

01

Крайние геометрии и диэлектрический тензор сверхрешеток

© А.В. Гончаренко

Институт физики полупроводников НАН Украины, Киев

Поступило в Редакцию 2 февраля 2000 г.

С использованием формализма спектральной плотности предложено однопараметрическое обобщение выражений для диагональных компонент диэлектрического тензора сверхрешеток. Обобщение предполагает учет отклонения реальной геометрии сверхрешеток от идеальной.

В настоящее время для описания диэлектрических и оптических свойств сверхрешеток (СР) широкое распространение получил подход, основанный на представлении о СР как об одноосной эффективной среде [1–5]. В этом случае СР описывается диэлектрическим тензором

$$\langle \varepsilon \rangle = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Если сверхрешетка образована из плоскопараллельных слоев (квантовых ям и барьеров) и ось z перпендикулярна слоям, $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$. При этом диагональные компоненты диэлектрического тензора задаются соотношениями

$$\varepsilon_{xx} = f_1 \varepsilon_1 + f_2 \varepsilon_2 \quad (2)$$

и

$$\varepsilon_{zz}^{-1} = f_1 \varepsilon_1^{-1} + f_2 \varepsilon_2^{-1}, \quad (3)$$

где f_1 (f_2) и (ε_1) (ε_2) — объемная доля и диэлектрическая проницаемость первой (второй) составляющих СР соответственно. Заметим, что соотношение (2) имеет место для компоненты ε_{xx} и в $1D$ -случае, когда сверхрешетка образована квантовой проволокой, если считать, что ось x направлена вдоль проволоки. При этом, вообще говоря, $\varepsilon_{xx} \neq \varepsilon_{yy} \neq \varepsilon_{zz}$. Компоненты ε_{yy} и ε_{zz} должны зависеть от формы поперечного сечения проволоки, причем $\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz}$, если это сечение круглое.

Необходимо отметить, что уравнения (2)–(3) являются результатом рассмотрения геометрий, являющихся в некотором смысле крайними. Первая геометрия соответствует ориентации электрического поля вдоль плоскопараллельных слоев, ей отвечает параллельное включение емкостей. Вторая соответствует ориентации электрического поля перпендикулярно слоям, и ей отвечает последовательное включение емкостей. Показано [6–8], что такие геометрии задают верхнее и нижнее (Винеровские) граничные значения эффективной диэлектрической функции (или проводимости) системы.

В реальных $2D(1D)$ СР нельзя утверждать, что все квантовые ямы (провода) строго параллельны. Например, в $2D$ СР, как правило, имеют место интерфейсные шероховатости, вызванные проблемами технологического характера. Причем влияние этих шероховатостей на оптические спектры, даже в приближении длинных волн, может быть существенным (см. например, [9–11]). В корругированных СР, более того, интерфейсы имеют волнистую форму, образуемую преднамеренно. Идеальную квантовую проволоку вырастить еще труднее. Можно утверждать, что в реальных СР имеет место определенное отклонение от идеальной геометрии, что может повлиять на компоненты тензора $\langle \varepsilon \rangle$, а значит, и на диэлектрические и оптические свойства СР. Это означает, что измерив эти свойства экспериментально, при наличии соответствующей теоретической модели можно найти меру этого отклонения и в результате судить о качестве СР. Таким образом, можно сформулировать следующий вопрос, имеющий практическое значение: как формально учесть отклонение реальной геометрии СР от идеальной? Для решения этой задачи естественным выглядит введение некоторого малого феноменологического параметра, который мог бы рассматриваться как мера вышеупомянутого отклонения или качества СР. Ниже мы попытаемся решить поставленную задачу, используя формализм так называемого спектрального (Бергмановского) представления для компонент диэлектрического тензора [8,12]. Заметим, что в реальных СР могут проявляться и другие факторы, влияющие на оптические свойства и определенным образом ограничивающие прямое применение уравнений (2), (3). В качестве примера можно назвать наличие механических напряжений, дефектов, флуктуации состава. С другой стороны, в СР могут иметь место и факторы, связанные со своеобразием физики систем с пониженной размерностью, например, межподзонные переходы, электрон-фононное взаимодействие и др., что при определенных услови-

ях делает некорректным использование в уравнениях (2) и (3) объемных значений диэлектрической проницаемости слоев. Рассмотрение этих вопросов, однако, выходит за рамки настоящей работы.

В представлении Бергмана (см., например, [12]) эффективная диэлектрическая функция произвольного двухкомпонентного композита может быть представлена в виде

$$\langle \varepsilon \rangle = \varepsilon_1 \left(1 + f_2 \int_0^1 \frac{g(x)}{s+x} dx \right), \quad (4)$$

где $s = \varepsilon_1 / (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)$, $g(x)$ — неотрицательная функция спектральной плотности, определенная на отрезке $[0;1]$, удовлетворяющая так называемым правилам сумм

$$\int_0^1 g(x) dx = 1 \quad (5)$$

и

$$\int_0^1 xg(x) dx = (1 - f_2)/3. \quad (6)$$

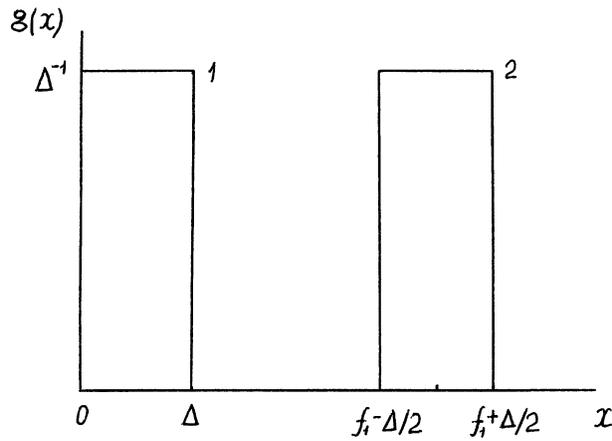
Показано [13], что уравнению (2) отвечает функция спектральной плотности вида

$$g_1(x) = \delta(x), \quad (7)$$

уравнению (3) — функция

$$g_2(x) = \delta(x - 1 + f_2) = \delta(x - f_1). \quad (8)$$

При наличии оптической анизотропии представление (4) применяется для компонент тензора $\langle \varepsilon \rangle$. Наша идея состоит в том, чтобы при рассмотрении реальных СР заменить дельта-функцию в выражениях (7) и (8) на некоторую близкую к ней функцию Φ , обладающую ненулевой полушириной Δ , причем должен выполняться предельный переход $\lim_{\Delta \rightarrow 0} \Phi(x) = \delta(x)$ или $\lim_{\Delta \rightarrow 0} \Phi(x) = \delta(x - 1 + f_2)$. Тогда Δ может рассматриваться как некий малый параметр ($\Delta \ll 1$), задающий меру отклонения реальной геометрии СР от идеальной. Наиболее простым примером такой функции Φ является функция-меандр, которая может



Функция спектральной плотности, соответствующая уравнениям 1 — (9), 2 — (10).

быть представлена в виде произведения двух единичных функций Хэвисайда χ . Тогда с учетом условия нормировки (5) функция спектральной плотности (7) обобщается до

$$g_1^*(x) = \frac{1}{\Delta} \chi(x) \chi(\Delta - x), \quad (9)$$

а функция (8) — до

$$g_2^*(x) = \frac{1}{\Delta} \chi\left(x - 1 + f_2 - \frac{\Delta}{2}\right) \chi\left(\frac{\Delta}{2} - x + 1 - f_2\right), \quad (10)$$

как указано на рисунке. Заметим, что в последнем соотношении должно выполняться условие $\Delta < \min(f_1, f_2)$. Подставляя (9) в (4), после несложного интегрирования получаем:

$$\frac{\langle \varepsilon \rangle_1^*}{\varepsilon_1} = 1 + \frac{f_2}{\Delta} \ln \left| 1 + \frac{\Delta}{s} \right|. \quad (11)$$

Разложение (11) в степенной ряд дает

$$\frac{\langle \varepsilon \rangle_1^*}{\varepsilon_1} = 1 + \frac{f_2}{s} - \frac{1}{2} f_2 \frac{\Delta}{s^2} + \frac{1}{3} f_2 \frac{\Delta^2}{s^3} + \dots = \langle \varepsilon \rangle_1 - \frac{1}{2} f_2 \frac{\Delta}{s^2} + \frac{1}{3} f_2 \frac{\Delta^2}{s^3} + \dots \quad (12)$$

Аналогично, подставляя (10) в (4), получаем

$$\frac{\langle \varepsilon \rangle_2^*}{\varepsilon_1} = 1 + \frac{f_2}{\Delta} \ln \left| \frac{s+1-f_2+\Delta/2}{s+1-f_2-\Delta/2} \right|. \quad (13)$$

В разложении (13) по степеням Δ первый не исчезающий член имеет порядок Δ^2 :

$$\frac{\langle \varepsilon \rangle_2^*}{\varepsilon_1} = 1 + \frac{f_2}{p} + \frac{1}{12} f_2 \frac{\Delta^2}{|p|^3} + \dots = \langle \varepsilon \rangle_2 + \frac{1}{12} f_2 \frac{\Delta^2}{|p^3|} + \dots, \quad (14)$$

где $p = s+1-f_2 = s+f_1$. Это может означать, что компонента ε_{zz} диэлектрического тензора менее подвержена изменениям при отклонении реальной геометрии СР от идеальной.

Как нетрудно убедиться, в тривиальном случае $\text{Im}(\varepsilon_1) = \text{Im}(\varepsilon_2) = 0$ неидеальность геометрии СР (т.е. $\Delta \neq 0$) ведет к снижению $\langle \varepsilon \rangle_1$ (или ε_{xx}) согласно уравнению (12) и возрастанию $\langle \varepsilon \rangle_2$ (или ε_{zz}) согласно уравнению (14), что согласуется с представлением о верхней и нижней Винеровских границах.

В заключение отметим, что наш подход выглядит корректным только для длиннопериодных сверхрешеток, поскольку мы полагаем, что $\varepsilon_1(\varepsilon_2)$ — объемные диэлектрические проницаемости составляющих СР. В случае короткопериодных СР, где в ИК области существенную роль может играть ограничение (локализация) оптических фононов (см., например, [3]) и/или носителей заряда в слоях, наш подход нуждается в некоторой модификации. Однако и в этом случае будут иметь место соотношения, подобные (2) и (3), но с видоизмененными значениями ε_1 и ε_2 . Так, при учете фононной локализации в соотношении (2) ε_1 и ε_2 могут быть заменены на

$$\varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon_1^\infty \left(1 - \sum_{lm} \frac{S_{Tlm}}{\omega^2 - \omega_{Tlm}^2} \right), \quad \varepsilon_2 \rightarrow \varepsilon_2^\infty \left(1 - \sum_{lm} \frac{S_{Tlm}}{\omega^2 - \omega_{Tlm}^2} \right), \quad (15)$$

а в соотношении (3) — на

$$\varepsilon_1 \rightarrow \left[\frac{1}{\varepsilon_1^\infty} \left(1 + \sum_{lm} \frac{S_{Llm}}{\omega^2 - \omega_{Llm}^2} \right) \right]^{-1}, \quad \varepsilon_2 \rightarrow \left[\frac{1}{\varepsilon_2^\infty} \left(1 + \sum_{lm} \frac{S_{Llm}}{\omega^2 - \omega_{Llm}^2} \right) \right]^{-1}, \quad (16)$$

где $\omega_{Tlm}(\omega_{Llm})$ и $S_{Tlm}(S_{Llm})$ — частоты и сила осцилляторов поперечных (продольных) локализованных оптических фононов соответственно [3].

Список литературы

- [1] *Agranovich V.M., Kravtsov V.E.* // Solid State Commun. 1985. V. 55. N 1. P. 85–90.
- [2] *Raj N., Tilley D.R.* // Solid State Commun. 1985. V. 55. N 4. P. 373–376.
- [3] *Dumelow T., Parker T.J., Smith S.R.P., Tilley D.R.* // Surf. Sci. Rep. 1993. V. 17. P. 151–212.
- [4] *Dumelow T., Tilley D.R.* // J. Opt. Soc. Am. A. 1993. V. 10. N 4. P. 633–645.
- [5] *Венгер Е.Ф., Гончаренко А.В., Горя О.С., Дмитрук Н.Л., Романюк В.Р.* // ЖПС. 1999. Т. 66. № 4. С. 460–466.
- [6] *Wiener O.* // Abh. d. Leipz. Akad. 1912. Bd. 32. S. 509–524.
- [7] *Смайт В.* Электростатика и электродинамика. М., 1954. 604 с.
- [8] *Bergman D.J.* // Phys. Rep. 1978. V. C43. N 9. P. 377–407.
- [9] *Molinari E., Baroni S., Giannozzi P., Gironcoli S.* // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. N 8. P. 4280–4288.
- [10] *Samson B., Dumelow T., Hamilton A.A., Parker T.J., Smith S.R.P., Tilley D.R., Foxon C.T., Hilton D., Moore K.J.* // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. N 4. P. 2375–2393.
- [11] *Dvoynenko M.M., Goncharenko A.V., Romaniuk V.R., Venger E.F.* // Superlatt. Microstr. 1999. V. 26. N 5. P. 333–342.
- [12] *Ghosh K., Fuchs R.* // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 8. P. 5222–5236.
- [13] *Goncharenko A.V., Lozovski V.Z., Venger E.F.* // Opt. Commun. 2000. V. 174. N 1–4. P. 19–32.