

## ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ HgTe, CdTe И ИХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

Мельничук С. В., Чернов В. М., Юрийчук И. Н.

Колебательный спектр HgTe, CdTe найден в модели жестких ионов. В приближении виртуального кристалла определен также фоновый спектр твердых растворов  $Cd_xHg_{1-x}Te$ . На основе полученных спектров вычислены плотности состояний, моменты плотностей состояний, температурные зависимости параметров Дебая. Для CdTe определено также  $\alpha = \partial E_g / \partial T$ . Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными для HgTe и CdTe.

Изучение свойств теллуридов ртути и кадмия и их твердых растворов остается актуальной задачей, поскольку это — перспективные материалы для ряда областей электроники [1]. Обладая отрицательной запрещенной зоной, HgTe (по ряду своих свойств) выпадает из закономерностей для группы  $A^{II}B^{VI}$ . В частности, по экспериментальным данным [2] среднеквадратичные отклонения атомов ртути больше, чем атомов теллура, хотя масса атома ртути больше массы атома теллура. Для CdTe и других соединений  $A^{II}B^{VI}$  наблюдается обратная тенденция.

Недавно проведен расчет среднеквадратичных отклонений атомов HgTe и твердых растворов  $Cd_xHg_{1-x}Te$  на основе фононного спектра, найденного в модели жестких ионов (RIM) [3]. Колебательный спектр твердых растворов определен в приближении виртуального кристалла. Тенденция преобладания  $\langle u_{Hg}^2 \rangle$  сохраняется вплоть до 4 К и справедлива также для твердых растворов с низким содержанием Cd. Однако  $\langle u^2 \rangle$  атомов твердых растворов с  $x > 0.5$  имеет противоположную тенденцию, то же самое имеет место для CdTe ( $\langle u_{Cd}^2 \rangle > \langle u_{Te}^2 \rangle$ ), что противоречит эксперименту.

Имеет свои особенности и температурная зависимость ширины запрещенной зоны, что не удается описать в модели Брука — Ю даже для теллурида ртути [2]. К сложностям описания HgTe для  $Cd_xHg_{1-x}Te$  добавляются сложности описания колебательных спектров смешанных кристаллов [4]. Поэтому важным становится знание возможностей моделей для описания колебательных и тепловых свойств.

В данной работе найдены плотности состояний фононного спектра CdTe, HgTe и их твердых растворов, моменты плотностей состояний, температурные зависимости параметров Дебая, а также температурный коэффициент ширины запрещенной зоны для CdTe. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными.

Фононный спектр теллуридов кадмия и ртути определялся в модели жестких ионов, параметры модели для  $Cd_xHg_{1-x}Te$  выражались через параметры CdTe и HgTe в приближении виртуального кристалла [3]. Плотность состояний колебательного спектра

$$\rho(\omega) = \sum_{\mathbf{k}_j} \delta(\omega - \omega_j(\mathbf{k})) \quad (1)$$

определялась суммированием по всем веткам спектра и по 37 897 точкам первой зоны Бриллюэна. На рис. 1 приведены  $\rho(\omega)$  для CdTe, HgTe и твердого раствора с  $x=0.6$ . В поведении максимумов плотности состояний в области

Моменты плотностей состояний колебательных спектров.  
В скобках — экспериментальные данные [5]

$\mu_p$	HgTe	Cd <sub>x</sub> Hg <sub>1-x</sub> Te				CdTe
		$x = 0.2$	$x = 0.4$	$x = 0.6$	$x = 0.8$	
$\mu_4 (10^{49} \text{ c}^{-4})$	10.63 (9.96 ± 0.85)	10.66	11.29	12.78	15.6	20.6 (20.4 ± 1.2)
$\mu_2 (10^{24} \text{ c}^{-2})$	8.405 (8.00 ± 0.25)	8.652	9.046	9.623	10.46	11.69 (11.4 ± 0.2)
$\mu_{-0.5} (10^{-6} \text{ c}^{0.5})$	0.744 (0.747 ± 0.003)	0.679	0.655	0.644	0.643	0.661 (0.657 ± 0.03)
$\mu_{-1} (10^{-13} \text{ c})$	6.587 (6.450 ± 0.025)	5.119	4.692	4.525	4.563	4.95 (4.85 ± 0.02)
$\mu_{-1.5} (10^{-19} \text{ c}^{1.5})$	6.891 (6.40 ± 0.03)	4.359	3.767	3.56	3.635	4.21 (3.91 ± 0.02)
$\mu_{-2} (10^{-25} \text{ c}^2)$	8.25 (6.64 ± 0.04)	4.259	3.498	3.24	3.325	4.05 (3.33 ± 0.02)
$\mu_{-2.5} (10^{-31} \text{ c}^{2.5})$	10.94 (6.77 ± 0.05)	4.855	3.88	3.531	3.582	5.07 (3.44 ± 0.03)

оптических частот наблюдается тенденция, характерная для одномодовых систем [4].

В таблице приведены значения моментов плотностей состояний

$$\mu_p = \int \rho(\omega) \omega^p d\omega \quad (2)$$

для различных значений  $p$ , рассчитанные с использованием полученных колебательных спектров и плотностей состояний. Для CdTe и HgTe даны также  $\mu_p$ , найденные из анализа измеренных тепловых характеристик этих материалов [5]. Результаты расчета практически совпадают с экспериментальными данными, особенно для  $p \geq -1$ .

На рис. 2 приведена температурная зависимость параметра Дебая  $\Theta_D(T)$ . Совпадение  $\Theta_D(T)$  для CdTe и HgTe с экспериментальными данными для температур  $\leq 50$  К вполне приемлемо. Уменьшение  $\Theta_D(T)$  при высоких  $T$  [5] связано с эффектами ангармонизма, что не учитывается в используемом гармоническом приближении.

Совпадение экспериментальных данных и результатов расчета для CdTe и HgTe дает основание предполагать, что результаты расчетов фононного спектра, проведенных в модели RIM для твердых растворов, тоже справедливы. Более аргументированные доказательства могли бы дать экспериментальные данные для твердых растворов. В области акустических веток, как видно из рис. 1, имеет место нарушение «одномодовости». Это, очевидно, приводит так же к немонотонности  $\Theta_D(T)$  в области низких температур, как функции  $x$ .

Для определения температурного коэффициента ширины запрещенной зоны можно использовать модель Брука—Ю [2]. Согласно этой модели, при расчете электронного спектра методом псевдопотенциала форм-факторы псевдопотенциала  $V_i(\mathbf{q})$  при учете колебаний атомов решетки заменяются на температурно зависящие форм-факторы:

$$V_i(\mathbf{q}, T) = V_i(\mathbf{q}) e^{-W_i(\mathbf{q}, T)}, \quad (3)$$

где  $W_i(\mathbf{q}, T)$  — фактор Дебая—Валлера:

$$W_i(\mathbf{q}, T) = \frac{|\mathbf{q}|^2 \hbar}{6Nm_i} \sum_{\mathbf{k}j} \frac{\left| c \left( j \left| \frac{\mathbf{k}}{i} \right| \right) \right|^2 \left[ n(\omega_j(\mathbf{k})) + \frac{1}{2} \right]}{\omega_j(\mathbf{k})}, \quad (4)$$

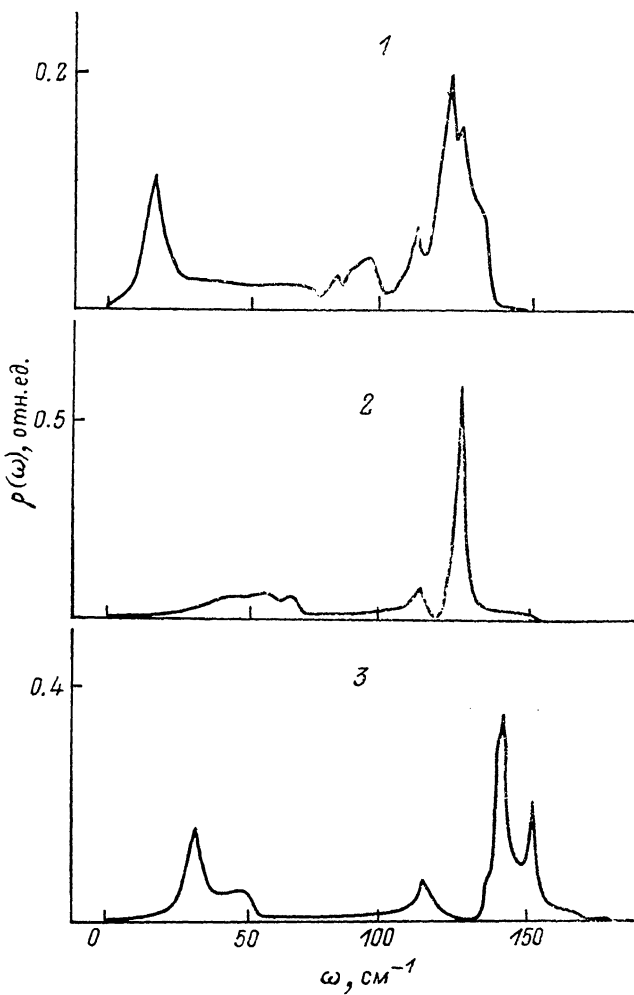


Рис. 1. Плотность состояний колебательного спектра.  
 1 — HgTe, 2 — Cd<sub>0.6</sub>Hg<sub>0.4</sub>Te, 3 — CdTe.

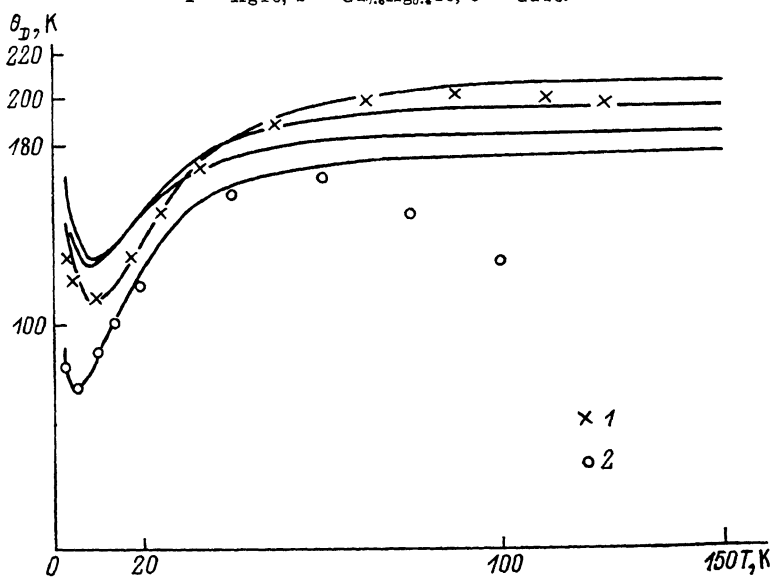


Рис. 2. Температурная зависимость параметра Дебая  $\theta_D(T)$ .

1 — CdTe, 2 — Cd<sub>0.6</sub>Hg<sub>0.4</sub>Te, 3 — Cd<sub>0.4</sub>Hg<sub>0.6</sub>Te, 4 — HgTe. Эксперимент [3]: 1 — CdTe, 2 — HgTe.

$\omega_j(\mathbf{k})$  — частота  $j$ -й фононной ветви в точке  $\mathbf{k}$  зоны Бриллюэна — собственное значение динамической матрицы,  $c \begin{pmatrix} j \\ \mathbf{k} \\ i \end{pmatrix}$  — соответствующий собственный вектор,  $n(\omega_j(\mathbf{k}))$  — числа заполнения фононных состояний,  $m_i$  — масса  $i$ -го атома,  $N$  — число атомов кристалла,  $\mathbf{q}$  — вектор обратной решетки. В случае HgTe вопрос о температурной зависимости ширины запрещенной зоны усложняется необходимостью учитывать междузонные матричные элементы в обычном электрон-колебательном взаимодействии. При определении электронного спектра CdTe методом эмпирического псевдопотенциала использовался базис из 137 плоских волн.

Для ускорения процесса диагонализации секулярной матрицы применялась процедура Левдина [6], позволяющая свести секулярную матрицу к матрице меньшей размерности (в нашем случае  $27 \times 27$ ). Правильность расчета электронного спектра для жесткой решетки контролировалась сравнением с результатами других авторов [7]. Форм-факторы эмпирического псевдопотенциала брались из работы [8].

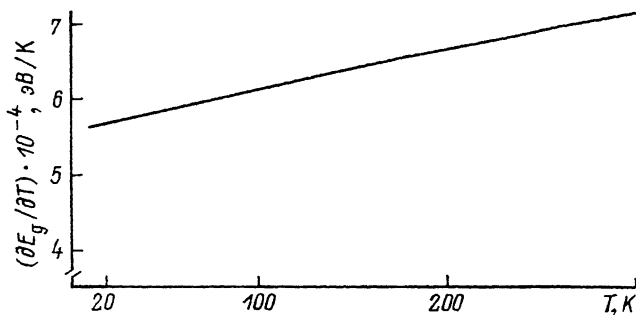


Рис. 3. Температурная зависимость  $\partial E_g/\partial T$  для CdTe.

На рис. 3 приведена температурная зависимость  $\alpha = \partial E_g/\partial T$ . Расчеты проводились в широком интервале температур. Коэффициент слабо меняется с температурой и близок к используемому в эмпирических оценках ( $\alpha = 5.25 \cdot 10^{-4}$  эВ/К) [1].

Таким образом, используемая модель вполне приемлемо описывает характеристики динамики решетки CdTe и HgTe. Аналогичные свойства твердых растворов требуют дальнейших как экспериментальных, так и теоретических исследований.

#### Список литературы

- [1] Физика соединений  $A_2B_6$  / Под ред. А. Н. Георгобяни, М. К. Шейнкмана. М., 1986. 320 с.
- [2] Guenzer C. S., Bienenstock A. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. N 10. P. 4655—4667.
- [3] Sadaiandi K., Ramachandran K. // Phys. St. Sol. (b). 1989. V. 154. N 2. P. K113—K115.
- [4] Зингер Г. М., Ипатова И. П., Рыскин А. И. // ФТП. 1984. Т. 18. В. 1. С. 24—42.
- [5] Русаков А. П., Векилов Ю. Х., Кадышевич А. Е. // ФТТ. 1970. Т. 12. В. 11. С. 3238—3243.
- [6] Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М., 1973. 557 с.
- [7] Chelikowsky J. R., Cohen M. L. // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. N 2. P. 556—582.
- [8] Cohen M. L., Bergstresser T. K. // Phys. Rev. 1966. V. 141. N 3. P. 789—796.

Черновицкий государственный университет

Получена 25.07.1990  
Принята к печати 11.01.1991