

赤外吸収測定による BaSi₂ エピタキシャル膜の分子振動評価

Investigation of molecular vibration in BaSi₂ epitaxial films by infrared absorption measurement

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

Kyushu Inst. of Tech.¹, Univ. of Tsukuba.² [○]H. Hoshida¹, N. Murakoso¹, M. Iinuma¹, H. Eguchi¹, T. Suemasu², Y. Terai¹

E-mail: p232211h@mail.kyutech.jp

【はじめに】 BaSi₂は斜方晶(D_{2h}^{18})の結晶対称性を有するが、Ba-Ba、Ba-Si 原子間の結合力が弱く、それに対し Si-Si 原子間の結合力が非常に強い。そのため Zintl 相と呼ばれ、その分子振動は主に結晶内に内包される Si クラスタ構造(T_d)に由来する[1]。これまで我々は、BaSi₂ エピタキシャル膜で偏光ラマンスペクトルを測定し、200–500 cm⁻¹で観測される Si クラスタ由来のラマン線のモード同定を行ってきた[2]。分子振動評価では、分極率変化を伴うラマン散乱と双極子モーメント変化を伴う赤外吸収(IR)は相補的な関係であることが知られているが、BaSi₂ エピタキシャル膜での IR による分子振動評価は行われていない。そこで本研究では、BaSi₂ エピタキシャル膜の IR スペクトルを測定し、ラマン活性と赤外活性の観点から分子振動評価を行った。

【実験方法】 今回新たに、両面鏡面の Si(001)基板の上に BaSi₂(100)エピタキシャル膜(膜厚 50 nm)を作製し、偏光ラマンスペクトルと IR スペクトルを測定した。ラマン測定では、入射電界と散乱電界が平行となるX(YY) $\bar{X}$ 配置で、散乱強度の試料回転角度依存性を測定した。IR 測定では、垂直入射の透過配置で、90–500 cm⁻¹の遠赤外領域で IR スペクトルを測定した。

【結果】

Fig.1 に偏光ラマンスペクトルの一例と IR スペクトルを示す。ラマンスペクトルでは、これまで報告した通り A_1 モード、2重縮退の E モード、3重縮退の F_2 モードの6本のラマン線を観測した。また、散乱強度の回転角度依存性もこれまでの報告と一致した。次に、IR スペクトルでは、353と374 cm⁻¹でのみ吸収ピークが観測された。この2つの吸収位置は、ラマンで観測された358、380 cm⁻¹の F_2 モードの位置とほぼ一致している。

活性(A)または不活性(I.A.)の観点で、本研究の実験結果と因子群解析の結果を Table I にまとめた。因子群解析では、 A_1 モードおよび2重縮退の E モードはIR不活性であり、3重縮退の F_2 モードがIR活性となる。しかし、本研究では358と380 cm⁻¹の F_2 モードのみ観測され、280 cm⁻¹の F_2 モードがIR不活性という因子群解析と実験結果の相違がある。よって、BaSi₂中のSiクラスタは完全な(T_d)対称性を有していないことが明らかとなった。因子群解析では、 F_2 モードのラマンテンソルは $F_2(x)$ 、 $F_2(y)$ 、 $F_2(z)$ に分類されるが、実験ではこの中の1つがIR不活性となっている。よって、ヘテロ界面で発生するひずみなどにより、BaSi₂中のSiクラスタがある一方向にのみひずんでいる可能性がある。

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

[2] Y. Terai, *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **56**, 05DD02 (2017).

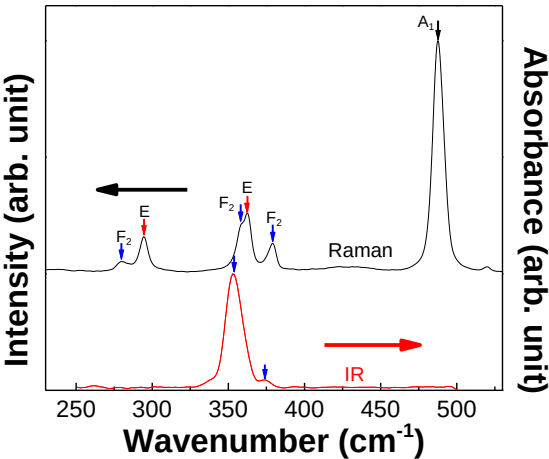


Fig.1 Polarized Raman and IR spectra in BaSi₂.

Table I Summary of Raman and IR spectra.
(A : active, I.A. : inactive.)

mode	Factor analysis of T_d symmetry		Experimental result in this study	
	Raman	IR	Raman	IR
A_1	A	I.A.	A 488 cm ⁻¹	I.A.
E (2)	A	I.A.	295 cm ⁻¹	I.A.
			362 cm ⁻¹	
F_2 (3)	A	A	280 cm ⁻¹	I.A.
			358 cm ⁻¹	A
			380 cm ⁻¹	
				353 cm ⁻¹
				374 cm ⁻¹