

М.В. Ткач, Ю.О. Сеті, І.В. Бойко, Ю.Б. Гринишин

## Взаємодія електронів з обмеженими фононами у багатошаровій резонансно-тунельній структурі

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, м. Чернівці, вул. Коцюбинського 2,  
e-mail: [ktf@chnu.edu.ua](mailto:ktf@chnu.edu.ua)*

Розвинена теорія стаціонарного спектру та хвильових функцій електрона в плоскій багатошаровій резонансно-тунельній структурі в постійному електричному полі як моделі активної зони квантового каскадного лазера. Для цієї ж наноструктури в моделі діелектричного континууму розвинена теорія спектру обмежених оптичних фононів.

Із використанням знайдених хвильових функцій електрона та потенціалів поляризації фононів розвинено теорію взаємодії електронів з обмеженими фононами у багатошаровій наноструктурі. Отримано гамільтоніан електрон-фононної взаємодії у представленні вторинного квантування. Для експериментально створеної резонансно-тунельної структури виконано розрахунок електронного та фононного спектрів, а також потенціалу поляризації обмежених фононів. Виконано розрахунки парціальних зсувів для перенормованого взаємодією з обмеженими фононами електронного спектру. Результати розрахунків електронного спектру добре корелюють з експериментом.

**Ключові слова:** квантовий каскадний лазер, резонансно-тунельна структура, обмежені фонони, електрон-фононна взаємодія.

*Стаття поступила до редакції 22.11.2013; прийнята до друку 15.12.2013.*

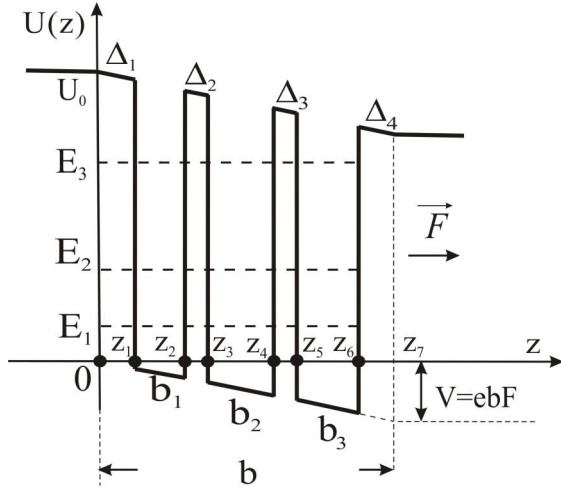
### Вступ

Плоскі багатошарові напівпровідникові резонансно-тунельні структури (РТС) зараз мають широке застосування в наноелектроніці як активні елементи квантових каскадних лазерів (ККЛ) та детекторів (ККД) [1, 2], що працюють в актуальних терагерцовому та інфрачервоному діапазонах електромагнітних хвиль. Геометричний дизайн таких РТС визначає не тільки частоту випромінювання чи поглинання, на якій працює наноприлад, а також і транспортні властивості каскадів цих наноприладів. У процесах тунелювання важлива взаємодія електронів з оптичними фононами, оскільки, як встановлено експериментально [3] та підтверджено теоретично [4], саме за рахунок електрон-фононної взаємодії відбувається релаксація електронного потоку в безвипромінювальних переходах. З іншого боку, значна взаємодія електронів з дисипативними підсистемами, зокрема фононами, може вивести прилад з когерентного стану. Тому важливим є вивчення впливу оптичних фононів на процеси тунелювання електронів крізь багатошарові РТС, задля оптимізації роботи наноприладів та з метою мінімізації впливу шкідливих факторів.

Теоретичне дослідження електрон-фононної взаємодії у плоских РТС було здійснено в роботах

[5, 6, 7] для двобар'єрних наноструктур, так званого, резонансно-тунельного діода. У роботі [8] досліджувався спектр оптичних фононів, а також часи розсіювання електронів на фононах. Слід зауважити, що теоретичні розрахунки у згаданих роботах виконувались здебільшого для напівпровідникових систем GaAs/AlGaAs. В сучасних напівпровідникових ККЛ та ККД [1, 2, 3] значне застосування мають потрібні напівпровідникові сполуки  $Ga_xIn_{1-x}As/Al_xIn_{1-x}As$ . Теорія спектру оптичних фононів для таких напівпровідникових нано-РТС лише починає розвиватися [9], проте суть і значимість впливу електрон-фононної взаємодії на тунелювання електронів крізь багатошарові РТС ще залишається до кінця не з'ясованою.

У пропонованій роботі на основі точного розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера в наближенні ефективних мас та прямокутних потенціальних бар'єрів розвинуто теорію стаціонарного енергетичного спектра та хвильових функцій електрона у багатошаровій РТС з  $Ga_xIn_{1-x}As$  – потенціальними ямами та  $Al_xIn_{1-x}As$  – бар'єрами, як моделі активної зони ККЛ. Для цієї ж РТС у моделі діелектричного континууму розвинуто теорію спектру обмежених оптичних фононів, а також, за умови слабкого зв'язку отримано та досліджено перенормований взаємодією з



**Рис. 1.** Геометрична та енергетична схеми закритої моделі багатобар'євої РТС.

обмеженими фононами спектр електронів. Показано, що значення електронних енергій перенормованого спектру добре корелюють з експериментальними

результатами.

## I. Енергетичний спектр та хвильові функції електрона у багатобар'євій РТС у постійному електричному полі

Розглядається чотирибар'єрна РТС з  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  – ямами та  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  – бар'єрами у постійному електричному полі напруженості  $F$ . Саме така РТС відіграла роль активної зони у каскаді ККЛ у експериментальній роботі [3]. З урахуванням незначної різниці величин постійних ґраток ям і бар'єрів РТС задача зводиться до вивчення електронних стаціонарних станів у моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів.

Вибравши систему координат так, як показано на рис. 1, ефективну масу і потенціальну енергію електрона в закритій РТС можна записати у вигляді:

$$m(z) = m_1[q(-z) + q(z-b)] + m_0 \sum_{p=1}^3 [q(z-z_{2p-1}) - q(z-z_{2p})] + m_1 \sum_{p=0}^3 [q(z-z_{2p}) - q(z-z_{2p+1})], \quad (1)$$

$$U(z) = U \left( [q(-z) + q(z-b)] + \sum_{p=0}^3 [q(z-z_{2p}) - q(z-z_{2p+1})] \right) - eFz[q(z-b) - q(z)] - Vq(z-b), \quad (2)$$

де  $V = eFb$ .

Для розрахунку стаціонарних хвильових функцій та енергетичного спектру електрона у моделі закритої системи потрібно розв'язати стаціонарне рівняння Шредінґера

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) \right) \Psi(z) = E\Psi(z). \quad (3)$$

З урахуванням виразів для ефективної маси (1) та потенціальної енергії електрона (2) рівняння Шредінґера (3) у межах РТС, а також зліва та справа, від неї має вигляд:

$$\begin{cases} \left( -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U - E \right) \Psi(z) = 0, & z \in (-\infty, 0], \\ \left( -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - E - V \frac{z}{b} \right) \Psi(z) = 0, & \text{ями,} \\ \left( -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U - E - V \frac{z}{b} \right) \Psi(z) = 0, & \text{бар'єри,} \\ \left( -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U - E - V \right) \Psi(z) = 0. & z \in [b, \infty) \end{cases} \quad (4)$$

Розв'язки рівнянь (4) можна подати у такому вигляді:

$$\Psi(z) = \Psi^{(0)}(z)q(-z) + \sum_{p=1}^7 \Psi^{(p)}(z) [q(z-z_{p-1}) - q(z-z_p)] + \Psi^{(8)}(z)q(z-b), \quad (5)$$

де функції

$$\begin{aligned} \Psi^{(0)}(z) &= A^{(0)} e^{c_0 z} + B^{(0)} e^{-c_0 z}; \\ (c_0 &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_1(U-E)}) \end{aligned} \quad (6)$$

$$\Psi^{(p)}(z) = A^{(p)} Ai(x_p(z)) + B^{(p)} Bi(x_p(z));$$

$$(p = 1, 2, \dots, 7) \quad (7)$$

$$\Psi^{(8)}(z) = A^{(8)} e^{c_1 z} + B^{(8)} e^{-c_1 z};$$

$$(c_1 = \hbar^{-1} \sqrt{2m_1(U-E-V)}) \quad (8)$$

є суперпозиціями точних лінійно незалежних

розв'язків рівнянь (4) у відповідних областях змінної  $z$ . Тут введено позначення:

$$x_p(z) = \begin{cases} + \left( \frac{2m_1 V b^2}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left( \frac{U-E}{V} - \frac{z}{b} \right), & p=1,3,5,7 \\ - \left( \frac{2m_0 V b^2}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left( \frac{E}{V} - \frac{z}{b} \right), & p=2,4,6. \end{cases} \quad (9)$$

$Ai(x_p(z)), Bi(x_p(z))$  - функції Ейрі.

На всіх межах РТС виконуються умови неперервності хвильових функцій і потоків густини ймовірностей:

$$\Psi^{(p)}(z_p) = \Psi^{(p+1)}(z_p); \quad \left. \frac{d\Psi^{(p)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p-e} = \left. \frac{d\Psi^{(p+1)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p+e}; \quad p=0 \div 8; \quad (e \rightarrow +0) \quad (10)$$

У моделі закритої РТС хвильові функції повинні прямувати до нуля при  $z \rightarrow \pm\infty$ , що дає  $B^{(0)} = A^{(8)} = 0$ . Тоді система рівнянь (10) приводить до дисперсійного рівняння, з якого однозначно визначається енергетичний спектр ( $E_n$ ), а також дозволяє знайти усі коефіцієнти  $A^{(p)}, B^{(p)}$  через один з них. Останній коефіцієнт знаходиться з умови нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(z) \Psi_n'(z) dz = 1, \quad (11)$$

що однозначно визначає хвильові функції  $\Psi_n(z)$  усіх стаціонарних станів електрона.

## II. Взаємодія електронів з обмеженими оптичними фононами у багат шаровій РТС

Розглядається закрыта РТС з фізичними та геометричними параметрами, що відповідають експериментальній роботі [3]. Вісь Oz вибирається у напрямку перпендикулярному до площин наноплівки РТС.

Діелектрична проникливість РТС має вигляд:

$$e(z, w) = e^0(w) \left[ q(-z) + q(z-b) + \sum_{p=1}^3 \left[ q(z-z_{2p-1}) - q(z-z_{2p}) \right] \right] + e^1(w) \sum_{p=0}^3 \left[ q(z-z_{2p}) - q(z-z_{2p+1}) \right], \quad (12)$$

де  $\varepsilon^0(w) = \varepsilon^2(w) = \varepsilon^4(w) = \varepsilon^6(w) = \varepsilon^8(w)$ ,  $\varepsilon^1(w) = \varepsilon^3(w) = \varepsilon^5(w) = \varepsilon^7(w)$  - діелектричні проникливості матеріалів шарів-ям та шарів-бар'єрів РТС відповідно.

Оскільки РТС складається з потрійних напівпровідникових сполук  $A_x B_{1-x} C$ , то діелектрична проникливість  $p$ -го середовища наносистеми задовольняє узагальненому співвідношенню Ліддейна-Сакса-Теллера

$$e^{(p)}(w) = e_{\infty}^{(p)} \frac{(w^2 - w_{Lp1}^2)(w^2 - w_{Lp2}^2)}{(w^2 - w_{Tp1}^2)(w^2 - w_{Tp2}^2)}, \quad p=0, \dots, 8, \quad (13)$$

де  $e_{\infty}^p$  та  $w_{Lp1}, w_{Tp1}; w_{Lp2}, w_{Tp2}$  -

високочастотні діелектричні проникливості і частоти обмежених та інтерфейсних фононів масивних кристалів типу АС та ВС відповідно.

У моделі діелектричного континууму [10, 11] в полярних кристалах коливання решітки, що пов'язані

з оптичними фононами, характеризуються величиною відносного зміщення  $u(\mathbf{r}, t)$ , яке є результатом дії макроскопічних локального електричного поля  $E_{loc}(\mathbf{r}, z)$  і поля поляризації  $P(\mathbf{r}, z)$ . Для того, щоб отримати спектр, вектор поляризації та потенціал поляризації поля обмежених фононів записується рівняння руху для вектора відносного зміщення  $u(\mathbf{r}, z)$ , де  $\mathbf{r} = x\mathbf{n}_x + y\mathbf{n}_y$ . Для трикомпонентних напівпровідників рівняння для зміщень  $u_1(\mathbf{r}, z), u_2(\mathbf{r}, z)$  мають вигляд [9, 10]:

$$m_{1(2)} \frac{d^2 u_{1(2)}(\mathbf{r}, t)}{dt^2} = -m_{1(2)} w_{T1(2)}^2 u_{1(2)}(\mathbf{r}, t) + e_{1(2)} E_{loc}(\mathbf{r}, t) \quad (14)$$

де  $m_{1(2)}$  - приведена ефективна маса для кожної з дипольних пар  $A\tilde{N}$  і  $BC$  відповідно;  $e_1, e_2$  - ефективні заряди.

Фононний спектр і потенціал поляризації

системи згідно з моделлю діелектричного континууму визначається матеріальним рівнянням і двома рівняннями Максвелла

$$\begin{cases} \vec{D} = \epsilon(z, \omega) \vec{E} = \vec{E} + 4\pi \vec{P}, \\ \vec{E} = -\nabla \Phi, \\ \nabla \cdot \vec{D} = 0, \end{cases} \quad (15)$$

де  $\vec{D}$  – вектор індукції електричного поля,  $\vec{E}$  – вектор напруженості електричного поля,  $\vec{P}$  – вектор поляризації,  $\Phi$  – потенціал поля поляризації.

Напруженість локального поля  $\vec{E}_{loc}$  пов'язана з напруженістю середнього поля  $\vec{E}$  і вектором поляризації  $\vec{P}$  співвідношенням:

$$\vec{E}_{loc} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} / 3, \quad (16)$$

Зв'язок вектора поляризації  $\vec{P}$  з векторами  $\vec{u}$  та  $\vec{E}_{loc}$  для дипольних пар  $AC$  і  $BC$  має вигляд

$$\vec{P}(r, z) = \epsilon_0(\epsilon_\infty - 1) \vec{E}_{loc}(r, z) + (1-x) \epsilon_1 \vec{u}_1(r, z) + x \epsilon_2 \vec{u}_2(r, z) \quad (17)$$

З рівнянь Максвелла для середовищ (15) отримується рівняння:

$$\epsilon(\omega) \Delta \Phi(\vec{r}, z) = 0, \quad (18)$$

розв'язки якого визначають спектр частот оптичних фонових наноструктури. Як видно з (18), існують два типи розв'язків:

а) якщо

$$e^p(\omega) = 0, \Delta \Phi_p(\vec{r}, z) \neq 0, \quad (p = 0, \dots, 8), \quad (19)$$

то отримується спектр частот обмежених оптичних фонових;

б) якщо

$$e^p(\omega) \neq 0, \Delta \Phi_p(\vec{r}, z) = 0, \quad (p = 0, \dots, 8), \quad (20)$$

то отримується спектр частот інтерфейсних оптичних фонових наноструктури.

Враховуючи умови (19) та співвідношення (13)

отримуємо, що енергії обмежених фонових РТС збігаються з відповідними енергіями оптичних фонових у масивних кристалах,

$$\Omega_{LP} \left\{ \begin{matrix} AC \\ BC \end{matrix} \right\} = \Omega_{LP} \left\{ \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \right\}, \quad (21)$$

Для знаходження потенціалу поляризації обмежених фонових  $\Phi_L(\vec{r}, z)$  використовується матеріальне рівняння (15) та умова  $e_p(\omega) = 0$ , що дає зв'язок вектора поляризації  $\vec{P}_L$  з напруженістю середнього та локального полів:

$$\vec{E} = -4\pi \vec{P}_L \quad (22)$$

$$\vec{E}_{loc} = -\frac{8\pi}{3} \vec{P}_L \quad (23)$$

У результаті отримується вираз для вектора поляризації:

$$\vec{P}_L = \frac{(1-x) \epsilon_1 \vec{u}_1(r, z) + x \epsilon_2 \vec{u}_2(r, z)}{1 + 8\pi \epsilon_0 (\epsilon_\infty - 1) / 3}, \quad (24)$$

та рівняння для потенціалу поля поляризації обмежених фонових:

$$\nabla \Phi_L(\vec{r}, z) = \frac{4\pi((1-x) \epsilon_1 \vec{u}_1(r, z) + x \epsilon_2 \vec{u}_2(r, z))}{1 + 8\pi \epsilon_0 (\epsilon_\infty - 1) / 3} \quad (25)$$

Потенціал  $\Phi_L(\vec{r}, z)$ , з фізичних міркувань повинен зникати на усіх межах РТС:

$$\Phi_{LP}(\vec{r}, z) \Big|_{z=z_p} = 0, \quad p = 0, 1, \dots, 8, \quad (26)$$

З урахуванням симетрії наносистеми електростатичний потенціал поля поляризації обмежених оптичних фонових  $\Phi_L(\vec{r}, z)$  всередині РТС ( $0 \leq z \leq b$ ) можна записати використовуючи двовимірне перетворення Фур'є:

$$\begin{aligned} \Phi_L(\vec{r}, 0 \leq z \leq b) &= \sum_{\vec{q}} \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{q \sqrt{L^2}} f_L(\vec{q}, z) = \\ &= \sum_{q_p} \sum_{\vec{q}} \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{\sqrt{L^2}} \left[ A_p(\vec{q}) \cos(q_p z) + B_p(\vec{q}) \sin(q_p z) \right] \left[ q(z - z_{p-1}) - q(z - z_p) \right], \end{aligned} \quad (27)$$

де  $L^2$  – площа основної області в площині  $xOy$ ,  $\vec{q} = \vec{q}_H = q_x \vec{n}_x + q_y \vec{n}_y$  – двовимірний хвильовий вектор у площині  $xOy$ ,  $\vec{n}_x$  та  $\vec{n}_y$  – одиничні вектори.

Для напівобмежених фонових потенціал поля поляризації записується у вигляді:

$$\Phi_L(\vec{r}, z \leq 0) = \sum_{q_0} \sum_{\vec{q}} \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{\sqrt{L^2}} B_0(\vec{q}) \sin(q_0 z), \quad (28)$$

$$\Phi_L(\vec{r}, z \geq b) = \sum_{q_8} \sum_{\vec{q}} \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{\sqrt{L^2}} B_8(\vec{q}) \sin(q_8(z - b)), \quad (29)$$

З використанням умови (25) отримується співвідношення між коефіцієнтами  $A_p(q)$  і  $B_p(q)$ :

$$B_p(\vec{q}) = -A_p(\vec{q}) \operatorname{ctg}(q_p z_p), \quad (30)$$

де:

$$q_p = m\pi / d_p, \quad m = 1, 2, \dots, \quad (31)$$

$$d_p = z_p - z_{p-1}, \quad (32)$$

де  $d_p$  - товщина  $p$ -го шару РТС.

(27) набуває остаточного вигляду:

Тепер потенціал поляризації обмежених фононів

$$\Phi_L(\mathbf{r}, z) = -\sum_m \sum_q \sum_{p=1}^7 \frac{e^{iqr}}{\sqrt{L^2}} C_p(\mathbf{q}) \sin[mp(z - z_{p-1})/d_p][q(z - z_{p-1}) - q(z - z_p)], \quad C_p(\mathbf{q}) = \frac{A_p(\mathbf{q})}{\sin(q_p z_p)} \quad (33)$$

Для напівобмежених фононів потенціали поляризації є такими

$$\Phi_L(\mathbf{r}, z \leq 0) = -\sum_m \sum_q \frac{e^{iqr}}{\sqrt{L^2}} B_0(\mathbf{q}) \sin(pmz/L), \quad (34)$$

$$\Phi_L(\mathbf{r}, z \geq b) = -\sum_m \sum_q \frac{e^{iqr}}{\sqrt{L^2}} B_8(\mathbf{q}) \sin(pm(z-b)/L) \quad (35)$$

Для нормалізації потенціалів поляризації використовується перетворення Фур'є величин:

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r}, z) &= \sum_q \mathbf{u}(\mathbf{q}, z) e^{iqr}, & E_{loc}(\mathbf{r}, z) &= \sum_q \mathbf{E}_{loc}(\mathbf{q}, z) e^{iqr}, \\ P(\mathbf{r}, z) &= \sum_q \mathbf{P}(\mathbf{q}, z) e^{iqr}. \end{aligned} \quad (36)$$

з урахуванням співвідношення

$$r_{1(2)}(w_{T_{1(2)}}^2 - w^2) u_{1(2)}(\mathbf{q}, z) = e_{1(2)}^* \mathbf{E}_{loc}(\mathbf{q}, z), \quad (37)$$

де  $r_1, r_2$  та  $e_1^*, e_2^*$  - ефективні густини приведеної маси та заряду іонів відповідно, використовуючи зв'язок:

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}, z) = e_0 \mathbf{e}(w) \mathbf{E}_{loc}(\mathbf{q}, z) = e_0 \mathbf{E}_{loc}(\mathbf{q}, z) + \mathbf{P}(\mathbf{q}, z) \quad (38)$$

та вираз для вектора поляризації

$$\mathbf{P}(\mathbf{q}, z) = e_0(e_\infty - 1) \mathbf{E}_{loc}(\mathbf{q}, z) + (1-x) e_1^* \mathbf{u}_1(\mathbf{q}, z) + x e_2^* \mathbf{u}_2(\mathbf{q}, z) \quad (39)$$

отримаємо рівність

$$e_0(e(w) - e_\infty) \mathbf{E}_{loc}(\mathbf{q}, z) = (1-x) e_1^* \mathbf{u}_1(\mathbf{q}, z) + x e_2^* \mathbf{u}_2(\mathbf{q}, z) \quad (40)$$

Підставляючи тепер співвідношення (37), (13) в (40) отримуємо:

$$(e_1^*)^2 = \frac{r_1 e_0 e_\infty (w_{LO_1}^2 - w_{TO_1}^2)(w_{LO_2}^2 - w_{TO_1}^2)}{(1-x)(w_{TO_2}^2 - w_{TO_1}^2)}; \quad (e_2^*)^2 = \frac{r_2 e_0 e_\infty (w_{LO_1}^2 - w_{TO_2}^2)(w_{LO_2}^2 - w_{TO_2}^2)}{(1-x)(w_{TO_1}^2 - w_{TO_2}^2)}, \quad (41)$$

що з урахуванням рівнянь (37) дає:

$$(1-x) \left| \sqrt{r_1} u_1(q, z) \right|^2 + x \left| \sqrt{r_2} u_2(q, z) \right|^2 = \frac{e_0}{2w} \frac{de(w)}{dw} \left| E_{loc}(q, z) \right|^2, \quad (42)$$

де

$$\frac{de(w)}{dw} = 2w e_\infty \left[ \frac{(w_{LO_1}^2 - w_{TO_1}^2)(w_{LO_2}^2 - w_{TO_1}^2)}{(w_{TO_2}^2 - w_{TO_1}^2)(w^2 - w_{TO_1}^2)^2} - \frac{(w_{LO_1}^2 - w_{TO_2}^2)(w_{LO_2}^2 - w_{TO_2}^2)}{(w_{TO_2}^2 - w_{TO_1}^2)(w^2 - w_{TO_2}^2)^2} \right], \quad (43)$$

Виконавши умову нормування потенціалу поляризації обмежених фононів отримаємо гамільтоніан взаємодії електронів з обмеженими і напівобмеженими фононами у зображенні вторинного квантування за фононними змінними та в координатному за електронними змінними

$$\begin{aligned} \hat{H}_{e-L} &= -e \Phi_L(\mathbf{r}, z) = -\sum_q f_L(\mathbf{q}, z) e^{iqr} (b_q + b_{-q}^+) = \\ &= \left( \frac{\hbar e^2}{e_0 L^2} \right)^{1/2} \sum_m \sum_q \left\{ \frac{de^{(0)}(w)}{dw} \left[ \mathbf{q}^2 + \left( \frac{mp}{L} \right)^2 \right] \right\}^{-1/2} 2 \sin[mpz/L] e^{iqr} \mathbf{q}(-z) (b_q + b_{-q}^+) + \\ &+ \left( \frac{\hbar e^2}{e_0 L^2} \right)^{1/2} \sum_m \sum_q \left\{ \frac{de^{(0)}(w)}{dw} \left[ \mathbf{q}^2 + \left( \frac{mp}{L} \right)^2 \right] \right\}^{-1/2} 2 \sin[mp(z-b)/L] e^{iqr} \mathbf{q}(z-b) (b_q + b_{-q}^+) + \left( \frac{\hbar e^2}{e_0 L^2} \right)^{1/2} \times \\ &\times \sum_m \sum_q \sum_{p=1}^7 \left\{ \frac{d_p}{2} \frac{de^{(p)}(w)}{dw} \left[ \mathbf{q}^2 + \left( \frac{mp}{d_p} \right)^2 \right] \right\}^{-1/2} \sin[mp(z-z_p)/d_p] e^{iqr} [q(z-z_{p-1}) - q(z-z_p)] (b_q + b_{-q}^+) \end{aligned} \quad (44)$$

де  $b_q, b_{-q}^+$  - фонові оператори знищення та народження.

Здійснивши далі перехід до зображення електронних чисел заповнення у електронному гамільтоніані та в гамільтоніані  $H_{e-L}$  (44), отримується [11] Фур'є-образ електронної функції Гріна  $n^{10}$  стану

при  $T = 0 K$  у вигляді

$$G_n(w) = (w - E_n - M_n(w))^{-1}, \quad (45)$$

У наближенні слабкого зв'язку масовий оператор  $M_n(w)$  має вигляд [11]:

$$M_n(w) = M_n^L(w) = \sum_{p=0}^8 \sum_m \sum_q \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{|F_{p,m,n}^L(\mathbf{q})|^2}{w - E_n - \Omega_{L_{0,1}}} + \frac{|F_{p,m,n}^L(\mathbf{q})|^2}{w - E_n - \Omega_{L_{0,2}}} + \frac{|F_{p,m,n}^L(\mathbf{q})|^2}{w - E_n - \Omega_{L_{1,1}}} + \frac{|F_{p,m,n}^L(\mathbf{q})|^2}{w - E_n - \Omega_{L_{1,2}}} \right\} \quad (46)$$

та містить доданки, що описують вклад у перенормування  $n$ -го енергетичного рівня від взаємодії електрона з обмеженими та напівобмеженими фононами через усі стани дискретного спектру,  $N$  - максимальне значення номера енергетичного рівня, який ще знаходиться у дискретній частині спектру,  $\Omega = \Omega_{L_s}$ , ( $s = 0, 1, 2, 3$ ) - енергії обмежених оптичних фонових, що визначаються згідно з (21).

Функції зв'язку обмежених фонових у (46) визначаються виразами:

$$F_{p,m,n}^L(\mathbf{q}) = \left( \frac{\hbar e^2}{e_0 L^2} \right)^{1/2} \left\{ \frac{d_p}{2} \frac{de^{(p)}(w)}{dw} \left[ \mathbf{r}^2 + \left( \frac{mp}{d_p} \right)^2 \right] \right\}^{-1/2} \int_{z_p}^{z_{p+1}} \Psi^{(p)*}(E_n, z) \sin[mp(z - z_p)/d_p] \Psi^{(p)}(E_n, z) dz, \quad (47)$$

де  $\Psi_n(E_n, z)$  - хвильові функції (5) електрона у закритій РТС.

Функції зв'язку напівобмежених фонових наступні:

$$F_{0,m,n}^L(\mathbf{q}) = \left( \frac{4\hbar e^2}{e_0 L^2} \right)^{1/2} \left\{ \frac{d_p}{2} \frac{de^{(0)}(w)}{dw} \left[ \mathbf{r}^2 + \left( \frac{mp}{d_p} \right)^2 \right] \right\}^{-1/2} \int_{-\infty}^0 \Psi^{(0)*}(E_n, z) \sin[mpz/L] \Psi^{(0)}(E_n, z) dz, \quad (48)$$

$$F_{8,m,n}^L(\mathbf{q}) = \left( \frac{4\hbar e^2}{e_0 L^2} \right)^{1/2} \left\{ \frac{d_p}{2} \frac{de^{(0)}(w)}{dw} \left[ \mathbf{r}^2 + \left( \frac{mp}{d_p} \right)^2 \right] \right\}^{-1/2} \int_b^{\infty} \Psi^{(8)*}(E_n, z) \sin[mp(z - b)/L] \Psi^{(8)}(E_n, z) dz \quad (49)$$

Тепер повний парціальний зсув  $n$ -го енергетичного рівня подається у вигляді суми

$$\Delta_n^L = \Delta_n^L \text{ Confined} + \Delta_n^L \text{ Half-space}, \quad (50)$$

де  $\Delta_n^L \text{ Confined}$ ,  $\Delta_n^L \text{ Half-space}$  - зсуви зумовлені

взаємодією електрона з обмеженими і напівобмеженими фононами РТС відповідно.

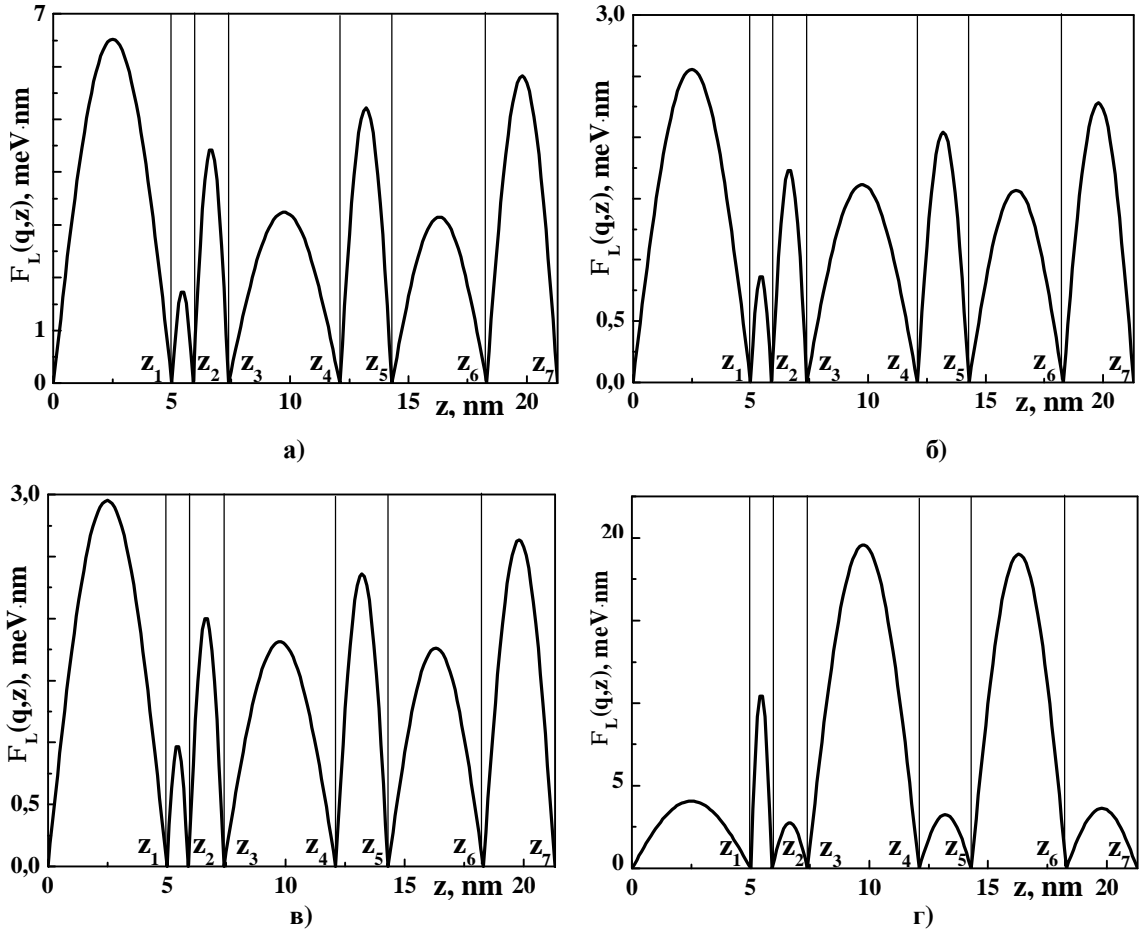
( $U = 516$  меВ,  $F = 68$  кВ/см,  $m_0 = 0.047 me$ ;  $m_1 = 0.089 me$ ). Ширини бар'єрів ( $\Delta p$ ) (5,0; 1,5; 2,2; 3,0) і ям ( $b_p$ ) (0,9; 4,7; 4,0), вказані у нанометрах, розташовані зліва направо по РТС (рис. 1), взяті такими ж, як і в експериментальній роботі [3], де досліджувана РТС слугувала активною зоною окремого каскаду ККЛ.

Таблиця 1

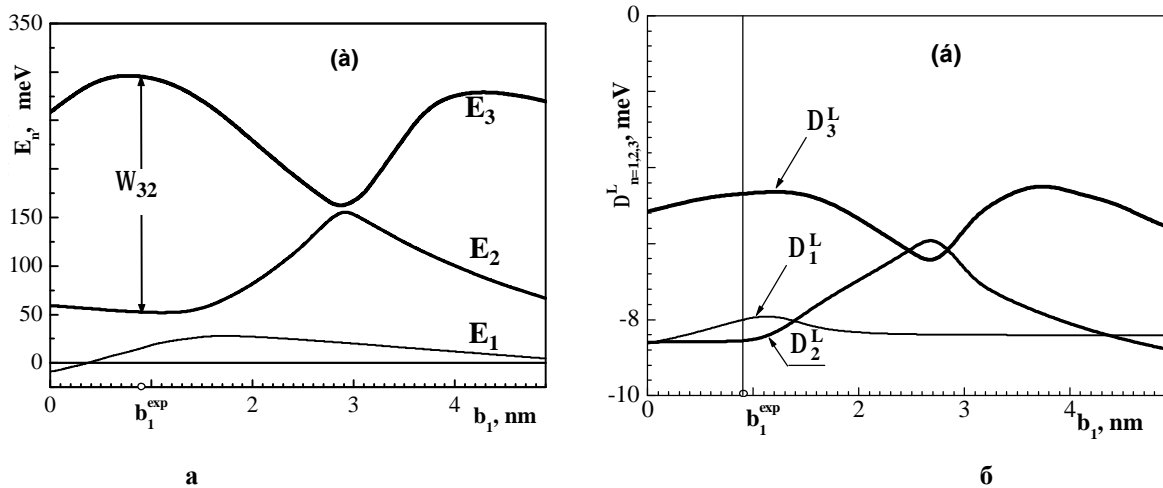
	$\Omega_{L_{p,1}}$ (меВ)	$\Omega_{L_{p,2}}$ (меВ)	$\Omega_{T_{p,1}}$ (меВ)	$\Omega_{T_{p,2}}$ (меВ)	$e_{\infty}$
GaInAs ( $p = 0$ )	33,69	29,43	31,57	28,03	11,64
AllnAs ( $p = 1$ )	29,79	48,09	27,18	44,63	10,31

### III. Результати числових розрахунків

Числові розрахунки електронного та фонових спектрів виконувались на прикладі РТС з Ga0.47In0.53As - ямами та Al0.48In0.52As - бар'єрами з відомими фізичними параметрами



**Рис. 2.** Нормовані потенціали поляризації обмежених фонових, як функції  $z$  при  $m = 1$ ;  $q = 0, 1p/a$  ( $a = 0,581 \text{ nm}$ );  $\Omega = \Omega_{L_{0,1}}$  (а),  $\Omega = \Omega_{L_{0,2}}$  (б);  $\Omega = \Omega_{L_{1,1}}$  (в);  $\Omega = \Omega_{L_{1,2}}$  (г).



**Рис. 3.** Еволюція енергетичного спектру електрона (а) та парціальних зміщень, викликаних взаємодією з обмеженими фонами (б), у залежності від ширини ( $b_1$ ) вхідної ями багатощарової РТС.

Розрахунки спектру та потенціалів поляризації обмежених оптичних фонових виконувались з використанням фізичних параметрів напівпровідників, приведених у табл. 1.

На рис. 2, а, б, в, г наведено розраховані нормовані потенціали поляризації обмежених фонових, як функції координати  $z$  при  $m = 1$ ,

$q = 0, 1p/a$  та при різних фіксованих значеннях енергії  $\Omega = \Omega_{L_{0,1}}$  (а);  $\Omega = \Omega_{L_{0,2}}$  (б);

$\Omega = \Omega_{L_{1,1}}$  (в);  $\Omega = \Omega_{L_{1,2}}$  (г). З рис. 2 видно, що всі

залежності  $\Phi_b(q, z)$  мають якісно схожий характер

зі зміною  $z$ . Вони досягають максимальних значень в точках  $z_{p-1} + (z_p - z_{p-1})/2 = z_{p-1} + d_p/2$ , тобто посередині кожного шару РТС, та неперервно прямують до нуля при наближенні  $z$  до гетеромереж системи  $z_p$ .

На рис. 3,а приведені результати розрахунків перших трьох енергетичних рівнів  $E_n$  електрона у залежності від положення ( $b_1$ ) внутрішнього двобар'єрного елемента між двома зовнішніми бар'єрами чотирибар'єрної РТС при фіксованих розмірах усіх інших елементів наносистеми. На цьому ж рисунку вказано положення  $b_1^{\text{exp}}$ , яке відповідає геометричному дизайну активної зони окремого каскаду експериментально реалізованого каскаду ККЛ [3].

Оскільки знайдені потенціали поляризації обмежених та напівобмежених фононів визначають перенормований енергетичний спектр електрона, то на їх основі виконувався розрахунок сумарного парціального зсуву  $\Delta_n^L$   $n$ -го енергетичного рівня електрона викликаного взаємодією електрона з фононами. Результати відповідних розрахунків (при  $n = 1, 2, 3$ ) у залежності від ширини ( $b_1$ ) вхідної ями багат шарової РТС приведено на рис. 3,б. З отриманих залежностей видно, що поведінка  $\Delta_1^L$ ,  $\Delta_2^L$ ,  $\Delta_3^L$  від  $b_1$  різна, однак залежності  $\Delta_n^L$  якісно подібні до відповідних залежностей  $E_n$  від  $b_1$  (рис. 3,а). Це зумовлює лінійне зміщення всіх трьох енергетичних рівнів  $E_n$  у низько енергетичну область.

Теоретично розраховане значення енергії

лазерного випромінювання  $\Omega_{32} = E_3 - E_2 = 236$  меВ при експериментально реалізованих геометричних параметрах РТС відрізняється від експериментально отриманого  $\Omega_{32}^{\text{exp}} = 238,8$  меВ на 2 %, а різниця енергій  $E_2 - E_1 = 33,6$  меВ добре корелює з величиною енергії обмежених фононів.

## Висновки

У роботі розвинена теорія хвильових функцій та дискретного енергетичного спектру електрона в багат шаровій закритій РТС, як моделі активної зони ККЛ. У моделі діелектричного континууму розвинена теорія спектру обмежених та напівобмежених оптичних фононів досліджуваної РТС.

На основі аналітично розрахованих потенціалів поляризації обмежених та напівобмежених фононів досліджено зсув енергетичного електронного спектра, викликаний взаємодією електрона з цими фононами. Показано, що врахування взаємодії електрона з обмеженими та напівобмеженими оптичними фононами дає таке значення енергії лазерного випромінювання, яке відрізняється від експериментального менше ніж на 2 %.

**Ткач М.В.** - доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри теоретичної фізики;  
**Сеті Ю.О.** - доктор фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри теоретичної фізики;  
**Бойко І.В.** - кандидат фізико-математичних наук;  
**Гринишин Ю.Б.** - аспірант кафедри теоретичної фізики;

- [1] C. Sirtori, P. Kruck, S. Barbieri, Appl. Phys. Lett. 75(25), 3911 (2004).
- [2] F. R. Giorgetta, E. Baumann, R. Théron, Appl. Phys. Lett. 92(12), 121101 (2008).
- [3] G. Gmachl, F. Capasso, D. L. Sivco, A. Y. Cho, Rep. Prog. Phys. 64(11), 1533 (2001).
- [4] M. V. Tkach, Ju. O. Seti, I. V. Boyko, O. M. Voitsekhivska, Condensed Matter Physics 16(3), 33701 (2013).
- [5] S. Yu, M. A Strosio, G. J. Iafrate, J. P. Sun, G. I. Haddad, J. Appl. Phys. 82(7), 3363 (1997).
- [6] B. H. Wu, J. C Kao, C. Q. Xia, H. C. Liu, Eur. Phys. J. B. 33(2), 00135 (2003).
- [7] J. G. Zhu, S. L Ban, Liu, Eur. Phys. J. B. 85(9), 20981 (2012).
- [8] B. S. Williams, Q. Hu, J. Appl. Phys. 90(11), 3363 (2001).
- [9] X. Gao, D. Botez, I. Knezevic, J. Appl. Phys. 103(7), 073101 (2008).
- [10] N. Mori, T. Ando, Phys. Rev. B. 40(9), 6175 (1989).
- [11] M.V. Tkach, Kvazichastinki u nanoheterosistemah. Kvantovi tochki ta droti (Ruta, Chernivci, 2003).



M.V. Tkach, Ju.O. Seti, I. Boyko, Ju.B. Grynysyn

## **Interaction of Electrons with Confined Phonons in Multilayer Resonant Tunneling Structure**

*Chernivtsi National University, Chernivtsi, Kotsubynsky str., 2, 58012, e-mail: [ktf@chnu.edu.ua](mailto:ktf@chnu.edu.ua)*

The theory of electron stationary spectrum and wave functions in plane multilayer resonant tunneling structure placed into the electric field is developed using the model of the active band of the quantum cascade laser. For the same nanostructure the theory of confined optical phonons spectra is established within the dielectric continuum model. Using the obtained electron wave functions and phonon polarizational potentials the theory of electron – confined phonons interaction in multilayer nanostructure is developed. The Hamiltonian of this interaction is obtained in the representation of second quantization. The calculations of the electron and the phonon spectra and potential of polarization of confined phonons are performed for the experimental resonant tunneling structure. The partial shifts are calculated for the electron spectrum renormalized by the interaction with confined phonons. The obtained results are in good correlation with the experimental data.

**Keywords:** quantum cascade laser, resonant tunneling structure, confined phonons, electron-phonon interaction.