

偏光ラマンスペクトル測定による BaSi₂ の分子振動モード解析 (II)

Analysis of vibrational modes in BaSi₂ by polarized Raman spectra (II)

九工大情報工¹, 筑波大数理物質², [○]村社尚紀¹, 飯沼元輝¹, 末益 崇², 寺井慶和¹

Kyushu Inst. of Tech.¹, Univ. of Tsukuba², [○]N. Murakoso¹, M. Iinuma, T. Suemasu², Y. Terai¹

E-mail: m232082n@mail.kyutech.jp

【はじめに】これまで我々は, BaSi₂(100)/Si(001)エピタキシャル膜の偏光ラマンスペクトルにおいて, 散乱強度の結晶回転角度依存性を測定してきた. その結果, Si クラスター構造(T_d)に基づく因子群解析により, 270–510 cm⁻¹に存在する 6 本のラマン線のモード同定に成功した[1]. 本研究では, その BaSi₂エピタキシャル膜において 90–150 cm⁻¹の低振動数領域で 5 本のラマン線が存在し, それらが散乱強度の結晶回転角度依存性を示すことを見出したので報告する.

【実験方法】MBE 法により作製した BaSi₂(100)/Si(001)エピタキシャル膜において, 擬後方散乱配置で偏光ラマンスペクトルを測定した. Si の TO フォノン(520.2 cm⁻¹)が不活性となる位置を $\theta = 0^\circ$ として定義し, 入射電界と散乱電界が平行となる X(YY)X 配置で試料のみを回転させて散乱強度の回転角度依存性を測定した.

【結果】Fig. 1 に無偏光で測定したラマンスペクトルを示す. 270–510 cm⁻¹の 6 本のラマン線にはこれまで同定したモード(A₁, E, F₂-modes)を図中に示した. 一方, 90–150 cm⁻¹の領域に X₁–X₅と示した 5 本のラマン線が明瞭に観測されていることが分かる. これら 5 本のラマン線における散乱強度の結晶回転角度依存性を Fig. 2 に示す. X₁, X₂ (98, 108 cm⁻¹)の散乱強度は $\theta = 45^\circ$ で極小, X₃, X₄, X₅ (118, 136, 147 cm⁻¹)は $\theta = 45^\circ$ で極大となり, これら低波数側のラマン線も散乱強度の回転角度依存性を示すことが明らかとなった. また, 図中の E-mode (295, 362 cm⁻¹) は $\theta = 45^\circ$ で極小, F₂-mode (280, 358, 380 cm⁻¹) は $\theta = 45^\circ$ で極大を示すことから, X₁, X₂は E-mode, X₃, X₄, X₅は F₂-mode と類似したラマンテンソルを有するといえる.

ジントル相である BaSi₂では, BaSi₂格子に内包される Si クラスターの原子振動が支配的であり, 200 cm⁻¹以上でその internal mode が存在すると報告されている[2]. 前回同定した A₁-, E-, F₂-modes がこれに対応する. 今回, 低振動数領域に観測した X₁–X₅は, Si クラスターの external mode, または lattice mode に由来すると考えられる. しかし, BaSi₂では Ba-Ba, Ba-Si 結合力は極めて弱いため, lattice mode より Si クラスターの external mode である可能性が高い. internal mode は原子振動, external mode は分子 (クラスター) 振動とその振動起源が異なるため, 当日はラマンシフト位置の温度依存性の結果もふまえ, X₁–X₅の起源について発表する予定である.

[1] 山口他, 第 63 回応用物理学会春季学術講演会, 21p-S223-8.

[2] M. Somer, Z. Anorg. Allg. Chem. **626**, 2478 (2000).

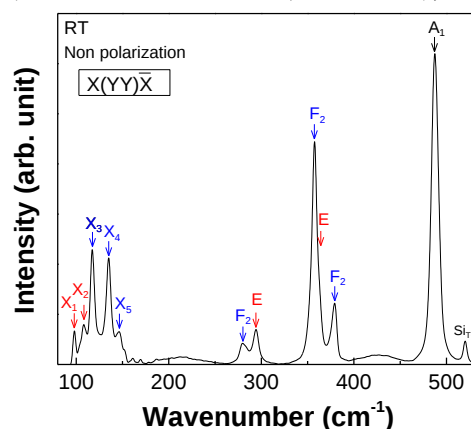


Fig. 1 Raman spectra of BaSi₂(100)/Si(001) epitaxial film.

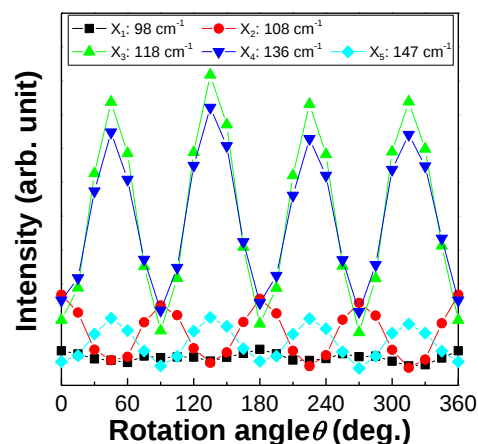


Fig. 2 θ -dependence of scattering intensities.