

УДК 530.145

## КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ МОДЫ СВЕРХСТРУКТУР И ВЛИЯНИЕ НА НИХ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ

В. С. Виноградов

*Сверхструктура представляется в виде совокупности периодически расположенных в решетке примесных атомов с измененной массой. С использованием метода расширенной ячейки получены уравнения для колебательных мод сверхструктур. Для структур с большим периодом прослеживается связь их спектра со спектром  $n$ -мерных твердых растворов ( $n = 1, 2, 3$ ).*

В настоящее время имеется значительное число работ, посвященных исследованию колебательных мод сверхрешеток [1, 2]. В них обсуждаются такие явления, как "плениение фононов", приграничные моды и др. Из-за сложности объекта часто используются упрощенные модели типа линейной цепочки, не пригодные для объектов другой размерности. В настоящей работе для описания колебательных мод используется общий метод и модель, применимые не только к сверхрешеткам, но и к другим сверхструктурам типа упорядоченно расположенных квантовых нитей или квантовых точек. Метод основан на использовании расширенной ячейки [3]. Исследуется влияние на колебательные спектры разупорядоченности расположения элементов структуры. Прослеживается связь между колебательными спектрами разупорядоченных сверхструктур и  $n$ -мерных твердых растворов ( $n = 1, 2, 3$ ). Ранее эта связь не анализировалась.

Будем рассматривать сверхструктуру как совокупность упорядоченно расположенных примесей замещения с измененной массой. Изменение силовых констант менее существенно, и мы им будем пренебрегать.

Спектр исходной решетки без примесей определяется полюсами Фурье-компоненты функции Грина  $g$ , которая имеет вид:

$$g_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ k & k' \end{pmatrix} = \frac{1}{N\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_{\mathbf{y}j} \frac{w_\alpha \left( k \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right) w_\beta^* \left( k' \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right)}{\omega_j^2(\mathbf{y}) - \omega^2} \times \\ \times \exp \left[ 2\pi i \mathbf{y} \left( \mathbf{x} \begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} - \mathbf{x} \begin{pmatrix} l' \\ k' \end{pmatrix} \right) \right], \quad (1)$$

где  $l$  – номер ячейки;  $k, m_k$  – номер атома в ячейке и его масса,  $\omega_j(\mathbf{y})$  – собственная частота моды с волновым вектором  $\mathbf{y}$  и номером ветви  $j$ ;  $N = L_1 L_2 L_3$  – число ячеек в периодически повторяющемся объеме. Векторы поляризации  $w_\alpha \left( k \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right)$  ( $\alpha = x, y, z$ ) удовлетворяют условиям нормировки и полноты  $\sum_{\alpha k} w_\alpha \left( k \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right) w_\alpha^* \left( k \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j' \end{matrix} \right. \right) = \delta_{jj'} \times$   
 $\times \sum_j w_\alpha \left( k \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right) w_\beta^* \left( k' \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{kk'}$ . Векторы  $\mathbf{x} \begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix}$  и  $\mathbf{y}$  представляются, соответственно, в виде разложения по базисным векторам  $\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_i$  прямой и обратной решетки  $\mathbf{x} \begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} = \mathbf{x}(l) + \mathbf{x}(k) \equiv l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3 + \mathbf{x}(k)$ ,  $\mathbf{y} = (h_1/L_1)\mathbf{b}_1 + (h_2/L_2)\mathbf{b}_2 + (h_3/L_3)\mathbf{b}_3$ , где вектор  $\mathbf{x}(l)$  характеризует положение ячейки, а  $\mathbf{x}(k)$  – положение атома в ячейке;  $h_i$  – целые числа, удовлетворяющие неравенствам  $-1/2 \leq h_i/L_i < 1/2$ , если  $\mathbf{y}$  находится в первой зоне Бриллюэна (ЗБ).

Произведем замещение атомов  $\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d \\ 1 \end{pmatrix}$  с массой  $m_1$  атомами с массой  $m'_1 = m_1 + \Delta m$ . Уравнение для функции Грина такой решетки имеет вид

$$G = g + \Delta m \omega^2 \vec{g} \vec{G}, \quad (2)$$

где направление стрелок над  $g, G$  указывает положение примесных индексов в матрицах, например,  $\vec{g} = g_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & d \\ k & 1 \end{pmatrix}$ ,  $\vec{G} = g_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} d & l \\ 1 & k \end{pmatrix}$ .

Так как расположение примесных атомов считаем периодическим, то для решения (2) удобно ввести новую элементарную ячейку и переобозначить атомы решетки в соответствии с  $\mathbf{x} \begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} = \mathbf{x}(d) + \mathbf{x} \begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} - \mathbf{x}(d) = \mathbf{x}(d) + \mathbf{x}(s) = \mathbf{x} \begin{pmatrix} d \\ s \end{pmatrix}$ , где  $\mathbf{x}(d) = d_1 \mathbf{a}'_1 + d_2 \mathbf{a}'_2 + d_3 \mathbf{a}'_3$  характеризует положение новой ячейки, а  $\mathbf{x}(s)$  – положение атомов в ней. Волновой вектор в такой решетке представляется в виде

$$\mathbf{q} = (r_1/L'_1)\mathbf{b}'_1 + (r_2/L'_2)\mathbf{b}'_2 + (r_3/L'_3)\mathbf{b}'_3 \quad (-1/2 \leq r_i/L'_i < 1/2). \quad (3)$$

Базисные вектора примесной прямой и обратной решеток связаны соотношениями  $\mathbf{a}'_i = n_i \mathbf{a}_i$ ,  $\mathbf{b}'_i = (1/n_i)\mathbf{b}_i$ , причем  $L_i = n_i L'_i$ ,  $N_d = L'_1 L'_2 L'_3$  - число элементарных ячеек в периодическом объеме примесной решетки.

Для решения уравнения (2) перейдем к Фурье-представлению по волновому вектору в соответствии с

$$g_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \vec{\nu} \\ ss' \end{pmatrix} = \sum_{d-d'} g_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} d & d' \\ s & s' \end{pmatrix} \exp \left[ -2\pi i \vec{\nu} \left( \mathbf{x} \begin{pmatrix} d \\ s \end{pmatrix} - \mathbf{x} \begin{pmatrix} d' \\ s' \end{pmatrix} \right) \right], \quad (4)$$

где  $\vec{\nu} = \mathbf{q} + \mathbf{K}_p$  находится в первой ЗБ исходной решетки,  $\mathbf{q}$  имеет вид (3),  $\mathbf{K}_p = p_1 \mathbf{b}'_1 + p_2 \mathbf{b}'_2 + p_3 \mathbf{b}'_3$  - вектор примесной обратной решетки. Используя соотношение

$$\sum_{d-d'} \exp[2\pi i \mathbf{y}(\mathbf{x}(d-d') + \mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(s'))] = N_d \exp[2\pi i \mathbf{K}_p(\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(s'))] \Delta(\mathbf{y}),$$

где  $\Delta(\mathbf{y}) = 0$  при  $\mathbf{y} = \mathbf{K}_p$ ,  $\Delta(\mathbf{y}) = 1$  при  $\mathbf{y} = \mathbf{K}_p$ , получим из (4) и (1)

$$g_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \vec{\nu} \\ ss' \end{pmatrix} = \frac{N_d}{N} \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \left\{ \sum_j \frac{w_\alpha \left( k \left| \begin{matrix} \vec{\nu} \\ j \end{matrix} \right. \right) w_\beta^* \left( k' \left| \begin{matrix} \vec{\nu} \\ j \end{matrix} \right. \right)}{\omega_j^2(\vec{\nu}) - \omega^2} + \left( \frac{N}{N_d} - 1 \right) \int dz \frac{C_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \vec{\nu} \\ ss' \end{pmatrix}}{z - \omega^2} \right\}, \quad (5)$$

где

$$C_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \vec{\nu} \\ ss' \end{pmatrix} = \left( \frac{N}{N_d} - 1 \right)^{-1} \sum_{j \mathbf{K}_p \neq 0} w_\alpha \left( k \left| \begin{matrix} \vec{\nu} + \mathbf{K}_p \\ j \end{matrix} \right. \right) w_\beta^* \left( k' \left| \begin{matrix} \vec{\nu} + \mathbf{K}_p \\ j \end{matrix} \right. \right) \delta(z - \omega_j^2(\vec{\nu} + \mathbf{K}_p)) \times \\ \times \exp[2\pi i \mathbf{K}_p(\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(s'))]$$

$$\int dz C_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \vec{\nu} \\ ss' \end{pmatrix} = \delta_{kk'} \delta_{\alpha\beta} \exp[2\pi i \mathbf{K}_p(\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(s'))]. \quad (6)$$

В (5) выделен член суммы с интересующим нас волновым вектором  $\vec{\nu}$ , а остальные записаны в виде интеграла.

Множество обратных векторов  $\mathbf{K}_p$  в сумме (6) зависит от размерности рассматриваемого объекта. В случае квантовых ям (плоскостей из примесных атомов) вектора

$\mathbf{K}_p$  располагаются вдоль направления, перпендикулярного плоскости квантовой ямы. В случае квантовой нити они находятся в плоскости, перпендикулярной нити. Так как векторы  $\vec{\nu} + \mathbf{K}_p$  не должны выходить из ЗБ исходной решетки, то число членов в сумме зависит от компоненты волнового вектора  $\vec{\nu}_{||}$ , параллельной структуре.

В случае квантовой точки  $\mathbf{K}_p$  располагаются по всему объему ЗБ.

Уравнение для колебательных мод сверхструктуры получается из (2) с помощью операции  $\leftarrow$ :  $Q\tilde{G} \equiv \{\tilde{1} - \Delta m \omega^2 \tilde{g}\} \tilde{G} = \tilde{g}$  и имеет вид

$$\det Q = 0, \quad (7)$$

где  $\tilde{1}$  – единичная матрица в примесном пространстве.

Это уравнение упрощается при нижеследующих условиях. Примесная ячейка содержит один примесный атом (это означает, что квантовые объекты имеют наименьшую толщину в один атом). Решетка исходного кристалла имеет два атома в элементарной ячейке и обладает кубической симметрией, а сверхструктура – симметрией не ниже ортогональной. Рассматриваются оптически-активные колебания ( $\vec{\nu} \rightarrow 0$ ), поляризованные по осям симметрии структуры. В этом случае

$$C_{\alpha\beta} \left( \begin{array}{c} \vec{\nu} \\ 11 \\ z \end{array} \right) = \delta_{\alpha\beta} \Psi_{\alpha}(1, z), \quad (8)$$

вид функции  $\Psi_{\alpha}(1, z)$  следует из (6),

$$w \left( k \left| \begin{array}{c} \vec{\nu} \\ a\kappa \end{array} \right. \right) = (m_k / (m_1 + m_2))^{1/2}, \quad w \left( k \left| \begin{array}{c} \vec{\nu} \\ onm \end{array} \right. \right) = -(-1)^k (m_{2-k} / (m_1 + m_2))^{1/2}$$

( $k = 1, 2$ ), и уравнение (7) принимает вид

$$\eta + x \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\omega_i^2}{\omega_i^2 - \omega^2} = (1 - x) F_{\alpha}(1, \omega^2), \quad (9)$$

где  $\eta = m'_1 / (m_1 - m'_1)$ ,  $x = N_d / N$ ,  $i = \perp, ||$  обозначает частоты поперечных и продольных колебаний при  $\vec{\nu} \rightarrow 0$ ,

$$F_{\alpha}(1, \omega^2) = \omega^2 \int dz \Psi_{\alpha}(1, z) / (\omega^2 - z) - 1.$$

Обсудим решение уравнения (9) в различных случаях. Рассмотрим, прежде всего, случай идеальной сверхструктуры, когда функция  $\Psi_{\alpha}(1, z)$  имеет вид суммы  $\delta$ -функций. Решения (9) представляют собой пересечения дисперсионных кривых осциллятора  $\omega_i(\vec{\nu})$

(левая часть (9)) и осцилляторов  $\omega_j(\vec{\nu} + \mathbf{K}_p)$  (правая часть (9)). При условии вырождения  $\omega_i(\vec{\nu}) = \omega_j(\vec{\nu} + \mathbf{K}_p)$  появляются щели в спектре. Число решений для данной ветви  $j$  равно  $3n(N/N_d)$ , где  $3$  – число поляризации,  $n$  – число атомов в ячейке исходной решетки. При  $x \rightarrow 0$  одно из решений  $\omega_i(x) \rightarrow \omega_i$ .

Рассмотрим теперь неидеальную сверхструктуру. В этом случае при достаточно малом  $x$  разность частот соседних осцилляторов  $\omega_j(\vec{\nu} + \mathbf{K}_p)$  может оказаться меньшей ширины осциллятора, возникающей из-за разброса параметров структуры или ангармонизма. Тогда сумма по  $\mathbf{K}_p$  в (8) может быть заменена на интеграл, и мы получим

$$\Psi_\alpha(1, z) = \Omega_d \sum_j \int (dy)^d \left| w_\alpha(1 \mid \frac{\mathbf{y}}{j}) \right|^2 \delta(z - \omega_j^2(\mathbf{y})),$$

где  $d$  – размерность пространства волновых векторов  $\mathbf{y}$ ,  $\Omega_d$  – объем элементарной ячейки в пространстве  $d$  измерений,  $d = 3 - d_r$ , где  $d_r$  – размерность квантового объекта (например,  $d_r = 2$  для квантовой ямы). Уравнение (9) в этом случае имеет вид уравнения для колебательных мод  $d$ -мерного твердого раствора.

На рис. 1 представлено графическое решение уравнения (9) в случае разупорядоченной сверхрешетки ( $d_r = 2$ ,  $d = 1$ ). Плотность состояний  $\Psi_\alpha(1, \omega^2)$  изображена для случая частично перекрывающихся по частоте продольной и поперечной оптических ветвей и полностью вырожденных акустических ветвей. Функция  $\Phi_i(\omega^2)$  представляет собой правую часть уравнения (9), деленную на  $(1 - x)$ . На рис. 2 изображена деталь рис. 1 при учете малого затухания. Видно, что имеется решение  $\omega_i(x) \rightarrow \omega_i$  при  $x \rightarrow 0$  (точка  $r$ ). Однако при увеличении  $x$  оно быстро аннигилирует (в отличие от случая  $d = 3$ ,  $d_r = 0$  с менее резкими особенностями) с антирезонансом  $a$ . Остается лишь решение типа локальной моды ( $l$ ).

Кроме обсужденных выше крайних случаев может быть рассмотрен промежуточный случай малого разупорядочения, когда (8) имеет вид ряда уширенных, но не слившихся пиков. В этом случае, в отличие от второго, эволюция спектра с изменением  $x$  имеет многомодовый характер. Такой тип перестройки спектра наблюдался в твердых растворах с сильной корреляцией [4].

С помощью выражений (2) и  $\vec{G} = Q^{-1}\vec{g}$  может быть рассчитана диэлектрическая функция системы. Она имеет вид, приведенной в [5], только фигурирующая там функция  $\Psi(1, z)$  должна быть заменена на функцию (8) данной работы.

Соответствующие предположениям данной статьи сверхструктуры могут быть построены из компонент  $AB$  и  $BC$ , образующих твердые растворы  $A_x B_{1-x} C$  во всем

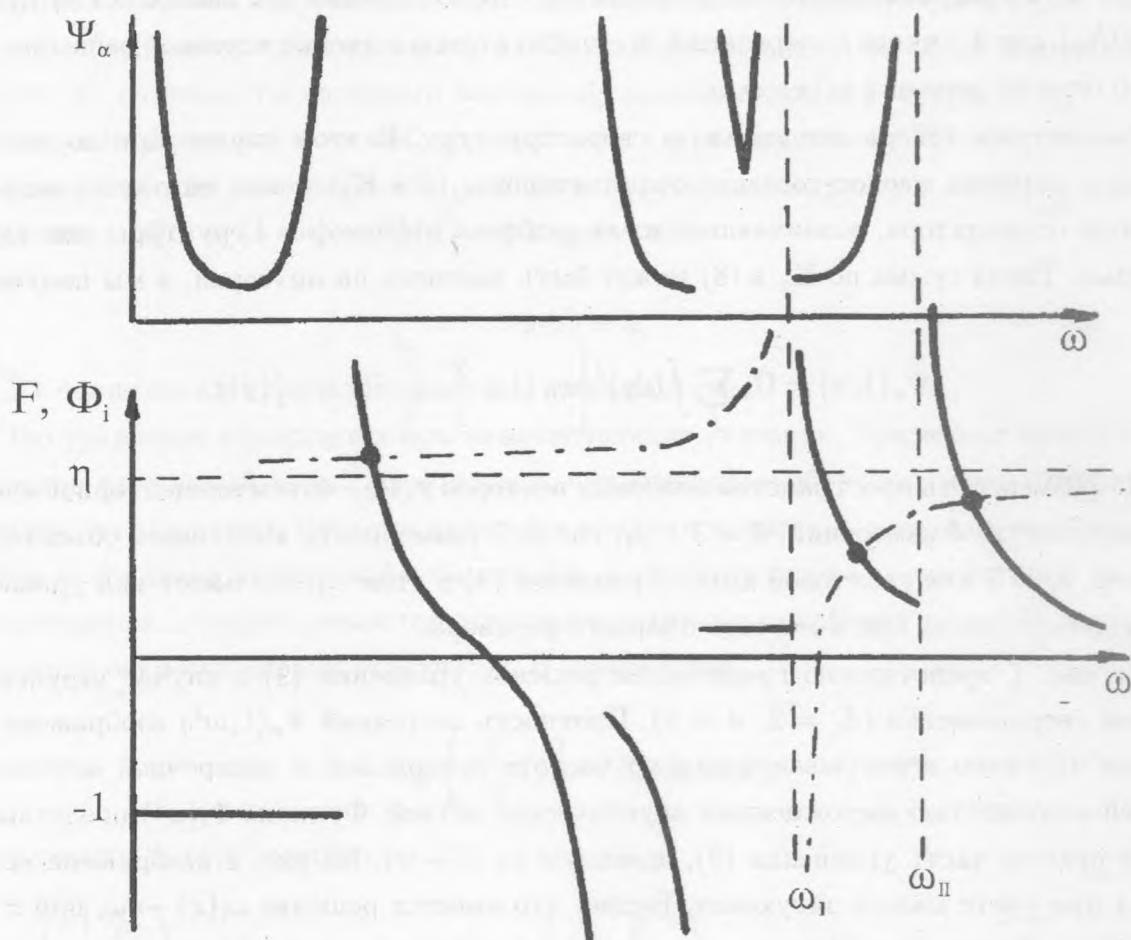


Рис. 1. Графическое решение уравнения (9). Функции  $F$ ,  $\Psi_\alpha$  – сплошные кривые, функция  $\Phi_i$  ( $i = \perp$ ) – штрих-пунктирная кривая.

интервале составов  $x$  и имеющих на его границах локальные или щелевые моды. Относительные изменения силовых констант  $\Delta k/k$ , возникающие при замещении  $B \rightarrow A$ , можно оценить, рассчитав выражение  $(\omega_{ACi}^2 M_{AC}) / (\omega_{BCi}^2 M_{BC}) - 1 = \Delta k/k$ , где  $\omega_{ACi}$ ,  $\omega_{BCi}$  – частоты оптически активных поперечных ( $i = \perp$ ) и продольных ( $i = \parallel$ ) мод компонент  $AC$ ,  $BC$ , а  $M_{AC}$ ,  $M_{BC}$  – их приведенные массы. Для большинства твердых растворов на основе полупроводниковых соединений IV – IV, II – VI, III – V  $\Delta k/k$  имеет величину около 10%. Имеются также твердые растворы с отклонениями от этой средней величины в ту и другую стороны. Так, для  $Al_x Ga_{1-x} As$   $\Delta k/k \simeq 5\%$ , для  $Al_x In_{1-x} Sb$

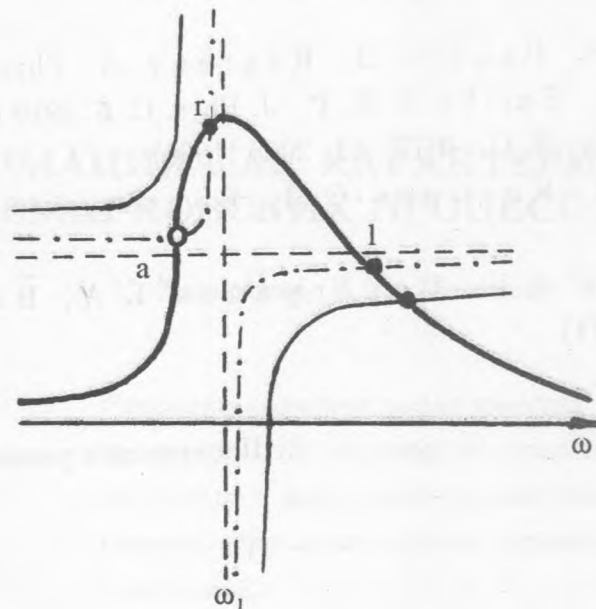


Рис. 2. Деталь рис. 1 при учете затухания. Функция  $\Phi_{\perp}$  при различных значениях  $x$ : штрихпунктирная и тонкая сплошная кривая. Последняя соответствует большему  $x$ .

$\Delta k/k \simeq 16\%$ .

Сверхструктуры с  $d_{\Gamma} = 2$  (сверхрешетки) могут быть построены из одного монослоя  $AC$  и  $n$  монослоев  $BC$ . В короткопериодных сверхрешетках в спектрах комбинационно-го рассеяния или инфракрасного поглощения должны наблюдаться моды "свернутых" фононов, определяемых, в основном, толстым слоем  $BC$ , и сильно отщепленные от них по частоте моды от монослоя  $AC$ . При увеличении толщины слоя  $BC$  до некоторого значения  $n_c$  ( $n_c$  зависит от качества сверхрешетки) структура в спектре от "свернутых" фононов должна размываться и вместо нее оставаться только оптически активная мода слоя  $BC$ . Отщепленные моды превращаются в локальные моды одномерного твердого раствора.

Аналогичные сверхструктуры с  $d_{\Gamma} = 1, 0$  (нити, точки) можно попытаться выращивать в канавках и ямках, образованных ступеньками и пересечениями ступенек поверхностей с большими индексами.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект N 94-02-04634).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Jusserand B., Paquet D., Regreny A. Phys. Rev., **B30**, 6245 (1984).
- [2] Dumelow T., Smith S. R. P. J. Phys. C, **5**, 2919 (1993).
- [3] Виноградов В. С. ФТТ, **11**, 2063 (1969).
- [4] Пырков В. Н., Козырев С. П., Водопьянов Л. К. ФТТ, **35**, 2479 (1993).
- [5] Водопьянов Л. К., Виноградов Е. А., Виноградов В. С. ФТТ, **16**, 849 (1974).

Поступила в редакцию 27 декабря 1995 г.