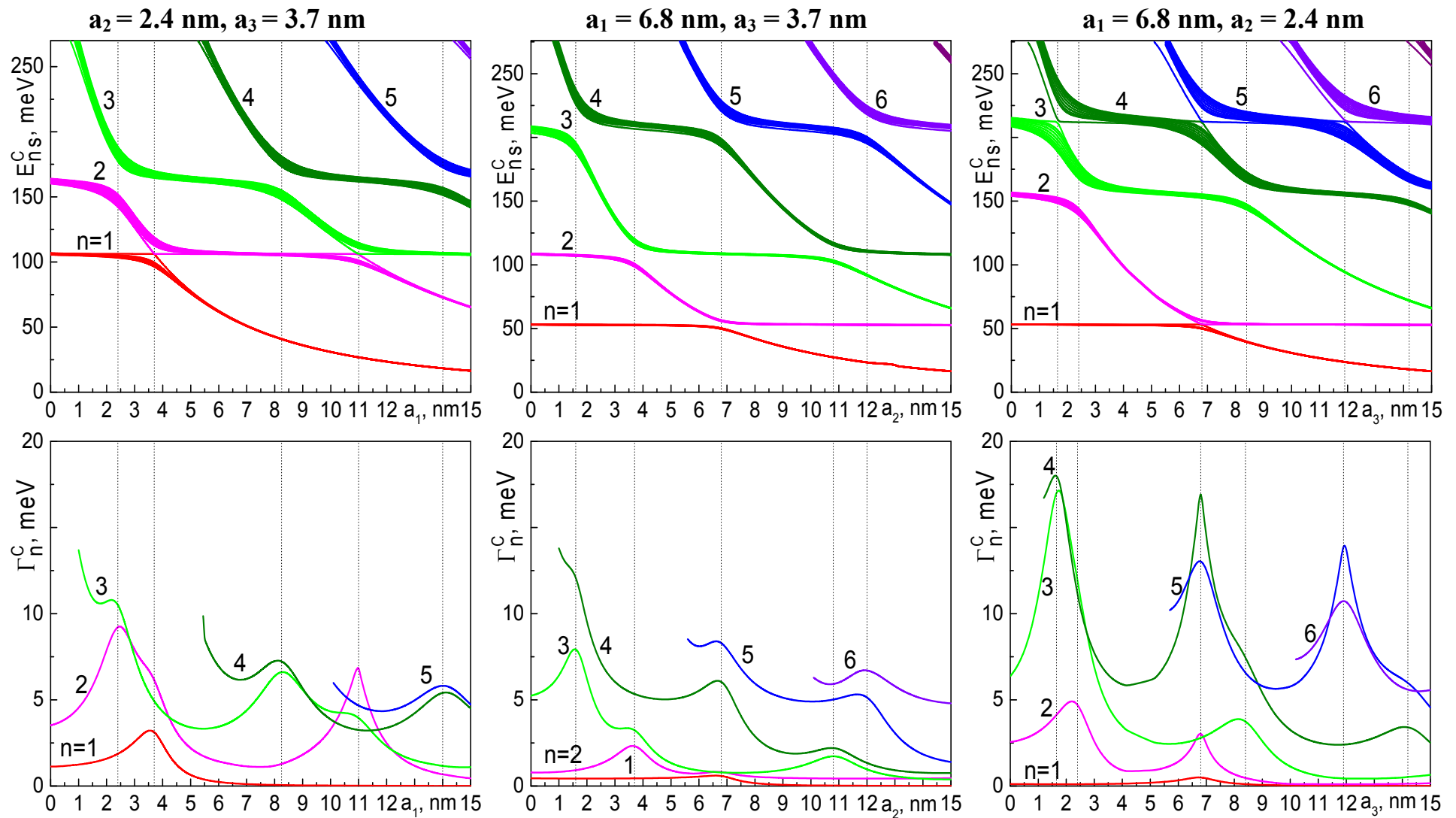


Рис. 3.9. Залежності енергетичного спектра (E_{ns}^C) і ширин (Γ_n^C) зон від ширин (a_1, a_2, a_3) потенціальних ям у десятикаскадній наноструктурі закритого типу при фіксованих товщина бар'єрів $b_1=b_2=b_3=3$ nm

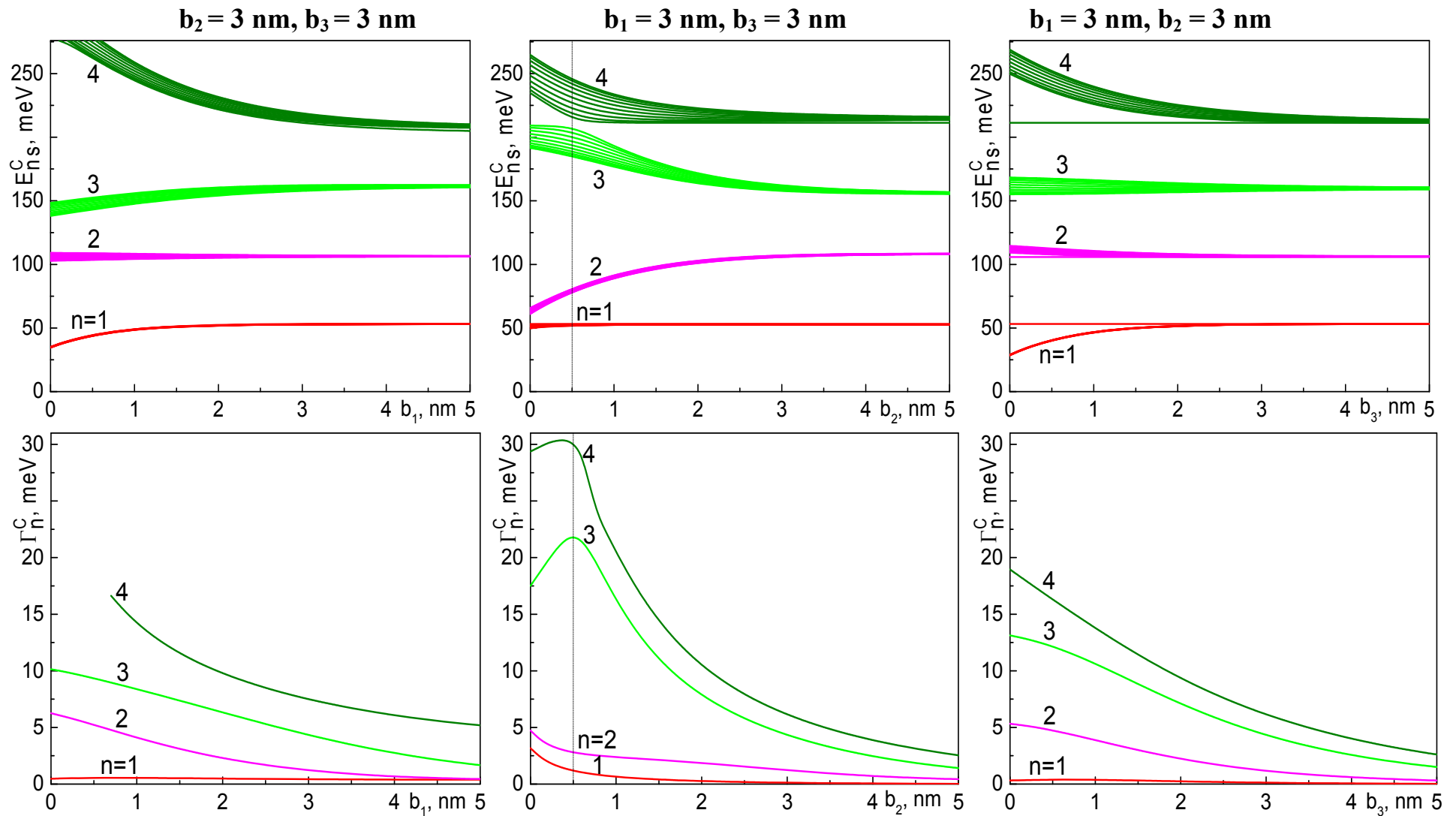


Рис. 3.10. Залежності енергетичного спектра (E_{ns}^C) і ширин (Γ_n^C) зон від товщин (b_1, b_2, b_3) потенціальних бар'єрів у десятикаскадній наноструктурі закритого типу при фіксованих ширинах ям $a_1=6.8\text{nm}$, $a_2=2.4\text{nm}$, $a_3=3.7\text{nm}$

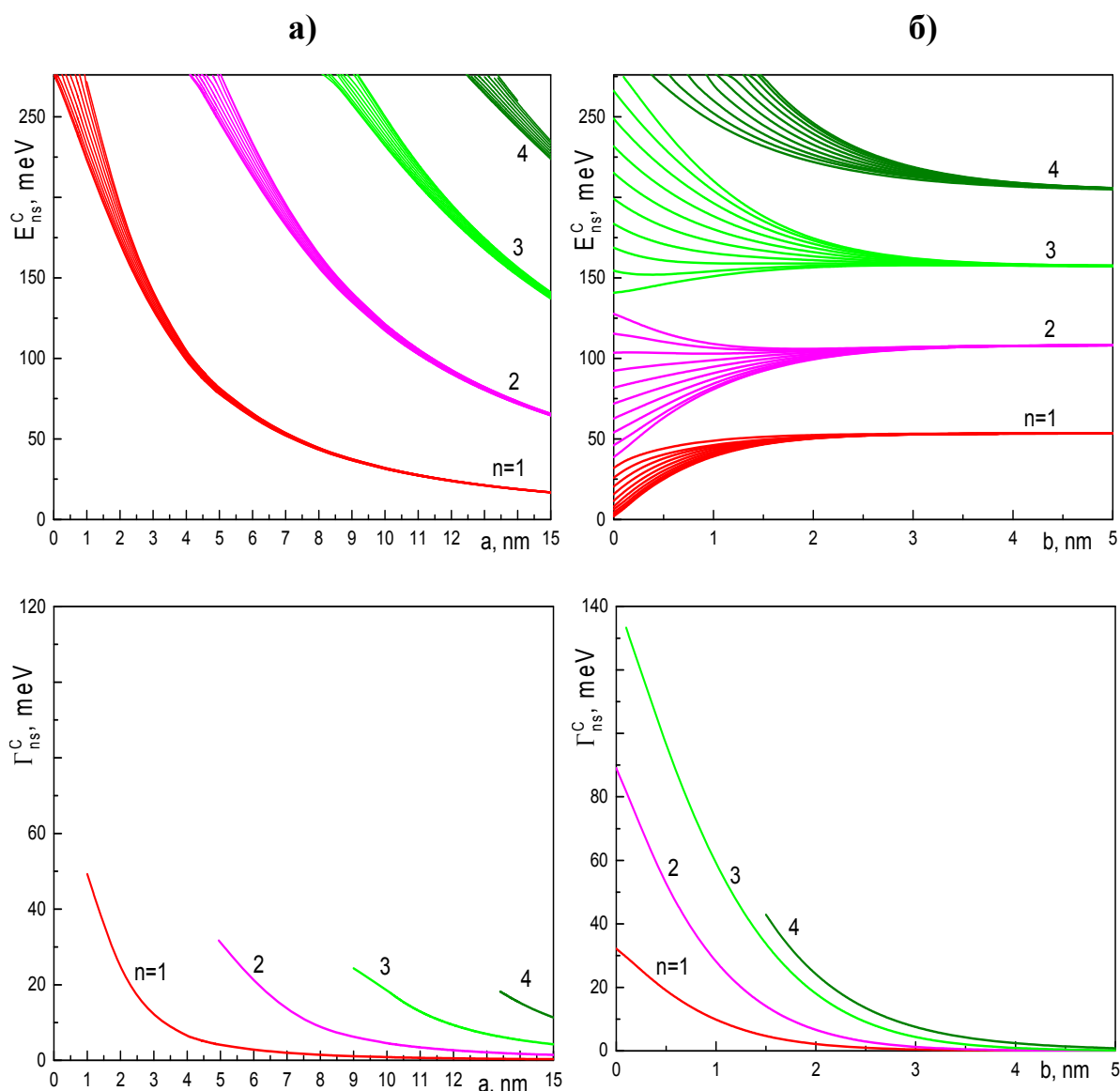


Рис. 3.11. Залежності енергетичного спектра (E_{ns}^C) і ширин (Γ_n^C) зон від ширини ям ($a = a_1 = a_2 = a_3$) при фіксованих товщинах бар'єрів ($b_1=b_2=b_3=3$ nm) та від товщини бар'єрів ($b=b_1=b_2=b_3$) при фіксованих ширинах ям ($a_1=6.8$ nm, $a_2=2.4$ nm, $a_3=3.7$ nm) у десятикаскадній С-структурі

Зазначимо, що виявлені основні властивості еволюції спектральних характеристик енергетичних зон у багатокаскадній структурі від геометричних розмірів ям і бар'єрів її каскадів якісно подібні [64] до залежностей резонансних енергій та резонансних ширин КСС електрона в окремому каскаді відкритого типу від розмірів його складових шарів.

3.4 Властивості спектральних характеристик багатокаскадного елемента експериментального квантового каскадного детектора

На основі чотириямного каскаду з $\text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{As}$ -ямами та $\text{In}_{0.53}\text{Al}_{0.47}\text{As}$ -бар'єрами, як структурного елемента експериментального ККД (зразок N1020) з роботи [6] дослідимо еволюцію спектральних властивостей багатокаскадної структури залежно від кількості каскадів у ній. Геометричні розміри шарів каскаду обиралися такими ж, як і в [6]: **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 [67]: $U = 516$ meV, $m_w = 0.044 m_e$, $m_b = 0.082 m_e$, m_e – маса вільного електрона.

У цитованій праці експериментальний ККД реалізований на основі 30-каскадного основного структурного елемента, що забезпечує поглинання електромагнітних хвиль довжиною $10.5 \mu\text{m}$ (118 meV) в актуальному далекому ІЧ-діапазоні. Для виявлення основних механізмів формування спектральних характеристик такої 30-каскадної структури у реалістичній закритій моделі, що враховує взаємодію між усіма каскадами, послідовно досліджені властивості електронних станів у структурах з різною кількістю каскадів: від найпростішої однокаскадної ($N=1$) і до тридцятикаскадної ($N=30$).

На рис.3.12 наведені розраховані дискретні залежності електронних енергій (E_{ns}) та ширин зон (Γ_n) від кількості каскадів (N), які з метою кращого візуального сприйняття зображені суцільними лініями. Для зручності подальшого аналізу властивостей електронних станів, як і в попередньому параграфі, тут і далі уведено подвійну нумерацію енергій E_{ns} , де індекс n указує номер смуги, а індекс s – номер рівня у ній.

Розрахунки енергетичного спектра показали, що в окремому каскаді ($N=1$) існує 9 рівнів енергій. Зі збільшенням N в їх малих околах утворюються квазідискретні смуги, кількість рівнів у яких дорівнює кількості каскадів. З фізичних міркувань очевидно, що зонний характер спектра зумовлений

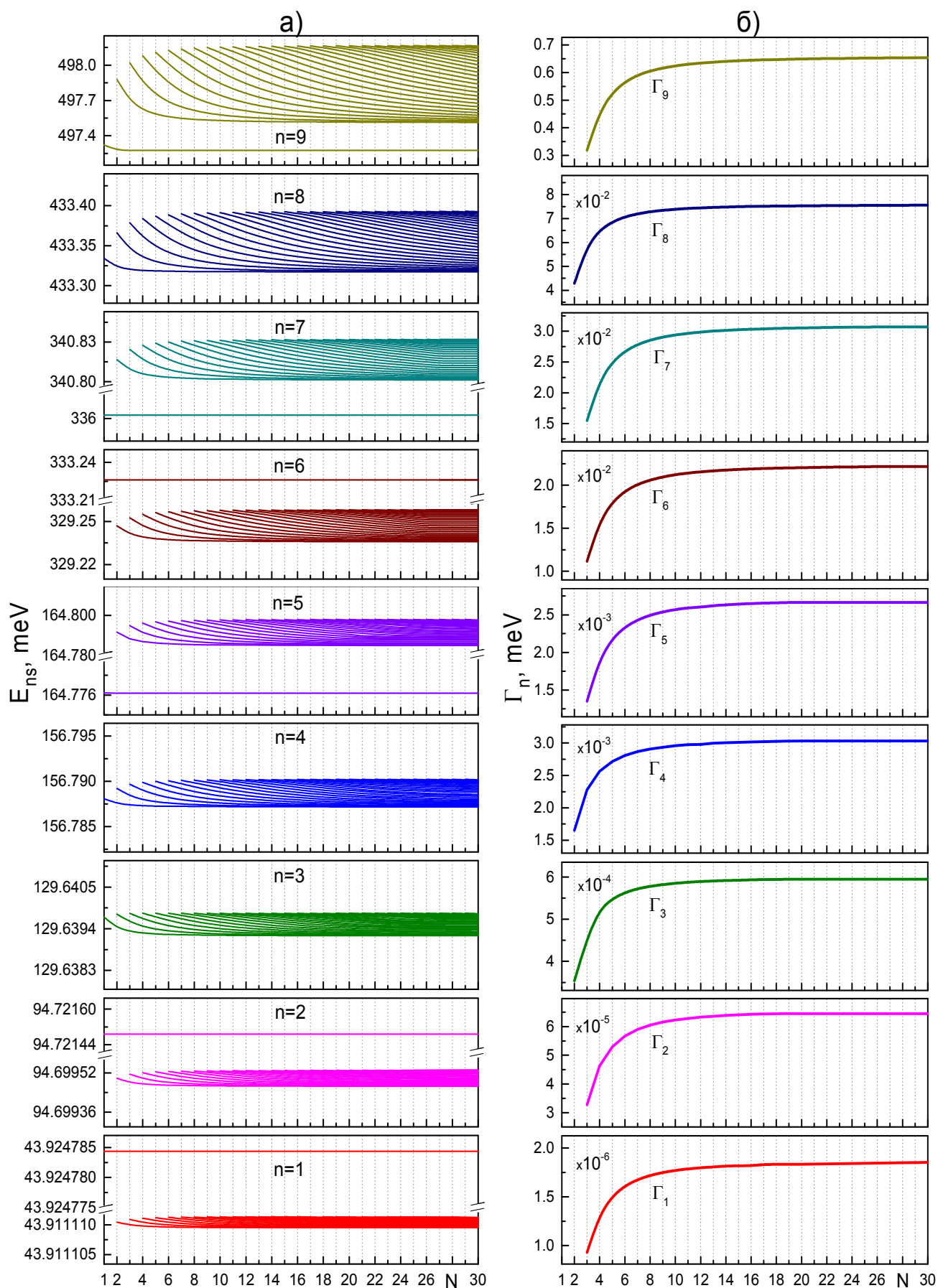


Рис. 3.12. Залежності енергетичного спектра (E_{ns}) і ширин зон (Γ_n)

від кількості каскадів (N) у наноструктурі

тунельним зв'язком між каскадами і зі збільшенням відстані між ними всі зони вироджуються у дискретні енергетичні рівні ізольованого каскаду.

З рис.3.12а видно, що у 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 високоенергетичний відокремлений рівень, енергія якого практично не залежить від N і збігається до енергії відповідного n -го стану в однокаскадній структурі ($N=1$).

На рис.3.12б 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 Γ_n тільки зростають, а при ($N > 10$) - змінюються слабо. У граничному випадку $N \rightarrow \infty$ ширини Γ_n збігаються з відповідними ширинами зон в ідеальній моделі безмежної надгратки Кроніга-Пенні.

Тепер розглянемо особливості локалізації електронних станів у багатокаскадних наноструктурах, від властивостей яких, як відомо [6, 8], суттєво залежить ефективність функціонування ККД. З цією метою розраховувалися розподіли густин імовірностей $|\Psi_{ns}(z)|^2$, а також імовірності знаходження електрона в каскадах $W_{ns}^N(i) = \int_{z_{i,0}}^{z_{i,P}} |\Psi_{ns}(z)|^2 dz$, ($i=1, \dots, N$) та їх структурних елементах (активних областях, екстракторах) багатокаскадних структур.

Приклади отриманих залежностей $|\Psi_{ns}(z)|^2$, нормовані на енергії E_{ns} відповідних станів, і парціальні ймовірності $W_{ns}^N(i)$ в одно-, дво-, три- та чотирикаскадних наноструктурах наведені на рис.3.13 і у таблиці 3.2 відповідно. У таблиці 3.2 ті величини $W_{ns}^N(i)$, які менші за 0.001, вважаються нехтовно малими і позначені як 0.

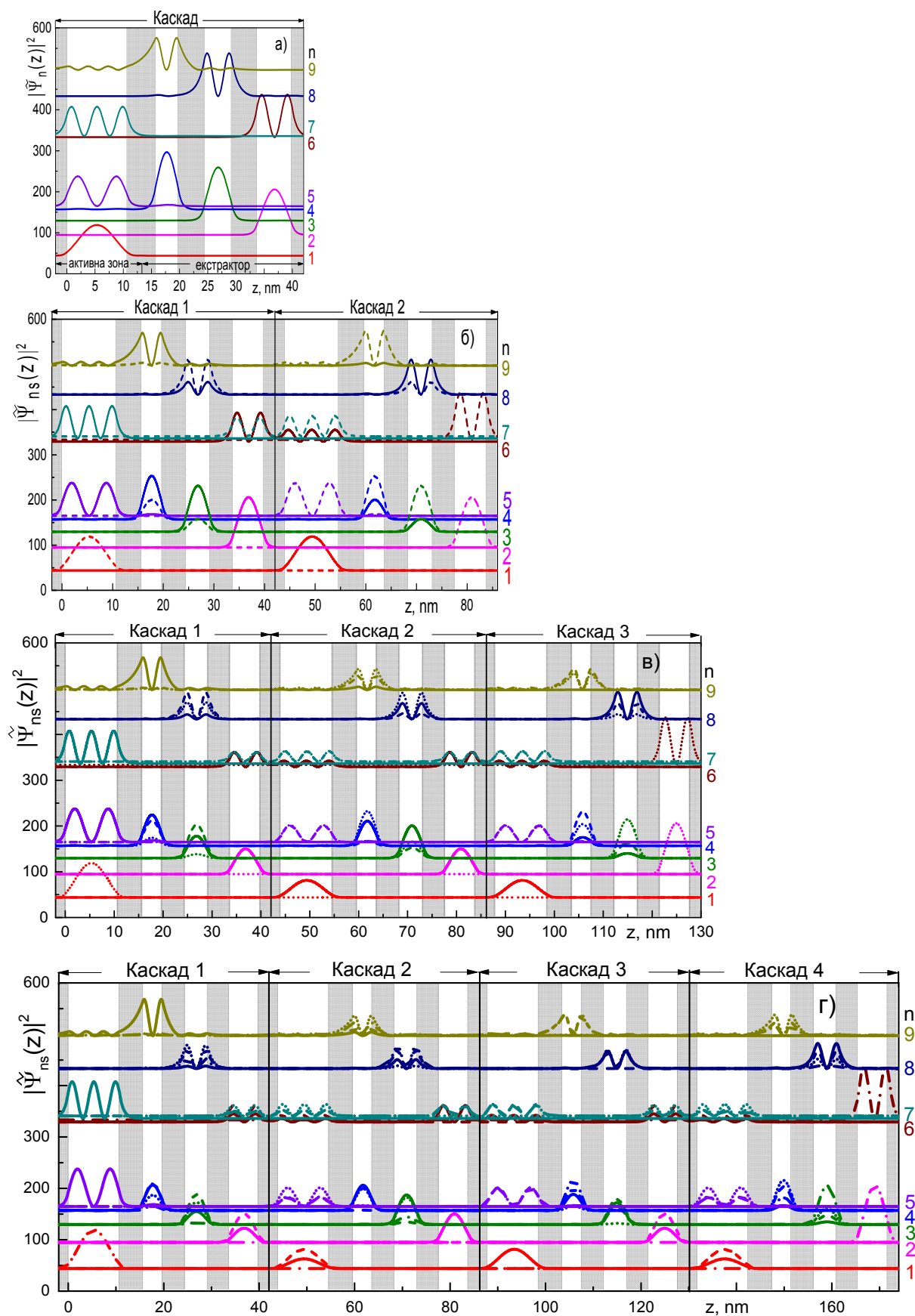


Рис. 3.13. Нормовані розподіли густин імовірностей $|\tilde{\Psi}_{ns}|^2$ при а) $N=1$, б) $N=2$, в) $N=3$ та г) $N=4$. Тут — $n, s=1$; ---- $n, s=2$; $n, s=3$; - - - - $n, s=4$

Аналіз рис.3.13а показує, що в однокаскадній структурі як основному структурному елементі експериментального ККД [6], 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 області каскаду, а в усіх інших станах – знаходиться в потенціальних ямах екстрактора. Поглинання електромагнітних хвиль далекого ІЧ-діапазону відбувається при квантовому переході між станами $n=1$ та $n=5$ із силою осцилятора $f_{1,5} = 0.84$. Розрахована енергія цього переходу $\Delta E_{1,5} = E_5 - E_1 = 120.9 \text{ meV}$ узгоджується з експериментальним результатом $\Delta E^{\text{exp}} = 118 \text{ meV}$ [6] не гірше ніж на 2.5%. Збуджені стани $n=2, 3, 4, 6, 8, 9$ послідовно локалізовані в активних ямах екстрактора. Стани $n=2, 3, 4$ утворюють так звану «фононну драбинку», по якій у фонон-супровідних переходах з релаксацією енергії відбувається тунелювання електронів. Всі інші високоенергетичні стани $n=6, 7, 8, 9$ у роботі приладу безпосередньо не задіяні. Тому далі для багатокаскадних структур ($N>1$) основну увагу зосередимо на вивченні властивостей робочих станів ($n=1-5, s=1-N$).

У двокаскадній структурі ($N=2$), як видно з рис.3.13б і табл.3.2, електрон з різними ймовірностями може перебувати у 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, у результаті чого у цих станах електрон локалізований у характерній області (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 з яких реалізується в активній області лише одного із каскадів, де хвильові функції робочих станів максимально перекриваються (рис.3.13б, $\Psi_{1,2}$ 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 $f_{1,2;5,1} = 0.84$ співвимірні між собою та з силою осцилятора робочого переходу в однокаскадній структурі.

Таблиця 3.2

Імовірності знаходження ($W_{ns}^N(i)$) електрона у станах n,s в одно-, дво-, три-, та чотирікаскадних наноструктурах. Тут i – номер каскаду

n	s	N=1	N=2		N=3			N=4			
		$i=1$	$i=1$	$i=2$	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=4$
5	4	—	—	—	—	—	—	0	0.26	0.49	0.25
	3	—	—	—	0.001	0.50	0.49	0.001	0.50	0	0.49
	2	—	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	4	—	—	—	—	—	—	0.06	0.34	0.42	0.17
	3	—	—	—	0.12	0.53	0.33	0.21	0.30	0.06	0.42
	2	—	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
3	4	—	—	—	—	—	—	0.03	0.11	0.28	0.58
	3	—	—	—	0.07	0.28	0.65	0.33	0.40	0.02	0.24
	2	—	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
2	4	—	—	—	—	—	—	0	0	0	0.99
	3	—	—	—	0	0	0.99	0.24	0.49	0.25	0
	2	—	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
1	4	—	—	—	—	—	—	0.99	0	0	0
	3	—	—	—	0.99	0	0	0	0.25	0.49	0.25
	2	—	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

При збільшенні кількості каскадів до трьох ($N=3$) або чотирьох ($N=4$) в кожному стані n,s для електрона з'являється принаймні один каскад, імовірність знаходження в якому нехтовно мала (рис.3.13в,г, табл.3.2). З подальшим збільшенням N число каскадів з близькою до нуля ймовірністю знаходження електрона тільки зростає, що видно з табл. 3.3 і 3.4, де для прикладу наведені парціальні ймовірності знаходження електрона в робочих станах у каскадах 7- та 10-каскадних структур.

З таблиць 3.2-3.4 та рис. 3.13 також видно, що в досліджуваних N -каскадних структурах є три стани ($n = 1, s = N$; $n = 2, s = N$ та $n = 5, s = 1$), в яких електрон локалізований в областях лише першого або останнього каскаду і не потрапляє в інші каскади структури. Згідно з фізичними міркуваннями, виникнення таких

Таблиця 3.3

Імовірності знаходження ($W_{ns}^{N=7}(i)$) електрона у станах n,s у каскадах

7-каскадної наноструктури. Тут i – номер каскада

n	s	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=4$	$i=5$	$i=6$	$i=7$
5	7	0	0.05	0.17	0.27	0.26	0.17	0.05
	6	0	0.18	0.26	0.05	0.05	0.27	0.17
	5	0	0.27	0.04	0.18	0.17	0.05	0.27
	4	0	0.26	0.05	0.17	0.17	0.05	0.27
	3	0	0.16	0.27	0.06	0.05	0.27	0.17
	2	0	0.05	0.17	0.27	0.27	0.17	0.05
	1	0.99	0	0	0	0	0	0
4	7	0.01	0.09	0.20	0.26	0.23	0.14	0.04
	6	0.05	0.24	0.19	0	0.09	0.26	0.14
	5	0.11	0.22	0	0.24	0.08	0.09	0.23
	4	0.17	0.06	0.21	0.03	0.24	0	0.26
	3	0.22	0	0.16	0.21	0	0.18	0.19
	2	0.25	0.14	0	0.05	0.21	0.23	0.09
	1	0.17	0.21	0.21	0.18	0.12	0.06	0.02
3	7	0	0.01	0.03	0.06	0.13	0.26	0.49
	6	0.08	0.24	0.29	0.18	0.03	0.01	0.15
	5	0.19	0.22	0	0.17	0.25	0.01	0.14
	4	0.26	0.02	0.23	0.06	0.17	0.13	0.11
	3	0.24	0.08	0.10	0.23	0	0.25	0.06
	2	0.15	0.26	0.08	0.02	0.21	0.23	0.03
	1	0.04	0.15	0.24	0.26	0.19	0.08	0
2	7	0	0	0	0	0	0	0.99
	6	0.05	0.17	0.27	0.27	0.17	0.05	0
	5	0.17	0.27	0.05	0.05	0.27	0.17	0
	4	0.27	0.05	0.17	0.17	0.05	0.27	0
	3	0.27	0.05	0.17	0.17	0.05	0.27	0
	2	0.17	0.27	0.05	0.05	0.27	0.17	0
	1	0.05	0.17	0.27	0.27	0.17	0.05	0
1	7	0.99	0	0	0	0	0	0
	6	0	0.05	0.17	0.27	0.27	0.17	0.05
	5	0	0.17	0.27	0.05	0.05	0.27	0.17
	4	0	0.27	0.05	0.17	0.17	0.05	0.27
	3	0	0.27	0.05	0.17	0.17	0.05	0.27
	2	0	0.17	0.27	0.05	0.05	0.27	0.17
	1	0	0.05	0.17	0.27	0.27	0.17	0.05

Таблиця 3.4

Імовірності знаходження ($W_{ns}^{N=10}(i)$) електрона у станах n,s у каскадах

10-каскадної наноструктури. Тут i – номер каскада

n	s	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=4$	$i=5$	$i=6$	$i=7$	$i=8$	$i=9$	$i=10$
5	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
	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
4	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
	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
3	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
	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
2	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
	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
1	10	0.99	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	9	0	0.02	0.07	0.13	0.18	0.19	0.18	0.13	0.07	0.02
	8	0	0.07	0.18	0.18	0.07	0	0.07	0.18	0.18	0.07
	7	0	0.13	0.18	0.02	0.07	0.19	0.07	0.02	0.18	0.13
	6	0	0.18	0.07	0.07	0.18	0	0.18	0.07	0.07	0.18
	5	0	0.19	0	0.19	0	0.19	0	0.19	0	0.19
	4	0	0.18	0.07	0.07	0.18	0	0.18	0.07	0.07	0.18
	3	0	0.13	0.18	0.02	0.07	0.19	0.07	0.02	0.18	0.13
	2	0	0.07	0.18	0.18	0.07	0	0.07	0.18	0.18	0.07
	1	0	0.02	0.07	0.13	0.18	0.19	0.18	0.13	0.07	0.02

приповерхневих станів зумовлене скінченністю розмірів наноструктур. Тому можна очікувати у реальних наноструктурах виявлення ефектів, зумовлених станами аналогічної природи.

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

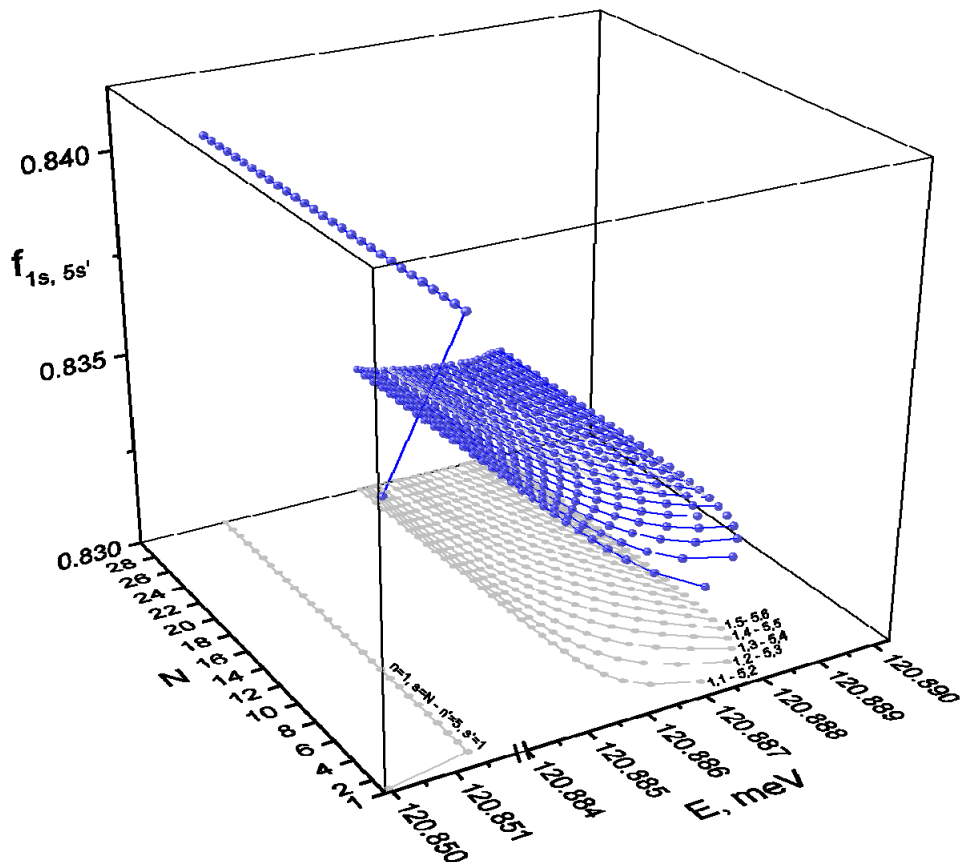


Рис. 3.14. Сили осцилятора квантових переходів $f_{1s,5s'}$ залежно від кількості каскадів N та енергії переходу E

Розрахунки показали (табл. 3.5-3.7), що в N -каскадній структурі в далекій ГЧ-області 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: $|1, 1\rangle \rightarrow |5, 2\rangle, |1, 2\rangle \rightarrow |5, 3\rangle, \dots,$

Таблиця 3.7

Сили осцилятора квантових переходів $f_{ns,n's'}$ між станами першої ($n=1, s=1, \dots, 10$) та п'ятої ($n'=5, s'=1, \dots, 10$) робочих смуг у 10-каскадній наноструктурі

n,s \ n',s'		$f_{ns,n's'}$									
		1,1	1,2	1,3	1,4	1,5	1,6	1,7	1,8	1,9	1,10
5,10		0	0	0	0	0	0	0	0	0.83	0
5,9		0	0	0	0	0	0	0	0.83	0	0
5,8		0	0	0	0	0	0	0.83	0	0	0
5,7		0	0	0	0	0	0.83	0	0	0	0
5,6		0	0	0	0	0.83	0	0	0	0	0
5,5		0	0	0	0.83	0	0	0	0	0	0
5,4		0	0	0.83	0	0	0	0	0	0	0
5,3		0	0.83	0	0	0	0	0	0	0	0
5,2		0.83	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5,1		0.009	0.03	0.06	0.08	0.08	0.07	0.05	0.02	0.007	0.84

Отже, виконаний аналіз показав, що, на відміну від усталених уявлень про однотипне функціонування всіх каскадів ККД, виявлені неоднорідні розподіли ймовірностей знаходження електрона в каскадах структури призводять до різних функціональних властивостей каскадів. Це може зумовлювати зниження тунельної прозорості всього багатокаскадного елемента ККД і, як наслідок, негативно впливати на ефективність роботи приладу.

Висновки до розділу 3

1. У наближенні координатозалежних ефективних мас і прямокутних потенціалів розвинена теорія електронних станів у багатокаскадній наноструктурі у двох моделях: у моделі структури закритого типу з безмежно широкими бар'єрами зовнішнього масивного середовища та у моделі надгратки з потенціалом типу Кроніга-Пенні. Здійснено порівняльний аналіз еволюції властивостей електронних станів залежно від кількості каскадів (N) і від їх геометричної конфігурації в обох моделях.

2. Установлено, що у багатокаскадній структурі електронний

енергетичний спектр характеризується квазідискретними смугами енергій, кількість рівнів у яких дорівнює кількості каскадів (N) у закритій моделі, а у моделі Кроніга-Пенні залежить від парності числа каскадів (N) у структурному елементі так, що при непарному N кількість рівнів у смугах дорівнює $(N+1)/2$, а при парному – $N/2$. Ширини зон у структурі з потенціалом типу Кроніга-Пенні при парній кількості каскадів дорівнюють ширинам зон при $N=2$, а при непарному N менші за відповідні ширини при $N=2$ і зі збільшенням числа каскадів асимптотично наближаються до них. У закритій багатокаскадній структурі ширини зон зі зростанням числа каскадів збігаються з ширинами відповідних зон у моделі Кроніга-Пенні при $N=2$.

3. Дослідження еволюції енергій та ширин зон від кількості каскадів виявили, що загальна оцінка величин спектральних характеристик закритої багатокаскадної структури скінченних розмірів може бути із задовільною точністю здійснена у простій моделі Кроніга-Пенні з двокаскадним елементом.

4. Досліджено спектральні характеристики багатокаскадних структур з різним геометричним дизайном каскадів. З'ясовано, що еволюції спектральних характеристик від розмірів ям та бар'єрів у структурі закритого типу та з потенціалом Кроніга-Пенні якісно однакові і проявляють основні властивості, притаманні резонансним енергіям і резонансним ширинам КСС електрона в окремому каскаді відкритого типу.

5. На основі розвиненої теорії спектральних характеристик багатокаскадної наноструктури закритого типу досліджено властивості електронних станів і сил осцилятора квантових переходів в основному структурному елементі експериментального ККД [6], що дозволило виявити особливості формування смуги поглинання приладу у далекій ІЧ-області.

6. Установлено, що у багатокаскадній структурі експериментального ККД енергетичний спектр характеризується квазідискретними смугами, електронні стани яких мають різні властивості у різних каскадах структури, що суттєво відрізняються від властивостей у поширених однокаскадній та надгратковій моделі.

7. Показано, що у багатокаскадному елементі ККД імовірності знаходження електрона можуть бути нехтовно малими в окремих каскадах або, навіть, у групах каскадів. У результаті смуга поглинання наноструктури формується переходами лише між тими станами, області локалізації яких максимально збігаються в усій багатокаскадній структурі. Установлено, що в N каскадному елементі ККД виникає N квантових переходів, які формують смугу поглинання приладу у далекій ІЧ-області. Ширина смуги поглинання визначається ширинами відповідних електронних зон.

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

РОЗДІЛ 4

ВЛАСТИВОСТІ КВАЗІСТАЦІОНАРНОГО СПЕКТРА БАГАТОКАСКАДНОЇ НАНОСТРУКТУРИ ВІДКРИТОГО ТИПУ

Інтенсивний розвиток нанофізики, який триває вже понад 30 років, привів до появи наноструктур різних розмірностей та геометричних форм (багатошарових квантових точок, дротів, плівок, кілець та їх різноманітних комбінацій). Як відомо [64, 66], у таких низьковимірних структурах просторове обмеження областей локалізації квазічастинок приводить до розмірного квантування енергій, властивості яких визначаються типом потенціального рельєфу і, зокрема, величиною потенціалу у масивному зовнішньому середовищі. Якщо потенціальна енергія електрона (дірки) у зовнішньому середовищі найбільша і, відповідно, створює потенціальний бар'єр, то квазічастинка виявляється локалізованою в обмеженій області наноструктури, де вона характеризується стаціонарним дискретним спектром. У такій системі ймовірність потрапляння квазічастинки у зовнішнє середовище на достатньо далеку відстань нехтовно мала, а отже, у цьому сенсі наноструктура є замкнута. Якщо ж потенціал зовнішнього середовища не перевищує величину енергії найглибшої потенціальної ями, то завжди існує ймовірність тунелювання квазічастинки крізь потенціальні бар'єри у масивне середовище-яму, через що квазічастинка виявляється делокалізованою у просторі. У цьому випадку стани електрона (дірки) квазістаціонарні і характеризуються резонансними енергіями та резонансними ширинами (тобто скінченним часом життя).

Оскільки з прикладного погляду найбільш привабливі структури з мінімально розмитими спектрами, що притаманно наносистемам замкнутого типу, то досить тривалий період часу більшість експериментальних і теоретичних праць стосувалися досліджень лише замкнутих наногетероструктур. Для таких систем розроблений математичний апарат у фізиці наноструктур [56, 66], на основі якого у різних моделях розвивалися теоретичні підходи до опису фізичних процесів і явищ. Експериментальному вивченню відкритих наносистем приділялася значно менша увага, через що переважна більшість

теоретичних робіт цього напрямку мали лише фундаментальний характер.

Ситуація змінилася після появи перших ККЛ і ККД, створених на основі відкритих багатокаскадних резонансно-тунельних наноструктур, що стимулювало зростання кількості експериментальних та теоретичних робіт цього напрямку. Незважаючи на більше ніж 20-річний період розвитку досліджень ККЛ і ККД, теорія фізичних процесів у їх структурних елементах ще й досі не завершена. Основні проблеми пов'язані з математичними складнощами, зумовленими нелокалізованими хвильовими функціями і квазістаціонарним спектром квазічастинок. У більшості теоретичних праць з метою спрощення громіздких математичних викладок дослідження властивостей КСС виконувалися у спрощених моделях одно- чи двоямних структур, де було показано, що фізичні властивості досліджуваних наноструктур надзвичайно чутливі до спектральних параметрів (резонансних енергій та ширин) КСС.

Отже, для побудови теорії, яка дозволить отримати цілісну картину фізики ККД, необхідно розвинути надійну і послідовну теорію спектральних характеристик КСС електрона у відкритих багатокаскадних РТС як елементах ККД, що і є метою цього розділу.

Основні результати розділу наведені в [189-191].

4.1 Теорія S-матриці та коефіцієнта прозорості відкритої багатокаскадної наноструктури

Розглядається N-каскадна наноструктура (рис.4.1), поміщена у зовнішнє масивне напівпровідникове середовище, яке для електрона створює потенціальну яму. Враховуючи, що величини постійних ґраток напівпровідникових матеріалів ям і бар'єрів у ізотропних наноструктурах типових ККД [6] близькі між собою, теорію КСС електрона будемо розвивати у моделі координатозалежної ефективної маси та прямокутних потенціалів. У декартовій системі координат з віссю oz , перпендикулярною до наносферів розглядової структури ефективна маса та потенціальна енергія електрона

можуть бути записані у такому вигляді:

$$m(E, z) = \begin{cases} m_b(E) = m_b \left(1 - \frac{(U-E)}{E_{gb}} \right), & j = 1, 3, 5, \dots, P-2, i = 1, 2, \dots, N; j = P, i = N; \\ & z_{i,j-1} < z < z_{i,j}, \\ m_w(E) = m_w \left(1 + \frac{E}{E_{gw}} \right), & j = 2, 4, \dots, P-1, i = 1, 2, \dots, N; j = 0, i = 1; j = P+1, i = N; \end{cases} \quad (4.1)$$

$$U(z) = \begin{cases} U, & j = 1, 3, 5, \dots, P-2, i = 1, 2, \dots, N; j = P, i = N; \\ & z_{i,j-1} < z < z_{i,j}, \\ 0, & j = 2, 4, \dots, P-1, i = 1, 2, \dots, N; j = 0, i = 1; j = P+1, i = N; \end{cases} \quad (4.2)$$

де $z_{i,j} = z_{1,j} + (i-1)d$ – координати гетеромеж в i -му каскаді; $z_{i,P-1} = z_{i+1,0}$; $z_{i,P} = z_{i+1,1}$; $z_{1,-1} = -\infty$; $z_{N,P+1} = +\infty$; d – лінійний розмір каскаду; P – загальна (непарна) кількість ям і бар'єрів в окремому каскаді; U – висоти потенціальних бар'єрів; m_w , m_b – ефективні маси електрона у масивних аналогах середовищ ям і бар'єрів.

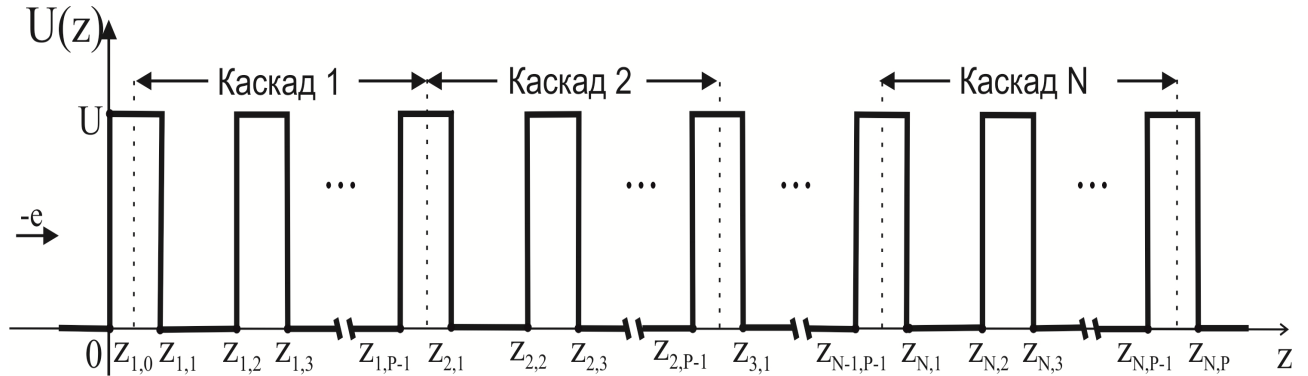


Рис.4.1. Потенціальний рельєф багатокаскадної наноструктури відкритого типу

Вважатимемо, що моноенергетичний потік електронів з енергією E налітає на РТС зліва, перпендикулярно до площин наночарів так, що квазіімпульс електрона у площині хоу дорівнює нулю ($\vec{k}_{||} = 0$). Тоді для електрона справедливе одномірне рівняння Шредінгера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(E, z)} \frac{d}{dz} + U(z) \right] \Psi(z) = E \Psi(z). \quad (4.3)$$

Розв'язок рівняння (4.3) подамо у вигляді кусково-неперервної функції

$$\Psi(z) = \Psi_{1,0}(z)\theta(-z) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{P-1} \Psi_{i,j}(z) [\theta(z - z_{i,j-1}) - \theta(z - z_{i,j})] + \Psi_{N,P}(z) [\theta(z - z_{N,P-1}) - \theta(z - z_{N,P})] + \Psi_{N,P+1}(z)\theta(z - z_{N,P}) \quad (4.4)$$

де $\Psi_{1,0}$, $\Psi_{N,P+1}$ – хвильові функції у зовнішніх напівбезмежних середовищах, $\theta(z)$ – функція Хевісайда.

Тоді, враховуючи координатну залежність $m(z)$ та $U(z)$ для функцій $\Psi_{i,j}$ з (4.3), отримується система диференціальних рівнянь

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_w(E)} \frac{d^2}{dz^2} + E \right] \Psi_{i,j}(z) = 0, \quad j = 2, 4, \dots, P-1, i = 1, 2, \dots, N; \\ \qquad \qquad \qquad j = 0, i = 1; j = P+1, i = N; \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m_b(E)} \frac{d^2}{dz^2} - (U - E) \right] \Psi_{i,j}(z) = 0, \quad j = 1, 3, 5, \dots, P-2, i = 1, 2, \dots, N; \\ \qquad \qquad \qquad j = P, i = N, \end{array} \right. \quad (4.5)$$

розв'язки яких повинні задовольняти граничні умови на межах між усіма гетерошарами досліджуваної РТС

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_{i,j}(z_{i,j} - \varepsilon) = \Psi_{i,j+1}(z_{i,j} + \varepsilon), \quad (\varepsilon \rightarrow 0) \\ \frac{1}{m(E,z)} \frac{d\Psi_{i,j}(z)}{dz} \Big|_{z=z_{i,j}-\varepsilon} = \frac{1}{m(E,z)} \frac{d\Psi_{i,j+1}(z)}{dz} \Big|_{z=z_{i,j}+\varepsilon} \end{array} \right. , \quad (4.6)$$

та умову нормування

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{k'}^*(z) \Psi_k(z) dz = \delta(k - k'). \quad (4.7)$$

Як відомо [64, 169], теорію КСС можна розвивати у двох незалежних підходах: коефіцієнта прозорості (D) та S -матриці розсіювання (яка дозволяє отримати функцію розподілу густини ймовірності (W)).

Хвильова функція, знайдена з (4.5), може бути записана у вигляді

$$\Psi^D(z) = \begin{cases} A_{i,j}^D e^{\chi z} + B_{i,j}^D e^{-\chi z}, & j = 1, 3, 5, \dots, P-2, i = 1, \dots, N; j = P, i = N \\ A_{i,j}^D e^{ikz} + B_{i,j}^D e^{-ikz}, & j = 2, 4, \dots, P-1, i = 1, \dots, N; j = 0, i = 1; j = P+1, i = N; \end{cases} \quad (4.8)$$

у підході коефіцієнта прозорості (D) та

$$\Psi^S(z) = \begin{cases} A_{1,0}^S (e^{ikz} - S e^{-ikz}), & j=0, i=1; \\ A_{i,j}^S e^{\chi z} + B_{i,j}^S e^{-\chi z}, & j=1,3,5,\dots,P-2, i=1,\dots,N; j=P, i=N; \\ A_{i,j}^S e^{ikz} + B_{i,j}^S e^{-ikz}, & j=2,4,\dots,P-2, i=1,\dots,N; \\ A_{N,P+1}^S (e^{-ikz} - S e^{ikz}), & j=P+1, i=N; \end{cases} \quad (4.9)$$

в S-матричному підході, де

$$k = \sqrt{\frac{2m_w(E)E}{\hbar^2}}; \quad \chi = \sqrt{\frac{2m_b(E)(U-E)}{\hbar^2}}. \quad (4.10)$$

$S = S(E)$ – матриця розсіювання.

Усі невідомі коефіцієнти $A_{i,j}^{D,S}$, $B_{i,j}^{D,S}$ і S-матриця однозначно визначаються з граничних умов (4.6) та умови нормування (4.7). Застосувавши метод трансфер-матриці (Т) [66, 67] в обох підходах, отримується зв'язок між коефіцієнтами хвильових функцій у зовнішніх напівбезмежних середовищах

$$\begin{pmatrix} A_{1,0}^D \\ B_{1,0}^D \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} A_{N,P+1}^D \\ B_{N,P+1}^D \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} A_{1,0}^S \\ -A_{1,0}^S S \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} -A_{N,P+1}^S S \\ A_{N,P+1}^S \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Тут трансфер-матриця має зручний для розрахунків мультиплікативний вигляд

$$T = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} = \frac{1}{2^{N(P-1)+2}} T_{0,1}^{(1)} \left[\prod_{i=1}^N \left(\prod_{j=1}^{P-1} T_{j,j+1}^{(i)} \right) \right] T_{P,P+1}^N \quad (4.12)$$

з відомими елементами

$$T_{j,j+1}^{(i)} = \begin{cases} \begin{pmatrix} \left(1 - i \frac{m_w(E)\chi}{m_b(E)k}\right) e^{(\chi-ik)z_{i,j}} & \left(1 + i \frac{m_w(E)\chi}{m_b(E)k}\right) e^{-(\chi+ik)z_{i,j}} \\ \left(1 + i \frac{m_w(E)\chi}{m_b(E)k}\right) e^{(\chi+ik)z_{i,j}} & \left(1 + i \frac{m_w(E)\chi}{m_b(E)k}\right) e^{-(\chi-ik)z_{i,j}} \end{pmatrix}, & j=0,2,4,\dots,P-1; \\ \begin{pmatrix} \left(1 + i \frac{m_b(E)k}{m_w(E)\chi}\right) e^{-(\chi-ik)z_{i,j}} & \left(1 - i \frac{m_b(E)k}{m_w(E)\chi}\right) e^{-(\chi+ik)z_{i,j}} \\ \left(1 - i \frac{m_b(E)k}{m_w(E)\chi}\right) e^{(\chi+ik)z_{i,j}} & \left(1 + i \frac{m_b(E)k}{m_w(E)\chi}\right) e^{(\chi-ik)z_{i,j}} \end{pmatrix}, & j=1,3,5,\dots,P. \end{cases} \quad (4.13)$$

Згідно з квантовою механікою [178], коефіцієнт прозорості розраховується як відношення густини потоку ($j_{\text{вух}}$) хвилі, яка пройшла крізь

наноструктуру, до густини потоку (j_{ex}) падаючої на систему хвилі

$$D(E) = \left| \frac{j_{вух}(E)}{j_{ex}(E)} \right|, \quad (4.14)$$

де густини потоків визначаються через відомі хвильові функції співвідношенням

$$j(E) = \frac{i\hbar}{2m_w(E,z)} \left(\Psi(z,E) \frac{\partial \Psi^*(z,E)}{\partial z} - \Psi^*(z,E) \frac{\partial \Psi(z,E)}{\partial z} \right) \quad (4.15)$$

Розрахувавши густини вхідного та вихідного потоків

$$j_{ex}(E) = \frac{k\hbar}{m_w(E)} |A_{1,0}^D|^2, \quad j_{вух}(E) = \frac{k\hbar}{m_w(E)} |A_{N,P+1}^D|^2 \quad (4.16)$$

та врахувавши, що справа від РТС у зовнішньому напівбезмежному середовищі відбита хвиля відсутня ($B_{N,P+1}^D = 0$), з (4.12) та (4.14), отримується точний аналітичний вираз для коефіцієнта прозорості

$$D(E) = \left| \frac{A_{N,P+1}^D}{A_{1,0}^D} \right|^2 = \frac{1}{|t_{11}|^2}, \quad (4.17)$$

який визначається лише одним (t_{11}) елементом трансфер-матриці.

Згідно із загальною теорією, коефіцієнт прозорості дозволяє розрахувати резонансні енергії (E_n^D) та резонансні ширини (Γ_n^D) квазістаціонарних станів електрона, як положення максимумів лоренцевих піків у шкалі енергії та ширини піків на половинах їх висот відповідно.

Для розрахунку S-матриці розсіювання з системи (4.11) отримується квадратне рівняння

$$S^2 + \frac{t_{21} - t_{12}}{t_{11}} S - \frac{t_{22}}{t_{11}} = 0, \quad (4.18)$$

яке має два розв'язки

$$S_{1,2} = \frac{t_{12} - t_{21}}{2t_{11}} \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{4t_{11}t_{22}}{(t_{12} - t_{21})^2}} \right), \quad (4.19)$$

що визначаються всіма елементами T-матриці.

Отже, у підході S-матриці хвильові функції у зовнішніх напівбезмежних середовищах знаходяться як лінійні комбінації обох незалежних розв'язків.

$$\begin{cases} \Psi_{1,0}^S(z) = C_1(e^{ikz} - Se^{-ikz}), \\ \Psi_{N,P+1}^S(z) = C_N(e^{-ikz} - Se^{ikz}), \end{cases} \quad (4.20)$$

з відомими коефіцієнтами та S-матрицею

$$C_i = A_{i,j}^{S(1)} + A_{i,j}^{S(2)}; S = \frac{A_{i,j}^{S(1)} + A_{i,j}^{S(2)}}{C_i}; i = 1, j = 0; i = N, j = P + 1. \quad (4.21)$$

Як відомо з теорії розсіювання [193], у комплексній площині енергій ($E = E' - iE''$) полюси S-матриці, які знаходяться як розв'язки рівняння

$$\frac{1}{S(E' - iE'')} = 0, \quad (4.22)$$

визначають резонансні енергії ($E_n^S = E_n'$) та резонансні ширини ($\Gamma_n^S = 2E_n''$) електронних станів.

4.2 Теорія функції розподілу густини ймовірності знаходження електрона у відкритій багатокаскадній наноструктурі

Знайдені у попередньому параграфі дві S-матриці (S_1 та S_2), згідно з [178], дають можливість виконати точний аналітичний розрахунок функції (W) розподілу густини ймовірності знаходження електрона у багатокаскадній наноструктурі. Використовуючи загальне квантово-механічне означення [64, 192] функції W і з урахуванням ортогональності хвильових функцій Ψ_1 і Ψ_2 , визначених згідно з (4.9) відповідними розв'язками S_1 і S_2 ,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*(z) \Psi_2(z) dz = 0 \quad (4.23)$$

вираз для функції густини ймовірності представляється у вигляді суми двох парціальних складових

$$W = W_1 + W_2 = \frac{1}{L} \left[\int_{-L/2}^{L/2} \left| \Psi_1 \left(z - \frac{L}{2} \right) \right|^2 dz + \int_{-L/2}^{L/2} \left| \Psi_2 \left(z - \frac{L}{2} \right) \right|^2 dz \right], \quad (4.24)$$

де початок системи координат зміщений на величину $L/2$ до центра РТС. Тут $L = Nd$ – лінійний розмір структури вздовж осі z ; d – розмір окремого каскаду; N – кількість каскадів у структурі.

Для розрахунку W_1 та W_2 розглянемо рівняння Шредінгера, записане для двох близьких значень (k і k') квазіімпульсів

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + k^2 \right] \Psi(k, z) = 0; \quad \left[\frac{d^2}{dz^2} + k'^2 \right] \Psi(k', z) = 0.$$

Домноживши перше рівняння на $\Psi^*(k', z)$, а друге – на $\Psi^*(k, z)$ та знайшовши їх різницю, у результаті інтегрування за змінною z у межах наноструктури отримаємо

$$\int_{-L/2}^{L/2} |\Psi(k, z)|^2 dz = \lim_{k' \rightarrow k} \frac{1}{k'^2 - k^2} \left[\Psi^*(k', z) \frac{d\Psi(k, z)}{dz} - \Psi(k, z) \frac{d\Psi^*(k', z)}{dz} \right] \Big|_{-L/2}^{L/2} \quad (4.25)$$

звідки видно, що густина ймовірності знаходження електрона у багатокаскадній структурі явно визначається лише хвильовими функціями електрона у зовнішніх напівбезмежних середовищах і для розрахунків не потребує точних аналітичних виразів для функцій у всіх внутрішніх шарах структури.

Тепер, використавши відомий з теорії розсіювання зв'язок S-матриці з фазою розсіювання (δ)

$$S = e^{2i\delta}, \quad (4.26)$$

хвильові функції електрона (4.9) у зовнішніх середовищах, визначені матрицями S_1 та S_2 , запишемо у вигляді

$$\Psi_{1,2}^{\pm} \left(z - \frac{L}{2} \right) = B_{1,2}^{\pm} \sin(\pm kz + \delta_{1,2}). \quad (4.27)$$

Тут з метою компактизації аналітичних виразів уведені індекси \pm , які відповідають функціям у лівому (-) та правому (+) напівбезмежних середовищах.

У результаті нескладних аналітичних перетворень із врахуванням (4.25)

та (4.27) вирази для W_1 та W_2 зводяться до вигляду:

$$W_i = \frac{|B_i^+|^2 + |B_i^-|^2}{2L} \lim_{k' \rightarrow k} \left\{ \frac{\sin \left[(k'-k) \frac{L}{2} + \delta_i(k') - \delta_i(k) \right]}{k'-k} + \frac{\sin \left[(k'+k) \frac{L}{2} + \delta_i(k') + \delta_i(k) \right]}{k'+k} \right\}, \quad i = 1, 2. \quad (4.28)$$

Далі, знайшовши з умови нормування (4.7) наступне співвідношення між коефіцієнтами $|B_{1,2}^+|^2 + |B_{1,2}^-|^2 = \frac{2}{\pi}$ та розклавши у ряд $\delta_{1,2}(k')$ з точністю до величин першого порядку малості з (4.29), отримуємо точний зв'язок W_i з фазами δ_1 та δ_2 відповідно

$$W_i = \frac{1}{\pi L} \left[\frac{L}{2} + \frac{d\delta_i(k)}{dk} - \frac{\sin[kL - 2\delta_i(k)]}{2k} \right], \quad i = 1, 2. \quad (4.29)$$

Тепер подамо комплексні функції S_1 і S_2 у вигляді

$$S_{1,2} = e^{-ikL} \frac{1 + iZ_{1,2}}{1 - iZ_{1,2}}, \quad (4.30)$$

де $Z_{1,2}$ – дійсні функції, що визначаються всіма елементами трансфер-матриці співвідношеннями

$$Z_{1,2} = \frac{\operatorname{Re}(t_{11} e^{ikL}) |t_{12}| \mp \sqrt{|t_{11}|^2 - |t_{12}|^2} \operatorname{Im}(t_{11} e^{-ikL})}{|t_{11}|^2 + \operatorname{Im}(t_{11} e^{-ikL}) |t_{12}| \pm \sqrt{|t_{11}|^2 - |t_{12}|^2} \operatorname{Re}(t_{11} e^{-ikL})} \quad (4.31)$$

Тоді з урахуванням (4.26) знаходиться однозначний розв'язок між $Z_{1,2}$ і фазами $\delta_{1,2}$

$$\delta_{1,2} = -\frac{1}{2} \left(kL - \frac{1}{i} \ln \frac{1 + iZ_{1,2}}{1 - iZ_{1,2}} \right), \quad (4.32)$$

а отже, і з обома складовими функції розподілу

$$W_{1,2} = \frac{1}{\pi L} \left(\frac{1}{1 + Z_{1,2}^2} \frac{dZ_{1,2}}{dk} - \frac{1}{k} \frac{Z_{1,2}}{1 + Z_{1,2}^2} \right) \quad (4.33)$$

Тепер вираз для функції розподілу густини ймовірності знаходження електрона з енергією E (або квазіімпульсом k) у N -каскадній РТС набуває аналітичного вигляду

$$W = \frac{1}{\pi L} \sum_{i=1}^2 \frac{1}{1 + Z_i^2} \frac{d}{dk} \left(\frac{Z_i}{k} \right). \quad (4.34)$$

Як відомо [178], залежності $W(E)$ дозволяють отримати значення резонансних енергій та ширин КСС електрона.

4.3 Властивості спектральних параметрів квазістаціонарних станів електрона у відкритій багатокаскадній наносистемі

Еволюцію спектральних параметрів КСС електрона у багат шаровій відкритій наноструктурі залежно від кількості каскадів у ній будемо вивчати у простій моделі, в основу якої покладено триямний каскад з GaAs-ямами ширин $a_1=6.8$ nm, $a_2=2.4$ nm, $a_3=3.7$ nm і з $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$ -бар'єрами однакових товщин 3 nm. Геометричні розміри потенціальних ям та бар'єрів такого каскаду моделюють загальну енергетичну схему одноямної (a_1) активної зони з двома робочими станами ($n=1$ та $n=4$), переходи між якими відбуваються з поглинанням електромагнітного випромінювання, та двоямного (a_2, a_3) екстрактора з двома станами ($n=2$ та $n=3$) фононної драбинки. Фізичні параметри структури також відомі: $m_w = 0.067 m_e$, $m_b = 0.095 m_e$, $U = 276$ meV.

Оскільки резонансні енергії та ширини електронних станів далі будуть знаходитись у трьох підходах як комплексні полюси S -матриці та із залежностей $W(E)$ і $D(E)$, то перш ніж перейти безпосередньо до вивчення властивостей КСС, спочатку розглянемо особливості еволюції функції розподілу густини ймовірності та коефіцієнта прозорості.

Розрахунок $W(E)$ та $D(E)$ виконувався у широкому інтервалі енергії у структурах з різною кількістю (N) каскадів. Він показав, що при довільних величинах N існують лише невеликі околиці енергій, в яких на залежностях $W(E)$ та $D(E)$ виникають квазілоренцові піки (при $N=1$) або комплекси піків (при

$N > 1$). Згідно з уведеною термінологією, такі піки називаються резонансними, або резонансами, і відповідають КСС електрона – положення піків визначають величини резонансних енергій (E_n), а їх ширини на половинах висот – резонансні ширини (Γ_n), або часи життя ($\tau_n = \hbar / \Gamma_n$) електронних станів. Тому на рис. 4.2 в одно-, дво-, та трикаскадній структурах зображені $W(E)$ та $D(E)$ лише в околах енергій резонансних піків, де n на панелях рисунків нумерує резонансні області.

З рис.4.2 видно, що в однокаскадній ($N=1$) структурі всі піки функції розподілу густини ймовірності та коефіцієнта прозорості мають лоренцову форму. Зі збільшенням кількості каскадів до двох ($N=2$) піки в областях $n=1, 2, 4$ деформуються (що добре видно на панелях при $n=4$) і зростають за величинами, а в області $n=3$ пік розщеплюється на два, висоти яких залишаються співмірні з відповідним резонансом при $N=1$.

У трикаскадній ($N=3$) структурі відбувається розщеплення всіх піків W і D з утворенням резонансів з двома ($n=1, 2, 4$) або трьома ($n=3$) максимумами. Подальше збільшення кількості каскадів, як видно з рис.4.3, приводить до формування на залежностях $W(E)$ та $D(E)$ резонансних комплексів, спектральні параметри яких визначають резонансні енергії (E_{nr}^D, E_{nr}^W) та ширини ($\Gamma_{nr}^D, \Gamma_{nr}^W$) квазістаціонарних станів електрона, як уже зазначалося раніше. Тут і далі уведена подвійна нумерація енергій і ширин, де індекс n відповідає номеру резонансного комплексу, а індекс r – номеру резонанса в комплексі. У структурі з одним каскадом $nr \equiv n$.

Як уже зазначалося, розрахунки резонансних енергій та ширин електронних станів здійснювалися, як у підходах функції розподілу ймовірності та коефіцієнта прозорості, так і S-матриці розсіювання, шляхом числового розв'язання рівняння (4.22).

Отримані числові результати показали, що при $N=1$ (табл.4.1) величини спектральних параметрів ($E_{nr}^S, E_{nr}^W, E_{nr}^D$ та $\Gamma_{nr}^S, \Gamma_{nr}^W, \Gamma_{nr}^D$) електронних станів у всіх трьох (S, W, D) підходах збігаються між собою з точністю не гірше 0.1%.

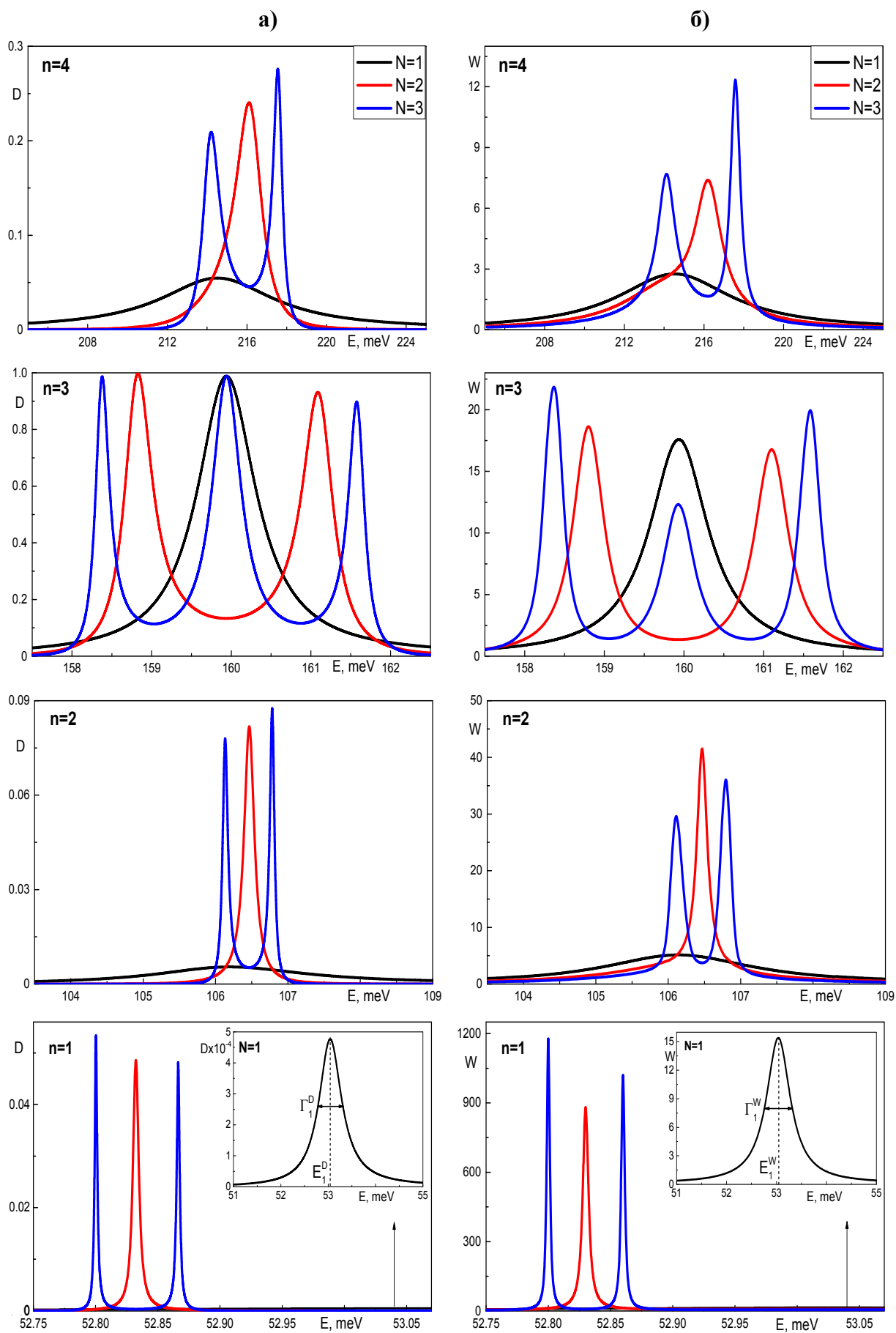


Рис. 4.2. Еволюція $D(E)$, $W(E)$ в околах резонансних піків

в одно-, дво-, та трикаскадних структурах

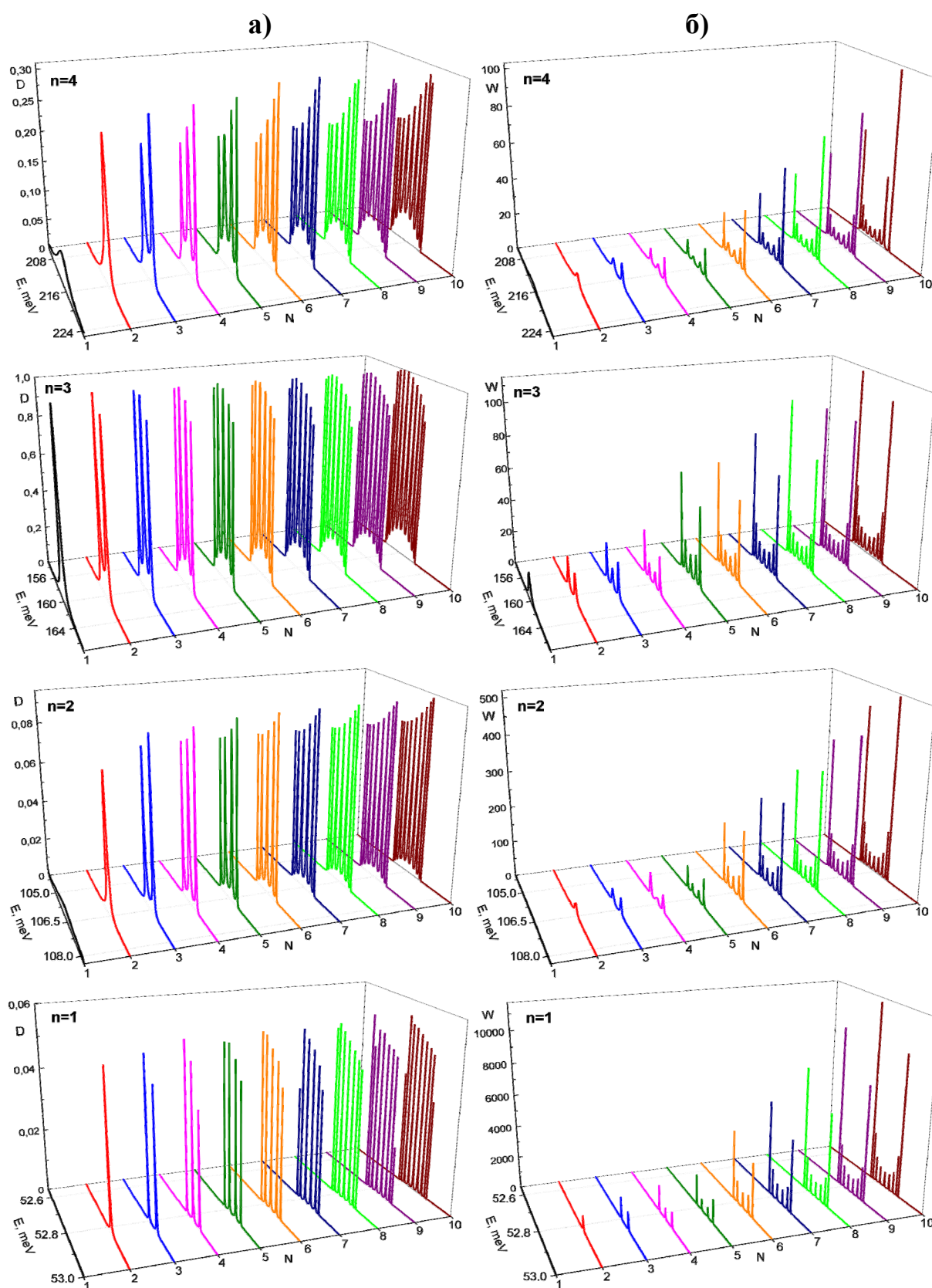


Рис. 4.3. Еволюція а) D та б) W в околах резонансних піків ($n=1, 2, 3, 4$) залежно від кількості каскадів (N)

Таблиця 4.1

Резонансні енергії ($E_{nr}^D, E_{nr}^W, E_{nr}^S$) та резонансні ширини ($\Gamma_{nr}^D, \Gamma_{nr}^W, \Gamma_{nr}^S$) квазістаціонарних станів електрона в одно- ($N=1$), дво- ($N=2$) та трикаскадній ($N=3$) структурах. Усі величини наведені в meV

n	r	N=1					
		E_{nr}^S	Γ_{nr}^S	E_{nr}^W	Γ_{nr}^W	E_{nr}^D	Γ_{nr}^D
4		214.52	6.94	214.58	6.96	214.51	6.99
3		159.94	0.89	159.94	0.89	159.93	0.89
2		106.14	2.50	106.14	2.58	106.19	2.52
1		53.04	0.58	53.04	0.58	53.04	0.58
		N=2					
4	2	216.22	1.57	216.20	1.98	216.10	1.63
	1	214.04	5.37	–	–	–	–
3	2	161.10	0.47	161.10	0.48	161.08	0.49
	1	158.80	0.42	158.80	0.42	158.82	0.44
2	2	106.46	0.17	106.46	0.17	106.46	0.17
	1	106.12	2.33	–	–	–	–
1	2	53.03	0.57	53.03	0.57	–	–
	1	52.83	$5 \cdot 10^{-3}$	52.83	$5 \cdot 10^{-3}$	52.83	$5 \cdot 10^{-3}$
		N=3					
4	3	217.58	0.54	217.58	0.58	217.55	0.58
	2	214.30	5.37	–	–	–	–
	1	214.12	1.03	214.12	–	214.20	–
3	3	161.58	0.24	161.58	0.25	161.57	0.26
	2	159.93	0.44	159.93	0.45	159.93	0.46
	1	158.36	0.21	158.36	0.21	158.37	0.22
2	3	106.78	0.07	106.78	0.07	106.78	0.07
	2	106.13	0.09	106.13	0.09	106.13	0.09
	1	106.12	2.34	–	–	–	–
1	3	53.03	0.57	53.02	0.57	–	–
	2	52.86	$3 \cdot 10^{-3}$	52.86	$3 \cdot 10^{-3}$	52.86	$3 \cdot 10^{-3}$
	1	52.80	$2 \cdot 10^{-3}$	52.80	$2 \cdot 10^{-3}$	52.80	$2 \cdot 10^{-3}$

У багатокаскадних структурах (наприклад $N=2, 3$ у табл.4.1) результати S -, W - і D -підходів відрізняються.

Зокрема, у N -каскадній системі у кожному ($n=1-4$) резонансному комплексі S -матриця однозначно визначає N резонансних енергій та N резонансних ширин, а у W - і D -підходах їх кількість менша у першому, другому та четвертому комплексах, що зумовлено колапсом [64] КСС з близькими

значеннями енергій та суттєво різними ширинами, який на залежностях $W(E)$ та $D(E)$ проявляється у злитті кількох резонансних піків в один (наприклад при $n=4$ на рис.4.2).

Як відомо з квантової механіки, знайдені у S-матричному підході резонансна енергія E_n^S та резонансна ширина Γ_n^S окремого квазістаціонарного стану дозволяють розрахувати функцію розподілу за енергією ймовірності знаходження електрона в системі, яка описується формулою Лоренца

$$L_n = \frac{\Gamma_n^S / 2}{(E - E_n^S)^2 + (\Gamma_n^S / 2)^2}$$

Тоді у випадку N -каскадної наноструктури, в якій виникають N -резонансні комплекси, в околі енергії n -го комплексу можна ввести наближену функцію розподілу густини ймовірності як нормовану лінійну комбінацію N функцій Лоренца:

$$W_n^S(E) = \sum_{r=1}^N W_{nr}^S(E), \quad (4.35)$$

де

$$W_{nr}^S(E) = C_n \frac{\gamma_{n,r}^S}{(E_n - E_{n,r}^S)^2 + (\gamma_{n,r}^S)^2}, \quad (4.36)$$

$E_{n,r}^S$, $\gamma_{n,r}^S = \Gamma_{nr}^S / 2$ - резонансні енергії та півширини, визначені полюсами S-матриці.

Коефіцієнт C_n визначається з умови [178], що інтеграл від функції розподілу $W_n^S(k)$ n -го комплексу по квазіімпульсу k в інтервалі, який охоплює N лоренцевих резонансів, повинен дорівнювати числу (N) квазістаціонарних станів електрона

$$\int_{K_n^{\min}}^{K_n^{\max}} W_n^S(E_0 K^2) dK = N$$

звідки для визначення C_n отримується співвідношення

$$C_n = \frac{N}{\sum_{r=1}^N I_{n,r}}, \quad (4.37)$$

$$I_{n,r} = \int_{K_n^{\min}}^{K_n^{\max}} \frac{\gamma_{n,r}^S}{(E_0 K^2 - E_{n,r}^S)^2 + (\gamma_{n,r}^S)^2} dK. \quad (4.38)$$

Тут

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0 L^2}; \quad K_n^{\min} = \sqrt{\frac{E_{n-1,N}^S + E_{n,1}^S}{2E_0}}; \quad K_n^{\max} = \sqrt{\frac{E_{n,N}^S + E_{n+1,1}^S}{2E_0}}; \quad K_1^{\min} = 0$$

Інтегрування в (4.39) виконується точно, у результаті чого для I_{nr} отримується остаточний аналітичний вираз

$$\begin{aligned} I_{n,r} = & \\ = \frac{1}{\sqrt{8}\Delta_{n,r}E_0} & \left\{ \alpha_{nr}^+ \left(\pi - \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{2}\alpha_{nr}^- (\Delta_{n,r} + K_n^{\min} K_n^{\max}) (K_n^{\max} - K_n^{\min})}{\Delta_{n,r} (K_n^{\max} - K_n^{\min})^2 - (\tilde{E}_{nr} - K_n^{\min} K_n^{\max})^2 - \tilde{\gamma}_{nr}^2} \right) + \right. \\ & \left. + \alpha_{nr}^- \ln \frac{(\Delta_{n,r} + (K_n^{\max})^2 + \sqrt{2\alpha_{nr}^+} K_n^{\max}) \sqrt{(\tilde{E}_{nr} - (K_n^{\min})^2)^2 + \tilde{\gamma}_{nr}^2}}{(\Delta_{n,r} + (K_n^{\min})^2 + \sqrt{2\alpha_{nr}^+} K_n^{\min}) \sqrt{(\tilde{E}_{nr} - (K_n^{\max})^2)^2 + \tilde{\gamma}_{nr}^2}} \right\} \quad (4.39) \end{aligned}$$

де введені позначення безрозмірених змінних

$$\Delta_{n,r} = \sqrt{\tilde{E}_{nr}^2 + \tilde{\gamma}_{nr}^2}; \quad \tilde{E}_{nr} = \frac{E_{nr}^S}{E_0}; \quad \tilde{\gamma}_{nr} = \frac{\gamma_{nr}^S}{E_{n0}}; \quad \alpha_{nr}^{\pm} = \Delta_{n,r} \pm \tilde{E}_{nr}.$$

На рис.4.4 зображені еволюції точної $W(E)$ та наближеної $W_n^S(E)$ функцій розподілу густин імовірностей, а також парціальних складових $W_{nr}^S(E)$, у двокаскадній ($N=2$) та трикаскадній ($N=3$) наносистемах. На цих рисунках з метою поліпшення візуалізації використана логарифмічна шкала. Зауважимо, що в усіх інтервалах енергій резонансних комплексів чисельні значення функцій $W(E)$ та $W_n^S(E)$ виявляються настільки близькими, що у масштабі рис.4.4 різниця між ними непомітна.

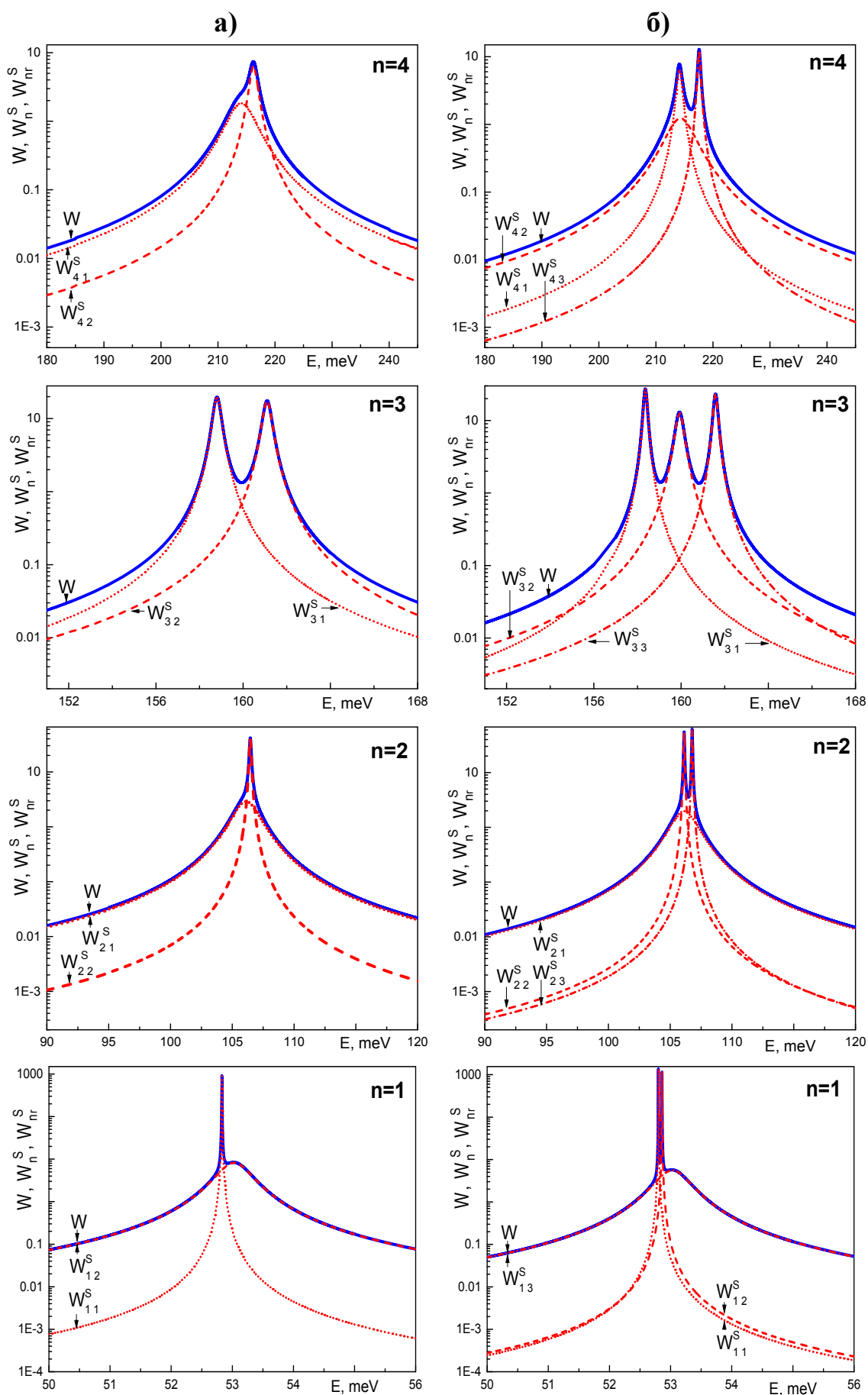


Рис. 4.4. Еволюції функцій W , $W_n^S(E)$ та W_{nr}^S в околах резонансних піків у а) двокаскадній ($N=2$) та б) трикаскадній ($N=3$) структурах

Рис.4.4 добре ілюструє процес утворення резонансних комплексів у наноструктурі зі збільшенням числа каскадів (N). Так, у двокаскадній структурі в тих околах ($n=1-4$) енергій, де знаходяться КСС окремого каскаду (рис.4.2), виникають пари електронних станів з близькими значеннями резонансних енергій (E_{n1}^S та E_{n2}^S). Співвідношення між ширинами цих станів визначальне при формуванні резонансних комплексів. Якщо ширини Γ_{n1}^S та Γ_{n2}^S сумірні і задовольняють нерівності $(\Gamma_{n1}^S + \Gamma_{n2}^S)/2 < (E_{n2}^S - E_{n1}^S)$, то форма $W(E)$ має вигляд двопікової кривої (див. панель при $n=3$), яка дозволяє однозначно визначити резонансні енергії (E_{n1}^W, E_{n2}^W) та ширини ($\Gamma_{n1}^W, \Gamma_{n2}^W$) обох електронних станів (табл.4.1 при $n=3$). У випадку значної різниці між величинами Γ_{n1}^S та Γ_{n2}^S на залежності $W(E)$ може утворюватися або крива з двома піками ($n=1$), або, у результаті колапсу, деформована крива з одним максимумом ($n=2, 4$), з яких однозначно отримати спектральні характеристики (E_{n1}^W, Γ_{n1}^W та E_{n2}^W, Γ_{n2}^W) обох КСС не вдається, що видно з табл.4.1 при $n=1, 2, 4$. Аналогічно у структурах з більшою кількістю каскадів (наприклад $N=3$, рис.4.4б) у результаті суперпозиції N резонансів на залежностях $W(E)$ виникають комплекси як з квазілоренцевими, так і з деформованими несиметричними піками.

Виявлені особливості спектральних характеристик резонансних комплексів $W(E)$ та $D(E)$ призводять до дещо різних залежностей від кількості каскадів резонансних енергій та ширин, визначених у W - і D - і S -підходах, які наведені на рис.4.5 і 4.6 відповідно. З метою ліпшого візуального сприйняття отримані дискретні значення $E_{nr}^S(N)$, $E_{nr}^W(N)$, $E_{nr}^D(N)$ та $\Gamma_{nr}^S(N)$, $\Gamma_{nr}^W(N)$, $\Gamma_{nr}^D(N)$ на цих рисунках зображені суцільними лініями.

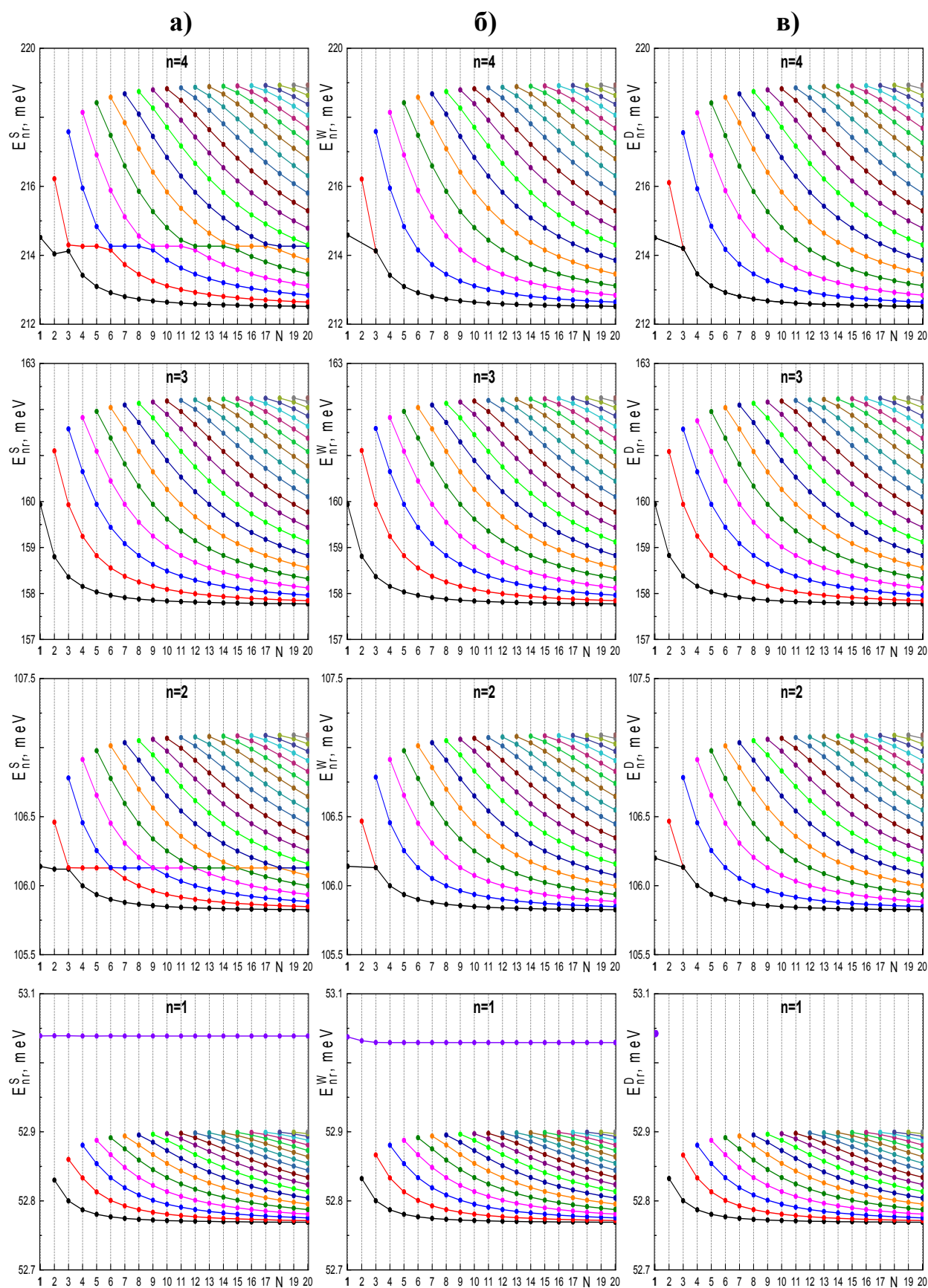


Рис.4.5. Еволюція резонансних енергій (E_{nr}^S , E_{nr}^W , E_{nr}^D) залежно від кількості каскадів (N) у наноструктурі, розрахованих у а) S -, б) W - і в) D -підходах

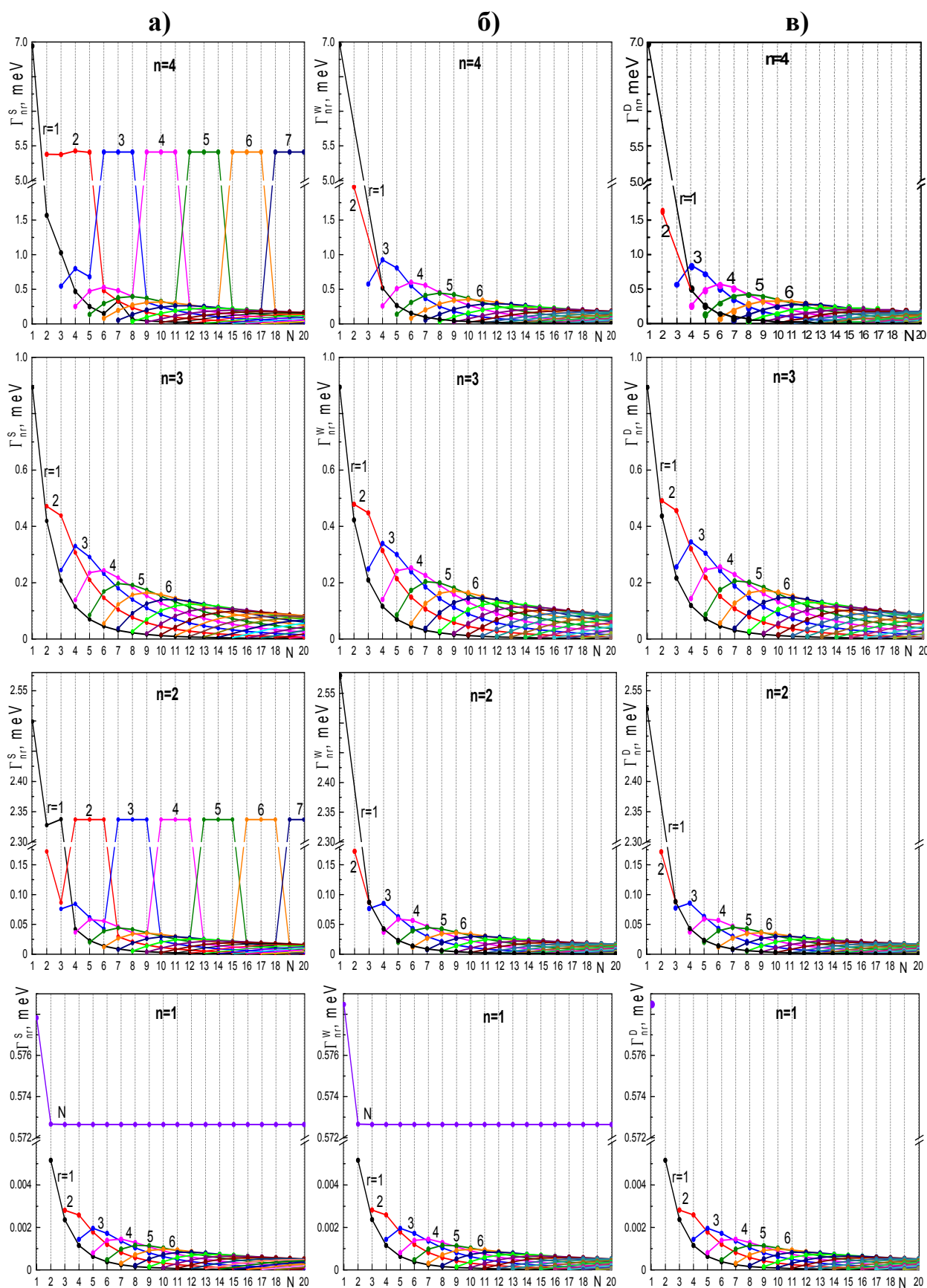


Рис. 4.6. Еволюція резонансних ширин (Γ_{nr}^S , Γ_{nr}^W , Γ_{nr}^D) у залежності від кількості каскадів (N) у наноструктурі, розрахованих у а) *S*-, б) *W*- і в) *D*-підходах

З рис.4.5 видно, що в усіх трьох підходах зі збільшенням N резонансні енергії ККС формують смуги, ширини яких при $N > 10$ практично не змінюються. Загальні властивості залежностей резонансних енергій та ширин у W - (рис.4.5б, рис.4.6б) і D - (рис.4.5в, рис.4.6в) підходах виявляються практично однаковими, а величини E_{nr}^W та E_{nr}^D і Γ_{nr}^W та Γ_{nr}^D – досить близькими, за винятком енергії E_{1N}^W , яка у D -підході відсутня. Щодо спектральних характеристик (E_{nr}^S та Γ_{nr}^S) у S підході, то, як видно з рис.4.5а, їх основна відмінність від W - і D -підходів полягає у тому, що при $n=2$ і $n=4$ на залежностях E_{nr}^S від N виникають антикросинги, які у двох інших підходах відсутні. Стани з енергіями на горизонтальних ділянках, розташованими між антикросингами, характеризуються суттєвими значеннями резонансних ширин (малими часами життя) – рис.4.6а. У цих станах електрон виявляється або слабо локалізованим у другій (a_{22}) ямі екстрактора (при $n=2$) останнього каскаду багатокаскадної структури, або в активній ямі (a_1) першого каскаду (при $n=4$), звідки він може легко тунелювати у зовнішнє напівбезмежне середовище-яму. Такі слаболокалізовані стани не проявляються на залежностях $W(E)$ та $D(E)$, а тому їх спектральні характеристики на рис. 4.5 і 4.6 також відсутні. Аналогічно, у стані з енергією $E_{n=1r=N}^S$ у S -підході або $E_{n=1r=N}^W$ у W -підході електрон характеризується значною резонансною шириною, як видно рис. 4.6, що зумовлено його слабкою локалізацією в активній ямі (a_1) першого каскаду завдяки високій імовірності тунелювання у ліве напівбезмежне середовище-яму.

Ширини всіх інших станів у розглядуваних трьох підходах (рис.4.6) мають якісно подібну залежність від N , яка полягає у зменшенні величин Γ_{nr}^S , Γ_{nr}^W і Γ_{nr}^D зі збільшенням кількості каскадів. Така їх поведінка пов'язана зі зростанням часів життя електрона у наношарах внутрішніх каскадів, через зменшення ймовірності виходу електрона з багатокаскадної наноструктури назовні при поступовому «додаванні» нових зовнішніх каскадів.

Відзначимо також цікаву особливість, характерну для резонансних ширин, визначених полюсами S-матриці, яка полягає у тому, що при довільному N сума ширин всіх КСС у n -му комплексі з високою точністю збігається з шириною n -го стану в однокаскадній ($N=1$) структурі $\sum_{r=1}^N \Gamma_{nr}^S(N) = \Gamma_n^S(N=1)$.

Як відомо [6, 8], одним із параметрів, який має важливе значення для оптимізації функціонування ККД, є часи життя електрона у робочих станах. Згідно з квантовою механікою [192], величини часів життя (або резонансних ширин) суттєво залежать від потужностей потенціальних бар'єрів. Тому далі, з метою виявлення впливу геометричних розмірів бар'єрів у обраній моделі багатокаскадної структури $(b_{in}/a_1/b_1/a_2/b_2/a_3/b_3/a_1/b_1/a_2/b_2/a_3/b_3/\dots/a_1/b_1/a_2/b_2/a_3/b_{out})$, досліджувалися особливості еволюцій спектральних характеристик (резонансних енергій і ширин) електронних станів від товщин внутрикаскадних (b_1, b_2), міжкаскадних (b_3), вхідного (b_{in}) і вихідного (b_{out}) бар'єрів у структурах з різною кількістю каскадів. Подальші розрахунки резонансних енергій та ширин виконувалися через комплексні полюси S-матриці, оскільки, як було встановлено вище, лише підхід S-матриці дозволяє отримати найбільш повну інформацію про всі КСС.

На рис.4.7 зображені залежності резонансних енергій (E_n^S) і ширин (Γ_n^S) електронних станів в однокаскадній ($N=1$) структурі від товщин зовнішніх лівого вхідного (b_{in}) і правого вихідного (b_{out}) та внутрішніх (b_1, b_2) бар'єрів при фіксованих ширинах потенціальних ям. З рис.4.7а,г видно, що зміна товщин зовнішніх бар'єрів (b_{in}, b_{out}) слабо впливає на енергії електронних станів. У граничних випадках $b_{in}=0$ ($b_{out}=0$) система перетворюється у двоямну $b_1/a_2/b_2/a_3/b_{out}$ ($b_{in}/a_1/b_1/a_2/b_2$), в якій стани ($n=1, 4$ або $n=2$), що були локалізовані у крайніх (a_1 або a_3) потенціальних ямах, відсутні. Збільшення товщин b_{in} або b_{out} приводять до зменшення ширин КСС. Причому цей вплив тим сильніший, чим ближче розташований бар'єр до області максимальної локалізації електрона в каскаді. Тому зміна b_{in} слабо впливає на Γ_2 , а b_{out} – на Γ_1 та Γ_4 . При

потужних бар'єрах b_{in} або b_{out} (більше 5 nm) систему можна вважати практично напіввідкритою, в якій E_{nr}^S та Γ_{nr}^S слабо залежать від товщини одного із зовнішніх бар'єрів.

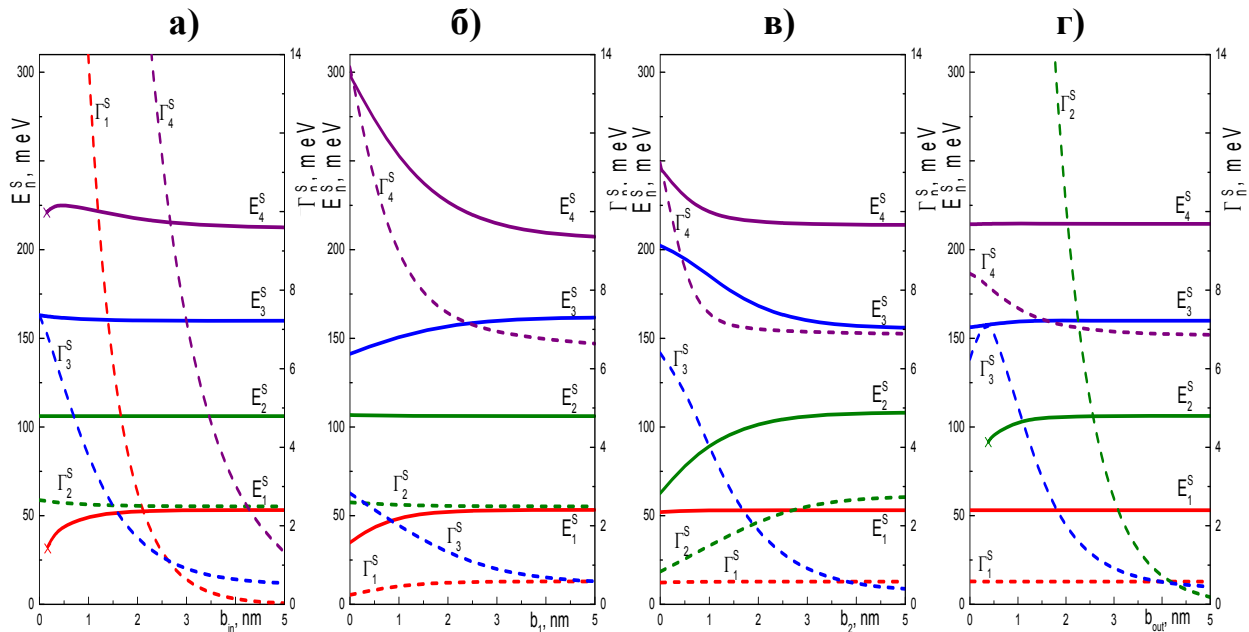


Рис. 4.7. Залежності резонансних енергій (E_n^S) та ширин (Γ_n^S) від товщин (b_{in} , b_1 , b_2 , b_{out}) бар'єрів в окремому каскаді

З рис.4.7 видно, що зміна внутрішніх бар'єрів (b_1 , b_2) найбільше впливає лише на ті стани, які локалізовані у потенціальних ямах, між якими розташований відповідний змінний бар'єр (a_1 та a_2 при зміні b_1 ; a_2 та a_3 при зміні b_2). Тому зміна b_1 (рис.4.7б) переважно впливає на спектральні параметри станів $n=1, 4$ (локалізовані в a_1) та $n=3$ (локалізований в a_2), а b_2 – на стани $n=2$ (локалізований в ямі a_3) та $n=3$. При зростанні b_1 (або b_2) у каскаді виникають слабозв'язані одноямна $b_{in}/a_1/b_1$ ($b_2/a_3/b_{out}$) та двоямна $b_1/a_2/b_2/a_3/b_{out}$ ($b_{in}/a_1/b_1/a_2/b_2$) структури, тунельний зв'язок між якими при потужних товщинах b_1 (b_2) практично відсутній і ці структури можна вважати односторонньо відкритими. Тому при $b_1, b_2 > 5$ nm ширини електронних станів змінюються слабо.

На рис.4.8 – 4.10 наведені результати розрахунку еволюції резонансних енергій (E_{nr}^S) та резонансних ширин (Γ_{nr}^S) ККС електрона у дво (рис.4.8), три

(рис.4.9) та десятикаскадних (рис.4.10) структурах у залежності від товщин внутрикаскадних (b_1, b_2) та міжкаскадних (b_3) бар'єрів при фіксованих інших параметрах наносистеми.

Зауважимо, що, як відомо з попереднього аналізу та видно з рис.4.8 – 4.10, у N -каскадних структурах у кожному з резонансних комплексів ($n=1-4$) виникає N квазістаціонарних станів. Зміна товщин бар'єрів (b_1, b_2, b_3), аналогічно до однокаскадної структури, найбільше впливає на енергії тих станів, які локалізовані у найближчих до відповідного бар'єра потенціальних ямах. Загальні еволюції E_{nr}^S від b_1, b_2 і b_3 при різних N (рис.4.8 – 4.10) якісно подібні, з яких видно, що збільшення b_1, b_2 та b_3 приводить до перенормування енергетичного спектра та зменшення відстані між резонансними енергіями в кожному з квазістаціонарних комплексів. Ширини електронних станів залежно від b_1, b_2 та b_3 еволюціонують по різному.

Зокрема, ширини електронних станів у багатокаскадних структурах при малих товщинах внутрикаскадних бар'єрів (b_1, b_2), що не перевищують порядку 1.5-2 nm, виявляються співмірними за величинами і зменшуються зі зростанням кількості (N) каскадів через зменшення загальної тунельної прозорості всієї структури. Зі збільшенням b_1 (або b_2), як видно з рис.4.8 – 4.10, ширина лише одного з станів у комплексах $n=1, 2, 4$ зростає і в інтервалі $b_1 (b_2) > 3$ nm змінюється слабо. Ширини всіх інших ($N-1$) станів зі зростанням товщин $b_1 (b_2)$ тільки зменшуються і при $b_1 (b_2) > 5$ nm набувають нехтовно малих значень. Така поведінка Γ_{nr}^S залежно від b_1 або b_2 зумовлена ось чим.

Збільшення товщин внутрикаскадних бар'єрів $b_1 (b_2)$ зменшує тунельний зв'язок між багатоямними структурами, які знаходяться між відповідними бар'єрами $b_1 (b_2)$ у сусідніх каскадах. Тому при достатньо потужних товщинах $b_1 (b_2)$ у багатокаскадній системі виникають практично невзаємодіючі ($N-1$) триямні структури $b_1/a_2/b_2/a_3/b_3/a_1/b_1$ ($b_2/a_3/b_3/a_1/b_1/a_2/b_2$) та напіввідкриті однамна $b_{in}/a_1/b_1$ ($b_2/a_3/b_{out}$) і двоямна $b_1/a_2/b_2/a_3/b_{out}$ ($b_{in}/a_1/b_1/a_2/b_2$).

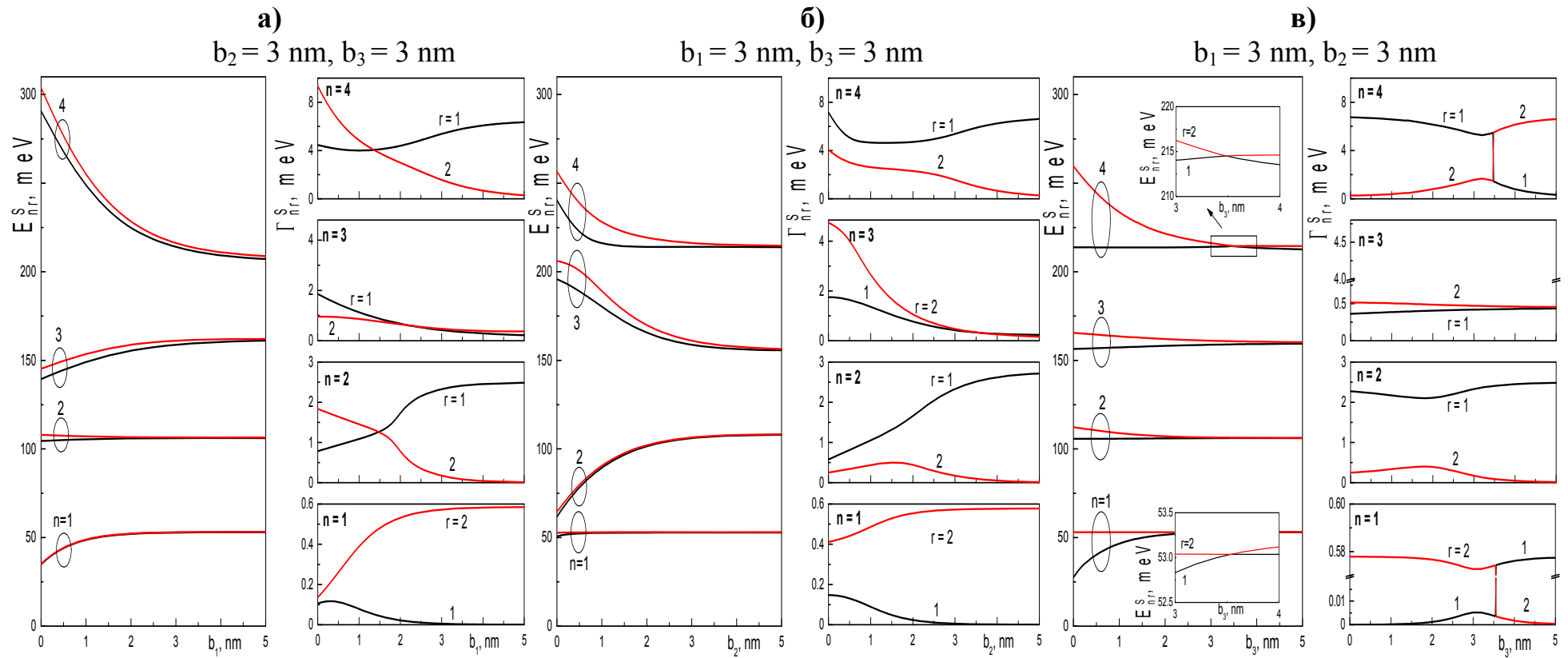


Рис. 4.8. Залежності резонансних енергій (E_{nr}^S) та ширин (Γ_{nr}^S) від товщин (b_1, b_2, b_3) бар'єрів у двокаскадній структурі

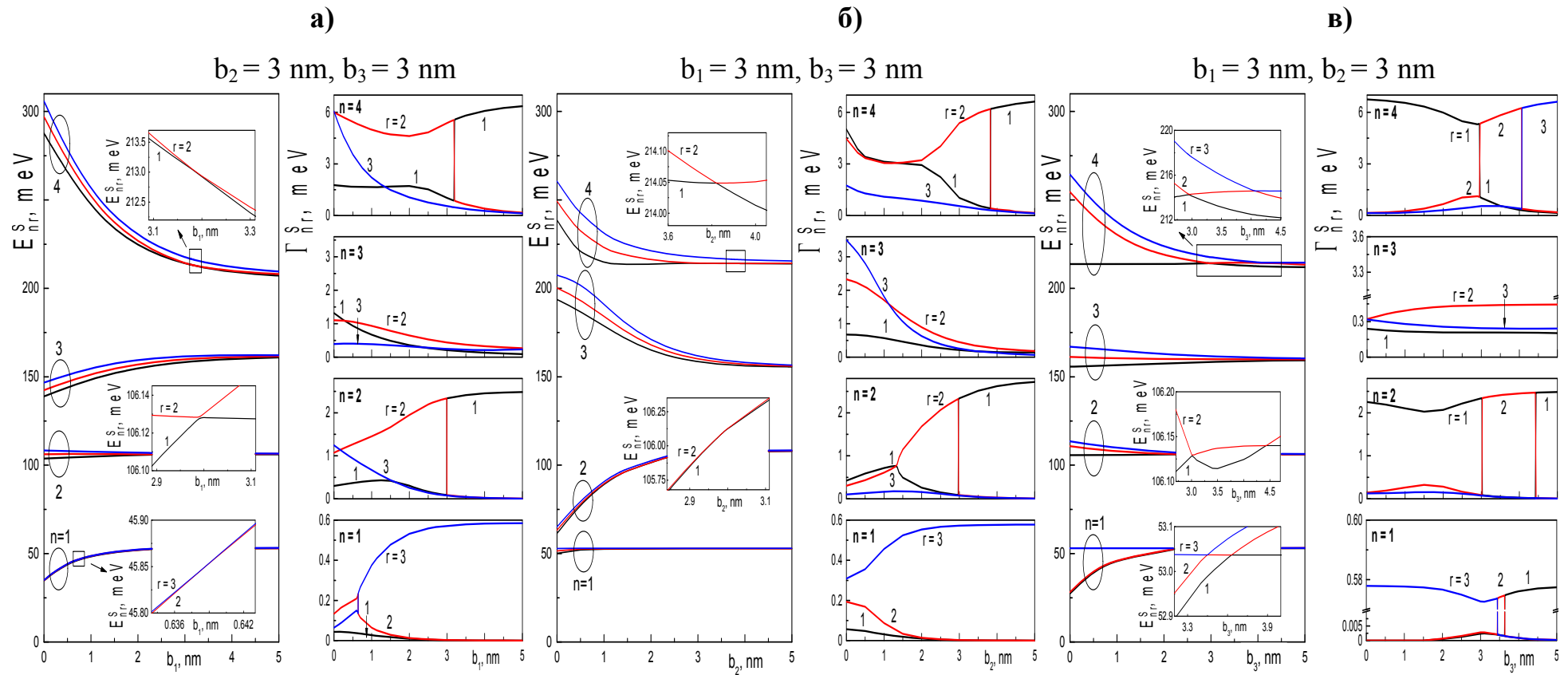


Рис. 4.9. Залежності резонансних енергій (E_{nr}^S) та ширин (Γ_{nr}^S) від товщин (b_1, b_2, b_3) бар'єрів у трикаскадній структурі

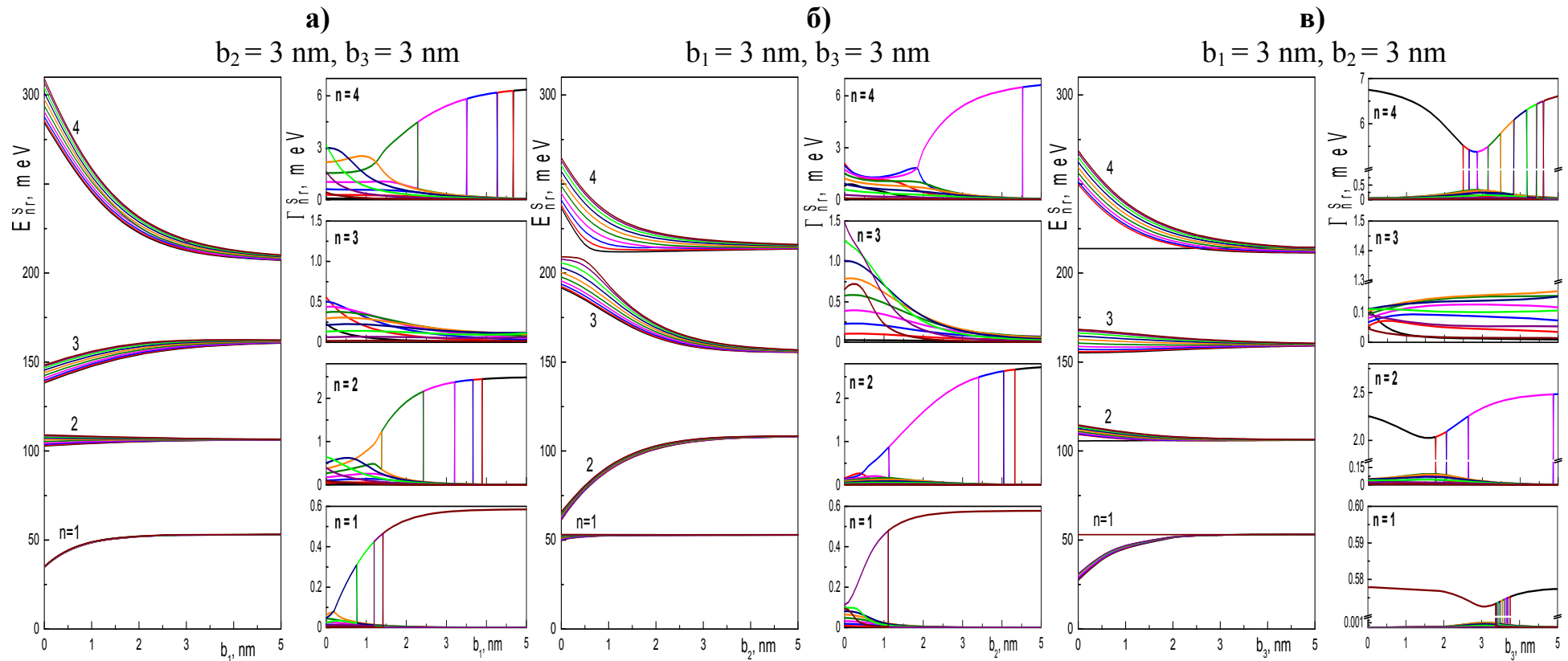


Рис. 4.10. Залежності резонансних енергій (E_{nr}^S) та ширин (Γ_{nr}^S) від товщин (b_1, b_2, b_3) бар'єрів

у десятикаскадній структурі

Стани електрона ($N-2$ у кожному $n=1-4$ резонансному комплексі) у внутрішніх триямних структурах виявляються сильно локалізованими і характеризуються великими часами життя (малими ширинами). У зовнішніх напіввідкритих структурах електрон локалізований слабше через більшу ймовірність виходу у зовнішнє напівбезмежне середовище-яму, а отже, у цьому стані електрон буде мати менший час затухання (більшу ширину), ніж у інших станах з відповідного резонансного комплексу.

Зі збільшенням міжкаскадного бар'єра (b_3), аналогічно до попередніх міркувань, у багатокаскадній структурі виділяються ($N-2$) внутрішні та два зовнішні напіввідкриті каскади. У внутрішніх ($N-2$) каскадах електрон виявляється локалізованим тим сильніше, чим більша товщина b_3 і чим далі знаходиться цей каскад від лівого чи правого краю структури, через що часи життя електрона у ($N-2$) станах у внутрішніх каскадах виявляються значними. Зі збільшенням b_3 (рис.4.8 – 4.10) ширини цих станів зменшуються, а часи життя – зростають.

У зовнішніх лівому та правому напіввідкритих каскадах часи життя електрона у двох станах з одного комплексу (n) виявляються різними, що зумовлено різною кількістю бар'єрів, які необхідно подолати електрону для виходу з структури. Наприклад, у станах з першого ($n=1$) чи четвертого ($n=4$) комплексів, у яких електрон з більшою ймовірністю перебуває в активних ямах (a_1) каскадів, для виходу з першого (лівого) каскаду достатньо проникнути крізь один бар'єр b_{in} . Тому електрон у такому стані буде мати малий час затухання і велику резонансну ширину. А для виходу з останнього каскаду електрон повинен пройти крізь три бар'єри сумарної товщини $b_1+b_2+b_{out}$, через що його час затухання буде значно більшим (ширина меншою). Аналогічні міркування справедливі для станів другого ($n=2$) комплексу, в яких електрон локалізований у ямах a_3 . Щодо станів третього ($n=3$) комплексу, то, оскільки електрон у цих станах знаходиться в ямах a_2 , які у крайніх лівому та правому каскадах відділені від зовнішніх напівбезмежних середовищ-ям бар'єрами $b_{in}+b_1$ та b_2+b_{out} , сумарна товщина яких у розглядуваному випадку однакова

(6 nm), резонансні ширини обох цих станів виявляються сумірні між собою і практично не залежать від величини b_3 .

Отже, як видно з рис.4.8-4.10, у всьому розглядуваному інтервалі зміни товщин міжкаскадних бар'єрів (b_3) у кожному з комплексів ($n=1, 2, 4$) завжди існує лише один стан з значною резонансною шириною, величина якої слабо залежить від b_3 . Ширини всіх інших станів за фіксованих товщинах внутрикаскадних бар'єрів ($b_1=b_2=3\text{нм}$) виявляються малими і зі збільшенням b_3 набувають нехтовно малих значень.

Привертає увагу ще один цікавий ефект, який проявляється у багатокаскадних структурах на залежностях E_{nr}^S та Γ_{nr}^S ($n=1, 2, 4$) спочатку при $N=2$ від b_3 (рис.4.8в), а при $N>2$ і від b_1 та b_2 (рис.4.9, 4.10), і полягає у різкій, майже стрибкоподібній (подібно до фазового переходу першого роду), зміні ширин двох станів у вузьких околах антикросингів між енергіями цих станів (показані на вставках на панелях рис.4.8 та рис.4.9). З фізичних міркувань очевидно, що в цих малих інтервалах товщин бар'єрів відбувається «обмін» областями локалізації електрона у двох станах з переходом із зовнішнього напіввідкритого каскаду, де час затухання електрона малий, у каскад зі значним часом життя. З рис.4.8-4.10 видно, що кількість таких інтервалів товщин бар'єрів (b_1, b_2, b_3) зі збільшенням числа каскадів тільки зростає.

Висновки до розділу 4

1. У наближенні ефективних мас і прямокутних потенціалів із застосуванням методу трансфер-матриці на основі точно отриманих аналітичних виразів для S -матриці розсіювання, функції розподілу густини ймовірності (W) та коефіцієнта прозорості (D) у відкритій наноструктурі з довільним числом багатошарових каскадів розвинено теорію спектральних характеристик (резонансних енергій та резонансних ширин) квазістаціонарних станів електрона.

2. На прикладі GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As багатокаскадної резонансно-тунельної

структури з однаковими триямними каскадами у залежності від числа каскадів досліджено особливості еволюції резонансних енергій та резонансних ширин, визначених у трьох різних підходах: (I) через комплексні полюси S -матриці та з спектральних розподілів (II) функції густини ймовірності й (III) коефіцієнта прозорості. Установлено, що у N -каскадній наносистемі в областях енергій, що не перевищують висоти потенціальних бар'єрів, утворюються чотири резонансні комплекси, у кожному з яких S -матриця однозначно визначає N резонансних енергій та N резонансних ширин КСС електрона, а у W - і D -підходах їх кількість у першому, другому та четвертому комплексах при $N > 1$ менша, що зумовлено колапсом резонансів.

3. Аналітично розрахована наближена функція розподілу густини ймовірності знаходження електрона у відкритій N -каскадній наноструктурі як нормована сума N функцій Лоренца з резонансними енергіями та ширинами, визначеними полюсами S -матриці, дозволила детально вивчити еволюцію резонансних комплексів КСС залежно від кількості каскадів і показати, що виникаючий на залежностях функції ймовірності від енергії колапс резонансів зумовлений суперпозицією електронних станів з близькими значеннями резонансних енергій та суттєво різними резонансними ширинами (часами життя).

4. Показано, що в усіх трьох підходах зі збільшенням кількості каскадів резонансні енергії квазістаціонарних станів у комплексах формують відповідні смуги, ширини яких при $N > 10$ практично не змінюються. При цьому у S -підході на залежностях енергій від N виникають антикросинги, які у двох інших підходах відсутні. Стани з енергіями на горизонтальних ділянках між антикросингами характеризуються суттєвими значеннями резонансних ширин (малими часами життя), через локалізацію електрона у крайніх лівому або правому каскадах і, відповідно, високу ймовірність тунелювання у зовнішнє напівбезмежне середовище-яму. Ширини всіх інших станів, локалізованих у внутрішніх каскадах багатокаскадної резонансно-тунельної структури, швидко спадають зі збільшенням кількості каскадів.

5. Проаналізовано залежності резонансних енергій та резонансних ширин ККС електрона від товщин внутрикаскадних і міжкаскадних потенціальних бар'єрів у відкритих резонансно-тунельних наноструктурах з різною кількістю каскадів. Установлено, що зміна розмірів бар'єрів найбільше впливає на енергії тих станів, які локалізовані у найближчих до відповідного бар'єра потенціальних ямах. Збільшення товщин внутрикаскадних або міжкаскадних бар'єрів приводить до такого перенормування енергетичного спектра, при якому відстані між резонансними енергіями (ширини смуг) у всіх комплексах тільки зменшуються.

6. З'ясовано, що у випадку слабопотужних (до 2 nm) внутрикаскадних бар'єрах резонансні ширини електронних станів у кожному з комплексів виявляються сумірними між собою і зменшуються зі зростанням кількості каскадів через зменшення загальної тунельної прозорості всієї багатокаскадної структури. Виявлено, що у результаті різної локалізації електронних станів у різних каскадах структури, у кожному з комплексів $n=1, 2, 4$ є лише один стан, резонансна ширина якого зростає зі збільшенням внутрикаскадних бар'єрів в інтервалі малих розмірів і змінюється слабо при товщинах більших за 3 nm. Товщини міжкаскадних бар'єрів практично не впливають на резонансні ширини (часи життя) цих станів. Натомість ширини інших $N-1$ станів зі зростанням як товщин внутрикаскадних, так і міжкаскадних бар'єрів, тільки зменшуються.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ

У моделі координатозалежних ефективних мас для електрона та ізотропного діелектричного континууму для обмежених та інтерфейсних фононів із використанням методу температурних функцій Гріна в однофононному наближенні розвинено квантово-механічну теорію перенормованих оптичними фононами, з урахуванням усіх внутривісних і міжвісних конфігураційних взаємодій, спектральних характеристик станів електрона у наноструктурі з довільною кількістю потенціальних ям і бар'єрів.

Досліджено особливості температурних еволюцій перенормованих взаємодією зі всіма гілками обмежених та інтерфейсних фононів електронних спектрів у каскаді (GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As) експериментального [49, 50] широкопasmового ККД далекого ІЧ-діапазону з двоюмною активною зоною та шестиямним екстрактором. Установлено, що за довільних температур основний внесок у перенормування електронних станів зумовлений взаємодією з 16 гілками високоенергетичної смуги інтерфейсних фононів, а вплив обмежених фононів виявляється на порядок меншим.

Уперше показано, що при таких товщинах бар'єра у двоюмній активній зоні каскаду ККД, при яких різниця між енергіями двох довільних станів електрона збігається з енергією поздовжніх фононів середовищ-ям або середовищ-бар'єрів, відбувається різке зростання величин і зміщень, і затухань обох станів, зумовлених взаємодією з фононами. Виявлений ефект може відігравати важливу роль при функціонуванні ККД з багатоямною активною зоною, перенормовуючи як робочі стани наноприладу, так і стани «фононної драбинки» екстракторів.

Установлено, що, відповідно до результатів експерименту [49, 50], у каскаді ККД з двоюмною активною зоною ширина смуги поглинання суттєво залежить від розміру потенціального бар'єра між ямами активної зони і зменшується зі збільшенням товщини бар'єра через зменшення відстані між енергіями розщеплених пар електронних станів. Показано, що збільшення температури приводить до низькоенергетичного зміщення смуги поглинання

ККД і розширення її піків, причому, через слабкість електрон-фононої взаємодії, основним фактором температурного перенормування спектрального положення смуги поглинання є відповідні температурні зміни висот потенціальних бар'єрів каскаду.

Послідовним аналізом енергетичного спектра електрона та сил осциляторів квантових переходів запропоновано оптимізований дизайн каскаду ККД, в якому розміри потенціальних ям і бар'єрів активної області й екстрактора підібрані так, щоб функціонування наноприладу відбувалося в інтервалі довжин хвиль 8.2-8.7 мкм далекого ІЧ-діапазону з ефективним фонон-супровідним тунелюванням електронів крізь екстрактор.

У наближенні координатозалежних ефективних мас розвинені теорії електронних станів у наноструктурі закритого типу з довільною скінченною кількістю каскадів та у надґратці з потенціалом типу Кроніґа-Пенні з періодом, який дорівнює окремому каскаду. Здійснено порівняльний аналіз еволюції властивостей електронних станів залежно від кількості каскадів та їх геометричних конфігурацій в обох моделях.

Досліджено властивості електронних станів і сил осцилятора у закритому багатокаскадному структурному елементі експериментального ККД [6] з чотирьохкаскадами з $\text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{As}$ -ямами та $\text{In}_{0.53}\text{Al}_{0.47}\text{As}$ -бар'єрами та проаналізовані особливості формування смуги поглинання наноприладу у далекій ІЧ-області. Установлено, що у N -каскадній наносистемі енергетичний спектр характеризується квазідискретними зонами енергій, кількість рівнів у яких дорівнює кількості каскадів. Показано, що оцінка спектральних характеристик енергетичних зон у закритій багатокаскадній структурі скінченних розмірів може бути із задовільною точністю здійснена у простій моделі Кроніґа-Пенні з двокаскадним елементом надґратки.

Уперше показано, що у закритій багатокаскадній структурі електрон може знаходитися у різних каскадах наносистеми з суттєво різними ймовірностями, величини яких в окремих каскадах або навіть групах каскадів можуть бути нехтовно малими, що значно відрізняється від устояних уявлень у

теорії ККД, які базуються на поширених у літературі надгратковій та однокаскадній моделях.

Уперше виявлено, що смуга поглинання N -каскадного ККД формується N квантовими переходами лише між тими станами, які характеризуються близькими просторовими розподілами ймовірностей знаходження у всій багатокаскадній системі, а ширина смуги поглинання визначається ширинами відповідних електронних зон, між якими відбуваються робочі переходи.

Можна очікувати, що виявлений ефект неоднорідного розподілу локалізації електронних станів у каскадах багатокаскадних наноструктур є однією з причин низької ефективності переважної більшості експериментальних ККД, для підвищення якої, очевидно, необхідний такий дизайн багатокаскадного елемента, який для електрона в усіх робочих станах забезпечить сумірні ймовірності знаходження у каскадах структури.

На основі точно аналітично розрахованих S -матриці розсіювання, функції густини ймовірності (W) і коефіцієнта прозорості (D) розвинено теорію спектральних характеристик квазістаціонарних станів електрона у відкритій резонансно-тунельній наноструктурі з довільною кількістю однакових каскадів.

На прикладі відкритої багатокаскадної наносистеми з трійними каскадами з GaAs-ямами та $Al_{0.33}Ga_{0.67}As$ -бар'єрами досліджено еволюцію резонансних енергій та резонансних ширин електронних станів у трьох підходах. З'ясовано, що у N -каскадній наносистемі виникають комплекси N квазістаціонарних станів, резонансні енергії та резонансні ширини яких однозначно визначаються полюсами S -матриці. Показано, що в тих областях енергій, де виникає колапс електронних резонансів, спектральні розподіли функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості не дозволяють розрахувати резонансні енергії та ширини обох станів.

Уперше проаналізовано вплив товщин внутрикаскадних і міжкаскадних потенціальних бар'єрів на спектральні характеристики квазістаціонарних станів електрона у відкритих багатокаскадних резонансно-тунельних наноструктурах. Установлено, що незалежно від кількості каскадів зміна розмірів

внутрикаскадних та міжкаскадних бар'єрів найбільше впливає на енергії тих квазістаціонарних комплексів, стани з яких локалізовані у найближчих до відповідного бар'єра потенціальних ямах. Збільшення товщин бар'єрів лише зменшує відстані між резонансними енергіями у всіх комплексах.

Уперше показано, що у відкритій N -каскадній структурі зі слабopotужними внутрикаскадними бар'єрами резонансні ширини електронних станів у квазістаціонарних комплексах мають сумірні величини. Зі збільшенням внутрикаскадних бар'єрів у комплексах виникає по одному стану, локалізованому у крайньому напіввідкритому каскаді, резонансна ширина якого в інтервалі малих товщин бар'єрів зростає і при товщина, більших за 3 нм, змінюється слабо. Товщини міжкаскадних бар'єрів практично не впливають на резонансні ширини таких слаболокалізованих у структурі станів. Ширини всіх інших $N-1$ станів, в яких електрон сильно локалізований у каскадах структури, тільки зменшуються зі збільшенням розмірів як внутрикаскадних, так і міжкаскадних бар'єрів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Belkin M. A., Capasso F. New frontiers in quantum cascade lasers: high performance room temperature terahertz sources. *Physica Scripta*. 2015. Vol. 90. no. 11. P. 118002.
2. Lyakh A., Maulini R., Tsekoun A., Go R., Patel C.K.N. Tapered 4.7 μm quantum cascade lasers with highly strained active region composition delivering over 4.5 watts of cw optical power. *Optics Express*. 2012. Vol. 20. P. 24272.
3. Kirch J.D., Chang C.-C., Boyle C., Mawst L.J., Lindberg D., Earles T. 86% Internal differential efficiency from 8 to 9 μm -emitting, step-taper active-region quantum cascade lasers. *Optics Express*. 2016. Vol. 24. no. 21. P. 24483–24494.
4. Botez D., Kirch J.D., Chang C.-C., Boyle C., Kim H., Oresick K.M., Sigler C., Mawst L.J., Jo M., Shin J.C., Doo G.-K., Lindberg D.F., Earles T.L. High internal differential efficiency mid-infrared quantum cascade lasers. *Proceedings of SPIE*. 2017. P. 10123.
5. Matsuoka Y., Semtsiv M.P., Masselink W. *Ted. Quantum Cascade Lasers. Mid-infrared Optoelectronics*. 2020. P. 131-179.
6. Giorgetta F. R., Baumann E., Graf M., Yang Q., Manz C., Kohler K., Beere H. E., Ritchie D. A., Linfield E., Davies A. G., Fedoryshyn Y., Jackel H., Fischer M., Faist J., Hofstetter D. Quantum cascade detectors. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 2009. Vol. 45. no. 8. P. 1039–1052.
7. Hofstetter D., Baumann E., Giorgetta F.R., Théron R., Wu H., Schaff W.J, Dawlaty J., George P.A, Eastman L.F, Rana F. Photodetectors based on intersubband transitions using III-nitride superlattice structures. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2009. Vol. 21. no. 17. P. 174208.
8. Delga A. *Quantum cascade detectors: A review*. Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials. 2020. P. 337–377
9. Kong N., Liu J.-Q., Li L., Liu F.-Q., Wang L.-J., Wang Z.-G. Strain-compensated InGaAs/InAlAs quantum cascade detector of 4.5 μm operating at room temperature. *Chinese Physics Letters*. 2010. Vol. 27. no. 3. P. 38501–038501

10. Zhai S.Q., Liu J.Q., Liu F.Q., Wang Z.G. A normal incident quantum cascade detector enhanced by surface plasmons, *Applied Physics Letters*. 2012. Vol. 100. P. 181104.
11. Lei W., Jagadish C. Lasers and photodetectors for mid-infrared 2 – 3 μm applications. *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 104. no. 9. P. 091101.
12. Beeler M., Trichas E., Monroy E. III-nitride semiconductors for intersubband optoelectronics: a review. *Semiconductor Science and Technology*. 2013. Vol. 28. no. 7. P. 074022.
13. Gunapala S., Bandara S., Liu J., Mumolo J., Rafol S., Ting D.Z., Soibel A., Hill C. Quantum Well Infrared Photodetector Technology and Applications. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. 2014. Vol. 20. no. 6. P. 3802312.
14. Schneider H., Liu H.C. Quantum well infrared photodetectors. Springer Berlin: Heidelberg, 2007. P. 248.
15. Wang C., Ke S., Yang J., Review of Quantum Dot-in-a-Well Infrared Photodetectors and Prospect of New Structures. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. 2016. Vol.16. no. 8. P. 8046-8054.
16. Gueriaux V., Nedelcu A., Bois Ph. Double barrier strained quantum well infrared photodetectors for the 3 – 5 μm atmospheric window. *Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 105. no. 11. P. 114515.
17. Kaya Ya., Ravikumar A., Chen G., Tamargo M.C., Shen A., Gmachl C. Two-band ZnCdSe/ZnCdMgSe quantum well infrared photodetector. *AIP Advances*. 2018. Vol. 8. no. 7. P. 075105.
18. Hofstetter D., Schad S., Wu H., Schaff W., Eastman L. GaN/AlN-based quantum-well infrared photodetector for 1.55 μm . *Applied Physics Letters*. 2003. Vol. 83. no. 3. P. 572–574.
19. Mensz P., Dror B., Ajay A., Bougerol C., Monroy E., Orenstein M., Bahir G. Design and implementation of bound-to-quasibound GaN/AlGaIn photovoltaic quantum well infrared photodetectors operating in the short wavelength infrared range at room temperature. *Journal of Applied Physics*. 2019. Vol. 125. no. 17. P. 174505.

20. Reininger P., Zederbauer T., Schwarz B., Detz H., MacFarland D., Andrews A.M., Schrenk W., Strasser G. InAs/AlAsSb based quantum cascade detector. *Applied Physics Letters*. 2015. Vol. 107. no. 8. P. 081107.
21. Reininger P., Schwarz B., Gansch R., Detz H., MacFarland D., Zederbauer T., Andrews A.M., Schrenk W., Strasser G. Quantum cascade detector utilizing the diagonal-transition scheme for high quality cavities. *Optics Express*. 2015. Vol. 23. no. 5. P. 6283–6291.
22. Harrer A., Schwarz B., Gansch R., Reininger P., Detz H., Zederbauer T., Andrews A.M., Schrenk W., Strasser G. Plasmonic lens enhanced mid-infrared quantum cascade detector. *Applied Physics Letters*. 2014. Vol. 105. no. 17. P.171112.
23. Zhao F., Zhang C., Chang H., Hu X. Design of Plasmonic Perfect Absorbers for Quantum-well Infrared Photodetection. *Plasmonics*. 2014. Vol. 9. P. 1397.
24. Levine B.F.. Quantum-well infrared photodetectors. *Journal of applied physics*. 1993. Vol. 74. no. 8. P. R1–R81.
25. Faist J., Capasso F., Sivco D.L., Sirtori C., Hutchinson A.L., Cho A.Y. Quantum cascade laser, *Science*. 1994. Vol. 264. no. 5158. P. 553.
26. Hofstetter D., Beck M., Faist J. Quantum-cascade-laser structures as photodetectors. *Applied Physics Letters*. 2002. Vol. 81. P. 2683.
27. Gendron L., Carras M., Huynh A., Ortiz V., Koeniguer C., Berger V. Quantum cascade photodetector. *Applied Physics Letters*. 2004. Vol. 85. no. 14. P. 2824–2826.
28. Giorgetta F.R., Baumann E., Theron R., Pellaton M.L., Hofstetter D., Fischer M., Faist J. Short wavelength (4 μm) quantum cascade detector based on strain compensated InGaAs/InAlAs. *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 92. no. 12. P. 121101.
29. Buffaz A., Carras M., Doyennette L., Nedelcu A., Marcadet X., Berger V. Quantum cascade detectors for very long wave infrared detection. *Applied Physics Letters*. 2010. Vol. 96. P. 172101.
30. Giorgetta F. R., Baumann E., Graf M., Ajili L., Hoyler N., Giovannini M., Faist J., Hofstetter D., Kr€otz P., Sonnabend G. 16.5 μm quantum cascade detector using miniband transport. *Applied Physics Letters*. 2007. Vol. 90. P. 231111.

31. Zhai S.-Q., Liu J.-Q., Wang X.-J., Zhuo N., Liu F.-Q., Wang Z.-G., Liu X.-H., Li N., Lu W. 19 μm quantum cascade infrared photodetectors. *Applied Physics Letters*. 2013. Vol. 102. no. 19. P. 191120.
32. Hofstetter D., Giorgetta F.R., Baumann E., Yang Q., Manz C., Kohler K., Midinfrared quantum cascade detector with a spectrally broad response. *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 93. no. 22. P. 221106.
33. Graf M., Hoyler N., Giovannini M., Faist J., Hofstetter D. InP-based quantum cascade detectors in the mid-infrared. *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 88. P. 241118.
34. Hofstetter D., Graf M., Aellen T., Faist J., Hvozdar L., Blaser S. 23 GHz operation of a room temperature photovoltaic quantum cascade detector at 5.35 μm . *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 89. no. 6. P. 061119.
35. Giorgetta F.R., Baumann E., Hofstetter D., Manz C., Yang Q., Kohler K., Graf M. InGaAs/AlAsSb quantum cascade detectors operating in the near infrared. *Applied Physics Letters*. 2007. Vol. 91. no.11. P. 111115.
36. Iizuka N., Kaneko K., Suzuki N., Asano T., Noda S., Wada O. Ultrafast intersubband relaxation (≤ 150 fs) in AlGaIn/GaN multiple quantum wells. *Applied Physics Letters*. 2000. Vol. 77. no. 5. P. 648–650.
37. Hofstetter D., Baumann E., Giorgetta F.R., Dawlaty J., George P.A., et. al. High frequency measurements on an AlN/GaN-based intersubband detector at 1550 and 780 nm. *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 92. no. 23. P. 231104
38. Vardi A., Bahir G., Guillot F., Bougerol C., Monroy E., Schacham S.E., Tchernycheva M., Julien F.H. Near infrared quantum cascade detector in GaN/AlGaIn/AlN heterostructures. *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 92. no.1. P. 011112.
39. Saha S., Kumar J. Role of interface roughness scattering, temperature, and structural parameters on the performance characteristics of III-nitride quantum cascade detectors. *Journal of Applied Physics*. 2017. Vol. 121. no. 5. P. 053104.
40. Schwarz B., Reiningger P., Detz H., Zederbauer T., Maxwell Andrews A., Kalchmair S., Schrenk W., Baumgartner O., Kosina H., Strasser G. A bi-functional

quantum cascade device for same-frequency lasing and detection. *Applied Physics Letters*. 2012. Vol. 101. no. 19. P. 191109.

41. Schwarz B., Reininger P., Harrer A., MacFarland D., Detz H., Andrews A.M., Schrenk W., Strasser G. The limit of quantum cascade detectors: A single period device. *Applied Physics Letters*. 2017. Vol. 111. no.6. P. 061107.

42. Harrer A., Schwarz B., Schuler S., Reininger P., Wirthmuller A., et al. 4.3 μm quantum cascade detector in pixel configuration. *Optics Express*. 2016. Vol. 24. no. 15. P. 17041–17049.

43. Song Y., Bhat R., Huang T.-Y., Badami P., Zah C.-E., Gmachl C. III-nitride quantum cascade detector grown by metal organic chemical vapor deposition. *Applied Physics Letters*. 2014. Vol. 105. no. 18. P. 182104.

44. Jollivet A., Hinkov B., Pirotta S., Hoang H., Derelle S., et al. Short infrared wavelength quantum cascade detectors based on m-plane ZnO/ZnMgO quantum wells. *Applied Physics Letters*. 2018. Vol. 113. no. 25. P. 251104.

45. Schwarz B., Ristanic D., Reininger P., Zederbauer T., MacFarland D., Detz H., Andrews A.M., Schrenk W., Strasser G. High performance bi-functional quantum cascade laser and detector. *Applied Physics Letters*. 2015. Vol. 107. no. 7. P. 071104.

46. Schwarz B., Wang C.A., Missaggia L., Mansuripur T.S., Chevalier P., Connors M.K., McNulty D., Cederberg J., Strasser G., Capasso F. Watt-level continuous-wave emission from a bifunctional quantum cascade laser/detector, *ACS photonics*. 2017. Vol. 4. no. 5. P. 1225–1231.

47. Schwarz B., Reininger P., Ristanic D., Detz H., Andrews A. M., Schrenk W., Strasser G. Monolithically integrated mid-infrared lab-on-a-chip using plasmonics and quantum cascade structures. *Nature Communications*. 2014. Vol. 5. P. 4085.

48. Ristanic D., Schwarz B., Reininger P., Detz H., Zederbauer T., Andrews A. M., Schrenk W., Strasser G. Monolithically integrated mid-infrared sensor using narrow mode operation and temperature feedback. *Applied Physics Letters*. 2015. Vol. 106. P. 041101.

49. Li L. *et al.* Long wavelength infrared quantum cascade detector with a broadband response. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2018. Vol. 51. P. 37LT01.
50. Zhou X., Li N., Lu W. Progress in quantum well and quantum cascade infrared photodetectors in SITP. *Chinese Physics B*. 2019. Vol. 28. P. 027801.
51. Hofstetter D., Giorgetta F.R., Baumann E., Yang Q., Manz C., Köhler K. Mid-infrared quantum cascade detectors for applications in spectroscopy and pyrometry. *Applied Physics B*. 2010. Vol. 100. P. 313–320.
52. Graf M., Scaliari G., Hofstetter D., Faist J., Beere H., Linfield E., Ritchie D., Davies G. *Applied Physics Letters*. 2004. Vol. 84. P. 475.
53. Sakr S., Giraud E., Dussaigne A., Tchernycheva M., Grandjean N., Julien F. H. Two-color GaN/AlGaIn quantum cascade detector at short infrared wavelengths of 1 and 1.7 μm . *Applied Physics Letters*. 2012. Vol. 100. P. 181103.
54. Quach P., Liu S. F., Jollivet A., Wang D., Cheng J. Y., Isac N., Pirotta S., Bouville D., Sheng S. S. A GaN/AlIn quantum cascade detector with a broad response from the mid-infrared (4.1 μm) to the visible (550 nm) spectral range. *Applied Physics Letters*. 2020. Vol. 116. P. 171102
55. Terazzi R., Gresch T., Wittmann A., Faist J. Sequential resonant tunneling in quantum cascade lasers, *Physical Review B*. 2008. Vol. 78. P.155328-1-155328-4.
56. Jirauschek C., Kubis T. Modeling techniques for quantum cascade lasers. *Applied Physics Reviews*. 2014. Vol. 1. no. 1. P. 011307.
57. Delga A., Carras M., Trinite V., Gueriaux V., Doyennette L., Nedelcu A., Schneider H., Berger V. Master equation approach of classical noise in intersubband detectors. *Physical Review B*. 2012. Vol. 85. no. 24. P. 245414.
58. Saha S., Kumar J. Rate equation modelling and investigation of quantum cascade detector characteristics. *Superlattices and Microstructures*. 2016. Vol. 98. P. 70–77.
59. Jirauschek C., Popp J., Haider M., Franckić M., Faist J. Ensemble Monte Carlo modeling of quantum cascade detectors. *Journal of Applied Physics*. 2021. Vol. 130. P. 203103.

60. Buffaz A., Carras M., Doyennette L., Trinite V., Marcadet X., Berger V. Long range resonant tunneling in quantum cascade structures. *Applied Physics Letters*. 2010. Vol. 96. no.16. P. 162103.
61. Tkach M.V., Seti Ju.O., Grynysyn Y.B., Voitsekhivska O.M. Dynamic conductivity of electrons and electron-phonon interaction in open three-well nanostructures. *Acta Physica Polonica A*. 2015. Vol. 128. no. 3. P. 343-352.
62. Tkach M.V., Seti Ju.O., Matijek V.O., Voitsekhivska O.M. Active conductivity of plane two-barrier resonance tunnel structure as operating element of quantum cascade laser or detector. *Condensed Matter Physics*. 2011. Vol. 14. no 2. P. 23704: 1-11.
63. Delga A., Doyennette L., Berger V., Carras M., Trinité V., Nedelcu A. Performance of quantum cascade detectors. *Inf. Phys. Tech*. 2013. Vol. 59. P 100-107.
64. Ткач М.В., Сеті Ю.О., Войцехівська О.М. *Квазічастинки у наносистемах. Квантові точки, дроти і плівки*. Чернівці : «Книги –XXI», 2015. P. 386
65. Giorgetta F. Design, fabrication, and testing of intersubband infrared photodetectors operating at wavelengths between 2 μm and 17 μm . Ph.D. thesis. School Université de Neuchâtel. 2007.
66. Harrison P., Valavanis A. *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons, 2016. P.624.
67. Davies J.H. *The Physics of Low-dimensional Semiconductors*. Cambridge University Press, 1998.
68. Helm M. *The Basic Physics of Intersubband Transitions*, Vol. 62 of Semiconductors and Semimetals. London, U.K.: Academic, 2000.
69. Chuang, S. L. *Physics of Optoelectronic Devices*. Wiley, New York. 1995.
70. Koeniguer C., Dubois G., Gomez A., Berger V. Electronic transport in quantum cascade structures at equilibrium. *Physical Review B*. 2006. Vol. 74. P. 235325-1-235325-6.

71. Buffaz A., Gomez A., Carras M., Doyennette L., Berger V. Role of subband occupancy on electronic transport in quantum cascade detectors. *Physical Review B*. 2010. Vol. 81. P. 075304-1-075304-8.
72. Wacker A. Semiconductor superlattices: a model system for nonlinear transport. *Physics Reports*. 2002. Vol. 357. no. 1. P. 1–111.
73. Willenberg H., Dohler G.H., Faist J. Intersubband gain in a Bloch oscillator and quantum cascade laser. *Physical Review B*. 2003. Vol. 67. no. 8. P. 085315.
74. Terazzi R., Faist J. A density matrix model of transport and radiation in quantum cascade lasers. *New Journal of Physics*. 2010. Vol. 12. no. 3. P. 033045.
75. Lee S.-C., Wacker A. Nonequilibrium Green's function theory for transport and gain properties of quantum cascade structures. *Physical Review B*. 2002. Vol. 66. no. 24. P. 245314.
76. Lindskog M., Wolf J.M., Trinite V., Liverini V., Faist J., Maisons G., Carras M., Aidam R., Ostendorf R., Wacker A. Comparative analysis of quantum cascade laser modeling based on density matrices and non-equilibrium Green's functions. *Applied Physics Letters*. 2014. Vol. 105. no. 10. P. 103106.
77. Wacker A., Lindskog M., Winge D.O. Nonequilibrium Green's function model for simulation of quantum cascade laser devices under operating conditions. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. 2013. Vol. 19. no. 5. P. 1–11.
78. Ткач М.В., Сеті Ю.О., Матієк В.О., Бойко І.В. Квантові каскадні детектори у слабких і сильних електромагнітних полях. *Журнал фізичних досліджень*. 2012. Т. 16. № 4. С. 4701: 1-7.
79. Tkach M. V., Seti Ju. O., Voitsekhivska O. M., Pytiuk O. Yu. Photon- and phonon-assisted transport of electrons in resonant tunneling structures. *Journal of Physical Studies*. 2017. Vol. 21. no. 1/2. P. 1702.
80. Seti Ju., Tkach M., Voitsekhivska O. Quasi-stationary states of an electron with linearly dependent effective mass in an open nanostructure within transmission coefficient and S-matrix methods. *The European Physical Journal Plus*. 2018. Vol.133. P. 90: 1-12.

81. Сеті Ю. О., Ткач М. В., Паньків М. В.. Дві моделі каскаду квантового каскадного детектора ближнього інфрачервоного діапазону. Журнал фізичних досліджень. 2016. Т. 20. №1/2. С. 1703: 1-6.
82. Петрик М.Р., Бойко І.В. Моделі та методи моделювання складних процесів в наноструктурах і нанопористих середовищах (на основі високопродуктивних обчислень): монографія. Тернопіль: Вид-во ТНТУ імені Івана Пулюя, 2021. 140 с.
83. Gryshuk A.M., Boyko I.V. Influence of dimensional static and dynamic charges on conduction in the active zone of a quantum cascade laser. *Semiconductor Physics. Quantum Electronics & Optoelectronics*. 2015. Vol. 18. no 2. P. 123-127.
84. Бойко І.В. Внесок двофотонних електронних переходів у формування активної динамічної провідності трибар'єрних резонансно-тунельних структур із постійним електричним полем. *Український фізичний журнал*. 2016. Т. 61. № 1.
85. Seti Ju., Tkach M., Voitsekhivska O. Dynamical conductivity of symmetric three-barrier plane nanosystem in constant electric field. *Condensed Matter Physics*. 2011. Vol. 14. no. 1. P. 13701: 1-7.
86. Tkach M. , Seti J. , Voitsekhivska O. Spectrum of electron in quantum well within the linearly-dependent effective mass model with the exact solution. *Superlattices and microstructures*. 2017. Vol.109. P. 905 – 914.
87. Tkach M.V. , Seti Ju.O. , Voitsekhivska O.M. Transmission canals for the photon-assisted transport of electron through the double-barrier resonant tunneling structure. *Acta Physica Polonica A*. 2013. Vol. 124. no. 1. P.94-101.
88. Bastard G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation. *Physical Review B*. 1981. Vol. 24. P. 5693.
89. Von Roos O., About One-Dimensional Conservative Systems with Position Depending Mass. *Physical Review B*. 1983. Vol. 27. P. 7547.
90. Morrow R.A., Brownstein K.R. Model effective-mass Hamiltonians for abrupt heterojunctions and the associated wave-function-matching conditions. *Physical Review B*. 1984. Vol. 30. P. 678.

91. Levy-Leblond J.-M. Position-dependent effective mass and Galilean invariance. *Physical Review A*. 1995. Vol. 52. P. 1845.
92. Roy B., Roy P., A Lie algebraic approach to effective mass Schrödinger equations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 2002. Vol. 35. P. 3961.
93. Galbraith I., Duggan G. Envelope-function matching conditions for GaAs/(Al,Ga)As heterojunctions. *Physical Review B*. 1988. Vol. 38. P. 10057.
94. Einevoll G.T., Hemmer P.C. The effective-mass Hamiltonian for abrupt heterostructures. *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1988. Vol. 21. P. L1193.
95. Einevoll G.T., Hemmer P.C., Thomsen J. Operator ordering in effective-mass theory for heterostructures. I. Comparison with exact results for superlattices, quantum wells, and localized potentials. *Physical Review B*. 1990. Vol. 42. P. 3485.
96. G.T. Einevoll, Operator ordering in effective-mass theory for heterostructures. II. Strained systems. *Physical Review B*. 1990. Vol. 42. P. 3497.
97. Einevoll G.T., Hemmer P.C. Superlattice minibands-explicit formulae for band gaps and effective masses. *Semiconductor Science and Technology*. 1991. Vol. 6. P. 590.
98. BenDaniel D.J., Duke C.B. Space-Charge Effects on Electron Tunneling. *Physical Review*. 1966. Vol. 152. P. 683.
99. Tkach M.V., Seti Ju.O., Voitsekhivska O.M., Zegrya G.G. Conductivity of three-barrier resonance tunnel structure. *Romanian Journal of Physics*. 2012. Vol. 57. no. 3-4. P. 620-629.
100. Ткач М.В., Сеті Ю.О. Теорія властивостей резонансно-тунельних наноструктур, як активних елементів квантових каскадних лазерів і детекторів. *Український фізичний журнал*. 2013. Т. 58. №2. С. 182-188.
101. Haus J. W., Zhou H. S., Honma I., Komiyama H. Quantum confinement in semiconductor heterostructure nanometer-size particles. *Physical Review B*. 1993. Vol. 47. no. 3. P. 1359.
102. Schooss D., Mews A., Eychmüller A., Weller H. Quantum-dot quantum well CdS/HgS/CdS: Theory and experiment. *Physical Review B*. 1994. Vol. 49. no. 24. P. 17072.

103. Tkach N.V., Makhanets A.M., Zegrya G.G. Energy spectrum of electron in quasiplane superlattice of cylindrical quantum dots. *Semiconductor Science and Technology*. 2000. Vol. 15. no. 4. P. 395.
104. Tkach M., Holovatsky V., Voitsekhivska O. Electron and hole quasistationary states in opened cylindrical quantum wire. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2001. Vol. 11. no. 1. P.17-26.
105. Ткач М.В. *Квазічастинки у наногетеросистемах. Квантові точки та дроти*: Посібник. Чернівці, 2003. 312 с.
106. Makhanets O.M., Voitsekhivska O.M., Gryschyk A.M. Confined and interface phonons in combined cylindrical nanoheterosystem. *Condensed Matter Physics*. 2006. Vol. 9. № 4 (48). P. 719 – 724.
107. Holovatsky V., Gutsul V. Electron energy spectrum in core-shell elliptic quantum wire. *Condensed Matter Physics*. 2007. Vol.10. no. 1. P.61-67.
108. Boichuk V.I., Bilynskiy I.V., Leshko R.Ya, Ground and Excited States of D0 and D- Donors in a Spherical Quantum Dot, *Ukrainian Journal of Physics*. 2008. Vol. 53. no. 10. P.991-996.
109. Holovatsky V., Makhanets O., Voitsekhivska O. Oscillator strengths of electron quantum transitions in spherical nanosystems with donor impurity in the center. *Physica E*. 2009. Vol. 41. P. 1522-1526.
110. Boichuk V.I., Bilynskiy I.V., Leshko R.Ya. Hole, impurity and exciton states in a spherical quantum dot. *Condensed Matter Physics*. 2010. T. 13. № 1. C. 13702: 1-12.
111. Boichuk V. I., Bilynskiy I. V., Leshko R. Ya., Turyanska L .M. Optical properties of a spherical quantum dot with two ions of hydrogenic impurity. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2013. Vol. 54. P. 281—287
112. Eickemeyer F. *Ultrafast Dynamics of Coherent Intersubband Polarizations in Quantum Wells and Quantum Cascade Laser Structures*. Humboldt-Universität zu Berlin, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät I, 2002.
113. Unuma T., Yoshita M., Noda T., Sakaki H., Akiyama H., Intersubband absorption linewidth in GaAs quantum wells due to scattering by interface roughness,

- phonons, alloy disorder, and impurities. *Journal of Applied Physics*. 2003. Vol. 93. no. 3. P. 1586–1597.
114. Wittmann A., Bonetti Y., Faist J., Gini E., Giovannini M. Intersubband linewidths in quantum cascade laser designs. *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 93. no. 14. P. 141103.
115. Harrison P. The nature of the electron distribution functions in quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*. 1999. Vol. 75. no. 18. P. 2800–2802.
116. Kazarinov R.F., Suris R.A. Electric and electromagnetic properties of semiconductors with a superlattice, *Soviet physics. Semiconductors*. 1972. Vol. 6. no. 1. P. 120–131.
117. Delga A, Carras M, Doyennette L, Trinité V, Nedelcu A et al. Predictive circuit model for noise in quantum cascade detectors. *Applied Physics Letters*. 2011. Vol. 99. P. 252106.
118. Zhu J, Ban SL, Ha SH. Intersubband absorption in strained $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ quantum wells with $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ nanogroove layers. *Superlattices and Microstructures*. 2012. Vol. 51. P. 471–479.
119. Bhourri A, Rached A, Lazzari J-L. Resonant tunneling transport in $\text{Al}_z\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{Al}_z\text{Ga}_{1-z}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ quantum structures. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2015. Vol. 48. P. 385102.
120. Mori N, Ando T. Electron - optical-phonon interaction in single and double heterostructures. *Physical Review B*. 1989. Vol. 40. P. 6175.
121. Stroscio MA, Dutta M. *Phonons in Nanostructures*. Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
122. Ridley B. K. *Electrons and Phonons in Semiconductor Multilayers*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
123. Babiker M. LO phonons in $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ superlattices and their Raman spectra. *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1986. Vol. 19. P. L339.
124. Huang K., Zhu B. Dielectric continuum model and Fröhlich interaction in superlattices, *Physical Review B*. 1988. Vol. 38. P. 13377.

125. Nash K. J., Mowbray D. J. Exciton-phonon interactions in quantum wells and superlattices. *Journal of Luminescence*. 1989. Vol. 44. P. 315.
126. Zianni X., Butcher P.N., Dharssi I. Macroscopic behaviour of longitudinal optical phonons in a AlAs/GaAs/AlAs quantum well. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1992. Vol. 4. P. L77.
127. Nash K. J. Electron-phonon interactions and lattice dynamics of optic phonons in semiconductor heterostructures, *Physical Review B*. 1992. Vol. 46. P. 7723.
128. Constantinou N.C., Ridley B.K., Effect of bulk dispersion on the electron–optical-phonon interaction in a single quantum well. *Physical Review B*. 1994. Vol. 49. P. 17065.
129. Gao X, Botez D, Knezevic I. Phonon confinement and electron transport in GaAs-based quantum cascade structures. *Journal of Applied Physics*. 2008. Vol. 103. P. 073101.
130. Zhu JG, Ban SL. Effect of electron-optical phonon interaction on resonant tunneling in coupled quantum wells. *The European Physical Journal B*. 2012. Vol. 85. P. 140.
131. Tang C, Lan Y, Dutta M, Stroschio MA, Shi J. AlGaAs/GaAs Triple Quantum Well Photodetector at 5 μm Wavelength—A Simulation Study. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 2016. Vol. 52. P. 4400108.
132. Gu Z, Ban SL, Jiang DD, Qu Y. Effects of two-mode transverse optical phonons in bulk wurtzite AlGaN on electronic mobility in AlGaN/GaN quantum wells. *Journal of Applied Physics*. 2017. Vol. 121. P. 035703.
133. Teng H.B., Sun J.P., Haddad G.I., Stroschio M.A., Yu S., Kim K.W. Phonon assisted intersubband transitions in step quantum well structures. *Journal of Applied Physics*. 1998. Vol. 84. no. 4. P. 2155–2164.
134. Compagnone F., Di Carlo A., Lugli P. Electron–optical-phonon interaction in the $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{In}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$ superlattice. *Physical Review B*. 2002. Vol. 65. P. 125314.
135. Wu B.H., Cao J.C., Xia G.Q., Liu H.C. Interface phonon assisted transition in double quantum well. *The European Physical Journal B*. 2003. Vol. 33. P. 9-14.

136. Zhang Li, Uniform description of polar optical phonon states and their Fröhlich electron–phonon interaction Hamiltonians in multi-layer wurtzite nitride low-dimensional quantum structures. *Superlattices and Microstructures*. 2013. Vol. 53. P. 113-129
137. Zhang L., Shi J.J., Liu Xian-Li. Interface optical phonon-assisted scattering rates in wurtzite nitride step quantum wells with strong built-in electric field, *Superlattices and Microstructures*, 2015. Vol. 83. P. 131-146.
138. Mohamed A., Park K., Bayram C., Dutta M., Stroscio M. Confined and interface optical phonon emission in GaN/InGaN double barrier quantum well heterostructures. *PLOS ONE*. (2019). Vol. 14. no.5. P. e0216630
139. Yu S., Kim K.W., Stroscio M.A., Iafrate G.J., Sun J.P., Haddad G.I. Transfer matrix method for interface optical-phonon modes in multiple-interface heterostructure systems. *Journal of Applied Physics*. 1997. Vol. 82. P. 3363.
140. Ткач М.В., Сеті Ю.О., Гринишин Ю.Б. Вплив обмежених поляризаційних фоновів на електронний спектр трибар'єрної активної зони квантового каскадного детектора. *Український фізичний журнал*. 2014. Т. 59. № 12. С. 1191-1200.
141. Tkach M.V., Seti Ju.O., Grynysyn Y.B., Voitsekhivska O.M. Influence of interface phonons at operating electron states in three-barrier resonant tunneling structure being an active region of quantum cascade detector. *Condensed Matter Physics*. 2014. Vol. 17. no. 2. P. 23704: 1-10.
142. Seti Ju., Tkach M., Pan'kiv M., Voitsekhivska O. The effect of optical phonons on the electronic states in two-well Resonant tunneling structure driven by electric field at finite temperature. *Romanian Journal of Physics*. 2016. Vol. 61. no. 5-6. P.980-991.
143. Сеті Ю.О., Ткач М.В., Паньків М.В. Роль інтерфейсних фоновів у функціонуванні безінжекторного квантового каскадного лазера. *Український фізичний журнал*. 2016. Т. 61. №. 9. С. 790-800.
144. Davydov A. S. *Theory of a solid body*. Moscow: Nauka, 1976. P. 639.

145. Levinson I. B., Rashba É. I. Threshold phenomena and bound states in the polaron problem. *Soviet Physics Uspekhi*. 1974. Vol. 16. P. 892.
146. Tkach, N.V. *Theoretical and Mathematical Physics*. 1984. Vol. 61. P. 1220.
147. Spencer P.E., Samson J.H., Kornilovitch P.E., Alexandrov A.S. Effect of electron-phonon interaction range on lattice polaron dynamics: A continuous-time quantum Monte Carlo study. *Physical Review B*. 2005. Vol. 71. P. 184310.
148. Hohenadler M., Neuber D., von der Linden W., Wellein G., Loos J., Fehske H. Photoemission spectra of many-polaron systems. *Physical Review B*. 2005. Vol. 71. P. 245111.
149. Hague J.P., Kornilovitch P.E., Alexandrov, A.S., Samson J.H., Erratum: Effects of lattice geometry and interaction range on polaron dynamics. *Physical Review B*. 2006. Vol. 73. P. 054303.
150. Mishchenko A.S., Prokof'ev N., Sakamoto A., Svistunov B.V, Diagrammatic quantum Monte Carlo study of the Fröhlich polaron. *Physical Review B*. 2000. Vol. 62. P. 6317.
151. Mishchenko A.S., Nagaosa N, Quasidegenerate Self-Trapping in One-Dimensional Charge Transfer Exciton. *Physical Review Letters*. 2001. Vol. 86. P. 4624.
152. Goulko O., Mishchenko A.S., Prokof'ev N., Svistunov B. Dark continuum in the spectral function of the resonant Fermi polaron. *Physical Review A*, 2016. Vol. 94. P. 051605(R).
153. Mishchenko A.S., De Filippis G., Cataudella V., Nagaosa N., Fehske, H., Optical signatures of exciton polarons from diagrammatic Monte Carlo. *Physical Review B*, 2018. Vol. 97. 045141.
154. Prokof'ev N., Svistunov B. Bold Diagrammatic Monte Carlo Technique: When the Sign Problem Is Welcome. *Physical Review Letters*. 2007. Vol. 99. P. 250201.
155. Van Houcke K. et al. Feynman diagrams versus Fermi-gas Feynman emulator. *Nature Physics*. 2012. Vol. 8. P. 366.

156. Kulagin S.A., Prokof'ev N., Starykh O.A., Svistunov B.V., Varney C.N. Bold Diagrammatic Monte Carlo Method Applied to Fermionized Frustrated Spins. *Physical Review Letters*. 2013. Vol. 110. P. 070601.
157. Mishchenko A.S., Nagaosa N., Prokof'ev N. Diagrammatic Monte Carlo Method for Many-Polaron Problems. *Physical Review Letters*. 2014. Vol. 113. P. 166402.
158. Marchand D.J.J., Stamp P.C.E., Berciu M., Dual coupling effective band model for polarons. *Physical Review B*, 2017. Vol. 95. P. 035117,
159. Möller M.M., Berciu M., *Discontinuous polaron transition in a two-band model*, *Physical Review B*. 2016. Vol. 93. P. 035130.
160. Berciu M. Green's Function of a Dressed Particle, *Physical Review Letters*. 2006. Vol. 97. P. 036402.
161. Marchand D.J.J. et al. Sharp Transition for Single Polarons in the One-Dimensional Su-Schrieffer-Heeger Model.. *Physical Review Letters*. 2010. Vol. 105. P. 266605.
162. Ebrahimnejad H., Berciu M., Trapping of three-dimensional Holstein polarons by various impurities. *Physical Review B*, 2012. Vol. 85. P. 165117.
163. Tkach M.V., Pytiuk O.Yu., Voitsekhivska O.M., Seti Ju.O. Generalized method of Feynman-Pines diagram technique in the theory of energy spectrum of two-level quasiparticle renormalized due to multi-phonon processes at cryogenic temperature. *Condensed Matter Physics*. 2018. Vol. 21. no. 4. P. 43703.
164. Tkach M.V., Seti Ju.O., Voitsekhivska O.M., Gutiv V.V. Method of successive separation and summing of multiplicative diagrams of mass operator for the multi-level quasiparticle interacting with polarization phonons. *Condensed Matter Physics*. 2019. Vol. 22. no 3. P. 33707: 1-15.
165. Ткач М.В., Сеті Ю.О., Войцехівська О.М. *Діаграмна техніка у методі функцій Гріна квазічастинок, взаємодіючих з фононами*. Чернівці: Чернівецький національний університет, 2019. 164 с.
166. Tkach M., Seti J., Voitsekhivska O., Gutiv V., Vereshko E. Properties of renormalized spectrum of interacting with polarization phonons localized

- quasiparticle with degenerated excited state. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2020. Vol. 701. no. 1. P. 48–58.
167. Mahan G.D. *Many Particle Physics: Third edition*, Springer-Verlag: New York, USA. 2000.
168. Abrikosov A.A., Gorkov L.P., Dzyaloshinski I.E. *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*. Dover Publications: New York, USA. 2012
169. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju., Voitsekhivska O.M. Modeling of optimized cascade of quantum cascade detector operating in far infrared range. *Mathematical Modeling and Computing*. 2020. Vol. 7. no. 1. P. 186–195.
170. Сеті Ю.О., Верешко Є.Ю., Ткач М.В., Войцехівська О.М. Особливості перенормування оптичними фононами електронного спектра в каскаді квантового каскадного детектора / Peculiarities of electron spectrum renormalized by optical phonons in the cascade of quantum cascade detector. *Журнал фізичних досліджень / Journal of Physical Studies*. 2021. Vol. 25. no. 3. P. 3706.
171. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju. Effect of Confined Phonons on Temperature Renormalization of Spectral Characteristics of Quantum Cascade Detector Operating in Far Infrared Range. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2021. Vol. 13. no. 2. P. 02031.
172. Seti J., Voitsekhivska O., Vereshko E., Tkach M. Effect of interface phonons on the functioning of quantum cascade detectors operating in the far infrared range. *Applied Nanoscience (Switzerland)*. 2022. Vol. 12. no. 3. P. 533-542.
173. Сеті Ю.О., Ткач М.В., Верешко Є.Ю. Спектральні властивості широкосмугового квантового каскадного детектора далекого ІЧ-діапазону з двоямною активною зоною. Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології (НАНСИС-2019): Тези VI Наук. конф. (Київ, 4–6 грудня 2019 р.) / редкол.: А. Г. Наумовець [та ін.]. Київ, 2019. С. 151.
174. Vereshko E.Ju., Seti Ju.O., Tkach M.V. Effect of interface phonons on the electron spectrum in far infrared range quantum cascade detector at cryogenic temperature. *Proceedings of the 2020 IEEE 10th International Conference on "Nanomaterials: Applications and Properties"* (NAP 2020). 2020. P. 9309532.

175. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju., Voitsekhivska O.M. Effect of interface phonons on the functioning of quantum cascade detectors operating in far infrared range. The International research and practice conference “*Nanotechnology and nanomaterials*” (NANO-2020): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 26 – 29 August 2020) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2020. P. 469.
176. Сеті Ю.О., Ткач М.В., Верешко Є.Ю. Перенормування електронного спектра взаємодією з обмеженими фононами у оптимізованому каскаді квантового каскадного детектора. 9-та Міжнародна науково-технічна конференція “*Сенсорна електроніка та мікросистемні технології*” (СЕМСТ-9): матеріали Міжнар. наук.-техн. конф., Одеса, 20-24 вересня 2021. Одеса, 2021. С. 36.
177. Nelson D.F., Miller R.C., Kleinman D.A. Band nonparabolicity effects in semiconductor quantum wells. *Physical Review B*. 1987. Vol. 35. 7770.
178. Ткач Н.В., Сеті Ю.А. Эволюция и коллапс квазистационарных состояний электрона в плоских симметричных трехбарьерных резонансно-туннельных структурах. *Физика низких температур*. 2009. Т.35. №7. С.710-720.
179. Tournie E., Cerutti L. *Mid-infrared Optoelectronics*. Woodhead Publishing. 2019.
180. Sakr S., Crozat P., Gacemi D., Kotsar Y., Pesach A., Quach P., Isac N., Tchernycheva M., Vivien L., Bahir G., Monroy E., Julien F. H. GaN/AlGaIn waveguide quantum cascade photodetectors at 1.55 μm with enhanced responsivity and 40 GHz frequency bandwidth. *Applied Physics Letters*. 2013. Vol. 102. no.1. P. 011135.
181. Zegrya G.G., Tkach N.V., Boiko I.V., et al. Quasi-stationary electron states in a multilayered structure in longitudinal electric and transverse magnetic fields. *Physics of the Solid State*. 2013. Vol. 55. P. 218.
182. Botez D., Chang C.-C., Mawst L. J. Temperature sensitivity of the electro-optical characteristics for mid-infrared ($\lambda = 3\text{--}16 \mu\text{m}$)-emitting quantum cascade lasers. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2016. Vol. 49. P. 043001.

183. He J., Wang P., Chen H., Guo X., Guo L., Yang Y. Study on temperature effect on properties of ZnO/MgZnO based quantum cascade detector in mid-infrared region. *Applied Physics Express*. 2017. Vol. 10. P. 011101.
184. Li Z., Wang P., He J., Chen H., Cheng J. Effect of Polarization on the Performance of ZnO/MgZnO Quantum Cascade Detector. *Superlattices and Microstructures*. 2017.
185. Rojas-Briseño J.G., Del Rio-De Santiago A., Mora-Ramos M.E., Martínez-Orozco J.C. Nonlinear intersubband absorption coefficient in an $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum cascade laser-like profile. *Optik*. 2020. Vol. 201. P. 163431.
186. Сеті Ю.О., Верешко Є.Ю., Ткач М.В. Властивості електронних станів у закритій нанокаскадній структурі як елементі квантового каскадного детектора / Properties of electron states in a closed multi-cascade nanostructure being an element of a quantum cascade detector. *Журнал фізичних досліджень / Journal of Physical Studies*. 2022. Vol. 26. no. 4. P. 4702.
187. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M. Properties of spectral parameters of multicascade nanostructure being a model of quantum cascade detector. *Springer Proceedings in Physics*. Nanomaterials and Nanocomposites, Nanostructure Surfaces, and Their Applications: 10th International Research and Practice Conference on Nanotechnology and Nanomaterials (NANO 2021). Lviv 25-28 August 2021. 2023. Vol. 279. P. 361 – 376.
188. Bastard G. Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope-function approximation. *Physical Review B*. 1982. Vol. 25. P. 7584.
189. Seti Ju.O, Vereshko E.Y., Voitsekhivska O.M., Tkach M.V. Spectral properties of open multi-cascade nanostructure as an element of quantum cascade detector. *XVIII International Freik Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*. Materials. / Ed. by Prof. V.V. Prokopiv. Ivano-Frankivsk: Publisher Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 2021. P. 51.
190. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M., Markin O. Properties of transmission coefficient of multicascade element in quantum cascade detector // The International research and practice conference “*Nanotechnology and nanomaterials*”

(NANO-2021): Abstract Book of participants of International research and practice conference (Lviv, 25 – 27 August 2021) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2021. P. 420.

191. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M. Properties of electron states in open multi-cascade nanostructure: S-matrix, transmission coefficient and probability function methods. The International research and practice conference “*Nanotechnology and nanomaterials*” (NANO-2022): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25–27 August 2022) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2022. P. 444.

192. Вакарчук І.О. *Квантова механіка* (4-те вид.). Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. 872 с

193. Eden R. J., Eden R.J., Landshoff P. V., Olive D. I., Polkinghorne J. C. *The Analytic S-Matrix*. Cambridge University Press, 2002. 296 стор.

ДОДАТОК**СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ****Статті у наукових фахових виданнях України, проіндексованих у базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus**

1. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju., Voitsekhivska O.M. Modeling of optimized cascade of quantum cascade detector operating in far infrared range. *Mathematical Modeling and Computing*. 2020. Vol. 7. no. 1. P. 186–195.
2. Сеті Ю.О., Верешко Є.Ю., Ткач М.В., Войцехівська О.М. Особливості перенормування оптичними фононами електронного спектра в каскаді квантового каскадного детектора / Peculiarities of electron spectrum renormalized by optical phonons in the cascade of quantum cascade detector. *Журнал фізичних досліджень / Journal of Physical Studies*. 2021. Vol. 25. no. 3. P. 3706 (10 pages).
3. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju. Effect of Confined Phonons on Temperature Renormalization of Spectral Characteristics of Quantum Cascade Detector Operating in Far Infrared Range. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2021. Vol. 13. no. 2. P. 02031.
4. Сеті Ю.О., Верешко Є.Ю., Ткач М.В. Властивості електронних станів у закритій нанокаскадній структурі як елементі квантового каскадного детектора / Properties of electron states in a closed multi-cascade nanostructure being an element of a quantum cascade detector. *Журнал фізичних досліджень / Journal of Physical Studies*. 2022. Vol. 26. no. 4. P. 4702.

Статті у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus

5. Tkach M., Seti J., Voitsekhivska O., Gutiv V., Vereshko E. Properties of renormalized spectrum of interacting with polarization phonons localized quasiparticle with degenerated excited state. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2020. Vol. 701. no. 1. P. 48–58.
6. Seti J., Voitsekhivska O., Vereshko E., Tkach M. Effect of interface phonons on the functioning of quantum cascade detectors operating in the far infrared range. *Applied Nanoscience (Switzerland)*. 2022. Vol. 12. no. 3. P. 533-542.

7. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M. Properties of spectral parameters of multicascade nanostructure being a model of quantum cascade detector. *Springer Proceedings in Physics*. Nanomaterials and Nanocomposites, Nanostructure Surfaces, and Their Applications: 10th International Research and Practice Conference on Nanotechnology and Nanomaterials (NANO 2021). Lviv 25-28 August 2021. 2023. Vol. 279. P. 361 – 376.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації

8. Сеті Ю.О., Ткач М.В., Верешко Є.Ю. Спектральні властивості широкопasmового квантового каскадного детектора далекого ІЧ-діапазону з двоямною активною зоною. Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології (НАНСИС-2019): Тези VI Наук. конф. (Київ, 4–6 грудня 2019 р.) / редкол.: А. Г. Наумовець [та ін.]. Київ, 2019. С. 151.

9. Tkach M., Seti Ju., Voitsekhivska O., Hutiv V., Ivanochko M., Vereshko E. Properties of renormalized spectrum of interacting with polarization phonons localized quasiparticle with degenerated excited state. The International research and practice conference “*Nanotechnology and nanomaterials*” (NANO-2019): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 27 – 30 August 2019) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2019. P. 576.

10. Vereshko E.Ju., Seti Ju.O., Tkach M.V. Effect of interface phonons on the electron spectrum in far infrared range quantum cascade detector at cryogenic temperature. *Proceedings of the 2020 IEEE 10th International Conference on "Nanomaterials: Applications and Properties"* (NAP 2020). 2020. P. 9309532.

11. Seti Ju.O., Tkach M.V., Vereshko E.Ju., Voitsekhivska O.M. Effect of interface phonons on the functioning of quantum cascade detectors operating in far infrared range. The International research and practice conference “*Nanotechnology and nanomaterials*” (NANO-2020): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 26 – 29 August 2020) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2020. P. 469.

12. Seti Ju.O, Vereshko E.Y., Voitsekhivska O.M., Tkach M.V. Spectral properties of open multi-cascade nanostructure as an element of quantum cascade detector. *XVIII International Freik Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems. Materials.* / Ed. by Prof. V.V. Prokopiv. Ivano-Frankivsk: Publisher Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 2021. P. 51.
13. Сеті Ю.О., Ткач М.В., Верешко Є.Ю. Перенормування електронного спектра взаємодією з обмеженими фононами у оптимізованому каскаді квантового каскадного детектора. 9-та Міжнародна науково-технічна конференція “Сенсорна електроніка та мікросистемні технології” (СЕМСТ-9): матеріали Міжнар. наук.-техн. конф., Одеса, 20-24 вересня 2021. Одеса, 2021. С. 36.
14. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M., Markin O. Properties of transmission coefficient of multicascade element in quantum cascade detector // The International research and practice conference “*Nanotechnology and nanomaterials*” (NANO-2021): Abstract Book of participants of International research and practice conference (Lviv, 25 – 27 August 2021) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2021. P. 420.
15. Seti Ju., Vereshko E., Voitsekhivska O., Tkach M. Properties of electron states in open multi-cascade nanostructure: S-matrix, transmission coefficient and probability function methods. The International research and practice conference “*Nanotechnology and nanomaterials*” (NANO-2022): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25–27 August 2022) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2022. P. 444.