

# Междолинное рассеяние электронов на фононах в сверхрешетке $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3(001)$

© Л.Н. Никитина, С.Н. Гриняев, В.Г. Тютюрев\*

Сибирский физико-технический институт им. акад. В.Д. Кузнецова при Томском государственном университете, 634050 Томск, Россия

\* Томский государственный педагогический университет, 634041 Томск, Россия

E-mail: gsn@phys.tsu.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 31 марта 2005 г.)

На основе метода псевдопотенциала и феноменологической модели сил связи изучено междолинное рассеяние электронов на фононах в сверхрешетке  $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3(001)$ . Рассчитаны деформационные потенциалы между экстремумами зоны проводимости сверхрешетки с участием коротковолновых и длинноволновых фононов. Показано, что смешивание состояний из сфалеритных  $L$ -долин играет в междолинном рассеянии сверхрешетки более существенную роль, чем  $\Gamma$ - $X$ -смешивание. В частности, за счет  $L$ - $L$ -смешивания переходы  $\Gamma_1$ - $X_3$ , являющиеся аналогами сфалеритных  $\Gamma$ - $L$ -переходов, имеют большую интенсивность, чем аналоги  $\Gamma$ - $X$ -переходов ( $\Gamma_1$ - $M_5$ ,  $\Gamma_1$ - $\Gamma_3$ ). Усредненные по каналам рассеяния деформационные потенциалы в сверхрешетке согласуются с соответствующими потенциалами в твердом растворе, но для нижних состояний все переходы в сверхрешетке более интенсивны.

Работа частично выполнена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований № 02-02-17848, 04-02-17508-а и гранта Президента РФ НШ-1743.2003.2.

PACS: 63.20.Kr, 73.21.Cd

## 1. Введение

Полупроводники с многодолинной зонной структурой представляют значительный интерес для разработки быстросрабатывающих многофункциональных электронных приборов. Поиск новых материалов в этом направлении концентрируется в основном вокруг бинарных полупроводников и их твердых растворов. В то же время искусственные сверхрешетки (SL)  $(AB)_n(CD)_m$  обладают гораздо более богатой зонной структурой с большим числом конкурирующих минимумов, что создает благоприятные условия для проявления нелинейных эффектов типа отрицательной дифференциальной проводимости. Исследование междолинного рассеяния представляет интерес также в связи с проблемой туннелирования электронов в многослойных структурах с участием фононов, релаксацией фотовозбужденных носителей, резонансным рамановским рассеянием, фотолюминесценцией горячих электронов и т.д. [1]. Преимуществом SL как упорядоченных материалов является отсутствие рассеяния носителей на случайном потенциале, которое всегда имеет место в твердых растворах.

Изменения структуры в SL геометрии сопровождаются реконструкцией электронного и фононного спектров, вследствие чего появляются дополнительные каналы рассеяния, возникает новый тип интерфейсных электронных и колебательных состояний [2]. Особенно ярко эффекты размерного квантования проявляются в SL с ультратонкими слоями ( $n, m < 7$ ), имеющих большие перспективы в качестве предельно миниатюрных планарных элементов.

До сих пор процессы электрон-фононного взаимодействия в SL теоретически исследовались главным

образом для случая длинноволновых полярных оптических колебаний; рассеяние на короткодействующем деформационном потенциале изучено недостаточно.

Для структур GaAs/AlAs с ориентацией гетерограницы (001) важную роль играет так называемое  $\Gamma$ - $X$ -рассеяние электронов в нижней зоне проводимости (здесь и далее подчеркнуты сфалеритные состояния).

Исследование спектров фотолюминесценции SL  $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n(001)$  ( $n = 4, 5, 10, 20$ ) показало [3], что интенсивность  $\Gamma$ - $X$ -рассеяния усиливается с ростом температуры, а величина междолинного деформационного потенциала близка к его значению в GaAs.

В работе [4] электронные  $\Gamma$ - $X$ -переходы в структурах GaAs/AlAs (001) с довольно толстыми слоями ( $> 50 \text{ \AA}$ ) исследовались методом огибающих волновых функций на основе данных для объемных материалов. Показано, что макроскопические поля не существенны для междолинного рассеяния электронов, а взаимодействие на деформационном потенциале играет такую же важную роль в вероятности  $\Gamma$ - $X$ -перехода, как и смешивание состояний на гетерограницах.

Однако в структурах GaAs/AlAs наряду с  $\Gamma$ - $X$  гибридизацией имеет место взаимодействие состояний и из других (в частности,  $L$ ) долин. Поскольку в GaAs  $L$ -долины расположены ниже по энергии, чем  $X$ -долины, их влияние на кинетические свойства может измениться за счет эффектов размерного квантования и смешивания состояний. Кроме того, возможность применения метода огибающих волновых функций для структур с ультратонкими слоями неочевидна и требует обоснования. Поэтому для них предпочтительнее использовать методы расчета, основанные на микроскопическом описании кристаллического потенциала и колебаний атомов.

Подобный подход был применен нами при исследовании рассеяния электронов на коротковолновых фононах в монослойной SL (AlAs)<sub>1</sub>(GaAs)<sub>1</sub>(001) [5]. Фононный спектр находился в реалистической модели зарядов на связи, зонная структура рассчитывалась методом модельного псевдопотенциала. Были определены деформационные потенциалы для всех возможных электронных переходов в нижних зонах проводимости этой SL.

Установление зависимостей параметров электрон-фононного взаимодействия в SL от их состава, ориентации границ и толщины слоев необходимо для определения области наиболее эффективного применения SL в электронике. Детальный анализ многочисленных каналов рассеяния в SL достаточно громоздок, поэтому для каждой из них требуется отдельное рассмотрение.

В настоящей работе изучены особенности электронных, фононных состояний и междолинных переходов электронов на фононах в SL (AlAs)<sub>1</sub>(GaAs)<sub>3</sub>(001). В семействе SL (AlAs)<sub>m</sub>(GaAs)<sub>n</sub>(001) данной сверхрешетке отвечают наименьшие по толщине слои, начиная с которых реализуются SL типа I. Вследствие размерного квантования состояний из  $\Gamma$ -,  $X$ - и  $L$ -долин зона проводимости (AlAs)<sub>1</sub>(GaAs)<sub>3</sub>(001) обладает более сложным устройством по сравнению с GaAs, что делает такую сверхрешетку вероятным конкурентом арсенида галлия при разработке генераторов Ганна.

## 2. Электронный и фононный спектр сверхрешетки (AlAs)<sub>1</sub>(GaAs)<sub>3</sub>(001)

В сверхрешетке (AlAs)<sub>1</sub>(GaAs)<sub>3</sub> монослой AlAs чередуется с тремя монослоями GaAs в направлении [001]. В элементарной ячейке SL содержится восемь атомов, пространственная группа симметрии  $D_{2d}^5$ . Электронные состояния SL вычислялись методом эмпирического псевдопотенциала [6], определенного из экспериментальных данных и результатов *ab initio* расчетов зонной структуры кристаллов. Детали метода расчета описаны в [7]. Дну зоны проводимости SL отвечает состояние  $\Gamma_1^c$ , энергия прямой запрещенной зоны равна  $E_g(\Gamma_1^c - \Gamma_5^v) = 1.79$  eV. Для неприводимых представлений используются обозначения из [8]. Близко к центральной долине  $\Gamma_1^c$  по энергии расположены боковые долины в симметричных точках  $X(1, 0, 0)$ ,  $M(1, 1, 0)$ ,  $Z(0, 0, 1/4)$ . Координаты точек даны в единицах  $(2\pi/t, 2\pi/t, 2\pi/a)$ ,  $t = a\sqrt{2}$ ,  $a = 5.652$  Å. Энергии дополнительных экстремумов относительно потолка валентной зоны ( $\Gamma_5^v$ ) равны  $E(X_3) = 1.86$  eV,  $E(X_1) = 2.20$  eV,  $E(M_5) = 2.05$  eV,  $E(\Gamma_3) = 2.05$  eV,  $E(Z_3) = 2.14$  eV,  $E(Z_1) = 2.15$  eV. В звездах  $M$  и  $Z$  имеется один луч, в звезде  $X$  — два луча. В других симметричных точках  $A(1, 1, 1/4)$  и  $R(0, 1, 1/4)$  край зоны проводимости SL примерно на 1 eV выше ее дна. Полученные в [7] соотношения совместности неприводимых представлений пространственных групп  $D_{2d}^5$  и  $T_d^2$  позволяют установить происхождение состояний SL из состояний

Таблица 1. Частоты фононов  $\omega_s(\mathbf{q})$  в GaAs и AlAs (в THz)

Фонон	GaAs		AlAs
	Теория	Эксперимент [11]	Теория
$X(LO)$	7.06	7.22	10.62
$X(LA)$	6.60	6.80	7.06
$X(TO)$	6.46	7.56	10.20
$X(TA)$	2.14	2.36	2.18
$L(LO)$	7.32	7.15	10.20
$L(LA)$	5.70	6.26	6.57
$L(TO)$	7.15	7.84	10.68
$L(TA)$	1.16	1.86	1.24

виртуального кристалла (BK) (AlAs)<sub>0.25</sub>(GaAs)<sub>0.75</sub>, „сворачиваемых“ в зону Бриллюэна SL. Тетрагональная компонента потенциала SL выступает возмущением к потенциалу BK. Оно приводит к наиболее заметным изменениям тех сфалеритных состояний, которые испытывают большие разрывы на гетерограницах. Для сверхрешетки (AlAs)<sub>1</sub>(GaAs)<sub>3</sub> это имеет место для состояний, происходящих из  $\Gamma$ - и  $L$ -долин BK, поскольку слой GaAs является достаточно „мощной“ квантовой ямой для  $\Gamma$ -состояний (глубиной 1.00 eV) и  $L$ -состояний (глубиной 0.56 eV). Их влияние проявилось в том, что уровень BK  $\Gamma$  понизился на 0.20 eV, а два вырожденных в геометрии сверхрешетки  $L$ -состояния BK расщепились на 0.34 eV в состояния  $X_3$  и  $X_1$ . В результате в SL нижняя боковая долина  $X_3$  расположена гораздо ближе (0.06 eV) к центральной  $\Gamma_1$  долине, чем  $L$ -долина к  $\Gamma$ -долине в GaAs (0.28 eV). С уменьшением толщины слоя GaAs взаимодействие между  $L$ -состояниями усиливается. Так, в монослойной сверхрешетке (AlAs)<sub>1</sub>(GaAs)<sub>1</sub>(001) расщепление между  $L$ -долинами достигает 0.40 eV [5]. В то же время для нижних  $X$ -состояний монослой AlAs

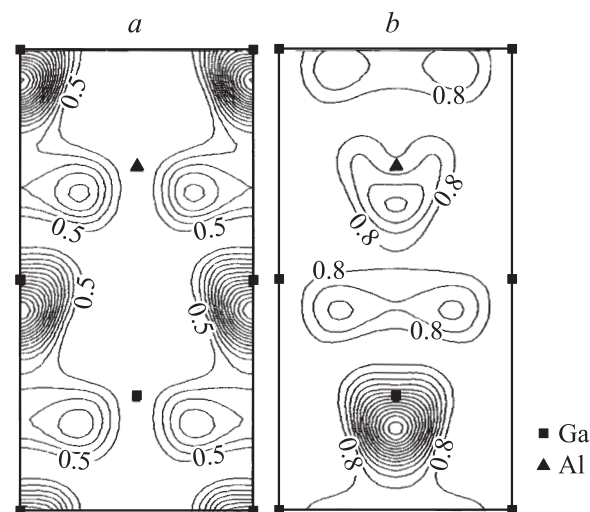


Рис. 1. Зарядовые плотности состояний  $X_3$  (a) и  $X_1$  (b) сверхрешетки в плоскости (001). Контуры плотности даны в единицах  $e/\Omega_{SL}$ .

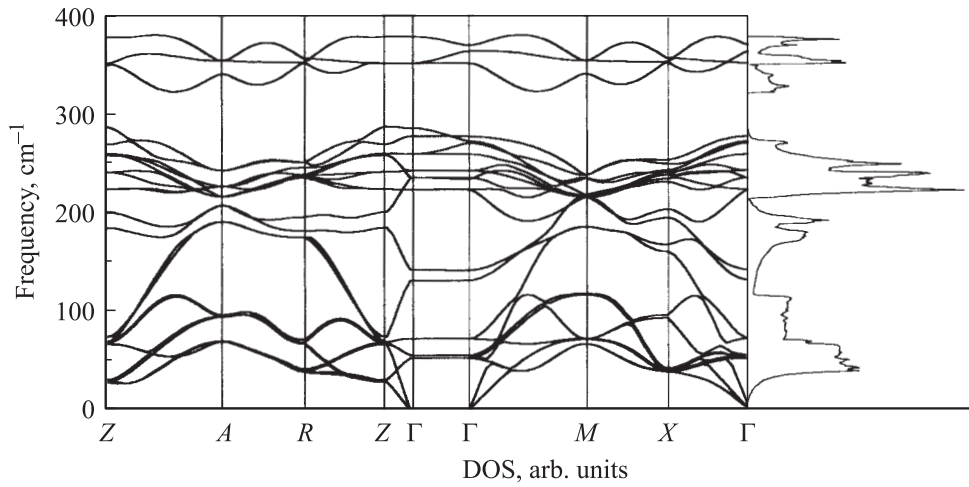


Рис. 2. Фононный спектр и плотность фононных состояний SL (AlAs)<sub>1</sub>(GaAs)<sub>3</sub>(001).

выступает в роли очень узкой и сравнительно мелкой (0.27 eV) квантовой ямы. Поэтому эффекты размерного квантования слабо проявились в сверхрешеточных состояниях  $M_5$  и  $\Gamma_3$ , происходящих из  $X$ -состояний ВК. Эти состояния имеют почти совпадающие энергии и за счет влияния непрямого компонента AlAs расположены к  $\Gamma_1$ -долине значительно ближе (0.26 eV), чем  $X$ -долина к  $\Gamma$ -долине в GaAs (0.48 eV). Анализ волновых функций состояний  $Z_1$  и  $Z_3$  показал, что они построены из сфалеритных состояний на линии  $\Delta$

в точках  $(0, 0, 1/4)$  и  $(0, 0, 3/4)$ , причем наибольший вклад в них вносит состояние из точки  $(0, 0, 3/4)$ .

Отмеченные особенности спектра SL согласуются с характером распределения зарядовых плотностей ее состояний. У состояний  $\Gamma_1$ ,  $X_3$  и  $X_1$  плотность локализована в слоях GaAs, причем у верхнего состояния  $X_1$  она локализована в среднем монослое GaAs, а у нижнего состояния  $X_3$  — в двух других слоях GaAs (рис. 1). Волновые функции состояний  $\Gamma_3$ ,  $M_5$  и  $X$  локализованы вблизи анионов. При этом зарядовая плотность состо-

Таблица 2. Частоты фононов  $\omega_s(\mathbf{q})$  в сверхрешетке (AlAs)<sub>1</sub>(GaAs)<sub>3</sub> (в THz)

$s \setminus \mathbf{q}$	$\Gamma$	$\omega_s(\mathbf{q})$	$M$	$\omega_s(\mathbf{q})$	$X$	$\omega_s(\mathbf{q})$	$Z$	$\omega_s(\mathbf{q})$	$R$	$\omega_s(\mathbf{q})$	$A$	$\omega_s(\mathbf{q})$
1	$\Gamma_5$	0.000	$M_5$	2.002	$X_2$	1.157	$Z_5$	0.861	$R_2$	1.168	$A_5$	2.075
2		0.000		2.002	$X_4$	1.167		0.861	$R_2$	1.168		2.075
3	$\Gamma_3$	0.000	$M_2$	2.144	$X_3$	1.170	$Z_5$	0.925	$R_4$	1.168	$A_5$	2.103
4	$\Gamma_5$	1.570	$M_5$	2.155	$X_2$	1.180		0.925	$R_4$	1.257		2.103
5		1.570		2.155	$X_1$	1.183	$Z_5$	2.007	$R_1$	2.015	$A_2$	2.828
6	$\Gamma_5$	1.658	$M_3$	2.163	$X_4$	1.258		2.007	$R_3$	2.015	$A_3$	2.828
7		1.658	$M_4$	3.489	$X_3$	2.778	$Z_1$	2.049	$R_3$	2.056	$A_4$	2.828
8	$\Gamma_5$	2.158	$M_3$	3.528	$X_1$	2.881	$Z_5$	2.064	$R_1$	2.136	$A_1$	2.883
9		2.158	$M_5$	5.562	$X_1$	4.801		2.064	$R_1$	5.247	$A_5$	5.717
10	$\Gamma_1$	3.939		5.562	$X_3$	5.008	$Z_3$	2.213	$R_3$	5.247		5.717
11	$\Gamma_3$	4.254	$M_1$	6.458	$X_1$	5.826	$Z_1$	5.542	$R_1$	5.433	$A_5$	6.222
12	$\Gamma_5$	6.693	$M_2$	6.458	$X_3$	6.082	$Z_3$	6.019	$R_3$	5.865		6.222
13		6.693	$M_2$	6.464	$X_3$	6.931	$Z_5$	6.706	$R_1$	7.069	$A_2$	6.472
14	$\Gamma_3$	7.053	$M_3$	6.483	$X_1$	7.013		6.706	$R_3$	7.069	$A_3$	6.472
15	$\Gamma_3$	7.062	$M_4$	6.503	$X_2$	7.146	$Z_5$	7.234	$R_3$	7.107	$A_4$	6.472
16	$\Gamma_5$	7.273	$M_5$	6.527	$X_4$	7.147		7.234	$R_2$	7.147	$A_1$	6.794
17		7.273		6.527	$X_2$	7.148	$Z_1$	7.757	$R_4$	7.147	$A_2$	6.802
18	$\Gamma_5$	7.786	$M_1$	7.055	$X_3$	7.228	$Z_5$	7.811	$R_2$	7.147	$A_3$	6.802
19		7.786	$M_4$	7.055	$X_1$	7.291		7.811	$R_1$	7.375	$A_4$	6.802
20	$\Gamma_1$	8.323	$M_5$	7.131	$X_3$	7.481	$Z_3$	8.083	$R_1$	7.539	$A_5$	7.279
21	$\Gamma_3$	8.572		7.131	$X_1$	7.600	$Z_1$	8.628	$R_3$	7.539		7.279
22	$\Gamma_5$	10.53	$M_3$	10.22	$X_3$	10.57	$Z_5$	10.53	$R_3$	10.56	$A_1$	10.22
23		10.53	$M_5$	10.61	$X_1$	10.58		10.53	$R_1$	10.58	$A_5$	10.61
24	$\Gamma_3$	11.35		10.61	$X_4$	10.68	$Z_3$	11.35	$R_4$	10.68		10.61

яний  $\Gamma_3$ ,  $M_5$  в слое AlAs лишь незначительно больше плотности в слоях GaAs.

Фононный спектр SL исследовался в феноменологической модели жестких ионов [9]. Близость структурных параметров и других свойств GaAs и AlAs позволяет считать, что межатомное силовое поле в них различается незначительно, а главные особенности колебательных состояний в GaAs, AlAs и SL связаны с различием масс атомов Ga и Al. Поэтому параметры межатомного взаимодействия в AlAs и SL были выбраны такими же, как в GaAs, что соответствует приближению дефекта масс [10]. Удовлетворительная точность модели видна из сравнения вычисленных и экспериментальных частот  $\omega_s(\mathbf{q})$  ( $s$  — номер фононной ветви,  $\mathbf{q}$  — волновой вектор фонона) на примере GaAs (табл. 1). В AlAs частоты колебаний для оптических ветвей существенно выше из-за присутствия более легкого атома Al.

Результаты расчета фононного спектра SL приведены на рис. 2 и в табл. 2. За счет использованного приближения дефекта масс для некоторых частот возникает дополнительное вырождение состояний. В области оптических частот в фононном спектре SL выделяются полосы, относящиеся к колебаниям отдельных связей Ga–As и Al–As. Эти полосы отделены щелями друг от друга и от акустической части спектра. Верхняя граница спектра SL несколько понижена по сравнению с AlAs вследствие увеличения приведенной массы от вклада более тяжелых атомов Ga в соответствующее колебание. В отличие от случая бинарных кристаллов во всех фононах с симметрией  $M_5$  присутствуют колебания анионов. Частоты длинноволновых фононов SL обнаруживают типичную для тройных соединений неаналитическую зависимость от взаимной ориентации волнового вектора фонона и тетрагональной оси кристалла.

### 3. Междолинные деформационные потенциалы

Интенсивность междолинного рассеяния электрона из начального состояния  $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  ( $n$  — номер зоны,  $\mathbf{k}$  — волновой вектор) в конечное состояние  $\Psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$  определяется деформационными потенциалами  $D_{nk,n'k'}^s$ , равными матричным элементам потенциала возмущения кристаллического потенциала при единичных смещениях атомов. В приближении жестких недеформируемых ионов их модули даются выражением [12]

$$|D_{nk,n'k'}^s| = \left| \sum_{\alpha} \left( \frac{M}{m_{\alpha}} \right)^{1/2} (\mathbf{e}^{\alpha}(s, \mathbf{q}) \cdot \mathbf{d}^{\alpha}(nk, n'k')) \right|,$$

где  $m_{\alpha}$  — масса  $\alpha$ -го атома,  $M$  — масса элементарной ячейки,  $\mathbf{e}^{\alpha}(s, \mathbf{q})$  — нормированные векторы поляризации,  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ ,  $\mathbf{d}^{\alpha}(nk, n'k')$  — матричные элементы, связанные с градиентом атомного потенциала и зависящие от свойств только электронной подсистемы. В базисе из

плоских волн  $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{G}} C_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp(i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r})$  матричные элементы  $\mathbf{d}^{\alpha}(nk, n'k')$  имеют вид

$$\mathbf{d}^{\alpha}(nk, n'k') = i \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} C_n^*(\mathbf{k} + \mathbf{G}) C_{n'}(\mathbf{k}' + \mathbf{G}') (\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{G}' - \mathbf{G}) \times V_{\alpha}(|\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{G} - \mathbf{G}'|) \exp(i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{G}' - \mathbf{G})\boldsymbol{\tau}_{\alpha}).$$

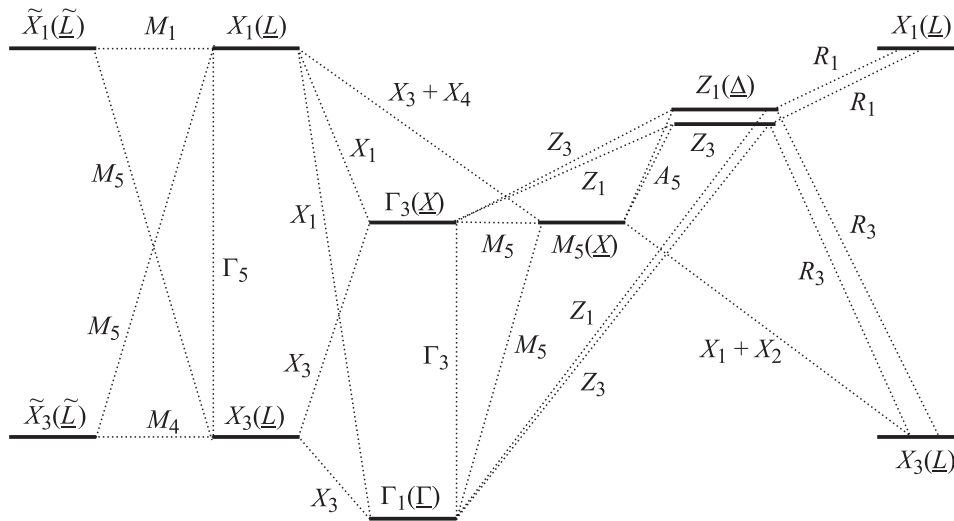
Здесь  $\mathbf{G}, \mathbf{G}'$  — векторы обратной решетки,  $V_{\alpha}(k) = \frac{1}{\Omega} \int V_{\alpha}(|\mathbf{r}|) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{r}$  — формфактор локального псевдопотенциала  $\alpha$ -го атома,  $\Omega$  — объем элементарной ячейки,  $\boldsymbol{\tau}_{\alpha}$  — радиус-вектор атома в элементарной ячейке. В том случае, когда имеется несколько фононных ветвей с близкими частотами, вклады от соответствующих колебаний в вероятность рассеяния можно объединить, вводя эффективный деформационный потенциал согласно формуле  $\left| \sum_s |D_{nk,n'k'}^s|^2 \right|^{1/2}$ . Наиболее интенсивные переходы между долинами происходят в области пиков плотностей фононных и электронных состояний и при максимальных значениях деформационных потенциалов.

### 4. Результаты расчета и обсуждение

Для проверки псевдопотенциалов [6] был проведен расчет и выполнено сравнение междолинных деформационных потенциалов в нижней зоне проводимости GaAs с экспериментальными и теоретическими данными. Результаты расчета приведены в табл. 3. Вследствие близости масс атомов Ga, As и соответствующих частот рассеяния электронов на фононах в нижней зоне проводимости GaAs может быть описано пятью эффективными деформационными потенциалами для переходов  $\Gamma-X$ ,  $\tilde{X}-X$ ,  $\Gamma-L$ ,  $X-L$ ,  $\tilde{L}-L$ . Здесь тильдой помечены неэквивалентные состояния лучей сфалеритных звезд  $\tilde{X}$  и  $\tilde{L}$ . Полученные потенциалы согласуются с нашим предыдущим расчетом [13], выполненным с нелокальными модельными псевдопотенциалами, а также с результатами расчетов других авторов. Теоретические значения

Таблица 3. Междолинные деформационные потенциалы в зоне проводимости GaAs ( $10^8$  eV/cm)

Переход	Фонон	Теория	Эксперимент
$\Gamma-X$	$LO$	4.9 4.0 [13], 4.1 [14]	5–11 [15], 4.8 [16]
$\tilde{X}-X$	$LO$	7.3 6.3 [13], 7.0 [14]	2.7–11 [15]
$\Gamma-L$	$LA + LO$	4.0 3.7 [13], 4.1 [14]	5–9 [17], 6.5 [18]
$\tilde{L}-L$	$LO + LA$	0.8 1.0 [13], 1.7 [14]	2–5 [19]
$X-L$	$LO + LA + TA + TO$	4.1 4.3 [13], 3.8 [14]	3 [19]



**Рис. 3.** Схема уровней и междолинных переходов в зоне проводимости SL  $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3$ . Симметрия фононов указана около пунктирных линий. В скобках приведены состояния ВК, из которых происходят состояния SL.

в основном находятся в пределах разброса экспериментальных данных. При этом у переходов  $\underline{\Gamma}-\underline{X}$ ,  $\underline{X}-\underline{X}$  и  $\underline{\tilde{L}}-\underline{L}$  деформационные потенциалы  $D_{nk,n'k'}^s$  полностью определяются электронными константами  $\mathbf{d}^\alpha(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}')$ , поскольку векторы поляризации  $\underline{X}$  фононов однозначно определяются из свойств симметрии. Переходы  $\underline{\Gamma}-\underline{X}$  и  $\underline{\tilde{X}}-\underline{X}$  в бинарных кристаллах со структурой сфалерита происходят с участием колебаний только катионов, в другие переходы вносят вклад и колебания анионов. В GaAs и AlAs наиболее интенсивным является переход  $\underline{\tilde{X}}-\underline{X}$  между  $\underline{X}$ -долинами, волновые функции которых носят антисимметричный характер вблизи анионов. Переход  $\underline{\Gamma}-\underline{L}$  происходит с участием продольных LA- и LO-фононов с симметрией  $\underline{L}_1$ . В GaAs ввиду близости масс Ga и As, частот LA- и LO-фононов и условия нормировки векторов поляризации эффективный потенциал  $\underline{\Gamma}-\underline{L}$ -рассеяния также зависит только от электронных констант:  $|D_{\underline{\Gamma}\underline{L}}^{LO+LA}|^2 = |d_{\underline{\Gamma}\underline{L}}^{\text{Ga}}|^2 + |d_{\underline{\Gamma}\underline{L}}^{\text{As}}|^2$ . Для AlAs подобное объединение, вообще говоря, несправедливо из-за большого различия частот LA- и LO-фононов, возникшего за счет различия масс атомов Al и As. Для  $\underline{X}-\underline{L}$ -перехода TA-фононы с симметрией  $\underline{L}_3$  вносят малый вклад в рассеяние, а фононам с высокими частотами (LO, LA, TO) отвечают большие деформационные потенциалы.

Наименее вероятным, согласно теории, является рассеяние между  $\underline{L}$ -долинами, тогда как экспериментальное значение потенциала для этого канала сравнимо с потенциалами других переходов. Возможно, что данное расхождение связано с маскировкой  $\underline{\tilde{L}}-\underline{L}$ -перехода другими процессами рассеяния.

В сверхрешетке за счет реконструкции зонного и фононного спектров, а также изменения правил отбора для междолинных переходов число каналов рассеяния электронов значительно увеличивается. На рис. 3 приведена схема уровней в зоне проводимости SL с указанием симметрии участвующих в переходах фононов. Анализ векторов поляризации фононов показал, что переходы  $\underline{\Gamma}_1-M_5$ ,  $\underline{\Gamma}_3-M_5$ ,  $\underline{X}_1-X_3$  связаны в основном с колебаниями катионов. В переход  $\underline{\tilde{X}}_3-X_3$  наибольший вклад вносят колебания атомов мышьяка с частотой 7.055 THz. Переходы  $\underline{\Gamma}_1-X_1$ ,  $\underline{\Gamma}_1-X_3$ ,  $X_3-M_5$ ,  $\underline{\Gamma}_3-X_3$  происходят при участии колебаний атомов как катионов, так и мышьяка.

Рассмотрение электронных констант  $\mathbf{d}^\alpha(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}')$  позволяет сделать дополнительные выводы о роли электронной подсистемы в междолинных переходах, в том числе о парциальных вкладах в рассеяние от различных подрешеток. Соответствующие результаты приведены в табл. 4, где помеченные атомы Ga и As расположены в

**Таблица 4.** Электронные константы  $\mathbf{d}^\alpha(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}')$  для наиболее интенсивных переходов в зоне проводимости GaAs, AlAs и сверхрешетки  $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3$  ( $10^8$  eV/cm)

Переход	$ \mathbf{d}^\alpha $ GaAs		$ \mathbf{d}^\alpha $ AlAs		Переход	$ \mathbf{d}^\alpha \frac{\Omega_{\text{SL}}}{\Omega_{\text{SF}}} $ $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3$							
	Ga	As	Al	As		Ga <sub>1</sub>	Ga <sub>2</sub>	Ga <sub>3</sub>	Al	As <sub>1</sub>	As <sub>2</sub>	As <sub>3</sub>	As <sub>4</sub>
$\underline{\Gamma}-\underline{X}$	3.40	0	2.86	0	$\underline{\Gamma}_1-M_5 \cdot \sqrt{2}$	2.92	3.31	2.92	3.43	0.02	0.02	0.83	0.83
$\underline{\tilde{X}}-\underline{X}$	5.07	0	4.96	0	$\underline{\Gamma}_3-M_5 \cdot \sqrt{2}$	5.10	4.96	5.10	5.03	0.08	0.08	0.02	0.02
$\underline{\Gamma}-\underline{L}$	2.63	0.92	2.46	0.40	$\underline{\Gamma}_1-X_3$	3.20	3.08	2.80	3.64	0.90	0.75	0.58	0.90
					$\underline{\Gamma}_1-X_1$	2.68	1.84	1.96	0.53	0.70	1.56	0.53	1.67

**Таблица 5.** Междолинные деформационные потенциалы  $D_{nk,n'k'}^s$  в сверхрешетке (AlAs)<sub>1</sub>(GaAs)<sub>3</sub> ( $10^8$  eV/cm). В скобках указаны номера  $s$  участвующих в переходе фононов из табл. 2

Переходы с участием $M$ -фононов					Переходы с участием $R$ -фононов			
$\Gamma_1-M_5$	$\Gamma_3-M_5$	$\tilde{X}_1-X_3$	$\tilde{X}_1-X_1$	$\tilde{X}_3-X_3$	$X_3-Z_3$	$X_3-Z_1$	$X_1-Z_3$	$X_1-Z_1$
0.46 (1,2)	1.74 (9,10)	0.20 (1,2)	1.00 (11,12)	0.73 (18,19)	0.39 (5,6)	0.48 (7)	0.44 (5,6)	0.67 (8)
0.74 (4,5)	6.41 (16,17)	0.49 (16,17)	0.69 (18,19)		0.31 (7)	1.17 (9,10)	0.25 (8)	2.59 (9,10)
0.31 (9,10)	5.79 (20,21)	0.30 (20,21)			2.37 (9,10)	2.41 (12)	1.35 (9,10)	1.01 (11)
3.32 (16,17)	7.67 (23,24)	0.67 (23,24)			0.98 (12)	1.58 (13,14)	2.67 (11)	3.15 (13,14)
4.44 (20,21)					1.73 (13,14)	1.96 (15)	0.35 (13,14)	0.20 (19)
5.07 (23,24)					1.66 (15)	1.26 (20,21)	0.30 (19)	0.33 (20,21)
					0.34 (20,21)	2.40 (22)	1.57 (20,21)	0.62 (23)
					3.26 (22)		0.38 (23)	

Переходы с участием $X$ -фононов						Переходы с участием $A$ -фононов	
$\Gamma_1-X_3$	$\Gamma_3-X_3$	$\Gamma_1-X_1$	$\Gamma_3-X_1$	$M_5-X_1$	$M_5-X_3$	$M_5-Z_3$	$M_5-Z_1$
0.25 (3)	0.65 (10)	0.21 (8)	0.31 (8)	0.34 (7)	3.68 (11)	0.20 (1,2)	0.51 (1,2)
0.24 (7)	2.22 (12)	1.27 (11)	0.32 (9)	1.55 (10)	0.65 (14)	0.29 (3,4)	0.50 (3,4)
0.40 (10)	3.21 (18)	0.24 (14)	2.66 (11)	3.75 (12)	2.97 (17)	5.33 (9,10)	5.11 (9,10)
3.10 (12)	2.21 (22)	2.64 (19)	2.40 (14)	2.58 (16)	3.00 (19)	3.78 (11,12)	6.47 (11,12)
0.34 (13)		1.01 (21)	0.76 (19)	1.81 (20)	2.40 (23)	3.02 (20,21)	3.34 (20,21)
2.05 (18)		0.47 (23)	0.87 (21)	1.79 (24)		8.88 (23,24)	1.84 (23,24)
2.10 (20)			0.44 (23)				
3.51 (22)							

Переходы с участием $Z$ -фононов				Переходы с участием $\Gamma$ -фононов			
$\Gamma_1-Z_3$	$\Gamma_1-Z_1$	$\Gamma_3-Z_3$	$\Gamma_3-Z_1$	$\Gamma_1-\Gamma_3$	$X_3-X_1$	$M_5^{(1)}-M_5^{(2)}$	$Z_1-Z_3$
0.23 (10)	0.76 (7)	2.18 (7)	2.32 (10)	2.54 (14)	0.24 (5)	0.72 (11)	1.14 (11)
1.68 (12)	2.19 (11)	2.55 (21)	0.83 (12)	4.28 (15)	0.21 (7)	3.42 (14)	0.76 (14)
3.20 (20)	3.87 (17)		2.26 (20)	1.09 (21)	0.37 (16)	5.76 (15)	1.28 (15)
0.26 (24)	1.21 (21)		1.07 (24)	0.50 (24)	2.50 (19)	0.72 (21)	1.85 (21)
					1.42 (22)	4.81 (24)	1.57 (24)

последовательных монослоях, причем слой из атомов Al находится между слоями из атомов мышьяка As<sub>3</sub> и As<sub>4</sub>. Поскольку объем элементарной ячейки SL  $\Omega_{SL}$  в 4 раза больше объема сфалеритной ячейки  $\Omega_{Sf}$ , для удобства сравнения константы  $d^a(nk, n'k')$  SL были перенормированы на объем сфалеритной ячейки, а для переходов с участием вырожденного уровня  $M_5$  в константе, учитывающей вклады от двух вырожденных состояний, кроме того, был выделен множитель  $\sqrt{2}$ . Одним из наиболее интенсивных каналов рассеяния в SL является переход  $\Gamma_3-M_5$ , соответствующий наиболее интенсивному сфалеритному  $\tilde{X}-X$ -переходу. В отличие от бинарных кристаллов в деформационный потенциал  $\Gamma_3-M_5$  перехода дополнительный вклад вносят колебания атомов мышьяка, однако за счет малости электронных констант  $d^a(nk, n'k')$  этот вклад оказался незначительным. Это же имеет место и для  $\Gamma_1-M_5$ -перехода, являющегося аналогом сфалеритного  $\Gamma-X$ -перехода. Из сравнения следует, что смешивание  $\Gamma$ - и  $X$ -состояний в SL слабо повлияло на интенсивность переходов  $\Gamma_1-M_5$  и  $\Gamma_3-M_5$ . Гораздо сильнее проявилось смешивание состояний из  $L$ -долин. Сфалеритному  $\Gamma-L$ -переходу в SL отвечают переходы  $\Gamma_1-X_3$  и  $\Gamma_1-X_1$ . За счет  $\tilde{L}-L$ -смешивания

амплитуда волновой функции нижнего состояния  $X_3$  в квантовых ямах GaAs заметно возросла по сравнению с амплитудой функции  $L$ -состояния компонентов. Поэтому константа рассеяния на катионной подрешетке между нижними состояниями  $\Gamma_1-X_3$  оказалась больше констант  $\Gamma-L$ -перехода в GaAs и AlAs. Для перехода  $\Gamma_1-X_1$  потенциалы, напротив, несколько уменьшились, но при этом колебания атомов мышьяка стали играть роль, сравнимую с ролью колебаний катионов.

Результаты расчета междолинных деформационных потенциалов в SL для каналов, у которых  $|D_{nk,n'k'}^s| > 0.2 \cdot 10^8$  eV/cm, приведены в табл. 5. Из нее следует, что рассеяние между  $\Gamma_1$ - и  $M_5$ -долинами происходит главным образом с участием фононов с частотами 6.527, 7.131 и 10.61 THz. Анализ векторов поляризации показал, что фононам с частотами 6.527 и 7.131 THz отвечают в основном колебания атомов Ga, а фонону с частотой 10.61 THz — колебания атомов Al. Более интенсивное рассеяние вызывают колебания легких атомов Al. Эти же фононы участвуют в переходе между долинами  $\Gamma_3$  и  $M_5$ . Среди новых каналов выделяется интенсивный переход с максимальным потенциалом  $8.88 \times 10^8$  eV/cm между близкими по энергии

**Таблица 6.** Междолинные деформационные потенциалы  $|D_{nk,n'k'}^s|$  в GaAs, AlAs и усредненные по фононам деформационные потенциалы в виртуальном кристалле и сверхрешетке ( $10^8$  eV/cm)

Переход	Фонон	GaAs	AlAs	БК	Переход	SL
$\underline{\Gamma}-\underline{X}$	$X(LO)$	4.91	5.58	5.11	$\Gamma_1-M_5$	$5.35 \cdot \sqrt{2}$
					$\Gamma_1-\Gamma_3$	5.12
$\underline{X}-\underline{X}$	$X(LO)$	7.31	9.64	7.89	$\Gamma_3-M_5$	$8.26 \cdot \sqrt{2}$
					$M_5^{(1)}-M_5^{(2)}$	8.30
$\underline{\Gamma}-\underline{L}$	$L(LA)$	2.51	0.80	4.22	$\Gamma_1-X_3$	5.56
	$L(LO)$	3.14	4.76		$\Gamma_1-X_1$	3.15
$\underline{L}-\underline{L}$	$X(LO+LA)$	0.77	0.39	0.65	$X_3-X_3$	0.73
					$X_1-X_1$	1.21
					$X_1-X_3$	0.90
					$X_3-X_1$	2.92
$\underline{X}-\underline{L}$	$L(LA)$	2.64	2.87	4.05	$X_1-M_5$	$3.85 \cdot \sqrt{2}$
	$L(LO)$	1.47	1.52		$X_3-M_5$	$4.33 \cdot \sqrt{2}$
	$L(TA)$	0.10	0.13		$\Gamma_3-X_1$	3.82
	$L(TO)$	2.73	2.34		$\Gamma_3-X_3$	4.53

долинами  $M_5$  и  $Z_3$ . В нем также участвуют колебания атомов Al с частотой 10.61 THz. Этому переходу соответствует сфалеритный переход из экстремума  $\underline{X}$ -долины в состояние, происходящее из другого луча звезды на линии  $\underline{\Delta}(0, 0, 3/4)$ .

Для удобства сравнения с результатами для бинарных кристаллов сверхрешеточные потенциалы для переходов, происходящих между одними и теми же зонами, но с участием различных фононов, были объединены в эффективные константы  $\left| \sum_s |D_{nk,n'k'}^s| \right|^{1/2}$ . В потенциалах с участием вырожденного состояния  $M_5$  снова был выделен множитель  $\sqrt{2}$ . Полученные эффективные деформационные потенциалы вместе с данными для компонент приведены в табл. 6. В сверхрешетке аналогами сфалеритного  $\underline{\Gamma}-\underline{X}$ -перехода являются два перехода  $\Gamma_1-M_5$  и  $\Gamma_1-\Gamma_3$ , имеющие близкие (в расчете на один канал) эффективные деформационные потенциалы. При этом переход  $\Gamma_1-\Gamma_3$  происходит между электронными состояниями с одним и тем же (или близкими) значением волнового вектора, поэтому в нем участвуют длинноволновые оптические колебания с симметрией  $\Gamma_3$ , которым в структуре сфалерита отвечает коротковолновый  $\underline{X}$ -фонон. Для расчета деформационных потенциалов  $\Gamma_1-\Gamma_3$ -перехода использовались электронные и фононные состояния из ближайшей окрестности экстремумов. Потенциалы этого перехода с участием различных фононов приведены в табл. 5. Была установлена слабая зависимость данных потенциалов от величины и направления волнового вектора фонона. Аналогичным образом были получены деформационные потенциалы и для переходов между двумя нижними состояниями

в зоне проводимости в точке  $X$  ( $X_3-X_1$ ) с участием длинноволновых оптических фононов с симметрией  $\Gamma_5$  и двумя состояниями в точках  $Z$  ( $Z_1-Z_3$ ) и  $M$  ( $M_5^{(1)}-M_5^{(2)}$ ) с участием оптических фононов с симметрией  $\Gamma_3$ . Здесь через  $M_5^{(1)}$  и  $M_5^{(2)}$  обозначены два почти вырожденных состояния вблизи одного экстремума. Вследствие слабого смешивания  $\underline{X}$ -состояния эффективные потенциалы переходов  $M_5^{(1)}-M_5^{(2)}$  в  $\Gamma_3-M_5$ , соответствующих сфалеритному  $\underline{X}-\underline{X}$ -переходу, близки друг к другу. С другой стороны, сильное смешивание  $\underline{L}$ -состояний привело к значительному различию эффективных потенциалов сверхрешеточных переходов  $\tilde{X}_3-X_3$ ,  $\tilde{X}_1-X_1$ ,  $\tilde{X}_1-X_3$  и  $X_3-X_1$ , являющихся аналогами сфалеритного перехода  $\tilde{L}-\underline{L}$ . Как и в бинарных кристаллах, они имеют наименьшую из всех переходов интенсивность за счет небольших значений электронных констант  $d^{\alpha}(nk, n'k')$ . Среди них наибольший потенциал ( $2.92 \cdot 10^8$  eV/cm) отвечает рассеянию между долинами  $X_3$  и  $X_1$  на длинноволновых оптических колебаниях.

В табл. 6 приведены также усредненные по фононам деформационные потенциалы для некоторых каналов рассеяния в твердом растворе  $(AlAs)_{0.26}(GaAs)_{0.75}$ . Они были вычислены в приближении ВК как для электронных, так и для фононных состояний. Деформационные потенциалы в твердом растворе практически совпадают со средневзвешенными значениями от потенциалов GaAs и AlAs, что объясняется линейной зависимостью блоховских функций ВК от состава. Они в целом согласуются и с усредненными по соответствующим каналам деформационными потенциалами SL, которые в большинстве случаев лишь ненамного их превосходят. Однако для нижних состояний переходы в SL для всех каналов более интенсивны, чем в твердом растворе. Вследствие сильного  $\underline{L}-\underline{L}$ -взаимодействия наиболее заметное различие ( $\sim 30\%$ ) имеет место между потенциалами  $\Gamma_1-X_3$ -перехода в SL и  $\underline{\Gamma}-\underline{L}$ -перехода в твердом растворе. В результате деформационный потенциал  $\Gamma_1-X_3$ -перехода оказался даже несколько больше потенциала  $\Gamma_1-M_5$ -перехода (в расчете на один канал), тогда как в компонентах SL более интенсивным является  $\underline{\Gamma}-\underline{X}$ -рассеяние.

У переходов  $\Gamma_3-X_3$ ,  $\Gamma_3-X_1$ ,  $X_3-M_5$ ,  $X_1-M_5$ , являющихся аналогами сфалеритного  $\underline{X}-\underline{L}$ -перехода, наибольшие значения деформационных потенциалов также имеют место для переходов в нижние  $X_3$ -состояния.

Для всех каналов рассеяния потенциалы, отвечающие низкочастотным фононам, как правило, меньше потенциалов с участием высокочастотных фононов. Поэтому с понижением температуры за счет „вымораживания“ фононов должно происходить уменьшение интенсивностей большинства переходов, что позволяет из их температурной зависимости определить парциальные вклады в потенциалы от акустических и оптических фононов.

Проведенное рассмотрение усредненных потенциалов в SL и твердом растворе демонстрирует связь параметров электрон-фононного взаимодействия в двух

системах. Однако оно носит в основном качественный характер, поскольку в нем пренебрегается значительным различием фоновых частот для большинства каналов. Поэтому при более точном описании междолинного рассеяния в SL необходимо использовать данные в табл. 2 и 5, а для нахождения фоновых состояний твердого раствора применять метод когерентного потенциала [20].

## 5. Заключение

Таким образом, в настоящей работе показано, что в сверхрешетке  $(AlAs)_1(GaAs)_3(001)$  вследствие близкого расположения конкурирующих долин и возросших значений деформационных потенциалов междолинное рассеяние электронов на фононах в нижней зоне проводимости носит более интенсивный, чем в GaAs, характер и поэтому должно наблюдаться в более слабых электрических полях. Эффекты смешивания наиболее существенно проявились в состояниях  $X_3$ , происходящих из сфалеритных  $L$ -долин, что усилило их роль по сравнению с  $L$ -долинами в GaAs. Наиболее интенсивные каналы рассеяния в сверхрешеточных переходах  $\Gamma_3-M_5$  и  $Z_3-M_5$  связаны с оптическими колебаниями легких атомов Al. Полученные деформационные потенциалы могут быть использованы для моделирования кинетических и оптических свойств сверхрешеток.

Авторы выражают признательность Г.Ф. Караваеву за полезные замечания.

## Список литературы

- [1] A.K. Sood, J. Menendez, M. Cardona, K. Ploog. Phys. Rev. Lett. **54**, 2111 (1985); З.С. Грибников, О.Э. Райчев. ФТП **23**, 2171 (1989); О.Э. Райчев. ФТП **25**, 1228 (1991); A. Mlayah, R. Carles, A. Sayari, R. Chtourou, F.F. Charfi, R. Planel. Phys. Rev. B **53**, 3960 (1996); I.A. Akimov, V.F. Sapega, D.N. Mirlin, V.M. Ustinov. Physica E **10**, 505 (2001).
- [2] P. Kinsler, R.W. Kelsall, P. Harrison. Superlatt. Microstruct. **25**, 163 (1999).
- [3] S. Guha, Q. Cai, M. Chandrasekhar, H.R. Chandrasekhar, H. Kim, A.D. Alvarenga, R. Vogelgesang, A.K. Rambas. Phys. Rev. B **58**, 7222 (1998).
- [4] O.E. Raichev. Phys. Rev. B **49**, 5448 (1994).
- [5] S.N. Grinyaev, G.F. Karavaev, V.G. Tyuterev. Physica B **228**, 319 (1996).
- [6] K.A. Mader, A. Zunger. Phys. Rev. B **40**, 10391 (1989).
- [7] С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваев. ФТП **31**, 545 (1997).
- [8] О.В. Ковалев. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. Наука, М. (1986).
- [9] K. Kunc, M. Balkanski, M.A. Nusimovici. Phys. Stat. Sol. (b) **72**, 229 (1975).
- [10] E. Molinari, A. Fasolino, K. Kunc. Superlatt. Microstruct. **2**, 397 (1986); G. Kannelis. Phys. Rev. B **35**, 746 (1987); L. Miglio, L. Colombo. Superlatt. Microstruct. **7**, 139 (1990); V.G. Tyuterev. J. Phys.: Cond. Matter **11**, 2153 (1999).
- [11] J.S. Blakemore. J. Appl. Phys. **53**, R123 (1982).

- [12] С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваев, В.Г. Тютереv, В.А. Чалдышев. ФТГ **30**, 2753 (1988).
- [13] С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваев, В.Г. Тютереv. ФТП **23**, 1458 (1989).
- [14] S. Zollner, S. Gopalan, M. Cardona. Appl. Phys. Lett. **54**, 614 (1989).
- [15] S. Adachi. J. Appl. Phys. **58**, R1 (1985).
- [16] A.R. Goni, A. Cantarero, K. Syassen, M. Cardona. Phys. Rev. B **41**, 10111 (1990).
- [17] И.Я. Карлик, Д.Н. Мирлин, В.Ф. Сапега. ФТП **21**, 1030 (1987).
- [18] J. Shah, B. Deveaud, T.C. Damen, W.T. Tsang, A.C. Gossard, P. Lugli. Phys. Rev. Lett. **59**, 2222 (1987).
- [19] R. Mickevicius, A. Reklaitis. Solid State Commun. **64**, 1305 (1987).
- [20] С.Н. Грейн, S. Zollner, M. Cardona. Phys. Rev. B **44**, 12761 (1991).