

Низкочастотные оптические решеточные колебания в сплавах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

© С.П. Козырев

Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,
119991 Москва, Россия

E-mail: skozyrev@sci.lebedev.ru

(Поступила в Редакцию 6 марта 2008 г.)

Представлена интерпретация спектров решеточного отражения сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.06-0.7$) в области низкочастотных оптических колебаний (область аномальной моды Hg-Te -колебаний в HgTe), измеренных при температуре 300 К. Наблюдаемые для всех составов сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ низкочастотные моды 98, 105 и 112 cm^{-1} приписываются модам Hg-Te -колебаний подобно тому, как это ранее проводилось для мод Cd-Te -колебаний в соответствии с квазимолекулярным приближением. Согласно модели двумного потенциала для атома Hg , в кристаллической решетке сплава атом Hg может либо занимать место в центре анионного тетраэдра, либо иметь внецентровое положение. Основная сильная мода Hg-Te -колебаний с частотой около 120 cm^{-1} (при $T = 300\text{ K}$) соответствует колебанию внецентрового атома Hg , а исследуемые низкочастотные моды колебаний соответствуют колебанию Hg в центре анионного тетраэдра.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Президиума РАН „Низкоразмерные квантовые структуры“ и РФФИ (проект № 07-02-00899-а).

PACS: 78.30.Fs, 78.66.Hf, 63.20.dd

1. Введение

Кристаллические сплавы (твердые растворы) $A_{1-x}B_xC$, образованные бинарными соединениями AC и BC с простейшей структурой цинковой обманки ZB или вюрцита (два атома на элементарную ячейку), по характеру перестройки решеточного колебательного спектра при изменении молярного состава сплава, как правило, являются двухмодовыми системами. Для таких систем диэлектрическая функция сплава в области решеточных колебаний характеризуется двумя модами колебаний с собственными частотами, близкими к частотам мод бинарных соединений, и силами осциллятора, приблизительно пропорциональными молярной концентрации компонент сплава x . Это означает, что при образовании сплава сохраняются индивидуальные свойства решеточных колебаний его бинарных компонентов. Сплавы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, образованные полупроводником CdTe и полуметаллом HgTe с одинаковой структурой ZB и почти равными решеточными параметрами ($a_0 = 6.482$ и 6.461 \AA соответственно для CdTe и HgTe), при гелиевых температурах рассматриваются как двухмодовая система с HgTe- и CdTe- подобными колебаниями, но с существенной оговоркой — двухмодовая система с тонкой структурой. Область CdTe- подобных колебаний допускает только многоосцилляторную (2–3 осциллятора) интерпретацию спектра решеточных колебаний. Обзор свойств решеточных колебаний сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ представлен в работе [1], в которой спектры решеточного отражения и комбинационного рассеяния света для разных составов сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ интерпретируются в квазимолекулярном приближении [2,3].

Сплавы $\text{Hg}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, по физическим свойствам во многом аналогичные сплавам $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, также обра-

зованы полупроводником ZnTe и полуметаллом HgTe с одинаковой структурой ZB , но с сильно различающимися решеточными параметрами ($a_0 = 6.10$ и 6.461 \AA для ZnTe и HgTe соответственно). В отличие от сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ в сплавах $\text{Hg}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, обогащенных HgTe , при низких температурах помимо основных мод HgTe- и ZnTe- подобных колебаний наблюдаются дополнительные „дефектные“ низкочастотные (ниже частоты основной моды Hg-Te -колебаний) моды с силой осциллятора, сравнимой с модами ZnTe- подобных колебаний [4]. В работе [4] исследовались спектры решеточного отражения сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ ($x = 0.1, 0.35$ и 0.55) и $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.2$) в интервале температур 40–300 К. Структура низкочастотных колебаний, наблюдаемая в HgZnTe во всем интервале температур 40–300 К, также проявляется и в $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$, но при температурах выше 100 К. Из сравнительного анализа параметров решеточных колебаний двух систем сплавов HgZnTe и HgCdTe получен вывод, что при полном подобии параметров основных решеточных мод температурные зависимости низкочастотных мод радикально различаются для двух систем сплавов. При увеличении температуры интенсивность низкочастотных мод в $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ резко возрастает, тогда как в $\text{Hg}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ ($x = 0.1, 0.35$ и 0.55) возникающая при низких температурах структура меняется незначительно.

В настоящей работе представлены анализ и интерпретация спектров решеточного отражения сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.06-0.7$) для области низкочастотных оптических колебаний (ниже частоты основной моды Hg-Te -колебаний), измеренных при температуре 300 К, при которой интенсивность низкочастотных колебаний наибольшая. Для всех составов сплава харак-

терно проявление трех мод низкочастотных колебаний с $\omega_n = 98, 105$ и 112 cm^{-1} . Из композиционной зависимости сил осцилляторов этих мод установлено, что они являются модами Hg–Te-колебаний.

2. Анализ низкочастотных мод решеточных колебаний в $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

Уже при ранних исследованиях спектров решеточного отражения сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, выполненных при температурах 80–90 К, из-за наблюдаемой в области CdTe-подобных колебаний тонкой структуры возникла необходимость более высокого спектрального разрешения, достижимого при гелиевых температурах. Естественно, последующие измерения проводились при гелиевых температурах, и никаких задач для исследования сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ при комнатной температуре не возникало. Но недавно [4] в результате совместного исследования сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ и $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ при температурах 40–300 К выяснилось, что при $T > 100 \text{ K}$ в спектре колебаний $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ проявляются интенсивные низкочастотные моды. На рис. 1 представлена мнимая часть диэлектрической функции $\text{Im}\epsilon(\omega)$ сплава $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ для температур 100, 170, 230 и 300 К, рассчитанная из спектров решеточного отражения $R(\omega)$ интегральным

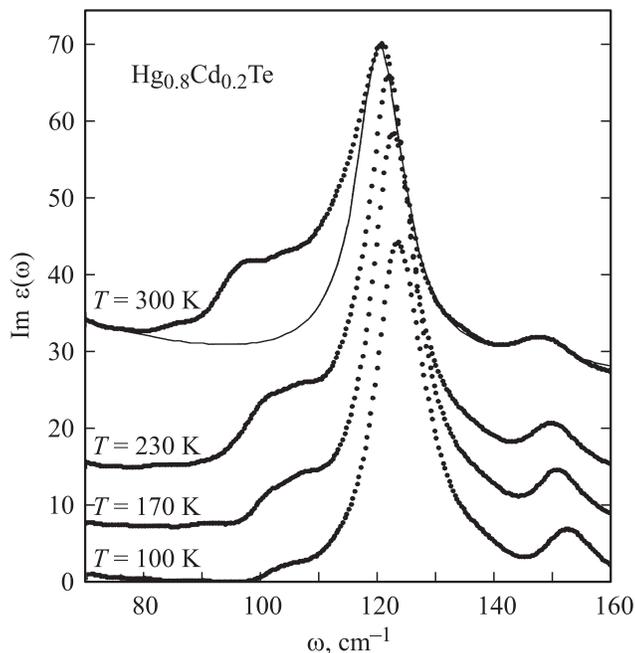


Рис. 1. Мнимая часть диэлектрической функции $\text{Im}\epsilon(\omega)$ для сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.2$) в области низкочастотных оптических колебаний при $T = 100, 170, 230$ и 300 K . Кривые последовательно смещены снизу вверх относительно друг друга по оси ординат. Для кривой при $T = 300 \text{ K}$ проявляется вклад свободных носителей. Справа от сильной моды Hg–Te-колебания наблюдаются моды CdTe-подобных колебаний.

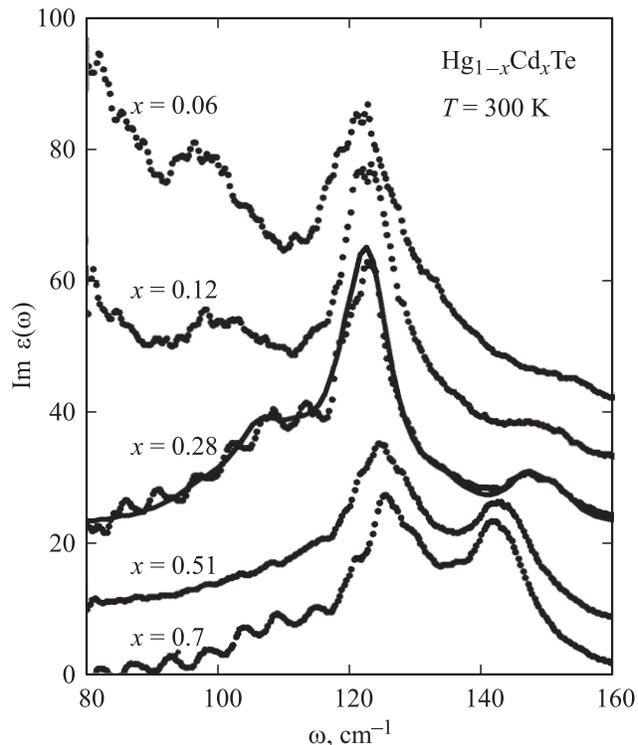


Рис. 2. Мнимая часть диэлектрической функции $\text{Im}\epsilon(\omega)$ для сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с $x = 0.06, 0.12, 0.28, 0.51$ и 0.7 при $T = 300 \text{ K}$. Кривые функций для разных составов смещены относительно друг друга по оси ординат. Для составов $x = 0.06$ и 0.12 наблюдается большой вклад свободных носителей заряда.

преобразованием Крамерса–Кронига. Пики в окрестности 120 и 150 cm^{-1} соответствуют HgTe- и CdTe-подобным колебаниям, а ниже частоты HgTe-моды проявляются низкочастотные колебания с силами осциллятора (площадью под контуром), которые при повышенных температурах не уступают силам осциллятора мод Cd–Te-колебаний. Из дисперсионного анализа кривых $\text{Im}\epsilon(\omega)$ найдено, что при $T = 100 \text{ K}$ проявляется одна мода, а с повышением температуры до 300 K количество низкочастотных мод увеличивается до трех с $\omega = 98, 105$ и 112 cm^{-1} с соответствующими силами осцилляторов $0.9, 0.75$ и 0.5 .

На рис. 2 показаны кривые диэлектрической функции $\text{Im}\epsilon(\omega)$ сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.06, 0.12, 0.28, 0.51, 0.7$) при $T = 300 \text{ K}$, полученные интегральным преобразованием Крамерса–Кронига из спектров отражения $R(\omega)$. Для удобства рассмотрения кривые для разных составов сплава x смещены по оси ординат. Образцы материала HgCdTe, как и в [4], предоставлены Triboulet. Спектры решеточного отражения $R(\omega)$ для рассмотренных составов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ измерялись при комнатной температуре на Фурье-спектрометре Bruker IFS-113v со спектральным разрешением около 1.5 cm^{-1} . Дисперсионный анализ полученной из $R(\omega)$ диэлектрической функции $\epsilon(\omega)$ проводился ее моделированием в

Характеристики (собственная частота ω_j , сила осциллятора S_j , затухание γ_j) оптических мод низкочастотных решеточных колебаний сплава Hg_{1-x}Cd_xTe для разных составов x при $T = 300$ К (Ω — частота основной моды Hg–Te-колебаний сплава)

Характеристика	x					
	0.06	0.12	0.2	0.28	0.51	0.71
Ω, cm^{-1}	121.5 (3.8/13)	122 (3.5/9)	121.5 (3.25/9)	122(3.0/9)	124.5 (2.1/12)	125.5 (1.8/10.5)
ω_2, cm^{-1} (S_2/γ_2)	—	112 (0.3/11)	112 (0.5/10)	112 (0.6/10)	113 (0.45/14)	112 (0.4/12)
ω_1, cm^{-1} (S_1/γ_1)	104 (0.2/9)	104 (0.45/8)	105 (0.75/12)	106 (0.95/12)	105 (0.45/14)	105 (0.3/12)
ω_0, cm^{-1} (S_0/γ_0)	98 (1.0/9)	99 (0.75/9)	98 (0.9/13)	98 (0.45/13)	96 (0.25/14)	—
$S_0 + S_1 + S_2$	1.2	1.5	2.15	2.0	1.15	0.7

классической аддитивной форме

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_p^2 \varepsilon_\infty}{(\omega^2 - i\omega\Gamma_p)} + \sum \frac{S_j \omega_{ij}^2}{\omega_{ij}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_j}. \quad (1)$$

Второй и третий члены уравнения определяют вклады свободных носителей и фононов. Здесь ω_p и Γ_p — частота и затухание плазмона, ω_j , S_j и γ_j — резонансная частота, сила осциллятора и затухание j -го решеточного осциллятора соответственно.

Для составов $x = 0.06, 0.12$ и 0.2 в диэлектрической функции $\text{Im}\varepsilon(\omega)$ проявляется значительный вклад свободных носителей, их плазменная частота составляет 280, 200 и 92 cm^{-1} соответственно. Наличие свободных носителей связано с тем, что при $T = 300$ К инверсия зон (или схлопывание межзонной щели) происходит при $x \approx 0.1$. Результаты дисперсионного анализа низкочастотной области спектра $\text{Im}\varepsilon(\omega)$ для разных составов сплава Hg_{1-x}Cd_xTe представлены в таблице. Характерным является то, что значения частот этих решеточных мод колебаний практически не изменяются с составом от $x = 0.06$ до $x = 0.7$ и равны 98, 105 и 112 cm^{-1} . В более ранней работе [5] аналогичные результаты были получены в Hg_{1-x}Cd_xTe разных составов для решеточных мод CdTe-подобных колебаний при температурах 25, 85 и 300 К. Но ни при каких температурах не удалось обнаружить тонкую структуру для основной моды Hg–Te-колебаний с $\omega = 118 \text{ cm}^{-1}$ (при $T = 25$ К). В соответствии с квазимолекулярным приближением [3] для HgTe- и CdTe-подобных колебаний должна существовать многомодовая система (в спектрах — тонкая структура). Ее отсутствие для HgTe-подобных колебаний и наличие только одной сильной моды объяснялось в [5] проявлением металлического характера в делокализации связи Hg–Te, что должно приводить к сильному взаимодействию близкорасположенных мод, и невозможностью их спектрального разрешения.

3. Низкочастотные моды — моды Hg–Te-решеточных колебаний

В настоящей работе утверждается, что наблюдаемые низкочастотные моды решеточных колебаний с $\omega = 98, 105$ и 112 cm^{-1} являются модами HgTe-подобных колебаний сплава Hg_{1-x}Cd_xTe. В соответствии с квазимолекулярным приближением [3] сплавы Hg_{1-x}Cd_xTe образованы пятью базисными ячейками Hg(4-n)Cd(n)Te ($n = 0, 1, 2, 3, 4$) из тетраэдрически расположенных катионов Hg и Cd вокруг общего аниона Te. Каждая ячейка окружена двенадцатью анионами Te, с помощью которых из базисных ячеек образуется кристаллическая структура сплава. Каждой базисной ячейке соответствует своя мода Hg–Te- и Cd–Te-колебаний. Спектр решеточных колебаний кристалла аппроксимируется свойствами четырех мод Hg–Te-колебаний с $^H\omega_n$ ($n = 0, 1, 2, 3$) и четырех мод Cd–Te-колебаний с $^C\omega_n$ ($n = 1, 2, 3, 4$) пяти базисных ячеек Hg(4-n)Cd(n)Te ($n = 0, 1, 2, 3, 4$) через распределение вероятностей $P_n(x)$ их различных конфигураций в сплавах Hg_{1-x}Cd_xTe разного состава. Для сплавов Hg_{1-x}Cd_xTe, образованных бинарными соединениями с почти равными параметрами решетки, частоты решеточных мод определяются катионной конфигурацией базисных ячеек и не зависят от состава сплава; от состава сплава зависят их силы осциллятора. В реальном спектре сплава конкретного состава все моды проявляться не могут, наблюдаются наиболее сильные. Это приближение успешно использовалось для интерпретации тонкой структуры спектров ЯМР ядер ^{125}Te в сплавах Hg_{1-x}Cd_xTe [6].

Для случайного некоррелированного распределения атомов Hg и Cd по катионной подрешетке сплава Hg_{1-x}Cd_xTe вероятность обнаружить базисную ячейку с n атомами Cd и $(4-n)$ атомами Hg в сплаве состава x равна $P_n(x) = \frac{4!}{n!(4-n)!} (1-x)^{4-n} x^n$. С учетом того, что в ячейке Hg(4-n)Cd(n)Te из четырех катионов доля атомов Hg составляет $(4-n)/4$, вероятность найти атом Hg

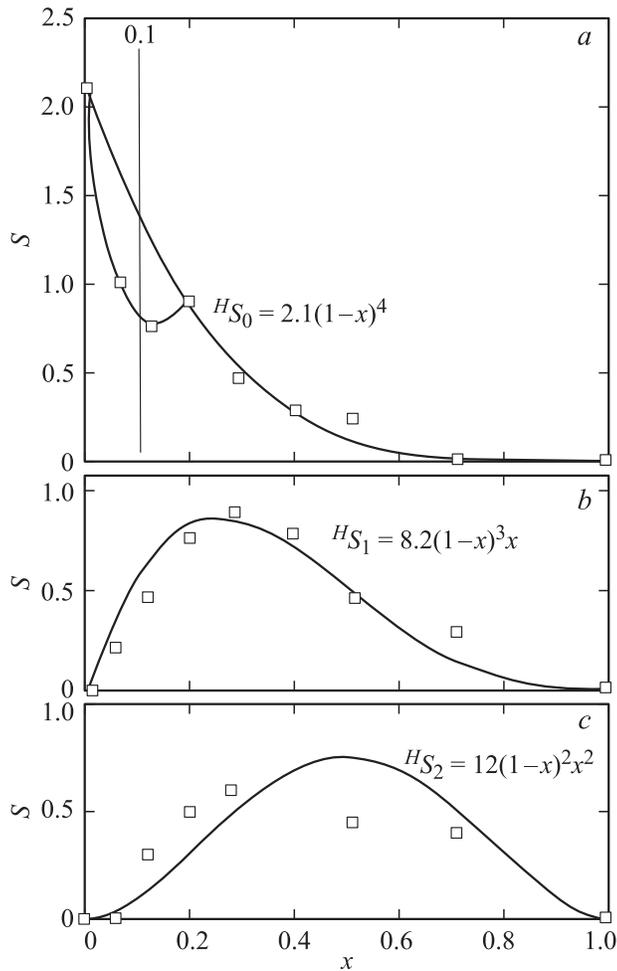


Рис. 3. Распределение сил осциллятора S в зависимости от состава x для мод Hg–Te-колебаний с $\omega_0 = 98 \text{ cm}^{-1}$ (a), $\omega_1 = 105 \text{ cm}^{-1}$ (b) и $\omega_2 = 112 \text{ cm}^{-1}$ (c) в сплавах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ при $T = 300 \text{ K}$. Распределения аппроксимируются расчетными кривыми уравнения (2). Метка $x = 0.1$ соответствует точке инверсии зон сплава при $T = 300 \text{ K}$.

(или ионную пару Hg–Te) в ячейке такой конфигурации в сплаве состава x будет ${}^H P_n(x) = \frac{4-n}{4} P_n(x)$. Для системы независимых колебаний решетки силу осциллятора ${}^H S_n(x)$ для n -й моды Hg–Te-колебания с частотой ${}^H \omega_n$ можно оценить как

$$\begin{aligned} {}^H S_n(x) &= {}^H f_n N {}^H P_n(x) \\ &= {}^H f_n N \frac{4-n}{4} \frac{4!}{n!(4-n)!} (1-x)^{4-n} x^n, \quad (2) \end{aligned}$$

где ${}^H f_n$ — приведенная к единичной связи Hg–Te сила осциллятора, N — число катионов (ионных пар) на единицу объема. Для сил осциллятора ${}^C S_n(x)$ n -й моды Cd–Te-колебаний имеет место аналогичное выражение, с заменой $(4-n)/4$ на $n/4$ [1,3].

В настоящей работе представляет интерес функциональная зависимость сил осцилляторов n -х мод низкочастотных решеточных колебаний от состава сплава x . На рис. 3 представлены значения $S_n(x)$ сил

осцилляторов низкочастотных мод $\omega_0 = 98 \text{ cm}^{-1}$ (a), $\omega_1 = 105 \text{ cm}^{-1}$ (b), $\omega_2 = 112 \text{ cm}^{-1}$ (c) для разных составов сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$. Видно, что экспериментальные значения сил осцилляторов низкочастотных мод для всего интервала составов сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ неплохо аппроксимируются кривыми, представленными уравнением (2) для расчетных сил осцилляторов ${}^H S_n(x)$ мод Hg–Te-колебаний. Следует отметить, что в чистом HgTe при комнатной температуре проявляются две сильные решеточные моды, связанные с Hg–Te-колебаниями [7,8]: основная мода ${}^H \Omega = 118 \text{ cm}^{-1}$ с силой осциллятора 4.7 и дополнительная „аномальная“ мода ${}^H \omega_0 = 98 \text{ cm}^{-1}$ с силой осциллятора 2.3. „Аномальной“ мода считается потому, что симметрией решетки со структурой ZB допускается только одна ТО-мода. Аномальные свойства решеточных колебаний в HgTe объясняются моделью [8] асимметричного двуямого потенциала для атома Hg, согласно которой атом Hg в HgTe может либо локализоваться в центре анионного тетраэдра, либо быть смещенным из него в другую, внецентровую потенциальную яму. Колебания атома Hg в центре анионного тетраэдра соответствует мода с ${}^H \omega_0 = 98 \text{ cm}^{-1}$, а внецентровым колебаниям атома Hg — мода с ${}^H \Omega = 118 \text{ cm}^{-1}$. Центральная яма более мелкая по отношению к внецентровой потому и центральная мода с ${}^H \omega_0 = 98 \text{ cm}^{-1}$ сильно проявляется только при повышенных температурах, при гелиевых температурах ее интенсивность близка к нулю.

Рассмотренная модель для мод колебаний в HgTe справедлива и для сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с учетом того, что для колебаний атома Hg в центральной яме (как и для атома Cd) допускаются четыре моды в их базисных ячейках $\text{Hg}(4-n)\text{Cd}(n)\text{Te}$ ($n = 0, 1, 2, 3, 4$). Моде ${}^H \omega_0 = 98 \text{ cm}^{-1}$, наблюдаемой в HgTe, соответствует колебание в базисной ячейке $\text{Hg}(4)\text{Te}$ с $n = 0$. На рис. 4 представлено распределение мод решеточных колебаний ${}^C \omega_n$, ${}^H \Omega$ и ${}^H \omega_n$ в сплавах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ разных составов x . Распределение мод Cd–Te-колебаний ${}^C \omega_n$ при $T = 25 \text{ K}$ взято из [1,3]. Частоты мод почти не изменяются с составом, что является следствием равенства решеточных параметров бинарных компонентов сплава. Для мод Hg–Te-колебаний (${}^H \omega_n = 98, 105, 112 \text{ cm}^{-1}$) разница в собственных частотах составляет $\sim 7 \text{ cm}^{-1}$, тогда как для мод Cd–Te-колебаний ${}^C \omega_n$ она составляет $\sim 2.5 \text{ cm}^{-1}$. Большое различие вызвано разным характером связи: в полуметалле HgTe связь Hg–Te в значительной степени металлическая, в широкозонном полупроводнике CdTe связь Cd–Te ковалентно-ионная.

Для системы сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, исследованных в предыдущей работе [4], из-за ограниченного числа образцов разного состава ($x = 0.1, 0.35$ и 0.55) не представилось возможным рассмотреть композиционную зависимость сил осциллятора „дефектных“ низкочастотных мод, как это было сделано на рис. 3, a–c для сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$. Но частоты этих „дефектных“ мод в $\text{Hg}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ (например, для состава $x = 0.1$ при $T = 200 \text{ K}$ $\omega_n = 94, 101$ и 108 cm^{-1} [4]) близки частотам

мод Hg-Te -колебаний в $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($^H\omega_n = 98, 105, 112 \text{ cm}^{-1}$) с одинаковой разницей в собственных частотах $\sim 7 \text{ cm}^{-1}$. Это является достаточным основанием считать „дефектные“ низкочастотные моды по аналогии со сплавами HgCdTe модами Hg-Te -колебаний. В отличие от $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ сплавы $\text{Hg}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ образованы бинарными компонентами с сильно различающимися решеточными параметрами, поэтому значения частот решеточных мод изменяются с изменением состава x из-за внутренних напряжений.

Выше отмечалось, что при $T = 300 \text{ K}$ в сплаве $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ состава $x \approx 0.1$ происходит схлопывание межзонной щели. Переход электронной системы сплава в бесщелевое состояние сопровождается резким понижением частот ЛО-мод HgTe - и CdTe -подобных колебаний [9] и соответственно приводит к резкому уменьшению ЛО–ТО-расщепления из-за вкладов, связанных с межзонными и внутризонными переходами. Аналогичный эффект наблюдался авторами [10] в полуметаллических узкозонных сплавах HgCdMnTe . В настоящей работе был обнаружен другой эффект, вызванный переходом электронной системы сплава в бесщелевое состояние — уменьшение сил осциллятора низкочастотных мод Hg-Te -колебаний в области инверсии зон. На рис. 5 представлены композиционные зависимости силы осциллятора основной моды (внецентровой) Hg-Te -

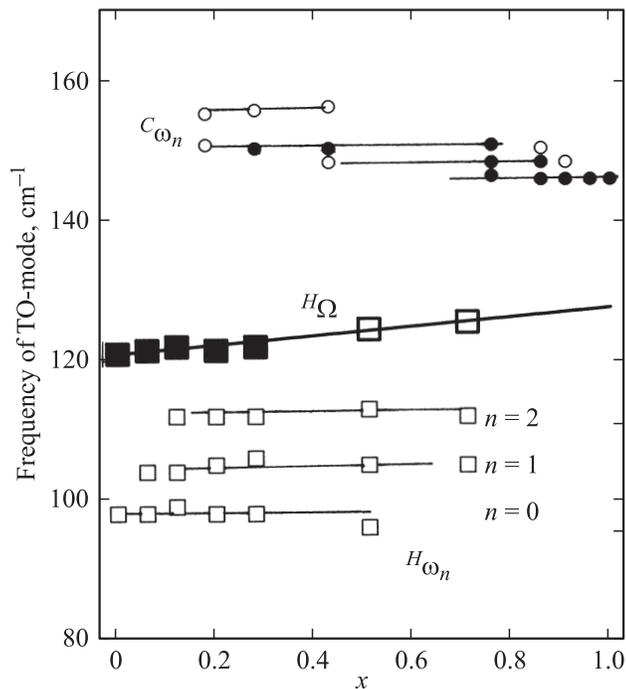


Рис. 4. Распределение мод $^H\omega_n$ ($n = 0, 1, 2$) и $^H\Omega$ Hg-Te -колебаний в зависимости от состава x в сплавах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ при $T = 300 \text{ K}$. Приводится также распределение мод $^C\omega_n$ ($n = 4, 3, 2, 1$) Cd-Te -колебаний при $T = 25 \text{ K}$ из [1,3]. Темные и светлые символы на кривых для обеих мод (с верхними индексами H и C) означают силу осциллятора этих мод. Темные символы соответствуют сильной моде, светлые — слабой моде.

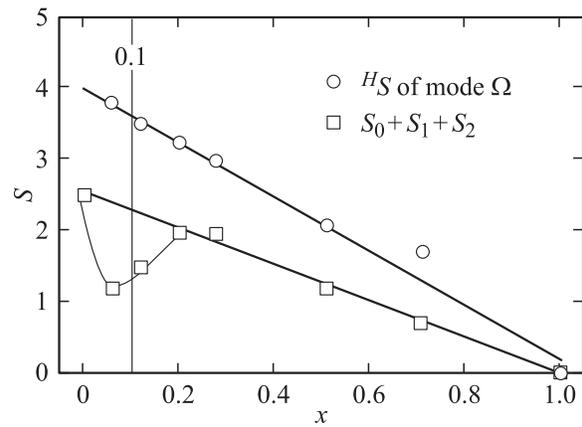


Рис. 5. Суммарное распределение сил осциллятора низкочастотных мод ($S_0 + S_1 + S_2$) и распределение силы осциллятора основной моды HS Hg-Te -колебаний в зависимости от состава сплава x . Метка $x = 0.1$ соответствует точке инверсии зон сплава при $T = 300 \text{ K}$.

колебания (HS) и суммарной силы осциллятора низкочастотных мод Hg-Te -колебаний ($S_0 + S_1 + S_2$). Первая зависимость $^HS(x)$ почти линейная для всего интервала составов, а для второй $\Sigma S_j(x)$ линейная зависимость нарушается сильным провалом в окрестности точки инверсии зон $x \approx 0.1$. Из катионных конфигураций $\text{Hg}(4-n)\text{Cd}(n)\text{Te}$ этот эффект касается в основном базисной ячейки $\text{Hg}(4)\text{Te}$ с $n = 0$ (рис. 3, а). Следует подчеркнуть, что линейная композиционная зависимость сил осцилляторов не нарушается в точке инверсии зон для внецентровых Hg-Te -колебаний, что указывает на локальность этого квазимолекулярного типа колебательного возбуждения. Причины для подобного рассмотрения в HgTe ранее обсуждались в [8].

4. Заключение

Представленный анализ диэлектрической функции $\text{Im } \epsilon(\omega)$ сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ в области низкочастотных колебаний, полученной интегральным преобразованием Крамера–Кронига из спектра решеточного отражения $R(\omega)$, указывает на наличие многомодовой системы Hg-Te -колебаний, аналогичной ранее исследованной системе Cd-Te -колебаний. Подобная многомодовая система Hg-Te -колебаний наблюдается также в сплавах $\text{Hg}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. Анализ проводился в квазимолекулярном приближении с учетом модели асимметричного двукратного потенциала для атома Hg в кристаллической решетке сплава. Наблюдаемые при повышенных температурах ($> 100 \text{ K}$) моды Hg-Te -колебаний ($^H\omega_n = 98, 105, 112 \text{ cm}^{-1}$) соответствуют колебательным модам в их базисных ячейках $\text{Hg}(4-n)\text{Cd}(n)\text{Te}$ ($n = 0, 1, 2$) для атома Hg , локализованного в центре анионного тетраэдра. Очень сильная колебательная мода $^H\Omega = 121.5 \text{ cm}^{-1}$, наблюдаемая при любой температуре, соответствует Hg-Te -колебанию внецентрового атома Hg .

В заключение автору хотелось бы сделать замечание по поводу статьи [10]. В обзорной работе [10] по решеточным колебаниям в полумагнитном узкозонном сплаве HgCdMnTe приводится комментарий относительно применимости модели асимметричного двуянного потенциала для атома Hg в HgTe [8], содержащий ошибку в описании этой модели. Согласно [8], более глубокая яма двуянного потенциала соответствует внецентровому атому Hg. При термическом возбуждении проявляется дополнительная „аномальная“ мода Hg–Te-колебаний, связанная с переходом Hg в центральное тетраэдрическое положение. В [10] наиболее сильная колебательная мода приписывается колебанию Hg в центре анионного тетраэдра (вероятно, по аналогии с суперионным AgI [11], для которого двуянный потенциал рассматривается в качестве механизма суперионного перехода), поэтому авторы и не могли воспользоваться моделью двуянного потенциала [8] для объяснения температурной зависимости решеточных мод в их в целом прекрасной статье.

Список литературы

- [1] S.P. Kozurev, L.K. Vodopyanov, R. Triboulet. *Phys. Rev. B* **58**, 1374 (1998).
- [2] H.W. Verleur, A.S. Barker. *Phys. Rev.* **149**, 715 (1966).
- [3] С.П. Козырев, В.Н. Пырков, Л.К. Водопьянов. *ФТТ* **43**, 3695 (1992).
- [4] С.П. Козырев, И.В. Кучеренко, М. Cestelli Guidi, R. Triboulet. *ФТТ* **49**, 2199 (2007).
- [5] С.П. Козырев, В.Н. Пырков, Л.К. Водопьянов. *ФТТ* **34**, 2372 (1992).
- [6] D.B. Zax, S. Vega, N. Yellin, D. Zamir. *Chem. Phys. Lett.* **138**, 105 (1987).
- [7] M. Grynbert, P.Le Toulec, M. Balkanski. *Phys. Rev. B* **9**, 517 (1974).
- [8] С.П. Козырев. *ФТТ* **35**, 1729 (1993).
- [9] С.П. Козырев, В.Н. Пырков, Л.К. Водопьянов. *ФТТ* **34**, 3705 (1992).
- [10] G.G. Tarasov, Yu.I. Mazur, M.P. Lisitsa, S.R. Lavoric, A.S. Rakitin, J.W. Tomm, A.P. Lityinchuk. *Semicond. Sci. Technol.* **14**, 187 (1999).
- [11] A. Rakitin, M. Kobayashi. *Phys. Rev. B* **53**, 3088 (1996).