

## Влияние кластерообразования на локализацию оптических фононов в двумерных псевдобинарных твердых растворах замещения

© М.И. Василевский\*, О.В. Вихрова, С.Н. Ершов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
603950 Нижний Новгород, Россия

\* Departamento de Física, Universidade do Minho,  
Campus de Gualtar, Braga 4710-057, Portugal

E-mail: Benushis@phys.unn.runnet.ru

(Поступила в Редакцию 26 сентября 2002 г.)

Исследовано влияние состава и ближнего порядка типа кластерообразования на локализацию оптических фононов в двумерных псевдобинарных твердых растворах замещения. Проведены прямые численные расчеты так называемой „обратной доли участия“ (IPR), исследован „скейлинг“ этой величины для основных мод, определяющих спектральную плотность состояний в центре зоны Бриллюэна усредненного кристалла. Показано, что кластерообразование способствует делокализации фононов, хотя природа этой тенденции различна для резонансных и локальных (в низкоконтрационном пределе) мод. Рассмотрено влияние степени ионности твердого раствора на локализацию и показано, что кулоновское взаимодействие нейтрализует эффект кластерообразования, одновременно снижая наблюдаемую величину IPR. Предложен новый физический критерий, связанный с видом функции распределения локальных узельных поглощений внешнего электромагнитного поля, позволяющий судить о степени локализации фононных мод в ионных сплавах.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и техники Португалии (FCT) (грант РОСТI/FIS/10128/1998) и Министерства образования России (НИР 1.4.99).

Локализация элементарных возбуждений в твердых телах, вызванная атомным беспорядком, является одной из важных проблем теории неупорядоченных систем. Исследования локализации электронных и колебательных состояний в неупорядоченных сплавах начались около сорока лет назад [1], но к настоящему времени эта проблема решена лишь частично, в основном для простых моделей систем пониженной размерности. Так, для двумерных (и более низкоразмерных) систем принято считать, что сколь угодно слабый беспорядок приводит к локализации всех электронных состояний. Такой вывод позволило сделать применение однопараметрической теории „скейлинга“ [2]. Недавно, однако, появились работы, посвященные экспериментальному исследованию перехода металл-изолятор в двумерной системе на основе структуры металл-окисел-полупроводник [3], где справедливость данного утверждения для любых двумерных систем ставится под сомнение. Основной фактор, не учитывавшийся прежде при изучении локализации, — электрон-электронное взаимодействие. Была предложена модернизированная теория „скейлинга“, учитывающая влияние электрон-электронного взаимодействия наряду с беспорядком и допускающая существование делокализованных состояний в неупорядоченных двумерных системах [4]. Возможно, не только взаимодействие между элементарными возбуждениями, но и другие факторы могут существенно влиять на их локализацию.

Известно, что в реальных неупорядоченных сплавах распределение примесей хотя и случайно, но зачастую имеет пространственную корреляцию, простирающуюся

на много межатомных расстояний. Так, в сплавах, имеющих тенденцию к распаду, происходит кластерообразование атомов примеси [5]. Не исключено, что наличие корреляций случайного потенциала может приводить к существенному изменению характера локализации элементарных возбуждений в системах пониженной размерности. Например, известно, что в одномерных системах определенные типы случайно коррелированного распределения примесей приводят к появлению слаболокализованных состояний с волновой функцией, убывающей с расстоянием по степенному закону [6,7]. Такой вывод был сделан не только для электронов, но и для других типов элементарных возбуждений, например магнонов в случайно коррелированных линейных цепочках [8].

Локализация фононов в случайно коррелированных сплавах изучалась теоретически [9] и путем численного моделирования [10]. В работе [9] методами теории поля показано, что все акустические фононные моды локализованы в двумерных системах с изотопическим беспорядком и при наличии корреляций, которые могут лишь повлиять на радиус локализации. В работе [10] локализация акустических фононов рассматривалась численно с точки зрения проблемы перколяции. Это позволило понять механизм возникновения локализованных и распространяющихся фононных состояний в модельных (двумерных и трехмерных) бинарных сплавах. Кроме того, были обнаружены различия в степени локализации фононных мод, которые в пределе малых концентраций примеси являются локальными или резонансными, однако малый размер исследованных систем не позволил

сделать количественные выводы. Необходимо также отметить, что в [9] рассматривалась континуальная (а не решеточная) модель с простейшим (упругим) взаимодействием, а локализация оптических фононов (ОФ), насколько нам известно, вообще не исследовалась. Между тем степень локализации ОФ важна для мезоскопических систем с точки зрения электрон-фононного взаимодействия и поглощения электромагнитного излучения дальнего ИК-диапазона, даже если общий вывод о локализации любых невзаимодействующих элементарных возбуждений в бесконечных двумерных системах с беспорядком остается в силе и для ОФ.

В настоящей работе представлены результаты численного исследования влияния корреляции (ближнего порядка) в расположении примесных атомов на локализацию оптических фононных мод в двумерных псевдобинарных твердых растворах (ТР) замещения. Расчеты проводились в рамках модели, учитывающей корреляции изинговского типа в расположении атомов изовалентной примеси в одной из подрешеток ТР. Модель ориентирована на описание свойств полупроводниковых ТР типа  $Cd_xHg_{1-x}Te$  и  $Al_xGa_{1-x}As$  различного состава.

## 1. Модели ближнего порядка и динамики решетки

Моделирование термодинамически равновесного ближнего порядка (БП) атомов замещения в одной из подрешеток двумерного псевдобинарного ТР осуществлялось в соответствии с алгоритмом, описанным в [11]. В основе его лежит модель Изинга статического взаимодействия атомов-соседей по подрешетке. Случайные сплавы с различной степенью БП строились методом Монте-Карло. Степень БП контролировалась заданной температурой формирования ТР.

В [11] подробно обсуждались результаты изучения влияния двух возможных в модели Изинга типов БП — кластерообразования и упорядочения с образованием сверхструктуры — на полную и спектральную плотность фононных состояний ТР без учета кулоновского взаимодействия между ионами. Выбор (более реалистичной) модели динамики решетки в настоящей работе был сделан на основе анализа литературных данных по расчету колебательных свойств Si, Ge и соединений  $A_3B_5$  [12,13].

Уравнения движения имеют следующий вид:

$$(\hat{F} - \omega^2 \hat{M})\mathbf{V} = 0, \quad (1)$$

где  $\hat{F}$  — матрица силовых постоянных,  $\hat{M}$  — диагональная матрица атомных масс,  $\mathbf{V}$  — вектор смещений. Для каждого атома учитывались взаимодействия с ближайшими соседями и соседями, следующими за ближайшими. В гармоническом приближении потенциальная энергия представлялась соотношениями:

а) для ближайших соседей

$$U_0 = \frac{k}{2} \sum_{s=\{nm\}} (\mathbf{V}_0 - \mathbf{V}_s)^2, \quad (2)$$

б) для соседей, следующих за ближайшими,

$$U_0 = \frac{k}{2a^2} \sum_{s=\{mnn\}} (\mathbf{a}_{0s}(\mathbf{V}_0 - \mathbf{V}_s))^2, \quad (3)$$

где  $k$  — константа упругости,  $\mathbf{a}_{0s}$  — вектор трансляции,  $\mathbf{V}_0, \mathbf{V}_s$  — векторы смещения соответствующих атомов. Как обычно, силовые постоянные  $\hat{F}$  представляют собой вторые производные полной потенциальной энергии.

Для моделирования кулоновского взаимодействия использовался потенциал следующего вида (для ионов одного знака):

$$U = -A^2 \ln \frac{r}{r_0}, \quad (4)$$

где  $A^2 = \frac{\mu S_0}{2\pi} (\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)$ ,  $\omega_{LO}$  и  $\omega_{TO}$  — частоты продольных и поперечных длинноволновых ОФ для бинарного соединения без примеси,  $\mu$  — приведенная масса положительного и отрицательного ионов,  $S_0$  — площадь элементарной ячейки,  $r_0$  — некоторая постоянная. „Кулоновский“ потенциал такого вида позволяет смоделировать  $LO-TO$ -расщепление для двумерного псевдобинарного ТР [14].

## 2. Расчет параметров локализации фононных мод

Динамика решетки модельных ТР, построенных по правилам, изложенным в предыдущем разделе, исследовалась путем прямых численных расчетов. Для этого был разработан пакет программ, позволяющий формировать на основе выбранных потенциалов динамическую матрицу квадратной суперъячейки псевдобинарного ТР с учетом периодических граничных условий и находить все ее собственные значения и собственные векторы посредством QR-алгоритма [15]. Полученные данные использовались для расчета величин, характеризующих степень локализации фононных мод.

В расчетах без учета кулоновского взаимодействия (гомополярный сплав) смещения атомов рассматривались как скалярные величины, динамическая матрица имела размерность  $N \times N$  ( $N$  — число атомов). Для определения степени локализации фононных мод рассчитывалась спектральная зависимость так называемой „обратной доли участия“ (inverse participation ration — IPR)

$$IPR(\omega) = \frac{1}{\sum_j \delta(\omega^2 - \omega_j^2)} \sum_j \frac{\sum_{i=1}^N (u_i^j)^4}{\left(\sum_{i=1}^N (u_i^j)^2\right)^2} \delta(\omega^2 - \omega_j^2), \quad (5)$$

где  $u_i^j$  — умноженное на квадратный корень из массы смещение  $i$ -го атома для  $j$ -го собственного значения. Формула (5) получена заменой модуля электронной волновой функции на величину  $u_i^j$  в стандартном определении IPR и усреднением по собственным модам,

имеющим близкие частоты (последнее удобно для анализа поведения этой величины в определенных участках спектра). Как известно [16], величина IPR обратно пропорциональна числу атомов, участвующих в формировании собственного состояния с частотой  $\omega_j$ . Делокализованным модам отвечают малые величины  $IPR \sim N^{-1}$ , в то время как локализованным соответствуют значения IPR порядка единицы. Необходимо оговориться, что, насколько нам известно, самоусредняющийся (в представлениях [17]) характер величины IPR не доказан. Критерий локализации, связанный с поведением этой величины, является скорее интуитивным; тем не менее он довольно широко используется.

При учете кулоновского взаимодействия смещения должны рассматриваться как векторы, что приводит к увеличению размера динамической матрицы. Параметр IPR в данном случае также вычислялся по формуле (5), но при этом использовались абсолютные величины смещений. Локализация фононных состояний в гетерополярном сплаве изучалась не только по спектральным характеристикам IPR, но и по распределению локальной интенсивности вынужденных колебаний, возбуждаемых внешним переменным электрическим полем. Оказалось, что функция распределения величин локального узельного поглощения внешнего поля частоты  $\omega$  на разных узлах решетки, твердого раствора весьма чувствительна к степени локализации фононных мод этой частоты. Понять это несложно, представив себе две крайние ситуации. Для сильно локализованной моды колеблется лишь несколько атомов-соседей. В этой малой области („горячей зоне“) поглощается энергия внешнего поля резонансной частоты, тогда как для узлов решетки вне этой зоны поглощение практически равно нулю. Наоборот, для полностью делокализованной моды поглощение внешнего поля должно быть приблизительно одинаковым для всех узлов кристаллита. Таким образом, вид функции распределения локальных величин поглощения должен существенно отличаться для локализованных и делокализованных мод.

Для того чтобы количественно определить предлагаемый критерий, рассмотрим подробнее вынужденные колебания частично ионного псевдобинарного TP  $A_xB_{1-x}C$ . Для простоты будем считать, что заряды ивалентных атомов А и В одинаковы. Можно показать, что решеточная восприимчивость (с точностью до множителя  $e_r^2$ ) определяется выражением (см. Приложение)

$$\chi = e_r^2 \frac{1}{N} \sum_{l,k} J_{lk}. \quad (6)$$

Темп поглощения энергии всем кристаллитом равен

$$Q = -\frac{E_0^2 e_r^2}{2} \omega \operatorname{Im} \sum_{lk} J_{lk}.$$

Введем функцию распределения мнимой части величин  $J_{lk}$

$$f(t) = \frac{1}{N} \sum_{l,k} \delta\left(t - \frac{\operatorname{Im} J_{lk}}{\operatorname{Im} \langle J \rangle}\right), \quad (7)$$

$$Q \sim \sum_{lk} \operatorname{Im} J_{lk} = N \operatorname{Im} \langle J \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) t dt.$$

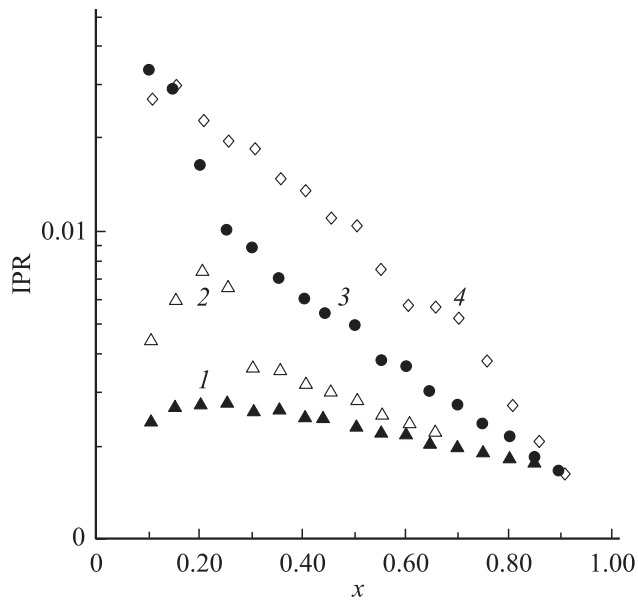
Как показано в следующем разделе, вид этой функции позволяет судить о характере оптических фононных мод соответствующей поляризации с частотами в окрестности частоты внешнего поля.

### 3. Результаты и обсуждение

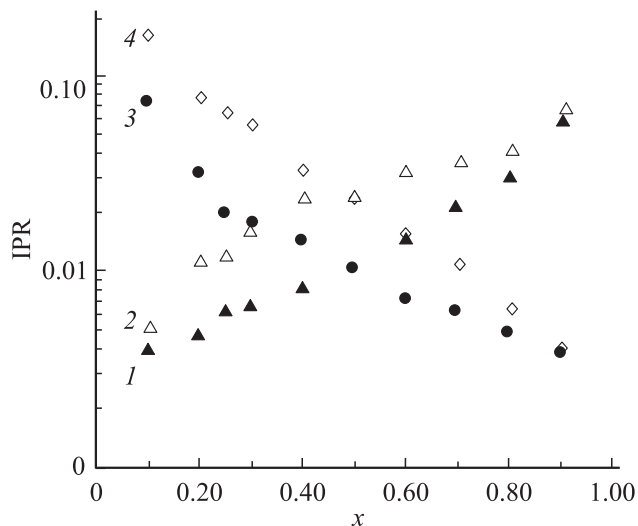
3.1. Гомополярный твердый раствор. Расчеты спектральных зависимостей IPR были выполнены для псевдобинарных TP с беспорядком атомных масс. Существуют по крайней мере два реальных полупроводниковых TP, удовлетворительно описывающихся изотопическим приближением [18]:  $Cd_xHg_{1-x}Te$  и  $Al_xGa_{1-x}As$ . Спектры длинноволновых ОФ этих TP являются двухмодовыми, т.е. спектральная плотность фононных состояний в центре зоны Бриллюэна таких растворов содержит две оптические моды, например HgTe-подобную и CdTe-подобную в случае  $Cd_xHg_{1-x}Te$ . Основной интерес представляет влияние кластерообразования на степень локализации именно этих мод. В наших расчетах мы брали атомные массы равными таковым для элементов, составляющих указанные TP, а силовые константы и „заряд“ А подбирали таким образом, чтобы получить правильные значения фононных частот в центре зоны Бриллюэна. В дальнейшем наши модельные сплавы будем называть, например,  $Cd_xHg_{1-x}Te$ , хотя, конечно, не следует переносить обсуждаемые расчетные результаты на реальные TP буквально.

На рис. 1 представлены зависимости IPR оптических мод от состава  $x$  для случайного и кластеризованного TP. Сначала обсудим, как ведет себя IPR CdTe-подобной моды с увеличением доли атомов Cd. Как для случайного, так и для кластеризованного TP наблюдается значительное уменьшение IPR с ростом  $x$ , причем в обоих случаях зависимость имеет приблизительно линейный характер. Наблюдаемое уменьшение IPR свидетельствует о тенденции CdTe-подобной моды к делокализации с ростом  $x$ . При  $x = 0.9$  величина IPR составляет  $\sim N^{-1}$  и для случайного, и для кластеризованного TP. Это означает, что радиус локализации становится равным размеру кристаллита.

Поведение IPR HgTe-подобной моды при изменении  $x$  существенно отличается. Практически во всем диапазоне изменения состава (0.1–0.9) значения IPR для HgTe-подобной моды гораздо меньше, чем для CdTe-подобной моды. Это неудивительно, поскольку HgTe-подобные колебания являются резонансными в нашей модели, т.е. их частоты попадают в зону оптических



**Рис. 1.** Зависимости IPR основных мод ОФ от состава для кластеризованного и случайного твердых растворов  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  (размер кристаллита  $30 \times 30$ ). 1, 2 — HgTe-подобная мода кластеризованного и случайного твердых растворов соответственно, 3, 4 — CdTe-подобная мода кластеризованного и случайного твердых растворов соответственно.



**Рис. 2.** То же, что на рис. 1, для твердых растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . 1, 2 — GaAs-подобная мода кластеризованного и случайного твердых растворов соответственно, 3, 4 — AlAs-подобная мода кластеризованного и случайного твердых растворов соответственно.

колебаний CdTe. Для случайного ТР в области малых концентраций Cd ( $x < 0.3$ ) IPR HgTe-подобной моды вначале увеличивается до некоторого максимального значения (при  $x \sim 0.25$ ), а затем резко уменьшается; начиная с  $x \sim 0.3$  это уменьшение происходит приблизительно по линейному закону. Обратим внимание на

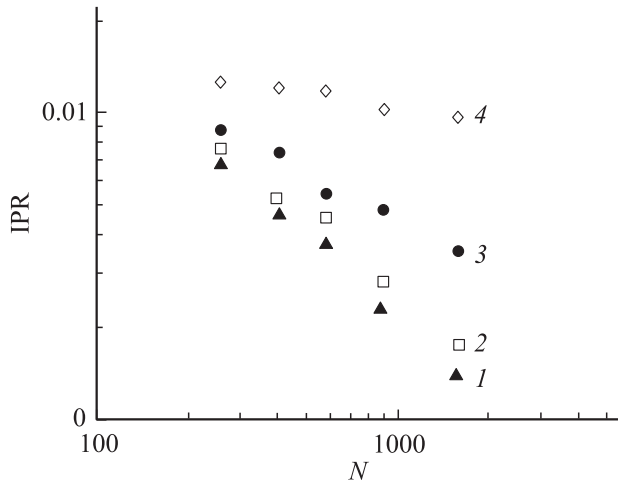
то, что максимум IPR на зависимостях  $\text{IPR}(x)$  наблюдается для всех размеров кристаллита. Его появление, на наш взгляд, обусловлено тем, что в области малых концентраций в случайном ТР атомы Cd размещаются главным образом по одному, что приводит к более сильному рассеянию HgTe-подобных колебаний. С увеличением концентрации Cd начинает формироваться зона CdTe-подобных колебаний. Возникают колебания с частотами, близкими к частоте длинноволновой HgTe-подобной моды, не связанные, однако, с колебаниями атомов Hg. Плотность состояний в обсуждаемой области частот растет, и величина IPR в расчете на одно состояние уменьшается. Таким образом, объяснение кажущегося странным поведения IPR HgTe-подобной моды основывается на том факте, что данная мода является квазилокальной (т.е. резонансной) в пределе малых концентраций Hg.

Аналогичные расчеты зависимости IPR от состава для оптических мод  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  подтверждают это объяснение. Случай  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  отличается от предыдущего тем, что GaAs-подобная мода лежит вне AlAs-зоны, т.е. является локальной, а не резонансной. Как видно из рис. 2, степень локализации GaAs-подобной моды возрастает с увеличением доли атомов алюминия в катионной подрешетке как для случайного, так и для кластеризованного ТР. Поведение AlAs-подобной моды практически совпадает с поведением CdTe-подобной моды на рис. 1. Изменение же с составом величины IPR HgTe-подобной моды аналогично таковому для GaAs-подобной моды лишь в области малых  $x$ . Таким образом, поведение локальных и резонансных мод при изменении состава различно, как отмечалось в [10].

Обратимся к влиянию БП на степень локализации ОФ. Как видно из рис. 1, кластерообразование способствует уменьшению IPR HgTe- и CdTe-подобных мод, т.е. уменьшает степень их локализации практически во всем диапазоне изменения состава. Аналогичный эффект виден и из рис. 2 для  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Для проверки этого вывода мы исследовали „скейлинг“ степени локализации фоновых мод. Зависимости IPR от количества атомов в кристаллите для  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  состава  $x = 0.5$  представлены на рис. 3 в двойном логарифмическом масштабе. Степень локализации определяет показатель степени в зависимости

$$\text{IPR} \sim N^{-\gamma}.$$

Данные рис. 3 свидетельствуют о том, что кластерообразование заметно уменьшает степень локализации основных фоновых мод ( $\gamma$  приближается к единице). HgTe-подобная мода в присутствии кластерообразования становится почти делокализованной ( $\gamma \approx 1$ ). CdTe-подобная мода демонстрирует „фрактальное поведение“ со „скейлингом“, где  $0 < \gamma < 1$  зависит от степени кластерообразования. Для сильного кластерообразования ( $T = 0.95T_C$ ,  $T_C$  — критическая температура в двумерной модели)  $\gamma \approx 0.8$ . Мы вернемся к обсуждению этих значений показателя  $\gamma$  позже.



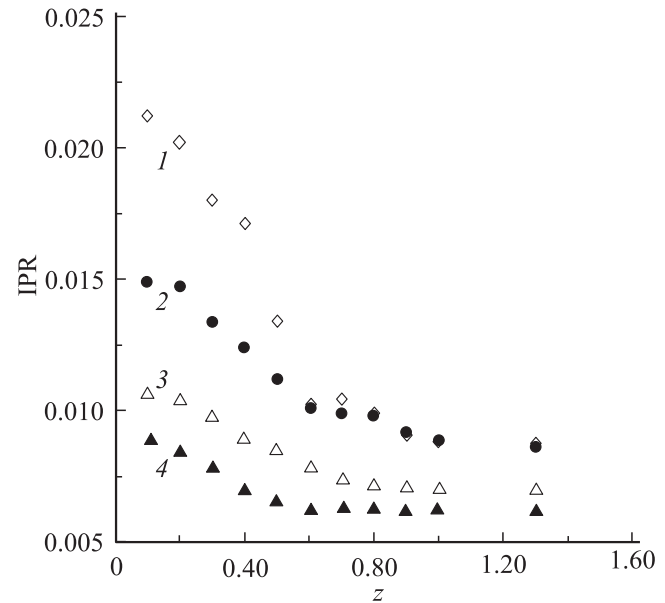
**Рис. 3.** Зависимости IPR основных фононных мод от полного числа атомов в кристаллите для кластеризованного и случайного  $\text{Cd}_{0.5}\text{Hg}_{0.5}\text{Te}$  (размер кристаллита варьировался в пределах от  $16 \times 16$  до  $40 \times 40$ ). 1, 2 — HgTe-подобная мода кластеризованного ( $\gamma \approx 0.897$ ) и случайного ( $\gamma \approx 0.87$ ) твердых растворов соответственно, 3, 4 — CdTe-подобная мода кластеризованного ( $\gamma \approx 0.8$ ) и случайного ( $\gamma \approx 0.71$ ) твердых растворов соответственно.

**3.2. Гетерополярный твердый раствор.** Для того чтобы ответить на вопрос о том, сохраняется ли влияние кластерообразования на локализацию фононных мод в присутствии кулоновского взаимодействия, мы исследовали зависимости IPR от „заряда“  $A$ . Данные зависимости для HgTe- и CdTe-подобных LO-мод кластеризованного и случайного  $\text{Cd}_{0.5}\text{Hg}_{0.5}\text{Te}$  представлены на рис. 4 ( $z = A/A_0$ , где  $A_0$  соответствует „правильным“, т.е. взятым из эксперимента, значениям  $\omega_{LO}^2$  и  $\omega_{TO}^2$ ). Видно, что увеличение заряда понижает степень локализации фононных мод. Этот факт объясняется неограниченным радиусом взаимодействия ионов, эффективно повышающим размерность системы. Напомним, что в нашей (изотопической) модели это взаимодействие не содержит беспорядка.

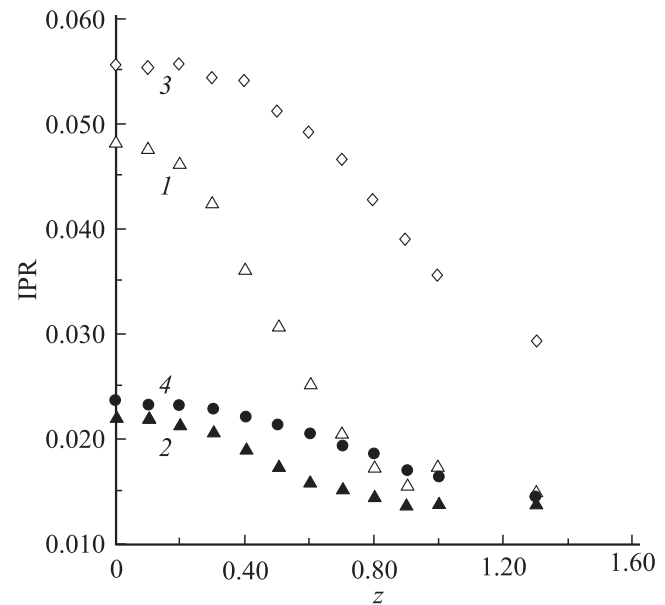
Вместе с тем характер влияния кластерообразования на IPR несколько отличается для HgTe-подобной (низкочастотной) и CdTe-подобной (высокочастотной) мод. Степень локализации высокочастотной моды в области малых зарядов ( $z < 0.5$ ) значительно уменьшается под влиянием кластерообразования, так же как и в гомополярном ТР. При  $z = 0.5-1.3$  кулоновское взаимодействие нейтрализует эффект кластерообразования. IPR здесь принимает практически одинаковые значения для случайного и кластеризованного ТР. Для низкочастотной моды кластерообразование приводит к небольшому уменьшению степени локализации во всем диапазоне изменения заряда. Эта мода практически делокализована уже в гомополярном ТР состава  $x = 0.5$ .

Подобным образом зависит от величины заряда и степени кластерообразования IPR AlAs- и GaAs-подобных

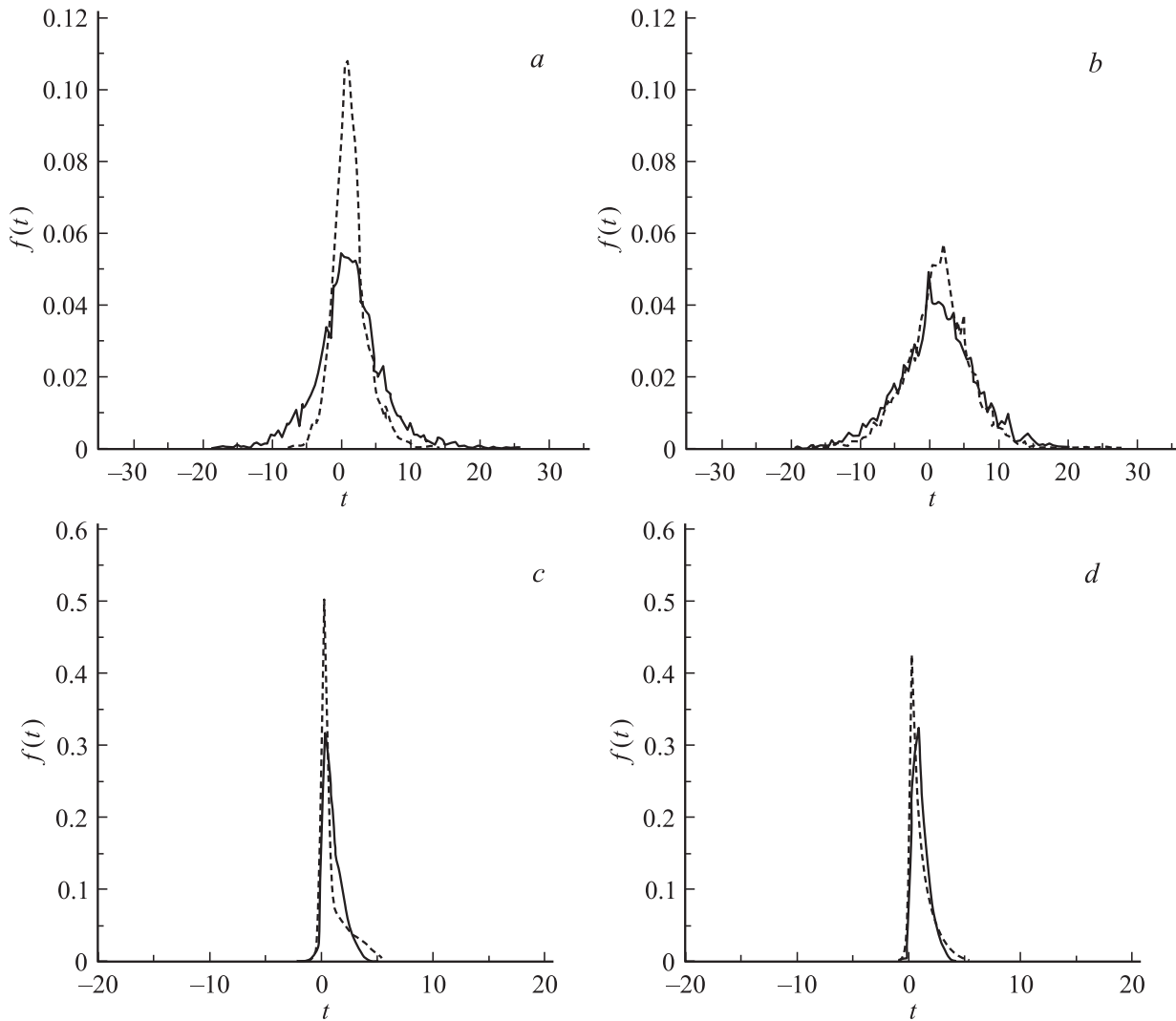
LO-мод  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$  (рис. 5). Вместе с тем наблюдаются некоторые отличия. Так, влияние кластерообразования на локализацию высокочастотной моды при  $z > 0.5$  компенсируется кулоновским взаимодействием не в полной мере. Кроме того, исходная степень локализации



**Рис. 4.** Зависимости IPR HgTe- и CdTe-подобных LO-мод случайного и кластеризованного  $\text{Cd}_{0.5}\text{Hg}_{0.5}\text{Te}$  от заряда ионов. 1, 2 — CdTe-подобная LO-мода случайного и кластеризованного твердых растворов соответственно, 3, 4 — HgTe-подобная LO-мода случайного и кластеризованного твердых растворов соответственно.



**Рис. 5.** То же, что и на рис. 4, для  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ . 1, 2 — AlAs-подобная LO-мода случайного и кластеризованного твердых растворов соответственно, 3, 4 — GaAs-подобная LO-мода случайного и кластеризованного твердых растворов соответственно.

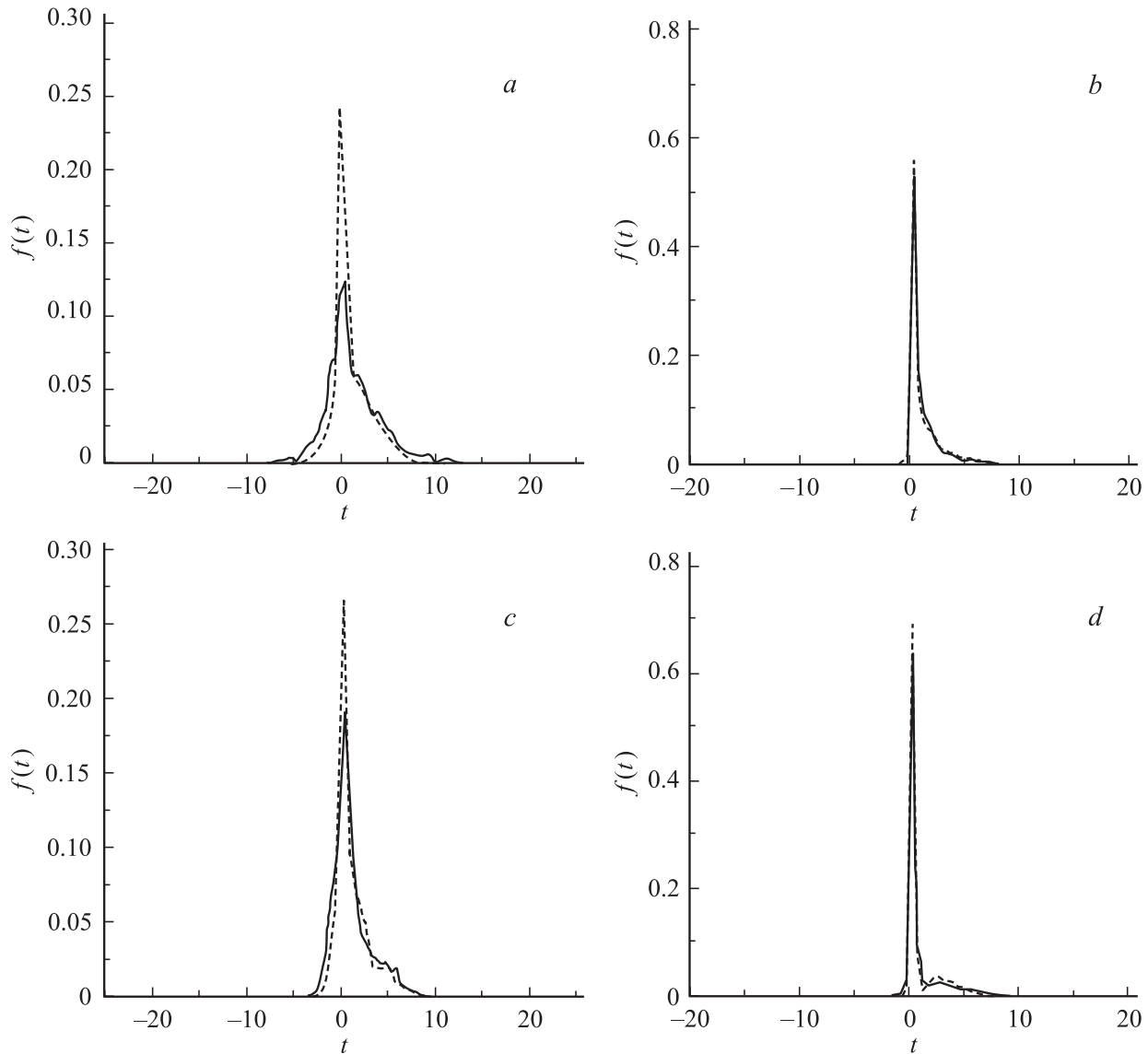


**Рис. 6.** Функции распределения локальной интенсивности узельного поглощения для основных фоновых мод  $\text{Cd}_{0.5}\text{Hg}_{0.5}\text{Te}$ . *a, b* —  $\text{HgTe}$ -подобная  $LO$ -мода, *c, d* —  $\text{CdTe}$ -подобная  $LO$ -мода. Сплошные линии соответствуют случайному твердому раствору, штриховые — кластеризованному. Заряд ионов:  $z \approx 0$  (*a, c*), 1 (*b, d*).

низкочастотной моды и диапазон ее уменьшения вследствие кластерообразования здесь намного больше. Эта мода остается локализованной и при наличии сильного кулоновского взаимодействия, что, по-видимому, связано с эффективно меньшей величиной элементов динамической матрицы, отвечающих взаимодействию ионов Ga, по сравнению с ионами Al (масса иона стоит в знаменателе). Отметим также, что во всем диапазоне изменения заряда сохраняются те же тенденции поведения IPR при изменении состава, что и в модели TP без кулоновского взаимодействия. Кулоновское взаимодействие, по-видимому, приводит к увеличению параметра „скейлинга“, хотя в случае гетерополярного TP мы были ограничены в расчетах значительно меньшими размерами кристаллита.

Обсудим теперь результаты, относящиеся к функции распределения (ФР) локальной интенсивности поглоще-

ния (7), которая имеет различный вид для низкочастотной и высокочастотной мод. На рис. 6 представлены ФР  $\text{CdTe}$ -подобной и  $\text{HgTe}$ -подобной  $LO$ -мод  $\text{Cd}_{0.5}\text{Hg}_{0.5}\text{Te}$ . ФР  $\text{HgTe}$ -подобной моды может быть аппроксимирована гауссовым распределением со средним значением, равным единице, тогда как ФР высокочастотной  $\text{CdTe}$ -подобной моды резко асимметрична. Для частот внешнего (продольного) поля в области низкочастотной  $LO$ -моды существуют узлы решетки, на которых локальная интенсивность поглощения отрицательна, т.е. энергия не поглощается, а излучается. Такие узлы отвечают атомам Cd или Hg, не находящимся внутри соответственно  $\text{CdTe}$ - и  $\text{HgTe}$ -кластеров и движущимся в противофазе с внешним полем. С увеличением степени БП кластеры  $\text{CdTe}$  и  $\text{HgTe}$  становятся больше и число anomalно движущихся атомов уменьшается. Движение атомов с частотой внешнего поля в обла-



**Рис. 7.** Функции распределения локальной интенсивности узельного поглощения  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$  (*a, b*) и модельного твердого раствора ( $m_A = 69.72$ ,  $m_B = 26.98$ ,  $m_C = 174.92$ ) (*c, d*) для низкочастотных (*a, c*) и высокочастотных (*b, d*)  $LO$ -мод. Сплошные линии соответствуют случайному твердому раствору, штриховые — кластеризованному. Заряд ионов во всех случаях принимался одинаковым, соответствующим  $z = 1$  для  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ .

сти высокочастотной ( $\text{CdTe}$ -подобной) моды ограничено  $\text{CdTe}$ -кластерами, и практически отсутствуют узлы с отрицательным поглощением (рис. 6, *c, d*). Отметим, что обсуждаемые эффекты практически не зависят от величины заряда ионов.

Подобные расчеты, выполненные для  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$  и модельного ТР, в котором масса аниона ( $m_C$ ) значительно превышает массы двух взаимозамещаемых ( $m_A, m_B$ ) катионов, подтверждают приведенную выше интерпретацию вида ФР (рис. 7). Амплитуда оптического колебания может принимать значения одного порядка (при различной фазе) почти на всех узлах решетки только в том случае, если это низкочастотная резонансная мода. Действительно, ФР  $\text{GaAs}$ - подобной  $LO$ -моды уже

заметно асимметрична (рис. 7, *a*), а в случае модельного твердого раствора ФР низкочастотной моды имеет вид, характерный для высокочастотной моды (рис. 7, *c*), приблизительно одинаковый для всех рассматриваемых сплавов.

Таким образом, несмотря на то что значения  $\text{IPR}$  основных оптических фононных мод близки в ТР с кулоновским взаимодействием, особенно в случае сильного кластерообразования, характер локализации этих мод может быть различным. Резонансная низкочастотная мода является делокализованной в том смысле, что амплитуда атомных смещений не обращается в нуль для большинства ионов кристаллита. Беспорядок приводит к тому, что фаза может быть существенно различной для

разных узлов. Кластерообразование несколько уменьшает вариации фазы атомных смещений, снижая дисперсию ФР локальных узельных поглощений.

В отличие от описанной ситуации, характерной для HgTe-подобной моды в  $Cd_xHg_{1-x}Te$ , все высокочастотные и те низкочастотные моды, которые являются локальными (а не резонансными) в низкоконтрационном пределе, локализованы практически внутри соответствующих кластеров, изолированных друг от друга. Типичный размер кластеров увеличивается вместе с размером системы, обуславливая „скейлинг“ с показателем  $\gamma$ , близким к единице, обнаруженный нами при численных расчетах. Поглощение электромагнитной энергии, связанное с такими колебательными модами, происходит в „горячих зонах“, существование которых особенно хорошо видно в случае модельного ТР со специально подобранными массами (рис. 7, *d*), где основная часть ионов неподвижна и не взаимодействует с внешним полем. Поглощение с разбросом интенсивностей вблизи некоторой типичной величины характеризует кластер, размер которого „выбран“ частотой внешнего поля.

Таким образом, в настоящей работе путем прямых численных расчетов показано, что степень локализации основных фононных мод в двумерных псевдобинарных ТР сильно зависит от состава. Существенное влияние оказывают также БП типа кластерообразования и интенсивность кулоновского взаимодействия (степень ионности ТР), которые способствуют делокализации оптических фононных мод.

Делокализирующее влияние дальнедействующего кулоновского взаимодействия можно объяснить эффективным повышением размерности системы (появлением дополнительных каналов для передачи колебательного возбуждения между узлами решетки). Проведенный анализ ФР локальных узельных поглощений внешнего электромагнитного поля показал, что высокочастотные и нерезонансные низкочастотные оптические моды локализованы на оптимальных по размеру кластерах соответствующего бинарного соединения. Поглощение электромагнитного поля с частотой, соответствующей таким модам, происходит локально, что может иметь большое значение для нелинейных свойств ТР. Тенденция к „делокализации“ при кластерообразовании, наблюдаемая по величине IPR, объясняется просто увеличением размера кластеров, на которых локализовано такое возбуждение. Напротив, резонансная низкочастотная мода имеет заметную амплитуду везде в пределах кристалла. Обнаруженный „скейлинг“ такой моды ( $\gamma \approx 1$ ) указывает на ее делокализованный характер, хотя, разумеется, это утверждение справедливо при определенных размерах  $x$  исследованных численно кристаллитов.

Авторы признательны А.М. Сатанину за полезные обсуждения.

## Приложение

При наложении внешнего электрического поля уравнения движения ионов, составляющих твердый раствор, приобретают следующий вид:

$$(\hat{B} - \omega^2 \hat{1})\mathbf{U} = \frac{e_k}{\sqrt{M_{lk}}} \mathbf{E}, \quad (\text{П1})$$

где  $\hat{B}$  — динамическая матрица;  $\mathbf{U}$  — вектор смещений, умноженных на  $\sqrt{M_{lk}}$ ;  $e_k = (-1)^k e_\tau$  и  $M_{lk}$  — соответственно заряд и масса иона  $k$ -й подрешетки в  $l$ -й элементарной ячейке;  $l_\tau$  — так называемый продольный заряд;  $\mathbf{E}$  — внешнее поле, предполагающееся однородным и изменяющимся во времени по гармоническому закону. Вынужденные смещения, определяемые уравнением (П1), даются формулой

$$\begin{aligned} V_{lk}^\alpha &\equiv \frac{U_{lk}^\alpha}{\sqrt{M_{lk}}} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{M_{lk}}} \sum_{l', k', \beta} G^{\alpha\beta}(lk, l', k') \frac{l_{k'} E^{\beta}}{\sqrt{M_{l'k'}}}, \end{aligned} \quad (\text{П2})$$

где  $\hat{G}$  — фононная функция Грина,

$$G^{\alpha\beta}(lk, l'k') = \sum_v \frac{u_v^\alpha(l, k) u_v^\beta(l', k')}{\omega^2 - \omega_v^2 + i\delta}, \quad (\text{П3})$$

$u_v(l, k)$  — собственные векторы, соответствующие  $v$ -му собственному значению динамической матрицы,  $\alpha$  и  $\beta$  — декартовы индексы.

Скорость локального поглощения электромагнитного поля решеткой на узле  $(l, k)$  равна

$$Q_{lk} = -\left\langle \frac{\partial}{\partial t} \int (e_k \mathbf{V}_{lk}) d\mathbf{E} \right\rangle = -\frac{e_\tau^2 E_0^2}{2} \omega \text{Im} J_{lk}(\omega), \quad (\text{П4})$$

где  $E_0$  — амплитуда поля. В (П4) угловые скобки обозначают усреднение по времени,

$$J_{lk}(\omega) = \frac{(-1)^k}{\sqrt{M_{lk}}} \sum_v \frac{D_v u_v(l, k)}{\omega_v^2 - \omega^2 - i\delta}, \quad (\text{П5})$$

где

$$D_v = \sum_{l, k} \frac{(-1)^k}{\sqrt{M_{l, k}}} u_v(l, k).$$

В (П4, П5) под  $u_v$  понимается компонента  $v$ -го собственного вектора, параллельная внешнему полю.

## Список литературы

- [1] И.М. Лифшиц. УФН **83**, 617 (1964).
- [2] P.A. Lee, T.V. Ramakrishnan. Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).



- [3] S.V. Kravchenko. Phys. Rev. B **51**, 7038 (1995).
- [4] P.A. Lee, C. Castellani, C.Di. Castro. Phys. Rev. B **57**, R9381 (1998).
- [5] А.Г. Хачатурян. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. Наука, М. (1989). 384 с.
- [6] S.M. Evangelou, A.Z. Wang. Phys. Rev. B **47**, 13 126 (1993).
- [7] A. Chakrabarti, S.N. Karmakar, R.K. Moitra. Phys. Rev. Lett. **74**, 1403 (1995).
- [8] S.M. Evangelou, A.Z. Wang. J. Phys.: Cond. Matter. **4**, L617 (1992).
- [9] S. John, M.J. Stephen. Phys. Rev. B **28**, 6358 (1983).
- [10] J. Canisius, J.L. van Hemmen. J. Phys. C **18**, 4873 (1985).
- [11] M.I. Vasilevskiy, O.V. Baranova, S.V. Stroganova. Computer Phys. Commun. **97**, 199 (1996).
- [12] G. Dolling, R.A. Cowley. Proc. Phys. Soc. **88**, 463 (1996).
- [13] W. Weber. Phys. Rev. B **15**, 4789 (1977).
- [14] M.I. Vasilevskiy, A.G. Rolo, M.J.M. Gomes, O.V. Vikhrova, C. Ricolleau. J. Phys.: Cond. Matter. **13**, 3491 (2001).
- [15] Дж. Уилкинсон, С. Райнш. Справочник алгоритмов на языке алгол. Линейная алгебра. Машиностроение, М. (1976). 389 с.
- [16] Дж. Займан. Модели беспорядка. Мир, М. (1973). 420 с.
- [17] И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур. Введение в теорию неупорядоченных систем. Наука, М. (1982). 360 с.
- [18] D.W. Taylor. Optical Properties of Mixed Crystals / Ed. R.J. Elliott, I.P. Ipatova. North-Holland, Amsterdam (1988). P. 35.