

Электрон-фононное взаимодействие в короткопериодических сверхрешетках $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$

© С.Н. Гриняев^{*+¶}, Л.Н. Никитина^{*+}, В.Г. Тютчев^{+•}

^{*} Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634050 Томск, Россия

⁺ Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия

[•] Томский государственный педагогический университет, 634041 Томск, Россия

(Получена 15 мая 2013 г. Принята к печати 26 мая 2013 г.)

На основе метода функционала электронной плотности определены деформационные потенциалы рассеяния электронов на коротковолновых фононах для междолинных переходов в зоне проводимости короткопериодических сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$ ($m, n = 1, 2, 3$). Проведен анализ зависимости электронных, фононных состояний и деформационных потенциалов от толщины слоев сверхрешеток. Результаты *ab-initio* расчетов хорошо согласуются с данными эмпирического расчета объединенных по фононам деформационных потенциалов, но отличаются от соответствующих потенциалов для парциальных каналов рассеяния вследствие приближений феноменологической модели сил связи.

1. Введение

Современные методы исследования физических свойств многоатомных систем позволяют определять не только электронные и колебательные состояния кристаллов, но и параметры, характеризующие их взаимодействие [1]. К настоящему времени достаточно полно изучены процессы рассеяния электронов на длинноволновых фононах, вызывающих электронные переходы в пределах одной долины зонного спектра [2]. Из анализа экспериментальных данных и теоретических расчетов [3] установлены внутримолекулярные деформационные потенциалы для большой группы алмазоподобных полупроводников. В меньшей степени исследовано межмолекулярное рассеяние электронов на коротковолновых фононах [4], обуславливающих целый ряд практически важных явлений. Известно, что процессы межмолекулярного рассеяния электронов приводят к отрицательной дифференциальной проводимости и генерации микроволнового излучения [5], токам утечки в каскадных лазерах [6–8], изменению вероятностей туннелирования электронов в барьерных структурах и интенсивности резонансного рамановского рассеяния [9]. Они определяют субпикосекундную динамику электронов и структуру спектров высокого временного разрешения [10], непрямозонного поглощения и люминесценции [11], релаксацию носителей заряда при высоких уровнях возбуждения [12] и т.д.

Особенно важную роль межмолекулярное рассеяние играет в свойствах короткопериодических сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$, в которых размерное квантование электронных и колебательных состояний вызывает сложное, многодолинное устройство зоны проводимости и многомолекулярный характер фононного спектра. Это затрудняет интерпретацию кинетических и оптических явлений и требует предварительного теоретического анализа ин-

тенсивностей парциальных каналов рассеяния. До сих пор, однако, выполнено довольно ограниченное число исследований электрон-фононного взаимодействия в гетероструктурах GaAs/AlAs, причем большинство из них посвящено внутримолекулярным переходам. Межмолекулярное рассеяние электронов изучалось в сверхрешетках $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$ с довольно толстыми слоями ($n, m > 10$) методом огибающих функций для переходов между состояниями, происходящими из Γ и X долин бинарных компонент [9]. В то же время известно, что при изменении толщины слоев и ориентации гетерограницы зона проводимости сверхрешеток может формироваться из состояний других сфалеритных долин (прежде всего L долин) и внутренних точек зоны Бриллюэна. Кроме того, в пределе ультратонких слоев адекватное описание электронных, колебательных состояний и процессов их взаимодействия требует применения фундаментальных методов, учитывающих атомистическое строение материалов. В связи с этим в работах [13,14] электронные свойства сверхрешеток с субатомными слоями $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ ($n, m = 1, 2, 3$) исследовались нами на основе метода эмпирического псевдопотенциала (МЭП) [15] и реалистической модели сил связи [16]. Было показано, что поведение межмолекулярных деформационных потенциалов в ряду сверхрешеток непосредственно определяется квантово-размерными эффектами в электронных и фононных состояниях. Полученные результаты требуют дальнейшего развития и обоснования в рамках метода функционала электронной плотности, подобно тому, как это было сделано для бинарных кристаллов [17–19].

Настоящая работа посвящена изучению процессов межмолекулярного рассеяния электронов на коротковолновых фононах в сверхрешетках $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$ с тонкими слоями на основе первопринципных расчетов электронных и колебательных состояний [20,21]. Вы-

¶ E-mail: gsn@phys.tsu.ru

численные деформационные потенциалы сравниваются с данными прежнего МЭП расчета [14].

2. Определение деформационных потенциалов

При рассеянии электрона из начального блоховского состояния $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ с энергией $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ (n — номер зоны, \mathbf{k} — волновой вектор) в конечное состояние $|\psi_{n'\mathbf{k}'}\rangle$ вследствие колебаний решетки, отвечающих фонону ветви λ с волновым вектором \mathbf{q} и частотой $\omega_{\lambda\mathbf{q}}$, выполняются законы сохранения энергии $\varepsilon_{n'\mathbf{k}'} = \varepsilon_{n\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_{\lambda\mathbf{q}}$ и квазиимпульса $\hbar\mathbf{k}' = \hbar\mathbf{k} \pm \hbar\mathbf{q}$ (верхний знак соответствует поглощению, нижний знак — испусканию фонона). Вероятность междолинного рассеяния записывается в виде [13,14]

$$P_{n\mathbf{k},n'\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}^\lambda = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{n\mathbf{k}} | \Delta \hat{U}_q^\lambda | \psi_{n'\mathbf{k}\pm\mathbf{q}} \rangle|^2 \times \left(N_{\lambda\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon_{n\mathbf{k}} - \varepsilon_{n'\mathbf{k}\pm\mathbf{q}} \pm \hbar\omega_{\lambda\mathbf{q}}), \quad (1)$$

где $N_{\lambda\mathbf{q}}$ — функция распределения фононов. Деформационный потенциал междолинного рассеяния пропорционален матричному элементу возмущения кристаллического потенциала $\Delta \hat{U}_q^\lambda$, вызванного фононом:

$$D_{n\mathbf{k},n'\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}^\lambda = \sqrt{\frac{2V\rho\omega_{\lambda\mathbf{q}}}{\hbar}} |\langle \psi_{n\mathbf{k}} | \Delta \hat{U}_q^\lambda | \psi_{n'\mathbf{k}\pm\mathbf{q}} \rangle|, \quad (2)$$

где ρ и V — плотность и объем кристалла соответственно.

В эмпирическом расчете деформационных потенциалов $D_{n\mathbf{k},n'\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}^\lambda$ частоты фононов $\omega_{\lambda\mathbf{q}}$ и векторы поляризации $\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}^\alpha$ (s — номер атома) определялись с использованием феноменологической модели связи [16], а зонные энергии $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ и блоховские функции $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ вычислялись методом эмпирического псевдопотенциала [15]. Кристаллический потенциал представлялся в виде суммы локальных, сферически симметричных псевдопотенциалов атомов, жестко сдвигающихся при колебаниях решетки в направлениях векторов поляризации $\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}^\alpha$. Потенциал возмущения $\Delta \hat{U}_q^\lambda$ определялся из разницы потенциалов деформированного и равновесного кристаллов.

Первопринципный расчет проводился с использованием теории возмущений функционала электронной плотности (DFPT) [21]. В этом методе частоты фононов определяются из расчета поправок к полной энергии основного состояния кристалла при смещениях атомов $u_l^{\alpha s} = \xi_q^{\alpha s} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_l)$, где $\xi_q^{\alpha s}$ — малый параметр, \mathbf{R}_l — вектор прямой решетки, $\alpha = x, y, z$. Для нахождения динамической матрицы были вычислены поправки к электронной плотности $\Delta\rho(\mathbf{r}) = \xi_q^{\alpha s} \delta\rho_q^{\alpha s}(\mathbf{r})$ и кристаллическому потенциалу $\Delta\hat{W} = \xi_q^{\alpha s} \delta\hat{W}_q^{\alpha s}$ в первом порядке

по $\xi_q^{\alpha s}$. Вариация плотности дается соотношением [21]

$$\delta\rho_q^{\alpha s}(\mathbf{r}) = 4\text{Re} \sum_{v\mathbf{k}} \psi_{v\mathbf{k}}(\mathbf{r})^* \delta\psi_{v\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\alpha s}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где суммирование проводится по занятым (v) состояниям. Величина $\delta\psi_{v\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\alpha s}(\mathbf{r})$ связана с поправкой 1-го порядка к волновой функции зонного состояния $\Delta\psi_{v\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \xi_q^{\alpha s} \delta\psi_{v\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\alpha s}(\mathbf{r})$ и находилась из уравнения [21]

$$(\hat{H}_{\text{SCF}} + g\hat{P}_v^{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{v\mathbf{k}}) |\delta\psi_{v\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\alpha s}\rangle = -\hat{P}_c^{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \delta\hat{W}_q^{\alpha s} |\psi_{v\mathbf{k}}\rangle. \quad (4)$$

Здесь \hat{H}_{SCF} — гамильтониан Кона-Шэма с самосогласованным потенциалом невозмущенного кристалла, $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$, $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ — его собственные энергии и волновые функции, $\hat{P}_v^{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ и $\hat{P}_c^{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ — операторы проектирования на занятые (v) и незанятые (c) зонные состояния соответственно, параметр g позволяет управлять режимом самосогласования. Оператор $\delta\hat{W}_q^{\alpha s}$ при известной $\delta\rho_q^{\alpha s}(\mathbf{r})$ вычислялся методом функционала плотности в приближении LDA с учетом обмена и корреляции.

Элементы динамической матрицы выражались, согласно теореме Геллмана-Фейнмана, через вторые производные по параметрам $\xi_q^{\alpha s}$ от полной энергии основного состояния возмущенного кристалла [21]. Для их нахождения, наряду с производными от (псевдо)потенциала по смещениям атомов, вычислялись невозмущенная электронная плотность и вариации плотности $\delta\rho_q^{\alpha s}(\mathbf{r})$ для всех атомов s в элементарной ячейке.

Частоты $\omega_{\lambda\mathbf{q}}$ и собственные векторы $\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}^{\alpha s}$ фононов определялись из диагонализации динамической матрицы. Возмущение кристаллического потенциала, вызванное фононом ветви λ с волновым вектором \mathbf{q} , конструировалось из самосогласованных парциальных решений по формуле $\Delta \hat{U}_q^\lambda = \sum_{\alpha s} \delta W_q^{\alpha s} e_{\lambda\mathbf{q}}^{\alpha s}$. Входящие в (1), (2) волновые функции находились в рамках той же процедуры. Таким образом, метод DFPT обеспечивает одновременное определение из первых принципов, как частоты фонона, так и матричного элемента перехода для рассматриваемого канала электрон-фононного рассеяния.

Алгоритм расчета фононного спектра и вероятностей электрон-фононного рассеяния методом DFPT для металлов реализован в программном пакете Quantum Espresso [22,23]. В модифицированном для непроводящих кристаллов варианте алгоритм применялся для изучения рассеяния на коротковолновых фононах в Si [24], Ge [25], бинарных полупроводниках $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ [17–19] и кристаллах ZnO и TiO_2 [12].

3. Кристаллическая структура и свойства симметрии сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$

Тетрагональные сверхрешетки $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$ с четным числом монослоев описываются пространственной группой симметрии D_{2d}^5 . Базисные векторы

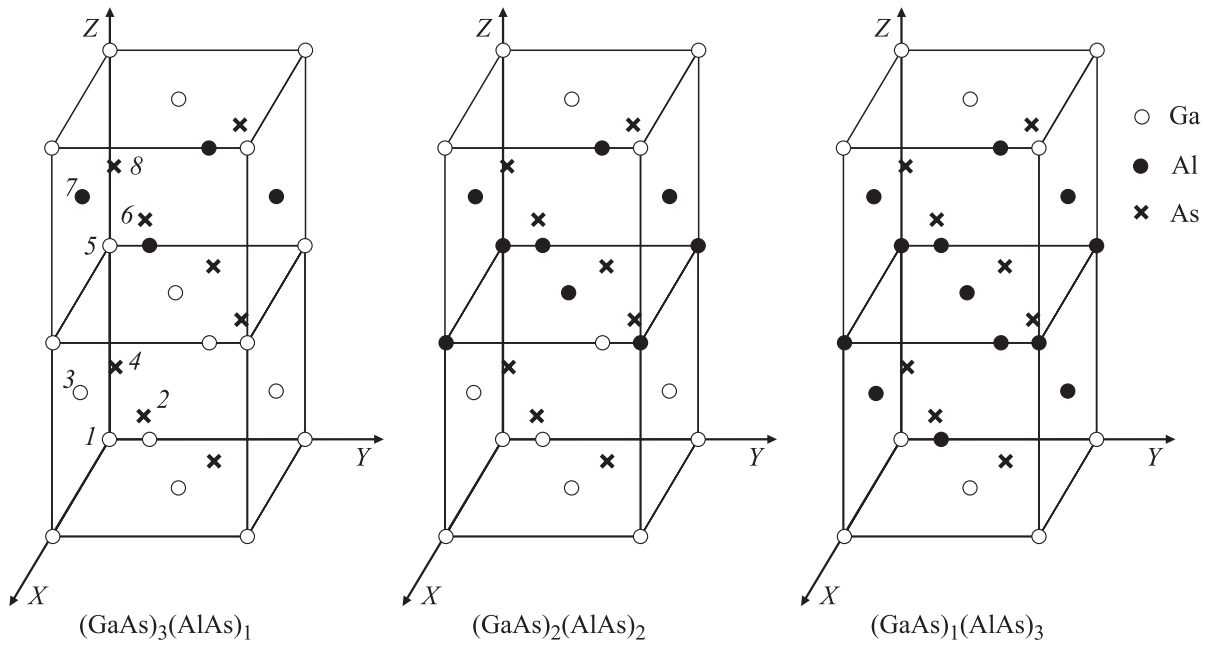


Рис. 1. Кристаллическая структура сверхрешеток. Цифрами указаны номера атомов в элементарной ячейке.

сверхрешеток имеют вид: $\mathbf{a}_1 = \frac{a_0}{2} (110)$, $\mathbf{a}_2 = \frac{a_0}{2} (\bar{1}10)$, $\mathbf{a}_3 = \frac{a_0}{2} [11(m+n)]$ ($a_0 = 5.652 \text{ \AA}$ — постоянная решетки в плоскости границы раздела слоев xy). Им соответствуют векторы обратной решетки: $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a_0} (1\bar{1}0)$, $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a_0} (110)$, $\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a_0} (00 \frac{2}{m+n})$. Использовалась система координат, отличающаяся от стандартной системы [26] поворотом на угол $\pi/4$ в плоскости xy , что удобно при сопоставлении с результатами, полученными для кубических кристаллов. В элементарной ячейке сверхрешеток содержится 8 атомов, расположенных в последовательных слоях, отстоящих друг от друга на $a_0/2$ вдоль тетрагональной оси z (рис. 1).

Симметричным точкам зоны Бриллюэна сверхрешеток с волновыми векторами \mathbf{k} эквивалентны точки зоны

Бриллюэна сфалерита с волновыми векторами \mathbf{k}

$$\begin{aligned} \Gamma(0, 0, 0) &\rightarrow \Gamma + \underline{X}(0, 01) + \underline{\Delta}(0, 0, 0.5) + \underline{\Delta}(0, 0, -0.5); \\ X(-0.5, 0.5, 0) &\rightarrow \underline{L}(0.5, -0.5, 0.5) + \underline{L}(0.5, -0.5, -0.5) \\ &\quad + \Sigma(0.5, -0.5, 0) + \Sigma(-0.5, 0.5, 0); \\ M(1, 0, 0) &\rightarrow \underline{X}(1, 0, 0) + \underline{X}(0, 1, 0) + \underline{W}(0, 1, 0.5) \\ &\quad + \underline{W}(0, 1, -0.5) + \underline{W}(1, 0, 0.5) + \underline{W}(1, 0, -0.5); \\ Z(0, 0, 0.25) &\rightarrow \underline{\Delta}(0, 0, 0.25) + \underline{\Delta}(0, 0, -0.25) \\ &\quad + \underline{\Delta}(0, 0, 0.75) + \underline{\Delta}(0, 0, -0.75). \end{aligned}$$

Таблица 1. Ширина запрещенной зоны и энергии электронных уровней сверхрешеток в симметричных точках тетрагональной зоны Бриллюэна (относительно дна зоны проводимости), эВ

	(GaAs) ₃ (AlAs) ₁			(GaAs) ₂ (AlAs) ₂			(GaAs) ₁ (AlAs) ₃		
	состояние	ab-initio	МЭП	состояние	ab-initio	МЭП	состояние	ab-initio	МЭП
E_g		1.11	1.79		1.36	2.09		1.37	2.16
Γ	Γ_1	0	0	$\Gamma_1^{(1)}$	0	0	Γ_3	0	0
	Γ_3	0.27	0.26	$\Gamma_1^{(2)}$	0.16	0.05	Γ_1	0.33	0.26
M	M_5	0.25	0.26	M_1	0.02	0.005	M_5	0.02	0
	M_4	0.40	0.59	M_4	0.04	0.006	M_1	0.45	0.56
	M_1	0.85	0.89	M_5	0.56	0.55	M_4	0.93	0.80
X	X_3	0.04	0.07	X_3	0.20	0.15	X_1	0.32	0.16
	X_1	0.48	0.41	X_1	0.32	0.17	X_3	0.86	0.63
Z	Z_3	0.23	0.35	Z_3	0.08	0.11	Z_1	0.09	0.13
	Z_1	0.57	0.36	Z_1	0.47	0.14	Z_3	0.49	0.17

Данное соответствие векторов указывает на происхождение сверхрешеточных состояний из состояний бинарных компонент.

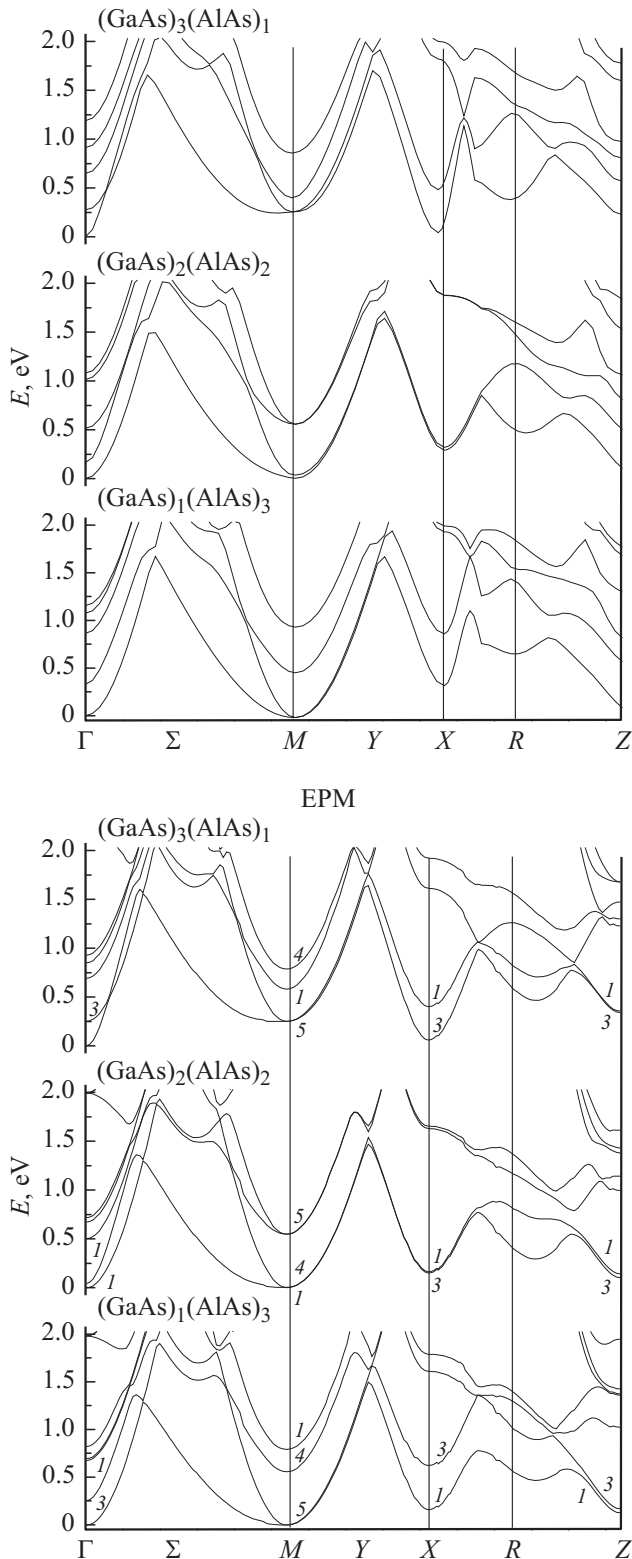


Рис. 2. Зоны проводимости сверхрешеток. Энергии отсчитаны относительно дна зоны проводимости. Цифрами указаны номера неприводимых представлений, по которым преобразуются электронные состояния.

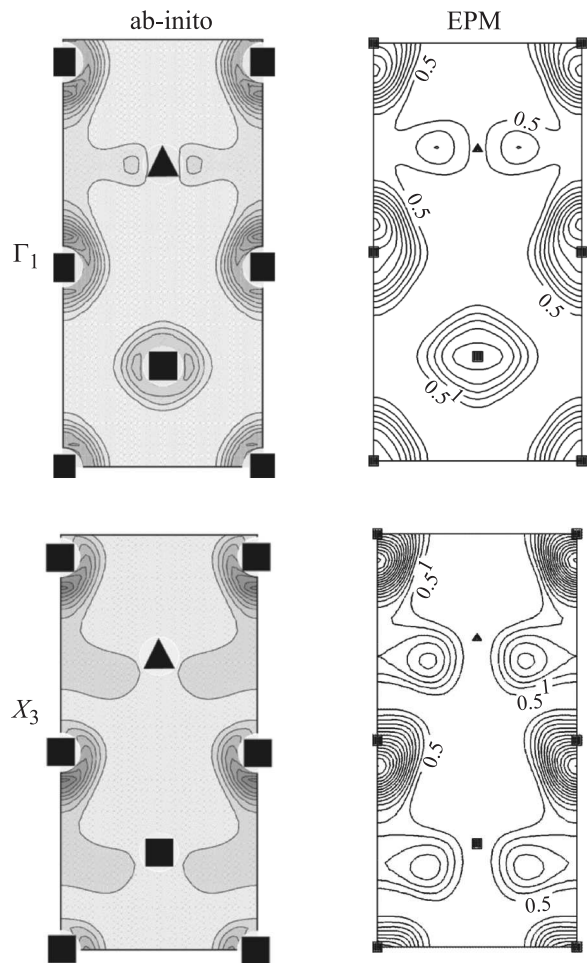


Рис. 3. Изолинии плотности вероятности Γ_1 и X_3 электронных состояний сверхрешетки $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ в плоскости (001) . Треугольниками обозначены атомы Al, квадратами — атомы Ga.

4. Зонные спектры сверхрешеток

Ab-initio зонные спектры сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$ рассчитывались с использованием пакета Quantum Espresso v.3.2 [22,23] и псевдопотенциалов Bachelet–Hamann–Schluter аналогично [26]. Форм-факторы псевдопотенциалов обрезались при модуле волнового вектора $q_{\text{max}} = 3.53$ а.е. В разложении волновых функций учитывались плоские волны с энергиями, меньшими $5Ry$. Результаты ab-initio расчетов энергий зоны проводимости сверхрешеток приведены в табл. 1 и на рис. 2 в сравнении с данными МЭП расчета [14]. Топологическая структура и симметрия электронных состояний в обоих расчетах одинаковые, количественные расхождения связаны в основном с известным сужением запрещенной зоны в приближении LDA. Удовлетворительное согласие двух расчетов наблюдается и для волновых функций. На рис. 3 это продемонстрировано на примере сравнения электронных плотностей состояний Γ_1 и X_3 зоны проводимости сверхрешетки $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$.

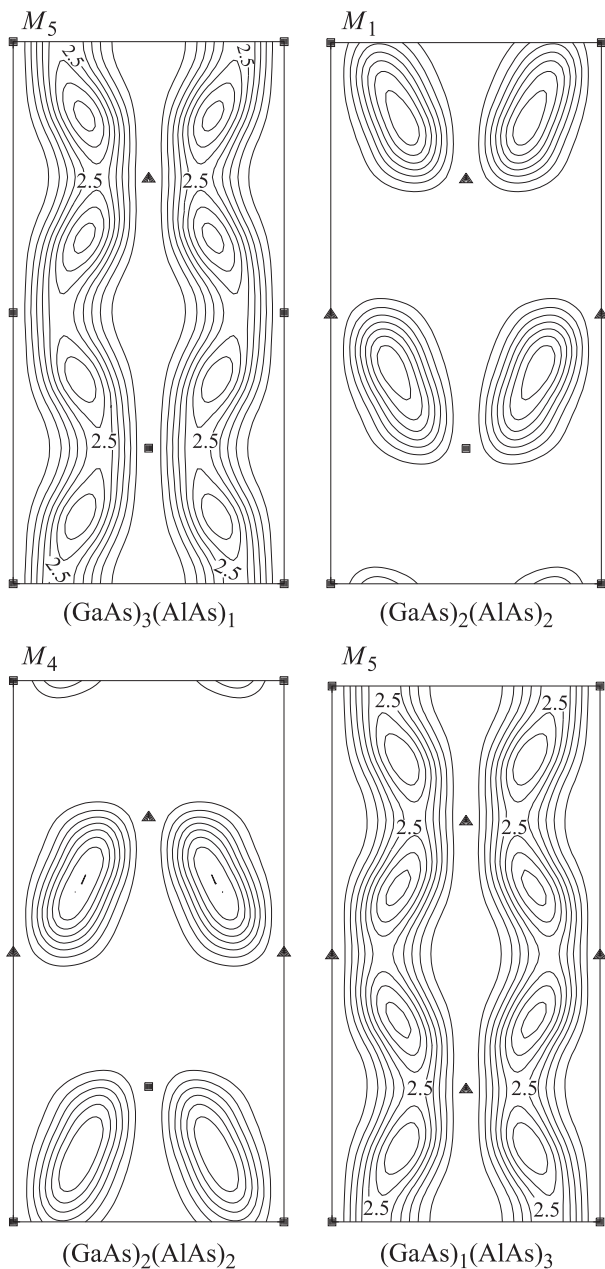


Рис. 4. Изолинии плотности вероятности M электронных состояний сверхрешеток в плоскости (001). Треугольниками обозначены атомы Al, квадратами — атомы Ga.

Дно зоны проводимости во всех рассмотренных сверхрешетках расположено в центральной долине Γ . В сверхрешетке $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ ему отвечает состояние с симметрией Γ_1 , происходящее главным образом из состояния Γ_1 виртуального кристалла (ВК) $\text{Ga}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$. В сверхрешетках $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$, $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ нижние состояния с симметрией Γ_1 и Γ_3 происходят из состояний \underline{X} долины ВК $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ и $\text{Ga}_{0.25}\text{Al}_{0.75}\text{As}$ соответственно.

Основными конкурирующими долинами в зоне проводимости сверхрешеток являются боковые M , X и Z долины. В сверхрешетках $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ и $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$

нижнее состояние M долины имеет симметрию M_5 . В сверхрешетке $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ ему соответствуют два состояния M_1 и M_4 с близкими энергиями. Все они имеют родственную природу и происходят из \underline{X} долин ВК. Это видно из подобия суммарных плотностей вероятности $|\psi(\mathbf{r})|^2$ состояний M_1 , M_4 сверхрешетки $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ и двух вырожденных состояний M_5 сверхрешеток $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ и $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ (рис. 4). Аналогичная связь имеется и между векторами поляризации сверхрешеток.

Сверхрешеточные состояния X_1 , X_3 происходят из состояний \underline{L} долин ВК, а состояния Z_1 , Z_3 — из состояний ВК с линии $\underline{\Delta}$. Расщепления между состояниями этих пар вызваны тетрагональной компонентой потенциала и зависят от дисперсии зоны проводимости ВК. МЭП расчет дает заниженные значения этих расщеплений вследствие приближений (локальное и сферическое), использованных при построении атомных псевдопотенциалов [15].

5. Фононные спектры сверхрешеток

Фононный спектр сверхрешеток рассчитывался, как описано выше, самосогласованным методом DFPT. Вычисленные частоты фононов сверхрешеток $\omega_\lambda(\mathbf{q})$ для волновых векторов, отвечающих симметричным точкам M и X тетрагональной зоны Бриллюэна, приведены в табл. 2 вместе с данными, полученными в феноменологической модели сил связи [13]. Сравнение показывает, что результаты ab-initio и эмпирические расчеты согласуются между собой с точностью $\sim 10\%$ в области оптических ветвей и с точностью 10–50% в области акустических ветвей. Увеличение погрешности модели жестких ионов для акустических частот связано с ограничением радиуса действия межатомных сил. Отметим также, что вырождение некоторых состояний с симметрией M_1 и M_4 , получающееся в приближении дефекта масс, в ab-initio DFPT расчете снимается.

6. Междолинные деформационные потенциалы

Вычисленные междолинные деформационные потенциалы $D_{nk,n'k\pm q}^\lambda$ для наиболее интенсивных каналов рассеяния приведены в табл. 3. На рис. 5 показана схема междолинных переходов в сверхрешетках с указанием значений парциальных деформационных потенциалов и атомов, колебания которых дают основной вклад в соответствующее рассеяние.

Рассмотрим изменение деформационных потенциалов в ряду сверхрешеток для родственных каналов рассеяния.

Междолинное рассеяние $\Gamma(\Gamma)-M(\underline{X})$ в сверхрешетках является аналогом $\underline{\Gamma}-\underline{X}$ рассеяния в виртуальных

Таблица 2. Частоты M и X фононов $\omega_\lambda(\mathbf{q})$ ТГц сверхрешеток

λ	$(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$				$(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$				$(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$			
	rigid		ab-initio		rigid		ab-initio		rigid		ab-initio	
1	M_5	2.002	2.179	M_4	M_3	2.017	2.392	M_5	M_5	2.040	2.338	M_3
2	M_5	2.002	2.374	M_5	M_4	2.022	2.392	M_5	M_5	2.040	2.670	M_5
3	M_2	2.144	2.374	M_5	M_5	2.163	2.484	M_2	M_2	2.163	2.670	M_5
4	M_5	2.155	2.426	M_3	M_5	2.163	2.506	M_1	M_5	2.175	2.902	M_2
5	M_5	2.155	2.895	M_2	M_2	2.164	3.500	M_5	M_5	2.175	3.454	M_3
6	M_3	2.163	3.426	M_5	M_3	2.169	3.500	M_5	M_3	2.183	3.799	M_5
7	M_3	3.489	3.426	M_5	M_5	3.528	3.586	M_3	M_2	3.528	3.799	M_5
8	M_3	3.528	3.553	M_3	M_5	3.528	3.691	M_2	M_4	3.565	3.838	M_4
9	M_5	5.562	5.829	M_2	M_3	5.756	5.815	M_5	M_5	6.172	5.765	M_1
10	M_5	5.562	5.868	M_1	M_4	5.775	5.815	M_5	M_5	6.172	5.801	M_4
11	M_1	6.458	6.413	M_5	M_5	6.458	6.536	M_5	M_4	6.458	6.453	M_1
12	M_4	6.458	6.413	M_5	M_5	6.458	6.536	M_5	M_1	6.458	6.487	M_4
13	M_2	6.464	6.579	M_4	M_5	6.483	6.541	M_2	M_2	6.483	7.109	M_5
14	M_3	6.483	6.624	M_1	M_5	6.483	6.904	M_3	M_4	7.055	7.109	M_5
15	M_4	6.503	7.296	M_5	M_2	6.881	7.356	M_3	M_1	7.055	7.718	M_3
16	M_5	6.527	7.296	M_5	M_1	6.997	7.631	M_4	M_5	9.134	9.909	M_2
17	M_5	6.527	7.546	M_2	M_5	7.055	7.765	M_5	M_5	9.134	9.938	M_3
18	M_1	7.055	7.621	M_5	M_5	7.055	7.765	M_5	M_3	10.202	9.966	M_5
19	M_4	7.055	7.621	M_5	M_3	9.416	9.974	M_5	M_4	10.218	9.966	M_5
20	M_5	7.131	7.800	M_3	M_4	9.679	9.974	M_5	M_3	10.231	10.055	M_4
21	M_5	7.131	7.951	M_4	M_5	10.217	10.002	M_3	M_5	10.419	10.163	M_5
22	M_3	10.217	10.012	M_3	M_5	10.217	10.036	M_4	M_5	10.419	10.163	M_5
23	M_5	10.611	10.515	M_5	M_2	11.321	10.939	M_4	M_5	11.747	11.290	M_5
24	M_5	10.611	10.515	M_5	M_1	11.479	10.971	M_1	M_5	11.747	11.290	M_5
1	X_2	1.157	1.728	X_2	X_2	1.166	1.852	X_2	X_4	1.166	1.838	X_2
2	X_4	1.167	1.779	X_3	X_4	1.166	1.853	X_4	X_1	1.212	1.973	X_1
3	X_3	1.170	1.867	X_4	X_1	1.197	1.919	X_3	X_3	1.228	2.119	X_3
4	X_2	1.180	1.896	X_1	X_3	1.198	1.934	X_1	X_2	1.244	2.150	X_4
5	X_1	1.183	2.131	X_2	X_2	1.258	2.453	X_4	X_4	1.258	2.443	X_2
6	X_4	1.258	2.466	X_4	X_4	1.258	2.457	X_2	X_2	1.269	2.620	X_4
7	X_3	2.778	3.054	X_3	X_3	2.895	3.376	X_1	X_1	2.917	3.491	X_1
8	X_1	2.881	3.316	X_1	X_1	2.906	3.451	X_3	X_3	3.025	3.692	X_3
9	X_1	4.801	4.877	X_1	X_3	5.010	4.963	X_3	X_3	5.071	5.121	X_3
10	X_3	5.008	4.959	X_3	X_1	5.064	5.069	X_1	X_1	5.492	5.236	X_1
11	X_1	5.826	6.280	X_1	X_1	6.182	6.297	X_3	X_3	6.378	6.310	X_3
12	X_3	6.082	6.298	X_3	X_3	6.270	6.334	X_1	X_1	6.388	6.324	X_1
13	X_3	6.931	7.102	X_1	X_1	7.016	7.140	X_3	X_1	7.111	7.215	X_3
14	X_1	7.013	7.112	X_3	X_3	7.109	7.223	X_1	X_4	7.147	7.667	X_2
15	X_2	7.146	7.234	X_1	X_2	7.147	7.662	X_1	X_3	7.338	7.815	X_1
16	X_4	7.147	7.624	X_2	X_4	7.147	7.811	X_2	X_3	9.602	10.113	X_1
17	X_2	7.148	7.692	X_3	X_3	7.434	7.840	X_1	X_1	9.692	10.246	X_4
18	X_3	7.228	7.803	X_4	X_1	7.438	7.979	X_3	X_1	10.389	10.290	X_2
19	X_1	7.291	7.829	X_2	X_3	9.768	10.288	X_2	X_3	10.536	10.319	X_3
20	X_3	7.481	8.015	X_1	X_1	10.045	10.354	X_3	X_2	10.6788	10.509	X_1
21	X_1	7.600	8.113	X_3	X_2	10.679	10.451	X_1	X_4	10.6795	10.520	X_4
22	X_3	10.570	10.466	X_4	X_4	10.679	10.470	X_4	X_2	10.6801	10.676	X_3
23	X_1	10.582	10.501	X_3	X_1	11.042	10.663	X_1	X_3	11.360	10.787	X_3
24	X_4	10.680	10.640	X_1	X_3	11.212	10.786	X_3	X_1	11.408	10.985	X_1

кристаллах и поэтому, подобно ему, происходит в основном за счет колебаний катионов. Наибольший вклад в деформационные потенциалы $\Gamma-M$ каналов дают колебания легких атомов Al с частотами в интервале

10.5–11.3 ТГц. В сверхрешетке $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ переходы Γ_1-M_5 , Γ_3-M_5 происходят в основном за счет колебаний атомов Al₅ среднего монослоя, в области которого максимальна амплитуда волновой функции. В сверхре-

Таблица 3. Междолинные деформационные потенциалы $D_{\text{нк.н}/\text{k}\pm\text{q}}^{\lambda}$ в сверхрешетках ($\text{эВ}/\text{\AA}$). В скобках указана симметрия и номера ветвей фононов λ (из табл. 2).

Сверхрешетка $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$								
Γ_1-M_5 (M_5)	Γ_3-M_5 (M_5)	Γ_1-X_3 (X_3)	Γ_1-X_1 (X_1)	Γ_3-X_3 (X_3)	Γ_3-X_1 (X_1)	$X_3-\tilde{X}_3$ (M_4)	$X_3-\tilde{X}_1$ (M_5)	$X_1-\tilde{X}_1$ (M_1)
2.38(11,12)	2.90(11,12)	2.51(12)	2.97(11)	0.47(10)	0.44(11)	2.22(13)	0.18(12)	1.80(10)
2.83(15,16)	7.40(15,16)	2.67(14)	0.76(13)	4.09(12)	1.43(13)	0.17(21)	0.29(19)	2.32(14)
6.24(23,24)	9.23(23,24)	1.97(17)	1.12(15)	0.34(19)			0.96(24)	
		4.82(23)	0.54(24)	1.42(23)				
Сверхрешетка $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$								
$\Gamma_1^{(1)}-M_1$ (M_1)	$\Gamma_1^{(1)}-M_4$ (M_4)	$\Gamma_1^{(2)}-M_1$ (M_1)	$\Gamma_1^{(2)}-M_4$ (M_4)	$\Gamma_1^{(2)}-X_3$ (X_3)	$\Gamma_1^{(2)}-X_1$ (X_1)	$X_3-\tilde{X}_1$ (M_4)	$X_3-\tilde{X}_1$ (M_5)	$X_1-\tilde{X}_1$ (M_1)
4.06(15)	1.96(13)	1.03(15)	3.76(13)	1.51(11)	3.46(15)	0.41(13)	1.61(10)	0.31(15)
10.22(24)	6.36(23)	2.77(24)	7.47(23)	2.85(13)	2.29(23)	1.24(23)	2.06(11)	1.38(24)
				0.68(18)				
				2.51(20)				
				2.96(24)				
Сверхрешетка $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$								
Γ_3-M_5 (M_5)	Γ_1-M_5 (M_5)	Γ_1-X_1 (X_1)	Γ_1-X_3 (X_3)	Γ_3-X_1 (X_1)	Γ_3-X_3 (X_3)	$X_3-\tilde{X}_3$ (M_4)	$X_3-\tilde{X}_1$ (M_5)	$X_1-\tilde{X}_1$ (M_1)
3.55(13,14)	0.58(13,14)	0.79(12)	1.19(9)	1.01(12)	3.08(15)	0.19(8)	0.18(14)	0.63(11)
0.45(18,19)	1.29(18,19)	3.64(15)	1.90(11)	0.80(24)	3.85(23)	1.45(12)	0.36(19)	
0.41(21,22)	2.76(21,22)	1.72(16)	1.61(19)				1.12(24)	
12.92(23,24)	7.01(23,24)	1.97(20)	0.20(22)					
		5.96(24)	0.83(23)					

шетке $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ из двух переходов $\Gamma_1^{(2)}-M_1$ и $\Gamma_1^{(2)}-M_4$ более интенсивным является переход $\Gamma_1^{(2)}-M_4$, поскольку волновые функции состояний $\Gamma_1^{(2)}$ и M_4 имеют заметную амплитуду в одном и том же слое AlAs, тогда как состояния $\Gamma_1^{(2)}$ и M_1 локализованы в разных областях пространства [14].

Междолинное рассеяние $\Gamma(\underline{\Gamma})-X(\underline{L})$ в сверхрешетках подобно рассеянию ВК $\underline{\Gamma}-\underline{L}$. Вследствие расщепления сфалеритных \underline{L} состояний одному $\underline{\Gamma}-\underline{L}$ каналу отвечают два сверхрешеточных перехода $\Gamma-X_1$ и $\Gamma-X_3$. В сверхрешетках $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ и $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ эти переходы вызваны преимущественно колебаниями катионов, а в сверхрешетке $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ дополнительный вклад в них дают колебания атомов мышьяка. Вероятность переходов зависит от взаимного положения уровней начального и конечного состояний. В сверхрешетке $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ более интенсивными являются переходы в нижнее состояние X_3 , в сверхрешетке $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ интенсивности всех каналов $\Gamma-X$ рассеяния выравниваются, в сверхрешетке $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ максимальную интенсивность имеет переход $\Gamma-X_1$ между уровнями с близкими энергиями. С ростом расщепления X_1-X_3 отличие интенсивностей $\Gamma-X_1$ и $\Gamma-X_3$ переходов увеличивается.

Междолинное рассеяние $\Gamma(\underline{X})-M(\underline{X})$ в сверхрешетках является аналогом $\underline{X}-\tilde{\underline{X}}$ рассеяния ВК и связано

с колебаниями катионов. Переход Γ_3-M_5 в сверхрешетках $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ и $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ происходит в основном за счет оптических колебаний атомов Al. В сверхрешетке $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ ему соответствуют два перехода $\Gamma_1^{(1)}-M_1$ и $\Gamma_1^{(1)}-M_4$, в которых колебания легких атомов также доминируют. Средний деформационный потенциал переходов $\Gamma_1^{(1)}-M_1$ и $\Gamma_1^{(1)}-M_4$ занимает промежуточное положение между значениями деформационных потенциалов перехода Γ_3-M_5 сверхрешеток $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ и $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$.

Междолинное рассеяние $X(\underline{L})-\tilde{X}(\tilde{\underline{L}})$ в сверхрешетках подобно $\underline{L}-\tilde{\underline{L}}$ рассеянию ВК, поэтому оно в основном обусловлено колебаниями атомов мышьяка. Вместе с тем, гибридизация векторов поляризации ВК приводит к дополнительным, существенным вкладам в деформационные потенциалы от колебаний катионов. Так, в сверхрешетке $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ рассеяние $X_3-\tilde{X}_3$ между лучами одной звезды связано главным образом с колебаниями атомов Ga с частотой 6.58 ТГц, рассеяние $X_1-\tilde{X}_1$ обусловлено колебаниями атомов As с частотой 6.62 ТГц, а рассеяние $X_3-\tilde{X}_1$ между расщепленными сфалеритными \underline{L}_1 состояниями связано с колебаниями всех атомов. В сверхрешетке $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ переходы $X_3-\tilde{X}_3$ и $X_1-\tilde{X}_1$ вызваны колебаниями атомов Al с частотой 10.94 и 10.97 ТГц соответственно, а рассеяние $X_3-\tilde{X}_1$ связано с колебаниями атомов мышьяка

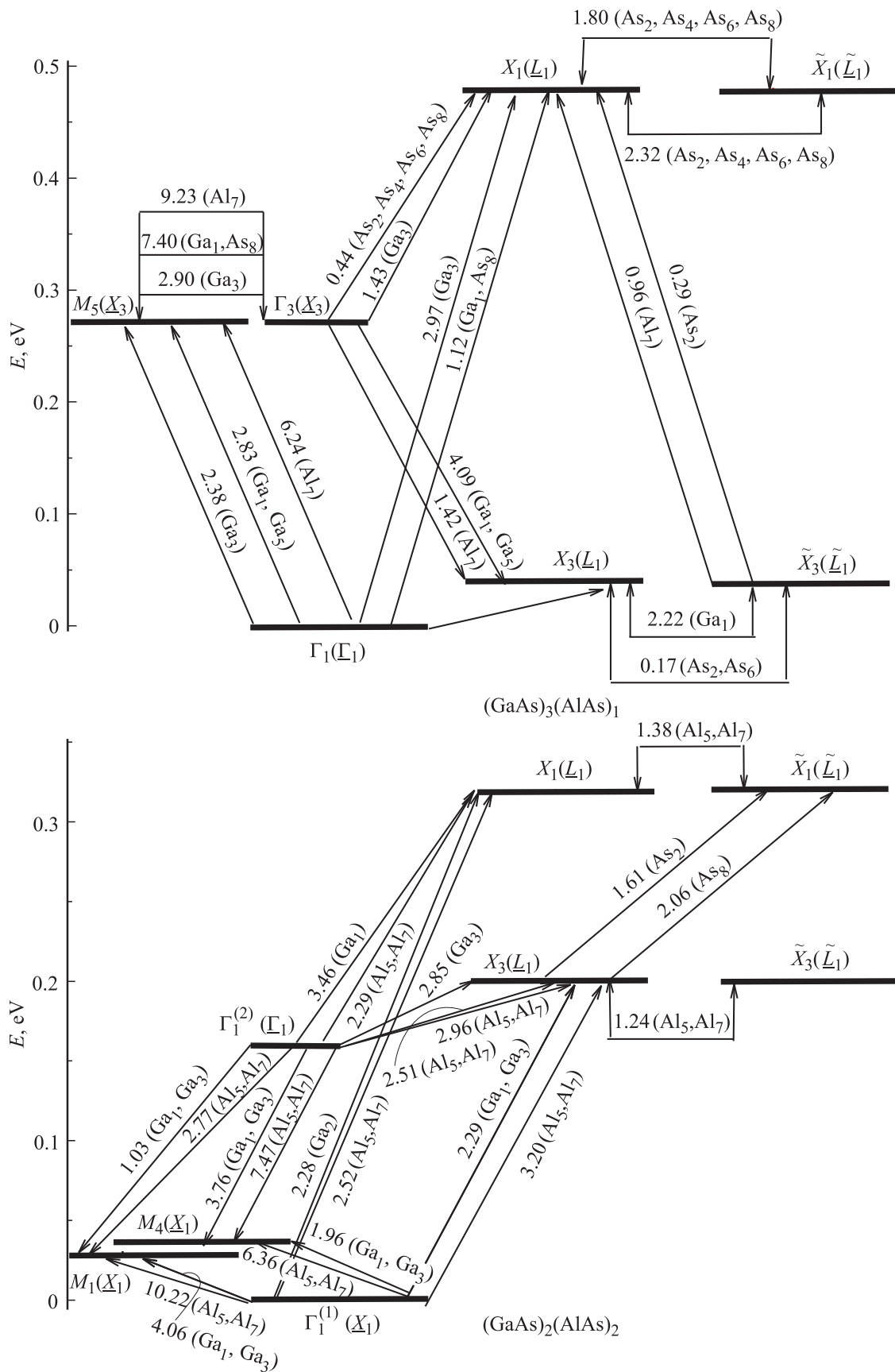


Рис. 5. Схема уровней нижней зоны проводимости сверхрешеток (относительно дна зоны проводимости). Указаны разрешенные междолинные переходы и значения парциальных деформационных потенциалов для атомов, колебания которых дают основной вклад в соответствующее рассеяние (индекс отвечает номеру атома s).

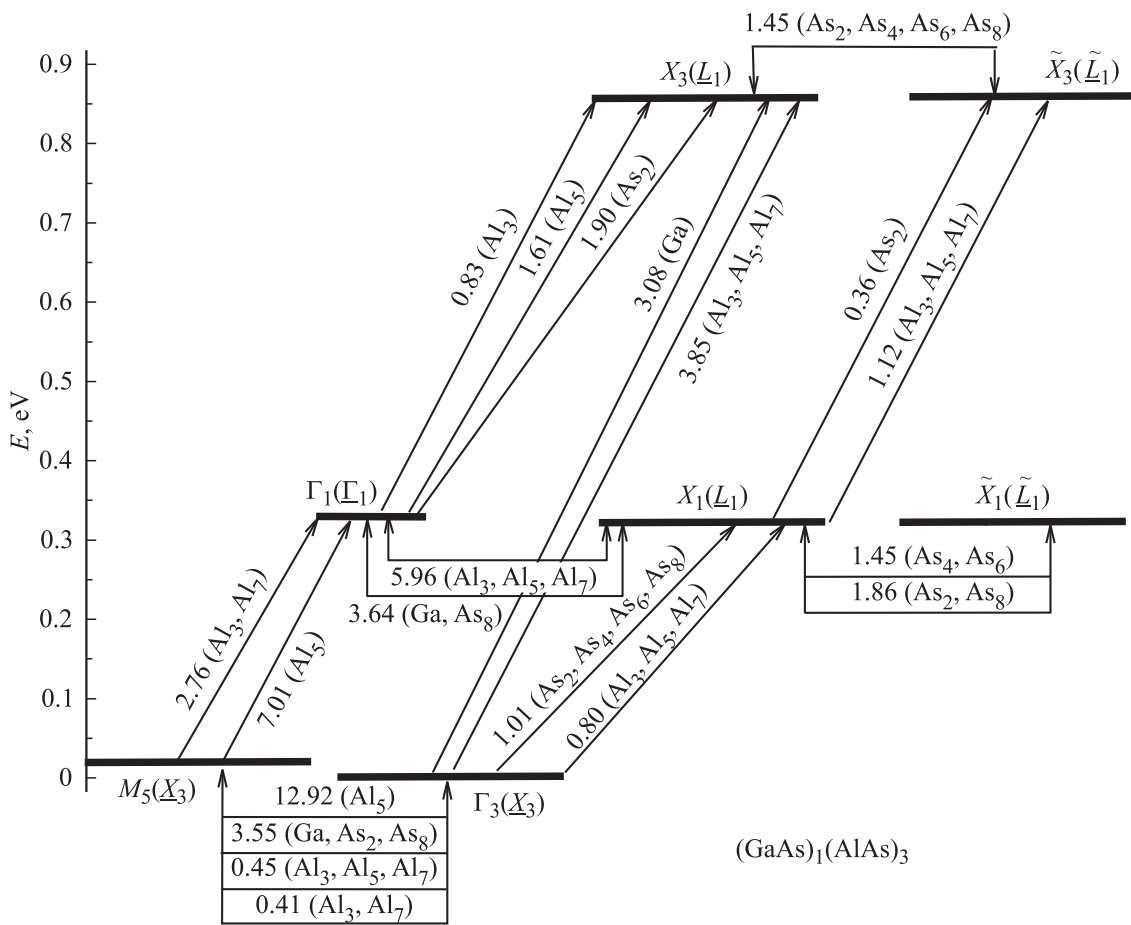


Рис. 5 (продолжение).

с частотой 10.97 ТГц. В сверхрешетке $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ наблюдается своеобразная инверсия вкладов колебаний атомов в деформационные потенциалы по сравнению со сверхрешеткой $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$, выражающаяся в том, что переходы $X_2-\tilde{X}_3$ и $X_1-\tilde{X}_1$ вызваны колебаниями анионов с частотами 10.45 и 10.47 ТГц соответственно, а переход $X_3-\tilde{X}_1$ вызван колебаниями Al.

Представляло интерес сравнить вычисленные методом *ab-initio* деформационные потенциалы с данными МЭП расчета [14]. Детальное сравнение результатов двух расчетов для отдельных каналов рассеяния затруднено прежде всего из-за отличий в последовательности фононных состояний, а также зависимости вероятностей переходов от вида волновых функций и вариаций кристаллического потенциала.

Поскольку, однако, кинетические процессы обычно определяются совокупным рассеянием электронов на всех разрешенных по симметрии фононах, было проведено сравнение эффективных деформационных потенциалов, полученных путем объединения парциальных деформационных потенциалов для отдельных фононов согласно формуле $\langle D_{nk,n'k\pm q} \rangle = \sqrt{\sum_{\lambda} |D_{nk,n'k\pm q}^{\lambda}|^2}$. В приближении жестких ионов такие потенциалы определя-

ются свойствами только электронной подсистемы, тогда как в *ab-initio* расчете они становятся зависимыми и от свойств колебательной системы в ходе определения Кон-Шэмовского самосогласованного потенциала $\Delta \tilde{U}_q^{\lambda}(\mathbf{r})$. Рассчитанные эффективные деформационные потенциалы даны в табл. 4. и на рис. 6. В случае сверхрешетки $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ для близких по энергии переходов в парах $\Gamma_1^{(1)}-M_1$, $\Gamma_1^{(1)}-M_4$ и $\Gamma_1^{(2)}-M_1$, $\Gamma_1^{(2)}-M_4$ приведены эффективные потенциалы, усредненные на один канал рассеяния $\Gamma_1^{(1)}-M_{1,4}$ и $\Gamma_1^{(2)}-M_{1,4}$ по формуле $\langle D_{\Gamma_1 M_{1,4}} \rangle = \sqrt{\frac{D_{\Gamma_1 M_1}^2 + D_{\Gamma_1 M_4}^2}{2}}$. В сверхрешетках $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ и $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ значения приведенных в табл. 4 эффективных потенциалов Γ_1-M_5 , Γ_3-M_5 также отвечают одному каналу рассеяния и совпадают со значениями потенциалов переходов в одно из вырожденных M_5 состояний.

Как видно из сравнения, эффективные деформационные потенциалы, полученные обоими методами для переходов типа $\underline{X}-\underline{X}$, $\underline{\Gamma}-\underline{X}$, $\underline{\Gamma}-\underline{L}$ хорошо согласуются друг с другом для всех сверхрешеток благодаря близости результатов расчетов электронных состояний. При этом деформационные потенциалы наиболее ин-

Таблица 4. Эффективные междолинные деформационные потенциалы $\langle D_{nk,n'k\pm q} \rangle$ в сверхрешетках (эВ/Å)

$(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$			$(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$			$(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$		
переход	ab-initio	МЭП	переход	ab-initio	МЭП	переход	ab-initio	МЭП
Γ_1-M_5	5.13	5.35	$\Gamma_1^{(2)}-M_{1,4}$	6.27	6.03	Γ_1-M_5	5.43	5.55
Γ_3-M_5	7.95	8.17	$\Gamma_1^{(1)}-M_{1,4}$	9.09	8.80	Γ_3-M_5	9.48	9.40
Γ_1-X_3	6.06	5.53	$\Gamma_1^{(2)}-X_3$	5.17	4.42	Γ_1-X_1	7.31	6.58
Γ_1-X_1	3.30	3.10	$\Gamma_1^{(2)}-X_1$	4.16	4.16	Γ_1-X_3	2.88	2.78
$X_3-\tilde{X}_3$	2.22	0.73	$X_3-\tilde{X}_3$	0.92	1.08	$X_3-\tilde{X}_3$	1.03	1.20
$X_1-\tilde{X}_1$	2.08	1.21	$X_1-\tilde{X}_1$	1.00	0.92	$X_1-\tilde{X}_1$	0.63	0.58
	0.72	0.90		1.85	1.71		0.84	0.91
$X_1-\tilde{X}_3$			$X_1-\tilde{X}_3$			$X_1-\tilde{X}_3$		

тенсивных переходов в сверхрешетках $X-\tilde{X}$ вследствие подобия функций начального и конечного состояний монотонно увеличиваются с ростом доли Al, постепенно приближаясь к значению потенциала в AlAs. С другой стороны, деформационные потенциалы переходов типа $\Gamma-X$ меняются в ряду сверхрешеток немонотонно, что связано с усилением локализации волновой функции Γ -состояния в слоях AlAs при переходе от сверхрешетки $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ к сверхрешетке $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ и ослаблением такой локализации при переходе от сверхрешетки $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ к сверхрешетке $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ [14].

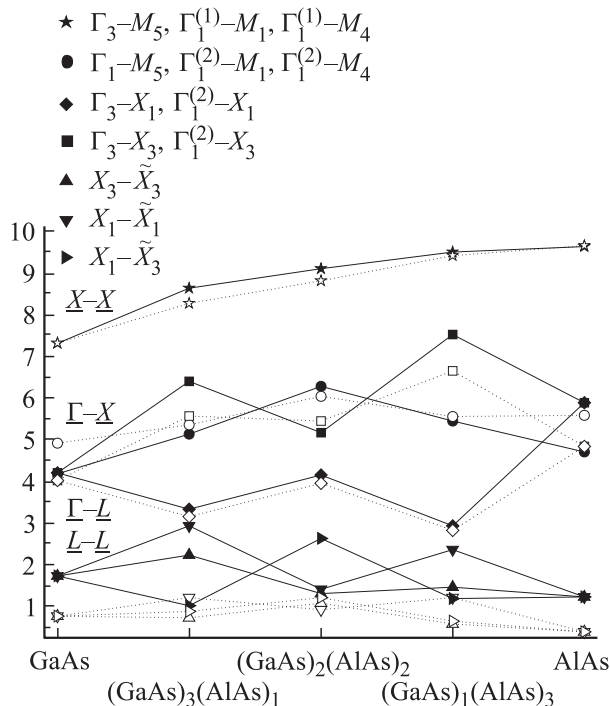


Рис. 6. Эффективные междолинные деформационные потенциалы в сверхрешетках и бинарных кристаллах. Сплошные линии — ab-initio расчет, пунктирные линии — эмпирический расчет.

Деформационные потенциалы переходов Γ_1-X_1 и Γ_1-X_3 осциллируют в ряду сверхрешеток пропорционально величине энергетического зазора X_1-X_3 .

Наименее интенсивные каналы рассеяния $X_3-\tilde{X}_1, X_1-\tilde{X}_1$ и $X_3-\tilde{X}_3$ вызваны акустическими и оптическими колебаниями катионов и анионов. В бинарных соединениях им соответствует междолинный переход $L-\tilde{L}$. Для GaAs деформационный потенциал этого перехода при рассеянии на LA- и LO-фононах, полученных в ab-initio расчете (1.7 эВ/Å), заметно больше соответствующего значения потенциалов МЭП расчета (1.0 эВ/Å). Как показано в [19], данное расхождение связано с недостатками модели жестких ионов в описании изменений электронной плотности, возникающих при колебаниях анионов. В случае сверхрешеток это проявилось в занижении эмпирических потенциалов для $X_1-\tilde{X}_1$ и $X_3-\tilde{X}_3$ переходов в сверхрешетке $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ с большей долей GaAs.

В связи с этим при интерпретации физических процессов, зависящих от парциальных каналов рассеяния электронов на отдельных фононах в гетероструктурах GaAs/AlAs (001), необходимо использовать результаты ab-initio расчета междолиновых деформационных потенциалов.

7. Заключение

Методом функционала электронной плотности впервые исследовано междолинное рассеяние электронов на коротковолновых фононах в сверхрешетках $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$ с ультратонкими слоями ($m, n = 1, 2, 3$). Получены парциальные деформационные потенциалы для основных каналов рассеяния электронов в зоне проводимости. Закономерности в изменении потенциалов в ряду сверхрешеток объясняются свойствами электронных и колебательных состояний. Усредненные по фононам деформационные потенциалы хорошо согласуются с результатами эмпирического расчета. Для парциальных каналов рассеяния отличия

результатов двух расчетов обусловлены недостатками упрощенной модели сил связи, использованной для определения колебательных состояний.

Вычисленные деформационные потенциалы выступают входными параметрами, необходимыми для моделирования оптических и транспортных характеристик сверхрешеток и гетероструктур GaAs/AlAs (001).

Работа выполнена в рамках проектов Министерства образования и науки РФ 2.624.2011, 2.4593.2011 и частично 2.3684.2011.

Список литературы

- [1] M. Calandra, N. Vast, F. Mauri. Phys. Rev. B, **69**, 224 505 (2004).
- [2] B.K. Ridley. *Quantum Processes in Semiconductors* (Oxford, Clarendon Press, 1999) P. 436.
- [3] S. Zollner, S. Gopalan, M. Cardona. Phys. Rev. B, **44**, 13 446 (1991).
- [4] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках* (М., Наука, 1984) с. 352.
- [5] B. Gunn. Sol. St. Commun., **1**, 88 (1963).
- [6] X. Gao, D. Botez, I. Knezevic. Appl. Phys. Lett., **89**, 191 119 (2006).
- [7] J. Tavish, Z. Ikonc, D. Indjin, P. Harrison. Acta Phys. Polon. A, **113**, 891 (2008).
- [8] J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtori, A.L. Hutchinson, A.Y. Cho. Science, **264**, 553 (1994).
- [9] С. Грибников, О.Э. Райчев. ФТП, **23**, 2171 (1989); Э. Райчев. ФТП, **25**, 1228 (1989); A. Mlayah, R. Carles, A. Sayari, R. Chtourou, F.F. Charfi, R. Planel. Phys. Rev. B, **53**, 3960 (1996); A. Akimov, V.F. Sapega, D.N. Mirlin, V.M. Ustinov. Physica E, **10**, 505 (2001); P. Kinsler, R.W. Kelsall, P. Harrison. Superlatt. Microstruct., **25**, 163 (1999); F. Rossi, T. Kuhn. Rev. Mod. Phys., **74**, 895 (2002).
- [10] J. Shah, B. Deveaud, T.C. Damen, W.T. Tsang, A.C. Gossard, P. Lugli. Phys. Rev. Lett., **59**, 2222 (1987).
- [11] V.P. Zhukov, E.V. Chulkov, V.G. Tyuterev. J. Phys.: Condens. Matter, **24**, 405 802 (2012); В.П. Жуков, В.Г. Тютерев. ФТТ, **54**(11), 2043 (2012).
- [12] S.N. Grinyaev, G.F. Karavaev, V.G. Tyuterev. Physica B, **228**, 319 (1996).
- [13] С.Н. Гриняев, Л.Н. Никитина, В.Г. Тютерев. ФТТ, **52**(8), 1498 (2010); С.Н. Гриняев, Л.Н. Никитина, В.Г. Тютерев. Деп. в ВИНТИ. Томск, 2009. № 670- В2009.
- [14] K.A. Mader, A. Zunger. Phys. Rev. B, **50**, 17 393 (1994).
- [15] K. Kunc, M. Balkanski, M.A. Nutildeovici. Phys. Status Solidi B, **71**, 341 (1975); K. Kunc, M. Balkanski, M. Nutildeovici. Phys. Status Solidi B, **72**, 229 (1975).
- [16] J. Sjakste, V. Tyuterev, N. Vast. Phys. Rev. B, **74**, 235 216 (2006).
- [17] J. Sjakste, N. Vast, V. Tyuterev. Phys. Rev. Lett., **99**, 236 405 (2007).
- [18] Л.Н. Никитина, С.В. Обухов, В.Г. Тютерев. Изв. вузов. Физика, **52**(7), 78 (2009).
- [19] В. Кон. УФН, **172**, 336 (2002).
- [20] S. Baroni, S. de Gironcoli, A.D. Corso, P. Giannozzi. Rev. Mod. Phys., **73**, 515 (2001).
- [21] S. Baroni et al. // <http://www.pwscf.org>.
- [22] P. Giannozzi, S. Baroni et al. J. Phys.: Condens. Matter, **21**, 395 502 (2009).
- [23] V.G. Tyuterev, N. Vast, J. Sjakste. Phys. Rev. B, **81**, 245 212 (2010).
- [24] V.G. Tyuterev, S.V. Obukhov, N. Vast, J. Sjakste. Phys. Rev. B, **84**, 035 201 (2011).
- [25] О.В. Ковалев. *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп* (М., Наука, 1986) с. 368.
- [26] G.B. Bachelet, M. Schluter, D.R. Hamann. Phys. Rev. B, **26**, 4199 (1982).

Редактор Т.А. Полянская

Electron-phonon interaction in short-period superlattices (GaAs)_m(AlAs)_n (001)

S.N. Grinyaev^{*+}, L.N. Nikitina^{*+}, V.G. Tyuterev^{+•}

^{*} National Research Tomsk Polytechnic University, 634050 Tomsk, Russia

⁺ National Research Tomsk State University, 634050 Tomsk, Russia

[•] Tomsk State Pedagogical University, 634041 Tomsk, Russia

Abstract The deformation potentials of scattering electrons on short-wave phonons for intervalley transitions in a band of conductivity of short-period superlattices (GaAs)_m(AlAs)_n (001) ($m, n = 1, 2, 3$) are determined by the method of functional electronic density. The analysis of electronic, phonon of states and deformation potentials dependences from thickness of layers of superlattices is carried out. The results of ab-initio calculations conform well to the data of empirical deformation potentials united on phonons, but differ from the corresponding potentials for particular channels of scattering owing to approximations phenomenological of model of atomic binding. The work is executed within the framework of the projects of Ministry of education and science of Russian Federation 2.624.2011, 2.4593.2011 and partially 2.3684.2011.