

УДК 519.4;531.3

## СИММЕТРИЯ ФОНОНОВ И СПЕКТРЫ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ В СВЕРХРЕШЕТКАХ $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$

Ю. Э. Кутаев, Р. А. Эварестов

Выполнена симметричная классификация колебательных состояний полупроводниковых сверхрешеток с квантоворазмерными гетероструктурами  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ , симметрия которых в зависимости от числа монослоев в примитивной ячейке  $(m+n)$  описывается двумя различными пространственными группами  $D_{2d}^{5_2}(m+n=2k)$  и  $D_{2d}^{9_2}(m+n=2k+1)$ . С помощью зонных представлений пространственных групп установлено, в каких колебаниях участвуют атомы с различной позиционной симметрией в примитивной ячейке. Показано, что фононный спектр сверхрешеток существенно перестраивается при изменении числа монослоев, поскольку размещение атомов в примитивной ячейке по позициям Уайкофа определяется конкретными значениями величин  $m$  и  $n$ . Получены общие формулы размещения атомов по позициям Уайкофа для произвольных  $m$  и  $n$ . Найдены критические точки функции плотности фононных состояний. Определены правила отбора для спектров комбинационного рассеяния света второго порядка для рассматриваемых типов сверхрешеток.

1. Современные технологические методы позволяют получить искусственные монокристаллы, представляющие собой чередующиеся сверхтонкие слои различных полупроводников — полупроводниковые сверхрешетки [1-4].

В данной работе проведена классификация колебательных состояний сверхрешеток  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ ; с помощью зонных представлений (ЗП) пространственных групп установлено, в каких колебаниях участвуют атомы с различной позиционной симметрией в примитивной ячейке; определены правила отбора для спектров комбинационного рассеяния света (КРС) второго порядка.

2. В зависимости от числа монослоев  $m+n$  в примитивной ячейке симметрия кристалла  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$  с ориентацией слоев параллельно плоскости (001) описывается двумя различными пространственными группами:  $D_{2d}^{5_2}(m+n=2k)$  и  $D_{2d}^{9_2}(m+n=2k+1)$  [5].

Размещение атомов внутри примитивной ячейки по различным орбитам (позициям Уайкофа) в пределах каждой пространственной группы определяется конкретными значениями чисел  $m$  и  $n$ . Нами проанализированы различные варианты комбинаций чисел  $m$  и  $n$ , приводящие к различным типам размещения атомов по позициям Уайкофа, и получены общие формулы такого размещения для групп  $D_{2d}^{5_2}$  и  $D_{2d}^{9_2}$  (табл. 1).

3. После того как установлено размещение атомов по позициям Уайкофа, можно, воспользовавшись ЗП соответствующих пространственных групп  $D_{2d}^{5_2}$  и  $D_{2d}^{9_2}$  [7, 8], определить типы симметрии фононов и то, в каких колебаниях участвуют атомы с различной позиционной симметрией. Использование ЗП позволяет решить задачу в общем виде для произвольных  $m$  и  $n$ , а не строить колебательное представление всякий раз заново для каждой из сверхрешеток, являющихся с точки зрения симметрии разными кристаллами.

В качестве примера в табл. 2 приведена симметрия фононов в сверхрешетке  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ , исследовавшейся экспериментально в работе [4].

Таблица 1

Размещение атомов по позициям Уайкофа в сверхрешетках  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ Пространственная группа  $D_{2d}^5 (m+n=2k), m \leq n$ 

$m=2k+1, n=2s+1$				$m=2k, n=2s$	
$m=4i+1$ $n=4j+3$	$m=4i+3$ $n=4j+1$	$m=4i+1$ $n=4j+1$	$m=4i+3$ $n=4j+3$	$m+n=4i$	$m+n=4i+2$
1Ga (a) (m+n) As (g)				mGa (g) nAl (g) 1As (a)	
1Al (d)		1Al (c)			
$\frac{m-1}{2}$ Ga (f)	$\frac{m+1}{2}$ Ga (f)	$\frac{m-1}{2}$ Ga (f)	$\frac{m+1}{2}$ Ga (f)	1As (d)	1As (c)
$\frac{m-1}{2}$ Ga (e)	$\frac{m-3}{2}$ Ga (e)	$\frac{m-1}{2}$ Ga (·)	$\frac{m-3}{2}$ Ga (·)	$\left(\frac{m+n}{2}\right)$ As (f)	$\left(\frac{m+n}{2}-1\right)$ As (f)
$\frac{n+1}{2}$ Al (f)	$\frac{n-1}{2}$ Al (f)	$\frac{n-1}{2}$ Al (f)	$\frac{n-3}{2}$ Al (f)	$\left(\frac{m+n}{2}-2\right)$ As (e)	$\left(\frac{m+n}{2}-1\right)$ As (e)
$\frac{n-3}{2}$ Al (e)	$\frac{n-1}{2}$ Al (e)	$\frac{n-1}{2}$ Al (e)	$\frac{n+1}{2}$ Al (e)		

Пространственная группа  $D_{2d}^3 (m+n=2k+1)$ 

$m=2k+1, n=2s$			$m=2k, n=2s+1$		
1Ga (a)	1As (c)	nAl (e)	1As (a)	1Al (c)	mGa (f)
(m-1) Ga (e)	(m+n-1) As (f)		(n-1) Al (f)	(m+n-1) As (e)	

Примечание. Числа перед химическим символом элемента обозначают число атомов данного сорта, находящихся в указанных в скобках позициях Уайкофа. Установка точечной группы, выбор векторов основных трансляций и обозначения позиций Уайкофа даны в соответствии с принятыми в [6]. Координатные оси x, y, z направлены вдоль векторов основных трансляций (ось z перпендикулярна плоскости слоев).

Используя таблицы ЗП вместе с табл. 1, можно показать, что типы симметрии фононов для всех сверхрешеток с данной группой симметрии не зависят от конкретных значений  $m$  и  $n$ . Однако вклад смещений конкретных атомов в фононные состояния зависит от числа слоев, так как при изменении числа слоев изменяется размещение атомов по позициям Уайкофа. При этом изменяется и структура колебательного представления, т. е. число ветвей с данной симметрией.

4. Правила отбора для спектров КРС первого порядка в сверхрешетках  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$  можно найти, например, в [5].

В настоящей работе получены правила отбора для спектров КРС второго порядка в этих кристаллах. В спектрах КРС второго порядка проявляются только те комбинации фононов, а) которые соответствуют критическим точкам функции плотности фононных состояний и б) прямое произведение НП для которых преобразуется как симметричный квадрат векторного представления точечной группы кристалла [10].

Для колебаний различной симметрии мы определили критические точки функции плотности фононных состояний, используя методику [10], и затем для них нашли правила отбора в геометрии, часто реализующейся в экспериментах, когда оси x, y повернуты на  $45^\circ$  вокруг оси z по отношению к основным векторам трансляций в плоскости слоя.

Таблица 2

Симметрия фононов в сверхрешетке (GaAs)<sub>1</sub>(AlAs)<sub>1</sub>

$D_{2d}^5$ $C_{2v}$		$\Gamma$ (000) $\frac{1}{2}2m$	$M$ $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ $\frac{1}{2}2m$	$A$ $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ $\frac{1}{2}2m$	$Z$ $(0 0 \frac{1}{2})$ $\frac{1}{2}2m$	$X$ $(0 \frac{1}{2} 0)$ $mm$	$R$ $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ $mm$
1	2	3	4	5	6	7	8
1Ga (a) (000) $\frac{1}{2}2m$	$b_2(z)$ $e(x, y)$	2 5	2 5	2 5	2 5	1 3,4	1 3,4
1Al (c) $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ $\frac{1}{2}2m$	$b_2(z)$ $e(x, y)$	2 5	3 5	4 5	1 5	3 1,2	3 1,2
2As (e) $(0 \frac{1}{2} z)$ $(\frac{1}{2} 0 z)$ $mm$	$a_1(z)$ $b_2(y)$ $b_1(x)$	1,2 5 5	5 1,2 3,4	5 1,2 3,4	1,2 5 5	1,3 1,4 2,3	1,3 1,4 2,3

Примечание. Стб. 1 — обозначение позиций Уайкофа с указанием заполнения их атомами, координаты позиций в единицах векторов основных трансляций и их локальная группа симметрии; стб. 2 — перечислены те НП локальной группы, по которым преобразуются компоненты векторов локальных смещений атомов. (Обозначения НП даны в соответствии с [7]); стб. 3—8 содержат индексы ЗП, полученных индуцированием с соответствующих НП локальной группы, в к-базисе, т. е. симметрии фононов в соответствующих точках симметрии зоны Бриллюэна (ЗБ). Символ точки симметрии ЗБ, ее координаты в единицах векторов обратной решетки и соответствующая точечная группа волнового вектора приведены в названии каждого столбца. (Для НП группы волнового вектора использованы обозначения, принятые в [8]).

Тогда для сверхрешеток с симметрией  $D_{2d}^5$  в спектрах КРС второго порядка разрешены следующие комбинации фононов:

в  $(xx)$  и  $(yy)$  геометриях рассеяния (в скобках указаны поляризации падающего и рассеянного света)

$$\Gamma_j \times \Gamma_j (j=1, 2); M_j \times M_j (j=1, 2, 3, 4), M_1 \times M_4, M_2 \times M_3, \\ Z_j \times Z_j (j=1, 2); A_j \times A_j (j=1, 2, 3, 4), A_1 \times A_4, A_2 \times A_3,$$

в  $(zz)$  геометрии

$$\Gamma_j \times \Gamma_j (j=1, 2); M_j \times M_j (j=1, 2, 3, 4); Z_j \times Z_j (j=1, 2); \\ A_j \times A_j (j=1, 2, 3, 4),$$

в  $(xy)$  геометрии

$$\Gamma_1 \times \Gamma_2; M_1 \times M_2, M_3 \times M_4; Z_1 \times Z_2; A_1 \times A_2, A_3 \times A_4.$$

В  $(xz)$  и  $(yz)$  геометриях рассеяния линии второго порядка правилами отбора запрещены.

Аналогично для сверхрешеток с симметрией  $D_{2d}^5$  получаем: в  $(xx)$ ,  $(yy)$ ,  $(zz)$  геометрии разрешены комбинации фононов

$$\Gamma_1 \times \Gamma_1, \Gamma_2 \times \Gamma_2; M_1 \times M_1, M_2 \times M_2; P_1 \times P_1, P_2 \times P_2; \\ \text{в } (xx), (yy) \text{ — также } P_1 \times P_2.$$

в  $(xy)$  геометрии

$$\Gamma_1 \times \Gamma_2; M_1 \times M_2; P_1 \times P_2.$$

В  $(xz)$  и  $(yz)$  геометриях рассеяния линии второго порядка правилами отбора запрещены.

Авторы признательны В. Х. Байрамову за полезные обсуждения.

## Л и т е р а т у р а

- [1] *Gossard A. C.* IEEE J. Quant. Electr., 1986, vol. QE-22, N 9, p. 1649—1655.
- [2] *Colvard C., Gant T. A., Klein M. V.* et al., Phys. Rev. B, 1985, vol. 31, N 4, p. 2080—2091.
- [3] *Klein M. V.* IEEE J. Quant. Electr., 1986, vol. QE-22, N 9, p. 1760—1770.
- [4] *Cardona M., Suemoto T., Christensen N. E.* et al. Phys. Rev. B, 1987, vol. 36, N 11, p. 5906—5913.
- [5] *Sapriel J., Michel J. C., Tolédano J. C.* et al. Phys. Rev. B, 1983, vol. 28, N 4, p. 2007—2016.
- [6] International Tables for Crystallography / Ed. Theo Hahn. Vol. A. Space-group symmetry. Dordrecht—Boston, Reidel, 1983. 854 p.
- [7] *Ковалев О. В.* Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М.: Наука, 1986. 368 с.
- [8] *Эварестов Р. А., Смирнов В. П.* Методы теории групп в квантовой химии твердого тела. Л.: Изд-во ЛГУ, 1987. 375 с.
- [9] *Miller S. C., Love W. F.* Tables of irreducible representations of space groups and corepresentations of magnetic space groups. Colorado, Boulder, 1967. 1095 p.
- [10] *Жижин Г. Н., Маврин Б. Н., Шабанов В. Ф.* Оптические колебательные спектры кристаллов. М.: Наука, 1984. 232 с.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
16 февраля 1988 г.  
В окончательной редакции  
25 апреля 1988 г.

