

АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ДЛИННОВОЛНОВОГО ИК ОТРАЖЕНИЯ СИСТЕМЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Cd_{1-x}Hg_xTe$ МЕТОДОМ КРАМЕРСА – КРОНИГА

А.Е. Милохин, Л.К. Водопьянов

УДК 621.315.592

Модельно-независимым анализом Крамерса – Кронига исследованы спектры отражения системы твердых растворов $Cd_{1-x}Hg_xTe$ ($0 \leq x \leq 0.8$) в области длин волн 100-200 см⁻¹. Найдены частоты основных и кластерных фононных мод. Получено хорошее согласие с данными работ [4] и [5].

В последнее время большое внимание уделяется изучению простейших полупроводниковых систем, таких как полупроводниковые твердые растворы замещения. Особый интерес представляет система кадмий – ртуть – теллур, в которой твердый раствор реализуется во всей области изменения состава и ширина запрещенной зоны меняется от нуля до 1,6 эВ.

При изучении таких систем представляет интерес выяснить, имеет ли место при формировании твердого раствора статистическое распределение замещающей примеси, или же примесные атомы группируются с образованием кластеров. Наиболее действенным методом для изучения этого эффекта является отражательная ИК спектроскопия.

В работе /1/ для случая Ga(AsP) и в работе /2/ для Cd(HgTe) было показано, что спектры ИК отражения в области остаточных лучей обнаруживают тонкую структуру, которая связывалась с эффектом образования кластеров. В /6/ кластерные моды наблюдались другим независимым методом, а именно в спектрах комбинационного рассеяния.

В /4/ обработка спектров ИК отражения проводилась методом классического дисперсионного анализа, подразумевающего использование нескольких подгоночных параметров. Для подтверждения достоверности полученных результатов представляло интерес провести анализ этих же спектров прямым методом Крамерса – Кронига.

Колебательный спектр системы $Cd_{1-x}Hg_xTe$ для ограниченных областей изменений состава изучался в /3,6/. Был сделан вывод о двухмодовом характере перестройки фононного спектра при изменении состава. Однако спектральные зависимости диэлектрической функции в этих работах не приведены.

В настоящей работе представлены результаты дисперсионного анализа Крамерса – Кронига спектров ИК отражений в области 100-200 см⁻¹ системы твердых растворов Cd_{1-x}Hg_xTe (0 ≤ x ≤ 0,8). Рассчитаны частотные зависимости мнимой и действительной частей диэлектрической проницаемости.

Метод расчета. Известно, что метод Крамерса – Кронига является прямым методом, то есть он не зависит от выбора модели и не требует использования подгоночных параметров. Суть этого метода состоит в следующем: при угле падения света, близком к нормальному, комплексный коэффициент отражения $\rho(\omega)$ связан с измеряемой в эксперименте отражательной способностью $R(\omega)$ соотношением:

$$\rho(\omega) = (n^* - 1)/(n^* + 1) = \sqrt{R(\omega)}e^{i\Theta}, \quad (1)$$

где $n^* = n + ik$ – комплексный коэффициент преломления, Θ – фазовый сдвиг при отражении. Интегральное соотношение Крамерса – Кронига позволяет вычислить фазовый сдвиг $\Theta(\omega)$, если в широком частотном интервале известна отражательная способность $R(\omega)$:

$$\Theta(\omega) = \frac{\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\ln R(\nu) - \ln R(\omega)}{\nu^2 - \omega^2} d\nu. \quad (2)$$

Из (1) можно определить n и k :

$$n(\omega) = \frac{1 - R(\omega)}{1 + R(\omega) - 2\sqrt{R(\omega)}\cos\Theta(\omega)}, \quad (3)$$

$$k(\omega) = - \frac{2\sqrt{R(\omega)}\sin\Theta(\omega)}{1 + R(\omega) - 2\sqrt{R(\omega)}\cos\Theta(\omega)}. \quad (4)$$

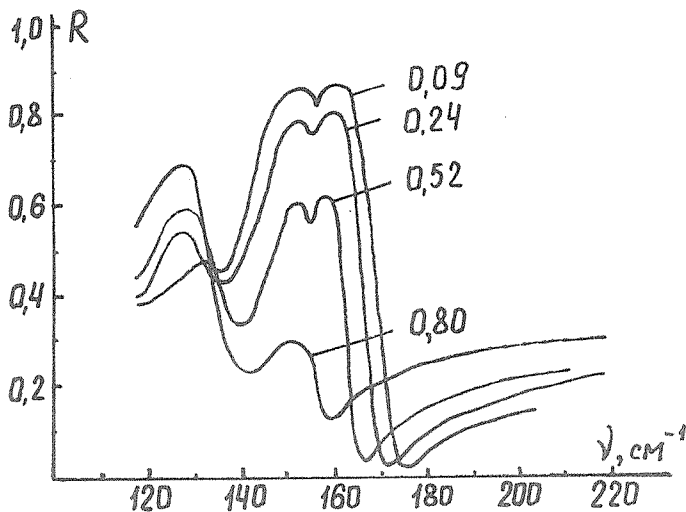
Таким образом, зная экспериментальную зависимость $R(\omega)$ и рассчитав $\Theta(\omega)$, можно определить частотные зависимости действительной $\epsilon_1 = n^2 - k^2$ и мнимой $\epsilon_2 = 2nk$ частей диэлектрической проницаемости. С другой стороны, классическая дисперсионная теория для системы из j осцилляторов дает следующие выражения для $\text{Im}\epsilon(\omega)$ и $\text{Im}\epsilon^{-1}(\omega)$:

$$\text{Im}\epsilon(\omega) = \sum_j \frac{4\pi\rho_{T0j}\omega_{T0j}^2\gamma_{T0j}\omega}{(\omega_{T0j}^2 - \omega^2) + \gamma_{T0j}\omega^2}, \quad (5)$$

$$\text{Im}\epsilon^{-1}(\omega) = - \sum_j \frac{4\pi\rho_{L0j}\omega_{L0j}^2\gamma_{L0j}\omega}{(\omega_{L0j}^2 - \omega^2) + \gamma_{L0j}\omega^2}, \quad (6)$$

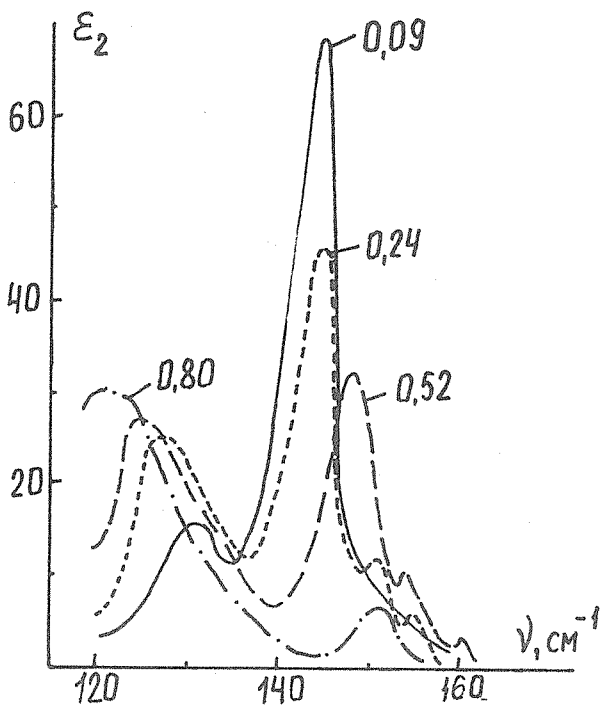
где ω_{Toj} , ω_{Loj} , $4\pi\rho_{Toj}$, $4\pi\rho_{Loj}$, γ_{Toj} , γ_{Loj} — соответственно поперечные и продольные составляющие частоты, силы осциллятора и коэффициента затухания j -го осциллятора.

Анализ соотношений (5) и (6) показывает, что при условии $\gamma_j \ll \omega_j$ $\text{Im}\epsilon(\omega)$ имеет максимум на частоте ω_{Toj} , а функция $-\text{Im}\epsilon^{-1}(\omega)$ — на частоте ω_{Loj} . Эти максимумы имеют форму кривой Лоренца с шириной на полувысоте, равной γ_j . Следовательно, измерив $R(\omega)$ и рассчитав из соотношения Крамерса — Кронига $\Theta(\omega)$, можно полностью охарактеризовать поперечные и продольные фононы изучаемого кристалла.



Р и с. 1. Спектры отражения $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$, цифры у кривых соответствуют содержанию ртути

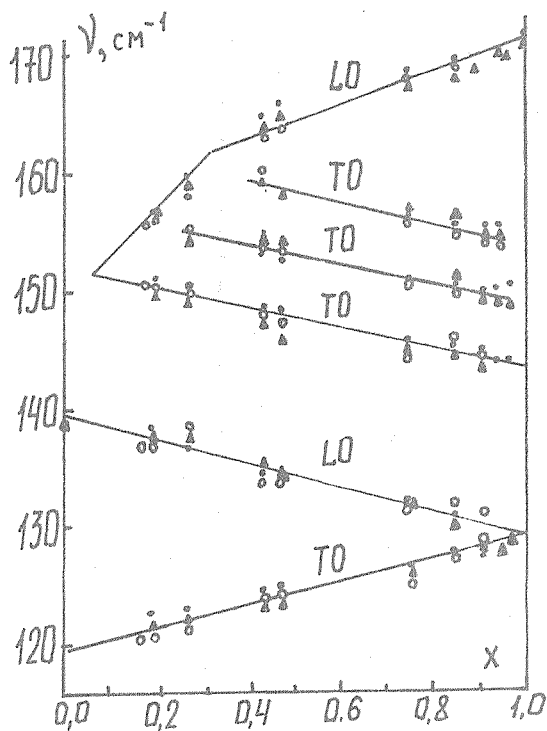
Результаты и их обсуждение. На рис. 1 представлены спектры отражения некоторых составов твердого раствора $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$, снятые при температуре 85°C . Видно, что каждый спектр содержит две полосы остаточных лучей, причем их положение и интенсивность зависят от состава. Это свидетельствует о двухмодовом характере перестройки фононного спектра. На фоне интенсивной высокочастотной полосы для составов $x = 0,09 \div 0,57$ проявляется тонкая структура, природа которой связана, согласно [4], с образованием кластеров одноименных ионов.



Р и с. 2. Дисперсия мнимой части диэлектрической проницаемости; обозначения те же, что на рис. 1

Типичные зависимости $\text{Im}\epsilon(\omega)$, рассчитанные из соответствующих спектров отражения, представлены на рис. 2, причем максимумы кривых соответствуют частотам поперечных фононов. Интенсивные пики на рис. 2 соответствуют CdTe- и HgTe-подобным модам колебаний решетки. На высокочастотном спаде CdTe-подобной моды наблюдаются дополнительные слабые максимумы, соответствующие тонкой структуре в спектрах отражения.

Концентрационная зависимость частот поперечных и продольных длинноволновых оптических фононов, соответствующих как основным сильным осцилляторам, так и слабым колебательным возбуждениям, связанным с кластерами, представлена на рис. 3. На том же рисунке для сравнения приведены данные обработки ИК спектров методом дисперсионного классического осциллятора /4/ и данные по комбинационному рассеянию света в тех же



Р и с. 3. Ветви фононных колебаний системы твердых растворов $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$; ● - /4/, ▲ - /5/, ○ - настоящая работа

кристаллах /5/. Видно, что результаты, полученные методом Крамерса – Кронига, в частности, для кластерных мод, хорошо согласуются с результатами предыдущих работ.

Поступила в редакцию 12 марта 1984 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. H.W. Verleur, A.S. Barker, Phys. Rev., 149, 715 (1966).
2. R. Dornhaus, G. Nimtz, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 78; N.Y., 1976, p. 1.
3. J. Baars, F. Sorger, Sol. St. Commun., 10, 875 (1972).

4. С.П. Козырев, Л.К. Водопьянов, Р. Трибуле, ФТТ, 25, вып. 3, 635 (1983).
5. Ю.А. Алещенко, Л.К. Водопьянов, С.П. Козырев, Тр. Всесоюзной конф. по физике полупроводников, Баку, 1982 г., т. 2, с. 28.
6. A. Mooradian, T.C. Harman, Proc. Conf. Physics of Semimetals and Narrow-gap Semiconductors, Dallas, 1970, p. 297-300.