

УДК 530.145

АНАЛИЗ ОСОБЕННОСТЕЙ ПОВЕДЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ В ТВЕРДОМ РАСТВОРЕ $Zn_xCd_{1-x}Te$

В. С. Виноградов

Обсуждаются особенности перестройки спектра оптических фононов с изменением x в $Zn_xCd_{1-x}Te$, а именно, положительный наклон обеих ветвей поперечных фононов, сублинейное изменение верхней ветви продольных фононов и др. Показано, что эти особенности объясняются близостью частоты локальной моды Zn к границе фононного спектра $CdTe$.

Твердый раствор $Zn_xCd_{1-x}Te$ привлекает внимание исследователей необычным характером перестройки спектра оптических фононов при изменении состава x . Относясь к двухмодовому типу, концентрационные зависимости частот фононов в $Zn_xCd_{1-x}Te$ отличаются рядом особенностей. Так, в $Zn_xCd_{1-x}Te$ частоты обеих поперечных мод растут с ростом x , что не встречается ни в одном из твердых растворов соединений II-VI. Обычно частота одной из поперечных мод растет, а другой уменьшается с ростом x . При $x \rightarrow 0$ кривые трех высокочастотных мод сходятся в малую окрестность продольной моды $CdTe$, причем самая высокочастотная продольная мода имеет ярко выраженное сублинейное изменение. Все эти черты фононного спектра $Zn_xCd_{1-x}Te$ были установлены в [1-3]. В [2, 3] измерения проводились при недостаточно малых значениях x , и локальное колебание не было разрешено в спектре. Поведение сил осцилляторов давало основание считать [3, 4], что локальное колебание находится ниже максимальной частоты в спектре $CdTe$ и фактически является резонансным. В [5] измерения проводились при значениях концентрации до $x = 0,005$, и локальное колебание было разрешено. Было установлено, что оно находится выше частоты продольных оптических колебаний в $CdTe$ на 4 см^{-1} . В связи с этими последними данными интересно выяснить, укладывается ли поведение оптических фононов в $Zn_xCd_{1-x}Te$ в теоретические схемы, и чем

объясняются его особенности. Для решения этих задач будем пользоваться соотношениями, полученными в [6]. Они были выведены в предположении отсутствия изменения силовых констант при замещении атома B атомом A в твердом растворе $A_x B_{1-x} C$. Использовалось также условие $x \ll 1$, однако соотношения дают правильный предел при $x \rightarrow 1$. Это позволяет предполагать, что и вблизи составов $x \sim 0,5$ они будут достаточно точными. Эти соотношения имеют вид

$$\eta + x \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\omega_i^2}{\omega_i^2 - \omega^2} = (1 - x)F(1, \omega^2), \quad (1)$$

где $\eta = m'_1 / (m_1 - m'_1)$; m_1, m'_1 – массы замещаемого и замещающего атомов, i принимает значения \perp и \parallel соответственно для поперечной и продольной оптической частоты кристалла ВС. Функция $F(1, \omega^2)$ связана с нормированной на единицу плотностью квадратов частот $\psi(\omega^2)$ соотношениями

$$F(1, \omega^2) = \omega^2 \int dz \frac{\psi(1, z)}{\omega^2 - z} - 1, \quad \psi(z) = \frac{1}{2} \sum_{k=1,2} \psi(k, z).$$

Будем употреблять следующие обозначения для решений уравнения (1). Решения, переходящие при $x \rightarrow 0$ в обычные фононы, обозначим $\omega_i(x)$ ($\omega_i(0) = \omega_i$). Решения, переходящие при $x \rightarrow 0$ в локальное колебание, обозначим $\Omega_{li}(x)$ ($\Omega_{li}(0) = \Omega_{li}$).

Оценим прежде всего изменение силовой константы в $Zn_x Cd_{1-x} Te$. Для этого воспользуемся вытекающим из (1) соотношением $[\omega(1)/\omega(0)]_i^2 = M/M'$, где M, M' – соответственно приведенные массы $CdTe$ и $ZnTe$. Подставив в его правую часть атомные веса Cd, Zn и Te $m_1 = 112,40, m'_1 = 65,38, m_2 = 127,60$, получим для $M/M' = 1,38$. Значения левой части найдем, воспользовавшись данными [5], приведенными на рис. 1. Получим для $i = \parallel$ величину 1,56, а для $i = \perp$ – 1,55. Таким образом, изменение силовой константы при замещении Cd на Zn значительно. Если перевести изменение силовой константы на дополнительное изменение массы, то вместо $m'_1 = 65,38$ получим $m''_1 = 54,62$ для $i = \parallel$ и $m''_1 = 55,04$ для $i = \perp$.

Чтобы ввести поправки на изменение силовой константы в уравнение (1) для описания оптических мод в области $x < 0,5$, воспользуемся тем обстоятельством, что моды $\Omega_{l\parallel}(x)$ и $\Omega_{l\perp}(x)$ перекрываются в интервале $172 - 180 \text{ см}^{-1}$ (рис. 1). Тогда можно найти такие значения x , что $\Omega_{l\parallel}(x_1) = \Omega_{l\perp}(x_2)$. На рис. 1 при значениях $x_1 = 0,15, x_2 = 0,8$ $\Omega_{l\parallel}(x_1) = \Omega_{l\perp}(x_2) = 181 \text{ см}^{-1}$. Подставив эти величины в деленные на $(1 - x)$ левые части уравнения для $i = \parallel$ и $i = \perp$ и приравняв их друг другу, получим уравнение для η . Разрешив его, получим $\eta = 0,88$ и $m''_1 = 52,73$, что близко к значениям, приведенным выше. Далее с помощью уравнения (1) для $i = \parallel$ и данных рис. 1 найдем функцию

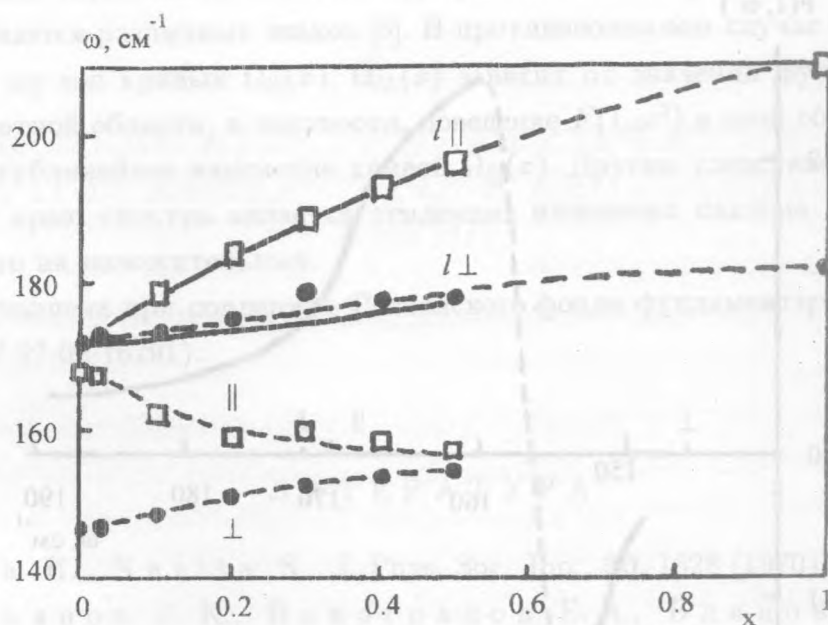


Рис. 1. Зависимости частот оптических фононов от состава x в $Zn_xCd_{1-x}Te$. Квадраты и сплошные кружки – экспериментальные точки из работы [5]. Пунктирные кривые – интерполяция между экспериментальными точками. Сплошные кривые – результат расчета. Значки $l||, l\perp$ означают продольные и поперечные моды, возникающие в результате расщепления локального колебания; $||, \perp$ – моды, сходящиеся при $x \rightarrow 0$ к продольной и поперечной модам $CdTe$.

$F(1, \omega^2)$ в области $\omega \geq \omega_{||} = 168 \text{ см}^{-1}$. По двум значениям частот $\Omega_{l||}(x)$ в точках $x = 0, 1$ и $0,2$ ее можно достаточно точно описать выражением $F(1, \omega^2) = F(1, \omega_{||}^2) - \sigma(y)y$, где $y = [(\omega/\omega_{||})^2 - 1]^{1/2}$, $\sigma(y) = 4,7006 - 4,1134y$, $F(1, \omega_{||}^2) = 1,7174$. Подставив найденное выражение для $F(1, \omega^2)$ в уравнение (1) для $i = \perp$, можно построить кривую $\Omega_{l\perp}(x)$ (это удобно делать, выразив в (1) x в функции ω). Так рассчитанная кривая $\Omega_{l\perp}(x)$ изображена на рис. 1 сплошной линией. Ее положительный наклон воспроизводится достаточно хорошо. Некоторое отступление от экспериментальных точек может быть объяснено как недостаточно точным учетом изменения силовой константы, так и приближенностью теории. С нижними ветвями $\omega_{||}(x), \omega_{\perp}(x)$ мы не можем провести операции, аналогичной вышеприведенной, так как эти ветви не имеют областей перекрытия по частоте. Вместо этого мы ими воспользуемся для построения функции $F(1, \omega^2)$ в областях $\omega < \omega_{||}$. Результаты для всех доступных областей приведены на рис. 2. Особый интерес предстает

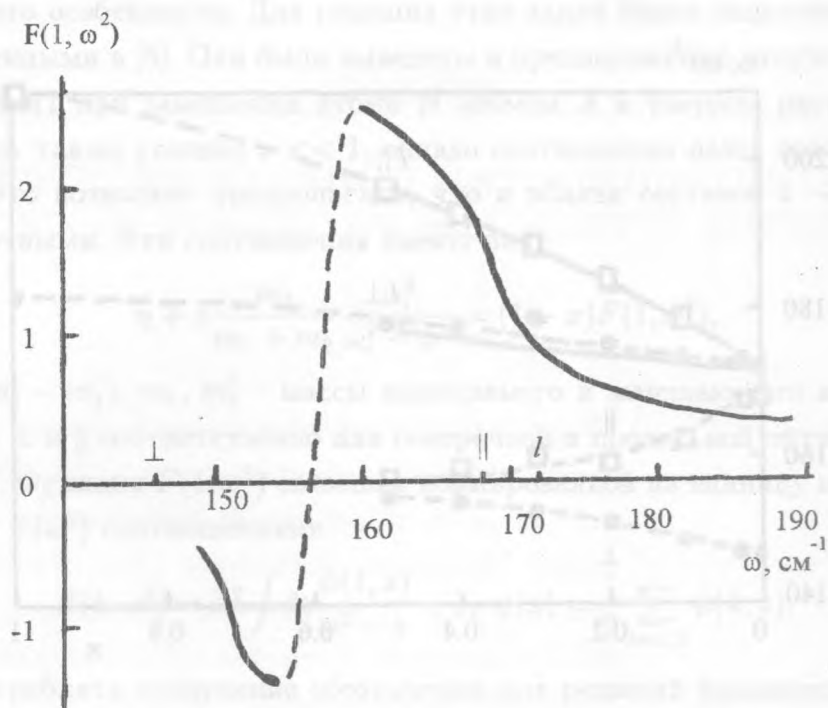


Рис. 2. Зависимость функции $F(1, \omega^2)$ от ω . Сплошные кривые – расчет с помощью соотношения (1), пунктирная кривая – интерполяция. Значки \perp , \parallel , l отмечают соответственно положения на оси частот поперечной и продольной оптических мод, а также локального колебания Zn в CdTe.

влияет поведение функции $F(1, \omega^2)$ вблизи частоты ω_{\parallel} . Как видно, она не имеет разрыва производной в точке $\omega = \omega_{\parallel}$, как это характерно для особой точки на краю спектра [6], хотя намеки на такое поведение сохраняются. Возможно, такой ход функции $F(1, \omega^2)$ объясняется наложением многих ветвей в фоновом спектре CdTe, а также размытием структуры из-за ангармоничности и дефектов. Ход $F(1, \omega^2)$ вблизи ω_{\parallel} свидетельствует о том, что предположения работ [3, 4] о существовании резонансного состояния были небезосновательными. При малой деформации спектра CdTe локальная мода Zn может погружаться в непрерывный спектр и становится резонансной.

В результате проведенного анализа можно сделать вывод, что особенности перестройки спектра оптических фононов в $Zn_x Cd_{1-x} Te$ объясняются близостью частоты локальных колебаний Ω_l к краю спектра CdTe, т.е. частоте ω_{\parallel} . Для описания расщепления удаленного от края спектра локального колебания достаточно знания функции

$F(1, \omega^2)$ в малой окрестности частоты Ω_l , при этом обычно наклоны кривых $\Omega_{||}(x)$, $\Omega_{\perp}(x)$ оказываются различных знаков [6]. В противоположном случае близкого расположения Ω_l к $\omega_{||}$ ход кривых $\Omega_{||}(x)$, $\Omega_{\perp}(x)$ зависит от значений функции $F(1, \omega^2)$ в широкой частотной области, в частности, поведение $F(1, \omega^2)$ в этой области определяет и сильное сублинейное изменение кривой $\Omega_{||}(x)$. Другим следствием приближения частоты Ω_l к краю спектра является тенденция изменения наклона кривой $\Omega_{\perp}(x)$ с отрицательного на положительный.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект N 97-02-16791).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Nagata H., Narita S. J. Phys. Soc. Jpn., **30**, 1628 (1970).
- [2] Водопьянов Л. К., Виноградов Е. А., Блинов А. М., Рукавишников В. А. ФТТ, **14**, 268 (1972).
- [3] Виноградов Е. А., Водопьянов Л. К. ФТТ, **17**, 3161 (1975).
- [4] Водопьянов Л. К., Виноградов Е. А., Виноградов В. С. ФТТ, **16**, 849 (1974).
- [5] Perkowski S., Kim L. S., Feng Z. C., Vesla P. Phys. Rev., **B42**, 1455 (1990).
- [6] Виноградов В. С. ФТТ, **11**, 2062 (1969).

Поступила в редакцию 9 июля 1998 г.