

# Колебательные спектры сверхрешеток AlN/GaN: теория и эксперимент

© М.Б. Смирнов, С.В. Карпов, В.Ю. Давыдов\*, А.Н. Смирнов\*, Е.Е. Заварин\*, В.В. Лундин\*

Научно-исследовательский институт физики им. В.А. Фока Санкт-Петербургского государственного университета, 198504 Санкт-Петербург, Россия

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

E-mail: valery.davydov@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 27 июля 2004 г.)

В результате численного моделирования динамики слоистых сверхрешеток AlN/GaN установлена микроскопическая природа колебательных состояний, соответствующих наиболее интенсивным полосам в спектрах комбинационного рассеяния. Предложена интерпретация экспериментальных спектров, в которых присутствуют две группы линий: одни с одномодовой, другие с двухмодовой зависимостью от соотношения толщин слоев. Результаты компьютерного моделирования и расчеты в приближении диэлектрического континуума позволяют объяснить наблюдаемое поведение мод степенью их локализации, а механизм межслоевого взаимодействия приписать дальнедействующим диполь-дипольным силам. Показано, что делокализованные моды, проявляющие „одномодовое поведение“, могут служить чувствительным зондом строения и состава сверхрешеток.

Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований (№ 03-02-17562), программами Президиума РАН „Низкоразмерные квантовые структуры“ и „Новые структуры и материалы“.

## 1. Введение

Последнее десятилетие ознаменовалось значительным ростом интереса к применению полупроводников на основе нитридов элементов третьей группы (Al, Ga, In) для создания различных оптоэлектронных приборов, работающих в широком спектральном диапазоне от инфракрасной до ультрафиолетовой области. Важную роль в таких приборах играют многослойные периодические гетероструктуры [1]. Оптимизация технологических процессов с целью получения совершенных сверхрешеток (СР) привела к поиску методов контроля структуры и качества выращенных образцов. Накопленный экспериментальный материал [2,3] убедительно показывает, что на роль неразрушающего метода анализа, обладающего высоким пространственным разрешением, может претендовать спектроскопия комбинационного рассеяния (КР).

Эксперименты, выполненные на нитридных СР, показывают, что разные линии в спектрах КР обладают различной чувствительностью к деталям их структуры [4–6]. Действительно, наряду с группой полос, положение которых близко к их положению в спектрах объемных составляющих (ОС), а интенсивность пропорциональна концентрации соответствующих ОС, в КР-спектре СР присутствуют полосы, отсутствующие в спектрах ОС. Положение этих полос нельзя объяснить сдвигом частоты, вызванным деформациями, неизбежно возникающими в ОС при их объединении в СР. Значения частот этих „новых“ линий очень чувствительны к составу и структуре СР. Именно они могут служить спектроскопическим зондом строения СР.

Вопрос о микроскопической природе колебательных состояний СР, определяющих эти спектральные полосы,

до сих пор до конца не ясен. В работах, посвященных теоретическому описанию колебательных состояний в СР, основное внимание уделяется определению частот и форм всех фононных мод и, как правило, не рассматривается вопрос об их оптической активности, в частности об интенсивности соответствующих полос в КР-спектрах, что затрудняет применение таких результатов для анализа реально наблюдаемых спектров. Известные из литературы немногочисленные работы, в которых содержится теоретический анализ КР-интенсивностей, либо ограничены рассмотрением СР очень малого периода [7], либо используют слишком упрощенную и малореалистичную модель линейной цепочки [8]. В связи с этим представляется весьма актуальным провести компьютерное моделирование спектров СР, период которых сравним с параметром сверхструктуры в реальных образцах. Есть все основания предполагать, что такое моделирование может привести к надежным заключениям, если в нем будут использованы модели потенциала межатомных взаимодействий, которые достаточно точно описывают динамические свойства ОС чистых кристаллов AlN и GaN [9]. Результаты таких расчетов, их интерпретация с помощью макроскопической модели диэлектрического континуума и их сравнение с экспериментальными данными представлены в настоящей работе.

## 2. Описание модели и схемы расчетов

В этой работе мы не рассматриваем влияние на колебательный спектр СР механических деформаций, возникающих при сопряжении слоев разных ОС. В на-

ших расчетах пренебрегается различием постоянных решеток AlN и GaN и используются усредненные значения параметров вюрцитной структуры:  $a = 3.15 \text{ \AA}$ ,  $c = 5 \text{ \AA}$  и  $z = 0.88$ . Используемая нами геометрическая модель CP — идеальный бесконечный кристалл, периодический мотив которого состоит из  $m$  элементарных слоев кристалла GaN (среда 1) и  $n$  элементарных слоев кристалла AlN (среда 2), с границей раздела, перпендикулярной оси  $z$ , совпадающей с гексагональной осью вюрцитной структуры ОС. Элементарный слой в направлении  $z$  включает одну элементарную ячейку вюрцитной структуры, т.е. состоит из двух плоскостей атомов металла и двух плоскостей атомов азота. Мы зафиксировали полную длину периода CP  $n + m = 20$  и варьировали относительную толщину слоев AlN и GaN, т.е. отношение  $n/m$ . Таким образом, элементарная ячейка рассматриваемой сверхструктуры состояла из 80 атомов.

Используемая нами модель потенциальной функции основана на модельных потенциалах идеальных кристаллов AlN и GaN [9]. Она включает кулоновское взаимодействие „жестких“ (неполяризуемых) ионов с зарядами катионов  $Z(\text{Al}) = 1.27e$  и  $Z(\text{Ga}) = 1.14e$ . Заряд каждого атома азота определялся с учетом условия электронейтральности и его локального окружения в решетке по формуле

$$Z(\text{N}) = -\frac{1}{4}[N(\text{Al})Z(\text{Al}) + N(\text{Ga})Z(\text{Ga})],$$

где  $N(\text{Al})$  и  $N(\text{Ga})$  — число соседних катионов данного сорта, причем  $N(\text{Al}) + N(\text{Ga}) = 4$ . Близкодействующее отталкивание описывалось в модели Борна–Кармана при помощи параметров  $A = \frac{\partial^2 E}{\partial R^2}$  и  $B = \frac{1}{R} \frac{\partial E}{\partial R}$  (где  $E$  — энергия, а  $R$  — длина связи) со следующими значениями (в N/m) [9]:

$$A(\text{Al-N}) = 265, \quad B(\text{Al-N}) = -22,$$

$$A(\text{Ga-N}) = 230, \quad B(\text{Ga-N}) = -17,$$

$$A(\text{Al-Al}) = A(\text{Ga-Ga}) = 20, \quad A(\text{N-N}) = 10.$$

Интенсивность полос в спектрах КР рассчитывалась в приближении поляризуемых связей [10]. В этом подходе поляризуемость многоатомной системы представляют в виде суммы вкладов отдельных валентных связей, а поляризуемость каждой связи описывают тензором с двумя независимыми компонентами  $\alpha_1$  (вдоль связи) и  $\alpha_2$  (поперек связи), величины которых предполагают зависящими от длины связи. Для описания КР-интенсивностей используют три параметра

$$\gamma_1 = \frac{d\alpha_1}{dR}, \quad \gamma_2 = \frac{d\alpha_2}{dR}, \quad \gamma_3 = \alpha_1 - \alpha_2.$$

Параметр  $\gamma_3$  определяет анизотропию статической поляризуемости связи. Его значение влияет преимущественно на интенсивности полос в низкочастотной части

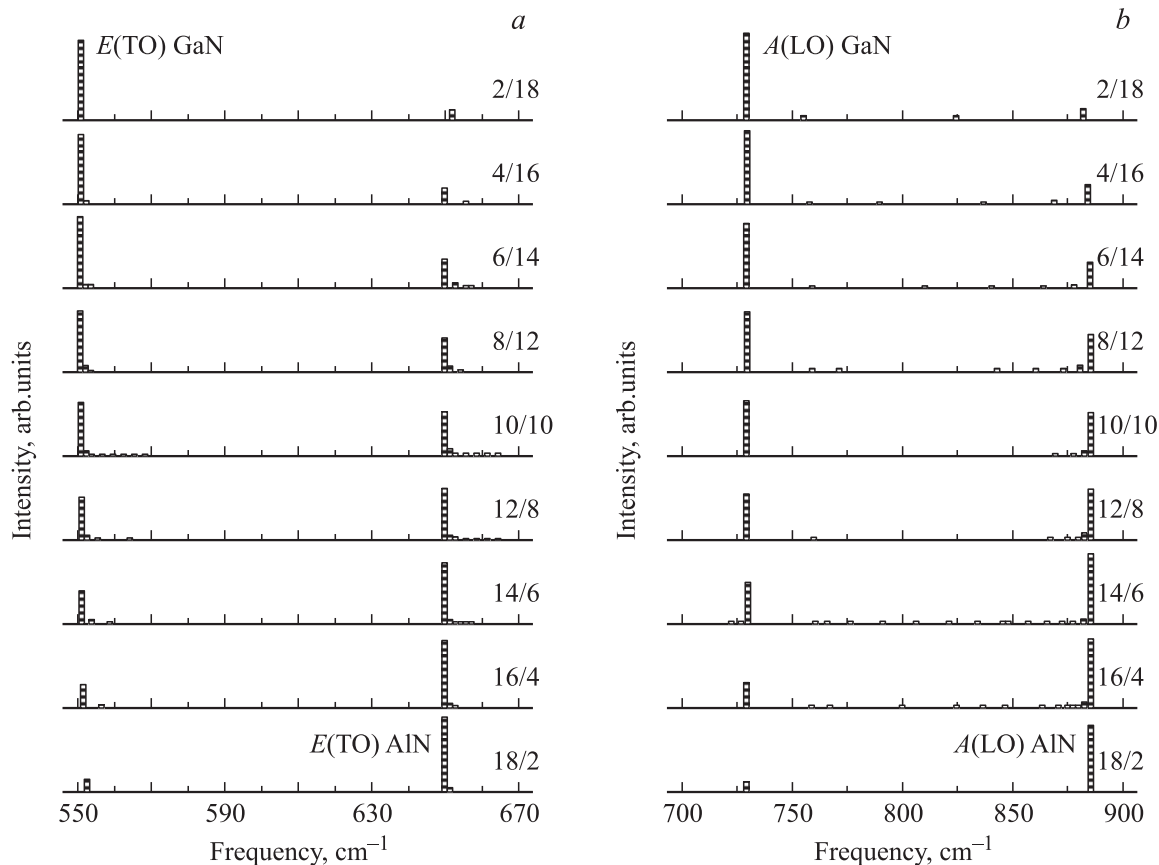
спектра, движение атомов в которых связаны не с растяжением/сжатием валентных связей, а с их поворотами. Параметры  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  — производные поляризуемости по длине связи — определяют КР-интенсивности высоко-частотных мод, собственные векторы которых включают изменения длины валентных связей. Численные значения параметров  $\gamma$  были выбраны так, чтобы наилучшим образом воспроизвести относительные интенсивности в КР-спектрах объемных кристаллов AlN и GaN. Учитывая, что поляризуемость ионов Ga заметно больше, чем поляризуемость ионов Al (что отражается и в величине  $\epsilon_\infty$ , которая в GaN почти на треть выше, чем в AlN), в наших расчетах мы использовали разные параметры поляризуемости связей Al–N и Ga–N, приняв соотношение  $\gamma(\text{Ga-N})/\gamma(\text{Al-N}) = 1.5$ .

Цель данной работы состоит в интерпретации спектров КР. Поэтому нами рассматривались лишь центрозонные колебательные состояния. Для вычисления кулоновского вклада в динамическую матрицу использовался метод Эвальда. Расчеты проводились в приближении длинных волн  $q \rightarrow 0$ . Сначала определялся спектр поперечных колебаний (ТО) с использованием диагонализации динамической матрицы без учета сингулярного члена, соответствующего макрополю. Спектр продольных колебаний (ЛО) вычислялся путем диагонализации „продольной“ динамической матрицы, которая получается из „поперечной“ добавлением соответствующего члена, учитывающего дальнедействующее диполь-дипольное взаимодействие,

$$D_{ij}^{\text{LO}} = \delta_{ij}\omega_i^2(\text{TO}) + \frac{4\pi}{V_c} \frac{(\xi_i q)(\xi_j q)}{q^2},$$

где  $\omega_i$  — частота,  $V_c$  — объем элементарной ячейки,  $\mathbf{q}$  — волновой вектор,  $\xi_i$  и  $\xi_j$  — векторы производных дипольного момента по амплитудам соответствующих ТО-мод. Разделение мод по симметрии на представления  $A$  и  $E$  осуществлялось на основе анализа форм колебаний: моды, в которых атомы двигаются вдоль оси  $z$ , перпендикулярной плоскости раздела слоев, были отнесены к представлению  $A$ , а двукратно вырожденные моды, в которых атомы двигаются в плоскости  $xu$ , — к представлению  $E$ . Выбирая при построении „продольной“ динамической матрицы направление волнового вектора последовательно вдоль и поперек оси  $z$ , мы смогли рассчитать спектры колебаний  $A(\text{LO})$  и  $E(\text{LO})$ . Таким образом нами были получены все центрозонные моды четырех независимых типов:  $A(\text{TO})$ ,  $A(\text{LO})$ ,  $E(\text{TO})$  и  $E(\text{LO})$ .

Как показано в работе [11], точная симметрия сверхрешеток  $(\text{GaN})_m(\text{AlN})_n$  зависит от числа монослоев  $m + n$  в примитивной ячейке и описывается пространственными группами  $C_{3v}^1$ , если  $m + n$  четное число, и  $C_{6v}^4$ , если  $m + n$  нечетное. Обсуждаемые в данной работе расчеты соответствуют первому случаю. Результаты проведенных в настоящей работе экспериментов также согласуются с симметрией  $C_{3v}$ . Такое понижение симметрии может быть следствием того, что структура вюрцита за



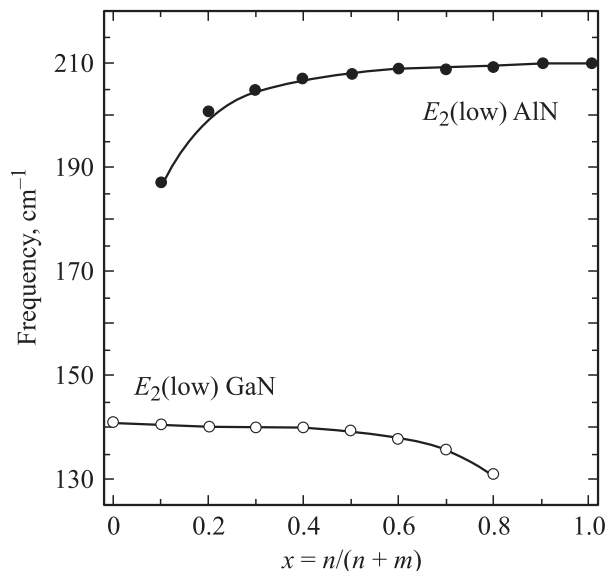
**Рис. 1.** Рассчитанные КР-спектры CP  $(\text{AlN})_n/(\text{GaN})_m$  симметрии  $E(\text{TO})$  (a) и  $A(\text{LO})$  (b) при разных значениях отношения  $n/m$ , указанных на рисунке.

счет различий в поляризуемости образующих решетку материалов и возникающих деформаций допускает появление спонтанного электрического поля, направленного вдоль оси  $z$  и понижающего симметрию сверхрешетки до  $C_{3v}$ . Такую же симметрию имеют и сверхрешетки на основе твердых растворов  $(\text{GaN})_m(\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{N})_n$ , спектры которых также обсуждаются в данной работе.

При понижении симметрии от  $C_{6v}$  до  $C_{3v}$  происходит „смещение“ неприводимых представлений:  $A_1 \oplus B_1 \Rightarrow A$  и  $E_1 \oplus E_2 \Rightarrow E$ . Заметим, что разделение вырожденных  $E$ -мод по представлениям  $E_1$  и  $E_2$  в CP, строго говоря, некорректно. Однако анализ тензора интенсивности КР позволяет сохранить такое разделение и в CP. Так, к модам представления  $E_1$  мы условно относим все двукратно вырожденные моды, у которых тензор производной поляризуемости принимает наибольшие значения в компонентах  $xz$  или  $yz$ , а к представлению  $E_2$  — моды, соответствующие наибольшему значению компонент  $xy$ . Кроме того, различие между модами представлений  $E_1$  и  $E_2$  можно контролировать по величине производной дипольного момента. Однако в численных расчетах спектров КР априорное разделение мод по симметрии не использовалось: относительные вклады разных мод в спектры определенной симметрии задавались соответствующими им тензорами производной поляризуемости.

### 3. Результаты численного моделирования

3.1. Частоты колебаний. Результаты наших расчетов показали, что полосы, наблюдаемые в КР-спектре CP, можно разбить на две группы, имеющие качественно разный характер поведения. К первой группе можно отнести полосы, поведение которых имеет „двухмодовый характер“. Частоты этих полос мало отличаются от частот аналогичных мод в объемных кристаллах и слабо зависят от структуры CP, а их интенсивности пропорциональны относительной толщине соответствующего слоя в CP, т.е. процентному содержанию GaN или AlN. Такое поведение проявляют полярные моды  $E(\text{TO})$  и  $A(\text{LO})$ , а также неполярные  $E$ -моды, происходящие из  $E_2$ -мод в ОС. Так, например, на рис. 1, a приведены рассчитанные КР-спектры колебаний  $E(\text{TO})$ , полученные для различных соотношений толщин слоев AlN ( $n$ ) и GaN ( $m$ ). При любом соотношении толщин слоев в спектре моды  $E(\text{TO})$  выделяются две полосы, частоты которых близки к значениям частот мод  $E(\text{TO})$  в спектрах объемных образцов AlN и GaN даже при очень тонких слоях (до двух элементарных ячеек). Сходное поведение обнаруживают линии в спектре  $A(\text{LO})$  (рис. 1, b). К этой же группе полос, имеющих „двух-



**Рис. 2.** Зависимость вычисленных частот колебаний  $E_2(\text{low})$  в СР  $(\text{AlN})_n/(\text{GaN})_m$  от относительной толщины слоя AlN  $x = n/(n + m)$ .

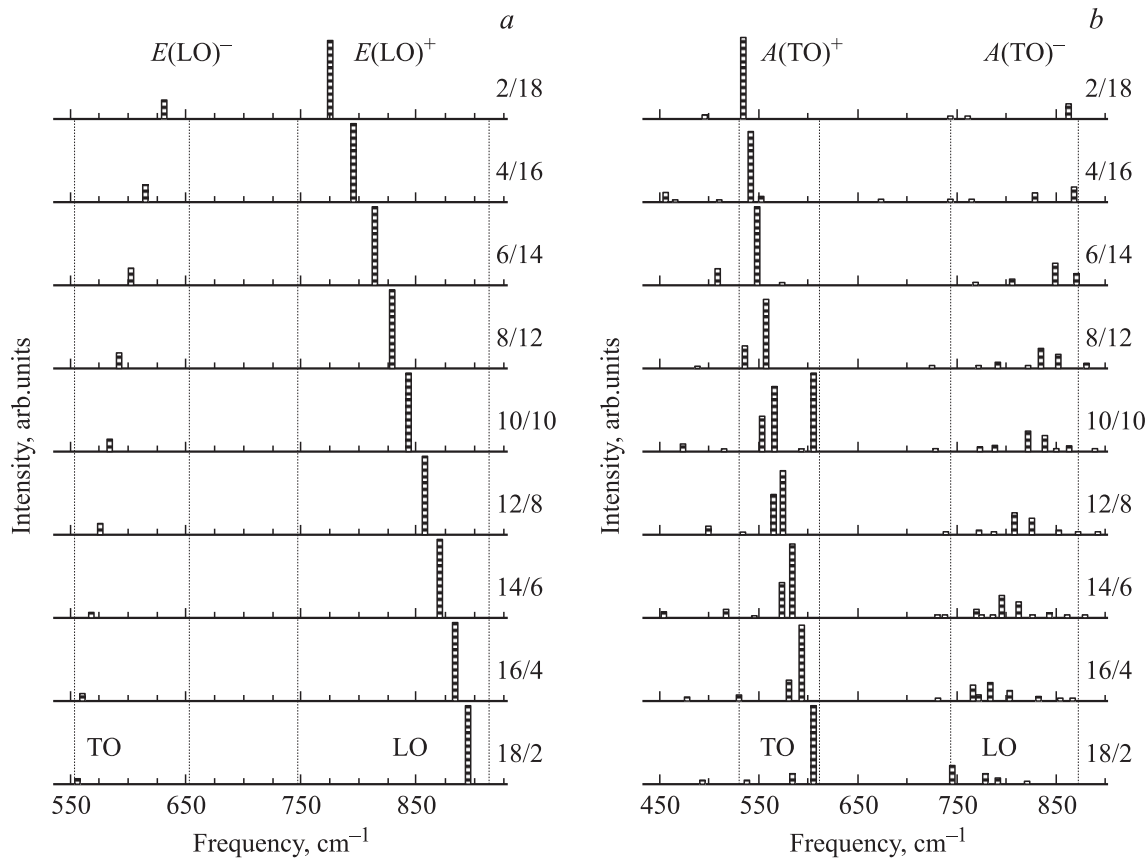
модовый характер“, относятся и неполярные  $E$ -моды, происходящие из  $E_2$ -мод объемных кристаллов. На рис. 2 показана зависимость частоты двух низкочастотных полос, соответствующих колебаниям  $E_2(\text{low})$ . Можно ви-

деть, что их положение в спектре СР мало отличается от их положения в спектрах ОС даже при весьма тонких слоях, составляющих не более 30% периода СР.

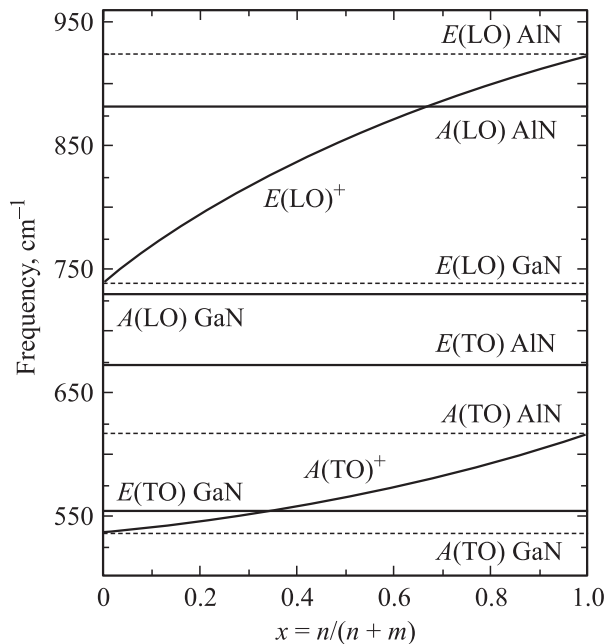
Качественно иное поведение имеют моды симметрии  $E(\text{LO})$  и  $A(\text{TO})$  (рис. 3, *a* и *b*). Каждый из этих спектров содержит по одной доминирующей полосе, интенсивность которой слабо меняется при изменении структуры СР, а ее частота монотонно меняется во всем интервале между значениями частот соответствующих мод в ОС. Причем положение указанных полос между частотами  $\omega(\text{GaN})$  и  $\omega(\text{AlN})$  примерно пропорционально относительной доле этих ОС в структуре СР. Аналогичное „одномодовое поведение“ проявляют некоторые моды в спектрах твердых растворов.

В вычисленном КР-спектре симметрии  $E(\text{LO})$  (рис. 3, *a*) кроме упомянутой выше интенсивной полосы, попадающей в частотный интервал между частотами  $E(\text{LO}) \text{ GaN}$  и  $E(\text{LO}) \text{ AlN}$ , наш расчет предсказывает еще одну группу менее интенсивных полос, частоты которых лежат в интервале от  $E(\text{TO}) \text{ GaN}$  до  $E(\text{TO}) \text{ AlN}$ . Аналогичная картина наблюдается и в вычисленном спектре  $A(\text{TO})$  (рис. 3, *b*): там также присутствует группа слабоинтенсивных полос, частоты которых лежат в интервале от  $A_1(\text{LO}) \text{ GaN}$  до  $A_1(\text{LO}) \text{ AlN}$ .

Обозначим интенсивные моды в этих представлениях как  $E(\text{LO})^+$  и  $A(\text{TO})^+$ , а слабоинтенсивные — как



**Рис. 3.** Рассчитанные КР-спектры СР  $(\text{AlN})_n/(\text{GaN})_m$  симметрии  $E(\text{LO})$  (*a*) и  $A(\text{TO})$  (*b*) при разных значениях отношения  $n/m$ , указанных на рисунке.



**Рис. 4.** Зависимость частот полярных колебаний в СР  $(\text{AlN})_n/(\text{GaN})_m$  от относительной толщины слоя нитрида алюминия  $x = n/(n+m)$ . Для колебаний  $E(\text{LO})$  и  $A(\text{TO})$ , распространяющихся в слоях, показана зависимость только основных компонент  $E(\text{LO})^+$  и  $A(\text{TO})^+$ .

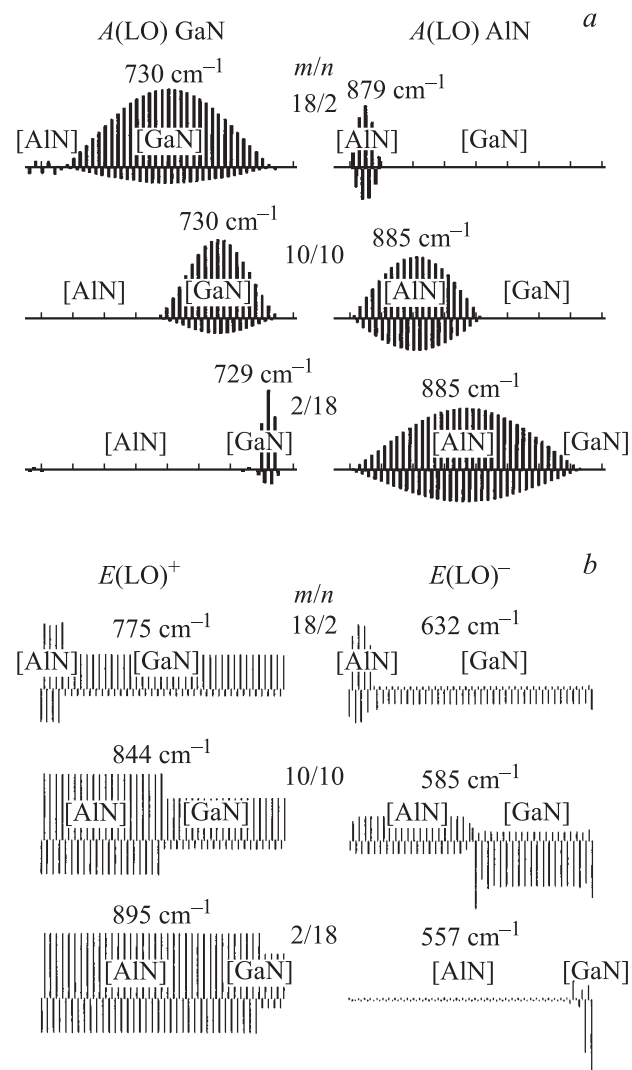
$E(\text{LO})^-$  и  $A(\text{TO})^-$ . Такие обозначения, как будет видно при анализе собственных векторов, отражают синфазный и антифазный характер смещений атомов в соседних слоях. Следует отметить, что изменение положения этой группы полос в частотном интервале поперечных колебаний происходит обратно пропорционально изменению состава СР. Так, например, при большой толщине слоев  $\text{AlN}$  положение полосы  $E(\text{LO})^-$  близко к частоте  $E(\text{TO}) \text{ GaN}$ .

Расчитанная зависимость частот полярных оптических мод от относительной толщины слоев в СР  $\text{GaN}/\text{AlN}$  представлена на рис. 4.

**3.2. Формы колебаний.** Принципиальное преимущество компьютерного моделирования колебательных спектров состоит в том, что такой подход не только позволяет предсказать или объяснить наблюдаемые спектральные кривые, но и предлагает их микроскопическую интерпретацию в виде картины атомных смещений, соответствующих отдельным колебаниям. Анализ рассчитанных собственных векторов показывает, что в КР-спектре СР линии, проявляющие „двухмодовый характер“, соответствуют модам, локализованным в отдельных слоях СР. На рис. 5, *a* и *b* показаны смещения атомов в колебаниях типа  $A(\text{LO})$  и  $E(\text{LO})$  при различных соотношениях толщин слоев. Расположение рисунков по вертикали соответствует разным СР: верхние рисунки отвечают СР с тонким слоем  $\text{AlN}$  ( $n/m = 18/2$ ), средний ряд — СР со слоями равной толщины ( $n/m = 10/10$ ), а в нижнем ряду приведена картина атомных смещений

в СР с тонким слоем  $\text{GaN}$  ( $n/m = 2/18$ ). Слева на рис. 5, *a* представлены собственные векторы моды, близкой по частоте к  $A(\text{LO}) \text{ GaN}$ , а правая часть этого рисунка соответствует моде, близкой по частоте к  $A(\text{LO}) \text{ AlN}$  (см. рис. 1, *b*). Такая картина атомных смещений убедительно свидетельствует о том, что при любом соотношении толщин слоев одна из мод локализована в слое  $\text{GaN}$ , а другая — в слое  $\text{AlN}$ . Такой характер атомных смещений объясняет и изменение интенсивностей этих полос, которые оказываются пропорциональными относительной толщине соответствующих слоев в структуре СР. Расчет показывает, что аналогичный характер имеют и колебания симметрии  $E(\text{TO})$ .

Картина смещений атомов в колебаниях симметрии  $E(\text{LO})$  и  $A(\text{TO})$  качественно иная. Рассчитанные собственные векторы мод  $E(\text{LO})^+$  и  $E(\text{LO})^-$  (рис. 5, *b*) убедительно свидетельствуют о том, что при любом соотношении толщин слоев это моды, делокализованные



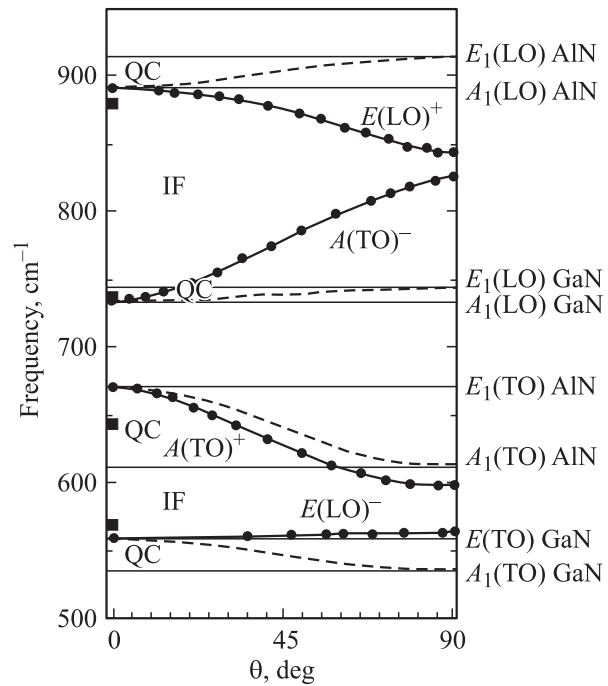
**Рис. 5.** Амплитуды смещений атомов в модах  $A(\text{LO})$  (*a*) и  $E(\text{LO})$  (*b*) СР  $(\text{AlN})_n/(\text{GaN})_m$  при соотношениях толщины слоев  $n/m = 2/18, 10/10, 18/2$ .

по всему объему СР. При этом собственный вектор моды  $E(\text{LO})^+$  — сумма собственных векторов отдельных слоев, а собственный вектор моды  $E(\text{LO})^-$  — их разность. Такая специфическая форма последнего колебания объясняет низкую интенсивность моды  $E(\text{LO})^-$  и в ИК- и КР-спектрах, вследствие антифазного характера смещений атомов соседние слои вносят вклады противоположного знака и в производную дипольного момента, и в производную поляризуемости.

Анализ форм колебаний  $E(\text{LO})^+$  и  $E(\text{LO})^-$ , показанных на рис. 5, *b*, позволяет сделать некоторые заключения, поясняющие поведение их частот. Представляется вполне естественным, что по частоте мода  $E(\text{LO})^+$  расположена между соответствующими модами ОС. Действительно, при этом колебании характер смещений атомов (показаны слева на рис. 5, *b*) в каждом слое не отличается от имеющего место в ОС, и все параметры потенциала, определяющие значение частоты (силовая постоянная близкодействия и эффективный заряд), при изменении структуры СР от AlN ( $n = 0$ ) к GaN ( $m = 0$ ) меняются непрерывным образом в интервале значений, которые они принимают в ОС.

Сложнее объяснить обратно пропорциональную зависимость частоты от состава, наблюдаемую для моды  $E(\text{LO})^-$ . Форма этого колебания показана справа на рис. 5, *b*. В этом колебании атомы чередующихся слоев движутся антифазно. Причем движутся преимущественно атомы азота вследствие их относительно малой массы. Заметим, что амплитуды смещений атомов в разных слоях обратно пропорциональны толщине слоя. Это обстоятельство связано с проявлением закона сохранения центра масс. Такое специфическое соотношение амплитуд в разных слоях и приводит к тому, что значение частоты этой моды определяется преимущественно колебаниями атомов тонкого слоя. Однако такое простое рассмотрение атомных смещений оставляет без ответа важный вопрос: почему частота этой LO-моды попадает в частотный интервал TO-колебаний?

**3.3. Угловая дисперсия.** Из приведенных выше результатов расчета следует, что в колебательном спектре СР моды  $A(\text{TO})$  и  $E(\text{LO})$ , проявляющие „одномодовый характер“, соответствуют колебаниям, делокализованным по всем объему СР, а моды  $A(\text{LO})$  и  $E(\text{TO})$ , имеющие „двухмодовое поведение“, локализованы в отдельных слоях. Моды  $A(\text{LO})$  и  $E(\text{TO})$  отвечают направлению волнового вектора  $\mathbf{q} \parallel z$ , а моды  $A(\text{TO})$  и  $E(\text{LO})$  наблюдаются при  $\mathbf{q} \perp z$ . Следовательно, при изменении угла  $\theta = \arccos(q_z/|\mathbf{q}|)$  от 0 до  $\pi/2$  происходит трансформация мод первой группы в моды второй группы и наоборот. При  $\theta = 0$  полный спектр представляет собой суперпозицию спектров, показанных на рис. 1, *a* и *b*, а при увеличении  $\theta$  до  $\pi/2$  эти спектры преобразуются к виду, приведенному на рис. 3, *a* и *b*. Зависимость частот всех полярных мод от угла  $\theta$  для рассчитанного в нашей модели спектра КР равнопериодной СР показана на рис. 6 точками.



**Рис. 6.** Угловая дисперсия полярных фононов симметрии  $E_1$  и  $A_1$  в объемных кристаллах GaN и AlN (штриховые линии). Показана также угловая дисперсия фононов в равнопериодной ( $m/n = 1$ ) СР, полученная с помощью численного моделирования (точки) и в модели диэлектрического континуума (сплошные линии). Экспериментальные значения, определенные по спектрам КР, показаны квадратами. Отмечены области частот квазиконфайментных (QC) и интерфейсных (IF) мод в СР [12].

В соответствии с результатами наших расчетов такая трансформация должна сопровождаться изменением характера колебаний от локализованных в отдельных слоях до делокализованных по всей решетке. Следовательно, при произвольном значении  $0 < \theta < \pi/2$  оптически активные фононные моды имеют промежуточный характер локализации. Изменение формы колебаний сопровождается изменением интенсивности полос в спектре КР; если при  $\theta = 0$  отношение интенсивностей линий в рассчитанном спектре равнопериодной ( $m = n$ ) СР (примерно 1:2) соответствует отношению поляризуемостей связей Al–N и Ga–N (рис. 1), то при  $\theta = \pi/2$  их интенсивности значительно различаются (рис. 3). При изменении волнового вектора от  $\theta = 0$  до  $\pi/2$  происходит „исчезновение“ двух полос  $A(\text{TO})^-$  и  $E(\text{LO})^-$ .

Результаты численного моделирования позволяют описать поведение спектра КР в СР переменного состава, но не объясняют причины, по которой моды  $E(\text{TO})$  и  $A(\text{LO})$  локализованы в отдельных слоях, а моды  $E(\text{LO})$  и  $A(\text{TO})$  делокализованы. Неожиданным представляется и поведение мод  $A(\text{TO})^-$  и  $E(\text{LO})^-$ , которое приводит к появлению в TO-спектре СР линий с частотами из LO-спектров ОС и наоборот. В используемой нами модели взаимодействие между колебаниями соседних

слоев описывается исключительно кулоновскими силами. Поэтому есть основание предполагать, что специфика спектра дипольных колебаний определяется диполь-дипольными взаимодействиями. Макроскопическое рассмотрение распространения волн поляризации в упругой слоистой среде может способствовать прояснению наблюдаемой ситуации. Такой подход обсуждается в следующем разделе.

#### 4. Модель диэлектрического континуума

В рамках приближения диэлектрического континуума пренебрегают микроскопическими деталями кристаллической структуры и рассматривают вещество, из которого состоят слои СР, как однородную упругую среду с заданной диэлектрической проницаемостью. Полное решение этой задачи для структур типа GaN/AlN, в которых происходит перекрывание дисперсионных зависимостей диэлектрических проницаемостей обеих сред, дано в [12]. Одно из первых применений этой модели для описания полярных колебаний в СР осуществлено в работе [13], где использованы формулы, выведенные ранее [14] при решении задачи о распространении радиоволн в мелкослоистой среде. Рассматривались полярные колебания упругого диэлектрического континуума в бесконечной системе, состоящей из плоских слоев толщиной  $d_1$  и  $d_2$  с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ , периодически повторяющихся в направлении  $z$ , перпендикулярном границам раздела. В результате совместного решения уравнения упругих колебаний и уравнений Максвелла с последующим усреднением по объему в работе [14] были получены следующие выражения для эффективной диэлектрической постоянной:

$$\varepsilon_{x,y} = d^{-1}(d_1\varepsilon_1 + d_2\varepsilon_2), \quad (1)$$

$$\varepsilon_z = d\varepsilon_1\varepsilon_2(d_1\varepsilon_2 + d_2\varepsilon_1)^{-1}, \quad (2)$$

где  $d = d_1 + d_2$ .

Строгий вывод формул (1) и (2), приведенный в [14], связан с громоздкими аналитическими выкладками. Однако, в предельном случае длинных волн полученный результат можно пояснить следующим образом. Рассмотрим состояния с однородной поляризацией в каждом слое. Именно такие состояния соответствуют атомным смещениям вдоль собственных векторов центрозонных фононов, проявляющих наибольшую интенсивность в оптических колебательных спектрах. Электрическое поле в слоях описывается векторами  $\mathbf{E}_1$ ,  $\mathbf{E}_2$  и векторами индукции  $\mathbf{D}_1 = \varepsilon_1\mathbf{E}_1$ ,  $\mathbf{D}_2 = \varepsilon_2\mathbf{E}_2$ .

В случае поля, направленного параллельно границе раздела слоев  $xy$ , из уравнения  $\text{rot } \mathbf{E} = 0$  следует условие непрерывности тангенциальной составляющей напряженности поля на границах раздела

$$E_{1,x} = E_{2,x} = \bar{E}.$$

Поэтому среднее значение индукции будет определяться выражением

$$\bar{D} = \frac{d_1}{d} D_1 + \frac{d_2}{d} D_2 = \frac{\bar{E}}{d} (d_1\varepsilon_1 + d_2\varepsilon_2) = \varepsilon_x \bar{E},$$

из которого непосредственно следует (1).

В случае поля, направленного параллельно оси  $z$ , из уравнения  $\text{div } \mathbf{D} = 0$  следует непрерывность индукции на границах раздела

$$D_{1,z} = D_{2,z} = \bar{D},$$

т. е. среднее значение напряженности составляет

$$\bar{E} = \frac{d_1}{d} E_1 + \frac{d_2}{d} E_2 = \frac{\bar{D}}{d} \left( \frac{d_1}{\varepsilon_1} + \frac{d_2}{\varepsilon_2} \right) = \frac{\bar{D}}{\varepsilon_z},$$

откуда непосредственно следует (2).

Выражение (1) соответствует случаю длинноволновых колебаний с поляризацией, перпендикулярной оси  $z$ , т. е. колебаниям типа  $E$ , а выражение (2) — случаю длинноволновых колебаний с поляризацией, параллельной оси  $z$ , т. е. колебаниям типа  $A$ . Решения уравнения  $\varepsilon(\omega) = 0$  отвечают ЛО-модам, а частоты, при которых  $\varepsilon(\omega)$  обращается в бесконечность, — ТО-модам.

Из (2) для диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_z(\omega)$  СР непосредственно следует вывод, что нули  $\varepsilon_z(\omega)$  соответствуют нулям диэлектрической проницаемости каждого из слоев, т. е.  $\varepsilon_z(\omega) = 0$ , когда либо  $\varepsilon_1(\omega) = 0$ , либо  $\varepsilon_2(\omega) = 0$ . Таким образом, частоты продольных колебаний  $A(\text{LO})$  в СР совпадают с частотами колебаний  $A(\text{LO})$  объемных материалов. То же самое можно сказать о поперечных колебаниях  $E(\text{TO})$ . Из (1) для диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_{x,y}(\omega)$  СР следует, что полюса  $\varepsilon_{x,y}(\omega)$  находятся на частотах, соответствующих полюсам диэлектрической проницаемости каждого из слоев, т. е.  $\varepsilon_{x,y}(\omega) = \infty$ , когда либо  $\varepsilon_1(\omega) = \infty$ , либо  $\varepsilon_2(\omega) = \infty$ . Поэтому частоты поперечных колебаний  $E(\text{TO})$  в СР совпадают с частотами таких колебаний в объемных материалах каждого слоя.

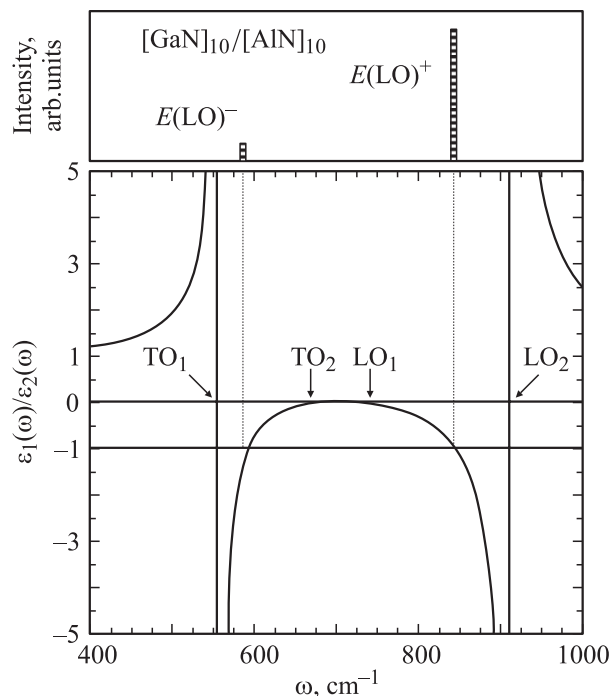
Таким образом, из уравнений (1), (2), описывающих волны поляризации в слоистой среде, следует подтверждение нашего вывода о том, что в СР существуют длинноволновые оптически активные колебания, частоты которых совпадают с частотами  $A(\text{LO})$  и  $E(\text{TO})$  чистых кристаллов.

Иной характер имеют решения уравнений  $\varepsilon_{x,y}(\omega) = 0$  и  $\varepsilon_z(\omega) = \infty$ , которые соответствуют модам  $A(\text{EO})$  и  $E(\text{AO})$ , распространяющимся вдоль слоев гетероструктуры. Для колебаний  $E(\text{LO})$  из соотношения (1) следует

$$\varepsilon_{x,y}(\omega) = 0 \Rightarrow \frac{\varepsilon_1(\omega)}{\varepsilon_2(\omega)} = -\frac{d_2}{d_1}, \quad (3)$$

а для колебаний  $A(\text{TO})$  из соотношения (2) непосредственно следует

$$\varepsilon_z(\omega) = \infty \Rightarrow \frac{\varepsilon_1(\omega)}{\varepsilon_2(\omega)} = -\frac{d_1}{d_2}. \quad (4)$$



**Рис. 7.** Отношение  $\epsilon(\text{GaN})/\epsilon(\text{AlN})$  как функция частоты. Отмечены частотные области, в которых расположены моды  $E(\text{LO})^+$  и  $E(\text{LO})^-$ . В верхней части приведен рассчитанный модельный спектр равнопериодной ( $n/m = 10/10$ ) СР (см. рис. 3, а). Полученные при расчете частоты соответствуют отношению  $\epsilon(\text{GaN})/\epsilon(\text{AlN}) = -1$ .

Зависимость  $\epsilon(\omega)$  для каждой ОС описывается выражением

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty \frac{\omega^2 - \omega_{\text{LO}}^2}{\omega^2 - \omega_{\text{TO}}^2}, \quad (5)$$

при этом компоненты  $\epsilon_{x,y}$  определяются вкладом  $E$ -мод, а  $\epsilon_z$  — вкладом  $A$ -мод. Пользуясь этими соотношениями и решая уравнения (3), (4) относительно  $\omega$ , можно вывести выражение для частот  $A(\text{TO})$  и  $E(\text{LO})$  в СР через параметры спектра ОС и значения толщин слоев. Вместо вывода этих громоздких выражений рассмотрим качественно характер зависимости этих решений от отношения  $d_1/d_2$ . Напомним, что для рассматриваемых кристаллов GaN (среда 1) и AlN (среда 2) имеет место соотношение частот

$$\text{TO1} < \text{TO2} < \text{LO1} < \text{LO2}$$

для колебаний и  $A$ - и  $E$ -типа. Соотношение (5) позволяет построить зависимость для отношения диэлектрических проницаемостей ОС  $f(\omega) = \epsilon_1(\omega)/\epsilon_2(\omega)$ . Эта функция представлена на рис. 7. Функция  $f(\omega)$  принимает отрицательные значения в интервалах  $\text{TO1} < \omega < \text{TO2}$  и  $\text{LO1} < \omega < \text{LO2}$ . Поскольку в каждом из этих интервалов  $f(\omega)$  монотонно изменяется от 0 до  $-\infty$ , при любом значении  $d_1/d_2$  каждое из уравнений (3), (4) в этих интервалах имеет по одному решению. В каждой паре таких решений есть „нормальные“ компоненты

( $A(\text{TO})^+$  и  $E(\text{LO})^+$ ), значения частот которых лежат между соответствующими значениями в ОС

$$A(\text{TO1}) < A(\text{TO})^+ < A(\text{TO2}),$$

$$E(\text{LO1}) < E(\text{LO})^+ < E(\text{LO2}),$$

и „аномальные“ ( $A(\text{TO})^-$  и  $E(\text{LO})^-$ ), частоты которых попадают в интервалы

$$A(\text{LO1}) < A(\text{TO})^- < A(\text{LO2}),$$

$$E(\text{TO1}) < E(\text{LO})^- < E(\text{TO2}).$$

По виду кривой, представленной на рис. 7, можно качественно определить характер зависимости частот „нормальных“ и „аномальных“ мод от соотношения толщин слоев в СР. Рассмотрим, например, моды  $E(\text{LO})$ , частоты которых определяются уравнением (3). „Нормальное“ решение этого уравнения из интервала ( $\text{LO1}, \text{LO2}$ ) при  $d_2 \rightarrow 0$  стремится к  $\text{LO1}$ , а при  $d_1 \rightarrow 0$  — к  $\text{LO2}$ , т.е. частота этой моды изменяется пропорционально составу СР. „Аномальное“ же решение этого уравнения из интервала ( $\text{TO1}, \text{TO2}$ ) при  $d_1 \rightarrow 0$  стремится к  $\text{TO1}$ , а при  $d_2 \rightarrow 0$  — к  $\text{TO2}$ , т.е. частота этой моды изменяется обратно пропорционально составу СР. Аналогичные заключения можно сделать и относительно решений  $A(\text{LO})^+$  и  $A(\text{LO})^-$ .

Используя выражения (1), (2) и (5), можно определить положение нулей и полюсов функции  $\epsilon(\omega)$  при произвольном направлении волнового вектора и таким образом исследовать угловую дисперсию „нормальных“ колебаний СР. Результаты таких расчетов для равнопериодной СР ( $m/n = 1$ ), представленные на рис. 6 сплошными кривыми, обнаруживают хорошее согласие с результатами численного моделирования (точки на том же рисунке).

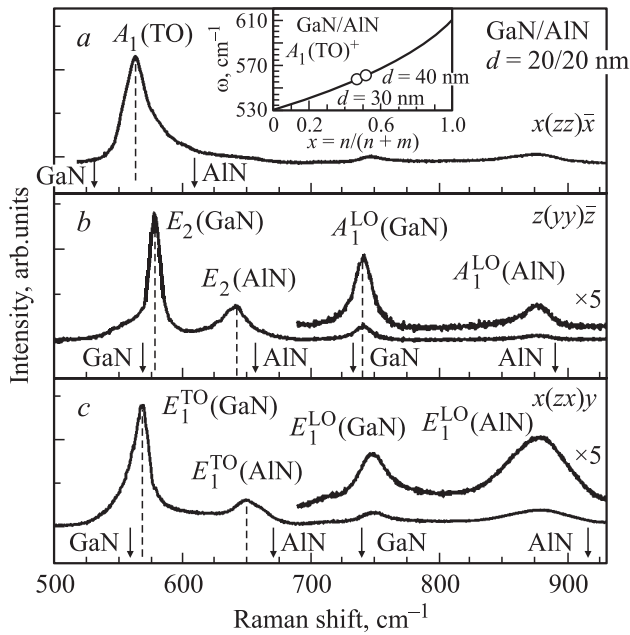
В целом модель диэлектрического континуума подтверждает выводы, сделанные на основании результатов численного моделирования. Более того, можно отметить хорошее совпадение и численных значений, полученных в этих двух подходах даже для СР с очень тонкими слоями. Вместе с тем численное моделирование позволяет исследовать интенсивности полос в спектрах КР и предлагает микроскопическое объяснение наблюдаемым явлениям.

## 5. Экспериментальные результаты

КР-спектры СР, созданных на основе гексагональных нитридов галлия и алюминия — GaN и AlN, в настоящее время экспериментально изучены недостаточно полно [4,15–17]. Это связано в первую очередь с технологическими сложностями получения таких гетероструктур.

Нами исследованы КР-спектры СР GaN/AlN, выращенных на подложке  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (0001) методом газофазной эпитаксии из металлорганических соединений с периодами  $d = 30, 40$  и  $100$  nm, и СР GaN/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 0.28$ ) с периодом от 320 до 5 nm [18].





**Рис. 8.** Поляризованные КР-спектры СР GaN/AlN с периодом  $d = 20 + 20$  nm. *a* — делокализованные колебания  $A_1(\text{TO})$ ; *b, c* — локализованные в слоях колебания  $A_1(\text{LO})$  и  $E_1(\text{TO})$ . На вставке теоретическая зависимость частоты моды  $A_1(\text{TO})^+$  в СР  $(\text{AlN})_n/(\text{GaN})_m$  от относительной толщины слоев  $x = n/(n+m)$  сопоставлена с экспериментальными данными для равнопериодных решеток с  $d = 30$  и  $40$  nm.

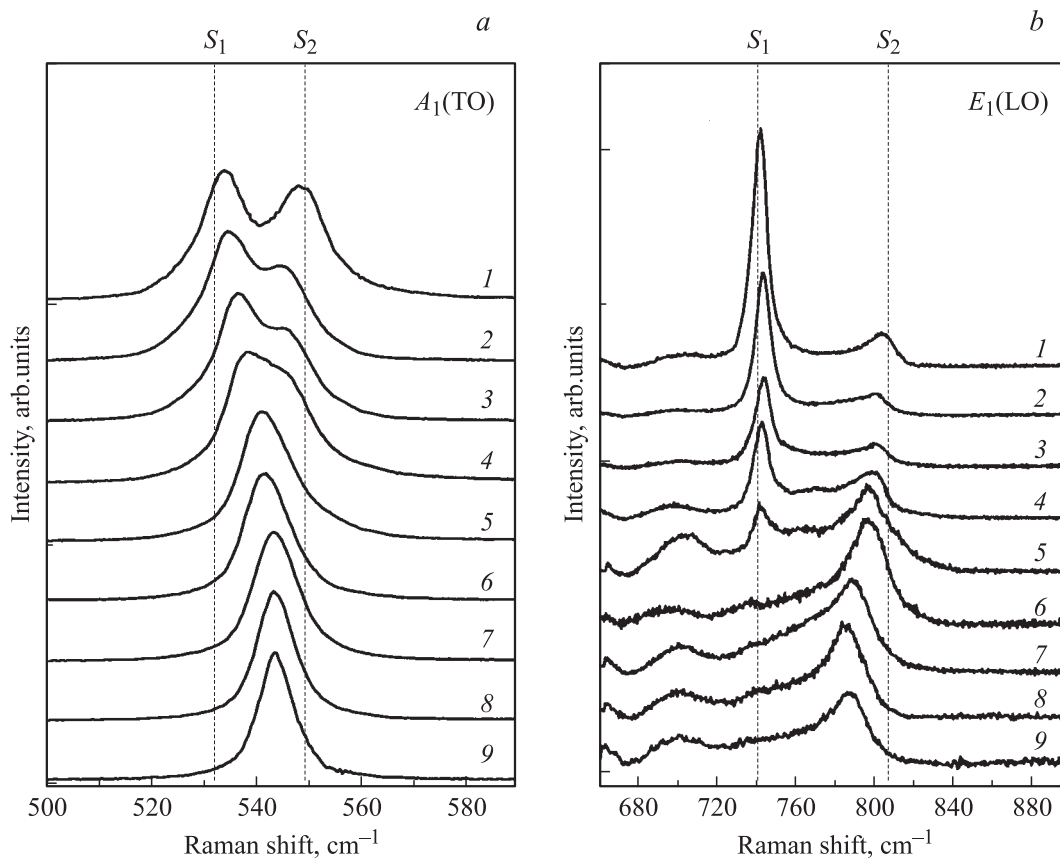
На рис. 8 представлены спектры СР GaN/AlN с периодом  $d = 20 + 20$  nm в области высокочастотных оптических колебаний. Анализ полученных спектров подтверждает вывод, сделанный при модельных расчетах, что в КР-спектре СР существует группа линий, значения частот которых близки к частотам фононов в объемных ненапряженных кристаллах GaN и AlN. К этой группе относятся линии, соответствующие рассеянию на фононах симметрии  $E_2$  и полярных модах  $A(\text{LO})$ ,  $E(\text{TO})$ , распространяющихся перпендикулярно слоям структуры. Данный вывод согласуется с результатами модельных расчетов, предсказывающих наличие в СР колебаний, локализованных в отдельных слоях. Наблюдаемые сдвиги линий относительно их положения в объемных ненапряженных кристаллах определенно связаны с механическими напряжениями, возникающими при росте гетероструктуры. Подобная интерпретация уже встречалась в литературе [4]. Однако лишь выявленная в наших расчетах локализованная природа этих колебаний придает ей теоретическое обоснование, что позволяет с уверенностью использовать наблюдаемые сдвиги частот для оценки величины и знака деформаций в слоях СР. Из рис. 8, в частности, видно, что сдвиги линий, соответствующие локализованным колебаниям  $E_1(\text{TO})$  в слоях AlN и GaN, имеют разные знаки, что указывает на разные знаки деформаций в этих слоях. С помощью данных о фононных деформационных потенциалах для GaN [19] и AlN [20] были получены величины деформации в слоях СР. Для СР GaN/AlN с периодом  $20/20$  nm

они составили  $-3.7$  GPa для GaN и  $5.6$  GPa для AlN, а для СР с периодом  $15/15$  nm они равны  $-4.5$  и  $8.7$  GPa для GaN и AlN соответственно.

Вместе с тем полученные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что наблюдаемый КР-спектр СР не аддитивен спектрам ОС, в нем присутствует группа линий, частоты которых заметно отличаются от частот линий в объемных кристаллах GaN или AlN. Эксперимент показывает, что этим линиям соответствуют фононы симметрии  $A_1(\text{TO})$  и при определенных условиях фононы симметрии  $E_1(\text{LO})$ . Заметим, что эти фононы распространяются вдоль слоев гетероструктуры. Согласно результатам расчета, они представляют собой делокализованные колебания, в которых принимают участие все слои СР. Действительно, в спектре, соответствующем фононам симметрии  $A(\text{TO})$  (рис. 8, *a*), наблюдается линия с частотой  $570 \text{ cm}^{-1}$  из интервала частот между  $A_1(\text{TO})$  GaN и  $A_1(\text{TO})$  AlN. Естественно отнести эту интенсивную линию к „нормальному“ колебанию  $A(\text{TO})^+$ , частота которого при численном моделировании равна  $565 \text{ cm}^{-1}$ , а в модели диэлектрического континуума —  $570 \text{ cm}^{-1}$ . Экспериментальные значения частоты колебания  $A(\text{TO})^+$  в нескольких СР представлены на вставке к рис. 8, *a*, где они сопоставлены с теоретически рассчитанной зависимостью частоты моды  $A(\text{TO})^+$  от относительной толщины слоев.

В спектре, показанном на рис. 8, *a*, невозможно определить положение второй линии, соответствующей моде  $A(\text{TO})^-$ , для частоты которой предсказано значение  $845 \text{ cm}^{-1}$  при численном моделировании и  $840 \text{ cm}^{-1}$  в модели диэлектрического континуума. Очевидно, это обстоятельство связано с малой интенсивностью данной моды (в полном соответствии с теорией).

Согласно теоретическому анализу, аналогичная ситуация должна была бы наблюдаться и в спектре продольных колебаний симметрии  $E_1$ . Однако в экспериментальном спектре  $E_1(\text{LO})$  в СР GaN/AlN с  $d = 20 + 20$  nm вместо одной наблюдаются две интенсивные линии с частотами, близкими к частотам колебаний  $E_1(\text{LO})$  объемных GaN и AlN (рис. 8, *c*). Такое несоответствие теории с экспериментом можно объяснить тем, что в теоретической модели использовалась СР с периодом, равным  $20$  постоянным решеткам, т.е. приблизительно  $10$  nm, в то время как экспериментальные спектры получены на решетках с периодом  $30$ ,  $40$  и  $100$  nm. Правдоподобно, что эффекты делокализации в этом случае отсутствуют вследствие слабого взаимодействия через продольное электрическое поле колебаний удаленных слоев, что естественно при сильном различии собственных частот продольных LO-колебаний объемных кристаллов GaN и AlN. В связи с изложенным выше нами были исследованы СР GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N ( $x = 0.28$ ) с периодом от  $320$  до  $5$  nm, в которых разница между частотами объемных фононов в GaN и твердом растворе Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N значительно меньше, чем для СР с чистым AlN ( $70 \text{ cm}^{-1}$  вместо  $172 \text{ cm}^{-1}$ ). Полученные данные представлены на рис. 9. При уменьшении периода СР GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N



**Рис. 9.** КР-спектры фононов, распространяющихся вдоль слоев CP GaN/Al<sub>0.28</sub>Ga<sub>0.72</sub>N с различными периодами  $d$ .  $a$  — область колебаний симметрии  $A_1(\text{TO})$ ,  $b$  — область колебаний типа  $E_1(\text{LO})$ . Периоды CP  $d_{\text{GaN}}/d_{\text{AlGa}}$ , nm: 1 — 1500/1500, 2 — 320/320, 3 — 160/160, 4 — 80/80, 5 — 40/40, 6 — 20/20, 7 — 10/10, 8 — 5/5, 9 — 2.5/2.5. Положение частот в объемных кристаллах показано штриховыми вертикальными линиями:  $S_1$  — GaN,  $S_2$  — Al<sub>0.28</sub>Ga<sub>0.72</sub>N.

наблюдаются эффекты, связанные с усилением делокализации продольного фонона симметрии  $E_1$ . Видно, что для CP GaN/Al <sub>$x$</sub> Ga<sub>1- $x$</sub> N ( $x = 0.28$ ) при  $d = 160$  nm характерна картина, аналогичная спектру, полученному на CP GaN/AlN с  $d = 40$  nm. Однако при уменьшении периода CP GaN/Al <sub>$x$</sub> Ga<sub>1- $x$</sub> N ниже 40 nm (кривая  $b$  на рис. 9,  $b$ ) наблюдаемая картина хорошо согласуется с предсказываемой на основе микроскопических расчетов. В спектре видна лишь одна линия, соответствующая делокализованному „нормальному“ колебанию  $E(\text{LO})^+$ , которая попадает в область частот между продольными колебаниями  $E_1(\text{LO})$  различных слоев. Вторая, „аномальная“ компонента этого колебания  $E(\text{LO})^-$  не наблюдается. По-видимому, это следствие предсказываемой теорией особой формы такого колебания, состоящего в антифазном движении атомов разных слоев. Аналогичная картина наблюдается и для спектра симметрии  $A_1(\text{TO})$  (рис. 9,  $a$ ).

## 6. Обсуждение результатов

В нашей модели потенциальной функции кристаллов AlN и GaN использовано разделение межатомных взаимодействий на ближкодействие и дальнедействие.

Ближкодействие ограничено пределами валентных тетраэдров и описывается силовыми постоянными взаимодействия первых и вторых соседей, а для описания дальнедействий применяется приближение жестких ионов. Несмотря на простоту модели, она воспроизводит спектр всех фононных состояний в хорошем согласии с результатами неэмпирических квантово-механических расчетов [21,22].

Как показывают результаты данного исследования, применение этой микроскопической модели при моделировании динамики CP AlN/GaN (в частности, при моделировании спектров КР) позволяет описать и интерпретировать основные закономерности, наблюдаемые в эксперименте. Наиболее интересной как с теоретической, так и с прикладной точки зрения особенностью колебательного спектра изучаемых CP является наличие в спектре КР интенсивных мод, частоты которых принимают значения в интервале частот соответствующих мод в объемных образцах AlN и GaN.

Хорошее согласие результатов, полученных при численном решении задачи о колебаниях атомов решетки и при решениях макроскопических уравнений, описывающих колебания упругой диэлектрической среды, приводит к выводу об определяющей роли дальнедействующего

ших диполь-дипольных взаимодействий. Интересно отметить, что макроскопическое описание справедливо даже при очень тонких слоях СР (вплоть до четырех атомарных слоев). Рассмотренные в этой работе решения соответствуют колебательным состояниям с почти однородной поляризацией слоев. И хотя полный фононный спектр СР содержит много других мод, происходящих из внутризонных фононов ОС и имеющих характер стоячих волн в отдельных слоях, именно указанные выше квази-однородные колебания, происходящие из центральных колебаний ОС, проявляют наибольшую интенсивность в оптических колебательных спектрах СР. Именно они и определяют основные линии, наблюдаемые в реальном эксперименте.

В КР-спектре СР проявляются две группы мод, имеющих разную зависимость от структуры СР. К первой группе относятся моды  $A_1(\text{LO})$ ,  $E_1(\text{TO})$ , частоты которых совпадают с частотами объемных материалов, ко второй — моды  $A_1(\text{TO})$  и  $E_1(\text{LO})$ , частоты которых заметно отличаются от частот аналогичных мод в объемных кристаллах. Результаты численного моделирования позволяют объяснить различие в поведении этих мод степенью локализации соответствующих колебаний.

В рамках модели диэлектрического континуума моды, принадлежащие этим двум группам, называют соответственно конфайнментными и интерфейсными [23]. Происхождение этих терминов связано с решением задачи о распространении упругих волн в системе двух полубесконечных сред с плоской границей раздела.

Среди возможных решений такой задачи есть моды, волновой вектор которых направлен по оси  $z$  (т.е. перпендикулярно границе раздела) и имеет действительное значение в обеих средах. Соответствующие комбинации таких решений описывают стоячие волны, локализованные (confinement) в отдельной среде. Такие решения и называются конфайнментными модами. Среди рассмотренных нами колебаний СР это моды  $A(\text{LO})$  и  $E(\text{TO})$  с волновым вектором, направленным по оси  $z$ . Из рис. 5, а следует, что „проникновение“ таких колебаний в соседний слой затрагивает не более двух-трех элементарных ячеек и быстро затухает. Природа конфайнмента — локализации колебаний в толще отдельных слоев — определяется двумя факторами: небольшим значением радиуса действия близкодействующих сил и экранированием дальнедействующих диполь-дипольных сил поверхностными зарядами интерфейса, индуцированными такими атомными смещениями.

В свою очередь интерфейсные моды соответствуют решениям, в которых  $x$ -,  $y$ -компоненты волнового вектора имеют действительные значения, а  $z$ -компонента принимает мнимые значения в обеих средах. Такое решение описывает волну, распространяющуюся в направлении, параллельном границе раздела, с амплитудой колебаний атомов, экспоненциально спадающей по мере удаления от этой границы. Это и оправдывает использование термина „интерфейсная мода“, т.е. мода, локализованная вблизи границы раздела. Заметим, однако, что применение понятия „интерфейсная мода“ для волн в слоистой

периодической среде будет содержательным лишь в том случае, если постоянная экспоненциального спада много меньше длины периода структуры. В противоположном случае, когда амплитуда атомных смещений спадает слабо и, следовательно, плохо различается по всей толщине отдельного слоя, представление об интерфейсных модах как о колебаниях, локализованных на границах раздела СР, теряет смысл. В таком случае решения с амплитудами, слабо спадающими в глубину обоих слоев, описывают не колебания, локализованные на интерфейсе, а, скорее, колебания, в которых участвуют все атомы всех слоев, т.е. полностью делокализованные колебания. Среди рассмотренных нами колебаний СР это моды  $A(\text{TO})$  и  $E(\text{LO})$  с волновым вектором, направленным по оси  $x$  или  $y$ . Взаимодействие между атомами разных слоев в основном определяется дальнедействующими диполь-дипольными силами (на это указывает хорошая точность результатов, полученных в макроскопическом приближении). Именно это межслоевое диполь-дипольное взаимодействие приводит к тому, что частоты мод  $A^+(\text{TO})$  и  $A^-(\text{TO})$  (с синфазным и антифазным движением атомов соседних слоев) столь сильно различаются, причем вторая величина даже попадает в интервал частот LO-мод.

По значению частоты делокализованные (или интерфейсные согласно установившейся традиции) моды в СР GaN/AlN попадают в интервалы, запрещенные в спектре объемных кристаллов. Это поясняет рис. 6, где показана угловая зависимость частот этих колебаний в равнопериодной СР GaN/AlN, а также угловая дисперсия полярных колебаний объемных кристаллов AlN и GaN. Зоны, заполненные TO- и LO-модами чистых кристаллов AlN и GaN, обозначены буквами QC. При  $\mathbf{q} \parallel z$  ( $\theta = 0$ , левая часть рис. 6) все полярные моды СР конфайнментные, т.е. локализованы в отдельных слоях, а при  $\mathbf{q} \perp z$  ( $\theta = \pi/2$ , правая часть рис. 6) они превращаются в интерфейсные моды, делокализованные по всей СР. Следовательно, при произвольном значении  $0 < \theta < \pi/2$  оптически активные фононные моды имеют промежуточный характер локализации. Такие моды называют квазиконфайнментными [12]. Они соответствуют решениям задачи о волнах в двух диэлектрических средах с действительным значением волнового вектора в одной среде и мнимым в другой среде и описывают стоячие волны, локализованные в одной среде и частично проникающие во вторую среду с экспоненциальным затуханием амплитуды по мере удаления от границы раздела.

## 7. Заключение

При изменении относительной толщины слоев СР AlN/GaN и GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N линии в спектрах КР проявляют либо „одномодовый“, либо „двухмодовый характер“. „Одномодовое поведение“, при котором интенсивность линии слабо меняется, а значение частоты монотонно меняется в интервале между значениями частот

соответствующих мод в ОС, обнаруживают моды  $A(TO)$  и  $E(LO)$ . „Двухмодовое поведение“, при котором частота линии в СР мало отличается от частоты аналогичной моды в ОС, а ее интенсивность пропорциональна процентному содержанию соответствующей ОС, проявляют моды симметрии  $A(LO)$  и  $E(TO)$ , а также неполярные  $E$ -моды, происходящие из  $E_2$ -моды в ОС.

Результаты численного моделирования динамики решеток позволяют объяснить такое поведение оптических мод в СР степенью локализации соответствующих колебаний. Линии с „двухмодовым характером“ происходят от колебаний, локализованных в отдельных слоях, в то время как линии с „одномодовым характером“ делокализованы по всему пространству СР. Решение соответствующей задачи в приближении диэлектрического континуума (упругой поляризуемой среды) дает значения частот, хорошо согласующиеся с результатами численного моделирования. Это обстоятельство позволяет уверенно объяснить особенности спектра колебательных оптических мод в СР проявлением дальнедействующих диполь-дипольных взаимодействий. Именно эти взаимодействия приводят к смешиванию колебаний отдельных слоев в делокализованных модах  $A(TO)$  и  $E(LO)$ , а экранирование внутреннего поля поверхностными зарядами на границах раздела определяет конфайнментный (локализованный в отдельных слоях) характер колебаний  $A(LO)$  и  $E(TO)$ .

Значения частот делокализованных колебаний сильно зависят от структуры СР. Одна из таких мод, соответствующая синфазному движению атомов соседних слоев, весьма интенсивна в спектрах КР. Сочетание этих характеристик определяет интерес к КР-спектроскопии как к эффективному и достаточно точному способу количественной характеристики структуры и состава СР.

## Список литературы

- [1] Gallium Nitrides I / Ed. J.I. Pankove and T. Moustakas. Semiconductors and Semimetals. V. 50. Academic, San Diego, CA (1998).
- [2] B. Jusserand, D. Paquet, F. Mollot, F. Alexandre, G. Le Roux. Phys. Rev. B **35**, 6, 2808 (1987).
- [3] H. Brugger, G. Abstreiter, H. Jorke, H.J. Herzog, E. Kasper. Phys. Rev. B **33**, 8, 5928 (1986).
- [4] J. Gleize, F. Demangeot, J. Frandon, M.A. Renucci, F. Widmann, B. Daudin. Appl. Phys. Lett. **74**, 5, 703 (1999).
- [5] V.Yu. Davydov, A.A. Klochikhin, I.E. Kozin, V.V. Emtsev, I.N. Goncharuk, A.N. Smirnov, R.N. Kyutt, M.P. Scheglov, A.V. Sakharov, W.V. Lundin, E.E. Zavarin, A.S. Usikov. Phys. Stat. Sol. (a) **188**, 2, 863 (2001).
- [6] V.Yu. Davydov, A.N. Smirnov, I.N. Goncharuk, R.N. Kyutt, M.P. Scheglov, M.V. Baidakova, W.V. Lundin, E.E. Zavarin, M.B. Smirnov, S.V. Karpov, H. Harima. Phys. Stat. Sol. (b) **234**, 3, 975 (2002).
- [7] G. Wei, J. Zi, K. Zhang, X. Xie. J. Appl. Phys. **82**, 2, 622 (1997).
- [8] E. Bezerra, V.N. Freire, A.M.R. Teixeira, M.A. Araújo Silva, P.T.C. Freire, J. Mendes Filho, V. Lemos. Phys. Rev. B **61**, 19, 13 060 (2000).
- [9] 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).
- [10] M.B. Волькенштейн, Л.А. Грибов, М.А. Ельяшевич, Б.И. Степанов. Колебания молекул. Наука, М. (1972).
- [11] Yu.E. Kitaev, M.F. Limonov, P. Tronc, G.N. Yushin. Phys. Rev. B **57**, 22, 14209 (1998).
- [12] J. Gleize, M.A. Renucci, J. Frandon, F. Demangeot. Phys. Rev. B **60**, 23, 15 985 (1999).
- [13] C. Colvard, T.A. Gant, M.V. Klein. Phys. Rev. B **31**, 4, 2080 (1985).
- [14] С.М. Рытов. ЖЭТФ **29**, 5, 605 (1955).
- [15] J. Gleize, J. Frandon, F. Demangeot, M.A. Renucci, M. Kubal, J.M. Hayes, F. Widmann, B. Daudin. Mater. Sci. Eng. B **82**, 27 (2001).
- [16] J. Gleize, J. Frandon, M.A. Renucci. Phys. Stat. Sol. (a) **195**, 3, 605 (2003).
- [17] M. Dutta, D. Alexson, L. Bergman, R.J. Nemanich, R. Dupuis, K.W. Kim, S. Komirenko, M. Stroschio. Physica E **11**, 277 (2001).
- [18] W.V. Lundin, A.V. Sakharov, A.F. Tsatsulnikov, E.E. Zavarin, A.I. Besulkin, M.F. Kokorev, R.N. Kyutt, V.Yu. Davydov, V.V. Tretyakov, D.V. Pakhnin, A.S. Usikov. Phys. Stat. Sol. (a) **188**, 2, 885 (2001).
- [19] 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**, 10, 5097 (1997).
- [20] A. Sarua, M. Kubal, J.E. Van Nostrand. Appl. Phys. Lett. **81**, 8, 1426 (2002).
- [21] K. Karch, F. Bechstedt. Phys. Rev. B **56**, 12, 7404 (1997).
- [22] K. Karch, J.-M. Wagner, F. Bechstedt. Phys. Rev. B **57**, 12, 7043 (1998).
- [23] P. Yu, M. Cardona. Fundamental of Semiconductors. Springer (1998).