Взаимодействие электронов с полярными оптическими фононами в полупроводниковых сверхрешетках

© В.Г. Тютерев

Томский государственный педагогический университет,
634041 Томск, Россия

E-mail: vgt@phys.tsu.ru

(Поступила в Редакцию 16 апреля 2004 г.)

На основе микроскопической решеточно-динамической теории проведен численный расчет электрических потенциалов, создаваемых оптическими фононами в полупроводниковых сверхрешетках. Показано, что пространственное распределение амплитуд электрических потенциалов отличается от предсказываемого в популярной макроскопической модели диэлектрического континуума без дисперсии. Предложена модифицированная макроскопическая континуальная теория, которая учитывает дисперсию короткодействующих межатомных сил и позволяет получить аналитические выражения для потенциалов электрон-фононного взаимодействия.

Работа частично поддержана грантами президента РФ № НШ-1743.2003.2 и INTAS N 01-0458.

1. Введение

Полярные оптические колебания в полупроводниковых наноструктурах являются источником сильного электрон-фононного взаимодействия и поэтому важны для исследования процессов переноса носителей. Смещения ионов, участвующих в оптических колебаниях, создают в кристалле электрическую поляризацию. Возникающая при этом электрическая индукция в отсутствие свободных зарядов удовлетворяет условию $\nabla(\varepsilon\mathbf{E}) = 0$. В неоднородной среде, каковой является наноструктура, диэлектрическая проницаемость ε зависит от пространственной координаты; решения для электрических полей $\mathbf{E}$ и связанных с ними потенциалов получаются отличающимися от решений в объемном материале, что и является проявлением размерного квантования фононов. В простейшем варианте теории — так называемой модели диэлектрического континуума [1] — в пределах отдельного слоя гетероструктуры частотная зависимость диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega)$ принимается такой же, как в соответствующем объемном материале, где она определяется в свою очередь его фононным спектром. Потенциалы, полученные в каждом отдельном случае, сшиваются друг с другом из условия непрерывности на гетерограницах. Полученные решения разбиваются на два типа. Потенциалы первого типа связаны с объемно-подобными фононами, запертыми в пределах слоя. Они также заперты в пределах этого активного слоя и обращаются в нуль на гетерограницах. Потенциалы второго типа, локализованные вблизи гетерограниц, ассоциируются с колебаниями интерфейса.

Принципиальная трудность, возникающая в модели диэлектрического континуума [1], состоит в несовместимости граничных условий для электрической и механической компонент огибающей функции фононного поля на межслоевых границах. Амплитуды механических смещений для запертых объемно-подобных фононов оказываются в этой модели разрывными. Электростатический вклад составляет только $\sim 10\%$ от энергии фонона, что в определенной степени ставит выводы модели диэлектрического континуума под сомнение [2]. С другой стороны, требование непрерывности механической компоненты приводит к разрывности уже потенциалов, а также к отсутствию интерфейсных потенциалов [3]. Попытки разрешения этой проблемы путем учета дисперсии короткодействующих межатомных сил в рамках модели диэлектрического континуума [3,4] приводят к неоправданному усложнению теории. В связи с этим в настоящее время большинство работ по исследованию процессов переноса выполнено на основе модели диэлектрического континуума [5] без учета дисперсии короткодействующих межатомных сил.

2. Микроскопический расчет потенциалов электрон-фононного взаимодействия в сверхрешетке $AlAs_nGaAs_m$ [001]

В [6] нами показано, что электрические поля фононов могут быть непосредственно вычислены на основании микроскопической теории.

Спектр фононов в сверхрешетке (рис. 1) рассчитывался нами в феноменологической модели зарядов на связи [7]. Структура $AlAs_nGaAs_m$ [001] преобразуется по группе симметрии D_{2d}^5, если $n+m=2p$, и по группе D_{2d}^9, если $n+m=2p+1$. Классификация длинноволновых колебаний по симметрии зависит от общего числа монослоев в элементарной ячейке. Разложение колебательного представления в точке Γ может содержать одномерные полносимметричные представления Γ_1, одномерные представления Γ_3, преобразующиеся как z-компонента вектора, и двумерные представления Γ_5, преобразующиеся как x, y-компоненты. Число различных неприводимых представлений определяется

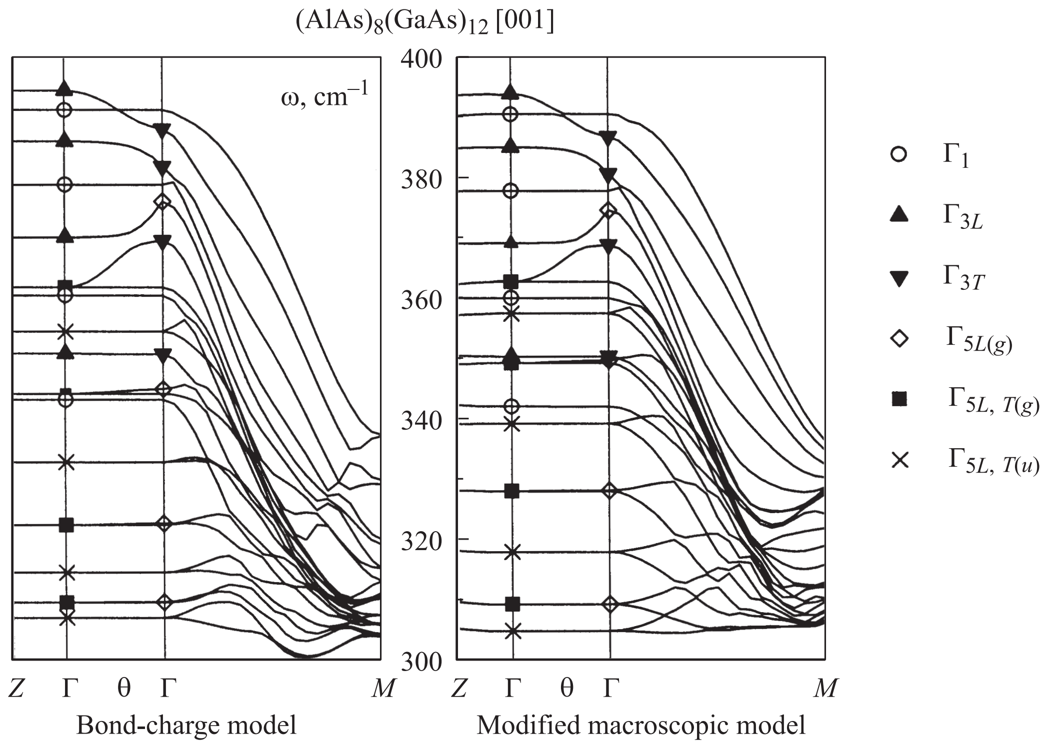

Рис. 1. Частоты AlAs-подобных фононов в сверхрешетке $(\mathrm{AlAs})_8(\mathrm{GaAs})_{12}$ [001] в двух симметричных направлениях $Z(0, 0, \pi/D)$, $M = (\pi/a, 0, 0)$. $D = 10a$ — период сверхрешетки, a — постоянная решетки цинковой обманки. В центральной части ($\Gamma{-}\Gamma$) показаны зависимости частот длинноволновых фононов $\mathbf{q} \to 0$ от угла $0 \le \theta \le \pi/2$ между волновым вектором и направлением оси роста сверхрешетки z. Слева — микроскопическая модель зарядов на связи, справа — расчет в модифицированной континуальной теории с учетом дисперсии короткодействующих сил. Даны обозначения неприводимых представлений в центре зоны Бриллюэна.

полным числом монослоев в элементарной ячейке конкретной сверхрешетки.

Расчет показывает, что в структуре $\mathrm{AlAs}_n\mathrm{GaAs}_m$ [001] смещения ионов, соответствующие оптическим колебаниям, оказываются локализованными в пределах отдельных подслоев (субъячеек) $(\mathrm{AlAs})_n$ либо $(\mathrm{GaAs})_m$, а относящиеся к разным подслоям частоты фононов разнесены по энергиям. Число представлений, по которым преобразуются длинноволновые фононы в активной субъячейке, определяется числом N_c монослоев в ней. Если $N_c = 2m$, разложение для фононов, относящихся к этому слою, имеет вид $\Gamma = m(\Gamma_1 + \Gamma_3 + 2\Gamma_5)$. Если $N_c = 2m + 1$, разложение для фононов, относящихся к такому подслою, имеет вид $\Gamma = m\Gamma_1 + (m+1)\Gamma_3 + (2m+1)\Gamma_5$. Расчет [6] показывает, что величина $\mathbf{s}^n = p_n M_n \mathbf{u}^n$ плавно изменяется с номером иона n и выступает в качестве огибающей функции для оптических колебаний. Здесь $p_n = z^n/Z^n$ — знак заряда иона, $Z^n = |z^n|$ — его величина, M_n — масса иона.

Огибающая оптических смещений ионов для фононов с симметрией Γ_1 имеет только компоненту, параллельную оси роста сверхрешетки z, и является нечетной функцией относительно центра активного подслоя. Для фононов Γ_3 огбающая смещений также содержит только z-компоненту, $\mathbf{s}^n$ — четная функция. Для двумерного представления Γ_5 смещения направлены в плоскости xy, перпендикулярной оси роста. Их можно подразделить на два типа: $\Gamma_{5(g)}$ с четными $\mathbf{s}^n$ и $\Gamma_{5(u)}$, для которых смещения нечетные.

Частоты колебательных мод типа Γ_1 в длинноволновом пределе от направления вектора $\mathbf{q}$ не зависят.

Фононы с симметрией Γ_1 независимо от направления волнового вектора создают потенциалы, амплитуды которых являются периодическими (с периодом сверхрешетки) функциями, четными относительно центра активного слоя (AlAs_n на рис. 2). Полей макроскопического пространственного масштаба изменения они не создают.

Частоты колебательных мод типа Γ_3 в длинноволновом пределе обладают ярко выраженной зависимостью от направления волнового вектора, которая является аналогом продольно-поперечного ($L{-}T$) расщепления оптических мод в кубических материалах. Потенциалы, создаваемые фононами с симметрией Γ_3, — нечетные функции относительно центра активного слоя (рис. 2). Они обладают существенной (неаналитической) зависимостью от направления волнового вектора. Распространяясь в направлении $\mathbf{q} \perp z$, эти фононы являются поперечными Γ_{3T}, они создают периодические потенциалы с периодом сверхрешетки (локальные поля).

Распространяясь в направлении $\mathbf{q} \parallel z$, фононы этой симметрии являются продольными Γ_{3L}. Наряду с локаль-

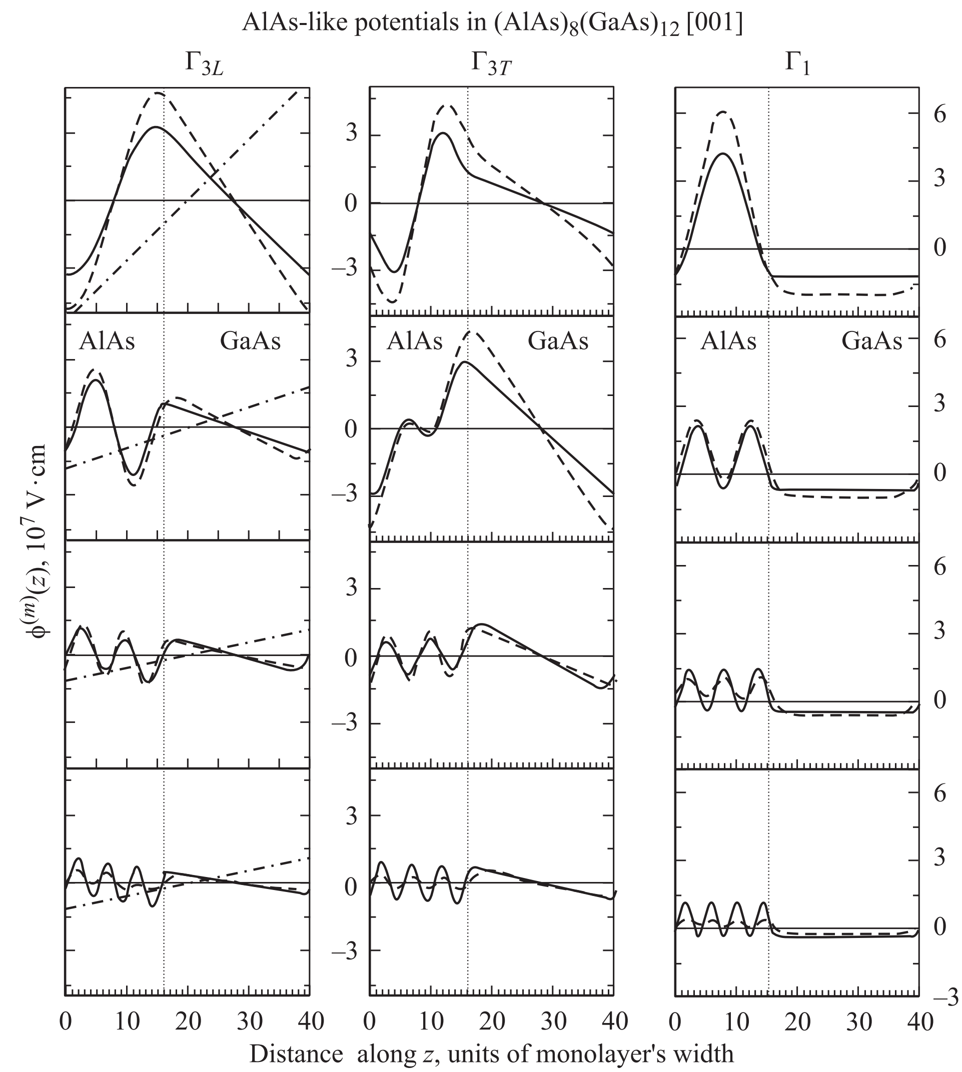

Рис. 2. Периодическая часть амплитуды электрических потенциалов, создаваемых длинноволновыми фононами. Штриховые линии — микроскопический расчет, сплошные — модифицированная континуальная теория. Для фононов Γ_{3L}, соответствующих распространению фонона в направлении $\mathbf{q} \parallel z$, показана также макроскопическая компонента (штрихпунктир).

ными полями они создают также вклад, имеющий макроскопический пространственный масштаб изменения. Макроскопическое электрическое поле $\mathbf{E}_{\text{macr}}$ направлено вдоль оси z.

В направлении $\mathbf{q} \parallel z$ все фононы Γ_5 являются поперечными, частоты двукратно вырождены, электрические поля такими фононами не создаются. Для длинноволновых фононов $\Gamma_{5(g)}$ с $\mathbf{q} \perp z$ имеет место $L{-}T$-расщепление $\Gamma_{5(g)} \to \Gamma_{5L(g)} + \Gamma_{5T(g)}$. Продольные фононы с частотой $\Gamma_{5L(g)}$ создают макроскопическое поле $\mathbf{E}_{\text{macr}}$ в плоскости xy, ориентированное вдоль вектора $\mathbf{q} \perp z$. В длинноволновом пределе потенциалы, созданные этими фононами, от z не зависят. Фононы типа $\Gamma_{5(u)}$ остаются вырожденными, они не создают электрических полей, так же как и $\Gamma_{5T(g)}$.

Среднее значение потенциалов, создаваемых длинноволновыми фононами Γ_{3L}, $\Gamma_{5L(g)}$, зависит от волнового вектора фонона как q^{-1}; для Γ_1 это константа, зависящая от частоты фонона.

Как видно из рис. 2, форма потенциалов длинноволновых фононов существенно отличается от полученной в рамках теории бездисперсионного континуума [1–3]. Это касается прежде всего потенциалов типа Γ_3. В отличие от потенциалов теории [1–3] они принимают конечные значения на гетерогранице. Для фононов, смещения в которых локализованы в одном из слоев (AlAs на рис. 2), они создают значительные потенциалы также и в неактивном слое (GaAs на рис. 2), где для этих мод смещения ионов полностью отсутствуют. Потенциалы фононов типа Γ_1 локализованы в своем активном слое, однако и они имеют на гетерогранице ненулевые значения.

Поверхностные колебания в длинноволновом пределе не обнаруживаются, они проявляются только при конечных значениях волнового вектора фонона.

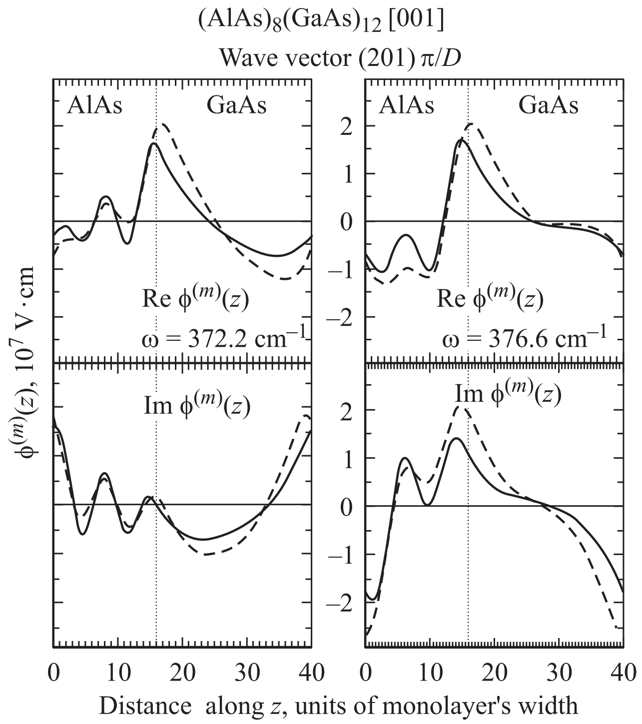

Рис. 3. Периодическая часть амплитуды электрических потенциалов двух коротковолновых AlAs-подобных фононов с $\mathbf{q} = (201)\pi/D$. Штриховые линии — макроскопический расчет, сплошные — модифицированная континуальная теория.

На рис. 3 приведены амплитуды потенциалов для двух коротковолновых AlAs-подобных фононов в той же сверхрешетке с волновым вектором $\mathbf{q} = (201)\pi/D$ (где D — период сверхрешетки) и частотами $\omega^{(3)}(\mathbf{q}) = 376.6\,\mathrm{cm}^{-1}$ и $\omega^{(5)}(\mathbf{q}) = 372.2\,\mathrm{cm}^{-1}$, порожденных длинноволновыми фононами Γ_3 и Γ_5 соответственно. Как видно из рисунка, при $q \neq 0$ интерфейсные колебания гибридизованы с объемными модами. С увеличением q амплитуды потенциалов уменьшаются и при $q \approx \pi/a$ (где a — постоянная решетки объемного материала) имеют значения, на порядок меньшие, чем в центре зоны.

Непосредственное применение результатов численного расчета для исследования процессов переноса непродуктивно, поскольку требует значительных вычислительных затрат. В то же время наш микроскопический расчет обнаруживает важные особенности потенциалов электрон-фононного взаимодействия, не находящие объяснения в упрощенных макроскопических теориях типа [1–3].

В следующем разделе предлагается иной макроскопический подход, объясняющий эти особенности, причем проблемы несовместимости граничных условий не возникает. Этот метод применен для расчета электрических потенциалов, создаваемых фононами с произвольной длиной волны в сверхрешетке типа $\mathrm{AlAs}_n\mathrm{GaAs}_m$ [001].

3. Электростатические потенциалы полярных колебаний в кристаллах с большой элементарной ячейкой: макроскопическая теория

Феноменологическое выражение для энергии колеблющейся кристаллической решетки в присутствии электрического поля запишем в виде [6]

$$W = \frac{1}{2}\sum_{nn'} \mathbf{u}^n \tilde{\Phi}_{nn'} \mathbf{u}^{n'} - \sum_n z^n \mathbf{u}^n \int \tilde{Q}_n(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}t) d\mathbf{r}$$
$$- \frac{1}{8\pi} \int \mathbf{E}(\mathbf{r}t)\, \tilde{\varepsilon}^{\infty}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{E}(\mathbf{r}'t) d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}'. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{u}^n$ — смещение иона в узле n кристаллической решетки, z^n — его заряд, $\mathbf{E}(\mathbf{r}t)$ — электрическое поле в точке $\mathbf{r}$, $\tilde{\varepsilon}^{\infty}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — высокочастотный диэлектрический тензор, $\Phi_{\alpha n, \alpha' n'}$ — силовая матрица короткодействующих сил, α, β — декартовы индексы; величина $z^n \sum_\alpha u^n_\alpha Q^n_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ определяет β-компоненту плотности дипольного момента, создаваемого при смещении n-го иона. Выше указывалось, что в структурах с большим числом частиц в элементарной ячейке величина $\mathbf{s}^n = p_n M_n \mathbf{u}^n$ плавно изменяется с номером n и выступает в качестве огибающей функции для оптических колебаний.

Поскольку смещения ионов $\mathbf{s}^n$ являются функциями дискретной переменной $\mathbf{r}_n$, а для полей предполагается континуальная зависимость от $\mathbf{r}$, возникает проблема перехода к континуальному пределу [8], которая может быть решена следующим образом. Определим некоторый набор функций $\{f_i(\mathbf{r})\}$ таким образом, чтобы они были локализованы в элементарной ячейке, причем выполнялось условие ортонормированности на дискретном наборе точек в виде

$$\Omega_a \sum_{n=0}^{n_0-1} f_i^*(\mathbf{r}_n) f_j(\mathbf{r}_n) = \delta_{ij}, \quad \Omega_a \sum_i^{n_0} f_i^*(\mathbf{r}_n) f_i(\mathbf{r}_{n'}) = \delta_{nn'}, \quad (2)$$

где $\mathbf{r}_n$ — равновесное положение иона, n_0 — число ионов в элементарной ячейке, Ω_a — объем, приходящийся на один атом, $i, j = 1, \ldots, n_0$. Переход к континуальному пределу для поля фононной поляризации будем понимать как стремление числа атомов n_0 в элементарной ячейке к бесконечности при сохранении объема элементарной ячейки $V_c = \mathrm{const}$, так что формально объем, приходящийся на атом, $\Omega_a \to 0$. Считаем $\mathbf{r}_n$ изменяющимся квазинепрерывным образом и заменяем суммирование интегрированием по правилу $\sum\limits_{n=0}^{n_0-1} \to \Omega_a^{-1} \int\limits_{V_c} d\mathbf{r}$. Предполагается, что функции $\{f_i(\mathbf{r})\}$ можно выбрать таким образом, чтобы в этом континуальном пределе выполнялось

$$\int\limits_{V_c} f_i^*(\mathbf{r}) f_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{ij}, \quad \sum_i^{n_0} f_i^*(\mathbf{r}) f_i(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3)$$

Удобно ввести функцию типа Ваннье („стандартные колебательные моды“)

$$F_{i\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = N_0^{-1/2} \sum_{\mathbf{L}} \exp(i\mathbf{qL})\, f_i(\mathbf{r} - \mathbf{L}). \tag{4}$$

Вектор $\mathbf{q}$ изменяется в первой зоне Бриллюэна; $\mathbf{L}$ — вектор прямой решетки, N_0 — число элементарных ячеек в кристалле. Атомные смещения на основании (2) представим в виде разложения

$$u_\alpha^n = \sqrt{\Omega_a}\, p_n \sum_{ii'} F_{i\mathbf{q}}(\mathbf{r}_n) \tau_{ii'}^{-1}(\mathbf{q}) S_{\alpha i'}(\mathbf{q})/M_n. \tag{5}$$

Здесь

$$S_{\alpha i}(\mathbf{q}) = \sum_{i'n} \mu_{ii'}^{-1}(\mathbf{q}) F_{i'\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}_n)\, s_\alpha^n. \tag{6}$$

Матрица $\tau_{ii'}(\mathbf{q})$ связана с положительно определенной массовой матрицей

$$\mu_{ii'}^{-1}(\mathbf{q}) = \Omega_a \sum_n F_{i\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}_n)\, M_n^{-1} F_{i'\mathbf{q}}(\mathbf{r}_{n'}) \tag{7}$$

соотношением $\tilde{\mu}^{-1}(\mathbf{q}) = \tilde{\tau}(\mathbf{q})\, \tilde{\tau}^+(\mathbf{q})$.

Производная $-\partial W/\partial u_\alpha^n$ определяет α-компоненту силы, действующей на ион n; электрическую индукцию в точке $\mathbf{r}$ определим как вариационную производную $\mathbf{D}(\mathbf{r}t) = -4\pi\delta W/\delta\mathbf{E}(\mathbf{r}t)$. Будем предполагать гармоническую зависимость $\exp(i\omega t)$ атомных смещений и полей по времени с частотой ω. Электрическое поле и индукцию представляем в виде разложения по (4) как по базису от непрерывной переменной. Тогда условие $\nabla\mathbf{D} = 0$ связывает коэффициенты разложения смещений и полей.

Классические уравнения движения для ионных смещений затем приводятся к виду

$$\sum_{\beta j} \big(\Theta_{\alpha i,\beta j}(\mathbf{q}) + W_{\alpha i,\beta j}(\mathbf{q})\big) S_{\beta j}^{(m)}(\mathbf{q}) = \omega_{(m)}^2(\mathbf{q})\, S_{\alpha i}^{(m)}(\mathbf{q}). \tag{8}$$

Матрица

$$\Theta_{\alpha i,\alpha' i'}(\mathbf{q}) = \Omega_a \sum_{jj'} \tau_{ij}(\mathbf{q}) \times \sum_{nn'} F_{j\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}_n) p_n \Phi_{\alpha\alpha'}^{nn'} p_{n'} F_{j'\mathbf{q}}(\mathbf{r}_{n'}) \tau_{j'i'}^+(\mathbf{q}) \tag{9}$$

обусловлена вкладом короткодействующих сил.

Вклад дальнодействующих сил на основании (3) записывается как

$$\tilde{W}(\mathbf{q}) = 4\pi\tilde{\xi}(\mathbf{q})\tilde{V}(\mathbf{q})\big(\tilde{1} + \tilde{\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{q})\tilde{V}(\mathbf{q})\big)^{-1}\tilde{\xi}^+(\mathbf{q}). \tag{10}$$

Здесь

$$V_{\alpha j,\alpha' j'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{F_{\alpha j\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) F_{\alpha' j'\mathbf{q}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\, d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}', \tag{11}$$

$$\xi_{\alpha i,\alpha' i'}(\mathbf{q}) = \sqrt{\Omega_a} \sum_{nj} \tau_{ij}(\mathbf{q}) F_{j\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}_n) p_n z^n \int Q_{\alpha\alpha'}^n(\mathbf{r}) F_{i'\mathbf{q}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \tag{12}$$

Матрица $\tilde{\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{q})$ описывает высокочастотную поляризацию

$$\kappa_{\alpha j,\alpha' j'}(\mathbf{q}) = \int F_{j\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) \varepsilon_{\alpha\alpha'}^\infty(\mathbf{r}, \mathbf{r}') F_{j'\mathbf{q}}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}' - \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{jj'}. \tag{13}$$

Входящие в (11) величины $F_{\alpha h\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ определяются как $F_{\alpha i\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \partial F_{i\mathbf{q}}(\mathbf{r})/\partial r_\alpha$. Уравнение (8) представляет собой задачу на собственные значения для нахождения частот колебаний решетки $\omega_{(m)}(\mathbf{q})$.

Для интересующих нас продольных полей в пренебрежении эффектами запаздывания $\mathbf{E}(\mathbf{r}t) = -\nabla\varphi(\mathbf{r}t)$ потенциал равен

$$\varphi(\mathbf{r}t) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\nabla\mathbf{E}(\mathbf{r}'t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\, d\mathbf{r}'. \tag{14}$$

После проведения стандартной процедуры квантования для атомных смещений (5) получаем для созданных ими потенциалов (14)

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{r}t) = N_0^{-1/2} \sum_{\mathbf{q}m} \varphi_{\mathbf{q}}^{(m)}(\mathbf{r}) \big(\tilde{a}_{m\mathbf{q}}^+(t) + \tilde{a}_{m\mathbf{q}}(t)\big), \tag{15}$$

$$\varphi_{\mathbf{q}}^{(m)}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2n_0\omega_{(m)}(\mathbf{q})}} \sum_{\alpha i} \phi_{\alpha i}(\mathbf{r}|\mathbf{q})\, S_{\alpha i}^{(m)}(\mathbf{q}). \tag{16}$$

Здесь $\tilde{a}_{m\mathbf{q}}^+(t)$, $\tilde{a}_{m\mathbf{q}}(t)$ — операторы рождения и уничтожения фононов, $\mathbf{S}^{(m)}(\mathbf{q})$ — собственные векторы (8), относящиеся к $\omega_{(m)}(\mathbf{q})$. Выражение (16) представляет собой разложение потенциала, созданного фононом с частотой $\omega_{(m)}(\mathbf{q})$, по некоторым „стандартным“ потенциалам $\phi_{\alpha i}(\mathbf{r}|\mathbf{q})$. Эти потенциалы, созданные „стандартными модами“ (смещения атомов направлены по оси α и их величины заданы функциями $F_{i\mathbf{q}}(\mathbf{r}_n)$), определяются выражением

$$\phi_{\alpha i}(\mathbf{r}|\mathbf{q}) = \sum_{\beta\beta' jj'} \int_V \frac{F_{\beta' j'\mathbf{q}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\, d\mathbf{r}' \times \big(\tilde{1} + \tilde{\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{q})\tilde{V}(\mathbf{q})\big)_{\beta' j',\beta j}^{-1} \xi_{\beta j,\alpha i}^*(\mathbf{q}). \tag{17}$$

4. Полярные колебания в полупроводниковых бинарных сверхструктурах

Будем предполагать, что элементарная ячейка сверхструктуры построена из частей (субъячеек), состоящих из различных материалов, которые будем нумеровать индексом c. Для бинарных материалов субъячейки содержат соответственно по $2N_c$ атомов, так что $n_0 = 2\sum_c N_c$.

В том случае, когда частоты $\bar{\omega}_1, \bar{\omega}_2$ длинноволновых поперечных оптических фононов в объемных материалах существенно различаются, как это имеет место, например, для GaAs и AlAs, оптические колебания в отдельных субъячейках сверхрешетки можно рассматривать независимо, что подтерждается и численным расчетом. Критерий применимости этого приближения $4\pi Z_c^2\left(\varepsilon^\infty\Omega_a\mu_c|\bar{\omega}_1^2-\bar{\omega}_2^2|\right)^{-1}\ll 1$. Здесь μ_c, Z_c — соответственно приведенная масса и величина заряда иона в субъячейке номера c.

В этом случае удобно выбрать функции $f_i(\mathbf{r})$ таким образом, чтобы набор (3) представлял собой объединение базисов $\sum_{\otimes c}\{f_{\lambda c}(\mathbf{r})\}$, при которых функции $f_{\lambda c}(\mathbf{r})$ отличны от нуля только в „своей“ субъячейке номера c.

Модель $\tau_{c\lambda,c\lambda'}(\mathbf{q})=\mu_c^{-1/2}\delta_{\lambda\lambda'}$, $\xi_{\alpha c\lambda,\alpha' c\lambda'}(\mathbf{q})=(\Omega_a\mu_c)^{-1/2}Z_c\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\alpha\alpha'}$, $\varepsilon^\infty_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}')=\varepsilon^\infty\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ соответствует приближению неполяризуемых ионов в сверхструктуре из материалов типа цинковой обманки с близкими значениями диэлектрической константы ε^∞, например GaAs/AlAs. В этой модели

$$W_{\alpha c\lambda,\alpha' c\lambda'}(\mathbf{q})=\frac{4\pi Z_c^2}{\varepsilon^\infty\Omega_a\mu_c}V_{\alpha c\lambda,\alpha' c\lambda'}(\mathbf{q}). \qquad (18)$$

5. Планарная геометрия

Сверхрешетка в континуальном приближении представляет собой периодическое повторение в направлении оси z перпендикулярного ей слоя $0<z\le D$ толщиной D, состоящего из двух слоев (субъячеек), изготовленных из бинарных материалов $c=1$ $(0<z\le d_1)$ и $c=2$ $(d_1<z\le D)$. Базис (2) удобно выбрать в виде $f_{c\lambda}(\mathbf{r})=S^{-1/2}\exp(i\mathbf{K}\boldsymbol{\rho})\psi_{cn}(z)$, где $\mathbf{K}$ и $\boldsymbol{\rho}$ направлены в плоскости слоя, т. е. $\mathbf{K},\boldsymbol{\rho}\perp z$; S — площадь слоя в плоскости, перпендикулярной оси z. Соответственно индекс $\lambda\equiv(n\mathbf{K})$ становится сложным. Зона Бриллюэна является одномерной, поэтому волновой вектор представляется в виде $\mathbf{q}=(\mathbf{K}k)$, его z-компонента k изменяется в пределах $-\pi/D\le k<\pi/D$.

Далее используем приближение, в котором колебания в отдельных слоях независимы. Для определения рассматривается слой $c=1$ $(0<z\le d_1)$. Рассматривая другой слой — $c=2$, достаточно соответствующим образом сместить начало координат $z_c=z-d_1$ и заменить $d_1\to d_2=D-d_1$. Поэтому все рассуждения не зависят от номера субъячейки и в последующих формулах там, где это не может вызвать недоразумения, индекс слоя у z_c, d_c опущен.

В „активной“ субъячейке $c=1$ в качестве $\psi_{cn}(z)$ удобно принять функции, обращающиеся в нуль вне подслоя $0\le z\le d$ и равные внутри него

$$\psi_n(z)=\sqrt{2/d}\,\sin(\pi nz/d). \qquad (19)$$

Здесь $n=1,\dots,N_c$, $2N_c$ — число атомных монослоев в субъячейке. Удобно направить одну из осей координатной системы, например y, вдоль вектора $\mathbf{K}$. Тогда из (11) следует, что $V_{xn\mathbf{K}'\beta n'\mathbf{K}''}(\mathbf{K}k)=0$, а для $\alpha,\beta=y,z$ матричные элементы не обращаются в нуль, только если $\mathbf{K}'=\mathbf{K}''=\mathbf{K}$; обозначим их как $V_{\alpha n\mathbf{K},\beta n'\mathbf{K}}(\mathbf{K}k)\equiv V_{\alpha\beta}(nn'|\mathbf{K}k)$. Расчет матричных элементов (11) сводится к вычислению выражения

$$V_{\alpha\beta}(mn|\mathbf{K}k)=\frac{1}{2KD}\sum_{L=-\infty}^{\infty}e^{ikLD}\int_0^d dz\,\Psi_\alpha^{m^*}(z,K)$$
$$\times\int_0^d dz'e^{-K|z-z'-LD|}\,\Psi_\beta^n(z',K). \qquad (20)$$

Здесь $K=|\mathbf{K}|$, L — целые числа, $\Psi_y^n(z,K)=iK\psi_n(z)$, $\Psi_z^n(z,K)=d\psi_n(z)/dz$. Вычисленные матричные элементы (20) приведены в Приложении 1.

„Стандартные“ потенциалы (16) в планарной геометрии записываются в блоховском виде

$$\psi_{\alpha n\mathbf{K}}(\mathbf{r}|\mathbf{q})=S^{-1/2}\exp(i\mathbf{K}\boldsymbol{\rho})\exp(ikz)$$
$$\times\frac{\bar{\varphi}_1}{\pi(\vartheta^2+n^2)}U_\alpha^{(n)}(z/\mathbf{K}k). \qquad (21)$$

Здесь $\vartheta=Kd/\pi$, $\bar{\varphi}_c=\frac{4\pi Z_c}{\varepsilon^\infty}\sqrt{2d_c/\Omega_a\mu_c}$, функции $U_\alpha^{(n)}(z|\mathbf{K}k)$ нами вычислены согласно (17) и приведены в Приложении 2.

Для расчета вклада короткодействующих сил (9) определим матрицу $\tilde{\Delta}_c(Q)$ размерности 3×3 таким образом, чтобы ее собственные значения воспроизводили спектр оптических фононов в объемном бинарном материале $c=1$ без учета полярной составляющей, т. е. так, как если бы они были неполярными. Такой спектр „неполярных“ фононов может быть получен с помощью данных микроскопической теории, соответствующая методика описана в [6]. Тогда матрица короткодействующих сил моделируется соотношением

$$\Phi^c_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_n,\mathbf{r}_{n'})=\frac{1}{N_0}\sum_Q\mu_c p_n\Delta^c_{\alpha\beta}(Q_x,Q_y,Q_z)p_{n'}$$
$$\times\exp\big(i\mathbf{Q}(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_{n'})\big), \qquad (22)$$

где $\mathbf{Q}$ изменяется в зоне Бриллюэна объемного бинарного кристалла. В матричные элементы (9) входит величина

$$\int_0^d\exp(-ikz)\psi_n(z)dz=\sqrt{2d}\,\frac{\pi n\big(1-(-1)^n e^{idk}\big)}{\big((kd)^2-(\pi n)^2\big)}. \qquad (23)$$

При $k\to\pm\pi n/d$ вклад от (23) в матричный элемент (9) максимален и равен $i\sqrt{d/2}$. Удерживая в (9) только эти главные члены, получим

$$\Theta_{\alpha n\mathbf{K},\alpha' n'\mathbf{K}'}\approx\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}\delta_{nn'}$$
$$\times\left\{\Delta^c_{\alpha\alpha'}\left(K_x,K_y,\frac{\pi n}{d}\right)+\Delta^c_{\alpha\alpha'}\left(K_x,K_y,-\frac{\pi n}{d}\right)\right\}. \qquad (24)$$

В этом приближении зависимость от продольной компоненты волнового вектора k отсутствует.

6. Точное решение в модели диэлектрического континуума

При пренебрежении дисперсией короткодействующих сил матрица (24) принимает вид

$$\Theta_{\alpha n\mathbf{K},\alpha' n'\mathbf{K}'}(\mathbf{K}k) = \overline{\omega}_c^2 \delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}\delta_{nn'}\delta_{\alpha\alpha'}. \qquad (25)$$

Здесь $\overline{\omega}_c^2$ — частота поперечного фонона в объемном материале из слоя c.

В континуальном пределе (8) представляет собой бесконечную систему уравнений, которая имеет точное решение. Детали решения сами по себе нетривиальны, расчет был проведен на языке Maple в оболочке Scientific Notebook и не может быть воспроизведен подробно в рамках журнальной статьи. Мы приведем лишь конечный результат.

Потенциалы представляются в блоховском виде

$$\varphi_{\mathbf{q}}^{(m)}(\mathbf{r}) = S^{-1/2}\exp(i\mathbf{K}\boldsymbol{\rho})\exp(ikz)\phi^{(m)}(z|\mathbf{K}k), \qquad (26)$$

$\phi^{(m)}(z + DL/\mathbf{K}k) = \psi^{(m)}(z|\mathbf{K}k)$, L — целые числа. Для фононов, оптические смещения которых $S_{\alpha n\mathbf{K}}^{(m)}(\mathbf{q})$ сосредоточены только в „активном“ слое $c = 1$ $(0 < z \le d)$, периодическая часть охватывает всю элементарную ячейку $0 \le z \le D$. Далее приведен вид периодической части потенциала $\phi^{(m)}(z|\mathbf{K}k)$ для таких фононов.

Решения представлены в виде $\phi^{(m)}(z|\mathbf{K}k) = \overline{\varphi}_1\left[\hbar/(2\omega_{(m)}(\mathbf{K}k))\right]^{1/2}\chi^{(m)}(z|\mathbf{K}k)$. Введем обозначения $\eta = KD$, $\xi = kD$, $\sigma = Kd/2$,

$$U_{\mathbf{q}}^{(\pm)} = \sqrt{\left(1 \pm H_{\mathbf{q}}/\sqrt{H_{\mathbf{q}}^2 + B_{\mathbf{q}}^2}\right)/2},$$

$$H_{\mathbf{q}} = \operatorname{ch} 2\sigma - \frac{\operatorname{sh}\eta \operatorname{sh} 2\sigma}{\operatorname{ch}\eta - \cos\xi}, \quad B_{\mathbf{q}} = \frac{\sin\xi \operatorname{sh} 2\sigma}{\operatorname{ch}\eta - \cos\xi}. \qquad (27)$$

Функция $\Theta(z, d) = 1$, если $0 \le z \le d$, и $\Theta(z, d) = 0$ при всех других значениях z.

1) Для данного слоя имеются два решения $m = (\pm)$, зависящие от направления распространения фонона $\mathbf{q} = (\mathbf{K}k)$:

$$\omega_{(\pm)}^2(\mathbf{K}k) = \overline{\omega}_1^2 + \frac{2\pi Z_1^2}{\mu_1\varepsilon^\infty\Omega_a}\left(1 \pm \sqrt{\frac{\operatorname{ch}(\eta - 2\sigma) - \cos\xi}{\operatorname{ch}\eta - \cos\xi}}\right), \qquad (28)$$

$$\chi^{(\pm)}(z|\mathbf{K}k) = \exp(-ikz)\frac{\sqrt{\operatorname{sh} 2\sigma/(2\sigma)}}{2(\operatorname{ch}\eta - \cos\xi)}$$
$$\times\left\{\left[U_{\mathbf{q}}^{(\pm)}\operatorname{ch}(Kz - \eta - \sigma) \pm i\frac{k}{|k|}U_{\mathbf{q}}^{(\mp)}\operatorname{sh}(Kz - \eta - \sigma)\right]\right.$$
$$\left. - e^{i\xi}\left[U_{\mathbf{q}}^{(\pm)}\operatorname{ch}(Kz - \sigma) \pm i\frac{k}{|k|}U_{\mathbf{q}}^{(\mp)}\operatorname{sh}(Kz - \sigma)\right]\right\}$$
$$+ \frac{1}{2}\exp(-ikz)\Theta(z, d)\operatorname{sh}(Kz - 2\sigma)$$
$$\times\left\{U_{\mathbf{q}}^{(\pm)}(\sigma \operatorname{th}\sigma)^{-1/2} \mp i\frac{k}{|k|}U_{\mathbf{q}}^{(\mp)}(\operatorname{th}\sigma/\sigma)^{-1/2}\right\}. \qquad (29)$$

Функции (29) с ростом K и k все более сильно локализуются вблизи межслоевой границы и представляют собой не что иное, как потенциалы колебаний интерфейса.

2) Дирекционно-независимым полярным решениеям $\omega_{l(m)}^2 = \overline{\omega}_1^2 + 4\pi Z_1^2/(\mu_1\varepsilon^\infty\Omega_a)$ с кратностью вырождения, равной бесконечности $m = 1, \dots, \infty$, соответствуют продольные оптические смещения ионов. Потенциалы, создаваемые этими колебаниями, не обращаются в нуль только в активном слое, в данном случае в слое $c = 1$, т.е. при $0 \le z \le d$, и там равны

$$\chi^{l(m)}(z|\mathbf{K}k) = i\Theta(z, d)$$
$$\times \exp(-ikz)\frac{4}{\sqrt{m^2 + \vartheta^2}}\sin(\pi mz/d). \qquad (30)$$

3) Дирекционно-независимым неполярным решениям $\omega_{t(m)}^2 = \overline{\omega}_1^2$ с кратностью вырождения, равной бесконечности $m = 1, \dots, \infty$, соответствуют поперечные оптические смещения ионов. Эти колебания не создают электрических полей.

Для фононов, смещения которых сосредоточены во втором слое $c = 2$ $(d < z \le D)$, решения имеют аналогичный вид. Их можно получить из (28)–(30) путем переноса начала координат $z' \to z - d$ с последующей заменой $d \to D - d$ и подстановкой объемных параметров фононного спектра для этого слоя $\overline{\omega}_2^2, \xi_2, \mu_2$.

Вычисленные поля (28)–(30) и смещения, приведенные в Приложении 3, полностью согласуются с картиной интерфейсных колебаний и их потенциалов (29) и объемно-подобных запертых колебаний и их полей (30), которые получены численно в континуальной модели в работах [1–4]. Заметим, что в аналитическом виде решения в континуальной модели, насколько нам известно, ранее не были получены. Анализ полученных решений показывает, что потенциалы (29) ведут себя неаналитическим образом при $\mathbf{q} \to 0$. Если в этом длинноволновом пределе $k \gg K$, то (29) — это поля макроскопического масштаба, охватывающие всю сверхрешетку. Если $k \ll K$, это локальные поля с периодом сверхрешетки. В предельном случае $d \to D \to \infty$ соотношения (28)–(30) переходят в известное выражение [9] для потенциалов рассеяния на длинноволновых полярных фононах в объемном материале кубической симметрии. Потенциалы (29), (30) непрерывны на границе слоев. Однако оптические смещения, как показывает расчет по формуле (5), для четных значений m оказываются разрывными, что соответствует выводам [2] о несовместимости граничных условий для механической и электродинамической компонент оптических колебаний в бездисперсионной континуальной модели. Для того, чтобы добиться одновременной непрерывности полей и смещений, необходим учет дисперсии короткодействующих сил [2,3].

7. Модель диэлектрического континуума, модифицированная учетом дисперсии короткодействующих сил

Для расчета спектра с учетом симметрии кристалла моделируем матрицу $\tilde{\Delta}^c(\mathbf{Q})$ в (22) соотношениями

$$\Delta^c_{xx}(\mathbf{Q}) = \bar{\omega}_c^2\big(1 + A(k)k_x^2 + B(k)(k_y^2 + k_z^2)\big),$$

$$\Delta^c_{yy}(\mathbf{Q}) = \bar{\omega}_c^2\big(1 + A(k)k_y^2 + B(k)(k_x^2 + k_z^2)\big),$$

$$\Delta^c_{zz}(\mathbf{Q}) = \bar{\omega}_c^2\big(1 + B(k)(k_x^2 + k_y^2) + A(k)k_z^2\big),$$

$$\Delta^c_{\alpha\beta}(\mathbf{Q}) = 2\bar{\omega}_c^2 G(k)k_\alpha k_\beta, \quad \alpha \neq \beta. \tag{31}$$

$A(k) = X_1 + X_2k^2 + X_3k^4$, $B(k) = X_4 + X_5k^2 + X_6k^4$, $G(k) = X_7 + X_8k^2 + X_9k^4$, где $\mathbf{k} = \mathbf{Q}a_c/2\pi$, a_c — постоянная решетки материала c. Поскольку в слое c имеется $3N_c$ степеней свободы оптических колебаний, размерность матрицы в (8) следует ограничить величиной $3N_c \times 3N_c$. Параметры объемного спектра в AlAs и GaAs выбраны путем сопоставления с рассчитанным в модели зарядов на связи спектром [6,7] ($Z_1 = Z_2 = 0.65\sqrt{\varepsilon^\infty}e_0$, $\varepsilon^\infty = 12$, $a_1 = a_2 = 5.65\,\text{Å}$, $M_{\text{Al}} = 26.98\,M_p$, $M_{\text{Ga}} = 69.72\,M_p$, $M_{\text{As}} = 74.92\,M_p$) и приведены в таблице.

Выбор базисных функций в виде (19) означает, что короткодействующие силы взаимодействия подслоев $(\text{AlAs})_n$ и $(\text{GaAs})_m$ не учитываются. Согласие с микроскопическим расчетом улучшается, если феноменологически учесть взаимодействие субъячеек путем введения в формулы Приложения 2 эффективной толщины „активного“ слоя $d_{\text{eff}} = d + \delta$. Для сверхрешетки $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_m$ [001] в пределах $n + m = 20$ для всех соотношений n, m равная степень согласия с численным расчетом достигается, если принять δ равной толщине одного монослоя.

На рис. 1 приведен спектр AlAs-подобных оптических фононов в сверхрешетке $(\text{AlAs})_8(\text{GaAs})_{12}$ [001] ($D = 56.5\,\text{Å}$, $d_{\text{eff}} = 37.67\,\text{Å}$), рассчитанный в микроскопической модели зарядов на связи (слева) и в макроскопической модели (8), (24), (31) (справа).

Как видно из этого рисунка, согласие в существенной для процессов рассеяния носителей заряда области $|\mathbf{q}| \le 2\pi/D$ весьма неплохое. Отклонения вблизи границы зоны Бриллюэна $|\mathbf{q}| \sim 2\pi/a$ более значительны и носят качественный характер, что неудивительно, поскольку формулы (31) правильно учитывают симметрию спектра объемных фононов только в пределе длинных волн.

При наличии дисперсии короткодействующих сил объемно-подобные моды (30) и моды интерфейса (29) смешиваются. В результате гибридизации непрерывными теперь являются как потенциалы, так и оптические смещения.

Полученные выводы иллюстрируются рис. 2, 3 на примере AlAs-подобных фононов в структуре $(\text{AlAs})_8(\text{GaAs})_{12}$ [001]. Потенциалы вычислены по формулам (16), (21) (см. также формулы в Приложении 2). Сплошными линиями показаны локальные компоненты потенциалов

$$\phi^{(m)}_{\text{loc}}(z\,|\mathbf{K}k) = \phi^{(m)}(z\,|\mathbf{K}k) - \bar{\phi}^{(m)}(\mathbf{K}k),$$

$$\bar{\phi}^{(m)}(\mathbf{K}k) = D^{-1}\int_0^D \phi^{(m)}(z\,|\mathbf{K}k)dz. \tag{32}$$

Для фононов типа Γ_{3L} существует также макроскопическая компонента потенциала $\phi^{(m)}_{\text{macr}}(z, k) = izk\bar{\phi}^{(m)}(0k)$, показанная на рис. 2 штрихпунктиром. Приведенные на рис. 2, 3 результаты являются типичными. Как видно, степень согласия между двумя теориями достаточно хорошая. Причины количественного расхождения связаны с тем, что в микроскопической модели заряда на связи эффективно учитывается высокочастотная поляризуемость среды, в то время как в макротеории мы ограничились приближением жесткого иона.

Согласие между микроскопическим расчетом и нашим вариантом континуальной теории для сверхрешеток $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_m$ [001] в пределах $n + m = 20$ для всех соотношений n, m, как четных, так и нечетных, находится на одинаковом уровне вплоть до $(\text{AlAs})_2(\text{GaAs})_{18}$ [001].

Параметры матрицы короткодействующих сил $\tilde{\Delta}$ в объемных материалах

Параметр	AlAs	GaAs
$\bar{\omega}$, cm^{-1}	364.39	271.36
X_1	−0.5637	−0.5441
X_2	0.2689	0.2110
X_3	−0.0256	−0.0097
X_4	−0.8293	−0.5771
X_5	0.7346	0.5385
X_6	−0.2001	−0.1535
X_7	−0.1514	−0.1672
X_8	0.1785	0.0369
X_9	−0.0518	0.0199

8. Заключение

Численный анализ в рамках реалистической модели межатомного взаимодействия показал, что пространственное распределение для амплитуд потенциалов взаимодействия электронов с оптическими фононами в сверхрешетке существенно отличается от предсказываемого в простой макроскопической теории бездисперсионного диэлектрического континуума [1–3]. Физическая причина расхождений связана с тем, что в простой макротеории принимается во внимание только дальнодействующая составляющая межатомных сил. Макроскопическая теория в развиваемом нами модифицированном подходе приводится в соответствие с численным расчетом только при дисперсии короткодействующей части межатомного взаимодействия.

Преимущество предложенной нами модифицированной макроскопической модели по сравнению с нашим же численным микрорасчетом состоит в том, что потенциалы электрон-фононного взаимодействия получены в аналитическом виде, более удобном для расчета вероятностей рассеяния, что соответственно упрощает исследование процессов переноса.

Следует отметить, что обнаруженные особенности поведения потенциалов должны оказаться существенными при учете рассеяния электронов между мини-зонами. Для процессов рассеяния внутри мини-зоны отличия от теории бездисперсионного континуума решающего значения не имеют, поскольку матричные элементы от потенциалов типа Γ_3 не вносят вклада из-за симметрии, а значения потенциалов типа Γ_1 на гетерогранице, как видно из рис. 2, невелики. Тем не менее наличие аналитических выражений для потенциалов электрон-фононного взаимодействия должно способствовать заметному сокращению объема вычислений и в этом случае.

Приложение 1. Матрица $V_{\alpha\alpha' jj'}(\mathbf{K}k)$ в планарной геометрии

Приведены только не обращающиеся в нуль внутрислоевые матричные элементы для $c = 1$.

$$V_{\alpha cm\mathbf{K}',\beta cn\mathbf{K}''}(\mathbf{q}) = V_{\alpha\beta}(mn|\mathbf{K}k)\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}''},$$

$$V_{yy}(mn|\mathbf{K}k) = f^{\mathbf{K}}_{mn}(s_{mn}\,t^{\mathbf{K}}_m R^m_{\mathbf{q}} - i a_{mn}B_{\mathbf{q}}) + \delta_{mn}\vartheta^2/(\vartheta^2 + m^2),$$

$$V_{zz}(mn|\mathbf{K}k) = f^{\mathbf{K}}_{mn}(-s_{mn}t^{\mathbf{K}}_m R^m_{\mathbf{q}} + i a_{mn}B_{\mathbf{q}}) + \delta_{mn}m^2/(\vartheta^2 + m^2),$$

$$V_{yz}(mn|\mathbf{K}k) = -f^{\mathbf{K}}_{mn}(s_{mn}\,t^{\mathbf{K}}_m B_{\mathbf{q}} + i a_{mn}R^m_{\mathbf{q}}) - (1-\delta_{mn}) \times 4imn\,\vartheta^2 a_{mn} \;/\; \big[\pi(\vartheta^2+m^2)|m^2-n^2|\big].$$

Здесь $V_{\alpha\beta}(mn|\mathbf{K}k) = V_{\beta\alpha}(mn|\mathbf{K}k)$. Помимо ранее введенных приняты обозначения

$$f^{\mathbf{K}}_{mn} = 2mn\,\vartheta \;/\; \big[\pi(\vartheta^2+m^2)(\vartheta^2+n^2)\big],$$

$$t^{\mathbf{K}}_m = \big(\operatorname{ch}2\sigma - (-1)^m\big) \;/\; \operatorname{sh}2\sigma,$$

$$s_{mn} = \big((-1)^m + (-1)^n\big) \;/\; 2, \quad R^m_{\mathbf{q}} = H_{\mathbf{q}} + (-1)^m,$$

$$a_{mn} = \big((-1)^m - (-1)^n\big) \;/\; 2.$$

Эрмитовость матрицы $V_{\alpha\beta}(mn|\mathbf{K}k)$ может быть проверена непосредственным вычислением.

Приложение 2. Собственные потенциалы фононов в планарной геометрии

Для расчета использованы формулы Приложения 4. При заданном выборе осей $U^{(n)}_x(z|\mathbf{K}k) = 0$,

$$U^{(n)}_y(z|\mathbf{K}k) = -i\,\frac{nS_n(\sigma)}{2(\operatorname{ch}\eta - \cos\xi)} \times \big(C_n(Kz-\sigma-\eta) - e^{i\xi}C_n(Kz-\sigma)\big) + i\Theta(z,d)\big\{(-1)^n n\operatorname{sh}(Kz-2\sigma) - \vartheta\sin(\pi nz/d)\big\},$$

$$U^{(n)}_z(z|\mathbf{K}k) = \frac{nS_n(\sigma)}{2(\operatorname{ch}\eta - \cos\xi)} \times \big(S_n(Kz-\sigma-\eta) - e^{i\xi}S_n(Kz-\sigma)\big) - \Theta(z,d)\big\{(-1)^n n\operatorname{ch}(Kz-2\sigma) + n\cos(\pi nz/d)\big\}.$$

Здесь $S_n(x) = \big(e^x - (-1)^n e^{-x}\big)/2$, $C_n(x) = \big(e^x + (-1)^n e^{-x}\big)/2$.

Приложение 3. Решение уравнения (8) в модели бездисперсионного диэлектрического континуума

Для расчета использованы формулы Приложения 4. Приведены собственные векторы $S^{(m)}_{\alpha n\mathbf{K}'}(\mathbf{q}) = S^{(m)}_{\alpha}(n|\mathbf{K}k)\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}$.

Дирекционно-зависимым частотам (28) соответствуют $S^{(\pm)}_\alpha(n|\mathbf{q}) = 2nr^{(\pm)}_\alpha(n|\mathbf{K}k)\sqrt{\vartheta t^{\mathbf{K}}_n/\pi} \;/\; (\vartheta^2+n^2)$. Величины $r^{(\pm)}_\alpha(n|\mathbf{K}k)$ для четных и нечетных n различны: $r^{(\pm)}_y(2m|\mathbf{q}) = iU^{(\pm)}_{\mathbf{q}}$, $r^{(\pm)}_z(2m|\mathbf{q}) = \mp i\,\frac{k}{|k|}\,U^{\pm}_{\mathbf{q}}$, $r^{(\pm)}_y(2m+1|\mathbf{q}) = \mp\frac{k}{|k|}\,U^{\pm}_{\mathbf{q}}$, $r^{(\pm)}_y(2m+1|\mathbf{q}) = -U^{(\pm)}_{\mathbf{q}}$. Для выбранного направления осей $r^{(\pm)}_x(n|\mathbf{K}k) = 0$.

Дирекционно-независимым полярным решениям $\omega^2_{l(m)}$ соответствуют собственные векторы

$$S^{(m)}_y(n|\mathbf{K}k) = \delta_{mn}\vartheta \;/\; \sqrt{m^2+\vartheta^2},$$

$$S^{(m)}_z(n|\mathbf{K}k) = (1-\delta_{mn})4imn\,a_{mn} \;/\; \big[(m^2-n^2)\sqrt{m^2+\vartheta^2}\,\big].$$

Неполярным решениям $\omega^2_{t(m)}$ соответствуют собственные векторы

$$S^{(m)}_y(n|\mathbf{K}k) = -(1-\delta_{mn})4imn\,a_{mn}/\big[(m^2-n^2)\sqrt{m^2+\vartheta^2}\,\big],$$

$$S^{(m)}_z(n|\mathbf{K}k) = \delta_{mn}\vartheta \;/\; \sqrt{m^2+\vartheta^2}.$$

Приложение 4. Некоторые соотношения, использованные при расчете

$$\sum_{n=1}^{\infty}(2n)^2 \,/\, \left(\vartheta^2+(2n)^2\right)^2$$
$$= \pi\left(2\,\mathrm{cth}(\pi\vartheta/2)+\pi\vartheta-\pi\vartheta\,\mathrm{cth}^2(\pi\vartheta/2)\right) \,/\, 16\vartheta,$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)^2 \,/\, \left(\vartheta^2+(2n+1)^2\right)^2$$
$$= \pi\left(2\,\mathrm{th}(\pi\vartheta/2)+\pi\vartheta-\pi\vartheta\,\mathrm{th}^2(\pi\vartheta/2)\right) \,/\, 16\vartheta,$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)^2 \,/\left[\left((2n+1)^2-(2m)^2\right)\left(\vartheta^2+(2n+1)^2\right)\right]$$
$$= \pi\vartheta\,\mathrm{th}(\pi\vartheta/2) \,/\, 4\left(\vartheta^2+(2m)^2\right),$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}(2n)^2 \,/\left[\left((2n)^2-(2m+1)^2\right)\left(\vartheta^2+(2n)^2\right)\right]$$
$$= \pi\vartheta\,\mathrm{cth}(\pi\vartheta/2) \,/\, 4\left(\vartheta^2+(2m+1)^2\right),$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)^2 \,/\, \Big[\left((2n+1)^2-(2m)^2\right)$$
$$\times\left((2n+1)^2-(2k)^2\right)\Big] = \delta_{mk}\pi^2 \,/\, 16,$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}(2n)^2 \,/\, \Big[\left((2n)^2-(2m)^2\right)$$
$$\times\left((2n)^2-(2k+1)^2\right)\Big] = \delta_{mk}\pi^2 \,/\, 16,$$

При $0 \le z \le d$ справедливы соотношения

$$\sum_{n=1}^{\infty} n\sin(2\pi nz/d) \,/\, \left((2n)^2+\vartheta^2\right)$$
$$= \pi\,\mathrm{sh}\left(\pi\vartheta(d-2z)/2d\right) \,/\, 8\,\mathrm{sh}(\pi\vartheta/2),$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)\sin\left(\pi(2n+1)z/d\right) \,/\, \left((2n+1)^2+\vartheta^2\right)$$
$$= \pi\,\mathrm{ch}\left(\pi\vartheta(d-2z)/2d\right) \,/\, 4\,\mathrm{ch}(\pi\vartheta/2).$$

Список литературы

[1] K. Huang, B. Zhu. Phys. Rev. B **38**, *18*, 13 377 (1988); G. Weber. Phys. Rev. B **46**, *24*, 16171 (1992).

[2] K.J. Nash. Phys. Rev. B **46**, *12*, 7723 (1992); M.P. Chamberlain, M. Cardona, B.K. Ridley. Phys. Rev. B **48**, *19*, 14 356 (1993).

[3] F. Comas, C. Trallero-Giner. Physica B **192**, 394 (1993); C. Trallero-Giner, F. Comas, G. Garcia-Moliner. Phys. Rev. B **50**, *3*, 1755 (1994); B.K. Ridley, O. Al-Dossary, N.C. Constantinou, M. Babiker. Phys. Rev. B **50**, *16*, 11 701 (1994).

[4] H. Rucker, E. Molinari, P. Lugli. Phys. Rev. B **44**, *7*, 3463 (1991).

[5] G.J. Warren, P.N. Butcher. Semicond. Sci. Technol. **1**, *2*, 133 (1986); I. Dharssi, P.N. Butcher. J. Phys.: Cond. Matter **2**, 119 (1990); F. Comas, F. Castro, J.L. Gondar. Physica B **239**, *3–4*, 370 (1997); V.G. Litovchenko, D.V. Korbutyak, S. Krylyuk, H.T. Grahn, K.H. Ploog. Phys. Rev. B **55**, 10 621 (1997); J. Pozela, A. Namajunas, K. Pozela, V. Juciene. Physica E **5**, *1–2*, 108 (1999); С.И. Борисенко. ФТП **38**, *2*, 207 (2004).

[6] V.G. Tyuterev. J. Phys.: Cond. Matter **11**, *9*, 2153 (1999).

[7] K.C. Rustagi, W. Weber. Solid State Commun. **18**, *6*, 673 (1976); G. Kannelis. Phys. Rev. B **35**, *2*, 746 (1987); E. Richter, D. Strauch. Solid State Commun. **64**, 867 (1987).

[8] B.A. Foreman. Phys. Rev. B **52**, *16*, 12 260 (1995).

[9] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972).