

- [3] Винокур В. М., Кравченко В. Я. // ФТП. 1975. Т. 9. В. 7. С. 1346—1350.
 [4] Read W. T. // Phil. Mag. 1954. V. 45. P. 775—786.
 [5] Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М., 1978. 615 с.

Институт физики твердого тела
 АН СССР
 Черногловка

Получено 3.10.1990
 Принято к печати 9.10.1990

ФТП, том 25, вып. 6, 1991

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ИК СПЕКТРЫ SiAs

Сырбу Н. Н., Хачатурова С. Б., Олиференко Н. М.,
 Бурка А., Лукин А. Н.

Для изготовления материалов *n*-типа проводимости кремний легируется фосфором и мышьяком. В литературе имеется большое количество исследований донорных примесей в кремнии. Обычно концентрация As и P в кремнии значительно меньше 1 % от химического состава, что не ведет к значительным изменениям в кристаллической структуре. Однако, если добавить в большое количество As и P в кремний, то в Si образуются комплексы, соответствующие соединениям SiAs, SiAs₂ или SiP [1-4]. Колебательные моды этих соединений могут сказываться и в сильно легированных слоях кремния как молекулярные включения. Исследованию полупроводниковых свойств этих материалов посвящен ряд работ [5-8]. Исследования колебательных спектров в ИК области нам не известны.

В данной работе исследованы оптические спектры поглощения и отражения в поляризованном свете монокристаллов SiAs в однофононной и двухфононной области поглощения, рассчитаны контуры спектров в многоосцилляционной модели и определены параметры ИК активных фононов в области 500—50 см⁻¹.

Монокристаллы, выращенные методом Бриджмена, имели сантиметровые размеры и зеркальные гладкие сколы. Измерения проведены на спектрометрах Specord M-80 и вакуумном спектрометре КСДИ-82.

Спектры отражения монокристаллов SiAs представлены на рис. 1, а и 2, а. В обеих поляризациях спектры отражения содержат ярко выраженные пики, характерные для осцилляторов с сильной поляризацией. Для ориентации E || b в SiAs наблюдаются две сильные полосы в области 350—400 см⁻¹, а

Параметры фононов SiAs

Поляризация	Мода	ν_{oj} , см ⁻¹	ν_{Lj} , см ⁻¹	ν_{Lj} , см ⁻¹	Γ , см ⁻¹	$\epsilon_{\infty j}$	$4\pi f_j$	ϵ_{∞}	ϵ_s
E C	1	122	6.0	128	7.2	12.1	0.200	$\epsilon_{\infty}=7.7$	$\epsilon_s=9.2$
	2	135.5	1.5	137.0	1.0	17.6	0.160		
	3	174.4	14.4	188.6	31.0	17.2	3.0		
	4	361.2	3.2	364.4	6.3	10.8	0.176		
	5	374.1	9.5	383.6	4.0	22.0	0.515		
E ⊥ C	1	68	12	80	35	4.9	3.3	$\epsilon_{\infty}=5.8$	$\epsilon_s=9.4$
	2	102	18	120	35	4.8	3.3		
	3	142	10	152	4.8	3.7	0.6		
	4	181	12	193	5.1	3.6	0.7		
	5	204	15	219	32	4.8	3.1		
	6	268.9	5.7	274.6	3.8	5.6	0.277		
	7	313.5	2.0	315.5	4.6	4.6	0.083		
	8	321.0	3.6	394.6	2.99	6.3	0.121		
	9	400.4	1.5	401.9	3.8	3.8	0.049		
	10	423.0	1.3	424.3	7.2	4.9	0.036		

в $E \perp C$ — полосы в области 380—450 см^{-1} . В поляризации $E \parallel b$ в кристаллах SiAs ИК активными являются полосы 1—5 (рис. 1, а) и в поляризации $E \perp b$ активны 1—10 (рис. 2, а).

Для определения оптических констант SiAs в области однофононного резонанса использовалась многоосцилляторная модель, в которой дисперсия диэлектрической проницаемости в исследуемой области частот описывается выражением

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_{j=1}^N \frac{\varepsilon_\infty(\omega_{ij}^2 - \omega_{tj}^2)}{\omega_{ij}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_j},$$

где, ε_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость кристалла, N — количество осцилляторов, Γ_j , ω_{ij} и ω_{tj} — затухание, продольные и поперечные

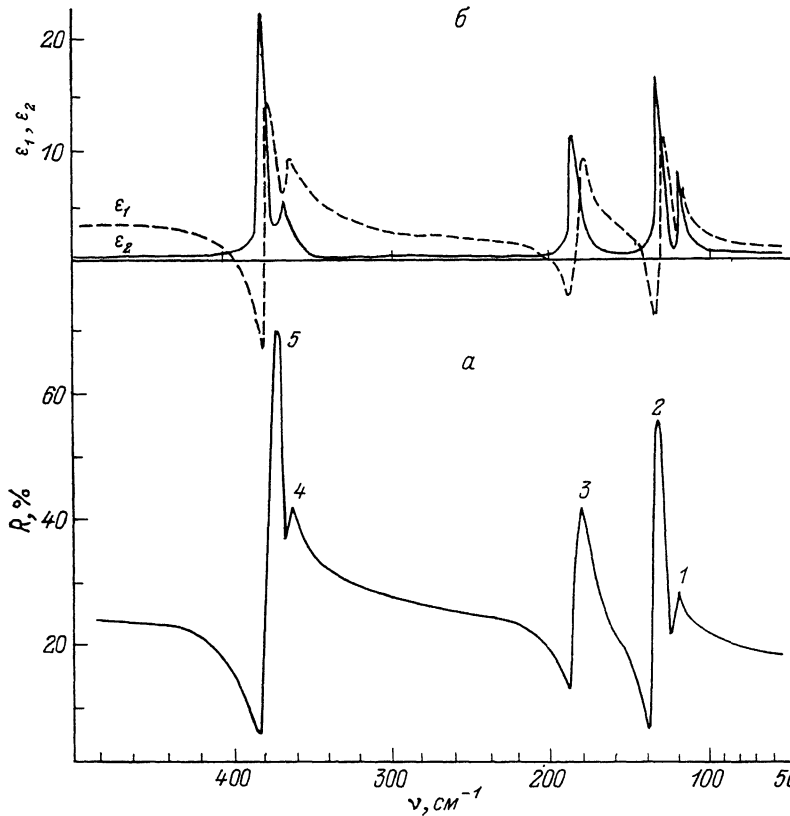


Рис. 1.

резонансные частоты оптических колебаний j -го осциллятора. Коэффициент отражения при этом определен как $R(\omega) = \left| \frac{n(\omega) - 1}{n(\omega) + 1} \right|^2$, $n(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)}$. Хорошее совпадение экспериментальных данных с расчетными наблюдается при значениях параметров фононов, приведенных в таблице. Частотные зависимости вещественной $\varepsilon_1(\omega)$ и мнимой $\varepsilon_2(\omega)$ частей диэлектрической проницаемости SiAs представлены на рис. 1, б и 2, б. Полученные значения диэлектрической постоянной в высокочастотной области удовлетворительно совпадают с данными [8, 9].

Монокристаллы SiAs обладают моноклинной решеткой с пространственной группой C_{2h}^5 или C^2/m с параметрами кристаллической решетки $a=15.98 \text{ \AA}$, $b=3.660 \text{ \AA}$, $c=9.529 \text{ \AA}$ и $\beta=106^\circ$, $V=537 \text{ \AA}^3$. В элементарной ячейке содержится 12 формульных единиц. Структура слоистая, каждый слой состоит

из искаженных октаэдров мышьяка, соединенных острями. Внутри октаэдров имеется по два атома кремния, каждый из которых окружен как элемент 4-й группы, т. е. имеет тетраэдрически расположенные три атома мышьяка и один атом кремния.

Кристаллы SiAs моноклинной решетки и пространственной группы C_{2h}^3 имеют критические точки фононного спектра Γ , Y , U , R , λ и G . Неприводимые представления фононных колебаний в центре зоны Бриллюэна имеют вид

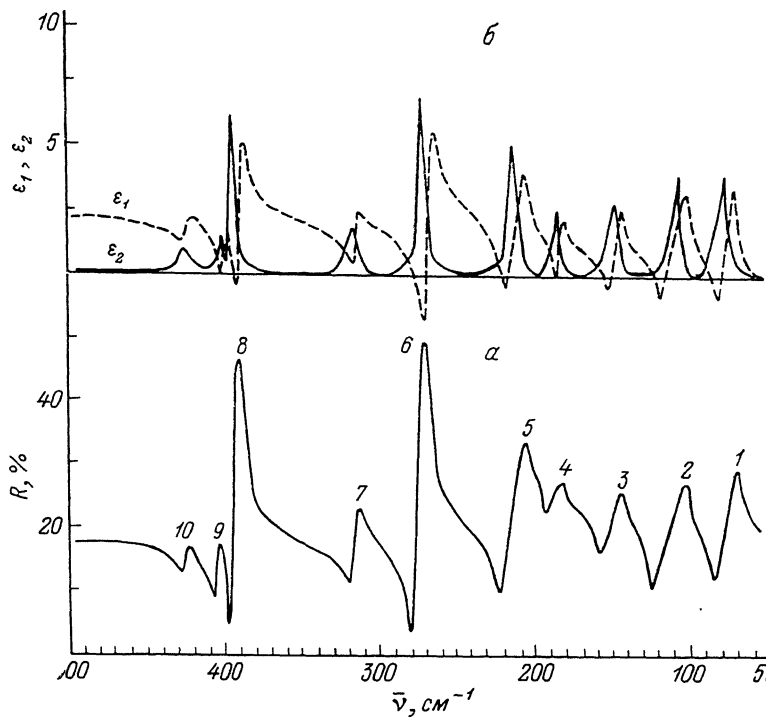


Рис. 2.

$\Gamma=18 A_g+18 B_g+18 A_u$ и $18 B_u$. В однофононных ИК спектрах могут проявиться 17 фононов симметрии A_u и 16 фононов симметрии B_u в поляризациях $E \parallel b$ и $E \perp b$ соответственно. В таблице приведены параметры фононов симметрии A_u и B_u в кристаллах SiAs.

Таким образом, для определения локальных колебательных мод комплексов SiAs в Si, легированных до высоких концентраций мышьяком, наиболее чувствительными окажутся колебательная полоса в области $170-220 \text{ см}^{-1}$ и полосы в интервале $360-400 \text{ см}^{-1}$.

Список литературы

- [1] Wadsten T. // Acta Chem. Scand. 1965. V. 19. N 3. P. 1238—1239.
- [2] Chu T., Kelm R., Jr., Chu S. // J. Appl. Phys. 1971. V. 42. N 3. P. 1169—1173.
- [3] Ing S., Chiang J., Haas W. // J. Electrochem. Soc. Sol. St. Sci. 1967. V. 7. N 3. P. 761—762.
- [4] Nagishi T., Ogowa K., Kunioko A. // Danki Cakkei Rombunsi. 1976. V. 96-A. N 7. P. 295—301.
- [5] Beck G., Stickler R. // J. Appl. Phys. 1966. V. 37. N 13. P. 4683—4687.
- [6] Miller L., Kannewurf G. // J. Phys. Chem. Sol. 1970. V. 31. N 6. P. 849—855.
- [7] Домашенская Э. П., Угай Л. А., Мирошниченко С. Н. и др. // Изв. АН СССР. Неорг. матер. 1974. Т. 10. В. 4. С. 731—732.
- [8] Радауцан С. И., Сырбу Н. Н., Лукин А. Н., Кюсов В. К., Фарберова О. В. // ФТП. 1978. Т. 12. В. 1. С. 43—46.
- [9] Kunioko A., Nok K., Sakai I. // J. Appl. Phys. 1974. V. 44. N 4. P. 1711—1792.