

ГРАФИЧЕСКИЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТОТ ФОНОНОВ
ИЗ СПЕКТРОВ ОТРАЖЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ В ДАЛЕКОЙ
ИНФРАКРАСНОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

В. А. Виноградов, Л. К. Володаров

Частоты оптических фононов центра зоны Бриллюэна обычно определяют из спектров отражения монокристаллов с помощью дисперсионного анализа Крамерса-Кронига /1/. Для определения частот фононов этим методом необходимо проводить измерения коэффициентов отражения в широком спектральном диапазоне с высокой точностью. Из анализа экспериментальной кривой отражения $R = R(\omega)$ с помощью ЗЭМ получают оптические константы кристалла $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$. Частоты поперечных фононов соответствуют максимумам функции $\text{Im}[\epsilon(\omega)] = \epsilon_2(\omega)$, а частоты продольных оптических фононов — минимумам функции $\text{Im}[-\epsilon^{-1}(\omega)]/2$. Кроме того, для "простых" монокристаллов (имеющих только одну полосу остаточных лучей) с помощью ЗЭМ, используя четыре подгоночных параметра для классического дисперсионного осциллятора вычисляют кривую отражения $R = R(\omega)/3$. Для ряда кристаллов удается получить хорошее совпадение экспериментальной и рассчитанной кривых /3/. В качестве подгоночных параметров используют статическую (ϵ_∞) и высокочастотную (ϵ_∞) диэлектрические проницаемости, частоту поперечного оптического фонона (ω_{TO}) и константу затухания χ . Если же кристалл обнаруживает две полосы в спектрах отражения или больше, то число подгоночных параметров значительно возрастает и этот метод становится практически неприменим.

В настоящей работе предлагается метод приближенного определения частот фононов из анализа экспериментальной кривой отражения. Как известно, для нормального падения света на кристалл коэффициент отражения определяется выражением

$$R = \left| \frac{\sqrt{\epsilon} - 1}{\sqrt{\epsilon} + 1} \right| = \frac{|\epsilon| + 1 - \sqrt{2(\epsilon_1 + |\epsilon|)}}{\epsilon + 1 + \sqrt{2(\epsilon_1 + |\epsilon|)}}, \quad (1)$$

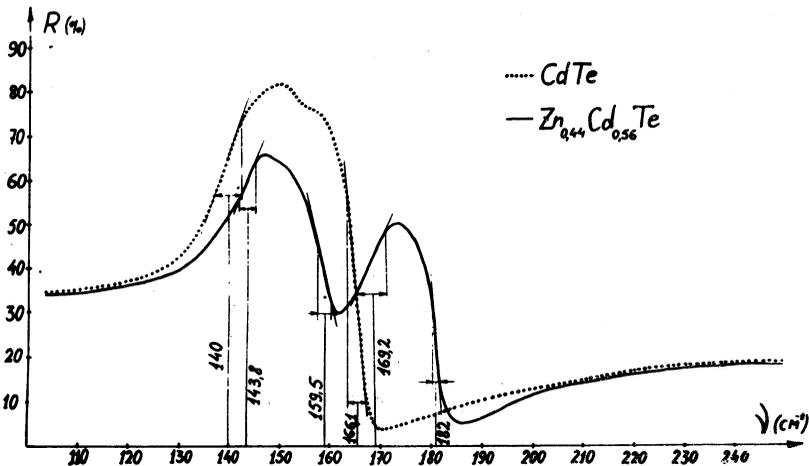
где

$$\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2, \quad |\epsilon|^2 = \epsilon_1^2 + \epsilon_2^2, \quad (2)$$

$$\epsilon_1 = \epsilon_\infty \frac{\gamma^2 \omega^2 + (\omega_{TO}^2 - \omega^2)(\omega_{LO}^2 - \omega)}{\gamma^2 \omega^2 + (\omega_{TO}^2 - \omega^2)}, \quad (3)$$

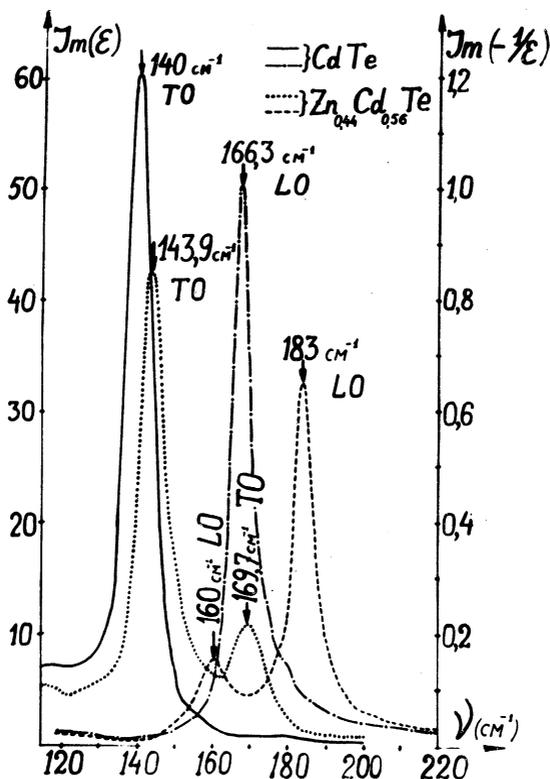
$$\epsilon_2 = \epsilon_\infty \frac{\gamma \omega (\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)^2}{\gamma^2 \omega^2 + (\omega_{TO}^2 - \omega^2)^2}. \quad (4)$$

Вблизи частот поперечного оптического фонона $\omega \approx \omega_{TO}$ выражения (3) и (4) можно упростить, так как $\gamma^2 \omega^2 \gg (\omega_{TO}^2 - \omega^2)^2$. Вблизи частот продольного оптического фонона при $\omega \approx \omega_{LO}$ можно предположить, что $\gamma^2 \omega^2 \ll (\omega_{TO}^2 - \omega^2)^2$. Используя эти упрощения, подставив (3) и (4) в (2), а затем в (1) и продифференцировав дважды функцию $R(\omega)$ по ω , можно обнаружить, что вблизи $\omega \approx \omega_{TO}$ $d^2R/d\omega^2$ меняет знак. Аналогично $d^2R/d\omega^2$ меняет знак при пере-



Р и с. I. Спектры отражения монокристаллов CdTe и Cd_{0,56}Zn_{0,44}Te.

ходе через точку $\omega = \omega_{LO}$. Таким образом, математический анализ соотношений (1) - (4) показал, что частоты оптических фононов центра зоны Бриллюэна соответствуют точкам перегиба кривой от-



Р и с. 2. Диэлектрические проницаемости $\text{Im}[\varepsilon(\omega)]$ и $\text{Im}[-\varepsilon^{-1}(\omega)]$ монокристаллов CdTe и $\text{Cd}_{0,56}\text{Zn}_{0,44}\text{Te}$.

ражения. Анализ многочисленных кривых отражения различных монокристаллов показал, что частоты поперечных оптических фононов действительно соответствуют максимумам функции $dR/d\omega$, а частоты продольных оптических фононов соответствуют минимумам функции $dR/d\omega$, т.е. частоты оптических фононов соответствуют точкам перегиба

экспериментальной кривой $R(\omega)$. На рис. 1 представлены спектры отражения монокристаллов CdTe и $\text{Cd}_{0,56}\text{Zn}_{0,44}\text{Te}$. Частоты оптических фононов для этих кристаллов определялись на основе дисперсионного соотношения Крамера-Кронига (с использованием счетной машины БЭСМ-4) из максимумов функций $\text{Im}[\epsilon(\omega)]$ и $\text{Im}[-\epsilon^{-1}(\omega)]$ (рис. 2). Если предположить, что точки перегиба лежат посредине линейных участков на фронтах нарастания и спада кривых отражения, то они просто определяются графическим методом. В таблице 1 представлены частоты оптических фононов, полученные из экспериментальных кривых отражения по положению точек перегиба и из анализа Крамера-Кронига.

Таблица 1

	Крамерс-Крониг	Точки перегиба
CdTe	$\omega_1 = 140 \pm 1 \text{ см}^{-1}$	$\omega_1 = 140 \text{ см}^{-1}$
	$\omega_2 = 166 \pm 1 \text{ см}^{-1}$	$\omega_2 = 166 \text{ см}^{-1}$
$\text{Zn}_{0,44}\text{Cd}_{0,56}\text{Te}$	$\omega_1 = 144 \pm 1 \text{ см}^{-1}$	$\omega_1 = 143,8 \text{ см}^{-1}$
	$\omega_2 = 160 \pm 1 \text{ см}^{-1}$	$\omega_2 = 159,5 \text{ см}^{-1}$
	$\omega_3 = 169,7 \pm 1 \text{ см}^{-1}$	$\omega_3 = 169,2 \text{ см}^{-1}$
	$\omega_4 = 183 \pm 1 \text{ см}^{-1}$	$\omega_4 = 182 \text{ см}^{-1}$

Как видно из таблицы, ошибка при определении частот фононов по положению точек перегиба кривых отражения не превышает $\pm 1 \text{ см}^{-1}$. Кривая отражения монокристалла, имеющего только одну полосу остаточных лучей, имеет по крайней мере три точки перегиба (без учета вклада в кривую отражения ангармонизма фононов). Чему соответствует третья (высокочастотная) точка перегиба, пока выяснить не удалось.

Поступила в редакцию
23 августа 1972 г.

Л и т е р а т у р а

1. F. Stern. Solid St. Phys., 15, 299 (1968).
2. R. Beserman, M. Balkanski. J. Phys. Chem. Solids, 31, 355 (1970).
3. М. Хэсс. Сборник "Оптические свойства полупроводников", стр. 13, "Мир", 1970 г.