

Междолинное рассеяние электронов на фононах в ультратонких сверхрешетках $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$

© С.Н. Гриняев¹, Л.Н. Никитина¹, В.Г. Тютюрев²

¹ Томский политехнический университет,
Томск, Россия

² Томский педагогический университет,
Томск, Россия

E-mail: gsn@phys.tsu.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 16 декабря 2009 г.)

На основе метода псевдопотенциала и феноменологической модели сил связи исследовано рассеяние электронов на коротковолновых и длинноволновых фононах в сверхрешетках $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$ с ультратонкими слоями ($n, m = 1, 2, 3$).

Определены деформационные потенциалы для междолинных переходов электронов в зонах проводимости сверхрешеток и твердых растворов соответствующих составов. Показано, что вследствие локализации волновых функций в квантовых ямах Γ , \underline{L} и \underline{X} междолинные переходы электронов в сверхрешетках в целом интенсивнее аналогичных переходов в твердых растворах. В ряду сверхрешеток с ростом доли легких атомов Al деформационные потенциалы монотонно увеличиваются для переходов типа $\underline{X}-\underline{X}$ и уменьшаются для переходов типа $\underline{L}-\underline{L}$, $\underline{X}-\underline{L}$. Потенциалы переходов типа $\Gamma-\underline{X}$ и $\Gamma-\underline{L}$ изменяются в зависимости от толщины слоев немонотонно за счет выраженных эффектов размерного квантования в глубоких \underline{L} квантовых ямах GaAs. Усредненные по фононам и родственным долинам деформационные потенциалы в сверхрешетках близки к соответствующим потенциалам в твердых растворах.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 080200640-а и Рособразования № 01.2.007 01695.

1. Введение

Междолинное рассеяние электронов на коротковолновых фононах играет важную роль в транспортных и оптических свойствах полупроводников с многодолинным зонным спектром. Оно вызывает известное явление отрицательной дифференциальной проводимости (эффект Ганна), приводит к непрямозонному поглощению света и токам утечки в каскадных лазерах, уменьшает подвижность электронов в каналах транзисторов, влияет на спектр фотолюминесценции горячих электронов и резонансное рамановское рассеяние, меняет вероятности туннелирования электронов в гетероструктурах и т.д. [1]. Интенсивность рассеяния зависит от электронных и колебательных состояний материала и значений деформационных потенциалов (ДП). Полупроводниковые сверхрешетки (SL) представляют значительный интерес для использования междолинных эффектов в приборах опто- и наноэлектроники. Благодаря размерному квантованию и гибридизации состояний в зоне проводимости SL возникают дополнительные конкурирующие долины, колебания атомов принимают смешанный многомодовый характер, а правила отбора для междолинных переходов становятся менее „жесткими“, чем в компонентах. В результате рассеяние электронов на фононах в SL происходит по многочисленным каналам и описывается большим числом ДП, что затрудняет интерпретацию экспериментальных данных и моделирование физических свойств. В связи с этим возникает необходимость определения ДП в SL теоретическими методами.

До сих пор теоретические исследования касались в основном процессов внутримолиного рассеяния электронов на длинноволновых оптических и акустических фононах с применением континуальных и микроскопических моделей [2]. Междолинное рассеяние на короткодействующем потенциале изучено в меньшей степени. В [3] методом огибающих волновых функций рассмотрены переходы $\Gamma-\underline{X}$ в сверхрешетках $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ с толстыми слоями. В [4,5] на основе метода псевдопотенциала и феноменологической модели сил связи определены ДП для всех междолинных переходов в тонкослойных сверхрешетках $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$, $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1(001)$. Такой подход позволяет получить более полное и точное описание квазичастичных состояний и механизмов электрон-фононного взаимодействия в SL.

В настоящей работе этот подход использован для установления закономерностей междолинного рассеяния электронов на коротковолновых и длинноволновых фононах в ряду ультратонких сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$ и соответствующих им твердых растворов.

2. Зонный спектр сверхрешеток

Были рассмотрены SL с четным числом монослоев $(m+n)$ $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ (SL13), $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ (SL22), $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ (SL31), в элементарной ячейке которых содержится восемь атомов, расположенных в последовательных слоях ($\gamma = 1, \dots, 8$), отстоящих друг от друга на $a_0/2$ вдоль тетрагональной оси ($a_0 = 5.652 \text{ \AA}$ —

постоянная решетки). Пространственная группа симметрии SL — D_{2d}^5 [6]. Вследствие „сворачивания“ зоны Бриллюэна ГЦК-решетки в тетрагональную зону Бриллюэна SL сфералитные волновые векторы \mathbf{k} эквивалентны соответствующим волновым векторам SL \mathbf{k} (в единицах $2\pi/a_0$): $\Gamma(0, 0, 0) \rightarrow \Gamma + \underline{X}(0, 0, 1) + \underline{\Delta}(0, 0, 0.5) + \underline{\Delta}(0, 0, -0.5)$; $X(-0.5, 0.5, 0) \rightarrow \underline{L}(0.5, -0.5, 0.5) + \underline{L}(0.5, -0.5, -0.5) + \underline{\Sigma}(0.5, -0.5, 0) + \underline{\Sigma}(-0.5, 0.5, 0)$; $M(1, 0, 0) \rightarrow \underline{X}(1, 0, 0) + \underline{X}(0, 1, 0) + \underline{W}(0, 1, 0.5) + \underline{W}(0, 1, -0.5) + \underline{W}(1, 0, 0.5) + \underline{W}(1, 0, -0.5)$; $Z(0, 0, 0.25) \rightarrow \underline{\Delta}(0, 0, 0.25) + \underline{\Delta}(0, 0, -0.25) + \underline{\Delta}(0, 0, 0.75) + \underline{\Delta}(0, 0, -0.75)$. Данная связь векторов указывает на возможное происхождение состояний SL из состояний компонент и их твердых растворов.

Расчет зонных спектров SL проводился методом эмпирического псевдопотенциала [7] с учетом условий обрыва и зависимости атомных формфакторов от ближайшего окружения. Вычисленные энергии основных долин зоны проводимости SL $E_{n\mathbf{k}\alpha}$ (n — номер зоны, \mathbf{k} — волновой вектор, α — номер неприводимого представления) в точках зоны Бриллюэна Γ, X, M даны в табл. 1. На рис. 1 показана схема уровней в нижних зонах проводимости и переходов между ними, вызванных колебаниями атомов решетки. Для анализа электронных состояний SL был проведен также расчет зонного спектра твердых растворов $(\text{GaAs})_x(\text{AlAs})_{1-x}$ в приближении виртуального кристалла (VC). Потенциалы VC представлялись в виде средневзвешенных потенциалов атомов компонент с концентрацией $x = m/(n + m)$. Рассчитанные энергии зонных уровней VC даны в табл. 1. Тетрагональная компонента кристаллического потенциала SL приводит к смешиванию и расщеплению состояний VC. Потолок валентной зоны во всех SL отвечает состояние с симметрией Γ_5 . Нижние состояния зоны проводимости SL31 и SL22 имеют симметрию Γ_1 и энергии 0.16 eV, 0.34 eV соответственно (относительно дна зоны проводимости GaAs). Анализ матриц перекрытия волновых функций SL и VC показал, что состояние Γ_1 (SL31) на 90% происходит из состояния Γ_1 (VC31), состояние Γ_1 (SL22) на 97% построено из состояния \underline{X}_1 (VC22). В SL13 нижнее состояние зоны проводимости имеет симметрию Γ_3 и энергию 0.28 eV, оно на 99% происходит из состояния \underline{X}_3 (VC13). Состояния SL $M_5(1, 0, 0)$ и $X_1, X_3(-0.5, 0.5, 0)$ построены из состояний VC с волновыми векторами $\underline{X}(1,0,0), \underline{X}(0, 1, 0)$ и $\underline{L}(0.5,-0.5,0.5), \underline{L}(0.5, -0.5, -0.5)$ соответственно. На рис. 1 и в табл. 1 происхождение состояний SL из состояний VC указано в скобках.

Результаты расчета зонного спектра GaAs и AlAs согласуются с экспериментальными значениями разрывов зон на гетерогранице GaAs/AlAs: $\Delta E_{\Gamma_1} = E_{\Gamma_1}(\text{AlAs}) - E_{\Gamma_1}(\text{GaAs}) = 1.00 \text{ eV}$, $\Delta E_{L_1} = E_{L_1}(\text{AlAs}) - E_{L_1}(\text{GaAs}) = 0.56 \text{ eV}$, $\Delta E_{X_1} = E_{X_1}(\text{AlAs}) - E_{X_1}(\text{GaAs}) = 0.27 \text{ eV}$, $\Delta E_{X_3} = E_{X_3}(\text{AlAs}) - E_{X_3}(\text{GaAs}) = 0.22 \text{ eV}$. Из них следует, что слои GaAs выступают довольно глубокими квантовыми ямами для электронных состояний Γ_1 и L_1 , а

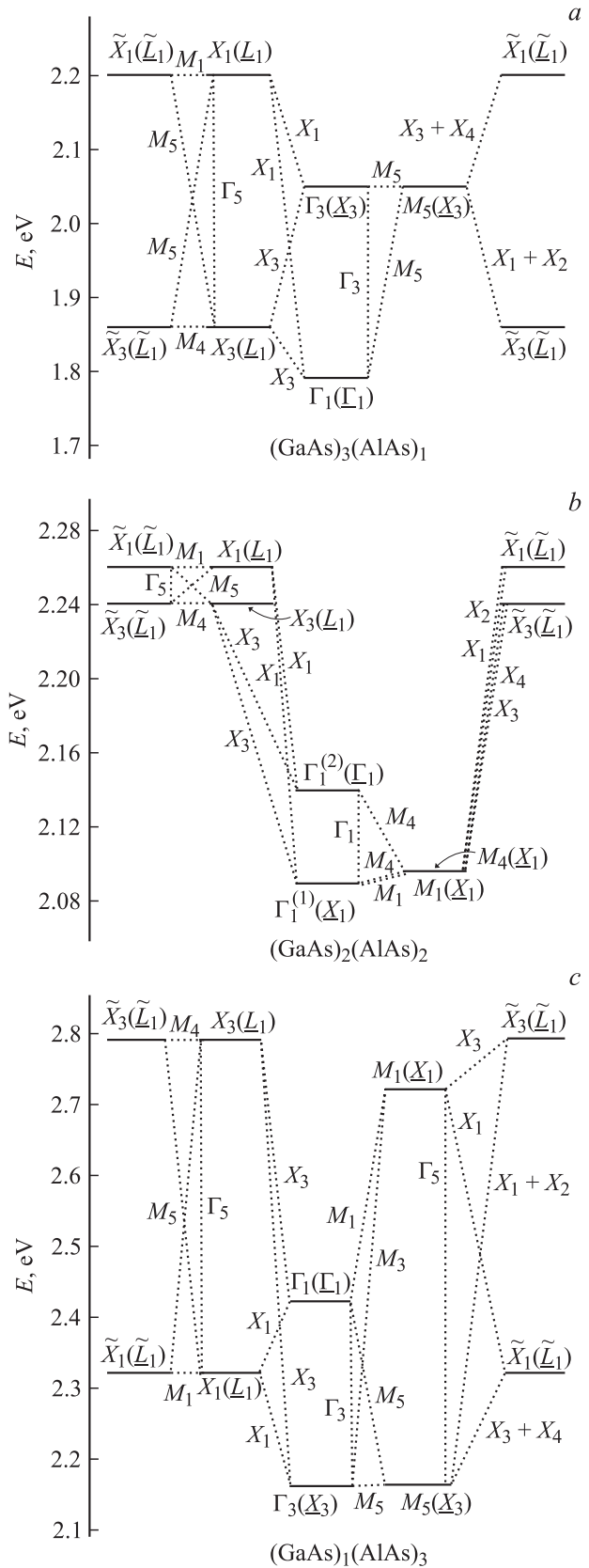


Рис. 1. Уровни зон проводимости SL $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ (a), $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ (b) и $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ (c) в симметричных точках Γ, X, M (относительно потолка валентной зоны SL). Пунктирными линиями указаны возможные междолинные переходы с участием фононов.

Таблица 1. Зонные энергии SL $E_{nk\alpha}$ относительно дна зоны проводимости Γ_1 (GaAs) в eV (в скобках указаны симметрия и энергия состояний VC, из которых происходят состояния SL)

SL31			SL22			SL13		
n	$k\alpha$	$E_{nk\alpha}$	n	$k\alpha$	$E_{nk\alpha}$	n	$k\alpha$	$E_{nk\alpha}$
17	$\Gamma_1(\Gamma_1)$	0.16(0.36)	17	$\Gamma_1^{(1)}(\underline{X}_1)$	0.34(0.36)	17	$\Gamma_3(\underline{X}_3)$	0.28(0.29)
18	$\Gamma_3(\underline{X}_3)$	0.41(0.42)	18	$\Gamma_1^{(2)}(\Gamma_1)$	0.39(0.63)	18	$\Gamma_1(\Gamma_1)$	0.53(0.84)
19	$\Gamma_1(\underline{X}_1)$	0.85(0.90)	19	$\Gamma_3(\underline{X}_3)$	0.85(0.97)	17,18	$M_5(\underline{X}_3)$	0.28(0.29)
17,18	$M_5(\underline{X}_3)$	0.41(0.42)	17	$M_1(\underline{X}_3)$	0.35(0.36)	19	$M_1(\underline{X}_1)$	0.83(1.00)
19	$M_4(\underline{X}_1)$	0.74(0.90)	18	$M_4(\underline{X}_3)$	0.35(0.36)	17	$X_1(\underline{L}_1)$	0.44(0.76)
20	$M_1(\underline{X}_1)$	0.95(0.90)	19,20	$M_5(\underline{X}_1)$	0.89(0.97)	18	$X_3(\underline{L}_1)$	0.90(0.76)
17	$X_3(\underline{L}_1)$	0.22(0.50)	17	$X_3(\underline{L}_1)$	0.49(0.65)			
18	$X_1(\underline{L}_1)$	0.56(0.50)	18	$X_1(\underline{L}_1)$	0.51(0.65)			

слои AlAs — сравнительно мелкими квантовыми ямами для состояний X_1 и X_3 . Поэтому эффекты размерного квантования вызывают наибольшие изменения в Γ_1 - и (X_1, X_3) -состояниях SL, являющихся аналогами Γ_1 - и \underline{L}_1 -состояний VC соответственно. Так, сильное смешивание на гетерограницах SL31 и SL13 состояний VC из долин \underline{L}_1 и $\tilde{\underline{L}}_1$ приводит к большому расщеплению состояний X_1 и X_3 (~ 0.3 – 0.5 eV).

3. Фононный спектр сверхрешеток

Фононный спектр SL рассчитывался в модели жестких ионов аналогично [5]. Вследствие близости постоянных решеток и силовых полей GaAs и AlAs особенности колебательных состояний SL в основном связаны с различием масс атомов Ga и Al. Поэтому фононные спектры SL определялись в приближении дефекта масс, в котором параметры межатомного взаимодействия Ga–As и Al–As считаются одинаковыми. Вычисленные частоты $\omega_s(\mathbf{q})$ фононов Γ , X и M , вызывающих интенсивные междолинные переходы в SL, даны в табл. 2 с указанием атомов, испытывающих наибольшие колебания. Приближение дефекта масс приводит к дополнительно вырождению некоторых состояний.

Из анализа векторов поляризации был установлен характер колебаний атомов в SL и их связь с колебаниями в компонентах. Колебания атомов SL носят в основном смешанный характер, в них присутствуют как продольные, так и поперечные колебания из оптических и акустических ветвей GaAs и AlAs. Фононы с большими частотами ($\omega_s(\mathbf{q}) > 9$ THz) связаны с колебаниями легких атомов Al. Частоты фононов X_3 (7.338 THz) в SL13 и X_1 (7.438 THz) в SL22 близки к частоте продольных оптических (LO) колебаний GaAs \underline{L}_1 (7.32 THz). Им отвечают колебания атомов Ga(1) и As(8), прилегающих к гетерогранице GaAs/AlAs. В аналогичном фононе SL31 X_3 (7.228 THz) колебания интерфейсных атомов также представлены с наибольшим весом, но за счет гибридизации с поперечными оптическими (TO) колебаниями GaAs \underline{L}_3 (7.15 THz) в нем присутствуют также

и колебания атомов Ga(5) и As(4) внутри слоя GaAs. Фононы (M_1, M_4) в SL31 и SL13, а также M_5 в SL22 сопровождаются колебаниями атомов As и происходят из продольных акустических (LA) колебаний бинарных кристаллов с частотой 7.055 THz. Эти же колебания определяют в SL и длинноволновый фонон Γ_3 той же частоты. Другие длинноволновые Γ -колебания в SL (табл. 2) происходят из фононов бинарных кристаллов с линии Δ .

4. Определение деформационных потенциалов

Вероятность междолинного рассеяния электронов на фононах в SL из начального состояния Ψ_{nk} в конечное состояние $\Psi_{n'k'}$ с поглощением (+) или испусканием (–) фонона дается выражением [4]

$$W(nk, n'k') = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{sq} \frac{|D_{nk,n',k'}^s|^2}{2\Omega\rho\omega_s(\mathbf{q})} \left(N_s(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \times \delta(E_{nk} - E_{n'k'} \pm \hbar\omega_s(\mathbf{q})),$$

где Ω — объем элементарной ячейки SL, ρ — плотность, $N_s(\mathbf{q})$ — число фононов, $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ — волновой вектор фонона. Квадраты модулей ДП определяются согласно

$$|D_{nk,n',k'}^s|^2 = \left| \sum_{i,\gamma} \left(\frac{M}{m_\gamma} \right)^{1/2} (e_i^\gamma(s, \mathbf{q}) \cdot d_i^\gamma(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}')) \right|^2,$$

где m_γ — масса атома с номером γ , $M = \sum_\gamma m_\gamma$ — масса элементарной ячейки, $d_i^\gamma(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}') = \langle \Psi_{nk} | \frac{dv_\gamma}{dx_i} | \Psi_{n'k'} \rangle$ — матричные элементы градиента атомного псевдопотенциала v_γ . Таким образом, ДП зависят от свойств электронной и колебательной подсистем через векторы поляризации, волновые функции, массы и формфакторы псевдопотенциалов атомов.

Таблица 2. Частоты $\omega_s(\mathbf{q})$ и симметрия фононов, вызывающих интенсивные электронные переходы в зоне проводимости SL (в скобках указаны номера фононных ветвей s и слоев колеблющихся атомов γ)

SL31		SL22		SL13	
$\omega_s(\mathbf{q})$, THz	Атом	$\omega_s(\mathbf{q})$, THz	Атом	$\omega_s(\mathbf{q})$, THz	Атом
6.458(11,12) M_1, M_2	As(2,4,6,8)	2.022(2) M_4	As(4,6)	6.172(9,10) M_5	Ga(1)
6.527(16,17) M_5	Ga(1,5)	5.775(10) M_4	Ga(1,3)	6.458(11,12) M_1, M_4	As(2,4,6,8)
7.055(18,19) M_1, M_4	As(2,4,6,8)	6.458(11,12) M_5	As(2,4,6,8)	7.055(14,15) M_1, M_4	As(2,4,6,8)
7.131(20,21) M_5	Ga(3)	6.997(16) M_1	Ga(1,3)	9.134(16,17) M_5	Al(3,5,7)
10.611(23,24) M_5	Al(7)	7.055(17,18) M_5	As(2,4,6,8)	10.232(20) M_4	Al(3,7)
5.826(11) X_1	Ga(1,3,5), As(8)	9.679(20) M_4	Al(5,7)	10.419(21,22) M_5	Al(3,7)
6.082(12) X_3	Ga(5), As(6)	11.479(24) M_1	Al(5,7)	11.747(23,24) M_5	Al(3,5,7)
7.013(14) X_1	Ga(3), As(2)	5.010(9) X_3	Ga(3), As(2,6)	5.071(9) X_3	Ga(1), As(4,8)
7.147(16) X_4	Ga(3), As(2)	6.182(11) X_1	Ga(3), As(4)	6.378(11) X_3	As(2,4)
7.148(17) X_2	Ga(1,5)	6.270(12) X_3	Ga(1), As(4,6)	6.388(12) X_1	Ga(1), As(2,4,6)
7.228(18) X_3	Ga(1,5), As(4,8)	7.016(13) X_1	Ga(3), As(2)	7.111(13) X_1	Ga(1), As(8)
7.291(19) X_1	Ga(1,5), As(4,8)	7.109(14) X_3	Ga(1), As(8)	7.147(14) X_4	Ga(1), As(8)
7.481(20) X_3	Ga(3), As(2)	7.147(15,16) X_2, X_4	Ga(1,3)	7.338(15) X_3	Ga(1), As(8)
7.600(21) X_1	Ga(1,3,5), As(8)	7.434(17) X_3	Ga(1,3), As(2)	9.602(16) X_3	Al(3,5)
10.570(22) X_3	Al(7)	7.438(18) X_1	Ga(1), As(8)	9.692(17) X_1	Al(5,7)
10.582(23) X_1	Al(7)	9.768(19) X_3	Al(5,7), As(4,6)	10.389(18) X_1	Al(3,7)
10.680(24) X_4	Al(7)	10.045(20) X_1	Al(5,7)	10.536(19) X_3	Al(3,7)
7.024(14) Γ_3	Ga(1,3,5)	10.680(21,22) X_2, X_4	Al(5,7)	10.680(21) X_4	Al(3,5)
7.055(15) Γ_3	As(2,4,6,8)	11.043(23) X_1	Al(5,7)	11.360(23) X_3	Al(3,5)
7.786(18,19) Γ_5	Ga(1,3,5), As(2,4)	11.212(24) X_3	Al(5,7)	7.235(13,14) Γ_5	Ga(1), As(2,8)
8.323(21) Γ_3	Ga(1,5), As(2,4,6,7)	7.474(15) Γ_1	Ga(1,3), As(4,8)	7.814(15) Γ_3	Ga(1), As(2,8)
10.534(22,23) Γ_5	Al(7)	7.632(16,17) Γ_5	Ga(1,3), As(2)	10.727(20) Γ_3	Al(3,7)
11.081(24) Γ_3	Al(7)	11.057(23) Γ_1	Al(5,7)	10.747(21,22) Γ_5	Al(3,5,7)
				11.084(23) Γ_3	Al(3,5,7)

5. Результаты расчета деформационных потенциалов

Вычисленные ДП $|D_{nk,n'k'}^s|$ для основных каналов рассеяния электронов в SL даны в табл. 3. На рис. 2 показаны эффективные ДП, объединенные по фононам и усредненные по родственным электронным состояниям

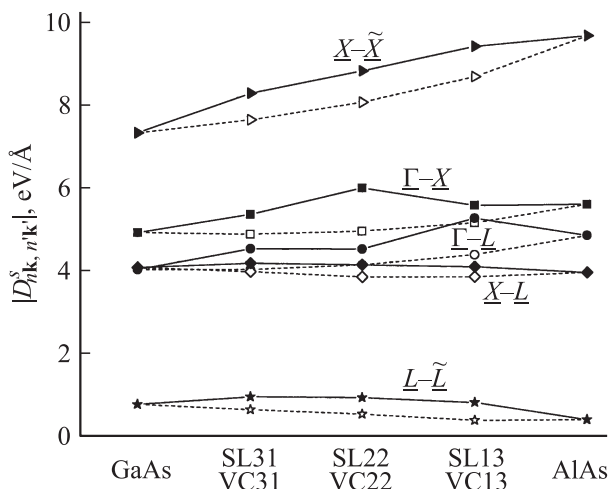


Рис. 2. Усредненные междолинные деформационные потенциалы в SL (темные символы) и VC (светлые символы).

согласно $\left| \sum_s |D_{nk,n'k'}^s|^2 \right|^{1/2}$. Здесь же для сравнения даны ДП твердых растворов. Видно, что рассеяние электронов на фононах в SL в целом интенсивнее рассеяния в VC. Из данных расчета фононного спектра и ДП SL (табл. 2, 3), а также анализа векторов поляризации SL и бинарных кристаллов GaAs, AlAs были установлены тип и характер колебаний атомов, вызывающих интенсивные междолинные переходы электронов в SL. Рассмотрим результаты анализа для разных каналов рассеяния.

5.1. Междолинное рассеяние $\Gamma_1 - M_5, \Gamma_1 - M_4$. Данные каналы рассеяния являются аналогами $\Gamma - X$ -рассеяния VC и обусловлены в основном колебаниями катионов. Наиболее интенсивное рассеяние связано с колебаниями легких атомов Al.

В SL31 переходы из долины Γ в долину M происходят при участии LA- и TO-подобных колебаний крайних атомов Ga в слое GaAs с частотой 6.527 THz, колебаний общего типа атомов As с частотой 6.458 THz, LA-колебаний атомов As с частотой 7.055 THz, LO-колебаний среднего атома Ga в слое GaAs с частотой 7.131 THz и LO-колебаний атомов Al с частотой 10.611 THz.

В SL22 междолинное рассеяние $\Gamma - M$ электронов определяется LO-колебаниями атомов Ga с частотой 6.997 THz, LA-колебаниями атомов As с частотой 7.055 THz, LO-колебаниями атомов Al с частотами 9.679 и 11.479 THz.

Таблица 3. Междолинные деформационные потенциалы $|D_{\mu k, \mu' k'}^s|$ (eV/Å) интенсивных электронных переходов между долинами зоны проводимости Γ , X и M (в скобках указаны симметрия фононов и номера ветвей s)

Сверхрешетка (GaAs) ₃ (AlAs) ₁							
$\Gamma_1 - M_5 (M_5)$	$\Gamma_3 - M_5 (M_5)$	$X_3 - \tilde{X}_3 (M_4)$	$X_1 - \tilde{X}_1 (M_1)$	$X_3 - \tilde{X}_1 (M_5)$			
3.32(16,17)	6.41(16,17)	0.73(19)	1.00(11)	0.49(16,17)			
4.44(20,21)	5.79(20,21)		0.69(18)	0.30(20,21)			
5.07(23,24)	7.67(23,24)			0.67(23,24)			
$\Gamma_1 - X_3 (X_3)$	$\Gamma_3 - X_3 (X_3)$	$\Gamma_1 - X_1 (X_1)$	$\Gamma_3 - X_1 (X_1)$	$M_5 - \tilde{X}_1 (X_3 + X_4)$	$M_5 - \tilde{X}_3 (X_1 + X_2)$		
3.10(12)	2.22(12)	1.27(11)	2.66(11)	3.75(12)	3.68(11)		
2.05(18)	3.21(18)	2.64(19)	2.40(14)	2.58(16)	2.97(17)		
2.10(20)	2.21(22)	1.01(21)		1.81(20)	3.00(19)		
3.51(22)				2.39(24)	2.40(23)		
$\Gamma_1 - \Gamma_3 (\Gamma_3)$	$X_3 - X_1 (\Gamma_5)$	$M_5^{(1)} - M_5^{(2)} (\Gamma_3)$					
2.54(14)	2.50(18,19)	3.42(14)					
4.28(15)	1.42(22,23)	5.76(15)					
1.09(21)		4.81(24)					
Сверхрешетка (GaAs) ₂ (AlAs) ₂							
$\Gamma_1^{(1)} - M_1 (M_1)$	$\Gamma_1^{(1)} - M_4 (M_4)$	$\Gamma_1^{(2)} - M_1 (M_1)$	$\Gamma_1^{(2)} - M_4 (M_4)$	$X_3 - \tilde{X}_3 (M_4)$	$X_1 - \tilde{X}_1 (M_1)$	$X_3 - \tilde{X}_1 (M_5)$	
6.22(16)	2.82(10)	2.85(16)	7.84(20)	0.46(2)	0.89(24)	1.38(11,12)	
7.43(24)	7.28(20)	1.49(24)		0.95(20)		1.00(17,18)	
$\Gamma_1^{(1)} - X_3 (X_3)$	$\Gamma_1^{(1)} - X_3 (X_3)$	$\Gamma_1^{(2)} - X_1 (X_1)$	$\Gamma_1^{(2)} - X_1 (X_1)$	$M_1 - \tilde{X}_3 (X_4)$	$M_4 - \tilde{X}_1 (X_2)$	$M_1 - \tilde{X}_1 (X_1)$	$M_4 - \tilde{X}_3 (X_3)$
1.57(12)	2.18(12)	2.88(11)	1.62(11)	2.43(16)	2.43(15)	3.68(11)	1.48(9)
3.34(14)	1.63(14)	2.15(13)	2.85(18)	1.64(22)	1.64(21)	1.71(18)	3.84(12)
1.18(24)	4.05(19)	2.11(20)	1.96(23)			2.00(20)	1.60(17)
	2.18(24)	1.47(23)				1.85(23)	1.29(24)
$\Gamma_1^{(1)} - \Gamma_1^{(2)} (\Gamma_1)$	$X_3 - X_1 (\Gamma_5)$	$M_1 - M_4 (\Gamma_4)$					
4.74(15)	1.90(16,17)	0.06(15)					
1.96(23)		0.07(23)					
Сверхрешетка (GaAs) ₁ (AlAs) ₃							
$\Gamma_3 - M_5 (M_5)$	$\Gamma_1 - M_5 (M_5)$	$X_3 - \tilde{X}_3 (M_4)$	$X_1 - \tilde{X}_1 (M_1)$	$X_3 - \tilde{X}_1 (M_5)$			
2.33(9,10)	2.65(16,17)	0.46(15)	0.96(11)	0.44(16,17)			
3.85(16,17)	4.81(21,22)	0.35(20)	0.75(14)	0.47(23,24)			
7.39(21,22)							
3.66(23,24)							
$\Gamma_3 - X_1 (X_1)$	$\Gamma_1 - X_1 (X_1)$	$\Gamma_3 - X_3 (X_3)$	$\Gamma_1 - X_3 (X_3)$	$M_5 - \tilde{X}_1 (X_3 + X_4)$	$M_5 - \tilde{X}_3 (X_1 + X_2)$		
1.95(12)	3.13(12)	2.92(11)	1.23(9)	1.88(11)	1.95(12)		
2.79(13)	2.10(13)	1.55(16)	1.63(15)	1.99(14)	2.79(13)		
2.76(18)	3.74(17)	1.25(19)	1.36(16)	1.48(19)	2.76(18)		
	3.89(18)	1.27(23)	1.30(23)	1.32(21)			
$\Gamma_1 - \Gamma_3 (\Gamma_3)$	$X_3 - X_1 (\Gamma_5)$	$M_5^{(1)} - M_5^{(2)} (\Gamma_3)$					
4.71(15)	1.18(13,14)	4.38(15)					
2.51(23)	1.84(21,22)	7.44(20)					
		3.77(23)					

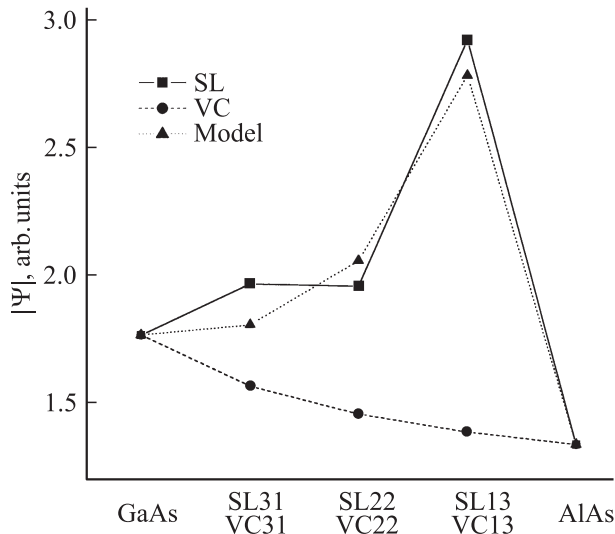


Рис. 3. Зависимость максимума амплитуды волновой функции $|\Psi_{\Gamma_1}(\Gamma_1)|$ в окрестности атома Ga из первого слоя в ряду SL и VC.

В SL13 основную роль в рассеянии $\Gamma-M$ играют колебания общего типа атома Ga с частотой 6.172 THz, атомов As с частотами 6.458 и 7.055 THz, атомов Al с частотами 9.134 и 11.747 THz, LO- и TO-колебания крайних атомов Al в слое AlAs с частотой 10.419 THz.

5.2. Междолинное рассеяние Γ_1-X_1 , Γ_1-X_3 . В SL31 такие переходы вызваны LA-колебаниями атомов Ga в слое GaAs с частотами 5.826 и 6.082 THz, LO- и TO-колебаниями крайних атомов Ga и атомов As в слое GaAs с частотами 7.291 и 7.228 THz, колебаниями общего типа атомов Ga в слое GaAs с частотой 7.600 THz и атома Al в слое AlAs с частотой 10.570 THz.

В SL22 в переходах $\Gamma-X$ и $M-X$ основную роль играют LO-колебания атомов Ga в слое GaAs с частотой 7.438 THz, LO- и LA-колебания атомов Al и As в слое AlAs с частотой 9.768 THz, LA-колебания атомов As в слоях GaAs и AlAs с частотой 6.270 THz.

В SL13 переходы $\Gamma-X$ и $M-X$ обусловлены колебаниями общего типа атомов Al в слоях AlAs с частотой 9.692 THz, LO- и TO-колебаниями атомов Al в слое AlAs с частотой 10.389 THz, колебаниями общего типа крайних атомов Al в слоях AlAs с частотами 9.602 и 11.360 THz.

Переходы Γ_1-X_1 , Γ_1-X_3 выступают аналогами перехода $\Gamma-L$ VC. Модуль вектора поляризации фононов X слабо меняется в ряду SL, поэтому различия в ДП связаны со свойствами Γ - и X-волновых функций SL. Поскольку относительное изменение электронной плотности у состояний X_1 и X_3 в SL менее значительно, чем у состояний Γ_1 , различия в объединенных ДП каналов рассеяния Γ_1-X_1 и Γ_1-X_3 в основном определяются особенностями волновой функции Γ_1 -состояния. На рис. 3 показаны модули волновых функций Γ_1 SL и VC в плоскости (001). Их поведение в основном повторяет зависимость ДП рассеяния $\Gamma-L$. Здесь же

для сравнения приведена модельная оценка амплитуд волновых функций в SL, полученная с учетом того, что в ряду SL плотность вероятности состояния $\Gamma_1(\Gamma_1)$ $\rho_{SL} = |\Psi_{SL}|^2$ локализована в слоях GaAs и поэтому ее величина обратно пропорциональна ширине квантовой ямы. Это позволяет представить плотность SL в виде $\rho_{SL} = \frac{m+n}{m} \rho_{VC}$, где $\rho_{VC} = |\Psi_{VC}|^2$ — плотность вероятности VC соответствующего состава. Модельные результаты согласуются с точным расчетом, поэтому основной причиной немонотонной зависимости ДП рассеяния $\Gamma-L$ в SL является эффект „конфайнмента“ волновой функции Γ_1 -состояния в квантовой яме GaAs.

5.3. Междолинное рассеяние Γ_3-M_5 , $\Gamma_1^{(1)}-M_1$, $\Gamma_1^{(1)}-M_4$, $M_5^{(1)}-M_5^{(2)}$, M_1-M_4 . Данные каналы рассеяния соответствуют рассеянию $X-\tilde{X}$ VC и связаны с колебаниями катионов. Наибольшие значения ДП отвечают переходам Γ_3-M_5 и $M_5^{(1)}-M_5^{(2)}$, происходящим за счет оптических колебаний атомов Al.

Вследствие подобия электронных плотностей состояний M и $\Gamma(X)$ усредненный ДП перехода $X-\tilde{X}$ меняется монотонно в ряду SL.

5.4. Междолинное рассеяние $X_1-\tilde{X}_1$, $X_1-\tilde{X}_3$, $X_3-\tilde{X}_3$. Переходы $X_1-\tilde{X}_1$, $X_1-\tilde{X}_3$, $X_3-\tilde{X}_3$ являются аналогами перехода $L-\tilde{L}$ VC и связаны преимущественно с колебаниями анионов. Поскольку электронная плотность вблизи анионов почти не зависит от химического состава, усредненные потенциалы перехода $L-\tilde{L}$ в SL имеют близкие значения.

5.5. Рассеяние между долинами, отвечающими одному и тому же волновому вектору. В „прямых“ переходах участвуют длинноволновые оптические колебания с симметрией Γ_1 , которым в структуре сфалерита соответствует коротковолновый фонон X. Для расчета ДП этих переходов использовались электронные и фононные состояния из малой окрестности Γ -экстремума. Полученные ДП слабо зависят от величины и направления волнового вектора фонона.

Междолинные переходы $M_5^{(1)}-M_5^{(2)}$ и M_1-M_4 происходят при участии длинноволновых акустических коле-

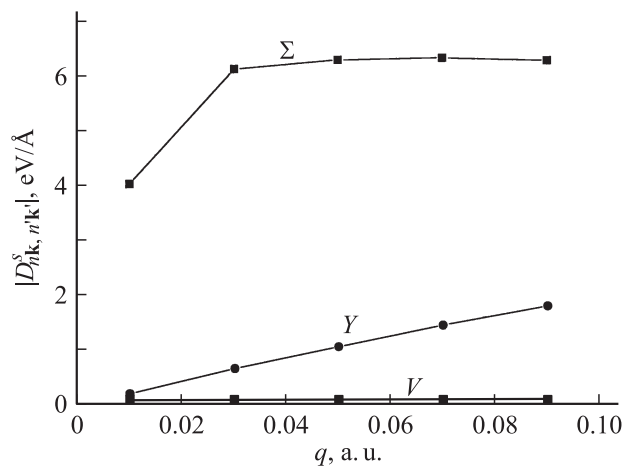


Рис. 4. Дисперсия потенциала внутримолинового перехода M_1-M_4 в сверхрешетке $(GaAs)_2(AIAs)_2$.

баний катионов. При вычислении их ДП использовались электронные состояния из окрестности точки M . В SL13 и SL31 интенсивность перехода $M_5^{(1)}-M_5^{(2)}$ почти не зависит от выбора таких состояний, тогда как в SL22 эта зависимость ДП перехода M_1-M_4 носит сильно анизотропный характер (рис. 4). Вдоль линии $\Sigma(\Gamma-M)$ ДП перехода M_1-M_4 растет с увеличением модуля волнового вектора фонона \mathbf{q} и достигает своего насыщения; вдоль линии $Y(M-X)$ зависимость почти линейная; вдоль линии $V(M-A)$ ДП близок к нулю. Поэтому в усредненном ДП перехода $X-X$ длинноволновые каналы рассеяния M_1-M_4 и $M_5^{(1)}-M_5^{(2)}$ не учитывались. Величина ДП перехода $X-X$ слабо зависит от состава SL (рис. 2).

6. Заключение

Определены междолинные ДП для основных каналов рассеяния электронов на фононах в нижних зонах проводимости ультратонких сверхрешеток $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3$, $(\text{AlAs})_2(\text{GaAs})_2$, $(\text{AlAs})_3(\text{GaAs})_1$ (001). Показано, что за счет локализации волновых функций в квантовых ямах Γ , X и L междолинные переходы электронов в сверхрешетках в целом интенсивнее соответствующих переходов в твердых растворах. Более сильная локализация волновых функций в глубоких Γ -ямах GaAs вызывает немонотонное изменение ДП переходов $\Gamma-X$ и $\Gamma-L$ в ряду SL. Максимальную интенсивность имеют переходы Γ_3-M_5 и Z_3-M_5 , вызванные оптическими колебаниями легких атомов Al и являющиеся аналогами переходов $X-X$ в твердых растворах. Переходы Γ_1-M_5 , Γ_1-X_1 , Γ_1-X_3 , X_1-X_1 , X_1-X_3 , Γ_3-M_5 в основном связаны с колебаниями катионов, переходы X_1-M_5 , X_3-M_5 , Γ_3-X_1 , Γ_3-X_3 — с колебаниями анионов. Обнаружена сильная анизотропия вероятности перехода M_1-M_4 в SL22 от величины и направления волнового вектора длинноволновых акустических колебаний катионов.

Полученные ДП вместе с данными для матрицы переноса в гетероструктурах GaAs/AlAs(001) [8] позволяют проводить моделирование оптических и транспортных свойств тонких сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$ с учетом двух основных механизмов рассеяния электронов — на гетерограницах и фононах.

Список литературы

- [1] З.С. Грибников, О.Э. Райчев. ФТП **23**, 2171 (1989); О.Э. Райчев. ФТП **25**, 1228 (1991); A. Mlayah, R. Carles, A. Sayari, R. Chtourou, F.F. Charfi, R. Planel. Phys. Rev. B **53**, 3960 (1996); R. Teissier, J.J. Finley, M.S. Skolnick, J.W. Cockburn. Phys. Rev. B **54**, R 8329 (1996); V.F. Sapega, V.I. Perel', A.Yu. Dobin, D.N. Mirlin, I.A. Akimov. Phys. Rev. B **56**, 6871 (1997); S. Guha, Q. Cai, M. Chandrasekhar, H.R. Chandrasekhar. Phys. Rev. B **58**, 7222 (1998); I.A. Akimov, V.E. Sapega, D.N. Mirlin, V.M. Ustinov. Physica E **10**, 505 (2001); X. Gao, D. Botez, I. Knezevic. Appl. Phys. Lett. **89**, 191119 (2006); J.McTavish, Z. Ikonc, D. Indjin, P. Harrison. Acta Phys. Pol. A **113**, 891 (2008).

- [2] М. Строшно. Фононы в наноструктурах. Физматлит. М. (2006). 320 с.
 [3] O.E. Raichev. Phys. Rev. B **49**, 5448 (1994).
 [4] S.N. Grinyaev, G.E. Karavaev, V.G. Tyuterev. Physica B **228**, 319 (1996).
 [5] С.Н. Гриняев, Л.Н. Никитина, В.Г. Тюттерев. ФТТ **48**, 120 (2006).
 [6] О.В. Ковалев. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. Наука, М. (1986). 368 с.
 [7] K.A. Mader, A. Zunger. Phys. Rev. B **40**, 10391 (1989).
 [8] Г.Ф. Караваев, С.Н. Гриняев. ФТТ **48**, 893 (2006); Г.Ф. Караваев, С.Н. Гриняев. Изв. вузов. Физика **50**, 34 (2007).