

Упругие деформации и делокализованные оптические фононы в сверхрешетках AlN/GaN

© Д.В. Панькин^{*,+}, М.Б. Смирнов^{*}, В.Ю. Давыдов^{*}, А.Н. Смирнов^{*}, Е.Е. Заважин^{*}, В.В. Лундин^{*}

^{*} Санкт-Петербургский государственный университет,
199034 Санкт-Петербург, Россия

⁺ Санкт-Петербургский государственный университет,
Ресурсный центр „Оптические и лазерные методы исследования вещества“,
199034 Санкт-Петербург, Россия

^{*} Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: dmitrii.pankin@spbu.ru

(Получена 8 февраля 2016 г. Принята к печати 11 февраля 2016 г.)

С использованием модели диэлектрического континуума установлена корреляция между частотами делокализованных фононов симметрии $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$ в рамановских спектрах короткопериодных AlN/GaN сверхрешеток и отношением толщин слоев структуры. Показано, что упругие деформации, возникающие в материалах слоев при росте сверхрешеток, слабо влияют на вид корреляционной зависимости между частотами мод $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$, имеющих высокую интенсивность в рамановских спектрах, и структурным параметром, определяющим отношения толщин слоев. Результаты расчетов фононных частот хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными и могут быть использованы для спектроскопической диагностики AlN/GaN сверхрешеток.

1. Введение

Нитриды металлов III группы, их твердые растворы и выращенные на их основе наноструктуры являются одними из наиболее широко исследуемых материалов современной оптоэлектроники. Отдельный класс таких материалов образуют AlN/GaN сверхрешетки — периодические наноструктуры с плоскими гетеропереходами. Эти сверхрешетки (СР) интересны и как весьма специфические объекты изучения физики твердого тела, и как материалы, важные для разнообразных применений в фотонных устройствах, работающих в широком оптическом диапазоне. В частности, они используются в светодиодах, излучающих в ультрафиолетовом диапазоне, а также рассматриваются в качестве перспективных элементов для устройств, работающих в инфракрасной области (модуляторы интенсивности, эмиттеры с оптической накачкой, фотодетекторы) [1,2].

Ввиду важности прикладных задач, основное внимание исследователей было привлечено к электронным состояниям в AlN/GaN СР. Фононы, как возбуждения, сильно взаимодействующие с электронами, также стали объектом многочисленных исследований. Их систематические исследования в таких СР начались в конце прошлого века [3]. Одной из характерных особенностей нитридов металлов III группы является высокая поляризуемость оптических фононов. Для AlN и GaN величина $\text{TO}-\text{LO}$ расщепления превышает 200 см^{-1} , вследствие чего дисперсионные кривые фононных мод этих материалов перекрываются. Этот факт приводит к появлению в рамановских спектрах СР, созданных на основе AlN и GaN, фононных мод с сильно выраженным полярным характером. Интерес к полярным фононам объясняется прежде всего тем, что именно эти возбуждения сильно

взаимодействуют с носителями тока (так называемое фрелиховское рассеяние) [4]. Другая причина интереса к полярным фононам связана с тем, что в AlN/GaN СР возникают моды, которые имеют делокализованный характер — атомные смещения в них затрагивают атомы всех слоев [5,6]. Частоты таких мод сильно зависят от деталей пространственного строения структуры, что открывает возможность использования рамановской спектроскопии в качестве тонкого структурного зонда. Как было показано в работе [6], в короткопериодных AlN/GaN СР делокализованные моды дают интенсивные линии в рамановских спектрах, а их частоты сильно зависят от отношения толщин слоев СР.

Приводимые в работе [6] зависимости частот делокализованных мод от структуры СР были установлены теоретически с использованием модели диэлектрического континуума (МДК). Эта модель учитывает взаимодействия диполей, индуцированных колеблющимися атомами, и удовлетворяет электростатическим граничным условиям на интерфейсах. Механические граничные условия в этой модели не рассматриваются, что приводит к серьезному недостатку — МДК не учитывает зависимости диэлектрических свойств материалов в слоях СР от упругих деформаций, неизбежно возникающих при росте сверхструктуры.

Задача определения упругих деформаций в слоях короткопериодных AlN/GaN СР рассматривалась в ряде работ [7–9]. Было установлено, что возникающие в таких структурах упругие деформации материалов соседних слоев имеют разные знаки и достигают значений 1–2%. Как следствие, это может вызвать сдвиги рамановских линий до $10-15 \text{ см}^{-1}$. При этом наиболее чувствительными к деформациям оказались именно моды, распространяющиеся в плоскости интерфейса.

Таким образом, есть два фактора, которые влияют примерно одинаково сильно на частоты полярных фононов в СР — диполь-дипольное взаимодействие и упругие деформации. Следовательно, корреляция „структура–спектр“, установленная в работе [6] путем учета диполь-дипольных взаимодействий, нуждается в корректировке, связанной с влиянием упругих деформаций. В данной работе проведен расчет спектра делокализованных полярных мод AlN/GaN СР с учетом и диполь-дипольных взаимодействий, и упругих деформаций. Диполь-дипольные взаимодействия описаны в рамках МДК с диэлектрическими функциями материалов слоев, зависящими от возникающих в них упругих деформаций. Полученные таким образом уточненные корреляции между структурой СР и положением линий в рамановских спектрах сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными.

2. Описание метода расчета

2.1. Модель диэлектрического континуума

Основы МДК были заложены Рытовым в работе [10]. Им рассматривалась задача о распространении электромагнитной плоской волны

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp(i\omega t + i\mathbf{q}\mathbf{r})$$

в слоистой среде, состоящей из периодически чередующихся слоев с разной диэлектрической проницаемостью.

В пренебрежении запаздыванием, электрическое поле должно удовлетворять уравнениям Максвелла:

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = 0, \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0 \quad (2)$$

и уравнению материальной связи

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}. \quad (3)$$

Здесь \mathbf{E} , \mathbf{D} , \mathbf{P} — напряженность электрического поля, вектор электрического смещения и вектор поляризации соответственно. В случае слоистой среды с плоскими интерфейсами на границах раздела слоев должны быть выполнены граничные условия:

$$E_{1,x} = E_{2,x}, \quad (4)$$

$$\varepsilon_{zz}^1 E_{1,z} = \varepsilon_{zz}^2 E_{2,z},$$

где ε_{zz} — матричный элемент тензора диэлектрических постоянных, который имеет диагональный вид

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & & \\ & \varepsilon_{xx} & \\ & & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}.$$

В формуле (4) и далее индексы 1 и 2 соответствуют AlN и GaN.

Нитриды металлов III группы $A^{III}N$ ($A^{III} = \text{Al, Ga, In}$) кристаллизуются в структуре вюртцита. В выращенных на их основе СР направление гексагональной оси (0001) располагается, как правило, перпендикулярно плоскости роста. В таких структурах фононные моды, распространяющиеся в плоскости интерфейсов, будут принадлежать представлениям $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$ [5,11]. В работах [5,6,12] было показано, что уравнения (1)–(4) имеют ненулевые решения, соответствующие модам $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$, лишь при определенных значениях отношений:

$$\rho_z = \varepsilon_{zz}^1 / \varepsilon_{zz}^2 \quad \text{и} \quad \rho_x = \varepsilon_{xx}^1 / \varepsilon_{xx}^2. \quad (5)$$

Величины этих разрешенных значений зависят от структуры СР.

Схема расчета в МДК выглядит следующим образом. Сначала, используя электростатические граничные условия (3), (4), решают уравнения (1), (2) и для заданной геометрии СР определяют разрешенные значения ρ . Затем представляют диэлектрические функции материалов слоев в виде дисперсионных соотношений

$$\varepsilon_{xx}(\omega) = \varepsilon^\infty \frac{\omega_{E(\text{LO})}^2 - \omega^2}{\omega_{E(\text{TO})}^2 - \omega^2}, \quad \varepsilon_{zz}(\omega) = \varepsilon^\infty \frac{\omega_{A(\text{LO})}^2 - \omega^2}{\omega_{A(\text{TO})}^2 - \omega^2}. \quad (6)$$

После этого находят значения частоты ω , которые обеспечивают разрешенные значения отношений (5). В используемом ранее варианте МДК значения частот ω_{TO} и ω_{LO} в выражении (6) определялись из фононного спектра объемных материалов и не зависели от напряжений. В данной работе мы рассматриваем эти величины как переменные, зависящие от упругих деформаций, возникающих в материалах слоев при заданных значениях толщин слоев AlN (d_1) и GaN (d_2) в СР, а в качестве параметра, характеризующего структуру СР, используется величина $f = d_1 / (d_1 + d_2)$.

2.2. Упругие деформации в слоях СР из анизотропных одноосных материалов

Кроме соотношений (4), вторым граничным условием является равенство решеточных постоянных кристаллической структуры граничащих материалов в плоскости интерфейса. Поскольку в свободном состоянии эти постоянные различны, то на интерфейсах в каждом из материалов возникают деформации. Для рассматриваемых нами материалов с гексагональными решетками условие сопряжения структур на интерфейсах можно записать в виде

$$a_0^1 (e_{xx}^1 + 1) = a_0^2 (e_{xx}^2 + 1). \quad (7)$$

Здесь a_0^i ($i = 1, 2$) — значение постоянной решетки в объемных ненапряженных материалах, а e_{xx}^i ($i = 1, 2$) — деформация в плоскости интерфейса. Условие механического равновесия вдоль оси роста (ось z) предполагает отсутствие внешних сил. Следовательно, должно выполняться условие

$$\sigma_{zz}^i = 0. \quad (8)$$

Здесь и далее $\sigma_{\alpha\beta}^i$ ($i = 1, 2$) — тензор напряжений в слоях СР.

Мы пренебрегаем влиянием спонтанной и пьезоэлектрической поляризации на величину деформации, поскольку в рассматриваемых нами AlN/GaN СР учет этого эффекта изменяет значения вычисленных частот не более чем на 1 см^{-1} [13]. Таким образом, можно считать, что напряжения и деформации связаны законом Гука. Для одноосных материалов, к которым принадлежат изучаемые нами гексагональные кристаллы, эта связь принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^i &= (C_{11}^i + C_{12}^i)e_{xx}^i + C_{13}^ie_{zz}^i, \\ \sigma_{zz}^i &= 2C_{13}^ie_{xx}^i + C_{33}^ie_{zz}^i. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь $C_{\mu\nu}^i$ — упругие постоянные, индекс i нумерует слои СР ($i = 1, 2$).

Вследствие периодичности СР полная свободная энергия будет пропорциональна свободной энергии на один период, выражение для которой в приближении двухосного сжатия имеет вид

$$U = \frac{1}{2}(d_1\sigma^1e^1 + d_2\sigma^2e^2). \quad (10)$$

Устойчивому состоянию термодинамического равновесия соответствует минимум полной свободной энергии. Полагая $dU/de = 0$ и учитывая (8), (9), получаем соотношение

$$d_1C_1e_{xx}^1 + \chi d_2C_2e_{xx}^2 = 0, \quad (11)$$

где $C_i = C_{11i} + C_{12i} - 2C_{13i}^2/C_{33i}$ и $\chi = a_{02}/a_{01}$.

Система уравнений (7)–(11) позволяет определить e_{xx}^i и e_{zz}^i — деформации в слоях СР при заданном значении толщин их слоев d_1 и d_2 .

3. Полученные результаты и их обсуждение

Используя деформационные потенциалы фононов (коэффициенты линейной связи между фононными частотами и величинами деформаций), для GaN и AlN [14–17] можно определить сдвиги частот ω_{TO} и ω_{LO} относительно их значений в ненапряженных материалах при аксиально-симметричной деформации:

$$\Delta\omega_n^i = 2a_n^ie_{xx}^i + b_n^ie_{zz}^i. \quad (12)$$

Полученные таким образом „сдвинутые“ значения частот можно использовать в формулах (6) при расчете частот делокализованных полярных фононов A(TO) и E(LO) в напряженных AlN/GaN СР. Характеристики объемных кристаллов, использованные в нашем расчете, приведены в таблице.

3.1. Деформации

Решение уравнений (7)–(11), полученное при разных значениях f , представлено на рис. 1. Видно, что вследствие относительно небольшой величины рассогласования параметров кристаллической решетки ($\sim 2.4\%$) и упругих модулей ($< 7\%$) двух материалов зависимость

Структурные, упругие и диэлектрические характеристики кристаллов AlN и GaN

Параметры	Единицы измерения	AlN		GaN		
a_0	Å	3.112	[18]	3.189	[18]	
c_0		4.982		5.185		
$C_{11} + C_{12}$	ГПа	528	[19]	500	[20]	
C_{33}		402		381		
C_{13}		95		114		
$\omega_{A(\text{TO})}$	см^{-1}	610	[21]	531	[22]	
$\omega_{E(\text{TO})}$		669		559		
$\omega_{A(\text{LO})}$		890		734		
$\omega_{E(\text{LO})}$		911		742		
$a_{A(\text{TO})}, b_{A(\text{TO})}$	см^{-1}	-930, -904	[16]	-630, -1290	[14]	
$a_{A(\text{LO})}, b_{A(\text{LO})}$		-643, -1157		-782, -1181		[17]
$a_{E(\text{TO})}, b_{E(\text{TO})}$		-982, -901		-820, -680		[14]
$a_{E(\text{LO})}, b_{E(\text{LO})}$		-864, -809		-776, -704		[15]
ϵ^∞		4.84	[23]	5.35	[24]	

деформаций от относительной толщины слоев носит квазилинейный характер.

Представленные на рис. 1 зависимости выглядят вполне естественно. В слое AlN при образовании СР материал растягивается в плоскости интерфейса и сжимается в перпендикулярном направлении. В слое GaN ситуация обратная. При уменьшении толщины одного из слоев, накопленные в нем деформации нарастают. При неограниченном росте толщины слоя его деформации стремятся к нулю.

На рис. 1 приведены и экспериментальные данные о величинах поперечных деформаций e_{xx} , полученные

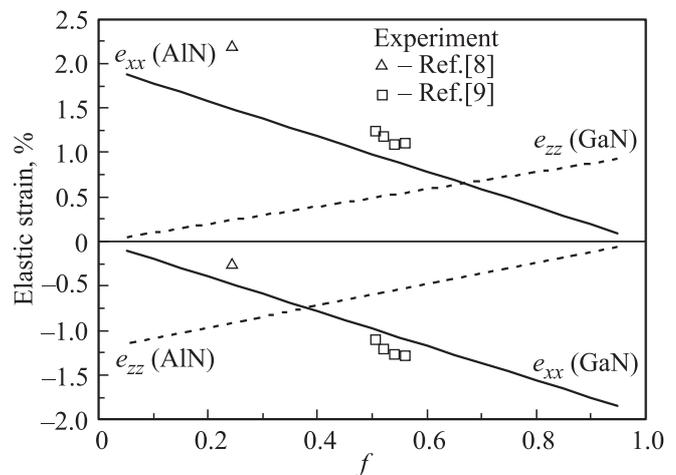


Рис. 1. Зависимость деформаций в плоскости интерфейса (e_{xx} — сплошные линии) и в направлении оси роста СР (e_{zz} — штриховые линии) от относительной толщины слоя AlN в короткопериодной AlN/GaN СР. Экспериментальные результаты для деформаций e_{xx} показаны символами.

из данных рентгеновской дифракции для СР с разным соотношением слоев. Видно, что общую тенденцию изменений напряжений в зависимости от параметра f использованный нами вариант теории передает правильно. Расхождение между теорией и экспериментом, присутствующее на рис. 1, можно объяснить прежде всего особенностями роста СР. В работе [25] было показано, что буферный слой может заметно влиять на величины упругих деформаций в слоях СР. В СР, выращенных на буфере GaN, поперечные деформации слоев GaN значительно меньше, чем в таких же СР, выращенных на буфере AlN. Обратная ситуация наблюдается в слоях AlN. В теоретическом анализе, основанном на формулах (7)–(11) рассматриваются свободные бесконечные СР, в которых влиянием подложки пренебрегают. Экспериментальные данные по деформациям взяты из работ [8,9]. В работе [8] в качестве буфера использовался GaN, в работе [9] — AlN. Поэтому расхождение этих данных с результатами расчетов выглядит вполне ожидаемо — в данных из работы [8] завышена величина деформации в слоях AlN, а в данных из работы [9] — величина деформации в слоях GaN. Кроме того, прецизионные измерения *in situ* методом дифракции быстрых электронов показали, что даже при очень тщательном выборе условий роста невозможно получить абсолютно бездефектные СР [26,27]. В этих работах было установлено, что в слоях из одинакового материала и одинаковой толщины величины деформаций меняются вдоль направления роста СР. Следовательно, условие (7) нарушается, а в областях интерфейсов образуются дислокации. Согласно результатам работ [25–27], величины деформаций зависят как от соотношения толщин слоев, так и от их количества и типа подложки. А используемое в теории приближение бесконечной периодической структуры этого не учитывает.

Критерием применимости модели бесконечной периодической структуры можно считать независимость деформаций слоев от полного периода СР. Такой вывод впервые был отмечен в работе [7]. Заметим, что это соотношение хорошо выполняется в анализируемых нами экспериментальных данных из работы [9] и не выполняется в данных из работы [8]. Из чего можно сделать вывод, что в СР, исследуемых в работе [8], деформации слоев не могут рассматриваться как чисто упругие. Этим можно объяснить столь значительное расхождение между экспериментальными данными работы [8] и используемой нами теорией.

3.2. Фононы

Теперь обратимся к МДК, позволяющему описать зависимость частот фононных мод $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$ от структуры СР. В работах [5,6,12] показано, что разрешенные значения отношений (5) являются функциями двух структурных параметров — введенного выше параметра f и величины $s = (d_1 + d_2)/\lambda$ — отношения полного периода СР и длины волны фонона λ . Известно,

что в рамановских спектрах первого порядка активными являются только длинноволновые фононы. Поэтому в рассматриваемых зависимостях мы можем положить $s = 0$. В таком случае МДК дает для разрешенных значений отношений (5) следующие выражения:

$$\rho_z = \frac{f}{f-1} \quad \text{и} \quad \rho_x = \frac{f-1}{f}. \quad (13)$$

В работе [6] эти соотношения были использованы совместно с дисперсионными формулами (6) для определения зависимости частот $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$ от параметра f . При этом значения частот и брались для объемных ненапряженных материалов. Эти зависимости показаны на рис. 2 штриховыми линиями.

В данной работе в формулах (6) мы использовали значения частот ω_{TO} и ω_{LO} , скорректированные по формулам (12) с помощью зависимостей $e_{\alpha\alpha}(f)$, показанных на рис. 1. Процедура решения задачи усложнилась:

— для каждого значения f с помощью уравнений (7)–(11) определялись величины деформаций слоев;

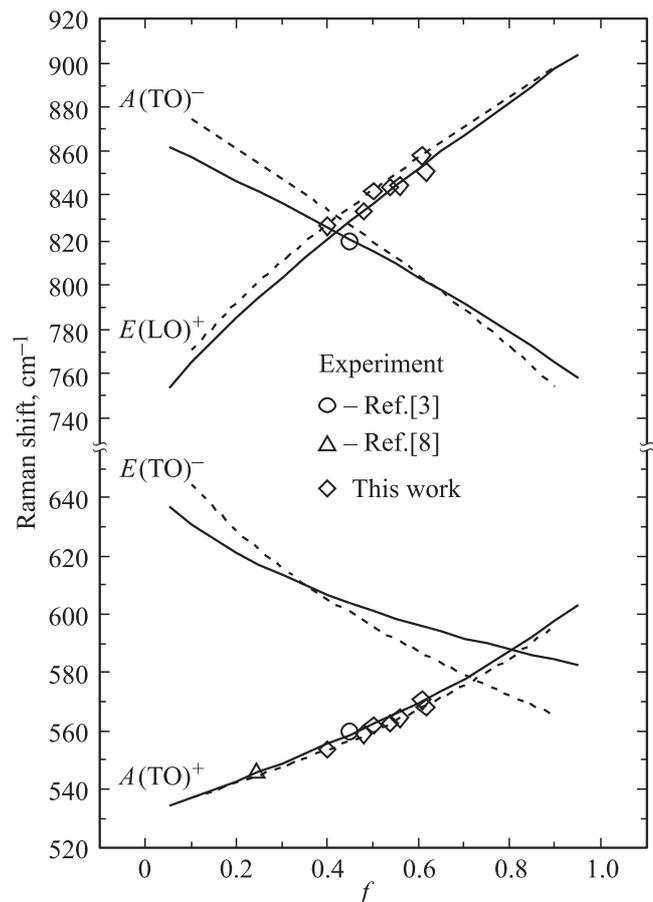


Рис. 2. Зависимость частот $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$ фононов от относительной толщины слоя AlN в короткопериодных AlN/GaN СР. Штриховыми линиями показаны результаты, полученные без учета упругих деформаций. Сплошными линиями показаны частоты, рассчитанные с учетом деформаций. Экспериментальные результаты для частот $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$ фононов показаны символами.

— по полученным деформациям с помощью уравнений (12) вычислялись сдвиги частот ω_{TO} и ω_{LO} в материалах 1 и 2;

— по „сдвинутым“ значениям частот строились диэлектрические функции $\varepsilon^1(\omega)$ и $\varepsilon^2(\omega)$;

— и наконец, с использованием таких скорректированных на деформации диэлектрических функций, решая уравнения (13), определялись частоты полярных фононов в спектрах CP симметрии $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$.

Результаты таких расчетов представлены на рис. 2 сплошными линиями. Эти линии соответствуют решениям уравнений (4)–(6) для мод, поляризованных в плоскости интерфейса (моды $E(\text{LO})$), и для мод, поляризованных перпендикулярно интерфейсу (моды $A(\text{TO})$).

Как было показано в работе [6], эти решения соответствуют почти однородному распределению атомных смещений в материалах всех слоев CP, а различие в соответствующих им значениях частот связано с фазовым отношением смещений атомов соседних слоев. В интенсивных модах ($A(\text{TO})^+$ и $E(\text{LO})^+$) атомы смежных слоев колеблются синфазно, а в слабоинтенсивных модах ($A(\text{TO})^-$ и $E(\text{LO})^-$) они колеблются противофазно. Такая форма колебаний $A(\text{TO})^-$ и $E(\text{LO})^-$ приводит к весьма специфическому виду индуцированных этими колебаниями электрических полей. Колебания атомов в моде $A(\text{TO})^-$ сопровождаются появлением больших поверхностных зарядов, локализованных на интерфейсах, вследствие чего частота этого колебания возрастает до значений, характерных для LO-мод. Противофазный характер колебаний атомов в моде $E(\text{LO})^-$ приводит к взаимной компенсации вкладов соседних слоев в индуцируемое электрическое макрполе, вследствие чего частота этого колебания понижается до значений, характерных для TO-мод.

Из рис. 2 видно, что учет напряжений не меняет качественно характер результата, полученного в МДК. Теория по-прежнему предсказывает два типа решений для фононных мод $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$. Один тип (отмеченный знаком „+“) имеет „правильную“ зависимость от f : частота меняется между значениями $\omega(\text{GaN})$ и $\omega(\text{AlN})$ пропорционально относительной толщине слоев из этих материалов. Эти моды дают сильные спектральные линии в рамановском рассеянии, которые могут служить наиболее эффективным способом анализа структуры CP [6]. Второй тип (отмеченный знаком „–“) имеет „неправильную“ зависимость: частота меняется между $\omega(\text{GaN})$ и $\omega(\text{AlN})$ обратно пропорционально доле данного вещества в структуре CP. Эти моды имеют низкие интенсивности в рамановских спектрах и экспериментально не наблюдались.

Полученные в данной работе результаты показывают, что частоты интенсивных мод ($A(\text{TO})^+$ и $E(\text{LO})^+$) под действием напряжений изменяются незначительно. Вызванный деформациями частотный сдвиг также слабо зависит от отношения толщин слоев. Вместе с тем результаты, представленные на рис 2, показывают, что

влияние упругих деформаций на значения частот слабоинтенсивных мод ($A(\text{TO})^-$ и $E(\text{LO})^-$) приводит к заметным изменениям зависимостей $\omega(f)$. Частотные сдвиги, вызванные упругими деформациями наиболее значительны при $f \rightarrow 0$ и $f \rightarrow 1$, т.е. в случаях, когда один из слоев много тоньше другого. Этот эффект имеет простую физическую интерпретацию. Частоты этих „неправильных“ мод в указанных пределах значений f приближаются к частотам объемных материалов для тонких слоев. Но, согласно рис. 1, именно эти тонкие слои испытывают наибольшие упругие деформации, которые и вызывают значительный сдвиг частот локализованных в этих слоях фононов. Кроме того, следует отметить, что учет упругих деформаций приводит к понижению наклона кривых $\omega(f)$ для мод $A(\text{TO})^-$ и $E(\text{LO})^-$, что снижает точность использования этих мод в качестве спектрального зонда.

На рис. 2 также приведены экспериментальные данные, заимствованные из литературы и полученные в данной работе на неравнотолщинных короткопериодных AlN/GaN CP, технология роста которых описана в работе [28]. Как видно из рис. 2, экспериментальные данные для мод $A(\text{TO})^+$ и $E(\text{LO})^+$ показывают хорошее согласие с теорией. Дальнейшая проверка предлагаемой корреляционной зависимости между структурой CP и частотным положением рамановских линий $A(\text{TO})^+$ и $E(\text{LO})^+$ станет возможной после появления экспериментальных исследований CP в более широком интервале вариации параметра f .

4. Заключение

Установлена корреляция между частотами делокализованных фононов симметрии $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$, наблюдаемых в рамановских спектрах короткопериодных AlN/GaN CP, и отношением толщин слоев, составляющих структуру. Теоретическая оценка фононных частот получена в рамках модели диэлектрического континуума с учетом упругих деформаций в слоях CP. Найдено, что упругие деформации, обусловленные согласованием постоянных кристаллической решетки GaN и AlN при росте CP, слабо влияют на значения частот делокализованных мод, имеющих высокую интенсивность в рамановских спектрах. Полученная в работе корреляционная зависимость между структурой CP и частотным положением делокализованных полярных фононов $A(\text{TO})^+$ и $E(\text{LO})^+$ хорошо согласуется с имеющимися в литературе экспериментальными данными. Установленная зависимость может быть использована для количественной оценки концентрации Al(Ga), усредненной по периоду AlN/GaN CP. Сочетая эту информацию с оценкой полного периода CP, полученной из спектров рассеяния на сложенных акустических фононах [29], можно определить абсолютные значения толщин слоев многослойной структуры.

Список литературы

- [1] S. Nikishin, M. Holtz, H. Temkin. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **44**, 7221 (2005).
- [2] D. Hofstetter, E. Baumann, F.R. Giorgetta, J. Dawlaty, P.A. George, F. Rana, F. Guillot, E. Monroy. *Appl. Phys. Lett.*, **92**, 231 104 (2008).
- [3] J. Gleize, F. Demangeot, J. Frandon, M.A. Renucci, F. Widmann, B. Daudin. *Appl. Phys. Lett.*, **74**, 703 (1999).
- [4] S.M. Komirenko, K.W. Kim, M.A. Stroscio, M. Dutta. *Phys. Rev. B*, **61**, 2034 (2000).
- [5] J. Gleize, M.A. Renucci, J. Frandon, F. Demangeot. *Phys. Rev. B*, **60**, 15 985 (1999).
- [6] M.B. Smirnov, S.V. Karpov, V.Yu. Davydov, A.N. Smirnov, E.E. Zavarin, V.V. Lundin. *Phys. Sol. St.*, **47**, 742 (2005).
- [7] J. Gleize, J. Frandon, M.A. Renucci. *Phys. Status Solidi A*, **195** (3), 605 (2003).
- [8] V. Darakchieva, E. Valcheva, P.P. Paskov, M. Schubert, T. Paskova, B. Monemar, H. Amano, I. Akasaki. *Phys. Rev. B*, **71**, 115 329 (2005).
- [9] R.N. Kyutt, M.P. Shcheglov, V.V. Ratnikov, V.Yu. Davydov, A.N. Smirnov, M.M. Rozhavskaia, E.E. Zavarin, V.V. Lundin. *Crystallography Reports*, **58**, 953 (2013).
- [10] С.М. Рыгов. *ЖЭТФ*, **29**, **5**, 605 (1955).
- [11] Yu.E. Kitaev, M.F. Limonov, P. Tronc, G.N. Yushin. *Phys. Rev. B*, **57**, 14 209 (1998).
- [12] L. Zhang. *Phys. Status Solidi B*, **248**, 2120 (2011).
- [13] J. Gleize, J. Frandon, M.A. Renucci, F. Bechstedt. *Phys. Rev. B*, **63**, 073 308 (2001).
- [14] V.Yu. Davydov, N.S. Averkiev, I.N. Goncharuk, D.K. Nelson, I.P. Nikitina, A.S. Polkovnikov, A.N. Smirnov, M.A. Jacobson, O.K. Semchinova. *J. Appl. Phys.*, **82**, 5097 (1997).
- [15] J.M. Wagner, F. Bechstedt. *Appl. Phys. Lett.*, **77**, 346 (2000).
- [16] J. Gleize, J. Frandon, M.A. Renucci, E. Bellet-Amalric, B. Daudin. *J. Appl. Phys.*, **93**, 2065 (2003).
- [17] F. Demangeot, J. Frandon, P. Baules, F. Natali, F. Semond, J. Massies. *Phys. Rev. B*, **69**, 155 215 (2004).
- [18] S. Strite, H. Morkoç. *J. Vac. Sci. Tech. B*, **10**, 1237 (1992).
- [19] M. Kazan, E. Moussaed, R. Nader, P. Masri. *Phys. Status Solidi C*, **4**, 204 (2007).
- [20] M. Yamaguchi, T. Yagi, T. Azuhata, T. Sota, K. Suzuki, S. Chichibu, S. Nakamura. *J. Phys.: Condens. Matter*, **9**, 241 (1997).
- [21] M. Kuball, J.M. Hayes, A.D. Prins, N.W.A. van Uden, D.J. Dunstan, Y. Shi, J.H. Edgar. *Appl. Phys. Lett.*, **78**, 724 (2001).
- [22] V.Yu. Davydov, Yu.E. Kitaev, I.N. Goncharuk, A.N. Smirnov, J. Graul, O. Semchinova, D. Uffmann, M.B. Smirnov, A.P. Mirgorodsky, R.A. Evarestov. *Phys. Rev. B*, **58**, 12 899 (1998).
- [23] A.T. Collins, E.C. Leitowlers, P.J. Dean. *Phys. Rev.*, **158**, 833 (1967).
- [24] J. Misek, F. Srobar. *Elektrotech. Cas.*, **30**, 690 (1979).
- [25] A. Bourret, C. Adelman, B. Daudin, J-L. Rouviere, G. Feuillet, G. Mula. *Phys. Rev. B*, **63**, 245 307 (2001).
- [26] G.P. Dimitrakopoulos, Ph. Komninou, Th. Kehagias, S.-L. Sakhontia, J. Kioseoglou, N. Vouroutzis, I. Hausler, W. Neumann, E. Iliopoulos, A. Georgakilas, Th. Karakostas. *Phys. Status Solidi A*, **205**, 2569 (2008).
- [27] P.K. Kandaswamy, C. Bougerol, D. Jalabert, P. Ruterana, E. Monroy. *J. Appl. Phys.*, **106**, 013 526 (2009).
- [28] W.V. Lundin, A.V. Sakharov, A.F. Tsatsulnikov, V.M. Ustinov. *Semicond. Sci. Technol.*, **26**, 014 039 (2011).
- [29] V.Yu. Davydov, E.M. Roginskii, A.N. Smirnov, Yu.E. Kitaev, M.A. Yagovkina, R.N. Kyutt, M.M. Rozhavskaia, E.E. Zavarin, W.V. Lundin, M.B. Smirnov. *Phys. Status Solidi A*, **210**, 484 (2013).

Редактор А.Н. Смирнов

Elastic strains and delocalized optical phonons in AlN/GaN superlattices

D.V. Pankin^{*,+}, M.B. Smirnov^{*}, V.Yu. Davydov^{*}, A.N. Smirnov^{*}, E.E. Zavarin^{*}, W.V. Lundin^{*}

^{*} St.Petersburg State University,
199034 St. Petersburg, Russia
⁺ Resource Center for Optical
and Laser Materials Research,
St. Petersburg State University,
199034 St. Petersburg, Russia
[•] Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Correlation between frequencies of the delocalized $A(\text{TO})$ and $E(\text{LO})$ phonons observed in Raman spectra of the short-period AlN/GaN superlattices and the ratio of layer thicknesses is established using the dielectric continuum model. It is shown that the elastic strains induced in the layers during the superlattice growth do not affect significantly the dependence of frequencies of the Raman-intense $A(\text{TO})$ and $E(\text{LO})$ phonon modes on the layer thickness ratio. Calculated phonon frequencies correlate well with available experimental data and can be used for spectroscopic structure characterization of the AlN/GaN superlattices.