

混晶的长波长光学声子谱*

吴 波 安

(中国科学院半导体研究所)

提 要

利用 Born-Huang (黄昆) 方程来描写等位移模型能够计算混晶 $AB_{1-x}C_x$ 的长波长光学声子频率。近邻离子间力常数 $F_{AB}(x)$ 和 $F_{AC}(x)$ 随组分的变化以近邻离子间反幂型排斥势假定来估算。模型的其它参数完全由混晶的组元的宏观参数所确定。不带任何可调参数, 计算了几种混晶系的 TO 模频和 LO 模频的组分依赖关系, 并与实验结果作了比较。本文考虑了 Lorentz-Lorenz 场的作用, 至少部分消除了许多作者指出的用通常等位移模型处理结果次邻互作用过大的不合理现象。

一、引言

对 $AB_{1-x}C_x$ 型混合晶体(以下简称混晶)的长波长光学声子的研究, 可以粗略地把混晶分为两类。一类是所谓“单模”型混晶, 随组分 x 的变化, 长波长光学模频率(一般由红外反射率测量并用 Kramers-Krönig 色散分析而得或由 Raman 谱直接测量)连续地、近乎线性地由纯化合物晶体(以下简称纯晶) AB 的长波长光学模频率变到纯晶 AC 的频率, 强度几乎保持不变。另一类是所谓“双模”型混晶, 其长波长光学模有类 AB 和类 AC 两支, 频率分别接近于纯晶 AB 和 AC 的频率, 类 AB(AC) 支的相对强度近似地正比于混晶中 AB(AC) 所占的克分子浓度比。详见 Chang 和 Mitra 的评述文章^[1]。

早期研究的是离子晶体的混晶, 它们几乎都是“单模”型, 理论上一般用虚晶模型来讨论。为了解释 $GaP_{1-x}As_x$ 的双模行为, Chen, Shockley 和 Pearson 在 1966 年提出了等位移模型^[2]—REI 模型(Random Element Isodispacement Model)。此模型的基本假设是同种原子以相同的振幅和位相从平衡位置作振动。每个离子受到它的邻近离子的统计平均的力的作用, 没有真正考虑无序的影响。此外, 计算中还假定了混晶的近邻离子间和次邻离子间的力常数随组分以相同的斜率作线性变化, 即

$$\frac{F_{AB}(x)}{F_{AB}(0)} = \frac{F_{AC}(x)}{F_{AC}(0)} = \frac{F_{B2}(x)}{F_{B2}(0)} = 1 - \theta x. \quad (1)$$

利用 REI 模型, 成功地说明了 $GaP_{1-x}As_x$ 的长波长横光学模频率随组分 x 的变化, 因而此模型得到广泛的采用。处理问题的缺点在于用了调节参数, 以此来使结果与实验很好相符。正如 Genzel 等^[3]和 Lucovsky 等^[4]指出, 这样做的结果有时使一些参数失去了物

* 1980 年 4 月 28 日收到。

理上的真实性,例如次邻离子间力常数 F_{BC} 和近邻离子间力常数 F_{AB} 和 F_{AC} 几乎一样大,甚至比它们更大些。Chang 和 Mitra 发展 REI 模型而提出 MREI 模型^[5] (Modified Random Element Isodisplacement Model), 利用混晶的两组元的一些物理常数,不用任何调节参数,计算了混晶的长波长光学模频率对组分依赖关系。

Born 和 Huang (黄昆)早就指出离子晶体的晶格振动理论中考虑极化场影响的必要性^[6]。因此,Genzel 等采纳这个思想,在忽略次邻离子间互作用和近邻离子间力常数随组分变化的简化下,讨论了混晶的晶格振动,对混晶的长波长光学模行为作了新的分类^[3]。由于近似比较粗糙,理论结果,尤其是“双模”型的理论结果与实验在定量上符合较差。Górská 和 Nazarewicz 也用 REI 模型并考虑极化场的影响^[7],假定混晶的高频介电常数 $\epsilon_\infty(x)$ 用它的组元纯晶 AB 和 AC 的高频介电常数 $\epsilon_{\infty,AB}$ 和 $\epsilon_{\infty,AC}$ 以 $\epsilon_\infty(x) = (1-x)\epsilon_{\infty,AB} + x\epsilon_{\infty,AC}$ 表示,把力常数随组分变化的参数 θ 作为调节参数,使得 CdSe_xTe_{1-x} 的长波长光学模频随组分变化的计算结果与实验相符。一般说来,两个近邻力常数和一个次邻力常数随组分变化的参数 θ_{AB} 、 θ_{AC} 和 θ_{BC} 应有差别^[4,8,9]。在实验上它以两支模频随组分变化的曲线有不同的曲率而反映出来。

本文利用 REI 模型,从 Born-Huang (黄昆) 方程^[6]出发,考虑极化场的影响及计及次邻离子间互作用,采用三个不同的 θ 分别描写三个不同的力常数随组分的变化,不含任何调节参数,计算了“双模”型混晶的长波长光学模频率。 θ_{AB} 和 θ_{AC} 是用包含反幂型排斥势能的势场模型作粗略估算的。理论结果和实验结果作了比较,相符尚好。

二、理论模型

从类似于离子晶体的 Born-Huang (黄昆) 方程出发,采用 REI 模型,立方对称的 AB_{1-x}C_x 型混晶的 A、B 和 C 离子运动方程可写成如下形式:

$$\left. \begin{aligned} m_A \ddot{\mathbf{u}}_A &= -(1-x)F_{AB}(x)(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B) - xF_{AC}(x)(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_C) \\ &\quad + [(1-x)e_{AB}^* + xe_{AC}^*]E_{\text{eff}}, \\ m_B \ddot{\mathbf{u}}_B &= -F_{AB}(x)(\mathbf{u}_B - \mathbf{u}_A) - xF_{BC}(x)(\mathbf{u}_B - \mathbf{u}_C) - e_{AB}^*E_{\text{eff}}, \\ m_C \ddot{\mathbf{u}}_C &= -F_{AC}(x)(\mathbf{u}_C - \mathbf{u}_A) - (1-x)F_{BC}(x)(\mathbf{u}_C - \mathbf{u}_B) - e_{AC}^*E_{\text{eff}}, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

式中 m_A 、 m_B 和 m_C 及 \mathbf{u}_A 、 \mathbf{u}_B 和 \mathbf{u}_C 分别是离子 A、B 和 C 的质量和对平衡位置的位移, e_{AB}^* 和 e_{AC}^* 分别是纯晶 AB 和 AC 的 Szigeti 有效电荷, E_{eff} 是有效电场, $F_{AB}(x)$ 、 $F_{AC}(x)$ 和 $F_{BC}(x)$ 分别是近邻和次邻的力常数。立方对称晶体的有效电场 E_{eff} 由 Lorentz 式给出:

$$E_{\text{eff}} = E + \frac{4\pi}{3}P, \quad (3)$$

式中 E 是宏观电场, P 是极化强度, 它由

$$\begin{aligned} P &= (1-x) \left[\frac{e_{AB}^*(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B) + (\alpha_A + \alpha_B)E_{\text{eff}}}{Q(x)} \right] \\ &\quad + x \left[\frac{e_{AC}^*(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_C) + (\alpha_A + \alpha_C)E_{\text{eff}}}{Q(x)} \right] \end{aligned} \quad (4)$$

来表示, α_A 、 α_B 和 α_C 分别是离子 A、B 和 C 的原子极化率, $\Omega(x)$ 是混晶 $AB_{1-x}C_x$ 的虚原胞体积. 利用 Clausius-Mossotti 公式:

$$\left. \begin{aligned} \frac{4\pi}{3} \frac{\alpha_A + \alpha_B}{\Omega_{AB}} &= \frac{\epsilon_{\infty,AB} - 1}{\epsilon_{\infty,AB} + 2}, \\ \frac{4\pi}{3} \frac{\alpha_A + \alpha_C}{\Omega_{AC}} &= \frac{\epsilon_{\infty,AC} - 1}{\epsilon_{\infty,AC} + 2}, \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

(Ω_{AB} 和 Ω_{AC} 分别是纯晶 AB 和 AC 的原胞体积), 有效电场可以写成:

$$\mathbf{E}_{\text{eff}} = \left\{ \mathbf{E} + \frac{4\pi}{3} \left[\frac{(1-x)\epsilon_{AB}^*(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B) + x\epsilon_{AC}^*(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_C)}{\Omega(x)} \right] \right\} \left(\frac{\epsilon_{\infty}(x) + 2}{3} \right), \quad (6)$$

其中 $\epsilon_{\infty}(x)$ 由

$$\frac{\epsilon_{\infty}(x) - 1}{\epsilon_{\infty}(x) + 2} = (1-x) \left(\frac{\epsilon_{\infty,AB} - 1}{\epsilon_{\infty,AB} + 2} \right) \frac{\Omega_{AB}}{\Omega(x)} + x \left(\frac{\epsilon_{\infty,AC} - 1}{\epsilon_{\infty,AC} + 2} \right) \frac{\Omega_{AC}}{\Omega(x)} \quad (7)$$

来定义.

对长波长横光学声子和纵光学声子, \mathbf{E} 分别取为 0 和 $(-4\pi\mathbf{P})$. 经运算, 方程(2)变为

$$\left. \begin{aligned} m_A \ddot{\mathbf{u}}_A &= -(1-x) F_{AB,\text{TO}}(x)(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B) - x F_{AC,\text{TO}}(x)(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_C), \\ m_B \ddot{\mathbf{u}}_B &= -F_{AB,\text{TO}}(x)(\mathbf{u}_B - \mathbf{u}_A) - x F_{BC,\text{TO}}(x)(\mathbf{u}_B - \mathbf{u}_C), \\ m_C \ddot{\mathbf{u}}_C &= -F_{AC,\text{TO}}(x)(\mathbf{u}_C - \mathbf{u}_A) - (1-x) F_{BC,\text{TO}}(x)(\mathbf{u}_C - \mathbf{u}_B). \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

TO 和 LO 分别对应于横光学模和纵光学模情况, 而

$$\left. \begin{aligned} F_{AB,\text{TO}}(x) &= F_{AB}(x) - \frac{4\pi}{3} \frac{\epsilon_{AB}^*[(1-x)\epsilon_{AB}^* + x\epsilon_{AC}^*]}{\Omega(x)} \left(\frac{\epsilon_{\infty}(x) + 2}{3} \right), \\ F_{AC,\text{TO}}(x) &= F_{AC}(x) - \frac{4\pi}{3} \frac{\epsilon_{AC}^*[(1-x)\epsilon_{AB}^* + x\epsilon_{AC}^*]}{\Omega(x)} \left(\frac{\epsilon_{\infty}(x) + 2}{3} \right), \\ F_{BC,\text{TO}}(x) &= F_{BC}(x) + \frac{4\pi}{3} \frac{\epsilon_{AB}^*\epsilon_{AC}^*}{\Omega(x)} \left(\frac{\epsilon_{\infty}(x) + 2}{3} \right), \\ F_{AB,\text{LO}}(x) &= F_{AB}(x) + \frac{8\pi}{3} \frac{\epsilon_{AB}^*[(1-x)\epsilon_{AB}^* + x\epsilon_{AC}^*]}{\Omega(x)} \left(\frac{\epsilon_{\infty}(x) + 2}{3\epsilon_{\infty}(x)} \right), \\ F_{AC,\text{LO}}(x) &= F_{AC}(x) + \frac{8\pi}{3} \frac{\epsilon_{AC}^*[(1-x)\epsilon_{AB}^* + x\epsilon_{AC}^*]}{\Omega(x)} \left(\frac{\epsilon_{\infty}(x) + 2}{3\epsilon_{\infty}(x)} \right), \\ F_{BC,\text{LO}}(x) &= F_{BC}(x) - \frac{8\pi}{3} \frac{\epsilon_{AB}^*\epsilon_{AC}^*}{\Omega(x)} \left(\frac{\epsilon_{\infty}(x) + 2}{3\epsilon_{\infty}(x)} \right). \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

方程(8)在形式上与文献[2]中的离子运动方程完全一样, 而(9)式右边第二项正是极化场的影响. $\epsilon_{\infty}(x)$ 是以(7)式定义的量而并不将它假设成 $\epsilon_{\infty}(x) = (1-x)\epsilon_{\infty,AB} + x\epsilon_{\infty,AC}$ 的形式. 对于力常数, 我们只假定次邻力常数随组分作线性变化:

$$F_{BC}(x) = F_{BC}(0)[1 - \theta_{BC}x]. \quad (10)$$

$F_{BC}(0)$ 是 $x \rightarrow 0$ 极限情况下混晶的次邻力常数, 它和 θ_{BC} 都是待定参数. 两个近邻力常数 $F_{AB}(x)$ 和 $F_{AC}(x)$ 随组分的变化将以包括反幂型排斥能的势场模型

$$U = -\frac{\alpha z_1 z_2 e^2}{r} + M\phi(r)$$

$$= -\frac{\alpha z_1 z_2 e^2}{r} + \frac{M b}{r^n} \quad (11)$$

来估算, 式中 z_1 和 z_2 分别是离子 A 和 B (或 A 和 C) 的电荷数, α 是 Madelung 常数, M 是配位数, b 为势常数, n 是幂指数。力常数则可由

$$\begin{aligned} f &= \frac{M}{3} \left[\phi''(r_0) + \frac{2}{r_0} \phi'(r_0) \right] \\ &= \frac{M b n(n-1)}{3 r_0^{n+2}} \end{aligned} \quad (12)$$

来估算^[6], 其中 r_0 是平衡条件下近邻离子的间距。由 (12) 式可得近邻力常数随组分 x 的变化形式:

$$\left. \begin{aligned} \frac{F_{AB}(x)}{F_{AB}(0)} &= \left(\frac{r_{0AB}}{r_{0AB}(x)} \right)^{n_{AB}+2}, \\ \frac{F_{AC}(x)}{F_{AC}(1)} &= \left(\frac{r_{0AC}}{r_{0AC}(x)} \right)^{n_{AC}+2}, \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

式中 $F_{AB}(0)$ 和 $F_{AC}(1)$ 分别是纯晶 AB 和 AC 的近邻力常数。 $r_0(x)$ 一般可采用 $r_0(x) = (1-x)r_{0AB} + xr_{0AC}$ 的形式, 则得到

$$\left. \begin{aligned} F_{AB}(x) &= F_{AB}(0)[1 + \theta'_{AB}x]^{-(n_{AB}+2)}, \\ F_{AC}(x) &= F_{AC}(1)[1 + \theta'_{AC}(1-x)]^{-(n_{AC}+2)} \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} \theta'_{AB} &= \frac{r_{0AC} - r_{0AB}}{r_{0AB}}, \\ \theta'_{AC} &= \frac{r_{0AB} - r_{0AC}}{r_{0AC}}. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

幂指数 n 可由纯晶 AB 和 AC 的压缩率 β 求得^[10]:

$$n = 1 + \frac{18gr_0^4}{\alpha z_1 z_2 e^2 \beta}, \quad (16)$$

g 是和结构有关的常数。由于 θ'_{AB} 和 θ'_{AC} 都是小量, $0 \leq x \leq 1$, 因而 (14) 式展开成

$$\left. \begin{aligned} F_{AB}(x) &\simeq F_{AB}(0)[1 - \theta_{AB}x], \\ F_{AC}(x) &\simeq F_{AC}(1)[1 - \theta_{AC}(1-x)], \end{aligned} \right\} \quad (14')$$

其中 $\theta_{AB} = (n_{AB} + 2)\theta'_{AB}$ 和 $\theta_{AC} = (n_{AC} + 2)\theta'_{AC}$.

由方程 (8), 易求得介模频的久期方程^[5]:

$$\begin{vmatrix} -\omega^2 + K_1 & K_{12} \\ K_{21} & -\omega^2 + K_2 \end{vmatrix} = 0, \quad (17)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} K_1 &= (1-x) \frac{F_{AB,LO}(x)}{m_A} + \frac{F_{AB,LO}(x)}{m_B} + x \frac{F_{BC,LO}(x)}{m_B}, \\ K_2 &= x \frac{F_{AC,LO}(x)}{m_A} + \frac{F_{AC,LO}(x)}{m_C} + (1-x) \frac{F_{BC,LO}(x)}{m_C}, \\ K_{12} &= x \frac{F_{AC,LO}(x)}{m_A} - x \frac{F_{BC,LO}(x)}{m_B}, \\ K_{21} &= (1-x) \frac{F_{AB,LO}(x)}{m_A} - (1-x) \frac{F_{BC,LO}(x)}{m_C}. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

在 $x = 0$ 和 $x = 1$ 的极限情况, 方程(17)和(18)仍应满足, 由此得到

$$\left. \begin{aligned} &x = 0 \\ &\omega_{AB,LO}^2 = \frac{F_{AB,TO}(0)}{m_A} + \frac{F_{AC,TO}(0)}{m_B} = \frac{F_{AB,TO}(0)}{\mu_{AB}}, \\ &\omega_{gap}^2(AB:C) = \frac{F_{AC,TO}(0) + F_{BC,TO}(0)}{m_C}, \\ &\quad = \frac{F_{AC,LO}(0) + F_{BC,LO}(0)}{m_C}; \\ &x = 1 \\ &\omega_{AC,LO}^2 = \frac{F_{AC,TO}(1)}{m_A} + \frac{F_{AC,TO}(1)}{m_C} = \frac{F_{AC,TO}(1)}{\mu_{AC}}, \\ &\omega_{loc}^2(AC:B) = \frac{F_{AB,TO}(1) + F_{BC,TO}(1)}{m_B}, \\ &\quad = \frac{F_{AB,LO}(1) + F_{BC,LO}(1)}{m_B}, \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

其中 $\omega_{AB,TO}$ 、 $\omega_{AB,LO}$ 、 $\omega_{AC,TO}$ 、 $\omega_{AC,LO}$ 、 $\omega_{gap}(AB:C)$ 、 $\omega_{loc}(AC:B)$ 分别是纯晶 AB 和 AC 的长波长横光学声子和纵光学声子频率以及 AB 中杂质 C 的隙模频率和 AC 中杂质 B 的局域模频率(规定了 $m_B < m_C$)， μ_{AB} 和 μ_{AC} 分别是 A、B 离子和 A、C 离子的折合质量。方程(19)用来确定模型的六个参数 $F_{AB}(0)$ 、 $F_{AC}(1)$ 、 e_{AB}^* 、 e_{AC}^* 、 $F_{BC}(0)$ 和 θ_{BC} 。

三、数值计算结果和讨论

以表 1 上半部分所列的物理常数作为出发点, 计算了 $Al_{1-x}Ga_xAs$ 、 $GaP_{1-x}As_x$ 、 Al_{1-x}

表 1 四种 $AB_{1-x}C_x$ 型混晶物理参数表

$AB_{1-x}C_x$	$Al_{1-x}Ga_xAs$		$GaP_{1-x}As_x$		$Al_{1-x}Ga_xSb$		$ZnS_{1-x}Se_x$	
AB, AC	AlAs	GaAs	GaP	GaAs	AlSb	GaSb	ZnS	ZnSe
$m_A(a.m.u)$	74.91		69.72		121.76		65.38	
$m_B, m_C(a.m.u)$	26.98	69.72	30.975	74.91	26.98	69.72	32.066	78.96
$a_{AB}, a_{AC}(A^0)$	5.66	5.653	5.450	5.653	6.135	6.095	5.406	5.667
$\epsilon_{\infty,AB}, \epsilon_{\infty,AC}$	8.5 ^[9]	10.9 ^[9]	8.457 ^[1]	10.9 ^[1]	9.88 ^[8]	14.3 ^[8]	5.2 ^[9]	5.75 ^[9]
$\omega_{AB,TO}, \omega_{AC,TO}(cm^{-1})$	362 ^[9]	268 ^[9]	366 ^[1]	268 ^[1]	318.8 ^[8]	225.2 ^[8]	270 ^{[9], [12]}	206 ^{[9], [12]}
$\omega_{AB,LO}, \omega_{AC,LO}(cm^{-1})$	400 ^[9]	292 ^[9]	406 ^[1]	295.5 ^[1]	339.6 ^[8]	235.0 ^[8]	350 ^{[9], [12]}	252 ^{[9], [12]}
$\omega_{gap}, \omega_{loc}(cm^{-1})$	252 ^[9]	356 ^[9]	271 ^[1]	339 ^[1]	205.4 ^[8]	312.3 ^[8]	220 ^{[9], [12]}	300 ^{[9], [12]}
$1/\beta_{AB}, 1/\beta_{AC}(\times 10^{12} \text{dyn/cm}^2)$	0.76	0.76 ^[11]	0.88	0.76 ^[11]	0.59 ^[11]	0.56 ^[11]	0.84 ^[11]	0.70
n_{AB}, n_{AC}	3.2	3.2	3.2	3.2	3.4	3.2	5.6	5.6
θ_{AB}, θ_{AC}	-0.0062	+0.0062	+0.20	-0.19	-0.041	+0.040	+0.36	-0.34
$e_{AB}^*/e, e_{AC}^*/e$	0.62	0.52	0.62	0.56	0.47	0.33	0.90	0.78
$F_{AB}(0), F_{AC}(1)(kg/sec^2)$	180.8	177.2	201.2	181.0	147.3	143.0	138.0	122.6
$F_{BC}(0)(kg/sec^2)$	85.1		105.6		36.0		51.5	
θ_{BC}	0.77		0.58		0.95		-0.42	

Ga_xSb 以及 $\text{ZnS}_{1-x}\text{Se}_x$ 四种半导体混晶的长波长光学模频率随组分的变化关系。需要说明的是立方晶体的压缩率 β 可由弹性劲度常数 C_{11} 和 C_{12} 按

$$\beta = \frac{3}{C_{11} + 2C_{12}} \quad (20)$$

来计算。对于尚未找到弹性劲度常数实验值的晶体，用下式估算^[11]：

$$\frac{\beta_1}{\beta_2} = \left(\frac{r_{01}}{r_{02}} \right)^4, \quad (21)$$

式中 r_{01} 和 r_{02} 分别是第一种晶体和第二种晶体(没有找到压缩率 β ，实验数据)的最近邻离

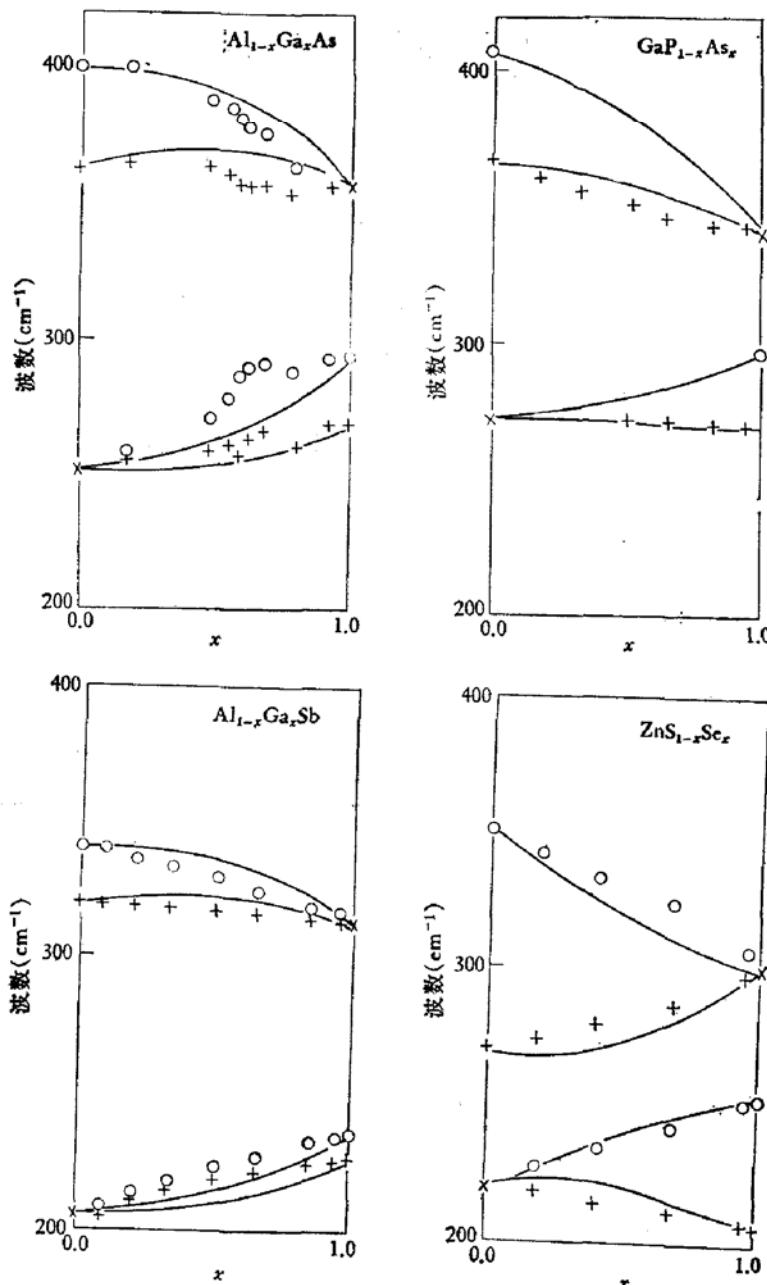


图1 四种混晶系的长波长光学模频率随组分的变化关系。○, +, ×分别是
LO 模频, TO 模频和杂质模频的实验数据。实验数据分别引自文献[9]、[2]、[8]和[12]

子间距。表1下半部分所列物理参数是由上半部分所列数据，按上节理论计算所得之结果。图1是根据计算结果所画的模频随组分变化的曲线。实验结果同时画于图中。理论计算结果与实验测量所得数据相符尚好。

本文考虑极化场作用后算得的四种混晶的力常数中，次邻力常数都比近邻的力常数小，不像MREI模型算得的有些次邻力常数与近邻力常数大小相当或甚而更大些（例如对 $ZnS_{1-x}Se_x$ ，次邻力常数大于近邻力常数）。

本工作得到黄昆教授的指导和帮助，并在繁忙之中为本文阅稿，理论组部分同志参加了讨论，作者在此深表谢意。

参 考 文 献

- [1] Chang, I. F. and Mitra, S. S. *Adv. Phys.*, **20**, 359(1971).
- [2] Chen, Y. S., Shockley, W. and Pearson, G. L., *Phys. Rev.*, **151**, 648(1966).
- [3] Genzel, L., Martin, T. P. and Perry, C. H., *Phys. Stat. Sol. (b)*, **62**, 83(1974).
- [4] Lucofsky, G., Burnham, R. D. and Alimonda, A. S., *Phys. Rev.*, **B14**, 2502(1976).
- [5] Chang, I. F. and Mitra, S. S., *Phys. Rev.*, **172**, 924(1968).
- [6] Born, M. and Huang, K., *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Oxford University Press, Oxford, (1954).
- [7] Górska, M. and Nazarewicz, W., *Phys. Stat. Sol. (b)*, **65**, 193 (1974).
- [8] Lucofsky, G., Cheng, K. Y. and Pearson, G. L., *Phys. Rev.*, **B12**, 4135(1975).
- [9] Illegems, M. and Pearson, G. L., *Phys. Rev.*, **B1**, 1576(1970).
- [10] 谢希德、方俊鑫，固体物理学，上海科学技术出版社，(1961)。
- [11] Keyes, R. W., *J. Appl. Phys.*, **33**, 3371(1962).
- [12] Brafman, O., Chang, I. F., Lengyel, G., Mitra, S. S. and Carnal, E., *Phys. Rev. Letters*, **19**, 1120(1967).

LONG-WAVELENGTH OPTICAL PHONON SPECTRA OF MIXED CRYSTALS

Wu Jian

(Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences)

Abstract

The long wavelength optical phonon frequencies of mixed crystals $AB_{1-x}C_x$ can be calculated, using Born-Huang equations to describe the random element isodisplacement model (REI model). The concentration dependence of the nearest neighbour force constants $F_{AB}(x)$ and $F_{AC}(x)$ between A- and B-ions and A- and C-ions is evaluated by assuming an inverse power repulsive potential between the nearest neighbour ions. The remaining parameters of the model are completely defined by the macroscopic parameters of the pure end members. The concentration dependence of the long wavelength TO and LO modes of several mixed crystal systems has been calculated without using any adjustable parameters and compared with experimental results. Apparently because we have taken account of the Lorentz-Lorenz field, the difficulty about the unreasonably large second-neighbour interaction in usual REI treatments, as observed by many authors, is at least partially overcome in the present work.