

## МАНДЕЛЬШТАМ-БРИЛЛЮЭНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА В КРИСТАЛЛЕ $ZnSiF_6 \cdot 6H_2O$

© В.Г.Вознюк, В.С.Курнос, А.В.Песчанский, В.И.Фомин

Физико-технический институт низких температур Академии наук Украины,  
 310164 Харьков, Украина

(Поступило в Редакцию 7 августа 1995 г.)

(В окончательной редакции 25 октября 1995 г.)

1. Гексагидрат фторосиликата цинка ( $ZnSiF_6 \cdot 6H_2O$ ) состоит из двухвалентных октаэдрических ионных комплексов  $Zn(H_2O)_6^{2+}$  и  $SiF_6^{2-}$ , образующих тригонально искаженную решетку типа CsCl, имеющую симметрию  $R\bar{3} (C_{3i}^2)$  [1]. При комнатной температуре в кристалле наблюдается ориентационная разупорядоченность комплексов  $SiF_6^{2-}$  [1].

2. Для исследований мандельштам-бриллюэновского рассеяния (МБР) были приготовлены три образца в виде прямоугольных параллелепипедов, вырезанные из одного монокристалла. Поверхности фазовых скоростей звуков в кристаллах данного класса ( $\bar{3}$ ) в общем случае развернуты на некоторый угол относительно базисных кристаллографических направлений, что не допускает произвола в выборе направления оси  $z$  ( $C_3$ ) для различных образцов. Ось  $x$  лабораторной системы координат была направлена параллельно одной из гексагональных ростовых граней.

МБР возбуждалось одномодовым He-Ne-лазером ( $\lambda_0 = 632.8 \text{ nm}$ ) мощностью 50 mW. Свет, рассеянный образцом под углом  $\theta = 90^\circ$ , анализировался трехпроходным интерферометром Фабри-Перо фирмы «Burgleigh» (модель RC-110). Регистрарция производилась охлаждаемым фотоумножителем в режиме счета фотонов. Накопление и обработка информации проводились на микроЭВМ.

3. Измеряемые в эксперименте частотные сдвиги  $\Delta\nu$  МБР спутников в спектре рассеянного под углом  $\theta$  света связаны со скоростями  $V$  звуков в веществе соотношением [2]

$$\frac{\Delta\nu}{\nu_0} = \frac{V}{c} (n_1^2 + n_2^2 - 2n_1 n_2 \cos \theta)^{1/2}, \quad (1)$$

где  $\nu_0$  — частота падающего света,  $c$  — скорость света в вакууме,  $n_1, n_2$  — показатели преломления для падающего и рассеянного света соответственно. В свою очередь скорости звуков определяются тензором упругих постоянных кристалла  $C_{ijkl}$  ( $C_{\alpha\beta}$  — форма обозначений в виде матрицы шестого порядка [3]) и плотностью вещества  $\rho$

$$\det|\Gamma_{ik} - \delta_{ik}X| = 0, \quad (2)$$

где  $\delta_{ik}$  — символ Кронекера,  $X = \rho V^2$ ,  $\Gamma_{ik} = C_{ijkl} q_j q_l$ ,  $q_j, q_l$  — направляющие косинусы волнового вектора  $\mathbf{Q}$  акустической волны, задаваемого геометрией эксперимента МБР.

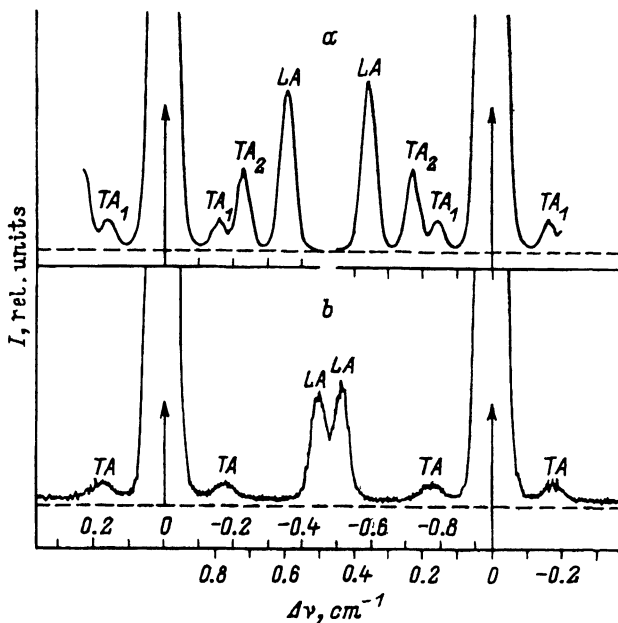


Рис. 1. Спектры МБР света в кристалле  $\text{ZnSiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  при комнатной температуре для двух геометрий эксперимента.

$a - \mathbf{Q} \parallel (1/2, 1/2, \sqrt{2}/2)$ ,  $b - \mathbf{Q} \parallel (0, 0, 1)$ . Поляризация возбуждающего света перпендикулярна плоскости рассеяния; поляризация рассеянного света не анализировалась.

Определение значений упругих постоянных сводится к решению системы в общем случае нелинейных по отношению к  $C_{\alpha\beta}$  уравнений, получаемых из (2) для различных направлений  $\mathbf{Q}$ , где параметры  $X$  определяются из эксперимента. В кристаллах класса  $\bar{3}$  существует только одно направление  $\mathbf{Q} \parallel C_3$ , позволяющее из одного эксперимента получить значения двух ( $C_{33}$  и  $C_{44}$ ) из семи независимых упругих констант [4]. Для всех остальных направлений уравнения становятся существенно нелинейными. Схема аналитического решения такой системы уравнений для классов  $\bar{3}$  и  $\bar{3}$  была заимствована из [5].

4. Экспериментальные спектры были получены для 13 направлений  $\mathbf{Q}$ . Примеры записей приведены на рис. 1. Пики в спектрах МБР, соответствующие квазипродольным ( $LA$ ) фононам, имеют интенсивность одного порядка с  $LA$ -пиками в спектре кристаллического кварца, а квазипродольные ( $TA_1, TA_2$ ) в 2–40 раз слабее в зависимости от геометрии эксперимента.

В вычислениях использовались значения рентгеновской плотности  $\rho = 2.13 \text{ g/cm}^3$  [1] и  $n_0 = 1.3786 \pm 0.0008$ ,  $n_e = 1.3930 \pm 0.001$ , измеренные нами для  $\lambda_0$ .

Полученные методом [5] значения  $C_{\alpha\beta}$  были уточнены расчетом, который основывался на нахождении минимума функционала

$$\Phi(C_{\alpha\beta}) = \sum_i [(X_{\text{exp}}^i - X_{\text{calc}}^i) / \Delta X^i]^4, \quad (3)$$

$C_{\alpha\beta}$	В лабораторных системах координат		В системе координат $x', y', z$		
	Наст. раб.	[6]	Наст. раб	[6]	[7]
$C_{11}$	$19.45 \pm 0.50$	$18.79 \pm 0.10$	$19.45 \pm 0.50$	$18.79 \pm 0.10$	19.25
$C_{33}$	$38.73 \pm 0.95$	$38.97 \pm 0.10$	$38.73 \pm 0.95$	$38.97 \pm 0.10$	40.04
$C_{44}$	$6.02 \pm 0.08$	$5.54 \pm 0.10$	$6.02 \pm 0.08$	$5.54 \pm 0.10$	5.68
$C_{66}$	$5.66 \pm 0.15$	$5.76 \pm 0.10$	$5.66 \pm 0.15$	$5.76 \pm 0.10$	5.78
$C_{13}$	$5.10 \pm 0.60$	$6.78 \pm 0.70$	$5.10 \pm 0.60$	$6.78 \pm 0.70$	5.03
$C_{14}$	$-0.26 \pm 0.09$	$-1.37 \pm 0.10$	$-1.12 \pm 0.15$	$-1.38 \pm 0.10$	-1.40
$C_{25}$	$1.09 \pm 0.09$	$-0.15 \pm 0.00$	0	0	0

где  $X_{\text{exp}}^i$  — данные эксперимента с погрешностью  $\Delta X^i$ ,  $X_{\text{calc}}^i$  — решения уравнения (2) в направлениях  $\mathbf{Q}^i$  для текущих значений  $C_{\alpha\beta}$ . Погрешности значений  $C_{\alpha\beta}$  определялись как их вариации, при которых  $|X_{\text{exp}}^i - X_{\text{calc}}^i|/\Delta X^i \leq 1$ .

Значения  $C_{\alpha\beta}$  и данные ультразвуковых исследований [6,7] представлены в таблице, расчетные сечения поверхностей скоростей звука приведены на рис. 2. Неоднозначность в выборе ориентации осей лабораторной системы координат  $x$  и  $y$  для кристаллов класса  $\bar{3}$  приводит к различию значений  $C_{14}$  и  $C_{25}$  для различных наборов данных. Их сопоставление возможно в системе координат  $x'y'z$ , в которой  $C_{25} = 0$ . Последняя связана с лабораторной поворотом на угол  $\varphi_z = \text{arctg}(C_{25}/C_{14})/3$  (см. таблицу и рис. 2).

5. Проверка влияния ангармоничности и ориентационной неупорядоченности кристалла  $\text{ZnSiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  на его упругие свойства являлась

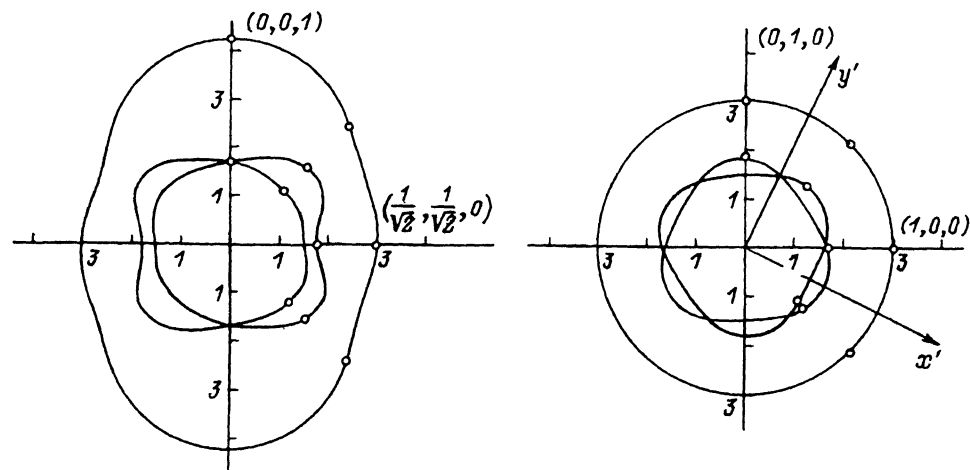


Рис. 2. Полярные диаграммы скоростей  $V$  упругих волн (в  $\text{km/s}$ ) в кристалле  $\text{ZnSiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ .

Для осей сечений указаны значения направляющих косинусов в лабораторной системе координат  $xuz$ .

одной из задач настоящей работы. Сравнение полученных в настоящей работе значений упругих констант на частотах МБР ( $\approx 10^{10}$  Hz) с ультразвуковыми данными <sup>[6,7]</sup> (частоты обычно составляют  $10^5 - 10^7$  Hz) в пределах погрешностей не позволяет сделать однозначный вывод о наличии дисперсии скоростей звука в данном соединении, по крайней мере для комнатной температуры (см. таблицу).

В заключение авторы выражают благодарность В.В. Еременко за интерес к работе и полезное обсуждение результатов.

### Список литературы

- [1] Ray S., Zalkin A., Templeton D.H. Acta Cryst. **B29**, 2741 (1973).
- [2] Фабелинский И.Л. Молекулярное рассеяние света. М. (1965). 512 с.
- [3] Федоров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах. М. (1965). 386 с.
- [4] Vacher R., Boyer L. Phys. Rev. **B6**, 2, 639 (1972).
- [5] Parker P.M., Mayer W.G. Acta Cryst. **15**, 4, 334 (1962).
- [6] Галкин А.А., Кожухарь А.Ю., Цинцадзе Г.А. ЖЭТФ **70**, 1, 248 (1976).
- [7] Васюков В.Н., Лукин С.Н., Цинцадзе Г.А. ЖЭТФ **77**, 4(10), 1544 (1979).

*Физика твердого тела, том 38, № 5, 1996*  
*Solid State Physics, vol. 38, N 5, 1996*

## ИК ФУРЬЕ-СПЕКТРОСКОПИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР GaAs/AlAs С ДВОЙНЫМИ КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ

© А.Г.Милехин, Ю.А.Пусеп, Ю.А.Яновский, И.И.Марахова

Институт физики и полупроводников Сибирского отделения  
Российской академии наук,  
630090 Новосибирск, Россия  
(Поступило в Редакцию 3 ноября 1995 г.)

Показано, что ИК Фурье-спектроскопия может быть успешно применена для изучения упорядочения атомов на гетерограницах полупроводниковых сверхрешеток. Исследованы ИК-спектры отражения периодических гетероструктур GaAs/AlAs с двойными квантовыми ямами. Анализ частот локализованных оптических колебательных мод позволил установить различие прямой и обратной гетерограниц. В рамках модели двухатомной линейной цепочки был рассчитан реальный профиль гетероструктур.

Экспериментально и теоретически колебательный спектр сверхрешеток (СР) GaAs/AlAs изучен достаточно подробно <sup>[1-5]</sup>. Известно, что продольные (LO) и поперечные (TO) оптические фононы GaAs и AlAs в СР GaAs/AlAs локализованы в соответствующих слоях, поскольку объемные дисперсии оптических фононов этих двух материалов не пересекаются во всем частотном интервале. Как следствие колебательный спектр СР представляет собой набор локализованных колебательных мод, число которых зависит от числа полудлин волн фонона, приходящихся на расстояние, равное толщине слоя. Было найдено хорошее согласие значений частот, полученных экспериментально и рассчитанных в рамках различных моделей <sup>[6-8]</sup>.

Вместе с тем недавно <sup>[9,10]</sup> было обнаружено различие между экспериментальными и рассчитанными частотами локализованных мод в