

Властивості повного фононного спектра анізотропних одно- і тришарових вюрцитних наносистем

Ю.О. Сеті*, М.В.Ткач

Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, вул. Коцюбинського, 2, 58012 Чернівці, Україна

(Одержано 11.03.2017, у відредагованій формі – 03.04.2017, опубліковано online 30.06.2017)

На основі моделі діелектричного континууму Лоудона розвинена теорія фононного спектра одно- і тришарових анізотропних наносистем вюрцитного типу з дво- і трикомпонентними сполуками. Розраховано і проаналізовано енергетичні спектри обмежених, інтерфейсних, напівобмежених та поширювальних фононів. Показано, що специфічні властивості фононного спектра тришарової наносистеми є результатом своєрідної суперпозиції фононних спектрів двокомпонентної і трикомпонентної підсистем.

Ключові слова: Модель діелектричного континууму, Вюрцитна наносистема, Оптичні фонони.

DOI: 10.21272/jnep.9(3).03028

PACS numbers: 78.67.De, 63.20.Dj, 63.22. + m

1. ВСТУП

Фізичні характеристики нітридів III групи (сильний міжатомний зв'язок, велика ширина забороненої зони, температурна стабільність, значна оптична ефективність та інші) роблять їх перспективним матеріалом для створення оптоелектронних приладів. З цим пов'язана постійна увага дослідників до вивчення властивостей 3D та низькорозмірних наносистем (НС). Зокрема, на основі GaN, AlN, InN та їх потрійних сполук створені світловипромінюючі діоди та лазерні діоди [1], а з розвитком сучасного методу молекулярно-променевої епітаксії – квантові каскадні детектори і лазери інфрачервоного діапазону [2-4]. Актуальність цих приладів в тому, що вони можуть працювати у широкому температурному діапазоні (від криогенних до кімнатних), через що роль фононної підсистеми, здатної впливати на їх оптичні властивості, є значною.

Кристалічна ґратка нітридів III групи, зазвичай, має гексагональну структуру вюрциту [5], а фізичні характеристики таких матеріалів є анізотропними. Це спричиняє кардинальні відмінності між фононними спектрами анізотропних вюрцитних систем та ізотропних систем з кубічною структурою кристалічної ґратки [6].

Теорія фононного спектра в анізотропних (зокрема вюрцитних) 3D та низькорозмірних НС розвивалася у моделі діелектричного континууму Лоудона [6]. У перших роботах [7, 8] цього напрямку вивчалися властивості фононних спектрів найпростіших одношарових НС зі структурою вюрциту. У цих роботах вперше була встановлена принципова відмінність фононних спектрів анізотропних від ізотропних НС. Виявилось, що анізотропія вюрцитних НС приводить до виникнення в них не трьох, як у ізотропних НС, а чотирьох типів фононів - інтерфейсних (I), обмежених (С), напівобмежених (HS) та поширювальних (P), особливістю яких є те, що енергії всіх їх гілок залежать від хвильового вектора.

У переважній більшості робіт, що стосувалися квазідвомірних НС, вивчалися спектри окремих типів фононів (інтерфейсних [9, 10], обмежених

[11, 12], поширювальних [13, 14]). При цьому, в основному, розглядалися одно- та двошарові симетричні та несиметричні НС, або періодичні структури – надґратки [15, 16]. Оскільки метою цих робіт було вивчення загальних властивостей фононного спектра, а також електрон-фононної взаємодії [17, 18] з отриманням відповідного гамільтоніана у зображенні вторинного квантування за фононними змінними, а в деяких роботах [19, 20] - розрахунок ймовірностей квантових переходів між електронними станами з використанням золотого правила Фермі, то фізичні та геометричні параметри шарів НС, як правило, вибиралися із загально-фізичних міркувань. Лише у невеликій кількості робіт (наприклад [7, 8, 17-19]) вивчалися фононні спектри НС з кількома типами фононів одночасно. Зокрема у роботі [7] досліджувалися всі чотири типи фононів у симетричній одношаровій бінарній наноплівці (GaN) у бінарних (AlN) і потрійних (AlGaIn) середовищах.

Метою пропонованої роботи є послідовний і детальний розвиток теорії всіх типів фононних спектрів анізотропної тришарової НС вюрцитного типу (AlN/GaN/AlN/Al_xGa_{1-x}N/AlN), яка є важливим складовим елементом окремого каскаду недавно створеного [21] квантового каскадного детектора ближнього інфрачервоного діапазону. Одночасно вивчались фононні спектри складових підсистем цієї складної НС, отримується можливість встановити нові специфічні властивості спектра фононів, які в подальшому проявлятимуться у характері електрон-фононної взаємодії та в перенормуванні електронного спектра.

Структура роботи така. У другому розділі викладено основні позиції теорії енергетичних спектрів та потенціалів поля поляризації всіх чотирьох типів (I, C, HS, P) оптичних фононів у багатошаровій анізотропній вюрцитній НС. У третьому розділі детально проаналізовані спектральні властивості фононів трьох НС: двох одношарових з бінарною (GaN) і потрійною (Al_xGa_{1-x}N) сполуками та одній тришаровій (GaN/AlN/Al_xGa_{1-x}N), з відповідними геометричними параметрами активної зони, екстрактора та окремого каскаду квантового каскадного детектора [21].

* j.seti@chnu.edu.ua

2. ПОТЕНЦІАЛИ ПОЛЯ ПОЛЯРИЗАЦІЇ ТА ЕНЕРГЕТИЧНІ СПЕКТРИ ОПТИЧНИХ ФОНОНІВ У АНІЗОТРОПНІЙ НАНОСИСТЕМІ ВЮРЦИТНОГО ТИПУ

Розглядається багат шарова плоска НС з середовищами вюрцитного типу, геометрична схема якої зображена на рис. 1. Вісь oz декартової системи координат направлена вздовж кристалографічної осі c , перпендикулярно до меж поділу між шарами наноструктури.

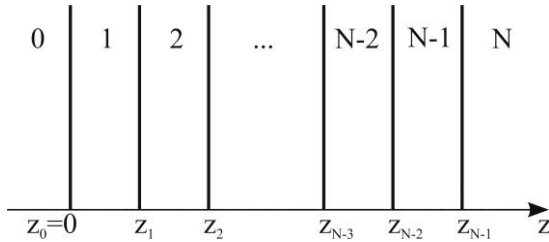


Рис. 1 - Геометрична схема багат шарової НС

Відомо [6], що у моделі анізотропного діелектричного континууму Лоудона діелектрична проникність ϵ тензором

$$\epsilon(\Omega) = \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp}(\Omega) & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{\perp}(\Omega) & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\parallel}(\Omega) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

де $\epsilon_{\perp}(\Omega)$, $\epsilon_{\parallel}(\Omega)$ - діелектричні проникності, що залежать від енергії Ω і визначаються співвідношеннями Ліддена-Сакса-Теллера

$$\epsilon_{\perp}(\Omega) = \epsilon_{\perp}^{\infty}(\Omega) \frac{\Omega^2 - \Omega_{L\perp}^2}{\Omega^2 - \Omega_{T\perp}^2}, \quad \epsilon_{\parallel}(\Omega) = \epsilon_{\parallel}^{\infty}(\Omega) \frac{\Omega^2 - \Omega_{L\parallel}^2}{\Omega^2 - \Omega_{T\parallel}^2}. \quad (2)$$

Тут індекси \perp і \parallel вказують перпендикулярний та паралельний напрямки до кристалографічної осі c ; $\Omega_{L\perp}$, $\Omega_{L\parallel}$, $\Omega_{T\perp}$, $\Omega_{T\parallel}$ - енергії оптичних мод у масивних анізотропних сполуках вюрцитного типу; $\epsilon_{\perp}^{\infty}$, $\epsilon_{\parallel}^{\infty}$ - високочастотні діелектричні проникності. Зауважимо, що у високочастотному наближенні справедлива рівність $\epsilon_{\perp}^{\infty} = \epsilon_{\parallel}^{\infty}$.

Для знаходження енергетичного спектра та потенціалу поля поляризації $\Phi(\vec{r})$ оптичних фоновів застосовуються електростатичні рівняння Максвелла

$$\begin{cases} \vec{E}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{r}), \\ \vec{D}(\vec{r}) = \epsilon(\Omega)\vec{E}(\vec{r}), \\ \vec{\nabla}\vec{D}(\vec{r}) = 0. \end{cases} \quad (3)$$

Шукаючи потенціал поля поляризації фоновів у вигляді

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}_{\perp}} \Phi(z) e^{i\vec{q}_{\perp}\vec{\rho}}, \quad (\vec{r} = \vec{\rho} + z\vec{n}_z) \quad (4)$$

$$\Phi(z) = \sum_{j=0}^N \Phi_j(z_{j-1} < z < z_j), \quad (z_{-1} = -\infty, z_N = \infty) \quad (5)$$

де $\vec{q}_{\perp} = (q_x, q_y)$, $\vec{\rho} = (x, y)$ - двомірні вектори, з системи (3) отримується система рівнянь

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \gamma_j(\Omega) q_{\perp}^2 \right] \Phi_j(z) = 0, \quad (j = 0 \div N) \quad (6)$$

для полів поляризації оптичних фоновів $\Phi_j(z)$ у j -тій області НС. Математична структура рівнянь (6) зумовлює важливу роль функції

$$\gamma_j(\Omega) = \frac{\epsilon_{\perp}^{(j)}(\Omega)}{\epsilon_{\parallel}^{(j)}(\Omega)}, \quad (7)$$

оскільки при дійсних додатних q_{\perp} та Ω розв'язки цих рівняння залежать від знака функції $\gamma(\Omega)$ і у j -му середовищі НС при фіксованій енергії Ω визначають або осцилюючі хвилі

$$\text{при } \gamma_j(\Omega) < 0, \quad (8)$$

або затухаючі хвилі

$$\text{при } \gamma_j(\Omega) > 0. \quad (9)$$

Внаслідок цього у НС вюрцитного типу може виникати чотири типи оптичних фоновів: інтерфейсні (I), обмежені (C), напівобмежені (HS) та поширювальні (P). Потенціал поля поляризації кожного типу фоновів нормований

$$\frac{\hbar^2}{2\Omega} = \sum_{j=0}^N \frac{\hbar^2}{8\pi\Omega} \int_{z_{j-1}}^{z_j} dz \left[q_{\perp}^2 \frac{\partial \epsilon_{\perp}^{(j)}(\Omega)}{\partial \Omega} |\Phi_j^s(z)|^2 + \frac{\partial \epsilon_{\parallel}^{(j)}(\Omega)}{\partial \Omega} \left| \frac{\partial \Phi_j^s(z)}{\partial z} \right|^2 \right] \quad (s = I, C, HS, P) \quad (10)$$

і визначаються системою рівнянь

$$\begin{cases} \Phi_l^s(z_l) = \Phi_{l+1}^s(z_l), \quad (l = 0 \div N-1) \\ \epsilon_{\parallel}^{(l)} \frac{d\Phi_l^s(z)}{dz} \Big|_{z=z_l} = \epsilon_{\parallel}^{(l+1)} \frac{d\Phi_{l+1}^s(z)}{dz} \Big|_{z=z_l}, \end{cases} \quad (11)$$

що отримується з умов неперервності нормальної складової вектора напруженості електричного поля та тангенціальної складової вектора зміщення на всіх межах між середовищами НС.

Тепер розглянемо кожний тип фоновів окремо.

2.1 Інтерфейсні фоновни

Інтерфейсні фоновни існують у НС при виконанні умови (9) у всіх її областях та за умови

$$\epsilon_{\parallel}^{(l)}(\Omega) \epsilon_{\parallel}^{(l+1)}(\Omega) < 0, \quad (l = 0 \div N-1) \quad (12)$$

яка забезпечує максимуми потенціалу поля поляризації I фоновів на всіх межах між шарами НС.

Потенціали поля поляризації I-фоновів у різних середовищах НС знаходяться з рівнянь (6) з урахувань вищезазначених умов і мають вигляд

$$\Phi_j^I(z) = A_j^I e^{\xi_j q_{\perp} z} + B_j^I e^{-\xi_j q_{\perp} z}, \quad z_{j-1} < z < z_j, \quad (13)$$

де $\xi_j = \sqrt{|\gamma_j|}$, $j = 0 \div N$.

Зауважимо, що за умови скінченності $\Phi(z)$ при $z \rightarrow \pm\infty$ коефіцієнти B_0^I та A_N^I зникають ($B_0^I = A_N^I = 0$).

2.2 Обмежені фонони

При виконанні умови (9) у зовнішніх ($j = 0, N$) середовищах НС і умови (8) хоча б в одному з внутрішніх шарів, виникають обмежені фонони, потенціали поля поляризації яких мають вигляд

$$\begin{aligned} \Phi_0^C(z) &= A_0^C e^{\xi_0 q_{\perp} z}, \quad z < 0, \\ \Phi_j^C(z) &= \begin{cases} A_j^C e^{\xi_j q_{\perp} z} + B_j^C e^{-\xi_j q_{\perp} z}, & \text{при } \gamma_j > 0 \\ A_j^C \cos(\xi_j q_{\perp} z) + B_j^C \sin(\xi_j q_{\perp} z), & \text{при } \gamma_j < 0 \end{cases}, \\ & \quad z_{j-1} < z < z_j, \quad j = 1 \div N - 1, \\ \Phi_N^C(z) &= A_N^C e^{-\xi_N q_{\perp} z}, \quad z > z_{N-1}. \end{aligned} \quad (14)$$

Важливо зауважити, що на відміну від ізотропних НС, у яких енергії обмежених фононів бездисперсійні [6, 22], а потенціали поля поляризації зникають на межах середовищ, у анізотропних вюрцитних НС енергії цих фононів залежать від q_{\perp} , а потенціали поляризації на межах не зникають.

2.3 Напівобмежені фонони

Якщо у зовнішніх середовищах НС виконується умова (8), а хоча б в одному з внутрішніх шарів – умова (9), то в системі виникають напівобмежені фонони з потенціалами поля поляризації

$$\begin{aligned} \Phi_0^{HS}(z) &= A_0^{HS} \cos(\xi_0 q_{\perp} z) + B_0^{HS} \sin(\xi_0 q_{\perp} z), \quad z < 0 \quad (15) \\ \Phi_j^{HS}(z) &= \begin{cases} A_j^{HS} e^{\xi_j q_{\perp} z} + B_j^{HS} e^{-\xi_j q_{\perp} z}, & \text{при } \gamma_j > 0 \\ A_j^{HS} \cos(\xi_j q_{\perp} z) + B_j^{HS} \sin(\xi_j q_{\perp} z), & \text{при } \gamma_j < 0 \end{cases}, \\ & \quad z_{j-1} < z < z_j, \quad j = 1 \div N - 1, \\ \Phi_N^{HS}(z) &= A_N^{HS} \cos(\xi_N q_{\perp} z) + B_N^{HS} \sin(\xi_N q_{\perp} z), \quad z > z_{N-1}. \end{aligned}$$

Подібно до обмежених фононів, потенціали поля поляризації напівобмежених фононів – скінченні на межах між середовищами, а спектри залежні від q_{\perp} .

2.4 Поширювальні фонони

Поширювальні фонони виникають у вюрцитних НС у єдиному випадку, коли умова (8) задовольняється у всіх середовищах структури, а хвильовий вектор \vec{q} та напруженість електричного поля \vec{E} колінеарні

$$[\vec{E} \vec{q}] = 0. \quad (16)$$

Тоді з (16) для потенціалів поля поляризації поширювальних фононів отримуються додаткові умови

$$\frac{1}{\xi_l} \frac{d\Phi_l^P(z)}{dz} \Big|_{z=z_l} = \frac{1}{\xi_{l+1}} \frac{d\Phi_{l+1}^P(z)}{dz} \Big|_{z=z_l}, \quad (l = 0 \div N - 1) \quad (17)$$

де потенціали поля поляризації, знайдені з рівнянь (6), мають вигляд

$$\Phi_j^P(z) = A_j^P \cos(\xi_j q_{\perp} z) + B_j^P \sin(\xi_j q_{\perp} z), \quad z_{j-1} < z < z_j, \quad j = 1 \div N. \quad (18)$$

Дисперсійні рівняння для визначення спектрів енергій всіх типів фононів отримуються з системи лінійних однорідних рівнянь (11). Ця ж система рівнянь разом з умовою нормування (10) дозволяє знайти всі невідомі коефіцієнти A_j^s, B_j^s ($j = 0 \div N$) та отримати потенціали поля поляризації всіх фононів

$$\Phi^s(\vec{r}) = \sum_{q_{\perp}} \sum_{j=0}^N \Phi_j^s(z) e^{i\vec{q}_{\perp} \vec{\rho}}, \quad (s = I, C, HS, P). \quad (19)$$

3. ВЛАСТИВОСТІ ФОНОННИХ СПЕКТРІВ ВЮРЦИТНИХ ОДНО- ТА ТРИШАРОВИХ НАНОСИСТЕМ

Відомо [2-4], що НС вюрцитного типу є основними елементами сучасних квантових каскадних лазерів та детекторів інфрачервоного діапазону, у функціонуванні яких оптичні фонони відіграють важливу роль каналу релаксації електронної енергії безвипромінювальними квантовими переходами. Тому дослідження властивостей фононів та їх взаємодії з іншими квазічастинками у таких НС є актуальним завданням.

На відміну від фононів у ізотропних НС, які детально вивчені у багатьох роботах (наприклад [22] та інші), властивості цих квазічастинки у анізотропних НС вивчені не достатньо, хоча вже відомо, що вони мають принципові відмінності. Зокрема анізотропія діелектричної проникності вюрцитних НС приводить до залежності від хвильового вектора енергій усіх типів фононів. Ще однією особливістю цих НС є можливість виникнення в них поширювальних фононів, які в ізотропних структурах не існують ні за яких умов.

На основі приведеної у попередньому розділі теорії досліджені фононні спектри трьох НС: а) простої одношарової бінарної (GaN), б) простої одношарової потрійної ($Al_x Ga_{1-x} N$), в) тришарової комбінованої ($GaN/AlN/Al_x Ga_{1-x} N$), вміщених у бінарне зовнішнє середовище AlN. Фізичні параметри напівпровідникових сполук відомі [5] і наведені у таблиці 1. Геометричні параметри НС вибиралися такими ж, як і розміри складових елементів (у нанометрах) квантового каскадного детектора з роботи [21]: а) $\infty/2.08/\infty$, б) $\infty/15/\infty$, в) $\infty/2.08/1/15/\infty$.

Таблиця 1 – Частоти фононних мод (у meV) та діелектричні проникності масивних бінарних і потрійної сполук

	AlN	GaN	$Al_{0.58}Ga_{0.42}N$
$\Omega_{L\perp}$	113.02	91.83	106.08
$\Omega_{L\parallel}$	110.3	90.97	104.45
$\Omega_{T\perp}$	83.13	69.25	77.30
$\Omega_{T\parallel}$	75.72	65.91	71.54
ε^{∞}	4.77	5.35	5.01

Згідно з розвинуеною у другому розділі теорією, типи фононних спектрів НС суттєво залежать від знаків функцій $\gamma_i(\Omega)$, тому розрахунок цих функцій виконувався для сполук середовищ трьох досліджуваних НС (а, б, с). Результати розрахунків функцій $\gamma_i(\Omega)$ для тришарової НС (с) приведені на рис. 2, де індекс i в γ_i , $\Omega_{L\perp}^{(i)}$, $\Omega_{L\parallel}^{(i)}$, $\Omega_{T\perp}^{(i)}$, $\Omega_{T\parallel}^{(i)}$ відповідає таким сполукам: 0 – AlN, 1 – GaN, 2 - Al_{0.58}Ga_{0.42}N.

З рис. 2 видно, що інтервал енергій, в якому існує фононний спектр НС знаходиться між мінімальною та максимальною енергіями із відомого спектра енергій $[\Omega_{L\perp}^{(i)}, \Omega_{L\parallel}^{(i)}, \Omega_{T\perp}^{(i)}, \Omega_{T\parallel}^{(i)}]$, ($i = 0, 1, 2$) у моделі Лодона (таблиця 1). Цей інтервал містить сім енергетичних смуг у одношарових НС (а) та одинадцять смуг у тришаровій НС (с). Кількість смуг визначається лише числом різних сполук наночастинок системи. Одна з цих смуг у всіх трьох досліджуваних НС є забороненою зоною енергій (для НС (с) – шоста на рис. 2), де фононний спектр не існує. Заборонена зона розділяє енергетичний інтервал на дві групи низькочастотних (НЧ) і високочастотних (ВЧ) смуг. Кожна з цих груп містить по три смуги енергій у одношарових НС та по п'ять смуг у тришаровій НС. У НС з трьома шарами групи смуг є своєрідною суперпозицією смуг обох попередніх одношарових систем.

Розглянемо тепер властивості фононних спектрів усіх трьох НС.

Розрахунки залежностей енергій від квазіімпульсу q_{\perp} виконувались для трьох НС (а, б, с). На рис. 3 приведено приклад залежностей для найскладнішої тришарової НС (с). Необхідно підкреслити, що на відміну від ізотропних НС [22], в анізотропних системах усі типи фононних енергій мають дисперсію. З рис. 3 видно, що лише І фонони мають скінченне число гілок, а С, HS та Р фонони – безмежне.

Виявилось, що в одношаровій бінарній НС (а) у НЧ області енергії С і HS фонони мають слабку від'ємну дисперсію, а у ВЧ області – слабку додатну. Інтерфейсні фонони мають по дві гілки енергій у НЧ та ВЧ областях зі значною позитивною і негативною дисперсіями відповідно. Зауважимо, що зі спектра С фононів у ВЧ смузі виділяється одна гілка енергій, яка має дуже різку позитивну залежність від q_{\perp} і при $\Omega = \Omega_{L\perp}^{(1)}$ вона неперервно переходить у гілку І фононів з позитивною дисперсією.

В одношаровій НС з потрійною сполукою (б) властивості всіх гілок фононів у ВЧ області подібні до щойно проаналізованої бінарної НС, а властивості НЧ спектра суттєво відрізняються. На відміну від бінарної системи, у цій НС між С та HS низькочастотними смугами з'являється смуга поширювальних Р-фононів з від'ємною дисперсією. Відмітимо, що при $\Omega = \Omega_{T\parallel}^{(0)}$ кожна n -та гілка Р фононів неперервно переходить у $(n+1)$ -шу гілку С фононів.

Також у потрійній одношаровій НС виникає цікава властивість HS-фононних спектрів. Виявляється, що у НЧ смузі виникають дві серії гілок HS фононів із додатною і від'ємною дисперсіями. Енергії обох серій гілок, як функції q_{\perp} , попарно зближуються зливаються при відповідних квазіімпульсах. Внаслідок цього у цій смузі з кожної пари гілок HS

фононів візуально утворюються своєрідні “петлі”.

З рис. 3 видно, що фононний спектр тришарової НС з бінарними і потрійними сполуками наночастинок є своєрідною суперпозицією спектрів обох щойно описаних систем (а, б), елементи яких присутні в цій складній системі.

Справді. Проаналізуємо властивості усіх десяти фононних смуг енергій системи (с) у їх узгодженні з системами (а, б). Спочатку розглянемо НЧ область.

Очевидно, що в області енергій $[\Omega_{T\parallel}^{(1)}, \Omega_{T\parallel}^{(2)}]$, де у системі (б) не існують фононні стани, у системі (с) виникають такі ж фонони з тими ж властивостями, що й у системі (а): у першій смузі - С фонони, а у другій – І фонони позитивної гілки.

Умови системи (с) такі, що у третій смузі виникають обмежені фонони з такою ж негативною дисперсією, як і в системі (б), а гілка І фононів негативною дисперсією системи (а) не реалізується.

Область енергій $[\Omega_{T\parallel}^{(0)}, \Omega_{T\perp}^{(0)}]$ у системі (с) енергією $\Omega_{T\perp}^{(2)}$ розділяється на дві смуги (4, 5), в яких виникають HS фонони з різними властивостями. У п'ятій смузі вони такі ж, як і в третій смузі системи (б), а в четвертій смузі гілки HS фононів з від'ємною дисперсією більш подібні до гілок Р фононів системи (б). Гілки HS фононів з позитивною дисперсією у четвертій смузі виражені дуже слабо. Крім петлеподібних гілок HS фононів, характерних системі (б), у п'ятій смузі системи (с) існують аналоги HS гілок системи (а), енергії яких, як функції q_{\perp} , перетинають петлеподібні пари гілок (аналогів системи (б), не створюючи антикросингів, що згідно з квантовою механікою [23], є наслідком різної симетрії коливань відповідних взаємодіючих підсистем.

Розглянемо тепер ВЧ область фононних енергій системи (с), яка знаходиться над забороненою зоною (б) між енергіями $\Omega_{L\parallel}^{(1)}$ та $\Omega_{L\perp}^{(0)}$ і за розмірами збігається з ВЧ областю системи (а).

Відмітимо, що властивості С фононів сьомої смуги і гілки позитивної дисперсії І фононів восьмої смуги системи (с) аналогічні до відповідної їй підсистеми (а), оскільки у системі (б) ця область енергій заборонена.

Специфічна картина фононного спектра у двох ВЧ смугах енергій (9, 10) у системі (с) зумовлена суперпозицією гілки І фононів з негативною дисперсією системи (а) з С фонами та І фонами системи (б). Внаслідок цього у системі (с) перша гілка С фононів із дев'ятої смуги переходить у гілку І фононів з позитивною дисперсією десятої смуги, характерною нижній гілці І фононів системи (б). Далі здійснюючи антикросинг з І-гілкою негативною дисперсії, вона змінює знак своєї дисперсії і з подальшим зростанням q_{\perp} спадає подібно до І-гілки з негативною дисперсією системи (а). При $\Omega = \Omega_{L\perp}^{(2)}$ ця І-гілка перетворюється у С-гілку дев'ятої смуги, проходячи крізь яку викликає слабо виражені антикросинги, і нарешті виходить з неї аж у восьму смугу у вигляді гілки І фононів з негативною дисперсією. Як видно з рис. 3, у десятій смузі системи (с) є ще дві гілки І фононів. У одинадцятій смузі існує сукупність таких же гілок HS фононів, як і у системі (б).

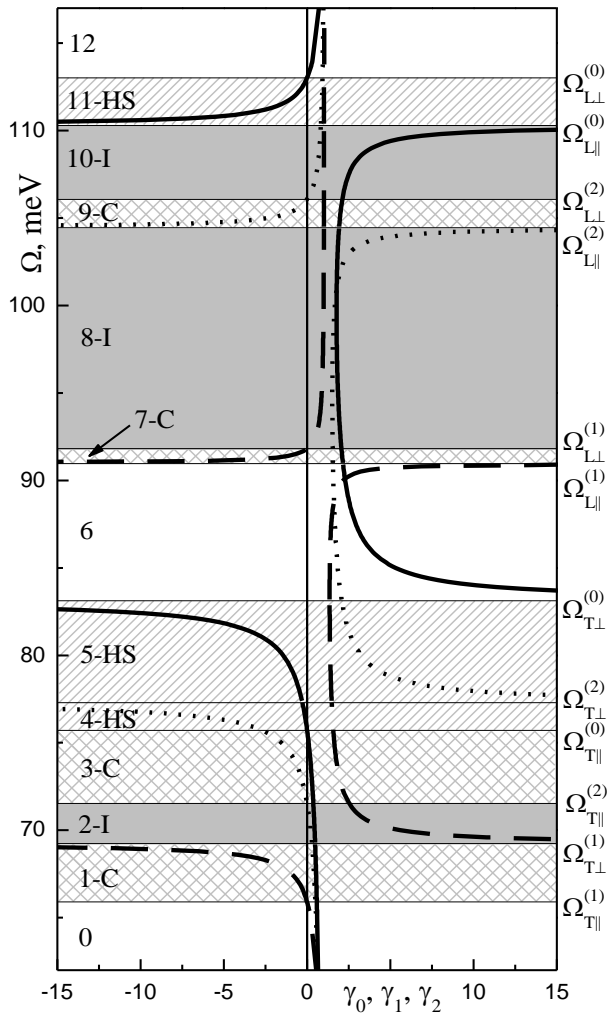


Рис. 2 – Залежності γ_0 (суцільна), γ_1 (штрихова), γ_2 (пунктирна) від енергії Ω та визначені ними смуги фононних мод (I, C, HS, P) у тришаровій НС (с) $\text{AlN}/\text{GaN}/\text{AlN}/\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}/\text{AlN}$

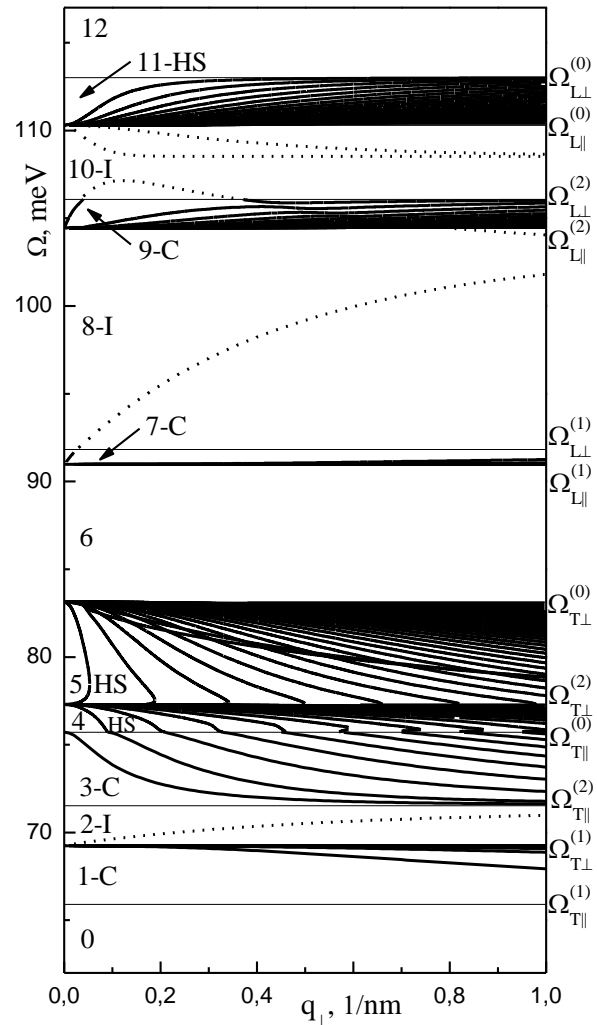


Рис. 3 – Залежності енергій усіх типів фононів (I, C, HS, P) від квазіімпульсу q_{\perp} у тришаровій НС (с) $\text{AlN}/\text{GaN}/\text{AlN}/\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}/\text{AlN}$

4. ВИСНОВКИ

Розвинена загальна теорія всіх гілок (I, C, HS, P) фононного спектра у НС з довільною кількістю анізотропних шарів подвійних і потрійних сполук.

Розраховані й детально проаналізовані фононні спектри двох одношарових НС з бінарними (а) GaN та потрійними (б) $\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}$ сполуками вюрцитного типу та складної тришарової (с) GaN/AlN/ $\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}$ НС у зовнішніх бінарних середовищах AlN.

Показано, що наявність того чи іншого типу фононів у НС не залежить від геометричних параметрів її складових шарів, а визначається лише співвідношенням між компонентами тензорів ($\epsilon_{\perp}/\epsilon_{\parallel}$) анізотропних діелектричних проникностей у всіх шарах системи. Залежності енергій різних типів фононів від квазіімпульса зумовлені як розмірами наночарів НС, так і співвідношенням між величинами енергій ($\Omega_{L\perp}^{(j)}$, $\Omega_{L\parallel}^{(j)}$, $\Omega_{T\perp}^{(j)}$, $\Omega_{T\parallel}^{(j)}$) оптичних коливань у масивних аналогах усіх j шарів НС.

Уперше показано, що складний фононний спектр тришарової НС з двома шарами бінарних сполук і одним потрійною сполуки є своєрідною суперпозицією спектрів цих підсистем.

Встановлено, що пеллеподібні дисперсійні криві напівобмежених фононів у НС з потрійними сполуками є результатом попарного злиття гілок з додатною та від'ємною дисперсіями.

У низькочастотній області енергії усі гілки поширювальних фононів системи (б) та напівобмежених фононів системи (с) при $\Omega = \Omega_{T\parallel}^{(\text{AlN})}$ зі збільшенням квазіімпульса переходять у відповідні гілки обмежених фононів. Напівобмежені фонони системи (с) зі смуги $[\Omega_{T\perp}^{(\text{AlGaN})}, \Omega_{T\perp}^{(\text{AlN})}]$ створюють складний спектр із суперпозицією гілок, які перетинаються між собою. В усіх трьох досліджуваних НС у високочастотній області енергій одна (у системах а, б) або дві (у системі с) гілки обмежених фононів переходять у відповідні гілки інтерфейсних фононів, причому у системі (с) у смугі енергій $[\Omega_{L\parallel}^{(\text{AlGaN})}, \Omega_{L\perp}^{(\text{AlGaN})}]$ це викликає антик-

росинги між гілками обмежених фононів.

Відмітимо, що подальший розвиток наведеної теорії дозволить знайти потенціали поля поляризації всіх типів фононів у складних багатопарових НС для побудови теорії електрон-фононної взаємодії у

загальній теорії квантових переходів під дією електромагнітного поля, яка необхідна для оптимізації функціонування квантових каскадних детекторів і лазерів ближнього інфрачервоного діапазону.

Свойства полного фононного спектра анизотропных одно- и трехслойных вюрцитных наносистем

Ю.А. Сети, Н.В. Ткач

Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича, ул. Коцюбинского, 2, 58012 Черновцы, Украина

На основе модели диэлектрического континуума Лоудона развита теория фононного спектра одно- и трехслойных анизотропных наносистем вюрцитного типа с одно- и трехкомпонентными соединениями. Рассчитаны и проанализированы спектры ограниченных, интерфейсных, полуграниченных и распространяющихся фононов. Показано, что специфические свойства фононного спектра трехслойной наносистемы являются результатом своеобразной суперпозиции фононных спектров двухкомпонентной и трехкомпонентной подсистем.

Ключевые слова: Модель диэлектрического континуума, Вюрцитная наносистема, Оптические фононы.

Properties of the Complete Phonon Spectrum of Anisotropic One- and Three-layer Wurtzite Nanostructures

Ju.O. Seti, M.V. Tkach

Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, 2, Kotsyubinsky Str., 58012 Chernivtsi, Ukraine

Within the Loudon dielectric continuum model, the theory of phonon spectrum is developed for the anisotropic wurtzite nanostructures: plane one-layer with binary and ternary components and three-layer with the same components. The energy spectra of confined, interface, semi-interface and propagating phonons are calculated and analyzed. It is shown that the specific properties of phonon spectrum of three-layer nanostructure are the result of proper superposition of phonon spectra of binary and ternary component subsystem.

Keywords: Dielectric continuum model, Wurtzite nanosystem, Optical phonons

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. S. Nakamura, S. Pearton, G. Fasol, *The Blue Laser Diode: The Complete Story* (Berlin: Springer-Verlag: 2000).
2. A. Vardi, G. Bahir, F. Guillot, C. Bougerol, E. Monroy, S.E. Schacham, M. Tchernycheva, F.H. Julien, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 011112 (2008).
3. W. Terashima, H. Hirayama, *phys. stat. solidi C* **6**, S615 (2009).
4. M. Beeler, E. Trichas, E. Monroy, *Semicond. Sci. Technol.* **28**, 074022 (2013).
5. Sadao Adachi, *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors* (Wiley: 2009).
6. M.A. Stroschio, M. Dutta, *Phonons in Nanostructures* (Cambridge: Cambridge University Press: 2001).
7. L. Bergman, M. Duttac, K.W. Kim, G. Klemens, S. Komirenko, and M.A. Stroschio, *Proceedings of SPIE* **3940**, 100 (2000).
8. C. Chen, M. Dutta, M.A. Stroschio, *J. Appl. Phys.* **95**, 2540 (2004).
9. J.-J. Shi, *Solid State Commun.* **127**, 51 (2003).
10. L. Zhang, S. Gao, J.-J. Shi, *Surf. Rev. Lett.* **12**, 3, 433 (2005).
11. L. Zhang, *Superlatt. Microstruct.* **40**, 144 (2006).
12. L. Zhang, J.-J. Shi, *Commun. Theor. Phys.* **47**, 349 (2007).
13. J.-J. Shi, X.-L. Chu, E.M. Goldys, *Phys. Rev. B* **70**, 115318 (2004).
14. W.D. Huang, Y.J. Ren, J.F. Yan, Q. Wu, S.H. Zhang, *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* **54**, 11301 (2011).
15. L. Zhang, *phys. stat. solidi B* **248**, 9, 2120 (2011).
16. L. Zhang, *Condens. Matter. Phys.* **14**, 1, 13602 (2011).
17. L. Li, D. Liu, J.-J. Shi, *Eur. Phys. J. B* **44**, 401 (2005).
18. L. Zhang, *Superlat. Microstruct.* **53**, 113 (2013).
19. J.T. Lü, J.C. Cao, *J. Appl. Phys.* **97**, 033502 (2005).
20. L. Zhang, J.J. Shi, X.-L. Liu, *Superlat. Microstruct.* **83**, 131 (2015).
21. S. Sakr, E. Giraud, M. Tchernycheva, N. Isac, P. Quach, E. Warde, N. Grandjean, F. H. Julien, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 251101 (2012).
22. M.V. Tkach, Ju.O. Seti, Y.B. Grynyshyn, O.M. Voitsekhivska, *Acta Phys. Pol. A* **128**, 343 (2015).
23. О.С. Давидов, *Квантова механіка* (Нац. акад. наук України: Ін-т теорет. фізики ім. М.М. Боголюбова: 2012).