

三元混晶四层系统的表面和界面声子极化激元*

包锦 闫翠玲 闫祖威†

(内蒙古农业大学理学院, 呼和浩特 010018)

(2013年12月26日收到; 2014年2月3日收到修改稿)

运用改进的无规元素等位移模型和玻恩-黄近似, 结合电磁场的麦克斯韦方程和边界条件, 研究了真空/极性二元晶体薄膜/极性三元混晶薄膜/极性二元晶体衬底四层系统的表面和界面声子极化激元. 以 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 和 $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 为例, 获得了表面和界面声子极化激元模的色散关系以及表面模和界面模的频率随混晶组分和薄膜厚度的变化关系. 结果表明, 三元混晶四层异质结系统中存在七支表面和界面声子极化激元模, 且这七支表面模和界面模的频率随混晶组分和薄膜厚度呈非线性变化, 三元混晶的“单模”和“双模”性也在色散曲线中得到了很好的体现.

关键词: 表面和界面声子极化激元, 四层系统, 三元混晶

PACS: 71.36.+c, 78.67.Pt, 78.30.Fs

DOI: 10.7498/aps.63.107105

1 引言

位于介质表面和界面处的红外长波横光学声子与太赫兹的电磁波耦合生成的表面和界面声子极化激元具有独特的物理性质, 如只能沿着介质的表面和界面传播, 且能够在介质的体声子极化激元的禁带频率区间内传播, 在此区间内介质的介电函数为负值, 所以其不仅在表面物理的基础理论研究方面起着重要的作用, 而且在实验技术应用方面, 如在热光伏能量转换^[1]、高密度数据存储^[2]、相干热辐射^[3]、光学传感器^[4]、红外显微镜^[5]等领域也有着重要的应用. 因此, 表面和界面声子极化激元在理论和实验两方面都得到了广泛的研究.

在实验方面, 人们通常使用拉曼散射和衰减全反射方法研究表面和界面声子极化激元的性质^[6,7]. 在理论方面, 准二维系统(如异质结、量子阱、超晶格系统)的表面和界面声子极化激元得到了广泛的研究^[8-11]. 龚志强等^[8]采用转移矩阵方法研究了含结构缺陷层的两耦合半无限超晶格中

的局域界面声子极化激元性质. Ng等^[9]研究了生长在碳化硅衬底上的GaN薄膜的表面和界面声子极化激元特性. 最近, Ng等^[10]又研究了纤锌矿结构氧化锌/金刚石异质结系统的表面声子极化激元. 但是大多数的准二维系统都是由二元晶体构成的, 三元混晶异质结系统的表面和界面声子极化激元的研究却很少. 由于三元混晶具有二元晶体所没有的独特的物理性质, 如其有两套长波横、纵光学声子, 且其频率随组分是连续变化的, 从而被广泛地应用于异质结、量子阱、超晶格、量子线和量子点等半导体低维系统, 是用于制造许多新型的电子器件和光电器件的重要材料. 三元混晶独特的物理性质将会导致三元混晶异质结系统的表面和界面声子极化激元表现出完全不同于二元系统的特性. 因此, 对三元混晶异质结系统的表面和界面声子极化激元模的研究是很有必要的.

本文采用改进的无规元素等位移模型^[12]和玻恩-黄近似^[13], 运用电磁场的麦克斯韦方程和边界条件研究三元混晶四层异质结系统的表面和界面声子极化激元模及其能量随波矢、组分和薄膜厚度

* 国家自然科学基金(批准号: 11364028)、内蒙古自治区自然科学基金重大项目(批准号: 2013ZD02)、内蒙古农业大学科技创新团队(培育)项目(批准号: NDPYTD2010-7)和内蒙古农业大学基础学科基金(批准号: JC201002)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zwyang101@126.com

的变化关系, 并对结果进行了讨论.

2 理论模型

本文研究一个包含三元混晶薄膜材料的四层异质结系统, 即真空/极性二元晶体薄膜/极性三元混晶薄膜/极性二元半导体衬底, 极性二元晶体薄膜和极性三元混晶薄膜分别位于 $-d_1 < z < 0$ 和 $-(d_1 + d_1) < z < -d_1$ 区间内, $z > 0$ 和 $z < -(d_1 + d_1)$ 区域分别为真空和极性二元半导体衬底, 在系统的表面和界面处有波矢为

$$E_x(z) = \begin{cases} E^{(0)} \exp(-\kappa_0 z) & (z > 0), \\ E^{(1)} \exp(\kappa_1 z) + E^{(2)} \exp(-\kappa_1 z) & (-d_1 < z < 0), \\ E^{(3)} \exp(\kappa_2 z) + E^{(4)} \exp(-\kappa_2 z) & (-(d_1 + d_2) < z < -d_1), \\ E^{(5)} \exp(\kappa_1 z) & (z < -(d_1 + d_2)). \end{cases}$$

这里 $E^{(0)}, E^{(1)}, E^{(2)}, E^{(3)}, E^{(4)}, E^{(5)}$ 为电场振幅; $\kappa_0, \kappa_1, \kappa_2$ 分别为真空、极性二元晶体薄膜、极性三元混晶薄膜的表面波和界面波的衰减常数, 其具体表达式为

$$\kappa_0^2 = k_{\parallel}^2 - \omega^2/c^2, \quad (2a)$$

$$\kappa_i^2 = k_{\parallel}^2 - \varepsilon_i(\omega)\omega^2/c^2 \quad (i = 1, 2). \quad (2b)$$

为了确保电磁波离开表面和界面后的衰减, 这些衰减常数都应为正的实数. 利用电磁场的边界条件可得到四层异质结系统中表面和界面声子极化激元的色散关系为

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{\kappa_1 \varepsilon_2}{\kappa_2 \varepsilon_1}\right) \left[\left(1 + \frac{\kappa_0}{\kappa_1} \varepsilon_1\right) \left(1 + \frac{\kappa_2 \varepsilon_1}{\kappa_1 \varepsilon_2}\right) \right. \\ & - \exp(-2\kappa_1 d_1) \left(1 - \frac{\kappa_0}{\kappa_1} \varepsilon_1\right) \left(1 - \frac{\kappa_2 \varepsilon_1}{\kappa_1 \varepsilon_2}\right) \left. \right] \\ & + \exp(-2\kappa_2 d_2) \left(1 - \frac{\kappa_1 \varepsilon_2}{\kappa_2 \varepsilon_1}\right) \\ & \times \left[\left(1 + \frac{\kappa_0}{\kappa_1} \varepsilon_1\right) \left(1 - \frac{\kappa_2 \varepsilon_1}{\kappa_1 \varepsilon_2}\right) \right. \\ & - \exp(-2\kappa_1 d_1) \left(1 - \frac{\kappa_0}{\kappa_1} \varepsilon_1\right) \left(1 + \frac{\kappa_2 \varepsilon_1}{\kappa_1 \varepsilon_2}\right) \left. \right] \\ & = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

二元晶体的介电函数 $\varepsilon_1(\omega)$ 为

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{LO}^2}{\omega^2 - \omega_{TO}^2}. \quad (4)$$

三元混晶的介电函数 $\varepsilon_2(\omega)$ 可以通过采用改进的无

k_{\parallel} 的表面和界面声子极化激元传播. 我们选择波矢 \mathbf{k}_{\parallel} 沿着 x 方向, 即 $k_x = k_{\parallel}, k_y = 0$. 只考虑有横磁特征的表面和界面声子极化激元, 即其电场 \mathbf{E} 位于 $x-z$ 平面内, 磁场 \mathbf{H} 沿 y 轴. 采用 Mills 和 Maradudin^[14] 提出的方法研究由三元混晶构成的四层异质结系统的表面和界面声子极化激元. 电场 \mathbf{E} 可以写为

$$\mathbf{E}_{\alpha} = \mathbf{E}_{\alpha}(z) \exp(ik_{\parallel}x - i\omega t) \quad (\alpha = x, z), \quad (1)$$

其中,

规元素等位移模型和描述三元混晶系统晶格振动的类玻恩-黄方程得到^[12,13].

描述三元混晶晶格振动的类玻恩-黄方程为

$$\ddot{\mathbf{W}}_1 = b_{11}\mathbf{W}_1 + b_{12}\mathbf{W}_2 + b_{13}\mathbf{E}, \quad (5)$$

$$\ddot{\mathbf{W}}_2 = b_{21}\mathbf{W}_1 + b_{22}\mathbf{W}_2 + b_{23}\mathbf{E}, \quad (6)$$

$$\mathbf{P} = b_{31}\mathbf{W}_1 + b_{32}\mathbf{W}_2 + b_{33}\mathbf{E}. \quad (7)$$

在方程(5)–(7)中, $\mathbf{W}_1 = \mu_1^{1/2}\mathbf{s}_1, \mathbf{W}_2 = \mu_2^{1/2}\mathbf{s}_2$, 其中, \mathbf{s}_1 和 \mathbf{s}_2 分别为 $A-C$ 离子对和 $B-C$ 离子对的相对位移, μ_1 和 μ_2 为相对应的约化质量, $\mathbf{s}_1 = (\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_C), \mathbf{s}_2 = (\mathbf{u}_B - \mathbf{u}_C), \mathbf{u}_A, \mathbf{u}_B$ 和 \mathbf{u}_C 分别为离子 A, B 和 C 的位移; \mathbf{E} 为宏观电场; \mathbf{P} 为极化矢量; $b_{ij} (i, j = 1, 2, 3)$ 为描述三元混晶的类玻恩-黄方程的动力学系数, 已由文献^[15, 16] 计算出, 本文可直接使用该数值.

假设方程(5)–(7)的解为

$$\mathbf{W}, \mathbf{P}, \mathbf{E} \propto \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (8)$$

其中 ω 和 \mathbf{k} 分别为极化激元的频率和波矢. 将方程(8)代入到方程(5)–(7)中, 可得到宏观电场 \mathbf{E} 和极化矢量 \mathbf{P} 之间的关系为

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = & \left\{ b_{31} \left[\frac{b_{23}b_{12} - b_{13}(b_{22} + \omega^2)}{(b_{11} + \omega^2)(b_{22} + \omega^2) - b_{12}b_{21}} \right] \right. \\ & + b_{32} \left[\frac{b_{13}b_{21} - b_{23}(b_{11} + \omega^2)}{(b_{11} + \omega^2)(b_{22} + \omega^2) - b_{12}b_{21}} \right] \\ & \left. + b_{33} \right\} \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (9)$$

三元混晶的介电常数为

$$\epsilon_2(\omega) = 1 + \chi(\omega)/\epsilon_0. \quad (10)$$

这里

$$\chi(\omega) = \left\{ b_{31} \left[\frac{b_{23}b_{12} - b_{13}(b_{22} + \omega^2)}{(b_{11} + \omega^2)(b_{22} + \omega^2) - b_{12}b_{21}} \right] + b_{32} \left[\frac{b_{13}b_{21} - b_{23}(b_{11} + \omega^2)}{(b_{11} + \omega^2)(b_{22} + \omega^2) - b_{12}b_{21}} \right] + b_{33} \right\}. \quad (11)$$

由此可知表面和界面声子极化激元的频率不仅依赖于二维波矢 k_{\parallel} , 而且还是三元混晶组分 x 以及极性二元晶体薄膜厚度 d_1 和极性三元混晶薄膜厚度 d_2 的函数.

3 结果及讨论

为了理解三元混晶四层异质结系统的表面和界面声子极化激元的性质, 我们以 $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ 和 $Zn_xCd_{1-x}Se/ZnSe$ 异质结系统为例, 数值计算了表面和界面声子极化激元模的色散关系, 以及表面模和界面模的能量随混晶组分和薄膜厚度的变化关系, 结果如图 1—图 3 所示. 计算所用的参数列于表 1—表 3.

图 1 给出了三元混晶异质结系统 $Al_{0.4}Ga_{0.6}As/GaAs$ 和 $Zn_{0.4}Cd_{0.6}Se/ZnSe$ 的表面和界面声子极化激元模的色散曲线. 这里波矢 k_{\parallel} 分别以 ω_{TGaAs}/c 和 ω_{TZnSe}/c 为单位, 其中, ω_{TGaAs} 和 ω_{TZnSe} 分别为二元晶体 GaAs 和 ZnSe 的长波横光学声子的频率, c 为光速. 由图 1 可知: 与三元混晶双层薄膜和二元晶体异质结系统不同, 在二元混晶异质结系统中有七支表面和界面声子极化激元模, 这些表面模和界面模的频率支分别位于二元晶体和三元混晶的三个体声子极化激元模的禁带频率区间内; 对于不同的系统, 这些表面模和界面模表现出了不同的色散特征. 这是由于二元晶体和三元混晶的横、纵光学声子模频率之间的大小关系不同引起的. 我们将二元晶体的横、纵光学声子模的频率记为 ω_{TO} 和 ω_{LO} , 将三元混晶的光学声子模的频率记为 ω_{1T} , ω_{1L} , ω_{2T} , ω_{2L} . 不失一般性, 我们假设 $\omega_{1T} < \omega_{2T}$, 则这两种系统的色散曲线被分为两种情况: 第一种是 $\omega_{1T} < \omega_{1L} < \omega_{TO} < \omega_{LO} < \omega_{2T} < \omega_{2L}$; 第二种是 $\omega_{1T} < \omega_{1L} < \omega_{2T} < \omega_{TO} < \omega_{2L} < \omega_{LO}$.

二元晶体和三元混晶材料材料的横、纵光学声子支的频率已被计算出, 将上述体声子模的频率列于表 1 和表 2. 这里 ϵ_0 和 ϵ_{∞} 分别为二元材料的静态介电常数和光学介电常数; m 和 M 分别为二元材料的电子有效质量和离子质量; a 为晶格常数.

为了便于表述, 我们分别以数字 1—7 来命名这七支表面和界面声子极化激元模. 模 1 为位于二元晶体薄膜表面的声子极化激元模, 模 2—7 为位于系统界面处的声子极化激元模. 在大波矢极限下, 这七支表面和界面声子极化激元模的频率趋于相应的表面声子模和界面声子模的值, 这些频率值由以下方程的解给出:

$$(\epsilon_1 + 1)(\epsilon_1 + \epsilon_2) = 0, \quad (12)$$

即令方程 (3) 中的波矢 $k_{\parallel} \rightarrow \infty$ 则可. 方程 (12) 中 $\epsilon_1 = -1$ 的解为二元晶体薄膜表面光学声子模的频率值 ω_{1S} , 界面光学声子模的频率值 ω_{2S} , ω_{3S} , ω_{4S} 则由方程 $\epsilon_1 + \epsilon_2 = 0$ 给出. 这里我们将计算得到的表面和界面声子模的频率值列于表 3.

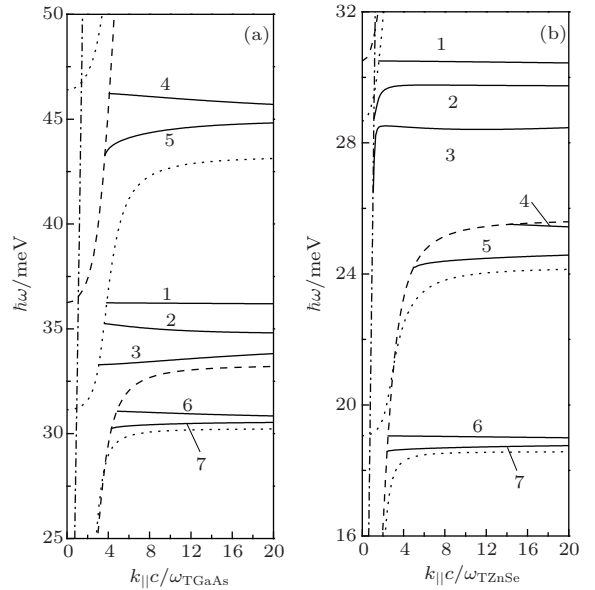


图 1 三元混晶异质结系统 $Al_{0.4}Ga_{0.6}As/GaAs$ 和 $Zn_{0.4}Cd_{0.6}Se/ZnSe$ 的表面和界面声子极化激元的色散曲线 $d_1 = d_2 = 70$ nm, 短划线和点线分别为相应的二元混晶和三元晶体的体声子极化激元的色散曲线, 点划线为光在真空中的色散曲线. (a) 三元混晶异质结系统 $Al_{0.4}Ga_{0.6}As/GaAs$; (b) 三元混晶异质结系统 $Zn_{0.4}Cd_{0.6}Se/ZnSe$

异质结系统 $Al_{0.4}Ga_{0.6}As/GaAs$ 的色散曲线属于第一种情况, 其表面和界面声子极化激元的色散曲线如图 1 (a) 所示. 在小波矢时, 表面模 1

及界面模 2, 3 和界面模 4, 5 及界面模 6, 7 的频率分别起始于 GaAs 和 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ 的体声子极化激元模的频率值, 随着波矢的增大逐渐分别趋于表面和界面光学声子模的频率值 ω_{1S} , ω_{2S} , ω_{3S} 和

ω_{4S} . 其中模 1—3 位于 GaAs 光学声子的频率区间 ($\omega_{\text{TO}}-\omega_{\text{LO}}$) 内, 而模 4, 5 和模 6, 7 则分别位于类 AlAs ($\omega_{2T}-\omega_{2L}$) 和类 GaAs ($\omega_{1T}-\omega_{1L}$) 光学声子的频率区间内.

表 1 数值计算中所用到的参数的取值

材料	$\hbar\omega_{\text{TO}}/\text{meV}$	$\hbar\omega_{\text{LO}}/\text{meV}$	ϵ_0	ϵ_∞	m	$M/\text{a.u.}$	$a^{[19]}/\text{nm}$	
AlAs ^[17]	44.88	50.09	10.06	8.16	0.150	26.99	74.92	0.5660
GaAs ^[17]	33.29	36.25	13.18	10.89	0.067	69.72	74.92	0.56419
ZnSe ^[18]	25.67	30.50	8.33	5.90	0.171	65.38	78.90	0.56680
CdSe ^[18]	21.52	26.56	9.30	6.10	0.130	112.4	78.90	0.59930

表 2 三元混晶 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ 和 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}$ 系统的体光学声子的能量

材料	$\hbar\omega_{1T}/\text{meV}$	$\hbar\omega_{1L}/\text{meV}$	$\hbar\omega_{2T}/\text{meV}$	$\hbar\omega_{2L}/\text{meV}$
$\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$	30.25	31.14	43.25	46.40
$\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}$	18.55	19.01	24.12	28.61

表 3 三元混晶异质结系统 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ 和 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 中表面和界面声子模的能量

材料	$\hbar\omega_{1S}/\text{meV}$	$\hbar\omega_{2S}/\text{meV}$	$\hbar\omega_{3S}/\text{meV}$	$\hbar\omega_{4S}/\text{meV}$
$\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$	36.01	34.78	44.92	30.56
$\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$	29.85	29.73	24.78	18.83

$\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 异质结系统的色散曲线则属于第二种情况. 由图 1 (b) 可知, 在波矢很小时, 表面模 1 和界面模 4—7 的频率值分别起始于二元晶体和三元混晶的体极化激元模的频率, 而界面模 2 和界面模 3 则位于光在真空中的色散曲线的右边. 界面模 2 和界面模 3 与光线的交叉点由下列方程给出:

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{\kappa_1\epsilon_2}{\kappa_2\epsilon_1}\right) \left[\left(1 + \frac{\kappa_2\epsilon_1}{\kappa_1\epsilon_2}\right) \right. \\ & \left. - \exp(-2\kappa_1d_1) \left(1 - \frac{\kappa_2\epsilon_1}{\kappa_1\epsilon_2}\right) \right] \\ & + \exp(-2\kappa_2d_2) \left(1 - \frac{\kappa_1\epsilon_2}{\kappa_2\epsilon_1}\right) \left[\left(1 - \frac{\kappa_2\epsilon_1}{\kappa_1\epsilon_2}\right) \right. \\ & \left. - \exp(-2\kappa_1d_1) \left(1 + \frac{\kappa_2\epsilon_1}{\kappa_1\epsilon_2}\right) \right] = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

由方程 (13) 可以获得交叉点处的波数和频率值, 界面模 2 和界面模 3 的波数、频率值分别为 1.0, 25.67 meV 和 1.12, 28.75 meV. 其中模 1—3 位于 ZnSe 光学声子的频率区间 ($\omega_{\text{TO}}-\omega_{\text{LO}}$) 内, 而界面模 6 和界面模 7 位于类 CdSe 光学声子的频率区间 ($\omega_{1T}-\omega_{1L}$) 内, 界面模 4 和界面模 5 则位于

$\omega_{2T}-\omega_{\text{TO}}$ 频率区间.

由于二元晶体和三元混晶的体声子极化激元模的禁带宽度不同, 故这七条表面模和界面模频率支并不是都能被很容易地测到. $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ 系统的模 1—3 和 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 系统的模 1—3 都处于二元晶体体模的宽禁带内, 对 GaAs 而言, 其禁带宽度约为 3 meV, ZnSe 的禁带宽度大于 4.8 meV, 因此这六条频率支都能很容易地被测到. 对于 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ 系统的其余四支界面模, 由于三元混晶 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ 的两个体声子极化激元的禁带都很宽, 故其都能被测得. 只是界面模 4 和界面模 5 位于混晶系统的类 AlAs 体模的禁带中, 而界面模 6 和界面模 7 位于类 GaAs 的体模禁带中. 类 GaAs 的体模禁带宽度大约为 1.0 meV, 为类 AlAs 体模禁带宽度 (3.0 meV) 的 1/3, 故我们可以断定在 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ 系统中的界面模 4 和界面模 5 能被很容易地测到, 而界面模 6 和界面模 7 的观测则稍微有点困难.

另一方面, 四层系统 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 中的 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}$ 是一个典型的“单模”性混晶, $\omega_{2T}-$

ω_{TO} 频率区间的宽度为 1.55 meV, 因此位于此禁带中的界面模 4 和界面模 5 的频率能被测到. 但是位于另一个很窄的, 宽度大约为 0.4 meV 的禁带中的界面模 6 和界面模 7 则不容易被测到.

为了说明三元混晶四层异质结系统中表面和界面声子极化激元模对混晶组分的依赖关系, 我们计算了二维波矢 $k_{\parallel} = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ [20] 时, 上述三元混晶异质结系统中表面和界面声子极化激元的能量随混晶组分的变化, 结果如图 2 (a) 和 (b) 所示. 在 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ 系统中, 位于三元混晶体声子极化激元的上禁带内的两支界面极化激元模 (模 4 和模 5) 随着 Al 组分的增加非线性增大, 而位于下禁带内的另两支界面极化激元模 (模 6 和模 7) 以及位于二元晶体 GaAs 体声子极化激元模禁带内的另三支极化激元模 (模 1—3) 则都随着 Al 组分的增加而非线性减小. 对于 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 系统而言, 位于三元混晶类 ZnSe 的体声子极化激元模禁带 ($\omega_{2T}-\omega_{2L}$) 内的两支界面极化激元模 (模 4 和模 5), 以及位于 $\omega_{2L}-\omega_{LO}$ 频率区间的模 1—3 都随着 Zn 组分的增加而非线性增大, 而位于类 CdSe 禁带 ($\omega_{1T}-\omega_{1L}$) 内的另两支界面极化激元模 (模 6 和模 7) 则随着 Zn 组分的增加而非线性减小.

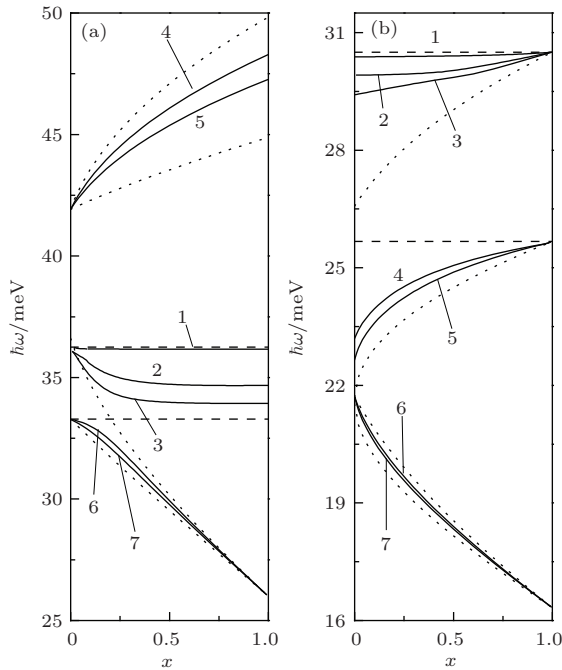


图 2 $k_{\parallel} = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ 时, 异质结系统 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ 和 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 中的表面和界面声子极化激元模的频率随组分 x 的变化. 短划线和点线分别为相应的二元声子模和三元混晶晶体材料的长波纵、横光学声子模. (a) 异质结系统 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$; (b) 异质结系统 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$

三元混晶的“单模”和“双模”性也在图 2 得到了很好的说明. 图 2 (b) 中 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 系统的模 6 和模 7 与两条低频支体系声子模几乎重合, 这主要是因为 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}$ 属于“单模性”混晶, 其低频支体系声子模的禁带非常小, 仅为 0.02 meV, 故 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 系统的模 6 和模 7 在实验上很难被测得.

由色散关系 (3) 式可知, 表面和界面声子极化激元的频率不仅依赖于波矢和混晶组分, 而且薄膜厚度 d 对表面和界面模的频率也有影响, 我们计算了 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ 和 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 系统中表面模和界面模的频率随薄膜厚度 d 的变化, 结果如图 3 (a) 和 (b) 所示.

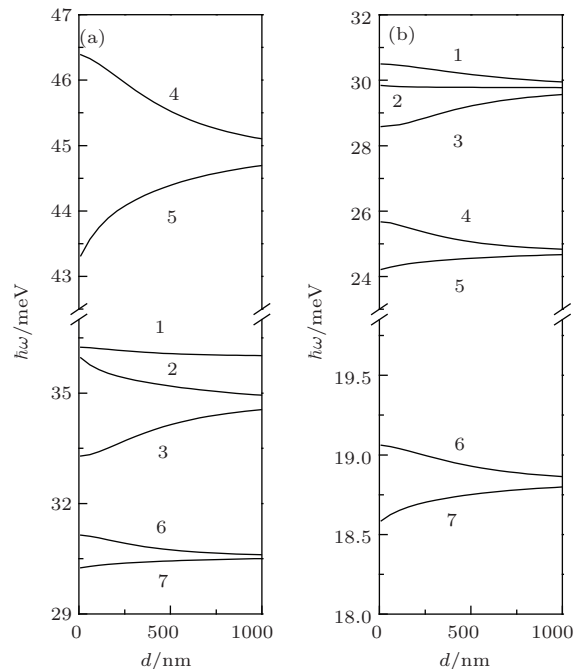


图 3 $k_{\parallel} = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ 时, 异质结系统 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ 和 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 中的表面和界面声子极化激元模的频率随薄膜厚度的变化 (a) 异质结系统 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$; (b) 异质结系统 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$

从图 3 (a) 和 (b) 可以看出, 在 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ 和 $\text{Zn}_{0.4}\text{Cd}_{0.6}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 系统中, 表面模 1 以及位于二元晶体体模禁带内的界面模 2 以及位于三元混晶模禁带内的界面模 4 和界面模 6 的频率都随着薄膜厚度的增加而逐渐减小, 而另外三支界面模, 即位于二元晶体体模禁带内的界面模 3 以及位于三元混晶模禁带内的界面模 5 和界面模 7 的频率都随着薄膜厚度的增加而逐渐增大.

4 结 论

本文采用改进的无规元素等位移模型和玻恩-黄近似, 运用电磁场的麦克斯韦方程和边界条件, 研究三元混晶四层异质结系统的表面和界面声子极化激元, 计算并讨论了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 和 $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$ 异质结系统的表面和界面声子极化激元的频率随波矢、混晶组分以及薄膜厚度的变化关系. 我们发现在三元混晶四层异质结构系统中有七支极化激元模, 且其能量随混晶组分和薄膜厚度的变化呈非线性变化. 而且混晶材料的“单模”和“双模”性也在表面模和界面模的色散曲线中得到了很好的体现.

参考文献

- [1] Francoeur M, Menguc M P, Vaillon R 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 034313
- [2] Ocelic N, Hillenbrand R 2004 *Nat. Mater.* **3** 606
- [3] Greffet J J, Carminati R, Joulain K, Mulet J P, Mainguy S, Chen Y 2002 *Nature* **416** 61
- [4] Taubner T, Keilmann F, Hillenbrand R 2004 *Nano Lett.* **4** 1669
- [5] Huber A J, Ocelic N, Hillenbrand R 2008 *J. Microscopy* **229** 389
- [6] Evans D J, Ushioda S, McMullen J D 1973 *Phys. Rev. Lett.* **31** 369
- [7] Torii K, Koga T, Sota T, Azuhata T, Chichibu S F, Nakamura S 2000 *J. Phys.: Condens. Matter* **12** 7041
- [8] Gong Z Q, He M D 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6607 (in Chinese) [龚志强, 贺梦冬 2007 物理学报 **56** 6607]
- [9] Ng S S, Yoon T L, Hassan Z, Hassan H A 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 241912
- [10] Ng S S, Lee S C, Ooi P K, Saw K, Abdullah M, Hassan Z, Hassan H A 2013 *Ceramics Inter.* **39** S529
- [11] Zhang L W, Xu J P, He L, Qiao W T 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7863 (in Chinese) [张利伟, 许静平, 赫丽, 乔文涛 2010 物理学报 **59** 7863]
- [12] Chang I F, Mitra S S 1971 *Adv. Phys.* **20** 359
- [13] Born M, Huang K 1954 *Dynamical Theory of Crystal Lattices* (New York: Oxford University Press) p82
- [14] Mills D L, Maradudin A A 1973 *Phys. Rev. Lett.* **31** 372
- [15] Liang X X, Ban S L 2004 *Chin. Phys.* **13** 71
- [16] Liang X X, Yang J S 1996 *Solid State Commum.* **100** 629
- [17] Adachi S 1985 *J. Appl. Phys.* **58** R1
- [18] Yu S, Kim K W, Bergman L, Dutta M, Strocio M A, Zavada J M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 15283
- [19] Strite S, Morkoc H 1992 *J. Vac. Sci. Technol. B* **10** 1237
- [20] Ooi P K, Lee S C, Ng S S, Hassan Z, Hassan H A 2011 *Thin Solid Films* **519** 5481

Surface and interface phonon-polaritons in four layer systems consisting of polar ternary mixed crystals*

Bao Jin Yan Cui-Ling Yan Zu-Wei[†]

(College of Sciences, Inner Mongolia Agricultural University, Hohhot 010018, China)

(Received 26 December 2013; revised manuscript received 3 February 2014)

Abstract

Surface and interface phonon-polaritons in a four-layer (vacuum/polar binary crystal slab/polar ternary mixed crystal slab/polar binary crystal substrate) system are investigated with the modified random-element-isodisplacement model and the Born-Huang approximation, based on the Maxwell's equations with the usual boundary conditions. The numerical results of the surface and interface phonon-polariton frequencies as functions of the wave-vector, composition x , and thickness of slab in the two four-layer systems, i.e., $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ and $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$, are obtained and discussed. It is shown that there are seven branches of surface and interface phonon-polariton modes in the heterostructure systems, and that the frequencies of the surface and interface modes vary non-linearly with the composition and thickness of slab. The "one mode" and "two mode" behaviors of the ternary mixed crystals are also shown in the dispersion curves.

Keywords: surface and interface phonon-polaritons, four layer systems, ternary mixed crystals

PACS: 71.36.+c, 78.67.Pt, 78.30.Fs

DOI: [10.7498/aps.63.107105](https://doi.org/10.7498/aps.63.107105)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11364028), the Major Program of Natural Science Foundation of Inner Mongolia Autonomous Region, China (Grant No. 2013ZD02), the Training Program for Science and Technology Innovation Team of Inner Mongolia Agricultural University, China (Grant No. NDPYTD2010-7), and the Foundation for Fundamental Subject of Inner Mongolia Agricultural University, China (Grant No. JC201002).

[†] Corresponding author. E-mail: zwyan101@126.com