

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОПТИЧЕСКИХ И ИНТЕРФЕЙСНЫХ ФОНОНОВ И ИХ АНИЗОТРОПИЯ В СВЕРХРЕШЕТКАХ GaAs/AlAs: ЭКСПЕРИМЕНТ И РАСЧЕТЫ

В. А. Володин^{a,b}, В. А. Сачков^c, М. П. Синюков^a*

*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

*^bНовосибирский государственный университет
630090, Новосибирск, Россия*

*^cОмский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук
644040, Омск, Россия*

Поступила в редакцию 6 ноября 2014 г.

Расчитаны и экспериментально исследованы угловая анизотропия интерфейсных фононов и их взаимодействие с оптическими фононами в сверхрешетках GaAs/AlAs (001). В эксперименте применялся метод спектроскопии комбинационного рассеяния света в различных геометриях рассеяния, для фононов с волновым вектором, направленным как по нормали к сверхрешетке, так и вдоль ее слоев. Для расчетов частот фононов применялся расширенный метод Борна с учетом кулоновского взаимодействия в приближении жестких ионов. Спектры комбинационного рассеяния света были рассчитаны в приближении поляризуемости связей Волькенштейна. Расчеты подтвердили, что экспериментально наблюдаемая угловая анизотропия фононов возникает вследствие взаимодействия (смешивания) оптических фононов, в которых атомы смещаются в основном по нормали к сверхрешетке, с интерфейсными фононами (TO-IF-моды). В геометрии рассеяния, когда волновой вектор лежит в плоскости слоев сверхрешеток, смешанные TO-IF-моды наблюдаются в нерезонансных условиях. Спектры комбинационного рассеяния света TO-IF-мод зависят от перемешивания атомов на гетерограницах.

DOI: 10.7868/S0044451015050043

1. ВВЕДЕНИЕ

Сверхрешетки — это твердотельные наногетроструктуры с искусственно задаваемым периодом в одном из направлений [1, 2]. Прежде всего, они интересны как объекты, в которых можно управлять энергетическим спектром электронов, в англоязычной литературе этот подход называется “band gap engineering”. Достижения современных технологий эпитаксии дают возможность контролируемого роста различных материалов с точностью до одного монослоя (МС “monolayer ML”) [3]. Такие структуры можно рассматривать как рукотворный кристалл, в примитивной ячейке которого содержатся несколько атомов, их количество определяется периодом сверхрешетки. Модификация структуры приводит

к модификации фононного спектра сверхрешеток. Это прежде всего эффект «свертки» акустических фононных мод и эффект локализации оптических мод, которые наблюдались с использованием метода спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) [3–11].

Сверхрешетки, как и слоистые структуры, являются объектами с выделенным направлением, поэтому в них должна проявляться угловая анизотропия дисперсии электромагнитных волн [12]. Дополнительный период приводит к свертке акустических ветвей, что было теоретически предсказано для макроскопических слоистых структур [13]. Кулоновское взаимодействие влияет на частоты фононных мод с волновыми векторами больше 100 см^{-1} , так как в этом случае можно пренебречь эффектами запаздывания вследствие конечности скорости света [14, 15]. Согласно расчетам, учет кулоновского взаимодействия в сверхрешетках приво-

*E-mail: volodin@isp.nsc.ru

дит к угловой анизотропии для оптических мод, обладающих большим дипольным моментом [16, 17]. Поскольку большинство полупроводниковых гетероструктур непрозрачны в видимом свете, при исследовании их методом КРС применяется геометрия обратного или квазиобратного рассеяния, при этом фотоны взаимодействуют с квазичастицами, импульс которых направлен перпендикулярно слоям сверхрешетки. Для исследования угловой анизотропии фононов необходимо использовать геометрию рассеяния вперед (forward scattering), а значит использовать свет, который не поглощается в подложке, либо изготавливать мембраны (вытравливая подложку) [18, 19]. Поэтому экспериментальных работ по исследованию угловой анизотропии фононов мало, хотя эта проблема остается актуальной задачей физики фононов в твердотельных наноструктурах [20]. С развитием экспериментальной техники и совершенствованием приборов для исследования КРС на микрообъектах (micro-Raman) появилась возможность применять геометрию рассеяния, в которой волновой вектор света не только перпендикулярен слоям сверхрешетки, но и лежит в ее плоскости, при освещении ее с «торца» [20–24]. Именно этот подход был использован в данной работе.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Сверхрешетки GaAs/AlAs были выращены с применением метода молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке GaAs с ориентацией (001). Сначала выращивались толстые буферные слои GaAs и AlAs, затем чередующиеся слои AlAs и GaAs, толщины которых составляли от 5 до 26 нм. Параметры сверхрешеток приведены в табл. 1. Некоторые сверхрешетки были покрыты относительно толстым защит-

Таблица 1. Параметры исследуемых сверхрешеток

№	GaAs, MLs	AlAs, MLs	Количество периодов	Толщина, нм	Защитный слой GaAs, нм
1	5	5	120	336	24
2	7	7	103	412	нет
3	9	9	20	100	нет
4	9	26	30	294	9

ным слоем GaAs, так как тонкие слои GaAs при хранении на воздухе могут окислиться, а слои AlAs химически нестабильны, при взаимодействии с кислородом образуют окислы, сквозь которые способен диффундировать кислород, и вся сверхрешетка может окислиться. Угловая анизотропия фононов исследовалась в геометрии обратного рассеяния. Все спектры регистрировались при комнатной температуре при возбуждении линией аргонового лазера 514.5 нм. Пространственное разрешение определялось размерами лазерного пучка в фокусе и составляло величину меньше одного микрометра. Мощность излучения, доходящего до образца, составляла 1 мВт, что не вызывало заметного нагрева образцов. Использовалось оборудование научно-образовательного комплекса «Наносистемы и современные материалы» Новосибирского государственного университета — спектрометр T64000 производства Horiba Jobin Yvon с приставкой для микроскопических исследований КРС на базе микроскопа Olympus.

3. ДЕТАЛИ РАСЧЕТОВ

Расчеты фононного спектра и спектров КРС вычислялись с помощью феноменологической модели Борна (приближение двухчастичного взаимодействия) [14], с учетом взаимодействия атома не только с ближайшими соседями, но и с атомами следующих координационных сфер (так называемая расширенная модель Борна). Для моделирования фононов в гетероструктурах GaAs/AlAs использовался метод массо-замещения [27, 28] на основе модельных параметров арсенида галлия (в случае атома алюминия менялась только масса). Учет дальнего действия кулоновского взаимодействия проводился в дипольном приближении. Эффективный заряд (e) катионов и анионов был найден из разницы квадратов [14] продольной ($\omega_L = 292.6 \text{ см}^{-1}$) и поперечной ($\omega_T = 269 \text{ см}^{-1}$) частот,

$$\frac{1}{a_0^3} \frac{e^2}{\epsilon} = \frac{1}{16\pi} \frac{m_{\text{Ga}} m_{\text{As}}}{m_{\text{Ga}} + m_{\text{As}}} (\omega_L^2 - \omega_T^2) = \frac{9.52 \cdot 10^4}{N_A} \frac{\text{г}}{\text{см}^2},$$

здесь a_0 — постоянная решетки GaAs, N_A — число Авогадро, m_{Ga} и m_{As} — массы соответственно атомов галлия и мышьяка. Упругие параметры подгонялись методом наименьших квадратов к экспериментальным данным рассеяния нейтронов на фононах в направлениях Δ , Σ , Λ , Z и Q , полученным при

$T = 12 \text{ K}$ [25]. Частоты фононов при комнатной температуре получались из следующей зависимости их от температуры: $\delta\omega/\delta T = 1.35 \cdot 10^{-2} \text{ см}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ [26].

Интенсивность КРС для каждой моды вычислялась в приближении аддитивной поляризуемости связей Волькенштейна [29]. 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 [30]. Параметры для расчетов гетероструктуры на основе GaAs и AlAs взяты из работы Кастрилло с соавторами [30]. Более детально расчеты описаны в работе [31].

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 показаны спектры всех сверхрешеток и объемного GaAs в случае, когда волновые векторы падающего и рассеянного фотона перпендикулярны плоскости образца. Спектры получены в гео-

метрии $Z(XY)-Z$. Здесь и далее оси в скобках соответствуют направлению поляризации вектора напряженности электрического поля падающей и рассеянной электромагнитных волн, а оси вне скобок показывают направление волнового вектора падающей и рассеянной электромагнитных волн. Оси X, Y и Z параллельны кристаллографическим направлениям соответственно (100), (010) и (001). В спектрах отчетливо наблюдаются пики, свидетельствующие о квантовании фононного спектра. В случае обратного рассеяния от поверхности (001) разрешенными для кристаллов с решетками типа цинковой обманки и алмаза являются только продольные моды. Для фононов, в которых атомы смещаются вдоль направлений X, Y и Z , компоненты тензора КРС ($D_{\alpha\beta}$) имеют вид

$$\begin{aligned} \text{TO}_X \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{TO}_Y \begin{pmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \text{LO}_Z \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1)$$

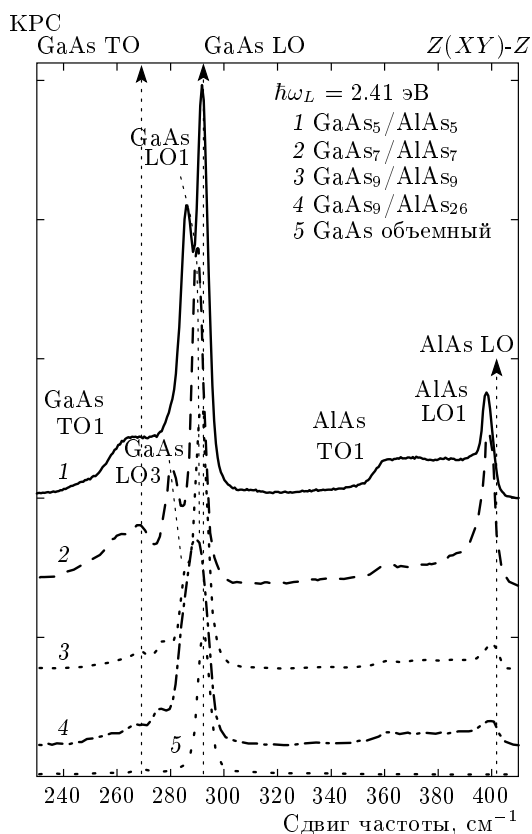


Рис. 1. Экспериментальные спектры КРС сверхрешеток GaAs/AlAs и объемного GaAs, волновой вектор света направлен по нормали к поверхности

где d определяется дифференциальной поляризуемостью связей при изменении их длины либо угла между ними [3, 11, 30–32]. В соответствии с правилами отбора, интенсивность КРС пропорциональна $(E_s^\alpha D_{\alpha\beta} E_i^\beta)^2$, где E_i — вектор поляризации падающего света, а E_s — вектор поляризации рассеянного света. Если оба этих вектора лежат в плоскости XY , то интенсивность рассеяния для мод TO_X и TO_Y равна нулю. Однако в спектрах видны пики от локализованных поперечных оптических мод первого порядка (TO_1 -моды) от AlAs и GaAs и TO -мода объемного GaAs. Это связано со смягчением правил отбора, что может быть обусловлено отклонением волновых векторов фотонов от нормали (объектив микроскопа собирает рассеянный свет в пределах большого телесного угла), а также дефектами и влиянием гетерограниц. Интенсивность разрешенных продольных мод гораздо больше, и в спектре на рис. 1 можно наблюдать пики от локализованных в слоях GaAs и AlAs продольных оптических мод первого порядка (LO_1), а для GaAs (в некоторых сверхрешетках) еще и разрешенную моду более высокого порядка (LO_3). Номер моды соответствует количеству полуволн оптических колебаний, укладывающихся в пределах слоя, четные моды при этом запрещены правилами отбора в случае нерезонансного КРС [3, 8]. Вблизи центра зоны Бриллюэна дисперсия оптиче-

ских фононов такова, что их частота уменьшается с ростом волнового вектора, поэтому сдвиг частот LO1-мод свидетельствует о локализации (квантовании) оптических фононов. В табл. 2 приведены экспериментально полученные и рассчитанные частоты LO1-мод в слоях GaAs. Частота длинноволнового LO-фонона в объемном GaAs по нашим данным составила 292.5 см^{-1} . Видно качественное совпадение расчетов и эксперимента (при уменьшении толщины слоев GaAs частоты LO1-мод в GaAs уменьшаются), однако наблюдается количественное различие. Это связано как с некоторой упрощенностью модели, так и с тем, что в реальных структурах на гетерогранице всегда есть перемешивание материалов, которое приводит к уменьшению «эффективной» толщины слоев [10]. Для слоев AlAs также наблюдается сдвиг частот LO1-мод по сравнению с частотой LO-фонона в объемном AlAs (которая по литературным данным составляет 401.5 см^{-1} , [33]). Заметим, что в слоях AlAs не наблюдается LO3-мод, а видна просто широкая особенность. Это связано с большим (чем в слоях GaAs) перемешиванием материалов, слои AlAs по сути представляют собой модулированный по толщине твердый раствор AlGaAs, а не чистый AlAs. Однако отметим, что квантование оптических фононов наблюдается как в слоях GaAs, так и в слоях AlAs (в последнем случае по крайней мере для LO1-мод).

На рис. 2–5 представлены спектры всех сверхрешеток для геометрии рассеяния, в которой волновые векторы падающего и рассеянного света лежат в плоскости сверхрешетки. Тензоры КРС для фононов, в которых атомы смещаются вдоль направлений (X', Y', Z) , теперь имеют вид

$$\begin{aligned} LO_{X'} & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & d \\ d & d & 0 \end{pmatrix}, \\ TO_{Y'} & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -d \\ 0 & 0 & d \\ -d & d & 0 \end{pmatrix}, \\ TO_Z & \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2)$$

Направления осей X' и Y' — это кристаллографические направления соответственно (110) и $(\bar{1}\bar{1}0)$. Обратим внимание на то, что поскольку волновой вектор теперь направлен вдоль оси X' , фонон с направлением смещения атомов вдоль оси Z

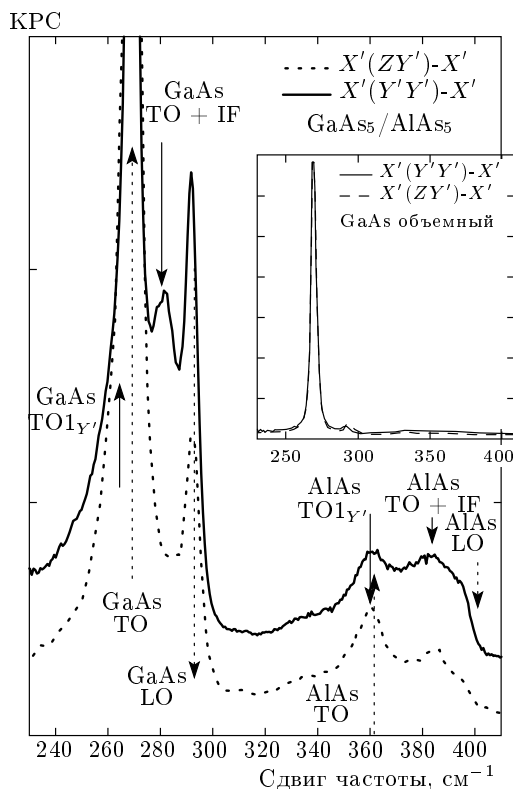


Рис. 2. Экспериментальные спектры КРС сверхрешетки GaAs₅/AlAs₅, волновые векторы падающего и рассеянного света направлены вдоль слоев сверхрешетки, поляризационные геометрии ZY' и Y'Y'. На вставке к рисунку — спектры монокристаллического GaAs в тех же поляризационных геометриях

теперь является поперечным, а не продольным. В данной геометрии фонон LO_{X'} запрещен во всех поляризациях. Фонон TO_Z разрешен только в геометрии X'(Y'Y') – X', а фонон TO_{Y'} разрешен только в геометрии X'(ZY') – X'. Это позволило регистрировать эти моды по отдельности. На рис. 2–5 приведены спектры, полученные в геометриях X'(ZY') – X' и X'(Y'Y') – X'. В работе [20] было показано, что для объемного GaAs в геометрии X'(ZY') – X' разрешен фонон TO_{Y'}, в геометрии X'(Y'Y') – X' — фонон TO_Z. Частоты этих фононов очень близки к частотам мод TO1_{Y'} и TO1_Z в сверхрешетке, поэтому их не всегда удалось разрешить, особенно для относительно тонких сверхрешеток и для сверхрешеток с защитным слоем GaAs. Другой особенностью спектров является присутствие аномально интенсивных пиков от продольных LO_{X'}-мод, которые запрещены правилами отбора. Так, для образца 1 (табл. 1) сверхрешетка

Таблица 2. Экспериментальные и рассчитанные частоты активных в КРС мод

№	LO1-Z(XY) - Z		IF+LO(TO) X'(Y'Y') - X'	
	Эксперимент	Расчеты	Эксперимент	Расчеты
1 - GaAs ₅ /AlAs ₅	286.5	291.8	281	282.2 273.4
2 - GaAs ₇ /AlAs ₇	290	292.2	279	278.4
3 - GaAs ₉ /AlAs ₉	291	292.3	283	281.1 275.8
4 - GaAs ₉ /AlAs ₂₆	291	292.3	284	284.4 277.5

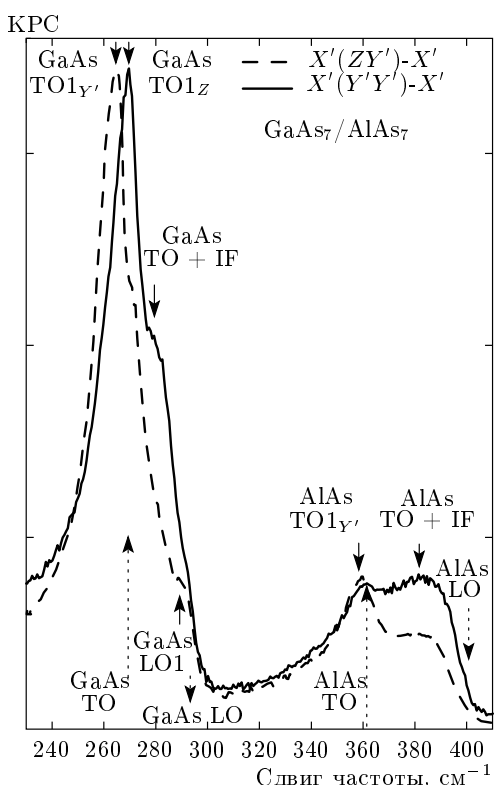


Рис. 3. Экспериментальные спектры КРС сверхрешетки GaAs₆/AlAs₆, поляризационные геометрии ZY' и Y'Y'

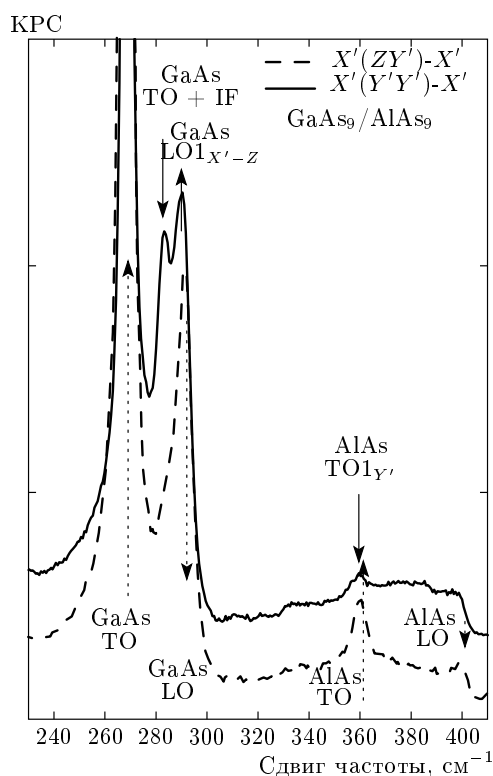


Рис. 4. Экспериментальные спектры КРС сверхрешетки GaAs₉/AlAs₉, поляризационные геометрии ZY' и Y'Y'

GaAs₅/AlAs₅ (рис. 2) в геометрии X'(Y'Y') - X' интенсивность разрешенного TO_Z-пика (для удобства восприятия он обрезан) всего в 3 раза больше интенсивности запрещенного LO_{X'}-пика. В геометрии X'(ZY') - X' интенсивность разрешенного TO_Y-пика (на рис. 2 для удобства восприятия он также обрезан) всего в 10 раз больше интенсивности

запрещенного LO_{X'}-пика. Для примера на вставке на рис. 2 показаны спектры монокристаллического GaAs, на которых видно, что интенсивность запрещенной LO_{X'}-моды в 30 раз меньше по сравнению с интенсивностью разрешенных поперечных мод. Нарушение правил отбора в сверхрешетках связано, по-видимому, с тем, что рабочий слой с толщиной от 100 до 412 нм (табл. 1) фактически является вол-

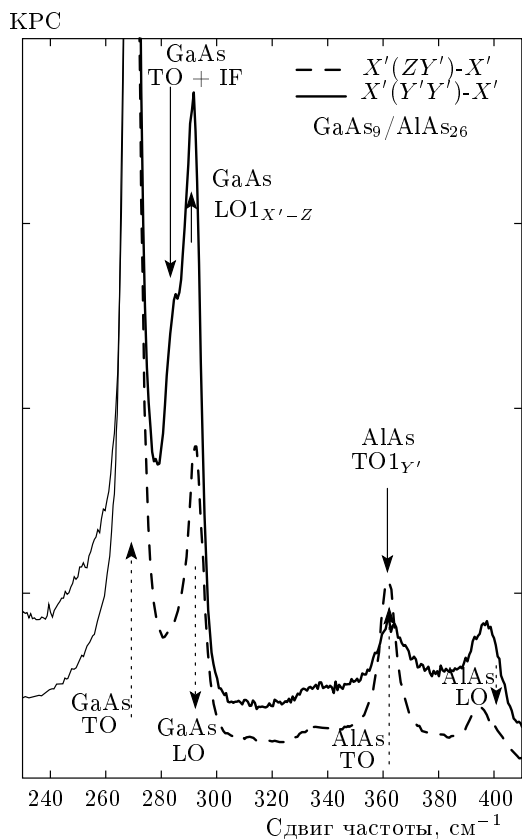


Рис. 5. Экспериментальные спектры КРС сверхрешетки GaAs₉/AlAs₂₆, поляризационные геометрии ZY' и Y'Y'

новодом (нижняя граница которого — подложка, а верхняя граница — защитные слои GaAs), в котором свет затухает и рассеивается, меняя свое направление, поэтому правила отбора смягчаются.

Если обратиться к табл. 1, то видно, что толщина всех сверхрешеток меньше, чем размер лазерного пятна, поэтому в спектрах КРС в геометрии с «торца» присутствует вклад от подложки или от защитного слоя. Для тонких сверхрешеток этот вклад был настолько силен, что на фоне сигнала от подложки невозможно было разрешить сигнал от сверхрешетки. Таким образом, вклад от объемного GaAs привел к тому, что моды TO_{1Y'} и TO_{1Z} удалось разрешить только для «толстой» сверхрешетки GaAs₇/AlAs₇ [20]. В данной работе мы обсудим другие эффекты — а именно, проявление во всех спектрах в геометрии X'(Y'Y') – X' моды с частотой, находящейся в промежутке между частотами продольных и поперечных мод. Некоторые особенности в геометрии X'(Y'Y') – X' наблюдаются также и для фононов, локализованных в слоях AlAs,

но по упомянутым выше причинам (неидеальность данных слоев вследствие перемешивания с Ga) этот эффект не столь ярок. В дальнейшем мы будем обсуждать только моды, локализованные в слоях GaAs. Экспериментальные значения частот этих мод приведены в табл. 2.

Особенно хорошо эти моды проявляются в сверхрешетках GaAs₅/AlAs₅ (рис. 2) и GaAs₉/AlAs₉ (рис. 4). Обратим внимание на то, что частоты наблюдаемых мод близки к частоте так называемых интерфейсных (IF) мод. Впервые данные моды были обнаружены в работе [18] в сверхрешетках GaAs₅/AlAs₄ (001) в спектрах КРС в геометрии обратного рассеяния. В работе [18] Мерлин и соавторы обнаружили дополнительный пик, расположенный между TO- и LO-фононами, причем (что важно отметить) этот пик наблюдался только в условиях резонансного рассеяния. Было предположено, что дополнительный пик вызван оптической модой «эффективной среды», распространяющейся в плоскости слоев и локализованной около интерфейса. В приближении эффективной среды частоты интерфейсных мод зависят от соотношений толщин слоев материалов сверхрешетки, а сами они затухают экспоненциально с показателем степени ($-q_z z$) [3], при удалении от интерфейса. Таким образом, в макроскопической модели частоты интерфейсных мод не зависят от абсолютных значений толщин слоев в сверхрешетках [3]. В случае равенства толщин слоев в сверхрешетках частоты интерфейсных мод определяются равенством $\epsilon_1 = -\epsilon_2$ (формула (3.29) в работе [3]), здесь ϵ_1 и ϵ_2 — это диэлектрические проницаемости материалов. Если воспользоваться параметрами для диэлектрических проницаемостей GaAs и AlAs, которые, например, приведены в работе [34], то частоты интерфейсных мод составляют 282 и 384 см⁻¹ для подобных мод соответственно GaAs и AlAs. Из экспериментальных данных видно, что эти частоты близки к экспериментально наблюдаемым данным (табл. 2), однако несколько отличаются от них. Отметим, что толщины исследуемых нами сверхрешеток составляют несколько МС, поэтому макроскопическая модель уже не является точной в данном случае.

Важным также представляется результат по поляризационной зависимости IF-фонона. На рис. 2–5 видно, что он проявляется в геометрии X'(Y'Y') – X' и не проявляется в геометрии X'(ZY') – X'. Это соответствует симметрии данных колебаний, согласно работам [3, 18] он относится к группе симметрии типа E и не наблюдается в геометрии Z(XY) – Z, однако наблюдается в резонансных условиях в гео-

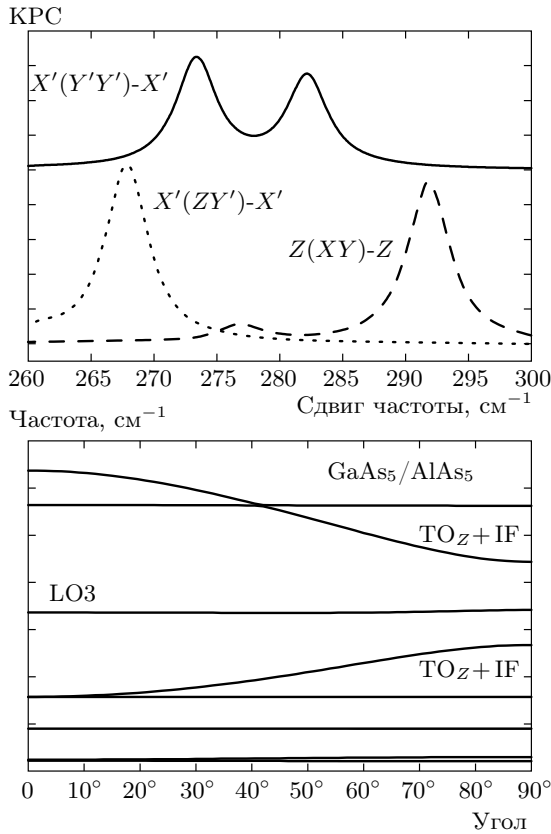


Рис. 6. Рассчитанные спектры комбинационного рассеяния света сверхрешетки GaAs₅/AlAs₅ (вверху), угловая анизотропия оптических мод (внизу)

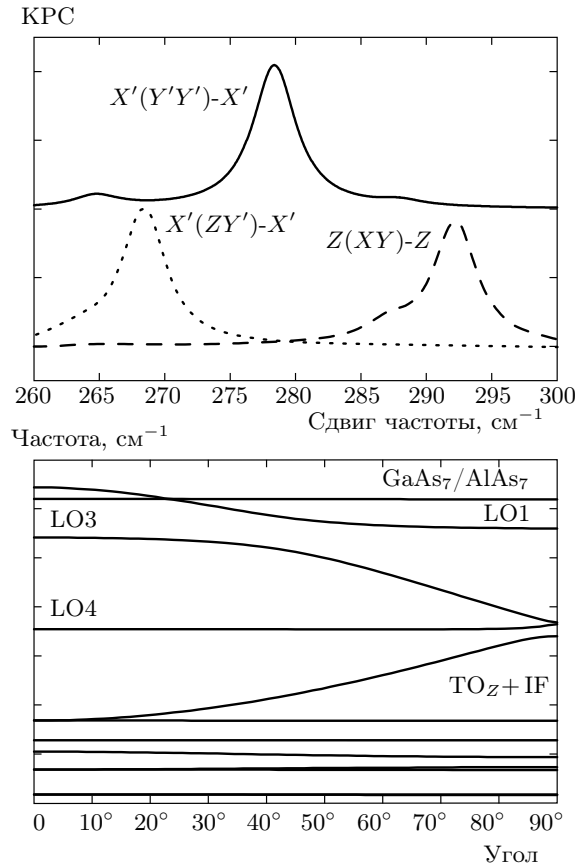


Рис. 7. Рассчитанные спектры КРС сверхрешетки GaAs₇/AlAs₇ (вверху), угловая анизотропия оптических мод (внизу)

метрии $Z(Y'Y') - Z$ как результат проявления фрёлиховского механизма рассеяния. Если рассчитать интенсивность пика КРС IF-фонона в геометрии $X'(Y'Y') - X'$, пользуясь тензорами (2) для объемного материала, то она будет пропорциональна d^2 , что соответствует интенсивности разрешенного LO_Z -фонона в геометрии $Z(XY) - Z$ (1). Как будет показано далее в расчетах, для сверхрешеток это соотношение приблизительно выполняется.

Нами были рассчитаны частоты фононов и смещения атомов в феноменологической модели. Затем в приближении поляризуемости связи Волькенштейна [29, 30] были рассчитаны спектры КРС. Результаты расчетов представлены на рис. 6–11. Из расчетов следует, что в геометрии $X'(Y'Y') - X'$ почти для всех сверхрешеток должны наблюдаться две активные в КРС моды (кроме сверхрешетки GaAs₇/AlAs₇, где данный дублет не разрешим, а вырожден по частоте). Рассчитаны были также угловые зависимости частот фононов для всех сверхрешеток (нижняя часть рис. 6–9). Отметим, что вол-

новой вектор фононов, передающих при обратном рассеянии фотону практически его удвоенный импульс, в нашем случае составляет $1.8 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$ [35]. Это гораздо больше предела, при котором необходимо учитывать эффекты запаздывания кулоновского взаимодействия (как отмечалось выше, этот предел составляет порядка 100 см^{-1}), но все же на порядок меньше границы зоны Бриллюэна в направлении роста сверхрешетки и на два с лишним порядка меньше границы зоны Бриллюэна в латеральных направлениях. Следовательно, исследуемые в нашем случае фононы являются длинноволновыми. Как показал анализ смещений атомов, перемешивание LO- и TO-фононов не существенно. Например в моде, показанной на рис. 11, смещение атомов вдоль направления X' почти на два порядка меньше, чем вдоль направления Z . Исключение составляет случай сверхрешетки GaAs₇/AlAs₇, где в моде $TO_Z + IF$ смещение атомов вдоль направления X' всего на 1 порядок меньше, чем вдоль направления Z . Вернем-

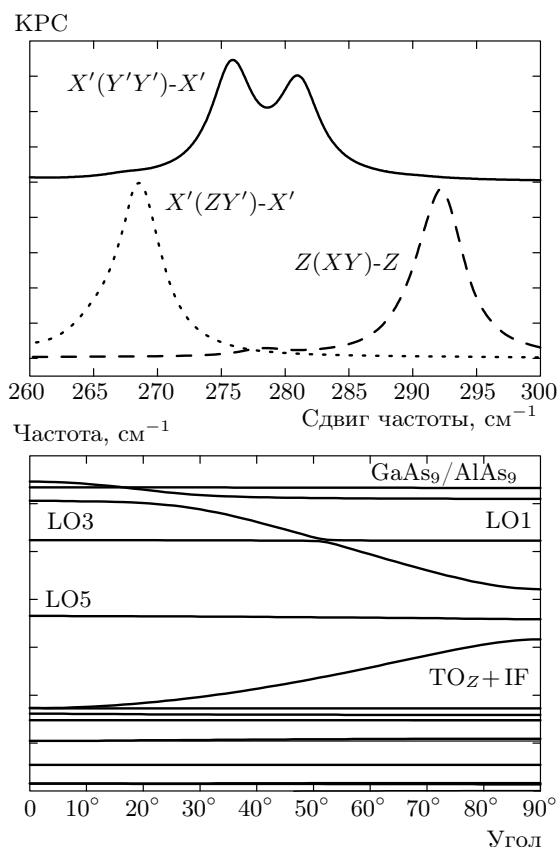


Рис. 8. Рассчитанные спектры КРС сверхрешетки GaAs₉/AlAs₉ (вверху), угловая анизотропия оптических мод (внизу)

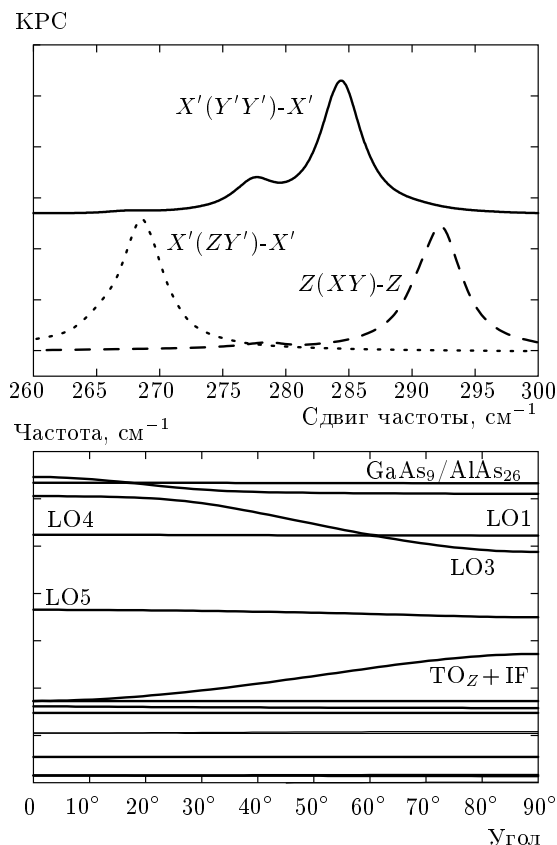


Рис. 9. Рассчитанные спектры КРС сверхрешетки GaAs₉/AlAs₂₆ (вверху), угловая анизотропия оптических мод (внизу)

ся к рис. 7, на котором видно, что в этом случае частота вырожденного дублета очень близка к частоте LO4-моды (которая практически не обладает угловой дисперсией). Возможно, это является причиной перемешивания данных мод и большего присутствия в них продольных смещений атомов.

Для сверхрешетки GaAs₉/AlAs₉ был рассчитан вид спектров КРС в зависимости от угла падения света, который отсчитывался от нормали к сверхрешетке (рис. 10). Видно, что разрешенная при нулевом угле падения (волновой вектор направлен перпендикулярно слоям сверхрешетки) LO1-мода плавно уменьшает частоту и интенсивность и эволюционирует в TO+IF-моду при угле падения 90° (волновой вектор лежит в плоскости слоев сверхрешетки). Запрещенная при нулевом угле падения TO1-мода плавно увеличивает частоту и интенсивность. Напомним, что эту моду не удалось наблюдать в эксперименте. Моды, наблюдаемые в геометрии X'(Y'Y') – X', являются не чисто интерфейсными и не чисто поперечными оптическими, о чем сви-

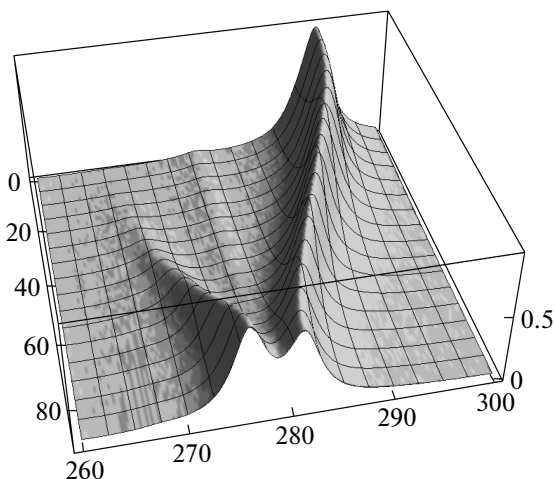


Рис. 10. Рассчитанные спектры КРС сверхрешетки GaAs₅/AlAs₅ в зависимости от угла, отсчитываемого от нормали к сверхрешетке

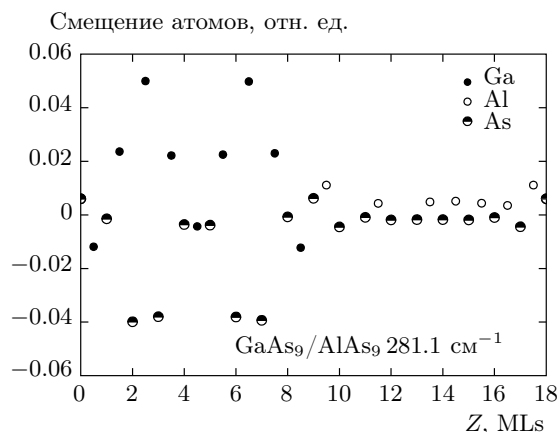


Рис. 11. Рассчитанные смещения атомов в сверхрешетке GaAs₅/AlAs₅ для моды, наблюдаемой в геометрии Y'Y'

детельствует следующее. Как уже отмечалось, частота интерфейсных мод зависит от соотношения толщин слоев материалов сверхрешетки, поэтому она не должна изменяться при пропорциональном увеличении толщин слоев. Но как следует из табл. 2 (сверхрешетки 1–3), частота данной моды не монотонно зависит от толщины (одинаковой для слоев GaAs и AlAs), а на рис. 11 видно, что фононы не строго локализованы в слоях GaAs, атомы Al отклоняются, причем не наблюдается затухания этих отклонений к центру слоя AlAs. Значит, эта мода не является строго локализованной. Отметим, что для оптических фононов, являющихся собственными для GaAs, затухание в слоях AlAs существенно — глубина проникновения составляет всего 1–2 МС [3, 35]. На рис. 11 видно также, что огибающая функция смещений атомов в слое GaAs имеет довольно сложный вид, а не представляет собой полуволну, как в чистой TO1-моды.

Таким образом, из сравнительного анализа экспериментальных и рассчитанных спектров можно сделать вывод, что в случае короткопериодных сверхрешеток нет чистых интерфейсных и локализованных оптических мод, они всегда «перемешаны». Особенно хорошо это следует из анализа зависимостей интенсивности этих мод от угла (рис. 10) и анализа атомных смещений (рис. 11). Другим важным результатом является то, что интерфейсные моды в геометрии, в которой волновой вектор света лежит в плоскости сверхрешеток, наблюдаются в нерезонансных условиях. Напомним, что в пионерских работах интерфейсные моды в сверхрешетках GaAs/AlAs были обнаружены либо в резонансных условиях [18],

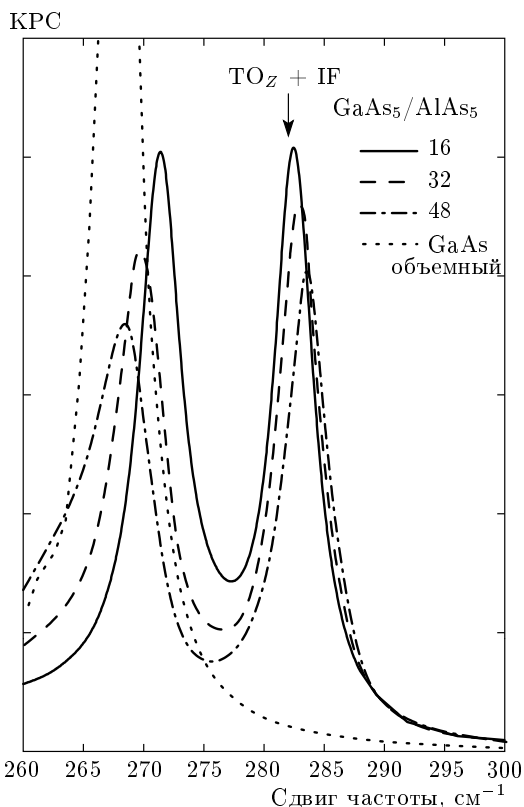


Рис. 12. Рассчитанные спектры КРС сверхрешетки GaAs₅/AlAs₅ с неидеальными гетерограницами; перемешано 16, 32 либо 48 атомов из 96 атомов в слое. Показан также рассчитанный спектр объемного GaAs

либо в спектрах инфракрасного поглощения [36].

Вернемся к экспериментальным данным и отметим, что в экспериментальных спектрах наблюдается не дублет, а один пик. Возможно, что пик с меньшей частотой просто не виден на фоне большого пика от поперечного фонона от подложки. Известно также, что гетерограница в сверхрешетках всегда неидеальна, даже в оптимальных условиях роста происходит перемешивание атомов разных материалов на 1–2 монослоя. Чтобы выяснить, как влияет неидеальность границы на спектры КРС в геометрии X'(Y'Y') – X', были проведены следующие расчеты. Была построена расширенная трехмерная ячейка сверхрешетки GaAs₅AlAs₅, содержащая в плоскости 12 × 8 примитивных ячеек, т. е. 96 атомов галлия либо алюминия в каждой плоскости. Затем несколько атомов галлия в приграничном монослое заменялись атомами алюминия (в случайном порядке) и наоборот, несколько атомов алюминия в приграничном монослое заменялись атомами галлия

также случайным образом. На рис. 12 представлены результаты расчетов спектров КРС таких структур с неидеальными границами, в которых были перемешаны 16, 32 и 48 атомов. Это соответствовало перемешиванию $1/6$, $1/3$ и половины атомов. Как видно на рис. 12, перемешивание атомов ведет к большему расщеплению дублета, причем пик с меньшей частотой сдвигается сильнее, к тому же уширяется и делается менее интенсивным. Для перемешивания половины атомов на гетерогранице данный пик уже не разрешим с ТО-пиком от монокристаллического (объемного) GaAs (также показан на рисунке), к тому же он гораздо менее интенсивен. По-видимому, это и является причиной того, что в экспериментальных спектрах данный пик не проявляется.

По положению и ширине пиков дублета в геометрии $X'(Y'Y')$ – X' можно судить о качестве гетерограниц сверхрешеток, но точный количественный анализ этого эффекта может быть предметом дальнейших исследований. Известно, что реконструкция поверхности определяет структуру гетерограницы и соответственно определяет форму спектров КРС, особенно в случае ультратонких, субмонослойных покрытий [37]. Интересным также представляется вопрос, как реконструкция поверхности повлияет на частоты смешанных ТО_Z+IF-мод.

Для исследования дисперсии этих мод при различных значениях угла между волновым вектором света и нормалью к структуре необходимо применять рассеяние на структурах со специально изготовленными клиньями [38]. Это также может быть предметом дальнейших исследований.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально обнаружена и подтверждена расчетами угловая анизотропия локализованных поперечных оптических мод, в которых атомы в основном смещаются в направлении, перпендикулярном слоям сверхрешеток GaAs/AlAs. Данная анизотропия является следствием их взаимодействия и смешивания с интерфейсными модами в сверхрешетках. При этом смешанные ТО+IF-моды в геометрии, в которой волновой вектор света лежит в плоскости сверхрешеток, наблюдаются в нерезонансных условиях КРС. Исследована поляризационная зависимость рассеяния для данных смешанных мод. Из расчетов получено, что спектры КРС данных смешанных мод зависят от перемешивания атомов на гетерограницах.

Авторы благодарны А. И. Торопову за предоставленные структуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. П. Силин, УФН **147**, 485 (1985).
2. М. Херман, *Полупроводниковые сверхрешетки*, Мир, Москва (1989).
3. *Light Scattering in Solids V. Superlattices and Other Microstructures*, ed. by M. Cardona, G. Guntherodt, Springer-Verlag, Berlin (1989).
4. A. S. Barker, Jr., J. L. Merz, and A. C. Gossard, Phys. Rev. B **17**, 3181 (1978).
5. G. A. Sai-Halasz, A. Pinczuk, P. Y. Yu, and L. Esaki, Sol. St. Comm. **25**, 381 (1978).
6. B. Jusserand, D. Paquet, J. Kervarec, and A. Regreny, J. Phys. **45**, C5 (1984).
7. C. Colvard, T. A. Gant, M. V. Klein, R. Merlin, R. Fischer, H. Morkoc, and A. C. Gossard, Phys. Rev., B **31**, 2080 (1985).
8. M. Cardona, Superlattices and Microstructures **5**, 27 (1989).
9. А. П. Шебанин, В. А. Гайслер, Т. В. Курочкина, Н. Т. Мошегов, С. И. Стенин, А. И. Торопов, Письма в ЖЭТФ **49**, 349 (1989).
10. В. А. Гайслер, *Спектроскопия комбинационного рассеяния света слоистых полупроводниковых структур*, Дисс. . . докт. физ.-матем. наук, Новосибирск (1996).
11. N. N. Ledentsov, D. Litvinov, A. Rosenauer et al. J. Electr. Mater. **30**, 463 (2001).
12. С. М. Рытов, ЖЭТФ **29**, 605 (1955).
13. С. М. Рытов, Акуст. ж. **2**, 71 (1956).
14. Макс Борн, Хуан Кунь, *Динамическая теория кристаллических решеток*, Изд-во иностр. лит., Москва (1958).
15. R. Tsu and S. S. Jha, Appl. Phys. Lett. **20**, 16 (1972).
16. Shang-Fen Ren, Hanyou Chu, and Yia-Chung Chang, Phys. Rev. B **37**, 8899 (1988).
17. M. P. Chamberlain, C. Trallero-Giner, and M. Cardona, Phys. Rev. B **50**, 1611 (1994).
18. R. Merlin, C. Colvard, M. V. Klein, H. Morkoc, A. Y. Cho, and A. C. Gossard, Appl. Phys. Lett. **36**, 43 (1980).

19. Д. А. Тэнне, В. А. Гайслер, Н. Т. Мошегов, А. И. Торопов, А. П. Шебанин, Письма в ЖЭТФ **68**, 50 (1998).
20. В. А. Володин, М. П. Синюков, Письма в ЖЭТФ **99**, 463 (2014).
21. В. А. Володин, Письма в ЖЭТФ **89**, 483 (2009).
22. В. А. Володин, ФТТ **53**, 377 (2011).
23. В. А. Володин, Письма в ЖЭТФ **95**, 76 (2012).
24. V. A. Volodin, M. P. Sinyukov, V. A. Sachkov, M. Stoffel, H. Rinnert, and M. Vergnat, Europhys. Lett. **105**, 16003 (2014).
25. D. Strauch and B. Dorner, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 1457 (1990).
26. B. Jusserand and J. Sapriel, Phys. Rev. B **24**, 7194 (1981).
27. G. Kanellis, Phys. Rev. B **35**, 746 (1987).
28. L. Miglio and L. Colombo, Superlattices and Microstructures **7**, 139 (1990).
29. М. В. Волькенштейн, ДАН СССР **XXXII**, 185 (1941).
30. P. Castrillo, L. Colombo, and G. Armelles, Phys. Rev. B **49**, 10362 (1994).
31. В. А. Сачков, *Исследование динамики решетки низкоразмерных реальных структур на основе GaAs/AlAs методом численного эксперимента*, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, Омск (2011).
32. D. Litvinov, A. Rosenauer, D. Gerthsen et al., Appl. Phys. Lett. **81**, 1080 (2002).
33. D. J. Lockwood, Guolin Yu, and N. L. Rowel, Sol. St. Comm. **136**, 404 (2005).
34. В. А. Володин, Автометрия **50**, 68 (2014).
35. В. А. Володин, М. Д. Ефремов, В. А. Сачков, ЖЭТФ **130**, 739 (2006).
36. A. S. Barker, Jr., J. L. Merz, and A. C. Gossard, Phys. Rev. B **17**, 3181 (1978).
37. М. Д. Ефремов, В. А. Володин, В. А. Сачков, В. В. Преображенский, Б. Р. Семягин, В. В. Болотов, Е. А. Галактионов, А. В. Кретинин, Письма в ЖЭТФ **70**, 73 (1999).
38. A. Huber, T. Egeler, W. Etmüller, H. Rothfritz, G. Trankle, and G. Abstreiter, Superlatt. Microstr. **9**, 309 (1991).