

Полярные оптические фононы в сверхрешетках Si/SiO₂

© М.Б. Смирнов¹, Н.Р. Григорьева¹, Д.В. Панькин¹, Е.М. Рогинский², А.В. Савин²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
194034 Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: n.r.grigorieva@spbu.ru

Поступила в Редакцию 26 декабря 2023 г.
В окончательной редакции 20 января 2024 г.
Принята к публикации 20 января 2024 г.

Изучены диэлектрические свойства планарных гетероструктур Si/SiO₂, играющих важную роль в современной электронике. С применением модели диэлектрического континуума исследованы спектры полярных оптических фононов в бинарных сверхрешетках Si/SiO₂. В качестве структурной модели оксидного слоя рассмотрены решетки кварца и кристобалита. Получены зависимости частот полярных оптических фононов и значения элементов тензора высокочастотной диэлектрической проницаемости от отношения толщин слоев. Полученные результаты открывают возможность использования спектроскопических данных для характеристики структуры сверхрешеток.

Ключевые слова: оксид-полупроводниковые гетероструктуры, сверхрешетки, компьютерное моделирование, модель диэлектрического континуума, колебательные спектры.

DOI: 10.61011/FTP.2024.01.57631.5900

1. Введение

Знание микроскопической структуры интерфейса Si/SiO₂ могло бы привести к улучшению качества разнообразных устройств, в которых используется последовательность гетеропереходов металл-оксид-полупроводник. Однако, несмотря на многолетние исследования с использованием разнообразных экспериментальных методик [1], детальная атомная структура этого интерфейса остается до настоящего времени практически неизвестной. Трудность заключается в том, что структура связей на этой границе соединяет идеально упорядоченный кристалл кремния с полностью разупорядоченной аморфной фазой оксида. Для понимания связи между структурой и свойствами таких объектов необходимо привлекать теоретические методы, основанные на квантово-механических расчетах. В подавляющем большинстве таких исследований моделью плоского интерфейса Si/SiO₂ служили сверхрешетки (СР) — периодические слоистые гетероструктуры [2]. Это позволяло использовать вычислительные программы, предназначенные для изучения трехмерных кристаллических структур. Впоследствии были развиты различные методы роста бинарных СР [3], и они стали объектом интенсивных экспериментальных исследований [4,5].

Значительные усилия были затрачены на поиски метода мониторинга качества интерфейса в выращенных образцах. Одним из таких методов может служить колебательная спектроскопия, которая зарекомендовала себя как эффективный и информативный инструмент исследования полупроводниковых СР [6]. Однако эффективное применение колебательной спектроскопии возможно лишь при условии наличия надежно установленной схемы отнесения наблюдаемых спектральных

линий к характеристическим колебательным модам типичных структурных фрагментов. Разработка такой схемы невозможна без использования теоретических расчетов фононного спектра. Предшествующие теоретические исследования в основном были посвящены изучению пространственного и электронного строения СР Si/SiO₂ и не касались колебательных состояний этих систем. Первые попытки таких исследований, основанных на использовании метода функционала плотности, появились сравнительно недавно [7,8].

Однако использование высокоточных квантово-механических расчетов в моделировании структуры и колебательных спектров гетероструктур ограничено трудоемкостью таких расчетов. Были предприняты поиски иных подходов, менее точных, но физически содержательных и применимых к большим системам. Одно из таких направлений связано с моделью диэлектрического континуума (МДК). Впервые модель диэлектрического континуума была предложена С.М. Рытовым в статье [9] для описания распространения радиоволн в мелкослойной среде. Идея применения этой модели к описанию фононов в СР была высказана в начале 80-х годов прошлого века [10]. Первые применения ограничивались рассмотрением изотропных сред (случай кубических арсенидных кристаллов) [11]. Вскоре после появления технологии выращивания нитридных СР (конец 90-х годов) была опубликована серия работ, в которых МДК обобщалась на случай СР, построенных из анизотропных сред [12].

Модель диэлектрического континуума представляет собой квазиклассическую континуальную модель, предназначенную для описания поведения полярных оптических фононов в пространственно неоднородных системах. В рамках МДК полярные фононы описываются как

волну поляризации, которая сопровождается электрическим полем:

$$\mathbf{E} \sim \exp(i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + i \omega t). \quad (1)$$

В рамках данной модели пренебрегают эффектами запаздывания, т.е. рассматривают гармонически осциллирующие во времени электростатические поля, к которым применимо классическое описание, основанное на уравнениях Максвелла для системы без свободных зарядов:

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = 0, \operatorname{div} \mathbf{D} = 0, \mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}. \quad (2)$$

Гетероструктуру, состоящую из нескольких областей, заполненных разными кристаллическими соединениями, рассматривают как сплошную среду, диэлектрическая проницаемость которой в данной точке пространства определяется диэлектрической функцией соответствующего кристалла:

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{q}) = \varepsilon^\infty \prod_k \frac{\omega_{\text{LO},k}^2(\mathbf{q}) - \omega^2}{\omega_{\text{TO},k}^2(\mathbf{q}) - \omega^2}. \quad (3)$$

Выражение (3) справедливо в пределе $\mathbf{q} \rightarrow 0$. В нем индекс k нумерует полярные фононные моды, а символами $\omega_{\text{LO},k}$ и $\omega_{\text{TO},k}$ обозначены частоты продольных и поперечных мод в направлении, заданном вектором \mathbf{q} . Рассматриваемые в данной работе оксидные кристаллы анизотропны, поэтому частоты полярных фононов для разных направлений \mathbf{q} имеют разные значения, меняясь в пределах ТО и ЛО значений (см. табл. 1 и 2).

Рассмотрим бинарную СР, состоящую из периодически чередующихся слоев с толщинами d_1 и d_2 и диэлектрическими функциями ε_1 и ε_2 . Если принять, что направление чередования слоев гетероструктуры соответствует оси z , то в длинноволновом пределе (когда $1/q \gg d_1, d_2$) значения компонент диэлектрической постоянной, усредненной по СР, будут определяться выражениями [11]:

$$\langle \varepsilon_{xx} \rangle = \frac{1}{d} (d_1 \varepsilon_{xx,1} + d_2 \varepsilon_{xx,2}), \quad (4)$$

$$\left\langle \frac{1}{\varepsilon_{zz}} \right\rangle = \frac{1}{d} \left(\frac{d_1}{\varepsilon_{zz,1}} + \frac{d_2}{\varepsilon_{zz,2}} \right), \quad (5)$$

где $d = d_1 + d_2$ — период СР. Напомним, что в рамках МДК рассматривают частотно-зависимую диэлектрическую функцию. В области частот, соответствующих фононам, поляризованным перпендикулярно оси СР, выполняется соотношение (4). Из соотношения (4) следует, что условие $\langle \varepsilon_{xx} \rangle = \infty$ может выполняться либо в случае $\varepsilon_{xx,1} = \infty$, либо в случае $\varepsilon_{xx,2} = \infty$. Это означает, что в слоистой гетероструктуре ТО-фононы, поляризованные перпендикулярно оси СР, локализованы в отдельных слоях. В области частот, соответствующих фононам, поляризованным вдоль оси СР, выполняется соотношение (5). Из соотношения (5) следует, что условие $\langle \varepsilon_{zz} \rangle = 0$ может выполняться либо в случае $\varepsilon_{zz,1} = 0$, либо в случае $\varepsilon_{zz,2} = 0$. Это означает, что

в слоистой гетероструктуре ЛО-фононы, поляризованные вдоль оси СР, локализованы в отдельных слоях. Эти выводы нашли подтверждение в экспериментальных спектрах нитридных СР. Отметим, что волновой вектор ТО-фононов, поляризованных перпендикулярно оси СР, и ЛО-фононов, поляризованных вдоль оси СР, направлен по z , т.е. в обоих случаях речь идет о фононах, распространяющихся вдоль оси СР. Такие фононы всегда локализованы в слоях определенного типа. Частоты таких фононов несут информацию о состоянии материалов в разных слоях, в частности о существующих в них упругих деформациях. Но они мало информативны для анализа структуры СР — отношения толщин слоев и состояния интерфейса.

В этом отношении значительно больший интерес представляют фононы, распространяющиеся перпендикулярно оси СР, т.е. в плоскости интерфейса. К ним относятся ТО-фононы, поляризованные вдоль оси СР, частоты которых, согласно (5), удовлетворяют соотношению

$$d_2 \varepsilon_{zz,1} = -d_1 \varepsilon_{zz,2}, \quad (6)$$

и ЛО-фононы, поляризованные перпендикулярно оси СР, частоты которых, согласно (4), удовлетворяют соотношению

$$d_1 \varepsilon_{xx,1} = -d_2 \varepsilon_{xx,2}. \quad (7)$$

Подставляя в уравнения (6)–(7) функции (3) с параметрами, определенными по спектрам изолированных объемных кристаллов, и задав отношение d_1/d_2 , можно получить значения частот фононов, распространяющихся в плоскости интерфейса. Частоты таких фононов проявляют сильную зависимость от отношения толщин слоев, что подтверждает их делокализованный характер.

2. Результаты

Модель диэлектрического континуума (МДК), широко применявшаяся в исследованиях колебательных спектров арсенидных и нитридных СР, была нами опробована в применении к СР Si/SiO₂. Специфика данных структур в том, что в одном из материалов, а именно в кристаллическом кремнии, отсутствуют полярные фононные моды. Как следствие, в области фононных частот диэлектрическая функция не зависит от частоты и равна ε^∞ . В применении МДК к таким СР предполагается, что ионная поляризация, связанная со смещениями атомов, всегда локализована в слоях SiO₂, а в кремниевых слоях присутствует только электронная поляризация. Тем не менее наличие диэлектрических (кремниевых) слоев влияет на полярные колебания в оксидных слоях. Частоты таких связанных фонон-фотонных состояний (поляритонов) как раз и определяются уравнениями (6)–(7).

2.1. Модели интерфейсов Si/SiO₂

При построении модели интерфейса в планарной гетероструктуре важным фактором является сочетае-

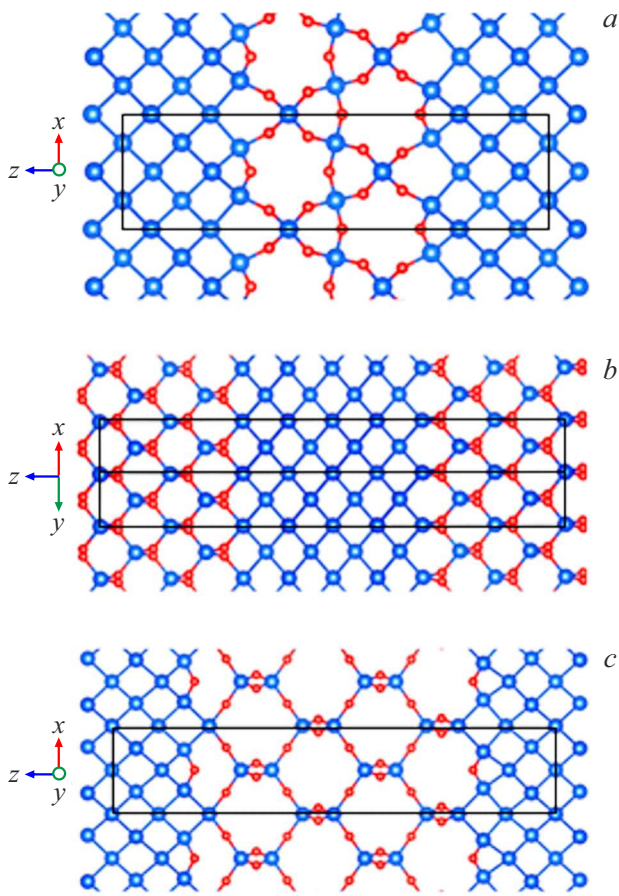


Рис. 1. Расположение атомов кремния (кружки большого радиуса) и кислорода (кружки малого радиуса) в СР с интерфейсами типа: *a* — Q, *b* — C1, *c* — C2. Черной линией выделена граница сверхъединицы СР, направления векторов трансляции которой приводятся слева.

мость размеров решеток на срачиваемых поверхностях двух кристаллов. В идеально сочетающихся материалах позиции атомов Si в слипающихся плоскостях должны совпадать. Если они не совпадают, но поверхностные плотности таких позиций близки, то материалы могут срастись путем незначительных упругих деформаций. Если поверхностные плотности сильно различны, то срастить такие поверхности невозможно.

Мы исходили из надежно установленного многими экспериментами факта того, что кремний всегда структурирован в кубической алмазоподобной решетке. Перебрав разные варианты выбора поверхности в основных модификациях кремнезема (кварце, кристобалите и тридимите), мы нашли четыре варианта, способных привести к образованию устойчивого интерфейса. Изучив релаксированную структуру каждого из этих интерфейсов и оценив соответствующие энергии образования, мы остановили свой выбор на трех моделях — одной с кварцем (Q) и двух с кристобалитом (C1 и C2). Фрагменты СР с такими интерфейсами показаны на рис. 1.

Интерфейс C1 получается при прямом срачивании поверхностей (001) кристаллов Si и кристобалита. Нами было показано [7], что, несмотря на значительное расхождение в расстояниях Si-Si на этих поверхностях, их прямое срачивание представляется вполне реалистичным, вследствие необычайной мягкости решетки кристобалита относительно сжатия в плоскости (001). Интерфейс C1 предельно тонкий, состоит из одного слоя атомов Si²⁺. Интерфейс C2 получен срачиванием тех же поверхностей с поворотом одного из кристаллов на 45°. Вследствие такого поворота расположение позиций Si на срачиваемых поверхностях становятся близкими, но позициям Si на поверхности оксида будет соответствовать лишь половина позиций Si на поверхности кремния. При таком соединении половина интерфейсных атомов Si оказывается с двумя оборванными связями. Это сильный дефект, наличие которого делает структуру неустойчивой. Было предложено заменять такие атомы Si атомами O, что приводит к формированию дополнительных мостиков Si-O-Si в интерфейсном слое [8]. Интерфейс C2 состоит из двух монослоев из атомов Si²⁺ и Si¹⁺. Такие Si-O-Si мостики присутствуют и в области интерфейса Q, который, как и C1, состоит всего из одного монослоя Si²⁺.

2.2. Полярные фононы в СР Si/SiO₂

Чтобы применить МДК к рассматриваемым СР, надо описать спектр полярных фононов, поляризованных вдоль и поперек интерфейса. В гетероструктурах с интерфейсами C1 и C2 (см. рис. 1, *b* и *c*) предполагается, что оксидный материал имеет структуру, близкую к тетрагональной модификации кристобалита, так называемому β -кристобалиту с пространственной группой $I\bar{4}2d$ [13]. При этом главная кристаллографическая ось тетрагонального кристобалита совпадает с направлением роста гетероструктуры. Напомним, что кристаллическая решетка β -кристобалита принадлежит кристаллическому классу D_{2d} . Следовательно, к полярным фононам, распространяющимся в плоскости интерфейса, в этих структурах относятся моды $B_2(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$. Частоты полярных фононов в β -кристобалите приведены в табл. 1.

В модели гетероперехода с интерфейсом Q (см. рис. 1, *a*) материал оксидного слоя кристаллизован в структуре α -кварца с главной осью, направленной вдоль интерфейса. Напомним, что кристаллическая решетка кварца принадлежит кристаллическому классу D_3 . Следовательно, к полярным фононам, распространяющимся в плоскости интерфейса, в структурах типа Q относятся моды $A_2(\text{LO})$ и $E(\text{TO})$. Частоты полярных фононов в кварце приведены в табл. 2.

Для β -кристобалита нет экспериментальных оценок ϵ^∞ . Поэтому мы использовали теоретически рассчитанное нами значение (см. табл. 1). Приведенное в табл. 2 значение ϵ^∞ для кварца для более точного

Таблица 1. Параметры полярных фононов в β -кristобалите из работы [14]

	TO, cm^{-1}	LO, cm^{-1}
B_2 -моды	422	497
$E \parallel z$	1063	1216
	130	134
E -моды	443	482
$E \perp z$	765	796
	1073	1212
ϵ^∞	2.205	

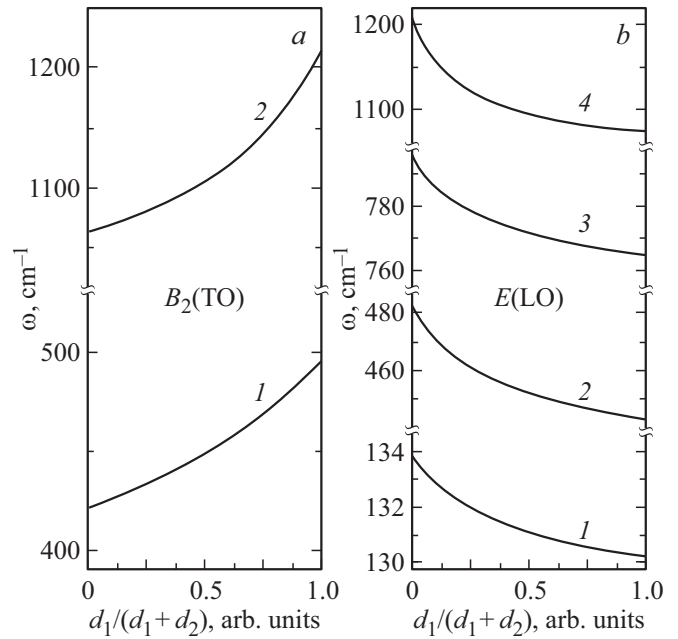
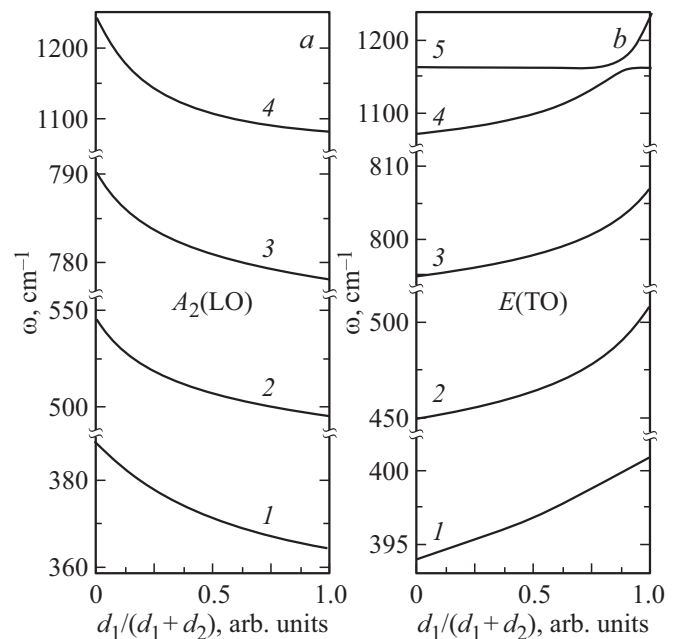
Таблица 2. Параметры полярных фононов в α -кварце из работы [15]

	TO, cm^{-1}	LO, cm^{-1}
A_2 -моды	364	388
$E \perp z$	495	547
	778	790
	1080	1240
	128	128
	265	265
	394	401
E -моды	450	509
$E \parallel z$	697	697
	795	807
	1072	1162
	1162	1235
ϵ^∞	2.172	

предсказания взяты из экспериментальных данных работы [16]. Значение ϵ^∞ в кубическом кристалле кремния мы положили равным экспериментально определенному значению 11.7 [17].

Как отмечалось выше, частоты фононов, распространяющихся в плоскости интерфейса и поляризованных вдоль оси CP, удовлетворяют уравнению (6). К ним относятся $B_2(\text{TO})$ -моды в CP кремний/кristобалит и $E(\text{TO})$ -моды в CP кремний/кварц. Вместе с тем частоты фононов, распространяющихся и поляризованных в плоскости интерфейса, удовлетворяют уравнению (7). К ним относятся $E(\text{LO})$ -моды в CP кремний/кristобалит и $A_2(\text{LO})$ -моды в CP кремний/кварц. При этом будем иметь в виду, что в данной работе мы не рассматриваем полярные фононы с волновым вектором, направленным вдоль оси CP, к которым относятся $B_2(\text{LO})$ - и $E(\text{TO})$ -моды кристобалита, а также $A_2(\text{TO})$ - и $E(\text{LO})$ -моды в кварце.

Решив уравнения (6) и (7) при разных соотношениях d_1 и d_2 , мы определили частоты перечисленных выше фононов в зависимости от соотношения толщин слоев. В качестве характеризующего CP структурного параметра мы выбрали безразмерную величину

**Рис. 2.** Частоты полярных фононов в CP с интерфейсами C1 и C2 в зависимости от отношения толщин слоев: d_1 — толщина слоя Si, d_2 — толщина слоя SiO₂. Полярным фононам $B_2(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$ соответствуют случаи a и b.**Рис. 3.** Частоты высокочастотных полярных фононов в CP с интерфейсами типа Q в зависимости от отношения толщин слоев. Полярным фононам $A_2(\text{LO})$ и $E(\text{TO})$ соответствуют случаи a и b.

$p = d_1/(d_1 + d_2)$. Если учесть, что индекс 1 соответствует Si, то становится понятным, что пределы $p = 0$ и $p = 1$ соответствуют случаям чистого SiO₂ и чистого Si соответственно. Результаты приведены на рис. 2 и 3.

Таблица 3. Диагональные компоненты диэлектрического тензора серии CP Si/Q с разными значениями d_1 (Si) и d_2 (SiO₂)

SL	$\varepsilon(\text{calc})$			$d_1, \text{Å}$	$d_2, \text{Å}$	$\varepsilon(\text{МДК})$	
	ε_x	ε_y	ε_z			ε_x	ε_y
2×1	8.344	8.108	4.382	10.834	8.872	8.470	4.463
1×1	6.323	6.082	3.487	5.380	8.888	6.582	3.554
1×2	4.897	4.634	2.955	5.401	17.666	5.019	3.041

2.3. Анизотропия показателя преломления в CP

В предшествующей части статьи мы использовали идеи МДК применительно к полярным фононам. Однако основные уравнения этой модели (уравнения (4)–(5)) одинаково применимы и к иным типам возбуждений. В частности, с их помощью можно описывать распространение световых волн в нерезонансном частотном интервале. При таком подходе уравнения (4)–(5) можно рассматривать как соотношения, позволяющие оценить элементы тензора диэлектрической постоянной CP через значения диэлектрической проницаемости составных материалов и структурных параметров d_1 и d_2 .

В отсутствии экспериментальных данных по диэлектрическим постоянным идею такого подхода можно проверить, используя результаты неэмпирических квантовомеханических расчетов. Все рассматриваемые выше CP были предметом теоретических исследований, детали которых описаны в работах [7,8,14]. В качестве примера рассмотрим результаты таких расчетов для CP кремний/кварц (Si/Q). Теоретически, с помощью компьютерного моделирования была изучена структура, колебательные спектры и диэлектрические восприимчивости серии CP Si/Q с различными толщинами слоев. Рассчитанные значения диагональных элементов диэлектрического тензора таких CP в рамках квантовомеханического подхода показаны в табл. 3 как $\varepsilon(\text{calc})$.

Можно видеть, что для всех CP значения поперечных поляризуемостей (ε_x , ε_y) близки и заметно выше значения продольной поляризуемости (ε_z). С ростом толщины оксидного слоя все компоненты тензора заметно понижаются. В поисках объяснений этих тенденций мы обратились к МДК.

Значения тех же величин были оценены с помощью формул (4)–(5). При применении этих соотношений мы использовали теоретические оценки диэлектрических постоянных объемных кристаллов: для кремния $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_z = 13.391$ и для кварца $\varepsilon_x = \varepsilon_y = 2.489$, $\varepsilon_z = 2.458$. Рассчитанные с помощью формул (4)–(5), значения диагональных элементов диэлектрического тензора таких CP показаны в табл. 3 как $\varepsilon(\text{МДК})$. Можно видеть, что они неплохо согласуются с расчетом. Таким образом, можно утверждать, что модель диэлектрического континуума позволяет воспроизвести как анизотропию тензора диэлектрической проницаемости

CP, так и изменения этой величины при изменении отношения толщин слоев. Насколько нам известно, этот результат — пример первого применения МДК к описанию высокочастотной составляющей диэлектрической функции бинарных CP.

3. Обсуждение

Прежде всего обратим внимание на общую закономерность в полученных результатах: с ростом значения p частоты ТО-мод возрастают, а частоты ЛО-мод убывают. При этом в пределе $p = 0$ (т.е. в случае бесконечно тонких кремниевых слоев или, иначе, в случае их отсутствия) частоты полярных мод CP принимают значения соответствующих мод в объемных оксидных кристаллах. Это выглядит логично и физически содержательно. В другом предельном случае $p = 1$ (т.е. в случае бесконечно тонких оксидных слоев или, иначе, в случае чередования толстых кремниевых слоев и тонких оксидных пленок) частоты полярных мод CP стремятся к значениям альтернативных мод в объемных оксидных кристаллах: частоты ТО-мод стремятся к частотам ЛО-мод и наоборот. На первый взгляд, такое поведение выглядит странным. Напомним, однако, что подобный эффект наблюдался в спектрах CP AlAs/GaAs [18]. В отличие от рассматриваемых нами CP, в арсенидных CP полярные фононы есть в обоих материалах, но соответствующие им частотные интервалы сильно разнесены. В результате оптические колебания атомов в соседних слоях слабо смешиваются и все моды делятся на AlAs-like и GaAs-like. Именно эти ТО- и ЛО-подобные моды зависят от отношения толщин слоев так же, как фононы в CP Si/SiO₂.

Объяснение наблюдаемому взаимному превращению ТО- и ЛО-мод можно предложить, если учесть, что каждая из таких мод локализована в одном слое (в нашем случае это всегда слой SiO₂), и принять во внимание то, что задача становится эквивалентной задаче о полярных колебательных состояниях атомов в образце, имеющем форму плоскопараллельной пластины (slab). Такая задача подробно изучалась как теоретически [19], так и экспериментально. Один из результатов таких исследований состоял в том, что в пределе бесконечно тонкой пластины ТО-колебания, поляризованные перпендикулярно плоскости пластины, превращаются в ЛО-колебания, а ЛО-колебания, поляризованные параллельно плоскости пластины, превращаются в ТО-колебания. Это в точности соответствует ситуации в CP Si/SiO₂.

Подчеркнем еще раз, что рассматриваемые в данной работе гетероструктуры отличаются от изученных ранее бинарных полупроводниковых CP (таких как GaAs/AlAs или GaN/AlN) тем, что в материале одного из слоев, а именно в кремнии, вообще нет полярных фононов. Поэтому, утверждая, что в предельном случае, когда толщина другого слоя (в данном случае — оксидного) стремится к нулю, спектр полярных фононов в таких CP

должен превратиться в спектр кремния. Иными словами, мы должны понимать, что в действительности спектр должен вообще исчезнуть, а это означает, что интенсивности всех мод должны стать нулевыми. Какой физический смысл имеют моды, частоты которых показаны на рис. 2 и 3 в пределе $p \rightarrow 1$? Случай $p \rightarrow 1$ соответствует гетеросистеме с массивными слоями кремния, разделенными очень тонкими оксидными пленками. В материале пленок есть полярные колебания и их спектр весьма анизотропен. Значениям кривых на рис. 2 и 3 при $p \rightarrow 1$ как раз и соответствуют частоты полярных колебаний в тонких оксидных пленках, разделяющих толстые слои кремния. Интенсивность таких мод пропорциональна толщине пленок и в пределе $p \rightarrow 1$ убывает.

4. Заключение

От структуры интерфейса в гетероструктурах Si/SiO₂ в значительной мере зависят электрооптические характеристики функциональных элементов в кремниевой электронике. Вопрос о быстром неразрушающем методе контроля качества таких интерфейсов имеет принципиальное значение. Одним из таких методов может быть колебательная спектроскопия. В данной работе рассмотрена возможность применения метода диэлектрического континуума к исследованию спектров полярных оптических фононов в сверхрешетках Si/SiO₂ с несколькими типами интерфейсов.

Учитывая отсутствие полярных фононов в кристалле Si, нами предложена модификация математического аппарата метода диэлектрического континуума к системам, в которых диэлектрические свойства одного из материалов описываются функцией без дисперсии. Рассмотрены решения полученных уравнений для двух основных структурных моделей гетероперехода Si/SiO₂, основанных на представлении оксида в форме β -кристобалита и α -кварца. Установлено, что в сверхрешетках Si/SiO₂ есть полярные моды, локализованные в толще оксидного слоя: в гетеросистемах Si/кристобалит это полярные моды $B_2(\text{LO})$ и $E(\text{TO})$, а в сверхрешетках Si/кварц это полярные моды $A_2(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$. Вместе с тем в тех же системах есть другие полярные моды, локализованные в области интерфейса: в сверхрешетках Si/кристобалит это полярные моды $B_2(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$, а в сверхрешетках Si/кварц это полярные моды $A_2(\text{LO})$ и $E(\text{TO})$. В короткопериодных сверхрешетках частоты мод последнего типа зависят от отношения толщин слоев и могут быть использованы в качестве спектроскопического зонда структуры исследуемых образцов. Полученные результаты показали физическую содержательность и прогностическую ценность предложенного подхода.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-22-20021) и Санкт-Петербур-

бургского научного фонда (проект № 32/2022) с использованием ресурсов Вычислительного центра Научного парка Санкт-Петербургского государственного университета и Вычислительного центра ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] S.T. Pantelides, S. Wang, A. Franceschetti, R. Buczko, M. Di Ventra, S.N. Rashkeev, L. Tsetseris, M.H. Evans, I.G. Batyrev, L.C. Feldman, S. Dhar, K. McDonald, R.A. Weller, R.D. Schrimpf, D.M. Fleetwood, X.J. Zhou, J.R. Williams, C.C. Tin, G.Y. Chung, T. Isaacs-Smith, S.R. Wang, S.J. Pennycook, G. Duscher, K. van Benthem L.M. Porter. *Mater. Sci. Forum*, **527–529**, 935 (2006).
- [2] Z.H. Lu, D.J. Lockwood, J.-M. Baribeau. *Nature*, **378**, 258 (1995).
- [3] N. Liu, J. Sun, S. Pan, Z. Chen, W. Shi, R. Wang, X. Wang. *Optics Commun.*, **176**, 239 (2000).
- [4] T. Zheng, Z. Li. *Superlatt. Microstruct.*, **37**, 227 (2005).
- [5] S. Yamada, M. Konagai, S. Miyajima. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **55**, 04ES06 (2016).
- [6] V. Davydov, E. Roginskii, Yu. Kitaev, A. Smirnov, I. Eliseyev, D. Nechaev, V. Jmerik, M. Smirnov. *Nanomaterials*, **11**, 286 (2021).
- [7] M.B. Smirnov, D.V. Pankin, E.M. Roginskii, A.V. Savin. *Phys. Solid State*, **64**, 1675 (2022).
- [8] M. Smirnov, E. Roginskii, A. Savin, N. Mazhenov, D. Pankin. *Coatings*, **13**, 1231 (2023).
- [9] С.М. Рытов. *ЖЭТФ*, **29** (5), 605 (1955).
- [10] K. Huang, B. Zhu. *Phys. Rev. B*, **38**, 13377 (1988).
- [11] J.-Z. Zhang, B.-F. Zhu, K. Huang. *Phys. Rev. B*, **59**, 13184 (1998).
- [12] J. Gleize, M.A. Renucci, J. Frandon, F. Demangeot. *Phys. Rev. B*, **60**, 15985 (1999).
- [13] S. Coh, D. Vanderbilt. *Phys. Rev. B*, **78**, 054117 (2008).
- [14] M. Smirnov, E. Roginskii, A. Savin, A. Oreshonkov, D. Pankin. *Photonics*, **10**, 902 (2023).
- [15] J.F. Scott, S.P.S. Porto. *Phys. Rev. B*, **161**, 903 (1967).
- [16] G. Ghosh. *Optics Commun.*, **163**, 95 (1999).
- [17] H. H. Li. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **9**, 561 (1980).
- [18] R.E. Camley, D.L. Mills. *Phys. Rev. B*, **29**, 1695 (1984).
- [19] R. Ruppin, R. Englman. *Rep. Progr. Phys.*, **33**, 149 (1970).

Редактор Г.А. Оганесян

Polar optical phonons in superlattices Si/SiO₂

*M.B. Smirnov¹, N.R. Grigorieva¹, D.V. Pankin¹,
E.M. Roginskii², A.V. Savin²*

¹ St. Petersburg State University,
194034 St. Petersburg, Russia

² Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract A study was carried out of the dielectric properties of planar Si/SiO₂ heterostructures, which play an important role in modern electronics. Using the model of dielectric continuum, the spectra of polar phonons in Si/SiO₂ binary superlattices have been studied. Quartz and cristobalite lattices are considered as a structural model of the oxide layer. The dependences of polar optical phonons frequencies and the high-frequency dielectric constant tensor elements on the ratio of layer thicknesses were obtained. The results obtained open up the possibility of using spectroscopic data to characterize the structure of superlattices.