

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
Analysis of vibrational modes in BaSi₂ by polarized Raman spectra

鹿児島大理工¹, 九工大情報工², 筑波大数理物質³

○山口陽己¹, 村社尚紀², 山崎一輝², 尾方済人¹, 塚本裕明¹, 末益 崇³, 寺井慶和^{1,2}

Kagoshima Univ.¹, Kyushu Inst. of Tech.², Univ. of Tsukuba³

○H. Yamaguchi¹, N. Murakoso², K. Yamasaki², S. Ogata¹, H. Tsukamoto¹, T. Suemasu³, Y. Terai^{1,2}

E-mail: K4716752@kadai.jp

【はじめに】 BaSi₂ のラマンスペクトルは結晶中の Si クラスター構造(T_d)に起因し、因子群解析では A₁-mode (1), E-mode (2), F₂-mode (3)の計 6 本のラマン線が存在する．これまで、観測されたラマン線に対し分子動力学(MD)に基づいたモード同定が報告されている[1]．しかし、結晶対称性を反映する偏光ラマンスペクトルによるモード同定は行われておらず、観測されるラマン線とモードとの対応関係は明確ではない．そこで本研究では、BaSi₂(100)/Si(001)エピタキシャル膜で偏光ラマンスペクトルを測定し、その散乱強度の結晶回転角度依存性から明確なモード同定を行った．

【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[2]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 に観測されたラマンスペクトルの一例を示す． $\theta = 0^\circ$ のスペクトルから 6 本のラマン線 (図中矢印) が存在することが分かる．そして、各ラマン線の散乱強度は回転角度 θ に依存して変化した．その散乱強度の回転角度依存性を Fig. 2 に示す．2 本のラマン線(295, 362 cm⁻¹)は $\theta = 45^\circ$ で極小、3 本(280, 358, 380 cm⁻¹)は $\theta = 45^\circ$ で極大となり、4 回対称で散乱強度が変化した．また、492 cm⁻¹ のラマン線では散乱強度の回転角度依存性は非常に小さかった．以上のように、散乱強度の回転角度依存性から 3 つのグループに明確に分類可能であることが明らかとなった．

点群 T_d のラマンテンソルから求まる各モードの散乱強度の回転角度依存性 (X(YY)X⁻ 配置) は、

$$I_{A_1} = Aa^2, I_E = A(3b^2 \cos^2 2\theta + b^2), I_{F_2} = Ad^2 \sin^2 2\theta$$

(A は定数, a, b, d はラマンテンソル成分) となる． Fig. 2 の結果を上式でフィッティングし(図中の実線), モード同定した結果を Table 1 に示す．この結果は従来の報告[1]と異なっており、これは Si クラスター構造を仮定した MD 計算では BaSi₂ 母体の結晶対称性が反映されていないためと考えられる．

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

[2] K. Toh et al. Journal of Crystal Growth **345**, 16 (2012).

Table 1 Mode assignment of Raman lines in BaSi₂.

Raman line (cm ⁻¹)	Previous study [1]	This study
280, 358 and 380	E, F ₂ and F ₂	F ₂
295 and 362	E and F ₂	E
492	A ₁	A ₁

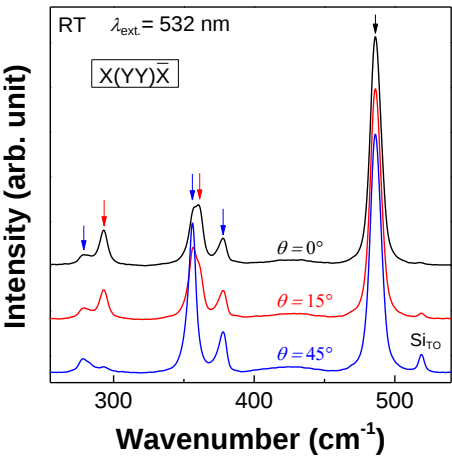


Fig. 1 Polarized Raman spectra of BaSi₂(100)/Si(001) epitaxial film.

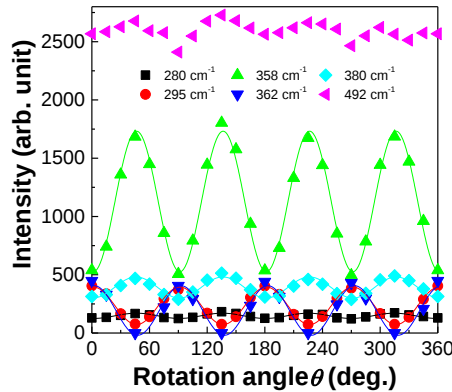


Fig. 2 θ -dependence of scattering intensities.