

# 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 [Intro1]. Однако большая часть таких лазеров создается на основе полупроводников типа A3B5 (GaAs, PbSb или InP), которые имеют высокое поглощение на оптических фоновых частотах в диапазоне 5-15 THz. QCL на основе GaN подступают к спектральному диапазону 5 - 15 THz со стороны низких частот (относительно частот оптических фононов), но их рабочие характеристики требуют значительного улучшения [Intro7].

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 фактором является процесс безызлучательной оже-рекомбинации. При этом традиционно ожидается, что вероятность межзонной оже-рекомбинации растёт с уменьшением ширины запрещённой зоны, что может затруднить генерацию 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 стремится 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  $46.5 \mu m$  [Intro8]. Фактор, который снижает эффективность оже-рекомбинации в PbSnSe(Te) [Intro1], [Intro9] - 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 остаточ-

---

ная концентрация носителей остается на высоком уровне  $10^{17}\text{cm}^{-3}$ . 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 [Rumyantsev:IOP:2018],[Rumyantsev:2019], 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  $\text{HgCdTe}$  (КРТ) с КЯ можно перестраивать ширину запрещенной зоны путем изменения ширины КЯ и содержания  $\text{Cd}$  в ней. Современная молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ) обеспечивает высокое качество эпитаксиальных пленок КРТ не только на подложках  $\text{CdZnTe}$ , но и на «альтернативных» подложках  $\text{GaAs}$  [Varavin:2003]. Высокое качество эпитаксиальных структур  $\text{HgCdTe}$ , выращенных на  $\text{GaAs}$  подложках, было подтверждено в ходе исследований фотопроводимости (ФП) и фотолюминесценции (ФЛ) в среднем и дальнем инфракрасном диапазонах ( $\approx 15\text{-}30\ \mu\text{m}$ ). Было получено стимулированное излучение (СИ) в КРТ структурах с КЯ на длине волны до  $20.3\ \mu\text{m}$  [Rumyantsev:IOP:2018], в то время как ранее лазерная генерация в  $\text{HgCdTe}$  была продемонстрирована лишь в коротковолновой области среднего инфракрасного диапазона спектра (на длинах волн  $2 - 5\ \mu\text{m}$ ).

Особый интерес представляют процессы с участием плазмонов в квантовых ямах  $\text{HgCdTe}$ . Двумерные плазмоны терагерцового диапазона сами по себе демонстрируют некоторые удивительные свойства: высокий коэффициент усиления за счет низкой скорости плазмона, отсутствие необходимости создания внешней волноводной структуры [bergman2003surface],[berini2012surface],[oulton2009plasmon],[khurgin2012practicality].  $\text{HgCdTe}$  квантовые ямы являются отличным

---

объектом для демонстрации таких свойств. Кроме того их производство является сравнительно отработанной технологией в сравнении с технологией производства графена - другого перспективного материала.

В таком случае идеи лазеров на основе квантовых ям и плазмонов могут быть объединены [kapralov2019feasibility] т.к. квантовые ямы поддерживают собственные плазмонные моды, что обеспечивает лучшее удержание поля в сравнении с поверхностными плазмонами на границе металл-изолятор [stern1967polarizability]. В этом подходе межзонные переходы электронов будут обеспечивать усиление плазмонов. Однако это возможно лишь в узкозонных или бесщелевых полупроводниках из-за сравнительно низкой концентрации носителей заряда и низких частот плазмонов. HgCdTe как полупроводник считается наилучшим кандидатом для реализации данной идеи.

Проблема усиления плазмонов таких структурах уже была рассмотрена в статье [kapralov2019feasibility]. Авторы рассматривали упрощенную зонную модель BHZ (Bernevig-Hughes-Zhang) [bernevig2006quantum] и зависимость коэффициента усиления от концентрации носителей в квантовой яме, пренебрегая легированием, переходами между валентными зонами и взаимодействием с плазмонами. В качестве одного из основных результатов был рассмотрен вопрос пороговой концентрации носителей заряда.

В данной работе проводится расчёт энергетических зонных спектров и соответствующих волновых функций узкозонных гетероструктур с квантовыми ямами на основе твёрдых растворов  $Hg_{1-x}Cd_xTe$ . Вычисляется спектр двумерных плазмонов  $\omega(\vec{q})$  и зависимость усиления (которые и определяются мнимой частью частоты  $\text{Im}(\omega)$ ), производится анализ для различных концентраций носителей заряда без приближений, использованных в [kapralov2019feasibility], то есть с учётом пространственной дисперсии, взаимодействия с фононами. Рассматривается вопрос влияния легирования полупроводника на усиление ЭМ волн плазмонами.

## 2 | 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  $Hg_xCd_{1-x}Te$ .

### 2.1. Электродинамические свойства двумерных плазмонов

Плазмоны представляют собой ТМ волны, имеющие одну компоненту магнитного поля  $\vec{H}$  и две компоненты электрического  $\vec{E}$ . Они распространяются вдоль проводящего слоя. Схематичное изображение электрического поля приведено на Рис. 2.1.

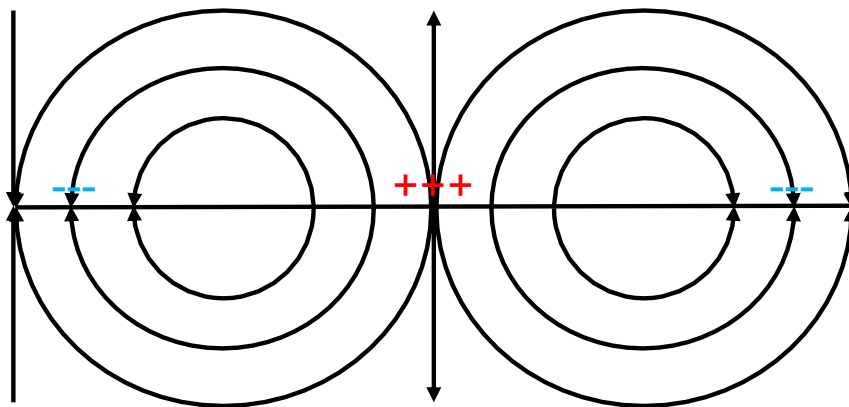


Рис. 2.1: Схематичное изображения распределения поля плазмона.

Рассмотрим свойства плазмонов, в предположении, что ток, соответствующий им локализован в квантовой яме и течет только в плоскости. Аппроксимация  $\delta$  функцией является справедливой, поскольку характерная

длина волны имеет порядок единиц  $\mu\text{m}$ , а толщина квантовой ямы - порядок единиц  $\text{nm}$ . Тогда из уравнений Максвелла:

$$\text{rot}\vec{H} = \frac{\kappa}{c}\dot{\vec{E}} + \frac{4\pi}{c}\delta(z)\vec{j}; \quad (2.1)$$

Предположим, что ток обусловлен исключительно электрическим полем  $\vec{j} = \chi\vec{E}$  и сделаем предположения о направлениях  $\vec{j} \parallel \vec{E} \parallel \vec{x}_0, \vec{H} \parallel \vec{y}_0$ . Распишем по компонентам, здесь важно отметить, что  $\kappa$  - диэлектрическая проницаемость барьеров (мы пренебрегаем проницаемостью КЯ в силу ее малой толщины):

$$\begin{aligned} \partial_x H_y &= \frac{\kappa}{c}\dot{E}_z; \\ \partial_z H_y &= -\frac{\kappa}{c}\dot{E}_x - \frac{4\pi}{c}j_x; \end{aligned} \quad (2.2)$$

Принимая во внимание уравнение на электрическое поле:

$$\text{rot}\vec{E} = \frac{1}{c}\dot{\vec{H}}; \quad (2.3)$$

Сделаем Фурье преобразование электрического поля в плоскости квантовой ямы и получим замкнутую систему уравнений:

$$\begin{cases} -i\frac{\omega}{c}H_y = ikE_z - \partial_z E_x; \\ -\partial_z H_y = \frac{4\pi}{c}\underbrace{\sigma E_x \delta(z)}_{\vec{j}} - i\kappa\frac{\omega}{c}E_x; \\ ikH_y = -i\kappa\frac{\omega}{c}E_z; \end{cases} \quad (2.4)$$

Решая её получим уравнение на зависимость поля от  $z$ :

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = \frac{4\pi i}{\kappa\omega} \left( k^2 - \kappa\frac{\omega^2}{c^2} \right) \chi E_x \delta(z) + \left( k^2 - \kappa\frac{\omega^2}{c^2} \right) E_x; \quad (2.5)$$

Предположим решение в виде спадающих от квантовой ямы экспонент с волновым вектором  $i\alpha$ :

$$E_x = \begin{cases} E_0 \exp\{-\alpha z\} & z > 0 \\ E_0 \exp\{\alpha z\} & z < 0 \end{cases};$$

Интегрируя в окрестности нуля получим граничное условие на производные:

$$\left. \frac{\partial E_x}{\partial z} \right|_{-0}^{+0} = \frac{4\pi i}{\kappa\omega} \left( k^2 - \kappa \frac{\omega^2}{c^2} \right) E_0 = 2\alpha E_0;$$

Отсюда можно получить дисперсионное соотношение для таких двумерных плазмонов:

$$1 + \frac{2\pi}{\kappa} \chi \sqrt{q^2 + \kappa \frac{\omega^2}{c^2}} = 0; \quad (2.6)$$

## 2.2. Поляризуемость двумерного электронного газа и диэлектрическая проницаемость барьеров

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

Выражение для поправки к диэлектрической проницаемости является обобщением т.н. формулы Линдхарда (учитывается несколько зон, в то время как сам Линдхард работал в однозонном приближении) и приведено ниже ( $\vec{q}$  - волновой вектор плазмона,  $f_m$  - функция распределения носителей заряда из  $m$  - подзоны,  $\varepsilon_m$  - соответствующая энергия):

$$\chi_{pl}(\vec{q}, \omega) = \frac{e^2}{\vec{q}^2 (2\pi)^2} \sum_{m,n} \int d\vec{k} \frac{f_m(\vec{k}) - f_n(\vec{k} + \vec{q})}{\varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q}) - \varepsilon_m - \hbar\omega - \hbar\alpha} \langle \psi_{\vec{k}+\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle; \quad (2.7)$$

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 потен-

циальной энергии:

$$\hat{\varphi} = U \exp\{i\vec{q}\vec{r} - i\omega t\} + U^\dagger \exp\{-i\vec{q}\vec{r} + i\omega t\}; \quad (2.8)$$

В общем виде функции представляются в виде огибающей, зависящей от времени и быстро осциллирующего члена. В частности:

$$|\vec{k}, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp\{i\vec{k}\vec{r}\} \exp\{-i\omega_{\vec{k},m} t\} \psi_{\vec{k},m}; \quad (2.9)$$

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 2.19, полученные по методике, описанной в секции 2.3.

Электрическое поле в виде 2.8 должно вызывать искажения такой равновесной волновой функции с волновыми векторами  $\vec{k} \pm \vec{q}$ , т.е. в первом порядке малости по полю:

$$\psi_m(\vec{k}, \vec{r}) = |\vec{k}, m\rangle + \sum_n b_{\vec{k}+\vec{q},m,n}(t) |\vec{k} + \vec{q}, n\rangle + \sum_n c_{\vec{k}-\vec{q},m,n}(t) |\vec{k} - \vec{q}, n\rangle; \quad (2.10)$$

В таком случае плотность заряда может быть записана как:

$$\begin{aligned} \rho = -e \sum_m \int d\vec{k} \left( \langle \psi_m(\vec{k}, \vec{r}) | \psi_m(\vec{k}, \vec{r}) \rangle - 1 \right) f_m(\vec{k}) = \sum_{m,n} \int d\vec{k} f_m(\vec{k}) \\ \left( b_{\vec{k}+\vec{q},m,n}(t) \langle \vec{k}, m | \vec{k} + \vec{q}, n \rangle + b_{\vec{k}+\vec{q},m,n}^\dagger(t) \langle \vec{k} + \vec{q}, n | \vec{k}, m \rangle \right. \\ \left. + c_{\vec{k}-\vec{q},m,n}(t) \langle \vec{k}, m | \vec{k} - \vec{q}, n \rangle + c_{\vec{k}-\vec{q},m,n}^\dagger(t) \langle \vec{k} - \vec{q}, n | \vec{k}, m \rangle \right); \quad (2.11) \end{aligned}$$

Для получения коэффициентов  $b$ ,  $c$  воспользуемся нестационарной теорией возмущений.

Результатом для вычисления коэффициентов является:

$$\begin{aligned} b_{\vec{k}+\vec{q},m,n}(t) = U \frac{\exp\{-i\omega t - i\varepsilon_m(\vec{k})t/\hbar + i\varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q})t/\hbar + \alpha t\}}{\varepsilon_m(\vec{k}) + \hbar\omega - \varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q}) + i\hbar\alpha} \langle \psi_{\vec{k}+\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle; \\ c_{\vec{k}-\vec{q},m,n}(t) = U^\dagger \frac{\exp\{i\omega t - i\varepsilon_m(\vec{k})t/\hbar + i\varepsilon_n(\vec{k} - \vec{q})t/\hbar + \alpha t\}}{\varepsilon_m(\vec{k}) - \hbar\omega - \varepsilon_n(\vec{k} - \vec{q}) + i\hbar\alpha} \langle \psi_{\vec{k}+\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle; \quad (2.12) \end{aligned}$$



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:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle &= \left\langle \sum_i \exp \left\{ k_{z,i} \sum_j c_{nij\vec{q}} \right\} u_j(\vec{r}) \middle| \sum_i \exp \left\{ k_{z,i} \sum_j c_{mij\vec{k}} \right\} u_j(\vec{r}) \right\rangle \\ &= \sum_{s=\{i,j\}} c_{ns\vec{q}}^\dagger c_{ms\vec{k}}; \quad (2.13) \end{aligned}$$

Подставляя полученные выражения в 2.11 и приводя подобные можно получить:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{e^2 U}{S} \exp\{i\vec{q}\vec{r} - i\omega t + \alpha t\} \sum_{m,n} \int d\vec{k} \left( \frac{\langle \psi_{\vec{k}+\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle}{\varepsilon_m(\vec{k}) + \hbar\omega - \varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q}) + i\hbar\alpha} + \right. \\ &\quad \left. \frac{\langle \psi_{\vec{k}-\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle}{\varepsilon_m(\vec{k}) - \hbar\omega - \varepsilon_n(\vec{k} - \vec{q}) - i\hbar\alpha} \right) + \text{c.c.} = \\ &= \frac{e^2 U}{S} \exp\{i\vec{q}\vec{r} - i\omega t + \alpha t\} \sum_{m,n} \int d\vec{k} \langle \psi_{\vec{k}+\vec{q},n} | \psi_{\vec{k},m} \rangle \frac{f_m(\vec{k}) - f_n(\vec{k} - \vec{q})}{\varepsilon_m(\vec{k}) + \hbar\omega - \varepsilon_n(\vec{k} + \vec{q}) + i\hbar\alpha}; \quad (2.14) \end{aligned}$$

Учитывая это выражение мы получаем формулу Линдхарда 2.7. Обладая этим знанием сравнительно легко получить дисперсионное соотношение для плазмонов 2.6, решая следующее уравнение, полученное раньше: 2.6.

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

Для того, чтобы это можно было вычислить необходимо знать диэлектрическую проницаемость материала. При этом можно считать, что только барьеры квантовых ям вносят в это свой вклад. Это оправданно в силу очень малой толщины квантовых ям. В данной работе считается, что диэлектрическая проницаемость имеет вид 2.15, константы брались из работы [palik1998handbook]ю

$$\kappa_{bar}(\omega) = \kappa_{\infty} + \sum_j \frac{S_j \omega_j^2}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma}; \quad (2.15)$$

Оказывается LO фононы и плазмоны могут взаимодействовать за счет продольной компоненты поля. В объемном материале эта задача была рассмотрена в [peter2002manuel].

## 2.3. Метод расчета спектра плазмонов

В этом разделе будет обсуждаться техническая сторона вычисления дисперсии плазмонов. Первым шагом для нахождения этих спектров является вычисление  $2D$  спектров носителей заряда. Это может быть сделано согласно методике, подробно описанной в [HgCdTeCalcZholudev].

Методика подразумевает рассмотрение гамильтониана Кейна  $8 \times 8$  [Kane:Band:1957]. Он записывается для однородного полупроводника, выращенного в направлении (001) (используемые обозначения согласованны с [Novik:2005]).

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} T & 0 & U + V & -\bar{S}_- & R & 0 & \bar{S}_-/\sqrt{2} & -\sqrt{2}R \\ \sqrt{2}k_z P & -k_- P/\sqrt{6} & -\bar{S}_-^\dagger & U - V & C & R & \sqrt{2}V & -\sqrt{3}\tilde{S}_-/\sqrt{2} \\ k_+ P/\sqrt{6} & \sqrt{2}k_z P/\sqrt{3} & R^\dagger & C^\dagger & U - V & \bar{S}_+^\dagger & -\sqrt{3}\tilde{S}_+/\sqrt{2} & -\sqrt{2}V \\ 0 & k_+ P/\sqrt{2} & 0 & R^\dagger & \bar{S}_+ & U + V & \sqrt{2}R^\dagger & \bar{S}_+/\sqrt{2} \\ -k_z P/\sqrt{3} & -k_- P/\sqrt{3} & \bar{S}_-^\dagger/\sqrt{2} & \sqrt{2}V & -\sqrt{3}\bar{S}_+^\dagger/\sqrt{2} & \sqrt{2}R & U - \Delta & C \\ -k_+ P/\sqrt{3} & k_z P/\sqrt{3} & -\sqrt{2}R^\dagger & -\sqrt{3}\bar{S}_-^\dagger/\sqrt{2} & -\sqrt{2}V & \bar{S}_+^\dagger/\sqrt{2} & C^\dagger & U - \Delta \end{bmatrix}; \quad (2.16)$$

Также при этом брался в расчет и вклад напряжений материала. Он

имеет вид дополнительного члена гамильтониана:

$$\hat{H}_\epsilon = \begin{bmatrix} T_\epsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & T_\epsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U_\epsilon + V_\epsilon & -S_\epsilon & R_\epsilon & 0 & S_\epsilon/\sqrt{2} & -\sqrt{2}R_\epsilon \\ 0 & 0 & -S_\epsilon^\dagger & U_\epsilon - V_\epsilon & 0 & R_\epsilon & \sqrt{2}V_\epsilon & -\sqrt{3}S_\epsilon/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & R_\epsilon^\dagger & 0 & U_\epsilon - V_\epsilon & S_\epsilon^\dagger & -\sqrt{3}S_\epsilon/\sqrt{2} & -\sqrt{2}V_\epsilon \\ 0 & 0 & 0 & R_\epsilon^\dagger & S_\epsilon & U_\epsilon + V_\epsilon & \sqrt{2}R_\epsilon^\dagger & S_\epsilon/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & S_\epsilon^\dagger/\sqrt{2} & \sqrt{2}V_\epsilon & -\sqrt{3}S_\epsilon^\dagger/\sqrt{2} & \sqrt{2}R_\epsilon & U_\epsilon - \Delta_\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}R_\epsilon^\dagger & -\sqrt{3}S_\epsilon^\dagger/\sqrt{2} & -\sqrt{2}V_\epsilon & S_\epsilon^\dagger/\sqrt{2} & 0 & U_\epsilon - \Delta_\epsilon \end{bmatrix}; \quad (2.17)$$

Однако возможно и обобщение на случай квантовой ямы (предполагается, что она параллельна плоскости 0XY) путем разложения квантованных  $z$ -зависимых компонент волновых функций по базису (например плоских волн).

$$\psi_{i,m}(\vec{r}) = c_{i,m} \exp(i\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp) \exp(ik_{z,m}z) u_i(\vec{r}); \quad (2.18)$$

$$\Psi = \sum_m \exp(i\vec{k}_m \vec{r}) \sum_i c_{i,m} u_i(\vec{r}); \quad (2.19)$$

Данный подход позволяет получить одновременно сами спектры и соответствующие волновые функции 2.9.

На практике однако, только этого недостаточно - необходима возможность получать спектры и для структур, выращенных в отличных от (001) направлениях. Это можно сделать осуществляя одновременно поворот и волнового вектора, и элементов гамильтониана [HgCdTeCalcZholudev].

В дальнейшем будет рассматриваться вопрос расчета дисперсионных соотношений непосредственно плазмонов. При этом будем считать, что всю необходимую информацию о носителях заряда мы знаем.

Важным обстоятельством, упрощающим расчет является то, что не все подзоны размерного квантования должны быть учтены, поскольку не все из них достаточно населены носителями заряда. На практике хватает всего нескольких валентных подзон и 1-2-х электронных 2.2.

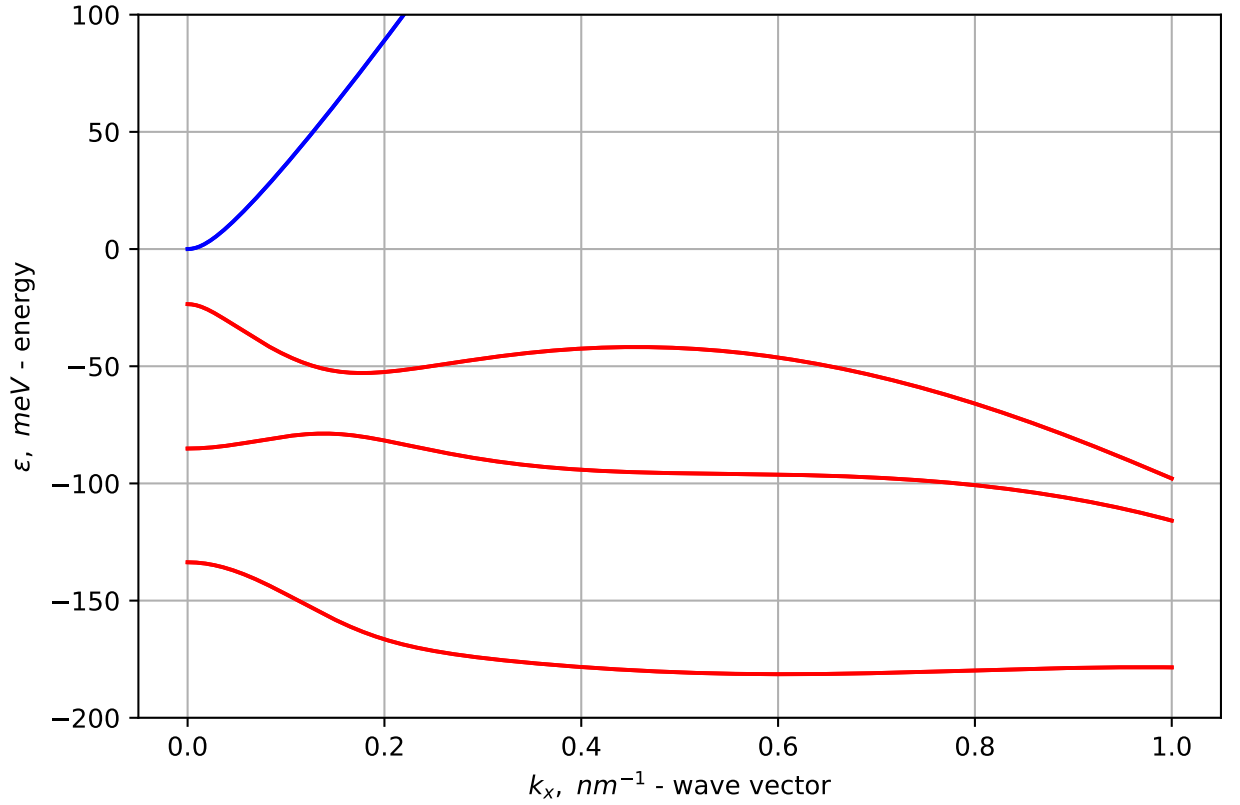


Рис. 2.2: Дисперсионные соотношения носителей заряда исследуемой структуры .

После этого производится поиск уровней ферми для  $e$  и  $h$ , что сводится к получению интегралов от вероятности нахождения частицы в точке с заданным значением спина и волнового вектора в зависимости от химического потенциала и решению уравнения относительно  $\mu$ :

$$N = \sum_s \int \frac{d^2 \vec{k}}{1 + e^{\frac{\varepsilon_s(\vec{k}) - \mu}{T}}}; \quad (2.20)$$

После этого для каждого отдельно взятого значения волнового вектора плазмона осуществляется поиск решения уравнений 2.14 и 2.6 относительно  $\omega \in \mathbb{C}$ .

Процесс решения является итеративным и использует одну из библиотечных функций. Эта стадия крайне чувствительна к заданию начального значения. Для лучшей сходимости дисперсионные соотношения полученные при близких параметрах аппроксимировались полиномами и использовались

в качестве начального значения для этой программы, что позволило существенно ускорить вычисления и уменьшить ошибки.

Для контроля корректности решения использовалась оценка ошибки:  $\delta(\omega) = \left| q^2 + \kappa \frac{\omega^2}{c^2} - \left( \frac{\kappa}{2\pi\chi} \right)^2 \right|^2$ . Как пороговое решение использовалось значение  $N_p$  при котором наблюдалась одна точка имеющая положительное значение мнимой части частоты и которая имела погрешность  $\leq 10^{-3} meV$ .

## 2.4. 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  $\vec{q} = (q_x, 0)$ .

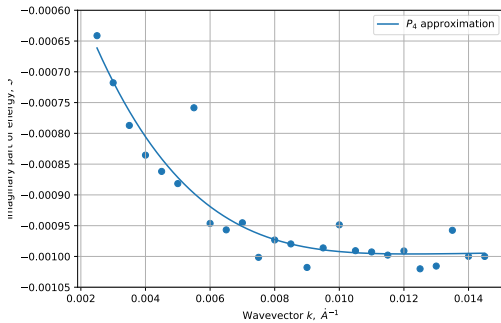


Рис. 2.3: Мнимая часть частоты в зависимости от волнового вектора, при  $N_e = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $N_h = 10^9 \text{ cm}^{-2}$

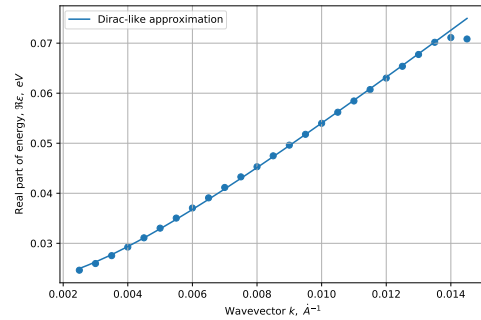


Рис. 2.4: Действительная часть частоты в зависимости от волнового вектора, при  $N_e = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $N_h = 10^9 \text{ cm}^{-2}$

На представленных выше графиках 2.3, 2.4 видно несколько особенностей. В частности заметно, что в данном случае плазмоны могут лишь затухать, поскольку нет достаточной инверсии населенности. Также

видно, что мнимая часть частоты вычисляется неустойчиво (т.е. "выбросы" на Рис. 2.3 являются артефактами численного расчёта).

Однако при некоторых условиях плазмоны могут иметь и положительную мнимую часть частоты, что соответствует усилению плазмонов. Для того, чтобы эти условия удовлетворялись необходимо, чтобы в полупроводнике была существенная инверсия населенности, а энергия плазмона была больше эффективной ширины запрещенной зоны [kapralov2019feasibility].

При низкой концентрации электронов энергия плазмонов будет меньше эффективной ширины запрещённой зоны. С увеличением концентрации равновесных носителей заряда растёт и энергия плазмонов при заданном волновом векторе  $\vec{q}$ . Таким образом повышая концентрацию равновесных носителей можно снизить пороговую концентрацию неравновесных.

Такие явления могут наблюдаться, к примеру, после накачки. Особый интерес представляет "граница" концентрации, при которой будет наблюдаться усиление. Одно из таких дисперсионных соотношений приведено ниже на Рис. 2.5, 2.6.

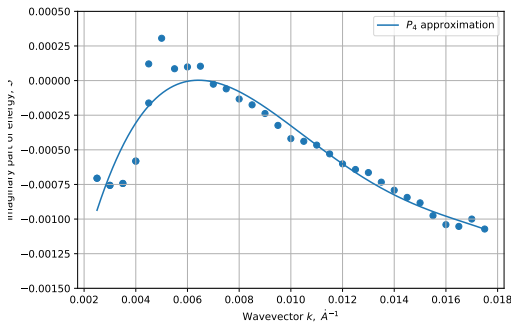


Рис. 2.5: Мнимая часть частоты в зависимости от волнового вектора, при  $N_e = 3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $N_h = 1.25 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

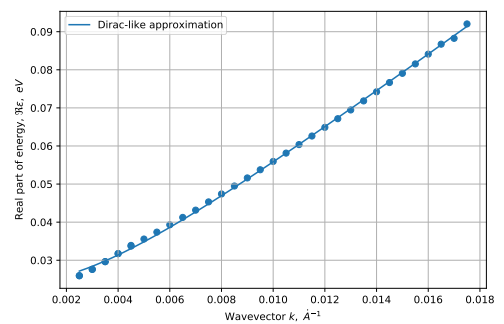


Рис. 2.6: Действительная часть частоты в зависимости от волнового вектора, при  $N_e = 3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $N_h = 1.25 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

Для того чтобы оценить, что действительно существует порог можно посмотреть на сводную диаграмму для семейства зависимостей  $\text{Im } \omega(\vec{q})$

(мнимой части дисперсионных соотношений) при постоянной концентрации электронов и изменяющейся концентрации дырок 2.7. Стоит отметить, что именно эта зависимость определяет коэффициент усиления/поглощения (пример 2.8):

$$\alpha(\text{Re } \omega(\vec{q})) = -2 \text{Im } \omega \text{Re} \left( \frac{d\omega}{d\vec{q}} \right)^{-1}; \quad (2.21)$$

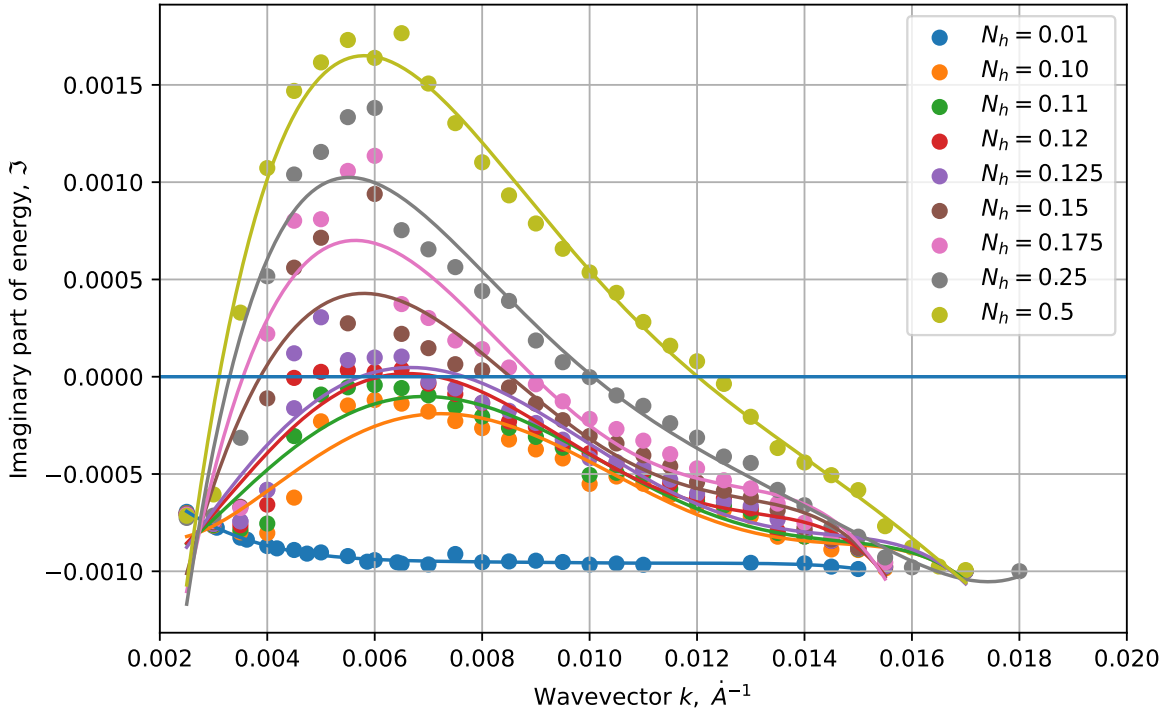


Рис. 2.7: Мнимая часть частоты в зависимости от волнового вектора, при  $N_e = 3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $N_h = x \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , где  $x$  указан на графике.

## 2.5. Пороговая неравновесная концентрация усиления

Важным возможным применением подобных структур является усиление ЭМ волн. Коэффициент усиления, однако, не всегда является положительным и зависит от волнового вектора плазмона  $\omega(\vec{q})$ , а также от параметров

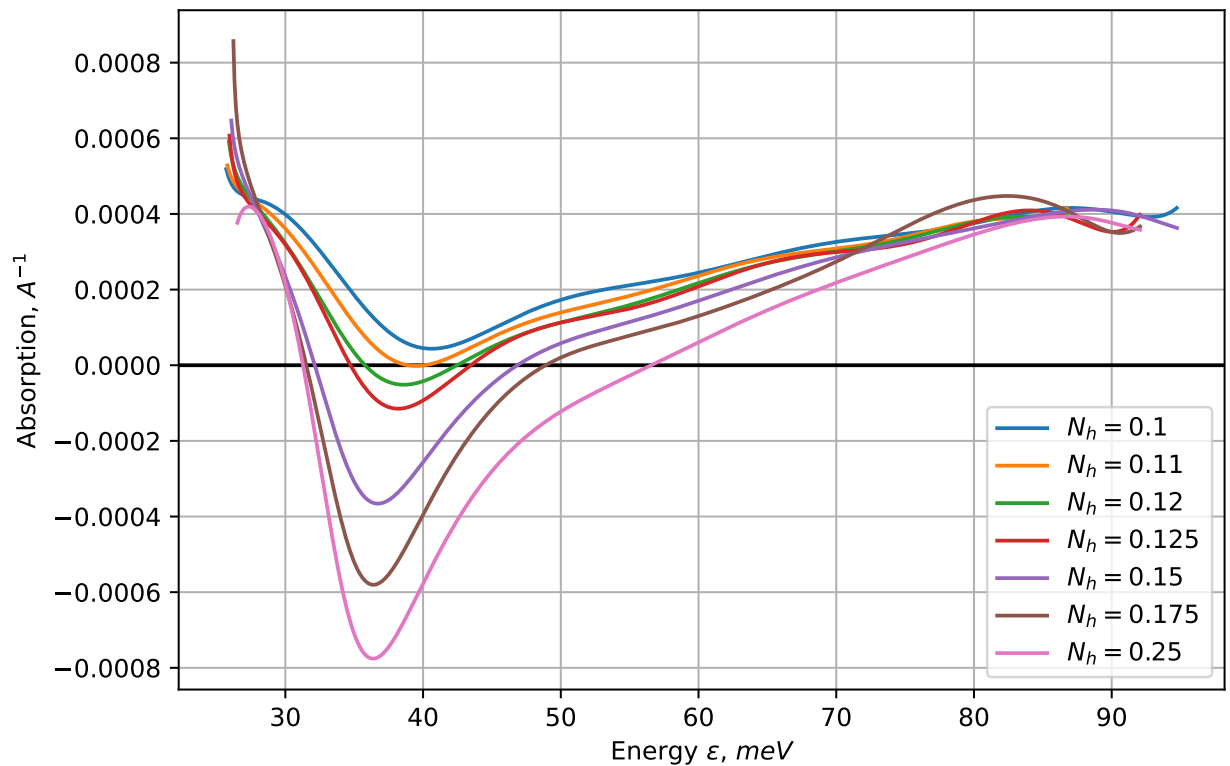


Рис. 2.8: Коэффициент поглощения в зависимости от частоты (энергии), при  $N_e = 3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $N_h = x \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , где  $x$  указан на графике.

структуры - равновесной и индуцированной (например легированием) концентрации носителей.

Очевидно, что чем меньше равновесная концентрация - тем сложнее добиться усиления, т.к. меньше и инверсия населенностей.

Это обуславливается тем, что

Таким образом была получена зависимость пороговой концентрации дырок  $N_h$  от концентрации электронов  $N_e$ . Она представлена на рисунке 2.12.



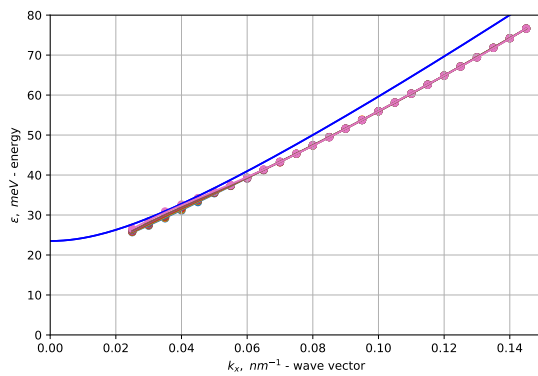


Рис. 2.9: Дисперсионные соотношения плазмонов, энергия перехода  $\varepsilon_c(q) - \varepsilon_v(0)$ . Параметры:  $N_e = 10^{11} \text{cm}^{-2}$ ,  $N_h = 10^{11} \text{cm}^{-2}$

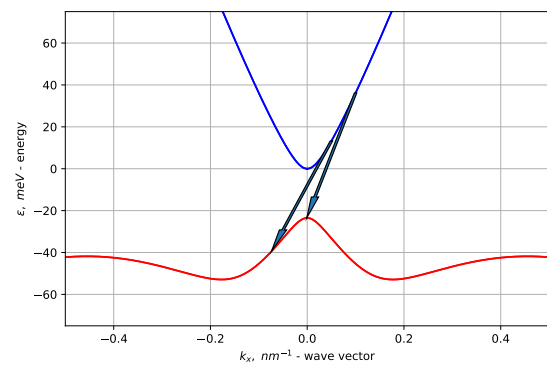


Рис. 2.10: Сравнение переходов из зоны проводимости в  $\Gamma$ -точку валентной зоны и "скошенных" переходов, в присутствии легирования

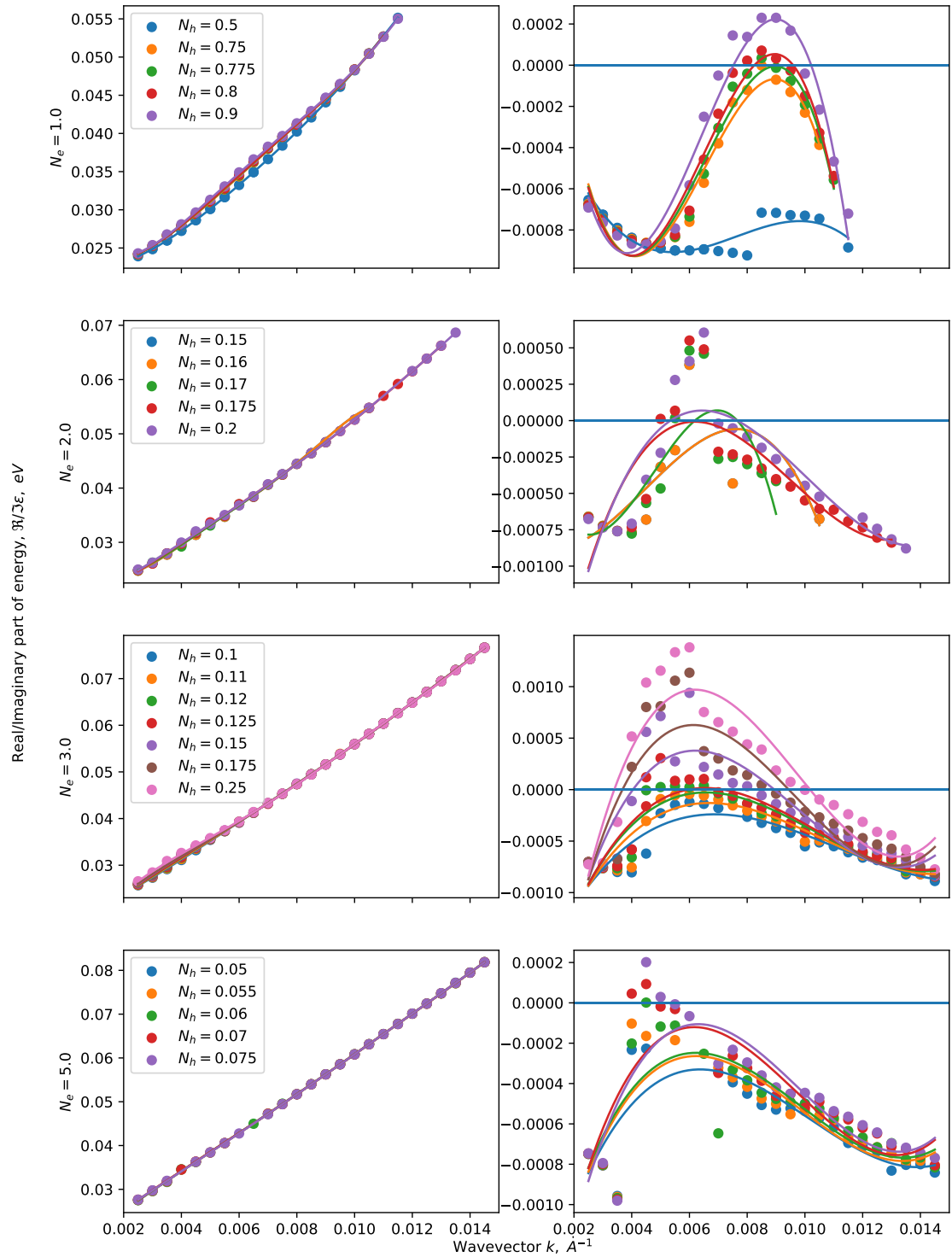


Рис. 2.11: Дисперсионные соотношения плазмонов, при разных концентрациях носителей. Концентрации указаны в  $\cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$ .

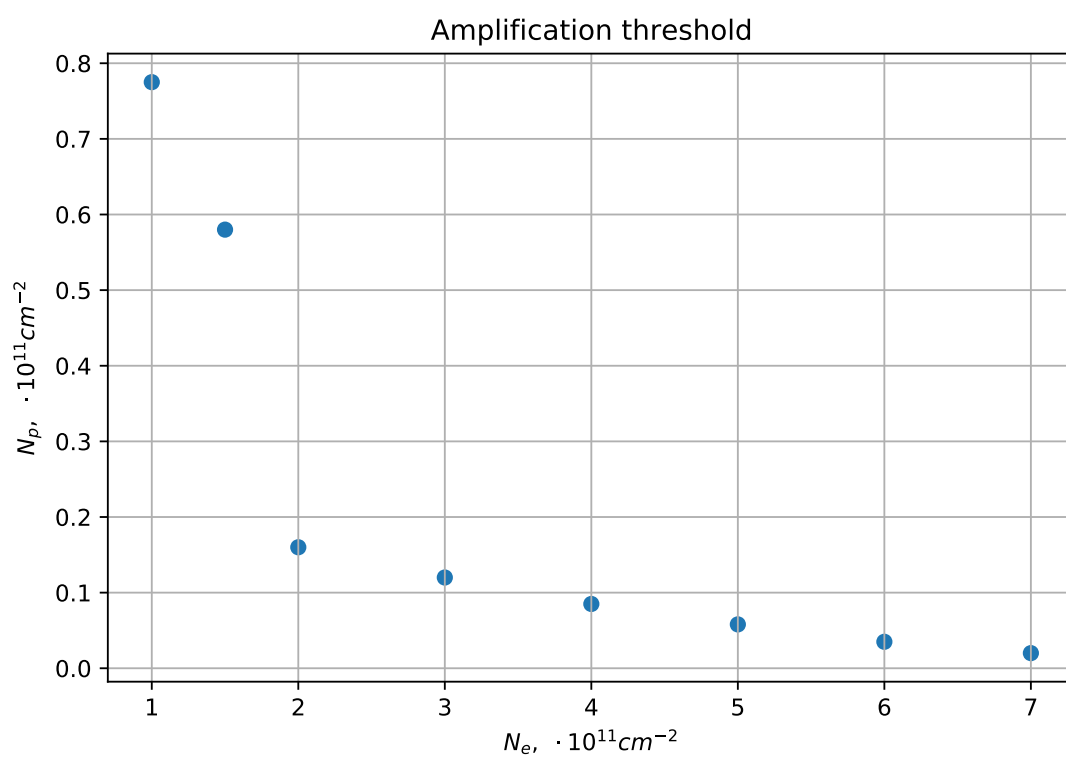


Рис. 2.12: Пороговые концентрации носителей .

## 3 | Заключение

### 3.1. 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.