

Zastosowanie aproksymacji wielomianowej w symulacjach kwantowych laserów kaskadowych

Streszczenie. W pracy (Application of polynomial approximation in simulations of quantum cascade lasers) zaprezentowano wyniki modelowania struktury kwantowego lasera kaskadowego z wykorzystaniem półanalizycznej metody aproksymacji wielomianowej pozwalającej na obliczanie rozkładu ładunku. Zastosowane podejście zapewnia szybką zbieżność samouzgodnionego rozwiązywania równań Schrödingera i Poissona oraz pozwala na uzyskiwanie wyników z ustaloną dokładnością. Dla poparcia powyższej tezy w pracy zamieszczono wybrane symulacje struktury lasera z użyciem najbardziej znanych modeli.

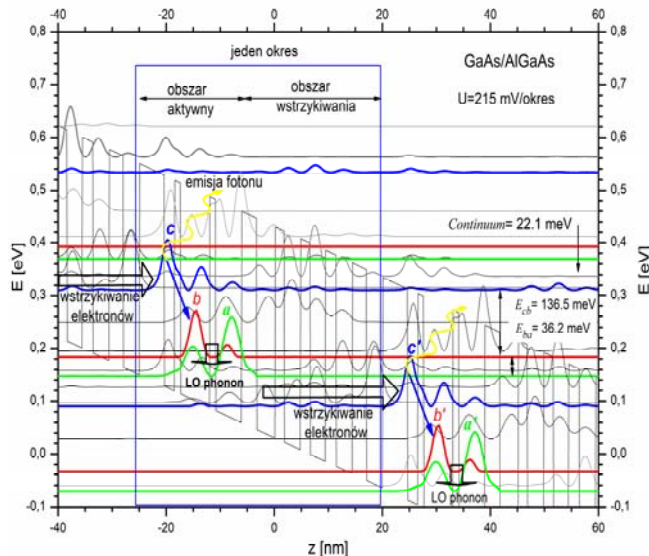
Abstract. The paper presents the use of semi-analytical polynomial approximation method to simulate of the QCL (quantum cascade laser) structures. The applied approach ensures a quick convergence of the self-consistent solution of the Schrödinger and Poisson equations and allows for a thesis that the numerical model using them is one of the most effective. To support the above thesis, a comparison of selected simulation results obtained with the use of the best known QCL models has been provided. (Application of polynomial approximation in simulations of quantum cascade lasers)

Słowa kluczowe: Kwantowy laser kaskadowy, rozwiązywanie równań Schrödingera i Poissona, formalizm NEGF.

Keywords: Quantum Cascade Laser, Schrödinger and Poisson equations, NEGF formalism.

Wstęp

Strukturę kwantowych laserów kaskadowych (QCL), można przedstawić jako periodyczny potencjał pochodzący od naprzemiennego ułożenia nanometrowych warstw dwóch różnych półprzewodników. Przyłożenie pola elektrycznego w takim układzie (patrz Rys.1.), determinuje transport elektronowy wzbogacony o zjawiska kwantowe, które mogą być wykorzystywane do emisji promieniowania o różnej energii [1], [2].



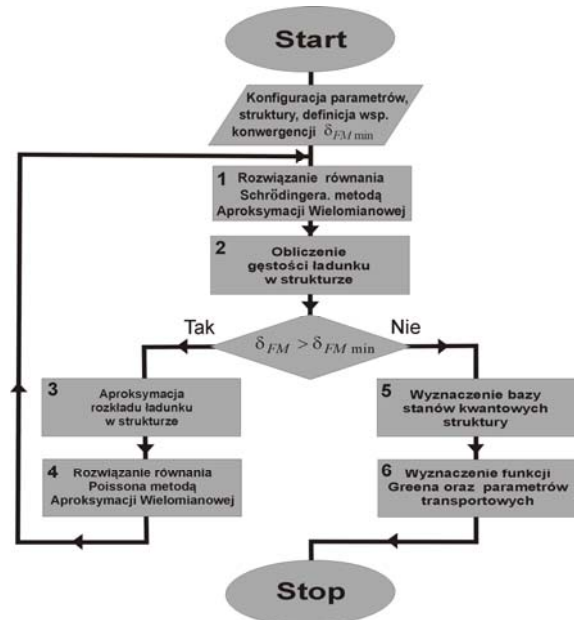
Rys. 1. Ilustracja podstawowych mechanizmów działania kwantowego lasera kaskadowego.

Z tego względu QCL znajdują szerokie zastosowanie w różnych gałęziach gospodarki a w ciągłym procesie ich innowacji dużą rolę odgrywają symulacje komputerowe. Najbardziej wszechstronnym podejściem w tym zakresie jest formalizm nierównowagowych funkcji Greena (NEGF), który może być stosowany w postaci modelu opisanego w reprezentacji pędowo-położeniowej (RSM) [3] lub modelu bazującego na właściwościach funkcji Wanniera (WFM) [4]. Zaproponowany przez nas skończony model supersieci (FMSL) [5], dzięki półanalizycznemu podejściu do samouzgodnionego rozwiązywania równań Schrödingera i Poissona, umożliwia nie tylko uwzględnienie dowolnej liczby okresów badanej struktury, ale jest równie efektywny

jak model WFM oraz może osiągać szybszą zbieżność symulacji niż model RSM. Niniejsza praca zawiera wyniki badań numerycznych potwierdzających powyższą tezę.

Model numeryczny

Symulacje struktur QCL z wykorzystaniem modelu FMSL odbywa się zgodnie z algorytmem przedstawionym na Rys. 2. Główną rolę, z punktu widzenia opisywanej metody, odgrywa tu proces samouzgodnionego rozwiązywania równań Schrödingera i Poissona, w wyniku którego otrzymywany jest rozkład całkowitego ładunku, dla danych parametrów materiałowych i warunków zasilania struktury.

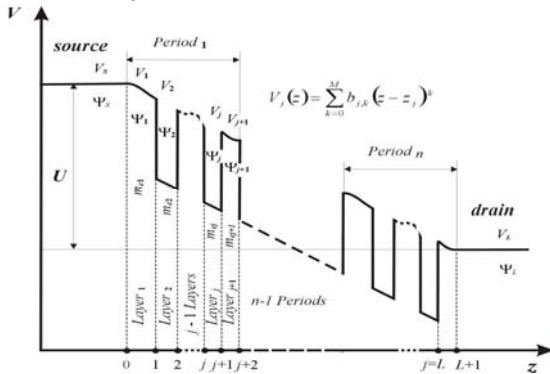


Rys. 2. Główny algorytm procesu symulacji struktur QCL.

W kolejnym etapie symulacji wyznaczana jest baza stanów kwantowych i z jej wykorzystaniem obliczane są nierównowagowe funkcje Greena. Na podstawie funkcji Greena można określić podstawowe parametry transportowe badanego układu z uwzględnieniem wybranych efektów kwantowych (np. rozpraszanie elektronów na fononach czy fotonach)

Ideę aproksymacji wielomianowej w modelu FMSL ilustruje schematycznie Rys. 3. Widać tu rozkład potencjału

w kierunku transportu elektronów, dla struktury QCL spolaryzowanej napięciem U , wraz z zestawem opisujących go parametrów. W obszarze każdej warstwy struktury założono stałą wartość masy efektywnej elektronu, ale uwzględniono zmienny potencjał, opisany funkcją wielomianową $V_j(z)$.



Rys. 3. Koncepcja aproksymacji wielomianowej potencjału w strukturze QCL. W każdej warstwie struktury założono stałą masę efektywną ale zmienny potencjał opisany funkcją $V_j(z)$.

Proces symulacji rozpoczyna rozwiązanie równania Schrödingera w postaci :

$$(1) \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial u^2} + [1 - W_j(u)] \psi(u) = 0,$$

gdzie

$$(2) \quad W_j(u) = \frac{V_j(z)}{E} \quad \text{oraz} \quad u_j = \frac{\sqrt{2m_{e_j}eE}}{\hbar} (z - z_j).$$

W powyższych zależnościach E oznacza energię (wyrażoną w eV), m_{e_j} to masa efektywna elektronu, natomiast e jest ładunkiem elementarnym. $V_j(z)$ określa całkowity potencjał w j -tej warstwie układu zgodnie z zależnością:

$$(3) \quad V_j(z) = \sum_{k=0}^M b_{j,k} (z - z_j)^k.$$

Warunki brzegowe dla równania (1) przyjęto w postaci:

$$(4) \quad \psi_j(z_{j+1}) = \psi_{j+1}(z_{j+1}),$$

$$(5) \quad m_{e_j} \frac{d\psi_j}{dz} \Big|_{z_{j+1}} = m_{e_{j+1}} \frac{d\psi_{j+1}}{dz} \Big|_{z_{j+1}},$$

natomiast rozwiązań poszukiwano w postaci szeregu potęgowego:

$$(6) \quad \psi_j(u) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{j,n} u^n,$$

gdzie:

$$(7) \quad c_{j,n} = \frac{1}{n(n-1)} [(d_{j,0} - 1)c_{j,n-2} + \sum_{k=1}^{\max(M, n-2)} d_{j,k} c_{j,n-k-2}] \quad \text{dla } n > 1$$

Współczynniki $c_{j,0}$ i $c_{j,1}$ można tu przyjąć dowolnie. Sposób rozwiązywania równania (1) opisano w pracach [5] i [6].

Razem z równaniem Schrödingera w iteracyjnej pętli procesu symulacji rozwiązywane jest równanie Poissona:

$$(8) \quad \frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s(z)}{dz} = -e\rho(z),$$

gdzie $\varepsilon(z)$ to względna przenikalność dielektryczna w

supersieci, e oznacza ładunek elementarny, zaś $\rho(z)$ to funkcja gęstości ładunku, obliczana na podstawie zależności opisanych w pracy [5]. Równanie (8) musi spełniać warunki ciągłości potencjału i jego pochodnej na granicy każdej warstwy struktury są:

$$(9) \quad V_j(z_{j+1}) = V_{j+1}(z_{j+1})$$

$$(10) \quad \varepsilon_j \frac{dV_j}{dz} \Big|_{z_{j+1}} = \varepsilon_{j+1} \frac{dV_{j+1}}{dz} \Big|_{z_{j+1}}$$

Funkcje gęstości ładunku $\rho(z)$ oraz potencjału całkowitego $V_s(z)$ w równaniu (8) są przybliżane przez wielomiany [5]:

$$(11) \quad \tilde{\rho}_j(z) = \sum_{k=0}^N a_{j,k} (z - z_j)^k$$

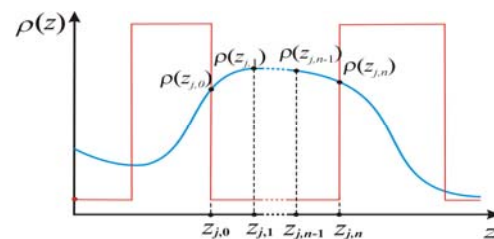
oraz

$$(12) \quad \tilde{V}_{s_j}(z) = \sum_{k=0}^{N+2} b_{j,k}^* (z - z_j)^k$$

Współczynniki wielomianu (12) obliczano zgodnie z zależnością:

$$(13) \quad b_{j,k+2}^* = \frac{a_{j,k}}{(k+1)(k+2)\varepsilon_j}$$

Do wyznaczenia wartości współczynników $a_{j,k}$ zastosowano metodę aproksymacji wielomianowej Lagrange'a. Polega ona na przybliżaniu funkcji wielomianem stopnia n przyjmującym w $n+1$ punktach (zwanym węzłami interpolacji) wartości takie same jak przybliżana funkcja. Idea aproksymacji została zilustrowana na Rys. 4.



Rys. 4. Idea aproksymacji funkcji gęstości ładunku $\rho(z)$ wielomianem w obrębie j -tej warstwy struktury.

Każda warstwa supersieci jest reprezentowana przez $n+1$ wartości funkcji rozkładu ładunku $\rho(z)$, co pozwala na sformułowanie wielomianu interpolacyjnego w postaci:

$$(14) \quad \tilde{\rho}_j(z) = \sum_{k=0}^N a_{j,k} (z - z_j)^k$$

Współczynniki $a_{j,k}$ dobierane są w taki sposób, aby były spełnione warunki:

$$(15) \quad \tilde{\rho}_j(z_{j,i}) = \rho_j(z_{j,i}), \quad \text{dla } i = 0, 1, \dots, N$$

gdzie $z_{j,i}$ oznaczają współrzędne danych węzła interpolacji funkcji $\rho(z)$. Porównując (14) i (15) otrzymujemy:

$$(16) \quad a_{j,0} = \rho_j(z_{j,0}),$$

Zatem równanie (14) można zapisać w postaci:

$$(17) \quad \sum_{k=1}^N a_{j,k} (z_{j,i} - z_{j,0})^k = \rho_j(z_{j,i}) - \rho_j(z_{j,0})$$

Na podstawie wyrażenia (17) można stworzyć układ równań:

$$(18) \begin{bmatrix} (z_{j,1} - z_{j,0}) & (z_{j,1} - z_{j,0})^2 & \dots & (z_{j,1} - z_{j,0})^N \\ (z_{j,2} - z_{j,0}) & (z_{j,2} - z_{j,0})^2 & \dots & (z_{j,2} - z_{j,0})^N \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (z_{j,N} - z_{j,0}) & (z_{j,N} - z_{j,0})^2 & \dots & (z_{j,N} - z_{j,0})^N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{j,1} \\ a_{j,2} \\ \vdots \\ a_{j,N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_j(z_{j,1}) - \rho_j(z_{j,0}) \\ \rho_j(z_{j,2}) - \rho_j(z_{j,0}) \\ \vdots \\ \rho_j(z_{j,N}) - \rho_j(z_{j,0}) \end{bmatrix}$$

Rozwiązanie układu równań (18) pozwala na ustalenie wartości współczynników wielomianu aproksymującego rozkład gęstości ładunku jak również umożliwia wyznaczenie parametrów analitycznego opisu potencjału.

Wyniki symulacji

Najważniejszym aspektem działania lasera jest zapewnienie inwersji obsadzeń dla tzw. górnych stanów kwantowych, na poziomie umożliwiającym kaskadowe emisje fotonów w kolejnych modułach nanoprzyrządu. Prawidłowy przebieg tego procesu wymaga niejednokrotnie bardzo złożonych struktur, co z kolei stawia wysokie wymagania dla modeli numerycznych zarówno od strony ich efektywności jak też dokładności.

Zaproponowana przez nas metoda aproksymacji rozkładu ładunku spełnia powyższe wymagania od strony teoretycznej (metoda półanalityczna), natomiast jej praktyczne zastosowanie zweryfikowano na podstawie wyników symulacji struktury QCL opisanej w pracy [7]. Podstawowe parametry wykonanych symulacji zapisano w tabeli 1, zaś ich wybrane wyniki zilustrowano na Rys. 5.

Tabela 1. Podstawowe parametry symulacji struktury QCL opisanej w pracy [7]

Numer symulacji	E_{max} [eV]	L_p	N_k
Sym. 1.	0.4	5	3
Sym. 2.			5
Sym. 3			7
Sym. 4			9

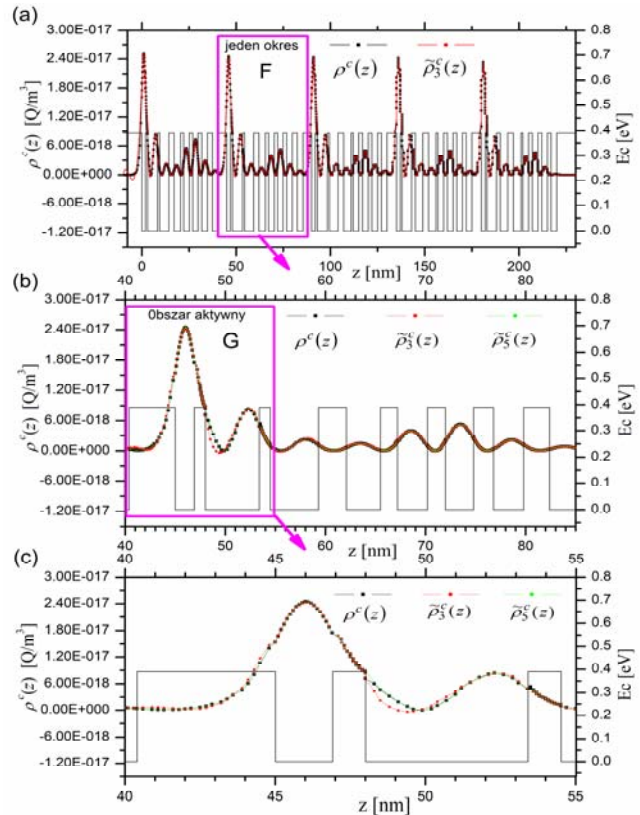
W ramach badań porównano dokładny rozkład ładunku, obliczony dla minipasma reprezentowanego przez górny poziom laserowy (c) z jego przybliżeniami determinowanymi przez funkcje wielomianowe. Wszystkie obliczenia przeprowadzono w zakresie energii do 0,4 eV (E_{max}) dla pięciu modułów struktury (L_p), zakładając warunki równowagi termodynamicznej oraz przyjmując temperaturę $T=100$ K.

W trzech kolejnych symulacjach (Sym. 1. do Sym. 3) zwiększono stopień wielomianu (N_k), aproksymującego rozkład ładunku w strukturze badanego lasera, analizując przy tym wpływ tego działania na dokładność otrzymywanych wyników. Graficzną ilustracją w.w. badań jest sekwencja wykresów widoczna w kolejnych częściach Rys. 5. W części (a) wykreślono sumaryczny rozkład ładunku pochodzącego od elektronów znajdujących się w zakresie wspomnianego wcześniej górnego poziomu laserowego. Skończone rozmiary modelu QCL (FMSL) sprawiają, że obserwujemy tu co prawda obraz zbliżony do wyników uzyskiwanych z użyciem szeroko obecnie stosowanych nieskończonych modeli QCL (RSM i WFM), ale w odróżnieniu od nich widać wyraźnie nieokresowy charakter funkcji rozkładu. W kolejnych modułach struktury obserwujemy różnice koncentracji ładunku, w obszarach poszczególnych studni kwantowych.

Najbardziej istotny z punktu widzenia emisji fotonowej jest stosunek liczby elektronów w obszarze czynnym dla stanu wysokiego, do ich liczności w pozostałej części modułu lasera. Można to ocenić na podstawie wykresów widocznych w części (b) Rys. 5. Część ta jest fragmentem wykresu (a) oznaczonym jako F i obejmuje jeden okres

* (stany wykreślone kolorem niebieskim na Rys. 1.)

badanej struktury QCL. Łatwo tu zauważyć, że amplitudy funkcji rozkładu ładunku są największe w obszarze aktywnym, wyróżnionym na rysunku przez fragment oznaczony jako G. Pozostałe poza obszarem aktywnym studnie kwantowe koncentrują elektrony, które nie biorąc udziału w akcji laserowej zwiększają odsetek ładunku niepożądanego, będącego źródłem dodatkowego prądu i rozproszeń fononowych.



Rys. 5. Przykłady aproksymacji rozkładu gęstości ładunku $\rho^c(z)$ w strukturze QCL [7] wielomianami (funkcję aproksymowaną wykreślano kolorem czarnym): (a) ilustracja aproksymacji wielomianem 3-go stopnia (funkcja $\tilde{\rho}^c(z^3)$) w obszarze 5 modułów struktury lasera; porównanie aproksymacji wielomianami 3-go (funkcja $\tilde{\rho}^c(z^3)$) i 5-go (funkcja $\tilde{\rho}^c(z^5)$) stopnia w zakresie jednego modułu (b) oraz obszaru aktywnego (c) badanego nanoprzyrządu.

Ze względu na fundamentalne znaczenie obszaru aktywnego w części (c) Rys. 5. zilustrowano fragment funkcji aproksymujących rozkład koncentracji elektronów $\rho^c(z)$ w wyżej wymienionym obszarze. Można tu zauważyć pewne niedokładności aproksymacji w przypadku funkcji $\tilde{\rho}^c(z^3)$, natomiast aproksymacja wielomianem stopnia piątego wydaje się wystarczająco dokładna, aby reprezentująca ją funkcja $\tilde{\rho}^c(z^5)$ mogła być skutecznie wykorzystana w procesie symulacji QCL.

Do podobnych wniosków można dojść po dokładnej analizie zbieżności funkcji aproksymujących z użyciem współczynnika zbieżności zdefiniowanego jako:

$$(19) \delta_{\rho_k^v} = \sqrt{\frac{\int (\rho^v - \tilde{\rho}_k^v)^2 dz}{\int (\rho^v)^2 dz}} \cdot 100\% ,$$

gdzie v indeksuje badane minipasma energetyczne, natomiast k określa stopień wielomianu funkcji aproksymującej rozkład ładunku. Wartości współczynnika $\delta_{\rho_k^v}$ wyrażone w procentach zebrano w tabeli 2, gdzie

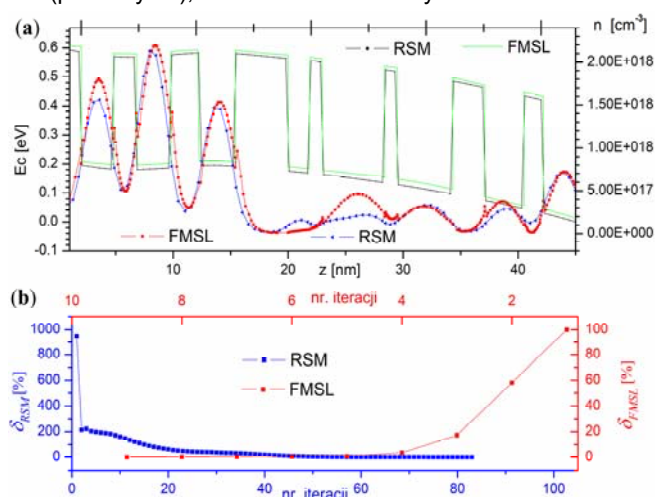
zapisano także czasy obliczeń T_S , potrzebne na realizację procedur programowych zawartych w pętli samouzgodnionego rozwiązywania równań Schrödingera i Poissona w ramach opisywanej tu metody (patrz Rys. 2.). Należy tu dodać, że obliczenia przeprowadzono na standardowym komputerze PC wyposażonym w system Windows 10 i procesor Intel core i7.

Tabela 2. Wartości współczynnika zbieżności funkcji aproksymujących rozkład ładunku w zakresie minipasma reprezentującego wysoki stan laserowy (c) oraz czasy obliczeń w ramach pętli samouzgodnionego rozwiązywania równań Schrödingera i Poissona dla symulacji QCL o parametrach podanych w tabeli 1.

Numer symulacji	N_k	$\delta_{\rho_{N_k}^c}$ [%]	T_S [s]
Sym. 1.	3	10.99	307
Sym. 2.	5	4.62	319
Sym. 3	7	2.08	340
Sym. 4	9	0.96	390

Zgromadzone w tabeli 2 wyniki wskazują, że zbieżność aproksymacji z użyciem funkcji wielomianowej 5-go stopnia ($\tilde{\rho}_5^c(z)$) reprezentowana przez współczynnik aproksymacji ($\delta_{\rho_5^c}$) osiąga wartość 4.62 %, co świadczy o dobrym jej dopasowaniu do funkcji aproksymowanej ($\rho^c(z)$). Jednocześnie wyniki Sym. 3, gdzie wartość parametru N_k , reprezentującego stopień wielomianu funkcji aproksymującej ustawiono na 7, wykazały lepszą wartość tego współczynnika ($\delta_{\rho_7^c} = 2,08$ %). Okazało się również, że dla $N_k=9$ osiągnął on najmniejszą wartość 0,96 %. Biorąc pod uwagę fakt, że zwiększenie w tym przypadku o 4 stopnia wielomianu funkcji $\tilde{\rho}^c(z)$ w stosunku do stanu w Sym. 2, spowodowało koszt w postaci wydłużenia czasu obliczeń T_S o 71 s, można uznać funkcję $\tilde{\rho}_9^c(z)$ jako docelowy element modelu numerycznego, prezentowanego w ramach niniejszej pracy.

Oprócz dobrej dokładności, opracowaną metodę charakteryzuje też bardzo szybka zbieżność pętli procesów 1-4 (patrz Rys.2), co zilustrowano na Rys. 6.



Rys. 6. Symulacje całkowitego rozkładu ładunku struktury QCL [7] z użyciem modeli RSM i FMSL: (a) rozkłady ładunku i potencjał u w jednym module struktury; (b) wykresy zbieżności obu metod

W części (a) tego rysunku widać wykresy rozkładów całkowitego ładunku i potencjału w jednym module struktury QCL [7] spolaryzowanej napięciem 215 mV/okres dla temperatury otoczenia $T=300$ K.

Wyniki uzyskane z użyciem modelu FMSL dla $N_k=9$ odniesiono do rezultatów modelu RSM w celu zilustrowania efektywności obu metod. Widoczne tu niewielkie różnice wynikają z założeń obu modeli (skończonego - FMSL oraz nieskończonego - RSM). Sposób obliczania poprawek ładunku δ_{FMSL} (metoda aproksymacji wielomianowej) oraz δ_{RSM} (metoda Newtona - Raphsona) podano w pracy [5]. W obu przypadkach założono zbieżność na poziomie 0.1 %

Podsumowanie

Aproksymacja rozkładu ładunku i potencjału w strukturze QCL wielomianami 9 - tego stopnia w ramach modelu FMSL zapewnia dokładne wyniki i dużo szybszą zbieżność symulacji w odniesieniu do często stosowanych modeli RSM.

This research was financed by the Minister of Education and Science of the Republic of Poland within the "Regional Initiative of Excellence" program for years 2019–2022. Project number 027/RID/2018/19, amount granted 11 999 900 PLN

Autorzy: dr inż. Mariusz Mączka, Politechnika Rzeszowska, Katedra Podstaw Elektroniki, ul. W. Pola 2a, 35-959 Rzeszów, E-mail: mmaczka@prz.edu.pl

dr hab. inż. Stanisław Pawłowski Politechnika Rzeszowska, Zakład Elektrodynamiki i Systemów Elektromaszynowych, ul. Pola 2, 35-959 Rzeszów, email: spawlo@prz.edu.pl;

dr inż. Grzegorz Hałdaś, Politechnika Rzeszowska, Katedra Podstaw Elektroniki, ul. W. Pola 2a, 35-959 Rzeszów, E-mail: ghaldas@prz.edu.pl

LITERATURA

- [1] Faist, J.; Capasso F.; Sivco D. L.; Hutchinson A. L.; Chu Sung-Nee G. and Cho A. Y.: Short wavelength ($\lambda \sim 3.4 \mu\text{m}$) quantum cascade laser based on strained compensated InGaAs/AlInAs, *Appl. Phys. Lett.* 1998, 72, 680-682.
- [2] Hu, Q.; Williams, B. S.; Kumar, S.; Callebaut Hans and Reno, J. L.: Terahertz quantum cascade lasers based on resonant phonon scattering for depopulation, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 2004, 362, 233–249.
- [3] Hałdaś, G. Implementation of non - uniform mesh in non - equilibrium Green's function simulations of quantum cascade lasers. *J. Comput. Electron.* 2019, 18, 1400–1406.
- [4] Pereira, M.; Lee, S-C, and Wacker, A.: Effect of Coulomb corrections and mean field on gain and absorption in Quantum Cascade Lasers, *Phys. Status Solidi C: current topics in Solid State Physics*, 2005, 2 (8), 3027–3030.
- [5] Mączka M.; Pawłowski S.: A Polynomial Approximation to Self Consistent Solution for Schrödinger–Poisson Equations in Superlattice Structures, *Energies*, 2022, 15, 760. <https://doi.org/10.3390/en15030760>
- [6] Pawłowski, S.; Mączka, M., Optimisation of QCL Structures Modelling by Polynomial Approximation, *Materials*, 2022, 15, 5715. <https://doi.org/10.3390/ma15165715>
- [7] Bugajski, M., et al., Room temperature AlGaAs/GaAs quantum cascade lasers, *Phot. Lett. Pol.*, 2011, 3, 2, 55-57, <https://doi.org/10.4302/phot.lett.pl.v3i2.213>