

UNIVERZITET U BEOGRADU
ELEKTROTEHNIČKI FAKULTET

Aleksandar D. Atić

**MODELOVANJE KVANTNIH
NANOSTRUKTURA ZASNOVANIH NA
OKSIDNIM POLUPROVODNICIMA SA
VELIKIM ENERGETSKIM PROCEPOM**

doktorska disertacija

Beograd, 2025

UNIVERSITY OF BELGRADE
SCHOOL OF ELECTRICAL ENGINEERING

Aleksandar D. Atić

**MODELING OF QUANTUM
NANOSTRUCTURES BASED ON WIDE
BANDGAP OXIDE SEMICONDUCTORS**

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2025

PODACI O MENTORU I ČLANOVIMA KOMISIJE

Mentor:

dr Jelena Radovanović, redovni profesor
Univerzitet u Beogradu, Elektrotehnički fakultet

dr Nikola Vuković, docent
Univerzitet u Beogradu, Elektrotehnički fakultet

Članovi komisije za javnu odbranu:

dr Milan Tadić, redovni profesor
Univerzitet u Beogradu, Elektrotehnički fakultet

dr Vladimir Arsoški, vanredni profesor
Univerzitet u Beogradu, Elektrotehnički fakultet

dr Goran Gligorić, naučni savetnik
Institut za nuklearne nauke „Vinča“, Institut od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju

Datum odbrane: _____

Zahvalnica

Ova disertacija je urađena u Laboratoriji za atomsku fiziku Instituta za nuklearne nauke „Vinča“, instituta od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju uz podršku Fonda za nauku Republike Srbije, 10504, *Ultra-Short Pulsations from TERAhertz Quantum Cascade Laser Using Passive Mode-LOCKing with Graphene Saturable Absorber-TERALOCK*.

Za početak iskreno zahvaljujem svojim mentorima, prof. dr Jeleni Radovanović i dr Nikoli Vukoviću, čija su nesebična pomoć, podrška, dragocene ideje, brojne sugestije, ispravke i pažljive recenzije bili od presudnog značaja za realizaciju ove disertacije. Želim takođe neizmerno da zahvalim kolegama sa Univerziteta u Lidsu dr Aleksandru Demiću i prof. dr Dragana Inđinu na njihovoj saradnji tokom izrade ovog doktorata, mlađem kolegi sa Elektrotehničkog fakulteta i budućem doktoru MSc Novaku Stanojeviću kao i svim drugim članovima TERALOCK projekta.

Zahvalan sam više nego što reči mogu da opišu svim članovima P^* grupe Laboratorije za Atomsku Fiziku INN „Vinča“ - najboljem radnom kolektivu koji čovek može da poželi. Prihvatili su me otvorenog srca, kao da se znamo ceo život, i tokom rada na ovom doktoratu postali ne samo sjajne kolege, već i iskreni prijatelji.

Posebnu zahvalnost dugujem dr Aleksandri Maluckov, od koje sam naučio da ne postoji nepremostiva prepreka i da uvek treba hrabro koračati dalje. Takođe, zahvaljujem dr Goranu Gligoriću, hodajućoj enciklopediji, zahvaljujući kome se jutarnje ispitanje kafe redovno završavalo tako da sam svaki put bio barem za nijansu mudrijeg nego što sam bio kad sam ustao.

Veliko hvala i mom cimeru iz kancelarije, Kolji Bugarskom, osobi s kojom, statistički gledano, provodim najveći deo dana. Zahvalan sam mu na sjajnoj radnoj atmosferi i spremnosti da uskoči kad god se suočim s nekim problemom u radu.

Posebno mesto u ovoj zahvalnici zaslužuje moj najbolji prijatelj i višegodišnji „cimer u ludilu“, Filip Stanković „Čoča“. Njegovo prijateljstvo i naši beskonačni razgovori do poznih noćnih sati o svemu i svačemu od svetske pop kulture pa sve do najdubljih slojeva kontinentalne filozofije bili su mi oslonac još od srednjoškolskih dana. Bez njega, ovaj put bi bio znatno teži, a svakodnevica daleko manje zabavna.

I za kraj sam naravno najzahvalniji svojim roditeljima i bratu na nepokolebljivoj podršci, razumevanju i ljubavi tokom čitavog mog akademskog života, od malih nogu kad sam se mučio sa čitanjem i pisanjem pa sve do kraja ovog doktorata. Prema Hegelu, porodica je prva manifestacija objektivnog duha, zajednica u kojoj pojedinac pronalazi jedinstvo sa drugima ne kroz spoljnu prinudu, već kroz slobodu koja se rađa iz ljubavi. Upravo u tom duhu, njihova prisutnost bila je za mene i utočište i pokretač - konkretna etička osnova bez koje ovaj rad ne bi bio moguć.

Aleksandar Atić

MODELovanje kvantnih nanostruktura zasnovanih na oksidnim poluprovodnicima sa velikim energetskim procepom

Rezime

Oksidni poluprovodnici sa velikim energetskim procepom su perspektivni kandidati za nove generacije emitera i detektora. Na primer, $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ heterostrukture pokazuju potencijal za rad na sobnoj temperaturi zbog povoljnih osobina, dok galijum oksid (Ga_2O_3) i njegove legure sa aluminijumom nude ultra široki energetski procep i specifične elektronske karakteristike.

Ova doktorska disertacija bavi se razvojem teorijskog modela i softverskog alata za proračun elektronske strukture i optičkih osobina ovih nanostruktura. Očekuje se da će rezultati doprineti boljem razumevanju novih materijala i njihovoј primeni u optoelektronici, kao i optimizaciji dizajna uređaja koji emituju ili detektuju infracrveno i terahercno zračenje. Prikazani rezultati za višestruke kvantne jame zasnovane na ZnO i Ga_2O_3 mogu da posluže kao korak ka dizajniranju aktivne oblasti kvantnog kaskadnog lasera. Analizirano je kako promena geometrijskih parametara, spoljašnje električno polje i koncentracija primesa kod višestruke kvantne jame zasnovane na $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ utiče na matrične elemente prelaza i optičku apsorpciju. Posebna pažnja posvećena je teorijskom modelu depolarizacionog pomeraja i njegovom uticaju na apsorpciju. Zatim je kod $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ rezonantne tunelske diode sa dvostrukom barijerom računata strujno-naponska karakteristika, PVR (eng. Peak-to-Valley Ratio) i dinamički opseg za gustinu struje i izvršena je optimizacija ovih parametara na primeru konkretne strukture. Sprovedeni su detaljni proračuni elektronske strukture i transportnih parametara (pojačanje, gustina struje i frekvencija) u zavisnosti od primjenjenog spoljašnjeg električnog polja, za dva konkretna dizajna aktivne oblasti terahercnog kvantnog kaskadnog lasera iz literature. Disertacija je izložena kroz devet poglavlja.

Ključne reči: poluprovodničke naprave, kvantni kaskadni laseri, rezonantna tunelska dioda, Šredinger-Poasonov samosaglasni postupak, ZnO , Ga_2O_3 , terahercni emiteri

Naučna oblast: Fizička elektronika

Uža naučna oblast: Nanoelektronika i fotonika

MODELING OF QUANTUM NANOSTRUCTURES BASED ON WIDE BANDGAP OXIDE SEMICONDUCTORS

Summary

Wide bandgap oxide semiconductors stand out as promising candidates for next-generation emitters and detectors. For instance, $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ heterostructures demonstrate potential for room-temperature operation due to their favourable properties, while gallium oxide (Ga_2O_3) and its aluminium-based alloys offer an ultra-wide bandgap and unique electronic characteristics.

This dissertation focuses on the development of a theoretical model and a software tool for calculating the electronic structures and optical properties of these nanostructures. The expected results aim to contribute to a better understanding of new materials and their applications in optoelectronics, as well as to the optimisation of device design for infrared and terahertz radiation emission and detection. Results are presented for various multiple quantum well structures based on ZnO and Ga_2O_3 , which mimic the active region of a quantum cascade laser. The effects of layer thickness variation, external electric field, and doping concentration on transition matrix elements and optical absorption were analysed. Special attention is given to the theoretical model of depolarisation shift and its impact on absorption. Current-voltage characteristic, PVR (Peak-to-Valley Ratio), and dynamical range for current density were calculated and optimised for a particular exemplary double-barrier $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ resonant tunnelling structure. Detailed calculations of electronic structure and transport parameters (material gain, current density, and frequency) as a function of external bias field were performed on two designs of THz quantum cascade lasers from the literature. The dissertation is structured into nine chapters.

Keywords: semiconductor devices, quantum cascade lasers, resonant tunneling diode, Schrödinger-Poisson self-consistent solver, ZnO , Ga_2O_3 , terahertz emitters

Scientific field: Physical electronics

Specific scientific field: Nanoelectronics and Photonics

SADRŽAJ

1. UVOD	1
2. OKSIDNI POLUPROVODNIČKI MATERIJALI SA VELIKIM ENERGETSKIM PROCEPOM	4
2.1. Cink oksid	4
2.1.1. Uvod.....	4
2.2.1. Kristalna struktura.....	4
2.2. Galijum Oksid.....	5
2.2.1. Uvod.....	5
2.2.2. Poluprovodničke karakteristike Ga_2O_3	6
3. REZONANTNA TUNELSKA DIODA	8
3.1. Tunelovanje kroz jednu barijeru	8
3.2. Rezonantno tunelovanje u strukturi sa dve barijere	10
4. KVANTNI KASKADNI LASERI	14
4.1. Unutarzonski prelazi	15
4.2. Rasejanje nosilaca na longitudinalnim optičkim fononima	18
4.3 Rasejanje nosilaca na neravninama međuspoja	20
4.4. Rasejanje elektron-elektron	22
4.5. Terahercni KKL	23
4.5.1. Čirpovana superrešetka.....	24
4.5.2. Dizajn baziran na vezano-slobodnim prelazima	25
4.5.3. Rezonantno-fononski dizajn	25
4.5.4. Hibridni dizajn	26
4.5.5. Injekcija uz pomoć rasejanja (indirektno pumpanje).....	27
4.5.6. Primeri dizajna aktivne oblasti THz KKL-a	27
4.5.7. Talasovodi za THz KKL	29
5. PRORAČUN ELEKTRONSKE STRUKTURE KVANTNOG KASKADNOG LASERA	32
5.1. Numeričko rešavanje Šredingerove jednačine	34
5.2. Numeričko rešavanje Poasonove jednačine	35
5.3. Šredinger-Poasonov samosaglasni postupak	36
6. MODELOVANJE TRANSPORTA NOSILACA	37
6.1. Brzinske jednačine	37
6.1.1. Primer brzinskih jednačina: optičko pojačanje u magnetnom polju	39
6.2. Metod matrice gustine.....	41
6.2.1. Implementacija metoda	42
6.2.2. Postupak proračuna transportnih karakteristika	47
7. DEPOLARIZACIONI POMERAJ	49
7.1 Hamiltonijan svetlosti	49
7.2. Hamiltonijan elektrona.....	51
7.3. Hamiltonijan interakcije.....	51
7.4. Bozonizacija Hamiltonijana.....	56
7.5. Plazmoni	58
7.6. Plazmonska korekcija apsorpcionog spektra	61
8. NUMERIČKI REZULTATI	64
8.1. Apsorpcija u dvostrukoj asimetričnoj ZnO kvantnoj jami bez uračunatog depolarizacionog pomeraja.....	64
8.2 Apsorpcija u dvostrukoj asimetričnoj ZnO kvantnoj jami sa uračunatim depolarizacionim pomerajem.....	70
8.3. Apsorpcija u ZnO -strukturi kao aktivnoj oblasti kvantnog kaskadnog lasera	72
8.4. Rezonantne tunelske strukture od $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$	78

8.5. Proračun transportnih karakteristika THz $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ kvantnog kaskadnog lasera	81
8.6. Apsorpcija u $\beta-(Al_xGa_{1-x})_2O_3/Ga_2O_3$ kvantnoj jami.....	86
8.7. Apsorpcija u strukturi sa dve kvantne jame od $Ga_2O_3/(Al_xGa_{1-x})_2O$	89
8.8. Apsorpcija u strukturi sa tri kvantne jame od $Ga_2O_3/(Al_xGa_{1-x})_2O$	89
8.9. Apsorpcija u strukturi koja imitira aktivnu oblast potencijalnog $Ga_2O_3/(Al_xGa_{1-x})_2O_3$ KKL-a	90
9. ZAKLJUČAK	93
LITERATURA	94
BIOGRAFIJA AUTORA.....	104

LISTA SLIKA

Slika 2.1 - ZnO vurcitna jedinična celija gde je Zn označen žutom a O sivom bojom. Prikazana je tetraedarska koordinacija za oba tipa atoma. Preuzeto iz [8] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/>).....5

Slika 2.2 - (a) Rombična kristalna struktura $\alpha-Ga_2O_3$ nalik korundu sa samo Oh (plavom) koordinacijom Ga . (b) Monoklinska $\beta-Ga_2O_3$ kristalna struktura: Ga katjoni locirani na Td (Ga_1 , zelena) i Oh (Ga_2 , plava) koordinacija. O anjoni su spakovani u iskrivljenu kubičnu strukturu sa dva trostruko koordinisana tipa (O_1 i O_2) i jednim četvorostrukim koordinisanog tipa (O_3). (c) Kubična defektna spinelna rešetkasta struktura γ -faze Ga_2O_3 sastoji se od Td (Ga_1 , zelena) i Oh (Ga_2 , plava) koordinisanog Ga u odnosu 1:2. (d) Ortorombna struktura $\varepsilon-Ga_2O_3$. Preuzeto iz [22] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).....7

Slika 3.1 - Potencijalna barijera sa talasnim funkcijama.9

Slika 3.2 - Profil provodne zone RTD sa dve barijere za različite napone: nulti napon (gore levo), napon praga (gore desno), rezonanca (dole levo), van rezonance (dole desno). E_F^L i E_L^R su lokalne energije Fermijevog nivoa u emiteru i kolektoru, a E_C^L i E_C^R su energije dna provodne zone u emiteru i kolektoru. Reprodukovano iz [48] uz dozvolu davaoca licence preko PLSclear-a12

Slika 4.1 - Šematski prikaz razlike principa rada između diodnog/međuzonskog lasera (gore) i kvantnog kaskadnog tj. unutarzonskog lasera (dole). Adaptirano iz [81].16

Slika 4.2 - Mehanizmi rasejanja između podzona koji se javljaju u srednjem infracrvenom (levo) i dalekom infracrvenom/ THz (desno) sistemu. Prikazana su tipična rasejanja kao što su rasejanje na LO fononima, elektron-elektron rasejanje, rasejanje na jonozovanim primesama, rasejanje na neravninama međuspoja i rasejanje na akustičnim fononima. Adaptirano iz [82] uz dozvolu (<https://rightsstatements.org/page/InC-NC/1.0/?language=en>).17

Slika 4.3 - Šematski prikaz emisije (levo) i apsorpcije (desno) fonona usled prelaska elektrona između odgovarajućih početnih i finalnih stanja. Adaptirano iz [84] uz dozvolu izdavača AIP Publishing..18

Slika 4.4 - Dvostruka kvantna jama sa envelopnim funkcijama (levo) i neravnine na međuspoju (desno). Reprodukovano iz [6] uz dozvolu davaoca licence preko PLSclear-a.21

Slika 4.5 - Maksimalne radne temperature THz KKL-ova iz literature na osnovu različitih dizajna aktivne oblasti u sistemima materijala $GaAs/AlGaAs$. ■ Čirpovana superrešetka u CW režimu; □ čirpovana superrešetka u impulsnom režimu; ▼ BTC u CW režimu; ▽ BTC u impulsnom režimu; ● rezonantni-fonon dizajn u CW režimu; ○ rezonantni-fonon/direktni-fonon (dvojamni) dizajn u

impulsnom režimu; \star , dizajni sa injekcijom uz pomoć rasejanja, u impulsnom režimu; i \diamond , THz KKL-ovi koji rade uz pomoć jakog magnetnog polja (10–15 T). Slika preuzeta iz [6] uz dozvolu davaoca licence preko PLSclear-a.....24

Slika 4.6 - Šematski prikaz nekoliko dizajna aktivne oblasti THz KKL-a: (a) čirpovana superrešetka (b) struktura sa vezano-slobodnim prelazima (c) struktura sa fononskom rezonancijom (d) hibridni dizajn. Adaptirano iz [93] uz dozvolu izdavača Springer Nature.....26

Slika 4.7 -Dizajn aktivne oblasti THz KKL-a gde je injekcija nosilaca potpomognuta rasejanjima. Preuzeto iz [100].27

Slika 4.8 - Dno provodne zone potencijala za THz KKL: (a) 200 K rezonantno-fononski (b) 2 THz BTC (c) Hibridni (d) 261 K rezonantno-fononski. Preuzeto iz [102], pod uslovima Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).....29

Slika 4.9 - Intenzitet optičkog moda u konfiguraciji talasovoda sa SP (a) i DM (b) THz KKL. Na slici je poprečni presek geometrije grebenskog talasovoda. Preuzeto iz [107] pod uslovima Creative Commons Attribution License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).....30

Slika 6.1 - Ilustracija povećavanja stepena kompleksnosti i preciznosti od (a)-(c) za tri modela transporta: (a) Brzinske jednačine, (b) Monte Karlo metod (c) 3D matrica gustine/NEGF. Preuzeto iz [123] uz dozvolu izdavača AIP Publishing.....37

Slika 6.2 - Proračun transportnih karakteristika na primeru GaAs THz KKL BTC laseru iz [96]. (a) Materijalno pojačanje u zavisnosti od frekvencije emisije $g(f)$, prikazano za različite vrednosti spoljašnjeg električnog polja. Maksimum funkcije $g(f)$ odgovara laserskom modu za konkretnu vrednost polja, a ekstrakcijom tih maksimuma za opseg vrednosti polja dobija se na slici (b) zavisnost pojačanja od polja $g(K)$. Mala slika na panelu (a) prikazuje frekvenciju emisije koja odgovara maksimumu pojačanja u zavisnosti od električnog polja. (b) Materijalno pojačanje g , i gustina struje J kao funkcije električnog polja K . Preuzeto iz [102], pod uslovima Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).....48

Slika 8.1 - Dijagram provodne zone (crno) sa modulom na kvadrat prve tri talasne funkcije pri $F = 0 \frac{V}{m}$ (a) i $F = 1.5 \times 10^7 \frac{V}{m}$ (b). Vezana stanja i njihove odgovarajuće talasne funkcije označene su punim crvenim linijama. Potencijal bez promene usled prostornog nanelektrisanja od dopiranja šire jame prikazan je isprekidanom crnom linijom. Krivljenje potencijala usled dopiranja prikazano je punom crnom linijom. Fermijev nivo se nalazi između prvog i drugog vezanog stanja i označen je plavom linijom. Preuzeto iz [157] uz saglasnost autora.66

Slika 8.2 - Spektri frakcioneapsorpcije za 3 različite debljine barijere sa istom koncentracijom donora $N_d \approx 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Sa leva na desno, prvi veći apsorpcioni maksimum odgovara prelazu između osnovnog i prvog vezanog stanja (A_{01}). Drugi maksimum odgovara prelazima između osnovnog i drugog vezanog stanja (A_{02}). Preuzeto iz [157] uz saglasnost autora.67

Slika 8.3 - Pikovi frakcione apsorpcije za 3 različite vrednosti koncentracije donora N_d , za fiksnu širinu barijere $t_b = 0.5 \text{ nm}$. Plava linija je isti apsorpcioni spektar kao na Slici 8.2, plava linija. Preuzeto iz [157] uz saglasnost autora.68

Slika 8.4 - Spektri apsorpcije za različite vrednosti primjenjenog električnog polja, za fiksnu širinu barijere $t_b = 0.5 \text{ nm}$ i fiksno dopiranje $N_d \approx 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Električno polje je varirano između

$F = 0 \frac{V}{m}$ i $F = 2.5 \times 10^7 \frac{V}{m}$ (a) i između $F = -2.5 \times 10^7 \frac{V}{m}$ i $F = 0 \frac{V}{m}$ (b). Preuzeto iz [157] uz saglasnost autora.....	69
Slika 8.5 - Apsorpcioni spektar asimetrične dvostrukе kvantne jame u jednočestičnom modelu apsorpcije (plavo) i sa depolarizacionim pomerajem (crveno) ³	70
Slika 8.6 - Apsorpcioni spektar računat pomoću modela koji uračunava kolektivne efekte, za različite vrednosti širine barijere.....	71
Slika 8.7 - Apsorpcioni spektar sa depolarizacionim pomerajem za različite vrednosti dopiranja široke jame.	71
Slika 8.8 - Apsorpcioni spektar računat pomoću modela koji uračunava kolektivne efekte, za različite vrednosti primjenjenog polja.....	72
Slika 8.9 - Profil potencijala provodne zone ZnO/Zn _{0.88} Mg _{0.12} O pri primjenjenom spoljašnjem električnom polju. Redosled slojeva dat je u nm i iznosi, sa leva na desno, 2.5/3.6/1.7/3.4/2.4/2.75/2.7/6.15/2.5 , gde su barijere podebljanje a ostalo su ZnO jame. Centar (2.05 nm) najšire jame 6.15 nm (podvučeno) je dopiran Ga koncentracije N _D = 3 × 10 ¹⁸ cm ⁻³ . Vezana stanja i njihove odgovarajuće talasne funkcije su kvadrirane i prikazane punim crvenim linijama. Isprekidana crna linija pokazuje efektivnu potencijalnu energiju bez dopiranja jama. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	73
Slika 8.10 - Apsorpcioni spektar unutarzonskih prelaza za različite vrednosti dopiranja široke jame stukture sa Slike 8.9. Gornji dijagram prikazuje spektar apsorpcije sa uračunatim depolarizacionim pomakom, dok donji dijagram prikazuje apsorpcioni spekar računat jednočestičnim modelom. Adaptirano iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	74
Slika 8.11 - Energija apsorpcionog pika u funkciji koncentracije dopanata u širokoj jami u strukturi datoј na Slici 8.9. Plava linija označava jednočestičnu sliku, dok crvena linija prikazuje rezultate punog kvantnog tretmana koji je neophodan za veće koncentracije dopiranja. Umetak pokazuje promenu pika koeficijenta apsorpcije u funkciji dopiranja široke jame. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	75
Slika 8.12 - Apsorpcioni spektar za različite molske udele Mg u barijerama. Koncentracija dopiranja široke jame je 5 × 10 ¹⁹ cm ⁻³ , a temperatura rešetke T = 300 K se koristi u svim simulacijama. Umetak prikazuje energiju koja odgovara poziciji maksimuma apsorpcionog spektra kao funkciju sastava Mg u slojevima barijere. Kako se procenat Mg povećava, vrh apsorpcionog spektra doživjava crveni pomak za približno 5 meV. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	76
Slika 8.13 - Slika pokazuje da proširenje široke jame izaziva crveni pomak spektra apsorpcije. Umetak prikazuje apsorpcionu energiju kao funkciju promene širine jame ΔW. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	77
Slika 8.14 - Samosaglasni potencijal i odgovarajuće koncentracije elektrona za tri različite vrednosti napona. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	78

Slika 8.15 - Zavisnost gustine struje od napona nepolarnih $ZnO/Zn_{0.88}Mg_{0.12}O$ rezonantnih tunelskih struktura. Nivo dopiranja emitera i kolektora variran je u rasponu od 10^{17} cm^{-3} do $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Debljine slojeva barijera i jama počevši od emitera u nm su $10/2/6/2/10$ (debljine kvantnih jama su označene podebljanim slovima). Umetnuta slika prikazuje dva najbitnija parametra, PVR za gusinu struje J (gornji panel, leva y-osa) i dinamički opseg ΔJ (gornji panel, desna y-osa) u NDR-u; donji panel umetka prikazuje napon u NDR u funkciji dopiranja emitera. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>). 79

Slika 8.16 - J-V karakteristika nepolarnih m -ravanskih $ZnO/Zn_{0.88}Mg_{0.12}O$ rezonantnih tunelskih struktura sa dvostrukom barijerom. Debljina barijera W_B menjana je za oko jedan monosloj oko nominalne vrednosti od 2 nm. Nominalne debljine slojeva barijera i kvantnih jama sastavnih epi-slojeva strukture počevši od emitera u nm su $10/1\cdot3/6/1\cdot3/10$ (debljine kvantnih barijera su označene podebljanim slovima). Umetnuta slika prikazuje PVR (leva y-osa) i dinamički opseg ΔJ u NDR-u; Koncentracija primesa u emiteru/kolektoru je $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, dok je temperatura $T = 300 \text{ K}$. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>). 80

Slika 8.17 - J-V karakteristika nepolarnih m -ravanskih $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ rezonantnih tunelskih struktura sa dvostrukom barijerom. Optimalno dopiranje u emiteru/kolektoru je $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ i izabrana je debljina barijere od 1.3 nm, odnosno nominalne debljine slojeva barijere i kvantnih jama sastavnih epi-slojeva strukture počev od emitera u nm su $10/1.3/6/1.3/10$ (debljina kvantnih barijera su podebljane). Umetnuta slika prikazuje PVR (leva y-osa) i dinamički opseg gusine struje ΔJ (desna y-osa) u NDR-u; temperatura rešetke je $T = 300 \text{ K}$. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>). 81

Slika 8.18 - Elektronska struktura originalnog dizajna za polje od 51.5 kV/cm 82

Slika 8.19 - Materijalno pojačanje, gusina struje i frekvencija emisije originalnog dizajna iz [9] u funkciji spoljašnjeg električnog polja. 82

Slika 8.20 - Elektronska struktura originalnog dizajna iz [9] sa umanjenim dopiranjem na $3 \times 10^{17} \text{ dopanata/cm}^3$ za polje od 51.5 kV/cm . Slojevi se mogu zapisati kao $2.5/3.6/1.7/3.4/2.4/2.75/2.7/2.05/2.05/2.05 \text{ nm}$ gde boldirani slojevi barijera sadrže 12 % Mg, a podvučen sloj dopiran je primesama koncentracije $3 \times 10^{17} \text{ dopanata/cm}^3$ 83

Slika 8.21 - Materijalno pojačanje, gusina struje i frekvencija emisije originalnog dizajna iz [9] sa umanjenim dopiranjem na $3 \times 10^{17} \text{ dopanata/cm}^3$ u funkciji spoljašnjeg električnog polja. 84

Slika 8.22 - Elektronska struktura dvojamnog THz KKL-a iz [11] za spoljašnje polje od 70 kV/cm 85

Slika 8.23 - Materijalno pojačanja, gusina struje i frekvencija dvojamnog THz KKL-a iz [11] u funkciji spoljašnjeg električnog polja. 85

Slika 8.24 - Profil apsorpcije za jednu kvantu jamu širine 3.1 nm. Prikazane su vrednosti računate jednočestičnim modelom (plava) i modelom sa depolarizacionim pomerajem (crvena). 87

Slika 8.25 - Profil apsorpcije za jednu kvantu jamu širine 10 nm. Udeo aluminijuma je 30 %. Prikazane su vrednosti računate sa i bez primene depolarizacionog pomeraja. Jama je dopirana Si koncentracije $N_D = 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Posmatrane su vrednosti za 4 vezana stanja. 88

Slika 8.26 - Profil apsorpcije za jednu kvantnu jamu širine 10 nm posmatrano za 8 vezanih stanja. Udeo aluminijuma je 30 %. Prikazane su vrednosti računate sa i bez primene depolarizacionog pomeraja.....	88
Slika 8.27 - Profil apsorpcije za dve kvantne jame širine 1.2 nm i 2.5 nm i barijere debljine 1nm. Obe jame su dopirane Si koncentracije $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Prikazane su vrednosti računate sa i bez modela depolarizacionog pomeraja, za 4 vezana stanja. Molski udeo Al je 42 %.....	89
Slika 8.28 - Profil apsorpcije za tri kvantne jame širine 3.1 nm, 2.4nm i 5.5 nm i barijere debljine 2.5 nm i 3.4 nm. Najšira jama je dopirana Si koncentracije $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Prikazane su vrednosti računate jednočestičnim modelom (plava) i složenim modelom koji uračunava kolektivne efekte (crvena). Udeo aluminijuma u barijeri je 30 %.....	90
Slika 8.29 - Elektronska struktura $\text{Ga}_2\text{O}_3/(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}$ heterostrukture u električnom polju, izračunata samosaglasnim postupkom. Debljine slojeva u nanometrima iznose 3/3.1/2.5/2.4/3.4/5.5/3 gde su podebljani barijerni slojevi. Molski udeo aluminijuma u barijerama je 30 %. Najšira jama dopirana je Si koncentracije $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Primljeno je spoljašnje električno polje jačine $7.3 \times 10^6 \text{ V/m}$	91
Slika 8.30 - Apsorpcioni spektar za $\text{Ga}_2\text{O}_3/(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}$ strukture sa Slike 8.29. Prikazane su vrednosti računate klasično (plava) i složenim proračunom koji uračunava depolarizaciono polje (crvena). Udeo aluminijuma u barijeri je 30 %.....	91
Slika 8.31 - Apsorpcioni spektar za $\text{Ga}_2\text{O}_3/(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}$ heterostrukturu sa Slike 8.30 za različite udele Al u barijerama. Prikazani rezultati uključuju depolarizacioni pomeraj.....	92

LISTA TABELA

Tabela 8.1- Svojstva materijala korišćena u proračunima $\beta-(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3/\text{Ga}_2\text{O}_3$ kvantnih jama u potpoglavlјima 8.6 – 8.9. Preuzeto iz [34].....	86
--	----

1. UVOD

Poluprovodnici sa velikim energetskim procepom (eng. *Ultra-Wide bandgap* - UWBG), odnosno sa energetskim procepima mnogo većim od 3.4 eV kod GaN ili 3.2 eV kod SiC, predstavljaju novo područje intenzivnih istraživanja obuhvatajući širok spektar materijala, fizike, uređaja i primene. Budući da kritično električno polje lavinskog proboga raste super-linearno sa povećanjem energetskog procepa, UWBG poluprovodnici mogu da podnesu visoka polja kako bi omogućili visokonaponske elektronske uređaje za telekomunikacije, pogone motora, elektroenergetsku mrežu, električna vozila, industrijsku i lokomotivnu kontrolu vuče, i različite druge primene [1]. Pored toga, emisija svetlosti iz UWBG materijala dešava se u dubokom ultravioletnom (UV) delu elektromagnetskog spektra, što je ključno za proširenje radnih talasnih dužina fotonaponskih uređaja izvan UV-vidljivog (eng. UV-vis) spektra što bi omogućilo potencijalne primene u optoelektronici [2], nauci o kvantnim informacijama i biohemijskim senzorima [3]. Ova nova klasa poluprovodnika takođe se istražuje za primene u uređajima koji rade u ekstremnim okruženjima iskorišćavanjem njihove termičke stabilnosti i otpornosti na zračenje. U poređenju sa razvojem GaN-a i SiC-a, svi UWBG materijali su relativno novi i još uvek u početnoj fazi istraživanja [4]. Većina istraživačkih napora u UWBG fokusira se na legure aluminijum-galijum-nitrida ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$), bor-ni nitrid (BN), dijamant, kao i na veliku porodicu binarnih (tipično β -faze galijum oksida ($\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$) i ternarnih oksidnih poluprovodnika. Obimne istraživačke aktivnosti usmerene ka ovim materijalima motivisane su mogućnošću pouzdanog dopiranja i visokim pokretljivostima nosilaca, dostupnošću podloga za rast tankih filmova i uspešnim realizacijama uređaja [5].

Proučavanje optičkih prelaza između kvazivezanih stanja u provodnoj zoni poluprovodničkih struktura zasnovanih na kvantnim jamama veoma je značajno za razvoj naprava kao što su rezonantne tunelske diode (RTD), detektori infracrvenog zračenja, kvantni kaskadni laseri (KKL), itd. Uz pomoć preciznog modelovanja, energija ovih prelaza može se podešavati tako da obezbedi širok opseg vrednosti za detekciju/emisiju koje su atraktivne za primene, posebno u bliskoj i srednjoj infracrvenoj, kao i u terahercnoj oblasti spektra. Za terahercni deo spektra, koji odgovara frekvencijama između 1 THz i 10 THz, odnosno talasnim dužinama od 30 μm do 300 μm, vezuje se pojam „terahercnog procepa“ (eng. terahertz gap) gde naprave za generisanje i detekciju zračenja u ovom opsegu nisu nedovoljno dostupne. Najzastupljeniji poluprovodnički materijal za realizaciju THz kvantnih kaskadnih lasera je GaAs, koji ispoljava standardni problem III-V jedinjenja a to je nedovoljno visoka radna temperatura usled velikih neradijativnih gubitaka [6]. Naime, maksimalna radna temperatura KKL-a koji rade u kontinualnom režimu (eng. continuous wave, CW) je 129 K, dok je za pulsnii režim nedavno postignuta maksimalna temperatura od 261 K što je omogućilo da se umesto skupih kriogenih sistema koriste Peltjeovi hladnjaci [7]. Ispitivanje novih struktura zasnovanih na spojevima novih materijala i odgovarajućih unutarzonski prelaza u njima, predstavlja alternativu za prevazilaženje ovog problema, za proširenje opsega radnih parametara postojećih tipova naprava, kao i za dizajniranje i realizaciju novih naprava.

Istraživanje poluprovodnika sa velikim energetskim procepom obuhvata sintezu različitih materijala i njihovih kombinacija, ispitivanje fizičkih osobina, realizaciju naprava i primene (u elektronici, optoelektronici, kvantnoj elektronici). U poređenju sa silicijumom i III–V jedinjenjima, razvoj ovih materijala i odgovarajućih naprava je u povoju. Interesovanje za poluprovodnike sa velikim energetskim procepom podstaklo je ranija istraživanja II-VI materijala i AlGaN/GaN sistema. Međutim II-VI jedinjenja se zasnivaju na kompleksnim kvaternarnim legurama, dok se kod standardnog c-GaN javljaju jaka unutrašnja polarizaciona polja što komplikuje dizajn i sintezu ovakvih struktura [8]. Kod nepolarnog GaN ne postoji unutrašnja polja, ali je narastanje vrlo zahtevno pri čemu je veličina vejfera relativno mala, što je vrlo nepogodno za realizaciju naprava. Poznato je da eksperimentalnim rezultatima u oblasti novih materijala uobičajeno prethode teorijski proračuni čija uloga je predviđanje osobina tih materijala i njihovih heterostruktura, proračun elektronske strukture, uticaja dopanata i slično.

Predmet istraživanja ove disertacije je razvijanje teorijskog i simulacionog okvira za proučavanje struktura zasnovanih na kvantnim jamama, realizovanih uz pomoć oksidnih materijala sa velikim energetskim procepom (na primerima $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ i $(Al_xGa_{1-x})_2O_3$ heterostruktura), kao i ispitivanje mogućnosti za realizaciju naprava kao što su kvantni kaskadni laseri i/ili detektori infracrvenog zračenja. $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ strukture su perspektivne za realizaciju terahercnih emitera za sobnu radnu temperaturu zahvaljujući povoljnim vrednostima parametara, prvenstveno većoj rezonantnoj energiji longitudinalnih optičkih fonona u odnosu na GaAs. Radi se o strukturama čija je primena za kvantne kaskadne lasere tek u povoju, te razvijanje detaljnog teorijskog modela i određivanje parametara strukture koji obezbeđuju emisiju u THz opsegu spektra, predstavljaju vrlo aktuelan problem. Iako je predloženo nekoliko KKL naprava zasnovanih na $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ dosada nije uspešno realizovana struktura koja daje lasersko zračenje već samo elektroluminescentno [9], o čemu će biti više reči u nastavku teze. Galijum oksid (Ga_2O_3) poseduje ultra veliki energetski procep i njegove jedinstvene osobine su motiv za intenzivno istraživanje budućih naprava, posebno kada su u pitanju legure sa aluminijumom ($(Al_xGa_{1-x})_2O_3$). U disertaciji će biti razmatrane strukture zasnovane na kvantnim jamama za emisiju i/ili detekciju zračenja u infracrvenoj oblasti spektra, kao i rezonantne tunelske diode od $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$, koje predstavljaju gradivne blokove, odnosno neophodne korake ka realizaciji KKL-a. U kvantnim jamama računata je apsorpcija, dok je za RTD računata strujno-naponska karakteristika, PVR i dinamički opseg za gustinu struje, kao i optimizacija parametara slojeva, molskog udela Mg u barijerama RTD-a, i koncentracije dopanata u injektoru. Osim toga, urađen je detaljni proračun elektronske strukture i transporta za dva THz KKL-a iz literature i pokazano je zašto te naprave nisu bile u stanju da dovedu do laserske emisije. Značaj istraživanja ogleda se u realizaciji odgovarajućeg modela i programskog koda koji će obezbediti efikasan opis elektronske strukture i procenu parametarskog prostora za dizajniranje emitera/detektora zasnovanih na novim oksidnim materijalima. Ispitivanjem uticaja parametara na energije unutarzonski prelaza, brzine rasejanja na fononima i optičko pojačanje, doprineće proceni aplikativnog potencijala budućih naprava na bazi pomenutih materijala i njihovom optimizovanom dizajnu. Rezultati dobijeni u okviru disertacije obezbediće jednostavnije razmatranje novih kombinacija materijala kao kandidata za efikasne emitere ili detektore infracrvenog/terahercnog zračenja. U istraživanju se polazi se od sledećih hipoteza:

- Naprave za emitovanje/detektovanje infracrvenog zračenja zasnovane na standardnim materijalima kao što je GaAs imaju fundamentalna ograničenja u pogledu radnih talasnih dužina i temperature. Maksimalna talasna dužina ograničena je vrednošću diskontinuiteta provodne zone, dok su pogledu rada na velikim talasnim dužinama ograničavajući faktor radne temperature neradijativni mehanizmi prelaza, prvenstveno rasejanje na longitudinalnim optičkim (LO) fononima, čija je energija u GaAs 36 meV, što je blizu termalne energije na sobnoj temperaturi koja je približno 26 meV.
- Kvantni kaskadni laseri su trenutno najperspektivnije naprave za rad u terahercnom delu elektromagnetskog spektra, međutim njihova radna temperatura u CW režimu daleko je od sobne. Razlog je u bliskosti rezonante energije LO fonona u GaAs sa energijom laserskog prelaza, što dovodi do smanjenja optičkog pojačanja.
- Cink oksid (ZnO) poseduje direkstan i širok energetski procep 3.37 eV [10] (na sobnoj temperaturi) i veću energiju LO fonona (72 meV), što ga čini pogodnim za realizaciju emitera/detektora značenja u terahercnoj oblasti spektra. Kvantni kaskadni laser realizovan uz pomoć poluprovodničkih legura ovog materijala ima potencijal za rad na sobnoj temperaturi.
- Optičke i transportne osobine poluprovodnika mogu se modulisati dopiranjem i legiranjem, što proširuje opseg primena materijala. Kombinovanjem sa MgO , čiji je energetski procep ~ 6.8 eV [11], energetski procep se povećava od 3.37 eV za čist ZnO pri sobnoj temperaturi, do 4.06 eV za leguru $Zn_{1-x}Mg_xO$ sa sadržajem Mg do $x = 0.3$ [12]. Tako dobijena legura $Zn_{1-x}Mg_xO$ predstavlja dobar materijal za barijerne slojeve.

- Polarne osobine ZnO se takođe moraju uzeti u razmatranje prilikom analize heterostrukura. Naime, spontana polarizacija duž c-pravca izaziva krivljenje provodne zone, što može imati nepovoljan uticaj na performanse naprava, pa će u disertaciji biti razmatrane samo strukture realizovane u nepolarnoj orientaciji (*m*-pravac narastanja).
- Galijum oksid (Ga_2O_3) jedan je od perspektivnih materijala za primenu u infracrvenom delu spektra zbog izuzetno velike vrednosti energetskog procepa (4.8 eV) i mogućnosti da se kombinuje sa aluminijumom u heterospojeve ($Al_xGa_{1-x}O_3/Ga_2O_3$, što obezbeđuje realizaciju kvantnih jama velike dubine, kao i zbog lakoće *n*-dopiranja.

U okviru disertacije, elektronska struktura provodne zone određivana je numeričkim rešavanjem Šredingerove jednačine metodom konačnih razlika (eng. finite difference method) ili metodom gađanja (eng. shooting method). Numeričko rešavanje sistema Šredingerove i Poasonove jednačine izvršeno je primenom samosaglasnog postupka. Dobijeni rezultati za energije unutarzonskih prelaza u kvantnim jamama upoređeni su sa eksperimentalnim rezultatima koji su dostupni u literaturi kako bi se preciznije utvrdile vrednosti parametara materijala. Zatim je analizirano kako promena geometrijskih parametara i dizajna višestruke kvantne jame zasnovane na $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ utiče na matrične elemente prelaza i optičku apsorpciju. Posebna pažnja je posvećena analizi jako dopiranih struktura gde se morao uzeti u obzir depolarizacioni pomeraj (pomak) koji izaziva preraspodelu u spektru usled multipodzonskih plazmonske efekata. Nakon toga, sprovedena je analiza relevantnih mehanizama rasejanja i izvršen numerički proračun za procenu profila strukture koji bi odgovarao aktivnoj oblasti kvantnog kaskadnog lasera. Za određivanje pojačanja aktivnog materijala i gustine struje nosilaca u zavisnosti od eksternog električnog polja, za THz KKL iz literature, korišćen je transportni model zasnovan na matrici gustine (eng. density matrix method). Po završenoj fazi istraživanja vezanoj za $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$, postupak će delimično biti ponovljen za strukture zasnovane na $(Al_xGa_{1-x})_2O_3/Ga_2O_3$. Kod ovog tipa materijala, analiziraće se mogućnosti realizacije unutarzonskih prelaza u širokom opsegu talasnih dužina u okviru infracrvenog dela spektra, radi procene potencijala ovog novog tipa heterostrukura za realizaciju detektora. Naučni doprinosi ove disertacije su:

- Detaljni proračun elektronske strukture kvantnih jama zasnovanih na oksidnim poluprovodnicima sa velikom vrednošću energetskog procepa.
- Analiza uticaja geometrijskih parametara, spoljašnjeg električnog polja i dopiranja strukture na elektronske i optičke osobine višestrukih kvantnih jama zasnovanih na $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ i $(Al_xGa_{1-x})_2O_3/Ga_2O_3$.
- Proračun strujno-naponske karakteristike, optimizacija PVR i dinamičkog opsega gustine struje RTD sa dvostrukom barijerom od $ZnMgO/ZnO$.
- Proračun transportnih karakteristika terahercnog kvantnog kaskadnog lasera zasnovanih na $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ metodom matrice gustine.
- Analiza višestrukih kvantnih jama realizovanih pomoću $(Al_xGa_{1-x})_2O_3/Ga_2O_3$ koji je u svojsvitu gradivnog elementa aktivne oblasti kvantnog kaskadnog lasera.

Naredna poglavља su organizovana tako da je u 2. poglavljju ukratko predstavljena kristalna struktura ZnO i Ga_2O_3 , u 3. poglavljju je dat teorijski pregled RTD, u 4. poglavljju je izložena teorija o KKL-u sa posebnim osvrtom na terahercne dizajne, u 5. poglavljju je prikazan numerički postupak za određivanje elektronske strukture KKL-a, u 6. poglavljju su izloženi transportni modeli sa posebnim osvrtom na matricu gustine koja se koristi za proračune THz KKL-a, u 7. poglavljju je obrađena teorija potrebna da se shvati depolarizacioni pomeraj i kako utiče na optičke prelaze, 8. poglavlje predstavlja numeričke rezultate u kojima je za proračun primenjena metodologija izložena u prethodnim poglavljima, a poglavlje 9. je kratak zaključak sa perspektivom za buduće istraživanje.

2. OKSIDNI POLUPROVODNIČKI MATERIJALI SA VELIKIM ENERGETSKIM PROCEPOM

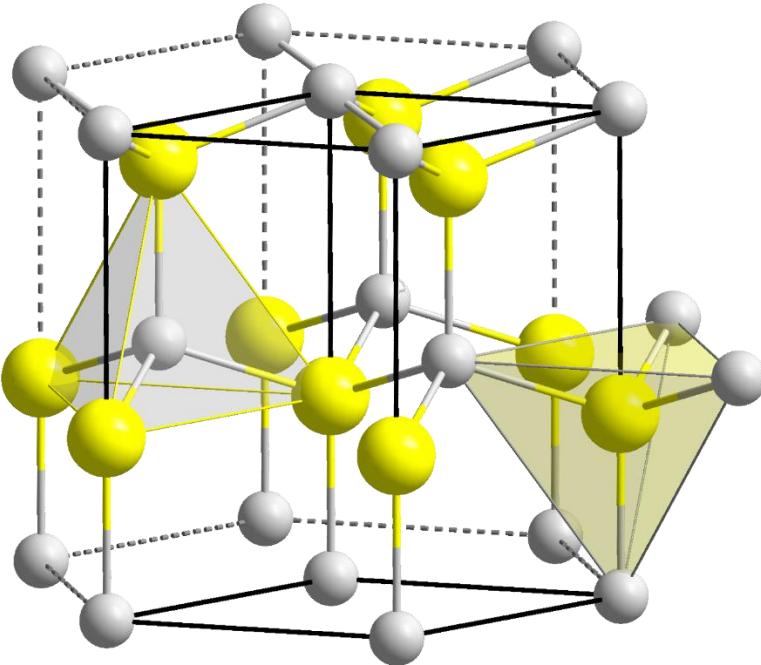
2.1. Cink oksid

2.1.1. Uvod

Cink oksid (ZnO) je perspektivan materijal za poluprovodničke uređaje zahvaljujući svojim izuzetnim svojstvima oksida sa ultra širokim energetskim procepom od približno 3.3 eV, čime obezbeđuje izuzetnu transparentnost u vidljivom spektru što ga čini pogodnim za mnoštvo optoelektronskih primena. ZnO je idealan kandidat za transparentne elektrode u uređajima kao što su organske diode koje emituju svetlost (OLED) [13] i ekrani osetljivi na dodir, gde su i električna provodnost i optička transparentnost najvažniji [14]. Široki energetski procep takođe daje uređajima od ZnO sposobnost da rade na povišenim temperaturama i naponima uz održavanje strukturalnih i električnih osobina. Ova karakteristika je posebno pogodna za visokoenergetsku elektroniku i radiofrekventne uređaje, gde je stabilnost u ekstremnim uslovima ključna. Štaviše, ZnO poseduje visoku topotnu provodljivost, olakšavajući efikasno rasipanje toplote u energetskoj elektronici i povećavajući pouzdanost uređaja. Njegova hemijska stabilnost dodatno proširuje njegovu upotrebu, posebno u teškim okruženjima gde je otpornost na koroziju i degradaciju od suštinskog značaja. Kompatibilnost ZnO sa različitim tehnikama depozicije, uključujući hemijsku depoziciju iz parnog stanja (CVD) i fizičku depoziciju iz parnog stanja (PVD), nudi raznovrsnost u proizvodnji uređaja, omogućavajući realizaciju složenih arhitektura sa preciznom kontrolom svojstava filma [14]. Uprkos izazovima povezanim sa defektima i dopiranjem u ZnO , tekući istraživački naporu nastoje da iskoriste njegovu jedinstvenu kombinaciju svojstava kako bi pokrenuli razvoj poluprovodničkih uređaja sledeće generacije u različitim aplikacijama [2]. Kroz sveobuhvatno razumevanje njegovih suštinskih karakteristika i prilagođenih pristupa inženjeringu uređaja, ZnO ima potencijal da napravi revoluciju u poluprovodničkoj tehnologiji i omogući napredak u raznim oblastima: od prikupljanja energije do telekomunikacija. Ako bismo želeli da napravimo jedinjenje sa većim energetskim procepom od ZnO , zamenili bismo procenat atoma Zn sa magnezijumom (Mg) ili berilijumom (Be) formirajući $Zn_{1-x}Mg_xO$ ili $Be_xZn_{1-x}O$, dok bismo za manji energetski procep zamenili Zn sa Cd i dobili leguru $Cd_xZn_{1-x}O$. Energija LO fonona ZnO je 72 meV, što je bliže energiji LO fonona kod GaN (91 meV), i daje nadu u mogućnost realizacije terahercnih kvantnih kaskadnih lasera operativnih na sobnoj temperaturi i iznad nje [15]. Dobrim odabirom molskog udela Mg, $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ heterostrukturu mogu biti dizajnirane tako da imaju savršenu strukturu kristalne rešeteke i visinu barijere do 0.9 eV što je znatno bolje od III-nitrida i III–IV kvantnih jama, gde postoje diskontinuiteti u kristalnoj rešetci, što znatno smanjuje mobilnost elektrona. Sve ovo čini kvantne kaskadne lasere bazirane na ZnO pogodnim za optoelektronske primene u terahercnom delu spektra [11], [16].

2.2.1. Kristalna struktura

Većina složenih poluprovodnika od jedinjenja II-VI grupe elementa se kristalizuje u kubičnu ili heksagonalnu vurcitnu strukturu gde je svaki anjon okružen sa četiri kajtona u uglovima tetraedra, i obrnuto. ZnO je II-VI složeni poluprovodnik čiji se jonicitet nalazi na granici između kovalentnih i jonskih poluprovodnika. Pri sobnim temperaturama, termodinamički stabilan oblik je vurcit, prikazan na Slici 2.1.



Slika 2.1 - ZnO vurcitna jedinična čelija gde je Zn označen žutom a O sivom bojom. Prikazana je tetraedarska koordinacija za oba tipa atoma. Preuzeto iz [8] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/>).

Vurcitnu strukturu karakteriše heksagonalna jedinična čelija sa dva dimenzionala parametra koja u idealnoj strukturi imaju odnos $c/a = \sqrt{8/3}$, dok su primitivni vektori:

$$\vec{a} = a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right), \quad \vec{b} = a \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right), \quad \vec{c} = a \left(0, 0, \frac{c}{a} \right) \quad (2.1)$$

Neke osobine koje razlikuju ZnO od ostalih poluprovodnika i oksida a koje su nam od interesa su:

- Direktan širok energetski procep: Energetski procep ZnO je 3.44 eV, pri niskim temperaturama, a 3.37 eV pri sobnoj temperaturi [10], [17] što je niže od vurcitnog GaN čije vrednosti su 3.50 eV i 3.44 eV, respektivno [18].
- Velika energija vezivanja ekscitona: Energija vezivanja slobodnog ekscitona u ZnO je 60 meV [19], u odnosu na 25 meV kod GaN [20]. Ovako velika energija vezivanja ukazuje na to da se emisija eksitona u ZnO može efektivno održati pri sobnoj i višim temperaturama.
- Veliki nelinearno-optički koeficijent: ZnO kristalni, a posebno tanki filmovi, ispoljavaju nelinearne osobine drugog i trećeg reda pogodne za nelinearne optičke naprave.

2.2. Galijum Oksid

2.2.1. Uvod

Galijum oksid (Ga_2O_3) je poluprovodnik sa širokim energetskim procepom od 4.8 eV, visokim probojnim poljem od 8 MV/cm [21] i visokom termičkom stabilnošću. Ovaj materijal je perspektivan za širok spektar primena, kao što su elektronski uređaji velike snage i ultraljubičasti (UV) fotodetektori. U proteklih nekoliko godina napravljen je značajan iskorak u procesu narastanja visokokvalitetnih kristala i tankih filmova i optimizacije uređaja za energetsku elektroniku i solarnu

UV detekciju. Međutim, ostaju mnogi izazovi, uključujući poteškoće u dopiranju p-tipa, pozadinsko dopiranje, prisustvo defekata/nečistoća itd. [22] Dostupan je u vidu velikih pojedinačnih kristala [23], pogodan za visokokvalitetni epitaksijalni rast tankog filma metal-organskom hemijskom depozicijom iz parnog stanja (MOCVD) [24],[25] i epitaksijom molekularnim snopom (MBE) [26], može se lako dopirati n-tipom primesa, a inženjering energetskog procepa može se postići mešanjem sa In i Al, dodajući veliku fleksibilnost dizajnu uređaja. Modulaciono dopiranje $(Al_xGa_{1-x})_2O_3/Ga_2O_3$ heterostruktura može se koristiti za odvajanje ionizovanih donora u $(Al_xGa_{1-x})_2O_3$ od elektrona u Ga_2O_3 [27], što dovodi do poboljšanja mobilnosti elektrona na oko $500 \text{ cm}^2\text{V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ [28] suzbijanjem rasejanja na ionizovanim primesama. Energetski procep legure $(Al_xGa_{1-x})_2O_3$ i offset zone između $(Al_xGa_{1-x})_2O_3$ i Ga_2O_3 su ključni parametri u dizajnu uređaja i tek treba da se utvrde.

Ga_2O_3 i $(Al_xGa_{1-x})_2O_3$ može da se napravi u više kristalnih struktura gde su najčešće monoklinska (β) i korundumska (α) faza. Debeli slojevi i tanki filmovi $\beta-(Al_xGa_{1-x})_2O_3$ dobijeni su sintezom sagorevanja rastvora, putem pulsne laserske depozicije (PLD) [29], i epitaksijom molekularnim snopom uz pomoć plazme kiseonika [30], dok je $\alpha-(Al_xGa_{1-x})_2O_3$ narastan na safirnim supstratima putem CVD za procenat Al do 81 % [31]. Energetski procep $(Al_xGa_{1-x})_2O_3$ za određen ideo Al je poznat [32],[33], ali offset zona između Ga_2O_3 i $(Al_xGa_{1-x})_2O_3$, je još uvek nepoznat jer je znatno teže doći do eksperimentalnih rezultata. Za proračune u 8. poglavlju ove disertacije najviše su od interesa optički unutarzonski prelazi sa primenama kod emitera/fotodetektora infracrvenog zračenja od $\beta-(Al_xGa_{1-x})_2O_3/Ga_2O_3$ struktura zasnovanih kvantnim jamama [34]. Za primene u optoelektronici interesantne su i RTD na bazi $\beta-(Al_xGa_{1-x})_2O_3/Ga_2O_3$, koje su teorijski analizirane u [35].

2.2.2. Poluprovodničke karakteristike Ga_2O_3

Postoji najmanje pet različitih polimorfa za Ga_2O_3 , uključujući monoklinsku fazu ($\beta-Ga_2O_3$), romboedarsku fazu ($\alpha-Ga_2O_3$), defektnu fazu spinela ($\gamma-Ga_2O_3$), kubičnu fazu ($\delta-Ga_2O_3$), i heksagonalnu fazu ($\epsilon-Ga_2O_3$). Među ovim polimorfima, $\beta-Ga_2O_3$ je najstabilnija u ambijentalnim sredinama i, samim tim, najopsežnije proučavana faza. Termodinamička stabilnost pet polimorfa je rangirana kao $\beta < \epsilon < \alpha < \delta < \gamma$. Monokristalna struktura $\beta-Ga_2O_3$ pripada prostornoj grupi $C2/m^1$, kao što je prikazano na Slici 2.2(b). Parametri kristalne strukture su $a = 12.21 \text{ \AA}$, $b = 3.04 \text{ \AA}$, $c = 5.80 \text{ \AA}$, $\beta = 103.8^\circ$, a zapremina jedinične celije je 208.85 \AA^3 . Detaljan opis kristalne strukture $\beta-Ga_2O_3$ može se naći u [36]. Jedinična celija $\beta-Ga_2O_3$ sadrži dva kristalografski različita Ga katjona i tri O anjona. Polovina Ga katjona je u iskrivljenoj tetraedarskoj koordinaciji (Ga1), a druga polovina je u iskrivljenoj oktaedarskoj koordinaciji (Ga2). Anjoni kiseonika su spakovani u iskrivljenu kubičnu strukturu sa dva trostruko koordinisana tipa (O1 i O2) i jednim četvorostruko koordinisanim tipom (O3). Zbog toga se u $\beta-Ga_2O_3$ mogu naći različita vezna okruženja: tetraedarski (Td) koordinisani Ga1 deli vezu sa jednim O1 jonom sa dužinom veze od 1.835 \AA , jednim O3 jonom sa dužinom veze od 1.833 \AA i dva O2 jona sa dužinom veze od 1.863 \AA . Oktaedarski (Oh) koordinirani Ga2 joni dele veze sa dva O1 jona sa dužinom veze od 1.937 \AA , jednim O2 jonom (1.937 \AA) i tri O3 jona (jedan sa 2.005 \AA i dva unutar bc-ravnih sa 2.074 \AA). Niska kristalografska simetrija monoklinske faze dovodi do anizotropije fizičkih, optičkih i električnih svojstava, kako je i predviđeno teorijski i eksperimentalno uočeno. Najčešće korištene kristalne ravni za primenu u uređajima i rast tankog filma su (010) i ($\bar{2}01$) ravni [22].

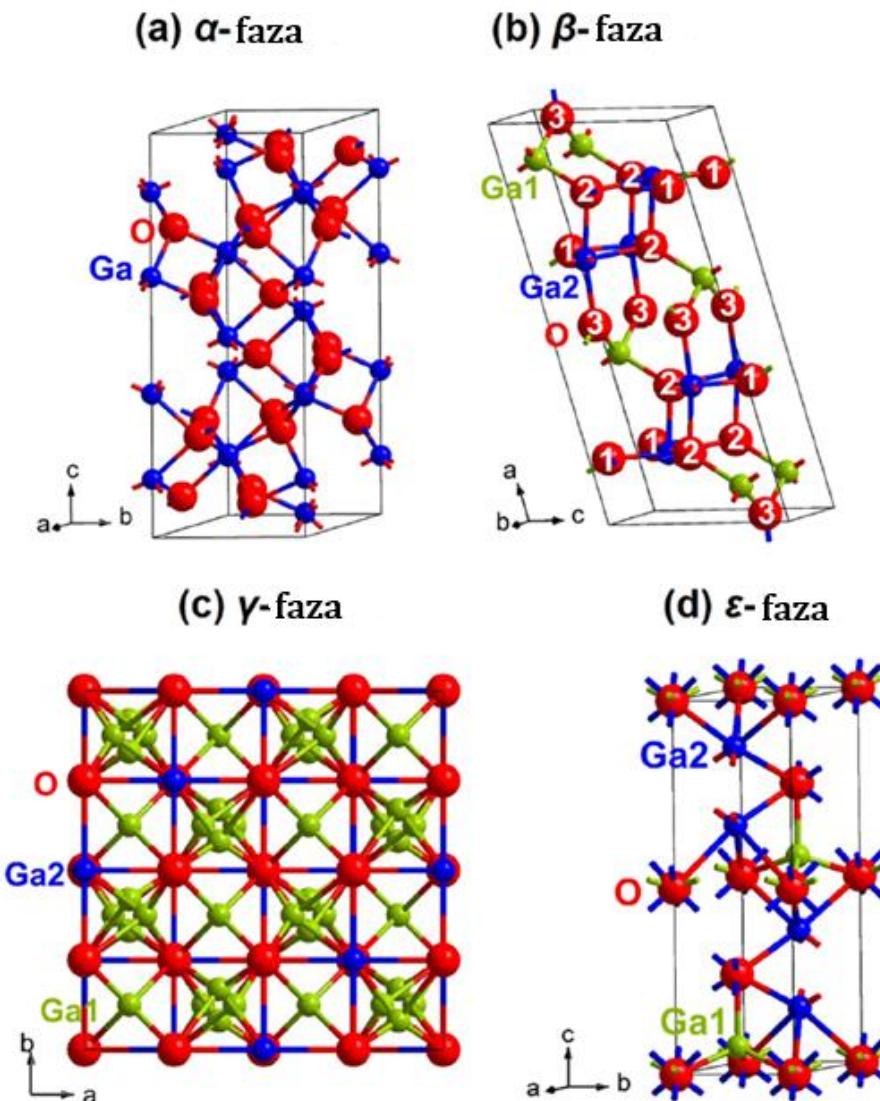
Polimorfi koji nisu β -faze su metastabilne faze i ne mogu biti narastani kao krupni kristali [22], ali mogli bi se epitaksijalno narastati kao tanki filmovi stabilizovani na supstratu. $\alpha-Ga_2O_3$ ima istu strukturu korunda kao Al_2O_3 , koji sadrži samo Oh koordinirana Ga mesta, sa parametrima rešetke od $a = 4.98 \text{ \AA}$ i $c = 13.43 \text{ \AA}$ i prostornu grupu $R\bar{3}c$ [37]. Ova struktura je zasnovana na

¹ $C2/m$ je prostorna grupa u monokliničnom kristalnom sistemu koja ima dve ose pod pravim uglom, a treća osa formira ugao različit od 90° .

heksagonalnom tesno zbijenom nizu O jona sa Ga katjonima koji ispunjavaju 2/3 centralnih Oh mesta. Visokokvalitetni epitaksijalni slojevi α -faze Ga_2O_3 dobijeni su na Al_2O_3 (0001) supstratima [38], [39], [40].

γ -faza Ga_2O_3 se sastoji od Oh i Td koordinisanog Ga u odnosu 2:1, sa prostornom grupom od $\text{Fd}\bar{3}\text{m}$, i parametrima rešetke od 8.22 \AA [41]. Tanki filmovi Ga_2O_3 γ -faze dobijeni su na Al_2O_3 i MgAl_2O_4 supstratima pomoću Mist-CVD tehnike na temperaturi rasta od 390°C – 400°C [42], pomoću PLD [43], i MBE [44].

Zagrevanjem δ - β - Ga_2O_3 na preko 500°C dobija se ε - Ga_2O_3 [45], koji ima ortorombičnu strukturu sa parametrima rešetke $a = 5.0$ – 5.1 \AA , $b = 8.7$ – 8.8 \AA , i $c = 9.2$ – 9.4 \AA . Poteškoće u narastanju, kao i neuređena priroda atoma Ga u ε fazi, dovode do poteškoća u određivanju strukture i svojstava ε - Ga_2O_3 [22].



Slika 2.2 - (a) Rombična kristalna struktura α - Ga_2O_3 nalik korundu sa samo Oh (plavom) koordinacijom Ga. (b) Monoklinska β - Ga_2O_3 kristalna struktura: Ga katjoni locirani na Td (Ga1, zelena) i Oh (Ga2, plava) koordinacija. O anjoni su spakovani u iskrivljenu kubičnu strukturu sa dva trostruko koordinisana tipa (O1 i O2) i jednim četvorostrukim koordinisanog tipa (O3). (c) Kubična defektna spinelna rešetkasta struktura γ -faze Ga_2O_3 sastoji se od Td (Ga1, zelena) i Oh (Ga2, plava) koordinisanog Ga u odnosu 1:2. (d) Ortorombna struktura ε - Ga_2O_3 . Preuzeto iz [22] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

3. REZONANTNA TUNELSKA DIODA

Rezonantne tunelske diode predstavljaju kvantne naprave koje koriste fenomen rezonantnog tunelovanja za postizanje jedinstvenih elektronskih karakteristika, uključujući negativnu diferencijalnu otpornost (eng. Negative differential resistance, NDR). Ova karakteristika omogućava RTD-ovima da rade na izuzetno visokim frekvencijama i sa visokim stepenom prilagodljivosti, što ih čini pogodnim za aplikacije u elektronici, oscilatorima i naprednim komunikacionim sistemima. RTD predstavljaju značajan otklon od konvencionalnih poluprovodničkih uređaja korišćenjem kvantomehaničkih efekata za poboljšanje performansi. Koncept rezonantnog tunelovanja prvi je predložio Leo Esaki 1950-ih [46]. Praktična realizacija RTD-a postala je izvodljiva sa napretkom u tehnikama epitaksijalnog rasta, posebno epitaksijom molekularnim snopom. Prvi eksperimentalni RTD demonstrirali su L. L. Chang, L. Esaki i R. Tsu 1974. godine, koristeći strukturu kvantne jame sa dvostrukom barijerom, u svom pionirskom radu [47] koji je postavio temelje razvoja RTD-a kao uređaja velike brzine i visoke frekvencije.

3.1. Tunelovanje kroz jednu barijeru

Tunelovanje je kvantomehanički fenomen koji dozvoljava da čestice prolaze kroz energetsku barijeru sa većim potencijalom od energije čestica, što je zabranjeno sa stanovišta klasične fizike gde čestica može savladati barijeru samo ako ima veću energiju od nje. U kvantnoj mehanici čestica ima talasnu prirodu i opisuje je talasna funkcija čestice, ψ , čiji kvadrat modula daje verovatnoću nalaženja čestice u prostoru. Pored toga, Hajzenbergov princip neodređenosti postulira da se položaj i impuls čestice ne mogu istovremeno tačno izmeriti. Ova dva svojstva manifestuju se u kvantomehaničkom tunelovanju, tako da izgleda kao da talasna funkcija čestice može obuhvatiti ceo prostor i dati nenultu verovatnoću merenja položaja čestice iza potencijalne barijere.

Polazimo od vremenski nezavisne Šredingerove jednačine u obliku:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + [V(x) - E] = 0. \quad (3.1)$$

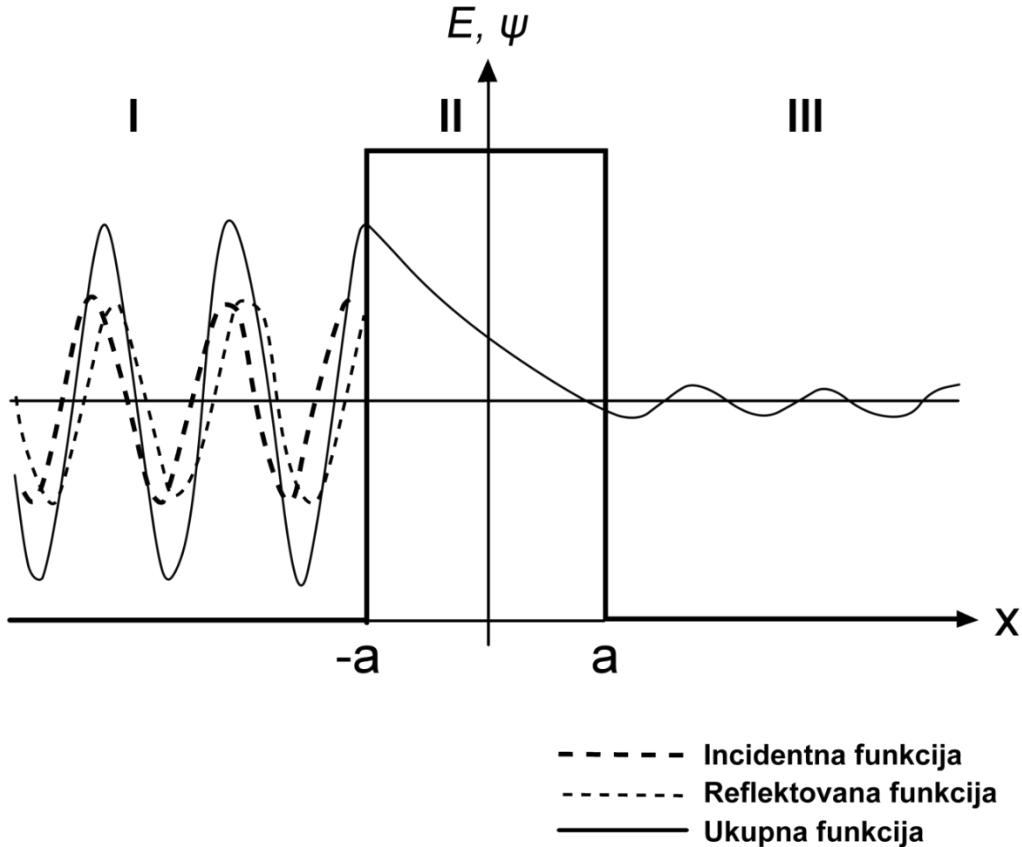
Posmatramo tri oblasti I, II i III, kao što je prikazano na Slici 3.1, u kojima rešavamo jednačinu (3.1) primenjujući osnovne osobine talasne funkcije i njenog izvoda. Oblasti I i III pripadaju slučaju kada je energija čestice E veća od potencijalne energije V , a oblast II pripada slučaju kada je E manje od V . Jednačinu (3.1) može se napisati i kao:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m(V - E)}{\hbar^2} \psi(x). \quad (3.2)$$

Talasnu funkciju tražimo u obliku $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, odakle jednačina 3.2 postaje:

$$-k^2 \psi(x) = \frac{2m(V - E)}{\hbar^2} \psi(x), \quad (3.3)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}}. \quad (3.4)$$



Slika 3.1 - Potencijalna barijera sa talasnim funkcijama.

U slučaju da je energija čestice veća od potencijala barijere, rešenje jednačine je:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (3.5)$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (3.6)$$

U slučaju da je energija čestice manja od potencijala barijere, vrednost k je imaginarna, tako da rešenja imaju oblik:

$$\psi(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, \quad (3.7)$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V - E)}{\hbar^2}}. \quad (3.8)$$

Talasna funkcija na celom domenu glasi:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < -a) \\ Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x} & (-a \leq x < a) \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & (x \geq a) \end{cases} \quad (3.9)$$

Nakon primene graničnih uslova u tačkama $x = -a$ i $x = a$ dobija se sistem:

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{ka} + De^{-ka}, \quad (3.10)$$

$$Ae^{-ika} - Be^{ika} = \frac{ik}{k} (Ce^{\kappa a} - De^{-\kappa a}), \quad (3.11)$$

$$Ce^{-\kappa a} + De^{\kappa a} = Fe^{ika} + Ge^{-ika}, \quad (3.12)$$

$$-Ce^{-\kappa a} + De^{\kappa a} = \frac{ik}{\kappa} (Fe^{ika} - Ge^{-ika}). \quad (3.13)$$

Koeficijenti A i F predstavljaju amplitudu talasa koji se kreće u pozitivnom smeru x -ose, dok B i G odgovaraju amplitudi talasa koji se kreće u negativnom smeru x -ose. Koeficijenti C i D odgovaraju opadajućoj i rastućoj eksponencijalnoj funkciji u oblasti barijere. Ako dozvolimo samo incidentne talase iz oblasti I, B možemo da definišemo kao amplitudu reflektovanih talasa od barijere, a F kao amplitudu transmitovanih talasa, dok G možemo izjednačiti sa nulom. Ostali koeficijenti ostaju isti.

Odavde sledi da koeficijent refleksije možemo definisati kao $R = \left| \frac{B}{A} \right|^2$ dok koeficijent transmisije, u sistemu bez apsorpcije snage, definišemo kao $T = 1 - R = \left| \frac{F}{A} \right|^2$. Rešavanjem sistema jednačina (3.10)-(3.13) dobijamo izraze za transmisiju i refleksiju:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V^2}{4E(V-E)} \sinh^2(2a\kappa)}, \quad (3.14)$$

$$R = \frac{1}{1 + \frac{4E(V-E)}{V^2 \sinh^2(2a\kappa)}}. \quad (3.15)$$

Iz jednačine 3.14 se vidi da je verovatnoća transmisije različita od nule kada je incidentna energija manja od visine barijere. U slučaju da je $E \ll V$, koeficijent transmisije u slučaju jedne barijere je približno $T(E) \approx \frac{16E(V-E)}{V^2} e^{-4\kappa a}$.

Rezonantno tunelovanje kroz injekcionu barijeru posebno je važno kod transporta u terahercnom kvantnom kaskadnom laseru, o čemu će biti reči u 4. i 6. poglavlju disertacije. Sada prelazimo na analizu rezonantne strukture sa dve barijere koja će biti razmatrana i u numeričkim proračunima u 8. poglavlju.

3.2. Rezonantno tunelovanje u strukturi sa dve barijere

Rezonantna tunelska dioda obično se sastoji od nedopirane kvantne jame smeštene između dva nedopirana barijerna sloja i jako dopiranih oblasti emitera i kolektora, kao što je prikazano na Slici 3.2. RTD je dakle otvoreni kvantni sistem u kome su elektronska stanja, stanja rasejanja sa kontinualnim energetskim spektrom, a ne vezana stanja (diskretan spektar). U kvantnoj jami se formiraju kvazivezana (rezonantna) stanja koja prihvataju elektrone, gde je najniže stanje označeno sa E_0 na Sl. 3.2. Do rezonantnog tunelovanja kroz dvostruku barijeru dolazi kada se energija elektrona iz emitera poklopi sa energijom kvazivezanog stanja u kvantnoj jami, E_0 . Pri nultom naponu, energije nivoa u emiteru i kvantnoj jami su fiksirane. Kada primenimo spoljašnji napon V dolazi do promene relativnog nivoa energija između emitera i kvazivezanih stanja u kvantnoj jami. Da bi došlo do rezonantnog tunelovanja, energija elektrona u emiteru mora biti poravnata sa kvazivezanim stanjima u kvantnoj jami. Primena spoljašnjeg napona podešava ovo poravnanje nivoa. Do rezonantnog tunelovanja dolazi kada E_0 dosegne kvazi-Fermijev nivo E_F^L , a prestaje kada se E_0 spusti ispod dna provodne zone emitera. U ovakvom tunelovanju komponente energije i impulsa u

transverzalnoj ravni su očuvane pošto je ovakva struktura translaciono invarijantna. Za gustinu struje tunelovanja važi sledeća relacija [48]:

$$J \propto \pi(k_F^2 + q_R^2) \propto (E_F^L - E_0), \quad (3.16)$$

gde je k_F Fermijev talasni vektor u emiteru, E_0 je energija rezonantnog stanja u kvantnoj jami, $E_F^L = E_F + E_F^L$ je lokalna Fermijeva energija u emiteru, a q_R je talasni vektor koji odgovara energiji rezonantnog stanja u odnosu na vrh provodne zone definisan kao:

$$q_R = \frac{\sqrt{2m^*(E_0 - E_C^L)}}{\hbar}. \quad (3.17)$$

Struja tunelovanja pri konačnim temperaturama data je Tsu-Esakijevom formulom:

$$J = J_R - J_L, \quad (3.18)$$

$$J_R = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty k_{||} dk_{||} \int_0^\infty dk_z e v_z \tau(E_z) f_L(k_{||}, k_z) [1 - f_R(k_{||}, k_z)], \quad (3.19)$$

$$J_L = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty k_{||} dk_{||} \int_{-\infty}^0 dk_z e v_z \tau(E_z) f_R(k_{||}, k_z) [1 - f_L(k_{||}, k_z)], \quad (3.20)$$

gde je $\tau(E_z)$ funkcija verovatnoće transmisije (koeficijent tunelovanja), a $f_{L,R}(\mathbf{k})$ Fermijeva funkcija raspodela u emiteru i kolektoru definisana kao:

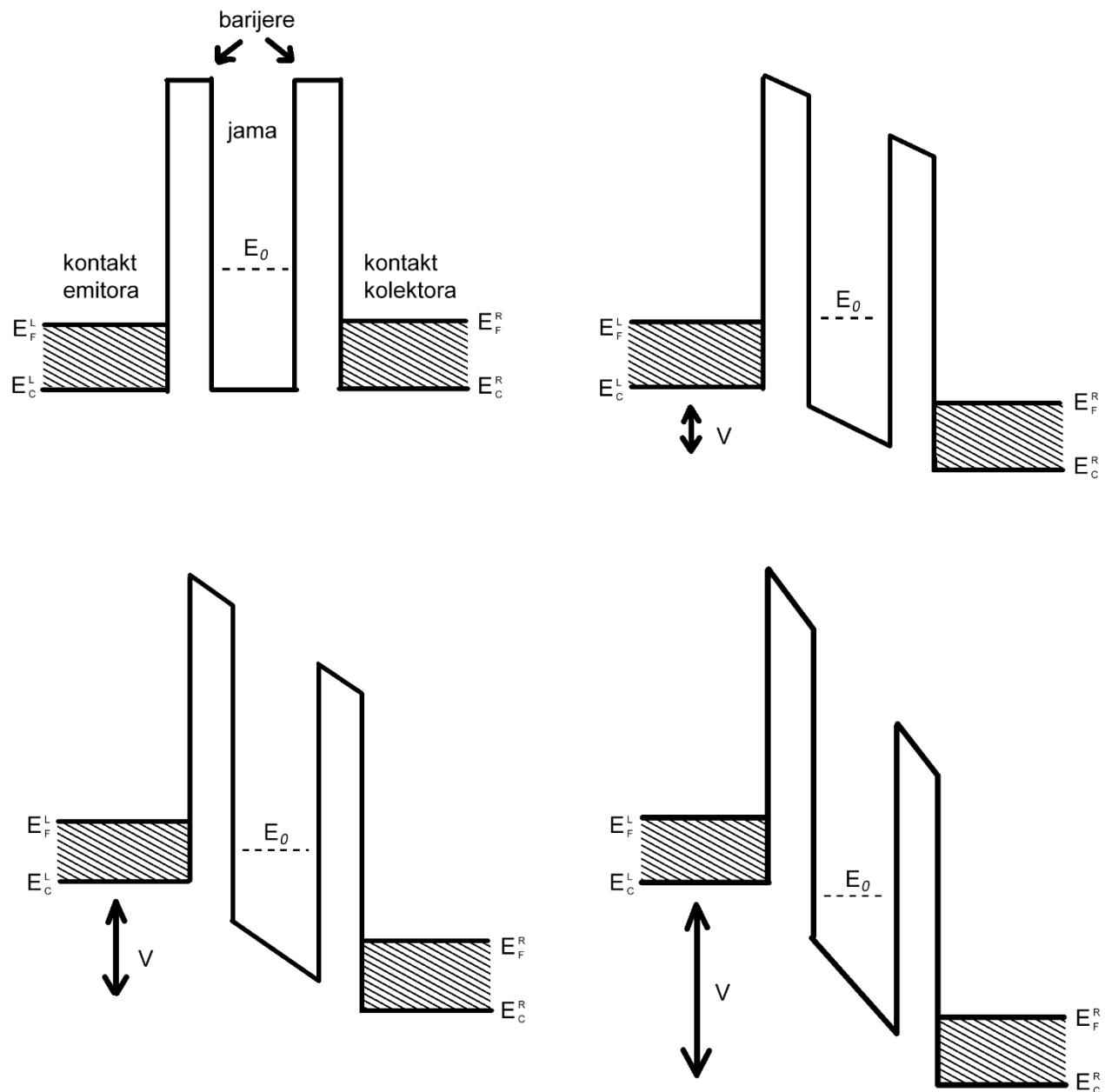
$$f_{L,R}(\mathbf{k}) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E(\mathbf{k}) - E_F^{L,R}}{k_B T}}}. \quad (3.21)$$

Zamenom izraza za brzinu elektrona u z-pravcu:

$$v_z = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_z}{dk_z}, \quad (3.22)$$

a zatim integracijom po transverzalnom talasnem vektoru $k_{||}$, dolazimo do izraz za gustinu struje [48],[49]:

$$J = \frac{e k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dE_z m^* \tau(E_z) \ln \left[\frac{1 + e^{\frac{E_F^L - E_z}{k_B T}}}{1 + e^{\frac{E_F^R - E_z}{k_B T}}} \right]. \quad (3.23)$$



Slika 3.2 - Profil provodne zone RTD sa dve barijere za različite napone: nulti napon (gore levo), napon praga (gore desno), rezonanca (dole levo), van rezonance (dole desno). E_F^L i E_F^R su lokalne energije Fermijevog nivoa u emiteru i kolektoru, a E_C^L i E_C^R su energije dna provodne zone u emiteru i kolektoru. Reprodukovano iz [48] uz dozvolu davaoca licence preko PLSclear-a.

Treba naglasiti da je izraz za gustinu struje dobijen iz koherentnog transportnog modela koji ne uzima u obzir struju rasejanja. Kada posmatramo dopirane strukture, jednostavna Fermi-Dirakova funkcija raspodele nekada nije dovoljna za opis akumulinanih elektrona u jami i onda je obavezno korišćenje kompleksne neravnotežne transportne teorije [48]. Ukoliko se držimo jednostavnijeg, koherentnog modela transporta, koncentracija elektrona se može izraziti kao:

$$\begin{aligned}
 n(z) &= 2 \sum_{k_z>0} |\psi_{k_z}(z)|^2 f_L(\mathbf{k}) + 2 \sum_{k_z<0} |\psi_{k_z}(z)|^2 f_R(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{k_B T}{2\pi^2 \hbar^2} \left(\int_0^\infty |\psi_{k_z}(z)|^2 m^* \ln \left\{ 1 + e^{\frac{E_F^L - E_z}{k_B T}} \right\} dk_z \right. \\
 &\quad \left. + \int_{-\infty}^0 |\psi_{k_z}(z)|^2 m^* \ln \left\{ 1 + e^{\frac{E_F^R - E_z}{k_B T}} \right\} dk_z \right), \tag{3.24}
 \end{aligned}$$

odnosno, kada se pređe na integraciju po energiji E_z dobija se izraz [49]:

$$\begin{aligned}
 n(z) &= \frac{k_B T}{2^{\frac{3}{2}} \pi^2 \hbar^3} \int_{E_c}^\infty |\psi(z, E)|^2 (m^*)^{\frac{3}{2}} E^{-\frac{1}{2}} \ln \left[1 + e^{\frac{E_F - E}{k_B T}} \right] dE \\
 &\quad + \frac{k_B T}{2^{\frac{3}{2}} \pi^2 \hbar^3} \int_{E_c - eV_R}^\infty |\psi(z, E)|^2 (m^*)^{\frac{3}{2}} E^{-\frac{1}{2}} \ln \left[1 + e^{\frac{E_F - E - eV_R}{k_B T}} \right] dE. \tag{3.25}
 \end{aligned}$$

Raspodela nanelektrisanja $n(z)$ povezana je sa samosaglasnim Hartrijevim potencijalom koji se nalazi rešavanjem Šredinger-Poasonovog sistema jednačina o čemu će više biti reči u narednim poglavljima.

4. KVANTNI KASKADNI LASERI

Kvantni kaskadni laser je naprava kod koje se emisija fotona odvija preko kvantnih prelaza između elektronskih stanja stvorenih kvantnim konfiniranjem u ultratankim naizmeničnim slojevima poluprovodnika koji formiraju kvantne jame [6]. Energija emitovanog fotona može biti skrojena po želji promenom širina jama i barijera (drugim rečima kvantnim inženeringom), omogućavajući kontrolu talasne dužine emisije u širokom rasponu. Treba naglasiti da se ovaj pristup u potpunosti razlikuje od onog koji je primjenjen kod tradicionalnih diodnih lasera u poluprovodnicima, gde je podešavanje talasne dužine emisije uslovljeno projektovanjem energetskog procepa sastavnih materijala. Koncept KKL-a prvi su predložili sovjetski fizičari Rudolf Kazarinov i Robert Suris još 1971. godine [50]. Međutim, bilo je potrebno da prođe više od dve decenije od njihovog teorijskog rada, da bi 1994. godine prvi KKL koji je radio na talasnoj dužini od $4.2 \mu\text{m}$ demonstrirali J. Faist, F. Capasso i njegovi saradnici iz Bell laboratorija [51]. Ovaj probaj omogućen je napretkom u epitaksijski molekularnim snopom, metodi koja je omogućila narastanje ultratankih poluprovodničkih slojeva [52].

U naredne tri decenije KKL se neprestano razvijao da bi danas predstavlja glavni izvor koherentnog zračenja na čipu, u srednjem infracrvenom (eng. Mid Infra-red, MIR) i terahercnom (THz) delu spektra. Razvoj KKL-a doveo je do napretka na više polja laserske fizike i njenih primena, a prati ga konstantan rast istraživačkih grupa i kompanija širom sveta koje se bave ovim problemima. U nastavku će biti dat kratak pregled usavršavanja KKL-a, od nastanka do sada, što je lepo predstavljeno u skorašnjoj publikaciji povodom 30 godina od nastanka, na konferenciji u Cirihi 2024. godine [53].

Prva decenija razvoja KKL-a predstavljala je istraživačku fazu koju su obeležila sledeća značajna tehnološka dostignuća: demonstriran je prvi KKL sa distribuiranom povratnom spiegom na sobnoj temperaturi [54], prvi MIR KKL-a koji radi u CW režimu [55], prvi THz KKL [56], kao i prve primene u senzorici [57], spektroskopiji visoke rezolucije [58] i komunikacijama u slobodnom prostoru [59]. Inženering materijalnog pojačanja, omogućio je stvaranje proizvoljno oblikovanog, ultra-širokopojasnog spektra pojačanja [60] koji je kasnije primjenjen kod lasera sa eksternim šupljinama i laserskih nizova [53].

Drugu deceniju razvoja obeležile su optimizacija radnih uslova i proširenje primena. Naime, tokom 2000-ih postignute su velike snage i visoke performance i MIR i THz KKL-a. Izlazne snage koje u velikoj meri prevazilaze 1 W i efikasnost energetske konverzije (eng. wall-plug efficiency, WPE) od 27% postignute su korišćenjem metoda optimizovanog narastanja [61]. Postignut je i napredak u spektroskopiji visoke preciznosti i senzorici [62]. Kada su u pitanju primene THz KKL-a, koriste se kao lokalni oscilatori za heterodinsku spektroskopiju kod astronomskih posmatranja [63], THz obradu slike (imaging) u realnom vremenu [64], biomedicinsku obradu slike [65], a demonstrirano je i aktivno zaključavanje modova sa rezolucijom vremenski zavisne amplitude polja [66].

Tokom poslednje decenije razvoja KKL-a, postali su komercijalno dostupni multimodni, monomodni, široko podesivi i laseri velike snage u opsegu talasnih dužina $4\text{-}12 \mu\text{m}$. Istraživanje je sve više usmereno ka frekvencijskim češljevima (eng. frequency combs - FC) koji su doživeli izuzetan napredak. Prvi samostartujući (eng. self-starting) frekvencijski modulisan (FM) - češljaj u MIR demonstriran je 2012. [67], a dve godine kasnije i u THz delu spektra [68], da bi se zatim istraživanje razgranalo na nekoliko zanimljivih pravaca, od primene kod spektroskopije sa dvostrukim češljjem [69], [70], do posmatranja samostartujućih optičkih solitona u različitim prstenastim rezonatorima (Nozaki-Bekki soliton i disipativni Kerovi soliton) [71]. Nedavno su terahercne naprave dostigle rad na temperaturama na kojima je dostupno termoelektrično hlađenje [72], [73], pokazujući impresivan propusni opseg i emisioni spektar širine preko jedne oktave (najveća frekvencija u spektru je barem dvostruko veća od najniže) sa jednog uređaja [74]. Iako je ovo veliki napredak, i dalje se traga za rešenjima koja bi obezbedila rad na sobnim temperaturama, kao što je to moguće za MIR kvantne kaskadne lasere. Zato se osim GaAs/AlGaAs za THz KKL

istražuju drugi sistemi materijala kao što su na primer InGaAs/GaAs, AlGaN/GaN, InGaN/GaN, ZnMgCdSe/ZnCdSe, ZnMgSe/ZnSe, ZnMgO/ZnO, SiGe/Si [11],[75]. Treba napomenuti da su napravljeni laseri koji rade na sobnoj temperaturi, na principu nelinearnog efekta konverzije razlike frekvencija gde se za konverziju koriste dva MIR KKL-a. Međutim ovi laseri imaju jako nisku izlaznu snagu i još neke probleme [76].

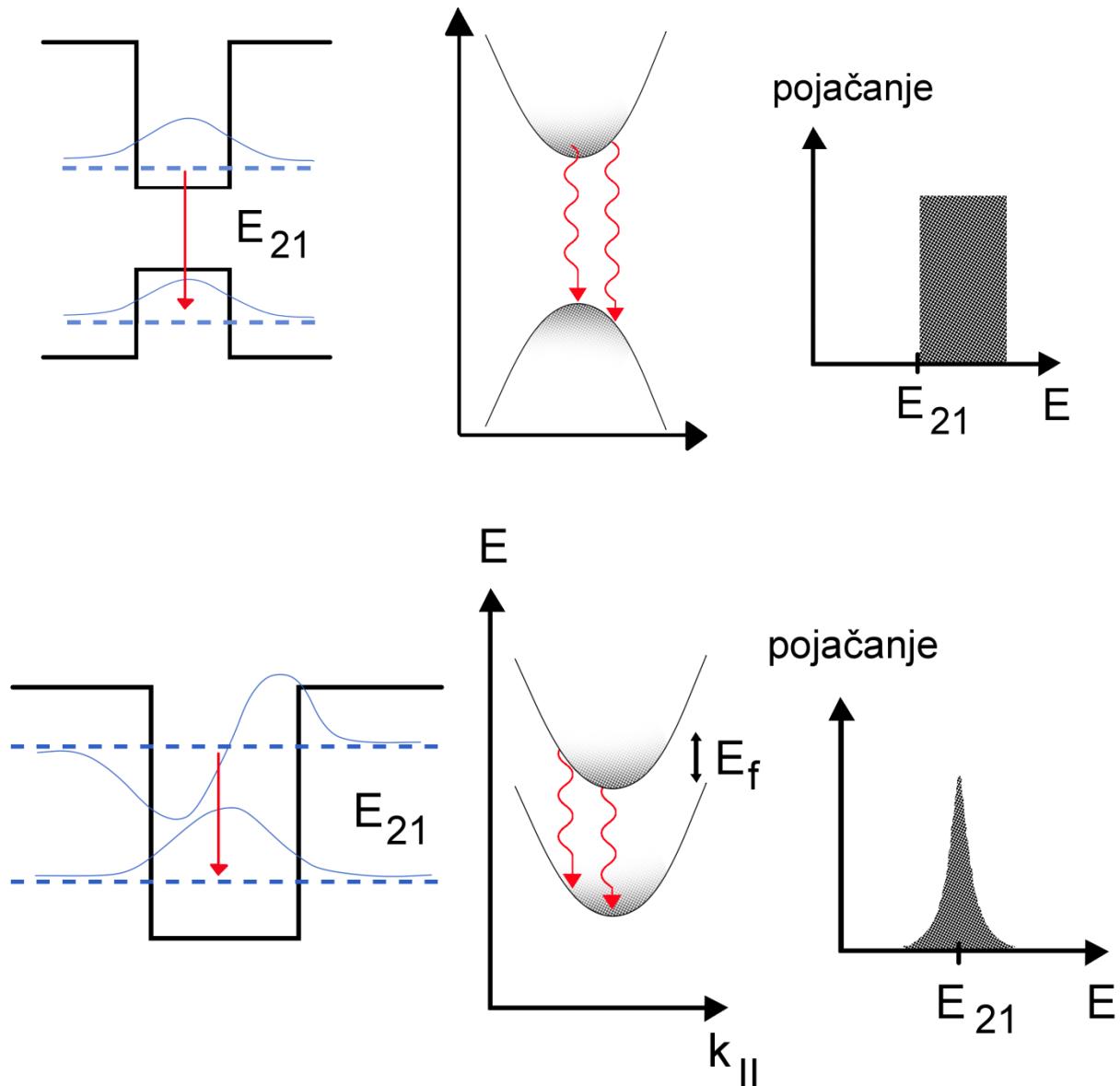
Istraživačka oblast MIR i THz nanoskopije značajno je profitirala postojanjem KKL-a na različitim talasnim dužinama [77]. Uspešno narastanje KKL-a sa veoma dobrim performansama na silicijumskom supstratu [78] otvara mogućnost za integraciju sa silicijumskom fotonikom i CMOS platformom.

Aktuelne teme o kojima se najviše raspravlja na kongresima u okviru KKL istraživačke zajednice su samostartujući FM češljevi u KKL-ovima, kao i razvoj detektora i modulatora velike brzine baziranim na unutarzonskim prelazima koji bi našli različite primene, od senzora i spektroskopije do telekomunikacije u slobodnom prostoru. Pokazalo se da ultrabrza priroda pojačanja KKL-a igra centralnu ulogu u postizanje novih režima aktivnog zaključavanja modova poput frekvencijskog češlja na bazi kvantnog hoda (eng. quantum walk comb) [79].

Verovatno jedan od najupečatljivijih aspekata kvantnog kaskadnog lasera je činjenica da ovaj uređaj radi uprkos izuzetno kratkom vremenu života gornjeg laserskog stanja. Zaista, uspeh KKL-a je pokazao da postizanje veoma niskih gubitaka u talasovodu i dobro optičko konfiniranje u sistemu sa velikim optičkim dipolnim matričnim elementom mogu u velikoj meri ublažiti problem kratkog vremena života nosilaca na gornjem laserskom nivou. Štaviše, veoma kratak životni vek gornjeg stanja omogućava stabilizaciju širokog frekvencijskog češlja u uređaju sa aktivnim zaključavanjem modova. Logično je očekivati da KKL osim svojih očiglednih primena kao izvor zračenja u MIR i THz spektru, nađe nove primene u laserskoj fizici, i u drugim sistemima poluprovodničkih materijala [53].

4.1. Unutarzonski prelazi

Kvantni kaskadni laser funkcioniše na osnovu unutarzonskih prelaza, između podzona u kvantnim jamama. Za razliku od tradicionalnih poluprovodničkih lasera, gde je emisija fotona rezultat rekombinacije elektrona iz provodne i šupljine iz valentne zone, KKL koristi niz kvantnih jama i barijera stvorenih korišćenjem različitih poluprovodničkih materijala. Elektroni se injektuju u gornju podzonu kvantne jame i potom prelaze u donju podzonu, emitujući tokom tog procesa foton. Emitovani foton ima energiju koja odgovara razlici energija između podzona. "Kaskada" u kvantnom kaskadnom laseru se odnosi na sekvencijalnu prirodu procesa emisije fotona. Nakon što elektron emituje foton, prolazi kroz barijeru do sledeće kvantne jame, gde može da emituje drugi foton. Ovaj proces se ponavlja kroz više faza, omogućavajući jednom elektronu da proizvede veliki broj fotona, čime se povećava efikasnost lasera [80]. Ovaj kaskadni mehanizam je definišuća karakteristika KKL-a, po čemu se razlikuju od drugih tipova poluprovodničkih lasera, što je ilustrovano na Slici 4.1.



Slika 4.1 - Šematski prikaz razlike principa rada između diodnog/međuzonskog lasera (gore) i kvantnog kaskadnog tj. unutarzonskog lasera (dole). Adaptirano iz [81].

Elektron može promeniti svoje stanje bilo optičkim prelazima putem apsorpcije ili emisije fotona ili nekim mehanizmom rasejanja. Prelaz između inicijalnog stanja i i finalnog stanja f dešava se brzinom - određenom Fermijevim zlatnim pravilom [82]:

$$W_{if} = \frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{H}'(t) | i \rangle|^2 \rho(E_f - E_i \pm \hbar\omega), \quad (4.1)$$

gde je $\hat{H}'(t)$ Hamiltonijan perturbacije zavisne od vremena koji opisuje spregu sistema sa elektromagnetskim poljem, a ρ je gustina stanja. Prema selepcionim pravilima, samo komponenta polja u pravcu narastanja (z) dovodi do prelaza. U dipolnoj aproksimaciji je $\hat{H}'(t) = ez\mathcal{E}_z$, i jednačina (4.1) postaje:

$$W_{if} = \frac{\pi e^2}{2\hbar} \mathcal{E}^2 |z_{if}|^2 \Delta N \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (4.2)$$

gde je z_{if} dipolni matrični element, a ΔN je razlika koncentracija između inicijalnog i finalnog stanja. Ovako definisan izraz može se koristiti i za apsorpciju i za stimulisaniu emisiju koju

dobijamo kao $\pm \hbar\omega \frac{W_{if}}{I}$, gde je I intenzitet povezan za električnim poljem \mathcal{E} . U slučaju inverzne naseljenosti (većinska naseljenost na gornjem nivou) odgovarajuće pojačanje (negativna apsorpcija) ima oblik [80]:

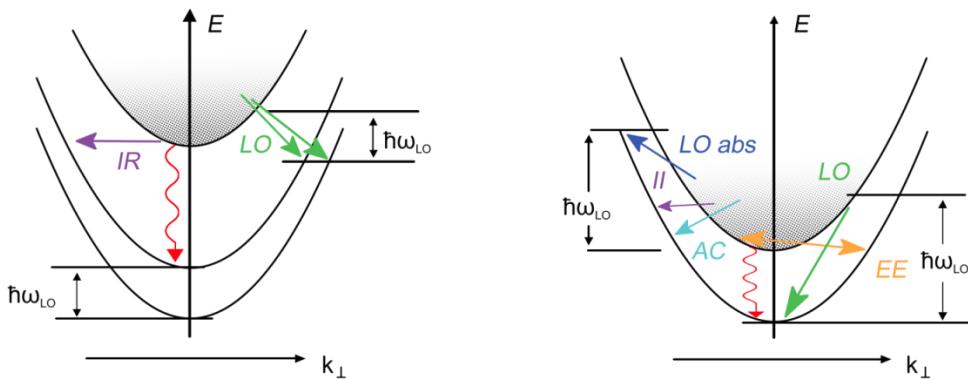
$$g = \frac{e^2}{\hbar\epsilon_0 c n_r} \hbar\omega |z_{if}|^2 \frac{\Delta N_s}{L_p} \frac{\gamma}{(E_{if} - \hbar\omega)^2 + \gamma^2}, \quad (4.3)$$

gde je ΔN_s razlika površinskih koncentracija, L_p je dužina apsorpcije, a delta funkcija je zamenjena normalizovanim Lorencijanom poluširine γ kako bi se u obzir uzelo realno širenje linije usled raznih mehanizama rasejanja.

Spontana emisija dobija se korišćenjem sekundarne kvantizacije i njena brzina data je izrazom [80]:

$$\omega_{spont} = \frac{e^2 n_{refr} z_{if}^2 E_{if}^3}{3 \hbar^4 \epsilon_0 c^3}. \quad (4.4)$$

Od svih mogućih mehanizama neradijativnih rasejanja, rasejanje elektrona na longitudinalnim optičkim (LO) fonomima najvažnije je za rad kvantnog kaskadnog lasera zbog svog izuzetno kratkog vremenskog trajanja (emisija LO fonona $\sim 0,5$ ps, apsorpcija LO fonona $\sim 2 - 5$ ps) koje se koristiti za postizanje inverzne naseljenosti. Ostali mehanizmi koji se uzimaju u obzir prilikom modelovanja su elektron-elektron (EE) rasejanje ($\sim 5 - 40$ ps), rasejanje na jonizovanim primesama (eng. ionized impurities, II $\sim 10 - 30$ ps), i rasejanje na neravninama međuspoja (eng. interface roughness scattering, IR $\sim 10 - 30$ ps) i rasejanje na akustičnim fonomima (AC, ~ 300 ps). Razlikujemo dva slučaja, prikazana na Sl. 4.2 u zavisnosti od toga da li je energija prelaza E_{if} veća (MIR KKL, leva slika), ili manja (FIR/THz KKL, desna slika) od energije LO-fonona $\hbar\omega_{LO}$ što onda definiše koliko određeni mehanizam rasejanja utiče na transportne karakteristike [82]. Kako je vreme života spontane emisije ($10 - 100$ ns) nekoliko redova veličine veće od vremena rasejanja, efikasnost zračenja je veoma loša ($10^{-4} - 10^{-5}$) i ne dozvoljava kvantne kaskadne svetleće diode sa velikom efikasnošću. U narednim potpoglavlјima biće detaljnije predstavljeni neki od opisanih mehanizama rasejanja u KKL-u. Za opis svih mogućih mehanizama rasejanja i detaljni matematički tretman čitaocu se preporučuje da pogleda [80], [83].



Slika 4.2 - Mehanizmi rasejanja između podzona koji se javljaju u srednjem infracrvenom (levo) i dalekom infracrvenom/ THz (desno) sistemu. Prikazana su tipična rasejanja kao što su rasejanje na LO fonomima, elektron-elektron rasejanje, rasejanje na jonozovanim primesama, rasejanje na neravninama međuspoja i rasejanje na akustičnim fonomima. Adaptirano iz [82] uz dozvolu (<https://rightsstatements.org/page/InC-NC/1.0/?language=en>).

4.2. Rasejanje nosilaca na longitudinalnim optičkim fononima

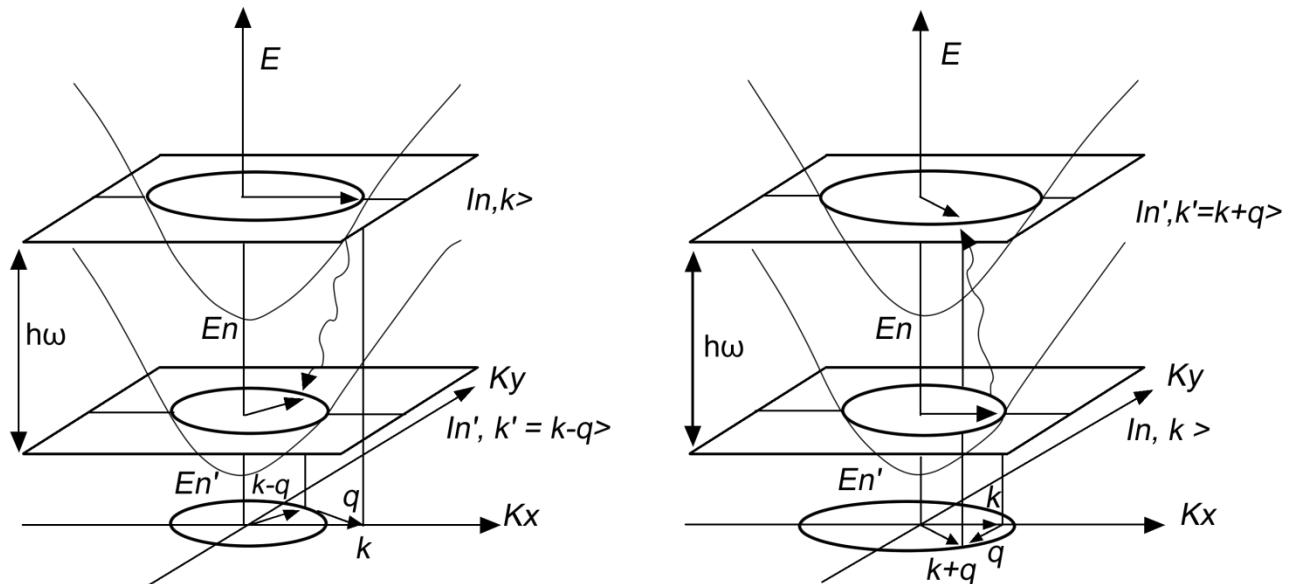
Hamiltonijan interakcije elektrona i fonona moda s ima oblik [84]:

$$H_{e-ph} = -e \sum_q \frac{1}{\sqrt{A}} e^{iq\rho} \phi_s(z) (a_{-q}^\dagger + a_q), \quad (4.5)$$

gde je A površina stukture u x - y ravni, \mathbf{q} transverzalni talasni vektor elektrona, ρ dvodimenzionalni vektor položaja, $\frac{1}{\sqrt{A}} e^{iq\rho} \phi_s(z)$ funkcija elektrostatičkog potencijala za fononski mod s , a $a_{\mathbf{q}}^\dagger (a_{\mathbf{q}})$ operator kreacije (anihilacije) fonona. Kao što je prikazano na Slici 4.3, pri emisiji elektron iz gornje podzone sa transverzalnim talasnim vektorom \mathbf{k} može emitovati fonon i spustiti se na jedno od dostupnih finalnih stanja u donjoj podzoni. U slučaju apsorpcije, elektron iz donje podzone prelazi u neko od stanja na ekvienergetskom krugu u gornjoj podzoni, pritom apsorbujući fonon. Verovatnoća prelaza u jedinici vremena iz početnog kvantnog stanja $|n, \mathbf{k}\rangle$ u konačno stanje $|n', \mathbf{k}'\rangle$ data je Fermijevim zlatnim pravilom:

$$W_{n,n'}^{\{e\}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n' \mathbf{k}', N_q \pm 1 | H_{e-ph} | n \mathbf{k}, N_q \rangle|^2 \times \delta(E_{n'} + E_{\mathbf{k}'} \pm \hbar\omega - E_n - E_{\mathbf{k}}), \quad (4.6)$$

gde su E_n i $E_{n'}$ su energije dna odgovarajućih podzona, \mathbf{k} i \mathbf{k}' transverzalni vektori inicijalnog i finalnog stanja, $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ je energija usled kretanja u transverzalnoj ravni, ω je frekvencija datog moda fonona, a $N_q = \frac{1}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)}$ je populacija fonona prema Boze-Ajnštajnovoj raspodeli.



Slika 4.3 - Šematski prikaz emisije (levo) i apsorpcije (desno) fonona usled prelaska elektrona između odgovarajućih početnih i finalnih stanja. Adaptirano iz [84] uz dozvolu izdavača AIP Publishing.

Brzine emisije i apsorpcije su istog reda i imaju sličnu energetsku zavisnost u ravni, tako da za data stanja stanja $|n, \mathbf{k}\rangle$ i $|n', \mathbf{k}'\rangle$ važi relacija:

$$\frac{W_{n,n'}^e(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{W_{n,n'}^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} = \frac{N_q + 1}{N_q} = e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}. \quad (4.7)$$

Kada je energetsko rastojanje između podzona manje od energije fonona, da bi došlo do emisije fonona elektron mora da poseduje određenu transverzalnu kinetičku energiju E_k , dok apsorpcija uvek može da desi kada je $E_{n'} - E_n \leq \hbar\omega$. Ako je energetsko rastojanje između podzona veće od energije fonona, onda emisija uvek može da se desi dok apsorpcija zahteva određenu početnu transverzalnu kinetičku energiju. Fokusirajmo se prvo na proces emisije fonona. Talasnu funkciju elektrona možemo zapisati kao [84]:

$$|n, \mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}} \psi_n(z). \quad (4.8)$$

Zanemarujemo efekat konfiniranja kinetičke energije i zato u izrazu (4.8) možemo da napišemo ψ_n nezavisno od k . Hamiltonian electron-fononske interakcije sada zapisujemo kao:

$$H_{e-ph} = \sum_q \frac{1}{\sqrt{A}} e^{iq\rho} h(q, z) (a_{-\mathbf{q}}^\dagger + a_{-\mathbf{q}}), \quad (4.9)$$

gde je $h(q, z) = -e\phi(q, z)$. Brzina emisije je odavde:

$$W_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} (N_q + 1) |F(q)|^2 \delta(E_{n'} + E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \hbar\omega - E_n - E_k), \quad (4.10)$$

gde je $F(q) = \int dz h(q, z) \psi_n^* \psi_{n'}$ i važi zakon održanja impulsa u ravni $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{q}$. Sumiranjem po svim vrednostima \mathbf{q} dobijamo brzinu emisije elektrona iz početnog stanja $|n, \mathbf{k}\rangle$ na nižu poziciju n' :

$$W_{n,n'}(\mathbf{k}) = \sum_q W_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{q}). \quad (4.11)$$

Zbog zakona održanja energije neki prelazi su zabranjeni, tako da ako je $E_k < \hbar\omega' \equiv \hbar\omega - (E_n - E_{n'})$ i $\omega' > 0$ odnosno krajevi dveju podzona su bliže nego energija fonona i elektron ne poseduje dovoljnu inicijalnu kinetičku energiju tako da nema dostupnih finalnih stanja, odnosno taj proces je zabranjen.

Kada je $\omega' > 0$ i $E_k > \hbar\omega'$ onda važi [84]:

$$W_{n,n'}(\mathbf{k}) = \frac{A}{4\pi^2} \frac{2\pi}{\hbar} (N_q + 1) \int_{-\theta_{max}}^{\theta_{max}} d\theta \frac{2m}{\hbar^2} \times \frac{|F(q_+)|^2 q_+ + |F(q_-)|^2 q_-}{|q_+ - q_-|}, \quad (4.12)$$

gde je:

$$q_\pm(\mathbf{k}) = k \cos\theta \pm \sqrt{k^2 \cos^2\theta - \frac{2m}{\hbar} \omega'}, \quad (4.13)$$

$$\theta_{max} = \cos^{-1} \left(\sqrt{\frac{2m\omega'}{\hbar k^2}} \right), \quad (4.14)$$

Kada je $\omega' < 0$ važi:

$$W_{n,n'}(\mathbf{k}) = \frac{A}{4\pi^2} \frac{2\pi}{\hbar} (N_q + 1) \int_0^{2\pi} d\theta \frac{2m}{\hbar^2} \frac{|F(q_+)|^2 q_+}{q_+}. \quad (4.15)$$

Analogno za proces apsorpcije, ako zamenimo $\omega \rightarrow -\omega$, $\omega' \rightarrow -\omega'$, $N_q + 1 \rightarrow N_q$, i $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$, dobijamo:

$$W_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} N_q |F(q)|^2 \delta(E_{n'} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega - E_n - E_{\mathbf{k}}). \quad (4.16)$$

Kada je $E_k < -\hbar\omega'$ i $\hbar\omega' \equiv \hbar\omega(E_{n'} - E_n) < 0$ onda nema dostupnih finalnih stanja i proces apsorpcije nije moguć.

Za $\omega' < 0$ i $E_k > -\hbar\omega'$ važi [84]:

$$W_{n,n'}(\mathbf{k}) = \frac{A}{4\pi^2} \frac{2\pi}{\hbar} N_q \int_{-\theta_{max}}^{\theta_{max}} d\theta \frac{2m}{\hbar^2} \times \frac{|F(q_+)|^2 q_+ + |F(q_-)|^2 q_-}{|q_+ - q_-|}, \quad (4.17)$$

gde je:

$$q_{\pm}(\mathbf{k}) = k \cos\theta \pm \sqrt{k^2 \cos^2\theta + \frac{2m}{\hbar} \omega'}, \quad (4.18)$$

$$\theta_{max} = \cos^{-1} \left(\sqrt{-\frac{2m\omega'}{\hbar k^2}} \right), \quad (4.19)$$

Za $\omega' > 0$ važi:

$$W_{n,n'}(\mathbf{k}) = \frac{A}{4\pi^2} \frac{2\pi}{\hbar} N_q \int_0^{2\pi} d\theta \frac{2m}{\hbar^2} \frac{|F(q_+)|^2 q_+}{q_+}. \quad (4.20)$$

Aleternativna izvođenja se mogu naći u 1. poglavlju knjige [6] ili u knjizi [80].

4.3 Rasejanje nosilaca na neravninama međuspoja

Jedan od mehanizama elastičnog rasejanja koje treba uzeti u obzir prilikom modelovanja transporta KKL-a, posebno u srednjem infracrvenom spektru, jeste rasejanje nosilaca na neravninama međuspoja (može se prevesti i kao hrapavost interfejsa) nastalih usled procesa narastanja slojeva. Ovaj tip rasejanja je u velikoj meri odgovoran za širenje linije kod unutarzonskih prelaza u srednjem infracrvenom spektru. Ovde ćemo izložiti model koji odlično opisuje ovaj mehanizam rasejanja, uveden od strane [85], na osnovu ideja razvijenih u [86]. Definišemo Hamiltonijan preturbacije na i -toj neravnini kao [6]:

$$V_{IR,i}^{(m,n)}(\mathbf{r}) = \Delta E_{c,i} f_c^{(m)}(\bar{z}_l) f_c^{(n)}(\bar{z}_l) [z_i(\mathbf{r}) - \bar{z}_l], \quad (4.21)$$

gde nam je $z_i(r)$ funkcija koja opisuje profil i -tog međuspoja, $f_c^{(m,n)}$ su anvelopne talasne funkcije, a $\Delta E_{c,i}$ je diskontinuitet (offset) provodne zone na i -tom međuspoju. Matrični element prelaza između

stanja blizu dna podzone m sa transverzalnim talasnim vektorom $k_{||m} \approx 0$ i podzone n sa istom energijom i transverzalnim talasnim vektorom $k_{||n} \approx \sqrt{\frac{2m^*E_{mn}}{\hbar^2}}$ možemo zapisati kao [6]:

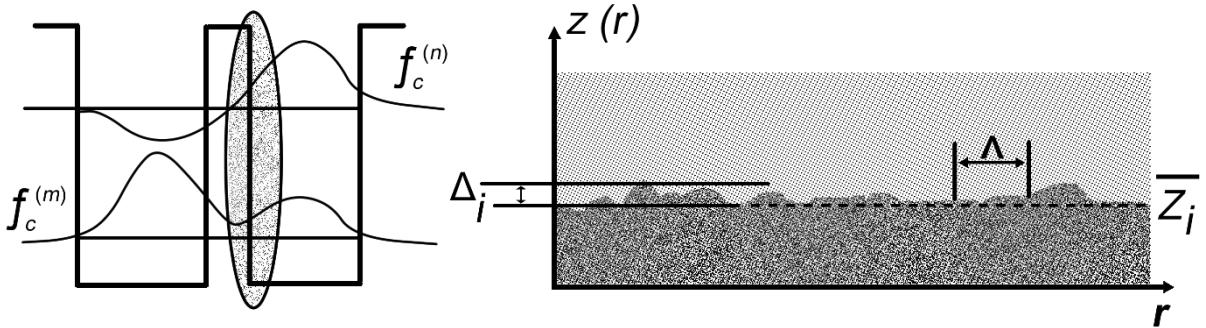
$$V_{IR}^{(m,n)}(k_{||}) = \sum_i \int V_{IR,i}^{(m,n)}(\mathbf{r}) e^{ik_{||}r} dr = \sum_i \Delta E_{c,i} f_c^{(m)}(\bar{z}_i) f_c^{(n)}(\bar{z}_i) \int [z_i - \bar{z}_i] e^{ik_{||}r} dr. \quad (4.22)$$

Možemo da primetimo da je izraz (4.22) u suštini Furijeova transformacija funkcije $z_i(\mathbf{r}) - \bar{z}_i$. Ako definisemo korelacionu funkciju:

$$C(\mathbf{r}_1) = \int [z_i(\mathbf{r}) - \bar{z}_i][z_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) - \bar{z}_i] d\mathbf{r} = \Delta_i^2 e^{-\frac{r_1^2}{\Lambda^2}}, \quad (4.23)$$

gde nam je $\Delta_i = \langle (z_i(r) - \bar{z}_i)^2 \rangle^{1/2}$ srednja kvadratna visina, a Λ je dužina korelacije u ravni normalnoj na pravac narastanja, primenom Viner-Hinčinove (eng. Wiener-Khinchin) relacije dobijamo sledeći izraz [6]:

$$\left| V_{IR}^{(m,n)}(k_{||}) \right|^2 = \sum_i \Delta_i^2 \Delta E_{c,i}^2 \left| f_c^{(m)}(\bar{z}_i) f_c^{(n)}(\bar{z}_i) \right|^2 \times \pi \Lambda^2 e^{-\frac{\Lambda^2 k_{||}^2}{4}}. \quad (4.24)$$



Slika 4.4 - Dvostruka kvantna jama sa envelopnim funkcijama (levo) i neravnine na međuspoju (desno). Reprodukovano iz [6] uz dozvolu davaoca licence preko PLSclear-a.

Pod pretpostavkom da su parametri ΔE_c , Λ i Δ_i isti za svaki međuspoj, brzina rasejanja ima formu [87]:

$$W_{IR,m \rightarrow n} = \frac{\pi m^*}{\hbar^3} \Delta E_c^2 \Delta_i^2 \Lambda^2 F_{IR} e^{-\frac{\Lambda^2 k_{||}^2}{4}}, \quad (4.25)$$

$$F_{IR} = \sum_i \left| f_c^{(m)}(\bar{z}_i) f_c^{(n)}(\bar{z}_i) \right|^2 < \frac{N_i}{a^2}, \quad (4.26)$$

gde je N_i ukupan broj međuspojeva, a je dužina aktivne oblasti. Ako primenimo $k_{||} \approx \sqrt{\frac{2m^*E_{mn}}{\hbar^2}}$ možemo odrediti red veličine maksimalne moguće brzine rasejanja usled neravnina na međuspoju kao:

$$W_{IR,m \rightarrow n} = \pi N_i \frac{\Delta E_c^2}{\hbar E_{mn}} \frac{\Delta_i^2}{a^2} G_{IFR} \left(-\frac{\Lambda k_{||}}{2} \right), \quad (4.27)$$

gde je $G_{IFR}(x) = 4x^2 e^{-x^2}$. Iz izraza (4.27) se vidi da je moguće skratiti vreme rasejanja kako bi ubrzali depopulaciju donjeg laserskog nivoa, jer u izrazu figuriše energija E_{mn} u imenici [6]. Ova vrsta rasejanja je od suštinskog značaja za projektovanje vremena života energetskih nivoa KKL-a, kao i za tunelovanje, širinu linije luminiscencije i injekcionu efikasnost.

4.4. Rasejanje elektron-elektron

Teorijsko izvođenje za ovaj tip rasejanja može se naći u više knjiga i radova [80], [88], [89], [90], [91]. Rasejanje elektron-elektron podrazumeva dva elektrona koja postoje u inicijalnim stanjima definisanim podzonama i i j i transverzalnim talasnim vektorima \mathbf{k}_i i \mathbf{k}_j . Nakon rasejanja finalna stanja su f i g sa transverzalnim talasnim vektorima \mathbf{k}_f i \mathbf{k}_g . Primenom Fermijevog zlatnog pravila, izraz za brzinu rasejanja za ovaj tip interakcije dobija se da je [90]:

$$W_{i,j \rightarrow f,g}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{k}_f, \mathbf{k}_g) = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \delta(E_f(k_f) + E_g(k_g) - E_i(k_i) - E_j(k_j)), \quad (4.28)$$

gde je M matrični element (amplituda verovatnoće rasejanja) dat izrazom:

$$M = \langle f, \mathbf{k}_f; g, \mathbf{k}_g | H' | i, \mathbf{k}_i; j, \mathbf{k}_j \rangle, \quad (4.29)$$

$$H' = \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (4.30)$$

gde je H' Hamiltonian preturbacije i predstavlja Kulonovu interakciju između dva elektrona opisanu trodimenzionalnim vektorima njihovog položaja \mathbf{r}_i i \mathbf{r}_j . Kako su elektroni konfinirani u pravcu narastanja z a slobodni u x-y ravni, talasne funkcije koje opisuju ova stanja možemo predstaviti kao bazis stacionarnih stanja $\zeta_i(z)$ u kombinaciji sa kvazislobodnim stanjima sa impulsom $\hbar\mathbf{k}_i$. Definišemo form-faktor kao [90]:

$$A_{ijfg}(q) = \int_0^{L_z} dz \int_0^{L_z} dz' \zeta_f^*(z) \zeta_g^*(z') \zeta_i(z) \zeta_j(z') e^{-|z-z'|q}, \quad (4.31)$$

gde je vektor definisan kao razlika transverzalnih talasnih vektora $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ čija je intenzitet

$$q = \sqrt{k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos(\theta_{k_i} - \theta_{k_f})}. \quad (4.32)$$

Brzinu elektron-elektron rasejanja u funkciji inicijalnog talasnog vektoru dobijamo kada uvrstimo Fermi-Dirakove funkcije raspodele $f_m(k_m)$, kako bismo uključili verovatnoću popunjenoosti inicijalnih i finalnih stanja, a potom izvršimo integraciju po \mathbf{k}_i , \mathbf{k}_f i \mathbf{k}_g [90]:

$$W_{i,j \rightarrow f,g}(\mathbf{k}_i) = \frac{m^* e^4}{32\pi^3 \hbar^3} \sum_{k_f} \int dk_f \int d\theta_{ij} \int d\theta_{k_f} \frac{k_f}{|k_s - 2k_f|} \frac{|A_{ijfg}(q)|^2}{q^2 \epsilon(q)^2} f_i(k_i) [1 - f_f(k_f)] [1 - f_g(k_g)], \quad (4.33)$$

gde je ugao $\theta_{ij} = \theta_{k_i} - \theta_{k_j}$ i $k_s = k_i \cos(\theta_{k_i} - \theta_{k_f}) + k_j \cos(\theta_{k_j} - \theta_{k_f})$. Talasni vektor \mathbf{q} možemo alternativno da definišemo kao:

$$q = \frac{|\mathbf{k}_{ij} - \mathbf{k}_{fg}|}{2}, \quad (4.34)$$

gde su $\mathbf{k}_{ij} = \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_i$ i $\mathbf{k}_{fg} = \mathbf{k}_g - \mathbf{k}_f$ relativni talasni vektori [90]. Tada je brzina rasejanja:

$$W_{i,j \rightarrow f,g}(\mathbf{k}_i) = \frac{m^* e^4}{64\pi^3 \hbar^3} \int dk_j \int d\theta_{ij} \int d\theta_{k_{ij},k_{fg}} \frac{|A_{ijfg}(q)|^2}{q^2 \epsilon(q)^2} k_j f_j(k_j) \times [1 - f_f(k_f)] [1 - f_g(k_g)], \quad (4.35)$$

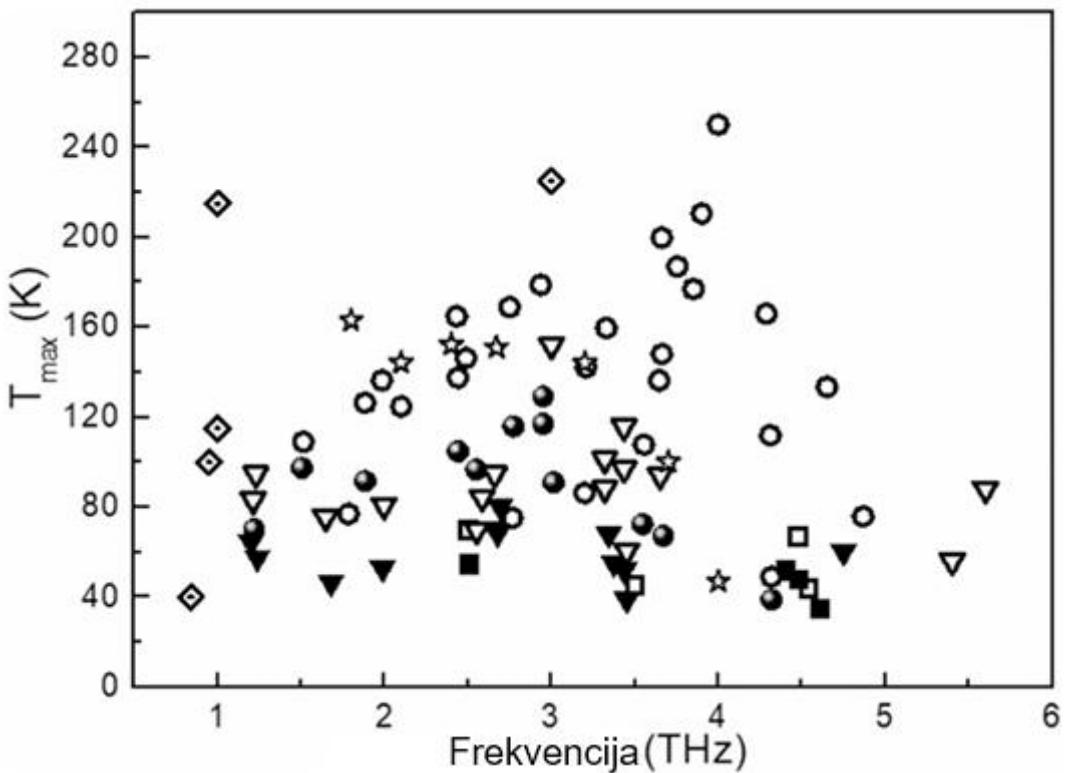
gde je ugao θ ugao između relativnih talasnih vektora. Srednja brzina elektron-elektron rasejanja dobija se usrednjavanjem relacije (4.35) po talasnom vektoru inicijalnog stanja:

$$\bar{W}_{i,j \rightarrow f,g} = \frac{\int dk_i W_{i,j \rightarrow f,g}(\mathbf{k}_i) k_i f_i(k_i)}{\int dk_i k_i f_i(k_i)}. \quad (4.36)$$

4.5. Terahercni KKL

Terahercna radijacija nije jonizujuća i u stanju je da prodre u niz neprovodnih materijala kao što su papir, drvo, odeća itd. Dubina prodiranja je manja nego kod mikrotalasnog zračenja. U stanju je da prodre u organsko tkivo tako da se razmatraju primene u medicini kao zamena i dopuna za primenu X zraka. Laserske poluprovodničke naprave zasnovane na kvantnim jamama imaju problema da funkcionišu iznad 100 GHz zato što je održavanje inverzne naseljenosti za male energije separacije nivoa (1–10 THz → 4–40 meV) izuzetno teško, posebno pri sobnoj temperaturi. THz frekvencije imaju energiju fonona manju od rezonantne energije LO fonona kod standardnih poluprovodnika. Razlog za teško održavanje inverzne naseljenosti leži u činjenici da, usled male energetske razlike između viših i nižih energetskih laserskih stanja, vreme života na višim laserskim stanjima je kraće nego za npr. srednje-mikrotalasne frekvencije. Efekti zagrevanja su iz istih razloga izraženiji i štetniji. Prva demonstracija kvantnog kaskadnog lasera koji je ostvario emitovanje u terahercnom opsegu (4.4 THz, ekvivalent talasnoj dužini od 67 μm) ja bila 2001. u *Scuola Normale Superiore* u Pizi [56]. Od tada, brojne istraživačke grupe se bave ovom oblašću i u međuvremenu su demonstrirani brojni tipovi dizajna terahercnih kvantnih kaskadnih lasera, što će biti izloženo u nastavku.

Pošto je energija fotona terahercnog zračenja manja od energije LO-fonona (36 meV za GaAs, 70 meV za ZnO itd.) i takođe blizu vrednosti termalne energije čak i na niskim temperaturama, jednostavno skaliranje dizajna aktivne oblasti KKL-a koji radi u MIR u THz opseg (4–20 meV) nije efikasno i treba uzeti u obzir dodatna ograničenja [6]. Posebna pažnja posvećena je selektivnom injektovanju nosilaca u gornji laserski nivo i efikasnoj depopulaciji donjeg laserskog nivoa, koji su po energiji veoma blizu jedan drugom. U ovom potpoglavlju ćemo predstaviti nekoliko glavnih varijanti dizajna aktivne oblasti koji omogućavaju visoke performanse. Slika 4.5 prikazuje zavisnost maksimalne radne temperature od radne frekvencije za različite THz KKL-ove iz literature [6], [92].



Slika 4.5 - Maksimalne radne temperature THz KKL-ova iz literature na osnovu različitih dizajna aktivne oblasti u sistemima materijala GaAs/AlGaAs. ■ Čir povana superrešetka u CW režimu; □ čir povana superrešetka u impulsnom režimu; ▼ BTC u CW režimu; ▽ BTC u impulsnom režimu; ● rezonantni-fonon dizajn u CW režimu; ○ rezonantni-fonon/direktni-fonon (dvojamni) dizajn u impulsnom režimu; ★, dizajni sa injekcijom uz pomoć rasejanja, u impulsnom režimu; i ♦, THz KKL-ovi koji rade uz pomoć jakog magnetnog polja (10–15 T). Slika preuzeta iz [6] uz dozvolu davaoca licence preko PLSclear-a.

4.5.1. Čir povana superrešetka

Aktivna oblast ovog dizajna KKL-a zasniva se na sprezi više kvantnih jama u superrešetki koje stvaraju minizone stanja usled primene odgovarajućeg električnog polja. Prvi realizovani THz KKL [56] bio je upravo sa ovim dizajnom. Na Slici 4.6a prikazan je šematski KKL sa dizajnom čir povane superrešetke. Nosioci se injektuju u čvrsto spregnuta stanja gornje minizone putem rezonantnog tunelovanja iz osnovnog stanja injektora iz prethodne periode. Radijativni prelaz projektovan je da se odvija vertikalno, od najnižeg stanja gornje minizone (u oznaci „2“) do gornjeg stanja donje minizone (u oznaci „1“), sa energijom fotona 10-20 meV. Inverzna naseljenost je uspostavljena jer je rasejanje elektrona između čvrsto spregnutih stanja unutar minizona (unutar-minizonsko rasejanje) favorizovano u odnosu na međuminizonsko rasejanje. Usled toga elektroni imaju tendenciju da se relaksiraju na dnu minizona, ostavljajući niža laserska stanja relativno praznim. Inverznu naseljenost takođe održava gustina stanja, tj. činjenica da elektroni u gornjem laserskom stanju „2“ mogu da se raseju u bilo koje od nižih stanja u minizoni, ali fotoni će verovatno biti emitovani samo na prelazu $2 \rightarrow 1$ između stanja na ivici zona. Ovaj dizajn obezbeđuje veliki dipolni matrični element prelaza zbog velikog preklapanja talasnih funkcija u (stvarnom) prostoru.

Elektroni u donjoj minizoni se relaksiraju u osnovno stanje putem nekoliko brzih procesa rasejanja unutar minizone: rasejanje na LO-fononima, rasejanje na jonizovanim primesama, rasejanje elektron-elektron i rasejanje na neravninama međuspoja. Zbog relativno malih širina minizona (oko 15–20 meV), LO-fononi nisu direktno uključeni u proces depopulacije, ali jesu posredno, jer je

spontana emisija LO-fonona dominantni način kojim se elektronski gas hlađi [93]. Kao rezultat, donje lasersko stanje 1 se brzo prazni, elektroni se akumuliraju u osnovnom stanju na dnu donje minizone i zatim selektivno injektuju u stanje 2 sledeće periode. Međutim, KKL-ovi sa superrešetkastim dizajnom imaju ograničene performanse, odnosno slabu efikasnost dP/dI i niske maksimalne radne temperature, zbog parazitne terahercne apsorpcije unutar minizona, termičkog popunjavanja (eng. thermal backfilling) niže minizone, kao i spore relaksacije elektrona sa donjeg laserskog nivoa [6].

4.5.2. Dizajn baziran na vezano-slobodnim prelazima

Alternativa dizajnu na bazi čirpovanih superrešetki je dizajn koji koristi vezano-slobodne prelaze (eng. Bound-to-Continuum, BTC). Kao i kod čirpovanih superrešetki, donje lasersko stanje i depopulacija zasnovana na minizonama i dalje postoje, ali je gornje lasersko stanje projektovano da bude vezano stanje unutar miniprocepa, što se postiže dodavanjem uske jame pored injektorske barijere [94], [95]. Radijativni prelaz je dijagonalan, što znači da ima značajno manji dipolni matrični element prelaza u odnosu na vertikalni prelaz, što se kod BTC-a delimično kompenzuje većom injekcionom efikasnošću zbog snažne sprege stanja injektora i gornjeg laserskog stanja, kao i dužim vremenom života gornjeg laserskog stanja jer su neradijativne brzine rasejanja dijagonalnih prelaza obično manje. Debljina barijere u ovom dizajnu je važan parametar koji se može optimizovati za postizanje visoke injekcione efikasnosti u gornje lasersko stanje uz smanjenje parazitne struje. BTC dizajni imaju poboljšane performanse temperature i snage u poređenju sa čirpovanim superrešetkama [93]. Veća selektivnost ubrizgavanja omogućava BTC-u da pokrije i veoma niske terahercne frekvencije (videti Sliku 4.6b). Međutim, performanse BTC dizajna brzo degradiraju sa temperaturom jer termičko popunjavanje donje minizone postaje značajno na visokoj temperaturi, što u velikoj meri smanjuje inverziju. Maksimalna radna temperatura BTC THz KKL-a godinama je bila ograničena na oko 100 K, a u cilju poboljšanja performansi na visokim temperaturama, u BTC dizajn je uključeno rasejanje na LO-fononima radi brze depopulacije elektrona iz donje minizone, što je rezultovalo tzv. hibridnim dizajnom aktivne oblasti, o čemu će biti reči u nastavku.

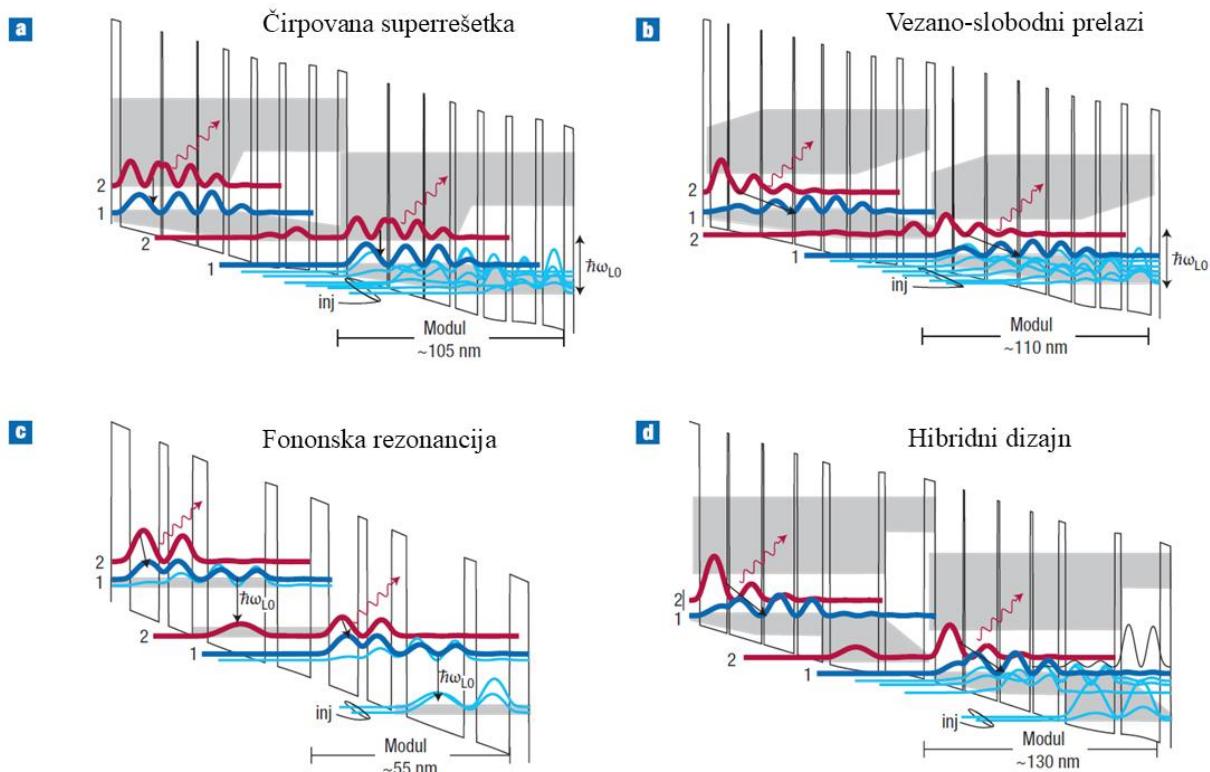
4.5.3. Rezonantno-fononski dizajn

Rezonantno-fononski (RP) dizajn aktivne oblasti (videti Sliku 4.6c) koji se sastoji iz relativno malo kvantnih jama (2-3) i ima jednostavnu zonsku strukturu, obezbeđuje najbolje performanse od svih dizajna na frekvencijama većim od 2.5 THz. Elektroni se injektuju putem rezonantnog tunelovanja u gornje lasersko stanje iz osnovnog stanja prethodne periode. Depopulacija donjeg laserskog nivoa dešava se kombinacijom rezonantnog tunelovanja (između donjeg laserskog nivoa i po energiji bliskog stanja na slici označenim svetlo-plavom) i zatim brzog rezonantnog LO-fononskog rasejanja elektrona u osnovno stanje [39]. Depopulacija nosilaca putem emisije LO-fonona brz je i robustan proces koji ne zavisi od visokih temperatura, a pritom separacija između nižeg laserskog stanja i injektorskog nivoa određena je energijom LO-fonona. Laserski prelaz može biti vertikalni ili dijagonalni, pri čemu dijagonalni pružaju poboljšane temperaturske performanse zbog kombinacije poboljšane injekcione efikasnosti i smanjenog neradijativnog rasejanja između laserskih stanja [54, 55]. Pored toga, prostorna razdvojenost gornjeg i donjeg laserskog stanja takođe doprinosi boljoj selektivnosti ekstrakcije elektrona sa donjeg laserskog stanja. Antikrosing između stanja koja tuneluju pažljivo se podešava kontrolisanjem debljina injekcione i kolektorske barijere u cilju postizanja visokih radnih temperatura [55]. Dobar primer kako se sistematskom

optimizacijom snage oscilatora² između gornjeg i donjeg laserskog stanja i debljina barijera (za efekat tunelovanje elektrona) mogu postići rekordne performanse je trojamni RP dizajn kod koga je postignuta maksimalna radna temperatura od 200 K [54], što je godinama bio rekord. Trenutno rekordnu temperaturu drži dvojamni RP dizajn. Novina je da se u dizajnu koriste barijere sa većim procentom aluminijuma i manje energetskih nivoa. Naime, ispostavlja se da povećanje udela aluminijuma u AlGaAs barijerama u GaAs/AlGaAs RP dizajnu sa 15 % na 25-30 % smanjuje curenje nosilaca u kontinuum [57-60]. Optimizacijom debljina slojeva korišćenjem transportnih modela i tačnijih parametara materijala u modelu doveli su do novih rekorda za T_{max} , prvo 210.5 K [72], a kasnije 250 K [73] na ~4 THz i najnoviji 261 K [96] o čemu će biti više reči u nastavku.

4.5.4. Hibridni dizajn

Kod ovakvog tipa lasera, prikazanog na Slici 4.6d, depopulacija potpomognuta fononima u aktivnim oblastima odigrava se u kombinaciji sa vezano-slobodnim prelazima. U odnosu na aktivnu oblast BTC dizajna, dodata je kolektorska/injektorska kvantna jama na kraju strukture. Kada je primenjeno odgovarajuće električno polje, minizona u injektoru se poravna sa donjim laserskim stanjem čija je energija za otprilike energiju LO-fonona iznad injektorskog stanja. Hibridnom strukturu se postiže smanjenje vremena života donjeg laserskog stanja i zaustavlja termalno popunjavanje, a radna temperatura je podignuta na 152 K [97] i omogućene su velike snage i u CW [98] i impulsnom režimu [99]. Usled činjenice da se procesi emisije fonona i fotona smenjuju nazivaju se i „isprepletane“ strukture [93].

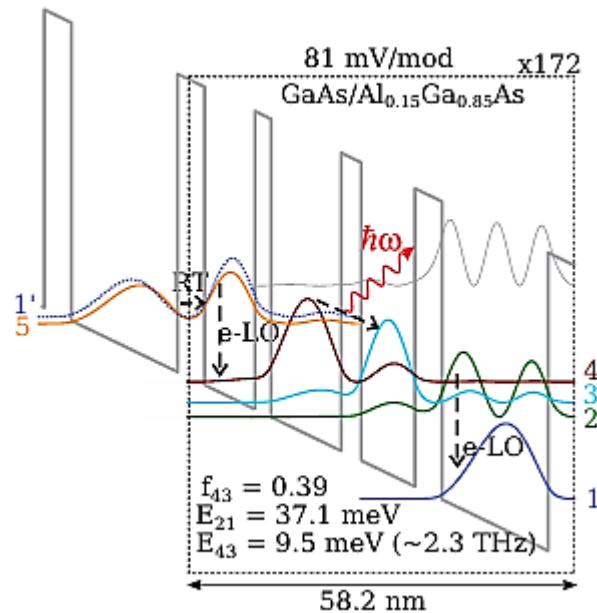


Slika 4.6 - Šematski prikaz nekoliko dizajna aktivne oblasti THz KKL-a: (a) čirpovana superrešetka (b) struktura sa vezano-slobodnim prelazima (c) struktura sa fononskom rezonancijom (d) hibridni dizajn. Adaptirano iz [93] uz dozvolu izdavača Springer Nature.

² Snaga oscilatora definiše se kao: $f_{ij} = \frac{2m_0}{\hbar^2} |z_{ij}|^2 (E_j - E_i)$

4.5.5. Injekcija uz pomoć rasejanja (indirektno pumpanje)

Kod ostalih tipova dizajna elektroni su injektovani u gornje lasersko stanje rezonantnim tunelovanjem. Kako je energija laserskog prelaza mala (4-20 meV) teško je da se izvrši selektivna injekcija elektrona samo u gornje lasersko stanje i onda se pravi relativno debela injektorska tunelska barijera kako bi se smanjilo nerezonantno tunelovanje u ostala stanja. Širina te injekcione barijere se uzima tako da je antikrosing između injektorskog stanja (i) i gornjeg laserskog stanja stanja (u) $2\hbar\Omega_{iu}$ manja od $\hbar\Delta\nu_{scat}$, gde je Ω_{iu} Rabijeva frekvencija spregnutih stanja, a $\Delta\nu_{scat}$ je poluširina linije laserskog prelaza (eng. full width at half maximum, FWHM) određena brzinama defaziranja usled rasejanja. Problem kod male vrednosti $2\hbar\Omega_{iu}$ je i slabo sprezanje između stanja „ i “ i „ u “, kao i dugo vreme tunelovanja iz „ i “ u „ u “. Iz ovih razloga je napravljen dizajn baziran na indirektnom pumpanju, gde je injekcija uspostavljena pomoću rasejanja, rezonantne emisije fonona [6], čime je izbegнутa injekcija putem tunelovanja, nerezonantno tunelovanje je sprečeno pa samim tim i injektorske barijere ne moraju da budu debele bez bojazni da će se povećati parazitna struja injekcije u donje lasersko stanje ili proširiti spektar pojačanja lasera. Ovaj dizajn je posebno dobar za THz KKL koji su za frekvencije < 2 THz, tako da ovi laseri imaju bolje temperaturske performanse u odnosu na druge dizajne na nižim učestanostima, videti Sl. 4.7. Više o ovom dizajnu, uključujući pregled najnovijih optimizovanih naprava, može se naći u [6].



Slika 4.7 -Dizajn aktivne oblasti THz KKL-a gde je injekcija nosilaca potpomognuta rasejanjima. Preuzeto iz [100].

4.5.6. Primeri dizajna aktivne oblasti THz KKL-a

Aktivna oblast za rad na 200 K koja koristi rezonantno-fononski dizajn

Ovaj primer strukture THz KKL-a iz [101] postigao je u impulsnom režimu maksimalnu temperaturu od 200 K sa emisijom na 3.22 THz, Slika 4.8a. Donji laserski nivo (LLL, crvena linija na slici) se efikasno depopuliše putem rasejanja na longitudinalnim optičkim fononima u injekcioni laserski nivo (ILL, plava linija na slici), koji je lociran na LO-fononskoj energiji (36 meV u GaAs) ispod donjeg laserskog nivoa koji je snažno spregnut sa gornjim laserskim nivoom (ULL, zelena linija) sledeće periode. Rezonantno tunelovanje se odvija kroz injekcionu barijeru čime se depopuliše injekcioni laserski nivo. Debljine slojeva, počevši od injekcione barijere su

4.3/8.9/2.46/8.15/4.1/(5.5+5.0+5.5) nm, gde su barijere $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ označene podebljanim slovima, a srednji deo poslednje jame dopirane sa $6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ je podvučen. Na Slici 4.8a je prikazan profil potencijala provodne zone sa prikazanim kvadriranim modulima talasnih funkcija [102].

Aktivna oblast koja koristi vezano-slobodne prelaze

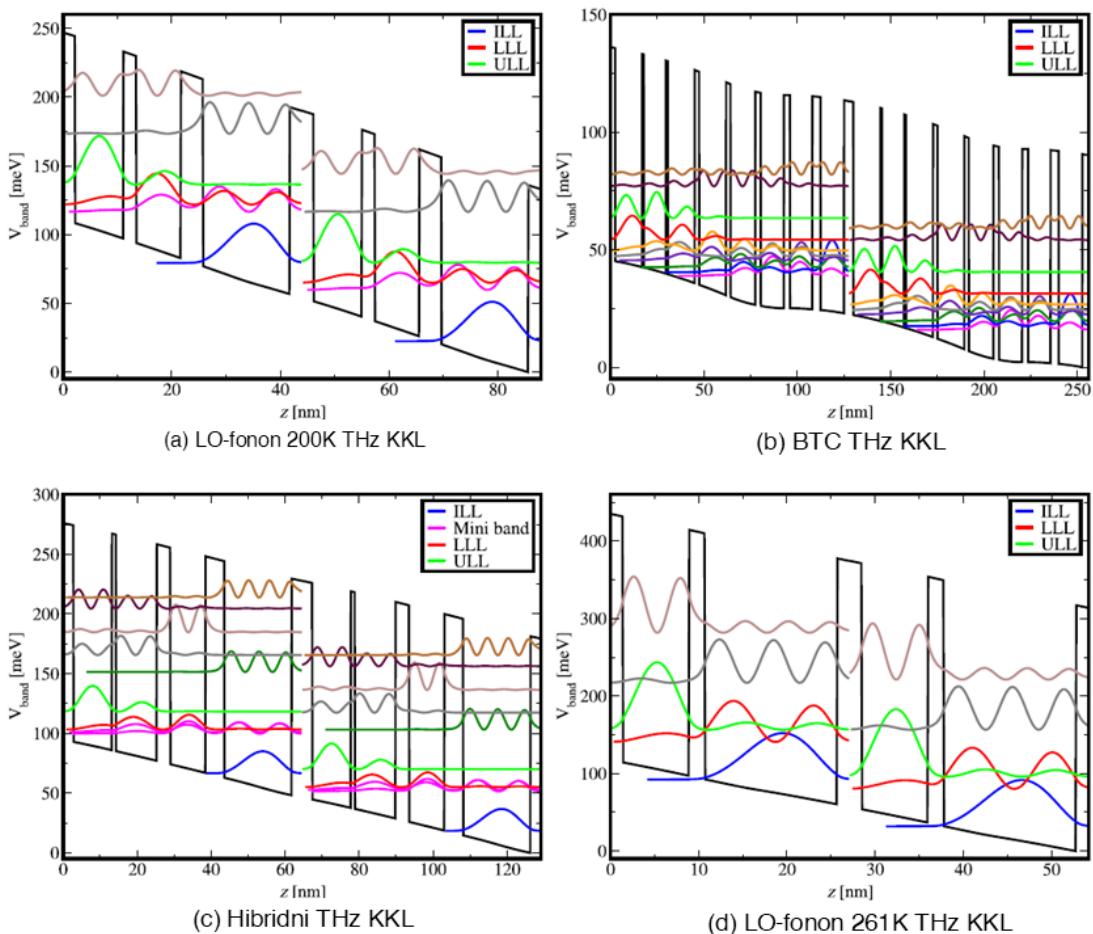
Ovako dizajniran BTC KKL radi na frekvenciji od 2 THz [103]. Ekstrakcija iz donjeg laserskog nivoa u injekcioni laserski nivo postiže se dijagonalnim prelazima unutar minizone, dok je injekcioni laserski nivo unutar minizone i snažno je povezan sa gornjim laserskim nivoom sledeće periode. Debljine slojeva, počevši od injekcione barijere su **5.0/14.4/1.0/11.8/1.0/14.4/2.4/14.4/2.4/13.2/3.0/12.4/3.2/12.0/4.4/12.6** nm, gde su $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ barijere prikazane podebljano, a jame dopirane sa $1.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ su podvučene. Na Slici 4.8b prikazan je potencijal dna provodne zone datog THz KKL-a sa kvadriranim modulima talasnih funkcija [102].

Aktivna oblast hibridnog KKL-a

Ovaj primer hibridnog THz KKL-a dizajniran je za nisku gustinu struje praga i veliku izlaznu snagu na 3.9 THz u CW režimu rada [104]. Emisija se odvija kroz dijagonalni prelaz između gornjeg i donjeg laserskog nivoa. Donji laserski nivo se nalazi iznad minizone, što omogućava brzu ekstrakciju elektrona. Minizona se depopuliše u injekcioni laserski nivo kroz LO-fononsko rasejanje. Debljine sloja, počevši od injekcione barijere su: **5.51/10.39/1.17/10.92/3.71/9.54/5.09/(8.23+10.0)** nm, gde su $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ barijere prikazane podebljanim slovima, i podvučen je desni deo poslednje jame dopirane sa $4.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Na Slici 4.8c prikazan je potencijal dna provodne zone primera hibridnog THz KKL-a sa kvadriranim modulima talasnih funkcija [102].

Nova aktivna oblast za rad na rekordnih 261K koja koristi rezonantno-fononski dizajn

Rekordna temperatura od 261 K postignuta je za LO-fononski THz KKL koji radi na 4 THz, koristi molski ideo od $x = 0.35$ Al u barijerama i donji laserski nivo se efikasno depopuliše rasejanjem na LO-fononima u injekcioni laserski nivo, koji se nalazi 48 meV ispod donjeg laserskog nivoa pri rezonantnom naponu [7]. Debljine slojeva, počevši od injekcione barijere, su **2.88/7.45/1.76/(3.0+3.0+9.0)** nm, gde su barijere od $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ označene podebljanim slovima, a srednji deo poslednje jame dopiran je sa $1.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (podvučeno). Na Slici 4.8d prikazan je potencijal dna provodne zone ovog lasera sa kvadriranim modulima talasnih funkcija [102].



Slika 4.8 - Dno provodne zone potencijala za THz KKL: (a) 200 K rezonantno-fononski (b) 2 THz BTC (c) Hibridni (d) 261 K rezonantno-fononski. Preuzeto iz [102], pod uslovima Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

4.5.7. Talasovodi za THz KKL

Propagirajući mod unutar laserskog talasovoda podleže uticajima tri glavna tipa gubitaka. Prvi mehanizam gubitaka proizilazi iz nesavršenosti površina koje čine laserski rezonator. Gubitke koji nastaju usled nasavršenosti tih površina mogu se izraziti na sledeći način [105]:

$$\alpha_m = -\frac{1}{2L} \ln(R_1 R_2), \quad (4.37)$$

gde je L dužina rezonatora, a R_1, R_2 su reflektivnosti ogledala. Drugi mehanizam gubitaka je apsorpcija slobodnih nosilaca, pri čemu je posebno bitno uključiti ga u oblasti dopiranih poluprovodnika i u slojevima sa metalnim kontaktima. Treći mogući mehanizam odnosi se na apsorpciju nosilaca u injektorskoj oblasti KKL-a usled velikih dipolnih matričnih elemenata koji karakterišu prelaze u okviru istih podzona.

Uzimajući u obzir sve pomenute mehanizme gubitaka, prag pojačanja se može izraziti kao:

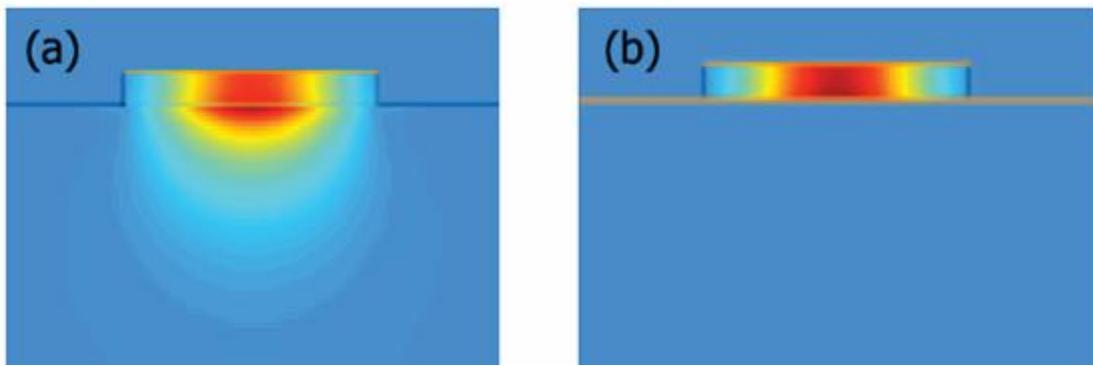
$$g_{th}\Gamma = \alpha_m + \alpha_w, \quad (4.38)$$

gde je α_w oznaka za gubitke usled apsorpcije slobodnih nosilaca, g_{th} prag pojačanja, a Γ faktor konfiniranja koji definiše koji se deo optičkog moda preklapa sa aktivnom oblasti lasera.

Kvantni kaskadni laseri koji rade u srednjem infracrvenom delu spektra koriste dielektrične talasovode slične onima koji se koriste kod međuzonskih poluprovodničkih lasera gde je konfiniranje modova postignuto kontrastom indeksa prelamanja između materijala u aktivnoj oblasti i u slojevima obloge, o čemu više informacija može naći u [106]. Međutim, skaliranje takve arhitekture talasovoda direktno na THz frekvencijski opseg zahtevalo bi veoma debele slojeve obloga, srazmerne talasnoj dužini svetlosti (reda veličine $100 \mu\text{m}$), što nije izvodljivo, jer prelavazilazi praktične mogućnosti epitaksijalnog rasta. Osim toga, dopiranje slojeva obloge, koje je potrebno za električnu provodljivost, dovodi do velikih gubitaka u talasovodu na terahercnim frekvencijama usled jake apsorpcije slobodnih nosilaca na ovim talasnim dužinama. Upravo je projektovanje optičkog talasovoda bio jedan od glavnih problema kod razvoja THz KKL-a. Ovaj problem je rešen korišćenjem dve šeme, jedna je talasovod sa površinskim plazmonom (eng. surface plasmon, SP), a druga talasovod sa dvostrukim metalom (eng. double metal, DM). Ni jedna od ove dve vrste talasovoda nema debele slojeve obloge, tako da obe obezbeđuju visoko preklapanje laserskog moda sa aktivnom oblasti i minimizuju gubitke talasovoda.

Kod SP talasovoda [56], imamo tanak ($0.2\text{--}0.8 \mu\text{m}$) jako dopirani sloj (n^+) poluprovodnika između aktivne oblasti KKL-a i polu-izolacionog supstrata. Ovaj jako dopirani kvazimetalni sloj ima za cilj da proizvede negativnu dielektričnu konstantu u THz frekvencijskom opsegu omogućavajući transverzalno-magnetični (TM) površinski plazmonski mod na spoju aktivne oblasti i supstrata. Uz postojanje gornjeg metalnog kontakta, formira se složeni talasovodni mod koji nastaje sprezanjem dva površinska plazmona, videti Sliku 4.9. Dobar deo moda ograničen je u aktivnoj oblasti, tipične debljine $10\text{--}12 \mu\text{m}$. Iako mod značajno zalazi u suprat, preklapanje sa kvazimetalnim slojem je malo zbog njegove relativno male debljine, što minimizuje modalni gubitak. Visoko dopirani sloj takođe funkcioniše kao donji kontaktni sloj koji obezbeđuje bočnu ekstrakciju struje do metalnog kontakta.

Prednost SP talasovoda ogleda se u visokoj vrednosti veličine α_w/Γ u spektralnom opsegu od $2\text{--}5 \text{ THz}$ i relativno niskoj refleksivnosti ogledala ($R \sim 0.32$) u poređenju sa DM talasovodima, što implicira relativno visoku izlaznu efikasnost THz zračenja iz lasera u slobodni prostor. SP talasovod pruža dobar balans između prilično niskog praga pojačanja i efikasnog izlaza svetlosti u slobodan prostor sa dobrim profilom emisije dalekog polja (snop ima relativno malu divergenciju $\sim 30^\circ$). Međutim, kada je reč o dužim radnim talasnim dužinama koje odgovaraju frekvencijama ispod približno $2\text{--}3 \text{ THz}$, i/ili smanjenim širinama talasovoda ispod približno $100\text{--}150 \mu\text{m}$, ova vrsta talasovoda postaje manje korisna, jer je osnovni mod talasovoda istisnut u supstrat, čime je smanjeno preklapanje moda i aktivne oblasti.



Slika 4.9 - Intenzitet optičkog moda u konfiguraciji talasovoda sa SP (a) i DM (b) THz KKL. Na slici je poprečni presek geometrije grebenskog talasovoda. Preuzeto iz [107] pod uslovima Creative Commons Attribution License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Dok SP talasovodi obezbeđuju relativno slabo konfiniranje optičkog moda unutar aktivne oblasti KKL-a, tipično $\Gamma \approx 0.2\text{--}0.3$, DM talasovodi obezbeđuju skoro 100% konfiniranja laserskog moda u aktivnoj oblasti. Šematski dijagrami DM talasovoda i profila laserskog moda u talasovodu su

prikazani na Slici 4.9b. U odnosu na SP, kod DM talasovoda je jako dopirani poluprovodnički sloj zamenjen metalnim slojem. Tehnološki postupak kako se realizuje DM talasovod možete videti u [93], [108]. Uprkos gorenavedenim značajnim razlikama u faktoru konfiniranja moda, vrednosti veličine α_w/Γ za SP i DM talasovode su za širine grebena talasovoda od preko 150 μm uporedive. Međutim, za razliku od SP talasovoda, DM zadržavaju visoku vrednost veličine α_w/Γ čak i za podtalasne širine grebena. DM talasovodi imaju poboljšanu refleksivnosti ogledala od $R = 0.9$ i stoga manje gubitke ogledala, imaju manje gustine struje praga i postižu više radne temperature, u poređenju sa laserima koji imaju SP talasovode. Zlato (Au) i bakar (Cu) se obično koriste kao metalni slojevi zajedno sa neophodnim slojevima za lepljenje i blokiranje difuzije, koji su obično napravljeni od titanijuma (Ti) i/ili tantala (Ta) debljine od 10–20 nm, pri čemu talasovodi od kombinacije slojeva Ta/Cu imaju nešto manje gubitke u poređenju sa kombinacijom Ti/Au metalnih slojeva [72], [109].

Mikrotrakasti DM THz KKL-ovi [110], [111] sa širinama grebena od samo 20–30 μm su konstruisani kako bi se smanjila struja praga i postigla efikasnija topotna disipacija, u poređenju sa THz KKL sa grebenom čija je širina uporediva sa talasnom dužinom terahercne svetlosti. Kao rezultat, DM mikrotrakasti KKL-i postižu najvišu radnu temperaturu u CW režimu [112]. Gubici na ogledalima u kod tipičnih DM THz KKL-a ($\alpha_m = 1 – 2 \text{ cm}^{-1}$) su za red veličine manji od gubitka u talasovodu ($\alpha_w = 10 – 20 \text{ m}^{-1}$) [93] što za posledicu ima nisku izlaznu efikasnost zračenja $\alpha_m/(\alpha_m + \alpha_w)$, odnosno izlazna snaga DM THz KKL-a je oko 10 puta manja od izlazne snage SP THz KKL-a. Problem predstavlja i velika divergencija snopa ($\sim 60^\circ$). U cilju postizanja visoke efikasnosti i male divergencije kod DM talasovoda koriste se tehnike bazirane na korišćenju horn antena [113], hiperhemisfernih silicijumskih sočiva [114], šupljih pravougaonih talasovoda na čipu [115] ili plazmonske kolimatora [116], ali i ekstrakcija svetlosti pomoću distribuirane povratne rešetke drugog [117] ili trećeg reda [118], ili implementacija novih dizajna rezonatora za vertikalnu emisiju, koristeći kružne geometrije [119], fotonske kristale [120], kvazikristale [121] ili čak mikrošupljine slične antenama [122], o čemu se više informacija može naći u [6], [107].

5. PRORAČUN ELEKTRONSKE STRUKTURE KVANTNOG KASKADNOG LASERA

Pažljivo dizajniranje kvantnih stanja u KKL heterostrukturi ključno je za razvoj i optimizaciju eksperimentalnih KKL-a. Naime, frekvencija lasera određena je razlikom energija gornjeg i donjeg laserskog nivoa. Štaviše, potrebno je pažljivo poravnavanje energetskih nivoa za postizanje efikasne injekcije u gornji i depopulacije donjem laserskom nivou. Takođe je važno pažljivo projektovanje talasnih funkcija, određivanje snage radijativnih i neradijativnih prelaza. Štaviše, različiti modeli transporta elektrona, zahtevaju kvantizovane energetske nivoe i talasne funkcije kao ulaz u model. Sopstvene energije i talasne funkcije određuju se rešavanjem stacionarne Šredingerove jednačine, ali pošto se uzmu u obzir i efekti prostornog nanelektrisanja, korišćenjem Šredinger-Poasonovog sistema jednačina [123].

Polazimo od stacionarne Šredingerove jednačine oblika:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m^{\parallel}(z)} (\partial_x^2 + \partial_y^2) + \partial_z \frac{1}{m^*(z)} \partial_z \right] + V(z) - E \right\} \psi_{3D}(x, y, z) = 0, \quad (5.1)$$

gde je $\psi_{3D}(x, y, z)$ talasna funkcija, E je svojstvena vrednost energije, m^* je efektivna masa u pravcu narastanja (z), m^{\parallel} je transverzalna efektivna masa, a $V(z)$ je potencijalna energija. Talasna funkcija se traži u obliku:

$$\psi_{3D}(x, y, z) = S^{-\frac{1}{2}} \psi_{\mathbf{k}}(z) e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad (5.2)$$

gde je S površina strukture u transverzalnoj ravni, a \mathbf{k} transverzalni talasni vektor. Kada se uvrsti ovakva talasna funkcija u Šredingerovu jednačinu, dobija se sledeća forma:

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2} \frac{k_x^2 + k_y^2}{m^{\parallel}(z)} - \frac{\hbar^2}{2} \partial_z \frac{1}{m^*(z)} \partial_z + V(z) - E_{\mathbf{k}} \right\} \psi_{\mathbf{k}}(z) = 0, \quad (5.3)$$

gde talasna funkcija $\psi_{\mathbf{k}}(z)$ i energija $E_{\mathbf{k}}$ zavise od transverzalnog talasnog vektora, odnosno od kretanja u transverzalnoj ravni. Ukoliko se prepostavi da m^{\parallel} ne zavisi od z -koordinate, dobija se uobičajeni oblik za 1D Šredingerovu jednačinu:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \partial_z \frac{1}{m^*(z)} \partial_z + V(z) - E \right\} \psi(z) = 0. \quad (5.4)$$

Ovde je E sopstvena vrednost energije usled konfiniranja u z -pravcu i povezana je sa ukupnom energijom $E_{\mathbf{k}}$ relacijom $E_{\mathbf{k}} = E + E_{kin}$, gde je kinetička energija slobodnog kretanja u transverzalnoj ravni data sa:

$$E_{kin} = \hbar^2 \frac{k_x^2 + k_y^2}{2m^{\parallel}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^{\parallel}}. \quad (5.5)$$

Efektivne mase zavise ne samo od sastava materijala koji čine heterostrukturu, već i od temperature rešetke i dopiranja, iako se ovi efekti obično zanemaruju [123].

Strogo gledano, kvantna stanja u KKL-u nisu vezana, pošto energija elektrona E premašuje potencijal barijere za velike vrednosti z , kada je primenjen spoljašnji napon na krajevima strukture, što znači da će elektroni nakon nekog konačnog vremena protunelovati iz sistema višestrukih kvantnih jama. Ako elektron ostane u sistemu dovoljno dugo, može se koristiti koncept kvazivezanih ili kvazistacionarnih stanja čija je sopstvena energija sada kompleksna veličina. Iako postoje numerički metodi razvijeni za rešavanje 1D Šredingerove jednačine za kvazivezana stanja, relevantna stanja koja se uzimaju u obzir za dizajniranje KKL-a, kao što su gornji i donji laserski nivoi i stanja injektora, obično su snažno vezana, kako bi se postigle optimalne performanse. Pošto je vreme života elektrona u ovim stanjima regulisano procesima rasejanja i rezonantnim tunelovanjem, ona se obično tretiraju kao vezana stanja. Ovo se u praksi radi ograničavanjem simulacije na konačni simulacioni interval koji sadrži ograničen broj perioda i nametanjem veštačkih graničnih uslova $\psi = 0$. Ovaj interval u kome se radi simulacija mora da bude dovoljno veliki tako da je deo talasne funkcije koji se nalazi unutar kvantnih jama, a koji se značajno razlikuje od nule, obuhvaćen. U simulaciji pretpostavljamo da je KKL periodična heterostruktura, gde je period definisan nizom višestrukih barijera i jama. Dakle, za KKL u primjenom spoljašnjem polju, dovoljno je izračunati sopstvene energije i odgovarajuće talasne funkcije za jedan energetski period širine E_p , koji odgovara padu napona na jednoj periodi KKL-a. Rešenja za ostale periode se onda jednostavno dobijaju transliranjem za celobrojne umnoške dužine periode L_p , i odgovarajućim pomacima u energiji [123]. Na primer, rešenja u desnoj susednoj periodi data su sa $\psi_i(z) = \psi_i(z - L_p)$, $E_i' = E_i - E_p$, gde su ψ_i i E_i talasna funkcija i sopstvena energija i -tog rešenja jednačine (5.3) dobijena u centralnoj periodi.

Provodna zona koju jedino razmatramo za modelovanje KKL-a, u okviru korišćenog Ben Daniel-Duke modela, ima tri minimuma poznata kao Γ , L i Δ doline u zavisnosti od pozicije u k -prostoru. Kod poluprovodnika sa direktnim energetskim procepom koji se obično koriste za KKL, najniži minimum je u Γ , pa se onda teorijska analiza obično svodi na Γ dolinu, iako pod određenim uslovima postoje prelazi u Δ i L dolinu koji utiču na rad naprave. Do sada je u izvođenju pretpostavljana parabolična disperziona relacija što je opravdano samo u blizini minimuma Γ doline, i ne važi za visoke energije. Odstupanje od paraboličnog modela, odnosno neparaboličnost, obrnuto je proporcionalna energetskom procepu i posebno je bitno da se uključi u modelovanje elektronske strukture MIR KKL-a kod kojih su laserski prelazi na energijama koje su reda 100 meV napravljenih uglavnom od poluprovodnika sa malim energetskim procepom. Obično se ne koristi detaljni tretman neparaboličnosti dobijen iz $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ teorije, već se koriste energetski zavisne efektivne mase dobijene iz $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ teorije [124]:

$$m^*(E') = \frac{m^*}{2\alpha'E'} \left[1 - (1 - 4\alpha'E')^{\frac{1}{2}} \right], \quad (5.6)$$

$$m^{\parallel}(E') = m^*[1 + (2\alpha' + \beta')E'], \quad (5.7)$$

gde su parametri neparaboličnosti α' i β' definisani u 14-zonskom $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ modelu [124], a $E' = E - V(z)$.

U samosaglasnom proračunu se svaki mehanizam rasejanja izračunava na osnovu odgovarajućeg Hamiltonijana koji zavisi od transverzalne efektivne mase podzone uključene u rasejanje. Ukoliko je potrebno da uključimo neparaboličnost u modelovanje procesa rasejanja onda treba da za proračun transverzalne efektivne mase koristimo poziciono-zavisnu formu iz jednačine (5.7). Međutim, uobičajeno je da se za proračune koristi usrednjena vrednost [123]:

$$m_i^{\parallel} = \int m^*(z) \{1 + [2\alpha'(z) + \beta'(z)][E' - V(z)]\} |\psi_i(z)|^2 dz, \quad (5.8)$$

gde je i indeks podzone.

5.1. Numeričko rešavanje Šredingerove jednačine

Numerička metoda za rešavanje 1D Šredingerove jednačine sa efektivnom masom mora da bude robusna i da se dovoljno brzo izvršava, posebno kada je potrebno realizovati jako veliki broj simulacija prilikom optimizacije KKL-a. Široko rasprostranjene su metode konačnih razlika [125], [126] i transfer matrica [127], [128], [129]. Obe metode imaju svoje prednosti i nedostatke, npr. transver-matrični metod je zgodniji za implemenzaciju neparaboličnosti, ali je podložniji numeričkim nestabilnostima. O unapređenoj verziji transver-matričnog metoda može se naći više informacija u skorašnjoj publikaciji [129], dok će ovde biti izložen samo metod konačnih razlika, koji je najviše korišćen za proračune elektronske strukture u 8. poglavlju.

Potrebno je diskretizovati Šredingerovu jednačinu. U ovom slučaju koristićemo uniformnu mrežu gde je Δ_z širina podeoka. Prvi izvod po z se može aproksimirati kao $\partial_z \psi(z_n + \frac{\Delta_z}{2}) \approx \Delta \psi_{n+\frac{1}{2}} = (\psi_{n+1} - \psi_n)/\Delta_z$. Član $\partial_z \frac{1}{m^*} \partial_z \psi$ se u tački z_n računa kao $\left(\frac{\Delta \psi_{n+\frac{1}{2}}}{m_{n+\frac{1}{2}}^*} - \frac{\Delta \psi_{n-\frac{1}{2}}}{m_{n-\frac{1}{2}}^*} \right)/\Delta_z$, gde koristimo linearnu interpolaciju $m_{n+\frac{1}{2}}^* = (m_n^* + m_{n+1}^*)/2$. Ovim postupkom je dobijena diskretizovana Šredingerova jednačina [126]:

$$-\frac{\hbar^2}{2\Delta_z^2} \left[\frac{\psi_{n+1}}{m_n^* + m_{n+1}^*} + \frac{\psi_{n-1}}{m_{n-1}^* + m_n^*} - \frac{\psi_n}{m_n^* + m_{n+1}^*} - \frac{\psi_n}{m_{n-1}^* + m_n^*} \right] + V_n \psi_n = E \psi_n. \quad (5.9)$$

Odnosno, uvođenjem smena možemo je zapisati kao [123]:

$$-s_n \psi_{n-1} + d_n \psi_n - s_{n+1} \psi_{n+1} = E \psi_n, \quad (5.10)$$

gde su

$$s_n = \frac{\hbar^2}{\Delta_z^2(m_{n-1}^* + m_n^*)}, \quad (5.11)$$

$$d_n = \frac{\hbar^2}{\Delta_z^2(m_{n-1}^* + m_n^*)} + \frac{\hbar^2}{\Delta_z^2(m_n^* + m_{n+1}^*)} + V_n. \quad (5.12)$$

Treba naglasiti da je kod ovakve podele bitno da diskontinuiteti provodne zone budu na polovini između dva uzastopna čvora mreže. Granični uslovi su $\psi_0 = \psi_N = 0$. U matričnoj formi naš problem se zapisuje kao sopstveni problem $(\mathbf{H} - EI)\psi = \mathbf{0}$, gde je $\psi = [\psi_1 \ \psi_2 \ \psi_3 \ \dots \ \psi_{N-1}]^T$ vektor kolona, \mathbf{I} je jedinična matrica dimenzije $N - 1$, a \mathbf{H} je tridiagonalna matrica Hamiltonijana čiji su nenulti elementi $H_{n,n} = d_n$, $H_{n,n-1} = -s_n$, $H_{n,n+1} = -s_{n+1}$. Ova jednačina se rešava standardnim postupkom za traženje sopstvenih vrednosti tridiagonalne matrice [130], pod pretpostavkom da neparaboličnost nije uračunata, u suprotnom bi

efektivne mase m_n^* bile energetski zavisne i morali bismo da koristimo modifikovanu numeričku šemu za rešavanje [131].

5.2. Numeričko rešavanje Poasonove jednačine

U Hartrijevoj aproksimaciji, interakcija elektron-elektron se razmatra samosaglasnim rešavanjem Šredingerove jednačine zajedno sa Poasonovom jednačinom:

$$\partial_z [\varepsilon(z) \partial_z \tilde{V}(z)] = e^2 \left[n_D(z) - \sum_i n_i^s |\psi_i(z)|^2 \right], \quad (5.13)$$

gde je $\varepsilon(z)$ poziciono zavisna permitivnost, e je elementarno nanelektrisanje, $n_D(z)$ je koncentracija donora, n_i^s je površinska koncentracija elektrona i -te podzone, sa talasnom funkcijom $\psi_i(z)$. Raspodela nanelektrisanja u strukturi dovodi do efekata prostornog nanelektrisanja koji dovode do dodatne elektrostaticke potencijalne energije $\tilde{V}(z)$ koja prouzrokuje krivljenje profila provodne zone [132]. Ukupni potencijal koji figuriše u Šredingerovoj jednačini dat sa $V = V_0 + \tilde{V}(z)$, gde je $V_0 = V_c - E_p z / L_p$, gde je V_c profil provodne zone bez primene spoljašnjeg polja, a član $-E_p z / L_p$ je posledica primjenjenog polja/naponu. Pad energije usled primjenjenog polja povezan je sa potencijalom kao $E_p = V(z_0) - V(z_0 + L_p)$, važi $\tilde{V}(z_0) = \tilde{V}(z_0 + L_p)$. Primjenujemo uslov da je svaka perioda elektroneutralna, odnosno da važi $\int_{z_0}^{z_0+L_p} \rho dz = 0$, odakle proističe i granični uslov $\partial_z \tilde{V}(z_0) = \partial_z \tilde{V}(z_0 + L_p)$ odnosno da je period funkcija \tilde{V} i V_c isti, pa ćemo rešavati Poasonovu jednačinu na istom domenu kao i Šredingerovu, na jednoj KKL-periodi, $z \in [z_0, z_0 + L_p]$, uz granični uslov $\tilde{V}(z_0) = \tilde{V}(z_0 + L_p) = 0$. Poasonova jednačina biće rešavana isto primenom konačnih razlika, analogno rešavanju Šredingerove jednačine, odakle se dobija [123]:

$$\tilde{s}_n \tilde{V}_{n-1} - \tilde{d}_n \tilde{V}_n + \tilde{s}_{n+1} \tilde{V}_{n+1} = \rho_n \quad (5.14)$$

zajedno sa:

$$\rho_n = e \left[n_{D,n} - \sum_i n_i^s |\psi_{i,n}|^2 \right], \quad (5.15)$$

$$\tilde{s}_n = \frac{1}{2e\Delta_z^2} (\varepsilon_{n-1} + \varepsilon_n), \quad (5.16)$$

$$\tilde{d}_n = \frac{1}{2e\Delta_z^2} (\varepsilon_{n-1} + 2\varepsilon_n + \varepsilon_{n+1}). \quad (5.17)$$

Diferencnu jednačinu (5.14) rešavamo na domenu $z \in [z_0, z_0 + L_p]$, gde se tačke z_n , $n = 0, 1, \dots, P$ poklapaju sa mrežom koju koristimo za rešavanje Šredingerove jednačine. Granični uslovi glase $\tilde{V}_0 = \tilde{V}_P = 0$, a diferencnu jednačinu zapisujemo u matričnom obliku kao $\mathbf{M}\tilde{\mathbf{V}} = \rho$, gde su $\tilde{\mathbf{V}}$ i ρ vektori čiji su elementi \tilde{V}_n i ρ_n , gde je indeks $n = 0 \dots P - 1$. Tridijagonalna matrica \mathbf{M} ima

elemente $M_{n,n} = -\tilde{d}_n$, $M_{n,n-1} = \tilde{s}_n$, $M_{n,n+1} = \tilde{s}_{n+1}$ i generalno se ovaj tridiagonalni sistem jednačina rešava jednostavno korišćenjem algoritma koji možete naći u [130].

5.3. Šredinger-Poasonov samosaglasni postupak

Iako se n_i^s može odrediti samo korišćenjem detaljnih transportnih modela, uobičajeno kod modelovanja KKL-a je da se usvoji sledeći uprošćeni i znatno brži pristup. Uzima se da je:

$$n_i^s = \frac{m_i^{\parallel}}{\pi\hbar^2} k_B T_L \ln(1 + e^{\frac{E_F - \tilde{E}_i}{k_B T_L}}), \quad (5.18)$$

gde je T_L temperature rešetke, a E_F hemijski potencijal koji se rekurzivno računa korišćenjem uslova elektroneutralnosti u oviru jedne KKL periode:

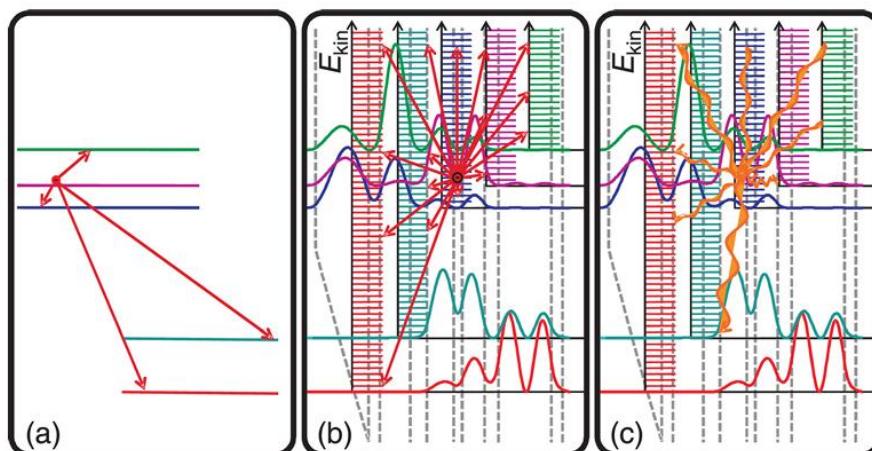
$$n^s = \int_{z_0}^{z_0 + L_p} n_D dz = \sum_i n_i^s. \quad (5.19)$$

Prvo treba odrediti donju granicu za E_F za koju važi $\sum_i n_i^s < n^s$, kao i gornju granicu za koju važi $\sum_i n_i^s > n^s$, a onda bisekcijom naći tačnu vrednost.

Potrebno je da iterativno rešavati Šredingerovu i Poasonovu jednačinu, prepostavljajući u prvoj iteraciji da je $\tilde{V} = 0$, dok vrednosti \tilde{V}, ψ_i, E_i ne iskonvergiraju [123]. U slučaju da se n_i^s određuje iz samosaglasnih transportnih simulacija (umesto da se koristi uprošćeni pristup), onda je potrebno da se i transportne simulacije i rešavanje Šredinger-Poasonovog sistema obavlja iterativno dok se ne postigne konvergencija, što je poznato kao samosamosaglasni postupak opisan npr. u referencama [132], [133].

6. MODELOVANJE TRANSPORTA NOSILACA

Složenost transportnih modela korišćenih kod KKL-a varira od vrlo jednostavnih polu-klasičnih pristupa koji koriste brzinske jednačine, do vrlo složenih modela kvantnog transporta. Zadatak transportnog modela je određivanje optičkog pojačanja koje je proporcionalno inverziji populacije između gornjeg i donjeg laserskog nivoa, kao i struje kroz strukturu u funkciji primjenjenog napona (ili spoljašnjeg električnog polja koje je srazmerno ovom naponu). Ulagani parametri većine modela su sopstvene energije i talasne funkcije koje su dobijene rešavanjem Šredinger-Poasonovog sistema, kao što je objašnjeno u 5. poglavlju. Polu-klasični pristupi u kojima se ubrajaju brzinske jednačine i Monte Karlo metod (eng. Ensemble Monte Carlo) ne uzimaju u obzir efekte kvantne koherencije i kvantnog defaziranja, koji su naročito bitni kod terahercnih KKL-a gde je energetsko rastojanje između nivoa malo, a što može prilikom izračunavnja dovesti do rezultata koji nisu fizički smisleni. Primer modela kvantnog transporta je metod matrice gustine (eng. density matrix), koji se u 1D verziji može posmatrati kao generalizacija metoda brzinskih jednačina, a često se koristi za analizu i optimizaciju THz KKL-a [101], [102], [103], [134]. Postoje i 3D verzije [135], [136]. Drugi primer kvantnog transporta je metod neravnotežne Grinove funkcije (eng. nonequilibrium Green's function, NEGF) koji važi za najgeneralniji metod kvantnog transporta kod KKL-a [137], [138], međutim po cenu jako velike potrošnje kompjuterskih resursa. Slika 6.1 ilustruje tri modela transporta, gde su (a) i (b) polu-klasični pristupi, a (c) kvantni transport. U nastavku ćemo izložiti metod brzinskih jednačina, kao i metod matrice gustine, kome ćemo posvetiti posebnu pažnju, jer nam je potreban za neke numeričke rezultate u 8. poglavlju. Više o metodama modelovanja transporta može se naći detaljno objašnjeno u [6], [123].



Slika 6.1 - Ilustracija povećavanja stepena kompleksnosti i preciznosti od (a)-(c) za tri modela transporta: (a) Brzinske jednačine, (b) Monte Karlo metod (c) 3D matrica gustine/NEGF. Preuzeto iz [123] uz dozvolu izdavača AIP Publishing.

6.1. Brzinske jednačine

Bolcmanova jednačina koja opisuje vremensku evoluciju populacije f_{jk} stanja opisanog kvantizacionim indeksom podzone j i transverzalnim talasnim vektorom $k = (k_x, k_y)$ usled rasejanja ima oblik:

$$\frac{df_{jk}}{dt} = \sum_{ik'} [P_{ik',jk} f_{ik'} - P_{jk,ik'} f_{jk}], \quad (6.1)$$

gde je $P_{ik'jk}$ brzina prelaza usled rasejanja iz stanja (i,k') u stanje (j,k) . Ukupna koncentracija elektrona koji se nalaze u podzoni j i imaju proizvoljan transverzalni talasni vektor k dobija se sumiranjem:

$$n_j \sim \sum_k f_{jk}. \quad (6.2)$$

Ako je funkcionalna forma raspodele poznata, može se izvršiti sumiranje po talasnom vektoru u Boltmanovoj jednačini što nam daje:

$$\frac{dn_j}{dt} = \sum_{k,k'} [w_{i,j} n_i - w_{j,i} n_j], \quad (6.3)$$

gde su:

$$w_{i,j} = \frac{\sum_{k,k'} P_{ik',jk} f_{ik'}}{\sum_{k'} f_{ik'}}, \quad (6.4)$$

brzine rasejanja između podzona usrednjene pomoću funkcije raspodele. Na ovaj način se ukupan broj jednačina za nosioce u pojedinačnim podzonama značajno redukuje, i ovakve jednačine su poznate pod nazivom *brzinske jednačine*.

Razmotrimo KKL strukturu sa velikim brojem perioda u primjenjenom spoljašnjem električnom polju. Energetski spektar je formalno kontinualan, ali se u veoma dobroj aproksimaciji može smatrati da se sastoji od kvazidiskretnih stanja (rezonancija). Na osnovu svojstava lokalizacije talasne funkcije, ova stanja mogu biti povezana sa različitim periodama KKL-a, tako da svaka perioda ima identičan skup od N stanja u energetskom opsegu od interesa. Rasejanje elektrona se dešava između stanja unutar iste periode, i između stanja povezanih sa različitim periodama, pri čemu ovaj poslednji mehanizam očigledno postaje manje efikasan za udaljenije periode, zbog smanjenog preklapanja talasnih funkcija.

Uz prepostavku identične raspodele elektrona u svakoj periodi, može se uzeti u obzir neka „centralna“ perioda i uzeti M najbližih suseda sa obe strane, i napisati brzinske jednačine rasejanja u ravnotežnom stanju [139]:

$$\begin{aligned} \frac{dn_f}{dt} = 0 = & \sum_{i=1}^N n_i W_{i,f} - n_f \sum_{i=1}^N W_{f,i} \\ & + \sum_{k=i}^M \left[\sum_{i=1}^N n_i (W_{i,f+kN} + W_{i+kN,f}) - n_f \sum_{i=1}^N (W_{f,i+kN} + W_{f+kN,i}) \right], \end{aligned} \quad (6.5)$$

gde je $i + kN$ i -to stanje k -te susedne periode, $W_{i,f}$ je ukupna brzina rasejanja iz stanja i u stanje f , a n_i je gustina elektrona i -tog stanja.

Gustina struje se računa kao suma doprinosa svih prelaza kroz referentnu ravan putem rasejanja. Uračunavaju se komponente unutar periode i između perioda.

$$J = e \sum_{i=1}^N n_i \sum_{k=1}^M k \sum_{f=1}^N (W_{i,f+kN} - W_{i+kN,f}). \quad (6.6)$$

6.1.1. Primer brzinskih jednačina: optičko pojačanje u magnetnom polju

U ovom primeru posmatramo KKL koji radi u srednjem infracrvenom delu spektra i koji modelujemo kao tronivovski laser. Ukoliko se struktura nalazi u spoljašnjem magnetnom polju, dolazi do dodatne kvantizacije podzona i pojave Landauovih nivoa. Ukupno pojačanje na svim prelazima između Landauovih nivoa koji pripadaju podzonama $n = 3$ i $n = 2$ aktivne oblasti KKL-a dato je izrazom:

$$g_{3 \rightarrow 2} = \frac{2e^2\pi^2}{\bar{n}\epsilon_0} \frac{d^2}{\lambda} \sum_i \delta(E_{3,i} - E_{2,i} - \hbar\omega)(N_{3,i} - N_{2,i}). \quad (6.7)$$

Da bi se izračunala inverzna populacija $N_{3,i} - N_{2,i}$ koja određuje vrednost pojačanja potrebno je odrediti raspodelu elektrona po svim nivoima aktivne oblasti.

Distribucija nosilaca injektovanih u aktivnu oblast se može odrediti rešavanjem sistema brzinskih jednačina kojim se opisuje promena populacije kao razlika između brzine kojom se nosioci injektuju i brzine pri kojoj napuštaju aktivnu oblast:

$$N_i \sum_{j \neq i} \frac{\bar{f}_j}{\tau_{i \rightarrow j}} - \bar{f}_i \sum_{j \neq i} \frac{N_j}{\tau_{j \rightarrow i}} + \frac{J_i}{e} = 0, \quad (6.8)$$

gde nam $1/\tau_{i \rightarrow j}$ predstavlja brzinu relaksacije elektrona pri neradijativnim prelazima iz stanja i u stanje j , usled npr. emisije LO fonona, a $\bar{f}_i(E_i) = 1 - f_{FD}(E_i)$. U slučaju tronivovskog modela, ulazna i izlazna struja se računaju kao:

$$J_{1,k} = J \frac{e^{-\frac{E_{1,k}}{k_B T}}}{\sum_{p=0}^{l_{\max 1}} e^{-\frac{E_{1,p}}{k_B T}}}, \quad (6.9)$$

$$J_{3,k} = J \frac{e^{-\frac{E_{3,k}}{k_B T}}}{\sum_{p=0}^{l_{\max 3}} e^{-\frac{E_{3,p}}{k_B T}}}, \quad (6.10)$$

gde nam je J konstantna površinska gustina struje kojom se injektuju elektroni na gornji laserski nivo, a l_{\max} je određen tako da svi nivoi iznad $(3, l_{\max})$ mogu smatrati neokupiranim. Pri nižim temperaturama možemo zanemariti proces apsorpcije fonona te sistem jednačina glasi [140], [141]:

$$\frac{\partial N_{3,l_{\max 3}}}{\partial t} = \frac{J_{3,l_{\max 3}}}{e} - N_{3,l_{\max 3}} \left[\sum_{p=0}^{l_{\max 3}} \frac{\bar{f}(E_{3,p})}{\tau_{3,l_{\max 3};3,p}} + \sum_{i=0}^{l_{\max 2}} \frac{\bar{f}(E_{2,i})}{\tau_{3,l_{\max 3};2,i}} + \sum_{j=0}^{l_{\max 1}} \frac{\bar{f}(E_{1,j})}{\tau_{3,l_{\max 3};1,j}} \right] = 0,$$

⋮

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial N_{3,k}}{\partial t} &= \frac{J_{3,k}}{e} + \bar{f}(E_{3,k}) \left[\sum_{p=k+1}^{l_{\max 3}} \frac{N_{3,p}}{\tau_{3,p;3,k}} + \sum_{i=i_{\min(3,k)}}^{l_{\max 2}} \frac{N_{2,i}}{\tau_{2,i;3,k}} + \sum_{j=j_{\min(3,k)}}^{l_{\max 1}} \frac{N_{1,j}}{\tau_{1,j;3,k}} \right] \\
 &\quad - N_{3,k} \left[\sum_{p=0}^{k-1} \frac{\bar{f}(E_{3,p})}{\tau_{3,k;3,p}} + \sum_{i=0}^{i_{\min(3,k)}-1} \frac{\bar{f}(E_{2,i})}{\tau_{3,k;2,i}} + \sum_{j=0}^{j_{\min(3,k)}-1} \frac{\bar{f}(E_{1,j})}{\tau_{3,k;1,j}} \right] = 0, \\
 &\vdots \\
 \frac{\partial N_{2,l_{\max 2}}}{\partial t} &= \bar{f}(E_{2,l_{\max 2}}) \left[\sum_{p=p_{\min(l_{\max 2})}}^{l_{\max 3}} \frac{N_{3,p}}{\tau_{3,p;2,l_{\max 2}}} + \sum_{j=j_{\min(2,l_{\max 2})}}^{l_{\max 1}} \frac{N_{1,j}}{\tau_{1,j;2,l_{\max 2}}} \right] \\
 &\quad - N_{2,l_{\max 2}} \left[\sum_{p=0}^{p_{\min(l_{\max 2})}-1} \frac{\bar{f}(E_{3,p})}{\tau_{2,l_{\max 2};3,p}} + \sum_{i=0}^{l_{\max 2}-1} \frac{\bar{f}(E_{2,i})}{\tau_{2,l_{\max 2};2,i}} + \sum_{j=0}^{i_{\min(l_{\max 2})}-1} \frac{\bar{f}(E_{1,j})}{\tau_{2,l_{\max 2};1,j}} \right] = 0, \\
 &\vdots \\
 \frac{\partial N_{2,0}}{\partial t} &= \bar{f}(E_{2,0}) \left[\sum_{p=0}^{l_{\max 3}} \frac{N_{3,p}}{\tau_{3,p;2,0}} + \sum_{i=1}^{l_{\max 2}} \frac{N_{2,i}}{\tau_{2,i;2,0}} + \sum_{j=j_{\min(2,0)}}^{l_{\max 1}} \frac{N_{1,j}}{\tau_{1,j;2,0}} \right] - N_{2,l_{\max 2}} \sum_{j=0}^{j_{\min(2,0)}-1} \frac{\bar{f}(E_{1,j})}{\tau_{2,0;1,j}} = 0, \\
 &\vdots \\
 \frac{\partial N_{1,k}}{\partial t} &= \bar{f}(E_{1,k}) \left[\sum_{p=p_{\min(1,k)}}^{l_{\max 3}} \frac{N_{3,p}}{\tau_{3,p;1,k}} + \sum_{i=i_{\min(1,k)}}^{l_{\max 2}} \frac{N_{2,i}}{\tau_{2,i;1,k}} + \sum_{j=k+1}^{l_{\max 1}} \frac{N_{1,j}}{\tau_{1,j;1,k}} \right] \\
 &\quad - N_{1,k} \left[\sum_{p=0}^{p_{\min(1,k)}-1} \frac{\bar{f}(E_{3,p})}{\tau_{1,k;3,p}} + \sum_{i=0}^{i_{\min(1,k)}-1} \frac{\bar{f}(E_{2,i})}{\tau_{1,k;2,i}} + \sum_{j=0}^{k-1} \frac{\bar{f}(E_{1,j})}{\tau_{1,k;1,j}} \right] - \frac{J_{1,k}}{e} = 0, \\
 &\vdots \\
 \frac{\partial N_{1,1}}{\partial t} &= \bar{f}(E_{1,1}) \left[\sum_{p=p_{\min(1,1)}}^{l_{\max 3}} \frac{N_{3,1}}{\tau_{3,p;1,1}} + \sum_{i=i_{\min(1,1)}}^{l_{\max 2}} \frac{N_{2,i}}{\tau_{2,i;1,1}} + \sum_{j=2}^{l_{\max 1}} \frac{N_{1,j}}{\tau_{1,j;1,1}} \right] \\
 &\quad - N_{1,1} \left[\sum_{p=0}^{p_{\min(1,1)}-1} \frac{\bar{f}(E_{3,p})}{\tau_{1,1;3,p}} + \sum_{i=0}^{i_{\min(1,1)}-1} \frac{\bar{f}(E_{2,i})}{\tau_{1,1;2,i}} + \frac{\bar{f}(E_{1,0})}{\tau_{1,1;1,0}} \right] - \frac{J_{1,1}}{e} = 0.
 \end{aligned} \tag{6.11}$$

Veličine $l_{\max 1}$ i $l_{\max 2}$ predstavljaju maksimalne vrednosti Landauovih indeksa nivoa koji potiču od dve niže podzone i za njih važe sledeće nejednakosti:

$$E_{3,0} - E_{1,l_{\max 1}} > 0, \tag{6.12}$$

$$E_{3,0} - E_{2,l_{\max 2}} > 0. \tag{6.13}$$

Rešavajući gornji sistem od ukupno $l_{\max 1} + l_{\max 2} + l_{\max 3} + 2$ nelinearnih jednačina, zajedno sa zakonom održanja ukupnog nanelektrisanja čestica:

$$\sum_{n,l} N_{n,l} = N_s, \tag{6.14}$$

gde je N_s ukupna površinska koncentracija nanelektrisanja određena dopiranjem, dobijamo optičko pojačanje aktivne oblasti KKL-a dato sa (6.7).

Nedavno je objavljen rad u kome se kombinuju rezonantno tunelovanje i brzinske jednačine za modelovanje transporta terahercnog KKL-a [83] i poređeni su rezultati sa naprednjim modelima, kao što je NEGF.

6.2. Metod matrice gustine

Kod kvantnog transporta elektrona kroz barijeru imamo koherentnu superpoziciju stanja koja se prostiru kroz celu strukturu između kojih je mala energija antikrosinga Δ_E , što rezultuje lokalizovanim talasnim paketom elektrona koji, zbog koherentne evolucije ovih bliskih stanja, osciluje između leve i desne Jame Rabijevom frekvencijom oscilovanja $\Omega = \Delta_E/\hbar$, a vreme tunelovanja određeno je sa $\tau_{tun} = \pi/\Omega$ [123]. U slučaju jakog defaziranja sa vremenima relaksacije koja ispunjavaju uslov $\tau < \tau_{tun}$, talasni paket više ne osciluje, već se elektroni akumuliraju u levoj jami, a struja postaje ograničena tunelovanjem kroz injekcionu barijeru. Ovaj efekat, poznatiji kao lokalizacija talasne funkcije usled defaziranja, nastaje u slučaju debele injekcione barijere i male antikrosing energije koje dovode do velikog τ_{tun} , što je pogotovo slučaj kod THz KKL-a. Tipični parametri kod THz KKL-a su $\Delta_E \approx 1$ meV, kome odgovara $\tau_{tun} \approx 2$ ps, dok je vreme defaziranja oko 0.3 ps.

Često se u praksi, umesto stanja koja se prostiru kroz celu strukturu, koriste lokalizovane talasne funkcije koje se određuju na jednoj periodi, pod pretpostavkom da su injekcione barijere na levom i desnom kraju periode beskonačno debele. Ovo je aproksimacija jake veze (eng. tight binding). I Šredingerova jednačina se rešava za taj novi potencijal V_{tb} , a ne za realni potencijal V . Rabijeva frekvencija za dublet stanja koja učestvuju u tunelovanju data je sa $\Omega_{ij} = \hbar^{-1}\langle i|V - V_{tb}|j \rangle$ [123].

Talasne funkcije ψ_i predstavljaju čista stanja i pomoću njih se ne mogu adekvatno opisati efekti dekoherencije usled interakcije sa okruženjem, već se ovo postiže korišćenjem matrice gustine $\rho_{ij}(t)$ kojom su predstavljena i čista i mešana stanja. Više o samoj matrici gustine može se naći u [142]. Elementi na dijagonali ρ_{ii} predstavljaju zauzetost i -tog stanja, dok vandijagonalni elementi ρ_{ij} predstavljaju koherenciju ili polarizaciju za dublet i, j . Može se izvršiti normalizacija tako da dijagonalni elementi predstavljaju površinsku koncentraciju $\rho_{ii} = n_i^s$. Vremenska evolucija matrice gustine $\rho_{ij}(t)$ data je Liuvilovom jednačinom [143]:

$$\frac{\partial \rho_{ij}(t)}{\partial t} = \sum_m (H_{im}\rho_{mj} - \rho_{im}H_{mj}), \quad (6.15)$$

odnosno, u operatorskom obliku kao:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (6.16)$$

Obično se u Liuvilovu jednačinu dodaju rasejanja kroz disipator $\widehat{\mathcal{D}} = -\hat{\rho}/\tau$, kako bi se uračunali procesi koji su odgovorni za dekoherenciju sistema. Liuvilova jednačina može se razviti na sledeći način [123]:

$$\frac{dn_i^s}{dt} = \sum_{j \neq i} \tau_{ji}^{-1} n_j^s - \tau_i^{-1} n_i^s + \sum_j i \Omega_{ij} (\rho_{ij} - \rho_{ji}), \quad (6.17)$$

$$\frac{d\rho_{ij}}{dt} = i\Omega_{ij} (n_i^s - n_j^s) - i\rho_{ij} \omega_{ij} - \gamma_{ij} \rho_{ij}, \quad (6.18)$$

gde je $\omega_{ij} = (E_i - E_j)/\hbar$ frekvencija prelaza, $\tau_i^{-1} = \sum_{j \neq i} \tau_{ij}^{-1}$ je ukupno inverzno vreme života i -tog nivoa, τ_{ji}^{-1} je inverzno vreme rasejanja između nivoa j i i , dok je vreme defaziranja dato sa [144]:

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{2}(\tau_i^{-1} + \tau_j^{-1}) + \tau_{pure,ij}^{-1}. \quad (6.19)$$

Bitno je da se kaže i da je Rabijeva frekvencija Ω_{ij} različita od nule samo za dublet koji je u injektorskoj barijeri.

U nastavku će biti izložen model koji je korišćen za numeričke proračune [103], [145] i koji koristi aproksimacije prvog suseda i jaku vezu, a podrazumeva beskonačno dugačku KKL strukturu. Mehanizmi rasejanja koji podrazumevaju neradijativnu interakciju elektrona sa LO-fononima, akustičnim fononima, poremećajem u leguri, neravninama na međuspoju, jonizovanim primesama, kao i drugim elektronima, opisani su kao perturbacije pomoću Fermijevog zlatnog pravila.

6.2.1. Implementacija metoda

Proračuni transporta pomoću matrice gustine oslanjaju se na izbor odgovarajućih bazisnih stanja za koherentan transport kroz KKL. Konvencionalni pristupi koriste bazis sa N stanja za modelovanje transporta kroz jednu injekcionu barijeru, gde je jedna injektorska podzona izabrana u periodi levo od barijere, a preostalih $N-1$ podzona je u periodi desno. Koherencije između injektora i preostalih podzona opisuju tunelovanje između perioda. Neki pristupi pojednostavljaju izračunavanje odabirom samo podskupa stanja iz perioda desno od barijere. Ručni izbor podzone injektora zahteva *a priori* poznavanje elektronske strukture KKL-a i stoga je nepraktično i nekompatibilno sa tehnikama optimizacije dizajna. Ovde će biti izložena numerička implementacija metoda matrice gustine, transportnog modela idealizovanog KKL-a sa beskonačnim brojem perioda, predstavljenog u radu [103]. Ovaj model će kasnije biti iskorišćen za proračun transporta THz KKL-a na bazi ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO u 8. poglavljvu.

Podimo za početak od malo jednostavnijeg modela [146] koji uzima u obzir tri susedne periode KKL-a. Rezultujuća $3N \times 3N$ matrica gustine za ovaj sistem ima sledeći oblik:

$$\rho = \begin{bmatrix} \rho_{GG} & \rho_{GC} & \rho_{GD} \\ \rho_{CG} & \rho_{CC} & \rho_{CD} \\ \rho_{DG} & \rho_{DC} & \rho_{DD} \end{bmatrix}, \quad (6.20)$$

gde indeksi C , G i D označavaju centralnu, gornju i donju periodu strukture. Svaki od ovih matričnih elemenata je $N \times N$ matrica sačinjena od gustina za parove stanja u periodi, kao na primer:

$$\rho_{CC} = \begin{bmatrix} \rho_{1,1} & \cdots & \rho_{1,N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{N,1} & \cdots & \rho_{N,N} \end{bmatrix}. \quad (6.21)$$

Ovde su elementi matrice nepoznate vrednosti koje treba odrediti, a koje predstavljaju srednju vrednost težinskih koeficijenata bazisnih stanja, $\rho_{ij} = \overline{c_i^* c_j}$. Hamiltonian ovakve strukture sa tri periode možemo predstaviti kao:

$$H = \begin{bmatrix} H_{GG} & H_{GC} & H_{GD} \\ H_{CG} & H_{CC} & H_{CD} \\ H_{DG} & H_{DC} & H_{DD} \end{bmatrix}, \quad (6.22)$$

gde svaki element predstavlja interakciju između centralne (C), gornje (G) i donje (D) periode. Sistem možemo zнатно da pojednostavimo ako ignorишемо direktno sprezanje između G i D periode, $H_{GD} = H_{DG} = 0$, i ako koristimo simetriju stukture važi da je $H_{CD} = H_{GC}$, $H_{DC} = H_{CG}$, $H_{GG} = H_{CC} + eKL_p$ i $H_{DD} = H_{CC} - eKL_p$, gde je K vrednost primjenjenog spoljašnjeg električnog polja, a L_p je dužina periode [103]. Ako usvojimo notaciju $H_{CC} \equiv H_1$, $H_{GC} \equiv H_2$, $H_{CG} \equiv H_3$, Hamiltonian (6.22) postaje:

$$H = \begin{bmatrix} H_1 + eKL_p & H_2 & 0 \\ H_3 & H_1 & H_2 \\ 0 & H_3 & H_1 - eKL_p \end{bmatrix}, \quad (6.23)$$

a matrica gustina:

$$\rho = \begin{bmatrix} \rho_1 & \rho_2 & 0 \\ \rho_3 & \rho_1 & \rho_2 \\ 0 & \rho_3 & \rho_1 \end{bmatrix}. \quad (6.24)$$

Blok H_1 u Hamiltonijanu odnosi se na centralnu periodu i sačinjen je od energija na glavnoj dijagonali i vandijagonalnih elemenata oblika $H_{ij} = ez_{ij}A_{inc}$ gde su z_{ij} dipolni matrični elementi a A_{inc} je električno polje incidentne svetlosti. Ako prepostavimo, kao u [103] i [146], da optičko polje ima oblik:

$$A_{inc} = A_0(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (6.25)$$

vrednosti Hamiltonijana centralne periode onda možemo zapisati kao:

$$H_1 = H^{dc} + H^{ac+}e^{i\omega t} + H^{ac-}e^{-i\omega t}, \quad (6.26)$$

gde je H^{dc} glavna dijagonala bloka H_1 , dok za ostale vrednost važi da je $|H^{ac+}| = |H^{ac-}|$ gde je $H_{ij}^{ac} = ez_{ij}A_0, i \neq j$. Elementi H_2 i H_3 imaju samo DC vrednosti i važi da je $H_2 = H_3^\dagger$. Bitno je naglasiti da elementi H_2 i H_3 sadrže članove sa Rabijevom frekvencijom (polovina energije antikrosinga podeljeno sa \hbar), koji se dobijaju na način opisan u [146]. Za transport unutar periode koriste se polu-klasične brzinske jednačine dobijene pomoću Fermijevog zlatnog pravila, ali se za transport između dve periode koristi rasejanje koje samo menja fazu, ali ne prouzrokuje depopulaciju. Dakle, za razliku od brzinskih jednačina, kod kojih se koristi Fermijevo zlatno pravilo i za transport između dve periode, kod ovog pristupa se uzima da se tunelovanje dešava na Rabijevoj frekvenciji kroz injekcionu barijeru (opisano u blokovima H_2 i H_3), kao i da stanja menjaju fazu tokom tog procesa.

Liuvilova jednačina (6.16) u koju smo dodali disipator opisuje vremensku evoluciju matrice gustine iz (6.24):

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] - \left(\frac{d\rho}{dt}\right)_{relaksacija}. \quad (6.27)$$

Član koji opisuje relaksaciju iz (6.8) možemo zapisati kao ρ/τ_r gde nam τ_r^{-1} ima oblik [103]:

$$\tau_r^{-1} = \begin{bmatrix} \left(\frac{1}{\tau}, \frac{1}{\tau_{||}''}\right) & \frac{1}{\tau_{||}} & 0 \\ \frac{1}{\tau_{||}} & \left(\frac{1}{\tau}, \frac{1}{\tau_{||}''}\right) & \frac{1}{\tau_{||}} \\ 0 & \frac{1}{\tau_{||}} & \left(\frac{1}{\tau}, \frac{1}{\tau_{||}''}\right) \end{bmatrix}. \quad (6.28)$$

Ovde $\left(\frac{1}{\tau}, \frac{1}{\tau_{||}''}\right)$ označava da blokovi sa dijagonale sadrže vremena života (τ) i vremena defaziranja ($\tau_{||}''$) unutar iste periode, dok blokovi van dijagonale sadrže samo vremena defaziranja ($\tau_{||}$) između stanja u različitim periodama [103]. Blokovi matrice relaksacije glase:

$$\left(\frac{\rho_1}{\tau}\right)_{ii} = \frac{\rho_{1ii}}{\tau_i} - \sum_{i \neq j} \frac{\rho_{1jj}}{\tau_{ji}}, \quad (6.29)$$

$$\left(\frac{\rho_1}{\tau}\right)_{ij} = \frac{\rho_{1ij}}{\tau_{||ij}}, \quad (6.30)$$

$$\frac{1}{\tau_{||ij}} = \frac{1}{2\tau_i} + \frac{1}{2\tau_j} + \frac{1}{\tau_{ii}} + \frac{1}{\tau_{jj}} - \frac{2}{\sqrt{\tau_{ii}^{IFR} \tau_{jj}^{IFR}}}, \quad (6.31)$$

gde su $\tau_i = \left(\sum \frac{1}{\tau_{ij}}\right)^{-1}$ vremena života stanja, a τ_{ij} prestavlja ukupno vreme života usled rasejanja između podzona nastala usled svih mogućih mehanizama rasejanja. Data vremena su dobijena usrednjavanjem propračuna Fermijevog zlatnog pravila kao u [91]. Vremena defaziranja $\tau_{||ij}$ ne zavise od unutarzonskih procesa tako da (6.29)-(6.31) važe za sve blokove u sistemu (6.28). Defaziranje se dešava između različitih stanja tako da su elementi glavne dijagonale $\frac{1}{\tau_{||}''}$ nule.

Blokovi (6.23), (6.24) i (6.28) su $N \times N$ matrice tako da njih treba zameniti u (6.27). Problem nastaje u matrici Hamiltonijana (6.23), zbog činjenice da gornja perioda GG ne interaguje sa periodom „iznad“ (levo od) nje, i analogno donja perioda GG ne interaguje sa periodom „ispod“ (desno od) nje, što znači da se moraju bolje definisati granični uslovi. Naime, zamenom (6.23) i (6.24) u Liuvilovu jednačinu (6.27) dobijamo sledeći izraz:

$$Q = \begin{bmatrix} C_G & G & E_2 \\ D & C & G \\ E_3 & D & C_D \end{bmatrix} = \frac{i}{\hbar} \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \rho_1 & \rho_2 & 0 \\ \rho_3 & \rho_1 & \rho_2 \\ 0 & \rho_3 & \rho_1 \end{bmatrix} + i\hbar \left(\frac{d\rho}{dt} \right)_{relaksacija}, \quad (6.32)$$

gde matrica Q predstavlja matricu komutatora i njeni elementi imaju vrednosti:

$$\begin{aligned} C_G &= [H_1, \rho_1] - \rho_2 H_3 + H_2 \rho_3, \\ C_D &= [H_1, \rho_1] + H_3 \rho_2 - \rho_3 H_2, \\ C &= [H_1, \rho_1] + [H_3, \rho_2] + [H_2, \rho_3], \\ G &= [H_2, \rho_1] + [H_1, \rho_2] + eKL_p \rho_2, \\ D &= [H_3, \rho_1] + [H_1, \rho_3] - eKL_p \rho_3, \\ E_2 &= [H_2, \rho_2], \\ E_3 &= [H_3, \rho_3]. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Jednačina (6.32) je ermitska, ali jednačine na glavnoj dijagonali nisu identične. U ovom slučaju imamo više jednačina nego što imamo promenljivih (sedam jednačina i tri promenljive). Jednačine

E_2 i E_3 opisuju sprezanje između GG i DD perioda što možemo da zanemarimo. Konstruišimo $P \times P$ sistem. Tada (6.32) postaje pentadiagonalna matrica [103]. Vrednost matrice komutatora $Q_{P \times P}$ sada ima članove C_G i C_D na krajevima glavne dijagonale, dok su ostali članovi glavne dijagonale jednaki C . Pretpostavimo da krajevi naprave nemaju uticaj na strukturu te da se mogu zanemariti. Iz (6.33) biramo jednačine za C , G i D da bi mogli da rešimo sistem i pustimo granični slučaj da $P \rightarrow \infty$ kada tražimo izlaz modela. Posmatrajmo slučaj za $P = 3$. Dipolna matrica sistema ima oblik:

$$Z_S = \begin{bmatrix} Z - L_p I & 0 & 0 \\ 0 & Z & 0 \\ 0 & 0 & Z + L_p I \end{bmatrix}, \quad (6.34)$$

gde je I jedinična $N \times N$ matrica. Z_S se proširuje u zavisnosti od izabrane vrednosti broja perioda, te izlaz sistema mora da se gleda kao limes kada $P \rightarrow \infty$. Pošto ovaj model koristi metodu jake veze, Z_S nema međuperiodne komponente.

Svaki komutator u sistemu (6.33) može da se linearizuje kao $L_i = H_i \otimes I - I \otimes H_i^T$. Kada primenimo aproksimaciju nerotirajućih talasa kao u [146] ceo sistem možemo da zapišemo kao:

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{ccccccccc} L_1^{dc} & L_1^{ac} & L_1^{ac} & L_3 & 0 & 0 & L_2 & 0 & 0 \\ L_1^{ac} & L_1^{dc} & 0 & 0 & L_3 & 0 & 0 & L_2 & 0 \\ L_1^{ac} & 0 & L_1^{dc} & 0 & 0 & L_3 & 0 & 0 & L_2 \\ L_2 & 0 & 0 & L_1^{dc} + V_\delta & L_1^{ac} & L_1^{ac} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & L_2 & 0 & L_1^{ac} & L_1^{dc} + V_\delta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L_2 & L_1^{ac} & 0 & L_1^{dc} + V_\delta & 0 & 0 & 0 \\ L_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & L_1^{dc} - V_\delta & L_1^{ac} & 0 \\ 0 & L_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & L_1^{ac} & L_1^{dc} - V_\delta & 0 \\ 0 & 0 & L_3 & 0 & 0 & 0 & L_1^{ac} & 0 & L_1^{dc} - V_\delta \end{array} \right) \\ & - \left(\begin{array}{ccccccccc} \tau_{lin}^{-1} + \tau_{lin||}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau_{lin}^{-1} + \tau_{lin||}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{lin}^{-1} + \tau_{lin||}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tau_{lin||}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \tau_{lin||}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tau_{lin||}^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tau_{lin||}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tau_{lin||}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tau_{lin||}^{-1} \end{array} \right) \begin{bmatrix} \rho_1^{dc'} \\ \rho_1^{ac+'} e^{i\omega t} \\ \rho_1^{ac-'} e^{-i\omega t} \\ \rho_2^{dc'} \\ \rho_2^{ac+'} e^{i\omega t} \\ \rho_2^{ac-'} e^{-i\omega t} \\ \rho_3^{dc'} \\ \rho_3^{ac+'} e^{i\omega t} \\ \rho_3^{ac-'} e^{-i\omega t} \end{bmatrix} \\ & - \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \rho_1^{dc'} \\ \rho_1^{ac+'} e^{i\omega t} \\ \rho_1^{ac-'} e^{-i\omega t} \\ \rho_2^{dc'} \\ \rho_2^{ac+'} e^{i\omega t} \\ \rho_2^{ac-'} e^{-i\omega t} \\ \rho_3^{dc'} \\ \rho_3^{ac+'} e^{i\omega t} \\ \rho_3^{ac-'} e^{-i\omega t} \end{bmatrix}, \quad (6.35) \end{aligned}$$

gde su $V_\delta = eKL_P I_{N^2 \times N^2}$, $\rho_3^{ac/dc'}$ anvelopne funkcije, a τ_{lin}^{-1} i $\tau_{lin||}^{-1}$ su linearizovani blokovi reda $N^2 \times N^2$, koji za slučaj $N = 2$ imaju oblik:

$$\tau_{||}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tau_{||11}} & \frac{1}{\tau_{||12}} \\ \frac{1}{\tau_{||21}} & \frac{1}{\tau_{||22}} \end{bmatrix}, \tau_{lin||}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tau_{||11}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\tau_{||12}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\tau_{||21}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\tau_{||22}} \end{bmatrix}, \quad (6.36)$$

$$\tau^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tau_{11}} & \frac{1}{\tau_{12}} \\ \frac{1}{\tau_{21}} & \frac{1}{\tau_{22}} \end{bmatrix}, \tau_{lin}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tau_{11}} & 0 & 0 & \frac{1}{\tau_{12}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\tau_{21}} & 0 & 0 & \frac{1}{\tau_{22}} \end{bmatrix}^T. \quad (6.37)$$

Ako konstruišemo Hamiltonijan (6.23) za P perioda, Hamiltonijan i odgovarajuća matrica gustina (6.24) postaju tridiagonalne $P \times P$ matrice, a komutator u (6.27) postaje pentadiagonalna matrica, kao što je već rečeno. Jednačine na glavnoj dijagonali se samo razlikuju na krajevima, što znači da ignorisemo kontakte KKL-a i pretpostavljamo trenutnu injekciju. Po uzoru na [147], [148] koristimo aproksimaciju da $P \rightarrow \infty$. Ovakva aproksimacija dovodi do toga da (6.27) dobije sledeći oblik:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_1}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} ([H_1, \rho_1] + [H_3, \rho_2] + [H_2, \rho_3]) - \frac{\rho_1}{\tau} - \frac{\rho_1}{\tau_{||}}, \\ \frac{d\rho_2}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} ([H_2, \rho_1] + [H_1, \rho_2] + eKL_P \rho_2) - \frac{\rho_2}{\tau_{||}}, \\ \frac{d\rho_3}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} ([H_3, \rho_1] + [H_1, \rho_2] - eKL_P \rho_3) - \frac{\rho_3}{\tau_{||}}. \end{aligned} \quad (6.38)$$

Gustina struje je izražena kao očekivana vrednost prosečne brzina drifa [103], [149]:

$$J = \frac{ien_S}{\hbar L_P} [H, Z_S], \quad (6.39)$$

gde je n_S površinska gustina nanelektrisanja, a Z_S je dipolna blok-dijagonalna matrica koja odgovara matrici Hamiltonijana H , čija dijagonala sadrži jednake blokove Z koji odgovaraju centralnoj periodi i ofset $\pm eKL_P$ za susedne periode usled njihove prostorne pomerenosti od centra. Odgovarajuća vrednost J se računa kao $\text{Tr}(\rho J)$, a koja u beskonačnoj strukturi ima oblik:

$$j = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr}(\rho J)}{M} = \frac{ien_S}{\hbar L_P} \text{Tr}(\rho_1[H_1, Z] + \rho_2[H_3, Z] + \rho_3[H_2, Z] + L_P(H_2\rho_3 - \rho_2H_3)), \quad (6.40)$$

Trag matrice u izrazu (6.40) prolazi kroz svaki član posebno i ima cikličnu osobinu što znači da na komutatorima ima osobinu $\text{Tr}(\rho_i[H_i, Z]) = -\text{Tr}(Z[H_i, \rho_i])$, te dati izraz možemo zapisati kao:

$$j = \frac{i e n_s}{L_p} \text{Tr} \left(Z \left(\frac{d\rho_1}{dt} + \frac{\rho_1}{\tau} + \frac{\rho_1}{\tau_{||}} \right) \right) + \frac{i e n_s}{L_p} \text{Tr}(H_2 \rho_3 - \rho_2 H_3). \quad (6.41)$$

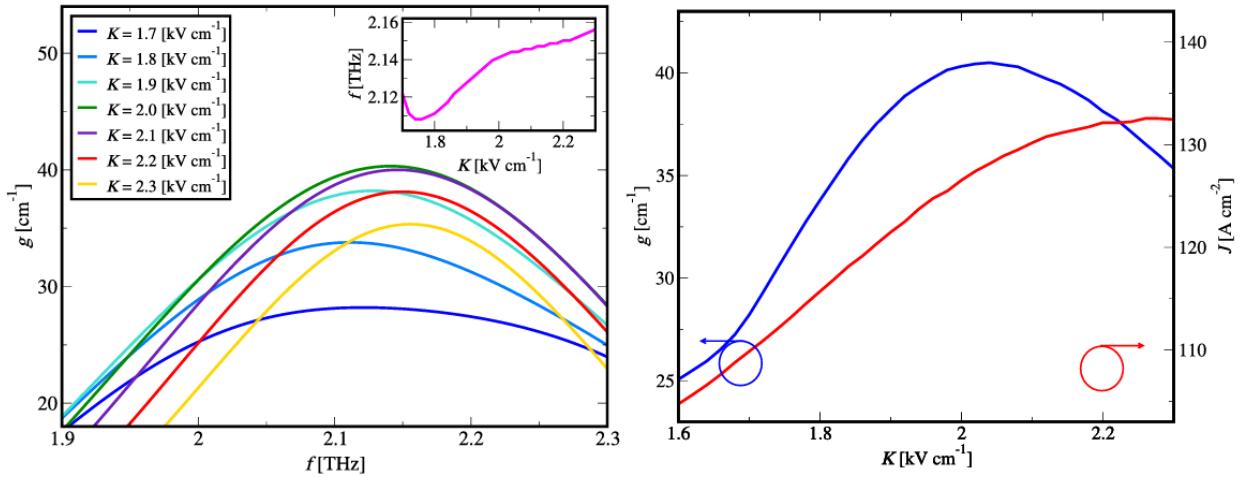
Struja ima vremenski nezavisnu (dc) i harmonisku (ac) komponentu, gde ac komponentu koristimo da dobijemo kompleksnu permitivnost ε elektronskog gasa aktivnog medijuma kao $j_{ac} = \varepsilon \frac{d}{dt} A_{inc}$. Ako nam je $A_{inc} = A_0 e^{i\omega t}$ pojačanje ima oblik:

$$g = \frac{\omega_0 \text{Im}(\varepsilon)}{n_r c} = -\frac{\omega_0 e n_{2D}}{\varepsilon_0 A_0 n_r c L_p \hbar} \text{Tr}(\rho_1^{ac} Z), \quad (6.42)$$

gde je n_r indeks prelamanja, a c brzina svetlosti u vakuumu.

6.2.2. Postupak proračuna transportnih karakteristika

Cilj nam je da odredimo transportne parametre: materijalno pojačanje g , gustinu struje J i frekvenciju na kojoj laser emituje f , kao funkcije primjenjenog spoljašnjeg električnog polja K koje je direktno srazmerno primjenjenom spoljašnjem naponu. Ovde će biti u kratkim crtama predstavljeni glavni koraci algoritma koji se koristi za proračun ovih parametara. Najpre se podese temperatura rešetke T_L i jačina električnog polja K , zatim se reše samosaglasno Šredinger-Poasonov sistem i jednačina kinetičkog balansa u aproksimaciji ekvitermalne podzone, odakle se dobijaju elektronska struktura i elektronska temperatura [132]. Korišćenjem transportnog modela matrice gustine opisanog u ovom poglavljju dobiju se zavisnosti pojačanja od fregvencije $g(f)$ i gustina struje J . Maksimum krive $g(f)$ se uzima kao vrednost nesaturiranog pojačanja, a frekvencija koja odgovara maksimumu za lasersku frekvenciju. Na istoj temperaturi rešetke, proces se ponavlja za veći opseg vrednosti spoljašnjeg električnog polja. Nakon toga se ekstrahuju zavisnosti nesaturiranog pojačanja od polja, $g(K)$, kao i zavisnost gustine struje od polja $J(K)$. Maksimum krive $g(K)$ odgovara rezonantnom tunelovanju, dok maksimum krive $J(K)$ odgovara tački negativne diferencijalne otpornosti, NDR tački, gde naprava u eksperimentalnim uslovima naglo prestaje da laseruje. Dakle, kada gustina struje pređe neki prag koji je određen time da je materijalno pojačanje veće od gubitaka (prag pojačanja), naprava počinje da radi i radi sve dok je gustina struje manja od maksimalne vrednosti određene NDR tačkom. Vrednost električnog polja koja odgovara NDR tački se ekstrahuje iz modela i označava sa K_{NDR} . Ova procedura ilustrovana je na primeru strukture BTC KKL-a koji radi na 2 THz [102], [103], na Slici 6.2.



Slika 6.2 - Proračun transportnih karakteristika na primeru GaAs THz KKL BTC laseru iz [103]. (a) Materijalno pojačanje u zavisnosti od frekvencije emisije $g(f)$, prikazano za različite vrednosti spoljašnjeg električnog polja. Maksimum funkcije $g(f)$ odgovara laserskom modu za konkretnu vrednost polja, a ekstrakcijom tih maksimuma za opseg vrednosti polja dobija se na slici (b) zavisnost pojačanja od polja $g(K)$. Mala slika na panelu (a) prikazuje frekvenciju emisije koja odgovara maksimumu pojačanja u zavisnosti od električnog polja. (b) Materijalno pojačanje g , i gustina struje J kao funkcije električnog polja K . Preuzeto iz [102], pod uslovima Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

7. DEPOLARIZACIONI POMERAJ

Izračunavanje talasnih funkcija (anvelopnih funkcija) sprovodi se, kao što smo videli u 5. poglavlju, samosaglasnim rešavanjem anvelopne Šredingerove i Poasonove jednačine. Pri postavljanju Hamiltonijana sistema, uglavnom se razmatra jednoelektronski model, u kome se zanemaruje međusobna Kulonova interakcija elektrona. Ovakva aproksimacija je često opravdana, uzimajući u obzir izuzetno slabu prirodu Kulonove interakcije. Centralna tema ovog poglavlja je izračunavanje apsorpcionog spektra sistema na bazi kvantnih jama, i to isključivo unutarzonskih prelaza. U jednoelektronskom modelu, apsorpcioni spektar se sastoji od linija čije centralne učestanosti odgovaraju prelazima između podzona, a jačina svake linije je funkcija učestanosti prelaza, razlike koncentracija elektrona podzona prelaza i dipolnog matričnog elementa prelaza. Ovaj rezultat se poklapa sa eksperimentalnim rezultatima, ali isključivo u slučajevima kvantnih jama sa niskom koncentracijom elektrona, odnosno u slabo dopiranim sistemima [150]. Pri visokim nivoima dopiranja, za tačan proračun spektra apsorpcije neophodno je uračunati međuinterakciju elektrona. Najuticajniji efekat ovih interakcija je sledeći: u prisustvu elektromagnetskog zračenja (fotona), na svaki elektron deluje efektivno polje, tzv. depolarizaciono polje, indukovano ekscitacijama ostalih elektrona. Rezultat usložnjenog modela na apsorpciju je dvojak: dolazi do pomeraja centralnih učestanosti linija spektra, ali, još bitnije, dolazi i do promene raspodele spektra, i to tako da se potiskuju svi efektivni prelazi osim jednog, odnosno spektar se pretvara u samo jednu liniju. Ovo poglavlje je ključno za razumevanje numeričkih rezultata u 8. poglavlju, kod jako dopiranih ZnO i Ga₂O₃ struktura na bazi kvantnih jama.

Najpre ćemo definisati posmatrani sistem i potom konstruisati odgovarajući Hamiltonijan sistema, čijom dijagonalizacijom dolazimo do svojstvenih vrednosti modova sistema. U najopštijem slučaju sistem se sastoji od kvantne heterostrukture sa pravcem narastanja duž z -ose, koju možemo izdeliti na skup homogenih slojeva odgovarajuće relativne dielektrične konstante, kako bismo dobili kontinualnu raspodelu dielektrične permitivnosti $\epsilon_r(z)$. Kvantna heterostruktura ubaćena je mikrorezonator, koji podržava određene elektromagnetne modove. Za unutarzonske prelaze važi selekciono pravilo da heterostruktura interaguje samo sa TM polarizacionim modovima, pa ćemo se ovde fokusirati isključivo na njih. Čestice koje posmatramo u sistemu su fotoni elektromagnetskog zračenja i elektroni provodne zone heterostrukture na bazi kvantnih jama. Pri formiranju ukupnog Hamiltonijana sistema moramo uzeti u obzir Hamiltonijane izolovanih čestica i Hamiltonijan njihove međusobne interakcije [151]:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_l + \hat{H}_{int} \quad (7.1)$$

gde je \hat{H}_e Hamiltonijan elektrona u heterostrukturi, \hat{H}_l Hamiltonijan slobodnih fotona, odnosno svetlosti, a \hat{H}_{int} Hamiltonijan interakcije. U nastavku poglavlja posvetićemo se svakom od tri dela Hamiltonijana pojedinačno, pre nego što dođemo do finalnog Hamiltonijana sistema, u odgovarajućoj formi.

7.1 Hamiltonian svetlosti

Hamiltonijan slobodnih fotona (svetlosti) zapisaćemo u obliku ukupne energije elektromagnetskog zračenja:

$$\hat{H}_l = \int \left[\frac{1}{2\epsilon_0\epsilon_r(z)} \hat{\mathbf{D}}^2(\mathbf{r}) + \frac{\mu_0}{2} \hat{\mathbf{H}}^2(\mathbf{r}) \right] d^3\mathbf{r}, \quad (7.2)$$

gde su $\widehat{\mathbf{D}}(\mathbf{r})$ i $\widehat{\mathbf{H}}(\mathbf{r})$ operatori vektora električnog pomeraja i magnetnog polja. Notacija koju uvodimo i koristimo do kraja rada je da su veličine čije su oznake podebljane (bold) vektorske. Materijali od interesa ne ispoljavaju magnetske osobine, pa izostavljamo iz izraza relativnu magnetnu permeabilnost, odnosno vektor magnetizacije jednak je nuli unutar čitavog sistema. Kako se parametri sistema menjaju isključivo duž pravca epitaksijalnog narastanja sistem je translaciono invarijantan u ravni normalnoj na z -osu, modovi fotona određeni su talasnim vektorom u xy -ravni \mathbf{q} i disperzionom relacijom $\omega_{cq} = \omega_{cq}(|\mathbf{q}|)$. Teorija kvantizacije TM elektromagnetnog polja u formalizmu operatora kreacije i anihilacije daje sledeće izraze za operatore komponenti elektromagnetnog polja:

$$\widehat{\mathbf{H}} = \sum_{\mathbf{q}} i A_{\mathbf{q}} (\mathbf{e}_q \times \mathbf{e}_z) f_{\mathbf{q}}(z) e^{i\mathbf{qr}_{||}} (\hat{a}_{\mathbf{q}} + \hat{a}_{-\mathbf{q}}^{\dagger}), \quad (7.3)$$

$$\widehat{\mathbf{D}}_z = \sum_{\mathbf{q}} i A_{\mathbf{q}} \mathbf{e}_z \frac{|\mathbf{q}|}{\omega_{cq}} f_{\mathbf{q}}(z) e^{i\mathbf{qr}_{||}} (\hat{a}_{\mathbf{q}} - \hat{a}_{-\mathbf{q}}^{\dagger}), \quad (7.4)$$

$$\widehat{\mathbf{D}}_{||} = - \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} \mathbf{e}_q \frac{1}{\omega_{cq}} \frac{df_{\mathbf{q}}(z)}{dz} e^{i\mathbf{qr}_{||}} (\hat{a}_{\mathbf{q}} - \hat{a}_{-\mathbf{q}}^{\dagger}), \quad (7.5)$$

$$A_{\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{\hbar \omega_{cq}}{2\mu_0 S L_{\mathbf{q}}}}, \quad (7.6)$$

$$\mathbf{e}_q = \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|}, \quad (7.7)$$

gde je S površina poprečnog preseka sistema, \mathbf{e}_q normalizovan talasni vektor moda, konstanta $A_{\mathbf{q}}$ predstavlja vakuumski intenzitet polja, a operatori $\hat{a}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ i $\hat{a}_{\mathbf{q}}$ predstavljaju bozonske operatore kreacije i anihilacije. Funkcija $f_{\mathbf{q}}(z)$ opisuje profil modova duž z -ose, normirana je na $L_{\mathbf{q}}$, i zadovoljava Helmholtzovu jednačinu:

$$\frac{d^2 f_{\mathbf{q}}(z)}{dz^2} - \mathbf{q}^2 f_{\mathbf{q}}(z) + \frac{\varepsilon_r(z) \omega_{cq}^2}{c^2} f_{\mathbf{q}}(z) = 0, \quad (7.8)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_{\mathbf{q}}(z)^2 dz = L_{\mathbf{q}}. \quad (7.9)$$

U nastavku rada smatramo da mikrorezonator predstavljaju dve paralelne idealne metalne ploče (normalne na z -osu) postavljene na rastojanju L_{cav} , i da je rezonator ispunjen dielektrikom relativne permitivnosti ε_r . Takođe, razmatraćemo isključivo TM_0 polarizacioni mod. Za ovaj slučaj važi $f_{\mathbf{q}}(z) = 1$, $L_{\mathbf{q}} = L_{cav}$, a disperziona relacija postaje $\mathbf{q}^2 = \frac{\varepsilon_r(z) \omega_{cq}^2}{c^2}$. Jasno je da je komponenta $\widehat{\mathbf{D}}_{||}$, dok je komponenta električnog pomeraja duž z -ose:

$$\widehat{\mathbf{D}}_z = i \mathbf{e}_z \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r \hbar \omega_{cq}}{2 S L_{cav}}} e^{i\mathbf{qr}_{||}} (\hat{a}_{\mathbf{q}} - \hat{a}_{-\mathbf{q}}^{\dagger}). \quad (7.10)$$

Konkretizacija koju smo uveli ima za cilj da nam uprostiti izraze i proračun, ali neće umanjiti njihovu opštost, jer sve jednačine zadržavaju svoj oblik pri generalizaciji sistema. Zamenom kvantovanih operatora komponenti elektromagnetskog polja u jednačinu za Hamiltonijan, dobijamo Hamiltonijan oblika:

$$\hat{H}_l = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{cq} \left(\hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right). \quad (7.11)$$

7.2. Hamiltonian elektrona

Hamiltonian elektrona predstavićemo u okviru formalizma sekundarne kvantizacije. Kao što se pri kvantizaciji elektromagnetskog polja uvode operatori kreacije i anihilacije, tako za elektrone možemo uvesti fermionske operatore kreacije i anihilacije u oznaci $\hat{c}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger$ i $\hat{c}_{\lambda\mathbf{k}}$, gde se λ odnosi na indeks podzone, a \mathbf{k} na transverzalni talasni vektor. Ovi operatori fenomenološki isto deluju na elektrone kao u slučaju fotona, ali se razlikuju u jednom detalju: talasne funkcije bozonskih višečestičnih sistema su simetrične, dok su u slučaju fermiona antisimetrične. Ova razlika dovodi do razlike u komutatorskim relacijama koje zadovoljavaju operatori kreacije i anihilacije [150]. Bozonski operatori zadovoljavaju:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_m, \hat{a}_n] &= [\hat{a}_m^\dagger, \hat{a}_n^\dagger] = 0, \\ [\hat{a}_m, \hat{a}_n^\dagger] &= \delta_{mn}, \end{aligned} \quad (7.12)$$

dok se u slučaju fermionskih operatora komutatori zamenjuju antikomutatorima:

$$\begin{aligned} \{\hat{c}_m, \hat{c}_n\} &= \{\hat{c}_m^\dagger, \hat{c}_n^\dagger\} = 0, \\ \{\hat{c}_m, \hat{c}_n^\dagger\} &= \delta_{mn}. \end{aligned} \quad (7.13)$$

U ovom formalizmu, Hamiltonian elektrona dat je u obliku:

$$\hat{H}_e = \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \hbar \omega_{\lambda\mathbf{k}} \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}}. \quad (7.14)$$

7.3. Hamiltonian interakcije

Iz elektromagnetike je dobro poznato da vektore električnog polja i magnetne indukcije možemo predstaviti pomoću električnog skalarnog i magnetskog vektor potencijala:

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (7.15)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (7.16)$$

Međutim, ovi potencijali nisu jednoznačno određeni, pa samim tim postoji stepen slobode pri njihovom odabiru. Konkretan odabir potencijala predstavlja kalibraciju potencijala, među kojim je najpoznatija Kulonova kalibracija, pri kojoj važi da je $\nabla A = 0$. Pri razmatranju interakcije materijala i svetlosti, odabir adekvatne kalibracije je od ključnog značaja. Iako finalni rezultat mora biti nezavisан od konkretne kalibracije, kompleksnost proračuna može biti drastično drugačija u različitim kalibracijama. Sa obzirom da se bavimo kvantnim fenomenima, kalibracije pripadaju domenu kvantne elektrodinamike (QED), gde je neophodno raditi u okviru formalizma Lagranžijana. Pri analizi nerelativističkog vezanog nanelektrisanja, vrlo često je pogodna takozvana PZW (eng. Power-Zienau-Woodley) kalibracija u okviru koje je stanje materije u potpunosti opisano vektorima električne i magnetske polarizacije, a interakcija svetlosti i materijala je određena vektorima električnog pomeraja i magnetnog polja, i u potpunosti se izostavljaju skalarni i vektor potencijal. Ukoliko se razmatraju nemagnetske sredine, što je naš slučaj, Hamiltonijan interakcije sadrži samo spregu električne polarizacije sa svetlošću, pa se u ovom slučaju PZW kalibracija naziva dipolna kalibracija. Izvođenje Hamiltonijana interakcije ove kalibracije je složeno i dugačko, pa ćemo se poslužiti samo konačnim izrazom, dok se detaljno izvođenje može naći u [152], [153]:

$$\hat{H}_{int} = \int \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r(z)} \left(-\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}) * \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \hat{\mathbf{P}}^2(\mathbf{r}) \right) d^3 r. \quad (7.17)$$

Prvi član integrala predstavlja interakciju materijala i svetlosti, dok drugi član predstavlja samo-interakciju elektronske polarizacije. Odnosno ovaj član sadrži Kulonovske nestacionarne dipol-dipol interakcije, koje nedostaju u jedno-elektronskom modelu. Ukoliko zanemarimo disipaciju u sistemu, polje električnog pomeraja $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r})$ je nezavisno od polarizacije konfiniranih elektrona, te predstavlja polje slobodnih fotona čiji smo operatorski oblik već predstavili. Ostaje još da dođemo do izraza za operator polarizacije. Klasično, polarizaciju definišemo kao srednji dipolni momenat na nekoj mikroskopskoj zapremini. Ova definicija je teško primenljiva na naš slučaj. Kako je raspodela nanelektrisanja u potpunosti određena talasnom funkcijom $\psi_\lambda(z)$, jasno je da ona mora na neki način figurisati u operatoru polarizacije. Alternativni pristup tiče se sledećeg izraza za mikroskopsku gustinu struje:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_p(\mathbf{r}) + \mathbf{j}_m(\mathbf{r}) = \dot{\mathbf{P}}(\mathbf{r}) + \nabla \times \mathbf{M}, \quad (7.18)$$

gde je, s obzirom da je vektor magnetizacije jednak nuli, vektor gustine struje određen samo vremenskom evolucijom vektora polarizacije. Ekvivalentno, definišimo operator vektora polarizacije tako da njegova vremenska evolucija pod punim Hamiltonijanom sistema daje operator mikroskopske gustine struje:

$$\frac{d\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r})}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}), \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}), \hat{H}_e] = \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}). \quad (7.19)$$

Kao što smo već napomenuli, vektor električnog pomeraja ne zavisi od raspodele elektrona u sistemu, za razliku od vektora polarizacije koji je vezan isključivo za nju, pa ova dva vektora međusobno komutiraju. To znači da u jednačini (7.19) jedini uticaj ima Hamiltonijan elektrona. U okviru PZW kalibracije operator gustine struje dat je kao:

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{i\hbar e}{2m^*} [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\Psi}(\mathbf{r}) - \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r})], \quad (7.20)$$

gde je $\hat{\Psi}$ operator polja, definisan na sledeći način:

$$\hat{\Psi}(z, \mathbf{r}_{||}) = \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \hat{c}_{\lambda \mathbf{k}} \psi_{\lambda}(z) \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i \mathbf{k} \mathbf{r}_{||}}. \quad (7.21)$$

S obzirom da nas zanimaju samo unutarzonski prelazi, na osnovu selekcionih pravila možemo da analiziramo samo z komponentu gustine struje:

$$\begin{aligned} \hat{j}_z(\mathbf{r}) &= \frac{i \hbar e}{2m^*} \left[\sum_{\lambda, \mathbf{k}} \hat{c}_{\lambda \mathbf{k}} \psi_{\lambda}(z) \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i \mathbf{k} \mathbf{r}_{||}} * \sum_{\mu, \mathbf{q}} \hat{c}_{\mu \mathbf{k} + \mathbf{q}} \frac{\partial \psi_{\mu}(z)}{\partial z} \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \mathbf{r}_{||}} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \hat{c}_{\lambda \mathbf{k}}^\dagger \frac{\partial \psi_{\lambda}(z)}{\partial z} \frac{1}{\sqrt{S}} e^{-i \mathbf{k} \mathbf{r}_{||}} * \sum_{\mu, \mathbf{q}} \hat{c}_{\mu \mathbf{k} + \mathbf{q}} \psi_{\mu}(z) \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \mathbf{r}_{||}} \right], \end{aligned} \quad (7.22)$$

$$\hat{j}_z(\mathbf{r}) = \frac{i \hbar e}{2m^*} \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \sum_{\mu, \mathbf{q}} \left(\psi_{\lambda}(z) \frac{\partial \psi_{\mu}(z)}{\partial z} - \frac{\partial \psi_{\lambda}(z)}{\partial z} \psi_{\mu}(z) \right) \hat{c}_{\lambda \mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mu \mathbf{k} + \mathbf{q}} \frac{1}{S} e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}_{||}}. \quad (7.23)$$

Uvešćemo sledeću smenu:

$$\xi_{\lambda \mu}(z) = \psi_{\lambda}(z) \frac{\partial \psi_{\mu}(z)}{\partial z} - \frac{\partial \psi_{\lambda}(z)}{\partial z} \psi_{\mu}(z). \quad (7.24)$$

U oznaci $\xi_{\lambda \mu}$ nalazi se zavisnost gustine struje od z koordinate, pa ona predstavlja neki vid funkcije raspodele struje vezane za prelaz $\mu \rightarrow \lambda$. Dodatno, definišimo operator:

$$\hat{B}_{\lambda \mu \mathbf{q}}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\lambda \mathbf{k} + \mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mu \mathbf{k}}. \quad (7.25)$$

Dvostruka suma u izrazu (7.23) može se transformisati u sledeću formu:

$$\hat{j}_z(\mathbf{r}) = \frac{i \hbar e}{2m^* S} \sum_{\lambda > \mu, \mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}_{||}} (\xi_{\lambda \mu}(z) \hat{c}_{\lambda \mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mu \mathbf{k} + \mathbf{q}} + \xi_{\mu \lambda}(z) \hat{c}_{\mu \mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\lambda \mathbf{k} + \mathbf{q}}), \quad (7.26)$$

gde je zanemaren član $\lambda = \mu$, jer je jasno da je $\xi_{\lambda \lambda} = 0$. Ako primetimo i da je $\xi_{\lambda \mu} = -\xi_{\mu \lambda}$, dolazimo do finalnog oblika operatora gustine struje:

$$\hat{j}_z(\mathbf{r}) = \frac{i \hbar e}{2m^* S} \sum_{\lambda > \mu, \mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{r}_{||}} \xi_{\lambda \mu}(z) [\hat{B}_{\lambda \mu \mathbf{q}} - \hat{B}_{\lambda \mu - \mathbf{q}}^\dagger]. \quad (7.27)$$

Kako bismo došli do izraza za operator polarizacije, potrebno nam je da odredimo komutator operatora \hat{B} i \hat{H}_e .

$$[\hat{B}_{\lambda \mu \mathbf{q}}^\dagger, \hat{H}_e] = \hat{B}_{\lambda \mu \mathbf{q}}^\dagger \hat{H}_e - \hat{H}_e \hat{B}_{\lambda \mu \mathbf{q}}^\dagger, \quad (7.28)$$

$$\hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger \hat{H}_e = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mu\mathbf{k}} \sum_{\lambda',\mathbf{k}'} \hbar\omega_{\lambda'\mathbf{k}'} \hat{c}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger \hat{c}_{\lambda'\mathbf{k}'} = \xrightarrow{\lambda'=\mu; \mathbf{k}'=\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mu\mathbf{k}} \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mu\mathbf{k}}, \quad (7.29)$$

$$\hat{H}_e \hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger = \sum_{\lambda',\mathbf{k}'} \hbar\omega_{\lambda'\mathbf{k}'} \hat{c}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger \hat{c}_{\lambda'\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mu\mathbf{k}} = \xrightarrow{\lambda'=\lambda; \mathbf{k}'=\mathbf{k}+\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mu\mathbf{k}}. \quad (7.30)$$

Odakle dobijamo traženi komutator kao:

$$[\hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger, \hat{H}_e] = - \sum_{\mathbf{k}} \hbar(\omega_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mu\mathbf{k}}) \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mu\mathbf{k}}. \quad (7.31)$$

Uvodimo dugotalasnu aproksimaciju, odnosno prepostavljamo da je talasni vektor fotona \mathbf{q} dovoljno mali u poređenju sa talasnim vektorom elektrona, čime zanemarujemo impuls fotona i posmatramo samo vertikalne prelaze. Dodatno, prepostavimo da su transverzalne mase različitih podzona približno iste, čime u energiji prelaza možemo zanemariti zavisnost od talasnih vektora, odnosno važi da je:

$$\omega_{\lambda\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mu\mathbf{k}} \approx \omega_{\lambda\mathbf{k}} - \omega_{\mu\mathbf{k}} \approx \omega_\lambda - \omega_\mu \equiv \omega_{\lambda\mu}. \quad (7.32)$$

Zamenom izraza (7.32) u (7.31) imamo:

$$[\hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger, \hat{H}_e] = -\hbar\omega_{\lambda\mu} \hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger. \quad (7.33)$$

Adjungovanjem prethodne relacije, dobija se:

$$[\hat{B}_{\lambda\mu q}, \hat{H}_e] = -\hbar\omega_{\lambda\mu} \hat{B}_{\lambda\mu q}. \quad (7.34)$$

Sada možemo da izrazimo operator polarizacije kao:

$$\hat{P}_z(\mathbf{r}) = \frac{\hbar e}{2m^*S} \sum_{\lambda > \mu, \mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_\parallel} \frac{\xi_{\lambda\mu}(z)}{\omega_{\lambda\mu}} [\hat{B}_{\lambda\mu q} + \hat{B}_{\lambda\mu-q}^\dagger]. \quad (7.35)$$

Sada kada smo izveli izraze za operatore polarizacije (7.35) i električnog pomeraja (7.10), spremni smo, da ih ubacimo u Hamiltonijan interakcije, dat izrazom (7.17). Posmatrajmo odvojeno interakciju svetlosti sa polarizacijom materijala (indeks $l-p$) i samo-interakciju polarizacije (indeks p):

$$\hat{H}_{int} = \hat{H}_{l-p} + \hat{H}_p, \quad (7.36)$$

$$\hat{H}_{l-p} = - \int \frac{\widehat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}) * \widehat{\mathbf{P}}(\mathbf{r})}{\varepsilon_0 \varepsilon_s(z)} d^3\mathbf{r}, \quad (7.37)$$

$$\hat{H}_p = \int \frac{\widehat{\mathbf{P}}^2(\mathbf{r})}{2\varepsilon_0 \varepsilon_s(z)} d^3\mathbf{r}. \quad (7.38)$$

Pre izvođenja izraza za Hamiltonijane interakcije, izvedimo vrlo korisnu relaciju, koja nam daje vezu između mikroskopske struje i dipolnih matričnih elemenata, koji se koriste za proračun spektra apsorpcije kasnije u ovom poglavlju:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi_{\lambda\mu}(z) dz = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\psi_\lambda(z) \frac{\partial \psi_\mu(z)}{\partial z} - \frac{\partial \psi_\lambda(z)}{\partial z} \psi_\mu(z) \right] dz = \frac{1}{i\hbar} (p_{z\mu\lambda} - p_{z\lambda\mu}), \quad (7.39)$$

$$\hat{p}_z = \frac{m^*}{i\hbar} [z, \hat{H}_e], \quad (7.40)$$

$$p_{z\mu\lambda} = \frac{m^*}{i\hbar} [z, \hat{H}_e]_{\mu\lambda} = \frac{m^*}{i\hbar} [\langle \psi_\mu | z \hat{H}_e | \psi_\lambda \rangle - \langle \psi_\mu | \hat{H}_e z | \psi_\lambda \rangle] = -im^* [\omega_\lambda z_{\mu\lambda} - \omega_\mu z_{\mu\lambda}] \\ = -im^* \omega_{\lambda\mu} z_{\mu\lambda} \quad (7.41)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi_{\lambda\mu}(z) dz = \frac{2m^* \omega_{\lambda\mu}}{\hbar} z_{\mu\lambda}. \quad (7.42)$$

Sada možemo da napišemo izraz za \hat{H}_{l-p} :

$$\hat{H}_{l-p} = \int \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_r(z)} i \sum_{\mathbf{q}'} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r \hbar \omega_{cq'}}{2SL_{cav}}} e^{i\mathbf{q}' \mathbf{r}_\parallel} (\hat{a}_{\mathbf{q}'} \\ - \hat{a}_{-\mathbf{q}'}) \frac{\hbar e}{2m^* S} \sum_{\lambda > \mu, \mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \mathbf{r}_\parallel} \frac{\xi_{\lambda\mu}(z)}{\omega_{\lambda\mu}} [\hat{B}_{\lambda\mu\mathbf{q}} + \hat{B}_{\lambda\mu-\mathbf{q}}^\dagger] d^3 \mathbf{r}. \quad (7.43)$$

Da bi integracija po transverzalnim koordinatama bila različita od nule, $\mathbf{q}' = -\mathbf{q}$:

$$\hat{H}_{l-p} = i \sum_{\lambda > \mu, \mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar \omega_{cq}}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r S L_{cav}}} \frac{\hbar e}{2m^* \omega_{\lambda\mu}} \int \xi_{\lambda\mu}(z) dz (\hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger - \hat{a}_{-\mathbf{q}}) (\hat{B}_{\lambda\mu\mathbf{q}} + \hat{B}_{\lambda\mu-\mathbf{q}}^\dagger) \\ = i \sum_{\lambda > \mu, \mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar \omega_{cq}}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r S L_{cav}}} e z_{\mu\lambda} (\hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger - \hat{a}_{-\mathbf{q}}) (\hat{B}_{\lambda\mu\mathbf{q}} + \hat{B}_{\lambda\mu-\mathbf{q}}^\dagger). \quad (7.44)$$

Na sličan način, dobija se izraz za drugi deo Hamiltonijana:

$$\hat{H}_p = \frac{e^2 \hbar^2}{8\varepsilon_0 \varepsilon_r S m^{*2}} \sum_{\lambda > \mu, \lambda' > \mu', \mathbf{q}} \frac{I_{\lambda\mu, \lambda'\mu'}}{\omega_{\lambda\mu} \omega_{\lambda'\mu'}} (\hat{B}_{\lambda\mu-\mathbf{q}} + \hat{B}_{\lambda\mu\mathbf{q}}^\dagger) (\hat{B}_{\lambda'\mu'\mathbf{q}} + \hat{B}_{\lambda'\mu'-\mathbf{q}}^\dagger), \quad (7.45)$$

$$I_{\lambda\mu,\lambda'\mu'} = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_{\lambda\mu}(z) \xi_{\lambda'\mu'}(z) dz,$$

gde $I_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}$ predstavlja integral preklapanja struja dva prelaza. Radi jednostavnije notacije, prelaz $\mu \rightarrow \lambda$ označen indeksom $\lambda\mu$ ćemo ubuduće označavati sa α , a prelaz $\mu' \rightarrow \lambda'$ sa β . Jasno je da prethodno korišćene sume sa uslovom $\lambda > \mu$ zapravo predstavljaju sumu po svim mogućim međupodzonskim prelazima. Uvećemo novu oznaku radi lakšeg zapisa:

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar\omega_\alpha} \frac{1}{\hbar\omega_\beta} \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 I_{\alpha\beta}, \quad (7.46)$$

gde je smisao novouvedene veličine $S_{\alpha\beta}$ karakteristična dužina interakcije dipola koji potiču od prelaza α i β , odnosno možemo primetiti da je ona ekvivalentna Kulonovom tenzoru:

$$S_{\alpha\beta} = S_{ij,kl} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left[\int_{-\infty}^z dz' \psi_i(z') \psi_j(z') \right] \left[\int_z^{+\infty} dz'' \psi_k(z'') \psi_l(z'') \right]. \quad (7.47)$$

7.4. Bozonizacija Hamiltonijana

U cilju određivanja svojstvene vrednosti Hamiltonijana sistema, potrebno je izvršiti njegovu dijagonalizaciju, a da bi Hamiltonian bio sведен na oblik koji je pogodniji za dijagonalizaciju, potrebno je uvesti efektivne bozonske operatore prelaza, kojim treba zameniti prethodno razmatrane fermionske operatore kreacije i anihilacije. Odredićemo sledeći komutator:

$$[\hat{B}_{\lambda\mu q}, \hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger] = \hat{B}_{\lambda\mu q} \hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger - \hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger \hat{B}_{\lambda\mu q}, \quad (7.48)$$

$$\hat{B}_{\lambda\mu q} \hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mu\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}+q} \sum_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}'+q}^\dagger \hat{c}_{\mu\mathbf{k}'} = \xrightarrow{k=k'} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mu\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mu\mathbf{k}} = \hat{N}_\mu, \quad (7.49)$$

$$\hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger \hat{B}_{\lambda\mu q} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}+q}^\dagger \hat{c}_{\mu\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mu\mathbf{k}'}^\dagger \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}'+q} = \xrightarrow{k=k'} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}+q}^\dagger \hat{c}_{\lambda\mathbf{k}+q} = \hat{N}_\lambda, \quad (7.50)$$

$$[\hat{B}_{\lambda\mu q}, \hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger] = \hat{N}_\mu - \hat{N}_\lambda. \quad (7.51)$$

Smisao veličine \hat{N}_λ je operator broja elektrona u podzoni λ . Dakle, prethodni komutator kao rezultat daje razliku populacija podzona μ i λ . U želji da normalizujemo operator $\hat{B}_{\lambda\mu q}$, uvodimo:

$$\hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger = \sqrt{\Delta \hat{N}_{\lambda\mu}} \hat{b}_{\lambda\mu q}^\dagger, \quad (7.52)$$

$$(7.53)$$

$$\Delta \hat{N}_{\lambda\mu} = \langle \hat{N}_\mu \rangle - \langle \hat{N}_\lambda \rangle.$$

Može se pokazati da u slučaju umereno dopiranih sistema operator $\hat{b}_{\lambda\mu q}^\dagger$ podleže bozonskim pravilima komutacije, odnosno važi:

$$[\hat{b}_{\lambda\mu q}, \hat{b}_{\lambda\mu q'}^\dagger] = \delta_{q,q'}. \quad (7.54)$$

Zbog važenja jednačina (7.33), (7.51) i (7.54), u okviru formalizma sekundarne kvantizacije možemo predstaviti Hamiltonijan elektrona, koji je prethodno bio dat u fermionskoj formi jednačinom (7.14), u efektivnoj bozonskoj formi kao:

$$\hat{H}'_e = \sum_{\lambda > \mu, q} \hbar \omega_{\lambda\mu} \hat{b}_{\lambda\mu q}^\dagger \hat{b}_{\lambda\mu q}. \quad (7.55)$$

Fenomenološki, ovaj Hamiltonijan i njegove operatore kreacije i anihilacije tumačimo kao skup svih dozvoljenih prelaza (ekscitacija) elektrona, izazvanih interakcijom sa svetlošću (fotonima), gde $\hat{b}_{\lambda\mu q}^\dagger \hat{b}_{\lambda\mu q}$ predstavlja operator broja pobudnih prelaza, a $\hbar \omega_{\lambda\mu}$ energiju prelaza.

Sledeći korak je da u Hamiltonijanu interakcije operatore $\hat{B}_{\lambda\mu q}^\dagger$ zamenimo sa $\hat{b}_{\lambda\mu q}^\dagger$, a takođe uvodimo plazma frekvenciju prelaza ω_{P_α} :

$$\omega_{P_\alpha}^2 = \frac{e^2 \Delta N_\alpha}{\epsilon_0 \epsilon_r m^* S L_{eff}^\alpha}, \quad (7.56)$$

$$L_{eff}^\alpha = \frac{2m^* \omega_\alpha}{\hbar I_{\alpha\alpha}}, \quad (7.57)$$

gde L_{eff}^α predstavlja efektivnu dužinu prelaza α (slično kao $S_{\alpha\alpha}$), i opisana je integralom preklapanja mikroskopske struje prelaza. Ako označimo oscilatornu jačinu prelaza sa f_α^0 i faktor preklapanja moda rezonatora i raspodele struje prelaza sa f_α^w (čiji je izraz dat za TM_0 mod, ali se može generalizovati za proizvoljan mod):

$$f_\alpha^0 = \frac{2m^* \omega_\alpha}{\hbar} z_\alpha^2, \quad (7.58)$$

$$f_\alpha^w = \frac{L_{eff}^\alpha}{L_{cav}}. \quad (7.59)$$

Hamiltonijan interakcije svetlosti i polarizacije možemo napisati i u sledećem obliku:

$$\hat{H}_{l-p} = i \sum_{\alpha, q} \frac{\hbar \omega_{P_\alpha}}{2} \sqrt{\frac{\omega_{cq}}{\omega_\alpha}} f_\alpha^0 f_\alpha^w (\hat{a}_q^\dagger - \hat{a}_{-q})(\hat{b}_{\alpha q} + \hat{b}_{\alpha-q}^\dagger). \quad (7.60)$$

Uvešćemo smenu $\Delta N_{S_\alpha} = \Delta N_\alpha / S$ koji figuriše u izrazu za plazma frekvenciju i čiji je smisao razlika površinskih koncentracija elektrona podzona koje učestvuju u prelazu α . Sada plazma frekvenciju možemo zapisati kao:

$$\omega_{P_\alpha}^2 = \frac{2e^2 \Delta N_{S_\alpha} \omega_\alpha}{\hbar \varepsilon_0 \varepsilon_r} S_{\alpha\alpha}. \quad (7.61)$$

Hamiltonian samointerakcije polarizacije materijala možemo predstaviti kao:

$$\hat{H}_p = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r} \sum_{\alpha, \beta, \mathbf{q}} S_{\alpha\beta} \sqrt{\Delta N_{S_\alpha} \Delta N_{S_\beta}} (\hat{b}_{\alpha-\mathbf{q}} + \hat{b}_{\alpha\mathbf{q}}^\dagger)(\hat{b}_{\beta\mathbf{q}} + \hat{b}_{\beta-\mathbf{q}}^\dagger). \quad (7.62)$$

Ukoliko se prethodni izraz napiše preko plazma frekvencije prelaza, dobija se:

$$\hat{H}_p = \frac{\hbar}{4} \sum_{\alpha, \beta, \mathbf{q}} \frac{\omega_{P_\alpha} \omega_{P_\beta}}{\sqrt{\omega_\alpha \omega_\beta}} \frac{S_{\alpha\beta}}{\sqrt{S_{\alpha\alpha} S_{\beta\beta}}} (\hat{b}_{\alpha-\mathbf{q}} + \hat{b}_{\alpha\mathbf{q}}^\dagger)(\hat{b}_{\beta\mathbf{q}} + \hat{b}_{\beta-\mathbf{q}}^\dagger). \quad (7.63)$$

Ukupan Hamiltonian sistema sada može da se zapiše u sledećem obliku:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \hbar \omega_\alpha \hat{b}_{\alpha\mathbf{q}}^\dagger \hat{b}_{\alpha\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{c\mathbf{q}} \left(\hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) \\ & + i \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \frac{\hbar \omega_{P_\alpha}}{2} \sqrt{\frac{\omega_{c\mathbf{q}}}{\omega_\alpha}} f_\alpha^0 f_\alpha^w (\hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger - \hat{a}_{-\mathbf{q}})(\hat{b}_{\alpha\mathbf{q}} + \hat{b}_{\alpha-\mathbf{q}}^\dagger) \\ & + \frac{\hbar}{4} \sum_{\alpha, \beta, \mathbf{q}} \frac{\omega_{P_\alpha} \omega_{P_\beta}}{\sqrt{\omega_\alpha \omega_\beta}} \frac{S_{\alpha\beta}}{\sqrt{S_{\alpha\alpha} S_{\beta\beta}}} (\hat{b}_{\alpha-\mathbf{q}} + \hat{b}_{\alpha\mathbf{q}}^\dagger)(\hat{b}_{\beta\mathbf{q}} + \hat{b}_{\beta-\mathbf{q}}^\dagger). \end{aligned} \quad (7.64)$$

7.5. Plazmoni

U okviru prethodnog poglavlja postavili smo sve komponente ukupnog Hamiltonijana posmatranog sistema, u kome su uključeni kolektivni efekti elektrona, koji nedostaju pri jednoelektronskoj aproksimaciji. Zadatak ovog poglavlja je da detaljno ispitamo stanje elektrona, odnosno njihove kolektivne modove, koji se nazivaju plazmoni. Da bismo to uradili, neophodno je da se pozabavimo delom ukupnog Hamiltonijana sistema koji se odnosi isključivo na materijal, a to su Hamiltonijani elektrona i samointerakcije polarizacije materijala:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{plasmon} &= \hat{H}'_e + \hat{H}_p \\ &= \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \hbar \omega_\alpha \hat{b}_{\alpha\mathbf{q}}^\dagger \hat{b}_{\alpha\mathbf{q}} + \frac{\hbar}{4} \sum_{\alpha, \beta, \mathbf{q}} \frac{\omega_{P_\alpha} \omega_{P_\beta}}{\sqrt{\omega_\alpha \omega_\beta}} \frac{S_{\alpha\beta}}{\sqrt{S_{\alpha\alpha} S_{\beta\beta}}} (\hat{b}_{\alpha-\mathbf{q}} + \hat{b}_{\alpha\mathbf{q}}^\dagger)(\hat{b}_{\beta\mathbf{q}} + \hat{b}_{\beta-\mathbf{q}}^\dagger). \end{aligned} \quad (7.65)$$

Prethodnu formulu možemo podeliti na dva dela, prvi deo koji sadrži samo interakciju električnih dipola koji svi potiču od istog prelaza α , takozvani međupodzonski plazmoni (eng. intersubband plasmons), a drugi koji predstavlja sprezanje različitih ($\alpha \neq \beta$) međupodzonskih plazmona.

Kako bismo odredili kolektivna elektronska svojstvena stanja sistema, zvana multipodzonski plazmoni (eng. multisubband plasmons), vršimo dijagonalizaciju plazmonskog Hamiltonijana kroz dva koraka. Prvo, zanemarujemo interakciju različitih prelaza i dijagonalizujemo Hamiltonian:

$$\hat{H}_{plasmon}(\alpha = \beta) = \sum_{\alpha, q} \left[\hbar \omega_\alpha \hat{b}_{\alpha q}^\dagger \hat{b}_{\alpha q} + \frac{\hbar \omega_{p_\alpha}^2}{4} (\hat{b}_{\alpha-q} + \hat{b}_{\alpha q}^\dagger)(\hat{b}_{\alpha q} + \hat{b}_{\alpha-q}^\dagger) \right]. \quad (7.66)$$

Dijagonalizaciju sprovodimo pomoću Bogoliubovljeve transformacije [154], koja se sastoji iz sledećih koraka:

1. Bozonske operatore $\hat{b}_{\alpha q}^\dagger$ želimo da predstavimo preko novih operatora $\hat{p}_{\alpha q}^\dagger$, kao:

$$\begin{aligned} \hat{b}_{\alpha q} &= u_{\alpha q} \hat{p}_{\alpha q} + v_{\alpha q} \hat{p}_{\alpha-q}^\dagger, \\ \hat{b}_{\alpha q}^\dagger &= u_{\alpha q} \hat{p}_{\alpha q}^\dagger + v_{\alpha q} \hat{p}_{\alpha-q}, \end{aligned} \quad (7.67)$$

gde su koeficijenti u_q i v_q realni i simetrični po talasnem vektoru q . Inverzna transformacija nam daje:

$$\hat{p}_{\alpha q} = u_{\alpha q} \hat{b}_{\alpha q} + v_{\alpha q} \hat{b}_{\alpha-q}^\dagger, \quad (7.68)$$

$$\hat{p}_{\alpha q}^\dagger = u_{\alpha q} \hat{b}_{\alpha q}^\dagger + v_{\alpha q} \hat{b}_{\alpha-q}.$$

Želimo da novi operatori takođe zadovoljavaju bozonske komutacione relacije, a jednostavno se pokazuje da je to ispunjeno kada koeficijenti ekspanzije zadovoljavaju relaciju:

$$u_{\alpha q}^2 - v_{\alpha q}^2 = 1 \quad (7.69)$$

2. Novi bozonski operatori $\hat{p}_{\alpha q}$ treba da ispunjavaju sledeće:

$$[\hat{p}_{\alpha q}, \hat{H}_{plasmon}(\alpha = \beta)] = \hbar \tilde{\omega}_\alpha \hat{p}_{\alpha q}, \quad (7.70)$$

pri čemu je frekvencija $\tilde{\omega}_\alpha$ svojstvena vrednost međupodzonskog plazmona, a operatori $\hat{p}_{\alpha q}$ i $\hat{p}_{\alpha q}^\dagger$ predstavljaju njegove operatore anihilacije i kreacije, tako da možemo zapisati:

$$\hat{H}_{plasmon}(\alpha = \beta) = \sum_{\alpha, q} \hbar \tilde{\omega}_\alpha \hat{p}_{\alpha q}^\dagger \hat{p}_{\alpha q}, \quad (7.71)$$

Drugo ime za $\tilde{\omega}_\alpha$ je plazma-pomerena frekvencija, a operatori $\hat{p}_{\alpha q}$ se zovu plazma operatori. Naime, bez izvođenja navodimo da važi sledeće [155]:

$$\hat{p}_{\alpha q} = \frac{\tilde{\omega}_\alpha + \omega_\alpha}{2\sqrt{\tilde{\omega}_\alpha \omega_\alpha}} \hat{b}_{\alpha q} + \frac{\tilde{\omega}_\alpha - \omega_\alpha}{2\sqrt{\tilde{\omega}_\alpha \omega_\alpha}} \hat{b}_{\alpha-q}^\dagger,$$

(7.72)

$$\tilde{\omega}_\alpha = \sqrt{\omega_\alpha^2 + \omega_{P_\alpha}^2},$$

odakle vidimo da je dipol-dipol interakcija prelaza dovela do plavog pomaka energije prelaza. Potrebno je da uračunamo i međusobnu interakciju različitih međupodzonskih plazmona, odnosno da jednačini (7.71) pridodamo članove druge sume jednačine (7.66) za koje je $\alpha \neq \beta$. Po analogiji prethodne dve navedene jednačine, odnosno primenjujući smisao formalizma sekundarne kvantizacije i dijagonalizacije Hamiltonijana, potrebno je u prethodno pomenutim članovima sume jednačine (7.66) efektivno zameniti operator $\hat{b}_{\alpha q}$ operatorom $\hat{p}_{\alpha q}$, a učestanost prelaza ω_α plazma-pomerenom učestanošću $\tilde{\omega}_\alpha$. Dodatno, uvodimo oznake [151]:

$$\Xi_{\alpha\beta} = \frac{\omega_{P_\alpha} \omega_{P_\beta}}{2\sqrt{\tilde{\omega}_\alpha \tilde{\omega}_\beta}} C_{\alpha\beta}, \quad (7.73)$$

$$C_{\alpha\beta} = \frac{S_{\alpha\beta}}{\sqrt{S_{\alpha\alpha} S_{\beta\beta}}} = \frac{I_{\alpha\beta}}{I_{\alpha\alpha} I_{\beta\beta}},$$

gde je $\Xi_{\alpha\beta}$ plazmon-plazmon konstanta sprezanja, a $C_{\alpha\beta}$ plazmon-plazmon koeficijent korelacije. Plazmonski Hamiltonian onda glasi:

$$\hat{H}_{plasmon} = \sum_{\alpha, q} \hbar \tilde{\omega}_\alpha \hat{p}_{\alpha q}^\dagger \hat{p}_{\alpha q} + \frac{\hbar}{2} \sum_{\alpha \neq \beta, q} \Xi_{\alpha\beta} (\hat{p}_{\alpha q}^\dagger + \hat{p}_{\alpha-q}) (\hat{p}_{\beta q} + \hat{p}_{\beta-q}^\dagger). \quad (7.74)$$

Potrebno je sprovesti finalnu dijagonalizaciju Hamiltonijana iz prethodne jednačine. Sprezanje N međupodzonskih plazmona (odnosno N različitih prelaza) daje N novih kolektivnih ekscitacija, svojstvenih vrednosti W_n , koje se dobijaju dijagonalizacijom Hopfield-Bogoliubov kvadratne matrice dimenzija $2N \times 2N$ [156]:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_1 & \mathbf{O}_{12} & \dots & \mathbf{O}_{1N} \\ \mathbf{O}_{12} & \mathbf{I}_2 & \dots & \mathbf{O}_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{O}_{1N} & \mathbf{O}_{2N} & \dots & \mathbf{I}_N \end{bmatrix}, \quad (7.75)$$

$$\mathbf{I}_\alpha = \begin{bmatrix} \omega_\alpha & 0 \\ 0 & -\omega_\alpha \end{bmatrix}, \quad \mathbf{O}_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} \Xi_{\alpha\beta} & -\Xi_{\alpha\beta} \\ \Xi_{\alpha\beta} & -\Xi_{\alpha\beta} \end{bmatrix}.$$

Kako matrica dimenzija $2N \times 2N$ ima $2N$ svojstvenih rešenja, za svaku pozitivnu svojstvenu vrednost W_n dobija se i njen negativni par $-W_n$. Mi se opredeljujemo za fizički smislu pozitivnu vrednost i njen svojstveni vektor \mathbf{V}_n , oblika: $\mathbf{V}_n = (a_{n1}, b_{n1}, \dots, a_{nN}, b_{nN})^T$.

Držeći se formalizma sekundarne kvantizacije, novi bozonski operatori anihilacije multipodzonskih plazmona dati su sa:

$$\hat{P}_{nq} = \sum_{\alpha} (a_{n\alpha} \hat{p}_{\alpha q} + b_{n\alpha} \hat{p}_{\alpha-q}^\dagger). \quad (7.76)$$

Komponente svojstvenog vektora \mathbf{V}_n moraju da zadovoljavaju normalizacioni uslov radi očuvanja bozonske prirode:

$$\sum_j \left(|a_{nj}|^2 - |b_{nj}|^2 \right) = 1. \quad (7.77)$$

Konačno dijagonalizovan plazmonski Hamiltonijan možemo da napišemo kao:

$$\hat{H}_{plasmon} = \sum_{n,q} \hbar W_n \hat{P}_{nq}^\dagger \hat{P}_{nq}, \quad (7.78)$$

$$[\hat{P}_{nq}, \hat{H}_{plasmon}] = \hbar W_n \hat{P}_{nq}. \quad (7.79)$$

7.6. Plazmonska korekcija apsorpcionog spektra

U jednoelektronskom modelu sistema, čiji je materijalni deo opisan samo Hamiltonijanom elektrona, izraz za frakcionu apsorpciju (izraženu u procentima) glasi:

$$A = \sum_{\alpha} \frac{e^2 \omega_{\alpha} |z_{\alpha}|^2 \pi}{\epsilon_0 c \sqrt{\epsilon_r}} \Delta N_{S_{\alpha}} L_{\alpha}(\hbar\omega), \quad (7.80)$$

gde je $L_{\alpha}(\hbar\omega)$ Lorencijan sa centrom na frekvenciji međupodzonskog prelaza α :

$$L_{\alpha}(\hbar\omega) = \frac{\frac{\Gamma_{\alpha}}{2\pi}}{(\hbar\omega_{\alpha} - \hbar\omega)^2 + \left(\frac{\Gamma_{\alpha}}{2}\right)^2}, \quad (7.81)$$

gde je Γ_{α} širina linije (FWHM) koja se najčešće eksperimentalno određuje. Operator gustine struje koji smo napisali u jednačini (7.27) možemo da malo drugačije napišemo, kao:

$$\hat{j}_z(\mathbf{r}) = i \sum_{\alpha, q} e^{iqr_{\parallel}} j_{\alpha}(z) [\hat{b}_{\alpha q} - \hat{b}_{\alpha - q}^{\dagger}], \quad (7.82)$$

gde je $j_{\alpha}(z)$ površinska gustina struje koja potiče od prelaza α i data je izrazom:

$$j_{\alpha}(z) = \frac{e\hbar}{2m^* \sqrt{S}} \xi_{\alpha}(z) \sqrt{\Delta N_{S_{\alpha}}}. \quad (7.83)$$

Integracijom prethodnog izraza po celoj z -osi uz primenu formule (7.42), dobija se:

$$\frac{S}{e^2 \omega_{\alpha}} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} j_{\alpha}(z) dz \right|^2 = \omega_{\alpha} |z_{\alpha}|^2 \Delta N_{S_{\alpha}}, \quad (7.84)$$

koji nam daje vezu između integrala gustine struje i apsorpcionog spektra. Za jednočestični model apsorpcioni spektar se računa kao:

$$A = \frac{S\pi}{\epsilon_0 c \sqrt{\epsilon_r}} \sum_{\alpha} \frac{1}{\omega_{\alpha}} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} j_{\alpha}(z) dz \right|^2 L_{\alpha}(\hbar\omega), \quad (7.85)$$

odakle je jasno da je frakciona apsorpcija jednoelektronskog modela funkcija gustine struje prelaza bozonskih modova sistema i njihovih svojstvenih učestanosti. Želimo da konstruišemo analogni izraz za frakcionu apsorpciju u slučaju postojanja plazmonskega modova. U okviru ovog poglavlja već je izneta procedura za izračunavanje svojstvenih učestanosti W_n , a preostalo je da izračunavamo gustine struja plazmonskega modova, za što je potrebno odrediti vremensku evoluciju operatora polarizacije, ali je sada sistem opisan plazmonskim Hamiltonijanom jednačina (7.78), a ne elektronskim Hamiltonijanom. Radi jednostavnog proračuna komutatora $[\hat{P}_z(\mathbf{r}), \hat{H}_{plasmon}]$, pomoću bozonskih komutacionih relacija, želimo da predstavimo operator polarizacije pomoću operatora kreacije i anihilacije multipodzonskih plazmona \hat{P}_n^\dagger i \hat{P}_{nq} . Konstruišimo matricu dimenzija $N \times N$:

$$Y_{n\alpha} = (a_{n\alpha} + b_{n\alpha}), \quad (7.86)$$

a zatim njen inverz: $X_{n\alpha} = Y_{n\alpha}^{-1}$. Operator međupodzonske polarizacije ima oblik:

$$\hat{P}_z(\mathbf{r}) = \frac{e\hbar}{2m^*\sqrt{S}} \sum_{n,\alpha,q} e^{iq\mathbf{r}\parallel} \frac{\xi_\alpha(z)\sqrt{\Delta N_{S_\alpha}}}{\sqrt{\omega_\alpha \tilde{\omega}_\alpha}} X_{\alpha n} (\hat{P}_{nq} + \hat{P}_{n-q}^\dagger). \quad (7.87)$$

Gustina struje plazmonskega modova je:

$$\hat{J}_z(\mathbf{r}) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{P}_z(\mathbf{r}), \hat{H}_{plasmon}] = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{P}_z(\mathbf{r}), \sum_{n,q} \hbar W_n \hat{P}_{nq}^\dagger \hat{P}_{nq} \right], \quad (7.88)$$

$$\begin{aligned} \hat{J}_z(\mathbf{r}) &= \frac{ie\hbar}{2m^*\sqrt{S}} \sum_{n,\alpha,q} e^{iq\mathbf{r}\parallel} W_n \frac{\xi_\alpha(z)\sqrt{\Delta N_{S_\alpha}}}{\sqrt{\omega_\alpha \tilde{\omega}_\alpha}} X_{\alpha n} (\hat{P}_{nq} - \hat{P}_{n-q}^\dagger) \\ &= i \sum_{n,q} e^{iq\mathbf{r}\parallel} J_n(z) (\hat{P}_{nq} - \hat{P}_{n-q}^\dagger), \end{aligned} \quad (7.89)$$

$$J_n(z) = \frac{e\hbar}{2m^*\sqrt{S}} W_n \sum_\alpha \frac{\xi_\alpha(z)\sqrt{\Delta N_{S_\alpha}}}{\sqrt{\omega_\alpha \tilde{\omega}_\alpha}} X_{\alpha n}. \quad (7.90)$$

Koeficijent apsorpcije se dobija sabiranjem doprinosa različitih multipodzonskih plazmonskega gustina struja. Koeficijent apsorpcije odavde ima oblik:

$$\begin{aligned} A_{2D}(\omega) &= \frac{S\pi}{\varepsilon_0 c \sqrt{\varepsilon_r}} \sum_n \frac{1}{W_n} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} J_n(z) dz \right|^2 L_n(\hbar\omega - W_n) \\ &= \frac{S\pi}{\varepsilon_0 c \sqrt{\varepsilon_r}} \sum_n W_n \left| \sum_\alpha \sqrt{\Delta N_{S_\alpha}} \sqrt{\frac{\omega_\alpha}{\tilde{\omega}_\alpha}} z_\alpha X_{\alpha n} \right|^2 L_n(\omega - W_n) \\ &= \frac{S\pi}{\varepsilon_0 c \sqrt{\varepsilon_r}} \sum_n W_n F_n L_n(\omega - W_n). \end{aligned} \quad (7.91)$$

Ovde $W_n F_n$ predstavlja efektivnu snagu oscilatora multipodzonskih plazmonskega modova. Sprezanje između podzonskih plazmona rezultuje preraspodelom amplitude apsorpcije sa prelaza međupodzonske na multipodzonske plazmonske modove. Ukupna apsorpcija zadovoljava sledeće pravilo:

$$\sum_{\alpha} \omega_{\alpha} |z_{\alpha}|^2 \Delta N_{\alpha} = \sum_n W_n F_n, \quad (7.92)$$

koje izražava očuvanje totalne verovatnoće prelaza i važi zbog komutacije Hamiltonijana dipol-dipol interakcije \hat{H}_p i Hamiltonijana interakcije svetlost i materijala \hat{H}_{l-p} .

8. NUMERIČKI REZULTATI

U ovom poglavlju predstavljeni su glavni naučni doprinosi ove disertacije, a koji obuhvataju rezultate modelovanja naprava baziranih na ZnO i Ga₂O₃ sistemima materijala, korišćenjem metoda opisanih u prethodnim poglavljima. Eksperimentalne realizacije oksidnih poluprovodničkih heterostruktura sa širokim energetskim procepm zasnovanih na unutarzonskim prelazima zahtevaju sveobuhvatno, ali u isto vreme jednostavno modelovanje i analizu koherentnog tunelskog transporta i unutarzonske apsorpcije. U nastavku su prikazani rezultati modelovanja apsorpcije u jako dopiranim višestrukim kvantnim jamama koje imitiraju aktivnu oblast KKL-a, gde je diskutovano o važnosti uračunavanja depolarizacionog polja i efekta depolarizacionog pomaka u proračunima. Osim toga, modelovana je strujno-naponska karakteristika i analizirana rapodela nanelektrisanja u funkciji napona kod ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO rezonantnih tunelskih struktura sa dvostrukom barijerom realizovanih u nepolarnoj orijentaciji (*m*-pravac narastanja). Na osnovu proračuna, ustanovljeno je da je PVR struje tunelovanja vrlo osetljiv na varijacije debljine barijere reda monosloja, kao i na promene molskog udela Mg i na koncentraciju dopanata u injektoru/kolektoru. Sve ove informacije korisne su za optimizaciju rezonantnog tunelskog transporta elektrona i injekcionu efikasnost u perspektivnim heterostrukturama koje rade na terahercnim frekvencijama. Zatim su predstavljeni rezultati modelovanja transporta: pojačanje, gustina struje i frekvencija za dva predložena dizajna THz KKL-a iz literature i na osnovu dobijenih rezultata objašnjeno je zašto ove naprave nisu uspešno laserovale. Na samom kraju, dati su rezultati modelovanja apsorpcije u jako dopiranim jamama od Ga₂O₃ i prvi put je pokazano kako jako dopiranje u ovom materijalu utiče na pojavu depolarizacionog polja i da je neophodno izvršiti plazmonsку korekciju apsorpcionog spektra.

8.1. Apsorpcija u dvostrukoj asimetričnoj ZnO kvantnoj jami bez uračunatog depolarizacionog pomeraja

Posmatramo najpre strukturu ZnO bez uticaja depolarizacionog pomeraja. Korišćen je Šredinger-Poasonov samosaglasni postupak [157], [158], [159] za strukturu asimetrične dvostrukе kvantne jame od ZnO/Zn_{0.7}Mg_{0.3}O materijala, gde je ZnO korišćen kao materijal kvantne jame. Veličine kvantnih jama su $t_{qw1} = 2.5$ nm i $t_{qw2} = 1.5$ nm, šira kvantna jama je uniformno dopirana galijumom (Ga) koncentracije $N_d \simeq 5 \times 10^{19}$ cm⁻³ kao u radu [160] kako bi osnovno stanje bilo dovoljno popunjeno. Uzeto je da je efektivna masa elektrona u jami i barijeri ista i da iznosi $m^* = 0.28 m_0$. Materijal barijere je Zn_{0.7}Mg_{0.3}O, a širina barijere je varirana između $t_b = 0.5$ nm i $t_b = 1.5$ nm. Diskontinuitet provodne zone uzet je kao $\Delta E_c = 0.675\Delta E_g$ što iznosi ~ 506 meV [157].

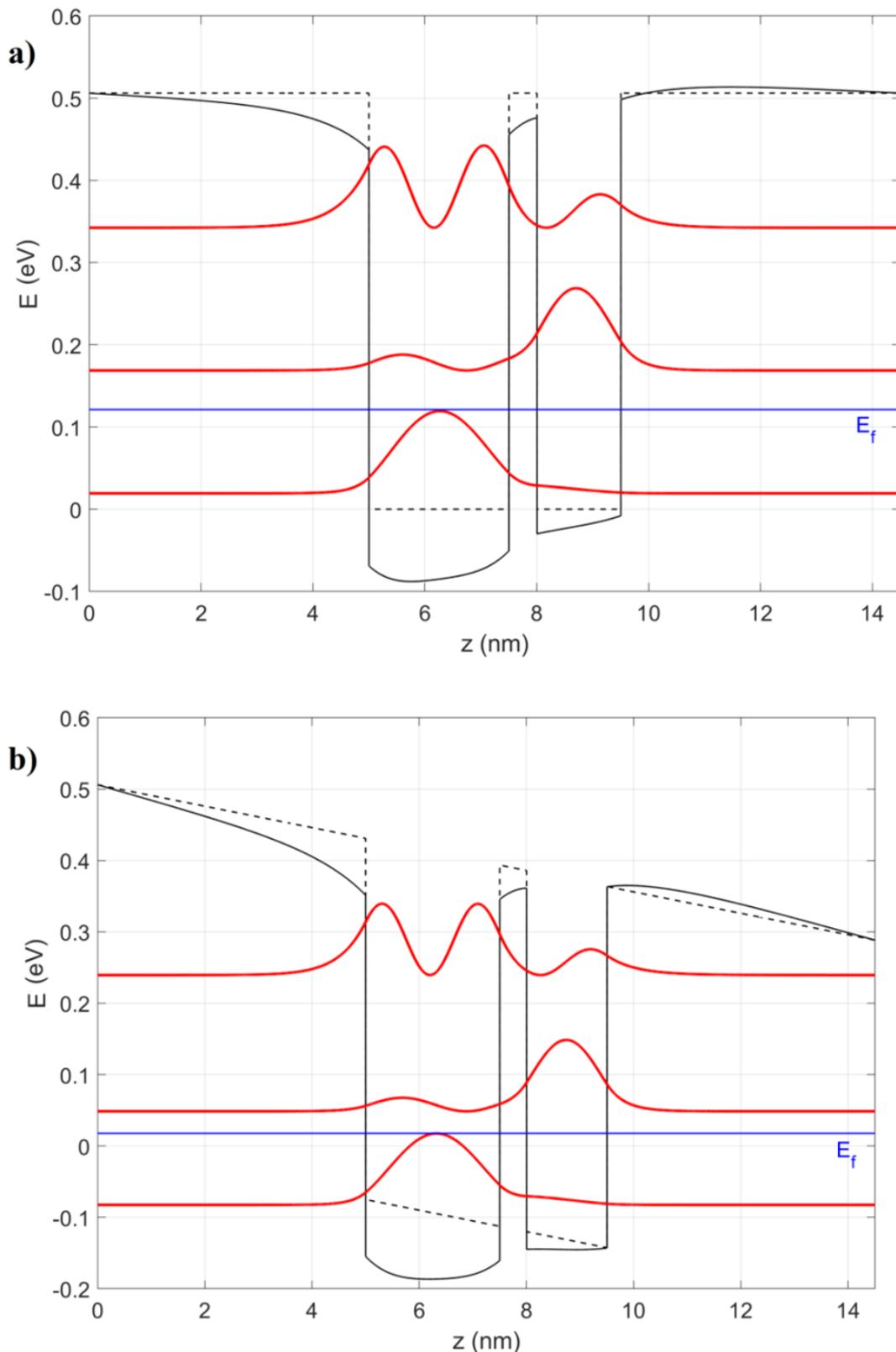
Pri simulacijama temperature je fiksna i iznosi $T = 300$ K. Slika 8.1 prikazuje profil provodne zone asimetrične duple kvantne jame (a) bez primjenjenog spoljašnjeg električnog polja i (b) u primjenjenom spoljašnjem električnom polju F koje je primjenjenu u pravcu narastanja structure z . Debljina barijere između dve jame je postavljena na vrednost $t_b = 0.5$ nm, barijere sa leve i desne strane structure su debljine 5 nm. Osnovno i drugo vezano stanje su lokalizovana u široj jami (t_{qw1}), dok je prvo vezano stanje konfinirano u užoj jami (t_{qw2}). Napomenimo da je tokom samosaglasnog postupka, u ukupnu potencijalnu energiju (osim članova koji se odnose na diskontinuitet provodne zone, elektrostaticku potencijalnu energiju od prostornog nanelektrisanja i potencijalnu energiju usled spoljašnjeg električnog polja F) uključen i član koji uračunava lokalnu izmensku interakciju V_{xc} i koji je dat sa [161]:

$$V_{xc}(z) = -\frac{e^4 m^*}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{2}{\pi r_s^*} \left[1 + 0.054 r_s^* \log\left(1 + \frac{11.4}{r_s^*}\right) \right], \quad (8.1)$$

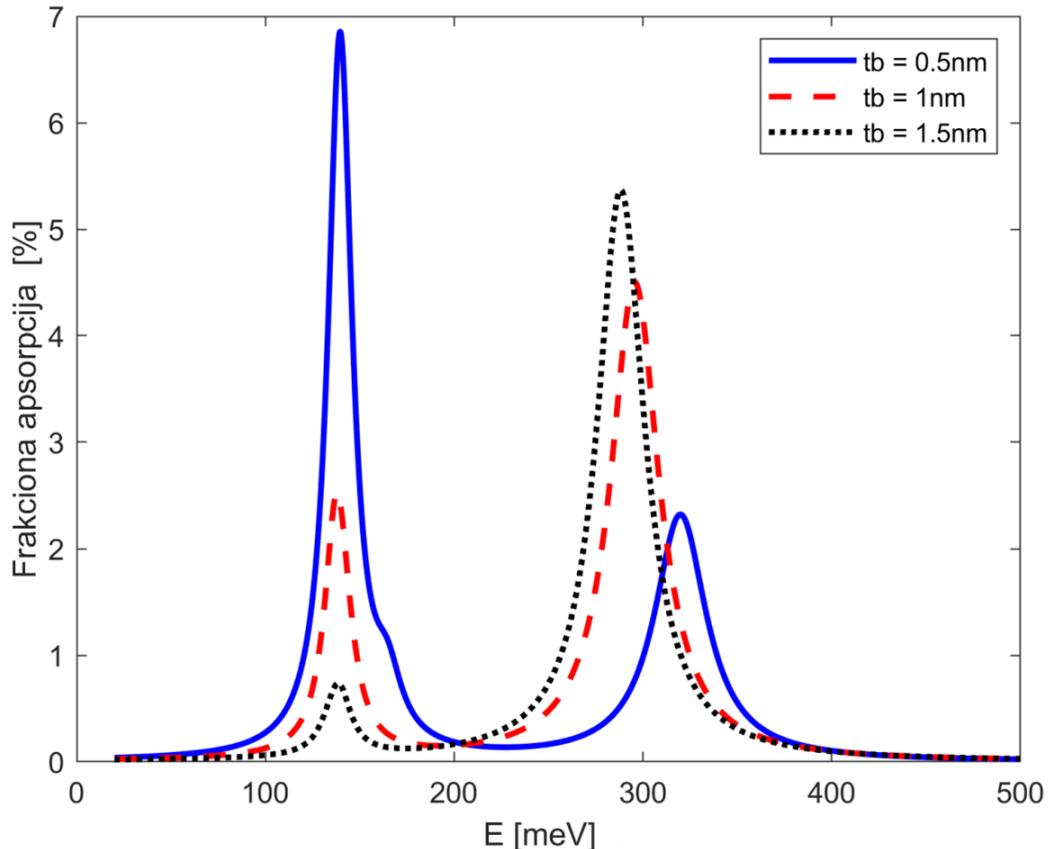
gde je pretpostavljeno da je dielektrična konstanta ϵ ista u svim slojevima i jednaka vrednosti u ZnO jami, a parametar r_s^* predstavlja srednje rastojanje između nosilaca podeljeno sa efektivnim Borovim radijusom $a_B^* = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{e^2m^*(z)}$:

$$r_s^* = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n(z)} \frac{1}{a_B^*}}. \quad (8.2)$$

Slika 8.2 prikazuje apsorpciju za različite vrednosti debljine barijere [157]. Može se uočiti da se apsorpcioni maksimum A_{01} smanjuje dok se maksimum A_{02} povećava sa porastom debljine barijere između dve kvantne jame. Pik apsorpcije A_{01} ima najveću vrednost od 6.8 % za najmanju dužinu barijere $t_b = 0.5$ nm. Kako povećavamo debljinu barijere, vidimo da pored dominacije A_{02} postoji i njegovo crveno pomeranje za 30 meV, dok je položaj pika A_{01} gotovo nepromenjen. Kako se debljina barijere povećava sa 0.5 na 1.5 nm, sprega između dve kvantne jame se smanjuje. S obzirom da su anvelopne talasne funkcije ograničene u kvantnim jamama, povećanje udaljenosti između jama smanjuje preklapanje talasnih funkcija, čime se smanjuju apsorpcioni maksimumi. Rastojanje između dva vrha takođe zavisi od razlika u energiji između E_{01} i E_{12} i to zavisi od sprege između jama.



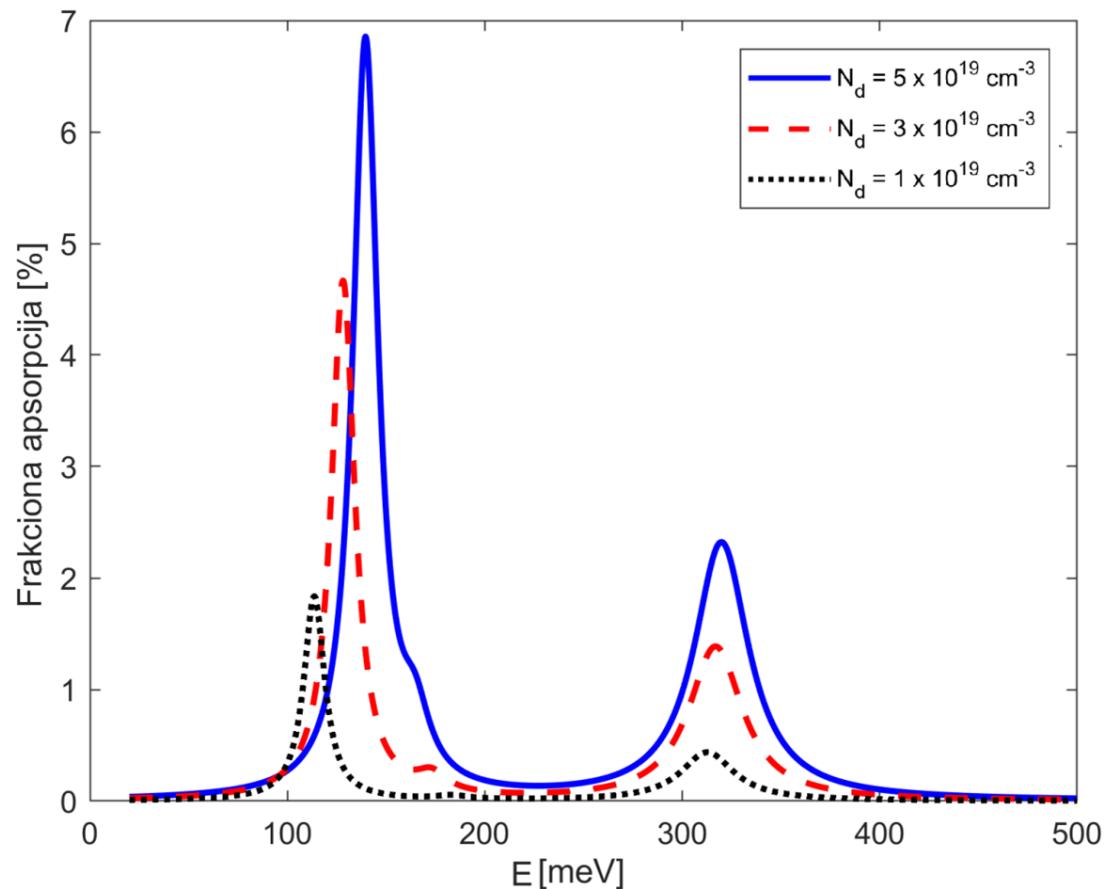
Slika 8.1 - Dijagram provodne zone (crno) sa modulom na kvadrat prve tri talasne funkcije pri $F = 0 \frac{V}{m}$ (a) i $F = 1.5 \times 10^7 \frac{V}{m}$ (b). Vezana stanja i njihove odgovarajuće talasne funkcije označene su punim crvenim linijama. Potencijal bez promene usled prostornog nanelektrisanja od dopiranja širejame prikazan je isprekidanim crnom linijom. Krivljenje potencijala usled dopiranja prikazano je punom crnom linijom. Fermijev nivo se nalazi između prvog i drugog vezanog stanja i označen je plavom linijom. Preuzeto iz [157] uz saglasnost autora.



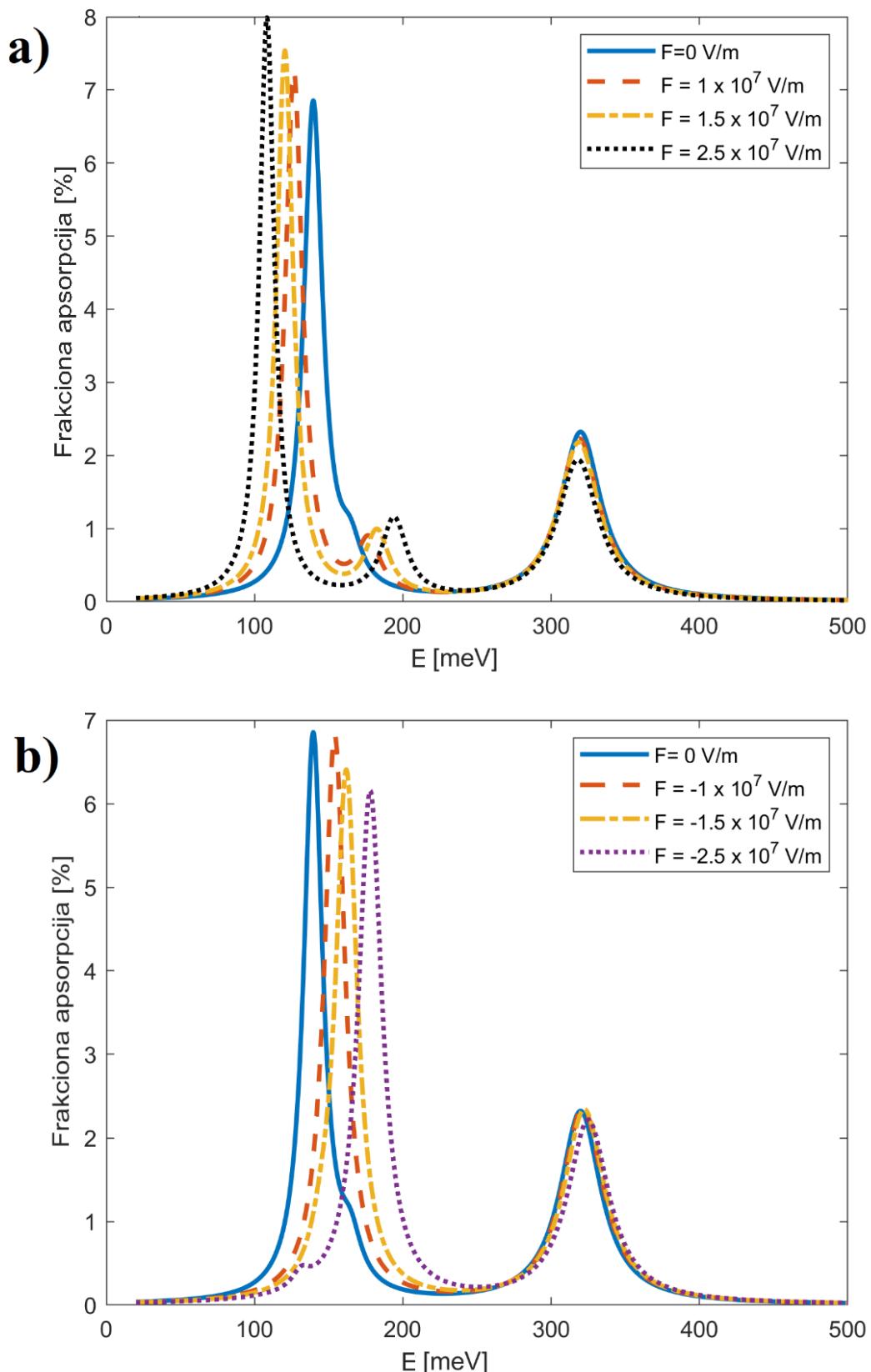
Slika 8.2 - Spektri frakcione apsorpcije za 3 različite deblijine barijere sa istom koncentracijom donora $N_d \approx 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Sa leva na desno, prvi veći apsorpcioni maksimum odgovara prelazu između osnovnog i prvog vezanog stanja (A_{01}). Drugi maksimum odgovara prelazima između osnovnog i drugog vezanog stanja (A_{02}). Preuzeto iz [157] uz saglasnost autora.

Slika 8.3 ilustruje promene u apsorpcionom spektru sa različitim koncentracijama Ga u široj (levoj) jami. Sa povećanjem dopiranjem Jame, maksimumi apsorpcije se takođe povećavaju, a energija prelaza A_{01} doživljava plavi pomak [157].

Takođe se uzima u obzir varijacija jačine spoljašnjeg električnog polja i njegov uticaj na spektre apsorpcije. Vrednosti primjenjenog električnog polja variraju od $F = +2.5 \times 10^7 \text{ V/m}$ do $F = -2.5 \times 10^7 \text{ V/m}$. Rezultati su prikazani u Slici 8.4 [157]. Najveća frakciona apsorpcija je pri polju $F = +2.5 \times 10^7 \text{ V/m}$. Slike 8.1(a) i slika 8.1(b) pokazuju da dopiranje šire Jame dovodi do krivljenja potencijala na suprotnu stranu u poređenju sa efektom spoljašnjeg polja usmerenog duž negativne z -ose. Polje tako kompenzuje delimično krivljenje i maksimum A_{02} ostaje oko 310 meV ali se postepeno smanjuje sa 2.3 % na 1.9 %. Za pozitivne vrednosti spoljašnjeg polja, pik A_{01} postepeno prolazi kroz plavi pomak za 40 meV i spušta na 6 %. Primećujemo da se vrhovi A_{01} i A_{02} sabiraju kako povećavamo polje. Na Slici 8.4 (a), fokusirajmo se na plave i žute spektralne linije koje odgovaraju istim jačinama polja koje su prikazane na Slici 8.1 (a) i (b) za potencijal provodne zone i talasne funkcije. Na Slici 8.1 se može videti da razlika energije između osnovnog i prvog pobuđenog stanja E_{01} opada sa primjenjenim električnim poljem (znak +), dok je razlika energije E_{02} približno ista u (a) i (b). Ovo se reflektuje na Slici 8.4 (a) gde dominantni apsorpcioni pik doživjava crveni pomak sa primjenjenim električnim poljem. Štaviše, spoljašnje primjeno električno polje dodatno krivi potencijal što neznatno povećava konfiniranje talasnih funkcija ili preklapanje talasnih funkcija (iako nije vidljivo na Slici 8.1) što dovodi do promene dominantnog apsorpcionog pika [157].



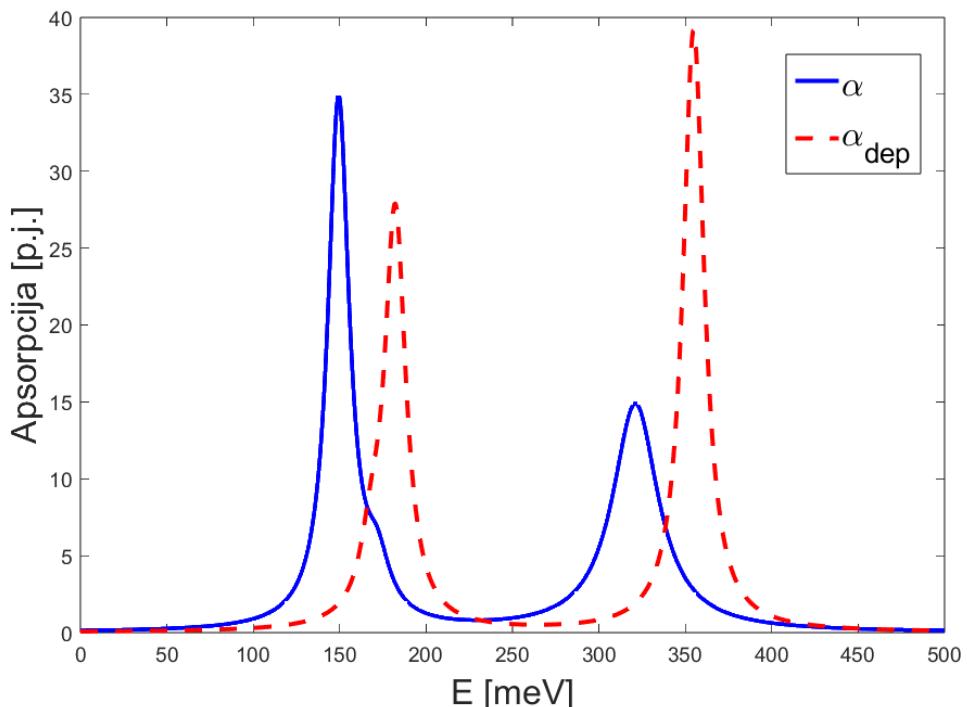
Slika 8.3 - Pikovi frakcione apsorpcije za 3 različite vrednosti koncentracije donora N_d , za fiksnu širinu barijere $t_b = 0.5 \text{ nm}$. Plava linija je isti apsorpcioni spektar kao na Slici 8.2, plava linija. Preuzeto iz [157] uz saglasnost autora.



Slika 8.4 - Spektri apsorpcije za različite vrednosti primjenjenog električnog polja, za fiksnu širinu barijere $t_b = 0.5 \text{ nm}$ i fiksno dopiranje $N_d \approx 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Električno polje je varirano između $F = 0 \frac{\text{V}}{\text{m}}$ i $F = 2.5 \times 10^7 \frac{\text{V}}{\text{m}}$ (a) i između $F = -2.5 \times 10^7 \frac{\text{V}}{\text{m}}$ i $F = 0 \frac{\text{V}}{\text{m}}$ (b). Preuzeto iz [157] uz saglasnost autora.

8.2 Apsorpcija u dvostrukoj asimetričnoj ZnO kvantnoj jami sa uračunatim depolarizacionim pomerajem

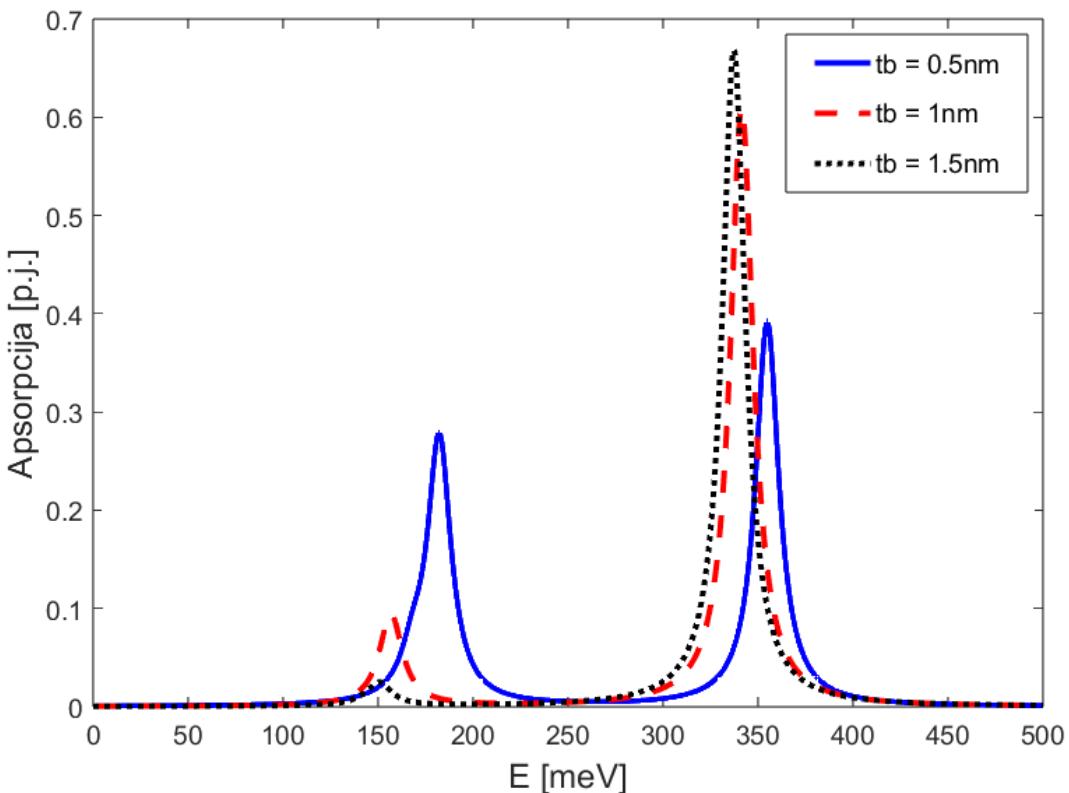
Posmaramo istu strukturu sa Slike 8.1, ali sa uračunatim efektom depolarizacionog polja koje dovodi do depolarizacionog pomeraja izraženog kod jako dopiranih struktura, a što je i eksperimentalno potvrđeno u [160], a teorijski izloženo u 7. poglavlju. Temperatura je uzeta da je $T = 100$ K, širina barijere na $t_b = 0.5$ nm i dopiranje je $N_d \simeq 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Slika 8.5 prikazuje preraspodelu u spektru apsorpcije u odnosu na jednostavniji, jednočestični model, koji ne uračunava kolektivne efekte, odakle se vidi da se apsorpcioni maksimumi pomeraju ka višim energijama za nekoliko desetina meV.



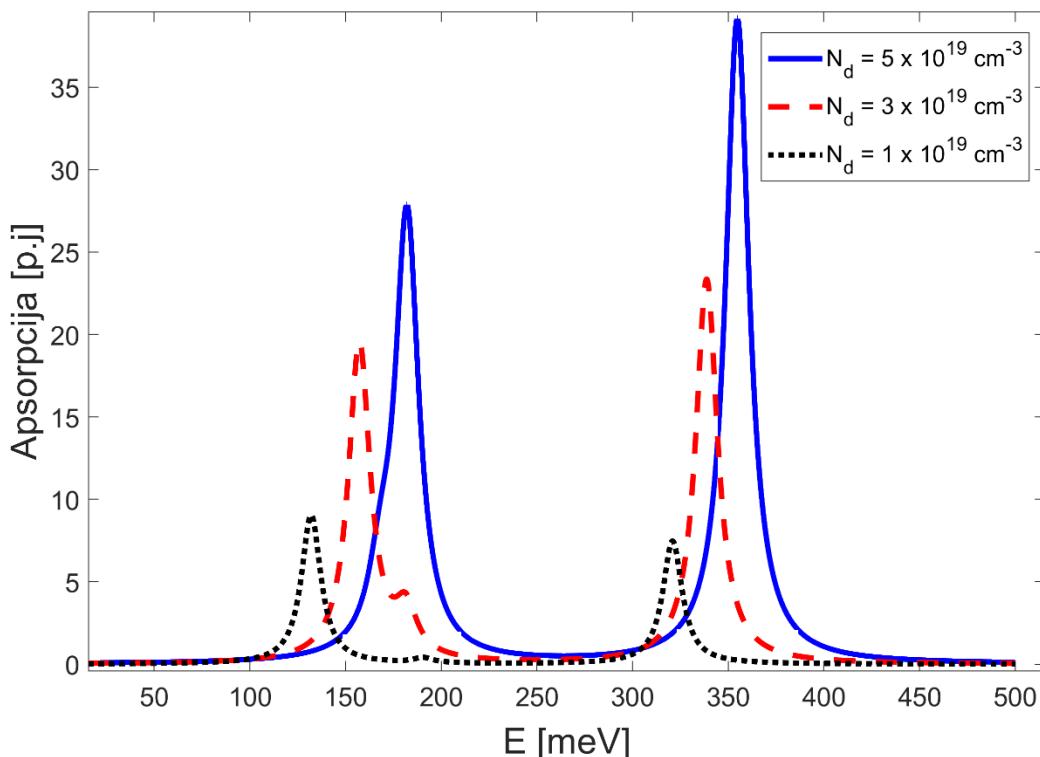
Slika 8.5 - Apsorpcioni spektar asimetrične dvostrukе kvantne jame u jednočestičnom modelu apsorpcije (plavo) i sa depolarizacionim pomerajem (crveno)³.

Slika 8.6 ilustruje uticaj širine barijere na apsorpcioni spektar, gde su u svim proračunima uključene korekcije usled depolarizacionog polja. Slika 8.7 prikazuje uticaj dopiranja šire jame na apsorpcioni spektar, pri čemu su u sva tri slučaja korišćene visoke vrednosti dopiranja kod kojih je efekat depolarizacionog pomeraja uočljiv. Na Slici 8.8 prikazan je apsorpcioni spektar u zavisnosti od primjenjenog spoljašnjeg električnog polja za fiksirane vrednosti širine barijere i koncentracije primesa.

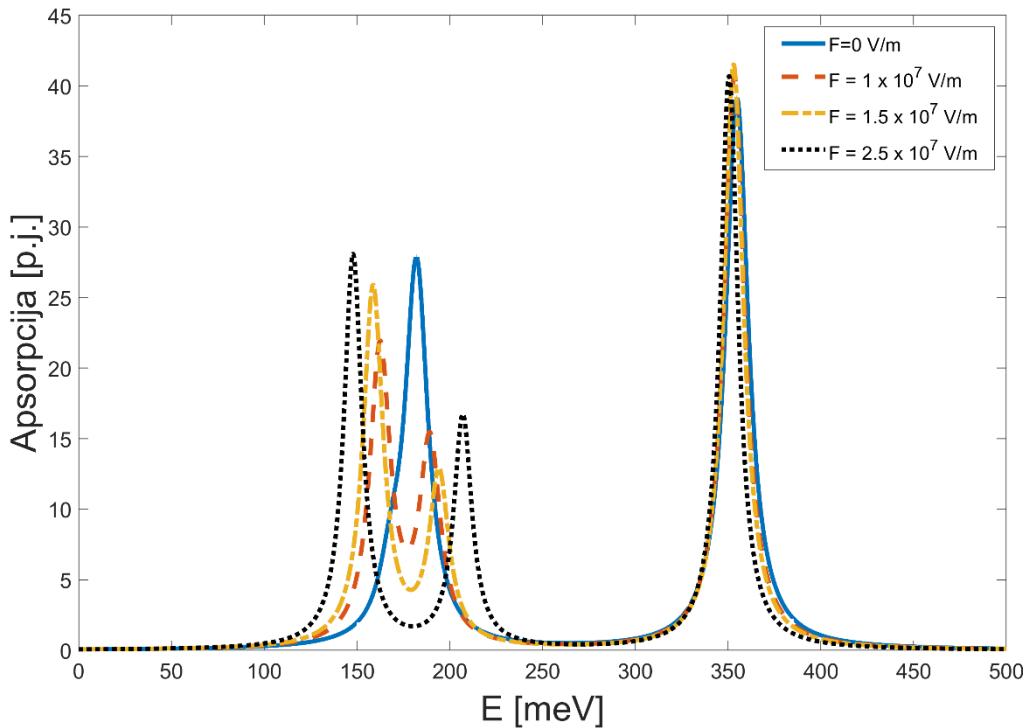
³ Na y osi p.j. označava proizvoljne jedinice



Slika 8.6 - Apsorpcioni spektar računat pomoću modela koji uračunava kolektivne efekte, za različite vrednosti širine barijere.



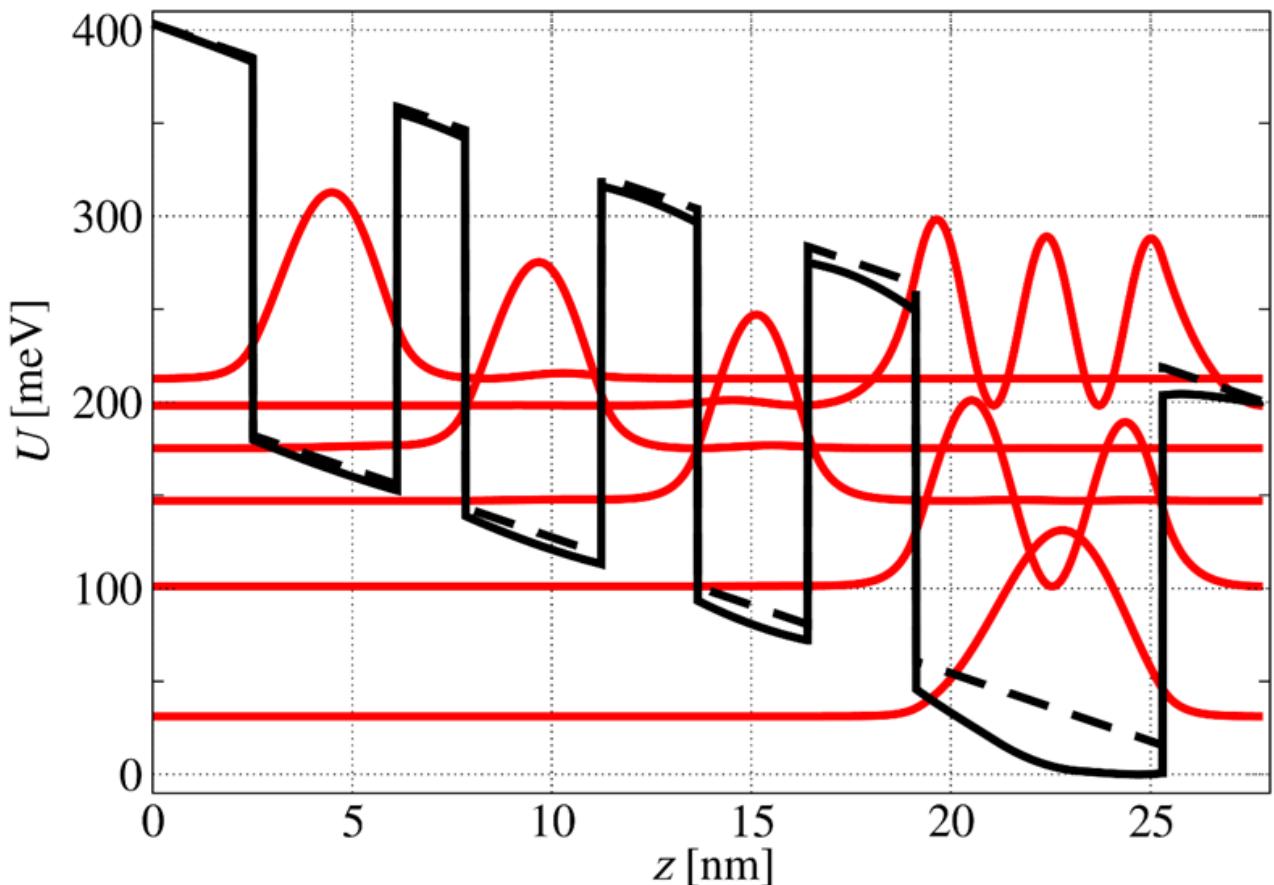
Slika 8.7 - Apsorpcioni spektar sa depolarizacionim pomerajem za različite vrednosti dopiranja široke jame.



Slika 8.8 - Apsorpcioni spektar računat pomoću modela koji uračunava kolektivne efekte, za različite vrednosti primjenjenog polja.

8.3. Apsorpcija u ZnO-strukturi kao aktivnoj oblasti kvantnog kaskadnog lasera

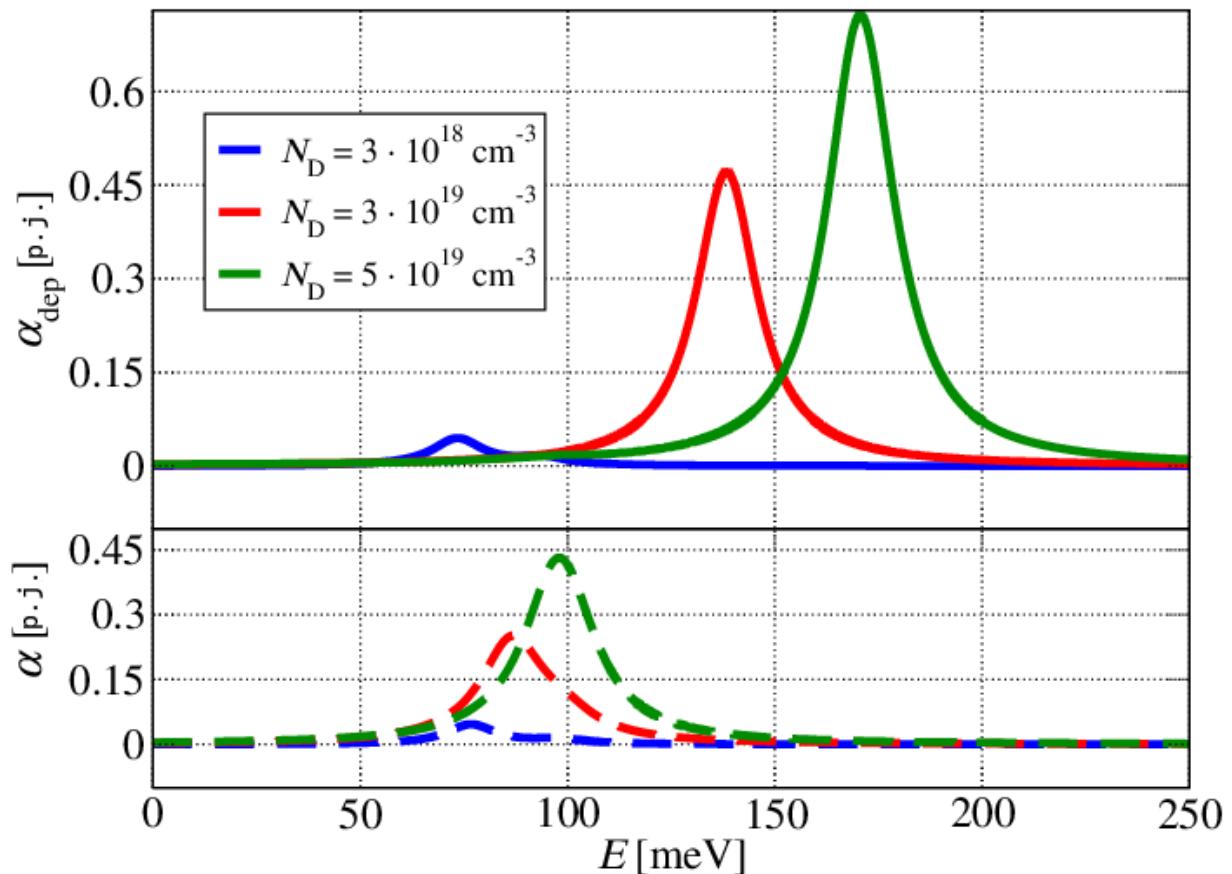
Posmatramo apsorpciju usled unutarzonskih prelaza u strukturi koja predstavlja aktivnu oblast/periodu KKL-a, koja je eksperimentalno realizovana u [9]. Ova struktura je obezbedila elektroluminiscenciju, ali ne i lasersku emisiju, koja inače, do sada, nije uspešno realizovana ni u jednoj predloženoj strukturi KKL-a na bazi ZnO. U ovom poglavlju ćemo dati objašnjenje zbog čega predložena struktura nije mogla da demonstrira lasersku emisiju. Materijal jame je ZnO, dok je barijera od $Zn_{0.88}Mg_{0.12}O$ materijala. Struktura je narastana na nepolarnoj m -ravni ZnO supstratu. Pojava pukotina u epitaksijalnom sloju narastanom na neusklađenoj podlozi, kao $(Zn, Mg)O$ na ZnO – može se predvideti korišćenjem kriterijuma kritične debljine kao što je objašnjeno u referenci [162]. Kritična debljina se definiše kao maksimalna debljina koja se može narasti pre nukleacije prve pukotine u sloju. Ispostavilo se da za uzorke THz kaskadnih uređaja (koji imaju nizak molski ideo Mg) relaksacija u m ravni ne predstavlja problem, jer je kritična debljina za 15 % Mg iznad 1 μm , što omogućava rast terahercnih kaskadnih naprava od m -ravanskog ZnO i $(Zn, Mg)O$, bez defekata. S druge strane, realizacija KKL u MIR opsegu korišćenjem m -ravnih nije moguća jer je sadržaj Mg veći i samim tim je kritična debljina znatno smanjena. Temperatura u simulacijama je $T = 300$ K, i spoljašnje primjeno električno polje je $F = 73$ kV/cm. Slika 8.9 prikazuje profil provodne zone strukture. Efektivne mase u kvantnim jamicama i barijerama su uzete da su iste kao masa ZnO polarona ($0.28 m_0$), kao u referenci [160], zbog jake interakcije između elektrona i fonona u ovom visokojonskom materijalu. Prepostavka o jednakim efektivnim masama u jami i barijeri ne unosi značajnu grešku pošto je sadržaj Mg uzet oko 12 % da bi doveo do diskontinuiteta provodne zone od ~ 200 meV.



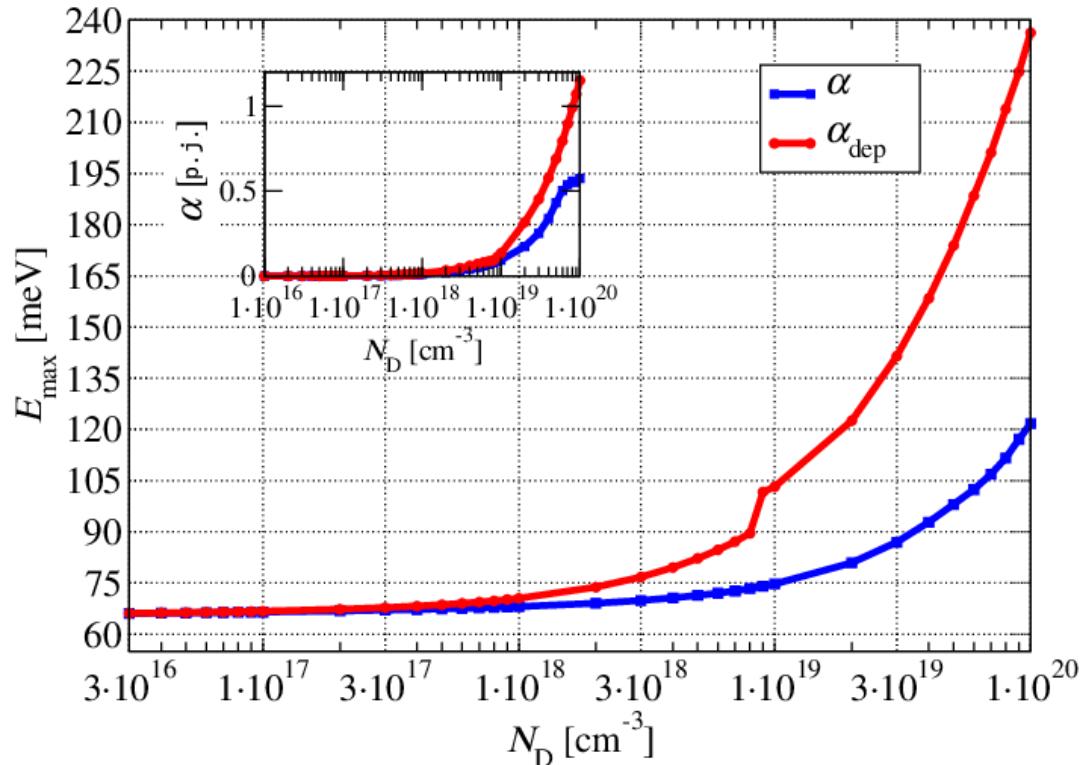
Slika 8.9 – Profil potencijala provodne zone ZnO/Zn_{0.88}Mg_{0.12}O pri primjenjenom spoljašnjem električnom polju. Redosled slojeva dat je u nm i iznosi, sa leva na desno, 2.5/3.6/1.7/3.4/2.4/2.75/2.7/6.15/2.5, gde su barijere podebljane a ostalo su ZnO jame. Centar (2.05 nm) najšire jame 6.15 nm (podvučeno) je dopiran Ga koncentracije $N_D = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Vezana stanja i njihove odgovarajuće talasne funkcije su kvadrirane i prikazane punim crvenim linijama. Isprekidana crna linija pokazuje efektivnu potencijalnu energiju bez dopiranja jama. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Na Slici 8.10 prikazujemo da proračunati apropcioni spektar za srednje dopiranje galijumom Ga ($N_D = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) ima pik na oko 70 meV. Razlika između jednočestičnog modela i složenog modela koji je izložen u 7. poglavlju je samo nekoliko meV. Sa druge strane, za velike vrednosti koncentracije donora ($N_D = 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$), primećujemo da je u jednočestičnom modelu, apsorpcioni maksimum na oko 100 meV, dok je u modelu sa depolarizacionim pomerajem maksimum na oko 170 meV, što predstavlja značajnu razliku koja pokazuje na to da se kolektivni efekti u ovom slučaju ne smeju zanemariti. Naravno, što više povećavamo dopiranje, depolarizacioni pomeraj postaje sve izraženiji. Ovo je takođe ilustrovano na Slici 8.11 na kojoj je energija koja odgovara maksimumu apsorpcije prikazana kao funkcija koncentracije donora. Umetak Slike 8.11 pokazuje zavisnost koeficijenta apsorpcije od koncentracije Ga [49].

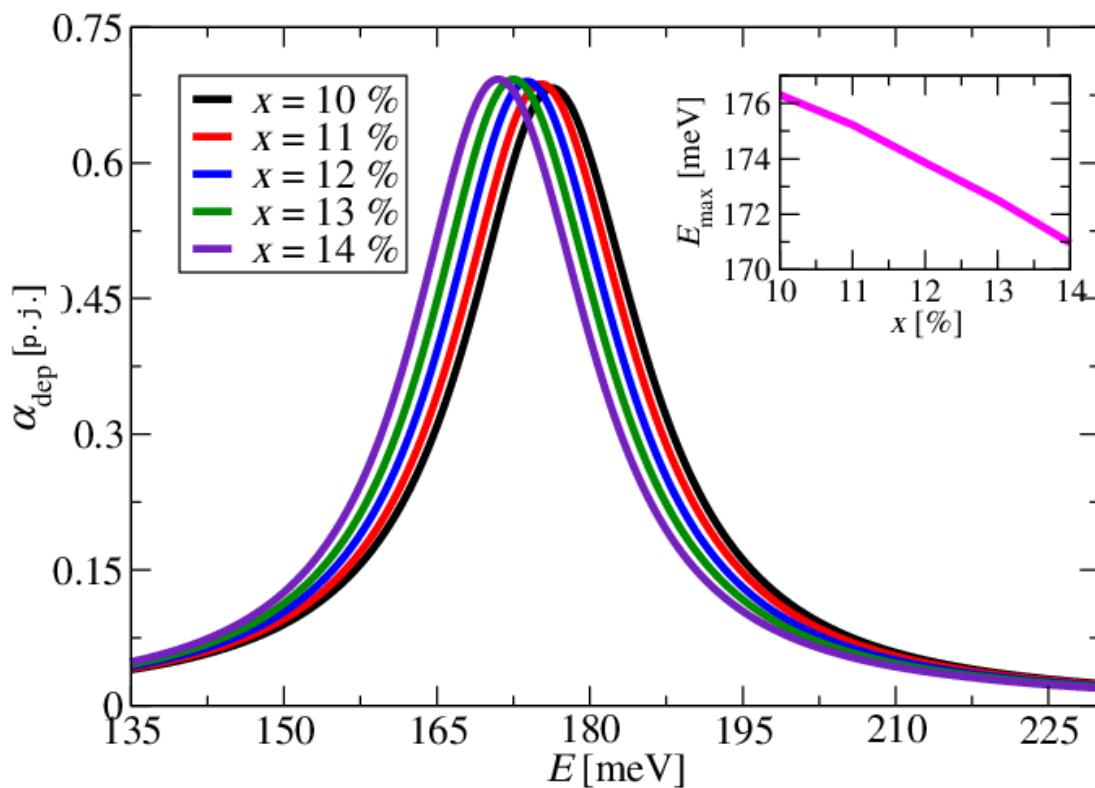
Na Slikama 8.12 i 8.13 prikazujemo proračun apsorpcije za veliku vrednost dopiranja $N_D = 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ uzimajući u obzir depolarizaciono polje, tj. u višeplazmonskoj slici. Promena visine barijere variranjem molskog udela Mg u slojevima barijere sa 10 % na 14 % sa korakom od 1 %, uzrokuje pomeranje spektra apsorpcije prikazanog na Slici 8.12. Energija apsorpcionog maksimuma doživljava crveni pomak sa povećanjem procenta Mg u barijeri. Uticaj malih varijacija širine dopirane jame za korake od $\pm 2,5 \text{ \AA}$ na spekture apsorpcije prikazan je na Slici 8.13. Povećanje širine jame dovodi do plavog pomaka apsorpcionih spektara.



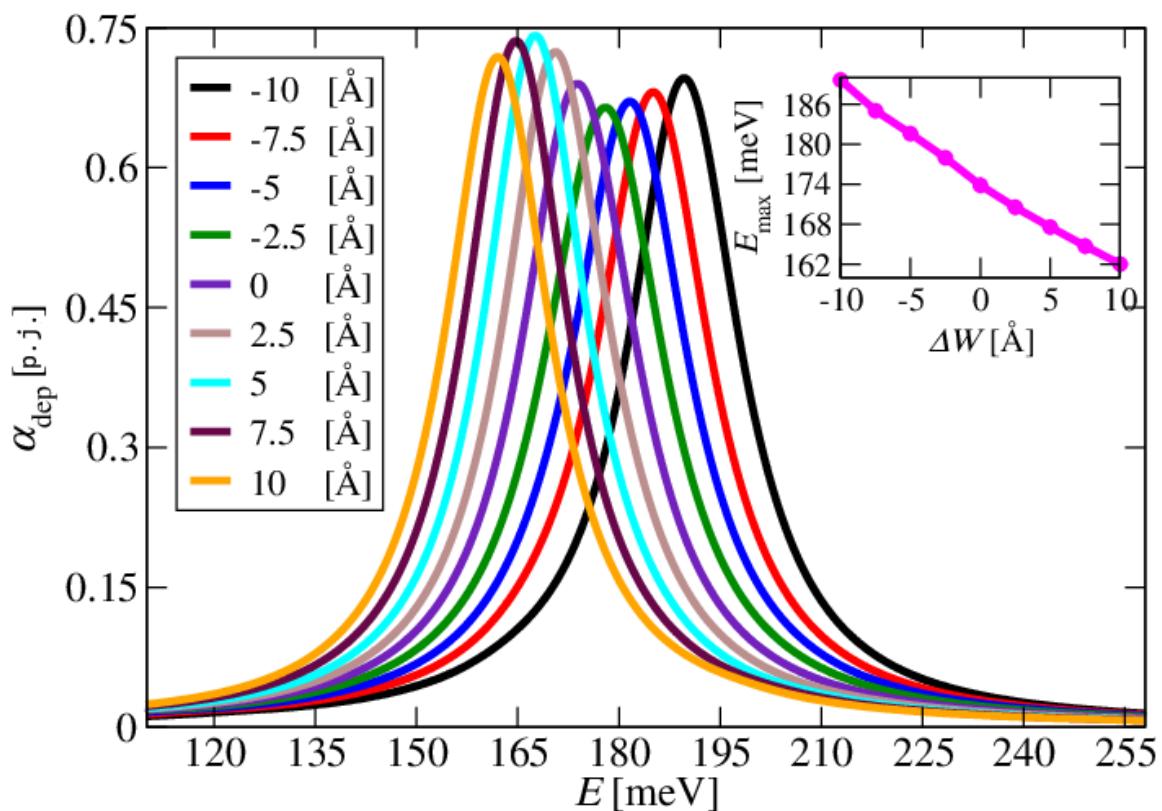
Slika 8.10 - Apsorpcioni spektar unutarzonskih prelaza za različite vrednosti dopiranja široke jame stukture sa Slike 8.9. Gornji dijagram prikazuje spektar apsorpcije sa uračunatim depolarizacionim pomakom, dok donji dijagram prikazuje apsorpcioni spekar računat jednočestičnim modelom. Adaptirano iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).



Slika 8.11 - Energija apsorpcionog pika u funkciji koncentracije dopanata u širokoj jami u strukturi dатој на Слици 8.9. Plava linija označава једноћестићну слику, док црвена линија приказује резултате пуног квантног тремана који је неопходан за веће концентрације додира. Уметак показује промену пика кофицијента апсорпције у функцији додира широке јаме. Пружето из [49] под условима Creative Commons Attribution (CC BY) лиценсе (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).



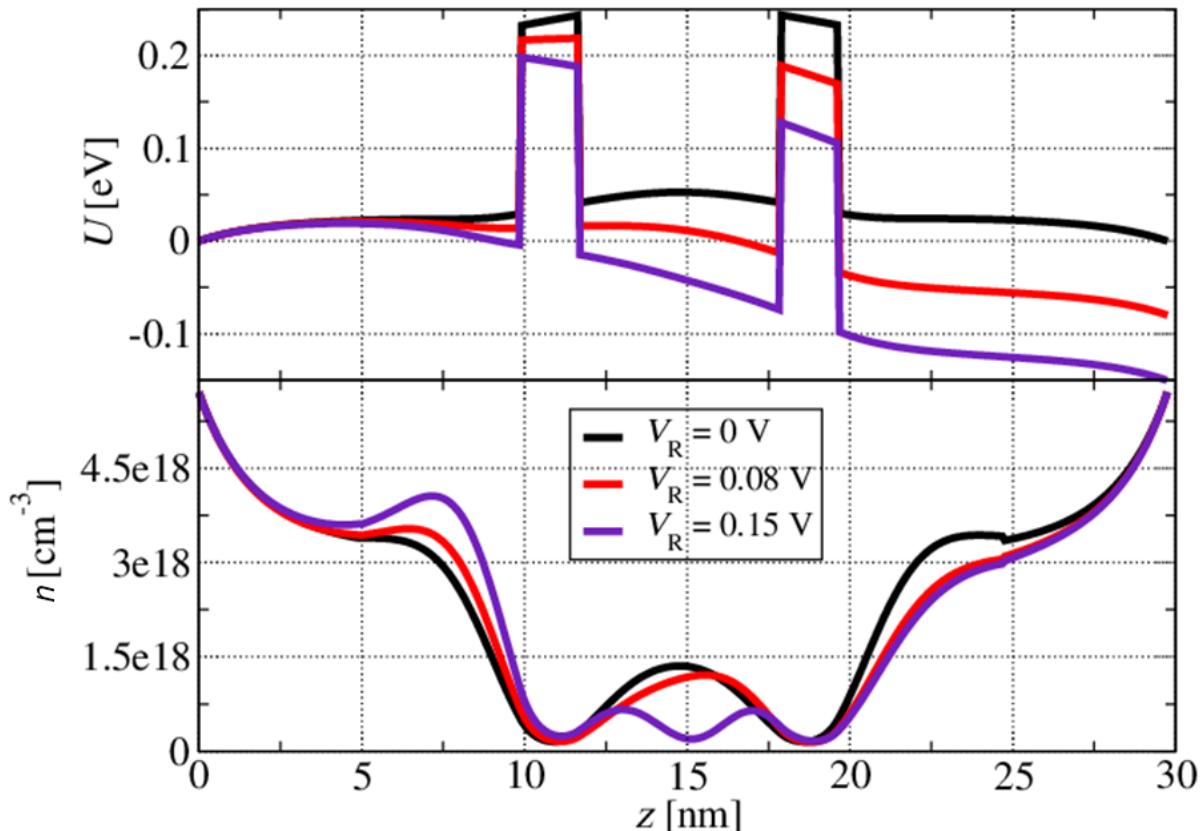
Slika 8.12 - Apsorpcioni spektar za različite molske udele Mg u barijerama. Koncentracija dopiranja široke jame je $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, a temperatura rešetke $T = 300 \text{ K}$ se koristi u svim simulacijama. Umetak prikazuje energiju koja odgovara poziciji maksimuma apsorpcionog spektra kao funkciju sastava Mg u slojevima barijere. Kako se procenat Mg povećava, vrh apsorpcionog spektra doživljava crveni pomak za približno 5 meV. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).



Slika 8.13 - Slika pokazuje da proširenje široke jame izaziva crveni pomak spektra apsorpcije. Umetak prikazuje apsorpcionu energiju kao funkciju promene širine jame ΔW . Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

8.4. Rezonantne tunelske strukture od $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$

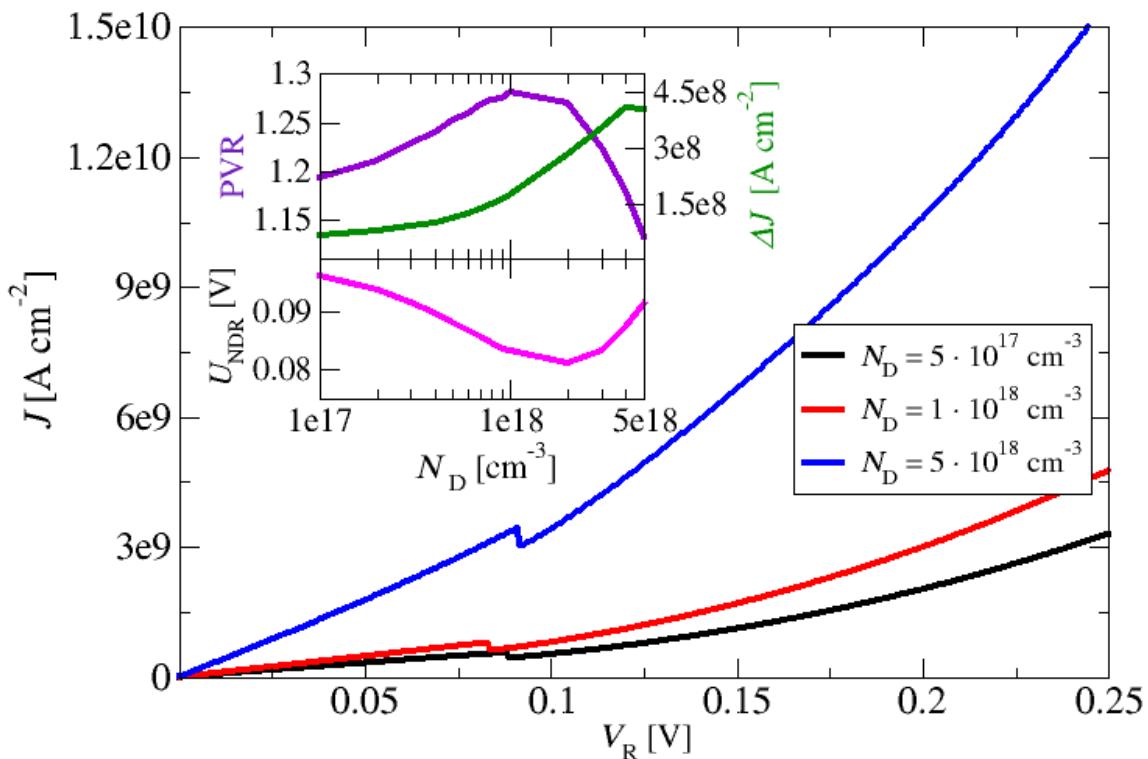
U ovom potpoglavlju razmatramo rezonantne tunelske strukture. U prvom delu proračuna analiziramo nepolarnu (m -ravan) $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ rezonantnu tunelsku strukturu sa dvostrukom barijerom kako bismo ispitali efekat promene debljine slojeva i uticaj varijacije koncentracije primesa na performanse rezonantnog tunelovanja u strukturi. Prva analizirana struktura ima ZnO kvantnu jamu debljine 6 nm okruženu sa dve $Zn_{0.88}Mg_{12}O$ barijere, svaka širine 2 nm. Debljine slojeva i sastav Mg u slojevima barijere izabrani su tako da oponašaju rezonantno tunelovanje (injekciju elektrona) potencijalne kvantno kaskadne strukture. Struktura sa dvostrukom barijerom postavljena je između slojeva ZnO injektora i kolektora, a na ovu kratku strukturu primenjen je spoljašnji napon V_R u opsegu između 0 i 0.25 V. Usvojeno je dopiranje injektora/kolektora galijumom $N_D = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [49]. Samosaglasni efektivni potencijal i odgovarajuća koncentracija elektrona na temperaturi rešetke od $T=300$ K za tri različite vrednosti napona prikazani su na Slici 8.14. Može se uočiti da je dno provodne zone u centru kvantne jame iskriviljeno na gore usled povećane populacije elektrona na najnižem kvazivezanom stanju, pri nižim naponima, jer je bliže Fermijevoj energiji na strani jako dopiranog emitera. Veća koncentracija elektrona u jami dovodi do jačeg samosaglasnog polja, a samim tim i do izraženijeg krivljenja potencijala. Za veće vrednosti napona, kao što je $V_R = 0.15$ V, oblik samosaglasne koncentracije elektrona u jami promenjen je sa padom efektivnog potencijala, odnosno drugo kvazivezano stanje u oblasti jame akumulira elektrone i postaje relevantno za proces tunelovanja nosilaca [49].



Slika 8.14 - Samosaglasni potencijal i odgovarajuće koncentracije elektrona za tri različite vrednosti napona. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

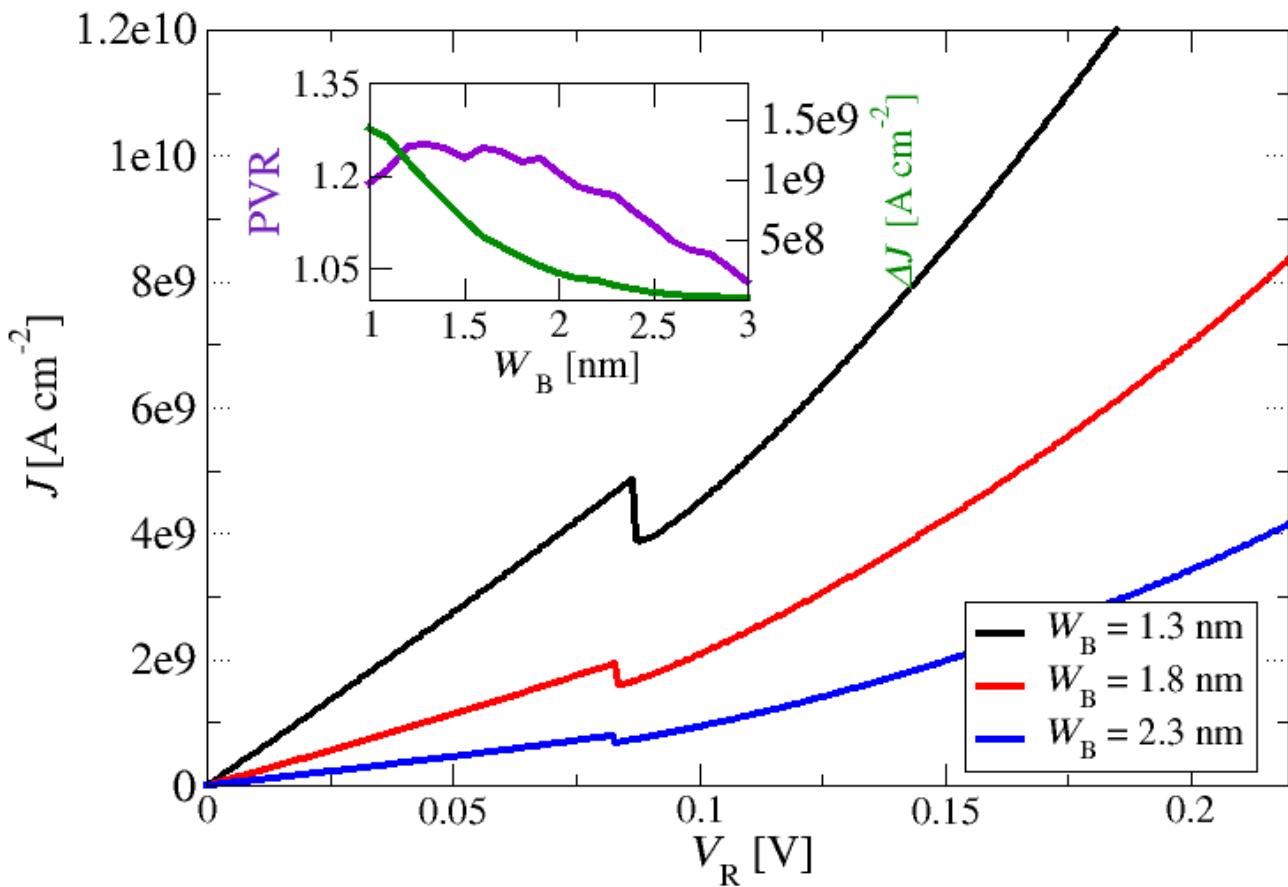
U sledećem skupu simulacija, posmatrana je ista struktura, ali je menjano dopiranje oblasti kolektora i emitera između 10^{17} cm^{-3} i $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. U svim proračunima temperatura je $T=300 \text{ K}$. Slika 8.15 prikazuje zavisnost gustine struje od napona ($J-V$ kriva) za tri vrednosti dopiranja. Vidimo da gustina struje raste sa povećanjem dopiranja emitera i kolektora u celom opsegu napona. Takođe, za sve posmatrane vrednosti dopiranja, krive zavisnosti gustine struje od napona struje imaju oblast sa negativnom diferencijalnim otporostju, odnosno NDR oblasti.

Bitan parameter je količnik između lokalnog maksimuma i lokalnog minimuma oko NDR tačke u strujno-naponskoj ($I-V$) karakteristici RTD-e je PVR. Iako RTD može imati višestruke rezonancije u zavisnosti od dizajna podzona, u praktičnim slučajevima najvažnija je prva „grba“ u $I-V$ karakteristici. Još jedna vrlo važna veličina za opis performansi RTD-a je *dinamički opseg* koji predstavlja razliku između vrednosti struje u lokalnom maksimumu i minimumu. Na umetnutoj slici u okviru Slike 8.15 može se videti kako *i*) PVR za gusinu struje J koji ukazuje na stepen razdvajanja pikova, *ii*) dinamički opseg ΔJ pri NDR, i *3*) vrednosti napona V_{NDR} u NDR-u, zavise od nivoa dopiranja emitera i kolektora [49]. PVR se povećava sa povećanjem nivoa dopiranja emitera i kolektora i ima maksimalnu vrednost PVR od ≈ 1.255 pri koncentraciji primesa od 10^{18} cm^{-3} . Dalje povećanje nivoa dopiranja emitera i kolektora dovodi do smanjenja PVR, a pri koncentracijama iznad $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, NDR oblast je skoro nestala ($\text{PVR} \approx 1$). Iz ovih rezultata zaključuje se da je optimalni nivo dopiranja *n*-tipa emitera i kolektora, ove strukture, oko 10^{18} cm^{-3} .



Slika 8.15 - Zavisnost gustine struje od napona nepolarnih $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.88}\text{Mg}_{0.12}\text{O}$ rezonantnih tunelskih struktura. Nivo dopiranja emitera i kolektora variran je u rasponu od 10^{17} cm^{-3} do $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Debljine slojeva barijera i jama počevši od emitera u nm su 10/2/6/2/10 (debljine kvantnih jama su označene podebljanim slovima). Umetnuta slika prikazuje dva najbitnija parametra, PVR za gusinu struje J (gornji panel, leva y-osa) i dinamički opseg ΔJ (gornji panel, desna y-osa) u NDR-u; donji panel umetka prikazuje napon u NDR u funkciji dopiranja emitera. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

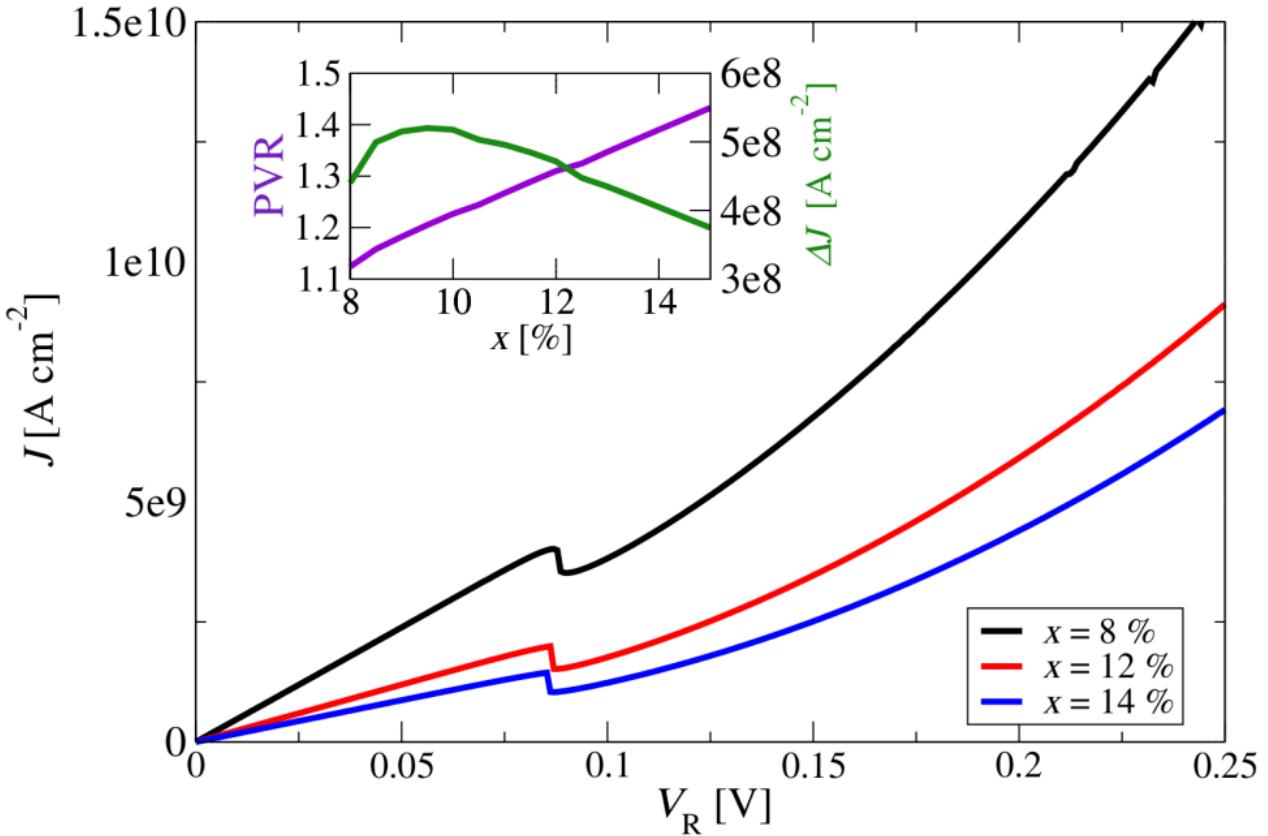
Kao što je i ranije istaknuto, sistem materijala $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ privukao je veliko interesovanje poslednjih godina iako je proces narastanja tehnološki vrlo zahtevan. Konkretno, varijacija debljine narastanog sloja i hrapavost (neravnine) na međuspoju reda veličine dela monosloja je još jedan problem koji je poznat u literaturi [163]. Strukture zasnovane na mehanizmima rezonantnog tunelovanja, kao što je THz KKL, [9] zahtevaju visok kvalitet i veoma precizno narastanje slojeva kako bi se obezbedilo efikasno rezonantno tunelovanje elektrona i proces selektivne injekcije u gornji laserski nivo. U cilju analize uticaja fluktuacije debljine sloja u rezonantnoj tunelskoj strukturi $ZnO/Zn_{0.88}Mg_{0.12}O$, uradili smo još jedan skup simulacija gde smo određivali $J-V$ karakteristike u referentnoj strukturi sa dve barijere, gde je nominalna debljina barijere 2 nm i debljina jame 6 nm. Ova struktura je slična i oponaša rezonantne injekcione slojeve u THz kvantno kaskadnoj strukturi iz reference [9]. Kao što vidimo sa Slike 8.16, jednoslojne promene debljine barijere od $Zn_{0.88}Mg_{0.12}O$, označene sa W_B , uprkos relativno niskom molskom udelu Mg, bitno utiču na jačinu struje tunelovanja, PVR i dinamički opseg [49]. To znači da je varijacija širine barijere važan parametar u potencijalnoj optimizaciji transporta elektrona $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ THz KKL-a. Umetnuta slika u okviru Slike 8.16 pokazuje da je optimalna vrednost za ovu konkretnu rezonantnu tunelsku strukturu oko 1.3 nm [49].



Slika 8.16 - $J - V$ karakteristika nepolarnih m -ravanskih $ZnO/Zn_{0.88}Mg_{0.12}O$ rezonantnih tunelskih struktura sa dvostrukom barijerom. Debljina barijera W_B menjana je za oko jedan monosloj oko nominalne vrednosti od 2 nm. Nominalne debljine slojeva barijera i kvantnih jama sastavnih episojeva strukture počevši od emitera u nm su 10/1-3/6/1-3/10 (debljine kvantnih barijera su označene podebljanim slovima). Umetnuta slika prikazuje PVR (leva y-osa) i dinamički opseg ΔJ u NDR-u; Koncentracija primesa u emiteru/kolektoru je $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, dok je temperatura $T = 300 \text{ K}$. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Na kraju je analiziran i uticaj molskog udela Mg na $J-V$ karakteristike RTD, gde su fiksirane prethodno dobijena optimizovana koncentracijom donora $N_D = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ i optimizovana

debljina barijere od $W_B = 1.3$ nm. Kao što je prikazano na Slici 8.17, i varijacija Mg u barijerama od $Zn_{1-x}Mg_xO$ značajno utiču na jačinu struje tunelovanja, PVR i dinamički opseg gustine struje, ukazujući da je i molski ideo Mg dodatni važan parametar u prospективnoj optimizaciji transporta elektrona u $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ THz KKL-u. Umetnuta slika u okviru Sl. 8.17 pokazuje da bi vrednost od oko $x = 9\%$ proizvela maksimalni dinamički opseg gustine struje ΔJ u ovoj konkretnoj strukturi [49].



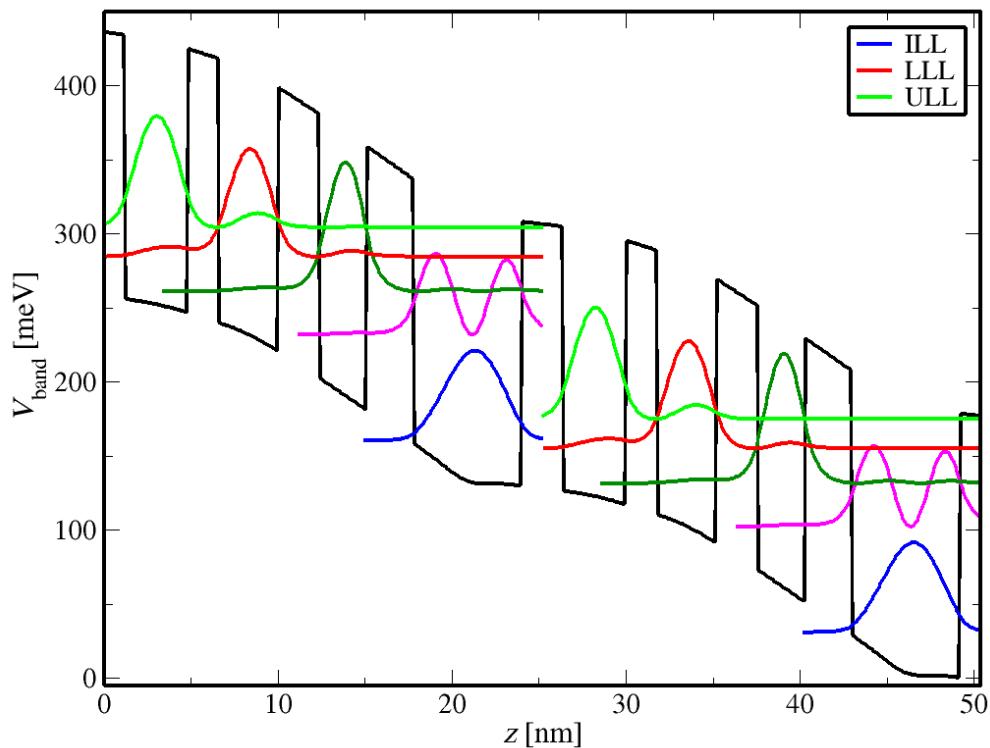
Slika 8.17 - $J - V$ karakteristika nepolarnih m -ravanskih $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ rezonantnih tunelskih struktura sa dvostrukom barijerom. Optimalno dopiranje u emiteru/kolektoru je $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ i izabrana je debljina barijere od 1.3 nm, odnosno nominalne debljine slojeva barijere i kvantnih jama sastavnih epi-slojeva strukture počev od emitera u nm su 10/1.3/6/1.3/10 (debljina kvantnih barijera su podebljane). Umetnuta slika prikazuje PVR (leva y-osa) i dinamički opseg gustine struje ΔJ (desna y-osa) u NDR-u; temperatura rešetke je $T = 300$ K. Preuzeto iz [49] pod uslovima Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

8.5. Proračun transportnih karakteristika THz $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ kvantnog kaskadnog lasera

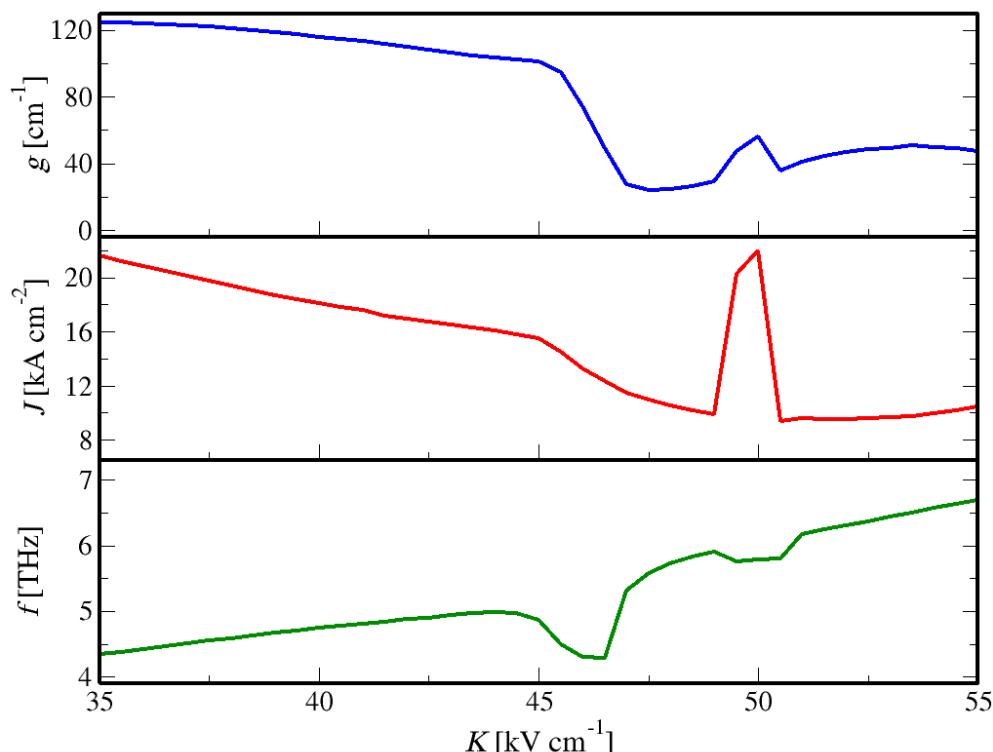
Dizajn aktivne oblasti THz $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ KKL-a predstavljenog u [9] dat je sledećim redosledom slojeva: **2.5/3.6/1.7/3.4/2.4/2.75/2.7/2.05/2.05/2.05** nm gde boldirani slojevi sadrže 12% Mg, a podvučen sloj dopiran je koncentracijom $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Struktura nije proizvela lasersku emisiju, već je u radu prijavljena samo elektroluminiscencija.

Za proračun transportnih karakteristika koristimo metod matrice gustine [103], [145] opisan detaljno u 6. poglavlju disertacije. Na Slici 8.18 prikazana je elektronska struktura dobijena samosaglasnim postupkom, gde možemo uočiti značajno krivljenje provodne zone zbog velike vrednosti dopiranja. Takođe, možemo primetiti da za polje koje odgovara NDR tački, $K_{NDR} =$

51.5 kV/cm , nema poklapanja injektorskog nivoa (ILL) leve periode i gornjeg laserskog nivoa (ULL) desne periode, što je jedan od preduslova za pojavu NDR tačke.

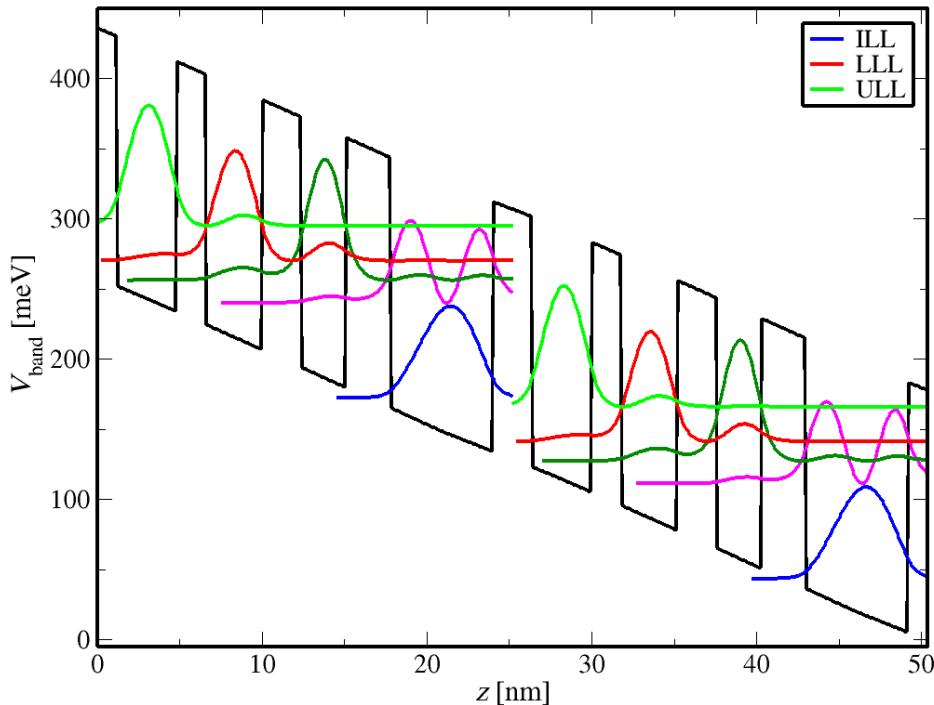


Slika 8.18 - Elektronska struktura originalnog dizajna za polje od 51.5 kV/cm

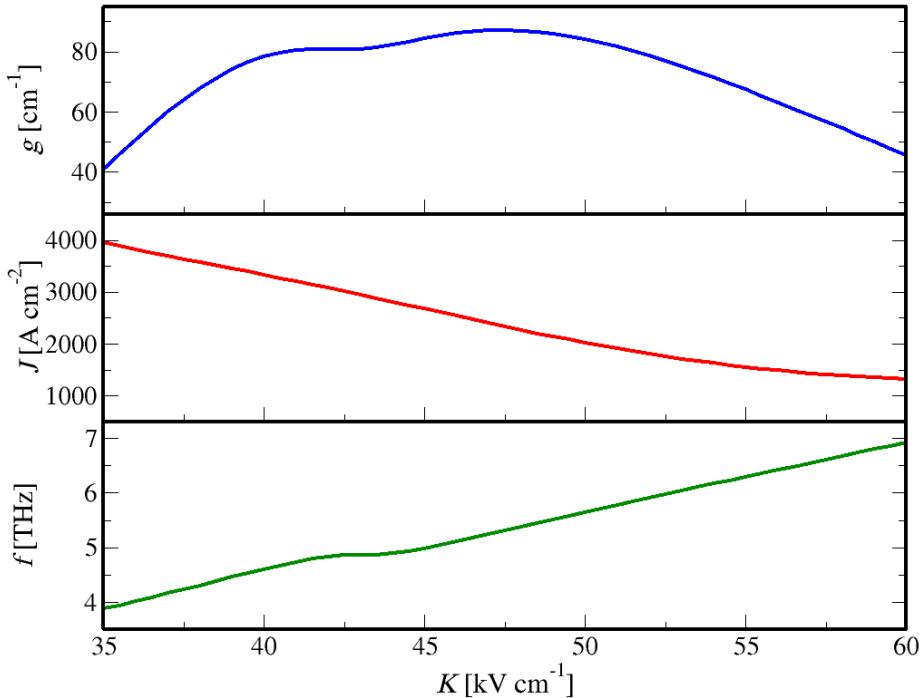


Slika 8.19 - Materijalno pojačanje, gustina struje i frekvencija emisije originalnog dizajna iz [9] u funkciji spoljašnjeg električnog polja.

Sa Slike 8.19 uočava se da je vrednost struje u NDR tački preko 20 kA/cm^2 što je izuzetno velika, fizički nerealna vrednost, a svakako daleko veća od vrednosti pokazanih u eksperimentu (oko 1 kA/cm^2). Ovo je očigledno posledica jakog dopiranja u samosaglasnom postupku. Autori u [9] su visoko dopirali obrazložili malim stepenom ionizacije dopanata, usled čega su efektivne vrednosti dopiranja dosta niže od koncentracije dopanata. Ponovljen je proračun sa vrednostima dopiranja smanjenim za red veličine, što otprilike odgovara efektivnim vrednostima dopiranja zbog niskog stepena ionizacije dopanata. Sa Slike 8.20 vidimo da ne dolazi do značajnog krivljenja zona, što je očekivano jer je koncentracija elektrona niža.



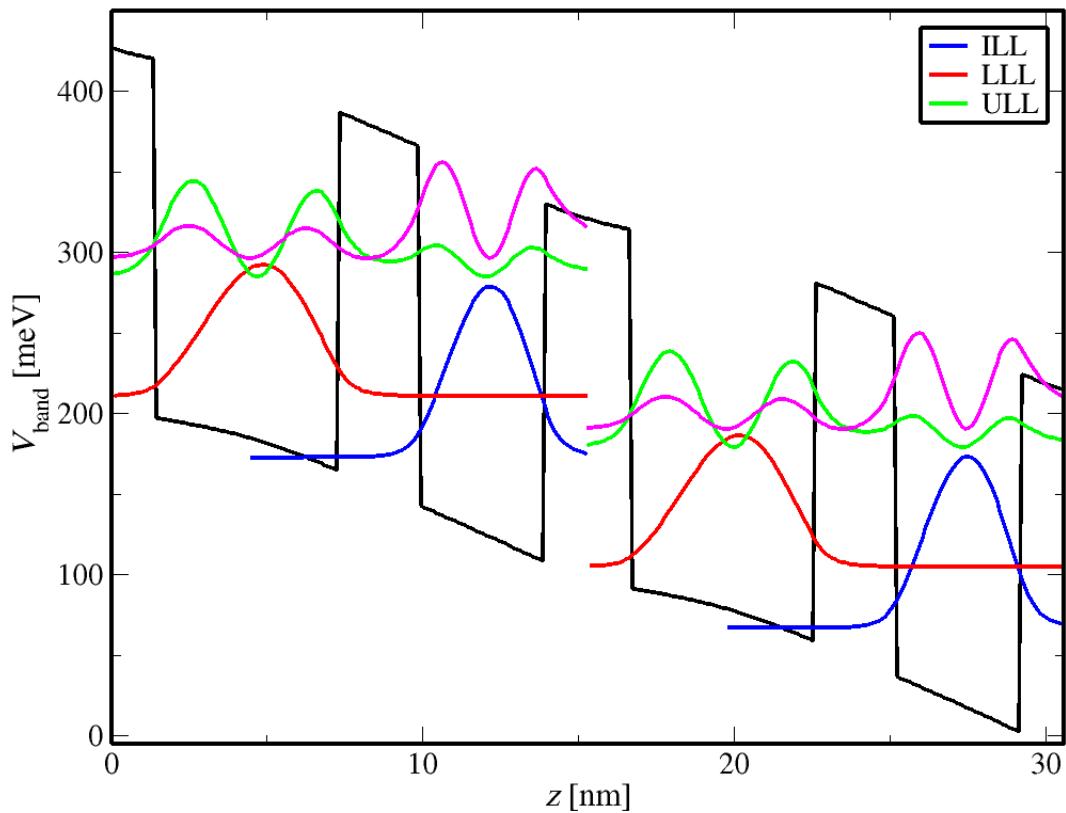
Slika 8.20 - Elektronska struktura originalnog dizajna iz [9] sa umanjenim dopiranjem na 3×10^{17} dopanata/cm³ za polje od 51.5 kV/cm. Slojevi se mogu zapisati kao **2.5/3.6/1.7/3.4/2.4/2.75/2.7/2.05/2.05/2.05** nm gde boldirani slojevi barijera sadrže 12 % Mg, a podvučen sloj dopiran je primesama koncentracije 3×10^{17} dopanata/cm³.



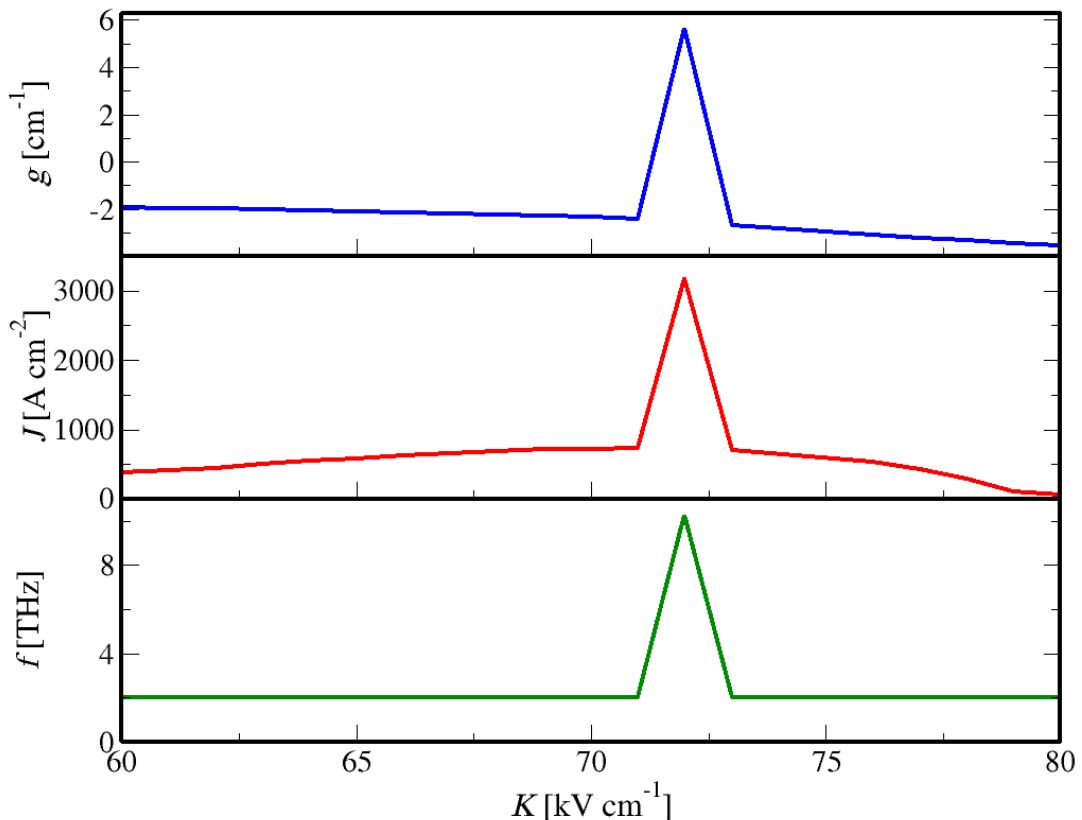
Slika 8.21 - Materijalno pojačanje, gustina struje i frekvencija emisije originalnog dizajna iz [9] sa umanjenim dopiranjem na 3×10^{17} dopanata/ cm^3 u funkciji spoljašnjeg električnog polja.

Na Slici 8.21, koja prikazuje transportne karakteristike, možemo videti da vrednost gustine struje sve vreme opada sa porastom polja, što govori o tome da ovakav dizajn lasera ne može da radi, jer su uslovi rada lasera da ima pojačanje veće od gubitaka (oko 20 cm^{-1}), kao i da struja raste sa porastom električnog polja. Zaključujemo da je ovo loš dizajn aktivne oblasti THz KKL-a i da je najverovatnije to uzrok što nije emitovao lasersko zračenje.

Na kraju je napravljen proračun za dvojamni dizajn aktivne oblasti THz $\text{ZnO/Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ KKL-a, predložen u [11], koji ima sledeći recept debljine slojeva **2.7/6.0/2.6/4.0 nm** gde su boldirani slojevi barijera sa 15 % Mg, a podvučen sloj dopiran je koncentracijom $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Sa Slike 8.22, koja prikazuje samosaglasni potencijal i kvadrate modula talasnih funkcija, vidi se da je razmak energija izmedju donjeg laserskog nivoa (LLL) i injekcionog nivoa (ILL) oko 30 meV umesto energije od oko 72 meV (odgovara energiji LO-fonona u ZnO) koja je neophodna za funkcionisanje ovakvog dizajna KKL-a na bazi ZnO. Dakle, elektronska struktura ovog dizajna u startu nije dobra zbog čega KKL nema pojačanja i samim tim ne može da radi, što se vidi i na Sl. 8.23 gde su prikazane transportne karakteristike u funkciji spoljašnjeg električnog polja.



Slika 8.22 - Elektronska struktura dvojamnog THz KKL-a iz [11] za spoljašnje polje od 70 kV/cm.



Slika 8.23 - Materijalno pojačanja, gustina struje i frekvencija dvojamnog THz KKL-a iz [11] u funkciji spoljašnjeg električnog polja.

U ovom potpoglavlju analizirana su dva dizajna predložena u literaturi i kroz detaljne proračune transporta, korišćenjem vrlo pouzdanog modela zasnovanom na metodu matrice gustine, kao i proverenim parametrima materijala, objašnjeno je zbog čega oni nisu u stanju da dovedu do uspešne laserske emisije. Za generisanje ispravnog dizajna, potrebno je obratiti posebnu pažnju optimizaciji injekcione barijere i uključiti u proračun sve relevantne mehanizme rasejanja [164]. Uz to, podrazumeva se da je neophodno imati i odgovarajuće parametre materijala (ne samo efektivne mase i diskontinuitete provodne zone materijala) koji su neophodni za detaljne simulacije.

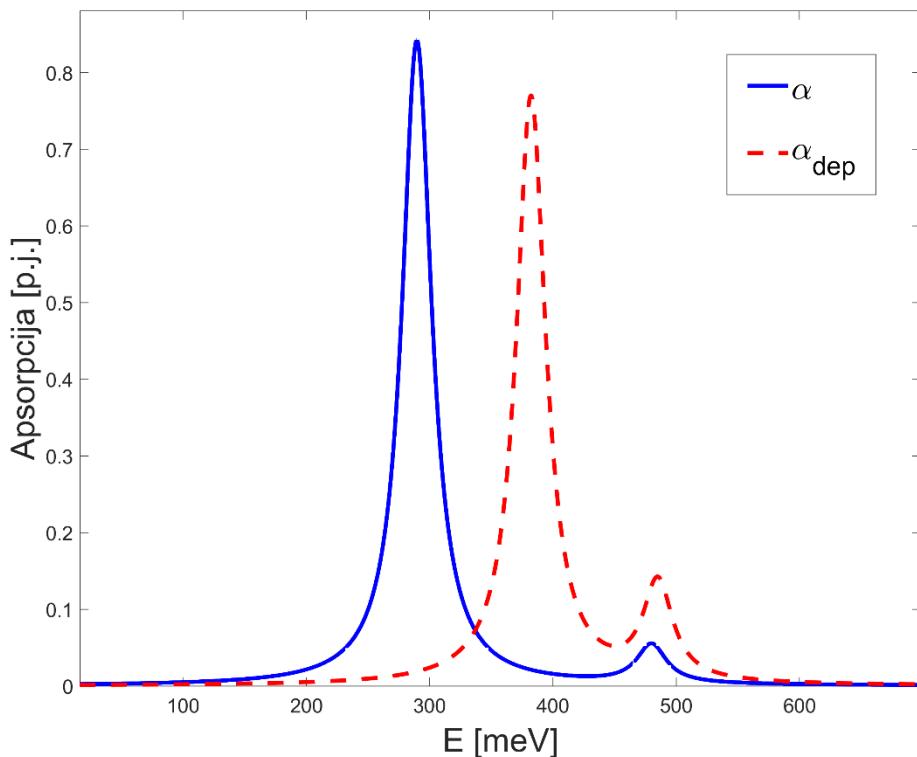
8.6. Apsorpcija u β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃/Ga₂O₃ kvantnoj jami

Uspešna demonstracija visokokvalitetnih uzoraka β -Ga₂O₃ tankih filmova MOVPE i MBE tehnikama epitaksijalnog narastanja opisanih u 2. poglavlju, motiviše istraživanje perspektivnih heterostrukturnih naprava od β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃/Ga₂O₃ koje bi radile na kraćim talasnim dužinama u odnosu na naprave od konvencionalnih materijala. U nastavku se bavimo unutarzonskim prelazima u kvantnim jamama i proračunom apsorpcije u strukturama koje bi mogle da posluže kao naprave za emisiju ili detekciju zračenja u infracrvenom delu spektra. U potpoglavljkima 8.6 – 8.9 apsorpcioni pikovi se javljaju na energijama u opsegu od 200-400 meV, što odgovara talasnim dužinama u opsegu od 3-6 μm. U ovom i narednim poglavljkima u simulacijama koristimo parametre materijala iz reference [34], koji su dati u Tabeli 8.1.

Tabela 8.1- Svojstva materijala korišćena u proračunima β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃/Ga₂O₃ kvantnih jama u potpoglavljkima 8.6 – 8.9. Preuzeto iz [34].

Parametar	Vrednost	Referenca
E_{g,Ga_2O_3} (eV)	4.69	[165]
E_{g,Al_2O_3} (eV)	7.03	[165]
$E_{g,(Al_xGa_{1-x})_2O_3}$ (eV)	$4.69 + 1.34x + 1.0x^2$	[165]
ΔE_c (eV)	$\begin{cases} 1.95x^2 - 0.24x + 0.96, & x > 0.5 \\ 0.94x^2 + 2.15x, & x < 0.5 \end{cases}$	[165]
$m_{Ga_2O_3}^*$ (kg)	$0.28m_0$	[166]
$m_{(Al_xGa_{1-x})_2}^*$ (kg)	$(0.28 + 0.11x)m_0$	[166]
ϵ_{r,Ga_2O_3}	10	[167]
$\epsilon_{r,(Al_xGa_{1-x})_2}$	10	prepostavljeno

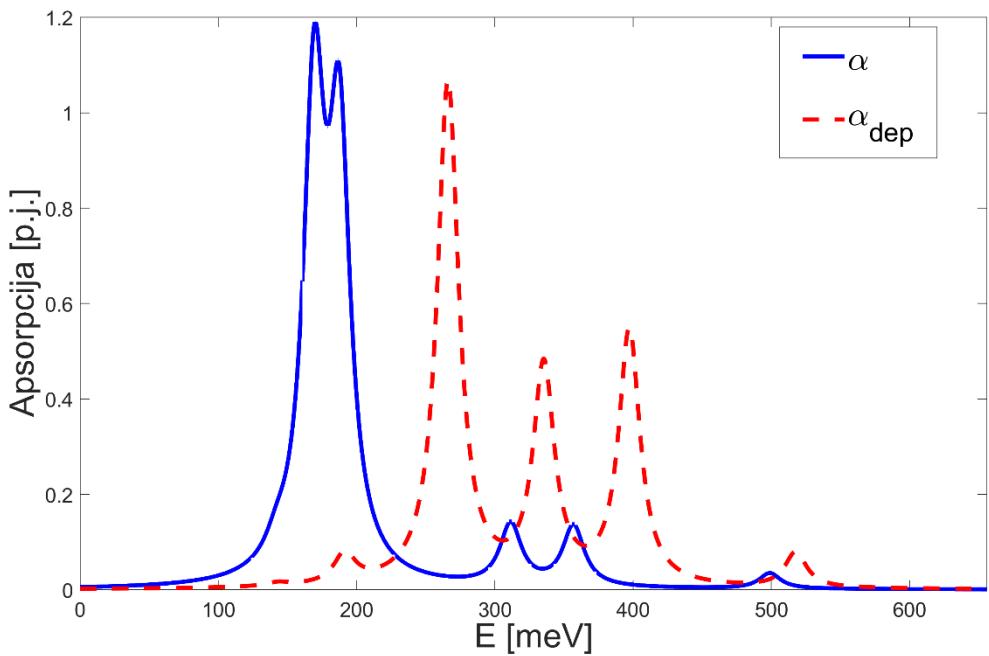
Posmatramo apsorpcioni spektar za jednu kvantu jamu na sobnoj temperaturi gde je primenjeno Si-δ dopiranje reda 10^{20} cm⁻³.



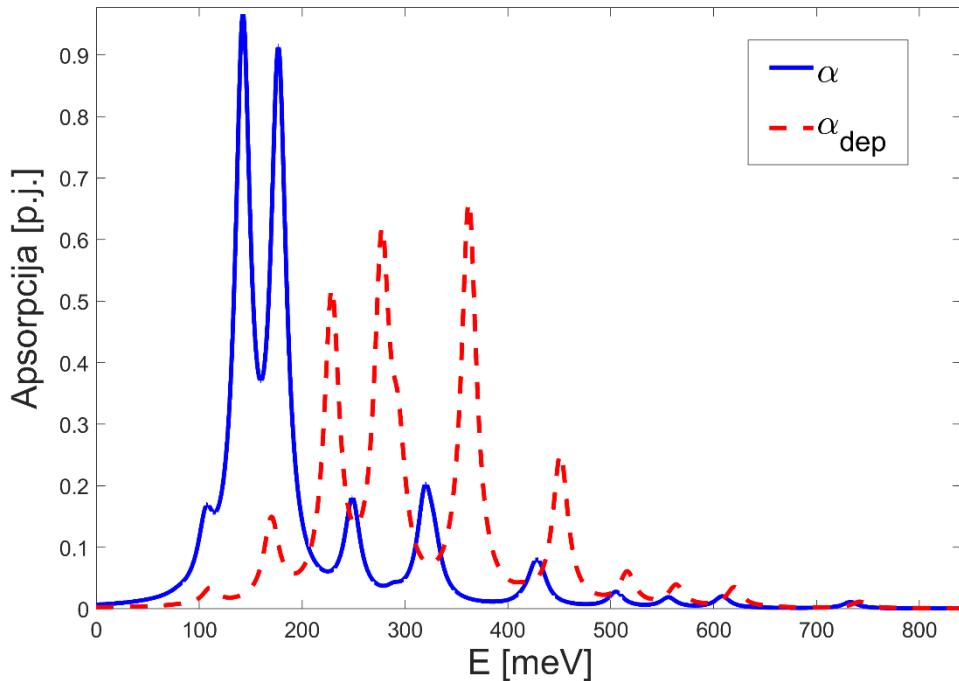
Slika 8.24 - Profil apsorpcije za jednu kvantnu jamu širine 3.1 nm. Prikazane su vrednosti računate jednočestičnim podelom (plava) i modelom sa depolarizacionim pomerajem (crvena).

Na Slici 8.24 plavom linijom je obeležena apsorpcija koja se računa klasično, jednočestičnim modelom, dok crvena isprekidana linija označava rezultat za apsorpciju preko punog kvantnog tretmana koji uključuje depolarizacioni pomeraj. Možemo primetiti da depolarizacioni pomeraj glavnog maksima iznosi čak 93 meV.

Slike 8.25 i 8.26 predstavljaju apsorpcione spekture za slučaj širejame u odnosu na prethodni slučaj, 10 nm. U slučaju da se u proračun ne uključi dovoljan broj stanja, npr. samo četiri (Sl. 8.25), dolazi do pogrešne procene apsorpcije, što se vidi na Slici 8.26 gde je uzeto u obzir 8 stanja. Broj stanja koji je potrebno razmatrati zavisi naravno od širine jame. I u slučaju struktura na bazi Ga_2O_3 vidimo da je za visoke koncentracije dopiranja (reda 10^{19} cm^{-3}) neophodno u proračune uvrstiti depolarizacioni pomeraj nastao usled kolektivnih efekata, inače se pravi ogromna greška u proračunu. Do sada u literaturi nismo pronašli primere da su analizirane jako dopirane heterostrukture od β - $(Al_xGa_{1-x})_2O_3/Ga_2O_3$ materijala i da je u modelovanju apsorpcije uzet u obzir ovaj efekat.



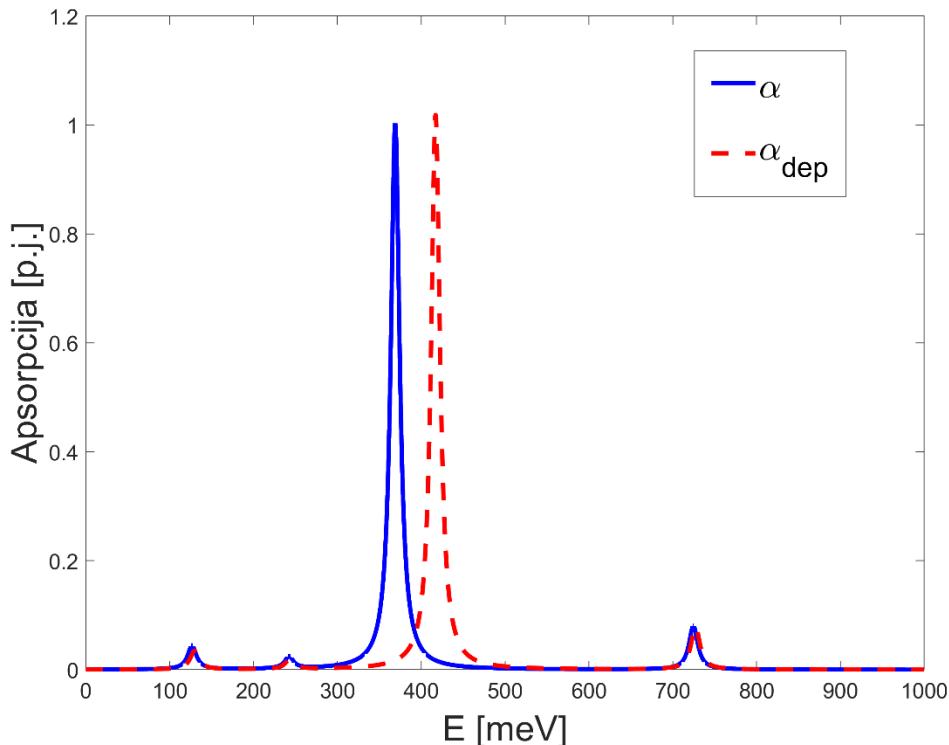
Slika 8.25 - Profil apsorpcije za jednu kvantnu jamu širine 10 nm. Udeo aluminijuma je 30 %. Prikazane su vrednosti računate sa i bez primene depolarizacionog pomeraja. Jama je dopirana Si koncentracije $N_D = 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Posmatrane su vrednosti za 4 vezana stanja.



Slika 8.26 - Profil apsorpcije za jednu kvantnu jamu širine 10 nm posmatrano za 8 vezanih stanja. Udeo aluminijuma je 30 %. Prikazane su vrednosti računate sa i bez primene depolarizacionog pomeraja.

8.7. Apsorpcija u strukturi sa dve kvantne jame od $Ga_2O_3/(Al_xGa_{1-x})_2O$

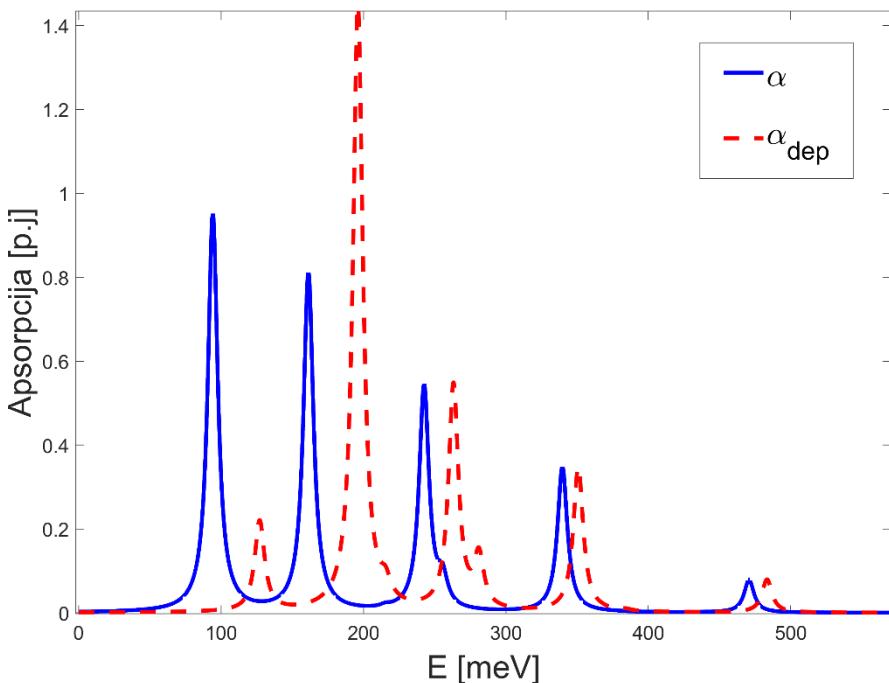
U narednom primeru posmatrane su dve asimetrične jako dopirane kvantne jame. Proračun spektra apsorpcije na Slici 8.27 jasno ukazuje na potrebu da se uračuna depolarizacioni pomeraj koji je u ovom slučaju nekoliko desetina meV. Za barijerni materijal je korišćen $(Al_xGa_{1-x})_2O_3$.



Slika 8.27 - Profil apsorpcije za dve kvantne jame širine 1.2 nm i 2.5 nm i barijere debljine 1 nm. Obe jame su dopirane Si koncentracije $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Prikazane su vrednosti računate sa i bez modela depolarizacionog pomeraja, za 4 vezana stanja. Molski ideo Al je 42 %.

8.8. Apsorpcija u strukturi sa tri kvantne jame od $Ga_2O_3/(Al_xGa_{1-x})_2O$

U ovom primeru proračuna posmatramo strukturu sa tri kvantne jame gde je najšira jama dopirana primesama koncentracije $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, pri čemu je jasno uočljiva preraspodela u spektru apsorpcije na Slici 8.28 usled multiplazmonske korekcije. Plava linija se odnosi na slučaj kada apsorpcioni prelazi odgovaraju energijama prelaza između nivoa u kvantnim jamama, dok je korekcija usled depolarizacionog polja prouzrokovala nove modove koji značajno odstupaju od očekivanih. Posmatrana je interakcija između osam podzona.

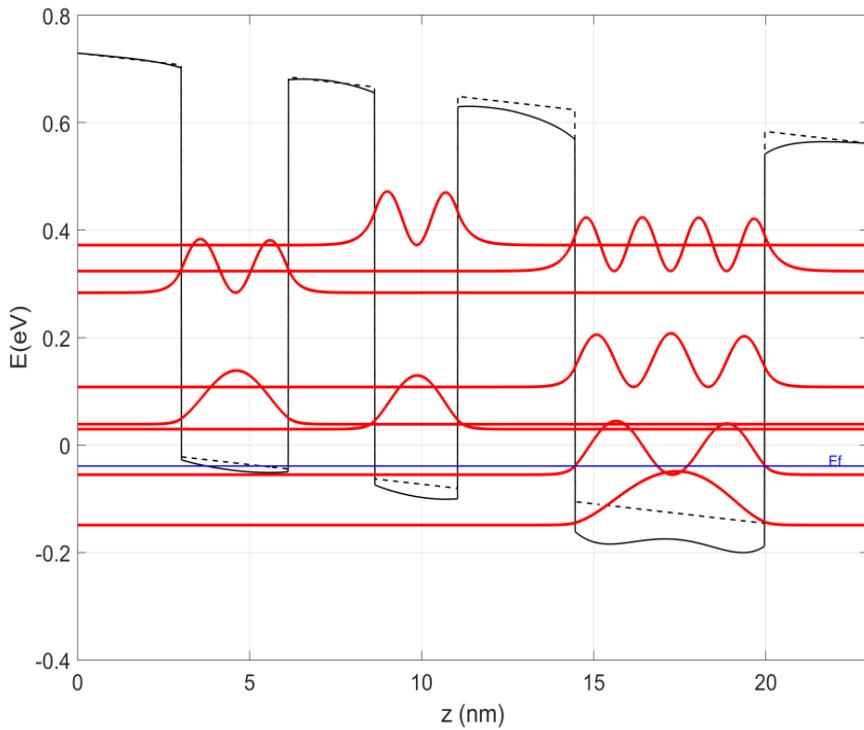


Slika 8.28 - Profil apsorpcije za tri kvantne jame širine 3.1 nm, 2.4 nm i 5.5 nm i barijere debljine 2.5 nm i 3.4 nm. Najšira jama je dopirana Si koncentracije $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Prikazane su vrednosti računate jednočestičnim modelom (plava) i složenim modelom koji uračunava kolektivne efekte (crvena). Udeo aluminijuma u barijeri je 30 %.

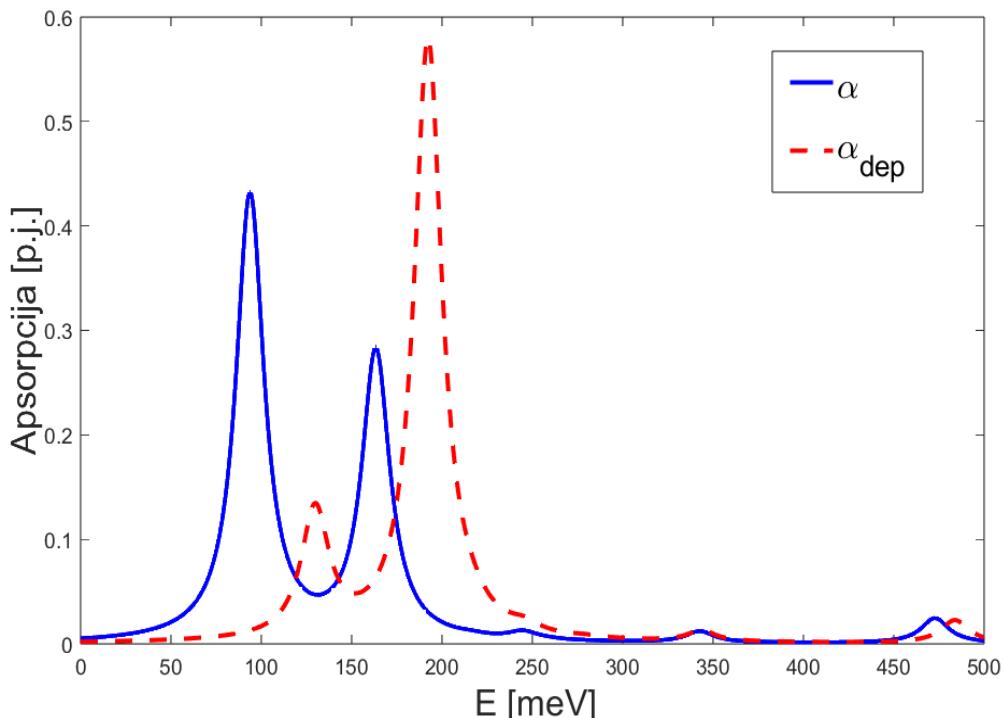
8.9. Apsorpcija u strukturi koja imitira aktivnu oblast potencijalnog $\text{Ga}_2\text{O}_3/(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ KKL-a

У недавно objavljenoj publikaciji [35], izračunата је по први пут elektronsка структура, струјно напонашка карактеристика и спектар трансмисије за резонантну тунелску диоду са двоструком барјером у систему материјала $\text{Ga}_2\text{O}_3/(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$. Извршена је и оптимизација дебљине барјера и концентрације допаната како би се постигao максимални PVR од 3.87. Оптимизован резонантни транспорт електрона је, zajедно са активном области, од посебног значаја за дизајнирање нових квантних каскадних лазера на бази оксидних материјала са широким енергетским пропегом. У овој дисертацији nije обрађена RTD у овом материјалном систему, али је то урађено у оквиру овог поглавља за ZnO RTD структуре. Upućujemo читаoca на резултате из [35], а ми у наставку посматрамо само активну област у $\text{Ga}_2\text{O}_3/(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ систему материјала.

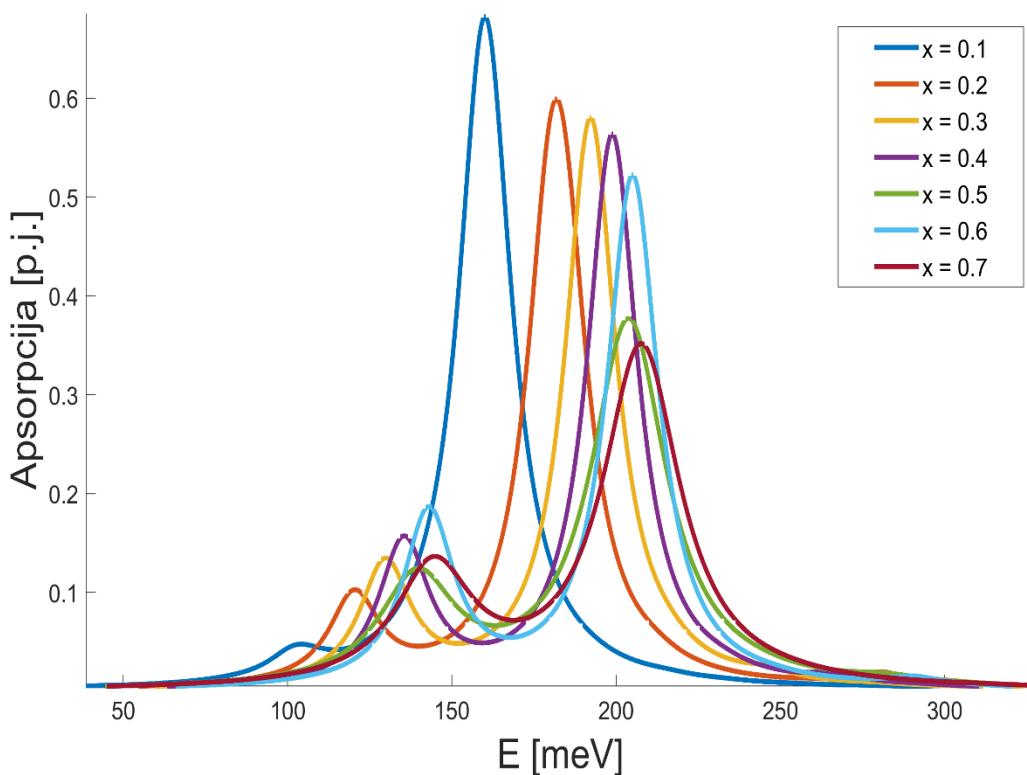
На Слици 8.29 приказана је elektronska структура $\text{Ga}_2\text{O}_3/(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ која треба да служи као активна област KKL-a. Центар најшире јаме од 5.5 nm је допиран, што доводи до кривљења профиле потенцијала дна двеју јаме. Посматрамо 8 vezanih stanja у структури. Апсорpcioni спектар на Слици 8.30 приказује прерасподелу услед деполаризационог поља које се јавља услед високе концентрације електрона у допирanoj јами. Осим допирања,битан параметар је и удео Al у барјерама који исто утиче на апсорpciju u strukturi, што се може видети са Слике 8.31, где се максимуми апсорpcије помијерaju ка већим енергијама са повећањем моловског удела Al. Жута линија на Слици 8.31 одговара црвеној испрекиданој линији са Слике 8.30.



Slika 8.29 - Elektronska struktura $\text{Ga}_2\text{O}_3/(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}_3$ heterostrukture u električnom polju, izračunata samosaglasnim postupkom. Debljine slojeva u nanometrima iznose **3/3.1/2.5/2.4/3.4/5.5/3** gde su podebljani barijerni slojevi. Molski ideo aluminijuma u barijerama je 30 %. Najšira jama dopirana je Si koncentracije $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Primljeno je spoljašnje električno polje jačine $7.3 \times 10^6 \text{ V/m}$.



Slika 8.30 - Apsorpcioni spektar za $\text{Ga}_2\text{O}_3/(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7})_2\text{O}_3$ strukture sa Slike 8.29. Prikazane su vrednosti računate klasično (plava) i složenim proračunom koji uračunava depolarizaciono polje (crvena). Udeo aluminijuma u barijeri je 30 %



Slika 8.31 - Apsorpcioni spektar za $\text{Ga}_2\text{O}_3/(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ heterostrukturu sa Slike 8.30 za različite udele Al u barijerama. Prikazani rezultati uključuju depolarizacioni pomeraj.

9. ZAKLJUČAK

U disertaciji su predstavljena glavna dostignuća i trenutni dometi (eng. state-of-the-art) u istraživačkom polju kvantnih kaskadnih lasera tokom tri decenije postojanja ove tehnologije, a tom prilikom opisani su i problemi koji su motivisali istraživanje alternativnih materijalnih platformi baziranih na oksidnim poluprovodnicima sa velikim energetskim procepcijom. Zatim su izložene metode koje se koriste pri modelovanju ovih naprava, od opisa numeričkog postupka za samosaglasni proračun elektronske strukture, preko transportnih modela različite složenosti: od brzinskih jednačina koje se mogu koristiti za srednji infracrveni deo spektra, do matrice gustine koja mnogo bolje daje predviđanja za THz deo spektra zbog uračunavanja efekata koherentnog transporta i defaziranja. Nakon toga, izložena je složena problematika vezana za depolarizaciono polje koje zahteva puni kvantomehanički tretman kolektivnih efekata i ima za posledicu korekciju spektra apsorpcije u slučaju velikih koncentracija primesa u strukturi. U poglavljju sa numeričkim rezultatima primenjene su numeričke metode i alati uvedeni u prethodnim poglavljima. Najpre su analizirane jednostavnije strukture zasnovane na ZnO sa dve kvantne lame, gde je pokazano kako promena debljine slojeva, dopiranje i električno polje utiču na spektor apsorpcije. Zatim je pokazano kakav efekat pravi depolarizaciono polje i analizirane su strukture sa višestrukim kvantnim jamama koje imitiraju neke predložene dizajne iz literature. Kao sledeći gradivni element KKL-a, posmatrana je rezonantna tunelska dioda u ZnO sistemu materijala kod koje je izvršen proračun strujno-naponske karakteristike i optimizacija PVR i dinamičkog opsega gustine struje u funkciji debljine injekcione barijere, dopiranja injektora/kolektora, kao i molskog udela Mg u barijeri. Nakon toga sproveden je detaljan proračun elektronske strukture i transporta na primeru dva dizajna aktivne oblasti THz KKL-a iz literature i objašnjeno je koji su njihovi nedostaci usled kojih nisu proizveli željeni efekat laserske emisije, čime je istaknuta važnost teorijskog modela sa malom tolerancijom greške. Na kraju, analizirane su kvantne lame od $\beta\text{-}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3/\text{Ga}_2\text{O}_3$ i tu je po prvi put modelovana apsorpcija korišćenjem složenog modela sa depolarizacionim poljem. Sledеći korak, u budućem istraživanju, biće generisanje novog dizajna aktivne oblasti THz KKL-a od $\text{ZnO/Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ koji radi na visokim temperaturama, što podrazumeva vrlo zahtevnu optimizaciju koja se sastoji iz detaljne pretrage parametarskog prostora slojeva i električnog polja, u dvojamnim, trojamnim i četvorojamnim strukturama (više miliona simulacija) pri proračunu transportnih karakteristika i maksimalnih radnih temperatura. S obzirom da se radi o izuzetno velikom broju simulacija, gde će ukupno vreme trajanja tih simulacija biti više meseci čak i na vrlo jakim serverima sa stotinama procesora najnovije generacije, jedan od načina da se ovaj proces donekle pojednostavi je da se koriste metode mašinskog učenja, odnosno neuralne mreže koje se treniraju za pronalaženje optimalnog dizajna.

LITERATURA

- [1] G. Gupta and E. Ahmadi, “(Ultra)wide-bandgap semiconductors for electric vehicles,” *MRS Bull.*, vol. 49, no. 7, pp. 730–737, Jul. 2024, doi: 10.1557/s43577-024-00750-5.
- [2] B. Hinkov *et al.*, “Optoelectronic Devices Based on ZnO/ZnMgO,” in *2019 Conference on Lasers and Electro-Optics Europe & European Quantum Electronics Conference (CLEO/Europe-EQEC)*, IEEE, Jun. 2019, pp. 1–1. doi: 10.1109/CLEOE-EQEC.2019.8873105.
- [3] M. Kneissl, T.-Y. Seong, J. Han, and H. Amano, “The emergence and prospects of deep-ultraviolet light-emitting diode technologies,” *Nat Photonics*, vol. 13, no. 4, pp. 233–244, Apr. 2019, doi: 10.1038/s41566-019-0359-9.
- [4] J. Y. Tsao *et al.*, “Ultrawide-Bandgap Semiconductors: Research Opportunities and Challenges,” *Adv Electron Mater.*, vol. 4, no. 1, Jan. 2018, doi: 10.1002/aelm.201600501.
- [5] K. Heinselman, P. Walker, A. Norman, P. Parilla, D. Ginley, and A. Zakutayev, “Performance and reliability of β -Ga₂O₃ Schottky barrier diodes at high temperature,” *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, vol. 39, no. 4, Jul. 2021, doi: 10.1116/6.0001003.
- [6] D. Botez and M. A. Belkin, Eds., *Mid-Infrared and Terahertz Quantum Cascade Lasers*. Cambridge University Press, 2023. doi: 10.1017/9781108552066.
- [7] A. Khalatpour, M. C. Tam, S. J. Addamane, J. Reno, Z. Wasilewski, and Q. Hu, “Enhanced operating temperature in terahertz quantum cascade lasers based on direct phonon depopulation,” *Appl Phys Lett*, vol. 122, no. 16, Apr. 2023, doi: 10.1063/5.0144705.
- [8] Y. Zhang, M. K. Ram, E. K. Stefanakos, and D. Y. Goswami, “Synthesis, Characterization, and Applications of ZnO Nanowires,” *J Nanomater*, vol. 2012, no. 1, Jan. 2012, doi: 10.1155/2012/624520.
- [9] B. Meng *et al.*, “Terahertz Intersubband Electroluminescence from Nonpolar m-Plane ZnO Quantum Cascade Structures,” *ACS Photonics*, vol. 8, no. 1, pp. 343–349, Jan. 2021, doi: 10.1021/acsphotonics.0c01641.
- [10] H. Che *et al.*, “Optical Properties of ZnO-Alloyed Nanocrystalline Films,” *J Nanomater*, vol. 2012, no. 1, Jan. 2012, doi: 10.1155/2012/963485.
- [11] V. P. Sirkeli and H. L. Hartnagel, “ZnO-based terahertz quantum cascade lasers,” *Opto-Electronics Review*, vol. 27, no. 2, pp. 119–122, Jun. 2019, doi: 10.1016/j.opelre.2019.04.002.
- [12] P. Kumar, H. K. Malik, A. Ghosh, R. Thangavel, and K. Asokan, “Bandgap tuning in highly c-axis oriented Zn_{1-x}Mg_xO thin films,” *Appl Phys Lett*, vol. 102, no. 22, Jun. 2013, doi: 10.1063/1.4809575.
- [13] Z. Chen *et al.*, “A Transparent Electrode Based on Solution-Processed ZnO for Organic Optoelectronic Devices,” *Nat Commun*, vol. 13, no. 1, p. 4387, Jul. 2022, doi: 10.1038/s41467-022-32010-y.
- [14] D. Buckley, A. Lonergan, and C. O’Dwyer, “Review—ZnO-based Thin Film Metal Oxide Semiconductors and Structures: Transistors, Optoelectronic Devices and Future Sustainable Electronics,” *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, vol. 14, no. 1, p. 015001, Jan. 2025, doi: 10.1149/2162-8777/ada3a2.
- [15] M. Franckie, B. Meng, and J. Faist, “ZnO quantum cascade lasers for room temperature operation,” in *Oxide-based Materials and Devices XII*, F. H. Teherani, D. C. Look, and D. J. Rogers, Eds., SPIE, Mar. 2021, p. 34. doi: 10.1117/12.2584977.
- [16] P. Sikam, R. Thirayatorn, P. Moontragoon, T. Kaewmaraya, V. Amornkitbamrung, and Z. Ikonic, “The quantum confined Stark effect in N-doped ZnO/ZnO/N-doped ZnO nanostructures for infrared and terahertz applications,” *Nanotechnology*, vol. 31, no. 44, p. 445207, Oct. 2020, doi: 10.1088/1361-6528/aba86f.

- [17] A. Mang, K. Reimann, and St. Rübenacke, “Band gaps, crystal-field splitting, spin-orbit coupling, and exciton binding energies in ZnO under hydrostatic pressure,” *Solid State Commun.*, vol. 94, no. 4, pp. 251–254, Apr. 1995, doi: 10.1016/0038-1098(95)00054-2.
- [18] H. Herr, V. Alex, and J. Weber, “Temperature Dependence Of The Fundamental Band Gap In Hexagonal GaN,” *MRS Proc.*, vol. 482, p. 719, Feb. 1997, doi: 10.1557/PROC-482-719.
- [19] L. Foglia *et al.*, “Revealing the competing contributions of charge carriers, excitons, and defects to the non-equilibrium optical properties of ZnO,” *Struct. Dyn.*, vol. 6, no. 3, May 2019, doi: 10.1063/1.5088767.
- [20] S. J. Xu, W. Liu, and M. F. Li, “Direct determination of free exciton binding energy from phonon-assisted luminescence spectra in GaN epilayers,” *Appl Phys Lett*, vol. 81, no. 16, pp. 2959–2961, Oct. 2002, doi: 10.1063/1.1514391.
- [21] M. Higashiwaki, K. Sasaki, A. Kuramata, T. Masui, and S. Yamakoshi, “Gallium oxide (Ga_2O_3) metal-semiconductor field-effect transistors on single-crystal β - Ga_2O_3 (010) substrates,” *Appl Phys Lett*, vol. 100, no. 1, Jan. 2012, doi: 10.1063/1.3674287.
- [22] J. Zhang, J. Shi, D.-C. Qi, L. Chen, and K. H. L. Zhang, “Recent progress on the electronic structure, defect, and doping properties of Ga_2O_3 ,” *APL Mater*, vol. 8, no. 2, Feb. 2020, doi: 10.1063/1.5142999.
- [23] H. Aida, K. Nishiguchi, H. Takeda, N. Aota, K. Sunakawa, and Y. Yaguchi, “Growth of β - Ga_2O_3 Single Crystals by the Edge-Defined, Film Fed Growth Method,” *Jpn J Appl Phys*, vol. 47, no. 11R, p. 8506, Nov. 2008, doi: 10.1143/JJAP.47.8506.
- [24] X. Du *et al.*, “Preparation and characterization of Sn-doped β - Ga_2O_3 homoepitaxial films by MOCVD,” *J Mater Sci*, vol. 50, no. 8, pp. 3252–3257, Apr. 2015, doi: 10.1007/s10853-015-8893-4.
- [25] M. Baldini, M. Albrecht, A. Fiedler, K. Irmscher, R. Schewski, and G. Wagner, “Editors’ Choice—Si- and Sn-Doped Homoepitaxial β - Ga_2O_3 Layers Grown by MOVPE on (010)-Oriented Substrates,” *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, vol. 6, no. 2, pp. Q3040–Q3044, Oct. 2017, doi: 10.1149/2.0081702jss.
- [26] T. Oshima, T. Okuno, and S. Fujita, “ Ga_2O_3 Thin Film Growth on c-Plane Sapphire Substrates by Molecular Beam Epitaxy for Deep-Ultraviolet Photodetectors,” *Jpn J Appl Phys*, vol. 46, no. 11R, p. 7217, Nov. 2007, doi: 10.1143/JJAP.46.7217.
- [27] S. Krishnamoorthy *et al.*, “Modulation-doped β -($\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}$) $_2\text{O}_3$ / Ga_2O_3 field-effect transistor,” *Appl Phys Lett*, vol. 111, no. 2, Jul. 2017, doi: 10.1063/1.4993569.
- [28] Y. Zhang *et al.*, “Demonstration of high mobility and quantum transport in modulation-doped β -($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}$) $_2\text{O}_3$ / Ga_2O_3 heterostructures,” *Appl Phys Lett*, vol. 112, no. 17, Apr. 2018, doi: 10.1063/1.5025704.
- [29] F. Zhang, K. Saito, T. Tanaka, M. Nishio, M. Arita, and Q. Guo, “Wide bandgap engineering of $(\text{AlGa})\text{O}_3$ films,” *Appl Phys Lett*, vol. 105, no. 16, Oct. 2014, doi: 10.1063/1.4900522.
- [30] E. Ahmadi *et al.*, “Demonstration of β -($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}$) $_2\text{O}_3$ / β - Ga_2O_3 modulation doped field-effect transistors with Ge as dopant grown via plasma-assisted molecular beam epitaxy,” *Applied Physics Express*, vol. 10, no. 7, p. 071101, Jul. 2017, doi: 10.7567/APEX.10.071101.
- [31] H. Ito, K. Kaneko, and S. Fujita, “Growth and Band Gap Control of Corundum-Structured α -($\text{AlGa})_2\text{O}_3$ Thin Films on Sapphire by Spray-Assisted Mist Chemical Vapor Deposition,” *Jpn J Appl Phys*, vol. 51, no. 10R, p. 100207, Oct. 2012, doi: 10.1143/JJAP.51.100207.
- [32] B. W. Krueger, C. S. Dandeneau, E. M. Nelson, S. T. Dunham, F. S. Ohuchi, and M. A. Olmstead, “Variation of Band Gap and Lattice Parameters of β -($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}$) $_2\text{O}_3$ Powder Produced by Solution Combustion Synthesis,” *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 99, no. 7, pp. 2467–2473, Jul. 2016, doi: 10.1111/jace.14222.
- [33] Q. Feng *et al.*, “($\text{AlGa})\text{O}_3$ solar-blind photodetectors on sapphire with wider bandgap and improved responsivity,” *Opt Mater Express*, vol. 7, no. 4, p. 1240, Apr. 2017, doi: 10.1364/OME.7.001240.

- [34] J. E. Lyman and S. Krishnamoorthy, “Theoretical investigation of optical intersubband transitions and infrared photodetection in β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃/Ga₂O₃ quantum well structures,” *J Appl Phys*, vol. 127, no. 17, May 2020, doi: 10.1063/5.0001917.
- [35] N. Stanojević, A. Demić, X. Wang, N. Vuković, D. Indjin, and J. Radovanović, “Design of Ga₂O₃/(AlGa)₂O₃ Double-Barrier Resonant Tunnelling Diode,” in *2024 11th International Conference on Electrical, Electronic and Computing Engineering (IcETRAN)*, IEEE, Jun. 2024, pp. 1–4. doi: 10.1109/IcETRAN62308.2024.10645113.
- [36] J. Åhman, G. Svensson, and J. Albertsson, “A Reinvestigation of β -Gallium Oxide,” *Acta Crystallogr C*, vol. 52, no. 6, pp. 1336–1338, Jun. 1996, doi: 10.1107/S0108270195016404.
- [37] M. Marezio and J. P. Remeika, “Bond Lengths in the α -Ga₂O₃ Structure and the High-Pressure Phase of Ga_{2-x}Fe_xO₃,” *J Chem Phys*, vol. 46, no. 5, pp. 1862–1865, Mar. 1967, doi: 10.1063/1.1840945.
- [38] D. Shinohara and S. Fujita, “Heteroepitaxy of Corundum-Structured α -Ga₂O₃ Thin Films on α -Al₂O₃ Substrates by Ultrasonic Mist Chemical Vapor Deposition,” *Jpn J Appl Phys*, vol. 47, no. 9R, p. 7311, Sep. 2008, doi: 10.1143/JJAP.47.7311.
- [39] K. Kaneko, H. Kawanowa, H. Ito, and S. Fujita, “Evaluation of Misfit Relaxation in α -Ga₂O₃ Epitaxial Growth on α -Al₂O₃ Substrate,” *Jpn J Appl Phys*, vol. 51, no. 2R, p. 020201, Feb. 2012, doi: 10.1143/JJAP.51.020201.
- [40] R. Jinno, T. Uchida, K. Kaneko, and S. Fujita, “Reduction in edge dislocation density in corundum-structured α -Ga₂O₃ layers on sapphire substrates with quasi-graded α -(Al,Ga)₂O₃ buffer layers,” *Applied Physics Express*, vol. 9, no. 7, p. 071101, Jul. 2016, doi: 10.7567/APEX.9.071101.
- [41] Helen. Y. Playford *et al.*, “Characterization of Structural Disorder in γ -Ga₂O₃,” *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 118, no. 29, pp. 16188–16198, Jul. 2014, doi: 10.1021/jp5033806.
- [42] T. Oshima, T. Nakazono, A. Mukai, and A. Ohtomo, “Epitaxial growth of γ -Ga₂O₃ films by mist chemical vapor deposition,” *J Cryst Growth*, vol. 359, pp. 60–63, Nov. 2012, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2012.08.025.
- [43] H. Hayashi *et al.*, “Room temperature ferromagnetism in Mn-doped γ -Ga₂O₃ with spinel structure,” *Appl Phys Lett*, vol. 89, no. 18, Oct. 2006, doi: 10.1063/1.2369541.
- [44] T. Oshima, Y. Kato, E. Magome, E. Kobayashi, and K. Takahashi, “Characterization of pseudomorphic γ -Ga₂O₃ and γ -Al₂O₃ films on MgAl₂O₄ substrates and the band-alignment at the coherent γ -Ga₂O₃/Al₂O₃ heterojunction interface,” *Jpn J Appl Phys*, vol. 58, no. 6, p. 060910, Jun. 2019, doi: 10.7567/1347-4065/ab219f.
- [45] R. Roy, V. G. Hill, and E. F. Osborn, “Polymorphism of Ga₂O₃ and the System Ga₂O₃ — H₂O,” *J Am Chem Soc*, vol. 74, no. 3, pp. 719–722, Feb. 1952, doi: 10.1021/ja01123a039.
- [46] L. Esaki, “New Phenomenon in Narrow Germanium p-n Junctions,” *Physical Review*, vol. 109, no. 2, pp. 603–604, Jan. 1958, doi: 10.1103/PhysRev.109.603.
- [47] L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu, “Resonant tunneling in semiconductor double barriers,” *Appl Phys Lett*, vol. 24, no. 12, pp. 593–595, Jun. 1974, doi: 10.1063/1.1655067.
- [48] H. Mizuta and T. Tanoue, *The Physics and Applications of Resonant Tunnelling Diodes*. Cambridge University Press, 1995. doi: 10.1017/CBO9780511629013.
- [49] A. Atić *et al.*, “Resonant Tunnelling and Intersubband Optical Properties of ZnO/ZnMgO Semiconductor Heterostructures: Impact of Doping and Layer Structure Variation,” *Materials*, vol. 17, no. 4, p. 927, Feb. 2024, doi: 10.3390/ma17040927.
- [50] R. F. Kazarinov and R. A. Suris., “Possible amplification of electromagnetic waves in a semiconductor with a superlattice,” *Fiz. Tekh. Poluprovodn.*, 1971.
- [51] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho, “Quantum Cascade Laser,” *Science* (1979), vol. 264, no. 5158, pp. 553–556, Apr. 1994, doi: 10.1126/science.264.5158.553.
- [52] A. Y. Cho and J. R. Arthur, “Molecular beam epitaxy,” *Progress in Solid State Chemistry*, vol. 10, pp. 157–191, Jan. 1975, doi: 10.1016/0079-6786(75)90005-9.

- [53] G. Scalari and J. Faist, “30 years of the quantum cascade laser,” *Commun Phys*, vol. 7, no. 1, p. 394, Dec. 2024, doi: 10.1038/s42005-024-01888-z.
- [54] J. Faist *et al.*, “Distributed feedback quantum cascade lasers,” *Appl Phys Lett*, vol. 70, no. 20, pp. 2670–2672, May 1997, doi: 10.1063/1.119208.
- [55] M. Beck *et al.*, “Continuous Wave Operation of a Mid-Infrared Semiconductor Laser at Room Temperature,” *Science (1979)*, vol. 295, no. 5553, pp. 301–305, Jan. 2002, doi: 10.1126/science.1066408.
- [56] R. Köhler *et al.*, “Terahertz semiconductor-heterostructure laser,” *Nature*, vol. 417, no. 6885, pp. 156–159, May 2002, doi: 10.1038/417156a.
- [57] A. A. Kosterev, Yu. A. Bakhirkin, R. F. Curl, and F. K. Tittel, “Quartz-enhanced photoacoustic spectroscopy,” *Opt Lett*, vol. 27, no. 21, p. 1902, Nov. 2002, doi: 10.1364/OL.27.001902.
- [58] K. Namjou *et al.*, “Sensitive absorption spectroscopy with a room-temperature distributed-feedback quantum-cascade laser,” *Opt Lett*, vol. 23, no. 3, p. 219, Feb. 1998, doi: 10.1364/OL.23.000219.
- [59] R. Martini *et al.*, “High-speed modulation and free-space optical audio/videotransmission using quantum cascade lasers,” *Electron Lett*, vol. 37, no. 3, pp. 191–193, Feb. 2001, doi: 10.1049/el:20010102.
- [60] C. Gmachl, D. L. Sivco, R. Colombelli, F. Capasso, and A. Y. Cho, “Ultra-broadband semiconductor laser,” *Nature*, vol. 415, no. 6874, pp. 883–887, Feb. 2002, doi: 10.1038/415883a.
- [61] Y. Bai, N. Bandyopadhyay, S. Tsao, S. Slivken, and M. Razeghi, “Room temperature quantum cascade lasers with 27% wall plug efficiency,” *Appl Phys Lett*, vol. 98, no. 18, May 2011, doi: 10.1063/1.3586773.
- [62] B. Tuzson *et al.*, “High precision and continuous field measurements of δ 13C and δ 18O in carbon dioxide with a cryogen-free QCLAS,” *Applied Physics B*, vol. 92, no. 3, p. 451, Sep. 2008, doi: 10.1007/s00340-008-3085-4.
- [63] J. R. Gao *et al.*, “Terahertz heterodyne receiver based on a quantum cascade laser and a superconducting bolometer,” *Appl Phys Lett*, vol. 86, no. 24, Jun. 2005, doi: 10.1063/1.1949724.
- [64] A. W. M. Lee, Q. Qin, S. Kumar, B. S. Williams, Q. Hu, and J. L. Reno, “Real-time terahertz imaging over a standoff distance (> 25meters),” *Appl Phys Lett*, vol. 89, no. 14, Oct. 2006, doi: 10.1063/1.2360210.
- [65] S. M. Kim *et al.*, “Biomedical terahertz imaging with a quantum cascade laser,” *Appl Phys Lett*, vol. 88, no. 15, Apr. 2006, doi: 10.1063/1.2194229.
- [66] S. Barbieri *et al.*, “Coherent sampling of active mode-locked terahertz quantum cascade lasers and frequency synthesis,” *Nat Photonics*, vol. 5, no. 5, pp. 306–313, 2011, doi: 10.1038/nphoton.2011.49.
- [67] A. Hugi, G. Villares, S. Blaser, H. C. Liu, and J. Faist, “Mid-infrared frequency comb based on a quantum cascade laser,” *Nature*, vol. 492, no. 7428, pp. 229–233, Dec. 2012, doi: 10.1038/nature11620.
- [68] D. Burghoff *et al.*, “Terahertz laser frequency combs,” *Nat Photonics*, vol. 8, no. 6, pp. 462–467, Jun. 2014, doi: 10.1038/nphoton.2014.85.
- [69] G. Villares, A. Hugi, S. Blaser, and J. Faist, “Dual-comb spectroscopy based on quantum-cascade-laser frequency combs,” *Nat Commun*, vol. 5, no. 1, p. 5192, Oct. 2014, doi: 10.1038/ncomms6192.
- [70] L. A. Sterczewski *et al.*, “Terahertz hyperspectral imaging with dual chip-scale combs,” *Optica*, vol. 6, no. 6, pp. 766–771, Jun. 2019, doi: 10.1364/OPTICA.6.000766.
- [71] N. Opačak *et al.*, “Nozaki–Bekki solitons in semiconductor lasers,” *Nature*, vol. 625, no. 7996, pp. 685–690, 2024, doi: 10.1038/s41586-023-06915-7.

- [72] L. Bosco, M. Franckié, G. Scalari, M. Beck, A. Wacker, and J. Faist, “Thermoelectrically cooled THz quantum cascade laser operating up to 210 K,” *Appl Phys Lett*, vol. 115, no. 1, Jul. 2019, doi: 10.1063/1.5110305.
- [73] A. Khalatpour, A. K. Paulsen, C. Deimert, Z. R. Wasilewski, and Q. Hu, “High-power portable terahertz laser systems,” *Nat Photonics*, vol. 15, no. 1, pp. 16–20, 2021, doi: 10.1038/s41566-020-00707-5.
- [74] M. Rösch, G. Scalari, M. Beck, and J. Faist, “Octave-spanning semiconductor laser,” *Nat Photonics*, vol. 9, no. 1, pp. 42–47, 2015, doi: 10.1038/nphoton.2014.279.
- [75] B. Wen and D. Ban, “High-temperature terahertz quantum cascade lasers,” *Prog Quantum Electron*, vol. 80, p. 100363, Nov. 2021, doi: 10.1016/j.pquantelec.2021.100363.
- [76] M. Razeghi and Q. Lu, “Room Temperature Terahertz and Frequency Combs Based on Intersubband Quantum Cascade Laser Diodes: History and Future,” *Photonics*, vol. 12, no. 1, p. 79, Jan. 2025, doi: 10.3390/photonics12010079.
- [77] Z. Fei *et al.*, “Gate-tuning of graphene plasmons revealed by infrared nano-imaging,” *Nature*, vol. 487, no. 7405, pp. 82–85, 2012, doi: 10.1038/nature11253.
- [78] H. Nguyen-Van *et al.*, “Quantum cascade lasers grown on silicon,” *Sci Rep*, vol. 8, no. 1, p. 7206, 2018, doi: 10.1038/s41598-018-24723-2.
- [79] I. Heckelmann, M. Bertrand, A. Dikopoltsev, M. Beck, G. Scalari, and J. Faist, “Quantum walk comb in a fast gain laser,” *Science (1979)*, vol. 382, no. 6669, pp. 434–438, Oct. 2023, doi: 10.1126/science.adj3858.
- [80] J. Faist, *Quantum Cascade Lasers*. in EBSCO ebook academic collection. OUP Oxford, 2013. [Online]. Available: <https://books.google.rs/books?id=tPHoMxFn5iMC>
- [81] R. Maulini, “Broadly tunable mid-infrared quantum cascade lasers for spectroscopic applications,” 2006.
- [82] D. Turcinkova, “Terahertz Quantum Cascade Lasers for Astronomical Applications,” ETH Zurich, Zurich, 2014. doi: 10.3929/ethz-a-010445747.
- [83] Z. Chen, A. Liu, D. Chang, S. Dhillon, M. Razeghi, and F. Wang, “Combined resonant tunneling and rate equation modeling of terahertz quantum cascade lasers,” *J Appl Phys*, vol. 135, no. 11, Mar. 2024, doi: 10.1063/5.0198059.
- [84] H. B. Teng, J. P. Sun, G. I. Haddad, M. A. Stroscio, S. Yu, and K. W. Kim, “Phonon assisted intersubband transitions in step quantum well structures,” *J Appl Phys*, vol. 84, no. 4, pp. 2155–2164, Aug. 1998, doi: 10.1063/1.368277.
- [85] T. Unuma, M. Yoshita, T. Noda, H. Sakaki, and H. Akiyama, “Intersubband absorption linewidth in GaAs quantum wells due to scattering by interface roughness, phonons, alloy disorder, and impurities,” *J Appl Phys*, vol. 93, no. 3, pp. 1586–1597, Feb. 2003, doi: 10.1063/1.1535733.
- [86] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, “Electronic properties of two-dimensional systems,” *Rev Mod Phys*, vol. 54, no. 2, pp. 437–672, Apr. 1982, doi: 10.1103/RevModPhys.54.437.
- [87] Y. Chiu, Y. Dikmelik, P. Q. Liu, N. L. Aung, J. B. Khurgin, and C. F. Gmachl, “Importance of interface roughness induced intersubband scattering in mid-infrared quantum cascade lasers,” *Appl Phys Lett*, vol. 101, no. 17, Oct. 2012, doi: 10.1063/1.4764516.
- [88] P. Kinsler, P. Harrison, and R. W. Kelsall, “Intersubband electron-electron scattering in asymmetric quantum wells designed for far-infrared emission,” *Phys Rev B*, vol. 58, no. 8, pp. 4771–4778, Aug. 1998, doi: 10.1103/PhysRevB.58.4771.
- [89] J. H. Smet, C. G. Fonstad, and Q. Hu, “Intrawell and interwell intersubband transitions in multiple quantum wells for far-infrared sources,” *J Appl Phys*, vol. 79, no. 12, pp. 9305–9320, Jun. 1996, doi: 10.1063/1.362607.
- [90] P. Slingerland, C. Baird, and R. Giles, “The effects of various approximations on electron-electron scattering calculations in QCLs,” L. P. Sadwick and C. M. M. O’Sullivan, Eds., Feb. 2011, p. 793809. doi: 10.11117/12.873292.
- [91] P. Harrison and A. Valavanis, *Quantum Wells, Wires and Dots*. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd, 2016. doi: 10.1002/9781118923337.

- [92] M. A. Belkin and F. Capasso, “New frontiers in quantum cascade lasers: high performance room temperature terahertz sources,” *Phys Scr*, vol. 90, no. 11, p. 118002, Nov. 2015, doi: 10.1088/0031-8949/90/11/118002.
- [93] B. S. Williams, “Terahertz quantum-cascade lasers,” *Nat Photonics*, vol. 1, no. 9, pp. 517–525, Sep. 2007, doi: 10.1038/nphoton.2007.166.
- [94] J. Faist, M. Beck, T. Aellen, and E. Gini, “Quantum-cascade lasers based on a bound-to-continuum transition,” *Appl Phys Lett*, vol. 78, no. 2, pp. 147–149, Jan. 2001, doi: 10.1063/1.1339843.
- [95] G. Scalari *et al.*, “Far-infrared ($\lambda \approx 87 \mu\text{m}$) bound-to-continuum quantum-cascade lasers operating up to 90 K,” *Appl Phys Lett*, vol. 82, no. 19, pp. 3165–3167, May 2003, doi: 10.1063/1.1571653.
- [96] A. Khalatpour, M. C. Tam, S. J. Addamane, J. Reno, Z. Wasilewski, and Q. Hu, “Terahertz semiconductor laser source at -12 °C,” Nov. 2022, [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/2211.08125>
- [97] M. I. Amanti *et al.*, “Bound-to-continuum terahertz quantum cascade laser with a single-quantum-well phonon extraction/injection stage,” *New J Phys*, vol. 11, no. 12, p. 125022, Dec. 2009, doi: 10.1088/1367-2630/11/12/125022.
- [98] X. Wang *et al.*, “High-power terahertz quantum cascade lasers with ~0.23 W in continuous wave mode,” *AIP Adv*, vol. 6, no. 7, Jul. 2016, doi: 10.1063/1.4959195.
- [99] L. Li *et al.*, “Terahertz quantum cascade lasers with >1 W output powers,” *Electron Lett*, vol. 50, no. 4, pp. 309–311, Feb. 2014, doi: 10.1049/el.2013.4035.
- [100] S. Khanal, J. L. Reno, and S. Kumar, “2.1 THz quantum-cascade laser operating up to 144 K based on a scattering-assisted injection design,” *Opt Express*, vol. 23, no. 15, p. 19689, Jul. 2015, doi: 10.1364/OE.23.019689.
- [101] S. Fathololoumi *et al.*, “Terahertz quantum cascade lasers operating up to ~ 200 K with optimized oscillator strength and improved injection tunneling,” *Opt Express*, vol. 20, no. 4, pp. 3866–3876, 2012, doi: 10.1364/OE.20.003866.
- [102] N. Stanojević *et al.*, “Effects of background doping, interdiffusion and layer thickness fluctuation on the transport characteristics of THz quantum cascade lasers,” *Sci Rep*, vol. 14, no. 1, p. 5641, Mar. 2024, doi: 10.1038/s41598-024-55700-7.
- [103] A. Demic *et al.*, “Infinite-Period Density-Matrix Model for Terahertz-Frequency Quantum Cascade Lasers,” *IEEE Trans Terahertz Sci Technol*, vol. 7, no. 4, pp. 368–377, Jul. 2017, doi: 10.1109/TTHZ.2017.2705481.
- [104] W. Li *et al.*, “Continuous-wave terahertz quantum cascade laser based on a hybrid bound to bound quantum design,” *Frontiers in Photonics*, vol. 3, Dec. 2022, doi: 10.3389/fphot.2022.1071879.
- [105] A. Rostami, H. Rasooli, and H. Baghban, “Terahertz and Infrared Quantum Cascade Lasers,” 2011, pp. 191–238. doi: 10.1007/978-3-642-15793-6_3.
- [106] J. Faist, “Mid-infrared waveguides,” in *Quantum Cascade Lasers*, Oxford University Press, 2013, pp. 91–107. doi: 10.1093/acprof:oso/9780198528241.003.0006.
- [107] M. S. Vitiello and A. Tredicucci, “Physics and technology of Terahertz quantum cascade lasers,” *Adv Phys X*, vol. 6, no. 1, Jan. 2021, doi: 10.1080/23746149.2021.1893809.
- [108] B. S. Williams, S. Kumar, H. Callebaut, Q. Hu, and J. L. Reno, “Terahertz quantum-cascade laser at $\lambda \approx 100 \mu\text{m}$ using metal waveguide for mode confinement,” *Appl Phys Lett*, vol. 83, no. 11, pp. 2124–2126, Sep. 2003, doi: 10.1063/1.1611642.
- [109] M. A. Belkin *et al.*, “Terahertz quantum cascade lasers with copper metal-metal waveguides operating up to 178 K,” *Opt Express*, vol. 16, no. 5, p. 3242, 2008, doi: 10.1364/OE.16.003242.
- [110] S. Dhillon *et al.*, “Ultralow threshold current terahertz quantum cascade lasers based on double-metal buried strip waveguides,” *Appl Phys Lett*, vol. 87, no. 7, Aug. 2005, doi: 10.1063/1.2001159.

- [111] B. S. Williams, S. Kumar, Q. Hu, and J. L. Reno, “Operation of terahertz quantum-cascade lasers at 164 K in pulsed mode and at 117 K in continuous-wave mode,” *Opt Express*, vol. 13, no. 9, p. 3331, 2005, doi: 10.1364/OPEX.13.003331.
- [112] M. Wienold *et al.*, “High-temperature, continuous-wave operation of terahertz quantum-cascade lasers with metal-metal waveguides and third-order distributed feedback,” *Opt Express*, vol. 22, no. 3, p. 3334, Feb. 2014, doi: 10.1364/OE.22.003334.
- [113] M. I. Amanti, M. Fischer, C. Walther, G. Scalari, and J. Faist, “Horn antennas for terahertz quantum cascade lasers,” *Electron Lett*, vol. 43, no. 10, pp. 573–574, May 2007, doi: 10.1049/el:20070450.
- [114] A. Wei Min Lee, Q. Qin, S. Kumar, B. S. Williams, Q. Hu, and J. L. Reno, “High-power and high-temperature THz quantum-cascade lasers based on lens-coupled metal-metal waveguides,” *Opt Lett*, vol. 32, no. 19, p. 2840, Oct. 2007, doi: 10.1364/OL.32.002840.
- [115] F. Castellano *et al.*, “THz waveguide adapters for efficient radiation out-coupling from double metal THz QCLs,” *Opt Express*, vol. 23, no. 4, p. 5190, Feb. 2015, doi: 10.1364/OE.23.005190.
- [116] N. Yu *et al.*, “Designer spoof surface plasmon structures collimate terahertz laser beams,” *Nat Mater*, vol. 9, no. 9, pp. 730–735, Sep. 2010, doi: 10.1038/nmat2822.
- [117] L. Mahler *et al.*, “High-power surface emission from terahertz distributed feedback lasers with a dual-slit unit cell,” *Appl Phys Lett*, vol. 96, no. 19, May 2010, doi: 10.1063/1.3430522.
- [118] M. I. Amanti, M. Fischer, G. Scalari, M. Beck, and J. Faist, “Low-divergence single-mode terahertz quantum cascade laser,” *Nat Photonics*, vol. 3, no. 10, pp. 586–590, Oct. 2009, doi: 10.1038/nphoton.2009.168.
- [119] L. Mahler *et al.*, “Vertically emitting microdisk lasers,” *Nat Photonics*, vol. 3, no. 1, pp. 46–49, Jan. 2009, doi: 10.1038/nphoton.2008.248.
- [120] Y. Chassagneux *et al.*, “Electrically pumped photonic-crystal terahertz lasers controlled by boundary conditions,” *Nature*, vol. 457, no. 7226, pp. 174–178, Jan. 2009, doi: 10.1038/nature07636.
- [121] M. S. Vitiello *et al.*, “Photonic quasi-crystal terahertz lasers,” *Nat Commun*, vol. 5, no. 1, p. 5884, Dec. 2014, doi: 10.1038/ncomms6884.
- [122] L. Masini *et al.*, “Continuous-wave laser operation of a dipole antenna terahertz microresonator,” *Light Sci Appl*, vol. 6, no. 10, pp. e17054–e17054, Mar. 2017, doi: 10.1038/lsa.2017.54.
- [123] C. Jirauschek and T. Kubis, “Modeling techniques for quantum cascade lasers,” *Appl Phys Rev*, vol. 1, no. 1, p. 011307, Mar. 2014, doi: 10.1063/1.4863665.
- [124] U. Ekenberg, “Nonparabolicity effects in a quantum well: Sublevel shift, parallel mass, and Landau levels,” *Phys Rev B*, vol. 40, no. 11, pp. 7714–7726, Oct. 1989, doi: 10.1103/PhysRevB.40.7714.
- [125] W. R. Frensley, *Heterostructures and Quantum Devices, VLSI Electronics: Microstructure Science*, 1st ed., vol. 24. Academic Press, 1994.
- [126] C. Juang, K. J. Kuhn, and R. B. Darling, “Stark shift and field-induced tunneling in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum-well structures,” *Phys Rev B*, vol. 41, no. 17, pp. 12047–12053, Jun. 1990, doi: 10.1103/PhysRevB.41.12047.
- [127] B. Jonsson and S. T. Eng, “Solving the Schrodinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method,” *IEEE J Quantum Electron*, vol. 26, no. 11, pp. 2025–2035, 1990, doi: 10.1109/3.62122.
- [128] C. Jirauschek, “Accuracy of Transfer Matrix Approaches for Solving the Effective Mass Schrödinger Equation,” *IEEE J Quantum Electron*, vol. 45, no. 9, pp. 1059–1067, Sep. 2009, doi: 10.1109/JQE.2009.2020998.
- [129] N. Stanojević *et al.*, “Derivative transfer matrix method: Machine precision calculation of electron structure and interface phonon dispersion in semiconductor heterostructures,” *Comput Phys Commun*, vol. 311, p. 109573, Jun. 2025, doi: 10.1016/j.cpc.2025.109573.

- [130] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, 3rd ed. Cambridge University Press, 2007.
- [131] J. D. Cooper, A. Valavanis, Z. Ikonić, P. Harrison, and J. E. Cunningham, “Finite difference method for solving the Schrödinger equation with band nonparabolicity in mid-infrared quantum cascade lasers,” *J Appl Phys*, vol. 108, no. 11, Dec. 2010, doi: 10.1063/1.3512981.
- [132] V. D. Jovanović *et al.*, “Mechanisms of dynamic range limitations in GaAs/AlGaAs quantum-cascade lasers: Influence of injector doping,” *Appl Phys Lett*, vol. 86, no. 21, May 2005, doi: 10.1063/1.1937993.
- [133] C. Jirauschek, A. Matyas, and P. Lugli, “Modeling bound-to-continuum terahertz quantum cascade lasers: The role of Coulomb interactions,” *J Appl Phys*, vol. 107, no. 1, Jan. 2010, doi: 10.1063/1.3276160.
- [134] R. Terazzi and J. Faist, “A density matrix model of transport and radiation in quantum cascade lasers,” *New J Phys*, vol. 12, no. 3, p. 033045, Mar. 2010, doi: 10.1088/1367-2630/12/3/033045.
- [135] C. Weber, A. Wacker, and A. Knorr, “Density-matrix theory of the optical dynamics and transport in quantum cascade structures: The role of coherence,” *Phys Rev B*, vol. 79, no. 16, p. 165322, Apr. 2009, doi: 10.1103/PhysRevB.79.165322.
- [136] R. C. Iotti and F. Rossi, “Nature of Charge Transport in Quantum-Cascade Lasers,” *Phys Rev Lett*, vol. 87, no. 14, p. 146603, Sep. 2001, doi: 10.1103/PhysRevLett.87.146603.
- [137] A. Wacker, M. Lindskog, and D. O. Winge, “Nonequilibrium Green’s Function Model for Simulation of Quantum Cascade Laser Devices Under Operating Conditions,” *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 19, no. 5, pp. 1–11, Sep. 2013, doi: 10.1109/JSTQE.2013.2239613.
- [138] A. Wacker, “Gain in quantum cascade lasers and superlattices: A quantum transport theory,” *Phys Rev B*, vol. 66, no. 8, p. 085326, Aug. 2002, doi: 10.1103/PhysRevB.66.085326.
- [139] P. Harrison *et al.*, “Carrier Dynamics in Quantum Cascade Lasers,” *Acta Phys Pol A*, vol. 107, no. 1, pp. 75–81, Jan. 2005, doi: 10.12693/APhysPolA.107.75.
- [140] J. Radovanović, V. Milanović, Z. Ikonić, and D. Indjin, “Control of Optical Gain in the Active Region of Quantum Cascade Laser by Strong Perpendicular Magnetic Field,” *Materials Science Forum*, vol. 494, pp. 31–36, Sep. 2005, doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.494.31.
- [141] G. Sun and J. B. Khurgin, “Optically pumped four-level infrared laser based on intersubband transitions in multiple quantum wells: feasibility study,” *IEEE J Quantum Electron*, vol. 29, no. 4, pp. 1104–1111, Apr. 1993, doi: 10.1109/3.214496.
- [142] R. W. Boyd, *Nonlinear Optics*, 3rd ed. in Nonlinear Optics Series. Elsevier Science, 2008. [Online]. Available: <https://books.google.rs/books?id=uoRUi1Yb7ooC>
- [143] K. Blum, “General Density Matrix Theory,” in *Density Matrix Theory and Applications*, K. Blum, Ed., Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012, pp. 35–60. doi: 10.1007/978-3-642-20561-3_2.
- [144] H. Callebaut and Q. Hu, “Importance of coherence for electron transport in terahertz quantum cascade lasers,” *J Appl Phys*, vol. 98, no. 10, Nov. 2005, doi: 10.1063/1.2136420.
- [145] A. Demić, Z. Ikonić, R. W. Kelsall, and D. Indjin, “Density matrix superoperator for periodic quantum systems and its application to quantum cascade laser structures,” *AIP Adv*, vol. 9, no. 9, Sep. 2019, doi: 10.1063/1.5095246.
- [146] T. V. Dinh, A. Valavanis, L. J. M. Lever, Z. Ikonić, and R. W. Kelsall, “Extended density-matrix model applied to silicon-based terahertz quantum cascade lasers,” *Phys Rev B*, vol. 85, no. 23, p. 235427, Jun. 2012, doi: 10.1103/PhysRevB.85.235427.
- [147] B. A. Burnett and B. S. Williams, “Density matrix model for polarons in a terahertz quantum dot cascade laser,” *Phys Rev B*, vol. 90, no. 15, p. 155309, Oct. 2014, doi: 10.1103/PhysRevB.90.155309.

- [148] B. A. Burnett and B. S. Williams, "Origins of Terahertz Difference Frequency Susceptibility in Midinfrared Quantum Cascade Lasers," *Phys Rev Appl*, vol. 5, no. 3, p. 034013, Mar. 2016, doi: 10.1103/PhysRevApplied.5.034013.
- [149] I. Savić *et al.*, "Density matrix theory of transport and gain in quantum cascade lasers in a magnetic field," *Phys Rev B*, vol. 76, no. 16, p. 165310, Oct. 2007, doi: 10.1103/PhysRevB.76.165310.
- [150] Aleksandar Jovanović, "Uticaj depolarizacionog pomeraja na apsorpciju u poluprovodničkim nanostrukturama na bazi kvantnih jama, diplomski rad," ETF, Beograd, 2023.
- [151] Y. Todorov and C. Sirtori, "Intersubband polaritons in the electrical dipole gauge," *Phys Rev B*, vol. 85, no. 4, p. 045304, Jan. 2012, doi: 10.1103/PhysRevB.85.045304.
- [152] M. Babiker and R. Loudon, "Derivation of the Power-Zienau-Woolley Hamiltonian in quantum electrodynamics by gauge transformation," *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 385, no. 1789, pp. 439–460, Feb. 1983, doi: 10.1098/rspa.1983.0022.
- [153] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg, "Quantum Electrodynamics in the Coulomb Gauge," in *Photons and Atoms*, Wiley, 1997, pp. 169–252. doi: 10.1002/9783527618422.ch3.
- [154] F. Schwabl, *Advanced Quantum Mechanics*, 4th ed. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008. doi: 10.1007/978-3-540-85062-5.
- [155] G. Pegolotti, A. Vasanelli, Y. Todorov, and C. Sirtori, "Quantum model of coupled intersubband plasmons," *Phys Rev B*, vol. 90, no. 3, p. 035305, Jul. 2014, doi: 10.1103/PhysRevB.90.035305.
- [156] Y. Todorov *et al.*, "Polaritonic spectroscopy of intersubband transitions," *Phys Rev B*, vol. 86, no. 12, p. 125314, Sep. 2012, doi: 10.1103/PhysRevB.86.125314.
- [157] A. Atić, N. Vuković, and J. Radovanović, "Calculation of intersubband absorption in ZnO/ZnMgO asymmetric double quantum wells," *Opt Quantum Electron*, vol. 54, no. 12, p. 810, Dec. 2022, doi: 10.1007/s11082-022-04170-0.
- [158] W. Göss, "Hole trapping and the negative bias temperature instability," Technische Universität Wien, 2011. doi: 10.34726/hss.2011.25057.
- [159] L.Nevou, "Q_SchrodingerPoisson1D_CB," 2022, https://github.com/LaurentNevou/Q_SchrodingerPoisson1D_CB.
- [160] B. Meng *et al.*, "Observation of Intersubband Absorption in ZnO Coupled Quantum Wells," *Phys Rev Appl*, vol. 12, no. 5, p. 054007, Nov. 2019, doi: 10.1103/PhysRevApplied.12.054007.
- [161] T. Ando, H. Taniyama, N. Ohtani, M. Nakayama, and M. Hosoda, "Self-consistent calculation of subband occupation and electron-hole plasma effects: Variational approach to quantum well states with Hartree and exchange-correlation interactions," *J Appl Phys*, vol. 94, no. 7, pp. 4489–4501, Oct. 2003, doi: 10.1063/1.1606512.
- [162] N. Le Biavan, "Toward a zinc oxide based quantum cascade laser," COMUE Université Côte d'Azur, 2019. Accessed: Apr. 16, 2025. [Online]. Available: <https://theses.hal.science/tel-02736475>
- [163] I. Ayoub *et al.*, "Advances in ZnO: Manipulation of defects for enhancing their technological potentials," *Nanotechnol Rev*, vol. 11, no. 1, pp. 575–619, Jan. 2022, doi: 10.1515/ntrev-2022-0035.
- [164] J. Radovanovic *et al.*, "Modelling of THz quantum cascade lasers for imaging, sensing, and biomedical applications," in *Nanoscale Imaging, Sensing, and Actuation for Biomedical Applications XXII*, D. Fixler and S. Wachsmann-Hogiu, Eds., SPIE, Mar. 2025, p. 11. doi: 10.1117/12.3044671.
- [165] T. Wang, W. Li, C. Ni, and A. Janotti, "Band Gap and Band Offset of Ga₂O₃ and (Al_xGa_{1-x})₂O₃ Alloys," *Phys Rev Appl*, vol. 10, no. 1, p. 011003, Jul. 2018, doi: 10.1103/PhysRevApplied.10.011003.

- [166] P. Ranga, A. Rishinaramangalam, J. Varley, A. Bhattacharyya, D. Feezell, and S. Krishnamoorthy, “Si-doped β -(Al_{0.26}Ga_{0.74})₂O₃ thin films and heterostructures grown by metalorganic vapor-phase epitaxy,” *Applied Physics Express*, vol. 12, no. 11, p. 111004, Nov. 2019, doi: 10.7567/1882-0786/ab47b8.
- [167] S. I. Stepanov, V. I. Nikolaev, V. E. Bougov, and A. E. Romanov, “Gallium oxide: Properties and applications—A review,” *Rev. Adv. Mater. Sci.* 44, 63, vol. 44, no. 63, 2016.

BIOGRAFIJA AUTORA

Aleksandar Atić je rođen 18. novembra 1992. godine u Beogradu, gde je završio osnovnu školu i VIII beogradsku gimnaziju. Godine 2011. upisao je Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu, na studijskom programu Elektrotehnika i računarstvo. Septembra 2016. godine diplomirao je na odseku Fizička elektronika, smer Nanoelektronika, optoelektronika i laserska tehnika, sa prosečnom ocenom 8.20. Iste godine upisao je master studije na istom fakultetu, na modulu Nanoelektronika i fotonika. Master rad odbranio je 2019. godine, sa prosečnom ocenom 8.83. Diplomski i master radovi rađeni su pod mentorstvom prof. dr Jelene Radovanović. Godine 2019. upisao je doktorske studije na Elektrotehničkom fakultetu Univerziteta u Beogradu, na smeru Nanoelektronika i fotonika. Položio je sve ispite sa prosečnom ocenom 10.00 i ispunio sve obaveze propisane studijskim programom.

Radio je kao „junior design engineer“ u firmi *Elsys Eastern Europe* od oktobra 2018. do februara 2019. godine. Od marta 2019. volontira, a od decembra iste godine zaposlen je u Institutu za nuklearne nauke „Vinča“, institutu od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju, pri Laboratoriji za atomsku fiziku.

Tokom doktorskih studija objavio je dva rada u časopisima sa SCI liste i sedam radova na međunarodnim konferencijama. Oblasti njegovog interesovanja su kvantni kaskadni laseri, terahercni deo elektromagnetskog spektra, terahercni emiteri i numerički modeli. Učesnik je na projektu iz poziva PROMIS 2023 Fonda za nauku Republike Srbije, broj 10504, pod nazivom: *Ultra-Short Pulsations from TERAhertz Quantum Cascade Laser Using Passive Mode-LOCKing with Graphene Saturable Absorber – TERALOCK*.

Izjava o autorstvu

Ime i prezime autora Aleksandar Atić

Broj indeksa 2019/5021

Izjavljujem

da je doktorska disertacija pod naslovom

"Modelovanje kvantnih nanostruktura zasnovanih na oksidnim poluprovodnicima sa velikim energetskim procepom"

- rezultat sopstvenog istraživačkog rada;
- da disertacija u celini, ni u delovima, nije bila predložena za sticanje druge diplome prema studijskim programima drugih visokoškolskih ustanova;
- da su rezultati korektno navedeni i
- da nisam kršio/la autorska prava i koristio/la intelektualnu svojinu drugih lica.

U Beogradu, 26.05.2025

Potpis autora

A handwritten signature in black ink, appearing to read "Aleksandar Atić". It is written in a cursive style with some loops and variations in thickness.

Izjava o istovetnosti štampane i elektronske verzije doktorskog rada

Ime i prezime autora Aleksandar Atić

Broj indeksa 2019/5021

Studijski program Elektrotehnika i računarstvo, modul Nanoelektronika i fotonika

Naslov rada Modelovanje kvantnih nanostruktura zasnovanih na oksidnim poluprovodnicima sa velikim energetskim procepom

Mentor prof. dr Jelena Radovanović i dr Nikola Vuković

Izjavljujem da je štampana verzija mog doktorskog rada istovetna elektronskoj verziji koju sam predao/la radi pohranjivanja u **Digitalnom repozitorijumu Univerziteta u Beogradu**.

Dozvoljavam da se objave moji lični podaci vezani za dobijanje akademskog naziva doktora nauka, kao što su ime i prezime, godina i mesto rođenja i datum odbrane rada.

Ovi lični podaci mogu se objaviti na mrežnim stranicama digitalne biblioteke, u elektronskom katalogu i u publikacijama Univerziteta u Beogradu.

U Beogradu, 26.05.2025

Potpis autora



Izjava o korišćenju

Ovlašćujem Univerzitetsku biblioteku „Svetozar Marković“ da u Digitalni repozitorijum Univerziteta u Beogradu unese moju disertaciju pod naslovom

Modelovanje kvantnih nanostruktura zasnovanih na oksidnim poluprovodnicima sa velikim energetskim procepom

koja je moje autorsko delo.

Disertaciju sa svim prilozima predao/la sam u elektronskom formatu pogodnom za trajno arhiviranje.

Moju doktorsku disertaciju pohranjenu u Digitalnom repozitorijumu Univerziteta u Beogradu i dostupnu u otvorenom pristupu mogu da koriste svi koji poštuju odredbe sadržane u odabranom tipu licence Kreativne zajednice (Creative Commons) za koju sam se odlučio/la.

1. Autorstvo (CC BY)
2. Autorstvo – nekomercijalno (CC BY-NC)
3. Autorstvo – nekomercijalno – bez prerade (CC BY-NC-ND)
4. Autorstvo – nekomercijalno – deliti pod istim uslovima (CC BY-NC-SA)
5. Autorstvo – bez prerade (CC BY-ND)
6. Autorstvo – deliti pod istim uslovima (CC BY-SA)

(Molimo da zaokružite samo jednu od šest ponuđenih licenci.
Kratak opis licenci je sastavni deo ove izjave.)

U Beogradu, 26.05.2025

Potpis autora



1. **Autorstvo.** Dozvoljavate umnožavanje, distribuciju i javno saopštavanje dela, i prerade, ako se navede ime autora na način određen od strane autora ili davaoca licence, čak i u komercijalne svrhe. Ovo je najslobodnija od svih licenci.
2. **Autorstvo – nekomercijalno.** Dozvoljavate umnožavanje, distribuciju i javno saopštavanje dela, i prerade, ako se navede ime autora na način određen od strane autora ili davaoca licence. Ova licenca ne dozvoljava komercijalnu upotrebu dela.
3. **Autorstvo – nekomercijalno – bez prerade.** Dozvoljavate umnožavanje, distribuciju i javno saopštavanje dela, bez promena, preoblikovanja ili upotrebe dela u svom delu, ako se navede ime autora na način određen od strane autora ili davaoca licence. Ova licenca ne dozvoljava komercijalnu upotrebu dela. U odnosu na sve ostale licence, ovom licencom se ograničava najveći obim prava korišćenja dela.
4. **Autorstvo – nekomercijalno – deliti pod istim uslovima.** Dozvoljavate umnožavanje, distribuciju i javno saopštavanje dela, i prerade, ako se navede ime autora na način određen od strane autora ili davaoca licence, i ako se prerada distribuira pod istom ili sličnom licencom. Ova licenca ne dozvoljava komercijalnu upotrebu dela i prerada.
5. **Autorstvo – bez prerade.** Dozvoljavate umnožavanje, distribuciju i javno saopštavanje dela, bez promena, preoblikovanja ili upotrebe dela u svom delu, ako se navede ime autora na način određen od strane autora ili davaoca licence. Ova licenca dozvoljava komercijalnu upotrebu dela.
6. **Autorstvo – deliti pod istim uslovima.** Dozvoljavate umnožavanje, distribuciju i javno saopštavanje dela, i prerade, ako se navede ime autora na način određen od strane autora ili davaoca licence i ako se prerada distribuira pod istom ili sličnom licencom. Ova licenca dozvoljava komercijalnu upotrebu dela i prerada. Slična je softverskim licencama, odnosno licencama otvorenog koda.