УДК 546.28 : 535.375

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ НА СПЕКТРЫ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ КРЕМНИЯ

И. И. Новак, В. В. Баптизманский и Ю. Ф. Титовец

Исследовано влияние деформации кристаллической решетки, измеренной методом рентгеновской дифракции, на спектры комбинационного рассеяния кремния. Показано, что в условиях центрального изгиба вырожденное колебание расщепляется на две частоты — дублет и синглет. Эти полосы рассеяния в зависимости от изменения деформации смещаются в сторону низких частот по линейному закону. На основе полученных данных вычислены постоянная Грюнайзена и другие параметры ангармонизма колебаний.

Как известно, под действием механической нагрузки в спектрах комбинационного рассеяния (КР) света кристаллов наблюдается смещение и расщепление вырожденных решеточных колебаний. Этот пьезоспектроскопический эффект обусловлен ангармонизмом колебаний и деформаций кристаллической решетки, которая обычно вычисляется из закона Гука по данным величин напряжений.

Однако представляет интерес исследование изменения решеточных частот непосредственно в зависимости от деформации кристалла.

Целью работы является изучение изменений спектра КР кристалла кремния под действием деформации межатомных плоскостей, измеренной методом рентгеновской дифракции. Полученные данные прямо позволяют получить ценные сведения об ангармонических параметрах колебаний решетки.

Круглые пластинки кремния перпендикулярно поверхности (кристаллографическое направление [111], ось z) нагружались по способу центрального изгиба. По закону Гука были определены деформации по кубическим осям [100], [010] и [001], а затем в линейном приближении малых деформаций получено вековое уравнение [1] для расчета смещения частоты деформированного кристалла

$$\begin{vmatrix} (2\varepsilon_x+\varepsilon_z)(p+2g)-3\lambda & -2r(\varepsilon_x-\varepsilon_z) & -2r(\varepsilon_x-\varepsilon_z) \\ -2r(\varepsilon_x-\varepsilon_z) & (2\varepsilon_x+\varepsilon_z)(p+2g)-3\lambda & -2r(\varepsilon_x-\varepsilon_z) \\ -2r(\varepsilon_x-\varepsilon_z) & -2r(\varepsilon_x-\varepsilon_z) & (2\varepsilon_x+\varepsilon_z)(p+2g)-3\lambda \end{vmatrix}=0. \quad (1)$$

В уравнении (1) p, g, r — ангармонические параметры, равные, согласно работе [1],

$$g=\frac{1}{m}\frac{\partial k_{ii}}{\partial \varepsilon_{jj}},\quad p=\frac{1}{m}\frac{\partial k_{ii}}{\partial \varepsilon_{ii}},\quad r=\frac{1}{m}\frac{\partial k_{ij}}{\partial \varepsilon_{ij}}, \quad (2)$$

m — приведенная масса атомов кремния, k_{ij} — компоненты тензора упругих констант; $\lambda=2\omega_0\Delta\omega$, где $\Delta\omega$ — смещение частоты ω_0 поперечной моды; ε_x, ε_y, ε_z — соответственно деформации по осям x, y и z. Из уравнения (1) были найдены сдвиги частоты ω_0.

$$\Delta\omega_d=[(2\varepsilon_x+\varepsilon_z)(p+2g)+2r(\varepsilon_x-\varepsilon_z)]/6\omega_0, \quad (3)$$

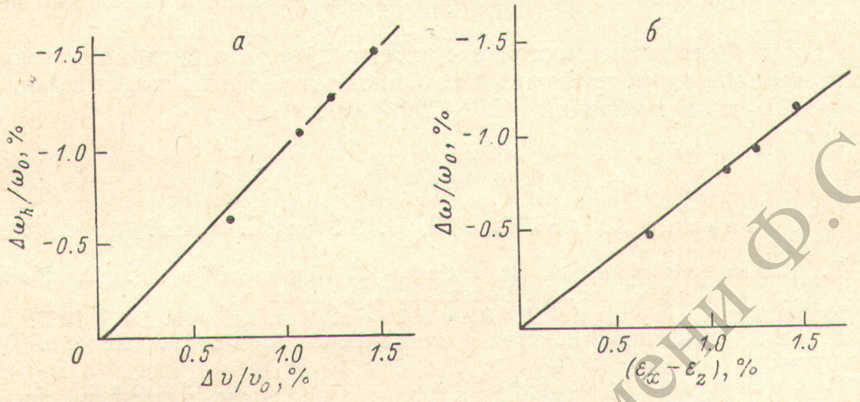
$$\Delta\omega_s=[(2\varepsilon_x+\varepsilon_z)(p+2g)-2r(\varepsilon_x-\varepsilon_z)]/6\omega_0. \quad (4)$$

Таким образом, при плоском напряженном состоянии трижды вырожденная оптическая мода расщепляется на одиночный фонон ω_s и две равные частоты — дублет ω_d. Из уравнений (3), (4) можно определить параметр Грюнайзена γ

$$\gamma \frac{\Delta v}{v_0} = -\frac{\Delta\omega_h}{\omega_0} = \frac{-1}{3\omega_0}(2\Delta\omega_d + \Delta\omega_s), \tag{5}$$

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} = \frac{\Delta\omega_d - \Delta\omega_s}{\omega_0} = \frac{(\varepsilon_x - \varepsilon_z)\, r}{\omega_0^2}, \tag{6}$$

где $\gamma = -(p + 2g)/6\omega_0^2$ — коэффициент Грюнайзена для кубической решетки [2], и $\Delta v/v_0 = 2\varepsilon_x + \varepsilon_z$ — изменение объема кристалла под действием нагрузки. Из формул (3) и (4) видно, что смещение частот дублета и син-



Изменение относительного смещения частот кремния под действием деформации.

а — зависимость относительной величины $\Delta\omega_h/\omega_0$ гидростатической компоненты смещения частоты от относительного изменения объема $\Delta v/v_0$; *б* — сдвиг относительного значения разности $\Delta\omega/\omega_0$ частот дублета и синглета в зависимости от разности $\varepsilon_x - \varepsilon_z$ деформаций по осям x и z.

глета обусловлено гидростатической компонентой деформации $\Delta v/v_0$ и разностью между деформациями вдоль осей x и z.

Для расчета деформаций межплоскостных расстояний при разных нагрузках методом рентгеноскопии измерялись углы дифракции от плоскостей типа $\{531\}$. По этим данным, согласно результатам работы [3], находили компоненты тензора деформаций

$$\varepsilon_x = \varepsilon_y = (5.06\Delta_1 - 9.00\Delta_2) \cdot 10^{-5}, \tag{7}$$

$$\varepsilon_z = (-5.8\Delta_1 + 2.67\Delta_2) \cdot 10^{-5}, \tag{8}$$

где Δ_1 и Δ_2 — изменения углов (в дуговых минутах) дифракции в направлениях $[531]$ и $[53\bar{1}]$ соответственно.

В работе использовались круглые шлифованные пластинки кремния n-типа диаметром 35÷40 мм и толщиной 0.2÷0.3 мм. Для упрочнения образцы обрабатывались в смеси плавиковой и азотной кислот. Нагружение пластинок осуществлялось в устройстве, описанном в работе [4]. На одних и тех же образцах в центре пластинки одновременно измерялись спектр КР от поверхности кристалла (глубина проникновения света 0.5 мкм) и методом рентгеновской дифрактометрии деформации ε_x и ε_z. Измерения спектров КР и углов дифракции Δ_1 и Δ_2 соответственно производились с помощью спектрометра Ramalog-5 Spectra Jndustries (с аргоновым лазером) и рентгеновским дифрактометром УРС-50 с характеристическим излучением $K_\alpha Co$.

На рисунке представлены зависимости относительной величины гидростатической компоненты смещения $\Delta\omega_h/\omega_0$ и величины $\Delta\omega/\omega_0$ от изменения объема $\Delta v/v_0$ и разностной деформации $\varepsilon_x - \varepsilon_z$ соответственно. Видно, что экспериментальные точки хорошо укладываются на прямые. На основе формул (5) и (6) были вычислены параметр Грюнайзена и величина r/ω_0^2 : $\gamma = +0.96 \pm 0.04$, $r/\omega_0^2 = -0.76 \pm 0.03$

($r=-0.77\cdot10^{28}$ с$^{-2}$; $p+2g=-5.8\cdot10^{28}$ с$^{-2}$). Измеренные величины ангармонизма γ и r согласуются с данными, полученными в работах [2, 5]. Найдем теперь растягивающее напряжение в центре пластинки. Учитывая изменение объемного модуля упругости B_0 [6], можно получить формулу для расчета напряжения σ

$$\sigma=\frac{1.5B_0\frac{\Delta v}{v_0}}{1+1.5B_0'\frac{\Delta v}{v_0}}, \tag{9}$$

где $B_0'=4.16$ [6]. Для деформации 1.5% $\sigma=208$ кг/мм^2. Если принять, что величина B_0 не зависит от деформации, то $\sigma=225$ кг/мм^2 (для изменения объема 1.5%). Таким образом, при не очень больших деформациях ($1.5\div2$%) в расчетах напряжений можно не учитывать изменение модуля упругости.

Из линейных зависимостей рисунка следует, что ангармонические параметры являются константами и не зависят от растягивающих деформаций ($1.5\div2$%) и напряжений ($200\div250$ кг/мм^2).

Литература

[1] S. Ganesan, A. Aradudin, J. Oitmaa. Ann. Phys., *56*, 566, 1970.

[2] E. Anastasicis, A. Pinzuk, E. Burstein, F. H. Pollak, M. Cardona. Sol. St. Comm., *8*, 133, 1970.

[3] Ю. Ф. Титовец, Д. М. Васильев. Зав. лаб., *10*, 1235, 1977.

[4] И. И. Новак, В. В. Баптизманский, Л. В. Жота. Опт. и спектр., *43*, 252, 1977.

[5] F. Cerderia, C. J. Buchenhauer, F. H. Pollak, M. Cardona. Phys. Rev., *5B*, 580, 1972.

[6] O. L. Anderson. J. Phys. Chem. Sol., *27*, 547, 1966.

Поступило в Редакцию 27 марта 1979 г.