

УДК 535.343.2

© 1992

СПЕКТР РЕШЕТОЧНОГО ОТРАЖЕНИЯ СПЛАВОВ $Cd_{1-x}Hg_xTe$ ($x = 0-0.8$)

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

Проведен анализ спектров решеточного отражения сплавов $Cd_{1-x}Hg_xTe$ ($x = 0-0.8$) при температуре 25 К. Сплавы образованы полупроводником CdTe и полуметаллом HgTe, оба кристаллизующиеся в простейшей структуре цинковой обманки с почти одинаковыми параметрами решетки. Математическая обработка спектров отражения $R(\omega)$ осуществлялась последовательным применением методов дисперсионного анализа и Крамерса—Кронига: сначала — дисперсионный анализ спектра $R(\omega)$ в двухмодовом приближении для достижения аналитических граничных условий на границе и вне интервала измерений, затем — анализ Крамерса—Кронига для восстановления диэлектрической функции $\hat{\epsilon}(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$ с последующим разложением функции $\epsilon''(\omega)$ на лорентцовые контуры решеточных осцилляторов. Значения частот решеточных осцилляторов для CdTe-подобных колебаний для всех составов сплава $Cd_{1-x}Hg_xTe$ распределяются по четырем модам: 146, 148.5, 150.5 и 156 cm^{-1} . Для любого состава сплава положение и форма полосы решеточного отражения для CdTe-подобных колебаний определяются четырьмя решеточными модами с частотами, не зависящими от состава сплава. С изменением состава сплава меняются силы осцилляторов этих мод. Наблюдается особенность на $\approx 137 cm^{-1}$ с почти одинаковой силой осциллятора ≈ 0.25 в сплавах состава от $x = 0$ до $x = 0.81$.

После открытия Миккельсоном и Бойсом [1] бимодального распределения длин связей между ближайшими соседними атомами в полупроводниковом сплаве $Ga_{1-x}In_xAs$ методом EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) резко возобновился интерес к исследованиям локальной структуры полупроводниковых сплавов (твердых растворов). Аналогичное распределение длин связей было обнаружено в других псевдобинарных сплавах соединений $A^{IV}B^{VI}$ с катионным замещением $Cd_{1-x}Mn_xTe$, $Cd_{1-x}Zn_xTe$ [2], $Cd_{1-x}Hg_xTe$ [2, 3], $Hg_{1-x}Mn_xTe$ [3], $Hg_{1-x}Zn_xTe$ [4]. В этих псевдобинарных сплавах замещения $A_{1-x}B_xC$ со структурой цинковой обманки длины связей между ближайшими соседями не равны усредненным значениям «виртуального кристалла», а имеют почти те же самые значения, что и в чистых соединениях AC и BC. Новая экспериментальная техника EXAFS позволяет утверждать, что локальные особенности в этих сплавах играют решающую роль в определении их свойств.

Большой интерес вызывают сплавы $Cd_{1-x}Hg_xTe$, образованные широкозонным полупроводником CdTe ($E_0 = 1.6$ эВ) и полуметаллом HgTe ($E_0 = -0.3$ эВ). Оба соединения CdTe и HgTe кристаллизуются в простейшей кристаллической структуре цинковой обманки, их длины связей $d = 2.806 \text{ \AA}$ для CdTe и $d = 2.798 \text{ \AA}$ для HgTe почти совпадают, что является результатом баланса ковалентного и ионного вкладов при образовании связи в CdTe и преимущественно ковалентного и металлического вкладов в связь в полуметалле HgTe. Сплавы $Cd_{1-x}Hg_xTe$ образуют непрерывный ряд твердых растворов с $0 < x < 1$ со структурой цинковой обманки. Априорно трудно предсказать, как изменятся локальная структура и соответственно свойства в сплавах из компонент с одинаковой кристаллической структурой и почти равными решеточными параметрами (т. е. без поля напряжений, связанного с решеточным рассогласованием), но с различной природой химической связи.

Шер и др. [5], используя теорию сильной связи Харрисона для полупроводников с тетраэдрической структурой, и позже Хасс и Вандербилт [6], используя метод псевдопотенциала, предсказывали значительные изменения длин связей Hg—Te и Cd—Te в сплаве $Hg_{1-x}Cd_xTe$. В соответствии с их предсказаниями более короткая связь Hg—Te в сплаве становится еще короче, а более длинная связь Cd—Te увеличивается, что должно приводить к структурной неустойчивости сплава. Ответственным за такую релаксацию связей считался зарядовый перенос в сплаве от Cd к Hg, который приводил к изменению кулоновских сил между ионами. Экспериментальные исследования методом EXAFS [2, 3] выявили, однако, что длины связей Hg—Te и Cd—Te в сплавах (HgCd)Te очень слабо релаксируют от их значений в чистых соединениях HgTe и CdTe с противоположным знаком релаксации (в сторону среднего значения). С учетом экспериментальных результатов в [7] представлены расчеты локальной релаксации длин связей в той же микроскопической модели сплава $Hg_{0.5}Cd_{0.5}Te$, как и в [6], но электроны d -оболочек Hg и Cd рассматривались валентными аналогично связывающим s - и p -электронам Hg, Cd и Te. Авторы [7] пришли к выводу, что ионные заряды определяются в основном связью между ближайшими соседями, и не нашли никаких доказательств большого переноса заряда между Cd и Hg в сплавах (HgCd)Te. Свойства связей между ближайшими соседями предельных кристаллов CdTe и HgTe сохраняются в этих полупроводниковых сплавах. К качественно подобным заключениям пришли Вэй и Цангер [8], рассчитавшие электронную структуру сплавов (HgCd)Te из первых принципов с целью изучения роли d -электронов в образовании химической связи в сплавах.

Возможности другого нового эффективного метода исследования локальной структуры полупроводниковых сплавов — MASS NMR (Magic-angle sample spinning NMR) — были продемонстрированы на полупроводниковых сплавах с катионным замещением $Hg_{1-x}Cd_xTe$ [9], $Cd_{1-x}Zn_xTe$ [10] и $Cd_{1-x}Mn_xTe$ [11]. Химический сдвиг резонансной частоты, определенный из тонкой структуры ЯМР ядер ^{125}Te катионных сплавов $A_{1-x}B_xTe$ в зависимости от состава (x), характеризуется дискретным набором линий, число которых зависит от состава. Различные значения химического сдвига ^{125}Te , чувствительного к его ближайшему локальному окружению, приписываются пяти возможным катионным конфигурациям — $A(4-n)B(n)$ с $n = 0, 1, 2, 3, 4$ — вокруг Te. Для сплавов $Hg_{1-x}Cd_xTe$ [9] с близкими значениями длин связей Hg—Te и Cd—Te и их неизменностью с составом сплава, но разной ионностью связей из-за различной природы химической связи в HgTe и CdTe кубическая симметрия в месте нахождения Te сохраняется при изменении состава сплава. Химический сдвиг ^{125}Te определяется зарядовым переносом между анионом Te и его тетраэдрическим окружением катионами в одной из конфигураций $Hg(4-n)Cd(n)$ и для данной катионной конфигурации не зависит от состава сплава. Из анализа формы спектра ЯМР с соответствующим расчетом интенсивности и ширины линий резонанса (число их зависит от состава) оценивалось структурное упорядочение катионов в сплаве $Hg_{1-x}Cd_xTe$ — степень отклонения от произвольного распределения двух катионов Hg и Cd в их положениях в решетке. Для состава $x = 0.3$ эффект катионного кластерообразования очень заметный. В системе сплавов $Cd_{1-x}Zn_xTe$ [10] из-за относительно большого различия длин связей Cd—Te и Zn—Te кубическая симметрия на месте Te в сплаве нарушается, при этом химический сдвиг ^{125}Te определяется зарядовым переносом и искажением локальной симметрии. Величина химического сдвига зависит от катионной конфигурации Cd ($4-x$) Zn (n) вокруг Te и от состава сплава.

Длинноволновая ИК спектроскопия решеточных колебаний сплавов $A_{1-x}B_xC$ с соответствующим анализом колебательных спектров также дает определенную информацию о характере межатомных взаимодействий. Характер замещения одних атомов другими — хаотический или с формированием кластеров в ближнем или дальнем порядке — исследовался в анионных сплавах Ga (AsP) [12] и Cd (SeS) [13] из анализа тонкой структуры спектров решеточного отражения. Катионные

сплавы $Cd_{1-x}Hg_xTe$ изучались методом ИК спектроскопии в работе [14]. Наблюдаемые особенности в структуре спектров решеточного отражения объясняются исходя из предположения, что при образовании сплавов замещения распределение Cd и Hg в катионной подрешетке не является случайным, в их распределении проявляется тенденция к образованию кластеров в ближнем порядке.

В настоящей работе представлена новая интерпретация результатов анализа спектров решеточного отражения сплавов $Cd_{1-x}Hg_xTe$ ($0 < x < 0.8$), согласующаяся с последними данными исследований локальной структуры полупроводниковых сплавов. Для более четкого выявления структуры и формы полос спектры решеточного отражения измерялись при низких температурах (≈ 25 K). Математическая обработка спектров отражения проводилась последовательным применением методов дисперсионного анализа и анализа Крамерса—Кронига.

1. Измерение и математическая обработка спектров решеточного отражения

Спектры отражения монокристаллических образцов $Cd_{1-x}Hg_xTe$ ($0 < x < 0.8$) измерялись на лабораторной модели дифракционного вакуумного спектрометра в спектральном интервале 40—90 мкм ($250—110$ см⁻¹) с разрешением ≈ 1 см⁻¹ при температурах 25, 85 и 300 K. Низкотемпературные измерения проводились с помощью криостата с подвижным хладопроводом «по точкам» — при фиксированной длине волны последовательно измерялось отражение от образца и от зеркала и при перекрытом световом пучке. Характеристики монокристаллических образцов приведены в [14].

Математическая обработка спектров отражения $R(\omega)$, т. е. восстановление диэлектрической функции кристалла $\hat{\epsilon}(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$, проводилась последовательным применением методов дисперсионного анализа и анализа Крамерса—Кронига. Анализ Крамерса—Кронига, заключающийся в интегральном преобразовании для комплексного коэффициента отражения $\hat{r} = r \exp(i\theta)$ ($R = |r|^2$) от амплитуды коэффициента отражения $r(\omega)$, заданного в интервале частот от 0 до ∞ , к фазовому углу $\theta(\omega)$ с последующим преобразованием к $\hat{\epsilon}(\omega) = \hat{\epsilon}[r(\omega), \theta(\omega)]$, является прямым методом, не зависящим от модельной формы диэлектрической функции

$$r = r \exp(i\theta), \quad \theta(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\ln(r(\omega)) \ln(r(\omega_j))}{\omega - \omega_j^2} d\omega,$$

$$\epsilon(\omega) = \hat{\epsilon}[r(\omega), \theta(\omega)]. \quad (1)$$

Но этот метод очень чувствителен к граничным условиям, поскольку значения $r(\omega)$ известны лишь в ограниченном интервале частот. В качестве аппроксимирующей функции для $r(\omega)$ за пределами частотного интервала измерения нами использовался спектр гармонических осцилляторов, параметры которых вычислялись методом дисперсионного анализа [15]. Для дисперсионного анализа нами использовалась диэлектрическая функция $\epsilon(\omega)$ в классической аддитивной форме для независимых затухающих осцилляторов.

$$\hat{\epsilon}(\omega) = \epsilon_{\infty} + \sum_j \frac{S_j \omega_{ij}^2}{\omega_{ij}^2 - \omega^2 - i\Gamma_{ij}\omega}, \quad (2)$$

где ω_{ij} , S_j и Γ_{ij} — резонансная частота, сила осциллятора и затухание j -моды ТО решеточных колебаний рассматриваются как варьируемые параметры.

На первом этапе математической обработки спектра отражения подбирались параметры двух осцилляторов, соответствующих HgTe-подобному колебанию с длинноволнового края экспериментального частотного интервала и CdTe-подобному колебанию с коротковолнового края, для которых модельный спектр отражения, рассчитанный из

$$R(\omega) = \left| \frac{\hat{\epsilon}(\omega)^{1/2} - 1}{\hat{\epsilon}(\omega)^{1/2} + 1} \right|^2, \quad (3)$$

позволил бы сделать хорошую аппроксимацию к экспериментальному спектру отражения на краях частотного интервала измерений. На основе полученного модельного спектра отражения за краями интервала измерений и экспериментальный спектр отражения проводился анализ Крамерса—Кронига с целью восстановления диэлектрической функции $\hat{\epsilon}(\omega)$. Эта функция будет отличаться от полученной дисперсионным анализом для двух осцилляторов (в двухмодовом приближении) дополнительной структурой и формой полос.

На втором этапе математической обработки полученная из преобразований Крамерса—Кронига диэлектрическая функция $\epsilon''(\omega) = \text{Im} [\hat{\epsilon}(\omega)]$ раскладывается на совокупность лорентцовых контуров для гармонических осцилляторов, из которых определялись параметры осцилляторов ω_{ij} , S_j и Γ_{ij} . В силу аддитивности функции $\epsilon''(\omega)$ разложение ее на элементарные лорентцовые контуры очень наглядно демонстрирует, какими решеточными осцилляторами определяется экспериментальный спектр отражения. С помощью найденных параметров осцилляторов через (2) и (3) рассчитывался модельный спектр отражения, который сравнивался с экспериментальным спектром с последующей оптимизацией дисперсионных параметров. Максимально приближенный к экспериментальному модельный спектр отражения снова использовался за краями интервала измерений при анализе Крамерса—Кронига для окончательного установления диэлектрической функции сплава $\hat{\epsilon}(\omega)$. На выходе математической программы обработки спектра отражения мы имеем экспериментальный и модельный (из дисперсионного анализа) спектры отражения, функции $\epsilon''(\omega)$ из анализа Крамерса—Кронига и дисперсионного анализа, $\text{Im} [-\hat{\epsilon}(\omega)^{-1}]$ для экспериментальной $\hat{\epsilon}(\omega)$ (из анализа Крамерса—Кронига) и дисперсионные параметры осцилляторов ω_{ij} , S_j и Γ_{ij} для модельной диэлектрической функции $\hat{\epsilon}(\omega)$. Положение пиков в спектральном распределении $\text{Im} [-\hat{\epsilon}(\omega)^{-1}]$ соответствует частотам продольных (LO) мод.

2. Результаты исследований

Сплавы, обогащенные HgTe, $\text{Cd}_{0.19}\text{Hg}_{0.81}\text{Te}$ и $\text{Cd}_{0.29}\text{Hg}_{0.71}\text{Te}$. На рис. 1 представлена диэлектрическая функция $\epsilon''(\omega)$, восстановленная из анализа Крамерса—Кронига (штриховая линия) спектра отражения $R(\omega)$ сплава $\text{Cd}_{0.29}\text{Hg}_{0.71}\text{Te}$ при 25 К (штриховая линия), с соответствующим разложением ее на лорентцовые контуры (сплошная линия) гармонических затухающих осцилляторов. На этом рисунке отчетливо видны два хорошо разрешенных контура осцилляторов на 150.5 и 156 см^{-1} . Их силы осцилляторов равны 0.25 и 0.20 соответственно, и осцилляторы должны рассматриваться как две моды решеточных CdTe-подобных колебаний. HgTe-подобные колебания представлены одной сильной модой на 121.5 см^{-1} с большой силой осциллятора 4.7. Отчетливо проявляется мода на 137 см^{-1} , не уступающая по силе (0.25) модам CdTe-подобных колебаний, которую удалось обнаружить только после восстановления $\epsilon''(\omega)$ из спектра отражения с помощью преобразования Крамерса—Кронига. В спектре отражения она не видна даже при 25 К, поскольку попадает на крыло очень сильной полосы HgTe-подобного колебания. На рис. 1 также изображена

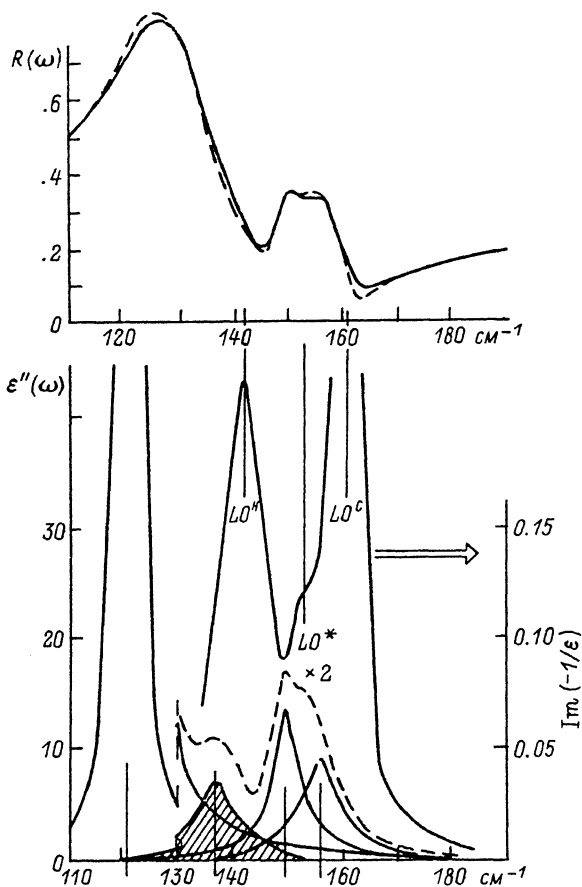


Рис. 1. Спектры отражения $R(\omega)$ сплава $\text{Cd}_{0.29}\text{Hg}_{0.71}\text{Te}$ при $T = 25$ К (штриховая линия — экспериментальный, сплошная линия — модельный). Диэлектрическая функция $\epsilon''(\omega)$ (штриховая линия), восстановленная из анализа Крамерса—Кронига спектра отражения $R(\omega)$, и лорентцовые контуры (сплошная линия) гармонических осцилляторов, на которые разложена функция $\epsilon''(\omega)$ для $\hat{\epsilon}(\omega)$, полученной из анализа Крамерса—Кронига.

функция $\text{Im}[-\hat{\epsilon}(\omega)^{-1}]$, обратная диэлектрической функции $\hat{\epsilon}(\omega)$, полученной из анализа Крамерса—Кронига. Ее максимум соответствует частотам LO мод, равным 142.0 см^{-1} для HgTe -подобного колебания ($\omega_{LO} = 121.5 \text{ см}^{-1}$), 155 и 161 см^{-1} для CdTe -подобных колебаний ($\omega_{LO} = 150.5$ и 156 см^{-1} соответственно).

Спектр отражения и результаты его анализа для сплава $\text{Cd}_{0.19}\text{Hg}_{0.81}\text{Te}$ при $T = 25$ К подобны случаю, рассмотренному выше для сплава $\text{Cd}_{0.29}\text{Hg}_{0.71}\text{Te}$, и аналогичны опубликованным в [16] для $n\text{-Hg}_{0.79}\text{Cd}_{0.21}\text{Te}$ при $T = 10$ К. На рис. 2 показана диэлектрическая функция $\epsilon''(\omega)$, восстановленная из анализа Крамерса—Кронига (штриховая линия) спектра отражения сплава $\text{Cd}_{0.19}\text{Hg}_{0.81}\text{Te}$, с лорентцовыми контурами (сплошная линия) гармонических осцилляторов, на которые раскладывается функция $\epsilon''(\omega)$. Частоты TO мод равны 121.0 см^{-1} для HgTe -подобного колебания и 151.0 и 155.5 см^{-1} для CdTe -подобных колебаний. Они совпадают с точностью до 0.5 см^{-1} с особенностями, найденными в [16] из анализа Крамерса—Кронига спектров отражения. Частоты LO мод равны 139.5 см^{-1} для HgTe -подобного колебания и 153 и 158.5 см^{-1} для CdTe -подобных колебаний. В [16] LO моде на частоте 158 см^{-1} ставится в соответствие TO мода на 151 см^{-1} , с чем мы не можем согласиться. В соответствии с дисперсионным анализом диэлектрической функции $\epsilon''(\omega)$ (рис. 2) CdTe -подобная полоса в спектре отражения определяется двумя колебательными TO модами на частотах

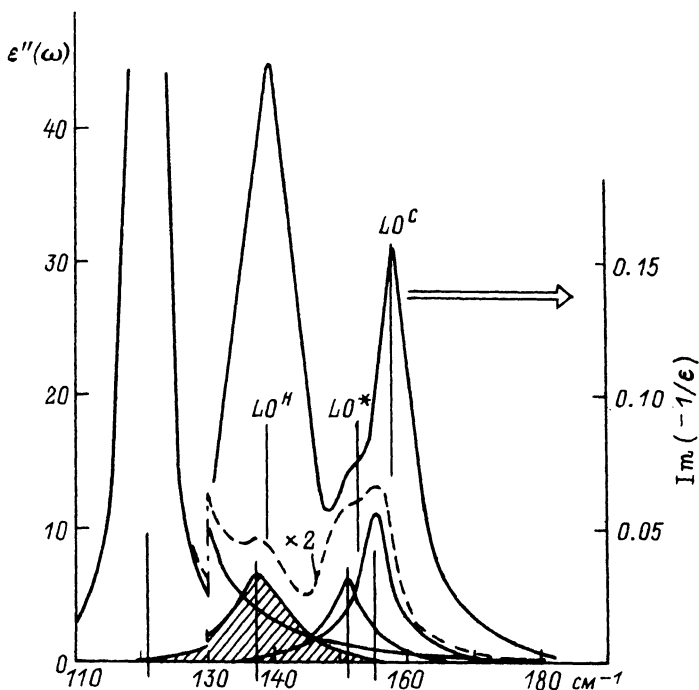


Рис. 2. Диэлектрическая функция $\epsilon''(\omega)$ (штриховая линия) сплава $\text{Cd}_{0.19}\text{Hg}_{0.81}\text{Te}$ при $T = 25$ К, восстановленная из анализа Крамерса—Кронига спектра отражения $R(\omega)$ и лорентцовые контуры (сплошная линия) гармонических осцилляторов, на которые разложена функция $\epsilon''(\omega)$. $\text{Im}[-\hat{\epsilon}(\omega)^{-1}]$ для $\epsilon(\omega)$, полученной из анализа Крамерса—Кронига.

151.0 и 155.5 с силами осцилляторов 0.12 и 0.23 соответственно. Им соответствуют LO мода на ≈ 153 cm^{-1} и LO мода на 158.5 cm^{-1} с LO — TO расщеплением 2 и 3 cm^{-1} , определяемым силами осцилляторов соответствующих TO мод. Наблюдаемая в спектрах комбинационного рассеяния света в [16] LO мода на частоте 156 cm^{-1} является усредненной полосой из-за экспериментальной неразрешимости по частоте двух рассмотренных LO мод. К тому же из-за разупорядочения кристаллической решетки в сплаве может проявляться и запрещенная правилами отбора TO мода на 155.5 cm^{-1} .

Наблюдаемая после разложения диэлектрической функции $\epsilon''(\omega)$ на лорентцовые контуры особенность на 137 cm^{-1} сравнима по силе осциллятора с TO модами CdTe -подобных колебаний. Мода ≈ 135 cm^{-1} наблюдалась в сплаве $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ в спектрах резонансного КРС при азотных температурах [17] и приписывалась авторами [18], исходя из рекурсивных расчетов по динамике решетки для $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$, колебаниям атома Te , тетраэдрически связанного с одним атомом Cd и тремя атомами Hg . Той же интерпретации склонны придерживаться в работе [16] после обнаружения особенности на 137 cm^{-1} из анализа Крамерса—Кронига спектра отражения сплава $\text{Hg}_{0.79}\text{Cd}_{0.21}\text{Te}$ при 10 К и в работе [19] из резонансного поведения моды на 133 cm^{-1} при исследовании резонансного КРС на сплавах $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ с $x = 0.69 \div 0.80$ при $T = 80$ К.

Уместно остановиться еще на одном аспекте работы [16], в которой проводился сравнительный анализ спектров решеточного отражения и соответствующих диэлектрических функций $\hat{\epsilon}(\omega)$ для образцов сплава $\text{Hg}_{0.79}\text{Cd}_{0.21}\text{Te}$ n - и p -типа, вырезанных из одного слитка (образец выращенного материала p -типа переходит в n -тип после продолжительного термического отжига в парах Hg). Диэлектрическая функция $\epsilon''(\omega)$ для образца n - $\text{Hg}_{0.79}\text{Cd}_{0.21}\text{Te}$ ([16] рис. 3) совпадает с $\epsilon''(\omega)$, рассчитанной нами для сплава $\text{Cd}_{0.19}\text{Hg}_{0.81}\text{Te}$ (рис. 2). Для TO мод 151.0

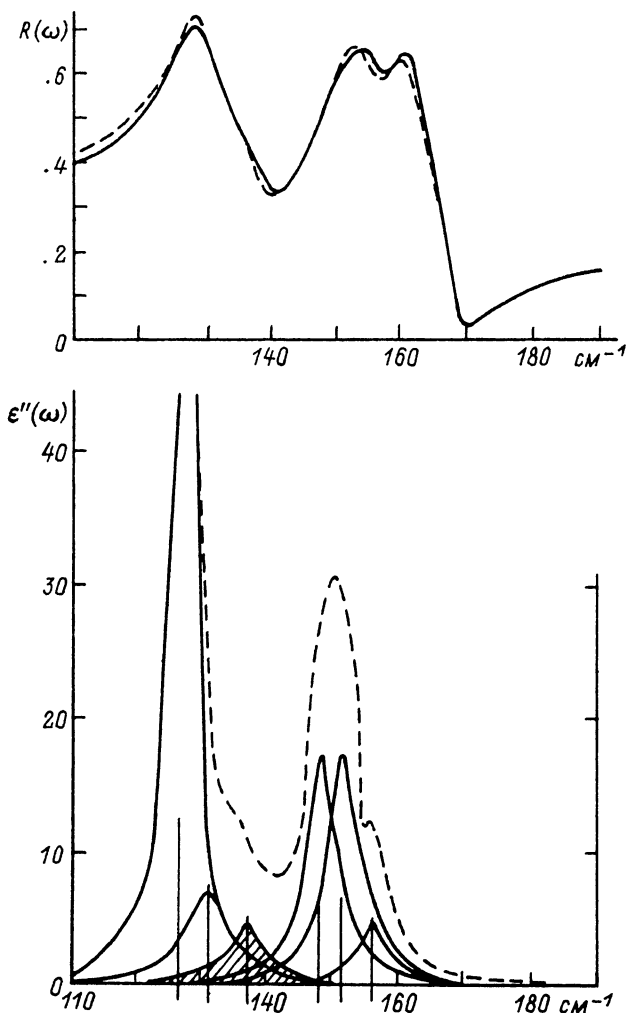


Рис. 3. Спектры отражения $R(\omega)$ сплава $\text{Cd}_{0.43}\text{Hg}_{0.57}\text{Te}$ при $T = 25$ К (штриховая линия — экспериментальный, сплошная линия — модельный). Диэлектрическая функция $\epsilon''(\omega)$ (штриховая линия), восстановленная из анализа Крамерса—Кронига спектра отражения $R(\omega)$, и лорентцевые контуры (сплошная линия) гармонических осцилляторов, на которые разложена функция $\epsilon''(\omega)$.

и 155.5 cm^{-1} CdTe-подобных колебаний мы установили из дисперсионного анализа соотношение сил осцилляторов 1:2 (0.12/0.23). Если сравнить функции $\epsilon''(\omega)$ в области CdTe-подобных колебаний образцов n - и p -типа ([¹⁶] рис. 3) с учетом вклада дырочной плазмы в дисперсию $\epsilon''(\omega)$ образца p -типа ($p = 4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), то соотношение сил осцилляторов TO мод 151.0 и 155.5 cm^{-1} будет примерно 1:1 (0.24/0.24). Следовательно, инверсия типа проводимости в процессе термического отжига сопровождается перераспределением сил осцилляторов между TO модами CdTe-подобных колебаний.

Сплавы промежуточных составов $\text{Cd}_{0.43}\text{Hg}_{0.57}\text{Te}$ и $\text{Cd}_{0.48}\text{Hg}_{0.52}\text{Te}$. Спектры решеточного отражения сплавов промежуточного состава $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ ($x \approx 1/2$) являются очень наглядной иллюстрацией того, что они даже по виду не могут рассматриваться образованными только двумя полосами решеточных CdTe- и HgTe-подобных колебаний, как это принимается в двухмодовой модели колеба-

тельных спектров сплавов замещения. На рис. 3 представлена диэлектрическая функция $\epsilon''(\omega)$ (штриховая линия), восстановленная из анализа Крамерса—Кронига спектра отражения $R(\omega)$ сплава $\text{Cd}_{0.43}\text{Hg}_{0.57}\text{Te}$ при 25 К (штриховая линия), с соответствующим разложением ее на лорентцовые контуры (сплошная линия) гармонических осцилляторов. Спектр отражения $R(\omega)$ и диэлектрическая функция $\epsilon''(\omega)$ для сплава $\text{Cd}_{0.48}\text{Hg}_{0.52}\text{Te}$ аналогичны сплаву $\text{Cd}_{0.43}\text{Hg}_{0.57}\text{Te}$, различие только в силах осцилляторов решеточных мод, которыми интерпретируется колебательный спектр. Для спектра отражения $R(\omega)$ сплава $\text{Cd}_{0.86}\text{Hg}_{0.14}\text{Te}$ при $T = 25$ К. Для HgTe -подобных колебаний в спектре $\epsilon''(\omega)$ проявляется одна TO мода на частоте 131 см^{-1} . Контур $\epsilon''(\omega)$ в области CdTe -подобных колебаний сильно асимметричен. Но поскольку спектральные измерения сплавов проводились при $T = 25$ К, нет оснований ожидать, что асимметрия фононных линий связана с проявлением сильного ангармонизма [20]. Спектр $\epsilon''(\omega)$ в области CdTe -подобных колебаний складывается на лорентцовые контуры с частотами осцилляторов 146.0 , 148.5 и 151.0 см^{-1} . Снова проявляется особенность на 138 см^{-1} и в сплаве, обогащенном CdTe . Ее сила осциллятора 0.3 не отличается от значений для сплавов, обогащенных HgTe , т. е. эта особенность в спектре решеточных колебаний не является специфической только для сплавов $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ с $x = 0.7 \div 0.8$. Положение частот LO мод для CdTe -подобных колебаний в спектре $\text{Im}[-\hat{\epsilon}(\omega)^{-1}]$ не разрешается для сплава, обогащенного CdTe , из-за близкого расположения сильных TO мод; их усредненное положение соответствует сильному пику по частоте 172.0 см^{-1} . Для HgTe -подобного колебания частота LO моды равна 134 см^{-1} . На рис. 4 в разложении функции $\epsilon''(\omega)$ на лорентцовые контуры не показан контур слабого осциллятора, сила которого составляет всего 0.02 , на частоте 157.5 см^{-1} , поскольку в кривой $\epsilon''(\omega)$ его трудно разрешить. Но этот слабый осциллятор с частотой, попадающей в область LO — TO расщепления сильной CdTe -подобной моды, хорошо проявляется в спектре отражения $R(\omega)$ в виде пика в максимуме полосы отражения CdTe -подобных колебаний. Согласно [20], в этом случае сильная мода играет роль усилителя слабой моды и поэтому слабая мода может четко проявляться в спектре отражения в виде тонкой структуры, но не разрешается в спектре диэлектрической функции $\epsilon''(\omega)$. Рассмотренный случай с модой 157.5 см^{-1} противоположен особенности на 137 см^{-1} , которая наблюдается только в спектре $\epsilon''(\omega)$ сплава $\text{Cd}_{0.43}\text{Hg}_{0.57}\text{Te}$ (рис. 3) контур $\epsilon''(\omega)$ в области HgTe -подобных колебаний сильно асимметричен. Причины асимметрии формы фононных линий для случая сегнетоэлектриков при высоких температурах (680 К) рассматривали Servoin и Gervais [20]. Они рассматривали два варианта: наличие двух близко расположенных мод с различающимися силами осцилляторов и ангармонический эффект. Поскольку наши спектральные измерения проводились при низкой температуре (25 К), нет оснований ожидать проявления ангармонизма, и спектр $\epsilon''(\omega)$ в области HgTe -подобных колебаний раскладывался на два контура, соответствующих модам решеточных колебаний на частоте 126.5 см^{-1} с силой осциллятора 2.2 и на частоте 131.0 см^{-1} с силой 0.45 . Область CdTe -подобных колебаний характеризуется тремя модами решеточных колебаний на частотах 148.5 , 150.5 и 156.5 см^{-1} . И снова в спектре $\epsilon''(\omega)$ наблюдается особенность на 137.5 см^{-1} с силой осциллятора 0.25 . Как увидим в последующем изложении результатов измерений, эта особенность проявляется с почти одинаковой силой осциллятора (≈ 0.25) в сплавах $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ состава от $x = 0.09$ до $x = 0.81$. Поэтому нет оснований считать ее решеточной модой, характерной для сплава состава $x = 0.7 \div 0.8$ и соответствующей колебаниям атома Te в тетраэдре ближайших соседей из одного атома Cd и трех атомов Hg , как утверждается в [18].

Сплавы, обогащенные CdTe , $\text{Cd}_{0.76}\text{Hg}_{0.24}\text{Te}$ и $\text{Cd}_{0.86}\text{Hg}_{0.14}\text{Te}$. Если спектры отражения сплавов $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$, обогащенных HgTe , характеризуются одной TO модой HgTe -подобных колебаний и двумя TO модами CdTe -подобных колебаний и особенностью на 137 см^{-1} , то интерпретация спектров отражения

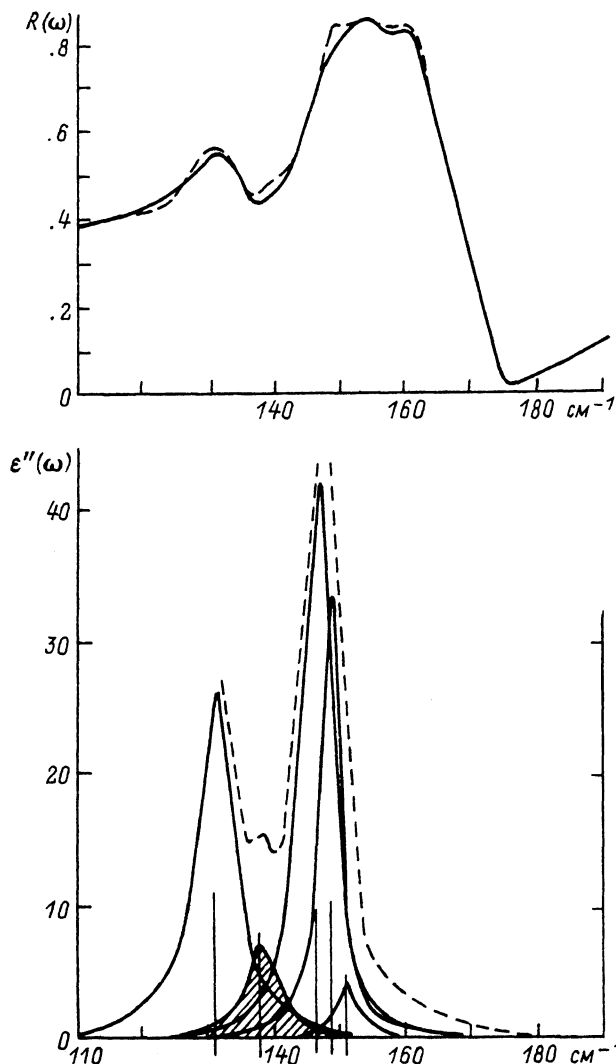


Рис. 4. Спектры отражения $R(\omega)$ сплава $\text{Cd}_{0.86}\text{Hg}_{0.14}\text{Te}$ при $T = 25$ К (штриховая линия — экспериментальный, сплошная линия — модельный). Диэлектрическая функция $\epsilon''(\omega)$ (штриховая линия), восстановленная из анализа Крамерса—Кронига спектра отражения $R(\omega)$ и лорентцовые контуры (сплошная линия) гармонических осцилляторов, на которые разложена функция $\epsilon''(\omega)$.

сплавов, обогащенных CdTe, более сложная. В качестве примера на рис. 4 представлены результаты анализа.

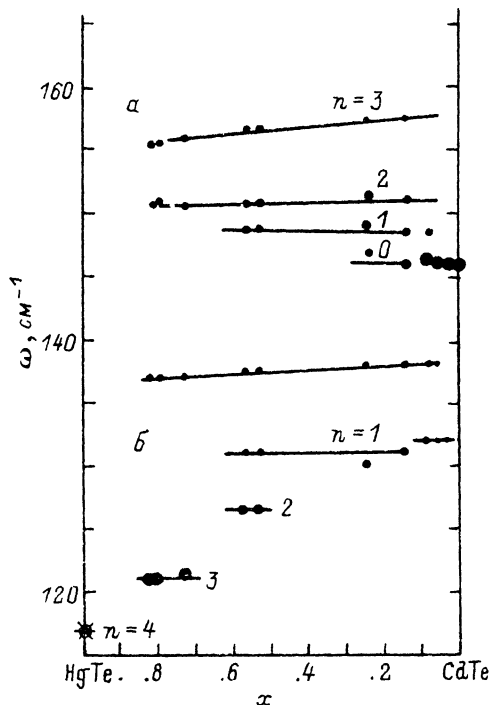
В сплаве $\text{Cd}_{0.76}\text{Hg}_{0.24}\text{Te}$ мода 157.5 см^{-1} с силой осциллятора 0.09 уже хорошо проявляется и в спектре $\epsilon''(\omega)$. Спектры отражения $R(\omega)$ для обогащенных CdTe сплавов $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ с $x = 0.09, 0.06$ и 0.03 характеризуются сильной полосой решеточного отражения CdTe-подобного колебания на частоте TO моды 146 см^{-1} с тонкой структурой, соответствующей слабой моде, и слабой TO модой HgTe-подобного колебания на 132 см^{-1} .

Частоты поперечных оптических (TO) фононов, соответствующих осцилляторам в дисперсионном анализе диэлектрической функции $\epsilon''(\omega)$ и спектра отражения $R(\omega)$ для сплавов $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ с составом от $x = 0$ до $x = 0.81$ при $T = 25$ К (рис. 1—4), представлены на рис. 5 в зависимости от состава сплава (x). Размер

Рис. 5. Распределение частот решеточных TO мод ω_n^C и ω_n^H $Cd-Te$ (а) и $Hg-Te$ (б) колебаний базисных ячеек $Cd(4-n)Hg(n)Te$ ($n=0, 1, 2, 3, 4$) в зависимости от состава сплава $Cd_{1-x}Hg_xTe$ при 25 К.

экспериментальных точек на рисунке приблизительно соответствует силе осциллятора соответствующих решеточных мод. Значение частоты 117 см^{-1} TO моды колебания для $HgTe$ при $T=8\text{ К}$ взято из [21].

Все экспериментальные точки для $CdTe$ -подобных колебаний для всех составов сплава $Cd_{1-x}Hg_xTe$ распределяются в пределах 1 см^{-1} по четырем модам: $146, 148.5, 150.5$ и 156 см^{-1} . Для любого состава сплава положение и форма полосы решеточного отражения для $CdTe$ -подобных колебаний определяются четырьмя решеточными модами с частотами, не зависящими от состава сплава. С изменением состава сплава меняются силы осцилляторов этих мод.



Список литературы

- [1] Mikkelson S. A., Boyce J. B. // Phys. Rev. B. 1983. V. 28. P. 7130—7140.
- [2] Balzarotti A. // Physica B. 1987. V. 146. P. 150—175.
- [3] Mayanovic R. A., Pong W.-F., Bunker B. A. // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 11174—11182.
- [4] Marbeuf A., Ballutaud D., Triboulet R., Dexpert H., Lagarde P., Marfaing Y. // J. Phys. Chem. Sol. 1989. V. 50. P. 975—979.
- [5] Sher A., Chen A.-B., Spicer W. E., Shin C.-K. // J. Vac. Sci. Technol. A. 1985. V. 3. P. 105—111.
- [6] Hass K. C., Vanderbilt D. // J. Vac. Sci. Technol. A. 1987. V. 5. P. 3019—3023.
- [7] Tsai M.-H., Dow J. D., Newman K. E., Kasowski R. V. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 7744—7748.
- [8] Wei S.-H., Zunger Z. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37 P. 8958—8981; J. Vac. Sci. Technol. A. 1988. V. 6. P. 2597—2611.
- [9] Zax D. B., Vega S., Yellin N., Zamir D. // Chem. Phys. Lett. 1987. V. 138. P. 105—109.
- [10] Beshah K., Zamir D., Becla P., Wolff P. A., Griffin R. G. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. P. 6420—6425.
- [11] Zamir D., Beshah K., Becla P., Wolff P. A., Griffin R. G., Zax D., Vega S., Yellin N. // J. Vac. Sci. Technol. A. 1988. V. 6. P. 2612—2613.
- [12] Verleur H. W., Barker A. S. // Phys. Rev. 1966. V. 149. P. 715—729.
- [13] Verleur H. W., Barker A. S. // Phys. Rev. 1967. V. 155. P. 750—763.
- [14] Козырев С. П., Водопьянов Л. К., Трибуле П. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 2. С. 635—641; Solid St. Comm. 1983. V. 45. P. 383—385.
- [15] Бурлаков В. М., Рзаев Д. А., Пырков В. Н. // Препринт ИСАН. Троицк, 1985. 28 с.
- [16] Amirtharaj P. M., Dhar N. K., Baars J., Seelwind H. // Semicond. Sci. Technol. 1990. V. 5. P. 68—72.
- [17] Amirtharaj P. M., Tiong K. K., Parayantal P., Pollack F. H., Furdyna J. K. // J. Vac. Sci. Technol. A. 1985. V. 3. P. 226—232.
- [18] Fu Z.-W., Dow J. D. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. P. 7625—7626.
- [19] Compaan A., Bowman R. C., Cooper D. E. // Semicond. Sci. Technol. 1990. V. 5. P. 73—77.
- [20] Servoin J. L., Gervais F. // Appl. Optics. 1977. V. 16. P. 2952—2956.
- [21] Grynberg M., Le Toullec R., Balkanski M. // Phys. Rev. B. 1974. V. 9. P. 517—526.