

ФОНОН-ПЛАЗМОННЫЕ МОДЫ В СПЕКТРАХ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Минтаиров А. М., Смекалин К. Е., Устинов В. М., Хвостиков В. П.

Теоретически и экспериментально исследованы спектры комбинационного рассеяния (КР) света на смешанных фонов-плазмонных модах (ФПМ) в $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x=0.12$ и 0.2 , $\eta = 5 \cdot 10^{17} + 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) при возбуждении 2.41 эВ (волновой вектор рассеяния $q \sim 10^6 \text{ см}^{-1}$). С использованием флуктуационно-диссипационной теоремы и молекулярного приближения для электронной поляризуемости получено выражение для интенсивности разрешенного КР в многомодовых полупроводниковых твердых растворах со структурой цинковой обманки. Показано, что интенсивность рассеяния света ФПМ имеет в этом случае p минимумов, где p — число продольных оптических фононов. В спектрах разрешенного КР в $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($p=2$) наблюдались три полосы ФПМ и минимум интенсивности рассеяния, обусловленный фононами типа AlAs . Исследована зависимость полуширины, положения и интенсивности максимумов полос ФПМ от концентрации свободных электронов и состава твердого раствора. Из измерений отношения интегральных интенсивностей линий LO -фононов в спектрах КР установлена справедливость молекулярного приближения для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и определена величина коэффициента Фауста—Генри для AlAs — $C_2 = -0.15$. На основании сопоставления расчетных и экспериментальных спектров КР показано, что наилучшее описание вклада свободных электронов в функцию диэлектрической проницаемости прямозонного $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ дает формула Линхарда—Мермина. Показано, что спектры КР ФПМ могут быть использованы для измерения профилей распределения концентрации свободных носителей по толщине эпитаксиальных слоев $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Введение. В полупроводниковых соединениях с частично ионной связью существуют смешанные возбуждения, обусловленные взаимодействием продольных оптических фононов с плазменными колебаниями свободных носителей заряда, — фонов-плазмонные моды (ФПМ) [1]. ФПМ впервые наблюдались в спектрах комбинационного рассеяния (КР) света $n\text{-GaAs}$ [2]. Современное состояние исследований спектров рассеяния света ФПМ в бинарных полупроводниках, имеющих единственный продольный оптический фонон, отражено в [3,4]. Было установлено, что форма спектров КР ФПМ существенным образом зависит от затухания плазмонов, механизмов взаимодействия света с кристаллической решеткой и свободными электронами, а также в случае малого затухания плазмонов, характерного для прямозонных соединений, от волнового вектора рассеяния. Было показано, что спектры КР ФПМ в полупроводниках дают возможность получить информацию о зависимости диэлектрической проницаемости свободного электронного газа от частоты и волнового вектора и могут быть использованы для определения концентрации и подвижности свободных носителей заряда.

Значительный интерес представляет исследование спектров КР ФПМ в многокомпонентных твердых растворах полупроводников, поскольку такие соединения имеют, как правило, более сложный спектр оптических фононов при высокой тетраэдрической симметрии кристаллической решетки и позволяют варьировать параметры фоновной и электронной систем путем изменения соотношения компонентов.

В последнее время появились работы, в которых исследовались спектры рассеяния света ФПМ в твердых растворах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [5-10], $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ [11], $\text{Zn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Se}$ [12], имеющих ярко выраженное двухмодовое поведение оптических

фононов. Основные закономерности спектров КР в таких соединениях в случае сильного затухания электронной плазмы ($\gamma_e > \omega_e$, где γ_e и ω_e — затухание и частота плазмона) были исследованы нами на примере непрямоугольного $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.5$ и 0.86) [10]. Было установлено, что в спектрах разрешенного рассеяния в этом случае проявляются только две полосы ФПМ, сдвиг частот максимумов которых относительно частот продольных оптических фононов составляет несколько обратных сантиметров и основным проявлением фонон-плазмонного взаимодействия является сильная зависимость полуширины и интенсивности полос ФПМ от концентрации свободных электронов. Исследование зависимости вида спектра КР от состава твердого раствора позволило наблюдать ослабление взаимодействия оптических фононов типа GaAs с плазмонами при уменьшении доли соответствующей компоненты твердого раствора. Была получена формула для зависимости интенсивности разрешенного рассеяния света двухмодовых твердых растворов от сдвига частоты и проведены расчеты формы спектров КР. Расчеты показали хорошее согласие с экспериментом и позволили установить, что в непрямоугольном $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в спектрах КР имеет место подавление третьей ФПМ, которое происходит вследствие сильного затухания плазмона и интерференции амплитуд рассеяния, обусловленных деформационным потенциалом и электрооптическим эффектом.

Несмотря на наличие ряда работ, посвященных прямоугольным соединениям [5–8, 12], ФПМ в спектрах КР двухмодовых твердых растворов в случае $\gamma_e \ll \omega_e$ изучены недостаточно. В связи с отсутствием расчетов и данных о состоянии поляризации спектров осталась не выясненным вопрос о влиянии различных механизмов рассеяния света и эффектов, обусловленных пространственной дисперсией плазменной частоты на форму спектров КР ФПМ в таких соединениях.

В настоящей работе приведены результаты теоретического и экспериментального исследования зависимости формы спектров КР в прямоугольном $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ от состава и концентрации свободных электронов ($x = 0.12$ и 0.2 , $n = 1 \cdot 10^{17} \div 7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) при $\hbar\nu_{\text{возб}} = 2.41 \text{ эВ}$ (волновой вектор рассеяния $q \sim 10^6 \text{ см}^{-1}$). Для описания разрешенных механизмов рассеяния света в многомодовых твердых растворах со структурой цинковой обманки предложена молекулярная модель, для которой с использованием флуктуационно-диссипационной теоремы получено аналитическое выражение для зависимости интенсивности КР ФПМ от сдвига частоты. Показано, что интенсивность рассеяния света в многомодовых твердых растворах имеет p минимумов, где p — число продольных оптических фононов, и получено выражение для частот минимумов для случая малого затухания фононов. В экспериментальных спектрах КР $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ наблюдались полосы, обусловленные тремя ФПМ, и минимум интенсивности рассеяния, обусловленный фононами типа AlAs. На основании сопоставления расчетных и экспериментальных контуров полос ФПМ определены условия применения формулы Линхарда—Мермина и гидродинамической теории для описания диэлектрической функции электронного газа в $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Показана возможность использования спектров КР для измерения концентрации и подвижности свободных носителей ($n = 10^{17} \div 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $\mu = 700 \div 2500 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$), а также профилей распределения концентрации по толщине эпитаксиальных слоев прямоугольного $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. На основании исследования зависимости отношения интегральных интенсивностей линий продольных оптических фононов в спектрах КР $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ определена величина коэффициента Фауста—Генри AlAs.

1. Методика эксперимента

Слой $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.12$ и 0.2) толщиной $1 \div 4 \text{ мкм}$ выращивались методом низкотемпературной жидкофазной эпитаксии [13] в диапазоне температур $650 \div 615 \text{ }^\circ\text{C}$ (величина пересыщения расплава составляла $5 \text{ }^\circ\text{C}$) на полупроводящих подложках GaAs с ориентацией [001] и легировались теллуром

по концентрации свободных электронов $n = 1 \cdot 10^{17} \div 7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Исследовались также преднамеренно не легированные ($n \sim 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$) слои $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.1, 0.2, 0.3, 0.5, 0.65, 0.86$), выращенные в тех же режимах на полуизолирующих подложках GaAs с ориентацией [001] и [110]. Состав твердого раствора измерялся методами микроанализа и рентгеновской дифракции. Равномерность распределения состава по толщине и поверхности образцов находилась в пределах 2%. Концентрация и подвижность свободных носителей определялись из холловских измерений.

Спектры КР возбуждались линией аргонового лазера (2.41 эВ) и регистрировались на двойном монохроматоре ДФС-52, оснащенный голографическими решетками. Луч лазера фокусировался на образце в пятно диаметром 50 мкм. Для поддержания постоянной температуры возбуждаемого объема ($T = 380 \pm 20 \text{ K}$), которая контролировалась по отношению стоксовой и антистоксовой компонент спектра, мощность возбуждения поддерживалась постоянной во всех экспериментах и равнялась 150 мВт.

Калибровка шкалы волновых чисел монохроматора по линиям излучения ртути и аргона позволила обеспечить точность измерения сдвига частоты в спектрах КР $\pm 0.5 \text{ см}^{-1}$. Полуширина щели спектрометра составляла $1 \div 5 \text{ см}^{-1}$.

Согласно [14], геометрию рассеяния удобно характеризовать парой углов (Φ, ϑ_i), отсчитываемых от направления на регистрирующую систему: Φ — угол падения возбуждающего света и ϑ_i — угол нормали к поверхности образца. Нами использовалась геометрия рассеяния на «отражение», в которой луч лазера падал на поверхность образца под углом, близким к углу Брюстера, а рассеянный свет собирался под углом 90° к падающему, т. е. (90, 20). Часть предварительных измерений была выполнена в геометриях (−40, 0) и (0, 0). Спектры анализировались в поляризациях $\vec{z}(xy)z$ для поверхности (001) и $\vec{z}'(yx')z'$ для (110), где x, y, z, x', z' соответствуют кристаллографическим направлениям [100], [010], [001], [011], [011].

Согласно правилам отбора [15], в геометрии обратного рассеяния в данных поляризациях разрешены линии, обусловленные длинноволновыми продольными оптическими фононами — $LO(\Gamma)$ для поверхности (001) и поперечными — $TO(\Gamma)$ для (011). В геометриях (90, 20) и (−40, 0) для поверхности (001) в спектрах КР слабо легированного $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ нами наблюдались слабые «запрещенные» линии $TO_p(\Gamma)$ -фононов (индекс $p = 1$ соответствует фононам GaAs-, а $p = 2$ — AlAs-типа), проявляющиеся вследствие отклонений от строгой геометрии обратного рассеяния — (0, 0) [14]. Вблизи этих линий проявлялись более слабые полосы — $DATO_p(X, L)$ и $DALO_p(X, L)$, которые обусловлены оптическими фононами из X- и L-точек зоны Бриллюэна, индуцированными разупорядоченностью кристаллической решетки твердого раствора, и были детально исследованы в [16]. Вклад линий обоих типов запрещенных фононов необходимо учитывать при исследовании формы полос ФПМ в спектрах КР $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при $\Phi, \vartheta_i \neq 0$. В геометрии (0, 0) линий $TO_p(\Gamma)$ -фононов мы не наблюдали, однако в этом случае на спектр КР накладывается интенсивный фон паразитного рассеяния, что затрудняет исследование слабых полос ФПМ.

Для $h\nu_{\text{возб}} = 2.41 \text{ эВ}$ коэффициент поглощения $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ α составляет $7.5 \cdot 10^4$ и $7.0 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ для $x = 0.12$ и 0.2 соответственно [17], и наблюдение ФПМ в легированных образцах возможно при $n > 10^{17} \text{ см}^{-3}$ (когда толщина обедненного поверхностного слоя становится меньше α^{-1}).

При измерении распределения концентрации свободных носителей по толщине слоев использовалось послонное анодное окисление [18].

2. Теория

а) Вывод формулы для интенсивности КР. Теория формы спектров КР на ФПМ для полупроводников, имеющих единственный продольный оптический

фонон, была рассмотрена в работах [19, 20]. Далее мы приведем вывод формулы для интенсивности рассеяния света на ФПМ, обусловленного деформационным потенциалом и электрооптическим эффектом (разрешенное рассеяние [4]), в многомодовых твердых растворах со структурой цинковой обманки. Вывод основывается на использовании флуктуационно-диссипационной теоремы [21], применение которой в теории КР полярных кристаллов было рассмотрено в [20, 22]. Использовалась также молекулярная модель многокомпонентного твердого раствора, которой соответствуют предположения о том, что длинноволновые оптические колебания кристаллической решетки твердого раствора описываются набором эффективных осцилляторов, соответствующих внутренним колебаниям элементарных ячеек различного типа [23], и что электронная поляризуемость элементарной ячейки не зависит от смещения атомов в соседних ячейках [24]. Для описания отклика свободных электронов используется приближение хаотических фаз, что предполагает аддитивность решеточного и плазменного вкладов в диэлектрическую проницаемость кристалла [1]. Рассматривался только случай нерезонансного КР.

В рассматриваемой модели усредненный по объему элементарной ячейки кристалла v_0 дипольный момент, индуцированный возбуждающим светом с амплитудой электрического поля \mathcal{E}_I , равен

$$\bar{P}^{NL}(\omega_s) = (v_0)^{-1} \left(\sum_{k=1}^{p+1} d_k \bar{X}_k \right) \bar{\mathcal{E}}_I, \quad (1)$$

где ω_s — частота рассеянного света, \bar{X}_k — набор физических величин (обобщенных координат), тепловые флуктуации которых определяют спектр рассеянного света (для $k=1 \dots p$ — это оптические смещения атомов \bar{Q}_k , где p — число компонент твердого раствора, для $k=p+1$ — макроскопическое продольное электрическое поле \bar{E}), d_k — первая производная тензора электронной поляризуемости кристалла по \bar{X}_k , являющаяся в случае нерезонансного КР реальной величиной. Свойства симметрии тензора d_k определяют правила отбора для поляризаций падающего и рассеянного света, рассмотренные выше, так что в дальнейшем величины, входящие в (1), мы будем считать скалярными. Дифференциальное сечение рассеяния света в диапазоне частот $d\omega_s$ в элемент телесного угла $d\Omega$ пропорционально усредненному по времени спектру мощности P^{NL} [22]:

$$\frac{d\sigma}{d\omega_s d\Omega} = \frac{\omega_s^3 \omega_I}{c^4} v_0^2 \langle |P^{NL}(\omega_s)|^2 \rangle_{\omega_s} (\mathcal{E}_I)^{-2} = \frac{\omega_s^2 \omega_I}{c^4} \sum_{kk'} d_k d_{k'} \langle X_k X_{k'} \rangle_{\omega_s}, \quad (2)$$

где c — скорость света, $\omega = \omega_I - \omega_s$ — сдвиг частоты. Применяя флуктуационно-диссипационную теорему, получаем

$$\frac{d\sigma}{d\omega_s d\Omega} = \frac{\omega_s^3 \omega_I}{c^4} \frac{\hbar}{\pi} \langle n(T) \rangle_{\omega} \sum_{kk'} d_k d_{k'} \text{Im} R(\omega)_{kk'}, \quad (3)$$

где $\langle n(T) \rangle_{\omega}$ — температурный множитель, $R_{kk'}(\omega)$ — элемент матрицы функции линейного отклика $R(\omega)$. Матрица $\tilde{R}(\omega)$ получается из решения системы линейных неоднородных уравнений, связывающих X_k с сопряженными обобщенными силами F_k . Для рассматриваемой простейшей модели твердого раствора имеем p электромеханических уравнений, описывающих вынужденные колебания диполей, соответствующих различным элементарным ячейкам (для $k=1 \dots p$), и уравнение Максвелла для вектора электрической индукции диэлектрика D , содержащего вклады связанных и свободных зарядов (для $k=p+1$). Уравнение

Максвелла включает в себя также внешнюю поляризацию $P_{\text{внеш}}$, которая вводится в качестве обобщенной силы F_{p+1} [20, 22]. Получающаяся система уравнений для фурье-компонент X_k и F_k описывается матрицей $\bar{R}^{-1}(\omega)$:

$$R_{kk'}^{-1}(\omega) = \begin{cases} 4\pi N_k^2 e_k^2 \chi_k^{-1}(\omega) \delta_{kk'} - N_k e_k \delta_{k'k''} & \text{при } k = 1 \dots p, \quad k' = p + 1, \\ -N_{k'} e_{k'} - (4\pi)^{-1} [\varepsilon_\infty + \chi_e(\omega, \bar{q}) - 4\pi N_{k'} e_{k'}] \delta_{kk'} & \text{при } k = p + 1. \end{cases} \quad (4)$$

Здесь $k' = 1 \dots p + 1$, ε_∞ — диэлектрическая проницаемость, обусловленная связанными электронами, $\chi_e(\omega, \bar{q})$ — восприимчивость свободных электронов, \bar{q} — волновой вектор, $\chi_k(\omega) = S_k \omega_{Tk}^2 (\omega_{Tk}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_k)^{-1}$ — фононная восприимчивость, $S_k = 4\pi N e_k^2 (M_k \omega_{Tk}^2)^{-1} = \omega_{Tk}^{-2} (\omega_{Lk}^2 - \omega_{Tk}^2) \prod_{m \neq k} (\omega_{Lm}^2 - \omega_{Tk}^2) (\omega_{Tm}^2 - \omega_{Tk}^2)^{-1}$ [23] — сила осциллятора, M_k — приведенная масса элементарной ячейки, e_k — динамический заряд, ω_{Tk} (ω_{Lk}) — частота поперечного (продольного) оптического фонона, Γ_k — затухание оптического фонона, $N_k = w_k N$ — концентрация ионных пар k -типа, w_k — мольная доля компонент твердого раствора, $N = (v_0)^{-1}$. Обращая $\bar{R}^{-1}(\omega)$ и подставляя полученный результат в (3), имеем

$$\frac{d\sigma}{d\omega_s d\Omega} = 4\hbar \frac{\omega_s^3 \omega_l}{c^4} (d_E)^2 \langle n(T) \rangle_\omega \times \\ \times \text{Im} \left\{ -\varepsilon(\omega, \bar{q})^{-1} \left[1 + \sum_P K_P \chi_P(\omega) \right]^2 + \sum_P K_P^2 \chi_P(\omega) \right\}, \quad (5)$$

где $\varepsilon(\omega, \bar{q}) = \varepsilon_\infty + \sum_P \chi_P(\omega) + \chi_e(\omega, \bar{q})$ — функция низкочастотной диэлектрической проницаемости кристалла; индекс p нумерует типы оптических фононов, $K_p = w_p (4\pi N_p e_p)^{-1} = w_p C_p S_p^{-1}$, $C_p = e_p (\omega_{Tp}^2 M_p)^{-1} (d_{Qp}/d_E)$ — коэффициент Фауста—Генри [25]. Множитель w_p появляется при усреднении (1) по v_0 .

Заметим, что для получения формулы (5) можно использовать другой выбор обобщенных координат — макроскопическую поляризацию P_k , связанную с продольными колебаниями ионов ($k=p$) и свободных электронов ($k=e$). При этом $P_p = (v_0)^{-1} e_p Q_p$ и $E = -4\pi \varepsilon_\infty^{-1} \left(\sum_P P_p + P_e \right)$, что дает $d_p = -4\pi \varepsilon_\infty^{-1} d_E + v_0 e_p^{-1} w_p d_{Qp}$, $d_{pe} = -4\pi \varepsilon_\infty^{-1} d_E$. Для определения $R_{kk'}^{-1}$ в качестве обобщенных сил вводят внешние «управляющие» поля D_k , что, как показано в [4, 19], приводит к $R_{kk'}^{-1} = \chi_k^{-1} \delta_{kk'} + 4\pi \varepsilon_\infty^{-1}$ ($k=p, e$).

В формуле (5) спектр КР определяется через полную функцию диэлектрической проницаемости и фононные восприимчивости. Эффекты, обусловленные фонон-плазмонным взаимодействием, учитываются через диэлектрическую проницаемость. Сумма по p , стоящая в квадратных скобках, описывает интерференцию вкладов деформационного потенциала и электрооптического эффекта. Вторая сумма по p компенсирует антирезонансы на частотах ω_{Tp} , возникающие в интерференционном члене при $\Gamma_p \neq 0$.

При $\Gamma_p = 0$ для формы спектра КР имеем

$$I_0^{KP}(\omega) \sim \omega_s^3 \langle n(T) \rangle_\omega \left[1 + \sum_p \omega_{Tp}^2 w_p C_p (\omega_{Tp}^2 - \omega^2)^{-1} \right]^2 \text{Im} [-\epsilon(\omega, q)^{-1}]. \quad (6)$$

Из (6) видно, что в пренебрежении затуханием фононов имеется p значений частот ω_{0p} , при которых интенсивность рассеяния обращается в нуль. Можно показать, что с точностью до членов порядка $w_p C_p w_p C_p$, $\omega_{0p}^2 = \omega_{Tp}^2 (1 + w_p C_p)$. При $\Gamma_p \neq 0$ и $\Gamma_p \ll \omega_{Tp} - \omega_{Tp}'$ на частотах ω_{0p} имеются минимумы интенсивности рассеяния. Заметим также, что функция продольного отклика $\text{Im} [-\epsilon(\omega, q)^{-1}]$ имеет минимумы при ω_{Tp} .

Из (6) также следует, что для значений частот, существенно превышающих частоты колебаний кристаллической решетки $\omega \gg \omega_{Tp}$, вкладом механизма деформационного потенциала в интенсивность рассеяния можно пренебречь и форма спектра КР определяется функцией $\text{Im} [-\epsilon(\omega, q)^{-1}]$, описывающей спектр флуктуаций макроскопического продольного электрического поля [20]. Условие $\omega \gg \omega_{Tp}$ соответствует «чистым» плазмонам, проявляющимся в спектрах КР за счет электрооптического эффекта, и выполняется для высокочастотной компоненты смешанных мод при больших концентрациях свободных носителей.

б) *Расчет спектров КР ФПМ.* С использованием формулы (5) для $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.12$ и 0.2 , $n = 10^{17} \div 10^{19} \text{ см}^{-3}$) были рассчитаны спектры КР ФПМ, а также зависимость частот ФПМ от концентрации свободных электронов. Параметры длинноволновых оптических фононов и зоны проводимости $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, используемые в расчете, приведены в табл. 1. Значения частот $LO_p(\Gamma)$ - и $TO_p(\Gamma)$ -фононов, затухание $LO_p(\Gamma)$ -фононов, определяющие χ_p , а также коэффициент Фауста—Генри для AlAs C_2 измерялись в спектрах КР слабо легированного $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (см. Приложение).

Заселенности Γ -, X - и L -минимумов зоны проводимости рассчитывались для невырожденного случая и $T = 380 \text{ К}$ с параметрами, приведенными в [26]. Учитывался вклад в восприимчивость свободных электронов только Γ -минимума. Для эффективной массы электронов в Γ -минимуме и ее зависимости от n использовались значения, полученные из измерений осцилляций Шубникова—де-Гааза

Таблица 1

Параметры оптических фононов и зоны проводимости $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, используемые в расчетах спектров КР ФПМ¹

Параметры	$x = 0.12$		$x = 0.20$	
	А. Тип оптического фонона			
	GaAs	AlAs	GaAs	AlAs
Частота TO -фонона ω_{Tp} , см^{-1}	264.0	354.5	263.0	355.0
Частота LO -фонона ω_{Lp} , см^{-1}	288.0	362.0	283.0	369.0
Затухание фонона Γ_p , см^{-1}	3.53	10.81	4.51	9.42
Коэффициенты Фауста—Генри, C_p	-0.55	-0.15	-0.55	-0.15

Параметры	В. Симметрия минимума зоны проводимости					
	Γ	L	X	Γ	L	X
Энергия электронного перехода E , эВ [26]	1.57	1.80	1.92	1.67	1.85	1.92
Дрейфовая эффективная масса m^*/m_0 [26] ²	0.070	0.114	0.313	0.075	0.116	0.308
Заселенность f	0.98	0.018	0.002	0.91	0.075	0.015

Примечание. ¹ Высокочастотная диэлектрическая проницаемость ϵ_∞ равна 10.61 для $x = 0.12$ и 10.42 для $x = 0.20$ [26]. ² Значения m^*/m_0 для Γ -долины взяты из [27].

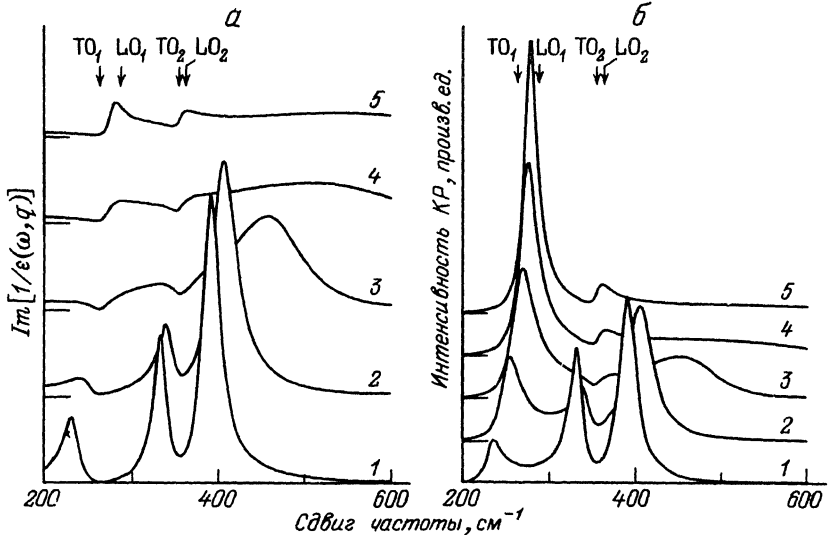


Рис. 1. Расчетная зависимость функции продольного отклика (а) и интенсивности разрешенного рассеяния (б) от сдвига частоты для $n\text{-Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}$ ($n = 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $\gamma_e = 50 \text{ см}^{-1}$, $T = 380 \text{ К}$) при различных значениях волнового вектора рассеяния q .

$q \cdot 10^{-6}, \text{ см}^{-1}$: 1 — 0.2, 2 — 0.6, 3 — 1.0, 4 — 1.4, 5 — 1.8.

[27] и пересчитанные для $T = 380 \text{ К}$. В расчетах учитывалась зависимость восприимчивости свободных электронов от волнового вектора, температуры и столкновительного затухания электронов γ_e с помощью выражения Линхарда—Мермина [28].

Считается, что приближение хаотических фаз, на основании которого получена формула Линхарда—Мермина, применимо для описания $\chi_c(q, \omega)$ при $r_s \ll 1$ [29], где r_s — безразмерный параметр, представляющий собой среднее расстояние между электронами в кристалле, выраженное в единицах эффективного борновского радиуса электронов. В $n\text{-GaAs}$ это приближение успешно использовалось при описании спектров КР ФПМ при $r_s < 1$ [30]. В $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при $T = 380 \text{ К}$ значению $r_s = 1$ соответствует $n_0 = 1.6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ для $x = 0.12$ и $4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ для $x = 0.2$. Обращает на себя внимание увеличение более чем в 2 раза величины n_0 при увеличении x в диапазоне $0.12 \div 0.2$, что связано с увеличением эффективной массы электронов и уменьшением заселенности Γ -минимума (табл. 1).

При сопоставлении с экспериментом расчеты производились с учетом неопределенности волнового вектора рассеяния, возникающей вследствие поглощения возбуждающего и рассеянного света [31], а подгонка расчетных кривых осуществлялась по высокочастотной полосе, лежащей в области $\omega > \omega_{L2}$. В качестве варьируемых параметров использовались концентрация электронов в Γ -минимуме $n_T = f_{\Gamma} n$ и γ_e . Производились также расчеты с использованием для $\chi_c(q, \omega)$ гидродинамического приближения [32], справедливого при $\omega > qv_F$ и $q < k_F$, где v_F и k_F — скорость и волновой вектор Ферми.

Расчеты показали, что, как и в случае $n\text{-GaAs}$ [30], на форму спектров КР ФПМ в $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.12$ и 0.2) при $h\nu_{\text{возб}} = 2.41 \text{ эВ}$ ($q \sim 10^6 \text{ см}^{-1}$) существенное влияние оказывают эффекты, обусловленные пространственной дисперсией плазменной частоты и (при $n < 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) затуханием Ландау [29]. На рис. 1, а, б представлены результаты расчетов функции продольного отклика и формы спектров разрешенного рассеяния I^{KR} для $x = 0.12$, $n = 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и набора значений q в диапазоне $(0.2 \div 1.8) \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$.

Как видно из рис. 1, а, при малых q ($0.2 \cdot 10^6$ см $^{-1}$) спектр длинноволновых продольных возбуждений $n\text{-Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}$ содержит три ярко выраженных пика, которые соответствуют трем ФПМ, возникающим при смешивании плазмона с двумя LO -фононами. При увеличении волнового вектора наблюдаются сдвиги максимумов пиков в высокочастотную сторону за счет пространственной дисперсии и их уширение за счет затухания Ландау. Влияние затухания Ландау становится значительным уже при $q = 1 \cdot 10^6$ см $^{-1}$ и приводит к сильному искажению формы пиков, соответствующих двум низкочастотным модам, которое возникает за счет проявления минимумов при $\omega_{\tau p}$. При больших волновых векторах ($q > 1.8 \cdot 10^6$ см $^{-1}$) максимумы, связанные с этими модами, возникают между $\omega_{\tau p}$ и ω_{Lp} , а максимум, связанный с высокочастотной модой, пропадает за счет его сильного уширения.

Аналогичную зависимость от q имеет вид функции I^{KP} (рис. 1, б) с той лишь разницей, что здесь первый пик, соответствующий низкочастотной компоненте, не испытывает искажений при увеличении q , поскольку первый минимум интенсивности рассеяния проявляется на более низкой частоте $\omega_{01} = 189$ см $^{-1}$. Заметим также, что при $q \approx 10^6$ см $^{-1}$ второй пик не проявляется за счет влияния минимума при ω_{02} .

Вследствие сильной зависимости I^{KP} от q учет неопределенности волнового вектора рассеяния оказывается важен, так как приводит к сдвигу частот максимумов этой функции на величину до 40 см $^{-1}$.

Расчеты, проведенные по формуле (6), показали, что пренебрежение затуханием фононов слабо влияет на форму пиков и приводит лишь к небольшому перераспределению их интенсивности.

В дальнейшем максимумы функции I^{KP} мы будем обозначать L_1 , L_0 и L_2 в соответствии с областями частот $\omega < \omega_{L1}$, $\omega_{L1} < \omega < \omega_{L2}$ и $\omega > \omega_{L2}$, в которых они проявляются, и относить их к ФПМ.

Сравнивая результаты расчетов, представленные на рис. 1, б, с приведенными в [30] для $n\text{-GaAs}$ ($n = 7 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$), можно видеть, что в $n\text{-Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}$ в спектрах КР проявляются дополнительный максимум, соответствующий ФПМ L_0 , а также минимум интенсивности рассеяния на частоте ω_{02} , что является следствием вклада фононов типа АІАs в интерференционный член и функцию диэлектрической проницаемости, входящие в формулу (5).

3. Сопоставление теории и эксперимента

Полосы, обусловленные ФПМ, наблюдались нами в спектрах КР прямозонного $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при $n > 1 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$. В табл. 2 для исследованных образцов приведены холловские концентрации и подвижности свободных электронов, эффективные массы электронов в Γ -минимуме, а также определенные из расчетов

спектров КР параметры электронной плазмы γ_e и ω_e , где $\omega_e = \left[\frac{4\pi e_0 n_{\Gamma}}{\varepsilon_{\infty} m_{\Gamma}^*} \right]^{1/2}$ — плазменная частота, e_0 — заряд электрона. На рис. 2 для двух значений состава $x = 0.12$ (рис. 2, а—б) и $x = 0.2$ (рис. 2, в—г) представлены наиболее характерные спектры, соответствующие значениям n , при которых $\omega_e < \omega_{L2}$, $\omega_e \approx \omega_{L2}$ и $\omega_e > \omega_{L2}$, а также результаты теоретических расчетов функции I^{KP} .

Сопоставление спектров, представленных на рис. 2, с неполяризованными спектрами КР $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, приведенными для близких значений x и n и $h\nu_{\text{возб}} = 2.41$ эВ в работах [6,7], показывает, что в обоих случаях общий вид спектров и их зависимость от концентрации свободных носителей согласуются между собой. Как показали наши измерения, интенсивность рассеяния в запрещенной диагональной поляризации $z(xx)\bar{z}$ на порядок слабее, чем в разрешенной, и, таким образом, в случае, когда поляризация рассеянного света не анализируется,

Параметры плазмонов в $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, определенные по спектрам КР ФПМ

Номер образца	Состав x	Концентрация n , см^{-3}	Подвижность μ , $\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$	Эффективная масса m^*/m_0	Плазменная частота ω_p , см^{-1}	Электронное затухание γ_e , см^{-1}
P2486	0.12	$4.2 \cdot 10^{17}$	2500	0.0728	227	150 (800)
P2470	0.12	$1.3 \cdot 10^{18}$	2000	0.0756	365	50 (2300)
P2429	0.12	$2.2 \cdot 10^{18}$	1400	0.0779	450	54 (2200)
P2450	0.12	$5.2 \cdot 10^{18}$	1800	0.0876	705	58 (1800)
P1835	0.12	$6.2 \cdot 10^{18}$	1500	0.0922	785	65 (1500)
507 ²	0.20	$6.5 \cdot 10^{17}$	700	0.0784	255	135 (800)
P2234	0.20	$1.2 \cdot 10^{18}$	1600	0.0803	345	66 (1600)
P2142	0.20	$1.9 \cdot 10^{18}$	1400	0.0812	382	62 (1700)
P2226	0.20	$2.7 \cdot 10^{18}$	1200	0.0846	505	65 (1600)
P2176	0.20	$4.1 \cdot 10^{18}$	1000	0.0878	600	61 (1600)
P2170	0.20	$5.1 \cdot 10^{18}$	850	0.0900	660	64 (1500)

Примечание. ¹ В скобках приведены значения подвижности (в $\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$), рассчитанные из значений электронного затухания по формуле $\mu = |e|/m^*\gamma_e$. ² Образец выращен молекулярно-лучевой эпитаксией.

основной вклад в спектр КР $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при $h\nu_{\text{возб}} = 2.41$ эВ, по-видимому, обусловлен разрешенными механизмами рассеяния света.

Сравнивая вид спектров, соответствующих различным концентрациям свободных электронов, можно видеть, что три полосы, обусловленные ФПМ (обозначены на рис. 2 как L_1 , L_0 и L_2), наблюдаются в спектрах КР прямозонного $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при $n < 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (рис. 2, а, б, з, д). В этом же диапазоне концентраций отчетливо проявляется минимум интенсивности рассеяния на частоте $\omega_{02} \sim 350 \text{ см}^{-1}$. При больших n в спектре можно наблюдать только две полосы: L_1 и L_2 .

Основные особенности зависимости интенсивности, частоты максимумов и полуширины полос ФПМ от концентрации свободных носителей в $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($n \approx 5 \cdot 10^{17} \div 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) заключаются в следующем. Для низкочастотной полосы L_1 имеет место резкое возрастание интенсивности при увеличении n . При этом частота ее максимума, расположенного вблизи ω_{T1} , и полуширина ($\sim 10 \text{ см}^{-1}$) практически не изменяются. Положение максимума и полуширину L_0 -полосы довольно трудно измерить, поскольку эта полоса сильно уширена вследствие затухания Ландау и ее форму искажает минимум ω_{02} . Интенсивность полосы L_0 быстро падает при увеличении концентрации свободных носителей, так что при $n > 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ эта полоса перестает наблюдаться. Для высокочастотной полосы L_2 основной эффект, обусловленный увеличением концентрации свободных носителей, — значительное смещение частоты максимума в высокочастотную сторону, которое в исследуемом диапазоне концентраций составляет $\sim 400 \text{ см}^{-1}$ для $x = 0.12$ и $\sim 300 \text{ см}^{-1}$ для $x = 0.2$. При этом полуширина изменяется от ~ 50 до $\sim 100 \text{ см}^{-1}$ в диапазоне $n = 5 \cdot 10^{17} \div 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, а при больших n остается практически постоянной.

В спектрах КР $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в исследуемой области частот, кроме полос ФПМ, проявляются также полосы, обусловленные $LO_p(\Gamma)$ -фононами обедненного поверхностного слоя и запрещенными оптическими фононами, отмечавшимися выше. Вклад этих фононов в спектр КР $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ затрудняет сопоставление экспериментальных контуров полос ФПМ с расчетными. В частности, вклад фононов $TO_1(\Gamma)$ и $DATO_1(X, L)$ не позволяет точно выделить форму контура ФПМ L_1 (рис. 3), а $DATO_2(X, L)$ — положение минимума ω_{02} . Так, значения частоты ω_{02} , измеренные в экспериментальных спектрах КР, — 350 и 348 см^{-1} для $x = 0.12$ и 0.2 соответственно, оказываются несколько ниже расчетных: 351.5 и 350 см^{-1} . Заметим также, что при $n > 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ расчет дает очень слабый максимум L_0 , расположенный между ω_{T2} и ω_{L2} , который не удается выявить в

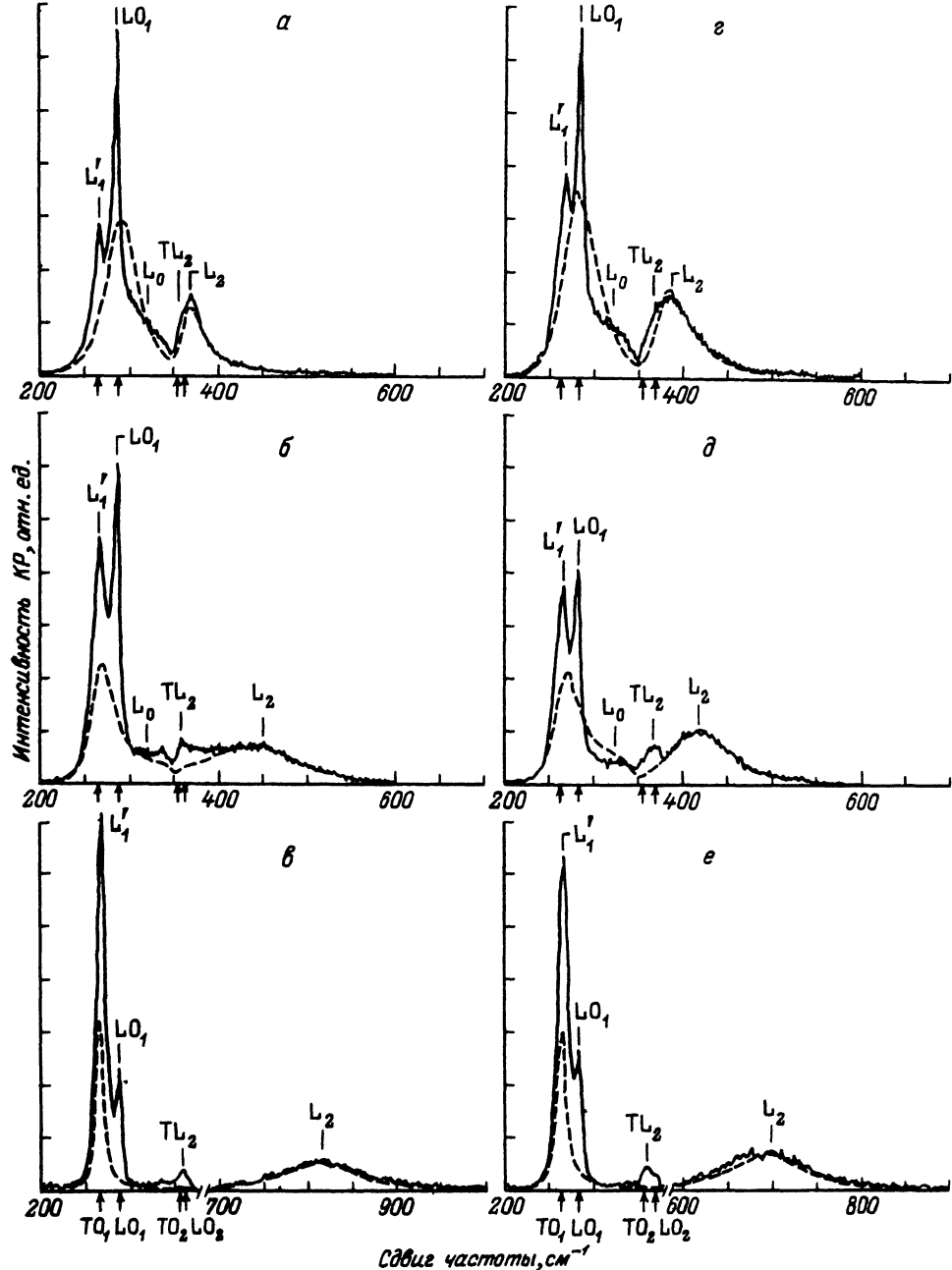


Рис. 2. Сопоставление экспериментальных (сплошные кривые) и расчетных (штриховые) спектров КР $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.
 $n, \text{см}^{-3}$: $a - 4.2 \cdot 10^{17}$, $b - 1.3 \cdot 10^{18}$, $c - 6.2 \cdot 10^{18}$ ($x = 0.12$, $q = 1.01 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$), $d - 6.5 \cdot 10^{17}$, $e - 1.2 \cdot 10^{18}$, $f - 5.1 \cdot 10^{18}$ ($x = 0.2$, $q = 0.98 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$). Поляризация $z(x\bar{y})\bar{z}$, $\hbar\nu_{\text{возб}} = 2.41 \text{ эВ}$.

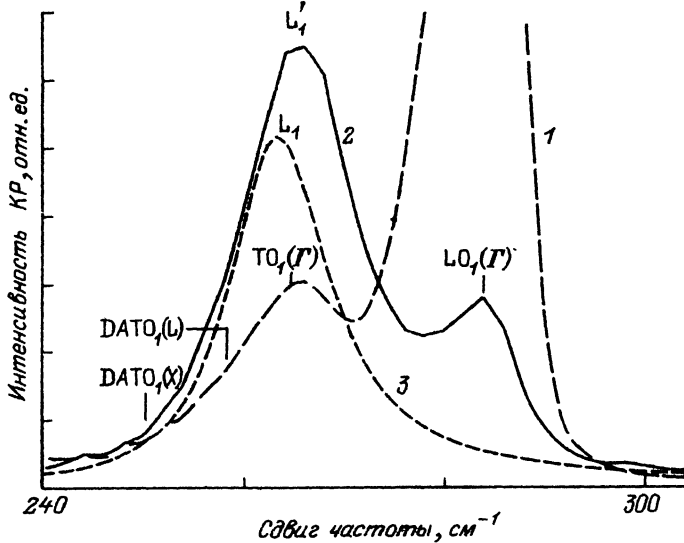


Рис. 3. Экспериментальные (1, 2) и расчетный (3) спектры КР $n\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ в области оптических фононов GaAs-типа.

$n, \text{см}^{-3}$: 1 — $5 \cdot 10^{16}$, 2, 3 — $5.1 \cdot 10^{18}$.

экспериментальных спектрах, поскольку он попадает в область более интенсивной полосы TL_2 , являющейся суперпозицией полос $TO_2(\Gamma)$ - и $LO_2(\Gamma)$ -фононов. Наблюдаемое изменение контура полосы TL_2 при увеличении концентрации свободных электронов не связано с ФПМ L_0 , а является следствием уменьшения вклада в эту полосу $LO_2(\Gamma)$ -фонона.

Сопоставление расчетных и экспериментальных спектров, проведенное с учетом вкладов запрещенных фононов (для L_1 -полосы такое сопоставление для $x = 0.2$ и $n = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ приведено на рис. 3), показывает, что расчетные контуры полос L_1 , L_0 и L_2 согласуются с экспериментальными для области значений концентрации свободных электронов $n > 1 \cdot 10^{18}$ и $3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ для $x = 0.12$ и 0.2 .

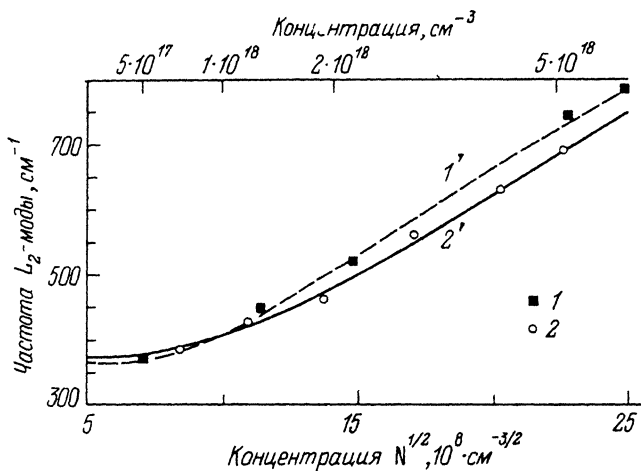


Рис. 4. Зависимость частоты максимума L_2 -полосы в спектрах КР $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ от концентрации свободных электронов.

1, 2 — эксперимент, 1', 2' — расчет; x : 1, 1' — 0.12, 2, 2' — 0.2.

соответственно (рис. 2, б, в, е), что соответствует области значений $r_s < 1$. При меньших n (вплоть до $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$) расчет позволяет хорошо описать только форму и положение минимума ω_{02} и высокочастотной полосы L_2 (рис. 2, а, г, д), и, таким образом, для области частот $\omega > \omega_{02}$ ПХФ правильно описывает свойства электронного газа в прямозонном $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ вплоть до значений $r_s \approx 3$. Этот вывод подтверждает и приведенное на рис. 4 сопоставление значений частот максимумов L_2 -полосы, измеренных в спектрах КР $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ для $x = 0.12$ и 0.2 , с расчетными зависимостями $\omega_{L2}(n)$. Видно, что расчет хорошо согласуется с экспериментом для обоих значений составов во всем диапазоне $n = 5 \cdot 10^{17} \div 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Отметим более резкий характер зависимости $\omega_{L2}(n)$ в случае $x = 0.12$. В табл. 2 вместе со значениями электронного затухания приведены рассчитанные из этих значений подвижности свободных носителей, которые для большинства образцов довольно хорошо согласуются с холловскими данными.

Расчеты, проведенные с использованием гидродинамического приближения для $\chi_e(\omega, q)$, показали, что это приближение дает аналогичные результаты при описании формы спектра КР в $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Однако параметры плазмонов, определенные в этом приближении, отличаются от параметров, получаемых в ПХФ. Значение γ_e оказывается в 2—3 раза завышенным, а значения плазменной частоты различаются на ~10% в сторону увеличения при $n < 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и в сторону уменьшения при $n > 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Эти различия приводят к тому, что в гидродинамическом приближении хуже описываются зависимость частоты L_2 -моды от концентрации свободных электронов и значения подвижностей свободных электронов.

Параметры электронного газа $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, определенные нами по спектрам КР, хорошо согласуются с данными спектров инфракрасного отражения, измеренных на этих же образцах.¹

Зависимости, приведенные на рис. 4, и данные табл. 2 демонстрируют возможности использования спектров КР для измерения концентрации и подвижности свободных носителей в $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, что является важным в связи с широким использованием этого соединения в приборах опто- и микроэлектроники.

С использованием методики послыого анодного окисления спектры КР позволяют измерять профиль распределения концентрации свободных носителей по толщине эпитаксиальных слоев $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Результаты таких измерений для двух образцов ($x = 0.2$), выращенных с пересыщением в объеме расплава 5 и 50 °С, приведены на рис. 5. Видно, что при большой величине пересыщения имеет место ярко выраженный градиент концентрации легирующей примеси, возникающий вследствие сильных различий в скоростях роста слоя в начальный и последующие моменты времени. Наличие сильных градиентов концентраций свободных носителей по толщине эпитаксиальных слоев затрудняет холловские измерения. Слабый градиент концентрации свободных носителей, имеющийся в слоях, выращенных с пересыщением 5 °С, дает для холловских измерений ошибку не более 20%, что находится в пределах точности этих измерений, а также в пределах отклонений экспериментальных точек от расчетной кривой $\omega_{L2}(n)$, приведенной на рис. 4.

Таким образом, на примере прямозонного $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ экспериментально и теоретически исследованы основные закономерности спектров КР ФПМ в двухмодовых твердых растворах с малым затуханием электронной плазмы и показана возможность использования спектров КР для измерения профилей распределения концентрации легирующей примеси по толщине эпитаксиальных слоев полупроводниковых твердых растворов.

¹ Сопоставление спектров комбинационного рассеяния и инфракрасного отражения $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ будет опубликовано.

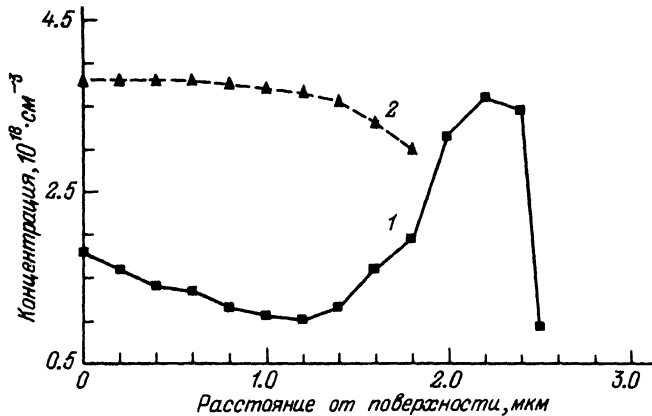


Рис. 5. Профили распределения концентрации свободных электронов по толщине эпитаксиальных слоев $n\text{-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$, выращенных с пересыщением в объеме расплава.

$\Delta T, ^\circ\text{C}$: 1 — 50, 2 — 5.

Авторы выражают благодарность И. П. Ипатовой, А. А. Ключихину, В. М. Андрееву и В. Д. Румянцеву за полезные обсуждения результатов работы и сделанные замечания.

Приложение

Проверка справедливости молекулярной модели для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и определение коэффициента Фауста—Генри AlAs

При использовании формул (5), (6) для описания спектров КР ФПМ в $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ встает вопрос о применимости для этого соединения предположений, соответствующих молекулярному приближению для электронной поляризуемости твердого раствора. Простой способ такой проверки дают измерения зависимости отношений интегральных интенсивностей линий $LO_p(\Gamma)$ -фононов в спектрах КР от x .

При $\chi_e = 0$ формула (5) описывает спектр разрешенного рассеяния света на $LO_p(\Gamma)$ -фононах многомодового твердого раствора. Подставляя выражение $\epsilon(\omega) = \prod_p (\omega_{Lp}^2 - \omega^2) (\omega_{Tp}^2 - \omega^2)^{-1}$ [33] в (6), можно получить формулу для интегральной интенсивности $LO_p(\Gamma)$ -фонона в виде

$$I_{Lp}^{\text{KP}} \sim (\omega_l - \omega_{Lp})^3 \langle n(T) \rangle_{\omega_{Lp}} (\omega_{Lp}^2 - \omega_{Tp}^2) \left[1 + \sum_m \omega_{Tm}^2 w_m C_m (\omega_{Tm}^2 - \omega_{Lm}^2)^{-1} \right]^2 \times \prod_{m \neq p} (\omega_{Tm}^2 - \omega_{Lp}^2) (\omega_{Lm}^2 - \omega_{Lp}^2)^{-1}. \quad (\text{П.1})$$

Как видно из (П.1), для расчета I_{Lp}^{KP} необходимо знать значения частот $TO_p(\Gamma)$ - и $LO_p(\Gamma)$ -фононов, содержание и коэффициенты Фауста—Генри компонент твердого раствора. Согласно молекулярной модели, коэффициенты C_p не зависят от x и можно для твердого раствора использовать их значения для бинарных соединений. Зная зависимость x от ω_{Lp} и ω_{Tp} , можно с помощью формулы (П.1) рассчитать зависимость x от $I_{Lp}^{\text{KP}}/I_{Lp}^{\text{KP}}$ и из сопоставления с экспериментом проверить справедливость сделанных приближений. В применении к $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ такое со-

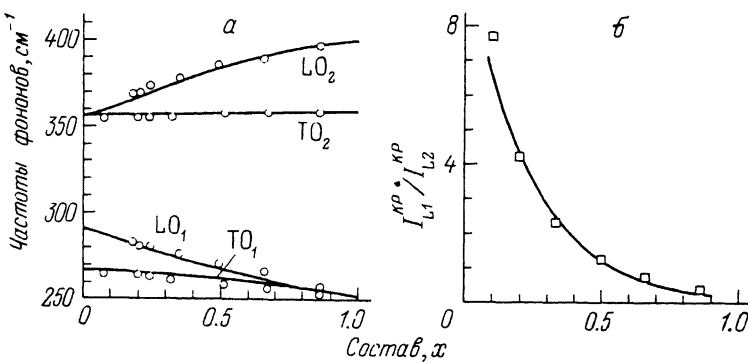


Рис. 6.

a — зависимость частот длинноволновых оптических фононов $Al_xGa_{1-x}As$ от x [точки — эксперимент (спектры КР), кривые — расчет в модели однородных смещений]; *б* — зависимость отношения интегральных интенсивностей линий продольных оптических фононов в спектрах КР $Al_xGa_{1-x}As$ от состава x (точки — эксперимент, кривая — расчет).

поставление позволяет определить значение коэффициента Фауста—Генри $A_{As} C_2$, данные о котором в литературе отсутствуют.

В спектрах КР слабо легированных образцов $Al_xGa_{1-x}As$ ($x = 0.1, 0.2, 0.3, 0.5, 0.65, 0.86$) с ориентацией $[001]$ и $[1\bar{1}0]$ нами были измерены частоты максимумов линий, соответствующих $LO_1(\Gamma)$ -, $LO_2(\Gamma)$ -, $TO_1(\Gamma)$ - и $TO_2(\Gamma)$ -фононам, и отношение I_{L1}^{KP}/I_{L2}^{KP} (рис. 6, *a*, *б*).

Были также проведены расчеты зависимости частот $LO_1(\Gamma)$ -, $LO_2(\Gamma)$ -, $TO_1(\Gamma)$ - и $TO_2(\Gamma)$ -фононов от x в различных модифицированных вариантах модели однородных смещений $[^{34-37}]$. Расчеты показали, что наилучшее согласие с экспериментом (рис. 6, *a*) обеспечивает модель, предложенная в $[^{38}]$, в которой, однако, необходимо учесть квадратичный по x вклад в силовые постоянные, т. е. $F = F^0 [1 - \theta (1 + ax)x]$, где F^0 — силовая постоянная для бинарной компоненты, а θ и a — подгоночные параметры. Параметры модели приведены в табл. 3. Как видно из приведенного на рис. 6, *a* сопоставления экспериментальных значений с расчетной кривой, для обоих типов фононов расчетные значения частот хорошо совпадают с экспериментальными в области составов, в которой соответствующая компонента твердого раствора преобладает, т. е. при $w_p > 0.5$. При $w_p < 0.5$ различия экспериментальных и расчетных значений частот фононов не превышают 4 см^{-1} . Величина 4 см^{-1} , по-видимому, соответствует предельной точности определения частот длинноволновых оптических фононов в $Al_xGa_{1-x}As$, которую может обеспечить модель однородных смещений, что согласуется и с данными работ $[^{36,39}]$.

Таблица 3

Параметры модифицированной модели однородных смещений, использованные при расчетах частот LO - и TO -фононов в $Al_xGa_{1-x}As$ ¹

Бинарная компонента тройного соединения	Частота TO -фонона $\omega_{TO}, \text{см}^{-1}$	Частота LO -фонона $\omega_{LO}, \text{см}^{-1}$	Примесная частота $\omega_{\text{гар}}(\text{лрс}), \text{см}^{-1}$	Высококачественная диэлектрическая проницаемость ϵ_{∞}	Эффективный заряд Борна e_B^*	Силовая постоянная $F^0 \cdot 10^{-5}, \text{дин/см}$
GaAs	267	291	252	10.9	2.22e	1.51
AlAs	359	400	356	8.5	2.17e	1.29

Примечание. ¹ Величины подгоночных параметров: $\theta = -0.165$, $a = 0.5$; силовая постоянная $F_{GaAl}^0 = 0.72 \cdot 10^5 \text{ дин/см}$.

На рис. 6, 6 приведено сопоставление экспериментально измеренной зависимости I_{L1}^{KP}/I_{L2}^{KP} от x и расчетной ($C_1 = -0.55$ [^{4,14,15}], $C_2 = -0.15$). В расчетах использовались экспериментальные значения ω_{LP} и ω_{TP} , а величина коэффициента C_2 варьировалась до получения лучшего согласия с экспериментом. Видно, что расчетная зависимость хорошо совпадает с экспериментальной для $x = 0.1 \div 0.86$, что доказывает справедливость молекулярной модели в применении к $Al_xGa_{1-x}As$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Varga B. B. // Phys. Rev. 1965. V. 137. N 6A. P. A1896—A1902.
- [2] Moogradian A., McWorter A. L. // Phys. Rev. Lett. 1967. V. 19. N 15. P. 849—854.
- [3] Клейн М. В. // Рассеяние света в твердых телах. М., 1979. С. 174—238.
- [4] Абштейгер Г., Кардона М., Пинзак А. // Рассеяние света в твердых телах. М., 1986. № 4. С. 12—182.
- [5] Yuasa T., Naritsuku S., Mannoh M., Shinozaki K., Ymanake K., Nomura Y., Mihara M. // Appl. Phys. Lett. 1985. V. 46. N 2. P. 176—178.
- [6] Yuasa T., Naritsuku S., Mannoh M., Shinozaki K., Ymanake K., Nomura Y., Mihara M., Ishii M. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 2. P. 1222—1232.
- [7] Kirillov D., Chai Y., Webb C., Davis G. // J. Appl. Phys. 1985. V. 59. N 1. P. 231—233.
- [8] Becker R. D., Luehrmann P. F., Langer D. W. // Appl. Phys. Lett. 1985. V. 47. N 5. P. 513—515.
- [9] Минтаилов А. М., Смекалин К. Е., Хвостиков В. П. // Тез. докл. XI Всес. конф. по физике полупроводников. Кишинев, 1988. Т. 2. С. 62.
- [10] Минтаилов А. М., Смекалин К. Е., Устинов В. М., Хвостиков В. П. // ФТП. 1990. Т. 24. В. 9. С. 1539—1549.
- [11] Imer G., Hems M., Monecke J., Bock H. // Phys. St. Sol. B. 1988. V. 145. N 1. P. 79—82.
- [12] Kumazaki K. // Phys. St. Sol. B. 1989. V. 153. N 2. P. 751—756. V. 108. N 1. P. 131—143.
- [13] Алфёров Ж. И., Погрёбский К. Ю., Андреев В. М., Воднев А. А., Конников С. Г., Ларионов В. Р., Румянцев В. Д., Хвостиков В. П. // Письма ЖТФ. 1986. Т. 12. В. 18. С. 1083—1093.
- [14] Anastassiadou A., Raptis Y. S., Anastassakis E. // J. Appl. Phys. 1986. V. 60. N 8. P. 2924—2931.
- [15] Кардона М. // Рассеяние света в твердых телах. М., 1984. С. 35—237.
- [16] Wang X., Zang X. // Sol. St. Commun. 1986. V. 59. N 12. P. 869—872.
- [17] Aspnes D. E., Kelso S. M., Logan R. A., Bhat R. // J. Appl. Phys. 1986. V. 60. N 2. P. 754—767.
- [18] Андреев В. М., Ларионов В. Р., Минтаилов А. М., Прутских Т. А., Румянцев В. Д., Смекалин К. Е., Хвостиков В. П. // Письма ЖТФ. 1990. Т. 16. В. 9. С. 7—12.
- [19] Klein M. V., Ganguly V. N., Colwell P. J. // Phys. Rev. B. 1972. V. 6. N 6. P. 2380—2388.
- [20] Hon D. T., Faust W. L. // Appl. Phys. 1973. V. 1. N 5. P. 241—256.
- [21] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М., 1976. 583 с.
- [22] Barker A. S., Loudon Jr. R. // Rev. Mod. Phys. 1972. V. 44. N 1. P. 18—47.
- [23] Зингер Г. М., Ипатова И. П., Рыскин А. И. // ФТП. 1984. Т. 18. В. 1. С. 24—42.
- [24] Flytzanis C. // Phys. Rev. B. 1972. V. 6. N 4. P. 1264—1290.
- [25] Faust M. L., Henry C. R. // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 17. N 25. P. 1265—1268.
- [26] Adachi S. // J. Appl. Phys. 1985. V. 58. N 3. P. R1—R29.
- [27] Jani B. E., Gibart P., Portal J. C., Aulombard R. L. // J. Appl. Phys. 1985. V. 58. N 9. P. 3481—3484.
- [28] Mermin N. D. // Phys. Rev. B. 1970. V. 1. N 5. P. 2362—2363.
- [29] Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. М., 1967. 382 с.
- [30] Abstreiter G., Trommer R., Cardona M. // Sol. St. Commun. 1979. V. 30. N 10. P. 703—707.
- [31] Katayama S., Murase K., Kawamura H. // Sol. St. Commun. 1975. V. 16. N 7. P. 945—948.
- [32] Nowak U., Richter W., Sachs G. // Phys. St. Sol. (b). 1981. V. 108. N 1. P. 131—143.
- [33] Кухарский А. А. // ФТТ. 1972. Т. 14. В. 6. С. 1744—1751.
- [34] Зингер Г. М., Ипатова И. П., Субашиев А. В. // ФТП. 1976. Т. 10. В. 3. С. 479—484.
- [35] Зингер Г. М., Ильин М. А., Рашевская Е. П., Рыскин А. И. // ФТТ. 1979. Т. 21. В. 9. С. 2647—2655.
- [36] Kim O. K., Spitzer W. G. // J. Appl. Phys. 1979. V. 50. N 6. P. 4362—4370.
- [37] Chemg Y. T., Jaw D. H., Jou M. J., Stringfellow // J. Appl. Phys. 1988. V. 65. N 8. P. 3285—3288.
- [38] Chang I. F., Mitra S. S. // Phys. Rev. 1968. V. 172. N 3. P. 924—933.
- [39] Talwar D. N., Vandevyver M. // Phys. Rev. B. 1990. V. 40. N 14. P. 9779—9789.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Получена 15.08.1991
Принята к печати 23.10.1991