

**ОМСКИЙ ФИЛИАЛ  
ИНСТИТУТА ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ИМ. А.В. РЖАНОВА  
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

На правах рукописи

**Сачков Виктор Анатольевич**

**ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ  
НИЗКОРАЗМЕРНЫХ РЕАЛЬНЫХ СТРУКТУР НА  
ОСНОВЕ GaAs/AlAs МЕТОДОМ ЧИСЛЕННОГО  
ЭКСПЕРИМЕНТА.**

Специальность 01.04.10  
(физика полупроводников)

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель –  
д.ф.-м.н., профессор В.В. Болотов

ОМСК – 2011

**СПИСОК УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ И СОКРАЩЕНИЙ**

KPC -	комбинационное рассеяние света
$I_{KPC}$ -	интенсивность комбинационного рассеяния света
$d_{ij}$ -	тензор комбинационного рассеяния света
$\alpha_{ij}$ -	тензор поляризуемости среды
LO-фонон -	продольный оптический фонон
TO-фонон -	поперечный оптический фонон
IF-фонон -	интерфейсный фонон
$q$ -	волновой вектор
QWW -	квантовая проволока
CP -	сверхрешетка
ЛСР -	латеральная сверхрешетка
T -	температура

## СОДЕРЖАНИЕ

	<u>стр.</u>
<b>ВВЕДЕНИЕ</b>	4
<b>ГЛАВА 1. РЕШЕТОЧНАЯ ДИНАМИКА ГЕТЕРОСТРУКТУР И КОМБИНАЦИОННОЕ РАССЕЙЯНИЕ СВЕТА (ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ).</b>	9
§1.1. Фононный спектр сверхрешеток GaAs/AlAs	10
§1.2. Трехмерное моделирование решеточной динамики гетероструктур	20
§1.3. Расчет интенсивности КРС.	42
§1.4. Оптические и фононные свойства квантовых проволок и квантовых точек на основе GaAs.	46
<b>ГЛАВА 2. МЕТОДЫ И ПРИБЛИЖЕНИЯ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ И РАСЧЕТАХ.</b>	54
§2.1. Расчет динамической матрицы сфалерита. Расширенная модель Борна и модель жестких ионов.	55
§2.2. Вычисление динамической матрицы гетероструктуры. Метод свертки.	60
§2.3. Метод расчета тензора КРС.	63
<b>ГЛАВА 3. ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ КОНФИГУРАЦИИ НАНООБЪЕКТОВ НА СПЕКТР КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЙЯНИЯ СВЕТА.</b>	67
§3.1. Исследование спектра оптических фононов, локализованных в квантовых островках GaAs, самоорганизующихся при гетероэпитаксиальном росте GaAs/AlAs в условиях реконструкции поверхности (001).	67
§3.2. Расщепление по частоте поперечных оптических фононов, локализованных в квантовых проволоках GaAs	79
<b>ГЛАВА 4. ДЕЛОКАЛИЗАЦИЯ ФОНОН-ПЛАЗМОННЫХ МОД В СВЕРХРЕШЁТКАХ GaAs/AlAs С ТУННЕЛЬНО-ТОНКИМИ БАРЬЕРАМИ AlAs.</b>	104
§4.1. Определение механизма делокализации фонон-плазмонных мод в легированных гетероструктурах с тонким слоем AlAs.	105
§4.2. Влияние анизотропии эффективной массы на дисперсию фонон-плазмонных мод в CP GaAs/AlAs.	120
<b>ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ.</b>	130
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ</b>	132
<b>ЛИТЕРАТУРА.</b>	134

## ВВЕДЕНИЕ.

Прогресс в области физики полупроводников в значительной степени обусловлен возможностями создания и исследования объектов пониженной размерности с квантовыми свойствами. Достижения современной науки и технологии позволяют создавать полупроводниковые объекты нанометровых масштабов – сверхрешетки (СР), квантовые проволоки и квантовые точки. Вследствие размерного квантования носителей заряда оптические и электронные свойства этих объектов могут кардинально меняться. Электронные и оптические свойства квантовых объектов определяются их структурными свойствами, для изучения которых весьма успешно используется методика комбинационного рассеяния света (КРС) [1,2]. Так, использование резонансного КРС позволило изучать свойства одиночной квантовой точки [2].

Если характерные размеры этих объектов ограничены несколькими нанометрами, то квантовые свойства могут проявляться и при высоких температурах. Большие надежды по созданию квантовых проволок и точек возлагаются на технологии, использующие их самоорганизацию в условиях гетероэпитаксиального роста, фазовых переходов и разделения фаз в гетерофазных системах [3-5].

Примером использования эффектов самоорганизации на границах раздела является формирование квантовых проволок GaAs в процессе гетероэпитаксиального роста сверхрешеток GaAs/AlAs на фасетированных поверхностях с большими индексами Миллера [5,6]. Так, поверхности (311)A GaAs и AlAs в определенных условиях расщепляются на периодический массив микроканалов с латеральным периодом 3.2 нм [6]. Латеральные размеры проволок при этом воспроизводимы и определяются расстоянием между фасетками, их толщина задается условиями роста. Гетероструктуры на основе соединений  $A^{III}-B^V$  находят широкое применение в быстродействующих приборах для телекоммуникаций, оптоэлектронных приборах и лазерах [3]. Качество гетерограниц оказывает существенное

влияние на свойства этих приборов, поэтому проблема исследования структуры гетерограниц имеет высокую актуальность. В этом плане методика КРС обладает рядом преимуществ перед другими методиками исследований гетерограниц, поверхностей и квантовых объектов. Прежде всего, она не требует специальных трудоемких процедур приготовления образцов, не требует дорогостоящего оборудования, не разрушает образцы, позволяет проводить экспрессные измерения, позволяет проводить сканирующие измерения микрообъектов [1]. Широко используются пластины с осью роста [001], поэтому большой интерес представляет исследование влияния ее структурных реконструкций на свойства гетероструктур. Структурные реконструкции этой поверхности активно исследуются методами дифракции быстрых электронов и сканирующей туннельной микроскопии [7]. Большой интерес и актуальность представляет исследование влияния реконструкции поверхности на структуру квантовых объектов, формирующихся на ней на начальном этапе гетероэпитаксиального роста.

Как известно, решение обратной задачи рассеяния (восстановление структуры объекта из его спектра) зачастую неоднозначно. Для реальных объектов эта задача еще и осложнена многообразием факторов, влияющих как на фононный спектр, так и на механизмы рассеяния (изменение соотношения вкладов деформационного и электрооптического потенциалов в тензор поляризуемости гетероструктуры и т.д.). Помимо состава, размеров, формы, качества гетерограницы и механических напряжений, для полупроводниковых нанообъектов иногда требуется принимать во внимание и эффекты электрон-фононного взаимодействия.

**Актуальность** исследования нанообъектов методом спектроскопии КРС обусловлена тем, что анализ активных в КРС фононных мод может дать информацию о следующих структурных свойствах вышеупомянутых объектов: а) их форме, среднем размере и дисперсии по размерам; б) их ориентации в случае появления эффекта выделенной ориентации, наличии структурной анизотропии; в) качестве гетерограниц. Основной

проблемой при этом является детальное описание механизмов возбуждения той или иной оптической моды при КРС и подтверждение расчетом в сравнение с экспериментальными данными

**Целью работы** является исследование КРС в массивах квантоворазмерных объектов на основе GaAs с анализом их структуры и процессов самоорганизации. Для достижения данной цели методом вычислительного эксперимента решались следующие задачи:

1. Провести исследование влияния гетерограницы на оптические фононные моды, активные в КРС для островков GaAs, окруженных матрицей AlAs, формирующихся при субмонослойном росте в условиях структурной перестройки поверхности (100) GaAs.

2. Провести исследование анизотропии оптических фононов, локализованных в массиве квантовых проволок GaAs, формирующихся на фасетированной поверхности (311)A.

3. Определить механизм делокализации фонон-плазменных мод в плоских легированных CP GaAs/AlAs с тонким слоем AlAs.

4. Определить влияние анизотропии электронного газа в CP GaAs/AlAs [001] с ультратонкими слоями AlAs на анизотропию смешанных фононных мод.

#### **Научная новизна работы**

1. Определена совокупность нанообъектов, вызывающих триплетную структуру пиков продольных оптических фононов в спектрах КРС CP GaAs/AlAs, содержащих субмонослой GaAs, формирующиеся в условиях структурной перестройки (2x4) поверхности (100) GaAs.

2. Показано, что различие частот локализованных в квантовых проволоках GaAs поперечных оптических фононов с направлением колебаний атомов вдоль и поперек квантовых проволок, обнаруженное в эксперименте, объясняется конечной длиной реальных массивов проволок.

3. Предложена модель «квазитрехмерного» электронного газа для объяснения обнаруженного увеличения частоты линии КРС для AlAs-подобной моды и понижения

частоты GaAs-подобной моды в легированных ультратонких плоских СП относительно нелегированных.

4. Предсказана угловая дисперсия для фонон-плазмонных мод в легированных ультратонких плоских СП вследствие снятия вырождения тензора обратной эффективной массы электронов.

#### **Практическая значимость работы**

1. Определена структура и состав островков GaAs в реальной гетероструктуре GaAs<sub>0.6</sub>/AlAs<sub>5</sub>(001) на основе численного моделирования спектров КРС.

2. Предложен метод определения наличия дефектов в гетероструктурах GaAs/AlAs(311)A и оценки длины квантовых проволок, формирующихся при гетероэпитаксиальном росте таких гетероструктур, из сравнительного анализа рассчитанных и экспериментальных спектров КРС.

3. Из данных КРС и проведенных расчетов определена толщина барьера AlAs в легированных СП GaAs/AlAs(001), при которой становятся существенными эффекты туннелирования электронов.

4. Разработан метод оценки концентрации свободных носителей заряда в СП GaAs/AlAs(001) из анализа спектров КРС на основе модели фонон-плазмонного взаимодействия в легированных гетероструктурах полярных полупроводников.

5. Создан пакет программного обеспечения для расчета фононного и КРС спектров гетероструктур произвольной геометрической конфигурации.

#### **Положения, выносимые на защиту**

1. Латеральная локализация оптических фононов в квантовых островках GaAs, формирующихся на реконструированной поверхности AlAs, приводит к появлению дополнительных фононных мод, активных в КРС, с частотами, зависящими от количества атомов в островке.

2. Поперечные оптические фононы, локализованные в квантовых проволоках GaAs, самоорганизующихся на фасетированной поверхности (311)A, расщепляются по энергии вследствие структурной анизотропии латеральных СР, содержащих периодический массив квантовых проволок конечной длины.

3. В легированных СР с туннельно-тонким барьером AlAs фонон-плазмонное взаимодействие является одним из доминирующих механизмов, влияющих на форму линий КРС. Фонон-плазмонное взаимодействие становится возможным вследствие увеличения вероятности туннелирования свободных электронов до такой степени, что электронный газ становится «квазитрехмерным».

4. Снятие вырождения тензора обратной эффективной массы свободных электронов, происходящее вследствие структурной анизотропии, вызывает угловую дисперсию для фонон-плазмонных мод в легированных СР с туннельно-тонким барьером AlAs.

#### **Структура и объем диссертации**

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, выводов, заключения и библиографического списка. Содержит 150 страниц, 37 рисунков на 31-ой страницах, 2 таблицы на 1-ой странице, 138 библиографических ссылок на 17-ти страницах.



## ГЛАВА 1. РЕШЕТОЧНАЯ ДИНАМИКА ГЕТЕРОСТРУКТУР И КОМБИНАЦИОННОЕ РАССЕЙЯНИЕ СВЕТА (ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ).

### Введение

Интерес к исследованию объектов пониженной размерности нанометрового масштаба вызван возможностью создания на их основе квантовых приборов, в том числе и одноэлектронных, работающих при комнатной температуре. Как новая и перспективная сфера приложения и развития научных методов, область исследования объектов с размерами в несколько нанометров была отмечена Р. Фейнманом еще в 1959 г. в его выступлении на годовом собрании Американского физического общества. С тех пор достигнуты впечатляющие успехи, сформировались различные разделы науки, посвященные нанообъектам. В структурах переменного состава, в особенности в структурах с границами и гетерограницами, роль последних является существенной в силу малого размера нанообъектов. Необходимо подчеркнуть, что свойства нанообъектов могут быть поняты, описаны и предсказаны на основе квантовой теории, которая должна быть развита для описания поведения реальных наноструктур. Вследствие чего характеристики таких объектов невозможно получить без численного моделирования [8].

Для создания одно - и нуль - мерных нанометровых объектов из-за ограниченности возможностей современной литографии перспективными являются методы, использующие свойства самоорганизующихся систем. Теоретические оценки показывают, что в процессах самоорганизации квантовых объектов (как в объеме, так и на поверхности) большую роль играют механические напряжения [9]. Широко исследованы квантовые объекты, создаваемые на основе арсенидов галлия и алюминия. Уникальность пары этих элементов состоит в близости постоянных решетки, чья относительная разница при комнатной температуре составляет менее 0.14%. Наиболее интенсивно гетероструктуры на основе GaAs/AlAs изучались во вторую половину 80<sup>х</sup> и 90<sup>е</sup> годы прошлого столетия. Однако и

сейчас регулярно выходят статьи по этой тематике, в том числе и в ведущих научных журналах мира [10-26]. Фононы проявляют себя практически во всех электрических тепловых и оптических эффектах полупроводников. Например, акустические и оптические фононы ограничивают электрическую проводимость. Оптические фононы сильно влияют на оптический отклик объемных материалов и наноструктур, тогда как акустические фононы во многом определяют теплопроводность. В длинноволновом пределе фононы образуют звуковые волны. Подобно электронам свойства фононов определяются их дисперсией, т.е. зависимостью частоты фонона от волнового вектора. Пространственное ограничение фононов в наноструктурах и гетероструктурах могут сильно влиять на фононную дисперсию, изменяя фононные свойства, такие как групповая скорость, поляризация атомных смещений, плотность состояний фононов, и на взаимодействие фононов с электронами, точечными дефектами, другими фононами. Таким образом, через точную подстройку дисперсии, изменяя параметры наноструктуры, можно контролировать фононный транспорт [27].

Широкое применение методики комбинационного рассеяния света (КРС) для исследования гетероструктур на основе арсенида галлия обусловлено, с одной стороны, обширностью получаемой информации, а с другой стороны – сильной зависимостью спектра фононов от размеров объектов и структуры гетерограниц [1], что позволяет характеризовать объекты нанометровых размеров.

#### §1.1. Фононный спектр сверхрешеток GaAs/AlAs.

Фононные свойства сверхрешеток и квантовых ям, определяемые их периодической структурой и пониженной размерностью.

Ряд новых интересных явлений в физике полупроводников был обнаружен и исследован благодаря появлению новых объектов – сверхрешеток (СР). “Сверхрешетками” обычно называют периодические структуры, состоящие из тонких слоев двух

полупроводников, повторяющихся в одном направлении [28]. Сверхрешетку можно рассматривать как искусственно синтезированный полупроводник, который обнаруживает новые электронные, фононные и оптические свойства. Среди новых физических явлений, связанных с особенностями колебательного спектра сверхрешеток, наиболее яркими являются следующие: появление интерфейсных фононов – колебаний с волновым вектором, направленным вдоль слоев сверхрешетки и затухающих по мере удаления от границы раздела; свертка акустических фононов; локализация оптических фононов [1]. Последние два явления связаны со сверткой зоны Бриллюэна в направлении роста сверхрешетки. Впервые свернутые акустические и локализованные оптические фононные моды были обнаружены в сверхрешетках GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As методом КРС в середине 80-тых годов [29-31]. Эффект локализации оптических фононов в слоях GaAs и AlAs возникает вследствие того, что собственные частоты оптических колебаний в этих материалах существенно различаются, поэтому оптические фононные моды, являющиеся собственными для одного из материалов, быстро затухают в другом материале, причем, глубина затухания может составлять 1-2 монослоя.

Задача расчета фононного спектра является нетривиальной. Существуют множество моделей разной степени сложности, имеющие разные области применимости.

#### Континуальные модели.

Континуальные модели [32-34] описывают колебания СР основываясь на скорости звука и плотности объемных материалов. Основная идея была опубликована еще в 1956 году [35] для расчета распространения звука в геологических породах.

Волновое уравнение для среды с переменными плотностью  $\rho(z)$  и коэффициентом упругости  $C(z)$  выглядит [36.]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho(z) \frac{\partial u}{\partial t} \right] = \frac{\partial}{\partial z} \left[ C(z) \frac{\partial u}{\partial z} \right] \quad (1.1)$$

В сверхрешетке, состоящей из чередующихся слоев А и В, плотность и коэффициент упругости внутри слоя постоянны и равны соответствующим объёмным параметрам. Тогда уравнение для распространения волны вдоль оси чередования для каждого слоя примет вид:

$$\rho_{A,B} \frac{\partial^2 u_{A,B}}{\partial t^2} = C_{A,B} \frac{\partial^2 u_{A,B}}{\partial z^2} \quad (1.2)$$

Решением этого уравнения для каждого слоя будет линейная комбинация плоских волн с частотой  $\omega$ , волновыми векторами  $\pm k_A(\omega)$  для слоя А,  $\pm k_B(\omega)$  для слоя В, где  $k_{A,B}(\omega) = \omega/V_{A,B}$ , и неизвестными амплитудами,  $V_{A,B}$  – скорость звука в соответствующем слое. Четыре неизвестных амплитуды можно найти из уравнения непрерывности напряженности на границе слоев в точке  $z_i$ :

$$C_A \left. \frac{\partial u_A}{\partial z} \right|_{z_i} = C_B \left. \frac{\partial u_B}{\partial z} \right|_{z_i} \quad (1.3)$$

и из уравнения непрерывности атомных смещений на границе слоев:

$$u_A(z_i) = u_B(z_i) \quad (1.4)$$

Учитывая, что граничные условия связаны теоремой Блоха, можно получить четыре уравнения с четырьмя неизвестными. Нетривиальное решение будет возможно, только если детерминант секулярного уравнения будет равен нулю, что выполняется при условии [35]

$$\cos(k d) = \cos\left(\frac{\omega d_A}{V_A}\right) \cos\left(\frac{\omega d_B}{V_B}\right) - \frac{1}{2} \left( \frac{\rho_B V_B}{\rho_A V_A} + \frac{\rho_A V_A}{\rho_B V_B} \right) \sin\left(\frac{\omega d_A}{V_A}\right) \sin\left(\frac{\omega d_B}{V_B}\right) \quad (1.5)$$

здесь  $d_{A,B}$  – толщина слоя А,В и  $d = d_A + d_B$ .

Если записать в эквивалентном виде

$$\cos(k d) = \cos\left(\omega \left( \frac{d_A}{V_A} + \frac{d_B}{V_B} \right)\right) - \frac{\varepsilon^2}{2} \sin\left(\frac{\omega d_A}{V_A}\right) \sin\left(\frac{\omega d_B}{V_B}\right) \quad (1.6)$$

где

$$\varepsilon = \frac{\rho_B V_B - \rho_A V_A}{(\rho_A V_A \rho_B V_B)^{1/2}} \quad (1.7)$$

и учесть, что для материалов, из которых обычно растят сверхрешетки обычно  $\varepsilon^2/2 \approx 10^2$ , то в первом приближении вторым членом в правой части (1.5) можно пренебречь, слева и справа останутся косинусы, и, следовательно, их аргументы равны с точностью до  $2\pi\nu$ . Тогда закон дисперсии примет вид:

$$\omega = \frac{k d}{\left( \frac{d_A}{V_A} + \frac{d_B}{V_B} \right)}$$

и

$$\omega = \frac{2\pi\nu \pm k d}{\left( \frac{d_A}{V_A} + \frac{d_B}{V_B} \right)}, \quad \nu = 1, 2, \dots \quad (1.8)$$

и скорость распространения звука будет равна:

$$V = \frac{V_A V_B}{(1-\alpha)V_A + \alpha V_B}, \quad (1.9)$$

где  $\alpha = d_B / (d_A + d_B)$

Дисперсионное соотношение (1.9) наглядно показывает процесс свертки акустических фононов. Однако в центре и на краю зоны Бриллюэна моды имеют вырождение, если учесть второй член в (1.6), то вырождение снимается

$$\Delta\Omega \cong \pm \frac{V}{d} \sin\left( \frac{\nu\pi}{2} \frac{(1-\alpha)V_B - \alpha V_A}{(1-\alpha)V_B + \alpha V_A} \right), \quad (1.10)$$

где  $\Delta\Omega$  - разница между вырожденной частотой в центре и на краю зоны Бриллюэна, рассчитанной по (1.8), и частотой, рассчитанной с учетом второго члена (1.6),  $\alpha = \frac{V_B}{V_A + V_B}$ .

Дисперсионное соотношение (1.5) применимо только в случае, если составные материалы имеют кубическую симметрию с осью роста [001] или [111]. В этих случаях продольные и поперечные колебания не смешиваются, и, следовательно, в дисперсионное соотношение для поперечных и продольных колебаний необходимо подставлять соответствующие скорости звука. Континуальная модель наглядно объясняет процесс свертки для акустических мод и хорошо подходит для толстых сверхрешеток. Однако в случае наноструктур интерфейс структуры во многом определяет свойства фононов, вследствие чего данная модель для них не применима.

Континуальная модель макроскопического электрического поля.

Расщепление между поперечными и продольными оптическими модами в полярных кристаллах в центре зоны Бриллюэна возникает из-за воздействия макроскопического электрического поля на продольные моды [37]. В некоторых случаях необходимо учитывать эффект запаздывания дальнедействующего кулоновского взаимодействия и, соответственно, поляритонные эффекты [38-40]. Так как основная масса экспериментальных результатов получена методом комбинационного рассеяния света в геометрии обратного рассеяния, то волновой вектор, передаваемый решетке,  $q \gg \omega/c$ , следовательно эффектами запаздывания в этих экспериментах можно пренебречь. В работе [41] в сверхрешетках  $14 \text{ \AA} \text{ GaAs} - 11 \text{ \AA} \text{ AlAs}$  с осью роста [001] методом КРС в геометрии обратного рассеяния  $z(x+y, x+y) \bar{z}$  был обнаружен дополнительный резонансный пик между ТО и LO частотами. Было предположено, что дополнительный пик вызван оптической модой «эффективной среды», распространяющейся в плоскости слоев и локализованной около интерфейса. Диэлектрическую проницаемость анизотропной среды  $\epsilon_P$  можно получить из диэлектрической проницаемости составных объемных материалов из условия

непрерывности соответствующих компонент напряженности электрического поля ( $E_x$ ,  $E_y$ ) и непрерывности компоненты, перпендикулярной границе электрического смещения  $D_z$ .

$$\varepsilon_z = \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2 (d_1 + d_2)}{\varepsilon_1 d_2 + \varepsilon_2 d_1} = \langle \varepsilon^{-1} \rangle^{-1} \quad (1.11)$$

$$\varepsilon_{x,y} = \frac{\varepsilon_1 d_2 + \varepsilon_2 d_1}{(d_1 + d_2)} = \langle \varepsilon \rangle \quad (1.12)$$

Из равенства нулю  $\varepsilon_z$  можно найти частоту продольной моды, а из полюсов  $\varepsilon_{x,y}$  – частоты поперечных мод, распространяющихся вдоль оси сверхрешетки. Эти частоты совпадают с объёмными частотами. Для колебаний, распространяющихся в плоскости сверхрешетки, частоты можно найти из

$$d \langle \varepsilon \rangle = d_1 \varepsilon_1 + d_2 \varepsilon_2 = 0 \quad (1.13)$$

для продольных частот и

$$d \langle \varepsilon^{-1} \rangle = d_1 / \varepsilon_1 + d_2 / \varepsilon_2 = 0 \quad (1.14)$$

для поперечных частот. Частоты, являющиеся решением этих уравнений, лежат между LO и TO объёмных материалов. Для  $d_1=d_2$  LO и TO эффективной среды вырождаются и удовлетворяют уравнению

$$\varepsilon_1 = -\varepsilon_2, \quad (1.15)$$

которое является стандартным уравнением для мод, локализованных около интерфейса для полуограниченных материалов [41]. На основании вышеизложенного было предположено, что дополнительный пик КРС связан с колебаниями интерфейса, распространяющимися в плоскости слоев сверхрешетки. Оптические объёмные моды сильно локализованы в одном из слоев, вследствие чего их частоты могут быть описаны с использованием однослойной модели [42]. Макроскопический метод из-за пренебрежения зависимостью потенциала от волнового вектора не чувствителен к деталям колебаний интерфейса. Более реалистичную

картину дает учет зависимости потенциала от волнового вектора, накладываемый на свойства кристалла его периодичностью [43,44]. Диэлектрическая проницаемость объёмных материалов:

$$\varepsilon_{1,2}(\omega) = \varepsilon_{1,2}^{\infty} \frac{\omega^2 - \omega L_{1,2}^2}{\omega^2 - \omega T_{1,2}^2} \quad (1.16)$$

В пренебрежении эффектов запаздывания электрический потенциал подчиняется уравнению Пуассона:

$$\varepsilon \nabla^2 \phi = 0, \quad (1.17)$$

которое автоматически выполняется для  $\varepsilon(\omega)=0$ . Это условие существования продольных мод ( $\omega_{L1}, \omega_{L2}$ ), которые локализованы в одном из слоёв, так как  $\omega_{L1} \neq \omega_{L2}$ . Но возможно другое решение, полученное из уравнения  $\nabla^2 \phi = 0$ . Это решение описывает колебания интерфейса. Вначале рассмотрим локализованные колебания в слоях и учтем периодичность потенциала в решетке. Условия дискретности для компонент волнового вектора, лежащих в плоскости, накладываются планарными размерами кристалла, вследствие чего их можно считать непрерывными. Для компоненты вдоль оси сверхрешетки условия дискретности накладываются размерами слоев, так как колебания локализованы в слоях. Чтобы определить возможные значения вдоль оси сверхрешетки ( $z$ ), разложим потенциал в ряд Фурье.

$$\phi_1(x, y) = \phi_0 e^{ikx} \cos(qz) \quad (1.18)$$

$$\phi_2(x, y) = \phi_0 e^{ikx} \sin(qz) \quad (1.19)$$

Так как колебания локализованы в одном слое, то смещения атомов для этой моды в другом слое отсутствуют. А так как диэлектрическая проницаемость используемых объёмных материалов не бесконечна, то и поляризация в этом слое, которая пропорциональна атомному смещению, равна нулю. Продольные атомные смещения



пропорциональны напряженности электрического поля, следовательно, электрическое поле и его смещение так же локализованы в одном слое. Для колебаний, локализованных в первом слое, из непрерывности  $E_x$  для Фурье компонент (1.18):

$$E_x = \frac{\partial \phi}{\partial x} = ik\phi_0 e^{ikx} \cos(qd_1/2) = 0 \quad (1.20)$$

Из непрерывности  $D_z$ :

$$D_z = \varepsilon_1 \frac{\partial \phi}{\partial z} = \varepsilon_1 q\phi_0 e^{ikx} \sin(qd_1/2) = 0 \quad (1.21)$$

Здесь начало координат по оси  $Z$  расположено в середине первого слоя. Решением уравнения (1.21) будет  $\varepsilon_1=0$ , откуда получаем частоты объёмных продольных мод. Атомные смещения непрерывны на границе, а так как для продольных колебаний смещения пропорциональны напряженности поля, то непрерывно и электрическое поле  $E_z$ . Из непрерывности  $E_z$

$$q\phi_0 e^{ikx} \sin(qd_1/2) = 0 \quad (1.22)$$

В случае  $k \neq 0$  и  $q \neq 0$  невозможно одновременно выполнить (1.22) и (1.20). В случае  $k=0$  из (1.20) находим:

$$q = \frac{\pi}{d_1} m, \quad m = 2, 4, 6 \dots \quad (1.23a)$$

и аналогично для Фурье компонент (1.19)

$$q = \frac{\pi}{d_1} m, \quad m = 1, 3, 5 \dots \quad (1.23b)$$

Этот результат можно применить для  $k$ , отличного от нуля, при условии, что  $k$  значительно меньше  $q$  из (1.23 a,b), что возможно для относительно тонких сверхрешеток.

Рассмотрим колебания структуры, локализованные около интерфейса. Уравнения потенциала для них можно получить из (1.18) и (1.19), заменив  $\sin$  и  $\cos$  на  $e^{\pm Qz}$

$$\phi_{1,2} = \phi_0 e^{ikx} e^{\pm Qz}. \quad (1.24)$$

Здесь начало координат выбрано на границе сред. Знаки для потенциала среды выбираются так, чтобы на бесконечности потенциал исчезал. (1.24) будет удовлетворять уравнению Пуассона (1.13) только в случае  $k=Q$ . Граничные условия для  $D_z$  приводят к (1.15). Для периодической системы интерфейсов возможна линейная комбинация потенциалов (1.24). Для такой системы электростатический потенциал подчиняется теореме Блоха

$$\phi_0(x, z) = \phi_0(x, z) e^{iqnx} \quad (1.25)$$

Учет того, что электрическое смещение на разных границах так же подчиняется теореме Блоха, приводит к [43]:

$$\cos(qd) = \cosh(kd_1)\cosh(kd_2) + \frac{1}{2} \left( \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \right) \sinh(kd_1)\sinh(kd_2) \quad (1.26)$$

Численное решение этого уравнения проанализировано в [43]. В [45] проведено сравнение численных и экспериментальных результатов для GaAs/AlAs сверхрешеток. Результатом решения для каждого значения  $q$  и  $k$  являются четыре частоты, которые образуют по две энергетические зоны в области оптических частот для каждого составного материала. Эти частоты лежат между ТО и LO объёмных частот.

Уравнение (1.26) в случае  $q=0$  можно решить аналитически

$$-\frac{\varepsilon_1(\omega)}{\varepsilon_2(\omega)} = \begin{cases} \tanh\left(\frac{kd_1}{2}\right) \coth\left(\frac{kd_2}{2}\right) \\ \tanh\left(\frac{kd_2}{2}\right) \coth\left(\frac{kd_1}{2}\right) \end{cases}. \quad (1.27)$$

В случае  $d_1=d_2$  уравнение для частоты колебаний интерфейса сводится к  $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$ , что эквивалентно уравнению полуограниченной среды (1.15). В длинноволновом пределе для лежащего в плоскости волнового вектора  $k$  при  $q=0$  уравнение эквивалентно (1.14). В этом

предельном случае длина затухания становится неограниченной, и реально колебания не локализованы около интерфейса, даже если диэлектрические свойства имеют «характер интерфейса». Электростатический анализ имеет широкую область применения. Его легко обобщить для других продольных возбуждений, например плазмонов [46], необходимо только проверить правомерность приближений. Так в [31,47] показано, что существование моды интерфейса в системах с плазмонами стоит под большим вопросом.

*Анализ частот локализованных оптических мод в модели линейной цепочки.*

Самой простой моделью, объясняющей возникновение в фононном спектре сверхрешеток вышеупомянутых свернутых и локализованных мод и численно описывающей их дисперсию, является модель линейной цепочки [1,48-51]. Обоснование возможности применения данной модели для расчетов собственных частот колебаний в сверхрешетках с плоскими границами раздела, например, такими, как сверхрешетки GaAs/GaAlAs, выращенных на поверхности (100), заключается в следующем. В простейшем случае “жесткой” локализации в слое, то есть когда смещения атомов на границе равны нулю, решением будет набор плоских стоячих волн с соответствующими длинами волн  $\lambda=2(d+\delta)/m$ , где  $m$  - целое число (порядок локализованной моды), а  $d$  - это толщина слоя, в котором локализованы фононы,  $\delta$  - глубина их проникновения в слой другого материала. Частоты локализованных мод соответствуют частотам объемных оптических фононов с волновыми векторами  $q=\pi m/(d+\delta)$ , где  $\delta$  обычно составляет один монослой [1,48,49,52,53]. В сверхрешетках с однородными слоями и гладкими гетерограницами в условиях резонансного КРС в спектрах наблюдались пики, соответствующие рассеянию на локализованных продольных оптических (LO) модах 8-ого порядка [53] и поперечных оптических (TO) модах 5-ого порядка [54].

Таким образом, исследование методом КРС оптических фононов, локализованных в слоях сверхрешеток, дает информацию об их дисперсии в объемном материале. Это

особенно важно в случае, когда изучаемый материал не может существовать в природе в нормальных условиях, как, например AlAs, который при контакте с атмосферой окисляется [55]. Как уже упоминалось выше, частоты локализованных оптических фононных мод сильно зависят от толщин слоев, в которых они локализованы, поэтому, изучая спектры КРС в СР, можно определять толщину и однородность этих слоев [55]. Анализируя положение и ширину пиков КРС на локальных модах, можно изучать шероховатость гетерограниц с атомарной точностью [55]. Однако, хотя влияние структуры гетерограниц, например возникновение атомарных ступенек в латеральном направлении, должно сильно проявляться именно в СР с очень тонкими слоями, к настоящему времени были исследованы структуры с относительно толстыми слоями GaAs/AlAs, и существует недостаток экспериментальных данных по КРС в СР, содержащих субмонослой GaAs.

### §1.2. Трехмерное моделирование решеточной динамики гетероструктур

Полномасштабное трехмерное моделирование можно осуществить двумя путями: а) методами “ab initio” [56,57], которыми из-за ограниченности вычислительных мощностей невозможно моделировать сложные структуры (100 и более атомов); б) построением атомистических феноменологических моделей [31,39,40,58,59], которым и посвящен данный параграф.

#### Модель силовых констант Борна

Модель, предложенная Борном [39], является самой простой и наиболее употребительной из атомистических феноменологических моделей. Общий формализм этих моделей следующий. Координаты атома кристалла в положении равновесия можно записать:

$R_s^{(l)} = R^l + r^s$ , где  $R^l$  – радиус вектор элементарной ячейки  $l$ ,  $r^s$  – радиус вектор атома сорта

$s$  внутри ячейки. Пусть  $u_s^{(l)}$  – вектор смещения атома сорта  $s$  в ячейке  $l$  из положения равновесия. Разложим потенциальную энергию в ряд Тейлора до второго порядка малости около положения равновесия:

$$\Phi = \Phi^0 - \sum_{l,s,\alpha} \Phi_{\alpha}^{(l)} u_{\alpha}^{(l)} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,s,\alpha \\ l',s',\beta}} \Phi_{\alpha,\beta}^{(l,l')} u_{\alpha}^{(l)} u_{\beta}^{(l')} \quad (1.28)$$

где  $\alpha, \beta$  – декартовы координаты,

$$\Phi_{\alpha}^{(l)} = - \left. \frac{\partial \Phi}{\partial u_{\alpha}^{(l)}} \right|_{u=0} = 0 \quad (1.29)$$

сила, действующая на атом сорта  $s$  в ячейке  $l$ . В положении равновесия сила, действующая на атом, равна нулю.

$$\Phi_{\alpha,\beta}^{(l,l')} = \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_{\alpha}^{(l)} \partial u_{\beta}^{(l')}} \right|_{u=0} \quad (1.30)$$

– так называемая силовая матрица. Ее компоненты в литературе называют силовыми константами. Уравнение движения такой системы выглядит

$$m_s \ddot{u}^{(l)} = - \sum_{l',s'} \Phi_{(s s')}^{(l l')} u^{(l')}$$

Закон, по которому будет изменяться смещение атома, можно записать в форме бегущих волн:

$$u_{\alpha}^{(l)}(s, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q,j} u_{\alpha}(s|q,j) \exp[i(q \cdot R^l) - \omega(q,j)t] \quad (1.31)$$

где  $s$  – сорт атома,  $q$  – вектор обратного пространства,  $u_{\alpha}(s|q,j)$  – коэффициенты разложения,  $j=1..3n$ ,  $n$  – количество атомов в элементарной ячейке,  $N$  – число элементарных ячеек в кристалле. Тогда уравнение движения примет вид:

$$\sum_{q,j} \left\{ m_s \omega^2(q,j) u(s|q,j) \right\} \exp[i(q \cdot R^l) - \omega(q,j)t] =$$

$$\sum_{q,j} \left\{ \sum_{s'} \left[ \sum_{l'} \Phi_{(s s')}^{(l l')} \exp[i(q \cdot (R^{l'} - R^l))] \right] u(s'|q,j) \right\} \exp[i(q \cdot R^l) - \omega(q,j)t].$$

Приравнивая множители перед  $\exp[i(q \cdot R^l) - \omega(q, j)t]$ , для каждого  $q$  получаем уравнение:

$$m_s \omega^2(q, j) u_\alpha(s | q, j) = \sum_{s', \beta} \bar{D}_{\alpha\beta}(s, s' | q) u_\beta(s' | q, j), \quad (1.32)$$

где  $\bar{D}(q)$  – матрица размерностью  $3n \times 3n$ ,

$$\bar{D}_{\alpha\beta}(s, s' | q) = \sum_{l'} \Phi_{\alpha, \beta}^{(l' | s, s')} \exp\{i[q \cdot (R^{l'} - R^l)]\} \quad (1.33)$$

Если принять обозначения

$$v_\alpha(s | q, j) = \sqrt{m_s} u_\alpha(s | q, j), \quad (1.34)$$

то уравнение (1.32) сводится к

$$\omega^2(q, j) v_\alpha(s | q, j) = \sum_{s', \beta} D_{\alpha\beta}(s, s' | q) v_\beta(s' | q, j), \quad (1.35)$$

где

$$D_{\alpha\beta}(s, s' | q) = \frac{1}{\sqrt{m_s m_{s'}}} \bar{D}_{\alpha\beta}(s, s' | q) \quad (1.36)$$

– так называемая динамическая матрица. Набор коэффициентов  $v_\alpha(s | q, j)$  ( $\alpha = 1..3$ ,  $s = 1..n$ ) в литературе называется вектором поляризации  $J^{\text{фо}}$  фонона с волновым вектором  $q$ .

Перепишем (1.35)

$$\sum_{s', \beta} \{D_{\alpha\beta}(s, s' | q) - \omega^2(q, j) \delta_{s, s'} \delta_{\alpha, \beta}\} v_\beta(s' | q, j) = 0 \quad (1.35a)$$

Для того, чтобы эта система имела отличные от нуля решения, должен обращаться в нуль ее определитель:

$$|D(q) - \omega^2(q, j) \delta_{s, s'} \delta_{\alpha, \beta}| = 0 \quad (1.35b)$$

Решая это так называемое характеристическое уравнение, находим для каждого  $q$  набор  $\omega^2(q, j)$ ,  $j = 1..3n$ .

Силовые константы, вообще говоря, могут служить подгоночными параметрами модели, однако, очевидно, некоторые из них будут зависимыми друг от друга. Эта зависимость накладывается симметрией кристалла. Из (1.30) следует:

$$\Phi_{\alpha,\beta} \begin{pmatrix} l l' \\ s s' \end{pmatrix} = \Phi_{\beta,\alpha} \begin{pmatrix} l' l \\ s' s \end{pmatrix} \quad (1.37)$$

При смещении кристалла как целого на произвольный вектор  $u$  сила, действующая на

произвольный атом, равна нулю:  $\sum_{l,s} \Phi \begin{pmatrix} l l' \\ s s' \end{pmatrix} u = 0$ . Ввиду произвольности  $u$

$$\sum_{l,s} \Phi_{\alpha,\beta} \begin{pmatrix} l l' \\ s s' \end{pmatrix} = 0 \quad (1.38)$$

Из инвариантности потенциальной энергии относительно поворота кристалла как целого следует [37,60,61]:

$$\sum_{l',s'} \Phi_{\alpha,\beta} \begin{pmatrix} l l' \\ s s' \end{pmatrix} R_{\gamma} \begin{pmatrix} l' \\ s' \end{pmatrix} = \sum_{l',s'} \Phi_{\alpha,\gamma} \begin{pmatrix} l l' \\ s s' \end{pmatrix} R_{\beta} \begin{pmatrix} l' \\ s' \end{pmatrix}$$

Наличие трансляционной симметрии приводит к

$$\Phi_{\alpha,\beta} \begin{pmatrix} l+h \ l'+h \\ s \ s' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha,\beta} \begin{pmatrix} l l' \\ s s' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha,\beta} \begin{pmatrix} 0 \ l'-l \\ s \ s' \end{pmatrix} = \Phi_{\alpha,\beta} \begin{pmatrix} l-l' \ 0 \\ s \ s' \end{pmatrix}, \quad (1.39)$$

где  $h$  – любая линейная комбинация векторов трансляции решетки [37,60]. Если взаимодействие между двумя атомами можно выразить посредством двухчастичного потенциала  $\Psi_{ss'} \{R \begin{pmatrix} l' \\ s' \end{pmatrix} - R \begin{pmatrix} l \\ s \end{pmatrix}\}$ , то в отсутствии внешнего поля такой потенциал можно

записать как функцию от модуля расстояния между частицами, т.е.  $\Psi_{ss'} \{r \begin{pmatrix} l \ l' \\ s \ s' \end{pmatrix}\}$ , где

$r \begin{pmatrix} l \ l' \\ s \ s' \end{pmatrix} = |R \begin{pmatrix} l' \\ s' \end{pmatrix} - R \begin{pmatrix} l \\ s \end{pmatrix}|$ . Потенциальная энергия кристалла примет вид:

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,s \\ l',s'}} \Psi_{ss'} \left\{ r \begin{pmatrix} l \ l' \\ s \ s' \end{pmatrix} \right\}$$

Подставляя вид потенциала в (1.30), получим:

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha,\beta}^{l',s'0} \left( \begin{matrix} l \\ s \ s' \end{matrix} \right) = & -\Psi_{s,s'}'' \left\{ \left| r^s - r^{s'} - R^l \right| \right\} \frac{\left( r^s - r^{s'} - R^l \right)_\alpha \left( r^s - r^{s'} - R^l \right)_\beta}{\left| r^s - r^{s'} - R^l \right| \left| r^s - r^{s'} - R^l \right|} + \\ & + \frac{\Psi_{s,s'}' \left\{ \left| r^s - r^{s'} - R^l \right| \right\}}{\left| r^s - r^{s'} - R^l \right|} \left[ \frac{\left( r^s - r^{s'} - R^l \right)_\alpha \left( r^s - r^{s'} - R^l \right)_\beta}{\left| r^s - r^{s'} - R^l \right| \left| r^s - r^{s'} - R^l \right|} - \delta_{\alpha,\beta} \right] \end{aligned} \quad (1.40)$$

и из (1.38)

$$\Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} 0 \\ s \ s \end{matrix} \right) = - \sum_{l,s'} \Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l \\ s \ s' \end{matrix} \right) \quad (1.41)$$

Здесь  $\Psi_{s,s'}''(x) = \frac{d^2 \Psi_{s,s'}(x)}{dx^2}$ ,  $\Psi_{s,s'}'(x) = \frac{d \Psi_{s,s'}(x)}{dx}$ . Первый член (1.40) описывает силу, действующую на атом  $\left( \begin{matrix} 0 \\ s \end{matrix} \right)$ , возникающую при смещении атома  $\left( \begin{matrix} l \\ s' \end{matrix} \right)$  вдоль связи из положения равновесия; второй – силу при смещении атома перпендикулярно связи. Так как  $\Psi_{s,s'}$  и ее производные зависят только от расстояния, удобно переобозначить атомы, взаимодействующие с атомом  $\left( \begin{matrix} 0 \\ s \end{matrix} \right)$ , по координационным сферам (первые соседи попадают в первую координационную сферу и т.д.). Так, каждый атом  $\left( \begin{matrix} l \\ s' \end{matrix} \right)$  при рассмотрении взаимодействия с  $\left( \begin{matrix} 0 \\ s \end{matrix} \right)$  попадает в некую координационную сферу  $P$  и имеет в ней некий номер  $i$ . Если ввести

$$R \left( \begin{matrix} l' \\ s' \end{matrix} \right) - R \left( \begin{matrix} 0 \\ s \end{matrix} \right) = r^{Pi}(s), \quad (1.42)$$

тогда (1.40) можно записать:

$$\Phi_{\alpha,\beta}^{l',s'0} \left( \begin{matrix} l \\ s \ s' \end{matrix} \right) = - \left( kl_{s,s'}^P - kt_{s,s'}^P \right) e_\alpha^{Pi} e_\beta^{Pi} - kt_{s,s'}^P \delta_{\alpha,\beta}, \quad (1.43)$$

здесь  $kl_{s,s'}^P = \Psi_{s,s'}'' \left( \left| r^{Pi}(s) \right| \right)$ ,  $kt_{s,s'}^P = \Psi_{s,s'}' \left( \left| r^{Pi}(s) \right| \right) / \left| r^{Pi}(s) \right|$ ,  $e^{Pi}(s) = r^{Pi}(s) / \left| r^{Pi}(s) \right|$ ,  $kl_{s,s'}^P$ ,  $kt_{s,s'}^P$  –

подгоночные константы жесткости связи при ее растяжении и изгибе, соответственно.



Борн рассмотрел решение этого секулярного уравнения в акустическом пределе ( $\omega \rightarrow 0$ ) и в длинноволновом пределе ( $q^2 = q_x^2 + q_y^2 + q_z^2 \rightarrow 0$ ). Из сравнения получившиеся матричных элементов с элементами характеристического уравнения для акустических волн, развитого в рамках теории упругости для решеток с кубической симметрией [37,60], были найдены следующие соотношения между константами упругости  $c_{11}$ ,  $c_{12}$ ,  $c_{44}$  и силовыми константами  $kl$ ,  $kt$ :

$$c_{11} = \frac{kl + kt}{4 \cdot a}, \quad c_{12} = \frac{kl - 2 \cdot kt}{4 \cdot a}, \quad c_{44} = \frac{3 \cdot kt \cdot (kl + \frac{kt}{4})}{4 \cdot a \cdot (kl + kt)}. \quad (1.44)$$

здесь  $a$ - постоянная решетки. Из (1.44) нетрудно получить Борновское соотношение:

$$I_B \equiv \frac{4c_{11}(c_{11} - c_{44})}{(c_{11} + c_{12})^2} = 1 \quad (1.45)$$

Значения  $I_B$ , рассчитанные из упругих констант, полученных экспериментальным способом, для алмаза равно 1.49, для кремния– 1.08, для германия– 1.01. Из этого видно, что соотношение Борна хорошо выполняется для кремния и германия, но не для алмаза.

#### Метод Эвальда

Метод, позволяющий учесть дальнедействующее взаимодействие в кристаллической решетке, был предложен Эвальдом [37,60,62]. Рассмотрим этот метод в применении к модели жестких ионов и получим конкретную формулу для расчета. Выделим из потенциальной энергии взаимодействующих частиц  $\Phi$  кулоновскую часть:  $\Phi = \Phi^M + \Phi^K$ , где  $\Phi^K$  – потенциальная энергия кулоновского взаимодействия,  $\Phi^M$  – потенциальная энергия всех остальных полей. В модели жестких ионов кристалл состоит из точечных недеформируемых зарядов. Кулоновское взаимодействие является двухчастичным, поэтому можно воспользоваться (1.40). Кулоновский потенциал имеет вид:

$$\Psi_{s s'}^k(r) = \frac{z^s z^{s'}}{r}, \quad (1.46)$$

где  $z^s$  – эффективный заряд  $s^{\text{го}}$  иона,  $r$  – модуль расстояния между взаимодействующими частицами. Силовую матрицу (1.40) кулоновского взаимодействия удобно записать в следующем виде:

$$\Phi_{\alpha, \beta}^{(l)}(s, s') = - \frac{\partial^2}{\partial R_\alpha \cdot \partial R_\beta} \left( \frac{z^s \cdot z^{s'}}{|R^l - R|} \right) \Bigg|_{R=r^s - r^{s'}}. \quad (1.47)$$

Тогда динамическая матрица (1.36) при  $s \neq s'$  примет вид:

$$D_{\alpha, \beta}^{s \neq s'} \langle s, s' | q \rangle = - \frac{z^s \cdot z^{s'}}{\sqrt{m_s \cdot m_{s'}}} \cdot \frac{\partial^2}{\partial R_\alpha \cdot \partial R_\beta} \sum_l \frac{e^{i(q \cdot R^l)}}{|R^l - R|} \Bigg|_{R=r^s - r^{s'}}. \quad (1.48)$$

Ряд в выражении (1.48) сходится плохо, и использовать для практических расчетов эту формулу невозможно. Это затруднение можно обойти, произведя тождественное преобразование, предложенное Эвальдом:

$$\frac{1}{|R^l - R|} \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\eta e^{-|R^l - R|^2 \cdot \rho^2} d\rho + \operatorname{erfc}(\eta \cdot |R^l - R|). \quad (1.49)$$

где  $\operatorname{erfc}(x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_x^\infty \exp(-t^2) \cdot dt$ , тогда выражение для динамической матрицы будет

представлять сумму двух рядов. Ряд, содержащий функцию  $\operatorname{erfc}$ , хорошо сходится для больших  $\eta$ . Ряд, содержащий интегралы, сходится плохо, однако, если произвести Фурье преобразование

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \sum_l \exp\left(-|R^l - R|^2 \cdot \rho^2 + i \cdot (q \cdot (R^l - r))\right) = \frac{2 \cdot \pi}{V_\alpha} \cdot \sum_K \frac{1}{\rho^3} \cdot \exp\left(-\frac{|K + q|^2}{4 \cdot \rho^2} + i \cdot (K \cdot R)\right) \quad (1.50)$$

этого ряда, то ряд становится быстро сходящимся, где  $V_\alpha$  – объем элементарной ячейки,  $K = k^1 \cdot b^1 + k^2 \cdot b^2 + k^3 \cdot b^3$ ,  $b^1, b^2, b^3$  – базисные векторы обратной решетки,

$k^1, k^2, k^3$  – целые числа. Равенство (1.50) носит название преобразования  $\mathcal{G}$  функции [37].

После произведенных преобразований динамическая матрица (1.48) примет вид

$$D_{\alpha,\beta}^{s \neq s'} \langle s, s' | q \rangle = -\frac{z^s \cdot z^{s'}}{\sqrt{m_s \cdot m_{s'}}} \cdot \left( \Pi_{\alpha,\beta}^{s s'}(q) + \frac{4 \cdot \pi \cdot \exp(i \cdot (q \cdot (r^s - r^{s'}))) \cdot q_\alpha \cdot q_\beta}{V_\alpha \cdot q^2} \right). \quad (1.51)$$

где

$$\Pi_{\alpha,\beta}^{s s'}(q) = \frac{\partial^2 \Pi(q, R)}{\partial R_\alpha \cdot \partial R_\beta} \Bigg|_{R=r^s - r^{s'}}, \quad (1.52)$$

и

$$\begin{aligned} \Pi(q, R) = & \sum_l \frac{\operatorname{erfc}(\eta \cdot |R^l - R|)}{|R^l - R|} \cdot \exp(i \cdot (q \cdot R^l)) + \frac{4 \cdot \pi}{V_\alpha} \cdot \sum_{K \neq 0} \frac{\exp\left(-\frac{|K+q|^2}{4 \cdot \eta} + i \cdot ((K+q) \cdot R)\right)}{|K+q|^2} + \\ & + \frac{4 \cdot \pi}{V_\alpha} \cdot \exp(i \cdot (q \cdot R)) \cdot \left( -\sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-q^2)^i}{(4 \cdot \eta)^{i+1} \cdot i!} \right); \end{aligned} \quad (1.53)$$

Теперь рассмотрим случай  $s' = s$ . Используя (1.47), (1.41), (1.36), получим:

$$D_{\alpha,\beta} \langle s, s | q \rangle = -\frac{1}{\sqrt{m_s \cdot m_s}} \cdot \left( \frac{z^s \cdot z^s \cdot \partial^2}{\partial R_\alpha \cdot \partial R_\beta} \sum_{l \neq 0} \frac{e^{i \cdot (q \cdot R^l)}}{|R^l - R|} \Bigg|_{R=0} + \Phi_{\alpha,\beta} \binom{0}{s,s} \right). \quad (1.54)$$

Первый член правой части (1.54)  $\sum_{l \neq 0} \frac{e^{i \cdot (q \cdot R^l)}}{|R^l - R|}$  – непериодическая функция от  $R$  (так как нет нулевого члена). Для того, чтобы можно было произвести Фурье преобразование, прибавим и вычтем  $\frac{1}{|R|}$ . После чего можно произвести процедуру, описанную для случая  $s \neq s$ .

Теперь рассмотрим в (1.54) оставшийся член  $\Phi_{\alpha,\beta} \binom{0}{s,s}$ . Подставим (1.47) в (1.41):

$$\Phi_{\alpha,\beta} \binom{0}{s,s} = z^s \cdot \frac{\partial^2}{\partial R_\alpha \cdot \partial R_\beta} \sum_{l, s'} \binom{l, s'}{s, s} \frac{z^{s'}}{|R^l - R + r^s - r^{s'}|} \Bigg|_{R=0} = z^s \cdot \lim_{R \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial R_\alpha \cdot \partial R_\beta} \left[ \sum_l \sum_{s'} \frac{z^{s'}}{|R^l - R + r^s - r^{s'}|} - \frac{z^s}{|R|} \right]. \quad (1.55)$$

$\sum_{l,s'} \frac{z^{s'}}{|R^l - R + r^s - r^{s'}|}$  – выражение для электростатического потенциала в точке R, создаваемого всеми ионами. Так как ионные решетки всегда являются сложными решетками, то желательно аддитивно разделить потенциал на вклады от отдельных простых решеток с тем, чтобы одно и то же решение использовать для разных кристаллов, состоящих из одинаковых подрешеток. Однако вычислить потенциал простой решетки оказывается невозможным, так как она состоит из точечных зарядов одного знака, и потенциал расходится. Решить проблему можно, если сделать простую решетку электрически нейтральной путем внесения в нее равномерно распределенного заряда. В такой модели потенциал подрешетки существует, а внесенный равномерно распределенный заряд исключится при наложении всех подрешеток, так как ячейка в целом электрически нейтральна. Совершив описанную процедуру [60], можно получить

$$\Phi_{\alpha,\beta} \left( \begin{smallmatrix} 0 \\ s,s \end{smallmatrix} \right) = z^s \cdot \left[ \sum_{s' \neq s} z^{s'} \cdot \Pi_{|\alpha,\beta}^{s,s'}(0) + z^s \cdot \tilde{\Pi}_{|\alpha,\beta}(0) \right]. \quad (1.56)$$

где

$$\tilde{\Pi}_{|\alpha,\beta}(q) = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial R_\alpha \cdot \partial R_\beta} \left( \Pi(q, R) - \frac{1}{|R|} \right), \quad (1.57)$$

После проведения вышеописанных процедур получим:

$$D_{\alpha,\beta} \langle s,s | q \rangle = \frac{z^s}{m_s} \cdot \left[ - \sum_{s' \neq s} z^{s'} \cdot \Pi_{|\alpha,\beta}^{s,s'}(0) - z^s \cdot \tilde{\Pi}_{|\alpha,\beta}(0) + z^s \cdot \tilde{\Pi}_{|\alpha,\beta}(q) + \frac{4 \cdot \pi \cdot z^s}{V_\alpha} \cdot \frac{q_\alpha \cdot q_\beta}{q^2} \right]. \quad (1.58)$$

Формулы (1.58) и (1.51) можно непосредственно использовать для учета кулоновского взаимодействия при расчете фононных спектров.

### Модель валентных сил Китинга.

В основе модели Борна лежит представление о двухчастичном взаимодействии атомов в кристалле. При учете взаимодействия только ближайших соседей коэффициент

объемного сжатия  $B = (c_{11} + 2c_{12})/3 = (kl - kt)/4a$  зависит от тангенциальных сил, что выглядит противоречивым. Здесь,  $a$  – постоянная решетки,  $kl$  и  $kt$  – коэффициенты жесткости центральных и тангенциальных сил между первыми соседями. Китинг предложил более общую модель [63]. Пусть энергия упругой деформации зависит только от позиций ядер. Тогда, учитывая, что потенциал должен быть инвариантным относительно произвольного смещения решетки как целого, потенциал межатомных взаимодействий  $\Phi$  может зависеть только от разницы между позициями атомов, т.е.  $\Phi = \Phi(x_k - x_l) = \Phi(x_{kl})$ , где  $x_{kl} = x_k - x_l$  и  $x_k$  – позиция  $k$  <sup>оро</sup> ядра после деформации. Но  $\Phi$  должно быть также инвариантно относительно поворота кристалла как целого.  $x_{kl}$  не инвариантно относительно такого преобразования. Простейшая инвариантная функция от  $x_{kl}$  – скалярное произведение. Отсюда определим

$$\lambda_{klmn} = \frac{(x_{kl} \cdot x_{mn} - X_{kl} \cdot X_{mn})}{2a}, \quad (1.59)$$

где  $a$  – решеточная константа,  $X_{kl} = X_k - X_l$  и  $X_k$  – радиус вектор  $k$  <sup>оро</sup> ядра в недеформированном кристалле. Последний член нужен для того, чтобы при отсутствии деформации  $\lambda$  равнялось нулю. Таким образом, энергия упругости будет функцией от большого числа  $\lambda_{klmn}$ . Так как  $\lambda$  мало, энергию можно разложить в ряд по  $\lambda$ . А так как в положении равновесия на ядро не должна действовать никакая сила, то коэффициент при линейном члене по  $\lambda_{klmn}$  должен равняться нулю, и тогда потенциал равен

$$\Phi = \frac{1}{2} B_{klmn}{}^{pqrs} \lambda_{klmn} \lambda_{pqrs} + O(\lambda^3) \quad (1.60)$$

Для описания системы из  $N^q$  частиц необходимо  $3N^q - 6$  обобщенных координат. Число различных  $\lambda$  равно  $1/8N^q(N^q + 1)[N^q(N^q + 1) + 2]$ , что явно избыточно. В работе [63] было показано, что для описания простой кристаллической решетки в пренебрежении краевыми эффектами достаточно взять в качестве обобщенных координат все скалярные произведения трех векторов между тремя ближайшими соседними атомами. То есть, пусть  $x_1(l), x_2(l), x_3(l)$  – векторы, соединяющие атом в ячейке  $(l)$  с тремя ближайшими соседними атомами, причем, если атомы находятся в состоянии покоя, то векторы  $x_1(l), x_2(l), x_3(l)$  становятся равны базисной тройке векторов решетки  $X_1, X_2, X_3$  соответственно. Тогда энергия равна

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{l, l'} \sum_{m, n, m', n'=1}^3 B_{mnm'n'} (l-l') \lambda_{mn}(l) \lambda_{m'n'}(l') + \dots \quad (1.61)$$

где  $\lambda_{mn}(l) = (x_m(l) \cdot x_n(l) - X_m \cdot X_n) / 2a$ ,  $l, l'$  – номер элементарной ячейки, суммирование происходит по всей решетке, а  $B_{mnm'n'}$  должен быть инвариантным относительно всех операций пространственной группы. Расширение модели для решетки с элементарной ячейкой с двумя атомами А и В делается следующим образом. В качестве  $x_1(l), x_2(l), x_3(l)$  берем векторы между атомом А ячейки  $(l)$  и тремя ближайшими атомами сорта В из соседних ячеек, и  $x_4(l)$  – вектор между положением атома А и положением атома В ячейки  $(l)$ . Увеличение ячейки на один атом требует увеличение числа обобщенных координат на три. Т. е. для ячейки из двух атомов надо 9 координат. Из набора векторов  $x_1(l), x_2(l), x_3(l), x_4(l)$  получается 10 различных скалярных произведений. Поэтому отбросим любое недиагональное произведение, например,  $x_3(l) \cdot x_4(l)$ . Тогда выражение для энергии примет вид:

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{l,l'} \sum_{\substack{m,n,m',n'=1 \\ ((m,n),(m',n') \neq \\ (3,4),(4,3))}}^4 B_{mnm'n'} (l-l') \lambda_{mn}(l) \lambda_{m'n'}(l') + \dots \quad (1.62)$$

При дальнейшем расширении ячейки формула для энергии изменяется аналогичным образом. Рассмотрим решетку алмаза. В модели Китинга в первом приближении можно пренебречь недиагональными членами силовой матрицы, т.е. если  $m' \neq m$  или  $n' \neq n$ , то  $B_{mnm'n'} = 0$ , и учитывать только два типа взаимодействия: центральное, между ближайшими соседями, и нецентральное, между вторыми соседями. Элементарная ячейка структуры алмаза состоит из двух атомов (1 и 0). Если точку отсчета системы координат поместить в точку расположения атома 0, то координаты атомов  $r^i$  ( $i = 1..4$ ) будут  $(1, \bar{1}, \bar{1})a/4$ ,  $(\bar{1}, \bar{1}, 1)a/4$ ,  $(\bar{1}, 1, \bar{1})a/4$  и  $(1, 1, 1)a/4$ , соответственно. Из симметрии кристалла  $B_{mmmm} = k_l$  (для всех  $m$ ) и  $B_{mnmn} = 6k_\phi/5$  (для всех  $m, n, m \neq n$ ), тогда модель становится двухпараметрической, и энергия равна

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_l \left[ \frac{k_l}{4a^2} \sum_{i=1}^4 \left( x_{0i}^2(l) - \frac{3a^2}{16} \right)^2 + \frac{k_\phi}{2a^2} \sum_{i,j>i}^4 \left( x_{0i}(l) \cdot x_{0j}(l) + \frac{a^2}{16} \right)^2 \right], \quad (1.63)$$

где  $x_{0i}(l) = r^i + u \begin{pmatrix} l' \\ s \end{pmatrix} - u \begin{pmatrix} l \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\begin{pmatrix} l' \\ s \end{pmatrix}$  — однозначно находится для  $i$ -го соседа атома  $\begin{pmatrix} l \\ 0 \end{pmatrix}$ .

Используя формулы (1.30), (1.36), (1.33), (1.63) можно построить динамическую матрицу.

Упругие константы можно получить длинноволновым методом Борна [37,63]:

$$c_{11} = (k_l + 3k_\phi)/4a, \quad c_{12} = (k_l - k_\phi)/4a, \quad c_{44} = k_l k_\phi / a(k_l + k_\phi). \quad (1.64)$$

Из этих уравнений вытекает соотношение, аналогичное Борновскому (1.20):

$$I_K \equiv \frac{2c_{44}(c_{11} + c_{12})}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 3c_{12})} = 1 \quad (1.65)$$

Величина  $I_K$ , рассчитанная из упругих констант, полученных экспериментальным путем, равна для алмаза 0.99, для кремния 0.99, для германия 1.07. Такая погрешность для

первого приближения характеризует модель Китинга как перспективную. Модель Китинга успешно применялась для различных материалов как самостоятельная модель, так и совместно с моделью жестких ионов, и как составная часть более сложных моделей, например, модель заряда на связи Вебера.

### Оболочечная модель

Если в ионном кристалле ионы сместить из положения равновесия, возникает дипольный момент, порождающий кулоновское поле, которое состоит из макроскопического поля и лоренцевского поля, связанного с так называемыми поправками на локальное поле. Макроскопическое поле, со своей стороны, действует на движение ионов как внешняя сила и, более того, может поляризовать ионы и, таким образом, увеличивать их дипольный момент [64]. Если мы пренебрежем поляризуемостью ионов, т.е. будем рассматривать их как жесткие или точечные, то колебательные свойства кристаллов можно будет изучать с помощью теории, описанной в предыдущих разделах.

Однако учет деформируемости и поляризуемости ионов требует иного подхода к вопросам динамики, так как эти свойства являются электронными по своей природе и не могут быть включены в теорию колебаний решетки, исходящей из разложения решеточного потенциала только по ионным смещениям. При феноменологическом выводе уравнений движения для колебаний ионных кристаллов, помимо смещений ионов  $u_{\beta}^{(l)}$ , компоненты макроскопического электрического поля кристалла  $E_{\alpha}^{(l)}$  рассматриваются как независимые динамические переменные. Однако, с помощью уравнений Максвелла, последние можно выразить через предыдущие так, что окончательные уравнения движения, которые и определяют собственные колебания, снова будут зависеть лишь от смещений.

Исходным пунктом для такой феноменологической теории может быть следующее выражение для потенциальной энергии:



$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,s,\alpha \\ l',s',\alpha'}} \Phi_{\alpha\alpha'} \binom{l \ l'}{s \ s'} u_{\alpha} \binom{l}{s} u_{\alpha'} \binom{l'}{s'} - \sum_{\substack{l,s,\alpha \\ l',s',\alpha'}} M_{\alpha\alpha'} \binom{l \ l'}{s \ s'} E_{\alpha} \binom{l}{s} u_{\alpha'} \binom{l'}{s'} - \sum_{\substack{l,s,\alpha \\ l',s',\alpha'}} P_{\alpha\alpha'} \binom{l \ l'}{s \ s'} E_{\alpha} \binom{l}{s} E_{\alpha'} \binom{l'}{s'}. \quad (1.66)$$

Здесь силовые константы  $\Phi_{\alpha\alpha'} \binom{l \ l'}{s \ s'}$  описывают короткодействующие силы, включая и силы, связанные с локальным полем. Влияние макроскопического электрического поля содержится во втором и третьем слагаемых выражения (1.66).  $M_{\alpha\alpha'} \binom{l \ l'}{s \ s'}$  – так называемый поперечный тензор эффективного заряда.  $P_{\alpha\alpha'} \binom{l \ l'}{s \ s'}$  – тензор электрической поляризуемости. В феноменологических подходах к динамике решетки силовые постоянные рассматривают как параметры, которые должны быть определены из экспериментальных данных. Чтобы получить адекватное приближение, нужно, чтобы в модели не содержалось слишком большого количества параметров, причем последние должны иметь определенный физический смысл. В оболочечной модели атом рассматривают как остов, с которым посредством изотропной пружины связана безмассовая оболочка, представляющая собой внешние валентные электроны (рис. 1.1). В этой модели существует лишь один тип поляризации: относительное смещение остова и оболочки, независимо от того, вызывается ли оно электрическим полем или влиянием короткодействующих сил.

Смещение оболочки полностью задается ее центром, поэтому можно формально заменить оболочку точечной заряженной частицей, находящуюся в центре оболочки. Тогда эта модель сводится к модели Борна для короткодействующих сил с удвоенным количеством частиц и модели жестких ионов с удвоенным количеством частиц для кулоновских сил, с учетом того, что остов со своей оболочкой электростатически не взаимодействует. Увеличение элементарной ячейки в два раза введет за собой нежелательный эффект увеличения размера динамической матрицы. Его легко обойти ввиду адиабатического движения оболочек. Пусть  $s, s'$  – номера остовов в ячейке,  $p, p'$  – номера оболочек в ячейке, тогда уравнение (1.32), с учетом того, что масса оболочки равна нулю, можно записать:

$$m_s \omega^2(q, j) v_\alpha(s | q, j) = \sum_{s', \beta} D_{\alpha\beta}(s, s' | q) v_\beta(s' | q, j) + \sum_{s', \beta} D_{\alpha\beta}(s, p' | q) v_\beta(p' | q, j) \quad (1.67)$$

и

$$0 = \sum_{s', \beta} D_{\alpha\beta}(p, s' | q) v_\beta(s' | q, j) + \sum_{s', \beta} D_{\alpha\beta}(p, p' | q) v_\beta(p' | q, j), \quad (1.68)$$

из (1.68) можно выразить компоненты  $v_\beta(p' | q, j)$ , и тогда уравнение (1.67) примет вид:

$$m_s \omega^2(q, j) v_\alpha(s | q, j) = \sum_{s', \beta} (D_{\alpha\beta}(s, s' | q) + \tilde{D}_{\alpha\beta}(s, s' | q)) v_\beta(s' | q, j), \quad (1.69)$$

где

$$\tilde{D}_{\alpha\beta}(s, s' | q) = \sum_{\substack{p, \alpha' \\ p', \beta'}} D_{\alpha\alpha'}(s, p | q) D_{\alpha'\beta'}^{-1}(p, p' | q) D_{\beta'\beta}(p', s' | q), \quad (1.70)$$

и тогда решение уравнения движения сводится к характеристическому уравнению (1.35b). Дальнейшее развитие оболочечной модели связано с дополнительным учетом радиально симметричной деформируемости ионов, т.е. так называемой дышащей (breathing) деформируемости, что позволяет существенно улучшить приближение экспериментальных фононных дисперсионных кривых с помощью оболочечной модели.

### Модель заряда на связи

Использование оболочечной модели в случае ковалентных веществ вызывает возражение, так как неадекватно приписывать электроны связи тому или другому атому, поскольку они между этими атомами распределены. В работе [65] дается физическое обоснование модели заряда на связи [66]. В этой модели неполное экранирование ионов в ковалентных кристаллах посредством диагональной матрицы диэлектрической

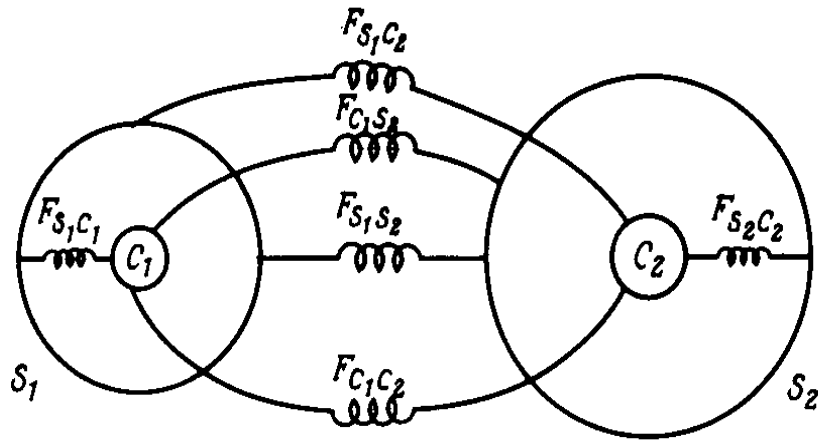


Рис. 1.1. Иллюстрация короткодействующих силовых постоянных в оболочечной модели.  $F_{S_2C_1}$  обозначает силовую постоянную между остовом 1 и оболочкой 2 и т.д.

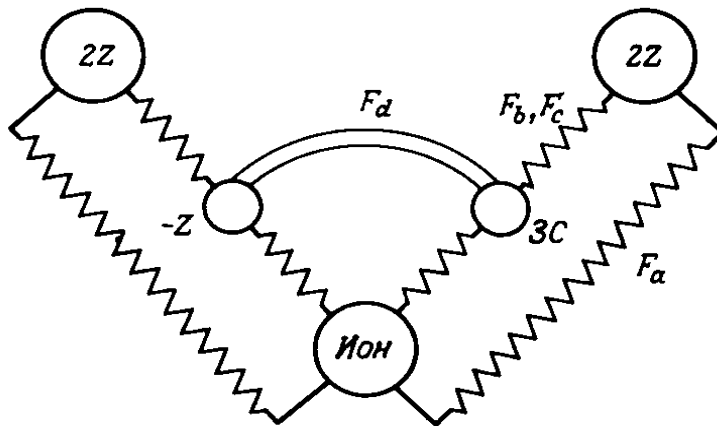


Рис. 1.2. Схематичное изображение модели заряда на связи.  $2Z$ – остаточный заряд иона, возникающий вследствие неполной экранировки посредством диагональной диэлектрической проницаемости.  $(-Z)$ – заряд на связи (3C). Присутствуют короткодействующие силы между ионами ( $F_a$ ) и кулоновские силы между ионами и 3C ( $F_b$ ).  $F_d$  описывает взаимодействие связь-связь, взаимодействие описывается потенциалом Китинга [67].

проницаемости компенсируется зарядами на связи; предполагают, что они расположены посередине между соседними ионами (рис. 1.2). Заряды на связи дают эффективные нецентральные силы между ионами и, таким образом, приводят к устойчивости решетки типа алмаза относительно скручивания. Из этого следует, что они соответствуют ковалентному характеру связи. Согласие между фононными спектрами, вычисленными и определенными экспериментально, можно улучшить, если ввести адиабатическое движение заряда на связи. На первый взгляд, между различными феноменологическими моделями, используемыми для изучения решетки различных систем, соответствия не видно. Микроскопическая теория фононов дает инструмент для исследования таких возможных соответствий между различными моделями, потому что она представляет собой единый подход к колебаниям решетки как в проводящих, так и в непроводящих кристаллах.

В микроскопической теории фононов общее выражение для постоянных выводится из микроскопического исследования взаимодействия между ионами, которые состоят из: 1) прямого ион-ионного взаимодействия; и 2) взаимодействия через электроны. Выражение для силы, действующей на ион, выводится посредством изучения отклика электронов кристалла на поле, возникающее при колебании ионов. Принимая приближения Борна–Оппенгеймера и гармоническое приближение, можно получить силы и, следовательно, динамическую матрицу, выраженные через матрицу обратной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon^{-1}(q + K, q + K')$  ( $q$  – волновой вектор, приведенный к первой зоне Бриллюэна,  $K, K'$  – векторы обратной решетки) [68].

Изучение аналитических свойств  $\varepsilon^{-1}$  как функции  $q$  вблизи  $q=0$  оказывается важным для установления связи между микроскопическим и феноменологическим подходами. Так, динамическая матрица, полученная для диэлектриков (ионных кристаллов) из чисто феноменологических соображений, может быть выведена микроскопически. В частности, может быть получено микроскопическое выражение для тензора эффективного заряда.

Из исследования длинноволновых акустических мод следует, что для диэлектриков все частоты акустических колебаний обращаются в нуль при  $q \rightarrow 0$ , если удовлетворяется условие нейтральности эффективных зарядов. Последнее условие подразумевает необходимость учета всех недиагональных элементов  $\varepsilon^{-1}$ , которые определяют поправки на локальное поле. Это указывает на важность эффектов локального поля в диэлектриках (включая также полупроводники, такие, как Ge или Si). В случае металлов такого условия не существует. Этот факт предполагает (в качестве наиболее грубого приближения) полное пренебрежение недиагональными элементами  $\varepsilon^{-1}$ . Таким образом, кроме, может быть, случая простых металлов, практически использовать микроскопический подход к динамике невозможно до тех пор, пока не решена задача обращения матрицы диэлектрической проницаемости. Следует отметить, что теоретические исследования показывают, что эффекты локального поля могут быть важны и в простых металлах благодаря тому, что поведение электронов проводимости, особенно вблизи остова, сильно отклоняется от приближения свободных электронов [69]. Представление Ванье дает практический способ обращения матрицы диэлектрической проницаемости. Таким способом, можно вывести микроскопическую оболочечную модель, что представляет собой квантово механическое обоснование феноменологической оболочечной модели [70,71] и модели заряда на связи.

Использование микроскопической теории требует более или менее строгих приближений для уменьшения трудностей в численном счете. Хотя микроскопические вычисления в последние годы дали впечатляющие результаты, использование феноменологических моделей все еще остается незаменимым инструментом в большинстве исследований фононов, особенно в случае, когда необходимо объяснить экспериментальные результаты. Из рисунка. 1.3 видно довольно хорошую точность для модели Борна, однако в направлении  $\Sigma$  для верхней оптической моды имеется качественное несоответствие с экспериментальными точками. Это несоответствие связано с наличием квадрупольных

полей, которые не учитываются моделью жестких ионов и которые практически нельзя учесть моделью Борна из-за их дальнедействующего характера. К тому же при использовании большого количества подгоночных параметров нельзя однозначно их подогнать. Это ставит под сомнение адекватность данной модели. Но, так как при моделировании заложена симметрия и структура кристалла, построенную таким образом динамическую матрицу, по крайней мере, можно использовать как экстраполяционную. К тому же простота модели позволяет легко варьировать количество взаимодействующих соседей, что важно для объяснения некоторых эффектов.

#### Метод свертки.

Главная идея метода свертки (конволюции) [58,73] состоит в том, что межатомные силы в различных кристаллах сравнительно схожи. Чаще всего основные особенности фононных спектров обусловлены различием масс ионов. В первом приближении для кристаллов с родственными типом химической связи можно пренебречь отличиями силового поля и рассматривать их в дальнейшем как возмущение.

Рассмотрение сверхрешетки удобно начать с анализа решетки сфалерита, рассматривая ее как сверхструктуру с расширенной элементарной ячейкой, состоящей из  $n_0$  ячеек сфалерита. Позицию атома в сверхструктуре запишем как  $R_{Lns} = R_L + R_{ns}$ . Здесь  $R_L$  – вектор прямой решетки сверхструктуры,  $R_{ns}$  – позиция атома в расширенной ячейке,  $R_{ns} = r_n + \rho_s$ ,  $r_n$  – положение  $n$ -ой ( $n=1, \dots, n_0$ ) ячейки сфалерита внутри расширенной ячейки,

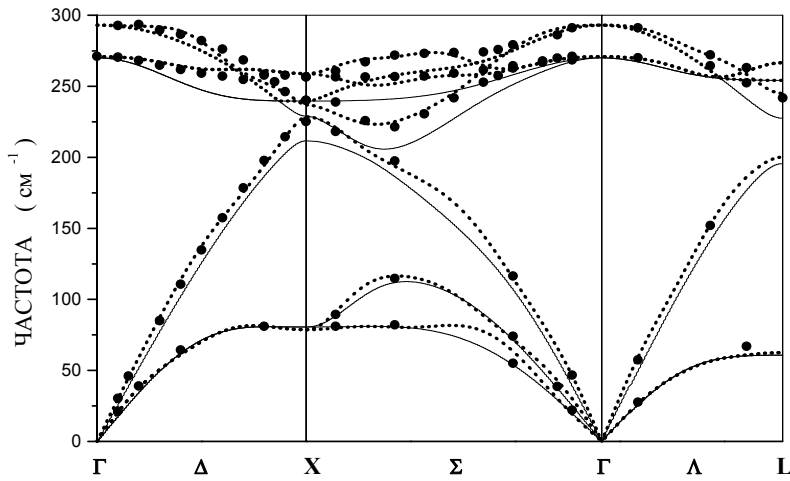


Рис. 1.3. Зависимость частоты фононного спектра GaAs от волнового вектора вдоль высокосимметричных направлений зоны Бриллюэна. Сплошная линия—адиабатическая модель заряда на связи Вебера, прерывистая линия – расширенная модель Борна. Экспериментальные данные [72] приведены точками.

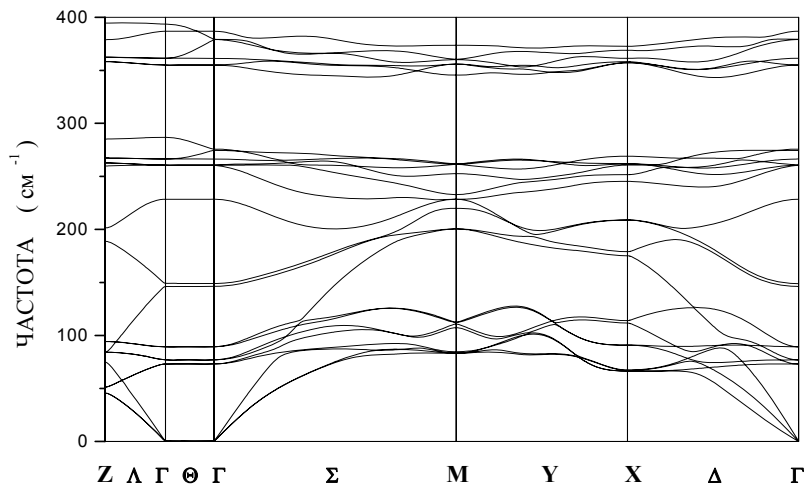


Рис. 1.4. Фононный спектр  $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_2$  (001) вдоль высокосимметричных направлений. Вдоль  $\Theta$  приведена зависимость частоты от угла между осью (001) и волновым вектором вблизи точки  $\Gamma$ .

$\rho_s$  – позиция атома в сфалеритной ячейке ( $s=1,2$ ). Очевидно, что  $R_L$  и  $r_n$  составляют в совокупности набор векторов прямой решетки сфалерита. Набор векторов обратной решетки сверхструктуры  $Q_m$  включает в себя все векторы обратной решетки сфалерита  $K_p$ , а также дополнительный набор векторов  $q_m$ , которые, очевидно, все лежат внутри зоны Бриллюэна сфалерита (большой зоны БЗ). Последняя в  $n_0$  превышает зону Бриллюэна сверхструктуры (малая зона– МЗ). Следовательно,  $m$  пробегает значения  $m=1, \dots, n_0$ .

В обеих структурах должны выполняться хорошо известные решеточные соотношения:

$$\frac{1}{n} \cdot \sum_l \exp(i \cdot (\xi \cdot R_l)) = \delta_{\xi, k+K_p}; \quad \frac{1}{n} \cdot \sum_k \exp(i \cdot (k \cdot R_l)) = \delta_{R_l, 0} \quad (1.71)$$

$$\frac{1}{N} \cdot \sum_L \exp(i \cdot (\xi \cdot R_L)) = \delta_{\xi, q+Q_m}; \quad \frac{1}{N} \cdot \sum_q \exp(i \cdot (q \cdot R_L)) = \delta_{R_L, 0} \quad (1.72)$$

Здесь  $k \in \text{БЗ}$ ,  $q \in \text{МЗ}$ ,  $\xi$  – любой вектор в обратном пространстве,  $n$  – число элементарных ячеек сфалерита в кристалле,  $N = n / n_0$  – число расширенных ячеек. Нетрудно видеть, что должен существовать набор  $r_n$  и  $q_m$  (возможно не единственный), таких, что

$$\frac{1}{n_0} \cdot \sum_{n=1}^{n_0} \exp(i \cdot (q_m \cdot r_n)) = \delta_{q_m, 0}; \quad \frac{1}{n_0} \cdot \sum_{m=1}^{n_0} \exp(i \cdot (q_m \cdot r_n)) = \delta_{r_n, 0} \quad (1.73)$$

Перейдем к рассмотрению динамической матрицы в обоих подходах. По определению

$$D_{\alpha, \beta}^{cf}(s, s' | k) = \sum_{l-l'} \Phi_{\alpha, \beta} \left( \begin{matrix} l-l' \\ s, s' \end{matrix} \right) \cdot \exp(-i \cdot (k \cdot (R^l - R^{l'}))) \cdot \frac{1}{\sqrt{m_s \cdot m_{s'}}} \quad (1.74)$$



Здесь  $\Phi_{\alpha,\beta}^{(l-l')}(s,s')$  – силовая матрица  $m_s$  – масса иона.

С точки зрения сверхструктуры

$$D_{\alpha,\beta}^{cc}(n s, n' s' | q) = \sum_{L-L'} \Phi_{\alpha,\beta} \left( \begin{matrix} (L+n) & (L'+n') \\ s, s' \end{matrix} \right) \cdot \exp(-i \cdot (q \cdot (R^L - R^{L'}))) \cdot \frac{1}{\sqrt{m_{ns} \cdot m_{n's'}}}. \quad (1.75)$$

Используя соотношения (1.71), (1.72) имеем:

$$D_{\alpha,\beta}^{cc}(n s, n' s' | q) = \frac{1}{n_0 \cdot \sqrt{m_{ns} \cdot m_{n's'}}} \sum_{\substack{L-L', m \\ n_1 - n_2}} \Phi_{\alpha,\beta} \left( \begin{matrix} (L+n_1) & (L'+n_2) \\ s, s' \end{matrix} \right) \times \\ \times \exp(-i \cdot ((q + q_m) \cdot (R^L - R^{L'} + r_{n_1} - r_{n_2}))) \cdot \exp(-i \cdot ((q + q_m) \cdot (r_n - r_{n'}))) = \\ = \frac{1}{n_0} \cdot \sqrt{\frac{m_s \cdot m_{s'}}{m_{ns} \cdot m_{n's'}}} \cdot \sum_m D_{\alpha,\beta}^{c\phi}(s, s' | q + q_m) \cdot \exp(-i \cdot ((q + q_m) \cdot (r_n - r_{n'}))). \quad (1.76)$$

Таким образом, динамическая матрица размерности  $6 \cdot n_0 \times 6 \cdot n_0$  получается из динамической матрицы сфалерита размерностью  $6 \times 6$  путем свертки из БЗ в МЗ. Спектр собственных значений матрицы  $D^{cc}$  есть сложенный в МЗ спектр фононов для цинковой обманки. Эффект массового замещения в сверхрешетке  $(a)_n(b)_m$ , где  $n + m = n_0$ , легко учитывается путем простой замены масс  $m_b$  вместо  $m_a$  на соответствующих узлах решетки в динамической матрице сверхструктуры  $(a)_{n+m}$ .

На рис. 1.4 изображен фононный спектр сверхрешетки  $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_2$  с осью роста (001), рассчитанный в приближении массового замещения методом конволюции (1.68) на основе динамической матрицы GaAs, построенной в модели Борна (рис. 1.3). Частота

приведена в зависимости от волнового вектора вдоль основных направлений высокой симметрии. Вдоль  $\Theta$  частота зависит от направления волнового вектора вблизи точки  $\Gamma$ .

### §1.3. Расчет интенсивности КРС.

#### Теория поляризуемости для комбинационного рассеяния света

Как обсуждалось ранее, использование методики комбинационного рассеяния света (КРС) позволяет осуществить экспериментальное наблюдение фотон-фононного взаимодействия. Из-за симметрии кристалла не все фононные моды активны в КРС вследствие запрета, налагаемого правилами отбора. С помощью теории симметрии [74] для каждой моды можно определить, активна она или нет. Однако для анализа сложных спектров важно знать интенсивности рассеянного света после взаимодействия с каждым фононом.

Интенсивность КРС ( $I_{KPC}$ ) пропорциональна следующему выражению:

$$I_{KPC} \sim |e_s \cdot D \cdot e_L|^2, \quad (1.77)$$

где  $e_s$  и  $e_L$  – единичные векторы, показывающие направление поляризации рассеянного и падающего света соответственно,  $D$  – тензор КРС.

Для определения вида тензора КРС воспользуемся выражением для энергии, излучаемой в единицу времени диполем  $M$ , колеблющимся с частотой  $\omega$  [75]:

$$\frac{dW_s}{d\Omega} = \frac{\omega^4}{(4\pi)^2 \varepsilon_0 c^3} |e_s \cdot M|^2, \quad (1.78)$$

где  $d\Omega$  – элемент телесного угла,  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая проницаемость изотропной и немагнитной среды,  $c$  – скорость света. Если предположить, что излучающий диполь – это система, размеры которой малы по сравнению с длиной волны света, тогда дипольный момент, наведенный в этой системе электрическим полем световой волны  $e_L E_L$ , равен

$$M = \chi \cdot e_L E_L, \quad (1.79)$$

где  $\chi$  – тензор поляризуемости данной системы. Подставив (1.79) в (1.78) и разделив на энергию  $W_L = e_0 c E_L^2$ , падающую на единицу площади в единицу времени, получим

выражение для дифференциального сечения рассеяния  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\omega^4}{(4\pi)^2 \varepsilon_0 c^3} |e_s \cdot \chi \cdot e_L|^2 \quad (1.80)$$

Твердое тело в пределах рассеивающего объема  $V$ , имеющее  $N$  элементарных ячеек, можно рассматривать как одну большую молекулу. Рассмотрим колебательную моду кристалла с частотой  $\omega(q, j)$ . Эта мода характеризуется смещениями атомов, зависящими от времени как  $\exp(\pm q \cdot R_l \mp i\omega(q, j)t)$  и имеющими амплитуды  $u_s^{(l)}$ . Выражение для смещения атома сорта  $s$  ячейки  $l$  для моды  $\omega(q, j)$ ,  $u_s^{(l)}(q, \omega(q, j)t)$  может быть получено из формул (1.31) и (1.34):

$$u_s^{(l)}(q, \omega(q, j)t) = \frac{1}{\sqrt{Nm_s}} \left( v(s|q, j) \xi(q, j) e^{i[q \cdot R_l - \omega(q, j)t]} + v(s|q, j)^* \xi^*(q, j) e^{-i[q \cdot R_l - \omega(q, j)t]} \right), \quad (1.81)$$

где  $v(s = 1 \dots n | q, j)$  – вектор поляризации соответствующего фонона,

$$\sum_{s=1}^n \sum_{\alpha=1}^3 (v_{\alpha}(s | q, j))^2 = 1, \quad s - \text{нумерует атом в ячейке, } n - \text{число атомов в элементарной ячейке, } m_s -$$

масса атомов сорта  $s$ ,  $\xi(q, j)$  – амплитуда колебания.

Обсудим далее так называемую квазистатическую, адиабатическую теорию или теорию поляризуемости для КРС [76]. Эта теория основывается на соотношении (1.78) (дипольное излучение) и на предположении, что  $\omega_v(q)$  мала по сравнению с “электронной энергией”, которая определяет поляризуемость  $\chi$ . При этих условиях мы можем рассматривать фонон как статическую деформацию кристалла и определять в каждый

момент времени поляризуемость  $\chi(\omega_L, \xi)$ , зависящую от времени через функцию  $\xi(q, j)e^{i[q \cdot R_L - \omega(q, j)t]}$ . Разлагая  $\chi(\omega_L, \xi)$  в ряд по  $\xi(q, j)e^{i[q \cdot R_L - \omega(q, j)t]}$ , находим

$$\chi(\omega_L, \xi) = \chi(\omega_L) + \frac{\partial \chi}{\partial \xi} \xi e^{i[q \cdot R_L - \omega(q, j)t]} + \frac{\partial \chi}{\partial \xi^*} \xi^* e^{-i[q \cdot R_L - \omega(q, j)t]} + \dots \quad (1.82)$$

Подставляя (1.82) в (1.79), получаем рассеянное излучение на частотах  $\omega_L \pm \omega(q, j)$  (обертоны рассеяния), а также рэлеевское рассеяние  $\omega_s = \omega_L$ . Поле рассеянного излучения содержит фазовый множитель  $\exp(-i[\omega_L \pm \omega(q, j)]t) \exp(i[q_L \pm q] \cdot r)$ , где знак плюс означает антистоксово, а знак минус – стоксово рассеяние,  $q_L$  – волновой вектор падающего света. Это соотношение включает в себе законы сохранения энергии и волнового вектора:  $\omega_s = \omega_L \pm \omega(q, j)$  и  $q_s = q_L \pm q$ .

Рассмотрим сечение однофоновнного рассеяния, которое получается в результате подстановки (1.82) в (1.80):

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \frac{\omega^4}{(4\pi)^2 \varepsilon_0 c^3} \left| e_s \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \xi} \cdot e_L \right|^2 \langle \xi \xi^* \rangle \quad (\text{стоксова компонента}), \quad (1.83)$$

$$\frac{d\sigma_a}{d\Omega} = \frac{\omega^4}{(4\pi)^2 \varepsilon_0 c^3} \left| e_s \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \xi^*} \cdot e_L \right|^2 \langle \xi^* \xi \rangle \quad (\text{антистоксова компонента}),$$

где  $\langle \rangle$  обозначает термодинамическое усреднение по основному состоянию кристалла. Вид тензора КРС можно записать из сравнения (1.77) и (1.83)

$$D \sim \frac{\partial \chi}{\partial \xi} \quad (1.84)$$

Рассмотрим структуру КРС поляризуемости  $\frac{\partial \chi}{\partial \xi}$ . Нормальная координата  $\xi$  соответствует ансамблю статических атомных смещений, выражаемых соотношением

(1.81) при  $t = 0, q = 0$ . Следовательно,  $\frac{\partial \chi}{\partial \xi}$  можно записать как

$$\frac{\partial \chi}{\partial \xi} = \sum_{s=1}^n \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial \chi}{\partial u_{\alpha}^s} \times \frac{\partial u_{\alpha}^s}{\partial \xi} = \sum_{s=1}^n \frac{1}{\sqrt{Nm_s}} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial \chi}{\partial u_{\alpha}^s} v_{\alpha}(s|q,j) \quad (1.85)$$

Для гетероструктур на основе материалов со структурой сфалерита выражение (1.85) удобно перенормировать на количество ячеек сфалерита  $n_0$ , входящих в элементарную ячейку гетероструктуры. Так как множитель  $N_0 = n_0 N$  не зависит от структуры, то его можно опустить и записать тензор КРС-поляризуемости как

$$\frac{\partial \chi}{\partial \xi} = \sqrt{n_0} \sum_{s=1}^n \frac{1}{\sqrt{m_s}} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial \chi}{\partial u_{\alpha}^s} v_{\alpha}(s|q,j) \quad (1.86)$$

В случае нерезонансного КРС вид тензоров поляризуемости определяется с помощью метода аддитивной поляризуемости связи Волькенштейна [77]. Этот метод основывается на предположении, что каждая ковалентная связь имеет свою поляризуемость, являющуюся функцией только длины этой связи. Тогда поляризуемость системы можно представить как сумму поляризуемостей всех связей [78]

$$\chi_{\alpha\beta}(j) = \sum_{s=1}^{n_0} \sum_{i=1}^4 \chi_{\alpha\beta}(s,i|j), \quad (1.87)$$

где  $i$  – номер связи,  $j$  – номер моды. У материалов со структурой сфалерита каждый атом имеет 4 ближайших соседа. На основе формул (1.86 и 1.87) была создана процедура расчета тензора КРС и которая приведена во второй главе.

§1.4. Оптические и фононные свойства квантовых проволок и квантовых точек на основе GaAs.

Прогресс в области физики полупроводников и твердотельной микро- и оптоэлектроники в настоящее время связывается с возможностью создания и исследование квантоворазмерных полупроводниковых гетероструктур с размерностью ниже, чем  $2 \text{ [5]}$ . Однако, вследствие ограниченных возможностей современной литографии, латеральные размеры объектов, как правило, существенно превышают вертикальные, поэтому эффекты латерального квантования в подобных искусственно созданных структурах выражены слабо. В свете вышесказанного, одним из перспективных методов получения одномерных и нульмерных структур является использование свойств самоорганизующихся систем, в частности, использование эффекта фасетирования поверхностей с большими индексами Миллера в условиях, типичных для молекулярно лучевой эпитаксии (МЛЭ).

*Формирование периодического массива квантовых проволок GaAs при гетероэпитаксиальном росте на фасетированной поверхности (311)A.*

В начале 90-тых годов было обнаружено, что поверхность  $(311)A$  GaAs и AlAs в некоторых условиях расщепляется на упорядоченный массив микроканалов [6,79]. Микроканалки, вытянутые вдоль кристаллографического направления  $[2\bar{3}3]$ , расположены с периодом 32 ангстрема в направлении  $[01\bar{1}]$  [6, 79]. Такая структура поверхности сохраняется при гетероэпитаксиальном росте GaAs и AlAs. В процессе гетероэпитаксиального роста GaAs на поверхности  $(311)A$  AlAs происходит заполнение канавок на исходной поверхности AlAs арсенидом галлия с последующим формированием фасеток GaAs. Таким образом, происходит формирование периодического массива квантовых проволок GaAs, то есть сверхрешетки, состоящей из квантовых проволок [5,6,79]. В англоязычной литературе такие структуры называются quantum-well-wire (QWW) superlattice [79], в русскоязычной литературе - латеральные сверхрешетки (ЛСР).

Хотя сам эффект периодического фасетирования поверхности (311)А был обнаружен несколькими группами авторов с применением различных методик: дифракция быстрых электронов под скользящим углом [6,79,80], прямое наблюдение высокоразрешающей электронной микроскопией [79], высокоразрешающая сканирующая туннельная микроскопия [81,82], до настоящего момента в данном вопросе нет полной ясности. Так, некоторые авторы утверждают, что фасетирование не является внутренним свойством, присущим поверхности (311)А, а проявляется только лишь в особых условиях МЛЭ [83,84]. Авторы, которые наблюдали периодический массив фасеток на этой поверхности, расходятся в вопросе об их высоте - 10.6 ангстрема (6 монослоев) [6,79], либо 3.4 ангстрема (2 монослоя) [81,82]. Здесь необходимо отметить, что фасетки с высотой 6 монослоев были обнаружены прямым методом по результатам высокоразрешающей микроскопии [79], а вывод о том, что высота фасеток составляет 2 монослоя, был сделан по результатам сканирующей туннельной микроскопии и по интерпретации результатов дифракции быстрых электронов, и, следовательно, является косвенным.

*Анизотропия свойств ЛСР, выращенных на фасетированной поверхности (311)А.*

Так как ЛСР, состоящие из квантовых проволок GaAs, выращенных на поверхности (311)А, обладают ярко выраженной структурной анизотропией, их электрические и оптические свойства так же должны быть анизотропны. Анизотропия проводимости вдоль и поперек проволок наблюдалась в работе [79], а в работе [80] было установлено, что это свойство сохраняется при высоких (до 500К) температурах. В работе [79] была также обнаружена интенсивная фотолюминесценция структур, содержащих квантовые проволоки, не затухающая при повышении температуры вплоть до 400К, а также сильная анизотропия экситонного резонанса. Анизотропия оптических свойств ЛСР GaAs/AlAs, выращенных на фасетированной поверхности (311)А, вызванная возникновением минизон вследствие

латеральной свертки, наблюдалась также по данным эллипсометрии и спектрам фотоотражения [85,86].

Фононные свойства ЛСР GaAs/AlAs, выращенных на фасетированной поверхности (311)A.

С момента появления вышеупомянутых ЛСР, содержащих квантовые проволоки, их фононные свойства изучались с использованием методики КРС. Так, в сверхрешетках GaAs/AlAs, выращенных на фасетированных поверхностях (311)A, был обнаружен эффект свертки акустических фононов вдоль направления роста [87,88]. Были также предприняты попытки обнаружить эффект латеральной свертки акустических фононов вдоль направления  $[011]$ , перпендикулярного фасеткам. Так, в работе [89], применив специальную геометрию рассеяния с большой латеральной составляющей волнового вектора падающих фотонов, удалось обнаружить пики КРС, соответствующие свернутым акустическим фононам. Период свертки, как и предполагалось, соответствовал трансляционному периоду микрофасеток и составлял 32 ангстрема. Локализованные в GaAs и AlAs продольные и поперечные оптические моды также наблюдались в спектрах КРС латеральных сверхрешеток GaAs/AlAs (311)A [88-91]. Предпринимались также попытки из анализа спектров КРС в оптической области определить высоту микрофасеток, и был сделан вывод, что она составляет 3.4 ангстрема [92,93]. Данный вывод следовал из представления о том, что оптические фононы локализованы в узких и широких областях гофрированного с периодом 32 ангстрема слоя GaAs и дают 2 независимые частоты колебаний. Данное представление является сомнительным, так как фонон - это коллективное возмущение с размером корреляции, составляющим, по оценкам, сотни ангстрем, что много больше, чем расстояние между узкой и широкой областью слоя (16 ангстрем). Необходимо отметить, что спектр фононных мод, локализованных в слоях GaAs и AlAs, был изучен в основном лишь для структур с относительно толстыми слоями (более 10 монослоев) [89-91]. Тогда как все эффекты,



связанные с латеральной симметрией и с локализацией фононов в квантовых проволоках, должны наиболее ярко проявляться для сверхрешеток со средней толщиной слоев GaAs, сравнимой с высотой микрофасеток на поверхности (311)A. Пожалуй, единственной работой, в которой исследовался фононный спектр ЛСР с относительно тонкими слоями GaAs, была работа Армеллеса, Кастрилло, Вонга, Торреса, Леденцова и Берта [94], в которой авторы утверждали, что сильное размытие гетерограниц, вероятно в 2-3 монослоя, не позволило им обнаружить влияние периодической корrugации на фононный спектр. Количественный анализ частот локализованных фононов в этой работе проделан не был. К тому же сигнал от тонкой полупрозрачной ЛСР был затенен сильным сигналом от подложки арсенида галлия.

#### Анализ структуры ЛСР методом КРС.

Возможны и другие механизмы гетероэпитаксиального роста, такие как рост "смачивающих" слоев одного материала на другом, или формирование нульмерных кластеров с последующим разрастанием вдоль фасеток. Данные механизмы были теоретически проанализированы в работах [5] и [9]. В работе [91] была предпринята попытка теоретического и экспериментального анализа влияния формы получаемых объектов GaAs на частоты локализованных оптических фононных мод. В зависимости от модели роста это либо плоские слои, либо квантовые проволоки с толщиной, соответствующей параметрам микрофасеток, либо "смачивающие" изогнутые слои. Но так как используемые в эксперименте сверхрешетки содержали достаточно толстые слои GaAs и AlAs (12 монослоев и более), полученные экспериментальные данные не позволили определить, по какому механизму происходил рост. Был сделан вывод, что для данных объектов спектроскопия КРС не обладает достаточной чувствительностью, чтобы определить наличие корrugации гетерограницы в 1-2 монослоя. Влияние корrugации гетерограницы (311)A на частоты локализованных фононных мод для сверхрешеток, содержащих слои GaAs со средней

толщиной в 8 и 4 монослоя, было исследовано теоретически в работе [95]. Было предсказано появление в спектрах КРС новых, “свернутых” в латеральном направлении поперечных оптических ( $TO_{lat}$ ) мод. Попытка обнаружить данные моды экспериментально была предпринята еще раньше [89]. Но для сверхрешеток с толщинами в 13 монослоев GaAs и 14 монослоев AlAs пики КРС, соответствующие рассеянию на этих модах, практически не выделялись на уровне шума. В работе [95] были найдены собственные частоты и собственные вектора колебаний “гладких” и корругированных, с высотой фасеток 6 и 2 монослоя, сверхрешеток  $GaAs_8AlAs_{10}$  и  $GaAs_4AlAs_{11}$ , и рассчитаны спектры КРС для различных поляризационных геометрий в модели поляризуемости связи. Однако ни в экспериментальных, ни в теоретических работах не было проведено детального анализа поведения локализованных оптических мод с разными направлениями атомных смещений: вдоль и поперек микрофасеток. Иными словами, не была исследована анизотропия фоновых свойств ЛСР, содержащих квантовые проволоки.

Предпринимались попытки экспериментально исследовать влияние корrugации гетерограниц на фоновый спектр ЛСР GaAs/AlAs (311)A [91-95]. В частности, в работе [91] исследовались сверхрешетки  $GaAs_{14}AlAs_{47}$  и  $GaAs_{20}AlAs_{50}$ , выращенные методом атомно-слоевой МЛЭ при температуре  $375^{\circ}C$ , в сравнении со сверхрешетками  $GaAs_{12}AlAs_{55}$  и  $GaAs_{17}AlAs_{50}$ , полученными методом МЛЭ. В первом случае поверхность (311)A не распадалась на периодический массив микрофасеток, а во втором случае условия роста соответствовали возникновению корrugации поверхности. Но вследствие того, что средние толщины слоев GaAs были большими, а “гладкие” и “корругированные” сверхрешетки были с различными параметрами толщин слоев, в эксперименте не было обнаружено свидетельств влияния корrugации гетерограниц на частоты локализованных фоновых мод. До настоящего времени не было отчетливых экспериментальных данных о влиянии корrugации гетерограниц (311)A на частоты локализованных поперечных и продольных фононов. В этой

связи представляется интересным сравнительное исследование сверхрешеток GaAs/AlAs, содержащих тонкие слои GaAs, выращенных в одних и тех же условиях, но на разных поверхностях - корругированной поверхности (311)А, а также на поверхностях (311)Б и (100). Известно, что из-за отсутствия центра инверсии в полупроводниках типа  $A^{III}B^V$ , направления А и Б кристаллографической оси [311] не являются эквивалентными. В отличие от поверхности (311)А, поверхность (311)Б GaAs не обладает столь ярко выраженной структурной анизотропией, что проявляется, в частности, в следующем: выращенные на поверхности (311)А GaAs квантовые островки арсенида индия вытянуты вдоль направления  $[\bar{2}33]$ , а на поверхности (311)Б, они имеют фактически дискообразную форму [96]. Сравнительный анализ фононных свойств СР GaAs/AlAs, выращенных на поверхностях (311)А и Б, может дать информацию о влиянии корrugации гетерограниц на эти свойства.

Недостаток экспериментальных данных о фононном спектре СР GaAs/AlAs (311)А и Б, содержащих слои GaAs со средней толщиной, сравнимой и меньше, чем высота микрофасеток на поверхности (311)А, стимулировал проведение экспериментов по исследованию КРС в подобных структурах с целью обнаружить эффекты влияния корrugации гетерограниц (311)А на частоты локализованных оптических фононов. Различие фононных свойств ЛСР GaAs/AlAs (311)А в сравнении со свойствами СР, выращенных в тех же условиях на поверхности (311)Б, позволило бы подтвердить наличие структурной анизотропии поверхности (311)А, а также оценить параметры квантовых проволок, формирующихся на данной поверхности.

*Структурная реконструкция поверхности (001) полупроводников типа  $A^{III}-B^V$ .*

Исследованию реконструкции поверхности (100) полупроводников типа  $A^{III}-B^V$  и определению структуры ее атомарных конфигураций в последнее время уделяется большое внимание. Достижения в этой области, прежде всего, связаны с развитием прямых методов исследования структуры поверхности: сканирующей туннельной микроскопии (СТМ),

атомно-силовой микроскопии и высокоразрешающей электронной микроскопии (ВРЭМ). По данным дифракции быстрых электронов (ДБЭ) было установлено, что при МЛЭ в условиях избытка галлия на поверхности (001) GaAs возникает структурная реконструкция типа (4x2), а в условиях избытка мышьяка - типа (2x4) [7]. Последний тип наиболее важен в плане технологического применения МЛЭ. В зависимости от температурного режима и потока мышьяка на поверхности (001) GaAs, по данным ДБЭ, наблюдали 3 фазы, обозначаемые  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ . Элементарные ячейки этих фаз различаются по содержанию димеров мышьяка. Так,  $\alpha$  фаза содержит 3 димера,  $\beta$  фаза - 2 димера, а  $\gamma$  фаза - 2 димера плюс добавочный димер, расположенный над ними [7]. По данным СТМ было установлено, что наиболее стабильная реконструкция (2x4) поверхности (001) GaAs - это  $\beta$  фаза, представляющая собой 2 высокоупорядоченные цепочки димеров мышьяка, вытянутые вдоль направления  $[1\bar{1}0]$  [97]. Ее структура, в соответствии с литературными данными, показана на рисунке 1.5. Эта фаза устойчива при гетероэпитаксиальном росте GaAs/AlAs.

Реконструированная (2x4) поверхность GaAs исследовалась также оптическими методиками, в основном спектроскопией фотоотражения. Для данной поверхности была обнаружена анизотропия фотоотражения, возникающая вследствие ее структурной анизотропии [98]. На начальной стадии гетероэпитаксиального роста на реконструированной поверхности AlAs структура квантовых объектов GaAs должна зависеть от структуры поверхности. Однако оптические и фононные свойства подобных квантовых объектов к настоящему времени практически не изучены, в связи с чем возникает задача их исследования.

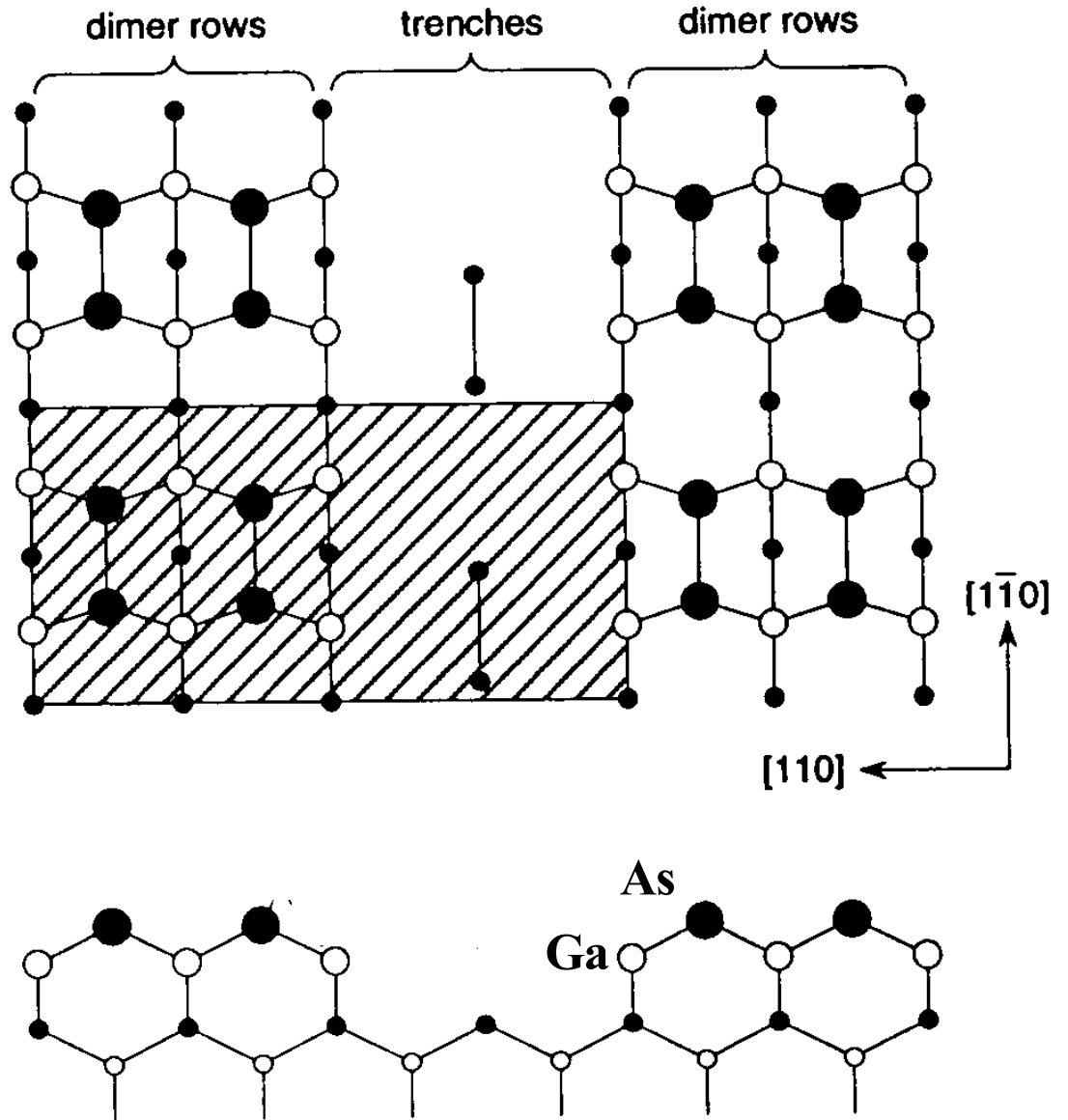


Рис. 1.5. Поверхность (001) GaAs, реконструированная (2x4). Вверху – вид в направлении (001), заштрихована элементарная ячейка. Внизу - сечение в плоскости  $(1\bar{1}0)$ .

## ГЛАВА 2. МЕТОДЫ И ПРИБЛИЖЕНИЯ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ И РАСЧЕТАХ.

Методика проведения численного эксперимента состояла из следующих этапов:

1. Создание программного обеспечения для построения динамической матрицы арсенида галлия в произвольной точке обратного пространства.

2. Построение геометрической конфигурации гетероструктуры, исходя из условий конкретного численного эксперимента. На основе п.1 в приближении массового замещения методом свертки строилась динамическая матрица для предложенной геометрии. Путем диагонализации находился фононный спектр гетероструктуры, состоящий из фононных частот и соответствующих векторов поляризации.

3. На основе векторов поляризации из п. 2 для каждой частоты методом аддитивной связи Волькенштейна строился тензор КРС, на основе которого производился расчет интенсивности для выбранной геометрии эксперимента. Форма линия моды КРС определялась распределением Лоренца. Спектральная линия КРС для каждой геометрически заданной гетероструктуры рассчитывалась как сумма вкладов от всех мод.

4. Определение конфигурации островков GaAs в массиве AlAs реальной гетероструктуры производилось следующим образом. Делался расчет спектральных линий различных, физически обоснованных конфигураций островков GaAs согласно п.3. Далее решалась задача, с какими коэффициентами должны складываться интенсивности спектральных линий рассчитанных объектов, чтобы суммарная спектральная линия была максимально похожа на линию экспериментального спектра. Коэффициенты подгонялись методом наименьших квадратов между точками экспериментального и рассчитанного спектров.

5. При моделировании спектров КРС гетероструктур  $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_m$  с осью роста [113], на основе имеющихся в литературе моделей, строились различные модификации структуры.

Далее, согласно п.3, рассчитывалась линия спектра КРС, и ее особенности сравнивались с особенностями экспериментальных спектров КРС.

6. Для анализа линий спектров КРС легированных сверхрешеток модифицировалась динамическая матрица из п.1. В ней выделялась часть, описывающая взаимодействие макроскопического электростатического поля, и диэлектрическая проницаемость в этой части модифицировалась с учетом вклада, вносимого плазмонами в приближении Линхарда-Мермина.

### §2.1. Расчет динамической матрицы сфалерита. Расширенная модель Борна и модель жестких ионов.

Элементарная ячейка структуры сфалерита состоит из двух атомов  $r^1=(0,0,0) a_0$  и  $r^2=(1/4,1/4,1/4) a_0$ . Векторы прямой решетки имеют вид:  $R^1=(1/2,1/2,0) a_0$ ;  $R^2=(1/2,0,1/2) a_0$ ;  $R^3=(0,1/2,1/2) a_0$ . Векторы обратной решетки имеют вид:  $K^1=2\pi(1,1,-1)/a_0$ ;  $K^2=2\pi(1,-1,1)/a_0$ ;  $K^3=2\pi(-1,1,1)/a_0$ . Постоянная решетки  $a_0$  для GaAs равна  $5.65\text{\AA}$ . Расчет динамической матрицы для структуры сфалерита  $D$  вычислялся как сумма  $D=D^{Sh}+D^C$ , где  $D^{Sh}$  – динамическая матрица, описывающая короткодействующее взаимодействие, получалась из (1.33,1.36,1.41,1.43) и вычислялась следующим образом. Для каждого атома  $s$  ( $s=1,2$ ) с радиусом вектором  $r^{p,i}$ ,  $p$  – номер координационной сферы ( $1 \leq p \leq 6$ ),  $i$  – номер атома в координационной сфере, определялся вектор ячейки  $R^l$ , в которой он находится. Далее вычислялся единичный вектор  $e^{p,i}(s) = r^{p,i}(s) / |r^{p,i}(s)|$  и следующей процедурой вычислялась матрица  $\bar{D}^{Sh}$  (1.33):

$$W_{\alpha\beta} = (kt_{ss'}^p - kl_{ss'}^p) e_{\alpha}^{p,i} e_{\beta}^{p,i} - kt_{ss'}^p \delta_{\alpha\beta}$$

$$\bar{D}_{\alpha\beta}^{Sh}(s, s' | q) = \bar{D}_{\alpha\beta}^{Sh}(s, s' | q) + W_{\alpha\beta} \cdot \exp\{i[q \cdot R^l]\}$$

$$\bar{D}_{\alpha\beta}^{Sh}(s, s | q) = \bar{D}_{\alpha\beta}^{Sh}(s, s | q) - W_{\alpha\beta}$$
(2.1)

где  $kl_{ss'}^p, kt_{ss'}^p$  – подгоночные константы жесткости связи при ее растяжении и изгибе соответственно. В процедуре (2.1) производилось суммирование по всем атомам первых шести координационных сфер. Далее вычислялась динамическая матрица

$$D_{\alpha\beta}^{Sh}(s, s' | q) = \frac{1}{\sqrt{m_s \cdot m_{s'}}} \bar{D}_{\alpha\beta}^{Sh}(s, s' | q), \text{ где } m_s - \text{масса атома сорта } s.$$

$D^C$  - динамической матрица, описывающая дальнедействующее кулоновское взаимодействие, вычислялась в приближении жестких ионов из (1.51, 1.58)

$$\bar{D}_{\alpha,\beta}^{C \ s \neq s'}(s, s' | q) = - \frac{z^s \cdot z^{s'}}{\varepsilon} \Pi_{|\alpha,\beta}^{s s'}(q) - \frac{4 \cdot \pi}{V_\alpha} \cdot \frac{z^s \cdot z^{s'}}{\varepsilon} \cdot \frac{q_\alpha \cdot q_\beta}{q^2} \cdot e^{i(q(r^s - r^{s'}))} \quad (2.2)$$

и

$$\begin{aligned} \bar{D}_{\alpha,\beta}^C(s, s | q) = & \sum_{s' \neq s} \frac{z^{s'} \cdot z^s}{\varepsilon} \cdot \Pi_{|\alpha,\beta}^{s s'}(0) + \frac{z^{s^2}}{\varepsilon} \cdot \tilde{\Pi}_{|\alpha,\beta}(0) - \frac{z^{s^2}}{\varepsilon} \cdot \tilde{\Pi}_{|\alpha,\beta}(q) - \\ & - \frac{4 \cdot \pi}{V_\alpha} \cdot \frac{z^{s^2}}{\varepsilon} \cdot \frac{q_\alpha \cdot q_\beta}{q^2}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Объем элементарной ячейки  $V_\alpha$  равен  $a_0^3/4$ .  $\Pi_{|\alpha,\beta}(q)$  вычислялся из (1.52, 1.53). Для расчета  $erfc(x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt$  использовалась математическая библиотека численных расчетов IMSL. В расчетах параметр  $\eta$  был равен  $2.5/a_0$ . В формулах (2.4) и (2.5)  $R^l = n_1 R^1 + n_2 R^2 + n_3 R^3$ , где  $R^i$  – векторы прямой решетки, суммирование по  $n_i$  проводилось от минус двух до двух, что составляло ряд из  $5^3=125$  членов.  $K = m_1 K^1 + m_2 K^2 + m_3 K^3$ , где  $K^i$  – векторы обратной решетки, суммирование по  $m_i$  от минус трёх до трёх, что составляло ряд из  $7^3=343$  членов. С учетом такого количества членов расчет  $D^C$  осуществлялся с точностью до пятого знака после первой значащей цифры.



$$\begin{aligned}
\Pi_{|\alpha,\beta}^{s,s'}(q) = & \\
= \sum_l & \left\{ \left[ \frac{\exp\left(-\left(\eta \cdot |R^l - (r^s - r^{s'})|\right)\right)^2}{\sqrt{\pi}} \cdot \left( \frac{4 \cdot \eta^3}{|R^l - (r^s - r^{s'})|^2} + \frac{6 \cdot \eta}{|R^l - (r^s - r^{s'})|^4} \right) + \right. \right. \\
& + \left. \frac{3 \cdot \left(\operatorname{erfc}\left(\eta \cdot |R^l - (r^s - r^{s'})|\right)\right)}{|R^l - (r^s - r^{s'})|^5} \right] \cdot (R^l - (r^s - r^{s'}))_\alpha \cdot (R^l - (r^s - r^{s'}))_\beta - \\
& - \left[ \frac{\left(\operatorname{erfc}\left(\eta \cdot |R^l - (r^s - r^{s'})|\right)\right)}{|R^l - (r^s - r^{s'})|^3} + \frac{2 \cdot \eta \cdot \exp\left(-\left(\eta \cdot |R^l - (r^s - r^{s'})|\right)\right)^2}{\sqrt{\pi} \cdot |R^l - (r^s - r^{s'})|^2} \right] \cdot \delta_{\alpha,\beta} \right\} \times \\
& \times \exp(i \cdot (q \cdot R^l)) - \\
& - \frac{4 \cdot \pi}{V_\alpha} \cdot \sum_{K \neq 0} \frac{\exp\left(-\frac{|K+q|^2}{4 \cdot \eta^2} + i \cdot ((K+q) \cdot (r^s - r^{s'}))\right)}{|K+q|^2} \cdot (K+q)_\alpha \cdot (K+q)_\beta - \\
& - \frac{4 \cdot \pi}{V_\alpha} \cdot \exp(i \cdot (q \cdot (r^s - r^{s'}))) \cdot \left( - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-q^2)^i}{(4 \cdot \eta^2)^{i+1} \cdot i!} \right) \cdot q_\alpha \cdot q_\beta
\end{aligned} \tag{2.4}$$

и  $\tilde{\Pi}_{|\alpha,\beta}(q)$ , полученное из (1.57,1.53)

$$\begin{aligned}
\tilde{\Pi}_{\alpha,\beta}(q) &= \\
&= \sum_{l \neq 0} \left\{ \left[ \frac{\exp\left(-(\eta \cdot |R^l|)^2\right)}{\sqrt{\pi}} \cdot \left( \frac{4 \cdot \eta^3}{|R^l|^2} + \frac{6 \cdot \eta}{|R^l|^4} \right) + \frac{3 \cdot \text{erfc}(\eta \cdot |R^l|)}{|R^l|^5} \right] \cdot R_\alpha^l \cdot R_\beta^l - \right. \\
&\quad \left. - \left[ \frac{\text{erfc}(\eta \cdot |R^l|)}{|R^l|^3} + \frac{2 \cdot \eta \cdot \exp\left(-(\eta \cdot |R^l|)^2\right)}{\sqrt{\pi} \cdot |R^l|^2} \right] \cdot \delta_{\alpha,\beta} \right\} \cdot \exp(i \cdot (q \cdot R^l)) + \\
&\quad + \frac{4}{3} \cdot \frac{\eta^3}{\sqrt{\pi}} \cdot \delta_{\alpha,\beta} - \\
&\quad - \frac{4 \cdot \pi}{V_\alpha} \cdot \sum_{K \neq 0} \frac{\exp\left(-\frac{|K+q|^2}{4 \cdot \eta^2}\right)}{|K+q|^2} \cdot (K+q)_\alpha \cdot (K+q)_\beta - \\
&\quad - \frac{4 \cdot \pi}{V_\alpha} \cdot \left( - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-q^2)^i}{(4 \cdot \eta^2)^{i+1} \cdot i!} \right) \cdot q_\alpha \cdot q_\beta \quad .
\end{aligned} \tag{2.5}$$

$$\bar{D} = \bar{D}^{Sh} + \bar{D}^C \tag{2.6}$$

Далее вычислялась динамическая матрица

$$D_{\alpha\beta}(s, s | q) = \frac{1}{\sqrt{m_s \cdot m_{s'}}} \bar{D}_{\alpha\beta}(s, s | q), \tag{2.7}$$

где  $m_s$  – масса атома сорта  $s$ . Константы жесткости связи  $kl_{ss'}^p$ ,  $kt_{ss'}^p$  и эффективный заряд  $Z^2/\varepsilon$  были найдены путем подгонки теоретических частот, полученных путем диагонализации динамической матрицы к экспериментальным данным рассеяния нейтронов

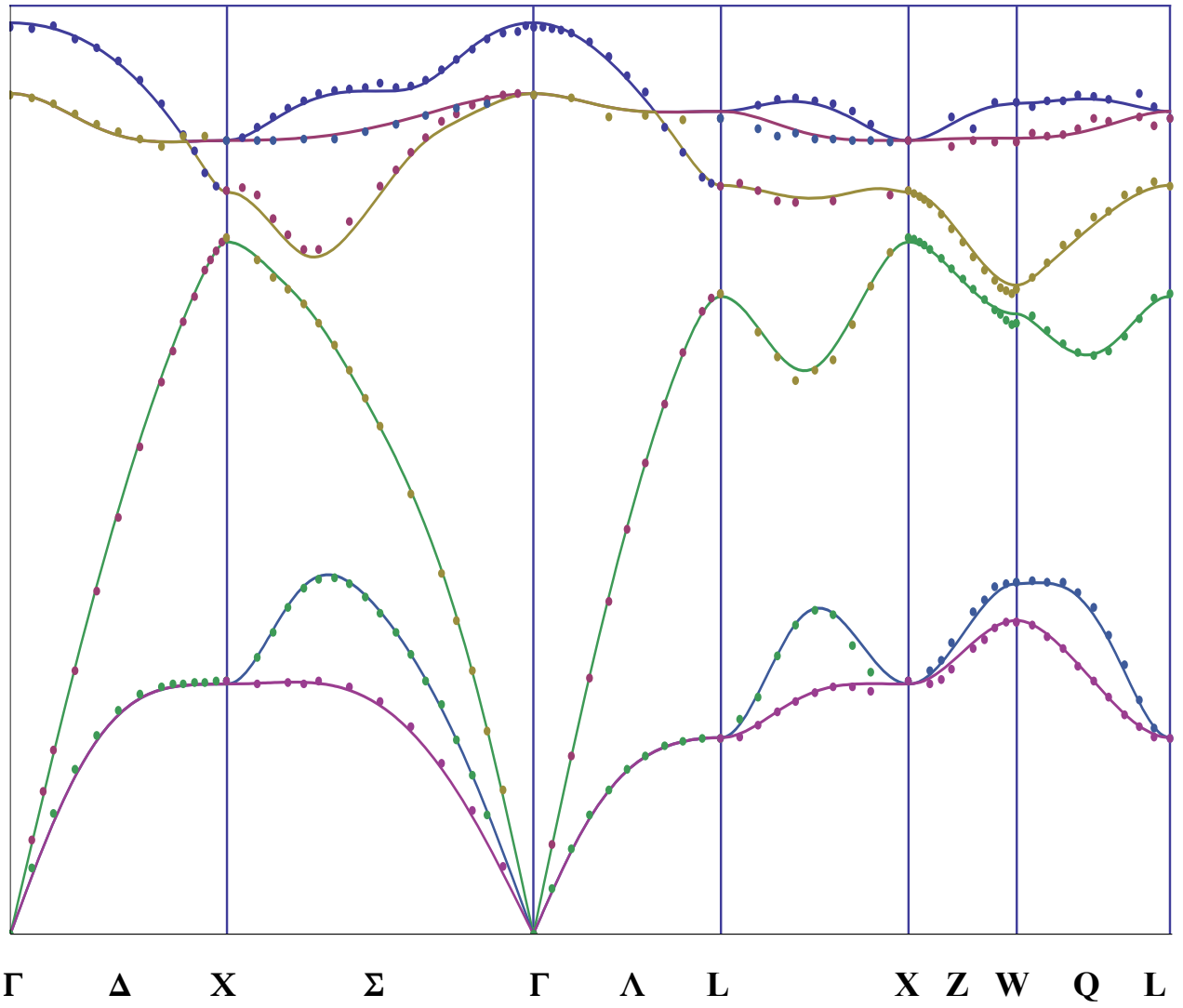


Рис. 2.1. Результаты подгонки расширенной модели зарядов к экспериментальным данным [72] (приведены точками).

на фононах в направлениях  $\Delta$ ,  $\Sigma$ ,  $\Lambda$ ,  $Z$  и  $Q$ , полученным при  $T=12\text{K}$  [72]. Частоты фононов при комнатной температуре получались из следующей зависимости их от температуры:

$$\frac{\delta\omega}{\delta T} = 1.35 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1} \text{K}^{-1} \text{ [99]}. \text{ Подгонка делалась методом наименьших квадратов. Результаты}$$

подгонки показаны на (рис. 1.3) штриховой линией. После проведения всех работ по моделированию, для проверки устойчивости полученных результатов относительно выбранной модели, основные выводы были проверены на основе расширенной модели зарядов на связи. Результаты подгонки параметров этой модели приведены на рисунке 2.1. Все полученные ранее выводы были подтверждены, что говорит о достоверности полученных результатов.

## §2.2. Вычисление динамической матрицы гетероструктуры. Метод свертки.

Расчет динамической матрицы гетероструктуры проводился в приближении массового замещения. Построение динамической матрицы осуществлялось с помощью формулы (1.76). Для упрощения расчетов бралась не динамическая матрица арсенида галлия, а матрица  $\bar{D}$  (2.6), тогда расчетная формула примет вид:

$$\begin{aligned} D_{\alpha,\beta}^{cc}(n s, n' s' | q) = \\ = \frac{1}{n_0} \cdot \sqrt{\frac{1}{m_{ns} \cdot m_{n's'}}} \cdot \sum_m \bar{D}_{\alpha,\beta}^{c\phi}(s, s' | q + q_m) \cdot \exp(-i \cdot ((q + q_m) \cdot (r_n - r_{n'}))). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Здесь  $n_0$  – количество ячеек сфалерита, из которых состоит элементарная ячейка гетероструктуры,  $r_n$  ( $1 \leq n \leq n_0$ ) – координаты этих ячеек сфалерита,  $q_m$  ( $1 \leq m \leq n_0$ ) – набор векторов, удовлетворяющих соотношению (1.73).

Расширенная ячейка и, соответственно, набор векторов  $r_n$  строились в кристаллографических координатах группы  $T_d^2$  [100] следующим образом:

1. В расчетах, представленных в §3.1 (см.ниже) элементарная ячейка была расширена по трем направлениям, содержала  $24k$  ячеек сфалерита и имела следующие размеры: вдоль направления  $[001]$  – 6 ячеек, вдоль направления  $[110]$  – 4 ячейки, вдоль направления  $[1-10]$  –  $k$  ячеек; число  $k$  варьировалось от 1 до 14. Векторы прямой решетки  $R^L$  и обратной решетки  $B^K$  гетероструктуры имеют вид:

$$R^1 = (2, 2, 0)a_0; \quad R^2 = \left(\frac{k}{2}, -\frac{k}{2}, 0\right)a_0; \quad R^3 = (0, 0, 3)a_0;$$

$$B^1 = 2\pi\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0\right)/a_0; \quad B^2 = 2\pi\left(\frac{1}{k}, -\frac{1}{k}, 0\right)/a_0; \quad B^3 = 2\pi\left(0, 0, \frac{1}{3}\right)/a_0;$$

Набор векторов  $r_n$  имеет вид:

$$r_n = i\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)a_0 + i'\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0\right)a_0 + i''\left(0, 0, \frac{1}{2}\right)a_0 + P(i'')\left(0, \frac{1}{2}, 0\right)a_0$$

$$\text{где } P(i) = \begin{cases} 0, & \text{если } i \text{ четное} \\ 1, & \text{если } i \text{ нечетное} \end{cases}; \quad 0 \leq i \leq 3; \quad 0 \leq i' \leq k-1; \quad 0 \leq i'' \leq 5; \quad 1 \leq n \leq 24k.$$

2. В расчетах, представленных в §3.2 (см.ниже) элементарная ячейка была расширена по трем направлениям, содержала  $16kk^\square$  ячеек сфалерита и имела следующие размеры: вдоль направления  $[01-1]$  – 8 ячеек, вдоль направления  $[311]$  –  $k$  ячейки, вдоль направления  $[-233]$  –  $2k^\square$  ячеек, число  $k$  варьировалось от 2 до 20, число  $k^\square$  варьировалось от 1 до 7. Векторы прямой решетки  $R^L$  и обратной решетки  $B^K$  гетероструктуры имеют вид:

$$R^1 = (0, 4, -4)a_0; \quad R^2 = k\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)a_0; \quad R^3 = k'\left(-1, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)a_0;$$

$$B^1 = 2\pi\left(0, \frac{1}{8}, -\frac{1}{8}\right)/a_0; \quad B^2 = \frac{2\pi}{k}(3, 1, 1)/a_0; \quad B^3 = \frac{2\pi}{k'}(1, 0, 0)/a_0;$$

Набор векторов  $r_n$  имеет вид:

$$r_n = i \left( 0, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right) a_0 + i' \left( 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) a_0 + \text{Int} \left( \frac{i''}{2} \right) \left( -1, \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right) a_0 + P(i''') \left( \frac{-1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right) a_0$$

где  $P(i) = \begin{cases} 0, & \text{если } i \text{ четное} \\ 1, & \text{если } i \text{ нечетное} \end{cases}$ ;  $\text{Int}(x)$  – целая часть числа  $x$ ;

$$0 \leq i \leq 7; \quad 0 \leq i^{\square} \leq k-1; \quad 0 \leq i^{\square} \leq 2k^{\square}-1; \quad 1 \leq n \leq 16kk^{\square}.$$

3. В расчетах, представленных в главе 4 (см. ниже) элементарная ячейка была расширена по направлению  $[0,0,1]$ , содержала  $k$  ячеек сфалерита, число  $k$  варьировалось от 2 до 34. Векторы прямой решетки  $R^L$  и обратной решетки  $B^K$  гетероструктуры имеют вид:

$$R^1 = \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right) a_0; \quad R^2 = \left( \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0 \right) a_0; \quad R^3 = \left( 0, \frac{P(k)}{2}, \frac{k}{2} \right) a_0;$$

$$B^1 = 2\pi \left( 1, 1, \frac{-P(k)}{k} \right) / a_0; \quad B^2 = 2\pi \left( 1, -1, \frac{P(k)}{k} \right) / a_0; \quad B^3 = 2\pi \left( 0, 0, \frac{2}{k} \right) / a_0;$$

где  $P(i) = \begin{cases} 0, & \text{если } i \text{ четное} \\ 1, & \text{если } i \text{ нечетное} \end{cases}$ .

Набор векторов  $r_n$  имеет вид:

$$r_n = \left( 0, \frac{P(i)}{2}, \frac{i}{2} \right); \quad 0 \leq i \leq k-1; \quad 1 \leq n \leq k..$$

Набор векторов  $q_m$  строился с помощью следующей процедуры. Строился параллелепипед, с одной из вершин в начале координат, из векторов обратной решетки сфалерита:  $K^1 = 2\pi(1, 1, -1)/a_0$ ;  $K^2 = 2\pi(1, -1, 1)/a_0$ ;  $K^3 = 2\pi(-1, 1, 1)/a_0$ . Далее в процедуре происходил перебор векторов равных целочисленным комбинациям векторов обратной решетки  $B^i$  гетероструктуры. Если вектор попадал в пространство параллелепипеда, то он становился одним из векторов  $q_m$ . Так как противоположные грани параллелепипеда эквивалентны, то в процедуре отсеивались векторы, попадающие на грани параллелепипеда, не проходящие через начало координат. Так как объем ячейки обратного пространства гетероструктуры в  $n_0$  раз меньше объема ячейки сфалерита обратного пространства, то набор

$q_m$  состоит из  $n_0$  векторов. Далее, во избежание ошибки, производилась контрольная проверка выражением (1.73). Затем полученный набор векторов,  $r_n$  ( $1 \leq n \leq n_0$ ) и  $q_m$  ( $1 \leq m \leq n_0$ ) использовался в формуле (2.8),  $m_{n1}$  – атомная масса мышьяка,  $m_{n2}$  – атомная масса алюминия или галлия в зависимости от геометрической конфигурации гетероструктуры.

### §2.3. Метод расчета тензора КРС.

Тензор КРС пропорционален производной тензора поляризуемости (1.84), так как в нашей работе используется относительная интенсивность КРС и значение коэффициента пропорциональности неважно, то в качестве тензора КРС использовалась производная тензора поляризуемости  $\frac{\partial \chi}{\partial \xi}$ , которая вычислялась следующим образом.

В случае нерезонансного КРС, вид тензоров поляризуемости определяется с помощью метода аддитивной поляризуемости связи Волькенштейна [77]. Этот метод основывается на предположении, что каждая ковалентная связь имеет свою поляризуемость, являющуюся функцией только длины этой связи. Тогда поляризуемость системы можно представить как сумму поляризуемостей всех связей [78]

$$\chi_{\alpha\beta}(j) = \sum_{s=1}^{n_0} \sum_{i=1}^4 \chi_{\alpha\beta}(s, i|j), \quad (2.9)$$

где  $i$  – номер связи,  $j$  – номер моды. У материалов со структурой сфалерита каждый атом имеет 4 ближайших соседа. Будем считать, что связи с ними определяют поляризуемость. Пусть  $\{r, s, t\}$  – ортонормированный базис, привязанный к связи, причем орта  $r$  параллельна связи. Приведем явный вид базисов в кристаллографических координатах группы  $T_d^2$  [100] для всех связей в положении равновесия:

$$\begin{aligned}
T_1 &= \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & 0 & -2/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} \end{bmatrix}, & T_2 &= \begin{bmatrix} -1/\sqrt{3} & 0 & -2/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} \end{bmatrix}, \\
T_3 &= \begin{bmatrix} -1/\sqrt{3} & 0 & 2/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} \end{bmatrix}, & T_4 &= \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & 0 & 2/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Простейший случай анизотропной поляризуемости реализуется в теле с аксиальной симметрией. В этом случае, когда ось координат привязана к связи, тензор поляризуемости имеет вид:

$$\chi = \begin{bmatrix} \alpha_{||}(l) & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{\perp}(l) & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{\perp}(l) \end{bmatrix} = a_0(l)E + a_2(l)A_1, \tag{2.11}$$

где  $a_0(l) = \frac{1}{3}(a_{||}(l) + a_{\perp}(l))$ ,  $a_2(l) = \frac{1}{3}(a_{||}(l) - a_{\perp}(l))$ ,  $E$  – единичная матрица  $3 \times 3$  и

$$A_1 = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{2.12}$$

В состоянии покоя в координатах (2.10)  $i$ ый сосед имеет координаты  $(l, 0, 0)$ ,  $l$  – длина связи, после смещения  $u$  ( $|u| \ll l$ ) из положения равновесия координаты примут вид  $(l + u_r, u_s, u_t)$ , т.е. длина вектора становится равной  $(l + u_r)$ , и вектор направления связи подвергается преобразованию поворота:

$$G = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{u_s}{l} & -\frac{u_t}{l} \\ \frac{u_s}{l} & 1 & 0 \\ \frac{u_t}{l} & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{2.13}$$



Тензор  $A_1$  привязан к координатам связи, в координатах покоя (2.10) его вид становится зависимым от смещения:

$$A_1(u) = G \cdot A_1 \cdot G^{-1} = A_1 + 3 \frac{u_s}{l} A_2 + 3 \frac{u_t}{l} A_3, \quad (2.14)$$

где

$$A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.15)$$

Запишем тензор поляризуемости связи в линейном приближении по смещению:

$$\chi(u) = a_0(l + u_r)E + a_2(l + u_r) \left( A_1 + 3 \frac{u_s}{l} A_2 + 3 \frac{u_t}{l} A_3 \right) \quad (2.16)$$

в главных координатах

$$\chi^i(u) = a_0(l + u_{r,i})E + a_2(l + u_{r,i}) \left( A_1^i + 3 \frac{u_{s,i}}{l} A_2^i + 3 \frac{u_{t,i}}{l} A_3^i \right), \quad (2.17)$$

где

$$A_p^i = T^i \cdot A_p \cdot (T^i)^{-1}, \quad (2.18)$$

$p=1\dots 3$ . Теперь можно записать вид  $\frac{\partial \chi}{\partial u_\alpha^s}$   $i$  ой связи атома сорта  $k$  в главных координатах:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi^i}{\partial u_\alpha^s} &= \sum_{p=1}^3 \frac{\partial \chi^i}{\partial u_p^s} \times \frac{\partial u_p^s}{\partial u_\alpha^s} = \sum_{p=1}^3 \frac{\partial \chi^i}{\partial u_p^s} \cdot T_{\alpha p}^i = \\ &= (a'_0(i, s)E + a'_2(i, s)A_1^i) r_\alpha^i + 3 \frac{a_2(i, s)}{l} (A_2^i s_\alpha^i + A_3^i t_\alpha^i), \end{aligned} \quad (2.19)$$

здесь  $p = \{r, s, t\}$ ,  $T_{\alpha p}^i$  – компоненты матриц (1.86)  $a'_0(i, s) = \left. \frac{\partial a_0(l+t)}{\partial t} \right|_0$ ,  $a'_2(i, s) = \left. \frac{\partial a_2(l+t)}{\partial t} \right|_0$ ,

$a_2(i, s) = a_2$  – параметры  $i$  ой связи атома сорта  $s$ .

В рамках метода Волькенштейна поляризуемость необходимо просуммировать по всем связям, имеющимся у атомов элементарной ячейки. Это можно сделать, взяв атомы под номером 1 в ячейке сфалерита, сложив вклады связей с четырьмя ближайшими соседями и просуммировав по всем ячейкам сфалерита, входящим в элементарную ячейку гетероструктуры. Тогда, с учетом выше сказанного, формулу (1.86) можно записать

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi}{\partial \xi} = & \sqrt{n_0} \sum_{n=1}^{n_0} \sum_{i=1}^4 [(a'_0(i, s)E + a'_2(i, s)A_1^i)(u^{ni} \cdot r^i) + \\ & + 3 \frac{a_2(i, s)}{l} (A_2^i(u^{ni} \cdot s^i) + A_3^i(u^{ni} \cdot t^i))] , \end{aligned} \quad (2.20)$$

здесь  $n$  – номер ячейки сфалерита,  $u^{ni}$  – вектор смещения первого атома в ячейке сфалерита под номером  $n$  с массой  $m^{n0}$  относительно  $i^{\text{го}}$  соседа с массой  $m^{ni}$  с компонентами:

$$u_{\alpha}^{ni} = \frac{v_{\alpha}(n, i | q, j)}{\sqrt{m^{ni}}} - \frac{v_{\alpha}(n, 0 | q, j)}{\sqrt{m^{n0}}} . \quad (2.21)$$

Нумерация (2.21) имеет однозначное соответствие  $(n, i) \rightarrow \begin{pmatrix} s \\ l \end{pmatrix}$ ,  $v_{\alpha}(s, l | q, j) = v_{\alpha}(s | q, j) \exp(iq \cdot R_l)$ . Вектора  $r^i, s^i, t^i$  определены в матрицах  $T^i$  (2.10). Матрицы  $A_p^i$  – определены выражением (2.18). Параметры  $a'_0(i, s), a'_2(i, s), a_2(i, s)$  являются подгоночными. Для гетероструктур на основе GaAs, AlAs в общем случае шесть независимых параметров. Их значения были взяты из работы [48], с учетом соотношений, изложенных в работе [78].

Численные расчеты производились пакетом программного обеспечения, созданном на языке программирования Fortran с использованием компиляторов MS PowerStations 4.0 и Compaq Visual Fortran 6.5. Диагонализация матриц и расчет специальной функции  $\text{erfc}$  производились с использованием встроенной в эти компиляторы математической библиотеки численных расчетов IMSL.

### ГЛАВА 3. ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ КОНФИГУРАЦИИ НАНООБЪЕКТОВ НА СПЕКТР КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА.

§3.1. Исследование спектра оптических фононов, локализованных в квантовых островках GaAs, самоорганизующихся при гетероэпитаксиальном росте GaAs/AlAs в условиях реконструкции поверхности (001).

Свойства квантоворазмерных объектов, создаваемых на основе гетероэпитаксии полупроводников типа  $A^{III}B^V$ , во многом зависят от структурного качества гетерограниц. Рост слоев в условиях структурной реконструкции поверхности задает атомарный рельеф гетерограницы, что может драматически изменять свойства сверхрешеток с ультратонкими слоями материалов. Для изучения с атомарной точностью как структуры самой поверхности, так и структуры объектов, формирующихся на ней на начальной стадии гетероэпитаксиального роста, обычно используются сканирующая туннельная микроскопия (СТМ), либо высокоразрешающая электронная микроскопия (ВРЭМ). Известно, что спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) является хорошим методом исследования полупроводниковых сверхрешеток [1]. Наиболее широко изучаемые сверхрешетки типа  $A^{III}B^V$  – это сверхрешетки GaAs/AlAs. Эффект локализации оптических фононов в слоях GaAs и AlAs в направлении, перпендикулярном росту, известен уже достаточно давно [29,30]. Локализация оптических фононов возникает вследствие того, что собственные частоты оптических колебаний в этих материалах существенно различаются, поэтому оптические фононные моды, являющиеся собственными для одного из материалов, не проникают в другой материал. Глубина их затухания может составлять один монослой [1,49], то есть колебания локализуются в объекте, состоящем из данного материала. Частоты локализованных состояний сильно зависят от толщины слоя и структуры гетерограниц, и, в случае плоских сверхрешеток, применение даже самых простейших моделей (типа линейной цепочки) позволяет с хорошей точностью определять толщины слоев и некоторые

структурные параметры гетерограниц, таких, как их шероховатость. Однако если GaAs в некоторых условиях на некоторых поверхностях образует не сплошной слой, а квантовые проволоки или квантовые островки, то фононный спектр данных объектов должен также сильно зависеть от их латеральных размеров и структуры. В этом случае ни модель линейной цепочки, ни континуальные модели неприемлемы, и необходим более серьезный анализ. Влияние структуры поверхности и латеральной локализации на фононный спектр квантовых проволок GaAs было изучено как теоретически, так и экспериментально [94,95,101,102]. Наиболее ярко эффект влияния латеральных размеров квантовых объектов проявляется, когда их размеры очень малы и составляют несколько межатомных расстояний. Преимуществом исследования структуры квантовых объектов с помощью спектроскопии КРС и сравнительного анализа эксперимента и расчетов является то, что этот метод неразрушающий, экспрессный и относительно недорогой. Однако, в силу слабой интенсивности нерезонансного КРС, с ее помощью невозможно изучать отдельный объект, как в случае СТМ или ВРЭМ, и для набора сигнала подходящей интенсивности необходимо создать большой ансамбль объектов, а в этом случае определяющую роль будет играть величина дисперсии объектов по размерам и по форме. Поэтому для формирования квантовых объектов (в идеальном случае имеющих одинаковую форму и размеры) необходимо использовать эффекты их самоорганизации.

В этом плане наиболее широко применяемая и хорошо изученная поверхность GaAs (001) представляет большой интерес, так как существующая в определенных условиях ее реконструкция (2x4) представляет собой высокоупорядоченные цепочки As димеров, вытянутых вдоль направления (110) [7,97]. Так, было обнаружено, что при субмонослойном покрытии Ga реконструированной поверхности GaAs(001) (2x4) атомы Ga формируют квантовые островки, наиболее стабильными из которых являются островки, содержащие 6 и менее димеров [103].

Исследуемая гетероструктура  $\text{GaAs}_{0.6}/\text{AlAs}_5$  были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на полуизолирующей подложке GaAs (001) с буферным эпитаксиальным слоем GaAs толщиной 0.1  $\mu\text{m}$ . Температура подложки составляла 550°C, а потоки атомов Ga, Al и As были подобраны таким образом, что условия были предпочтительны для реконструкции (2x4) [104], что и наблюдалось по данным дифракции быстрых электронов. После каждой стадии эпитаксии Ga структура выдерживалась некоторое время в вакууме, чтобы “выжили” только стабильные конфигурации островков. Сверхрешетка содержала 400 периодов и была покрыта сверху защитным слоем GaAs.

Спектры КРС регистрировались при комнатной температуре в геометрии обратного рассеяния  $Z[XY]\bar{Z}$  на автоматизированной установке на базе монохроматора ДФС 52. Для возбуждения КРС использовался Ar лазер ЛГН 503.

На рисунке 3.1 приведены спектры КРС сверхрешетки  $\text{GaAs}_{0.6}/\text{AlAs}_5$  при возбуждении линиями Ar лазера 514.5, 496.5, 488, и 476.5 нм [105,106]. Пик в районе 290  $\text{cm}^{-1}$ , видимый во всех спектрах, соответствует КРС на длинноволновых LO фононах в подложке GaAs, что говорит о том, что сверхрешетка полупрозрачна на используемых длинах волн. Видно, что во всех 4 спектрах пик, соответствующий рассеянию на LO фоне, локализованном в GaAs, имеет триплетную структуру (рис. 3.1). Естественно предположить, что появление дополнительных фононных мод с различающимися частотами обусловлено латеральной структурой квантовых объектов GaAs. Частота пика 2 отличается от частоты пика 1 на 7.5  $\text{cm}^{-1}$ , а различие частот пиков 3 и 2 составляет 5.5  $\text{cm}^{-1}$  для всех длин волн возбуждения КРС. По этим параметрам можно провести оценки латеральных размеров объектов GaAs, которые составляют 2-3 постоянных решетки. Необходимо

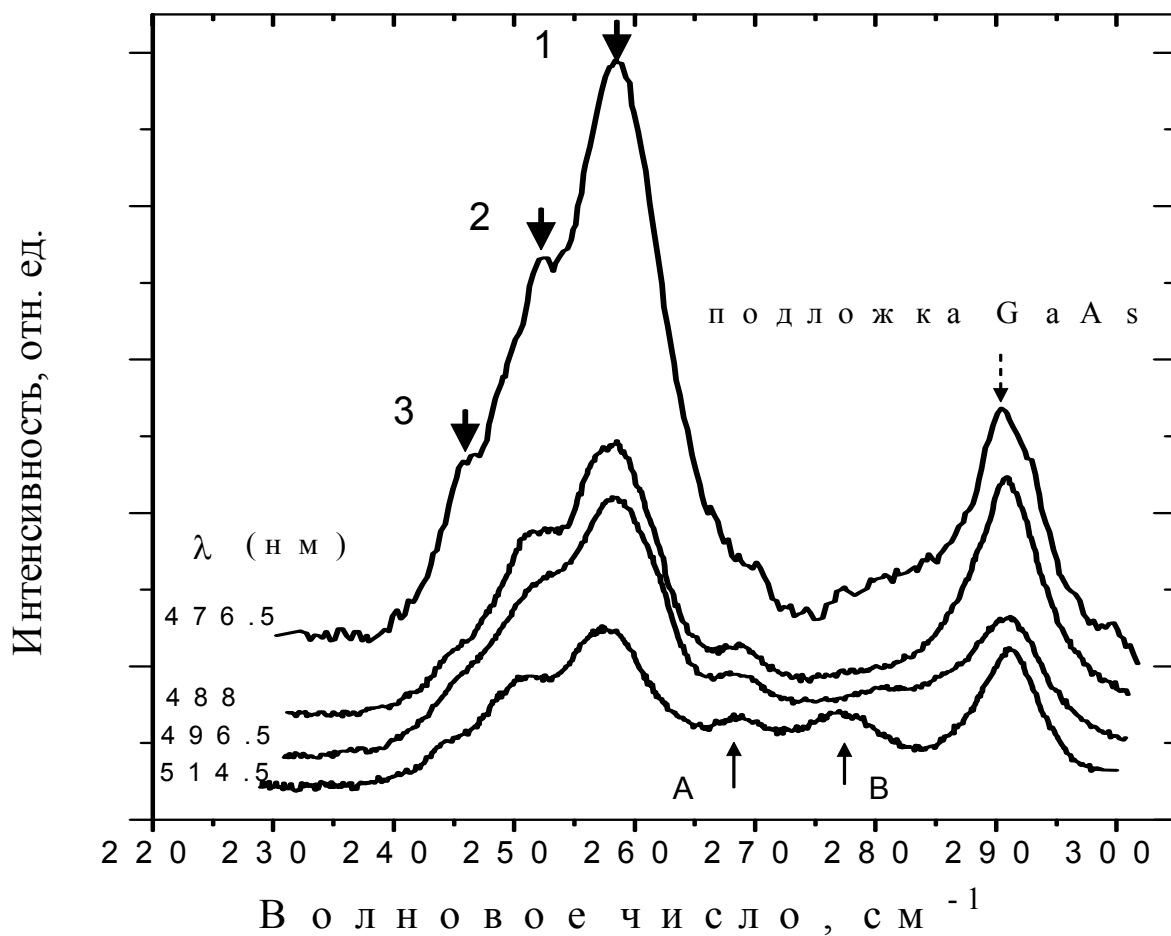


Рис. 3.1. Спектры КРС сверхрешетки  $\text{GaAs}_{0.6}/\text{AlAs}_5$ , выращенной на реконструированной поверхности (001)  $(2 \times 4)$ , полученные в геометрии  $Z[XY]\bar{Z}$ , для различных длин волн возбуждения рассеяния.

отметить, что структура наблюдаемых спектров КРС не различалась при сканировании по поверхности СР, что говорит о ее однородности и устойчивости формируемых квантовых объектов GaAs.

Для того, чтобы выявить структуру и форму формирующихся квантовых островков GaAs на поверхности AlAs (001), были проведены теоретические расчеты фононных мод для их различных конфигураций, базирующихся на известных моделях их роста на реконструированной (2x4) поверхности (001).

Так как на рисунке 3.1 в экспериментальных спектрах КРС четко видны 3 локализованные LO моды, вначале было предположено, что происходила реконструкция поверхности (2x4) по типу  $\alpha$ , и рост осуществлялся по three As dimer model (Chadi), [7,107]. Однако расчеты показали, что в случае, если GaAs островки представляли бы собой квантовые проволоки из 3 атомов Ga, лежащих в одной плоскости и вытянутые вдоль направления  $[\bar{1}10]$ , разделенные атомом Al, то из 9 оптических мод GaAs-типа активны в КРС в геометрии (XY) лишь 2 моды, причем частота наиболее интенсивной из них на  $6 \text{ см}^{-1}$  выше частоты экспериментально наблюдаемого пика 1 (рис. 3.1). Как было показано в работе [38], элементарная ячейка реконструированной поверхности (001) (2x4) конфигураций  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  содержит 2 As димера и 2 вакансии димеров. В работе [103] по данным СТМ было установлено, что адатомы Ga формируют квантовые островки, вытянутые вдоль направления  $[\bar{1}10]$ , а ширина островков в направлении  $[110]$  составляет 2 межатомных расстояния. Рассмотрим в начале конфигурацию островков GaAs в виде квантовых проволок вдоль направления  $[\bar{1}10]$ , сформированных димерами Ga. Элементарная ячейка такой структуры в направлении  $[110]$  содержит по 2 атома Ga и As, разделенных четырьмя атомами Al и As, в направлении роста  $[001]$  она содержит 5 монослоев AlAs. Покрытие слоя GaAs в этой конфигурации составляет 0.5 монослоя, а слоя AlAs – 5.5 монослоя. Атомарная конфигурация

подобной структуры показана на рисунке 3.2*a*, конфигурации некоторых других структур показаны на рисунках 3.2*б* *е*. Фононный спектр и спектр КРС в геометрии  $Z[XY]\bar{Z}$  были рассчитаны для подобных островков, и результаты приведены на рисунке 3.3 [105,106,108,109]. Вертикальными линиями показаны собственные частоты фононных мод GaAs-типа, их высота пропорциональна интенсивности КРС, внизу отмечены моды, не активные в рассеянии, подобные обозначения приняты для всех расчетов. Во всех рассчитанных спектрах КРС ширина всех линий на полувысоте принималась  $5 \text{ см}^{-1}$ . Как видно из рисунка 3.3*a*, из 6 оптических фононных мод GaAs-типа (что естественно, так как в элементарной ячейке в данной конфигурации содержится 2 атома Ga) в рассеянии активны 2 моды. Первая мода примерно на  $2 \text{ см}^{-1}$  выше по энергии, чем экспериментальный пик 1 (рис. 3.1), а вторая на  $8 \text{ см}^{-1}$  ниже, чем первая. Эти 2 моды возникают за счет латеральной локализации оптических фононов GaAs-типа в направлении  $[110]$ , перпендикулярном квантовой проволоке.

Как уже отмечалось, наиболее стабильными конфигурациями островков GaAs являлись островки, содержащие 6 и менее димеров Ga [103]. Если оборвать квантовую проволоку GaAs, конфигурация которой описана выше, барьерами из атомов Al, оптические фононы GaAs-типа будут локализованы также и в направлении  $[\bar{1}\bar{1}0]$ . Были рассчитаны фононные спектры подобных квантовых проволок конечной длины для разной толщины барьеров AlAs. Если толщина барьера составляла 1 атом Al, рассчитанный фононный спектр таких структур практически не отличался от спектра бесконечной проволоки. А если толщина барьера составляла 2 атома Al, в спектре ярко проявлялись особенности, связанные с дополнительной латеральной локализацией оптических фононов, причем при увеличении



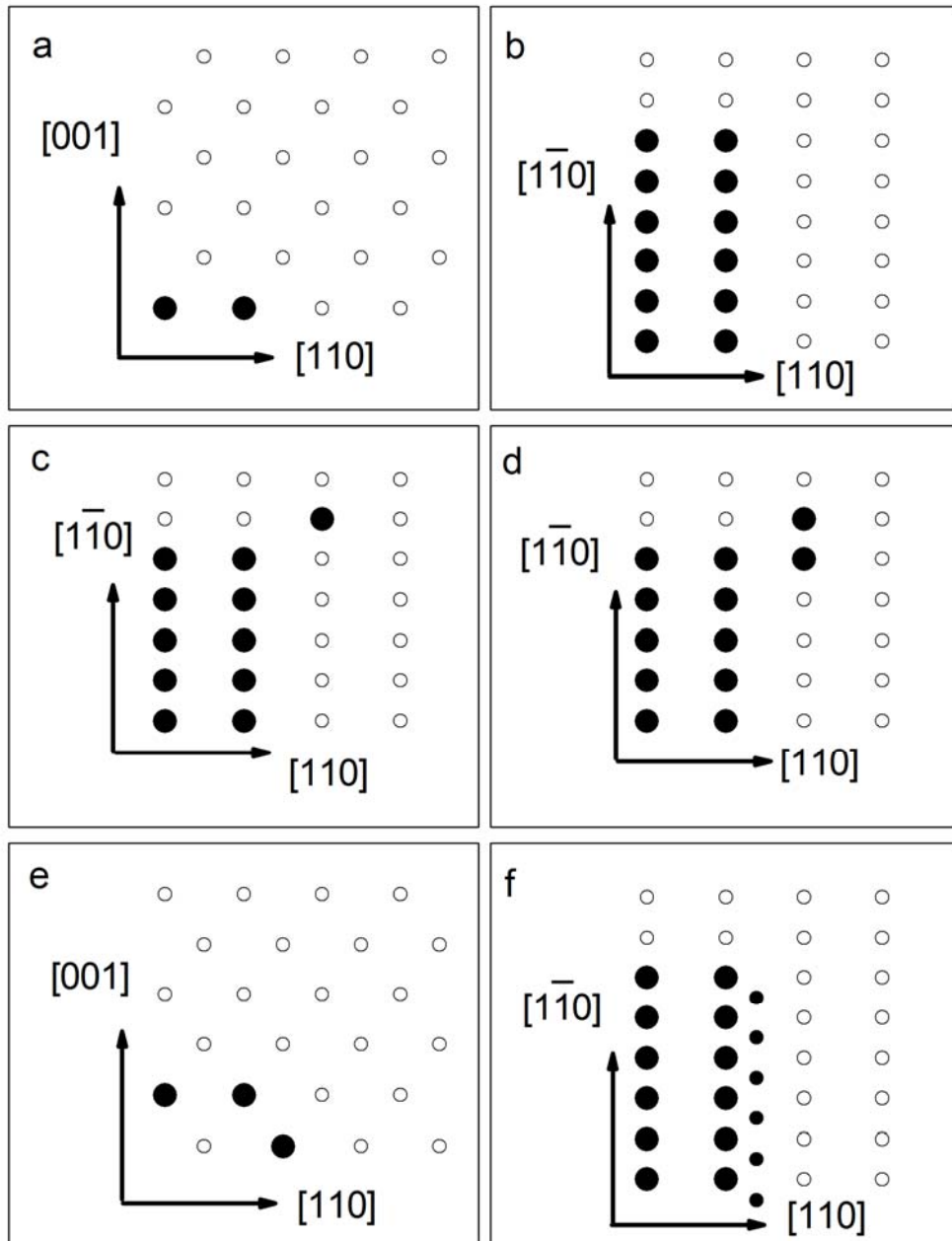


Рис. 3.2. Конфигурации квантовых островков GaAs. Темными кружками показаны атомы Ga, светлыми – атомы Al, атомы As не показаны, чтобы не усложнять картину.

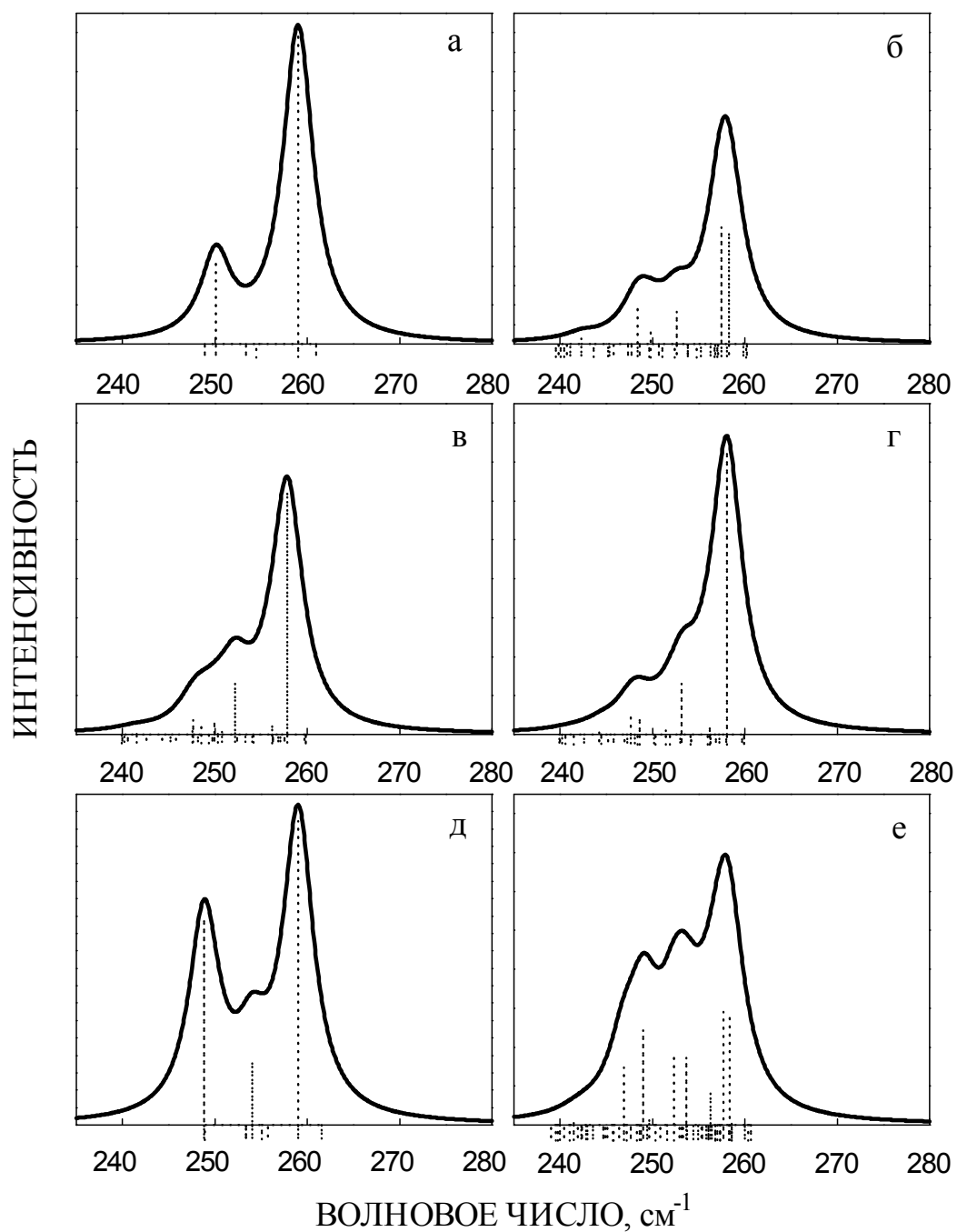


Рис. 3.3. Фононные спектры и спектры КРС, рассчитанные для различных конфигураций (показаны на рисунках 3.2 а е) квантовых островков GaAs.

барьера до 3 и более атомов Al дальнейшей трансформации спектра не наблюдалось. Это позволяет сделать вывод, что проникновение в латеральном направлении оптических фононных мод GaAs-типа в глубь AlAs очень мала, и барьера в 2 монослоя AlAs достаточно для появления латеральной локализации. Необходимо отметить, что глубина “латерального затухания”, в общем-то, соответствует глубине затухания вдоль направления роста, которая составляет порядка 1 монослоя [1,49].

Фононный спектр и спектр КРС островков конфигурации  $6 \times 2$  (где 6 и 2 – количество атомов Ga в направлениях  $[\bar{1}10]$  и  $[110]$  соответственно), разделенных барьерами из 2 атомов Al, приведены на рисунке 3.3б. Покрытие слоя GaAs в этой конфигурации составляет 0.375 монослоя. Видно, что 6 активных в КРС мод (из 36 общего количества мод) группируются в 3 полосы, частоты которых близки к частотам экспериментально наблюдаемых пиков. Рассчитанные спектры качественно соответствуют экспериментально наблюдаемым, однако соотношения между интенсивностями экспериментальных пиков 1, 2 и 3 (рис. 3.1) и расчетом (рис. 3.3б) не совпадают. Естественно было попытаться определить, какие конфигурации островков GaAs будут лучше соответствовать наблюдаемым спектрам.

На рисунках 3.3в и 3.3г приведены рассчитанные спектры КРС островков GaAs конфигурации  $5 \times 2$ , но с еще одним добавленным атомом Ga и добавленным димером Ga соответственно, во втором случае димер ориентирован вдоль направления  $[\bar{1}10]$ . Покрытие слоя GaAs для обеих конфигураций составляет 0.4 и 0.43 монослоя, соответственно. Видно, что в данном случае рассчитанные спектры очень хорошо совпадают с экспериментально наблюдаемыми пиками 1, 2 и 3 (рис. 3.1). Однако, средняя толщина слоя GaAs для этих конфигураций существенно меньше, чем толщина, определяемая экспериментально в процессе роста – 0.6 монослоя. При покрытии реконструированной поверхности AlAs(001) ( $2 \times 4$ ) слоем GaAs с толщиной более 0.5 монослоя может происходить заполнение атомами Ga не только димерных рядов As  $[103]$ , но и “траншей” на поверхности (001) ( $2 \times 4$ ). Спектры

КРС для подобных конфигураций островков GaAs приведены на рисунках 3.3*d* и 3.3*e*. Конфигурация, приведенная на рисунке 3.2*d*, представляет собой квантовую проволоку бесконечной длины вдоль направления  $[\bar{1}10]$ , ее элементарная ячейка в направлении  $[110]$  содержит по 2 атома Ga и As, разделенных четырьмя атомами Al и As, а также атом Ga, расположенный на 1 слой ниже (вдоль направления роста). Конфигурация, приведенная на рисунке 3.2*e*, схожа с предыдущей, но длина квантовой проволоки GaAs ограничена 6-ю атомами Ga, разделенными барьером из 2 атомов Al. Покрытие слоя GaAs для конфигураций 3.2*d* и 3.2*e* составляет 0.75 и 0.625 монослоя соответственно. Из рисунка 3.3*d* и 3.3*e* видно, что спектр КРС, рассчитанный для последней конфигурации, качественно соответствует эксперименту, при этом хорошо соответствуют и расчетные, и экспериментальные средние толщины слоев GaAs.

Возвращаясь к рисунку 3.1 и сравнивая его с рисунком 3.3*a e*, необходимо обратить внимание на то, что в рамках рассчитанных спектров КРС для вышеупомянутых конфигураций качественно и количественно объясняются пики 1, 2, и 3, но не объясняются экспериментально наблюдаемые особенности А и В, помеченные на рисунке 3.1 стрелками вверх. Эти особенности можно объяснить, если предположить возможность формирования квантовых островков GaAs с толщиной более 1 монослоя. На рисунке 3.4 представлены спектры КРС, рассчитанные для конфигураций островков GaAs на реконструированной поверхности AlAs(001) (2x4) с толщиной от 1 до 1.5 монослоя. По-видимому, пики А и В на рисунке 3.1 в районе  $269$  и  $277$   $\text{см}^{-1}$ , ясно обнаруживаемые в экспериментальном спектре для длины возбуждения  $514$  нм, объясняются рассеянием на фононах, локализованных в

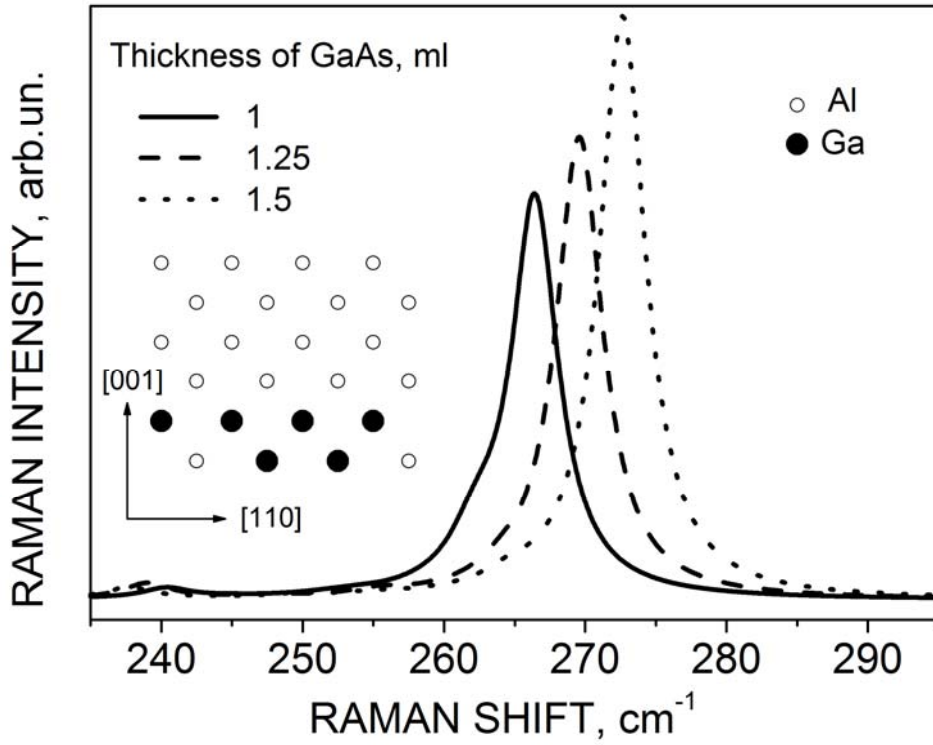


Рис. 3.4. Спектры КРС, рассчитанные для квантовых островков GaAs с толщиной 1 монослой и более.

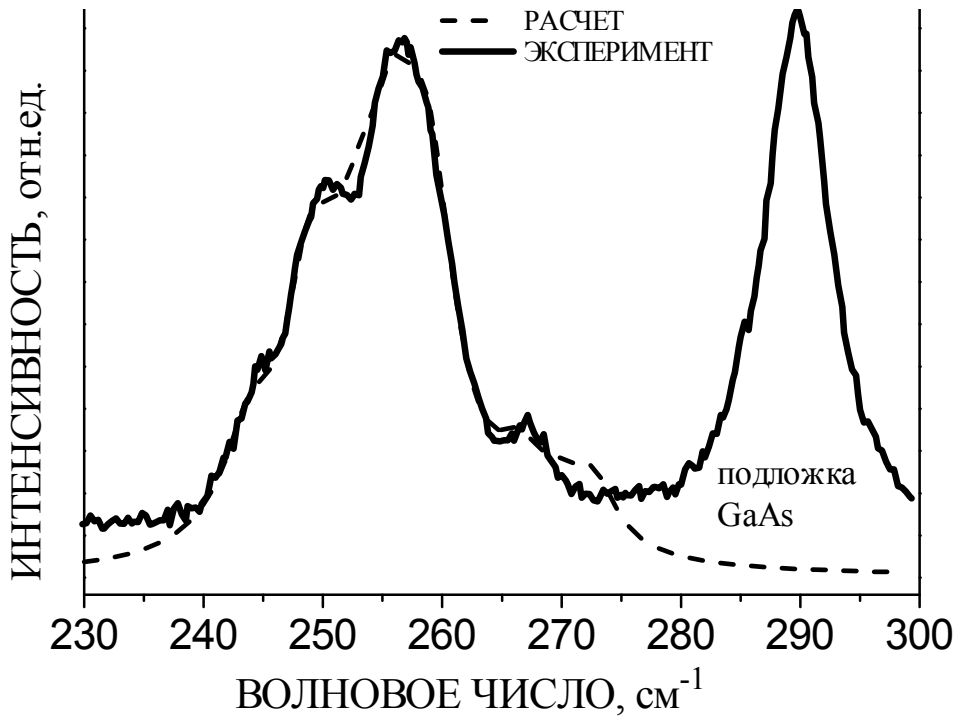


Рис. 3.5. Экспериментальный ( $\lambda_{\text{exc}}=488$  нм) и рассчитанный спектры КРС сверхрешетки  $\text{GaAs}_{0.6}/\text{AlAs}_5$ , выращенной на реконструированной поверхности (001) (2x4) и содержащей квантовые островки GaAs.

подобных объектах GaAs. Когда длина волны света, возбуждающего КРС, составляет 514 нм, вероятно условия КРС близки к резонансным, что может объяснить зависимость интенсивности этих пиков от длины волны накачки.

На рисунке 3.5 приведен экспериментальный спектр КРС для длины волны 488 нм в сравнении с рассчитанным спектром, в котором учитывался вклад от 20 различных конфигураций островков. Теоретический спектр подгонялся к экспериментальному путем минимизации среднеквадратичного отклонения. Из рисунка видно хорошее совпадение теории и эксперимента. Причем крайне поразителен тот факт, что даже толщина слоя GaAs, полученная усреднением по всем конфигурациям, с высокой точностью совпала с экспериментальной толщиной – 0.6 монослоя. Судя по результатам подгонки, около 70 % квантовых островков GaAs содержат менее 12 атомов Ga, что подтверждает выводы работы [103] о том, что наиболее стабильны маленькие островки GaAs.

#### Выводы:

1. Сравнение экспериментальных и рассчитанных спектров КРС показывает, что триплетная структура пика, соответствующая КРС в сверхрешетке  $\text{GaAs}_{0.6}/\text{AlAs}_5$ , выращенной методом молекулярно лучевой эпитаксии на поверхности (001), реконструированной по типу (2x4), возникает вследствие латеральной локализации фононов в квантовых островках GaAs, формирующихся при субмонослойном покрытии поверхности (001) (2x4).
2. Анализ экспериментальных и теоретических спектров КРС, рассчитанных в приближении поляризуемости связи Волькенштейна, позволил определить распределение островков по различным конфигурациям. Атомарная конфигурация островков совпадает с ранее известными результатами, полученными методом сканирующей туннельной микроскопии. Согласно расчетам, 70% островков содержат менее 12 атомов Ga.
3. Показано, что латеральная локализация оптических фононов в квантовых

островках GaAs происходит при толщине барьеров AlAs в 2 монослоя и более.

4. Показано, что для монослойного островка GaAs с латеральными размерами  $3 \times 3$  атомами Ga максимальные частоты фононов значительно больше максимальных частот фононов бесконечной монослойной проволоки шириной 2 атома Ga.

### §3.2. Расщепление по частоте поперечных оптических фононов, локализованных в квантовых проволоках GaAs.

Для создания квантовых проволок и точек весьма перспективными являются гетероэпитаксиальные технологии, использующие свойства самоорганизующихся систем, например, свойства фасетированной поверхности (311)A GaAs. Эта поверхность в некоторых условиях реконструируется в периодический массив микрофасеток, направленных вдоль кристаллографического направления  $[\bar{2}33]$  с периодом  $32\text{\AA}$  вдоль направления  $[01\bar{1}]$  [6,79-82]. Определение высоты микрофасеток является принципиальным вопросом для анализа возможностей создания квантоворазмерных приборов на основе эффекта фасетирования. Высота микрофасеток в одной из моделей составляет  $10.2\text{\AA}$  [6,79], в другой –  $3.4\text{\AA}$  [81,82], или 6 и 2 монослоя соответственно, толщина монослоя в направлении  $[311]$  составляет  $1.7\text{\AA}$ .

Достижения в технологии роста полупроводниковых гетероструктур сделали возможным создание на поверхности (311)A GaAs латеральных сверхрешеток (ЛСР) GaAs/AlAs и массивов сверхтонких квантовых проволок GaAs, размеры которых можно контролировать с высокой точностью. В данном параграфе представлены результаты исследований локализации поперечных оптических (ТО) фононов в квантовых проволоках и слоях GaAs, формирующихся при гетероэпитаксиальном росте GaAs/AlAs на фасетированной поверхности (311)A и на поверхности (311)Б, соответственно. Особый интерес представляло исследование влияния гофрировки гетерограниц GaAs/AlAs (311)A на фононные свойства, которое должно проявляться для тонких слоев GaAs, и исследование свойств локализованных оптических фононов в гетероструктурах GaAs/AlAs (311)A при

переходе от ЛСР к массиву квантовых проволок GaAs.

Изготовление ЛСР, содержащих квантовые проволоки GaAs.

Исследуемые структуры были изготовлены методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на полуизолирующих подложках GaAs с ориентацией (311)А и Б (разориентация  $< 15^\circ$ ) с буферным слоем эпитаксиальных GaAs (0.2  $\mu\text{m}$ ) и AlAs (0.1  $\mu\text{m}$ ). Направления А и Б определялись по анизотропии химического травления. При гетероэпитаксиальном росте происходит заполнение арсенидом галлия микроканалов на поверхности AlAs(311)А с последующим формированием фасеток GaAs, то есть происходит формирование периодического массива проволок или гофрированных слоев GaAs, в зависимости от средней толщины GaAs. Для более четкого формирования фасеток после каждой стадии эпитаксиального роста структуры некоторое время выдерживались без потока атомов As, Ga и Al на поверхность (113). В случае, если рост происходит по модели, изложенной в работе Нотцеля и Леденцова [79], формируется периодический массив квантовых проволок, сечение которого в плоскости  $(\bar{2}33)$  для одного периода сверхрешетки GaAs/AlAs (311)А показано на рисунке 3.6. В зависимости от средней толщины покрытия GaAs, возможны два случая: формирование гофрированных слоев GaAs и AlAs (рис. 3.6.А) или распад гофрированного слоя GaAs на периодический в латеральном направлении  $[01\bar{1}]$  массив изолированных квантовых проволок (рис. 3.6.Б). Во втором случае средняя толщина слоев GaAs ( $d_{\text{GaAs}}$ ) должна быть меньше высоты микрофасеток (6 монослоев в одной из моделей реконструкции поверхности (311)А [6,79]).



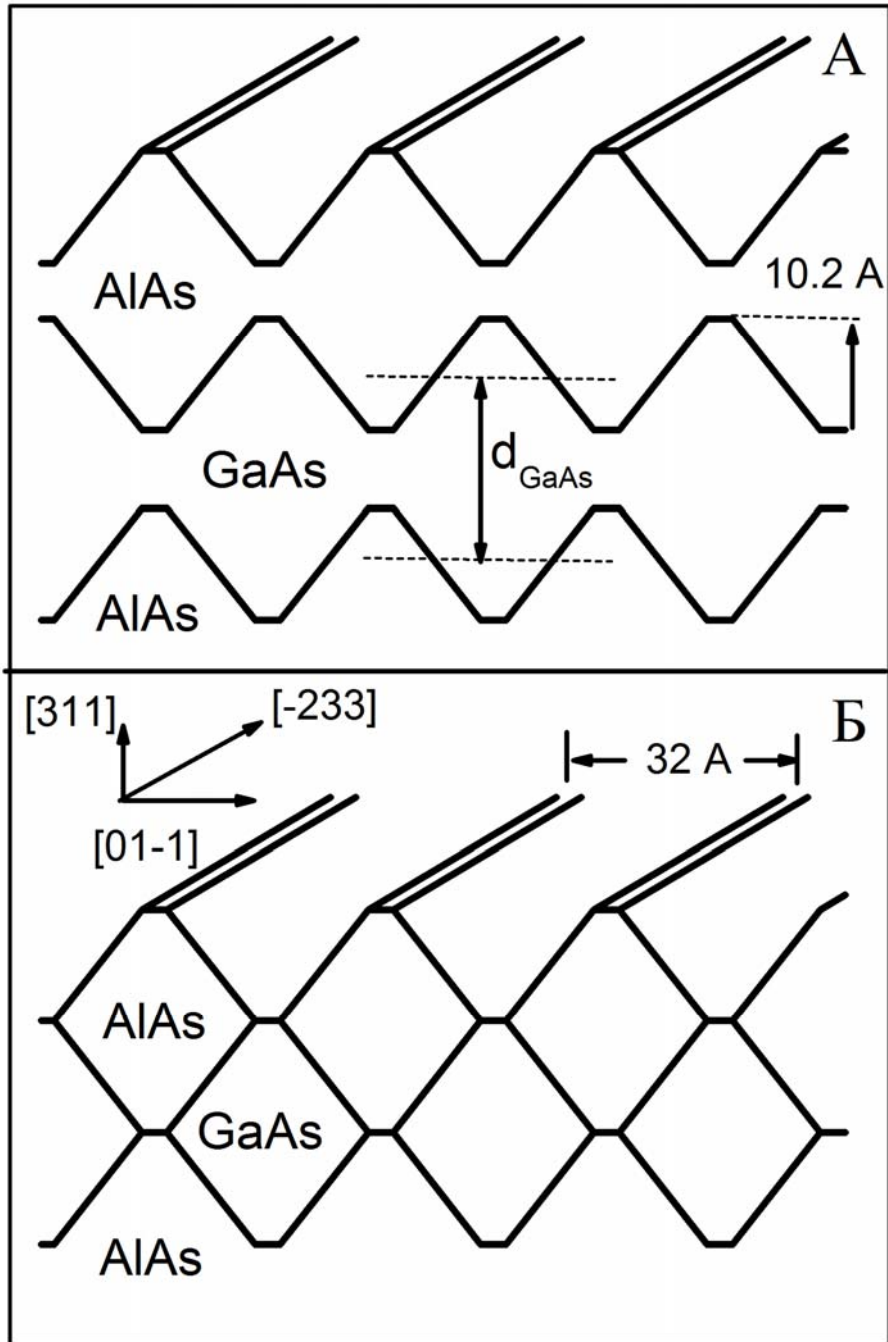


Рис. 3.6. Модель сечения в плоскости  $(\bar{2}33)$  ЛСР, формирующихся на фасетированной поверхности  $(311)A$ : а - GaAs образует гофрированные слои; б - слои GaAs распадаются на массив квантовых проволок.

Таблица 1. Параметры и спецификация сверхрешеток GaAs<sub>n</sub>AlAs<sub>m</sub>.

Ориентация подложки		Средняя толщина GaAs, в монослоях	Средняя толщина AlAs, в монослоях	Количество периодов
(311)A	(311)B	n	m	
АЛ1		12	16	25*3
АЛ2		10	16	25*3
АЛ3		9	16	25*3
АЛ4		7	16	25*3
АЛ5		5	16	25*3
A1	B1	12	12	100
A2	B2	10	8	100
A3		6	8	100
A4	B4	5	12	200
A5	B5	4	8	200

Таблица 2. Интенсивность нерезонансного КРС на продольных и поперечных модах в геометрии квазиобратного рассеяния от поверхности (311) GaAs для различных поляризаций.

Моды	Поляризационная геометрия КРС		
	(XX)	(YY)	(YX)
LO	$9/11d^2$	$(15/(11\sqrt{11}))^2 d^2$	0
TO <sub>y</sub>	$2/11d^2$	$(54/(11\sqrt{22}))^2 d^2$	0
TO <sub>x</sub>	0	0	$2/11d^2$

Параметры исследуемых сверхрешеток приведены в Таблице 1. Образцы, в спецификации которых содержится литера “Л”, через каждые 25 периодов сверхрешетки содержали легированные бериллием барьеры AlAs толщиной 350 Å и были покрыты защитным слоем GaAs толщиной 250 Å. Остальные образцы были не легированы и покрыты защитным слоем GaAs толщиной 40Å. Спектры КРС регистрировались при комнатной температуре. Для возбуждения КРС использовалась линия аргонового лазера 488 нм. Данные КРС на структурах с удаленным защитным слоем и подложкой, а также данные фотолюминесценции на некоторых образцах показали, что лазерное излучение в основном поглощается в сверхрешетках (то есть почти не достигает подложки), и сигнал КРС соответствует рассеянию на фонах в сверхрешетке. Спектры записывались в геометриях квазиобратного рассеяния  $Z(XX)\bar{Z}$ ,  $Z(YY)\bar{Z}$  и  $Z(YX)\bar{Z}$ , где оси Z, X и Y соответствуют кристаллографическим направлениям  $[311]$ ,  $[01\bar{1}]$  и  $[\bar{2}33]$ .

Моды  $TO_x$  и  $TO_y$  соответствуют фононам с направлением смещения атомов вдоль направлений X  $[01\bar{1}]$  и Y  $[\bar{2}33]$ , то есть поперек и вдоль фасеток на поверхности (311)A соответственно. Интенсивность КРС пропорциональна квадрату произведения вектора поляризации падающего света на тензор КРС и на вектор поляризации рассеянного света. Векторы, вдоль которых был поляризован либо падающий, либо рассеянный свет были X -  $[01\bar{1}]/\sqrt{2}$  и Y -  $[\bar{2}33]/\sqrt{22}$ . Данные по интенсивности КРС на всех модах обобщены в Таблице 2., из которых видно, что моды  $TO_x$  и  $TO_y$ , наблюдаются в двух различных геометриях и поэтому могут быть с большой точностью разрешены по положению соответствующих им пиков КРС в спектре. КРС на продольных фонах проявляется в геометрии  $Z(XX)\bar{Z}$ .

На рисунке 3.7 приведены спектры КРС на локализованных в GaAs поперечных оптических модах для образцов со средней толщиной слоев GaAs 21 Å и 8.5 Å в геометриях

рассеяния  $Z(YY)\bar{Z}$  (видны моды  $TO_y$ ) и  $Z(YX)\bar{Z}$  (видны моды  $TO_x$ ). Хорошо видно, что для образца с  $d_{GaAs} = 21 \text{ \AA}$ , расщепление основных локализованных мод  $TO_{1y}$  и  $TO_{1x}$  почти не проявляется (рис. 3.7.а), а для образца с  $d_{GaAs} = 8.5 \text{ \AA}$  наблюдается существенное расщепление этих мод (рис. 3.7.б). Необходимо также отметить, что интенсивности пиков КРС для  $TO_{1y}$  ( $I_{TO_y}$ ) и  $TO_{1x}$  ( $I_{TO_x}$ ) мод различаются в 1.8 раза для сверхрешетки с  $d_{GaAs} 21 \text{ \AA}$ . Это соотношение уменьшается с уменьшением слоев GaAs и составляет 1.5 раза для сверхрешетки с ультратонкими слоями GaAs ( $d_{GaAs}$  составляет  $8.5 \text{ \AA}$ ), тогда как для объемного GaAs эти пики должны различаться по интенсивности примерно в 6 раз (смотри таблицу 2), что и наблюдалось в спектрах КРС от объемного GaAs с ориентацией (311)A. По-видимому, изменение соотношения  $I_{TO_y}/I_{TO_x}$  для ЛСР по сравнению с объемным GaAs связано с изменением соотношения между суммой проекций связей Ga-As и As-Al на направления смещения атомов для мод  $TO_y$  и  $TO_x$  вдоль и поперек фасеток соответственно, вследствие влияния гетерограниц и модуляции толщины слоя вдоль направления  $-[01\bar{1}]$ .

Положение каждого пика в спектрах КРС было определено с помощью аппроксимации экспериментальных спектров кривыми Лоренца с минимизацией среднеквадратичного отклонения. Данные о расщеплении частот  $TO_1$  мод для всех исследуемых образцов приведены на рисунке 3.8. Видно, что эффект расщепления двух различных  $TO_1$  мод возрастает с уменьшением средней толщины слоев GaAs, причем частота  $TO_{1y}$  моды, в которой атомы колеблются вдоль квантовых проволок, выше, чем частота моды  $TO_{1x}$  (атомы смещаются поперек квантовых проволок). Можно предположить, что данный эффект обусловлен именно влиянием корrugации гетерограницы, а не смешиванием поперечных и продольных мод, вследствие пониженной симметрии направления  $[311]$ , так как в этом случае, согласно расчетам без учета

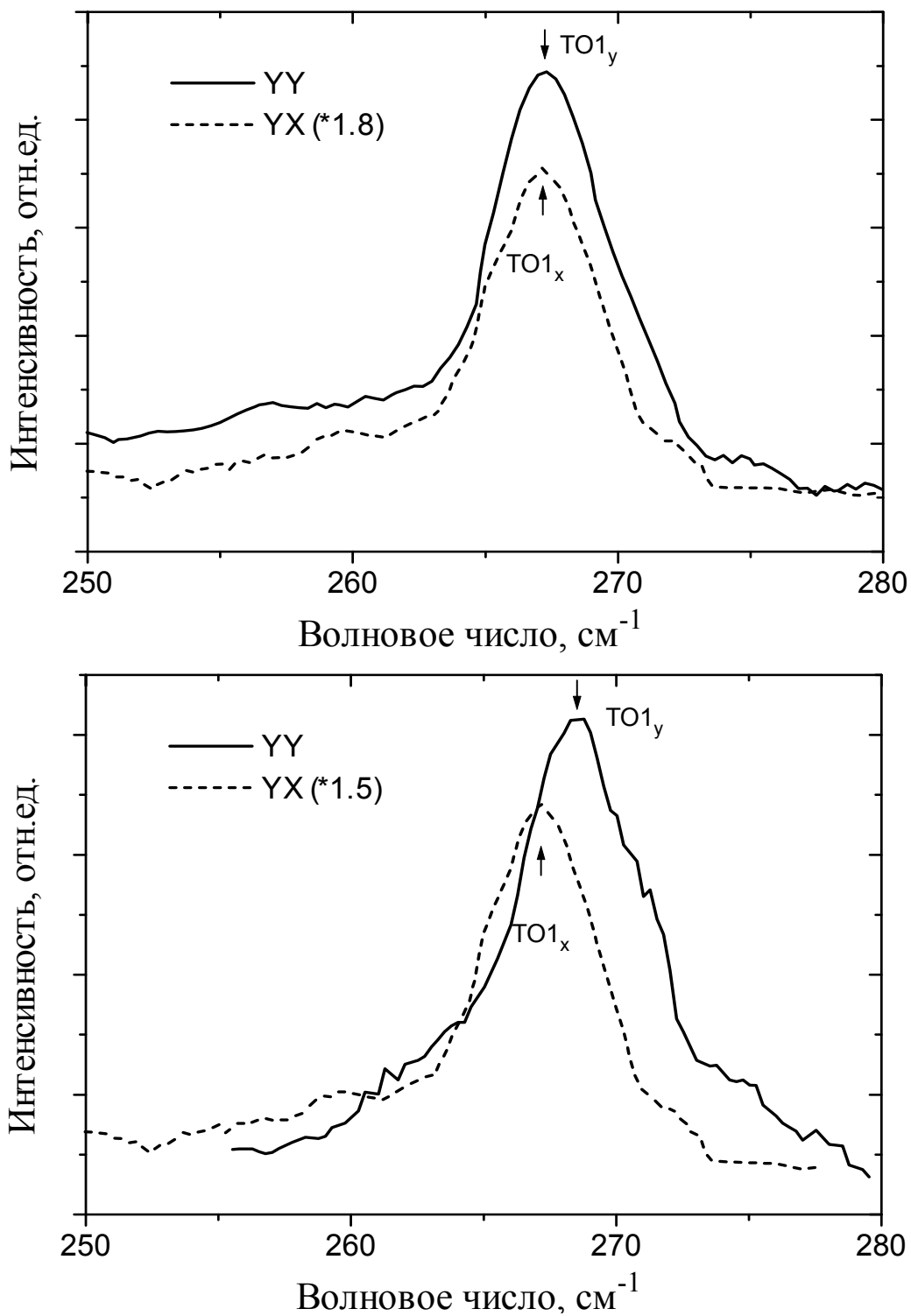


Рис. 3.7. Спектры КРС в геометриях  $Z(Y\bar{Y})\bar{Z}$  ( $TO_y$  моды, сплошная линия) и  $Z(YX)\bar{Z}$  ( $TO_x$  моды, штрих-линия) для образцов а: АЛ1 ( $d_{GaAs} = 21\text{\AA}$ ), б: АЛ5 ( $d_{GaAs} = 8.5\text{\AA}$ )

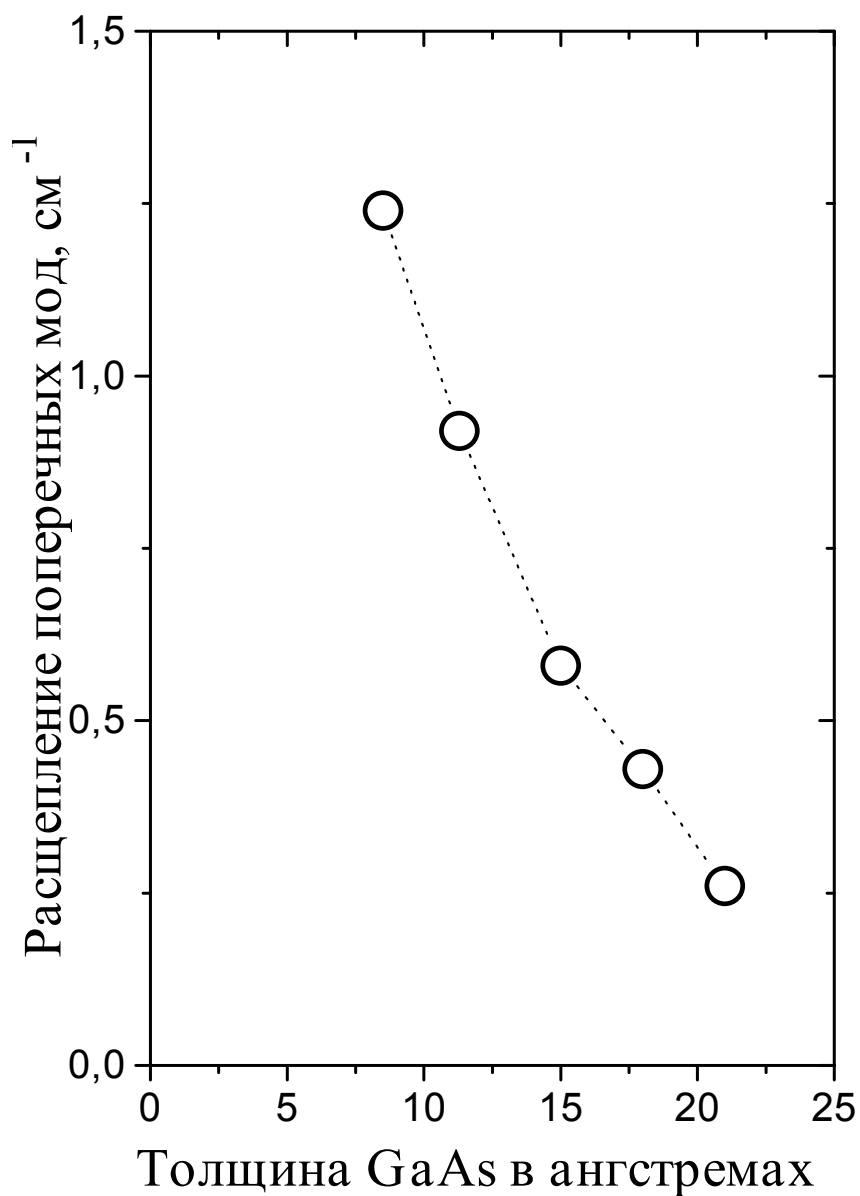


Рис. 3.8. Расщепление мод  $TO1_y$  (атомы смещаются вдоль микрофасеток) и  $TO1_x$  (атомы смещаются поперек микрофасеток) для образцов АЛ1-АЛ5 в зависимости от средней толщины слоев GaAs в ЛСР, выращенных на поверхности (311)А.

корrugации, этот эффект присутствует лишь для мод с волновыми векторами примерно в середине зоны Бриллюэна [88]. Увеличение расщепления  $TO_x$  и  $TO_y$  мод с уменьшением средней толщины слоев GaAs до 8.5 ангстрем (рис. 3.8) связан, по-видимому, с возникновением в этом случае изолированных квантовых проволок GaAs и, соответственно, с локализацией оптических фононов в латеральном направлении  $[01\bar{1}]$ . Хотя в этом направлении проволоки GaAs расположены близко друг к другу, оптические фононные моды локализуются в них, так как глубина проникновения оптических фононов из GaAs в AlAs составляет 1-2 монослоя [1]. В модели “жесткой” локализации, если пренебречь распространением колебаний из GaAs в AlAs, граничные условия следующие: смещения атомов на границе равны нулю. Данные граничные условия анизотропны в плоскости роста, в этой же плоскости смещаются атомы при поперечных колебаниях, если пренебречь перемешиванием  $TO_y$  и LO мод. Таким образом, можно предположить, что расщепление локализованных TO мод в сверхрешетках GaAs/AlAs (311)A происходит вследствие анизотропии граничных условий в корrugированных слоях и квантовых проволоках GaAs [102,110,111].

Необходимо подчеркнуть, что для длинноволновых колебаний, разрешенных в КРС, от объемного GaAs моды  $TO_y$  и  $TO_x$  вырождены, и расщепления поперечных мод на объемном GaAs в эксперименте не наблюдалось. Так как образцы АЛ1-АЛ5 были покрыты довольно толстым защитным слоем GaAs (250 Å), некоторая часть сигнала (по оценкам примерно 30%) была обусловлена рассеянием на объемных длинноволновых  $TO_y$  и  $TO_x$  модах, которые были неразрешимы в спектрах вследствие близости их частот к частотам локализованных  $TO1$  мод, и поэтому реальное расщепление  $TO1_x$  и  $TO1_y$  мод должно быть больше. Это было подтверждено в эксперименте по КРС на образцах с удаленным защитным слоем GaAs, а также на специально приготовленных мембранах с удалением подложки GaAs селективным травлением и регистрацией сигнала со стороны буферного слоя AlAs. Однако

точность определения положения пиков КРС в этом случае была хуже вследствие сильного фонового сигнала засветки, возникающего из-за диффузного рассеяния света от травленной поверхности.

Как уже отмечалось выше, исследуемые образцы АЛ1-АЛ5 содержали сильнолегированные барьеры АIAs. Известно, что фонон-плазмонное взаимодействие в легированных полярных полупроводниках приводит к образованию смешанных фонон-плазмонных мод, частоты которых зависят от уровня легирования [112]. Хотя в объемном GaAs длинноволновые ТО моды не создают дипольного момента и, соответственно, не взаимодействуют с плазмонами, локализованные в квантовых проволоках ТО моды могут обладать дипольным моментом и, следовательно, их частоты могут зависеть от уровня легирования. Для получения более достоверных экспериментальных данных по расщеплению локализованных ТО фононов были изготовлены и исследованы нелегированные образцы А1-А5 с параметрами, приведенными в таблице 1.

Для того, чтобы убедиться в том, что расщепление  $TO_{1y}$  и  $TO_{1x}$  мод обусловлено именно влиянием корrugации гетерограниц (311)А GaAs/AlAs, а не смешиванием LO- $TO_y$  мод вследствие симметрии направления [311], были проведены дополнительные эксперименты. В абсолютно одинаковых условиях были изготовлены сверхрешетки GaAs/AlAs на поверхностях (311)А и (311)Б. Известно, что поверхность (311)Б не обладает такой ярко выраженной структурной анизотропией, как поверхность (311)А [96]. Сравнив результаты по КРС на локализованных ТО фононах в случае сверхрешеток, выращенных на поверхностях (311)А и (311)Б, можно выделить расщепление, обусловленное корrugацией гетерограниц, и расщепление, если оно существенно, возникающее в результате смешивания продольных и поперечных мод. В последнем случае расщепление должно происходить и для сверхрешеток с плоскими гетерограницами.

Спектры КРС в геометрии (XX) образцов А5 и Б5, выращенных на фасетированной



поверхности GaAs (311)А и поверхности GaAs (311)Б соответственно и содержащих тонкие слои GaAs (4 монослоя), приведены на рисунке 3.9. В данной геометрии в рассеянии наиболее активны LO моды. Как видно из рисунка, частота локализованной оптической моды первого порядка (LO1 моды) в образце А5, содержащего массивы квантовых проволок GaAs, выше, чем в образце Б5. Так как толщины сверхрешеток, выращенных на поверхностях А и Б, определенные по положению интерференционных экстремумов в спектрах пропускания света, были равны, то различие частот LO1 мод может быть обусловлено только различием в структурах гетерограниц (311) А и Б. По данным теоретических расчетов известно, что, когда средняя толщина GaAs примерно равна высоте фасеток, частота LO1 мод в корругированных ЛСР выше, чем в сверхрешетках с плоскими гетерограницами [95]. Авторы объясняли это тем, что максимальная толщина квантовых проволок больше, чем средняя толщина плоских слоев. Возможно, это связано с дополнительной латеральной локализацией оптических фононов в квантовых проволоках, что в модели двумерной цепочки приводило к росту частоты локализованных LO фононов [113]. На рисунках 3.10.а и 3.10.б представлены спектры КРС в геометриях YY и XY для образцов, полученных в одном росте, но на различных поверхностях - (311)А и (311)Б. На рисунке 3.10.а видно расщепление основных локализованных мод  $TO1_y$  и  $TO1_x$ , причем с уменьшением средней толщины слоев GaAs эффект расщепления возрастает. В спектрах образцов А1 и А2 (толщина GaAs 12 и 10 монослоев) видны также локализованные ТО моды третьего порядка. Видно также, что ширина пиков в спектрах образцов А3-А5 возросла, что может быть связано с размытием гетерограниц AlAs/GaAs на масштабах порядка одного - двух монослоев. Особенности в районе  $280 \text{ см}^{-1}$ , наблюдаемые в спектре

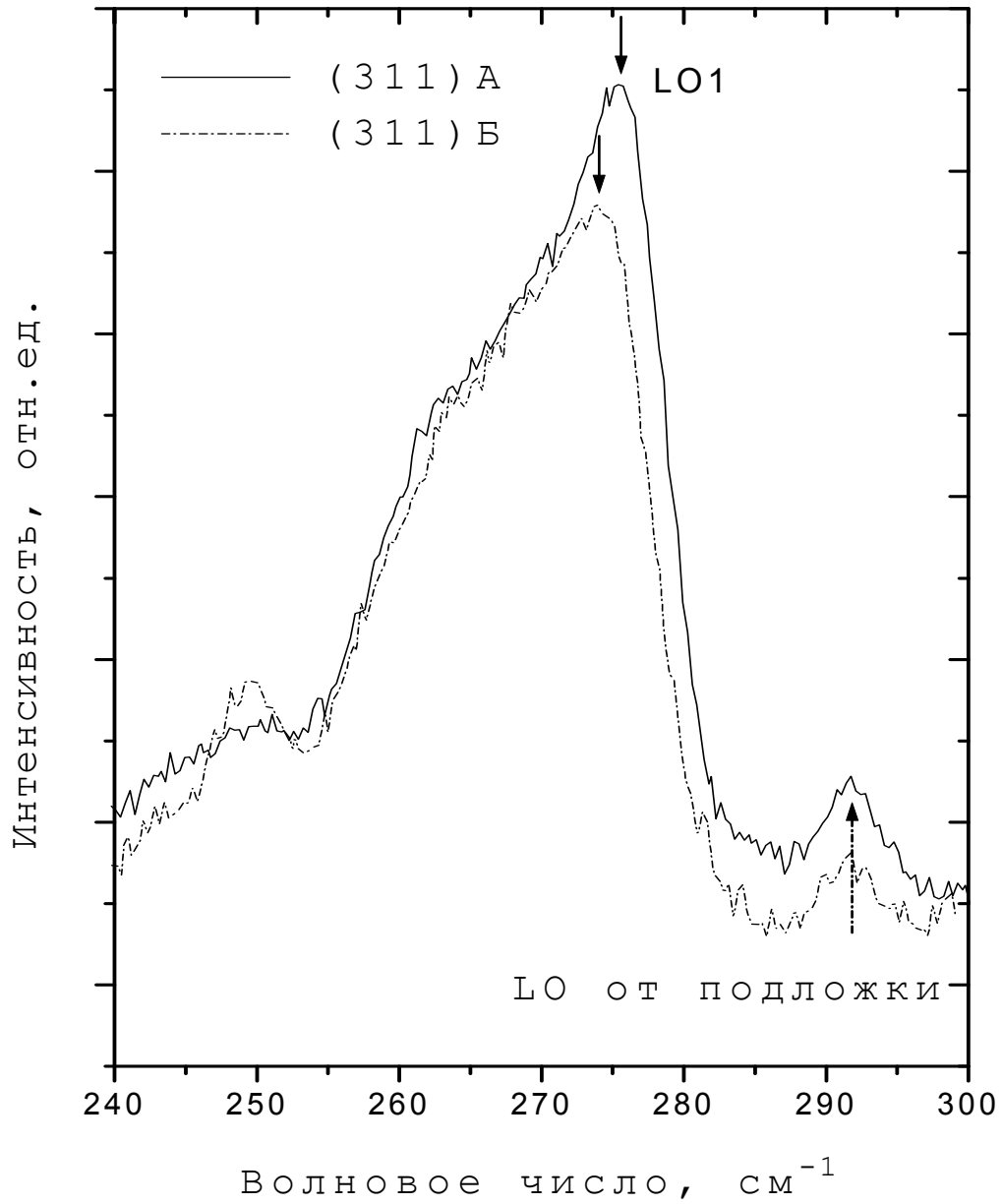


Рис. 3.9. Спектры КРС в геометрии (XX) от образцов А5 (сплошная линия, подложка (311)А) и Б5 (штрихованная линия, подложка (311)Б).

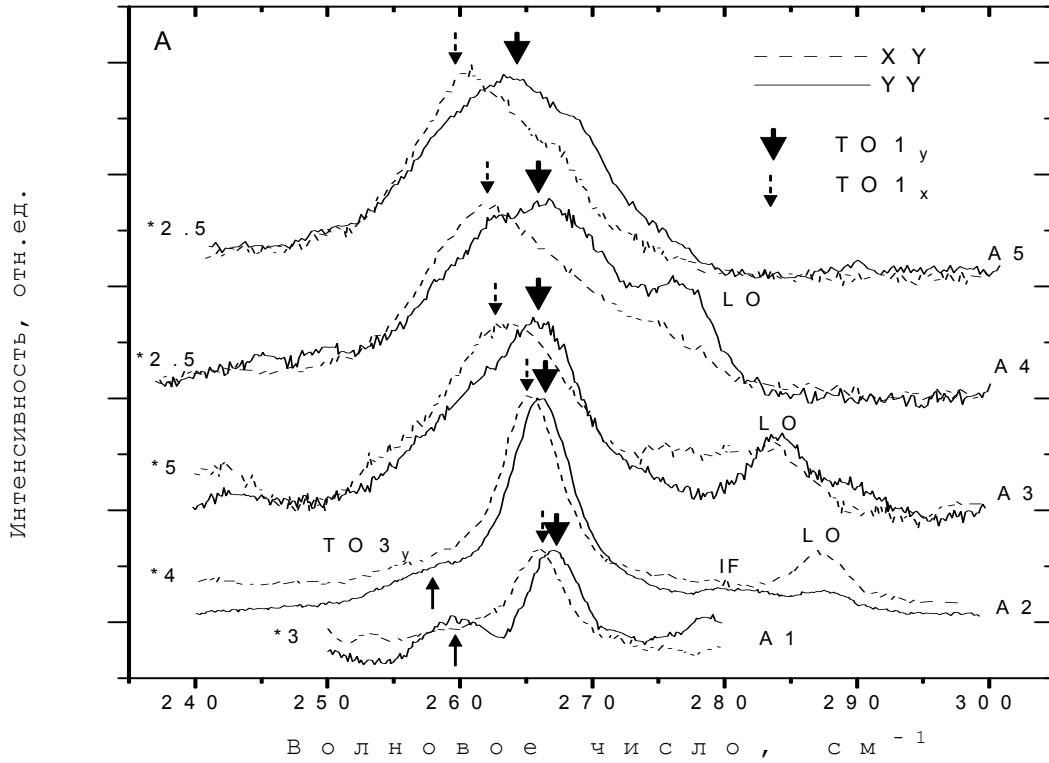


Рис. 3.10.а. Спектры КРС в геометриях YY (сплошная линия) и XY (штрихованная линия) от ЛСР  $\text{GaAs}_n/\text{AlAs}_m$  А1-А5, выращенных на фасетированной поверхности (311)А.

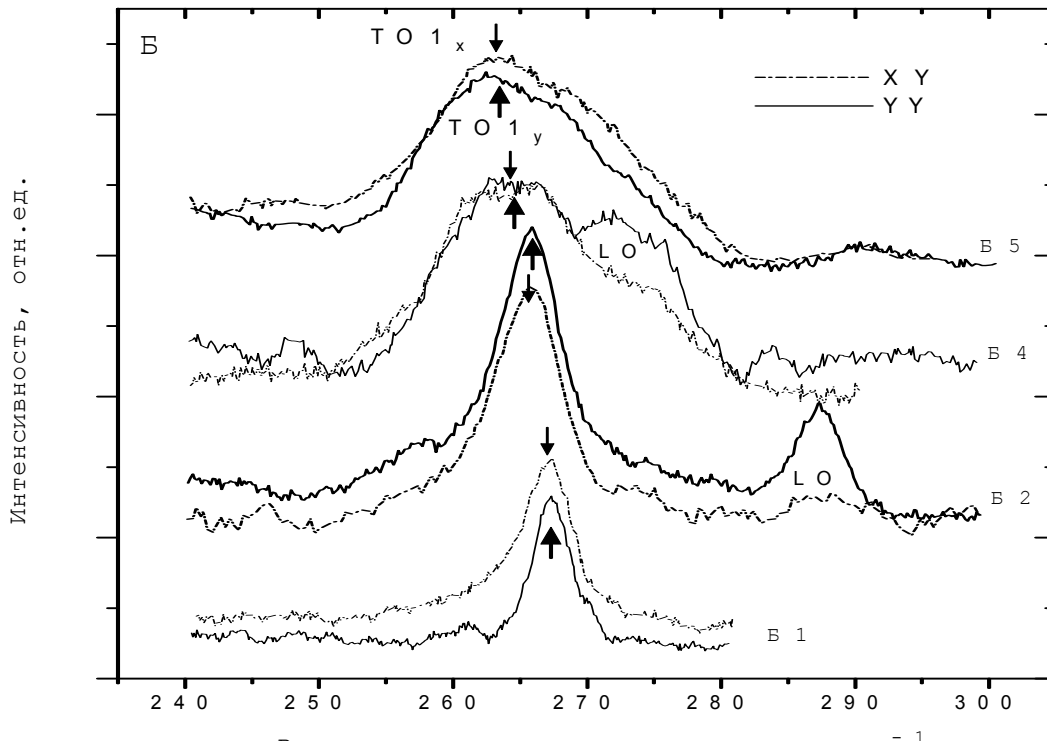


Рис. 3.10.б. Спектры КРС в геометриях YY (сплошная линия) и XY (штрихованная линия) сверхрешеток  $\text{GaAs}_n/\text{AlAs}_m$  Б1,Б2,Б4,Б5, выращенных на поверхности (311)Б.

образца А2 в геометрии  $Z(Y\bar{Y})\bar{Z}$ , совпадают по положению с интерфейсными (IF) фононами для данного соотношения толщин AlAs/GaAs. Наблюдение интерфейсных фононов в ЛСР в условиях, далеких от резонансных, может быть вызвано эффектом корrugации гетерограниц. Необходимо отметить немонотонную зависимость соотношения интенсивностей пиков КРС для  $TO_y$  и  $TO_x$  мод. Для удобства восприятия интенсивность спектров КРС, зарегистрированных в геометрии XY, была умножена в 2.5 - 5 раз (рис. 3.10.a). Для ЛСР с относительно толстыми слоями GaAs (образец А1, 12 монослоев) и для ЛСР с самыми тонкими слоями GaAs (А4 и А5, 5 и 4 монослоев соответственно) интенсивности пиков КРС для  $TO_y$  и  $TO_x$  мод различаются всего в 2.5-3 раза. Согласно таблицы 2 для объемного GaAs, эти пики должны различаться по интенсивности примерно в 6 раз, что и наблюдалось при КРС от подложки GaAs (311)А, а также приблизительно выполнялось для ЛСР с толщинами слоев GaAs 10 и 6 монослоев (образцы А2 и А3, рис. 3.10.a) и для сверхрешеток, выращенных на поверхности (311)Б (рис. 3.10.б). Как уже отмечалось, изменение соотношения интенсивностей КРС на модах  $TO_y$  и  $TO_x$  для ЛСР связано как с перемешиванием продольных и поперечных фононных мод, так и с изменением соотношения между суммой проекций связей Ga-As, Al-As на направления вдоль и поперек фасеток вследствие модуляции толщины слоя вдоль направления  $[01\bar{1}]$ .

Спектры КРС образцов Б1,Б2,Б4 и Б5, выращенных на поверхности (311)Б, показаны на рисунке 3.10.б. Видно, что в этом случае расщепления  $TO$  мод практически не происходит. В спектрах, зарегистрированных в геометрии  $Y\bar{Y}$ , проявляются пики рассеяния на  $LO1$  модах. Интенсивности КРС на модах  $TO1_y$  и  $TO1_x$  различаются примерно в 4.5-6 раз, что отличается от данных соотношений для ЛСР, выращенных на поверхности (311)А (рис. 3.10.a) и ближе к соотношению для объемного GaAs. Положение пиков, соответствующих КРС для  $TO1_y$  и  $TO1_x$  мод, было определено с помощью описанной выше процедуры аппроксимации экспериментальных спектров кривыми Лоренца. Данные о расщеплении

частот  $TO_1$  мод с различным направлением атомных смещений приведены на рисунке 3.11. Видно, что, как и в случае ЛСР, выращенных на поверхности (311)А с легированными барьерами (рис. 3.8), эффект расщепления  $TO_1$  мод возрастает с уменьшением средней толщины слоев GaAs, причем частота  $TO_{1y}$  моды, в которой атомы смещаются вдоль квантовых проволок, выше, чем частота моды  $TO_{1x}$ , в которой атомы смещаются поперек квантовых проволок. Так как в случае сверхрешеток, выращенных на поверхности (311)Б, расщепления  $TO_1$  мод фактически не наблюдалось, можно сделать вывод, что данный эффект обусловлен именно влиянием корrugации гетерограницы, а не смешиванием  $TO_y$  и  $LO$  мод, вследствие пониженной симметрии направления  $[311]$   $[111,113]$ . Необходимо отметить, что для образцов А5, А4 и А3 средняя толщина слоев GaAs была почти равна, либо даже меньше, чем масштаб корrugации гетерограниц, равный высоте микрофасеток на поверхности GaAs в одной из моделей (6 монослоев, [6,79]), то есть, предположительно, в этом случае в процессе роста происходило смыкание фасеток соседних слоев AlAs, и GaAs образовывал не сплошной гофрированный слой, а периодический массив изолированных квантовых проволок. Для этих образцов, как видно из рисунка 3.11, эффект расщепления  $TO_x$  и  $TO_y$  мод резко усиливался, что может быть косвенным подтверждением формирования квантовых проволок GaAs.

По результатам расчетов спектров КРС [95], выполненных для образца со средней толщиной слоев GaAs в 8 монослоев, качественных отличий в рассчитанных спектрах КРС для модели поверхности (311)А с высотой фасеток 2 и для модели без корrugации не наблюдалось. Нами обнаружено значительное расщепление  $TO$  мод для образца А1 с 10 монослоями GaAs. По расчетам спектров КРС тех же авторов [95], для сверхрешетки с толщиной GaAs в 4 монослоя, присутствие корrugации поверхности всего в 2 монослоя, в

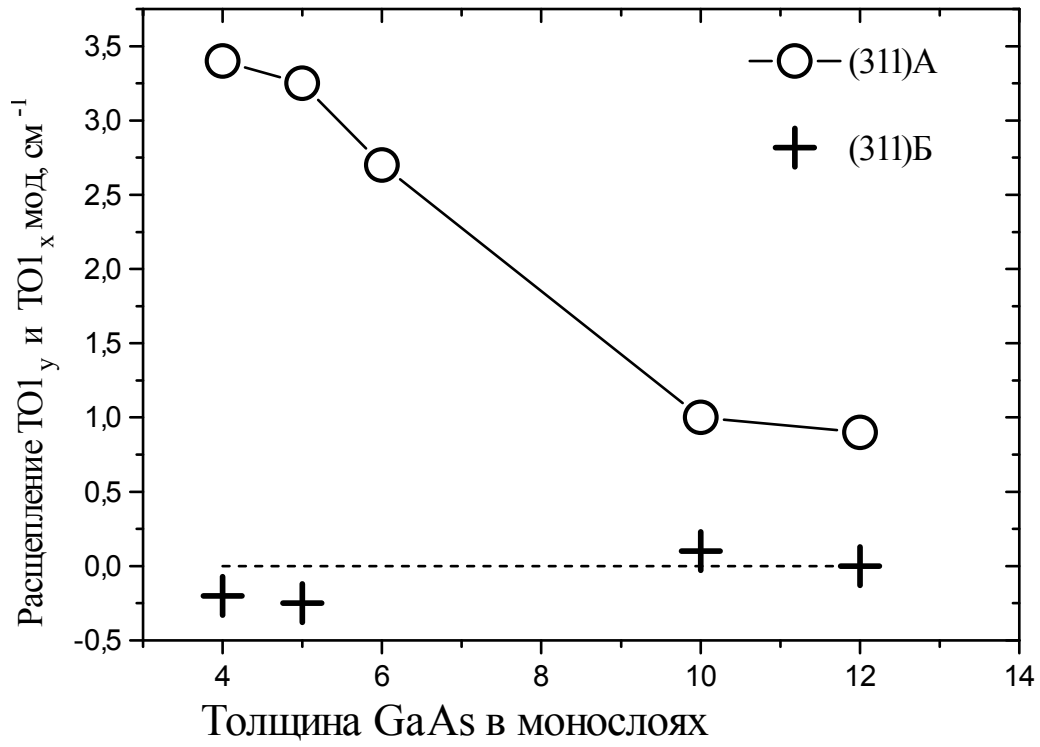


Рис. 3.11. Расщепление частот мод TO<sub>1y</sub> и TO<sub>1x</sub> в зависимости от средней толщины слоев GaAs в сверхрешетках, выращенных на поверхностях (311)А и (311)Б.

случае роста GaAs по типу квантовых проволок, приводит к заметному отличию рассчитанных спектров КРС для корругированной и некорругированной поверхности. В случае модели роста квантовых проволок [6,79], для столь тонких слоев GaAs должны, по видимому, сформироваться отдельные квантовые проволоки GaAs и, соответственно, должна наблюдаться локализация оптических фононов в дополнительном, латеральном направлении. К сожалению, большая ширина пиков для образцов А3-А5 и Б4, Б5 (рис. 3.10.а и б) не позволила разрешить их дополнительную структуру, связанную с особенностями перестройки поверхностей (311) А и Б. Явно наблюдалось лишь расщепление ТО мод в случае ЛСР, выращенных на поверхности (311)А, и отсутствие расщепления для сверхрешеток, выращенных на поверхности (311)Б.

На рисунке 3.12 показана форма идеальной проволоки и один из возможных ее дефектов. На рисунке 3.13 приведены рассчитанные спектры КРС для  $\text{GaAs}_{10}/\text{AlAs}_8$  и для  $\text{GaAs}_6/\text{AlAs}_8$ , соответствующие структуре без дефектов. На этих спектрах в геометрии ХУ виден пик в районе  $280 \text{ см}^{-1}$  [106,108,109,114,115,116]. Этот пик в работах [91, 94] считается характеризующим для такого типа корrugации и исчезает только при сильной размытости границ. На экспериментальных спектрах (рис. 3.10а) пик в этой области присутствует только для образца А2 ( $\text{GaAs}_{10}/\text{AlAs}_8$ ). Наличие этого пика, скорее всего, свидетельствует о высоком качестве гетерограниц у данного образца, у остальных они сильно размыты. Для СР  $\text{GaAs}_6/\text{AlAs}_8$  в геометрии ХУ (точечная линия на рис.3.13) пик с максимальной интенсивностью находится в области более высоких частот, чем пик в геометрии УУ (сплошная линия), т.е. расщепление имеет знак, противоположный наблюдаемому в эксперименте.

Было сделано предположение, что наблюдаемое в эксперименте расщепление вызвано дефектами структуры, которые всегда присутствуют в реальных образцах. Были

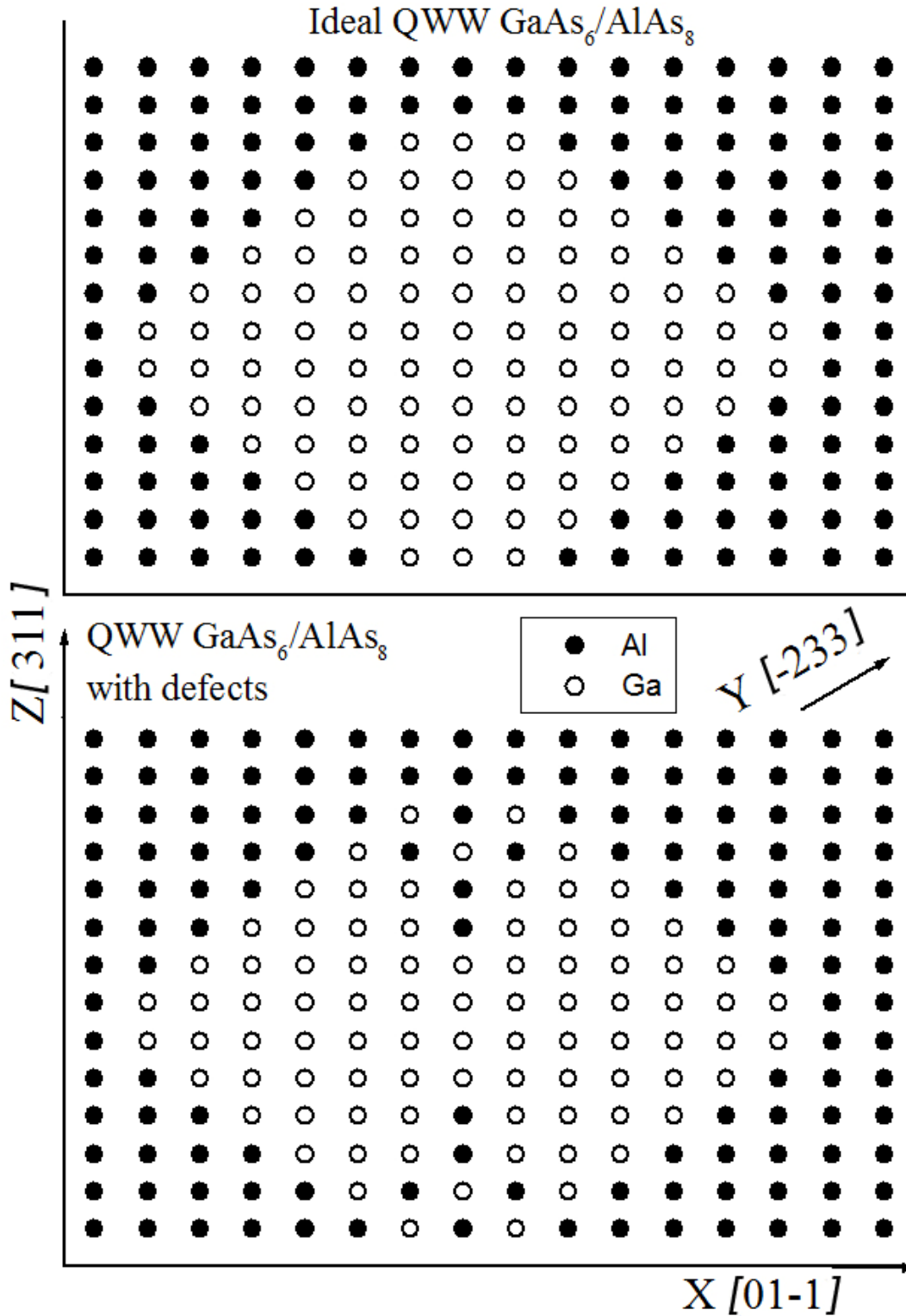


Рис. 3.12. Элементарная ячейка идеальной квантовой проволоки GaAs (верхний рисунок) и пример возможных дефектов (нижний рисунок). Темными кружками показаны атомы Al, светлыми – атомы Ga, атомы As не показаны, чтобы не усложнять картину.



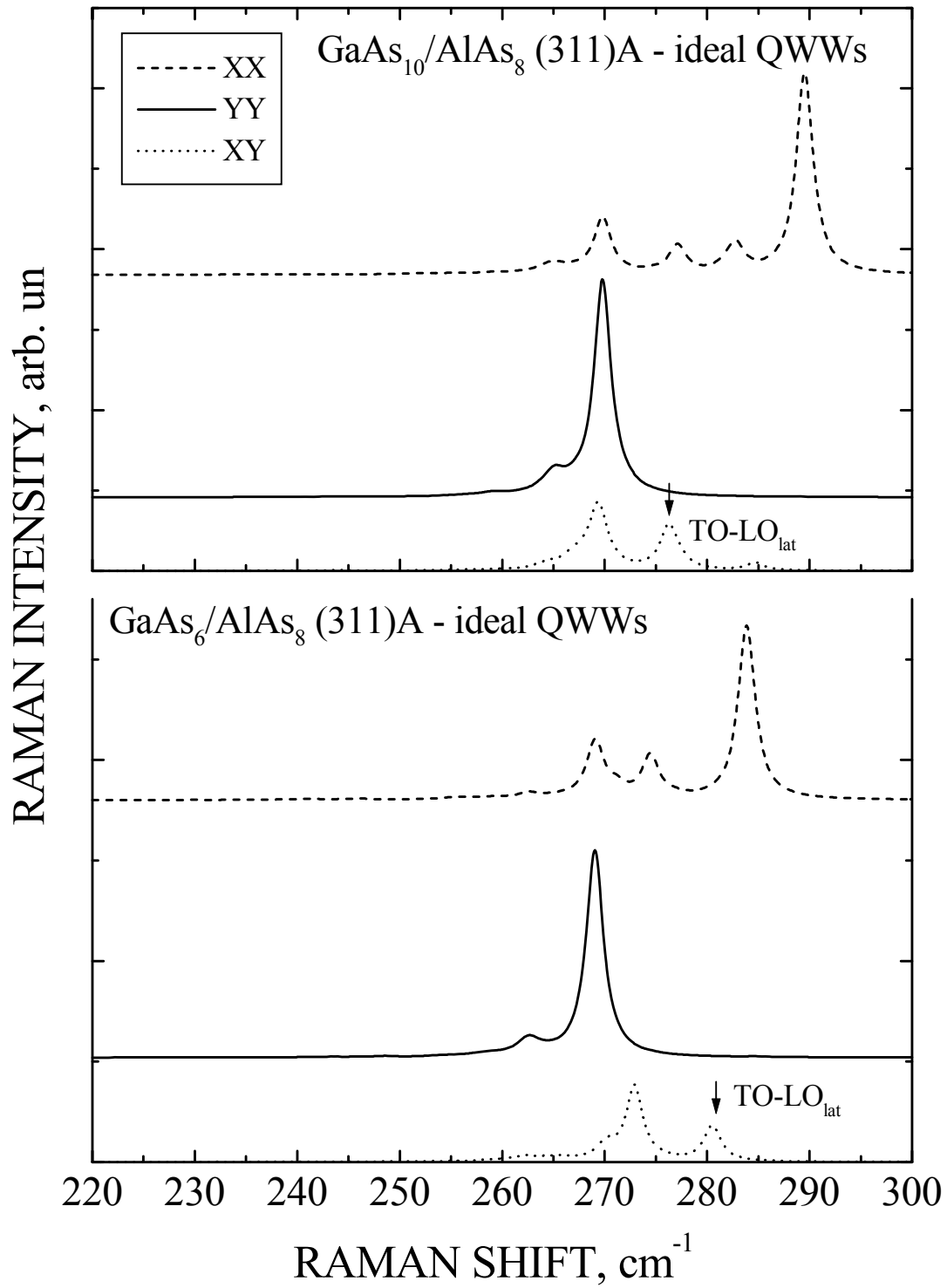


Рис. 3.13 Рассчитанные спектры КРС для идеальной квантовой проволоки GaAs.

промоделированы различные дефекты:

1) Дефект, моделирующий размытость части гетерограницы, изображен на рисунке 3.12. Этому дефекту соответствует спектр КРС, изображенный на рисунке 3.14, из которого видно, что реально заметным остается один пик. Такой результат расчета соответствует экспериментальным данным, но описанное ранее расщепление в этом случае имеет противоположное наблюдаемому в эксперименте значение.

2) На рисунке 3.15А приведены рассчитанные спектры КРС для структуры  $\text{GaAs}_{10}/\text{AlAs}_8$ , в которой моделировалась неравномерность толщины проволоки в направлении  $[\bar{2}33]$ . Моделирование неравномерности толщины производилось следующим образом: строилась расширенная ячейка, которая содержала 4 слоя в направлении  $[\bar{2}33]$ , каждый из слоев заполнялся GaAs разной толщины согласно модели корrugации так, чтобы средняя толщина всех слоев равнялась 6. В этом случае пик (линия точками рис. 3.15А) в области  $280 \text{ см}^{-1}$  практически исчезает, но расщепление остается противоположным наблюдаемому экспериментально. Производилось моделирование и с большей длиной периода – 5-6 слоев в направлении  $[\bar{2}33]$ , но вид этих спектров КРС примерно соответствовал показанному на рисунке 3.15А. 3) На рисунке 3.15В приведен спектр КРС структуры с дефектом, изображенным на рисунке 3.16. Как видно из рисунка, в этом случае расщепления практически нет, что так же не соответствует эксперименту.

После проведения около 100 численных экспериментов с разными модификациями дефектов структуры, были сделаны выводы: а) некоторые дефекты так модифицируют векторы поляризации атомных смещений, что интенсивность пика в районе  $280 \text{ см}^{-1}$  (рис. 3.13), характерная для идеальной квантовой проволоки, исчезает; б) наблюдаемое в эксперименте расщепление поперечных мод не удается воспроизвести с помощью дефектов.

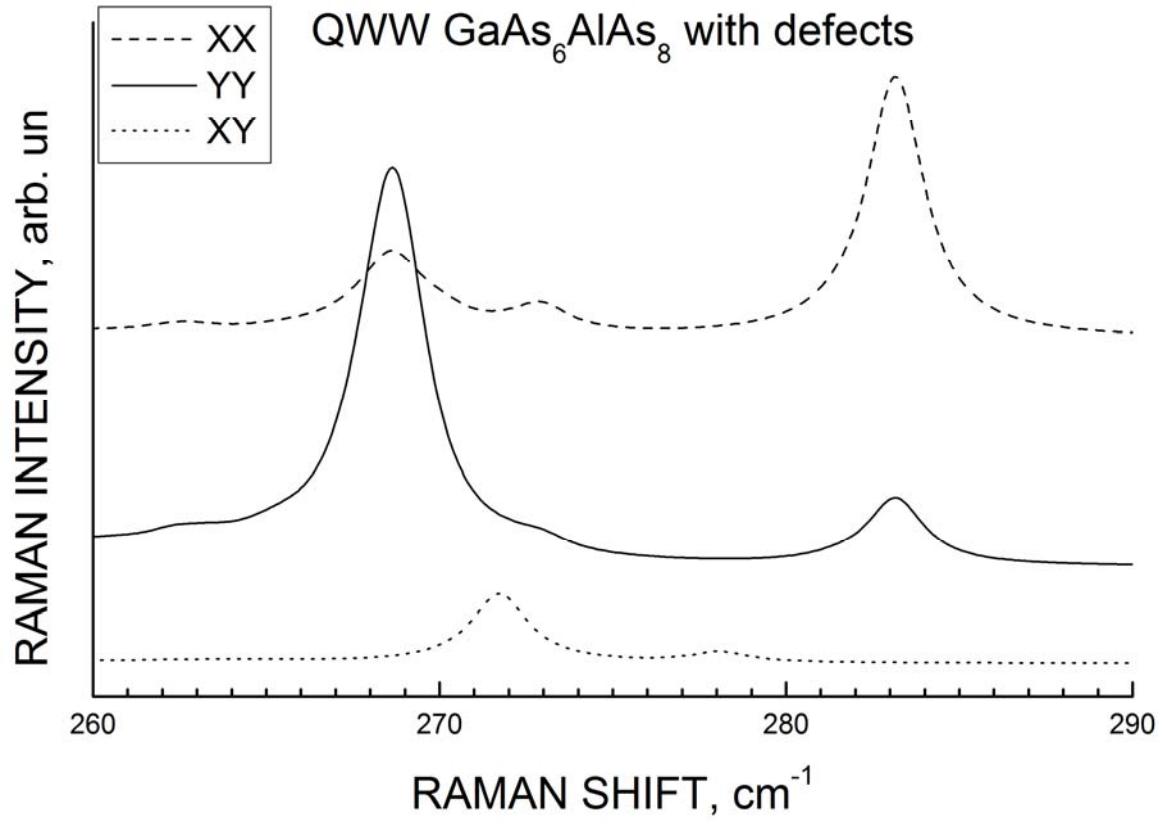


Рис. 3.14. Рассчитанные спектры КРС квантовой проволоки GaAs с размытой границей.

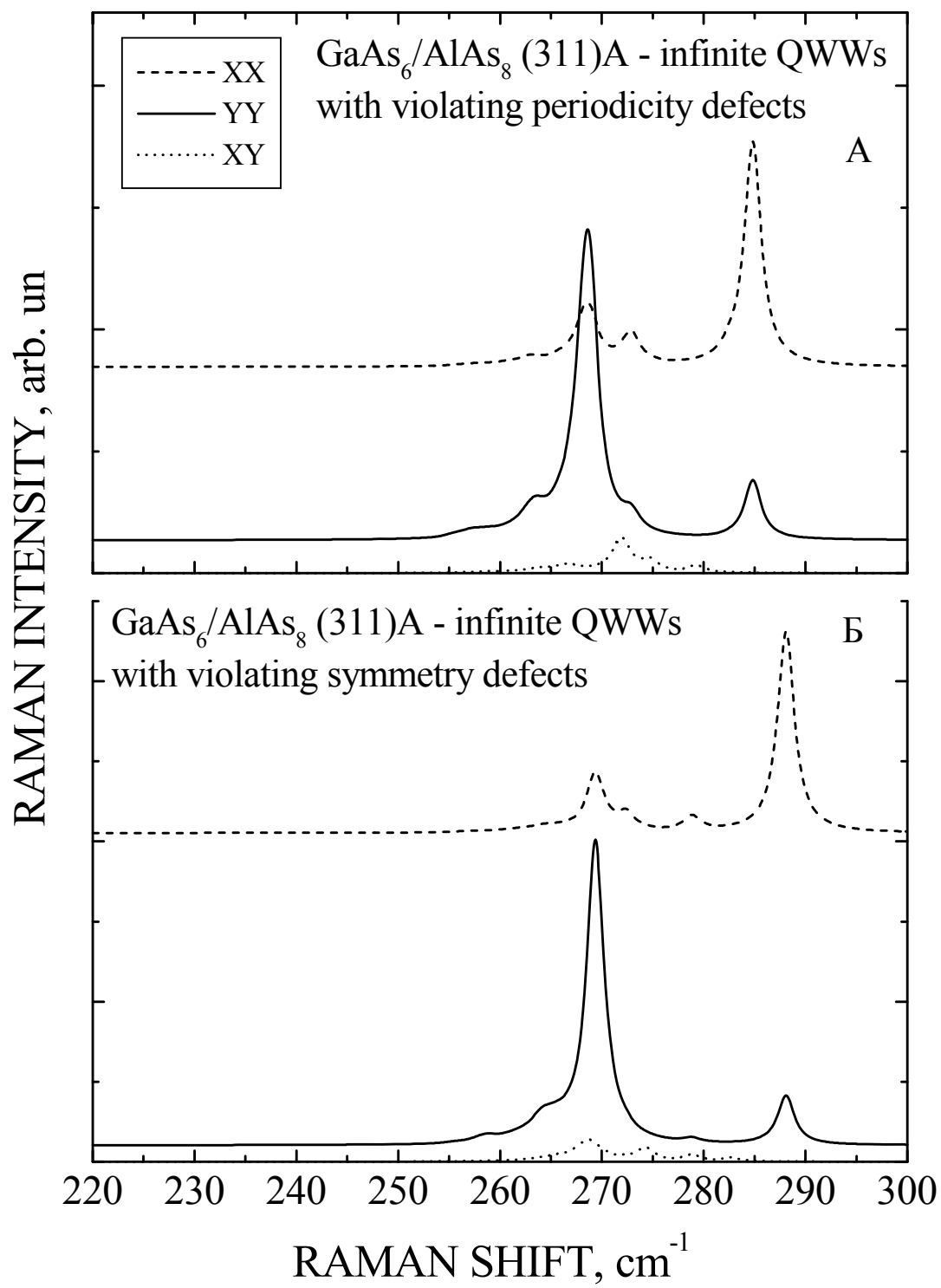


Рис. 3.15. Рассчитанные спектры КРС для квантовой проволоки GaAs с дефектами.

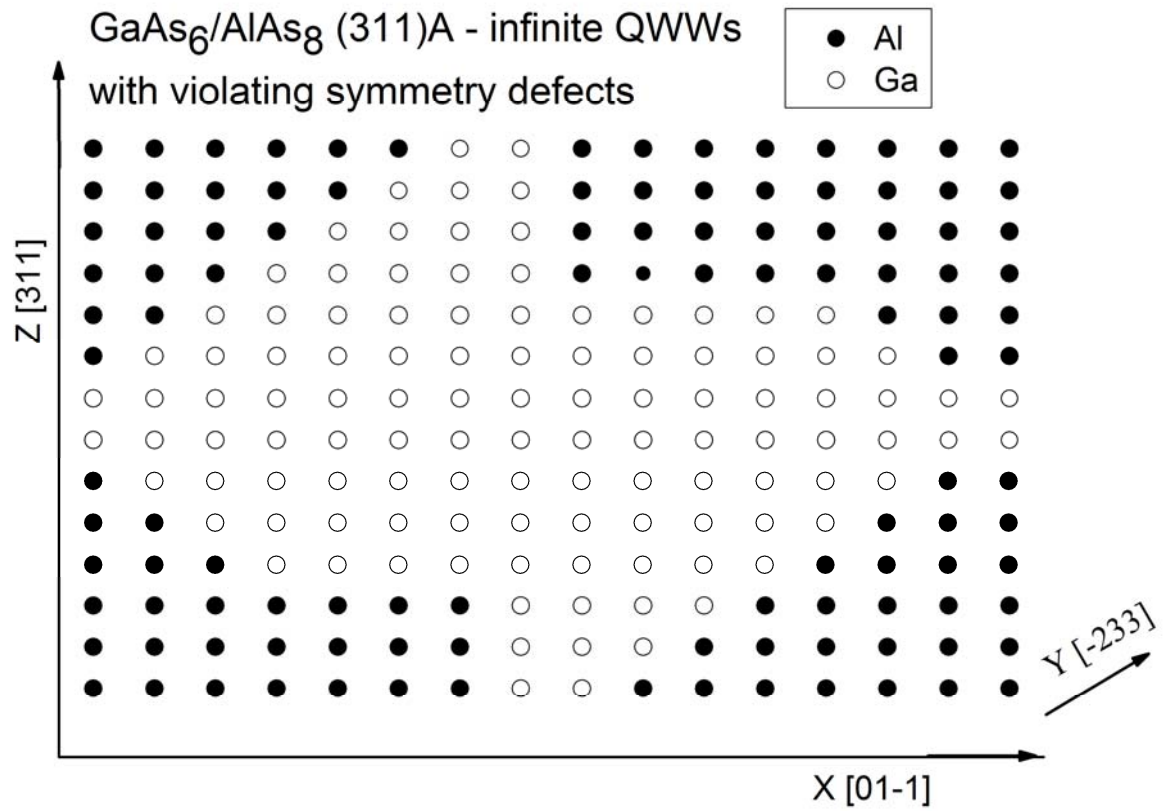


Рис. 3.16. Элементарная ячейка квантовой проволоки GaAs с дефектом структуры, в которой нарушается изоляция слоев GaAs. Темными кружками показаны атомы Al, светлыми – атомы Ga, атомы As не показаны, чтобы не усложнять картину.

Следующим было предположение о том, что в реальных образцах квантовые проволоки имеют конечную длину. Был проведен ряд численных экспериментов, в которых, кроме учета дефектов гетерограницы, моделировалась длина проволоки. На рисунке 3.17 представлены результаты (А – без дефектов, Б– с дефектами). Как видно из рисунка 3.17 Б, ограничение длины с учетом неидеальности гетерограницы дает хорошее согласие с экспериментальным спектром. В работе [117] методом просвечивающей электронной микроскопии с высоким разрешением вывод о конечности длины квантовой проволоки в исследуемых образцах был подтвержден.

#### Выводы:

1. Наблюдаемое в эксперименте расщепление  $TO_{1y}$  и  $TO_{1x}$  мод в латеральных сверхрешетках, выращенных на фасетированной поверхности GaAs (311)A, связано с различным направлением атомных смещений (вдоль либо поперек микрофасеток на поверхности (311)A) и обусловлено влиянием структурной анизотропии в латеральных сверхрешетках GaAs/AlAs (311)A, а именно, формированием на данной поверхности периодического массива квантовых проволок ограниченной длины.
2. С помощью численного эксперимента установлено, что расщепление TO фононов в квантовых проволоках GaAs с ориентацией (311)A в рамках имеющихся в литературе модели корrugации возможно при условии ограничения длины квантовых проволок. Это расщепление может служить характеризующим фактором для определения линейного размера реального объекта вдоль направления  $[\bar{2}33]$ . Для исследуемых образцов характерная длина составляла 4 нм.
3. Влияние корrugации гетерограниц на частоты фононов, локализованных в квантовых объектах существенно, если средняя толщина этих объектов равна, либо меньше масштаба корrugации.

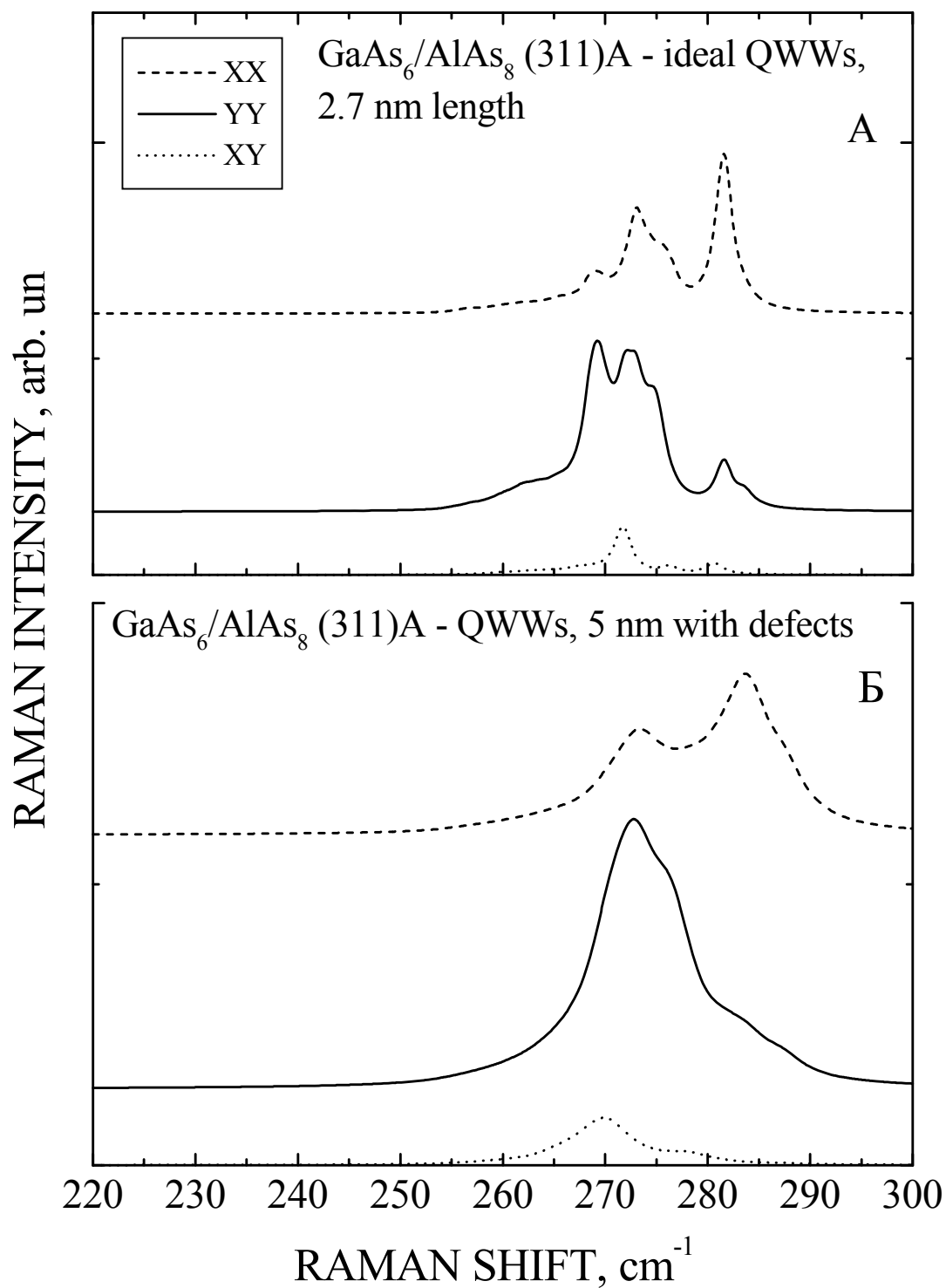


Рис. 3.17. Рассчитанные спектры КРС спектры КРС для квантовой проволоки GaAs ограниченной длины.

#### **ГЛАВА 4. ДЕЛОКАЛИЗАЦИЯ ФОНОН-ПЛАЗМОННЫХ МОД В СВЕРХРЕШЁТКАХ GaAs/AlAs С ТУННЕЛЬНО-ТОНКИМИ БАРЬЕРАМИ AlAs.**

Эффекты взаимодействия фононов с другими квазичастицами в твёрдых телах привлекают внимание исследователей на протяжении многих лет [118, 119]. В структуре металл-окисел-кремний р-типа при инверсии носителей заряда в тонком приповерхностном слое в спектрах КРС был обнаружен пик от двумерного (2D) плазмона [120]. В теоретических работах методом самосогласованного поля были рассчитаны дисперсии 2D-плазмонов в одиночной квантовой яме [121] и в периодических массивах 2D слоёв электронного газа [122]. Экспериментальные работы по исследованию фонон-плазмонного взаимодействия методом спектроскопии КРС были выполнены либо для гетероструктур GaAs-(AlGa)As с одиночными квантовыми ямами, либо для достаточно толстых сверхрешёток (СР) с толщиной AlAs- барьеров 250 ангстрем и выше [123].

До настоящего времени появляются теоретические работы, посвящённые расчётам плазменных колебаний в сверхрешётках [124-126]. Однако процессы фонон-плазмонного взаимодействия в туннельно-тонких сверхрешётках, а также в системах со сложным фононным спектром практически не исследованы. В работе [127] авторами наблюдалось проявление эффекта делокализации электронов в спектрах КРС фонон-плазмонных мод в СР GaAs/AlAs при уменьшении толщины слоёв GaAs и, соответственно, выталкивания уровня электронов из ям. Необходимым представляется исследование фонон-плазмонного взаимодействия в СР GaAs/AlAs при переходе от отдельных (связанных только кулоновским взаимодействием) периодических слоёв 2D электронного газа к туннельно-связанным слоям, чему и посвящена данная глава.



### Экспериментальные данные.

Набор нелегированных и легированных СР GaAs/AlAs был изготовлен с применением метода молекулярно лучевой эпитаксии на подложке GaAs с ориентацией (001). Толщина слоёв AlAs менялась от половины монослоя до 17 монослоёв, толщина слоёв GaAs – от 5 до 25 монослоёв. Рост осуществлялся при температуре подложки 550°C в условиях структурной перестройки типа (2x4) для поверхностей как GaAs, так и AlAs, что контролировалось с использованием метода дифракции быстрых электронов. Некоторые СР были однородно легированы кремнием, концентрация кремния составляла  $2.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , что, по оценкам, при комнатной температуре даёт объёмную концентрацию электронов  $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Все СР были покрыты защитным слоем GaAs толщиной 50 ангстрем. Спектр фононов и смешанных фонон-плазмонных мод исследовался с помощью спектроскопии КРС. Спектры КРС регистрировались при комнатной температуре и при температуре 77К в геометрии квазиобратного рассеяния на автоматизированном спектрометре на базе монохроматора ДФС-52, с использованием линий Ar лазера 514.5 нм (2.41эВ) и 488 нм (2.54эВ). Спектрометр оборудован охлаждаемым фотоэлектронным умножителем, работающем в режиме счёта фотонов. Все спектры регистрировались в Стоксовой области. Спектры КРС в акустической области регистрировались в условиях вакуума (давление 20 Паскалей) для того, чтобы избежать паразитных линий рассеяния на колебательных и вращательных модах газов, присутствующих в атмосфере.

#### §4.1. Определение механизма делокализации фонон-плазмонных мод в легированных гетероструктурах с тонким слоем AlAs.

На рисунке 4.1 представлены спектры КРС нелегированной и легированной СР GaAs<sub>17</sub>/AlAs<sub>17</sub> (50 периодов). В поляризационной геометрии  $Z(XY)\bar{Z}$  видны нечётные локализованные моды (в слое GaAs помещается нечётное количество полуволен), в

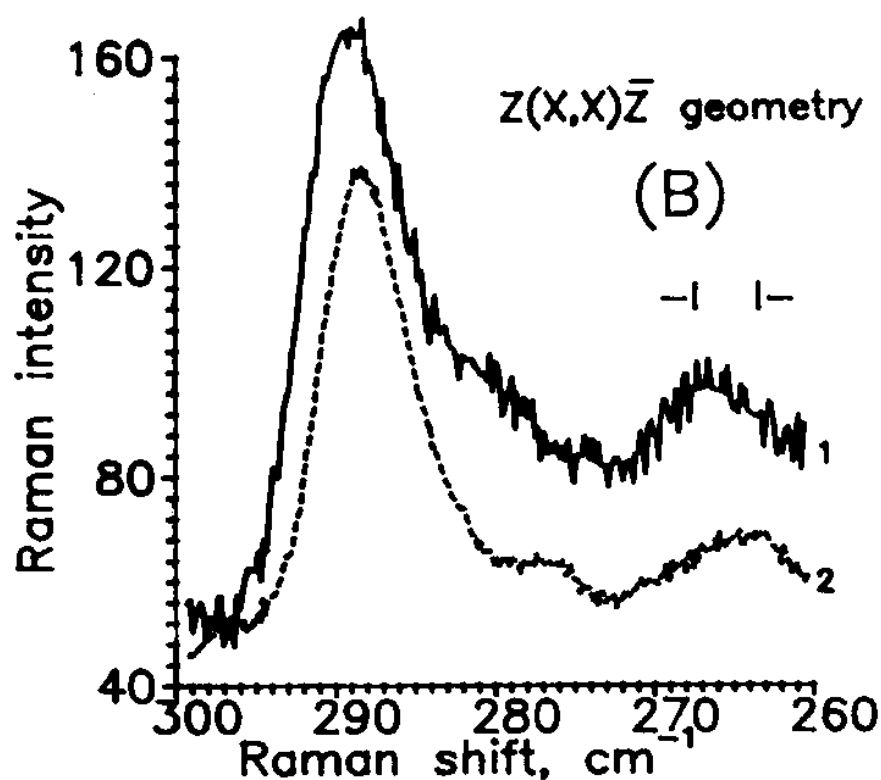
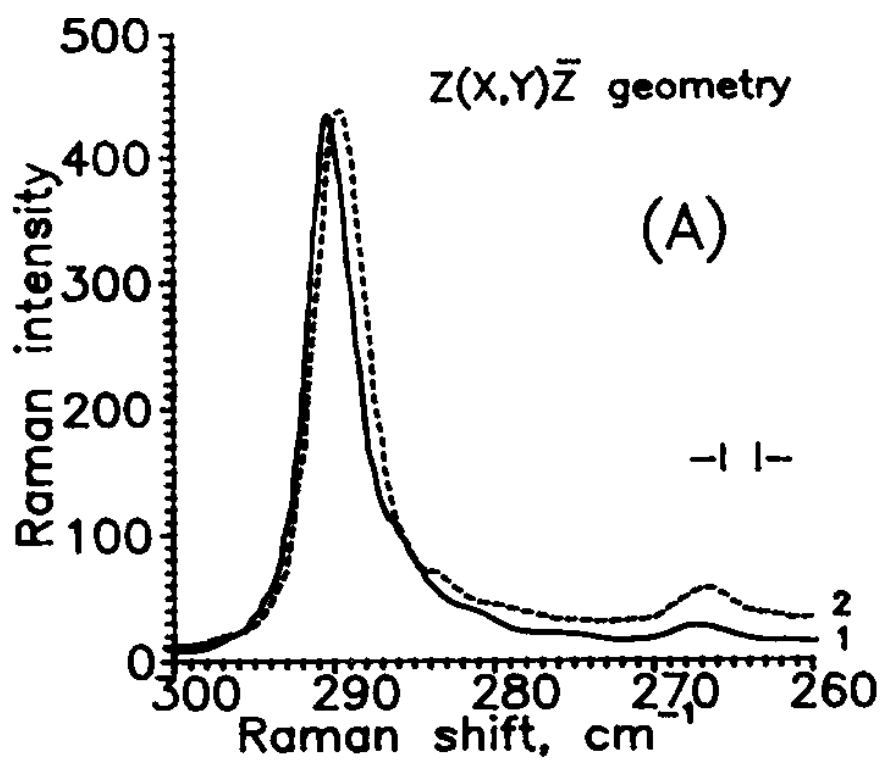


Рис. 4.1. Спектры КРС ( $T=300\text{K}$ ) нелегированной (непрерывная линия) и легированной (штриховая линия)  $\text{GaAs}_{17}/\text{AlAs}_{17}$  СР в различных поляризационных геометриях (оптический диапазон).

геометрии  $Z(XX)\bar{Z}$  видны чётные локализованные моды [1]. Оси X, Y и Z соответствуют кристаллографическим направлениям [100], [010] и [001] соответственно. Пик рассеяния на локализованных продольных оптических (LO) фононных модах имеет частоту  $291 \text{ см}^{-1}$ , что весьма близко к частоте LO фонона в объёмном GaAs. Видно, что легирование не приводит к заметному изменению спектра КРС, пики в легированной СР лишь немного сдвинуты в сторону меньших частот. Оценим, к чему привело бы фонон-плазмонное взаимодействие при том же уровне легирования в случае объёмного материала. Частота плазмона с волновым вектором, много меньшим волнового вектора Ферми, равна [119]:

$$\Omega_p^2 = \frac{4\pi N e^2}{m^* \cdot \epsilon_\infty}, \quad (4.1)$$

где  $N$  – объёмная концентрация носителей заряда,  $e$  – заряд электрона,  $m^*$  – эффективная масса,  $\epsilon_\infty$  – диэлектрическая проницаемость для частот, много больше фононных (но меньше оптических частот). Фермиевское волновое число для электронов в GaAs с концентрацией  $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  составляет  $3 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$ , тогда как максимально возможное (при рассеянии назад фотона с длиной волны 488 нм) волновое число квазичастицы составляет  $10^6 \text{ см}^{-1}$ . Известно, что поправка к частоте плазмона вследствие дисперсии пропорциональна

квадрату волнового числа  $q$ :  $\Omega_p^2(q) = \Omega_p^2(0) + \frac{3}{5} \cdot q^2 \cdot v_F^2$  [128]. Для данной концентрации

скорость Ферми  $v_F$  составляет  $5.4 \cdot 10^7 \text{ см/сек}$ , и поправка к плазменной частоте не превышает 5%. Тогда, с хорошей точностью, полная диэлектрическая проницаемость кристалла (с учётом вклада фононов и плазмонов) равна:

$$\epsilon_{total} = \epsilon_\infty \left( \frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2} \right) \quad (4.2)$$

Нули диэлектрической проницаемости соответствуют возникновению самопроизвольных колебаний. Тогда частоты связанных фонон-плазмонных мод (помечены плюсом и минусом) равны:

$$\omega_{L^+,L^-}^2 = \frac{1}{2} \left\{ \left( \Omega_p^2 + \omega_{LO}^2 \right) \pm \left[ \left( \Omega_p^2 + \omega_{LO}^2 \right)^2 - 4\Omega_p^2 \omega_{TO}^2 \right]^{1/2} \right\} \quad (4.3)$$

На рисунке 4.2 представлена рассчитанная по формуле 4.3 зависимость частот фонон-плазмонных мод от концентрации электронов в объёмном GaAs. Видно, что при концентрации электронов от приблизительно  $2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  и выше фонон-плазмонное взаимодействия становится существенным, невозможно выделить «чистые» фононные или плазменные моды. В спектрах КРС должны наблюдаться  $L^+$  моды с частотами, значительно большими частот LO фононов, и  $L^-$  моды с частотами, несколько меньшими частот поперечных оптических (ТО) фононов. Ничего подобного не наблюдается в эксперименте (рис. 4.1, область частот  $L^-$  моды). В области высоких частот также не наблюдалось пика от рассеяния на  $L^+$  моде. Естественно предположить, что это обусловлено изменением энергетического спектра электронов в СР. По оценкам, исходя из модели Кронига-Пенни и в приближения эффективных масс, уже при ширине GaAs ямы 250 ангстрем (барьеры из AlAs) разница между нулевым и первым уровнями квантования составляет 0.026 мэВ (комнатная температура в энергетических единицах). В случае GaAs ям шириной 50 ангстрем (разделены AlAs-барьерами в 50 ангстрем) все свободные электроны (поверхностная концентрация  $N_s = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ) находятся на нулевом уровне с волновым вектором Ферми в плоскости  $3.5 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$ . В подобной структуре возможно возникновение коллективных колебаний периодических плоскостей 2D электронного газа (2D-плазмонов) с частотами, лежащими в акустической области [123].

В системе M периодических слоёв 2D электронного газа, связанных кулоновским

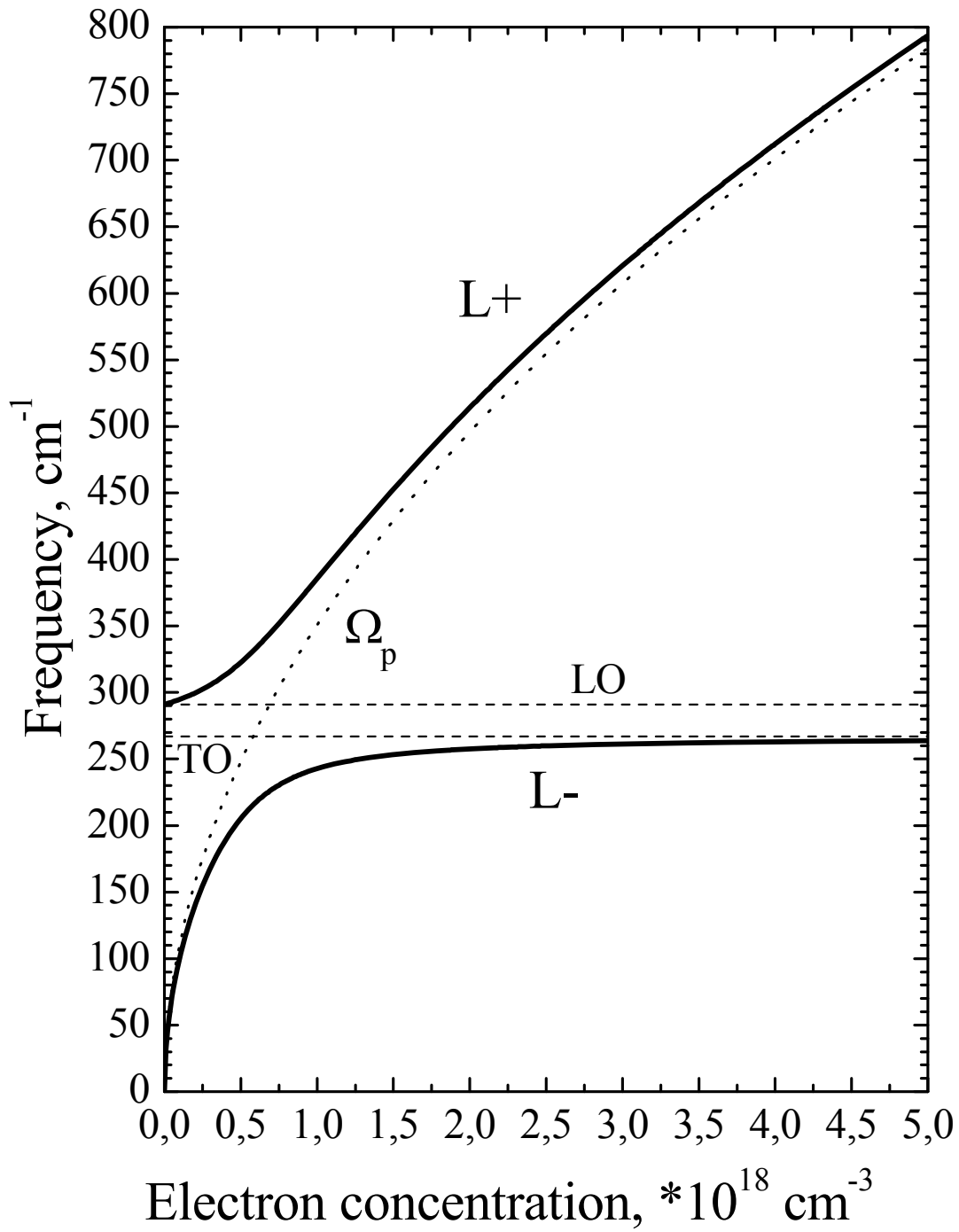


Рис. 4.2. Рассчитанные частоты смешанных L- и L+ мод и плазменной частоты от концентрации электронов для объёмного GaAs.

взаимодействием, возникает  $M$  плазменных мод, из которых  $(M-1)$  – затухающие [122].

Известно, что дисперсия незатухающей моды такова, что при нулевой проекции волнового вектора на плоскость частота её стремится к нулю [122]:

$$\omega_{2Dplasm} = \left( \frac{2\pi \cdot N_s \cdot e^2}{\varepsilon_M \cdot m^*} \cdot k_{II} \cdot \frac{\sinh(k_{II}d)}{\cosh(k_{II}d) - \cos(k_{\perp}d)} \right)^{1/2} \quad (4.4)$$

где  $\varepsilon_M$  – диэлектрическая проницаемость среды, окружающей 2D электронный газ (в нашем случае – эффективная диэлектрическая проницаемость для СР),  $d$  – период СР,  $k_{\perp}$  – компонента волнового вектора, перпендикулярная СР,  $k_{II}$  – компонента волнового вектора, параллельная плоскости 2D электронного газа (“in plain vector”). Таким образом, для обнаружения 2D плазмона необходима геометрия рассеяния, при которой фотон передаёт часть импульса параллельно СР. Была применена геометрия рассеяния, в котором угол между волновыми векторами падающего и рассеянного фотонов составлял  $90^\circ$ . В такой геометрии, если угол падения равен  $\theta$ , передаваемый “in plain” волновой вектор равен [123]:

$$k_{II} = \frac{2\pi}{\lambda} (\sin \theta - \cos \theta) \quad (4.5)$$

В нашем случае для длины волны 488 нм и угла падения  $68^\circ$  данная компонента волнового вектора составляет  $7.1 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ .

$$k_{\perp} = \frac{2 \cdot 2\pi \cdot n}{\lambda} \cdot \cos \theta' \quad (4.6)$$

где  $n$  – показатель преломления СР,  $\theta'$  – угол преломления. Так как показатель преломления СР довольно большой (около 4), а угол преломления мал, то перпендикулярная составляющая волнового вектора равна  $10^6 \text{ см}^{-1}$ .

На рисунке 4.3 представлены спектры КРС нелегированной и легированной СР

GaAs<sub>17</sub>/AlAs<sub>17</sub> в акустической области частот. Спектры зарегистрированы при комнатной температуре в геометрии, описанной выше. В спектре нелегированной СР виден дублет вследствие рассеяния на свёрнутых (“folded”) продольных акустических (LA) мод. Явление свертки акустических фононов в СР изучено достаточно хорошо [1]. Положение дублета хорошо соответствует значению, рассчитанному в рамках модели, детали которой будут описаны ниже. Некоторые особенности в спектре нелегированной СР в районе 60 см<sup>-1</sup> могут быть связаны с рассеянием на свёрнутых модах более высокого (третьего) порядка. В спектрах легированной СР, помимо некоторого сдвига дублета в область меньших частот, ясно наблюдается пик с положением примерно 33 см<sup>-1</sup>.

Рассчитаем частоту 2D плазмона, используя результаты работы [122]. Поскольку для периода в 100 ангстрем  $k_{\perp} \cdot d = 1$ , то для данной СР справедливо приближение плоскостей электронного газа, связанных кулоновским взаимодействием. Гетероструктуру можно рассматривать как набор несвязанных кулоновским взаимодействием квантовых ям в случае  $k_{\perp} \cdot d \gg 1$  [122]. В этом случае 2D плазмоны различных плоскостей не взаимодействуют друг с другом, их частота не зависит от  $k_{\perp}$ , а от  $k_{\parallel}$  зависит коренным образом [121]. Так как в нашем случае  $k_{\parallel} \cdot d \ll 1$ , формулу 4.4 можно упростить [122,123]:

$$\omega_{2Dplasm} = k_{\parallel} \left( \frac{2\pi \cdot N_s \cdot e^2}{\epsilon_M \cdot m^*} \cdot \frac{d}{1 - \cos(k_{\perp} d)} \right)^{1/2} \quad (4.7)$$

Тогда рассчитанная частота 2D плазмона составляет 35 см<sup>-1</sup>, что соответствует экспериментально наблюдаемому значению. При варьировании угла падения частота плазмона также смещается, этот эффект наблюдался экспериментально в работе [123]. Наблюдаемое смещение LA1 дублета в легированной СР может быть вследствие

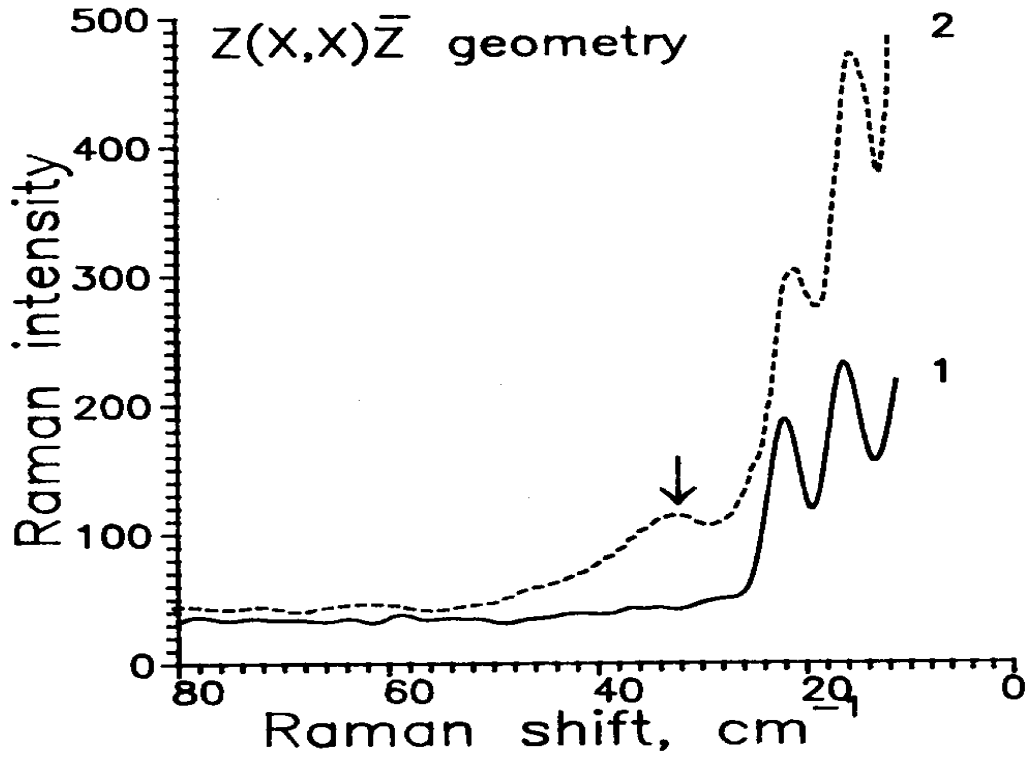


Рис. 4.3. Спектры КРС ( $T=300\text{K}$ ) нелегированной (непрерывная линия) и легированной (штриховая линия)  $\text{GaAs}_{17}/\text{AlAs}_{17}$  СР (акустический диапазон). Стрелкой показана рассчитанная частота 2D плазмона.

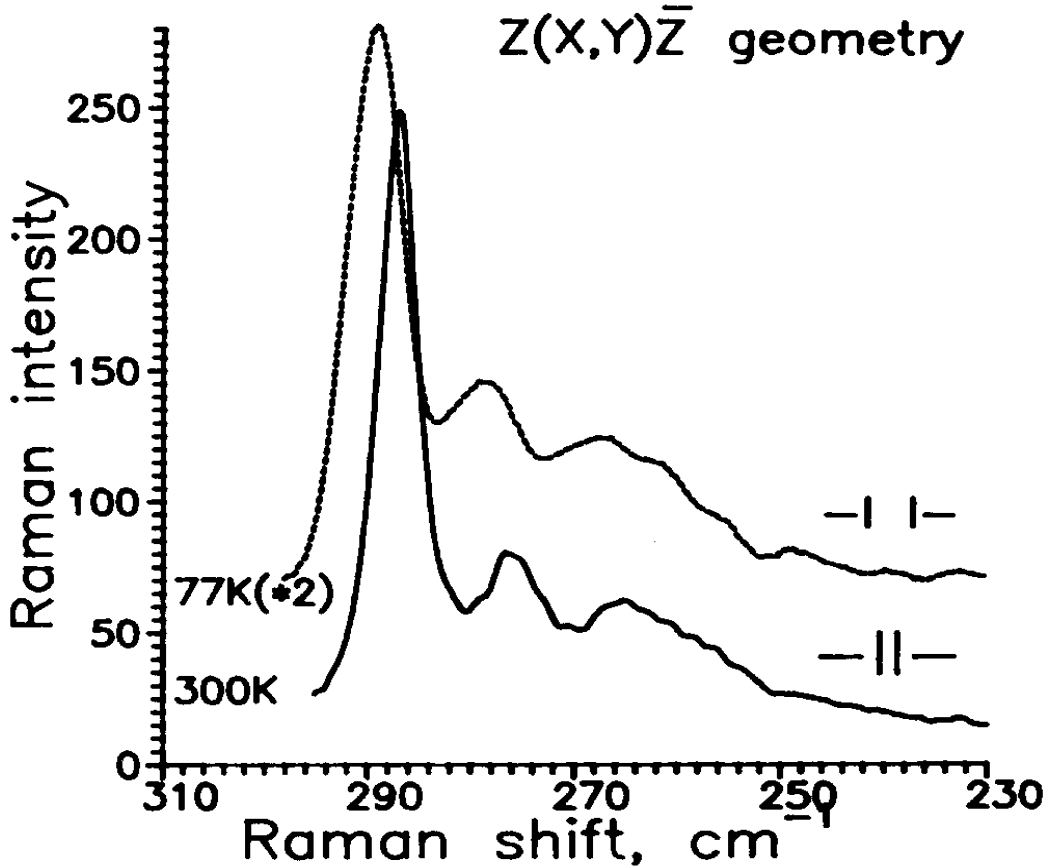


Рис. 4.4. Спектры КРС легированной  $\text{GaAs}_5/\text{AlAs}_5$  СР (оптический диапазон).



взаимодействия свёрнутых LA фононов с 2D плазмонами. Плазмоны экранируют кулоновское взаимодействие катионов и анионов, изменяя частоту колебаний. Подобное явление не наблюдалось ранее, так как исследовались СР с периодом примерно на порядок большим [123], и, соответственно, свёрнутые моды не могли быть разрешены.

На рисунке 4.4 представлены спектры легированной GaAs<sub>5</sub>/AlAs<sub>5</sub> (001) СР (100 периодов) в области частот оптических колебаний GaAs. Уровень легирования СР в пересчёте на объёмную концентрацию составлял  $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . По оценкам модели Кронига-Пенни, ширина минизоны составляет примерно 100 мэВ, и туннелирование в данной СР уже существенно. В спектрах КРС доминирует пик от рассеяния на первой локализованной продольной оптической моде (LO1). Виден также пик от рассеяния на локализованной моде третьего порядка (положение примерно  $276 \text{ см}^{-1}$  при комнатной температуре). Виден сдвиг пиков в сторону больших частот при понижении температуры образца вследствие ангармонизма колебаний. Наличие локализованных мод (вплоть до 5-ого и 7-ого порядков) характерно для нелегированных СР [1]. Нехарактерным является наличие достаточно интенсивного и широкого пика в районе  $267 \text{ см}^{-1}$ .

Для геометрии квазиобратного рассеяния от поверхности (001) кристалла с решёткой типа цинковой обманки тензоры КРС следующие:

$$\text{LO-} \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \text{TO}_x\text{-} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{pmatrix}; \text{TO}_y\text{-} \begin{pmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Поперечные оптические моды  $\text{TO}_x$  и  $\text{TO}_y$  соответствуют смещениям атомов вдоль осей X [ $100$ ] и Y [ $010$ ]. Согласно правилам отбора, LO моды проявляются в геометрии  $Z(XY)\bar{Z}$ , а обе TO моды запрещены в любой геометрии, так как вектор напряжённости электрического поля лежит (при строго обратном рассеянии) в плоскости XY. Вследствие некоторого отклонения геометрии от идеально обратного рассеяния, а также вследствие нарушения

симметрии (механические напряжения, дефекты), ТО моды также проявляются в спектрах объемного GaAs и в спектрах СР GaAs/AlAs (смотри например рисунок 4.1), но их интенсивность в 30 раз меньше интенсивности LO мод. В легированной СР с барьерами и ямами в 5 монослоёв (рис. 4.4) интегральная интенсивность пика с максимумом  $267 \text{ см}^{-1}$  сравнима с интенсивностью пика от LO1 моды. Предположительно это связано с проявлением фонон-плазмонного взаимодействия. В данном случае туннельно-тонкой СР не работает ни «объёмная» модель, ни «двумерная» модель, учитывающая образование 2D плазмонов. Подход для расчёта фонон-плазмонного взаимодействия в гетероструктурах со сложным фононным спектром развит в [129,130] и будет изложен ниже.

Рассмотрим СР с ультратонким AlAs барьерами, в которых эффекты туннелирования электронов играют определяющую роль. Была исследована GaAs<sub>25</sub>/AlAs<sub>2</sub> СР (50 периодов), легированная кремнием с той же концентрацией, что и ранее исследованные СР. Спектр КРС данной СР в области частот оптических колебаний GaAs представлен на рисунке 4.5. Для сравнения также приведён спектр объемного полуизолирующего GaAs. В спектре легированной СР видна интенсивная фонон-плазмонная  $L^-$  мода. Пик с максимумом в районе  $290 \text{ см}^{-1}$ , по-видимому, обусловлен вкладом от нелегированного защитного слоя GaAs. Данная СР была также исследована в области частот  $L^+$  моды (рис. 4.6). Обнаружен широкий пик с максимумом примерно  $750 \text{ см}^{-1}$ . Если предположить, что электронный спектр СР близок к электронному, то оцененная из формулы 4.3 и графика на рисунке 4.2 концентрация электронов должна составлять  $4-4.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Для более точной оценки необходим расчёт с учётом неравенства нулю волнового вектора, непараболичности долин, реального электронного спектра, влияния оптических фононов локализованных в слоях AlAs.

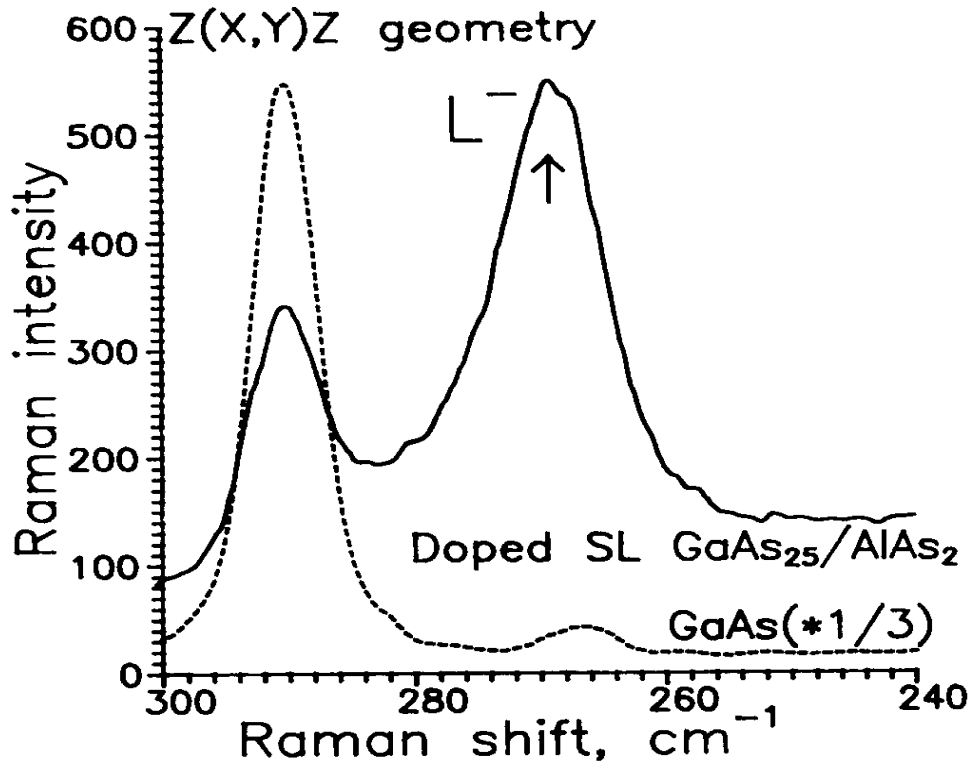


Рис. 4.5. Спектры КРС (T=300K) легированной (непрерывная линия) GaAs<sub>25</sub>/AlAs<sub>2</sub> CP и объемного GaAs (штриховая линия).

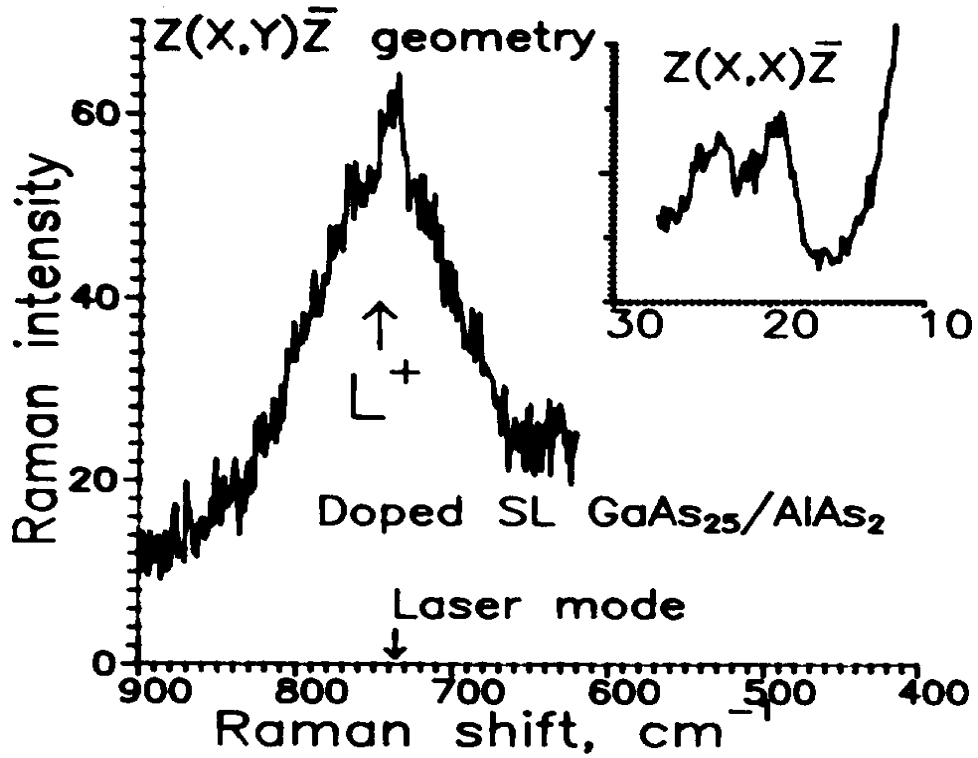


Рис. 4.6. Спектр КРС (T=300K) легированной GaAs<sub>25</sub>/AlAs<sub>2</sub> CP в диапазоне частот L+ моды. На вставке – спектр того же образца в акустической области.

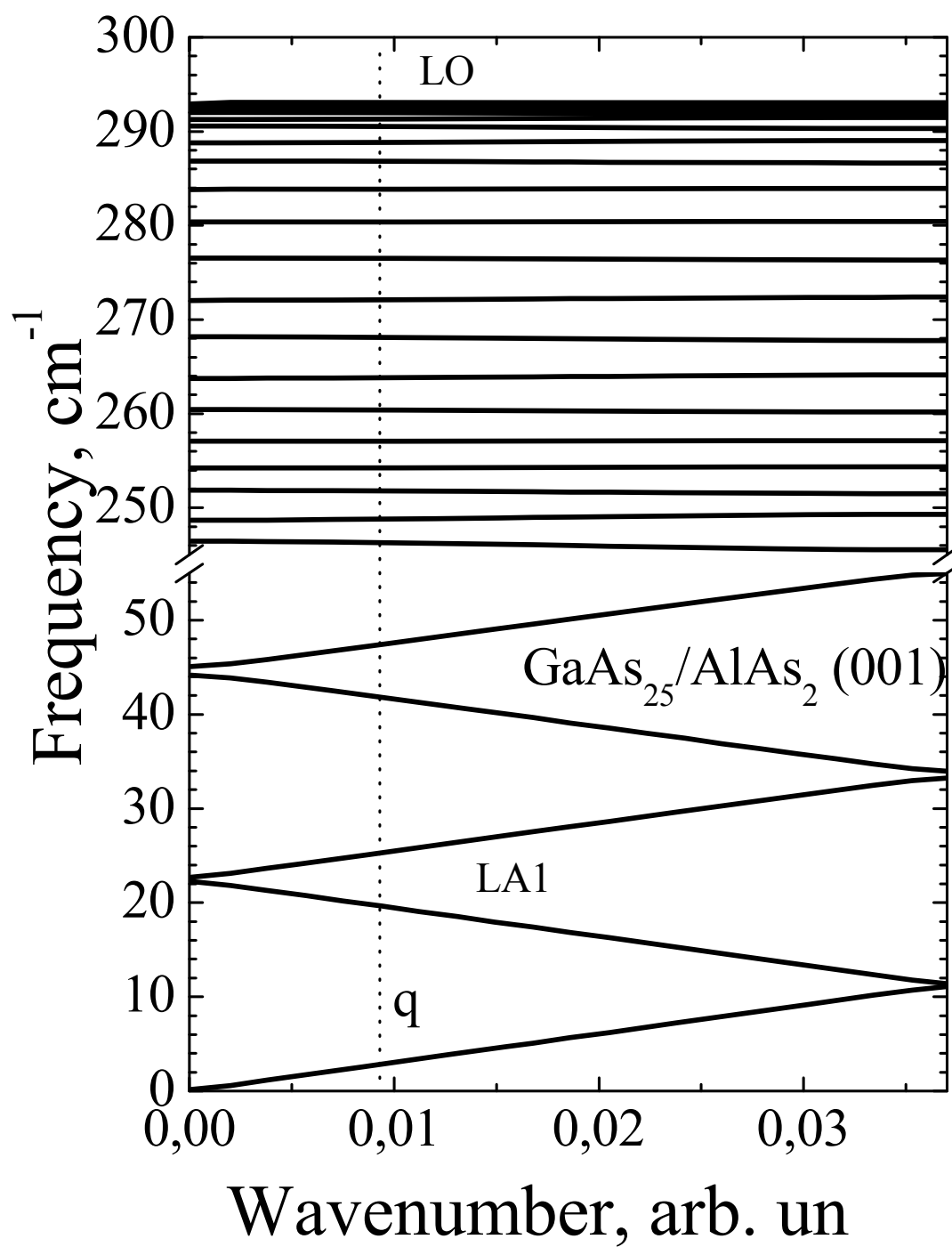


Рис. 4.7. Рассчитанная дисперсия фононов в GaAs<sub>25</sub>/AlAs<sub>2</sub> СР.

Чтобы убедиться в том, что исследованная структура представляла СР с хорошей периодичностью, был зарегистрирован спектр КРС в акустической области (вставка к рисунку 4.6). На спектре виден дублет от свёрнутой моды первого порядка – LA1. Для точного определения периода СР было проведено численное моделирование фононного спектра. На рисунке 4.7 представлена дисперсия акустических и оптических мод в направлении роста СР. Линией показан волновой вектор, передаваемый фотону при обратном рассеянии. Из сравнения рассчитанных (рис. 4.7) и экспериментальных (вставка к рис. 4.6) данных о положении LA1 дублета видно очень хорошее их соответствие. Таким образом, исследуемая структура имеет хорошую периодичность, однако фонон-плазмонные моды в ней делокализованы. Интересно, что играет большую роль в делокализации – туннельная прозрачность AlAs-барьеров для электронов или их прозрачность для оптических фононов GaAs-типа. Для исследования данного вопроса был проведён следующий эксперимент.

Для того чтобы выяснить, какой толщины слоя AlAs достаточно для эффективного затухания оптических колебаний GaAs-типа, были выращены и исследованы нелегированные GaAs<sub>8</sub>/AlAs<sub>m</sub> (001) СР. Каждая СР содержала 100 периодов, а толщина AlAs (в монослоях) варьировалась и составляла 8, 2, 1, и 0.5 (всего 4 образца). На рисунке 4.8 приведены спектры КРС этих СР в области частот оптических колебаний GaAs- и AlAs-типа. В области частот оптических колебаний AlAs-типа в спектрах СР, содержащих AlAs толщиной в 8, 2 и 1 монослой, присутствуют пики, обусловленные рассеянием на LO (380 – 400 см<sup>-1</sup>) и TO (360 см<sup>-1</sup>) локализованных модах, а также широкий пик между TO и LO модами, который соответствует рассеянию на интерфейсных модах. При уменьшении толщины AlAs видно смещение пиков в сторону меньших частот. В спектре СР, содержащей половину монослоя AlAs, видны локальные колебания Al в матрице GaAs. В области

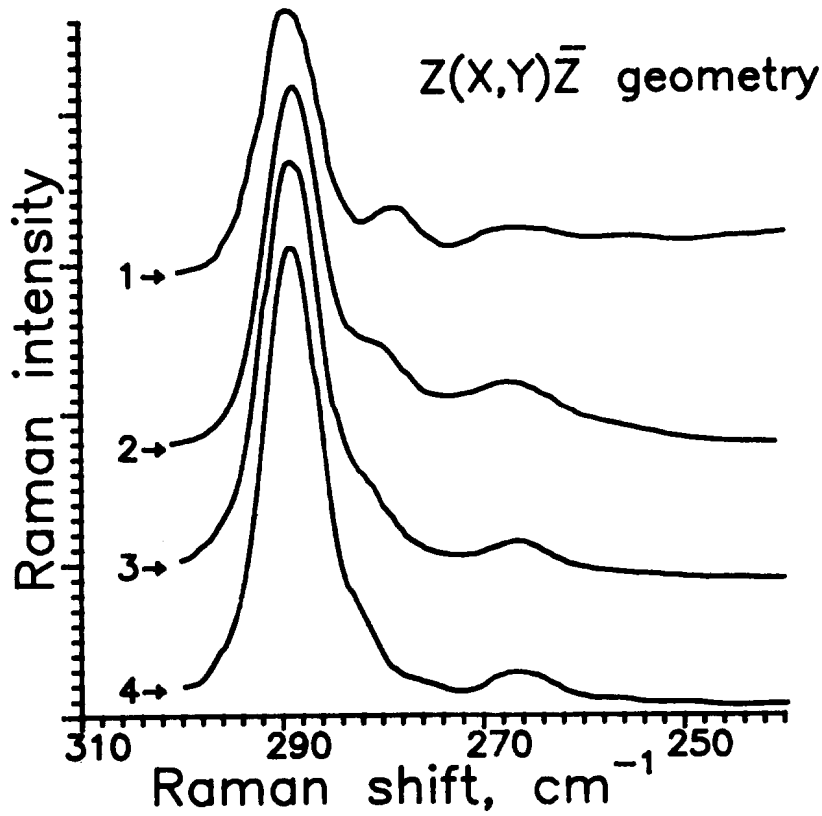


Рис. 4.8. Спектры КРС ( $T=300\text{K}$ ) нелегированных  $\text{GaAs}_8/\text{AlAs}_m$  СП.

1 –  $m=8$ ; 2 –  $m=2$ ; 3 –  $m=1$ ; 4 –  $m=0.5$ .

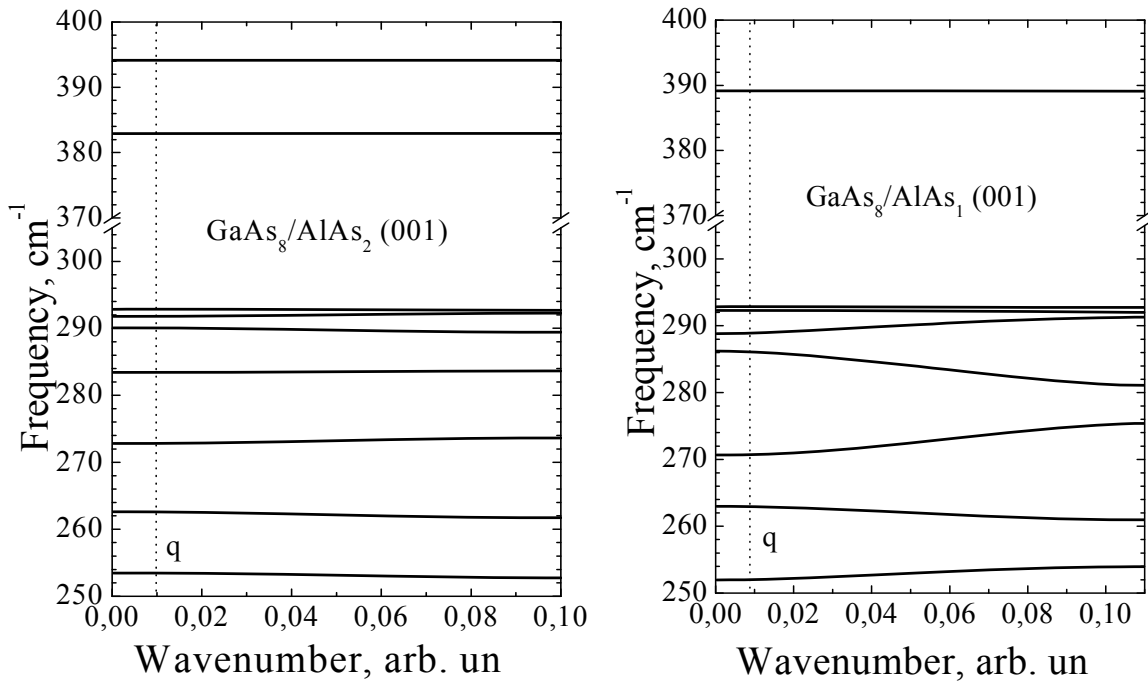


Рис. 4.9. Рассчитанные дисперсии оптических фононов в  $\text{GaAs}_8/\text{AlAs}_2$  и  $\text{GaAs}_8/\text{AlAs}_1$  СП.

оптических колебаний мод GaAs-типа также видны пики рассеяния на LO и TO модах. При этом в спектрах CP, содержащих AlAs толщиной в 8 и 2 монослоя, присутствуют пики, обусловленные рассеянием на локализованных LO модах более высокого порядка. В CP с тонкими слоями AlAs эти моды практически не проявляются, по-видимому, такой малой толщины уже не достаточно для локализации оптических фононов.

Необходимо внести некоторую терминологическую ясность, что понимается под локализованными и свёрнутыми фононами. Колебания с частотами LO мод GaAs типа (около  $290 \text{ см}^{-1}$ ) попадают в щель дисперсии между LO и LA фононами в AlAs и экспоненциально затухают вглубь слоя AlAs. Вообще говоря, несмотря на затухание, данный фонон является общим для всей CP, независимо от толщины барьера. Поэтому в первых работах по GaAs/AlAs CP подобные фононы также называли свёрнутыми, по аналогии с акустическими фононами [131]. Однако, если толщина барьера AlAs достаточно велика, частота оптических фононов GaAs типа практически не зависит от полного периода CP, а зависит только от толщины GaAs. При этом частоты таких фононов практически не зависят от волнового вектора, такие ветки бездисперсны. В этом случае говорят о локализованных (“confined”) модах [53].

Для того чтобы подтвердить, что оптические фононы GaAs-типа в CP, содержащих AlAs толщиной 2 монослоя, локализованы, а не свёрнуты, было проведено моделирование фононного спектра в модели, изложенной выше. Результаты моделирования представлены на рисунке 4.9. Видно, что оптические фононы GaAs типа практически бездисперсны для CP с барьерами в 2 монослоя AlAs, а в случае уменьшения толщины барьера до 1 монослоя их дисперсия уже существенна. Таким образом, и по результатам моделирования, и по результатам эксперимента, для локализации оптических фононов в слоях GaAs достаточно барьера AlAs в 2 монослоя. Значит, наблюдаемая делокализация смешанных фонон-плазмонных мод в легированной  $\text{Ga}_{25}/\text{AlAs}_2$  CP обусловлена туннельной прозрачностью

барьеров AlAs для свободных электронов [132].

Выводы:

1. В легированных CP GaAs<sub>17</sub>AlAs<sub>17</sub> электронный газ находится в двумерном состоянии.
2. Путем модельных расчетов акустических мод показана хорошая периодичность легированной CP GaAs<sub>25</sub>AlAs<sub>2</sub>.
3. В легированных CP GaAs<sub>25</sub>AlAs<sub>2</sub> происходит делокализация электрон-фононного взаимодействия.
4. Делокализация электрон-фононного взаимодействия обусловлена туннельной прозрачностью барьеров AlAs для свободных электронов.

§4.2. Влияние анизотропии эффективной массы на дисперсию фонон-плазмонных мод в CP GaAs/AlAs.

На рисунке 4.10 приведены спектры КР сверхрешеток в области частот оптических колебаний GaAs. Пик с положением  $291 \text{ см}^{-1}$ , проявляющийся для всех сверхрешеток, соответствует КР на продольных оптических (LO) фононах объемного GaAs подложки и защитного слоя. Рассмотрение фонон-плазмонного взаимодействия в сверхрешетках осложняется тем, что число фононных мод возрастает в силу увеличения элементарной ячейки, а фононные частоты уменьшаются с уменьшением толщины слоев вследствие локализации оптических фононов в слоях GaAs и AlAs. Частоты локализованных фононов могут быть получены из спектров КР нелегированных решеток, представленных на рисунке 4.10. Появление дополнительных пиков в образце 5 (рис. 4.10, спектр 5) обсуждалось в §3.1. В спектрах легированных сверхрешеток наблюдаются пики, соответствующие КР на смешанных фонон-плазмонных модах. Обозначим линии КР,



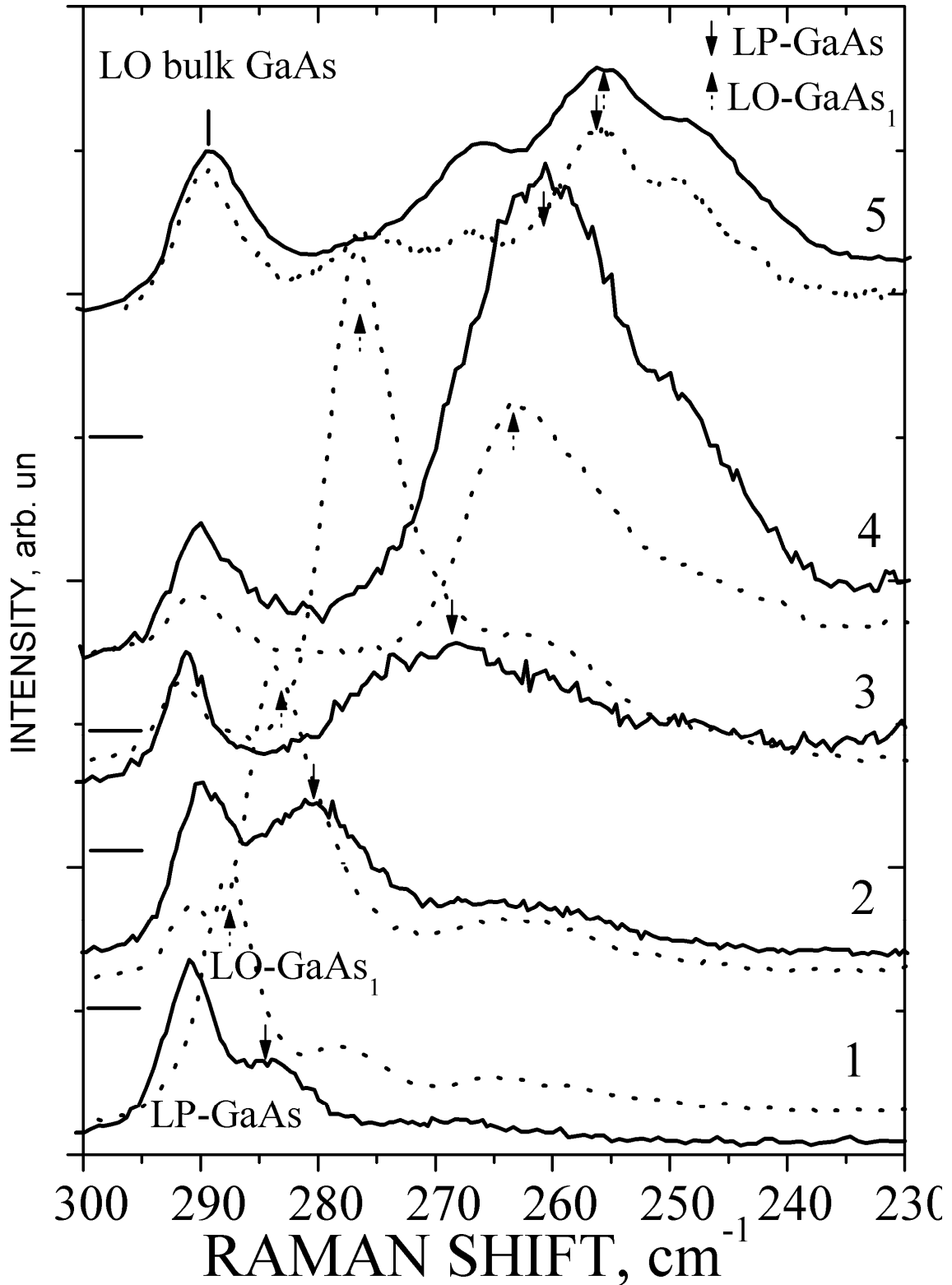


Рис 4.10. Спектры КРС сверхрешеток GaAs<sub>n</sub>/AlAs<sub>m</sub> (001) в области частот фононов GaAs типа,  $m=5$  монослоев,  $n = 6, 3.6, 2.4, 1.2, 0.6$  монослоя для образцов 1-5 соответственно (сплошная линия - легированные, точечная линия - нелегированные образцы).

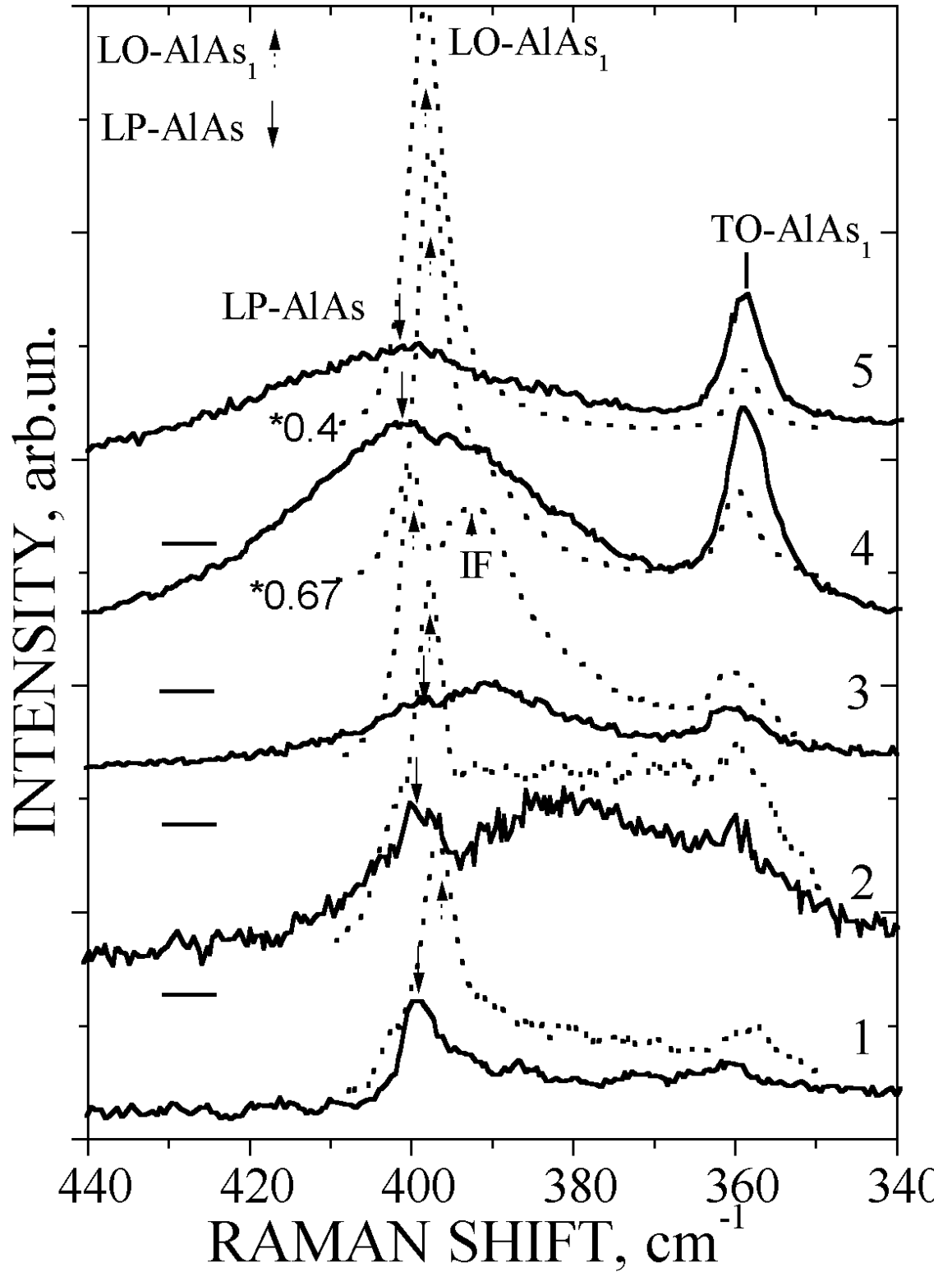


Рис 4.11. Спектры КРС сверхрешеток  $\text{GaAs}_n/\text{AlAs}_m$  (001) в области частот фононов  $\text{AlAs}$  типа,  $m=5$  монослоев,  $n = 6, 3.6, 2.4, 1.2, 0.6$  монослоя для образцов 1-5 соответственно (сплошная линия - легированные, точечная линия - нелегированные образцы).

соответствующие продольным локализованным модам первого порядка в слоях GaAs и AlAs, как LO<sub>1</sub> и LO<sub>2</sub>, соответственно. В легированных сверхрешетках им будут соответствовать обозначения LP1, LP2 для смешанных фонон-плазмонных мод. Так, в случае слабого туннелирования, соответствующего образцу 1, наблюдается небольшой сдвиг линии LP1 в область меньших энергий относительно линии LO<sub>1</sub> (рис. 4.10, спектр 1), а линия LP2 смещается область больших энергий относительно линии LO<sub>2</sub> (рис. 4.11, спектр 1).

В геометрии эксперимента  $k_{\parallel}$ ,  $k_{\perp}$  равнялись  $8.65 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$  и  $1.0 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$  соответственно. Оценка плазменной частоты, сделанная по формуле (4.4), справедливой для взаимодействующих плоскостей двумерного электронного газа без учета туннелирования и с учетом внутривозонных переходов, дает значение  $28 \text{ см}^{-1}$ , что является слишком малой величиной для объяснения наблюдаемых смещений линий. Можно предположить, что обсуждаемые смещения происходят вследствие взаимодействия фононов с плазменными колебаниями с участием межвозонных переходов. Как было показано в предыдущем параграфе, для СР с ультратонкими слоями AlAs нельзя пренебрегать эффектами туннелирования. Для объяснения наблюдаемого сдвига фонон-плазмонных мод была предложена следующая модель.

В полярных полупроводниках продольные колебания создают макроскопическое электрическое поле. Влияние плазменных колебаний на частоты фононов заключается в том, что они экранируют это дальнедействующее кулоновское поле. Для численного моделирования дисперсии связанных фонон-плазмонных мод в гетероструктурах со сложным фононным спектром была приложена следующая модель. Был разделён вклад локального и дальнедействующего взаимодействия в динамическую матрицу:

$$D_{\alpha\beta,s,s'}(q) = D_{\alpha\beta,s,s'}^{\text{short}}(q) + D_{\alpha\beta,s,s'}^{\text{long}}(q), \quad (4.8)$$

локальное взаимодействие рассчитывалось в модели Борна, а дальнедействующее

кулоновское - в модели жёстких ионов с учётом экранирования:

$$D_{\alpha\beta,s,s'}^{\text{long}}(q) = \frac{4\pi Z_S Z_{S'}}{V} \cdot \frac{1}{\sqrt{m_S \cdot m_{S'}}} \cdot \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2} \cdot \frac{1}{\varepsilon}, \quad (4.9)$$

где  $\alpha, \beta$  - координатные индексы (пробегают значения x, y, z),  $s, s'$  - номера атомов в элементарной ячейке с массами  $m_S, m_{S'}$  соответственно,  $q$  - волновой вектор,  $V$  - объём элементарной ячейки,  $Z_S$  - эффективный заряд атома с номером  $s$ .

Вклад плазмонов в диэлектрическую проницаемость учитывался в приближении эффективной массы. Для определения поляризуемости безстолкновительной плазмы (температура  $T$ ) в зависимости от волнового вектора  $q$  вдоль оси  $Z$  и от частоты известная формула Линдхарда [118] была несколько модифицирована:

$$\chi^0(q, \omega) = 2\sqrt{2} \frac{e^2}{\pi^2 \sqrt{m_x^{-1ef} m_y^{-1ef} q \hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left( \frac{\sqrt{m_z^{-1ef} \hbar q}}{\sqrt{k_b T}} + 2\sqrt{2}\xi \right) \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_f}{k_b T} - \xi^2 \right) \right]}{\left( \frac{m_z^{-1ef} \hbar^2 q^2}{k_b T} + \frac{2\sqrt{2} \hbar q \sqrt{m_z^{-1ef}}}{\sqrt{k_b T}} \xi \right)^2 - 4 \left( \frac{\hbar \omega}{k_b T} \right)^2} d\xi \quad (4.10)$$

Модификация формулы Линдхарда [118] позволит исследовать зависимость дисперсии фонов-плазмонных мод от анизотропии эффективной массы. Учёт столкновений осуществляется в подходе Линдхарда-Мермина, где вводится параметр затухания  $\Gamma$  [118]:

$$\chi(q, \omega) = \frac{(1 + i\Gamma / \omega) [\chi^0(q, \omega + i\Gamma)]}{1 + i\Gamma / \omega [\chi^0(q, \omega + i\Gamma) / \chi^0(q, 0)]} \quad (4.11)$$

Далее алгоритм вычислений был следующий. Вычислялась дисперсия «чистых» фононов, без учёта экранировки плазмонами. Затем частоты фононов рассчитывались с учетом экранирования. Так как экранировка сильно зависит от частоты, требовалось

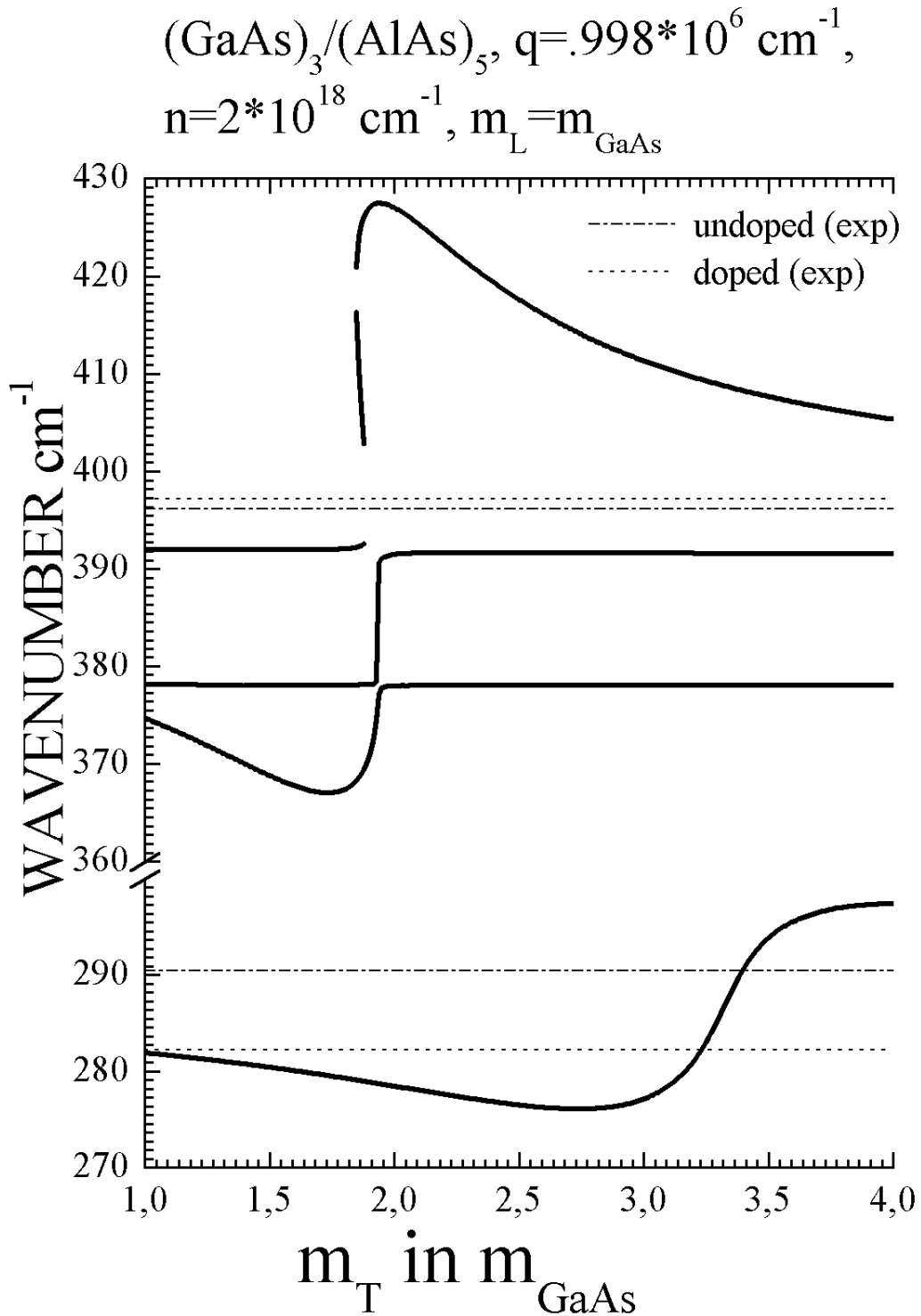


Рис. 4.12. Зависимость частот фонон-плазмонных мод от  $m_T$ .

проводить процедуру перенормировки до схождения к самосогласованному решению.

В случае плоских СР с осью роста [001] тензор обратной эффективной массы  $m^{-1}$  в кристаллографических координатах будет иметь диагональный вид, причем компоненты X и Y тензора будут вырождены. Удобно ввести следующие параметры:  $m_T = (m^{-1}_z)^{-1}$ , характеризующий свойства тензора обратной эффективной массы свободных электронов поперек слоев СР, и  $m_L = (m^{-1}_x)^{-1}$ , характеризующий свойства тензора обратной эффективной массы вдоль слоев СР. На рисунке 4.12 представлена рассчитанная зависимость частот фонон-плазмонных мод от  $m_T$  легированной СР GaAs<sub>3</sub>AlAs<sub>5</sub>(001) с концентрацией свободных носителей  $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .  $m_L$  была принята равной эффективной массе свободных электронов в объемном GaAs. Как видно из рисунка 4.12, при  $m_T$ , равной  $1.8 m_L$ , частоты фонон-плазмонных мод приблизительно равны наблюдаемым экспериментально (рис. 4.12 точечная линия). Т.е. наблюдаемые экспериментально сдвиги фонон-плазмонных мод (для AlAs-подобных мод – в область более высоких частот, для GaAs-подобных мод – в область более низких частот) можно объяснить влиянием плазменных колебаний на экранирование дальнедействующего кулоновское поля.

Интересно было исследовать анизотропию дисперсии фонон-плазмонных мод в зависимости от анизотропии эффективной массы. Некоторые результаты расчётов представлены на рисунках 4.13 и 4.14 [133-136]. Для примера были рассчитаны дисперсии для GaAs<sub>2</sub>AlAs<sub>5</sub> (001) СР. “Тяжелая” эффективная масса  $(m^{-1}_x)^{-1}$  была либо  $4m^*$  (рис. 4.13), либо  $2m^*$  (рисунок 4.14), масса  $(m^{-1}_z)^{-1} = 1.8m^*$ , а  $(m^{-1}_y)^{-1} = m^*$ . Прямыми линиями на рисунках 4.13 и 4.14 показаны частоты «чистых» фононов (не зависят от концентрации электронов) и частоты смешанных  $L^+$  и  $L^-$  мод в зависимости от концентрации электронов. Волновой вектор направлен вдоль оси X (непрерывная линия), либо вдоль оси Y (штриховая линия), значения волнового числа показаны на рисунках. Во-первых, видно, что некоторые

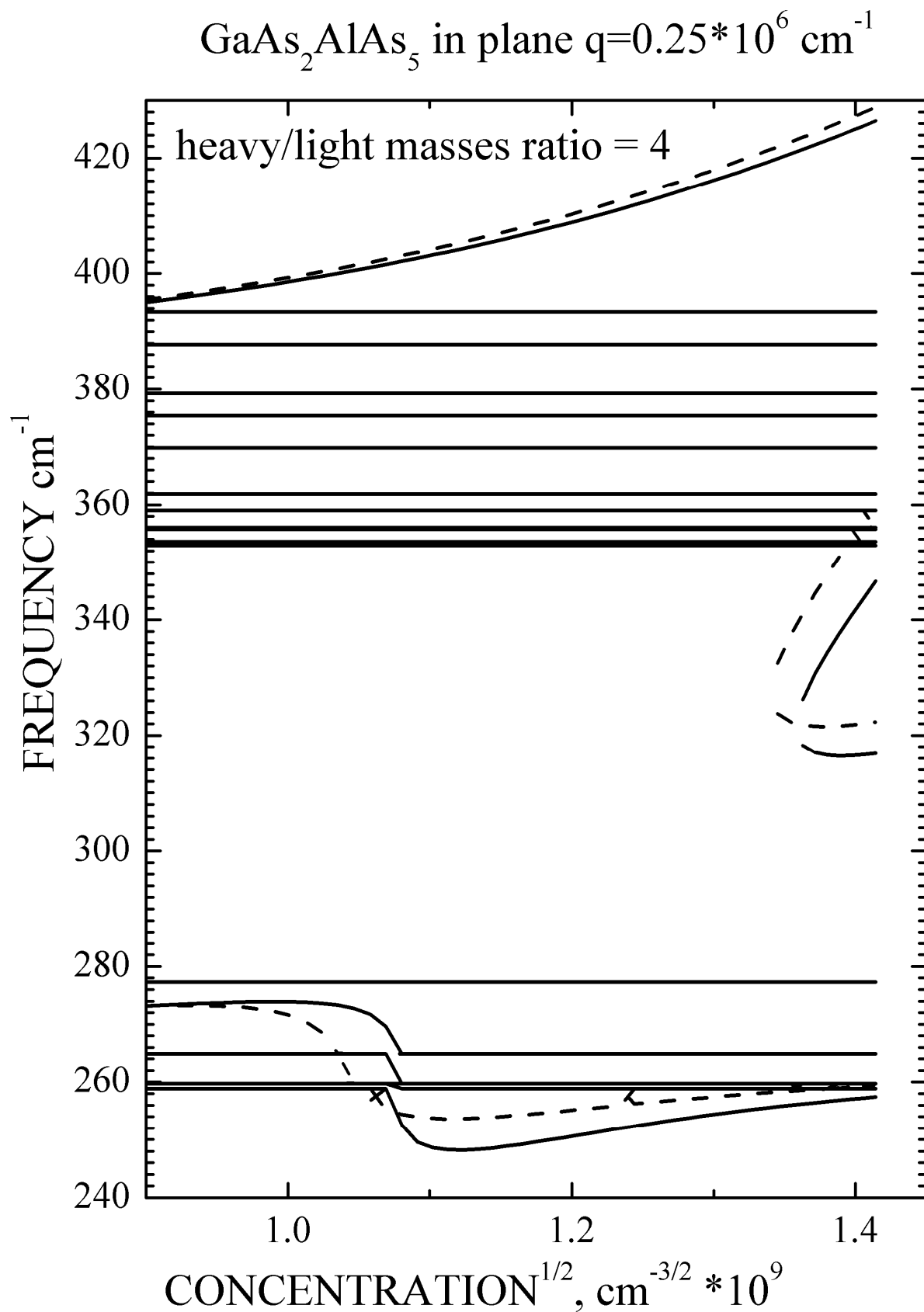


Рис. 4.13. Рассчитанная зависимость частоты фонон-плазменных мод в GaAs<sub>2</sub>AlAs<sub>5</sub> (001) СП от концентрации электронов. Случай «малых» волновых чисел.

GaAs<sub>2</sub>AlAs<sub>5</sub> in plane  $q=10^6 \text{ cm}^{-1}$

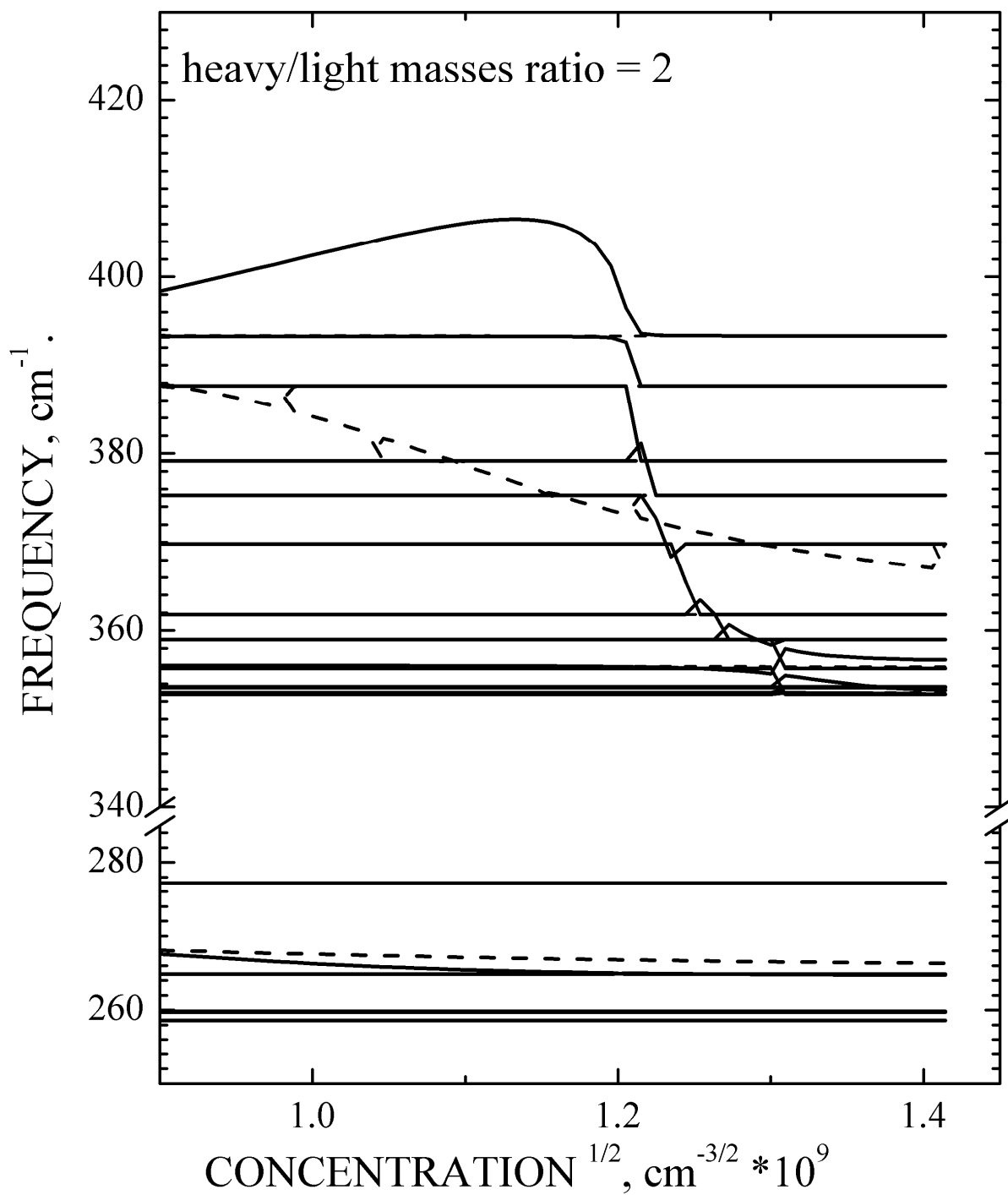


Рис.4.14. Рассчитанная зависимость частоты фонон-плазмонных мод в GaAs<sub>2</sub>AlAs<sub>5</sub> (001) CP от концентрации электронов. Случай «больших» волновых чисел.



зависимости имеют Z-образную форму (самосогласованное решение неустойчиво). Во-вторых, заметная зависимость частоты фонон-плазмонной моды от направления волнового вектора появляется для волновых чисел  $10^6 \text{ см}^{-1}$  и более. При этом анизотропия эффективной массы не так уж велика (рис.4.14). Однако, при квазиобратном рассеянии даже при скользющем угле падения, максимальный импульс, передаваемый в плоскости, не превышает  $10^5 \text{ см}^{-1}$ . Значит, для наблюдения эффектов анизотропии в плоскости структуры нужно использовать другую геометрию, например, квазиобратное рассеяние с различных «торцов» плёнки. Так как толщина исследуемых СР обычно не превышает 1 микрона, целесообразно в таком случае использование техники КРС с объективом микроскопа (micro-Raman technique). В работах [137,138] такой эксперимент был поставлен и предсказанная в наших работах анизотропия была обнаружена.

Выводы.

1. Наблюдаемые экспериментально сдвиги фонон-плазмонных мод для AlAs-подобных мод – в область более высоких частот, для GaAs-подобных мод – в область более низких частот вызваны влиянием плазменных колебаний на экранирование дальнедействующего кулоновского поля.
2. Построена модель для расчёта частот связанных фонон-плазмонных мод в гетероструктурах полярных полупроводников с учётом динамической экранировки плазмонами кулоновского взаимодействия. Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений позволит бесконтактно оценивать концентрацию носителей заряда в гетероструктурах. Проведены исследования анизотропии эффективной массы из анализа дисперсии смешанных фонон-плазмонных мод.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ.

1. Сравнение экспериментальных и рассчитанных спектров КРС показывает, что триплетная структура пика, соответствующая КРС в сверхрешетке  $\text{GaAs}_{0.6}/\text{AlAs}_5$ , выращенной методом молекулярно-лучевой эпитаксии на поверхности (001), реконструированной по типу (2x4), возникает вследствие латеральной локализации фононов в квантовых островках GaAs, формирующихся при субмонослойном покрытии поверхности (001) (2x4).
2. Анализ экспериментальных и теоретических спектров КРС, рассчитанных в приближении поляризуемости связи Волькенштейна, позволил определить распределение островков GaAs, формирующихся при субмонослойном покрытии поверхности (001) (2x4), по различным конфигурациям. Атомарная конфигурация островков совпадает с ранее известными результатами, полученными методом сканирующей туннельной микроскопии. Согласно расчетам, 70% островков содержат менее 12 атомов Ga.
3. С помощью численного эксперимента установлено, что, в рамках имеющейся в литературе модели корrugации, расщепление ТО фононов в квантовых проволоках GaAs с ориентацией  $[311]_A$  возможно при условии ограничения длины квантовых проволок. Это расщепление может служить характеризующим фактором при определении линейного размера реального квантового объекта вдоль направления  $[\bar{2}33]$ . Для исследуемых образцов характерная длина проволок составляла  $\sim 4$  nm.
4. Модельными расчетами установлено, что влияние корrugации гетерограниц на частоты фононов, локализованных в квантовых объектах, существенно, если средняя толщина этих объектов равна, либо меньше масштаба корrugации.

5. Установлено, что в легированных СР  $\text{GaAs}_{17}\text{AlAs}_{17}$  электронный газ находится в двухмерном состоянии. С уменьшением толщины барьера  $\text{AlAs}$  до ультратонкого происходит делокализация фонон-плазмонного взаимодействия, которая обусловлена туннельной прозрачностью барьеров  $\text{AlAs}$  для свободных электронов.
6. Предложена модель и выполнены расчеты частот связанных фонон-плазмонных мод в гетероструктурах полярных полупроводников с учетом динамической экранировки плазмонами кулоновского взаимодействия. Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений спектров КРС позволяет бесконтактно оценивать концентрацию носителей заряда в гетероструктурах.
7. На основе модели фонон-плазмонного взаимодействия предложен способ исследования анизотропии эффективной массы свободных электронов из анализа дисперсии смешанных фонон-плазмонных мод в гетероструктурах полярных полупроводников.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе методом численного эксперимента исследована динамика решетки нанометровых и субнанометровых объектов на основе арсенида галлия, формирующихся в объеме и на поверхности полупроводниковых гетероструктур, выращенных со специально заданными характеристиками. Определено влияние структурной анизотропии и легирования квантовых объектов на свойства локализованных в них оптических фононов.

\*\*\*\*\*

Представленная работа выполнена в Омском филиале Института физики полупроводников СО РАН под руководством директора Омского филиала Института физики полупроводников СО РАН д.ф.-м.н., профессора Болотова В.В.

Экспериментальные спектры комбинационного рассеяния света были получены Володиным В.А. Постановка научных задач исследования и обсуждение результатов осуществлялось при участии Володина В.А. и Ефремова М.Д., за что автор выражает им глубокую признательность.

Автор выражает особую благодарность профессору Тютереву В.Г., под чьим руководством были освоены большинство из используемых в представленной работе методов, за полезные замечания и обсуждения.

Автор выражает искреннюю благодарность всем коллегам, принимавшим участие в работе:

Рагозиной Н.В. за поддержку и помощь в оформлении представленной работы.

Преображенскому В.В. и Семягину Б.Р. за изготовление сверхрешеток GaAs/AlAs.

Леденцову Н.Н., Устинову В.М., Сошникову И.П. Литвтинову Д., Rosenauer A., Gerthsen D. за проявленный интерес к нашей работе и снимки образцов, полученные методом просвечивающей электронной микроскопии с высоким разрешением.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Light Scattering in Solids V Superlattices and Other Microstructures./ edited by M.Cardona and G.Günterodt. - Berlin: Springer-Verlag, 1989. - 351 p.
2. Gammon D. High-resolution spectroscopy of individual quantum dots in wells // MRS Bulletin. – 1998. – February. – P. 44-48.
3. Леденцов Н.Н . Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. (Обзор) / Н.Н.Леденцов, В.М.Устинов, В.А.Щукин, П.С.Копьев, Ж.И.Алферов, Д.Бимберг // ФТП. – 1998. – Т. 32, Вып. 4. – С. 385-410.
4. Alivisatos A.Paul Semiconductor nanocrystals // MRS bulletin. – 1995. – August. – P. 23-32.
5. Алферов Ж.И. Выращивание квантовых кластеров GaAs-AlAs на ориентированных не по (100) фасетированных поверхностях GaAs методом молекулярно-пучковой эпитаксии/ Ж.И.Алферов, А.Ю.Егоров, А.Е.Жуков, С.В.Иванов, П.С.Копьев, Н.Н.Леденцов, Б.Я.Мельцер, В.М.Устинов // ФТП. – 1992. - Том 26, Вып. 10, С. 1715-1721.
6. Nötzel R. Direct synthesis of corrugated superlattices on non-(100)-oriented surfaces /R.Nötzel, N.N.Ledentsov, L.A.Däweritz, M.Hohenstein, K.Ploog // Phys. Rev. Lett. – 1991. – Vol. 67. – N. 27 – P. 3812-3815.
7. Hashizume Tomihiro. Structures of As-Rich GaAs(001)-(2x4) Reconstructions / Tomihiro Hashizume, Q.K. Xue, J. Zhou, A. Ichimiya, and T. Sakurai // Phys. Rev. Lett. – 1994. – Vol. 73. – N. 16. – P. 2208-2211.
8. Караваев Г.Ф. Исследование Электронных Процессов В Наноструктурах, / Г.Ф. Караваев, С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов // Вестник ТГУ – 2005. - №.285. – Январь. – С. 53-62.

9. Shchukin V.A Theory of quantum-wire on corrugated surface / V.A.Shchukin, A.I.Borovkov, N.N.Ledentsov, P.S.Kop'ev. // Phys. Rev. B, - 1995. – Vol. 51. – N 24. – P. 17767-17779.
10. Heiss Martin Direct correlation of crystal structure and optical properties in wurtzite/zinc-blende GaAs nanowire heterostructures / Martin Heiss, Sonia Conesa-Boj, Jun Ren, Hsiang-Han Tseng, Adam Gali, Andreas Rudolph, Emanuele Uccelli, Francesca Peiro', Joan Ramon Morante, Dieter Schuh, Elisabeth Reiger, Efthimios Kaxiras, Jordi Arbiol, Anna Fontcuberta i Morral // Phys. Rev. B – 2011. – Vol. 83, N 4. – P. 045303(1–10).
11. Large Nicolas Raman-Brillouin electronic density in short-period superlattices / Nicolas Large, Jean-Roch Huntzinger, Javier Aizpurua, Bernard Jusserand, Adnen Mlayah // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 82, N 7. –P. 075310(1–9).
12. Beardsley R. Optical detection of folded mini-zone-edge coherent acoustic modes in a doped GaAs/AlAs superlattice / R. Beardsley, A. V. Akimov, B. A. Glavin, W. Maryam, M. Henini, A. J. Kent // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 82, N 4. – P. 041302(1–4).
13. Spirkoska D. Structural and optical properties of high quality zinc-blende/wurtzite GaAs nanowire heterostructures // D. Spirkoska, J. Arbiol, A. Gustafsson, S. Conesa-Boj, F. Glas, I. Zardo, M. Heigoldt, M. H. Gass, A. L. Bleloch, S. Estrade, M. Kaniber, J. Rossler, F. Peiro, J. R. Morante, G. Abstreiter, L. Samuelson, and A. Fontcuberta i Morral // Phys. Rev. B. – 2009. – Vol. 80, N 24. – P. 245325(1–9).
14. Pusep Yu. A. Delocalization-localization transition of plasmons in random  $(\text{GaAs})_m(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_6$  superlattices / Yu. A. Pusep, A. D. Rodrigues, and S. S. Sokolov // Phys. Rev. B. – 2009. – Vol. 80, N 20. P. 205307(1–5).
15. Duquesne J.-Y. Thermal conductivity of semiconductor superlattices: Experimental study of interface scattering // Phys. Rev. B. – 2009. – Vol. 79, N 15. – P. 153304(1–4).

16. Walker P. Excitation and detection of high-frequency coherent acoustic phonons in low-symmetry superlattices / P. Walker, R. P. Campion, A. J. Kent, D. Lehmann, and Cz. Jasiukiewicz // *Phys. Rev. B.* – 2008. – Vol. 78, N 23. – P. 233307(1-4).
17. Hepplestone S. P. Phononic gaps in thin semiconductor superlattices / S. P. Hepplestone , G. P. Srivastava// *J. Appl. Phys.* – 2010. – Vol. 107. – P. 043504(1-9).
18. Guériaux Vincent Double barrier strained quantum well infrared photodetectors for the 3–5  $\mu$ m atmospheric window / Vincent Guériaux, Alexandru Nedelcu, Philippe Bois // *J. Appl. Phys.* – 2009. – Vol. 105. – P. 114515(1-8).
19. Scrutton P. Effect of intermixing on bulk and interface Raman modes in GaAs/AlAs superlattice waveguide structures / P. Scrutton, B. Fung, and A. S. Helmy // *J. Appl. Phys.* – 2008. – Vol. 104. – P. 073103(1-9).
20. Kundrotas Jurgis. Impurity-related photoluminescence line shape asymmetry in GaAs/AlAs multiple quantum wells: Fractional-dimensional space approach / Jurgis Kundrotas, Aurimas Čerškus, Gintaras Valušis, Agne Johannessen, Erik Johannessen, Paul Harrison, and Edmund H. Linfield // *J. Appl. Phys.* – 2010. – Vol. 107. – P. 093109(1-7).
21. Ikonić Zoran. Interdiffusion effects and line broadening of hole intersubband absorption in complex GaAs/AlGaAs quantum well structures / Zoran Ikonić, Oana Malis, Loren N. Pfeiffer, Kenneth W. West, and Paul Harrison // *J. Appl. Phys.* – 2010. – Vol. 107. – P. 113107(1-6).
22. Mizoguchi K. Characterization of terahertz electromagnetic waves from coherent longitudinal optical phonons in GaAs/AlAs multiple quantum wells / K. Mizoguchi, A. Mizumoto, M. Nakayama, S. Saito, A. Syouji, K. Sakai, N. Yamamoto, K. Akahane // *J. Appl. Phys.* – 2006. – Vol. 100. – P. 103527(1-7)
23. Roh Cheong Hyun. Characterization of the morphology and optical properties of InAs/AlAs quantum dots with a GaAs insertion layer / Cheong Hyun Roh, Hong Joo Song, Dong Ho



- Kim, Joon Soo Park, Yeon-Shik Choi, Hoon Kim, Cheol-Koo Hahn // *J. Appl. Phys.* - 2007. – Vol. 101. – P. 064320(1-7).
24. Pässler Roland. Basic moments of phonon density of states spectra and characteristic phonon temperatures of group IV, III–V, and II–VI materials // *J. Appl. Phys.* – 2007. – Vol. 101. – P. 093513(1-12).
25. Richter M. Two-dimensional electron gases: Theory of ultrafast dynamics of electron-phonon interactions in graphene, surfaces, and quantum wells / M. Richter, A. Carmele, S. Butscher, N. Bücking, F. Milde, P. Kratzer, M. Scheffler, A. Knorr // *J. Appl. Phys.* – 2009. – Vol. 105. – P. 122409(1-7).
26. Kłos Jarosław W. Two-dimensional GaAs/AlGaAs superlattice structures for solar cell applications: Ultimate efficiency estimation / Jarosław W. Kłos, Maciej Krawczyk // *J. Appl. Phys.* – 2009. – Vol. 106. – P. 093703(1-9).
27. Balandin, A.A. Nanophononics: Fine-Tuning Phonon Dispersion in Semiconductor Nanostructures // *Moldavian Journal of the Physical Sciences.* – 2007. – Vol. 6, N 1. – P.33-38.
28. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки / М.: Мир. - 1989. - 240 с.
29. Sapriel J. Light scattering from vibrational modes in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As superlattices and related alloys / J.Sapriel, J.C.Michel, J.C.Toledano, R.Vacher, J.Kervarec, A.Regreny // *Phys. Rev. B.* – 1983. – Vol. 28, N 4. – P. 2007-2016.
30. Jusserand B. Raman scattering study of acoustical and optical folded modes in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As superlattices / B.Jusserand, D.Paquet, J.Kervarec, A.Regreny // *Journal de physique.* – 1984. - Vol. 45, N 4. - P. C5-145-C5-149.
31. Richter E. Lattice dynamics of GaAs/AlAs superlattices / E. Richter, D. Strauch // *Solid State Communications* – 1987. – Vol. 64. – P. 867-870.

32. Colvard C. Observation of Folded Acoustic Phonons in a Semiconductor Superlattice / C. Colvard, R. Merlin, M. V. Klein, and A. C. Gossard // Phys. Rev. Lett. – 1980. – Vol. 45, N 4. – P. 298-301.
33. Jusserand Bernard. Raman scattering study of acoustical zone-center gaps in GaAs/AlAs superlattices / Bernard Jusserand, François Alexandre, Jimmy Dubard, and Daniel Paquet // Phys. Rev. B – 1986. – Vol. 33, N 4. – P. 2897-2899.
34. Santos P. V. Frequency gaps for acoustic phonons in *a*-Si:H/*a*-SiN<sub>x</sub>:H superlattices / P. V. Santos, L. Ley, J. Mebert, and O. Koblinger // Phys. Rev. B – 1987. – Vol. 36, N 9. – P. 4858-4867.
35. Рытов С.М. Акустические свойства мелкослоистой среды // Акустический журнал. – 1956. – Т. 2, №1. – С. 68–80.
36. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Теория упругости / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М. : ФМЛ, 2003. – 264 с.
37. Борн Макс. Динамическая теория кристаллических решеток / Макс Борн, Хуан Кунь. – М. : ИЛ, 1958. – 488 с.
38. Tsu R. Phonon and Polariton Modes in a Superlattice / R. Tsu and Sudhanshu S. Jha // Appl. Phys. Lett. – 1972. – Vol. 20 – P. 16-18.
39. Mochán W. Luis. Effect of plasma waves on the optical properties of metal-insulator superlattices / W. Luis Mochán, Marcelo del CastilloMussot, Rubén G. Barrera // Phys. Rev. B – 1987. – Vol. 35, N 3. – P. 1088-1098.
40. Nakayama M. Raman scattering by interface-phonon polaritons in a GaAs/AlAs heterostructure /M. Nakayama, M. Ishida, and N. Sano// Phys. Rev. B – 1988. – Vol. 38, N 9. – P. 6348-6351.

41. Merlin R. Raman scattering in superlattices: Anisotropy of polar phonons / R. Merlin, C. Colvard, M. V. Klein, H. Morkoc, A. Y. Cho, and A. C. Gossard // *Appl. Phys. Lett.* – 1980. – Vol. 36. – P. 43-45.
42. Fuchs R. Optical Modes of Vibration in an Ionic Crystal Slab / Ronald Fuchs and K. L. Kliewer // *Phys. Rev.* – 1965. – Vol. 140, N 6A. – P. A2076-A2088.
43. Camley R. E. Collective excitations of semi-infinite superlattice structures: Surface plasmons, bulk plasmons, and the electron-energy-loss spectrum / R. E. Camley and D. L. Mills // *Phys. Rev. B.* – 1984. – Vol. 29, N 4. – P. 1695-1706.
44. Klein M. Phonons in semiconductor superlattices // *IEEE J. QE.* – 1986. – Vol. 22, N 9. – P. 1760-1770.
45. Sood A. K. Interface Vibrational Modes in GaAs-AlAs Superlattices / A. K. Sood, J. Menéndez, M. Cardona, and K. Ploog // *Phys. Rev. Lett.* – 1985. – Vol. 54, N 19. – P. 2115-2118.
46. Fasol G. Raman Scattering by Coupled-Layer Plasmons and In-Plane Two-Dimensional Single-Particle Excitations in Multi-Quantum-Well Structures / G. Fasol, N. Mestres, H. P. Hughes, A. Fischer, and K. Ploog // *Phys. Rev. Lett.* – 1986. – Vol. 56, N 23. – P. 2517-2520.
47. Ren F. Anisotropy of optical phonons in GaAs-AlAs superlattices / Shang-Fen Ren, Hanyou Chu, and Yia-Chung Chang // *Phys. Rev. Lett.* – 1987. – Vol. 59, N 16. – P. 1841-1844.
48. Barker A.S. Study of zone-folding effects on phonons in alternating monolayers of GaAs-AlAs / A.S.Barker, Jr., J.L.Merz, A.C.Gossard / *Phys. Rev. B.* – 1978. - Vol. 17, N. 8. - P. 3181-3196.
49. Cardona M. Folded, confined, interface, surface, and slab vibrational modes in semiconductor superlattices / *Superlattices and microstructures.* – 1989. Vol. 5, N 1 – P. 27-42.

50. Colvard C. Folded acoustic and quantized optic phonons in (GaAl)As superlattices / C.Colvard, T.A.Gant, M.V.Klein, R.Merlin, R.Fischer, H.Morkoc, A.C.Gossard // Phys. Rev. B. – 1985. – Vol. 31, N 4 – P. 2080-2091.
51. Гайслер В.А. Фононный спектр сверхрешеток GaAs-InAs. / В.А.Гайслер, А.О.Говоров, Т.В.Курочкина, Н.Т.Мошегов, С.И.Стенин, А.И.Торопов, А.П.Шебанин // ЖЭТФ. – 1990. – Т. 98, Вып. 3(9). – С. 1081-1093.
52. Bernasconi M. Vibrational properties and infrared spectra of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> systems. Order and disorder features in superlattice configuration / M.Bernasconi, L.Colombo, L.Miglio // Phys. Rev. B. – 1991. – Vol. 43, N 18. – P. 14457-14464.
53. Mowbray D.J. Confined LO phonons in GaAs/AlAs superlattices / D.J. Mowbray, M.Cardona, K.Ploog // Phys. Rev. B. – 1991. – Vol. 43, N 2 – P. 1598-1603.
54. Sood A.K. Resonance Raman scattering by confined LO and TO phonons in GaAs-AlAs superlattices / A.K.Sood, J.Menendez, M.Cardona, K.Ploog // Phys. Rev. Lett. – 1985. - Vol 54, N 19. – P. 2111-2114.
55. Гайслер В.А. Спектроскопия комбинационного рассеяния света слоистых полупроводниковых структур / Диссертация на соискание степени доктора физико-математических наук. – Новосибирск. – 1996.
56. Gironcoli Stefano de. Phonons in Si-Ge systems: An *ab initio* interatomic-force-constant approach // Phys. Rev. B – 1992. – Vol. 46, N 4. – P. 2412-2419.
57. Molinari Elisa. Effects of disorder on the Raman spectra of GaAs/AlAs superlattices / Elisa Molinari, Stefano Baroni, Paolo Giannozzi, and Stefano de Gironcoli // Phys. Rev. B – 1992. – Vol. 45, N 8. – P. 4280-4288.
58. Kanellis G. New approach to the problem of lattice dynamics of modulated structures: Application to superlattices // Phys. Rev. B – 1987. – Vol. 35, N 2. – P. 746-756.

59. Yip S. Theory of phonon dispersion relations in semiconductor superlattices / Sung-kit Yip and Yia-Chung Chang // *Phys. Rev. B* – 1984. – Vol. 30, N 12. – P. 7037-7059.
60. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов / М.: ФМЛ, 1963. – 312 с.
61. Рейсленд Дж. Физика фононов / М.: Мир, 1975. – 365 С.
62. Ewald P.P. Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale // *Ann. Physik.* – 1921. – Vol. 64. – P. 253-287.
63. Keating. P.N. Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure // *Phys. Rev.* – 1966. – Vol. 145, N 2. P. 637-645.
64. Бетгер Х. Принципы динамической теории решетки / М.: Мир, 1986. – 392 с.
65. Martin Richard M. Dielectric Screening Model for Lattice Vibrations of Diamond-Structure Crystals // *Phys. Rev.* – 1969. – Vol. 186, N 3. – P. 871-884.
66. Phillips J. C. Covalent Bond in Crystals. I. Elements of a Structural Theory // *Phys. Rev.* – 1968. – Vol. 166, N 3. – P. 832-838.
67. Weber Werner. Adiabatic bond charge model for the phonons in diamond, Si, Ge, and  $\alpha$ -Sn // *Phys. Rev. B.* – 1977. – Vol. 15, N 10. – P. 4789-4803.
68. Pick R. Microscopic Theory of Force Constants in the Adiabatic Approximation / Robert M. Pick, Morrel H. Cohen, and Richard M. Martin // *Phys. Rev. B.* – 1970. – Vol. 1, N 2. – P. 910-920.
69. Weilacher K H. Phonon spectrum of metallic lithium from first-principles bandstructure / K. H. Weilacher and H. Bross // *Journal of Physics F: Metal Physics.* – 1977. – Vol. 7, N 11. – P. 2253-2270.
70. Hanke Werner R. Microscopic Theory of Dielectric Screening and Lattice Dynamics in the Wannier Representation. I. Theory // *Phys. Rev. B.* – 1973. – Vol. 8, N 10. – P. 4585-4590.

71. Hanke W. Dielectric theory of elementary excitations in crystals // *Advances in Physics*. – 1978. – Vol. 27, N 2. – P. 287-341.
72. Strauch D. Phonon dispersion in GaAs / D. Strauch and B. Dorner // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 1990. – Vol. 2, N 6. – P. 1457-1474.
73. Miglio L. Geometric construction of large dynamical matrices: Applications to reconstructed surfaces, superlattices and mixed crystals / L. Miglio, L. Colombo // *Superlattices and Microstructures*. – 1990. – Vol. 7, N 2 – P. 139-146.
74. Овандер Л.Н. О форме тензора комбинационного рассеяния // *Оптика и спектроскопия*. - 1960. – Т. IX, Вып. 5. С. 571-575.
75. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Теория поля / М.: Наука, 1988. – 512 с.
76. Кардона М. Резонансные явления / Рассеяние света в твердых телах II. Основные понятия и методы исследования // Под редакцией М. Кардоны и Г. Гюнтеродта. М.: Мир, 1984. – С. 35-237.
77. Волькенштейн М.В. Поляризуемость молекул и межмолекулярные силы // *Доклады АН СССР*. – 1941. – Т. XXXII, № 3. – С. 185-188.
78. Castrillo P. Lattice dynamics and Raman response of (113) GaAs/AlAs superlattices / P. Castrillo, L. Colombo, and G. Armelles // *Phys. Rev. B*. – 1994. – Vol. 49, N 15. – P. 10362-10372.
79. Nötzel R. Semiconductor quantum-wire structures directly grown on high-index surfaces / R. Nötzel, N.N.Ledentsov, L.A.Däweritz, K.Ploog, M.Hohenstein // *Phys. Rev B*. – 1992. – Vol. 45, N 7 – P. 3507-3515.
80. Принц В.Я. Высокотемпературная анизотропия проводимости сверхрешеток GaAs квантовых проволок, выращенных на фасетированных поверхностях 311А / В.Я.Принц, И.А.Панаев, В.В.Преображенский, Б.Р.Семягин // *Письма в ЖЭТФ*. – 1994. – Т. 60, Вып. 3. – С. 209-212.

81. Wassermeier M. Reconstruction of the GaAs (311)A surface / M.Wassermeier, J.Sudijono, M.D.Johnson K.T.Leung, B.G.Orr, L.A.Däweritz, K.Ploog // Journal of Crystal Growth. – 1995. – Vol. 150. – P. 425-429.
82. Wassermeier M. Reconstruction of the GaAs (311)A surface / M.Wassermeier, J.Sudijono, M.D.Johnson, K.T.Leung, B.G.Orr, L.A.Däweritz, K.Ploog // Phys. Rev. B. – 1995. – Vol. 51, N 20. – P. 14721-14724.
83. Hsu Y. Molecular-beam epitaxial GaAs/AlAs superlattices in the (311) orientation / Y.Hsu, W.I.Wang, T.S.Kuan // Phys. Rev. B. – 1994. – Vol. 50, N 7 – P. 4973-4975.
84. Moriarty P. Absence of long-range ordered reconstruction on the (311)A surface / P.Moriarty, Y.-R.Ma, A.W.Dunn, P.H.Beton, M.Henini // Phys. Rev. B. – 1997. – Vol. 55, N 23, p. 15397-15400.
85. Santos Paulo V. Optical properties of (311)-oriented GaAs/AlAs superlattices / Paulo V.Santos, A.Cantarero, M.Cardona, R.Nötzel, K.Ploog // Phys. Rev. B. – 1995. – Vol. 52, N 3 – P. 1970-1977.
86. Белоусов М.В. Оптическая анизотропия сверхрешеток GaAs/AlAs выращенных вдоль направления [113] / М.В.Белоусов, В.Л.Беркович, А.О.Гусев, Е.Л.Ивченко, П.С.Копьев, Н.Н.Леденцов, А.И.Несвижский.. - ФТТ, 1994, том 36, №4, с. 1098-1105.
87. Белоусов М.В. Комбинационное рассеяние света на LA- и TA- фононах в сверхрешетках GaAs/AlAs выращенных вдоль направлений (111), (112) и (113) / М.В.Белоусов, В.Ю.Давыдов, И.Э.Козин, П.С.Копьев, Н.Н.Леденцов // Письма в ЖЭТФ. – 1993. – Т. 57, Вып. 2. – С. 112-115.
88. Popovič Z.V. Phonon properties of (311) GaAs/AlAs superlattices / Z.V.Popovič, E.Richter, J.Spitzer, M.Cardona, A.J.Shields, R.Nötzel, K.Ploog // Phys. Rev. B. – 1994. – Vol. 49, N 11. – P. 7577-7583.

89. Popovič Z.V. Folded phonons from lateral periodicity in (311) GaAs/AlAs corrugated superlattices / Z.V.Popovič, M.V.Vukomirovič, Y.P.Raptis, E.Anastassakis, R.Nötzel, K.Ploog // Phys. Rev. B. – 1995. – Vol. 52, N 8. – P. 5789-5794.
90. Shields A.J. Resonant interference effect in the phonon Raman spectra of (311) GaAs/AlAs superlattices / A.J.Shields, Z.V.Popovič, M.Cardona, J.Spitzer, R.Nötzel, K.Ploog // Phys. Rev. B. – 1994. – Vol. 49, N 11 – P. 7584-7591.
91. Castrillo P. Phonon properties and Raman response of (113) GaAs/AlAs corrugated superlattices / P.Castrillo, G.Armelles, L.González, P.S.Domínguez // Phys. Rev. B. – 1995. – Vol. 51, N 3. – P. 1647-1652.
92. Silva S.W. da. Raman study of interface roughness in (GaAs)<sub>n</sub>/(AlAs)<sub>n</sub> superlattices grown on tilted surfaces: Evidence of corrugation of the (113) interface / S.W. da Silva, Yu.A.Pusep, J.C.Galzerani, M.A.Pimenta, D.I.Lubyshev, P.B.Gonzalez Borrero, P.Basmaji // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 53, N 4. – P. 1927-1932.
93. Lürßen D. Interface structure of (001) and (113)A GaAs/AlAs superlattices / D.Lürßen, A.Dinger, H.Kalf, W.Braun, R.Nötzel, K.Ploog // Phys. Rev. B. – 1998. – Vol. 57, N 3. – P. 1631-1636.
94. Armelles G. Interface structure of GaAs/AlAs superlattices grown on (113) surfaces: Raman scattering studies / G.Armelles, P.Castrillo, P.D.Wang, C.M.Sotomayor Torres, N.N.Ledentsov, N.A.Bert // Solid State Communications. – 1995. – Vol. 94, N 8. – P. 613-617.
95. Castrillo P. Consequence of interface corrugation on the lattice dynamics and Raman spectra in high-index AlAs/GaAs superlattices / P.Castrillo, G.Armelles, J.Barbolla // Solid State Electronics. – 1996. – Vol. 40, Nos. 1-8. – P. 175-180.



96. Lobo C. InGaAs islands shapes and adatom migration behavior on (100), (110), (111), and (311) GaAs surfaces / C.Lobo, R.Leon // Journal of Applied Physics. – 1998. – Vol. 83, N 8. – P. 4168-4172.
97. Avery A.R. Mechanism for Disorder on GaAs(001)-(2x4) Surfaces / A.R.Avery, C.M.Goringe, D.M.Holmes, J.L.Sudijono, and T.S.Jones // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 76, N 18. – P. 3344-3347.
98. Shkrebtii A.I. Reflectance Anisotropy of GaAs (100): Theory and Experiment / A.I.Shkrebtii, N.Esser, W.Richter, W.G.Schmidt, F.Bechstedt, B.O.Fimland, A.Kley, R. Del Sole // Phys. Rev. Lett. – 1998. – Vol. 81, N 3. – P. 721-724.
99. Jusserand B. Raman investigation of anharmonicity and disorder-induced effects in Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As epitaxial layers / Bernard Jusserand and Jacques Sapriel // Phys. Rev. B. -1981. – Vol. 24, N 12. – P. 7194-7205.
100. Ковалев О.В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп / М.: Наука, 1986. 368 С.
101. Володин В.А. Наблюдение локализации LO-фононов в квантовых проволоках GaAs на фасетированной поверхности (311)A / Володин В.А., Ефремов М.Д., Принц В.Я., Преображенский В.В., Семягин Б.Р. // Письма в ЖЭТФ. – 1996. – Т. 63, № 12. – С. 942-946.
102. Володин В.А. Расщепление поперечных оптических фононных мод, локализованных в квантовых проволоках GaAs на фасетированной поверхности (311)A / Володин В.А., Ефремов М.Д., Принц В.Я., Преображенский В.В., Семягин Б.Р., Говоров А.О. // Письма в ЖЭТФ. – 1997. – Т. 66, № 1. – С. 45-48.
103. Itoh M. Island Nucleation and Growth on Reconstructed GaAs(001) Surfaces / M. Itoh, G. R. Bell, A. R. Avery, T. S. Jones, B. A. Joyce, and D. D. Vvedensky // Phys. Rev. Lett. – 1998. – Vol. 81. – N 3 – P. 633-636.

104. Regiński K. Static phase diagrams of reconstructions for MBE-grown GaAs(001) and AlAs(001) surfaces / K. Regiński, J. Muszalski, V. V. Preobrazhenskii, D. I. Lubyshev // *Thin Solid Films*. – 1995. - Vol. 267. – P. 54-57.
105. Ефремов М.Д. Латеральная локализация оптических фононов в квантовых островках GaAs / Ефремов М.Д., Володин В.А., Сачков В.А., Преображенский В.В., Семягин Б.Р., Болотов В.В., Галактионов Е.А., Кретинин А.В. // *Письма в ЖЭТФ*. – 1999. – Т. 70, № 2. – С. 73-79.
106. Efremov M.D. Reconstruction of GaAs/AlAs (311) and (100) interfaces: Raman study / M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.V.Bolotov, V.A.Sachkov, G.A.Lubas, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin // *Solid State Phenomena*. – 1999. – Vols. 69-70. – P. 507-512.
107. Chadi D.J. Atomic structure of GaAs(100)-(2×1) and (2×4) reconstructed surfaces // *J. Vac. Sci. Technol. A*. – 1987. – Vol. 5. – P. 834-837.
108. Efremov M.D. Interface reconstruction in GaAs/AlAs ultrathin superlattices grown on (311) and (001) surfaces / M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.A.Sachkov, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin, V.V.Bolotov, E.A.Galaktionov, A.V.Kretinin // *Nanotechnology*. – 2001. – Vol. 12, N. 4. – P. 421-424.
109. Interface reconstruction in GaAs/AlAs ultrathin superlattices grown on (311) and (001) surfaces / M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin, V.A.Sachkov, N.N.Ledentsov, V.M.Ustinov, I.P.Soshnikov, D.Litvinov, A.Rosenauer, D.Gerthsen // *Trends in Nanotechnology Research / edited by Eugene V. Dirote*. – New York: Nova Science Publishers Inc., 2004. – Chapter 7. – P. 145-172.
110. M.D. Efremov Raman polarization scattering in the system of quantum wires on facet 311 surface of GaAs / M.D. Efremov, V.A. Volodin, V.Ya. Prints, V.V. Preobrazhenski, B.R. Semyagin // *In abstract of International Symposium: Nanostructures: Physics and Technology, St.Petersburg, Russia, 1995, P.201*.

111. Volodin V.A. Raman study of confinement of optical phonons in GaAs QWWs on facet (311)A GaAs / V.A. Volodin, M.D. Efremov, V.Ya. Prints, V.V. Preobrazhenski, B.R. Semyagin // In abstract of ICSMM-9, Liege, Belgium, 1996, ThP-25.
112. Рассеяние света в твердых телах: проблемы прикладной физики / под редакцией М.Кардоны. - М.: Мир, 1979. - 392 с.
113. Volodin V.A. Raman study of confined TO phonons in GaAs/AlAs superlattices grown on GaAs (311) A and B surfaces / V.A.Volodin, M.D.Efremov, V.V.Preobrazhenskii, B.R.Semyagin, V.V.Bolotov // Superlattices and Microstructures. – 1999. – Vol. 26, No.1. – P. 11-16.
114. Володин В.А. Исследование методом комбинационного рассеяния света расщепления ТО фононов в сверхрешетках GaAs/AlAs выращенных на поверхностях (311) / В.А.Володин, М.Д.Ефремов, В.В.Преображенский, Б.Р.Семягин, В.В.Болотов, В.А.Сачков // ФТП. – 2000. – Т. 34, № 1. – С. 62-66.
115. Efremov M.D. Raman study of GaAs quantum wires grown with partial filling of corrugated (311)A AlAs surfaces / M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.A.Sachkov, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin, N.N.Ledentsov, V.M.Ustinov, I.P.Soshnikov, D.Litvinov, A.Rosenauer, D.Gerthsen // Microelectronic Journal. – 2002. – Vol. 33, N.7. – P. 535-540.
116. Efremov M.D. Structure and photoluminescence study of type-II GaAs quantum wires and dots grown on nano-faced (311)A surface / M.D. Efremov, V.A. Volodin, V.A. Sachkov, V.V. Preobrazhenskii, B.R. Semyagin, D.V. Marin, R.S. Matvienko, N.N. Ledentsov, I.P. Soshnikov, D. Litvinov, A. Rosenauer, D. Gerthsen // Physica E. – 2004. – Vol. 23, Nos. 3-4. – P. 461-465.
117. Ledentsov N.N. Interface structure and growth mode of quantumwire and quantum dot GaAs-AlAs structures on corrugated (311)A surfaces/N.N.Ledentsov, D.Litvinov,

- A.Rosenauer, D.Gerthsen, I.P. Soshnikov, V.A.Shchukin, V.M.Ustinov, A.Yu.Egorov, A.E.Zukov, V.A.Volodin, M.D.Efremov, V.V. Preobrazhenskii, B.P.Semyagin, D.Bimberg, And Zh.I.Alferov// J. of ELECTRONIC MATERIALS.- 2001. - Vol. 30, No. 5. P. 463-470.
118. Рассеяние света в твердых телах. Выпуск IV. Электронное рассеяние, спиновые эффекты, морфические эффекты. / Под ред. М.Кардоны и Г.Гюнтеродта. – М.: Мир, 1986.- 408с.
119. Mooradian A. Observation of the Interaction of Plasmons with Longitudinal Optical Phonons in GaAs / A. Mooradian and G. B. Wright // Phys. Rev. Lett. – 1966. – Vol. 16. – N. 22 – P. 999-1001.
120. Allen S.J. Observation of the Two-Dimensional Plasmon in Silicon Inversion Layers / S. J. Allen, Jr., D. C. Tsui, and R. A. Logan // Phys. Rev. Lett. – 1977. – Vol. 38. – N. 17 – P. 980-983.
121. Stern F. Polarizability of a Two-Dimensional Electron Gas // Phys. Rev. Lett. – 1967. – Vol. 18. – N. 14 – P. 546-548.
122. Sarma S. Das. Collective excitations in semiconductor superlattices / S. Das Sarma and J. J. Quinn // Phys. Rev. B. – 1982. – Vol. 25. – N. 12 – P. 7603-7618.
123. Olego D. Plasma dispersion in a layered electron gas: A determination in GaAs-(AlGa) As heterostructures / Diego Olego, A. Pinczuk, A. C. Gossard, and W. Wiegmann // Phys. Rev. B. – 1982. – Vol. 25. – N. 12 – P. 7867-7870.
124. Витлина Р. З. Новая ветвь межподзонных плазмонов в неравновесной двухслойной системе / Р. З. Витлина, А. В. Чаплик // Письма в ЖЭТФ. – 2005. – Т. 81, № 12. – С. 758-761.
125. Фальковский Л.А. Фонон-плазмонные связанные моды в гетеро-сверхрешетках / Л. А. Фальковский, Е. Ж. Мищенко // Письма в ЖЭТФ. – 2005. – Т. 82, № 2. – С. 103-107.

126. Бисти В.Е. Дисперсионные свойства плазменных возбуждений в туннельно связанных двухслойных электронных системах / В.Е. Бисти, В.Е. Кирпичев, Л.В. Кулик, И.В. Кукушкин // Письма в ЖЭТФ. – 2006. – Т. 83, № 6. – С. 300-304.
127. Володин В.А. Исследование фонон-плазмонного взаимодействия в туннельных сверхрешетках GaAs/AlAs / Володин В.А., Ефремов М.Д., Преображенский В.В., Семягин Б.Р., Болотов В.В., Сачков В.А., Галактионов Е.А., Кретицин А.В. // Письма в ЖЭТФ. – 2000. – Т. 71, № 11. – С. 698-704.
128. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твёрдых телах / М.: Мир, 1965. – 195 с.
129. Сачков В.А. Фононы в структурах на основе GaAs и AlAs: численное моделирование и эксперимент / В.А.Сачков, В.В.Болотов, В.А.Володин, М.Д.Ефремов // Препринт ИСМЭ СО РАН 2000-01, Омск, 2000. – С. 1-62.
130. Volodin V.A. Raman study of phonon-plasmon coupling modes in tunnelling GaAs/AlAs superlattices, grown on (311) and (001) surfaces / V.A.Volodin, M.D.Efremov, V.A.Sachkov, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin, E.A.Galaktionov, D.A.Orehov // Nanotechnology. -2001. – Vol. 12, N. 4. – P. 508-511.
131. Jusserand B. "Folded" optical phonons in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As superlattices / Bernard Jusserand, Daniel Paquet, and André Regreny // Phys. Rev. B. – 1984. – Vol. 30. – N. 10 – P. 6245-6247.
132. Efremov M.D. Raman study of phonon-plasmon modes in short period GaAs<sub>1</sub>/AlAs<sub>1</sub> superlattices / M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.V.Bolotov // In Proceedings of 21 International Conference on Physics of Semiconductors, Beijing, China, 1992 – P. 204.
133. Efremov M.D. Phonon-plasmon interaction in tunnelling GaAs/AlAs superlattices grown on (311) and (100) substrates / M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.A.Sachkov, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin, N.N.Ledentsov, V.M.Ustinov, D.Litvinov and D.Gerthsen // Solid State Phenomena.n – 2002. – Vols. 82-84. P. 581-586.

134. Volodin V.A. Influence of electron mass anisotropy on phonon-plasmon coupling in short period GaAs/AlAs superlattices grown on (100), (311)B and (311)A nano-faceted surfaces / V.A.Volodin, M.D.Efremov, V.A.Sachkov, N.N.Ledentsov // Phys. Low-Dim. Struct. – 2003. – Vols. 5/6. – P. 109-116.
135. Phonon-plasmon coupling modes in tunneling thin GaAs/AlAs (311) and (001) SLs: Raman studies and modeling / V.A.Volodin, M.D.Efremov, V.A.Sachkov // Nanophysics, Nanoclusters and Nanodevices // edited by Kimberly S. Gehar. - New York: Nova Science Publishers Inc., 2006. – Chapter 9. – P. 245-281.
136. Володин В.А. Делокализация фонон-плазмонных мод в сверхрешётках GaAs/AlAs с туннельно-тонкими барьерами AlAs / В.А.Володин, М.Д.Ефремов, В.А.Сачков // ЖЭТФ – 2006. – Т. 130, № 4. – С. 739-747.
137. Володин В.А. Экспериментальное обнаружение анизотропии фонон-плазмонных мод в сверхрешетках GaAs/AlAs (100) // Письма в ЖЭТФ. – 2009. – Т. 89, Вып. 8. – С. 483-485.
138. Володин В.А. Анизотропия Фонон-плазмонных мод в сверхрешетках GaAs/AlAs (311) // ФТТ.- 2011. – Т. 53, Вып. 2. – С. 369-371.