

# Оптические и вибрационные свойства твердых растворов

## $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$

© А.И. Белогорохов, А.А. Флоренцев, И.А. Белогорохов\*, А.В. Елютин

ФГУП „Гиредмет“,  
119017 Москва, Россия

\* Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
119899 Москва, Россия

E-mail: belog@mig.phys.msu.ru

(Поступила в Редакцию 22 февраля 2005 г.  
В окончательной редакции 18 июля 2005 г.)

Представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований динамики решетки твердых растворов  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ . Выполнены расчеты значений частот основных оптических фононов  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  в рамках модифицированной модели однородных ячеечных смещений, что позволило идентифицировать все основные колебания кристаллической решетки, оказывающие существенное влияние на оптические свойства данного материала в спектральной области, соответствующей однофононному резонансу. Исследовались оптические свойства эпитаксиальных слоев  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ , выращенных методом жидкофазной эпитаксии на подложках  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ . Проведено сравнение теоретических и экспериментальных спектральных зависимостей диэлектрической функции твердого раствора  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  разного состава при температурах 295 и 78 К, получено их хорошее совпадение. Дополнительные решеточные колебания, частоты которых в плотности фононных состояний располагаются ниже по энергии, чем мода  $HgTe$ , обусловлены дефектами кристаллической решетки твердого раствора  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ .

Работа выполнена в рамках проекта Российского фонда фундаментальных исследований и проекта НШ-1700.2003.3.

PACS: 78.66.Hf, 63.20.Dj

## 1. Введение

Полупроводниковые твердые растворы  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  могут стать одним из основных материалов для создания на их основе ИК-детекторов, работающих в интервале длин волн  $3-5\ \mu m$  при температурах 170–295 К. Для этого необходимо решить проблему выращивания гетероструктур  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe/Cd_{1-x}Zn_xTe$  с заданной шириной запрещенной зоны и улучшенными структурными свойствами. Добавление  $ZnTe$  приводит к упрочнению связей в твердом растворе, что в свою очередь влечет за собой улучшение его механических свойств и положительных сказывается на стабильности рабочих характеристик ИК-детекторов. Тем не менее следует иметь в виду, что многокомпонентные изовалентные полупроводниковые твердые растворы в ряде случаев не являются случайными сплавами. В них может наблюдаться коррелированное заполнение узлов подрешеток [1,2]. Для того чтобы иметь возможность адекватно оценивать степень влияния эффектов упорядочения на процесс формирования твердых растворов  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ , необходимо детально теоретически и экспериментально исследовать динамику их решетки. В настоящее время достаточно большое число публикаций посвящено исследованиям колебаний решетки двухкомпонентных и трехкомпонентных полупроводников, значительно меньшее — четырехкомпонентным, в частности твердым рас-

творам группы  $A^2B^6$  [3–6]. В случае  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  подобные сведения отсутствуют.

В настоящей работе представлены результаты исследований оптических и электрофизических свойств твердых растворов  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ . Перестройка их колебательного спектра в широком диапазоне составов исследована теоретически с привлечением модели однородных ячеечных смещений. Проведен расчет частот основных оптических фононов, а также сравнение экспериментальных и теоретических данных.

## 2. Образцы и методика эксперимента

Выращивание эпитаксиальных слоев  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  проводилось методом жидкофазной эпитаксии в запаянной кварцевой ампуле при температуре 490–500°C с удалением остатков раствора-расплава на основе теллура центрифугированием [7]. В качестве подложек использовались монокристаллические образцы  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  ( $x = 0.03-0.05$ ) ориентации  $(111)B$ . Выращенные слои имели  $p$ -тип проводимости, концентрация и подвижность носителей заряда при  $T = 300\ K$  составляли  $p \sim 10^{17}\ cm^{-3}$  и  $\mu \sim 200-240\ cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$  соответственно. Проведенный послеростовой отжиг образцов в насыщенных парах ртути при температуре 360°C в течение 4–5 h позволил уменьшить концентрацию дырок до уровня  $(0.8-1.0) \cdot 10^{16}\ cm^{-3}$ , а в некоторых случаях

перевести материал  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  из  $p$ -типа в  $n$ -тип проводимости. Подвижность носителей заряда в первом случае составила  $\mu > 500 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ , во втором  $\mu > 1.5 \cdot 10^5 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ . Плотность дислокаций в эпитаксиальных слоях не превышала значений  $(2-4) \cdot 10^4 \text{ cm}^{-2}$ .

Неразрушающие методы ИК-спектроскопии (FTIR) часто используются для получения информации о дисперсионной зависимости функции диэлектрического отклика гетерополярных полупроводниковых кристаллов, к которым, в частности, относится твердый раствор  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ . Для них диэлектрический отклик в дальнем ИК-диапазоне волновых чисел определяется в основном оптическими фононами. Зависимости коэффициентов отражения  $R(\omega)$  и пропускания  $T(\omega)$  регистрировались в частотном диапазоне  $\omega = 10-5000 \text{ cm}^{-1}$ , охватывающем области межзонного поглощения квантов света, многофононного и однофононного резонанса, с помощью Фурье-спектрометра IFS-113v (Bruker, Germany) со спектральным разрешением не хуже  $0.2 \text{ cm}^{-1}$ .

Обработка экспериментальных зависимостей с целью получения значений частот оптических фононов и параметров их затухания проводилась с использованием соотношений Крамерса–Кронига и генетического алгоритма [8]. В рамках этого подхода реальная дисперсионная зависимость коэффициента отражения от длины волны падающего на образец электромагнитного излучения аппроксимируется с помощью комплексной диэлектрической проницаемости материала  $\varepsilon(\omega)$ . Последняя в свою очередь задается суммой независимых затухающих осцилляторов

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \prod_j \frac{\omega_{LO,j}^2 - \omega^2 + i\omega\gamma_{LO,j}}{\omega_{TO,j}^2 - \omega^2 + i\omega\gamma_{TO,j}}. \quad (1)$$

Здесь  $\varepsilon$  — высокочастотная диэлектрическая проницаемость,  $\omega_{TO,j}$  и  $\gamma_{TO,j}$  — частота и параметр затухания  $j$ -й поперечной ( $TO$ ) оптической моды соответственно;  $\omega_{LO,j}$  и  $\gamma_{LO,j}$  имеют аналогичный смысл для продольной ( $LO$ ) моды. Вклад свободных носителей заряда в  $\varepsilon(\omega)$  можно учесть, добавив в (1) дополнительное слагаемое

$$\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_p)}, \quad (2)$$

где

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi N e^2}{\varepsilon_\infty m^*},$$

$\omega_p$  и  $\gamma_p$  — частота и параметр затухания плазменных колебаний соответственно,  $N$  — концентрация свободных носителей заряда,  $m^*$  — эффективная масса.

Исследование структурного совершенства выращенных гетероструктур и определение периода решетки  $a$  эпитаксиального слоя и подложки осуществлялись с помощью метода рентгеновской дифрактометрии. Использовалась следующая зависимость  $a$  от состава твердого раствора  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ :

$$a = 6.4614 + 2.09 \cdot 10^{-2}x - 0.3584y \text{ (Å)}.$$

По положению края основного поглощения оценивались значения ширины запрещенной зоны  $E_g$  в исследованных эпитаксиальных пленках  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ .

### 3. Результаты и их обсуждение

3.1. Основные оптические фононы. Перестройку колебательного спектра твердых растворов типа  $AB_{1-x-y}C_xD_y$  можно теоретически описать с привлечением модели однородных смещений. В рамках этой модели предполагается, что атомы одного сорта колеблются в твердом растворе в фазе и с одинаковой амплитудой, при этом подрешетка типа  $A$  упорядочена, а по узлам другой подрешетки хаотически распределены атомы  $B, C$  и  $D$ . Существующие в настоящее время различные модификации этой модели отличаются друг от друга в подходе к учету влияния эффектов дальнедействующего взаимодействия. Введение в рассмотрение последних влечет за собой появление в уравнениях движения атомов твердого раствора ряда подгоночных параметров, численные значения которых не всегда соответствуют реальной физической картине. Для того чтобы устранить указанное несоответствие, было предложено вместо одноузельного [9] использовать многоузельное приближение [10], в рамках которого рассматриваются однородные по всему кристаллу значения относительных смещений атомов в ячейках ( $AB, AC$  и  $AD$  в твердом растворе  $AB_{1-x-y}C_xD_y$ ) и однородные смещения центров тяжести ячеек. К преимуществам этой модели можно отнести тот факт, что она не содержит подгоночных параметров, и значения межячеечных силовых постоянных удается оценить из дисперсионных зависимостей оптических ветвей бинарных компонентов твердого раствора  $AB_{1-x-y}C_xD_y$ :  $AB, AC$  и  $AD$ .

Расчет фононных спектров твердых растворов на основе модели однородных ячейчных смещений предполагает малость межячеечного взаимодействия по сравнению с внутриячеечным. Гамильтониан решетки смешанного кристалла в гармоническом приближении имеет следующий вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,l,s} M_{ls} [\dot{U}_\alpha(ls)]^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha,l,s \\ \beta,l',s'}} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ s & s' \end{pmatrix} U_\alpha(ls) U_\beta(l's'), \quad (3)$$

где  $U_\alpha(ls)$  —  $\alpha$ -я компонента вектора смещения  $s$ -го атома из положения равновесия в  $l$ -й элементарной ячейке,  $M_{ls}$  — масса атома с номером  $s$ ;  $\Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ s & s' \end{pmatrix}$  — силовые константы, равные вторым производным по  $U_\alpha, U_\beta$  от потенциальной энергии взаимодействия атомов кристалла, взятым в положениях равновесия. Вследствие независимости потенциальной энергии от малых трансляций кристалла как целого силовые постоянные удовлетворяют

условия равновесия

$$\sum_{l',s'} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ s & s' \end{pmatrix} = 0. \quad (4)$$

Для кристаллической решетки с двумя ионами в элементарной ячейке, обладающей кубической симметрией, уравнения движения, полученные из гамильтониана (3), запишутся в виде

$$M_{ls} \ddot{U}_\alpha(l_s) = - \sum_{\beta,l',s'} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ s & s' \end{pmatrix} U_\beta(l's'). \quad (5)$$

Пусть подрешетка  $l=1$  упорядочена и занята атомами сорта  $A$ , а подрешетка  $l=2$  состоит из хаотически разбросанных по узлам атомов  $B, C$  и  $D$ . Чтобы явно выделить внутри- и межъячеечные взаимодействия, в уравнение движения (5) необходимо ввести новые переменные, которые характеризуют смещения центров масс ячеек и относительные смещения атомов в ячейках [11]. В пренебрежении относительным движением центров тяжести ячеек разного сорта для векторов относительного смещения атомов в ячейках всех сортов твердого раствора  $AB_{1-x-y}C_xD_y$  будет справедливо следующее выражение:

$$\mu_i \ddot{U}_i = -\Phi_{ii} U_i - \sum_{j=1}^3 P_j(x, y) \varphi_{ij} U_j. \quad (6)$$

Здесь  $\mu_i$  — приведенная масса атомов, составляющих ячейку сорта  $i$ ;  $i$  — номер элементарной ячейки:  $i=1, 2, 3$  отвечают ячейкам  $HgTe$ ,  $CdTe$  и  $ZnTe$  в  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ . Силовые постоянные  $\Phi_{ii}$  и  $\varphi_{ij}$  характеризуют взаимодействие при относительном движении атомов в ячейках и отвечают взаимодействию центров масс ячеек;  $P_j(x, y)$  — вероятность реализации ячейки сорта  $j$ . Выводя за рамки рассмотрения относительное движение центров тяжести ячеек разного сорта, необходимо тем не менее учитывать локальное электрическое поле  $E_{loc}$ , обусловленное колебаниями решетки. В таком случае в уравнении (6) появится еще одно слагаемое:  $+e_i E_{loc}$ . Под  $e_i$  в данном случае подразумеваются эффективные заряды ионов, формирующих ячейки разного типа. В свою очередь локальное электрическое поле можно выразить через дальнедействующее кулоновское поле  $E$  и макроскопическую поляризацию кристалла  $P$

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E} + \frac{4\pi}{3} \mathbf{P}. \quad (7)$$

Макроскопическую поляризацию можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = & (1-x-y) \left\{ \frac{eAB}{v} (\mathbf{U}_A - \mathbf{U}_B) + \frac{d_A + d_B}{v} \mathbf{E}_{loc} \right\} \\ & + x \left\{ \frac{eAC}{v} (\mathbf{U}_A - \mathbf{U}_C) + \frac{d_A + d_C}{v} \mathbf{E}_{loc} \right\} \\ & + y \left\{ \frac{eAD}{v} (\mathbf{U}_A - \mathbf{U}_D) + \frac{d_A + d_D}{v} \mathbf{E}_{loc} \right\}, \quad (8) \end{aligned}$$

где  $d_A, d_B, d_C$  и  $d_D$  — поляризуемости ионов  $A, B, C$  и  $D$  за счет деформации электронных оболочек,  $v$  —

объем элементарной ячейки. Следуя подходу, принятому в электродинамике сплошных сред [11], микроскопические величины можно выразить через макроскопические, такие как высокочастотные  $\epsilon$  и статические  $\epsilon_0$  диэлектрические проницаемости крайних компонентов твердого раствора замещения:

$$\frac{(d_1 + d_2)_i}{v} = \frac{\epsilon_{\infty,i} - 1}{\epsilon_{\infty,i} + 2}, \quad (9)$$

$$\frac{\Phi_{ii}^0(n_i + 1)}{\mu_i} = \frac{\epsilon_{0,i} - +2}{\epsilon_{\infty,i} + 2} \omega_{TO,i}^2, \quad (10)$$

$$\frac{4\pi}{9} \frac{e_i^2}{\mu_i v} = \frac{\epsilon_{\infty,i} - \epsilon_{0,i}}{(\epsilon_{\infty,i} + 2)^2} \omega_{TO,i}^2. \quad (11)$$

Здесь  $d_1$  характеризует атомы сорта  $A$ , а  $d_2$  — сорта  $B, C$  или  $D$ ,  $\omega_{TO,i}$  — частота поперечных оптических фононов в точке  $\Gamma$  зоны Бриллюэна беспримесного бинарного кристалла, а диагональные элементы межъячеечных силовых постоянных  $\varphi_{ij}$ , характеризующие дисперсию оптических фононных ветвей, можно представить в виде

$$\varphi_{ii} = n_i \Phi_{ii}^0, \quad (12)$$

где  $\Phi_{ii}^0$  — силовые постоянные, характеризующие взаимодействие внутри ячеек разного сорта в беспримесных бинарных компонентах твердого раствора замещения. Из уравнений (10) и (12) можно получить следующее соотношение:

$$\frac{\varphi_{ii}}{\mu_i} = \frac{n_i}{1 + n_i} \frac{\epsilon_{0,i} + 2}{\epsilon_{\infty,i} + 2} \omega_{TO,i}^2. \quad (13)$$

Величины  $n_{LO,TO}$  оценивались нами по значениям вторых производных  $-d\omega^2/dK^2$  дисперсионных зависимостей оптических фононов в зоне Бриллюэна [12]

$$\begin{aligned} \omega^2(K) = & \omega_1^2 + \omega_2^2 + \sqrt{(\omega_1^2 + \omega_2^2)^2 - 4\omega_1^2\omega_2^2 \sin^2(K/2)} \\ \omega_1^2 = & \omega_{min}^2/2, \quad \omega_2^2 = (\omega_{max}^2 - 2\omega_1^2)/2, \quad (14) \end{aligned}$$

где  $\omega_{min}$  и  $\omega_{max}$  — минимальное (на краю зоны Бриллюэна) и максимальное (в точке  $\Gamma$ ) значения частоты оптического фонона; параметр  $K$  принимает значения от 0 до  $\pi$ ;  $n_i = 0.5(n_{LO} + n_{TO})$ . Далее необходимо в явном виде учесть взаимодействие кристалла с примесной ячейкой, что приводит к процедуре перенормировки внутриячеечных силовых постоянных примесных ячеек [4]

$$\Phi_{ii} = \Phi_{ii}^0 + \text{sign} \sum_{j=1}^3 P_j(x, y) \varphi_{ij}. \quad (15)$$

В уравнении (15) знак плюс соответствует случаю, когда приведенная масса атомов, составляющих  $i$ -ю примесную ячейку, больше, чем эффективная масса атомов кристалла, в котором располагается данная ячейка. В противном случае необходимо выбрать знак минус. Для

**Таблица 1.** Параметры бинарных кристаллов, формирующих твердый раствор  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  ( $T = 295\text{ K}$ )

Кристалл	$\mu_i$	$\varepsilon$	$\varepsilon_0$	$\omega_{TO}, \text{cm}^{-1}$	$ n $
ZnTe	43.20	7.28	10.10	178.90	0.15 [4]
CdTe	59.80	7.21	10.60	140.90	0.15 [4]
HgTe	78.00	14.02	20.30	121.50	0.13

Примечание.  $\mu_i$  — приведенная масса атомов, составляющих элементарную ячейку,  $\varepsilon$  — высокочастотная,  $\varepsilon_0$  — статическая диэлектрическая проницаемость,  $\omega_{TO}$  — частота поперечного оптического фонона,  $n$  — параметр, характеризующий дисперсию решеточных колебаний.

нахождения частот внутриячеечных колебаний можно воспользоваться следующими уравнениями:

$$\Phi_{ii}^{\perp} - \omega^2 + \sum_{j=1; j \neq i}^3 \Phi_{ij}^{\perp} = 0, \quad (16)$$

$$\Phi_{ii}^{\parallel} - \omega^2 + \sum_{j=1; j \neq i}^3 \Phi_{ij}^{\parallel} = 0. \quad (17)$$

Решая совместно уравнения (16) и (17), можно найти значения частот основных оптических фононов для любых комбинаций  $x$  и  $y$ , когда в кристалле реализуются все три типа ячеек:  $AB$ ,  $AC$  и  $AD$ . Процедура вычисления значений величин  $\Phi_{ij}^{\perp}$ ,  $\Phi_{ij}^{\parallel}$ , входящих в (16) и (17), описана в работе [6]. Значения параметров бинарных соединений, которые были использованы для расчета частот основных оптических фононов твердых растворов  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ , приведены в табл. 1. Нами были рассчитаны значения постоянных межячеечного взаимодействия  $\varphi_{ij}$ , которые для твердого раствора  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  оказались равными ( $\text{kg} \cdot \text{s}^{-2}$ )

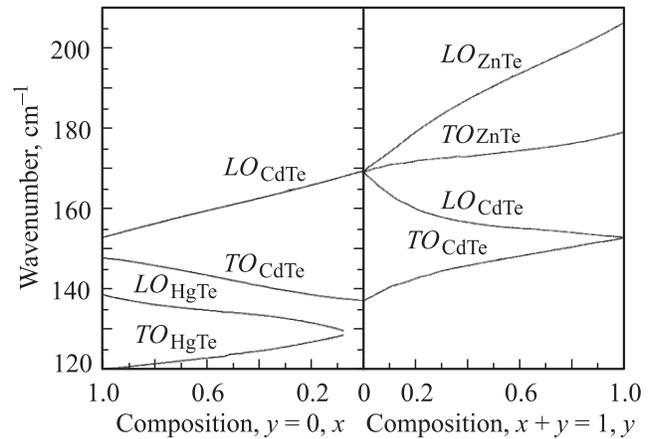
$$\begin{aligned} \varphi_{12} &= 4.36 \cdot 10^{-2}, & \varphi_{13} &= 3.76 \cdot 10^{-1}, \\ \varphi_{23} &= 3.31 \cdot 10^{-1}, & \varphi_{21} &= 1.81 \cdot 10^{-1}, \\ \varphi_{31} &= 4.66 \cdot 10^{-1}, & \varphi_{32} &= 3.39 \cdot 10^{-1}. \end{aligned}$$

В рамках теоретического подхода, изложенного выше, для всех составов твердого раствора  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  были рассчитаны значения частот основных оптических фононов. Сравнение теоретических данных с экспериментальными и с результатами других исследований, полученными для тройных соединений  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  [13–15] и  $\text{Cd}_y\text{Zn}_{1-y}\text{Te}$  [16,17], показало хорошее согласие. Для  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  с одновременным замещением имеют место три типа внутриячеечных колебаний, характеризующихся различной концентрационной зависимостью продольно-поперечного расщепления. На рис. 1 представлены результаты расчетов для предельных сечений  $x+y=1, y$  и  $y=0, x$ . При введении в тройной твердый раствор четвертого компонента в количестве менее 2 at.% в фононных спектрах появляются локальные моды. Результаты проведенного

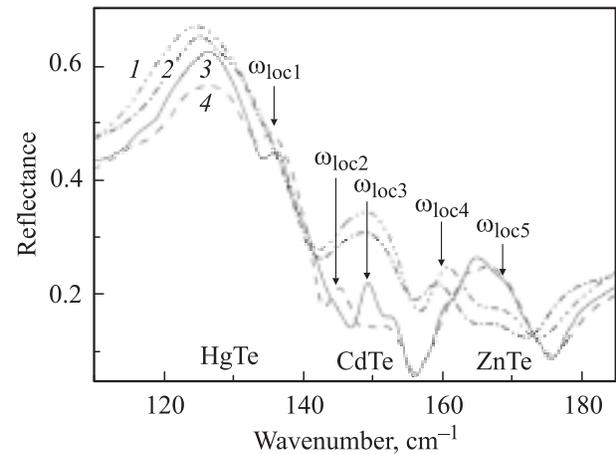
расчета позволили установить значения частот искомых вибрационных мод ( $\text{cm}^{-1}$ )

$$\begin{aligned} \omega_{\text{imp}}^{\text{Zn}}(\text{HgTe}) &= 171.8, & \omega_{\text{imp}}^{\text{Zn}}(\text{CdTe}) &= 177.3, \\ \omega_{\text{imp}}^{\text{Cd}}(\text{HgTe}) &= 145.9, & \omega_{\text{imp}}^{\text{Hg}}(\text{CdTe}) &= 131.9, \\ \omega_{\text{imp}}^{\text{Hg}}(\text{ZnTe}) &= 140.5, & \omega_{\text{imp}}^{\text{Cd}}(\text{ZnTe}) &= 160.5. \end{aligned}$$

Используя соотношения (1) и (2), из экспериментальных спектров отражения в области решеточного поглощения можно получить информацию о спектральном положении основных фононных мод твердого раствора  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ . Сравнив эти данные с результатами теоретического расчета, проведенного выше, можно, во-первых, оценить значения  $x$  и  $y$ , а во-вторых, сделать выводы о том, проявляются или нет корреляционные эффекты в объеме исследуемого твердого раствора. На рис. 2 представлены экспериментальные зависимости  $R(\omega)$  образцов  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  разного состава



**Рис. 1.** Концентрационные зависимости продольно-поперечного расщепления внутриячеечных колебаний в предельных сечениях  $y=0, x$  ( $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ) и  $x+y=1, y$  ( $\text{Cd}_y\text{Zn}_{1-y}\text{Te}$ ).



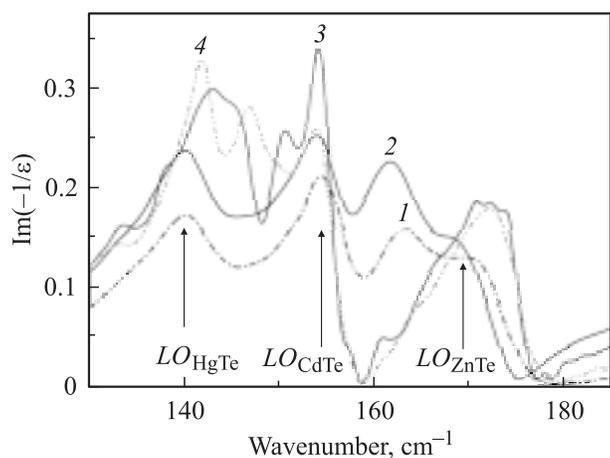
**Рис. 2.** Спектральные зависимости  $R(\omega)$  образцов  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  разного состава, полученные при комнатной температуре. Номера кривых соответствуют номерам образцов в табл. 2.

**Таблица 2.** Параметры решеточных колебаний твердого раствора  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ , рассчитанные теоретически и из FTIR-спектров

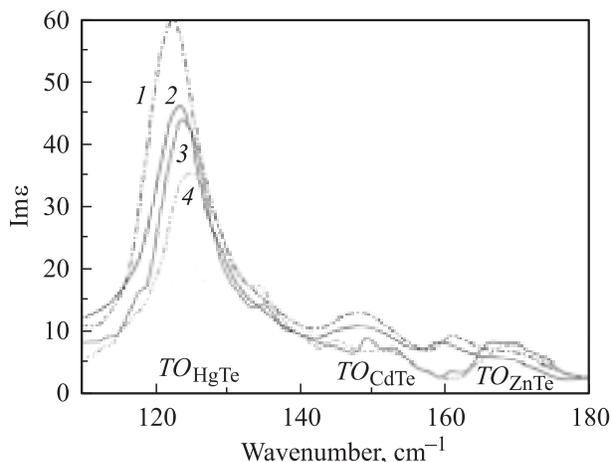
Параметр		Номер образца							
		1		2		3		4	
		Эксперимент	Теория	Эксперимент	Теория	Эксперимент	Теория	Эксперимент	Теория
Состав	$x$	0.19	0.20	0.22	0.22	0.10	0.09	0.09	0.09
	$y$	0.02	0.02	0.03	0.03	0.11	0.11	0.13	0.13
Мода HgTe	$\omega_{TO}, cm^{-1}$	122.2	123.0	124.3	124.0	122.5	121.9	124.0	123.9
	$\omega_{LO}, cm^{-1}$	137.0	137.7	137.3	137.5	132.8	133.6	132.1	133.3
Мода CdTe	$\omega_{TO}, cm^{-1}$	149.2	149.5	151.4	150.8	152.4	152.2	150.3	149.7
	$\omega_{LO}, cm^{-1}$	155.4	155.3	156.1	155.9	153.3	153.1	152.1	151.3
Мода ZnTe	$\omega_{TO}, cm^{-1}$	171.2	169.7	172.1	172.1	169.3	170.8	171.1	169.7
	$\omega_{LO}, cm^{-1}$	171.4	169.9	172.1	172.3	173.7	173.0	174.1	174.0
$\epsilon$		12.06	11.97	11.54	11.57	12.04	12.00	11.78	11.69
$E_g, eV$		0.183	0.189	0.238	0.240	0.260	0.248	0.298	0.293
$\omega_{loc}, cm^{-1}$		$\omega_{loc4} = 161.2$		$\omega_{loc4} = 159.8$		$\omega_{loc1} = 136.1$ $\omega_{loc3} = 149.2$		$\omega_{loc1} = 135.2$ $\omega_{loc2} = 145.1$	

(табл. 2). В области продольно-поперечных расщеплений можно выделить три области решеточных колебаний, соответствующих модам HgTe, CdTe и ZnTe. Относительная амплитуда этих фононных пиков пропорциональна концентрации компонентов твердого раствора  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ . Для некоторых колебательных мод отсутствует  $LO-TO$ -расщепление. В таком случае их можно рассматривать как локализованные возбуждения. Это видно из сравнения рис. 3 и 4. На первом из них представлены зависимости мнимой части обратной величины диэлектрической проницаемости исследованных образцов, взятой со знаком минус. Максимумы приведенных зависимостей соответствуют спектральному положению продольных оптических фононов. Наряду

с основными решеточными колебаниями присутствует ряд дополнительных пиков, располагающихся на частотах  $\omega_{loc}$ , близких к рассчитанным выше. Их можно видеть и на рис. 4, где представлены зависимости  $Im \epsilon(\omega)$ , по положению максимумов которых в свою очередь можно оценить частоты поперечных решеточных колебаний. Спектральное положение упомянутых выше дополнительных пиков, как это видно из рис. 3 и 4, практически не меняется. Значения частот основных оптических фононов и  $\omega_{loc}$ , полученные из экспериментальных зависимостей  $R(\omega)$ , приведены в табл. 2. По мере увеличения концентрации катионов определенного сорта и соответственно влияния дальнедействующего кулоновского взаимодействия спектральное положение



**Рис. 3.** Спектральная зависимость  $Im(-1/\epsilon)$  твердых растворов  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ , спектры  $R(\omega)$  которых представлены на рис. 2.



**Рис. 4.** Спектральная зависимость  $Im \epsilon$  твердых растворов  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ , спектры  $R(\omega)$  которых представлены на рис. 2.

этих мод изменяется, что приводит к ситуации, когда их уже необходимо рассматривать не как локализованные примесные, а как основные решеточные колебания. Это хорошо видно на примере образцов № 3 и 4. Так, например, при увеличении в твердом растворе  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  доли ионов кадмия локальная мода  $\omega_{\text{loc1}}$  смещается в сторону больших энергий. Подобное поведение демонстрирует и мода  $\omega_{\text{loc2}}$ , которая, переместившись на  $4.1\text{ cm}^{-1}$ , в конечном счете занимает положение  $\omega_{\text{loc3}}$ . При дальнейшем увеличении кадмиевой компоненты, что имеет место в образцах № 1 и 2, начинает проявляться  $LO$ – $TO$ -колебание подрешетки  $\text{CdTe}$ . Аналогичная картина наблюдается и в спектральной области, соответствующей колебаниям  $\text{ZnTe}$ -компоненты  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ . Количество введенного в образец № 1 цинка было минимальным, что сказалось на форме зависимости  $R(\omega)$ : в спектре проявились две локальные моды  $\omega_{\text{loc4}}$  и  $\omega_{\text{loc5}}$ , смещенные на  $3.8$  и  $3.4\text{ cm}^{-1}$  в область меньших энергий по отношению к рассчитанным значениям концентрации атомов цинка (образцы № 3 и 4) в  $R(\omega)$ , естественно, имеют место  $LO$ - и  $TO$ -колебания подрешетки  $\text{ZnTe}$ . Для того чтобы иметь возможность сравнить результаты теоретического расчета с данными, полученными с помощью FTIR-спектроскопии, в табл. 2 приведены значения частот основных оптических фононов, ширины запрещенной зоны, высокочастотной диэлектрической проницаемости  $\epsilon$  и составы твердых растворов  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ , спектры  $R(\omega)$  которых показаны на рис. 2.

Обращает на себя внимание тот факт, что при достаточно больших концентрациях компоненты  $\text{CdTe}$  в твердом растворе  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  — вплоть до значений  $x \sim 0.09$  (образцы № 3 и 4) — величина кулоновского  $LO$ – $TO$ -расщепления в ячейке  $\text{CdTe}$  достаточно мала. Так, например, в случае образца № 3 она составляет всего лишь  $\sim 1\text{ cm}^{-1}$ , что обычно характерно для локальных колебательных мод. Скорее всего, подобный характер поведения этой фононной моды обусловлен спецификой ионно-ковалентной химической связи  $\text{Cd}$ – $\text{Te}$  в данном твердом растворе. Исследуя сплавы  $\text{Cd}_{0.29}\text{Hg}_{0.71}\text{Te}$  при  $T = 25\text{ K}$ , авторы работы [14] обратили внимание на то, что вид спектральной зависимости  $R(\omega)$  в области  $\text{CdTe}$ -подобных колебаний определяется двумя гармоническими затухающими осцилляторами, отстоящими друг от друга на  $\sim 5.5\text{ cm}^{-1}$ , силы которых соотносятся как  $4/5$  ( $0.20/0.25$ ). Для  $\text{Cd}_{0.29}\text{Hg}_{0.71}\text{Te}$  при  $T = 25\text{ K}$   $\omega_{S_1}^{TO} = 150.5\text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_{S_1}^{LO} = 155\text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_{S_2}^{TO} = 156\text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_{S_2}^{LO} = 161\text{ cm}^{-1}$  [14]. Для этих мод величина кулоновского  $LO$ – $TO$ -расщепления составила  $\sim 4.5\text{ cm}^{-1}$ . Аналогичные результаты были получены в [18] с той лишь разницей, что силы осцилляторов составили  $S_1 = 0.12$  и  $S_2 = 0.23$  с  $LO$ – $TO$ -расщеплением  $2$  и  $3\text{ cm}^{-1}$  соответственно. В работе [18] проводилось также сравнение спектров  $R(\omega)$  образцов  $\text{Cd}_{0.21}\text{Hg}_{0.79}\text{Te}$   $n$ - и  $p$ -типа проводимости. Было получено, что в первом

случае отношение  $S_1/S_2$  составило  $1/2$  ( $0.12/0.23$ ), а во втором —  $1/1$  ( $0.24/0.24$ ), из чего в свою очередь был сделан вывод о том, что процедура перевода материала  $\text{Cd}_{0.21}\text{Hg}_{0.79}\text{Te}$  из  $p$ -типа проводимости в  $n$ -тип в результате термического отжига влияет на перераспределение сил осцилляторов между  $TO$ -модами  $\text{CdTe}$ -подобных колебаний. В [14,16] сложный вид  $R(\omega)$  сплавов  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  и  $\text{Cd}_{1-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  в области  $\text{CdTe}$  аппроксимировался четырьмя модами  $\text{Cd}$ – $\text{Te}$ -колебаний в системе базисных ячеек  $\text{Cd}(4-n)\text{Hg}(n)\text{Te}$  или  $\text{Cd}(4-n)\text{Zn}(n)\text{Te}$  ( $n = 0-4$ ). Подобный подход к описанию спектров отражения реальных твердых растворов  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  и  $\text{Cd}_{1-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  не совсем адекватен. В большинстве случаев в  $R(\omega)$  не проявляются четыре моды  $\text{Cd}$ – $\text{Te}$ - и/или четыре моды  $\text{Zn}$ – $\text{Te}$ -колебаний. Как указывалось выше, достаточно учета двух осцилляторов для удовлетворительного описания формы кривой  $R(\omega)$  в области  $\text{Cd}$ – $\text{Te}$ - и  $\text{Zn}$ – $\text{Te}$ -колебаний. Тот факт, что смена типа проводимости и уменьшение концентрации свободных носителей заряда в  $\text{Cd}_{0.21}\text{Hg}_{0.79}\text{Te}$  без изменения состава твердого раствора повлекли за собой изменения в соотношении сил осцилляторов, формирующих моду  $\text{CdTe}$  [18], может свидетельствовать о том, что в результате проведенного отжига в насыщенных парах ртути часть дефектов или дефектных комплексов акцепторного типа либо аннигилировала, либо перешла в другое состояние. Такими дефектами могут быть, например, теллурические комплексы типа нанопреципитатов, которые обусловлены скоплениями вакансий в катионной подрешетке. Их линейные размеры не должны превышать нескольких десятков значений постоянной решетки, чтобы между нанопреципитатом и ближайшим кристаллическим окружением не происходило формирования фазовой границы, которая может появиться, если изменится локальная симметрия подрешетки теллура в наноконкомпексах. В дефектах подобного типа периферийные атомы теллура могут быть смещены из своего центрально-симметричного положения; кроме того, здесь же должно быть значительное число оборванных связей, что предопределяет акцепторное поведение нанопреципитатов теллура в  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ . Значение частоты локальной моды, обусловленной дефектом подобного типа, будет равным  $\sim 152.9\text{ cm}^{-1}$  [19], что с точностью до температурного множителя совпадает с резонансной частотой осциллятора, расположенного со стороны низких энергий, — одного из двух формирующих  $R(\omega)$  в области колебаний типа  $\text{Cd}$ – $\text{Te}$  [14,18]. В таком случае в сплаве  $\text{Cd}_{0.21}\text{Hg}_{0.79}\text{Te}$   $n$ -типа проводимости сила осциллятора указанного колебания ( $S_1$ ) должна быть меньше, чем в материале  $p$ -типа. Действительно, именно такая ситуация и реализуется на практике [18]. В четверных твердых растворах  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  при некоторых значениях  $x$  и  $y$  может иметь место пересечение ветвей поперечных оптических колебаний. В дополнение к этому значения частот примесных и  $TO$ -вибрационных мод могут быть близки, что в свою очередь приводит к резонансному их взаимодействию и далее к расталкиванию

взаимодействующих колебаний. В результате изменяется величина  $LO-TO$ -расщепления и перераспределяются интенсивности сил осцилляторов близлежащих вибрационных мод. В исследованных в данной работе образцах подобная ситуация, вероятнее всего, наблюдается в случае образца № 3, что можно видеть из зависимости  $Im(-\epsilon^{-1}(\omega))$  в области  $CdTe$ -колебаний.

Факт присутствия в оптических спектрах образцов № 3 и 4 наряду с основными двух локальных колебаний, располагающихся в области волновых чисел  $\sim 135-136$  и  $145-149\text{ cm}^{-1}$ , может дополнительно свидетельствовать о том, что мы действительно имеем дело с многокомпонентным твердым раствором, так как частоты этих мод достаточно хорошо совпадают с рассчитанными значениями примесных решеточных мод в  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ . По аналогии с этим в образцах № 1 и 2 появление в спектрах локальной моды в области  $\sim 159-161\text{ cm}^{-1}$  обусловлено примесным характером вхождения части атомов цинка в твердые раствор  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ . Мода решеточных колебаний, располагающаяся в области  $\sim 135-136\text{ cm}^{-1}$ , которую можно наблюдать в спектрах образцов № 3 и 4, должна быть отнесена к категории именно локальных, а не кластерных мод, как было по мнению авторов [16], в полупроводниковом материале  $Cd_xHg_{1-x}Te$  ( $137\text{ cm}^{-1}$ ). В последнем случае спектральное положение кластерной моды оставалось неизменным в диапазоне составов  $0.09 < x < 0.81$ , в то время как в случае твердого раствора  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  незначительное увеличение содержания кадмия повлекло за собой смещение указанной локальной моды на  $1\text{ cm}^{-1}$  в сторону больших энергий. К этому можно добавить, что процесс упорядочения атомов, формирующих кристаллическую решетку твердого раствора, должен сопровождаться увеличением вклада фоннных колебаний виртуального кристалла, расположенных на краю зоны Бриллюэна, в собственную энергию кристалла. Введение нового локального трансляционного периода, связанного с упорядочением, влечет за собой частичное ограничение фоннных дисперсионных кривых (аналогично тому как это происходит в сверхрешетке). Тем не менее вклад подобных колебательных мод в суммарную спектральную плотность фоннных состояний оказывается слишком малым для того, чтобы они могли оказывать существенное влияние на изменение вида спектральной зависимости в области решеточных колебаний [20]. Следовательно, дополнительная мода, ранее наблюдавшаяся в FTIR-спектрах отражения материала  $Cd_xHg_{1-x}Te$  на частоте  $\sim 137\text{ cm}^{-1}$  [16,18,21] и идентифицированная авторами этих работ как кластерная мода, скорее всего, не обусловлена влиянием эффектов кластерирования, а имеет иную природу. Можно предположить, что она обязана своим появлением присутствию скоплений вакансий в катионной подрешетке твердых растворов группы  $A^2B^6$ . Наиболее существенные изменения фоннных колебаний, связанные с упорядочением, должны проис-

ходить в области частот основных объемных продольных и поперечных фоннных мод. Они смешаются в сторону меньших волновых чисел по сравнению со случаем равномерного распределения компонентов твердого раствора в его объеме, если имеют место эффекты частичного упорядочения, и в противоположную сторону в случае проявления эффектов кластерирования [20]. В оптических спектрах образцов  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ , исследовавшихся в данной работе, подобных эффектов не наблюдалось. Полученное удовлетворительное соответствие теоретических и экспериментальных данных позволяет сделать вывод о том, что выращенные эпитаксиальные слои твердых растворов  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  имеют высокое структурное совершенство, атомы  $Cd$ ,  $Hg$  и  $Zn$  располагаются в катионной подрешетке произвольно. Данный вывод подтверждается еще и тем фактом, что значения параметров затухания фоннных колебаний, как правило, находились в пределах  $4.1-6.7\text{ cm}^{-1}$  для продольных и  $2.1-5.2\text{ cm}^{-1}$  для поперечных оптических фононов.

3.2. Низкочастотные локальные моды решеточных колебаний. Для того чтобы иметь возможность детально исследовать проблему появления дополнительных колебательных мод в низкочастотной области спектра ( $\omega < 115\text{ cm}^{-1}$ ), спектры отражения регистрировались и при температуре жидкого азота. Для примера на рис. 5 представлены спектральные зависимости коэффициента отражения, а на рис. 6 — функций  $Im\epsilon(\omega)$  и  $Im(-\epsilon^{-1}(\omega))$  твердого раствора  $n-Cd_{0.20}Hg_{0.78}Zn_{0.02}Te$ , полученные при температурах 78 и 295 К. Значения частот основных оптических фононов, рассчитанные в рамках описанной выше модели для  $T = 78\text{ K}$ , хорошо согласуются с экспериментальными данными. С понижением температуры от 295 до 78 К в образцах состава  $0 < x < 0.3$ ,  $0 < y < 0.2$  частота поперечного фонона моды  $CdTe$  смещается

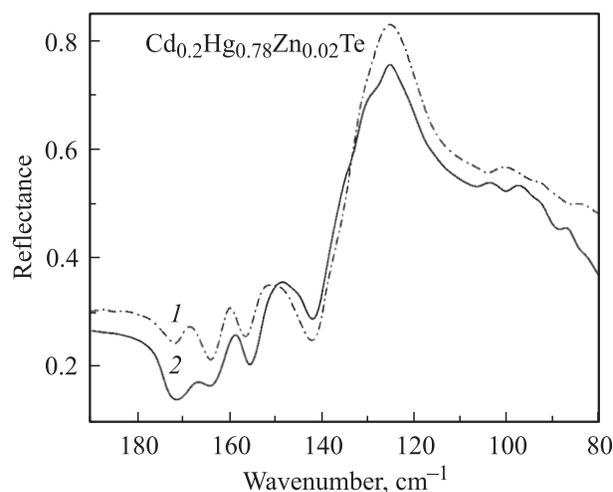
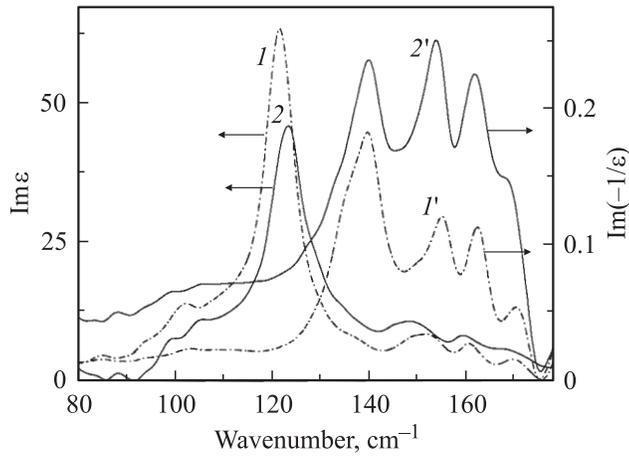


Рис. 5. Экспериментальные спектры отражения твердого раствора  $Cd_{0.2}Hg_{0.78}Zn_{0.02}Te$ , полученные при температуре измерений 78 (1) и 295 К (2).



**Рис. 6.** Спектральные зависимости  $\text{Im } \epsilon$  и  $\text{Im}(-1/\epsilon)$  твердого раствора  $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.78}\text{Zn}_{0.02}\text{Te}$ , спектры  $R(\omega)$  которого представлены на рис. 5.  $T, \text{K}$ : 1, 1' — 78, 2, 2' — 295.

на  $\sim 3.5\text{--}4.0\text{ cm}^{-1}$ , моды  $\text{ZnTe}$  — на  $\sim 1.5\text{--}2.5\text{ cm}^{-1}$  в сторону меньших длин волн, что наблюдалось и в тройных твердых растворах  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  [14],  $\text{Cd}_{1-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  [17], а также в  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Mn}_y\text{Te}$  [6]. Аналогичное, но в 2 раза меньшее смещение имеет место и для продольных оптических фононов мод  $\text{ZnTe}$  и  $\text{CdTe}$ . В противоположность этому значения частот как продольного, так и поперечного оптического фонона моды  $\text{HgTe}$  либо остаются почти неизменными, либо уменьшаются на  $1\text{--}2\text{ cm}^{-1}$  с понижением температуры образца. В табл. 3 приведены экспериментальные значения частот продольных и поперечных оптических фононов образцов  $\text{Cd}_{0.18}\text{Hg}_{0.79}\text{Zn}_{0.03}\text{Te}$  и  $\text{Cd}_{0.22}\text{Hg}_{0.76}\text{Zn}_{0.02}\text{Te}$ , полученные при двух температурах измерений. Анализируя данные, приведенные в табл. 3, необходимо обратить внимание на то, что наряду с основными, а также с уже обсуждавшимися выше примесными фононными модами в спектральных зависимостях коэффициента отражения имеют место дополнительные решеточные колебания, частоты которых в плотности фононных состояний располагаются ниже по энергии, чем мода  $\text{HgTe}$ . В табл. 3 они обозначены как мода 1 и мода 2. Интерес к ним объясняется тем, что они обусловлены собственными дефектами кристаллической решетки твердого раствора  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  [18,22].

Первая из них ( $\omega \sim 94\text{--}100\text{ cm}^{-1}$ ) соответствует продольной акустической моде колебаний подрешетки  $\text{HgTe}$ , которая проявляется в оптических спектрах вследствие несовершенства строения кристаллической структуры твердого раствора, что может быть вызвано ее частичным структурным разупорядочением. Подобная мода колебаний наблюдалась и в  $\text{HgCdMnTe}$  [6].

В работе [6] был проведен критический анализ существующих в настоящее время подходов к объяснению возможных причин появления моды 2 ( $\sim 105\text{ cm}^{-1}$ ) в  $R(\omega)$ , предложенных другими исследователями. Так, например, в [23] высказано предположение, что в твер-

дых растворах  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  с небольшим содержанием кадмия в спектрах  $R(\omega)$  проявляется разностная  $LO\text{--}LA$ -фононная мода. В то же время в [24] в результате проведенных теоретических расчетов была предсказана возможность появления локального колебания антиструктурного теллура в решетке  $\text{HgTe}$ . Необходимо обратить внимание на то, что помимо полупроводниковых материалов типа кадмий–ртуть–теллур локальная мода 2 наблюдалась в содержащих марганец тройных  $\text{HgMnTe}$  [25] и четверных  $\text{HgCdMnTe}$  [6] твердых растворах. В последнем случае смещение данной вибрационной моды при понижении температуры образца от 300 до 100 К составило порядка  $6.2\text{--}6.5\text{ cm}^{-1}$  для  $TO$ - и  $4.7\text{--}6.7\text{ cm}^{-1}$  для  $LO$ -колебаний и увеличивалось с ростом концентрации кадмия в твердом растворе. Содержание компоненты  $\text{CdTe}$  в этих образцах было равным  $x = 0.121\text{--}0.34$ , марганца — менее 0.02. В нашем случае при охлаждении образца от комнатной температуры до температуры жидкого азота и при  $x \sim 0.18\text{--}0.22$ ,  $y \sim 0.02$  величина смещения  $TO$ -колебания составила  $1.6\text{--}1.9\text{ cm}^{-1}$ , для  $LO$ -колебания она была равна  $\sim 2.4\text{--}2.5\text{ cm}^{-1}$  и в противоположность предыдущему случаю увеличивалась с уменьшением содержания кадмия в образце. Следовательно, в данном случае не наблюдалось сильной температурной зависимости значений силы осциллятора и положения в  $R(\omega)$   $LO$ - и  $TO$ -частот локальной моды 2,

**Таблица 3.** Значения параметров решеточных колебаний твердых растворов  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ , полученных из экспериментальных спектров отражения

Тип колебания	$\omega_{TO}, \text{cm}^{-1}$		$\omega_{LO}, \text{cm}^{-1}$	
	295 К	78 К	295 К	78 К
<b><math>\text{Cd}_{0.22}\text{Hg}_{0.76}\text{Zn}_{0.02}\text{Te}</math></b>				
Мода 1	94.40	93.89	94.42	94.67
Мода 2	105.80	107.35	106.45	108.97
$\text{HgTe}$	123.47	121.73	140.1	139.87
$\omega_{\text{ZnTe}}^{\text{Hg}}(\text{loc})$	135.18	138.35	136.68	139.16
$\omega_{\text{HgTe}}^{\text{Cd}}(\text{loc})$	145.85	149.58	146.16	150.20
$\text{CdTe}$	151.71	152.68	154.41	155.71
$\omega_{\text{ZnTe}}^{\text{Cd}}(\text{loc})$	159.15	160.32	161.76	162.27
$\text{ZnTe}$	163.21	164.20	167.79	168.15
$\omega_{\text{HgTe}}^{\text{Zn}}(\text{loc})$	169.02	169.44	169.15	170.11
<b><math>\text{Cd}_{0.18}\text{Hg}_{0.79}\text{Zn}_{0.03}\text{Te}</math></b>				
Мода 1	95.33	94.93	95.87	95.99
Мода 2	105.73	107.58	106.17	108.55
$\text{HgTe}$	122.41	122.34	142.22	140.18
$\omega_{\text{ZnTe}}^{\text{Hg}}(\text{loc})$	134.88	138.72	139.75	139.18
$\omega_{\text{HgTe}}^{\text{Cd}}(\text{loc})$	147.26	149.52	149.81	150.45
$\text{CdTe}$	148.29	151.72	153.90	155.07
$\omega_{\text{ZnTe}}^{\text{Cd}}(\text{loc})$	162.41	159.27	158.41	159.86
$\text{ZnTe}$	163.47	164.61	168.27	168.78
$\omega_{\text{HgTe}}^{\text{Zn}}(\text{loc})$	171.98	172.81	173.46	174.63

т.е. процесс двухфононного поглощения квантов света на частоте  $\sim 105\text{ см}^{-1}$  [26] в исследованных образцах  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  маловероятен. В [27] указывается, что мода колебаний ( $105\text{--}108\text{ см}^{-1}$ ) должна соответствовать вакансиям ртути, она наблюдалась в спектрах комбинационного рассеяния света (КРС) в  $p$ - $Cd_xHg_{1-x}Te$  и отсутствовала в  $Cd_xHg_{1-x}Te$   $n$ -типа проводимости. Нами было отмечено, что появление этой моды в спектрах КРС имело место при различных энергиях лазерного возбуждения на длинах волн 488 и 514.5 nm в эпитаксиальных слоях  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ , которые после выращивания подверглись отжигу в парах ртути при температуре  $T = 350^\circ\text{C}$ . Как правило, после подобной процедуры концентрация вакансий ртути значительно уменьшается, что должно повлечь за собой исчезновение моды  $107\text{ см}^{-1}$ , если ее появление обусловлено этими вакансиями. Кроме того, в [28] в противоположность [24] высказано предположение, что мода  $105\text{--}107\text{ см}^{-1}$  связана с встраиванием атомов Hg в узлы подрешетки теллура (антиструктурный дефект). Расчет частот локальных колебаний, возникновение которых в экспериментальных оптических спектрах может быть обусловлено антиструктурными дефектами, такими, в частности, как встраивание атомов кадмия и/или цинка в подрешетку HgTe или появление атомов ртути на месте атомов кадмия в подрешетке CdTe или цинка в ZnTe и, наконец, антиструктурного теллура в той или иной из них, можно провести, используя следующее соотношение:

$$\omega^2(B : AC) = \frac{1}{m_B} (d_{A-B} + d_{B-C}). \quad (18)$$

Здесь  $m_B$  — масса атома, создающего антиструктурный дефект,  $d_{A-B}$ ,  $d_{B-C}$  — силовые константы, принимающие следующие значения:  $d_{Cd-Te} = 95.4\text{ N/m}$ ,  $d_{Hg-Cd} = 95.4\text{ N/m}$ ,  $d_{Hg-Te} = 104.8\text{ N/m}$  [28],  $d_{Te-Te} = 68.1\text{ N/m}$ . Значение частоты локальной моды  $\omega_{HgTe-Te}$  оказалось равным  $107.1\text{ см}^{-1}$  [19], что вполне удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными. Следовательно, можно предположить, что появление в оптических спектрах моды колебаний  $105\text{--}107\text{ см}^{-1}$  обусловлено присутствием дефектов типа HgTe в  $n$ - $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ . С увеличением концентрации цинка в  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  сила осциллятора моды  $105\text{ см}^{-1}$  значительно уменьшалась.

#### 4. Заключение

Проведен расчет значений частот основных оптических фононов полупроводникового твердого раствора  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  в рамках модифицированной модели однородных ячеечных смещений, что позволяет идентифицировать все основные колебания кристаллической решетки, оказывающие существенное влияние на оптические свойства данного материала в спектральной области, соответствующей однофононному резонансу.

Исследованы оптические свойства эпитаксиальных слоев  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ , выращенных методом жидкофазной эпитаксии на подложках  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ . Проведено сравнение рассчитанных теоретически и полученных экспериментально спектральных зависимостей диэлектрической функции твердого раствора  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  разного состава при температурах 295 и 78 К. Хорошее согласие теоретических и экспериментальных данных позволяет сделать вывод о том, что выращенные эпитаксиальные слои твердых растворов  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  имеют удовлетворительное структурное совершенство, атомы Cd, Hg и Zn располагаются в катионной подрешетке произвольно. Этот вывод подтверждается еще и тем фактом, что значения параметров затухания фононных колебаний, как правило, находятся в пределах  $4.1\text{--}6.7\text{ см}^{-1}$  для продольных и  $2.4\text{--}5.2\text{ см}^{-1}$  для поперечных оптических фононов. Мода решеточных колебаний, располагающаяся в области  $\sim 137\text{ см}^{-1}$ , относится к категории локальных, а не кластерных мод, как это имело место в полупроводниковом материале  $Cd_xHg_{1-x}Te$  [15]. В последнем случае спектральное положение кластерной моды оставалось неизменным в диапазоне составов  $0.09 < x < 0.81$ , в то время как в случае твердого раствора  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$  незначительное увеличение содержания кадмия повлекло за собой смещение указанной локальной моды на  $1\text{ см}^{-1}$  в сторону больших энергий. Дополнительные решеточные колебания, частоты которых в плотности фононных состояний располагаются ниже по энергии, чем мода HgTe, обусловлены дефектами кристаллической решетки твердого раствора  $Cd_xHg_{1-x-y}Zn_yTe$ .

#### Список литературы

- [1] T.L. McDevit, S. Mahajan, D.E. Laughlin, W.A. Bonner, V.G. Keramidis. Phys. Rev. B **45**, 6614 (1992).
- [2] P. Roura, J. Bosch, S.A. Clark, A. Cornet, J.R. Morante, R.H. Williams. Semicond. Sci. Technol. **11**, 1310 (1996).
- [3] Kōki Talita, Shinji Kuroda, Hyuk-Jin Kwon. Semicond. Sci. Technol. **8**, S 66 (1993).
- [4] V.M. Burlakov, A.P. Litvinchuk, V.N. Pyrkov, G.G. Tarasov, N.I. Vitrikhovskii. Phys. Stat. Sol. (b) **128**, 389 (1985).
- [5] М.Я. Валах, А.П. Литвинчук, Г.Г. Тарасов. ФТТ **25**, 10, 3036 (1983).
- [6] G.G. Tarasov, Yu.I. Mazur, M.P. Lisitsa, S.R. Lavoric, A.S. Rakitin, J.W. Tomm, A.P. Litvinchuk. Semicond. Sci. Technol. **14**, 187 (1999).
- [7] Н.А. Смирнов, А.И. Белогорохов, И.А. Денисов, А.А. Флоренцев, Т.Г. Югова. Материалы VI Рос. конф. по физике полупроводников. СПб (2003). С. 239.
- [8] А.Ю. Куркин, И.С. Захаров, А.И. Белогорохов. Программа для обработки спектров отражения кристаллических веществ методом дисперсионного анализа с применением генетического алгоритма. Свидетельство об официальной регистрации программ для ЭВМ № 2003611834 (2003).
- [9] L. Genzel, T.P. Martin, C.H. Perry. Phys. Stat. Sol. (b) **62**, 83 (1974).

- [10] Г.М. Зингер, И.П. Ипатова, А.В. Субашиев. ФТП **10**, 479 (1976).
- [11] М. Борн, Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. ИЛ, М. (1958).
- [12] M.I. Vasilevskiy. Phys. Rev. B **66**, 1953 (2002).
- [13] А.И. Белогорохов, А.Г. Белов, В.М. Лаксенков. Автометрия (СО РАН) **5**, 8 (1996).
- [14] С.П. Козырев, В.Н. Пырков, Л.К. Водопьянов. ФТТ **34**, 2372 (1992).
- [15] S.P. Kozyrev, L.K. Vodopyanov, R. Triboulet. Solid State Commun. **45**, 383 (1983).
- [16] С.П. Козырев, В.Н. Пырков, Л.К. Водопьянов. ФТТ **34**, 2367 (1992).
- [17] A.I. Belogorokhov, L.I. Belogorokhova, A.G. Belov, V.M. Lakenkov, L.M. Liberant, N.A. Smirnova. J. Cryst. Growth **159**, 186 (1996).
- [18] P.M. Amirtharaj, K.K. Tiong, P. Parayanthal, F.H. Pollak, J.K. Furdyna. J. Vac. Technol. A **3**, 226 (1985).
- [19] А.И. Белогорохов, И.А. Денисов, Н.А. Смирнова, Л.И. Белогорохова. ФТП **38**, 1, 84 (2004).
- [20] M.I. Vasilevskiy, A.I. Belogorokhov, M.J.M. Gomes. J. Electron. Mater. **28**, 6, 654 (1999).
- [21] С.П. Козырев, В.Н. Пырков, Л.К. Водопьянов. ФТТ **37**, 1293 (1995).
- [22] A.M. Witowski, M. Grynberg. Phys. Stat. Sol. (b) **100**, 389 (1980).
- [23] J. Vaars, F. Sorger. Solid State Commun. **10**, 875 (1972).
- [24] Shyama Rath, K.P. Jain, S.C. Abbi, C. Julien, M. Balkanski. Phys. Rev. B **52**, 17 172 (1995).
- [25] W. Lu, H.J. Ye, Z.Y. Yu, S.Y. Zhang, Y. Fu, W.L. Xu, S.C. Shen, W. Giriat. Phys. Stat. Sol. (b) **147**, 767 (1988).
- [26] G.G. Tarasov, Yu.I. Mazur, J.W. Tomm, S.Y. Kriven', S.R. LAVORIK, N.V. Shevchenko. Proc. SPIE **2113**, 17 (1994).
- [27] I. Hill. J. Appl. Phys. **67**, 4270 (1990).
- [28] D.N. Talwar, M. Vandevyver. J. Appl. Phys. **56**, 1601 (1984).