

БЕСЩЕЛЕВОЕ СОСТОЯНИЕ И ФОНОННЫЙ СПЕКТР СИСТЕМЫ УЗКОЗОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ $Pb_{1-x}Sn_xSe$

Л.К.Водопьянов, И.В.Кучеренко, А.П.Шотов
Р.Шерм¹⁾

Методом неупругого рассеяния медленных нейтронов впервые получен фононный спектр системы твердых растворов $Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x = 0,07, x = 0,2$). Для кристалла $x = 0,2$ претерпевающего при $T = 100K$ инверсию зон, обнаружено размягчение $TO(q \rightarrow 0)$ фонона, связанное с реализацией в системе в бесщелевого состояния.

Влияние электронной системы на фононный спектр кристаллов удобно изучать в узкозонных полупроводниковых соединениях типа $A^{IV}B^{VI}$. В некоторых из этих соединений при определенных условиях осуществляется бесщелевое состояние с последующей инверсией зон.

В [1, 2] было показано, что в системе $Pb_{1-x}Sn_xFe$ в точке инверсии зон эффективность эффекта Мессбауэра падает примерно на 30%. В [3] при измерении магнетоплазменного отражения той же системы было отмечено аномальное увеличение статической диэлектрической проницаемости при захлопывании зон.

Целью настоящей работы было изучение влияния бесщелевого состояния в системе твердых растворов $Pb_{1-x}Sn_xSe$ на ее фононный спектр. В качестве экспериментального метода был выбран метод неупругого рассеяния медленных нейтронов, так как он позволяет получить наиболее полную информацию о дисперсионных зависимостях колебательных мод во всей зоне Бриллюэна.

Переход в бесщелевое состояние может быть достигнут несколькими путями: изменением состава твердого раствора x , изменением температуры или приложением гидростатического давления. В настоящей работе мы использовали два первых метода.

Однородные по составу монокристаллы $Pb_{1-x}Sn_xSe$ выращивались нами методом направленной кристаллизации из паровой фазы. Для измерений отбирались образцы, имеющие объем не менее 1 см^3 .

Опыты по неупругому рассеянию медленных нейтронов проводились на трехосном спектрометре IN3 при сильнопоточном реакторе Объединенного института Лауэ-Ланжевена в г.Гренобле. Сканирования выполнялись при условии постоянства импульса, передаваемого нейтронами решетке, и фиксированной энергии рассеянных нейтронов.

Проведенные измерения показали, что экспериментальные максимумы энергетического распределения неупругого рассеяния нейтронов на фононах хорошо разрешаются на фоне более интенсивных максимумов упругого рассеяния.

¹⁾Объединенный институт Лауэ-Ланжевена, г.Гренобль.

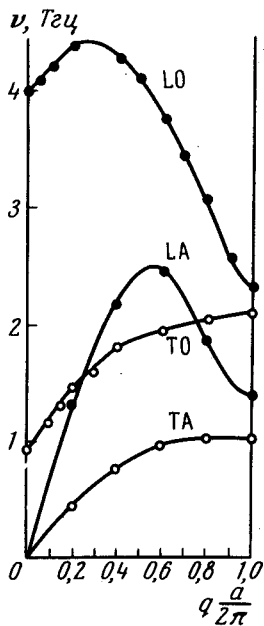


Рис. 1. Дисперсионные зависимости нормальных мод, распространяющихся в направлении (100) в кристалле $\text{Pb}_{0,8}\text{Sn}_{0,2}\text{Se}$ при $T = 80\text{K}$

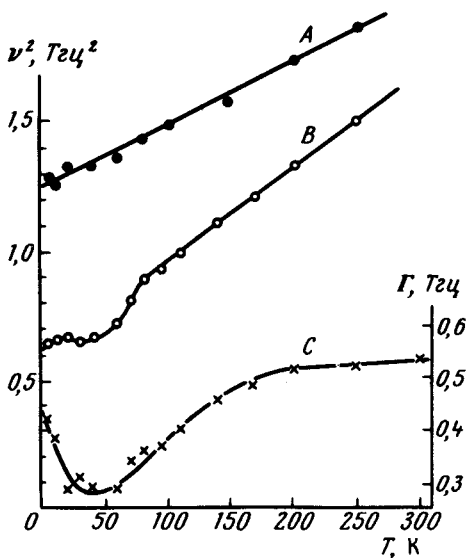


Рис. 2. Температурные зависимости квадрата частоты $TO (q \rightarrow 0)$ фононов для кристаллов $x = 0,07 (A)$ и $x = 0,2 (B)$, а также коэффициента затухания фононов $\Gamma (C)$

Анализ полученных данных позволил проследить дисперсионные зависимости $\nu(q)$ для всех колебательных мод, предсказанных теорией симметрии для кубической структуры типа NaCl (рис. 1). Наибольшую информацию о динамике кристаллической решетки может дать анализ поведения TO моды. На частоту же LO — моды заметное влияние оказывает экранирование свободными носителями, неизбежно присутствующими в узкозонных полупроводниках. Как видно из рис. 1 в области $q \rightarrow 0$ наблюдается заметное размягчение TO моды. Для того, чтобы определить природу этого размягчения, снималась температурная зависимость квадрата частоты TO (при $q \rightarrow 0$) фонона в диапазоне $T = 4,5 \div 300\text{K}$, для кристаллов $x = 0,07$ и $x = 0,2$. Эти два кристалла качественно отличаются друг от друга тем, что в первом из них инвер-

сии зон не происходит (ни при каких температурах), а во втором она имеет место при $T \approx 100\text{K}$. Анализ температурных зависимостей (рис. 2) обнаружил два эффекта: линейное уменьшение ν_{TO}^2 с понижением температуры, наблюдаемое для обоих кристаллов, и дополнительное размягчение частоты TO фонона в области $\sim 50\text{K}$, проявляющееся только в случае образца $x = 0,2$. Первый эффект доказывает существование температурно зависимой мягкой моды, свидетельствующей о стремлении системы к структурному фазовому переходу в сегнетоэлектрическое состояние [4]. Экстраполяция полученных зависимостей до пересечения с горизонтальной осью (рис. 2) позволила оценить температуры фазового перехода, которые составили для кристалла $x = 0,07$ $T_K = -500\text{K}$, для $x = 0,2$ $T_K = -175\text{K}$. Видно, что с увеличением в твердом растворе $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ содержания олова температура фазового перехода существенно возрастает.

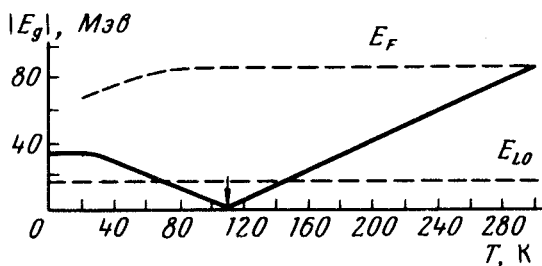


Рис. 3. Рассчитанные зависимости модуля ширины запрещенной зоны E_g и энергии ферми E_F для кристалла $x = 0,2$ от температуры. E_{LO} — средняя энергия LO фонона

Второй эффект мы связываем с влиянием перехода кристалла в бесщелевое состояние на характер его колебательных возбуждений. Наблюдаемое дополнительное размягчение свидетельствует о сильном электрон-фононном взаимодействии в точке инверсии зон.

Однако, рассмотрение энергетического состояния кристалла $x = 0,2$ показало, что в данном случае исключено прямое резонансное взаимодействие фононной и электронной систем даже в точке захлопывания зон. Дело в том, что этот кристалл имел концентрацию дырок $p = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, при которой имеет место вырождение. В результате энергия ферми (E_F) лежит гораздо выше характеристических энергий dO и особенно TO фононов. Соответствующие зависимости E_g , E_F и E_{LO} от температуры представлены на рис. 3. Следует отметить, что центр экспериментально наблюдаемого минимума $\nu_{TO}^2(T)$ лежит при более низкой температуре ($\sim 60\text{K}$), чем точка инверсии зон ($\sim 110\text{K}$) Это, возможно, связано с уменьшением энергии ферми в результате роста плотности состояний за точкой инверсии зон [5].

Следует отметить, что в области дополнительного размягчения также наблюдается ярко выраженный минимум в температурной зависимости линии неупругого рассеяния (Γ) (рис. 2, С)

Литература

- [1] И.Н.Николаев, А.П.Шотов, А.Ф.Волков, В.П.Марьин. Письма в ЖЭТФ, 21, 144, 1975.
- [2] И.Н.Николаев, В.П.Потапов, А.П.Шотов, Е.А.Юрчакевич. Письма в ЖЭТФ, 25, 185, 1977.
- [3] H.Kawamura, K.Murase, S.Nishikawa, S.Nishi, S.Katayama. Sol. State Comm., 17, 341, 1975.
- [4] W.Cochran. Phys. Rev. Lett., 3, 412, 1959.
- [5] I.O.Dimmock. Phys. Semimet. Narrowgap Semicond (ed. Carter a Bate), Pergamon Press 4, 319, 1971.
-