

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Панькин Дмитрий Васильевич

Исследование полярных оптических фононов в слоистых гетероструктурах.

Специальность: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург
2018

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном университете

Научный руководитель: **Смирнов Михаил Борисович**, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики твердого тела Санкт-Петербургского государственного университета

Официальные оппоненты: **Втюрин Александр Николаевич**, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, главный научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск

Немов Сергей Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры «Технология и исследование материалов» ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», г. Санкт-Петербург

Ведущая организация: ФГБУ ВОН «Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет Российской академии наук», г. Санкт-Петербург

Защита состоится «___» _____ 2018 г. в _____ на заседании диссертационного совета Д 212.232.33 по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук на базе Санкт-Петербургского государственного университета по адресу 198504, г. Санкт-Петербург, Петродворец, ул. Ульяновская, д. 1, малый конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке им. М. Горького Санкт-Петербургского государственного университета по адресу: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7/9. Диссертация и автореферат диссертации размещены на сайте <https://disser.spbu.ru>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба направлять по адресу: 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, Ульяновская ул., д. 1, ученому секретарю диссертационного совета Д 212.232.33 А.М. Поляничко.

Автореферат разослан « ___ » _____ 2018 г.

Ученый секретарь Совета Д 212.232.33,
кандидат физ.-мат. наук, доцент

Поляничко А.М.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

В настоящее время слоистые гетероструктуры широко используются в качестве ключевых элементов различных оптоэлектронных приборов. В частности, они применяются в лазерной технике, способной работать в терагерцевом диапазоне, и для регистрации инфракрасного (ИК) излучения в окнах атмосферной прозрачности. Устройства со слоистыми гетероструктурами на межподзонных переходах, работающие в ИК-области, нашли применение в качестве газовых детекторов, индикаторов открытого горения, детектирования военных целей, излучающих в ИК-диапазоне, и в астрономии. К перспективным областям применения слоистых гетероструктур относятся телекоммуникация в области частот, соответствующих окнам прозрачности атмосферы, неинвазивная диагностика заболеваний (например, по степени нагрева и по концентрации выдыхаемых человеком газов), проведение медицинских операций с применением ИК-видения, разработка телеметрических систем с высоким температурным разрешением. Одними из важнейших технических характеристик, которые необходимы для работы таких приборов, являются компактность и возможность работы при комнатных рабочих температурах. Решение данных задач включает и разработку новых типов материалов.

Широкому применению гетероструктур способствовали следующие факторы: развитие методов роста (таких как молекулярно-пучковая эпитаксия и газофазная эпитаксия из металл-органических соединений), совершенствование экспериментальных методов диагностики выращенных структур (детектирующей аппаратуры, источников излучения, оптических материалов и т.д.), развитие теоретических методов исследования (квантовомеханических и полуклассических модельных подходов).

К числу перспективных материалов для создания оптоэлектронных приборов относятся нитридные полупроводники типа A_3B_5 . Среди них особое место занимает пара материалов GaN и AlN. Удачное сочетание ширины запрещенных зон в данных материалах позволяет создавать гетероструктуры, работающие в диапазоне от ИК (гетероструктуры на межподзонных переходах) до сине-зеленой и УФ областей (для гетероструктур на междузонных переходах). Большие энергии фононов в нитридных материалах (по сравнению с гетероструктурами на базе арсенидных материалов) значительно понижают вероятность рассеяния носителей на продольных оптических фононах. Большие ширины запрещенных зон позволяют использовать данные материалы в устройствах, работающих при высоких напряжениях и температурах.

Данные материалы уже находят применение в светоизлучающих светодиодах и лазерах. Тем не менее, существуют трудности технологического характера. Одной из главных проблем при росте нитридных гетероструктур является существенное рассогласование постоянных решеток самих нитридных материалов и материалов, используемых в качестве подложек. Релаксация напряжений приводит к росту структур с дислокациями и остаточными деформациями в слоях. Поиск режимов

роста минимально дефектных структур требует подбора соответствующих условий роста, который невозможен без анализа структуры выращенных образцов. Методом, чувствительным к особенностям выращенных структур, может служить спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС). Она зарекомендовала себя в качестве чувствительного, бесконтактного, точного и неразрушающего метода анализа как структуры объемных материалов, так и структур с пониженной размерностью, например, квантовых ям и сверхрешеток, квантовых нитей, квантовых точек и др.

Частоты и интенсивности спектральных линий, наблюдаемых в спектрах КРС, содержат богатую информацию о структуре образца, о характере межатомных и электрон-фононных взаимодействий. Однако, эффективное использование этой информации возможно лишь при наличии схемы отнесения наблюдаемых в спектре линий конкретным типам колебаний тех или иных структурных фрагментов. Такое отнесение может быть установлено только при сопоставлении экспериментальных данных с результатами расчетов по динамике решетки. Особенности строения полупроводниковых гетероструктур (низкая симметрия, большое число атомов) исключают возможность использования подходов, используемых в исследованиях объемных кристаллов, основанных либо на классических моделях с эмпирическими потенциалами межатомных взаимодействий, либо на квантово-механических расчетах из первых принципов. Поэтому в теоретических исследованиях фононов в гетероструктурах широкое применение нашли континуальные модели, в которых области однородности, заполненные различными полупроводниковыми материалами, рассматриваются в приближении сплошной среды. В применении к оптическим полярным фононам такой подход называют моделью диэлектрического континуума (МДК). В целом ряде работ этот подход успешно применялся для моделирования фононных состояний в разнообразных гетероструктурах. Однако, многие важные аспекты колебательной динамики слоистых гетероструктур до сих пор остались неизученными.

В данной работе показано, что подход, основанный на применении МДК, можно успешно применить для оценки влияния разных структурных факторов на частоты фононов и, таким образом, установить практически важные корреляции «структура-спектр» для ряда слоистых гетероструктур состава GaN/AlN.

Цель работы

В рамках данной работы ставилась задача изучения влияния структурных факторов на спектры полярных оптических фононов в слоистых гетероструктурах. В качестве объекта исследования были выбраны такие практически важные структуры как многократные квантовые ямы (МКЯ) и сверхрешетки (СР). В качестве экспериментального метода регистрации полярных оптических фононов была выбрана спектроскопия КРС, а для теоретического описания данного типа фононов выбрана МДК. Среди структурных факторов,

влияющих на частоты полярных оптических фононов в слоистых гетероструктурах, в рамках данной работы были выделены следующие:

- 1) соотношение толщин слоев, образующих бинарную СР
- 2) общая длина периода СР,
- 3) упругие деформации в слоях СР,
- 4) влияние буферных слоев,
- 5) диффузия атомов на гетероинтерфейсах.

Помимо анализа структурных факторов, в работе проведен общий анализ решений уравнений МДК и получены важные соотношения, значительно облегчающие процедуру расчета.

Задачи работы

Для достижения поставленных целей в данной работе были поставлены и решены следующие задачи:

- 1) изучить влияние отношения толщин слоев на спектры полярных оптических фононов в СР,
- 2) изучить влияние периода СР на поведение полярных оптических фононов в широком диапазоне толщин слоев,
- 3) оценить существующие в материалах слоев упругие деформации и их влияние на частоты полярных оптических фононов,
- 4) оценить влияние буферных слоев на частоты полярных оптических фононов в МКЯ, и изучить поведение фононного спектра при постепенном увеличении числа слоев, то есть при переходе МКЯ в СР,
- 5) оценить влияние диффузии атомов и модернизировать модель для возможности учета размытости гетерограниц,
- 6) определить степень влияния приведенных выше факторов на различные типы мод и сделать вывод о чувствительности различных фононных мод и соответствующих им спектральных линий для оценки геометрических особенностей выращенной гетероструктуры.

Методы исследования

В качестве теоретического метода описания поведения полярных оптических фононов была выбрана континуальная эмпирическая модель диэлектрического континуума. В качестве экспериментального метода была выбрана спектроскопия КРС. Измерения частично были проведены на базе Научного Парка Санкт-Петербургского государственного университета ресурсного центра «Оптические и лазерные методы исследования вещества».

Научная новизна

- 1) Выведены новые соотношения, определяющие общие свойства решений уравнений МДК для произвольной слоистой гетероструктуры;
- 2) Установлена зависимость между частотами полярных фононов и соотношением толщин слоев в бинарных гетероструктурах;
- 3) Получены численные оценки влияния упругих деформаций материалов слоев на частоты полярных оптических фононов;
- 4) Предложен новый метод учета влияния буферных слоев на частоты полярных оптических фононов в СР и МКЯ;
- 5) Предложена новая модель учета диффузии атомов на плоской гетерогранице.

Научная и практическая ценность

Показана перспективность анализа спектров КРС в области полярных оптических фононов для определения и количественной оценки геометрических особенностей выращенных СР и МКЯ. Показано, что частотное положение спектральных линий и их интенсивности несут важную информацию о толщинах слоев, их числе, качестве интерфейсов, наличии и величине упругих напряжений. Полученные в работе количественные корреляции позволяют из наблюдаемых спектров КРС получать количественные оценки важных структурных характеристик слоистых гетероструктур, таких как толщины слоев, степень размытости интерфейса и величины упругих деформаций. Установленные в работе общие свойства решений уравнений МДК позволяют значительно упростить процедуру расчёта частот нормальных колебаний.

Положения, выносимые на защиту

1) Общим свойством пространственного распределения поляризации, индуцированной полярными интерфейсными фононами в произвольной плоской гетероструктуре, является одновременное равенство нулю средних вдоль направления, перпендикулярного плоскости интерфейса, значений компоненты электрического поля в направлении, перпендикулярном к интерфейсам, и компоненты вектора электрического смещения в плоскости интерфейса. Использование этих положений значительно упрощает процедуру решения уравнений, описывающих в приближении диэлектрического континуума спектр полярных фононов в произвольной плоской гетероструктуре..

2) Упругие деформации, возникающие в слоях CP GaN/AlN из-за рассогласования параметров кристаллической структуры, слабо влияют на частоты полярных оптических мод симметрии A(TO) и E(LO), в которых смещения атомов в соседних слоях синфазны, и сильно влияют на моды с антифазными атомными смещениями. Первый результат оправдывает использование спектральных линий синфазных мод для определения соотношения толщин слоев в исследуемой структуре. Второй результат позволяет использовать линии антифазных мод для оценки величины упругих деформаций.

3) Уравнения МДК допускают модификацию, позволяющую учесть влияние буферного слоя на фононный спектр слоистой гетероструктуры. С использованием такой модифицированной модели показано, что в случае МКЯ с полубесконечными буферными слоями частотный диапазон полярных оптических фононов совпадает с частотным диапазоном, характерным для ОКЯ.

4) Наличие интерфейсных слоев конечной толщины приводит к появлению дополнительных фононных мод, активных в спектрах КРС. Частоты этих новых спектральных линий содержат информацию, позволяющую оценить относительную толщину интерфейсных слоев.

5) Частоты полярных оптических мод симметрии A(TO) и E(LO), соответствующих интенсивным линиям в спектрах КРС сверхрешеток GaN/AlN, сильно зависят от отношения толщин слоев. Эти зависимости меняются при вариации длины периода сверхструктуры, что позволяет из анализа частотного распределения линий КРС получить количественную оценку не только отношения толщин слоев, но и длины полного периода CP.

Достоверность полученных результатов определяется сравнением результатов теоретических расчетов с экспериментальными данными и с теоретическими результатами, которые известны из научной литературы, в том числе и с результатами, полученными с применением высокоточных квантово-механических расчетов.

Личный вклад автора заключался в том, что им были предложены изложенные в работе теоретические подходы и проведено компьютерное моделирование фононных состояний в различных гетероструктурах. Автор также участвовал в обсуждении полученных результатов и проводил эксперименты по КРС.

Апробация работы:

Результаты работы были доложены на следующих конференциях:
20th International Symposium “Nanostructures: physics and technology”, Nizhny Novgorod, Russia, 2012; 21th International Symposium “Nanostructures: physics and technology”, Saint-Petersburg, Russia, 2013; International student conference “Science and progress”, Saint-Petersburg, Russia,

2014; XVI Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, Санкт-Петербург, Россия, 2014; 1-ая междисциплинарная конференция «Современные решения для исследования природных, синтетических и биологических материалов», Санкт-Петербург, Россия, 2014; 10-я Всероссийская конференция Нитриды галлия, индия и алюминия: структуры и приборы, Санкт-Петербург, Россия, 2015; XVI Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, Санкт-Петербург, Россия, 2015; 18 всероссийская молодёжной конференции ФизикА.СПб, Санкт-Петербург, Россия, 2015; 3rd International School and Conference "Saint-Petersburg OPEN 2016", Saint-Petersburg, Russia, 2016; V International Scientific Conference STRANN 2016, Saint-Petersburg, Russia, 2016.

Публикации

По результатам работы было опубликовано 4 статьи в журналах, входящих в список ВАК, в том числе 3 из них индексируются в международной базе Scopus. Результаты работы были доложены на 10 конференциях

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, девяти глав, выводов и списка использованной литературы. Общий объем составляет 161 страницу, включая 38 рисунков, 9 таблиц, список цитируемой литературы содержит 134 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В разделе **Введение** раскрывается актуальность исследуемой проблемы. Обосновывается перспективность выбора пары нитридных материалов GaN и AlN для дальнейших исследований. Ставятся цели и задачи работы, обосновывается научная новизна полученных результатов. Кратко описывается структура диссертации. В **главе 1** продемонстрирована прикладная важность гетероструктур с плоскими интерфейсами, приведен обзор работ, демонстрирующих перспективность нитридных гетероструктур на базе GaN и AlN. Описан круг текущих проблем, связанных с ростом и диагностикой выращиваемых нитридных гетероструктур.

В **главе 2** показана практическая важность исследования фоновых состояний и спектров КРС как чувствительного и информативного метода характеристики строения гетероструктур. Выделена особая роль полярных оптических фононов, связанная с их высокой

чувствительностью к особенностям выращенных структур. Приведен краткий обзор экспериментальных исследований спектров КРС слоистых гетероструктур. Описана методика измерения поляризованных спектров нитридных СР и приведены результаты, полученные с применением этой методики.

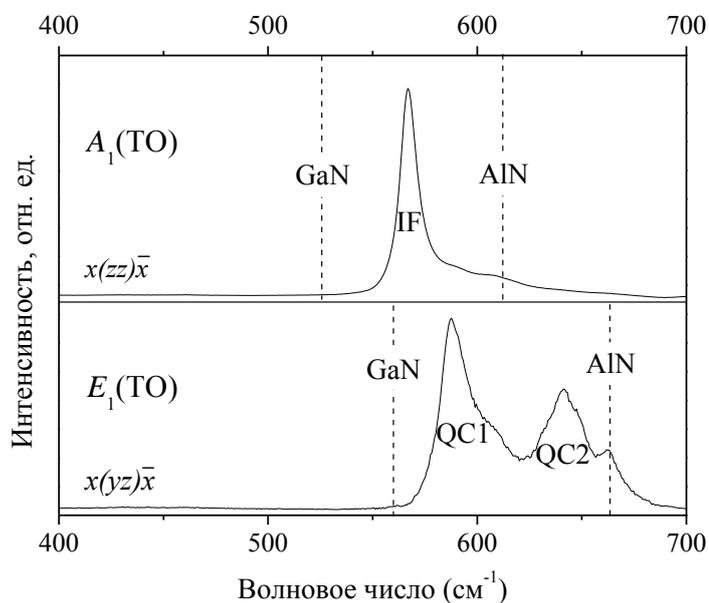


Рисунок 1- Спектры КРС в диапазоне 400-700 см^{-1} , снятые в различных поляризациях на СР GaN/AlN 1.5/1.5 нм. Вертикальными линиями показаны положения линий в спектрах объемных кристаллов.

На рис. 1 представлен пример спектра КРС СР GaN/AlN с равными толщинами слоев. Можно видеть, что спектр СР не является суммой спектров объемных материалов. Причем, в спектре СР симметрии $A_1(\text{TO})$ присутствует лишь одна интенсивная линия с промежуточной частотой (IF), в спектре СР симметрии $E_1(\text{TO})$ наблюдаются две линии (QC1 и QC2) на смещенных частотах. Для интерпретации природы этих линий и оценки их частотного положения в зависимости от структуры СР существует ряд подходов, которые описаны в следующей главе. В главе 3 описаны методы, используемые для расчета фононных частот и интерпретации спектров КРС. Приведены примеры их применения при изучении полученных экспериментальных спектров.

В главе 4 рассмотрены общие свойства полярных фононов в произвольной слоистой гетеросистеме. Показано, что в случае волнового вектора, направленного перпендикулярно плоскости интерфейса, полярные фононы преимущественно локализованы в слоях из разных материалов (их называют конфайнментными). А в случае, волнового вектора, направленного в плоскости интерфейса, полярные фононы могут быть делокализованы по всем слоям (их называют интерфейсными - IF) или локализованными в отдельных слоях (их называют квазиконфайнментными - QC). Рассмотрены общие свойства решений уравнений МДК, описывающих интерфейсные фононы в произвольной слоистой гетеросистеме. Выведенное нами Свойство 1 утверждает, что электрическое поле, индуцируемое полярными фононами в гетероструктурах с плоскими интерфейсами, должно удовлетворять следующему условию:

средние вдоль направления перпендикулярного плоскости интерфейса значения компоненты электрического поля в направлении, перпендикулярном к интерфейсам, и компоненты вектора электрического смещения в плоскости интерфейса должны одновременно обращаться в ноль. При выводе Свойства 1 не использовалось каких-либо дополнительных предположений. Это позволяет утверждать, что данное свойство справедливо как для изотропных, так и для анизотропных гетероструктур с различными материалами и толщинами слоев. В выведенном Свойстве 2 утверждается, что, если в рассматриваемой бинарной гетероструктуре есть полярный фонон, частота которого ω_1 соответствует отношению $\varepsilon_1(\omega_1)/\varepsilon_2(\omega_1)=R$, то должен существовать и другой полярный фонон с частотой ω_2 , соответствующий отношению $\varepsilon_1(\omega_2)/\varepsilon_2(\omega_2)=1/R$. Вывод Свойства 2 опирается на предположение об изотропности материалов бинарной гетероструктуры. Ограничений на число слоев или их толщину при выводе Свойства 2 не накладывалось.

В главе 5 на примере изолированного гетероперехода (ИГ), симметричной ОКЯ и бинарной СР показано, что в случае изотропных материалов в уравнениях на определение частот ИФ-фононов в гетероструктурах можно выделить пространственно-зависимый фактор, отражающий геометрию образца, и частотно-зависимый фактор, характеризующий свойства материала. В отношении частотно-зависимого фактора показано, что в зависимости от взаимного расположения ТО-ЛО интервалов материалов соседних слоев, интерфейсные моды имеют разный характер. В случае перекрытия ТО-ЛО интервалов ИФ-моды делокализованы по всем слоям гетероструктуры, а их частоты принадлежат либо интервалу TO_1-TO_2 , либо LO_1-LO_2 . В случае неперекрывания ТО-ЛО интервалов ИФ-моды локализованы в отдельных слоях гетероструктуры, а их частоты принадлежат ТО-ЛО интервалам соответствующих объемных материалов. Установлено, что гетероструктуры из нитридных материалов (InN, GaN, AlN в сфалеритных модификациях) и арсенидных материалов (InAs, GaAs, AlAs) проявляют поведение по первому и второму типу соответственно. В отношении пространственно-зависимого фактора для ОКЯ показано, что зависимость частот ИФ-фононов от ширины ямы имеет характер монотонного перехода от частот объемных составляющих (случай узкой ямы) к частотам ИФ-мод ИГ (случай широкой). В отношении пространственно-зависимого фактора для СР выделены три предельных случая: случай тонких слоев, СР с одним тонким слоем (предельный случай ОКЯ) и случай толстых слоев. Разделение слоев на толстые и тонкие подразумевает сравнение толщины слоя с длиной волны ИФ-фонона (которая, в свою очередь, определяется длиной волны рассеиваемого света). В случае короткопериодных СР зависимость частот от отношения слоев носит монотонный характер, меняясь между значениями, характерными для объемных образцов соответствующих материалов. При увеличении полного периода СР зависимость частот от отношения слоев меняется. Для СР с достаточно толстыми

слоями зависимость частоты от структуры постепенно исчезает и независимо от отношения толщин слоев частота принимает значение, характерное для ИГ.

В главе 6 на примере вюрцитных материалов GaN и AlN показано, что одноосная анизотропия приводит к появлению фононов нового типа – квазиконфайнментных, которые имеют разный характер в соседних слоях: характер распространяющейся плоской волны в одном слое сменяется экспоненциальным затуханием в другом, свойственным интерфейсным фононам. Для разных типов структур (ИГ, ОКЯ, СР) определены частотные диапазоны, в которых существуют полярные оптические фононы разных типов. В случае ИГ возможно существование лишь интерфейсных мод. В случае ОКЯ, кроме интерфейсных, возможны квазиконфайнментные моды с распространяющимся характером в слое квантовой ямы. В бинарных СР, кроме интерфейсных, возможны два типа квазиконфайнментных мод с распространяющимся характером в одном из двух типов слоев. Для всех типов структур выведены формулы, описывающие пространственное распределение поля и получены вековые уравнения, позволяющие определить частоты как интерфейсных, так и квазиконфайнментных фононов. Рассмотрены особенности решений вековых уравнений в трех предельных случаях: в случае, когда толщина одного из слоев существенно больше длины волны фонона (предельный случай ОКЯ), в случае, когда толщина обоих слоев гораздо больше длины волны фонона (предельный случай одиночного гетероперехода), и случай тонких слоев. Показано, что только в случае тонких слоев (или иначе, в длинноволновом приближении) в уравнениях можно провести разделение пространственной (связанной с геометрией образца) и частотной (связанной с составляющими гетероструктуру материалами) зависимостей.

Показано, что в короткопериодных СР (рис 2а) учет анизотропии не приводит к изменению вида уравнений как для ИГ-фононов, так и для QC-фононов. Анизотропию слоев СР можно учесть выбором соответствующей компоненты диэлектрической функции. Зависимости $\omega(f)$ (ω – частота фонона, f – относительная толщина слоя AlN) также не меняют своего вида, сдвигаются лишь частотные интервалы значений этих зависимостей. В фононном спектре СР с толщинами слоев сравнимых с длиной волны рассеиваемого света (рис. 2б) наблюдается смешивание мод разной симметрии $A(\text{TO})-E(\text{TO})$ и $E(\text{LO})-A(\text{LO})$ и наблюдается расщепление спектральных линий. Величина расщепления в достаточно большом диапазоне частот заметно зависит от толщины периода, этот результат может быть использован для оценки, как соотношения толщин слоев, так и периода выращенной СР. В длиннопериодных СР (рис. 2в) расщепление достигает максимума, а ИГ-фононы становятся подобными ИГ-модам ИГ.

В главе 7 с использованием МДК и уравнений теории упругости изучено влияние аксиально-симметричных упругих деформаций на частоты полярных оптических фононов в бесконечной периодической СР в практически важном случае вюрцитных тонкопериодных СР

GaN/AlN. Показано, что частоты интенсивных в КРС мод ($A(TO)^+$ и $E(LO)^+$) под влиянием упругих деформаций изменяются незначительно. Причем, вызванный деформациями частотный сдвиг имеет одинаковый знак и слабо зависит от отношения толщин слоев.

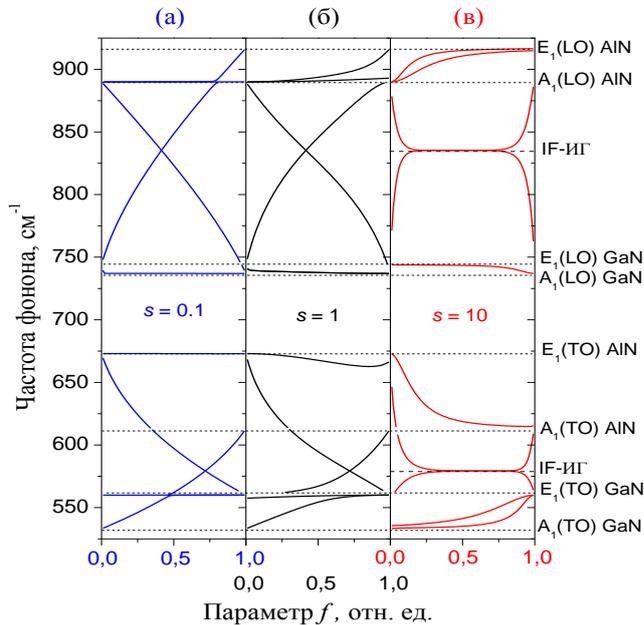


Рисунок 2 - Зависимость частот полярных оптических фононов – интерфейсных фононов и головной линии квазиконфайнментных от относительной толщины слоя AlN, выраженной через параметр f , для нескольких значений параметра $s=qd_{cp}$, где q - модуль волнового вектора фонона, d_{cp} – период СР.

Этот результат позволяет оправдать использование положения линий $A(TO)^+$ и $E(LO)^+$ в качестве высокочувствительного метода оценки толщин слоев в бинарных СР. Полученные результаты показывают, что влияние упругих деформаций на значения частот слабоинтенсивных мод ($A(TO)^-$ и $E(LO)^-$) приводит к заметным изменениям зависимостей $\omega(f)$. Частотные сдвиги, вызванные упругими деформациями наиболее значительны в случае, когда один слой СР много тоньше другого. Этот эффект имеет простую физическую интерпретацию. Частоты этих «неправильных» мод в указанных пределах значений f приближаются к частотам материалов тонких слоев. Но, именно эти тонкие слои испытывают наибольшие упругие деформации, которые и вызывают значительный сдвиг частот локализованных в этих слоях фононов. В целом, можно констатировать, что полярные оптические фононы симметрии $A(TO)$ и $E(LO)$, в которых атомные смещения в соседних слоях синфазны, испытывают гораздо меньшее влияние деформаций, чем фононы, в которых атомные смещения в соседних слоях антифазны. Это позволяет использовать частоты фононов с синфазными атомными смещениями в соседних слоях для характеристики структуры. Наименее чувствительной к деформациям оказывается мода с синфазными атомными смещениями в соседних слоях, расположенная в TO диапазоне.

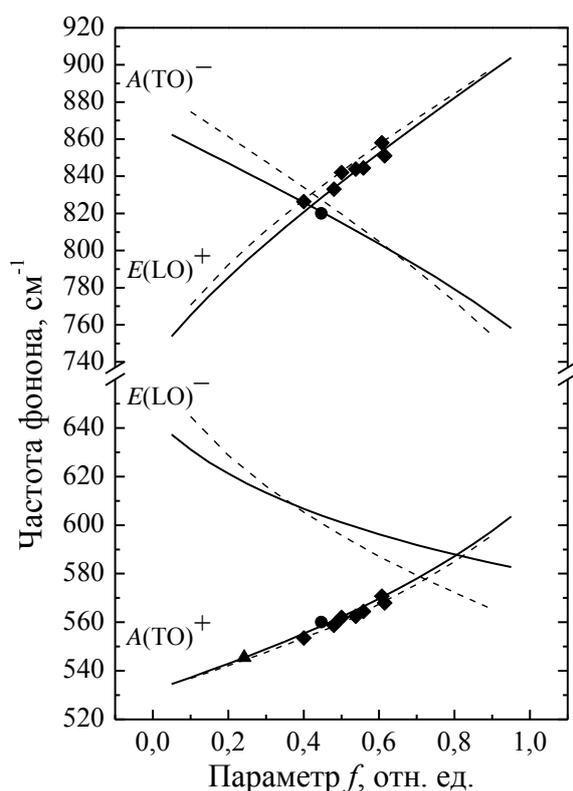


Рисунок 3 - Частоты $A(TO)$ и $E(LO)$ мод в зависимости от относительной толщины слоя AlN для напряженной (сплошная линия) и ненапряженной (штриховая линия) SR GaN/AlN. Символами отмечены экспериментальные данные из [1] (круги), из [2] (треугольники), из данной работы (ромбы).

В главе 8 в рамках МДК оценено влияние буферных слоев на частоты полярных оптических фононов. Для изучения вопроса о влиянии анизотропии оценки проводились для гетероструктур, слои которых содержали как сфалеритные, так и вюрцитные модификации GaN и AlN. Для определенности были выбраны гетероструктуры с буферными и барьерными слоями AlN и ямными слоями GaN. Представлен формальный метод написания векового уравнения для оценки влияния буферных слоев. Показано (рис. 4), что в предельных случаях $N=1$ и $N \rightarrow \infty$ полученные уравнения переходили в соответствующие вековые уравнения для ОКЯ и СР. Установлено, что для изотропной гетероструктуры МКЯ с буферными слоями расчет дает частоты интерфейсных фононов в тех же частотных интервалах, что и для ОКЯ и СР.

В анизотропных МКЯ сосуществуют интерфейсные фононы и квазиконфайнментные фононы, имеющие распространяющийся характер в ямном слое. Таким образом, частотный диапазон полярных оптических фононов для иллюстрируемой системы совпадает с частотным диапазоном, характерным для ОКЯ.

В главе 9 Проведена оценка влияния конечной толщины интерфейса на частоты полярных оптических фононов в короткопериодных бинарных СР. Традиционная модель с двуслойным периодом была расширена путем добавления двух слоев с промежуточными свойствами, моделирующими переходный слой. В качестве количественной меры размытости интерфейсов был введен параметр h , равный отношению толщины промежуточного слоя к полному периоду СР. Было установлено (см. рис. 5), что введение дополнительных слоев слабо влияет на частоты нормальных фононов, в которых атомные смещения в слоях синфазны. С

другой стороны, отмечено появление двух аномальных мод, в которых движения атомов в основных слоях антифазны.

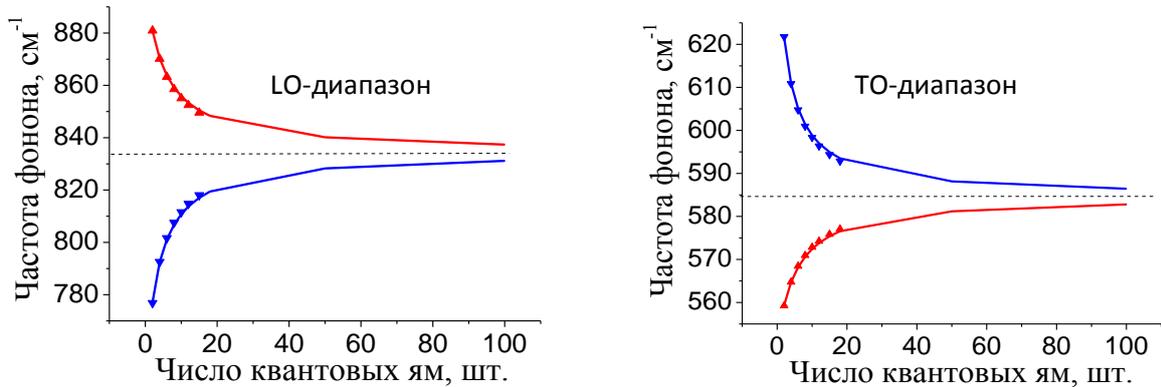


Рисунок 4 - Зависимость частот IFZ (синий цвет) и IFX (красный цвет) фононов от количества квантовых ям, рассчитанная по формулам, выведенным в длинноволновом приближении (непрерывная линия) и общим методом (точки) в сфалеритных МКЯ GaN/AlN с равными толщинами слоев и полубесконечными барьерами AlN. Горизонтальные штриховые линии соответствуют частотам фононов в бесконечной равнопериодной СР.

Расщепление частот в дублете аномальных мод связано с различными (синфазными и антифазными) движениями атомов в промежуточных слоях. Величина расщепления аномальных мод зависит от толщины промежуточного слоя и может быть использована для оценки степени размытости интерфейсов.

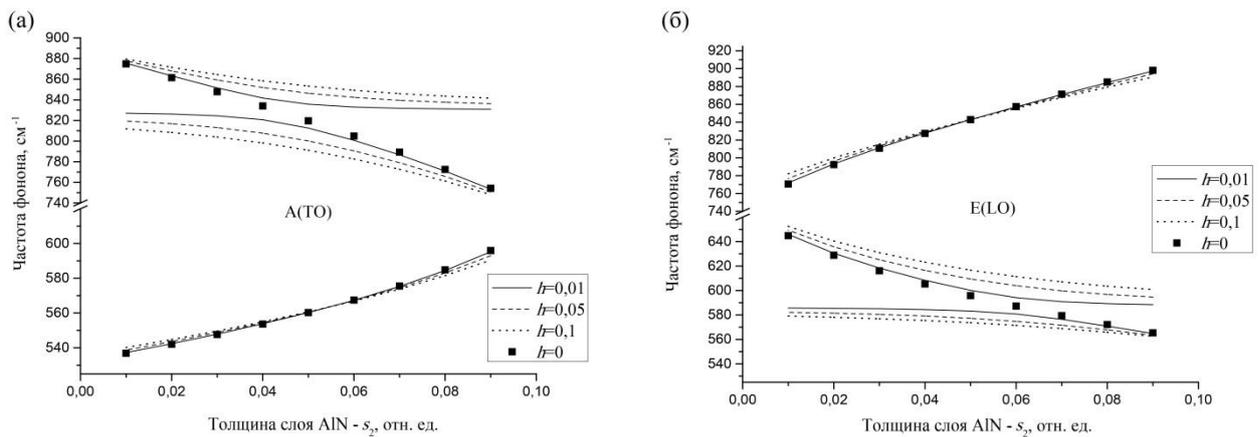


Рисунок 5 - Рассчитанные частоты $A(TO)$ (а) и $E(LO)$ (б) мод в бинарной СР (символы) и в 4-х слойной СР (линии) для различных значений параметра h (1 – 0.01, 2 – 0.05, 3 – 0.10) в зависимости от толщины слоя AlN (s_2) при постоянной суммарной толщине основных слоев $s_1 + s_2$ (s_1 – толщина слоя GaN)

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В результате проделанной работы были получены следующие результаты:

- 1) установлено, что электрическое поле, индуцируемое полярными интерфейсными фононами в плоских гетероструктурах, должно удовлетворять следующему условию: средние вдоль направления, перпендикулярного плоскости интерфейса, значения компоненты электрического поля в направлении, перпендикулярном к интерфейсам, и компоненты вектора электрического смещения в плоскости интерфейса должны одновременно обращаться в ноль;
- 2) предложен метод учета влияния буферных слоев на частоты полярных оптических фононов в СР;
- 3) с учетом упругих деформаций исследованы спектры полярных фононов в анизотропных СР GaN/AlN в практически важном тонкопериодном пределе;
- 4) установлено, что упругие деформации слабо влияют на частоты полярных оптических мод в СР, в которых смещения атомов в соседних слоях синфазны, и сильно влияют на моды с антифазными атомными смещениями; показано, что последний эффект можно использовать для оценки величин упругих деформаций;
- 5) продемонстрирована возможность оценки длины периода СР на основании расщепления спектральных линий, соответствующих квазиконфайментным и интерфейсным модам;
- 6) предложен способ модификации МДК, позволяющий учесть влияние на фононный спектр гетероструктуры степени размытости интерфейсов;
- 7) в спектрах гетероструктур с размытыми интерфейсами предсказано появление дополнительных фононных дублетов, величина расщепления которых отражает относительную толщину переходных слоев;
- 8) продемонстрирована возможность использования спектров КРС, содержащих вклады различных типов полярных оптических фононов, для характеристики особенностей выращенной гетероструктуры.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ

1. Панькин Д.В., Смирнов М.Б. Возможность применения спектроскопии комбинационного рассеяния света для оценки толщины интерфейсного слоя в сверхрешетках AlN/GaN // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2016. - № 2(242), С. 27-36. (личный вклад – 70%).
2. Pankin D.V., Smirnov M.B., Davydov V.Yu., Smirnov A.N. Elastic strains effect on frequencies of delocalized polar phonons in AlN/GaN superlattices // AIP Conf. Proc. – 2016. – Т. 1748.- № 050007. - С. 050007-1 - 050007-6. (личный вклад – 50%).
3. Д.В. Панькин, М.Б. Смирнов, В.Ю. Давыдов, А.Н. Смирнов, Е.Е. Заварин, В.В. Лундин, Упругие деформации и делокализованные оптические фононы в сверхрешетках AlN/GaN // Физика и техника полупроводников. – 2016, - Т. 50, - №8, С. 1064-1069. (личный вклад – 50%)
4. Pankin D.V., Smirnov M.B, Influence of AlN/GaN superlattice period on frequency of polar optical modes // Journal of Physics: Conference Series. - 2016 – Т. 741. – №. 012123. – С. 1-6. (личный вклад – 70%)

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gleize J. et al. Phonons in a strained hexagonal GaN–AlN superlattice// Appl. Phys. Lett. 1999. Vol. 74. №5. P. 703 – 705.
2. Darakchieva V. et al. Phonon mode behavior in strained wurtzite AlN/GaN superlattices// Phys. Rev. B. 2005. Vol. 71. №115329. P. 1 – 9.