

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ЕЛЕКТРОТЕХНИЧКИ ФАКУЛТЕТ



Новак Г. Станојевић

**МОДЕЛОВАЊЕ ЕЛЕКТРОНСКЕ СТРУКТУРЕ,
ТРАНСПОРТНО-ОПТИЧКИХ КАРАКТЕРИСТИКА
И НЕЛИНЕАРНЕ ДИНАМИКЕ ТЕРАХЕРЦНИХ
КВАНТНИХ КАСКАДНИХ ЛАСЕРА**

докторска дисертација

Београд, 2026

UNIVERSITY OF BELGRADE
SCHOOL OF ELECTRICAL ENGINEERING



Novak G. Stanojević

**MODELING OF ELECTRONIC STRUCTURE,
TRANSPORT-OPTICAL CHARACTERISTICS,
AND NONLINEAR DYNAMICS OF TERAHERTZ
QUANTUM CASCADE LASERS**

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2026

Ментор:

др Никола Вуковић, ванредни професор
Универзитет у Београду, Електротехнички факултет

Чланови комисије:

др Јелена Радовановић, редовни професор
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

др Милан Тадић, редовни професор
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

др Александра Малуцков, научни саветник
Универзитет у Београду – Институт за нуклеарне науке „Винча“,
Институт од националног значаја за Републику Србију

др Владимир Арсоски, редовни професор
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

др Ненад Вукмировић, научни саветник
Универзитет у Београду – Институт за физику у Београду,
Институт од националног значаја за Републику Србију

Датум одбране: _____

ЗАХВАЛНИЦА

Желим да изразим захвалност свом ментору, проф. др Николи Вуковићу, на стручном вођењу, конструктивним дискусијама, подршци и стрпљењу током израде ове докторске дисертације, као и проф. др Јелени Радовановић, на дугогодишњој подршци, стручним саветима и конструктивним дискусијама које су пратиле мој истраживачки рад од основних студија. Њихови савети и сугестије значајно су допринели квалитету овог рада.

Захваљујем се колегама са Универзитета у Лидсу, пре свега др Александру Демићу на несеквичном преношењу знања и бројним стручним дискусијама које су у великој мери обликовале моје разумевање теме истраживања, као и проф. др Драгану Инђину на подршци и корисним сугестијама током рада.

Посебну захвалност дугујем руководству Влатаком Института високих технологија на разумевању, подршци и подстицајном окружењу које су ми пружили током докторских студија. Њихова отвореност и подршка значајно су допринели успешном завршетку ове дисертације.

Најискренију захвалност упућујем својој породици на безусловној подршци, стрпљењу и разумевању током свих фаза студирања и израде ове дисертације.

Највећу и најдубљу захвалност дугујем својој супрузи, Кристини, која је била уз мене на сваком кораку још од основних студија. Њена подршка, стрпљење и вера у мене били су непроцењиви током свих фаза мог истраживања и израде докторске дисертације.

Наслов дисертације: Моделовање електронске структуре, транспортно-оптичких карактеристика и нелинеарне динамике терахерцних квантних каскадних ласера

Сажетак: Ова дисертација се бави нумеричким моделовањем и анализом терахерцних квантних каскадних ласера (THz ККЛ), са посебним нагласком на моделовање технолошких несавршености нарастања, развој унапређеног нумеричког метода за израчунавање електронске структуре и анализу ласерске динамике у присуству спољашње оптичке повратне спреге. Анализирани су ефекти позадинског допирања, интердифузије и флуктуација дебљине слојева на транспортно-оптичке карактеристике различитих THz ККЛ дизајна, показујући њихову високу осетљивост и ограничену поновљивост процеса нарастања, при чему у најосетљивијим структурама долази и до губитка функционалности. Развијен је унапређени трансфер матрични метод (dTMM) који задржава полу-аналитичку и интуитивну природу класичног ТММ-а, али отклања његове нумеричке недостатке и омогућава постизање машинске прецизности. dTMM омогућава рад са већом просторном резолуцијом и значајно нижим нумеричким трошком у поређењу са стандардним ТММ-ом, надмашујући чак и методе коначних разлика у ефикасности и брзини. Метод је примењен на израчунавање електронске структуре ККЛ-а у различитим моделима ефективне масе, као и на израчунавање дисперзионих релација оптичких интерфејс фонона у хетероструктурама. Анализирана је динамика THz ККЛ-а са спољашњом оптичком повратном спрегом применом модела из литературе, који је модификован да укључује струјно-зависне параметре добијене из транспортних симулација конкретног уређаја заснованих на моделу матрице густине. Ово омогућава реалистичније и предиктивно моделовање рада ККЛ-а у његовом релевантном опсегу радних струја. Модел пружа основу за процену излазних спектра и идентификацију ККЛ-а који обезбеђују стабилан и интерпретабилан сигнал погодан за примену у сензорици.

Кључне речи: THz квантни каскадни ласери, моделовање технолошких несавршености нарастања, трансфер матрични метод, електронска структура, ласерска динамика, спољашња повратна спрега

Научна област: Физичка електроника

Ужа научна област: Наноелектроника и фотоника

УДК број: 621.3

Dissertation title: Modeling of electronic structure, transport-optical characteristics, and nonlinear dynamics of terahertz quantum cascade lasers

Abstract: This dissertation focuses on the numerical modeling and analysis of terahertz quantum cascade lasers (THz QCLs), with particular emphasis on the modelling of technological growth imperfections, the development of an improved numerical method for calculating the electronic structure, and the analysis of laser dynamics in the presence of external optical feedback. The effects of background doping, interdiffusion, and layer thickness fluctuations on the transport-optical characteristics of various THz QCL designs is analyzed, revealing their high sensitivity and limited reproducibility, with loss of functionality occurring in the most sensitive structures. An improved transfer matrix method (dTMM) is developed, retaining the semi-analytical and intuitive nature of the classical TMM while eliminating its numerical limitations and achieving machine-level precision. This method allows for higher spatial resolution and significantly reduced computational cost compared to standard TMM, surpassing even finite difference methods in efficiency and speed. The method is applied to calculate the electronic structure of QCLs in different effective-mass models, as well as to calculate the dispersion relations of interface optical phonons in heterostructures. The dynamics of THz QCL with external optical feedback is analysed using a model from the literature, which is modified to include current-dependent parameters obtained from transport simulations of a specific device based on the density matrix model. This enables realistic and predictive modeling of QCL operation within its relevant current range. The model provides a basis for evaluating output spectra and identifying QCLs that deliver a stable and interpretable signal suitable for sensing applications.

Keywords: THz quantum cascade lasers, modeling of technological growth imperfections, transfer matrix method, electronic structure, laser dynamics, external optical feedback

Research area: Physical electronics

Research sub-area: Nanoelectronics and photonics

UDC number: 621.3

Садржај

1	Увод	1
1.1	Полупроводнички ласери	1
1.2	Квантни каскадни ласери	2
1.3	Терахерцни квантни каскадни ласери	3
1.3.1	ЛО фононски дизајн	4
1.3.2	ВТС дизајн	7
1.3.3	Хибридни дизајн	8
1.3.4	Преглед експериментално реализованих ККЛ-а	9
1.4	Нарастање, фабрикација и таласоводи THz ККЛ-а	10
1.4.1	Нарастање и фабрикација THz ККЛ-а	11
1.4.2	Таласоводи THz ККЛ-а	12
1.5	Структура дисертације	13
2	Шредингер–Поасонова једначина и механизми расејања	14
2.1	Шредингера једначина	14
2.2	Поасонова једначина	16
2.3	Фермијево златно правило	17
2.4	Расејање услед неуређености легуре	19
2.5	Расејање услед јонизованих примеса	20
2.6	Расејање услед неравнина интерфејса	21
2.7	Расејање услед лонгитудиналних оптичких фонона	23
2.8	Расејање услед лонгитудиналних акустичних фонона	24
2.9	Расејање услед електрон–електрон интеракције	25
2.10	Једначина кинетичког биланса	26
2.11	Само-самосагласни поступак	27
2.11.1	Спољашња петља: Кинетички биланс	28
2.11.2	Унутрашња петља: ШП самосагласни поступак	29
3	Модел матрице густине и транспортно-оптичке карактеристике	30
3.1	Лиувилова једначина	30
3.2	Апроксимације јаке везе и најближих суседа	31
3.3	Дисипативни члан	33
3.4	Диполна апроксимација	34
3.5	Апроксимација неротирајућег таласа	35
3.6	Густина струје и материјално појачање	36
3.7	Транспортно-оптичке карактеристике	37
4	Моделовање технолошких несавршености нарастања ККЛ-а	40
4.1	Позадинско допирање	40
4.2	Интердифузија	45

4.3	Флуктуација дебљине слојева	46
4.4	Осетљивост високотемпературских ККЛ-а	49
5	Унапређени трансфер матрични метод	54
5.1	Математички формализам унапређеног ТММ	55
5.2	Рачунање електронске структуре у апроксимацији ефективне масе	58
5.2.1	Теоријско разматрање	58
5.2.2	Нумерички резултати и дискусија	61
5.3	Рачунање електронске структуре у 14 k·p непараболичном моделу	64
5.3.1	Теоријско разматрање	64
5.3.2	Нумерички резултати и дискусија	66
5.4	Поређење перформанси нумеричких метода	67
5.5	Рачунање дисперзионих релација оптичких интерфејс фонона	70
5.5.1	Теоријско разматрање	70
5.5.2	Нумерички резултати и дискусија	72
6	Динамика ККЛ-а са спољашњом оптичком повратном спрегом	75
6.1	Ефективне Максвел–Блохове једначине за полупроводнике	77
6.1.1	Теоријски модел	77
6.1.2	Нумеричко решавање методом коначних разлика	80
6.2	Карактеризација моделованог ККЛ-а	84
6.3	Емисија при струји прага	85
6.3.1	Рад без спољашње оптичке повратне спреге	85
6.3.2	Рад са спољашњом оптичком повратном спрегом	86
6.4	Емисија при максималној струји	92
6.4.1	Рад без спољашње оптичке повратне спреге	92
6.4.2	Рад са спољашњом оптичком повратном спрегом	94
6.5	Примена спољашње повратне спреге у сензорици	96
7	Закључак	100
А	Активне области моделованих ККЛ-а	103
A.1	ЛО фононски тројамни THz ККЛ са температуром рада од 200 K	103
A.2	ВТС THz ККЛ са фреквенцијом емисије од 2 THz	103
A.3	Хибридни THz ККЛ рекордне снаге CW емисије	104
A.4	ЛО фононски двојамни THz ККЛ са температуром рада од 261 K	105
A.5	ЛО фононски InGaAs/InAlAs тројамни THz ККЛ	105
A.6	ЛО фононски InGaAs/GaAsSb тројамни THz ККЛ	106
A.7	ЛО фононски GaSb/AlSb THz ККЛ	107
Б	Примена FDM на Шредингер–Поасонову једначину	108
B.1	Дискретизација Шредингерове једначине	108
B.2	Дискретизација Поасонове једначине	109
В	Једначине и изводи за рачунање електронске структуре применом dTMM	110
V.1	Параболични модел	110
V.2	Двезонски Кејнов непараболични модел	111
V.3	Тејлорова апроксимација Кејновог модела	111
V.4	14 k·p непараболични модел	112
	Литература	114

Списак слика

1.1	Принцип рада ласера заснива се на пумпању активног медијума, чиме се обезбеђује инверзна популација. Унутар оптичког резонатора спонтано емитовани фотони бивају појачани процесом стимулисане емисије, што доводи до настанка монохроматског и кохерентног зрачења.	1
1.2	а) Код диодних ласера емисија настаје услед међузонских прелаза, при чему је фреквенција зрачења одређена ширином енергетског процепа. б) Код ККЛ-а емисија настаје услед унутар-зонских прелаза, односно прелазима између енергетских подзона (стања) унутар проводне зоне. Инверзна популација се обезбеђује применом спољашњег напона и тунеловањем електрона кроз баријере.	2
1.3	Електромагнетни спектар приказан на скали таласне дужине λ у μm , фреквенције фотона ν у THz и енергије фотона E у meV	3
1.4	ЛО фононски тројамни дизајн са импулсном емисијом до 200 K [46]. Ласерски прелаз је дијагоналан (означено љубичастом стрелицом), док се депопулација ДЛН-а постиже преко прелазног нивоа ДЛН1, са ког се електрони релаксирају на ИЛН путем ЛО фононског расејања (означено зеленом стрелицом). ИЛН је резонантно спрегнут са ГЛН-ом суседне периоде.	5
1.5	ЛО фононски двојамни дизајн са рекордно високом температуром импулсне емисије од 261 K [33]. Ласерски прелаз је дијагоналан (означено љубичастом стрелицом) и емитује на фреквенцији од 4 THz. Дизајн има доста високе баријерне слојеве који садрже 35% алуминијума. ДЛН се ефикасно депопулише ЛО фононским расејањем на ИЛН-у (означено зеленом стрелицом), који се налази 48 meV испод ДЛН-а при резонантном напону.	5
1.6	ВТС дизајн са фреквенцијом емисије од 2 THz [51]. Ласерски прелаз је углавном вертикалан (љубичаста стрелица). Екстракција са ДЛН-а на ИЛН остварује се преко дијагоналних прелаза унутар мини зоне (зелена стрелица), док је ИЛН смештен унутар мини зоне и снажно повезан са ГЛН-ом наредне периоде. Енергетска разлика између ГЛН-а и ИЛН-а унутар једне периоде мора бити мања од енергије ЛО фонона (36 meV).	7
1.7	Хибридни дизајн са високом излазном снагом при континуалној емисији на 3.9 THz [35]. Ласерски прелаз је дијагоналан (означено љубичастом стрелицом). ДЛН је смештен изнад мини зоне, што омогућава брзу екстракцију електрона дијагонално кроз мини зону (означено бордо стрелицом). Мини зона се депопулише вертикалним ЛО фононским расејањем (означено зеленом стрелицом) у ИЛН, што обезбеђује ефикасну екстракцију.	8
1.8	Приказ максималне температуре рада и фреквенције емисије у NDR тачки 96 експериментално реализованих ККЛ-а груписаних по типовима дизајна активне зоне при импулсној емисији. Највећи број реализованих ККЛ-а је ЛО фононски тројамни и двојамни дизајн, због својих јако добрих температурских перформанси. Рекордну температуру 261 K остварили су ЛО фононски двојамни ККЛ-и.	9
1.9	Приказ максималне температуре рада и фреквенције емисије у NDR тачки 32 експериментално реализована ККЛ-а при континуалној емисији груписаних по типовима дизајна активне зоне. Континуалном емисијом доминирају ВТС и хибридни дизајни, због умерених струја рада. . . .	10

1.10	Поставка раста EMC-ом $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на супстрату од GaAs-a. Молекулски млаз (Al, Ga или As) генерише се из малих Кнудсенових ефузионих ћелија унутар којих се налазе коморе са одговарајућим материјалима који се загревају на температуре од око 1200 °C. Испред отвора сваке ефузионе ћелије налазе се механички закљони који служе за временску контролу протока молекулског млаза из саме ћелије до супстрата.	11
1.11	а) ЈП таласовод и б) ММ таласовод. Димензије на слици нису пропорционалне. Стандардне димензије таласовода су: дебљина супстрата $\approx 200\text{ }\mu\text{m}$ — $300\text{ }\mu\text{m}$, дебљина таласовода $\approx 9\text{ }\mu\text{m}$ — $15\text{ }\mu\text{m}$, дужина таласовода $\approx 1\text{ mm}$ — 4 mm , ширина таласовода $\approx 100\text{ }\mu\text{m}$ — $250\text{ }\mu\text{m}$	12
2.1	Параболичне дисперзионе релације две енергетске подзоне између којих се дешава прелаз. Прелаз се може десити између два стања чији таласни вектори задовољавају услов задат делта функцијом у Фермијевом златном правилу.	18
2.2	Неравнине на интерфејсима слојева јама и баријера доводе до пертурбације у потенцијалу проводне зоне и расејања електрона. Ове неравнине се описују средњом квадратном висином корелације Δ_{IFR} , и корелационом дужином Λ_{IFR}	21
2.3	Шематски приказ само-самосагласног поступка. Алгоритам се састоји од два угнеждена самосагласна поступка: један за решавање Шредингер–Поасонове једначине и један за решавање једначине кинетичког биланса. Спољашња петља осигурава конзистентност температуре електрона са условима енергетског биланса, док унутрашња ШП петља обезбеђује конзистентност таласних функција, енергија подзона и електростатичког потенцијала.	28
3.1	Зависност материјалног појачања од носеће фреквенције за различита електрична поља. График у горњем десном делу слике приказује фреквенцију емисије, која одговара максимуму криве материјалног појачања, у функцији електричног поља. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	38
3.2	Зависност материјалног појачања и густине струје од електричног поља. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	39
4.1	Зависност материјалног појачања и густине струје од електричног поља за различите вредности позадинског допирања n - и p -типа у случају BTC ККЛ-а [51]. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	42
4.2	Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије за различите ККЛ дизајне [35, 46, 51] у зависности од концентрације n -позадинског допирања приказане релативно у односу на вредности које је свака структура имала без позадинског допирања при спољашњем електричном пољу око максимума материјалног појачања (дате у табели 4.1). Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), легенда је преведена.	43
4.3	Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије за различите ККЛ дизајне [35, 46, 51] у зависности од концентрације p -позадинског допирања приказане релативно у односу на вредности које је свака структура имала без позадинског допирања при спољашњем електричном пољу око максимума материјалног појачања (дате у табели 4.1). Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), легенда је преведена.	43
4.4	Дно проводне зоне ЛО фононског тројамног THz ККЛ-а са радном температуром од 200 K [46] за различите дифузионе дужине интердифузије. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	45

4.5	Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије у зависности од дифузионе дужине интердифузије за различите ККЛ дизајне [35, 46, 51]. Приказане су релативне вредности у односу на вредности које је сваки дизајн имао без интердифузије, при изабраном спољашњем електричном пољу око максимума материјалног појачања приказаним у табели 4.1). Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), легенда је преведена.	46
4.6	Материјално појачање и густина струје за првих 100 насумичних варијација структура за сва три дизајна ККЛ-а [35, 46, 51]. Резултати су приказани релативно у односу на вредности материјалног појачања и густине струје код структура чије су дебљине слојева једнаке пројектованим, при спољашњем електричном пољу NDR тачке, приказаним у табели 4.3. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), легенда је преведена.	48
4.7	Дно проводне зоне ЛО фоноског двојамног дизајна са рекордном температуром рада од 261 К [33] за различите дифузионе дужине интердифузије. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	50
4.8	Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије у зависности од дифузионе дужине интердифузије ЛО фоноског двојамног дизајна са рекордном температуром рада од 261 К [33]. Приказане су релативне вредности у односу на вредности које је дизајн имао без интердифузије при изабраном спољашњем електричном пољу око максимума материјалног појачања приказаним у табели 4.4. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	51
4.9	Материјално појачање и густина струје за свих 81 могућих варијација структуре. Резултати су приказани релативно у односу на вредности материјалног појачања и густине струје код структуре чије су дебљине слојева једнаке пројектованим, при спољашњем електричном пољу које одговара NDR тачки, приказаним у табели 4.4. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	52
4.10	Материјално појачање и густина струје када је варирана дебљина само једног слоја, за сва четири слоја у структури у NDR тачки, релативно у односу на вредности материјалног појачања и густине струје код структуре чије су дебљине слојева једнаке пројектованим, приказаним у табели 4.4. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), легенда је преведена.	53
5.1	Дискретизација профила потенцијалне енергије $V(z)$. z -оса се састоји од N сегмената, и за сваки сегмент постоји аналитичко решење које нам омогућава примену dTMM формализма. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), ознаке су промењене.	59
5.2	Дно проводне зоне GaSb/AlSb THz структуре [134] израчунато стандардним ТММ-ом са приказаним дивергирајућим таласним функцијама. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	62
5.3	Дно проводне зоне GaSb/AlSb THz структуре [134] израчунато dTMM-ом без дивергирајућих таласних функција. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	62

- 5.4 Пример зависности елемента трансфер матрице m_{11} и његовог првог извода $\frac{d|m_{11}|}{dE}$ у зависности од енергије (лево). Минимуми m_{11} ($\frac{d|m_{11}|}{dE} = 0$) представљају решења својствених вредности Шредингерове једначине, приказана љубичастим круговима за InGaAs/InAlAs ЛО фононски тројамни дизајн [132] (ККЛ 2 из табеле 5.1). Дијаграми са десне стране илуструју зависност m_{11} и $\frac{d|m_{11}|}{dE}$ око једног од својствених решења. Испрекидане вертикалне линије (плаве) показују интервал енергије dE у којем је потребно применити алгоритам адаптивне мреже за проналазак минимума m_{11} или алгоритам инкременталне претраге за проналазак нуле $\frac{d|m_{11}|}{dE}$ како би се постигла машинска прецизност решења. Око једног решења адаптивна мрежа обично захтева ~ 4000 позива $m_{11}(E)$, док алгоритам инкременталне претраге (dTMM) може детектовати нулу у ~ 37 позива $\frac{d|m_{11}(E)|}{dE}$. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), текст је преведен. 63
- 5.5 Временске перформансе нумеричких метода у зависности од корака дуж просторне мреже (доња x-оса на слици) и просторне резолуције (горња x-оса на слици) нумеричке мреже примењене на BTC THz ККЛ [51]. FDM нумерички методи нису могли да обраде већу просторну резолуцију због ограничења у смештању матрица. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена. 68
- 5.6 Конвергенција израчунатог основног и горњег ласерског стања у зависности од просторног корака (доња x-оса) и просторне резолуције (горња x-оса) за BTC THz ККЛ [51]. Конвергенција је израчуната као разлика енергија између узастопних решења при промени просторне резолуције. Опсег просторног корака био је између 0.01 и 2 Å. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена. 69
- 5.7 Разлика енергија између FDM и dTMM нумеричких метода примењених на исте случајеве не-параболичности у зависности од просторног корака (доња x-оса) и просторне резолуције (горња x-оса) за BTC THz ККЛ [51]. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена. 69
- 5.8 Дисперзионе релације IF-фонона приказане заједно за сваки од три скупа IF-модова, приказани за ЛО фононски тројамни ККЛ дизајн [46] са комбинацијом материјала GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As. 73
- 5.9 Дисперзионе релације IF-фонона приказане индивидуално за сваки од три скупа IF-модова, приказани за ЛО фононски тројамни ККЛ дизајн [46] од материјала GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>). 74
- 5.10 Електростатички потенцијали 18 IF-оптичких модова за таласни вектор $q = 0.1 \text{ nm}^{-1}$, приказани за ЛО фононски тројамни ККЛ дизајн [46] од материјала GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As. Слојеви баријере од Al_{0.15}Ga_{0.85}As су освенчени. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>). 74
- 6.1 Илустрација 2D просторно-временске мреже са означеним релевантним тачкама за одређивање анvelopа електричних поља која пропадају унапред и уназад дуж координатне осе, поларизације и густина носилаца применом методе коначних разлика. За израчунавање вредности $E^+(z, t)$ у наредном временском кораку потребно је познавати његове вредности у претходном временском кораку на истој и на претходној просторној координати. Насупрот томе, за $E^-(z, t)$ неопходне су вредности у претходном временском кораку на истој и на наредној просторној координати. За поларизацију и густине носилаца довољне су вредности на истој просторној координати у претходном временском кораку. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 81

6.2	Илустрација THz ККЛ-а у Фабри–Перо резонатору са спољашњом оптичком повратном спрегом од спољашњег рефлектора. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/), текст је преведен.	84
6.3	Материјално појачање, струја и фреквенција емисије у зависности од примењеног електричног поља за GaAs/AlGaAs BTC THz ККЛ [51], са означеним тачкама прага и максимума струје коме одговара NDR тачка. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/), текст је преведен.	85
6.4	Временски облик излазне снаге ККЛ-а за струју прага $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ без спољашње оптичке повратне спреге, док је у доњем десном делу приказан оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у мономодном режиму. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).	86
6.5	Стационарни временски облик излазне снаге ККЛ-а за струју прага $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ без спољашње оптичке повратне спреге, при чему ККЛ емитује у мономодном режиму. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).	86
6.6	Временска зависност излазне снаге ККЛ-а за струју $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујуће мете са коефицијентом рефлексије 0.3, постављене на растојању од 8 mm. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у мултимодном режиму који одговара фундаменталном оптичком фреквенцијском чешљу, са модовима раздвојеним за слободни спектрални опсег резонатора од 18.9 GHz. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).	88
6.7	Стационарни временски облик излазне снаге ККЛ-а током трајања два повратна пута резонатора, при чему је време једног повратног пута једнако 52.8 ps. Ласер ради на струји $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 8 mm, и емитује у мултимодном режиму који одговара фундаменталном оптичком фреквенцијском чешљу, са модовима раздвојеним за слободни спектрални опсег резонатора од 18.9 GHz. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).	88
6.8	Временска зависност излазне снаге ККЛ-а за струју $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у мултимодном режиму који одговара оптичком фреквенцијском чешљу другог хармоника, са модовима раздвојеним за $2 \times \text{FSR}_{\text{int}} \approx 37.8 \text{ GHz}$. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).	89
6.9	Стационарни временски облик излазне снаге ККЛ-а током два повратна пута резонатора, при чему је време једног повратног пута једнако 52.8 ps. Ласер ради на струји $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге, и емитује у мултимодном режиму који одговара оптичком фреквенцијском чешљу другог хармоника. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).	90

- 6.10 Временска зависност излазне снаге ККЛ-а за ефективну струју прага од $I = 417 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 4 mm. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у мономодном режиму. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 90
- 6.11 Временска зависност излазне снаге ККЛ-а за струју $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 20 cm. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у мешовитом мултимодном режиму са модовима раздвојеним за слободни спектрални опсег резонатора од 18.9 GHz, при чему сваки од њих представља кластер модова међусобно раздвојених за слободни спектрални опсег спољашње шупљине $\text{FSR}_{\text{ext}} = 0.75 \text{ GHz}$. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 91
- 6.12 Стационарни временски облик излазне снаге ККЛ-а током приближно четири повратна пута резонатора, при чему је време једног повратног пута једнако 52.8 ps. Ласер ради на струји $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 20 cm, при чему ККЛ емитује у мешовитом мултимодном режиму са модовима раздвојеним за слободни спектрални опсег резонатора од 18.9 GHz, при чему сваки од њих представља кластер модова раздвојених за слободни спектрални опсег спољашње шупљине $\text{FSR}_{\text{ext}} = 0.75 \text{ GHz}$. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 92
- 6.13 Временска зависност излазне снаге ККЛ-а при максималној струји $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ без спољашње оптичке повратне спреге. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар у мултимодном режиму који подсећа на оптички фреквенцијски чешаљ са 14 модова унутар интервала од -15 dB , међусобно раздвојених за 18.9 GHz. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 93
- 6.14 Стационарни временски облик излазне снаге ККЛ-а током трајања два повратна пута резонатора, где је време једног повратног пута једнако 52.8 ps. Ласер ради при максималној струји $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ без спољашње оптичке повратне спреге и емитује у мултимодном режиму. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 93
- 6.15 Временска зависност излазне снаге ККЛ-а при максималној струји $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ са спољашњом оптичком повратном спрегом са мете рефлектансе 0.3, постављене на растојању од 4 mm. У доњем делу слике приказан је оптички спектар емитоване светлости, где ККЛ емитује у мултимодном режиму који подсећа на оптички фреквенцијски чешаљ другог хармоника, са модовима раздвојеним за $2 \times \text{FSR}_{\text{int}} \approx 37.8 \text{ GHz}$. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 94
- 6.16 Зависност снаге ККЛ-а за два повратна пута кроз резонатор. Ласер ради при максималној струји $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ са спољашњом повратном спрегом, и емитује у мултимодном режиму који подсећа на оптички фреквенцијски чешаљ другог хармоника. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 95

- 6.17 Временска зависност снаге ККЛ-а при $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ са спољашњом повратном спрегом са мете рефлектансе 0.3, на растојању од 20 cm. У доњем десном делу слике је спектар емитоване светлости у мешовитом мултимодном режиму, са модовима раздвојеним за $\text{FSR}_{\text{int}} \approx 18.9 \text{ GHz}$, при чему је сваки од њих кластер модова раздвојених за $\text{FSR}_{\text{ext}} \approx 0.75 \text{ GHz}$. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 95
- 6.18 Временска зависност излазне снаге ККЛ-а у стационарном режиму за временски интервал који приближно одговара трајању три повратна пута кроз резонатор, где је време једног повратног пута једнако 52.8 ps. Ласер ради при струји $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ са спољашњом оптичком повратном спрегом са спољашње мете рефлектансе 0.3, постављене на растојању од 20 cm и емитује у мешовитом мултимодном режиму, са модовима раздвојеним за $\text{FSR}_{\text{int}} \approx 18.9 \text{ GHz}$, при чему сваки мод представља кластер модова раздвојених за $\text{FSR}_{\text{ext}} \approx 0.75 \text{ GHz}$ спољашње шупљине. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 96
- 6.19 Временска зависност излазне снаге ККЛ-а за струју $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 10 cm. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у мултимодном режиму са малим бројем модова раздвојених за слободни спектрални опсег резонатора од 18.9 GHz. 97
- 6.20 Средња вредност снаге ККЛ-а у функцији дужине спољашње шупљине за струју $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ са спољашњом оптичком повратном спрегом са спољашње мете рефлектансе 0.3. Интерференциона периода износи приближно 68 μm , што одговара вредности $\lambda/2$ за централну фреквенцију од 2.2 THz. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 97
- 6.21 Временска зависност снаге ККЛ-а при струји $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ са спољашњом повратном спрегом са мете рефлектансе 0.3, на растојању од 10 cm. У доњем десном делу слике приказан је спектар емитоване светлости у мултимодном режиму, са великим бројем модова који су раздвојеним за $\text{FSR}_{\text{int}} \approx 18.9 \text{ GHz}$ 98
- 6.22 Средња вредност излазе снаге ККЛ-а у функцији дужине спољашње шупљине за струју у NDR тачки $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ са спољашњом оптичком повратном спрегом са спољашње мете рефлектансе 0.3. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). 98
- A.1 Дно проводне зоне и модули таласних функција GaAs/AlGaAs ЛО фононског тројамног THz ККЛ-а са температуром рада од 200 K [46]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су 4.3/8.9/2.46/8.15/4.1/(5.5+5.0+5.5) nm, где су $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ баријере подебљане, а средњи део последње јаме допиран до $6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучен. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена. 103
- A.2 Дно проводне зоне, као и модули таласних функција GaAs/AlGaAs BTC ККЛ-а који је дизајниран за рад на фреквенцији од 2 THz [51]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: 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, где су $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ баријере подебљане, а јаме допиране до $1.3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ подвучене. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена. 104

- A.3 Дно проводне зоне, као и модули таласних функција GaAs/AlGaAs хибридног ККЛ-а који је дизајниран за рад са рекордном снагом емисије у континуалном режиму [35]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: **5.51/10.39/1.17/10.92/3.71/9.54/5.09/(8.23+10.0)** nm, где су Al_{0.2}Ga_{0.8}As баријере означене подебљаним фонтом, а десни део последње јаме допиран до $4.0 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучен. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена. 104
- A.4 Дно проводне зоне, као и модули таласних функција GaAs/AlGaAs ЛО фононског двојамног THz ККЛ-а са рекордном температуром рада од 261 K [33]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере: **2.88/7.45/1.76/(3.0+3.0+9.0)** nm, где су Al_{0.35}Ga_{0.65}As баријере означене подебљано, а средњи део последње јаме допиран до $1.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ је подвучен. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена. 105
- A.5 Дно проводне зоне, као и модули таласних функција ЛО фононског InGaAs/InAlAs тројамног THz ККЛ-а [132]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: **1.8/13.3/0.6/13.3/1.8/(9.0+6.0+9.0)** nm. Слојеви јаме су од In_{0.53}Ga_{0.47}As, док су баријере од In_{0.52}Al_{0.48}As означене подебљаним фонтом. Средњи део последње јаме, допиран концентрацијом $3.3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, је подвучен. Преузето из сопственог рада [60], под Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>) условима, легенда је преведена. . . 106
- A.6 Дно проводне зоне, као и модули таласних функција ЛО фононског InGaAs/GaAsSb тројамног THz ККЛ-а [133]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: **3.0/13.5/1.0/14.4/3.0/2.0/20.3/2.0** nm. Слојеви јаме су од In_{0.53}Ga_{0.47}As, док су баријере од GaAs_{0.51}Sb_{0.49} означене подебљаним фонтом. Средњи део последње јаме, допиран концентрацијом $1.0 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучен. Преузето из сопственог рада [60], под Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>) условима, легенда је преведена. . . 106
- A.7 Дно проводне зоне, и модули таласних функција ЛО фононског GaSb/AlSb THz ККЛ-а [134]. Дебљине слојева, почевши од инјекционе баријере: **4.3/14.4/2.4/11.4/3.8/24.6/3.0/16.2** nm, где су AlSb баријере подебљане, а слојеви јаме су од GaSb. Јама допирана концентрацијом $1.9 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучена. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена. . . . 107

Списак табела

4.1	Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије за три дизајна THz ККЛ-а [35, 46, 51], при спољашњем електричном пољу око максимума материјалног појачања. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), текст је преведен.	44
4.2	Средња вредност, стандардна девијација и корен средње квадратне грешке материјалног појачања, густине струје и емисионе фреквенције на вредности спољашњег електричног поља које одговара NDR тачки за три различита ККЛ дизајна [35, 46, 51] добијених из 500 насумичних варијација структура, приказаних релативно у односу на вредности код структура чије су дебљине слојева једнаке пројектованим у NDR тачки. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), текст је преведен.	47
4.3	Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије за три дизајна THz ККЛ-а [35, 46, 51], при спољашњем електричном пољу које одговара NDR тачки. Преузето из сопственог рада [59], под Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/) условима, текст је преведен.	47
4.4	Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије за ЛО фононски двојамни дизајн са рекордном температуром рада од 261 K [33], при електричном пољу око максимума појачања, као и у тачки негативног диференцијалног отпора, која одговара максимуму струје. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), текст је преведен.	50
4.5	Средња вредност, стандардна девијација и корен средње квадратне грешке материјалног појачања, густине струје и фреквенције емисије за ЛО фононски двојамни ККЛ са рекордном радном температуром од 261 K [33], за свих 81 варијација структуре, у NDR тачки приказаних релативно у односу на вредности код структуре чије су дебљине слојева једнаке пројектованим. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), текст је преведен.	52
5.1	Апсолутна вредност разлике енергија подзона добијених dTMM-ом и FDM-ом за три различита ККЛ-а при одговарајућим резонантним електричним пољем од 1.9 kV/cm, 10 kV/cm и 8 kV/cm редом. За сваки ККЛ приказани су резултати параболичног модела, двозонског Кејновог непараболичног модела и његове Тејлорове апроксимације у првој, другој и трећој колони редом. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	61
5.2	Енергије подзона у GaSb/AlSb THz структури за резонантно електрично поље од 5.4 kV/cm израчунате ТММ-ом и dTMM-ом. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	63

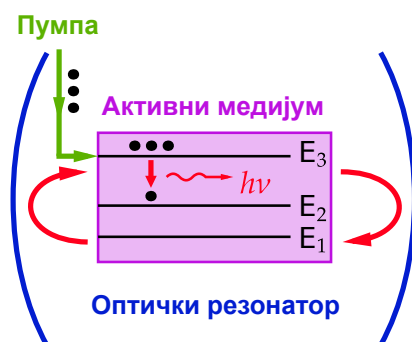
5.3	Енергије подзона у GaAs/AlGaAs BTC THz ККЛ-у [51] за резонантно електрично поље од 1.9 kV/cm, приказане за параболични модел, двозонски Кејнов непараболични модел, његову Тејлорову апроксимацију и 14-зонски k·p непараболични модел. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), текст је преведен.	66
5.4	Енергије подзона у InGaAs/InAlAs ЛО фононском THzККЛ-у [132] за резонантно електрично поље од 10 kV/cm, приказане за параболични модел, двозонски Кејнов непараболични модел, његову Тејлорову апроксимацију и 14-зонски k·p непараболични модел. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), текст је преведен.	66
5.5	Енергије подзона у InGaAs/GaAsSb ЛО фононском THz ККЛ-у [133] за резонантно електрично поље од 8 kV/cm, приказане за параболични модел, двозонски Кејнов непараболични модел, његову Тејлорову апроксимацију и 14-зонски k·p непараболични модел. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), текст је преведен.	67
5.6	Диелектричне пропустљивости на високим фреквенцијама и фононске енергије [148] коришћене у прорачуну дисперзионих релација. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).	72
6.1	Параметри ККЛ-а коришћени у симулацијама. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/), текст је преведен.	84

Поглавље 1

Увод

1.1 Полупроводнички ласери

Ласери (енгл. Laser - Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) су уређаји који производе кохерентно електромагнетно зрачење помоћу стимулисане емисије. За њихов рад, који се заснива на квантно-механичким ефектима, неопходно је неколико услова: потребан је активни медијум са више енергетских нивоа, процес пумпања који обезбеђује инверзну популацију између тих нивоа, као и оптички резонатор који омогућава вишеструки пролазак зрачења кроз активни медијум и тиме омогућава појачање зрачења [1], што је илустровано на слици 1.1.



Слика 1.1. Принцип рада ласера заснива се на пумпању активног медијума, чиме се обезбеђује инверзна популација. Унутар оптичког резонатора спонтано емитовани фотони бивају појачани процесом стимулисане емисије, што доводи до настанка монохроматског и кохерентног зрачења.

У савременој ласерској техници развијен је велики број активних медијума који омогућавају генерисање зрачења у различитим деловима електромагнетног спектра. Најзначајнији типови ласера су: гасни ласери, ласери са органским бојама, чврстотелни ласери и полупроводнички ласери. Сваки од ових активних медијума поседује специфичне особине које одређују његову ефикасност, спектрални опсег и погодност за одређене примене. Гасни ласери познати су по високом квалитету и стабилности зрачења, ласери са органским бојама омогућавају континуално подешавање таласне дужине, чврстотелни ласери издвајају се великом снагом и поузданошћу, док полупроводнички ласери, захваљујући својој компактности и енергетској ефикасности, заузимају централно место у модерној телекомуникационој и индустријској технологији. Оваква разноврсност активних медијума омогућила је ласерима широке примене, како у истраживањима тако и у технолошке и медицинске сврхе [2].

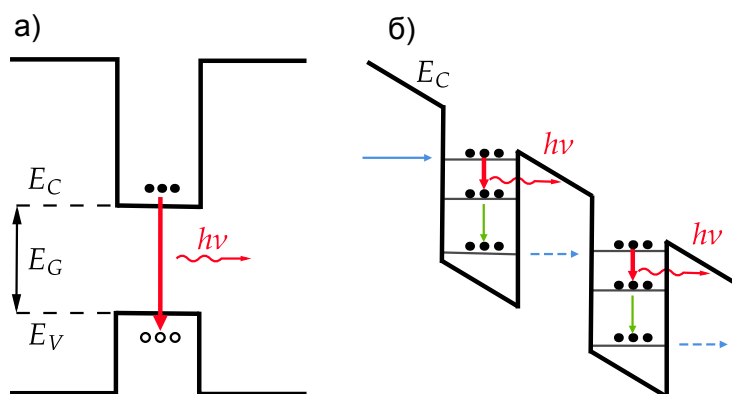
Први полупроводнички ласери реализовани су 1962. године у GaAs p–n споју [3]. Због своје кристалне структуре, полупроводници поседују периодични распоред атомских потенцијала, што доводи до формирања дозвољених енергетских зона носиоцима наелектрисања. Најзначајније су валентна зона (E_V), која је скоро у потпуности попуњена електронима, и проводна зона (E_C), која је углавном празна. Ове две зоне раздвојене су енергетским процепом (E_G), чија

величина одређује могуће електронске прелазе. У диодним ласерима стимулирана емисија настаје као последица рекомбинације електрона из проводне зоне са шупљинама у валентној зони, а енергија, односно таласна дужина емитованог зрачења, директно зависи од ширине енергетског процепа, што се може видети на слици 1.2а).

Диодним ласерима је теоријски могуће добити ласерско зрачење на било којој фреквенцији, све док је доступан материјал са директним енергетским процепом који одговара жељеној фреквенцији. Због тога се у пракси користи велики број различитих полупроводничких једињења, од бинарних до тернарних и квартарних легура [4] како би се могло приступити што већем делу електромагнетног спектра. Проблем настаје када је потребно радити у домену далеког инфрацрвеног спектра јер овим фреквенцијама одговарају сувише мале вредности енергетског процепа ($\sim 10 \text{ meV}$), које се код уобичајених полупроводничких материјала не могу лако и прецизно подешавати. Ово ограничење указује да класични диодни ласери нису погодни за тај опсег, због чега је било неопходно развити концептуално нови тип ласера који заобилазе ово физичко ограничење. Наредни корак у развоју диодних ласера [5] и побољшању њихових карактеристика био је увођење хетероспојева и формирање квантних јама и квантних баријера [6] ради контроле транспорта електрона. Избором коришћеног материјала и дебљине слојева било је могуће дизајнирање и инжењеринг зонског потенцијала, и даље истраживање система са великим бројем квантних јама [7–9] и новог концепта рада полупроводничких ласера који је могао превазићи ограничења таласне дужине емисије, присутне због ограничења могућег енергетског процепа материјала код класичних диодних ласера.

1.2 Квантни каскадни ласери

Концепт полупроводничког ласера заснованог на систему више квантних јама унутар проводне зоне први пут се уводи у [9]. Слично као што периодични атомски потенцијал у кристалној решетки полупроводника доводи до формирања енергетских зона, тако периодична структура ових квантних јама доводи до формирања енергетских подзона (квазивезаних стања). Транспорт електрона кроз структуру омогућен је тунеловањем електрона кроз баријерне слојеве у суседну јаму применом спољашњег електричног поља. Механизам функционисања ових квантних каскадних ласера (ККЛ-а) приказан је на слици 1.2б).



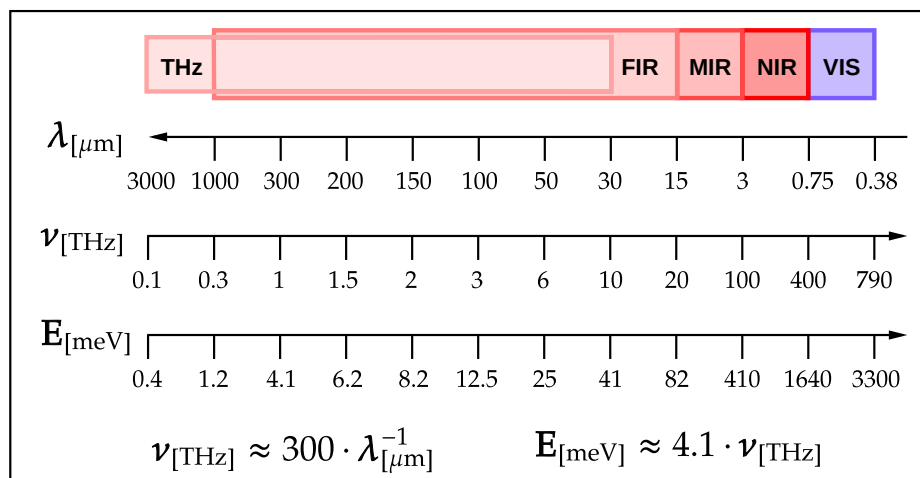
Слика 1.2. а) Код диодних ласера емисија настаје услед међузонских прелаза, при чему је фреквенција зрачења одређена ширином енергетског процепа. б) Код ККЛ-а емисија настаје услед унутарзонских прелаза, односно прелазима између енергетских подзона (стања) унутар проводне зоне. Инверзна популација се обезбеђује применом спољашњег напона и тунеловањем електрона кроз баријере.

Предност овакве каскадне структуре је генерација великог броја фотона једним електроном, јер до прелаза може доћи у свакој каскади, док је код стандардних диодних ласера теоријски максимум који један електрон може постићи генерација једног фотона рекомбинацијом са шупљином из валентне зоне. Први ККЛ је експериментално направљен 1994. године [10], у $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}/\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ хетероструктури која је емитовала на таласној дужини од 4.2

μm . Овиме је демонстрирана потенцијална могућност емисије у средњем и далеком инфрацрвеном (MIR и FIR) опсегу. Након тога испитани су бројни системи материјала (InP/InGaAs, GaAs/AlGaAs, InAs/AlSb и др.) и различити дизајни [11, 12], који су омогућили рад ККЛ-а на собној температури [13, 14], постизање високих снага емисије [15, 16] и емисију на таласним дужинама од 3 μm [17] до 16 μm [18]. Данас су ККЛ-и нашли широку примену у MIR домену од хемијске детекције [19], комуникација [20], медицинске дијагностике [21], до плазма спектроскопије [22] и високоосетљиве гасне спектроскопије [23].

1.3 Терахерцни квантни каскадни ласери

Терахерцни (THz), тј. далеко-инфрацрвени део спектра, налази се између микроталасног и средње-инфрацрвеног подручја, и одговарају му фреквенције 0.1–10 THz, таласне дужине 30–3000 μm , и енергије 0.4–40 meV, што је приказано на слици 1.3. Овај део спектра дуго је био готово недоступан због непрактичности доступних извора зрачења, као што су р-Ge ласери [24], THz параметарски осцилатори [25] и ласери са слободним електронима [26]. Унутарзонски прелази између енергетских подзона присутни код ККЛ-а, приказани на слици 1.2b), омогућили су реализацију извора светлости са врло малим енергијама фотона, које припадају THz делу спектра. Први THz ККЛ направљен је 2002. године [27] од GaAs, на 4.4 THz, до температуре од 50 K. Од тада је развијен велики број дизајна [28, 29], који су омогућили емисију у опсегу од 1.2 THz [30, 31] до 6.03 THz [32] у импулсном режиму, емисију у опсегу од 1.2 THz [30, 31] до 5.71 THz [32] у континуалном режиму, рад до 261 K у импулсном [33], и до 129 K [34] у континуалном режиму, највећу снагу при континуалној емисији од 312 mW [35], и највећу снагу при импулсној емисији 2.4 W [36].



Слика 1.3. Електромагнетни спектар приказан на скали таласне дужине λ у μm , фреквенције фотона ν у THz и енергије фотона E у meV

Мала фреквенција емисије код THz ККЛ-а представља значајан изазов за рад на високим температурама због ограничења самог принципа рада и својстава материјала, као и због недостатка одговарајуће технологије за друге материјалне системе осим GaAs-а [37]. На собној температури термална енергија електрона ($k_B T \sim 26 \text{ meV}$) је често већа од овог енергетског размака између подзона (10 meV), што омогућава електронима да се термално попну на виши ниво, чиме уништавају инверзну популацију потребну за ласеровање. Са друге стране, повећана фононска интеракција на вишим температурама доводи до брже декохеренције и релаксације носилаца, што додатно смањује ефикасност ласера. Горња граница фреквенције емисије одређена је својствима материјала, пре свега постојањем јако апсорбујућег *Reststrahlen* опсега у GaAs/AlAs структурама изнад 6 THz [38, 39], док је доња граница фреквенције емисије условљена тиме што је за зрачење испод 1 THz потребно да разлика енергија између подзона буде мања

од 4.1 meV, што доводи до значајне апсорпције чак и на криогеним температурама. Због свега наведеног, остваривање стабилне ласерске емисије у THz опсегу на високим температурама је веома сложено. Тренутно су једини THz ККЛ-и који раде на собној температури засновани на MIR ККЛ-има које користе нелинеарне ефекте [40, 41]. Међутим, такви системи производе врло малу оптичку снагу због ниске ефикасности нелинеарних ефеката.

Како би принцип рада ККЛ-а, приказан на слици 1.2b), био изводљив потребно је да се они састоје од великог броја (10–100) поновљених периода, од којих је свака вишеслојна структура која садржи активну и инјекциону област. У активној области формира се и одржава инверзна популација између горњег и доњег ласерског нивоа, иза које се налази инјекциона област чија је функција да омогући транспорт електрона и њихово убризгавање (инјекција) резонантним тунеловањем у активну област наредне периоде. На тај начин обезбеђује се селективно убризгавање у виши ласерски ниво и ефикасна екстракција из нижег ласерског нивоа, уз прихватљиве динамичке карактеристике рада.

Активна област је део периоде у којој долази до радијативних прелаза између горњег ласерског нивоа (ГЛН) и доњег ласерског нивоа (ДЛН) током којих се емитује светлост. Сваком стању одговара таласна функција чији квадрат модула представља просторну расподелу вероватноћа налажења електрона. У случају великог преклапања таласних функција ГЛН-а и ДЛН-а велика је вероватноћа не само радијативних прелаза, већ и непожељне апсорпције и нерадијативних прелаза [42], посебно на вишим температурама [43]. До овога долази код вертикалних прелаза, где се ова два стања налазе у истој квантној јами. Са друге стране, у случају малог преклапања таласних функција ГЛН-а и ДЛН-а, ласер има мало материјално појачање, јер оно зависи од квадрата диполног матричног елемента, због чега ни овај случај није пожељан. Ово се јавља код дијагоналних прелаза, где се ГЛН и ДЛН налазе у суседним квантним јамама. Потребно је пронаћи компромис између ова два случаја за постизање доброг ККЛ дизајна.

Инјекциона област служи за екстракцију електрона са ДЛН-а, као и за њихово убризгавање у ГЛН наредне периоде. Пројектује се тако да садржи додатни ласерски ниво, назван инјекциони ласерски ниво (ИЛН). ИЛН је углавном основни ниво периоде ККЛ-а, и он мора бити приближно изједначен по енергији са ГЛН-ом наредне периоде, што се постиже применом резонантног спољашњег електричног поља дуж правца раста структуре. За ефикасну екстракцију електрона са ДЛН-а често се ИЛН пројектује на енергији ДЛН-а умањеној за енергију лонгитудиналног оптичког фонона (ЛО фонона). Још већа ефикасност екстракције електрона са ДЛН-а постиже се додавањем кластера прелазних стања, што омогућава дизајн ККЛ-а веће снаге, али због паразитних апсорпција ограничава температуру на којој ласер може радити, па је и овде неопходан компромис.

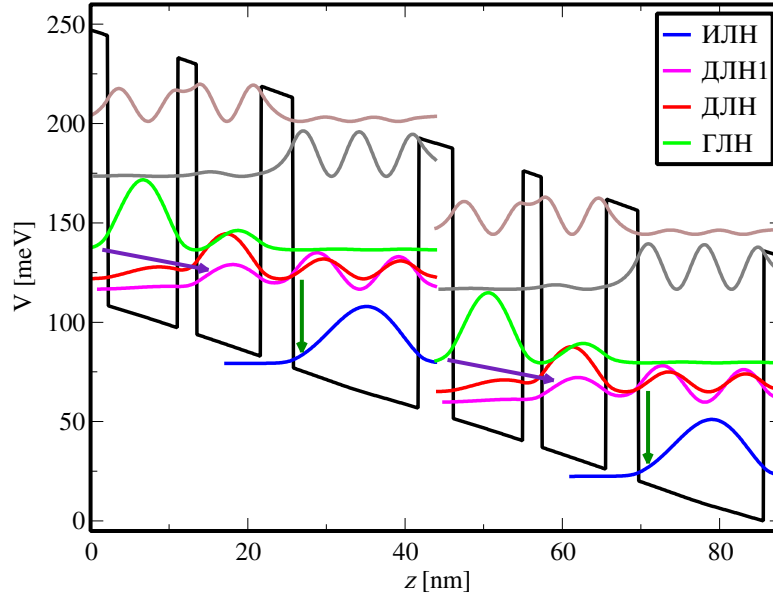
Постојање више ефеката између којих треба пронаћи равнотежу довело је до формирања три велике групе THz ККЛ дизајна [28, 44], код којих су изражене различите особине, описане на примерима структура приказаним у овом раду. Најзначајнији дизајни THz ККЛ-а су: ЛО фононски дизајн, где разликујемо двојамни и тројамни дизајн, bound-to-continuum (BTC) дизајн и хибридни дизајн. Детаљни подаци о активним областима моделованих ККЛ-а дати су у Додатку А.

1.3.1 ЛО фононски дизајн

ЛО фононски дизајн [43, 45] састоји се од малог броја квантних јама: две у активној области и једна у инјекторској области (тројамни дизајн) или једна у активној области и једна у инјекторској области (двојамни дизајн), због чега овај дизајн има мали број енергетских стања. Ове структуре су оптимизоване за рад на високим температурама, што је постигнуто малим бројем енергетских стања и ефикасном депопулацијом ДЛН-а путем ЛО фононског расејања на ИЛН који се налази на ЛО фонон енергији испод ДЛН-а (36 meV у GaAs-у).

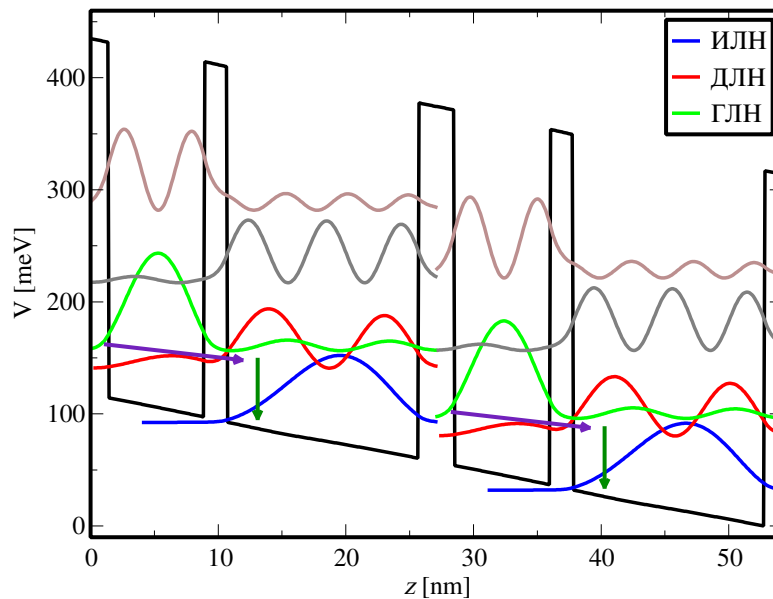
На слици 1.4 приказан је ЛО фононски тројамни ККЛ дизајниран за рад на високој темпе-

ратури од 200 К у импулсном режиму [46]. Код овог дизајна ласерски прелаз је дијагоналан и депопулација ДЛН постигнута је коришћењем прелазног нивоа (означеног као ДЛН1 на слици 1.4) са којим је јако спрегнут. Са ДЛН1 долази до ЛО фононског прелаза на ИЛН који је резонантно спрегнут са ГЛН-ом наредне периоде. Механизам расејања електрона са ЛО фононима доминантан је механизам расејања у сваком ККЛ-у, због чега се мора обезбедити да њиме не долази до нежељене депопулације ГЛН-а [28], што је реализовано увођењем прелазног нивоа између ДЛН-а и ИЛН-а.



Слика 1.4. ЛО фононски тројамни дизајн са импулсном емисијом до 200 К [46]. Ласерски прелаз је дијагоналан (означено љубичастом стрелицом), док се депопулација ДЛН-а постиже преко прелазног нивоа ДЛН1, са ког се електрони релаксирају на ИЛН путем ЛО фононског расејања (означено зеленом стрелицом). ИЛН је резонантно спрегнут са ГЛН-ом суседне периоде.

Прелазно стање је снажно повезано са ДЛН-ом, док је његова таласна функција локализована у истој квантној јами као и ИЛН. Овакав дизајн омогућава ефикасну депопулацију ДЛН-а у прелазно стање у суседној квантној јами и ЛО фононски прелаз из ДЛН1 у ИЛН, без значајног преклапања ГЛН-а са ИЛН-ом.



Слика 1.5. ЛО фононски двојамни дизајн са рекордно високом температуром импулсне емисије од 261 К [33]. Ласерски прелаз је дијагоналан (означено љубичастом стрелицом) и емитује на фреквенцији од 4 THz. Дизајн има доста високе баријерне слојеве који садрже 35% алуминијума. ДЛН се ефикасно депопулише ЛО фононским расејањем на ИЛН-у (означено зеленом стрелицом), који се налази 48 meV испод ДЛН-а при резонантном напону.

Други приступ спречавања нежељене депопулације ГЛН-а је примена двојамног дизајна са вишим баријерама, као у случају ККЛ-а са рекордном радном температуром од 261 К у импулсном режиму [33] који је приказан на слици 1.5.

Висина баријере одређена је моларним уделом алуминијума x у GaAs-у, то јест у легури $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. У већини реализованих THz ККЛ-а најчешће се користи $x = 0.15$, јер је код оваквих баријера (око 125 meV) дизајн релативно робустан на експерименталне толеранције током фабрикације. Такође је код дизајна са високим баријерама неопходна већа концентрација допирања, пошто су електрони снажније локализовани. Због тога овај ККЛ са рекордном температуром емисије ради при веома високој густини струје.

Предности ЛО фононског дизајна су:

- Кратка дужина периоде која је лакша за нарастање.
- Способност рада на вишим фреквенцијама при вишим температурама у импулсном режиму због малог броја енергетских стања.

Мане ЛО фононског дизајна су:

- Велика струја прага и велики радни напон.
- Превелико загревање у континуалном (енгл. continuous-wave - CW) режиму рада због велике струје.
- Релативно лоша инјекција електрона из ИЛН-а у ГЛН наредне периоде.
- Ограничена излазна снага ласера због дијагоналног ласерског прелаза и релативно лоше инјекционе ефикасности електрона.
- Неидеалне перформансе емисије на нижим фреквенцијама при вишим температурама због потешкоће у одржавању инверзне популације, што је последица релативно лоше инјекционе ефикасности електрона.

Направљено је неколико дизајна који у мањој или већој мери имају сличности са ЛО фононским дизајном. Један од њих је расејањем потпомогнут дизајн (енгл. scattering assisted) [47], који је по принципу рада обрнути ЛО фононски дизајн. Уместо да се ДЛН депопулише ЛО фононским расејањем, у овом случају се ГЛН пумпа овим механизмом, док се ДЛН депопулише путем резонантног тунеловања. Прва јама у дизајну мора бити ужа како би се прво енергетско стање „подигло“ за приближно 36 meV изнад ГЛН-а, а инјекциона баријера мора бити танка ради ефикасне депопулације ДЛН-а. Овај дизајн, међутим, нема значајне предности у поређењу са осталима [48], углавном због паразитних стања која сама структура није могла да потисне. Овај проблем је у одређеној мери ублажен увођењем виших баријера [49], са моларним уделом алуминијума $x = 0.2 - 0.3$, али овакво решење има веома висок радни напон, велику густину струје прага, као и технолошке потешкоће при фабрикацији.

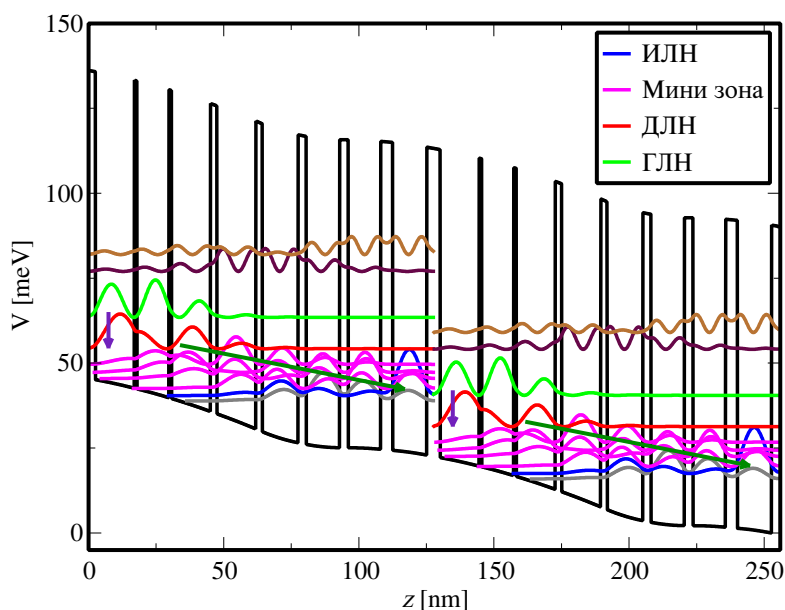
Још једна варијација ЛО фононског дизајна је двоструки фононски дизајн (енгл. dual phonon) заснован на два узастопна ЛО фононска прелаза, који пумпају/депопулишу ГЛН/ДЛН истим механизмом. Оваква структура дала је најбоље температурске перформансе на ниским фреквенцијама [50]. Главни проблем овог решења је веома висок резонантни напон потребан да се структура искриви за приближно 36 meV + 8 meV + 36 meV по периоди, како би се одговарајућа енергетска стања поравнала.

1.3.2 ВТС дизајн

ВТС структуре се састоје од великог броја квантних јама услед чега долази до формирања квазиконтинуалних мини зона које су направљене од скупа дозвољених енергетских стања која се налазе између ДЛН-а и ИЛН-а, док ГЛН остаје локализован. Због овога се ласерски прелаз дешава између, условно речено, везаног ГЛН-а и континуалног ДЛН-а, одакле су ове структуре и добиле име (енгл. bound to continuum).

Главна карактеристика ВТС дизајна је ефикасна депопулација ДЛН-а и инјекција у ГЛН наредне периоде која се постиже проласком кроз велики број енергетски блиских стања мини зоне између ДЛН-а и ИЛН-а. Како не би дошло до депопулације ГЛН-а ЛО фононским расејањем, које би уништило инверзну популацију, разлика енергија између ГЛН-а и ИЛН-а унутар једне периоде мора бити мања од енергије ЛО фонона. ИЛН се налази унутар мини зоне и спрегнут је са ГЛН-ом наредне периоде. На слици 1.6 приказан је ВТС ККЛ дизајниран за рад на фреквенцији од 2 THz [51].

Ласерски прелаз у овој структури претежно је вертикалан, што омогућава постизање већег материјалног појачања. Пошто електрони природно теже ка нижим енергијама, релаксација са ДЛН-а на ИЛН дијагоналним прелазима унутар мини зоне се врло лако остварује. Ипак, при томе су и процеси апсорпције веома вероватни, па је неопходно да број квантних јама буде велики како би се обезбедило просторно померање таласних функција сваког стања унутар мини зоне, чиме се постиже ефекат „дијагоналног прелаза у традиционалном смислу“. Са друге стране, велики број енергетски блиских стања онемогућава рад на повишеним температурама, што представља кључно ограничење овог дизајна.



Слика 1.6. ВТС дизајн са фреквенцијом емисије од 2 THz [51]. Ласерски прелаз је углавном вертикалан (љубичаста стрелица). Екстракција са ДЛН-а на ИЛН остварује се преко дијагоналних прелаза унутар мини зоне (зелена стрелица), док је ИЛН смештен унутар мини зоне и снажно повезан са ГЛН-ом наредне периоде. Енергетска разлика између ГЛН-а и ИЛН-а унутар једне периоде мора бити мања од енергије ЛО фонона (36 meV).

Предности ВТС дизајна су:

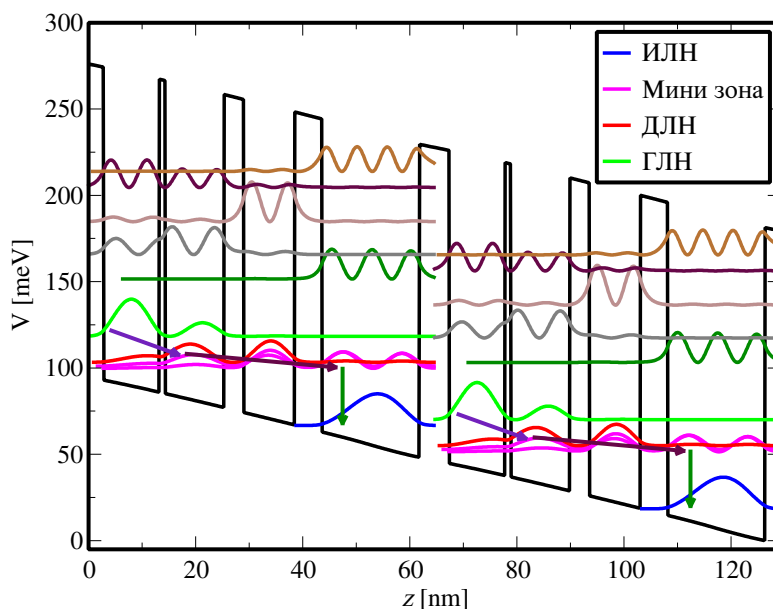
- Ниска струја прага, која омогућава континуални режим рада.
- Велика излазна снага на ниским температурама.
- Одличне перформансе на ниским фреквенцијама.
- Велика ефикасност екстракције и инјекције електрона у наредну периоду.

Мане ВТС дизајна су:

- Велика дужина периоде, која може бити проблематична у нарастању.
- Лоше перформансе на високим температурама, због великог броја блиских енергетских стања.

1.3.3 Хибридни дизајн

Хибридни дизајн комбинује способност рада на високим температурама ЛО фононског дизајна и велику екстракциону ефикасност и снагу ВТС дизајна. Овај дизајн се може назвати bound-to-continuum-to-bound јер су ГЛН и ИЛН јасно одређена енергетска стања, док је ДЛН енергетски уска мини зона дозвољених стања која се приближно налази на ЛО фонон енергији изнад ИЛН-а. На слици 1.7 приказан је хибридни ККЛ дизајн са рекордно високом снагом СW емисије [35]. У овом дизајну ласерски прелаз је дијагоналан, а ДЛН се налази на врху мини зоне што омогућава веома брзу екстракцију електрона.



Слика 1.7. Хибридни дизајн са високом излазном снагом при континуалној емисији на 3.9 THz [35]. Ласерски прелаз је дијагоналан (означено љубичастом стрелицом). ДЛН је смештен изнад мини зоне, што омогућава брзу екстракцију електрона дијагонално кроз мини зону (означено бордо стрелицом). Мини зона се депопулише вертикалним ЛО фононским расејањем (означено зеленом стрелицом) у ИЛН, што обезбеђује ефикасну екстракцију.

Овакав дизајн у доброј мери решава проблеме претходна два дизајна, јер мини зона омогућава ефикасну екстракцију са ДЛН-а, из које затим долази до ефикасног ЛО фононског прелаза на ИЛН, па је струја прага мања него код ЛО фононских структура, што омогућава континуалну емисију. Због постојања ЛО фонон екстракције, овакав дизајн може радити на вишим температурама од ВТС дизајна, док је дужина периоде мања него код ВТС-а, што омогућава нарастање већег броја периода ради постизања веће оптичке снаге.

Пошто је ЛО фононски процес доминантан на вишим температурама, овај дизајн карактерише веома широк динамички опсег оптичке снаге и тренутно држи рекорде за: највишу радну фреквенцију [32], највишу СW температуру [34], највећу излазну снагу у СW емисији [35], и највећу излазну снагу у импулсној емисији [36] међу THz ККЛ-има.

Предности хибридног дизајна су:

- Изразито велика снага.
- Добре перформансе на високим фреквенцијама.

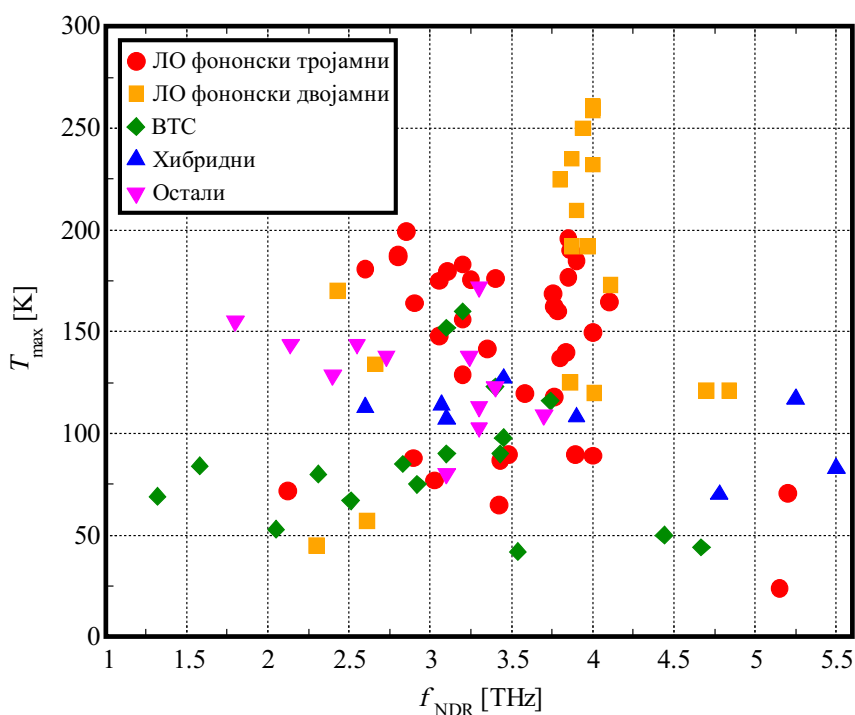
- Широки динамички опсег.
- Умерена струја прага, која омогућава континуалну емисију.

Мане хибридног дизајна су:

- Проблеми у раду на високим температурама услед постојања мини зоне.
- Велика дужина периоде, која може бити проблематична у процесу нарастања.

1.3.4 Преглед експериментално реализованих ККЛ-а

Детаљним прегледом доступне литературе систематизовани су подаци о експериментално реализованим THz ККЛ-има са циљем да се на једном месту прикажу максималне температуре њиховог рада, као и остварене фреквенције емисије. На слици 1.8 приказане су максималне температуре рада и фреквенције емисије при импулсном режиму рада ККЛ-а при највећој радној струји сваког од ККЛ-а, то јест, у NDR тачки (енгл. negative differential resistance point). ККЛ-и су груписани по до сада реализованим типовима дизајна активне зоне. Највећа пажња посвећена је најчешћим дизајнима: ЛО фононски тројамни и двојамни дизајн, ВТС дизајн и хибридни дизајн, који представљају основу развоја THz ККЛ-а. У категорију „остали“ сврстани су мање заступљени дизајни, међу којима су: расејањем потпомогнут дизајн, двоструки фононски дизајн, фонон–фотон–фононски дизајн и екстракционо контролисани дизајн.



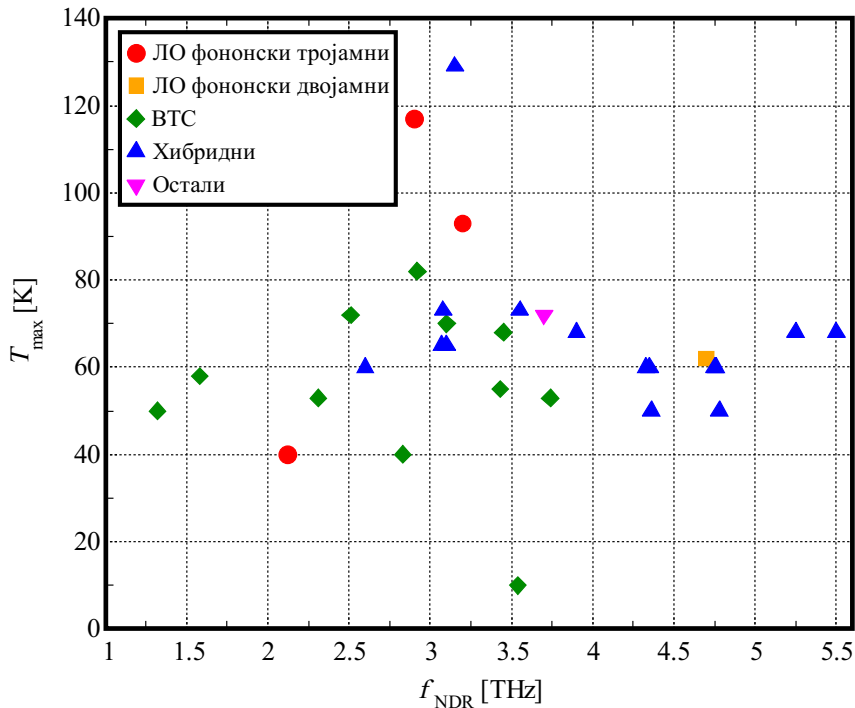
Слика 1.8. Приказ максималне температуре рада и фреквенције емисије у NDR тачки 96 експериментално реализованих ККЛ-а груписаних по типовима дизајна активне зоне при импулсној емисији. Највећи број реализованих ККЛ-а је ЛО фононски тројамни и двојамни дизајн, због својих јако добрих температурских перформанси. Рекордну температуру 261 К остварили су ЛО фононски двојамни ККЛ-и.

На слици 1.8 се може видети да је фреквенција емисије свих ККЛ-а између 1.2 THz и 5.6 THz, док већина ККЛ-а емитује између 2 THz и 4 THz. Приказани су подаци о импулсној емисији за укупно 96 ККЛ-а, при чему је највећи број реализованих ККЛ-а ЛО фононски тројамни и двојамни дизајн. Због малог броја релативно удаљених енергетских стања ови ККЛ-и могу радити при вишим температурама на вишим фреквенцијама, док на нижим фреквенцијама имају потешкоћа у одржавању инверзне популације услед релативно лоше инјекционе ефикасности

електрона у наредну каскаду. Убедљиво најбоље температурске перформансе имају ЛО фононски дизајни, који су једини постигли радне температуре преко 200 K, што је омогућило увођење термоелектричких система за хлађење уместо течног хелијума, значајно ширећи потенцијалну индустријску примену THz технологије. Такође, на слици 1.8 се издваја јасна вертикална линија у интервалу од 3.8 THz до 4 THz где се налазе искључиво двојамни ЛО фононски дизајни који су достигли рекордну температуру рада од 261 K.

На слици 1.9 приказане су максималне температуре рада и фреквенције емисије свих ККЛ-а који су остварили континуалну емисију, при струји која одговара NDR тачки. Приказани су подаци о континуалној емисији за укупно 32 ККЛ-а, при чему је приказан јако мали број ЛО фононских дизајна код којих услед превелике струје рада, долази до превеликог загревања, што онемогућава континуалну емисију. Континуалном емисијом доминирају ВТС и хибридни дизајни, који држе рекорд за највишу температуру континуалне емисије од 129 K, због умерених струја рада. ВТС дизајни поседују одличне перформансе на ниским фреквенцијама, док због великог броја блиских енергетских стања имају лоше перформансе на високим температурама.

Хибридни дизајни имају добре перформансе на високим фреквенцијама, али и проблеме у раду на високим температурама услед постојања мини зоне.



Слика 1.9. Приказ максималне температуре рада и фреквенције емисије у NDR тачки 32 експериментално реализована ККЛ-а при континуалној емисији груписаних по типовима дизајна активне зоне. Континуалном емисијом доминирају ВТС и хибридни дизајни, због умерених струја рада.

1.4 Нарастање, фабрикација и таласоводи THz ККЛ-а

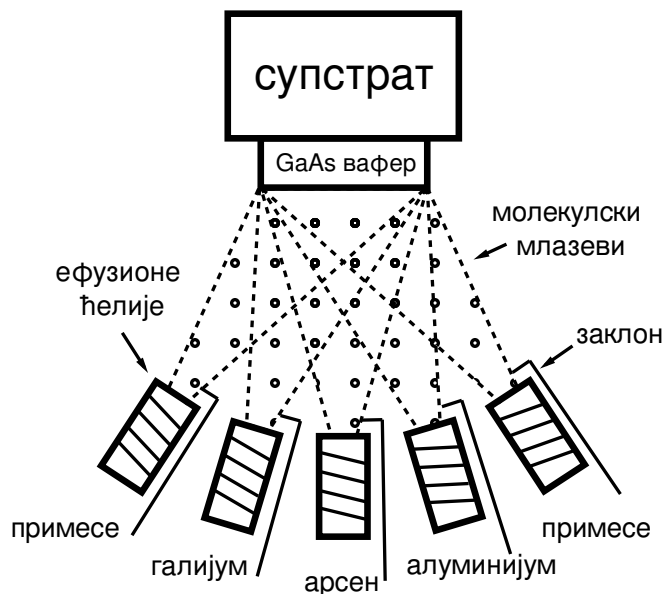
Процес израде THz ККЛ-а може се поделити на неколико основних технолошких целина. Најпре се епитаксијалним нарастањем формира сложена полупроводничка хетероструктура, чији распоред слојева, дебљине и састав одређују енергетску структуру и особине активне области. Након тога следи фабрикација, која обухвата даљу обраду израслог вејфера применом поступака као што су литографија, нагризање, метализација и формирање електричних контаката, како би се добио функционалан ласерски уређај. Посебан значај има избор и реализација одговарајуће таласоводне структуре, јер она одређује просторну расподелу и степен конфинирања електромагнетског поља у активној области, као и оптичке губитке и одвођење топлоте.

1.4.1 Нарастање и фабрикација THz ККЛ-а

Нанотехнологија је доживела огроман напредак захваљујући открићу епитаксије молекулским снопом (ЕМС) (енгл. Molecular Beam Epitaxy) [52], која је омогућила контролисани раст ултратанких слојева дебљине неколико атомских монослојева, односно реда нанометра. То је процес у коме, у условима веома високог вакуума, долази до напаравања, односно реакције термалних молекула (или атома) са монокристалном подлогом која је загрејана на температуру која омогућава епитаксијални раст [53]. Данас је ЕМС добро развијена и широко прихваћена технологија, нарочито за материјале Si и GaAs. Највећа предност ЕМС-а је спора брзина таложења (мања од 1000 nm/h), што уз високи вакуум омогућава добијање слојева прецизно контролисане дебљине са минималном количином нечистоћа.

THz ККЛ-и захтевају изузетно прецизан раст, а главни изазов у изради јесте постизање поновљивости чак и уз пажљиву калибрацију [54, 55]. Уопштено, дизајни са дужим периодима и већим бројем слојева имају мању поновљивост. Са већим димензијама чипа очекује се и боља температурска стабилност, али се истовремено повећава и ризик од појаве дефеката при расту.

Израда и раст слојева ККЛ-а је захтеван процес, али у најопштијем обухвата велики број осетљивих поступака који, поред раста ЕМС-ом, укључују фотолитографију, ецовање, жарење, депозицију, као и најсавременије методе калибрације и праћења процеса [56]. ЕМС се подешава према конкретном материјалном систему. Поред GaAs-а, THz ККЛ-и су реализовани и у системима на бази InGaAs-а са InAlAs, GaAsSb и AlInGaAs баријерама [37, 57], али ниједан од тих система не достиже квалитет и перформансе GaAs уређаја.



Слика 1.10. Поставка раста ЕМС-ом $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на супстрату од GaAs-а. Молекулски млаз (Al, Ga или As) генерише се из малих Кнудсенових ефузионих ћелија унутар којих се налазе коморе са одговарајућим материјалима који се загревају на температуре од око 1200 °C. Испред отвора сваке ефузионе ћелије налазе се механички закони који служе за временску контролу протока молекулског млаза из саме ћелије до супстрата.

На слици 1.10 је дат шематски приказ поставке раста ЕМС-ом $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на супстрату од GaAs-а. Молекулски млаз (Al, Ga или As) генерише се из малих Кнудсенових ефузионих ћелија унутар којих се налазе коморе са одговарајућим материјалима који се загревају на температуре око 1200 °C. Флуks молекула који из ефузионе ћелије стиже на супстрат зависи од површине отвора ћелије, температуре молекула, молекулске (атомске) тежине, и растојања између ћелије и подлоге [53]. Процес раста кристала састоји се од пријањања надошлих молекула на површину подлоге, и њиховог кретања по подлози и заузимања одговарајућих места. Испред отвора сваке ефузионе ћелије налазе се механички закони који служе за временску контролу протока молекулског млаза из саме ћелије до супстрата. Контролом температуре и брзине отварања поклопаца ефузионих ћелија, може се прецизно управљати растом кристала на подлози при

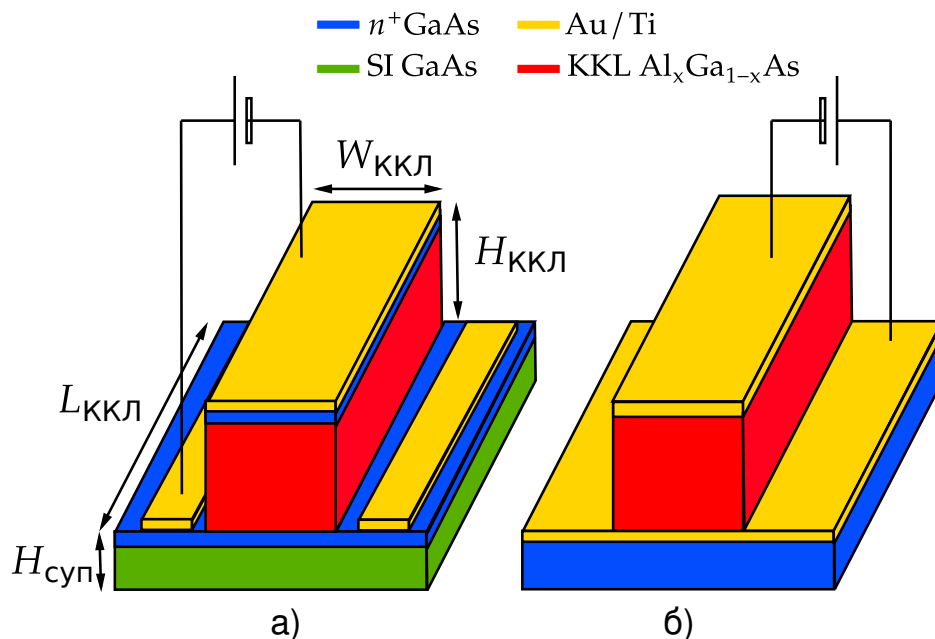
формирању слојевите структуре.

Приликом моделовања електронске структуре ККЛ-а, спојеви различитих материјала се апроксимирају оштрим прелазима који не одговарају реалним структурама. У процесу нарастања структуре, приликом преласка са слоја јаме на слој баријере, отвара се ефузиона ћелија из које на супстрат доспева флуks молекула додатног баријерног материјала (Al у случају GaAs/AlGaAs структура) неопходан за жељену композицију.

На високим температурама нарастања долази до дифузије додатног баријерног материјала из слојева баријере у слојеве јаме, што прелаз између јаме и баријере чини мање стрмим, при чему постоји просторна варијација молског удела у легури, што даље има утицаја и на електронску структуру, о чему ће бити више речи у поглављу 4.

1.4.2 Таласоводи THz ККЛ-а

Како би ласер функционисао, потребан је механизам оптичке повратне спреге који омогућава да генерисано зрачење пролази више пута кроз активни медијум ради ефикаснијег појачања. Како долази до јаке апсорпције THz зрачења од стране слободних носилаца [28] развијени су посебни таласоводи који користе плазмонске ефекте [58] у металима или јако допираним полупроводницима. За THz ККЛ-е развијена су два типа таласовода: полуизолаторски (енгл. semi insulating - SI) једноплазмонски (ЈП) (енгл. single plasmon) и метал-метал (ММ) таласовод [28], који се могу видети на слици 1.11.



Слика 1.11. а) ЈП таласовод и б) ММ таласовод. Димензије на слици нису пропорционалне. Стандардне димензије таласовода су: дебљина супстрата $\approx 200 \mu\text{m} - 300 \mu\text{m}$, дебљина таласовода $\approx 9 \mu\text{m} - 15 \mu\text{m}$, дужина таласовода $\approx 1 \text{ mm} - 4 \text{ mm}$, ширина таласовода $\approx 100 \mu\text{m} - 250 \mu\text{m}$.

У ЈП таласоводу активна зона је окружена са обе стране танким високодопираним слојевима полупроводника. Цела структура се налази на полуизолаторском GaAs супстрату и прекрива се са горње стране металним контактом. Оваква конфигурација омогућава формирање површинских плазмонских модова унутар допираних слојева. Горњи метални контакт спречава расипање светлости, док доњи допирани полупроводнички слој пропушта светлост кроз супстрат. Резултат је релативно мали фактор конфинирања мода ($\Gamma \approx 0.1 - 0.5$), који је дефинисан као део светлости затворен у активnoj зони, али су губици услед апсорпције THz зрачења од стране слободних носиоца минимизовани јер је преклапање са допираним слојевима ограничено.

Код ММ таласовода, уместо јако допираних полупроводничких слојева користе се метални контакти. Ово омогућава веома јако конфинирање светлости у активnoj зони ($\Gamma \approx 1$), али губици

услед слободних носилаца постају знатно већи него код ЈП таласовода. Додатна предност ММ таласовода је велика рефлектанса огледала ($R \approx 0.5 - 0.9$), што доводи до мањих губитака на огледалима. Укупно гледано, ММ таласоводи имају мање модалне губитке (укупни губици подељени са Γ) од ЈП таласовода.

Предности ЈП таласовода су одличан профил снопа и могућност постизања велике снаге, док су недостаци повећан праг струје (услед већих губитака) и јача термална дисипација која ограничава рад у CW режиму. Са друге стране, предности ММ таласовода су у малој термалној дисипацији и ниском прагу струје, али уз нешто слабији квалитет снопа и нижу излазну снагу.

1.5 Структура дисертације

Ова дисертација се бави нумеричким моделовањем и анализом THz ККЛ-а, са посебним нагласком на моделовање технолошких несавршености нарастања, развој унапређеног нумеричког метода за израчунавање електронске структуре и анализу ласерске динамике у присуству спољашње оптичке повратне спреге.

Поглавље 2 представља модел транспорта у оквиру једне периоде ККЛ-а, заснован на самосагласном поступку који комбинује Шредингер–Поасонову једначину са једначином кинетичког биланса и укључује све релевантне механизме расејања унутар једне периоде. Модел омогућава одређивање енергија подзона, таласних функција, популација подзона, Фермијеве енергије и електронске температуре и развијен је унутар групе Универзитета у Лидсу.

Поглавље 3 приказује модел матрице густине и његову примену на ККЛ-е за израчунавање транспортно-оптичких карактеристика, укључујући зависност густине струје и материјалног појачања од примењеног електричног поља, и развијен је унутар групе Универзитета у Лидсу.

Поглавље 4 се бави моделовањем утицаја технолошких несавршености процеса нарастања на транспортно-оптичке карактеристике THz ККЛ. У овом поглављу анализирани су ефекти позадинског допирања, интердифузије и флукуација дебљине слојева на три различита дизајна: ЛО фононски тројамни, ВТС и хибридни дизајн. Посебна пажња је посвећена ЛО фононском двојамном дизајну са рекордном температуром. Резултати показују њихову високу осетљивост и ограничену поновљивост процеса раста ККЛ-а, при чему у најосетљивијим структурама долази и до губитка функционалности. Резултати приказани у овом поглављу објављени су у ауторовом раду [59].

Поглавље 5 приказује унапређени трансфер матрични метод (dTMM) базиран на рачунању аналитичког првог извода трансфер матрица и проналажења његових нула, чиме задржава полуаналитичку и интуитивну природу класичног ТММ-а, али отклања његове нумеричке недостатке и омогућава постизање машинске прецизности. Метод је примењен на израчунавање електронске структуре ККЛ-а у различитим моделима ефективне масе, као и на анализу дисперзионих релација интерфејс оптичких фонона у хетероструктурама. Резултати приказани у овом поглављу објављени су у ауторовом раду [60].

Поглавље 6 бави се анализом динамике THz ККЛ-а са спољашњом оптичком повратном спрегом применом модела из литературе. Модел је у литератури дат у облику система диференцијалних једначина, које су у оквиру ове дисертације дискретизоване методом коначних разлика, а комплетна нумеричка имплементација развијена је најпре у MATLAB-у, а затим у C++. Модел је додатно модификован да укључује струјно-зависне параметре добијене из транспортних симулација конкретног уређаја, заснованих на моделу матрице густине, што омогућава реалистичније моделовање рада ККЛ-а у релевантном опсегу радних струја. Модел пружа основу за процену излазних спектралних карактеристика и идентификацију ККЛ-а који обезбеђују стабилан и интерпретабилан сигнал, погодан за примену у сензорици. По први пут, овај приступ је примењен на фабриковани THz ККЛ, конкретно на ВТС дизајн са емисијом на 2 THz. Резултати приказани у овом поглављу објављени су у ауторовом раду [61].

Поглавље 2

Шредингер–Поасонова једначина и механизми расејања

Транспорт носилаца у наноструктурама одређен је квантно-механичким ефектима. У овом поглављу је приказан прорачун електронске структуре у оквиру апроксимације споро променљивих анвелопних функција. Представљена је Шредингер–Поасонова једначина, заједно са дискусијом о одређивању својствених енергија и њихових таласних функција. Такође су размотрени механизми расејања који описују интеракцију носилаца са неуређеностима легуре, јонизованим примесима, интерфејсима хетероструктуре, акустичним и оптичким вибрацијама решетке (фононима), као и са другим носиоцима.

2.1 Шредингерова једначина

Решавањем Шредингерове једначине одређују се енергетски нивои (стања) у ККЛ-у. Иако електронска структура масивног полупроводника подразумева интеракцију великог броја честица у периодичној кристалној решетки, за опис електрона који пролазе кроз структуру користи се ефективна једноелектронска Шредингерова једначина. Ради избегавања сложеног експлицитног разматрања свих међучестичних интеракција, примењују се периодичност кристалне решетке, апроксимација споро променљивих анвелопних функција [62] и једноелектронска апроксимација [63]. Једноелектронска апроксимација подразумева да се квантно-механичка својства система одређују проучавањем кретања једног електрона у ефективном потенцијалу. Интеракције посматраног електрона са осталим електронима не занемарују се у потпуности, већ се њихов утицај апроксимира средњим пољем. На тај начин се сложени многочестични проблем своди на ефективни једноелектронски проблем, без експлицитног разматрања интеракције сваког пара електрона.

Хамилтонијан електрона у кристалној решетки састоји се од кинетичког оператора $\hat{T}$, периодичног атомског потенцијала $\hat{U}_a$ и споро променљивог ефективног потенцијала $\hat{U}$. Потенцијал $\hat{U}_a$ описује периодични потенцијал кристалне решетке, док $\hat{U}$ описује просторну промену ивице проводне зоне услед различитих материјала у слојевима хетероструктуре и примењеног електричног поља, као и утицај осталих електрона представљен Хартријевим чланом. Пошто Хамилтонијан нема експлицитну зависност од времена, систем се може описати временски независном Шредингеровом једначином. У апроксимацији споро променљивих анвелопних функција укупна таласна функција представља се као производ периодичног Блоховог дела и споро променљиве анвелопне функције. Утицај потенцијала $\hat{U}_a$ тада је садржан у параметрима зонске структуре, пре свега у енергији на дну проводне зоне и ефективној маси, док потенцијал $\hat{U}$ остаје експлицитно присутан у једначини за анвелопну функцију. Извођење ове апроксимације објашњено је у [62].

Шредингерова једначина са апроксимацијом споро променљивих анвелопних функција у полупроводнику са директним енергетским процепом је:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \nabla + U(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = (E - E_0) \Psi(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

где је E_0 енергија на дну проводне зоне (Гама тачка), кинетички оператор је написан у облику $\nabla \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \nabla$ како би се, на адекватан начин, узела у обзир просторна зависност ефективне масе услед слојева хетероструктуре од различитог материјала, а $\Psi(\mathbf{r})$ је анвелопна таласна функција.

У зависности од степена конфинирања носилаца у наноструктури, односно да ли се ради о квантним јамама (конфинирање у једној димензији), квантним жицама (конфинирање у две димензије) или квантним тачкама (конфинирање у три димензије), једначина (2.1) другачије изгледа. За систем квантних јама претпоставља се да је кретање електрона у xy равни слободно, односно $U_x = U_y = 0$, док је ограничење присутно само у правцу раста структуре $U_z = V(z)$. Таласна функција се може представити као производ равног таласа у xy равни и анвелопне функције $\psi(z)$ која зависи од координате z : $\Psi(\mathbf{r}) = A^{-\frac{1}{2}} \psi(z) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{\parallel}}$, где је A нормализациона константа која одговара површини слоја, а $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ таласни вектор у xy равни. Ефективна маса и потенцијал варирају искључиво у z -правцу. Ради једноставности, енергија на дну проводне зоне се може поставити на $E_0 = 0$, јер је увек могуће извршити избор координатног система за енергију. Онда Шредингерова једначина за систем квантних јама, коме одговара потенцијална енергија $V(z)$, добија облик:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + V(z) \right) \psi(z) = \left(E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(z)} \right) \psi(z). \quad (2.2)$$

Дисперзиона релација енергије облика $E_i(k) = E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(z)}$ назива се енергија подзоне. Она показује да код ККЛ-а, због смењивања слојева јама и баријера дуж једне димензије, долази до формирања дискретних енергетских нивоа E (минимуми енергије подзона), али истовремено оставља могућност континуалне дисперзије у равни таласног вектора k због чега су у питању подзоне, а не дискретна енергетска стања. Једначину (2.2) потребно је решавати за скуп континуалних вредности k , што није нумерички практично. Стандардан начин решавања је да се прво одреди минимум енергије подзоне E постављањем $k = 0$, након чега се утицај ненулног k посматра као корекција потенцијалне енергије $V(z)$ применом теорије пертурбација, и урачунава се кроз ефективну масу. Овакав приступ је оправдан јер је једна од апроксимација из које је изведена једначина (2.2) та да је таласни вектор близу Γ_c тачке Брилуенове зоне, што одговара малим вредностима k . У случају виших енергија у подзони дисперзиона релација садржи додатне чланове (више степене k) и тада говоримо о непараболичним дисперзионим релацијама подзона.

Најчешће коришћена непараболична апроксимација заснива се на двозонском Кејновом моделу, у којој се уводи енергетски зависна ефективна маса: $m^*(z, E) = m^*(z, 0) (1 + \alpha(E - V(z)))$. Параметар α једнак је реципрочной вредности енергетског процепа. Ефекти непараболичности утичу на вредности енергије минимума подзона, посебно код виших енергетских нивоа. У ККЛ-има од GaAs ова апроксимација је сасвим довољна, јер је енергетски процеп релативно широк (~ 1.42 eV), а посматрани нивои у проводној зони нису високи. Додатне корекције могу се увести директно у дисперзиону релацију применом вишезонског ($k \cdot p$) модела, који обично обухвата 6, 8, 14 или 26 зона. О овоме ће бити више речи у поглављу 5.

Свакако за стандардан начин решавања где се одређује минимум енергије i -те подзоне E_i постављањем $k = 0$, Шредингерова једначина добија облик:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z, E_i)} \frac{d}{dz} + V(z) \right) \psi_i(z) = E_i \psi_i(z), \quad (2.3)$$

где је $V(z)$ укупна потенцијална енергија $V(z) = V_c(z) - eKz - e\phi(z)$, која се састоји од офсета проводне зоне $V_c(z)$ који описује профил дна проводне зоне дуж правца нарастања ККЛ-а, електростатичке потенцијалне енергије услед интеракције електрона са примењеним спољашњим електричним пољем K дуж правца раста ККЛ-а z и електростатичке потенцијалне енергије интеракције електрона са другим електронима и јонима у ККЛ-у (Хартријев члан). Одавде видимо да је за решавање Шредингерове једначине потребно знати електростатичку потенцијалну енергију интеракције електрона са другим електронима.

2.2 Поасонова једначина

Како би се омогућио проток струје кроз полупроводнички материјал неопходно је допирати неке од слојева. Како су ККЛ-и униполарни уређаји за чији су рад потребни искључиво електрони, потребно је структуру допирати донорима. Допанти у полупроводничкој кристалној решетки делују као јонизоване нечистоће које обезбеђују слободне електроне. Електрично поље потиче од електрона и јонизованих допаната, и може се описати преко електростатичког потенцијала $\phi(z)$ Поасоновом једначином:

$$\frac{d}{dz} \left[\epsilon_r(z) \frac{d\phi(z)}{dz} \right] = -\frac{e}{\epsilon_0} (N_d^+(z) - n_e(z)), \quad (2.4)$$

где је $N_d^+(z)$ концентрација јонизованих донора, а $n_e(z)$ концентрација електрона. У случају да су сви донори јонизовани, $N_d^+(z) = N_D(z)$, где је $N_D(z)$ концентрација допирања, што је оправдана апроксимација на вишим температурама.

На нижим температурама, расподела јонизованих донора је:

$$N_d^+(z) = \frac{N_D(z)}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_F - E_D(z)}{k_B T}\right)}, \quad (2.5)$$

где је E_D енергетски ниво донора, а E_F Фермијев ниво.

Електрони се налазе у више подзона, које се добијају решавањем Шредингерове једначине, и електронима у свакој подзони у ККЛ-у одговара Ферми–Диракова расподела са сопственим квази-Фермијевим нивоом E_{QFi} (и ефективном температуром електрона), који је директно повезан са површинском густином електрона те подзоне, која одговара броју електрона по јединици површине у i -тој подзони:

$$N_{s,i} = \frac{m_{ti} k_B T_i}{\pi \hbar^2} \ln\left(1 + e^{\frac{E_{QFi} - E_i}{k_B T_i}}\right), \quad (2.6)$$

где је $m_{t,i}$ трансверзална маса која је описана интегралом дуж целе структуре

$$\frac{1}{m_{t,i}} = \int \psi_i^*(k_{\parallel} = 0) \frac{1}{m^*(z)} \psi_i(k_{\parallel} = 0) dz. \quad (2.7)$$

Површинске густине електрона појединачних подзона добијају се решавањем Шредингерове једначине у одговарајућој апроксимацији, након налажења Фермијевог нивоа. Концентрација електрона у i -тој подзони рачуна се као производ површинске густине електрона подзоне $N_{s,i}$ и вероватноће присуства на координати z , која је дата квадратом модула таласне функције $|\psi_i(z)|^2$. Док се укупна концентрација електрона добија као збир концентрација електрона у свим подзонама:

$$n_e(z) = \sum_i N_{s,i} |\psi_i(z)|^2. \quad (2.8)$$

За решавање једначине (2.4) потребне су вредности о $n_e(z)$ које се добијају решавањем једначине (2.3). Међутим за решавање ове једначине потребно је решити једначину (2.4), што доводи до система спрегнутих диференцијалних једначина који се уобичајено назива Шредингер–Поасонова једначина. Опште је прихваћено да се овакав систем једначина решава самосагласним поступком који почиње претпоставком за $n_e(z)$ и затим решава једначине (2.3) и (2.4) одвојено. Процедура се понавља све док се не постигне конвергенција.

Шредингер–Поасонова једначина може се нумерички решити методом коначних разлика (енгл. finite difference method - FDM), где се добија тридијагонални својствени проблем који се може директно решити Гаусовим методом елиминације (Томасов алгоритам [64]). Овај поступак је приказан у Додатку Б.

2.3 Фермијево златно правило

Теорија пертурбација је најчешћа техника за урачунавање различитих ефеката који нису садржани у Хамилтонијану система приликом решавања Шредингерове једначине, уз услов да су релевантни матрични елементи Хамилтонијана пертурбације довољно мали у односу на карактеристичне разлике енергија непетурбованог система. Временски независна Шредингерова једначина може се користити за описивање система чији Хамилтонијан нема експлицитну зависност од времена, јер се при извођењу ове једначине полази од временски зависне Шредингерове једначине и претпоставља да се таласна функција може написати као производ само просторно зависног и само временски зависног дела.

За временски зависни део таласне функције добија се $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$, док се просторни део таласне функције мора одредити решавањем временски независне Шредингерове једначине. Јасно је да, ако Хамилтонијан постане временски зависан, овакво раздвајање више није могуће.

Временски зависна теорија пертурбација примењује се када се Хамилтонијан система може написати као збир непетурбованог Хамилтонијана $\hat{H}_0$ и слабе временски зависне пертурбације $\hat{H}'(t)$. Ово омогућава одређивање промена амплитуда својствених стања непетурбованог система, а може се користити и за израчунавање вероватноћа прелаза које изазива $\hat{H}'(t)$. Први и други члан амплитуде прелаза из почетног стања ψ_i у крајње стање ψ_f , за $f \neq i$, једнаки су:

$$\begin{aligned} c_f^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H'_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}t'} dt', \\ c_f^{(2)}(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} H'_{fm}(t') H'_{mi}(t'') e^{i\omega_{fm}t' + i\omega_{mi}t''} dt'' dt', \end{aligned} \quad (2.9)$$

где је $\omega_{fi} = \hbar^{-1}(E_f - E_i)$, док су $H'_{fi}(t) = \langle \psi_f | \hat{H}'(t) | \psi_i \rangle$ матрични елементи пертурбације, у којима су садржане таласне функције одговарајућих стања. Квадрат модула амплитуде даје вероватноћу прелаза: $P_{i \rightarrow f}(t) = |c_f(t)|^2 = |\delta_{fi} + c_f^{(1)}(t) + c_f^{(2)}(t)|^2$

Први и други члан амплитуде прелаза, дати једначином (2.9), могу се користити за описивање различитих временски зависних пертурбација. Ако се претпостави да је допринос првог реда доминантан и да се разматра хармонијска компонента пертурбације облика $\hat{H}'(t) = \hat{V}'(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \theta(t)$, где је $\theta(t)$ степ-функција, за $t_0 = 0$ добија се:

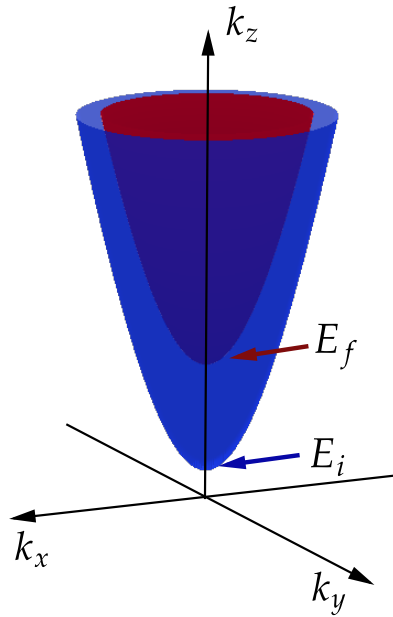
$$c_f^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} V'_{fi} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2} t\right)}{\frac{\omega_{fi} - \omega}{2}} e^{i\frac{\omega_{fi} - \omega}{2} t}. \quad (2.10)$$

где је $V'_{fi} = \langle \psi_f | \hat{V}' | \psi_i \rangle$ матрични елемент пертурбације између почетног и крајњег стања. Вероватноћа прелаза $i \rightarrow f$ дата је са $P_{i \rightarrow f}(t) \approx |c_f^{(1)}(t)|^2$.

Ако се стопа прелаза дефинише као $W_{i \rightarrow f} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{P_{i \rightarrow f}(t)}{t}$ и искористе се својства *sinc* функције у граничном случају, добија се Фермијево златно правило за стопу прелаза:

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V'_{fi}|^2 \delta(\omega_{fi} - \omega). \quad (2.11)$$

Прелаз се дешава између између стања f и i , свако од којих је дефинисано одговарајућим таласним вектором и енергијом. Дисперзионе релације ових стања су параболичне јер припадају одговарајућим подзонама, што је приказано на слици 2.1. Ове подзоне су континуалне у k простору, али како делта функција у једначини (2.11) зависи од енергетске разлике између стања f и i , она намеће услов и за таласне векторе стања између којих може доћи до прелаза. Поред тога, прелаз мора да испуни и закон одржања енергије, због чега се уводи модел кинетичког биланса, који захтева додатну итеративну процедуру у оквиру самосагласног решавања Шредингер–Поасонове једначина, што резултује такозваним само–самосагласним поступком.



Слика 2.1. Параболичне дисперзионе релације две енергетске подзоне између којих се дешава прелаз. Прелаз се може десити између два стања чији таласни вектори задовољавају услов задат делта функцијом у Фермијевом златном правилу.

Ако је пертурбациони потенцијал статичан (временски независан) облика $H' = V(\mathbf{r})\theta(t)$, што је чешћи случај него хармонијски, може се поставити $\omega = 0$ у једначини (2.11), чиме се добија Фермијево златно правило за статичне пертурбације

$$W_{if}(k_i) = \frac{2\pi m^*}{\hbar^3 |k_\alpha|} |V'_{fi}|^2 \delta(|k_f| \pm |k_\alpha|) \theta(k_f^2), \quad (2.12)$$

$$k_\alpha = \sqrt{k_i^2 - \frac{2m^* E_{fi}}{\hbar^2}},$$

где је степ функција $\theta(k_f^2)$ додата како би се обезбедило да финално стање припада финалној подзони [65]. У овом извођењу коришћена је параболична зависност енергетских подзона, идентична ефективна маса у подзонама i и f као и својства делта функције. Добијена је стопа прелаза електрона између стања f и i , међутим од интереса је просечна стопа прелаза између подзоне i и свих осталих подзона. Ово захтева да се једначина (2.12) сумира по различитим вредностима k_f , а пошто је таласни вектор континуалан сума се може заменити интегралом. На основу Паулијевог правила искључивања, прелаз се не може догодити уколико је циљно квантно стање већ попуњено, па се претходна стопа прелаза сада може редуковати W'_{if} , док се за просечну стопу прелаза $\bar{W}_{if}$ добија:

$$\begin{aligned}
W'_{if}(k_i) &= \frac{Am^*}{2\pi\hbar^3} \Theta((k_{\alpha^2})(1 - f_{\text{FD}}(E_{s,f}, T_e)) \int |V'_{fi}|^2 d\phi, \\
\bar{W}_{if} &= \frac{\int_0^\infty f_{\text{FD}}(E_{s,i}, T_e) W'_{if} k_i dk_i}{\pi N_{s,i}}, \\
f_{\text{FD}}(E, T_e) &= \left(e^{\frac{1}{k_B T_e} (E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - E_F)} + 1 \right)^{-1},
\end{aligned} \tag{2.13}$$

где је A површина, а ϕ угао (обе величине настају приликом преласка са суме на интеграл када се користи поларни координатни систем), k_B је Болцманова константа, E_F Фермијев ниво, T_e температура електрона, $N_{s,i}$ површинска густина стања подзоне i , а E_i и E_f параболичне енергије подзона за стања i и f , респективно. Ферми–Диракова расподела $f_{\text{FD}}(E, T_e)$ даје вероватноће заузетости подзоне E . Због делта функције у изразу (2.12) наметнуто је $k_f = k_\alpha$, а детаљно извођење се може наћи у [65]. Интеграција $\bar{W}_{if}$ се обично врши са коначним границама, пошто се може апроксимирати да се 99% популације подзоне налази испод $4.6 k_B T_e$. Због тога што се Фермијев ниво E_F не може дефинисати у систему који није у равнотежи, као што је ККЛ, свака подзона има свој квази-Фермијев ниво и електронску температуру, због чега је потребно применити модел кинетичког биланса.

Применом једначине (2.11) могу се одвојено описати разне еластичне и нееластичне пертурбације које доводе до прелаза између подзона у ККЛ-има. Све ове прелазе називамо расејања и потребно их је све урачунати приликом моделовања транспорта ККЛ-а.

2.4 Расејање услед неуређености легуре

Било која полупроводничка хетероструктура нарушава кристалну решетку материјала од којих се састоји. Како би хетероструктура била стабилна неопходно је да материјали буду добро усклађени по величини и типу кристалне решетке. Због овога се ККЛ-и праве од парова добро изабраних материјала који се могу комбиновати. Ако постоји одређено неподударење величине кристалне решетке коришћених материјала долази до појаве механичког напрезања саме структуре. У ККЛ-има се најчешће користи GaAs за израду слојева квантне јаме, док се за слојеве баријере користи легура $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, добијена комбинацијом GaAs и AlAs где x означава удео алуминијума у легури. Димензија решетке легуре $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ остаје иста као и код GaAs-а за било коју вредност x , али се генерално не користе удео већи од $x = 0.45$, јер је до те вредности енергетски процеп AlGaAs-а директан, што је неопходно за рад ласера.

Како у хетероструктури долази до нарушавања структуре кристалне решетке материјала, мења се и атомски потенцијал који више није савршено периодичан. Због стохастичког присуства атома Al у кристалној решетки долази до расејања на овим атомима који представљају врсту неуређености легуре, и овај ефекат се може третирати у оквиру теорије пертурбација

Расејање услед неуређености легуре (енгл. alloy disorder scattering - ADS) описује се увођењем виртуелног атома GaAl чији је атомски потенцијал дат као $V_{\text{GaAl}} = x(z)V_{\text{Al}}(\mathbf{r}_{\parallel}) + (1 - x(z))V_{\text{Ga}}(\mathbf{r}_{\parallel})$. Виртуелни атомски потенцијал кристалне решетке се затим добија сумирањем преко целе решетке. Пертурбациони потенцијал је онда разлика између стварног и виртуелног атомског потенцијала кристалне решетке и, како је та разлика мала, може се апроксимирати као $V_{\text{diff}} \approx \frac{a^3}{8} V_{\text{ad}} \delta(\mathbf{r}_{\parallel})$, где је a димензиони параметар кристалне решетке материјала квантне јаме (GaAs), а V_{ad} је константан потенцијал расејања услед неуређености легуре [66], за који се узима да је једнак енергетском офсету између материјала баријере и јаме. Како је V_{diff} пертурбација на нивоу атома, њени матрични елементи морају укључити пуну таласну функцију, која садржи и брзо променљиву Блохову компоненту и споро променљиву анвелопу. Средња квадратна вредност елемента V_{fi} дата је у [65]:

$$|V'_{fi\text{ADS}}|^2 = \frac{a^3 V_{\text{ad}}^2}{8A} \int |\psi_f|^2 |\psi_i|^2 x(z) (1 - x(z)) dz. \quad (2.14)$$

Коришћењем овог матричног елемента и једначине (2.13), добија се редукована стопа расејања услед неуређености легуре:

$$W'_{if}(k_i) = \frac{m^* a^3}{8\hbar^3} \Theta(k_\alpha^2) (1 - f_{\text{FD}}(E_{s,f}, T_e)) V_{\text{ad}}^2 \int |\psi_f|^2 |\psi_i|^2 x(z) (1 - x(z)) dz. \quad (2.15)$$

Како матрични елемент $|V'_{fi\text{ADS}}|$ не зависи од таласног вектора, рачунање просечне стопе расејања услед неуређености легуре није захтевно. У једначини (2.15) интеграл се по целој дужини структуре. Како је у слојевима јаме $x = 0$, интеграл се може рачунати само преко слојева баријера, а пошто је x константан у слојевима баријера, расејање услед неуређености легуре настаје искључиво као последица преклапања таласних функција, до чега углавном долази у танким баријерним слојевима.

2.5 Расејање услед јонизованих примеса

Услед допирања долази до уградње атома допаната у кристалну решетку полупроводника, чиме се стварају дефекти, односно примесе у кристалној структури. ККЛ-и се допирају атомима донора који отпуштају електрон и остају позитивно наелектрисани јони који интерагују Кулоновом силом са слободним електронима. Овако настаје расејање услед јонизованих примеса (енгл. ionised impurity scattering - IMP) које се описује као пертурбација следећим Хамилтонијаном пертурбације:

$$V'^{\text{IMP}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}, \quad (2.16)$$

где је $\mathbf{r}_0$ координата примесе.

Коришћењем чињенице да у ККЛ-има постоји конфинурање дуж само једне димензије (z) може се упростити рачунање матричних елемената ове пертурбације. Укупна таласна функција има облик $\psi_{3\text{D},i} = A^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \psi_i$, па се квадрат матричних елемената пертурбационог потенцијала V'^{IMP} може свести на облик:

$$\begin{aligned} |V'_{fi\text{IMP}}|^2 &= \left(\frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_r q} \right)^2 J_{fi}, \\ J_{fi} &= \int l_0 |I_{fi}|^2 dz_0, \\ I_{fi} &= \int \psi_f^* e^{-q|z-z_0|} \psi_i dz, \end{aligned} \quad (2.17)$$

где је $\mathbf{q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ таласни вектор расејања.

Пертурбација настала услед једне јонизоване примесе описује се преко величине $|I_{fi}|^2$, док се увођењем J_{fi} интеграцијом израза за $|I_{fi}|^2$ узимају у обзир све примесе на танком слоју $l_0(z_0) dz_0$ дуж координате z_0 . Детаљно извођење овога дато је у [65].

Увршћивањем једначина (2.17) једначину (2.13), добија се редукована стопа расејања услед јонизованих примеса:

$$W'_{if}(k_i) = \frac{m^* e^4}{4\pi\hbar^3 \epsilon_0^2 \epsilon_r^2} \Theta(k_\alpha^2) (1 - f_{\text{FD}}(E_{s,f}, T_e)) \int_0^\pi \frac{J_{fi}}{(q_\alpha + q_{\text{TF}})^2} d\phi, \quad (2.18)$$

где је $q_{\text{TF}} = \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r\hbar^2}$ Томас–Фермијева инверзна дужина расејања, која је уведена како би модел урачунао ефекат екранирања, то јест, ефективно слабљење интеракције јона и просторно далеких електрона услед присуства просторно блиских електрона око тог јона.

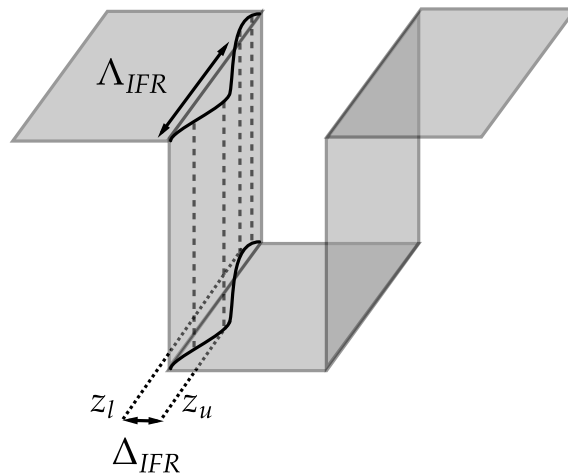
Ова корекција таласног вектора расејања q мора се додати и у I_{fi} и у J_{fi} . Како матрични елементи I_{fi} зависе од модула $|z - z_0|$, рачунање овог интеграла се може поједноставити како би се избегло непотребно рачунање:

$$\begin{aligned} I_{fi} &= e^{-q_\alpha z_0} C_{fi}^- + e^{q_\alpha z_0} C_{fi}^+, \\ C_{fi}^- &= \int_{-\infty}^{z_0} \psi_f^* e^{q_\alpha z} \psi_i dz, \\ C_{fi}^+ &= \int_{z_0}^{\infty} \psi_f^* e^{-q_\alpha z} \psi_i dz. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Како расејање услед јонизованих примеса у највећој мери зависи од преклапања таласних функција на месту допирања, могуће је оптимизовати локацију допирања у ККЛ-у. Овиме се може повећати стопа расејања услед јонизованих примеса у слојевима где је то пожељно, као и обезбедити да оно буде минимално у слојевима у којима се дешава оптички прелаз, због његовог штетног утицаја на ширину оптичке линије [67, 68].

2.6 Расејање услед неравнина интерфејса

У ККЛ-има је кретање електрона конфинирано само у једном правцу z , односно у правцу нарастања слојева јама и баријера. Углавном се зависност проводне зоне показује само у овој димензији, док у реалним направама ова зависност постоји и у остала два правца, додуше, у доста мањој мери. Стварни тродимензионални облик проводне зоне приказан је на слици 2.2. Укупна висина THz ККЛ-а је око 12 μm , његова ширина је 10–20 пута већа, а дужина 100–200 пута већа, што је приказано на слици 1.11, али не у пропорцији. Другим речима, ККЛ-и су доста веће димензије у равни интерфејса него дуж правца нарастања. Ови интерфејси између слојева јама и баријера нису потпуно равни, јер састав материјала варира, што производи расејање услед неравнина интерфејса (енгл. interface roughness scattering - IFR).



Слика 2.2. Неравнине на интерфејсима слојева јама и баријера доводе до пертурбације у потенцијалу проводне зоне и расејања електрона. Ове неравнине се описују средњом квадратном висином корелације Δ_{IFR} , и корелационом дужином Λ_{IFR} .

Локације ових неправилности, то јест неравнина, су насумичне и њихова величина се може моделовати Гаусовом расподелом тако да Фуријеова трансформација ових неправилности $\Delta_z(\mathbf{r})$ описује Гаусову расподелу. Средња квадратна висина ове расподеле, која описују карактеристичну величину неправилности интерфејса, је Δ_{IFR} , док је њена корелациона дужина, која представља карактеристичну удаљеност на којој су неправилности у корелацији, једнака Λ_{IFR} . За ове величине у две тачке $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_0$ важи $\langle \Delta_z(\mathbf{r})\Delta_z(\mathbf{r}_0) \rangle = \Delta_{\text{IFR}}^2 e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{\Lambda_{\text{IFR}}}}$. Пертурбациони потенцијал у близини интерфејса I је дат као:

$$V_I'^{\text{IFR}} = -\Delta_z(\mathbf{r}) \frac{dV}{dz} \text{rect} \left(\frac{z - z_I}{z_u - z_l} \right). \quad (2.20)$$

До одступања потенцијала проводне зоне око тачке z_I долази унутар правоугаоника координата од z_l до z_u . За коначни облик матричних елемената, што је приказано у [65], добија се:

$$|V_{Ifi}'|^2 = \frac{|F_{Ifi}\Delta_{\text{IFR}}\Lambda_{\text{IFR}}|^2 \pi}{A} e^{-\frac{q^2 \Lambda_{\text{IFR}}^2}{4}}, \quad (2.21)$$

$$F_{Ifi} = \int_{z_l}^{z_u} \psi_f^* \frac{dV}{dz} \psi_i dz,$$

где је $\mathbf{q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ таласни вектор расејања.

За редуковану стопу расејања на интерфејсу I се на основу једначина (2.13)) добија:

$$W_{If}'(k_i) = \frac{m|F_{Ifi}|^2 \Delta_{\text{IFR}}^2 \Lambda_{\text{IFR}}^2}{\hbar^3} \Theta(k_\alpha^2) (1 - f_{\text{FD}}(E_{s,f}, T_e)) \int_0^\pi e^{-\frac{q_\alpha^2 \Lambda_{\text{IFR}}^2}{4}} d\phi. \quad (2.22)$$

Интеграл у једначини (2.22) може се решити коришћењем идентитета $\int_0^\pi e^{a \cos \phi} d\phi = \pi I_0(a)$, где је I_0 обична модификована цилиндрична Беселова функција нултог реда. Како би се добила укупна стопа расејања која урачунава све интерфејсе, потребно је сумирати по свим интерфејсима:

$$W_{If}'(k_i) = \frac{\pi m \Delta_{\text{IFR}}^2 \Lambda_{\text{IFR}}^2}{\hbar^3} \beta(k_i) \sum_I |F_{Ifi}|^2, \quad (2.23)$$

$$\beta(k_i) = e^{-\frac{(k_i^2 + k_\alpha^2) \Lambda_{\text{IFR}}^2}{4}} I_0 \left(\frac{k_i k_\alpha \Lambda_{\text{IFR}}^2}{2} \right) \Theta(k_\alpha^2) (1 - f_{\text{FD}}(E_{s,f}, T_e)).$$

Матрични елементи F_{Ifi} у једначини (2.21) дозвољавају произвољан облик зависности потенцијалне енергије дна проводне зоне на интерфејсу дуж правца нарастања. У случају да је промена проводне зоне на интерфејсима моделована степ функцијом, извод постаје делта функција и добија се $F_{Ifi} \approx V_{\text{lb}} \psi_f^*(z_i) \psi_i(z_i)$, где је V_{lb} висина баријере. Расејање услед неравнина интерфејса углавном зависи од преклапања таласних функција на интерфејсима и од висине баријере. Овај механизам је значајнији у структурама са вишим баријерама и већим бројем интерфејса.

Вредности корелационе дужине и средње квадратне висине неправилности нису генерално познате, али су неке стандардне вредности за корелациону дужину Λ_{IFR} у интервалу 20–120 Å, а за средњу квадратну висину корелације Δ_{IFR} у интервалу 0.1–3 Å. Зависност густине струје и материјалног појачања у ККЛ-има углавном је линеарна са Δ_{IFR} и Λ_{IFR} , при чему је већа осетљивост на промену Δ_{IFR} [51].

2.7 Расејање услед лонгитудиналних оптичких фонона

Пошто примитивна ћелија GaAs садржи два атома, фононска дисперзиона релација има шест грана: три акустичне – једну лонгитудиналну и две трансверзалне – и три оптичке – једну лонгитудиналну и две трансверзалне. У дуготаласној граници два атома у примитивној ћелији осцилују приближно у истој фази код акустичних, а у супротној фази код оптичких модова. До сада описани механизми расејања, то јест, расејање услед неуређености легуре, јонизованих примеса и неравнина интерфејса су сви били еластични, што значи да током расејања не долази до губитка енергије. За разлику од њих, расејање услед лонгитудиналних оптичких фонона је нееластичан механизам расејања у коме електрон делимично губи своју енергију, предајући је кристалу, или пак добија енергију од њега. Ово расејање је заправо интеракција електрона са кристалном решетком, а описује се увођењем квазичестице фонона. Кристална решетка се описује као хармонијски осцилатор чије су вибрације квантоване, а њихово постојање описује се увођењем фонона. Ове вибрације изазивају периодичне пертурбације и напрезање кристалне решетке, што доводи до пертурбације потенцијалне енергије проводне зоне. За моделовање хармонијског осцилатора користи се уобичајени формализам друге квантизације [62]:

$$\begin{aligned}\frac{\hat{p}_q^2}{2m} + \frac{m\omega_q^2 \hat{u}_q^2}{2} &= \hbar\omega_q(\hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2}), \\ \hat{a}_q &= \sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}} \hat{u}_q + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_q}} \hat{p}_q, \\ \hat{u}_q &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_q}} (\hat{a}_q + \hat{a}_q^\dagger),\end{aligned}\tag{2.24}$$

где је $\mathbf{q}$ таласни вектор фонона, $\hat{u}_q$ и $\hat{p}_q$ су хермитски оператори помераја (разлике положаја) и импулса на угаоној учестаности ω_q , респективно. Укупни вектор помераја добија се као сума свих u_q за све могуће поларизационе модове j :

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = N_{\text{cell}}^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_j \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_q}} \mathbf{e}_{\mathbf{q},j} (\hat{a}_{\mathbf{q},j} + \hat{a}_{\mathbf{q},j}^\dagger) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}},\tag{2.25}$$

где је N_{cell} број елементарних ћелија кристала, а $\mathbf{e}_{\mathbf{q},j}$ јединични вектор поларизације. Хамилтонијан интеракције (познат као Фрелихова интеракција) је просторни извод поларизације и има облик [62, 65, 69]:

$$\begin{aligned}V^{\text{ph}} &= \sum_{\mathbf{q}} \frac{C}{q} (\hat{a}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}), \\ C &= -i\sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}^2}{V_c}} \left(\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right),\end{aligned}\tag{2.26}$$

где је ω_{LO} фреквенција лонгитудиналног оптичког фонона, $\epsilon(\infty)$ диелектрична константа при ω_{LO} , а V_c запремина кристала. Таласни вектор овог расејања $\mathbf{q}$ има компоненте у све три димензије. За одређивање матричних елемената V^{ph} мора се користити пуна таласна функција ψ_{3D} која садржи и брзо променљиви Блохов део, као и споро променљиви анвелопни део. Коришћењем једначине (2.13) добија се редукована стопа расејања:

$$\begin{aligned}
W'_{if} &= \frac{\Upsilon}{2} (1 - f_{\text{FD}}(E_{s,f}, T_e)) \Theta(k_i^2 - \frac{2m^* \Delta_E}{\hbar^2}) \int \frac{\pi |G_{fi}(q_z)|^2}{\sqrt{q_z^4 + 2q_z^2(2k_i^2 - \frac{2m^* \Delta_E}{\hbar^2}) + (\frac{2m^* \Delta_E}{\hbar^2})^2}} dk_z, \\
G_{fi} &= \int \psi_f^* e^{-iq_z z} \psi_i dz, \\
\Upsilon &= \frac{2m^* e^2 \omega_{\text{LO}}}{\hbar^2} P', \\
P' &= \left(\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right) \left(N_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right), \\
N_0 &= \left(e^{\frac{\hbar \omega_{\text{LO}}}{k_B T}} - 1 \right)^{-1},
\end{aligned} \tag{2.27}$$

где се фактор $\Delta_E = E_f - E_i \pm \hbar \omega_{\text{LO}}$ узима са $-\hbar \omega_{\text{LO}}$ у случају апсорпције фонона, а са $+\hbar \omega_{\text{LO}}$ у случају емисије фонона. Број фонона N_0 описује се температурно-зависном Бозе–Ајнштајновом расподелом. Слично као код расејања услед јонизованих примеса, на вибрације решетке утиче присуство електрона, па је неопходно увести ефекат екранирања електрона преко дужине екранирања Λ_s . Ова корекција модификује z -компоненту таласног вектора фонона у облику $q_z^2 \rightarrow q_z^2 \left(1 + \frac{\Lambda_s^2}{q_z^2} \right)^2$. Уобичајени приступи за моделовање овог ефекта су Дебајева и Паркова метода [69]:

$$\begin{aligned}
\Lambda_s^{\text{Debye}} &= \sqrt{\frac{\epsilon k_B T}{e^2 N_D}}, \\
\Lambda_s^{\text{Park}} &= \frac{e^2}{\pi \hbar^2 \epsilon(0)} \sum_i \frac{\sqrt{2m^* E_i} m^* f^{\text{FD}}(E_i)}{\pi \hbar}.
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Механизам расејања услед ЛО фонона је кључан процес за функционисање THz ККЛ-а. Енергија ЛО фонона $\hbar \omega_{\text{LO}}$ у GaAs износи приближно 36 meV и управо она представља једно од главних ограничења за рад THz ККЛ-а од GaAs на повишеним температурама. Стопа расејања из једначине (2.27) у великој мери зависе од енергетског размака између нивоа и њихове попуњености преко члана Δ_E . Такође зависе од температуре преко Бозе–Ајнштајнове расподеле фонона и преко дужине екранирања.

2.8 Расејање услед лонгитудиналних акустичних фонона

Расејање електрона услед акустичних фонона може се одвијати посредством два механизма: пиезоелектричног спрезања и деформационог потенцијала.

Пиезоелектрични механизам је по облику сличан расејању услед ЛО фонона, јер интеракција потиче од електричног поља изазваног поларизацијом кристалне решетке. Хамилтонијан пиезоелектричне интеракције има исти облик као у једначини (2.26), при чему је разлика у константи спрезања C . Код акустичних фонона поларизација настаје услед деформације кристалне решетке, а у дуготаласној апроксимацији важи $\omega_q = qv_s$. Због тога константа спрезања C садржи фактор q , који се скрађује са q у имениоцу у једначини (2.26). У прорачуну коришћеном у овом раду пиезоелектрични допринос је занемарен као мањи, док је задржано расејање услед лонгитудиналних акустичних (ЛА) фонона посредством деформационог потенцијала.

Код механизма деформационог потенцијала користи се дуготаласна апроксимација, у којој суседни атоми осцилују приближно у истој фази и са истом амплитудом U_0 . Просечна укупна енергија ових осцилација је $\rho_m V_c U_0^2 \omega_q^2 / 2$, где је ρ_m густина материјала. Изједначавањем ове

енергије са квантованом енергијом фонона добија се амплитуда U_0 [65, 69]. Померање атома може се записати као $u(z) = U_0 e^{i(q_z z - \omega_q t)}$, а линеарном везом између промене енергије проводне зоне и релативног истезања добија се $V' = D_{ac} \frac{\partial u}{\partial z}$, где је D_{ac} деформациони потенцијал. На тај начин добија се пертурбациони потенцијал у облику:

$$V'_{ac} = i D_{ac} q_z \sqrt{\frac{2\hbar}{\rho_m V_c \omega_q}} e^{i q_z z - i \omega_q t}. \quad (2.29)$$

Коришћењем овог пертурбационог потенцијала и једначине (2.13) добија се редукована стопа расејања, што је детаљно приказано у [69].

$$\begin{aligned} W'_{if} &= \frac{D_{ac}^2 m^*}{\rho_m v_s \hbar^2} (1 - f_{FD}(E_{s,f}, T_e)) \left(N_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \\ &\times \int_0^\infty \int_0^{2\pi} |G_{fi}(q_z)|^2 \frac{\alpha_1 \sqrt{\alpha_1^2 + q_z^2} \Theta(\alpha_1) + \alpha_2 \sqrt{\alpha_2^2 + q_z^2} \Theta(\alpha_2)}{\alpha_1 - \alpha_2} d\phi dq_z, \\ \alpha_{1,2} &= -k_i \cos \phi \pm \sqrt{k_i^2 \cos^2 \phi - \frac{2m^*(E_f - E_i)}{\hbar^2}}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Расејање услед акустичних фонона преко деформационог потенцијала спорије је од расејања услед лонгитудиналних оптичких фонона. Његов утицај је, генерално, занемарљив у THz ККЛ-има у поређењу са расејањем услед ЛО фонона.

2.9 Расејање услед електрон–електрон интеракције

Расејање услед електрон–електрон интеракције узима у обзир многочестичне ефекте електрона у енергетским подзонама. Хамилтонијан интеракције има исти облик као у једначини (2.16) код расејања услед јонизованих примеса, али је овде $\mathbf{r}_0$ координата другог електрона. Како у овој интеракцији учествују два електрона, сваки од којих има почетно и крајње стање (таласну функцију), за опис интеракције је потребно разматрати четири једночестична електронска стања (прелаз из двочестичног стања $|i, j\rangle$ у двочестично стање $|f, g\rangle$). Такође је потребно разликовати прелазе између подзона од прелазу унутар подзоне приликом процеса расејања. Иако је сам облик Хамилтонијана релативно једноставан, примена Фермијевог златног правила (једначина (2.11)) доводи до појаве квадруполног интеграла у матричном елементу $V'_{f,g,i,j}^{ee}$. Такође делта функција мора да задовољи четири услова одржања енергије, а не два, као код осталих механизма расејања.

Детаљно извођење се може наћи у [65, 69]. Стопа расејања за прелаз $|i, j\rangle \rightarrow |f, g\rangle$ дата је следећим изразом:

$$\begin{aligned} W_{i,j,f,g} &= \frac{m^* e^4}{8\hbar^3 \epsilon_0^2 \epsilon_r^2} \int \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{|A_{f,g,i,j}|^2}{q_{xy}^2} P_j(\mathbf{k}_j) d\theta d\alpha k_j dk_j, \\ A_{f,g,i,j} &= \int \int \psi_f^*(z') \psi_g^*(z') e^{-q_{xy}|z-z'|} \psi_i(z) \psi_j(z) dz' dz, \\ 4q_{xy}^2 &= 2k_{ij}^2 + \delta k_0^2 - 2k_{ij} \sqrt{k_{ij}^2 + \delta k_0^2} \cos \theta, \\ k_{ij} &= k_i^2 + k_j^2 - 2k_i k_j \cos \alpha, \end{aligned} \quad (2.31)$$

где је $P_j(\mathbf{k}_j) = f_{FD}(E_{s,j}, T)$ Ферми–Диракова расподела.

Потребно је урачунати екранирање електрона приликом рачунања редуковане стопе прела-

за. Ово се може урадити модификацијом диелектричне константе у облику $\epsilon_0\epsilon_r \rightarrow \epsilon_0\epsilon_r\epsilon_{sc}$, где је ефекат екранирања дат као у [70]:

$$\begin{aligned}\epsilon_{sc} &= 1 + \frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_r q_{xy}} \Pi_{ii}(q_{xy}, T) A_{i,i,i,i}, \\ \Pi_{ii} &= \int_0^\infty \frac{\Pi_{ii}(q_{xy}, T=0)}{4k_B T \cosh^2\left(\frac{E_F - E}{2k_B T}\right)}, \\ \Pi_{ii}(q_{xy}, T=0) &= \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \left(1 - \Theta(q_{xy} - 2\sqrt{2\pi N_i}) \sqrt{1 - \frac{8\pi N_i}{q_{xy}^2}}\right).\end{aligned}\quad (2.32)$$

Рачунање расејања услед електрон–електрон интеракције је нумерички изузетно захтевно, јер је за N стања потребно извршити N^4 рачунских операција, док сва остала расејања имају сложеност N^2 . Такође, доводи се у питање физичка ваљаност овако рачунатог расејања, јер је приликом извођења претпостављено да је укупно квантно стање дато као производ два једночестична стања без икаквих корелационих ефеката. Резултати показују да међуподзонско расејање термализује подзоне слично као и други еластични процеси (не значајно), док унутарподзонско расејање има доста значајнији ефекат.

2.10 Једначина кинетичког биланса

Хамилтонијани свих до сада разматраних механизма расејања имају класично тумачење, док је квантна природа транспорта урачуната једино преко Фермијевог златног правила, па се зато ови модели сматрају полукласичним. Фермијево златно правило садржи делта функцију која намеће услов за енергију због дискретности енергетских нивоа, али се расејања могу тумачити као судари у класичном смислу, па је неопходно увести и закон одржања енергије. Расподела електрона у свакој подзони се описује Ферми–Дираковом расподелом, али како ласер ради у неравнотежним условима услед деловања спољашњег напона, потребно је увести сопствену Ферми–Диракову расподелу, са својом ефективном температуром електрона и квази–Фермијевим нивоом у свакој подзони, и да се за меру средње кинетичке енергије сваке подзоне користи температура електрона у тој подзони.

Приликом расејања $i \rightarrow f$, подзона f се загрева и добија додатну кинетичку енергију, док подзона i исту ту енергију губи. Поред тога, ако је процес расејања нееластичан, долази до додатне промене кинетичке енергије. Разлика између кинетичке енергије подзоне f , E_k^f , и кинетичке енергије подзоне i , E_k^i , износи:

$$\Delta E_k = E_k^f - E_k^i = E_i - E_f + \delta E, \quad (2.33)$$

где $\delta E = \pm E_{LO}$ за апсорпцију/емисију фонона, а $\delta E = 0$ за еластична расејања.

Свакој подзони i одговара популација n_{e_i} и просечна стопа расејања $\bar{W}_{if}$ за различите механизме расејања. Пренос кинетичке енергије између подзона i и f може се описати увођењем брзине преноса кинетичке енергије w_{if}^+ и w_{if}^- које представљају редом, брзину раста кинетичке енергије подзоне f и брзину смањења кинетичке енергије подзоне i . Ове брзине су нормализоване Ферми–Дираковом расподелом:

$$\begin{aligned}w_{if}^+ &= \frac{\int E_k^f \bar{W}_{if} f_{FD}(E_{QF}^i, T_i) (1 - f_{FD}(E_{QF}^f, T_f)) dE_k^i}{\int f_{FD}(E_{QF}^i, T_i) dE_k^i} \\ w_{if}^- &= \frac{\int E_k^i \bar{W}_{if} f_{FD}(E_{QF}^i, T_i) (1 - f_{FD}(E_{QF}^f, T_f)) dE_k^i}{\int f_{FD}(E_{QF}^i, T_i) dE_k^i}\end{aligned}\quad (2.34)$$

где је E_{QF}^i квази–Фермијев ниво подзоне i . Коришћењем једначине (2.33) добија се $w_{if}^+ = \Delta E_k \bar{W}_{if} + w_{if}^-$. У случају унутарподзонских расејања важи $w_{ii}^+ = w_{ii}^-$, што је посебно значајно код расејања услед електрон–електрон интеракције [62]. Једначина резултујућег преноса кинетичке енергије се дефинише као:

$$\frac{d\epsilon_k}{dt} = \sum_i n_{e_i} w_{if}^+ - n_{e_f} w_{fi}^- \quad (2.35)$$

У стационарном стању једначина (2.35) је једнака нули, и ако се примени апроксимација најближих суседа, где се узимају у обзир само расејања између две суседне подзоне, добија се систем од $2N$ нелинеарних једначина у којима фигурише N електронских температура подзона и N концентрација електрона у подзонама, где је N број подзона у једној периоди ККЛ-а. Како би се израчунале брзине промене кинетичке енергије које фигуришу у једначини (2.34) и просечне стопе расејања у једначини (2.13) неопходно је познавати енергије квази–Фермијевих нивоа и температура подзона T_i , што чини једначину (2.35) нумерички и математички веома сложен, јер се мора решавати заједно са Шредингер–Поасоновом једначином.

Прихваћена апроксимација која олакшава овај поступак је апроксимација о еквитермалним подзонама која претпоставља да све подзоне имају исту електронску температуру T_e која задовољава једначину (2.35) [71]. Ова апроксимација није у потпуности физички оправдана јер је за функционисање ККЛ-а неопходна инверзна популација између ГЛН и ДЛН, што значи да ДЛН (и ИЛН) прима више кинетичке енергије од осталих нивоа. Додуше, ова апроксимација се може интерпретирати као увођење ефективне електронске температуре свих подзона, слично као што је уведена ефективно електрично поље дуж целе структуре како би се избегао проблем локалних домена електричног поља.

Поједностављење једначине (2.35) дато у [62, 72] доводи до једначине кинетичког биланса [69, 73]:

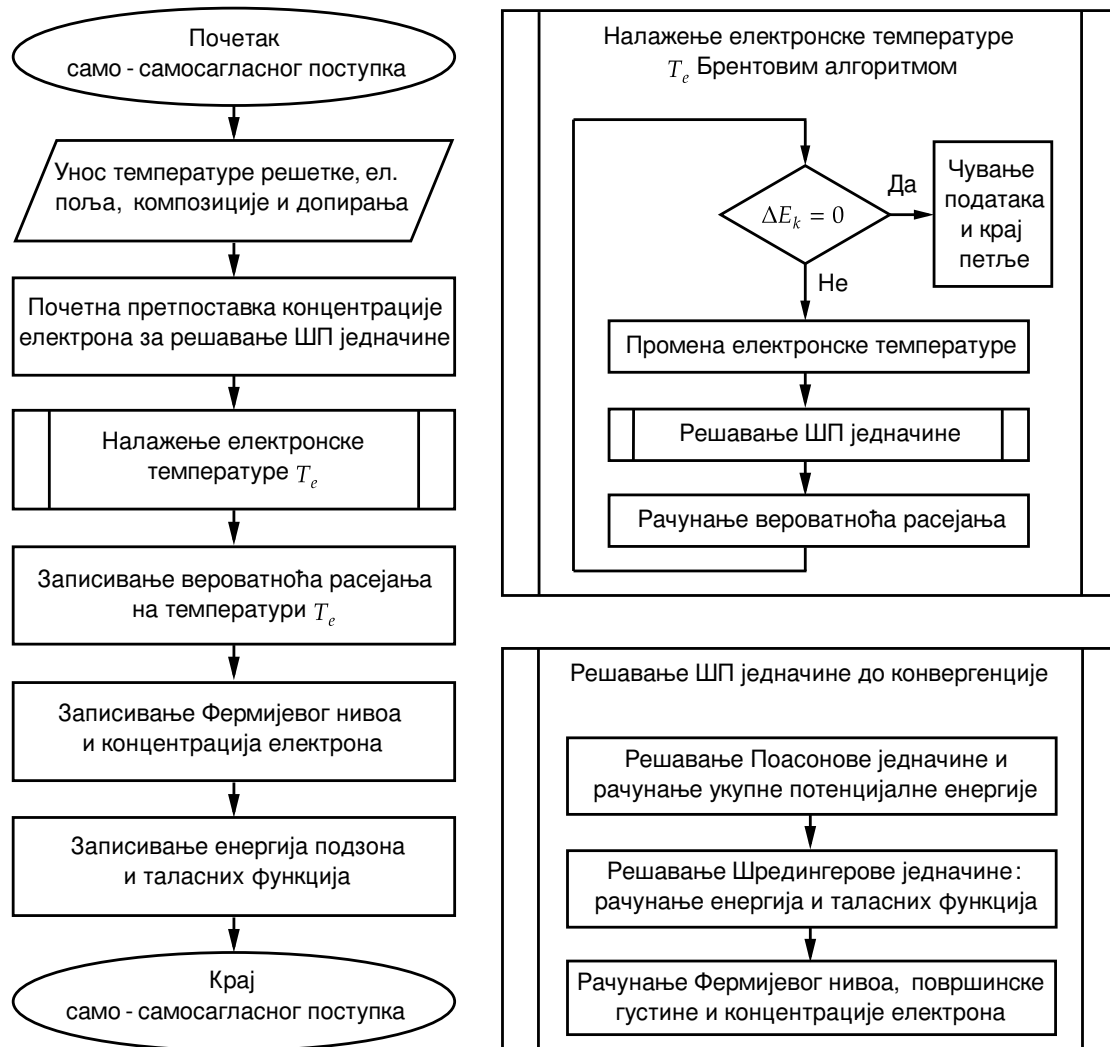
$$\sum_s \sum_f \sum_i n_{e_i} \bar{W}_{if}^s \Delta E_k^s = 0 \quad (2.36)$$

где се сумом по бројачу s узимају у обзир сва еластична и нееластична расејања, а ΔE_k за свако расејање је дато приликом дефинисања једначине (2.33).

2.11 Само-самосагласни поступак

Апроксимација о еквитермалним подзонама уклања потребу за брзинама промене кинетичке енергије и квази–Фермијевим нивоима у једначини (2.34), али се једначина (2.36) и даље мора решавати самосагласно, заједно са самосагласним поступком решавања Шредингер–Поасонове (ШП) једначине [42, 73]. Решавање једначине (2.36) се нумерички своди на минимизациони проблем који се може решити Брентовим алгоритмом [74]. Решавањем овог система добијају се: електронска температура, стопе расејања, популације свих подзона, Фермијева енергија, као и енергије подзона и таласне функције, које се затим уносе у транспортни модел (нпр. модел матрице густине) ради рачунања излазних параметара, као што су: густина струје J и материјално појачање g .

Шематски приказ само-самосагласног поступка дат је на слици 2.3. Приказан је двоструко самосагласан алгоритам, у виду две угнежене итерационе петље, за решавање електронске структуре у ККЛ-има, који истовремено одређује енергетске нивое, таласне функције електрона, расподелу носилаца по подзонама, електростатички потенцијал, као и ефективну електронску температуру T_e , која обезбеђује енергетску равнотежу у систему.



Слика 2.3. Шематски приказ само-самосагласног поступка. Алгоритам се састоји од два угнеждена самосагласна поступка: један за решавање Шредингер–Поасонове једначине и један за решавање једначине кинетичког биланса. Спољашња петља осигурава конзистентност температуре електрона са условима енергетског биланса, док унутрашња ШП петља обезбеђује конзистентност таласних функција, енергија подзона и електростатичког потенцијала.

У спољашњој петљи самосагласно се тражи ефективна електронска температура (под апроксимацијом еквитермалних подзона), таква да укупна размена кинетичке енергије између свих подзона и свих механизма расејања задовољава једначину кинетичког биланса (2.36), чиме усаглашава температуру електрона са њиховом енергијом, док унутрашња петља решава Шредингер–Поасонову једначину и обезбеђује конзистентност таласних функција, енергетских нивоа и електростатичког потенцијала. На самом почетку алгоритма задају се иницијални параметри: примењено електрично поље, температура решетки, просторна расподела допирања и композиција слојева, као и почетна претпоставка концентрације електрона за решавање ШП једначине, након чега се улази у спољашњу петљу.

2.11.1 Спољашња петља: Кинетички биланс

Пошто је транспорт у ККЛ-има неравнотежан, расподела носилаца се не може описати Ферми–Дираковом функцијом на температури решетки. Уместо тога, уводи се концепт ефективне електронске температуре, дефинисан преко једначине кинетичког биланса (2.36). У стационарном стању овај биланс мора бити задовољен, тј. укупни прилив и одлив кинетичке енергије морају бити једнаки. Први пут се у спољашњу петљу улази са претпоставком да је електронска температура једнака температури решетки и након тога поступак је:

1. Позива се унутрашња Шредингер–Поасонова петља која враћа енергетске нивое, таласне функције и популације електрона.
2. Са познатом електронском температуром T_e израчунавају се усредњене стопе свих расејања.
3. Израчунава се нето кинетички биланс на основу једначине (2.36).
4. Ако биланс није задовољен, вредност T_e се ажурира у складу са Брентовим алгоритмом, и поступак се понавља.

Итерације трају све док нето кинетички биланс не постане довољно близак нули, јер је проблем одређивања електронске температуре минимизациони проблем у коме се тражи температура T_e која минимизује апсолутну вредност ΔE_k , дефинисану једначином (2.33). За адаптивну промену температуре у свакој итерацији спољашње петље корити се Брентов алгоритам, који комбинује робусност бисекционе методе са брзином методом сечице и инверзне квадратне интерполације, све док се не постигне стање у коме је ΔE_k минимално, односно практично једнако нули. Овиме се одређује самосагласна ефективна електронска температура, која није стварна температура сваке појединачне подзоне, већ ефективан параметар који обезбеђује глобалну енергетску равнотежу у систему.

2.11.2 Унутрашња петља: ШП самосагласни поступак

Унутрашња петља је Шредингер–Поасонов самосагласни поступак, који обезбеђује конзистентност таласних функција, енергетских нивоа и електростатичког потенцијала. Она се за дату температуру T_e понавља све док се не постигне конвергенција, то јест док се не нађе самосагласно решење. Поступак садржи следеће кораке:

1. Решавање Поасонове једначине на основу тренутне међувредности густине наелектрисања (електрона и јона допаната), израчунавање новог електростатичког потенцијала, и укупне потенцијалне енергије дна проводне зоне.
2. Решавање Шредингерове једначине на основу нове укупне потенцијалне енергије дна проводне зоне, и добијање нових енергија дна подзона и одговарајућих таласних функција.
3. Израчунавање Фермијевог нивоа тако да укупан број електрона у свим подзонама одговара укупном броју допаната. На основу електронске температуре, тренутних енергија подзона и Фермијеве енергије одређују се површинске густине електрона свих подзона и концентрација електрона, након чега се поступак понавља.

Итерације се настављају све док се разлике између узастопних итерација у профилу укупне потенцијалне енергије дна проводне зоне, или у концентрацији електрона, или у енергији подзона, не сведу испод унапред дефинисаног критеријума конвергенције. На тај начин постиже се самосагласност између таласних функција, енергетских нивоа и електростатичког потенцијала.

Цео поступак представља само-самосагласни алгоритам, и тек када обе петље конвергирају, резултати су физички смислени и могу се користити за израчунавање транспортних параметара и оптичких карактеристика уређаја.

Поглавље 3

Модел матрице густине и транспортно-оптичке карактеристике

У претходном поглављу објашњена је Шредингер–Поасонова једначина и само-самосагласни поступак за одређивање електронске структуре у полупроводничким структурама, којим се добијају енергије дна подзона, њихове одговарајуће таласне функције, популација енергетских подзона и времена расејања. Једноставнији транспортни модели третирају расејања у оквиру теорије пертурбација, док напреднији модели као што су модел матрице густине (ММГ) (енгл. density matrix model) [75] и модел неравнотежних Гринових функција (енгл. non-equilibrium Green's function) користе сложенији формализам вишечестичних интеракција.

Историјски посматрано, модел брзинских једначина (БЈ) (енгл. rate equation) представљао је доминантан модел за опис рада ласера. Он разматра кретање електрона између дискретних енергетских нивоа, а транспорт описује преко пертурбација, при чему се занемарују квантни ефекти кохеренције и декохеренције. Главни недостатак модела БЈ лежи у томе што је полукласичан, па стога не може у потпуности да опише резонантно тунеловање у ККЛ-има. Због тога је неопходно применити квантномеханичке моделе, као што су ММГ [51, 67, 76–78] и модел неравнотежних Гринових функција [79, 80], који укључују ефекте кохерентности.

Модел матрице густине превазилази ограничења модела БЈ и може се посматрати као његова генерализација. Ипак, нумеричка сложеност ММГ је знатно већа у односу на модел БЈ, а његова формулација је математички доста захтевнија. При примени ММГ-а на ККЛ-е базис таласних функција се добија решавањем Шредингер–Поасонове једначине у оквиру једне периоде, у апроксимацији јаке везе (енгл. tight-binding approximation), постављањем бесконачно дебелих баријера са обе стране посматране периоде. Хамилтонијан у апроксимацији јаке везе проширује се укључивањем коначног времена декохеренције кроз баријеру, као и Рабијевих осцилација између стања у суседним периодама која су поравната услед спољашњег поља. У овом поглављу је детаљно представљена теорија матрице густине (МГ) и њена примена на ККЛ-е за израчунавање транспортно-оптичких карактеристика као што су зависност густине струје и материјалног појачања од примењеног електричног поља.

3.1 Лиувилова једначина

Модел матрице густине први је увео Ј. фон Нојман [81, 82] и овај модел је од тада нашао примене у различитим областима квантне механике [83, 84]. ММГ је квантни модел који користи базис таласних функција за формирање статистичког ансамбла свих могућих интеракција у систему, што је од нарочитог интереса код описивања мешовитих квантних стања. Матрица густине је оператор дефинисан са $\hat{\rho} = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, где се у општем случају таласна функција може расписати по базисним векторима (таласним функцијама) ϕ_i са коефицијентима $\psi_i = C_i \phi_i$,

па матрица густине представља све комбинације коефицијената C_i у облику $\rho_{ij} = C_i C_j^*$. Услов нормализације Шредингерове једначине је онда $\sum_i |\hat{\psi}_i\rangle \langle \hat{\psi}_i^*| = 1$, то јест збир елемената на главној дијагонали матрице густине представља услов нормализације вероватноће, па се цела матрица може посматрати као мера вероватноће.

Временски зависна Шредингерова једначина описује еволуцију чистог стања $|\psi(t)\rangle$ одређеног Хамилтонијаном $\hat{H}$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi. \quad (3.1)$$

Увођењем оператора матрице густине $\hat{\rho} = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$ у временски зависну Шредингерову једначину и налажењем одговарајућег извода добија се Лиувилова једначина која описује еволуцију ансамбла таласних функција:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (3.2)$$

где је $[\hat{H}, \hat{\rho}] = \hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H}$ комутатор Хамилтонијана и матрице густине. Извођење ове једначине може се наћи у бројним уџбеницима [83]. Уколико базис таласних функција садржи чиста стања, Лиувилова једначина даје информацију о еволуцији мешовитих стања кроз своје вандијагоналне елементе $\hat{\rho}_{ij} = |\psi_i\rangle \langle \psi_j|$.

Уобичајено је да се стопе расејања добијене из теорије пертурбација додају увођењем дисипативног члана (дисипатора) $\hat{D}$ у Лиувилу једначину. Овај члан узима у обзир процесе који нису обухваћени Хамилтонијаном, али доводе до декохеренције система и тада Лиувилова једначина добија облик:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \hat{D} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] - \left(\frac{\hat{\rho}}{\tau} \right)_{\text{relax}}. \quad (3.3)$$

Основни услов за физички смислено решење је да матрица ρ буде позитивна полудефинитна, што је обезбеђено ако је дисипатор записан у Линдбладовом облику [85–88]. Сви механизми расејања разматрани у поглављу 2 третирају се као пертурбације преко Фермијевог златног правила које задовољава Линдбладову формулацију.

3.2 Апроксимације јаке везе и најближих суседа

Прве примене ММГ на ККЛ-ове [46, 77, 89, 90] разматрале су неколико енергетских нивоа (ГЛН, ДЛН и ИЛН), што је оправдано при моделовању MIR структура [91] и THz ЛО фононских ККЛ-а. Каснији приступи [51, 67, 78, 92–96] развили су modele матрице густине који су применљиви на произвољан број стања по периоди што је од нарочитог значаја при моделовању ВТС и хибридних дизајна.

При примени ММГ-а на ККЛ-е уводе се апроксимација јаке везе и апроксимација најближих суседа (енгл. nearest neighbour approximation). У оквиру апроксимације јаке везе, решавањем Шредингер–Поасонове једначине у оквиру једне периоде, добија се базис таласних функција, а постављањем бесконачно дебелих баријера са обе стране посматране периоде обезбеђује локализованост таласних функција унутар једне периоде, док је апроксимација најближих суседа математичко ограничење уведено у оквиру модела јаке везе. Према овој апроксимацији, спрега између таласних функција узима се у обзир само између суседних периода структуре, док се утицај удаљенијих периода занемарује. Добијени Хамилтонијан може се записати као тридијагонална матрица:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} H_0 & H_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ H_{-1} & \ddots & \ddots & \ddots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & \ddots & H_0 & H_1 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & H_{-1} & H_0 & H_1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & H_{-1} & H_0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & H_1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & H_{-1} & H_0 \end{pmatrix} + eKL_p \begin{pmatrix} \frac{Q}{2} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & 1 & \ddots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \ddots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & -\frac{Q}{2} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

где је L_p дужина једне периоде ККЛ-а. Можемо сматрати да је централна периода ККЛ-а окружена са обе стране једнаким бројем суседних периода. Хамилтонијан централне периоде означавамо са H_0 , док је Хамилтонијан интеракције са левом и десном суседном периодом H_{-1} односно H_1 . Други члан у једначини (3.4) описује утицај спољашњег електричног поља K , где је претпостављено да суседи са десне стране H_0 имају нижи потенцијал (отуда знак "-" у матрици). Хамилтонијан $\mathcal{H}$ мора бити хермитски што је еквивалентно условима $H_0 = H_0^\dagger$ и $H_1 = H_{-1}^\dagger$.

Како је ККЛ уређај заснован на резонантном тунеловању, тако Хамилтонијан интеракције суседних периода мора урачунати овај ефекат. Применом спољашњег електричног поља K и повећавањем његовог интензитета, долази до све већег кривљења дна проводне зоне ККЛ-а, тако да ИЛН једне периоде и ГЛН наредне периоде долазе у резонанцију. Ова резонанција углавном не подразумева потпуно поклапање енергија ових нивоа, већ достизање одређене минималне енергетске разлике која се назива енергија антикросинга $\Delta_{ij'}$, а вредност електричног поља при ком долази до овог размака енергетских нивоа назива се антикросинг поље K_A . За вредности поља $K > K_A$ нивои замене места (антикросинг) и транспорт се наставља нормално, док при $K = K_A$ долази до резонантног тунеловања и тада је транспорт најефикаснији, па уређај емитује максималну оптичку снагу. Резонантно тунеловање електрона између два стања захтева одређено време, које је одређено кохерентном еволуцијом ових стања. Кохерентна суперпозиција ова два стања формира таласни пакет који на Рабијевој фреквенцији $\Delta_{ij'}/\hbar$ осцилује између две јаме окружене инјекционим баријерама и пригушен декохеренцијом, када се налази у десној јами, празни се путем међуподзонских расејања [77].

У апроксимацији јаке везе неопходно је да на крајевима периоде буде раван потенцијал проводне зоне. Приликом нумеричког решавања, потребно је да периода ККЛ-а почиње инјекционим баријером. Добијене таласне функције формирају ортонормиран базис који се користи у ММГ, а може се претпоставити да све периоде имају идентичне таласне функције.

Најједноставнији облик Хамилтонијана интеракције између суседних периода је стандардни Хамилтонијан резонантног тунеловања [97] кроз инјекциону баријеру, где је интеракција између стања из горње периоде i_1 и стања из централне периоде j_0 дата као:

$$H_{i_1 j_0} = \sqrt{\langle i_1 | V - V_{TB_0} | j_0 \rangle \langle i_1 | V - V_{TB_1} | j_0 \rangle}, \quad (3.5)$$

где V представља потенцијалну енергију проводне зоне целог ККЛ-а. Потенцијалне енергије V_{TB_0} и V_{TB_1} означавају потенцијалне енергије проводне зоне у апроксимацији јаке везе централне периоде и периоде лево од ње, редом. Потенцијала енергија V_{TB_0} једнака је потенцијалној енергије једне периоде, при чему су све остале периоде замењене вредностима потенцијалне енергије на крајевима ове периоде (стандардна апроксимација јаке везе бесконачно дебелих равних зидова). Због периодичности структуре важи релација $V_{TB_1}(z) = V_{TB_0}(z + L_p) + eKL_p$. Како су таласне функције суседних периода раздвојене за дужину једне периоде, вредност елемента $\langle i_1 | V - V_{TB_{0,1}} | j_0 \rangle$ углавном зависи од преклапања таласних функција у инјекционој баријери.

Пошто је базис таласних функција у апроксимацији јаке везе добијен на једној периоди, матрица густине задржава тридијагонални облик Хамилтонијана дат у једначини (3.4).

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_0 & \rho_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \rho_{-1} & \ddots & \ddots & \ddots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & \ddots & \rho_0 & \rho_1 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \rho_{-1} & \rho_0 & \rho_1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \rho_{-1} & \rho_0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \rho_1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \rho_{-1} & \rho_0 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Због присуства спољашњег електричног поља долази до нарушења симетрије Хамилтонијана из једначине (3.4) дуж главне дијагонале, али уз апроксимацију да је његов утицај мали, базис таласних функција се може просторно транслирати са централне периода на све суседне периоде. Ова апроксимација ће имати значајан утицај на извођење излазних параметара.

Комутатор у једначини (3.3) садржи производ две тридијагоналне матрице, што резултује пентодијагоналном матрицом и системом од пет једначина. Ипак, релевантне једначине су оне које одговарају трима централним дијагоналама, које су довољне за решавање система три непознате у МГ. Додатне две једначине, $[H_1, \rho_1] = [H_{-1}, \rho_{-1}] = 0$, су последица дуплирања информација у систему. Пошто су интеракције централне периоде занемарљиве са свим периодама, осим са суседним, услед просторног раздвајања таласних функција, МГ узимамо у облику датом у једначини (3.6) и на тај начин систем приморавамо да интерагује само са својим најближим суседима, док су додатне једначине последица интеракције између првог и другог суседа, што доводи до дуплирања информација у систему. Једначине од интереса су:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\rho_1}{dt} &= [H_0, \rho_1] + [H_1, \rho_0] + eKL_P \rho_1 - i\hbar \frac{\rho_1}{\tau_D}, \\ i\hbar \frac{d\rho_0}{dt} &= [H_{-1}, \rho_1] + [H_0, \rho_0] + [H_1, \rho_{-1}] - i\hbar \frac{\rho_0}{\tau_{D_0}} - i\hbar \frac{\rho_0}{\tau}, \\ i\hbar \frac{d\rho_{-1}}{dt} &= [H_{-1}, \rho_0] + [H_0, \rho_{-1}] - eKL_P \rho_{-1} - i\hbar \frac{\rho_{-1}}{\tau_D}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

при чему је претпостављено у дисипатору да је релаксација између суседних периода искључиво декохерента и описана тензором декохеренције τ_D , док су у централној периоди присутни процеси декохеренције и процеси расејања који мењају популације, који су описани тензором τ , у коме су сва расејања узета у обзир преко Фермијевог златног правила.

Овај систем једначина од $3N^2$ једначина записаних у матричном облику (3.7) је нелинеаран. Решавање таквог система је јако комплексно и захтева линеарну трансформацију ових једначине. Формално, Лиувилова једначина (3.3) може се линеаризовати у облику $i\hbar \rho_{\text{lin}} = \mathcal{L} \rho_{\text{lin}}$, где се $\mathcal{L}$ назива Лиувилев супероператор. Међутим, у апроксимацији најближих суседа добијени систем једначина се мора линеаризовати помоћу другачијег супероператора. Извођење и примена овог супероператора, као и решавање овог система једначина детаљно је приказано у [98].

3.3 Дисипативни члан

Дисипативни члан, или дисипатор, у једначини (3.7) је уведен преко тензора τ_D и τ , који представљају процесе декохеренције и расејања у ККЛ-има. Урачунато је расејање само унутар централне периоде, док су процеси декохеренције урачунати унутар централне периоде и између периода. Расејање унутар централне периоде је описано блок матрицом густине ρ_0 и оно утиче само на популације нивоа, то јест, само на дијагоналне елементе матрице ρ_0 , па самим тим не утиче на кохерентност [84]:

$$\left(\frac{\rho_0}{\tau}\right)_{ii} = -\frac{\rho_{0,ii}}{\tau_i} + \sum_{j \neq i} \frac{\rho_{0,jj}}{\tau_{ji}}, \quad (3.8)$$

где су $\tau_i^{-1} = \sum_j \tau_{ij}^{-1}$ времена живота стања.

Декохеренција се може најлакше објаснити на примеру стања које је суперпозиција два чиста стања $\psi_i = a_i(t)e^{-iE_it/\hbar}\psi_i(\mathbf{r})$ и $\psi_j = a_j(t)e^{-iE_jt/\hbar}\psi_j(\mathbf{r})$, када укупна вероватноћа има три члана:

1. насељеност стања $|a_i(t)\psi_i(\mathbf{r})|^2$,
2. насељеност стања $|a_j(t)\psi_j(\mathbf{r})|^2$,
3. синусоидну компоненту $a_i(t)a_j(t)\psi_i(\mathbf{r})\psi_j(\mathbf{r})$ са фреквенцијом која одговара разлици енергија између стања i и j .

Ова последња компонента је везана за недијагоналне елементе матрице густине и временом опада пропорционално опадању величине $|a_i(t)a_j(t)|$. Међутим, коефицијенти $a_i(t)$ и $a_j(t)$ садрже фазе $e^{i\phi_i}$ и $e^{i\phi_j}$, што уноси додатни фазни фактор $e^{i(\phi_j - \phi_i)}$. Фазна разлика $\phi_j - \phi_i$ може бити измењена процесима чисте декохеренције, који не мењају популације стања (амплитуде $|a_i|$, $|a_j|$). Декохеренција утиче на све недијагоналне елементе матрице густине, без обзира у ком се блоку они налазе и најчешће се уводи у облику:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{0,\pm 1_{ij}}}{\tau_{ij}} &= -\frac{\rho_{0,\pm 1_{ij}}}{\tau_{||ij}}, \quad \rho_0 : i \neq j, \\ \frac{1}{\tau_{||ij}} &= \frac{1}{2\tau_i^*} + \frac{1}{2\tau_j^*} + \frac{1}{\tau_{ii}^*} + \frac{1}{\tau_{jj}^*} - \frac{2}{\sqrt{\tau_{ii}^{\text{IFR}}\tau_{jj}^{\text{IFR}}}}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Стопе расејања и времена живота обележена звездом * не укључују расејање услед неравнина интерфејса, јер се утицај овог расејања на декохеренцију урачунава на другачији начин [67] преко последњег члана у једначини (3.9). Декохеренција се не јавља у централној периоди за $i = j$. Време декохеренције $\tau_{||ij'}$ између стања i из централне периоде и стања j' из суседне периоде идентично је времену $\tau_{||ij}$, где је j стање из централне периоде, што произилази из чињенице да су таласне функције у суседној периоди просторно померене таласне функције из централне периоде.

3.4 Диполна апроксимација

Уобичајени приступ код моделовања оптичке интеракције код ККЛ-а је претпоставка да се оптичка интеракција дешава само унутар једне периоде, као и да се систем квантних нивоа понаша као диполна антена која резонује на специфичној енергији прелаза између нивоа. Због тога формулишемо Хамилтонијан централне периоде као збир Хамилтонијана у апроксимацији јаке везе $\hat{V}_{\text{ТВ}}$ и диполног енергетског члана $\hat{V}_{\text{д}} = \boldsymbol{\mu} \mathbf{E}$, где је $\boldsymbol{\mu} = -e \mathbf{r}$ оператор електричног диполног момента [84], а $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ је оптичко електрично поље.

Матрица Хамилтонијана може се записати као $H_0 = H_{\text{DC}} + H_{\text{AC}}$, где је H_{DC} дијагонална матрица која садржи енергије нивоа из апроксимације јаке везе, а $H_{\text{AC}} = -eZE(z, t)$ је интеракција дипола са пољем. Елементи $Z_{ij} = \langle i | \hat{z} | j \rangle$ су елементи матрице диполних момената и они описују вероватноћу прелаза између стања i и j .

Оптичко електрично поље $E(z, t)$ добија се решавањем Максвелове таласне једначине, а поларизација се добија формализмом матрице густине преко очекиване вредности оператора поларизације $\hat{P} = -en_e\hat{Z}$, где је n_e просторна концентрација носилаца. У ММГ очекивана вредност произвољног оператора $\hat{O}$ је $\langle O \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{O})$, па се поларизација рачуна као $P = -en_e\text{Tr}(\rho Z)$. Одавде се види да је Максвелова таласна једначина спрегнута са Лиувилловом једначином, јер поларизација P утиче на Максвелову таласну једначину, а оптичко поље $E(z, t)$ мења Хамилтонијан у Лиувилловој једначини.

3.5 Апроксимација неротирајућег таласа

Полазећи од Максвелових једначина за електрично и магнетно поље у хомогеном и изотропном медијуму без спољашњег магнетног поља, може се извести таласна једначина за електрично поље [1]:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{v_g^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \frac{\sigma}{\epsilon_0 c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}, \quad (3.10)$$

где је $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ оптичко електрично поље, $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ поларизација средине, $v_g = c/n$ групна брзина, σ електрична проводност која описује омске губитке у резонатору [1], а n је индекс преламања.

Најчешће коришћена апроксимација таласне једначине јесте Фуријеов метод, у којој је електрично поље суперпозиција ортогоналних нормалних мода $\mathbf{u}_n(\mathbf{r})$ који су модулисани временски зависним амплелопама $E_n(t)$, и важи: $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_n \mathbf{u}_n(\mathbf{r}) E_n(t)$. Поларизација је развијена у истом ортогоналном базису $\mathbf{u}_n(\mathbf{r})$, јер се ствара кохерентним деловањем електричног поља. Ортогонални модови задовољавају Лапласову једначину $(\nabla^2 + k_n^2) \mathbf{u}_n(\mathbf{r}) = 0$, па се на основу једначине (3.10) добија:

$$\frac{\partial^2 E_n}{\partial t^2} + \frac{\sigma}{\epsilon_0 n^2} \frac{\partial E_n}{\partial t} + \omega_n^2 E_n = -\frac{1}{\epsilon_0 n^2} \frac{\partial^2 P_n}{\partial t^2}, \quad (3.11)$$

где су ω_n резонантне угаоне фреквенције резонатора, а вектори $\mathbf{u}_n(\mathbf{r})$ и вредности ω_n својствени вектори и својствене вредности празног резонатора (без поларизације) [1]. Оваква формулација таласне једначине се користити за моделовање мултимодне емисије у ласерској структури [1]. За структуре са једним доминантним модом, уобичајени приступ је увођење споропроменљиве амплелопе $E(t)$ и тражење одзива на косинусну побуду носеће угаоне фреквенције ω , тако да важи:

$$E_n = E(t) (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad P_n = P(t) (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}). \quad (3.12)$$

Увођење оваког облика оптичког електричног поља и поларизације назива се апроксимација неротирајућег таласа. Тада једначина (3.11) добија облик:

$$\frac{\partial E}{\partial t} = - \left(\frac{\sigma}{2\epsilon_0 n^2} + i(\omega - \omega_n) \right) E - i \frac{\omega}{2\epsilon_0 n^2} P. \quad (3.13)$$

Хамилтонијан централне периоде у апроксимацији неротирајућег таласа:

$$H_0 = H_{\text{DC}} + H_{\text{AC}}^+ e^{i\omega t} + H_{\text{AC}}^- e^{-i\omega t}, \quad (3.14)$$

где је $H_{\text{AC}}^\pm = -eZE(t)$. Овај израз представља временски зависну побуду у Лиувилловој једначини (3.7), па се претпоставља да сваки блок матрице густине ρ_k , за $k = 0, 1, -1$, такође има облик $\rho_k = \rho_k^{\text{DC}} + \rho_k^+ e^{i\omega t} + \rho_k^- e^{-i\omega t}$. Када се овај израз унесе у једначину (3.7), број једначина система се увећава три пута, тако да се добија укупно $9N^2$ једначина:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\rho_1^-}{dt} &= [H_{\text{DC}}, \rho_1^-] + [H_{\text{AC}}^-, \rho_1^{\text{DC}}] + [H_1, \rho_0^-] + eKL_P \rho_1^- - i\hbar \frac{\rho_1^-}{\tau_D} - \hbar\omega \rho_1^-, \\
i\hbar \frac{d\rho_1^{\text{DC}}}{dt} &= [H_{\text{DC}}, \rho_1^{\text{DC}}] + [H_1, \rho_0^{\text{DC}}] + [H_{\text{AC}}^+, \rho_1^-] + [H_{\text{AC}}^-, \rho_1^+] + eKL_P \rho_1^{\text{DC}} - i\hbar \frac{\rho_1^{\text{DC}}}{\tau_D}, \\
i\hbar \frac{d\rho_1^+}{dt} &= [H_{\text{DC}}, \rho_1^+] + [H_{\text{AC}}^+, \rho_1^{\text{DC}}] + [H_1, \rho_0^+] + eKL_P \rho_1^+ - i\hbar \frac{\rho_1^+}{\tau_D} + \hbar\omega \rho_1^+, \\
i\hbar \frac{d\rho_0^-}{dt} &= [H_{-1}, \rho_1^-] + [H_{\text{AC}}^-, \rho_0^{\text{DC}}] + [H_{\text{DC}}, \rho_0^-] + [H_1, \rho_{-1}^-] - i\hbar \frac{\rho_0^-}{\tau_{D_0}} - i\hbar \frac{\rho_0^-}{\tau} - \hbar\omega \rho_0^+, \\
i\hbar \frac{d\rho_0^{\text{DC}}}{dt} &= [H_{-1}, \rho_1^{\text{DC}}] + [H_{\text{DC}}, \rho_0^{\text{DC}}] + [H_{\text{AC}}^+, \rho_0^-] + [H_{\text{AC}}^-, \rho_0^+] + [H_1, \rho_{-1}^{\text{DC}}] - i\hbar \frac{\rho_0^{\text{DC}}}{\tau_{D_0}} - i\hbar \frac{\rho_0^{\text{DC}}}{\tau}, \\
i\hbar \frac{d\rho_0^+}{dt} &= [H_{-1}, \rho_1^+] + [H_{\text{DC}}, \rho_0^+] + [H_{\text{AC}}^+, \rho_0^{\text{DC}}] + [H_1, \rho_{-1}^+] - i\hbar \frac{\rho_0^+}{\tau_{D_0}} - i\hbar \frac{\rho_0^+}{\tau} + \hbar\omega \rho_0^+, \\
i\hbar \frac{d\rho_{-1}^-}{dt} &= [H_{-1}, \rho_0^-] + [H_{\text{DC}}, \rho_{-1}^-] + [H_{\text{AC}}^-, \rho_{-1}^{\text{DC}}] - eKL_P \rho_{-1}^- - i\hbar \frac{\rho_{-1}^-}{\tau_D} - \hbar\omega \rho_{-1}^-, \\
i\hbar \frac{d\rho_{-1}^{\text{DC}}}{dt} &= [H_{-1}, \rho_0^{\text{DC}}] + [H_{\text{DC}}, \rho_{-1}^{\text{DC}}] + [H_{\text{AC}}^+, \rho_{-1}^-] + [H_{\text{AC}}^-, \rho_{-1}^+] - eKL_P \rho_{-1}^{\text{DC}} - i\hbar \frac{\rho_{-1}^{\text{DC}}}{\tau_D}, \\
i\hbar \frac{d\rho_{-1}^+}{dt} &= [H_{-1}, \rho_0^+] + [H_{\text{DC}}, \rho_{-1}^+] + [H_{\text{AC}}^+, \rho_{-1}^{\text{DC}}] - eKL_P \rho_{-1}^+ - i\hbar \frac{\rho_{-1}^+}{\tau_D} + \hbar\omega \rho_{-1}^+.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Овај систем једначина (3.15) је нелинеаран и састоји се од $9N^2$ једначина записаних у матричном облику. Слично као и са једначинама (3.7), решавање је јако комплексно и захтева извођење новог супероператора. Извођење и примена овог супероператора, као и решавање овог система, детаљно је приказано у [98].

За добијање стационарног стања сви изводи по времену у систему једначина (3.15) морају бити једнаки нули. Такође, како дијагонални елементи матрице густине представљају вероватноће, нормализациони услов је да траг DC блока централне периоде матрице густине мора имати јединичну вредност

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho_k^{\text{DC},+,-}}{dt}(t \rightarrow \infty) &= 0, \quad k = 0, 1, -1 \\
\sum_i \rho_{0ii}^{\text{DC}} &= 1.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

3.6 Густина струје и материјално појачање

За израчунавање густине струје и материјалног појачања ККЛ-а потребно је наћи очекиване вредности оператора густине струје и поларизације:

$$\begin{aligned}
\hat{J} &= \frac{i}{\hbar} en_e [\hat{\mathcal{H}}, \hat{Z}], \\
\hat{P} &= -en_e \hat{Z}.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Очекиване вредности оператора се израчунавају помоћу укупне матрице густине, дате у једначини (3.6), као траг производа матрице густине и оператора. Како радимо под апроксимацијом да је матрица бесконачне величине $Q \times Q$, па $Q \rightarrow \infty$, очекивана вредност оператора $\hat{O}$ може се одредити као лимес: $\langle \hat{O} \rangle = \lim_{Q \rightarrow \infty} \frac{1}{Q} \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{O})$, те се густина струје израчунава као [51]:

$$\begin{aligned}
J &= \frac{i}{\hbar} en_e \text{Tr} (\rho_0 [H_0, Z] + \rho_{-1} [H_1, Z] + \rho_1 [H_{-1}, Z] + L_P (H_1 \rho_{-1} - \rho_1 H_{-1})) \\
&= -\frac{i}{\hbar} en_e \text{Tr} [Z ([H_0, \rho_0] + [H_1, \rho_{-1}] + [H_{-1}, \rho_1]) - L_P (H_1 \rho_{-1} - \rho_1 H_{-1})] \\
&= en_e \text{Tr} \left(Z \left(\frac{d\rho_0}{dt} + \frac{\rho_0}{\tau} + \frac{\rho_0}{\tau_{D_0}} \right) \right) + \frac{i}{\hbar} en_e L_P \text{Tr} (H_1 \rho_{-1} - \rho_1 H_{-1}).
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Изрази у једначини (3.18) добијени су коришћењем цикличних својстава операције трага и средњег израза из једначине (3.7). Додатни члан $L_P (H_1 \rho_{-1} - \rho_1 H_{-1})$, је последица утицаја спољашњег електричног поља.

Очекивана вредност поларизације се добија као:

$$P = -en_e \text{Tr} (Z \rho_0). \tag{3.19}$$

Због апроксимација неротирајућег таласа, густина струје J и поларизација P имају три компоненте. Међутим, мерљиве величине су једино компонента густине струје обележена са DC и одзив на оптичко поље, који је одређен позитивним чланом поларизације (P^+).

$$\begin{aligned}
J_{\text{DC}} &= -\frac{i}{\hbar} en_e \text{Tr} [Z ([H_{-1}, \rho_1^{\text{DC}}] + [H_{\text{DC}}, \rho_0^{\text{DC}}] + [H_{\text{AC}}^+, \rho_0^-] + [H_{\text{AC}}^-, \rho_0^+] + [H_1, \rho_{-1}^{\text{DC}}]) \\
&\quad - L_P (H_1 \rho_{-1}^{\text{DC}} - \rho_{-1}^{\text{DC}} H_{-1})], \\
P^+ &= -en_e \text{Tr} (Z \rho_0^+).
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Поларизација P^+ уноси се у Максвелову једначину, чиме се формира систем спрегнутих једначина, јер H_{AC} зависи од оптичког поља. Материјално појачање се може одредити из поларизације, уз претпоставку да је ККЛ изотропна линеарна средина чија поларизација има облик $P^+ = \epsilon_0 \chi E$. Имагинарни део електричне сусцептибилности χ пропорционалан је материјалном појачању:

$$g = \frac{\omega}{nc\epsilon_0} \frac{\Im P^+}{\Re E} = -\frac{\omega}{nc\epsilon_0} en_e \frac{\Im \text{Tr} (Z \rho_0^+)}{\Re E}. \tag{3.21}$$

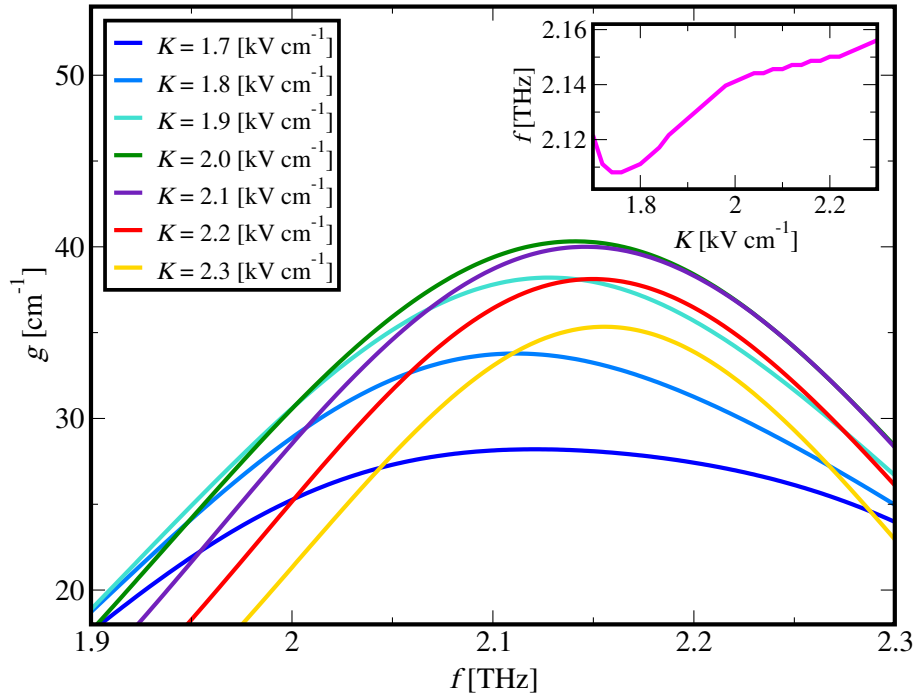
3.7 Транспортно-оптичке карактеристике

У претходним секцијама објашњено је како је коришћењем ММГ-а добијена густина струје и материјално појачање за задату вредност носеће угаоне фреквенције ω , која одговара носећој фреквенцији f . Како је цео модел спроведен коришћењем Хамилтонијана датог у једначини (3.4), у коме је урачунато спољашње електрично поље K , израчуната густина струје $J(f, K)$ и материјално појачање $g(f, K)$ су функције носеће фреквенције f и електричног поља.

Примењен приступ објашњен је у [59] и фокусиран је на мономодну емисију на фреквенцији максималног материјалног појачања, а улазни параметар модела је спољашње електрично поље. Како би се описала оваква емисија за дату вредност спољашњег електричног поља K израчунато је појачање $g(f, K)$ на разумном интервалу носећих фреквенција и установљена је носећа фреквенција којој одговара максимално материјално појачање, након чега се та вредност фреквенције емисије, материјалног појачања, као и густине струје при тој фреквенцији емисије узимају као параметри емисије при електричном пољу K .

Како би се добиле транспортно-оптичке карактеристике, као што су зависност густине струје од спољашњег електричног поља и зависност материјалног појачања од спољашњег електричног поља, потребно је варирати вредност спољашњег електричног поља K . За сваку вред-

ност спољашњег електричног поља цео прорачун се понавља, чиме се добијају зависности фреквенције емисије $f(K)$, материјалног појачања $g(K)$ и густине струје $J(K)$ за сваку вредност спољашњег електричног поља у интервалу од интереса. У наставку ће поступак бити илустрован применом алгоритма на 2 THz ВТС ККЛ-у [51]. Детаљни подаци о активној области овог ККЛ-а дати су у Додатку А

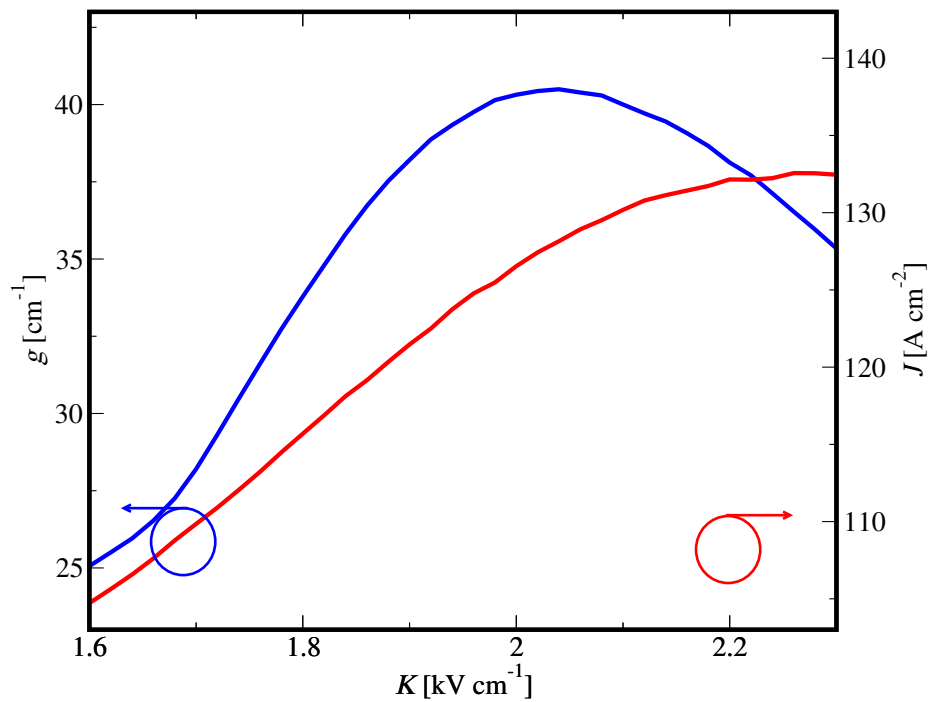


Слика 3.1. Зависност материјалног појачања од носеће фреквенције за различита електрична поља. График у горњем десном делу слике приказује фреквенцију емисије, која одговара максимуму криве материјалног појачања у функцији електричног поља. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

На слици 3.1 приказана је зависност материјалног појачања од носеће фреквенције $g(f)$ за различите вредности електричног поља. Фреквенција максимума криве $g(f)$ одговара фреквенцији емисије за примењено поље, а налажењем максималних вредности криве за различите вредности поља добија се зависност материјалног појачања од електричног поља $g(K)$. Налажењем вредности густине струје за свако електрично поље добија се $J(K)$. График у горњем десном делу слике 3.1 приказује фреквенцију емисије у функцији електричног поља $f(K)$. Повећање кривих на слици 3.1 ка вишим фреквенцијама са повећањем поља последица је Штарк-овог ефекта. На слици 3.2, приказана је зависност материјалног појачања $g(K)$ и густине струје $J(K)$ од електричног поља.

Максимум криве $g(K)$ одговара резонантном тунеловању између ИЛН и ГЛН које доводи до оптималног поравнања енергетских нивоа, што омогућава најефикаснији пренос носилаца. Међутим, поље максималног појачања није исто као оно при коме струја достиже највећу вредност. Даљим повећањем електричног поља, нарушава се резонантно поравнање нивоа, долази до пораста расејања и декохеренције таласних функција, што доводи до смањења струје. У тачки K_{NDR} густина струје $J(K)$ достиже свој максимум, након чега се струја смањује упркос растућем пољу, док материјално појачање нагло опада.

У NDR тачки, уређаји углавном нагло престају да емитују, па NDR тачка представља поуздан показатељ карактеристика ККЛ-а. Она дефинише максималну густину струје при којој ласер може да функционише, док емисија започиње при оној вредности густине струје за коју је материјално појачање једнако прагу појачања. У пракси рад ККЛ-а се одвија између резонантног поља и NDR поља, то јест у области где је појачање довољно велико, а струја није достигла вредност при којој долази до нестабилности или престанка ласеровања.



Слика 3.2. Зависност материјалног појачања и густине струје од електричног поља. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Поглавље 4

Моделовање технолошких несавршености нарастања ККЛ-а

Како је већ детаљније објашњено у секцији 1.4.1, THz ККЛ-и се најчешће нарастају епитаксијом молекулским снопом која омогућава контролисани раст ултратанких слојева дебљине од неколико атомских монослојева, односно реда нанометра. ЕМС је процес у коме, у условима веома високог вакуума, долази до реакције термалних молекула (или атома) са монокристалном подлогом која је загрејана на температуру која омогућава епитаксијални раст [53].

Током нарастања ККЛ-а, чак и мала одступања могу значајно утицати на њихове перформансе. У овом поглављу су детаљно представљена три нежељена ефекта који настају услед технолошких несавршености нарастања ККЛ-а: позадинско допирање, интердифузија (мешање материјала у непосредном контакту, односно, баријере и јаме, на повишеној температури) и флуктуација дебљине слојева. Разматран је њихов утицај на транспортно-оптичке карактеристике ових уређаја, односно на зависност материјалног појачања од примењеног спољашњег електричног поља и на струјно-напонску карактеристику, чије је рачунање описано у секцији 3.7. Резултати су приказани на ЛО фононском тројамном [46], ВТС [51] и хибридном [35] дизајну THz ККЛ-а, описаним у секцији 1.3, а посебна пажња посвећена је ЛО фононском двојамном дизајну са рекордном температуром [33], описаним у секцији 1.3. Подаци о активним областима моделованих ККЛ-а дати су у Додатку А

Позадинско допирање нежељеним n - или p -типом примеса присутно је у сваком слоју структуре због нечистоћа у материјалима унутар ефузионих ћелија и услед нечистоћа из саме машине за ЕМС. Иако је позадинско допирање експериментално познат ефекат [55], његово моделовање није присутно у литератури. Раст ККЛ-а методом ЕМС одвија се на високим температурама, што их чини подложним интердифузији (што има за последицу повећање моларног удела AlAs у јами и смањење у баријери), па реални ККЛ-и немају оштре прелазе између слојева, што може имати значајан утицај на њихов рад [99]. Раст ККЛ-а ЕМС-ом одвија се слој по слој, при чему се време раста сваког слоја израчунава у зависности од жељене дебљине слоја и флукса молекула који падају на супстрат. Због варијација у интензитету флукса, слојеви се често нарасту са дебљинама различитим од планираних, што се назива флуктуација дебљине слојева. Резултати приказани у овом поглављу објављени су у ауторовом раду [59].

4.1 Позадинско допирање

Позадинско допирање је ефекат нежељеног уношења n или p нечистоћа у сваки слој. Потиче од контаминације материјала у ефузионим ћелијама или нечистоћа у самој ЕМС машини. Анализиран је утицај n - и p -типа позадинског допирања на транспортно-оптичке карактеристике код ЛО фононског тројамног [46], ВТС [51] и хибридног [35] дизајна THz ККЛ-а, описаним у

секцији 1.3, као и у Додатку А, ради одређивања њихове осетљивости и критичне концентрације нечистоћа при којима долази до значајног нарушавања транспорта.

Позадинско допирање мења профил допирања и укупан број електрона у структури што утиче на Хартријев члан у 1D Шредингеровој једначини у апроксимацији ефективне масе датој једначином (2.3), као и на Поасонову једначину дату једначином (2.4). Ове две једначине решавају се само-самосагласним поступком, описаном у секцији 2.11, заједно са једначином кинетичког биланса, која је дата једначином (2.36) код израчунавања електронске структуре. Енергије подзона, одговарајуће таласне функције и вероватноће расејања добијене само-самосагласним поступком користе се у даљем прорачуну у моделу матрице густине, као што је то детаљно описано у поглављу 3, за одређивање Хамилтонијана интеракције између суседних периода, датог једначином (3.5), дисипативних чланова датих једначинама (3.8) и (3.9), као и Хамилтонијана централне периоде датог једначином (3.14). Даље се ове величине користе за решавање система једначина матрице густине, датог једначином (3.15), на основу кога се рачунају густина струје која је дата једначином (3.20), и материјално појачање које је дато једначином (3.21) и одређивање транспортно оптичких карактеристика, као што је то описано у секцији 3.7. Следи да било која промена профила допирања и укупног броја електрона утиче на излазне карактеристике ККЛ-а које дефинишу његове перформансе и могућност рада.

У THz ККЛ-има је типично највећа квантна јама намерно допирана n -типом примеса концентрације $N_D(z)$, и управо ти носиоци одређују радне карактеристике уређаја. За моделовање позадинског допирања, претпостављено је да су сви слојеви у структури равномерно допирани додатним нечистоћама (допантима), што даје ефективни профил допирања $N_{\text{eff}}(z)$.

У случају n -типа позадинског допирања, профил допирања се мења повећањем концентрације у сваком слоју за густину позадинског допирања $N_B(z)$:

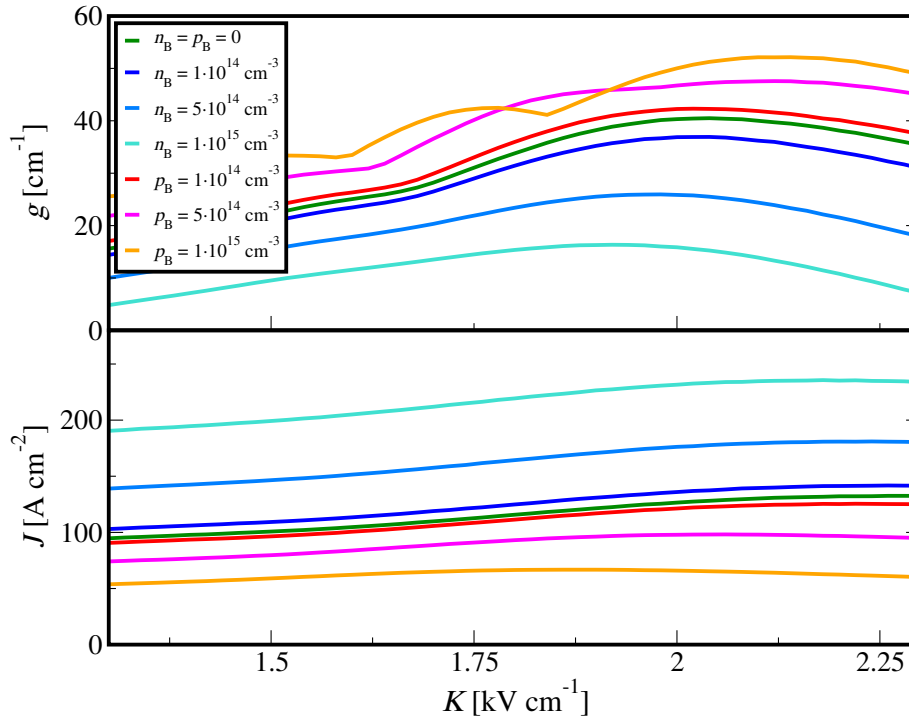
$$N_{\text{eff}}(z) = N_D(z) + N_B(z). \quad (4.1)$$

У случају p -типа позадинског допирања, ситуација је сложенија, јер структура садржи и n - и p -тип допаната, па једноставно смањивање концентрације n -допаната у сваком слоју није физички исправно. Како p -допанти доводе до повећања броја шупљина у валентној зони, долази до повећања вероватноће рекомбинације парова електрона и шупљина, што ефективно смањује концентрацију електрона у проводној зони $n_e(z)$. За моделовање овог ефекта коришћен је феноменолошки приступ у коме је само промењена ефективна концентрација $N_{\text{eff}}(z)$ у слојевима који су намерно допирани тако да укупна површинска густина носилаца буде једнака густини носилаца $N_D \cdot l_D$ умањеној за позадинску густину по површини $P_B \cdot l_{\text{total}}$ у слоју p -типа:

$$N_{\text{eff}} = \frac{N_D \cdot l_D - P_B \cdot l_{\text{total}}}{l_D}, \quad (4.2)$$

где је l_D дужина намерно допираних слојева, а l_{total} укупна дужина једне периоде ККЛ-а. Физичка мотивација за овакав приступ лежи у чињеници да рекомбинација носилаца који потичу од намерног допирања N_D са шупљинама насталим услед присуства p -типа позадинских нечистоћа доводи до смањења густине струје, што је овде имплицитно узето у обзир кроз смањење површинске густине носилаца. При ниским температурама позадински допанти могу бити делимично или недовољно јонизовани, па овај модел даје процену, а не тачну вредност интензитета ефекта.

Утицај n - и p -типа позадинског допирања на транспортно-оптичке карактеристике испитан је променом њиховог профила допирања коришћењем једначина (4.1) и (4.2). На слици 4.1 приказано је како промена густине позадинског допирања утиче на материјално појачање и густину струје у функцији спољашњег електричног поља у случају BTC ККЛ-а [51].



Слика 4.1. Зависност материјалног појачања и густине струје од електричног поља за различите вредности позадинског допирања n - и p -типа у случају ВТС ККЛ-а [51]. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

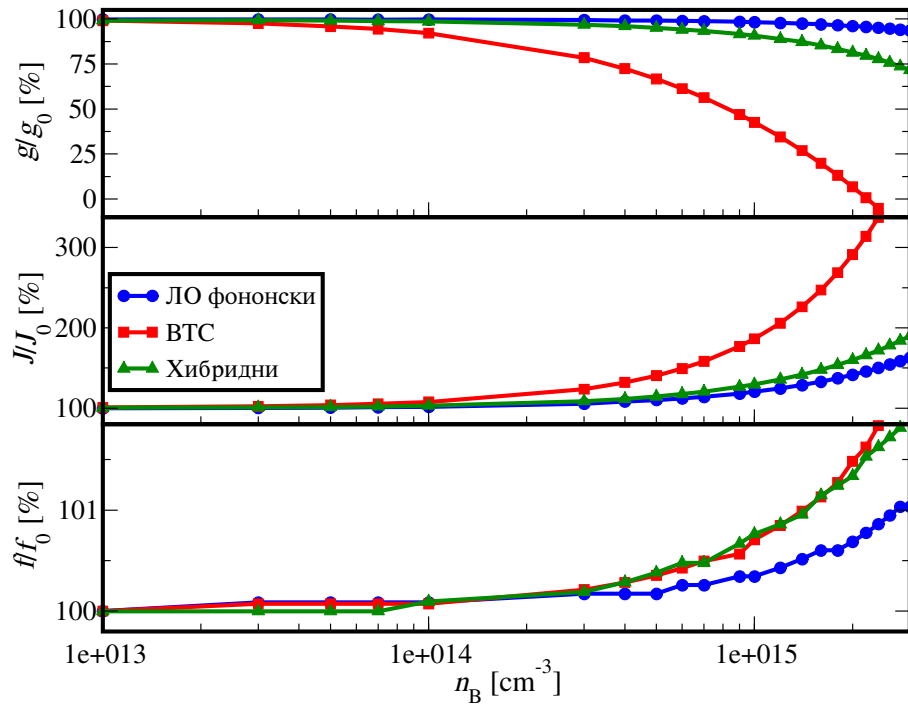
У случају n -типа позадинског допирања укупан број електрона се повећава. То доводи до повећања густине струје, што затим доводи и до смањења материјалног појачања у односу на случај без позадинског допирања, што је приказано на слици 4.1. Насупрот томе, p тип позадинског допирања доводи до смањења густине струје услед рекомбинације електрона и шупљина, што доводи до повећања материјалног појачања.

Можемо закључити да n -тип позадинског допирања повећава густину струје, док је p -тип смањује. Међутим, не можемо уопштено закључити како ће ово утицати на материјално појачање, јер за сваки ТНз ККЛ дизајн постоји оптималан ниво допирања. Важно је нагласити да ово значи да позадинско допирање утиче на то у којој мери морамо компензовати номинални ниво допирања.

Да би се одредили осетљивост и концентрације позадинског допирања при којима се транспортне карактеристике значајно мењају код различитих дизајна ТНз ККЛ, варирана је концентрација n - и p -типа позадинског допирања од 0 cm^{-3} до $3.0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ за три дизајна [35, 46, 51]. Резултати су приказани на слици 4.2 и на слици 4.3, а приказане вредности су дате релативно у односу на вредности које сваки дизајн има без позадинског допирања, за вредност спољашњег електричног поља око максимума материјалног појачања. Вредности материјалног појачања, густине струје, фреквенције емисије и спољашњег електричног поља за ова три дизајна [35, 46, 51] дати су у табели 4.1 за задато електрично поље око максимума материјалног појачања.

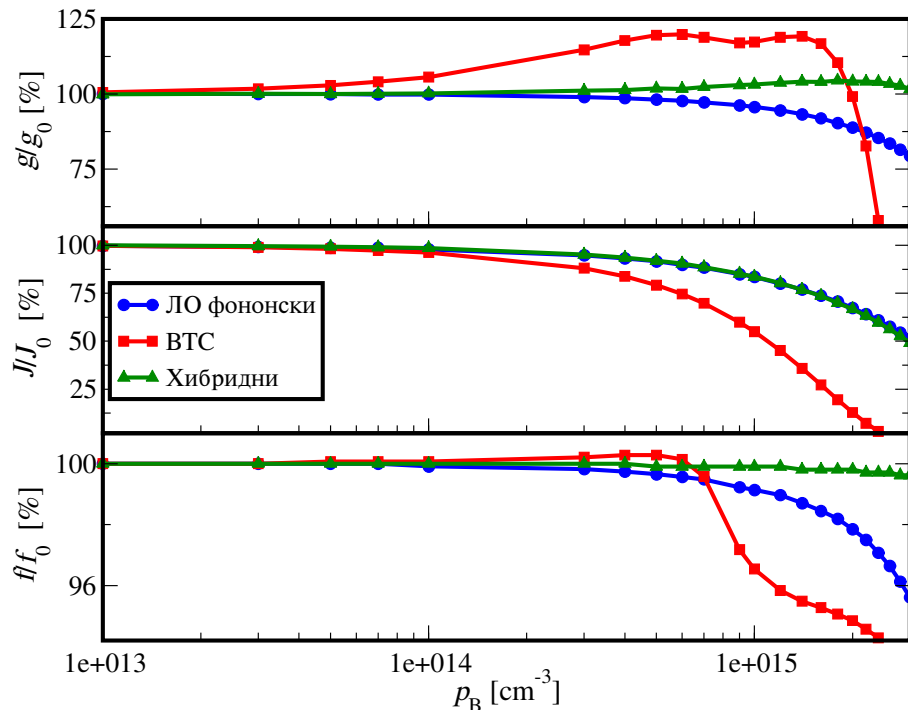
На слици 4.2 је приказано да n -тип позадинско допирање значајно повећава густину струје у сва три дизајна и благо повећава фреквенцију емисије (до $\sim 2\%$). Материјално појачање је значајно смањено код ВТС дизајна, што га чини најосетљивијим на n -тип позадинско допирање, затим следи хибридни, а најмање осетљив је ЛО фононски тројамни дизајн. ВТС престаје са ласеровањем при концентрацији позадинског допирања од око $1.0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, када његово материјално појачање пада на вредност прага од 20 cm^{-1} .

Хибридни и ЛО фононски тројамни дизајни имају повећану струју, док њихово појачање није значајно смањено, због чега су робустнији него ВТС дизајн, али уз цену повећаног прага струје и загревања у импулсном режиму, што може ограничити или онемогућити континуални рад хибридних структура.



Слика 4.2. Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије за различите ККЛ дизајне [35, 46, 51] у зависности од концентрације n -позадинског допирања приказане релативно у односу на вредности које је свака структура имала без позадинског допирања при спољашњем електричном пољу око максимума материјалног појачања (дате у табели 4.1). Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

На слици 4.3 видимо да код p -типа позадинског допирања густина струје опада (до $\sim 5\%$), а фреквенција емисије се благо смањује. За концентрације око $2.0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ густина струје ВТС дизајна опада скоро до нуле. Његово материјално појачање у почетку расте (због малог пада струје), али потом нагло опада како се густина струје све више смањује.



Слика 4.3. Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије за различите ККЛ дизајне [35, 46, 51] у зависности од концентрације p -позадинског допирања приказане релативно у односу на вредности које је свака структура имала без позадинског допирања при спољашњем електричном пољу око максимума материјалног појачања (дате у табели 4.1). Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

ЛО фононски тројамни дизајн је осетљивији на p -тип допирања него хибридни, јер му материјално појачање опада, док хибридни не показује значајну промену. Као и у случају n -типа допирања, ВТС престаје са ласеровањем за концентрације позадинског допирања између $1.0 \cdot 10^{15}$ и $2.0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

Табела 4.1. Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије за три дизајна THz ККЛ-а [35, 46, 51], при спољашњем електричном пољу око максимума материјалног појачања. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), текст је преведен.

ККЛ дизајн	$g_0[\text{cm}^{-1}]$	$J_0[\text{Acm}^{-2}]$	$f_0[\text{THz}]$	$K_0[\text{kVcm}^{-1}]$
ЛО фононски тројамни	74.4	948.4	3.49	13.0
ВТС	38.2	121.5	2.13	1.9
Хибридни	40.0	229.0	3.66	7.5

Физичко објашњење резултата приказаних на сликама 4.2 и 4.3 добија се из електронске структуре анализираних ККЛ-а, приказане у Додатку А. ВТС дизајн има низак праг струје, малу вредност електричног поља и ради на ниским фреквенцијама ($<2.5 \text{ THz}$). Због тога је веома осетљив на варијације у профилу допирања, јер је утицај Хартјевог потенцијала значајнији него код ЛО фононског тројамног и хибридног дизајна (са већим допирањем, долази до већег кривљења потенцијалне енергије дна проводне зоне). ВТС има дугачке периоде, па је због присуства позадинског допирања у сваком слоју укупна површинска густина допаната већа него код дизајна са краћим периодима. Ова два фактора чине ВТС најосетљивијим.

ЛО фононски тројамни дизајн има висок праг струје, високу вредност електричног поља и кратку периоду, па је утицај Хартјевог потенцијала мањи. Међутим, овај дизајн захтева прецизно поравнање резонантних стања, па како сваки THz ККЛ има оптималан ниво допирања и он има умерену осетљивост.

Хибридни дизајн комбинује особине оба: депопулација ДЛН преко ЛО фонона и брзог дијагоналног релаксационог канала преко мини зоне, а доњи ниво може бити део мини зоне ради боље инјекције у ГЛН наредне периоде. Зато хибридни дизајн има умерен праг струје, умерену вредност електричног поља и дугачке периоде [100]. Његова осетљивост није универзална јер ако је периода јако дуга, више личи на ВТС са нижим прагом [100] и допринос Хартјевог потенцијала би био значајнији, док за кратке периоде, више личи на ЛО фононски дизајн. Поједини хибридни дизајни могу бити и врло робусни (као на сликама 4.2 и 4.3), ако је утицај Хартјевог потенцијала због допирања слаб (побеђујући недостатке ВТС дизајна), а пумпање ЛГН ефикасније него у ЛО фононском дизајну (побеђујући недостатке ЛО фононског дизајна).

Коришћени модел који смо описали једначинама (4.1) и (4.2) је феноменолошки, али концентрације позадинског допирања при којима се транспорт значајно мења, приказане на сликама 4.2 и 4.3), сагласне су са експериментима који показују да концентрације позадинског допирања $>5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (p -тип) имају изразито непожељан утицај на рад THz ККЛ-а [55].

Позадинско допирање n -типа доводи до повећања густине струје услед већег броја електрона, али истовремено смањује материјално појачање. За ВТС дизајн појачање се значајно умањује и ласер престаје са радом већ око концентрације позадинског допирања $1.0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, што овај дизајн чини најосетљивијим на n -тип позадинског допирања. Следи хибридни дизајн, док је ЛО фононски дизајн најмање осетљив.

Позадинско допирање p -типа, услед рекомбинације електрона и шупљина, смањује густину струје, што доводи до повећања материјалног појачања. Међутим, уколико је густина струје сувише умањена, структура може престати са ласеровањем. За концентрацију позадинског допирања p -типа од $2.0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, густина струје у ВТС дизајну пада готово на нулу, што га поново чини најосетљивијим на овај ефекат. Моделовани ЛО фононски дизајн показује нешто већу осетљивост него хибридни дизајн.

4.2 Интердифузија

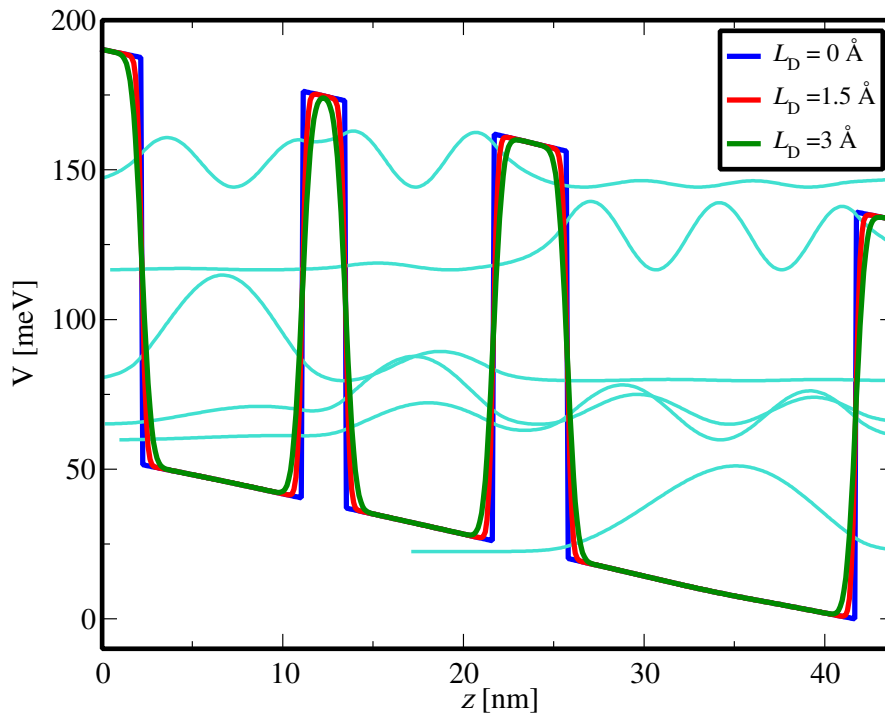
Високе температуре током раста ЕМС-ом чине ККЈЛ-е подложне интердифузији, то јест, дифузији композиције баријерног материјала (Al у AlGaAs), па реални уређаји немају идеално оштре спојеве између слојева јама и баријера, што може значајно утицати на рад ласера [99].

Интердифузија на спојевима хетероструктуре описана је Фиковим законом дифузије који је примењен на композицију баријерног материјала x , конкретно Al компоненте. Нумерички је решен коришћењем методе коначних разлика. У случају једнодимензионих структура Фиков закон се може дискретизовати као:

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2}, \quad (4.3)$$

$$\frac{x(z_i, t_{j+1}) - x(z_i, t_j)}{dt} = D_x \frac{x(z_{i+1}, t_j) - 2x(z_i, t_j) + x(z_{i-1}, t_j)}{(dz)^2}, \quad (4.4)$$

где су dz и dt редом кораци координатне и временске мреже. За сваку вредност времена, састав се израчунава за целу структуру коришћењем вредности из претходног временског тренутка. Време дифузије t повезано је са дужином дифузије $L_D = \sqrt{Dt}$. Дифузијом композиције баријерног материјала описана је реалистичнија вредност потенцијалне енергије дна проводне зоне $V_c(z)$, као и профил ефективне масе $m^*(z)$, јер обе зависе од вредности композиције баријерног материјала x , што утиче на 1D Шредингерову једначину у апроксимацији ефективне масе дату једначином (2.3) и доводи до промене електронске структуре, која се користи у МГ прорачуну, описаном у поглављу 3, и доводи до промене транспортно-оптичких карактеристика, као што је то описано у секцији 3.7.

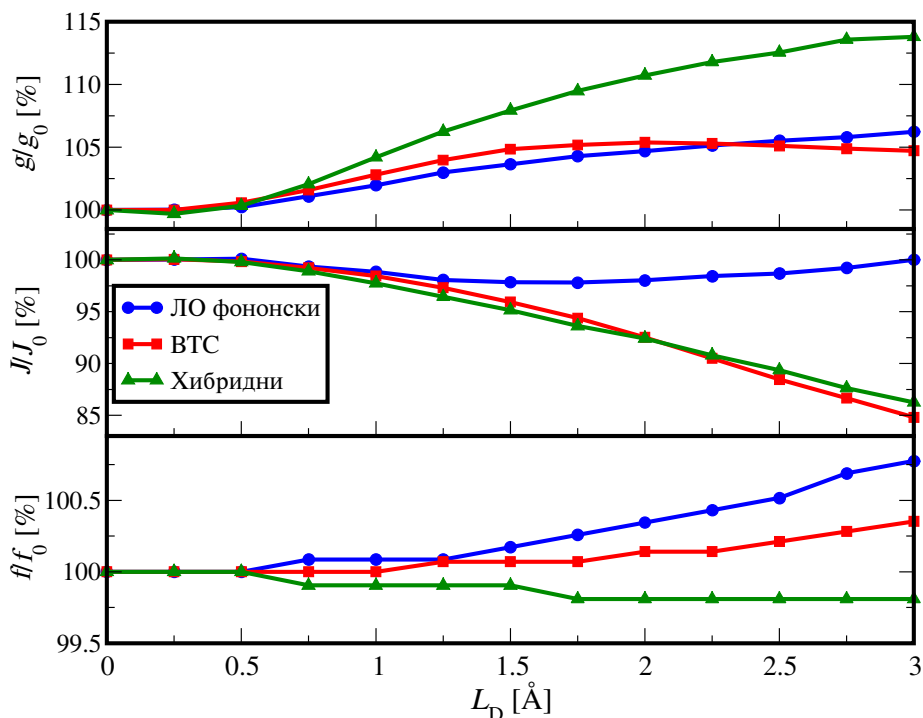


Слика 4.4. Дно проводне зоне ЛО фоноског тројамног THz ККЈЛ-а са радном температуром од 200 K [46] за различите дифузионе дужине интердифузије. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Претпостављено је да сви спојеви у структури имају исту дифузиону дужину $L_D = \sqrt{Dt}$. На слици 4.4 приказано је како интердифузија утиче на профил проводне зоне на примеру ЛО фоноског тројамног дизајна [46]. Преношењем материјала баријере из слојева баријера у слојеве јама, интердифузија ефективно проширује горњи део и сужава доњи део слојева јама. Ово

доводи до благог пораста енергија електронских стања, што доводи до промене фреквенције емисије. Промена постаје израженија са порастом дифузионе дужине.

Ради испитивања осетљивости THz ККЛ дизајна на интердифузију, варирана је дифузиона дужина од 0 Å до 3.0 Å у целој структури, за сва три моделована дизајна [35, 46, 51]. На слици 4.5 приказани су резултати релативно у односу на вредности које је сваки дизајн имао без интердифузије, при спољашњем електричном пољу у близини максимума материјалног појачања приказаним у табели 4.1. Са слике 4.5 уочавамо да интердифузија доводи до повећања материјалног појачања код свих дизајна, а за ВТС и хибридни дизајн и до смањења густине струје. Смањење густине струје настаје услед ширења инјекционе баријере, што смањује вероватноћу резонантног тунеловања кроз инјекциону баријеру у ГЛН наредне периоде, и тиме смањује струју тунеловања.



Слика 4.5. Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије у зависности од дифузионе дужине интердифузије за различите ККЛ дизајне [35, 46, 51]. Приказане су релативне вредности у односу на вредности које је сваки дизајн имао без интердифузије, при изабраном спољашњем електричном пољу око максимума материјалног појачања приказаним у табели 4.1). Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

Резултати показују да су ВТС и хибридни дизајн осетљивији на интердифузију у односу на ЛО фононски тројамни дизајн. Физичко објашњење следи из тога да су неки од слојева у овим дизајнима доста уски, због чега је релативна промена настала услед интердифузије код њих доста већа.

4.3 Флукуација дебљине слојева

Раст ККЛ-а процесом епитаксије молекулским снопом одвија се слој по слој, а време раста сваког слоја одређује се на основу жељене дебљине и интензитета молекуларног флукса. Како интензитет флукса није потпуно стабилан, он може варирати током раста, што доводи до тога да дебљина слојева одступа од пројектоване. Утицај флукуације дебљине слојева испитан је моделовањем варијација структура код којих су дозвољене случајне флукуације од ± 1 монослоја (2.8 Å у систему $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) за сваки слој, што значи да у свакој варијацији структуре сваки слој може бити промењен за ± 1 монослој или може остати непромењен. Оваква промена утиче на 1D Шредингерову једначину у апроксимацији ефективне масе дату једначином (2.3)

и доводи до промене електронске структуре, која се користи у МГ прорачуну, описаном у поглављу 3, и доводи до промене транспортно-оптичких карактеристика, као што је то описано у секцији 3.7, показујући зашто више узорака истог дизајна експериментално имају различите перформансе, што је чест случај у пракси.

Симулирано је 500 насумичних варијација ове три структуре, и израчуната је средња вредност, стандардна девијација (STD) и корен средње квадратне грешке (RMSE) материјалног појачања, густине струје и фреквенције емисије на вредности спољашњег електричног поља које одговара тачки негативног диференцијалног отпора (NDR), то јест максимуму густине струје, за сваки репрезентативни уређај што је приказано у табели 4.2. Резултати су приказани релативно у односу на вредности код структура чије су дебљине слојева једнаке пројектованим, приказаним у табели 4.3.

Табела 4.2. Средња вредност, стандардна девијација и корен средње квадратне грешке материјалног појачања, густине струје и емисионе фреквенције на вредности спољашњег електричног поља које одговара NDR тачки за три различита ККЛ дизајна [35, 46, 51] добијених из 500 насумичних варијација структура, приказаних релативно у односу на вредности код структура чије су дебљине слојева једнаке пројектованим у NDR тачки. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), текст је преведен.

ККЛ дизајн	ЛО фононски тројамни	ВТС	Хибридни
g_{mean}/g_0 [%]	84.0	86.8	95.3
g_{STD}/g_0 [%]	23.4	32.6	29.9
$(g_0 \pm g_{\text{RMSE}})/g_0$ [%]	100 ± 28.4	100 ± 35.1	100 ± 30.3
J_{mean}/J_0 [%]	100.5	100.7	94.0
J_{STD}/J_0 [%]	20.1	13.1	20.7
$(J_0 \pm J_{\text{RMSE}})/J_0$ [%]	100 ± 20.1	100 ± 13.1	100 ± 21.6
f_{mean}/f_0 [%]	93.1	99.8	97.8
f_{STD}/f_0 [%]	17.2	8.8	9.2
$(f_0 \pm f_{\text{RMSE}})/f_0$ [%]	100 ± 18.5	100 ± 8.8	100 ± 9.4

Вредности материјалног појачања, густине струје и фреквенције емисије за три дизајна THz ККЛ-а [35, 46, 51] код структура чије су дебљине слојева једнаке пројектованим, при спољашњем електричном пољу које одговара NDR тачки, то јест максимуму густине струје, приказане су у табели 4.3.

Табела 4.3. Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије за три дизајна THz ККЛ-а [35, 46, 51], при спољашњем електричном пољу које одговара NDR тачки. Преузето из сопственог рада [59], под Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>) условима, текст је преведен.

ККЛ дизајн	g_0 [cm ⁻¹]	J_0 [Acm ⁻²]	f_0 [THz]	K_0 [kVcm ⁻¹]
ЛО фононски тројамни	46.1	1291.2	3.77	14.3
ВТС	34.7	132.6	2.16	2.3
Хибридни	34.3	234.5	3.73	7.8

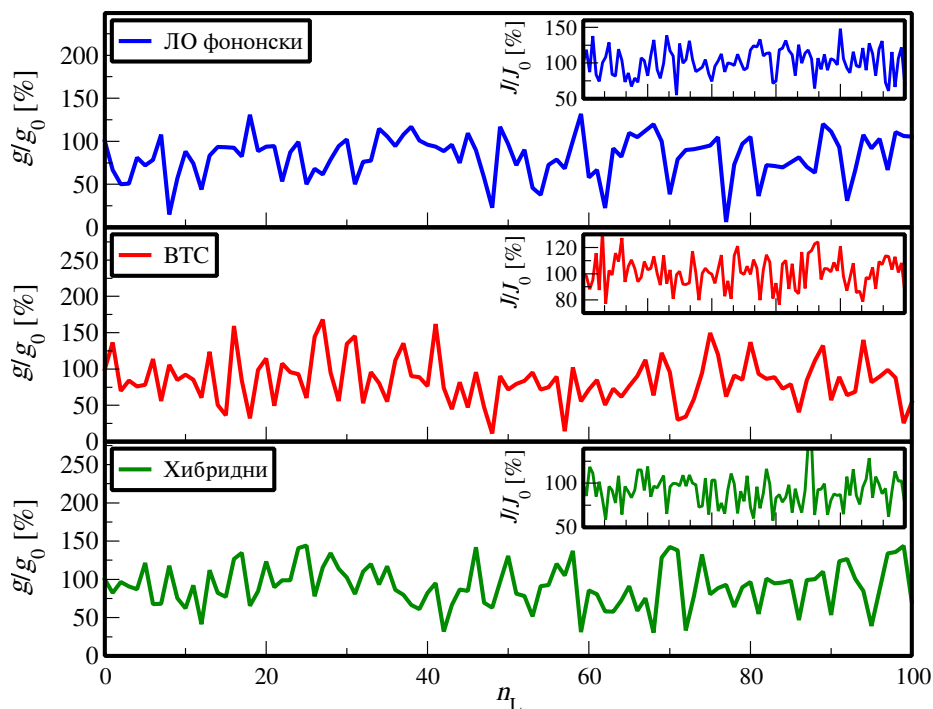
Материјално појачање и густина струје за првих 100 насумичних варијација дебљина слојева за три ККЛ дизајна приказани су на слици 4.6 релативно у односу на вредности материјалног појачања и густине струје код структура чије су дебљине слојева једнаке пројектованим при спољашњем електричном пољу које одговара NDR тачки, приказаним у табели 4.3

Из табеле 4.2 можемо уочити да је материјално појачање највише промењено флукуацијама дебљине слојева, јер има највеће смањење средњих вредности и највећи RMSE. Следи густина струје, док је фреквенција емисије најмање захваћена и не мења се значајно. Због овако великог варирања материјалног појачања, значајан број насумичних варијација структуре има материјално појачање испод вредности прага и не може остварити ласеровање. За метал-метал

таласовод типични губици (у опсегу фреквенција 2–4 THz) износе око 20 cm^{-1} , што одговара релативним вредностима материјалног појачања са слике 4.6 од 43.3 %, 57.6 % и 58.3 % за ЛО фононски, ВТС и хибридни дизајн, редом.

Како су коришћени насумично генерисани низови вредности -1 , 0 и $+1$ за сваки слој, сваки слој је статистички био вариран (погрешан) у 66.67 % случајева. То значи да што дизајн садржи већи број слојева, то је већи и број грешака у насумичним варијацијама. Пошто моделирани ЛО фононски дизајн има 6 слојева, ВТС дизајн 16, а хибридни дизајн 8 слојева, просечан број грешака у варијацијама дебљина слојева био је 4, 10.67 и 5.33, редом. Иако резултати у табели 4.2 показују да RMSE материјалног појачања ЛО фононског дизајна јесте нешто мањи од RMSE за ВТС и хибридни дизајн, ова вредност је постигнута уз мањи просечан број варијација, због чега се ЛО фононски дизајн показао као најосетљивији на флукуације дебљине слојева, а након њега хибридни дизајн.

Већа осетљивост ЛО фононског дизајна, као и у мањој мери хибридног дизајна, потиче од њихове зависности од расејања електрона на ЛО фононима као механизма екстракције. Промена дебљине слојева мења енергије подзона, које су пројектоване да буду распоређене тако да омогуће рад ККЛ-а путем екстракције засноване на електрон – ЛО фонон расејању. ВТС дизајн остварује екстракцију из доњег ласерског нивоа у инјекциони ласерски ниво путем дијагоналних прелаза унутар мини зоне блиско раздвојених стања, што га чини отпорнијим на промене енергија подзона, па стога може поднети већи број грешака без губитка функционалности. Из истог разлога је хибридни дизајн робуснији од ЛО фононског дизајна, јер је његов доњи ласерски ниво мини зона који се ка инјекционом ласерском нивоу расејава електрон – ЛО фонон расејањем.



Слика 4.6. Материјално појачање и густина струје за првих 100 насумичних варијација структура за сва три дизајна ККЛ-а [35, 46, 51]. Резултати су приказани релативно у односу на вредности материјалног појачања и густине струје код структура чије су дебљине слојева једнаке пројектованим, при спољашњем електричном пољу NDR тачке, приказаним у табели 4.3. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

На слици 4.6 су приказани ефекти флукуација дебљине раста слојева који би били карактеристични за ЕМС системе лошијег квалитета. Типичне толеранције савремених ЕМС система који се користе за раст THz ККЛ-а су углавном значајно испод ± 1 монослоја. Много вероватнији реалан ефекат јесте флукуација упадног флукса током средњих и касних стадијума раста ККЛ-а, који обично садрже преко 100 периода. То би значило да касније периоде у ККЛ-у могу

имати састав различит од планираног, што је са аспекта моделовања изазовно јер може довести до формирања домена електричног поља [101, 102] и неуједначене расподеле напона, чиме се онемогућава приступ моделовања електронске структуре једне периоде. Ипак, може се закључити да флуктуације дебљине раста слојева ограничавају репродуктивност израде ККЛ-а, јер су присутне чак и код ЕМС система са малим толеранцијама дебљине слојева.

Утврђено је да флуктуације дебљине слојева могу довести до значајних промена у материјалном појачању и густини струје код ККЛ-а, а у појединим случајевима и до раста структура које уопште не могу да раде. Због осетљивости механизма расејања електрон – ЛО фонон на енергетску разлику између енергија подзона, структуре које се за екстракцију ослањају на овај механизам, као што је ЛО фононски дизајн, и у мањој мери хибридни дизајн, испољавају већу осетљивост. ВТС дизајн је отпорнији на померање енергија подзона и стога може да поднесе већи број флуктуација током раста, а да и даље функционише. Толеранције савремених ЕМС система су знатно мање од ± 1 монослоја, али приказани резултати показују колико је осетљив процес раста THz ККЛ-а, и да чак и при малим толеранцијама флуктуација овај ефекат може утицати на репродуктивност раста THz ККЛ-а.

4.4 Осетљивост високотемпературских ККЛ-а

THz ККЛ су радили у импулсном режиму [46] на температурама испод 200 K, све до постижања рекорда радне температуре најпре на 210 K [103] коришћењем ЛО фононског двојамног дизајна са високим баријерама ($x = 0.25$), а затим на 250 K и 261 K [33, 104], где су примењене још више баријере ($x = 0.25 - 0.3$). Ова последња два рекорда заснивају се на високим ЛО фононским енергијама депопулације (> 48 meV), а у радовима [100, 105] предложени су слични дизајни и показано је да више баријере и веће ЛО фононске енергије депопулације могу довести до рада на вишим температурама.

Физички, расејање електрона на ЛО фононима на високим температурама постаје значајно на енергијама 10–70 meV [105], са максимумом на 36 meV у GaAs-у. Основно ограничење високотемпературног рада потиче од ЛО фононског расејања које смањује инверзну популацију између ласерских стања (размакнутих око 8–20 meV). Током развоја ККЛ-а, ЛО фононско расејање је сматрано идеалним механизмом депопулације ДЛН, па је већина оптимизованих дизајна користила енергију од 36 meV између ДЛН и ИЛН. Међутим, овај приступ није најповољнији за рад на високим температурама, јер ГЛН може да „цури“ ка ИЛН-у, а ефекат апсорпције ЛО фонона између ИЛН и ДЛН постаје израженији на резонантној ЛО фононској енергији, чиме се умањује ефикасност депопулације ДЛН стања. У раду [100] предложени су високотемпературни дизајни са преко 45 meV размака између ДЛН и ИЛН, и истакнуте предности виших баријера за рад на високим температурама. Најновија експериментална остварења ЛО фононских двојамних структура [33, 104] потврђују ове промене парадигме у дизајну THz ККЛ-а.

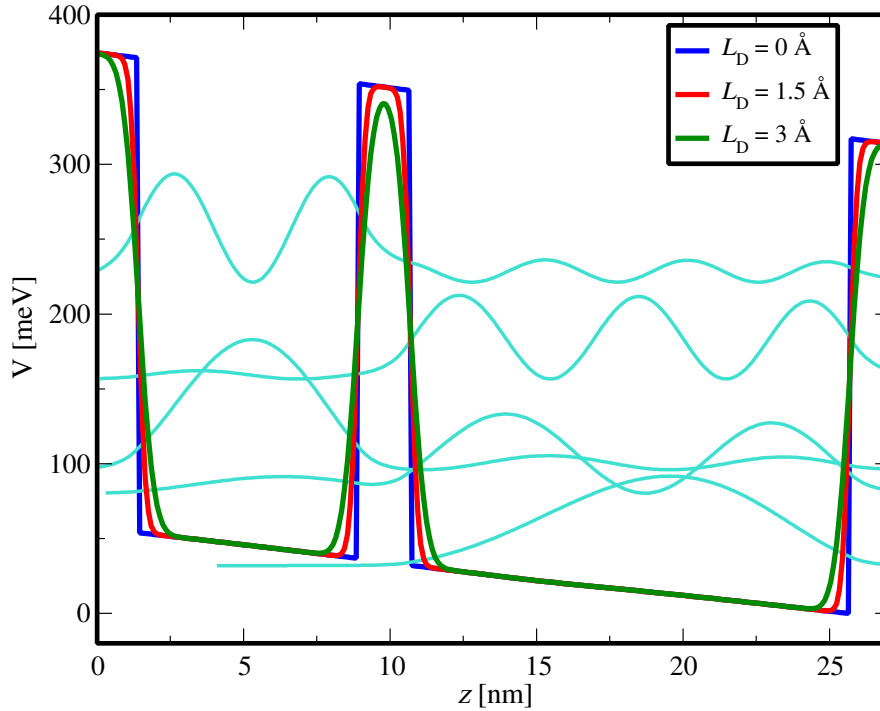
Претходно приказана анализа осетљивости ККЛ-а на технолошке несавршености раста приказана у секцијама 4.1, 4.2 и 4.3 примењена је на двојамни ЛО фононски THz ККЛ који је постигао импулсни рад на рекордној температури 261 K [33], описан у секцији 1.3, као и у Додатку А. Овај дизајн је нарочито значајан јер садржи само две квантне јаме по периоди, користи баријере са релативно високим уделом Al ($x = 0.35$) и заснива се на ЛО фононској енергији екстракције од 48.5 meV, што је значајно веће од резонантне ЛО фононске енергије од 36 meV, због чега може бити нарочито осетљив током процеса раста.

Вредности материјалног појачања, густине струје и фреквенције емисије за ЛО фононски двојамни дизајн са рекордном температуром рада од 261 K [33], при спољашњем електричном пољу око максимума материјалног појачања, као и у NDR тачки, која одговара максимуму струје, приказане су у табели 4.4.

Табела 4.4. Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије за ЛО фононски двојамни дизајн са рекордном температуром рада од 261 K [33], при електричном пољу око максимума појачања, као и у тачки негативног диференцијалног отпора, која одговара максимуму струје. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), текст је преведен.

ЛО фононски двојамни	$g_0[\text{cm}^{-1}]$	$J_0[\text{Acm}^{-2}]$	$f_0[\text{THz}]$	$K_0[\text{kVcm}^{-1}]$
Максимум појачања	65.0	2591.5	3.99	22.5
NDR тачка	64.2	2601.4	4.02	22.6

Прво је разматран ефекат интердифузије. На слици 4.7 приказано је како интердифузија утиче на профил дна проводне зоне ове структуре.

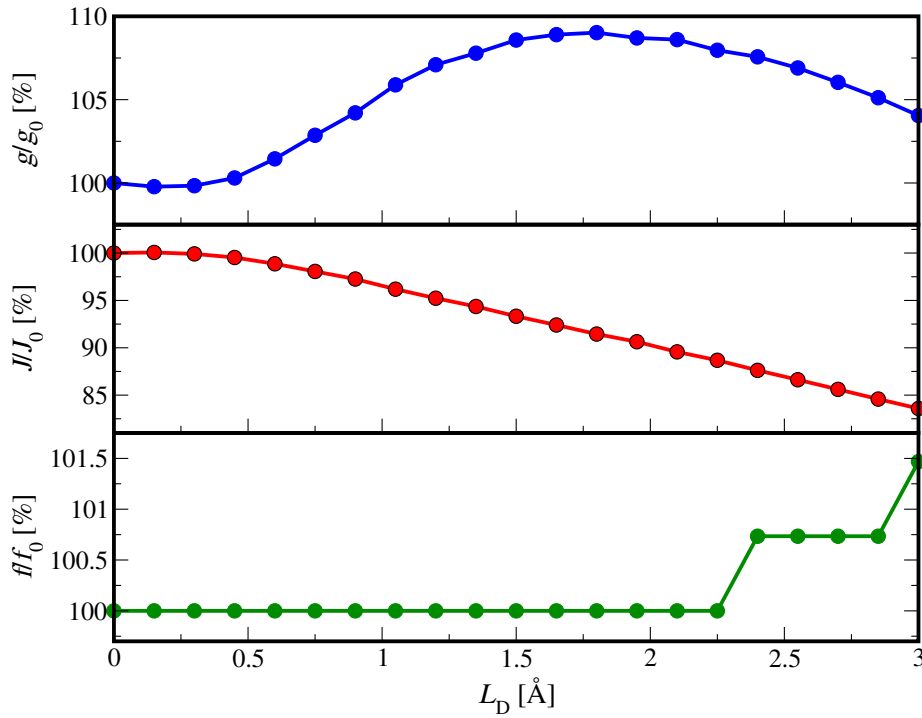


Слика 4.7. Дно проводне зоне ЛО фононског двојамног дизајна са рекордном температуром рада од 261 K [33] за различите дифузионе дужине интердифузије. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

На слици 4.8, слично као на слици 4.5, приказан је утицај интердифузије на материјално појачање, густину струје и фреквенцију емисије за двојамни дизајн, при чему су резултати приказани релативно у односу на вредности које структура има без интердифузије приказаним у табели 4.4, при изабраном спољашњем електричном пољу у околини максимума материјалног појачања. Резултати на слици 4.8 су слични резултатима ЛО фононског тројамног дизајна са слике 4.5 анализираних у секцији 4.2, али је осетљивост знатно већа у случају двојамног дизајна. Највећа разлика је што двојамна структура испољава велики пад густине струје са порастом дужине интердифузије. Ово се приписује знатно вишим баријерама у двојамној структури радне температуре 261 K (где је $x = 0.35$, па је висина баријера око 317 meV), у поређењу са тројамном структуром радне температуре 200 K (где је $x = 0.15$, па је висина баријера око 136 meV), као и чињеница да је разлика енергија за екстракцију између ДЛН и ИЛН у случају двојамног дизајна једнака око 48 meV.

Због већег удела алуминијума и веће висине баријере подзоне на вишим енергијама јаче су погођене интердифузијом, што је видљиво на слици 4.7. Резонантно тунеловање из ИЛН у ГЛН наредне периоде је ослабљено ширењем инјекционе баријере, што смањује струју тунеловања, и овај ефекат је израженији у случају двојамног него у случају тројамног дизајна (слика 4.4).

Утицај позадинског допирања на транспортно-оптичке карактеристике ЛО фононског двојамног ККЛ-а сличан је оном приказаном за ЛО фононски тројамни дизајн на сликама 4.2 и 4.3, те због тога није посебно анализиран.

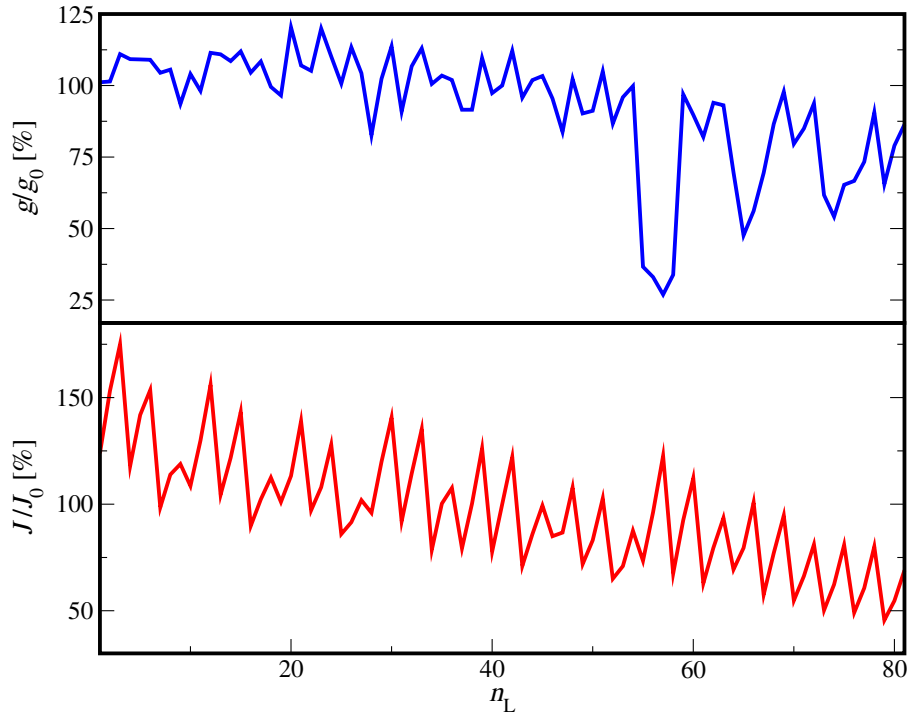


Слика 4.8. Материјално појачање, густина струје и фреквенција емисије у зависности од дифузионе дужине интердифузије ЛО фононског двојамног дизајна са рекордном температуром рада од 261 К [33]. Приказане су релативне вредности у односу на вредности које је дизајн имао без интердифузије при изабраном спољашњем електричном пољу око максимума материјалног појачања приказаним у табели 4.4. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

На слици 4.6 анализиран је утицај флукуације дебљине слојева приказивањем резултата првих 100 насумичних варијација дебљина слојева за три ККЛ дизајна, где је дозвољена флукуација дебљине слојева од ± 1 монослоја у сваком слоју активне области. Пошто 261 К структура има две јаме и две баријере, број слојева у једној периоди ККЛ-а је мали, па је релативно просто симулирати све могуће варијације дебљина слојева и одредити који је слој најосетљивији. Структура се састоји од укупно 4 слоја, при чему сваки слој може имати три могуће варијације дебљине ($-1, 0, +1$), што даје укупан број варијација $3^4 = 81$.

Систематично варирање дебљина сваког слоја за $(-1, 0, 1) \cdot 2.825 \text{ Å}$ урађено је коришћењем четири угнеђене петље у коду чији су бројачи узимали вредности $-1, 0$ и $+1$. Редослед слојева који су одговарали овим бројачима, од спољашње ка унутрашњој петљи, био је 3, 4, 1, 2, што значи да је спољашња петља контролисала варијацију трећег слоја, затим следећа петља варијацију четвртог слоја, потом петља за први слој (инјекциона баријера), а унутрашња петља контролисала је варијацију другог слоја. Варијација број 41 одговара дизајнираној структури без флукуација дебљина слојева, јер су бројачи у том случају једнаки 0, 0, 0, 0. Како спољашња петља управља варијацијом трећег слоја, прва трећина варијација (1–27) одговара вредности -1 за трећи слој, друга трећина (28–54) вредности 0, а последња трећина (55–81) вредности $+1$. Свака од ове три трећине има исту секвенцу бројача за преостала три слоја, разликујући се само у вредности варијације трећег слоја. На овај начин може се директно уочити осетљивост на флукуације трећег слоја (друге баријере).

Слика 4.9 приказује релативно материјално појачање и густину струје за свих 81 могућих варијација дебљине слојева код ЛО фононског двојамног ККЛ-а у NDR тачки. Дизајниране вредности структуре без флукуација у NDR тачки дате су у табели 4.4, док су средња вредност, стандардна девијација (STD) и корен средње квадратне грешке (RMSE) материјалног појачања, густине струје и фреквенције емисије приказани у табели 4.5.



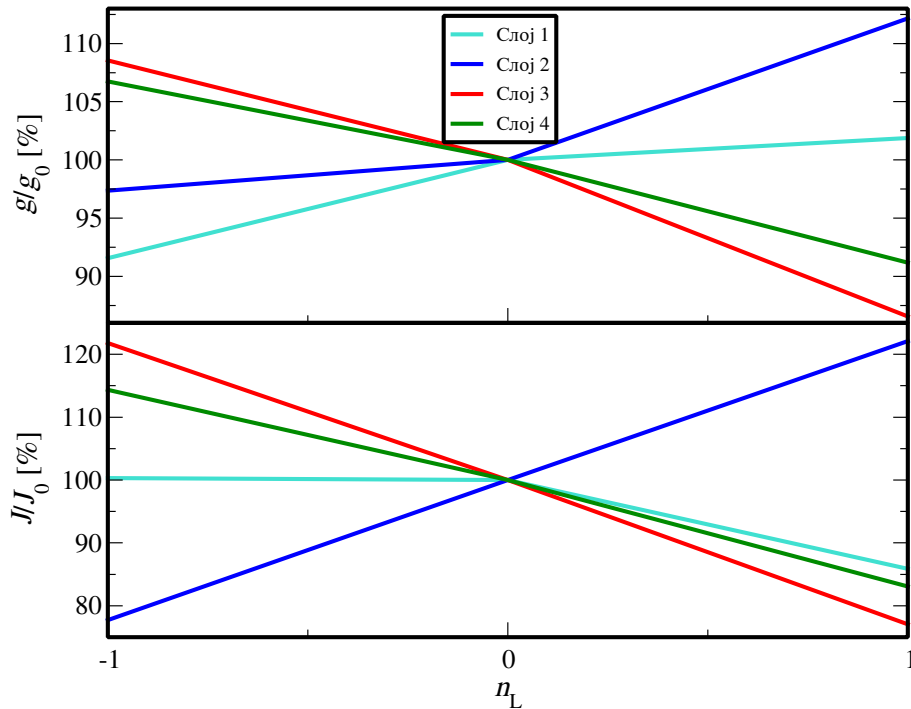
Слика 4.9. Материјално појачање и густина струје за свих 81 могућих варијација структуре. Резултати су приказани релативно у односу на вредности материјалног појачања и густине струје код структуре чије су дебљине слојева једнаке пројектованим, при спољашњем електричном пољу које одговара NDR тачки, приказаним у табели 4.4. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Табела 4.5. Средња вредност, стандардна девијација и корен средње квадратне грешке материјалног појачања, густине струје и фреквенције емисије за ЛО фононски двојамни ККЛ са рекордном радном температуром од 261 К [33], за свих 81 варијација структуре, у NDR тачки приказаних релативно у односу на вредности код структуре чије су дебљине слојева једнаке пројектованим. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), текст је преведен.

ККЛ дизајн	ЛО фононски двојамни
g_{mean}/g_0 [%]	92.1
g_{STD}/g_0 [%]	21.6
$(g_0 \pm g_{\text{RMSE}})/g_0$ [%]	100 ± 22.0
J_{mean}/J_0 [%]	97.8
J_{STD}/J_0 [%]	27.5
$(J_0 \pm J_{\text{RMSE}})/J_0$ [%]	100 ± 27.7
f_{mean}/f_0 [%]	106.0
f_{STD}/f_0 [%]	19.2
$(f_0 \pm f_{\text{RMSE}})/f_0$ [%]	100 ± 20.1

На слици 4.9 се може видети да материјално појачање и густина струје опадају са редним бројем варијације, при чему су највеће вредности у првој трећини варијација када је трећи слој промењен за -1 монослој, а најмање у последњој трећини варијација када је трећи слој промењен за $+1$ монослој. Ово показује да је код ЛО фононског двојамног дизајна трећи слој најосетљивији на варијације дебљине и да његово повећање значајно смањује и материјално појачање и густину струје. Физички објашњење овога је да дебљина друге баријере контролише колико је ласерски прелаз дијагоналан и утиче на енергетско раздвајање између ДЛН и ИЛН. Сужавањем овог слоја повећава се диполни момент између ласерских нивоа што доводи до већег материјалног појачања, док се ширењем баријере диполни момент смањује, што умањује материјално појачање.

Такође је варирана дебљина само једног слоја, при чему су сви остали слојеви задржали пројектовану дебљину, како би се приказао појединачан утицај сваког слоја на материјално појачање и густину струје у ЛО фононском двојамном ККЛ-у. Резултати на слици 4.10 дати су релативно у односу на дизајниране вредности без флукуација приказане у табели 4.4.



Слика 4.10. Материјално појачање и густина струје када је варирана дебљина само једног слоја, за сва четири слоја у структури у NDR тачки, релативно у односу на вредности материјалног појачања и густине струје код структуре чије су дебљине слојева једнаке пројектованим, приказаним у табели 4.4. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

Са слике 4.10 се може видети да је по утицају на материјално појачање и густину струје, трећи слој најосетљивији, затим други, па четврти. Варијација дебљина слојева мења енергетске нивое везаних стања и енергетски размак између ДЛН и ИЛН, што утиче на екстракцију из ДЛН, смањујући инверзну популацију између ГЛН и ДЛН, а тиме и материјално појачање. Смањење густине струје потиче од повећања енергетског размака између ИЛН и ГЛН, између којих се дешава резонантно тунеловање кроз инјекциону баријеру.

У овој секцији анализиран је ЛО фононски двојамни дизајн са рекордном радном температуром од 261 К [33], која се издваја по јединственој електронској структури и употреби високих баријера. Уочена је значајно већа осетљивост на интердифузију у односу на ЛО фононски тројамни дизајн [46] испитан у секцији 4.2, који има ниске баријере. Такође је анализиран утицај флукуација дебљина слојева у овом дизајну и утврђено је да је структура изразито осетљива на дебљину друге баријере, која одређује дијагоналност ласерског прелаза.

Овај дизајн је био предмет и засебног истраживања примене метода машинског учења у оптимизацији високотемпературских THz ККЛ-а [106], где је послужио као полазна структура за тренирање модела машинског учења и претрагу великог простора могућих конфигурација у циљу идентификације дизајна са побољшаним карактеристикама.

Ефекти разматрани у овом поглављу су од суштинског значаја за реализацију THz ККЛ-а у другим перспективним материјалним системима. Технологија раста у систему GaAs/Al_xGa_{1-x}As је зрела, али други материјални системи могу трпети од високих нивоа позадинског допирања или флукуација током раста. Слично томе, материјални системи који користе више баријере захтевају тање слојеве баријера, што их чини подложнијим интердифузији. Анализа спроведена у овом поглављу и објављена у ауторовом раду [59], има за циљ да истакне ове ефекте у систему GaAs/Al_xGa_{1-x}As и да послужи као водич за израду ККЛ-а у другим материјалним системима.

Поглавље 5

Унапређени трансфер матрични метод

Трансфер матрични метод (ТММ) је широко коришћен нумерички метод за решавање обичних диференцијалних једначина (ОДЈ), првобитно уведен као математички метод у статистичкој механици [107]. ТММ је нашао бројне примене као што су израчунавање карактеристика пропагације у планарним таласоводима [108, 109], истраживање спонтане емисије у DFB-ласеру [110, 111], анализа акустичних таласа у вишеслојним структурама [112–114], одређивање фотонске зонске структуре у фотонским кристалима [115–117], као и испитивање везаних стања у метал-оксид-полупроводничким (MOS) структурама и хетероструктурама са квантним јамама [118–122].

ТММ нуди интуитиван начин решавања ОДЈ захваљујући својој способности да спаја аналитичка решења појединачних сегмената на нумеричкој мрежи. Међутим, приликом решавања својствених проблема, као што је израчунавање електронске структуре, јављају се два проблема: 1) елементи укупне трансфер матрице (ТМ) немају исти ред величине за различите својствене вредности и 2) тражење својствених вредности ради се неефикасним поступком линеарног проласка кроз енергије [123]. Први проблем се решава тражењем минимума вредности елементарне трансфер матрице, док је други проблем први пут разматран у ауторовом раду [60]. У овом поглављу је представљен унапређени трансфер матрични метод (енгл. derivative transfer matrix method - dTMM) који је базиран на рачунању аналитичког првог извода трансфер матрица и проналажења његових нула нумерички ефикасним бисекционим алгоритмом, који обично брзо конвергира, због чега dTMM има далеко боље перформансе у односу на стандардни ТММ, како у времену извршавања, тако и у прецизности решавања електронске структуре, решавајући претходно наведени други проблем.

Математички формализам унапређеног трансфер матричног метода dTMM изложен је у секцији 5.1 овог поглавља. Изложени приступ се протеже и ван проблема сопствених вредности, јер алгоритам омогућава одређивање првог извода било ког параметра који утиче на укупну ТМ. У овом поглављу разматране су две ОДЈ где је ТММ широко примењиван за израчунавање електронске структуре уређаја заснованих на полупроводничким хетероструктурама са више квантних јама и израчунавање дисперзионих релација оптичких интерфејс фонона у полупроводничким хетероструктурама коришћењем модела диелектричног континуума (МДК).

Израчунавање електронске структуре ККЛ-а захтева решавање Шредингерове једначине, обично у формализму ефективне масе, дате једначином (2.3). Решења су Блохови таласи који представљају квазивезане подзоне. Подзоне имају параболичну дисперзију у k -простору (параболични модел), али у зависности од материјалног система и кристалне структуре решења могу одступати од параболичности и захтевати укључивање непараболичности при израчунавању електронске структуре, о чему је било речи на крају секције 2.1. Ови ефекти су нарочито важни у полупроводничким структурама са малим енергетским процепом, у хетероструктурама са великим бројем квантних јама са малим енергетским размацима између подзона или високоенергетским подзонама.

Постоји више приступа за укључивање непараболичности у проводну зону, а најчешће је коришћен двозонски Кејнов модел који узима у обзир интеракцију проводне зоне и валентне зоне лаких шупљина [66, 124–126]. Ради валидације тачности и прецизности развијеног унапређеног трансфер матричног метода у секцији 5.2 овог поглавља извршено је поређење резултата добијених dTMM-ом са резултатима добијеним методом коначних разлика (FDM) [127] при израчунавању електронске структуре ККЛ-а израђених од најчешће коришћених материјалних система. За сваку структуру је решена електронска структура коришћењем параболичног модела, двозонског Кејновог непараболичног модела и његове Тејлорове апроксимације. Такође је анализиран пример структуре која је нарочито осетљива на нумеричку прецизност својствених вредности (енергија подзона) и за коју стандардни ТММ доводи до дивергенције решења.

Сложенији приступи обухватају три или више подзона, као што је приказано у раду Екенберга [128], где је разматрано 14 подзона, што доводи до Шредингерове једначине четвртог реда која ће бити приказана у секцији 5.3 овог поглавља, у коме је dTMM примењен за израчунавање непараболичне електронске структуре ККЛ-а ради испитавања утицаја непараболичности на електронску структуру проводне зоне и поређења резултата са двозонским моделом.

У секцији 5.4 анализирани су нумеричке перформансе dTMM-а, као и FDM-а. Поређена су времена израчунавања као и конвергенција резултата у зависности од просторне резолуције приликом дискретизације простора код решавања електронске структуре ККЛ-а коришћењем параболичног модела, двозонског Кејновог непараболичног модела и његове Тејлорове апроксимације.

Расејање услед лонгитудиналних оптичких фонона има значајну улогу у транспорту ККЛ-а, о чему је било речи у секцији 2.7. Просторно конфинирање у хетероструктурама утиче на електронску структуру полупроводника, али и на акустичне и оптичке фононске модове, што даље утиче на интеракцију електрона са овим фононима. Као последица овог конфинирања формирају се интерфејсни и конфинирани фононски модови. У секцији 5.5 показано је како се dTMM може применити за израчунавање дисперзионих релација локализованих интерфејс фононских модова, као и за израчунавање електростатичког потенцијала сваког мода у оквиру МДК у хетероструктурама, као замена стандардног начина израчунавања применом ТММ [129].

Резултати приказани у овом поглављу објављени су у ауторовом раду [60], а коришћени софтвер за примену dTMM доступан је у MATLAB верзији и може се пронаћи на https://github.com/AcaDemicNanoLab/dTMM_Schrodinger.

5.1 Математички формализам унапређеног трансфер матричног метода

Трансфер матрични метод је општи нумерички метод који се може применити на широк спектар проблема који обухватају обичне диференцијалне једначине. Основни услови његове применљивости јесу да се укупни систем може раздвојити на низ подсистема који међусобно интерагују само са суседним подсистемима и постојање аналитичких решења за сваки од тих подсистема.

У општем случају, аналитичка решења ОДЈ дата су са x_i и x_{i+1} за два суседна подсистема, и представљају k -димензионе векторе сачињене од својствених стања једначине за i -ти односно $(i+1)$ -ви подсистем, при чему је k најчешће једнако реду диференцијалне једначине. Трансфер матрица M_i је матрица величине $k \times k$ која описује прелаз између i -тог и $(i+1)$ -вог подсистема и важи:

$$x_{i+1} = M_i x_i. \quad (5.1)$$

Ако се на читавом простору на коме се врши дискретизација примени једначина (5.1) и повежу почетни и крајњи подсистем, добија се:

$$x_{N_z+1} = M_{N_z} M_{N_z-1} \dots M_2 M_1 x_1 = M x_1, \quad (5.2)$$

где је M укупна трансфер матрица система дата са:

$$M = M_{N_z} M_{N_z-1} \dots M_2 M_1 = \prod_{i=1}^{N_z} M_i = \begin{bmatrix} m_{11} & \dots & m_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{k1} & \dots & m_{kk} \end{bmatrix}_{k \times k} \quad (5.3)$$

У зависности од примене, од одређених елемената m_{ij} (или њихових комбинација) у матрици M се захтева да испуне специфичне услове, најчешће дефинисане неким граничним условом који намеће одређено понашање решења у првом подсистему x_1 и решења у последњем подсистему x_{N_z+1} . То типично подразумева тражење услова при којем је неки елемент m_{ij} (или његова комбинација) једнак нули, минималан или максималан.

У својственим ОДЈ проблемима, попут Шредингерове једначине, ТММ подразумева тражење нула или минимума зависности $m_{ij}(E)$, тако да одређена вредност E представља решење ОДЈ. У нумеричким прорачунима m_{ij} је често комплексан број, па се уместо нуле одређује минимум модула $|m_{ij}|$, а одговарајућа енергија узима се као енергија стања подзоне.

Потребно је простор могућих решења (вредности енергије у овом случају) пребрисати проверавајући потенцијалне кандидате. Проблем је да коришћење константног корака dE доводи до тога да вредност dE директно одређује нумеричку тачност добијених својствених енергија. Ово је један од главних недостатака стандардног ТММ, којим би за постизање машинске прецизности захтевао обухватање интервала од неколико стотина meV кораком $dE \approx 10^{-16}$ meV, што је нумерички изузетно захтевно, у односу на коришћење метода коначних разлика, који резултује системском матрицом чије су својствене вредности истовремено и тражена решења која инхерентно имају машинску прецизност.

Стандардни ТММ поступак може се убрзати применом адаптивне мреже [130]. На пример, грубом претрагом енергетског опсега већим кораком dE добија се скуп потенцијалних кандидата за својствене енергије, након чега се за сваки од кандидата поново примењује ТММ у уском енергетском опсегу. Понављањем овог поступка више пута може се достићи тачност FDM приступа. Недостатак овог решења је да се у сваком кораку мора рачунати $m_{ij}(E)$, а како је свака вредност добијена из аналитичких подсистема који су дискретизовани на мрежи величине N_z , поступак је и даље веома захтеван.

У литератури су стандардни ТММ и његова модификација адаптивном мрежом често коришћени уз напомену да ТММ, за разлику од FDM, не може ефикасно постићи машинску прецизност решавања својствених проблема. У литератури није било покушаја да се искористи полуаналитичка природа ТММ-а и израчуна први извод трансфер матрице, што омогућава налажење минимума елемената $|m_{ij}(E)|$ применом алгоритама за налажење нула, без непотребног рачунања $|m_{ij}(E)|$ на адаптивним мрежама, при чему је једини проблем алгоритамска сложеност израчунавања извода трансфер матрице. У овој секцији је показано да је нумеричка сложеност рачунања $\frac{d|m_{ij}(E)|}{dE}$ линеарна.

Укупна трансфер матрица дата је једначином (5.3) као производ матрица, па из једначине (5.1) следи да први извод укупне трансфер матрице гласи:

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dE} &= \frac{d(M_{N_z} M_{N_z-1} \dots M_2 M_1)}{dE} = \\ &= \frac{dM_{N_z}}{dE} M_{N_z-1} \dots M_2 M_1 + M_{N_z} \frac{dM_{N_z-1}}{dE} \dots M_2 M_1 + \dots \\ &+ M_{N_z} M_{N_z-1} \dots \frac{dM_2}{dE} M_1 + M_{N_z} M_{N_z-1} \dots M_2 \frac{dM_1}{dE}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Збир у једначини (5.4) садржи N_z чланова, од којих је сваки производ од N_z матрица, где N_z представља укупан број подсистема на дискретизованој мрежи. Како би се избегла $\mathcal{O}(N_z^2)$ сложеност при рачунању збира, могу се конструисати низови левих и десних кумулативних производа дужине N_z . На овај начин сваки појединачни производ рачуна се само једном и смешта у одговарајући елемент ових низова, који се касније директно користе у изразу за извод укупне трансфер матрице. Елементи низова кумулативних производа могу се записати као:

$$\begin{aligned} M_{\text{left}}^c(i) &= M_i M_{i-1} \dots M_2 M_1 = M_i M_{\text{left}}^c(i-1), \\ M_{\text{right}}^c(i) &= M_{N_z} M_{N_z-1} \dots M_{i+1} M_i = M_{\text{right}}^c(i+1) M_i, \\ M_{\text{left}}^c(1) &= M_1, \quad M_{\text{right}}^c(N_z) = M_{N_z}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Коришћењем ових кумулативних производа, први извод укупне трансфер матрице из једначине (5.4) може се записати као:

$$\frac{dM}{dE} = \frac{dM_{N_z}}{dE} M_{\text{left}}^c(N_z - 1) + \sum_{i=N_z-1}^2 M_{\text{right}}^c(i+1) \frac{dM_i}{dE} M_{\text{left}}^c(i-1) + M_{\text{right}}^c(2) \frac{dM_1}{dE}. \quad (5.6)$$

На тај начин је рачунање првог извода укупне трансфер матрице сведено на рачунање два низа кумулативних производа и један збир од N_z чланова, при чему се сваки члан састоји од производа две или три матрице (видети (5.6)). Укупна сложеност тако износи

$$\mathcal{O}(N_z) + \mathcal{O}(N_z) + \mathcal{O}(N_z) = 3\mathcal{O}(N_z) \sim \mathcal{O}(N_z),$$

што значи да је применом низова кумулативних производа добијена линеарна сложеност, као и за рачунање саме трансфер матрице у стандардном ТММ.

Применом једначине (5.6) добија се први извод сваког елемента укупне трансфер матрице $\frac{dm_{ij}}{dE}$. Како су ови елементи комплексне вредности од интереса је извод њиховог модула, који се може изразити као:

$$\begin{aligned} \frac{d|m_{ij}|}{dE} &= \frac{d}{dE} \left(\sqrt{(\Re m_{ij})^2 + (\Im m_{ij})^2} \right) \\ &= \frac{1}{|m_{ij}|} \left[\Re(m_{ij}) \Re\left(\frac{dm_{ij}}{dE}\right) + \Im(m_{ij}) \Im\left(\frac{dm_{ij}}{dE}\right) \right]. \end{aligned} \quad (5.7)$$

dTMM функционише обављањем грубог претраживања решења у интервалу од интереса, при чему се за сваку вредност енергије рачуна $\frac{d|m_{ij}|}{dE}$ из једначине (5.7). Затим се примењује инкрементални алгоритам претраге како би се идентификовали интервали у којима $\frac{d|m_{ij}|}{dE}$ мења знак и у сваком таквом интервалу примењује бисекциони алгоритам за тражење нуле. Ово омогућава одређивање минимума модула $|m_{ij}(E)|$ и тиме прорачун својствених вредности разматране ОДЈ. Кључна разлика између dTMM и стандардног ТММ јесте да није потребно више пута примењивати адаптивну мрежу око сваког потенцијалног решења, већ је довољно применити брз алгоритам проналажења нула. У наредним секцијама овог поглавља показано је да се машинска прецизност може постићи са 30–40 итерација бисекционог алгоритма, док би за исту тачност приступ адаптивне мреже захтевао примену мреже од хиљаду тачака више пута.

Увођење низа кумулативних производа из једначине (5.5) омогућило је да се први извод укупне трансфер матрице из једначине (5.4) израчуна са $\mathcal{O}(N_z)$ сложености. Овај формализам може се проширити на рачунање и виших извода матрице M . dTMM приступ стога пружа високу прецизност уз мањи нумерички трошак у односу на стандардни ТММ, при чему је једини додатни услов аналитичко извођење $\frac{dM_i}{dE}$ за конкретну ОДЈ.

dTMM није ограничен само на својствене проблеме јер променљива E у једначинама (5.4–5.7) може представљати било који параметар који утиче на укупну трансфер матрицу, што је показано у секцији 5.5.

5.2 Рачунање електронске структуре у апроксимацији ефективне масе

У овој секцији развијен је теоријски приступ који примењује једначине (5.1–5.7) на Шредингерову једначину у оквиру апроксимације ефективне масе, која је у литератури стандардни приступ за одређивање електронске структуре у квантним хетероструктурама. Тачност dTMM је потврђена поређењем са решењима добијеним методом коначних разлика [127] за случај параболних и двозонских непараболних подзона. Такође је дат пример ККЛ-а за који стандардан ТММ није у стању да тачно израчуна електронску структуру. Овај пример служи као додатна мотивација за развој dTMM, који је постигао решења високе прецизности приближно 30 пута брже него стандардни ТММ.

5.2.1 Теоријско разматрање

Као што је већ речено у секцији 2.1, у наноструктурама са једнодимензионалним конфинирањем носилаца Шредингерово једначина у апроксимацији ефективне масе може се записати као [66]:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z, E)} \frac{d\psi(z)}{dz} + V(z)\psi(z) = E\psi(z), \quad (5.8)$$

где је $m^*(z, E)$ енергетски зависна ефективна маса електрона дуж правца конфинирања која варира са позицијом због промена у саставу материјала, $\psi(z)$ је анвелопна таласна функција, E је енергија минимума подзоне, а $V(z)$ је укупна потенцијална енергија $V(z) = V_c(z) - eKz - e\phi(z)$ која се састоји од офсета проводне зоне $V_c(z)$, потенцијалне енергије због спољашњег електричног поља K дуж правца раста z и електростатичке потенцијалне енергије интеракције електрона са другим електронима и јонима (Хартријев члан).

ТММ дискретизује $V(z)$ преко просторне мреже са N_z сегмената, што је приказано на слици 5.1. За сваки сегмент, једначина (5.8) има константну укупну потенцијалну енергију U_i и постоји аналитичко решење у облику:

$$\psi(z_i) = A_i e^{k_i z_i} + B_i e^{-k_i z_i}, \quad k_i^2 = \frac{2m_i^*(V_i - E)}{\hbar^2}, \quad (5.9)$$

где је k_i таласни вектор који је комплексан број.

Ова аналитичка решења морају задовољити два гранична услова између сегмената: непрекидност таласне функције и непрекидност струје вероватноће:

$$\psi(z_i) = \psi(z_{i+1}), \quad \frac{1}{m_i^*} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z_i} = \frac{1}{m_{i+1}^*} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z_{i+1}}, \quad (5.10)$$

где су m_i^* и m_{i+1}^* вредности $m^*(z, E)$ у тачкама z_i и z_{i+1} редом.

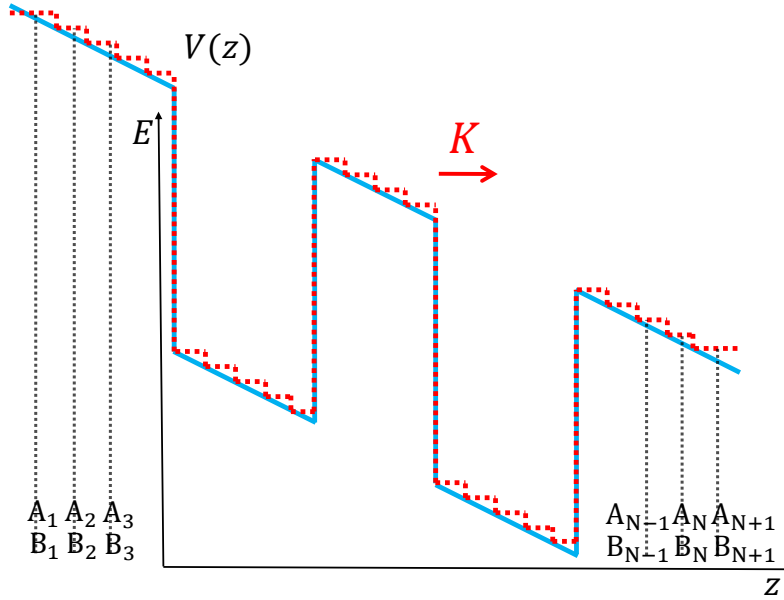
Применом ових граничних услова, и увођењем ознака:

$$k_i = p, \quad k_{i+1} = q, \quad q_{pq} = \frac{m_{i+1}^*}{m_i^*} \frac{p}{q}, \quad (5.11)$$

добиа се генерални израз за трансфер матрицу за i -ти сегмент као [121]:

$$M_i = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (1 + q_{pq})e^{(p-q)z_i} & (1 - q_{pq})e^{-(p+q)z_i} \\ (1 - q_{pq})e^{(p+q)z_i} & (1 + q_{pq})e^{-(p-q)z_i} \end{bmatrix}. \quad (5.12)$$

Једначина (5.12) повезује аналитичка решења на два суседна сегмента просторне мреже као

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = M_i \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}.$$


Слика 5.1. Дискретизација профила потенцијалне енергије $V(z)$. z -оса се састоји од N сегмента, и за сваки сегмент постоји аналитичко решење које нам омогућава примену dTMM формализма. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), ознаке су промењене.

За добијање трансфер матрице целог система, овај процес се понавља за сваки сегмент и добија се веза прве и последње тачке мреже као:

$$\begin{bmatrix} A_{N_z+1} \\ B_{N_z+1} \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \quad (5.13)$$

$$M = M_{N_z+1} M_{N_z} \dots M_2 M_1 = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}.$$

За квазивезана електронска стања коефицијенти A_{N_z+1} и B_1 морају бити нула како би се избегла дивергенција таласних функција на крајевима структуре. Ово намеће услов $m_{11} = 0$ и у стандардном ТММ се траже потенцијалне својствене вредности за које је овај услов задовољен. У пракси, међутим, због коначне величине просторне мреже, зависност $m_{11}(E)$ не тежи нули на исти начин за сваку својствену вредност и такође је m_{11} комплексни број. За неке својствене вредности је $|m_{11}| \sim 10^{-16}$, али за неке може бити $|m_{11}| \sim 10^{-3}$, па директна примена алгоритама за проналажење нуле на $|m_{11}(E)|$ не би гарантовала једнаку нумеричку прецизност својствених вредности. Због тога се у пракси често тражи минимум зависности $|m_{11}(E)|$.

За примену dTMM, чији је математички формализам објашњен у претходној секцији 5.1, неопходно је израчунати први извод трансфер матрице у једначини (5.12). За извод појединачних елемената ове трансфер матрице добија се:

$$\begin{aligned}\left. \frac{dM_i}{dE} \right|_{11} &= \frac{1}{2} \left[\frac{dq_{pq}}{dE} + (1 + q_{pq}) \left(\frac{dp}{dE} - \frac{dq}{dE} \right) z_i \right] e^{(p-q)z_i}, \\ \left. \frac{dM_i}{dE} \right|_{12} &= \frac{1}{2} \left[-\frac{dq_{pq}}{dE} - (1 - q_{pq}) \left(\frac{dp}{dE} + \frac{dq}{dE} \right) z_i \right] e^{-(p+q)z_i}, \\ \left. \frac{dM_i}{dE} \right|_{21} &= \frac{1}{2} \left[-\frac{dq_{pq}}{dE} + (1 - q_{pq}) \left(\frac{dp}{dE} + \frac{dq}{dE} \right) z_i \right] e^{(p+q)z_i}, \\ \left. \frac{dM_i}{dE} \right|_{22} &= \frac{1}{2} \left[\frac{dq_{pq}}{dE} - (1 + q_{pq}) \left(\frac{dp}{dE} - \frac{dq}{dE} \right) z_i \right] e^{-(p-q)z_i},\end{aligned}\tag{5.14}$$

где су рачунањем извода једначина (5.9) и (5.11) добијају изрази:

$$\begin{aligned}\frac{dq_{pq}}{dE} &= \frac{m_{i+1}^*}{m_i^*} \frac{\frac{dp}{dE}q - \frac{dq}{dE}p}{q^2} + \frac{p}{q} \frac{\frac{dm_{i+1}^*}{dE}m_i^* - \frac{dm_i^*}{dE}m_{i+1}^*}{m_i^{*2}}, \\ \frac{dp}{dE} &= -\frac{m_i^*}{\hbar^2 p} + \frac{V_i - E}{\hbar^2 p} \frac{dm_i^*}{dE}, \\ \frac{dq}{dE} &= -\frac{m_{i+1}^*}{\hbar^2 q} + \frac{V_{i+1} - E}{\hbar^2 q} \frac{dm_{i+1}^*}{dE}.\end{aligned}\tag{5.15}$$

У једначини (5.15) претпостављено је да је ефективна маса $m^*(z)$ зависна од енергије E . Ово је стандардни приступ за разматрање ефекта непараболичности [66]. Најчешћи коришћен приступ урачунавања енергетски зависне ефективне масе следи из двозонског Кејновог модела:

$$m_i^* = m_i (1 + \alpha_i(E - V_i)),\tag{5.16}$$

где је параметар непараболичности α_i дат као реципрочна вредност енергетског процепа, а за први извод по енергији ефективне масе добија се $\alpha_i m_i$, где је m_i ефективна маса материјала.

Двонзонски Кејнов модел се може поједноставити Тејлоровом апроксимацијом [131] за мале вредности α_i , па је енергетски зависна ефективна маса:

$$m_i^* = m_i (1 - \alpha_i(E - V_i))^{-1},\tag{5.17}$$

чији је први извод по енергији $m_i \alpha_i (1 - \alpha_i(E - V_i))^{-2}$.

Ако се непараболичност занемари, сви чланови у једначини (5.15) у којима фигурише извод ефективне масе нестају јер у параболичној апроксимацији ефективна маса не зависи од енергије па су ови изводи по енергији нула.

Једна од предности TMM и dTMM у односу на FDM је што се непараболичност може једноставно третирати у једначини (5.15) кроз енергетски зависну ефективну масу, што није случај код FDM [127] где се једначина (5.8) мора решавати као општи својствени проблем.

5.2.2 Нумерички резултати и дискусија

Ради провере dTMM-а, резултати dTMM-а су поређени са резултатима FDM-а [127, 131] на три анализирана ККЛ-а израђена од различитих система материјала. ККЛ 1 је GaAs/AlGaAs ВТС дизајн са емисијом на 2 THz [51], ККЛ 2 је InGaAs/InAlAs ЛО фононски тројамни дизајн са великом снагом емисије [132] и ККЛ 3 је InGaAs/GaAsSb ЛО фононски тројамни дизајн са високим перформансама у спектралном интервалу од 3.3 до 4.0 THz [133]. Детаљан опис активне области сва три ККЛ-а дат је у Додатку А.

Електронска структура је добијена нумеричким решавањем једначине (5.8) користећи dTMM дат једначинама (5.12–5.15). Разматран је параболични модел, двозонски Кејнов непараболични модел и његова Тејлорова апроксимација и израчунати изрази дати једначинама (5.11) и (5.15) за ова три случаја приказани су у Додатку В. У табели 5.1 је приказана разлика енергија подзона између dTMM и FDM за три моделована ККЛ-а.

Табела 5.1. Апсолутна вредност разлике енергија подзона добијених dTMM-ом и FDM-ом за три различита ККЛ-а при одговарајућим резонантним електричним пољем од 1.9 kV/cm, 10 kV/cm и 8 kV/cm редом. За сваки ККЛ приказани су резултати параболичног модела, двозонског Кејновог непараболичног модела и његове Тејлорове апроксимације у првој, другој и трећој колони редом. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

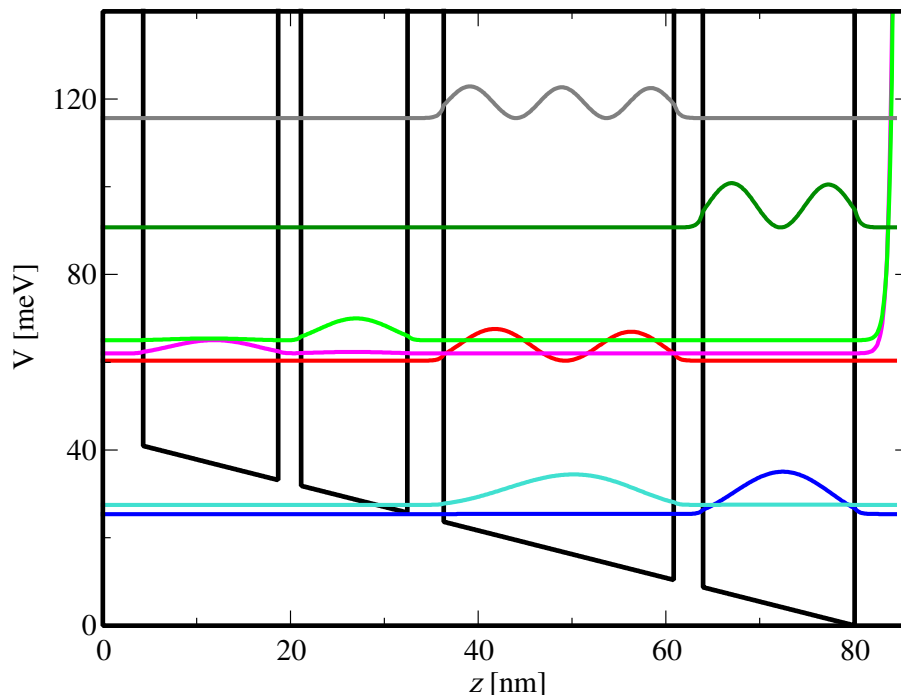
	ККЛ 1			ККЛ 2			ККЛ 3		
$\delta E_1[\mu\text{eV}]$	0.74	1.23	1.22	9.27	0.34	0.94	0.54	1.96	0.83
$\delta E_2[\mu\text{eV}]$	0.79	1.21	1.20	21.58	2.69	0.01	2.31	3.60	1.17
$\delta E_3[\mu\text{eV}]$	0.69	1.05	1.04	26.95	1.95	1.00	2.25	5.75	2.77
$\delta E_4[\mu\text{eV}]$	0.58	0.92	0.91	42.97	0.86	3.95	1.95	8.15	3.99
$\delta E_5[\mu\text{eV}]$	0.39	0.91	0.90	...	...	...	...	...	...
$\delta E_6[\mu\text{eV}]$	0.16	0.85	0.84	...	...	...	...	...	...
$\delta E_7[\mu\text{eV}]$	0.13	0.67	0.66	...	...	...	...	...	...
$\delta E_8[\mu\text{eV}]$	0.16	0.82	0.80	...	...	...	...	...	...
$\delta E_9[\mu\text{eV}]$	2.31	2.67	2.66	...	...	...	...	...	...
$\delta E_{10}[\mu\text{eV}]$	2.61	3.12	3.13	...	...	...	...	...	...

Приликом коришћења dTMM, за први пролазак по енергетској оси коришћен је корак од $dE = 0.1 \text{ meV}$. Циљ првог проласка је откривање интервала енергија у којима се налазе решења (енергије дна подзона), што се постиже проналажењем промена знака $\frac{d|m_{11}|}{dE}$ елемента укупне трансфер матрице структуре. Ово омогућава грубу локализацију решења, након које се за прецизно одређивање решења примењује стандардни бисекциони алгоритам за тражење нуле аналитички израчунатог првог извода са толеранцијом 10^{-16} eV , као што је то описано у секцији 5.1, који обично конвергира за 35–40 итерација за сваку вредност енергије подзона. Из табеле 5.1 се може видети да dTMM и FDM дају веома сличне резултате, са разликом реда $10^{-7} - 10^{-5} \text{ eV}$, што потврђује тачност dTMM, јер решења добијена FDM-ом инхерентно имају машинску прецизност.

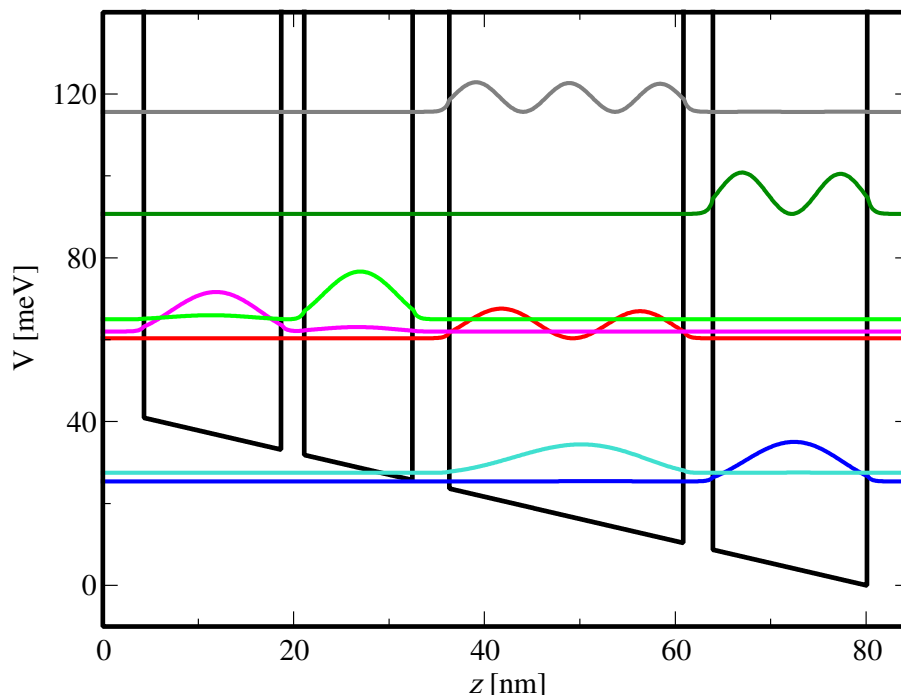
Једна од мотивација за развој dTMM је постојање структура код којих стандардни ТММ не може довољно тачно да израчуна енергије подзона. Услед недовољне тачности израчунатих енергија подзона долази до дивергирања таласних функција подзона на крају структуре. До овог проблема долази код јако дугачких структура или структура са високим баријерама. Овај проблем се може решити већим бројем итерација алгоритма адаптивне мреже, што значајно повећава временску сложеност (CPU време). Боље решење је примена dTMM који представља природно проширење ТММ јер омогућава већу прецизност за значајно мање време извршавања.

Пример ККЛ-а са дугом периодом и високим баријерама, која је подложна овом проблему, је GaSb/AlSb THz структура дизајнирана за рад на 2.6 THz [134]. Детаљан опис активне области ове структуре дат је у Додатку А.

Поређење енергија подзона GaSb/AlSb структуре израчунатих ТММ-ом и dТММ-ом приказано је у табели 5.2. Добијене енергије подзона су сличне, и њихове разлике су реда величине $10^{-6} - 10^{-5}$ eV. Међутим, подзоне добијене ТММ-ом имају дивергирајуће таласне функције, што је приказано на слици 5.2, док таласне функције израчунате dТММ-ом, приказане на слици 5.3, не дивергирају захваљујући већој тачности израчунатих енергија подзона.



Слика 5.2. Дно проводне зоне GaSb/AlSb THz структуре [134] израчунато стандардним ТММ-ом са приказаним дивергирајућим таласним функцијама. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

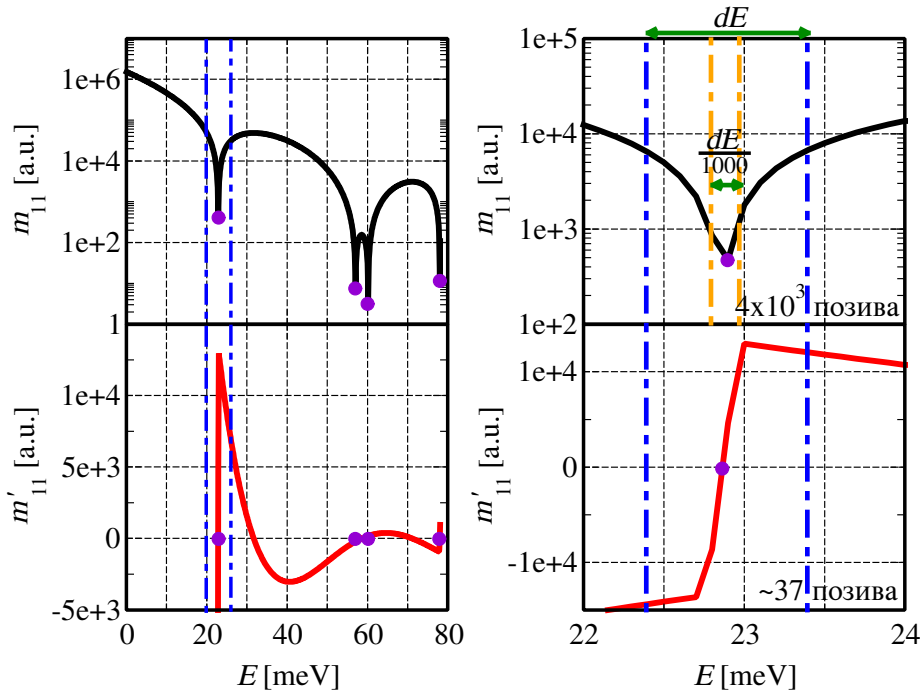


Слика 5.3. Дно проводне зоне GaSb/AlSb THz структуре [134] израчунато dТММ-ом без дивергирајућих таласних функција. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Табела 5.2. Енергије подзона у GaSb/AlSb THz структури за резонантно електрично поље од 5.4 kV/cm израчунате TMM-ом и dTMM-ом. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

	TMM	dTMM
$E_1[\text{meV}]$	25.40380	25.40546
$E_2[\text{meV}]$	27.50423	27.50439
$E_3[\text{meV}]$	60.35376	60.35366
$E_4[\text{meV}]$	62.00911	62.00793
$E_5[\text{meV}]$	64.99478	64.99611
$E_6[\text{meV}]$	90.71985	90.71953
$E_7[\text{meV}]$	115.64217	115.64195

Ефикасност dTMM-а значајно је боља у односу на TMM. За једну енергију подзоне, након детекције минимума елемента m_{11} унутар интервала dE , стандардни TMM метод применом алгорита адаптивне мреже у 1000 тачака унутар dE интервала, добија се резолуција $dE/1000$, што је приказано у горњем делу слике 5.4. С друге стране, dTMM користи алгоритам инкременталне претраге за детекцију промене знака $\frac{d|m_{11}|}{dE}$ и позива бисекциони алгоритам унутар dE интервала који брзо конвергира. Ако је, на пример, $dE = 1 \text{ meV}$, потребно је применити адаптивну мрежу са 1000 тачака четири пута за тачност $10^{-12} \cdot dE$ и тако позвати $m_{11}(E)$ 4000 пута, достижући прецизност 10^{-15} eV , док dTMM постиже тачност $10^{-12} \cdot dE$ кроз ~ 37 позива $\frac{d|m_{11}|}{dE}$ ($2^{-37} = 7.3 \cdot 10^{-12}$). dTMM захтева мало више меморије због потребе чувања низа кумулативних производа. Стога, сваки позив $\frac{d|m_{11}|}{dE}$ има сложеност $3O(N_z)$, док сваки позив $m_{11}(E)$ има $O(N_z)$ сложеност, што значи да је dTMM $\sim 4000/3/37 \approx 36$ пута бржи од TMM.



Слика 5.4. Пример зависности елемента трансфер матрице m_{11} и његовог првог извода $\frac{d|m_{11}|}{dE}$ у зависности од енергије (лево). Минимуми m_{11} ($\frac{d|m_{11}|}{dE} = 0$) представљају решења својствених вредности Шредингерове једначине, приказана љубичастим круговима за InGaAs/InAlAs ЛО фононски тројамни дизајн [132] (ККЈ 2 из табеле 5.1). Дијаграми са десне стране илуструју зависност m_{11} и $\frac{d|m_{11}|}{dE}$ око једног од својствених решења. Испрекидане вертикалне линије (плаве) показују интервал енергије dE у којем је потребно применити алгоритам адаптивне мреже за проналазак минимума m_{11} или алгоритам инкременталне претраге за проналазак нуле $\frac{d|m_{11}|}{dE}$ како би се постигла машинска прецизност решења. Око једног решења адаптивна мрежа обично захтева ~ 4000 позива $m_{11}(E)$, док алгоритам инкременталне претраге (dTMM) може детектовати нулу у ~ 37 позива $\frac{d|m_{11}(E)|}{dE}$. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), текст је преведен.

5.3 Рачунање електронске структуре у 14 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ непараболичном моделу

У претходној секцији је електронска структура ККЛ-а израчуната коришћењем једнозонског параболичног модела са ефективном масом, двозонског Кејновог непараболичног модела, као и његове Тејлорове апроксимације. Урачунавање непараболичности зонске структуре је од нарочито значаја код система материјала са високим зонским офсетом код којих се подзоне налазе на великим енергијама. Јако непараболични материјали углавном имају мали енергетски процеп и мању ефективну масу електрона, што директно утиче на оптичке прелазе. Комплекснији третман непараболичности представљен је у [128], где је дисперзиона релација проводне зоне за III–V материјал са директним енергетским процепом развијена до четвртог реда, а коефицијенти су добијени решавањем 14-зонског $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ модела [135]. Овај модел коришћен је у литератури за моделовање транспорта електрона у јако непараболичним материјалима [123, 130]. У овој секцији dTMM је примењен на овај непараболични модел, демонстрирајући функционисање dTMM-а на диференцијалну једначину четвртог реда.

5.3.1 Теоријско разматрање

Дисперзиона релација проводне зоне масивног полупроводника из III–V групе једињења са директним енергетским процепом, која описује интеракцију најниже проводне зоне са валентном зоном лакших шупљина, валентном зоном тешких шупљина, отцепљеном валентном зоном и три више проводне зоне [128], дата је изразом:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha^E k^4 + \beta_0 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) \pm \gamma_0 \sqrt{k^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) - 9k_x^2 k_y^2 k_z^2}, \quad (5.18)$$

где су k_x , k_y и k_z компоненте таласног вектора, $m^*(z)$ је ефективна маса на дну проводне зоне у масивном полупроводнику, док су коефицијенти α^E , β_0 и γ_0 параметри непараболичности који имају негативне вредности и добијени су решавањем четрнаестозонског $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ модела [135]. Параметар γ_0 , који се јавља уз чланове трећег степена таласног вектора, последица је раздвајања спина (услед недостатка инверзионе симетрије у GaAs), али далеко мање утиче на дисперзију од претходна два параметра, па се често занемарује. Тада се након преуређивања добија упрошћена форма:

$$E(\mathbf{k}) = \alpha^E k_z^4 + \left[\frac{\hbar^2}{2m^*} + (2\alpha^E + \beta_0)(k_x^2 + k_y^2) \right] k_z^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) + (2\alpha^E + \beta_0) k_x^2 k_y^2 + \alpha^E (k_x^4 + k_y^4). \quad (5.19)$$

У случају наноструктура нараслих дуж z -правца, за $k_x = k_y = 0$ једнодимензиона непараболична Шредингерова једначина у апроксимацији ефективне масе може се записати као:

$$\frac{d^2}{dz^2} \alpha^E(z) \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} - \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d \psi(z)}{dz} + V(z) \psi(z) = E \psi(z). \quad (5.20)$$

У овом моделу непараболичности ефективна маса у једначини (5.20) не зависи од енергије. Непараболичност се третира преко параметра $\alpha^E(z)$, који зависи од материјала и квантификује утицај суседних енергетских зона на дисперзију електрона. Овај параметар није исти као параметар непараболичности у двозонској апроксимацији, јер $\alpha^E(z)$ има сложену зависност не само од енергетског процепа, већ од великог броја зонских параметара, као што је приказано у [130]. У [130] представљена су два приступа за израчунавање $\alpha^E(z)$. У овој секцији су коришћене формуле из [136] и зонски параметри материјала из [137].

Примена ТММ на једначину (5.20) аналогна је третману једначине (5.8). Након дискретизације укупне потенцијалне енергије $V(z)$ дуж просторне мреже (приказано на слици 5.1), једначина (5.20) се своди на аналитички решиву биквадратну једначину у сваком појединачном сегменту:

$$\alpha_i^E k_i^4 + \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_i} = E - V_i, \quad (5.21)$$

при чему је само једна грана решења физички прихватљива [123], и та решења дата су једначином:

$$k_i^2 = \frac{\hbar^2}{4|\alpha_i^E|m_i} \left[1 - \sqrt{1 - 16|\alpha_i^E|(E - V_i) \left(\frac{m_i}{\hbar^2} \right)^2} \right]. \quad (5.22)$$

Решење таласне функције на сваком појединачном сегменту је:

$$\psi(z_i) = A_i e^{k_i z_i} + B_i e^{-k_i z_i}. \quad (5.23)$$

Аналитичка решења морају задовољити граничне услове између сегмената: непрекидност таласне функције и струје вероватноће што даје услов [123, 130]:

$$\begin{aligned} \psi(z_i) &= \psi(z_{i+1}), \\ \left(2\alpha_i^E k_i^2 - \frac{\hbar^2}{2m_i} \right) \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z_i} &= \left(2\alpha_{i+1}^E k_{i+1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{i+1}} \right) \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z_{i+1}}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Трансфер матрица за i -ти сегмент на просторној мрежи има исти облик као у једначини (5.12), при чему је разлика у изразима за p , q и q_{pq} :

$$p = k_i, \quad q = k_{i+1}, \quad q_{pq} = \frac{2\alpha_i^E p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_i}}{2\alpha_{i+1}^E q^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{i+1}}} \frac{p}{q}. \quad (5.25)$$

Дисперзија дефинисана таласним вектором k_i у (5.25) је једино физички прихватљиво решење биквадратне једначине која произилази из једначине (5.20). Цео модел важи до енергије

$$E_\pi = \frac{5}{9} E_{\max}, \quad E_{\max} = \frac{\hbar^4}{16|\alpha^E|m^2}, \quad (5.26)$$

на којој дисперзиона релација постаје конкавна, што математички одговара негативној ефективној маси и самим тим није физички могуће [138].

Изрази за извод трансфер матрице су исто као у претходном случају дати једначином (5.14), али се разлике јављају у члановима p , q , q_{pq} и њиховим изводима по енергији, што је приказано и у Додатку В.

$$\begin{aligned} \frac{dq_{pq}}{dE} &= \left[\frac{6\alpha_i^E p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_i}}{2\alpha_{i+1}^E q^3 - \frac{\hbar^2}{2m_{i+1}}} \frac{dp}{dE} - \frac{\left(2\alpha_i^E p^3 - \frac{\hbar^2}{2m_i} p \right) \left(6\alpha_{i+1}^E q^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{i+1}} \right)}{\left(2\alpha_{i+1}^E q^3 - \frac{\hbar^2}{2m_{i+1}} \right)^2} \frac{dq}{dE} \right], \\ \frac{dp}{dE} &= \frac{m_i}{\hbar^2} \frac{1}{p + \frac{4|\alpha_i^E|m_i}{\hbar^2} p^3}, \quad \frac{dq}{dE} = \frac{m_{i+1}}{\hbar^2} \frac{1}{q + \frac{4|\alpha_{i+1}^E|m_{i+1}}{\hbar^2} q^3}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Нумеричка имплементација dTMM за (5.20) веома је слична као у случају једначине (5.8). Главне разлике су у таласним векторима и њиховим изводима по енергији, као и у чињеници да ефективна маса не зависи од енергије, док се непараболичност у потпуности садржи у изразима за таласне векторе у (5.25).

Једначина (5.20) се може дискретизовати методом коначних разлика, при чему чињеница да ефективна маса не зависи од енергије знатно поједностављује поступак, али овај приступ има фундаменталне недостатке који су дискутовани у литератури [127]. Наиме, својствене вредности матрице добијене у FDM-у могу бити лажна решења која треба ручно елиминисати. У литератури је показан начин аутоматизације овог процеса [127], али то није могуће за једначину (5.20) јер FDM нема механизам којим може игнорисати нефизичку грану дисперзије која је у TMM-у већ одбачена. Примена FDM-а на једначину (5.20) стога даје мешавину тачних решења, лажних решења и нефизичких решења, што чини избор физички исправних својствених вредности веома захтевним, па резултати добијени FDM-ом за једначину (5.20) неће бити разматрани.

5.3.2 Нумерички резултати и дискусија

У овој секцији је приказана електронска структура за три ККЛ-а [51, 132, 133] од GaAs/AlGaAs, InGaAs/InAlAs и InGaAs/GaAsSb система материјала из претходне секције 5.2. Двонзонски Кејнов непараболични модел и његова Тејлорова апроксимација, израчунате су решавањем једначине (5.8) коришћењем dTMM-а, док је 14-зонски $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ непараболични модел израчунат решавањем (5.20) такође dTMM-ом. Резултати су приказани у табелама 5.3, 5.4 и 5.5.

Табела 5.3. Енергије подзона у GaAs/AlGaAs BTC THz ККЛ-у [51] за резонантно електрично поље од 1.9 kV/cm, приказане за параболични модел, двонзонски Кејнов непараболични модел, његову Тејлорову апроксимацију и 14-зонски $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ непараболични модел. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), текст је преведен.

	Параболични	Кејнов	Тејлорова	14 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$
E_1 [meV]	17.7071	17.7780	17.7708	18.3292
E_2 [meV]	20.6693	20.7204	20.7147	21.2403
E_3 [meV]	22.9848	23.0249	23.0200	23.4719
E_4 [meV]	25.1394	25.1735	25.1689	25.5640
E_5 [meV]	26.9686	27.0236	27.0157	27.4512
E_6 [meV]	29.9409	29.9913	29.9814	30.4052
E_7 [meV]	32.7406	32.7618	32.7549	33.0735
E_8 [meV]	41.8661	41.7628	41.7526	42.0859
E_9 [meV]	58.4094	57.6049	57.5769	58.0818
E_{10} [meV]	62.1036	61.0577	61.0129	61.6258

Табела 5.4. Енергије подзона у InGaAs/InAlAs ЛО фононском THz ККЛ-у [132] за резонантно електрично поље од 10 kV/cm, приказане за параболични модел, двонзонски Кејнов непараболични модел, његову Тејлорову апроксимацију и 14-зонски $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ непараболични модел. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), текст је преведен.

	Параболични	Кејнов	Тејлорова	14 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$
E_1 [meV]	22.8640	23.2619	23.1124	23.5196
E_2 [meV]	57.0385	56.8035	56.4867	58.1573
E_3 [meV]	60.1812	60.4932	60.0862	61.7031
E_4 [meV]	77.9856	78.6086	78.1281	79.5514

Табела 5.5. Енергије подзона у InGaAs/GaAsSb ЛО фононском THz ККЛ-у [133] за резонантно електрично поље од 8 kV/cm, приказане за параболични модел, двозонски Кејнов непараболични модел, његову Тејлорову апроксимацију и 14-зонски **k·p** непараболични модел. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), текст је преведен.

	Параболични	Кејнов	Тејлорова	14 k·p
E_1 [meV]	20.7661	21.0584	20.9500	21.2180
E_2 [meV]	51.4799	51.5901	51.4372	53.8374
E_3 [meV]	56.0809	55.6355	55.2439	56.0760
E_4 [meV]	70.2315	70.5727	70.2359	71.2781

Резултати у табелама 5.3, 5.4 и 5.5 показују да непараболичност подиже енергије подзона, с тим да је утицај већи на подзоне које се налазе на вишој енергији у односу на дно проводне зоне материјала јаме. Такође се види да 14-зонски **k·p** модел даје јаче ефекте непараболичности од двозонског модела, што је и очекивано јер укључује интеракције проводне зоне са валентном зоном лаких шупљина, валентном зоном тешких шупљина, отцепљеном валентном зоном и три више проводне зоне, док двозонски модел узима у обзир само интеракцију проводне зоне и зоне лаких шупљина.

Резултати показују да су у InGaAs/InAlAs и InGaAs/GaAsSb структурама ефекти непараболичности израженији него у GaAs/AlGaAs, што је очекивано јер ови материјали имају мањи енергетски процеп, а тиме већи параметар непараболичности. [130].

Двозонска Тејлорова апроксимација даје сличне резултате као Кејнов модел у GaAs/AlGaAs структурама, али је мање тачна у InGaAs-заснованим структурама због већег параметра непараболичности, што нарушава ваљаност Тејлорове апроксимације.

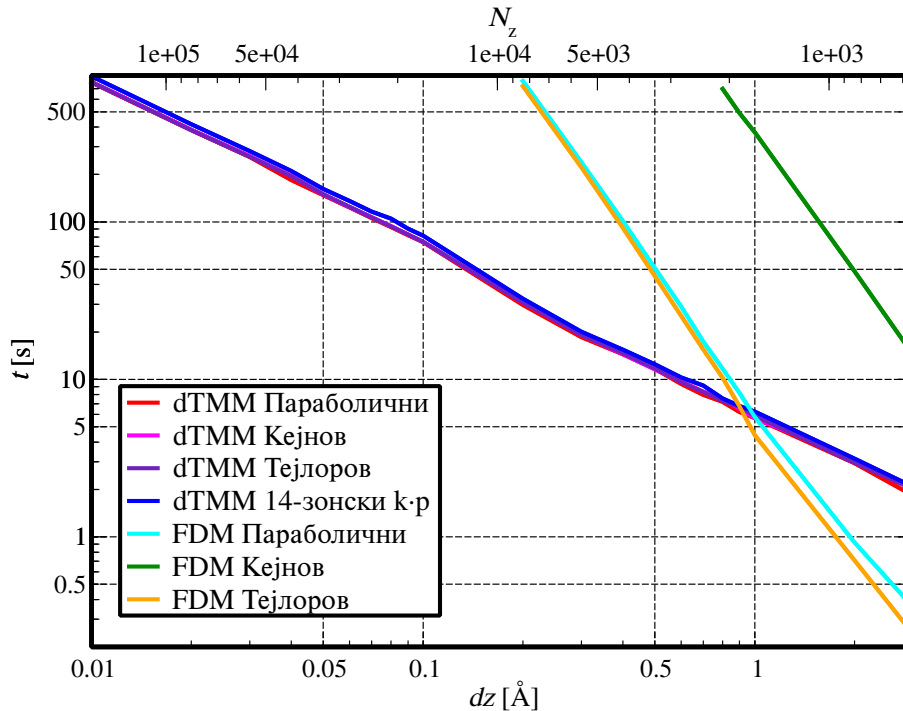
5.4 Поређење перформанси нумеричких метода

У претходном излагању dTMM је верификован анализом различитих структура. Ако је N_b број интервала у којима су идентификоване нуле функције, укупна сложеност овог метода за израчунавање својствених вредности износи $O\left([N_i + N_b \log_2\left(\frac{dE}{\epsilon}\right)] N_z\right)$. Мрежа за претрагу својствених вредности са N_i интервала најпре се пролази линеарно како би се идентификовали интервали који садрже нуле функције, након чега се у тим интервалима примењује метода бисекције, где је dE дужина сваког интервала, а ϵ жељена прецизност. Сваки позив функције $\frac{d|m_{11}|}{dE}$ има линеарну сложеност $O(N_z)$ услед проласка кроз просторну мрежу. Типично је N_b знатно мањи од N_i и у већини случајева од интереса мањи је од 20. С друге стране, FDM приступи имају сложеност $O(N_z^3)$ [139], док dTMM линеарно пролази кроз просторну мрежу, па се очекује да буде бржи, иако директно поређење ова два метода није једноставно.

За тестирање перформанси нумеричких метода одабран је GaAs/AlGaAs BTC [51] (ККЛ 1 у секцији 5.2), због великог броја енергетских подзона (10 својствених вредности од интереса и периода од 1276 Å, као што је приказано у Додатку А). Временске перформансе нумеричких метода приказане су на слици 5.5. Нумеричка анализа изведена је на Intel Xeon Gold 6138 процесорима.

Решавање електронске структуре у двозонском Кејновом непараболичном моделу коришћењем FDM-а урађено је као у раду [127], решавањем општег полиномијалног својственог проблема четвртог реда. Овај нумерички метод на слици 5.5 обележен је као FDM Кејнов, и резултати показују да је најспорији због тога што има највећу просторну сложеност, због чега захтева складиштење матрице димензија $4N_z \times 4N_z$ са FDM коефицијентима. Нумерички методи названи FDM Тајлоров и FDM Параболични захтевају складиштење матрице $N_z \times N_z$, што им омогућава боље временске перформансе.

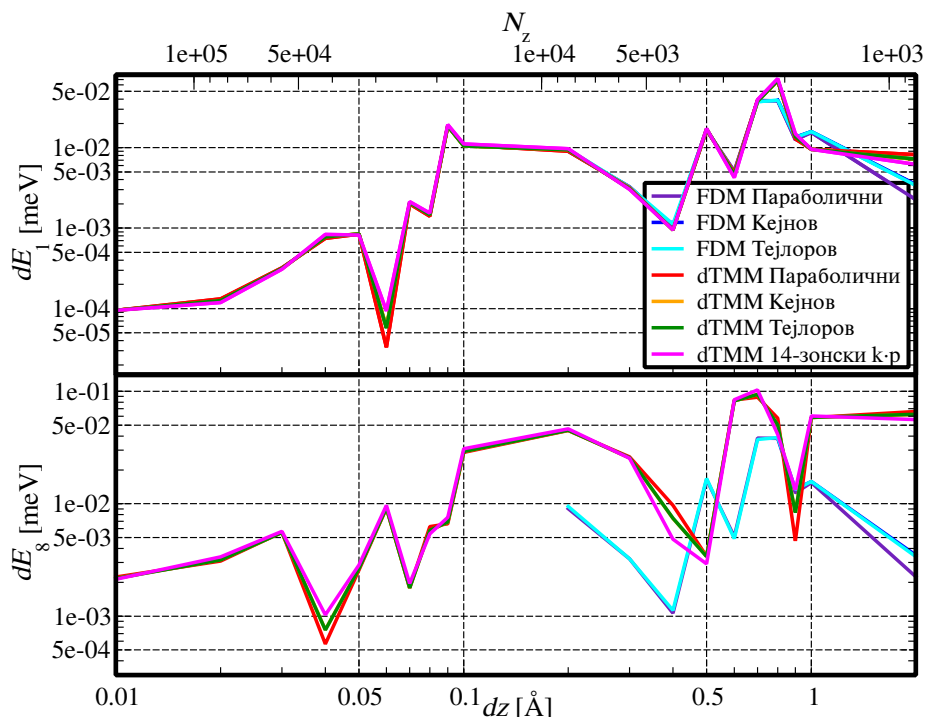
dTMM је примењен у четири случаја: параболични модел, Кејнов двозонски непараболични модел, његова Тејлорова апроксимација и 14-зонски **k-p** непараболични модел и ови нумерички методи су на слици 5.5 обележени као dTMM Параболични, dTMM Кејнов, dTMM Тејлоров и dTMM 14-зонски **k-p**, редом. У сва четири случаја није потребно складиштити матрице јер кроз просторну мрежу пролазе само линеарно. Због тога сва четири примењена dTMM имају врло сличне перформансе и могу да поднесу далеко већу просторну резолуцију од FDM-a, управо захваљујући мањој просторној сложености. FDM резултати надмашују dTMM само при веома грубој просторној резолуцији.



Слика 5.5. Временске перформансе нумеричких метода у зависности од корака дуж просторне мреже (доња x-оса на слици) и просторне резолуције (горња x-оса на слици) нумеричке мреже примењене на BTC THz ККЛ [51]. FDM нумерички методи нису могли да обраде већу просторну резолуцију због ограничења у смештању матрица. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

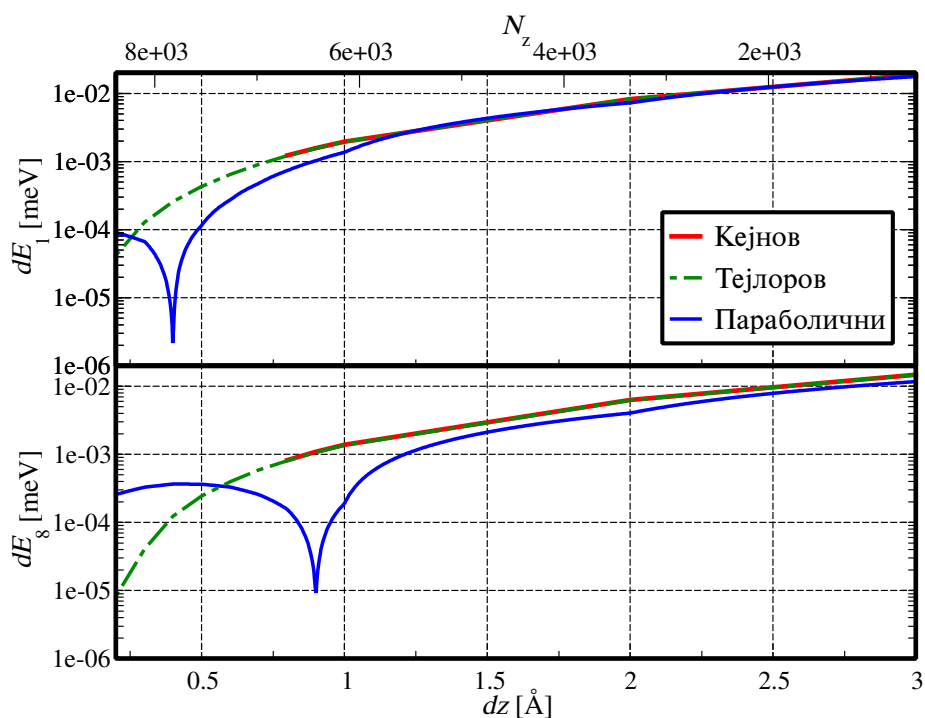
На слици 5.6 приказан је тест конвергенције добијених својствених вредности при промени просторне резолуције. Занимљиво је да сви случајеви имају сличне резултате, и да се решења приближавају стварној вредности са смањењем просторног корака, али FDM случајеви нису били у стању да обраде веома високу резолуцију. Веома занимљив резултат је тај да иако FDM решења имају машинску прецизност, енергије израчунате за два различита просторна корака могу да се разликују и на нивоу од 10^{-2} meV. Ово потиче од профила потенцијалне енергије структуре и нумеричким последицама које из њега произилазе, то јест, чињенице да профил потенцијала има скоковиту промену на интерфејсима између материјала што доводи до наглих промена када се рачунају изводи у једначини (5.8). Иако ово не узрокује дивергенцију FDM резултата, може утицати на конвергенцију. У целини, просторна резолуција уводи грешку у све нумеричке методе и тиме утиче на конвергенцију резултата.

У табели 5.1 приказане су разлике енергија између FDM и dTMM нумеричких метода примењених на исте случајеве непараболичности за различите структуре при фиксној просторној резолуцији. На слици 5.7 приказани су разлике између FDM и dTMM нумеричких метода примењених на исте случајеве непараболичности (нпр. |dTMM Кејнов – FDM Кејнов| итд.) при промени просторне резолуције. Ово поређење је ограничено јер FDM нумерички методи не могу да обраде високе резолуције, али се може уочити да се решења приближавају једно другом са смањењем просторног корака.



Слика 5.6. Конвергенција израчунаог основног и горњег ласерског стања у зависности од просторног корака (доња x-оса) и просторне резолуције (горња x-оса) за BTC THz ККЛ [51]. Конвергенција је израчуната као разлика енергија између узастопних решења при промени просторне резолуције. Опсег просторног корака био је између 0.01 и 2 Å. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

Одступање између FDM и dTMM нумеричких метода потиче од проблема конвергенције уоченим на слици 5.6. Сви случајеви имају веома високу прецизност својствених вредности, али имају различиту зависност грешке од просторног корака због чега њихово поређење није једноставно.



Слика 5.7. Разлика енергија између FDM и dTMM нумеричких метода примењених на исте случајеве непараболичности у зависности од просторног корака (доња x-оса) и просторне резолуције (горња x-оса) за BTC THz ККЛ [51]. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

5.5 Рачунање дисперзионих релација оптичких интерфејс фонона

Један од кључних механизма расејања електрона у полупроводничким структурама јесте интеракција између електрона и оптичких фонона. Модели расејања обично користе запреминске (енгл. bulk) фононе чак и у хетероструктурама и уређајима заснованим на суперрешеткама. Иако је ово добра апроксимација, физички исправнији модел треба да узме у обзир дејство конфинирања на оптичке фононске модове, што доводи до појаве интерфејс (IF) модова и конфинираних (CF) фононских модова.

5.5.1 Теоријско разматрање

Интерфејс модови су локализовани на интерфејсима хетероструктуре, док се конфинирани модови могу посматрати као запремински модови „исечени“ интерфејсима хетероструктуре. Ови фононски модови се рачунају у оквиру макроскопског диелектричног континуум модела [140, 141], који се заснива на стварању електричне поларизације $P(r)$ услед вибрација кристалне решетке. МДК описује фононске модове преко њиховог електростатичког потенцијала дуж хетероструктуре. За средину са диелектричном пропустљивошћу $\epsilon(\omega)$ ове једначине гласе:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}) &= \rho_0(\mathbf{r}), \\ \mathbf{D}(\mathbf{r}) &= \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{P}(\mathbf{r}), \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= -\nabla \phi(\mathbf{r}),\end{aligned}\tag{5.28}$$

где су $\mathbf{D}(\mathbf{r})$, $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, $\rho_0(\mathbf{r})$ електрична индукција, електрично поље, електрична поларизација и електростатички потенцијал. $\rho_0(\mathbf{r})$ је густина слободног наелектрисања, а ϵ и ϵ_0 су диелектричне пропустљивости материјала и вакуума. Користећи генерализовану Лидан–Сакс–Телерову релацију, $\epsilon(\omega)$ се може записати као функција са једним полом за бинарну легуру:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty \frac{\omega^2 - \omega_{\text{LO}}^2}{\omega^2 - \omega_{\text{TO}}^2},\tag{5.29}$$

и као двополна функција за тернарну легуру [142]:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty \frac{(\omega^2 - \omega_{\text{LO1}}^2)(\omega^2 - \omega_{\text{LO2}}^2)}{(\omega^2 - \omega_{\text{TO1}}^2)(\omega^2 - \omega_{\text{TO2}}^2)},\tag{5.30}$$

где је ϵ_∞ диелектрична пропустљивост на високим фреквенцијама. ЛО и ТО означавају лонгитудинални и трансверзални оптички мод, а индекси 1 и 2 се односе на одговарајуће материјале.

У случају $\rho_0(\mathbf{r}) = 0$ једначине (5.28) доводе до услова $\epsilon(\omega) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = 0$. У запреминским материјалима ово води до оптичких фонона који испуњавају услов $\epsilon(\omega) = 0$. За системе квантних јама, који су просторно конфинирани дуж правца раста z , а немају ограничење у x - y равни, електростатички потенцијал $\phi_i(\mathbf{r})$ и његова Фуријеова трансформација $\phi_i(q, z)$ у области $[z_{i-1}, z_i]$ може се записати као $\phi_i(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \phi_i(q, z)$, где су $\mathbf{r}$ и $\mathbf{q}$ положај и таласни вектор у равни интерфејса. Ово доводи до једначине:

$$\epsilon(\omega) \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q^2 \right) \phi_i(q, z) = 0.\tag{5.31}$$

Решења једначине (5.31) задовољавају или $\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q^2\right) \phi_i(q, z) = 0$, што одговара IF-модовима оптичких фонона или $\epsilon(\omega) = 0$, што даје CF-модове.

CF-модови добијени условом $\epsilon(\omega) = 0$ су $\omega = \omega_{LO}$ за бинарне материјале и $\omega = \omega_{LO}$ или $\omega = \omega_{TO}$ за тернарне материјале. Ови модови су запреминског карактера и простиру се кроз један слој између два суседна интерфејса од којих се потпуно одбијају јер суседни слојеви имају различите оптичке фононске фреквенције. Електростатички потенцијали CF-модова чине ортогоналан и комплетан скуп, а један од могућих скупова потенцијала гласи [143, 144]:

$$\phi_i^{CF}(q, z_i) = \left(\frac{\hbar}{\epsilon_0} \frac{1}{d\epsilon_i(\omega)/d\omega}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{q^2 + (m\pi/a_i)^2}\right)^{1/2} \left(\frac{2}{a_i}\right)^{1/2} \sin\left[\frac{m\pi}{a_i}(z - z_i)\right], \quad (5.32)$$

где је $m = 1, 2, 3, \dots$, $z_i < z < z_i + a_i$, а a_i ширина слоја.

За разлику од CF-модова, чији се потенцијали добијају аналитички, потенцијали IF-модова могу се израчунати само нумерички. За нумеричко решавање IF-модова из једначине (5.31), може се применити ТММ/dТММ метод јер једначина на сваком сегменту има аналитичко решење након дискретизације:

$$\phi_i(q, z) = A_i e^{qz} + B_i e^{-qz}. \quad (5.33)$$

Сви модови добијени из једначине (5.31) морају задовољити граничне услове МДК који захтевају континуитет тангенцијалне компоненте електричног поља и нормалне компоненте електричне индукције на сваком интерфејсу [141, 145–147], што даје граничне услове:

$$\phi_i(q, z_i) = \phi_{i+1}(q, z_i), \quad \epsilon_i \frac{\partial}{\partial z} \phi_i(q, z_i) = \epsilon_{i+1} \frac{\partial}{\partial z} \phi_{i+1}(q, z_i), \quad (5.34)$$

па ТММ матрица за i -ти сегмент гласи:

$$M_i = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (1 + \epsilon_i/\epsilon_{i+1}) & (1 - \epsilon_i/\epsilon_{i+1})e^{-2qz_i} \\ (1 - \epsilon_i/\epsilon_{i+1})e^{2qz_i} & (1 + \epsilon_i/\epsilon_{i+1}) \end{bmatrix}. \quad (5.35)$$

ТММ може да повеже сегментне матрице из (5.35) како би се добила дисперзиона релација и електростатички потенцијал IF-модова [129]. Као и у случају електронске структуре, коефицијенти A_{N_z} и B_1 морају бити нула како решење не би дивергирало за $z \rightarrow \pm\infty$. Ово доводи до истог услова $m_{11} = 0$ за IF-модове као и за електронске подзоне у једначини (5.13). Разлика је у томе што се не траже енергије из једначине (5.31), већ фреквенције ω које испуњавају услов $m_{11} = 0$. Стога је потребно ручно претражити ω , аналогно проласку кроз енергије у Шредингеровој једначини, или користити $E = \hbar\omega$ па вршити пролазак по енергији фонона.

Уместо стандардног ТММ може се применити dТММ, како је већ показана његова нумеричка супериорност. Потребно је израчунати први извод по енергији матрице (5.35):

$$\frac{dM_i}{dE} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \frac{dt_i}{dE} & -\frac{dt_i}{dE} e^{-2qz_i} \\ -\frac{dt_i}{dE} e^{2qz_i} & \frac{dt_i}{dE} \end{bmatrix}, \quad (5.36)$$

где је уведено $t_i = \epsilon_i/\epsilon_{i+1}$ и важи:

$$\begin{aligned}
\frac{dt_i}{dE} &= \frac{1}{\hbar} \frac{dt_i}{d\omega} = \frac{1}{\hbar} \frac{\frac{d\epsilon_i}{d\omega} \epsilon_{i+1} - \frac{d\epsilon_{i+1}}{d\omega} \epsilon_i}{\epsilon_{i+1}^2} \\
\frac{d\epsilon_i^{\text{binary}}}{d\omega} &= \epsilon_{\infty i} \frac{2\omega(\omega_{\text{LO}}^2 - \omega_{\text{TO}}^2)}{(\omega^2 - \omega_{\text{TO}}^2)^2} \\
\frac{d\epsilon_i^{\text{ternary}}}{d\omega} &= 2\omega\epsilon_{\infty i} \left[\frac{(\omega_{\text{LO1}}^2 - \omega_{\text{TO1}}^2)(\omega^2 - \omega_{\text{LO2}}^2)}{(\omega^2 - \omega_{\text{TO1}}^2)^2(\omega^2 - \omega_{\text{TO2}}^2)} \right. \\
&\quad \left. + \frac{(\omega_{\text{LO2}}^2 - \omega_{\text{TO2}}^2)(\omega^2 - \omega_{\text{LO1}}^2)}{(\omega^2 - \omega_{\text{TO2}}^2)^2(\omega^2 - \omega_{\text{TO1}}^2)} \right]
\end{aligned} \tag{5.37}$$

где се изводи по енергији разликују за бинарне и тернарне материјале.

Вредности диелектричних пропустљивости на високим фреквенцијама и фононских енергија за системе GaAs/Al_xGa_{1-x}As дате су у табели 5.6 [148].

Табела 5.6. Диелектричне пропустљивости на високим фреквенцијама и фононске енергије [148] коришћене у прорачуну дисперзионих релација. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

	GaAs	AlAs	Al _x Ga _{1-x} As
ϵ_{∞}	10.89	8.16	10.89-2.73x
$\hbar\omega_{\text{LO1}}$ [meV]	36.25	...	36.25-6.55x+1.79x ²
$\hbar\omega_{\text{TO1}}$ [meV]	33.29	...	33.29-0.64x-1.16x ²
$\hbar\omega_{\text{LO2}}$ [meV]	...	50.09	44.63+8.78x-3.32x ²
$\hbar\omega_{\text{TO2}}$ [meV]	...	44.88	44.63+0.55x-0.30x ²

Користећи једначине (5.35) и (5.36) примењен је dTMM као у одељку 5.1 и минимизован $|m_{11}|$ користећи једначину (5.7). Након проналажења енергије IF-модова, одређивање електростатичког потенцијала сваког мода своди се на множење матрица ради добијања коефицијената A_i и B_i у сваком слоју.

У систему са већим бројем квантних јама са n интерфејса у случају бинарне хетероструктуре (нпр. GaAs/AlAs) постоји $2n$ IF-фононских модова, док у структури са бинарним и тернарним слојевима (нпр. GaAs/Al_xGa_{1-x}As) постоји $3n$ IF-модова, јер сваки тернарни слој има два „бинарна“ мода [129].

Након добијања електростатичких потенцијала свих IF-модова, потребно је применити услов енергетске нормализације [129, 149]:

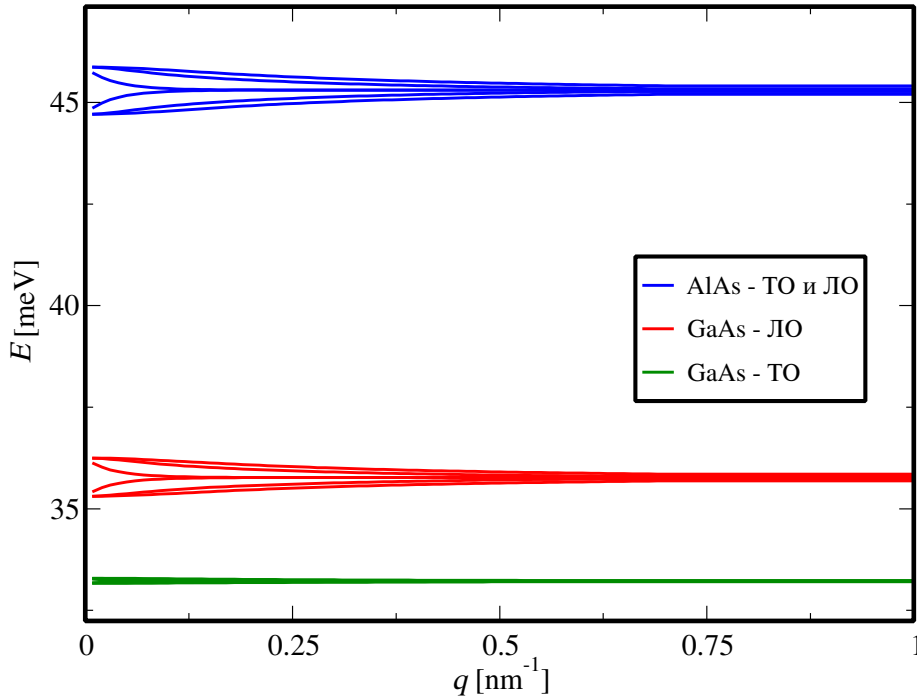
$$\frac{\hbar}{2\omega} = \sum_k \frac{\epsilon_0}{2\omega} \frac{d\epsilon_k(\omega)}{d\omega} \int_{R_k} \left(q^2 |\phi_i(q, z)|^2 + \left| \frac{\partial \phi_k(q, z)}{\partial z} \right|^2 \right) dz, \tag{5.38}$$

где се сумира преко свих слојева структуре, а $R_k = [z_i, z_{i+1}]$ представља интервал сваког слоја.

5.5.2 Нумерички резултати и дискусија

У овој секцији је примењен dTMM за израчунавање дисперзионих релација интерфејс фонона и електростатичких потенцијала фонона за ЛО фононски тројамни ККЛ дизајн, који је постигао импулсни рад на температури од 200 К [46]. Детаљан опис активне области овог ККЛ-а дат је у Додатку А.

Примењен је dTMM за одређивање дисперзионих релација и енергија интерфејс фононских модова за различите вредности таласног вектора фонона q , у распону од $q \in [0, 1] \text{ nm}^{-1}$. Добијене дисперзионе релације приказане су заједно на слици 5.8.



Слика 5.8. Дисперзионе релације IF-фонона приказане заједно за сваки од три скупа IF-модова, приказани за ЛО фононски тројамни ККЛ дизајн [46] са комбинацијом материјала $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$.

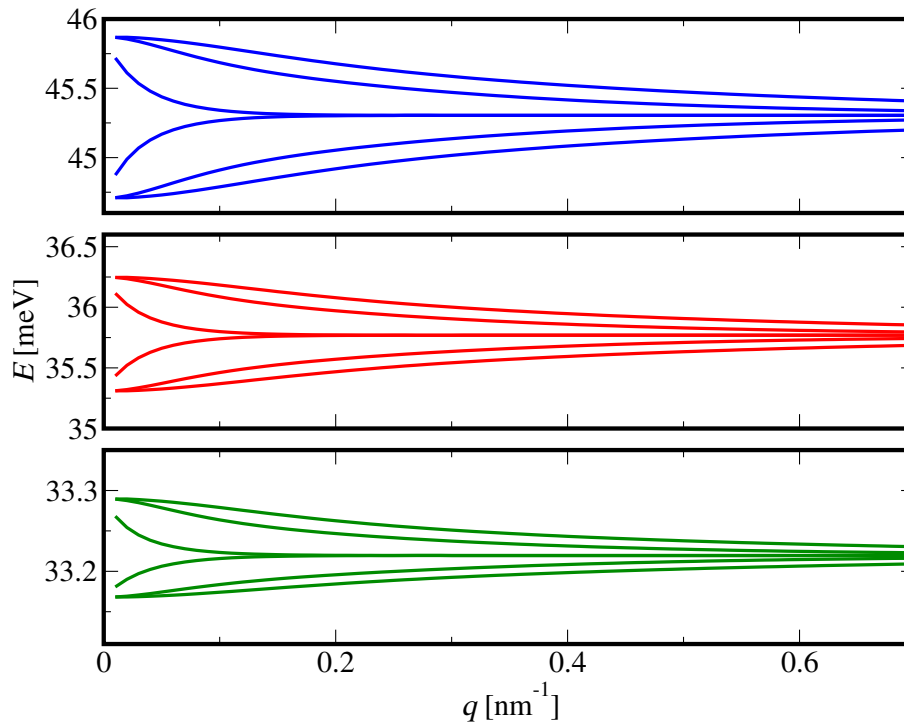
На слици 5.8 може се уочити да IF-оптички фононски модови формирају три групе, од којих свака садржи по 6 модова, што у збиру даје укупно 18 модова. Пошто моделовани ККЛ има 6 интерфејса између бинарног материјала и тернарног материјала ($\text{GaAs}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$), очекивани број IF-модова је $3 \cdot 6 = 18$. Тернарне слојеве баријера карактеришу и GaAs-слични и AlAs-слични модови, при чему се GaAs-слични модови у $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ разликују од оних у GaAs слојевима, што доводи до дуплирања броја ЛО и ТО GaAs модова. Настали IF-модови представљају заједничке модове GaAs материјала из слојева јаме и GaAs-сличних модова из слојева баријере [129].

Најнижа група модова налази се између енергије ТО мода у GaAs од 33.29 meV и GaAs-сличног ТО мода од 33.168 meV у $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ слоју. Како је разлика у енергији мала, ова група модова показује веома малу дисперзију, што је уочљиво на слици 5.9. Средња група модова налази се између ЛО енергије GaAs (36.25 meV) и GaAs-сличног ЛО мода (35.308 meV), уз значајно већу дисперзију у односу на ТО групу.

Трећа група модова налази се између AlAs-сличног ЛО мода од 45.872 meV и AlAs-сличног ТО мода од 44.706 meV у тернарним слојевима, и има највећу дисперзију од све три групе.

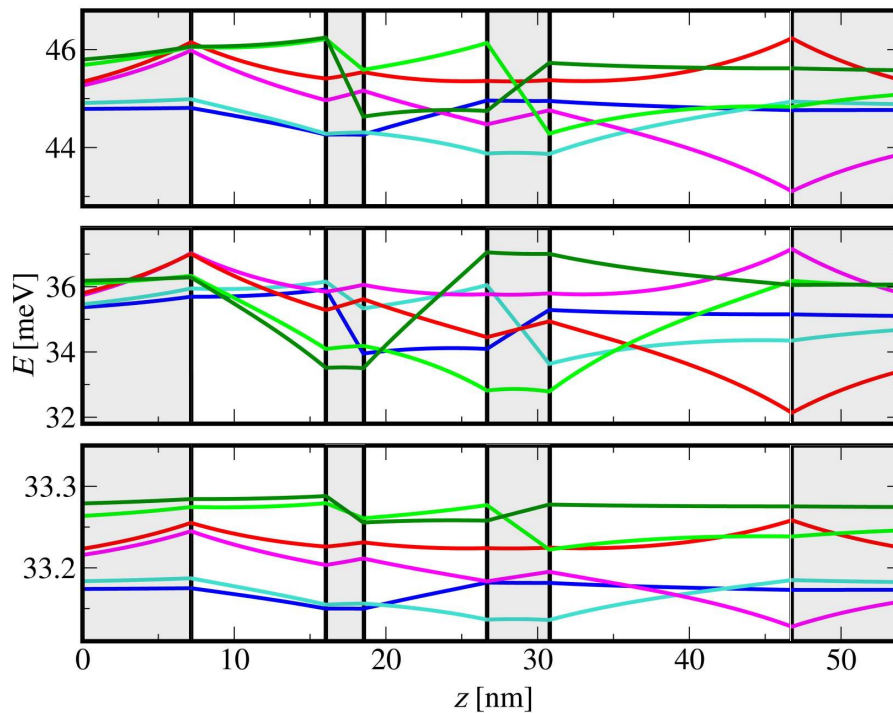
Након одређивања дисперзионих релација, електростатички потенцијал сваког мода за сваки таласни вектор се добија ТММ методом и нормализује тако да задовољи услов енергетске нормализације (5.38). Електростатички потенцијали 18 IF-модова приказани су на слици 5.10 за таласни вектор $q = 0.1 \text{ nm}^{-1}$.

На слици 5.10 може се уочити да су електростатички потенцијали линеарне комбинације експоненцијално растућих и опадајућих просторних функција. Сви израчунати IF-модови на слици 5.9 се налазе у непосредној близини запреминских вредности модова, што оправдава занемаривање IF-модова у моделима транспорта електрона [69]. Ово је у складу са литературом [150] која показује да укључивање CF и IF-модова у GaAs/AlGaAs ККЛ доводи до занемарљивог повећања стопа електрон-ЛО фонон расејања и да утиче на транспорт електрона само у виду мањих корекција у односу на резултате добијене у апроксимацији запреминских фонона.



Слика 5.9. Дисперзионе релације IF-фона приказане индивидуално за сваки од три скупа IF-модова, приказани за ЛО фононски тројамни ККЛ дизајн [46] од материјала GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Анализирањем дисперзије интерфејс оптичких фона у полупроводничким хетероструктурама показана је могућност примене dTMM-а на једначину потпуно неvezану за електронску структуру. Показано је да се dTMM може употребити за израчунавање дисперзионих релација IF-фононских модова и електростатичког потенцијала сваког мода у оквиру модела диелектричног континуума.



Слика 5.10. Електростатички потенцијали 18 IF-оптичких модова за таласни вектор $q = 0.1 \text{ nm}^{-1}$, приказани за ЛО фононски тројамни ККЛ дизајн [46] од материјала GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As. Слојеви баријере од Al_{0.15}Ga_{0.85}As су освенени. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Поглавље 6

Динамика ККЛ-а са спољашњом оптичком повратном спрегом

Максвел–Блохове једначине су од њиховог појављивања осамдесетих година прошлог века [151–153] нашле значајну примену у анализи полупроводничких ласера. Представљају систем спрегнутих диференцијалних једначина које, у оквиру формализма матрице густине, описују популације енергетских стања, електрично поље и индуковану поларизацију. Постале су незаменљив алат при моделовању интеракције светлости и материје у области нелинеарне оптике [154, 155], а коришћене су за опис самоиндуковане транспарентности [156, 157], као и за моделовање динамике ласера [158–161].

У овом поглављу коришћен је теоријски модел развијен у [162], ради проучавања динамике THz ККЛ-а у Фабри–Перо (ФП) конфигурацији, заснован на ефективним Максвел–Блоховим једначинама за полупроводнике (ЕМБЈП) (енгл. effective semiconductor Maxwell–Bloch equations) [163]. Модел обухвата кључне карактеристике полупроводничког активног медијума, као што су асиметрично фреквенцијски зависно појачање и индекс преламања, спрегу фазе и амплитуде описану фактором појачања ширине линије и укључује карактеристичну сусцептибилност полупроводника [164] у комбинацији са увођењем споро променљиве и брзо променљивих варијабли (енгл. multiple scale analysis) [165]. Овај приступ узима у обзир формирање стојећих таласа у резонатору и описује пад појачања у активном медијуму, који је одговоран за просторно сагоревање рупа (енгл. spatial hole burning). Увођењем инјекције повратног зрачења кроз граничне услове, модел може описати утицај спољашње оптичке повратне спреге на ККЛ-е. Коришћени модел описан је у секцији 6.1 овог поглавља.

У последњих неколико година развијени су различити теоријски приступи за опис динамике ККЛ-а. Међу њима, теорија средњег поља резонатора (енгл. cavity mean-field theory) представља модел у коме се просторна динамика поља замењује једним самосагласним средњим пољем, што омогућава ефикасан опис глобалне нелинеарне динамике резонатора и фазно закључаних режима [166, 167]. Због усредњавања дуж резонатора, овај модел не разрешава експлицитно просторне ефекте као што је просторно сагоревање рупа. Као међуниво између овог приступа и потпуно микроскопских модела, развијени су редуковани модели засновани на мастер једначинама који експлицитно укључују кључне физичке механизме [168]. Насупрот томе, ЕМБЈП приступи задржавају пуну просторну структуру поља и пружају детаљан микроскопски опис интеракције светлости и материје. Детаљно поређење наведених теоријских приступа и њиховог односа са експерименталним резултатима дато је у [169].

Један недостатак постојећих ЕМБЈП модела је увођење нерадијативне релаксације носилаца и декохеренције поларизације путем фиксних репрезентативних вредности времена [162], иако ове величине у ККЛ-има зависе од улазне струје. У овом поглављу је коришћени модел из литературе модификован да укључи зависност улазних параметара, као што су материјално појачање, концентрација носилаца, нерадијативно време живота носилаца и време декохерен-

ције поларизације од улазне струје, ради повећања тачности. Зависност улазних параметара од струје добијена је из симулација транспорта заснованих на моделу матрице густине описаном у поглављу 3, полазећи само од дизајна ККЛ-а (дебљина слојева, композиције и допирања). Модел је по први пут примењен на фабриковани ТНз ККЛ, конкретно на GaAs/AlGaAs ВТС дизајн са емисијом на 2 ТНз [51], а транспортно-оптичке карактеристике овог ККЛ-а приказане су у секцији 6.2 овог поглавља. Овај приступ омогућава реалистичније и поузданије предикције у конкретном радном опсегу струја моделованог ККЛ-а. Детаљан опис активне области овог ККЛ-а дат је у Додатку А.

Примена унапређеног модела на реалан ТНз ККЛ омогућава реалистичније симулације динамике у присуству оптичке повратне спреге. Овакав приступ омогућава предвиђање и анализу ефеката и динамичких режима описаних у [170], као што су прелази из мономодног у мултимодни режим рада изазвани спољашњом оптичком повратном спрегом, појава фундаменталних и хармонијских оптичких фреквенцијских чешљева, као и мешовитих динамичких стања. Поред оваквих ефективних модела, у литератури постоје и сложенији приступи засновани на решавању Максвел–Блохових једначина за већи број енергетских стања, што омогућава детаљнији опис транспорта носилаца и ласерске динамике [171]. Динамички режими индуковани оптичком повратном спрегом интензивно су и експериментално проучавани у новијим истраживањима. Показано је да спољашња шупљина са повратном спрегом омогућава контролисано генерисање хармонијских фреквенцијских чешљева и представља ефикасан начин за обликовање спектралних и временских особина емисије ККЛ-а [172]. Такође, експериментално је демонстрирано да јака оптичка повратна спрега представља ефикасно средство за стабилизацију рада ККЛ-а и постизање значајног сужења ширине линије, што је од кључног значаја за примене у спектроскопији високе резолуције [173]. ККЛ фреквенцијски чешљеви успешно су примењени у широкопојасној фототермалној спектроскопији, где омогућавају осетљиву и широкопојасну детекцију у средњем инфрацрвеном спектралном опсегу [174]. Ови резултати наглашавају потенцијал ККЛ фреквенцијских чешљева као компактних, кохерентних и високо прилагодљивих извора зрачења за примене у сензорима и спектроскопији.

У претходној литератури експериментално је јасно утврђено да спољашња оптичка повратна спрега може да модификује праг струје ККЛ-а. У већини случајева, смањење прага струје износило је свега неколико процената у односу на вредност у режиму рада без спољашње повратне спреге [175, 176]. Међутим, у новијим истраживањима пријављено је изражено смањење прага струје код ФП ККЛ-а [177], при чему је праг струје опао са приближно 550 mA на око 350 mA у присуству јаке спољашње оптичке повратне спреге.

Моделовање рада ласера при струји прага приказано је у секцији 6.3 овог поглавља. Додавање спољашње оптичке повратне спреге ККЛ-у који ради у мономодном режиму доводи до преласка ласера у мултимодни режим и, у зависности од дужине спољашње шупљине, доводи до различитих спектра емисије. Додатно, приказано је и квантитативно одређено смањење струје прага изазвано спољашњом оптичком повратном спрегом.

У секцији 6.4 овог поглавља анализиран је рад ККЛ-а при максималној струји у тачки негативне диференцијалне отпорности. При овој струји ласер емитује у мултимодном режиму без присуства спољашње оптичке повратне спреге. Увођењем спољашње шупљине долази до значајних промена у емисионом спектру, при чему су поједини модови појачани, док су други потиснути.

На крају, у секцији 6.5 анализирана је погодност различитих режима рада за примене у сензорици услед различите осетљивости излазне снаге ККЛ-а на промене дужине спољашње шупљине. Модел предвиђа високу осетљивост излазне снаге ККЛ-а на промене дужине спољашње шупљине. Када ласер ради у мономодном режиму или са само неколико модова, излаз је интерпретабилан, омогућавајући поуздану анализу и обраду резултата за примену у сензорици. Присуство великог броја модова доводи до повећања зашумљености излазног сигнала, што отежава интерпретацију и обраду резултата за примену у сензорици.

Унапређени модел пружа реалистичнију анализу динамике THz ККЛ-а под утицајем спољашње оптичке повратне спреге. Анализа динамике ласера омогућава идентификацију дизајна који испољавају минимално мултимодно понашање, чиме се олакшавају прецизна и јасно интерпретабилна мерења у сензорским применама. Добијени резултати указују на значајан потенцијал за развој прецизних сензорских и комуникационих уређаја заснованих на ККЛ-има.

Резултати приказани у овом поглављу објављени су у ауторовом раду [61].

6.1 Ефективне Максвел–Блохове једначине за полупроводнике

Детаљно извођење ефективних Максвел–Блохових једначина за полупроводнике дато је у [162], док су у секцији 6.1.1 приказани кључни кораци и претпоставке коришћене у извођењу. Полази се од д’Аламберове једначине која описује просторновременску еволуцију електричног поља у Фабри–Перо резонатору дужине неколико mm, при чему је примењена апроксимација споро променљиве анvelope (енгл. *slowly varying envelope approximation*) ради увођења анvelope електричног поља и поларизације одвојено за оба смера простирања.

За опис поларизације, као оптичког одзива активног медијума на побудно електрично поље, коришћена је феноменолошка оптичка сусцептибилност која узима у обзир асиметрично, фреквенцијски зависно појачање и индекс преламања и која је функција густине носилаца. Детаљно извођење ове оптичке сусцептибилности дато је у раду [164].

Динамика носилаца у активном медијуму у великој мери зависи од динамике електричног поља. Због брзе депопулације доњег ласерског нивоа, претпостављено је да је он празан, па је густина носилаца једнака популацији горњег ласерског нивоа. Еволуција густине носилаца изведена је применом Блоховог двонивоског модела у оквиру апроксимације ротирајућег таласа (енгл. *rotating wave approximation*) [155]. На крају, примењен је приступ увођења споропроменљивих и брзопроменљивих варијабли [178], којим су просторне варијације поларизације и густине носилаца развијене у Фуријеов ред, чиме се систем једначина поједностављује.

За нумеричко решавање овог система једначина примењена је дискретизација у просторно-временском домену у облику путујућег таласа (енгл. *time-domain traveling-wave*) коришћењем методе коначних разлика, што је детаљно изложено у секцији 6.1.2. Дискретизација је спроведена на дводимензионалној просторно-временској мрежи.

6.1.1 Теоријски модел

Полази се од д’Аламберове једначине која описује просторно-временску еволуцију електричног поља у ФП резонатору дужине неколико mm:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2}, \quad (6.1)$$

где су E електрично поље, P поларизација, а v групна брзина. Претпостављено је да се електрично поље и поларизација могу записати у облику:

$$E(z, t) = \frac{1}{2} [E^+(z, t)e^{-ik_0 z + i\omega_0 t} + E^-(z, t)e^{ik_0 z + i\omega_0 t} + \text{c.c.}], \quad (6.2)$$

$$P(z, t) = \frac{1}{2} [P_0(z, t)e^{i\omega_0 t} + \text{c.c.}], \quad (6.3)$$

где су E^+ и E^- споропроменљиве анvelope електричних поља усмерених напред и назад унутар

резонатора, док је P_0 анVELOпа поларизације за коју се претпоставља да варира споро само у времену. Овде су ω_0 и k_0 кружна учестаност и одговарајући таласни вектор.

Убацивањем једначина (6.2) и (6.3) у једначину (6.1) и применом апроксимације споро ротирајуће анVELOпе добија се:

$$\left(\frac{\partial E^+}{\partial z} + \frac{1}{v} \frac{\partial E^+}{\partial t} \right) e^{-ik_0 z} + \left(-\frac{\partial E^-}{\partial z} + \frac{1}{v} \frac{\partial E^-}{\partial t} \right) e^{ik_0 z} = \kappa P_0, \quad (6.4)$$

где је κ комплексни коефицијент дат изразом

$$\kappa = \frac{-i\omega_0 N_p \Gamma_c}{2\varepsilon_0 n c}. \quad (6.5)$$

Овде је N_p број периода ККЛ-а, Γ_c фактор оптичког конфинирања који описује преклапање оптичког мода и активне области, а n индекс преламања медијума.

Динамика поља повезана је са динамиком носилаца активног медијума. Претпостављено је да је у сваком прелазу основно стање увек празно, услед брзе депопулације интеракцијом електрона са ЛО фононима. Због тога је једина динамичка променљива густина носилаца горњег ласерског нивоа $N(z, t)$.

Једначина еволуције добија се из Блоховог двонивоског приступа у апроксимацији ротирајућег таласа [155]. Струја пумпања обележена је са I и нерадијативно време живота носилаца са τ_e . Урачунавањем амплитуда електричног поља које се креће унапред и уназад (потребно за ФП резонатор), добија се:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{I}{eV} - \frac{N}{\tau_e} - \frac{i}{4\hbar} \left[(E^+ e^{-ik_0 z} + E^- e^{ik_0 z}) P_0^* - (E^{+*} e^{ik_0 z} + E^{-*} e^{-ik_0 z}) P_0 \right], \quad (6.6)$$

где је V запремина активног медијума.

Детаљно извођење једначине за динамику поларизације описано је у [164]. Почиње се увођењем феноменолошке оптичке суцептибилности која омогућава опис спектрално асиметричних кривих за појачање и дисперзију, које зависе од густине носилаца:

$$\chi(\omega, N) = \frac{f_0 N_d (1 + i\alpha)(i - \alpha)}{(1 + i\alpha) + i\omega\tau_d}, \quad (6.7)$$

где је N_d запреминска концентрација електрона, f_0 диференцијално појачање које квантификује осетљивост материјалног појачања на промене густине носилаца и повезује индуковану поларизацију са електричним пољем у медијуму, α фактор појачања ширине линије (енгл. linewidth enhancement factor), а τ_d време декохеренције поларизације. У једначини (6.7) претпостављено је, ради поједностављења, да се максимум појачања поклапа са фреквенцијом мода резонатора ω_0 . На основу једначине (6.7) добија се једначина у временском домену за поларизацију:

$$\frac{\partial P_0}{\partial t} = \frac{1}{\tau_d} (1 + i\alpha) \left[(E^+ e^{-ik_0 z} + E^- e^{ik_0 z}) P_0^* - (E^{+*} e^{ik_0 z} + E^{-*} e^{-ik_0 z}) P_0 \right], \quad (6.8)$$

Уз задржавање физичког смисла и нумеричке изводљивости, уведено је поједностављење развијањем у Фуријев ред просторне варијације поларизације P и густине носилаца N [178]:

$$P_0 = e^{-ik_0 z} \sum_{n=0}^{\infty} P_n^+ e^{-2nik_0 z} + e^{ik_0 z} \sum_{n=0}^{\infty} P_n^- e^{2nik_0 z}, \quad (6.9)$$

$$N = N_0 + \sum_{n=1}^{\infty} N_n^+ e^{-2nik_0 z} + \sum_{n=1}^{\infty} N_n^- e^{2nik_0 z}. \quad (6.10)$$

Убацивањем једначина (6.9) и (6.10) у једначине (6.4), (6.6) и (6.8), и занемаривањем чланова са таласним вектором већим од $2k_0$, добијен је коначан скуп ефективних Максвел–Блохових једначина за полупроводник, које описују динамику ККЛ-а у ФП конфигурацији [162]:

$$\frac{\partial E^+}{\partial z} + \frac{1}{v} \frac{\partial E^+}{\partial t} = -\frac{\alpha_L}{2} E^+ + \kappa P_0^+, \quad (6.11)$$

$$-\frac{\partial E^-}{\partial z} + \frac{1}{v} \frac{\partial E^-}{\partial t} = -\frac{\alpha_L}{2} E^- + \kappa P_0^-, \quad (6.12)$$

$$\frac{\partial P_0^+}{\partial t} = \frac{(1+i\alpha)}{\tau_d} [-P_0^+ + i f_0 \varepsilon_0 \varepsilon_r (1+i\alpha)(N_0 E^+ + N_1^+ E^-)], \quad (6.13)$$

$$\frac{\partial P_0^-}{\partial t} = \frac{(1+i\alpha)}{\tau_d} [-P_0^- + i f_0 \varepsilon_0 \varepsilon_r (1+i\alpha)(N_0 E^- + N_1^- E^+)], \quad (6.14)$$

$$\frac{\partial N_0}{\partial t} = \frac{I}{eV} - \frac{N_0}{\tau_e} + \frac{i}{4\hbar} (E^{+*} P_0^+ + E^{-*} P_0^- - E^+ P_0^{+*} - E^- P_0^{-*}), \quad (6.15)$$

$$\frac{\partial N_1^+}{\partial t} = -\frac{N_1^+}{\tau_e} + \frac{i}{4\hbar} (E^{-*} P_0^+ - E^+ P_0^{-*}), \quad (6.16)$$

где је α_L коефицијент губитака у резонатору, коефицијенти N_0 и N_1^+ су Фуријеови коефицијенти популације у горњем ласерском нивоу.

За разлику од претходних примена модела [170, 179], овај модел је модификован тако да се диференцијално појачање f_0 не узима као типична константа за THz ККЛ, већ се израчунава на основу материјалног појачања g_0 , запреминске концентрације електрона N_d и времена декохеренције поларизације τ_d , добијених из транспортних симулација заснованих на моделу матрице густине [51, 180] изложеном у поглављу 3.

Материјално појачање дефинисано је као имагинарни део оптичке сусцептибилности, дато једначином (3.21):

$$g(\omega) = \frac{\omega}{nc_0} \Im[\chi(\omega, N_d)]. \quad (6.17)$$

Коришћењем једначине (6.7) добија се имагинарни део сусцептибилности:

$$\Im[\chi] = f_0 N_d \frac{1 + \alpha^2 + 2\alpha\omega\tau_d}{1 + (\alpha + \omega\tau_d)^2}. \quad (6.18)$$

Комбинацијом претходна два израза, диференцијално појачање се може записати у облику:

$$f_0 = \frac{nc_0 g(\omega)}{\omega N_d} \frac{1 + (\alpha + \omega\tau_d)^2}{1 + \alpha^2 + 2\alpha\omega\tau_d}. \quad (6.19)$$

Примењивањем овог израза на мод резонатора најближи максимуму појачања, $\omega = \omega_0$, при чему је $g(\omega_0) = g_0$, добија се:

$$f_0 = \frac{nc_0 g_0}{\omega_0 N_d} \frac{1 + (\alpha + \omega_0\tau_d)^2}{1 + \alpha^2 + 2\alpha\omega_0\tau_d}. \quad (6.20)$$

Увођење спољашње оптичке повратне спреге, односно повратка електричног поља рефлектованог од спољашње мете која се налази на растојању L_{ext} од излазног краја ККЛ-а дужине L , уводи се преко граничних услова:

$$E^-(L, t) = \sqrt{R} E^+(L, t) + r_{\text{ext}} t_L^2 E^+(L, t - \tau_{\text{ext}}) e^{-i\omega_0 \tau_{\text{ext}}}, \quad (6.21)$$

$$E^+(0, t) = \sqrt{R} E^-(0, t), \quad (6.22)$$

где је R рефлективност огледала ФП резонатора, $\tau_{\text{ext}} = 2L_{\text{ext}}/c_0$ време једног повратног пута спољашње шупљине (енгл. round-trip time), $t_L = \sqrt{1 - R}$ коефицијент трансмисије излазне стране резонатора ККЛ-а, а r_{ext} укупна рефлективност спољашње мете. Укупно електрично поље може се изразити преко споро променљивих анVELOпа у облику

$$E(z, t) = \frac{1}{2} \left[E^+(z, t) e^{-ik_0 z + i\omega_0 t} + E^-(z, t) e^{ik_0 z + i\omega_0 t} + \text{c.c.} \right]. \quad (6.23)$$

Израчунато укупно електрично поље на излазу ККЛ-а $E(L, t)$ користи се за одређивање излазне снаге и спектра ласера. Излазна снага дата је изразом:

$$P_{\text{out}}(t) = \frac{1}{2} (1 - R) \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{V}{L} \frac{c}{n} |E(L, t)|^2. \quad (6.24)$$

6.1.2 Нумеричко решавање методом коначних разлика

За нумеричко решавање ефективних Максвел–Блохових једначина за полупроводнике примењена је дискретизација у просторно-временском домену у облику путујућег таласа коришћењем методе коначних разлика, која је детаљно објашњена у [181].

Дискретизација се спроводи на дводимензионалној (2D) просторно-временској мрежи, дуж просторне координате z и дуж временске координате t . Тачке мреже дефинисане су као $z_i = i \Delta z$ и $t_j = j \Delta t$, где Δz и Δt представљају корак дуж просторне и временске осе, респективно. Шест главних динамичких променљивих у моделу ефективних Максвел–Блохових једначина за полупроводнике су $E^+(z, t)$, $E^-(z, t)$, $P_0^+(z, t)$, $P_0^-(z, t)$, $N_0(z, t)$ и $N_1^+(z, t)$, које се израчунавају у дискретним тачкама мреже (z_i, t_j) .

Дискретизоване једначине решавају се применом метода коначних разлика. Просторни изводи анVELOпа електричног поља која пропaгирају унапред и уназад дуж координатне осе апроксимирају се разликама првог реда: разликом „уназад” за $E^+(z, t)$

$$\left. \frac{\partial E^+}{\partial z} \right|_{(z_i, t_j)} \approx \frac{E^+(z_i, t_j) - E^+(z_{i-1}, t_j)}{\Delta z}, \quad (6.25)$$

и разликом „унапред” за $E^-(z, t)$.

$$\left. \frac{\partial E^-}{\partial z} \right|_{(z_i, t_j)} \approx \frac{E^-(z_{i+1}, t_j) - E^-(z_i, t_j)}{\Delta z}. \quad (6.26)$$

Временски изводи свих поља и густина носилаца дискретизују се разликом „унапред”

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{(z_i, t_j)} \approx \frac{f(z_i, t_{j+1}) - f(z_i, t_j)}{\Delta t}. \quad (6.27)$$

Оваква дискретизација омогућава секвенцијално решавање променљивих у времену, односно решење се израчунава ред по ред дуж временске димензије: вредности поља и густине носилаца у наредном временском кораку t_{j+1} добијају се на основу познатих вредности у кораку t_j за све просторне тачке.

Унутар једног временског корака, ажурирање се спроводи секвенцијално дуж просторне мреже, што одражава пропагацију анVELOпа електричних поља која пропадају унапред и уназад дуж координатне осе, као што је илустровано на слици 6.1.

Нумеричка стабилност се обезбеђује испуњавањем услова који повезује корак дуж временске и просторне осе преко групне брзине $v_g = c/n$, односно Курант–Фридрихс–Левијевог услова:

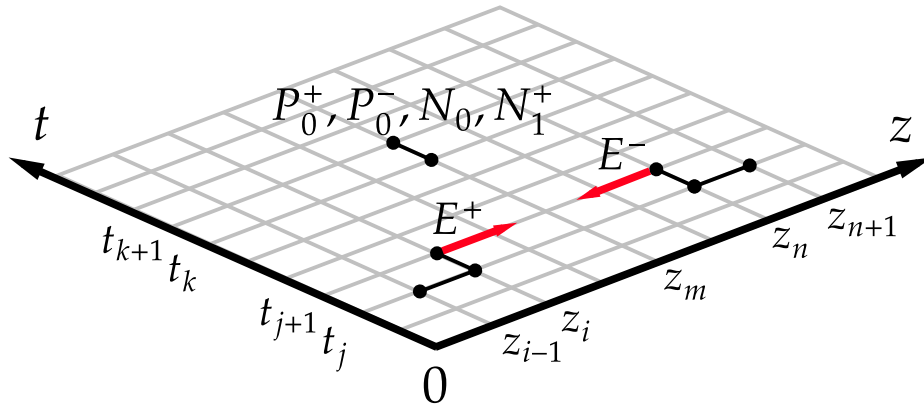
$$\Delta t \lesssim \frac{\Delta z}{v}. \quad (6.28)$$

На граничним тачкама, $z = 0$ и $z = L$, једначине коначних разлика се не могу директно применити, већ се користе гранични услови који описују рефлексију и спољашњу оптичку повратну спрегу:

$$E^-(L, t_{j+1}) = \sqrt{R} E^+(L, t_j) + r_{\text{ext}} t_L^2 E^+(L, t_j - \tau_{\text{ext}}) e^{-i\omega_0 \tau_{\text{ext}}}, \quad (6.29)$$

$$E^+(0, t_{j+1}) = \sqrt{R} E^-(0, t_j), \quad (6.30)$$

где је R рефлективност унутрашње шупљине, r_{ext} коефицијент рефлексије спољашњег огледала, t_L амплитудски коефицијент трансмисије излазне стране резонатора, а $\tau_{\text{ext}} = 2L_{\text{ext}}/c$ време једног повратног пута спољашње шупљине.



Слика 6.1. Илустрација 2D просторно-временске мреже са означеним релевантним тачкама за одређивање анVELOпа електричних поља која пропадају унапред и уназад дуж координатне осе, поларизације и густина носилаца применом методе коначних разлика. За израчунавање вредности $E^+(z, t)$ у наредном временском кораку потребно је познавати његове вредности у претходном временском кораку на истој и на претходној просторној координати. Насупрот томе, за $E^-(z, t)$ неопходне су вредности у претходном временском кораку на истој и на наредној просторној координати. За поларизацију и густине носилаца довољне су вредности на истој просторној координати у претходном временском кораку. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Почетни услови за $t = 0$ постављени су тако да електрична поља и поларизације имају веома мале реалне вредности у свим просторним тачкама, док су популације носилаца иницијализоване на нулу. Ове мале почетне вредности служе као покретач динамике, али не утичу на коначно решење све док су знатно мање од јединице.

Претходно описана дискретизација шест динамичких променљивих спроведена је на следећи начин:

1. АнVELOпа електричног поља која пропадају унапред

Полазна диференцијална једначина (6.11) дата је са:

$$\frac{\partial E^+}{\partial z} + \frac{1}{v} \frac{\partial E^+}{\partial t} = -\frac{\alpha_L}{2} E^+ + \kappa P_0^+.$$

Применом коначних разлика добија се:

$$\frac{E^+(z_i, t_j) - E^+(z_{i-1}, t_j)}{\Delta z} + \frac{E^+(z_i, t_{j+1}) - E^+(z_i, t_j)}{v\Delta t} = -\frac{\alpha_L}{2}E^+(z_i, t_j) + \kappa P_0^+(z_i, t_j).$$

Из ове једначине следи експлицитна форма за ажурирање поља:

$$E^+(z_i, t_{j+1}) = E^+(z_i, t_j) \left[1 - \frac{v\Delta t}{\Delta z} - v\Delta t \frac{\alpha_L}{2} \right] + \frac{v\Delta t}{\Delta z} E^+(z_{i-1}, t_j) + v\Delta t \kappa P_0^+(z_i, t_j). \quad (6.31)$$

2. Анвелоп електричног поља која пропагира уназад

Полазна диференцијална једначина (6.12) дата је са:

$$-\frac{\partial E^-}{\partial z} + \frac{1}{v} \frac{\partial E^-}{\partial t} = -\frac{\alpha_L}{2}E^- + \kappa P_0^-.$$

Применом коначних разлика добија се:

$$-\frac{E^-(z_{i+1}, t_j) - E^-(z_i, t_j)}{\Delta z} + \frac{E^-(z_i, t_{j+1}) - E^-(z_i, t_j)}{v\Delta t} = -\frac{\alpha_L}{2}E^-(z_i, t_j) + \kappa P_0^-(z_i, t_j).$$

Из ове једначине следи експлицитна форма за ажурирање поља:

$$E^-(z_i, t_{j+1}) = E^-(z_i, t_j) \left[1 - v\Delta t \left(\frac{1}{\Delta z} + \frac{\alpha_L}{2} \right) \right] + v\Delta t \frac{E^-(z_{i+1}, t_j)}{\Delta z} + v\Delta t \kappa P_0^-(z_i, t_j). \quad (6.32)$$

3. Анвелоп поларизације која пропагира унапред

Полазна диференцијална једначина (6.13) дата је са:

$$\frac{\partial P_0^+}{\partial t} = \frac{(1 + i\alpha)}{\tau_d} [-P_0^+ + if_0\epsilon_0\epsilon_r(1 + i\alpha)(N_0E^+ + N_1^+E^-)].$$

Применом коначних разлика добија се:

$$\frac{P_0^+(z_i, t_{j+1}) - P_0^+(z_i, t_j)}{\Delta t} = \frac{(1 + i\alpha)}{\tau_d} [-P_0^+(z_i, t_j) + if_0\epsilon_0\epsilon_r(1 + i\alpha)(N_0(z_i, t_j)E^+(z_i, t_j) + N_1^+(z_i, t_j)E^-(z_i, t_j))].$$

Из ове једначине следи експлицитна форма за ажурирање поларизације:

$$P_0^+(z_i, t_{j+1}) = P_0^+(z_i, t_j) \left[1 - \frac{\Delta t(1 + i\alpha)}{\tau_d} \right] + \frac{\Delta t(1 + i\alpha)^2}{\tau_d} if_0\epsilon_0\epsilon_r (N_0(z_i, t_j)E^+(z_i, t_j) + N_1^+(z_i, t_j)E^-(z_i, t_j)). \quad (6.33)$$

4. Анвелоп поларизације која пропагира уназад

Полазна диференцијална једначина (6.14) дата је са:

$$\frac{\partial P_0^-}{\partial t} = \frac{(1 + i\alpha)}{\tau_d} [-P_0^- + if_0\epsilon_0\epsilon_r(1 + i\alpha)(N_0E^- + N_1^-E^+)].$$

Применом коначних разлика добија се:

$$\frac{P_0^-(z_i, t_{j+1}) - P_0^-(z_i, t_j)}{\Delta t} = \frac{(1 + i\alpha)}{\tau_d} \left[-P_0^-(z_i, t_j) + i f_0 \varepsilon_0 \varepsilon_r (1 + i\alpha) (N_0(z_i, t_j) E^-(z_i, t_j) + N_1^-(z_i, t_j) E^+(z_i, t_j)) \right].$$

Из ове једначине следи експлицитна форма за ажурирање поларизације:

$$P_0^-(z_i, t_{j+1}) = P_0^-(z_i, t_j) \left[1 - \frac{\Delta t (1 + i\alpha)}{\tau_d} \right] + \frac{\Delta t (1 + i\alpha)^2}{\tau_d} i f_0 \varepsilon_0 \varepsilon_r (N_0(z_i, t_j) E^-(z_i, t_j) + N_1^-(z_i, t_j) E^+(z_i, t_j)). \quad (6.34)$$

5. Инверзна популација - хомогена компонента

Полазна диференцијална једначина (6.15) дата је са:

$$\frac{\partial N_0}{\partial t} = \frac{I}{eV} - \frac{N_0}{\tau_e} + \frac{i}{4\hbar} (E^{+*} P_0^+ + E^{-*} P_0^- - E^+ P_0^{+*} - E^- P_0^{-*}).$$

Применом коначних разлика добија се:

$$\begin{aligned} \frac{N_0(z_i, t_{j+1}) - N_0(z_i, t_j)}{\Delta t} &= \frac{I}{eV} \\ &- \frac{N_0(z_i, t_j)}{\tau_e} + \frac{i}{4\hbar} (E^{+*}(z_i, t_j) P_0^+(z_i, t_j) + E^{-*}(z_i, t_j) P_0^-(z_i, t_j)) \\ &- \frac{i}{4\hbar} (E^+(z_i, t_j) P_0^{+*}(z_i, t_j) + E^-(z_i, t_j) P_0^{-*}(z_i, t_j)). \end{aligned}$$

Па форма за ажурирање хомогене компоненте инверзне популације гласи:

$$\begin{aligned} N_0(z_i, t_{j+1}) &= N_0(z_i, t_j) \left[1 - \frac{\Delta t}{\tau_e} \right] + \Delta t \frac{I}{eV} \\ &+ \frac{i\Delta t}{4\hbar} (E^{+*}(z_i, t_j) P_0^+(z_i, t_j) + E^{-*}(z_i, t_j) P_0^-(z_i, t_j)) \\ &- \frac{i\Delta t}{4\hbar} (E^+(z_i, t_j) P_0^{+*}(z_i, t_j) + E^-(z_i, t_j) P_0^{-*}(z_i, t_j)). \end{aligned} \quad (6.35)$$

6. Инверзна популација - просторна модулација

Полазна диференцијална једначина (6.16) дата је са:

$$\frac{\partial N_1^+}{\partial t} = -\frac{N_1^+}{\tau_e} + \frac{i}{4\hbar} (E^{-*} P_0^+ - E^+ P_0^{-*}).$$

Применом коначних разлика добија се:

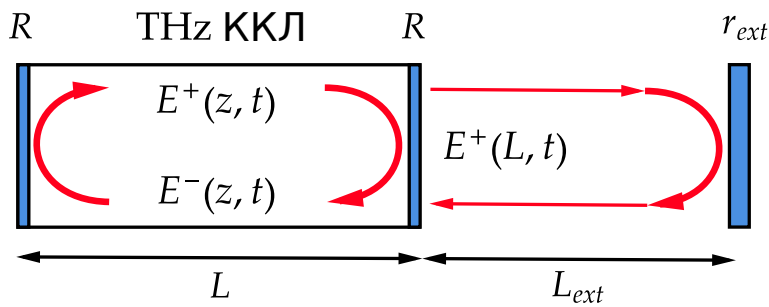
$$\begin{aligned} \frac{N_1^+(z_i, t_{j+1}) - N_1^+(z_i, t_j)}{\Delta t} &= -\frac{N_1^+(z_i, t_j)}{\tau_e} \\ &+ \frac{i}{4\hbar} (E^{-*}(z_i, t_j) P_0^+(z_i, t_j) - E^+(z_i, t_j) P_0^{-*}(z_i, t_j)). \end{aligned}$$

Следи израз за ажурирање просторне модулације инверзне популације:

$$N_1^+(z_i, t_{j+1}) = N_1^+(z_i, t_j) \left[1 - \frac{\Delta t}{\tau_e} \right] + \frac{i\Delta t}{4\hbar} (E^{-*}(z_i, t_j)P_0^+(z_i, t_j) - E^+(z_i, t_j)P_0^{-*}(z_i, t_j)). \quad (6.36)$$

6.2 Карактеризација моделованог ККЛ-а

Модел је примењен на GaAs/AlGaAs ВТС дизајн са емисијом на 2 THz [51]. ККЛ у Фабри–Перо резонатору са спољашњом оптичком повратном спрегом од рефлектора рефлективности r_{ext} , постављеног на растојању L_{ext} од излазне стране ККЛ-а дужине L и рефлективности R приказан је на слици 6.2.



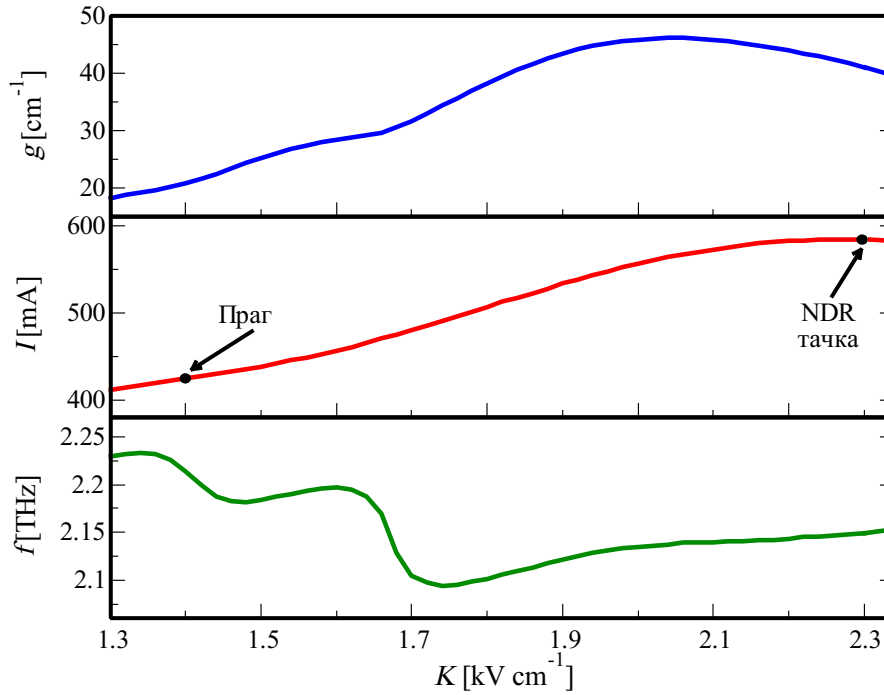
Слика 6.2. Илустрација THz ККЛ-а у Фабри–Перо резонатору са спољашњом оптичком повратном спрегом од спољашњег рефлектора. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>), текст је преведен.

Параметри ККЛ-а коришћени у симулацијама приказани су у табели 6.1.

Табела 6.1. Параметри ККЛ-а коришћени у симулацијама. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>), текст је преведен.

Параметар	Вредност
Запремина активне области - V	$6.16 \cdot 10^{-12} \text{ m}^3$
Дужина - L	2.2 mm
Ширина - W	200 μm
Висина - H	14 μm
Рефлективност огледала - R	0.3
Фактор конфинирања - Γ	0.13
Индекс преламања - n	3.6
Број периода - N_p	110

Улазни параметри за модел ефективних Максвел–Блохових једначина за полупроводнике захтевају реалистичне параметре који зависе од струје, добијене из транспортног модела. Материјално појачање, струја и фреквенција емисије у зависности од примењеног електричног поља за GaAs/AlGaAs ВТС THz ККЛ [51], израчунати помоћу модела МГ, приказани су на слици 6.3. Тачка прага ($I_{thr} = 430 \text{ mA}$) и тачка максималне струје којој одговара NDR тачка ($I_{NDR} = 580 \text{ mA}$) коришћене у симулацијама су означене на слици.



Слика 6.3. Материјално појачање, струја и фреквенција емисије у зависности од примењеног електричног поља за GaAs/AlGaAs BTC THz ККЛ [51], са означеним тачкама прага и максимума струје коме одговара NDR тачка. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>), текст је преведен.

Додатни параметри израчунати су коришћењем модела МГ [51, 180] приказаном у поглављу 3 за дате улазне струје и коришћени у моделовања ККЛ-а.

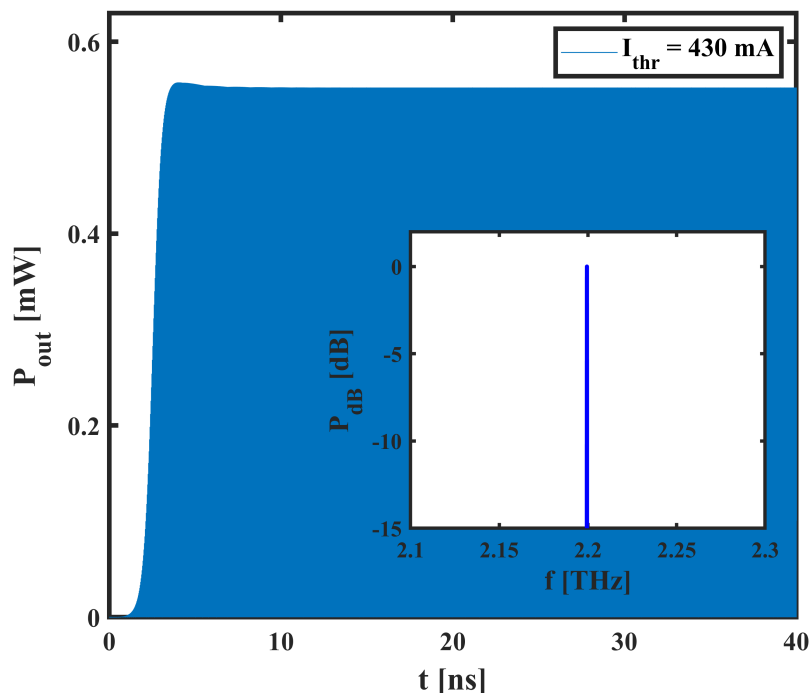
6.3 Емисија при струји прага

Динамика ККЛ-а моделована је при струји прага $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$. Параметри израчунати помоћу модела МГ за ову вредност струје су следећи: материјално појачање $g_0 = 2085 \text{ m}^{-1}$, фреквенција максимума појачања $f = 2.2 \text{ THz}$, запреминска концентрација електрона $N_d = 4.88 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$, нерадијативно време живота носилаца $\tau_e = 6.5 \text{ ps}$ и време декохеренције поларизације $\tau_d = 0.638 \text{ ps}$.

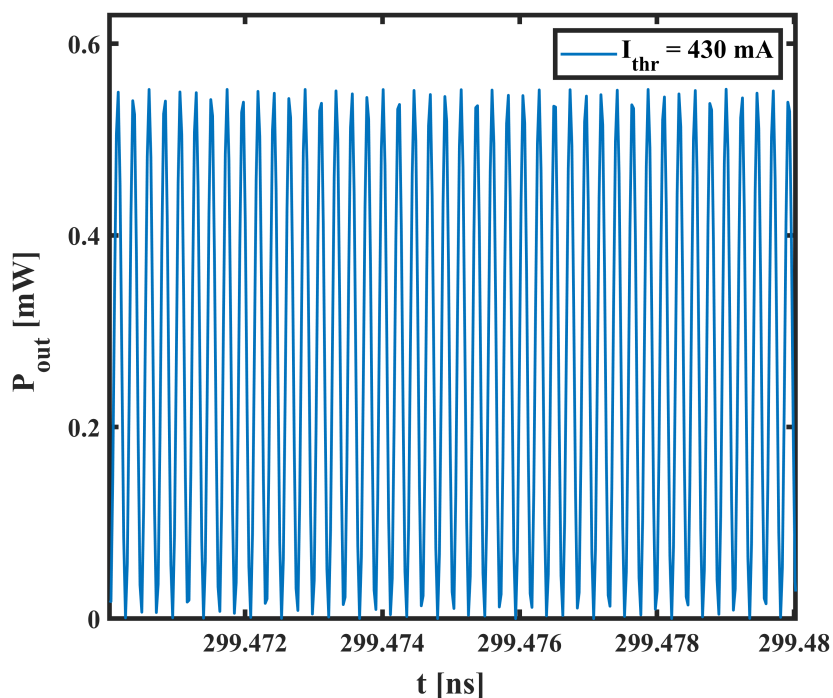
6.3.1 Рад без спољашње оптичке повратне спреге

Најпре је динамика ККЛ-а моделована у режиму рада без спољашње оптичке повратне спреге. На слици 6.4 приказан је временски облик излазне снаге ККЛ-а, док је у доњем десном делу приказан оптички спектар емитованог зрачења на излазу ККЛ-а. За ову струју, спектар садржи један мод на фреквенцији од 2.2 THz , што указује на мономодни режим рада. Излазна снага брзо достиже стационарну вредност ($< 10 \text{ ns}$), а њена средња вредност износи 0.28 mW .

На слици 6.5 приказан је увећани део слике 6.4. Може се уочити да ласер емитује у континуалном режиму и да излазна снага осцилује на фреквенцији од 4.4 THz , што је двострука вредност фреквенције осцилација електричног поља (2.2 THz), која одговара фреквенцији максимума појачања. Временски интервал између узастопних максимума износи $0.227 \text{ ps} \approx 1/4.4 \text{ THz}$. На струји прага ККЛ тек почиње да ласерује, па је излазна снага веома мала. Активни медијум се понаша као јединствен систем, не формира се путујући талас, а излазна снага непосредно одражава електрично поље дуж читаве активне средине.



Слика 6.4. Временски облик излазне снаге ККЛ-а за струју прага $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ без спољашње оптичке повратне спреге, док је у доњем десном делу приказан оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у мономодном режиму. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).



Слика 6.5. Стационарни временски облик излазне снаге ККЛ-а за струју прага $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ без спољашње оптичке повратне спреге, при чему ККЛ емитује у мономодном режиму. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

6.3.2 Рад са спољашњом оптичком повратном спрегом

У литератури је показано да увођење спољашње оптичке повратне спреге код ККЛ-а који ради у мономодном режиму при струји прага може довести до формирања фундаменталног оптичког фреквенцијског чешља, хармонијског фреквенцијског чешља, као и разних мешовитих стања, у зависности од дужине спољашње шупљине L_{ext} [170]. Фундаментални оптички фреквентни чешаљ карактеризован је мултимодном емисијом при чему су модови раздвојени

за слободни спектрални опсег (енгл. free spectral range - FSR) резонатора, док се хармонијски фреквенцијски чешаљ (енгл. harmonic frequency comb - HFC) јавља када је побуђен само сваки N -ти лонгитудинални мод, тако да је фреквенцијско растојање између модова целобројни умножак фундаменталног FSR-а.

Моделовани BTC ККЛ има дужину резонатора од $L = 2.2 \text{ mm}$, а индекс преламања активне области $n = 3.6$, па слободни спектрални опсег резонатора износи:

$$\text{FSR}_{\text{int}} = \frac{c_0}{2nL} \approx 18.9 \text{ GHz}. \quad (6.37)$$

Да би се формирао фундаментални оптички фреквенцијски чешаљ дужина спољашње шупљине треба да задовољи услов:

$$L_{\text{ext}}^{\text{FFC}} = \frac{c_0}{2 \text{FSR}_{\text{int}}} = 7.94 \text{ mm} \approx 8.00 \text{ mm}, \quad (6.38)$$

док је за формирање другог хармоника (HFC2), код кога је растојање између модова удвостручено, потребно да дужина спољашње шупљине задовољи услов:

$$L_{\text{ext}}^{\text{HFC2}} = \frac{c_0}{2 \cdot 2 \text{FSR}_{\text{int}}} = 3.97 \text{ mm} \approx 4.00 \text{ mm}. \quad (6.39)$$

Подешавањем дужине спољашње шупљине L_{ext} могуће је довести до формирања фундаменталног оптичког фреквенцијског чешља и хармонијског фреквенцијског чешља, док се за веће вредности L_{ext} може појавити мешовито стање, које карактеришу пикови у спектру приближно раздвојени за слободни спектрални опсег резонатора FSR_{int} . Међутим, сваки од ових пикова не представља један мод, већ скуп модова међусобно раздвојених за слободни спектрални опсег спољашње шупљине, FSR_{ext} , због међусобног дејства унутрашње и спољашње шупљине.

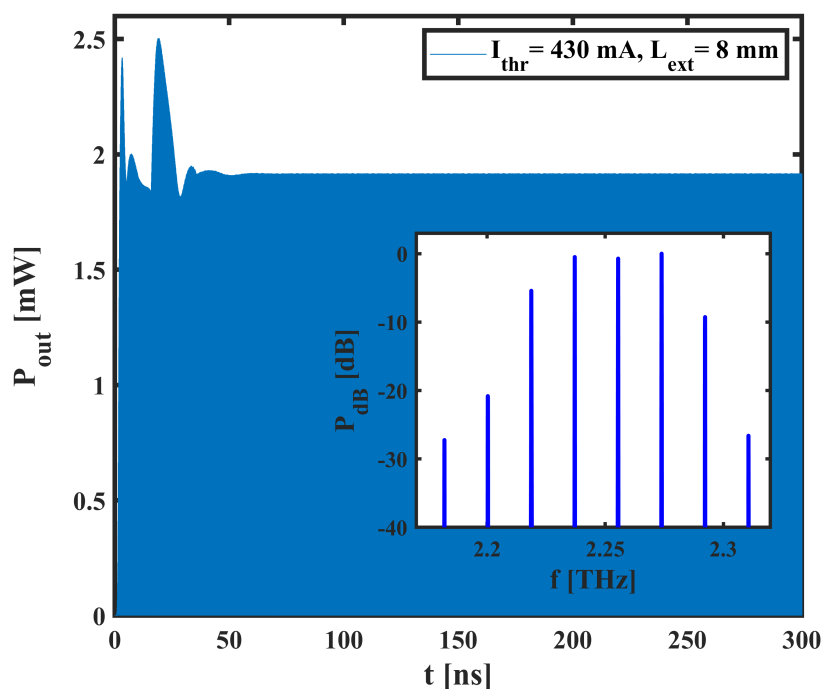
Додавањем спољашње оптичке повратне спреге ККЛ-у који ради на струји прага $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$, уз исте параметре као у секцији 6.3.1, и коришћењем спољашње рефлектујуће мете са коефицијентом рефлексије 0.3, постављене на растојањима од 8 mm, 4 mm и 20 cm, проучавано је формирање претходно описаних динамичких стања.

Спољашња шупљина дужине 8 mm

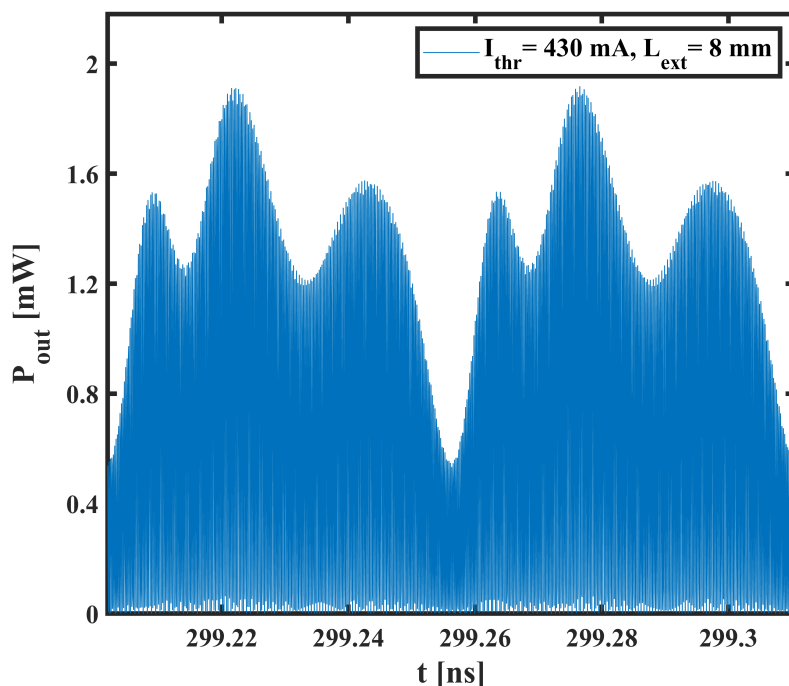
Временска зависност излазне снаге ККЛ-а приказана је на слици 6.6, док је у доњем десном делу слике приказан оптички спектар емитованог зрачења на излазу ККЛ-а у присуству спољашње рефлектујуће мете са коефицијентом рефлексије 0.3, постављене на растојању од 8 mm. Услед спољашње оптичке повратне спреге, суседни лонгитудинални модови почињу да ласерују, чиме ККЛ прелази у мултимодни режим рада. Фреквенцијско растојање између модова износи 18.9 GHz, што одговара слободном спектралном опсегу резонатора.

Излазна снага достиже стационарно стање након знатно дужег временског интервала (око 50 ns) у поређењу са случајем приказаним на слици 6.4, услед присуства спољашње повратне спреге. Средња вредност емитоване снаге износи 0.68 mW, што је значајно више у односу на средњу излазну снагу за исту струју у одсуству спољашње повратне спреге.

На слици 6.7 приказан је увећани део слике 6.6 за временски интервал који одговара трајању два времена повратног пута резонатора, при чему је време једног повратног пута једнако $\tau_{\text{rt}} = \frac{2nL}{c_0} = 52.8 \text{ ps}$. Услед спољашње оптичке повратне спреге, ласер емитује у мултимодном режиму, а суперпозиција ових модова доводи до формирања изражених максимума и минимума интензитета, који настају услед наизменичне делимично конструктивне и деструктивне интерференције. Када су модови закључани повратном спрегом, ова структура је стабилна и понавља се током сваког времена повратног пута резонатора.



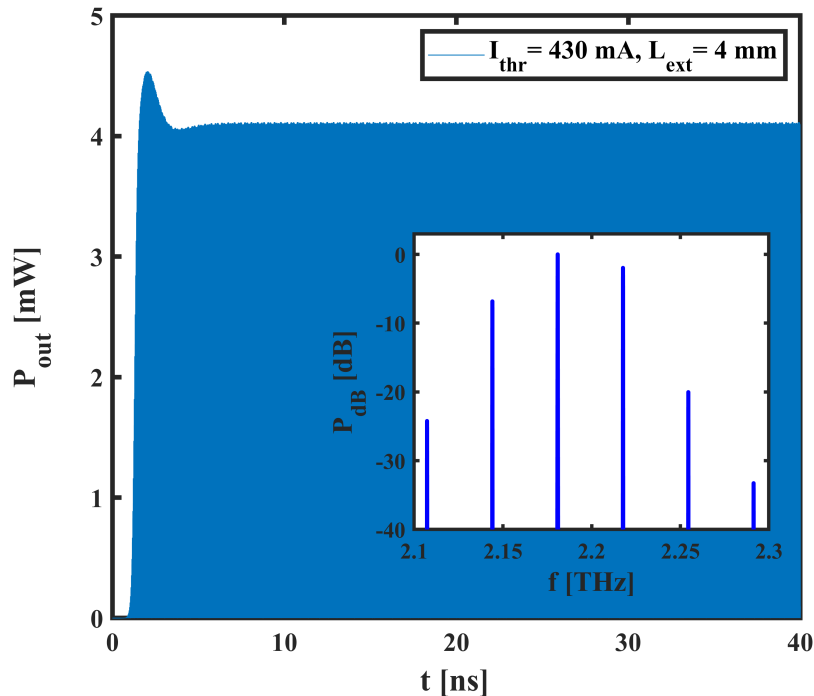
Слика 6.6. Временска зависност излазне снаге ККЛ-а за струју $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујуће мете са коефицијентом рефлексије 0.3, постављене на растојању од 8 mm. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у мултимодном режиму који одговара фундаменталном оптичком фреквенцијском чешљу, са модовима раздвојеним за слободни спектрални опсег резонатора од 18.9 GHz. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).



Слика 6.7. Стационарни временски облик излазне снаге ККЛ-а током трајања два повратна пута резонатора, при чему је време једног повратног пута једнако 52.8 ps. Ласер ради на струји $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 8 mm, и емитује у мултимодном режиму који одговара фундаменталном оптичком фреквенцијском чешљу, са модовима раздвојеним за слободни спектрални опсег резонатора од 18.9 GHz. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Спољашња шупљина дужине 4 mm

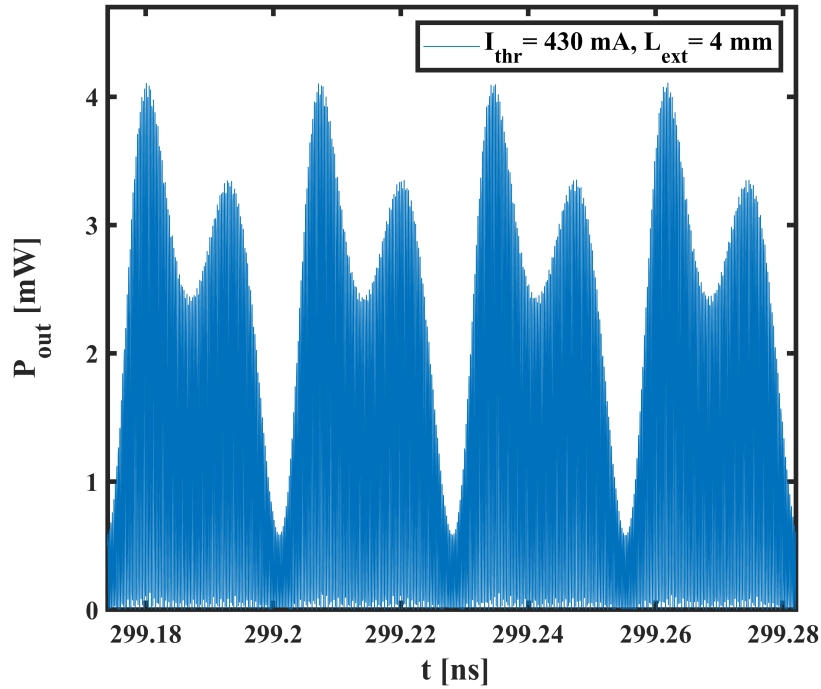
Временска зависност излазне снаге ККЛ-а приказана је на слици 6.8, док је у доњем десном делу приказан оптички спектар емитованог зрачења у присуству спољашњег рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 4 mm. Услед спољашње оптичке повратне спреге, суседни лонгитудинални модови почињу да ласерују, чиме ККЛ прелази у мултимодни режим рада. Када је дужина спољашње шупљине L_{ext} подешена тако да задовољи услов за други хармонијски фреквенцијски чешаљ (HFC2), селективно се појачава сваки други лонгитудинални мод резонатора. Као последица тога, ККЛ емитује у мултимодном режиму који одговара фреквенцијском чешљу другог хармоника, при чему су модови раздвојени за $2 \times \text{FSR}_{\text{int}} \approx 37.8 \text{ GHz}$. До овога долази јер спољашња шупљина обезбеђује повратну спрегу која конструктивно појачава само оне модове које су усклађени са њеним слободним спектралним опсегом, док се остали модови ефикасно потискују. Излазна снага достиже стационарно стање након приближно 10 ns. Средња вредност емитоване снаге износи 1.31 mW, што је значајно више у односу на средњу излазну снагу за исту струју у одсуству спољашње оптичке повратне спреге.



Слика 6.8. Временска зависност излазне снаге ККЛ-а за струју $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у мултимодном режиму који одговара оптичком фреквенцијском чешљу другог хармоника, са модовима раздвојеним за $2 \times \text{FSR}_{\text{int}} \approx 37.8 \text{ GHz}$. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

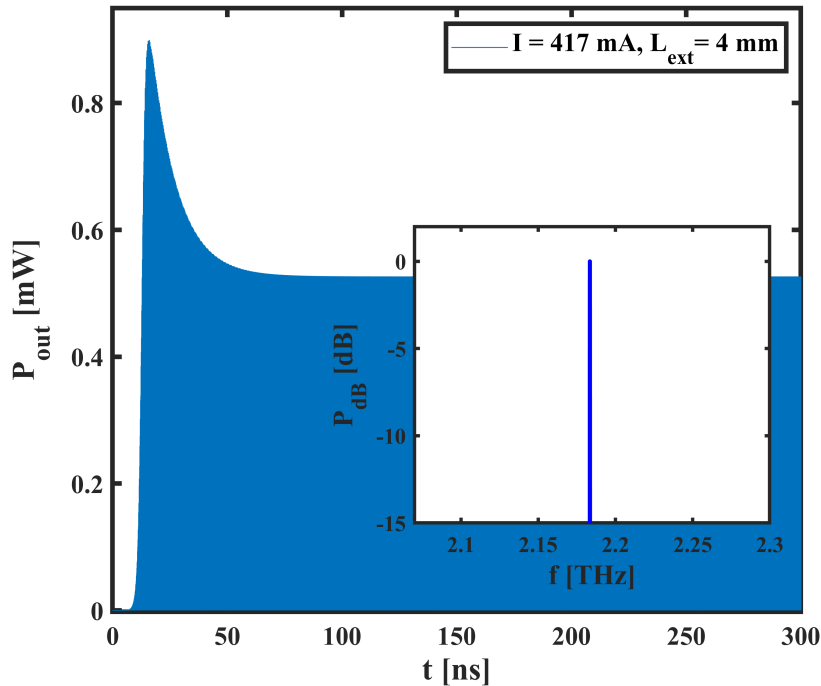
На слици 6.9 приказан је увећан део слике 6.8 за временски интервал два повратна пута резонатора, где је време једног повратног пута једнако $\tau_{\text{rt}} = 52.8 \text{ ps}$. Како спољашња шупљина задовољава HFC2 услов, појачава се сваки други лонгитудинални мод. Као последица тога, иако приказ обухвата временски интервал од два повратна пута, уочавају се четири идентична профила интензитета.

Добијени резултати показују да спољашња оптичка повратна спрега значајно мења услове рада ККЛ-а који емитују на струји прага, прелазећи из мономодног у мултимодни режим рада, услед тога што инјектовано електрично поље ефективно смањује праг појачања. Другим речима, присуство спољашње повратне спреге доводи до смањења потребне струје прага. Ради квантификације овог смањења струје прага, иста конфигурација спољашње повратне спреге са дужином спољашње шупљине од 4 mm је моделована уз постепено смањивање струје, као и одговарајућу измену свих параметара који зависе од струје.



Слика 6.9. Стационарни временски облик излазне снаге ККЛ-а током два повратна пута резонатора, при чему је време једног повратног пута једнако 52.8 ps. Ласер ради на струји $I_{\text{thr}} = 430$ mA у присуству спољашње оптичке повратне спреге, и емитује у мултимодном режиму који одговара оптичком фреквенцијском чешљу другог хармоника. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Услов прага је идентификован при струји од $I = 417$ mA,



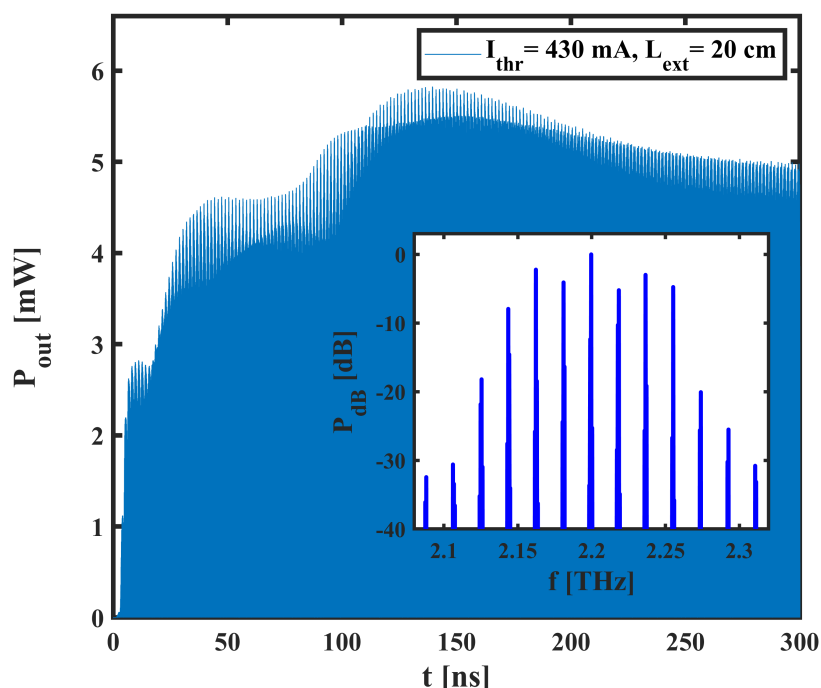
Слика 6.10. Временска зависност излазне снаге ККЛ-а за ефективну струју прага од $I = 417$ mA у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 4 mm. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у монодном режиму. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

При струји прага од $I = 417$ mA израчунати су параметри зависни од струје помоћу модела МГ: материјално појачање $g_0 = 1930 \text{ m}^{-1}$, фреквенција максимума појачања $f = 2.24 \text{ THz}$, запреминска концентрација електрона $N_d = 4.69 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$, нерадијативно време живота носилаца $\tau_e = 6.06 \text{ ps}$ и време декохеренције поларизације $\tau_d = 0.631 \text{ ps}$.

Временска зависност излазне снаге ККЛ-а приказана је на слици 6.10, док је у доњем десном делу слике приказан оптички спектар емитованог зрачења на излазу ККЛ-а. Спектар показује један мод, што значи да ККЛ емитује у мономодном режиму. Излазна снага постиже стационарно стање након 100 ns, њена средња вредност износи 0.263 mW, па ККЛ ради у близини прага ласеровања. Ови резултати показују да увођење спољашње оптичке повратне спреге доводи до смањења струје прага са 430 mA на 417 mA.

Спољашња шупљина дужине 20 cm

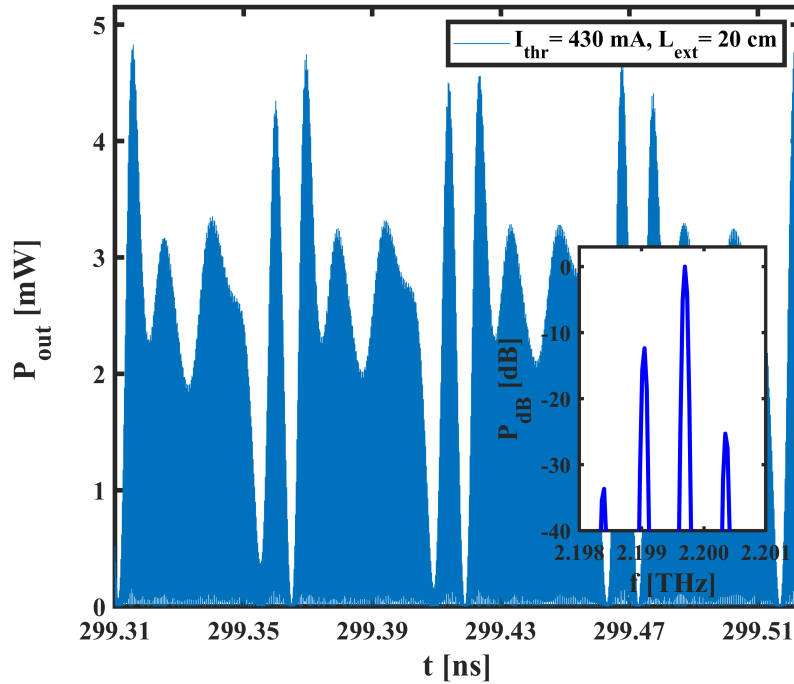
Временска зависност излазне снаге ККЛ-а приказана је на слици 6.11, док је у доњем десном делу слике приказан оптички спектар емитованог зрачења за случај спољашњег рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 20 cm. Услед спољашње оптичке повратне спреге, суседни лонгитудинални модови унутрашње шупљине почињу да ласерују, чиме ККЛ емитује у мешовитом мултимодном режиму рада.



Слика 6.11. Временска зависност излазне снаге ККЛ-а за струју $I_{thr} = 430$ mA у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 20 cm. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у мешовитом мултимодном режиму са модовима раздвојеним за слободни спектрални опсег резонатора од 18.9 GHz, при чему сваки од њих представља кластер мода међусобно раздвојених за слободни спектрални опсег спољашње шупљине $FSR_{ext} = 0.75$ GHz. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-Non-Commercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

У овом режиму рада сваки лонгитудинални мод резонатора, раздвојен за $FSR_{int} \approx 18.9$ GHz, састоји се од неколико уско раздвојених мода. Размак између мода унутар сваког кластера одређен је слободним спектралним опсегом спољашње шупљине, $FSR_{ext} \approx 0.75$ GHz. Оваква кластеризација настаје јер спољашња шупљина намеће сопствени резонантни услов, селективно појачавајући модове међусобно раздвојене за FSR_{ext} , док резонатор и даље одређује укупну спектралну анвелопу са размаком мода од FSR_{int} . Средња вредност емитоване снаге износи 1.27 mW. Због дугог времена повратног пута спољашње шупљине у поређењу са претходним случајевима, излазна снага достиже стационарно стање након знатно дужег временског интервала (око 300 ns).

На слици 6.12 приказан је увећани део слике 6.11 за временски интервал који приближно одговара трајању четири повратна пута резонатора, при чему је време једног повратног пута једнако $\tau_{rt} = 52.8$ ps. У доњем десном делу слике приказан је кластер модова око једног мода резонатора, који су међусобно раздвојени за $FSR_{ext} \approx 0.75$ GHz, што потврђује да дугачка спољашња шупљина намеће сопствени резонантни услов.



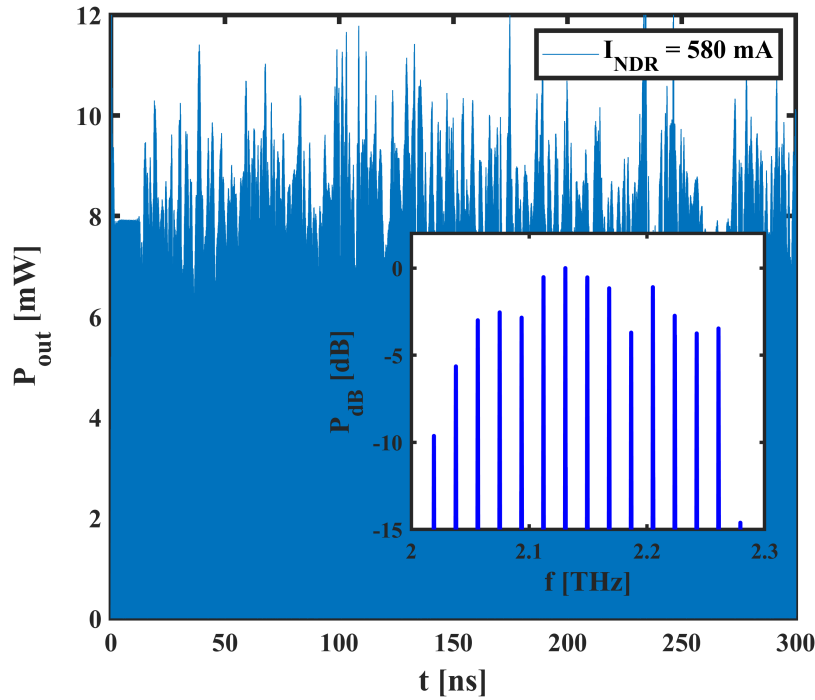
Слика 6.12. Стационарни временски облик излазне снаге ККЛ-а током приближно четири повратна пута резонатора, при чему је време једног повратног пута једнако 52.8 ps. Ласер ради на струји $I_{thr} = 430$ mA у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 20 cm, при чему ККЛ емитује у мешовитом мултимодном режиму са модовима раздвојеним за слободни спектрални опсег резонатора од 18.9 GHz, при чему сваки од њих представља кластер модова раздвојених за слободни спектрални опсег спољашње шупљине $FSR_{ext} = 0.75$ GHz. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

6.4 Емисија при максималној струји

Динамика ККЛ-а моделована је при раду на максималној струји $I_{NDR} = 580$ mA, која одговара NDR тачки. NDR тачка представља добар индикатор карактеристика ККЛ-а, будући да велики број ових направа ради управо до ове радне тачке. Параметри добијени из модела МГ за ову вредност струје су следећи: материјално појачање $g_0 = 4125$ m⁻¹, фреквенција максимума појачања $f = 2.15$ THz, запреминска концентрација електрона $N_d = 6.85 \cdot 10^{20}$ m⁻³, нерадијативно време живота носилаца $\tau_e = 9.71$ ps, као и време декохеренције поларизације $\tau_d = 0.68$ ps.

6.4.1 Рад без спољашње оптичке повратне спреге

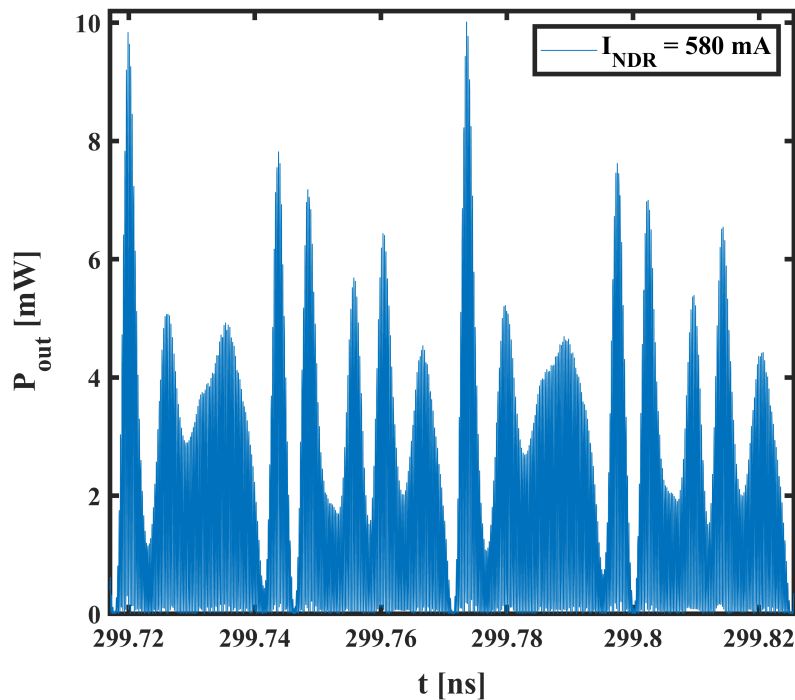
Моделована је динамика ККЛ-а при раду без спољашње оптичке повратне спреге. На слици 6.13 приказана је временска зависност излазне снаге ККЛ-а, док је у доњем десном делу слике приказан оптички спектар емитованог зрачења. За ову вредност струје, спектар показује да ККЛ емитује у мултимодном режиму који подсећа на оптички фреквенцијски чешаљ, са модовима центрираним око 2.15 THz и међусобно раздвојеним за 18.9 GHz, при чему се у интервалу од -15 dB налази укупно 14 модова. Средња емитована снага износи 1.8 mW.



Слика 6.13. Временска зависност излазне снаге ККЛ-а при максималној струји $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ без спољашње оптичке повратне спреге. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар у мултимодном режиму који подсећа на оптички фреквенцијски чешаљ са 14 мода унутар интервала од -15 dB , међусобно раздвојених за 18.9 GHz . Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

На слици 6.14 приказан је увећани део слике 6.13 за временски интервал који одговара трајању два повратна пута резонатора, при чему је време једног повратног пута једнако 52.8 ps .

При раду на максималној струји (NDR тачка), спектар појачања подржава велики број лонгитудиналних мода, што доводи до мултимодног режима рада. Под овим условима, излазна снага током једног времена повратног пута резонатора састоји се од више локалних максимума, који настају као последица интерференције различитих мода.



Слика 6.14. Стационарни временски облик излазне снаге ККЛ-а током трајања два повратна пута резонатора, где је време једног повратног пута једнако 52.8 ps . Ласер ради при максималној струји $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ без спољашње оптичке повратне спреге и емитује у мултимодном режиму. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

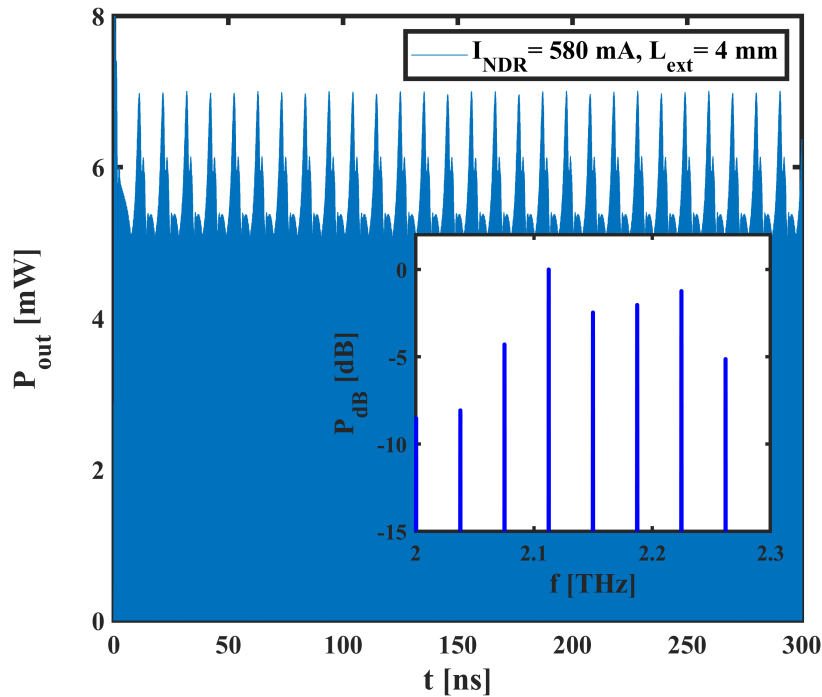
6.4.2 Рад са спољашњом оптичком повратном спрегом

У литератури је показано да увођење спољашње оптичке повратне спреге код ККЛ-а који ради у режиму фундаменталног фреквенцијског чешља, при струји значајно већој од струје прага, може довести до формирања хармонијског фреквенцијског чешља или мешовитог стања, у зависности од дужине спољашњом шупљине L_{ext} [170]. Фундаментални оптички чешаљ карактерише мултимодна емисија при чему су модови раздвојени за слободни спектрални опсег резонатора, док се хармонијски фреквенцијски чешаљ (HFC) јавља када је побуђен само сваки N -ти лонгитудинални мод, тако да је размак између модова једнак целобројном умношку слободног спектралног опсега резонатора.

Као и у претходној секцији 6.3.2, за моделовани ВТС ККЛ слободни спектрални опсег резонатора износи приближно 18.9 GHz, а за добијање хармонијског фреквенцијског чешља другог реда (HFC2) потребно је да дужина спољашње шупљине буде $L_{\text{ext}}^{\text{HFC2}} \approx 4.00$ mm, што је показано у једначини (6.39). Додавањем спољашње оптичке повратне спреге ККЛ-у који ради при максималној струји од $I_{\text{NDR}} = 580$ mA, уз све исте параметре као у секцији 6.4.1, са спољашњом метом рефлективности 0.3 постављеном на растојањима од 4 mm и 20 cm, проучавано је формирање претходно описаних режима рада.

Спољашња шупљина дужине 4 mm

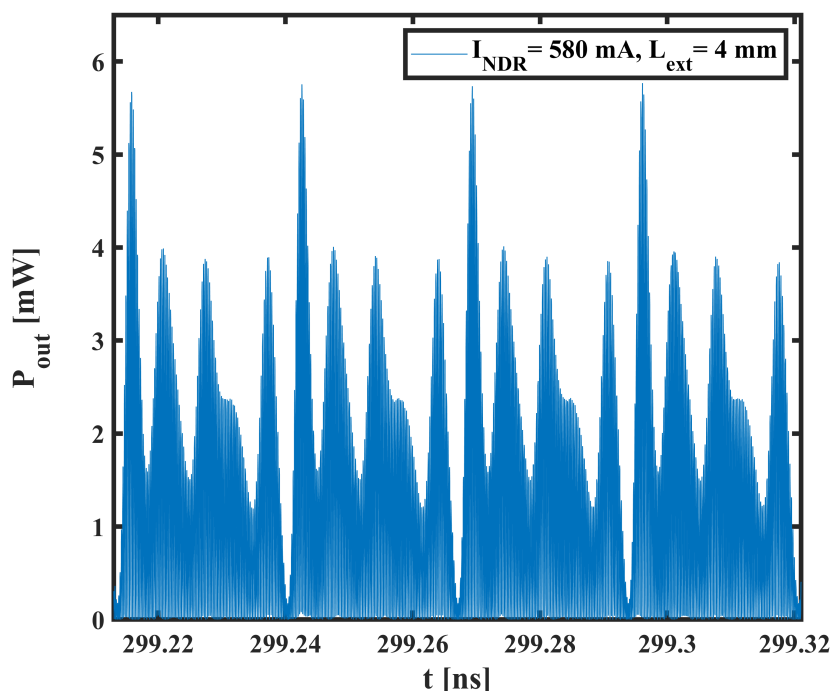
Временска зависност снаге ККЛ-а са спољашњом оптичком повратном спрегом са мете рефлективности 0.3, постављене на растојању од 4 mm, приказана је на слици 6.15, док је у доњем десном делу слике приказан оптички спектар емитоване светлости на излазу ККЛ-а.



Слика 6.15. Временска зависност излазне снаге ККЛ-а при максималној струји $I_{\text{NDR}} = 580$ mA са спољашњом оптичком повратном спрегом са мете рефлектансе 0.3, постављене на растојању од 4 mm. У доњем делу слике приказан је оптички спектар емитоване светлости, где ККЛ емитује у мултимодном режиму који подсећа на оптички фреквенцијски чешаљ другог хармоника, са модовима раздвојеним за $2 \times \text{FSR}_{\text{int}} \approx 37.8$ GHz. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Ласер ради у мултимодном режиму који подсећа на хармонијски фреквенцијски чешаљ, са модовима центрираним око 2.15 THz и раздвојеним за $2 \times \text{FSR}_{\text{int}} \approx 37.8$ GHz, са 8 модела у интервалу од -15 dB. У поређењу са сликом 6.13, може се уочити да увођење спољашње оптичке повратне спреге мења спектар тако што су поједини модови унутрашње шупљине потиснути, док су други селективно појачани. Средња емитована снага износи 1.3 mW.

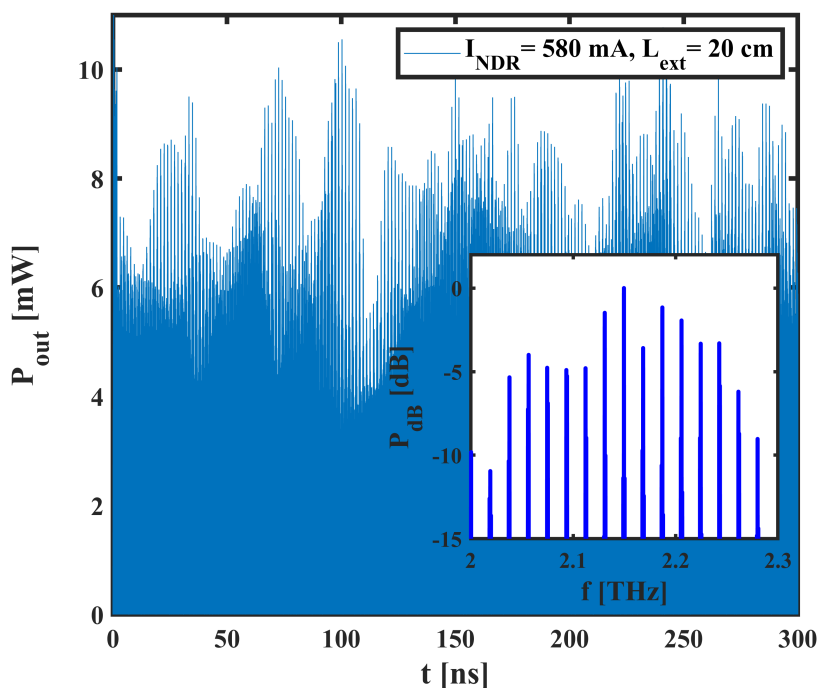
На слици 6.16 приказан је увећани део слике 6.15 за временски интервал од два повратна пута, где је време једног повратног пута једнако 52.8 ps. Дужина спољашње шупљине одабрана је тако да задовољи услов да појачава сваки други лонгитудинални мод. Као последица тога, иако су на слици приказана два времена повратног пута, уочавају се четири идентична профила интензитета.



Слика 6.16. Зависност снаге ККЛ-а за два повратна пута кроз резонатор. Ласер ради при максималној струји $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ са спољашњом повратном спрегом, и емитује у мултимодном режиму који подсећа на оптички фреквенцијски чешаљ другог хармоника. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Спољашња шупљина дужине 20 cm

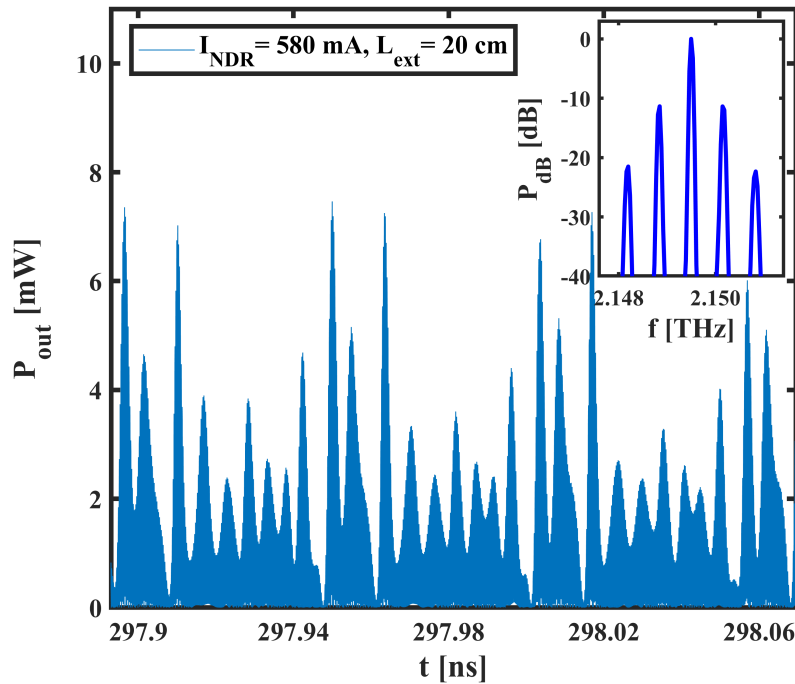
Временска зависност излазне снаге ККЛ-а приказана је на слици 6.17.



Слика 6.17. Временска зависност снаге ККЛ-а при $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ са спољашњом повратном спрегом са мете рефлектансе 0.3, на растојању од 20 cm. У доњем десном делу слике је спектар емитоване светлости у мешовитом мултимодном режиму, са модовима раздвојеним за $\text{FSR}_{\text{int}} \approx 18.9 \text{ GHz}$, при чему је сваки од њих кластер модела раздвојених за $\text{FSR}_{\text{ext}} \approx 0.75 \text{ GHz}$. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар емитоване светлости за случај спољашње мете рефлектансе 0.3, постављене на растојању од 20 cm. У овом радном стању, сваки лонгитудинални мод резонатора (раздвојен за $\text{FSR}_{\text{int}} \approx 18.9$ GHz) раздваја се на кластер уско распоређених модова. Размак између модова унутар сваког кластера одређен је слободним спектралним опсегом спољашње шупљине, $\text{FSR}_{\text{ext}} \approx 0.75$ GHz. Оваква кластеризација настаје услед тога што дуга спољашња шупљина намеће сопствени резонантни услов, селективно појачавајући фреквенције раздвојене за FSR_{ext} , док резонатор и даље дефинише општу спектралну анвелопу са FSR_{int} . Средња вредност емитоване снага износи 1.04 mW.

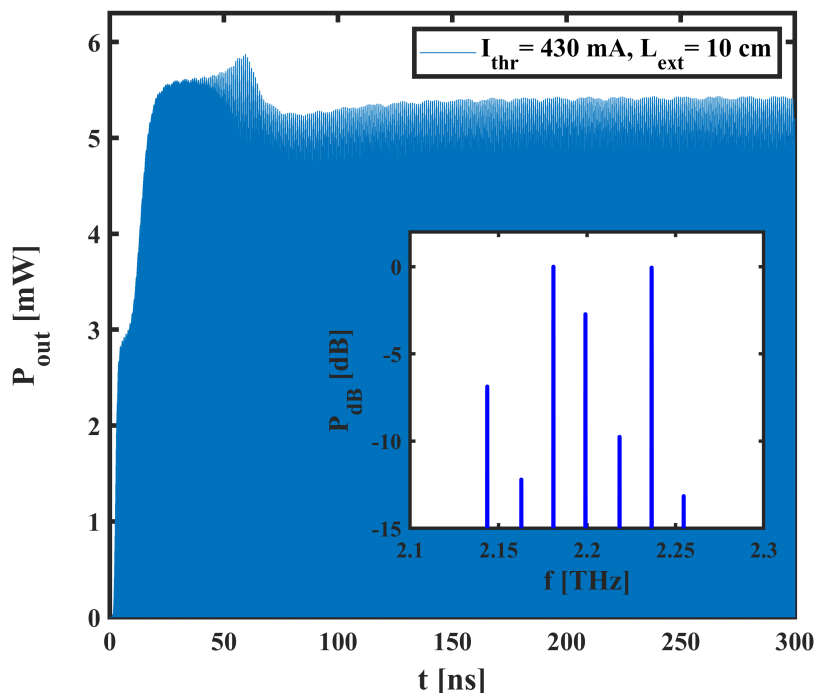
На слици 6.18 приказан је увећани део слике 6.17 за временски интервал приближно једнак трајању три повратна пута кроз резонатор, при чему је време једног повратног пута једнако $\tau_{\text{rt}} = 52.8$ ps. У доњем десном делу слике приказан је кластер модова око једног резонаторског мода, раздвојених за $\text{FSR}_{\text{ext}} \approx 0.75$ GHz услед резонантног услова дуге спољашње шупљине.



Слика 6.18. Временска зависност излазне снаге ККЛ-а у стационарном режиму за временски интервал који приближно одговара трајању три повратна пута кроз резонатор, где је време једног повратног пута једнако 52.8 ps. Ласер ради при струји $I_{\text{NDR}} = 580$ mA са спољашњом оптичком повратном спрегом са спољашње мете рефлектансе 0.3, постављене на растојању од 20 cm и емитује у мешовитом мултимодном режиму, са модовима раздвојеним за $\text{FSR}_{\text{int}} \approx 18.9$ GHz, при чему сваки мод представља кластер модова раздвојених за $\text{FSR}_{\text{ext}} \approx 0.75$ GHz спољашње шупљине. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

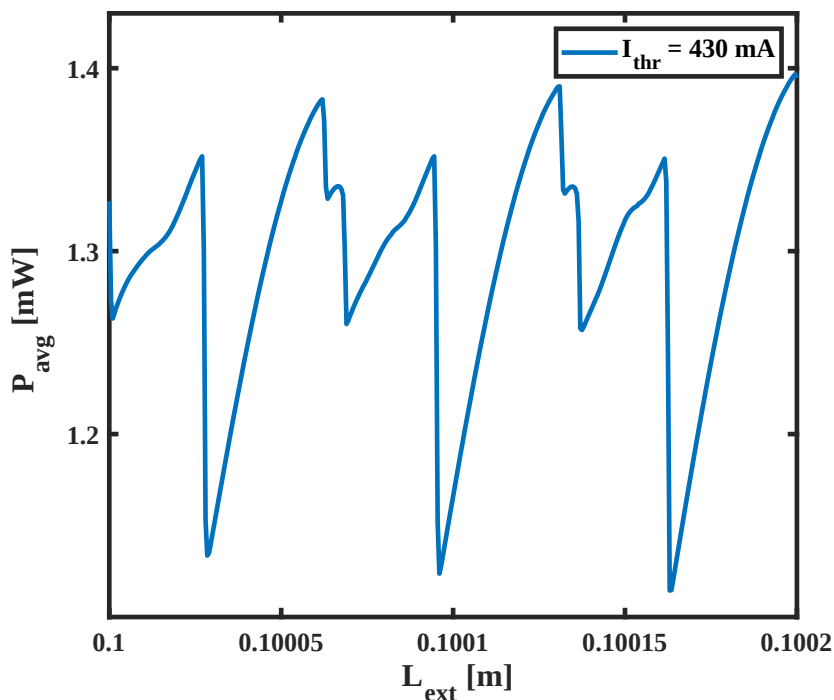
6.5 Примена спољашње повратне спреге у сензорици

За сензорске примене спољашње оптичке повратне спреге, спектрална структура ККЛ-а има кључну улогу у одређивању осетљивости детекције. Интерферометрија се заснива на враћању дела зрачења рефлектованог од мете у ласерску шупљину, чиме се мења излазни сигнал ласера. Померање или вибрације мете мењају дужину спољашње шупљине и фазу повратног зрачења, што доводи до мерљиве промене излазног сигнала ККЛ-а [182]. Тако ККЛ истовремено служи као извор зрачења и детектор. У овој секцији анализирана је зависност излазне снаге од дужине спољашње шупљине близу струје прага $I_{\text{thr}} = 430$ mA и у NDR тачки при $I_{\text{NDR}} = 580$ mA. Рефлектанса мете је 0.3, а дужина спољашње шупљине мења се од 0.1 m до 0.1002 m у корацима од 0.5 μm . На слици 6.19 приказани су временска зависност снаге ККЛ-а и, у доњем десном делу, оптички спектар за мету на растојању од 10 cm. Услед спољашње оптичке повратне спреге, ККЛ ради у мултимодном режиму.



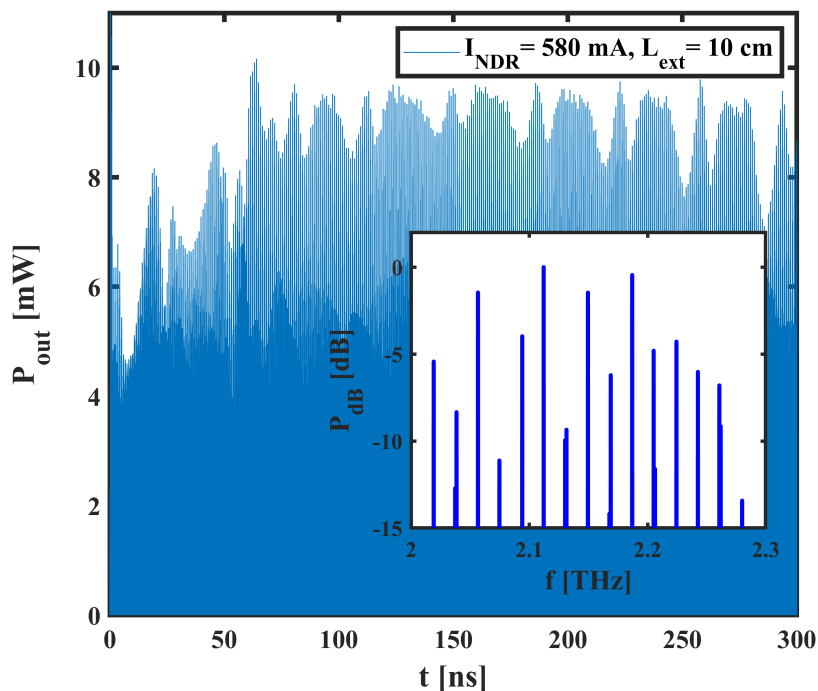
Слика 6.19. Временска зависност излазне снаге ККЛ-а за струју $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ у присуству спољашње оптичке повратне спреге од рефлектујућег објекта са коефицијентом рефлексије 0.3, постављеног на растојању од 10 cm. У доњем десном делу слике приказан је оптички спектар емитованог зрачења, при чему ККЛ емитује у мултимодном режиму са малим бројем модова раздвојеним за слободни спектрални опсег резонатора од 18.9 GHz.

Средња вредност снаге ККЛ-а приказана је на слици 6.20 за струју прага $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$, при чему су коришћени исти параметри као у секцији 6.3. ККЛ у овом режиму емитује у мултимодном режиму са малим бројем модова, што је илустровано на слици 6.19, спољашња повратна спрега утиче на фазе појединих модова, а њихова интерференција генерише неколико оштрих пикова унутар једне интерференционе периоде, што ефективно доводи до суперпозиције више синусоида, а не једноставне синусоидалне зависности. Периода износи приближно $68 \text{ }\mu\text{m}$, што одговара вредности $\lambda/2$ централне фреквенције од 2.2 THz.



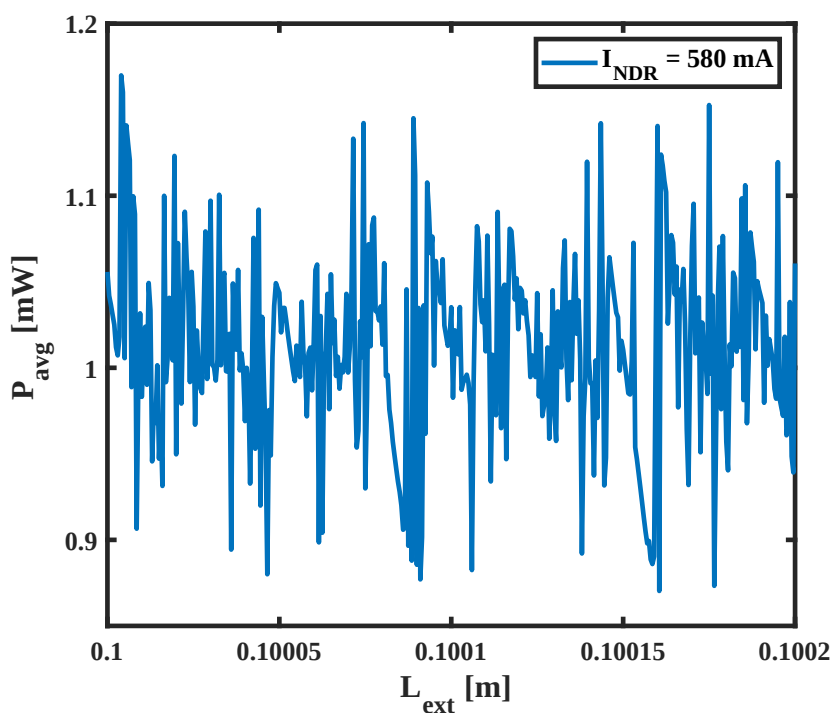
Слика 6.20. Средња вредност снаге ККЛ-а у функцији дужине спољашње шупљине за струју $I_{\text{thr}} = 430 \text{ mA}$ са спољашном оптичком повратном спрегом са спољашње мете рефлектансе 0.3. Интерференциона периода износи приближно $68 \text{ }\mu\text{m}$, што одговара вредности $\lambda/2$ за централну фреквенцију од 2.2 THz. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Са слике 6.20 може се уочити да је снага ККЛ-а са спољашњом оптичком повратном спрегом изузетно осетљива на промене дужине спољашње шупљине, што ове уређаје чини погодним за детекцију веома малих варијација и помераја.



Слика 6.21. Временска зависност снаге ККЛ-а при струји $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ са спољашњом повратном спрегом са мете рефлектансе 0.3, на растојању од 10 cm. У доњем десном делу слике приказан је спектар емитоване светлости у мултимодном режиму, са великим бројем модова који су раздвојеним за $\text{FSR}_{\text{int}} \approx 18.9 \text{ GHz}$.

Временска зависност излазне снаге ККЛ-а приказана је на слици 6.21. У доњем десном делу слике приказан оптички спектар емитоване светлости за случај спољашње мете постављене на растојању од 10 cm. У овом радном стању, велики број модова резонатора ласерује и раздвојени су за $\text{FSR}_{\text{int}} \approx 18.9 \text{ GHz}$.



Слика 6.22. Средња вредност излазе снаге ККЛ-а у функцији дужине спољашње шупљине за струју у NDR тачки $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$ са спољашњом оптичком повратном спрегом са спољашње мете рефлектансе 0.3. Преузето из сопственог рада [61], под условима Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Средња вредност излазне снага ККЛ-а приказана је на слици 6.22 за струју $I_{\text{NDR}} = 580 \text{ mA}$, при чему су коришћени исти параметри као у секцији 6.4. Са слике 6.22 може се уочити да је излазна снага ККЛ-а са спољашњом оптичком повратном спрегом веома осетљива на промене дужине спољашње шупљине. Међутим, услед тога што ККЛ у овом режиму емитује у мултимодном режиму са великим бројем модова, што се може видети на слици 6.21, зависност средње вредности излазне снаге од дужине спољашње шупљине постаје веома хаотична и није погодна за детекцију малих помераја.

При раду близу прага, ласер подржава само неколико лонгитудиналних модова, што резултује стабилном и лако интерпретабилном модулацијом изазваном спољашњом повратном спрегом. Насупрот томе, рад у NDR тачки доводи до мултимодног спектра са великим бројем модова, при чему интерференција великог броја модова генерише значајне флукуације које нарушавају јасноћу сигнала, чинећи рад близу прага, са малим бројем модова, далеко погоднијим за прецизна мерења у сензорици.

Поглавље 7

Закључак

У овој дисертацији спроведено је нумеричко моделовање електронске структуре, транспортно-оптичких карактеристика и нелинеарне динамике THz квантних каскадних ласера. Истраживање је било усмерено на три главна проблема: утицај технолошких несавршености нарастања на транспортно-оптичке карактеристике различитих THz ККЛ дизајна, развој унапређеног трансфер матричног метода за прецизно и ефикасно решавање својствених проблема и анализу динамике THz ККЛ-а у присуству спољашње оптичке повратне спреге, а најважнији закључци приказани су у наставку.

У поглављу 4 су представљена три нежељена ефекта која настају услед технолошких несавршености нарастања ККЛ-а: позадинско допирање, интердифузија (дифузија композиције баријерног материјала) и флукуација дебљине слојева, и анализиран је њихов утицај на транспортно-оптичке карактеристике THz ККЛ-а. Резултати су приказани на ЛО фононском тројамном, ВТС и хибридном дизајну, описаним у секцији 1.3, а посебна пажња посвећена је ЛО фононском двојамном дизајну са рекордном температуром импулсне емисије.

Показано је у секцији 4.1 да позадинско допирање n типа доводи до повећања густине струје услед већег броја електрона и до смањења материјалног појачања. Материјално појачање се значајно смањује код ВТС дизајна и ласеровање престаје при концентрацији позадинског допирања од око $1.0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, што овај дизајн чини најосетљивијим на позадинско допирање n -типа, затим следи хибридни дизајн, а најмању осетљивост показао је ЛО фононски тројамни дизајн. Позадинско допирање p -типа доводи до смањења густине струје услед рекомбинације електрона са шупљинама, што резултује повећањем материјалног појачања, и структуре могу престати са ласеровањем уколико је густина струје сувише смањена. За концентрацију позадинског допирања p -типа од $2.0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ густина струје ВТС дизајна опада приближно на нулу, што га чини најосетљивијим на овај ефекат. ЛО фононски тројамни дизајн показује нешто већу осетљивост на овај ефекат у поређењу са хибридним дизајном.

Резултати добијени у секцији 4.2 показују да интердифузија проширује доњи део инјекционе баријере, чиме се смањује ефекат резонантног тунеловања и снижава инјекциона струја. ВТС и хибридни дизајн показали су већу осетљивост на интердифузију у односу на ЛО фононски тројамни дизајн, будући да неки њихови слојеви имају врло мале дебљине, због чега су релативно више промењени истом вредношћу дифузионе дужине.

У секцији 4.3 испитане су флукуације дебљине слојева дозвољавањем одступања до једног монослоја у сваком слоју моделованих структура. Утврђено је да ове флукуације могу довести до значајних промена материјалног појачања и густине струје ККЛ-а, као и до нарастања структура које не могу ласеровати. Услед осетљивости механизма ЛО фононског расејања на енергетски размак између подзона, дизајни који се ослањају на овај механизам за екстракцију носилаца, као што су ЛО фононски тројамни и хибридни дизајн, показују већу осетљивост. ВТС дизајн је отпорнији на померање енергија подзона и може поднети већи број грешака током процеса раста, без губљења функционалности. Добијени резултати показују изузетну осетљивост

процеса нарастања ККЛ-а и значајан утицај овог ефекта на поновљивост раста.

На крају, у секцији 4.4 анализиран је ЛО фононски двојамни дизајн са рекордном радном температуром од 261 К због своје јединствене електронске структуре и употребе високих баријера. Уочена је знатно већа осетљивост на интердифузију у поређењу са ЛО фононским тројамним дизајном, који користи ниске баријере. Такође је анализиран утицај флукуација дебљине слојева и утврђено је да је структура изразито осетљива на дебљину друге баријере, која контролише колико је ласерски прелаз дијагоналан.

Разматрани ефекти су од кључног значаја за реализацију THz ККЛ-а у новим, перспективним материјалима. Технологија у $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ систему је зрела, међутим, други материјални системи могу патити од високих нивоа позадинског допирања или флукуација током раста. Слично томе, материјални системи који користе више баријере захтевају тање баријерне слојеве, што може довести до израженијих ефеката који су последица интердифузије. Анализа спроведена у овој дисертацији има за циљ да истакне ове ефекте у систему $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, али и да послужи као својеврстан оријентир за кораке калибрације неопходне за успешну реализацију THz ККЛ-а у другим материјалним системима.

Трансфер матрични метод има дугу историју примене захваљујући својој интуитивној и полуаналитичкој природи, али је често критикован као нумерички неефикасан у поређењу са приступима заснованим на методи коначних разлика. Кључна предност ТММ у односу на FDM јесте мања просторна сложеност, што омогућава већу просторну резолуцију. Међутим, главна замерка при примени ТММ на својствене проблеме јесте његова висока нумеричка захтевност приликом постизања високе прецизности. У поглављу 5 ове дисертације, искоришћена је полуаналитичка природа ТММ-а и он је унапређен на dTMM, који је у стању да по нумеричкој прецизности и ефикасности парира FDM-у.

У секцији 5.1 уведен је општи математички формализам који се може применити на широк спектар проблема који укључују обичне диференцијалне једначине и својствене проблеме, а који омогућава да dTMM постигне високу прецизност уз мањи нумерички трошак у односу на стандардни ТММ. Стандардни ТММ заснива на проналажењу минимума модула $|m_{ij}|$ елемента укупне трансфер матрице $M(E)$, тражећи решења линеарним проласком кроз укупни интервал могућих решења, што често захтева примену адаптивних мрежа ради повећања прецизности. Насупрот томе, dTMM користи аналитички израчунат први извод $\frac{d|m_{ij}|}{dE}$, што омогућава примену великог броја ефикасних алгоритама за проналажење нула, којима се може достићи машинска прецизност.

Израчунавање електронске структуре система са великим бројем квантних јама, као што су ККЛ-и, са становишта нумеричке тачности представља изузетно захтеван задатак. Изазов произилази из потребе за високом прецизношћу својствених вредности и великом просторном резолуцијом. Приказаном анализом показано је да је dTMM подједнако прецизан, а истовремено омогућава већу просторну резолуцију у односу на FDM.

У секцији 5.2 анализирана је једнодимензиона Шредингерова једначина у апроксимацији ефективне масе, при чему су разматрани параболични модел, двозонски Кејнов непараболични модел, као и његова Тејлорова апроксимација. Модел је верификован анализом електронске структуре ККЛ-а израђеним од различитих материјала, упоређивањем dTMM-а са FDM-ом. Значај нумеричке прецизности илустрован је примером структуре која даје дивергентна решења услед недовољне тачности ТММ-а, као и показивањем да се овај проблем може отклонити применом dTMM-а уз већу нумеричку ефикасност.

Показано је како се dTMM може применити на сложеније обичне диференцијалне једначине у секцији 5.3, анализом Шредингерове једначине четвртог реда која произилази из 14 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ формализма и узима у обзир интеракцију најниже проводне зоне са лаком и тешком валентном зоном, отцепљеном валентном зоном и три више проводне зоне.

У секцији 5.4 упоређене су нумеричке перформансе dTMM-а и FDM-а. FDM нумерички методи нису били у стању да обраде већу просторну резолуцију, док су dTMM нумерички методи,

захваљујући мањој просторној сложености, могли да обраде знатно већу просторну резолуцију и притом надмаше FDM у погледу временских перформанси.

Као још једна могућа примена dTMM-а, у секцији 5.5 анализирана је дисперзија интерфејс оптичких фонона у полупроводничким хетероструктурама. Интеракција електрона са лонгитудиналним оптичким фононима представља један од кључних транспортних механизма у ККЛ-има и често се апроксимира искључиво запреминским третманом, без узимања у обзир утицаја варијација слојева у хетероструктури. У овој секцији представљен је реалистичнији третман оптичких фонона, у коме су запремински фонони замењени конфинираним и интерфејс фононима. Показано је како се dTMM може применити за израчунавање дисперзионих релација интерфејс фононских модова и електростатичког потенцијала сваког мода у оквиру диелектричног континуум модела.

Представљена је нова нумеричка метода која отклања више недостатака класичне методе трансфер матрица, а предложени формализам се може даље генерализовати и проширити на различите типове проблема. Кључна предност dTMM-а лежи у томе што задржава интуитивну и полуаналитичку природу ТММ-а, уз истовремено високу прецизност, мањи нумерички трошак и могућност надмашивања FDM-а при раду са високом просторном резолуцијом.

У поглављу 6 анализирана је динамика BTC THz ККЛ-а са спољашњом оптичком повратном спрегом при струји прага, и при максималној радној струји која одговара NDR тачки. Модел је заснован на моделу већ присутном у литератури, али је модификован тако да укључи зависност улазних параметара, као што су материјално појачање, концентрација носилаца, време нерадијативног живота носилаца и време декохеренције поларизације од улазне струје. Ове зависности добијене су из транспортних симулација применом модела матрице густине, чиме је побољшана физичка тачност добијених резултата и омогућено је предиктивно моделовање у релевантном опсегу струја конкретних ККЛ-а.

Резултати приказани у секцији 6.3 показују да увођење спољашње оптичке повратне спреге код ККЛ-а који ради у мономодном режиму, при струји блиској струји прага, доводи до преласка емитованог спектра из мономодног у мултимодни режим, као и до могућег формирања мешовитог стања, у зависности од дужине спољашње шупљине. Додатно, приказано је и квантификовано смањење струје прага изазвано спољашњом оптичком повратном спрегом.

У секцији 6.4 симулиран је ККЛ при NDR струји, при чему је и без присуства спољашње оптичке повратне спреге радио у мултимодном режиму, са расподелом модова која прати фреквенцијски зависан профил појачања. Увођењем спољашње повратне спреге мења се спектар и може доћи до различитих динамичких режима, у зависности од дужине спољашње шупљине.

На крају, у секцији 6.5 модел предвиђа високу осетљивост излазне снаге ККЛ-а на промене дужине спољашње шупљине. Поред тога, када је присутан велики број модова, излазни сигнал постаје деградиран шумом, што отежава његову интерпретацију и обраду у сензорским применама. Насупрот томе, када ласер ради у режиму са малим бројем модова, излазни сигнал остаје интерпретабилан, омогућавајући поуздану анализу за примену у сензорици.

Унапређени модел пружа реалистичнији оквир за анализу динамике конкретних ККЛ-а под дејством спољашње оптичке повратне спреге заснован искључиво на дизајну ККЛ-а (дебљинама, композицији и допирању слојева). С обзиром на то да примене у сензорици у великој мери зависе од спектра ласера, анализа ласерске динамике омогућава идентификацију оних ККЛ-а које имају минималну мултимодну емисију у овим условима, чиме се омогућавају тачна и јасно интерпретабилна мерења.

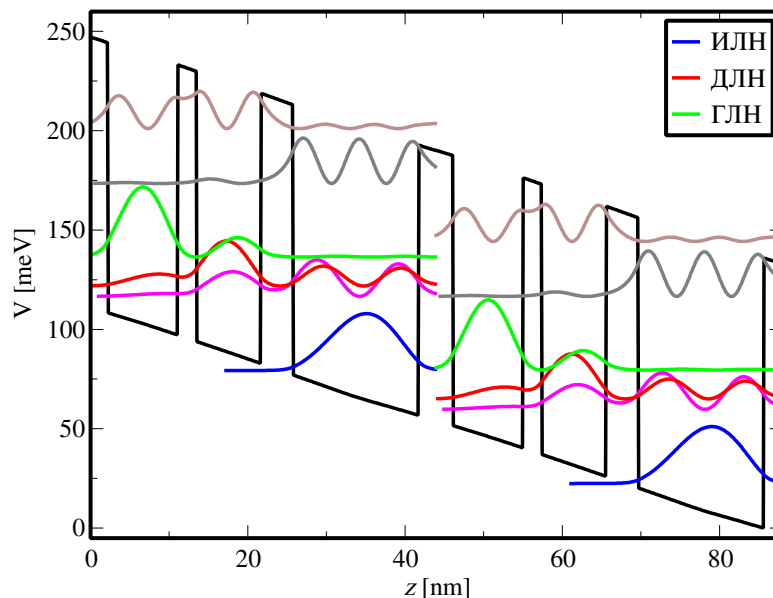
Будућа истраживања биће усмерена ка примени модела заснованих на решавању Максвел–Блохових једначина за већи број енергетских стања, како би се омогућило детаљније испитивање утицаја спољашње оптичке повратне спреге на динамику и спектралне особине ККЛ-а.

Додатак А

Активне области моделованих ККЛ-а

А.1 ЛО фононски тројамни THz ККЛ са температуром рада од 200 К

Моделовани GaAs/AlGaAs ЛО фононски THz ККЛ остварио је импулсну емисију на 200 К [46] на фреквенцији од 3.22 THz. ДЛН се ефикасно депопулише ЛО фононским расејањем на ИЛН, који се налази на енергији ЛО фонона (36 meV у GaAs) испод ДЛН и који је јако спрегнут са ГЛН наредне периоде. Резонантно тунеловање се одвија кроз инјекциону баријеру депопулишући ИЛН. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су **4.3/8.9/2.46/8.15/4.1/(5.5+5.0+5.5)** nm, где су Al_{0.15}Ga_{0.85}As баријере означене подебљаним фонтом, а средњи део последње јаме допиран до $6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучен. На слици А.1 приказано је дно проводне зоне, као и модули таласних функција који илуструју расподелу електрона овог ККЛ-а.

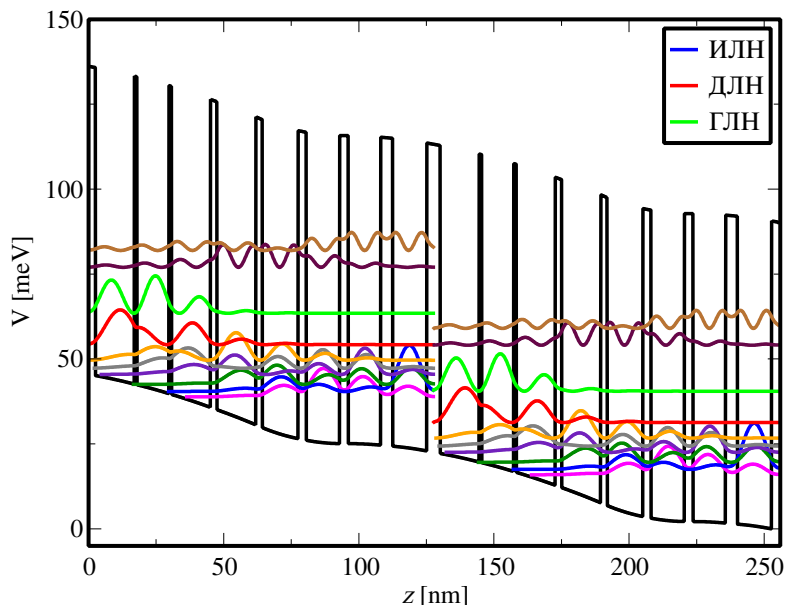


Слика А.1. Дно проводне зоне и модули таласних функција GaAs/AlGaAs ЛО фононског тројамног THz ККЛ-а са температуром рада од 200 К [46]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су **4.3/8.9/2.46/8.15/4.1/(5.5+5.0+5.5)** nm, где су Al_{0.15}Ga_{0.85}As баријере подебљане, а средњи део последње јаме допиран до $6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучен. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

А.2 ВТС THz ККЛ са фреквенцијом емисије од 2 THz

Моделовани GaAs/AlGaAs ВТС ККЛ је дизајниран за рад на фреквенцији од 2 THz [51]. Екстракција са ДЛН у ИЛН остварује се кроз дијагоналне прелазе унутар мини зоне, док се ИЛН налази унутар мини зоне и јако је спрегнут са ГЛН наредне периоде. Како не би дошло до депопулације ГЛН ЛО фононским расејањем, које би уништило инверзну популацију, разлика енергија између ГЛН и ИЛН унутар једне периоде мања је од енергије ЛО фонона. Дебљине слојева,

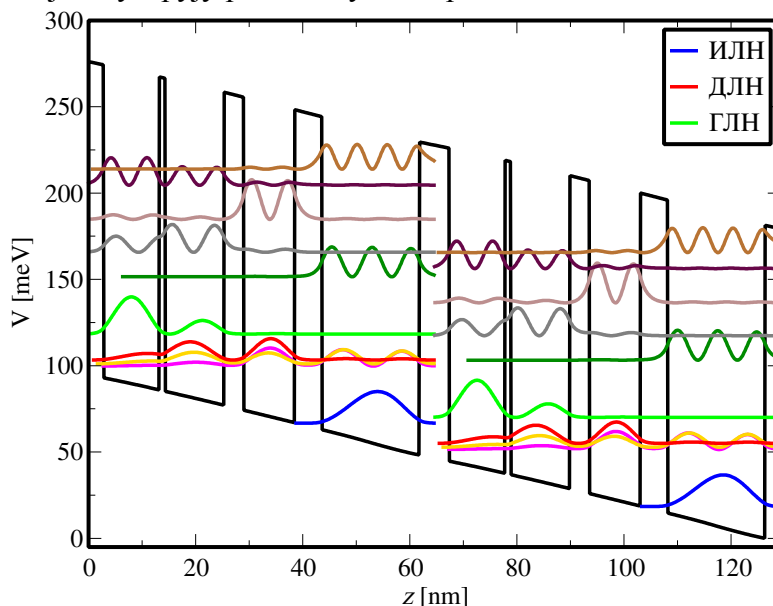
почев од инјекционе баријере, су: **5.0/14.4/1.0/11.8/1.0/14.4/2.4/14.4/2.4/13.2/3.0/12.4/3.2/12.0/4.4/12.6 nm**, где су $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ баријере приказане подебљаним фонтом, а јаме допирене до $1.3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ подвучене. На слици А.2 приказано је дно проводне зоне, као и модули таласних функција који илуструју расподелу електрона овог ККЛ-а.



Слика А.2. Дно проводне зоне, као и модули таласних функција GaAs/AlGaAs BTC ККЛ-а који је дизајниран за рад на фреквенцији од 2 THz [51]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: **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**, где су $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ баријере подебљане, а јаме допирене до $1.3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ подвучене. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

А.3 Хибридни THz ККЛ рекордне снаге CW емисије

Моделовани GaAs/AlGaAs хибридни ККЛ је дизајниран за рад са рекордном снагом CW емисије при емисији на 3,9 THz [35]. На слици А.3 приказано је дно проводне зоне, као и модули таласних функција који илуструју расподелу електрона овог ККЛ-а.

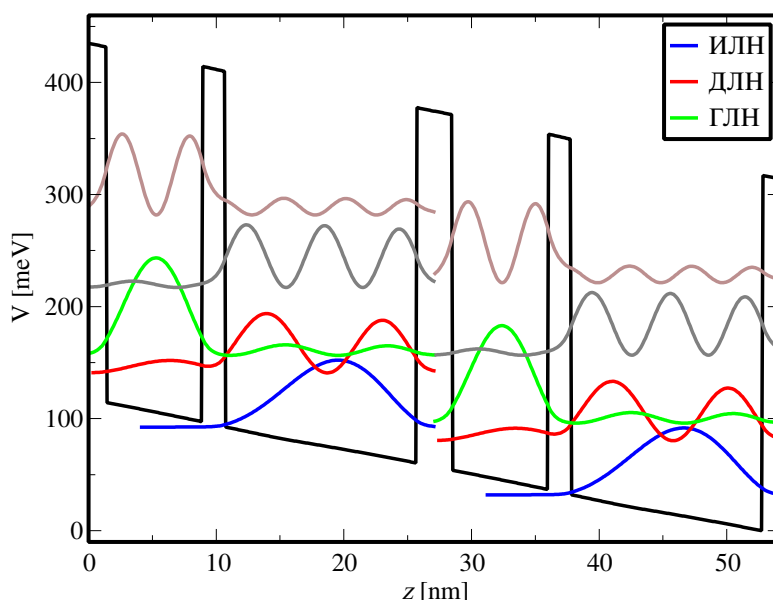


Слика А.3. Дно проводне зоне, као и модули таласних функција GaAs/AlGaAs хибридног ККЛ-а који је дизајниран за рад са рекордном снагом емисије у континуалном режиму [35]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: **5.51/10.39/1.17/10.92/3.71/9.54/5.09/(8.23+10.0) nm**, где су $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ баријере означене подебљаним фонтом, а десни део последње јаме допиран до $4.0 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучен. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

Ласерски прелаз је дијагоналан између ГЛН и ДЛН. ДЛН се налази изнад мини зоне, што омогућава брзу екстракцију електрона. Мини зона се депопулише у ИЛН путем ЛО фононског расејања. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: **5.51/10.39/1.17/10.92/3.71/9.54/5.09/(8.23+10.0)** nm, где су $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ баријере означене подебљаним фонтом, а десни део последње јаме допиран до $4.0 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучен.

А.4 ЛО фононски двојамни THz ККЛ са температуром рада од 261 K

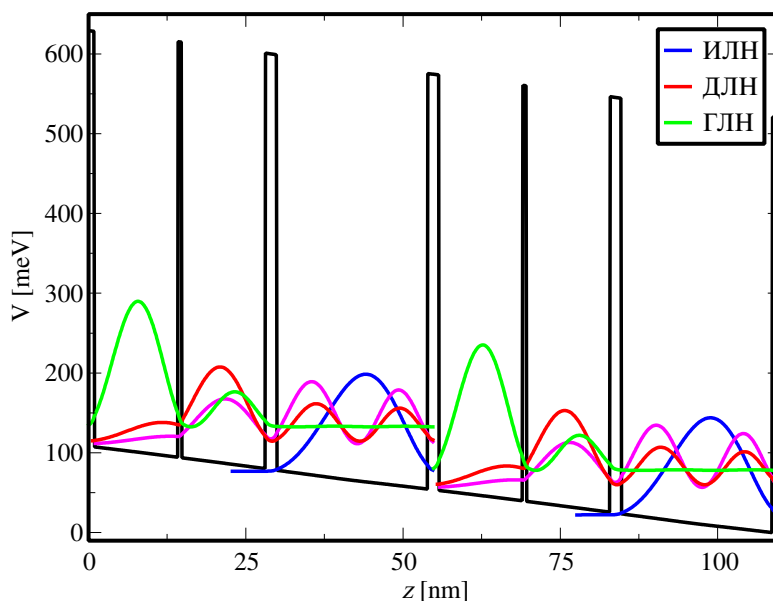
Моделовани GaAs/AlGaAs ЛО фононски двојамни THz ККЛ са рекордном температуром рада од 261 K [33], који ради на 4 THz, користи баријере са $x = 0.35$ удела алуминијума, а ДЛН се ефикасно депопулише ЛО фононским расејањем у ИЛН, који се налази 48 meV испод ДЛН при резонантном напону. На слици А.4 приказано је дно проводне зоне, и модули таласних функција који илуструју расподелу електрона ККЛ-а. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: **2.88/7.45/1.76/(3.0+3.0+9.0)** nm, где су $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ баријере означене подебљано, а средњи део последње јаме, допиран до $1.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, је подвучен.



Слика А.4. Дно проводне зоне, као и модули таласних функција GaAs/AlGaAs ЛО фононског двојамног THz ККЛ-а са рекордном температуром рада од 261 K [33]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере: **2.88/7.45/1.76/(3.0+3.0+9.0)** nm, где су $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ баријере означене подебљано, а средњи део последње јаме допиран до $1.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ је подвучен. Преузето из сопственог рада [59], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

А.5 ЛО фононски InGaAs/InAlAs тројамни THz ККЛ

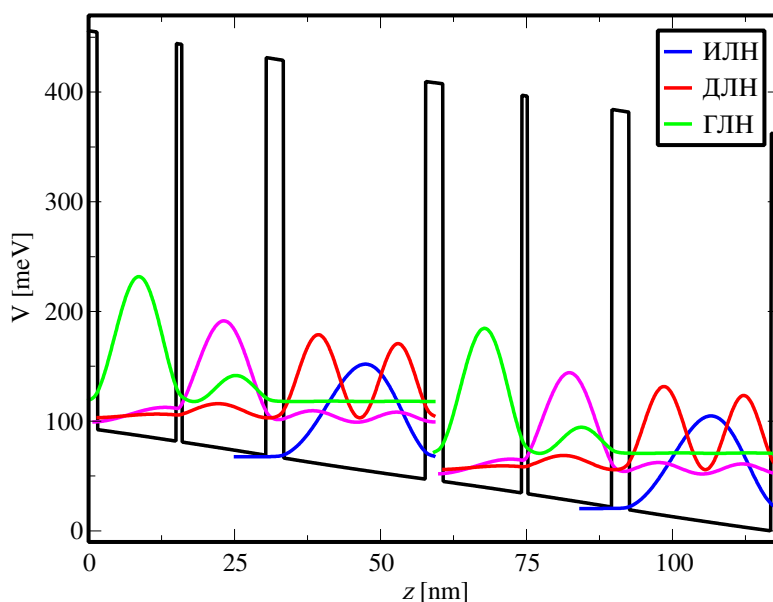
На слици А.5 приказано је дно проводне зоне, као и модули таласних функција који илуструју расподелу електрона овог ККЛ-а. Моделовани ЛО фононски InGaAs/InAlAs тројамни THz ККЛ дизајниран је за високу снагу емисије [132]. Ефикасна екстракција ДЛН постиже се резонантном ЛО фононском емисијом у најширој јами. Материјал ККЛ-а је усклађен по величини кристалне решетке са InP подлогом. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: **1.8/13.3/0.6/13.3/1.8/(9.0+6.0+9.0)** nm. Слојеви јаме су од $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, док су баријере од $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ означене подебљаним фонтом. Средњи део последње јаме, допиран концентрацијом $3.3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, је подвучен.



Слика А.5. Дно проводне зоне, као и модули таласних функција ЛО фононског InGaAs/InAlAs тројамног THz ККЛ-а [132]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: **1.8/13.3/0.6/13.3/1.8/(9.0+6.0+9.0)** nm. Слојеви јама су од $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, док су баријере од $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ означене подебљаним фонтом. Средњи део последње јама, допиран концентрацијом $3.3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, је подвучен. Преузето из сопственог рада [60], под Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>) условима, легенда је преведена.

А.6 ЛО фононски InGaAs/GaAsSb тројамни THz ККЛ

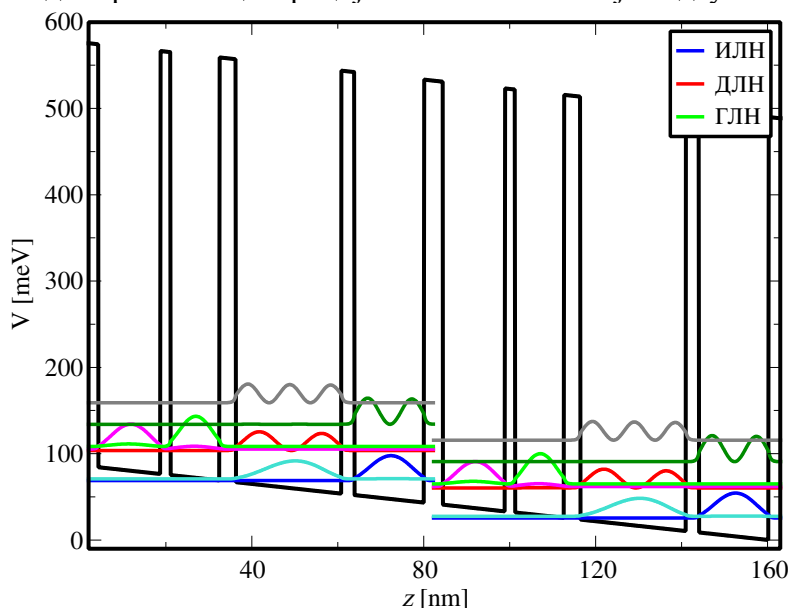
На слици А.6 приказано је дно проводне зоне, као и модули таласних функција који илуструју расподелу електрона овог ККЛ-а. Моделовани ЛО фононски InGaAs/GaAsSb тројамни THz ККЛ је дизајниран да емитује између 3.3 и 4 THz [133]. Материјал јама и баријера је усклађен по величини кристалне решетке са InP подлогом. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: **3.0/13.5/1.0/14.4/3.0/2.0/20.3/2.0** nm. Слојеви јама су од $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, док су баријере од $\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$ означене подебљаним фонтом. Средњи део последње јама, допиран концентрацијом $1.0 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучен.



Слика А.6. Дно проводне зоне, као и модули таласних функција ЛО фононског InGaAs/GaAsSb тројамног THz ККЛ-а [133]. Дебљине слојева, почев од инјекционе баријере, су: **3.0/13.5/1.0/14.4/3.0/2.0/20.3/2.0** nm. Слојеви јама су од $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, док су баријере од $\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$ означене подебљаним фонтом. Средњи део последње јама, допиран концентрацијом $1.0 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучен. Преузето из сопственог рада [60], под Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>) условима, легенда је преведена.

А.7 ЛО фононски GaSb/AlSb THz ККЛ

На слици А.7 приказано је дно проводне зоне, као и модули таласних функција који илуструју расподелу електрона овог ККЛ-а. Моделовани ЛО фононски GaSb/AlSb THz ККЛ је дизајниран за импулсну емисију на 2.6 THz [134]. ДЛН је ефикасно депопулисан ЛО фононским расејањем у ИЛН, који се налази на ЛО фонон енергији (28.9 meV у GaSb) испод ДЛН и снажно је спрегнут са ГЛН наредне периоде. Резонантно тунеловање се дешава кроз инјекциону баријеру депопулишући ИЛН. Дебљине слојева, почевши од инјекционе баријере, износе: 4.3/14.4/2.4/11.4/3.8/24.6/3.0/16.2 nm, где су AlSb баријере подебљане, а слојеви јама су направљени од GaSb. Јама допирана концентрацијом $1.9 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучена.



Слика А.7. Дно проводне зоне, и модули таласних функција ЛО фононског GaSb/AlSb THz ККЛ-а [134]. Дебљине слојева, почевши од инјекционе баријере: 4.3/14.4/2.4/11.4/3.8/24.6/3.0/16.2 nm, где су AlSb баријере подебљане, а слојеви јама су од GaSb. Јама допирана концентрацијом $1.9 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ је подвучена. Преузето из сопственог рада [60], под условима Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), легенда је преведена.

Додатак Б

Примена FDM на Шредингер–Поасонову једначину

Метод коначних разлика је стандардан поступак за решавање диференцијалних једначина. У 1D случају, зависна променљива (z) се дискретизује у n_z равномерно распоређених тачака са растојањем h_z , и тада се први и други извод функције $f(z)$ могу записати као:

$$\begin{aligned}\frac{df_k}{dz} &= \frac{f_k - f_{k-1}}{h_z}, \\ \frac{d^2 f_k}{dz^2} &= \frac{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}{h_z^2}.\end{aligned}\tag{Б.1}$$

Први извод у једначини (Б.1) је дат по дефиницији извода за $h_z \rightarrow 0$. Други извод се може записати на више начина, и у једначини (Б.1) добијен је применом правила централне разлике, у коме фигуришу три тачке. Овај избор директно одређује колико ће матрична форма дискретизоване диференцијалне једначине имати дијагоналу.

Б.1 Дискретизација Шредингерове једначине

Шредингерова једначина је диференцијална једначина другог реда, и када се примени (Б.1) добија се облик:

$$\begin{aligned}a_k \psi_{k-1} + b_k \psi_k + c_k \psi_{k+1} &= E \psi_k, \\ b_k &= \frac{\hbar^2}{h_z^2} \left(\frac{1}{m_{k+\frac{1}{2}}^*} + \frac{1}{m_{k-\frac{1}{2}}^*} \right) + V_k, \\ a_{k+1} = c_k &= -\frac{\hbar^2}{2m_{k+\frac{1}{2}}^* h_z^2},\end{aligned}\tag{Б.2}$$

где $k + \frac{1}{2}$ одговара тачкама на половини интервала око z_k . Применом једначина (Б.2) на сваку тачку дуж z -осе, и груписањем коефицијената по таласним функцијама у свакој тачки добија се следећи матрични облик проблема:

$$\begin{pmatrix} b_0 & c_0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_1 & b_1 & c_1 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & a_{n_z-2} & b_{n_z-2} & c_{n_z-2} \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n_z} & b_{n_z-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{n_z-2} \\ \psi_{n_z-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{n_z-2} \\ \psi_{n_z-1} \end{pmatrix}.\tag{Б.3}$$

Добијен је тридијагонални својствени проблем који се може решавати бројним методама, али због непараболичности ефективна маса зависи од енергије $m_k^*(E) = m_k^*(0) (1 + \alpha_k(E - V_k))$, што једначину (Б.3) претвара у нелинеаран својствени проблем облика:

$$H(E)\psi = E\psi. \quad (\text{Б.4})$$

Овакав проблем се решава тражењем оних енергија E за које постоји решење једначине:

$$(H(E) - EI)\psi = \lambda_0\psi, \quad (\text{Б.5})$$

где је I јединична матрица, а тражено решење једначине (Б.3) је скуп енергија за које важи $\lambda_0 = 0$.

Б.2 Дискретизација Поасонове једначине

Поасонова једначина је другог реда, али је њен облик знатно једноставнији од Шредингерове једначине и за њено решавање није потребно решити својствени проблем. Њена форма након примене метода коначних разлика гласи:

$$a_k\phi_{k-1} + b_k\phi_k + c_k\phi_{k+1} = r_k, \quad (\text{Б.6})$$

где су $a_k = \varepsilon_{k-\frac{1}{2}}$, $b_k = -(\varepsilon_{k-\frac{1}{2}} + \varepsilon_{k+\frac{1}{2}})$, $c_k = \varepsilon_{k+\frac{1}{2}}$ а десна страна представља густину наелектрисања $r_k = -eh_z^2 (N_{d_k}^+ - n_{e_k})$, у складу са $N_d(z)$ и ρ из одељка 2.2. Матрични облик дискретизоване Поасонове једначине је:

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & a_{n_z-1} & b_{n_z-1} & c_{n_z-1} \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n_z} & b_{n_z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{n_z-1} \\ \phi_{n_z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{n_z-1} \\ r_{n_z} \end{pmatrix}. \quad (\text{Б.7})$$

Ово је дијагонална линеарна матрична једначина. Решење се добија применом Томасовог алгорита [64]. Дефинишимо помоћне коефицијенте:

$$\begin{aligned} c'_1 &= \frac{c_1}{b_1}, & c'_k &= \frac{c_k}{b_k - a_k c'_{k-1}}, & k &= 2, \dots, n_z - 1, \\ r'_1 &= \frac{r_1}{b_1}, & r'_k &= \frac{r_k - a_k r'_{k-1}}{b_k - a_k c'_{k-1}}, & k &= 2, \dots, n_z, \end{aligned} \quad (\text{Б.8})$$

тада се за решења електростатичког потенцијала добија:

$$\begin{aligned} \phi_{n_z} &= r'_{n_z}, \\ \phi_k &= r'_k - c'_k \phi_{k+1}, & k &\neq n_z. \end{aligned} \quad (\text{Б.9})$$

Добијени потенцијал потребан је за решавање Шредингерове једначине јер фигурише у укупној потенцијалној енергији $V(z) = V_c(z) - eKz - e\phi(z)$.

Додатак В

Једначине и изводи за рачунање електронске структуре применом dTMM

У овом додатку је показано детаљније извођење коришћених израза и одговарајућих првих извода по енергији коришћених у dTMM приликом рачунања електронске структуре ККЛ-а у параболичном моделу, двозонском Кејновом непараболичном моделу, његовој Тејлоровој апроксимацији, као и 14 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ непараболичном моделу у секцијама 5.2 и 5.3.

В.1 Параболични модел

Шредингерова једначина у апроксимацији ефективне масе са једнодимензионалним конфинирањем носилаца у параболичном моделу дата је једначином (5.8), где ефективна маса не зависи од енергије већ само од положаја:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi(z)}{dz} + V(z)\psi(z) = E\psi(z). \quad (\text{B.1})$$

Таласни вектор је дат једначином (5.9). Таласни вектори p и q на левом и десном сегменту на i -том споју, као и величина q_{pq} на основу ознака уведених једначином (5.11) једнаки су:

$$p = \sqrt{\frac{2m_i(V_i - E)}{\hbar^2}}, \quad (\text{B.2})$$

$$q = \sqrt{\frac{2m_{i+1}(V_{i+1} - E)}{\hbar^2}}, \quad (\text{B.3})$$

$$q_{pq} = \frac{m_{i+1}}{m_i} \frac{p}{q}. \quad (\text{B.4})$$

За одређивање првог извода по енергији претходних израза коришћени су изрази дати једначином (5.15) у којима је урачунато да у параболичном моделу ефективна маса не зависи од енергије па су изводи ефективне масе по енергији нула, одакле се добијају коначни изрази:

$$\frac{dp}{dE} = -\frac{m_i}{\hbar^2 p}, \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{dq}{dE} = -\frac{m_{i+1}}{\hbar^2 q}, \quad (\text{B.6})$$

$$\frac{dq_{pq}}{dE} = \frac{m_{i+1}}{m_i} \frac{\frac{dp}{dE} q - \frac{dq}{dE} p}{q^2}. \quad (\text{B.7})$$

В.2 Двонзонски Кејнов непараболични модел

Шредингерова једначина у апроксимацији ефективне масе са једнодимензионалним конфинурањем носилаца у двонзонском Кејновом непараболичном моделу дата је једначином (5.8), где је замењена ефективна маса $m_i^* = m_i (1 + \alpha_i(E - V_i))$ дата једначином (5.16) доводећи до финалног облика једначине:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z) (1 + \alpha(E - V(z)))} \frac{d\psi(z)}{dz} + V(z)\psi(z) = E\psi(z). \quad (\text{B.8})$$

Таласни вектор је дат једначином (5.9). Таласни вектори p и q на левом и десном сегменту на i -том споју, као и величина q_{pq} на основу ознака уведених једначином (5.11) и заменом ефективне масе дате једначином (5.16) једнаки су:

$$p = \sqrt{\frac{2m_i (1 + \alpha_i(E - V_i)) (V_i - E)}{\hbar^2}}, \quad (\text{B.9})$$

$$q = \sqrt{\frac{2m_{i+1} (1 + \alpha_{i+1}(E - V_{i+1})) (V_{i+1} - E)}{\hbar^2}}, \quad (\text{B.10})$$

$$q_{pq} = \frac{m_{i+1} (1 + \alpha_{i+1}(E - V_{i+1}))}{m_i (1 + \alpha_i(E - V_i))} \frac{p}{q}. \quad (\text{B.11})$$

За одређивање првог извода по енергији претходних израза коришћени су изрази дати једначином (5.15) у којима је урачунато да је у двонзонском Кејновом непараболичном моделу први извод ефективне масе по енергији једнак $\alpha_i m_i$, одакле се добијају коначни изрази:

$$\frac{dp}{dE} = -\frac{m_i (1 + 2\alpha_i(E - V_i))}{\hbar^2 p}, \quad (\text{B.12})$$

$$\frac{dq}{dE} = -\frac{m_{i+1} (1 + 2\alpha_{i+1}(E - V_{i+1}))}{\hbar^2 q}, \quad (\text{B.13})$$

$$\frac{dq_{pq}}{dE} = \frac{m_{i+1} (1 + \alpha_{i+1}(E - V_{i+1}))}{m_i (1 + \alpha_i(E - V_i))} \frac{\frac{dp}{dE} q - \frac{dq}{dE} p}{q^2} + \frac{p}{q} \frac{m_{i+1} (\alpha_{i+1} - \alpha_i + \alpha_i \alpha_{i+1} (V_{i+1} - V_i))}{m_i (1 + \alpha_i(E - V_i))^2}. \quad (\text{B.14})$$

В.3 Тејлорова апроксимација Кејновог модела

Шредингерова једначина у апроксимацији ефективне масе са једнодимензионалним конфинурањем носилаца у Тејлоровој апроксимацији двонзног Кејновог непараболичног модела дата је једначином (5.8), где је замењена ефективна маса $m_i^* = m_i (1 - \alpha_i(E - V_i))^{-1}$ дата једначином (5.17) што доводи до финалног облика једначине:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{(1 - \alpha(E - V(z)))}{m^*(z)} \frac{d\psi(z)}{dz} + V(z)\psi(z) = E\psi(z). \quad (\text{B.15})$$

Таласни вектор је дат једначином (5.9). Таласни вектори p и q на левом и десном сегменту на i -том споју, као и величина q_{pq} на основу ознака уведених једначином (5.11) и заменом ефективне масе дате једначином (5.17) једнаки су:

$$p = \sqrt{\frac{2m_i(V_i - E)}{(1 - \alpha_i(E - V_i)) \hbar^2}}, \quad (\text{B.16})$$

$$q = \sqrt{\frac{2m_{i+1}(V_{i+1} - E)}{(1 - \alpha_{i+1}(E - V_{i+1})) \hbar^2}}, \quad (\text{B.17})$$

$$q_{pq} = \frac{m_{i+1}(1 - \alpha_i(E - V_i))}{m_i(1 - \alpha_{i+1}(E - V_{i+1}))} \frac{p}{q}. \quad (\text{B.18})$$

За одређивање првог извода по енергији претходних израза коришћени су изрази дати једначином (5.15) у којима је урачунато да је у Тејлоровој апроксимацији двозонског Кејновог не-параболичног модела први извод ефективне масе по енергији једнак $m_i \alpha_i (1 - \alpha_i(E - V_i))^{-2}$, одакле се добијају коначни изрази:

$$\frac{dp}{dE} = -\frac{m_i}{(1 - \alpha_i(E - V_i))^2 \hbar^2 p}, \quad (\text{B.19})$$

$$\frac{dq}{dE} = -\frac{m_{i+1}}{(1 - \alpha_{i+1}(E - V_{i+1}))^2 \hbar^2 q}, \quad (\text{B.20})$$

$$\begin{aligned} \frac{dq_{pq}}{dE} &= \frac{m_{i+1}(1 - \alpha_i(E - V_i))}{m_i(1 - \alpha_{i+1}(E - V_{i+1}))} \frac{\frac{dp}{dE}q - \frac{dq}{dE}p}{q^2} \\ &+ \frac{p}{q} \left(\frac{\alpha_{i+1}m_{i+1}(1 - \alpha_i(E - V_i))}{m_i(1 - \alpha_{i+1}(E - V_{i+1}))^2} - \frac{m_{i+1}\alpha_i}{m_i(1 - \alpha_{i+1}(E - V_{i+1}))} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

В.4 14 k·p непараболични модел

Шредингерова једначина у апроксимацији ефективне масе са једнодимензионалним конфигурањем носилаца у 14 k·p непараболичном моделу дата је једначином (5.20):

$$\frac{d^2}{dz^2} \alpha^E(z) \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} - \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi(z)}{dz} + V(z)\psi(z) = E\psi(z). \quad (\text{B.22})$$

Таласни вектор је дат једначином (5.22). Таласни вектори p и q на левом и десном сегменту на i -том споју, као и величина q_{pq} на основу ознака уведених једначином (5.25) једнаки су:

$$p = \sqrt{\frac{\hbar^2 \left[1 - \sqrt{1 - 16|\alpha_i^E|(E - V_i) \left(\frac{m_i}{\hbar^2}\right)^2} \right]}{4|\alpha_i^E|m_i}}, \quad (\text{B.23})$$

$$q = \sqrt{\frac{\hbar^2 \left[1 - \sqrt{1 - 16|\alpha_{i+1}^E|(E - V_{i+1}) \left(\frac{m_{i+1}}{\hbar^2}\right)^2} \right]}{4|\alpha_{i+1}^E|m_{i+1}}}, \quad (\text{B.24})$$

$$q_{pq} = \frac{2\alpha_i^E p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{p}{q}}{2\alpha_{i+1}^E q^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{i+1}} \frac{p}{q}}. \quad (\text{B.25})$$

За одређивање првог извода по енергији претходних израза коришћени су изрази дати једначином (5.27):

$$\frac{dp}{dE} = \frac{m_i}{\hbar^2} \frac{1}{p + \frac{4|\alpha_i^E|m_i}{\hbar^2}p^3}, \quad (\text{B.26})$$

$$\frac{dq}{dE} = \frac{m_{i+1}}{\hbar^2} \frac{1}{q + \frac{4|\alpha_{i+1}^E|m_{i+1}}{\hbar^2}q^3}, \quad (\text{B.27})$$

$$\frac{dq_{pq}}{dE} = \frac{6\alpha_i^E p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_i}}{2\alpha_{i+1}^E q^3 - \frac{\hbar^2}{2m_{i+1}}q} \frac{dp}{dE} - \frac{\left(2\alpha_i^E p^3 - \frac{\hbar^2}{2m_i}p\right) \left(6\alpha_{i+1}^E q^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{i+1}}\right)}{\left(2\alpha_{i+1}^E q^3 - \frac{\hbar^2}{2m_{i+1}}q\right)^2} \frac{dq}{dE}. \quad (\text{B.28})$$

Литература

- [1] A. Siegman, *Lasers*. University Science Books, 1986.
- [2] M. J. Weber, *Handbook of Laser Wavelengths*. CRC press, 1998.
- [3] R. N. Hall, G. E. Fenner, J. Kingsley, T. Soltys, and R. Carlson, “Coherent light emission from GaAs junctions,” *Physical Review Letters*, vol. 9, no. 9, p. 366, 1962.
- [4] I. Vurgaftman, J. Meyer, and L. Ram-Mohan, “Band parameters for iii–v compound semiconductors and their alloys,” *Journal of Applied Physics*, vol. 89, no. 11, pp. 5815–5875, 2001.
- [5] G. P. Agrawal and N. K. Dutta, *Semiconductor Lasers*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [6] L. A. Coldren, S. W. Corzine, and M. L. Mashanović, *Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits*, en. John Wiley & Sons, 2012.
- [7] L. Esaki and R. Tsu, “Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors,” *IBM Journal of Research and Development*, vol. 14, no. 1, pp. 61–65, 1970.
- [8] R. Tsu and L. Esaki, “Tunneling in a finite superlattice,” *Applied Physics Letters*, vol. 22, no. 11, pp. 562–564, 1973.
- [9] R. Kazarinov, “Possibility of amplification of electromagnetic waves in a semiconductor with superlattice,” *Sov. Phys.-Semicond.*, vol. 5, no. 4, pp. 707–709, 1971.
- [10] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho, “Quantum Cascade Laser,” *Science*, vol. 264, no. 5158, pp. 553–556, 1994.
- [11] C. Gmachl, F. Capasso, D. L. Sivco, and A. Y. Cho, “Recent progress in quantum cascade lasers and applications,” *Rep. Prog. Phys.*, vol. 64, no. 11, p. 1533, 2001. DOI: 10.1088/0034-4885/64/11/204.
- [12] F. Capasso, “High-performance mid-infrared quantum cascade lasers,” *Optical Engineering*, vol. 49, no. 11, pp. 111102–111102–9, 2010.
- [13] H. Page, C. Becker, A. Robertson, G. Glastre, V. Ortiz, and C. Sirtori, “300 K operation of a GaAs-based quantum-cascade laser at $\lambda \approx 9 \mu\text{m}$,” *Applied Physics Letters*, vol. 78, no. 22, pp. 3529–3531, 2001.
- [14] C. Pflügl *et al.*, “High-temperature performance of GaAs-based bound-to-continuum quantum-cascade lasers,” *Applied physics letters*, vol. 83, no. 23, pp. 4698–4700, 2003.
- [15] Y. Bai, N. Bandyopadhyay, S. Tsao, S. Slivken, and M. Razeghi, “Room temperature quantum cascade lasers with 27% wall plug efficiency,” *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 18, p. 181 102, 2011.
- [16] M. Razeghi, W. Zhou, S. Slivken, Q.-Y. Lu, D. Wu, and R. McClintock, “Recent progress of quantum cascade laser research from 3 to 12 μm at the center for quantum devices,” *Applied optics*, vol. 56, no. 31, H30–H44, 2017.

- [17] J. Devenson, R. Teissier, O. Cathabard, and A. Baranov, "InAs / AlSb quantum cascade lasers emitting below 3 μm ," *Applied physics letters*, vol. 90, no. 11, p. 111 118, 2007.
- [18] M. Rochat, D. Hofstetter, M. Beck, and J. Faist, "Long-wavelength ($\lambda \approx 16 \mu\text{m}$), room-temperature, single-frequency quantum-cascade lasers based on a bound-to-continuum transition," *Applied Physics Letters*, vol. 79, no. 26, pp. 4271–4273, 2001.
- [19] R. F. Curl *et al.*, "Quantum cascade lasers in chemical physics," *Chemical Physics Letters*, vol. 487, no. 1-3, pp. 1–18, 2010.
- [20] R. Martini and E. Whittaker, "Quantum cascade laser-based free space optical communications," in *Free-Space Laser Communications*, Springer, 2005, pp. 393–406.
- [21] M. Hannemann *et al.*, "Influence of age and sex in exhaled breath samples investigated by means of infrared laser absorption spectroscopy," *Journal of breath research*, vol. 5, no. 2, p. 027 101, 2011.
- [22] J. Röpcke, P. Davies, N. Lang, A. Rousseau, and S. Welzel, "Applications of quantum cascade lasers in plasma diagnostics: A review," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 45, no. 42, p. 423 001, 2012.
- [23] J. B. McManus, J. H. Shorter, D. D. Nelson, M. S. Zahniser, D. E. Glenn, and R. M. McGovern, "Pulsed quantum cascade laser instrument with compact design for rapid, high sensitivity measurements of trace gases in air," *Appl. Phys. B*, vol. 92, no. 3, p. 387, 2008.
- [24] E. Bründermann, D. R. Chamberlin, and E. E. Haller, "High duty cycle and continuous terahertz emission from germanium," *Applied Physics Letters*, vol. 76, no. 21, pp. 2991–2993, 2000.
- [25] K. Kawase, J.-i. Shikata, H. Minamide, K. Imai, and H. Ito, "Arrayed silicon prism coupler for a terahertz-wave parametric oscillator," *Applied optics*, vol. 40, no. 9, pp. 1423–1426, 2001.
- [26] B. Knyazev, G. Kulipanov, and N. Vinokurov, "Novosibirsk terahertz free electron laser: Instrumentation development and experimental achievements," *Measurement Science and Technology*, vol. 21, no. 5, p. 054 017, 2010.
- [27] R. Köhler *et al.*, "Terahertz semiconductor-heterostructure laser," *Nature*, vol. 417, no. 6885, pp. 156–159, 2002.
- [28] B. S. Williams, "Terahertz quantum-cascade lasers," *Nature Photonics*, vol. 1, no. 9, pp. 517–525, 2007.
- [29] M. Tonouchi, "Cutting-edge terahertz technology," *Nature photonics*, vol. 1, no. 2, p. 97, 2007.
- [30] C. Walther, M. Fischer, G. Scalari, R. Terazzi, N. Hoyler, and J. Faist, "Quantum cascade lasers operating from 1.2 to 1.6 THz," *Applied Physics Letters*, vol. 91, no. 13, p. 131 122, 2007.
- [31] G. Scalari *et al.*, "THz and sub-THz quantum cascade lasers," *Laser & Photon. Rev.*, vol. 3, no. 1-2, pp. 45–66, 2009.
- [32] M. Shahili, S. J. Addamane, A. D. Kim, C. A. Curwen, J. H. Kawamura, and B. S. Williams, "Continuous-wave GaAs/AlGaAs quantum cascade laser at 5.7 THz," *Nanophotonics*, vol. 13, no. 10, pp. 1735–1743, 2024.
- [33] 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," *Applied Physics Letters*, vol. 122, no. 16, p. 161 101, Apr. 2023.

- [34] 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, pp. 3334–3348, 2014.
- [35] W. Li *et al.*, “Continuous-wave terahertz quantum cascade laser based on a hybrid bound to bound quantum design,” *Frontiers in Photonics*, vol. 3, p. 1 071 879, 2022.
- [36] L. Li *et al.*, “Multi-watt high-power thz frequency quantum cascade lasers,” *Electronics Letters*, vol. 53, no. 12, pp. 799–800, 2017.
- [37] M. S. Vitiello, G. Scalari, B. Williams, and P. De Natale, “Quantum cascade lasers: 20 years of challenges,” *Optics express*, vol. 23, no. 4, pp. 5167–5182, 2015.
- [38] S. F. Shayesteh *et al.*, “Far-infrared spectra of reflectivity, transmission and hot-hole emission in p-doped multiple quantum wells,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 11, no. 3, p. 323, 1996.
- [39] M. Dyksik *et al.*, “Optical properties of active regions in terahertz quantum cascade lasers,” *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, vol. 37, no. 7, pp. 710–719, 2016.
- [40] K. Fujita *et al.*, “Recent progress in terahertz difference-frequency quantum cascade laser sources,” *Nanophotonics*, vol. 7, no. 11, pp. 1795–1817, 2018.
- [41] M. Razeghi *et al.*, “Quantum cascade lasers: From tool to product,” *Optics express*, vol. 23, no. 7, pp. 8462–8475, 2015.
- [42] D. Indjin, P. Harrison, R. W. Kelsall, and Z. Ikonić, “Mechanisms of temperature performance degradation in quantum-cascade lasers,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 82, no. 9, pp. 1347–1349, 2003.
- [43] S. Kumar, “Recent progress in terahertz quantum cascade lasers,” *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 17, no. 1, pp. 38–47, 2011.
- [44] C. A. Evans, “The optical and thermal properties of quantum cascade lasers,” Ph.D. dissertation, University of Leeds, 2008, <http://etheses.whiterose.ac.uk/5079/>.
- [45] B. S. Williams, H. Callebaut, S. Kumar, Q. Hu, and J. L. Reno, “3.4-THz quantum cascade laser based on longitudinal-optical-phonon scattering for depopulation,” *Applied Physics Letters*, vol. 82, no. 7, pp. 1015–1017, 2003.
- [46] S. Fatholouloumi *et al.*, “Terahertz quantum cascade lasers operating up to 200 K with optimized oscillator strength and improved injection tunneling,” *Optics express*, vol. 20, no. 4, pp. 3866–3876, 2012.
- [47] S. Kumar, C. W. I. Chan, Q. Hu, and J. L. Reno, “A 1.8-THz quantum cascade laser operating significantly above the temperature of $\hbar \omega/k_B$,” *Nature Physics*, vol. 7, no. 2, p. 166, 2011.
- [48] Y. Han *et al.*, “Extraction-controlled terahertz frequency quantum cascade lasers with a diagonal LO-phonon extraction and injection stage,” *Optics express*, vol. 24, no. 25, pp. 28 583–28 593, 2016.
- [49] L. Wang, T.-T. Lin, K. Wang, T. Grange, S. Birner, and H. Hirayama, “Short-period scattering-assisted terahertz quantum cascade lasers operating at high temperatures,” *Scientific reports*, vol. 9, no. 1, p. 9446, 2019.
- [50] 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,” *Optics express*, vol. 23, no. 15, pp. 19 689–19 697, 2015.
- [51] A. Demić *et al.*, “Infinite-period density-matrix model for terahertz-frequency quantum cascade lasers,” *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, vol. 7, no. 4, pp. 368–377, 2017.

- [52] A. Y. Cho and J. Arthur, "Molecular beam epitaxy," *Progress in solid state chemistry*, vol. 10, pp. 157–191, 1975.
- [53] Z. Ikonić and V. Milanović, *Poluprovodničke kvantne mikrostrukture*. Univerzitet u Beogradu, 1997.
- [54] M. Henini, *Molecular Beam Epitaxy: From Research to Mass Production*. Newnes, 2012.
- [55] L. Li, J. Zhu, L. Chen, A. Davies, and E. Linfield, "The MBE growth and optimization of high performance terahertz frequency quantum cascade lasers," *Optics Express*, vol. 23, no. 3, pp. 2720–2729, 2015.
- [56] J. Zhu, "MBE growth, fabrication, and electrical characterisation of terahertz frequency quantum cascade lasers," Ph.D. dissertation, University of Leeds, 2015, <http://etheses.whiterose.ac.uk/11459/>.
- [57] H. Detz *et al.*, "Evaluation of material systems for THz quantum cascade laser active regions," *physica status solidi (a)*, vol. 216, no. 1, p. 1 800 504, 2019.
- [58] O. Demichel *et al.*, "Surface plasmon photonic structures in terahertz quantum cascade lasers," *Optics express*, vol. 14, no. 12, pp. 5335–5345, 2006.
- [59] N. Stanojević *et al.*, "Effects of background doping, interdiffusion and layer thickness fluctuation on the transport characteristics of THz quantum cascade lasers," *Scientific Reports*, vol. 14, no. 1, p. 5641, 2024.
- [60] N. Stanojević *et al.*, "Derivative transfer matrix method: Machine precision calculation of electron structure and interface phonon dispersion in semiconductor heterostructures," *Computer Physics Communications*, vol. 311, p. 109 573, 2025.
- [61] N. Stanojević, N. Vuković, M. Ignjatović, N. Basta, and J. Radovanović, "Analysis of self-mixing in THz quantum cascade lasers under varying mode dynamics and external optical feedback," *Applied Physics B*, vol. 132, no. 76, 2026.
- [62] V. Jovanović, "Theory and design of GaAs and GaN-based quantum cascade lasers and quantum well infrared photodetectors," Ph.D. dissertation, University of Leeds, 2005.
- [63] O. Madelung, *Introduction to Solid-state Theory*. Springer Science & Business Media, 2012, vol. 2.
- [64] B. N. Datta, *Numerical Linear Algebra and Applications*. Siam, 2010, vol. 116.
- [65] A. Valavanis, "N-type silicon-germanium based terahertz quantum cascade lasers," PhD, University of Leeds, 2009, <http://etheses.whiterose.ac.uk/1262/>.
- [66] G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. New York, NY (USA); John Wiley and Sons Inc., 1990.
- [67] A. Grier, "Modelling the optical and electronic transport properties of AlGaAs and AlGaN intersubband devices and optimisation of quantum cascade laser active regions," PhD, University of Leeds, 2015, <http://etheses.whiterose.ac.uk/11221/>.
- [68] C. Jirauschek and T. Kubis, "Modeling techniques for quantum cascade lasers," *Appl. Phys. Rev.*, vol. 1, no. 1, p. 011 307, 2014.
- [69] P. Harrison and A. Valavanis, *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons, 2016.
- [70] J. H. Smet, C. G. Fonstad, and Q. Hu, "Intrawell and interwell intersubband transitions in multiple quantum wells for far-infrared sources," *Journal of Applied Physics*, vol. 79, no. 12, pp. 9305–9320, 1996.

- [71] P. Harrison, D. Indjin, and R. Kelsall, "Electron temperature and mechanisms of hot carrier generation in quantum cascade lasers," *Journal of Applied Physics*, vol. 92, no. 11, pp. 6921–6923, 2002.
- [72] V. Jovanović *et al.*, "Influence of doping density on electron dynamics in GaAs/AlGaAs quantum cascade lasers," *Journal of Applied Physics*, vol. 99, no. 10, p. 103 106, 2006.
- [73] D. Indjin, P. Harrison, R. W. Kelsall, and Z. Ikonic, "Self-consistent scattering model of carrier dynamics in GaAs-AlGaAs terahertz quantum-cascade lasers," *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 15, no. 1, pp. 15–17, 2003.
- [74] K. E. Atkinson, *An Introduction to Numerical Analysis*. John Wiley & Sons, 2008.
- [75] A. Pan, B. A. Burnett, C. O. Chui, and B. S. Williams, "Density matrix modeling of quantum cascade lasers without an artificially localized basis: A generalized scattering approach," *Physical Review B*, vol. 96, no. 8, p. 085 308, 2017.
- [76] S. Kumar and Q. Hu, "Coherence of resonant-tunneling transport in terahertz quantum-cascade lasers," *Phys. Rev. B*, vol. 80, no. 24, p. 245 316, 2009.
- [77] H. Callebaut and Q. Hu, "Importance of coherence for electron transport in terahertz quantum cascade lasers," *J. Appl. Phys.*, vol. 98, no. 10, p. 104 505, 2005.
- [78] 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. 235 427, 2012.
- [79] 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, 2013.
- [80] H. Yasuda, T. Kubis, P. Vogl, N. Sekine, I. Hosako, and K. Hirakawa, "Nonequilibrium Green's function calculation for four-level scheme terahertz quantum cascade lasers," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 94, no. 15, p. 151 109, 2009.
- [81] R. McWeeny, "Some recent advances in density matrix theory," *Reviews of Modern Physics*, vol. 32, no. 2, p. 335, 1960.
- [82] U. Fano, "Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques," *Reviews of Modern Physics*, vol. 29, no. 1, p. 74, 1957.
- [83] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications*. Springer Science & Business Media, 2012, vol. 64.
- [84] R. W. Boyd, *Nonlinear Optics*. Academic Press, 2008.
- [85] G. Lindblad, "On the generators of quantum dynamical semigroups," *Communications in Mathematical Physics*, vol. 48, no. 2, pp. 119–130, 1976.
- [86] A. Kossakowski, "On quantum statistical mechanics of non-hamiltonian systems," *Reports on Mathematical Physics*, vol. 3, no. 4, pp. 247–274, 1972.
- [87] V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, "Completely positive dynamical semigroups of n-level systems," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 17, no. 5, pp. 821–825, 1976.
- [88] T. Banks, L. Susskind, and M. E. Peskin, "Difficulties for the evolution of pure states into mixed states," *Nuclear Physics B*, vol. 244, no. 1, pp. 125–134, 1984.
- [89] 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. 165 310, 2007.

- [90] E. Dupont, S. Fatholouloumi, and H. C. Liu, “Simplified density-matrix model applied to three-well terahertz quantum cascade lasers,” *Phys. Rev. B*, vol. 81, no. 20, p. 205 311, 2010.
- [91] P. Tzenov, D. Burghoff, Q. Hu, and C. Jirauschek, “Time domain modeling of terahertz quantum cascade lasers for frequency comb generation,” *Opt. Express*, vol. 24, no. 20, pp. 23 232–23 247, 2016.
- [92] 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. 155 309, 2014.
- [93] B. A. Burnett and B. S. Williams, “Origins of terahertz difference frequency susceptibility in midinfrared quantum cascade lasers,” *Phys. Rev. Applied*, vol. 5, no. 3, p. 034 013, 2016.
- [94] O. Jonasson, “Quantum transport in semiconductor heterostructures using density-matrix and Wigner-function formalisms,” Ph.D. dissertation, The University of Wisconsin-Madison, 2016.
- [95] O. Jonasson, F. Karimi, and I. Knezevic, “Partially coherent electron transport in terahertz quantum cascade lasers based on a Markovian master equation for the density matrix,” en, *J Comput Electron*, vol. 15, no. 4, pp. 1192–1205, 2016.
- [96] O. Jonasson *et al.*, “Quantum transport simulation of high-power 4.6- μm quantum cascade lasers,” in *Photonics*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, vol. 3, 2016, p. 38.
- [97] A. Yariv, C. Lindsey, and U. Sivan, “Approximate analytic solution for electronic wave functions and energies in coupled quantum wells,” *J. Appl. Phys.*, vol. 58, no. 9, pp. 3669–3672, 1985.
- [98] A. Demic, “Density matrix modelling of terahertz frequency quantum cascade lasers: Steady state analysis and Maxwell-Bloch dynamics,” Ph.D. dissertation, University of Leeds, 2019, <https://etheses.whiterose.ac.uk/id/eprint/26539/>.
- [99] L. Wang, T.-T. Lin, M. Chen, K. Wang, and H. Hirayama, “Terahertz quantum cascade laser considering compositional interdiffusion effect,” *Applied Physics Express*, vol. 16, no. 3, p. 032 007, 2023.
- [100] A. Demić, Z. Ikonić, P. Dean, and D. Indjin, “Dual resonance phonon–photon–phonon terahertz quantum-cascade laser: Physics of the electron transport and temperature performance optimization,” *Optics Express*, vol. 28, no. 26, pp. 38 788–38 812, 2020.
- [101] A. Wacker, “Semiconductor superlattices: a model system for nonlinear transport,” *Physics Reports*, vol. 357, no. 1, pp. 1–111, 2002.
- [102] M. Wienold, L. Schrottke, M. Giehler, R. Hey, and H. Grahn, “Nonlinear transport in quantum-cascade lasers: The role of electric-field domain formation for the laser characteristics,” *Journal of Applied Physics*, vol. 109, no. 7, 2011.
- [103] L. Bosco, M. Franckić, G. Scalari, M. Beck, A. Wacker, and J. Faist, “Thermoelectrically cooled THz quantum cascade laser operating up to 210 K,” *Applied Physics Letters*, vol. 115, no. 1, 2019.
- [104] A. Khalatpour, A. K. Paulsen, C. Deimert, Z. R. Wasilewski, and Q. Hu, “High-power portable terahertz laser systems,” *Nature Photonics*, vol. 15, no. 1, pp. 16–20, 2021.
- [105] A. Demić, Z. Ikonić, P. Dean, and D. Indjin, “Prospects of temperature performance enhancement through higher resonant phonon transition designs in gaas-based terahertz quantum-cascade lasers,” *New Journal of Physics*, vol. 24, no. 3, p. 033 047, 2022.
- [106] M. Stojković *et al.*, “Machine learning models for predicting key performance characteristics of high-temperature THz quantum cascade lasers,” *Nanomaterials*, vol. 16, no. 11:651, 2026.

- [107] H. A. Kramers and G. H. Wannier, "Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part I," *Physical Review*, vol. 60, no. 3, p. 252, 1941.
- [108] L.M. Walpita, "Solutions for planar optical waveguide equations by selecting zero elements in a characteristic matrix," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 2, no. 4, pp. 595–602, 1985.
- [109] A. Ghatak, K. Thyagarajan, and M. Shenoy, "Numerical analysis of planar optical waveguides using matrix approach," *Journal of Lightwave technology*, vol. 5, no. 5, pp. 660–667, 1987.
- [110] T. Makino and J. Glinski, "Transfer matrix analysis of the amplified spontaneous emission of DFB semiconductor laser amplifiers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 24, no. 8, pp. 1507–1518, 1988.
- [111] C. F. Fernandes, "Transfer matrix modelling in DFB lasers," *Microelectronic Engineering*, vol. 43, pp. 553–560, 1998.
- [112] E. L. Adler, "Matrix methods applied to acoustic waves in multilayers," *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*, vol. 37, no. 6, pp. 485–490, 1990.
- [113] C. Cai, G. Liu, and K. Lam, "A transfer matrix approach for acoustic analysis of a multilayered active acoustic coating," *Journal of Sound and Vibration*, vol. 248, no. 1, pp. 71–89, 2001.
- [114] H. Liu, J. Lee, and Z. Cai, "Analysis of nonlinear acoustoelastic effect of surface acoustic waves in laminated structures by transfer matrix method," *Mechanics Research Communications*, vol. 31, no. 6, pp. 667–675, 2004.
- [115] Z. Y. Li and L. L. Lin, "Photonic band structures solved by a plane-wave-based transfer-matrix method," *Physical Review E*, vol. 67, no. 4, p. 046 607, 2003.
- [116] M. H. Eghlidi, K. Mehrany, and B. Rashidian, "Improved differential-transfer-matrix method for inhomogeneous one-dimensional photonic crystals," *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 23, no. 7, pp. 1451–1459, 2006.
- [117] T. Zhan, X. Shi, Y. Dai, X. Liu, and J. Zi, "Transfer matrix method for optics in graphene layers," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 25, no. 21, p. 215 301, 2013.
- [118] Y. Ando and T. Itoh, "Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers," *Journal of Applied Physics*, vol. 61, no. 4, pp. 1497–1502, 1987.
- [119] B. Jonsson and S. T. Eng, "Solving the Schrodinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 26, no. 11, pp. 2025–2035, 1990.
- [120] E. Cassan, "On the reduction of direct tunneling leakage through ultrathin gate oxides by a one-dimensional Schrödinger–Poisson solver," *Journal of Applied Physics*, vol. 87, no. 11, pp. 7931–7939, 2000.
- [121] J. H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*. Cambridge university press, 1998.
- [122] C. Jirauschek, "Accuracy of transfer matrix approaches for solving the effective mass Schrödinger equation," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 45, no. 9, pp. 1059–1067, 2009.
- [123] N. Vukovic, J. Radovanovic, and V. Milanovic, "Enhanced modeling of band nonparabolicity with application to a mid-IR quantum cascade laser structure," *Physica Scripta*, vol. 2014, no. T162, p. 014 014, 2014.
- [124] G. Bastard, "Superlattice band structure in the envelope-function approximation," *Physical Review B*, vol. 24, no. 10, p. 5693, 1981.
- [125] G. Bastard, "Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope-function approximation," *Physical Review B*, vol. 25, no. 12, p. 7584, 1982.

- [126] C. Sirtori, F. Capasso, J. Faist, and S. Scandolo, "Nonparabolicity and a sum rule associated with bound-to-bound and bound-to-continuum intersubband transitions in quantum wells," *Physical Review B*, vol. 50, no. 12, p. 8663, 1994.
- [127] J. Cooper, A. Valavanis, Z. Ikonić, P. Harrison, and J. Cunningham, "Finite difference method for solving the schrödinger equation with band nonparabolicity in mid-infrared quantum cascade lasers," *Journal of Applied Physics*, vol. 108, no. 11, 2010.
- [128] U. Ekenberg, "Nonparabolicity effects in a quantum well: sublevel shift, parallel mass, and Landau levels," *Physical Review B*, vol. 40, no. 11, p. 7714, 1989.
- [129] S. Yu, K. Kim, M. A. Strosio, G. Iafrate, J.-P. Sun, and G. I. Haddad, "Transfer matrix method for interface optical-phonon modes in multiple-interface heterostructure systems," *Journal of Applied Physics*, vol. 82, no. 7, pp. 3363–3367, 1997.
- [130] A. Demić, J. Radovanović, and V. Milanović, "Analysis of the influence of external magnetic field on transition matrix elements in quantum well and quantum cascade laser structures," *Superlattices and Microstructures*, vol. 96, pp. 134–149, 2016.
- [131] F. Alharbi, "An explicit FDM calculation of nonparabolicity effects in energy states of quantum wells," *Optical and Quantum Electronics*, vol. 40, pp. 551–559, 2008.
- [132] C. Deutsch *et al.*, "High-power growth-robust InGaAs/InAlAs terahertz quantum cascade lasers," *Acs Photonics*, vol. 4, no. 4, pp. 957–962, 2017.
- [133] C. Deutsch *et al.*, "High performance InGaAs/GaAsSb terahertz quantum cascade lasers operating up to 142 K," *Applied Physics Letters*, vol. 101, no. 21, 2012.
- [134] H. Yasuda, I. Hosako, S. Miyashita, and M. Patrashin, "GaSb/AlSb quantum cascade laser for terahertz signal source," in *2005 Asia-Pacific Microwave Conference Proceedings*, IEEE, vol. 5, 2005, 3–pp.
- [135] M. Braun and U. Rossler, "Magneto-optic transitions and non-parabolicity parameters in the conduction band of semiconductors," *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 18, no. 17, p. 3365, 1985.
- [136] V. Golubev, V. Ivanov-Omskii, I. Minervin, A. Osutin, and D. Polyakov, "Nonparabolicity and anisotropy of the electron energy spectrum in GaAs," *Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki*, vol. 88, no. 6, pp. 2052–62, 1985.
- [137] J.-M. Jancu, R. Scholz, E. d. A. e Silva, and G. La Rocca, "Atomistic spin-orbit coupling and $k \cdot p$ parameters in III-V semiconductors," *Physical Review B*, vol. 72, no. 19, p. 193 201, 2005.
- [138] N. Vuković, V. Milanović, and J. Radovanović, "Influence of nonparabolicity on electronic structure of quantum cascade laser," *Physics Letters A*, vol. 378, no. 30-31, pp. 2222–2225, 2014.
- [139] J. Demmel, I. Dumitriu, and O. Holtz, "Fast linear algebra is stable," *Numerische Mathematik*, vol. 108, no. 1, pp. 59–91, 2007.
- [140] A. Lucas, E. Kartheuser, and R. Badro, "Electron-phonon interaction in dielectric films. Application to electron energy loss and gain spectra," *Physical Review B*, vol. 2, no. 7, p. 2488, 1970.
- [141] J. J. Licari and R. Evrard, "Electron-phonon interaction in a dielectric slab: Effect of the electronic polarizability," *Physical Review B*, vol. 15, no. 4, p. 2254, 1977.
- [142] K. Kim and M. Strosio, "Electron-optical-phonon interaction in binary/ternary heterostructures," *Journal of Applied Physics*, vol. 68, no. 12, pp. 6289–6292, 1990.

- [143] H. Teng, J. Sun, G. I. Haddad, M. A. Strosio, S. Yu, and K. Kim, “Phonon assisted intersub-band transitions in step quantum well structures,” *Journal of Applied Physics*, vol. 84, no. 4, pp. 2155–2164, 1998.
- [144] H. Xiao-Yong, C. Jun-Cheng, L. Jing-Tao, and F. Song-Lin, “Simulation of confined and interface phonons scattering in terahertz quantum cascade laser,” *Chinese Physics Letters*, vol. 22, no. 12, p. 3163, 2005.
- [145] N. Mori and T. Ando, “Electron–optical-phonon interaction in single and double heterostructures,” *Physical Review B*, vol. 40, no. 9, p. 6175, 1989.
- [146] L. Wendler, “Electron–phonon interaction in dielectric bilayer systems. effect of the electronic polarizability,” *Physica Status Solidi (b)*, vol. 129, no. 2, pp. 513–530, 1985.
- [147] R. Chen, D. Lin, and T. F. George, “Optical-phonon modes in a double heterostructure of polar crystals,” *Physical Review B*, vol. 41, no. 3, p. 1435, 1990.
- [148] S. Adachi, “GaAs, AlAs, and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: Material parameters for use in research and device applications,” *Journal of Applied Physics*, vol. 58, no. 3, R1–R29, 1985.
- [149] M. A. Strosio and M. Dutta, *Phonons in nanostructures*. Cambridge University Press, 2001.
- [150] X. Gao, D. Botez, and I. Knezevic, “Phonon confinement and electron transport in GaAs-based quantum cascade structures,” *Journal of Applied Physics*, vol. 103, no. 7, 2008.
- [151] G. P. Agrawal, “Spectral hole-burning and gain saturation in semiconductor lasers: Strong-signal theory,” *Journal of applied physics*, vol. 63, no. 4, pp. 1232–1235, 1988.
- [152] M. Yamada, “Theoretical analysis of nonlinear optical phenomena taking into account the beating vibration of the electron density in semiconductor lasers,” *Journal of applied physics*, vol. 66, no. 1, pp. 81–89, 1989.
- [153] G. Agrawal, “Gain nonlinearities in semiconductor lasers: Theory and application to distributed feedback lasers,” *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 23, no. 6, pp. 860–868, 2003.
- [154] R. W. Boyd, A. L. Gaeta, and E. Giese, “Nonlinear optics,” in *Springer Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics*, New York: Springer, 2008, pp. 1097–1110.
- [155] L. Lugiato, F. Prati, and M. Brambilla, *Nonlinear optical systems*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2015.
- [156] S. L. McCall and E. L. Hahn, “Self-induced transparency by pulsed coherent light,” *Physical Review Letters*, vol. 18, no. 21, p. 908, 1967.
- [157] S. L. McCall and E. L. Hahn, “Self-induced transparency,” *Physical Review*, vol. 183, no. 2, p. 457, 1969.
- [158] C. M. Bowden and G. P. Agrawal, “Generalized Bloch-Maxwell formulation for semiconductor lasers,” *Optics communications*, vol. 100, no. 1-4, pp. 147–152, 1993.
- [159] J. Yao, G. P. Agrawal, P. Gallion, and C. M. Bowden, “Semiconductor laser dynamics beyond the rate-equation approximation,” *Optics communications*, vol. 119, no. 1-2, pp. 246–255, 1995.
- [160] C. Jirauschek, M. Riesch, and P. Tzenov, “Optoelectronic device simulations based on macroscopic Maxwell–Bloch equations,” *Advanced Theory and Simulations*, vol. 2, no. 8, p. 1900018, 2019.
- [161] A. Demić *et al.*, “Liouvillian superoperator and Maxwell–Bloch dynamics under optical feedback via the self-mixing effect in terahertz quantum cascade lasers,” in *Photonics*, MDPI, vol. 12, 2025, p. 1134.

- [162] C. Silvestri, L. L. Columbo, M. Brambilla, and M. Gioannini, “Coherent multi-mode dynamics in a quantum cascade laser: Amplitude-and frequency-modulated optical frequency combs,” *Optics Express*, vol. 28, no. 16, pp. 23 846–23 861, 2020.
- [163] C.-Z. Ning, R. Indik, and J. Moloney, “Effective bloch equations for semiconductor lasers and amplifiers,” *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 33, no. 9, pp. 1543–1550, 2002.
- [164] L. L. Columbo, S. Barbieri, C. Sirtori, and M. Brambilla, “Dynamics of a broad-band quantum cascade laser: From chaos to coherent dynamics and mode-locking,” *Optics Express*, vol. 26, no. 3, pp. 2829–2847, 2018.
- [165] P. Bardella, L. L. Columbo, and M. Gioannini, “Self-generation of optical frequency comb in single section quantum dot Fabry-Perot lasers: A theoretical study,” *Optics express*, vol. 25, no. 21, pp. 26 234–26 252, 2017.
- [166] D. Burghoff, “Unraveling the origin of frequency modulated combs using active cavity mean-field theory,” *Optica*, vol. 7, no. 12, pp. 1781–1787, 2020.
- [167] L. Humbard and D. Burghoff, “Analytical theory of frequency-modulated combs: Generalized mean-field theory, complex cavities, and harmonic states,” *Optics Express*, vol. 30, no. 4, pp. 5376–5401, 2022.
- [168] N. Opačak and B. Schwarz, “Theory of frequency-modulated combs in lasers with spatial hole burning, dispersion, and kerr nonlinearity,” *Physical review letters*, vol. 123, no. 24, p. 243 902, 2019.
- [169] C. Silvestri, X. Qi, T. Taimre, K. Bertling, and A. D. Rakić, “Frequency combs in quantum cascade lasers: An overview of modeling and experiments,” *APL Photonics*, vol. 8, no. 2, 2023.
- [170] C. Silvestri, X. Qi, T. Taimre, and A. D. Rakić, “Frequency combs induced by optical feedback and harmonic order tunability in quantum cascade lasers,” *APL Photonics*, vol. 8, no. 11, 2023.
- [171] N. Vuković *et al.*, “THz quantum cascade laser modelling for biomedical applications: Maxwell-Bloch simulations and machine learning frameworks,” in *Biomedical Spectroscopy, Microscopy, and Imaging IV*, SPIE, vol. 14094, 2026, p. 239.
- [172] B. Huang, N. Kosan, and G. Wysocki, “Controlled generation of harmonic states in mid-infrared quantum cascade laser frequency combs by external cavity optical feedback,” *Optics Express*, vol. 32, no. 2, pp. 1966–1978, 2024.
- [173] B.-B. Zhao, X.-G. Wang, and C. Wang, “Strong optical feedback stabilized quantum cascade laser,” *ACS Photonics*, vol. 7, no. 5, pp. 1255–1261, 2020.
- [174] B. Huang, G. Gomólka, T. Mikkonen, and G. Wysocki, “Broadband photothermal spectroscopy with a mid-infrared quantum cascade laser frequency comb,” *Optics Express*, vol. 33, no. 2, pp. 2126–2136, 2025.
- [175] L. Jümpertz, *Nonlinear Photonics in Mid-Infrared Quantum Cascade Lasers*, 1st ed. Berlin/Heidelberg, Germany: Springer, 2017.
- [176] B.-B. Zhao, X.-G. Wang, and C. Wang, “Low-frequency oscillations in quantum cascade lasers with tilted optical feedback,” *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 28, no. 1: Semiconductor Lasers, pp. 1–7, 2021.
- [177] O. Spitz, L. Durupt, and F. Grillot, “Competition between entrainment phenomenon and chaos in a quantum-cascade laser under strong optical reinjection,” in *Photonics*, MDPI, vol. 9, 2022, p. 29.
- [178] S. Stenholm and W. E. Lamb Jr, “Semiclassical theory of a high-intensity laser,” *Physical Review*, vol. 181, no. 2, p. 618, 1969.

-
- [179] C. Silvestri, X. Qi, T. Taimre, and A. D. Rakić, “Multimode dynamics of terahertz quantum cascade lasers: Spontaneous and actively induced generation of dense and harmonic coherent regimes,” *Physical Review A*, vol. 106, no. 5, p. 053 526, 2022.
- [180] A. Damić, Z. Ikonić, R. W. Kelsall, and D. Indjin, “Density matrix superoperator for periodic quantum systems and its application to quantum cascade laser structures,” *AIP Advances*, vol. 9, no. 9, 2019.
- [181] A. R. Totović, “Моделовање полупроводничких оптичких појачавача за примене у оптичким приступним мрежама,” *Универзитет у Београду*, 2018.
- [182] Y. Leng Lim *et al.*, “Demonstration of a self-mixing displacement sensor based on terahertz quantum cascade lasers,” *Applied Physics Letters*, vol. 99, no. 8, p. 081 108, 2011.

Биографија

Новак Г. Станојевић рођен је 11. 7. 1999. године у Нишу. Завршио је основну школу „Свети Сава” у Нишу као вуковац и ђак генерације. Уписао је специјално одељење за физику у гимназији „Светозар Марковић“ у Нишу и завршио га као вуковац. Током школовања освојио је награде на бројним такмичењима из физике и астрофизике, у земљи и иностранству. Међу најпрестижнијим наградама које је освојио су: бронзана медаља на Међународној јуниорској научној олимпијади у Аргентини 2014. године, бронзана медаља на Међународној олимпијади из астрономије и астрофизике у Индији 2016. године, сребрна медаља на Међународној олимпијади из физике у Индонезији 2017. године, сребрна медаља на Румунском мастеру из физике у Румунији 2017. године и сребрна медаља на Међународној олимпијади из физике у Португалу 2018. године.

Након завршене средње школе своје образовање наставио је у Београду где је уписао основне академске студије на Електротехничком факултету и Физичком факултету. Завршио је основне академске студије 2018–2022. године на студијском програму Електротехника и рачунарство, модул Физичка електроника, смер Наноелектроника, оптоелектроника и ласерска техника на Електротехничком факултету Универзитета у Београду у року са просечном оценом 9,76. Одбранио је дипломски рад „Моделовање електронске структуре и оптичких особина $\text{BaSnO}_3/\text{BaO}$ квантних јама“ под менторством проф. др Николе Вуковића са оценом 10,00. Такође је завршио основне академске студије 2018–2022. године на смеру Теоријска и експериментална физика на Физичком факултету Универзитета у Београду, у року, са просечном оценом 9,85.

Уписао је мастер академске студије на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, модул Наноелектроника и фотоника, 2022. године и завршио их 2023. године са просечном оценом 10,00. Одбранио је мастер рад „Утицај зонске непараболичности, дифузије и позадинског допирања на транспортне карактеристике терахерцних квантних каскадних ласера“ под менторством др Николе Вуковића са оценом 10,00.

Уписао је докторске академске студије на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, модул Наноелектроника и фотоника, 2023. године и положио све испите са просечном оценом 10,00.

Аутор је и коаутор 6 радова објављених у научним часописима међународног значаја, као и 18 радова који су саопштени и публиковани на међународним научним скуповима.

Од марта 2023. године запослен је у Влатаком Институту високих технологија на позицији систем инжењер. У новембру 2023. године изабран је у звање истраживач приправник, а у јуну 2026. године изабран је у звање истраживач сарадник.

Изјава о ауторству

Име и презиме аутора: Новак Станојевић

Број индекса: 2023/5001

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

Моделовање електронске структуре, транспортно-оптичких карактеристика и нелинеарне динамике терахерцних квантних каскадних ласера

- резултат сопственог истраживачког рада;
- да дисертација у целини ни у деловима није била предложена за стицање друге дипломе према студијским програмима других високошколских установа;
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио/ла интелектуалну својину других лица.

Потпис аутора

У Београду, 09.06.2026. године

Новак Станојевић

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора: Новак Станојевић

Број индекса: 2023/5001

Студијски програм: Електротехника у рачунарство

Наслов рада: Моделовање електронске структуре, транспортно-оптичких карактеристика и нелинеарне динамике терахерцних квантних каскадних ласера

Ментор: др Никола Вуковић, ванредни професор

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла ради похрањивања у Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског назива доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

У Београду, 09.06.2026. године

Потпис аутора

Новак Станојевић

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју дисертацију под насловом:

Моделовање електронске структуре, транспортно-оптичких карактеристика и нелинеарне динамике терахерцних квантних каскадних ласера

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду и доступну у отвореном приступу могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство (CC BY)
2. Ауторство – некомерцијално (CC BY-NC)
3. Ауторство – некомерцијално – без прераде (CC BY-NC-ND)
- ☒ 4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима (CC BY-NC-SA)
5. Ауторство – без прераде (CC BY-ND)
6. Ауторство – делити под истим условима (CC BY-SA)

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци.
Кратак опис лиценци је саставни део ове изјаве.)

У Београду, 09.06.2026. године

Потпис аутора



1. **Ауторство.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.
2. **Ауторство – некомерцијално.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.
3. **Ауторство – некомерцијално – без прераде.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.
4. **Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.
5. **Ауторство – без прераде.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.
6. **Ауторство – делити под истим условима.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.