

Hg_{1-x}Cd_xTe 光学声子双模行为的物理本质

傅柔励

(中国科学院上海技术物理研究所)

对于 Hg_{1-x}Cd_xTe 中的声子, 迄今已知的特点是其光学声子有双模行为。本文提出一种物理图象, 分析讨论这种双模行为的物理本质, 由此得到一种计算 Hg_{1-x}Cd_xTe 声子谱的可能方法。

本文分析的出发点是把 Hg_{1-x}Cd_xTe 三元合金看成具有 0~25% 替位杂质的二元晶体。替位杂质最多为 25% ($x=0.5$ 时), 最少为零 ($x=0$ 或 1 时)。为分析问题方便起见, 此时看成还有一个替位杂质。

先计算一维时理想的, 及只有一个替位杂质 Hg(Cd) 的 CdTe(HgTe) 双原子链声子谱。计算后者时用了质量缺陷模型, 结果为: 一个 Cd 原子替代 HgTe 原子链中一个 Hg 原子时, 引起两个杂质模(从 HgTe 链光学支带顶移出一个模式成为局域模, 从 HgTe 链声学支带顶移出一个模式成间隙模); 一个 Hg 原子替代 CdTe 链的一个 Cd 原子时, 引起一个杂质模——从光学支带底部移出为间隙模。三维晶体振动谱具有一维时的主要特点, 替位杂质会引起类似杂质模。

只计一个替位杂质时, 二元主晶格的模式是理想扩展模; 而杂质模对应的原子振动振幅随离此杂质的距离迅速衰减。对连续变化的物理量, 在一级近似下, 其中间值可看作二端点值的线性内插, 这样就得到了 $k=0$ 时 Hg_{1-x}Cd_xTe 振动模式的基本特点。

此结果的光学声子部分与 $k \rightarrow 0$ 时 Hg_{1-x}Cd_xTe 光学声子双模行为的实验事实相当一致; 此结果也指出: 对 Hg_{1-x}Cd_xTe 在 $k \neq 0$ 存在频率不趋于零的声学声子, 它们起因于类 CdTe 声学声子, 用此能解释 Shen 等在 Hg_{1-x}Cd_xTe 中观察到的远红外低频吸收带。

最后本文得到: (1) Hg_{1-x}Cd_xTe 中振动模是介于扩展模和局域模之间的准扩展模和准局域模。(2) Hg_{1-x}Cd_xTe 既然可视为有 0~25% 替位杂质的二元晶体, 因此粗略地说可以用 k 矢量的概念。虽此时这个概念是种近似, 不够精确, 但这种近似还是可用的, 有其合理性。(3) 计算 Hg_{1-x}Cd_xTe 声子谱(包括一切 k 值)的可取途径: 先算出理想 CdTe、HgTe 晶体的声子谱, 再算出单个 Hg(Cd) 替位杂质在 CdTe(HgTe) 晶体中引起的杂质模, 然后用直线内插法得 Hg_{1-x}Cd_xTe 声子谱的初步结果; 有了完整的 Hg_{1-x}Cd_xTe 声子谱实验曲线后, 进一步考虑替位杂质引起力常数变化等因素, 引进弓形参数以和实验曲线完全拟合。