

УДК 535.343.2

©1993

## МОДЕЛЬНЫЙ РАСЧЕТ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ РЕШЕТОЧНЫХ КОЛЕБАНИЙ ДЛЯ СПЛАВА $A_{1-x}B_xC$ (НА ПРИМЕРЕ $Hg_{1-x}Cd_xTe$ )

*В.Н.Пырков, С.П.Козырев, Л.К.Водопьянов*

Рассматривается динамическая модель кристаллической решетки «идеального» сплава замещения  $A_{1-x}B_xC$  со структурой цинковой обманки в приближении жестких ионов с короткодействующим взаимодействием между ближайшими соседями и дальнедействующим кулоновским взаимодействием. При замещении иона А на ион В учитывается только изменение массы атома. Для уменьшения влияния границ и однородного распределения ионов А и В по объему исследуется кубический фрагмент кристаллической решетки большого размера ( $\approx 3000$  атомов). Частоты оптических колебаний в сплаве рассчитывались для различных значений двух параметров: силовой постоянной  $k$  центрального взаимодействия между ближайшими соседями и ионного заряда  $\pm Q$ . В зависимости от их соотношения дипольный отклик динамической системы фрагмента сплава  $A_{1-x}B_xC$  характеризуется в общем случае дискретным набором собственных частот с предельным переходом к двухмодовой системе при  $Q \rightarrow 0$  и к одномодовой системе при больших  $Q$ . Частотам решеточных мод  $Hg-Te$  и  $Cd-Te$  колебаний сплава  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  соответствует дискретный набор частот А-С и В-С колебаний идеального сплава  $A_{1-x}B_xC$  с  $k = 0.6 \cdot 10^5$  дин/см и  $Q = 0.7e$ .

Исследование колебательных свойств системы сплавов  $Cd_{1-x}Hg_xTe$ , образованных полупроводником  $CdTe$  и полуметаллом  $HgTe$ , вызывает большой интерес. Это прежде всего связано с тем, что оба соединения  $CdTe$  и  $HgTe$  кристаллизуются в простейшей структуре цинковой обманки с почти одинаковыми параметрами решетки и образуют непрерывный ряд твердых растворов замещения с  $0 < x < 1$ . Кроме того, низкотемпературные спектры решеточного отражения сплавов не могут быть интерпретированы двухосцилляторной моделью диэлектрической функции  $\hat{\epsilon}(\omega)$  в соответствии с двухмодовой концепцией колебательных спектров полупроводниковых сплавов.

В работе [1] представлены результаты математической обработки спектров решеточного отражения сплавов  $Cd_{1-x}Hg_xTe$  ( $x = 0 \div 0.81$ ), полученные последовательным применением дисперсионного анализа и анализа Крамерса-Кронига. Все частоты решеточных осцилляторов и для  $CdTe$ , и для  $HgTe$ -подобных колебаний для всех составов сплава распределяются по соответствующим четырем модам с частотами, не зависящими от состава сплава. Такое распределение частот решеточных осцилляторов было объяснено в [2] квазимолекулярной моделью, согласно которой сплав  $Cd_{1-x}Hg_xTe$  образуется пятью базисными ячейками  $Cd(4-n)Hg(n)Te$  ( $n = 0, 1, 2, 3, 4$ ) из тетраэдрически расположенных катионов  $Cd$  и  $Hg$  вокруг общего аниона  $Te$ , причем каждой базисной ячейке

соответствует своя мода Cd-Te и Hg-Te колебаний. В этом случае колебательный спектр кристалла аппроксимируется свойствами четырех мод Cd-Te колебаний и четырех мод Hg-Te колебаний [1,2].

Такой подход является более точным приближением по сравнению с моделью изомещенияй, предсказывающей двухмодовое поведение (моды Cd-Te и Hg-Te колебаний) для сплавов  $Cd_{1-x}Hg_xTe$ . В настоящей работе нами рассматривается динамическая модель кристаллической решетки «идеального» сплава  $A_{1-x}B_xC$  со структурой цинковой обманки. Расчет проводился в приближении жестких ионов с короткодействующим центральным взаимодействием между ближайшими соседями и дальнедействующим кулоновским взаимодействием для фрагмента кристаллической решетки (кластера) большого размера  $N \times N \times N$ , где  $N^3$  — число элементарных кубических ячеек в кластере с четырьмя катионами и четырьмя анионами на ячейку. Большой размер кластера ( $N = 7$ ) принимался для однородности распределения ионов А и В по объему и уменьшения влияния границ фрагмента. Рассчитывались только частоты оптических активных колебаний в сплаве без нахождения всего спектра собственных колебаний, поскольку диагонализация матрицы большой размерности требует больших затрат машинного времени.

Под «идеальным» мы понимаем сплав, в котором замещение одного катиона другим сопровождается только изменением массы иона без изменения силовой постоянной  $k$  и статического заряда катиона  $Q$ , т.е. с чисто изотопическим замещением. Это позволило при расчете ограничиваться варьированием только двух параметров  $k$  и  $Q$ . В зависимости от их соотношения отклик динамической системы кластера сплава  $A_{1-x}B_xC$  характеризуется в общем случае реально встречающихся зарядов  $Q$  дискретным набором собственных частот с предельным переходом к двухмодовой системе при  $Q \rightarrow 0$  к одномодовой системе при больших  $Q$ . Для атомных параметров сплава Hg $_{1-x}$ Cd $_x$ Te (т.е. значений масс его компонент и решеточной постоянной  $a_0 = 6.4 \text{ \AA}$  для всех составов ( $x$ )) для заряда  $Q = 0.7e$  и силовой постоянной  $k = 0.6 \cdot 10^5 \text{ дин/см}$  при расчете получается набор частот А-С и В-С колебаний, соотносимый с экспериментально наблюдаемыми частотами Hg-Te и Cd-Te колебаний [1], а при  $Q \geq 2.4e$  система практически переходит в одномодовую с сильным понижением частоты.

## 1. Описание модели

Феноменологические подходы к динамике кристаллической решетки, такие как оболочечная модель, модель деформируемых диполей, приближение деформируемых связей, модель жестких ионов, успешно используются для интерпретации экспериментальных данных по рассеянию медленных нейтронов в бинарных соединениях  $A^{III}B^V$  и  $A^{II}B^{VI}$  с последующим построением фоновных дисперсионных кривых и расчетом плотности фоновных состояний (обзор этих моделей представлен, например, в [3,4]). Но даже в наиболее простой из указанных модели жестких ионов для идеальной решетки бинарного соединения требуется подбор 11 параметров, причем физический смысл этих параметров часто оказывается неясным.

Для исследования перестройки спектра колебательных мод с составом сплава мы рассмотрим динамическую модель кристаллической решетки сплава  $A_{1-x}B_xC$  с минимальным числом подгруппочных параметров,

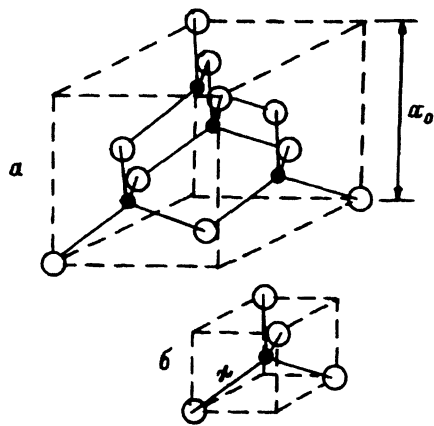


Рис. 1. Элементарная кубическая ячейка (а) в структуре цинковой обманки, образованная базисными ячейками  $L$  (б).  $a_0$  — постоянная решетки.

подобную предложенной Борном и Кунем [5] для бинарных ионных кристаллов, и рассчитаем ее в пределах кластера большого размера. Минимальный размер кластера определяется длиной, когда смещение атома в одном узле решетки не отражается на состоянии движения атома в другом узле на расстоянии, превышающем размер кластера. Для учета эффектов кулоновского взаимодействия в гетерополярных кристаллах требуется большой кластер.

Если ограничиться расчетом только частот оптически активных колебаний, не пытаясь диагонализировать динамическую матрицу, то, применяя гармонический анализ, можно исследовать кластер больших размеров. В нашем случае кластер состоит из  $8N^3$  атомов ( $N = 7$ ), где  $N^3$  — число элементарных кубических ячеек в кластере. Состояние кластера в любой момент времени однозначно описывается вектором смещений  $\mathbf{u}(t)$  ионов из их положений равновесия в узлах решетки и вектором их скоростей  $\dot{\mathbf{u}}(t)$ . Размерность этих векторов равна  $24N^3$ . Граничные условия являются циклическими с периодом, равным размеру кластера. Основными уравнениями динамической модели являются

$$M\ddot{\mathbf{u}} = D\mathbf{u} + Q\mathbf{e}, \quad (1)$$

$$D_{nm} = \frac{\partial^2 \Phi_s}{\partial u_n \partial u_m} + \frac{\partial^2 \Phi_c}{\partial u_n \partial u_m}, \quad (2)$$

$$\Phi_s = \sum_{L\kappa} \frac{k_{L\kappa} (\Delta r_{L\kappa})^2}{2}, \quad (3)$$

$$\Phi_c \mathbf{P}^T \mathbf{B} \mathbf{P}, \quad \mathbf{P} = Q\mathbf{u}, \quad (4)$$

$$\mathbf{e} = N\mathbf{E} - V\mathbf{P}. \quad (5)$$

Индекс  $n$  у вектора смещений ионов  $\mathbf{u}$  соответствует  $i$ -компоненте  $(x, y, z)$  смещения  $\gamma$ -иона (катиона или аниона) в ячейке  $L(L_1, L_2, L_3)$  кластера решетки. Элементарная кубическая ячейка (рис. 1, а) в структуре цинковой обманки состоит из четырех базисных ячеек (рис. 1, б), представляющих собой катионные тетраэдры с анионом в центре (или наоборот). Поэтому удобнее индексировать атом — катион ( $\gamma = 1$ ) или анион

( $\gamma = 2$ ) — через базисные ячейки  $L(L_1, L_2, L_3)$ . Полное число таких ячеек равно  $4N^3$ , где  $N^3$  — число элементарных кубических ячеек в кластере;  $M$  и  $Q$  — диагональные матрицы, элементы которых  $M_{nn}$  и  $Q_{nn}$  равны массе и заряду соответствующего иона с индексом  $n$ ;  $D$  — силовая матрица внутрешеточного взаимодействия ионов кластера между собой. Она определяется вторыми производными потенциальной энергии «пружин»  $\Phi_s$  и кулоновским взаимодействием  $\Phi_c$  диполей, возникающих при смещениях ионов из положений равновесия.

Потенциальная энергия «пружин»  $\Phi_s$  (3) описывает центральные короткодействующие силы между ближайшими соседями в кластере. На каждую ячейку  $L$  приходится по четыре «пружины» ( $\kappa = 1, 2, 3, 4$ ) с жесткостью  $k_{L\kappa}$ ;  $\Delta r_{L\kappa}$  — удлинение «пружины». Мы не использовали приближение поля валентных сил [6] с соответствующими силовыми постоянными центрального  $\alpha$  и нецентрального  $\beta$  взаимодействия между ближайшими соседями, чтобы не вводить дополнительный параметр, поскольку из-за высокой ионности соединений CdTe и HgTe соотношение  $\beta/\alpha$  для них равно 0.084 [6] и 0.090 [7] соответственно. Для перестройки оптических длинноволновых мод, происходящей с изменением состава сплава, учет кулоновского взаимодействия дипольных моментов, индуцированных ионными смещениями, более существен, чем учет слабых нецентральных сил.

Кулоновская энергия  $\Phi_c$  (4) учитывает взаимодействие диполей  $P_n$ , возникающих при малых смещениях ионов  $u_n$  с зарядом  $Q_{nn}$  из положений равновесия. Для жестких ионов дипольный момент при смещении иона из равновесного положения определяется как  $P_{iL\gamma} = Q_{iL\gamma} u_{iL\gamma}$ , а энергия электростатического взаимодействия двух диполей для ионов  $L\gamma$  и  $K\xi$  равна

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 P_{iL\gamma} \left( \frac{3R_j R_i}{|R|^5} - \frac{\delta_{ij}}{|R|^3} \right) P_{jK\xi} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 P_{iL\gamma} B_{iL\gamma, jK\xi} P_{jK\xi}. \quad (6)$$

Здесь  $\mathbf{R}$  — трехмерный радиус-вектор равновесного положения иона  $L\gamma$  относительно иона  $K\xi$ ;  $R_i$  и  $R_j$  — его декартовы компоненты. Переходя к индексам  $n$  и матричному виду, получим формулы (4), определяющие электростатический вклад в потенциальную энергию кластера.

Последний член  $Q_e$  в уравнении (1) описывает дальнедействующую электростатическую силу, действующую на ион кластера со стороны однородно-поляризованной среды, в которую встроен исследуемый кластер. Здесь  $Q$  — диагональная матрица зарядов соответствующих ионов. Чтобы получить вектор  $e$  локального электрического поля, нужно из однородного макроскопического поля  $\mathbf{E}$  вычесть поле, создаваемое в точке равновесного положения иона  $L\gamma$  однородно-поляризованным кубом, геометрически совпадающим с выделенным кластером, с плотностью дипольного момента  $\mathbf{P}$ . В уравнении (5) матрица  $\hat{N}$  размерности  $(24N^3) \times 3$  расширяет трехмерный вектор  $\mathbf{E}$  однородного макроскопического поля до размерности векторов  $\mathbf{u}$ . Плотность дипольного момента  $\mathbf{P}$  получается делением суммы дипольных моментов  $\mathbf{P}_{L\gamma}$  по всем ионам кластера на его объем. Матрица  $V$  введена для определения поля однородно-поляризованного куба в точке расположения иона  $L\gamma$ . Ее раз-

мерность  $(24N^3) \times 3$ , а элементы определяются формулой

$$V_{iL\gamma,j} = \iiint \left\{ \frac{3(r_{iL\gamma} - r_i)(r_{jL\gamma} - r_j)}{|r_{L\gamma} - r|^5} - \frac{\delta_{ij}}{|r_{L\gamma} - r|^3} \right\} dr^3. \quad (7)$$

Здесь  $r_{L\gamma}$  — вектор равновесного положения иона  $L\gamma$ , а  $r$  — радиус-вектор элемента объема кластера. Интегрирование ведется по всему кубу, который занимает выделенный кластер.

Для нахождения оптически активных мод (с волновым вектором  $k \approx 0$ ) в уравнении (1) выделим член, зависящий от однородного макроскопического поля  $\mathbf{E}$

$$M\ddot{\mathbf{u}} = D\mathbf{u} - QVP + QNE. \quad (8)$$

Из сравнения этого уравнения с уравнением, предложенным Борном и Кунем [5]

$$m\ddot{\mathbf{w}} = k\mathbf{w} + \frac{4\pi}{3}qP + qE_{\text{macro}}, \quad (9)$$

очевидно их подобие при замене скалярных величин на соответствующие векторные. Уравнение (8) является основным уравнением, определяющим движение ионов в кластере под действием пробного макроскопического поля  $\mathbf{E}$ . Приняв поле для длинноволновых колебаний в форме  $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t)$  и решая уравнение (8) с небольшим затуханием  $\Gamma = 0.02 \text{ см}^{-1}$  (добавляя в уравнение справа член  $-\Gamma M\ddot{\mathbf{u}}$ ) при произвольных начальных условиях для  $\mathbf{u}(0)$  и  $\dot{\mathbf{u}}(0)$ , получим через промежуток времени  $T$  ( $T\Gamma \gg 1$ ) зависимость макроскопического дипольного момента от времени в виде

$$\mathbf{P}(t) = \mathbf{P}_0 \cos(\omega t + \beta). \quad (10)$$

Величина  $\alpha(\omega) = \mathbf{P}_0/\mathbf{E}_0$  является модулем поляризуемости кластера сплава  $A_{1-x}B_xC$  на выбранной частоте  $\omega$ . Повторяя эту процедуру на разных частотах с определенным шагом (например,  $0.5 \text{ см}^{-1}$ ), можно получить модельный спектральный отклик для данного сплава. В настоящей работе пробное поле рассматривалось в виде волнового пакета  $\mathbf{E}(t) = \sum_j \mathbf{E}_0 \cos(\omega_j t)$ , а решение задачи имело форму Фурье-разложения макроскопического дипольного момента  $\mathbf{P}(t) = \sum_j \mathbf{P}_{0j} \cos(\omega_j t + \beta_j)$  с частотами  $\omega_j$ , соответствующими волновому пакету.

## 2. Результаты модельных расчетов

При решении уравнений (1)–(5) принималось, что  $k_{Lx} = k$  и  $Q_{nn} = \pm Q$  при неизменной постоянной кристаллической решетки для всех составов сплава  $A_{1-x}B_xC$ . Т.е. расчет проводился для «идеального» сплава замещения, в котором замена одного катиона другим сопровождается изменением только массы катиона без изменений силовой постоянной  $k$  и ионного заряда  $+Q$ . Массы катионов и аниона принимались равными массам компонент сплава  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ :  $M_{\text{Hg}} = 200$ ,  $M_{\text{Cd}} = 112$  и  $M_{\text{Te}} = 128$  а.е. Распределение атомов А и В по катионной подрешетке задавалось с помощью генератора случайных чисел с учетом моллярного содержания

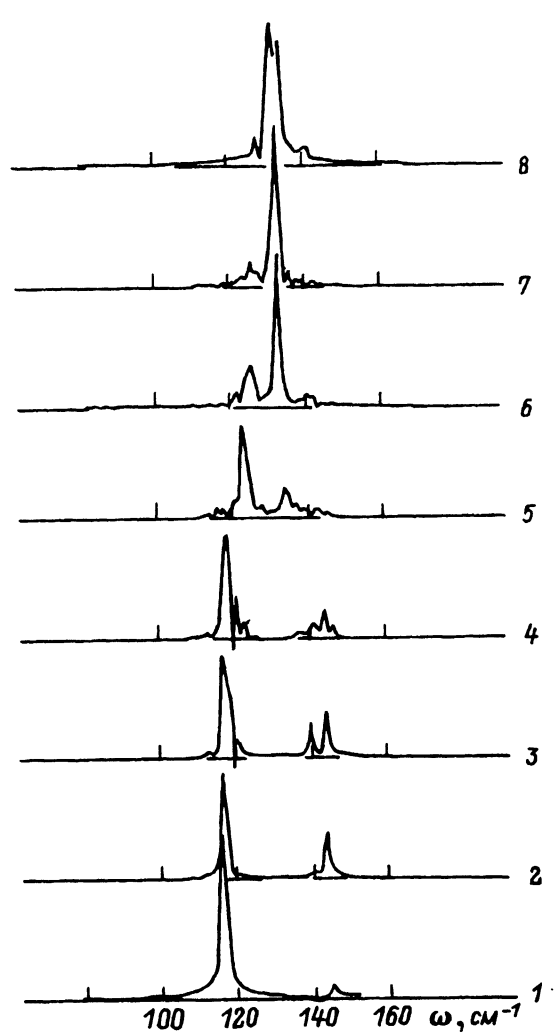


Рис. 2. Функции спектрального отклика  $\alpha(\omega)$  (в произвольных единицах) сплавов  $A_{1-x}B_xC$  с  $x = 0.05$  (1), 0.10 (2), 0.25 (3), 0.45 (4), 0.55 (5), 0.75 (6), 0.90 (7), 0.95 (8) для силовой постоянной  $k = 0.6 \cdot 10^5$  дин/см и ионного заряда  $Q = 0.7e$ . Массы компонент сплава  $M_A = M_{Bz}$ ,  $M_B = M_{Cd}$ ,  $M_C = M_{Te}$ .

катионов. Ясно, что для кластера малых размеров необходимо проведение усреднения по конфигурационному пространству взаимного расположения катионов разного сорта [4].

В случае фрагмента больших размеров различные варианты взаимного расположения разных катионов уже содержатся в нем с соответствующим усреднением за счет случайного распределения атомов А и В по большому числу катионных узлов во фрагменте. Поэтому в настоящей работе для фрагмента с числом атомов  $\approx 3000$  специальная программа усреднения по конфигурационному пространству нами не выводилась. Воспроизводимость результатов расчета наблюдалась на примере сплавов состава  $x = 0.1$  и  $x = 0.9$  при двух вариантах распределения атомов по катионной подрешетке, задаваемых генератором случайных чисел.

Варьирование в задаче проводилось по двум параметрам  $k$  и  $Q$  для составов сплава  $x = 0.05, 0.1, 0.25, 0.45, 0.55, 0.75, 0.9, 0.95$ . В качестве иллюстрации на рис. 2 представлены функции  $\alpha(\omega)$  спектрального отклика

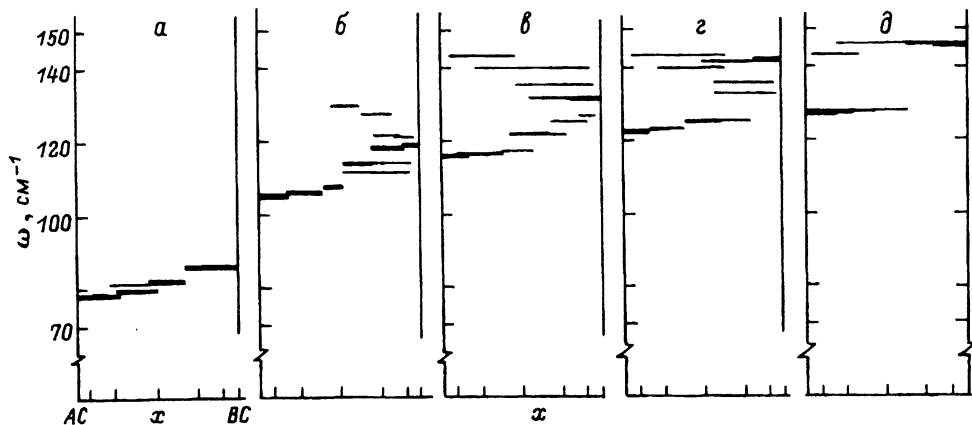


Рис. 3. Распределение частот оптически активных колебаний в зависимости от  $x$  состава сплава  $A_{1-x}B_xC$  для  $k = 0.6 \cdot 10^5$  дин/см и ионных зарядов  $Q = 2.4e$  (а),  $1.2e$  (б),  $0.7e$  (в),  $0.3e$  (г),  $0.06e$  (д).

(в произвольных единицах) сплавов  $A_{1-x}B_xC$  этих составов для силовой постоянной  $k = 0.6 \cdot 10^5$  дин/см и заряда  $Q = 0.7e$ . Пики функций  $\alpha(\omega)$  соответствуют оптически активным колебаниям. Распределение частот этих колебаний для разных составов сплава  $A_{1-x}B_xC$  с ионным зарядом  $\pm Q = 0.7e$ , полученное из спектров  $\alpha(\omega)$  на рис. 2, показано на рис. 3, в. Толщина линий приблизительно соответствует относительной интенсивности пиков. Там же показаны распределения оптически активных частот для сплава  $A_{1-x}B_xC$  с разными ионными зарядами  $Q$ . Видно, что в зависимости от соотношения между  $k$  и  $Q$  (т.е. от ионности связи) проявляется: 1) ( $Q = 0.006e$ ) двухмодовый характер перестройки колебательного спектра сплава с составом  $x$ , когда частоты наблюдаемых двух мод не изменяются с составом, а их интенсивность монотонно изменяется в соответствии с молярной концентрацией компонент сплава; 2) ( $Q = 2.4e$ ) одномодовый характер перестройки колебательного спектра сплава, когда наблюдается только одна мода с частотой, значительно изменяющейся с составом сплава; 3) ( $1.5e > Q > 1e$ ) набор колебательных мод.

Для этих трех типов перестройки колебательного спектра сплава  $A_{1-x}B_xC$  для состава  $x = 0.45$  вычислялась корреляционная функция  $F(zl\gamma)$  для  $z$ -компоненты смещений атомов  $C$  (анионов  $\gamma = 2$ ) при оптических колебаниях

$$F(zl\gamma) = \frac{1}{4N^3} \sum_L u_{zL\gamma} u_{zL+\gamma}. \quad (11)$$

Здесь  $u_{zL\gamma}$  —  $z$ -компонента смещения аниона  $C$  в ячейке  $L$  рассматриваемого кластера,  $l$  — радиус-вектор между анионами,  $4N^3$  — число анионов в кластере. Корреляция рассматривается для анионных смещений, потому что анионы являются общими (их число постоянно) для различных атомных конфигураций внутри кластера, а  $z$ -компонента смещений сонаправлена с пробным макроскопическим полем  $(0,0,E_z)$ .

На рис. 4 представлены графики функции  $F(l)$ , полученной усреднением корреляционной функции  $F(zl\gamma)$  по всем векторам  $l$  с одинаковой

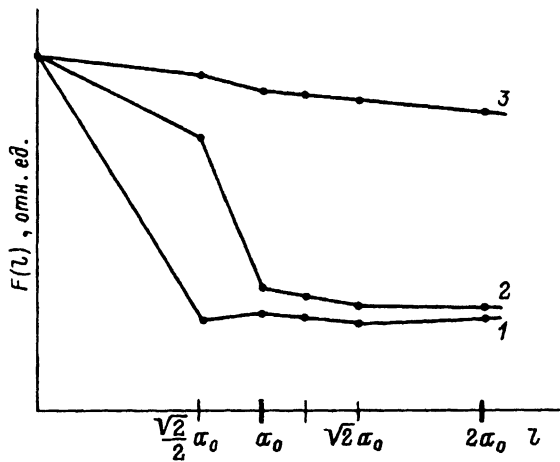


Рис. 4. Корреляционная функция  $F(l)$  для  $z$ -компонент анионных смещений при оптических колебаниях в сплаве  $A_{1-x}B_xC$  ( $x = 0.45$ ) для ионных зарядов  $Q = 0.006e$  (1),  $0.7e$  (2) и  $2.4e$  (3) с силовой постоянной  $k = 0.6 \cdot 10^5$  дин/см.  $l$  — расстояние между анионами в кристаллической решетке сплава с постоянной решетки  $a_0$ .

длиной  $|l| = l$ , для трех значений ионного заряда. Видно, что ширина корреляционной функции  $F(l)$  сильно изменяется при изменении одного из параметров модели — ионного заряда  $Q$ .

В случае 1) малого ионного заряда для  $Q = 0.006e$  движение даже ближайших анионов является несогласованным и сплав  $A_{1-x}B_xC$  можно рассматривать как совокупность слабовзаимодействующих двухатомных «квазимолекул» AC и BC, каждая из которых характеризуется своей модой колебаний. Колебательный спектр такого сплава, в котором преобладающим является взаимодействие между ближайшими соседями (случай сильной ковалентной связи), характеризуется двухмодовой перестройкой спектра с составом сплава.

В промежуточном случае 3) для  $Q = 0.7e$  корреляционная длина анионных смещений соответствует расстоянию между ближайшими анионами, поэтому размер «квазимолекул» в сплаве по сравнению с предыдущим случаем увеличивается. Возрастает и многообразие таких «квазимолекул», что ведет к увеличению числа колебательных мод, т.е. реализуется многомодовый характер перестройки колебательного спектра сплава.

Для сплава с сильной ионной связью в случае 2) для  $Q = 2.4e$  длина корреляции очень большая, движение всех атомов скоррелировано сильным электрическим взаимодействием; преобладает одна обобщенная мода решеточных колебаний, и реализуется одномодовый тип перестройки.

Расчитанные распределения частот оптически активных колебаний в зависимости от состава сплава  $A_{1-x}B_xC$  для различных значений ионного заряда  $Q$  (рис. 3) сравнивались с дискретным набором частот решеточных мод Hg-Te и Cd-Te колебаний в сплаве  $Hg_{1-x}Cd_xTe$ , определенных из анализа ИК-спектров решеточного отражения [1]. Установлено, что наиболее приемлемым оказывается модельный спектр с параметрами  $k = 0.6 \cdot 10^5$  дин/см и  $Q = 0.7e$ . При этом частоты А-С колебаний близки частотам мод Hg-Te колебаний, а частоты В-С колебаний значительно ниже частот мод Cd-Te колебаний. В расчете принималось равенство силовых постоянных  $k$  для А-С и В-С колебаний. Если увеличить по отношению к А-С колебаниям силовую постоянную для В-С колебаний, то их частоты должны увеличиться.



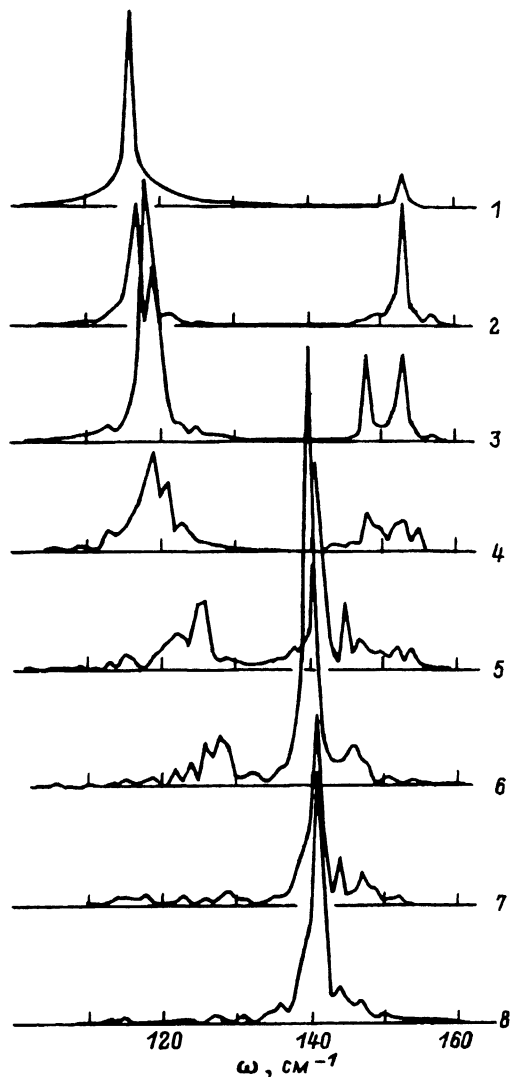


Рис. 5. Функции спектрального отклика  $\alpha(\omega)$  (в произвольных единицах) сплавов  $A_{1-x}B_xC$  с  $x = 0.05$  (1), 0.10 (2), 0.25 (3), 0.45 (4), 0.55 (5), 0.75 (6), 0.90 (7), 0.95 (8).

Значения параметров те же, что и на рис. 2, кроме  $M_B = 0.8M_{Cd}$ .

Такую задачу мы качественно рассмотрели, не вводя дополнительно параметра, связанного с различием силовых постоянных. Был проведен расчет модельного спектра оптически активных колебаний в сплаве  $A_{1-x}B_xC$  для различных  $x$  при тех же параметрах  $k$  и  $Q$ , что и в предыдущем случае, но с уменьшенной массой В-катиона, т.е. для  $M_B = 0.8M_{Cd}$  с  $M_A = M_{Hg}$  и  $M_C = M_{Te}$ . Это позволило поднять по частоте дискретный спектр В-С колебаний без изменения спектра А-С колебаний (рис. 5).

Известно (см., например, [5]), что для двухатомного кристалла ВС частота поперечного оптического колебания определяется формулой

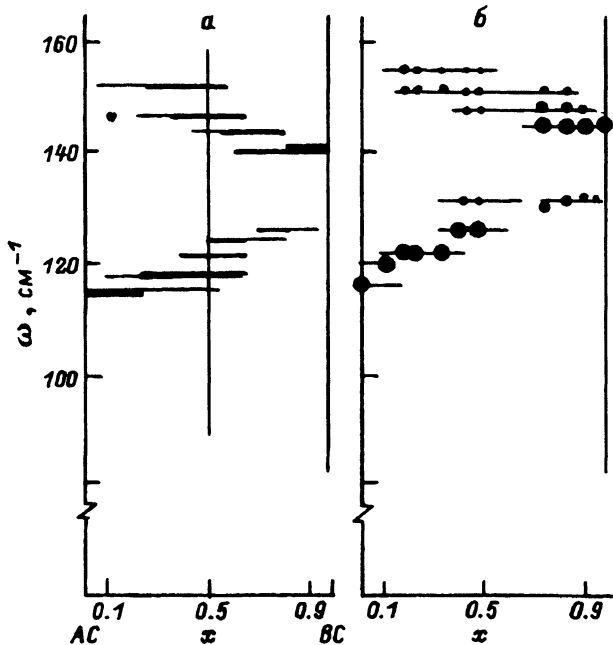


Рис. 6. а) Распределение частот оптически активных колебаний в зависимости от состава  $x$  сплава  $A_{1-x}B_xC$  для  $k = 0.6 \cdot 10^5$  дин/см,  $Q = 0.7e$  и  $M_B = 0.8M_C$ . б) Распределение частот оптических мод решеточных колебаний в зависимости от состава  $x$  сплава  $Hg_{1-x}Cd_xTe$ , определенное из анализа спектров ИК-отражения.

$\omega_0 = [k(1/M_B + 1/M_C)]^{1/2}$  и увеличение частоты формально возможно либо за счет уменьшения массы катиона (или аниона), либо за счет увеличения силовой постоянной взаимодействия между ближайшими соседями. Допуская, что эквивалентность уменьшения массы катиона и увеличения

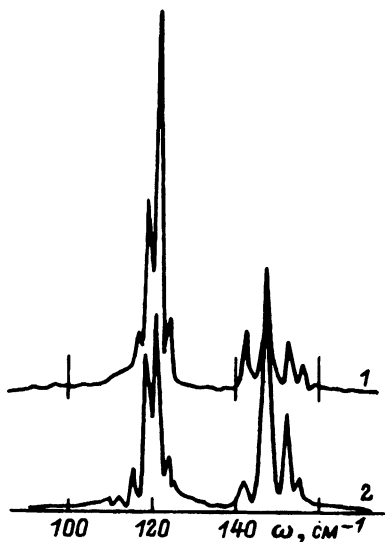


Рис. 7. Функции спектрального отклика  $\alpha(\omega)$  (в произвольных единицах) сплава  $A_{0.5}B_{0.5}C$ , рассчитанные для двух поляризаций пробного макроскопического поля:  $E = (E_x, 0, 0)$  (1),  $E = (0, 0, E_z)$  (2).

силовой постоянной в увеличении частоты оптического колебания для бинарного соединения ВС качественно сохраняется и для В-С колебаний в сплаве  $A_{1-x}B_xC$ , мы считаем условие  $M_B = 0.8M_{Cd}$  при  $k_{BC} = k_{AC} = k$  равносильным увеличению силовой постоянной  $k_{BC}$  для связи В-С по отношению к  $k_{AC}$  для связи А-С при  $M_B = M_{Cd}$ .

Распределение частот оптически активных колебаний для разных составов сплава  $A_{1-x}B_xC$ , полученное из функций спектрального отклика  $\alpha(\omega)$  на рис. 5, показано на рис. 6,а. Для сравнения на рис. 6,б представлен дискретный набор частот решеточных мод Hg-Te и Cd-Te колебаний в сплаве  $Hg_{1-x}Cd_xTe$ , определенный из анализа спектров ИК-отражения [1]. Наблюдается хорошее согласие распределений оптически активных частот, полученных из эксперимента и модельного расчета.

На рис. 7 представлены функции спектрального отклика  $\alpha(\omega)$  сплава  $A_{0.5}B_{0.5}C$ , рассчитанные для двух поляризаций пробного макроскопического поля  $\mathbf{E} = (E_x, 0, 0)$  и  $\mathbf{E} = (0, 0, E_z)$ . Подобие спектров указывает на воспроизводимость результатов вне зависимости от поляризации пробного поля, связанную с хаотическим распределением катионов А и В по катионной решетке.

Простая двухпараметрическая модель «идеального» сплава  $A_{1-x}B_xC$  с дефектом массы хорошо объясняет дискретный спектр решеточных мод колебаний сплава  $Hg_{1-x}Cd_xTe$ , наблюдаемый экспериментально в ИК-отражении. В зависимости от соотношения двух параметров: силовой постоянной  $k$  центрального взаимодействия между ближайшими соседями и ионного заряда  $\pm Q$  модель предсказывает в общем случае многомодовый характер перестройки колебательного спектра с составом сплава  $A_{1-x}B_xC$ . В частных случаях модель указывает на двухмодовый характер при  $Q \rightarrow 0$  и на одномодовый характер при большом  $Q$ . Хорошее согласие модельного расчета с экспериментальными результатами для сплава  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  является следствием приемлемости модели «идеального» сплава  $A_{1-x}B_xC$  для реального сплава  $Hg_{1-x}Cd_xTe$ .

### Список литературы

- [1] Козырев С.П., Пырков В.Н., Водопьянов Л.К. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 8. С. 2372-2381.
- [2] Козырев С.П., Пырков В.Н., Водопьянов Л.К. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 12. С. 3695-3708.
- [3] Kunc K., Balkanski M., Nusimovici M.A. // Phys. Stat. Sol. (b). 1975. V. 71. P. 341-349; V. 72. P. 229-248; V. 72. P. 249-254.
- [4] Бетгер Х. Принципы динамической теории решетки. М.: Мир, 1986.
- [5] Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллической решетки. М.: ИЛ, 1958.
- [6] Martin R.M. // Phys. Rev. B. 1970. V. 1. P. 4005-4011.
- [7] Kumazaki K. // Phys. Stat. Sol.(a). 1976. V. 33. P. 615-623.

Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН  
Москва

Поступило в Редакцию  
26 января 1993 г.  
В окончательной редакции  
14 апреля 1993 г.