

1 | Введение

Одной из наиболее актуальных проблем современной прикладной физики является создание источников когерентного излучения терагерцового (ТГц) диапазона. Такие источники могли бы использоваться во множестве медицинских приложений, ввиду достаточно малого поглощения этого излучения тканями человека, что позволило бы разработать новые неинвазивные методы диагностики онкологии и иных заболеваний; другим возможным применением может стать спектроскопия сложных органических соединений, поскольку они имеют вращательные и колебательные степени свободы, имеющие соответствующие частоты лежащие именно в терагерцовом диапазоне.

В настоящее время имеется несколько способов генерации подобного излучения, которые, однако, имеют много недостатков. Одним из классов таких приборов являются квантово-каскадные лазеры (ККЛ). Они демонстрируют превосходные характеристики (высокий КПД, высокий уровень когерентности) в диапазоне 1-5 THz и выше 15 THz [25]. Однако большая часть таких лазеров создается на основе полупроводников типа A3B5 (GaAs, PbSb или InP), которые имеют высокое поглощение на оптических фонах в диапазоне 5-15 THz. QCL на основе GaN подступают к спектральному диапазону 5 - 15 THz со стороны низких частот (относительно частот оптических фонов), но их рабочие характеристики требуют значительного улучшения [3].

Альтернативой ККЛ являются лазеры на основе межзонных переходов в узкозонных полупроводниковых структурах. Такие лазеры намного проще в изготовлении, а также позволяют наблюдать стимулированное излучение и генерацию в диапазоне 5-15 THz. Кроме того, их отличительной чертой является возможность перестройки частоты в достаточно широком диапазоне, за счет изменения температуры. Однако ограничивающим факто-

ром является процесс безызлучательной оже-рекомбинации. При этом традиционно ожидается, что вероятность межзонной оже-рекомбинации растёт с уменьшением ширины запрещённой зоны, что может затруднить m стимулированного излучения.

Оже-рекомбинация представляет собой безызлучательный трёхчастичный процесс. По типу носителей заряда, участвующих в процессе он делится на ССНС и ННСН процессы (процесс с участием двух электронов и дырки и процесс с двумя дырками и электроном соответственно). В ходе этого процесса пара носителей с противоположным зарядом рекомбинирует и передаёт энергию и импульс третьему. В силу ограничений, накладываемых законами сохранения энергии и импульса, этот процесс является пороговым. Поэтому температура сильно влияет на темп таких процессов, а значит и на эффективность лазеров.

Повлиять на это можно, варьируя материалы/структуры и изменяя тем самым дисперсионные соотношения в них. В частности, существуют законы дисперсии, в которых такие процессы принципиально запрещены законами сохранения (к примеру Дираковский закон дисперсии для массовых частиц). С другой стороны возможны структуры, в которых энергетический порог таких оже-процессов к нулю (к примеру Дираковский закон дисперсии безмассовых частиц).

Спектральный диапазон 5 - 15 THz к настоящему моменту частично перекрыт лишь диодными лазерами на основе халькогенидов свинца-олова, которые обеспечивают длины волн излучения вплоть до $46.5 \mu m$ [18]. Фактор, который снижает эффективность оже-рекомбинации в PbSnSe(Te) [25], [9] - симметрия между законами дисперсии носителей в зоне проводимости и в валентной зоне. Однако их рабочие характеристики ограничены технологией роста: существуют труднопреодолимые проблемы в реализации квантовых ям (КЯ) для твердых растворов PbSnSe(Te) и остаточная концентрация носителей остается на высоком уровне $10^{17} cm^{-3}$. К тому же технология

производства подобных полупроводников пока не отработана в достаточной мере, что не позволяет выращивать структуры с квантовыми ямами и единственной возможностью влиять на дисперсионное соотношение и ширину запрещенной зоны является изменение состава.

Существуют альтернативные полупроводниковые системы, которые позволяют приблизиться к дираковскому закону дисперсии, но с конечной шириной запрещенной зоны. Как было показано в многочисленных работах [11],[6], одна из таких систем - гетероструктуры с КЯ на основе $\text{Hg}(\text{Cd})\text{Te}/\text{CdHgTe}$. В отличие от графена, в структурах на основе HgCdTe (КРТ) с КЯ можно перестраивать ширину запрещенной зоны путем изменения ширины КЯ и содержания Cd в ней. Современная молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ) обеспечивает высокое качество эпитаксиальных пленок КРТ не только на подложках CdZnTe , но и на «альтернативных» подложках GaAs [12]. Высокое качество эпитаксиальных структур HgCdTe , выращенных на GaAs подложках, было подтверждено в ходе исследований фотопроводимости (ФП) и фотолюминесценции (ФЛ) в среднем и дальнем инфракрасном диапазонах ($\lambda = 15\text{-}30\ \mu\text{m}$). Было получено стимулированное излучение (СИ) в КРТ структурах с КЯ на длине волны до $20.3\ \mu\text{m}$ [11], в то время как ранее лазерная генерация в HgCdTe была продемонстрирована лишь в коротковолновой области среднего инфракрасного диапазона спектра (на длинах волн $2\text{ - }5\ \mu\text{m}$).

Целью настоящей работы было исследование длинноволнового СИ из подобных структур и выявление факторов, определяющих наблюдаемые характеристики СИ, и возможных путей подавления безызлучательной рекомбинации в таких структурах. В работе было продемонстрировано, что возможно подавление оже-процессов в подобных структурах за счет увеличения его порога [6]. Рассмотрены способы его повышения за счет изменения толщины и состава квантовых ям, а также состава барьеров.

В данной работе проводится расчёт энергетических зонных спектров

и соответствующих волновых функций узкозонных гетероструктур с квантовыми ямами на основе твёрдых растворов $Hg_{1-x}Cd_xTe$. Это является важным и необходимым шагом для расчётов порога оже-рекомбинации.

2 | Вычисление зонного спектра

2.1. Модель Кейна 8x8

2.1.1. Обзор

В силу того, что $HgTe$ имеет отрицательную ширину запрещённой зоны, гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) на основе $Hg_{1-x}Cd_xTe$ могут реализовать как инвертированный, так и нормальный зонный спектр (например [19]).

Возможность работы с чрезвычайно малыми величинами E_g порядка ~ 1 meV налагает высокие требования на точность рассматриваемой модели. Эти требования не могут быть выполнены при использовании, например, модели Кона-Латинджера. В то же время, как это было показано в [16], [15] модель Кейна [14] даёт воспроизводимые и близкие к экспериментальным значениям результаты.

2.1.2. Однородная структура

В данной работе был рассмотрен гамильтониан Кейна, полученный для структур, рост которых осуществлялся в кристаллографическом направлении (001).

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} T & 0 & -Pk_+/\sqrt{2} & \sqrt{2}Pk_z/\sqrt{3} & Pk_-/\sqrt{6} & 0 & -Pk_z/\sqrt{3} & -Pk_-/\sqrt{3} \\ 0 & T & 0 & -Pk_+/\sqrt{6} & \sqrt{2}Pk_z/\sqrt{3} & Pk_-/\sqrt{2} & -Pk_+/\sqrt{3} & Pk_z/\sqrt{3} \\ -k_-P/\sqrt{2} & 0 & U+V & -\bar{S}_- & R & 0 & \bar{S}_-/\sqrt{2} & -\sqrt{2}R \\ \sqrt{2}k_zP & -k_-P/\sqrt{6} & -\bar{S}_-^\dagger & U-V & C & R & \sqrt{2}V & -\sqrt{3}\bar{S}_-/\sqrt{2} \\ k_+P/\sqrt{6} & \sqrt{2}k_zP/\sqrt{3} & R^\dagger & C^\dagger & U-V & \bar{S}_+^\dagger & -\sqrt{3}\bar{S}_+/\sqrt{2} & -\sqrt{2}V \\ 0 & k_+P/\sqrt{2} & 0 & R^\dagger & \bar{S}_+ & U+V & \sqrt{2}R^\dagger & \bar{S}_+/\sqrt{2} \\ -k_zP/\sqrt{3} & -k_-P/\sqrt{3} & \bar{S}_-^\dagger/\sqrt{2} & \sqrt{2}V & -\sqrt{3}\bar{S}_+^\dagger/\sqrt{2} & \sqrt{2}R & U-\Delta & C \\ -k_+P/\sqrt{3} & k_zP/\sqrt{3} & -\sqrt{2}R^\dagger & -\sqrt{3}\bar{S}_-^\dagger/\sqrt{2} & -\sqrt{2}V & \bar{S}_+^\dagger/\sqrt{2} & C^\dagger & U-\Delta \end{bmatrix}; \quad (2.1)$$

Этот гамильтониан подробно рассмотрен в статье [16]. Вид каждого отдельного элемента может быть найден в этой же статье. Важно лишь отметить, возможность представления такого элемента как билинейной формы:

$$Q = (1, k_x, k_y, k_z) \cdot \hat{Q}_{4 \times 4} \cdot (1, k_x, k_y, k_z)^T; \quad (2.2)$$

В дальнейшем это позволит более просто вычислять матричные элементы для состояний с разными значениями волновых векторов.

Этот гамильтониан действует в пространстве комплексных векторов размерности 8×1 , описывающих разложение по Блоховским функциям:

$$\psi_i(\vec{r}) = c_i \exp(i\vec{k}\vec{r}) u_i(\vec{r});$$

Требуется отметить, что этот гамильтониан приведён для объёмного материала. В силу того, что в данной работе рассматриваются гетероструктуры состав $Hg_{1-x}Cd_xTe$ оказывается сильно неоднородным по оси \vec{z}_0 .

2.1.3. Случай гетероструктуры

Для начала стоит обсудить проблему выбора базиса. В силу того, что нас интересуют состояния, локализованные внутри квантовых ям мы можем выбрать для рассмотрения конечный по оси \vec{z}_0 участок гетероструктуры длиной L . Это возможно для $L \gg d \exp(-E/E_{g,bar})$ (d - толщина квантовой ямы, E -

разница энергии n -ого уровня в Γ точке, $E_{g,bar}$ - ширина запрещённой зоны в однородном материале барьера).

Базисными функциями по оси \vec{z}_0 выберем плоские волны $\frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ik_{z,m}z)$, с квантованным значением проекции квазиимпульса:

$$k_{z,m} = \frac{2\pi}{L}m; \quad (2.3)$$

В таком случае, при фиксированном $\vec{k}_\perp = (k_x, k_y)$ базисные функции имеют два индекса: отвечающий Блоховской функции i , уровню размерного квантования m для бесконечной ямы ширины L . Базисная функция:

$$\psi_{i,m}(\vec{r}) = c_{i,m} \exp(i\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp) \exp(ik_{z,m}z) u_i(\vec{r}); \quad (2.4)$$

Полная волновая функция будет иметь вид:

$$\Psi = \sum_m \exp(i\vec{k}_m \vec{r}) \sum_i c_{i,m} u_i(\vec{r}); \quad (2.5)$$

Где $\vec{k}_m = (\vec{k}_\perp, k_{z,m})$ - волновой вектор, с учётом (2.3).

Тогда мы можем перейти в представление, связанное с коэффициентами $c_{i,m}$. Будем группировать эти коэффициенты в "вектора отвечающие одному уровню размерного квантования:

$$\vec{c}_m = (c_{0,m}, \dots, c_{7,m});$$

Также для перехода в такое представление нам потребуется перейти к операторам, при записи каждого элемента "объёмного" гамильтониана Кейна: $H_{i,j} \rightarrow \hat{H}_{i,j}$. Это можно сделать, вычислив матричные значения на огибающих функциях:

$$\hat{H}_{(i,j)(m,s)} = \frac{1}{L} \int_0^L \exp(-ik_{z,m}z) H_{i,j}(z) \exp(ik_{z,s}z) dz; \quad (2.6)$$

Гамильтониан Кейна в таком случае примет блочный вид и запишется как:

$$\hat{H} = \{\hat{H}_{m,s}\} \quad (2.7)$$

Дальнейшее решение задачи сводится к диагонализации полученной матрицы при каждом конкретном \vec{k}_\perp или, говоря иначе, к разложению:

$$\hat{H} = Q^\dagger \Lambda Q;$$

В таком случае Λ - диагональная матрица с уровнями энергии, а Q - матрица собственных векторов или коэффициентов разложений волновых функций.

2.2. Гамильтониан напряжений

2.2.1. Учёт напряжения

Задача учёта механического напряжения является актуальной для данных материалов, поскольку величины ширины запрещённой зоны могут быть сопоставимыми таки с энергией механического напряжения.

Такой учёт может быть произведён в том же формализме, добавляя к гамильтониану Кейна некий эффективный гамильтониан напряжений:

$$\hat{H}_\epsilon = \begin{bmatrix} T_\epsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & T_\epsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U_\epsilon + V_\epsilon & -S_\epsilon & R_\epsilon & 0 & S_\epsilon/\sqrt{2} & -\sqrt{2}R_\epsilon \\ 0 & 0 & -S_\epsilon^\dagger & U_\epsilon - V_\epsilon & 0 & R_\epsilon & \sqrt{2}V_\epsilon & -\sqrt{3}S_\epsilon/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & R_\epsilon^\dagger & 0 & U_\epsilon - V_\epsilon & S_\epsilon^\dagger & -\sqrt{3}S_\epsilon/\sqrt{2} & -\sqrt{2}V_\epsilon \\ 0 & 0 & 0 & R_\epsilon^\dagger & S_\epsilon & U_\epsilon + V_\epsilon & \sqrt{2}R_\epsilon^\dagger & S_\epsilon/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & S_\epsilon^\dagger/\sqrt{2} & \sqrt{2}V_\epsilon & -\sqrt{3}S_\epsilon^\dagger/\sqrt{2} & \sqrt{2}R_\epsilon & U_\epsilon - \Delta_\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}R_\epsilon^\dagger & -\sqrt{3}S_\epsilon^\dagger/\sqrt{2} & -\sqrt{2}V_\epsilon & S_\epsilon^\dagger/\sqrt{2} & 0 & U_\epsilon - \Delta_\epsilon \end{bmatrix}; \quad (2.8)$$

Элементы этого гамильтониана также приведены в работе [16] и зависят лишь от тензора деформации в точке $\varepsilon_{ij}(z)$.

2.2.2. Расчёт напряжения

В практических применениях часто используется т.н. "приближение тонкой плёнки": считается, что, если "тонкая"гетероструктура с параметром решёт-

ки $a(x)$ выращенна на "толстом" слое материала с параметром решётки a_0 , то она будет "наследовать" его. Вообще говоря это характерно для плёнок с толщиной l , выращенных на буффере, толщиной L такой, что выполняется: $l/L \ll (a - a_0)/a_0$.

В нашем случае это приближение является справедливым, так как $L \sim 10\mu m$, $l \sim 10nm$, а $(a - a_0)/a_0 \sim 1/20$.

Таким образом, поскольку мы рассматриваем тонкую плёнку, то мы знаем некоторые компоненты тензора деформация:

$$\varepsilon_{xx}(z) = \varepsilon_{yy}(z) = \frac{a(z) - a_0}{a_0}, \quad \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = 0; \quad (2.9)$$

Задача сводится к отысканию $\varepsilon_{zz}, \varepsilon_{xz}, \varepsilon_{yz}$. Можно воспользоваться законом Гука, связывающего тензор натяжений и тензор деформаций (вид тензора C_{ijkl} можно увидеть в [26]):

$$\sigma_{ij}(z) = \sum_{k,l} C_{ikjl}(z) \varepsilon_{k,l}(z); \quad (2.10)$$

Вообще говоря, тензор натяжений в равновесии связан с внешними силами как:

$$\sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}(z)}{\partial x_j} + F_i(z) = 0; \quad (2.11)$$

В нашем случае плоскостой среды без внешних сил это приводит к условию: $\sigma_{iz} = 0$. А сама задача сводится к решению простой системы линейных уравнений в каждой точке по оси z :

$$\sum_k C_{ikzk} \varepsilon_{kz} + (C_{ixzx} \varepsilon_{xx} + C_{iyzy} \varepsilon_{yy}) = \sigma_{iz} = 0, \quad \forall i; \quad (2.12)$$

2.3. Случай отличного от (001) направления роста структур

В силу целого ряда технологических причин направление роста (001) не является оптимальным для подобных структур. Гораздо более выгодным ока-

зываются направления (013), (011). Они характеризуются большей скоростью роста и более низкой концентрацией дефектов.

Таким образом встаёт задача расчёта энергетического спектра для подобных структур.

2.3.1. Гамильтониан Кейна

Рассмотрим некое направление роста (hkl) и найдём углы Эйлера, на которые он повёрнут относительно <<эталонного>> направления (001).

$$\phi(\alpha) = \text{atan} \frac{\sin \alpha}{\cos \alpha} + \begin{cases} 0 & \cos \alpha > 0; \\ \text{sign}(\sin \alpha) & \cos \alpha < 0; \end{cases}; \quad (2.13)$$

$$(x, y, z) = (h, k, l) / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}; \quad (2.14)$$

$$\sin \alpha = z, \quad \cos \alpha = \sqrt{1 - z^2}; \quad (2.15)$$

$$\sin \beta = y$$

Тогда мы могли бы перейти в нашем рассмотрении от неизвестного гамильтониана Кейна для структур, выращенных в направлении (hkl), к уже известным. Введём две системы координат K, K' , повёрнутые друг относительно друга на вышеупомянутые углы Эйлера.

Переходу из одной системы в другую соответствует применение к вектору \vec{r} матрицы вида:

$$\hat{K} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\hat{K}_z(\alpha)} \underbrace{\begin{bmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{bmatrix}}_{\hat{K}_y(\beta)} \underbrace{\begin{bmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\hat{K}_z(\gamma)} \quad (2.16)$$

Аналогично преобразуется и волновой вектор \vec{k} . В то же время требуется изменить и гамильтониан. Сам гамильтониан определён, как матричные элементы, между волновыми функциями, являющимися собственными для

оператора момента импульса по оси z (здесь $\langle \hat{H} \rangle$ - матрица оператора):

$$\langle 1 | \hat{H} | 2 \rangle = \sum_{i,j} C_i^{(1)*} \langle u_i | \hat{H} | u_j \rangle C_j^{(2)} = \vec{C}^{(1)\dagger} \langle \hat{H} \rangle \vec{C}^{(2)};$$

Соответственно наша задача сводится к отысканию матрицы преобразования \hat{R} , связывающей коэффициенты разложения в при разных поворотах:

$$\hat{R} \vec{C} = \vec{C}';$$

Эта матрица является сопряжённой $\hat{R} = \hat{T}^*$ к оператору поворота вектора базисных функций:

$$\hat{T} \vec{u} = \vec{u}';$$

При этом обычно матрица поворота гамильтониана вводится как:

$$\hat{R} = \exp(i \hat{J}_z \gamma) \exp(i \hat{J}_y \beta) \exp(i \hat{J}_x \alpha); \quad (2.17)$$

Здесь \hat{J}_i , $i = x, y, z$ - операторы проекции полного момента импульса на соответствующие координаты.

2.3.2. Гамильтониан деформации

Тензор деформации при повороте меняется как (из [26]):

$$\hat{\varepsilon}' = \hat{R} \hat{\varepsilon} \hat{R}^T; \quad (2.18)$$

Однако это не единственное изменения, требуемое для корректного учёта смены системы координат.

В силу поворота системы координат тензор модулей упругости \hat{C} , связывающая тензор напряжений $\hat{\sigma}$ с тензором деформации $\hat{\varepsilon}$ также изменится при повороте системы координат.

В таком случае получаем:

$$\begin{aligned} \hat{\varepsilon}'_{ij} &= \hat{R}_{ik} \hat{R}_{jl} \hat{\varepsilon}_{kl}; \\ \hat{\sigma}'_{ij} &= \hat{R}_{ik} \hat{R}_{jl} \hat{\sigma}_{kl}; \end{aligned} \quad (2.19)$$

Это удобно переписать при помощи прямого матричного умножения:

$$\hat{\mathbb{R}} = \hat{R} \otimes \hat{R};$$

То есть если расписывать покомпонентно:

$$\hat{\mathbb{R}}_{ijkl} = \hat{R}_{ij} \hat{R}_{kl};$$

Для работы удобно ввести 6-и и 9-и компонентные вектора вместо находящихся тензоров (введение так называемой нотации Фойгта [23]):

$$\hat{\varepsilon} \equiv \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{zy} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \varepsilon_6 \equiv \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \varepsilon_9 \equiv \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{zy} \\ \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}; \quad (2.20)$$

И аналогично преобразование в вектор и тензора напряжений σ , соответственно тензор модулей упругости может быть превращён в матрицу 6×6 . При этом между этими матрицами существуют преобразования: $\hat{T}_{6 \rightarrow 9}, \hat{T}_{9 \rightarrow 6}$. Эти матрицы взаимно обратны.

В таком случае можно написать закон Гука (2.10) в изначальной системе координат, но другой форме:

$$\hat{T}_{9 \rightarrow 6} \hat{\sigma}_9 = \hat{\sigma}_6 = \hat{C} \hat{\sigma}_6 = \hat{C} \hat{T}_{9 \rightarrow 6} \hat{\varepsilon}_9; \quad (2.21)$$

В таком случае при непосредственно повороте у нас по известному закону преобразуются тензоры деформации и напряжений (2.19) и мы сможем получить закон преобразования тензора \hat{C} :

$$\hat{T}_{9 \rightarrow 6} \hat{\mathbb{R}}^\dagger \hat{\sigma}'_9 = \hat{C} \hat{T}_{9 \rightarrow 6} \hat{\mathbb{R}}^\dagger \hat{\varepsilon}'_9;$$

Или возвращаясь к работе с 6-и мерными векторами:

$$\hat{T}_{9 \rightarrow 6} \hat{\mathbb{R}}^\dagger \hat{T}_{6 \rightarrow 9} \hat{\sigma}'_6 = \hat{C} \hat{T}_{9 \rightarrow 6} \hat{\mathbb{R}}^\dagger \hat{T}_{6 \rightarrow 9} \hat{\varepsilon}'_6; \quad (2.22)$$

Пользуясь ранее обсуждёнными свойствами матриц и определением $\hat{\sigma}'_6 = \hat{C}' \hat{\varepsilon}'_6$:

$$\hat{C}' = (\hat{T}_{9 \rightarrow 6} \hat{\mathbb{R}} \hat{T}_{6 \rightarrow 9}) \hat{C} (\hat{T}_{9 \rightarrow 6} \hat{\mathbb{R}}^\dagger \hat{T}_{6 \rightarrow 9}); \quad (2.23)$$

Таким образом задача получения модифицированного гамильтониана сводится к:

- Вычислению $\varepsilon'_{xx}, \varepsilon'_{xy}, \varepsilon'_{yy}$ как обычно (2.9).
- Получению тензора модулей упругости по формуле (2.23).
- Получению оставшихся тензоров деформации.

В остальном процедура полностью аналогична работе с Гамильтонианом Кейна.

Программно это может быть реализовано в виде решения вышеописанной задачи в некотором небольшом наборе точек и дальнейшей аппроксимации результатов сплайнами для улучшения производительности.

2.3.3. Результаты численных экспериментов

Было решено для демонстрации произвести расчёты для двух структур №170130 (Рис. 2.1) и №190225 (Рис. 2.2). Эти структуры были подробно описаны в частности в работе [28].

Эти результаты хорошо согласуются с ранее полученными.

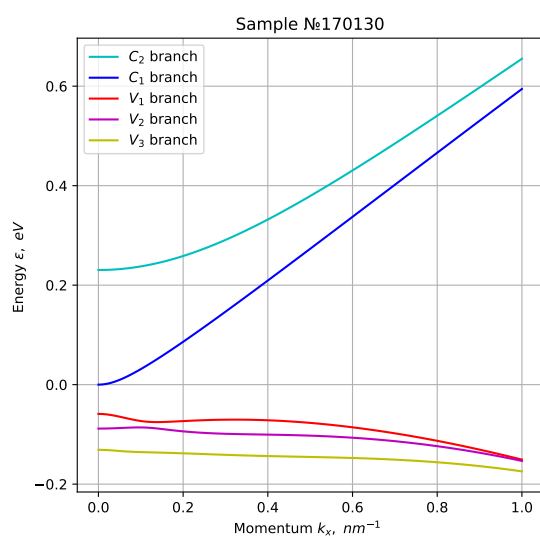


Рис. 2.1: Срез дисперсионных соотношений для структуры №170130 в плоскости $k_y = 0$.

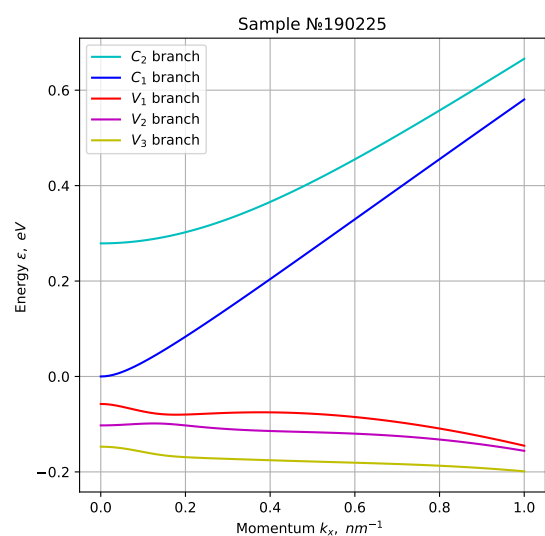


Рис. 2.2: Срез дисперсионных соотношений для структуры №190225 в плоскости $k_y = 0$.

3 | Плазмонные эффекты в HgCdTe

Плазмоны - это квазичастицы, отвечающие квантованию Ленгмюровских колебаний. Они в значительной мере определяют оптические свойства материалов, в том числе гетероструктур на основе $Hg_xCd_{1-x}Te$.

3.1. Дисперсионные соотношения плазмонов

Поскольку речь идёт о квантовании классических ЭМ колебаний, для получения дисперсионного соотношения необходимо найти материальные соотношения, а в частности - зависимость диэлектрической проницаемости от частоты.

Формула для поправки к диэлектрической проницаемости от учёта плазмонных эффектов носит имя Линдхарда:

$$\kappa_{pl}(\vec{q}, \omega) = \frac{4\pi}{\vec{q}^2 V} \sum_{m,n} \int d\vec{k} \frac{f_m(\vec{k}) - f_n(\vec{k} + \vec{q})}{\varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q}) - \varepsilon_m - \hbar\omega - \hbar\alpha} \langle \psi_{\vec{k}+\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle; \quad (3.1)$$

Ленгмюровские колебания являются колебаниями поляризации. Таким образом они должны подчиняться уравнению связи поляризации и плотности свободного заряда $\nabla \cdot \vec{P} = -\rho$. Кроме того такие колебания могут возбуждаться внешним электрическим полем, которое мы примем потенциальным $\vec{E} = -\nabla\varphi$ и гармоническим. Тогда оно будет давать добавку потенциальной энергии:

$$\hat{\varphi} = U \exp\{i\vec{q}\vec{r} - i\omega t\} + U^\dagger \exp\{-i\vec{q}\vec{r} + i\omega t\}; \quad (3.2)$$

В общем виде функции представляются в виде огибающей, зависящей

от времени и быстроосциллирующего члена. В частности:

$$|\vec{k}, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp\{i\vec{k}\vec{r}\} \exp\{-i\omega_{\vec{k},m}t\} \psi_{\vec{k},m}; \quad (3.3)$$

Здесь \vec{k} - волновой вектор, которому отвечает функция, m - номер подзоны с учётом спина и размерного квантования по оси z . $\psi_{\vec{k},m}$ - волновые функции 2.5, полученные по методике, описанной в прошлой главе 2.

Электрическое поле в виде 3.2 должно вызывать искажения такой равновесной волновой функции с волновыми векторами $\vec{k} \pm \vec{q}$, т.е. в первом порядке малости по полю:

$$\psi_m(\vec{k}, \vec{r}) = |\vec{k}, m\rangle + \sum_n b_{\vec{k}+\vec{q},m,n}(t) |\vec{k} + \vec{q}, n\rangle + \sum_n c_{\vec{k}-\vec{q},m,n}(t) |\vec{k} - \vec{q}, n\rangle; \quad (3.4)$$

В таком случае плотность заряда может быть записана как:

$$\begin{aligned} \rho = -e \sum_m \int d\vec{k} \left(\langle \psi_m(\vec{k}, \vec{r}) | \psi_m(\vec{k}, \vec{r}) \rangle - 1 \right) f_m(\vec{k}) = \sum_{m,n} \int d\vec{k} f_m(\vec{k}) \\ \left(b_{\vec{k}+\vec{q},m,n}(t) \langle \vec{k}, m | \vec{k} + \vec{q}, n \rangle + b_{\vec{k}+\vec{q},m,n}^\dagger(t) \langle \vec{k} + \vec{q}, n | \vec{k}, m \rangle \right. \\ \left. + c_{\vec{k}-\vec{q},m,n}(t) \langle \vec{k}, m | \vec{k} - \vec{q}, n \rangle + c_{\vec{k}-\vec{q},m,n}^\dagger(t) \langle \vec{k} - \vec{q}, n | \vec{k}, m \rangle \right); \quad (3.5) \end{aligned}$$

Для получения коэффициентов b , c воспользуемся нестационарной теорией возмущений.

Результатом для вычисления коэффициентов является:

$$\begin{aligned} b_{\vec{k}+\vec{q},m,n}(t) = U \frac{\exp\{-i\omega t - i\varepsilon_m(\vec{k})t/\hbar + i\varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q})t/\hbar + \alpha t\}}{\varepsilon_m(\vec{k}) + \hbar\omega - \varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q}) + i\hbar\alpha} \langle \psi_{\vec{k}+\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle; \\ c_{\vec{k}-\vec{q},m,n}(t) = U^\dagger \frac{\exp\{i\omega t - i\varepsilon_m(\vec{k})t/\hbar + i\varepsilon_n(\vec{k} - \vec{q})t/\hbar + \alpha t\}}{\varepsilon_m(\vec{k}) - \hbar\omega - \varepsilon_n(\vec{k} - \vec{q}) + i\hbar\alpha} \langle \psi_{\vec{k}+\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle; \quad (3.6) \end{aligned}$$

В частности, стоит отметить, что для случая квантовой ямы, скалярное произведение функций вида $\psi_{k,m}$ будет содержать в том числе и скалярное

произведение по оси z . Предполагая квантованность по этой оси:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle &= \left\langle \sum_i \exp \left\{ k_{z,i} \sum_j c_{nij\vec{q}} \right\} u_j(\vec{r}) \middle| \sum_i \exp \left\{ k_{z,i} \sum_j c_{mij\vec{k}} \right\} u_j(\vec{r}) \right\rangle \\ &= \sum_{s=\{i,j\}} c_{ns\vec{q}}^\dagger c_{ms\vec{k}}; \quad (3.7) \end{aligned}$$

Подставляя полученные выражения в 3.5 и приводя подобные можно получить:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{e^2 U}{S} \exp\{i\vec{q}\vec{r} - i\omega t + \alpha t\} \sum_{m,n} \int d\vec{k} \left(\frac{\langle \psi_{\vec{k}+\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle}{\varepsilon_m(\vec{k}) + \hbar\omega - \varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q}) + i\hbar\alpha} + \right. \\ &\quad \left. \frac{\langle \psi_{\vec{k}-\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle}{\varepsilon_m(\vec{k}) - \hbar\omega - \varepsilon_n(\vec{k} - \vec{q}) - i\hbar\alpha} \right) + \text{c.c.} = \\ &= \frac{e^2 U}{S} \exp\{i\vec{q}\vec{r} - i\omega t + \alpha t\} \sum_{m,n} \int d\vec{k} \langle \psi_{\vec{k}+\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle \frac{f_m(\vec{k}) - f_n(\vec{k} - \vec{q})}{\varepsilon_m(\vec{k}) + \hbar\omega - \varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q}) + i\hbar\alpha}; \quad (3.8) \end{aligned}$$

Учитывая это выражение мы получаем формулу Линдхарда 3.1. Обладая этим знанием сравнительно легко получить дисперсионное соотношение для плазмонов, решая следующее уравнение:

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\kappa^2}{\kappa_{pl}^2} = \vec{q}^2 - \kappa \frac{\omega^2}{c^2}; \quad (3.9)$$

Очевидно, что это уравнение может иметь мнимые корни. Причём, как правило, численно удобнее решать это уравнение, задавая частоту и решая относительно волнового вектора.

Также то уравнение имеет два корня, отвечающие "нижней" и "верхней" ветвям дисперсионного соотношения.

3.2. Результаты расчёта спектра плазмонов

В дальнейшем будут показаны зонные спектры плазмонов "верхней" ветки в квантовой яме толщиной 6 nm, имеющую состав ямы $HgTe$ и барьеров

$CdTe$. При этом структура полагается выращенной в кристаллографическом направлении $[013]$, а температура решётки и температура носителей заряда равной температуре жидкого гелия 4.2 К. Продемонстрированы срезы $\vec{k} = (k_x, 0)$.

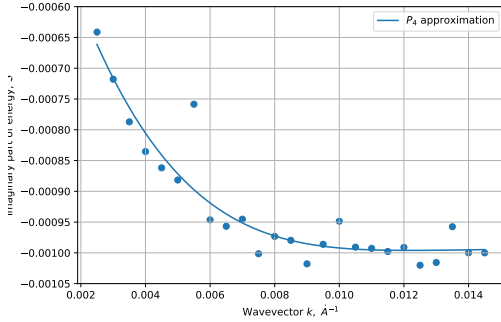


Рис. 3.1: Мнимая часть частоты в зависимости от волнового вектора, при $N_e = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $N_h = 10^9 \text{ cm}^{-2}$

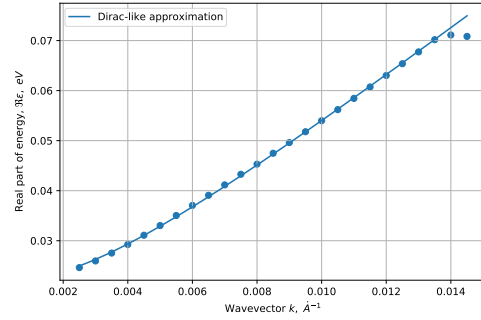


Рис. 3.2: Действительная часть частоты в зависимости от волнового вектора, при $N_e = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $N_h = 10^9 \text{ cm}^{-2}$

На представленных выше графиках 3.1, 3.2 видно несколько особенностей. В частности заметно, что в данном случае плазмоны могут лишь поглощать ЭМ волны. Также видно, что мнимая часть частоты вычисляется неустойчиво (т.е. "выбросы" на Рис. 3.1 являются артефактами численного расчета).

Однако при некоторых условиях плазмоны могут иметь и положительную часть частоты, что соответствует усилению ЭМ волн. Для того, чтобы эти условия удовлетворялись необходимо, чтобы в полупроводнике была существенная инверсия населенности. Такие явления могут наблюдаться, к примимеру, после накачки. Особый интерес представляет "граница" концентрации, при которой будет наблюдаться усиление. Одно из таких дисперсионных соотношений приведено ниже Рис. 3.3, 3.4.

Для того чтобы оценить, что действительно существует порог можно посмотреть на сводную диаграмму для семейства дисперсионных соотноше-

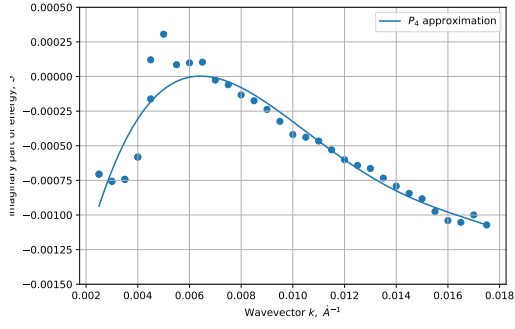


Рис. 3.3: Мнимая часть частоты в зависимости от волнового вектора, при $N_e = 3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $N_h = 1.25 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

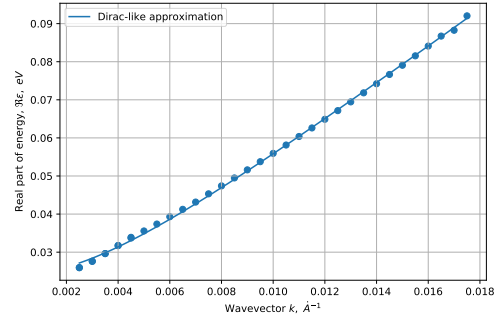


Рис. 3.4: Действительная часть частоты в зависимости от волнового вектора, при $N_e = 3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $N_h = 1.25 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

ний при постоянной концентрации электронов и изменяющейся концентрации дырок 3.5.

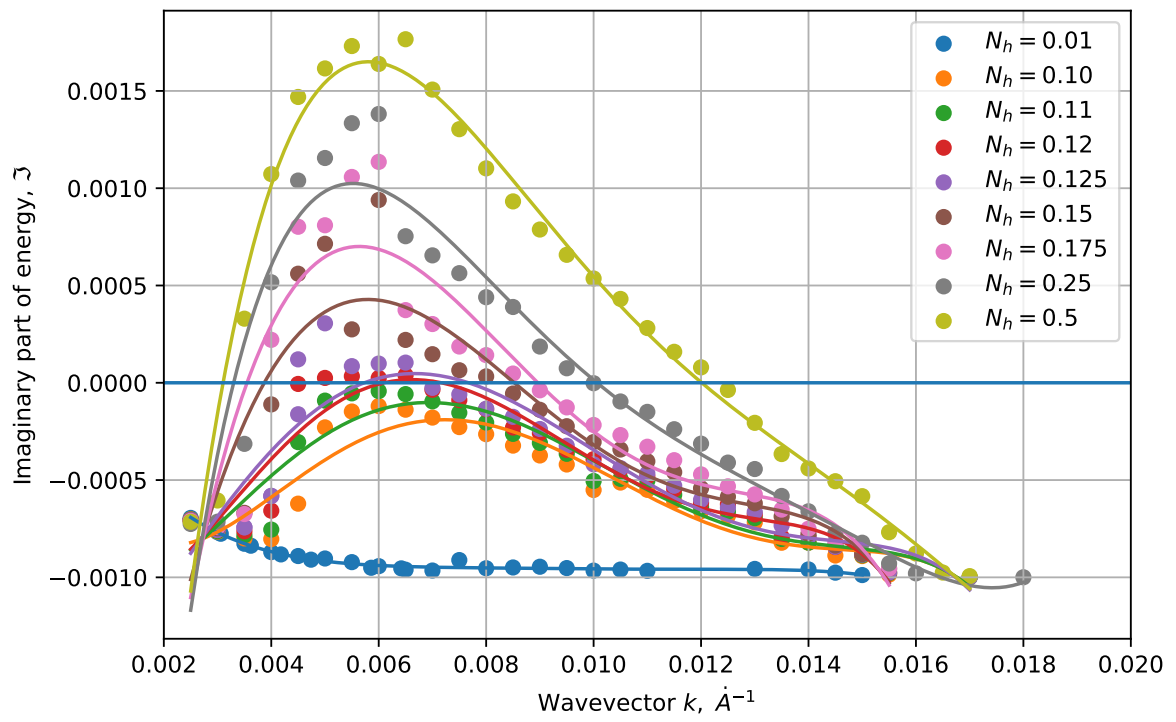


Рис. 3.5: Мнимая часть частоты в зависимости от волнового вектора, при $N_e = 3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $N_h = x \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, где x указан на графике.

4 | Заключение

4.1. Результаты

Изучены теоретические основы расчётов дисперсионных соотношений носителей заряда в гетероструктурах с квантовыми ямами на основе $HgCdTe$.

Разработана программная реализация этих численных моделей. Это программное обеспечение позволяет рассчитывать зонные спектры таких структур при всех возможных параметрах и произвольном профиле распределения состава по структуре.

Произведённые с его помощью расчёты совпадают с ранее полученными результатами, а в некоторых случаях позволяют предсказывать и новые эффекты.

При помощи сторонней программы были произведены расчёты дисперсионных соотношений плазмонов в квантовых ямах. Продемонстрирована возможность управления процессами поглощения/излучения плазмонами при помощи изменения концентрации носителей заряда.

Список литературы

1. *Akima H.* A new method of interpolation and smooth curve fitting based on local procedures // Journal of the ACM (JACM). — 1970. — Т. 17, № 4. — С. 589—602.
2. *Andreev A., O'Reilly E. P.* Theoretical study of Auger recombination in a GaInNAs 1.3 μ m quantum well laser structure // Applied physics letters. — 2004. — Т. 84, № 11. — С. 1826—1828.
3. *Anwar M. F., Crowe T. W., Manzur T.* Terahertz Physics, Devices, and Systems IX: Advanced Applications in Industry and Defense // Proc. of SPIE Vol. — 2015. — Т. 9483. — С. 948301—1.
4. *Asryan L. V.* Spontaneous radiative recombination and nonradiative Auger recombination in quantum-confined heterostructures // Quantum Electronics. — 2005. — Т. 35, № 12. — С. 1117.
5. Auger recombination in Dirac materials: A tangle of many-body effects / G. Alymov [и др.] // Phys. Rev. B. — 2018. — Май. — Т. 97, вып. 20. — С. 205411. — DOI: 10 . 1103 / PhysRevB . 97 . 205411. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.205411>.
6. Carrier Recombination, Long-Wavelength Photoluminescence, and Stimulated Emission in HgCdTe Quantum Well Heterostructures / V. Rumyantsev [и др.] // Physica status solidi (b). — 2019. — С. 1800546.
7. *Conn A. R., Gould G., Toint P. L.* LANCELOT: a Fortran package for large-scale nonlinear optimization (Release A). — 2013.
8. *Dierckx P.* Curve and surface fitting with splines. — 1995.

-
9. *Dimmock J., Melngailis I., Strauss A.* Band structure and laser action in Pb x Sn 1- x Te // *Physical Review Letters*. — 1966. — T. 16, № 26. — C. 1193.
 10. *Dutta N. K.* Long wavelength semiconductor lasers // *Technical Digest., International Electron Devices Meeting*. — 1988. — C. 304—306.
 11. HgCdTe based quantum well heterostructures for long-wavelength lasers operating in 5-15 THz range / V. Romyantsev [и др.] // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2018. — T. 1092, № 1. — C. 012126.
 12. HgCdTe epilayers on GaAs: growth and devices / V. S. Varavin [и др.] // *Solid State Crystals 2002: Crystalline Materials for Optoelectronics*. — 2003. — T. 5136. — C. 381—396.
 13. *Johnson S. G.* The NLOpt nonlinear-optimization package. — 2014. — URL: <http://github.com/stevengj/nlopt>.
 14. *Kane E. O.* Band structure of indium antimonide // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. — 1957. — T. 1, № 4. — C. 249—261.
 15. Magnetospectroscopy of two-dimensional HgTe-based topological insulators around the critical thickness / M. Zholudev [и др.] // *Physical Review B*. — 2012. — T. 86, № 20. — C. 205420.
 16. *Novik, E. G.* Band structure of semimagnetic $\text{Hg}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Te}$ quantum wells / E. G. Novik [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2005. — ИЮЛЬ. — T. 72, вып. 3. — C. 035321. — DOI: 10.1103/PhysRevB.72.035321. — URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.035321>.
 17. *Steiauf D., Kioupakis E., Van de Walle C. G.* Auger recombination in GaAs from first principles // *Acs Photonics*. — 2014. — T. 1, № 8. — C. 643—646.
 18. Terahertz Injection Lasers Based on a PbSnSe Solid Solution with an Emission Wavelength up to 50 μm and Their Application in the Magnetospectroscopy of Semiconductors / K. Maremyanin [и др.] // *Semiconductors*. — 2018. — T. 52, № 12. — C. 1590—1594.

-
19. Valence band energy spectrum of HgTe quantum wells with an inverted band structure / G. Minkov [и др.] // *Physical Review B*. — 2017. — Т. 96, № 3. — С. 035310.
 20. *Vasko F. T., Raichev O. E. Quantum Kinetic Theory and Applications: Electrons, Photons, Phonons.* — 2006.
 21. *Zholudev, M. Magnetospectroscopy of two-dimensional HgTe-based topological insulators around the critical thickness* / M. Zholudev [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2012. — Нояб. — Т. 86, вып. 20. — С. 205420. — DOI: 10.1103/PhysRevB.86.205420. — URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.205420>.
 22. *Абакумов В., Перель В., Ясиевич И. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* // Изд-во ПИЯФ, СПб. — 1997.
 23. *Аквис М. А., Гольдберг В. В. Тензорное исчисление.* — 2011.
 24. *Жолудев М. Терагерцовая спектроскопия квантовых ям $Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_yHg_{1-y}Te$.* — 2013.
 25. *Засавицкий И. Инфракрасная люминесценция и характеристики энергетического спектра полупроводников типа A4B6* // Труды ФИАН. Оптические и электрические свойства полупроводников. — 1993. — Т. 224. — С. 3—118.
 26. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости.* — 1965.
 27. Особенности фотолюминесценции двойных акцепторов в гетероструктурах HgTe/CdHgTe с квантовыми ямами в терагерцовом диапазоне / Д. В. Козлов [и др.] // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2019. — Т. 109, № 10. — С. 679—684.
 28. Расчёт порога оже-рекомбинации в узкозонных гетероструктурах на основе HgCdTe / N. Kulikov [и др.] // Материалы XXIV Международного симпозиума Нанофизика и наноэлектроникă. — 2020. — Т. 2. — С. 639.

-
29. *Румянцев, В.В.* Влияние особенностей зонного спектра на характеристики стимулированного излучения в узкозонных гетероструктурах с квантовыми ямами на основе HgCdTe / В. Румянцев [и др.] // Физика и техника полупроводников. — 2018. — Т. 52, вып. 20. — С. 1263.
30. *Уточкин, В.В.* Исследование пороговой энергии оже-рекомбинации в волноводных структурах с квантовыми ямами HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te в области 14 мкм / В. Уточкин [и др.] // Физика и техника полупроводников. — 2019.