

UNIVERZITET U BEOGRADU
ELEKTROTEHNIČKI FAKULTET

Jasna V. Crnjanski

**SPEKTRALNE KARAKTERISTIKE KVANTNIH
CRTA U SREDNJOJ INFRACRVENOJ OBLASTI**

doktorska disertacija

Beograd, 2013.

UNIVERSITY OF BELGRADE
SCHOOL OF ELECTRICAL ENGINEERING

Jasna V. Crnjanski

**SPECTRAL PROPERTIES OF MID-INFRARED
QUANTUM DASHES**

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2013.

Mentor:

dr Dejan Gvozdić, redovni profesor

(Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu)

Članovi komisije:

dr Jovan Radunović, redovni profesor

(Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu)

dr Nebojša Romčević, naučni savetnik

(Institut za fiziku u Beogradu)

dr Milan Tadić, redovni profesor

(Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu)

dr Vitomir Milanović, redovni profesor u penziji

(Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu)

Datum odbrane:

SPEKTRALNE KARAKTERISTIKE KVANTNIH CRTA U SREDNJOJ INFRACRVENOJ OBLASTI

Rezime

U mnogim primenama fotonskih sistema od interesa su komponente koje funkcionišu u oblasti srednjeg i dalekog infracrvenog zračenja ($3 - 30 \mu\text{m}$). Neke od atraktivnih aplikacija vezane su za termalnu vizuelizaciju, spektroskopiju, astronomiju, gasne i bio-senzore, nedestruktivnu evaluaciju, industrijski i ekološki monitoring, medicinsku dijagnostiku, vojne primene, komunikaciju u slobodnom prostoru i slično. Ove primene su mahom omogućene postojanjem transparentnih atmosferskih prozora ($3-5 \mu\text{m}$ i $8-13 \mu\text{m}$) u srednjoj infracrvenoj oblasti, kao i činjenicom da veliki broj molekula u ovoj oblasti ima izražene karakteristične vibracione prelaze. Danas, kvantno-kaskadni laseri predstavljaju široko prihvaćeno rešenje za realizaciju koherentnih poluprovodničkih izvora zračenja za srednju infracrvenu i terahercnu spektralnu oblast. Međutim, još uvek postoji prostor za unapređenje njihovih performansi u pogledu struje praga i efikasnosti konverzije snage.

Nedavno sprovedena istraživanja potvrdila su da uređaji za srednju-infracrvenu oblast koji koriste poluprovodničke nanostrukture u kojima je kretanje elektrona ograničeno u više od jednog pravca, mogu prevazići neka od ograničenja koja se javljaju u kvantnim jamama, prvenstveno kratko vreme života eksitovanih stanja koje je posledica izraženog rasejanja naelektrisanja u ravni jame. Samo-organizovane nanostrukture, kao što su trodimenzionalno konfinirane kvantne tačke, ili njihova izdužena verzija sa izraženim dvodimenzionalnim konfiniranjem, nazvana kvantne crte, obezbeđuju dodatno konfiniranje koje omogućava smanjenje rasejanja i poboljšanje jačine optičkih prelaza. Iz tog razloga, istraživanje elektronske strukture ovih nanostrukture predstavlja osnovu za dalje razumevanje problematike i optimizaciju procesa rasejanja nosilaca, njihovog vremena života, jačine optičkih prelaza i tipa polarizacije.

Kvantne crte koje se fabrikuju mehanizmima samo-organizovanog narastanja, prvobitno su korišćene za realizaciju lasera i optičkih pojačavača za telekomunikacione talasne dužine u okolini $1.55 \mu\text{m}$. Aktivni materijal na bazi kvantnih crta omogućio je ostvarivanje novih osobina, koje uređaji sa konvencionalnim dizajnom nisu mogli da

ponude. Primera radi, realizovane su aktivne oblasti za širokopojasne lasere sa širinom spektra pojačanja od preko 300 nm za emisiju u opsegu od 1.4 do 1.65 μm . Međutim, i pored intenzivnih eksperimentalnih istraživanja usmerenih ka eksploataciji međuzonskih prelaza u kvantnim crtama, unutarzonski prelazi pogodni za emisiju u srednjoj i dalekoj infracrvenoj oblasti, do nedavno nisu privlačili značajnu pažnju.

Ova disertacija daje opštu sliku spektralnih osobina kvantnih crta u srednjoj infracrvenoj oblasti, sa posebnim fokusom na razmatranje kako na spektar utiču koncentracija elektrona, fluktuacije veličina kvantnih crta u ansamblu i debljina vlažećeg sloja. Pre nego što pristupi razmatranju detalja matematičkih formulacija koje leže u osnovi fizičkog modela unutarzonske apsorpcije, disertacija daje pregled osobina kvantnih crta kroz odgovore na neka jednostavna pitanja: šta je kvantna crta, kako se formiraju ansambli kvantnih crta, koje su njihove osnovne geometrijske i optičke karakteristike i konačno, kako se kvantne crte mogu koristiti u poluprovodničkim fotonskim komponentama.

Nakon ovih uvodnih poglavlja, izloženi su detalji teorijskog modela za izračunavanje zonske strukture i unutarzonske apsorpcije, kao i metoda korišćenih za numerička izračunavanja. Elektronska struktura izolovane kvantne crte se određuje rešavanjem jednozonske Schrödinger-ove jednačine u aproksimaciji anvelopne funkcije. Zonska struktura se određuje samosaglasno, u paraboličnoj aproksimaciji efektivne mase, a numerička implementacija je izvedena primenom metode konačnih elemenata. Pored toga, u disertaciji je predložen još jedan efikasan i jednostavan metod za određivanje elektronske strukture. Predloženi metod kombinuje koordinatnu transformaciju geometrije kvantne crte i barijernog materijala koji je okružuje u pravougaoni domen izračunavanja i rešavanje jednozonske Schrödinger-ove jednačine na pravougaonom domenu primenom metode konačnih razlika. Prilagodljivost ovog metoda potiče od velikog broja familija funkcija koje se mogu koristiti za fitovanje heterogranica kvantnih crta i definisanje domena izračunavanja pogodnog oblika i veličine. Za predložene koordinatne transformacije analizirana je primenljivost, robusnost i konvergencija metode promenom veličine diskretizacionog koraka i veličine domena izračunavanja. Metod obezbeđuje zadovoljavajuću preciznost, stabilnost i fleksibilnost u pogledu veličina i oblika kvantnih crta, a pre svega, obezbeđuje izuzetnu jednostavnost, što ga čini potencijalno pogodnim za rešavanje višezonskih Schrödinger-

ovih jednačina. Izborom odgovarajuće periodične funkcije koja fituje heterogranicu kvantne crte, ovaj metod se može koristiti i za određivanje zonske strukture periodičnog niza kvantnih crta i njene karakterizacije u zavisnosti od relevantnih geometrijskih parametara.

U nastavku, mini-zonska struktura InAs/GaAs niza kvantnih crta određena je u aproksimaciji koja ne uzima u obzir dopiranje barijere i uticaj konfiniranih elektrona na strukturu provodne zone. Izračunavanja su pokazala da je energija mini-zona jako zavisna od visine i širine kvantne crte, dok širina mini-zona zavisi od periode niza i širine kvantne crte. Za velike vrednosti perioda i određene kritične dimenzije kvantnih crta, između susednih pobuđenih mini-zona može doći do pojave nultog-energetskog-procepa i višestrukih anti-ukrštanja koja su praćena promenom karaktera talasnih funkcija vrha i dna susednih mini-zona. Kao posledica prisustva vlažećeg sloja, više mini-zone su grupisane u okolini vrha jame i formiraju neku vrstu “vezanog kontinuuma” koji može biti od značaja za kontrolu procesa zahvata i otpuštanja eksitovanih nosilaca. Međutim, u narednim razmatranjima, pretpostavlja se da se mini-zone, odgovorne za unutarzonske prelaze onda kada određivanje zonske strukture uzima u obzir uticaj jonizovanih donora i odgovarajućih elektrona, mogu aproksimirati diskretnim energetskim nivoima, te da svojim prisustvom ne utiču na perturbaciju izračunatog Hartree potencijala.

Polazeći od zonske strukture, usrednjeni apsorpcioni spektar ansambla kvantnih crta izračunava se u dipolnoj aproksimaciji za polarizaciju upadne svetlosti u pravcu izraženijeg i u pravcu slabijeg konfiniranja u kvantnoj crti, uz pretpostavku da se fluktuacije dimenzija kvantnih crta u ansamblu mogu modelovati dvodimenzionalnom Gauss-ovom raspodelom.

Izračunati apsorpcioni spektar je izražen za polarizaciju upadne svetlosti u pravcu slabijeg konfiniranja i u zavisnosti od materijalnog sistema i dimenzija kvantnih crta u ansamblu zauzima opseg talasnih dužina od 4 do 16 μm , što pripada srednjoj infracrvenoj oblasti. Sa povećanjem fluktuacija u dimenzijama, spektar ansambla postaje širi, zaravnjen i sve više asimetričan. Kada se uzme u obzir prisustvo vlažećeg sloja, koncentracija elektrona značajno utiče na apsorpciju, a spektar se može podešavati promenom debljine bafer slojeva. Povećanje debljine vlažećeg sloja dovodi do smanjenja apsorpcije i crvenog pomaka spektra, što je posebno izraženo za ansamble

sa manjim fluktuacijama dimenzija. Konačno, pažljivim podešavanjem debljine bafer slojeva može se postići optimizacija spektra u smislu ostvarivanja maksimalne apsorpcije.

U zavisnosti od materijalnog sistema, nominalne debljine InAs sloja i parametara narastanja, samo-organizovane kvantne crte mogu imati različite profile poprečnog preseka. U cilju ravnopravnog poređenja uticaja profila poprečnog preseka na apsorpcioni spektar, definisani su kriterijumi ekvivalencije uobičajenih geometrijskih oblika koji se koriste za aproksimaciju poprečnog preseka kvantnih crta (sočivasti, trapezni, trougaoni i pravougaoni oblik). Bez obzira na fluktuaciju u dimenzijama, spektri ansambla sa sočivastim i ekvivalentnim trapeznim poprečnim presekom su slični. Primena pravougaone aproksimacije sočivastog oblika je opravdana samo za relativno male fluktuacije u dimenzijama. Apsorpcioni spektri za ansamble sa ekvivalentnim trougaonim profilom su značajno crveno pomereni i sa nešto većom maksimalnom apsorpcijom nego za ansamble sa sočivastim profilom kvantnih crta.

Konačno, može se zaključiti da uticaji debljine vlažećeg sloja, distribucije po veličinama i koncentracije elektrona u jami određene debljinom bafer sloja na spektar unutarzonske apsorpcije, pokazuju zanimljive trendove koje nije moguće intuitivno pretpostaviti. Iz tog razloga, rezultati prezentovani u okviru ove disertacije mogu biti od koristi u eksperimentalnim istraživanjima, za optimizaciju spektralnih karakteristika kvantnih crta sa primenom u novim poluprovodničkim uređajima za srednju infracrvenu spektralnu oblast.

Ključne reči: kvantne crte, srednja infracrvena spektralna oblast, samosaglasna elektronska struktura, unutarzonska apsorpcija, fluktuacija dimenzija, vlažeći sloj, dizajn i optimizacija apsorpcionog spektra.

Naučna oblast: nanoelektronika, fotonika, kvantna elektronika

Uža naučna oblast: optoelektronika i optoelektronske komunikacije

UDK broj: 621.3

SPECTRAL PROPERTIES OF MID-INFRARED QUANTUM DASHES

Abstract

Mid- and far-infrared regions (3 – 30 μm) are very attractive for many photonics applications such as thermal imaging, spectroscopy, astronomy, gas and biosensing, nondestructive evaluation, industrial and ecology monitoring, medical diagnostics, military applications, free-space communications, and etc. This is mainly due to the high transparency atmospheric windows (3–5 μm and 8–13 μm) in which the Earth's atmosphere is relatively transparent, and the fact that a large number of molecules undergo strong characteristic vibrational transitions in this spectral range. Now-a-days quantum cascade lasers are well-established coherent sources of radiation in the mid-infrared and terahertz regions. Even though in the mid-IR these devices work extremely well, they could still benefit from improved threshold currents and higher wall plug efficiencies.

Recent studies have shown that mid-infrared photonic devices incorporating semiconductor nanostructures in which the electronic motion is confined in more than one spatial direction, may overcome some of the limitations of quantum well based devices, especially short excited-state carrier lifetime, caused by numerous in-plane scattering paths. Self assembled nanostructures, as three-dimensionally confined quantum dots or their elongated version with two dimensional confinement, called quantum dashes (QDHs), may provide the additional confinement required for reduction of scattering events or improvement of optical transitions strength and polarization. Therefore, investigation of their electronic structure is a basis for further understanding and optimization with respect to carrier scattering processes and its lifetime, optical transitions strength and polarization type.

Quantum-dash structures, fabricated by self assembly growth techniques, were initially used to realize long wavelength lasers and amplifiers for telecom applications. This new type of laser material allows to achieve new device features not possible by conventional device designs. For example, broadband laser material with a gain bandwidth of more than 300 nm could be obtained to cover the extended telecommunication wavelength range between 1.4 and 1.65 μm . In spite of intensive experimental investigation directed toward employing interband transitions in quantum

dashes, intersubband transitions suitable for mid- and far-infrared emission, until recently, did not attract attention at all.

This thesis delivers an overall picture of the mid-infrared spectral properties of quantum dash nanostructures, while focusing in particular on its dependence on electron concentration, the size fluctuation of QDHs in ensemble, and thicknesses of the wetting layer. Before going into all the details of the mathematical equations underlying the physical model of intersubband absorption in quantum dashes, the thesis set the stage by providing an overview of some general answers on questions regarding the quantum dashes: What is a quantum dash, how quantum dashes form an ensemble, what are their basic geometrical and optical properties, and finally, how we can use them in semiconductor photonic components.

After these introductory chapters, details of theoretical model of band structure and intersubband absorption, as well as method for their numerical calculations, are presented. The electronic band structure of a single QDHs is modeled by using the single-band Schrödinger equation in the envelope function approximation. The band structure calculation is performed self-consistently in the parabolic approximation by using the finite elements method.

Additionally, a newly developed, efficient and simple method for the band structure and wavefunction calculation of quantum dashes is presented. The method is a combination of the coordinate transformation of the QDH geometry and its vicinity into rectangular computational domain and the single-band Schrödinger equation solved in this domain by the finite differences method. The method versatility comes from a broad set of function families which can fit the QDH heterointerface and generate the computational domain of the proper form and size. For the proposed coordinate transformations, applicability, robustness and convergence of the method are investigated and analyzed by varying the FDM grid density and size of the computational domain. The method provides sufficient accuracy, stability and flexibility with respect to the size and shape of the quantum dash and above all, extreme simplicity, which is promising and essential for an extension of the method to the multiband Schrödinger equation case. By choosing appropriate periodic functions this method can be used to investigate the band structure of a quantum dash array and its dependence on geometrical parameters.

The miniband structure of the InAs/GaAs quantum dash array is calculated without taking into account the influence of the barrier doping and confined electrons on the conduction subband structure. The calculation shows that miniband energy significantly depends on the dash height and width, while the miniband width depends on the array period and the dash width. For large periods and some critical dimensions of QDHs, adjacent excited minibands may exhibit the effect of zero miniband gap and the multiple anticrossings, which are followed by the swapping of the wavefunction character of adjacent minibands top and bottom. Due to the wetting layer, higher minibands are clustered in the vicinity of the well top, providing a kind of the “bound continuum,” which might be relevant for control of capture and relaxation of excited carriers. However, it is assumed that lower minibands, responsible for intersubband transitions when ionized donors and corresponding electrons are taken into account, can be approximated by single energy levels, while the calculated Hartree potential remains unperturbed by their presence.

Starting from the band structure, averaged intersubband absorption of a QDH ensemble is calculated in the dipole approximation, for incident light polarization in directions of stronger and weaker confinement in the QDHs, assuming that stochastic size distribution of QDHs in the ensemble can be modeled by two-dimensional Gaussian distribution.

The absorption spectrum is pronounced for incident light polarization in the direction of weak confinement in QDHs and, depending on the material system and average dimensions of the QDHs in ensemble, dominantly occupies the mid-infrared wavelength range from 4 to 16 μm . It is observed that, with an increase in the QDH size fluctuations, the absorption spectra become broader, more asymmetric and flattened. As far as the wetting layer is taken into account, the electron concentration significantly affects the absorption, while the spectrum can be tailored by adjusting the spacer layers. The increase in the wetting layer thickness considerably reduces the absorption and leads to the redshift in the spectra, especially for smaller QDH size fluctuations. Finally, careful design of the spacer layers thickness can be used for optimization of the absorption spectrum regarding its maximization.

Depending on the material system, the nominal thickness of the InAs layer and growth parameters, the self-assembled QDHs may have various cross-section profiles.

In order to make a fair comparison and investigate the influence of QDH cross-section profile on the absorption spectrum, the criteria of equivalence for commonly used shape approximations (lens-like, trapezoidal, triangular and rectangular) are defined. It is observed that, regardless of the size fluctuation, absorption spectra for lens-like and equivalent trapezoidal cross-section profiles are similar. Using a rectangular approximation of the lens-like profile is justified for small-size fluctuations. The absorption spectra for ensembles with equivalent triangular QDHs exhibit significant red-shift and somewhat larger peak absorption in comparison to the ensembles with lens-like QDHs.

In conclusion, the influences of the wetting layer thickness, the size distribution, and the remote doping by the spacer layer thickness on the mid-infrared absorption spectra, show interesting trends which are not fully intuitive. Therefore, the results presented in this thesis could help experimentalists to optimize specific intersubband transition properties in quantum dash nanostructures for future mid-infrared applications.

Key-words: quantum dashes, mid-infrared spectral region, self-consistent electronic band structure, intersubband absorption, size fluctuations, wetting layer, design and optimization of absorption spectra

Scientific field: nanoelectronics, photonics, quantum electronics

Special topic: optoelectronics and photonic communications

UDK number: 621.3

Sadržaj

Uvod	1
1. Samo-organizujuće kvantne crte	9
1.1 Kako su otkrivene kvantne crte?	10
1.2 Kako se formiraju kvantne crte?	13
1.3 Geometrijska karakterizacija ansambla kvantnih crta	25
1.4 Optička karakterizacija kvantnih crta	31
1.5 Pregled modela za određivanje elektronskih i optičkih karakteristika	43
2. Kvantne crte u fotonskim komponentama	47
2.1 Kvantne crte kao aktivna oblast u međuzonskim laserima	48
2.2 Kvantne crte u poluprovodničkim optičkim pojačavačima	58
2.3 Kvantno-kaskadni laseri na bazi kvantnih crta	64
3. Modelovanje zonske strukture i unutarzonske apsorpcije u kvantnim crtama	71
3.1 Elektronska struktura	72
3.1.1 Metoda efektivne mase	72
3.1.2 Samosaglasno određivanje elektronske strukture	78
3.1.3 Uticaj kvantno-mehaničke sprege na elektronsku strukturu	88
3.2 Unutarzonska apsorpcija	90
3.2.1 Unutarzonska apsorpcija u ansamblu kvantnih crta	95
4. Numerička implementacija modela	97
4.1 Osnovni algoritamski blokovi	98
4.2 Numerička implementacija metode efektivne mase	102
4.2.1 Opis metode KT-FDM	104
4.2.2 Koordinatne transformacije	108
4.2.3 Karakterizacija KT-FDM metode	112
4.2.4 Primena metode KT-FDM na periodične nizove kvantnih crta	118
4.2.5 Primena metode konačnih elemenata	122

4.3	Numerička implementacija samosaglasnog postupka	127
4.4	Određivanje spektra unutarzonske apsorpcije za ansambl kvantnih crta	130
5.	Rezultati i diskusija	132
5.1	Elektronska struktura izolovane kvantne crte	133
5.2	Elektronska struktura periodičnog niza kvantnih crta	138
5.3	Apsorpcija ansambla kvantnih crta bez vlažećeg sloja	152
5.4	Apsorpcija ansambla kvantnih crta sa vlažećim slojem	157
5.5	Uticaj profila kvantnih crta na spektar unutarzonske apsorpcije	161
5.6	Uticaj debljine bafer sloja na spektar unutarzonske apsorpcije	167
	Zaključak	174
	Literatura	178
	Biografija autora	190

UVOD

Ljudska vrsta je razvila i poseduje čulo ukusa i mirisa kao veoma osetljive sisteme za blisku i neposrednu detekciju različitih hemijskih supstanci u prirodnom okruženju. Sa druge strane, potreba da se uoče i prepoznaju udaljeni objekti uslovljava da čulo vida bude osetljivo u onom spektralnom opsegu za koji je uticaj hemikalija u datoj sredini minimalan. Međutim, kada bi ljudsko oko bilo osetljivo na elektromagnetsko zračenje iz srednjeg infracrvenog opsega talasnih dužina, svet bi izgledao značajno drugačije: bilo bi moguće videti kako biljke dišu, osmatranjem sa distance moglo bi se detektovati da li neko industrijsko postrojenje koristi sistem za prečišćavanje otpadnih gasova ili da li, i u kojoj meri, gas curi iz gasovoda, čak i kada su cevi postavljene nekoliko metara ispod zemlje. Ova interesantna osobina srednje infracrvene spektralne oblasti posledica je činjenice da mali molekuli (kao što su SO_x , N_xO_y , CO , CO_2 , CH_4 , NH_4 , formaldehid, rastvarači i slično) apsorbuju svetlost iz opsega koji obuhvata talasne dužine između 2 i 30 μm , nekoliko stotina ili hiljada puta intenzivnije, nego u bliskoj infracrvenoj ili vidljivoj oblasti [1]. Time je omogućena ne samo identifikacija i kvantifikacija molekularnih vrsta, već i čitav niz primena vezanih za termalnu vizuelizaciju [2], spektroskopiju hemijskih veza [3], astronomiju [4], gasne [5] i bio-senzore, medicinsku dijagnostiku [6], nedestruktivnu evaluaciju, industrijski i ekološki monitoring [7], kao i različite vojne primene.

Realizacija fotonskih komponenata za srednju i daleku infracrvenu oblast u prošlosti se suočavala sa velikim brojem problema. Iako koherentni poluprovodnički izvori i detektori za ovu spektralnu oblast postoje već neko vreme, oni su mahom masivni i skupi [8] ili zbog nekih fundamentalnih ograničenja, kao što su Auger-ova neradijativna rekombinacija i velika brzina termalne generacije [9], zahtevaju rad na niskim temperaturama [10], [11]. Za veliki broj primena, upotreba kriogenih hladnjaka nije poželjna, zbog relativno kratkog radnog veka i dodatne potrošnje energije, težine, gabarita i naravno cene.

Međutim, tokom poslednje decenije povećano je interesovanje za srednju infracrvenu spektralnu oblast, mahom zbog potencijalnih vojnih primena koje uključuju raketne protivmere (praćenje i prepoznavanje projektila) [12], detekciju eksplozivnih pretnji [13], a zahvaljujući atmosferskim prozorima na 3-5 μm i 8-13 μm i primena kao što su daljinska detekcija i komunikacije u slobodnom prostoru [14]. Veća ulaganja u istraživanja su neminovno dovela do napretka, između ostalog i u domenu integrisane silicijumske fotonike [15]-[17]. Iako standardna SOI (silicijum-na-izolatoru) platforma nije pogodna za veće talasne dužine, izvestan napredak u fabrikaciji talasovoda za srednju infracrvenu oblast postignut je primenom talasovoda sa šupljim jezgrom i talasovoda sa vazdušnom oblogom [18], [19].

Sa druge strane, realizacija svetlosnih izvora sa performansama uporedivim sa već postojećim izvorima za blisku infracrvenu oblast, pokazala se kao veliki izazov [20]. Nedostaci tradicionalno korišćenih izvora za srednju infracrvenu oblast ogledaju se u slabom izlazu sa niskom spektralnom gustinom (infracrveni Fourier-ovi spektrometri (FTIR)) ili u velikoj potrošnji snage i neophodnom hlađenju (CO_2 laseri i laseri na bazi olovnih soli), kao i relativno velikim gabaritima uređaja [1]. Međutim, tokom godina, najviše zahvaljujući dokazanim prednostima koje obezbeđuje poluprovodnička tehnologija, kao jedno od perspektivnijih rešenja nametnuli su se kvantno-kaskadni laseri. Prva kontinualna emisija ovih lasera na sobnoj temperaturi ostvarena je 2002. godine [21], [22]. Intenzivna istraživanja dovela su do toga da su danas komercijalno dostupni jeftini, kompaktni i pouzdani kvantno-kaskadni laseri sa talasnim dužinama emisije do 11 μm i snagom od 100 mW do preko 1 W, koji većinom rade na sobnim temperaturama [1], [23]-[25]. Napredak je postignut i sa stanovišta konverzije efikasnosti snage, koja se, u zavisnosti od moda rada i temperaturskih performansi, kreće u opsegu od 20–50% mahom za veće emisije talasne dužine [26].

Dalje povećanje talasnih dužina emisije, ka veoma atraktivnoj terahercnoj spektralnoj oblasti (od 30 do 300 μm), interesantno je za primene u bezbednosnim sistemima za detekciju eksploziva ili odećom sakrivenih metalnih predmeta, kao i za nedestruktivnu evaluaciju malignih oboljenja kože. Međutim, razvoj ovih aplikacija je relativno spor, najviše zbog nedostatka kompaktnog i snažnog poluprovodničkog izvora koherentnog zračenja koji bi mogao da radi na sobnim temperaturama. Proboj u rešavanju ovog problema ostvaren je takođe 2002. godine, kada je predložen prvi

poluprovodnički terahercni kvantno-kaskadni laser [27]. Međutim, za razliku od kvantno-kaskadnih lasera za srednju infracrvenu oblast, još uvek nije izvesno da li će terahercni kvantno-kaskadni laseri uspeti da postignu rad na temperaturama značajno iznad trenutnih 164 K [28]. Neka od alternativnih rešenja, umesto dalje optimizacije dizajna kvantno-kaskadnih lasera, predlažu generaciju terahercnog zračenja kroz frekvencijsku konverziju srednje-infracrvne ili čak vidljive svetlosti u nelinearnim optičkim kristalima [29] ili GaAs fotoprovodnim antenama [30] kroz fenomen frekvencijskog izbijanja. Predložena rešenja u pogledu izlazne snage i radne temperature još uvek imaju uporedive performanse u odnosu na kvantno-kaskadne lasere, ali postoji čitav niz ideja kako bi se ove realizacije mogle usavršiti.

U potrazi za infracrvenim detektorima koji bi smanjili cenu infracrvenih kamera eliminacijom tradicionalnih sistema hlađenja na bazi tečnog azota, fotodetektor na bazi kvantnih tačaka predstavili su se kao tehnologija koja potencijalno može obezbediti detekciju svetlosti u širokom opsegu infracrvenih talasnih dužina [31], [32]. U poređenju sa konvencionalnim detektorima na bazi kvantnih jama, aktivne oblasti sa kvantnim tačkama, zahvaljujući trodimenzionalnom konfiniranju, ostvaruju niz prednosti koje uključuju: mogućnost detekcije normalno incidentne svetlosti, veće vreme života fotoeksitovanih elektrona usled smanjenog elektron-fonon rasejanja i manje struje mraka koje potencijalno mogu obezbediti rad na višim (>120 K) [33], pa čak i na sobnim temperaturama [34].

Dostignuća u realizaciji široke lepeze fotonskih komponenata koje koriste unutarzonske prelaze u kvantnim jamama su svakako impresivna, iako su realizovane naprave i dalje suočene sa određenim problemima i ograničenjima, što otvara put za dalja istraživanja i potragu za napravama baziranim na novim konceptima ili sa usavršenim performansama. Uprkos intenzivnim istraživanjima poluprovodničkih fotonskih komponenata u srednjoj i dalekoj infracrvenoj oblasti, do skoro nije bilo izvesno da li će komponente u kojima je elektronsko kretanje konfinirano u više od jedne dimenzije, biti u stanju da prevaziđu ograničenja uređaja baziranih na kvantnim jamama. Dugogodišnje analize su pokazale da je jedan od parametara koji ograničava efikasnost rada poluprovodničkih optoelektronskih naprava vreme relaksacije nosilaca [35]. Međutim, prema poslednjim istraživanjima, podešavanjem razlike energetske nivoa u kvantnim tačkama mogu se ostvariti vremena života eksitovanih stanja koja su

uporediva ili čak duža nego ona u kvantnim jamama [36]. U tom svetlu, kvantne tačke nove generacije imaju potencijal da zamene kvantne jame kao aktivnu oblast u kvantno-kaskadnim laserima za srednju infracrvenu i terahercnu oblast talasnih dužina i na taj način naprave značajan tehnološki proboj u oblasti terahercne fotonike [31], [37], [38].

Pored kvantnih tačaka, postoji još jedan tip samo-organizujućih nanostrukture, koje nalaze primenu u proširenom telekomunikacionom opsegu talasnih dužina. Strukture oblika izduženih nano-ostrva, koje karakteriše dvodimenzionalno konfiniranje nosilaca, slično kao kod kvantnih žica, nazivaju se kvantne crte [39], [40]. Kao posledica samo-organizujućeg procesa fabrikacije, kod kvantnih crta prisutna je značajna fluktuacija u pogledu dimenzija, što dovodi do širenja oštarih pikova gustine stanja karakterističnih za strukture slične kvantnim žicama, kao i do širenja spektra u pojačanju, onda kada se kvantne crte koriste kao aktivni medijumi lasera [41]. Iako se njihove elektronske i optičke karakteristike i dalje intenzivno eksperimentalno proučavaju, osobine kvantnih crta koje se odnose na međuzonske prelaze su relativno slabo razmotrene. Sa druge strane, za razliku od kvantnih tačaka [31], [37], [42] unutarzonski prelazi u kvantnim crtama, koliko je poznato, do sada nisu razmatrani. Zbog dvodimenzionalnog konfiniranja nosilaca koje dovodi do zavisnosti energije od kontinualnog talasnog vektora u pravcu u kome ne postoji konfiniranje, priroda unutarzonskih prelaza u kvantnim crtama je drugačija nego kod kvantnih tačaka. Iz istog razloga, sposobnost skladištenja nosilaca u kvantnim crtama je veća nego kod kvantnih tačaka [40]. Zbog toga je dinamika nosilaca u ovim strukturama potencijalno drugačija.

Budući da kvantne crte imaju drugačije elektronske i optičke osobine nego kvantne tačke i da te osobine mogu biti od koristi pri projektovanju kvantnih generatora svetlosti i detektora u oblasti srednjeg infracrvenog i terahercnog dela spektra, od interesa je napraviti detaljnu studiju njihovih unutarzonskih prelaza i spektralnih karakteristika koje proističu iz ovih prelaza. Takođe, potrebno je razmotriti geometrijske i tehnološke uticaje, kao i uticaj fluktuacije dimenzija u ansamblu kvantnih crta na spektralne karakteristike. Ovakva studija zahteva formiranje efikasnog metoda za određivanje zonske strukture i unutarzonske apsorpcije, koji tom prilikom uzima u obzir prisustvo naelektrisanja neophodnog za odvijanje procesa apsorpcije. Dodatni problem

u određivanju zonske strukture predstavlja asimetrija profila kvantnih crta, što zahteva primenu i eventualno razvoj sofisticiranih numeričkih metoda.

Cilj rada ove disertacije je teorijsko istraživanje unutarzonskog spektra kvantnih crta, radi njihove primene u srednjem infracrvenom području. Istraživanje obuhvata ispitivanje elektronske zonske strukture koja je odgovorna za dominantne optičke prelaze u kvantnim crtama, kao i istraživanje efikasnih metoda za proračun elektronske strukture, što predstavlja numerički najzahtevniji segment proračuna. Apsorpcioni spektar ansambla kvantnih crta je ispitivan u zavisnosti od geometrijskih i tehnoloških parametara, kao što su debljina vlažećeg sloja, oblik poprečnog preseka, debljina sloja koji odvađa optički aktivnu oblast od dopiranih slojeva i konačno veličina fluktuacija dimenzija kvantnih crta u ansamblu. Disertacija sistematski analizira unutarzonske prelaze u kvantnim crtama i uticaj relevantnih parametara na spektralne karakteristike polazeći od sledećih hipoteza:

- Osnovna hipoteza ove disertacije je da unutarzonski prelazi, pre svega u provodnoj zoni, mogu obezbediti intenzivnu interakciju kvantnih crta sa elektromagnetskim poljem u srednjem i delom u dalekom infracrvenom području. Ova hipoteza se zasniva na činjenici da su dimenzije kvantnih crta, kao i materijalni parametri poluprovodnika od kojih su kvantne crte sačinjene, slični onima koji se javljaju kod kvantnih žica i tačaka, a kod kojih unutarzonski optički prelazi odgovaraju srednjem i dalekom infracrvenom, ili čak terahercnom području talasnih dužina.
- Druga hipoteza odnosi se na uticaj statističke raspodele dimenzija kvantnih crta na profil unutarzonskog apsorpcionog spektra. U dosadašnjoj literaturi uticaj statističke distribucije dimenzija kvantno-konfiniranih nanostrukture na apsorpcioni spektar najčešće je tretiran tako što je apsorpcioni spektar najviše zastupljene dimenzije nanostrukture ponderisan empirijskom funkcijom raspodele po energijama koja odgovara raspodeli po dimenzijama. Tako na primer, Gausovoj raspodeli po dimenzijama odgovarao bi apsorpcioni spektar sa gausovskim profilom. Ova disertacija polazi od hipoteze da gausovsku raspodelu po dimenzijama, ne mora obavezno da prati gausovski profil apsorpcionog spektra.

- Treća hipoteza odnosi se na uticaj vlažećeg sloja kvantnih crta na unutarzonski apsorpcioni spektar. U literaturi se uticaj ovog sloja kod kvantnih tačaka i kvantnih crta vrlo često zanemaruje. Međutim, kako vlažeći sloj generalno smanjuje stepen konfiniranja u kvantnim crtama, on može svojim prisustvom uticati na zonsku strukturu kvantnih crta i time na njihovu unutarzonsku apsorpciju. Iz tog razloga će razmatranje sprovedeno u disertaciji uzeti u obzir uticaj vlažećeg sloja, za koji se očekuje da može dovesti do smanjenja apsorpcije i eventualno pojave crvenog pomeraja u spektru apsorpcije.
- Četvrta hipoteza odnosi se na uticaj Hartree potencijala na zonsku strukturu i apsorpcioni spektar. Naime, prisustvo slobodnog naelektrisanja može da utiče na krivljenje zone i konfiniranje nosilaca, zbog čega se pretpostavlja da je u proračunu apsorpcije od interesa uzeti u obzir uticaj slobodnih nosilaca na konfinirajući potencijal. Kako je ovde reč o naelektrisanjima istog tipa (elektronima), onda se pretpostavlja da će njihova međusobna repulzija uticati na smanjenje stepena konfiniranja, zatim broja vezanih stanja i konačno same apsorpcije.
- Peta hipoteza odnosi se na uticaj položaja kvantnih crta u odnosu na dopirane delove strukture koji obezbeđuju naelektrisanje neophodno za apsorpciju. Pretpostavka od koje se polazi je da se optimizacijom rastojanja između dopiranih slojeva i sloja sa kvantnim crtama može postići maksimum apsorpcije.
- Konačno, šesta hipoteza razmatra uticaj dvodimenzionalnog konfiniranja na polarizacionu zavisnost apsorpcionog spektra. U osnovi ove hipoteze leži činjenica da dvodimenzionalno konfiniranje može da obezbedi različite apsorpcione spektre za različite polarizacije incidentnog električnog vektora elektromagnetskog polja. Pretpostavka od koje se polazi je da će intenzitet apsorpcije u pravcu intenzivnijeg konfiniranja elektrona dati slabije vrednosti za apsorpciju, budući da u zonskoj strukturi preovlađuju energetske nivoi koje dominantno određuje pravac slabijeg konfiniranja.

Realizacija ove disertacije bazira se na primeni metoda koje su proistekle iz kvantno-mehaničkog razmatranja elektronskih i optičkih karakteristika poluprovodničkih nanostrukture. Dominantu ulogu i najveće zahteve po pitanju računarskih resursa imaju metode koje se tiču određivanja elektronske zonske strukture.

Fundamentalna metoda u proračunu zonske strukture je metoda anvelopnih funkcija. U cilju određivanja elektronske strukture, Schrödinger-ova jednačina po sporo-promenljivom anvelopnom delu ukupne talasne funkcije se rešava za zadati dvodimenzionalni (2D) profil potencijala, koji je određen geometrijom poprečnog preseka kvantnih crta, diskontinuitetom provodnih zona i elektrostatičkim potencijalom koji potiče od slobodnih naelektrisanja neophodnih za odvijanje procesa apsorpcije. Za numeričku implementaciju ovog problema koristi se metoda konačnih elemenata. Međutim, pored metode konačnih elementa, biće razmotrene i neke druge tehnike rešavanja Schrödinger-ove jednačine koje mogu da obezbede precizne i efikasne pristupe rešavanju, a koje pri tome ne zahtevaju primenu komplikovanih algoritama za diskretizaciju domena. Kako su od interesa tehnike koje mogu pravilno da opišu neregularni profil heterogranica kvantnih crta, predložene metode se zasnivaju na kombinaciji transformacije koordinata i metodi konačnih razlika.

U cilju određivanja realne zonske strukture kvantnih crta, Schrödinger-ova jednačina bi dodatno trebalo da uzme u obzir uticaj Hartree potencijala, koji potiče od prisutnih naelektrisanja, a koja inače učestvuju u optičkim prelazima. Metoda koja se tom prilikom koristi naziva se samosaglasni postupak i podrazumeva simultano i iterativno rešavanje Schrödinger-ove jednačine i 2D nelinearne Poisson-ove jednačine.

Zonska struktura proistekla iz prethodno opisanih postupaka i metoda, osnova je za proračun optičkih osobina ansambla kvantnih crta. U osnovi proračuna apsorpcije leži Fermijevo „zlatno pravilo” primenjeno u dipolnoj aproksimaciji. Prilikom proračuna apsorpcije potrebno je za svaku od dimenzija kvantnih crta, polazeći od zonske strukture, izvršiti proračun matričnih elementa prelaza za svaki od dva pravca polarizacije, a zatim na osnovu naseljenosti pojedinih diskretnih nivoa dobijenih kroz samosaglasni postupak, odrediti spektar apsorpcije. Isti proračun je neophodno ponoviti za kompletan ansambl dimenzija, tj. za skup kvantnih crta različitih dimenzija i na osnovu spektra svake od crta i verovatnoće zastupljenosti svake od dimenzija iz skupa, dobiti usrednjeni apsorpcioni spektar.

Doktorska disertacija je izložena kroz sedam poglavlja. Nakon uvodnog poglavlja, prvo poglavlje odgovara na pitanja šta su kvantne crte i kako se formiraju, a zatim kroz pregled relevantne literature opisuje najvažnije geometrijske i optičke osobine ovih samo-organizujućih nanostrukture. Drugo poglavlje pravi presek kroz najčešće primene

kvantnih crta u fotonskim komponentama. U okviru trećeg poglavlja predstavljena je teorijska osnova na kojoj se zasniva model elektronske zonske strukture i unutarzonske apsorpcije ansambla kvantnih crta, dok se četvrto poglavlje fokusira na numeričku implementaciju predloženog modela. U ovom poglavlju su dati detalji implementacije metoda korišćenih za određivanje elektronske zonske strukture kvantnih crta asimetričnog poprečnog preseka, baziranih na konačnim elementima i na kombinaciji transformacija koordinata i konačnih razlika, kao i poređenje predloženih metoda u pogledu konvergencije i efikasnosti metode. U petom poglavlju predstavljeni su rezultati simulacija i izvršena je njihova analiza sa stanovišta uticaja debljine vlažećeg sloja, debljine sloja koji definiše koncentraciju nosilaca u kvantnim crtama i fluktuacije dimenzija struktura u ansamblu. Konačno, u zaključku je dat kratak pregled disertacije sa posebnim naglaskom na održivost polaznih hipoteza i osnovne doprinose rada.

Poglavlje 1.

SAMO-ORGANIZUJUĆE KVANTNE CRTE

Tehnike fabrikacije nanostruktura sa izraženim kvantnim-konfiniranjem, kao i njihova primena u optoelektronskim uređajima, već skoro pola veka predmet su intenzivnih istraživanja. Na osnovu rezultata tih istraživanja, izvesno je da su poboljšane performanse uređaja na bazi kvantnih jama posledica povećanja gustine stanja naelektrisanja u odnosu na masivne poluprovodnike. Shodno tome, a imajući u vidu da smanjenje stepeni slobode kretanja naelektrisanja dovodi do porasta gustine stanja u okolini ekstremuma podzona, tokom vremena fokus istraživanja usmeren je ka kvantnim žicama i naročito kvantnim tačkama. Iako je ova ideja originalno uvedena još sedamdesetih godina prošlog veka, uređaji na bazi kvantnih žica i tačaka imali su manjak praktične realizacije u odnosu na kvantne jame. Teorijska razmatranja davala su optimistične rezultate: predviđano je da primena kvantnih žica i tačaka u okviru aktivnih oblasti laserskih dioda omogući mnogo veće optičko pojačanje, uže spektralne linije, povećano diferencijalno pojačanje, veći propusni opseg modulacije [43], [44], smanjenje struje praga kao i smanjenje njene temperaturske osetljivosti [45]. Međutim, većina do sada dokumentovanih eksperimentalnih ispitivanja performansi lasera na bazi kvantnih žica i samo-organizovanih kvantnih tačaka na sobnim temperaturama, pokazuje relativno skromne propusne opsege u poređenju sa kvalitetnim laserima na bazi kvantnih jama [46], a vrednosti diferencijalnog pojačanja nisu ni blizu onoliko velike kolika su predviđanja. Kroz nastojanja da se eksperimentom potvrde teorijska očekivanja i da se pomere limiti performansi postojećih uređaja, neprekidno su usavršavani tehnološki procesi što je, igrom slučaja, dovelo do otkrića jedne nove klase samo-organizovanih struktura, nazvane kvantne crte. Kvantne crte kombinuju neke od osobina kvantnih žica i tačaka, te potencijalno omogućavaju dalje poboljšanje performansi ili čak realizaciju optoelektronskih uređaja sa novim funkcionalnostima. Iako relativno

skoro otkrivene, kvantne crte našle su primenu u širokopojasnim poluprovodničkim laserima i optičkim pojačavačima za telekomunikacione primene [39]. Pored toga, nedavno je demonstrirana međuzonska emisija svetlosti u srednjem infracrvenom području [47], i po prvi put eksperimentalno istraživana mogućnost primene ovih struktura u kvantno-kaskadnim laserima [48]. Međutim, dosadašnja istraživanja su dominantno usmerena ka eksploataciji međuzonskih optičkih prelaza, što ostavlja dosta prostora za proučavanje i potencijalnu primenu ovih struktura u optoelektronskim uređajima čiji se rad bazira na unutarzonskim prelazima, a koji pokrivaju srednji i daleki infracrveni spektralni opseg.

1.1 Kako su otkrivene kvantne crte?

Tokom protekle decenije mehanizmi samo-organizujućeg narastanja nanostruktura bili su predmet opsežnih istraživanja sa ciljem ostvarivanja kvalitetnih naprava sa novim funkcionalnostima. Svakako najpoznatiji predstavnik samo-organizujućih struktura su kvantne tačke (*Quantum Dot*, QDot) koje su intenzivno proučavane za primene u fotonici, biomedicini i optičkim komunikacijama. Kvantne tačke unutar aktivnih oblasti lasera i optičkih pojačavača obezbeđuju nižu struju praga, čirp i mali alfa faktor (*linewidth enhancement factor*, ili Henry faktor) [49], [50]. Prvobitno realizovani laseri sa InAs kvantnim tačkama na GaAs supstratu, emitovali su svetlost u opsegu talasnih dužina od 1 do 1.3 μm što je omogućilo revoluciju u smislu primene ovih lasera kao koherentnih izvora u kratko-dometnim lokalnim i gradskim komunikacionim sistemima sa brzinom prenosa od 10 Gb/s. Tokom vremena, kako su se zahtevi telekomunikacione industrije, kao jedne od najpropulzivnijih industrijskih grana danjašnjice, menjali i postepeno sa optičkog prozora oko 1.3 μm premeštali na veće talasne dužine, tako su istraživanja usmerena ka realizaciji poluprovodničkih izvora za optički prozor u okolini 1.55 μm . Međutim, realizacija lasera na bazi kvantnih tačaka koji bi obezbedili emisiju na talasnim dužinama većim od 1.3 μm još uvek je u fazi istraživanja. U principu, povećanje talasne dužine emisije u standardnom materijalnom sistemu baziranom na InAs/GaAs moguće je ostvariti povećanjem dimenzija kvantnih tačaka. Sa druge strane, povećanje dimenzija je ograničeno maksimalnim naprežanjem između InAs i GaAs (oko 7% [51]), pa se talasna dužina na

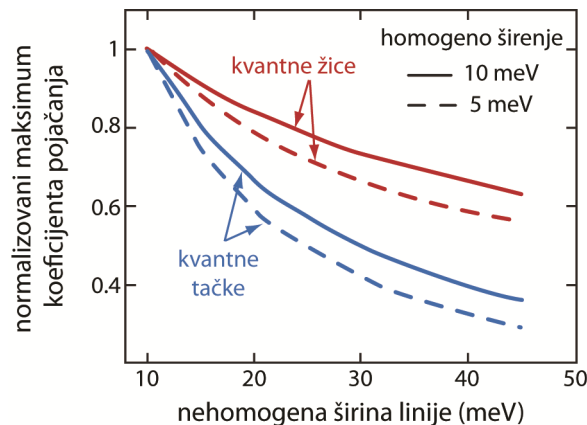
sobnim temperaturama može povećati tek na oko 1.35 μm . Eventualno, uz parcijalnu relaksaciju naprezanja korišćenjem odgovarajućeg odstoynog među-sloja (*bafer* sloja), moguće je ostvariti maksimalnu talasnu dužinu od 1.49 μm [39]. Primenom ove tehnike realizovan je laser sa emisijom na 1.45 μm i performansama koje su uporedive sa laserskim diodama na 1.3 μm [52]. Međutim, emisija na talasnim dužinama većim od 1.5 μm još uvek predstavlja veliki izazov za GaAs materijalni sistem [39].

Problemi do kojih dolazi usled velikog naprezanja između InAs i GaAs mogu se u izvesnoj meri prevazići ukoliko se kao supstrat umesto GaAs iskoristi InP. Razlika konstanti kristalnih rešetki za InAs i InP je oko dva puta manja nego za InAs i GaAs, pa je naprezanje smanjeno na 3% [51], što otvara mogućnost za povećanje emisione talasne dužine dosta iza 1.5 μm . Sa druge strane, proces samo-organizovanog narastanja na InP i na sa njim usaglašenim ternarnim i kvaternarnim jedinjenjima, dosta je komplikovaniji i osetljiviji na kinetiku. I pored toga, tehnološke prednosti rada sa nominalnim (011) InP supstratima uslovile su intenzivna istraživanja mogućnosti narastanja cirkularnih kvantnih tačaka primenom različitih procedura narastanja i opreme za epitaksiju, koja uključuje epitaksiju molekularnim snopom (*Molecular Beam Epitaxy*, MBE), metalogransku epitaksiju iz parne faze (*MetalOrganic Vapour Phase Epitaxy*, MOVPE), epitaksiju hemijskim snopom (*Chemical Beam Epitaxy*, CBE), epitaksiju molekularnim snopom iz gasnog izvora (*Gas Source Molecular Beam Epitaxy*, GS-MBE). U zavisnosti od moda narastanja, prilikom deponovanja InAs na InP supstrat može doći do formiranja cirkularnih ostrvaca koja odgovaraju kvantnim tačkama ili do pojave ostrvaca koja su više izdužena u jednom pravcu i podsećaju na kvantne žice [39]. Primera radi, ukoliko se za fabrikaciju kvantnih tačaka koristi CBE sistem, tipična procedura za formiranje cirkularnih tačaka na (011) InP supstratima je deponovanje nekoliko monoslojeva InAs na nenapregnuti kvaternarni InGaAsP bafer sloj, a zatim zaustavljanje procesa narastanja na oko pola minuta pod As potpritiskom kako bi se podstaklo formiranje ostrvaca. Međutim, ako se trajanje u prekidu procesa narastanja skрати na oko 5 s, dolazi do formiranja izduženih i na sličan način orijentisanih struktura, koja po obliku podsećaju na kvantne žice. Kao posledica samo-organizovanog procesa narastanja kod ovako formiranih ostrvaca prisutna je određena fluktuacija u orijentaciji i dimenzijama. Iako strukture zapravo formiraju gust ansambl kvantnih žica, postoji veliki broj strukturalnih neregularnosti koje ukazuju na

moгуćnost lokalizacija i ponašanje karakteristično za kvantne tačke [53], pa ovako dobijene strukture predstavljaju novu klasu samo-organizovanih nanostrukture koje se nazivaju **kvantne crte** (*Quantum Dash*, QDash).

Dimenzija koja dominantno određuje kvantizacionu energiju kvantnih crta je visina (dimenzija u pravcu narastanja). Visina je mnogo manja od širine i dužine strukture i uobičajeno iznosi nekoliko nanometara [54]. Pored toga, širina crte, koja obično iznosi oko 10-20 nm, dovoljno je mala da dovede do dodatne kvantizacije, dok je dužina crte (od oko 50 do 200 nm) već dovoljno velika da dovede do formiranja mini-zonske strukture na sobnim temperaturama, pa se kvantne crte praktično ponašaju kao jako dugačke (“beskonačno dugačke”) kvantne žice [53], [54]. Međutim, dužina crta je i dalje dosta kraća od difuzione dužine nosilaca u masivnom (balkovskom) materijalu, pa je lokalizacija nosilaca u lateralnom pravcu snažna i očekivana je pojava efekata specifičnih za kvantne tačke, kao što su lokalizovana rekombinacija nosilaca, lokalno skladištenje nosilaca ili jako smanjena migracija naelektrisanja u lateralnim pravcima [53]. U tom smislu, postavljeno je pitanje da li priroda ovih struktura više nalikuje kvantnim žicama (dvodimenzionalno konfiniranim strukturama) ili kvantnim tačkama (trodimenzionalno konfiniranim strukturama). U potrazi za odgovorom na ovo pitanje, elektronske i optičke osobine kvantnih crta određivane su pod pretpostavkom da je njihova funkcija gustine stanja ona koja odgovara kvantnim žicama, a dobijena funkcija pojačanja korišćena je za fitovanje spektra pojačane spontane emisije (*Amplified Spontaneous Emission*, ASE) optičkih pojačavača na bazi kvantnih crta [53]. Ostvareno je odlično poklapanje sa eksperimentalno dobijenim ASE spektrom, koje pokriva dva reda veličine pobudne struje i spektralni opseg širine od preko 300 nm. Sa druge strane, poklapanje rezultata nije ostvareno kada je korišćena funkcija pojačanja koja odgovara kvantnim tačkama. Na osnovu ovih istraživanja zaključeno je da pojačavački materijal na bazi kvantnih crta zaista pokazuje osobine ansambla kvantnih žica [40].

Iako su kvantne crte strukture daleko od idealnih nisko-dimenzionalnih sistema, one imaju neke praktične prednosti nad kružnim kvantnim tačkama. Primera radi, pojačanje kvantnih crta je, zahvaljujući prirodi koja nalikuje na kvantne žice, manje osetljivo na fluktuacije veličine u odnosu na pojačanje ansambla kvantnih tačaka. Na Sl. 1 prikazano je poređenje normalizovanih vrednosti maksimalnog pojačanja u funkciji od nehomogenog širenja za ansamble kvantnih tačaka i žica za dve vrednosti homogenog



Sl. 1. Poređenje prigušenja maksimuma pojačanja u zavisnosti od nehomogenog širenja za kvantne tačke i žice sa različitim homogenim širenjima linije. Slika je preuzeta iz [40].

širenja. Pojačanja su normalizovana na vrednost koja odgovara nehomogenom širenju od 10 meV. Za nehomogeno širenje u opsegu od 10 do 45 meV, maksimum pojačanja ansambla kvantnih tačaka opada za oko dve trećine normalizovane vrednosti, dok je ova redukcija za kvantne žice upola manja. Očekivano je da krive za materijal kvantnih crta budu veoma slične onima koje se dobijaju za kvantne žice [40].

1.2. Kako se formiraju kvantne crte?

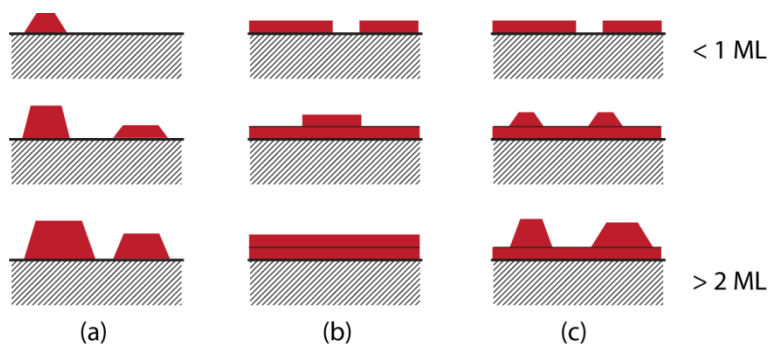
Proces hetero-epitaksijalnog narastanja tankih filmova usled razlike u konstantama kristalnih rešetki materijala filma i supstrata dovodi do formiranja napregnutih filmova. Zapravo, proces formiranja tankih filmova odvija se u nekoliko faza. U početku, film se obično formira ravnomerno, sloj po sloj, prekrivajući čitavu površinu supstrata. Nakon dostizanja određene kritične debljine otpočinje proces nukleacije i dolazi do formiranja trodimenzionalnih ostrva kroz proces koji je poznat pod nazivom Stranski-Krastanov prelaz (ili mod narastanja). Kritična debljina slojeva pri kojoj dolazi do grupisanja atoma u ostrvca zavisi od koeficijenta naprezanja i hemijskog potencijala deponovanih slojeva filma i supstrata, tako da veći koeficijent naprezanja dovodi do manje kritične debljine. Kritična debljina se kreće od dimenzija dela monosloja (*MonoLayer*, ML) pa do debljine od nekoliko monoslojeva.

Stranski-Krastanov mod je jedan od tri osnovna režima epitaksijalnog narastanja tankih filmova na površini kristala prikazanih na Sl. 2. Kod Volmer-Weber narastanja međusobna interakcija između dodatih atoma filma na supstratu je jača nego između

dodatih atoma i supstrata, što dovodi do spajanja dodatih atoma u trodimenzionalne klastere ili ostrva. Narastanje ovih klastera, dovodi do formiranja hrapavih višeslojnih filmova na površini supstrata, Sl. 2(a). Sa druge strane, kod Frank-van der Merwe narastanja, dodati atomi filma se preferirano vezuju za površinske atome supstrata što rezultuje u stvaranju glatkih, potpuno formiranih slojeva. Ovakvo slojevito narastanje je dvodimenzionalno, što ukazuje na to da do formiranja kompletnog sloja filma dolazi pre narastanja narednog sloja [Sl. 2(b)].

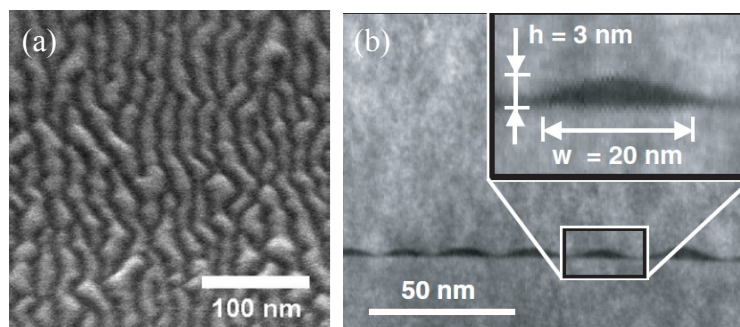
Kod Stranski-Krastanov moda, inicijalno narastanje prati Frank-van der Merwe mehanizam, što dovodi do akumulacije energije naprezanja u deponovanim slojevima. Međutim, nakon postizanja kritične debljine, akumulirano naprezanje dovodi do promene znaka hemijskog potencijala i promene u modu narastanja. U ovom trenutku relaksacija naprezanja dovodi do nukleacije ostrvaca i dalje narastanje se odvija po Volmer-Weber-ovom mehanizmu [Sl. 2(c)]. Prvobitno formirani dvodimenzionalni sloj naziva se **vlažeći sloj** (*Wetting layer*, WL) i predstavlja karakteristično obeležje nanostruktura koje se samo-organizuju putem Stranski-Krastanov procesa.

Najčešće korišćeni materijal za Stranski-Krastanov narastanje kvantnih crta je InAs, koji se deponuje direktno na InP supstrat ili na bafer sloj od nenapregnutog InGaAs, AlGaInAs ili GaInAsP. Zbog manje razlike u konstantama rešetki između InAs i InP, moguće je formiranje nešto većih ostrvaca nego za prvobitno fabrikovane kvantne tačke bazirane na GaAs materijalnom sistemu. Tipične lateralne dimenzije su 20 do 30 nm u jednom pravcu i 20 do nekoliko stotina nanometara u drugom pravcu, dok je visina struktura reda veličine 5 nm [40]. Fabrikacija se može ostvariti većinom



Sl. 2. Prikaz osnovnih modova narastanja napregnutog tankog filma na supstrat: (a) Volmer-Weber, (b) Frank van der Merwe i (c) Stranski-Krastanov za različite površinske pokrivenosti supstrata.

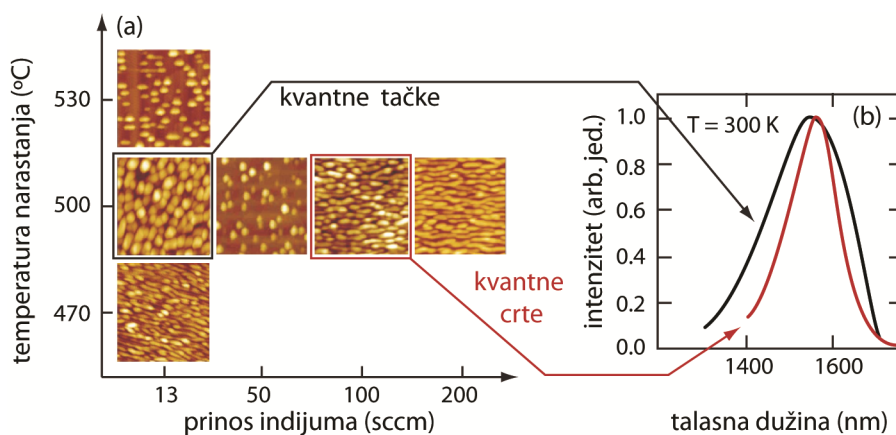
uobičajenih tehnika narastanja kao što su MBE, GS-MBE, MOVPE, u zavisnosti od toga koji materijalni sistem se koristi, moda narastanja i orijentacije supstrata. Primera radi, na Sl. 3(a) data je fotografija uzorka nastalog narastanjem 5 ML InAs na bafer sloj od $\text{Al}_{0.238}\text{Ga}_{0.234}\text{In}_{0.528}\text{As}$ dobijena skenirajućim elektronskim mikroskopom (*Scanning Electron Microscope*, SEM). Uočljiva je gusta mreža izduženih kvantnih crta, koje su mahom orijentisane u [0-11] pravcu, ali sa prisutnim fluktuacijama u orijentaciji i dimenzijama strukture. Zapravo, ovako formirane strukture više izgledaju kao izraženo nabrana površina, a ne kao izolovana trodimenzionalna ostrvca kvantnih tačaka [39]. Prilikom fabrikacije naprava, aktivni slojevi koje čine kvantne nanostrukture uobičajeno se prekrivaju novim slojevima u zavisnosti od toga koje funkcionalnosti treba obezbediti. Tom prilikom postoji mogućnost da narastanje novog (prekrivnog) sloja dovede do promene veličine, oblika i gustine, a samim tim i karakteristika projektovanih nanostrukture [40]. Na Sl. 3(b) prikazan je XTEM (*Cross-Sectional Transmission Electron Microscope*) profil poprečnog preseka uzorka kvantnih crta sa Sl. 3(a) nakon narastanja novog AlGaInAs sloja, što u konkretnom slučaju nije dovelo do znatne promene u gustini i dimenzijama kvantnih crta [40].



Sl. 3. (a) SEM prikaz uzorka kvantnih crta dobijenih narastanjem 5 monoslojeva InAs na $\text{Al}_{0.238}\text{Ga}_{0.234}\text{In}_{0.528}\text{As}$ [40]. (b) XTEM slika poprečnog preseka QDH uzorka nakon prekrivanja sloja kvantnih crta novim AlGaInAs slojem. Inset: uvećani prikaz jedne kvantne crte sa naznačenim karakterističnim dimenzijama [40].

Suprotno proceduri fabrikacije cirkularnih kvantnih tačaka na nominalnom (011) InP supstratu, formiranje ostrvaca nalik crtama ne zahteva specijalne tehnike prekida procesa narastanja. Međutim, sam proces se odvija daleko do termalne ravnoteže, što ima za posledicu da su efekti narastanja vremenski zavisni, pa trajanje i brzina procesa narastanja, kao i temperatura supstrata imaju veliki uticaj na formiranje kvantnih crta.

Na Sl. 4(a) prikazane su $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ fotografije dobijene mikroskopom atomskih sila (*Atomic Force Microscopy*, AFM) koje prikazuju oblik kvantnih tačaka/crta u zavisnosti od temperature na kojoj se vrši narastanje i prinosa indijuma [55]. Kao bafer sloj na koji je deponovan InAs korišćen je nenapregnuti InGaAsP. Za male prinose tri-metil-indijuma (TMIn) i/ili visoke temperature, dolazi do formiranja kvantnih tačaka, dok se na nižim temperaturama i/ili za veće prinose TMIn formiraju kvantne crte. Na Sl. 4(b) prikazano je poređenje fotoluminiscentnog (*PhotoLuminescence*, PL) spektra za ansambl kvantnih tačaka i ansambl kvantnih crta sa sličnim emisijim talasnim dužinama u okolini $1.55 \mu\text{m}$.

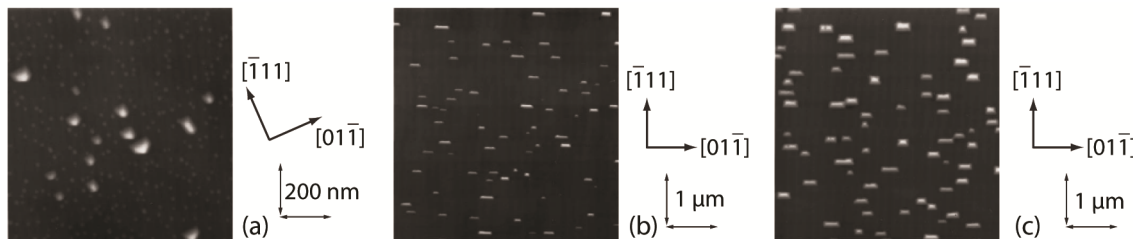


Sl. 4. (a) $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ AFM slike koje prikazuju oblik kvantnih tačaka/crta u zavisnosti od temperature na kojoj se vrši narastanje i prinosa indijuma. (b) PL spektar kvantnih tačaka/crta na sobnoj temperaturi [55].

Iako se istraživanja samo-organizovanih nanostrukture u velikoj meri baziraju na primeni nominalnih (001) supstrata, postoje eksperimentalni rezultati koji potvrđuju mogućnost samo-organizovanog narastanja na kristalima različitih orijentacija. Izbor kristalografske ravni na kojoj dolazi do samo-organizovanog narastanja crta utiče na karakteristike narastanih struktura, usled anizotropnosti naprezanja za različite pravce u kristalu [56]. Primera radi, osnovni problemi prilikom dizajniranja lasera na bazi kvantnih tačaka na (011) InP supstratu za talasne dužine veće od $1.55 \mu\text{m}$ su mala gustina tačaka (reda veličine $1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$) i smanjena kontrola veličine tačke koja dovodi do povećanog nehomogenog širenja linije (između 100 meV i 200 meV). Korišćenje izraženo misorijentisanih supstrata, kao što je (311)B InP, može obezbediti povećanje gustine centara nukleacije i veću gustinu tačaka (reda veličine $5 - 10 \times 10^{10}$

cm^{-2}), ali i značajno smanjenje efekata površinske migracije, pa su formirane kvantne tačke više simetrične u planarnom pravcu [40]. Nehomogeno širenje linije je i dalje prilično veliko, sa tipičnom vrednošću od oko 100 meV i veće. Fluktuacija veličine tačaka se može dodatno smanjiti primenom MBE tehnike, a raspored centara nukleacije je ravnomerniji ukoliko se za bafer sloj iskoristi AlGaInAs. Dalji napredak u kontroli geometrije može se ostvariti primenom “*double-cap*” tehnike, koja omogućava modifikaciju profila poprečnog preseka tačke, kroz optimizaciju debljine prekrivnog sloja i trajanja intervala tokom kog se zaustavlja narastanje [40], [57]. Zapravo, narastanjem dvostrukog prekrivnog sloja usled migracije površinskih atoma jame smanjuje se visina struktura, pa profil poprečnog preseka postaje zaravnjen. Kao posledica toga, fluktuacija visine tačaka je manje izražena i nehomogeno širenje linije se smanjuje na oko 50 meV. Još jedna od tehnika koja omogućava povećanu kontrolu veličine tačke, a samim tim i kontrolu nehomogenog širenja linije i kontrolu talasne dužine emisije je narastanje kratko-periodične GaAs/InAs superrešetke na (411)A InP supstrat [40]. Promenom debljine InAs sloja i/ili broja perioda superrešetke, moguće je kontinualno podešavanje talasne dužine emisije u opsegu između 1.3 i 1.6 μm . Ova tehnika omogućava najmanje nehomogeno širenje linije od približno 35 meV na talasnim dužinama oko 1.5 μm .

Fabrikacija samo-organizovanih nanostrukutra na supstratu od GaAs ili na sa njim usaglašenim jedinjenjima ima nešto drugačije karakteristike u odnosu na prethodno opisani InAs/InP materijalni sistem. Primera radi, prilikom narastanja iste količine InAs (6 monoslojeva,) MBE tehnikom na superrešetku od AlAs/GaAs na GaAs (211)B supstratu, dolazi do formiranja kvantnih tačaka pri temperaturi od 450°C [Sl. 5(a)] ili kvantnih crta ukoliko je temperatura 500°C [Sl. 5(b)] [56]. Pri depoziciji InAs prvo dolazi do formiranja vlažećeg sloja, a zatim se formiraju nanostrukture tipa kvantnih tačka u međufazi rasta. Kvantne tačke postaju metastabilne sa povećanjem temperature sa 450°C na 500°C, jer dolazi do povećane površinske migracije atoma indijuma, što dovodi do spajanja tačaka duž $[01\bar{1}]$ pravca u kvantne crte. Formirane kvantne crte su mahom orijentisane tako da se izdužena dimenzija prostire u $[01\bar{1}]$ pravcu i imaju odnos dužine i širine između 1 i 3. Povećanjem debljine InAs sloja dolazi do značajne promene širine kvantnih crta, dok se srednja dužina i gustina povećavaju tek neznatno [Sl. 5(c)] [56].

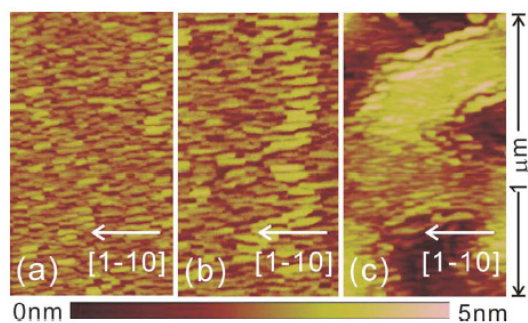


Sl. 5. AFM fotografije za strukture nastale depozicijom 6 monoslojeva InAs na (211B) GaAs pri temperaturi (a) 450 °C i (b) 500 °C i strukture nastale depozicijom 12 monoslojeva InAs na (211B) supstrat na temperaturi 500 °C [56].

Uobičajeni metod narastanja kvantnih crta, mehanizam Stranski-Krastanov, za sada nije omogućio narastanje kvantnih crta na nominalnim GaAs(001) substratima. Međutim, nedavno je demonstrirana tehnika koja omogućava narastanje InGaAs kvantnih crta na GaAs(001) substratu primenom MBE kroz proces koji se odvija u dve faze [58]. Prva faza podrazumeva narastanje epislojeva na dovoljno niskim temperaturama tako da ne dolazi do Stranski-Krastanov transformacije iz dvodimenzionalnih slojeva u trodimenzionalna ostrva tokom procesa depozicije. Zatim se epislojevi kratkotrajno izlažu visokim temperaturama uz kontrolisano hlađenje (tehnika žarenja, eng. *annealing*). Depozicija na nižim temperaturama omogućava se izbegne proces segregacije indijuma koji dovodi do neravnomerne distribucije naprezanja. Redistribucija naprezanja jako utiče na oblik samo-organizovanih struktura, jer relaksacija naprezanja, koja predstavlja osnovnu pokretačku silu iza Stranski-Krastanov moda narastanja, zavisi od kompozicije indijuma duž fronta narastanja, koja je pod uticajem segregacije i mešanja. Za razliku od procesa direktne depozicije na visokim temperaturama, žarenjem se smanjuju efekti mešanja i segregacije jer se pseudomorfni sloj koji je već formiran ponaša kao barijera onda kada je deblji od efektivnih površinskih slojeva. Naravno, u kasnijim fazama žarenja dolazi do difuzije među slojevima usled istanjivanja pseudomorfnog sloja izazvanog 3D tranzicijama, ali je ona mnogo slabije izražena za one nanostrukture koje su već formirane tokom inicijalne faze žarenja. Ovakav pristup omogućio je ne samo formiranje InGaAs kvantnih crta na nominalnim GaAs(001) supstratima, već i kontrolu njihovog oblika variranjem specifičnih parametara narastanja, kao što su temperatura i nadpritisak arsenida. Formirane crte su prilično pravilne i široke, sa zaravnjenim gornjim površinama, tako da profil poprečnog preseka ima oblik trapeza. Dužina struktura se

kreće od 158 do 325 nm, širina osnove od 30 do 70 nm a širina gornje zaravnjene površine od 10 do 27 nm, dok je visina struktura od 3 do 7 nm.

Dodavanje antimonida (Sb) u InAs kvantne tačke dovodi do dramatičnih promena u morfologiji nanostrukture. Formiraju se guste, zaravnjene InAsSb kvantne crte koje omogućavaju emisiju u srednjem infracrvenom opsegu od 2 do 3 μm [59]. Slično kao i kod InAs kvantnih crta, izbor bafer sloja na kom dolazi do samo-organizovanog narastanja u velikoj meri utiče na morfologiju i fizičke osobine formiranih struktura. U slučaju antimonidnih jedinjenja, samo-organizovano narastanje na InGaAs dovodi do formiranja kvantnih tačaka i kraćih kvantnih crta, dok se na InP i InAlAs formiraju dugačke kvantne crte i kvantne žice, respektivno [Sl. 6]. InAsSb/InGaAs nanostrukture pokazale su se pogodne za ostvarivanje temperaturni stabilne emisije na velikim talasnim dužinama.



Sl. 6. AFM slike InAsSb nanostrukture na (a) $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, (b) InP i (c) $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ bafer sloju [59].

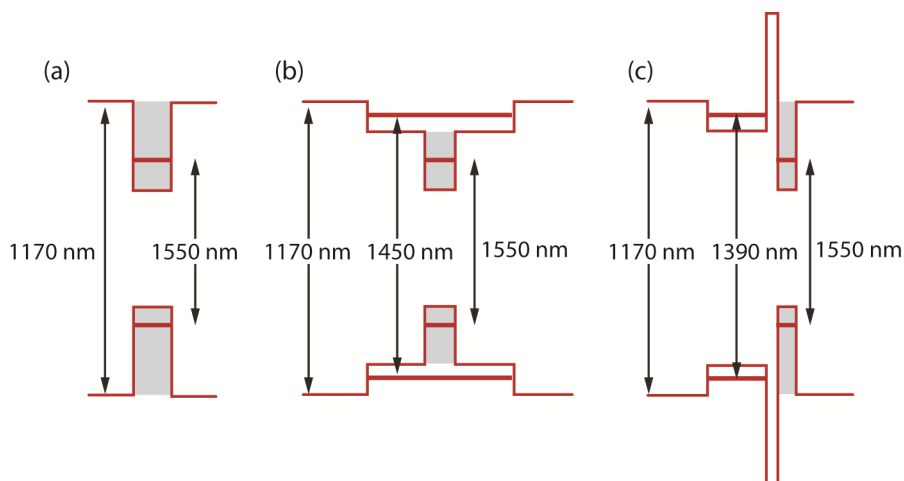
Izbor materijala i kristalografske orijentacije supstrata kroz veličinu energetskog procepa direktno utiče na diskontinuitete zona i kompletnu zonsku strukturu. Pored toga, materijal supstrata odnosno bafer slojeva utiče na geometrijske karakteristike, pre svega dimenzije, formiranih kvantnih crta, pa samim tim ponovo posredno utiče na zonsku strukturu i na energije optičkih prelaza. Sa stanovišta međuzonskih prelaza, InAs kvantne crte na supstratima od GaAs i InP omogućavaju emisiju/detekciju svetlosti u opsegu 1370-1650 nm. Velika razlika u konstantama kristalnih rešetki između InAs i GaAs ($\sim 7\%$) predstavlja osnovnu prepreku u realizaciji kvantnih crta koje mogu da obezbede emisiju sa talasnom dužinom većom od 1.55 μm . Isti problem postoji kod kvantnih tačaka, međutim, primenom metamorfnog bafer sloja od AlGaAsSb koji graduirano menja konstantu kristalne rešetke i smanjuje naprezanje na

oko 4.9% ostvarena je PL emisija iz osnovnog stanja na 1.6 μm [60]. Sličnom tehnikom, uz korišćenje još agresivnijeg metamorfnog bafer sloja koji razliku konstanti kristalnih rešetki smanjuje na 3.2%, fabrikovane su velike InAs kvantne crte na GaAs substratu što omogućava emisiju svetlosti na 2 μm [60]. Sa stanovišta unutarzonskih prelaza, izbor GaAs za materijal substrata nudi više mogućnosti od InP, jer zbog većeg energetskog procepa GaAs, InAs/GaAs kvantne crte imaju veći diskontinuitet zone i što omogućava formiranje više vezanih stanja unutar provodne zone. Talasna dužina unutarzonskih optičkih prelaza pripada srednjem ili dalekom infracrvenom opsegu i jako zavisi od dimenzija posmatranih nanostrukture.

U cilju poboljšanja optičkog konfiniranja, slično kao i kod lasera na bazi kvantnih jama, tanki aktivni sloj koji čine kvantne crte formira se između slojeva sa manjim indeksom prelamanja koja služe kao obloga optičkog talasovoda (*Separate Confinement Heterostructure*, SCH). Pored toga, u cilju podešavanja elektronskih karakteristika, sloj kvantnih crta se može inkorporirati unutar jamske ili barijerne oblasti kvantne jame. Za formiranje jamskih i barijernih oblasti naprava baziranih na InP supstratima koriste se ternarne i kvaternarne legure III-V jedinjenja, kao što su InGaAsP i InGaAlAs, koji mogu formirati i jamsku i barijernu oblast (u zavisnosti od molskog udela), InAlAs za barijernu i InGaAs za jamsku oblast [61]. Navedena jedinjenja se mogu koristiti i za realizaciju bafer slojeva, ali pod uslovom da je molskim sastvom obezbeđena nenapregnutost u odnosu na InP supstrat. Na Sl. 7 dat je šematski prikaz tri tipične realizacije struktura sa aktivnim slojem kvantnih crta koje se koriste za realizaciju Fabry-Perot lasera [61], [62]:

- 1) crte-u-jami (*Dashes-in-a-WELL*, DWELL), kod kojih se sloj kvantnih crta nalazi unutar kvantne jame,
- 2) crte-u-barijeri (*Dashes-in-a-BARrier*, DBAR), kod kojih se sloj kvantnih crta narasta direktno unutar barijernog materijala,
- 3) strukture sa injekcionim tunelovanjem (*Tunnel Injection Quantum Dash*, TIQDH). U ovoj konfiguraciji sloj kvantnih crta nalazi se unutar barijerne oblasti, ali u neposrednoj blizini kvantne jame. Za kvantnu jamu se koristi materijal sa većim energetskim procepom, pa su stanja u jami energetski iznad stanja u kvantnim crtama, što omogućava tunelsku injekciju nosilaca u kvantne crte.

Istorijski gledano, prvobitno su realizovani laseri tipa DBAR koji su ostvarili performanse uporedive sa tipičnim strukturama realizovanim na bazi kvantnih jama [61]. DWELL i TIQDH laseri nastali su u cilju daljeg poboljšanja karakteristika naprava na bazi DBAR struktura. DWELL strukture pod određenim uslovima mogu ostvariti manju vrednost struje praga, jer se posredstvom jame unutar koje se nalazi sloj kvantnih crta postiže nešto bolja injekcija nosilaca. Sa druge strane, TIQDH strukture omogućavaju smanjenje uticaja vrućih nosilaca (prvenstveno elektrona) koji u velikoj meri ograničavaju brzinu rada direktno moduliranih lasera na bazi kvantnih crta. Naime, na povišenim temperaturama značajan broj injektovanih nosilaca naseljava pobuđena stanja u crtama ili čak stanja u vlažećem sloju ili barijerama, što prouzrokuje ne samo duže vreme relaksacije, već i povećava struju praga [50], [63]. U TIQDH strukturama, “hladni” nosioci uz interakciju sa fononima tuneluju kroz barijeru direktno iz kvantne jame na stanja u kvantnim crtama koja su odgovorna za optičke prelaze i praktično istom brzinom se uklanjaju putem stimulisane emisije. Vreme potrebno za injekciju elektrona je čak do dva reda veličine kraće od vremena relaksacije elektrona sa eksitovanih stanja u kvantnim crtama [63]. Problem dugačkog vremena relaksacije odnosi se prvenstveno na elektrone, pošto je vreme relaksacije šupljina generalno dosta kraće.



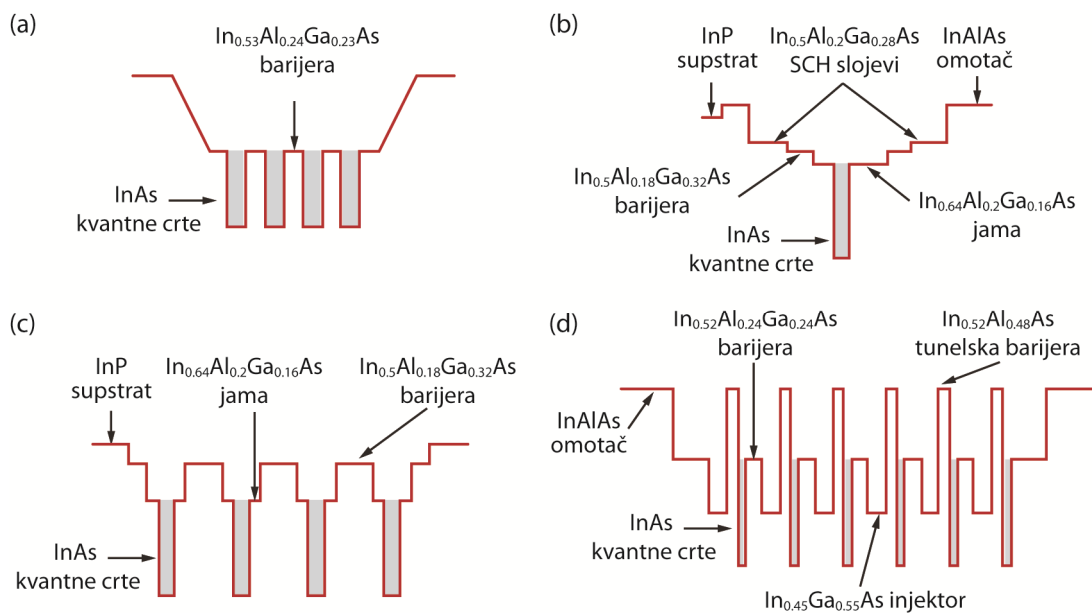
Sl. 7. Šematski prikaz realizacije optičkih prelaza na 1550 nm u sloju kvantnih crta za (a) DBAR, (b) DWELL i (c) TIQDH strukture.

Pored problema koje izazivaju “vrući nosioci”, laseri na bazi kvantnih tačaka i kvantnih crta imaju ograničene modulacione karakteristike usled efekta kompresije

pojačanja izazvanog velikom gustinom stanja u barijernim stanjima i stanjima u vlažećem sloju. Pored toga, raspodela šupljina je termalno proširena na veliki broj dostupnih stanja na malim energetsom opsegu, pa je za ostvarivanje velikog pojačanja potrebno obezbediti veliku injekciju šupljina. Ovaj problem se može kompenzovati bilo direktnim bilo modulacionim dopiranjem akceptorima (p-dopiranje), što obezbeđuje inverznu naseljenost sa manje injektovanih šupljina iz kontakata. Ukoliko se za aktivnu oblast lasera iskoriste kvantne crte modulaciono dopirane šupljinama, dolazi do povećanja propusnog opsega sa 6 GHz na 8 GHz uz čirp od oko 1 Å i alfa-faktor od oko 1 za rad na sobnim temperaturama [64]. Iako p-dopiranje povećava pojačanje i diferencijalno pojačanje, prisustvo stanja unutar vlažećeg sloja, relativno veliko nehomogeno širenje, kao i značajno povećana Auger-ova rekombinacija u velikoj meri limitiraju potencijalne prednosti. Uprkos tome, za TIQDH lasere sa p-modulacionim dopiranjem ostvareni su veliki propusni opseg (~ 12 GHz), skoro nulta vrednost alfa-faktora i mali čirp (~ 0.3 Å) [64].

Neki primeri realizacije naprava na bazi DBAR, DWELL i TIQDH struktura prikazani su na Sl. 8. Prvi primer je DBAR struktura kod koje su 4 sloja kvantnih crta od InAs na rastojanjima od po 25 nm narastana unutar $\text{In}_{0.53}\text{Al}_{0.24}\text{Ga}_{0.23}\text{As}$ barijernog materijala [Sl. 8(a)] [65]. Na Sl. 8(b) dat je šematski prikaz InAs/InAlGaAs DWELL lasera na (100) S-dopiranom InP supstratu [66]. Struktura lasera je uobičajena p-i-n konfiguracija sa nedopiranim SCH talasovodom od nenapregnutog $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.28}\text{As}$ sloja debljine 320 nm. Prvi (donji) omotač talasovoda sastoji se od InP supstrata i $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ sloja dopiranog sa Si (10^{18} cm^{-3}) debljine 200 nm. Drugi (gornji) omotač i kontaktne slojeve čine $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ debljine 1700 nm i $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ debljine 150 nm dopiranog Be ($2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). Jezgro talasovoda čini DWELL aktivna oblast koja nije dopirana, sa InAs slojem kvantnih crta u asimetričnoj InAlGaAs kvantnoj jami. Aktivna oblast se sastoji od četiri naizmenično narastana niza slojeva: kompresivno napregnutog $\text{In}_{0.64}\text{Ga}_{0.16}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ debljine 1.3 nm, sloja InAs kvantnih crta debljine 5 ML i kompresivno napregnutog $\text{In}_{0.64}\text{Ga}_{0.16}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ debljine 6.3 nm. Materijal kvantnih crta ima manju energiju od okolnog materijala kvantne jame, koji praktično ima ulogu “barijera” za InAs kvantne crte. Ove četiri crte-u-jami međusobno su razdvojene tenzilno napregnutim $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.32}\text{Al}_{0.18}\text{As}$ slojevima debljine 30 nm koji vrše kompenzaciju naprezanja. Na Sl. 8(c) prikazan je još jedan primer DWELL struktura

narastanih na S-dopiranom InP(100) supstratu. Četiri sloja InAs QDH nalaze se u 7.6 nm tankim kompresivno napregnutim $\text{In}_{0.64}\text{Ga}_{0.16}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ jamama, razdvojenim tenzilno napregnutim $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.32}\text{Al}_{0.18}\text{As}$ barijerama debljine 30 nm [67]. Konačno, Sl. 8(d) prikazuje strukturu koja se sastoji od niza TIQDH međusobno razdvojenih $\text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.24}\text{Al}_{0.24}\text{As}$ barijerama debljine 40 nm [64]. Za materijal jame (injektora) korišćen je 8 nm tanak sloj $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}$, a kao materijal barijere $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ sloj debljine 2.5 nm. InAs QDH-ovi su p-dopirani.

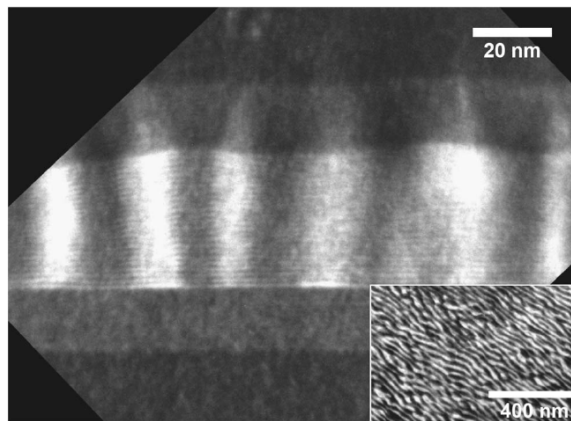


Sl. 8. Profil provodne zone i korišćeni materijali za neke primere realizacija naprava na bazi DBAR, DWELL i TIQDH struktura.

DWELL strukture sa pogodnim sastavom i kontrolisanim naprežanjem mogu obezbediti i pomeranje spektra ka većim talasnim dužinama. Formiranjem nekoliko slojeva kvantnih crta unutar konvencionalnih kvantnih jama realizovani su laseri na bazi InP koji obezbeđuju emisiju na 2 μm pri sobnim temperaturama. Slično tome, primenom asimetričnih DWELL struktura, tj. struktura kod kojih se kvantne crte narastaju unutar step-kvantnih jama (*Dash-in-a-Step-WELL*) uz kombinaciju materijala koji uključuje InAlGaAs kako bi se poboljšalo konfiniranje naelektrisanja, realizovani su laseri koji na sobnoj temperaturi omogućavaju emisiju svetlosti na 2.12 μm [47]. Smanjenje energije prelaza postiže se povećanjem širine napregnute kvantne jame unutar koje se formira sloj kvantnih crta. Međutim, nakon postizanja određene kritične širine, emisiona talasna dužina se dalje ne povećava, već smanjuje, kao posledica

inkrementalnog kompresivnog naprezanja u jami, koje nastavlja da raste i potencijalno ugrožava optičke karakteristike materijala.

Asimetrični oblik kvantnih crta, zaravnjenost gornje površine i profil naprezanja za posledicu imaju razliku u pojačanju koje je veće za transverzalnu električnu (TE) nego za transverzalnu magnetsku (TM) polarizaciju svetlosti. Jedan od načina da se ostvari polarizaciona nezavisnost struktura na bazi kvantnih crta je narastanje kratko periodične strukture u kojoj su slojevi kvantnih crta narastani na veoma malim rastojanjima. Ovako formirane strukture nazivaju se stubaste kvantne crte (*Columnar QDasH*, CQDH) [68]. Struktura prikazana na Sl. 9 realizovana je na supstratu od n-dopiranog InP, naizmeničnim deponovanjem slojeva 24 sloja InAs i GaAs tanjih od 1 nm. Zbog mešanja InAs i GaAs tokom procesa epitaksijalnog narastanja, sastav CQDH je zapravo InGaAs [68]. Na TEM slici, svetle vertikalne pruge predstavljaju CQDH i imaju veći udeo In, dok tamne pruge koje ih razdvajaju potiču od sloja nalik kvantnim jamama koji okružuje crte u ravni i predstavlja ostatak vlažećeg sloja. Na Sl. 9 je prikan poprečni presek CQDH normalan na pravac duž kog se prostire izdužena dimenzija kvantnih crta, dok inset prikazuje planarni pogled na CQDH.



Sl. 9. TEM slika poprečnog preseka CQDH strukture [69].

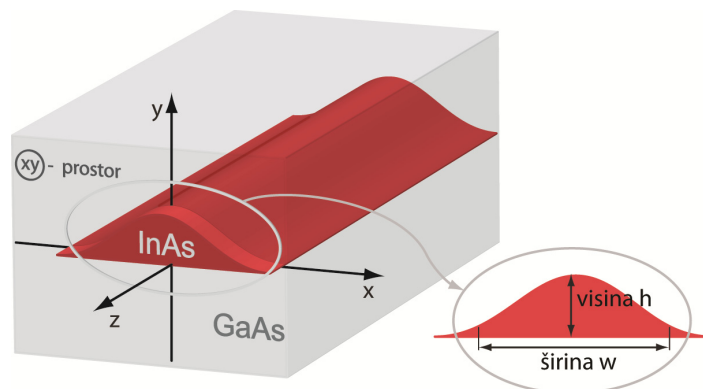
Stepen polarizacije fotoluminiscentnog i elektroluminiscentnog spektra zavisi od orijentacije CQDH relativno u odnosu na osu prostiranja svetlosti [69]. Prema tome, polarizacija svetlosti koju emituju CQDH se može podešavati od dominantno TE polarizacije do TM polarizacije prostom promenom geometrijske konfiguracije. Optimizacijom broja slojeva kvantnih crta prilikom formiranja CQDH, kao i ugla pod

kojim se CQDH prostiru, može se postići polarizaciono neosetljivo pojačanje u opsegu talasnih dužina oko $1.55\ \mu\text{m}$ [69].

1.3. Geometrijska karakterizacija ansambla kvantnih crta

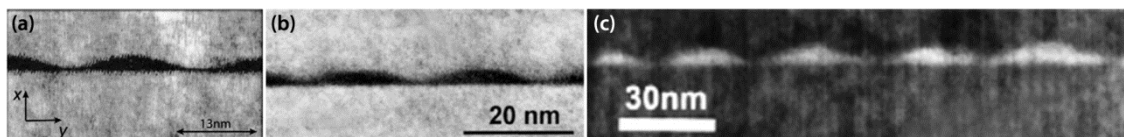
Samo-organizacija u Stranski-Krastanov modu je relativno jeftin proces fabrikacije kvalitetnih struktura, ali se za razliku od litografskih tehnika odlikuje ograničenom kontrolom apsolutnih dimenzija [70]. Pored toga, priroda ovog mehanizma inherentno je povezana sa formiranjem ansambla struktura sa izraženim stohastičkim fluktuacijama u dimenzijama. U zavisnosti od materijalnog sistema, nominalne debljine InAs sloja i parametara narastanja, kvantne crte mogu imati različite oblike, a fluktuacija dimenzija u ansamblu se razlikuje u pogledu funkcije raspodele.

Kvantne crte su izdužene nanostrukture sa poprečnim presekom koji podseća na plitke kvantne tačke, dimenzija nekoliko nanometara u pravcu narastanja i 10-20 nm u lateralnom pravcu. Ova plitka izdužena ostrva mahom su orijentisana u pravcu izdužene dimenzije koja iznosi nekoliko stotina nanometara, pa se konfiniranje u ovom pravcu praktično može zanemariti [53]. Iz tog razloga, u teorijski modelima veoma često se primenjuje aproksimacija koja kvantne crte tretira kao žice i analizira konfiniranje nosilaca isključivo u ravni poprečnog preseka (transverzalna ravan) [65]. Na Sl. 10 dat je šematski prikaz jedne strukture izolovane iz ansambla kvantnih crta. Ravan poprečnog preseka je xOy ravan, dok je struktura izdužena u longitudinalnom z -pravcu i ima dimenziju Z . U ravni poprečnog preseka, dimenzija u pravcu narastanja (y -pravac) je visina crte h , dok je dimenzija u lateralnom pravcu (x -pravac) širina crte w .



Sl. 10. Šematski prikaz izolovane kvantne crte. Inset prikazuje profil poprečnog preseka.

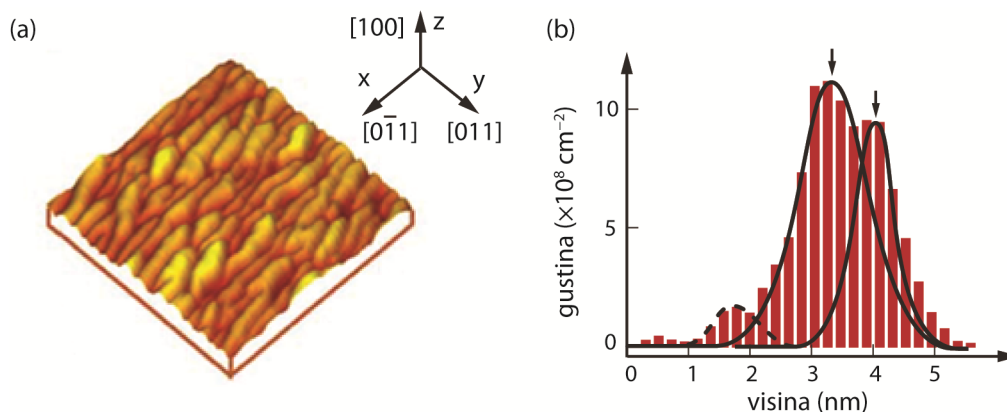
Činjenica da je konfiniranje nosilaca dominantno u xOy ravni uslovljava da su elektronske i optičke osobine kvantnih crta praktično određene oblikom i dimenzijama poprečnog preseka strukture. Na osnovu SEM i TEM fotografija uzoraka kvantnih crta moguće je proceniti oblik i dimenzije struktura u ravni poprečnog preseka. Konkretni profil poprečnog preseka zavisi od postupka fabrikacije i izbora materijala koji su korišćeni za supstrat, bafer slojeve i jamske/barijerne oblasti ukoliko su strukture narastane u formi DWELL, DBAR ili TIQDH. Međutim, priroda Stranski-Krastanov mehanizma dovodi do toga da su ivice struktura relativno nepravilne, pa je često dosta teško ustanoviti kojim geometrijskim oblikom bi se za potrebe simulacija adekvatno predstavio profil poprečnog preseka. Najčešće aproksimacije su geometrijski oblici nalik na položeno plan-konveksno sočivo (sočivast profil) [65], [71] i trapez [58], [66], [67], [72], dok u nekim konfiguracijama kvantne crte nisu zaravnjene i imaju profil nalik trouglu [56], [70]. Na Sl. 11 prikazane su TEM fotografije profila poprečnog preseka nekoliko reprezentativnih uzoraka kvantnih crta. Konačno, u cilju jednostavnijeg izračunavanja zonske strukture i povećanja efikasnosti sa stanovišta iskorišćenja procesorske snage i memorije, profil poprečnog preseka se često aproksimira ekvivalentnim pravougaonim oblikom izabranim na taj način da površina poprečnog preseka ostane ista [41], [47], [54], [73].



Sl. 11. TEM fotografije poprečnih preseka različitih uzoraka kvantnih crta: (a) sočivasti [65], (b) trapezni [72] i (c) trougaoni [70] profil.

Na prikazanim TEM fotografijama jasno se uočava prisustvo vlažećeg sloja koji predstavlja zaostatak tankog filma od kog tokom Stranski-Krastanov procesa nastaju kvantne crte. Pored toga, pažljivim posmatranjem mogu se uočiti izvesne promene oblika i dimenzija kvantnih crta unutar istog uzorka, koje postaju očiglednije ukoliko se analizira Sl. 12(a). Fluktuacije u dimenzijama struktura u okviru istog ansambla predstavljaju prirodnu posledicu samo-organizovanog narastanja. Raspodela po dimenzijama uobičajeno se modeluje Gauss-ovom funkcijom [41], iako eksperimentalni rezultati prikazani na Sl. 12(b) pokazuju da fluktuacija visina u ansamblu kvantnih crta

više odgovara bimodalnoj raspodeli [66]. U konkretnom slučaju, za ansambl sa Sl. 12(b), bimodalna raspodela se može predstaviti preko dve gausove funkcije sa maksimalnim gustinama kvantnih crta od $\sim 10^9 \text{ cm}^{-2}$ na 3.2 i 4.2 nm. Kvantne crte u ovom uzorku imaju srednju širinu od oko 18 nm, dužina osnove iznosi od 20 do 75 nm, a pokrivenost površine je oko 70%. Izražene fluktuacije u obliku i veličini imaju za posledicu disperziju energija u konfinirajućem potencijalu, što dovodi do nehomogenog širenja i formiranja kontinualno proširene spektralne karakteristike pojačanja, odnosno apsorpcije. Profil nehomogenog širenja se uobičajeno modeluje Gausovom raspodelom [41], [54], iako usled velikog odnosa Z/w i w/h i istovremenih fluktuacija sve tri dimenzije crta u ansamblu, energije konfiniranih stanja imaju nelinearnu varijaciju, pa funkcija nehomogenog širenja može značajno odstupati od Gausovog profila.



Sl. 12. (a) AFM slika površine sloja kvantnih crta (površina $0.5 \mu\text{m} \times 0.5 \mu\text{m}$; kontrast visine 8 nm) i (b) odgovarajuća bimodalna raspodela crta po visini [66].

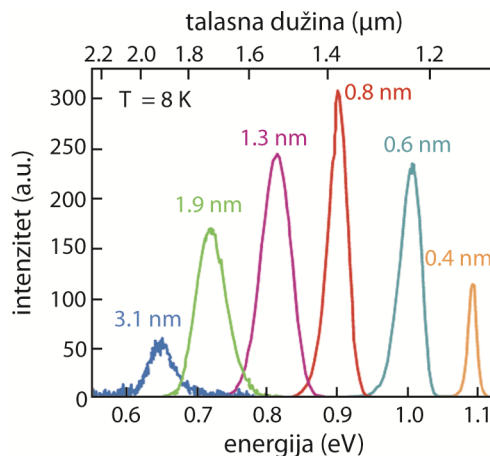
Dimenzije struktura zavise od izbora materijalnog sistema i parametara narastanja (primera radi, temperature, molskih odnosa grupa III/V i brzine procesa narastanja), ali takođe i od debljine (broja monoslojeva) InAs koji se deponuje na materijal supstrata ili na bafer sloj. Preciznom kontrolom temperature i brzine narastanja koje igraju ključnu ulogu u procesu samo-organizovanog narastanja, uz primenu specijalnih tehnika, kao što su prekid narastanja i/ili kratkotrajno izlaganje visokim temperaturama uz kontrolisano hlađenje, moguće je podešavanje veličine struktura, a time i kontrola radne talasne dužine u opsegu od 300 nm [70]. Međutim, ukoliko se fiksiraju parametri narastanja, kontrola veličine struktura, odnosno radne talasne dužine, može se ostvariti prostom promenom debljine deponovanog InAs sloja. Formiranje ostrva započinje pri nominalnoj debljini od oko dva do tri monosloja InAs. Kvantizaciona energija je

dominantno određena visinom strukture, pa se energija optičkih prelaza može direktno kontrolisati debljinom deponovanog InAs materijala. Drugim rečima, kontrola i podešavanje srednje vrednosti dimenzija ansambla (dimenzije koje odgovaraju maksimumu raspodele) kroz podešavanje debljine InAs tankog filma praktično omogućava kontrolu i podešavanje centralne radne talasne dužine za projektovane naprave [39], [70].

U tom smislu, u naporima da se zadovolje zahtevi koje postavljaju konkretne aplikacije, fokus istraživanja prilikom fabrikacije kvantnih crta usmeren je na kontrolu tehnološkog procesa, tačnije, na potragu za načinom da se utiče na veličinu, oblik i kompoziciju, pa prema tome i na elektronske i optičke osobine ovih nanostrukture. Poznato je da su oblik i veličina samo-organizujućih struktura rezultat međusobne interakcije između elastičnih i površinskih sila koje se javljaju u napregnutim filmovima, što problem kontrole veličine struktura prenosi u domen određivanja pogodnih uslova narastanja koji međusobni uticaj ovih veličina koriste na konstruktivan način [70].

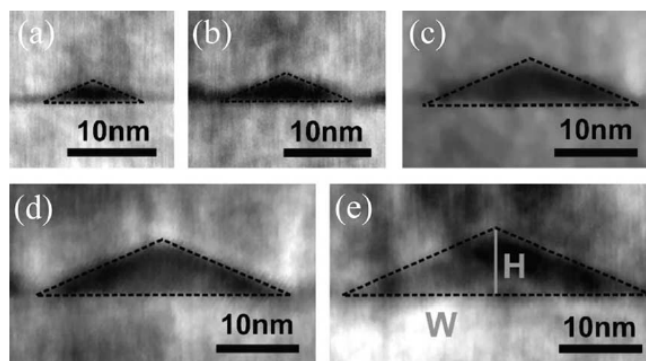
Primeru radi, ispitivan je uticaj nominalne debljine InAs sloja prilikom samo-organizovanog formiranja kvantnih crta na S-dopiranom (001) InP supstratu. Direktno na InP supstrat narastan je nenapregnuti $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.23}\text{Al}_{0.24}\text{As}$ bafer sloj debljine 200 nm na temperaturi 500 °C. Nakon toga, u cilju formiranja kvantnih crta na temperaturi 470 °C deponovan je InAs sa različitim nominalnim debljinama. Sledi još jedan $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.23}\text{Al}_{0.24}\text{As}$ bafer sloj debljine 100 nm i konačno, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ tanki prekrivni sloj. Na Sl. 13 prikazan je niskotemperaturni ($T = 8$ K) fotoluminiscentni spektar za uzorke kvantnih crta formirane deponovanjem pet različitih nominalnih debljina InAs slojeva: 0.8 nm (= 2.7 ML, uzorak A), 1.2 nm (uzorak B), 1.6 nm (uzorak C), 2.4 nm (uzorak D) i 3.1 nm (= 10.3 ML, uzorak E) [70]. Talasna dužina optičkog prelaza varira od 1.37 do 1.9 μm . Za nominalnu debljinu InAs sloja od 1.3 nm (oko 5 monoslojeva) energija fotoluminiscencije je približno 0.8 eV (1.5 μm). Širina emisijih linija je u opsegu od 35 do 50 meV, što je značajno manje nego kod kružnih kvantnih tačaka narastanih na (001)B InP supstratu i ukazuje na relativno malu fluktuaciju visine struktura. Promenom nominalne debljine sloja do 0.4 do 3.1 nm, što je ekvivalentno debljini od oko 10 monoslojeva, emisijona talasna dužina se može kontinualno podešavati u opsegu od oko 800 nm [40]. Ovakav materijal može obezbediti optičko

pojačanje u opsegu između 1.2 i 2.0 μm koji je od posebnog značaja za optičke telekomunikacione sisteme. Integral intenziteta fotoluminiscencije održava se za nominalne debljine između 0.6 i 1.9 nm, dok iznad 3 nm intenzitet značajno degradira kao posledica stvaranja neradijativnih rekombinacionih centara, prevashodno izazvanih delimičnom relaksacijom naprezanja [40].



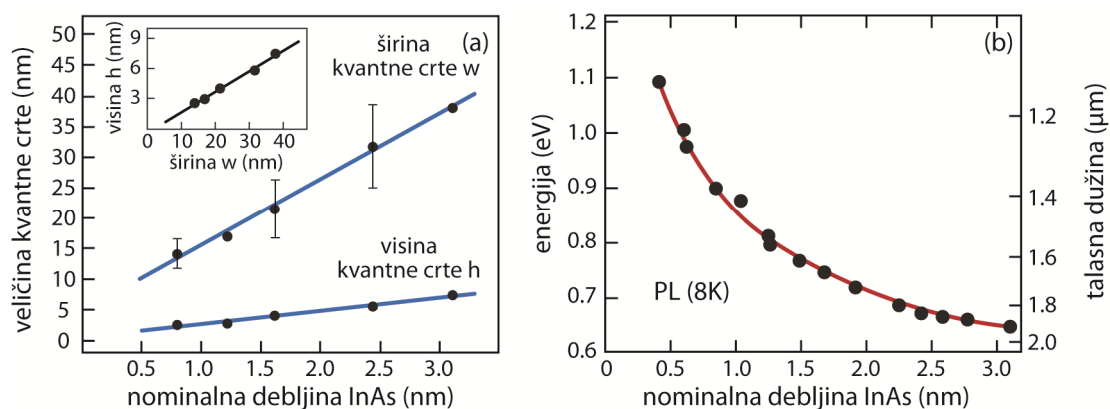
Sl. 13. Normalizovani niskotemperaturni fotoluminiscentni spektri za uzorke sa različitim nominalnom debljinom InAs [39].

Opisanim tehnološkim postupkom formira se periodični niz kvantnih crta orijentisanih mahom duž $[1\bar{1}0]$ pravca. Dužina kvantnih crta može se grubo proceniti na između 50 nm i nekoliko stotina nanometara. Z-kontrastni mikrograf jednog od dobijenih uzoraka prikazan je na Sl. 11(c). Suprotno InAs/InP kvantnim crtama [72], ove kvantne crte nisu zaravnjene i imaju trougaoni poprečni presek [70]. Površinska gustina kvantnih crta je prilično velika i zavisi od širine osnove trougaonih kvantnih crta. Rezultujuća površinska pokrivenost je blizu 100%. Ispitivanja koja su vršena hemijski osetljivim Z-kontrast mikrografom pokazala su da se kvantne crte formiraju od čistog InAs, što potvrđuje da ne postoji značajno mešanje materijala kvantnih crta i materijala koji ih okružuje tokom narastanja InAs i prekrivanja slojem $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.23}\text{Al}_{0.24}\text{As}$ [70]. Na Sl. 14 prikazani su poprečni presezi kvantnih crta za različite nominalne debljine InAs koje odgovaraju uzorcima sa Sl. 13. Kao što je i očekivano, veličina crta se sistematski povećava sa povećanjem nominalne debljine InAs, ali ono što je iznenađujuće je da oblik poprečnog preseka ostaje očuvan iako se dimenzije menjaju skoro 4 puta.



Sl. 14. Poprečni presek uzoraka kvantnih crta sa nominalnom debljinom InAs (a) 0.4 nm, (b) 0.6 nm, (c) 0.8 nm, (d) 1.3 nm i (e) 1.9 nm koje odgovaraju fotoluminiscentnim spektrima prikazanim na Sl. 13 [70].

U cilju dobijanja kvantitativnog seta strukturalnih podataka o kvantnim crtama, statistički je određivana veličina struktura i raspodela struktura po veličinama [70]. U tu svrhu sistematski je proučavan veliki broj kvantnih crta u različitim uzorcima i određivana je srednja vrednost i standardna devijacija širine osnove i visine kvantnih crta. Svi uzorci su dobijeni za identične parametre procesa narastanja (izuzev nominalne debljine InAs). Rezultati ovog istraživanja prikazani su na Sl. 15(a). Merena srednja visina i srednja širina kvantne crte jasno pokazuju linearno povećanje sa nominalnom debljinom InAs sloja. Konstantan odnos h/w postaje evidentan na insetu Sl. 15(a) koji pokazuje linearnu zavisnost između visine i širine osnove kvantne crte, što jasno dokazuje da se oblik poprečnog preseka kvantnih crta ne menja, dok veličina struktura linearno zavisi od nominalne debljine InAs sloja [70]. Na Sl. 15(b) prikazana je nisko-



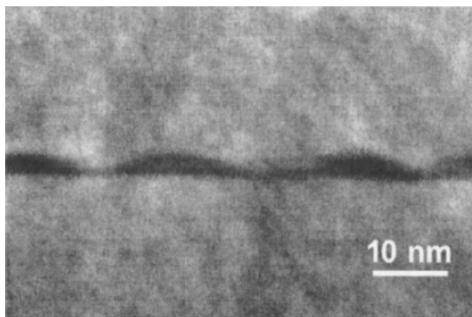
Sl. 15. (a) Visina h i širina osnove w kvantnih crta u funkciji od nominalne debljine InAs sloja. (b) Energija luminiscencije u funkciji od nominalne debljine deponovanog InAs [39].

temperaturska fotoluminiscentna emisija u funkciji od nominalne debljine sloja. Promenom debljine deponovanog sloja InAs talasna dužina se može podešavati u opsegu od 1.1 do 1.9 μm . Ova jedinstvena osobina omogućava da se kombinacijom slojeva kvantnih crta različitih dimenzija dizajnira optički pojačavački materijal sa veoma širokim opsegom pojačanja [39].

1.4. Optička karakterizacija kvantnih crta

Poznavanje optičkih prelaza i shodno tome energija diskretnih stanja u provodnoj i valentnoj zoni je od velikog značaja u smislu određivanja osobina optoelektronskih naprava na bazi kvantnih crta, ili modelovanja samih struktura, primera radi, modelovanja temperaturske zavisnosti, pojačanja ili modulacionog odziva. Za eksperimentalnu karakterizaciju optičkih osobina uzoraka kvantnih crta uobičajeno se koriste fotoluminiscentna (*PhotoLuminiscent*, PL) i fotorefleksiona (*PhotoReflectance*, PR) merenja, kao nedestruktivne metode koje se primenjuju nakon narastanja struktura.

U cilju optičke detekcije vlažećeg sloja karakterističnog za Stranski-Krastanov mod i njegove karakterizacije, vršena su PL i PR merenja InAs/InGaAlAs/InP kvantnih crta sa različitim nominalnim debljinama InAs [71]. Uzorci su narastani MBE tehnikom na (001) S-dopiranom InP supstratu. InAs crte su formirane na nenapregnutom $\text{In}_{0.528}\text{Ga}_{0.234}\text{Al}_{0.238}\text{As}$ bafer sloju debljine 200 nm, a zatim prekrivene slojem $\text{In}_{0.528}\text{Ga}_{0.234}\text{Al}_{0.238}\text{As}$ debljine 100 nm. Čitav uzorak pokriven je sa slojem $\text{In}_{0.532}\text{Ga}_{0.468}\text{As}$ debljine 10 nm. Analizirani su uzorci sa nekoliko različitih nominalnih debljina InAs, od 0.62 do 2.58 nm, što direktno određuje širinu i visinu kvantnih crta, kao i njihovu gustinu. Formirane su kvantne crte sočivastog poprečnog preseka na tankom vlažećem sloju (Sl. 16). Za nominalnu debljinu InAs od 1.62 nm visina



Sl. 16. TEM poprečnog preseka InAs/InGaAlAs/InP kvantnih crta [71].

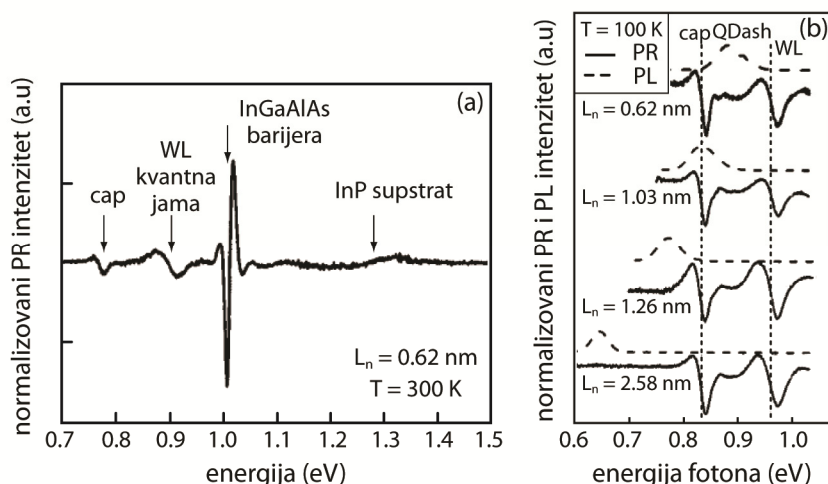
kvantnih crta je oko 3 nm, dok se za dati kontrast debljina vlažećeg sloja ne može pouzdano odrediti, mada je procena da je ona oko pet puta manja od visine kvantne crte.

Emisiona linija povezana sa kvantnim crtama detektovana je u nisko-temperaturskom PL spektru. Sa povećanjem nominalne debljine InAs, ova spektralna linija se pomera ka većim talasnim dužinama (crveni pomak), što odgovara činjenici da dolazi do povećanja veličine kvantnih crta. U cilju detekcije spektralne linije koja se javlja kao posledica prisustva vlažećeg sloja, a time i eksperimentalne potvrde prisustva i optičke aktivnosti ovog sloja u uzorcima kvantnih crta, izvršena je dodatna karakterizacija PR merenjem. Primenom ove tehnike detektovane su karakteristične promene u spektru koje se ne mogu povezati sa energetskim procepima bafer slojeva, niti sa emisijom u kvantnim crtama. Povrh toga, ove promene se javljaju uvek na istoj energiji, bez obzira na to koji se uzorak ispituje. Na osnovu teorijskih izračunavanja u aproksimaciji efektivne mase za tanku InAs/InGaAlAs kvantnu jamu, ovaj optički prelaz interpretiran je kao prelaz između osnovnih stanja koja se formiraju u vlažećem sloju [71].

Na Sl. 17(a) prikazan je PR spektar na $T = 300$ K za strukturu sa nominalnom debljinom InAs sloja od $L_n = 0.62$ nm. Karakteristične promene u PR intenzitetu se mogu povezati sa različitim slojevima uzorka: InP supstratu odgovara široki i slabi signal na oko 1.33 eV, promena na 1.03 eV odgovara energetskom procepu za balkovski prelaz u InGaAlAs barijerama, dok ona na 0.75 eV odgovara energetskom procepu tj. prelazu u tankom InGaAs prekrivnom sloju. Preostaje da je promena na oko 0.9 eV povezana sa InAs delom strukture, tj. sa kvantnim crtama ili vlažećim slojem. Međutim, na sobnoj temperaturi nije dijagnostikovao ni jedan PL signal koji bi mogao da se poveže sa kvantnim crtama, čak ni pri umereno visokim gustinama snage eksitacije. Iz tog razloga, merenje je sprovedeno na niskim temperaturama ($T = 100$ K), što omogućava da se pri istim uslovima istovremeno analizira i PL i PR spektar [71].

Na Sl. 17(b) prikazani su nisko-temperaturski PL i PR spektar za opseg energija koje odgovaraju očekivanim prelazima u kvantnim crtama i vlažećem sloju. Široki, slabo asimetrični gausovski pik koji se može primetiti u PL spektru odgovara emisiji u kvantnim crtama i značajno se pomera ka manjim energijama sa povećanjem nominalne debljine InAs materijala. Međutim, u PR spektru se ne može pouzdano odrediti intenzivna crta koja bi odgovarala detektovanoj PL liniji. Jedan od razloga može biti

prilično velika dimenzija kvantnih crta i/ili izražena nehomogenost kvantnih crta u ansamblu. Naime, kao posledica prisustva kvantnih crta različitih dimenzija u ansamblu, moguće je da dolazi do delimične destruktivne superpozicije PR linija proisteklih od strane pojedinačnih crta u širokom spektralnom opsegu (oblik PR linije je nalik izvodu PL linije, tj. sa odnosom pozitivnih i negativnih amplituda koji zavisi od njihovih faza).



Sl. 17. (a) PR spektar za InAs/InGaAlAs/InP kvantne crte ($L_n = 0.62$ nm InAs) [71]. (b) Niskotemperaturnski PL i PR spektar za četiri uzorka kvantnih crta sa različitim L_n [71].

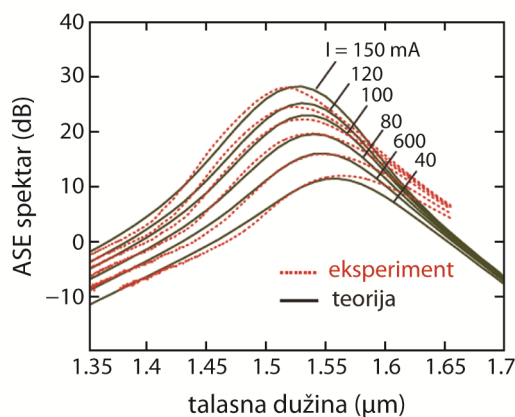
Konačno, pored linija koje se povezuju sa InGaAs prekrivnim (*cap*) slojem i InGaAlAs barijerama, može se uočiti dodatna linija na 0.955 eV koja je prisutna za sve analizirane uzorke i odgovara liniji detektovanoj na 0.9 eV za $T = 300$ K [Sl. 17(a)]. Posmatrana linija se može okarakterisati gotovo konstantnom energetsom pozicijom i nehomogenim širenjem (oko 30 meV), koji ne zavise od dizajna strukture, a njeno poreklo se povezuje sa osnovnim prelazom između podzona teških šupljina i elektrona u $\text{In}_{0.528}\text{Ga}_{0.234}\text{Al}_{0.238}\text{As}$ kvantnoj jami formiranoj u vidu vlažećeg sloja [71]. Na Sl. 17(b) energije na kojima se javljaju PR pikovi kao posledica prekrivnog i vlažećeg sloja obeležene su vertikalnim tačkastim linijama.

U cilju potvrde zaključaka izvedenih na osnovu eksperimentalnih rezultata i otkrivanja mogućih stanja i optičkih prelaza u kvantnoj jami koju čini vlažeći sloj, formiran je teorijski model baziran na metodi anvelopne funkcije koji uzima u obzir efekte naprezanja i neparaboličnosti [71]. Kako tačna debljina vlažećeg sloja nije poznata, zonska struktura je određivana za debljine vlažećeg sloja od 1 do 4 ML sa korakom od 1 ML. Na osnovu teorijskog modela izračunata je zavisnost energija

optičkih prelaza sa osnovnog stanja teških i osnovnog stanja lakih šupljina na osnovno stanje elektrona, a najbolje poklapanje sa eksperimentalno određenom energijom prelaza između stanja teških šupljina i elektrona na sobnoj temperaturi koja iznosi 0.9 eV dobijeno je za debljinu vlažećeg sloja od oko 2 ML. Debljina vlažećeg sloja određena na ovaj način je u saglasnosti sa predviđanjima baziranim na visoko-energetskoj elektronskoj difrakciji i transmisionalnoj elektronskoj mikroskopiji $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ slojeva različitog molskog sastava, koja ukazuju na debljinu od oko 6 Å, kao i predviđanjima na osnovu mikroskopije atomskih sila InAs/InP nanostrukture nalik na žice, koja pokazuju da formiranje ostrva počinje za InAs slojeve debljine između 1.5 i 3 ML. U jami koja odgovara vlažećem sloju se formira jedno elektronsko vezano stanje i po jedno vezano stanje za zone teških i lakih šupljina, ali se vezana stanja elektrona i lakih šupljina nalaze veoma blizu ivica diskontinuiteta odgovarajućih zona, pa su praktično degenerisana sa barijernim stanjima. Iz tog razloga u PR spektru je detektovana samo jedna karakteristična promena koja se može povezati sa vlažećim slojem, a koja odgovara prelazu sa stanja teških šupljina. Pored toga, elektronska stanja su veoma slabo konfinirana, što predstavlja još jedan razlog za otežanu detekciju PL emisije koja se javlja kao posledica vlažećeg sloja, čak i kada su eksitacione gustine dovoljno jake da ispune stanja u kvantnim crtama čitavog ansambla. Foto-generisani elektroni lako mogu da “pobegnu” iz oblasti kvantne jame u barijeru pre nego što dođe do njihove rekombinacije. Na osnovu analize eksperimentalnih i teorijskih rezultata, potvrđena je dvodimenzionalna kvantizaciona priroda vlažećeg sloja, kao i njegova optička aktivnost [71].

Primenom teorijskih modela moguće je dodatno analizirati optičke osobine materijala kvantnih crta, kao što su spektar luminiscencije, materijalno i modalno pojačanje i spektar pojačane spontane emisije, a zatim izvršiti poređenja sa dostupnim eksperimentalnim rezultatima [41], [54]. Primera radi, na Sl. 18 prikazano je poređenje teorijski i eksperimentalno dobijenih spektara pojačane spontane emisije (ASE) za poluprovodnički optički pojačavač (*Semiconductor Optical Amplifier*, SOA) na bazi kvantnih crta. Aktivna oblast pojačavača sastoji se iz četiri nominalno identična sloja kvantnih crta. Spektar je analiziran za različite struje injekcije. Rezultati simulacija bazirani su na pojednostavljenoj pravougaonoj geometriji crta sa efektivnim dimenzijama u ravni poprečnog preseka određenim na osnovu SEM i X-TEM (*Cross-*

Sectional Transmission Electron Microscopy) merenja i pretpostavljenom dužinom, koja je za oko jedan red veličine veća od širine (što odgovara strukturama nalik kvantnim žicama). Fitovanje teorijski dobijenih krivih sa eksperimentalnim rezultatima izvršeno je finim podešavanjem fluktuacija veličine, kojima dominira fluktuacija u visini [40].



Sl. 18. ASE spektar za poluprovodnički optički pojačavač za različite struje injekcije [40].

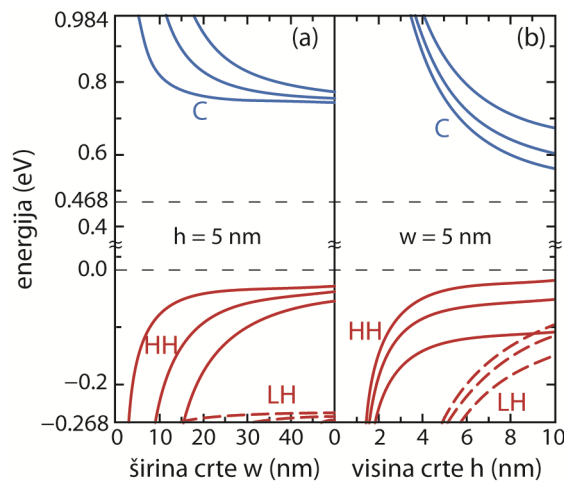
Aktivna oblast se sastoji od 4 sloja kvantnih crta.

Strogo gledano, kvantne crte omogućavaju konfiniranje nosilaca u sva tri prostorna pravca. Međutim, konfiniranje u pravcu jako izdužene dimenzije (kvantni indeks k) je manje izraženo nego u pravcu visine (kvantni indeks n) i širine (kvantni indeks m) [54]. Eksperimentalni rezultati prikazani na Sl. 18 potvrđuju da u ASE spektru ansambla kvantnih crta nema sekundarnih pikova koji bi bili posledica prelaza između stanja prvog reda ($01k$). Drugim rečima, ASE spektru doprinose samo prelazi između nekoliko prvih konfiniranih stanja sa kvantnim indeksima $00k$ [54]. Odsustvo sekundarnih pikova može se objasniti smanjenim konfiniranjem $01k$ stanja usled izražene kvantno-mehaničke sprege između crta u lateralnom pravcu (pravac širine). Širenje spektra mahom je posledica fluktuacija visine kvantnih crta, a u izvesnoj meri doprinosi nekoliko konfiniranih stanja koja se javljaju usled izdužene forme crte. U slučaju relativno velikih fluktuacija visina (oko 10% od srednje visine), spektar pojačanja ne zavisi od dužine crte, a ponašanje sistema odgovara strukturama nalik kvantnim žicama [41], [53], [54].

Poređenje numeričkih modela sa dostupnim eksperimentalnim rezultatima [54] pokazuje da se velike vrednosti pojačanja javljaju u relativno uskom opsegu talasnih

dužina (reda veličine nekoliko desetina nm), kao i da energija maksimuma pojačanja ne zavisi od gustine injektovanih nosilaca naelektrisanja. Takođe, maksimum pojačanja se ne pomera sa promenom fluktuacija po dužini, a vršna vrednost pojačanja slabo zavisi od varijanse fluktuacija po dužini. Za stanja $00k$ (000, 001 i 002) čiji prelazi dominiraju u formiranju spektra, nehomogeno širenje je manje izraženo ili uporedivo sa postojećim homogenim širenjem i iznosi oko 10 meV širine na polovini maksimalne vrednosti (FWHM), pa je širina spektra određena homogenim širenjem, a uticaj fluktuacija dužina se može zanemariti [54]. Međutim, evidentno je da fluktuacije u dimenzijama na složen način utiču na spektar pojačanja, pa je od interesa detaljno razmotriti njihov uticaj na optičke osobine. Zapravo, fluktuacije u dimenzijama dovode do širenja oštih pikova tipičnih za gustinu stanja kvantnih žica, pa iako kvantne crte u pogledu geometrije strukture u velikoj meri nalikuju kvantnim žicama, njihova gustina stanja ima specifične karakteristike koje se razlikuju u odnosu na kvantne žice i jame [41].

Uticaj fluktuacije veličina kvantnih crta na gustinu stanja može se analizirati posmatranjem zavisnosti energija vezanih elektrona i šupljina od širine i visine struktura (Sl. 19). Teorijska analiza je sprovedena za InAs kvantne crte narastane na AlGaInAs barijernom materijalu nenapregnutom u odnosu na InP supstrat [41]. Fluktuacije dimenzija u pravcu širine i visine opisuju se Gausovom raspodelom. Fluktuacija veličina kvantnih crta može se okarakterisati preko parametra fluktuacije Δ koji se

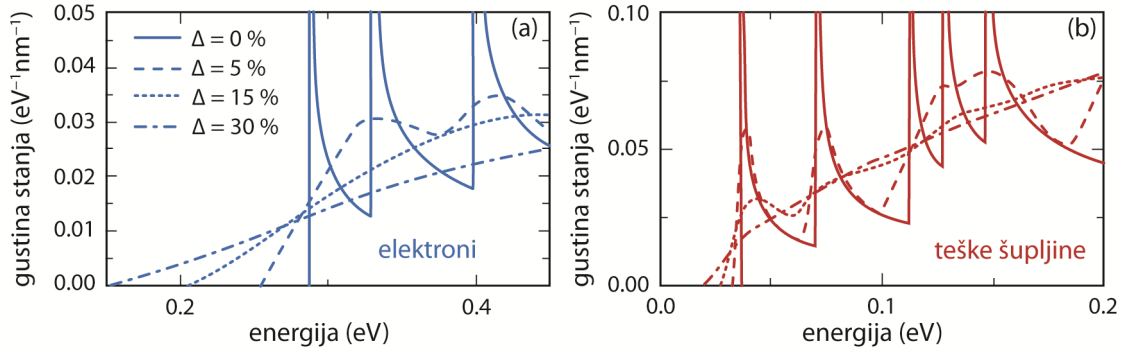


Sl. 19. Zavisnost energija tri najniže podzone u funkciji od širine (w) i visine (h) za provodnu zonu (CB), zonu teških šupljina (HH) i zonu lakih šupljina (LH) za (a) fiksiranu visinu strukture h i (b) fiksiranu širinu strukture w [41].

definiše kao količnik standardne devijacije i srednje vrednosti oko koje se grupišu dimenzije u ansamblu, $\Delta = \delta_x/x_{sr}$ [41]. Može se pretpostaviti da su fluktuacije širine i visine kvantnih crta iste ($\Delta_w = \Delta_h = \Delta$). Na osnovu dostupnih AFM i SEM fotografija uzoraka kvantnih crta procena je da su fluktuacije dimenzija u opsegu od $\Delta = 10\%$ do 30% od srednjih dimenzija u ansamblu [41]. Za potrebe kvalitativnog razmatranja, model je pojednostavljen tako što je usvojeno da je profil poprečnog preseka kvantnih crta pravougaoni, uz pretpostavku da ova aproksimacija ne utiče značajno na zaključke koji se odnose na gustinu stanja. Pored toga, pretpostavljeno je da sve crte imaju istu dužinu, jer fluktuacije ove dimenzije imaju mali uticaj na zonsku strukturu i profil pojačanja, onda kada je ta dimenzija značajno veća od širine i visine.

Za kvantnu crtu koja ima dimenzije jednake pretpostavljenim srednjim dimenzijama ansambla ($Z = 300$ nm, $w = 25$ nm i $h = 5$ nm) postoje tri vezana stanja za elektrone. Na Sl. 19 su prikazana samo prva tri šupljinska stanja, iako je, zbog veće efektivne mase, za šupljine broj vezanih stanja veći. Za fiksiranu vrednost visine ($h = 5$ nm), najniže dve energije u provodnoj zoni, kao i energije teških šupljina pri vrhu valentne zone, za dovoljno velike vrednosti širine ($w > 20$ nm) postaju praktično nezavisne od promene širine [Sl. 19(a)]. Sa druge strane, u slučaju kada je širina fiksirana ($w = 25$ nm), a posmatra se zavisnost energija od visine [Sl. 19(b)], uočljiva je izrazita promena energija konfiniranih stanja u provodnoj zoni i zoni lakih šupljina. Energije konfiniranih stanja zone teških šupljina postaju “neosetljive” na promene visine za relativno male vrednosti visine, kao posledica veće efektivne mase koju imaju teške šupljine u odnosu na elektrone i lake šupljine. Takođe, može se uočiti da su stanja lakih šupljina značajno energetski razdvojena od stanja teških šupljina, pa se smatra da njihov uticaj na optičke osobine nije od velikog značaja [41]. Međutim, treba imati u vidu da je teorijski model na osnovu kog je izvršena ova analiza zasnovan na rešavanju jednozonskih Schrödinger-ovih jednačina za provodnu zonu i za valentnu zonu, posebno za lake i teške, te kao takav ne uzima u obzir međusobni uticaj ovih zona. Konačno, na osnovu Sl. 19 može se zaključiti da se najizraženija promena energije javlja za elektronska stanja i mahom je posledica fluktuacije visine kvantnih crta [41].

Na Sl. 20 prikazana je gustina stanja za elektrone i teške šupljine u zavisnosti od energije za različite vrednosti parametra fluktuacije veličina. Kada je $\Delta = 0$ gustina stanja elektrona ima zavisnost tipičnu za jednodimenzionalne sisteme (kvantne žice) sa



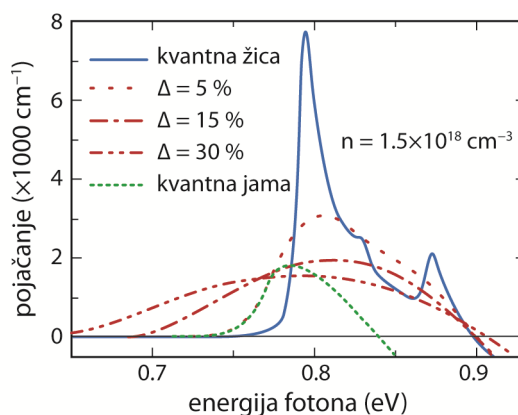
Sl. 20. Gustina stanja za elektrone i teške šupljine za različite fluktuacije veličina, pod pretpostavkom da su fluktuacije duž x i duž y pravca jednake [41].

izraženim ostrim pikovima koji odgovaraju vezanim stanjima [Sl. 20(a)]. Za $\Delta = 5\%$ u gustini stanja se i dalje mogu uočiti pikovi, što ukazuje da i za ovu fluktuaciju struktura odgovara jednodimenzionalnom sistemu. Međutim, u konkretnom primeru prva dva pika gustine stanja elektrona se spajaju u jedan, pošto je njihova energetska razlika relativna mala. Sa daljim porastom parametra Δ , gustina stanja pojedinih nivoa okarakterisana ostrim pikovima se širi i maksimalna vrednost pikova opada, tako da za $\Delta = 15\%$ ili 30% gustina stanja elektrona postaje glatka i ima oblik koji podseća na gustinu stanja za masivni poluprovodnički materijal. Značajna gustina stanja od $0.01 \text{ eV}^{-1}\text{nm}^{-1}$ može se uočiti u energetskom opsegu od 0.25 do 0.29 eV, neposredno ispod ivice prve podzone koja se javlja za idealnu kvantnu žicu (fluktuacija dimenzija 0%). Ova nisko-energetska stanja, koja se javljaju u kvantnim crtama sa većim dimenzijama poprečnog preseka, imaju važnu ulogu u određivanju optičkih osobina kvantnih crta, posebno pri niskim nivoima injekcije.

Pikovi u gustini stanja teških šupljina mogu se uočiti za fluktuacije dimenzija od $\Delta = 5\%$ i 15% . Pikovi za $\Delta = 5\%$ su veoma jasni i gustina stanja ima zavisnost koja liči na jednodimenzionalne sisteme, dok je za $\Delta = 15\%$ izražen samo prvi pik [Sl. 20(b)]. Gustina stanja za teške šupljine ima više izraženu jednodimenzionalnu karakteristiku kada je fluktuacija po veličinama mala, zbog toga što su energije teških šupljina manje osetljive na fluktuaciju veličina. Za $\Delta = 30\%$, gustina stanja teških šupljina menja nagib u blizini ivice najniže podzone za gustinu stanja kvantne žice, na energiji od oko 0.04 eV. Za manje energije, slično kao i za elektronsku gustinu stanja, javlja se značajna gustina stanja od $0.01 \text{ eV}^{-1}\text{nm}^{-1}$. Međutim, energetsko širenje ovih nisko-energetskih nivoa je mnogo manje (u opsegu od 0.01 eV) nego kod elektrona [Sl. 19 i Sl. 20]. Na

osnovu sprovedene analize, može se zaključiti da je za široku spektralnu karakteristiku pojačavačkog materijala na bazi kvantnih crta dominantno odgovorno širenje elektronskih nivoa, a ne nivoa teških šupljina [41].

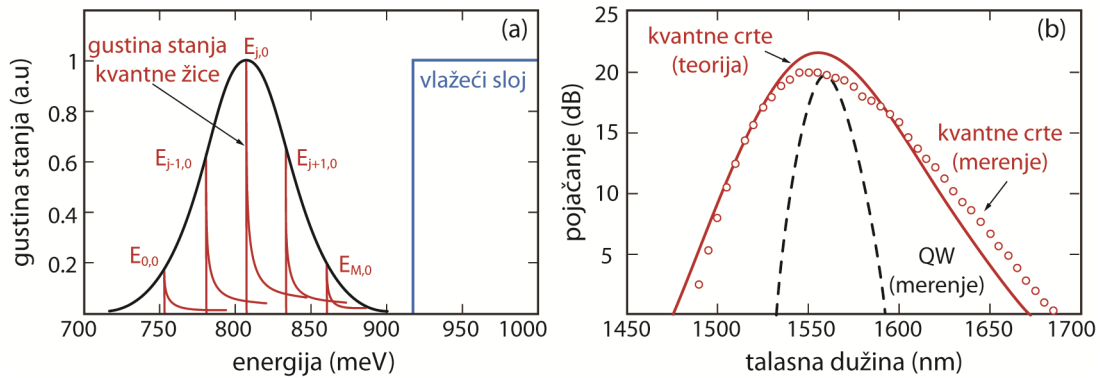
Spektar pojačanja kvantnih crta analiziran je u zavisnosti od fluktuacije po dimenzijama Δ [41]. Na Sl. 21 prikazano je poređenje spektra pojačanja za kvantne crte sa različitim Δ i kvantne jame (QW). Spektar pojačanja za kvantne crte sa fluktuacijama $\Delta = 0\%$ označen je kao spektar pojačanja kvantne žice. Kvantna jama se modeluje pravougaonom žicom dimenzija $h = 5$ nm i $z = 250$ nm, koja ima istu efektivnu masu i konfinirajući potencijal kao i kvantna crta. Na ovaj način, razlike u prikazanim karakteristikama pojačanja mogu se pripisati isključivo razlikama u gustini stanja i raspodeli naelektrisanja. Spektar pojačanja zavisi od gustine injektovane struje, pa je poređenje na Sl. 21 prikazano za koncentraciju injektovanih nosilaca $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ za koju su pikovi pojačanja za kvantne crte sa fluktuacijama $\Delta = 15\%$ i 30% uporedivi sa pikom pojačanja QW strukture, koji iznosi oko 2000 cm^{-1} . Ova vrednost pojačanja je nešto veća od očekivane za kvantne crte (tipično pojačanje je između 1000 i 1500 cm^{-1}), ali omogućava ravnopravno poređenje karakteristika spektra različitih struktura, jer je vršna vrednost pojačanja uporediva. Na Sl. 21 je prikazan samo spektar za TE polarizaciju (koji odgovara x - i z -pravcu, Sl. 10), jer TM polarizacija ima veće energije optičkih prelaza (pošto se za prelaze koriste zone lakih šupljina), pa prema tome zahteva injekciju veće gustine nosilaca da bi bila primetna. Takođe, zbog zanemarenog mešanja zona lakih i teških šupljina, spektri za X i Z polarizaciju se ne razlikuju.



Sl. 21. Spektar pojačanja kvantne crte, kvantne jame i kvantne žice za koncentraciju injektovanih nosilaca $n = 1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [41].

Sa povećanjem fluktuacija dimenzija pik pojačanja za kvantne crte se smanjuje, a širina spektra raste. Spektar pojačanja za ansambl kvantnih crta sa fluktuacijom $\Delta = 5\%$ po obliku podseća na spektar pojačanja kvantne jame, kod kog se pojačanje brzo povećava do maksimalne vrednosti, a zatim nešto sporije opada na nulu. Oštri pikovi se lako uočavaju u spektru kvantnih žica, koji ima tipičnu jednodimenzionalnu karakteristiku. Brze promene u spektrima kvantnih jama, žica i crta sa malom fluktuacijom dimenzija javljaju se kao posledica oštarih promena u gustini stanja. Suprotno tome, za kvantne crte sa fluktuacijama $\Delta = 15$ i 30% , pojačanje se sporo menja od nule do maksimalne vrednosti, a zatim opada na nulu sa brzinom promene koja je znatno manja nego kod prethodna tri spektra. Kao rezultat, spektar pojačanja za kvantne crte je prilično ravan u okolini maksimuma pojačanja (promene u pojačanju u okolini maksimuma su od 6% do 15% , kada su emisone energije za oko 30 meV veće od pozicija maksimalnog pojačanja). Slaba zavisnost pojačanja od energije fotona u okolini maksimuma pojačanja otvara mogućnost za primenu kvantnih crta u aktivnim oblastima uređaja kod kojih je potrebno podešavanje talasne dužine emisije. Generalno gledano, maksimalno pojačanje za fluktuacije $\Delta = 15$ i 30% je dosta manje nego za QWR i kvantne crte sa $\Delta = 5\%$, ali je i dalje uporedivo sa pojačanjem kvantnih jama, što ukazuje da se kvantne crte mogu koristiti u fotonskim komponentama kao pojačavački materijal sa malim pragom pojačanja.

Osobina širokog spektra pojačanja je mahom rezultat izražene distribucije elektronskih energetskih nivoa. Za energije koje su ispod oštrog pika pojačanja za QWR spektar, veliko pojačanje može biti prisutno za energetski opseg od 0.7 do 0.78 eV za fluktuacije 15% i 30% . Ovi delovi spektra potiču od prelaza koji uključuju energetske nivoe u nisko-energetskom repu elektronske gustine stanja, tj. nivoa koji potiču od kvantnih crta većih dimenzija. Još jedan faktor koji određuje širinu spektra je raspodela naelektrisanja. Na Sl. 20 može se primetiti da je elektronska gustina stanja manja od gustine stanja šupljina. Kao posledica, disperzija energetskih nivoa elektrona je dosta veća nego za šupljine, pa je profil pojačanja dominantno određen raspodelom energetskih stanja elektrona. Ovo može objasniti zašto pik u gustini stanja šupljina za fluktuaciju $\Delta = 15\%$ ne dovodi do formiranja pika u spektru pojačanja.

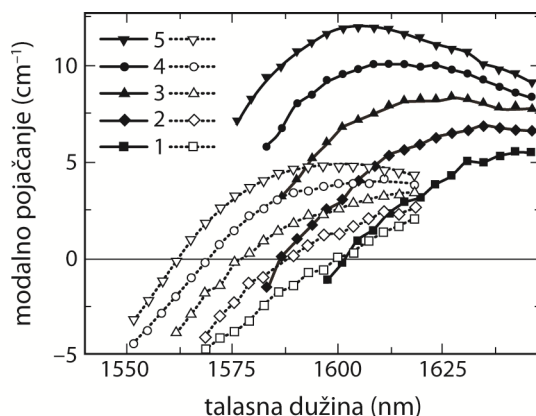


Sl. 22. (a) Funkcija gustine stanja QDash pojačavačkog materijala nehomogeno proširena Gauss-ovom anvelopnom funkcijom. (b) Izračunato (puna linija) i mereno (kružići) pojačanje za QDash i QW SOA (isprekidana linija) [39].

U cilju realističnog i više kvantitativnog razumevanja, prilikom simulacije poluprovodničkih optičkih pojačavača na bazi kvantnih crta uzeta je u obzir gustina stanja koja odgovara strukturama nalik kvantnim žicama [39]. Na Sl. 22(a) šematski je prikazana normalizovana funkcija gustine stanja za ansambl kvantnih crta. Pretpostavljeno je da se ansambl kvantnih crta može podeliti na grupacije struktura sličnih geometrijskih karakteristika, čije su zajedničke funkcije gustine stanja homogeno proširene i mogu se opisati konvolucionim integralom Lorencove funkcije sa tipičnom gustinom stanja koja ima recipročnu korenu zavisnost od energije. Gustina stanja ansambla određena je kao nehomogeno proširena gausovska anvelopa pojedinačnih gustina stanja. Usled odstupanja pojedinačnih funkcija gustina stanja od δ -funkcije koja odgovara ansamblima kvantnih tačaka, anvelopna funkcija gustine stanja koja odgovara ansamblu je asimetrična i može se preklapati sa kontinualnim stanjima u vlažećem sloju, koji je modelovan kao kvantna jama sa jednim energetskim stanjem [39].

Poređenje ovog modela sa eksperimentalnim rezultatima daje veoma dobro kvantitativno poklapanje. Na Sl. 22(b) prikazano je poređenje izračunatog spektra pojačanja QDash-SOA (puna linija) sa pojačanjem izračunatim na osnovu podataka dobijenih iz ASE merenja (otvoreni kružići). Usled efekta zonske ispune i veće gustine stanja na višim energijama, mereno pojačanje ima više izraženu asimetriju u odnosu na rezultate dobijene simulacijom [39]. Na slici je prikazana i kriva pojačanja za QW-SOA, koja ima oko tri puta užu spektralni opseg od QDash-SOA.

Kao što je već pomenuto, anizotropija u obliku kvantnih crta ima za posledicu polarizacionu zavisnost matričnih elemenata prelaza, pa dovodi do anizotropije u modalnom pojačanju, kao i u alfa-faktoru. Zavisnost optičkih osobina od orijentacije aktivne oblasti lasera bazirane na kvantnim crtama ispitivana je eksperimentalno, određivanjem modalnog pojačanja na osnovu ASE spektra primenom metode Hakki-Paoli [74]. Ispitivana su dva lasera koja se razlikuju samo po orijentaciji kvantnih crta u odnosu na osu laserskog rezonatora, pa su u jednom slučaju kvantne crte bile orijentisane tako da se njihova izdužena dimenzija poklapa sa osom rezonatora (paralelna orijentacija), a u drugom slučaju izdužena dimenzija je bila normalna na osu rezonatora (normalna orijentacija). Maksimalna vrednost pojačanja je oko 2.3 puta veća u slučaju normalne orijentacije, a pozicija maksimuma je pomeren za oko 10 nm ka većim talasnim dužinama u odnosu na paralelnu orijentaciju (Sl. 23). Ova razlika se može objasniti činjenicom da se, kada se kvantne crte modeluju kao kvantne žice, što je uobičajeni pristup, polarizaciona zavisnost matričnog elementa prelaza razlikuje za teške i lake šupljine. Kompresivno naprezanje u kvantnim crtama dovodi do toga da je najniži međuzonski prelaz primarno prelaz između provodne zone i zone teških šupljina, koji ima najveći doprinos onda kada je električno polje paralelno sa osom kvantne žice. Pomeraj u piku modalnog pojačanja sugerise povećanje relativnog doprinosa pojačanju od strane prelaza između provodne zone i zone lakih šupljina kada se orijentacija promeni iz normalne u paralelnu, jer ovi prelazi imaju maksimalnu snagu kada je



Sl. 23. Zavisnost modalnog pojačanja lasera na bazi kvantnih crta od talasne dužine za normalnu orijentaciju (pune linije) i paralelnu orijentaciju (isprekidane linije) kvantnih crta u odnosu na rezonator. Oznake 1- 5 odgovaraju redom gustinama struja od 250, 285, 321, 356 i 392 A/cm², respektivno [74].

električno polje normalno na osu žice. Pored toga, analiza Sl. 23 pokazuje da sa povećanjem gustine struje injekcije dolazi do plavog pomeraja spektra što se pripisuje efektu zonske ispunje. Relativno mali broj najvećih crta koje doprinose prelazima na najmanjim energijama se prve naseljavaju nosiocima, dok se brojnije manje crte naseljavaju sa povećanjem gustine struje. Efekat saturacije pojačanja javlja se za obe orijentacije na većim talasnim dužinama. Sličnim metodom može se odrediti i alfa faktor za koji se pokazuje da ima tipičnu zavisnost koja se odlikuje minimumom, uz blago opadanje za manje talasne dužine i brzi porast na većim talasnim dužinama. Alfa faktor ima veću vrednost za slučaj paralelne orijentacije.

1.5. Pregled modela za određivanje elektronskih i optičkih karakteristika kvantnih crta

Primena numeričkih modela za određivanje elektronskih i optičkih osobina kvantnih crta omogućava kvantitativno predviđanje karakteristika pojačanja i spontane emisije i njihovo povezivanje sa materijalnim parametrima, a samim tim i sa tehnološkim parametrima koji definišu proces fabrikacije ovih struktura. Za određivanje elektronske strukture kvantnih tačaka, postoji više teorijskih modela različite sofisticiranosti, koji uzimaju u obzir efekte naprežanja, Coulomb-ove interakcije između vezanih naelektrisanja i različite geometrijske oblike struktura [75], [76]. Iako ove modele odlikuje velika preciznost, njihova eksploatacija zahteva značajne procesorske i memorijske resurse. Pored toga, kada su u pitanju kvantne crte, usled izraženih fluktuacija dimenzija kvantnih crta, izračunavanja je potrebno izvršiti za svaku veličinu crte u ansamblu kako bi se ispravno kvantifikovali efekti nehomogenog širenja na spektralne karakteristike, pa je proces određivanja elektronske strukture jako zahtevan po pitanju vremena izračunavanja. Iz tog razloga, uobičajeno se uvode određene aproksimacije u pogledu oblika crte, modelovanja efekata naprežanja i metoda rešavanja Schrödinger-ove jednačine.

Značajno pojednostavljenje ostvaruje se ukoliko se vezana stanja u usamljenoj kvantnoj crti određuju rešavanjem jednozonske Schrödinger-ove jednačine u aproksimaciji efektivnih masa, za konačne barijere i različite efektivne mase za elektrone i teške šupljine i za materijal crte i za barijerni materijal [41], [54]. U okviru modela datih u referencama [41] i [54], zanemaruje se sprežanje između lakih šupljina i

otcepljene zone, uz opravdanje da su za kompresivno napregnute InAs crte ove dve zone dovoljno udaljene od vrha valentne zone. Pored toga, uvodi se aproksimacija u pogledu oblika kvantne crte i realistični sočivasti profil poprečnog preseka ekvivalentira se pravougaonim oblikom iste površine poprečnog preseka. Pojačanje i spektar spontane emisije za aktivni materijal određuju se polazeći od matrice gustine, uzimajući u obzir doprinose rekombinacije između svih stanja u provodnoj i valentnoj zoni [54]. Fluktuacija u veličini crta modeluje se uz pretpostavku da je raspodela svake od dimenzija strukture određena nezavisnom Gausovom raspodelom sa odgovarajućom srednjom vrednošću i standardnom fluktuacijom. Verovatnoće zauzetosti u konfiniranim stanjima i vlažećem sloju predstavljene su Fermijevom raspodelom koja je određena elektronskim i šupljinskim kvazi Fermijevim nivoima. Pretpostavljeno je da su vrednosti za kvazi Fermijeve nivoe konstantni za sve crte u ansamblu, odnosno da ne zavise od veličine crta.

Proces samo-organizovanog narastanja neizbežno dovodi do nastanka vlažećeg sloja u formi tankog filma na kom dolazi do formiranja kvantnih ostrvaca. Prisustvo vlažećeg sloja značajno utiče na konfiniranje nosilaca u pobuđenim stanjima i može degradirati emisione performanse. Uprkos značajnom uticaju vlažećeg sloja, veliki broj modela koji se koristi za ispitivanje električnih i optičkih osobina zanemaruje prisustvo ovog tankog sloja i ne određuje samosaglasno energetska stanja posmatrajući kvantne crte, barijere i vlažeći sloj kao sistem. Takođe, u velikom broju slučajeva, nanostrukture se tretiraju kao izolovane, u smislu da se posmatra jedna crta u potpunosti okružena barijernim materijalom [54]. Međutim, relativno velika gustina struktura u ansamblima kvantnih crta, koja je mahom prioritet kako bi se postiglo dovoljno veliko modalno pojačanje, uslovljava kvantno-mehaničko sprežanje između struktura koje nije zanemarljivo, a dodatno je pojačano prisustvom vlažećeg sloja. Prilikom izračunavanja naseljenosti konfiniranih stanja i nakon toga, spektra pojačanja, prisustvo vlažećeg sloja se uobičajeno uključuje kao generičko stanje sa odgovarajućom efektivnom degeneracijom koja se procenjuje iz dvodimenzionalne gustine stanja. Tipično, za energiju stanja u vlažećem sloju se pretpostavlja energija ivica provodne i valentne zone (barijerna energija) ili neka vrednost koja se nalazi neposredno ispod ivica zone. Kako većina ovih modela razmatra samo osnovno stanje, zanemaruju se efekti koji se javljaju kao posledica vlažećeg sloja i uticaj velike gustine crta na druga viša energetska stanja.

Uz ovakve aproksimacije pretpostavlja se da se svaka nanostruktura ponaša nezavisno od ansambla kome pripada.

Međutim, u realnim QDash strukturama površinska pokrivenost uzorka crtama je veća od 50% i prisustvo vlažećeg sloja značajno utiče na elektronske i optičke osobine. Za razliku od prethodno pomenutih modela, model korišćen u referenci [65] uzima u obzir prisustvo vlažećeg sloja i razmatra njegov uticaj. Rezultati simulacija pokazali su da vlažeći sloj negativno utiče na širinu spektra optičkog pojačanja, ograničava maksimalno pojačanje na sobnoj temperaturi i smanjuje diferencijalno pojačanje. Dodatno, ovaj model uzima u obzir kvantno-mehaničko sprezanje između susednih crta, koje dovodi do toga da pobuđena elektronska stanja sa energijom ispod ivice zone u barijeri postaju kvazi-kontinualna, što ima za posledicu da elektronske talasne funkcije nisu više lokalizovane u izolovanim crtama. Sa druge strane, odgovarajuća pobuđena šupljinska stanja i dalje ostaju dobro lokalizovana unutar crta, zahvaljujući većoj efektivnoj masi. Iz ovih razloga neophodno je samosaglasno modelovanje čitavog ansambla kvantnih crta kako bi se odredio spektar pojačanja u realnim uslovima. Međutim, modeli koji uzimaju u obzir samosaglasnu zonsku strukturu, uobičajeno zanemaruju stohastičku distribuciju veličina kvantnih crta i pretpostavljaju da su sve crte iste veličine i raspoređene u jednodimenzionalni periodični niz [65].

Nešto drugačiji pristup u modelovanju podrazumeva kombinaciju pojednostavljene geometrije kvantnih crta i sofisticiranog 8×8 k.p metoda za određivanje elektronske strukture i optičkih osobina kvantnih crta korišćenih za realizaciju aktivnih oblasti poluprovodničkih lasera sa emisijom u okolini $1.55 \mu\text{m}$ [73]. Za razliku od uobičajenih pristupa koji posmatraju samo poprečni presek kvantnih crta i aproksimiraju ga pogodnim geometrijskim oblikom, ova analiza pretpostavlja da su kvantne crte oblika kvadra, pa razmatra uticaj naprezanja i trodimenzionalnog konfiniranja.

Za određivanje elektronske strukture i spektra fotoluminiscencije kvantnih crta oblika kvadra u step-kvantnim jamama, korišćen je Luttinger-Kohn-ov 4×4 Hamiltonijan za određivanje šupljinskih stanja i jednozonska Schrödinger-ova jednačina u aproksimaciji efektivnih masa za elektronska stanja [47]. Naprezanje u kvantnim crtama i u kvantnim jamama uzeto je u obzir, a analiziran je i među-uticaj naprezanja i povećanja dimenzija kvantnih crta na povećanje talasne dužine emisije.

Slično tome, prilikom modelovanja kvantnih crta sa trapeznim poprečnim presekom, korišćen je 8×8 k.p metod i jednozonska Schrödinger-ova jednačina u aproksimaciji efektivnih masa [72]. Zahvaljujući činjenici da je visina kvantnih crta mnogo manja od širine i dužine, deformacije unutar kvantnih crta su modelovane uz pretpostavku da se kvantne crte mogu smatrati tankim epitaksijalnim slojem. Pored toga, imajući u vidu da je za konkretan oblik kvantnih crta gornja površina strukture ravna i relativno široka, potencijali teških i lakih šupljina su dosta razdvojeni, pa se mešanje ovih zona može zanemariti. Iz tih razloga, za ovaj tip struktura, moguće je razmatrati samo prelaze između provodne zone i zone teških šupljina. Za određivanje konfinirajućeg potencijala, energetskog procepa i efektivnih masa za balkovski InAs materijal u prisustvu naprezanja korišćen je 8×8 k.p metod primenjen na masivni InAs materijal. Ovako izračunati parametri su korišćeni za određivanje svojstvenih energija i talasnih funkcija primenom jednozonskog Hamiltonijana u aproksimaciji efektivne mase.

Poglavlje 2.

KVANTNE CRTE U FOTONSKIM KOMPONENTAMA

Jedan od važnih aspekata primene kvantnih tačka i crta u optoelektronskim komponentama je mogućnost kontrole materijalnih parametara podešavanjem geometrije korišćenih nanostrukture, bez promene kompozicije materijala ili makroskopskog dizajna slojeva [39]. Iako veliki broj osobina uređaja na bazi kvantnih crta ukazuje na sličnosti sa kvantnim žicama, očuvane su i neke osobine specifične za kvantne tačke, kao što su lokalna rekombinacija naelektrisanja i nehomogeno distribuiran spektar pojačanja [39]. Kombinacijom ovih osobina ostvarene su neke sasvim neobične performanse uređaja na bazi kvantnih crta, kao što je istovremeno pojačavanje većeg broja kanala na različitim talasnim dužinama bez preslušavanja do brzine od 10 Gb/s, kao i pojačavanje veoma brzih signala na 40 Gb/s uz redukciju šuma i bez efekta utiskivanja u zasićenim optičkim pojačavačima [39]. U poređenju sa ansamblima kvantnih tačaka kod kojih mali broj elektronskih i šupljinskih stanja doprinosi pojačanju, kvantne crte mahom imaju jedno ili dva kvantizovana stanja u odnosu na transversalni poprečni presek i veliki broj kvantizacionih maksimuma u longitudinalnom pravcu [54]. Ova longitudinalno konfinirana stanja se mogu popuniti pri relativno malim gustinama struje injekcije, što u kombinaciji sa izraženim fluktuacijama veličine poprečnog preseka, dovodi do formiranja širokog spektra pojačanja [39]. U tom smislu, pojačavački materijal na bazi kvantnih crta je dobar kandidat za fabričaku različitih fotonskih komponenata koje imaju koristi od širokog spektra optičkog pojačanja, kao što su superluminiscentne poluprovodničke diode, poluprovodnički optički pojačavači i monomodni laseri koji pokrivaju opseg 1400-1650 nm, kao i aktivni talasovodi za podesive lasere sa eksternim rezonatorom [54]. Napredak u tehnologiji fabričaku i materijalima korišćenim za realizaciju crta omogućio je pomeranje talasne dužine međuzonske emisije na iznad 2 μm [47], a realizovani su i prvi kvantno-kaskadni laseri koji koriste

kvantne crte [48]. Međutim, iako su protekle decenije sprovedena intenzivna istraživanja sa stanovišta primene kvantnih tačaka za generaciju i detekciju svetlosti u srednjoj infracrvenoj oblasti [49], kvantne crte još uvek nisu dobile značajnu pažnju u pogledu eksploatacije ove spektralne oblasti.

2.1 Kvantne crte kao aktivna oblast u međuzonskim laserima

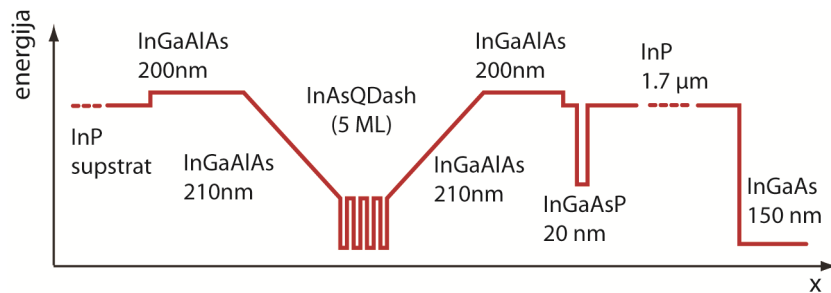
Poluprovodnički laseri predstavljaju fotonske komponente koje su zahvaljujući efektu kvantnog konfiniranja, kroz primenu kvantnih jama sa precizno kontrolisanim dimenzijama i kompozicijom, ostvarile zapaženo unapređenje performansi [77]. Zahvaljujući modifikacijama u zonskoj strukturi i gustini stanja, sa daljim povećanjem stepena konfiniranja očekivano je dodatno usavršavanje performansi lasera, u pogledu ostvarivanja manje gustine struje praga, većeg diferencijalnog pojačanja i manjeg alfa-faktora [57]. Međutim, uprkos oštrijoj funkciji gustine stanja koju obezbeđuju nanostrukture sa većim stepenom konfiniranja, fluktuacije po dimenzijama usled samo-organizovanog narastanja dovode do nehomogenog širenja spektra, što za posledicu ima smanjenje optičkog pojačanja [77].

Nezaobilazne komponente u optičkim komunikacionim sistemima su, poluprovodnički laseri sa talasnom dužinom emisije između 1.3 μm i 1.55 μm (*long-wavelength* laseri), zahvaljujući činjenici da je za standardno optičko vlakno na talasnoj dužini 1.3 μm minimalna materijalna disperzija, dok je na 1.55 μm minimalno optičko slabljenje [77]. Laseri na bazi kvantnih tačaka, koji mogu da obezbede emisiju na talasnoj dužini 1.3 μm , već su prepoznati kao izvori nove generacije za optičke telekomunikacione sisteme i shodno tome intenzivno su proučavani proteklih decenija [78]. Međutim, kao što je već napomenuto, primena kvantnih tačaka za ostvarivanje emisije na talasnoj dužini 1.55 μm je problematična, zbog velikog naprezanja koje se javlja za veće dimenzije struktura. Tehnološki procesi su uslovili da se za veće talasne dužine aktivne oblasti realizuju primenom kvantnih crta, što za posledicu ima nešto drugačije performanse uređaja od onih na bazi kvantnih tačaka.

Jedna od interesantnih karakteristika kvantnih tačaka i crta je širok spektar pojačanja, pa eksploatacija ovih nanostrukture unutar aktivnih oblasti poluprovodničkih lasera omogućava realizaciju širokopojasnih lasera. Širokopojasni laseri nalaze primenu u optičkim telekomunikacijama, detekciji različitih hemijskih agenasa, atmosferskih i

planetarnih gasova, optičkoj metrologiji i spektroskopiji visoke preciznosti, biomedicinskom imidžingu, itd [22]. Prvobitne realizacije bazirale su se na primeni kvantnih tačaka, koje širok spektar pojačanja obezbeđuju zahvaljujući nehomogenosti struktura u ansamblu. Pažljivim projektovanjem ovih nehomogenosti i energetskih razlika između susednih kvantizovanih stanja, stimulisana emisija se može ostvariti istovremeno iz više različitih stanja u prostorno izolovanim tačkama unutar istog ansambla [67]. Slično tome, ansamblu kvantnih crta sadrže strukture koje se značajno razlikuju i po obliku i po dimenzijama, a variraju od struktura oblika tačaka do struktura oblika žica konačne dužine. Ova inherentna osobina ansambla kvantnih crta omogućava da se relativno lako prevaziđu izazovi postavljeni pred epitaksijalni nano-inženjering za fabrikaciju izraženo nehomogenog pojačavačkog materijala na bazi kvantnih tačaka. Nehomogene kvantne crte obezbeđuju izraženo širenje energija u konfinirajućem potencijalu, što dovodi do proširene karakteristike optičkog pojačanja i čini ovaj materijal veoma pogodnim za fabrikaciju širokopojasnih optičkih naprava kao što su superluminiscentne diode.

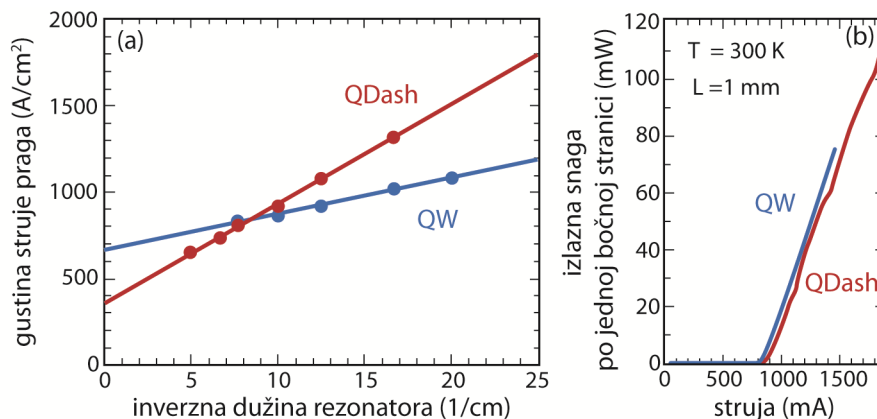
Jedan od primera realizacije su širokopojasne laserske diode koje koriste samoorganizovane kvantne crte na InP supstratu, a omogućavaju emisiju u opsegu talasnih dužina širine 76 nm u okolini 1.64 μm na sobnoj temperaturi [67]. Značajno veća fluktuacija u efektivnoj zapremini u ansamblima kvantnih crta u odnosu na ansamble kvantnih tačaka, dovodi do toga da se inverzna naseljenost unutar pojedinačnih kvantnih crta u aktivnom materijalu ostvaruje pri različitim gustinama struje injekcije, u zavisnosti od dimenzija pojedinačnih struktura. Pri manjim gustinama struje injekcije, inverzna naseljenost se dominantno uspostavlja u tačkastim crtama manje dužine (sa manjom aktivnom zapreminom), koje usled jačeg lateralnog konfiniranja naelektrisanja (pa i većeg integrala gustine stanja) ostvaruju veliki koeficijent pojačanja. Sa druge strane, duže crte, zbog veće aktivne zapremine imaju veći optički faktor konfiniranja, što povećava modalno pojačanje. Međutim, zbog slabijeg elektronskog konfiniranja, duže crte zahtevaju jaču injekciju za uspostavljanje inverzne naseljenosti. Sa povećanjem injekcije, stimulisana emisija se potencijalno javlja i u dužim crtama, sa slabijim elektronskim konfiniranjem. Zbog većih dimenzija, ove strukture dominantno doprinose emisionim linijama na većim talasnim dužinama, što dovodi do izraženog crvenog pomeraja u talasnoj dužini laserskog zračenja [67].



Sl. 24. Šematski prikaz zonske strukture QDash lasera na (001) InP supstratu. Smer narastanja je sa leva na desno. Svi slojevi su nenapregnuti izuzev InAs kvantnih crta [39].

Prilikom fabrikacije lasera, pojačavački materijal na bazi kvantnih crta uobičajeno se narasta unutar posebnog heterostruktturnog talasovoda koji se realizuje, ili kao SCH struktura, ili kao SCH struktura sa gradijentnom promenom indeksa prelamanja (*GRaded INdex Separate Confinement Heterostructure*, GRINSCH). Uobičajena orijentacija kvantnih crta je takva da se ostvari maksimalni dipolni matrični element što se postiže kada je izdužena dimenzija kvantnih crta normalna u odnosu na osu optičkog rezonatora [53]. Tipičan dizajn strukture sa 4 sloja kvantnih crta u aktivnoj oblasti prikazan je na Sl. 24 [39]. Ovakav dizajn omogućava da se za laser dužine 1 mm i širine 100 μm postignu male gustine struje transparencije od 1 kA/cm² u širokom opsegu talasnih dužina. Na sobnoj temperaturi emisiona talasna dužina ovog lasera je 1.88 μm. Primena DWELL dizajna omogućava povećanje veličine crte bez degradacije materijala [47] i povećava efikasnost zahvata nosilaca naelektrisanja.

U cilju direktnog poređenja performansi QDash i QW lasera, analiziran je SCH dizajn sa 4 aktivna sloja kvantnih crta, odnosno 4 kvantne jame. Širina talasovoda lasera je 100 μm, a analizirani su rezonatori različitih dužina. Na Sl. 25(a) prikazana je zavisnost gustine struje praga od inverzne dužine rezonatora, a na Sl. 25(b) izlazne optičke karakteristike za oba tipa lasera [40]. Merenja su sprovedena na sobnoj temperaturi u impulsnom režimu. U kraćim rezonatorima, manja vrednost modalnog pojačanja za aktivnu oblast na bazi kvantnih crta (zbog manjeg optičkog faktora konfiniranja) dovodi do toga da je gustina struje praga QDash lasera veća nego za QW laser. Suprotno tome, u dužim rezonatorima, uslov inverzne naseljenosti u QDash laserima se zbog smanjene zapremine aktivnog materijala i povećane gustine stanja, postiže za manje vrednosti gustine struje nego kod QW lasera. Na osnovu rezultata prikazanih na Sl. 25(a), može se zaključiti da se korišćenjem QDash aktivnih slojeva



Sl. 25. (a) Gustina struje praga u zavisnosti od inverzne dužine rezonatora za QDash i QW širokopojasni laser širine $100 \mu m$ sa uporedivim dizajnom talasovoda i četiri aktivna sloja. (b) Izlazna optička karakteristika QDash i QW lasera za rezonator dužine $L = 1 mm$ [40].

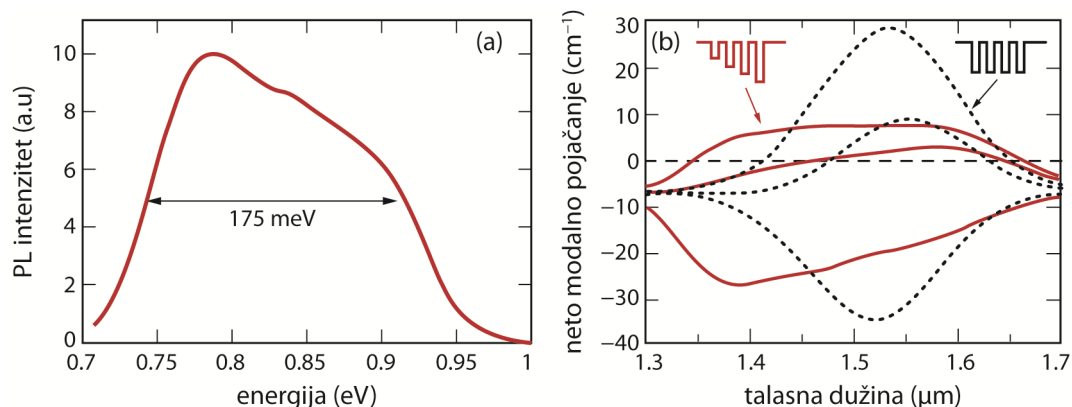
gustina struje praga može smanjiti skoro dva puta, do ekstrapolirane vrednosti od oko $350 A/cm^2$ [40]. U okolini tačke u kojoj dolazi do ukrštanja zavisnosti gustine struje praga od inverzne dužine rezonatora za QDash i QW laser [Sl. 25(a)], diferencijalna efikasnost ovih lasera je ista i za dužinu rezonatora od 1 mm iznosi oko $0.11 W/A$ po bočnoj stranici [40].

Ostvarivanje niske struje praga posebno je značajno sa stanovišta primene kvantnih crta u “*mode-locked*” laserima koji se koriste za generisanje ultra-kratkih optičkih impulsa (reda veličine ps, ili fs). Za postizanje velikih brzina rada ovih lasera poželjna je mala dužina rezonatora, kao i što je moguće manja gustina struje praga. Međutim, mala gustina struktura i velika disperzija po veličinama u ansamblu kvantnih crta, u kombinaciji sa saturacijom naelektrisanja u nanostrukturama, dovode do smanjenja pojačanja i time veće gustine struje praga, slično kao i kod kvantnih tačaka. Štaviše, kako je fluktuacija po dimenzijama kvantnih crta više izražena nego za kvantne tačke, za sličan dizajn lasera gustina struje praga za QDash laser je nekoliko puta veća nego za QDot laser. Ovaj problem se delimično može prevazići smanjenjem fluktuacije visina kvantnih crta u ansamblu kroz optimizaciju “*double-cap*” tehnike narastanja, koja podrazumeva optimizaciju debljine prekrivnog sloja i vremena prekida narastanja [57].

Prethodno razmatrana struktura lasera sa 4 nominalno identična sloja kvantnih crta koja su razdvojena dovoljno širokim barijerama (25 nm) da se može smatrati da ne dolazi do sprežavanja naprezanja između susednih QDash slojeva, pri gustini struje od oko

5 kA/cm^2 ostvaruje maksimum neto modalnog pojačanja od oko 10 cm^{-1} . Međutim, za ovako debele barijere smanjena je efikasnost transporta naelektrisanja do unutrašnjih slojeva kvantnih crta. Ako se debljina barijera smanji na 10 nm , sprezanje naprezanja postaje značajno i tokom fabrikacije, veličina kvantnih crta raste u svakom narednom sloju. Sa jedne strane, promena dimenzija struktura dovodi do spektralnog širenja i smanjenja pojačanja, ali je, sa druge strane, porast modalnog pojačanja dominantan efekat i kompenzuje smanjenje usled dodatnog spektralnog širenja. Merenjem pojačanja za ovakve strukture potvrđene su maksimalne vrednosti neto modalnog pojačanja veće od 30 cm^{-1} [40]. Pored toga, značajno poboljšanje performansi lasera može se ostvariti ako se GRINSCH struktura prikazana na Sl. 24 modifikuje kroz optimizaciju dopiranja. Noviji dizajni talasovoda za QDash lasere omogućavaju unutrašnju apsorpciju od 3 do 5 cm^{-1} i kvantnu efikasnost iznad 60% [40]. Vrednosti kvantnih efikasnosti su već veoma bliske očekivanim teorijskim ograničenjima određenim sopstvenim gubicima, kao što je Auger-ova rekombinacija, koja se može značajno smanjiti jedino smanjenjem gustine struje [40].

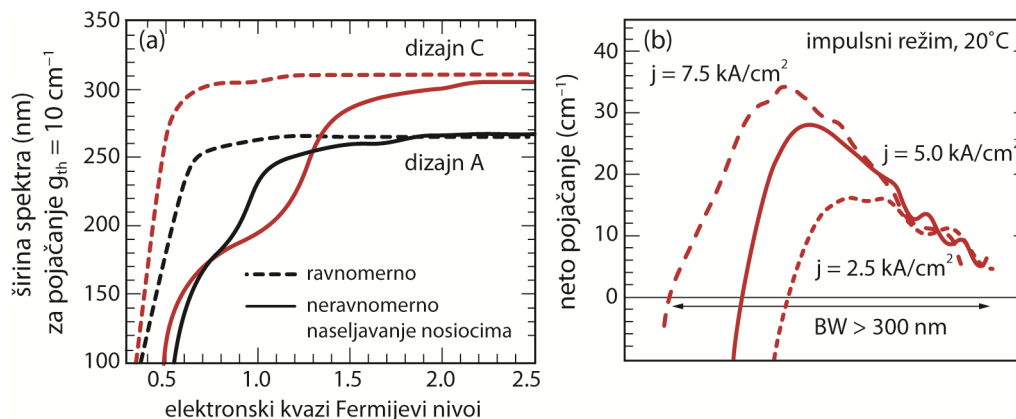
Širina opsega pojačanja za jedan sloj kvantnih crta je već dosta veća nego za kvantnu jamu (na Sl. 13 može se uočiti širina linije od 100 nm). Međutim, postoji potreba za daljim proširenjem opsega pojačanja, koji bi potencijalno obuhvatio kompletan telekomunikacioni opseg talasnih dužina od 1.4 do $1.65 \mu\text{m}$. Jedan od načina da se realizuje širok spektar pojačanja je korišćenje već pomenute osobine kvantnih crta da je centralna talasna dužina emisije ansambla određena nominalnom debljinom InAs tokom procesa fabrikacije. Odabirom odgovarajućeg broja slojeva kvantnih crta sa različitim srednjim veličinama i kontrolom elektronskog sprezanja između slojeva kroz podešavanje širine barijera, profil pojačanja se može podešavati u širokom spektralnog opsegu. Podešavanje spektra ne mora nužno biti usmereno ka postizanju velike širine spektra, već, primera radi može imati za cilj ostvarivanje što ujednačenijeg pojačanja, odnosno ravne karakteristike pojačanja u određenom opsegu. Na Sl. 26(a) prikazani su rezultati teorijskog istraživanja na osnovu kog je izračunat spektar fotoluminiscencije strukture sa četiri sloja kvantnih crta različitih nominalnih debljina. Veliko nehomogeno širenje svakog sloja dovodi do formiranja širokog spektra luminiscencije. Rezultati izračunavanja neto modalnog pojačanja za različite gustine struje injekcije prikazani su na Sl. 26(b). U poređenju sa dizajnom kod kog su korišćena četiri identična sloja



Sl. 26. (a) PL spektar na $T = 8$ K za laser sa četiri QDash sloja sa različitim nominalnim debljinama. (b) Neto modalno pojačanje za laser sa četiri identična QDash sloja (isprekidane linije) i kombinaciju slojeva sa različitim veličinama crta (pune linije) za gustine struje daleko ispod, u okolini i dosta iznad gustine struje praga. Gornje krive odgovaraju gustini struje od $3\text{--}5 \text{ kA cm}^{-2}$ [40].

kvantnih crta, ova struktura ima ravniju karakteristiku pojačanja u širokom spektralnom opsegu [40]. Međutim, maksimum pojačanja je značajno manji, pa je prilikom projektovanja realnih naprava potrebno napraviti kompromis između spektralne širine i minimalnog pojačanja potrebnog za funkcionisanje naprave.

Precizno određivanje opsega pojačanja QDash lasera zahteva da se u proračun uključi neuniformna distribucija nosilaca naelektrisanja koja se javlja kao posledica transporta naelektrisanja između slojeva kvantnih crta različitih nominalnih debljina [39], [54]. Na Sl. 27(a) prikazana je širina spektra pojačanja za dva različita dizajna aktivne oblasti lasera za pretpostavljeno ravnomerno (isprekidane linije) i neravnomerno (pune linije) naseljavanje slojeva nosiocima, u zavisnosti od stepena inverzne naseljenosti (kvantifikovano kvazi-Fermijevim nivoom za elektrone). Dizajn A se zasniva na četiri QDash sloja sa različitim nominalnim debljinama. Da bi se smanjilo vreme transporta naelektrisanja do zone u kojoj dolazi do rekombinacije, slojevi su razdvojeni relativno tankim barijerama debljine 10 nm. Međutim, ovako tanke barijere omogućavaju tunelovanje elektrona između slojeva kvantnih crta, što dovodi do toga je naseljavanje nosiocima neravnomerno, tj. da se prvo popunjavaju niža energetska stanja u sistemu. Iz tog razloga, dodatno proširenje spektra pojačanja ne može se ostvariti prostim dodavanjem novih slojeva kvantnih crta sa manjim dimenzijama struktura [40]. Kompromisni dizajn, označen na Sl. 27(a) sa C, koristi tri grupe QDash slojeva sa

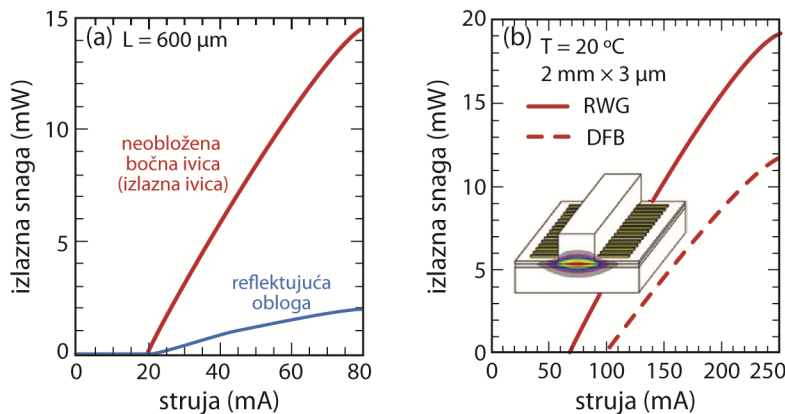


Sl. 27. (a) Širina spektra pojačanja za dva dizajna QDash lasera izračunata za pretpostavljeno ravnomerno (isprekidane linije) i neravnomerno (pune linije) naseljavanje naelektrisanja. (b) Neto modalno pojačanje za QDash laser (dizajn C) za različite gustine struje injekcije [39].

različitim nominalnim debljinama, koje su međusobno razdvojene nešto debljim barijerama od 20 nm. Svaka od grupa se sastoji od dva nominalno identična sloja kvantnih crta razdvojena tankom barijerom (10 nm). U ovoj konfiguraciji, sprezanje naprezanja između slojeva unutar svake grupe dovodi dodatnih varijacija veličina crta, pa se širina opsega pojačanja pri većim gustinama struje injekcije povećava sa 250 na 300 nm [39]. Na Sl. 27(b) prikazani su mereni profili pojačanja lasera sa dizajnom C za različite gustine struje. Merene vrednosti su u saglasnosti sa rezultatima simulacija i potvrđuju da veliku širinu spektra pojačanja, od preko 300 nm, koja pokriva telekomunikacioni opseg talasnih dužina oko 1.55 μm [39].

Ovakav aktivni materijal sa širokim spektrom pojačanja veoma je interesantan za različite aplikacije kao što su generacija kratkih impulsa, laseri sa podesivom talasnom dužinom, integracija svetlosnih izvora na više talasnih dužina (*MultiWavelength Sources*) i širokopojasni pojačavači za primene u sistemima sa multipleksiranjem po talasnim dužinama [39].

Aktivna oblast na bazi QDash materijala korišćena je za fabrikaciju lasera sa grebenastim talasovodnim rezonatorom (*Ridge WaveGuide, RWG*), tipične širine grebena od 3 μm [39]. Uobičajena orijentacija grebena je normalna u odnosu na pravac izdužene dimenzije crta kako bi se postiglo najveće modalno pojačanje. Na Sl. 28(a) prikazana je optičko-strujna karakteristika za RWG QDash laser dužine 600 μm , sa emisijom svetlosti na oko 1.55 μm , na $T = 20^\circ\text{C}$. Obe bočne stranice talasovoda su

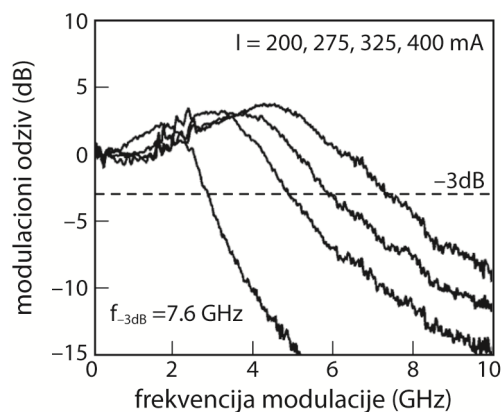


Sl. 28. (a) Optičko-strujna karakteristika (a) RWG QDash lasera dužine $600 \mu\text{m}$ u kontinualnom random režimu na 20°C i (b) QDash lasera dužine 2 mm u RWG (puna linija) i DFB (isprekidana linija) konfiguraciji. Inset: šematski prikaz DFB lasera sa lateralno spregnutom metalnom rešetkom [39].

formirane cepanjem kristala duž odgovarajućih kristalografskih ravni, a zatim je zadnja stranica obložena visokoreflektujućim slojem. Sa prikazane optičko-strujne karakteristike može se odrediti da je struja praga 20 mA , diferencijalna efikasnost oko 0.32 W/A , dok je izlazna optička snaga oko 15 mW na 80 mA [39]. Modifikacija posmatrane strukture, koja se izvodi uvođenjem lateralnih metalnih rešetki u strukturu [šematski prikaz dat je u insetu Sl. 28(b)], omogućava da se ostvari kontinualni monomodni optički izlaz. Optička povratna sprega bazirana je na preklapanju evanescentnih modova u RWG sa lateralnom metalnom rešetkom. Usled kompleksne prirode indeksa prelamanja metala, optička povratna sprega omogućava emisiju Bragg-ovog moda rešetke i stabilnu emisiju jednog moda bez dodatnog faznog pomaka.

Na Sl. 28(b) prikazano je poređenje izlaznih svetlosnih karakteristika lasera sa kompleksno-spregnutom distribuiranom povratnom spregom (*Distributed FeedBack*, DFB) i RWG lasera. Oba uređaja proizvedena su na istom vejferu i imaju iste geometrijske karakteristike. Sa slike je evidentno da je prag pojačanja DFB lasera veći, a nagib karakteristike manji, što je posledica gubitaka usled apsorpcije u metalnim rešetkama. Ovi gubici se ne mogu u potpunosti izbeći, ali ih je moguće smanjiti optimizacijom rešetke i RWG dizajna [39]. Ispitivani DFB laser demonstrira faktor potiskivanja sporednih modova veći od 40 dB .

Za primene u telekomunikacijama od velikog značaja je brzina direktne modulacije lasera. Za ostvarivanje brzina modulacije većih od 10 GHz često se koristi hibridna kombinacija lasera koji emituje u kontinualnom režimu i brzog eksternog modulatora. Međutim, za ekonomski isplativije aplikacije korišćenje direktno modulisanog lasera i dalje predstavlja preferirani izbor. I pored toga što strukture QDash lasera opisane u prethodnom izlaganju nisu u potpunosti optimizovane za rad na velikim brzinama, ostvareni propusni opseg modulacije od oko 7.6 GHz (Sl. 29) je zadovoljavajući za transmisiju na 10 Gb/s [39]. Da bi se prevazišla trenutna ograničenja brzine modulacije, potrebno je razmotriti kombinovane efekte konačnog vremena zahvata nosilaca u kvantne crte i njihovog otpuštanja, nehomogenost pojačanja, kao i vreme transporta šupljina. Detaljno istraživanje uloge diskretnih energetske stanja u kvantnim crtama sa konačnim visinama barijera i njihove interakcije sa kontinualnim stanjima u vlažećem sloju na proces zahvata nosilaca, pokazala su da simetrija između procesa zahvata i otpuštanja vrućih nosilaca generalno ograničava vreme odziva ovakvih sistema na frekvencijski opseg reda veličine 10 GHz ili manji, zbog činjenice da se diferencijalno pojačanje i nelinearni faktor potiskivanja pojačanja ne mogu istovremeno optimizovati [40]. Ovaj efekat nije jedinstven za kvantne crte i primećen je i u drugim nanostrukturama. Primera radi, brzina modulacije 1.3 μm InAs/GaAs QDot lasera je ograničena na oko 10 GHz. Dodatni ograničavajući efekat, zajednički za sve niskodimenzionalne nanostrukture, onda kada su realizovane unutar standardnih heterostruktura, je efekat ispunje zona (*band filling*) kroz naseljavanje eksitovanih, barijernih i stanja u vlažećem sloju na sobnim temperaturama, što određuje maksimalno



Sl. 29. Modulacioni odziv za male signale za različite pobude u impulsnom režimu [39].

diferencijalno pojačanje, a samim tim i brzinu modulacije.

U cilju povećanja brzine modulacije lasera na bazi kvantnih tačaka korišćeni su različiti pristupi. Izvesno poboljšanje diferencijalnog pojačanja može se ostvariti p-dopiranjem aktivne oblasti. Uticaj p-dopiranja je simuliran u slučaju različitih dizajna QDash lasera sa različitim debljinama barijera i u zavisnosti od toga da li je vlažeći sloj uzet u obzir ili ne. Zaključak je da je manja koncentracija primesa važna za postizanje značajnog povećanja diferencijalnog pojačanja ako su barijere tanke (< 40 nm). Međutim, prisustvo vlažećeg sloja značajno umanjuje efikasnost p-dopiranja na diferencijalno pojačanje [40]. Prema tome, p-dopiranje bez popravke konfiniranja nosilaca, tj. povećanja potencijalne dubine kvantnih tačaka, nije dovoljno. Dosta izgledniji pristup je baziran na tunelskoj injekciji, koja je prvi put demonstrirana u kvantnim jamama, a kasnije i u kratko-talasnim laserima na bazi kvantnih tačaka. Ukoliko se aktivna oblast realizuje korišćenjem kvantnih jama koje obezbeđuju brzu relaksaciju i tunelsku injekciju hladnih nosilaca u kvantne crte (TiQDH), efekti vrućih elektrona, kao što je otpuštanje nosilaca, mogu se potisnuti dok su istovremeno očekivana znatno brža vremena zahvata [64]. U kombinaciji sa umerenim p-dopiranjem, koje omogućava da se prevaziđe usko grlo u transportu šupljina, tunelska injekcija može da obezbedi značajno povećanje diferencijalnog pojačanja i propusnog opsega.

Performanse poluprovodničkih lasera pri velikim brzinama transmisije dosta zavise od faktora prigušenja relaksacionih oscilacija [78]. U laserima na bazi kvantnih tačaka, uloga mehanizama otpuštanja naelektrisanja je uglavnom zanemarljiva, a faktor prigušenja je određen odnosom vremena zahvata naelektrisanja i pojačanjem. Aktivni materijal na bazi kvantnih crta može obezbediti veće modalno pojačanje (oko 30 do 50 cm^{-1}) od konvencionalnog materijala na bazi kvantnih tačaka [79], a za relativno male dužine rezonatora (oko 600 μm), vreme života fotona je reda veličine 10 ps i može biti istog reda veličine kao vreme zahvata [78]. Mala energetska razlika između osnovnog stanja i stanja u vlažećem sloju kvantnih crta, rezultuje u intenziviranju procesa otpuštanja naelektrisanja iz osnovnog stanja. Kao posledica toga, energetska razmena između osnovnog stanja i vlažećeg sloja je brža, što sugerise da vreme otpuštanja može biti istog reda veličine kao i vreme zahvata. Velika brzina otpuštanja elektrona iz kvantnih crta utiče na relaksacione karakteristike na dva načina. Sa jedne strane, sa povećanjem brzine otpuštanja nosilaca faktor prigušenja relaksacionih oscilacija se

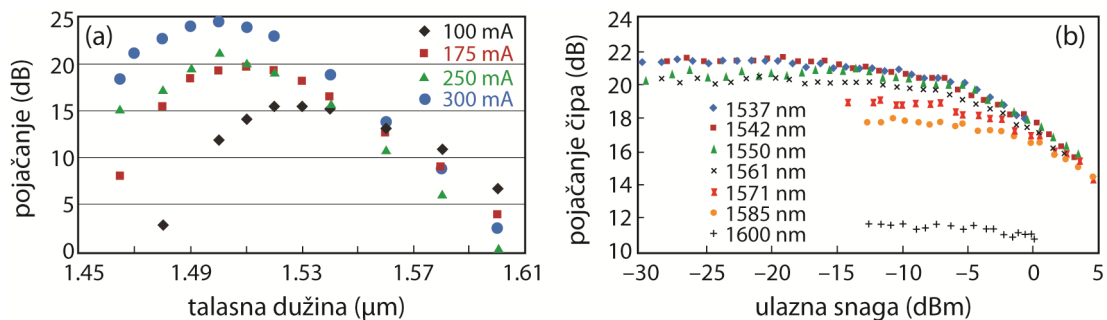
smanjuje, čime se može objasniti veća osetljivost lasera na bazi kvantnih crta na optičku povratnu spregu u poređenju sa laserima na kvantnim tačkama. Sa druge strane, sa povećanjem brzine otpuštanja nosilaca, odnos faktora prigušenja i kvadrata frekvencije relaksacionih oscilacija koji određuje propusni opseg modulacije, se povećava, što ograničava brzinu modulacije [78].

2.2 Kvantne crte u poluprovodničkim optičkim pojačavačima

Poluprovodnički optički pojačavači (*Semiconductor Optical Amplifier*, SOA) bazirani na nanostrukturnom pojačavačkom materijalu, kao što su kvantne tačke i kvantne crte, potencijalno obezbeđuju poboljšane karakteristike u poređenju sa uobičajeno korišćenim balkovskim pojačavačima i pojačavačima na bazi kvantnih jama. Potencijalne prednosti proističu iz nekoliko fundamentalnih karakteristika kvantnih tačaka i crta [80]:

- 1) Fluktuacije u veličini dovode do nehomogeno proširenog spektra pojačanja, sa širinom koja je dva do tri puta veća, nego za slučaj aktivnog materijala na bazi kvantnih jama.
- 2) Kratko vreme oporavka pojačanja, kroz veću brzinu odziva, omogućava pojačanje bez distorzije pri velikim brzinama prenosa signala, što je od velikog interesa za telekomunikacione primene.
- 3) Zahvaljujući brzom vremenu oporavka, malom faktoru konfiniranja i saturaciji naseljenosti osnovnog stanja, snaga zasićenja je veća nego za aktivni materijal na bazi kvantnih jama.
- 4) Sprezanje različitih spektralnih regiona unutar nehomogeno proširenog spektra pojačanja zavisi od talasne dužine i širine impulsa signala, što omogućava istovremeno pojačanje više signala na različitim talasnim dužinama bez preslušavanja i konverziju talasnih dužina. Zapravo, čitav spektar pojačanja napaja se nosiocima iz zajedničkog rezervoara, pa procesi zahvata i otpuštanja nosilaca, u i iz rezervoara, dovode do sprezanja različitih spektralnih regiona pojačanja.

Sa stanovišta fabrikacije, poluprovodnički optički pojačavači su veoma slični sa RWG laserima. Osnovna razlika je što se kod pojačavača sa progresivno prostirućim talasima (*Travelling Wave SOA*, TW-SOA) obe bočne stranice presvlače visoko-

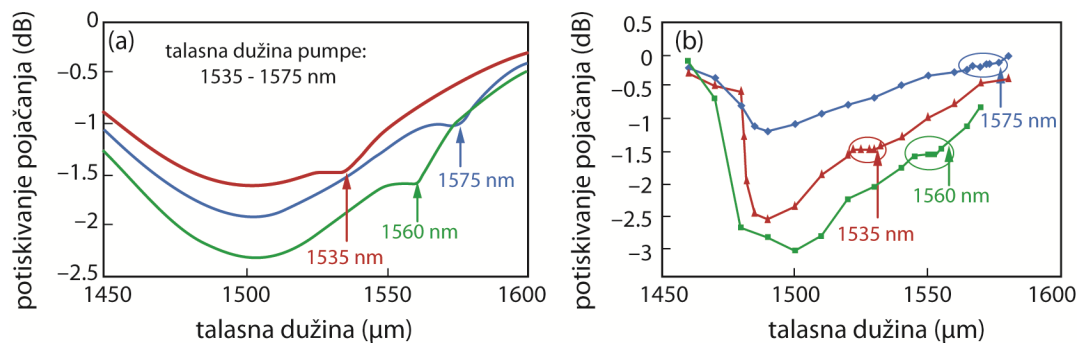


Sl. 30. (a) Spektar optičkog pojaćanja QDash SOA za različite pobudne struje. (b) Izlazno pojaćanje QDash SOA u funkciji od ulazne snage i talasne dužine [40].

kvalitetnim širokopojasnim anti-refleksionim oblogama koje tipično obezbeđuju refleksivnost manju od 10^{-3} u opsegu od 200 nm, sa ciljem da spreče nastanak povratne sprege i autooscilacija unutar rezonatora. Razmatranje osobina optičkih pojaćavaća koje sledi, odnosi se na uređaje čija konstrukcija odgovara RWG laserima sa talasovodom tipične širine 3-5 μm i dužine 1-2.5 mm, dok je aktivni materijal na bazi kvantnih crta dizajniran slično kao u prethodnom izlaganju koje se odnosi na poluprovodničke lasere [40].

Na Sl. 30(a) prikazan je spektar pojaćanja za SOA dužine 2.5 mm za nekoliko različitih struja injekcije. Za struju od 300 mA postiže se maksimalno pojaćanje od 25 dB, dok se pojaćanje od 10 dB može ostvariti u širokom opsegu od 120 nm, što je oko tri puta veća širina od one koju mogu obezbediti QW SOA. Na slici Sl. 30(b) data je zavisnost pojaćanja u funkciji od upadne snage za različite talasne dužine. Može se zaključiti da QDash SOA ima veoma ravnu karakteristiku pojaćanja za širok opseg ulaznih snaga. Izlazna snaga saturacije je oko 18 dBm, što je u poređenju sa QW SOA prilično velika vrednost i potvrđuje predviđanja o visokoj vrednosti snage zasićenja, kratkom vremenu oporavka i malom faktoru konfiniranja [80].

Tokom procesa pojaćanja ulaznog optičkog signala gustina nosilaca u optičkom pojaćavaću se smanjuje usled stimulisane emisije. Ovaj efekat se može kvantitativno opisati uvođenjem faktora potiskivanja pojaćanja. Na Sl. 31 prikazan je faktor potiskivanja pojaćanja određen na osnovu rezultata simulacije (a) i merenja (b). Merenje je izvršeno u režimu umerene saturacije izazvane prisustvom dodatne optičke pumpe. Usled relativno široke homogene linije QDash prelaza na sobnoj temperaturi, signal optičke pumpe dovodi do vidljivog smanjenja u spektru optičkog pojaćanja [39]. Ovaj

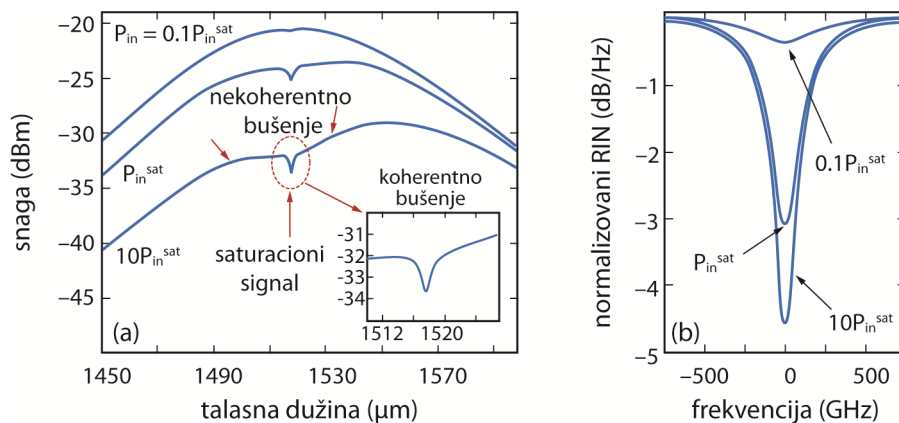


Sl. 31. (a) Izračunato i (b) mereno potiskivanje pojačanja za različite talasne dužine pumpe pri umerenoj saturaciji [39].

fenomen je eksperimentalno potvrđen kroz pojavu zaravnjenih oblasti u spektru pojačanja na Sl. 31(b). Širina zaravnjenih oblasti omogućava da se homogeno širenje proceni na oko 12 nm, što odgovara energiji od 6 meV. Ova procenjena vrednost homogenog širenja linije na sobnoj temperaturi je istog reda veličine kao širenje kod InAs/GaAs kvantnih tačaka koje emituju na manjim talasnim dužinama.

Rezultat proračuna ASE spektra za različite nivoe saturacije u QDot pojačavaču prikazan je na Sl. 32(a). Za ulazne snage uporedive sa snagom saturacije ($P_{in} = P_{sat}$), kao posledica fenomena spektralnog bušenja (*Spectral Hole Burning*), na talasnoj dužini signala dolazi do stvaranja udubljenja u ASE spektru. Sa daljim povećanjem snage ulaznog signala, u dubokoj saturaciji ($P_{in} = 10P_{sat}$), ova jama postaje sve izraženija, a uz nju i ulegnuće kao posledica nekoherentne redukcije pojačanja. Ne koherentna redukcija ASE se javlja kao posledica preraspodele naelektrisanja iz spektralne okoline signala kako bi se iznova naselila stanja osiromašena efektom spektralnog bušenja. Frekvencijski opseg smanjenja ASE snage koji se javlja kao posledica spektralnog bušenja određen je brzim vremenom zahvata. Kako je odziv na brze eksitacije u pojačavačima na bazi kvantnih tačaka i crta sličan, prikazani rezultati se kvalitativno mogu primeniti i na zasićene QDash pojačavače [39].

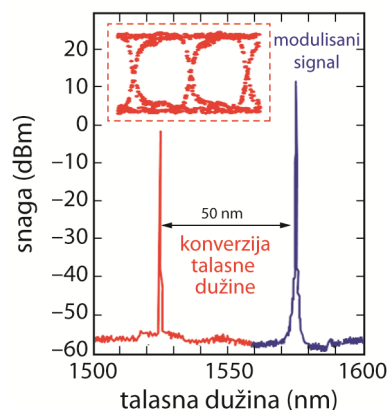
Usled efekta koherentnog bušenja, nivo šuma je značajno smanjen u spektralnoj okolini talasne dužine signala. Na slici Sl. 32(b) prikazan je rezultat izračunavanja spektra relativnog intenzitetskog šuma (*Relative Intensity Noise*, RIN) za iste nivoe saturacije koji su prikazani na Sl. 32(a), za pojačavač na bazi kvantnih tačaka. Sa povećanjem nivoa saturacije šum se sve više smanjuje, a ono što je još interesantnije je da je spektralna širina opsega u kom dolazi do redukcije šuma reda veličine nekoliko



Sl. 32. (a) Izračunat spektar snage ASE u QDot pojačavaču za različite nivoe saturacije. Inset prikazuje uvećanu oblast koja se u režimu duboke saturacije povezuje sa fenomenom koherentnog spektralnog bušenja. (b) Normalizovan spektar RIN izračunat za različite nivoe saturacije u QDot pojačavaču [39].

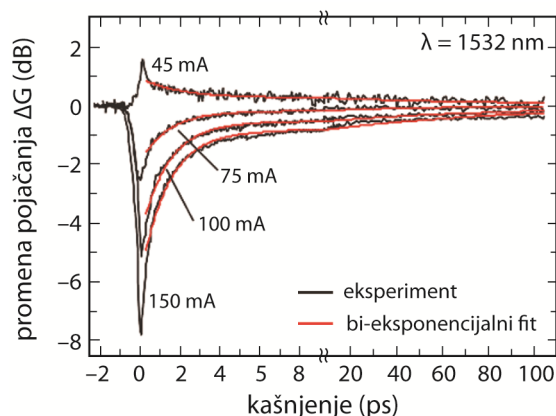
stotina GHz, što je barem za jedan red veličine veće nego u QW-SOA i potencijalno može da obezbedi oporavak signala bez efekta utiskivanja na brzinama modulacije većim od 100 GHz [39].

Usled mogućeg preklapanja QDash stanja sa kontinualnim stanjima u vlažećem sloju, postoji određena verovatnoća da će doći do elektronskog sprežanja različitih grupacija kvantnih crta u okviru ansambla, što dovodi do preslušavanja između kanala koji odgovaraju različitim talasnim dužinama u QDash pojačavačima. Ovaj efekat se može iskoristiti za konverziju talasne dužine u širokom spektralnom opsegu [39]. Na Sl. 34 prikazani su rezultati eksperimenta konverzije talasne dužine korišćenjem mehanizma ukrštene modulacije pojačanja u QDash SOA. Desna strana slike prikazuje spektar modulisanog ulaznog signala pumpe (plava boja) dok je sa leve strane (crvena boja) prikazan spektar kontinualnog test signala nakon transmisije kroz SOA i modulacije od strane ulaznog signala. Evidentna je konverzija talasne dužine za oko 50 nm. Za pseudo-slučajnu sekvencu bitova sa bitskom brzinom 2.5 GB/s, dijagram oka konvertovanog signala, prikazan u insetu Sl. 34, je otvoren i potvrđuje funkcionalnost QDash SOA kao konvertera talasnih dužina. Za veću spektralnu razliku između signala pumpe i test signala, kao i za veće frekvencije modulacije, signal na konvertovanoj talasnoj dužini iščezava, jer transport naelektrisanja između prostorno odvojenih grupacija kvantnih crta previše dugo traje da bi bilo moguće ispratiti brze promene signala [39].



Sl. 34. Spektar modulisanog ulaznog signala (plava boja) i kontinualnog test signala nakon konverzije talasne dužine (crvena boja). Inset: Dijagram oka za 2.5 Gb/s pseudo-slučajnu povorku signala nakon konverzije talasne dužine [40].

Bolje razumevanje dinamike nosilaca i procesa rekombinacije u QDash strukturama može se ostvariti na osnovu spektroskopije u vremenskom domenu. Na Sl. 33 prikazana je karakteristika brzog vremenskog odziva QDash SOA za različite radne uslove prilikom testiranja naprave impulsom trajanja 150 fs na talasnoj dužini 1523 nm u okolini maksimuma pojačanja. SOA reaguje veoma brzo, sa manje od 1 ps vremenom uspona i oko 1-2 ps vremenom oporavka. Pored ove brze komponente oporavka, postoji i spora komponenta (uočljiva kroz bi-eksponencijalni fit na Sl. 33), koja je reda veličine 100-200 ps. Vreme oporavka zavisi od talasne dužine, tako što brza komponenta slabo raste za kraće talasne dužine, dok spora komponenta ostaje praktično konstantna [40].

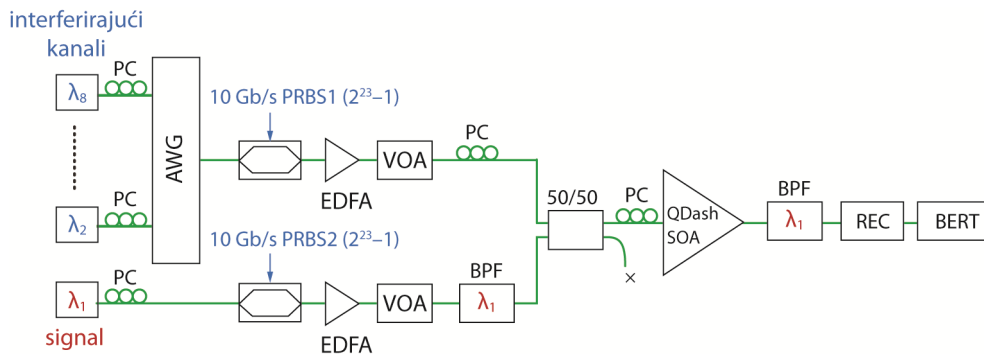


Sl. 33. Vremenski odziv pojačanja QDash SOA na impulsnu pobudu za različite struje injekcije [40].

Na osnovu prikazanih rezultata i teorijskog razmatranja formiran je pojednostavljeni model za osnovne dinamičke efekte u QDash SOA i laserima [40]. Velika brzina odziva u kvantnim crtama praktično je omogućena većim prostorom za lokalno skladištenje naelektrisanja unutar svake crte, u odnosu na manje cirkularne kvantne tačke. Mehanizam koji odgovara brzom procesu tokom kog se naelektrisanje potrebno za odvijanje stimulisane emisije obnavlja kroz proces lokalne relaksacije sa viših nivoa (*intra-dot* relaksacija), opisan je vremenskom konstantom τ_1 (1-2 ps). Praktično, sve dok se dovoljno nosilaca naelektrisanja može smestiti unutar jame tokom trajanja impulsa, neće doći do distorzije prilikom pojačavanja signala, jer je oporavak naseljenosti dovoljno brz.

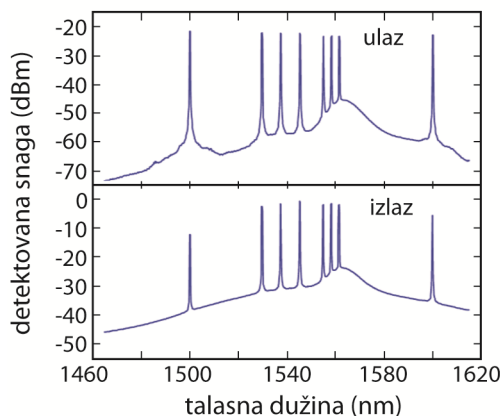
Sa druge strane, pri direktnoj modulaciji QDash lasera, pojačanje je u direktnoj korelaciji sa procesom zahvata naelektrisanja sa kontinualnih stanja, primera radi, iz vlažećeg sloja. Vremenska konstanta koja odgovara ovom mehanizmu, τ_3 , ima vrednost od 100-200 ps. Spora komponenta odziva je odgovorna za preslušavanje između crta kroz kontinualna stanja u vlažećem sloju i može se povezati sa vremenom transporta između individualnih crta. Zahvaljujući ovom procesu, za niske frekvencije modulacije, dolazi do elektronskog sprezanja prostorno odvojenih tačaka različitih veličina i energija prelaza. Međutim, sa povećanjem brzine modulacije, transport naelektrisanja između prostorno razdvojenih kvantnih crta traje suviše dugo da bi se pratili brži signali, pa preslušavanje u potpunosti nestaje i dominira brza komponenta odziva, što omogućava pojačavanje signala na više talasnih dužina istovremeno.

U cilju eksperimentalnog ispitivanja mogućnosti pojačanja višekanalnih signala, QDash SOA je korišćen za istovremeno pojačavanje 8 signala na različitim talasnim dužinama. Na Sl. 35 je šematski prikazana postavka eksperimenta. Sedam signala na različitim talasnim dužinama je modulirano pseudo-slučajnim nizom podataka sa bitskom brzinom 10 Gb/s. Istovremeno, signal na osmoj talasnoj dužini, koji se prostire kroz posebno vlakno, je nezavisno modulisan istom brzinom. Talasna dužina ovog signala može da se podešava u cilju testiranja preslušavanja.



Sl. 35. Eksperimentalna postavka za testiranje multikanalnog pojačanja u QDash SOA.

Na Sl. 36 prikazan je spektar ulaznih signala snage -20 dBm i spektar signala nakon pojačavanja do maksimalne izlazne snage od oko 0 dBm. Iako se kanali nalaze u opsegu od oko 100 nm, širokopojasna karakteristika QDash SOA omogućava njihovo istovremeno pojačavanje. U užem spektralnom opsegu od 30 nm, pojačanje je veoma homogeno. Za posmatranu bitsku brzinu, merenjem verovatnoće greške, nije detektovano preslušavanje između kanala [39].



Sl. 36. Spektar (a) ulaznog optičkog signala koji se sastoji od osam signala na različitim talasnim dužinama i (b) izlaznog optičkog signala nakon pojačavanja u QDash SOA [39].

6.3. Kvantno-kaskadni laseri na bazi kvantnih crta

Uprkos činjenici da su kvantno-kaskadni laseri (*Quantum-Cascade Lasers*, QCL) već dugo vremena prepoznati kao izvori koherentnog zračenja u srednjoj infracrvenoj oblasti, još uvek su prisutni ozbiljni problemi koji se ogledaju u relativno velikoj struji praga i maloj efikasnosti iskorišćenja energije napajanja zbog kratkog vremena života neradijativne unutarzonske rekombinacije [81]. Nedugo nakon prve realizacije QCL,

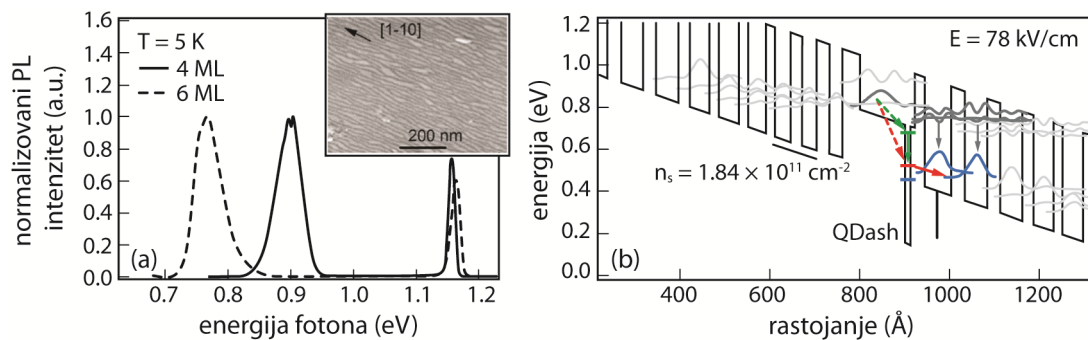
predloženo je da se umesto jednodimenzionalnog konfiniranja koje obezbeđuju kvantne jame, koristi aktivna oblast sa trodimenzionalnim konfiniranjem koje mogu da obezbede kvantne tačke. Na ovaj način, potencijalno bi se smanjio uticaj rasejanja koja se, usled nedostatka konfiniranja, javljaju u kvantnim jama i smanjuju vreme života gornjeg laserskog stanja, što dovodi do povećanja struje praga. Inicijalni napor ka ostvarivanju ove zamisli bazirani su na primeni kvantnih tačaka u GaAs materijalnom sistemu [37], mahom zbog činjenice da se usled velike razdešenosti kristalne rešetke (7%) između materijala supstrata i materijala od kog se formiraju tačke, za fabrikaciju može iskoristiti Stranski-Krastanov mod narastanja. Nažalost, za sada ne postoji eksperimentalna verifikacija stimulisane emisije iz uređaja baziranih na ovakvim kvantnim tačkama [48]. Jedan od problema koji se javljaju u ovom materijalnom sistemu je nedostatak pogodnog ekstrakcionog mehanizma naelektrisanja koja se nalaze konfinirana u kvantnim tačkama. Tipično, prilikom realizacije QCL depopulacija nižeg laserskog nivoa obavlja se kroz rezonantno tunelovanje u susednu kvantnu jamu. Međutim, u GaAs materijalnom sistemu nije moguće formirati jamu sa dovoljno dubokim energetskim nivoima, osim ukoliko se ne primeni jako naprezanje [48]. Manje istražena mogućnost je korišćenje InAs kvantnih tačaka u materijalnim sistemima na bazi InP. Međutim, konvencionalna MBE iz čvrstog izvora u kombinaciji sa ternarnim jedinjenjima kao što su AlInAs i InGaAs ili kvaternarnim jedinjenjima InGaAlAs na (100) InP supstratima, usled manje razlike u konstantama rešetke između InAs i InP (3.2% u odnosu na 7% za InAs i GaAs), dovodi do formiranja kvantnih crta. Druge tehnike, kao što su MBE iz gasnog izvora i narastanje na supstratima drugačijih orijentacija, na primer (111B) ili (311B) InP, mogu se iskoristiti za formiranje pravih kvantnih tačaka.

Korišćenje InP kao supstrata u kvantno-kaskadnim strukturama ima nekoliko prednosti u poređenju sa GaAs. Pre svega, ekstrakcija naelektrisanja iz stanja u kvantnim crtama vrši se kroz nenapregnute InGaAs kvantne jame, tj. nije potrebno uvođenje dodatnog naprezanja koje bi bilo teško kompenzovati [81]. U ovakvim strukturama, jedino naprezanje potiče od sloja kvantnih crta, međutim, zahvaljujući fleksibilnosti ovog materijalnog sistema njega je moguće kompenzovati uvođenjem odgovarajućih slojeva sa tenzilnim naprezanjem. Pored toga, veća površinska gustina (pokrivenost), koja se prirodno javlja prilikom narastanja InAs/InP kvantnih crta,

potencijalno dovodi do povećanja pojačanja [81]. Konačno, do sada najbolji QCL bazirani su na InP, za koji je tehnološki proces dobro ispitan i utemeljen, a takođe omogućava korišćenje talasovoda sa veoma malim gubicima, što je preduslov za ostvarivanje vrhunskih performansi uređaja. Dodatna prednost u primeni samoorganizovanih kvantnih tačaka ili crta je njihovo inherentno nehomogeno širenje. Ova karakteristika može se iskoristiti za razvijanje kvantno-kaskadnih lasera za srednju infracrvenu oblast sa velikom spektralnom širinom pojačanja, što je veoma korisno za primene u spektroskopiji [81].

Činjenica da već postoje eksperimentalne demonstracije međuzonskih InAs QDash lasera na kvaternarnom materijalu AlInGaAs, za opseg talasnih dužina u okolini 1.55 μm , dala je podstrek u pokušaju da se u ovom materijalnom sistemu realizuju i kvantno-kaskadni laseri. Kvantne crte su narastane na $\text{In}_{0.53}\text{Al}_{0.24}\text{Ga}_{0.23}\text{As}$ bafer sloju nenapregnutom u odnosu na blago dopirani S-InP supstrat [48]. Nakon postizanja nominalne debljine od ili 4 ML ili 6 ML, proces narastanja kvantnih crta se zaustavlja i struktura se prekriva narastanjem debljeg sloja InAlGaAs.

Međuzonska karakteristika kvantnih crta proučavana je fotoluminiscencijom jednostavnih test struktura koje se sastoje od samo jednog sloja kvantnih crta [Sl. 37(a)]. Za obe nominalne debljine InAs u spektru su uočljiva dva izražena pika: intenzivniji pik na nižim energijama koji se može povezati sa emisijom iz kvantnih crta i slabije izraženi pik na većim energijama koji odgovara emisiji iz masivnog AlInGaAs. Povećanje debljine InAs dovodi do crvenog pomaka od oko 100 meV. Inset na Sl. 37(a) prikazuje SEM fotografiju neprekrivenih kvantnih crta za nominalnu debljinu 4 ML. Crte su poravnate u $[1\ -1\ 0]$ pravcu i imaju dužinu od nekoliko stotina nanometara, širinu oko $12 \pm 5\text{ nm}$, dok se visina može grubo proceniti na oko 2.5 nm. Na osnovu dimenzija kvantnih crta i pretpostavke da diskontinuitet provodne zone iznosi 70% razlike energetskih procepa, osnovno energetsko stanje za 4 ML (6 ML) kvantne crte se nalazi na oko 180 meV (270 meV) ispod InAlGaAs barijere. Za 4 ML kvantne crte, unutarzonska karakterizacija QDot infracrvenim fotodetektorom pokazala je da se stanje koje odgovara vlažećem sloju nalazi na oko 50 meV ispod minimuma provodne zone u InAlGaAs.

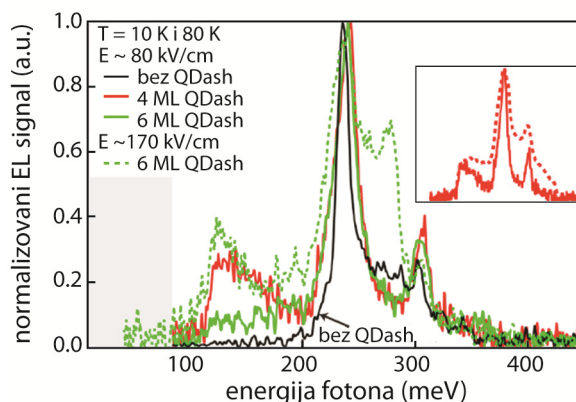


Sl. 37. (a) Fotoluminiscentni spektar InAs/InAlGaAs QDash struktura na $T = 5$ K. Inset: SEM fotografija 4 ML kvantnih crta. (b) Predloženi dizajn InAs QDash QCL [48].

Predloženi dizajn kvantno-kaskadne strukture prikazan je na Sl. 37(b) pod primenjenim električnim poljem od 78 kV/cm [48]. Osnovno stanje 4 ML kvantnih crta prikazano je crvenom crtom unutar potencijala koji odgovara kvantnim crtama, dok je za 6 ML kvantne crte obeleženo plavom crtom. Eksperimentalno određena pozicija energetskog nivoa u vlažećem sloju obeležena je zelenom crtom. Originalna ideja prilikom projektovanja ovog QCL bila je da se elektroni zahvataju na stanju u vlažećem sloju ili nižem pobuđenom stanju kroz osnovno stanje u InAlGaAs kvantnoj jami unutar koje se nalazi sloj kvantnih crta (zeleno isprekidana strelica). Optički prelaz bi se tada javljao sa ovog stanja na osnovno stanje u kvantnim crtama (zeleno strelica), a depopulacija bi se odvijala tunelovanjem u susednu InGaAs kvantnu jamu. Međutim, eksperimentalni rezultati su pokazali da je putanja obeležena crvenom strelicom više verovatna, tj. da injekcija elektrona iz InAlGaAs kvantne jame ide direktno na osnovno stanje u kvantnim crtama (crvena isprekidana strelica), a zatim sledi prelaz na osnovno stanje u susednoj kvantnoj jami uz emisiju fotona (crvena strelica).

Poređenje performansi QCL lasera izvršeno je za dva dizajna aktivne oblasti, od kojih svaki sadrži po jedan sloj kvantnih crta različitih nominalnih debljina, 4 ML ili 6 ML, kao i za kontrolnu strukturu bez sloja kvantnih crta. Pored toga, da bi se dobio intenzivniji signal i proučio uticaj periodične strukture, projektovana je i struktura sa 10 perioda 4 ML kvantnih crta. Uređaji su analizirani injekcijom struje u impulsnom režimu na temperaturama $T = 10$ K i 80 K. Na Sl. 38 prikazan je normalizovan elektroluminiscentni spektar uređaja sa jednom periodom kvantnih crta pri primenjenom naponu ~ 1.3 V, koji odgovara električnom polju od oko 80 kV/cm. Za sve testirane uređaje, dominantni pik se javlja na oko 245 meV, a bočni pik manjeg intenziteta na

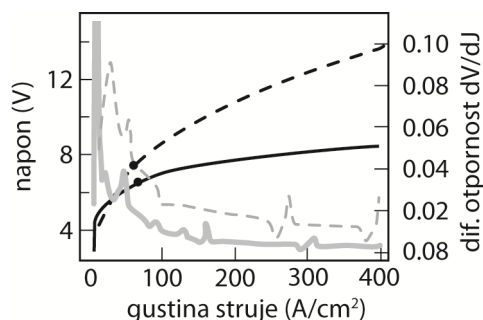
300 meV, a razlika između spektara na 10 i 80 K nije značajna. Bočni pik se javlja kao posledica vertikalnih prelaza injektovanih elektrona sa gornjih na donja stanja unutar susednih kvantnih jama [sive vertikalne strelice na Sl. 37(b)]. Međutim, za uzorak sa 4 ML QDash (crvena linija) prisutan je i široki slabiji pik na oko 150 meV. Ovaj pik se može objasniti prelazima sa pobuđenog ili osnovnog stanja u kvantnim crtama na osnovno stanje u susednoj kvantnoj jami. Činjenica da se ovaj prelaz ne može detektovati za 6 ML kvantne crte ukazuje na to da ovaj prelaz potiče od osnovnog stanja u kvantnim crtama, koje se za ovaj uzorak pri datom električnom polju, nalazi ispod osnovnog stanja u kvantnoj jami. Međutim, ukoliko se polje poveća na 170 kV/cm, osnovno stanje u 6 ML kvantnim crtama se izdiže iznad stanja u susednoj kvantnoj jami i široki pik se javlja i za ovu strukturu (zeleno tačkasta linija). Elektroluminiscencija iz uzorka sa 10 perioda na bazi 4 ML kvantnih crta prikazana je u insetu Sl. 38 (isprekidanom linijom) zajedno sa strukturom sa samo jednom periodom (puna linija) za primenjeno polje od 80 kV/cm. Ovaj spektar potvrđuje da je pik na 150 meV još uvek prisutan, iako je njegova širina nešto veća, što može biti posledica varijacija u veličini kvantnih crta u pojedinim periodama. Širenje dominantnog pika pripisano je nepravilnostima interfejsa prilikom narastanja sukcesivnih perioda kvantnih crta [48].



Sl. 38. Normalizovani elektroluminiscentni signal za testirane QCL uzorke na $T = 10\text{ K}$ i 80 K za dve vrednosti primenjenog električnog polja, 80 kV/cm i 170 kV/cm . Osenčena oblast predstavlja granicu rada detektora. Inset: poređenje između strukture sa jednom (puna linija) i deset (isprekidana linija) perioda 4 ML QDash [48].

U cilju proučavanja transportnih osobina, uzorci su montirani na kriostat sa tečnim azotom i električno pumpani u impulsnom režimu sa frekvencijom od 100 kHz i stepenom iskorišćenja 1.5% [81]. Na Sl. 39 prikazane su strujno-naponska

karakteristika (leva osa) za uzorak sa kvantnim crtama (isprekidana crna linija) i za uzorak u kom je sloj kvantnih crta zamenjen sa ekvivalentnom $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ kvantnom jamom debljine 3.5 nm (puna crna linija), kao i diferencijalna otpornost (dV/dJ) za obe strujno-naponske karakteristike (odgovarajuće sive linije), kako bi se uočila promena u nagibu. Za QW uzorak, promena nagiba se javlja na oko 6.5 V, a za QDash uzorak na oko 7.5 V, što je označeno crnim tačkama na strujno-naponskim karakteristikama. Saturacija se za uzorak sa kvantnim crtama postiže dosta sporije u odnosu na uzorak sa referentnom kvantnom jamom. Jedna primetna razlika je da QW uzorak pokazuje oštru negativnu diferencijalnu otpornost na nešto ispod 13 V. Negativna diferencijalna otpornost se javlja kada se osnovno stanje injektora poravna sa osnovnim stanjem u kvantnoj jami. Činjenica da se saturacija postiže sporije za uređaje na bazi kvantnih crta, može se pripisati velikom nehomogenom širenju osnovnog stanja u kvantnim crtama. Smanjenje debljine barijere i povećanje koncentracije primesa dovodi do istog efekta, jer zapravo, više struje prolazi kroz uređaj za isti primenjeni napon, što dokazuje da struja injektovana u uređaj nije limitirana brojem dozvoljenih stanja u kvantnim crtama [81].



Sl. 39. Leva osa: Strujno-naponska karakteristika za QDash uzorak (isprekidana crna linija) i uzorak sa ekvivalentnom $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ QW debljine 3.5 nm (puna crna linija). Desna osa: diferencijalna otpornost dV/dJ za QDash uzorak (siva isprekidana linija) i uzorak sa ekvivalentnom QW (puna siva linija) [81].

Od praktičnog značaja za budući razvoj kvantno-kaskadnih lasera na bazi kvantnih crta je poređenje pojačanja predloženog QDash QCL sa već postojećim, funkcionalnim QCL koji mogu obezbediti odgovarajuću stimulisanu emisiju u sličnoj spektralnoj oblasti, i čiji rad se takođe zasniva na dijagonalnom prelazu. Pojačanje je procenjeno na osnovu normalizovanog elektroluminiscentnog odziva QDash i

referentne QCL strukture, ponderisanog sa kvadratom energije fotona kako bi se dobila vrednost proporcionalna pojačanju. Za predloženi dizajn kvantno-kaskadnog lasera sa kvantnim crtama pojačanje je nešto manje, ali uporedivo sa pojačanjem koji se za isti dizajn aktivne oblasti dobija kada se slojevi kvantnih crta zamene ekvivalentnim kvantnim jamama [81]. Relativno mala vrednost pojačanja za QCL uzorak sa ekvivalentnim kvantnim jamama može se objasniti ranom pojavom negativne diferencijalne otpornosti, koja sprečava intenzivniju pobudu, kao i činjenicom da predloženi QCL dizajn sa širokim injektorom nije optimizovan za kvantne jame. Ostvareno pojačanje u predloženom QDash QCL, iako značajno manje nego u referentnom funkcionalnom uzorku QW QCL, uz smanjenje gubitaka u talasovodu, ima potencijal da, u budućnosti, obezbedi lasersku emisiju u širokom spektralnom opsegu [81].

Poglavlje 3.

MODELOVANJE ZONSKE STRUKTURE I UNUTARZONSKE APSORPCIJE U KVANTNIM CRTAMA

U okviru ovog poglavlja predstavljena je teorijska analiza na bazi koje je moguće formiranje modela za određivanje zonske strukture i spektra unutarzonske apsorpcije ansambla kvantnih crta. Iako postoje metode kao što su empirijski metod pseudo-potencijala i metod jake veze [82], [83], koji se mogu koristiti za izračunavanje zonske strukture kvantnih crta uzimajući u obzir potencijal individualnih atoma, ove metode su veoma zahtevne sa stanovišta izračunavanja. Efikasnija metoda koja se široko primenjuje već nekoliko decenija je metoda aproksimacije anvelopnom funkcijom (Envelope Function Approximation, EFA). Osnovna pretpostavka na kojoj se bazira ova metoda je da je varijacija potencijala sporo-promenljiva funkcija na domenu čija je dimenzija reda veličine konstante kristalne rešetke. Prednosti i numerička efikasnost EFA proističu iz činjenice da se može izbeći eksplicitno uzimanje u obzir periodičnog potencijala kristalne rešetke i da samo njegova sporo-promenljiva perturbacija ulazi u Hamiltonijan. U konkretnom slučaju, razmatranje je ograničeno na elektronsku strukturu provodne zone, pa je potrebno rešiti jednozonsku Schrödinger-ovu jednačinu koja uključuje samo sporo-promenljivi deo talasne funkcije. Naelektrisanja potrebna za ostvarivanje unutarzonskih optičkih prelaza utiču na krivljenje zone i konfiniranje nosilaca, a njihov uticaj se u obzir uzima kroz samosaglasno rešavanje Schrödinger-ove i dvodimenzionalne nelinearne Poisson-ove jednačine. Dobijena elektronska struktura osnova je za proračun optičkih osobina ansambla kvantnih crta. U osnovi proračuna apsorpcije leži Fermi-jevo zlatno pravilo primenjeno u dipolnoj aproksimaciji. Kako dvodimenzionalno konfiniranje može da obezbedi različite apsorpcione spektre za različite polarizacije incidentnog električnog vektora elektromagnetskog polja, proračun matričnih elemenata prelaza se sprovodi za svaki od dva pravca polarizacije.

Zatim se, na osnovu naseljenosti pojedinih diskretnih nivoa dobijenih kroz samosaglasni postupak, određuje spektar apsorpcije. Ovaj postupak ponavlja se za svaku kombinaciju dimenzija kvantnih crta prisutnih u ansamblu, a doprinos pojedinačnih kvantnih crta ukupnom usrednjenom spektru određen je funkcijom raspodele po veličinama kvantnih crta u ansamblu.

3.1 Elektronska struktura

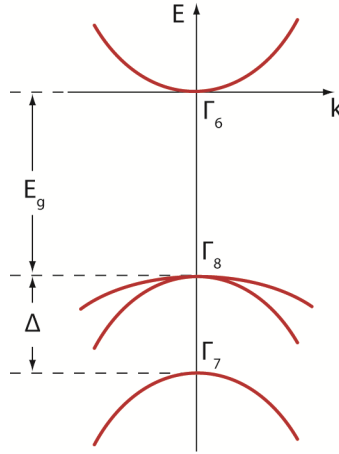
Najjednostavnija, ali široko primenjivana metoda izračunavanja elektronske strukture kvantno-konfiniranih poluprovodničkih struktura je metoda efektivne mase. Ova metoda koja pripada grupi metoda slojeva tj. anvelopnih funkcija, slojeve u okviru heterostrukture tretira pojedinačno, a talasne funkcije elektronskih stanja prikazuje u obliku linearnih kombinacija talasnih funkcija homogenog poluprovodnika (Bloch-ovih funkcija), i to najčešće u obliku anvelopnih (sporopromenljivih) funkcija koje modulišu Bloch-ove funkcije. Za razliku od složenijih metoda anvelopnih funkcija, kao što je **k·p** metoda, koje pri izračunavanju elektronske strukture u obzir uzimaju i provodnu i valentnu zonu, a u okviru valentne zone, zonu lakih i teških šupljina i spin-orbitno otcepljenu zonu šupljina, metoda efektivne mase je ograničena na uticaje samo jedne od pomenutih zona, Sl. 40 [84]. U praksi se gotovo uvek radi o provodnoj zoni (Γ_6), dok se valentna, zbog prisustva degeneracije i generalno jake sprege između zone teških i zone lakih šupljina, ređe i samo grubo opisuje metodom efektivne mase. Izuzetak su situacije u kojima se posmatraju isključivo nulte, ili vrlo male, vrednosti talasnog vektora u ravni slojeva strukture, kada sprega između lakih i teških šupljina ne postoji, ili je zanemarljivo mala, pa se zone mogu posmatrati nezavisno [84].

3.1.1 Metoda efektivne mase

Elektronska struktura kvantno konfiniranih poluprovodničkih struktura može se opisati Schrödinger-ovom jednačinom:

$$[\hat{H}_0 + V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

gde je $\hat{H}_0$ neperturbovani Hamiltonijan idealnog kristala, a $V(\mathbf{r})$ sporo promenljiva perturbacija u kristalnoj strukturi idealne rešetke koja može biti posledica diskontinuiteta zona na heterospoju u heterostrukturama i/ili prisustva primesnih jona i



Sl. 40. Zonska struktura III-V jedinjenja u blizini centra Brillouin-ove zone. Γ_6 je provodna zona, Γ_8 zona lakih i teških šupljina, a Γ_7 zona spin-orbitno otcepljenih šupljina.

slobodnih elektrona. Sa E i $\psi(\mathbf{r})$ su označene svojstvene energije i talasne funkcije, respektivno. Za neku svojstvenu energiju (3.1), odgovarajuća svojstvena funkcija $\psi(\mathbf{r})$ se ne poklapa sa svojstvenim funkcijama neperturbovanog Hamiltonijana $\hat{H}_0$ koji opisuje idealnu kristalnu strukturu. Schrödinger-ova jednačina za idealan kristal, napisana za jednodimenzionalni prostor sa ciljem pojednostavljenja notacije, glasi:

$$\hat{H}_0 \phi_{nk}(x) = \varepsilon_{nk}(k) \phi_{nk}(x), \quad (3.2)$$

gde je $\varepsilon_{nk}(k)$ svojstvena energija idealnog kristala, a $\phi_{nk}(x)$ odgovarajuća svojstvena funkcija neperturbovanog Hamiltonijana. Sa k je označena kontinualna promenljiva koja uzima sve moguće vrednosti talasnog vektora u okviru prve Brillouin-ove zone. Kako $\phi_{nk}(x)$ čine potpun skup ortogonalnih funkcija na domenu celog kristala, svojstvene talasne funkcije kompletnog kristala sa uključenom perturbacijom mogu se prikazati kao linearna kombinacija talasnih funkcija neperturbovanog kristala [85], tj. u obliku:

$$\psi(x) = \sum_n \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \hat{\chi}_n(k) \phi_{nk}(x) \frac{dk}{2\pi}, \quad (3.3)$$

gde su sa $\hat{\chi}_n$ označeni koeficijenti u linearnoj kombinaciji, a $\pm\pi/a$ predstavlja granice prve Brillouin-ove zone. Celobrojna vrednost n u relaciji (3.3) prolazi kroz indekse svih zona idealnog kristala. Zamenom izraza (3.3) u Schrödinger-ovu jednačinu (3.1), i njenim rešavanjem, moguće je dobiti egzaktno rešenje za svojstvene energije i talasne funkcije. Međutim, ovaj pristup u principu nije ništa jednostavniji od rešavanja

originalne jednačine (3.1). Metoda efektivne mase uvodi aproksimativni pristup problemu koji podrazumeva određene pretpostavke. Prva pretpostavka je da posmatrana zona nije degenerisana, da se njen ekstremum nalazi u $k = 0$, a da su energije vezanih stanja u relativnoj blizini ekstremuma n -te zone, E_{n0} . Takođe, poluprovodnik je takav da je energija ekstremuma posmatrane zone dovoljno udaljena od drugih zona u okviru modela zonske strukture. Praktično, ukoliko se metoda efektivne mase koristi za određivanje elektronske strukture provodne zone, zanemaruje se uticaj valentne zone (i ostalih zona iznad provodne zone) i istovremeno se posmatra samo mali deo k -prostora u okolini dna provodne zone, pa se sumiranje po n u prethodnom izrazu može zanemariti (odnosno pod indeksom n se u narednom razmatranju podrazumeva samo jedna zona). Bloch-ove funkcije se tada mogu izraziti u obliku $\phi_{nk}(x) = u_{nk}(x) \exp(ikx)$, gde je $u_{nk}(x)$ periodična funkcija sa periodom koji odgovara periodu potencijala neperturbovane kristalne rešetke. Ukoliko se pretpostavi da su varijacije $\phi_{nk}(x)$ sa k najvećim delom posledica prisustva planarnog talasa, $u_{nk}(x)$ se može tretirati nezavisno od k u malom segmentu k -prostora, pa važi:

$$\phi_{nk}(x) = u_{nk}(x) \exp(ikx) \approx u_{n0}(x) \exp(ikx) = \phi_{n0}(x) \exp(ikx). \quad (3.4)$$

Talasna funkcija (3.3), uz aproksimaciju uvedenu prethodnim izrazom, može se primenom inverzne Fourier-ove transformacije izraziti u obliku:

$$\psi(x) \approx \phi_{n0}(x) \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \hat{\chi}_n(k) \exp(ikx) \frac{dk}{2\pi} = \phi_{n0}(x) \chi(x), \quad (3.5)$$

tj. u vidu proizvoda Bloch-ovih funkcija $\phi_{n0}(x)$ i anvelopne funkcije $\chi(x)$. Pritom, potrebno je napomenuti da u skladu sa ograničenjem uvedenim vezano za posmatranje malog segmenta k -prostora, a samim tim i malog broja talasnih brojeva koje obuhvata $\hat{\chi}(k)$, anvelopna funkcija $\chi(x)$ mora biti sporo promenljiva funkcija.

Ukoliko se u skladu sa pretpostavkama metode efektivne mase posmatra samo jedna zona u okviru modela poluprovodničke strukture, što ukida sumiranje u relaciji (3.3), uticaj operatora neperturbovanog Hamiltonijana na talasnu funkciju se svodi na:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0\psi(x) &= \hat{H}_0 \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \hat{\chi}_n(k) \phi_{nk}(x) \frac{dk}{2\pi} = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \hat{\chi}(k) \varepsilon_n(k) \phi_{nk}(x) \frac{dk}{2\pi} \\ &\approx \phi_{n0}(x) \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \hat{\chi}(k) \varepsilon_n(k) \exp(ikx) \frac{dk}{2\pi}.\end{aligned}\quad (3.6)$$

Razvoj svojstvenih energija neperturbovanog Hamiltonijana u stepeni red u k -prostoru, $\varepsilon_n(k) = \sum_m a_m k^m$, nakon zamene u prethodnu relaciju, daje:

$$\hat{H}_0\psi(x) \approx \phi_{n0}(x) \sum_m a_m \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \hat{\chi}(k) k^m \exp(ikx) \frac{dk}{2\pi}. \quad (3.7)$$

Relacija (3.7) se može dalje uprostiti primenom izraza za Fourier-ovu transformaciju izvoda:

$$\int \frac{df(x)}{dx} \exp(-ikx) dx = ik \int f(x) \exp(-ikx) dx = ik \hat{f}(k), \quad (3.8)$$

na osnovu kog sledi da inverzna Fourier-ova transformacija od $k \hat{f}(k)$ ima vrednost $-i \cdot df(x)/dx$. Generalizacijom prethodnog zaključka za izvode višeg reda, dobija se da je inverzna transformacija izraza $k^m \hat{f}(k)$ jednaka $(-i \cdot d/dx)^m f(x)$, pa relacija (3.7) postaje:

$$\hat{H}_0\psi(x) \approx \phi_{n0}(x) \sum_m a_m \left(-i \frac{d^m \chi(x)}{dx^m} \right) \equiv \phi_{n0}(x) \varepsilon_n \left(-i \frac{d}{dx} \right) \chi(x). \quad (3.9)$$

U prethodnom izrazu, $\varepsilon_n(-i \cdot d/dx)$ predstavlja oznaku za razvoj dat sa leve strane iste relacije. To praktično znači, da u razvoju $\varepsilon_n(k)$ u stepeni red po k , treba zameniti svako k sa $-i \cdot d/dx$ u svakom članu stepenog reda. Konačno, zamenom izraza (3.9) i (3.5) u Schrödinger-ovu jednačinu (3.1), dobija se jednačina jednostavnog oblika, u kojoj ne figurišu Bloch-ove funkcije $\phi_{n0}(x)$ [85]:

$$\left[\varepsilon_n \left(-i \frac{d}{dx} \right) + V(x) \right] \chi(x) = E \chi(x). \quad (3.10)$$

Prethodna jednačina, napisana za jednodimenzionalnu geometriju, može se generalizovati kako bi se uzele u obzir sve tri prostorne dimenzije, prostom zamenom $\varepsilon_n(-id/dx)$ sa $\varepsilon_n(-i\nabla)$. Efektivni Hamiltonijan $[\varepsilon_n(-i \cdot d/dx) + V(x)]$ je i dalje veoma

komplikovan ukoliko se razmatra celokupna zonska struktura $\varepsilon_n(k)$. Međutim, u odnosu na pretpostavku da se talasne funkcije prostiru u maloj oblasti k -prostora, zavisnost $\varepsilon_n(k)$ se može aproksimirati kao parabolična zavisnost energije u odnosu na ekstremum posmatrane zone [84], [85]:

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) \approx E_{n0} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0 m_n}, \quad (3.11)$$

gde je m_n efektivna masa u posmatranoj zoni, a sa $\mathbf{k}$ je označen trodimenzionalni talasni vektor. Nakon smene $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$ konačno se dobija:

$$\varepsilon_n(-i\nabla) \approx E_{n0} - \frac{\hbar^2}{2m_0 m_n} \nabla^2. \quad (3.12)$$

Zamenom izraza (3.12) u efektivnu Schrödinger-ovu jednačinu (3.10), uz pretpostavku da se energije računaju od ekstremuma zone, za koji je usvojena nulta referentna vrednost (primera radi, za razmatranje provodne zone, $E_{n0} = E_c = 0$), dobija se Schrödinger-ova jednačina za anvelopnu talasnu funkciju:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_n^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \chi(\mathbf{r}) = E \chi(\mathbf{r}), \quad (3.13)$$

sa konstantnom efektivnom masom ($m_n^* = m_0 m_n$) u posmatranom sloju poluprovodnika.

Konstantnost efektivne mase u relaciji (3.13) ograničava validnost izvedene jednačine na tretiranje homogenih poluprovodničkih materijala. Ukoliko je poluprovodnik promenljivog sastava, javlja se prostorno zavisani lokalni ekstremum zone, pa $E_{n0} \rightarrow E_{n0}(\mathbf{r})$, čiji se doprinos računat u odnosu na neki referentni nivo može pridružiti makroskopskom potencijalu. Pored toga, za poluprovodnike promenljivog sastava i efektivna masa postaje prostorno zavisna, pa $m_n^* \rightarrow m_n^*(\mathbf{r})$, što zahteva još jednu modifikaciju (3.13). Nakon hermitske generalizacije kinetičkog dela Hamiltonijana koja omogućava tretiranje prostorno zavisne efektivne mase [$\hat{\mathbf{p}} \cdot (1/m_n(\mathbf{r})) \cdot \hat{\mathbf{p}}$], Schrödinger-ova jednačina sa efektivnom masom glasi [84]:

$$\frac{1}{2} \hat{\mathbf{p}} \left(\frac{1}{m_n^*(\mathbf{r})} \right) \hat{\mathbf{p}} \chi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \chi(\mathbf{r}) = E \chi(\mathbf{r}), \quad (3.14)$$

gde je $\chi(\mathbf{r})$ anvelopna funkcija, koju u prvoj aproksimaciji treba pomnožiti sa Bloch-ovom funkcijom u datom materijalu da bi se dobila ukupna talasna funkcija, a $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ je operator impulsa.

Kod poluprovodničkih struktura kod kojih se sastav menja strmo na heterospojevima, dok se u okviru samog sloja između heterospoja menja sporo ili je konstantan, jednačina (3.14) se može rešavati samo u okviru pojedinih slojeva, a dobijena rešenja treba na heterospojevima povezati korišćenjem odgovarajućih graničnih uslova. Primera radi, posmatra se ravan heterospoj dva različita materijala. Efektivne mase materijala sa različitih strana heterospoja se mogu označiti sa m_{n1}^* i m_{n2}^* , pa formalna integracija jednačine (3.14) u beskonačno maloj oblasti u okolini heterospoja, daje granične uslove [84]:

$$\chi_1 = \chi_2 \quad (3.15)$$

$$\frac{1}{m_{n1}^*} \nabla \chi_1 = \frac{1}{m_{n2}^*} \nabla \chi_2 \quad (3.16)$$

gde χ_1 i χ_2 predstavljaju anvelopne talasne funkcije sa jedne i sa druge strane heterospoja. Razmatranjem ovih graničnih uslova dolazi se do zaključka da se anvelopna talasna funkcija uz konačan potencijal i u prisustvu diskontinuiteta mase lomi, ali ipak ostaje neprekidna, što nije u skladu sa osnovnim zahtevom da talasna funkcija mora biti glatka. Takođe, uslovi (3.15) i (3.16) su diskutabilni i sa stanovišta teorije efektivne mase, pošto se potencijal i efektivna masa na heterospoju menjaju brzo, pa se može postaviti pitanje da li metoda efektivne mase, a samim tim i jednačina (3.14), u okolini heterospoja uopšte važe?

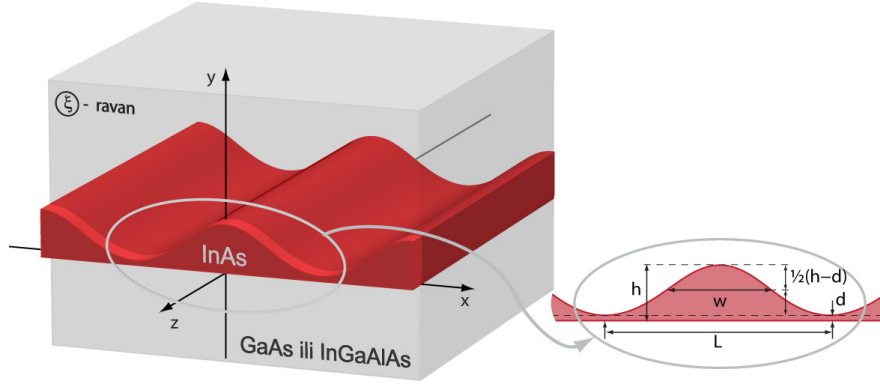
Osnovni granični uslovi za talasnu funkciju na heterospoju zapravo zahtevaju da kompletna talasna funkcija na heterospoju bude neprekidna i glatka, što ne mora važiti za pojedine njene komponente, pa ni za anvelopnu funkciju, koja globalno gledano čini dominantnu, ali ne i jedinu, komponentu ukupne talasne funkcije. Anvelopna talasna funkcija, prema tome, uopšte ne mora biti neprekidna na heterospoju, a pogotovo što ona ima smisla samo malo dalje od heterospoja. Za razliku od nešto složenijih metoda, metoda efektivne mase ne uzima u obzir evanescentna stanja, tj. komponente ukupne talasne funkcije koje potiču od drugih zona u modelu poluprovodničke strukture, a

izražene su samo u okolini heterospoja [84]. Iako je anvelopna funkcija dominantna u ukupnoj talasnoj funkciji, određena ispitivanja su pokazala da na samom heterospoju veći broj evanescentnih stanja ima značajne amplitude, koje u dubini sloja na rastojanju od samo nekoliko konstanti rešetke praktično opadaju na nulu. Ovo znači da se granični uslovi za anvelopne talasne funkcije, koji simuliraju stvarno stanje na heterospoju mogu dobiti samo mikroskopskim metodama, na način koji omogućava održanje kvantno-mehaničke struje verovatnoće kroz heterospoj [84]. Međutim, primene mikroskopskih metoda izračunavanja pokazuju da su za uobičajene spojeve kao što je npr. GaAs/(AlGa)As gde su dna provodnih zona konstituenata u Γ tački relativno bliska, granični uslovi (3.15)-(3.16) generalno dosta dobri. Osnovna prednost primene ovih graničnih uslova je prvenstveno u jednostavnosti. Pored toga, potrebno je poznavanje jedino vrednosti efektivnih masa, koje su poznate uglavnom za sve poluprovodničke materijale od interesa, pa su ovi granični uslovi daleko najčešće korišćeni u praksi.

Schrödinger-ova jednačina za anvelopnu talasnu funkciju (3.14), izvedena je pod pretpostavkama metode efektivne mase, što uvodi određena ograničenja u njenu primenljivost. Prvo ograničenje je posledica parabolične aproksimacije energetskih zona uvedene relacijom (3.11), što pri razmatranju iole većih opsega energija, može uvesti značajna numerička odstupanja u rezultate modelovanja. Drugo, razmatranje uticaja samo jedne zone na talasne funkcije u okviru modela poluprovodničke strukture, onemogućava primenu ove relacije za materijale koji u provodnoj zoni imaju više ekvivalentnih dolina (na primer, silicijum), ili ukoliko je u razmatranju neophodno zadržati više od jedne zone. I pored svih ovih ograničenja, metoda efektivne mase je daleko najčešće korišćena za analizu mnogih osobina poluprovodničkih heterostruktura, zahvaljujući svojoj jednostavnosti, mogućnosti analitičkog tretmana i tačnosti koja je u mnogim slučajevima sasvim dovoljna za praktičan rad.

3.1.2 Samosaglasno određivanje elektronske strukture kvantnih crta

Prethodna razmatranja vezana za anvelopnu Schrödinger-ovu jednačinu u aproksimaciji efektivne mase, nisu se ograničavala na posmatranje pojedinih kvantno-konfiniranih struktura, te se mogu primeniti i na masivne poluprovodnike, ali i na strukture sa različitim stepenom konfiniranja nosilaca.



Sl. 41. Šematski prikaz kvantne crte izolovane iz ansambla. Inset prikazuje profil poprečnog preseka jamske oblasti (InAs) sa obeleženim karakterističnim geometrijskim parametrima.

Kvantne crte su izdužene nanostrukture koje po obliku podsećaju na plitka ostrvca. U ansamblu kvantnih crta orijentacija struktura je mahom slična, ali su uobičajeno prisutne značajne varijacije u dimenzijama pojedinačnih crta, kao i u rastojanjima na kojima dolazi do formiranja susednih struktura. U prvoj aproksimaciji, moguće je pretpostaviti da se susedne strukture nalaze na dovoljno velikom rastojanju da se njihov međusobni uticaj može zanemariti, pa se praktično mogu posmatrati izolovane kvantne crte. Na Sl. 41 dat je šematski prikaz jedne strukture izolovane iz ansambla kvantnih crta. Ravan poprečnog preseka je xOy ravan, dok je struktura izdužena u longitudinalnom z -pravcu i ima dimenziju Z . U ravni poprečnog preseka, dimenzija jamske oblasti u pravcu narastanja (y -pravac) označava se kao visina crte h , dok je dimenzija u lateralnom pravcu (x -pravac) širina crte w .

Dužina crta u longitudinalnom pravcu obično iznosi nekoliko stotina nanometara, pa se konfiniranje u ovom pravcu praktično može zanemariti [53]. Iz tog razloga, teorijski modeli često koriste aproksimaciju koja kvantne crte tretira kao žice i analizira konfiniranje nosilaca isključivo u ravni poprečnog preseka (transverzalna ravan) [65], pa se anvelopna talasna funkcija u provodnoj zoni može predstaviti u obliku:

$$\chi(r) = \eta(x, y) \exp(ik_z z), \quad (3.17)$$

gde je k_z talasni vektor duž crte, u longitudinalnom z -pravcu. Zamenom prethodne relacije u anvelopnu Schrödinger-ovu jednačinu (3.14), dobija se:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla_{xy} \left(\frac{1}{m_e^*(x, y)} \nabla_{xy} \eta(x, y) \right) + \left(\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*(x, y)} + E_c(x, y) \right) \eta(x, y) = E \eta(x, y), \quad (3.18)$$

gde je $\eta(x,y)$ dvodimenzionalna anvelopna talasna funkcija u provodnoj zoni, m_e^* efektivna masa elektrona, a ∇_{xy} dvodimenzionalni operator gradijenta koji potiče od operatora impulsa u xy -ravni [relacija (3.14)]. Sa $E_c(x,y)$ je označena prostorna zavisnost profila provodne zone koji definiše potencijal u kome se nalaze nosioci naelektrisanja. Ovaj profil istovremeno određuju diskontinuitet zone na heterospoju ΔE_c i elektrostatički potencijal $\phi(x,y)$, koji potiče od pokretnih nosilaca i jonizovanih primesa prisutnih ukoliko je materijal dopiran. Relacija (3.18) je parcijalna diferencijalna jednačina, koju je potrebno rešiti se za svaku pojedinačnu vrednost k_z^2 . To praktično znači da rešenja ove jednačine, svojstvene energije E i talasne funkcije $\eta(x,y)$ eksplicitno zavise od k_z^2 . Međutim, ako se pretpostavi da je efektivna masa m_e^* uniformna duž strukture (u z -pravcu), može se smatrati da talasne funkcije $\eta(x,y)$ nisu funkcija od k_z^2 , tj. da se talasne funkcije za neko k_z ne razlikuju značajno od talasnih funkcija za $k_z = 0$, pa se uzima u obzir samo zavisnost svojstvenih energija od talasnog vektora u z -pravcu [84].

U odnosu na heterostrukturnu prirodu kvantnih crta i uobičajeno dopiranje materijala primesama, profil provodne zone određuju prostorna zavisnost diskontinuiteta provodne zone (kao posledica postojanja heterospojeva) i elektrostatički potencijal koji potiče od nosilaca naelektrisanja prisutnih u strukturi. Prostornu zavisnost diskontinuiteta zone uglavnom nije teško odrediti, jer zavisi samo od elektronskih afiniteta i energetske procepa materijala koji čine heterostrukturu, a za uobičajeno korišćene materijale (III-V ili II-IV jedinjenja) ove vrednosti su mahom poznate. Sa druge strane, potencijal nosilaca naelektrisanja direktno zavisi distribucije od koncentracije nosilaca, koja, sa druge strane zavisi od svojstvenih talasnih funkcija. Za poznatu koncentraciju, potencijal nosilaca naelektrisanja se može odrediti rešavanjem Poisson-ove jednačine, što bi generalno gledano, zatvorilo ovaj problem. Međutim, kako talasne funkcije nisu unapred poznate, pa samim tim ni koncentracija nosilaca, egzaktno rešenje se može dobiti jedino rešavanjem Schrödinger-ove jednačine koja postaje nelinearna integralno-diferencijalna jednačina. Egzaktno rešavanje ovakve jednačine predstavlja ozbiljan matematički problem, pa se uobičajena procedura u prevazilaženju ovog problema zasniva na samosaglasnom rešavanju spregnute Schrödinger-ove i Poisson-ove jednačine [84].

Samosaglasni postupak počinje izborom probne zavisnosti potencijalne energije. U situacijama kada su koncentracije primesa relativno niske (do 10^{18} cm^{-3}), uobičajeno se uzima da je probni potencijal jednak nuli na celom domenu. Ako su u pitanju viši nivoi dopiranja, tada se najpre samosaglasno odredi potencijal za niže nivoe dopiranja, pa se dobijena vrednost potencijala uzima kao probna. Za poznat probni potencijal, rešava se Schrödinger-ova jednačina (3.18), posebno za svaki sloj u sastavu heterostrukture i dobijena rešenja se povezuju graničnim uslovima (3.15) i (3.16). Drugi pristup realizacije samosaglasnog postupka, polazi od homogene raspodele nosioca naelektrisanja u jami za koju se određuje elektrostatički potencijal i zatim nastavlja sa samosaglasnim postupkom.

Prostorna zavisnost koncentracije elektrona u strukturi izračunava se na osnovu:

$$n(x, y) = n_{1D}(x, y) + n_{3D}(x, y), \quad (3.19)$$

gde je sa $n_{1D}(x, y)$ označena prostorna zavisnost koncentracije dvodimenzionalno konfiniranih elektrona koja potiče od elektrona na vezanim stanjima (jednodimenzionalni elektronski gas), a sa $n_{3D}(x, y)$ prostorna zavisnost koncentracije nosilaca u balkovskim elektronskim stanjima. Potrebno je napomenuti, da su u oblasti jame, strogo gledano, konfinirani samo elektroni nižih energija. Zbog činjenice da su diskontinuiteti provodne zone na heterogranicama konačni, elektroni na višim energijama u jami su kvazi-slobodni i čine trodimenzionalni elektronski gas čije su osobine veoma slične 3D elektronskom gasu u barijernim oblastima. U ovom razmatranju, 3D koncentracija elektrona na višim energetske stanjima u jami se ne uzima u obzir, jer su ova stanja daleko iznad Fermijevog nivoa pa se njihov uticaj na koncentraciju može zanemariti. Za poznate vrednosti svojstvenih energija i talasne funkcije, moguće je odrediti koncentraciju jednodimenzionalnog elektronskog gasa, na osnovu izraza [84]:

$$n_{1D}(x, y) = \frac{2}{\pi} \sum_p |\eta_p(x, y)|^2 \int_0^{+\infty} \frac{dk_z}{1 + \exp \frac{E_p(k_z) - E_F}{k_B T}}, \quad (3.20)$$

gde je sa p označen redni broj datog vezanog stanja, k_z je talasni vektor u z -pravcu (Sl. 41), E_F energija Fermijevog nivoa, a k_B Boltzmann-ova konstanta. Fermijev nivo,

izražen u odnosu na dno provodne zone, određuje se na osnovu uslova globalne elektroneutralnosti na granicama domena [dovoljno daleko od jame, $(x, y) \rightarrow (\pm\infty, \pm\infty)$]:

$$n_{3D}(x, y) + N_a^-(x, y) = p_{3D}(x, y) + N_d^+(x, y), \quad (3.21)$$

gde su N_d^+ i N_a^- koncentracije jonizovanih donorskih i akceptorskih primesa, respektivno. U prethodnoj relaciji, sa n_{3D} i p_{3D} , označene su koncentracije elektrona i šupljina u 3D balkovskim stanjima u barijernom materijalu:

$$n_{3D}(x, y) = N_c \cdot F_{1/2} \left(\frac{E_F + q \cdot \varphi(x, y)}{k_B T} \right), \quad (3.22)$$

$$p_{3D}(x, y) = N_v \cdot F_{1/2} \left(\frac{q \cdot \varphi(x, y) - E_g - E_F}{k_B T} \right), \quad (3.23)$$

gde su N_c i N_v efektivne gustine stanja u provodnoj i valentnoj zoni barijernog materijala, respektivno, E_g je odgovarajući energetska procep, $\varphi(x, y)$ elektrostatički potencijal strukture, a $F_{1/2}$ je Fermijev integral [86]:

$$F_j(\xi) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^{+\infty} \frac{x^j}{1 + \exp(x - \xi)} dx. \quad (3.24)$$

U cilju obezbeđivanja nosioca naelektrisanja potrebnih za ostvarivanje unutarzonskih prelaza, barijerna oblast je dopirana donorskim primesama koncentracije N_d , dok se koncentracija akceptorskih primesa može zanemariti. Pod pretpostavkom da su primele mahom joznizovane, usled prisustva diskontinuiteta zone na heterospoju materijala jame i barijere većina elektrona će preći u jamu ostavljajući za sobom nekompenzovane jonizovane donore u barijernoj oblasti u okolini heterospoja. Modulaciono dopiranje, tj. dopiranje barijerne oblasti koje ima za cilj akumulaciju nosilaca u oblasti jame, ima prednost u odnosu na direktno dopiranje one oblasti u kojoj se optički prelazi odigravaju. Direktno dopiranje utiče na položaje diskretnih energetskih stanja i doprinosi apsorpciji prelazima koji se odvijaju uz učešće primesnih nivoa. Pored toga, usled rasejanja na jonizovanim primesama, značajno se smanjuje pokretljivost nosilaca naelektrisanja, što je od značaja za transport nosilaca kroz strukturu.

Uobičajeni pristup u tretiranju poluprovodničkih heterostruktura zasniva se na aproksimaciji potpunog osiromašenja, koja pretpostavlja da je oblast osiromašenja precizno definisana i ima jasne granice sa strmim prelazom između potpuno osiromašene (oblast koju formiraju jonizovani donori) i neutralne oblasti. Međutim, ako je barijerni materijal dopiran donorskim primesama koncentracije N_d , koncentracija jonizovanih donora se može odrediti na osnovu relacije:

$$N_d^+ = N_d - \frac{N_d}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_d - E_F - q \cdot \varphi(x, y)}{k_B T}\right)}, \quad (3.25)$$

koja se ne zasniva na pretpostavci totalnog osiromašenja, niti pretpostavlja profil oblasti osiromašenja. Iz ovog razloga, predloženi model je primenljiv za širok spektar struktura različitih geometrija poprečnog preseka, dimenzija, koncentracija primesa i temperatura. U relaciji (3.25) sa E_d je označen donorski energetska nivo.

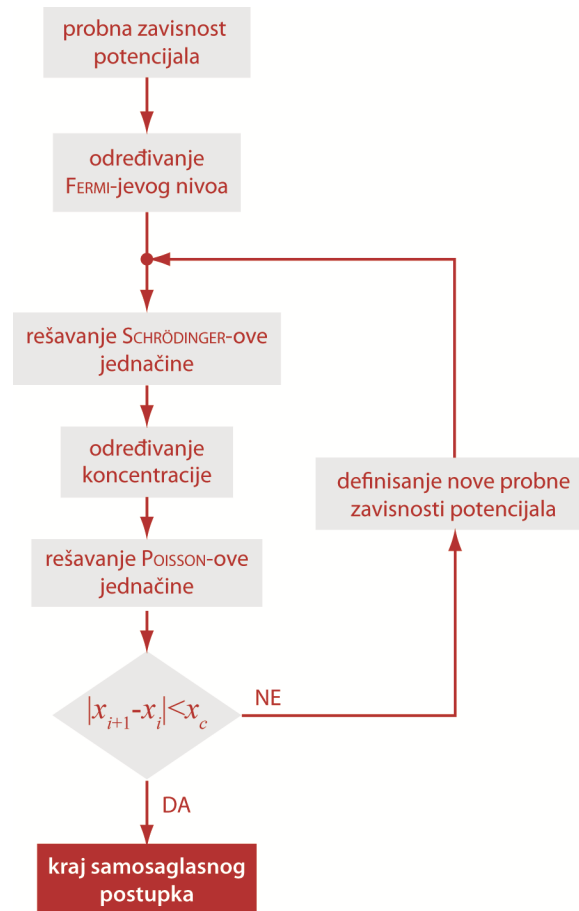
Zamenom izraza (3.22), (3.23) i (3.25) u jednačinu elektroneutralnosti (3.21), uz uslov da je potencijal usled prisustva naelektrisanih nosioca na granicama domena jednak nuli [$\varphi(\pm\infty, \pm\infty) = 0$], dobija se nelinearna relacija, čijim se rešavanjem može odrediti položaj Fermijevog nivoa u odnosu na granice domena.

Sledeći korak u samosaglasnom postupku predstavlja rešavanje Poisson-ove jednačine:

$$\nabla[\varepsilon(x, y) \nabla \varphi(x, y)] = -q \cdot [N_d^+ - n(x, y)], \quad (3.26)$$

gde je $\varepsilon(x, y)$ prostorna zavisnost statičke dielektrične konstante, $n(x, y)$ koncentracija elektrona definisana izrazima (3.19), (3.20) i (3.22), a N_d^+ koncentracija jonizovanih donorskih primesa data izrazom (3.25). Nakon zamene navedenih izraza u relaciju (3.26), Poisson-ova jednačina postaje nelinearna parcijalna diferencijalna jednačina, što dodatno komplikuje samosaglasni postupak. Detalji rešavanja ove jednačine biće izneti u sledećem poglavlju.

Rešenje Poisson-ove jednačine je nova vrednost potencijala $\varphi(x, y)$, koja se razlikuje od probno zadatog potencijala, što znači da Schrödinger-ova i Poisson-ova jednačina nisu usaglašene, pa je kompletnu proceduru rešavanja jednačina (3.18) i (3.26) potrebno ponoviti sa novim probnim potencijalom. Neka je rešenje Poisson-ove



Sl. 42. Blok dijagram samosaglasnog postupka za određivanje elektronske strukture. Pod x_i se podrazumeva vrednost veličine x (energija diskretnih stanja, maksimalna koncentracija, potencijal...) u i -tom iterativnom koraku, dok je x_c unapred zadato odstupanje koje određuje tačnost samosaglasnog postupka.

jednačine u prvom iterativnom koraku potencijal φ_1 . Na osnovu poznavanja diskontinuiteta provodne zone na heterospojevima (ΔE_c), potencijala φ_1 i eventualnih dodatnih korekcija potencijala (kao posledice različitih dielektričnih konstanti materijala ili međusobne interakcije nosilaca naelektrisanja), može se odrediti nova vrednost potencijala, sa kojom se ponovo ulazi u rešavanje Schrödinger-ove jednačine (3.18), čime praktično otpočinje sledeći iterativni korak samosaglasnog postupka. Samosaglasni postupak se završava kada se zavisnosti neke od veličina (energije diskretnih stanja, maksimalna koncentracija vezanih elektrona, potencijal,...) u dva uzastopna iterativna koraka dovoljno malo razlikuju. Blok dijagram samosaglasnog postupka prikazan je na Sl. 42.

Konvergenција samosaglasnog postupka se može podešavati uvođenjem relaksacionog faktora f na sledeći način [84]: potencijal V_{i+1} kojom počinje $i+1$ -vi iterativni korak određuje se kao $V_{i+1} = fV_i + (1-f)u_i$, gde je u_i potencijal kojim započinje i -ti iterativni korak, a V_i potencijal kojim se i -ti korak završava. Relaksacioni faktor može uzimati vrednosti između 0 i 1, u zavisnosti od željene brzine konvergencije. Za vrednosti f bliske jedinici konvergenција je brza ali nestabilna, a za vrednosti bliske nuli, proces samousaglašavanja je spor, sa velikim brojem potrebnih iterativnih koraka. Prikazani metod podešavanja konvergencije samosaglasnog postupka može se modifikovati u cilju dodatnog smanjenja brzine i povećanja stabilnosti.

Sva dosadašnja razmatranja bazirana su na Schrödinger-ovoj jednačini efektivne mase (3.18) u paraboličnoj aproksimaciji (3.11), koja je izvedena uz pretpostavku da se provodna zona može razmatrati nezavisno od valentne zone. Jednačina (3.18) u ovom obliku važi (uz prihvatljivu grešku) u opsegu energija od tipično nekoliko stotina meV. Međutim, postoje određene generalizacije koje omogućavaju uključivanje neparaboličnosti disperzije balka, tj. uzimaju u obzir uticaj valentne zone na ponašanje elektrona u okviru provodne zone bez eksplicitnog uključivanja te zone u razmatranje. Ove modifikacije povećavaju tačnost metode efektivne mase, odnosno povećavaju energetski opseg njene primenljivosti.

Jedna od često korišćenih generalizacija odnosi se na uključivanje interakcije zone lakih šupljina sa provodnom zonom [87], [88]. Odgovarajuća Schrödinger-ova jednačina za elektrone u provodnoj zoni se nakon zanemarivanja spinske orijentacije, praktično svodi na klasičnu Schrödinger-ovu jednačinu za anvelopnu talasnu funkciju, ali za novu vrednost efektivne mase $M_e^*(\mathbf{r}, E)$ koja sada zavisi od svojstvene energije svakog pojedinačnog vezanog stanja, a definisana je Kane-ovom relacijom [84]:

$$M_e^*(\mathbf{r}, E) = m_e^*(\mathbf{r}) \left[1 + \frac{E - E_c(\mathbf{r})}{E_g(\mathbf{r})} \right], \quad (3.27)$$

U prethodnoj relaciji $m_e^*(\mathbf{r})$ je prostorna zavisnost efektivne mase elektrona u centru Brillouin-ove zone, $E_g(\mathbf{r})$ je prostorna zavisnost direktnog energetskog procepa, a $E_c(\mathbf{r})$ prostorna zavisnost potencijala strukture. Uticaj zone lakih šupljina na provodnu

zonu uključen je preko efektivne mase $M_e^*(\mathbf{r}, E)$ koja zamenjuje efektivnu masu $m_e^*(\mathbf{r})$ u ekstremumu provodne zone.

Schrödinger-ova jednačina se prvo rešava za efektivnu masu u ekstremumu provodne zone, za svaku vrednost k_z , što daje svojstvene talasne funkcije i disperziju svojstvenih vrednosti energije $E_p(k_z)$. Nakon toga, ulazi se u iterativni proces rešavanja Schrödinger-ove jednačine, za korigovanu vrednost efektivne mase (3.27) u svakom iterativnom koraku. Iterativni postupak se pojedinačno izvodi za svako diskretno stanje p i za svaku vrednost talasnog vektora k_z . Treba napomenuti da, sada kada efektivna masa zavisi od energije, talasne funkcije koje se dobijaju kao rešenja Schrödinger-ove jednačine nisu ortogonalne.

Pristup uračunavanja neparaboličnosti disperzije preko energetski zavisne efektivne mase (3.27), inicijalno je razvijen za strukture sa jednodimenzionalnim konfiniranjem nosilaca, tj. kvantne jame. Generalno gledano, kod kvantno-konfiniranih struktura sa većim stepenom konfiniranja, razmatranje neparaboličnosti potencijalno zahteva tretman valentne zone u okviru višezonske teorije efektivne mase, baziran na Luttinger-Kohn Hamiltonian-u [89]:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 \\ -S^+ & P-Q & 0 & R \\ R^+ & 0 & P-Q & S \\ 0 & R^+ & S^+ & P+Q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |3/2, +3/2\rangle \\ |3/2, +1/2\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle \end{bmatrix}, \quad (3.28)$$

gde je m_0 je masa slobodnog elektrona, a elementi matrice su dati sa:

$$P = \gamma_1 k_z^2 - (k_x^2 + k_y^2) \gamma_1 + \frac{2m_0}{\hbar^2} V_h(x, y), \quad (3.29)$$

$$Q = \gamma_2 (k_z^2 - k_x^2 + 2k_y^2), \quad (3.30)$$

$$R = \sqrt{3} (\gamma_3 k_z^2 + k_x^2 \gamma_3 + 2ik_z k_x \gamma_2), \quad (3.31)$$

$$S = 2\sqrt{3} \gamma_3 (ik_y k_z^2 - k_x k_y). \quad (3.32)$$

U prethodnim relacijama, γ_1, γ_2 i γ_3 su Luttinger-ovi parametri, $\hat{k}_x = -i(\partial/\partial x)$ i $\hat{k}_y = -i(\partial/\partial y)$ su operatori, dok je k_z parametar. $V_h(x, y)$ je prostorna zavisnost diskontinuiteta valentne zone. Hamiltonijan (3.28) napisan je za osu kvantizacije

postavljenu duž pravca narastanja strukture (y -osa, Sl. 41). Posmatranjem izraza (3.29)-(3.32) može se zaključiti da za $k_z = 0$, vandijagonalni elementi Hamiltonijana (3.28) imaju vrednost različitu od nule, pa su stanja lakih i teških šupljina u okviru valentne zone Γ_8 spregnuta. Sa druge strane, ukoliko se posmatra kvantna jama, za koju se osa kvantizacije poklapa sa pravcem u kom dolazi do konfiniranja nosilaca naelektrisanja (y -osa), koeficijenti R i S dati relacijama (3.31) i (3.32), postaju nula za $k_x = k_z = 0$ (Γ -tačka), pa Hamiltonijan (3.28) dobija dijagonalnu formu. Prema tome, razmatranje modela kvantnih jama, dozvoljava samostalnu analizu zona lakih i teških šupljina, jer ne postoji sprezanje između ovih zona (određivanje strukture valentne zone u tom slučaju se svodi na rešavanje dve nezavisne Schrödinger-ove jednačine za efektivnu masu, posebno za lake i posebno za teške šupljine). Međutim, kod kod kvantnih crta, čak i za $k_z = 0$ diskretna stanja šupljina u valentnoj zoni se ne mogu striktno okarakterisati kao stanja lakih ili teških šupljina, pa korekcija efektivne mase uvedena relacijom (3.27) nije u potpunosti opravdana. Iako se precizan tretman neparaboličnosti disperzije balka može dobiti samo uz uključen spregnuti uticaj zone lakih i teških šupljina na provodnu zonu, Kane-ova relacija (3.27) ipak može dati uvid u značaj uračunavanja efekta neparaboličnosti.

Uticaj neparaboličnosti na unutarzonsku apsorpciju u V -olučenim kvantnim žicama detaljno je ispitivan primenom Kane-ove relacije [87]. Profil poprečnog preseka ispitivanih kvantnih žica je sa stanovišta simetrije analogan realističnom sočivastom profilu kvantnih crta, a dimenzije struktura su nešto veće od standardnih dimenzija kvantnih crta. Zbog većih dimenzija, broj diskretnih energetske stanja je veći u ispitivanim kvantnim žicama, ali se zaključci izvedeni za niža energetska stanja kvalitativno mogu primeniti i na kvantne crte. Pokazuje se da su vrednosti energija za niža vezana stanja u neparaboličnoj aproksimaciji veće, dok su za viša vezana stanja energije manje, nego za primenjenu paraboličnu aproksimaciju, pa neparabolična aproksimacija dovodi do smanjenja energija prelaza i pomeranja apsorpcionih pikova ka nižim energijama. Smanjenje energije prelaza naročito je izraženo za prelaze sa nižih (pri dnu jame) na viša (pri vrhu jame) energetska stanja, što dovodi do nešto većeg crvenog pomaka visoko-energetskog pika za polarizaciju incidentne svetlosti u pravcu izraženijeg konfiniranja strukture (Y -polarizacija) [87]. Uticaj neparaboličnosti postaje značajno izražen za veće vrednosti talasnog vektora k_z i ogleda se kroz usporavanje

brzine rasta energije E sa k_z . Međutim, samo krivljenje zavisnosti $E(k_z)$ nema veliki uticaj na apsorpcioni spektar niti na širinu spektralnih linija, jer energetska razlika između vezanih stanja ostaje približno ista kao u paraboličnom slučaju [90]. Na osnovu ovih rezultata, može se zaključiti da doprinos prostornog naelektrisanja, koje se uzima u obzir kroz samosaglasni postupak, ima dominantan uticaj u odnosu na doprinos neparabolične aproksimacije, posebno za strukture kod kojih ne postoji veliki broj vezanih stanja što upravo odgovara standardnim kvantnim crtama.

3.1.3 Uticaj kvantno-mehaničke sprege na elektronsku strukturu

Relativno velika površinska gustina struktura i prisustvo zajedničkog vlažećeg sloja u ansamblu kvantnih crta, uslovljava postojanje kvantno-mehaničke sprege između susednih struktura. Usled prisustva kvantno-mehaničke sprege elektronska struktura kao i optičke osobine kvantnih crta mogu u značajnoj meri odstupati od onih koji se dobijaju za slučaj izolovane crte. Prilikom modelovanja ansambla kvantnih crta jedna od boljih geometrijskih aproksimacija bazira se na realističnom profilu poprečnog preseka, ali pretpostavlja da su sve strukture jednake dužine, na isti način orijentisane i na ekvidistantnim rastojanjima, tako da se formira pravilan periodičan niz. Iako ovakav model ne može omogućiti precizan uvid u zonsku strukturu niza kvantnih crta koji se sastoji od struktura sa slučajnim fluktuacijama u dimenzijama i međusobnim rastojanjima, može pomoći da se razume i razotkrije uticaj različitih geometrijskih parametara na zonsku strukturu.

Određivanje zonske strukture za periodičan niz identičnih kvantnih crta moguće je na osnovu relacije (3.18), u kojoj sada talasna funkcija $\eta(x, y)$ predstavlja talasnu funkciju celokupnog ansambla kvantnih crta. Na osnovu Bloch-ove teoreme primenjene sa stanovišta periodičnosti dvodimenzionalnog potencijala u x -pravcu, anvelopna talasna funkcija n -te elektronske zone može se predstaviti kao proizvod brzopromenljive periodične funkcije $u_{n,K}(x, y)$, koja karakteriše stanja pojedinačnih kvantnih crta iz ansambla i sporopromenljive eksponencijalne funkcije [65]:

$$\eta(x, y) = \frac{1}{L} u_{n,K}(x, y) \exp(-jKx), \quad (3.33)$$

gde je sa K označen talasni vektor u x -pravcu, a L je perioda sa kojom se ponavljaju kvantne crte u nizu, odnosno dimenzija elementarne ćelije periodičnog niza.

Brzopromenljiva funkcija $u_{n,K}(x, y)$ zadovoljava periodične granične uslove na granicama elementarne ćelije:

$$u_{n,K}(x + L, y) = u_{n,K}(x, y) \quad (3.34)$$

i granične uslove na heterospoju:

$$u_{n,K}^{(1)}(x, y) = u_{n,K}^{(2)}(x, y) \quad (3.35)$$

$$\frac{1}{m_{n1}^*(x, y)} \nabla u_{n,K}^{(1)}(x, y) = \frac{1}{m_{n2}^*(x, y)} \nabla u_{n,K}^{(2)}(x, y) \quad (3.36)$$

Zamenom relacije (3.33) u (3.18) dobija se Schrödinger-ova jednačina po brzopromenljivoj funkciji $u_{n,K}(x, y)$ za jednu elementarnu ćeliju periodične strukture:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2} \nabla_{xy} \left[\frac{1}{m_e^*(x, y)} \nabla_{xy} u_{n,K}(x, y) \right] - jK \frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar^2}{m_e^*(x, y)} u_{n,K}(x, y) + \\ & + \left[\frac{\hbar^2 K^2}{2m_e^*(x, y)} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*(x, y)} + E_c(x, y) \right] u_{n,K}(x, y) = E_{n,K} u_{n,K}(x, y) \end{aligned} \quad (3.37)$$

Rešavanjem jednačine (3.37), uz postavljanje odgovarajućih periodičnih uslova na levoj i desnoj granici elementarne ćelije, moguće je odrediti vrednosti funkcija $u_{n,K}(x, y)$ i svojstvenih energija $E_{n,K}$ za stanje sa talasnim vektorom K u n -toj podzoni. Periodična zavisnost sporopromenljivog potencijala i efektivne mase, dovodi do formiranja “trakastog” energetskog spektra, koji se sastoji od dozvoljenih i zabranjenih opsega energije, slično kao u slučaju superrešetki [84]. Energetski spektar u dozvoljenim oblastima energije, takozvanim mini-zonama, je pratkično kontinualan.

Drugi pristup u određivanju mini-zonske strukture polazi od pretpostavke da ako je $\eta(x, y)$ opšte rešenje Schrödinger-ove jednačine u periodičnom potencijalu sa periodom L , onda je i $\eta(x + L, y)$ rešenje Schrödinger-ove jednačine. Kako su potencijalna energija i efektivna masa periodične funkcije, ova dva rešenja su linearno zavisna, pa se može pisati:

$$\eta(x + L, y) = \lambda \eta(x, y), \quad (3.38)$$

gde je λ konstanta, koja u oblastima energija gde su moguća energetska stanja ima vrednost $|\lambda|^2 = 1$ jer verovatnoća nalaženje elektrona u tački sa kordinatama (x, y) mora biti jednaka verovatnoći nalaženja elektrona u tački sa koordinatama $(x + L, y)$. Na

osnovu periodičnosti funkcije $u_{n,K}(x,y)$ date relacijom (3.34) i veze sa anvelopnom talasnom funkcijom (3.33), dobija se:

$$\eta(x+L, y) = \eta(x, y) \exp(jKL) \quad (3.39)$$

Prema tome, mini-zonska struktura se može odrediti i direktno, rešavanjem Schrodinger-ove jednačine (3.18) uz granične uslove (3.15) i (3.16), s tim da anvelopna talasna funkcija $\eta(x, y)$ mora da zadovolji relaciju (3.39). Ekstremne vrednosti faznog pomaka $\exp(iKL)$, $+1$ i -1 , koje odgovaraju uslovima $K \cdot L = 0$ i $K \cdot L = \pi$, respektivno, određuju granice mini-zona i odgovarajuće talasne funkcije.

3.2 Unutarzonska apsorpcija

Na osnovu poznate elektronske strukture provodne zone, tj. poznatih svojstvenih energija i talasnih funkcija, može se odrediti spektar unutarzonske apsorpcije. Pod unutarzonskom apsorpcijom se podrazumeva oblik interakcije incidentnog elektromagnetnog zračenja sa elektronima u okviru jedne zone, u konkretnom slučaju provodne. Na osnovu Fermijevog "zlatnog pravila", verovatnoća prelaza kvantnog sistema iz stanja i u stanje j ili obratno, u jedinici vremena, za harmonijsku perturbaciju frekvencije ω , definisana je sa:

$$W_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{ij}|^2 \delta(E_j - E_i \pm \hbar\omega) \quad (3.40)$$

gde su E_j i E_i energije finalnog i inicijalnog stanja između kojih dolazi do prelaza elektrona, a H'_{ij} Hamiltonijan interakcije sa elektromagnetskim zračenjem. U prisustvu perturbacije (elektromagnetskog talasa, opisanog magnetnim vektor-potencijalom $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$), ukupni Hamiltonijan elektrona u nekoj strukturi sa detaljnim potencijalom $U(\mathbf{r})$ može se izraziti u obliku:

$$\hat{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m_0} [\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 + U(\mathbf{r}) \quad (3.41)$$

gde je m_0 masa slobodnog elektrona. Neperturbovani Hamiltonijan se iz prethodne relacije dobija za uslov $\mathbf{A} = 0$, tj. $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m_0) + U(\mathbf{r})$, pa se kao Hamiltonijan interakcije konačno dobija:

$$\hat{H}' = \frac{e}{m_0} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \quad (3.42)$$

što je dobijeno uz zanemarivanje člana uz A^2 u relaciji (3.41) i uz Coulomb-ovsku kalibraciju (zadovoljen Lorentz-ov uslov, $\text{div} \mathbf{A} = 0$). Zanemarivanje člana uz A^2 se izvodi uz pretpostavku da je njegov kvantitativni doprinos pri realnim intenzitetima svetlosti mali. Matrični element Hamiltonijana se na osnovu prethodnog izraza, dobija u obliku:

$$H'_{ij} = \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \hat{H}' \psi_j(\mathbf{r}) d^3 r = \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \frac{e}{m_0} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} \psi_j(\mathbf{r}) d^3 r, \quad (3.43)$$

a kako prostorna zavisnost $\mathbf{A}$ praktično ne utiče na matrične elemente prelaza (dimenzije nanostruktura su male u odnosu na talasnu dužinu incidentnog zračenja), može se uzeti da je $A = \text{const}$ i dalje raditi sa matričnim elementima impulsa:

$$\Pi_{ij} = \langle i | \hat{\mathbf{p}} | j \rangle = \int \psi_i^* \hat{\mathbf{p}} \psi_j d^3 r \quad (3.44)$$

za prelaze između različitih elektronskih stanja u strukturi, ako su njihove ukupne talasne funkcije ψ poznate, bez obzira kojom metodom su dobijene.

Koeficijent apsorpcije elektromagnetskog zračenja intenziteta I_p , koje prolazi kroz poluprovodničku strukturu, pri prelazu elektrona sa jednog inicijalnog (i) na jedno finalno (j) kvantno stanje, dat je izrazom:

$$\alpha_{ij}^{(1)} = \frac{W_{ij} \cdot F_{if} \cdot \hbar \omega}{V \cdot I_p} \quad (3.45)$$

gde je sa $\hbar \omega$ označena energija incidentnog fotona, a sa $V = L_x L_y L_z$ zapremina poluprovodničke strukture, dok indeks (1) označava da je u pitanju apsorpcija pri samo jednom prelazu $i \rightarrow j$. Izraz (3.40), za verovatnoću prelaza $i \rightarrow j$ uključuje doprinos prelaza sa nižeg na viši energetski nivo ($i \rightarrow j$) za $E_i < E_j$, uz apsorpciju fotona, i doprinos prelaza elektrona sa višeg na niži energetski nivo ($j \rightarrow i$) za $E_i > E_j$, uz stimulisanu emisiju fotona. Međutim, usled fermionske prirode elektrona, stvarna brzina nekog prelaza se dobija kada se relacija (3.40) pomnoži sa verovatnoćom da su odgovarajuća stanja naseljena odnosno nenaseljena naelektrisanjima, drugim rečima, sa verovatnoćom zauzetosti odgovarajućeg energetskog stanja. Za prelaze tipa $i \rightarrow j$,

odgovarajuća verovatnoća podrazumeva da je stanje i popunjeno, a stanje j prazno, dok je za prelaze tipa $j \rightarrow i$, u pitanju verovatnoća da je stanje j popunjeno, a stanje i prazno. Konačno, neto brzina prelaza $i \rightarrow j$, koja praktično određuje koeficijent apsorpcije, dobija se množenjem relacije (3.40) sa razlikom verovatnoća naseljenosti stanja pri prelazima $i \rightarrow j$ i $j \rightarrow i$, tj. sa Fermi-Dirac-ovim faktorom F_{ij} :

$$F_{ij} = f(E_i) \cdot [1 - f(E_j)] - f(E_j) \cdot [1 - f(E_i)] = f(E_i) - f(E_j), \quad (3.46)$$

gde je sa $f(E)$ označena verovatnoća zauzetosti stanja sa energijom E . U ravnotežnim uslovima, raspodela nosilaca po stanjima u strukturi opisana je Fermi-Dirac-ovom funkcijom raspodele $f(E) = f_{FD} = [1 + \exp((E - E_F)/(k_B T))]^{-1}$, gde je T temperatura, k_B Boltzmann-ova konstanta, a E_F energija Fermijevog nivoa.

Na osnovu veze između intenziteta svetlosti I_p i amplitude magnetnog vektor-potencijala A :

$$I_p = 2\varepsilon_0 \bar{n} c \omega^2 A^2 \quad (3.47)$$

kao i izraza za Hamiltonijan interakcije:

$$H'_{ij} = (e/m_0) \mathbf{\Pi}_{ij} \cdot A, \quad (3.48)$$

zamenom u (3.45), dobija se koeficijent apsorpcije za jedan prelaz:

$$\alpha_{ij}^{(1)} = \frac{\pi e^2}{\bar{n} \varepsilon_0 \omega m_0^2 c L_x L_y L_z} \cdot F_{ij} |\mathbf{\Pi}_{ij}|^2 \delta(E_j - E_i - \hbar \omega) \quad (3.49)$$

gde je $\mathbf{\Pi}_{ij}$ matrični element impulsa, $\bar{n}$ srednji indeks prelamanja, a c i ε_0 brzina svetlosti i dielektrična permeabilnost vakuma, respektivno.

U poluprovodničkim kvantnim nanostrukturama energije stanja zavise od jednog ili više diskretnih indeksa stanja i kontinualno promenljivih komponenti talasnog vektora po pravcima u kojima je kretanje slobodno [84]. Konkretno, kod struktura na bazi kvazi-dvodimenzionalnog konfiniranja nosilaca, kao što su kvantne crte, energije stanja zavise od dva diskretna indeksa i jedne kontinualne komponente talasnog vektora (k_z). Uobičajeno je da se pod apsorpcijom na prelazu $i \rightarrow j$ podrazumeva apsorpcija koja nastaje na prelazima sa svih stanja čiji je diskretni kvantni broj i i imaju ma koju vrednost talasnog vektora k_z , u sva stanja čiji je diskretni kvantni broj j i imaju ma koju

(dovoljenu) vrednost talasnog vektora k_z . Prema tome, ukupna apsorpcija pri prelazu $i \rightarrow j$, α_{ij} , dobija se kao suma koeficijenata apsorpcije za fiksiranu vrednost k_z inicijalnog i finalnog stanja. Iako je k_z kontinualno promenljivo, privremeno se uvodi diskretno prebrojavanje ovog indeksa kvantnog stanja kao da je u pitanju struktura konačno velikih dimenzija u z -pravcu, pa se u izraz (3.49) uvodi sumiranje po dozvoljenim vrednostima k_z :

$$\alpha_{ij} = \frac{\pi e^2}{\bar{n} \varepsilon_0 \omega m_0^2 c L_x L_y L_z} \cdot \sum_{k_z} F_{ij} |\Pi_{ij}|^2 \delta(E_j - E_i - \hbar \omega) \cdot \frac{\Delta k_z}{\Delta k_z} \quad (3.50)$$

U prethodnu sumu je uveden faktor Δk_z i u brojiocu i u imeniocu, koji predstavlja inkrement sume po k_z . Razmak između dve uzastopne vrednosti k_z određen je dužinom strukture, i može se odrediti na osnovu graničnih uslova. Ukoliko se usvoji granični uslov po kom talasna funkcija za izolovanu strukturu mora biti anulirana na granicama domena, važi da je $\Delta k_z = \pi / L_z$, što zamenom u imenilac izraza (3.43), daje:

$$\alpha_{ij} = \frac{e^2}{\bar{n} \varepsilon_0 \omega m_0^2 c S} \cdot \int_0^{+\infty} F_{ij} |\Pi_{ij}|^2 \delta(E_j - E_i - \hbar \omega) dk_z, \quad (3.51)$$

gde je $S = L_x L_y$ površina poprečnog preseka strukture, a suma iz relacije (3.50) prelazi u integral kako bi se uzela u obzir kontinualna priroda k_z .

U izrazima za koeficijent apsorpcije do ovog trenutka je pretpostavljano da profil apsorpcije ima oblik Dirac-ove δ -funkcije. Međutim, pored širenja linije uslovljenog različitim disperzijama nivoa, širenje linije se može javiti usled rasejanja elektrona na fononima, primesama, defektima i drugim elektronima, a ovi mehanizmi dominantno oblikuju profil apsorpcionih linija. Uticaj pomenutih mehanizama se aproksimativno može opisati ako se širenje linije predstavi Lorentz-ovom funkcijom:

$$L(\hbar \omega, \hbar \omega_{ij}) = \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{(\hbar \omega - \hbar \omega_{ij})^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (3.52)$$

gde je Γ parametar koji definiše širinu linije, a $\hbar \omega_{ij} = E_i - E_j$ energija prelaza. U numeričkim izračunavanjima, za vrednost parametra Γ se uzima gornja granica vrednosti određenih na osnovu empirijske relacije za homogeno širenje spektralne linije

[91], za definisanu temperaturu i opseg koncentracija elektrona koje se javljaju u oblasti jame. Ako se u relaciji (3.51) δ -funkcija zameni Lorentz-ovom funkcijom, dobija se:

$$\alpha_{ij} = \frac{e^2}{\bar{n} \epsilon_0 \omega m_0^2 c S} \cdot L(\hbar \omega, \hbar \omega_{ij}) \int_0^{+\infty} F_{ij} |\Pi_{ij}|^2 dk_z \quad (3.53)$$

Konačno, prethodni izraz je potrebno sumirati po svim indeksima i i j da bi se dobila ukupna apsorpcija $\alpha(\omega)$, prvi svim mogućim prelazima za datu energiju fotona:

$$\alpha(\omega) = \frac{2e^2}{\bar{n} \epsilon_0 m_0^2 c S \omega} \sum_{i,j} L(\hbar \omega, \hbar \omega_{ij}) \int_0^{+\infty} |\Pi_{ij}|^2 [f(E_i) - f(E_j)] dk_z, \quad (3.54)$$

gde je u brojiocu uveden faktor 2 koji uzima u obzir dve moguće vrednosti spina elektrona (spin se u optički indukovanim prelazima održava).

U izrazu za koeficijent apsorpcije (3.54) indirektno figurišu svojstvene vrednosti energija vezanih stanja, kroz Fermi-Dirac-ove funkcije raspodele $f(E)$, i svojstvene talasne funkcije kroz matrični element impulsa (3.37). Međutim, elektronska struktura je određena metodom efektivne mase, pa su zapravo poznate anvelopne talasne funkcije $\chi(\mathbf{r})$, a ukupne talasne funkcije $\psi(\mathbf{r})$ se dobijaju kao proizvod anvelopne funkcije $\chi(\mathbf{r})$ i Bloch-ove funkcije u ekstremumu zone $u_{c0}(\mathbf{r})$, gde c označava provodnu zonu. Međutim, ovakva funkcija je nedovoljno precizna za određivanje matričnog elementa pa se nakon korekcije koja proističe iz prvog reda perturbacija [84], matrični element impulsa može predstaviti u obliku:

$$\Pi_{ij} = \frac{m_0}{m_e^*} \int \psi_i^* \hat{\mathbf{p}} \psi_j d^3r \quad (3.55)$$

Prethodni izraz se može prikazati i na drugačiji način, koristeći komutator $\hat{\mathbf{p}} = (m_e^* / i\hbar) [\hat{H}_{macro}, \mathbf{r}]$, gde $\hat{H}_{macro}$ predstavlja makroskopski Hamiltonijan sa efektivnom masom i potencijalom koji daje anvelopne talasne funkcije. Izraz (3.55) sada postaje:

$$\Pi_{ij} = \frac{m_0(E_i - E_j)}{i\hbar} \int \psi_i^* \mathbf{r} \psi_j d^3r = \frac{m_0(E_i - E_j)}{i\hbar} \cdot \mathbf{d}_{ij} \quad (3.56)$$

gde je $\mathbf{d}_{ij}$ dipolni matrični element u kom ne figuriše efektivna masa. Eksplicitno izračunavanje matričnog elementa prelaza preko operatora impulsa u principu zahteva

tačnije poznavanje talasnih funkcija nego kada se koristi operator koordinate, jer se uticaj udaljenih zona jednostavno manifestuje kroz efektivnu masu, dok se eksplicitno koriste samo anvelopne talasne funkcije [84].

Konkretno, u slučaju kvantnih crta, kod kojih je elektronski gas konfiniran u xy ravni (Sl. 41), matrični element za X i Y polarizaciju elektromagnetskog zračenja, izražen preko dipolnog matričnog elementa, dat je izrazom:

$$\begin{aligned}\Pi_{i,j}^{xy} &= -im_0\omega_{ij}\langle\eta_i(x,y)|x\cdot\mathbf{e}_x + y\cdot\mathbf{e}_y|\eta_j(x,y)\rangle \\ &= -im_0\omega_{ij}\int\eta_i^*x\eta_jdx\cdot\mathbf{e}_x - im_0\omega_{ij}\int\eta_i^*y\eta_jdy\cdot\mathbf{e}_y\end{aligned}\quad (3.57)$$

Kako je pretpostavka da anvelopne talasne funkcije ne zavise od talasnog vektora k_z , što važi i za Lorentz-ovu funkciju (3.52), konačan izraz za koeficijent apsorpcije elektromagnetskog zračenja u izolovanoj kvantnoj crti se dobija u obliku:

$$\alpha(\omega) = \frac{2e^2}{\bar{n}\epsilon_0m_0^2cS\omega}\sum_{i,j}|\Pi_{ij}^{xy}|^2\cdot L(\hbar\omega,\hbar\omega_{ij})\int_0^{+\infty}[f(E_i)-f(E_j)]dk_z\quad (3.58)$$

3.2.1 Unutarzonska apsorpcija u ansamblu kvantnih crta

Prethodno izvedeni izraz (3.58) omogućava određivanje koeficijenta apsorpcije za izolovanu kvantnu crtu. Međutim, unutar ansambla kvantnih crta prisutna je stohastička fluktuacija dimenzija, ali i rastojanja na kojima se formiraju pojedinačne strukture, kao posledica samo-organizovanog narastanja. Realistično određivanje apsorpcije čitavog ansambla zahteva da se u obzir uzmu različite dimenzije struktura unutar ansambla, kao i njihov međusobni uticaj koji se javlja kao posledica relativno velike gustine struktura, odnosno relativno malih rastojanja na kojima se formiraju strukture. Međutim, uobičajeni pristup koji omogućava uzimanje u obzir kvantno mehaničke sprege, pretpostavlja da se ansambl sastoji od periodičnog niza identičnih kvantnih crta, što samim tim onemogućava računanje fluktuacija struktura po dimenzijama. Sa druge strane, ako se pretpostavi da se strukture formiraju na dovoljno velikim rastojanjima da se mini-zonska struktura može aproksimirati diskretnim energetske stanjima, moguće je posmatrati kvantne crte unutar ansambla kao izolovane i za pretpostavljenu raspodelu po dimenzijama $G(w, h)$ odrediti srednju vrednost apsorpcije za ansambl.

Prilikom određivanja usrednjene apsorpcije za ansambl koji sadrži kvantne crte sa različitim dimenzijama, pogodno je apsorpcioni koeficijent dat izrazom (3.58) pomnožiti sa površinom poprečnog preseka S , kako bi se dobila veličina nezavisna od dimenzija. Koeficijent apsorpcije dat izrazom (3.58) zapravo zavisi od konkretnih dimenzija posmatrane strukture, pa je $\alpha(\omega) = \alpha(\omega, w, h)$, gde su w i h označene širina i visina posmatrane strukture, respektivno. Nakon množenja izraza (3.58) sa površinom poprečnog preseka S , dobija se veličina koja se naziva apsorpcija i izražava se u jedinicama dužine:

$$a(\omega, w, h) = \alpha(\omega, w, h) \cdot S = \frac{2e^2}{\bar{n}\epsilon_0 m_0^2 c \omega} \sum_{i,j} |\Pi_{ij}^{xy}|^2 \cdot L(\hbar\omega, \hbar\omega_{ij}) \int_0^{+\infty} [f(E_i) - f(E_j)] dk_z \quad (3.59)$$

Fluktuacija struktura po dimenzijama dovodi do nehomogenog širenja spektra usrednjene apsorpcije ansambla kvantnih crta $A(\omega)$, koji se dobija integracijom po čitavom domenu širina w i visina h prisutnih u ansamblu:

$$A(\omega) = \iint a(\omega, w, h) G(w, h) dw dh. \quad (3.60)$$

Uz određenu aproksimaciju [92], infinitezimalno mali inkrementi, dw i dh , mogu se zameniti konačnim diskretizacionim koracima δ_w i δ_h , respektivno, dok prethodni integral prelazi u sumu po podskupovima (j, k) ansambla kvantnih crta diskretizovanog po dimenzijama. Kvantne crte koje pripadaju podskupu (j, k) imaju dimenzije $w \in (w_-, w_+)$ i $h \in (h_-, h_+)$, gde je $w_{\pm} = w_j \pm \delta_w/2$ i $h_{\pm} = h_k \pm \delta_h/2$, dok su w_j i h_k srednje dimenzije posmatranog podskupa. Apsorpcija svakog podskupa (j, k) aproksimira se apsorpcijom $a(\omega, w_j, h_k)$ jedne izolovane crte sa dimenzijama w_j i h_k . Konačno, usrednjena apsorpcija ansambla po jednoj crti, dobija se u obliku:

$$A(\omega) \approx \sum_{j,k} a(\omega, w_j, h_k) \int_{w_-}^{w_+} \int_{h_-}^{h_+} G(w, h) dw dh \quad (3.61)$$

Integral u izrazu (3.61) zapravo predstavlja verovatnoću da u ansamblu postoji kvantna crta sa dimenzijama $w \in (w_-, w_+)$ i $h \in (h_-, h_+)$.

Poglavlje 4.

NUMERIČKA IMPLEMENTACIJA MODELA

Analiza spektralnih karakteristika koje proizilaze iz unutarzonskih prelaza u ansamblu kvantnih crta zahteva korišćenje efikasne metode za određivanje zonske strukture i unutarzonske apsorpcije. Sa stanovišta procesorske snage i memorijskih resursa, najzahtevnije su upravo metode koje se tiču određivanja elektronske strukture, pogotovo za strukture sa asimetričnim oblikom i nepravilnim heterogranicama, kao što su kvantne crte. Fundamentalna metoda koja se koristi za proračun zonske strukture je metoda anvelopnih funkcija, koja u konkretnom slučaju omogućava određivanje zonske strukture rešavanjem jednozonske Schrödinger-ove jednačine po sporo-promenljivom anvelopnom delu ukupne talasne funkcije. Schrödinger-ovu jednačinu je potrebno rešiti za zadati dvodimenzionalni profil potencijala koji je određen geometrijom poprečnog preseka kvantnih crta, diskontinuitetom provodne zone i elektrostatičkim potencijalom koji potiče od nosilaca naelektrisanja prisutnih u strukturi. Rešavanje se može postići primenom različitih matematičkih metoda, čija kompleksnost i zahtevi po pitanju procesorske snage i memorijskih resursa zavise od geometrije strukture i preciznosti koju model treba da obezbedi. U široko primenjivane metode ubrajaju se metode konačnih elemenata (Finite Element Method, FEM), konačnih razlika (Finite Difference Method), kao i ekspanzione metode [88], [93]-[95]. U nekim situacijama moguće je izbeći zahtevna numerička izračunavanja, ali po cenu analitičkih priprema koje se baziraju na preslikavanju geometrije strukture i odgovarajućeg Hamiltonian-a [88]. Sa druge strane, metode konačnih elemenata i konačnih razlika su nešto jednostavnije za implementaciju, ali veoma zahtevne po pitanju memorijskih resursa. Algoritam za numeričku implementaciju metode efektivne mase u ovom radu koristi metodu konačnih elemenata, ali razmatra i neke druge tehnike rešavanja Schrödinger-ove

jednačine koje mogu da obezbede precizne i efikasne pristupe rešavanju, a pri tome ne zahtevaju primenu specijalnih rutina za generisanje mreže. Konkretno, od interesa su tehnike koje mogu pravilno da opišu neregularni profil heterogranica kvantnih crta, što se može postići kombinacijom transformacije koordinata i metode konačnih razlika.

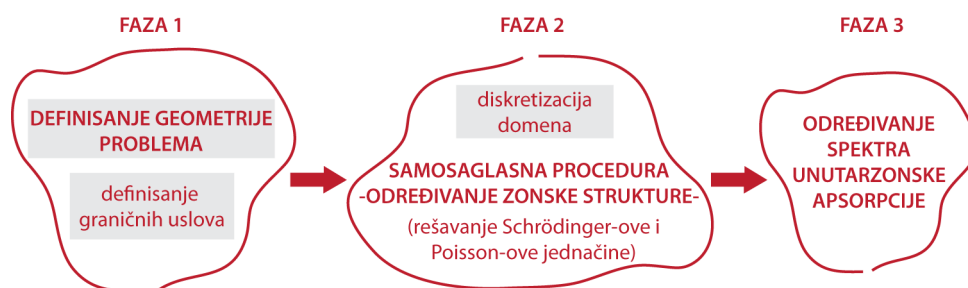
4.1 Osnovni algoritamski blokovi

Algoritam formiranja kompletnog numeričkog modela koji treba da omogućiti određivanje spektra unutarzonske apsorpcije, sastoji se iz tri osnovne faze (Sl. 43):

- definisanje materijalnih parametara, geometrije problema i graničnih uslova,
- samosaglasno određivanje elektronske strukture provodne zone, i
- određivanje spektra unutarzonske apsorpcije.

U okviru prve faze prvi korak je formiranje geometrijskog modela strukture, što podrazumeva definisanje domena rešavanja, dimenzija kvantne crte, kao i pozicije kvantne crte u odnosu na dopirane slojeve. Pretpostavka je da su kvantne crte modulaciono dopirane, tj. da se nosioci koji učestvuju u optičkim prelazima obezbeđuju iz posebnih dopiranih slojeva od kojih su kvantne crte odvojene slabo-dopiranim bafer (*spacer*) slojevima.

Sledeći korak je određivanje materijalnih parametara, pre svega efektivnih masa i diskontinuitete zona, za svaki korišćeni materijal, a zatim i definisanje koncentracije primesa dopiranih i nedopiranih (odnosno slabo dopiranih) barijernih oblasti. Temperaturni zavisna efektivna masa elektrona u provodnoj zoni m_e^* izračunava se na osnovu relacije [96]:



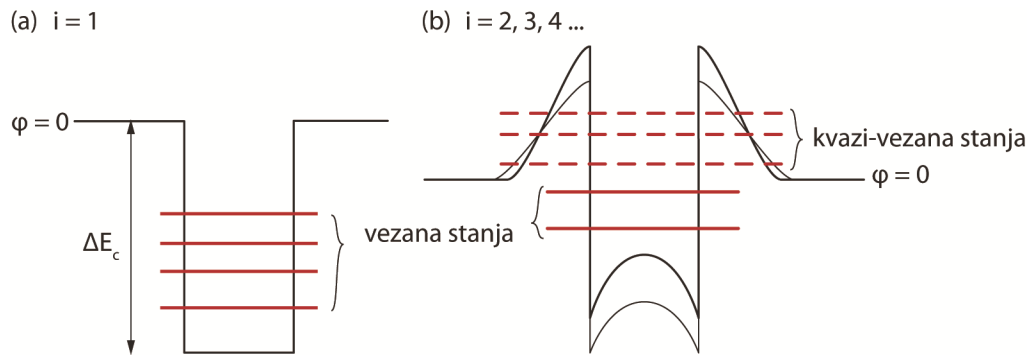
Sl. 43. Osnovne faze algoritma za određivanje spektra unutarzonske apsorpcije.

$$\frac{m_0}{m_e^*} = (1 + 2F) + \frac{E_p(E_g + 2\Delta_{so}/3)}{E_g(E_g + \Delta_{so})}, \quad (4.1)$$

gde je E_g energetski procep, Δ_{so} energija spin-orbitnog cepanja, E_p Kane-ov matrični element impulsa, a F Kane-ov parametar koji modeluje doprinose viših zona provodnoj zoni. Zavisnost efektivne mase od temperature je posledica temperaturski zavisne vrednosti energetskog procepa, jer se parametri E_p i F uobičajeno smatraju nezavisnim od temperature [96]. Temperaturska zavisnost energetskog procepa može se modelovati korišćenjem empirijske Varshni formule [96]. Ukoliko je korišćeni materijal ternarno ili kvaternarno jedinjenje vrednosti materijalnih parametara koji figurišu u izrazu (4.1) određuju se standardnim interpolacionim formulama [96], a zatim se efektivna masa složenog jedinjenja određuje evaluacijom izraza (4.1). Vrednosti diskontinuiteta zona na heterogranicama se određuju na osnovu poznatih energetskih procepa i relativnih pozicija zona određenih primenom „*model-solid*“ teorije [97].

U zavisnosti od konkretne aproksimacije u kojoj se razmatra unutarzonska apsorpcija u kvantnim crtama, potrebno je definisati odgovarajuće granične uslove, koji omogućavaju analizu izolovanih kvantnih crta sa ili bez vlažećeg sloja, ili periodičnih nizova identičnih kvantnih crta. Granične uslove na ivicama domena je potrebno definisati i za talasne funkcije koje se dobijaju rešavanjem Schrödinger-ove jednačine i za elektrostatički potencijal koji se dobija kao rezultat rešavanja Poisson-ove jednačine.

Sa definisanim geometrijskim modelom, materijalnim parametrima, koncentracijama primesa i graničnim uslovima, može se preći na realizaciju faze 2. Samosaglasno određivanje zonske strukture podrazumeva simultano rešavanje 2D Schrödinger-ove i nelinearne Poisson-ove jednačine. Sistem od ove dve jednačine se rešava iterativno, sve dok se ne postigne konvergencija rešenja i zadovoljavajuća tačnost rešenja obe jednačine. Na slici Sl. 42 dat je šematski prikaz primenjenog postupka. Procedura započinje usvajanjem probnog profila elektrostatičkog potencijala. Uobičajeno se usvaja nulta vrednost probnog potencijala $\varphi_0(x, y) = 0$, pa se zonska struktura određuje rešavanjem Schrödinger-ove jednačine za profil provodne zone određen isključivo diskontinuitetom zone na razdvojnoj površini jame i barijere, Sl. 44(a). Zonska struktura koja se dobija u okviru prve iteracije ($i = 1$) odgovara aproksimaciji “ravnih zona” koja definiše referentnu, nultu vrednost potencijala u



Sl. 44. Šematski prikaz profila provodne zone za (a) prvu ($i = 1$) i (b) naredne ($i = 2, 3, \dots$) iteracije samosaglasne procedure.

odnosu na ivicu domena u barijernom materijalu. Za razliku od prve iteracije, naredne iteracije ($i > 1$) uzimaju u obzir doprinos slobodnog naelektrisanja i njihov uticaj na konfinirajući potencijal, tako što se prilikom formiranja novog probnog potencijala $\varphi_i(x, y)$ za svaku narednu iteraciju (i), u obzir uzima i elektrostatički potencijal $u_{i-1}(x, y)$ određen u Hartree aproksimaciji, rešavanjem Poisson-ove jednačine (3.26) u iteraciji $i-1$. Zapravo, već u drugoj iteraciji samosaglasnog postupka dolazi do krivljenja provodne zone usled prisustva elektrostatičkog potencijala elektrona i jonizovanih donora, Sl. 44(b). Stoga, u barijernoj oblasti uz heterogranicu dolazi do formiranja konačne potencijalne barijere, pa se pored vezanih stanja u jami sa energijama ispod nulte vrednosti potencijala provodne zone [pune linije na Sl. 44(b)], mogu javiti i vezana stanja sa energijama iznad nulte vrednosti potencijala [isprekidane linije na Sl. 44(b)]. Konačna debljina nastale potencijalne barijere ima za posledicu veće prodiranje talasnih funkcija u barijernu oblast, pa su ova viša stanja zapravo kvazi- konfinirana.

U cilju povećanja brzine samosaglasnog postupka, prilikom izračunavanja koncentracije vezanih stanja u početnim iteracijama u obzir se uzimaju samo niže energetske podzone, tj. one podzone koje se nalaze ispod referentnog nivoa potencijala. Nakon određenog broja iteracija izvedenih na ovaj način, uzima se u obzir celokupna zonska struktura, uključujući i kvazi-vezana stanja koja se javljaju u oblasti jame. Samosaglasni postupak završava se u onoj iteraciji u kojoj se vrednost elektrostatičkog potencijala određena rešavanjem Poisson-ove jednačine razlikuje od probne vrednosti potencijala za datu iteraciju za manje od 1 meV.

Brzina konvergencije samosaglasnog postupka može se podešavati pomoću relaksacionog faktora f na način prikazan u prethodnom poglavlju. Međutim, konkretan algoritam se bazira na modifikovanoj proceduri, koja potencijal u iteraciji $(i + 1)$, u svakoj tački domena, određuje na osnovu potencijala iz prethodnih $n + 2$ iterativnih koraka, prema relaciji:

$$\varphi_{i+1}(x, y) = \frac{1}{\theta + 2} \left[u_i(x, y) + \sum_{k=i-\theta}^i \varphi_k(x, y) \right], \quad (4.2)$$

gde je $\varphi_i(x, y)$ probni potencijali, dok je $u_i(x, y)$ potencijal dobijen rešavanjem Poisson-ove jednačine, u iteraciji i . Parametar θ se koristi za podešavanje brzine konvergencije, a u konkretnim izračunavanjima uzima vrednosti između 2 i 6 u zavisnosti od geometrijskih i tehnoloških parametara strukture. S tim u vezi, smatra se da je samosaglasni postupak završen onda, kada se potencijali $\varphi_i(x, y)$ i $u_i(x, y)$ u $\theta + 2$ uzastopne iteracije razlikuju za manje od 1 meV.

Konačno, u okviru treće faze algoritma određuju se dipolni matrični elementi (3.57), odgovarajuća razlika naseljenosti diskretnih stanja, a zatim i spektar unutarzonske apsorpcije za izolovanu kvantnu crtu (3.58). Faze 2 i 3 se ponavljaju za svaku dimenziju kvantnih crta u ansamblu, a zatim se vrši usrednjavanje po unapred zadatoj funkciji raspodele po dimenzijama.

U okviru opisanog algoritma mogu se identifikovati pojedini koraci čija je implementacija od ključnog značaja za formiranje modela, a realizacija specifična u zavisnosti od izbora matematičke metode za numeričku implementaciju. U tom smislu, ključni korak je svakako određivanje zonske strukture, što podrazumeva rešavanje Schrödinger-ove jednačine i predstavlja numerički najzahtevniji segment proračuna. Postoji više matematičkih metoda koje se mogu iskoristiti za rešavanje svojstvenog problema definisanog Schrödinger-ovom jednačinom, a koji se razlikuju u pogledu jednostavnosti implementacije i efikasnosti sa stanovišta korišćenja procesorske snage i numeričkih resursa. Često primenjivane metode, prvenstveno zbog relativno lake implementacije, su metode konačnih elemenata i konačnih razlika. Metoda konačnih elemenata se bazira na aproksimaciji rešenja diferencijalne jednačine na unapred diskretizovanom domenu, dok se u okviru metode konačnih razlika vrši aproksimacija same diferencijalne jednačine, pa je njena implementacija nešto jednostavnija.

Međutim, velika prednost FEMa je fleksibilnost u diskretizaciji domena koja omogućava precizno opisivanje izraženo nepravilnih krivolinijskih geometrijskih oblika i generisanje neravnomerne mreže, što značajno povećava efikasnost korišćenja memorijskih resursa, ali zahteva primenu specijalizovanih potprograma za diskretizaciju domena. Sa druge strane, iako je FDM u svojoj osnovnoj formi ograničena na pravougaone oblike i njihove jednostavne alternacije, u kombinaciji sa odgovarajućim koordinatnim transformacijama potencijalno može obezbediti jednostavnu implementaciju i efikasno određivanje zonske stukture i za strukture sa krivolinijskim heterogranicama.

U izlaganju koje sledi biće predstavljena numerička implementacija metode bazirane na kombinaciji koordinatnog preslikavanja i FDM, a zatim će ova metoda biti testirana sa stanovišta efikasnosti i tačnosti u odnosu na FEM koja koristi komercijalne algoritme za automatsku generaciju mreže dostupne u okviru programskih paketa MatLab i Comsol MultiPhysics. Nakon toga, biće predstavljena implementacija preostalih koraka u okviru faze 2, kao i implementacija kompletne faze 3.

4.2 Numerička implementacija metode efektivne mase

Uobičajena numerička metoda za implementaciju metode efektivne mase u proračunu zonske strukture za jedno- i nulto-dimenzionalne nanostrukture sa nepravilnim oblicima je metoda konačnih elemenata [44], [89], [98]. Ova metoda obezbeđuje veliku fleksibilnost i može se implementirati čak i onda kada su heterogranice takve da ih je komplikovano opisati analitičkim funkcijama. Kako su bazisne funkcije za FEM relativno jednostavne, diskretizacione matrice se mogu jednostavno postaviti i efikasno izračunavati. Iako su u ovom slučaju diskretizacione matrice retke, u zavisnosti od veličine domena na kom se vrši izračunavanje i gustine mreže, dimenzije matrice mogu biti veoma velike. Međutim, glavni nedostatak FEM je činjenica da zahteva primenu specijalizovanih rutina za diskretizaciju domena. Mreža, sama po sebi, ako nije pažljivo generisana, može uticati na preciznost izračunavanja i dovesti do nepotrebno velikih diskretizacionih matrica i svojstvenih problema.

Za Hamiltonijane čija kompleksnost prevazilazi jednostavnije probleme, koji se mogu opisati eliptičkim diferencijalnim jednačinama, pogodna je primena ekspanzionih metoda [88], [93], [99]. Veličina diskretizacione matrice kod ekspanzione metode zavisi

od kvaliteta i broja bazisnih funkcija koje se koriste u ekspanziji. Međutim, iako je gustina matrica uobičajeno velika, ona ne zavisi značajno od kompleksnosti Hamiltonijana, pa je ovaj metod pogodan za kompleksnije Hamiltonijane, kao što su oni za višezonsku Schrödinger-ovu jednačinu [88], [83], [99] ili oni koji uključuju članove vezane za inverzionu asimetriju balka [100]. Sa druge strane, i pored toga što su matrice često umerene veličine, zbog velike gustine matrice, dijagonalizacija je vremenski zahtevna, dok izračunavanje Hamiltonijana zahteva dosta procesorske snage pošto se izvodi numeričkom integracijom.

Metod koji je generalno veoma popularan, najviše zahvaljujući svojoj jednostavnosti, čak i za primene na kompleksne Hamiltonijane, a koji istovremeno obezbeđuje veliku brzinu konvergencije i retke diskretizacione matrice, je metod konačnih razlika [101]. Međutim, FDM u principu zahteva da su heterogranice ravne ili poligonalne, jer u suprotnom nisu nužno poravnate sa mrežom već prolaze između tačaka mreže, što dovodi do smanjenja preciznosti ove metode [102] i ograničava klasu problema koji se mogu tretirati. Iz tih razloga, analiza zonske strukture nanostrukture kao što su kvantne tačke i kvantne crte može izgledati van domašaja FDM, jer se njihov oblik retko može opisati ravnim heterogranicama, već mnogo češće različitim zakrivljenim formama. Ovaj problem se, u nekim situacijama, može prevazići primenom odgovarajućih koordinatnih transformacija. Koordinatne transformacije mogu da pojednostave geometriju strukture i kompletnog domena izračunavanja, dovodeći ih u formu ravnih granica i na taj način, omogućavajući implementaciju FDM u novom koordinatnom prostoru [103]-[105]. U slučaju nanostrukture kod kojih je konfiniranje dvodimenzionalno, najveći broj efikasnih koordinatnih transformacija bazira se na konformnom preslikavanju [88], jer kinetički deo Hamiltonijana u preslikanom prostoru ima oblik Laplacian-a pomnoženog sa determinantom Jacobian-ove matrice i nisu prisutni članovi sa mešanim izvodima.

Ukoliko se domen na kom se vrše izračunavanja sastoji od nekoliko oblasti [104], potrebno je više od jedne funkcije kako bi se ostvarile ravne granice u preslikanom prostoru. U tim situacijama, oblasti se moraju pažljivo povezati kako bi se izbeglo smanjenje preciznosti, što zahteva dodatno programersko umeće. Štaviše, ravan domen izračunavanja koji se dobija nakon preslikavanja, može biti neodgovarajuće veličine u odnosu na distribuciju talasne funkcije ili gustinu mreže. Drugim rečima, ekvidistantna

mreža u preslikanom prostoru može odgovarati gustoj mreži u onom delu originalnog prostora u kom se talasna funkcija relativno slabo menja, dok retka mreža može pokrivati oblast u kojoj se talasne funkcije izraženo menjaju, što utiče na preciznost izračunavanja. Slično, može se desiti da veliki domen izračunavanja u preslikanom prostoru odgovara domenu u originalnom prostoru koji nije dovoljno veliki da omogući prirodno smeštanje talasnih funkcija. Sa druge strane, preveliki domen izračunavanja u preslikanom prostoru može dovesti do ogromnih diskretizacionih materica, čija je dijagonalizacija zahtevna, ili koje i pored značajne veličine, mogu dovesti do nedovoljne preciznosti izračunatih svojstvenih energija. Na osnovu svega izloženog, jasno je da uspešna primena ove metode u velikoj meri zavisi od izbora dovoljno kvalitetnih koordinatnih transformacija sa stanovišta istovremenog fitovanja heterogranica i formiranja zadovoljavajućeg domena izračunavanja. Drugim rečima, potrebno je pronaći ona preslikavanja koja mogu da obezbede dovoljno veliki domen izračunavanja za prirodno smeštanje talasnih funkcija, ali istovremeno i zadovoljavajuće fitovanje heterogranica između jame i barijere.

Predloženi numerički metod baziran na kombinaciji koordinatnih transformacija i metode konačnih razlika (KT-FDM), omogućava jednostavan i efikasan pristup u određivanju zonske strukture i talasnih funkcija kvantnih crta različitih profila poprečnog preseka i različitih dimenzija. Analizirane su najvažnije osobine koje treba da zadovolje koordinatne transformacije, a zatim je predloženo nekoliko funkcija koje mogu da omoguće fitovanje različitih profila poprečnih preseka izolovanih kvantnih crta i periodičnih nizova kvantnih crta. Metod je testiran sa stanovišta uticaja diskretizacionog koraka i veličine domena na konvergenciju i efikasnost postupka za određivanje zonske strukture izolovanih kvantnih crta sa sočivastim [40], [65], [71] i trapeznim [66], [67], [72] poprečnim presekom, što su uobičajene aproksimacije oblika kvantnih crta.

4.2.1 Opis metode KT-FDM

Predloženi metod sastoji se iz četiri osnovna koraka:

1. Izbor koordinatne transformacije koja istovremeno obezbeđuje zadovoljavajući fit heterogranica između jame i barijere za izolovanu kvantnu crtu (Sl. 10) i zadovoljavajuću veličinu domena izračunavanja.

2. Preslikavanje Hamiltonijana u novi koordinatni prostor korišćenjem Jacobian-a za primenjenu koordinatnu transformaciju.
3. Diskretizacija Hamiltonijana po šemi konačnih razlika i definisanje diskretizacione matrice.
4. Izračunavanje svojstvenih vrednosti koje predstavljaju vezana stanja u kvantnim crtama, što se može postići primenom specializovanih rutina za određivanje svojstvenih vrednosti.

Korake 2 i 3 je moguće izvesti u opštem obliku, nezavisno od primenjene koordinatne transformacije, pa će prvo biti dat opis preslikavanja Hamiltonijana i FDM diskretizacije, a zatim sledi analiza i izbor konkretnih koordinatnih transformacija (korak 1).

Kao što je već napomenuto, usled izdužene geometrije kvantnih crta, kvantizacija u longitudinalnom (z -pravcu) dovodi do kvazi-kontinualne strukture podzona, čija energija se dobro može aproksimirati sa paraboličnom zavisnošću u odnosu na odgovarajući talasni vector (k_z), pa jednozonska Schrödinger-ova jednačina u aproksimaciji efektivne mase (3.18) za elektrone u provodnoj zoni glasi:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{m_e^*(x,y)} \frac{\partial \eta(x,y)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{m_e^*(x,y)} \frac{\partial \eta(x,y)}{\partial y} \right] \right\} + \left(\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*(x,y)} + U \right) \eta(x,y) = E \eta(x,y), \quad (4.3)$$

gde je $\eta = \eta(x, y)$ sporo-promenljivi deo ukupne talasne funkcije, $U = U(x, y)$ je 2D profil potencijala određen poprečnim presekom kvantne crte i diskontinuitetom provodne zone, $m_e^* = m_e^*(x, y)$ je elektronska efektivna masa, dok je E energija vezanih stanja u odnosu na dno provodne zone u barijernom materijalu. Kako je ovo razmatranje prvenstveno posvećeno analizi KT-FDM metode, u cilju pojednostavljenja izlaganja, biće određivane samo svojstvene energije koje odgovaraju dnu podzona, za koje je $k_z = 0$, a izračunavanje se sprovodi u aproksimaciji ravnih zona. Da bi bili zadovoljeni uslovi kontinualnost gustine verovatnoće i struje verovatnoće, potrebno je da talasna funkcija $\eta(x, y)$, kao i njen gradijent normalan na heterogranicu podeljen sa efektivnom masom, budu kontinualni na heterogranicama, što je uvedeno relacijama (3.15) i (3.16).

Međutim, prilikom implementacije šeme konačnih razlika ovi uslovi su prirodno ugrađeni u diskretizaciju i nije potrebno eksplicitno ih forsirati.

Za izabrane koordinatne transformacije $x = x(u,v)$, $y = y(u,v)$, gde su x i y koordinate u originalnom xy koordinatnom prostoru, Schrödinger-ova jednačina (4.3) može se preslikati u novi uv prostor:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[u_x \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{u_x}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial u} + \frac{v_x}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial v} \right) + v_x \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{u_x}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial u} + \frac{v_x}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial v} \right) + \right. \\ \left. + u_y \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{u_y}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial u} + \frac{v_y}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial v} \right) + v_y \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{u_y}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial u} + \frac{v_y}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial v} \right) \right] + U\psi = E\psi \quad (4.4)$$

U jednačini (4.4) $\psi[x(u,v), y(u,v)] = \psi(u,v)$, $U[x(u,v), y(u,v)] = U(u, v)$, dok su u_x , v_x , u_y , i v_y elementi matrice Jacobian-a J_{xy} koji predstavljaju parcijalne izvode inverznih funkcija $u = u(x, y)$ i $v = v(x, y)$ po x i y . Da bi se Schrödinger-ova jednačina predstavila u uv -prostoru, potrebno je elemente matrice J_{xy} izraziti u funkciji od u i v , tj. $u_x = u_x(u,v)$, $v_x = v_x(u,v)$, $u_y = u_y(u,v)$, $v_y = v_y(u,v)$. U tu svrhu, polazi se od koordinatnih transformacija $x = x(u,v)$, $y = y(u,v)$ i odgovarajuće matrice Jacobian-a J_{uv} , koja je eksplicitna funkcija od u i v data sa:

$$J_{uv} = \begin{bmatrix} x_u & x_v \\ y_u & y_v \end{bmatrix}, \quad (4.5)$$

gde indeksi sada označavaju parcijalne izvode po u i v . Kako je matrica Jacobian-a J_{xy} za inverzno preslikavanje $u = u(x, y)$, $v = v(x, y)$ data sa $J_{xy} = J_{uv}^{-1}$, konačno se J_{xy} izvodi u obliku koji je sada eksplicitnu funkciju po u i v :

$$J_{xy} = \begin{bmatrix} u_x & u_y \\ v_x & v_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_u & x_v \\ y_u & y_v \end{bmatrix}^{-1}. \quad (4.6)$$

Elementi matrice J_{xy} zavise od izabranih koordinatnih transformacija. Generalna forma transformacija koje se koriste za fitovanje heterogranica i definisanje domena izračunavanja data je sa:

$$x = Cu, \quad (4.7a)$$

$$y = Cf(u,v), \quad (4.7b)$$

gde je C konstanta izražena u nanometrima. Ovaj tip koordinatnih transformacija dovodi do jednostavnije forme matrica J_{uv} i J_{xy} :

$$J_{uv} = \begin{bmatrix} x_u & x_v \\ y_u & y_v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C & 0 \\ C f_u & C f_v \end{bmatrix}, \quad (4.8a)$$

$$J_{xy} = \begin{bmatrix} u_x & u_y \\ v_x & v_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/C & 0 \\ -f_u/(C f_v) & 1/(C f_v) \end{bmatrix} = \frac{1}{C} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \mu & \rho \end{bmatrix}, \quad (4.8b)$$

gde su f_u i f_v izvodi $f(u, v)$ u odnosu na u i v , respektivno, $\mu = \mu(u, v) = C v_x = -f_u / f_v$ i $\rho = \rho(u, v) = C v_y = 1 / f_v$. Važno je primetiti da je potrebno da funkcija $f(u, v)$ obezbedi da determinanta matrice Jacobian-a bude različita od 0, tj. $|J_{uv}| = |J_{xy}|^{-1} = C^2 f_v \neq 0$. U ovom slučaju, transformacija je tipa “jedan-na-jedan” i postoji inverzna transformacija u svim tačkama domena. Za slučaj transformacija datih relacijom (4.7), jednačina (4.3) se može pojednostaviti i postaje:

$$-\frac{\hbar^2}{2C^2} \left[\frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{1}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial u} + \frac{\mu}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial v} \right) + \mu \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{1}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial u} + \frac{\mu}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial v} \right) + \rho \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{\rho}{m_e^*} \frac{\partial \eta}{\partial v} \right) \right] + U\eta = E\eta. \quad (4.9)$$

Diskretizacija jednačine (4.9) primenom šeme standardnih centralnih razlika, daje:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2C^2} \left\{ \frac{1}{h_u} \left[\left(\frac{1}{m_e^*} \right)_{i+1/2, j} \frac{\eta_{i+1, j} - \eta_{i, j}}{h_u} - \left(\frac{1}{m_e^*} \right)_{i-1/2, j} \frac{\eta_{i, j} - \eta_{i-1, j}}{h_u} + \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \left(\frac{\mu}{m_e^*} \right)_{i+1/2, j} \frac{\eta_{i+1/2, j+1/2} - \eta_{i+1/2, j-1/2}}{h_v} - \left(\frac{\mu}{m_e^*} \right)_{i-1/2, j} \frac{\eta_{i-1/2, j+1/2} - \eta_{i-1/2, j-1/2}}{h_v} \right] + \right. \\ & \quad \left. + \frac{(\mu)_{i, j}}{h_v} \left[\left(\frac{1}{m_e^*} \right)_{i, j+1/2} \frac{\eta_{i+1/2, j+1/2} - \eta_{i-1/2, j+1/2}}{h_u} - \left(\frac{1}{m_e^*} \right)_{i, j-1/2} \frac{\eta_{i+1/2, j-1/2} - \eta_{i-1/2, j-1/2}}{h_u} + \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \left(\frac{\mu}{m_e^*} \right)_{i, j+1/2} \frac{\eta_{i, j+1} - \eta_{i, j}}{h_v} - \left(\frac{\mu}{m_e^*} \right)_{i, j-1/2} \frac{\eta_{i, j} - \eta_{i, j-1}}{h_v} \right] + \right. \\ & \quad \left. + \frac{(\rho)_{i, j}}{h_v} \left[\left(\frac{\rho}{m_e^*} \right)_{i, j+1/2} \frac{\eta_{i, j+1} - \eta_{i, j}}{h_v} - \left(\frac{\rho}{m_e^*} \right)_{i, j-1/2} \frac{\eta_{i, j} - \eta_{i, j-1}}{h_v} \right] \right\} + U_{i, j} \eta_{i, j} = E \eta_{i, j} \quad (4.10) \end{aligned}$$

gde su i i j indeksi diskretizacionih tačaka, dok h_u i h_v predstavljaju diskretizacione korake duž u i v koordinate, respektivno. Na osnovu jednačine (4.10) može se zaključiti da implementirani metod diskretizacije očuvava kontinuitet gustine verovatnoće i struje verovatnoće, jer efektivne mase ostaju pod izvodom. Nametanjem Dirichlet-ovih graničnih uslova na granicama domena izračunavanja, gde za izolovanu kvantnu crtu bez vlažećeg sloja talasna funkcija mora opadati na nulu, izračunava se diskretizaciona

matrica korišćenjem relacije (4.10). Važno je primetiti da je za precizno izračunavanje svojstvenih energija efektivnu masu u središnjim tačkama ($i + 1/2$ ili $j + 1/2$) potrebno izračunavati kao srednju vrednost efektivnih masa u susednim tačkama, a ne kao srednju vrednost recipročnih masa, što bi mogla da implicira jednačina (4.10).

4.2.2 Koordinatne transformacije

Postoji nekoliko koordinatnih transformacija koje mogu da obezbede fitovanje heterogranica kvantnih crta prikazanih na Sl. 10, pa se $f(u,v)$ može analizirati kao familija funkcija. Ova familija funkcija nije definisana jedinstveno, već u smislu uslova koje je potrebno da zadovolji. Iako transformacije definisane familijom funkcija mogu da obezbede slične profile poprečnog preseka, one se mogu i značajno razlikovati u zavisnosti od parametara koji definišu funkciju $f(u,v)$. To znači, da uprkos činjenici da funkcije nisu iste, za ispravno usvojene parametre fitovanja, one mogu obezbediti iste ili slične profile poprečnog preseka. Imajući u vidu profil poprečnog preseka kvantnih crta, očigledno je da funkcija koja dobro fituje heterogranicu između jame i barijere treba da bude tipa Gauss-ove funkcije u odnosu na koordinatu u , tj. treba da bude parna funkcija koja opada sa $|u|$ i da ima maksimalnu vrednost za $u = 0$. Sa druge strane, za barijernu oblast koja okružuje region crte, $f(u,v)$ treba da obezbedi sličan profil kao za heterogranicu jama-barijera, ali takav da za veće vrednosti $|v|$ obezbedi veću širinu u odnosu na u i da na taj način obezbedi zatvaranje barijerne oblasti oko kvantne crte i definiše domen izračunavanja. Ova analiza dovodi do mogućih rešenja za funkciju $f(u,v)$, koja se može predstaviti u obliku proizvoda dve funkcije od kojih jedna zavisi od

Tabela I. Set funkcija $g(u)$, $h(v)$, i $\gamma(v)$ koji zadovoljava definisane uslove koordinatnih transformacija, gde su n , m i p pozitivni celi brojevi.

Predložene funkcije za $g(u)$:

$$(G + B \cdot u^{2m})^{-1}; \exp(-B \cdot u^{2m}); \operatorname{sech}(B \cdot u^m); \operatorname{sech}(G + B \cdot u^{2m})$$

Predložene funkcije za $h(v)$:

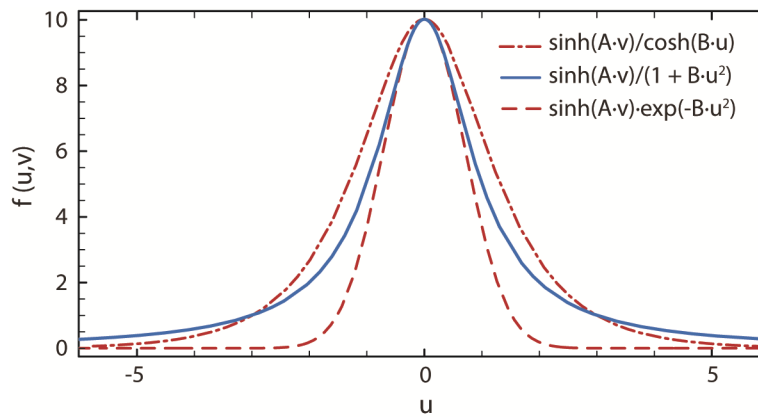
$$v^{2n+1}; \sinh(A \cdot v^{2n+1})$$

Predložene funkcije za $\gamma(v)$:

$$(F + K \cdot v^{2p})^{-1}; \operatorname{sech}(K \cdot v^p); \operatorname{sech}(F + K \cdot v^{2p})$$

u , a druga od v , tj. $f(u,v) = h(v) \cdot g(u)$. U $f(u,v)$, $g(u)$ je gausovska funkcija, dok je $h(v)$ bilo koja neparna funkcija čiji moduo monotono raste sa $|v|$. Na taj način, $h(v)$ moduliše $g(u)$ i obezbeđuje veliko povećanje domena koji okružuje jamski materijal kvantne crte i za pozitivne i za negativne vrednosti v . Opis funkcija $h(v)$ i $g(u)$ nudi nekoliko mogućih rešenja, a neka od njih su data u Tabeli I, gde A , B , G , n i m predstavljaju parametre fitovanja.

Na Sl. 45 prikazani su različiti profili koji se mogu iskoristiti za fitovanje granica kvantne crte, formirani u vidu kombinacije prve tri funkcije $g(u)$ i funkcije $h(v) = \sinh(A \cdot v)$ iz Tabele I. Međutim, većina predloženih rešenja formira domene čija veličina za velike vrednosti u , veoma sporo ili čak zanemarljivo, raste sa $|v|$, što dovodi do brzog sužavanja domena izračunavanja za koje $y(u,v)$ postaje vrlo blisko 0. Zapravo, ovo sužavanje jeste pogodno za fitovanje gornje heterogranice kvantne crte, ali ne i za domen izračunavanja. Zahtev za relativno otvorenim domenom u x -pravcu, proističe iz činjenice da se talasne funkcije mogu značajno “razlivati” u okolini ivica kvantnih crta, gde se spajaju gornja i donja heterogranica. Prema tome, da bi se obezbedilo istovremeno fitovanje heterogranica i formiranje okružujućeg domena zadovoljavajućeg oblika i dimenzija, neophodno je zadržati pogodne karakteristike gausovskih funkcija $g(u)$ uz dodavanje nove karakteristike, takve da usporava opadanje funkcije $g(u)$, sprečavajući kolaps domena za velike vrednosti u . Ovo se može postići uvođenjem nove parne funkcije $\gamma(v)$, koja monotono opada sa $|v|$ i moduliše argument funkcije $g(u)$, tako što je smanjuje za veće vrednosti $|v|$. Konačna forma preslikavanja dobija se u obliku



Sl. 45. Gausovski profil poprečnog preseka za neke kombinacije funkcija $h(v)$ i $g(u)$ date u Tabeli I, za $v = 2.5$, $A = 1.2$, $B = G = 1$, $C = 1$ nm i $m = 1$.

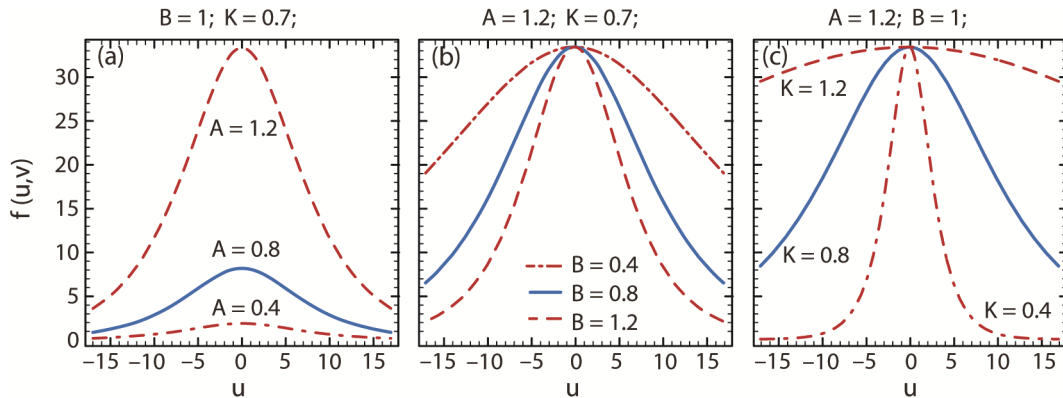
$f(u,v) = h(v) \cdot g[\gamma(v) \cdot u^q]$, gde je q pozitivan ceo broj. Kako funkcija $\gamma(v)$ ima iste osobine kao funkcija $g(u)$ predložena u Tabeli 1, $g(u)$ se može iskoristiti kao model za funkciju $\gamma(v)$. Prema Tabeli I, $\gamma(v)$ se izvodi iz $g(u)$, tako što se parametri G , B i m u funkciji $g(u)$ prosto zamene sa F , K i p , respektivno.

Polazeći od prethodnog razmatranja, konstruisano je jednostavno koordinatno preslikavanje koje obezbeđuje fitovanje sočivastog poprečnog preseka kvantnih crta i formiranje razumno malog domena izračunavanja, takvog da može da obezbedi prirodno smeštanje talasnih funkcija vezanih stanja:

$$x = C u, \quad (4.11a)$$

$$y = \frac{C \sinh(A v)}{\cosh[B u / \cosh(K v)]}. \quad (4.11b)$$

Na Sl. 46 pokazano je kako svaki od parametara preslikavanja (4.11) utiče na oblik funkcije $f(u,v)$, za fiksnu vrednost $v = 3.5$. Može se uočiti da A utiče na vrednost maksimuma krive, koja eksponencijalno raste sa A , dok B i K kontrolišu oblik Gauss-ove funkcije. Povećanje parametra B dovodi do smanjenja širine krive, dok povećanje parametra K dovodi do njenog povećanja. Štaviše, oblik krive i njena širina više zavise od K nego od B . Kako $f(u,v)$ zavisi od proizvoda $A \cdot v$ i $K \cdot v$, prethodno razmatranje ukazuje da je za fiksno A i K , povećanje parametra v ekvivalentno povećanju parametara A i K za fiksno v . Prema tome, povećanje v istovremeno povećava maksimum krive i njenu širinu, što omogućava proširenje domena izračunavanja za velike vrednosti $|u|$. To znači da izabrana funkcija omogućava uspešno fitovanje gornje heterogranice kvantne crte, dok za veće vrednosti $|v|$ dovodi do šire krive koja može predstavljati pogodnu



Sl. 46. Uticaj parametara na oblik koordinatnog preslikavanja datog relacijom (4.11)

granicu domena izračunavanja.

Međutim, odlične mogućnosti fitovanja koje obezbeđuje funkcija (4.11) nisu neophodno u korelaciji sa invertibilnošću funkcije. Kao što je već pomenuto, ove osobine zavise od determinante Jacobian-a, koja mora da bude različita od nule u svim tačkama domena izračunavanja. Prema tome, potrebno je izvršiti analizu elemenata matrice Jacobiana J_{uv} , posebno $y_v = y_v(u, v)$, koje u konkretnom slučaju predstavlja i determinantu Jacobian-a (relacija 4.8(a)) skaliranu sa konstantom C :

$$y_v = \frac{\partial y}{\partial v} = C \frac{A \cosh(Av) + B K u \sinh(Av) \sinh(Kv) \frac{\tanh[Bu / \cosh(Kv)]}{\cosh^2(Kv)}}{\cosh\left[\frac{Bu}{\cosh(Kv)}\right]}. \quad (4.12)$$

Relacija (4.12) određuje $|J_{uv}|/C$, koje je različito od nule za bilo koju vrednost argumenata u i v , obezbeđujući postojanje inverzne koordinatne transformacije i matrice J_{xy} . Iako $|J_{uv}|$ nema nula u okviru domena izračunavanja, determinanta opada sa $|u|$ i prilazi nuli za dovoljno veliko $|u|$ i malo $|v|$, što može uticati na preciznost izračunavanja. Međutim, ova situacija se ne javlja za uobičajene veličine domena izračunavanja. Na osnovu prethodne diskusije, može se zaključiti da izabrana transformacija zadovoljava najvažnije zahteve za uspešnu implementaciju FDM uključujući i značajno povećanje domena za male varijacije parametra v .

Kao što je već napomenuto, odgovarajućom kombinacijom funkcija iz Tabele I moguće je fitovanje trapeznog poprečnog preseka kvantnih crta. Jedno moguće rešenje je korišćenje sledeće koordinatne transformacije:

$$x = Cu, \quad (4.13a)$$

$$y = \frac{C \sinh(Av)}{\cosh[Bu^2 / (F + Kv^2)]}. \quad (4.13b)$$

Funkcija (4.13) omogućava preslikavanje trapeznog poprečnog preseka, međutim, u slučaju širokih struktura (velikih vrednosti $|u|$), determinanta Jacobian-a je previše mala (≈ 0) i preslikavanje postaje neefikasno. Strukture sa ovakvim geometrijskim karakteristikama zahtevaju modifikaciju preslikavanja, takvu da za velike vrednost $|u|$ argument u imeniocu ulazi u saturaciju. U cilju fitovanja eksperimentalno dobijenih trapeznih poprečnih preseka [67], pogodnija je sledeća koordinatna transformacija:

$$x = C u, \quad (4.14a)$$

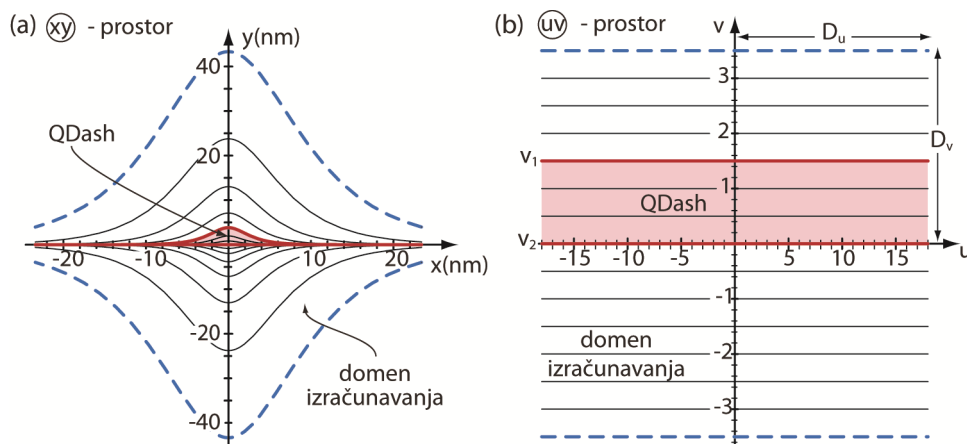
$$y = \frac{C \sinh(A v)}{\cosh[G \tanh(B u^q) / \cosh(K v^p)]}, \quad (4.14b)$$

gde su p i q pozitivni celi brojevi. Zaključci koji se odnose na osobine koordinatne transformacije za sočivastu aproksimaciju poprečnog preseka važe i u ovom slučaju.

4.2.3 Karakterizacija KT-FDM metode

U cilju karakterizacije metode KT-FDM, analiziran je uticaj gustine mreže i veličine domena na svojstvene energije vezanih stanja u sočivastim kvantnim crtama. Prvi korak u ovoj analizi je određivanje adekvatne veličine domena izračunavanja za koji će talasne funkcije vezanih stanja moći prirodno da se smeste unutar domena. Na Sl. 47(a) prikazan je profil poprečnog preseka InAs sočivaste kvantne crte sa tipičnim dimenzijama $w \approx 14$ nm, $h = 3.5$ nm i profil okružujuće GaAs barijerne oblasti. Na Sl. 47(b) prikazana je struktura nakon prelaska u preslikani prostor primenom koordinatnog preslikavanja (4.11) za parametre fitovanja $C = 1.3$ nm, $A = 1.2$, $B = 1$, $K = 0.7$. Gornja heterogranica kvantne crte preslikan je u $v_1 = 1.5$, dok se donja preslikava u $v_2 = 0$. Veličina izabranog domena u preslikanom prostoru određena je sa $D_u = \pm 18$ i $D_v = \pm 3.5$.

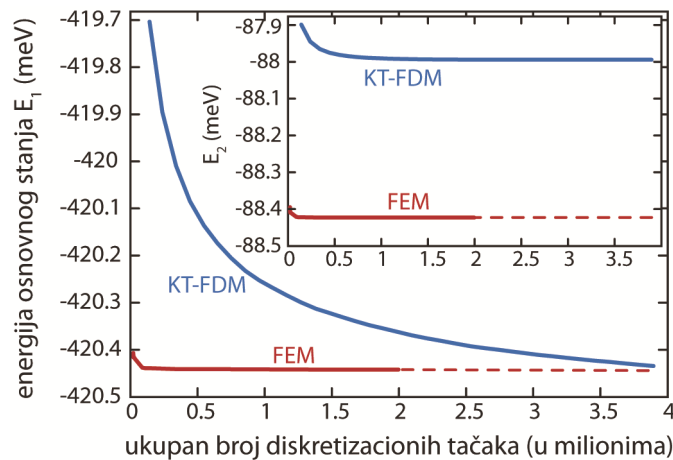
Za kvantnu crtu i izabrani domen u preslikanom prostoru, proporcionalno i postepeno se menja gustina mreže u oba pravca i primenom FDM-a izračunavaju se svojstvene vrednosti energija. Diskretizacioni koraci su jednaki u oba pravca, tj. $\Delta = h_u = h_v$. Kako je domen fiksiran, a diskretizacioni koraci jednaki u oba pravca, međusobni



Sl. 47. Poprečni presek kvantne crte i okružujućeg domena u (a) xy - i (b) uv -prostoru.

odnos broja tačaka u oba pravca se održava. Iz tog razloga, u narednom razmatranju nije neophodno pratiti broj tačka u svakom od pravaca (N_u , N_v), već ukupan broj tačaka u mreži ($N_{uv} = N_u \times N_v$), što odgovara veličini diskretizacione matrice. Ova veličina se koristi kao parametar na osnovu kog se procenjuje vreme izračunavanja i zahtevani memorijski resursi.

Za posmatranu QDash strukturu, postoje dva vezana stanja u provodnoj zoni. Na Sl. 48 prikazana je zavisnost izračunatih svojstvenih energija za oba vezana stanja u zavisnosti od ukupnog broja diskretizacionih tačaka N_{uv} za primenjen metod KT-FDM u poređenju sa FEM. Može se uočiti da za mali broj tačaka, zavisnost svojstvenih vrednosti strmo opada, dok sa povećanjem gustine mreže ulazi u saturaciju. Prag saturacije za KT-FDM nije uočljiv jasno kao za FEM koji se odlikuje jako brzom konvergencijom. Međutim, može se uočiti da za primenjen KT-FDM razlika između svojstvenih vrednosti energije osnovnog stanja za najveću gustinu mreže ($\approx 4 \cdot 10^6$) i za bilo koju drugu gustinu, postaje manja od 0.3 meV, kada ukupni broj tačaka u mreži postane veći od $5 \cdot 10^5$. Za prvo pobuđeno stanje konvergencija je još brža pa razlika energija postaje manja od 0.1 meV kada ukupni broj tačaka u mreži postane veći od $5 \cdot 10^5$ (inset u Sl. 48). Ukupna varijacija u energiji prvog pobuđenog stanja sa brojem diskretizacionih tačaka od 0.1 meV, je dosta manja nego za osnovno stanje (oko 0.7 meV), što pokazuje da je prvo pobuđeno stanje manje osetljivo na gustinu mreže nego osnovno stanje. U cilju ostvarivanja kompromisa između preciznosti i potrebnog vremena izračunavanja, kriterijum za optimalni broj tačaka mreže izabran je tako da



Sl. 48. Energija osnovnog stanja u zavisnosti od ukupnog broja diskretizacionih tačaka za KT-FDM i FEM metod. Inset: isto za prvo pobuđeno stanje.

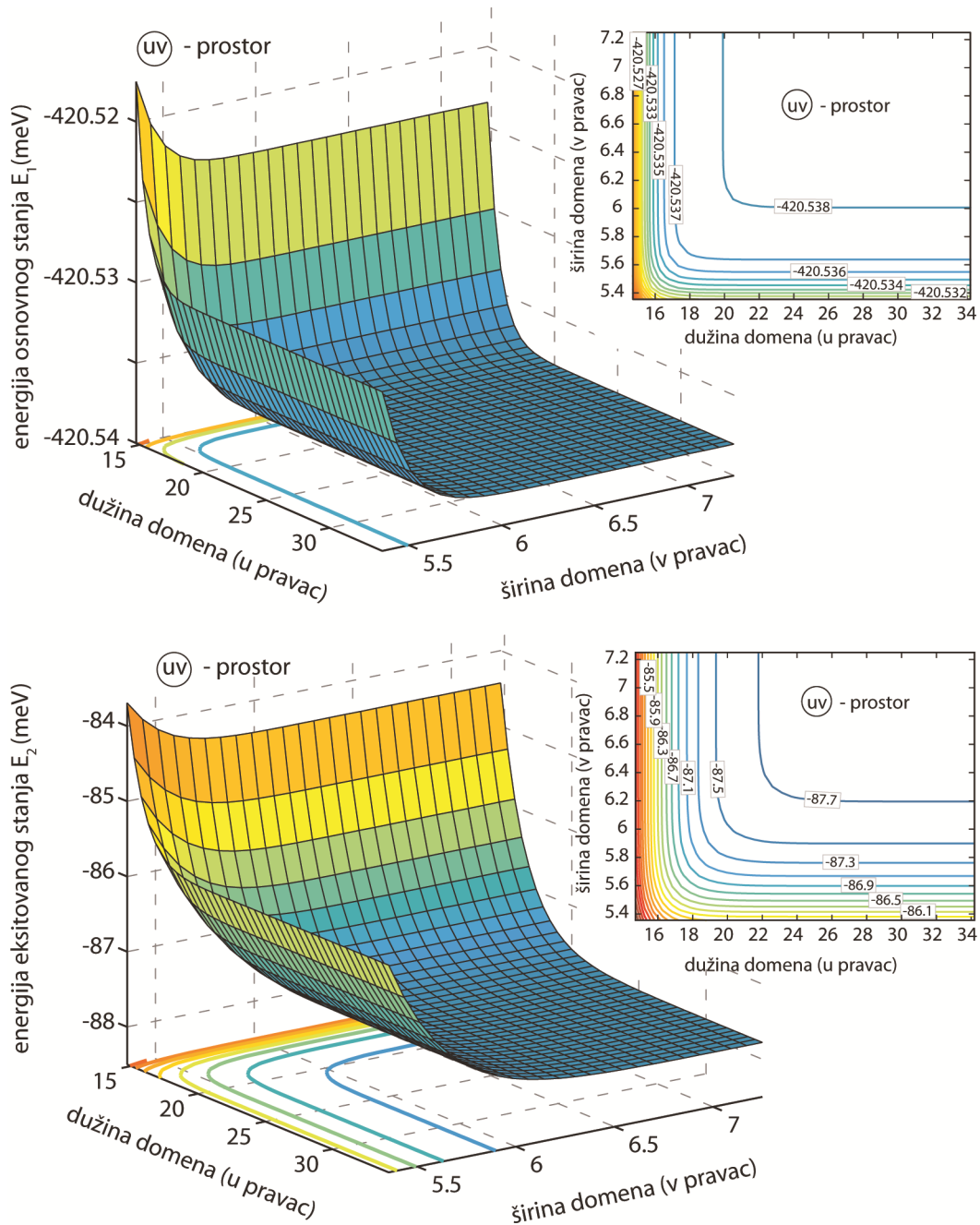
odstupanje izračunatih svojstvenih energija od energije koja se dobija za najveći razmatrani broj diskretizacionih tačaka bude manje od 0.2 meV, za sva vezana stanja. Prema Sl. 48, optimalan broj tačaka za usvojenu veličinu domena i preciznost od 0.2 meV, je $6 \cdot 10^5$.

Na osnovu zavisnosti sa Sl. 48, moguće je odrediti brzinu konvergencije ovog metoda, koja je približno 1 za osnovno stanje i približno 1.3 za prvo pobuđeno stanje [104]. Kada se ima u vidu da je korišćena standardna verzija konačnih razlika, ovo je očekivani rezultat, mada se brzina konvergencije može popraviti implementacijom sofisticiranih metoda diskretizacije.

U cilju testiranja preciznosti primenjene metode, referentne vrednosti svojstvenih energija dobijene su primenom metode konačnih elemenata u originalnom xy -prostoru, za strukturu i domen koji u potpunosti odgovaraju domenu u uv -prostoru na koji je primenjena KT-FDM metoda. Tom prilikom, broj elemenata u FEM izračunavanju održavan je približno jednakim broju tačaka N_{uv} . Međutim, direktna korespondencija između broja tačaka koje koriste KT-FDM i FEM nije u potpunosti opravdana, jer mreža koju koristi FEM nije homogena, za razliku od mreže koja se koristi za KT-FDM. Sve u svemu, dobijena su dosta dobra slaganja, jer se izračunate svojstvene energije razlikuju za manje od jednog desetog dela meV. U pogledu vremena potrebnog za izračunavanje, KT-FDM se pokazao bržim od FEM-a. Sprovedeni su testovi obe metode na desktop računaru sa Intel Core2Quad@2.66GHz procesorom i 8 GB DDR2 memorije (dostupna fizička memorija je 6.47 GB) na 64-bit Windows 7 platformi. Kada se broj tačaka diskretizacije (odnosno FEM elemenata) podesi na $N_{uv} = 0.55, 1.27, 1.87$ miliona, KT-FDM metod završava izračunavanja za 2.3, 13, i 34.1 minuta, dok je primenom FEM-a potrebno 15.5, 82.3, i 179.6 minuta, respektivno, što ukazuje da je primenjeni KT-FDM oko 5 puta brži od FEMa. Iako se ovaj trend održava i za veliki broj tačaka, poređenje više nije pouzdano jer oba metoda počinju da koriste virtuelnu memoriju, a za vrednosti broja elemenata veće od 2 miliona, FEM nije bio u mogućnosti da uspešno završi proračun.

Na Sl. 49 prikazane su energije osnovnog i prvog pobuđenog stanja u zavisnosti od veličine domena na kom se vrše izračunavanja u u i v pravcu, za fiksnu vrednost diskretizacionog koraka $\Delta = 0.013$. U skladu sa očekivanjima, ako je veličina domena

previše mala, bilo u u ili v pravcu, talasna funkcija ne može da se smesti na odgovarajući način unutar domena izračunavanja. U ovom slučaju, uzak domen se ponaša kao beskonačno visok potencijal, koji podiže energije oba vezana stanja. Domen za koji energije pobuđenog stanja ulaze u saturaciju nije lako uočiti, iako se grubo može proceniti oblast $2D_u \geq 20$ i $2D_v \geq 5.8$, za koji je varijacija u energijama manja od 0.5

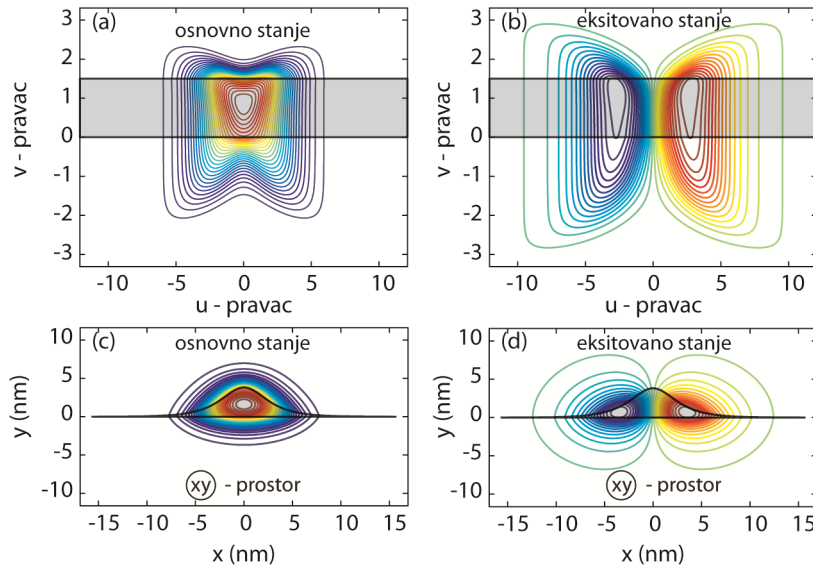


Sl. 49. Energije (a) osnovnog i (b) prvog pobuđenog stanja u zavisnosti od veličine domena izračunavanja u preslikanom uv -prostoru.

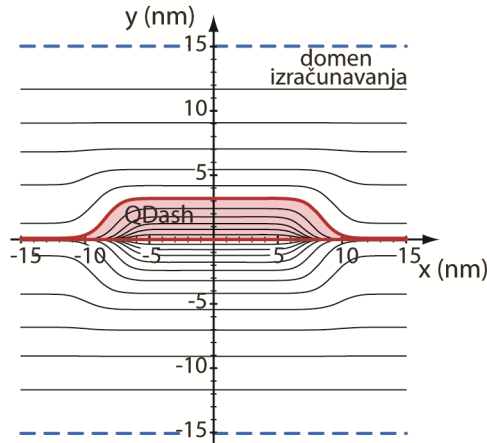
meV. Situacija je mnogo povoljnija za osnovno stanje, koje je zbog izraženijeg konfiniranja unutar jame manje osetljivo na varijacije u veličini domena. U ovom slučaju, red veličine varijacije energije osnovnog stanja je 10^{-2} meV za sve razmatrane dimenzije domena izračunavanja, što je skoro zanemarljivo u odnosu na prvo pobuđeno stanje. Može se uočiti da je za osnovno stanje oblast saturacije mnogo izraženija nego za pobuđeno stanje i procenjuje se na oblast $2D_u \geq 18$ i $2D_v \geq 5.7$, za koju je varijacija u energijama manja od 10^{-3} meV. Treba napomenuti da zadovoljavajuća veličina domena u uv -prostoru ne zavisi od konkretne veličine kvantne crte već više od njenog oblika, tj. odnosa širine i visine. Ova karakteristika je omogućena skalirajućim faktorom C , koji se koristi da sve crte istog oblika, bez obzira na njihovu veličinu, smesti u isti domen u preslikanom prostoru.

Na Sl. 50 prikazana je distribucija talasne funkcije u xy - i uv -prostoru. Može se primetiti da su u uv -prostoru talasne funkcije za oba stanja sabijene duž v -pravca u sredini domena izračunavanja, što je posledica implementiranog preslikavanja, koje u uv -prostoru proširuje prostor u okolini krajeva kvantne crte i istovremeno sabija prostor u centru kvantne crte. Nakon implementacije inverznog preslikavanja iz uv - u xy -prostor, obe talasne funkcije se prirodno smeštaju u izabrani domen izračunavanja.

Primenom koordinatne transformacije (4.14) za parametre fitovanja: $p = 2$, $q = 6$,



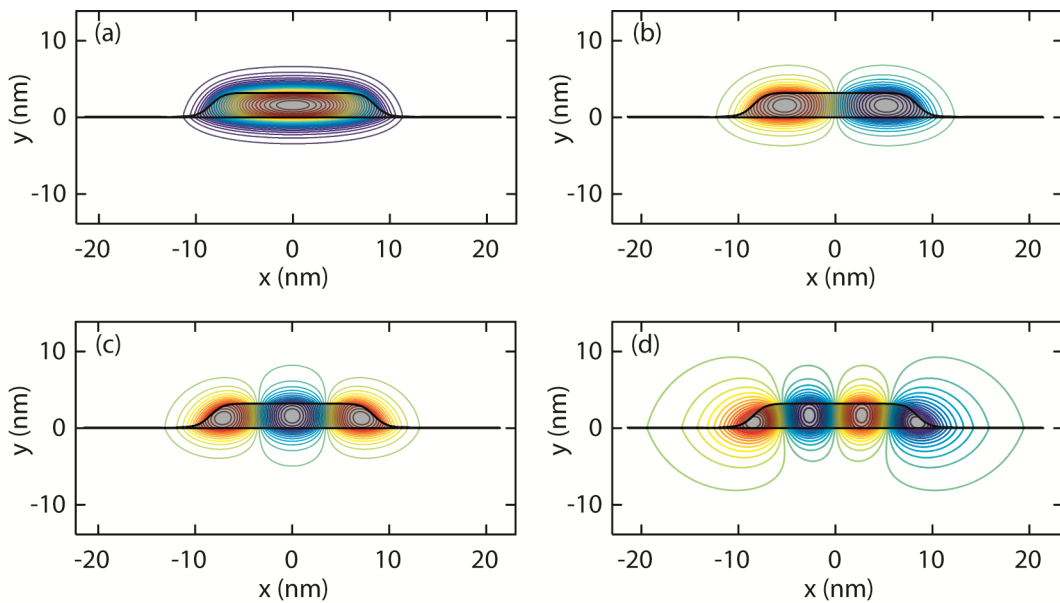
Sl. 50. Konturni prikaz talasnih funkcija osnovnog i prvog pobuđenog stanja u uv - i xy -prostoru za kvantnu crtu sa Sl. 47



Sl. 52. Kvantna crta sa trapeznim profilom poprečnog preseka i odgovarajući domen izračunavanja u xy -prostoru.

$A = 1$, $C = 1.5$, $G = 20$, $B = 10^{-5}$, i $K = 1$, određivane su svojstvene energije i talasne funkcije za trapezni profil kvantnih crta [67]. Profil poprečnog preseka kvantne crte i odgovarajući domen izračunavanja u xy -prostoru prikazani su na Sl. 52, dok je oblik domena izračunavanja u preslikanom prostoru isti kao na Sl. 47(b). Na Sl. 51 prikazane su energije vezanih stanja i odgovarajuće talasne funkcije za osnovno i prva tri pobuđena stanja u originalnom, xy -prostoru.

Treba primetiti da jednostavnije preslikavanje dato relacijom (4.13), može



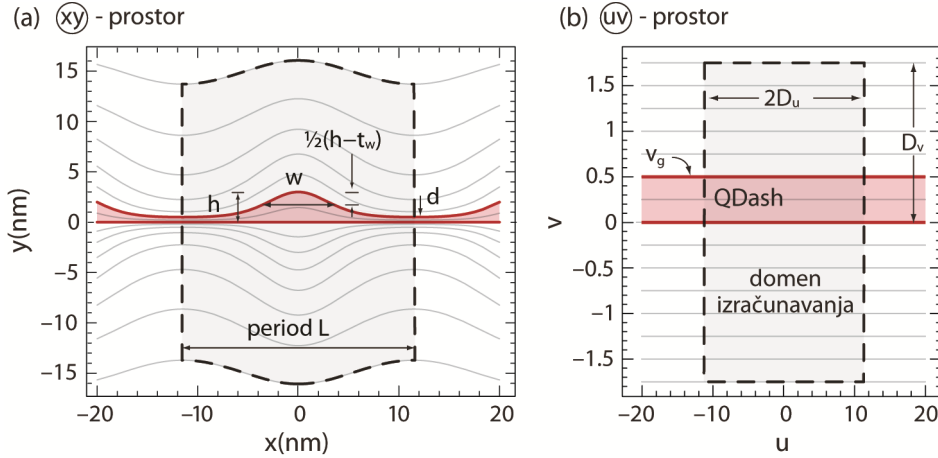
Sl. 51. Konturni prikaz talasnih funkcija za (a) osnovno i prva tri pobuđena stanja (b)-(d) u xy -prostoru za kvantne crte sa trapeznim poprečnim presekom sa Sl. 52.

obezbediti uspešno fitovanje užih formi trapeznih oblika veće visine. Međutim, u konkretnom slučaju, profil kvantne crte je toliko izdužen, da je širina u poređenju sa visinom kvantne crte za jedan red veličine veća, što je prilično teško fitovati jednostavnom kombinacijom funkcija. Relacija (4.14) obezbeđuje ne samo veoma široku i ravnu gornju heterogranicu kvantne crte, već i odgovarajući ugao pod kojim se formiraju bočne stranice trapeza. Ovaj ugao je veoma važan pošto značajno utiče na distribuciju talasnih funkcija i ukazuje na to da aproksimacija profila kvantnih crta jednostavnim pravougaonim oblikom nije adekvatna zamena za trapezni profil. Štaviše, predložena koordinatna transformacija i metod pojednostavljaju implementaciju FDM u poređenju sa situacijom kada bi se problem rešavao u originalnom xy -prostoru.

4.2.4 Primena metode KT-FDM na periodične nizove kvantnih crta

Prikazani metod se, uz određene modifikacije koordinatnih transformacija, može uspešno primeniti na modelovanje zonske strukture periodičnog niza identičnih kvantnih crta. Kako intenzitet kvantno-mehaničke sprege u velikoj meri zavisi od prisustva i debljine vlažećeg sloja, potrebno je formirati koordinatne transformacije koje mogu da obezbede uspešno fitovanje, a zatim i preslikavanje u novi prostor, kvantnih crta uzimajući u obzir vlažeći sloj. Šematski prikaz ovakvog periodičnog niza već je predstavljen u okviru prethodnog poglavlja, na Sl. 41. Geometrijski parametri koji definišu profil poprečnog preseka kvantne crte su maksimalna visina niza kvantnih crta h , širina kvantne crte na polovini maksimalne vrednosti w mereno u odnosu na vlažeći sloj, debljina vlažećeg sloja d i perioda L .

Periodičnost u x -pravcu zahteva primenu periodičnih graničnih uslova za sporopromenljivi deo talasne funkcije, definisanih relacijom (3.39). Pored toga, domen izračunavanja je u x -, odnosno u -pravcu, ograničen na jednu elementarnu ćeliju niza dimenzije koja odgovara periodu L , Sl. 53. Na ovaj način, domen izračunavanja se iz beskonačne trake svodi na pravougaonik i omogućava rešavanje jednozonske Schrödinger-ove jednačine (4.3) u novom koordinatnom prostoru prostom primenom metode konačnih razlika. Analizirana struktura je periodična u x -, odnosno u -pravcu, dok u y -pravcu (v -pravcu) ne postoji sprezanje između crta, pa važe Dirichlet-ovi granični uslovi, tj. $\eta(u, v) = 0$ na ivicama domena izračunavanja u v -pravcu (za $|v| = D_v / 2$).



Sl. 53. Poprečni presek periodičnog niza kvantnih crta u (a) xy - i (b) uv -prostoru.

Isprekidane linije označavaju granice domena na kom se vrši izračunavanje, odnosno jednu elementarnu ćeliju periodičnog niza kvantnih crta.

Pored već opisanih uslova koje treba da zadovolji koordinatna transformacija, u slučaju periodičnih nizova kvantnih crta potrebno je da funkcija $f(u,v)$ bude periodična u odnosu na koordinatu u sa periodom L [106]. Izbor periodične funkcije omogućava da se periodični uslovi (3.39) u originalnom xy -prostoru ispravno preslikaju u uv -prostor. U slučaju kada bi $f(u,v)$ bila aperiodična funkcija, prostor van granica elementarne ćelije bi bio nepravilno preslikan, što može dovesti do degradacije graničnih uslova i preciznosti metode.

Ako se gornja heterogranica kvantne crte fituje sa $y = f(u, v_g) = g(u)$, gde je v_g odgovarajuća v koordinata, geometrijski parametri profila poprečnog preseka se mogu izraziti u odnosu na funkciju $g(u)$ na sledeći način: $d = g(\pm L/2)$, $h = g(0)$ i konačno $(h-d)/2 = g(\pm w/2) - d$. Simetrija profila kvantnih crta zahteva da $f(u,v)$ i $g(u)$ budu parne funkcije. Imajući u vidu pravila na osnovu kojih su izvedene koordinatne transformacije za izolovane kvantne crte, preslikavanje koje može obezbediti fitovanje gausovskog profila kvantnih crta u periodičnom nizu dato je funkcijama [106]:

$$x = u ,$$

$$y = f(u, v) = \sinh(Av) \left\{ D + F \exp \left[-C \sin^2 \left(\frac{\pi}{L} u \right) \exp(-Bv^2) \right] \right\} \quad (4.15)$$

gde su A , B , C , D i F pozitivne konstante. Iako svi ovi parametri generalno obezbeđuju fitovanje profila poprečnog preseka kvantne crte i formiranje domena izračunavanja

odgovarajućeg oblika i dimenzija, svaki od njih na različit način utiče na geometrijske parametre elementarne ćelije kvantnih crta. Primera radi, parametri A i B omogućavaju kontrolu dimenzija domena izračunavanja u xy -prostoru. Jednom kada su A i B usvojeni, može se istražiti uticaj drugih parametara, kao što su C , D i F koji omogućavaju precizno fitovanje gornje heterogranice unutar elementarne ćelije periodičnog niza kvantnih crta. Na primer, D i F se mogu koristiti za podešavanje debljine vlažećeg sloja i visine kvantne crte. Na osnovu izraza za debljinu vlažećeg sloja $d = g(\pm L/2) = \sinh(Av_g)[D + F \exp(-C)]$ može se uočiti da izuzev skalirajućeg člana $\sinh(Av_g)$, D dominantno određuje debljinu vlažećeg sloja, pošto F uglavnom ima mali doprinos za uobičajene vrednosti parametra C . Sa druge strane, D i F značajno utiču na fitovanje visine kvantne crte, jer $g(0) = \sinh(Av_g)(D + F)$. Konačno, C se može iskoristiti za fitovanje širine kvantne crte i podešavanje gausovskog profila. Primenom relacije (4.15) moguće je odrediti parametre C , D i F za širok opseg geometrijskih parametara d , h i w .

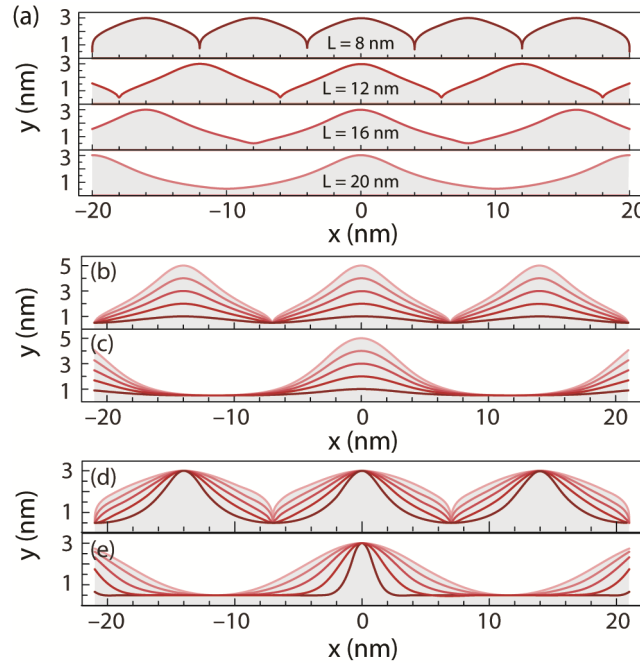
Međutim, koordinatna transformacija (4.15) ne može se koristiti za fitovanje nizova sa gusto poredanim kvantnim crtama. U ovom slučaju odnos w/L je prilično velik, dok C , D i F mogu imati negativne vrednosti. Pored toga, koordinatna transformacija postaje neinvertibilna. Analiza periodičnih nizova kvantnih crta sa velikim vrednostima odnosa w/L može se postići primenom nešto drugačijeg koordinatnog preslikavanja, datog sa [106]:

$$x = u ,$$

$$y = f(u, v) = \frac{\sinh(Av)}{D + \operatorname{arctanh}[C \sin^2(\pi u / L)] / \cosh(Bv)} \quad (4.16)$$

Kod ovog preslikavanja parametri v_g i B se koriste za kontrolisanje dimenzija domena izračunavanja u ξ -prostoru. Jednom kada su v_g i B fiksirani, iz relacije (4.16) mogu se odrediti pozitivni parametri A , C i D u funkciji od d , h i w .

Na Sl. 54 prikazani su profili kvantnih crta, fitovani primenom relacije (4.16), za koje su širina crte w i period L uporedivi. Može se primetiti da takvim dimenzijama kvantnih crta (primera radi, $w = 7$ nm i $L = 8$ nm) odgovaraju gotovo vertikalne ivice elementarnih ćelija, što je uobičajeni profil za slučaj gusto pakovanih kvantnih crta. Profil dobijen na osnovu relacije (4.16) za relativno mali odnos ($w = 7$ nm, $L = 20$ nm), može se jednako dobro fitovati i gausovskom funkcijom definisanom relacijom (4.15).



Sl. 54. Profil poprečnog preseka periodičnog niz kvantnih crta za (a) različite periode L prema relaciji (4.16) ($h = 3$ nm, $w = 7$ nm), različite visine $h = 1$ nm – 5 nm (b) prema relaciji (4.16) ($w = 7$ nm, $L = 14$ nm) i (c) prema relaciji (4.15) ($w = 7$ nm, $L = 23$ nm) i različite širine (d) $w = 4, 6, 8, 10$ i 12 nm prema relaciji (4.16) ($h = 3$ nm, $L = 14$ nm) i (e) $w = 2, 4, 6, 8$ i 10 nm prema relaciji (4.15) ($h = 3$ nm, $L = 23$ nm).

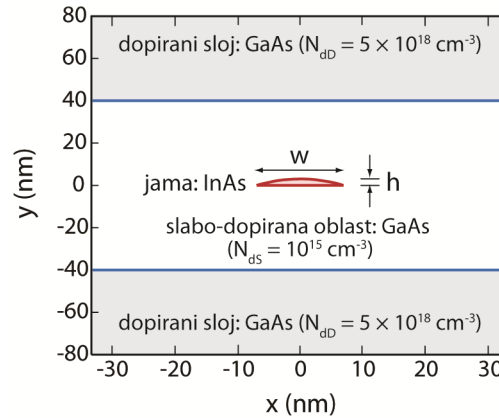
Za manje odnose w/L , heterogranice kvantnih crta se mogu bolje fitovati funkcijom (4.15) nego (4.16) jer funkcija (4.15) omogućava veoma male vrednosti w/L . Sl. 54(b) i (c) prikazuje profile kvantnih crta za različite visine kada su ostali parametri fiksirani, dobijene na osnovu relacije (4.15) i (4.16), respektivno. Može se uočiti da relacija (4.15), koja se koristi za veće periode L i manje odnose w/L , omogućava širok opseg gausovskih ili sočivastih profila različitih visina, dok relacija (4.16), specijalizovana za manje periode L i veće odnose w/L , omogućava fitovanje trougaonih profila. Sl. 54(d) i (e) prikazuju familije profila dobijene na osnovu relacija (4.15) i (4.16), respektivno, za koje su varirane širine w dok su svi ostali parametri fiksirani. Može se uočiti da varijacija širine w u slučaju relacije (4.15), pored sočivastih profila, omogućava fitovanje i zvonastih profila, za koje je širina kvantne crte veoma mala. Sa druge strane, relacija (4.16) obezbeđuje veću varijaciju u profilima koji se menjaju od konkavnih do konveksnih oblika.

Kako je opisani metod koji se koristi za određivanje elektronske strukture periodičnog niza kvantnih crta zapravo samo ekstenzija osnovnog metoda koji se koristi za izolovane kvantne crte [107], pod uslovom da je funkcija koordinatnog preslikavanja izabrana tako da je uslov invertibilnosti zadovoljen, periodičnost funkcije neće uticati na efikasnost i konvergenciju metode.

4.2.5 Primena metode konačnih elemenata

U okviru prethodnog izlaganja predstavljena je metoda koja kombinuje koordinatna preslikavanja i metodu konačnih razlika za određivanje zonske strukture kvantnih crta. Iako se ova metoda efikasno može primeniti kako na izolovane kvantne crte, tako i na periodične nizove identičnih kvantnih crta, njena implementacija postaje znatno komplikovanija u situacijama kada domen izračunavanja obuhvata više od dve oblasti različitih materijala i/ili različite dopiranosti, čije se granice ne mogu opisati istom analitičkom funkcijom. Sa druge strane, metoda za određivanje realistične zonske strukture kvantnih crta treba da omogući uzimanje u obzir Hartree-evog potencijala koji se javlja usled prisustva naelektrisanja neophodnog za odvijanje procesa apsorpcije, što se postiže primenom samosaglasnog rešavanja 2D Schrödinger-ove i nelinearne Poisson-ove jednačine izvan aproksimacije totalnog osiromašenja. Naelektrisanja potrebna za ostvarivanje optičkih prelaza se obezbeđuju inkorporacijom posebnih dopiranih slojeva, koji omogućavaju modulaciono dopiranje kvantnih crta, ali čije granice u opštem slučaju ne prate analitičke zavisnosti kojima su definisane heterogranice kvantnih crta. Primer najjednostavnije strukture koja se sastoji od izolovane kvantne crte sa zanemarenim vlažećim slojem i odgovarajućih dopiranih slojeva prikazan je na Sl. 55. Iako je Schrödinger-ovu, a kasnije i Poisson-ovu jednačinu za ovakvu strukturu moguće rešiti primenom KT-FDM metode, to se jednostavnije može postići primenom metode konačnih elemenata čija je implementacija u komercijalnim programskim paketima znatno unapređena postojanjem gotovih specijalizovanih rutina za generaciju mreže.

Kao što je već napomenuto, metoda konačnih elemenata zasniva se na diskretizaciji domena na kome se traži rešenje parcijalne diferencijalne jednačine i formiranju algebarskog problema čije rešenje predstavlja aproksimaciju rešenja originalnog problema. Domen na kom se traži rešenje određene klase problema



Sl. 55. Profil poprečnog preseka kvantne crte i domena na kom se vrši samosaglasno određivanje zonske strukture.

diskretizuje se podelom na proizvoljno male segmente jednostavnog oblika. Ovako dobijeni elementi (najčešće trougaoni, ukoliko je domen rešavanja dvodimenzionalan) formiraju mrežu, čija gustina određuje kvalitet aproksimacije rešenja, ali i dimenziju algebarskog problema koji se dobija na osnovu diskretizacije parcijalnih diferencijalnih jednačina. Gustina mreže je zadovoljavajuća onda kada dalje povećanje broja elemenata ne utiče na konačno rešenje problema. Aproksimativno rešenje parcijalne diferencijalne jednačine traži se na svakom pojedinačnom elementu, a ukupno, kompletno rešenje dobija se povezivanjem individualnih rešenja na granicama između elemenata.

Nakon izvršene diskretizacije domena, potrebno je opredeliti se za funkcije koje sa zadovoljavajućim kvalitetom aproksimiraju rešenje na svakom pojedinačnom segmentu. Zbog jednostavnosti matematičkih operacija, kao aproksimativne funkcije se mahom koriste polinomske funkcije. Stepenn polinoma je generalno proizvoljan (sa izuzetkom polinoma nultog stepena, tj. konstantnih funkcija koje ne mogu zadovoljiti uslove kontinualnosti na granicama elementarnih segmenata), iako se najčešće upotrebljavaju polinomi prvog reda, tj. linearne funkcije (deo po deo linearne funkcije na svakom elementarnom segmentu).

Primenom metode konačnih elemenata mogu se rešavati različiti tipovi parcijalnih diferencijalnih jednačina, ali je sa stanovišta ovog rada posebno značajno rešavanje eliptičkih jednačina čiji je opšti oblik dat izrazom:

$$-\nabla \cdot (c \nabla u) + au = f, \quad (4.17)$$

gde su c , a i f u opštem slučaju kompleksni koeficijenti, a sa u je označeno nepoznato rešenje eliptičke jednačine. Praktično, metoda konačnih elemenata pretpostavlja aproksimaciju rešenja u u obliku linearne kombinacije bazisnih funkcija, koje su, kao što je već napomenuto najčešće deo-po-deo linearne funkcije, i ima za cilj određivanje koeficijenata u linearnoj kombinaciji tako da se ostvari najbolja moguća aproksimacija rešenja u , na posmatranom elementarnom segmentu, u smislu da je odstupanje od tačnog rešenja minimalno.

Eliptički oblik parcijalne diferencijalne jednačine je posebno značajan, jer u klasi svojstvenih problema ovom tipu jednačina pripada i stacionarna Schrödinger-ova jednačina (3.18) koja se koristi za određivanje zonske strukture kvantnih crta. Opšti oblik eliptičke jednačine u klasi svojstvenih problema dat je izrazom:

$$-\nabla(c\nabla u) + au = \lambda du, \quad (4.18)$$

gde su sa c , a i d označeni koeficijenti koji u opštem slučaju mogu imati kompleksne vrednosti, λ je svojstvena vrednost, a u nepoznati svojstveni vektor.

Jedna od značajnih prednosti primene metode konačnih elemenata je velika fleksibilnosti u pogledu mogućnosti rešavanja različitih tipova parcijalnih diferencijalnih jednačina na složenim 2D ili čak 3D domenima, koji se sastoje od geometrijskih oblika praktično proizvoljnih krivolinijskih formi. To je uslovalo da ova metoda bude implementirana u okviru većeg broja komercijalno dostupnih programskih paketa, od kojih su najpoznatiji primeri MatLab i Comsol. Ovakvi paketi, pored toga što obezbeđuju specijalizovane rutine za automatsku generaciju mreže, vrlo često poseduju i grafičke interfejse (*Graphical User Interface*, GUI) koji u ogromnoj meri pojednostavljaju korišćenje. Oba pomenuta paketa poseduju ugrađene rutine za rešavanje eliptičkih, paraboličkih i hiperboličkih parcijalnih diferencijalnih jednačina, kao i parcijalnih diferencijalnih jednačina sa svojstvenim vrednostima, i njihovih sistema proizvoljnog reda, što omogućava primenu u širokom rasponu naučnih i inženjerskih problema. Primera radi, Comsol ne samo da se može koristiti za modelovanje različitih pojava u akustici, bionauci, hemiji, optici, fotonici, kvantnoj mehanici, itd, već omogućava povezivanje i simultanu obradu diferencijalnih jednačina koje opisuju dve ili više različitih fizičkih pojava. Za razliku od Comsola koji je praktično specijalizovan za rešavanje parcijalnih diferencijalnih jednačina primenom

metode konačnih elemenata, MatLab ima nešto skromnije mogućnosti rešavanja parcijalnih diferencijalnih jednačina i dosta skromniji grafički korisnički interfejs. Međutim, ono što je sa stanovišta ovog rada najznačajnija razlika je nemogućnost MatLaba da prilikom rešavanja parcijalnih diferencijalnih jednačina implementira odgovarajuće periodične granične uslove koji su potrebni u slučaju kada se razmatra međusobna kvantno-mehanička sprega između susednih kvantnih crta u ansamblu.

Naime, pored graničnih uslova (3.15) i (3.16) koje je potrebno da zadovolje talasne funkcije na heterogranicama, kako bi bio ispunjen uslov kontinualnosti, neophodno je definisati granične uslove na ivicama domena. Ukoliko se razmatra izolovana kvantna crta za koju je zanemaren vlažeći sloj, odgovarajući granični uslov zahteva anulaciju talasne funkcije na ivicama domena (Dirichlet-ov granični uslov), za koje se pretpostavlja da se nalaze dovoljno daleko od heterogranica. Prisustvo vlažećeg sloja, koji za naelektrisanja praktično predstavlja potencijalnu jamu u y -pravcu i kontinuum u x -pravcu (Sl. 41), zahteva postavljanje prirodnih (Neumann-ovih) graničnih uslova na bočnim granicama domena. MatLab u okviru procedura koje rešavaju parcijalne diferencijalne jednačine metodom konačnih elemenata, ima predefinisane mogućnosti za postavljanje oba ova uslova. Dirichlet-ov granični uslovi predefinisani su izrazom:

$$hu = r, \quad (4.19)$$

dok je generalisani Neumann-ov uslov:

$$\mathbf{n}(c\nabla u) + qu = g \quad (4.20)$$

gde je $\mathbf{n}$ ort normale usmeren od spoljašnjeg graničnog segmenta ka oblasti sa oznakom 0, g , q , h i r su kompleksne funkcije definisane na spoljašnjim graničnim segmentima, u je nepoznato rešenje parcijalne diferencijalne jednačine, a sa c je označen koeficijent koji figuriše uz gradijent promenljive u u opštim oblicima parcijalnih diferencijalnih jednačina datih izrazima (4.17) i (4.18). Konačno, u pogledu graničnih uslova koje je potrebno da zadovolje talasne funkcije na heterogranicama, pažljivim razmatranjem rezultata modelovanja kao i algoritama implementiranih u procedurama koje se koriste za rešavanje parcijalnih diferencijalnih jednačina, utvrđeno je da su granični uslovi na heterogranicama (3.15) i (3.16) automatski implementirani kroz metodu konačnih elemenata. Međutim, za razliku od MatLab-a, Comsol pored toga što ima mogućnost

implementacije Dirichlet-ovih i Neumann-ovih graničnih uslova, omogućava i jednostavno postavljanje periodičnih graničnih uslova (3.38) koji povezuju talasne funkcije na spoljašnjim graničnim segmentima domena.

Sa druge strane, biblioteka ugrađenih funkcija koju koristi Comsol je dosta skromnija. Međutim, Comsol poseduje mogućnost sprezanja sa drugim programskim paketima, između ostalog i sa MatLab-om što u ogromnoj meri povećava funkcionalnost oba programska paketa. Ovo je posebno značajno ukoliko se ima u vidu da Comsol nema mogućnost programskog formiranja petlji koje na jednostavan način omogućavaju ponovno izvršavanje programa u cilju parametarske analize. Međutim, eksportovanjem Comsol fajla koji je zadužen za rešavanje parcijalne diferencijalne jednačine i njegovim ugrađivanjem u MatLab-ov programski kod, željena funkcionalnost se može jednostavno ostvariti.

Princip rešavanja parcijalnih diferencijalnih jednačina od interesa programskom implementacijom metode konačnih elemenata u MatLab-u detaljno je predstavljen u referenci [108]. Sa druge strane, napredan grafički interfejs u Comsol-u praktično omogućava realizaciju svih neophodnih koraka korišćenjem jednostavnih grafičkih alatki i podešavanjem odgovarajućih koeficijenata u predefinisanim parcijalnim diferencijalnim jednačinama tako da odgovaraju konkretnom problemu. Primera radi, upoređivanjem jednačine (3.18) sa opštim oblikom parcijalne diferencijalne jednačine (4.18) mogu se odrediti koeficijenti c , a i d :

$$c = \frac{1}{m_e^*(x, y)}, \quad (4.21)$$

$$a = \frac{k_z^2}{m_e^*(x, y)} + \frac{2}{\hbar^2} E_c(x, y), \quad (4.22)$$

$$d = \frac{2}{\hbar^2}. \quad (4.23)$$

Kako se materijalni parametri razlikuju za različite oblasti u okviru domena rešavanja, Schrödinger-ovu jednačinu (3.18) je potrebno rešiti posebno za svaku podoblast, što podrazumeva i određivanje koeficijenata definisanih relacijama (4.21)-(4.23) za svaku podoblast pojedinačno.

Konačno, na osnovu prethodnog izlaganja može se zaključiti da, uprkos većoj brzini koju obezbeđuje KT-FDM metoda, metoda konačnih elemenata ima veću fleksibilnost i zahvaljujući komercijalno dostupnim programskim paketima njena implementacija je jednostavnija, što predstavlja osnovni razlog zbog kog je dominantno korišćena i u implementaciji preostalih koraka u okviru osnovnih algoritamskih blokova sa Sl. 43.

4.3 Numerička implementacija samosaglasnog postupka

Samosaglasni postupak prikazan blok dijagramom na Sl. 42, zahteva iterativno rešavanje Schrödinger-ove jednačine i Poisson-ove jednačine (3.26), koja predstavlja nelinearnu parcijalnu diferencijalnu jednačinu, eliptičkog tipa:

$$-\nabla \cdot [c(u)\nabla u] + a(u)u = f(u), \quad (4.24)$$

Slično kao za eliptičku jednačinu u klasi svojstvenih problema (4.18), sa c , a i f su označeni kompleksni koeficijenti, a u je nepoznati elektrostatički potencijal. Datu jednačinu potrebno je rešiti za svaku podoblast domena izračunavanja. Međutim, za razliku od jednačine (4.18) koeficijenti u Poisson-ovoj jednačini zavise od vrednosti nepoznatog elektrostatičkog potencijala u , koji ujedno predstavlja i rešenje jednačine, pa je jednačina (4.24) zapravo nelinearna. U okviru programskih paketa MatLab i Comsol postoji ugrađena procedura za rešavanje ovakvih nelinearnih jednačina, pa je zahvaljujući tome, moguće rešiti kompletnu nelinearnu Poisson-ovu jednačinu, čime se značajno smanjuje ukupan broj iterativnih koraka u samosaglasnoj proceduri. Poređenjem relacija (3.26) i (4.24) može se zaključiti da su u datoj podoblasti koeficijenti c i a konstante:

$$c = \varepsilon_0 \varepsilon_r, \quad (4.25)$$

$$a = 0, \quad (4.26)$$

gde je ε_r relativna dielektrična konstanta materijala date podoblasti, a ε_0 dielektrična permitivnost vakuma. Međutim, koeficijent f zavisi od koncentracije elektrona $n(x, y)$ (3.19) i koncentracije jonizovanih donorskih primesa $N_d^+(x, y)$ (3.25), što u opštem slučaju dovodi do izraza:

$$f = -q[n_{1D}(x, y) + n_{3D}(x, y) - N_d^+(x, y)]. \quad (4.27)$$

Prilikom određivanja koeficijenta f za različite podoblasti domena, zanemaruju se 3D stanja elektrona u kvantnim crtama, dok se 1D koncentracija vezanih elektrona uračunava i u oblasti kvantne crte, ali i u barijernoj oblasti koja je okružuje, zahvaljujući činjenici da se talasne funkcije vezanih stanja u izvesnoj meri “razlivaju” u okolini heterogranice u barijernoj oblasti.

Koncentracija vezanih elektrona $n_{1D}(x, y)$ određuje se primenom izraza (3.20) za poznatu raspodelu energija po talasnom vektoru $E(k_z)$ i poznate normalizovane talasne funkcije diskretnih stanja, određene rešavanjem Schrödinger-ove jednačine. Zapravo, Schrödinger-ova jednačina se u okviru svake iteracije samosaglasnog postupka rešava za nekoliko konkretnih vrednosti k_z (uključujući $k_z = 0$), a zavisnost $E(k_z)$ dobija se fitovanjem polinomskom funkcijom drugog stepena, jer je pretpostavljena parabolična zavisnost energije od talasnog vektora. Integral po svim vrednostima talasnog vektora, izračunava se numeričkom integracijom za unapred određenu vrednost Fermijevog nivoa.

Fermijev nivo E_F , u odnosu na nultu vrednost potencijala provodne zone na ivicama domena u barijernoj oblasti, određuje se iz jednačine elektroneutralnosti (3.21), na osnovu izraza za koncentracije elektrona (3.22) i (3.23), i jonizovanih donora (3.25). Dobijena jednačina je nelinearna, a Fermijev nivo figuriše unutar Fermijevog integrala (3.24). Rešavanje ove jednačine se može izvesti numerički uz korišćenje aproksimativnog izraza za Fermijev integral [86]:

$$F_{1/2}(\xi) = \frac{1}{\exp(-\xi) + C_{1/2}}, \quad (4.28)$$

gde je ξ parametar definisan izrazom:

$$\xi = \frac{E_F + qu}{k_B T}, \quad (4.29)$$

a koeficijent $C_{1/2}$:

$$C_{1/2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \{ \xi^4 + 33.6\xi \cdot [1 - 0.68 \exp(-0.17(\xi + 1)^2) + 50]^{3/8} \}. \quad (4.30)$$

U izrazu (4.29), sa k_B je označena Boltzmann-ova konstanta, dok je T temperatura.

U cilju definisanja koeficijenta f i rešavanja Poisson-ove jednačine potrebno je odrediti koncentraciju jonizovanih donorskih primesa N_d^+ primenom relacije (2.26) i 3D koncentraciju elektrona n_{3D} u barijernom materijalu primenom relacije (3.23), za određenu vrednost Fermijevog nivoa. Međutim, obe ove koncentracije zavise od elektrostatičkog potencijala strukture u , koji ujedno predstavlja i rešenje Poisson-ove jednačine. Problem se dodatno komplikuje jer elektrostatički potencijal u izrazu za 3D koncentraciju elektrona u barijernoj oblasti figuriše unutar Fermijevog integral. Ovaj problem se može prevazići ponovnom primenom aproksimativnog izraza za Fermijev integral (4.28)-(4.30). Konačno, kada se u jednačinu (4.24) uvrste vrednosti konstantnih koeficijenata a i c , kao i funkcionalna zavisnost koeficijenta f od rešenja u , dobija se konačan oblik nelinearne eliptičke parcijalne diferencijalne jednačine koji se može rešiti kombinacijom metode konačnih elemenata i Gauss-Newton-ovog iterativnog postupka, što je integrisano u okviru programskih paketa MatLab i Comsol.

Rešavanjem Poisson-ove jednačine (4.24) dobija se vrednost elektrostatičkog potencijala $u(x, y)$ u svakoj tački domena u i -toj iteraciji. Na osnovu izračunatog potencijala, formira se nova vrednost probnog potencijala (slika 3.3), i ulazi u sledeću ($i + 1$) iteraciju samosaglasnog postupka. Profil provodne zone $E_c(x, y)$ potreban za rešavanje Schrödinger-ove jednačine (3.18) u ovoj iteraciji samosaglasnog postupka određuje se na osnovu poznatog diskontinuiteta provodne zone na heterospoju ΔE_c i vrednosti probnog potencijala $\varphi_i(x, y)$:

$$E_c(x, y) = -q \cdot \varphi_i(x, y) - \Delta E_c. \quad (4.31)$$

U zavisnosti od toga koja je faza samosaglasne procedure u toku, vrednost probnog potencijala $\varphi_i(x, y)$ može imati vrednost nula ili vrednost određenu na osnovu potencijala iz prethodnih iteracija primenom relacije (4.2).

4.4 Određivanje spektra unutarzonske apsorpcije za ansambl kvantnih crta

Konačno, na osnovu samosaglasno određene zonske strukture, može se pristupiti izračunavanju spektra unutarzonske apsorpcije. U cilju određivanja spektra usrednjene apsorpcije za čitav ansambl, postupak određivanja zonske strukture i unutarzonske apsorpcije se sprovodi za svaku kombinaciju dimenzija kvantnih crta koja za datu raspodelu po dimenzijama, postoji u ansamblu.

Matrični elementi za prelaz sa inicijalnog (i) na finalno (j) stanje, određuju se u dipolnoj aproksimaciji posebno za X i Y polarizaciju svetlosti za koordinatni sistem definisan na Sl. 41. Integracija u relaciji (2.50) se svodi na sumiranje, jer nije poznata analitička zavisnost talasnih funkcija, već numerička zavisnost na svakom elementarnom segmentu mreže:

$$\Pi_{i,j}^x = -im\omega_{ij} \sum_t \eta_i(t) \cdot x(t) \cdot \eta_j(t) S_{\Delta} \quad (4.32)$$

$$\Pi_{i,j}^y = -im\omega_{ij} \sum_t \eta_i(t) \cdot y(t) \cdot \eta_j(t) S_{\Delta} \quad (4.33)$$

gde suma ide po svim elementarnim trouglovima t u okviru mreže, a sa S_{Δ} je označena površina datog elementarnog trougla. Koordinate centra mase svakog elementarnog segmenta mogu se odrediti na osnovu koordinata temena trouglova, tj. podataka koji se definišu izborom mreže za diskretizaciju domena. Prilikom izračunavanja matričnih elemenata, frekvencijska razlika između inicijalnog i finalnog stanja (ω_{ij}) se može aproksimirati sa ω čime se uzima u obzir širenje spektralnih linija usled neodređenosti energetske stanja [109].

Spektar unutarzonske apsorpcije za svaku kvantnu crtu u ansamblu dobija se izračunavanjem izraza (3.59) za svaku pojedinačnu energiju fotona $\hbar\omega$. Integral razlike Fermi-Dirac-ovih funkcija se određuje numeričkom integracijom, na osnovu poznate raspodele energija po talasnom vektoru, na sličan način kao kod određivanja 1D koncentracije elektrona u strukturi. Sumiranjem po svim kombinacijama (i, j) gde je $j > i$, uzimaju se u obzir doprinosi apsorpcije na svim prelazima u okviru provodne zone.

Usrednjeni spektar ansambla kvantnih crta izračunava se na osnovu izraza (3.61), koji se praktično svodi na sumiranje doprinosa apsorpcije svake pojedinačne crte u ansamblu, ponderisanog sa verovatnoćom da se crta sa datim dimenzijama nalazi u ansamblu. Stohastička distribucija dimenzija kvantnih crta u ansamblu se uobičajeno modeluje dvodimenzionalnom gausovskom raspodelom:

$$G(w, h) = \frac{1}{2\pi\sigma_w\sigma_h} \exp\left[-\frac{(w-w_0)^2}{2\sigma_w^2} - \frac{(h-h_0)^2}{2\sigma_h^2}\right], \quad (4.34)$$

gde su sa w_0 i h_0 označene srednje vrednosti raspodele, dok σ_w i σ_h , predstavljaju standardne devijacije u x - i y -pravcu, respektivno. Srednje vrednosti raspodele zapravo odgovaraju onim dimenzijama kvantnih crta koje su u najvećem broju (sa najvećom verovatnoćom) prisutne u ansamblu. Kako se unutarzonska apsorpcija primenom prethodno opisanih postupaka može izračunati za konačan broj kvantnih crta sa različitim veličinama, raspodelu po veličinama je potrebno izdeliti na particije konačne veličine, dimenzija δ_w i δ_h , u x - i y -pravcu, respektivno. Verovatnoća koja odgovara svakoj particiji izračunava se kao integral raspodele $G(w, h)$ u granicama dimenzija koje definišu posmatranu particiju, tj.:

$$\int_{w_-}^{w_+} \int_{h_-}^{h_+} G(w, h) dw dh, \quad (4.35)$$

gde je $w_{\pm} = w_j \pm \delta_w/2$ i $h_{\pm} = h_k \pm \delta_h/2$, dok su w_j i h_k , srednje dimenzije posmatrane particije. Ovako izračunata verovatnoća pridružuje se kvantnoj crti sa dimenzijama w_j i h_k , a sumiranjem doprinosa svih particija, odnosno odgovarajućih kvantnih crta, dobija se usrednjeni apsorpcioni spektar.

U cilju analize uticaja koji varijacija u dimenzijama kvantnih crta u okviru jednog ansambla ima na usrednjeni apsorpcioni spektar, veličina fluktuacija se izražava parametrom Δ koji se definiše kao odnos standardne devijacije i srednje vrednosti raspodele po dimenzijama u posmatranom pravcu.

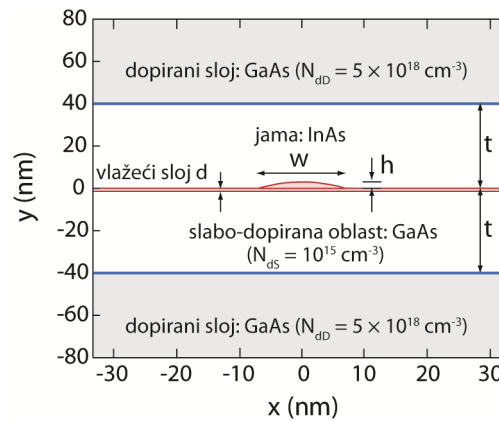
Poglavlje 5.

REZULTATI I DISKUSIJA

U ovom poglavlju prikazani su rezultati proračuna elektronske strukture i spektra unutarzonske apsorpcije za izolovane kvantne crte, kao i za ansamble kvantnih crta sa prisutnim fluktuacijama po dimenzijama. Analiza i diskusija rezultata sprovedene su sistematski, prateći polazne hipoteze ove disertacije. Prvi korak je određivanje elektronske strukture izolovanih kvantnih crta uzimajući u obzir uticaj prostornog naelektrisanja preko Hartree potencijala i ispitivanje u kojoj meri je ovakav pristup koji zahteva samosaglasno rešavanje Schrödinger-ove i Poisson-ove jednačine od značaja. Nakon toga izvršena je analiza uticaja kvantno-mehaničke sprege između susednih kvantnih crta, pod pretpostavkom da se ansambl sastoji od periodičnog niza identičnih nanostrukture. Na osnovu diskusije rezultata dobijenih za elektronsku strukturu, kako izolovanih, tako i spregnutih kvantnih crta, uvedene su pretpostavke i odgovarajuće aproksimacije koje omogućavaju efikasnu analizu unutarzonskog spektra apsorpcije kvantnih crta. Analiza apsorpcionog spektra sprovedena je za ansamble izolovanih kvantnih crta bez vlažećeg sloja, za dve međusobno ortogonalne polarizacije upadne svetlosti i u zavisnosti od izraženosti fluktuacija dimenzija struktura u ansamblu. Zatim je detaljno analiziran uticaj vlažećeg sloja, kao i izbor geometrijskog oblika kojim se aproksimira profil poprečnog preseka kvantne crte na apsorpcioni spektar ansambla, ponovo uzimajući u obzir fluktuacije u dimenzijama. Konačno, analiziran je uticaj debljine slabo-dopiranih bafer slojeva na intenzitet apsorpcije i mogućnost optimizacije ovog parametra sa stanovišta maksimizacije apsorpcije.

5.1 Elektronska struktura izolovane kvantne crte

Osnovna struktura na kojoj će biti analiziran uticaj Hartree potencijala koji se javlja usled prisustva slobodnih naelektrisanja neophodnih za odvijanje optičkih prelaza, kao i uticaj prisustva vlažećeg sloja na elektronsku strukturu, je modulaciono dopirana InAs kvantna crta sa sočivastim profilom poprečnog preseka. Na Sl. 56 prikazan je profil izolovane kvantne crte i domen na kom se sprovodi samosaglasno određivanje elektronske strukture. Dimenzije strukture su širina osnove $w = 14$ nm i maksimalna visina $h = 3$ nm (merena od gornje površine vlažećeg sloja). Elektroni potrebni za ostvarivanje optičkih prelaza se obezbeđuju iz dva n-dopirana sloja čija koncentracija donorskih primesa iznosi $N_{dDL} = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Ovi slojevi su od kvantne crte odvojeni slabo-dopiranim bafer slojevima ($N_{dSL} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$), koji svojom debljinom i malom koncentracijom primesa omogućavaju kontrolu koncentracije naelektrisanja unutar kvantne crte. U okviru ovog razmatranja, debljine bafer slojeva, merene od osnove kvantne crte do dopiranih slojeva, su jednake i fiksirane na $t = 40$ nm. Analiza će biti sprovedena za slučaj kada se prisustvo vlažećeg sloja zanemaruje i za slučaj kada se u obzir uzima vlažeći sloj debljine $d = 0.5$ nm.



Sl. 56. Profil kvantne crte i domen samosaglasnog rešavanja sa obeleženim karakterističnim dimenzijama.

Oblik kvantnih crta aproksimira se izduženom geometrijom oblika odsečka cilindra koja definiše poprečni presek sočivastog oblika. Kao posledica izduženosti oblika, kvantizacija u longitudinalnom pravcu (z -pravac), slično kao kod kvantnih žica [53], dovodi do kvazi-kontinualne strukture podzona čija energija se može opisati paraboličnom zavisnošću od odgovarajućeg talasnog vektora (k_z). Na osnovu toga, u

razmatranju koje sledi, kvantne crte se tretiraju kao kvantne žice jednake dužine za koje je konfiniranje naelektrisanja značajno praktično samo u transversalnoj ravni poprečnog preseka.

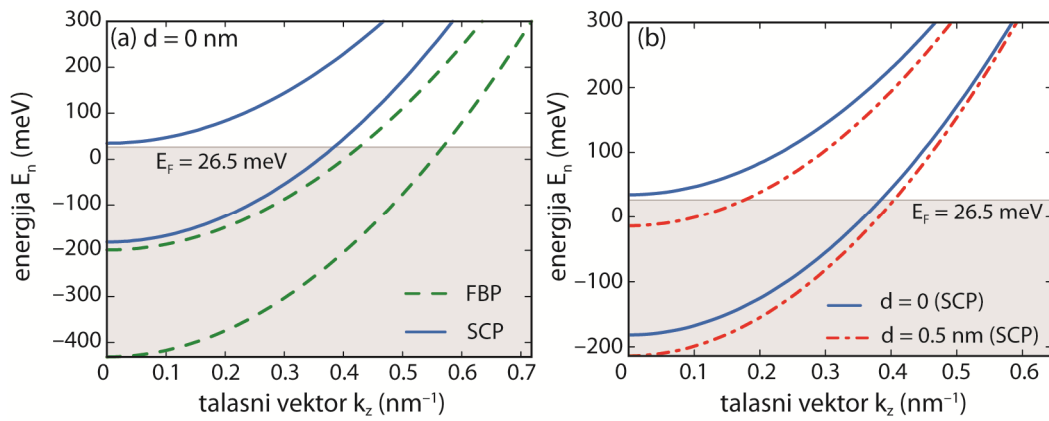
Izbor barijernog materijala koji okružuje kvantnu crtu definiše vrednost diskontinuiteta zona i značajno utiče na elektronske, a samim tim i na optičke osobine ovih nanostrukture. Narastanje InAs kvantnih crta na InAlGaAs bafer sloju pogodno je za primene u telekomunikacijama, jer međuzonski prelazi u ovakvim kvantnim crtama obezbeđuju emisiju svetlosti na 1.55 μm . Sa druge strane, ova kombinacija materijala je nedavno primenjena i za realizaciju aktivne oblasti kvantno-kaskadnih lasera [48], što InAs/InAlGaAs čini interesantnim i sa stanovišta proučavanja spektra unutarzonske apsorpcije. Međutim, relativno mali diskontinuitet provodne zone u velikoj meri ograničava prostor za detaljno proučavanje raznih interesantnih efekata koji se mogu javiti prilikom unutarzonskih prelaza. Iz tog razloga, fokus narednog razmatranja biće InAs/GaAs materijalni sistem koji obezbeđuje veliku dubinu potencijalne jame i lakšu detekciju i analizu efekata koji se javljaju u elektronskoj strukturi. Pored toga, u okviru pojedinih segmenata istraživanja biće izvršeno poređenje rezultata koji se dobijaju za InAs/GaAs i InAs/InAlGaAs materijalni sistem. U Tabeli II navedeni su materijalni parametri, kao i ofset provodne zone, određeni uz pretpostavku kompresivno napregnutih kvantnih crta za oba materijalna sistema od interesa. Svi parametri određeni su primenom procedure predstavljene u prethodnom poglavlju, za sobnu temperaturu ($T = 300 \text{ K}$).

Tabela II Materijalni parametri za izračunavanje elektronske strukture

Parametar/materijal	InAs	GaAs	$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.23}\text{Al}_{0.24}\text{As}$
Efektivna masa m^* (m_0)	0.0221	0.0623	0.0547
Diskontinuitet zone ΔE_c (meV)		858.7	396.9

Elektronska struktura kvantne crte se modeluje jednozonskom Schrödinger-ovom jednačinom u aproksimaciji efektivne mase. Na Sl. 57(a) prikazana je zavisnost energija vezanih stanja za izolovanu kvantnu crtu bez vlažećeg sloja od longitudinalnog talasnog vektora k_z u prvoj iteraciji samosaglasnog postupka (isprekidane linije), za koju je konfinirajući potencijal određen isključivo diskontinuitetom zona. U ovom iterativnom

koraku donorska stanja u barijeri još uvek nisu jonizovana i elektrostatički potencijal je određen samo na osnovu 1D koncentracije elektrona u oblasti jame, pa se energije dobijene u ovoj iteraciji označavaju kao energije u aproksimaciji ravnih zona (*Flat-Band Parabolic*, FBP). Kako je u pitanju izolovana crta bez vlažećeg sloja, koja je u potpunosti okružena barijernim materijalom, na svim spoljašnjim ivicama domena usvojeni su Dirichlet-ovi granični uslovi koji forsiraju da talasna funkcija na ivicama domena bude jednaka nuli. Vrednost Fermijevog nivoa određuje se na osnovu uslova lokalne elektroneutralnosti i u odnosu na referentnu vrednost energije koja odgovara dnu provodne zone u dopiranoj barijernoj oblasti na ivicama domena nalazi se na $E_F = 26.5$ meV za InAs/GaAs materijalni sistem.



Sl. 57. Zavisnost energija vezanih stanja od talasnog vektora k_z za (a) prvu iteraciju (isprekidane linije) i poslednju iteraciju (pune linije) samosaglasnog postupka za izolovanu kvantnu crtu bez vlažećeg sloja. (b) Uticaj vlažećeg sloja na zavisnost samosaglasno određenih energija od talasnog vektora k_z .

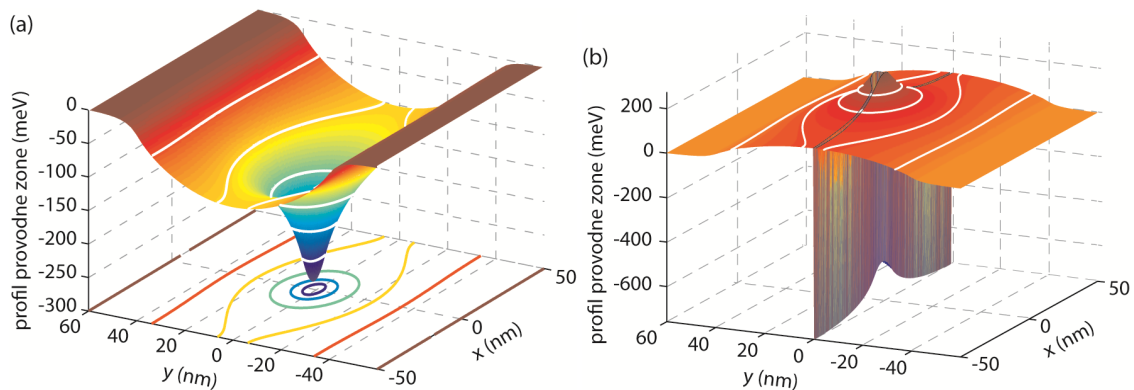
U opštem slučaju, u narednim iteracijama elektrostatički potencijal se određuje uz zanemarivanje kvazi-vezanih stanja (Sl. 44), što u velikoj meri povećava brzinu samosaglasnog postupka. Naime, ova stanja se nalaze dovoljno daleko od Fermijevog nivoa, pa je njihov uticaj na 1D koncentraciju elektrona značajno manji od stanja koja se nalaze pri dnu potencijalne jame. Već nakon prvih nekoliko iteracija, donorska naelektrisanja su jonizovana, a oblast u okolini jame osiromašena, pa se u narednim iteracijama vrednost elektrostatičkog potencijala relativno malo menja. Kada vrednost potencijala u par uzastopnih iteracija prestane značajno da se menja, za određivanje 1D koncentracije elektrona uzimaju se u obzir sva diskretna stanja, uključujući i kvazi-vezana. Samosaglasni postupak se završava kada se u okviru iste iteracije vrednost

probnog potencijala razlikuje od potencijala dobijenog rešavanjem Poisson-ove jednačine za manje od 1 meV.

Na Sl. 57(a) punim linijama označene su zavisnosti energija vezanih stanja od talasnog vektora k_z nakon završenog samosaglasnog postupka (*Self-Consistent Parabolic*, SCP). Pomeraj energija vezanih stanja javlja se kao posledica prisustva prostornog naelektrisanja. Samosaglasni elektrostatički potencijal podiže energije vezanih stanja, pa drugo vezano stanje koje se u aproksimaciji ravnih zona nalazilo duboko u jami, na oko 200 meV ispod dna ivice zone, u SCP aproksimaciji postaje kvazi-vezano stanje koje se nalazi neposredno iznad Fermijevog nivoa. Iako neparaboličnost zavisnosti $E(k_z)$ utiče na pozicije energetskih nivoa, kao i na njihovu međusobnu energetsku razliku, u narednom razmatranju neće biti uzimana u obzir jer je uticaj Hartree potencijala mnogo više izražen [87].

Naredna analiza odnosi se na uticaj vlažećeg sloja koji se, kao posledica Stranski-Krastanov mehanizma samo-organizovanog narastanja, neizbežno formira u ansamblima kvantnih crta. Vlažeći sloj smanjuje lateralno konfiniranje u kvantnim crtama. Sa jedne strane, to dovodi do efektivnog povećanja širine jame, pa se energije vezanih stanja smanjuju, dok sa druge strane dolazi do smanjenja efektivne dubine jame, što za neke dimenzije kvantnih crta može imati za posledicu da neka, ili čak sva, pobuđena stanja, koja bi se javila u crtama bez vlažećeg sloja, više ne postoje. U prvoj iteraciji samosaglasnog postupka kvantna crta sa vlažećim slojem debljine $d = 0.5$ nm omogućava formiranje tri diskretna stanja, što potvrđuje da vlažeći sloj kroz smanjenje lateralnog konfiniranja dovodi do smanjenja energija vezanih stanja i time omogućava formiranje većeg broja diskretnih stanja. Međutim, kao posledica krivljenja zone usled prisustva prostornog naelektrisanja, nakon završetka samosaglasnog postupka unutar jame postoje opet samo dva diskretna stanja, slično kao za kvantnu crtu bez vlažećeg sloja, Sl. 57(b). U poređenju sa crtom bez vlažećeg sloja, došlo je do smanjenja energije osnovnog stanja za oko 35 meV, dok se energija prvog pobuđenog stanja smanjila za nešto manje od 50 meV. U konkretnom slučaju broj vezanih stanja ostaje isti kao za kvantnu crtu bez vlažećeg sloja, ali je raspored energetskih nivoa u odnosu na Fermijev nivo drugačiji, što ima za posledicu promenu u naseljenostima ovih nivoa i shodno tome, promenu koeficijenta apsorpcije.

Na Sl. 58(a) prikazana je prostorna zavisnost samosaglasnog elektrostatičkog potencijala u paraboličnoj aproksimaciji efektivne mase za kvantnu crtu sa vlažećim slojem. Vlažeći sloj zapravo predstavlja neku vrstu kvantne jame koja omogućava slobodno kretanje nosilaca i u x - i u z -pravcu. U tom smislu, prirodno je postavljanje Neumann-ovih graničnih uslova na bočne ivice domena koji obezbeđuju da je izvod talasne funkcije jednak nuli. Slično tome, za rešavanje Poisson-ove jednačine, usvaja se uslov da je izvod potencijala na bočnim ivicama domena jednak nuli. Ovakvi, izmenjeni granični uslovi za kvantnu crtu sa vlažećim slojem, dovode do značajne promene u profilu elektrostatičkog potencijala u x -pravcu duž vlažećeg sloja, dok je raspodela u y -pravcu vrlo slična onoj koja se dobija za kvantnu crtu bez vlažećeg sloja.



Sl. 58. Samosaglasni (a) elektrostatički potencijal i (b) profil provodne zone za kvantnu crtu sa vlažećim slojem.

Elektrostatički potencijal moduliše profil provodne zone [Sl. 58(b)], koji je u odsustvu potencijala ravan i određen isključivo diskontinuitetom zone na heterospoju (PFB). Krivljenje profila provodne zone je anizotropno, što je u skladu sa asimetričnim profilom poprečnog preseka strukture [Sl. 58(b)].

Anizotropna deformacija profila provodne zone utiče na raspodelu naelektrisanja i strukturu energetske stanja. U prisustvu elektrostatičkog potencijala konfiniranje elektrona nije izotropno, što se direktno odražava na profil talasnih funkcija vezanih stanja. Lokalizacija talasnih funkcija je oslabljena u x -pravcu u okolini krajeva jame, gde je akumulacija elektrona najveća. Sa druge strane, y -pravac je okarakterisan izraženijim konfiniranjem nosilaca naelektrisanja, što je posledica krivljenja profila provodne zone [Sl. 58(b)]. Krivljenje profila provodne zone omogućava formiranje diskretnih energetske stanja, takozvanih rezonancija, na energijama koje se nalaze

iznad dna provodne zone u odnosu na barijernu oblast dovoljno daleko od jame (Sl. 44). Anizotropija talasnih funkcija ovih stanja je još izraženija nego za stanja koja se javljaju dovoljno duboko u jami. Kako zakrivljeni deo barijerne oblasti u okolini jame ima konačnu debljinu [Sl. 58(b)], može doći do značajnog prodiranja talasnih funkcija u barijernu oblast, tj. do "razlivanja" talasnih funkcija i smanjene lokalizacije. U konkretnom slučaju, kvazi-konfinirana stanja su i dalje relativno duboko u jami, pa se ne može uočiti značajna promena u profilu talasne funkcije, mada bi za neke druge dimenzije kvantnih crta i potencijalno veći broj diskretnih stanja ovaj efekat bio više uočljiv. Pored toga, prisustvo vlažećeg sloja dovodi do smanjenja lateralnog konfiniranja koje se ogleda u dodatnom razlivanju talasnih funkcija.

5.2 Elektronska struktura periodičnog niza kvantnih crta

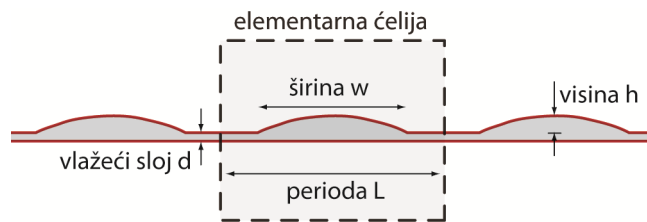
Elektronska struktura kvantnih tačaka i crta se uobičajeno detaljno proučava za slučaj izolovanih struktura. Međutim, samo-organizovano formiranje dovodi do formiranja ansambla u kom su strukture na relativno malim rastojanjima, što dovodi do kvantno-mehaničkog sprežanja, pa elektronska struktura, a samim tim i optičke osobine, mogu značajno odstupati od onih koje se dobijaju za izolovane tačke ili crte [106].

Samo-organizovano narastanje ima za posledicu stohastičku raspodelu po dimenzijama, što praktično znači da se posmatrani niz kvantnih crta između kojih dolazi do kvantno-mehaničke sprege može sastojati od struktura sa različitim poprečnim presecima, u smislu širine, visine i oblika, pa čak i rastojanja između susednih crta. Međutim, ovaj model se bazira na pretpostavci da se ansambl kvantnih crta sastoji od jednako dugačkih struktura istog poprečnog preseka raspoređenih tako da obrazuju periodičan niz. Iako ovakav model ne može obezbediti precizan uvid u zonsku strukturu niza kvantnih crta koji se sastoji od struktura sa randomizovanim dimenzijama i oblikom profila poprečnog preseka, on može pomoći da se razume i razotkrije uticaj različitih karakterističnih geometrijskih parametara na zonsku strukturu. U razmatranju koje sledi biće prikazan uticaj visine i širine kvantnih crta, kao i periode formiranog niza na zonsku strukturu provodne zone. Analiza će takođe obuhvatiti uticaj promene debljine vlažećeg sloja.

Na osnovu prethodnog razmatranja evidentno je da elektrostatički potencijal koji se javlja kao posledica slobodnih naelektrisanja dovodi do povećanja energija vezanih

stanja u kvantnim crtama, bez obzira na to da li se vlažeći sloj zanemaruje ili ne. Poznavanje ovog trenda omogućava da se analiza uticaja međusobne kvantno-mehaničke sprege između identičnih kvantnih crta sprovede u aproksimaciji ravnih zona (za prvu iteraciju samosaglasnog postupka), a da se izvedeni zaključci generalizuju na proračun koji uzima u obzir Hartree potencijal, što predstavlja značajnu prednost sa stanovišta vremena potrebnog za izračunavanje.

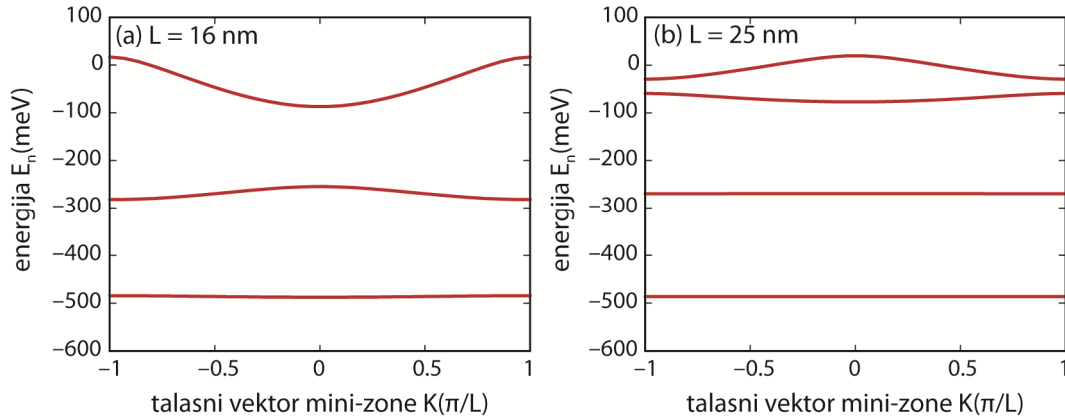
Posmatra se periodični niz identičnih kvantnih crta visine $h = 3$ nm i širine $w = 14$ nm sa vlažećim slojem debljine $d = 0.5$ nm, Sl. 59. Sa L je označena perioda niza, odnosno dimenzija jedne elementarne ćelije u pravcu u kom je prisutna periodičnost. Proračun elektronske strukture biće izveden u aproksimaciji ravnih zona (prva iteracija samosaglasnog postupka), za koju donorska barijerna stanja još uvek nisu jonizovana, pa prilikom formiranja geometrijskog modela nije potrebno uzimati u obzir prisustvo dopiranih slojeva.



Sl. 59. Periodični niz kvantnih crta sa definisanom elementarnom ćelijom dužine L

Slično kao u slučaju superrešetke, periodičnost sporo-promenljivog potencijala u x -pravcu dovodi do pojave mini-zona, unutar kojih stanja praktično pripadaju kontinualnom spektru. Intenzitet kvantno-mehaničke sprege je, za fiksnu debljinu vlažećeg sloja, određen rastojanjem na kom se nalaze susedne kvantne crte, pa će razmatranje biti sprovedeno za dve vrednosti periode, $L = 16$ nm i $L = 25$ nm, koje odgovaraju jače i slabije izraženoj kvantno-mehaničkoj sprezi, respektivno. Na Sl. 60 prikazana je zavisnost energija vezanih stanja za ekstremum podzona definisan longitudinalnim talasnim vektorom $k_z = 0$, u funkciji od talasnog vektora K periodične strukture u x -pravcu (Bloch-ov talasni broj, tj. talasni vektor mini-zone), određena rešavanjem jednačine (3.37).

Za manju vrednost periode ($L = 16$ nm), koja odgovara intenzivnoj kvantno-mehaničkoj sprezi između susednih kvantnih crta, formiraju se tri mini-zone. Energija prve mini-zone ne zavisi od talasnog vektora periodične strukture K , pa je zona veoma

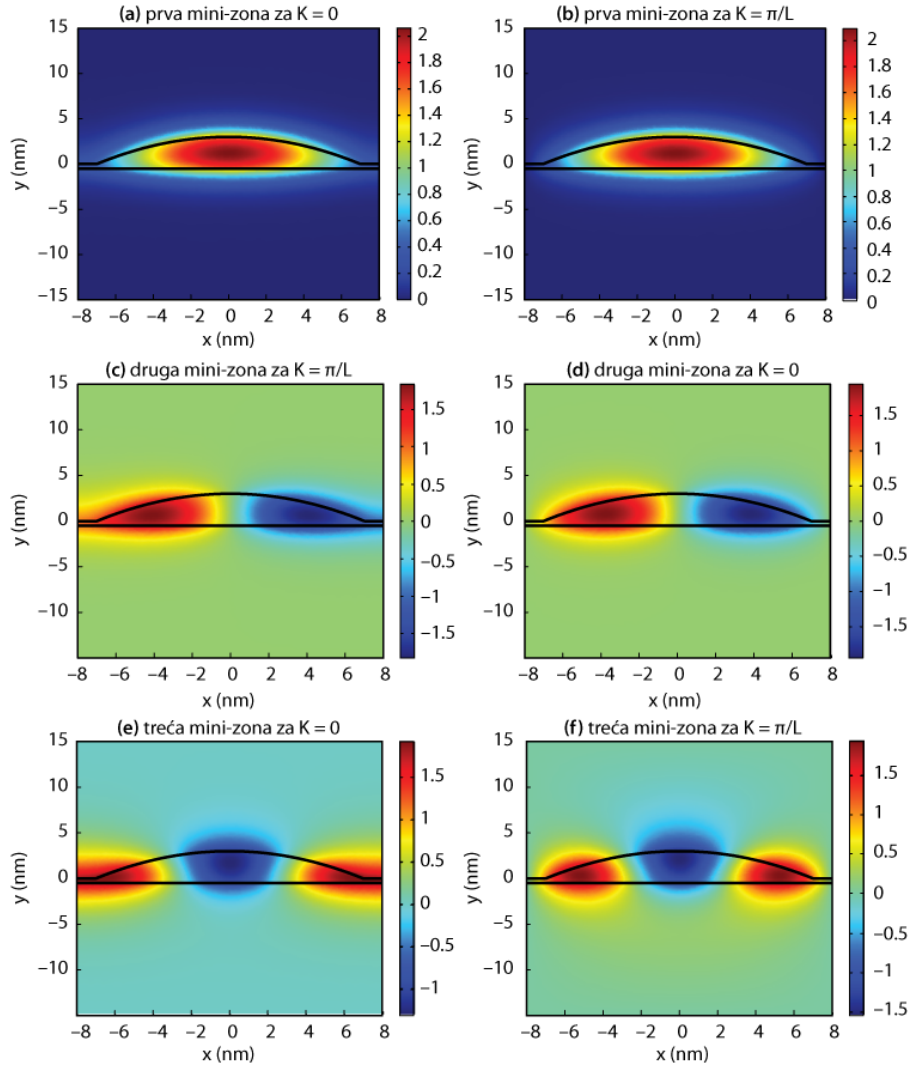


Sl. 60. Redukovan zonski dijagram energija vezanih stanja u funkciji od talasnog vektora periodične strukture K za (a) $L = 16$ nm i (b) $L = 25$ nm

uska i gotovo svedena na diskretan energetska nivo. Zavisnost energija od talasnog vektora K druge i treće mini-zone, izraženija je od odgovarajuće zavisnosti prve mini-zone. Za veću vrednost periode, $L = 25$ nm [Sl. 60(b)], redukovan zonski dijagram pokazuje da su mini-zone praktično nestale za osnovno i prvo pobuđeno stanje. Sa druge strane, energetska opseg koji je zauzimala treća mini-zona za $L = 16$ nm, zbog slabije kvantno-mehaničke sprege, cepa se na dve relativno bliske mini-zone. Ove dve mini-zone zajedno sa zabranjenom zonom koja ih razdvaja praktično zauzimaju isti energetska opseg kao treća mini-zona za manju vrednost periode L . Međutim, kako u konkretnom slučaju periodičnost struktura postoji samo u x -pravcu, dok u y -pravcu ne postoji sprezanje između kvantnih crta, formiranje mini-zona je ograničeno na opseg energija ispod dna provodne zone u barijernom materijalu, dok su za veće energije stanja kontinualna. Ostvarivanje potpune periodičnosti (u oba pravca) zahteva narastanje više slojeva kvantnih crta jednih nad drugim, što bi omogućilo da se mini-zone formiraju i u energetska opsegu koji pripada jami i za energije iznad vrha jame.

Stanja na granicama mini-zona i odgovarajuće talasne funkcije određene su ekstremnim vrednostima faznog faktora $\exp(i \cdot K \cdot L)$, $+1$ i -1 , koje odgovaraju uslovima $K \cdot L = 0$ i $K \cdot L = \pi$, respektivno. Na Sl. 61 prikazane su talasne funkcije za stanja čije energije odgovaraju granicama mini-zona sa Sl. 60(a) i to tako da leva slika odgovara dnu, a desna vrhu odgovarajuće podzone. Vrlo mala širina prve mini-zone uslovljava da su talasne funkcije koje odgovaraju stanjima na dnu [Sl. 61(a)] i vrhu [Sl. 61(b)] ove podzone skoro identične i veoma dobro lokalizovane u centralnom delu jamske oblasti. Ipak, pažljivo posmatranje otkriva da je talasna funkcija za stanje čija energija odgovara

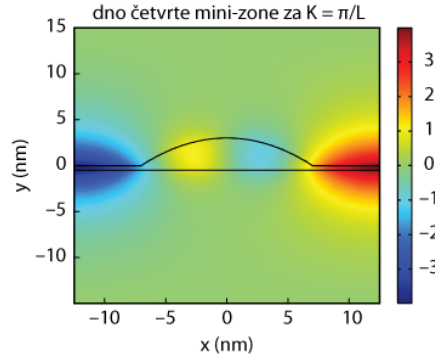
dnu prve mini-zone nešto više “razlivena” prema granicama elementarne ćelije. Ovaj fenomen je mnogo više izražen za talasne funkcije koje odgovaraju dnu druge i treće mini-zone, za koje talasne funkcije značajno prodiru u oblast vlažećeg sloja.



Sl. 61. Talasne funkcije za stanja na granicama (a)-(b) prve, (c)-(d) druge i (e)-(f) treće mini-zone za $L = 16$ nm. Slike sa leve strane odgovaraju dnu, a sa desne strane vrhu posmatrane mini-zone.

Za veću vrednost periode ($L = 25$ nm), energije prva dva stanja su nezavisne od talasnog vektora K [Sl. 60(b)]. Talasne funkcije koje odgovaraju stanjima na granicama prve dve mini-zone vrlo su slične onima sa Sl. 61(a)-(d), sa tom razlikom da su zbog veće širine periode veoma dobro lokalizovane unutar jamske oblasti kvantnih crta. Interakcija između susednih crta za ova dva stanja ne postoji, ili je zanemarljivo mala. Talasna funkcija koja odgovara dnu treće mini-zone značajno prodire u oblast vlažećeg

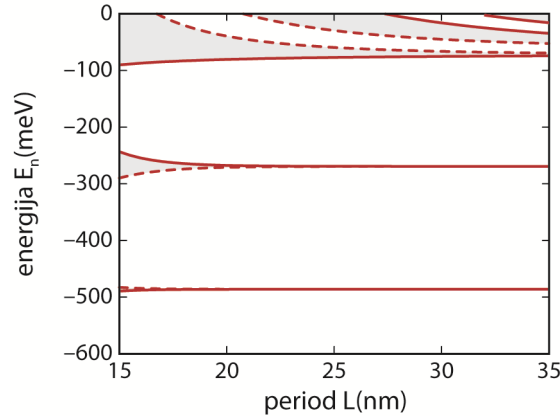
sloja, dok je talasna funkcija koja odgovara dnu četvrte mini-zone praktično u potpunosti lokalizovana u vlažećem sloju (Sl. 62). Vrh četvrte mini-zone javlja se za energije koje su iznad vrha jame, pa nije uključen u ovo razmatranje.



Sl. 62. Talasna funkcija za stanje na dnu četvrte mini-zone za $L = 25$ nm.

U okviru analize uticaja geometrijskih parametara na mini-zonsku strukturu provodne zone periodičnog niza kvantnih crta posmatran je uticaj širine periode niza L , širine w i visine kvantne crte h , kao i debljine vlažećeg sloja d . Uticaj svakog od ovih geometrijskih parametara je posmatran izolovano, tako što su preostali parametri fiksirani na uobičajene srednje vrednosti.

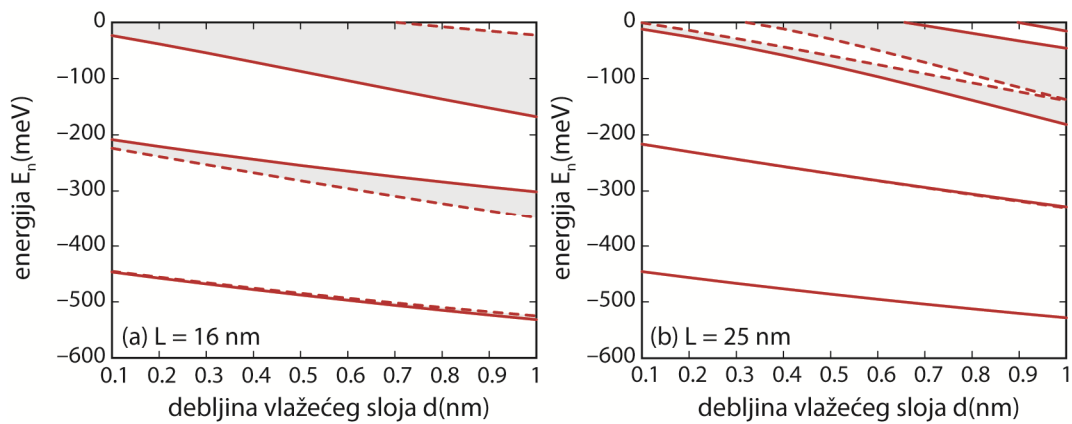
Na Sl. 63 prikazana je mini-zonska struktura za niz InAs/GaAs kvantnih crta sa visinom $h = 3$ nm i širinom crte $w = 14$ nm u zavisnosti od širine elementarne ćelije, tj. periode L . Debljina vlažećeg sloja je fiksirana i iznosi $d = 0.5$ nm. Sa povećanjem periode L mini-zone se sužavaju, tako da za $L > 22$ nm prve dve mini-zone praktično konvergiraju u diskretno vezano stanje. Sprezanje sa susednim kvantnim crtama omogućava i formiranje viših mini-zona koje postaju vezane za dovoljno veliko L [106]. Drugim rečima, ove više mini-zone predstavljaju deo kontinuuma za pozitivne energije, tj. za manje vrednosti periode L . Međutim, za veće vrednosti L , usled smanjenja kvantno-mehaničke sprege, mini-zone postaju vezane, a njihova širina se smanjuje sa tendencijom da dovede do formiranja diskretnog pobuđenog stanja. Za prve tri mini-zone sa Sl. 63 donja granica energetski raste sa porastom periode, a gornja granica energetski opada, tako da vrednosti energija za koje ove mini-zone konvergiraju u diskretne energetske nivoe praktično sve vreme pripadaju datoj mini-zoni. Sa druge strane, za više mini-zone obe granice mini-zone energetski opadaju sa povećanjem periode. Konačno, za slabo sprezanje između crta, tj. za velike vrednosti periode L , što



Sl. 63. Mini-zonska struktura periodičnog niza InAs/GaAs kvantnih crta u zavisnosti od širine periode L . Punim linijama označene su granice mini-zona dobijene za granični uslov $K \cdot L = 0$, a isprekidanim linijama za uslov $K \cdot L = \pi$.

odgovara gotovo izolovanim crtama, zonska struktura se sastoji od dva vezana stanja i nekoliko relativno bliskih mini-zona u blizini vrha jame.

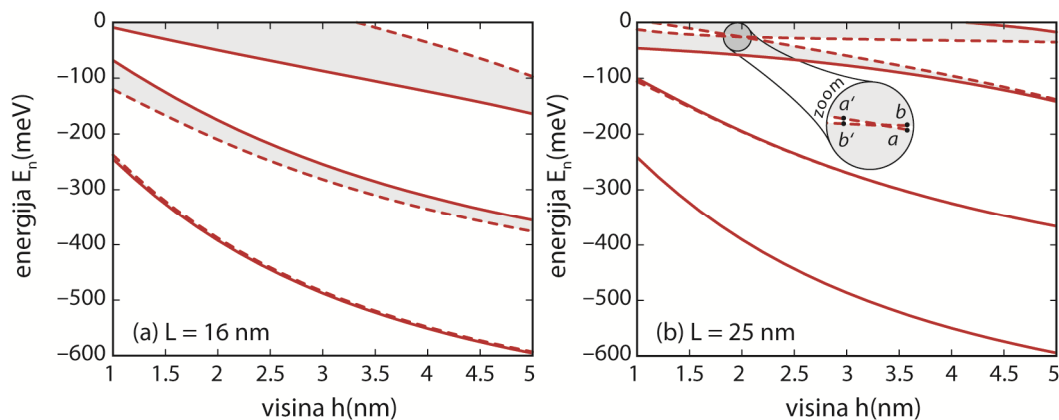
Na intenzitet kvantno-mehaničke sprege, pored periode L , značajno utiče i debljina vlažećeg sloja d , koja predstavlja parametar ansambla kvantnih crta [106]. Uticaj debljine vlažećeg sloja na mini-zonsku strukturu ispitivan je za dve vrednosti periode L i prikazan na Sl. 64. Povećanje debljine vlažećeg sloja povećava sprezanje između crta i dovodi do povećanja širine mini-zona koje je najviše izraženo za mini-zone u okolini vrha jame. Istovremeno, energije mini-zona opadaju, što je u konzistenciji sa rezultatima dobijenim za slučaj izolovane kvantne crte [Sl. 57(b)]. Za jaču spregu koja se postiže za periodu $L = 16$ nm, širina mini-zona se mnogo više menja



Sl. 64. Mini-zonska struktura periodičnog niza InAs/GaAs kvantnih crta u zavisnosti od debljine vlažećeg sloja d .

sa porastom debljine vlažećeg sloja nego za slučaj $L = 25$ nm. Pažljivim posmatranjem treće mini-zone na Sl. 64(a) može se uočiti da sa povećanjem periode na $L = 25$ nm, zapravo dolazi do njenog cepanja na dve mini-zone [Sl. 64(b)], koje se za velike vrednosti debljine vlažećeg sloja ($d = 1$ nm) skoro spajaju.

Na Sl. 65 prikazana je mini-zonska struktura za InAs/GaAs niz kvantnih crta širine $w = 14$ nm u zavisnosti od visine kvantne crte, za fiksnu debljinu vlažećeg sloja $d = 0.5$ nm i dve vrednosti periode, $L = 16$ nm i $L = 25$ nm. Kod gusto pakovanih kvantnih crta, za koje je perioda relativno mala [Sl. 65(a)], varijacija visine slabo utiče na širinu osnovne mini-zone, posebno za veće vrednosti visine h . Ovaj rezultat nije iznenađujući, jer sprezanje između kvantnih crta koje određuje širinu mini-zone više zavisi od rastojanja između kvantnih crta u x -pravcu koje je dominantno određeno periodom L i širinom w , nego dimenzijom struktura u y -pravcu. Sa druge strane, y -pravac je pravac izraženijeg konfiniranja, pa varijacija visine dovodi do uočljivije promene energija mini-zona, koje se sa povećanjem visine smanjuju. Slično kao za elektron u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami, za koji je energija inverzno proporcionalna sa kvadratom širine jame, energija mini-zona u kvantnim crtama se u zavisnosti od visine menja intenzivnije za manje visine jama nego za veće. Iz tog razloga promena visine dovodi do izražene promene energije mini-zona. Povećanje visine kvantnih crta obezbeđuje više prostora unutar jame za smeštanje talasnih funkcija, koje se sada više šire u y - nego u x -pravcu, što efektivno smanjuje sprezanje i dovodi do smanjenja širine mini-zona.

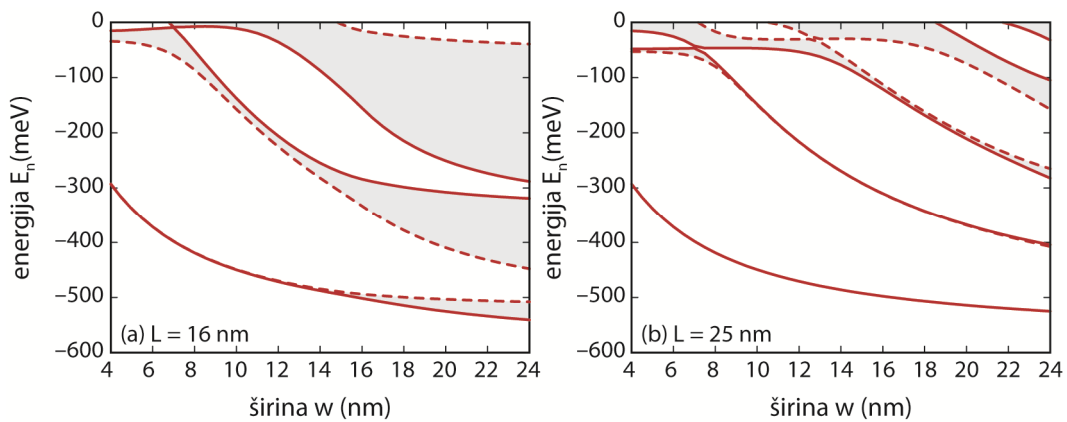


Sl. 65. Mini-zonska struktura periodičnog niza InAs/GaAs kvantnih crta širine $w = 14$ nm u zavisnosti od visine kvantne crte h za dve vrednosti periode (a) $L = 16$ nm i (b) $L = 25$ nm.

Inset: uvećana oblast u okolini nultog energetskeg procepa.

Mini-zonska struktura za širinu periode $L = 25$ nm, kojoj odgovara slabija kvantno-mehanička sprema [Sl. 65(b)], ispoljava iste trendove u pogledu energija i širina mini-zona kao za $L = 16$ nm, sa tom razlikom da su širine mini-zona sada značajno manje. Smanjenje intenziteta kvantno-mehaničke sprege dovodi do toga da se pobuđene zone u okolini vrha jame cepaju na više mini-zona manje širine, što za određene kombinacije geometrijskih parametara omogućava pojavu nultog mini-zonskog energetskeg procepa (*Zero Mini-Band-Gap*, ZMBG) [106]. Ovaj efekat se može se uočiti na Sl. 65(b) za pobuđene mini-zone u okolini vrha jame i visinu $h \approx 2$ nm, a praćen je razmenom karaktera talasnih funkcija. Drugim rečima, za kritične dimenzije kvantne crte, talasna funkcija koja odgovara stanju na vrhu niže mini-zone [označena sa b' u insetu Sl. 65(b)] menja karakter sa talasnom funkcijom koja odgovara stanju na dnu više mini-zone (a').

Slično kao i prilikom povećanja visine h , povećanje širine kvantne crte w dovodi do smanjenja energije mini-zona (Sl. 66). Međutim, sa porastom širine w dolazi do povećanja širine mini-zona, koje je mnogo izraženije u slučaju jake kvantno-mehaničke sprege [Sl. 66(a)], ali je evidentno i za sve pobuđene mini-zone u slučaju slabije sprege [Sl. 66(b)]. Zapravo, povećanje širine kvantne crte za fiksnu vrednost periode dovodi do smanjenja rastojanja između susednih kvantnih crta, što povećava sprezanje i samim tim širinu mini-zona. Treba napomenuti, da se za vrednosti širine w koje premašuju fiksiranu vrednost periode ($w > L$), više ne može govoriti o periodičnom nizu koliko-toliko odvojenih struktura sa zajedničkim vlažećim slojem, već se formira deblji jamski



Sl. 66. Mini-zonska struktura periodičnog niza InAs/GaAs kvantnih crta visine $h = 3$ nm u zavisnosti od širine kvantne crte w za dve vrednosti periode (a) $L = 16$ nm i (b) $L = 25$ nm.

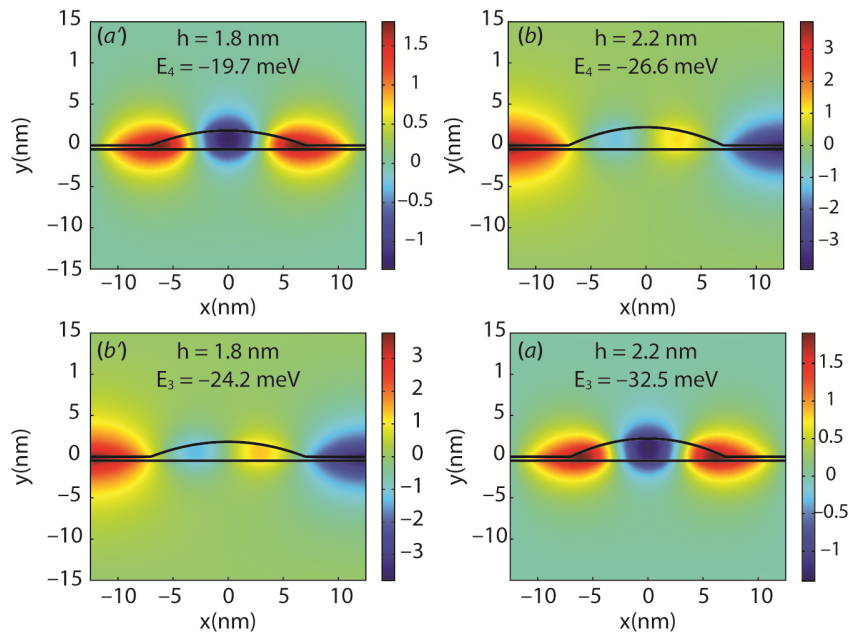
sloj sa gustom, pravilno nabranom površinom. Na osnovu razmatranja uticaja varijacije visine kvantne crte na mini-zonsku strukturu, jasno je da će se za kritične dimenzije strukture i veličinu periode efekat nultog energetskog procepa javiti i prilikom varijacije širine kvantnih crta w , kao i periode L . Prilikom varijacije širine nulti energetski procep se može uočiti za $L = 16$ nm i za kritičnu širinu $w \approx 7$ nm, dok se za $L = 25$ nm pored $W \approx 7$ nm, efekat nultog mini-zonskog energetskog procepa javlja i za $w \approx 12.3$ nm.

Efekat nultog mini-zonskog energetskog procepa već je razmatran u okviru jednodimenzionalnih superrešetki na bazi promene efektivne mase [110]. Tom prilikom pokazano je da se ZMBG može javiti samo za energije iznad vrha jame za slučaj varijacije transversalnog talasnog vektora k_t . Analitički tretman koji se može primeniti na jednodimenzionalne superrešetke potvrđuje da se efekat ZMBG javlja onda kada su zadovoljeni određeni uslovi za širine jamske i barijerne oblasti i njihove efektivne mase. Međutim, u slučaju niza kvantnih crta, problem određivanja veze između kritičnih parametara za koje će se formirati nulti energetski procep, previše je komplikovan za analitički tretman. Kao što je pokazano na Sl. 65 i Sl. 66, pojava ZMBG zavisi od sva tri geometrijska parametra (L , w i h). Primenom razvijenog numeričkog postupka može se pokazati da se za vrednosti longitudinalnog talasnog vektora $k_z > 0$ dobijaju grafici slični onima prikazanim na Sl. 63, Sl. 65 i Sl. 66, sa tom razlikom da su pozicije nultih mini-zonskih energetskih procepa pomerene ka većim dimenzijama, tj. većim vrednostima L , h i w . Ovaj pomeraj može se objasniti razlikom efektivnih masa u jami i barijeri. Kako je efektivna masa u barijeri veća od mase u jami, povećanje talasnog vektora k_z dovodi do efektivnog smanjenja dubine jame i samim tim slabije varijacije energije podzona sa promenom dimenzija crta nego za $k_z = 0$. Kao posledica toga, za $k_z > 0$, efekat nultog energetskog procepa javlja se za veće dimenzije nego za $k_z = 0$.

Međutim, postojanje vlažećeg sloja omogućava da mini-zone, koje se u slučaju superrešetki javljaju isključivo iznad vrha jame, “potonu” u jamu i formiraju nulti energetski procep za opseg energija za koji se ovaj efekat uobičajeno ne očekuje [106]. Smanjenje debljine vlažećeg sloja na vrednost blisku nuli pokazuje da mini-zonska struktura za velike vrednosti L potpuno nestaje i biva zamenjena diskretnim energetskim nivoima. Kao posledica toga, nestaje i efekat nultog energetskog procepa.

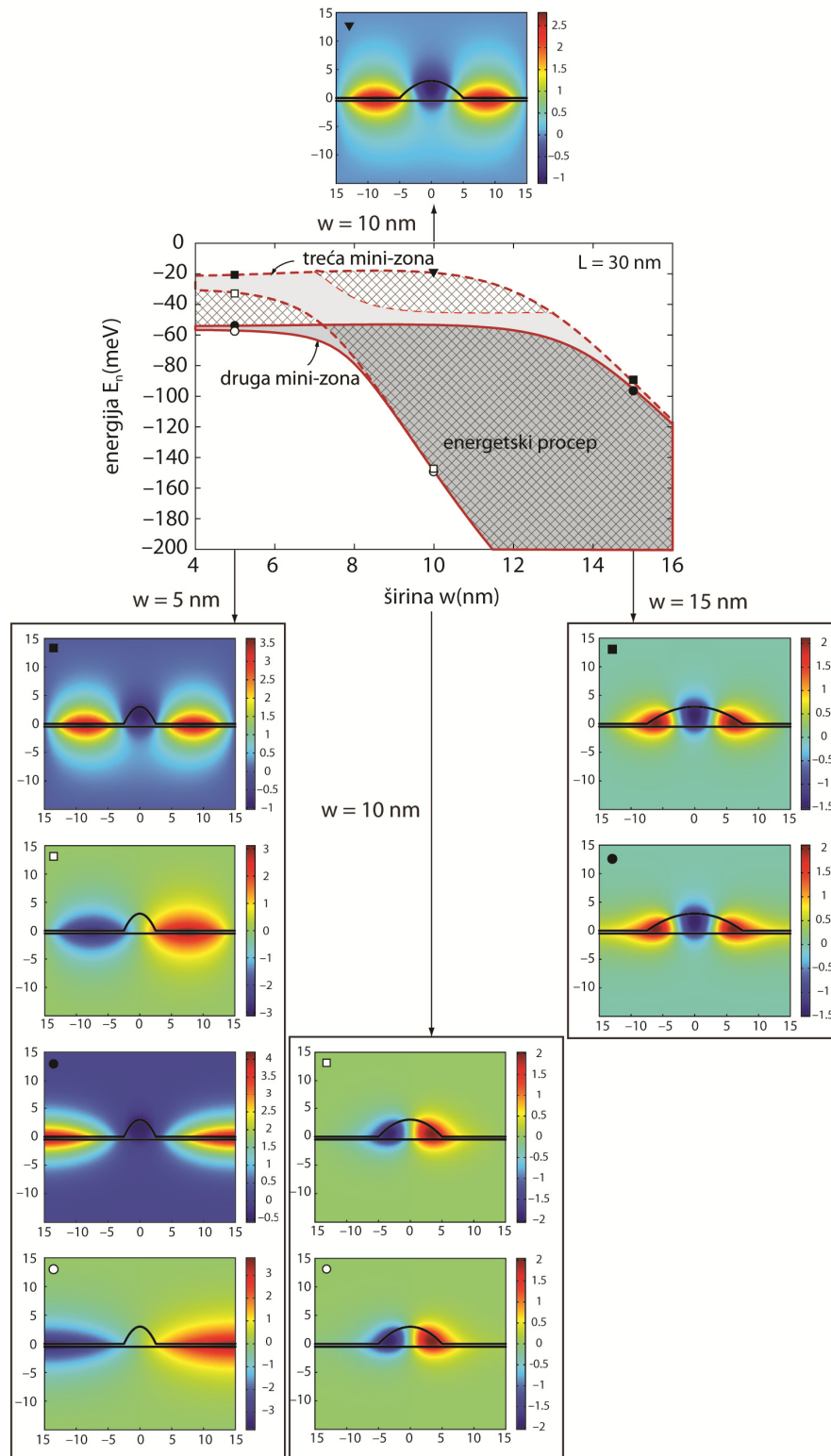
Pojava nultog energetskog procepa praćena je fenomenom razmene karaktera talasnih funkcija u tački anti-ukrštanja (“odbijanja”) krivih. Na Sl. 65(b) dat je uvećan prikaz mini-zonske strukture u okolini nultog-energetskog procepa između treće i četvrte mini-zone koji se javlja za kritičnu visinu $h \approx 2$ nm. Granični uslovi za ekstreme (vrh i dno) svake mini-zone imaju različit znak faznog faktora $\exp(iKL)$, koji može biti $+1$ ili -1 , u zavisnosti od toga kog je reda posmatrana mini-zona. Pored toga, znak faznog faktora, za dati ekstrem mini-zone, prema Kronig-Penney modelu alternativno se menja za susedne mini-zone. Prema tome, i vrh treće i dno četvrte mini-zone trebalo bi da odgovaraju istom, u ovom slučaju negativnom faznom faktoru. Generalno gledano, talasna funkcija više mini-zone trebalo bi da ima različitu parnost, odnosno preciznije, veći broj čvorova u jednom ili drugom pravcu konfiniranja, od donje mini-zone. Na Sl. 67(a) i (b) prikazane su talasne funkcije stanja označenih sa (a') i (b') na Sl. 65(b). Odmah se uočava da talasne funkcije koje odgovaraju visini manjoj od kritične ($h = 1.8$ nm) ne prate uobičajeni trend u pogledu broja čvorova. Međutim, za visine veće od kritične [$h = 2.2$ nm, tačke (b) i (a) na Sl. 65(b)] trend je opet zadovoljen, što znači da su u tački nultog mini-zonskog energetskog procepa stanja na vrhu i dnu susednih mini-zona zamenila karakter, tj. parnost talasne funkcije, pritom održavajući isti fazni faktor.

U cilju kvalitativnog opisivanja efekta nultog mini-zonskog energetskog



Sl. 67. Profili talasnih funkcija koji odgovaraju uvećanom prikazu sa Sl. 65(b).

procepa, detaljna analiza sprovedena je za antiukrštanje između druge i treće mini-zone šematski prikazano na Sl. 68, koje se javlja prilikom varijacije širine kvantne crte. Slično kao na Sl. 66(b) posmatran je niz kvantnih crta visine $h = 3$ nm, sa vlažećim slojem debljine $d = 0.5$ nm, ali je za širinu periode izabrana nešto malo veća vrednost $L = 30$ nm koja omogućava da zone od interesa “potonu” dublje u jamu i postanu “vezane” zone. Za male vrednosti širina kvantnih crta ($w < 6$ nm) talasne funkcije druge i treće mini-zone su mahom smeštene u oblasti vlažećeg sloja, što potvrđuju profili talasnih funkcija prikazani u levoj koloni na Sl. 68 za $w = 5$ nm. Širina mini-zona tada je vrlo mala, zahvaljujući činjenici da je perioda L dovoljno velika da su moduli talasnih funkcija koje odgovaraju ekstremima mini-zona veoma slični, iako same talasne funkcije imaju različitu parnost zbog suprotnih faznih faktora. Povećanje širine w obezbeđuje više prostora za smeštanje talasne funkcije u oblasti kvantne crte. Sve dok su talasne funkcije mahom lokalizovane u vlažećem sloju, povećanje širine kvantne crte ne utiče značajno na energiju mini-zone. Primer je talasna funkcija za $w = 10$ nm, koja odgovara dnu četvrte mini-zone, a označena je crnim trougaonim markerom. Onda kada je kvantna crta dovoljno široka da omogući lokalizaciju značajnog dela talasne funkcije, povećanje širine kvantne crte dovodi do smanjenja energije mini-zone ili jednog njenog dela (talasne funkcije za $w = 10$ nm koje odgovaraju granicama druge mini-zone i označene su crnim i belim kružnim markerom). Međutim, kao posledica različitih parnosti, ekstremi date mini-zone ili najbliži ekstremi dve susedne mini-zone imaju različite kritične širine za koje njihove energije počinju da opadaju. Primera radi, vrh druge mini-zone ima isti fazni faktor kao dno treće mini-zone. Uprkos tome, parnost ove dve talasne funkcije je različita, slično kao parnost vrha i dna bilo koje dve susedne mini-zone. Usled većeg broja čvorova u talasnoj funkciji (crni kružni marker i odgovarajuća talasna funkcija za $w = 5$ nm) vrh druge mini-zone počinje da opada za veće širine nego dno treće mini-zone, čije talasne funkcije imaju manji broj čvorova (beli kvadratni marker i odgovarajuća talasna funkcija za $w = 5$ nm). Prema tome, za širine za koje dno treće mini-zone opada, vrh druge mini-zone i dalje ima skoro konstantnu energiju. Kao rezultat, ova dva ekstrema se približavaju jedan drugom i dovode do anti-ukrštanja mini-zona i razmene karaktera talasnih funkcija (talasne funkcije označene odgovarajućim markerima za $w = 10$ nm i $w = 15$ nm), a osenčena šrafirana oblast postaje oblast energetskog procepa.

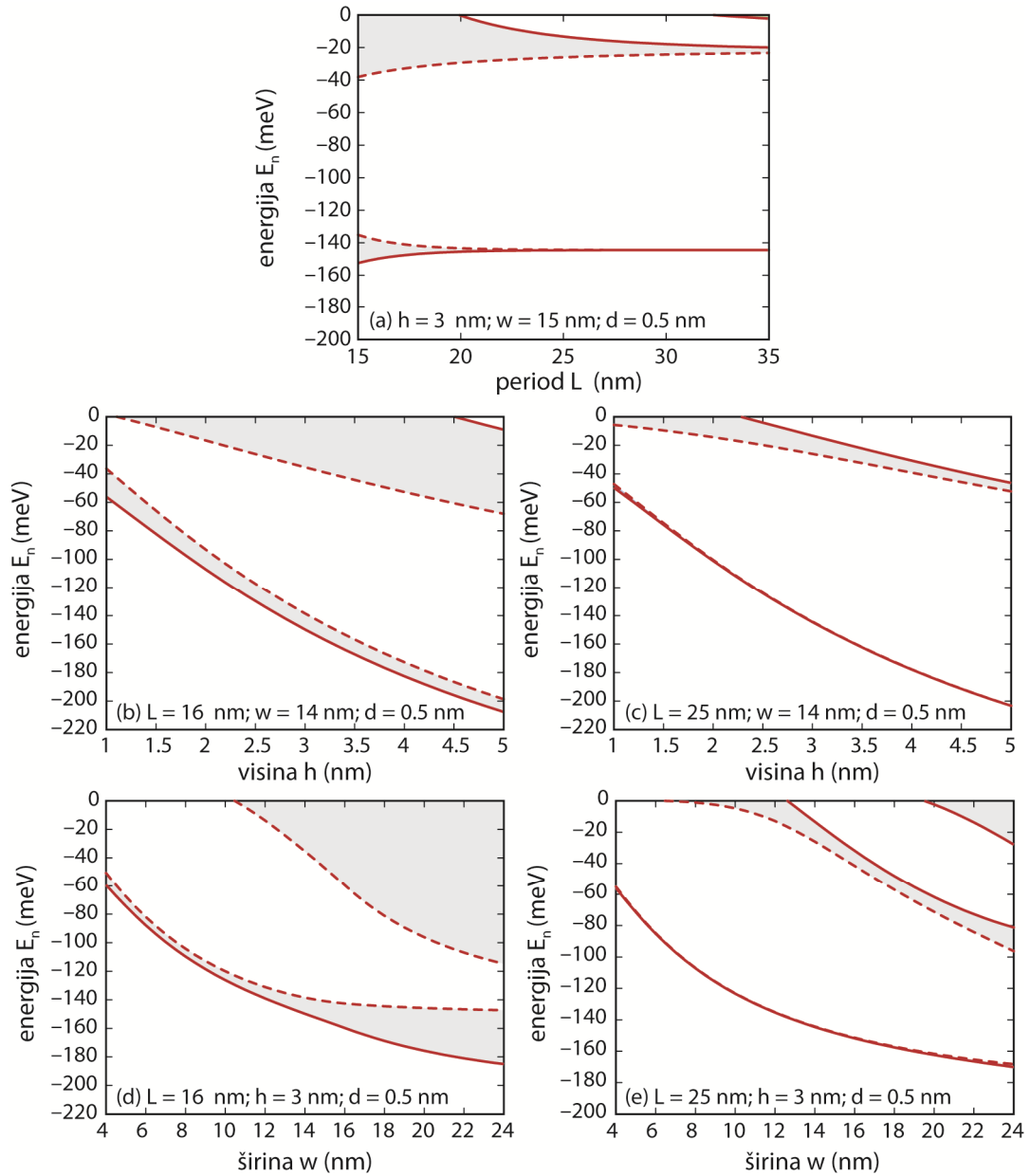


Sl. 68. Šematski prikaz ZMBG efekta i antiukrštanja između druge i treće mini-zone za niz kvantnih crta sa $L = 30$ nm i $h = 3$ nm, koji se javlja prilikom varijacije w . Profili talasnih funkcija su sa pozicijama na šematskom prikazu povezani odgovarajućim markerima.

Generalno gledano, zonska struktura u okolini vrha jame sastoji se od gusto pakovanih mini-zona koje predstavljaju neku vrstu takozvanog “vezanog kontinuuma”. Pažljivim dizajnom ovakvog kompleksnog kontinuuma potencijalno se može obezbediti efikasan zahvat i relaksacija naelektrisanja u jamu kvantne crte, što može biti od značaja za aplikacije koje se baziraju na optičkim prelazima.

U cilju ispitivanja zonske strukture za niz kvantnih crta u InAs/InAlGaAs materijalnom sistemu koji se odlikuje manjim diskontinuitetom zona, te samim tim i potencijalnom jamom manje dubine, analiza uticaja geometrijskih parametara ponovljena je za parametre date u Tabeli II, koji odgovaraju ovom materijalnom sistemu. Na Sl. 69 prikazan je uticaj promene periode, visine i širine kvantne crte na mini-zonsku strukturu analiziran tako, da je izvršena varijacija samo jednog od navedenih parametara, dok su preostala dva fiksirana na uobičajene srednje vrednosti. Iako su trendovi promena vrlo slični onima uočenim za InAs/GaAs materijalni sistem, evidentno je da je, kao posledica manje dubine potencijalne jame, broj mini-zona manji. Pored toga, konvergencija mini-zona u diskretna stanja je nešto sporija sa povećanjem širine periode L , a slični rezultati se dobijaju i za varijaciju visine h i širine w kvantne crte. Takođe, za razliku od dubljih jama, pojava nultog-mini-zonskog energetskog procepa nije tako česta u InAs/InAlGaAs materijalnom sistemu, a za konkretne vrednosti parametara ne može se detektovati ni jedan primer ovog efekta.

Na osnovu prethodnog razmatranja jasno je da je kvantno-mehaničko sprezanje izraženo za relativno mala rastojanja između susednih kvantnih crta u nizu i da značajno utiče na širinu i energetsku poziciju mini-zona. Međutim, prikazani rezultati su dobijeni u aproksimaciji ravnih zona i ne uzimaju u obzir prostornu raspodelu naelektrisanja koja daje daleko realniji uvid u elektronsku strukturu. Imajući u vidu da prostorno naelektrisanje dovodi do krivljenja profila provodne zone i povećanja energije vezanih stanja, može se zaključiti da bi čak i za relativno male periode ($L > 20$ nm), elektronsku strukturu činilo nekoliko veoma uskih mini-zona koje se praktično mogu tretirati kao diskretni energetski nivoi. Pri tome, treba imati u vidu da dimenzije elementarne ćelije od oko 20 nm za jamu širine 14 nm i dalje opisuju dosta gusto poredane strukture, jer rastojanje između susednih jama iznosi tek negde oko 6 nm. Sa daljim povećanjem periode, širina mini-zona se dodatno smanjuje pa je utoliko više opravdana aproksimacija u kojoj se jame tretiraju kao izolovane.



Sl. 69. Mini-zonska struktura za InAs/InAlGaAs niz kvantnih crta za varijaciju (a) periode, (b) varijaciju visine i (d) širine kvantne crte, kada je perioda fiksirana na $L = 16 \text{ nm}$ i (c) varijaciju visine i (e) širine kvantne crte, kada je perioda fiksirana na $L = 25 \text{ nm}$.

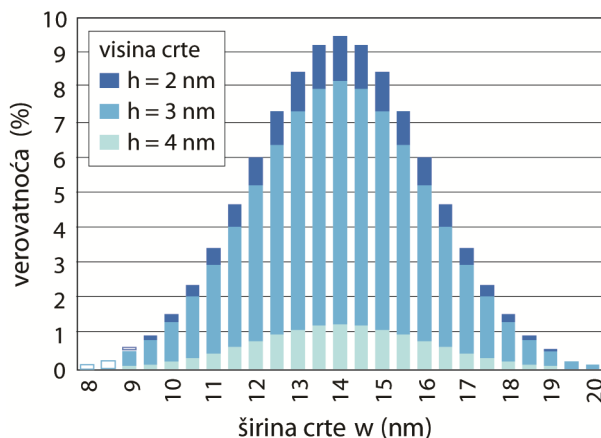
5.3 Apsorpcija ansambla kvantnih crta bez vlažećeg sloja

Uobičajeni mehanizam fabrikacije kvantnih-crta, samo-organizovano narastanje kroz Stranski-Krastanov prelaz, dovodi do stohastičke distribucije struktura po veličinama, što za posledicu ima energetska širenje konfiniranih podzona i samim tim širenje apsorpcionog spektra. Fluktuacija kvantnih crta po veličinama modeluje su uz pretpostavku da svaka od dimenzija u poprečnom preseku kvantne crte podleže nezavisnoj Gauss-ovoj raspodeli $G(w_0, h_0)$ sa srednjim vrednostima w_0, h_0 i standardnim devijacijama σ_w, σ_h , respektivno [relacija (4.34)]. Fluktuacija veličina kvantifikovana je preko parametra Δ koji se definiše kao odnos standardne devijacije i srednje vrednosti dimenzije u posmatranom pravcu, $\Delta = \sigma_w/w_0 = \sigma_h/h_0$, gde je zarad jednostavnijeg proračuna usvojena pretpostavka da su fluktuacije dimenzija iste u oba pravca.

U razmatranju koje sledi analizira se apsorpcioni spektar ansambla modulaciono dopiranih InAs kvantnih crta sa srednjim dimenzijama širine i visine kvantne crte $w_0 = 14$ nm i $h_0 = 3$ nm, respektivno. Zanimareno je prisustvo vlažećeg sloja ($d = 0$) i kvantne crte se tretiraju kao izolovane strukture u potpunosti okružene GaAs barijernim materijalom. Domen izračunavanja sa definisanim dimenzijama slabo-dopiranih i n-dopiranih slojeva i koncentracijama primesa prikazan je na Sl. 56. Iako neparaboličnost može uticati na unutarzonski apsorpcioni spektar, u okviru ovog razmatranja uračunava se samo uticaj Hartree potencijala koji je mnogo više izražen [87]. Polazeći od zonske strukture, unutarzonska apsorpcija za izolovanu crtu se izračunava na $T = 300$ K u dipolnoj aproksimaciji za X i Y polarizaciju upadne svetlosti [87].

Raspodela kvantnih crta po dimenzijama za ansambl sa parametrom fluktuacije $\Delta = 15\%$ prikazana je na Sl. 70 i odgovara ansamblu za koji se širina kvantnih crta nalazi u opsegu od $w = 8$ do 20 nm, dok se visina menja od $h = 2$ do 4 nm. Raspodela po dimenzijama je diskretizovana korišćenjem konačnih diskretizacionih koraka $\delta_w = 0.5$ nm i $\delta_h = 1$ nm, u pravcu visine i širine, respektivno, što omogućava da se usrednjeni apsorpcioni spektar izračunava sumiranjem po konačnom broju podskupova određenih particijama ansambla kvantnih crta. Praktično, svaki element histograma sa Sl. 70 predstavlja verovatnoću $\Delta G(w_j, h_k)$ nalaženja kvantne crte sa dimenzijama (w_j, h_k) u posmatranom ansamblu. Dominacija relativno malih dimenzija crta u ansamblu uslovljava da je apsorpcioni spektar mahom određen prelazima sa osnovnog na prvo

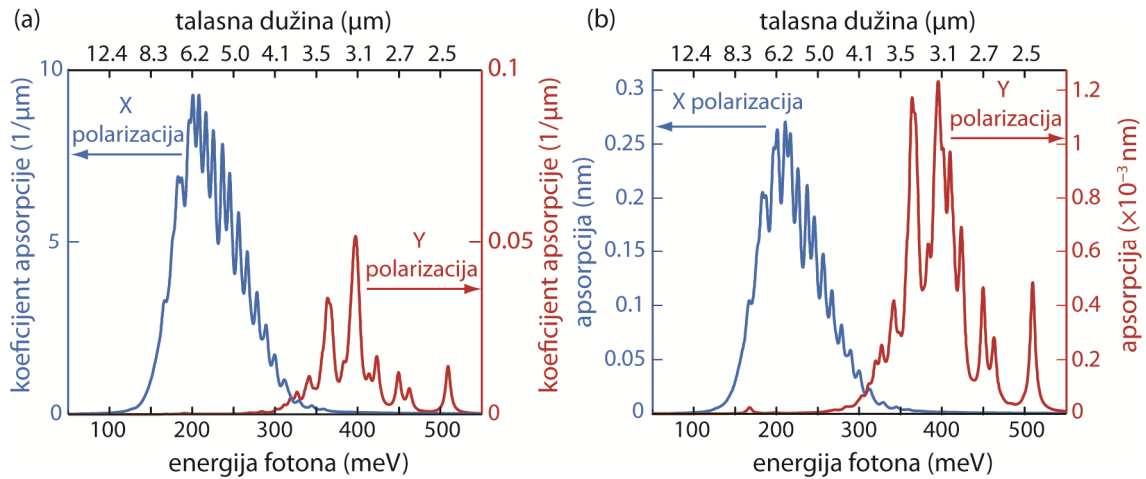
pobuđeno stanje. Izuzetak je podskup ansambla sa kvantnim crtama čije su dimenzije veće od srednjih vrednosti. U okviru ovog podskupa može se javiti i drugo, pa čak i treće pobuđeno stanje, te su mogući i njima odgovarajući unutarzonski prelazi. Za kvantne crte sa dimenzijama $(w, h) = \{(8 \text{ nm}, 3 \text{ nm}), (8.5 \text{ nm}, 3 \text{ nm}), (9 \text{ nm}, 2 \text{ nm})\}$, koje su na Sl. 70 označene belim segmentima, postoji samo osnovno stanje, pa ove kvantne crte nemaju uticaj na apsorpcioni spektar.



Sl. 70. Distribucija kvantnih crta po veličinama za ansambl sa fluktuacijom $\Delta = 15\%$.

Na Sl. 71(a) prikazan je koeficijent unutarzonske apsorpcije za posmatrani ansambl. Profil spektra za polarizaciju svetlosti u x -pravcu sastoji od gusto raspoređenih apsorpcionih pikova, koji potiču od pojedinačnih kvantnih crta [92]. Zapravo, svaki elementarni podskup ansambla kvantnih crta koji obuhvata dimenzije onih kvantnih crta koje od centralnih dimenzija podskupa odstupaju za polovinu diskretizacionog koraka, može se zameniti jednom kvantnom crtom sa dimenzijama jednakim centralnim dimenzijama podskupa. Superpozicijom ovih apsorpcionih pikova dobija se široka apsorpciona oblast, koja zauzima opseg talasnih dužina između $\lambda = 3.5$ i $10 \mu\text{m}$, sa maksimumom apsorpcionog koeficijenta na oko $6.2 \mu\text{m}$ [92]. Usled relativno malih visina kvantnih crta u ansamblu, profili talasnih funkcija za sva vezana stanja su takvi, da se maksimumi modula talasnih funkcija ređaju samo u x -pravcu. Kako sve podzone u provodnoj zoni kvantne crte imaju iste Bloch-ove funkcije, dok je optički dipolni moment neparna funkcija koordinate, najveća jačina oscilatora, a shodno tome i matrični element prelaza biće za optičke prelaze između podzona čije anvelopne talasne funkcije imaju različitu parnost. Prema tome, najveći doprinos apsorpciji X polarizovane upadne svetlosti dolazi od prelaza između susednih podzona, dominantno

sa osnovnog na prvo pobuđeno stanje [87]. Istovremeno, ovi prelazi imaju skoro zanemarljive matrične elemente za Y polarizaciju upadne svetlosti. Međutim, postojanje viših pobuđenih stanja za podskup ansambla kvantnih crta sa većim dimenzijama, omogućava prelaze sa relativno malim matričnim elementima u y-pravcu za veće energije fotona. Apsorpcioni koeficijent za Y polarizaciju upadne svetlosti je oko 200 puta slabiji nego za X polarizaciju, i sastoji se od nekoliko relativno izolovanih apsorpcionih pikova u opsegu talasnih dužina od 2.3 do 4.1 μm . Osnovni razlog za relativno veliki doprinos ovih prelaza, uprkos malim matričnim elementima, je prilično velika razlika u naseljenosti odgovarajućih podzona. Zbog značajno manje vrednosti apsorpcionog koeficijenta za Y polarizaciju, u svim narednim razmatranjima biće analiziran isključivo spektar za X polarizaciju.



Sl. 71. (a) Koeficijent apsorpcije i (b) apsorpcija za fluktuaciju $\Delta = 15\%$ za X polarizaciju (leva osa) i Y polarizaciju (desna osa) upadne svetlosti.

Međutim, na osnovu relacije (3.59) evidentno je da izračunate vrednosti koeficijenta apsorpcije zavise od veličine poprečnog preseka strukture $S(w, h)$ koja u ansamblu sa fluktuacijom dimenzija takođe predstavlja promenljivu veličinu. U tom smislu, od interesa je kvantifikacija apsorpcije korišćenjem veličine koja ne zavisi od poprečnog preseka strukture, što se može ostvariti množenjem koeficijenta apsorpcije α svake posmatrane kvantne crte u ansamblu sa odgovarajućom površinom poprečnog preseka S . Na taj način se dobija apsorpcija $a(\omega, w, h)$ izražena u jedinicama dužine (u konkretnom slučaju, kao jedinica se koriste nanometri). Spektar $A(\omega)$ se, kao što je već objašnjeno, dobija integracijom $A(\omega) = \iint a(\omega, w, h)G(w, h)dw \cdot dh$, po domenu dostupnih

dimenzija w i h u ansamblu. Na osnovu Sl. 71(b) na kojoj je prikazan spektar apsorpcije nezavisan od površine poprečnog preseka pojedinačnih kvantnih crta u ansamblu, jasno je da profil spektra apsorpcije u velikoj meri odgovara profilu spektra koeficijenta apsorpcije, posebno za X polarizaciju upadne svetlosti koja je u nastavku razmatranja od interesa.

Spektar apsorpcije prikazan na Sl. 71 jasno pokazuje zavisnost od veličine diskretizacionog koraka koja se ogleda u prisustvu izraženih apsorpcionih pikova unutar apsorpcione zone. Smanjenjem diskretizacionih koraka δ_w i δ_h , vrednosti susednih maksimuma i minimuma u spektru aproksimativno konvergiraju njihovoj srednjoj vrednosti, što rezultuje u značajno glatkijem profilu apsorpcionog spektra. Na osnovu toga, može se zaključiti da se, za dovoljno male vrednosti koraka diskretizacije, apsorpcioni spektar izračunat na osnovu particije ansambla može uspešno aproksimirati spektrom koji se dobija fitovanjem izračunatih vrednosti apsorpcije reprezentativnih kvantnih crta u ansamblu pogodno izabranom funkcijom [92]. Funkcija koja se koristi za fitovanje izračunatog spektra apsorpcije data je u formi sume Gauss-ovih funkcija:

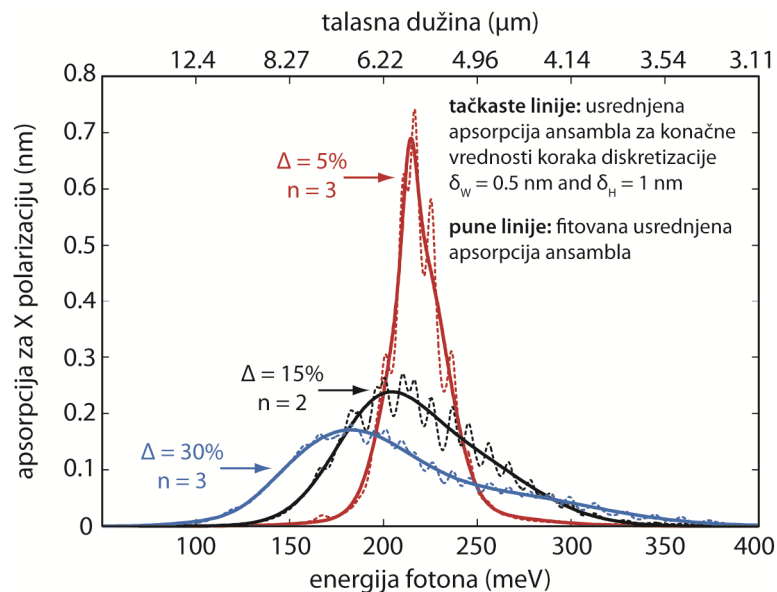
$$\alpha_{fit} = \sum_{i=1}^n b_i \exp \left[- \left(\frac{\hbar\omega - c_i}{d_i} \right)^2 \right] \quad (5.1)$$

gde je n broj članova sume potrebnih za uspešno fitovanje, b_i , c_i i d_i su koeficijenti koji omogućavaju prilagođavanje funkcije, a $\hbar\omega$ energija upadnog fotona. Izbor Gauss-ove funkcije logično se nameće kao posledica definisanih fluktuacija po dimenzijama koje takođe podležu gausovoj raspodeli. Za veličinu fluktuacije, profil i materijalni sistem koji je od interesa za ovo razmatranje, suma u prethodnom izrazu sadrži relativno mali broj članova (do $n = 5$). Na Sl. 72 tačkastim linijama prikazani su izračunati apsorpcioni spektri, dok su punim linijama predstavljene odgovarajuće krive dobijene fitovanjem izračunatih podataka, što omogućava predviđanje profila apsorpcionog spektra za beskonačno mali korak diskretizacije.

U cilju ispitivanja uticaja fluktuacije dimenzija na apsorpcioni spektar, razmatrani su spektri za tri karakteristične vrednosti parametra fluktuacije $\Delta = 5, 15$ i 30% . Usled relativno male fluktuacije veličina u ansamblu za $\Delta = 5\%$, apsorpcioni spektar, iako proširen, i dalje održava oblik apsorpcionog spektra za kvantne žice [87]. Međutim, i pored toga što je oblik spektra relativno jednostavan, zadovoljavajuće poklapanje sa

fitujućom funkcijom zahteva funkciju u obliku sume tri gausove funkcije ($n = 3$). Razlog tome su izuzetno oštri pikovi koji su posledica malog broja kvantnih crta u ansamblu.

Povećanje fluktuacije dovodi do širenja apsorpcionog spektra. Pored toga, doprinos spektru je značajno različit za manje i veće visine kvantnih crta u ansamblu. Povećanje energetske razlike između susednih podzona sa smanjenjem dimenzija crta je više izraženo (brže) u manjim nego u većim kvantnim crtama. Kako manje kvantne crte određuju visoko-energetski deo spektra, dok su veće dimenzije odgovorne za nisko-energetski deo, povećanje fluktuacije povećava asimetriju spektra koji se istovremeno pomera ka nižim energijama fotona. Prema tome, spektar za $\Delta = 15\%$ je dosta širi i više asimetričan nego spektar za $\Delta = 5\%$, a isti odnos važi za poređenje spektra za $\Delta = 30\%$ i $\Delta = 15\%$. Za $\Delta = 30\%$ apsorpcioni spektar obuhvata srednji infracrveni opseg talasnih dužina od $3.5 \mu\text{m}$ do $12 \mu\text{m}$.



Sl. 72. Koeficijent apsorpcije za fluktuacije veličina $\Delta = 5\%$, 15% i 30% (isprekidane linije). Punim linijama predstavljeni su rezultati fitovanja izračunatog koeficijenta apsorpcije primenom relacije (5.1).

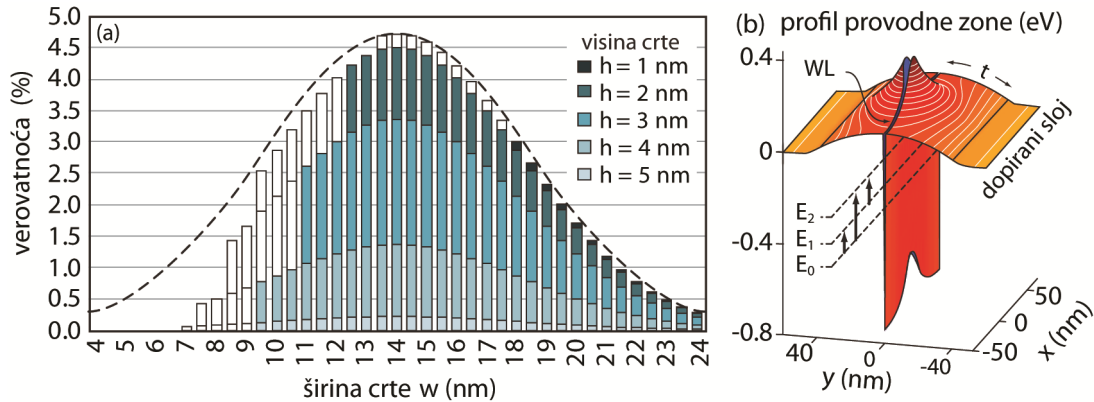
Konačno, sa povećanjem fluktuacija spektar se širi, postaje više asimetričan i zaravnjen u opsegu talasnih dužina od $6.2 \mu\text{m}$ do $7.5 \mu\text{m}$. Ovakav široki i zaravnjeni apsorpcioni spektar pogodan je za detekciju i modulaciju srednjeg infracrvenog

zračenja, za terabitne optičke komunikacije i metrologiju i spektroskopiju visoke preciznosti [22].

5.4 Apsorpcija ansambla kvantnih crta sa vlažećim slojem

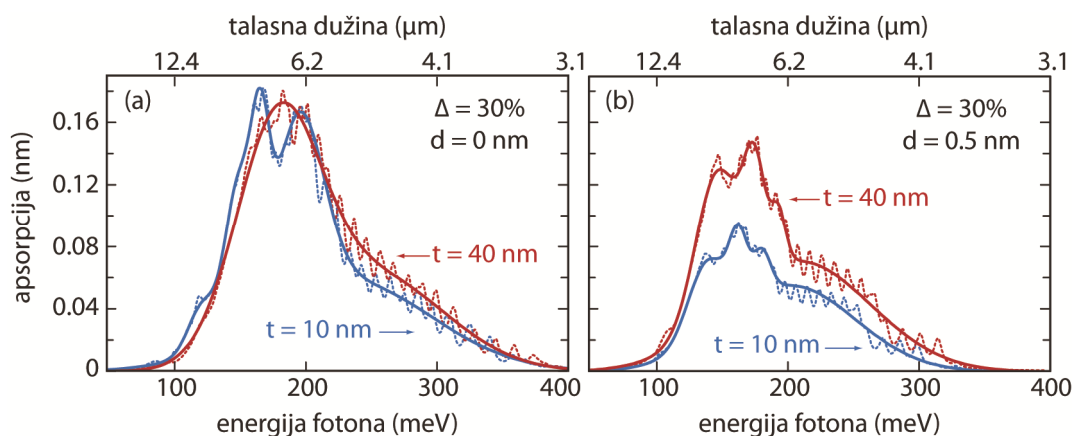
Razmatranje uticaja vlažećeg sloja (WL) na spektar unutarzonske apsorpcije ansambla kvantnih crta sprovodi se analizom modulaciono dopiranih InAs kvantnih crta, narastanih i okruženih GaAs barijernim materijalom, uzimajući u obzir odgovarajuću fluktuaciju po dimenzijama [111]. Debljina vlažećeg sloja d je parametar ansambla kvantnih crta. Domen rešavanja sa definisanim n-dopiranim ($N_{dDL} = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) i slabo-dopiranim bafer ($N_{dSL} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) slojevima prikazan je na Sl. 56. Debljina bafer slojeva t koristi se za kontrolu koncentracije nosilaca u crti i u okviru ovog razmatranja uzima vrednosti $t = 10 \text{ nm}$ i 40 nm . Prisustvo prostornog naelektrisanja uzima se u obzir kroz Hartree potencijal. Pretpostavlja se da je rastojanje između susednih crta dovoljno veliko da se minizone koje se javljaju kao posledica sprezanja mogu aproksimirati diskretnim energetskim nivoima, dok izračunati Hartree-jeer potencijal nije perturbovan njihovim prisustvom [111].

U cilju ispitivanja uticaja koji fluktuacije u veličinama imaju na usrednjeni spektar $A(\omega)$, on se izračunava za $\Delta = 5, 15$ i 30% . Profil gausovske raspodele za $\Delta = 30\%$ u odnosu na širinu kvantne crte prikazan je na Sl. 73 isprekidanom linijom. Svaki element histograma prikazanog na Sl. 73(a) predstavlja verovatnoću $\Delta G(w_j, h_k)$ koja odgovara kvantnoj crti bez vlažećeg sloja sa dimenzijama (w_j, h_k) , koja ima barem dve podzone i samim tim može da obezbedi unutarzonske optičke prelaze. Obojeni elementi histograma odnose se na kvantne crte sa dimenzijama (w_j, h_k) i dodatim vlažećim slojem debljine d (tako da je ukupna visina kvantne crte $d + h_k$) koje mogu da obezbede optičke prelaze. Ostatak raspodele koji nedostaje odgovara kvantnim crtama koje nemaju dovoljan broj podzona za ostvarivanje unutarzonskih prelaza. Evidentno je da, kao posledica prisustva vlažećeg sloja, dolazi do efektivnog smanjenja dubine potencijalne jame i samim tim manjeg broja vezanih stanja, što dovodi do toga da manji broj kvantnih crta sa vlažećim slojem doprinosi unutarzonskoj apsorpciji ansambla. Na Sl. 73(b) je prikazan primer profila provodne zone za kvantnu crtu širine $w = 24 \text{ nm}$ i visine $h = 3 \text{ nm}$ sa dodatim vlažećim slojem debljine $d = 0.5 \text{ nm}$ koja omogućava formiranje tri energetske podzone i odgovarajuće optičke prelaze.



Sl. 73. (a) Raspodela po veličinama onih kvantnih crta koje doprinose unutarzonskim optičkim prelazima za $\Delta = 30\%$ bez vlažećeg sloja (svi segmenti prikazani na slici) i sa dodatim vlažećim slojem debljine $d = 0.5$ nm (obojeni segmenti). (b) Profil provodne zone izolovane kvantne crte sa dodatim vlažećim slojem debljine $d = 0.5$ nm u okolini kvantne crte sa označenim pozicijama vezanih stanja u jami, kao i odgovarajućim unutarzonskim prelazima.

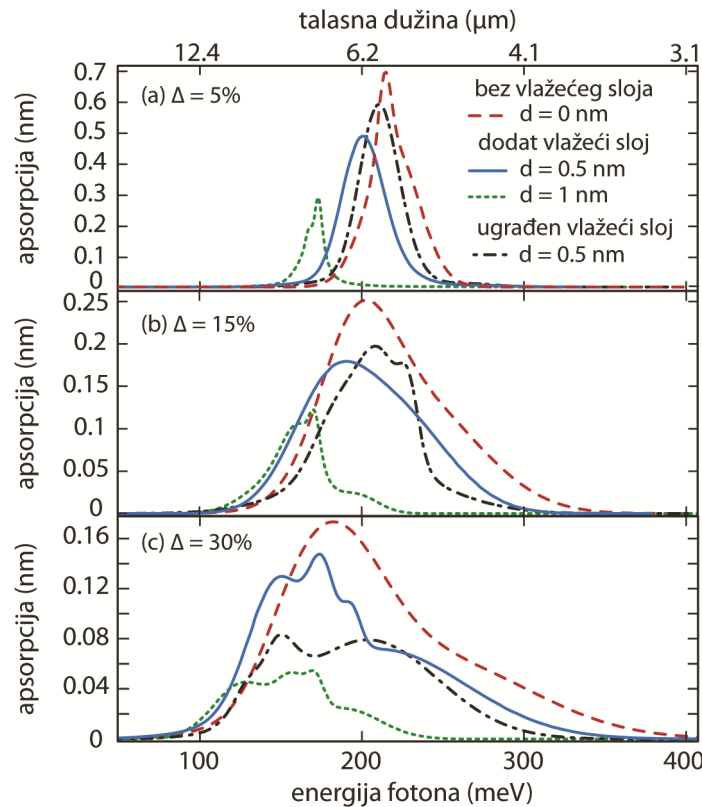
Na Sl. 74 je prikazan usrednjen apsorpcioni spektar po jednoj crti za $\Delta = 30\%$ i za dve različite debljine bafer slojeva, $t = 10$ nm i $t = 40$ nm, sa i bez vlažećeg sloja, za X polarizaciju upadne svetlosti. Apsorpcioni spektar se sastoji od gusto raspoređenih apsorpcionih pikova koji predstavljaju doprinose pojedinačnih kvantnih crta u ansamblu prikazanih isprekidanim linijama. Sl. 74(a) pokazuje da promena debljine bafer sloja neznatno utiče na intenzitet apsorpcije, a vrlo malo na profil apsorpcionog spektra kada je vlažeći sloj zanemaren. Međutim, za ansamble sa dodatim vlažećim slojem debljine d



Sl. 74. Usrednjena apsorpcija ansambla kvantnih crta (isprekidane linije) za $\Delta = 30\%$ i za $t = 10$ nm i 40 nm (a) bez vlažećeg sloja i (b) sa dodatim vlažećim slojem. Pune linije predstavljaju odgovarajući fit predstavljen sumom gausovih funkcija.

= 0.5 nm [Sl. 74(b)], uticaj debljine bafer sloja postaje primetan. Tanji bafer sloj ($t = 10$ nm) povećava naseljenost viših zona elektronima i dovodi do smanjenja apsorpcije. Povećanje debljine bafer sloja do neke optimalne vrednosti dovodi do povećanja apsorpcije usled postizanja izbalansirane raspodele elektrona koji tada mahom okupiraju niže podzone. Pored toga, dodati vlažeći sloj utiče na smanjenje apsorpcije bez obzira na debljinu bafer sloja, što je mahom posledica manjeg broja kvantnih crta koje doprinose unutarzonskim prelazima (Sl. 73).

Smanjenje fluktuacija po veličini dovodi do sužavanja apsorpcionog spektra, slično kao za slučaj ansambla kvantnih crta bez vlažećeg sloja (Sl. 72). Za male fluktuacije (primeru radi, $\Delta = 5\%$), samo nekoliko dimenzija kvantnih crta, bliskih srednjim vrednostima ansambla, doprinose unutarzonskim prelazima i samim tim apsorpciji ansambla. Shodno tome, spektar usrednjene apsorpcije $A(\omega)$ je gotovo simetričan i zadržava formu Gauss-ovog profila (Sl. 75).

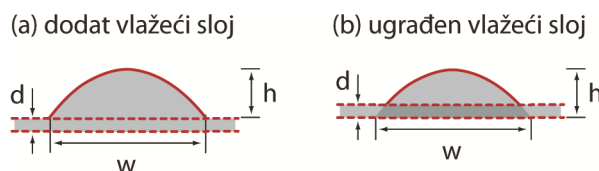


Sl. 75. Apsorpcioni spektar po crti (usrednjen) za ansamble sa fluktuacijama dimenzija (a) $\Delta = 5\%$, (b) $\Delta = 15\%$ i (c) $\Delta = 30\%$ i za različite debljine vlažećeg sloja.

Međutim, sa povećanjem fluktuacija ($\Delta = 30\%$), doprinos spektru je značajno različit za veće i manje visine kvantnih crta u ansamblu. U ovom slučaju, energetska razlika između podzona u kvantnim crtama povećava se brže sa smanjenjem dimenzija za manje kvantne crte. To dovodi do dosta šireg opsega dozvoljenih unutarzonskih optičkih prelaza za manje kvantne crte nego za veće. Kako manje kvantne crte određuju visoko-energetski deo spektra, povećanje u fluktuacijama dimenzijama dovodi do više asimetričnog profila spektra koji se istovremeno pomera ka manjim energijama fotona. Prema tome, sa povećanjem fluktuacija po dimenzijama, spektar unutarzonske apsorpcije $A(\omega)$ se širi i postaje sve više asimetričan.

Prisustvo i povećanje debljine vlažećeg sloja dovodi do dva efekta: smanjenja intenziteta apsorpcije i crvenog pomaka apsorpcionog spektra [111]. Kao što je već napomenuto, vlažeći sloj smanjuje lateralno konfiniranje u kvantnim crtama i samim tim efektivnu dubinu jame, što ima za posledicu da neka ili čak sva pobuđena stanja, koja bi se javila u crtama bez vlažećeg sloja, sada ne postoje. Međutim, uticaj vlažećeg sloja se može uračunati na dva različita načina. U prvom slučaju, pretpostavka je da je vlažeći sloj “dodat” na crtu, ali tako njegova debljina ne ulazi u merenu visinu crte, dok je u drugom slučaju vlažeći sloj “ugrađen” u samu crtu i njegova debljina ulazi u ukupnu visinu crte (Sl. 76). Kada se vlažeći sloj dodaje na prethodno definisanu kvantnu crtu, poprečni presek kvantne crte se efektivno uvećava, pa dolazi do smanjenja energetske razlike između podzona i time crvenog pomaka spektra. Pored toga, ivice podzona tonu dublje u jamu, što dovodi do intenzivnije ispunjene zone i kao posledica toga, manje razlike u njihovoj naseljenosti, pa shodno tome i do smanjenja apsorpcije. Iako se svi ovi efekti javljaju u ansamblu kvantnih crta, njihov doprinos zavisi od fluktuacije po veličinama.

Usled smanjenja lateralnog konfiniranja i broja vezanih stanja, veliki broj manjih crta ne doprinosi apsorpcionom spektru za $\Delta = 5\%$ i debljinu vlažećeg sloja $d = 1$ nm,



Sl. 76. Profil kvantne crte sa označenim karakterističnim dimenzijama za slučaj kada je vlažeći sloj (a) “dodat” i (b) “ugrađen”.

što se može zaključiti analizom raspodele sa Sl. 73. Prema tome, samo crte sa dimenzijama jednakim ili većim od srednjih dimenzija, za koje su energije prelaza relativno male, doprinose apsorpcionom spektru. To dovodi do crvenog pomaka spektra u poređenju sa spektrom bez vlažećeg sloja. Za istu fluktuaciju i $d = 0.5$ nm, bez obzira na to da li je vlažeći sloj dodat ili ugrađen, veličine kvantnih crta koje učestvuju u unutarzonskim optičkim prelazima su slične kao za $d = 1$ nm. Međutim, zbog većeg poprečnog preseka kvantnih crta sa dodatim vlažećim slojem, vezana stanja su više naseljena nego za ugrađeni vlažeći sloj, što dovodi do smanjenja apsorpcije.

Za izraženije fluktuacije po dimenzijama, $\Delta = 30\%$, apsorpcija za ugrađeni vlažeći sloj je manja nego za dodati, suprotno slučaju kada je $\Delta = 5\%$. U slučaju ugrađenog sloja i fluktuacije $\Delta = 30\%$, veći broj manjih kvantnih crta je takav da nema dovoljno vezanih stanja, nego za dodati vlažeći sloj. Iako su stanja u crtama sa dodatim vlažećim slojem dublja i više popunjena elektronima od onih u kvantnim crtama sa ugrađenim slojem, njihov veći poprečni presek obezbeđuje veći broj vezanih stanja za različite dimenzije crta i prema tome značajniju apsorpciju. Generalno gledano, za $\Delta = 30\%$, povećanje debljine vlažećeg sloja dovodi do crvenog pomaka spektra, koji se javlja mahom zbog činjenice da su manje crte osiromašene u pogledu vezanih stanja zbog lošijeg konfiniranja izazvanog debljim vlažećim slojem. Kada bi konfiniranje bilo prisutno u svim pravcima, energetska razlika između vezanih stanja u malim crtama bila bi velika, što bi dovelo do uključivanja velikih energija prelaza u apsorpcioni spektar ansambla i sprečilo crveni pomak spektra [111].

5.5 Uticaj profila kvantnih crta na spektar unutarzonske apsorpcije

U zavisnosti od materijalnog sistema, nominalne debljine InAs sloja i parametara narastanja, primera radi, temperature, odnosa elemenata grupa III/V i brzine rasta, samo-organizovane kvantne crte mogu imati različite profile poprečnog preseka, kao i različite srednje vrednosti i standardne devijacije raspodele po dimenzijama u ansamblu, što značajno određuje elektronske, a samim tim i optičke osobine nanostrukturnog materijala [112]. Pored toga, za samo-organizovane nanostrukture karakteristične su nepravilne ivice transverzalnog poprečnog preseka koji dominantno određuje zonsku strukturu, pa je ponekad vrlo teško odlučiti se koji od geometrijskih oblika predstavlja

najbolju aproksimaciju profila poprečnog preseka, kako bi se formirao što realističniji model. Najčešće korišćene aproksimacije profila poprečnog preseka su sočivasti, trapezni i trougaoni oblici. Pored toga, u cilju pojednostavljenja proračuna sočivasti profil se relativno često aproksimira ekvivalentnim pravougaonim oblikom koji zadržava istu površinu poprečnog preseka. U razmatranju koje sledi biće analizirano koliko je ovakva aproksimacija opravdana, kao i u kojoj meri izbor ekvivalentnih geometrijskih oblika za modelovanje profila poprečnog preseka utiče na spektar unutarzonske apsorpcije.

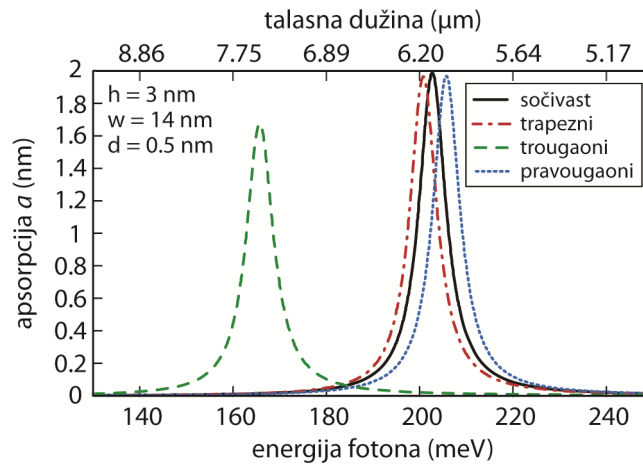
Razmatranje uticaja profila poprečnog preseka na spektar unutarzonske apsorpcije koristi istu metodologiju i bazirano je na sličnoj strukturi koja je korišćena za analizu uticaja vlažećeg sloja (domen izračunavanja je prikazan na Sl. 56). Jedna od razlika je u samom profilu poprečnog preseka, koji je do sada uvek bio sočivast, a sada će imati formu različitih geometrijskih oblika. Pored toga, razlikuje se i debljina slabo-dopiranih bafer slojeva koja je u razmatranju koje sledi nešto veća i iznosi $t = 100$ nm. Kao što je već pokazano [111], vlažeći sloj značajno utiče na apsorpcioni spektar, pa će vlažeći sloj debljine $d = 0.5$ nm za koji se smatra da je dodat na svaki od ekvivalentnih profila, biti tretiran kao parametar ansambla.

U cilju fer poređenja koje može da obezbedi analizu uticaja profila poprečnog preseka kvantne crte na spektar unutarzonske apsorpcije, potrebno je definisati kriterijume ekvivalentnosti uobičajeno korišćenih geometrijskih oblika: sočivastog, trapeznog, trougaonog i pravougaonog oblika [112]. Osnovna pretpostavka je da svi ekvivalentni profili kvantne crte imaju istu površinu poprečnog preseka S kao sočivasti oblik sa dimenzijama w i h , prikazan na Sl. 56. Preostali uslovi se razlikuju u zavisnosti od toga koji se ekvivalentni oblik formira:

- Širina ekvivalentnog pravougaonika (w_R) je jednaka punoj-širini-na-polovini-maksimalne-visine (m) sočivastog profila ($w_R = m$), dok se visina (h_R) određuje na osnovu jednakosti površina poprečnog preseka: $h_R = S/w_R$.
- Medijana (m_T) i duža osnovica (w_{T1}) ekvivalentnog trapeza jednake su m i w sočivastog profila, tj. važi $w_{T1} = w$ i $m_T = m$. Kraća paralelna stranica trapeza se dobija na osnovu $w_{T2} = 2m - w_{T1}$, dok se visina (h_T) određuje na osnovu uslova jednakosti površina poprečnih preseka: $h_T = S/m$.

- Medijana (m_{Δ}) ekvivalentnog trougla je jednaka punoj-širini-na-polovini-maksimalne-visine sočivastog profila ($m_{\Delta} = m$), pa je osnovica trougla $w_{\Delta} = 2m$, dok se visina (h_{Δ}) određuje tako da zadovolji uslov jednakosti površina poprečnih preseka: $h_{\Delta} = S/m$.

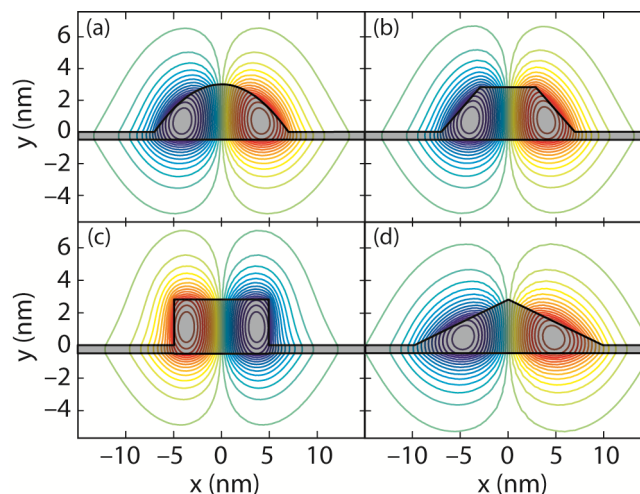
Na Sl. 77 prikazan je apsorpcioni spektar $a(\omega)$ za izolovanu kvantnu crtu sa dimenzijama koje odgovaraju srednjim dimenzijama ansambla, $w = w_0 = 14$ nm i $h = h_0 = 3$ nm, za različite ekvivalentne profile poprečnog preseka crte. Razlika između spektara za sočivasti i ekvivalentni trapezni profil je mala, i ogleda se u veoma malom crvenom pomaku spektra za trapezni profil (oko 1 meV) i nešto manjoj maksimalnoj vrednosti apsorpcije. Sa druge strane, spektar za ekvivalentni pravougaoni profil je blago plavo pomeren (oko 3 meV) u odnosu na sočivasti profil, a vrednost maksimalne apsorpcije je gotovo ista kao za trapezni profil. Međutim, spektar za ekvivalentni trougaoni profil značajno se razlikuje od prethodna tri, kako u pogledu energetske pozicije gde je pomeren ka nižim energijama za oko 22 meV, tako i u dosta manjoj vrednosti maksimalne apsorpcije. Kako su dimenzije kvantne crte relativno male, postoje samo dva konfinirana stanja pa se sva četiri spektra sastoje od samo jednog apsorpcionog pika.



Sl. 77. Spektar unutarzonske apsorpcije $a(\omega)$ za izolovanu kvantnu crtu sa trapeznim, pravougaonim i trougaonim profilom poprečnog-preseka ekvivalentnim sočivastom profilu sa dimenzijama $w = 14$ nm i $h = 3$ nm.

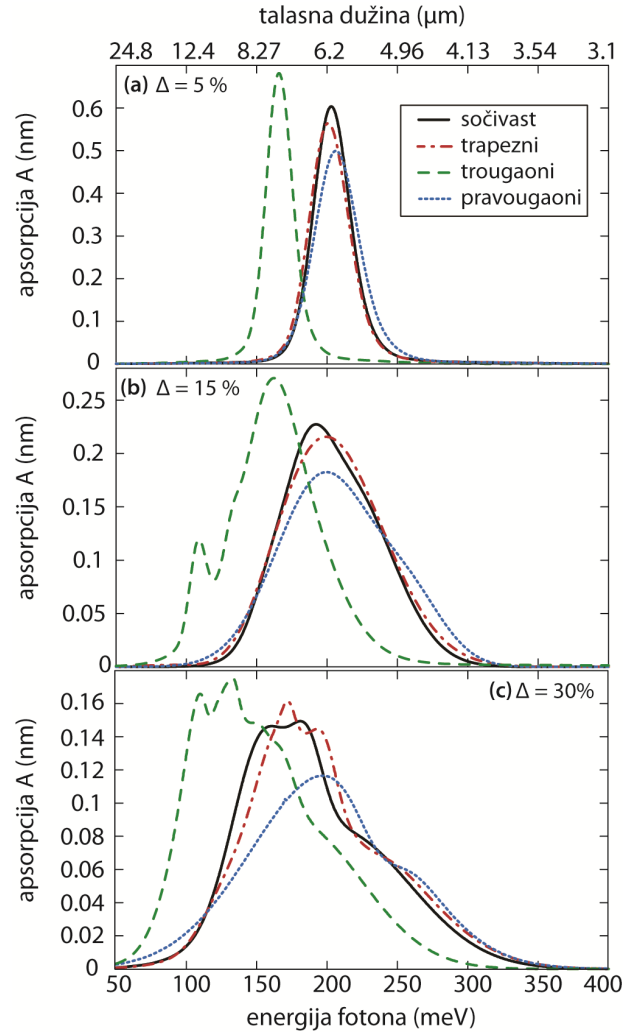
Na Sl. 78 dati su konturni prikazi raspodele talasnih funkcija prvog pobuđenog stanja u odnosu na oblik poprečnog preseka kvantne crte za sva četiri ekvivalentna

profila, dobijenih samosaglasnim proračunom zonske strukture. Može se primetiti da za sočivasti i trapezni profil poprečnog preseka talasne funkcije prvog pobuđenog stanja zauzimaju gotovo istu površinu, što zapravo znači da je efektivna širina ova dva profila gotovo ista. Upravo efektivna širina dominantno određuje energiju optičkih prelaza, što ima za posledicu veoma slične apsorpcione pikove za ova dva ekvivalentna profila. Međutim, za pravougaoni poprečni presek efektivna širina je evidentno manja, što objašnjava blagi plavi pomak apsorpcionog spektra. Konačno, efektivna širina za trougaoni profil je značajno veća nego za prethodna tri oblika što potvrđuje izraženo “razlivanje” talasne funkcije, a ima za posledicu optičke prelaze na značajno manjim energijama. Pored toga, zahvaljujući većoj efektivnoj širini, elektronske podzone su dublje u trougaonoj jami, što dovodi do manje razlike u naseljenosti ovih podzona i shodno tome, do manje apsorpcije.



Sl. 78. Konturni prikazi profila talasnih funkcija prvog pobuđenog stanja za ekvivalentni (a) sočivasti, (b) trapezni, (c) pravougaoni i (d) trougaoni profil poprečnog preseka kvantne crte.

Na Sl. 79 prikazani su usrednjeni apsorpcioni spektri $A(\omega)$ za ansamble kvantnih crta sa sočivastim, trapeznim, trougaonim i pravougaonim profilom poprečnim presekom za različite vrednosti parametra fluktuacije $\Delta = 5\%$, 15% , 30% . Bez obzira na profil poprečnog preseka, usrednjena apsorpcija ansambla generalno pokazuje već opisano ponašanje, koje se ogleda u širenju spektra i sve većoj asimetričnosti sa povećanjem parametra fluktuacije.



Sl. 79. Usrednjeni apsorpcioni spektar $A(\omega)$ za različite parametre fluktuacije (a) $\Delta = 5\%$, (b) $\Delta = 15\%$ i (c) $\Delta = 30\%$ za ansamble sa sočivastim, trapeznim, pravougaonim i trougaonim profilom poprečnog preseka kvantne crte.

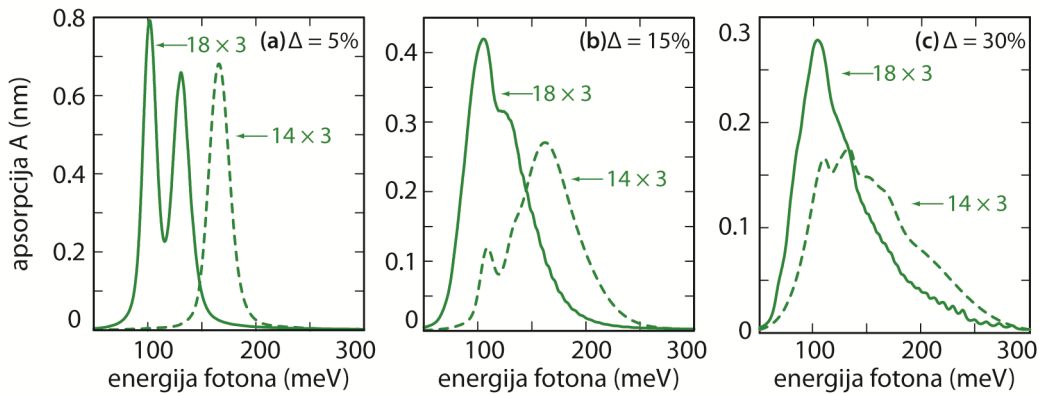
Kao i u slučaju apsorpcije za izolovanu kvantnu crtu, usrednjena apsorpcija ansambla je veoma slična za sočivasti i trapezni profil poprečnog preseka, nezavisno od iznosa fluktuacija po veličinama (Sl. 79) [112]. Spektar za pravougaoni profil je donekle manje izražen za niže vrednosti energija. Usled manje efektivne širine pravougaonog profila, broj kvantnih crta sa višim konfiniranim stanjima (drugim i trećim stanjem) je manji. Ova stanja se mogu javiti u kvantnim crtama sa većim dimenzijama, koje mogu da obezbede unutarzonske optičke prelaze na nižim energijama, pa je nisko-energetski deo spektra za pravougaoni profil nešto manje izražen. Odstupanja usrednjenog apsorpcionog spektra ansambla sa pravougaonim profilom od spektra ansambla sa sočivastim profilom kvantnih crta se povećava sa povećanjem fluktuacije dimenzija.

Prema tome, često korišćena pravougaona aproksimacija [41], [54] ima ograničenu validnost za fluktuacije po veličinama koje premašuju $\Delta = 15\%$ [112].

Konačno, zahvaljujući većoj efektivnoj širini trougaonog profila, usrednjena apsorpcija ansambla sa trougaonim poprečnim presekom je, slično kao i za usamljenu kvantnu crtu, crveno pomerena u odnosu na spektre ansambla sa preostala tri ekvivalentna profila (Sl. 79). Međutim, uprkos činjenici da je razlika u naseljenosti podzona manja, maksimalna apsorpcija ansambla sa trougaonim profilom je veća nego za ansamble sa sočivastim, trapeznim i pravougaonim profilom. Detaljnija analiza apsorpcionog spektra za parametar fluktuacije $\Delta = 5\%$ prikazanog na Sl. 79(a), otkriva da je širina spektra na polovini maksimuma za trougaoni profil manja nego za sočivasti. Za trougaoni profil poprečnog preseka kvantnih crta konfiniranje talasnih funkcija u oblasti jame je slabije u odnosu na sočivasti profil. To ima za posledicu da je efektivna širina trougaone jame manje osetljiva na promenu dimenzija kvantne crte, što dovodi do manje energetske razlike između susednih apsorpcionih pikova koji proističu od individualnih kvantnih crta u ansamblu. Usled toga, dolazi do preklapanja i superpozicije u okolini maksimuma apsorpcije koji, zbog najveće zastupljenosti u ansamblu, praktično odgovara kvantnoj crti sa srednjim dimenzijama (w_0 , h_0). Kao posledica toga, dolazi do formiranja užeg, ali istovremeno intenzivnijeg apsorpcionog spektra za ansamble kvantnih crta sa trougaonim profilom poprečnog preseka. Povećanje fluktuacije po dimenzijama na $\Delta = 15\%$ dovodi do formiranja drugog, manje izraženog apsorpcionog pika na nižim energijama [Sl. 79(b)]. Ovaj pik se javlja kao posledica optičkih prelaza sa prvog na drugo pobuđeno stanje, dostupnim u kvantnim crtama sa većim dimenzijama koje su više zastupljene u ansamblima sa većom fluktuacijom po dimenzijama. Sa daljim povećanjem parametra fluktuacije Δ , zastupljenost kvantnih crta sa višim pobuđenim stanjima raste, pa nisko-energetski pik postaje sve više izražen i po intenzitetu uporediv sa visoko-energetskim pikom [Sl. 79(c)]. Preklapanje ova dva pika praktično ima za posledicu širenje apsorpcionog spektra.

Povećanje nominalne debljine InAs tokom procesa samo-organizacije dovodi do povećanja dimenzija kvantnih crta u ansamblu, što se ogleda u povećanju srednjih dimenzija ansambla [70]. Iz tog razloga, od interesa je analizirati kako na usrednjenu apsorpciju ansambla $A(\omega)$ utiče promena srednje vrednosti raspodele po dimenzijama.

Ovo razmatranje biće sprovedeno na ansamblu sa kvantnim crtama trougaonog profila poprečnog preseka, analiziranjem već postojećih apsorpcionih spektara za srednju vrednost dimenzija $w_0 = 14$ nm i $h_0 = 3$ nm i ansambla sa povećanom srednjom širinom na $w_0 = 18$ nm, za fiksnu vrednost srednje visine ($h_0 = 3$ nm). ApSORPCIONI spektri prikazani na Sl. 80 pokazuju da povećanje srednje širine dovodi do značajnog crvenog pomaka apsorpcionog spektra, koji se javlja kao posledica povećane površine poprečnog preseka kvantnih crta zastupljenih u ansamblu. Štaviše, nisko-energetski pik se sada pojavljuje i za manje vrednosti parametra fluktuacije ($\Delta = 5\%$) i svojim intenzitetom prevazilazi visoko-energetski pik. Za veće fluktuacije dimenzija ($\Delta = 15\%$ i 30%), izraženi nisko-energetski pik se spaja sa visoko-energetskim pikom, što dovodi do šireg i intenzivnijeg apsorpcionog spektra. Prema tome, kontrolom nominalne debljine InAs sloja tokom procesa fabrikacije može se kontrolisati odnos između nisko- i visoko-energetskog pika i generalno podešavati profil apsorpcionog spektra.



Sl. 80. Poređenje usrednjene apsorpcije ansambla sa kvantnim crtama trougaonog profila poprečnog preseka sa srednjim dimenzijama $w_0 = 14$ nm i $h_0 = 3$ nm (isprekidane linije) i $w_0 = 18$ nm i $h_0 = 3$ nm (pune linije) za različite parametre fluktuacije (a) $\Delta = 5\%$, (b) $\Delta = 15\%$ i (c) $\Delta = 30\%$.

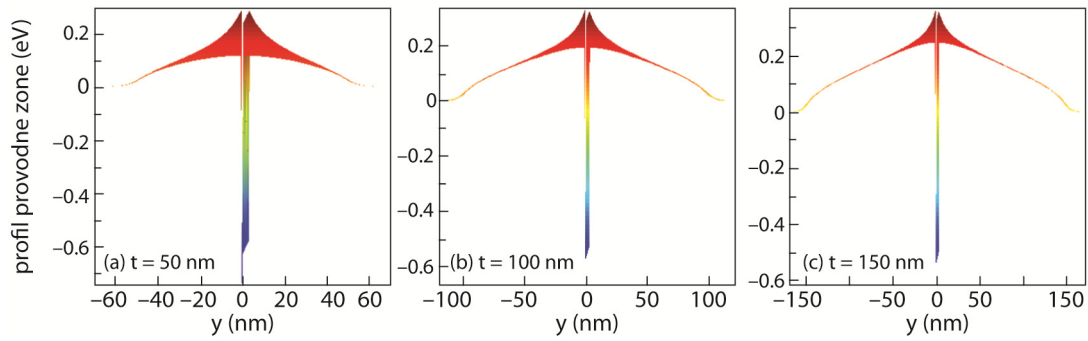
5.6 Uticaj debljine bafer sloja na spektar apsorpcije

Slabo-dopirani bafer slojevi, između kojih se nalazi sloj kvantnih crta, imaju dvojaku ulogu. Sa jedne strane, postojanje slabo-dopirane oblasti obezbeđuje da slobodni elektroni potrebni za ostvarivanje unutarzonskih prelaza budu prostorno odvojeni od nepokretnih donorskih jona, što smanjuje rasejanje pokretnih naelektrisanja i apsorpciju na donorskim primesama. Sa druge strane, promenom debljine ovih slojeva

moguće je kontrolisati krivljenje profila dna provodne zone u okolini kvantne crte, što omogućava kontrolu naseljenosti podzona između kojih dolazi do unutarzonskih prelaza. To se postiže kroz podešavanje rasporeda energetskih podzona u odnosu na Fermijev nivo i samim tim, vrši se kontrola intenziteta apsorpcije.

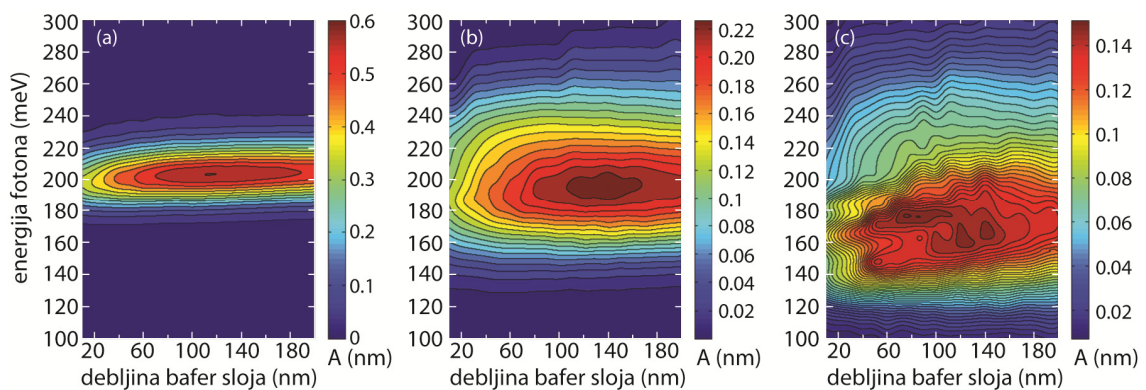
Na osnovu teorijskog razmatranja sprovedenog u poglavlju 3, za odvijanje unutarzonskih prelaza između vezanih stanja potrebno je da struktura podržava barem dva stanja. Pri tome, intenzitet apsorpcije zavisi od naseljenosti ova dva stanja, u smislu da je potrebno da niže stanje bude sa velikom verovatnoćom popunjeno, a više stanje upražnjeno. Naseljenost energetskih stanja praktično je određena pozicijom u odnosu na Fermijev nivo, pa se može zaključiti da je za slučaj kvantne crte koja podržava dva vezana stanja, idealan raspored tih stanja sa stanovišta intenzivne apsorpcije takav, da je niže stanje značajno ispod, a više stanje dovoljno iznad Fermijevog nivoa. Ako jama podržava više od dva vezana stanja, sva stanja doprinose optičkim prelazima, ali je zbog najvećeg matričnog elementa prelaza između prvog i drugog stanja, ovaj prelaz dominantan, pa se optimizacija rasporeda energetskih stanja opet vrši na sličan način kao za jamu sa samo dva vezana stanja.

Na Sl. 81 prikazani su profili dna provodne zone za tri različite debljine slabodopiranog bafer sloja, za modulaciono dopiranu kvantnu crtu dimenzija $w = 14$ nm i $h = 3$ nm sa dodatim vlažećim slojem debljine $d = 0.5$ nm. Koncentracija primesa u n-dopiranim i slabodopiranim oblastima je ista kao u prethodnim razmatranjima. Sa povećanjem debljine bafer sloja dno provodne zone u jami, i u barijernoj oblasti u okolini jame, se sve više izdiže, što ima za posledicu povećanje energija vezanih stanja. Za tri razmatrane debljine bafer sloja $t = \{50, 100, 150\}$ nm, energije u ekstremumu podzone osnovnog stanja su $E_1 = \{-203, -160, -127\}$ meV, a za prvo pobuđeno stanje $E_2 = \{-3, 43, 77\}$ meV. Imajući u vidu poziciju Fermijevog nivoa, $E_F = 26.5$ meV, evidentno je da su za $t = 50$ nm, oba stanja ispod Fermijevog nivoa i samim tim, sa velikom verovatnoćom popunjena, pa je zbog male razlike naseljenosti intenzitet apsorpcije mali. Sa druge strane, sa povećanjem debljine bafer sloja na $t = 150$ nm, smanjuje se naseljenost osnovnog stanja koje se približava Fermijevom nivou, što opet dovodi do smanjenja apsorpcije. Prema tome, može se zaključiti da postoji neka optimalna vrednost debljine bafer sloja za koju su vezana energetska stanja raspoređena tako da postoji velika razlika u naseljenosti i samim tim, intenzivna apsorpcija.



Sl. 81. Profil provodne zone za samosaglasno određenu elektronsku strukturu kvantne crte sa dimenzijama $w = 14$ nm i $h = 3$ nm sa dodatim vlažećim slojem debljine $d = 0.5$ nm za debljinu bafer sloja (a) $t = 50$ nm, (b) $t = 100$ nm i (c) $t = 150$ nm.

Na Sl. 82 prikazana je apsorpcija za X polarizaciju upadne svetlosti u zavisnosti od energije upadnog fotona i debljine bafer sloja za tri različite vrednosti parametra fluktuacije $\Delta = 5\%$, 15% i 30% . Debljina bafer sloja se menja od $t = 10$ nm do 200 nm. Sa povećanjem fluktuacije dimenzija maksimalna vrednost apsorpcije opada, a spektar se sve više širi, što je u skladu sa prethodno sprovedenim analizama [111]. Maksimalna vrednost apsorpcije za $\Delta = 5\%$ se postiže za bafer sloj debljine oko $t = 115$ nm i za upadnu energiju fotona od oko 200 meV (talasna dužina od 6.2 μm). Za $\Delta = 15\%$ intenzivna apsorpcija postiže se za debljine bafer sloja od $t = 110$ nm do oko 160 nm sa apsolutnim maksimumom za $t = 120$ nm. Maksimalna vrednost apsorpcije je oko tri puta manja nego za $\Delta = 5\%$. Konačno, za $\Delta = 30\%$ maksimalna vrednost se postiže za $t \approx 80$ nm, ali u veoma uskom spektralnom opsegu na oko 180 meV (6.89 μm), dok se



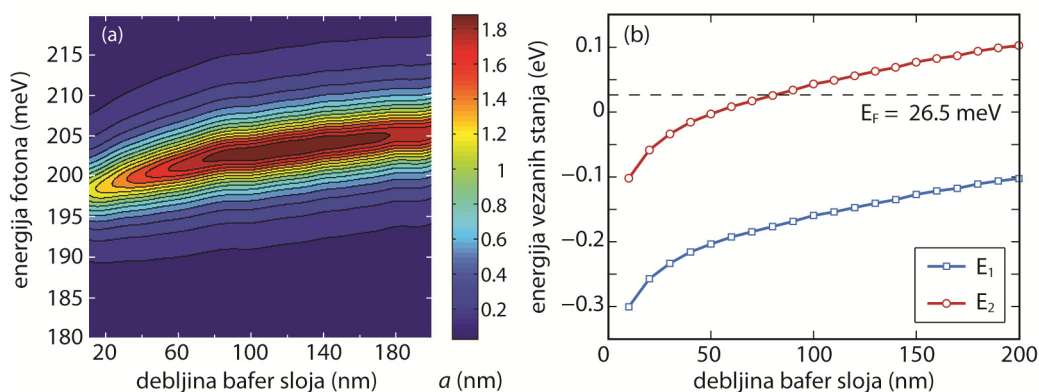
Sl. 82. Usrednjeni spektar apsorpcije ansambla kvantnih crta sa fluktuacijom (a) $\Delta = 5\%$, (b) $\Delta = 15\%$ i (c) $\Delta = 30\%$ u zavisnosti od debljine bafer sloja.

vrednosti bliske maksimalnoj u dosta širem spektralnom opsegu (od 157 do 172 meV) postižu za debljinu bafer sloja $t = 120$ nm. Maksimalna apsorpcija je u ovom slučaju oko 4 puta manja nego za $\Delta = 5\%$.

Određivanje optimalne debljine bafer sloja je od značaja prilikom projektovanja fotodetektora, a imajući u vidu vezu koja postoji između pojačanja i apsorpcije, izvedeni zaključci se mogu primeniti i na projektovanje aktivnih oblasti poluprovodničkih lasera na bazi kvantnih crta. Međutim, primenjeni metod, koji određuje optimalnu debljinu bafer sloja za ansamble kvantnih crta sa prisutnim fluktuacijama u dimenzijama, je veoma zahtevan sa stanovišta vremena izračunavanja, pošto predviđa samosaglasni proračun elektronske strukture za svaku od kvantnih crta u ansamblu. Za velike fluktuacije po dimenzijama ($\Delta = 30\%$), dovoljno sitna diskretizacija raspodele po dimenzijama koja omogućava određivanje zadovoljavajuće funkcije za fitovanje izračunatih apsorpcija, uslovljava samosaglasno proračunavanje elektronske strukture za nešto više od 200 kvantnih crta različitih dimenzija. Naravno, broj kvantnih crta u ansamblu je značajno manji za $\Delta = 5\%$, što proračun optimalne debljine bafer sloja za taj slučaj čini dosta efikasnijim. Kako se za sve tri fluktuacije dimenzija optimalna debljina bafer sloja može grubo proceniti na $t = 120$ nm, može se zaključiti da se relativno dobra procena optimalne debljine bafer sloja može izvršiti na osnovu rezultata dobijenih za malu fluktuaciju po dimenzijama. U tom smislu, postavlja se pitanje koliko dobru procenu optimalne debljine je moguće dobiti analizom apsorpcije za izolovane kvantne crte sa dimenzijama koje odgovaraju srednjim vrednostima raspodele po dimenzijama u ansamblu?

Na Sl. 83(a) prikazana je zavisnost apsorpcije od energije fotona i debljine bafer sloja za izolovane kvantne crte dimenzija $w = 14$ nm, $h = 3$ nm i $d = 0.5$ nm. Može se uočiti da se oblast visoke apsorpcije dobija za debljine bafer sloja od $t = 80$ do 170 nm. Najmanja vrednost debljine bafer sloja za koju se postiže intenzivna apsorpcija javlja se kada je energija drugog vezanog stanja neposredno iznad Fermijevog nivoa [Sl. 83(b)]. Međutim, detaljnom inspekcijom može se utvrditi da maksimalna vrednost apsorpcije odgovara debljini $t = 120$ nm, za koju se energija drugog vezanog stanja nalazi 30-tak meV iznad Fermijevog nivoa. Ovaj rezultat se poklapa sa rezultatima koji su dobijeni za ansamble kvantnih crta sa prisutnim fluktuacijama, iako je sa povećanjem debljine bafer sloja plavi pomeraj spektra dosta izraženiji nego za $\Delta = 5\%$ [Sl. 82(a)]. Na osnovu ovog

poređenja, može se zaključiti da se za određivanje optimalne debljine bafer sloja, praktično može koristiti efikasan proračun koji ne uzima u obzir fluktuacije dimenzija, što značajno skraćuje vreme izračunavanja. Naravno, treba imati u vidu da bi za nešto veću srednju dimenziju kvantnih crta u ansamblu, optimalna debljina bafer sloja dobijena za srednje vrednosti dimenzija kvantne crte mogla značajnije da odstupa od optimalnih vrednosti za ansamble sa izraženim fluktuacijama i to utoliko više, koliko je fluktuacija po dimenzijama više izražena, što ovakvoj aproksimativnoj proceni optimalne debljine ograničava primenljivost.



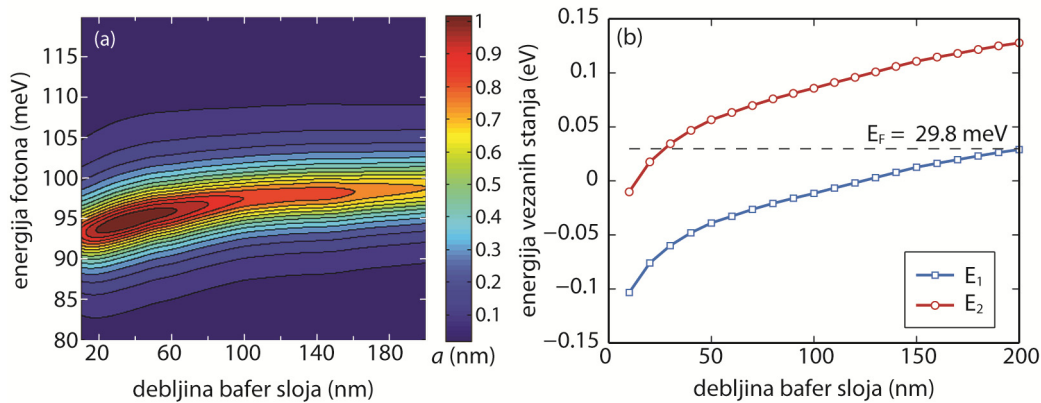
Sl. 83. (a) Spektar apsorpcije i (b) energije vezanih stanja za kvantnu crtu sa dimenzijama $w = 14$ nm, $h = 3$ nm i $d = 0.5$ nm u zavisnosti od debljine bafer sloja.

Dosta dobra procena optimalne debljine bafer sloja na osnovu proračuna koji ne uzima u obzir fluktuacije dimenzija kvantnih crta u ansamblu, pruža mogućnost da se ovakav efikasniji proračun primeni za procenu debljine bafer sloja za InAs/InAlGaAs materijalni sistem sa istim geometrijskim parametrima kvantnih crta i za istu koncentraciju primesa u dopiranim i slabo-dopiranim oblastima. Međutim, pokazuje se da, nakon samosaglasnog proračuna, kvantne crte sa dimenzijama $w = 14$ nm i $h = 3$ nm, zbog dosta manje vrednosti diskontinuiteta zona (dubine potencijalne jame) u ovom materijalnom sistemu, omogućavaju formiranje samo osnovnog vezanog stanja, pa ova dimenzija ne doprinosi apsorpciji.

Iz tog razloga, analiza za InAs/InAlGaAs materijalni sistem je sprovedena za ansamble sa nešto većim srednjim dimenzijama, u prvom slučaju za $w = 20$ nm i $h = 4$ nm, a zatim i za $w = 25$ nm i $h = 5$ nm [41]. Optimalna debljina je procenjena na osnovu

apsorpcije u kvantnoj crti sa dimenzijama koje odgovaraju srednjim dimenzijama ansambla. U ovom materijalnom sistemu Fermijev nivo se nalazi na $E_F = 29.8$ meV.

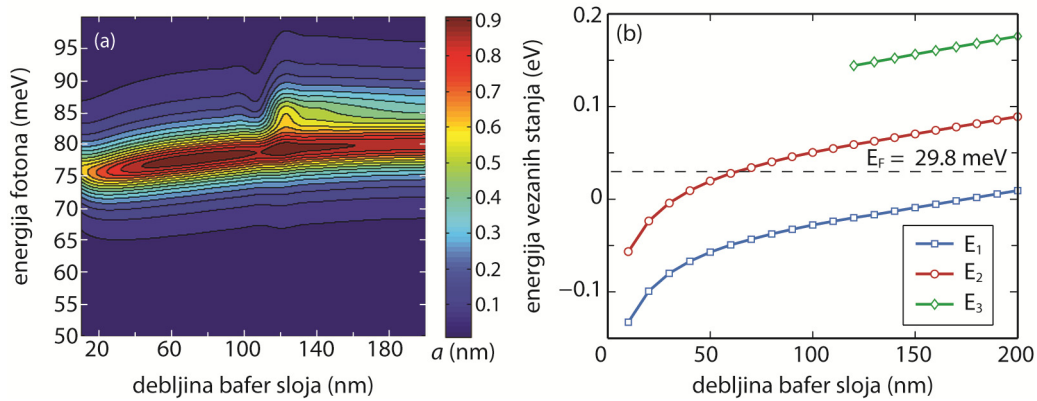
Povećanje srednjih dimenzija ansambla na $w = 20$ nm i $h = 4$ nm omogućava da se, u relativno plitkoj potencijalnoj jami, nakon samosaglasnog postupka, formiraju dva vezana stanja za sve vrednosti debljine bafer sloja od interesa. Zavisnost apsorpcionog spektra od debljine bafer sloja u osnovi je slična kao za InAs/GaAs materijalni sistem i jamu dimenzija $w = 14$ nm, $h = 3$ nm, sa tom razlikom što je oblast intenzivne apsorpcije pomerena ka manjim debljinama bafer sloja i javlja se za energiju prelaza od oko 95 meV (talasna dužina od oko 13 μ m) (Sl. 84(a)). Manja vrednost energije prelaza javlja se kao posledica većih dimenzija kvantne crte, za koje se energije vezanih stanja, kao i energetska razlika između njih, smanjuju. Sa druge strane, zbog male dubine potencijalne jame, energije vezanih stanja su više izdignute u odnosu na Fermijev nivo, pa je uslov da se energija drugog stanja nalazi iznad Fermijevog nivoa ispunjen već za $t = 30$ nm, što određuje početak oblasti intenzivne apsorpcije (Sl. 84(b)). Energija drugog vezanog stanja se nalazi iznad Fermijevog nivoa za oko 30 meV za debljinu bafer sloja od oko 40 nm, što određuje optimalnu debljinu za koju se javlja maksimum apsorpcije.



Sl. 84. (a) Spektar apsorpcije i (b) energije vezanih stanja, za InAs/InAlGaAs kvantnu crtu sa dimenzijama $w = 20$ nm, $h = 4$ nm i $d = 0.5$ nm u zavisnosti od debljine bafer sloja.

Za kvantnu crtu dimenzija $w = 25$ nm i $h = 5$ nm maksimalna vrednost apsorpcije se postiže za $t = 120$ nm, iako je apsorpcija dosta intenzivna u opsegu $t = 50$ nm do 150 nm (Sl. 85(a)). Relativno velika dimenzija kvantne crte, i pored male vrednosti diskontinuiteta zone, omogućava da se za veće debljine bafer sloja ($t > 110$ nm) u jamu smeste tri vezana stanja (Sl. 85(b)), što dovodi do širenja apsorpcionog spektra.

Međutim, energetska razlika između prvog i drugog stanja je dosta bliska razlici između drugog i trećeg energetskog stanja, što dovodi do toga da se u spektru apsorpcije formira jedan izolovan apsorpcioni pik. Vrednost maksimalne apsorpcije se i u ovom slučaju može povezati sa debljinom bafer sloja za koju se energija drugog stanja nalazi oko 30 meV iznad Fermijevog nivoa. Pored toga, velike dimenzije kvantne crte dodatno spuštaju energiju prelaza u odnosu na prethodni slučaj, pa se talasna dužina za koju se javlja maksimum apsorpcije pomera na blizu 16 μm . Ova talasna dužina emisije odgovara dalekom infracrvenom zračenju i potvrđuje da se apsorpcioni spektar može prilagođavati u širokom opsegu srednje i daleke infracrvene oblasti, izborom materijalnog sistema i finim podešavanjem nominalnih debljina InAs prilikom narastanja kvantnih crta.



Sl. 85. (a) Spektar apsorpcije i (b) energije vezanih stanja, za InAs/InAlGaAs kvantnu crtu sa dimenzijama $w = 25 \text{ nm}$, $h = 5 \text{ nm}$ i $d = 0.5 \text{ nm}$ u zavisnosti od debljine bafer sloja.

Relativno velika srednja dimenzija kvantnih crta u ansamblima sa većim fluktuacijama po dimenzijama ($\Delta > 5\%$), omogućava da usrednjenoj apsorpciji ansambla doprinosi veliki broj kvantnih crta sa tri ili čak i više vezanih energetskih stanja. Iz tog razloga, vrednost optimalne debljine bafer sloja za ansambl može značajnije da odstupa od vrednosti procenjene na osnovu kvantne crte sa srednjim dimenzijama, pa ovakvoj vrsti aproksimativne procene treba pristupiti oprezno.

ZAKLJUČAK

U proteklih nekoliko godina došlo je do nagle ekspanzije istraživanja u oblasti tehnologija vezanih za srednji i daleki infracrveni spektralni opseg elektromagnetskog zračenja. Uređaji koji baziraju svoj rad u ovom spektralnom opsegu postaju osnova za veliki broj različitih aplikacija, koje između ostalog uključuju informaciono-komunikacione tehnologije, hemijska, biološka i medicinska istraživanja, nedestruktivne metode evaluacije, sigurnosne sisteme, kontrolu kvaliteta, astronomska posmatranja, kao i ekologiju i monitoring globalnog prirodnog okruženja. Uprkos velikog broja potencijalnih primena, ova spektralna oblast je još uvek nedovoljno eksploatisana, prvenstveno usled poteškoća u razvoju praktičnih, kompaktnih i jeftinih poluprovodničkih izvora i detektora.

Realizacija novih koherentnih poluprovodničkih izvora i detektora zračenja u infracrvenom i terahercnom spektralnom opsegu zasniva se na primeni nanostrukture koje mogu da obezbede redukciju rasejanja elektrona sa viših energetske nivoa putem longitudinalnih optičkih fonona. Jedan od načina da se to postigne zasniva se na povećanju stepena kvantnog konfiniranja u nanostrukturama, što se može postići primenom kvantnih tačaka i crta. Proučavanje kvantnih crta kao potencijalnih kandidata u ovim primenama zahteva za početak poznavanje njihovog apsorpcionog spektra i njegovu zavisnost od tehnoloških i geometrijskih parametara. U tom pogledu, rezultati ovog rada mogu predstavljati jedan od značajnih koraka u daljem unapređenju infracrvenih fotodetektora i kvantno-kaskadnih lasera.

U okviru ove disertacije predložen je kompletan fizičko-matematički model namenjen za određivanje spektra unutarzonske apsorpcije ansambla kvantnih crta. Model za određivanje elektronske strukture je baziran na samosaglasnom rešavanju jednozonske Schrödinger-ove i Poisson-ove jednačine, dok se unutarzonska apsorpcija određuje u dipolnoj aproksimaciji. Prikazana je numerička implementacija ovog modela, kao i rezultati koji iz modela proističu. Dobijeni rezultati su detaljno analizirani i diskutovani sa stanovišta održivosti polaznih hipoteza. Na osnovu prikazanih rezultata moguće je prepoznati osnovne doprinose ove disertacije:

ZAKLJUČAK

- Predložen je i formulisan kompletan dvodimenzionalni model za proračun zonske strukture i unutarzonske apsorpcije u nanostrukturama sa asimetričnim i/ili nepravilnim poprečnim presekom.
- Predložen je metod za određivanje elektronske zonske strukture na bazi kombinacije metoda koordinatnog preslikavanja i konačnih razlika, koji omogućava analizu izolovanih kvantnih crta i periodičnih nizova identičnih kvantnih crta. Testiranjem ovog metoda potvrđena je zadovoljavajuća konvergencija i efikasnost u poređenju sa metodom konačnih elemenata.
- Model je numerički implementiran primenom metode konačnih elemenata, čime je omogućeno efikasno, simultano i samosaglasno rešavanje dvodimenzionalne Schrödinger-ove i nelinearne Poisson-ove jednačine izvan aproksimacije totalnog osiromašanja. Prisustvo slobodnog naelektrisanja u velikoj meri utiče na profil zone i konfiniranje nosilaca, pa primenjeni metod uključuje u proračun uticaj slobodnih nosilaca na konfinirajući potencijal, a shodno tome i na apsorpcioni spektar. Uticaj Hartree potencijala se ogleda u smanjenju stepena konfiniranja, zatim broja vezanih stanja i konačno same apsorpcije.
- Analiziran je uticaj međusobne kvantno-mehaničke sprege na mini-zonsku strukturu u periodičnom nizu identičnih kvantnih crta. Na osnovu rezultata je zaključeno da je za standardne dimenzije kvantnih crta u ansamblu, čak i za relativno mala rastojanja između susednih kvantnih crta (oko 20 nm), mini-zonska struktura slabo izražena i da se vezana stanja, koja nisu pri samom vrhu jame, mogu tretirati kao diskretni energetski nivoi. Ovaj zaključak posebno dobija na značaju kada se zonska struktura određuje samosaglasnim postupkom.
- Elektronska struktura i spektar unutarzonske apsorpcije detaljno su analizirani sa aspekta uticaja vlažećeg sloja, koji se neizostavno javlja prilikom fabrikacije nanostrukture Stranski-Krastanov metodom. Pokazano je da, i pored relativno malih debljina vlažećeg sloja, njegovo prisustvo značajno utiče na unutarzonski spektar, tako što kroz smanjenje stepena konfiniranja u kvantnim crtama dovodi do smanjenja apsorpcije i pojave crvenog pomeraja u spektru apsorpcije.
- Pokazano je da se, za usvojenu Gausovu raspodelu kvantnih crta u ansamblu sa izraženim fluktuacijama po dimenzijama, egzaktan apsorpcioni spektar, dobijen

usrednjavanjem spektra pojedinačnih kvantnih crta u ansamblu, može aproksimirati sumom od nekoliko pomerenih Gausovih raspodela.

- Analizom usrednjenog spektra apsorpcije, pokazano je da ansamblu samo-organizovanih InAs kvantnih crta na GaAs supstratu obezbeđuju intenzivnu interakciju kvantnih crta sa elektromagnetskim poljem u srednjem infracrvenom području, u opsegu talasnih dužina od 4 do 12 μm .
- Pokazano je da apsorpcioni spektar ispoljava izraženu asimetriju u odnosu na polarizaciju incidentnog električnog vektora elektromagnetskog polja, što je posledica anizotropije zonske strukture i razlike u stepenu konfiniranja jamske oblasti, a što je u osnovi posledica asimetrije profila poprečnog preseka strukture. Analizom apsorpcionog spektra za dva međusobno ortogonalna pravca polarizacije upadne svetlosti, utvrđeno je da je intenzitet apsorpcije svetlosti polarizovane u pravcu izraženijeg konfiniranja elektrona za nekoliko redova veličine manji nego za pravac slabijeg konfiniranja, budući da u zonskoj strukturi dominiraju energetske nivoi koje dominantno određuje pravac slabijeg konfiniranja.
- Analiza uticaja fluktuacija po dimenzijama u ansamblu kvantnih crta pokazala je da povećanje fluktuacija dovodi do širenja apsorpcionog spektra, koji postaje sve više asimetričan i zaravnjen. Za male fluktuacije po dimenzijama, spektar ansambla u velikoj meri zadržava osobine spektra kvantne crte sa najvećom zastupljenošću u ansamblu.
- Analiziran je uticaj izbora geometrijskog oblika kojim se aproksimira poprečni presek kvantnih crta u ansamblu na apsorpcioni spektar. Definirani su kriterijumi ekvivalencije geometrijskih oblika. Analiza je pokazala da sočivasti i trapezni oblik daju veoma dobro poklapanje spektara, dok je za trougaoni profil spektar nešto intenzivniji i pomeren ka manjim energijama. Pokazano je da je u literaturi uobičajeno korišćena pravougaona aproksimacija profila poprečnog preseka kvantnih crta, opravdana samo za relativno male fluktuacije dimenzija u ansamblu.
- Analiziran je uticaj položaja sloja kvantnih crta u odnosu na dopirane delove strukture koji obezbeđuju naelektrisanje neophodno za apsorpciju, a zatim je izvršena optimizacija geometrije strukture u cilju ostvarivanja maksimalne

apsorpcije. Pokazano je da se maksimum apsorpcije za InAs/GaAs ansambl kvantnih crta sa srednjim dimenzijama poprečnog preseka od 14×3 nm, ostvaruje za bafer sloj debljine od oko 120 nm.

- Pokazano je da se dobra procena optimalne dimenzije bafer sloja za ansamble sa relativno malim fluktuacijama u dimenzijama može ostvariti na osnovu razmatranja apsorpcije u funkciji od dimenzije bafer sloja za jednu kvantnu crtu, čije dimenzije odgovaraju srednjim dimenzijama ansambla.
- Procena optimalne dimenzije bafer sloja za InAs/InAlGaAs ansamble kvantnih crta, zbog manje razlike u diskontinuitetima provodnih zona, izvršena je za ansamble sa većim srednjim dimenzijama, 20×4 nm i 25×5 nm. Pokazano je da se u tom slučaju maksimum apsorpcije pomera na veće talasne dužine, u opseg od 13 do 16 μm .

Formirani modeli na osnovu kojih su izvršena izračunavanja i rezultati koji proističu iz njih, detaljno opisuju kvantne crte u pogledu spektralnih karakteristika u srednjoj infracrvenoj oblasti. Međutim, jedini relevantni mehanizam procene kvaliteta predloženih modela i održivosti izvedenih zaključaka je poređenje sa eksperimentalnim rezultatima, koji još uvek nisu prisutni u literaturi. Određena sličnost koja postoji između kvantnih crta i kvantnih tačaka sa jedne, a kvantnih žica sa druge strane, u osnovi daje potvrdu rezultata ostvarenih u okviru ovog rada. Sa aspekta eksperimentalnog istraživanja od najvećeg interesa su doprinosi koji se tiču utvrđivanja uticaja fluktuacije dimenzija kvantnih crta u ansamblu na spektar unutarzonske apsorpcije, utvrđivanje uticaja vlažećeg sloja na apsorpcioni spektar i određivanje karaktera promene apsorpcionog spektra od širine oblasti koja odvaja ansambl kvantnih crta od dopiranih slojeva, primenjene u cilju optimizacije za koju se postiže maksimalna apsorpcija.

Rezultati koji prate ove doprinose iskazuju veoma interesantne trendove, koji nisu u potpunosti intuitivno predvidljivi i mogu biti od pomoći tokom dizajna i fabrikacije poluprovodničkih kvantnih crta sa optimizovanim karakteristikama spektra unutarzonske apsorpcije.

Literatura

- [1] Y. Bonetti and J. Faist, "Entering the mid-infrared," *Nature Photonics*, Vol. **3**, 2009, pp. 32- 35.
- [2] G. C. Holst, and S. W. McHugh, "Review of thermal imaging system performance," *Proceedings of SPIE*, 1992, pp. 78-84.
- [3] H. B. Gray, "Chemical Bonds: An Introduction to Atomic and Molecular Structure," *University Science Books*, 1994.
- [4] L. Labadie, and O. Wallner, "Mid-infrared guided optics: a perspective for astronomical instruments," *Optics Express*, Vol. **17**, 2009, pp. 1947–1962.
- [5] P. Werle, P. F. Slemr, K. Maurer, R. Kormann, R. Mucke, and B. Janker, "Near- and mid-infrared laser-optical sensors for gas analysis," *Optics and Lasers in Engineering*, Vol. **37**, 2002, pp. 101-114.
- [6] K. Namjou, C. B. Roller, and P. J. McCann, "The Breathmeter: a new laser device to analyze your health," *IEEE Circuits and Devices Magazine*, Vol. **22**, 2006, pp. 22–28.
- [7] U. Willer, M. Saraji, A. Khorsandi, P. Geiser, and W. Schade, "Near- and midinfrared laser monitoring of industrial processes, environment and security applications," *Optical Laser Engineering*, Vol. **44**, 2006, pp. 699–710.
- [8] F. Rotermund, V. Petrov, and F. Noack, "Difference-frequency generation of intense femtosecond pulses in the mid-IR using HgGa₂S₄ and AgGaS₂," *Optics Communications*, Vol. **185**, 2000, pp. 177-183.
- [9] W. Lei and C. Jagadish, "Lasers and photodetectors for mid-infrared 2–3 μm applications," *Journal of Applied Physics*, Vol. **104**, 2008, pp. 091101.
- [10] M. Tacke, "Lead-salt lasers," *Philosophical Transactions: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. **359**, 2000, pp. 547-566.
- [11] J. Piotrowski, A. Rogalski, "New generation of infrared photodetectors," *Sensors and Actuators A*, Vol. **67**, 1998, pp. 146-152.

LITERATURA

- [12] The Federation of American Scientists, “AN/AAQ-24 Directional Infrared Countermeasures (DIRCM),” <http://www.fas.org/man/dod-101/sys/ac/equip/an-aaq-24.htm>
- [13] D. S. Moore, “Instrumentation for trace detection of high explosives,” *Review of Scientific Instrumentation*, Vol. **75**, 2004, pp. 2499–2512.
- [14] F. Capasso, et al., “Quantum cascade lasers: ultrahigh-speed operation, optical wireless communication, narrow linewidth, and far-infrared emission,” *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. **38**, 2002, pp. 511–532.
- [15] R. Soref, “Mid-infrared photonics in silicon and germanium,” *Nature Photonics*, Vol. **4**, 2010, pp. 495–497.
- [16] B. Jalali, “Nonlinear optics in the mid-infrared,” *Nature Photonics*, Vol. **4**, 2010, pp. 506–608.
- [17] T. Baehr-Jones, A. Spott, R. Ilic, A. Spott, B. Penkov, W. Asher and M. Hochberg, “Silicon-on-sapphire integrated waveguides for the mid-infrared,” *Optic Express*, Vol. **18**, 2010, pp. 12127–12135.
- [18] S. Stankovic, M. Milosevic, B. Timotijevic, P. Y. Yang, E. J. Teo, J. Crnjanski, P. Matavulj, and G. Z. Mashanovich, “Silicon Photonic Waveguides for Near- and Mid-Infrared Regions,” *Acta Physica Polonica-Series A*, Vol. **112**, 2007, pp. 1019–1024.
- [19] P. Y. Yang, S. Stankovic, J. Crnjanski, E. J. Teo, D. Thomson, A. A. Bettiol, M. B. H. Breese, W. Headley, C. Giusca, G. T. Reed and G. Z. Mashanovich, “Silicon photonic waveguides for mid- and long-wave infrared region,” *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, Vol. **20**, 2009, pp. 159–163.
- [20] R. Won, “Shining in the mid-infrared,” *Nature Photonics*, Vol. **5**, 2011, pp. 457–458.
- [21] M. Beck, et al., “Continuous wave operation of a mid-infrared semiconductor laser at room temperature,” *Science*, Vol. **295**, 2002, pp. 301–305.
- [22] C. Gmachl, D. L. Sivco, R. Colombelli, F. Capasso and A. Y. Cho, “Ultra-broadband semiconductor laser,” *Nature*, Vol. **415**, 2002, pp. 883–887.

LITERATURA

- [23] Alpes Lasers, “Lasers In Stock,” <http://www.alpeslasers.com/lasers-on-stock/index.html>.
- [24] A. Lyakh, C. Pflugl, L. Diehl, Q. J. Wang, F. Capasso, X. J. Wang, J. Y. Fan, T. Tanbun-Ek, R. Maulini, A. Tsekoun, R. Go, and C. K. N. Patel, “1.6 W high wall plug efficiency, continuous-wave room temperature quantum cascade laser emitting at 4.6 μm ,” *Applied Physics Letters*, Vol. **92**, 2008, pp. 111110.
- [25] The Scott Partnership, “Mid-infrared lasers,” *Nature Photonics*, Vol. **4**, 2010, pp. 576-577.
- [26] Y. Yao, A. J. Hoffman, and C. F. Gmachl, “Mid-infrared quantum cascade lasers,” *Nature Photonics*, Vol. **6**, 2012, pp. 432-439.
- [27] R. Köhler, A. Tredicucci, F. Beltram, H. E. Beere, E. H. Linfield, A. Giles Davies, D. A. Ritchie, R. C. Iotti, and F. Rossi, “Terahertz semiconductor heterostructure laser,” *Nature*, Vol. **417**, 2002, pp. 156-159.
- [28] E. Linfield, “Terahertz applications: A source of fresh hope,” *Nature Photonics*, Vol. **1**, 2007, pp. 257-258.
- [29] M. A. Belkin, F. Capasso, A. Belyanin, D. L. Sivco, A. Y. Cho, D. C. Oakley, C. J. Vineis, and G. W. Turner, “Terahertz quantum-cascade-laser source based on intracavity difference-frequency generation,” *Nature Photonics*, Vol. **1**, 2007, pp. 288-292.
- [30] Tahsin Akalin “Powerful photomixers,” *Nature Photonics*, Vol. **6**, 2012, pp. 81.
- [31] P. Bhattacharya, X. Su, G. Ariyawansa, A.G.U. Perera, “High-Temperature Tunneling Quantum-Dot Intersublevel Detectors for Mid-Infrared to Terahertz Frequencies,” *Proceedings of the IEEE*, Vol. **95**, 2007, pp. 1828-1837.
- [32] S. Krishna “Quantum dots-in-a-well infrared photodetectors,” *Journal of Physics D*, Vol. **38**, 2005, pp. 2142-2150.
- [33] S. Chakrabarti, A. D. Stiff-Roberts, X. H. Su, P. Bhattacharya, G. Ariyawansa, and A. G. U. Perera, “High-performance mid-infrared quantum dot infrared photodetectors,” *Journal of Physics D*, Vol. **38**, 2005, pp. 2135-2141.

LITERATURA

- [34] H. Lim, S. Tsao, W. Zhang, and M. Razeghi, "High-performance InAs quantum-dot infrared photodetectors grown on InP substrate operating at room temperature," *Applied Physics Letters*, Vol. **90**, 2007, pp. 131112.
- [35] A. Tredicucci, "Long life in zero dimensions," *Nature Materials*, Vol. **8**, 2009, pp. 775-776.
- [36] E. A. Zibik, T. Grange, B. A. Carpenter, N. E. Porter, R. Ferreira, G. Bastard, D. Stehr, S. Winnerl, M. Helm, H. Y. Liu, M. S. Skolnick, L. R. Wilson, "Long lifetimes of quantum-dot intersublevel transitions in the terahertz range," *Nature Materials*, Vol. **8**, 2009, pp. 803-807.
- [37] D. Wasserman, T. Ribaudo, S. A. Lyon, S. K. Lyo, and E. A. Shaner, "Room temperature midinfrared electroluminescence from InAs quantum dots," *Applied Physics Letters*, Vol. **94**, 2009, pp. 061101.
- [38] I. A. Dmitriev, R. A. Suris, "Quantum dot cascade laser: Arguments in favor," *Physica E*, Vol. **40**, 2008, pp. 2007-2009.
- [39] J. P. Reithmaier, G. Eisenstein, A. Forchel, "InAs/InP Quantum-Dash Lasers and Amplifiers," *Proceedings of the IEEE*, Vol. **95**, 2007, pp. 1779-1790.
- [40] J. P. Reithmaier, A. Somers, S. Deubert, R. Schwertberger, W. Kaiser, A. Forchel, M. Calligaro, P. Resneau, O. Parillaud, S. Bansropun, M. Krakowski, R. Alizon, D. Hadass, A. Bilenca, H. Dery, V. Mikhelashvili, G. Eisenstein, M. Gioannini, I. Montrosset, T. W. Berg, M. van der Poel, J. Mørk, and B. Tromborg, "InP based lasers and optical amplifiers with wire-/dot-like active regions," *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. **38**, 2005, pp. 2088-2102.
- [41] J. H. Wei, K. S. Chan, "A theoretical analysis of quantum dash structures," *Journal of Applied Physics*, Vol. **97**, 2005, pp. 123524-123535.
- [42] L. C. Lew, Y. Voon and M. Willatzen, "Intersubband Optics in Parabolic Quantum Dots," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. **39**, 2003, pp. 1424-1429.
- [43] E. Kapon, "Quantum wire lasers," *Proceedings of the IEEE*, Vol. **80**, 1992, pp. 398-410.

LITERATURA

- [44] J. C. Yi, N. Dagli, "Finite-element analysis of valence band structure and optical properties of quantum-wire arrays on vicinal substrates," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. **31**, 1995, pp. 208–218.
- [45] D. M. Gvozdić and A. Schlachetzki, "Influence of Temperature and Optical Confinement on Threshold Current of an InGaAs/InP Quantum Wire Laser," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Vol. **9**, 2003, pp. 732–735.
- [46] H. Dery and G. Eisenstein, "Why is the room temperature optical differential gain of zero, one and two dimensional semiconductor lasers nearly identical", *Proceedings of the Conference on Lasers & Electro-Optics*, 2005, pp. 710-712.
- [47] J. X. Kong, Q. S. Zhu, B. Xu, and Z. G. Wang, "Experimental and theoretical study for InAs quantum dashes-in-a-step-well structure on (001)-oriented InP substrate," *Journal of Applied Physics*, Vol. **109**, 2011, pp. 084345.
- [48] V. Liverini, A. Bismuto, L. Nevou, M. Beck, and J. Faist, "Midinfrared electroluminescence from InAs/InP quantum dashes," *Applied Physics Letters*, Vol. **97**, 2010, pp. 221109.
- [49] P. Bhattacharya, and Z. Mi, "Quantum-Dot Optoelectronic Devices," *Proceedings of the IEEE*, Vol. **95**, 2007, pp. 1723-1740.
- [50] S. Fathpour, Z. Mi and P. Bhattacharya, "High-speed quantum dot lasers," *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. **38**, 2005, pp. 2103-2111.
- [51] R. H. Wang, A. Stintz, P. M. Varangis, T. C. Newell, H. Li, K. J. Malloy, and L. F. Lester, "Room-Temperature Operation of InAs Quantum-Dash Lasers on InP (001)," *IEEE Photonics Technology Letters*, Vol. **13**, 2001, pp. 767-769,
- [52] Z. Mi, P. Bhattacharya, and J. Yang, "Growth and characteristics of ultra-low threshold 1.45 μm metamorphic InAs tunnel injection quantum dot lasers on GaAs," *Applied Physics Letters*, Vol. **89**, 2006, pp. 153109.
- [53] H. Dery, E. Benisty, A. Epstein, R. Alizon, V. Mikhelashvili, G. Eisenstein, R. Schwertberger, D. Gold, J. P. Reithmaier, and A. Forchel, "On the nature of quantum dash structures," *Journal of Applied Physics*, Vol. **95**, 2004, pp. 6103-6111.

LITERATURA

- [54] M. Gioannini, "Numerical Modeling of the Emission Characteristics of Semiconductor Quantum Dash Materials for Lasers and Optical Amplifiers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. **40**, 2004, pp. 364-373.
- [55] A. Lenz, F. Genz, H. Eisele, L. Ivanova, R. Timm, D. Franke, H. Künzel, U. W. Pohl, and M. Dähne, "Formation of InAs/InGaAsP quantum-dashes on InP(001)," *Applied Physics Letters*, Vol. **95**, 2009, pp. 203105.
- [56] S. P. Guo, H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, and Y. Ohno, "InAs self-organized quantum dashes grown on GaAs (211)B," *Applied Physics Letters*, Vol. **70**, 1997, pp. 2738-2740.
- [57] D. Zhou, R. Piron, M. Dontabactouny, O. Dehaese, F. Grillot, T. Batte, K. Tavernier, J. Even, and S. Loualiche, "Low threshold current density of InAs quantum dash laser on InP (100) through optimizing double cap technique," *Applied Physics Letters*, Vol. **94**, 2009, pp. 081107.
- [58] D. J. Kim and H. Yang, "Shape control of InGaAs nanostructures on nominal GaAs(001): dashes and dots," *Nanotechnology*, Vol. **19**, 2008, pp. 475601.
- [59] W. Lei, H. H. Tan, and C. Jagadish, "Effect of matrix material on the morphology and optical properties of InP-based InAsSb nanostructures," *Applied Physics Letters*, Vol. **95**, 2009, pp. 143124.
- [60] G. Balakrishnan, S. Huang, T. J. Rotter, A. Stintz, L. R. Dawson, K. J. Malloy, H. Xu, and D. L. Huffaker, "2.0 μm wavelength InAs quantum dashes grown on a GaAs substrate using a metamorphic buffer layer," *Applied Physics Letters*, Vol. **84**, 2004, pp. 2058-2060.
- [61] F. Lelarge, B. Dagens, J. Renaudier, R. Brenot, A. Accard, F. van Dijk, D. Make, O. Le Gouezigou, J.-G. Provost, F. Poingt, J. Landreau, O. Drisse, E. Derouin, B. Rousseau, F. Pommereau, and G.-H. Duan, "Recent Advances on InAs/InP Quantum Dash Based Semiconductor Lasers and Optical Amplifiers Operating at 1.55 μm ," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Vol. **13**, 2007, pp. 111-124.
- [62] S. Azouigui, B. Dagens, F. Lelarge, A. Accard, D. Make, O. Le Gouezigou, K. Merghem, A. Martinez, Q. Zou, and A. Ramdane, "Systematic investigation of

- InAs/InP quantum-dash based lasers under external optical feedback,” *Applied Physics Letters*, Vol. **92**, 2008, pp. 201106.
- [63] G. Sęk, P. Poloczek, P. Podemski, R. Kudrawiec, J. Misiewicz, A. Somers, S. Hein, S. Höfling, and A. Forchel, “Experimental evidence on quantum well–quantum dash energy transfer in tunnel injection structures for 1.55 μm emission,” *Applied Physics Letters*, Vol. **90**, 2007, pp. 081915.
- [64] Z. Mi and P. Bhattacharya, “DC and Dynamic Characteristics of P-Doped and Tunnel Injection 1.65 μm InAs Quantum-Dash Lasers Grown on InP (001),” *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. **42**, 2006, pp. 1225-1232.
- [65] M. Gioannini, “Analysis of the Optical Gain Characteristics of Semiconductor Quantum-Dash Materials Including the Band Structure Modifications Due to the Wetting Layer,” *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. **42**, 2006, pp. 331-340.
- [66] B. S. Ooi, H. S. Djie, Y. Wang, C.-L. Tan, J. C. M. Hwang, X.-M. Fang, J. M. Fastenau, A. W. K. Liu, G. T. Dang, and W. H. Chang, “Quantum Dashes on InP Substrate for Broadband Emitter Applications,” *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Vol. **14**, 2008, pp. 1230-1238.
- [67] H. S. Djie, C. L. Tan, B. S. Ooi, J. C. M. Hwang, X.-M. Fang, Y. Wu, J. M. Fastenau, W. K. Liu, G. T. Dang and W. H. Chang, “Ultrabroad stimulated emission from quantum-dash laser,” *Applied Physics Letters*, Vol. **91**, 2007, pp. 11116.
- [68] P. Podemski, G. Sęk, K. Ryczko, J. Misiewicz, S. Hein, S. Höfling, A. Forchel, and G. Patriarche, “Columnar quantum dashes for an active region in polarization independent semiconductor optical amplifiers at 1.55 μm ,” *Applied Physics Letters*, Vol. **93**, 2008, pp. 171910.
- [69] S. Hein, P. Podemski, G. Sęk, J. Misiewicz, P. Ridha, A. Fiore, G. Patriarche, S. Höfling, and A. Forchel, “Orientation dependent emission properties of columnar quantum dash laser structures,” *Applied Physics Letters*, Vol. **94**, 2009, pp. 241113.

LITERATURA

- [70] A. Sauerwald, T. Kümmell, G. Bacher, A. Somers, R. Schwertberger, J. P. Reithmaier, and A. Forchel, "Size control of InAs quantum dashes," *Applied Physics Letters*, Vol. **86**, 2005, pp. 253112.
- [71] W. Rudno-Rudziński, G. Sęk, K. Ryczko, R. Kudrawiec, J. Misiewicz, A. Somers, R. Schwertberger, J. P. Reithmaier, and A. Forchel, "Optically probed wetting layer in InAs/InGaAlAs/InP quantum-dash structures," *Applied Physics Letters*, Vol. **86**, 2005, pp. 101904.
- [72] P. Miska, J. Even, C. Platz, B. Salem, T. Benyattou, C. Bru-Chevalier, G. Guillot, G. Bremond, Kh. Moumanis, F. H. Julien, O. Marty, C. Monat and M. Gendry, "Experimental and theoretical investigation of carrier confinement in InAs quantum dashes grown on InP(001)," *Journal of Applied Physics*, Vol. **95**, 2004, pp. 1074-1080.
- [73] S. C. Heck, S. B. Healy, S. Osborne, E. P. O'Reilly, F. Lelarge, F. Poingt, A. Accard, F. Pommereau, O. Le Gouezigou, and B. Dagens, "An analysis of 1.55 μm InAs/InP quantum dash lasers," *Applied Physics Letters*, Vol. **92**, 2008, pp. 251105.
- [74] A. A. Ukhanov, R. H. Wang, T. J. Rotter, A. Stintz, L. F. Lester, P. G. Eliseev, and K. J. Malloy, "Orientation dependence of the optical properties in InAs quantum-dash lasers on InP," *Applied Physics Letters*, Vol. **81**, 2002, pp. 981-983.
- [75] D. Bimberg, M. Grundmann, and N. N. Ledentsov, "Quantum Dot Heterostructures," Chichester, U.K.: Wiley, 1999.
- [76] L. W. Wang, A. J. Williamson, A. Zunger, H. Jiang, and J. Singh, "Comparison of k.p and direct diagonalization approaches to the electronic structure of InAs/GaAs quantum dots," *Applied Physics Letters*, Vol. **76**, 2000, pp. 339-341.
- [77] S. Arai, and T. Maruyama, "GaInAsP/InP Quantum Wire Lasers," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Vol. **15**, 2009, pp. 731-742.
- [78] T. Erneux, E. A. Viktorov, P. Mandel, S. Azouigui, and A. Ramdane, "Relaxation characteristics of quantum-dash-based semiconductor lasers," *Applied Physics Letters*, Vol. **95**, 2009, pp. 231107.

- [79] G. Moreau, S. Azouigui, D.-Y. Cong, K. Merghem, A. Martinez, G. Patriarche, A. Ramdane, F. Lelarge, B. Rousseau, B. Dagens, F. Poingt, A. Accard, F. Pommereau, "Effect of layer stacking and p-type doping on the performance of InAs/InP quantum-dash-in-a-well lasers emitting at 1.55 μm ," *Applied Physics Letters*, Vol. **89**, 2006, pp. 241123.
- [80] D. Hadass, A. Bilenca, R. Alizon, H. Dery, V. Mikhelashvili, G. Eisenstein, R. Schwerberger, A. Somers, J. P. Reithmaier, A. Forchel, M. Calligaro, S. Bansropun, and M. Krakowski, "Gain and Noise Saturation of Wide-Band InAs–InP Quantum Dash Optical Amplifiers: Model and Experiments," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Vol. **11**, 2005, pp. 1015-1026.
- [81] V. Liverini, A. Bismuto, L. Nevou, M. Beck, F. Grammb, E. Müller, J. Faist, "InAs/AlInAs quantum-dash cascade structures with electroluminescence in the mid-infrared," *Journal of Crystal Growth*, Vol. **323**, 2011, pp. 491-495.
- [82] T. Yamauchi, T. Takahashi, Y. Arakawa, "Tight binding analysis for quantumwire lasers and quantum-wire infrared detectors," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. **27**, 1991, pp. 1817–1823.
- [83] S. Pescetelli, A. D. Carlo, P. Lugli, "Conduction-band mixing in T and V-shaped quantum wires," *Physical Review B*, Vol. **56**, 1997, pp. R1668–R1671.
- [84] Z. Ikonić, V. Milanović, "Poluprovodničke kvantne mikrostrukture," Univerzitet u Beogradu, Beograd, (1997).
- [85] J. H. Davies, "The Physics of Low-Dimensional Semiconductors," Cambridge University Press, (1998).
- [86] S. L. Chuang, "Physics of Optoelectronic Devices," Wiley New York, 1995.
- [87] J. V. Crnjanski and D. M. Gvozdić, "Band structure and intersubband absorption in modulation-doped V-groove quantum wires," *Journal of Applied Physics*, Vol. **101**, 2007, pp. 013104.
- [88] D. Gvozdić and A. Schlachetzki, "Electronic states in the conduction band of V-groove quantum wires," *Journal of Applied Physics*, Vol. **92**, 2002, pp. 2023-2034.

LITERATURA

- [89] F. Vouilloz, D. Y. Oberli, M.-A. Dupertuis, A. Gustafsson, F. Reinhardt, and E. Kapon, "Effect of lateral confinement on valence-band mixing and polarization anisotropy in quantum wires," *Physical Review B*, Vol. **57**, 1998, pp. 12378-12387.
- [90] J. V. Crnjanski and D. M. Gvozdić, "Self - consistent treatment of V-groove quantum wire band structure in nonparabolic approximation," *Serbian Journal of Electrical Engineering*, 2004, Vol. **1**, pp. 69-77.
- [91] D. Huang and M.O. Manasreh, "Intersubband transitions in strained $\text{In}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{As}/\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ multiple quantum wells and their application to a two-colors photodetector," *Physical Review B*, Vol. **54**, 1996, pp. 5620-5628.
- [92] J. V. Crnjanski and D. M. Gvozdić, "Intersubband Absorption in Quantum Dash Nanostructures," *Acta Physica Polonica A*, Vol. **116**, 2009, pp. 668-671.
- [93] G. Goldoni, F. Rossi, E. Molinari and A. Fasolino, "Band structure and optical anisotropy in V-shaped and T-shaped semiconductor quantum wires," *Physical Review B*, Vol. **55**, 1997, pp. 7110-7123.
- [94] A. Sa'ar, S. Calderon, A. Givant, O. Ben-Shalom, E. Kapon, and C. Caneau, "Energy subbands, envelope states, and intersubband optical transitions in one-dimensional quantum wires: The local-envelope-states approach," *Physical Review B*, Vol. **54**, 1996, pp. 2675-2684.
- [95] M. Tadić and Z. Ikonić, "Self-consistent electronic-structure calculation of rectangular modulation-doped $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ quantum wires," *Physical Review B*, Vol. **50**, 1994, pp. 7680-7688.
- [96] I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan, "Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys," *Journal of Applied Physics*, Vol. **89**, 2001, pp. 5815-5875.
- [97] C. G. Van de Walle, "Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory," *Physical Review B*, Vol. **39**, 1989, pp. 1871-1883.
- [98] M. Ogawa, T. Kunimasa, T. Ito, T. Miyoshi, "Finite-element analysis of quantum wires with arbitrary cross sections," *Journal of Applied Physics*, Vol. **84**, 1998, pp. 3242-3249.

LITERATURA

- [99] D. M. Gvozdić, N. M. Nenadović, A. Schlachetzki, "Gain and threshold-current calculation of V-groove quantum-wire InGaAs-InP laser," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. **38**, 2002, pp. 1565–1579.
- [100] U. Ekenberg, D. M. Gvozdić, "Analysis of electric-field-induced spin splitting in wide modulation-doped quantum wells," *Physical Review B*, Vol. **78**, 2008, pp. 205317–205326.
- [101] C. Pryor, "Electronic structure and optical properties of serpentine superlattice quantum-wire arrays," *Physical Review B*, Vol. **44**, 1991, pp. 12912–12917.
- [102] T.-M. Hwang, W.-W. Lin, W.-C. Wang, W. Wang, "Numerical simulation of three dimensional pyramid quantum dot," *Journal of Computational Physics*, Vol. **196**, 2004, pp. 208–232.
- [103] C. J. Fall, M.-A. Dupertuis, E. Kapon, "Electronic states in hyperbolic-boundary crescent-shaped quantum wires," *Optical and Quantum Electronics*, Vol. **31**, 1999, pp. 201–213.
- [104] T.-M. Hwang, W.-C. Wang, W. Wang, "Numerical schemes for three-dimensional irregular shape quantum dots over curvilinear coordinate systems," *Journal of Computational Physics*, Vol. **226**, 2007, pp. 754–773.
- [105] G. Creci, G. Weber, "Electron and hole states in V-groove quantum wires: an effective potential calculation," *Semiconductor Science Technology*, Vol. **14**, 1999, pp. 690–694.
- [106] B. M. Stupovski, J. V. Crnjanski, and D. M. Gvozdić, "Miniband electronic structure of quantum dash array," *Journal of Applied Physics*, Vol. **112**, 2012, pp. 123716.
- [107] B.M. Stupovski, J.V. Crnjanski, D.M. Gvozdić, "Application of coordinate transformation and finite differences method in numerical modeling of quantum dash band structure," *Computer Physics Communication*, Vol. **182**, 2011, pp. 289-298.
- [108] Jasna V. Crnjanski, "Zonska struktura i unutarzonska apsorpcija V-olučenih kvantnih žica," magistarska teza, Beograd, (2007).

LITERATURA

- [109] D. M. Gvozdić and A. Schlachetzki, “Intersubband absorption in V-groove quantum wires,” *Journal of Applied Physics*, Vol. **94**, 2003, pp. 5049-5052.
- [110] V. Milanović, and Z. Ikonić, “Band structure of an effective-mass superlattice,” *Physical Review B*, Vol. **37**, 1988, pp. 7125-7128.
- [111] J. V. Crnjanski and D. M. Gvozdić, “Mid- and far-infrared intersubband absorption in quantum dash nanostructures,” *Applied Physics Letters*, Vol. **97**, 2010, pp. 091906.
- [112] J. V. Crnjanski, “Intersubband absorption in quantum dashes with various cross-section profiles,” *Physica Scripta*, Vol. **T149**, 2012, pp. 014034

BIOGRAFIJA AUTORA

Jasna Crnjanski je rođena 10. maja 1978. godine u Beogradu. Osnovnu školu i gimnaziju je završila u Beogradu. Elektrotehnički fakultet u Beogradu upisala je 1997. godine. Diplomirala je novembra 2002. godine, na smeru za Optoelektroniku i lasersku tehniku, ostvarivši prosečnu ocenu tokom studija 8,78. Maja 2004. godine izabrana je u zvanje asistenta-pripravnika na Katedri za mikroelektroniku i tehničku fiziku Elektrotehničkog fakulteta u Beogradu. U julu 2007. godine na Elektrotehničkom fakultetu u Beogradu odbranila je magistarski rad pod naslovom: "Zonska struktura i unutarzonska apsorpcija u V-olučenim kvantnim žicama" (mentor prof. dr Dejan Gvozdić). Unapređena je u zvanje asistenta u decembru 2007. godine. Do sada je autor ili koautor 12 radova u časopisima od međunarodnog značaja (sa impact faktorom), 1 rada u časopisu od nacionalnog značaja, 4 na međunarodnim konferencijama i 4 rada na domaćim konferencijama.

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани-а Јасна Црибански

број индекса _____

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

СПЕКТРАЛНЕ КАРАКТЕРИСТИКЕ КВАНТНИХ
ЦРТА У СРЕЊОЈ ИНФРАЦРВЕНОЈ ОБЛАСТИ

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

Потпис докторанда

У Београду, 25.01.2013

Јасна Црибански

Прилог 2.

**Изјава о истоветности штампане и електронске
верзије докторског рада**

Име и презиме аутора Јасна Црњански
Број индекса _____
Студијски програм _____
Наслов рада СПЕКТРАЛНЕ КАРАКТЕРИСТИКЕ КВАНТНИХ ЦРТА
У СРЕДЊОЈ ИНФРАЦРВЕНОЈ ОБЛАСТИ
Ментор проф. др Дејан Гвоздић
Потписани/а Јасна Црњански

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла за објављивање на порталу **Дигиталног репозиторијума Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања 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.

Потпис докторанда

У Београду, 25.01.2013

Јасна Црњански

Прилог 3.

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

СПЕКТРАЛНЕ КАРАКТЕРИСТИКЕ КВАНТНИХ ЦРГА
У СРЕДЊОЈ ИНФРАЦРВЕНОЈ ОБЛАСТИ

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство

☒ 2. Ауторство - некомерцијално

3. Ауторство – некомерцијално – без прераде

4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима

5. Ауторство – без прераде

6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

Потпис докторанда

У Београду, 25.01.2013

Јасин Ђунаић

1. Ауторство - Дозвољавање 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. Дозвољавање 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. Дозвољавање 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. Дозвољавање 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. Дозвољавање 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. Дозвољавање 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.