

К вопросу о перестройке колебательного спектра твердого раствора $Zn_{1-x}Cd_xSe$ с составом

© С.П. Козырев

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

E-mail: skozyrev@sci.lebedev.ru

(Поступила в Редакцию 1 сентября 2008 г.)

Представлены интерпретация и анализ спектров решеточного отражения объемных кристаллов $Zn_{1-x}Cd_xSe$ для составов $x = 0.08, 0.21$ и 0.30 , кристаллизующихся в кубической структуре цинковой обманки, и $x = 0.45, 0.65$ и 0.80 , кристаллизующихся в гексагональной структуре вюрцита. Моды решеточных колебаний для всех составов распределяются по частоте на ZnSe- и CdSe-подобные колебания. При фазовом переходе $x > 0.3$ наблюдается заметный скачок ($7-8 \text{ cm}^{-1}$) по частоте решеточных мод, но наибольшие изменения происходят в силах осцилляторов мод. Однако суммарная сила осцилляторов мод ZnSe- и CdSe-подобных колебаний мало изменяется при фазовом переходе, что соответствует двумодовому типу перестройки колебательного спектра твердого раствора $Zn_{1-x}Cd_xSe$ с составом. Анализ решеточных мод сопровождается сравнением с параметрами решеточных мод эпитаксиальных слоев $Zn_{1-x}Cd_xSe$ ($x = 0-0.55$), выращенных на подложке GaAs методом молекулярно-лучевой эпитаксии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 07-02-00899-а).

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

1. Введение

При исследовании динамики кристаллической решетки твердого раствора замещения (например, катионного $A_{1-x}B_xC$) и свойств его решеточных колебаний одним из первых возникает вопрос: сохраняются ли в твердом растворе индивидуальные свойства бинарных компонент AC и BC? Если индивидуальные свойства решеточных колебаний при образовании раствора сохраняются, твердый раствор считается двумодовым. Если же характеристики решеточных колебаний бинарных компонент усредняются подобно тому, как это делается в приближении виртуального кристалла, это одномодовый твердый раствор. Как ни странно, твердый раствор $Zn_{1-x}Cd_xSe$ (в отличие от подобных соединений II-VI и III-V) до последнего времени [1,2] считался одномодовым, несмотря на то что все оценки модовости для этого соединения свидетельствуют об обратном. Причина, вероятно, в следующем. Большинство исследований (их немного) проводилось на пленочном материале с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). Типичной для этого вида исследования является работа [3], в которой методом КРС изучались эпитаксиальные слои $Zn_{1-x}Cd_xSe$, выращенные на подложке (001) GaAs. Помимо основных TO- и LO-мод, соответствующих, по мнению авторов одномодовому характеру перестройки колебательного спектра с составом твердого раствора, наблюдалась дополнительная мода. Ее интерпретировали как моду примесного колебания Cd в ZnSe для составов вблизи $x = 0$, переходящую с изменением состава в моду примесного колебания Zn в CdSe вблизи $x = 1$. В последующих работах с использованием спектроскопии КРС [1,2] выводы были аналогичными.

Но из того, что одна из мод не наблюдается в КРС, не следует ее отсутствие в спектре решеточных колебаний $Zn_{1-x}Cd_xSe$. Спецификой спектроскопии КРС с обратным рассеянием является то, что в спектре наиболее сильно проявляются LO-моды решеточных колебаний (в соответствии с правилами отбора по симметрии). И в случае, если частоты собственных колебаний расположены близко друг к другу, а силы осцилляторов этих колебаний немалые и сравнимы по величине, из-за взаимодействия решеточных колебаний происходит сильная перенормировка LO-мод. Низкочастотная LO-мода, расположенная по частоте между TO-модами взаимодействующих решеточных осцилляторов, проявляется слабо, но становится очень сильной высокочастотная LO-мода. В длинноволновой ИК-спектроскопии регистрируются оптически активные поперечные (TO) колебания, поэтому ИК-спектроскопия является основным методом идентификации решеточных колебаний в твердых растворах. В отношении $Zn_{1-x}Cd_xSe$ таких работ практически нет. В нашей давней работе [4] по исследованию решеточного отражения от эпитаксиальных слоев $Zn_{1-x}Cd_xSe$ ($0 \leq x \leq 0.55$), выращенных на подложке (001) GaAs методом молекулярно-лучевой эпитаксии, спектры интерпретировались с использованием одноосцилляторной модели решеточных колебаний. Тем самым предполагался одномодовый характер перестройки решеточных колебаний с составом твердого раствора, хотя не исключалась и многоосцилляторная интерпретация. Неоднозначность интерпретации объяснялась полным отсутствием работ по решеточной ИК-спектроскопии объемных кристаллов $Zn_{1-x}Cd_xSe$, для которых возможно модельно-независимое восстановление диэлектрической функции кристалла из спектра отражения $R(\omega)$ посредством интегрального преоб-

разования Крамерса–Кронига. С появлением возможности работать с объемным материалом $Zn_{1-x}Cd_xSe$ ситуация изменилась. В недавней работе [5] был проведен совместный анализ спектров решеточного отражения от объемных кристаллов $Zn_{1-x}Cd_xSe$ составов $x = 0.08$ и 0.21 и спектров решеточного отражения от эпитаксиальных слоев $Zn_{1-x}Cd_xSe$ соответствующих составов. Исходя из подобия рассчитанных диэлектрических функций для этих составов была рассмотрена более точная интерпретация спектров решеточного ИК-отражения от эпитаксиальных слоев $Zn_{1-x}Cd_xSe$ для составов $0 \leq x \leq 0.55$. Для этого интервала составов твердого раствора проявляются моды $ZnSe$ - и $CdSe$ -подобных решеточных колебаний с постоянным значением суммы сил осцилляторов мод для разных составов, что является характерным признаком двухмодового типа перестройки колебательного спектра твердого раствора. Также в [5] в окрестности $x = 0.4–0.5$ наблюдалось резкое изменение сил осцилляторов для мод $ZnSe$ - и $CdSe$ -подобных колебаний, что связывалось с фазовым переходом сплава $Zn_{1-x}Cd_xSe$ из кубической фазы в гексагональную. Для более точной интерпретации фазового перехода необходимы дополнительные исследования составов с $x > 0.5$.

В настоящей работе продолжены исследования решеточного ИК-отражения от объемных кристаллов $Zn_{1-x}Cd_xSe$ составов $x = 0.08, 0.21, 0.30, 0.45, 0.65$ и 0.80 с целью доказательства двухмодового типа перестройки спектра решеточных колебаний в твердом растворе $Zn_{1-x}Cd_xSe$ с составом x . При $x = 0.30$ в $Zn_{1-x}Cd_xSe$ наблюдался фазовый переход из кубической фазы в гексагональную фазу. Ранее в работе [2] наряду со спектрами КРС рассматривались ИК-спектры решеточных колебаний объемных кристаллов $Zn_{1-x}Cd_xSe$, но анализ параметров решеточных колебаний (частот мод, их сил осциллятора) в зависимости от состава твердого раствора x не проводился.

2. Анализ данных решеточного ИК-отражения объемных кристаллов

Исследуемый материал $Zn_{1-x}Cd_xSe$ — тот же самый, что рассматривался в публикации [2]. Спектры решеточного ИК-отражения $R(\omega)$ измерялись при комнатной температуре на Фурье-спектрометре Bruker IFS-113v и частично на лабораторной модели дифракционного ИК-спектрометра со спектральным разрешением не хуже 1 cm^{-1} . Предполагалось сравнение с результатами анализа спектров решеточного отражения от эпитаксиальных слоев $Zn_{1-x}Cd_xSe$, ранее измеренных на лабораторной модели дифракционного ИК-спектрометра [5]. На рис. 1 представлены диэлектрические функции $\text{Im}\varepsilon(\omega)$ твердых растворов $Zn_{1-x}Cd_xSe$ разных составов, полученные из $R(\omega)$ интегральным преобразованием Крамерса–Кронига. Для удобства их рассмотрения функции смещены относительно друг друга по оси ординат. Спектры решеточного ИК-отражения здесь не приводятся. Они менее наглядны в сравнение

с $\text{Im}\varepsilon(\omega)$, к тому же $\varepsilon(\omega)$ получена из $R(\omega)$ модельно-независимым интегральным преобразованием. Из рисунка видно, что при изменении состава в интервале от $x = 0.30$ до 0.45 четко прослеживается изменение формы спектральных линий, связанное с фазовым переходом от кубической фазы к гексагональной фазе. Согласно [6], кубическая фаза в $Zn_{1-x}Cd_xSe$ проявляется для составов $x \leq 0.30$. Кривые разделяются на две группы в соответствии с кристаллической структурой образцов: твердые растворы с $x = 0.08, 0.21$ и 0.30 кристаллизуются в кубической фазе, растворы с $x = 0.45, 0.65$ и 0.80 — в гексагональной. Кривые $\text{Im}\varepsilon(\omega)$ для твердых растворов в гексагональной фазе заметно более плоские по сравнению с кристаллами в кубической фазе, что соответствует большему затуханию оптических фононов в несовершенных по кристаллической структуре твердых растворов с гексагональной структурой.

Дисперсионный анализ полученной из $R(\omega)$ диэлектрической функции $\varepsilon(\omega)$ проводился ее моделированием в классической аддитивной форме

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

Варируются частота j -ой решеточной ТО-моды ω_{ij} , ее сила осциллятора S_j и параметр затухания γ_j . В качестве примера на рис. 2 приводится анализ $\text{Im}\varepsilon(\omega)$ для кристалла $Zn_{1-x}Cd_xSe$ ($x = 0.21$). Кривая

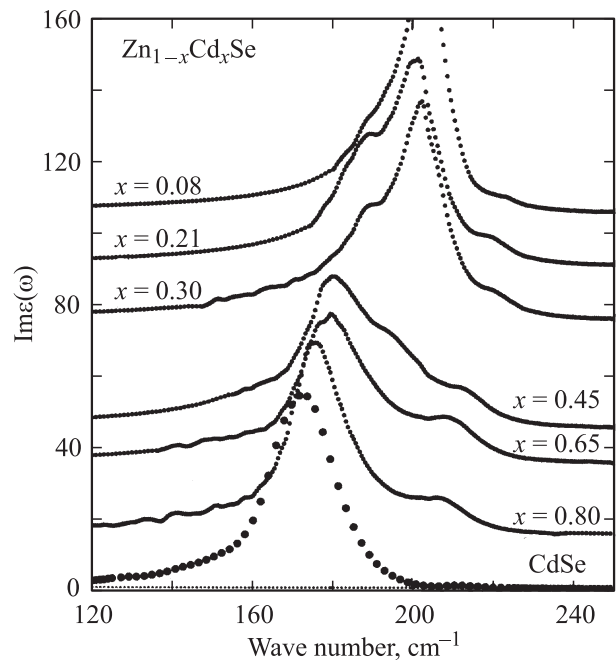


Рис. 1. Мнимая часть диэлектрической функции твердого раствора $Zn_{1-x}Cd_xSe$, восстановленная преобразованием Крамерса–Кронига из коэффициента отражения $R(\omega)$, для кристаллов с кубической ($x = 0.08, 0.21, 0.30$) и гексагональной ($x = 0.45, 0.65, 0.80$) структурой при $T = 300\text{ K}$. Для удобства кривые смещены относительно друг друга по оси ординат.

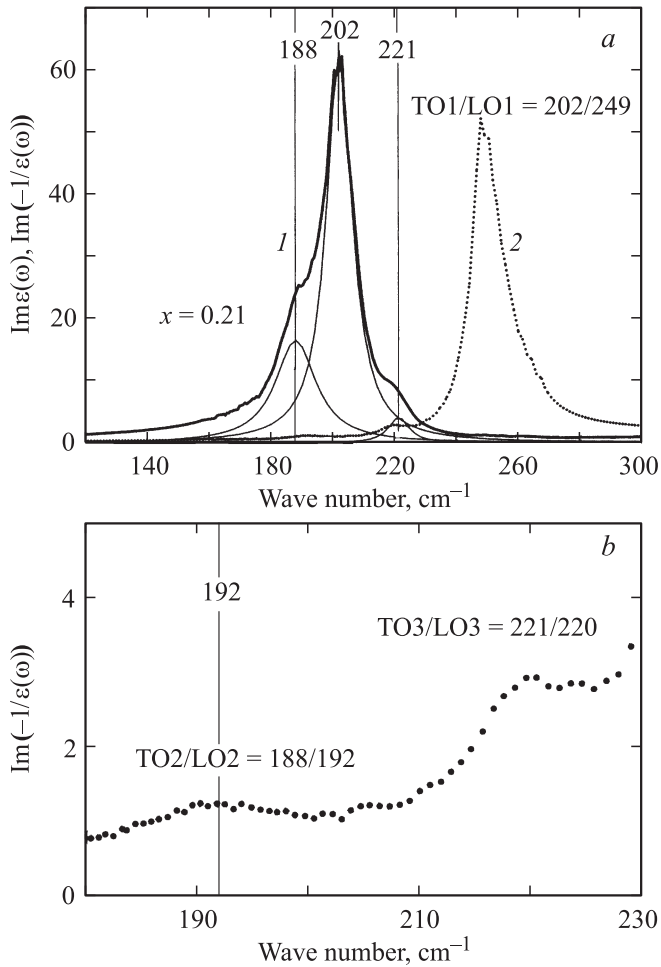


Рис. 2. *a*) Мнимая часть диэлектрической функции $\text{Im} \varepsilon(\omega)$ кристалла $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ ($x = 0.21$) (кривая 1). Тонкими линиями показано разложение функции $\text{Im} \varepsilon(\omega)$ на три лоренцевских контура гармонических осцилляторов с собственными частотами 202, 188 и 221 cm^{-1} (в порядке уменьшения их сил осциллятора). Кривая 2 — мнимая часть обратной диэлектрической функции $\text{Im}(-1/\varepsilon(\omega))$ в условных единицах. *b*) Часть функции $\text{Im}(-1/\varepsilon(\omega))$ в увеличенном виде.

$\text{Im} \varepsilon(\omega)$ (кривая 1 на рис. 2, *a*) допускает разложение диэлектрической функции на три лоренцевских контура гармонических затухающих осцилляторов с собственными частотами 202, 188 и 221 cm^{-1} . Здесь же показана функция $\text{Im}(-1/\varepsilon(\omega))$ в условных единицах (кривая 2); частоты ее максимумов соответствуют положению LO-мод кристалла. Для удобства часть функции $\text{Im}(-1/\varepsilon(\omega))$ показана на рис. 2, *b* в более крупном масштабе. Каждой TO-мод соответствует своя TO/LO-пара: 202/249, 188/192 и 221/220. В последней паре по частоте TO-мода превышает LO-моду, потому что слабая мода оказалась в области LO–TO-расщепления сильной моды. Наличие LO–TO-пар говорит о том, что мы имеем дело с кристаллическими модами, а не с локализованным в окрестности примеси локальным возбуждением. Характерным для распределения LO-мод в системе $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ (не только для данного состава

твердого раствора $x = 0.21$) является наличие одного очень сильного пика при едва разрешимых остальных пиках. Такое распределение возникает в случаях (типичных для сегнетоэлектриков), когда две (или более) сильные моды по энергии расположены близко друг к другу, и дисперсионный анализ необходимо проводить с учетом взаимодействия сильных мод. Возможно, именно эта особенность диэлектрической функции $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ является причиной того, что в КРС видна только одна сильная LO-моды.

3. Двухмодовый характер перестройки колебательного спектра кристаллов $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ с составом

На рис. 3, *a* представлены значения частот решеточных колебательных мод для исследованных кристаллов $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$, а на рис. 4, *a* — значения сил осцилляторов для этих решеточных мод. Для сравнения на рис. 3, *b* и 4, *b* представлены значения соответствующих параметров колебательных мод для эпитаксиальных пленок $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$, выращенных на подложке (001)GaAs методом молекулярно-лучевой эпитаксии [5]. По составу твердые растворы $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ разделяются на кристаллизующиеся в кубической фазе ($x = 0.08, 0.21$ и 0.30) и гексагональной фазе ($x = 0.45, 0.65$ и 0.80). Частоты решеточных колебаний четко разделяются на две группы мод: на ZnSe-подобные колебания, преобладающие (с наибольшей силой осциллятора) в кубической фазе, и CdSe-подобные колебания, преобладающие в гексагональной фазе. В области фазового перехода происходит заметный скачок ($7\text{--}8 \text{ cm}^{-1}$) по частоте решеточных

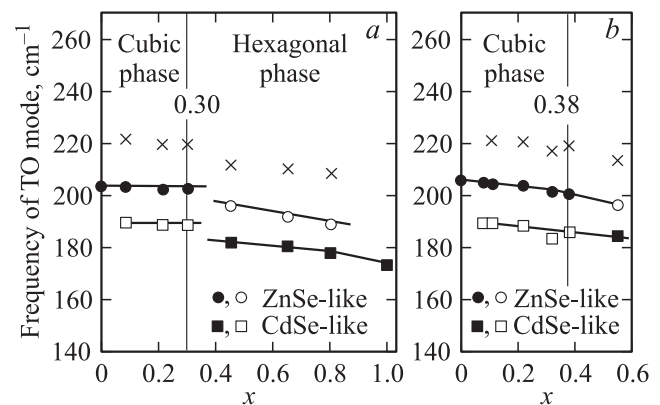


Рис. 3. *a*) Распределение основных TO-мод решеточных колебаний по ZnSe- и CdSe-подобным колебаниям в твердых растворах $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ разных составов. Темные и светлые символы на кривых для обеих мод означают силу осциллятора: темные символы соответствуют сильной моде, светлые — слабой моде. Крестиками представлены значения частот слабой моды. Граница $x = 0.30$ соответствует разделу кубической и гексагональной фаз твердых растворов $\text{Zn}_x\text{Cd}_x\text{Se}$. *b*) Частоты мод ZnSe- и CdSe-подобных решеточных колебаний в эпитаксиальных пленках $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ на подложке GaAs [5] (показаны для сравнения). Граница раздела фаз смещена до $x = 0.38$.

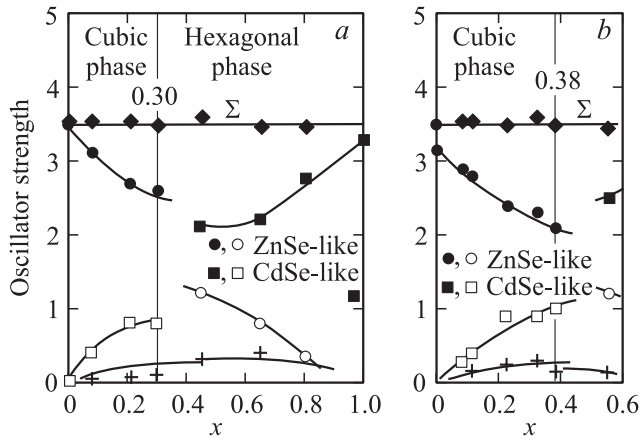


Рис. 4. а) Распределение сил осцилляторов основных ТО-мод решеточных колебаний по ZnSe- и CdSe-подобным колебаниям в твердых растворах $Zn_{1-x}Cd_xSe$ разных составов. Темные и светлые символы на кривых для обеих мод означают силу осциллятора: темные символы соответствуют сильной моде, светлые — слабой моде. Крестиками представлены значения для слабой моды. Линия $\Sigma = \text{const}$ соответствует распределению суммарной силы осцилляторов для ZnSe- и CdSe-подобных колебаний по составу твердого состава. Граница $x = 0.30$ соответствует разделу кубической и гексагональной фаз в $Zn_{1-x}Cd_xSe$. б) Распределение сил осцилляторов решеточных мод ZnSe- и CdSe-подобных колебаний в эпитаксиальных пленках $Zn_{1-x}Cd_xSe$ на подложке GaAs [5] (показано для сравнения). Граница раздела фаз смещена до $x = 0.38$.

мод. Для сил осцилляторов решеточных мод изменения при фазовом переходе более существенны (рис. 4, а): для ZnSe-подобной моды сила осциллятора падает с 2.5 до 1.2, тогда как для CdSe-подобной моды сила осциллятора возрастает до 2.1. Но суммарная сила осциллятора для ZnSe- и CdSe-подобных колебаний мало меняется для всего интервала составов, несмотря на фазовый переход. Такое распределение параметров решеточных мод с составом в $Zn_{1-x}Cd_xSe$ является характерным для двухмодового типа перестройки колебательного спектра твердого раствора с составом.

Что касается резких изменений сил осцилляторов решеточных мод при фазовом переходе, напрашивается следующее объяснение. При внедрении атомов Cd в матрицу ZnSe происходит не просто замещение одного атома другим. В местах скопления Cd образуются небольшие гексагональные фазы внедрения CdSe в кубической матрице ZnSe. Взаимодействие между этими гексагональными фазами соответствует появлению решеточных CdSe-подобных колебаний. Они не поддерживаются кулоновским полем кубической матрицы ZnSe, а подавляются им. При фазовом переходе симметрия кулоновского поля меняется с кубической на гексагональную, и кулоновское поле уже способствует CdSe-подобным колебаниям и подавляет ZnSe-подобные колебания кубической фазы. Наблюдаемые изменения параметров решеточных мод при приближении к фазовому переходу соответствуют мягкому типу фазового

перехода, когда вторая фаза постепенно накапливается в первой до определенной критической величины.

При сравнении с параметрами решеточных колебаний в эпитаксиальных пленках $Zn_{1-x}Cd_xSe$ (рис. 3, б и 4, б) отметим следующее. При фазовом переходе частоты ZnSe- и CdSe-подобных колебаний в пленках меняются мягко, без скачков; скачкообразно же меняются силы осцилляторов этих мод. Фазовый переход в пленках смещен в область составов $x > 0.38$, в то время как для объемных кристаллов он соответствует составу $x = 0.30$ [6]. Сказывается стабилизирующий эффект кубической подложки GaAs, фазовый переход смещается в сторону больших значений x . Во всем остальном параметры решеточных колебаний в объемных кристаллах $Zn_{1-x}Cd_xSe$ и пленках аналогичны. Аналогичны даже параметры затухания решеточных мод в кристаллах и пленках. На рис. 5 они показаны совместно. В кубической фазе параметр затухания меняется в пределах $7\text{--}12\text{ cm}^{-1}$, в гексагональной фазе $14\text{--}20\text{ cm}^{-1}$. Параметр затухания для решеточной моды — это степень рассеяния колебательного возбуждения при его распространении по кристаллической решетке. Для гексагональной фазы он большой: твердые растворы с гексагональной структурой значительно уступают по качеству кристаллам с кубической структурой.

На рис. 3 и 4 также представлены (крестиками) данные для слабой решеточной моды с частотой около 220 cm^{-1} и силой осциллятора, не превышающей 0.3–0.4, которой было уделено большое внимание в работах [1,2]. Подобная слабая мода ранее наблюдалась в одномодовой системе $Zn_{1-x}Cd_xS$ [7]. Наиболее приемлемым объяснением для нее является модель решеточных колебаний, предложенная Jahne [8]. Одной из мод решеточных колебаний твердого раствора $A_{1-x}B_xC$ соответствуют колебания катионных А- и В-подрешеток относительно друг друга при малых смещениях анионной С-подрешетки.

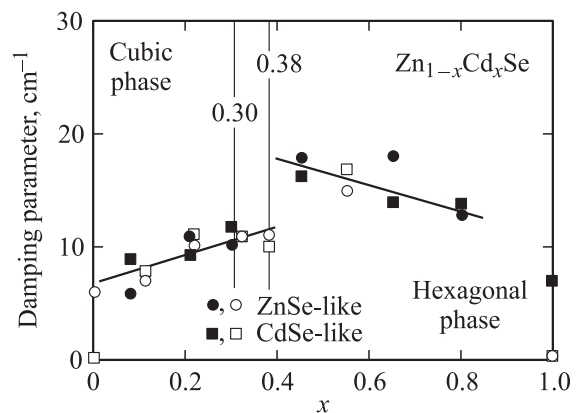


Рис. 5. Распределение параметра затухания для мод ZnSe- и CdSe-подобных колебаний в твердых растворах $Zn_{1-x}Cd_xSe$ разных составов для объемных кристаллов (темные символы) и эпитаксиальных пленок (светлые символы). Границы $x = 0.30$ и $x = 0.38$ соответствуют разделу кубической и гексагональной фаз для объемных кристаллов и эпитаксиальных пленок соответственно.

4. Заключение

Совместные исследования спектров решеточного отражения объемных кристаллов $Zn_{1-x}Cd_xSe$ с $x = 0.08, 0.21, 0.30, 0.45, 0.65$ и 0.80 и эпитаксиальных пленок $Zn_{1-x}Cd_xSe/GaAs$ с содержанием Cd от $x = 0.08$ до 0.55 позволили сделать вывод о двухмодовом типе перестройки колебательного спектра твердого раствора $Zn_{1-x}Cd_xSe$ с составом. К такому же заключению приводит и современный критерий оценки характера перестройки колебательного спектра, сформулированный для решеточных колебаний в твердых растворах замещения Dow [9].

В заключение предлагается расчет диэлектрической функции $\varepsilon(\omega)$ для твердого раствора $Zn_{1-x}Cd_xSe$ с малым содержанием Cd в соответствии с микроскопической теорией [10], в краткой форме изложенной в [2]. В этой теории частоты оптических колебаний твердого раствора $A_{1-x}B_xC$ при малом содержании одной из компонент ($x \ll 1$) определяются из уравнения

$$\Phi_i(\omega) = F(A, \omega^2),$$

$$\Phi_i(\omega) = \frac{1}{1-x} \left(\eta + x \frac{m_C}{m_A + m_C} \frac{\omega_i^2}{\omega_i^2 - \omega^2} \right). \quad (2)$$

Здесь $\eta = m_B/(m_B - m_A)$, m_A, m_B, m_C — массы соответствующих атомов, ω_i — частоты ТО- и LO-колебаний беспримесного кристалла AC,

$$F(A, \omega^2) = -1 + \omega^2 G(A, \omega^2),$$

$G(A, \omega^2)$ — функция Грина для кристалла AC, в котором замещается атом A. Для твердого раствора $Zn_{1-x}Cd_xSe$ с малым содержанием Cd функция Грина $G(Zn, \omega^2)$ была рассчитана в [2] с использованием функции плотности фононных состояний чистого ZnSe из [11]. На рис. 6, a представлена функция плотности состояний ZnSe [11], а на рис. 6, b — графическое решение уравнения (2). Точка пересечения функций $Re(F(Zn, \omega^2))$ и $Re(\Phi_{TO}(\omega))$ при малых x соответствует частоте щелевой моды Cd в ZnSe, равной $\sim 182 \text{ cm}^{-1}$. Согласно рис. 6, a, эта мода попадает в область с нулевой плотностью состояний, и потому существуют условия для возникновения кристаллической ТО-моды и CdSe-подобных колебаний при увеличении x . Пересечение функций $Re(F(Zn, \omega^2))$ и $Re(\Phi_{LO}(\omega))$ соответствует частоте LO-моды CdSe-подобных колебаний.

Мнимая часть $Im \varepsilon(\omega)$ диэлектрической функции $\varepsilon(\omega)$, рассчитанной в виде [12]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty)\omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - (\omega^2 + i\omega\gamma)\chi(x, \omega)},$$

$$\chi(x, \omega) = \frac{(1-x)F(Zn, \omega^2) - \eta}{(1-x)F(Zn, \omega^2) - \eta - x \frac{m_C}{m_A + m_C}}$$

с использованием ранее определенной функции Грина, для $Zn_{1-x}Cd_xSe$ ($x = 0.2$) с параметром затухания

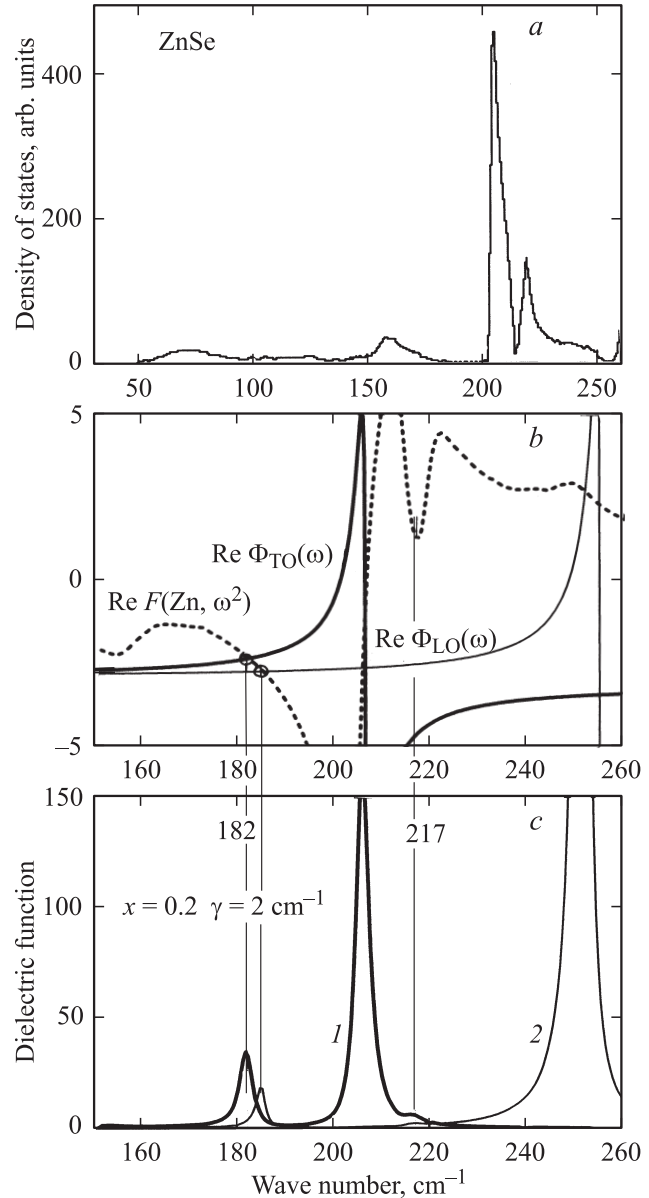


Рис. 6. a) Фононная плотность состояний в ZnSe [11]. b) Графическое решение уравнения (2) $\Phi_i(\omega) = F(Zn, \omega^2)$, $i = TO, LO$: $\omega_{TO} = 182 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_{LO} = 186 \text{ cm}^{-1}$. c) Мнимая часть диэлектрической функции $Im \varepsilon(\omega)$ кристалла $Zn_{1-x}Cd_xSe$ ($x = 0.2$), рассчитанная в соответствии с микроскопической теорией [10,12] (кривая 1). Кривая 2 — мнимая часть обратной диэлектрической функции $Im(-1/\varepsilon(\omega))$ в условных единицах. Особенность $Im \varepsilon(\omega)$ на $\omega = 217 \text{ cm}^{-1}$ соответствует сильному провалу в фононной плотности состояний ZnSe.

$\gamma = 2 \text{ cm}^{-1}$ показана на рис. 6, c. Там же представлена функция $Im(-1/\varepsilon(\omega))$ для определения локализации LO-моды. Помимо основной решеточной моды ZnSe, априорно задаваемой при расчете, для малых значений x возникает щелевая мода $\sim 182 \text{ cm}^{-1}$. С увеличением x она переходит в кристаллическую CdSe-подобную ТО-моду с отщепленной LO-модой. Величина

ЛО–ТО-расщепления определяется силой осциллятора ТО-моды. При увеличении x от 0 до 0.3 сила осциллятора CdSe-подобной решеточной моды, рассчитанная из интеграла по контуру линии $(2/\pi) \int (\text{Im } \varepsilon(\omega)/\omega) d\omega$, равна 0.42 ($x = 0.1$), 0.79 ($x = 0.2$) и 1.18 ($x = 0.3$), а величина ЛО–ТО-расщепления изменяется от 0 до 1.5 cm^{-1} ($x = 0.1$), 2.5 cm^{-1} ($x = 0.2$) и 4 cm^{-1} ($x = 0.3$). Тенденция изменения силы осциллятора CdSe-подобной ТО-моды и величины ЛО–ТО-расщепления с составом твердого раствора является характерной для двухмодовой системы твердых растворов. Таким образом, и в рамках приближения микроскопической теории [10] система $Zn_{1-x}Cd_xSe$ проявляет двухмодовый характер перестройки колебательного спектра с изменением состава. Другие особенности рассчитанной диэлектрической функции $\text{Im } \varepsilon(\omega)$, в частности в окрестности слабой моды $\sim 217 \text{ cm}^{-1}$, рассматривались в [2].

Автор выражает благодарность В.С. Виноградову за обсуждение некоторых аспектов микроскопической теории твердого тела.

Список литературы

- [1] Е.А. Виноградов, Б.Н. Маврин, Л.К. Водопьянов. ЖЭТФ **126**, 866 (2004).
- [2] L.K. Vodopyanov, E.A. Vinogradov, V.S. Vinogradov, I.V. Kucherenko, B.N. Mavrin, N.N. Novikova, P.V. Shapkin. Phys. Status Solidi C **1**, 3162 (2004).
- [3] R.G. Alonso, E.-K. Suh, A.K. Ramdas, N. Samarth, H. Luo, J.K. Furdyna. Phys. Rev. B **40**, 3720 (1989).
- [4] Л.К. Водопьянов, С.П. Козырев, Ю.Г. Садофьев. ФТТ **41**, 982 (1999).
- [5] С.П. Козырев. ФТТ **50**, 1071 (2008).
- [6] К.В. Шалимова, А.Ф. Ботнев, В.А. Дмитриев, Н.З. Когновицкая, В.В. Старостин. Кристаллография **14**, 629 (1969).
- [7] Ю.А. Митягин, Л.К. Водопьянов, Е.А. Виноградов. ФТТ **17**, 2054 (1975).
- [8] E. Jahne. Phys. Status Solidi B **74**, 275 (1976); **75**, 222 (1976).
- [9] J. Dow, W. Packard, H. Blackstead, D. Jenkins. Dynamical properties of solids: phonon physics / Ed. G. Hortoy (1995). V. 7. P. 349.
- [10] В.С. Виноградов. ФТТ **11**, 2062 (1969).
- [11] J.C. Irwin, J. La Combe. Can. J. Phys. **50**, 2596 (1972).
- [12] Л.К. Водопьянов, Е.А. Виноградов, В.С. Виноградов. ФТТ **16**, 849 (1974).