

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 Γ - X -смешивание. В частности, за счет L - L -смешивания переходы Γ_1 - X_3 , являющиеся аналогами сфалеритных Γ - L -переходов, имеют большую интенсивность, чем аналоги Γ - X -переходов (Γ_1 - M_5 , Γ_1 - Γ_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.

1. Введение

Полупроводники с многодолинной зонной структурой представляют значительный интерес для разработки быстродействующих 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 Γ - 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 Γ - X -рассеяния усиливается с ростом температуры, а величина междолинного деформационного потенциала близка к его значению в GaAs.

В работе [4] электронные Γ - 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 Γ - X -перехода, как и смешивание состояний на гетерограницах.

Однако в структурах GaAs/AlAs наряду с Γ - 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)₁(GaAs)₁(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)₁(GaAs)₃(001). В семействе SL (AlAs)_m(GaAs)_n(001) данной сверхрешетке отвечают наименьшие по толщине слои, начиная с которых реализуются SL типа I. Вследствие размерного квантования состояний из Γ -, X - и L -долин зона проводимости (AlAs)₁(GaAs)₃(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)₁(GaAs)₃(001)

В сверхрешетке (AlAs)₁(GaAs)₃ 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 Γ_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 Γ_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 (Γ_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)_{0.25}(GaAs)_{0.75}, „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)₁(GaAs)₃ это имеет место для состояний, происходящих из Γ - и L -долин BK, поскольку слой GaAs является достаточно „мощной“ квантовой ямой для Γ -состояний (глубиной 1.00 eV) и L -состояний (глубиной 0.56 eV). Их влияние проявилось в том, что уровень BK Γ 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 Γ_1 долине, чем L -долина к Γ -долине в GaAs (0.28 eV). С уменьшением толщины слоя GaAs взаимодействие между L -состояниями усиливается. Так, в монослойной сверхрешетке (AlAs)₁(GaAs)₁(001) расщепление между L -долинами достигает 0.40 eV [5]. В то же время для нижних X -состояний монослой AlAs

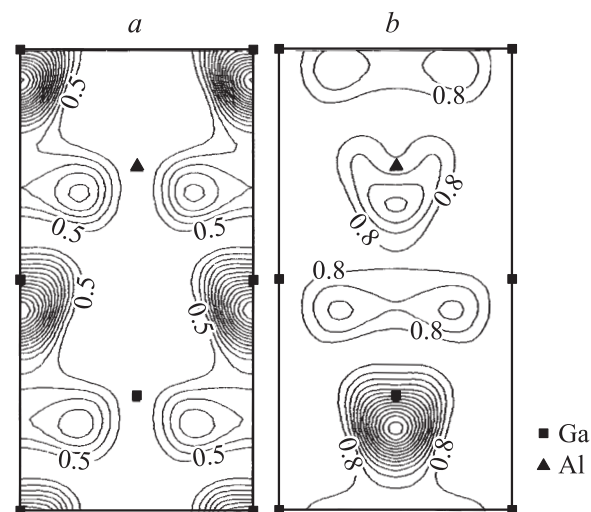


Рис. 1. Зарядовые плотности состояний X_3 (a) и X_1 (b) сверхрешетки в плоскости (001). Контуры плотности даны в единицах e/Ω_{SL} .

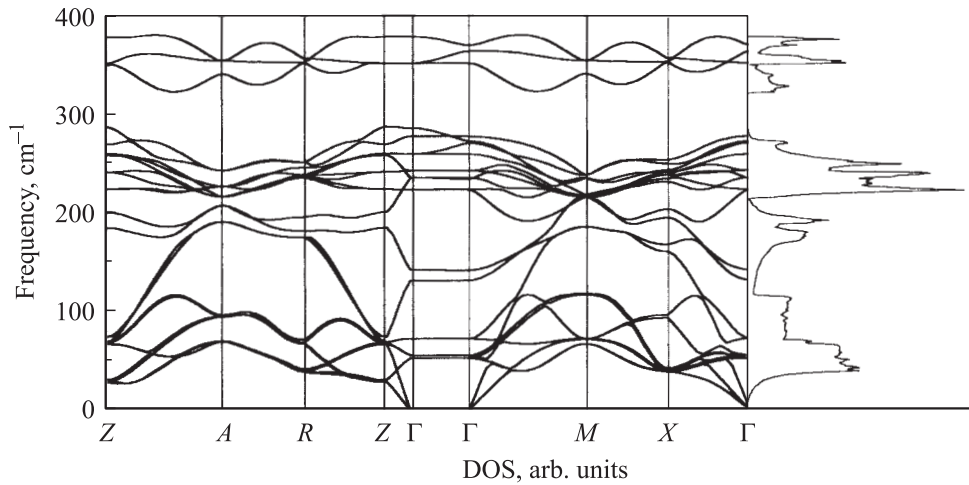


Рис. 2. Фононный спектр и плотность фононных состояний SL (AlAs)₁(GaAs)₃(001).

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 Γ_3 , происходящих из X -состояний ВК. Эти состояния имеют почти совпадающие энергии и за счет влияния непрямого компонента AlAs расположены к Γ_1 -долине значительно ближе (0.26 eV), чем X -долина к Γ -долине в GaAs (0.48 eV). Анализ волновых функций состояний Z_1 и Z_3 показал, что они построены из сфалеритных состояний на линии Δ

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 Γ_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 Γ_3 , M_5 и X локализованы вблизи анионов. При этом зарядовая плотность состо-

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

$s \setminus \mathbf{q}$	Γ	$\omega_s(\mathbf{q})$	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	Γ_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	Γ_3	0.000	M_2	2.144	X_3	1.170	Z_5	0.925	R_4	1.168	A_5	2.103
4	Γ_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	Γ_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	Γ_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	Γ_1	3.939		5.562	X_3	5.008	Z_3	2.213	R_3	5.247		5.717
11	Γ_3	4.254	M_1	6.458	X_1	5.826	Z_1	5.542	R_1	5.433	A_5	6.222
12	Γ_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	Γ_3	7.053	M_3	6.483	X_1	7.013		6.706	R_3	7.069	A_3	6.472
15	Γ_3	7.062	M_4	6.503	X_2	7.146	Z_5	7.234	R_3	7.107	A_4	6.472
16	Γ_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	Γ_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	Γ_1	8.323	M_5	7.131	X_3	7.481	Z_3	8.083	R_1	7.539	A_5	7.279
21	Γ_3	8.572		7.131	X_1	7.600	Z_1	8.628	R_3	7.539		7.279
22	Γ_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	Γ_3	11.35		10.61	X_4	10.68	Z_3	11.35	R_4	10.68		10.61

яний Γ_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_{α} — масса α -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

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

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 α -го атома, Ω — объем элементарной ячейки, \mathbf{r}_{α} — 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]

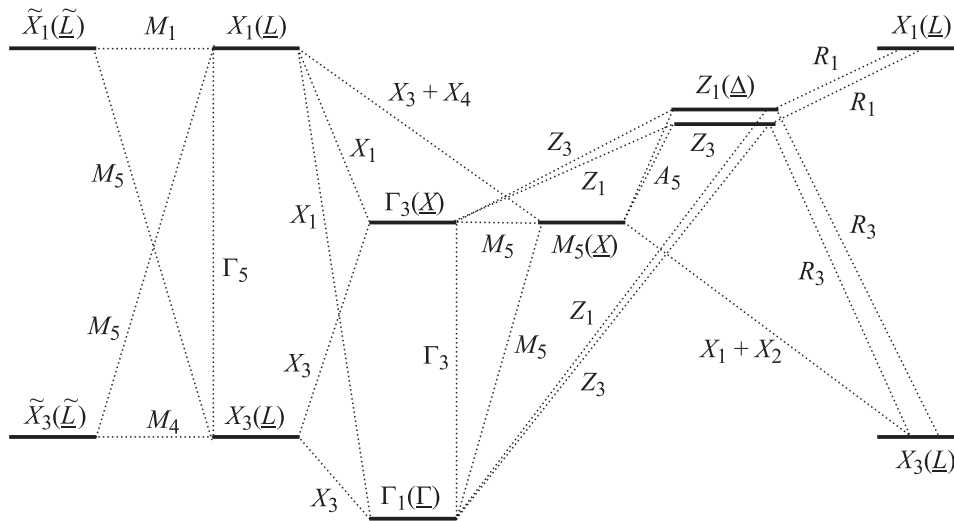


Рис. 3. Схема уровней и междолинных переходов в зоне проводимости SL $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3$. Симметрия фононов указана около пунктирных линий. В скобках приведены состояния ВК, из которых происходят состояния SL.

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 ₁	Ga ₂	Ga ₃	Al	As ₁	As ₂	As ₃	As ₄
$\underline{\Gamma}-\underline{X}$	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)₁(GaAs)₃ (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			
Γ_1-M_5	Γ_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	
Γ_1-X_3	Γ_3-X_3	Γ_1-X_1	Γ_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 Γ -фононов			
Γ_1-Z_3	Γ_1-Z_1	Γ_3-Z_3	Γ_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 As₃ и As₄. Поскольку объем элементарной ячейки SL Ω_{SL} в 4 раза больше объема сфалеритной ячейки Ω_{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 Γ_3-M_5 , соответствующий наиболее интенсивному сфалеритному $\tilde{X}-X$ -переходу. В отличие от бинарных кристаллов в деформационный потенциал Γ_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 Γ_1-M_5 -перехода, являющегося аналогом сфалеритного $\Gamma-X$ -перехода. Из сравнения следует, что смешивание Γ - и X -состояний в SL слабо повлияло на интенсивность переходов Γ_1-M_5 и Γ_3-M_5 . Гораздо сильнее проявилось смешивание состояний из L -долин. Сфалеритному $\Gamma-L$ -переходу в SL отвечают переходы Γ_1-X_3 и Γ_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 Γ_1-X_3 оказалась больше констант $\Gamma-L$ -перехода в GaAs и AlAs. Для перехода Γ_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 Γ_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 Γ_3 и M_5 . Среди новых каналов выделяется интенсивный переход с максимальным потенциалом 8.88×10^8 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	Γ_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	Γ_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	Γ_1-X_3	5.56
	$L(LO)$	3.14	4.76		Γ_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		Γ_3-X_1	3.82
	$L(TO)$	2.73	2.34		Γ_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 Γ_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 Γ_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 Γ_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 Γ_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 Γ_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 Γ_1-X_3 -перехода в SL и $\underline{\Gamma}-\underline{L}$ -перехода в твердом растворе. В результате деформационный потенциал Γ_1-X_3 -перехода оказался даже несколько больше потенциала Γ_1-M_5 -перехода (в расчете на один канал), тогда как в компонентах SL более интенсивным является $\underline{\Gamma}-\underline{X}$ -рассеяние.

У переходов Γ_3-X_3 , Γ_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 Γ_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).