

10,11

Особенности свойств решеточных Hg–Te-колебаний в сплавах Cd_{1–y}Hg_yTe, обогащенных CdTe

© С.П. Козырев

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,
Москва, Россия

E-mail: skozyrev@sci.lebedev.ru

(Поступила в Редакцию 7 февраля 2012 г.)

В сплавах (твердых растворах) Cd_{1–y}Hg_yTe, обогащенных CdTe, свойства решеточных колебаний Hg–Te определяются одноянным решеточным потенциалом для атома Hg, локализованного в центре анионного тетраэдра. В сплавах, обогащенных HgTe, сохраняются аномальные свойства решеточных колебаний Hg–Te, которые определяются двуянным решеточным потенциалом для атома Hg с его внецентровой локализацией при низких температурах; более мелкая яма потенциала для атома Hg в центре анионного тетраэдра заполняется при термической активации. Поляризуемость ионной пары в ТО моде решеточных колебаний Hg–Te с атомом Hg в центре анионного тетраэдра, для сплавов, обогащенных CdTe, значительно превышает поляризуемость пары с внецентровым атомом Hg для сплавов, обогащенных HgTe.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект © 09-02-01425-а.

1. Введение

Сплавы Cd_{1–y}Hg_yTe, образованные полупроводником CdTe и полуметаллом HgTe с одинаковой структурой цинковой обманки (ZB) и почти равными решеточными параметрами ($a_0 = 6.482$ и 6.461 Å соответственно для CdTe и HgTe) рассматриваются как двухмодовая система с CdTe- и HgTe-подобными колебаниями. Для двухмодовых систем диэлектрическая функция сплава в области решеточных колебаний характеризуется двумя модами колебаний с собственными частотами, близкими к частотам мод бинарных компонент сплава, и силами осциллятора, примерно пропорциональными молярной концентрации компонент сплава y . Это означает, что при образовании сплава сохраняются индивидуальные свойства решеточных колебаний бинарных компонент сплава, хотя и с определенной модификацией. Для сплава Cd_{1–y}Hg_yTe любого состава интерпретация спектров решеточных колебаний в области CdTe-подобных колебаний возможна только при учете нескольких решеточных мод (2–3 моды), появление которых связано с расщеплением моды бинарной компоненты в сплаве. В соответствии с микроскопической теорией динамики кристаллической решетки (см., например, [1]) частоты ИК-активных ТО-мод колебаний в полярных кристаллах имеют вид $\omega_{TO}^2 = \omega_0^2 - \omega_{DD}^2$, где ω_0^2 — вклад сил ближнего действия, включая и диполь-дипольное взаимодействие между ближайшими ионами, а ω_{DD}^2 — отрицательный вклад дальнедействующих диполь-дипольных взаимодействий (для двухатомных кубических кристаллов — внутреннее лоренцово поле). Многомодовое расщепление в сплавах вызвано вкладом диполь-дипольного взаимодействия между ближайшими ионами в ω_0^2 в связи с многообразием локального окружения общего аниона Te катионами Cd и Hg. Из-за различия масс катионов

их смещения и соответствующие дипольные моменты, индуцированные макроскопическим полем, будут различными, что и приводит к различным вкладам диполь-дипольного взаимодействия между ближайшими ионами для разных катионных конфигураций вокруг общего аниона в сплаве. К тому же, природа химической связи в CdTe и HgTe различна: в CdTe связь считается ионно-ковалентной и осуществляется преимущественно через sp^3 -орбитали, а в HgTe она в значительной мере формируется через гибридизацию $p(\text{Te})$ и $d(\text{Hg})$ электронных состояний [2,3].

Обзор ранних исследований свойств решеточных колебаний сплава Cd_{1–y}Hg_yTe представлен в работе [4], где спектры решеточного отражения и комбинационного рассеяния света для разных составов сплава интерпретируются в квазимолекулярном приближении [5,6]. В соответствии с этим приближением сплавы Cd_{1–y}Hg_yTe рассматриваются как образованные пятью базисными ячейками Hg(4– n)Cd(n)Te ($n = 0, 1, 2, 3, 4$) из катионов Cd и Hg, тетраэдрически расположенных вокруг общего аниона Te. Каждая ячейка окружена 12 анионами Te, а из базисных ячеек формируется кристаллическая структура сплава. Каждой базисной ячейке соответствует своя мода Cd–Te- и Hg–Te-колебаний. Спектр решеточных колебаний кристалла аппроксимируется свойствами четырех мод Cd–Te-колебаний с $^C\omega_n$ ($n = 1, 2, 3, 4$) и четырех мод Hg–Te-колебаний с $^H\omega_n$ ($n = 0, 1, 2, 3$) пяти базисных ячеек Hg(4– n)Cd(n)Te ($n = 0, 1, 2, 3, 4$) через распределение вероятностей $P_n(y)$ их различных конфигураций в сплавах Cd_{1–y}Hg_yTe разного состава. Для сплавов Cd_{1–y}Hg_yTe из бинарных компонент с почти равными параметрами решетки частоты решеточных мод определяются катионной конфигурацией базисных ячеек и не зависят от состава сплава; от состава сплава зависят их силы осциллятора. В реальном спектре спла-

ва конкретного состава все моды проявляться не могут, наблюдаются наиболее сильные. Тонкая структура (или многомодовость) в области CdTe-подобных колебаний в $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$ разных составов наблюдалась при температурах 25, 85 и 300 К. Но не удалось обнаружить подобную тонкую структуру при низких температурах для HgTe-подобных колебаний.

Последующие исследования свойств решеточных колебаний сплава $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$ в основном ограничивались составами сплава, обогащенными HgTe (узкозонные сплавы $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ и $\text{Hg}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Te}$). В работе [7] исследовались спектры решеточного отражения сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ ($x = 0.1, 0.35$) и $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.2$) в интервале температур 40–300 К. В HgZnTe во всем интервале температур 40–300 К наблюдаются низкочастотные оптические моды колебаний, дополнительные к основной моде HgTe-подобных колебаний. Подобная структура низкочастотных мод также проявляется и в $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$, но при температурах выше 100 К. Исследования низкочастотных оптических мод колебаний в $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ для интервала составов $x = 0.06–0.7$ были продолжены в [8] для температуры 300 К, при которой интенсивность низкочастотных колебаний наибольшая. Из композиционной зависимости сил осцилляторов наблюдаемых низкочастотных мод установлено, что они являются модами Hg–Te колебаний — подобно тому, как ранее это было найдено для мод Cd–Te колебаний в соответствии с квазимолекулярным приближением.

В настоящей работе представлены анализ и интерпретация спектров решеточного отражения сплавов $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$, обогащенных CdTe, при температуре измерения 25 К. Рассматриваются особенности моды колебаний Hg–Te.

2. Общий анализ мод решеточных колебаний в $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$

Кристаллические образцы $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$ ($y = 0.034, 0.056, 0.09, 0.14, 0.24$ и 0.52), еще ранее [4] предоставленные нам R. Triboulet (Laboratoires de Physique des Solides, CNRS, Meudon, France), выращены методом движущегося нагревателя [9]. Состав образцов (y) определялся рентгеновским микронзондовым анализатором и из рентген-дифракционных измерений постоянной решетки. Спектры длинноволнового ИК-отражения в области решеточных колебаний регистрировались на лабораторной модели дифракционного ИК-спектрометра со спектральным разрешением не хуже 1 cm^{-1} . Математическая обработка спектров отражения $R(\omega)$, т.е. восстановление диэлектрической функции кристалла $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$, проводилась с использованием интегрального преобразования Крамерса-Кронига с последующим дисперсионным анализом диэлектрической функции $\epsilon(\omega)$, представленной в классической аддитив-

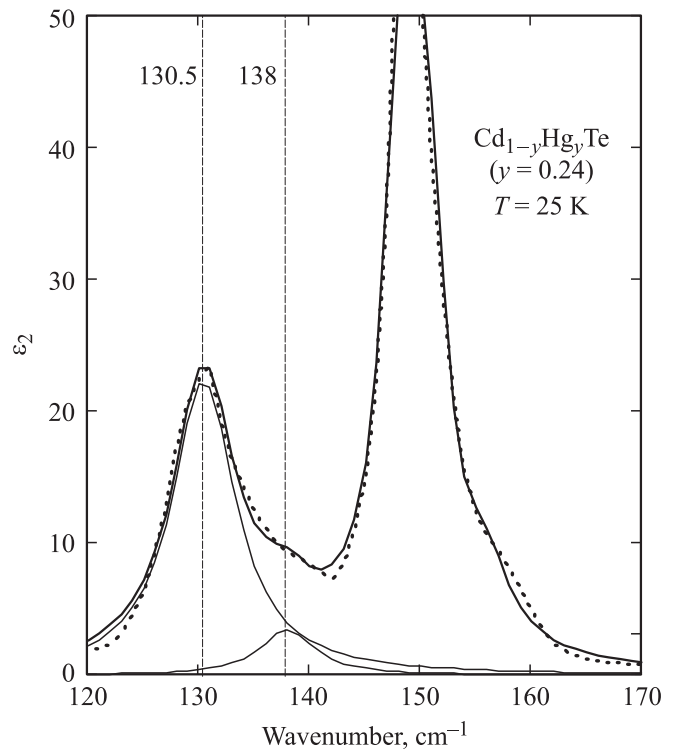


Рис. 1. Мнимая часть диэлектрической функции $\epsilon_2(\omega) = \text{Im } \epsilon(\omega)$ для сплава $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$ ($y = 0.24$) в области оптических колебаний при $T = 25 \text{ K}$. Метка 130.5 cm^{-1} соответствует частоте моды HgTe-подобных колебаний, а пик в окрестности 150 cm^{-1} — модам CdTe-подобных колебаний.

ной форме

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\omega_p^2 \cdot \epsilon_\infty}{(\omega^2 - i \cdot \omega \cdot \Gamma_p)} + \sum_j \frac{S_j \cdot \omega_{ij}^2}{\omega_{ij}^2 - \omega^2 - i \cdot \omega \cdot \gamma_j}. \quad (1)$$

Здесь ω_{ij} , S_j и γ_j — резонансная частота, сила осциллятора и затухание j -го решеточного осциллятора соответственно. Второй член в выражении (1) определяет вклад свободных носителей заряда. Поскольку сплавы $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$, обогащенные CdTe, являются широкозонными полупроводниками, вклад свободных носителей в $\epsilon(\omega)$ в области решеточных колебаний не учитывался. Измерения проводились при температуре 25 К. Дополнительные измерения при более высоких температурах никаких существенных изменений не выявили.

На рис. 1 представлена диэлектрическая функция (ее мнимая часть) $\text{Im } \epsilon(\omega)$ сплава $\text{Cd}_{0.76}\text{Hg}_{0.24}\text{Te}$ при температуре 25 К, восстановленная из спектра решеточного отражения $R(\omega)$ интегральным преобразованием Крамерса–Кронига. Пик со сложным контуром в окрестности 150 cm^{-1} соответствует CdTe-подобным колебаниям, а пик на частоте 130.5 cm^{-1} — моде HgTe-подобных колебаний. Кривая $\text{Im } \epsilon(\omega)$ допускает разложение на три лорентцевых контура в области Cd–Te-колебаний (на рисунке не показаны) и лорентцевы контуры осцилляторов с собственными частотами 130.5 и 138 cm^{-1}

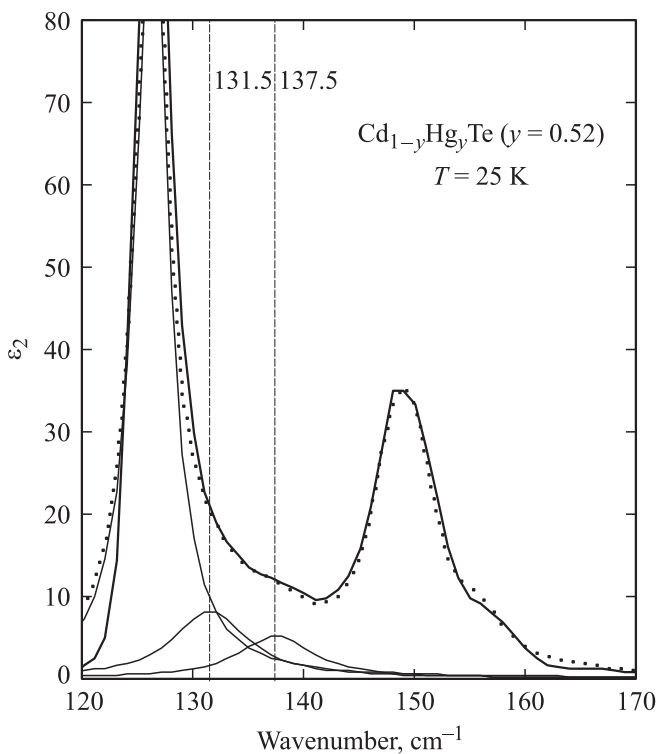


Рис. 2. Мнимая часть диэлектрической функции $\epsilon_2(\omega) = \text{Im } \epsilon(\omega)$ для сплава Cd_{1-y}Hg_yTe ($y = 0.52$) в области оптических колебаний при $T = 25$ К. Пик на частоте 126 cm^{-1} и метка 131.5 cm^{-1} соответствуют частотам мод HgTe-подобных колебаний, а пик в окрестности 150 cm^{-1} — модам CdTe-подобных колебаний.

(показаны тонкими линиями). Видно, что проявляется только одна мода Hg–Te-колебаний с силой осциллятора (площадью под контуром) $= 1.2$, сравнимой с силой мод Cd–Te-колебаний. Мода 138 cm^{-1} ранее наблюдалась в узкозонных (обогащенных HgTe) сплавах. Моды CdTe-подобных колебаний здесь не анализируются, для сравнительных целей их характеристики принимаются из работы [4].

Для остальных составов Cd_{1-y}Hg_yTe их диэлектрические функции $\text{Im } \epsilon(\omega)$ подобны с учетом изменения сил осцилляторов (площади под контуром) компонент диэлектрической функции при изменении состава сплава, за исключением состава $y = 0.52$. На рис. 2 представлена диэлектрическая функция $\text{Im } \epsilon(\omega)$ сплава Cd_{0.48}Hg_{0.52}Te при температуре 25 К. Для этого состава интенсивность HgTe-подобных колебаний в окрестности 126 cm^{-1} значительно превышает интенсивность CdTe-подобных колебаний. Но главное в том, что контур функции $\text{Im } \epsilon(\omega)$ в области Hg–Te-колебаний сильно асимметричен, он характеризуется двумя модами Hg–Te-колебаний с частотами 126 и 131.5 cm^{-1} . Рассмотрение особенностей диэлектрической функции $\text{Im } \epsilon(\omega)$ для сплава состава с $y = 0.52$ продолжено ниже при обсуждении характера изменения проявлении мод Hg–Te при изменении состава сплава.

3. Особенности решеточных Hg–Te колебаний

Значения частот мод колебаний Hg–Te и Cd–Te, полученные из разложения диэлектрической функции $\text{Im } \epsilon(\omega)$ сплава Cd_{1-y}Hg_yTe при $T = 25$ К на лоренцевы контуры в соответствии с (1), показаны на рис. 3, а для разных составов сплава y . Значения для мод Cd–Te колебаний взяты из [4], для мод Hg–Te-колебаний узкозонных сплавов — из [10] для HgTe, [11] для $y = 0.87$ и [4] для $y = 0.8$ и 0.72 . Там же представлены значения частот мод Hg–Te колебаний другого сплава Hg_{1-x}Zn_xTe при $T = 40$ К [7] для составов $x = 0.1$ и 0.35 (или $y = 0.9$ и 0.65). Для всех составов, кроме $y = 0.52$, наблюдается только одна мода Hg–Te-колебаний. Дополнительные низкочастотные моды Hg–Te-колебаний начнут проявляться при $T > 100$ К [7]. Композиционные зависимости частоты моды Hg–Te-колебаний для обеих систем сплавов HgZnTe и HgCdTe совпадают и аппроксимируются прямой линией. Замена в катионном окружении Cd на Zn не влияет на частоту Hg–Te колебаний.

Более интересной оказывается композиционная зависимость силы осциллятора моды Hg–Te-колебаний для сплавов Cd_{1-y}Hg_yTe ($y = 0.034–0.52$). Как видно из рис. 3, б, она аппроксимируется (на рисунке тонкой линией) функцией $S(y) = 10.8y(1-y)^3$, соответствующей расчетной ${}^H S_n(y)$ для Hg–Te-колебаний базисной ячейки Hg(4-n)Cd(n)Te ($n = 3$) в квазимолекулярном приближении сплава. Для случайного распределения атомов Hg и Cd по катионной подрешетке сплава Cd_{1-y}Hg_yTe вероятность обнаружить базисную ячейку Hg(4-n)Cd(n)Te в сплаве состава y равна $P_n(y) = \frac{4!}{n!(4-n)!} y^{4-n}(1-y)^n$. С учетом того, что в ячейке Hg(4-n)Cd(n)Te из четырех катионов доля атомов Hg составляет $(4-n)/4$, вероятность найти атом Hg (или ионную пару Hg–Te) в ячейке такой конфигурации в сплаве состава y будет ${}^H P_n(y) = \frac{4-n}{4} P_n(y)$. Для системы независимых колебаний решетки силу осциллятора ${}^H S_n(y)$ для n -й моды колебания Hg–Te с частотой ${}^H \omega_n$ можно оценить как

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

где ${}^H f_n$ — приведенная к единичной связи Hg–Te сила осциллятора, N — число катионов (ионных пар) на единицу объема. Для силы осциллятора ${}^C S_n(y)$ n -ой моды колебаний Cd–Te выражение аналогичное, но с заменой $(4-n)/4$ на $n/4$.

Аппроксимирующая кривая на рис. 3, б описывается функцией ${}^H S_3(y) = {}^H f_3 N y(1-y)^3 = 10.8y(1-y)^3$. Для сплавов Cd_{1-y}Hg_yTe, обогащенных CdTe, приведенная к единичной связи сила осциллятора Hg–Te-колебаний ${}^H f_3$ равна $10.8/N$. Для сплавов Cd_{1-y}Hg_yTe, обогащенных HgTe, композиционная зависимость сил осциллятора Hg–Te-колебаний на рис. 3, б описывается

прямой $S(y) = 4.7y$ ($y > 0.5$). Для этих составов сплава с $y > 0.5$ приведенная сила осциллятора Hg–Te колебаний равна ${}^H f_0 = 4.7/N$, что совпадает со значением для HgTe.

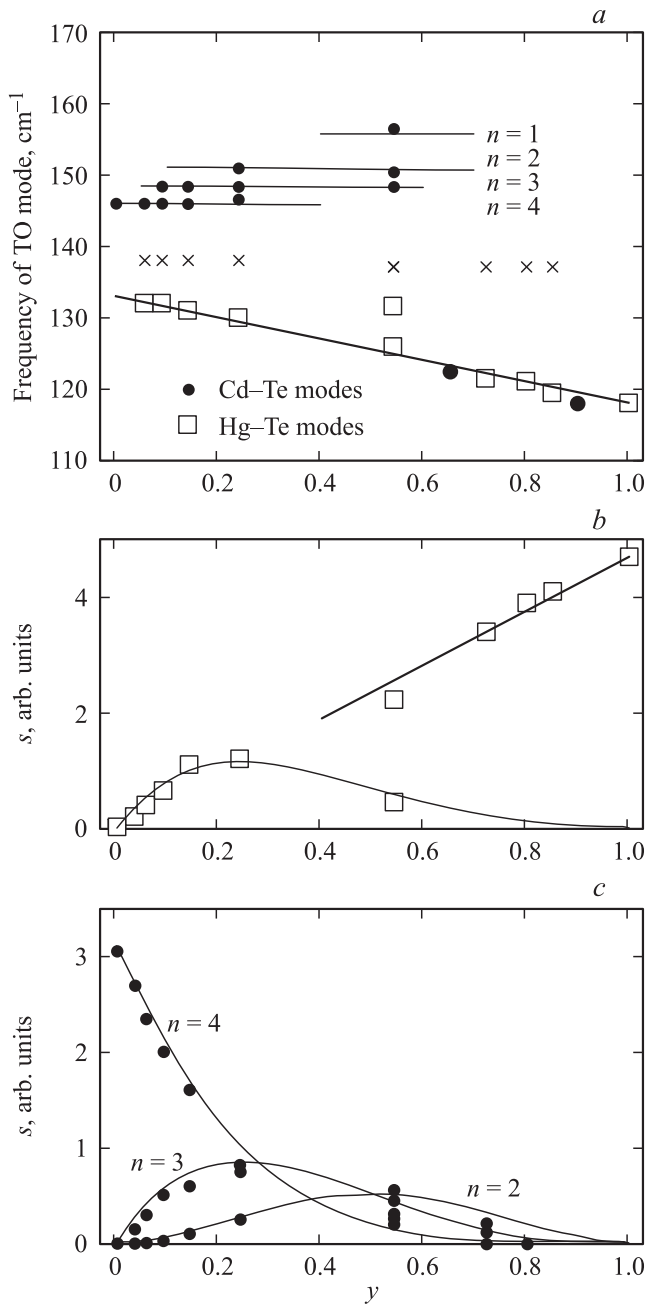


Рис. 3. а) Распределения частот TO мод ${}^H\omega$ Hg–Te-колебаний и TO мод ${}^C\omega_n$ ($n = 4, 3, 2, 1$) Cd–Te-колебаний в зависимости от состава y сплава $Cd_{1-y}Hg_yTe$ при $T = 25$ К. Распределение частот для „моды 137 cm^{-1} “ показано крестиками. б) Распределение сил осциллятора ${}^H S$ мод Hg–Te-колебаний в зависимости от состава y сплава $Cd_{1-y}Hg_yTe$ при $T = 25$ К. Распределение для моды с частотой ${}^H\omega \approx 130\text{ cm}^{-1}$ аппроксимируется расчетной кривой $S(y) = 10.8y(1-y)^3$. в) Распределения сил осциллятора ${}^C S_n(y)$ n -мод Cd–Te-колебаний в зависимости от состава y сплава $Cd_{1-y}Hg_yTe$ при $T = 25$ К и их аппроксимация расчетными кривыми ${}^C S_n(y)$ для $n = 4, 3, 2$ [4].

На рис. 3, в изображены расчетные кривые для сил осциллятора ${}^C S_n(y)$ n -й моды колебаний Cd–Te, аппроксимирующие экспериментальную зависимость сил осцилляторов мод Cd–Te-колебаний от состава y сплава $Cd_{1-y}Hg_yTe$ [4]

$${}^C S_n(y) = {}^C f_n N \frac{n}{4} \frac{4!}{n!(4-n)!} y^{4-n} (1-y)^n :$$

$${}^C S_4(y) = {}^C f_4 N (1-y)^4 = 3.1(1-y)^4,$$

$${}^C S_3(y) = {}^C f_3 N 3y(1-y)^3 = 8.1y(1-y)^3,$$

$${}^C S_2(y) = {}^C f_2 N 3y^2(1-y)^2 = 8.1y^2(1-y)^2.$$

Для всего интервала составов сплава $Cd_{1-y}Hg_yTe$ ($0 < y < 1$) приведенная к единичной связи сила осциллятора Cd–Te-колебаний ${}^C f$ сохраняется одинаковой, равной $2.7/N$, и только в сплавах с малым содержанием HgTe она увеличивается до $3.1/N$. Ранее [12] при интерпретации спектров решеточного отражения сплавов CdZnTe в квазимолекулярном приближении достигалось хорошее согласие с экспериментом, когда приведенные к одиночной связи силы осцилляторов Cd–Te- и Zn–Te-колебаний принимались независимыми от катионной конфигурации и равными значениям ${}^C f = 3.1/N$ и ${}^Z f = 2.8/N$ для бинарных соединений CdTe и ZnTe соответственно. Для сплавов бинарных соединений группы A^3B^5 (например, AlGaAs и AlGaP) значения подобных величин равны $f = 2.0 \div 2.5$.

Для сплавов бинарных соединений групп A^3B^5 и A^2B^6 , кристаллизующихся в структуре ZB в силу их ионно-ковалентного характера связи, приведенная к единичной связи сила осциллятора мод решеточных колебаний не превышает величины $f \approx 3/N$. Для HgTe и CdHgTe, обогащенного HgTe, приведенная сила осциллятора Hg–Te-колебаний равна ${}^H f_0 = 4.7/N$, в 1.5 раза больше чем для ионно-ковалентной связи в CdTe. Причина — в особенностях природы химической связи этих соединений, для которых характерна сильная p – d гибридизация между p (Te) и d (Hg) электронными состояниями на краю валентной зоны [2,3], приводящая к решеточной нестабильности [13] с образованием двумного решеточного потенциала для атомов Hg. Атом Hg может либо занимать место в центре анионного тетраэдра, либо быть во внецентровом положении. При низких (гелиевых) температурах проявляется основная сильная TO -мода Hg–Te-колебаний с частотой ${}^H\Omega \sim 120\text{ cm}^{-1}$, соответствующая колебанию внецентрового атома Hg. Дополнительная мода проявляется при повышенных температурах, когда атом Hg термически возбуждается из глубокой ямы потенциала в более мелкую яму в центре анионного тетраэдра. В чистом HgTe сила осциллятора дополнительной моды ${}^H\omega_0 = 98\text{ cm}^{-1}$ при комнатной температуре составляет 2.3, а для основной моды — 4.7. В сплавах CdHgTe, обогащенных HgTe, „аномальные“ свойства решеточных колебаний HgTe сохраняются в проявлении при повышенных температурах

низкочастотных оптических мод, которые являются производными от моды ${}^H\omega_0 = 98 \text{ см}^{-1}$ [14]. Для колебаний атома Hg в центральной яме (как и для атома Cd) допускаются четыре моды ${}^H\omega_n$ в их базисных ячейках Hg(4-n)Cd(n)Te ($n = 0, 1, 2, 3$). Моде ${}^H\omega_0 = 98 \text{ см}^{-1}$, наблюдаемой в HgTe, соответствует колебание в базисной ячейке Hg(4)Te с $n = 0$. Для мод Hg–Te колебаний ${}^H\omega_n$ разница в собственных частотах $\sim 7 \text{ см}^{-1}$, для мод Cd–Te-колебаний ${}^C\omega_n$ она составляет $\sim 2.5 \text{ см}^{-1}$. Для основной TO -моды Hg–Te-колебаний атома Hg во внецентровой яме решеточного потенциала расщепление не наблюдается. Ранее [15] при интерпретации в HgTe температурных зависимостей сил осцилляторов основной и дополнительной мод колебаний (с частотами ${}^H\Omega$ и ${}^H\omega_0$ соответственно) необходимым условием было ${}^Hf_{\omega_0} = 4{}^Hf_{\Omega}$, т.е. поляризуемость ионной пары Hg–Te с атомом Hg в центре анионного тетраэдра должна значительно превышать поляризуемость для внецентрового атома Hg, что физически ясно.

Наблюдаемая в сплавах Cd_{1-y}Hg_yTe, обогащенных CdTe, при низких температурах композиционная зависимость силы осциллятора $S(y) = 10.8y(1-y)^3$ моды Hg–Te-колебаний с частотой $\approx 130 \text{ см}^{-1}$ характерна для атомов Hg, локализованных в центре анионного тетраэдра. Выше при анализе диэлектрической функции $\text{Im } \epsilon(\omega)$ сплава Cd_{0.48}Hg_{0.52}Te (рис. 2) отмечалось, что контур функции $\text{Im } \epsilon(\omega)$ в области Hg–Te-колебаний сильно асимметричен и характеризуется двумя модами Hg–Te колебаний с частотами 126 и 131.5 см^{-1} . Мода 126 см^{-1} соответствует основной TO -моды Hg–Te-колебаний с внецентровым атомом Hg в двухмном решеточном потенциале. Мода 131.5 см^{-1} — мода Hg–Te-колебаний с атомом Hg, локализованным в центре анионного тетраэдра. Это та же мода Hg–Te колебаний, что и в сплавах, обогащенных CdTe, с частотой ${}^H\omega = 130.5 \text{ см}^{-1}$. Таким образом, область составов с $y \approx 0.5$ является переходной для атомов Hg от двухмного решеточного потенциала в сплавах, обогащенных HgTe, к одноявному потенциалу в центре анионного тетраэдра в сплавах, обогащенных CdTe, причем в последнем случае приведенная к единичной связи сила осциллятора Hg–Te-колебаний равна ${}^Hf = 10.8/N (\gg {}^Hf_0 = 4.7/N)$. Характеристики решеточных мод (собственная частота и сила осциллятора S) для атома Hg в двухмном и одноявном потенциалах в сплаве Cd_{1-y}Hg_yTe ($y = 0.52$) при $T = 25$ и 300 К представлены в таблице. Видно, что при $T = 300$ К помимо основной моды Ω внецентровой ямы проявляются дополнительные низкочастотные моды ω_0, ω_1 и ω_2 центральной ямы двухмного потенциала за счет термического возбуждения из более глубокой внецентровой ямы — это со стороны обогащенного HgTe сплава. Со стороны сплава, обогащенного CdTe, проявляется одна мода одноявного потенциала.

В осцилляторной модели TO колебаний в полупроводнике (например, [16]), из которой получено дисперсионное выражение (1) для

Моды решеточных Hg–Te-колебаний с атомом Hg в двухмном и центральном одноявном потенциалах в сплаве Cd_{1-y}Hg_yTe ($y = 0.52$) при температурах 25 и 300 К

T, К	Мода, см^{-1}				$\omega_{\text{central}}, \text{см}^{-1}$	$\omega_{137}, \text{см}^{-1}$
	Ω	ω_0	ω_1	ω_2		
25	126	—	—	—	131.5	137.5
	$S = 2.7$				$S_c = 0.5$	$S = 0.3$
300	124	96	105	113	129	134
	$S = 1.45$	$S_0 = 0.25$	$S_1 = 0.45$	$S_2 = 0.45$	$S_c = 0.5$	$S = 0.25$

диэлектрической функции $\epsilon(\omega)$, решением уравнения движения гармонического осциллятора в электрическом поле амплитуды E и частоты ω будет $u \exp(i\omega t) = \frac{eT}{\mu} \frac{1}{\omega_i^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} E \exp(i\omega t)$, где u — амплитуда относительного смещения ионов, eT — поперечный эффективный заряд, μ — приведенная масса ионной пары, N — количество ионных пар на единицу объема. В выражении (1) для $\epsilon(\omega)$ сила осциллятора для j -й TO -моды равна (по определению)

$$S_j = \frac{e_{Tj}^2}{\mu_j \omega_{ij}^2} \frac{N_j}{\epsilon_0} = f_j N_j; \quad (3)$$

физический смысл ее следует из (1) как $\epsilon_0(\omega = 0) = \epsilon_\infty + \sum S_j$ для совокупности решеточных осцилляторов. В осцилляторной модели TO -колебаний эффективный заряд j -й ионной пары $e_{Tj} \sim \sqrt{f_j}$, амплитуда их относительного смещения $u_j \sim e_{Tj} \sim \sqrt{f_j}$, поляризуемость пары (дипольный момент, индуцируемый внешним полем) $\sim f_j$.

В сплавах Cd_{1-y}Hg_yTe амплитуда относительного смещения ионов ${}^C u$ в TO -моды Cd–Te-колебаний практически не изменяется с составом y , а ее значение такое же как и в других сплавах A^3B^5 и A^2B^6 . Амплитуда относительного смещения ионов ${}^H u$ в TO -моды Hg–Te-колебаний изменяется (и не монотонно) с составом сплава. В сплавах CdHgTe, обогащенных HgTe, ${}^H u$ превышает ${}^C u$ в $\sqrt{1.5}$ раза. Это не противоречит выводам работы [17] по ионному каналированию в Cd_{1-y}Hg_yTe ($y = 0.3-0.76$) — среднеквадратичные смещения тяжелого атома Hg превышают смещения более легких атомов Cd и Te во всем интервале составов исследуемых сплавов. В сплавах CdHgTe, обогащенных CdTe, характеристики Hg–Te-колебаний резко изменяются. Согласно (3), поперечный эффективный заряд ${}^H e_T$ увеличивается более чем в $\sqrt{2}$ раза в сравнении с HgTe. Поперечный эффективный заряд в решеточных колебаниях определяется не только ионным зарядом, но и „динамическим“ вкладом, связанным с перераспределением заряда между катионом и анионом при их движении в TO -моды колебаний [18]. Только „динамическим“ вкладом, например, определяется большой поперечный заряд (и сила осциллятора в TO -моды колебаний) в тригональном кристаллическом теллуре, для которого основным

структурным элементом является спиральная цепочка атомов Те. В германии с его вырожденной структурой *ZB* поперечный эффективный заряд — нулевой.

Во всех исследованных образцах наблюдается мода 138 см^{-1} . В сплавах, обогащенных HgTe, это мода 137 см^{-1} [19]. Как отмечалось выше, исследования свойств решеточных колебаний сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ в основном ограничивались узкозонными составами $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ и $\text{Hg}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Te}$. Поскольку, считалось, что эта мода проявляется только в составах с $x \approx 0.25$, одним из немногочисленных предположений о природе моды 137 см^{-1} было наличие избыточной (по отношению к статистической) концентрации „3 : 1 — мини-кластеров“, образованных катионным тетраэдром из трех Hg и одного Cd вокруг общего аниона Те. Однако в спектрах решеточного отражения сплавов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.2-1$) при 25 К [20] мода 137 см^{-1} обнаружена почти для всех составов. Она не является специфической только для составов $x = 0.2-0.3$. И в настоящей работе ее можно видеть на рисунках 1 и 2. В [19] на основе модельных расчетов рассматривается предположение, что за особенность на 137 см^{-1} ответственны Cd–Te колебания упорядоченной фазы $\text{Hg}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$ со структурой типа CuAu–1, присутствующей наряду с разупорядоченной фазой в сплавах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ разных составов.

4. Заключение

Для сплавов (твердых растворов) $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$ ($y = 0.034-0.52$), обогащенных CdTe, при $T = 25\text{ К}$ композиционная зависимость силы осциллятора моды Hg–Te колебаний аппроксимируется функцией $S(y) = 10.8y(1-y)^3$, соответствующей расчетной $^H S_n(y)$ для Hg–Te-колебаний в базисной ячейке $\text{Hg}(4-n)\text{Cd}(n)\text{Te}$ ($n = 3$) с атомами Hg в центре анионного тетраэдра. Приведенная к единичной связи сила осциллятора Hg–Te-колебаний $^H f_3$ равна $10.8/N$, тогда как для составов сплава с $y > 0.5$ приведенная сила осциллятора Hg–Te колебаний равна $^H f_0 = 4.7/N$, что совпадает со значением для HgTe. Поляризуемость ионной пары (дипольный момент, индуцируемый внешним полем) в *TO* моде решеточных колебаний $\sim f_j$. Поляризуемость пары Hg–Te в сплавах, обогащенных CdTe, значительно превышает (более чем в 2 раза) поляризуемость пары Hg–Te в сплавах, обогащенных HgTe. Ранее отмечалось, что и в сплавах, обогащенных HgTe, с их двукратным решеточным потенциалом для атомов Hg поляризуемость пары Hg–Te с атомом Hg в центре анионного тетраэдра значительно превышает поляризуемость пары с внецентровым атомом Hg.

Список литературы

- [1] О.Е. Квятковский, Е.Г. Максимов. УФН **154**, 3 (1988).
- [2] S.H. Wei, A. Zunger. Phys. Rev. B **37**, 8958 (1988).
- [3] G.G. Tarasov, Yu.I. Mazur, A.S. Rakitin, M.P. Lisitsa, S.R. Lavoric, J.W. Tomm, A.P. Lityinchuk. Asian J. Spectroscopy **2**, 1 (1998).
- [4] S.P. Kozurev, L.K. Vodopyanov, R. Triboulet. Phys. Rev. B **58**, 1374 (1998).
- [5] H.W. Verleur, A.S. Barker. Phys. Rev. **149**, 715 (1966).
- [6] С.П. Козырев, В.Н. Пырков, Л.К. Водопьянов. ФТТ **34**, 3695 (1992).
- [7] С.П. Козырев, И.В. Кучеренко, М. Cestelli Guidi, R. Triboulet. ФТТ **49**, 2199 (2007).
- [8] С.П. Козырев. ФТТ **50**, 2073 (2008).
- [9] R. Triboulet, A. Lasbley, B. Toulouse, R. Granger. J. Cryst. Growth **79**, 695 (1986).
- [10] M. Grynberg, P.Le Toulec, M. Balkanski. Phys. Rev. B **9**, 517 (1974).
- [11] A. Polian, P.Le Toulec, M. Balkanski. Phys. Rev. B **13**, 3558 (1976).
- [12] С.П. Козырев, В.Н. Пырков, Л.К. Водопьянов. ФТТ **34**, 2367 (1992).
- [13] A. Rakitin, M. Kobayashi. Phys. Rev. B **53**, 3088 (1996).
- [14] С.П. Козырев. ФТТ **53**, 153 (2011).
- [15] С.П. Козырев. ФТТ **35**, 1729 (1993).
- [16] К. Зеегер. Физика полупроводников. Мир, М. (1977). Гл. 11.
- [17] D. Comedi, R. Kalish. Phys.Rev. B **46**, 15844 (1992).
- [18] У.А. Харрисон. Электронная структура и свойства твердых тел. Физика химической связи. Мир, М. (1983). Т. 1.
- [19] С.П. Козырев, В.Н. Пырков, Л.К. Водопьянов. ФТТ **37**, 1293 (1995).
- [20] С.П. Козырев, В.Н. Пырков, Л.К. Водопьянов. ФТТ **34**, 2372 (1992).