

三元合金缺陷层对有限超晶格中局域 界面光学声子模的影响*

王新军¹⁾²⁾ 王玲玲^{1)†} 黄维清¹⁾ 唐黎明¹⁾ 邹炳锁¹⁾ 陈克求^{1)‡}

1) 湖南大学应用物理系, 长沙 410082)

2) (中南林业科技大学理学院, 长沙 410004)

(2005 年 8 月 15 日收到, 2005 年 11 月 15 日收到修改稿)

在宏观介电连续近似下, 采用转移矩阵方法, 研究了三元合金缺陷层对有限超晶格中局域界面光学声子模的影响. 在这种有限超晶格结构中, 可以清楚地看到所有界面模的演化轨迹. 结果表明: 存在两类局域模, 它们的宏观静电势波函数分别局域在缺陷层和表面层附近, 且这些模随着超晶格组分和缺陷层的相对厚度和介电常数的改变, 其局域位置和特性发生显著变化. 此外, 发现虽然能隙中局域模的数目不守恒, 但所有界面模的总数守恒.

关键词: 超晶格中的界面光学声子模, 局域模

PACC: 6322, 6320P

1. 引 言

20 多年来, 低维纳米结构, 如量子点、量子线、量子阱和超晶格等的研究^[1-7]一直在凝聚态物理和高新技术发展中占有极其重要的地位. 这些体系不断展现出全新的物理内涵, 同时也显示了广泛的应用前景. 半导体超晶格是研究最多的低维结构之一, 人们对其晶格振动特性进行了大量的研究^[7-19]. 研究表明, 就光学声子模^[8,9]而言, 可以分为两类: 一类是类体模, 它们被完全限制在不同的组分, 其频率等于各材料相应的纵光学模(LO)或横光学模(TO)的频率; 另一类是宏观界面模, 它们会扩展到整个超晶格, 界面模的静电势沿界面以指数形式向两侧衰减, 其色散曲线的频率位于 TO 声子和 LO 声子的频率范围内. 其中, 宏观界面光学声子模在超晶格和量子阱等结构中的电-声子相互作用中起着重要的作用^[10-12,20], 它们与束缚电子之间的耦合作用是最主要的散射机理之一.

含结构缺陷超晶格是近年来提出的一种新型超晶格结构, 它是在超晶格中人为地引入表面、界面或缺陷层, 这种结构具有周期超晶格所没有的独特的

物理特性, 它会在能隙中形成局域态, 或者在微带中形成共振散射态. 正是由于在含结构缺陷超晶格中既存在局域态又存在具有连续能谱的共振散射态, 因此会产生许多与此相关的新的特性. 而且, 在制作上对结构缺陷的控制比对杂质缺陷的控制要容易和精确得多, 这样, 结构缺陷超晶格的品质比掺杂超晶格的品质要高. 最近的研究还表明, 结构缺陷超晶格在红外探测和红外激光器等光电子器件方面有着相当的应用前景^[13]. 因此, 对结构缺陷超晶格结构的研究具有重要的理论意义和应用价值. 人们对其晶格振动特性, 特别是局域振动模^[14-17]进行了深入地研究. 近来, Chen 等研究了含结构缺陷的耦合半无限超晶格^[18]和带包覆层半无限超晶格^[19]的局域界面光学声子模的性质, 并在结构缺陷中引入了三元合金. 他们的研究表明: 在无限和半无限超晶格中, 扩展的宏观界面模(被称之为扩展模)耦合成几个连续微带(体带). 结构缺陷使得在这些微带上、下及微带间的间隙(微隙)内出现多条界面光学声子模, 它们的宏观静电势波函数总是局域在缺陷层附近, 并向两侧呈指数型衰减, 被称之为局域模. 当缺陷层为三元合金时, 其两模行为会导致局域模的数目增加, 且随着合金成分的改变而发生简并、分离等有趣

* 国家自然科学基金(批准号 90403026)、高等学校博士点学科专项基金(批准号 20050532013)资助的课题.

† E-mail: llwang@hnu.cn

‡ E-mail: keqiuchen@hnu.cn

现象.这一现象也带来一个疑问:对于不同的横向波数,能隙中局域模的数目还守恒吗?然而,在无限和半无限超晶格结构中,界面模的体带都是连续的,当在某种结构参数下,有些局域模会没入体带而成为扩展模时,无法观察到这些模的演化轨迹,也不能确知界面模总数的守恒情况.因此,本文研究一种含三元合金缺陷层的有限超晶格,这种结构的界面光学声子模的分立特征能使我们清楚地看到它们随结构参数和横向波数的演化规律.

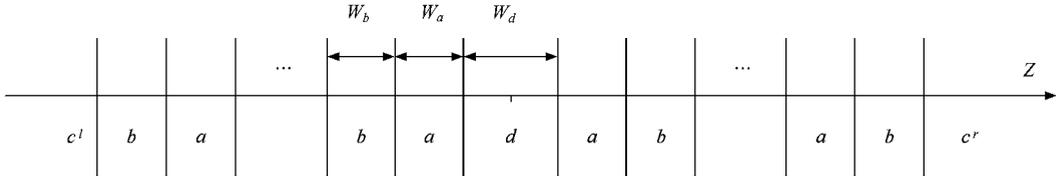


图 1 一个缺陷层 d 镶嵌在两个有限超晶格中的结构示意图(超晶格组分层和缺陷层的厚度分别为 W_a , W_b 和 W_d .选取缺陷层的中心为原点($Z=0$))

本文采用介电连续模型研究图 1 所示的结构中的界面光学声子模的性质.介质中宏观静电势服从拉普拉斯方程

$$\nabla^2 \phi(r) = 0. \quad (1)$$

由于超晶格在 xy 平面内仍有体材料的平移对称性,并假定其在 xy 平面内各向同性,不失一般性,方程(1)的解可写成 $\phi(r) = \phi(z) e^{iq_{\parallel} y}$,其中 q_{\parallel} 为超晶格波矢 $\mathbf{q} = (q_{\parallel}, q_z)$ 平行于界面的分量,在各层中都相同.因而每层的静电势可表示为

$$\phi(z) = c^l e^{q_{\parallel}(z+W_d/2+nW)}, z \leq -(W_d/2+nW) \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \phi(z) = & B_{n,1}^l e^{q_{\parallel}[z+W_d/2+(n-1)W+W_a]} \\ & + B_{n,2}^l e^{-q_{\parallel}[z+W_d/2+(n-1)W+W_a]}, \quad (3) \\ & -(W_d/2+nW) \leq z \\ & \leq -[W_d/2+(n-1)W+W_a], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi(z) = & A_{n,1}^l e^{q_{\parallel}[z+W_d/2+(n-1)W]} \\ & + A_{n,2}^l e^{-q_{\parallel}[z+W_d/2+(n-1)W]}, \quad (4) \\ & -[W_d/2+(n-1)W+W_a] \leq z \\ & \leq -[W_d/2+(n-1)W], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \dots \\ \phi(z) = & D_1 e^{q_{\parallel} z} + D_2 e^{-q_{\parallel} z}, \quad (5) \\ & -(W_d/2) \leq z \leq W_d/2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \dots \\ \phi(z) = & A_{n,1}^r e^{q_{\parallel}[z-W_d/2-(n-1)W]} \\ & + A_{n,2}^r e^{-q_{\parallel}[z-W_d/2-(n-1)W]}, \quad (6) \end{aligned}$$

2. 模型与公式

考虑如图 1 所示结构;一个缺陷层 d ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) 镶嵌在两个周期数为 n 的有限超晶格之间,超晶格组分层由 a (GaAs) 和 b (AlAs) 构成,两边的基底都为均匀介电层 (GaAs) 被分别标为 c^l 和 c^r .各层的介电常数为 ϵ_i (ω, \mathbf{k}) 分别代表 a, b, d, c^l 和 c^r 组分层 a 和 b 的厚度分别为 W_a 和 W_b ,周期为 $W = W_a + W_b$.

$$\begin{aligned} W_d/2 + (n-1)W & \leq z \\ & \leq W_d/2 + (n-1)W + W_a, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi(z) = & B_{n,1}^r e^{q_{\parallel}[z-W_d/2-(n-1)W-W_a]} \\ & + B_{n,2}^r e^{-q_{\parallel}[z-W_d/2-(n-1)W-W_a]}, \quad (7) \\ W_d/2 + (n-1)W + W_a \\ & \leq z \leq W_d/2 + nW, \end{aligned}$$

$$\phi(z) = c^r e^{-q_{\parallel}[z-W_d/2-nW]}, z \geq W_d/2 + nW. \quad (8)$$

应用边界条件:静电势 $\phi(\mathbf{r})$ 和电位移 D [$D = \epsilon E = -\epsilon \nabla \phi(\mathbf{r})$] 的垂直分量在边界处连续,可导出下列等式:

$$\begin{pmatrix} c^r \\ q_{\parallel} \epsilon_c^l c^l \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} 0 \\ c^l \end{pmatrix}, \quad (9)$$

式中

$$\begin{aligned} T = & \mathcal{T}(W_b, \epsilon_b) T_l^{(n-1)} M^{-1}(\epsilon_b) \mathcal{T}(W_a, \epsilon_a) T_{da} \\ & \times T_{da} T^{-1}(-W_a, \epsilon_a) \mathcal{M}(\epsilon_b) \\ & \times T_r^{(n-1)} T^{-1}(-W_b, \epsilon_b) C_0, \quad (10) \end{aligned}$$

其中

$$\mathcal{T}(z, \epsilon) = \begin{pmatrix} e^{-q_{\parallel} z} & e^{q_{\parallel} z} \\ q_{\parallel} \epsilon e^{-q_{\parallel} z} & -q_{\parallel} \epsilon e^{q_{\parallel} z} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

$$\mathcal{M}(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ q_{\parallel} \epsilon & -q_{\parallel} \epsilon \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$T_l = M^{-1}(\epsilon_b) \mathcal{T}(W_a, \epsilon_a) M^{-1}(\epsilon_a) \mathcal{T}(W_b, \epsilon_b) \quad (13)$$

$$\begin{aligned} T_r = & T^{-1}(-W_b, \epsilon_b) \mathcal{M}(\epsilon_a) \\ & \times T^{-1}(-W_a, \epsilon_a) \mathcal{M}(\epsilon_b), \quad (14) \end{aligned}$$

$$T_{ad} = M^{-1}(\epsilon_a)T(W_d/2, \epsilon_d), \quad (15)$$

$$T_{da} = T^{-1}(-W_d/2, \epsilon_d)M(\epsilon_a), \quad (16)$$

$$C_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -q_{\parallel} \epsilon_c^r \end{pmatrix}. \quad (17)$$

由(9)–(17)式,可以导出图1所示结构的色散关系为

$$T_{22} - q_{\parallel} \epsilon_c^r T_{12} = 0. \quad (18)$$

其中 T_{22} 和 T_{12} 为 T 的矩阵元.对于三元合金缺陷层 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$,其介电函数表达式为^[19]

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} \frac{(\omega^2 - \omega_{LOa}^2)(\omega^2 - \omega_{LOb}^2)}{(\omega^2 - \omega_{TOa}^2)(\omega^2 - \omega_{TOb}^2)}, \quad (19)$$

式中的 ϵ_{∞} 为高频介电常数,下标 a, b 分别对应三元合金中的类 GaAs 模和类 AlAs 模, ω_{TO} 和 ω_{LO} 分别为横向和纵向光学声子频率.且有

$$\epsilon_{\infty}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = 10.89 - 2.73x,$$

$$\begin{aligned} \omega_{LO}(\text{类 GaAs 模}) &= 55.0450 - 9.9461x + 2.7181x^2, \\ \omega_{TO}(\text{类 GaAs 模}) &= 50.5503 - 0.9718x - 1.7614x^2, \\ \omega_{LO}(\text{类 AlAs 模}) &= 67.7699 + 13.3323x - 5.0414x^2, \\ \omega_{TO}(\text{类 AlAs 模}) &= 67.7699 + 0.8352x - 0.4555x^{2[21]}. \end{aligned}$$

3. 结果与讨论

图2给出了缺陷层 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 取不同的掺杂浓度 x 时,类 AlAs 模的色散关系.图2(a)–(f)分别对应着 $x = 1, 0.85, 0.7, 0.5, 0.3, 0.2$.这里取 $W_a = 20 \text{ nm}$, $W_b = 10 \text{ nm}$, $W_d = 14 \text{ nm}$, $n = 5$.为清楚地了解界面模的局域性质与其在体带外或内的频率位置的关系,图中还给出了与该有限超晶格组分层具有同样结构参数的无限超晶格的连续体带的带边,它们分别对应着布里渊微区的中心和边界(即 $q_z = 0$ 和

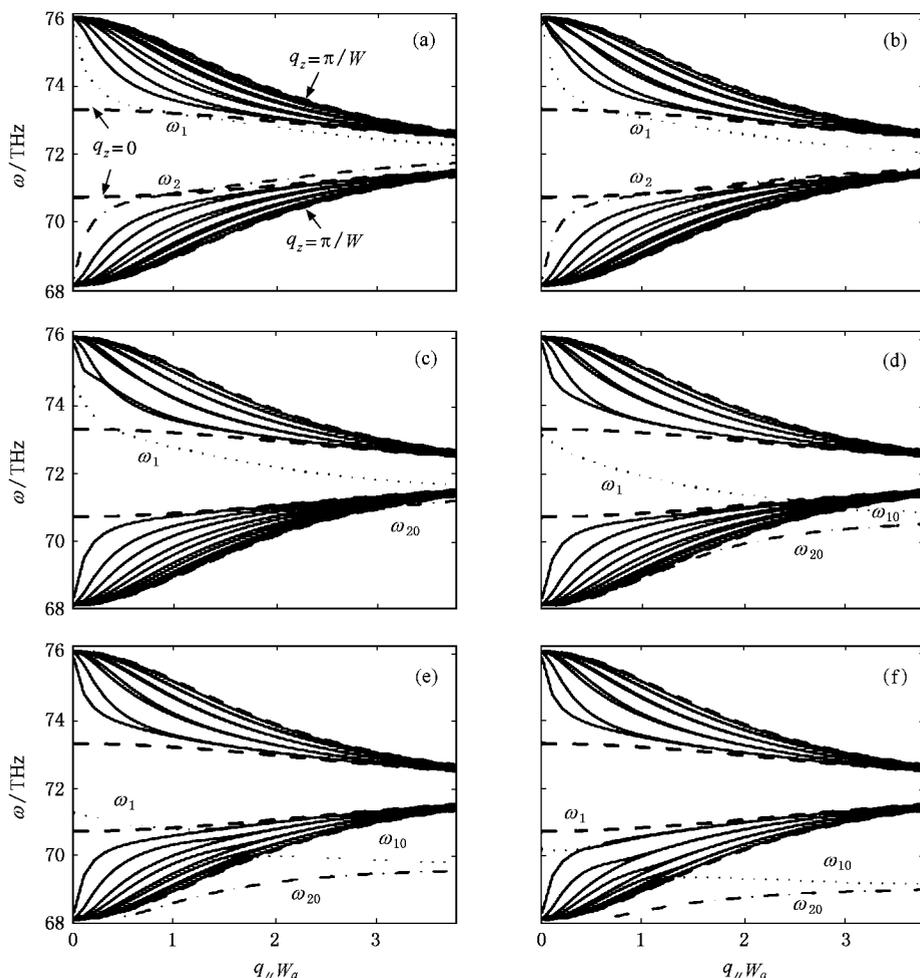


图2 改变缺陷层成分数 x 时类 AlAs 界面光学声子模频率随横向波数的变化关系 (a)–(f) 分别对应 $x = 1, 0.85, 0.7, 0.5, 0.3, 0.2$.局域模 ω_1, ω_{10} 和 ω_2, ω_{20} 分别用点线和点划线表示,实线表示扩展模.虚线分别对应着无限超晶格中连续体带的布里渊微区的中心和边界(即 $q_z = 0$ 和 $q_z = \pi/W$)

$q_z = \pi/W$). 显然, 在无限和半无限超晶格中的连续体带在有限超晶格中分裂成了 22 条分立的界面模, 一个微隙将这些模分成上、下两部分, 且此微隙随着横向波数的增大而逐渐变窄, 在大的 q_{\parallel} 值处形成态的密集区. 为了解这些界面模的局域情况, 分别计算了各支模的宏观静电势波函数, 发现只有模 ω_1 , ω_2 , ω_{10} 和 ω_{20} 局域在缺陷层附近, 称之为局域模, 其他模均没有明显的局域位置, 称之为扩展模. 图 3(a)(b) 分别给出了图 2 中的 ω_1, ω_{10} 及 ω_2, ω_{20} 在 $q_{\parallel} = 2/W_a$ 处的宏观静电势波函数的模 $|\varphi(z)|$.

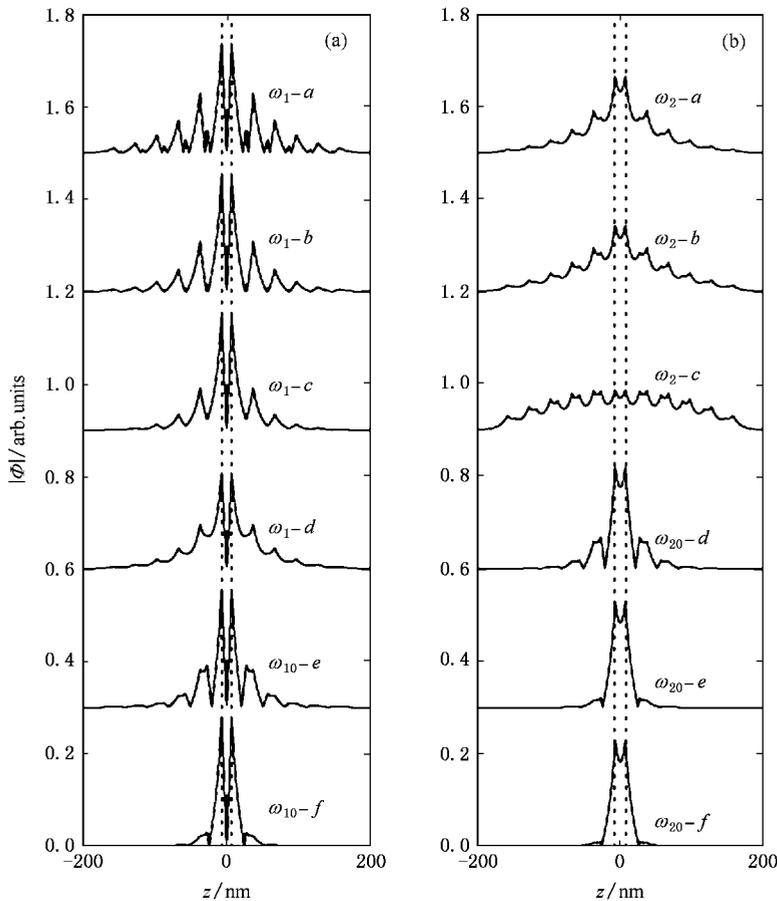


图 3 局域模在 Z 方向的宏观静电势波函数的模 $|\varphi(z)|$ (a) 和 (b) 中的实曲线自上至下分别对应图 2(a)–(f) 中 $q_{\parallel} = 2/W_a$ 处的 ω_1, ω_{10} 和 ω_2, ω_{20} 模, 两条点线对应缺陷层的两个边界. 为清晰起见, 相邻曲线依次垂直平移了 0.3 个单位

从图 2(a) 和图 3 可以看出, 当缺陷层的掺杂浓度 x 为 1 (即缺陷层为二元合金 AlAs) 时, 在微隙内出现一对界面光学声子模 ω_1 和 ω_2 , 它们的静电势波函数大部分集中在缺陷层附近, 是为局域模. 引入三元合金 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($0 < x < 1$) 后, 随着成分数 x 减小, 两条局域模逐渐向低频方向移动. 从图 3 可以发现, 局域模的频率越接近微隙的中心, 其在缺陷层附

由图 2 可以发现: 除了在 $q_{\parallel} \approx 0$ 附近, 即使在缺陷层左右两侧分别只取 5 个周期, 其扩展模形成的体带边与无限超晶格的连续体带边也吻合得很好, 这是由于界面光学声子模的隧穿深度往往只有几个片层, 而在布里渊区中心附近其波长更长而隧穿的片层更多. 在本文的计算中, 缺陷层左右两侧分别只取 5 个周期的另外一个原因是下面讨论的局域模和表面模的特征并不随层数的增加而变化, 而且当更多的层数被计算时, 界面模的数目增加而难以分清.

近的局域程度越高. 当 x 约为 0.7 时, ω_2 支慢慢地进入体带而变成扩展模; 与此同时在体带下有一条局域模 ω_{20} 从体带中逐渐剥离出来, 而从图 3 可看出, 它具有与 ω_2 支相同的偶宇称, 因而将它标为 ω_{20} (见图 2(c)). 当 x 约为 0.5 时, ω_1 支短波部分穿透体带而在体带下方出现一条新的模 ω_{10} (见图 2(d)), 这支模与 ω_1 具有同样的奇宇称. 这样在某些

参数下,会出现多达三条的局域模存在于微隙内或微带外.当 x 继续减小时, ω_1 支也会渐渐进入体带,同时 ω_{10} 支和 ω_{20} 支继续向低频方向移动,局域程度又逐渐变大.这些计算结果带来一个疑问:对于不同的横向波数 q_{\parallel} ,为何局域模的数目不守恒?对这一问题,可从物理上解释如下:在理想的超晶格结构中,微带可以看成是由相邻的介电层之间的周期性耦合而导致能级劈裂所形成的,而对于有着非均匀层的超晶格如目前讨论的结构,这种周期性耦合在非均匀层附近被局部地破坏了,从而产生局部的非周期性耦合,这种非周期性耦合导致新的能级劈裂,它不同于周期性耦合所产生的能级劈裂,某些非周期性的劈裂可能位于超晶格的微带之中,从而变成扩展模,而另外一些可能位于微隙之中或微带外面而变成局域模.虽然对于不同的横向波数 q_{\parallel} ,局域模的数目可能不守恒,但总的模数是守恒的.上面的计算结果清楚地证实了这一解释:在界面模演化过程中,虽然发生了局域模的没入、穿越等行为,但对于所有的横向波数,界面模的总数总是守恒的.在图

2 中, ω_2 支从上没入体带的同时会有 ω_{20} 支从体带下方剥离出来(见图 2(c)),而 ω_1 支低频部分从上没入体带的同时会有 ω_{10} 支从体带下方出现(见图 2(d)),这样界面模的总数总能保持恒定.另外,从计算中还可以发现所有界面模的静电势波函数是奇宇称和偶宇称交替出现的,这里有确定的宇称是由于所研究的结构是关于缺陷层中心对称的,在有空间反演对称性的受限系统中,所有的非简并本征态都有确定的宇称.同时还能看出每条界面模的宏观静电势能函数的波峰和波谷都对应于超晶格片层的界面和中垂面,与文献 [18] 的结果相符合.

上面研究了类 AlAs 模的演化过程,而对于图 1 所示结构的类 GaAs 模,除了局域模随着 x 的增加向高频方向移动及宏观静电势波函数的对称性相反外,其他现象都与类 AlAs 模相似.

局域模与超晶格结构参数也有很大关系,特别是缺陷层和组分层之间及组分层内的相对厚度显著地影响着局域模的特性.图 4 给出了当 b 层厚度取不同值时,局域模的演化规律.这里取 $W_a = 10$ nm,

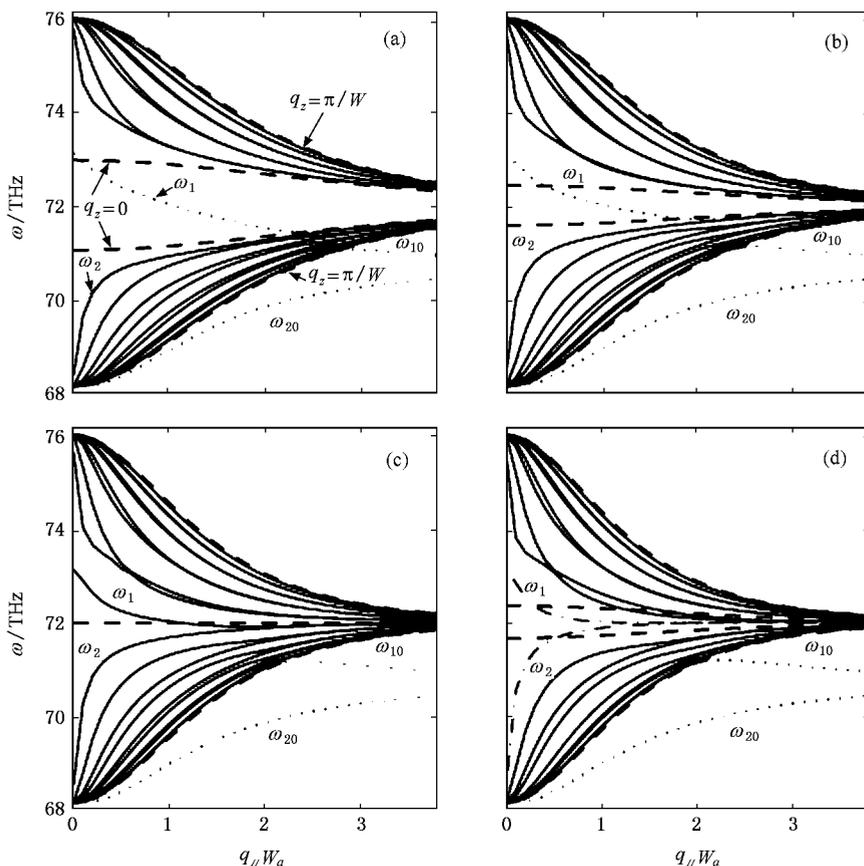


图 4 改变组分层 b 的厚度 W_b 时类 AlAs 界面光学声子模频率随横向波数的变化关系 (a)–(d) 分别对应 $W_b = 6, 8, 10, 12$ nm. $W_a = 10$ nm, $W_d = 6$ nm, $n = 5$, $x = 0.5$.点线和点划线分别表示局域模和表面模, ω_1 和 ω_2 为靠近微隙中心的两条模.其他说明同图 2

$W_d = 6 \text{ nm}$, $n = 5$, $\mu = 0.5$. 图 4(a)–(d) 分别对应 $W_b = 6, 8, 10, 12 \text{ nm}$. 显然, 当 W_b 改变时, 缺陷层和组分层之间及组分层内部的相对厚度都发生了改变. 从图 4 可知, 随着 W_b 的增加, 上、下两部分的扩展模向着微隙中心彼此靠拢, 两条位于体带外的局域模除了其横向波数范围逐渐变宽以外, 其频率特征基本不随组分层的厚度的变化而改变, 但靠近微隙中心的两条模却发生了显著变化. 为了探究这两条模的演化规律, 图 5 给出了它们在 $q_{\parallel} = 1/W_a$ 处的宏观静电势波函数的模 $|\phi(z)|$ 的变化情况. 在 $W_b = 6 \text{ nm}$ 时, 缺陷层厚度与组分层 b 的厚度相等, 此时结构参数变成了一个理想的有限超晶格, 但由于缺陷层成分特性的不同, 导致微隙中仍有局域模 ω_1 支存在(见图 4(a)), 并且随着 W_b 的增加, 体模向微隙中心挤压, 而局域模的静电势波函数分布向左右两侧移动, 局域程度逐渐减弱. 当 W_b 增加到 10 nm , 即 $W_b = W_a$ 时(见图 4(c)), 这时超晶格组分层的厚度

相同, 图中的微隙闭合成一条线, ω_1 的静电势波函数看不出明显的局域位置(见图 5), 此时, 局域模已演变成了扩展模. 但当 W_b 继续增大($W_b > W_a$) 时, 微隙重新出现, 扩展模的静电势波函数分布继续向左右两侧移动而局域在两个表面, 变成了具有奇宇称的表面模, 与此同时, 扩展模 ω_2 支也会演化成表面模, 但其具有偶宇称, 而且两条表面模之间出现了简并现象, 简并位置随着 W_b 的增加而向长波方向移动(见图 4(d)). 然而, 即使这两条表面模发生了简并(即它们的频率相同), 但由于其宇称不一样, 其实质上还是两条模, 界面模的总数依然保持守恒. 另外, 在图 4(d) 中, 当 q_{\parallel} 大约为 $1.5/W_a$ 时, 发现微隙上部有两条扩展模相继进入微隙中, 计算表明此时它们的波函数大部分位于与缺陷层相邻的第一个片层, 因而具有与局域模相似的局域特性, 但它们分别拥有不同的宇称.

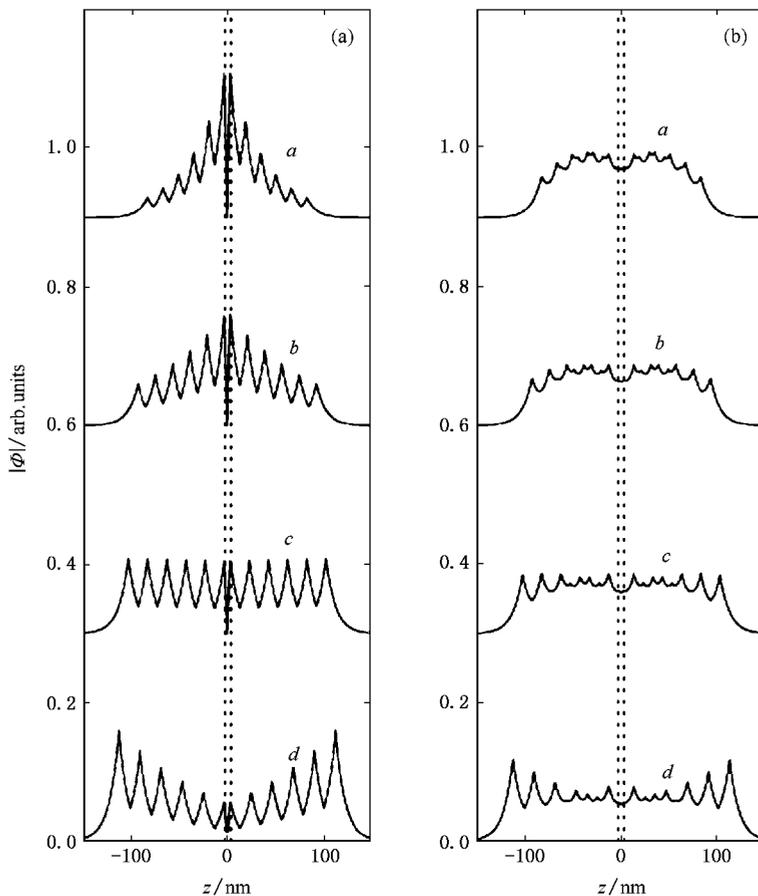


图 5 光学声子模在 z 方向的宏观静电势波函数的模 $|\phi(z)|$ (a) 和 (b) 中实曲线自上至下分别对应图 4(a)–(d) 在 $q_{\parallel} = 1/W_a$ 处的 ω_1 和 ω_2 . 其他说明同图 3

为了更进一步的看清局域模随组分厚度变化的变化,图6给出了所有界面模随 b 层厚度连续变化的演变情况.这里的 $n=20$.需要指出的是前面计算中有限超晶格的两侧分别只取了5个周期,但从图6易知,当取更多周期数时,除了体模增多、变密外,局域模和表面模的位置及性质并不发生改变,而且由于体模的增多使得界面模的演化轨迹难以分辨.随着 b 层宽度的增加,局域模 ω_2 支逐渐没入体带中而成为扩展模,与此同时, ω_{20} 支从体带下方出现,且当 W_b 继续增加时不再有明显的色散,频率趋于不变;另一支局域模 ω_1 支则在 W_b 超过 W_a 时演化为具有确定宇称的表面模 ω_s .另外,从图可知连续体带间的微隙随着 W_b 的增加先是逐渐变窄,在 $W_b = W_a$ 时趋向于0,然后又逐渐变宽,但局域模始终在连续体带之外.然而对于较大的 W_b 值,在微隙中又出现了一条新的模 ω' ,计算表明该模的静电势波函数也大部分集中于缺陷层附近的第一个片层中,具有与局域模相似的局域特性.这些都说明了组分厚度相对厚度对界面模的深刻影响.

上述现象可以从物理的角度来加以理解:对于一个含缺陷的有限超晶格,周期性在表面和缺陷附近被局部破坏了,从而导致了新的耦合的产生,使得在微隙内或微隙外出现局域在缺陷或表面的界面模,且这些模的存在与特性很明显地依赖于组分厚度和缺陷层的介电常数及相对厚度,特别是连接左右两部分的缺陷层的介电特性.所以,当缺陷层为三元合金时,其两模行为不仅导致了第三条局域模的出现,而且局域模的特性也被三元合金的成分强烈地影响,而当某一组分厚度改变时,会引起其对另一组分厚度及缺陷层的相对厚度改变,从而使得局域模的性质发生显著变化.

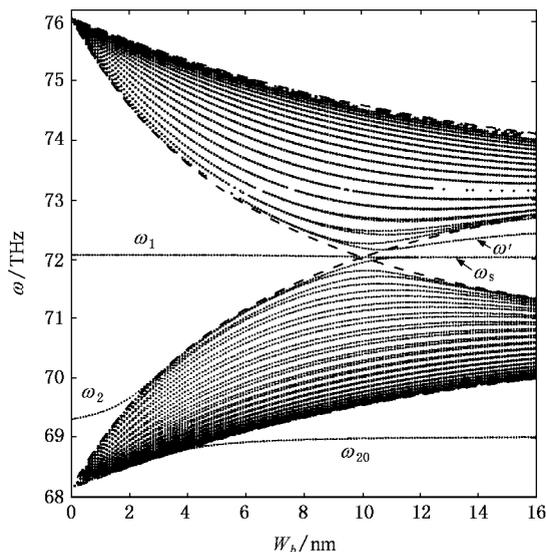


图6 类AlAs界面光学声子模频率随组分厚度 W_b 的变化关系. $W_a = 10 \text{ nm}$, $W_d = 6 \text{ nm}$, $x = 0.5$, $n = 20$, $q_{\parallel} = 1/W_a$.所有界面模都用点线表示,虚线说明同图2

4. 结 论

本文采用转移矩阵的方法,研究了含三元合金缺陷层对有限超晶格中局域界面光学声子模的影响.结果显示,在这种结构中,既存在局域模,又存在表面模.当改变缺陷层和组分厚度的介电常数或相对厚度时,局域模和表面模发生没入、穿越和简并等行为,其局域位置和特性发生显著变化,但在变化过程中,所有界面模的总数对不同横向波数而言总是守恒的.三元合金与二元合金介电性质大不相同,它有着两模行为,当缺陷层由这种材料组成时,相应结构中的耦合变得更为复杂,导致了更为丰富的局域模谱.这些结果表明局域界面光学声子模能很好地通过改变结构参数和材料性质来进行调制.

- [1] Xia J B, Li S S 2003 *Phys. Rev. B* **68** 75310
 [2] Zhu B F, Chang Y C 1994 *Phys. Rev. B* **50** 11932
 [3] Zhu J L, Dai Z S, Hu X 2003 *Phys. Rev. B* **68** 45324
 [4] Luo X D, Bian L F, Xu Z Y *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1761 (in Chinese) [罗向东、边历峰、徐仲英等 2003 物理学报 **52** 1761]
 [5] Liu C S, Ma B K 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2027 (in Chinese) [刘承师、马本 2003 物理学报 **52** 2027]
 [6] Huang W Q, Chen K Q, Shuai Z G *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2330 (in Chinese) [黄维清、陈克求、帅志刚等 2004 物理学报

- 53** 2330]
 Huang W Q, Chen K Q, Shuai Z G *et al* 2004 *Phys. Lett. A* **325** 70
 [7] Liang X X, Ban S L 2004 *Chin. Phys.* **13** 0071
 [8] Sood A K, Menendez, Cardona 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 2115
 [9] Colvard C, Gant T A, Klein M V 1985 *Phys. Rev. B* **31** 2080
 [10] Zucker J E., Pinczuk A, Chemla D S *et al* 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 1280
 [11] Gu B L., Duan W H, Xiong S Y, Guo Y J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 1683

- [12] Zheng R S , Mitsuru 1999 *Phys. Rev. B* **60** 4937
- [13] Wang X H , Gu B Y , Yang G Z 1998 *Phys. Rev. B* **58** 4629
- [14] Mizuno S , Tamura S I 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13423
Mizuno S , Tamura S I 1996 *Phys. Rev. B* **53** 4549
- [15] Camley R E , Mills D L 1984 *Phys. Rev. B* **29** 1695
- [16] Streight S R , Mills D L 1987 *Phys. Rev. B* **35** 6337
- [17] Tsuruoka T , Uehara Y , Ushioda S 1994 *Phys. Rev. B* **49** 4745
- [18] Chen K Q , Wang X H , Gu B Y 2000 *Phys. Rev. B* **62** 9919
Chen K Q , Wang X H , Gu B Y 2002 *Phys. Rev. B* **65** 153305
- [19] Chen K Q , Gu B L , Gu B Y *et al* 2002 *J. Phys. : Condens , Matter* **14** 13761
- [20] Sang H Y , Gu B Y , Wang X H *et al* 2005 *Phys. Lett. A* **334** 55
- [21] Adachi S 1985 *J. Appl. Phys.* **58** R 1

Influence of ternary mixed crystal defect layer on the localized interface optical-phonon modes in a finite superlattice^{*}

Wang Xin-Jun^{1,2)} Wang Ling-Ling^{1)†} Huang Wei-Qing¹⁾ Tang Li-Ming¹⁾ Zou Bing-Suo¹⁾ Chen Ke-Qiu^{1)‡}

¹⁾ Department of Applied Physics , Hunan University , Changsha 410082 , China)

²⁾ School of Science , Central South University of Forestry & Technology , Changsha 410004 , China)

(Received 15 August 2005 ; revised manuscript received 15 November 2005)

Abstract

Within the framework of dielectric continuum theory , we study the effect of ternary mixed crystal defect layer on the localized interface optical-phonon modes in a finite superlattice by using a transfer matrix method. In such a finite superlattice , the evolution of all the interface modes can be clearly tracked. Our numerical results show there exist two types of localized modes and their macroscopic electrostatic potentials mostly locate in the vicinity of the defect layer or surface layer , respectively. As the relative widths and nature of the structural cell or the defect layer are altered , the localized characteristics of these modes are significantly influenced. Though the conservation of the total number of localized modes is broken , the conservation of the total number of all interface modes including both the extended modes and localized modes is still kept for every value of the wavevector q_{\parallel} .

Keywords : interface optical-phonon modes in superlattice , localized modes

PACC : 6322 , 6320P

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 90403026) and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20050532013).

[†] E-mail : llwang@hnu.cn

[‡] E-mail : keqiuchen@hnu.cn