

**Верешко Є.Ю. Теорія електронних станів та електрон-фононої взаємодії у структурних елементах квантових каскадних детекторів. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія». – Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича МОН України, Чернівці, 2023.

Дисертаційна робота присвячена побудові послідовної теорії електронних станів та електрон-фононої взаємодії у нанорозмірних структурних елементах квантових каскадних детекторів з метою виявлення основних властивостей та оптимізації їх функціональних характеристик. Основна увага зосереджена на дослідженні впливу обмежених та інтерфейсних фононів на енергетичний спектр електрона в окремому каскаді, а також вивченні властивостей електронних станів у багатокаскадних закритих і відкритих наноструктурах елементів квантових каскадних детекторів.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційного дослідження, вказано його зв'язок з науковими програмами, планами та темами, сформульовано мету і завдання дисертації, висвітлено її наукове та практичне значення, представлено інформацію про публікації й особистий внесок здобувача, апробацію результатів роботи, її структуру та обсяг.

У **першому розділі** виконано огляд наукової літератури, присвяченої експериментальним та теоретичним дослідженням квантових каскадних детекторів. Детально проаналізовано весь період розвитку експериментально створених квантових каскадних детекторів інфрачервоного та терагерцового діапазонів та обговорено різноманітні механізми вдосконалення їх функціональних характеристик, зокрема оптимізацією геометричного дизайну каскадів, підбором нових систем напівпровідникових матеріалів, поєднанням об'єктів різної просторової симетрії (наприклад, наноплівки, квантові точки, квантові дроти) тощо. Розглянуті основні теоретичні підходи і методи дослідження фотон- та фонон-супровідного тунелювання електронів крізь структурні елементи квантових каскадних детекторів. Відзначено, що у багатьох теоретичних роботах використовується золоте правило Фермі, на основі якого здійснюється розрахунок швидкостей фотон-супровідних оптичних переходів для дослідження коефіцієнта поглинання та визначених ним фізичних величин або часів фонон-супровідних переходів у задачах про розсіювання електронів на фононах. Зауважено, що у роботах цього напрямку, як правило, дослідження виконуються або на основі спрощеної моделі окремої області каскаду, або у підході ідеалізованої нескінченної надгратки.

**Другий розділ** присвячений побудові квантово-механічної теорії електрон-фононної взаємодії у багатошаровій наноструктурі, як каскаді квантового каскадного детектора, та вивченню малодослідженого одночасного впливу всіх гілок обмежених та інтерфейсних фононів на спектральні характеристики електронних станів.

Для цього у моделі координато-залежних ефективних мас для електрона та діелектричного континууму для обмежених та інтерфейсних фононів здійснено розрахунок енергетичних спектрів та хвильових функцій електрона й спектра енергій та потенціалів полів поляризації всіх гілок фононів, на основі яких отримані функції електрон-фононного зв'язку та з перших принципів визначено гамільтоніан системи у зображенні чисел заповнення за всіма змінними. Методом температурних функцій Гріна в однофононному наближенні точно розраховані масові оператори з урахуванням як внутривісних, так і міжвісних конфігураційних взаємодій. Дійсні та уявні частини відповідних масових операторів дозволили розрахувати параметри (зміщення та затухання) перенормування електронних станів взаємодією з фононами.

На прикладі восьмивісної наноструктури GaAs/Al<sub>0.33</sub>Ga<sub>0.67</sub>As, як каскаду експериментального широкосмугового ККД далекого ІЧ діапазону з двоямною активною зоною, досліджено еволюцію енергій електронних станів, перенормованих взаємодією зі всіма гілками обмежених та інтерфейсних фононів, у залежності від товщини потенціального бар'єра в активній зоні при зміні температури у широкому інтервалі від криогенної до кімнатної. Отримані результати дозволили не лише встановити ступінь узгодження теоретичної моделі з експериментом, але й виявити фізичні ефекти, зумовлені електрон-фононою взаємодією.

На основі розвиненої теорії аналізом енергетичного спектра електрона та сил осциляторів квантових переходів запропоновано оптимізований дизайн каскаду квантового каскадного детектора далекого ІЧ діапазону. Розміри потенціальних ям та бар'єрів екстрактора оптимізовані так, щоб функціонування наноприладу відбувалося в інтервалі довжин хвиль 8.2-8.7 мкм з ефективним фонон-супровідним тунелюванням електронів крізь екстрактор.

Наукову новизну висновків, зроблених на основі отриманих у другому розділі результатів, розкривають такі положення:

- Встановлено, що у каскаді широкосмугового квантового каскадного детектора далекого ІЧ діапазону з двоямною активною зоною та шестивісним екстрактором за довірливих температур основний вклад у перенормування електронних станів зумовлений взаємодією з гілками високоенергетичної

смуги інтерфейсних фононів, а вплив обмежених фононів виявляється на порядок меншим.

- Виявлено, що якщо різниця між енергіями двох довільних станів електрона у багат шаровому каскаді квантового каскадного детектора збігається з енергією поздовжнього фонона середовища-ями або середовища-бар'єра, відбувається різке зростання величин і зміщень, і згасань обох станів, зумовлених взаємодією з оптичними фононами.

**Третій розділ** присвячений побудові теорії стаціонарних станів електрона і сил осциляторів квантових переходів у закритій багатокаскадній наносистемі, як основному структурному елементі квантового каскадного детектора, та дослідженню властивостей спектральних характеристик наносистеми, сформованих оптичними переходами між електронними станами.

Хвильові функції та енергії електронних станів у багатокаскадній наноструктурі знаходилися у наближенні координато-залежних ефективних мас та прямокутних потенціалів як розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера з урахуванням умови нормування та умов неперервності функцій і потоків густин їх ймовірностей на всіх гетеромежах структури. На основі отриманих енергій та хвильових функцій здійснено розрахунок функцій густин ймовірностей знаходження електрона у каскадах наносистеми та сил осцилятора квантових переходів. Також розв'язана задача про енергетичний спектр та хвильові функції електрона в надгратці з потенціалом типу Кроніга-Пенні з періодом рівним окремому каскаду, як поширеній у літературі моделі в теорії квантових каскадних детекторів.

На основі розвиненої теорії досліджено властивості електронних станів та сил осцилятора квантових переходів у багатокаскадному основному структурному елементі експериментального квантового каскадного детектора, що дозволило виявити особливості формування смуги поглинання приладу у далекій ІЧ області. Здійснено порівняльний аналіз еволюції властивостей електронних станів у залежності від кількості каскадів та від їх геометричної конфігурації у закритій та надгратковій моделях.

Наукову новизну висновків, зроблених на основі отриманих у третьому розділі результатів, розкривають такі положення:

- На основі розвиненої теорії електронних станів у наноструктурі закритого типу з довільною кількістю каскадів показано, що у багатокаскадній наносистемі енергетичний спектр електрона характеризується квазідискретними смугами, кількість рівнів у яких дорівнює кількості каскадів. Виявлено, що оцінка спектральних характеристик енергетичних зон у закритій багатокаскадній структурі може бути з задовільною точністю

здійснена у простій моделі Кроніга-Пенні з двокаскадним періодичним елементом надгратки.

- Показано, що ймовірності знаходження електрона у станах з енергіями з однієї зони можуть суттєво відрізнятися у різних каскадах закритої багатокаскадної наносистеми, через що смуга поглинання  $N$ -каскадного квантового каскадного детектора формується  $N$  квантовими переходами лише між тими станами, які характеризуються близькими просторовими розподілами ймовірностей знаходження, а ширина смуги поглинання визначається ширинами відповідних електронних зон, між якими відбуваються робочі переходи.

**У четвертому розділі** у наближенні ефективних мас і прямокутних потенціалів із застосуванням методу трансфер-матриці отримані точні аналітичні вирази для  $S$ -матриці розсіювання, функції розподілу густини ймовірності та коефіцієнта прозорості у відкритій багатокаскадній резонансно-тунельній наноструктурі, що дозволило розвинути у трьох підходах теорію спектральних характеристик (резонансних енергій та резонансних ширин) квазістаціонарних станів електрона у багатокаскадному елементі квантового каскадного детектора.

На прикладі відкритої багатокаскадної резонансно-тунельної наноструктури з трійними каскадами з GaAs ямами та  $Al_{0.33}Ga_{0.67}As$  бар'єрами досліджено еволюцію резонансних енергій та резонансних ширин квазістаціонарних станів електрона у залежності від кількості каскадів у наносистемі та здійснено порівняльний аналіз результатів трьох розвинених підходів. Проаналізовано вплив товщин внутрикаскадних та міжкаскадних потенціальних бар'єрів на спектральні характеристики електронних станів у відкритих резонансно-тунельних наноструктурах з різною кількістю каскадів.

На основі визначених полюсами  $S$ -матриці резонансних енергій та ширин аналітично розрахована наближена функція розподілу густини ймовірності знаходження електрона у відкритій  $N$ -каскадній наноструктурі як нормована сума  $N$  функцій Лоренца, яка дозволила показати, що виникаючий на залежностях функції густини ймовірності від енергії колапс резонансів зумовлений суперпозицією електронних станів з близькими значеннями резонансних енергій та суттєво різними резонансними ширинами (часами життя).

Наукову новизну висновків, зроблених на основі отриманих у четвертому розділі результатів, розкривають такі положення:

- Встановлено, що у відкритій  $N$ -каскадній наносистемі виникають комплекси  $N$  квазістаціонарних станів, резонансні енергії та резонансні ширини яких однозначно визначаються лише комплексними полюсами  $S$ -

матриці. У тих областях енергій, де на спектральних розподілах функції густини ймовірності та коефіцієнта прозорості виникає колапс резонансів, обидва підходи не дозволяють розрахувати резонансні енергії та ширини електронних станів.

- Досліджено еволюцію резонансних енергій та резонансних ширин квазістаціонарних станів електрона у відкритих багатокаскадних резонансно-тунельних наносистемах від товщин внутрикаскадних та міжкаскадних потенціальних бар'єрів та виявлено такі конфігурації, за яких структуру можна вважати закритою.

### **Практичне значення отриманих результатів.**

Розвинена теорія електрон-фононої взаємодії у каскаді квантового каскадного детектора дозволила виявити умови, за яких величини зміщень та затухань електронних станів, зумовлені взаємодією з оптичними фононами, різко зростають. Знайдені геометричні конфігурації двоямної активної зони квантового каскадного детектора далекого ІЧ діапазону, за яких виявлений ефект найбільше проявляється і може впливати на ефективність функціонування наноприладу.

Запропонована теорія електронних станів у багатокаскадних наносистемах виявила неоднорідні розподіли густин ймовірностей знаходження електрона у різних каскадах структури, що може бути однією з причин низької ефективності переважної більшості експериментальних квантових каскадних детекторів.

Розвинені теорії стаціонарних та квазістаціонарних станів електрона у багатокаскадних наносистемах, які дозволяють оцінити енергії та часи життя електронних станів, а також інтенсивності квантових переходів, можуть бути важливі у задачах про оптимізацію дизайнів каскадів квантових каскадних детекторів з метою підвищення їх ефективності.

**Ключові слова:** електрон, фонон, енергетичний спектр, хвильова функція, ефективна маса, сила осцилятора квантового (оптичного) переходу, коефіцієнт поглинання, стаціонарні та квазістаціонарні стани, часи життя (затухання), наноструктура (система), резонансно-тунельна структура, квантова точка, наноплівка, надгратка, квантовий каскадний детектор (прилад).