

Расчеты из первых принципов фононных спектров сверхрешеток $(\text{GaP})_n(\text{AlP})_m$

© А.В. Кособуцкий[¶], Е.Н. Малышева

Кемеровский государственный университет,
650043 Кемерово, Россия

(Получена 28 января 2008 г. Принята к печати 2 февраля 2008 г.)

Методом линейного отклика выполнены вычисления колебательных спектров и плотности состояний кристаллов GaP, AlP и монослойной сверхрешетки GaP/AlP. В центре зоны Бриллюэна проведены расчеты фононных мод сверхрешеток $(\text{GaP})_n(\text{AlP})_m$ с различным числом монослоев. Полученные результаты сравниваются с данными комбинационного рассеяния и обсуждается влияние неидеальности интерфейса на фононные частоты.

PACS: 63.20.Dj, 63.22.+m, 68.65.Cd

1. Введение

Исследование колебательных состояний полупроводниковых сверхрешеток (СР) представляет большой интерес в связи с их важной ролью в формировании оптических и электрических свойств, а также вследствие их высокой чувствительности к дефектам структуры. Наиболее полные сведения получены для согласованных СР GaAs/AlAs, расчеты фононных спектров которых проводились для простых одномерных моделей, моделей с большим числом подгоночных параметров, а также из первых принципов. Для согласованных СР GaP/AlP эксперимент представлен меньшим числом работ; кроме того, отсутствует систематическое теоретическое изучение их колебательных свойств, что и определяет актуальность данного исследования. С практической точки зрения данные СР привлекательны своими характеристиками для создания оптоэлектронных устройств, работающих в желто-зеленой области спектра [1,2]. Гетероструктуры на основе GaP/AlP рассматриваются так же, как альтернативные соединения GaN/AlGaIn системы, для разработки инфракрасных полупроводниковых лазеров и детекторов [3].

Изучение фононных спектров полупроводниковых СР на основе материалов $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ проводилось ранее в работах [4,5] в рамках феноменологической модели Китинга. Полученные в этих работах результаты позволили объяснить наиболее важные особенности колебательных спектров СР (сложные акустические фононы, локализация оптических фононов), но сравнение с экспериментальными данными показывает недостаточно высокую количественную точность используемой модели.

Как показано в [6], расчеты из первых принципов колебательных состояний как объемных кристаллов с различной химической связью, так и СР приводят к весьма близким к эксперименту значениям фононных частот и обладают большей предсказательной силой в отличие от полуэмпирических модельных подходов. Качество получаемых при этом результатов зависит

от качества самосогласованных вычислений и выбора исходной атомной конфигурации.

В данной работе выполнены первопринципные расчеты фононных мод СР $(\text{GaP})_n(\text{AlP})_m$ (001) с различным числом монослоев n и m , а также объемных кристаллов GaP, AlP. Результаты вычислений хорошо согласуются с экспериментом.

2. Методика расчета

Расчеты фононных спектров проводились по методу линейного отклика [6–9]. Данный метод базируется на применении теоремы Геллмана–Фейнмана при вычислении производной от энергии системы. Основной подход заключается в следующем. Хорошо известно, что силовые постоянные, определяемые как вторые производные от полной энергии электронов кристалла E_R по смещениям ядер $u_{\alpha i}(\mathbf{R})$ (индекс α обозначает декартовы компоненты смещения i -го атома в элементарной ячейке, положение которой указывается вектором решетки \mathbf{R}), могут быть представлены в виде суммы двух величин:

$$C_{\alpha i, \beta j}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = \frac{\partial^2 E_R}{\partial u_{\alpha i}(\mathbf{R}) \partial u_{\beta j}(\mathbf{R}')} = C_{\alpha i, \beta j}^{\text{ion}}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') + C_{\alpha i, \beta j}^{\text{elec}}(\mathbf{R} - \mathbf{R}'), \quad (1)$$

где $C_{\alpha i, \beta j}^{\text{ion}}$ — ионный вклад в силовые постоянные, вычисляемый путем дифференцирования суммы Эвальда, $C_{\alpha i, \beta j}^{\text{elec}}$ — электронный вклад, расчет которого представляет главную проблему. С учетом теоремы Геллмана–Фейнмана выражение для $C_{\alpha i, \beta j}^{\text{elec}}$ имеет вид [8,9]:

$$C_{\alpha i, \beta j}^{\text{elec}}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = \int \left(\frac{\partial n(\mathbf{r})}{\partial u_{\alpha i}(\mathbf{R})} \frac{\partial V_{\text{ion}}(\mathbf{r})}{\partial u_{\beta j}(\mathbf{R}')} + n_0(\mathbf{r}) \frac{\partial^2 V_{\text{ion}}(\mathbf{r})}{\partial u_{\alpha i}(\mathbf{R}) \partial u_{\beta j}(\mathbf{R}')} \right) d\mathbf{r}. \quad (2)$$

Здесь $n(\mathbf{r})$ — распределение электронной плотности, $V_{\text{ion}}(\mathbf{r})$ — ионный потенциал, который при конкретных

[¶] E-mail: kosobutsky@kemsu.ru

расчетах определяется как сумма по решетке „голых“ ионных псевдопотенциалов

$$V_{\text{ion}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}, i} v_i(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\tau}_i), \quad (3)$$

где $\boldsymbol{\tau}_i$ указывает положение i -го иона в элементарной ячейке.

Как видно из (3), вычисление силовых констант требует определения линейного отклика электронной плотности $\partial n(\mathbf{r})/\partial u_{ai}(\mathbf{R})$ на смещения атомов. Решение данной задачи в рамках теории функционала плотности привело к развитию теории возмущений для функционала плотности (density functional perturbation theory — DFPT [6,8]). Самосогласованное решение уравнений DFPT позволяет определить с любой заданной точностью линейный отклик для решеточного возмущения с произвольной длиной волны. В настоящей работе все численные результаты получены с помощью программного пакета PWscf [10], в котором данный подход реализован в базисе плоских волн.

Вычисления фононных спектров в данной работе проводились с применением псевдопотенциалов [11], обменно-корреляционные эффекты учитывались в рамках приближения локальной плотности. С целью устранения рассогласования теоретических значений постоянных решеток объемных компонентов псевдопотенциал атома Ga был получен в конфигурации, учитывающей возбужденные $4d$ -состояния. Аналогичная процедура применялась для Ga в [8] при расчетах фононных спектров GaAs, AlAs. При генерировании псевдопотенциалов Ga, Al, P использовались также поправки на нелинейность обменно-корреляционного потенциала [12] (NLCC), связанные с вкладом остоной плотности.

Все необходимые в рамках DFPT расчеты проводились при разложении кристаллических орбиталей рассматриваемых соединений по плоским волнам с энергией до 23 Ry, что составляет ~ 250 плоских волн на атом. Интегрирование по зоне Бриллюэна велось по методу специальных точек Монкхорста–Пака [13] на сетке $6 \times 6 \times 6$ в случае GaP, AlP, $(\text{GaP})_1(\text{AlP})_1$ и на сетках $6 \times 6 \times 2$ для $(\text{GaP})_2(\text{AlP})_2$, $(\text{GaP})_3(\text{AlP})_3$, $6 \times 6 \times 1$ для остальных рассмотренных СР. Уменьшение числа узлов сеток вдоль оси z отражает сжатие зоны Бриллюэна СР с увеличением числа монослоев. Полученное при данных параметрах теоретическое значение постоянных решеток GaP, AlP имеет величину 5.416 \AA , что менее чем на 1% отличается от соответствующих экспериментальных значений ($a_{\text{GaP}} = 5.451 \text{ \AA}$, $a_{\text{AlP}} = 5.467 \text{ \AA}$ [14]). Отметим, что занижение в той или иной степени величин постоянных решеток является известным следствием применения приближения локальной плотности.

Расчеты матриц силовых констант для вычисления динамических матриц объемных кристаллов и монослойной СР с помощью обратного фурье-преобразования выполнялись с использованием точек в обратном про-

странстве из набора $6 \times 6 \times 6$, что эквивалентно использованию в прямом пространстве суперячейки с линейными размерами в 6 раз больше исходной примитивной элементарной ячейки. Для структуры сфалерита, в которую кристаллизуются GaP и AlP, такая суперячейка содержит 432 атома, в случае же простой тетрагональной решетки $(\text{GaP})_1(\text{AlP})_1$ число атомов составляет 864. Полученные таким образом силовые константы были затем использованы для расчета фононных спектров по всей зоне Бриллюэна, а также колебательных плотностей состояний. Фононные плотности состояний являются медленно сходящимися функциями по отношению к числу используемых специальных точек. В данной работе сходимость в пределах 1% достигнута при использовании специальных точек из набора $30 \times 30 \times 30$.

Тестовые вычисления для проверки сходимости фононных спектров объемных кристаллов в отдельных точках высокой симметрии с числом плоских волн, доведенным до 2000, на сетке $16 \times 16 \times 16$ показывают максимальное отклонение в значениях частот от их значений, полученных по вышеописанной схеме, $\sim 2 \text{ см}^{-1}$. Для СР прямую проверку сходимости провести весьма сложно из-за резкого роста требований к вычислительным ресурсам с ростом числа атомов в элементарной ячейке, однако в силу близости структур СР к структурам объемных кристаллов следует ожидать и близкую собственную точность расчета. Это подтверждается также и хорошим согласием полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными.

3. Основные результаты

3.1. Колебательные свойства кристаллов GaP, AlP

На рис. 1 и 2 представлены фононные спектры кристаллов GaP и AlP. Результаты расчетов для GaP сравниваются с результатами измерений методами ней-

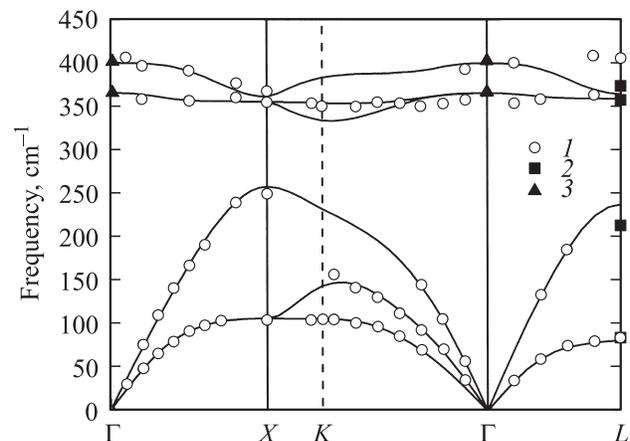


Рис. 1. Рассчитанный фононный спектр GaP (сплошные линии). Экспериментальные данные представлены работами: 1 — [15], 2 — [16], 3 — [17].

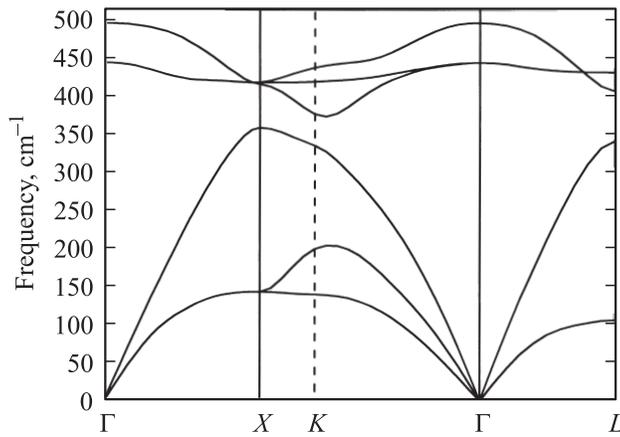


Рис. 2. Фононный спектр AlP.

тронного рассеяния [15,16], а также ИК-спектроскопии (точка Γ [17]). Как видно из рис. 1, имеется весьма хорошее соответствие между теорией и экспериментом. Отметим, что наши результаты вычисления фононного спектра GaP (рис. 1) очень близки к результатам аналогичных расчетов методом линейного отклика [18].

Как отмечается в [19], электронное строение AlP является наименее изученным по сравнению с другими бинарными полупроводниками из ряда $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$. Колебательные свойства этого соединения также изучены недостаточно полно. Имеющиеся экспериментальные данные для кристалла AlP относятся преимущественно к центру зоны Бриллюэна [20,21], а первопринципные расчеты дают значения частот отдельных мод в точках Γ и X [20] (метод замороженных фононов) либо ограничиваются одной точкой Γ [22] (DFPT). Изображенные на рис. 2 результаты расчетов из первых принципов фононного спектра AlP вдоль линий высокой симметрии зоны Бриллюэна выполнены впервые. Вычисленные нами значения частот поперечных (ТО) и продольной (ЛО) оптических мод в точке Γ $\omega_{\text{TO}} = 444 \text{ см}^{-1}$ и $\omega_{\text{LO}} = 497 \text{ см}^{-1}$ близки к данным комбинационного рассеяния (КР), которые дают $\omega_{\text{TO}} = 440 \text{ см}^{-1}$, $\omega_{\text{LO}} = 501 \text{ см}^{-1}$ [21] и $\omega_{\text{TO}} = 439 \text{ см}^{-1}$ [20].

Полученные результаты показывают, что в AlP зависимость частоты ЛО-фононов от волнового вектора \mathbf{k} имеет большую величину дисперсии по сравнению с GaP (рис. 1, 2). Частоты ТО-фононов GaP и AlP принимают минимальное значение в точке W , не изображенной на рис. 1 и 2. Полоса запрещенных частот между акустическими и оптическими ветвями в AlP намного меньше, чем в GaP (AlP — 3 см^{-1} , GaP — 70 см^{-1}), что обусловлено различием масс катионов в этих соединениях. При переходе от GaP к AlP происходит возрастание ионной составляющей химической связи, проявляющееся в увеличении расщепления длинноволновых оптических мод. Так, для GaP величина расщепления ЛО — ТО составляет 34 см^{-1} в данной работе и 36 см^{-1} в [17], а для AlP — 53 см^{-1} из наших расчетов и 54 см^{-1} в [22],

61 см^{-1} [21]. Отметим, что величина расщепления ЛО — ТО в AlP имеет наибольшее значение и по сравнению с другими соединениями $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, не содержащими в своем составе азота, как это видно из сравнения с данными [22,23]. Этот факт говорит о его большей, по сравнению с указанными соединениями, динамической ионности, связанной с величиной эффективного заряда Борна Z^* , которая для AlP имеет значение 2.20 в единицах заряда электрона согласно нашим расчетам и 2.21 согласно расчетам [22].

Как видно из рис. 2, при $\mathbf{k} \rightarrow L$ по линии Λ происходит понижение ЛО-ветви AlP относительно ТО-ветви. В соединениях Al с более массивными атомами, чем фосфор — AlAs и AlSb, — этого понижения не наблюдается.

3.2. Колебательные свойства сверхрешеток $(\text{GaP})_n(\text{AlP})_m$

Для полупроводниковых ненапряженных сверхрешеток $(\text{GaP})_n(\text{AlP})_m$ с ориентацией (001), образующихся из композитов с одинаковым анионом, симметрия в зависимости от числа монослоев в элементарной ячейке описывается двумя различными пространственными группами $D_{2d}^{5_2}$ ($m+n$ четное) и D_{2d}^9 ($m+n$ нечетное). В данной работе выполнены расчеты фононных частот CP с четным числом монослоев, для которых имеется возможность сравнения с экспериментом [24]. Заметим, что, несмотря на свою относительную давность, работа [24] является практически единственной, содержащей систематические исследования колебательных свойств обыкновенных CP GaP/AlP методом комбинационного рассеяния (КР), с которыми мы смогли сравнить свои результаты.

Результаты расчета в точках и линиях высокой симметрии фононного спектра CP $(\text{GaP})_1(\text{AlP})_1$ (001) представлены на рис. 3. Поскольку массы катионов в слоях CP значительно различаются, оптические колебания состоят из двух групп ветвей, разделенных запрещенной полосой, обнаруживая двухмодовое поведение (GaP-подобные и AlP-подобные моды). Это хорошо видно также из рис. 4, на котором изображены графики плотности фононных состояний для объемных кристаллов и монослойной CP.

Проанализированы амплитуды смещений длинноволновых фононов исследуемых CP. Смешанный характер колебаний обнаруживают так называемые сложные акустические моды. Они сохраняют свой акустический характер: катионы и анионы движутся синфазно. В эти колебания вовлечены все атомы CP, они чувствительны главным образом к величине ее периода, в то время как вследствие локализованности оптические моды колебаний (GaP-подобные и AlP-подобные) больше зависят от толщины каждого слоя. Следует отметить, что продольная мода в монослойной CP с частотой $\omega = 359 \text{ см}^{-1}$ является чисто сфалеритной и представляет собой смещения атомов P в противофазе. Подобные моды чисто анионного характера были обнаружены для

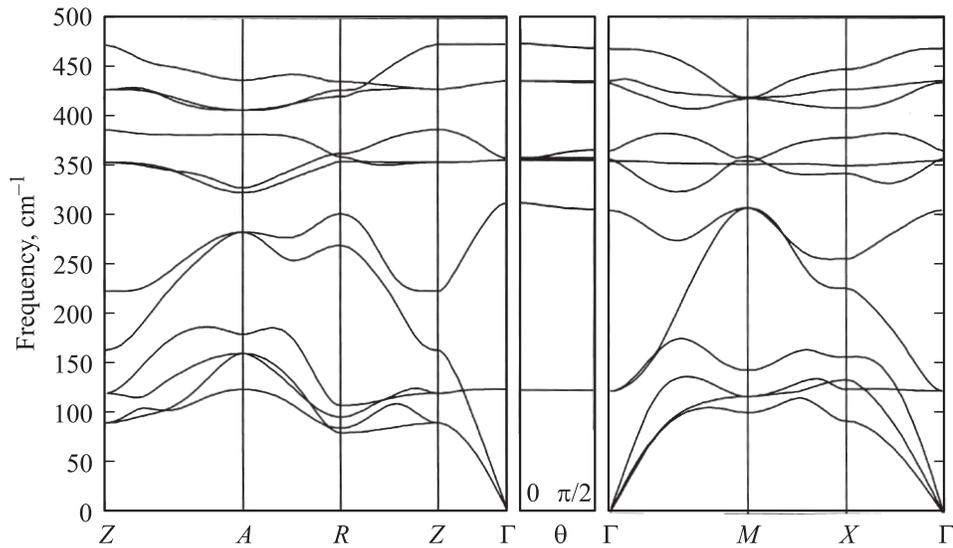


Рис. 3. Фононный спектр монослойной сверхрешетки $(\text{GaP})_1(\text{AIP})_1$.

всех исследуемых СР GaP/AIP в рамках феноменологической модели Китинга [25]. Их частоты занимают промежуточное положение между соответствующими частотами мод объемных материалов.

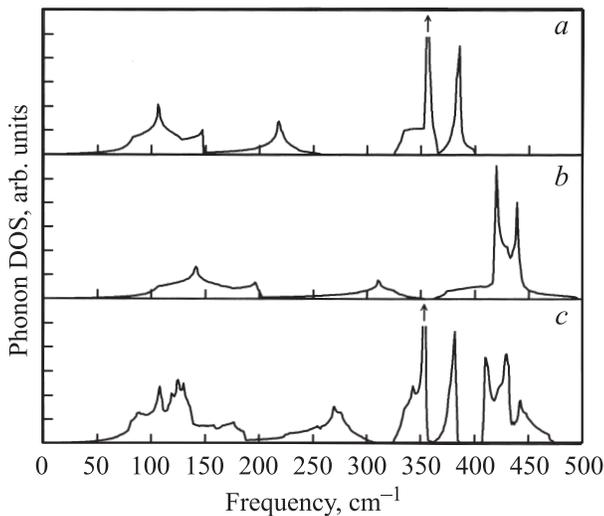


Рис. 4. Фононные плотности состояний: *a* — GaP, *b* — AIP, *c* — $(\text{GaP})_1(\text{AIP})_1$.

Наличие дополнительной периодичности, приводящее к уменьшению зоны Бриллюэна в направлении оси роста СР GaP/AIP, обуславливает появление в области низких частот сложенных акустических фононов, наблюдаемых в спектрах КР в виде эквидистантных дублетов. В табл. 1 соответствующие рассчитанные частоты сопоставляются с экспериментальными [24] (*m* — номер ветви сложенных фононов, знаки „±“ при данном *m* соответствуют двум ветвям дисперсии, которые наблюдаются в виде дублетов).

В спектрах КР проявляют также активность верхние GaP- и AIP-подобные LO, а также некоторые TO-моды. В табл. 2 проводится сравнение их рассчитанных и экспериментальных частот. Для СР $(\text{GaP})_7(\text{AIP})_7$ и $(\text{GaP})_9(\text{AIP})_9$ эксперимент [24] позволяет определить частоты трех LO-мод симметрии B_2 , которые перечислены

Таблица 1. Частоты сложенных LA-фононов сверхрешетки $(\text{GaP})_9(\text{AIP})_5$ в см^{-1}

<i>m</i>	Теория	Эксперимент (КР) [24]
−1	53	53
+1	58	58
−2	107	106
+2	110	111

Таблица 2. Частоты GaP- и AIP-подобных LO-мод сверхрешеток $(\text{GaP})_n(\text{AIP})_m$ в см^{-1}

Число монослоев	GaP-подобные моды				AIP-подобные моды		
	Теория		Эксперимент (КР) [24]		Теория	Эксперимент (КР) [24]	
<i>n</i>	<i>m</i>	TO	LO	TO	LO	LO	LO
1	1	356	359	—	—	474	—
2	2	360	394	—	—	487	—
3	3	361	395	363	393	492	486
11	3	365	400	—	—	492	486
4	4	362	398	—	—	493	—
5	5	363	399	365	396	495	496
9	5	365	400	—	—	495	496
7	7	364	400, 386,376	—	399, 387,378	496	498
9	9	365	400, 396,385	366	400, 394,382	497	500

Таблица 3. Смещение частот локализованных GaP- и AlP-подобных LO_1 -мод сверхрешетки $(\text{GaP})_n(\text{AlP})_m$ от частот объемных компонентов в см^{-1}

n	GaP-подобные моды		AlP-подобные моды	
	Теория	Эксперимент (КР) [24]	Теория	Эксперимент (КР) [24]
1	41	—	23	—
2	6	—	10	—
3	5	9	5	15
4	2	—	4	—
5	1	6	2	5
7	0	3	1	3
9	0	2	0	1

в порядке убывания ($\text{LO}_1, \text{LO}_3, \text{LO}_5$). Как показывает табл. 2, с увеличением толщины слоев n, m наблюдается сдвиг GaP- и AlP-подобных мод в область более высоких энергий и при $n, m = 9$ достигаются значения LO частот объемных кристаллов GaP и AlP — 400 и 497 см^{-1} соответственно.

Из представленных данных видно, что разница между теорией и экспериментом почти для всех значений частот находится в пределах 3 см^{-1} . Наибольшее отклонение в 6 см^{-1} имеется для AlP-подобной LO_1 -моды при $m = 3$. Обсудим в принципе возможные причины этой разницы. Помимо точности теоретических расчетов, которая, как было показано для объемных кристаллов, достаточно высока, наблюдаемые отклонения частот связаны с реальным строением СП, получаемых на практике. Интерфейсные области СП вследствие перемешивания атомов металлов более близки по структуре к твердым растворам с той или иной степенью неупорядоченности [2,24]. При этом в экспериментальных работах [2,24] предполагается, что отклонения от идеальности структуры в слоях AlP проявляются в большей степени, чем в слоях GaP. Этот эффект связывается с разной глубиной проникновения (миграционной длиной) атомов Al и Ga соответственно в слой GaP и AlP, которая больше для атомов Ga. Уменьшение эффективной толщины структурно упорядоченных слоев из-за описанного механизма приводит к занижению получаемых экспериментально частот локализованных мод по сравнению с их частотами в идеальной СП. По нашим данным, для LO_1 -мод всех рассмотренных СП, где возможно сравнение с экспериментом, это занижение составляет 2–3 см^{-1} , за исключением AlP-подобной LO_1 -моды СП $(\text{GaP})_3(\text{AlP})_3$, где, как уже отмечалось, оно увеличивается до 6 см^{-1} . С учетом того что наши расчеты сами дают несколько преуменьшенные частоты LO-фононов объемных кристаллов в точке Γ по сравнению с экспериментом — на 2 см^{-1} для GaP и 4 см^{-1} в случае AlP, наблюдаемая разница имеет еще большую величину. Для более корректной оценки занижения лучше воспользоваться сравнением не абсолютных значений частот, а величин

их сдвигов по отношению к частотам соответствующих объемных кристаллов. Такое сравнение производится в табл. 3. Согласно данной таблице, сдвиги частот GaP- и AlP-подобных LO-мод из теоретических расчетов при уменьшении n от 9 до 3 постоянно увеличиваются и отличаются друг от друга на величины не больше 2 см^{-1} . При этом теоретические смещения частот СП с числом монослоев n в целом наиболее близки экспериментальным для СП с числом монослоев $n=2$, что говорит о наличии катионного перемешивания, распространяющегося на глубину до двух переходных монослоев. Для случая $n = 3$ возмущения слоев объемных компонентов также проникают за пределы плоскости интерфейса более чем на один монослой, при этом возросшая до 6 см^{-1} разница между сдвигами экспериментальных частот обусловлена, по-видимому, в большей степени размерными эффектами, а не преимущественным возмущением слоев AlP, как видно из теоретических данных при $n = 2$, для которых также характерно увеличение разницы до 4 см^{-1} . К сожалению, опытные данные для монослойной и двуслойной СП отсутствуют, что не позволяет провести сравнение для этих случаев, где влияние от уменьшения толщины структурно упорядоченных слоев проявляется сильнее.

Заметим, что в случае систем GaP/AlP анализ влияния беспорядка на смещение частот затруднительнее, чем для СП GaAs/AlAs, где в силу весьма бездисперсного поведения LO-ветви AlAs было найдено [26], что одни только эффекты квантово-размерного ограничения („конфайнмента“) могут приводить к сдвигу частоты LO-моды AlAs в пределах лишь нескольких см^{-1} . Дисперсия LO-ветвей GaP и AlP довольно велика (рис. 1, 2), и это затрудняет отделение эффектов разупорядочивания от эффектов размерного ограничения на основании только лишь экспериментальных данных. С помощью расчетов из первых принципов, позволяющих с высокой точностью изучать колебательные свойства идеальных структур, а также моделировать влияние беспорядка путем соответствующего размещения атомов в суперячейке, возможно разделить влияние этих факторов и, таким образом, получить сведения об особенностях строения интерфейса практически получаемых гетероструктур.

4. Заключение

Для различных направлений зоны Бриллюэна методом линейного отклика рассчитаны колебательные спектры и плотности состояний кристаллов GaP, AlP и монослойной сверхрешетки GaP/AlP. Сравнение фононных спектров объемных кристаллов показывает, что зависимость частоты $\omega(\mathbf{k})$ LO-фононов в AlP имеет большую величину дисперсии по сравнению с GaP. Вычисленные фононные частоты сверхрешеток $(\text{GaP})_n(\text{AlP})_m$ с различными n, m в центре зоны Бриллюэна весьма близки к полученным экспериментально, что дает возможность моделирования колебательных свойств рассматриваемых

систем на хорошем количественном уровне в случае отсутствия измерительных данных. Анализ сдвига частот локализованных СаР- и АІР-подобных продольных оптических мод показывает наличие катионного перемешивания, распространяющегося на глубину до двух монослоев, хотя и не выявляет преимущественного возмущения слоев АІР. Для более тщательного исследования вопроса асимметричности интерфейса в СР GaP/AIP необходимо сравнение теоретических и экспериментальных данных для монослойной и двуслойной СР.

Полученные результаты могут быть использованы при изучении физических процессов в исследуемых СР, а также для оценки их возможного применения в качестве материалов полупроводниковой нанoeлектроники.

Список литературы

- [1] A. Morii, H. Okagawa, K. Hara, J. Yoshino, H. Kukimoto. *Electron. Lett.*, **28** (9), 836 (1992).
- [2] R.K. Soni, S. Tripathy, H. Asahi. *Physica E*, **21** (1), 131 (2004).
- [3] M.P. Semtsiv, U. Müller, W.T. Masselink, N. Georgiev, T. Dekorsy, M. Helm. *Appl. Phys. Lett.*, **89**, 184 102 (2006).
- [4] Е.Н. Прыкина, Ю.И. Польшгалов, А.В. Копытов. *ФТП*, **35** (1), 89 (2001).
- [5] Е.Н. Прыкина, Ю.И. Польшгалов, А.В. Копытов. *ФТП*, **37** (3), 328 (2003).
- [6] S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, P. Giannozzi. *Rev. Mod. Phys.*, **73** (2), 515 (2001).
- [7] Н.Е. Зейн. *ФТТ*, **26** (10), 3028 (1984).
- [8] P. Giannozzi, S. de Gironcoli, P. Pavone, S. Baroni. *Phys. Rev. B*, **43** (9), 7231 (1991).
- [9] С.Ю. Саврасов, Е.Г. Максимов. *УФН*, **165** (7), 773 (1995).
- [10] S. Baroni, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, P. Giannozzi. <http://www.pwscf.org/>
- [11] A.M. Rappe, K.M. Rabe, E. Kaxiras, J.D. Joannopoulos. *Phys. Rev. B*, **41** (2), 1227 (1990).
- [12] S.G. Louie, S. Froyen, M.L. Cohen. *Phys. Rev. B*, **26** (4), 1738 (1982).
- [13] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. *Phys. Rev. B*, **13** (12), 5188 (1976).
- [14] K. Nishi, T. Anan, Y. Ide, K. Onabe. *J. Cryst. Growth*, **95**, 202 (1989).
- [15] P.H. Borchers, K. Kunc, G.F. Alfrey, R.L. Hall. *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, **12**, 4699 (1979).
- [16] J.L. Yarnell, J.L. Warren, R.G. Wenzel, P.J. Dean. *Neutron Inelastic Scattering* (IAEA, Vienna, Austria, 1968) v. 1, p. 301.
- [17] D.J. Lockwood, G. Yu, N.L. Rowell. *Sol. St. Commun.*, **136**, 404 (2005).
- [18] V. Ozoliņš, A. Zunger. *Phys. Rev. B*, **57** (16), R9404 (1998).
- [19] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.*, **89** (11), 5815 (2001).
- [20] C.O. Rodriguez, R.A. Casali, E.L. Peltzer, O.M. Cappannini, M. Methfessel. *Phys. Rev. B*, **40** (6), 3975 (1989).
- [21] *The Raman Effect*, ed. by A. Anderson (N.-Y., Marcel Dekker Inc., 1973) v. 2.
- [22] S.Q. Wang, H.Q. Ye. *J. Phys.: Condens. Matter*, **17**, 4475 (2005).
- [23] D. Touat, M. Ferhat, A. Zaoui. *J. Phys.: Condens. Matter*, **18**, 3647 (2006).
- [24] R.K. Soni, H. Asahi, S. Emura, T. Watanabe, K. Asami, S. Gonda. *Appl. Surf. Sci.*, **60-61**, 553 (1992).
- [25] Е.Н. Прыкина, Ю.И. Польшгалов, А.В. Копытов. *Деп. в ВИНТИ* 11.12.98, № 3643-B98.
- [26] E. Molinari, S. Baroni, P. Giannozzi, S. de Gironcoli. *Phys. Rev. B*, **45** (8), 4280 (1992).

Редактор Т.А. Полянская

Phonon spectra of $(\text{GaP})_n(\text{AIP})_m$ superlattices from *ab initio* calculations

A.V. Kosobutskii, E.N. Malysheva

Kemerovo State University,
650043 Kemerovo, Russia

Abstract A linear response approach based on the density functional perturbation theory has been used to compute phonon dispersion curves and densities of states of bulk crystals GaP, AIP and GaP/AIP monolayer superlattice. In the centre of Brillouin zone calculations of phonon modes are performed for $(\text{GaP})_n(\text{AIP})_m$ superlattices with various numbers of monolayers. The results obtained are compared with the Raman scattering data and interface roughness influence on phonon frequencies is discussed.