

# Самосогласованный расчёт собственных энергий электронных уровней сверхрешетки с учётом пространственного распределения заряда

Ан. А. Афоненко, Д. В. Ушаков

Белорусский государственный университет, Минск; Беларусь, e-mail [afonenkooa@bsu.by](mailto:afonenkooa@bsu.by)

На основе самосогласованных расчётов уравнений Шрёдингера и Пуассона для квантово-каскадной гетероструктуры найдено, что обратная длина экранирования при расположении примеси в центре широкой квантовой ямы получается в 2.7 раз меньше, чем при использовании приближения объёмного экранирования. Энергетическая глубина залегания основного уровня в зависимости от положения примеси варьируется в пределах 2.6 мэВ, что в 2 раза меньше, чем при использовании приближения объёмного экранирования.

**Ключевые слова:** квантово-каскадная гетероструктура; примесные состояния; уравнения Шрёдингера-Пуассона.

## Self-consistent calculation of the eigenenergies of electronic levels of a superlattice taken into account of the spatial charge distribution

Ан. А. Afonenko, D. V. Ushakov

Belarusian State University, Minsk; Belarus, e-mail [afonenkooa@bsu.by](mailto:afonenkooa@bsu.by)

On the basis of self-consistent calculations of the Schrödinger and the Poisson equations for a quantum-cascade heterostructure, it was found that the inverse screening length at the location of the impurity in the center of a wide quantum well is 2.7 times smaller than when using the bulk screening approximation. The energy depth of the main level depending on the position of the impurity varies within 2.6 meV, which is 2 times smaller than when using the bulk screening approximation.

**Keywords:** quantum cascade heterostructure; impurity states; Schrödinger-Poisson equations.

### Введение

Вопросы влияния примесей на перенос носителей заряда и усиление квантово-каскадных лазеров (ККЛ) играют важную роль для оптимизации их характеристик. В последнее время возрос интерес к увеличению уровня легирования, что позволяет увеличить максимальное усиление и мощность генерации ККЛ. При этом рассеяние с участием примесей может стать доминирующим механизмом переноса носителей заряда. Обычно в расчетах рассеяния для потенциала примеси используется кулоновский потенциал с экранированием как для объёмного материала [1]. В сверхрешетках справедливость применения такого приближения нуждается в подтверждении.

### 1. Дизайн квантово-каскадной гетероструктуры

Анализ экранирования проводится на примере гетероструктуры  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  с периодом из 4-х слоев 3.26/7.99/1.90/16.46 нм [2]. Легирование гетероструктуры  $N_d = 4.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  на период. Рассматривается сверхрешетка с одним заряженным центром. Рассматриваемая область содержит 4 периода структуры  $z_{\text{max}} \approx 120$  нм.

Структура рассматривается при температуре  $T = 77$  К без приложения внешнего напряжения.

## 2. Определение обратной длины экранирования

При расчёте характеристик полупроводниковых гетероструктур обычно используется экранированный потенциал примеси

$$\mu(r) = -\frac{e \cdot \exp(-kr)}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r}, \quad (1)$$

где  $k$  – обратная длина экранирования, которая для объемного полупроводника рассчитывается как

$$k = \sqrt{\frac{e^2 N_d^{3D}}{\epsilon\epsilon_0 kT}}, \quad (2)$$

где  $N_d^{3D}$  – объемная концентрация примесей,  $T$  – температура структуры,  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость материала.

Для построения самосогласованного расчёта требуется определить распределение заряда, создаваемого одним электроном. Для этого решается уравнение Шредингера в отсутствие примеси и распределение заряда нормируется на  $N$  электронов. Далее добавляется потенциал примеси и распределение заряда нормируется на  $N+1$  электрон. Разность двух распределений дает распределение заряда вокруг примеси.

Для определения потенциала, создаваемого распределённым зарядом примеси, решается уравнение Пуассона. При этом удобно использовать сферическую систему координат. Решение ищется в виде разложения по сферическим гармоникам. Для радиальных компонент разложения потенциала  $\mu_j(r)$  ожидается зависимость вида

$$\mu_j(r) = \frac{f_j(r)}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r}, \quad (3)$$

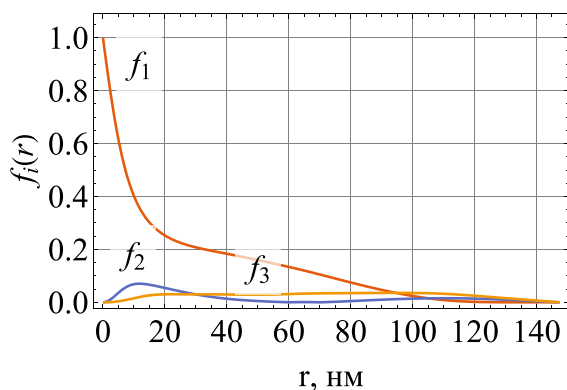


Рис. 1. Координатная зависимость радиальных компонент экранирующего множителя нулевого ( $f_1$ ), первого ( $f_2$ ) и второго ( $f_3$ ) порядка

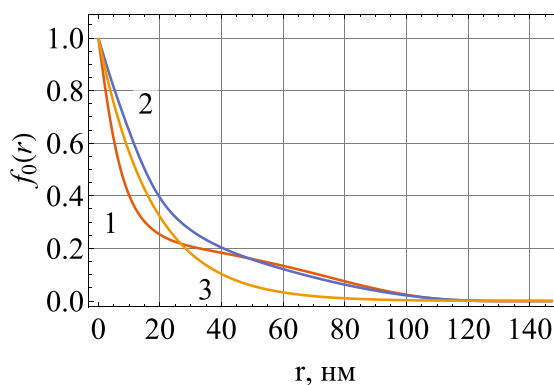


Рис. 2. Координатная зависимость экранирующего множителя при расположении примеси в широкой квантовой яме (2), узкой квантовой яме (1) и аналитическая зависимость для объемного полупроводника (3)

где  $f_j(r)$  – экранирующий множитель для  $j$ -й сферической гармоники, который в объемном случае отличен от 0 только для 0-й гармоники  $f_1(r) = \exp(-kr)$ .

Рассчитанный вклад компонент высших порядков мал по сравнению со сферически симметричной компонентой (рис. 1). Функция экранирующего множителя является монотонной и затухает медленнее по сравнению с аналитическим приближением (рис. 2).

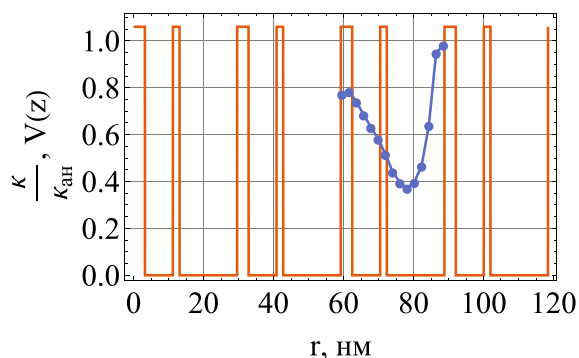


Рис. 3. Нормированная зависимость обратной длины экранирования  $\kappa$  от положения примеси. Схематично приведена величина гетеропотенциала

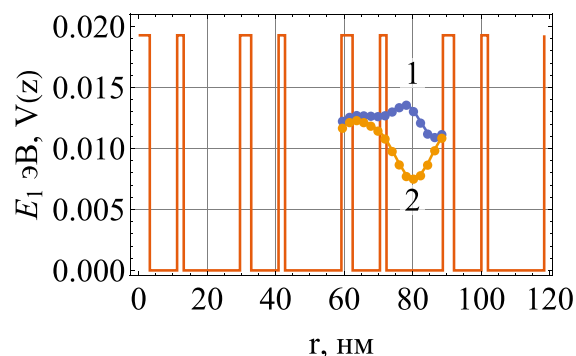


Рис. 4. Зависимость энергии основного состояния примеси  $E_1$  от положения примеси для рассчитанного (1) и аналитического (2) экранирования. Схематично приведена величина гетеропотенциала

Наименьшая обратная длина экранирования  $\kappa = 2.12 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$  получается при расположении примеси в центре широкой квантовой ямы, что в 2.7 раз меньше аналитического приближения  $\kappa = 5.70 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$  (рис. 3). Наибольшая  $\kappa = 5.94 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$  – при расположении примеси в широком барьере. Зависимость энергии основного уровня от положения примеси существенно отличается от расчетов с использованием объемного экранирования (рис. 4). Энергия основного уровня примеси в зависимости от ее положения варьируется в пределах 2.6 мэВ, в то время как при использовании объемного экранирования диапазон вариации составляет 5 мэВ.

## Заключение

Найденная значительно меньшая длина экранирования примеси по сравнению с объемным приближением должна приводить к существенному увеличению расчетной скорости рассеяния на примесях. Малый диапазон вариации глубины залегания основного уровня примеси в зависимости от ее положения свидетельствует о меньшем неоднородном спектральном уширении уровней квантово-каскадных гетероструктур, чем в приближении объемного экранирования.

## Библиографические ссылки

1. Влияние селективного легирования на характеристики квантово-каскадных лазеров ТГц диапазона / Ан. А. Афоненко [и др.] // Труды XXVI Международного симпозиума «Нанопизика и наноэлектроника» (Нижний Новгород, 13–16 марта 2023 г.) в 2 т. Том 2. – Нижний Новгород: ИПФ РАН, 2023. С. 530–531.
2. Thermoelectrically cooled THz quantum cascade laser operating up to 210 K / L. Bosco [et al.] // Applied Physics Letters. 2019. Vol. 115, № 1. P. 010601.