

УДК 535.343.2

© 1991

СИЛЬНОЗАТУХАЮЩЕЕ КОЛЕБАНИЕ РЕШЕТКИ КАРБИДА КРЕМНИЯ

Л. И. Бережинский, В. А. Клименко, П. А. Коротков, М. П. Лисица

Теоретической обработкой низкочастотной области спектра комбинационного рассеяния света в кристалле $6H\text{-SiC}$ получена сверхзатухающая мода колебательного спектра с частотой $\nu_0 = 235 \pm 10 \text{ см}^{-1}$ и константой затухания $\Gamma = 450 \pm 20 \text{ см}^{-1}$. Показано, что природа этой моды обусловлена смешанной упаковкой гексагональных и кубических атомных слоев кристаллической решетки. Длина затухания наблюдаемой моды, по оценкам, составляет $6\text{--}10 \text{ \AA}$ (3–4 слоя).

При исследовании комбинационного рассеяния света КРС в SiC наблюдалось интенсивное низкочастотное крыло протяженностью около 300 см^{-1} , непосредственно примыкающее к рэлеевской линии [1, 2]. Наблюдение на тех же образцах поляритонного рассеяния [3], когда качество кристалла имеет первостепенное значение, свидетельствует о том, что неоднородность образцов не является единственной причиной столь большой протяженности крыла рэлеевской линии.

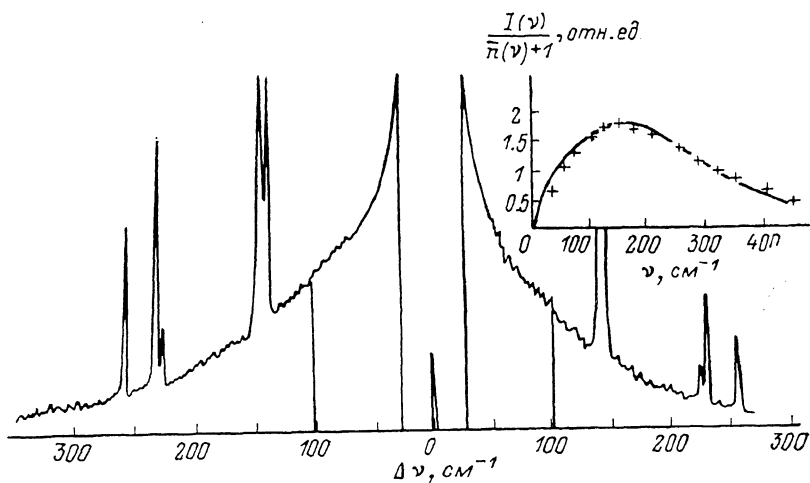
В случае SiC этот вывод подтверждается результатами работы [4], в которой наблюдался спектр КРС от поверхности кристалла до и после имплантации ионами хрома. В спектре исходного образца обнаружены полосы, характерные для политипа $6H$: $150, 768, 784, 796, 959 \text{ см}^{-1}$, и довольно интенсивное крыло рэлеевской линии, простирающееся до 400 см^{-1} . После имплантации протяженность крыла уменьшилась до 200 см^{-1} . При этом существенно уменьшилась его интенсивность и полностью исчезли полосы, характерные для кристаллической структуры. Эти результаты позволяют отнести наблюдаемое крыло рэлеевской линии к низкочастотным колебаниям кристаллической решетки SiC . Для однозначности такого вывода нами предприняты дополнительные исследования спектра КРС монокристалла $6H\text{-SiC}$.

Измерения выполнены на спектрометре ДФС-24 при возбуждении линиями 5145 и 4880 \AA аргонового лазера. В качестве образцов использованы монокристаллы промышленного производства, выращенные по методу Лели с концентрацией азота $5 \cdot 10^{17}\text{--}10^{18} \text{ см}^{-3}$. Спектры образцов размера $0.8 \times 0.5 \times 0.3 \text{ см}$ регистрировались по 90° методике. Ось c была направлена вдоль меньшего ребра.

В низкочастотной области спектра КР наблюдаются полосы $143, 150, 231, 240$ и 265 см^{-1} и крыло рэлеевской линии, простирающееся до 300 см^{-1} (см. рисунок). Узкие линии соответствуют фононам акустических ветвей большой зоны Бриллюэна [5], активным в КР для политипа $6H\text{-SiC}$. Форма же наблюдаемого крыла одинакова во всех геометриях рассеяния и аналогична полосам передемфированных мод, характерных для сегнетоэлектрических кристаллов [6].

Из этого рисунка видно, что форма крыла рэлеевской линии для стоксовой области спектра отлична от антистоксовой (ср., например, ординаты при $\nu = 100 \text{ см}^{-1}$). Это свидетельствует о том, что, кроме рэлеевского рассеяния, в крыльях отражено рассеяние на низкочастотных колебаниях

решетки. Чтобы выделить вклад последнего, измерения проводились следующим образом. По методике 90° рассеяния регистрировалась интенсивность в максимуме рэлеевской линии от кальцита (CaCO_3). При этом спектральная ширина щели составляла $1-1.5 \text{ см}^{-1}$ и чувствительность регистрирующей аппаратуры сильно загрублялась. Кальцит выбран потому, что его спектр КР многократно и тщательно исследован и в его низкочастотной области отсутствуют какие-либо сильнозатухающие моды. Эта особенность фононного спектра кальцита позволяет использовать его в качестве эталонного образца. Затем устанавливался нормальный режим регистрирующей аппаратуры и записывался спектр крыла рэлеевской линии от CaCO_3 . Далее, заменив последний исследуемым образцом, при тех же режимах регистрирующей аппаратуры записывалось крыло рэлеевской



Спектр комбинационного рассеяния кристалла $6H\text{-SiC}$.

На вставке — функция $\text{Im } T(\nu)$. Сплошная кривая — эксперимент, точки — теория.

линии $6H\text{-SiC}$. После этого, загрубив чувствительность установки до уровня, при котором регистрировалась пиковая интенсивность рэлеевской линии от CaCO_3 , фиксировался максимум интенсивности этой же линии от исследуемого кристалла $6H\text{-SiC}$. Поскольку сечения рассеяния SiC и CaCO_3 различны, то и пиковые интенсивности рэлеевской линии, записанные для них в одинаковых условиях, будут отличаться. Зная пиковые интенсивности и учитывая телесные углы рассеяния света через показатели преломления SiC и CaCO_3 , можно определить пересчетный коэффициент и скорректировать соответствующим образом крыло рэлеевской линии от CaCO_3 . Вычитая скорректированный спектр CaCO_3 из спектра КР исследуемого кристалла SiC , получим искомое распределение интенсивности $I(\nu)$, обусловленное вкладом низкочастотных колебаний SiC .

Полученная кривая $I(\nu)$ была обработана в соответствии с теоретическими положениями работы [6], согласно которой интенсивность спектра КР в стоковой области описывается выражением

$$I(\omega) = (\hbar/\pi) \{ [\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]^{-1} + 1 \} \text{Im } T(\omega) = (\hbar/\pi) [\bar{n}(\nu) + 1] \text{Im } T(\nu), \quad (1)$$

где k_B — константа Больцмана, $\text{Im } T(\omega)$ — мнимая часть функции отклика $T(\omega)$ системы, $\omega = 2\pi\nu$ (ν — в см^{-1}). Для ангармонического осциллятора функция отклика имеет вид

$$T(\omega) = (1/m) / (\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma), \quad (2)$$

где $\omega_0 = (k/m)^{1/2}$ — резонансная частота, k — упругая константа связи, Γ — константа затухания. Выделив из (2) мнимую часть, получим

$$\text{Im } T(\omega) = (1/m) \omega \Gamma / [(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \Gamma^2]. \quad (3)$$

Результат обработки наблюдаемого спектра $I(\nu)$ по формуле (1) приведен на вставке к рисунку. Приведенная кривая описывается формулой

(3), характерной для ангармонического осциллятора с собственной частотой $\nu_0 = 235 \pm 10 \text{ см}^{-1}$ и затуханием $\Gamma = 450 \pm 20 \text{ см}^{-1}$. Моделирование кривой $I(\nu)/[\bar{n}(\nu)+1]$ функцией отклика релаксирующего возбуждения не дает ни качественного, ни количественного соответствия эксперименту.

Таким образом, в низкочастотной области спектра КР монокристалла $6H\text{-SiC}$ расположена полоса колебаний осцилляторного типа, обладающая аномально большим затуханием, из-за которого образуется широкое крыло Рэлея без максимума интенсивности.

Кроме политипа $6H\text{-SiC}$, нами с той же целью были исследованы монокристаллы политипов $15R$, $21R$ и $27R$. В их спектрах также проявляются аналогичные низкочастотные колебания, в то время как в кристалле SiC кубической модификации [7], а также в кристалле с чисто гексагональной упаковкой атомов CdS [8], структура которого идентична политипу $2H\text{-SiC}$, соответствующая полоса отсутствует.

Любой политип SiC , включая кубическую модификацию, представляет собой упаковку из идентичных слоев, чередующихся определенным образом, характерным для каждого политипа. В различных политипах существуют слои в кубическом и гексагональном окружении. При этом толщины слоев в кубическом и гексагональном окружении различаются, из-за чего на стыке таких слоев возникает напряжение [9], вызывающие характерную для сложных сверхпериодических структур модуляцию диэлектрической проницаемости.

Поскольку полоса аномально затухающего колебания не наблюдается в кристаллах с чисто кубической или гексагональной упаковкой, это свидетельствует о наличии смешанной упаковки слоев.

В работе [10] колебательные спектры различных политипов SiC $4H$, $6H$, $15R$, $21R$ представлены в рамках большой зоны Бриллюэна, приведенной для гипотетического кристалла SiC , содержащего в элементарной ячейке один слой, т. е. 2 атома. В такой зоне Бриллюэна должно быть 6 ветвей, причем TO и TA ветви дважды вырождены. При этом колебательный спектр любого из указанных политипов может быть получен из ветвей большой зоны Бриллюэна путем их отражения на границе разового или многократного сложения (перегибания) зоны в соответствии с размерами решетки вдоль оси c . Из анализа дисперсии ветвей большой зоны Бриллюэна следует, что мода $\nu_0 = 235 \text{ см}^{-1}$ может наблюдаться в кристаллах $6H$, $15R$, $21R$ и происходит из акустической моды.

Зная величину Γ и скорость распространения звука в SiC ($7 \cdot 10^5 \text{ см/с}$ для поперечных и $13 \cdot 10^5 \text{ см/с}$ для продольных волн [10]), можно оценить длину затухания наблюдаемой моды. Она оказалась равной $6\text{--}10 \text{ \AA}$; т. е. составляет 3—4 слоя (средняя толщина слоя SiC составляет 2.5 \AA [9]). Столь сильное затухание обусловлено, вероятно, тем обстоятельством, что каждый атом Si(C) тетраэдрически окружен атомами C(Si) , так что один из них входит в состав того же слоя, а три других находятся в соседнем слое, т. е. атом, находящийся в центре тетраэдра, принимает участие в колебательных движениях в двух соседних слоях одновременно.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Горбань И. С., Луговой В. И. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 6. С. 2113—2117.
- [2] Артамонов В. В., Ажнюк Ю. Н. и др. // Укр. физ. журн. 1987. Т. 32. № 6. С. 848—851.
- [3] Ажнюк Ю. Н., Артамонов В. В. и др. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 7. С. 1962—1967.
- [4] McHargue C. J., Farlow G. C. et al. // Nucl. Instruments and Method in Physics Research (North Holland). 1986. V. B16. P. 212—220.
- [5] Feldman D. W., Parker J. H. et al. // Phys. Rev. 1968. V. 170. N 3. P. 698—704.
- [6] Barker A. S., Loundon R. // Rev. Mod. Phys. 1972. V. 44. N 1. P. 18—47.
- [7] Вакуленко Ю. А., Горбань И. С. и др. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 7. С. 2233—2236.
- [8] Tell B., Damen T. C., Porto S. P. S. // Phys. Rev. 1966. V. 144. N 2. P. 771—774.
- [9] Weltner W. // J. Chem. Phys. 1969. V. 51. N 6. P. 2469—2483.
- [10] Feldman D. W., Parker J. H. et al. // Phys. Rev. 1968. V. 173. N 3. P. 787—793.