

# Колебательные спектры сверхрешеток $(\text{GaAs})_n(\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As})_m$ в модели Китинга

© Е.Н. Прыкина<sup>¶</sup>, Ю.И. Польшгалов, А.В. Копытов

Кемеровский государственный университет,  
650043 Кемерово, Россия

(Получена 25 марта 2002 г. Принята к печати 25 июня 2002 г.)

Проведен расчет колебательных спектров сверхрешеток  $(\text{GaAs})_n(\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As})_m$  в модели Китинга с учетом дальнедействующих сил. Рассчитанные сложенные продольные акустические ветви хорошо согласуются с соответствующими экспериментально наблюдаемыми дублетами. Наблюдаемая как в наших расчетах, так и экспериментально тенденция к высокочастотному сдвигу продольных оптических колебаний с ростом числа монослоев GaAs обусловлена их локализацией в слое GaAs.

Экспериментальное исследование фононного спектра сверхрешеток (СР) GaAs/GaAlAs (001) представлено значительным числом работ. Эта система является наиболее изученной экспериментально и представляет собой модельный объект для исследователей. К настоящему времени имеются расчеты фононного спектра таких СР в простых моделях (модель линейной цепочки, диэлектрическая континуальная модель, модель упругого континуума), не в полной мере охватывающих особенности фононного спектра СР.

**Таблица 1.** Частоты сложенных LA фононов сверхрешетки  $(\text{GaAs})_{15}(\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As})_3$  ( $\text{см}^{-1}$ )

$k$	Наш расчет	Эксперимент
-1	29	26
+1	33	31
-2	58	57
+2	62	63
-3	88	89
+3	90	94

В данной работе мы исследовали особенности колебательных мод СР  $(\text{GaAs})_n(\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As})_m$  в модели Китинга с учетом дальнедействующих кулоновских сил.

Ранее эта модель использовалась нами для анализа решеточных колебаний в напряженных сверхрешетках ZnSe/ZnS, ZnSe/ZnTe, ZnS/ZnTe [1].

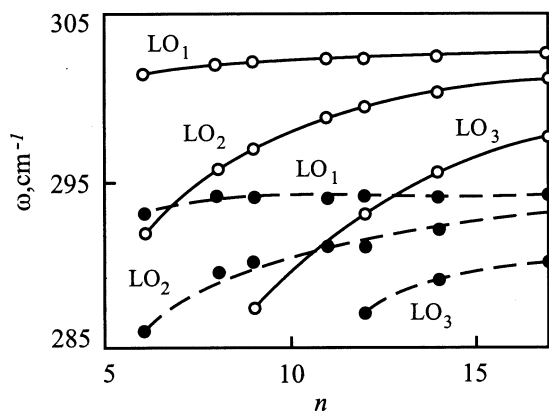
При расчете фононных спектров твердых растворов и сплавных сверхрешеток на их основе для моделирования беспорядка требуется большая сверхъядчейка, что может привести к вычислительным трудностям. В данной работе мы используем приближение псевдоэлементарной ячейки, составленной из атомов  $(1-x)\text{Ga}$ ,  $x\text{Al}$ , As [2,3]. В табл. 1 приводится сравнение экспериментальных и рассчитанных частот сложенных продольных акустических мод (LA) СР  $(\text{GaAs})_{15}(\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As})_3$ . В таблице  $k$  — номер ветви сложенных фононов, знаки „±“ при данном  $k$  соответствуют двум ветвям дисперсии, которые экспериментально наблюдаются в виде дублетов в спектрах комбинационного рассеяния [4]. Видно, что экспериментально наблюдаемые дублеты хорошо согласуются с рассчитанными.

На рисунке представлены рассчитанные и экспериментальные [5] частоты продольных оптических (LO) колебаний СР  $(\text{GaAs})_n(\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As})_m$  в зависимости от числа монослоев  $n$ . Значения  $m$ , мольной доли  $x$  и числа монослоев  $n$  соответствуют табл. 2. Анализ рассчитанных нами колебательных мод  $\text{LO}_1$ ,  $\text{LO}_2$ ,  $\text{LO}_3$  показывает, что наблюдаемая экспериментально и в нашем расчете

**Таблица 2.** Частоты LO фононов в сверхрешетке  $(\text{GaAs})_n(\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As})_m$  в диапазоне колебаний GaAs ( $\text{см}^{-1}$ )

Параметры сверхрешетки			$\text{LO}_1$		$\text{LO}_2$		$\text{LO}_3$	
$n$	$m$	$x$	наш расчет	эксперимент	наш расчет	эксперимент	наш расчет	эксперимент
6	4	0.123	302	293	291	286		
8	6	0.126	302	294	292	289.5		
9	9	0.147	302	294	297	290		
11	11	0.15	302	294	299	291	292	
12	7	0.141	303	294	299	291	293	287
14	14	0.15	303	294	300	292	296	289
17	12	0.145	303	294	301	—	298	290

<sup>¶</sup> E-mail: Selena@rsl.kemsu.ru



Зависимость частот продольных оптических (LO) колебаний сверхрешетки  $(\text{GaAs})_n(\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As})_m$  от числа монослоев  $n$ . Светлые точки — расчет в модели Китинга. Черные точки — экспериментальные значения.

тенденция к высокочастотному сдвигу исследуемых фононов обусловлена их локализацией в слое GaAs.

## Список литературы

- [1] Е.Н. Прыкина, Ю.И. Польшгалов, А.В. Копытов. ФТП, **35**, 89 (2001)
- [2] I. Lee, S.M. Goodnick, M. Gulia, E. Molinari, L. Lugli. Phys. Rev. B, **51**, 7046 (1995).
- [3] I.F. Chang, S.S. Mitra. Adv. Phys., **20**, 359 (1971).
- [4] M.V. Klein. *Raman Spectroscopy: Sixty Years on Amsterdam*. (1989) p. 203.
- [5] B. Jusserand, D. Paquet. Phys. Rev. B, **30**, 6245 (1984).

Редактор Т.А. Полянская

## Phonon spectra of $(\text{GaAs})_n(\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As})_m$ superlattices within the Keating model

*E.N. Prykina, Yu.I. Polygalov, A.V. Kopytov*

Kemerovo State University,  
650043 Kemerovo, Russia