

10,13

Сравнительное исследование пленки BaTiO_3 и сверхрешетки $\text{BaTiO}_3/(\text{Ba}_{0.7}\text{Sr}_{0.3})\text{TiO}_3$ методами дифракции рентгеновских лучей и спектроскопии комбинационного рассеяния света

© О.А. Маслова¹, И.Н. Захарченко¹, О.А. Бунина¹, Ю.И. Юзюк¹, N. Ortega², A. Kumar², R.S. Katiyar²

¹ Южный федеральный университет,
Ростов-на-Дону, Россия

² Department of Physics and Institute for Functional Nanomaterials, University of Puerto Rico,
San Juan, USA

E-mail: olga_8611@pochta.ru

(Поступила в Редакцию 11 января 2012 г.)

Проведено сравнительное исследование эпитаксиальной пленки BaTiO_3 и сверхрешетки состава $\text{BaTiO}_3/(\text{Ba}_{0.7}\text{Sr}_{0.3})\text{TiO}_3$, изготовленных методом импульсного лазерного осаждения на подложках (100) MgO . На основе данных рентгеновской дифрактометрии установлена полная параллельная ориентация пленки и подложки, определены период модуляции сверхрешетки $\Lambda = 28 \text{ nm}$, параметры ячейки, усредненной по периоду Λ , и параметры ячеек слоев сверхрешетки. Согласно рентгенографическим данным, ячейка однокомпонентной пленки BaTiO_3 и усредненная по периоду Λ ячейка сверхрешетки являются псевдокубическими, однако анализ поляризационных характеристик спектров комбинационного рассеяния света позволил предположить моноклинную симметрию ($P_x = P_y \neq 0, P_z \neq 0$) в пленке и сверхрешетке. Обсуждается трансформация компонент мягкой моды, обусловленная деформацией эпитаксиальных слоев, образующих сверхрешетку.

Работа проводилась при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

1. Введение

Сегнетоэлектрические сверхрешетки, состоящие из чередующихся слоев как полярных, так и неполярных перовскитов, являются популярными объектами исследований в последние годы, что обусловлено их весьма специфическими свойствами [1–8]. Использование в сверхрешетках различных как по химическому составу, так и по толщине слоев позволяет в широких пределах варьировать их физические свойства и достигать весьма значительных преимуществ в характеристиках по сравнению с однокомпонентными пленками сегнетоэлектриков. Варьируя деформации эпитаксиальных слоев, образующих сверхрешетки, можно получить большую спонтанную поляризацию, существенно повысить температуру Кюри или величину диэлектрической проницаемости. Возникновение новых фаз, не реализующихся в исходных материалах, образующих сверхрешетки, делает эти объекты привлекательными как для фундаментальной, так и для прикладной физики конденсированного состояния.

Наиболее изученными в настоящее время являются сверхрешетки $\text{BaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ (BT/ST), в которых можно индуцировать сегнетоэлектрическое состояние в слоях ST за счет их деформации, вызванной несоответствием параметров решетки слоев BT и ST [9–19]. Искажения слоев и направления поляризации могут варьироваться посредством выбора типа подложки, условий роста и толщин слоев, образующих сверхрешетку. Несмотря на то что система твердых растворов достаточно хорошо

изучена [20], работы, в которых были бы исследованы сверхрешетки с частичным замещением $\text{Ba} \rightarrow \text{Sr}$, немногочисленны. Управлять физическими свойствами искусственных сверхрешеток можно, не только варьируя толщины слоев, но и меняя химический состав одного из слоев. Недавно [21,22] в сверхрешетках $\text{BaTiO}_3/(\text{Ba,Sr})\text{TiO}_3$ (BT/BST), выращенных на подложках MgO с постоянной периодичностью слоев BT/BST и переменным составом Ba/Sr в слоях BST, было обнаружено систематическое изменение частоты мягкой моды (более чем в 3 раза) в зависимости от соотношения Ba/Sr . Такой подход конструирования сверхрешеток позволяет на порядок изменять величину статической диэлектрической проницаемости, не меняя периодичность сверхрешетки и ее полную толщину.

В настоящей работе методами дифракции рентгеновских лучей и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) выполнено сравнительное исследование пленки BaTiO_3 (BT) и сверхрешетки состава $\text{BaTiO}_3/(\text{Ba}_{0.7}\text{Sr}_{0.3})\text{TiO}_3$ (BT/BST-0.3), выращенных на поверхности (001) монокристаллов MgO , с целью определения возникающих в них структурных искажений.

2. Эксперимент

Пленки BT и сверхрешетки BT/BST-0.3 были выращены на подложках (001) MgO методом импульсного лазерного осаждения путем попеременной фокусировки пучка лазерного излучения на стехиометрические мишени BT и BST. Для осаждения сверхрешеток исполь-

зовался эксимерный лазер (KrF, 248 nm) с плотностью энергии лазерного излучения 1.5 J/cm^2 и частотой повторения импульсов 10 Hz. В процессе осаждения температура подложки составляла 830°C , давление кислорода — 200 mTorr. Толщины слоев сверхрешетки в каждом цикле осаждения были одинаковыми, общая толщина пленки BT/BST составляла 1000 nm. Для сравнительного анализа при аналогичных условиях была выращена пленка BT той же толщины.

Рентгенографические исследования проводились на дифрактометре Rigaku Ultima IV. В использовавшейся высокоразрешающей оптической схеме параллельный монохроматический пучок $\text{CuK}\alpha_1$ -излучения формировался многослойным параболическим зеркалом и двухкристалльным Ge(220)-монохроматором. При проведении исследований использовались методы ω - 2θ - и φ -сканирования (см. рис. 2 в [23]).

Спектры КРС возбуждались поляризованным излучением аргонового лазера ($\lambda = 514.5 \text{ nm}$) и регистрировались спектрометром Renishaw, оснащенный CCD-детектором. Возбуждающее излучение фокусировалось на образец с помощью оптического микроскопа Leica, диаметр сфокусированного пучка на образце составлял $2 \mu\text{m}$. Спектры были получены при комнатной температуре в геометриях обратного рассеяния от поверхности пленки ($Z(YX)\bar{Z}$, $Z(Y\bar{Y})\bar{Z}$) и в геометриях рассеяния от торца пленки (side-view backscattering) [24] ($Y(ZX)\bar{Y}$, $Y(XX)\bar{Y}$ и $Y(ZZ)\bar{Y}$), при которых ориентация волнового вектора и поляризации падающей волны соответствовали кристаллографическим осям кубической подложки: $X \parallel [100]$, $Y \parallel [010]$, $Z \parallel [001]$. Для всех спектрограмм, приведенных в настоящей работе, произведена коррекция интенсивности с учетом фактора температурной заселенности.

3. Экспериментальные результаты и обсуждение

3.1. Дифракция рентгеновских лучей. На рис. 1 показаны профили рефлексов $(00l)$ пленки BT и сверхрешетки BT/BST-0.3. На дифрактограммах, полученных методом ω - 2θ -сканирования ($\omega = 2\theta/2$), наблюдались только эти рефлексы, каждый из которых содержал главный максимум и сателлиты, обычно возникающие при дифракции рентгеновских лучей на сверхрешетках [2,5,6,25–27]. Значения l , равные 1, 2, 3 и 4, соответствуют ячейке, усредненной по параметрам каждого из слоев сверхрешетки. Результаты φ -сканирования рефлексов (103), (113), (114), (024) для пар пленка BT–подложка и сверхрешетка–подложка позволили сделать вывод об эпитаксиальном росте пленки BT и сверхрешетки BT/BST-0.3 на подложках MgO и об их полной параллельной ориентации относительно подложек. Рассчитанные при анализе дифракционной картины характеристики пленки BT и сверхрешетки BT/BST-0.3 приведены в таблице.

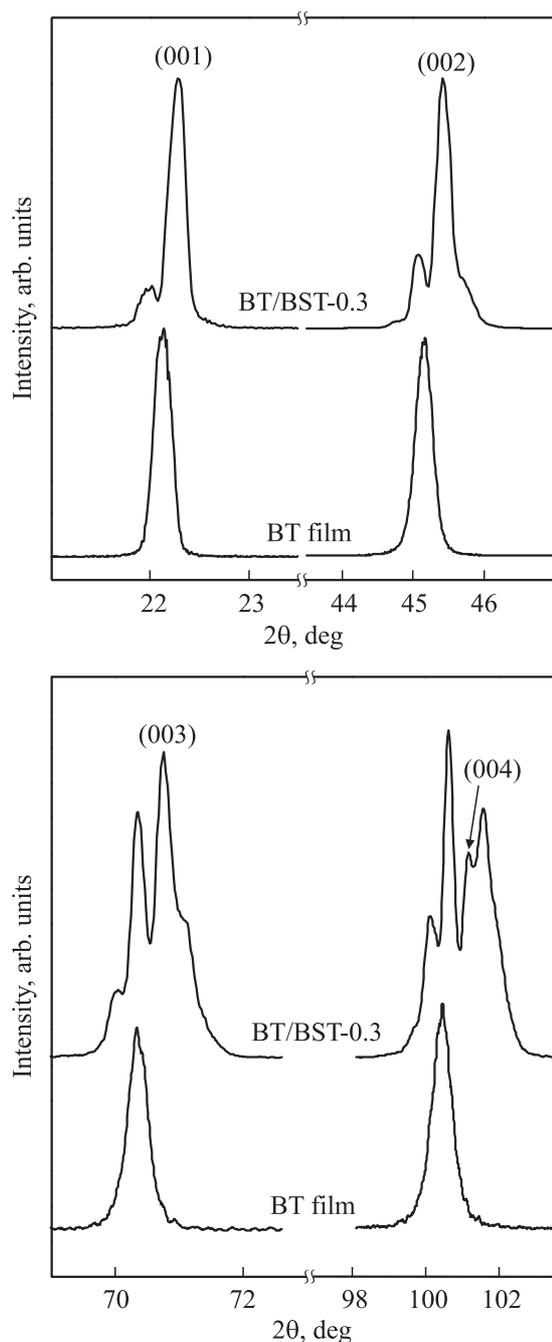


Рис. 1. Профили рефлексов $00l$ ($l = 1, 2, 3, 4$) тонкой пленки BT и сверхрешетки BT/BST-0.3, полученные методом ω - 2θ -сканирования ($\omega = 2\theta/2$). Индексы рефлексов, указанные над основными максимумами, соответствуют ячейке решетки, усредненной по параметрам слоев сверхрешетки.

Период модуляции Λ определялся по угловому положению сателлитов в рефлексе [2]

$$\Lambda = \lambda/2(\sin \theta_{n+1} - \sin \theta_n), \quad (1)$$

где λ — длина волны $\text{CuK}\alpha_1$ -излучения, θ_{n+1} и θ_n — угловые положения соседних максимумов в рефлексе.

Характеристики сверхрешетки ВТ/BST-0.3 и пленки ВТ (по данным дифракции рентгеновских лучей)

| Объект исследования | Характеристика | Значение |
|-------------------------|------------------|-------------------|
| Сверхрешетка ВТ/BST-0.3 | Λ , nm | 28 |
| | D , nm | 57 |
| | ε | $7 \cdot 10^{-4}$ |
| | c_1 , nm (BST) | 0.3971 |
| | c_2 , nm (ВТ) | 0.4009 |
| Пленка ВТ | c_0 , nm | 0.4014 |
| | D , nm | 67 |
| | ε | $2 \cdot 10^{-3}$ |

Примечание. Λ — период модуляции, D — среднее значение областей когерентного рассеяния, ε — среднее значение микродеформации, c_1, c_2 — параметры элементарной ячейки слоев сверхрешетки ВТ/BST-0.3, c_0 — параметр элементарной ячейки пленки ВТ.

Для оценки средних размеров областей когерентного рассеяния D и микродеформаций ε в направлении нормали к поверхности $[001]$ использовались интегральные ширины β_l основных максимумов рефлексов $(00l)$ сверхрешетки, полученные после разделения мультиплетов $(00l)$ на отдельные компоненты. Аппаратурная функция и форма компонентов мультиплетов аппроксимировались гауссианами. Использовалось соотношение [28]

$$\beta_l^2 = \lambda^2 / D^2 \cos^2 \theta_l + 16\varepsilon^2 \operatorname{tg}^2 \theta_l, \quad (2)$$

где величина l принимала значения от 1 до 4; β_l — уширение главного максимума рефлекса l -го порядка. Величины D и ε определялись на основе соотношений (2). Расчеты показали, что $D \approx 2\Lambda$. Характеристики пленки ВТ находились аналогично. Параметр c сверхрешетки, усредненный по периоду Λ и определенный по угловому положению основных максимумов $(00l)$, составил 0.3989 nm. Регистрация рефлексов (103) , (113) , (114) , (024) от плоскостей, составлявших углы ψ с поверхностью (001) (метод $\omega-2\theta$, где $\omega = \theta - \psi$), позволила определить средний параметр a . Для сверхрешетки и пленки ВТ с точностью $\pm 2 \cdot 10^{-4}$ nm параметры a оказались равными соответствующим параметрам c , т.е. в пределах указанной погрешности усредненная ячейка и пленки, и сверхрешетки является кубической.

Определение параметров элементарных ячеек слоев в сверхрешетке c_1 (BST-0.3) и c_2 (ВТ) в направлении $[001]$ проводилось путем подгонки расчетных соотношений интегральных интенсивностей компонент в рефлексах $(00l)$ к экспериментальным значениям. Использовалась модель [29], в которой межплоскостные расстояния d_{001} (параметры c_1 и c_2) оставались неизменными в слоях, тогда

$$\Lambda = d_{\text{BST}}N_1 + d_{\text{ВТ}}N_2 = dN, \quad N = N_1 + N_2,$$

где N_1, N_2 — число плоскостей 001 в слоях, d — среднее межплоскостное расстояние (средний параметр c) в периоде Λ . Распределение интенсивностей в рефлексах $(00l)$ рассчитывалось в кинематическом приближе-

нии, промежуточный параметр интерфейса между слоями не рассматривался. Относительные интенсивности сателлитов и основного пика, а также асимметрия в распределении интенсивностей сателлитов в рефлексе определяются параметрами c_1, c_2 и структурными факторами слоев сверхрешетки. Указанные в таблице значения параметров соответствуют распределению интенсивностей во всех четырех порядках отражения $(00l)$. Определение параметров a_1 и a_2 проводилось по рефлексу (103) . Для расчетов использовалась система координат, в которой плоскость (103) исходной установки приобретала индексы (001) . Полученные значения параметров a_1 и a_2 свидетельствуют о кубической симметрии элементарных ячеек слоев в пределах указанной выше погрешности.

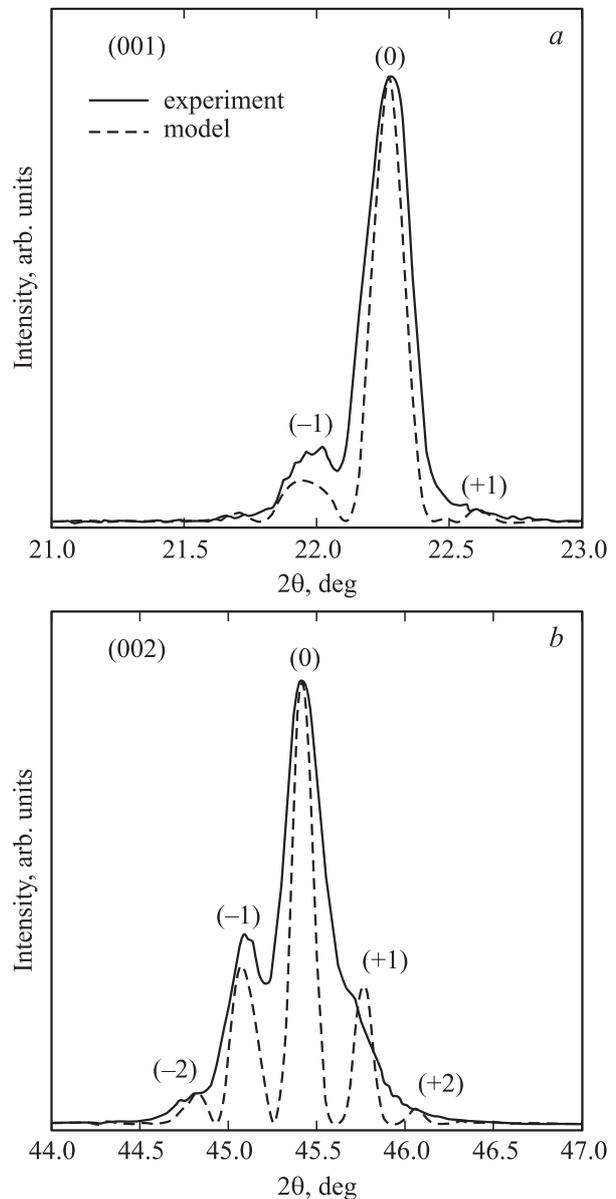


Рис. 2. Результаты подгонки профилей рефлексов (001) (а) и (002) (б) сверхрешетки ВТ/BST-0.3.

Результаты подгонки профилей (размытие расчетных профилей аппаратурной функцией не показано) приведены на рис. 2. Различия между экспериментальными данными и расчетными контурами могут быть обусловлены несовершенством межслоевых интерфейсов, которые не включены в модель подгонки. В сверхрешетке значение параметра $c_1 = 0.3971$ nm совпадает с параметром кубической ячейки порошкового образца BST-0.3, который можно вычислить с помощью аппроксимации данных для составов $(Ba,Sr)TiO_3$, приведенных в [30]. Для слоев ВТ значение c_2 является промежуточным между значениями $c = 0.4038$ nm и $a = 0.3994$ nm для тетрагонального кристалла ВТ [31].

3.2. Спектроскопия комбинационного рассеяния света. На рис. 3 показаны поляризованные спектры КРС для пленки ВТ и сверхрешетки ВТ/BST-0.3, полученные при комнатной температуре в различных геометриях рассеяния. Отнесение оптических мод для пленок ВТ и BST- x , а также сверхрешеток ВТ/ST и ВТ/BST-0.5 с соотношением Ва/Sr 50/50 было опубликовано ранее [32,33]. Наличие спектров КРС, в которых надежно регистрируются линии полярных мод, однозначно указывает на то, что пленка ВТ не является кубической с симметрией $O_h^1 - Pm\bar{3}m$. Поляризационные характеристики спектров не соответствуют правилам отбора для c -доменной тетрагональной фазы, так как для геометрии рассеяния $Z(YX)\bar{Z}$ достаточно надежно регистрируются линии КРС, запрещенные правилами отбора для этой фазы [32,33]. В поляризованных спектрах КРС пленки ВТ (рис. 3) очевидна деполяризация, проявляющаяся в „перетекании“ (leakage) интенсивных линий из геометрий рассеяния, соответствующих диагональным компонентам тензора поляризуемости, в спектры, соответствующие недиагональным компонентам, и наоборот, что возможно в случае орторомбической или моноклинной симметрии.

Сравнительный анализ спектров пленки ВТ и сверхрешетки ВТ/BST-0.3 позволил выявить следующие особенности.

1. В спектре в геометрии рассеяния $Y(XX)\bar{Y}$ интенсивная линия, частота которой в случае пленки ВТ составляет 272 cm^{-1} , смещается в сторону более низких частот примерно на 7 cm^{-1} при частичном замещении атомов Ва атомами Sr в слое BST сверхрешетки. В работе [34] колебательную моду, наблюдаемую в интервале частот $230\text{--}270\text{ cm}^{-1}$, интерпретировали как полностью симметричную компоненту сегнетоэлектрической мягкой моды ($A_1(2TO)$) в тетрагональной фазе ВТ). Частотное положение этой моды скачком уменьшалось от 270 до 245 cm^{-1} при переходе из тетрагональной в орторомбическую фазу. По мере понижения температуры в пределах стабильности орторомбической фазы частота этой моды возрастала до 262 cm^{-1} , но затем снова резко падала до 245 cm^{-1} при переходе в ромбоэдрическую фазу. Как известно, в ВТ при переходе из тетрагональной в орторомбическую фазу происходит изменение наклона вектора поляризации так, что ниже

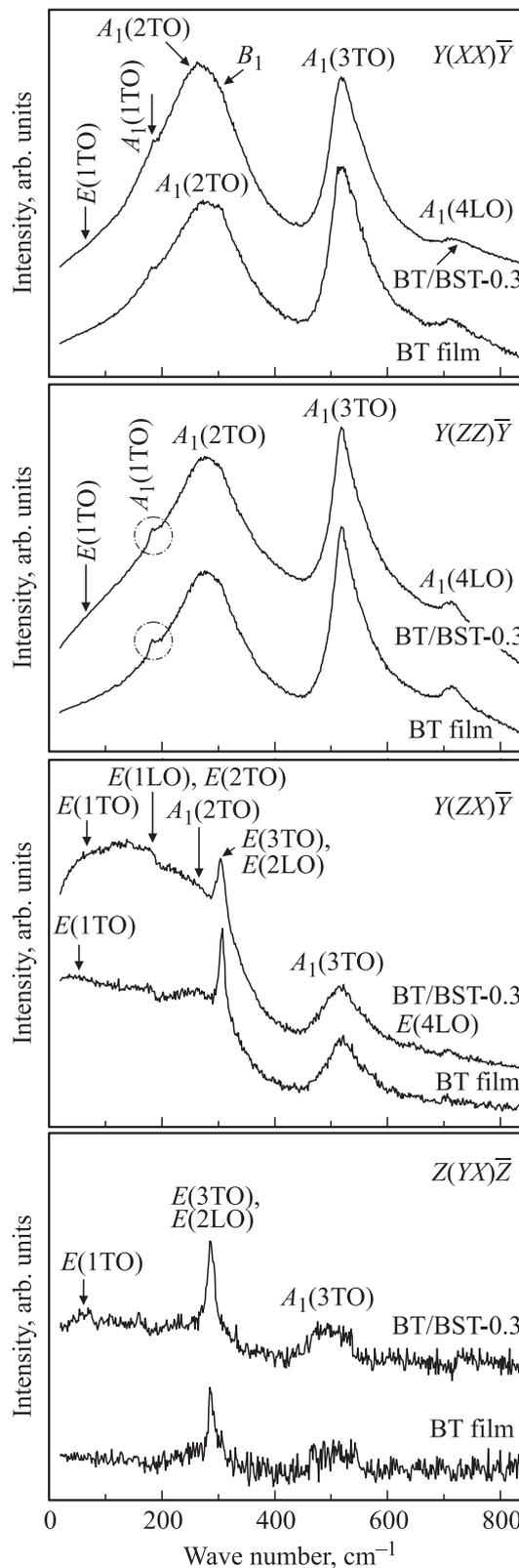


Рис. 3. Поляризованные спектры КРС пленки ВТ и сверхрешетки ВТ/BST-0.3. Отнесение мод соответствует тетрагональной фазе монокристалла ВТ. Окружностями выделены области, где наблюдаются узкие пики вместо провала.

температуры перехода поляризация направлена вдоль диагонали орторомбической ячейки, которая содержит две моноклинно искаженные перовскитные ячейки. При переходе из орторомбической фазы в ромбоэдрическую направление поляризации снова меняется так, что она направлена по пространственной диагонали исходной перовскитной ячейки. Таким образом, смещение компоненты $A_1(2TO)$ в область более низких частот при последовательных фазовых переходах в ВТ связано с последовательными отклонениями вектора спонтанной поляризации от направления оси четвертого порядка тетрагональной фазы. Сдвиг моды 272 см^{-1} при переходе от пленки ВТ к сверхрешетке ВТ/BST-0.3 не столь значителен, как в кристалле ВТ при последовательных переходах, и может соответствовать небольшому изменению наклона вектора поляризации при переходе от пленки к сверхрешетке.

2. Другим важным наблюдением является трансформация передемпфированной мягкой моды в геометрии рассеяния $Y(ZX)\bar{Y}$. В пленке ВТ самая низкочастотная мода ($E(1TO)$ в тетрагональной фазе ВТ) представляет собой колебание с большим затуханием, которое при малой частоте $\sim 30\text{ см}^{-1}$ обладает значительной (около 170 см^{-1}) полушириной. Как видно из рис. 3, полуширина этой мягкой моды в сверхрешетке ВТ/BST-0.3 существенно уменьшается, а частота повышается до 50 см^{-1} . Компьютерное моделирование этих спектров позволило определить, что полуширина уменьшается от 171 см^{-1} в спектре пленки ВТ до 143 см^{-1} в спектре сверхрешетки ВТ/BST-0.3. Такая трансформация может быть обусловлена двумерным напряжением между слоями ВТ и BST в сверхрешетке [21].

3. В спектре КРС тетрагонального моноклинного кристалла ВТ в геометрии $Y(ZZ)\bar{Y}$ наблюдается резкий интерференционный провал при 180 см^{-1} , обусловленный взаимодействием двух мод симметрии A_1 [35]. В $Y(XX)\bar{Y}$ спектре кристалла ВТ этот провал исчезает, а вместо него возникает узкий пик на той же частоте. Аналогичный эффект наблюдается и в c -доменных пленках ВТ и BST- x [24,32,33]. Интерференционный провал обычно наблюдается в спектрах КРС полидоменных кристаллов, керамики и порошков ВТ. При исследовании размерных эффектов в порошках ВТ [36,37] было обнаружено, что в спектрах порошков с размером частиц менее 100 нм интерференционный провал при 180 см^{-1} исчезает, и возникает узкий пик на той же частоте. Исчезновение провала при 180 см^{-1} в спектрах свидетельствует об отсутствии взаимодействия мод $A_1(1TO)$ и $A_1(2TO)$, которое характерно для тетрагональной фазы ВТ. Согласно [36], по данным рентгенографических исследований симметрия этих наночастиц кубическая, а исходя из их спектров КРС — орторомбическая.

В спектрах КРС пленки ВТ и сверхрешетки ВТ/BST-0.3, соответствующих $Y(ZZ)\bar{Y}$ - и $Y(XX)\bar{Y}$ -геометриям рассеяния, наблюдается узкий пик 180 см^{-1} , а провал отсутствует (на рис. 3 эта область выделена

окружностью), поэтому можно сделать вывод, что симметрия данной пленки ВТ (а также сверхрешетки) не тетрагональная, а, скорее, орторомбическая.

4. Интенсивность линий в спектре в геометрии $Z(YX)\bar{Z}$ для сверхрешетки несколько выше, чем для пленки ВТ, что свидетельствует о большем отличии структуры сверхрешетки от тетрагональной. В низкочастотной области (ниже 100 см^{-1}) появляется широкая линия, которая может возникать в результате расщепления мягкой моды $E(1TO)$ (двукратно вырожденной в тетрагональной фазе) на две компоненты, активные в разных геометриях рассеяния в низкосимметричной (орторомбической или моноклинной) фазе, где отсутствуют вырожденные моды.

Сопоставление рентгеновских дифракционных данных с анализом спектров КРС указывает на слабое искажение кубической ячейки как в пленке ВТ, так и в сверхрешетке, обусловленное процессом эпитаксиального роста. Ожидаемое увеличение параметра элементарной ячейки пленки (параметр ячейки MgO больше, чем пленки) компенсируется дислокациями несоответствия. Различие коэффициентов теплового расширения пленки и подложки создает механические двумерные равноосные напряжения сжатия в пленке, при этом блочная структура пленок и сверхрешеток, выращенных методом импульсного лазерного осаждения [22], обуславливает по крайней мере частичную релаксацию этих напряжений на границах ростовых блоков, поэтому, видимо, тетрагональная симметрия в явном виде не наблюдается. Наличие дислокаций на границах блоков, по-видимому, обуславливает уширение рефлексов, маскирующее слабое искажение кубической ячейки. В случае небольшого моноклинного искажения параметры решетки пленки мало отличаются друг от друга, угол моноклинности близок к 90° , и экспериментально ее трудно отличить от кубической.

Феноменологическое рассмотрение, проведенное авторами работ [38,39], предсказывает четыре возможных фазовых состояния эпитаксиальных пленок ВТ при комнатной температуре: тетрагональная фаза c ($P_x = P_y = 0, P_z \neq 0$) с поляризацией, перпендикулярной подложке, возникающая при больших сжимающих напряжениях со стороны подложки, исключается как рентгенографическими данными, так и поляризационными характеристиками спектров КРС. В случае орторомбической фазы aa ($P_x = P_y \neq 0, P_z = 0$) с поляризацией в плоскости подложки, которая возникает при больших растягивающих напряжениях, должен наблюдаться достаточно интенсивный спектр КРС в геометрии рассеяния $Z(YX)\bar{Z}$, который в нашем случае отсутствует. Рентгенографические данные также не подтверждают орторомбическую симметрию. Поскольку механизм роста пленки и сверхрешетки допускает релаксацию механических напряжений, наиболее вероятной является моноклинная фаза r с компонентами поляризации ($P_x = P_y \neq 0, P_z \neq 0$), которая стабильна вблизи нулевых деформаций несоответствия на фазовой

диаграмме. Не исключается также моноклинная ac -фаза с компонентами поляризации ($P_x \neq 0, P_y = 0, P_z \neq 0$), также стабильная в узкой области на фазовой диаграмме [39].

Сходные результаты были получены для тетрагональной и орторомбической фаз при расчетах из первых принципов [40]. Вблизи нулевых деформаций область стабильности моноклинной фазы r разделена на две: r_c ($P_z > P_x = P_y \neq 0$) и r_{aa} ($P_x = P_y > P_z \neq 0$), различающиеся величиной компоненты поляризации вдоль нормали к подложке.

Таким образом, совокупный анализ приведенных экспериментальных данных и существующих теоретических результатов позволяет заключить, что симметрия пленок ВТ является моноклинной C_s^3 (как в [38]) с углом моноклинности γ , близким к 90° , и малым различием параметров решетки. Из результатов рентгенографических исследований сверхрешетки ВТ/BST-0.3 следует, что на границах раздела слои ВТ, подверженные некоторому сжатию, могут испытывать тетрагональное искажение с поляризацией, направленной вдоль нормали к подложке (c -фаза), а в слоях BST, подверженных растяжению, возможен аналог орторомбической фазы с поляризацией в плоскости пленки. В окрестностях границ раздела между слоями ВТ и BST направление поляризации должно постепенно изменяться от направления [001] (c -домен) к направлению вдоль [110] (a -домен). Как известно [19], такая переходная область распространяется, как минимум, на несколько элементарных ячеек по обе стороны от границы. В этом случае результирующий вектор поляризации в сверхрешетке не будет параллелен нормали к подложке, а симметрия понизится до моноклинной фазы r ($P_x = P_y \neq 0, P_z \neq 0$). Такое понижение симметрии согласуется с поляризационными характеристиками спектров КРС, а изменение угла между вектором поляризации в сверхрешетке и нормалью к поверхности слоя ВТ приводит к сдвигу полносимметричной компоненты мягкой моды (272 cm^{-1} в ВТ и 265 cm^{-1} в ВТ/BST-0.3) и повышению частоты мягкой моды в плоскости подложки.

4. Заключение

Методами рентгенографического анализа определены параметры решетки эпитаксиальной пленки ВТ и сверхрешетки ВТ/BST-0.3 с периодом модуляции 28 nm. Несмотря на большую толщину чередующихся слоев в сверхрешетке, полной релаксации напряжений, вызванных несоответствием параметров решеток ВТ и BST-0.3, не происходит. Усредненная по периоду Λ ячейка сверхрешетки является псевдокубической (параметр c приближенно равен параметру a), как и ячейка однокомпонентной пленки ВТ, осажденной при аналогичных условиях. Спектроскопия КРС позволила уточнить кристаллическую структуру пленок. На основании анализа поляризационных характеристик спектров КРС

можно предположить моноклинную симметрию (r -фаза- C_s^3) в однокомпонентной пленке ВТ, поскольку имеет место частичная деполяризация линий, перетекающих из параллельных геометрий в скрещенные, и наоборот, наблюдается спектр в геометрии рассеяния $Z(YX)\bar{Z}$ и, наконец, отсутствует интерференционный провал 180 cm^{-1} . В поляризованных спектрах сверхрешетки наблюдаются аналогичные особенности, характерные для моноклинной фазы с большей степенью искажения, о чем свидетельствуют понижение частоты полносимметричной компоненты мягкой моды и повышение частоты другой ее компоненты в плоскости подложки.

Список литературы

- [1] K. Iijima, T. Terashima, Y. Bando, K. Kamigaki, I. Terauchi. *J. Appl. Phys.* **72**, 2840 (1992).
- [2] F.L. Marrec, R. Farhi, M.E. Marssi, J.L. Dellis, G. Karkut, D. Ariosa. *Phys. Rev. B* **61**, R6447 (2000).
- [3] J.B. Neaton, K.M. Rabe. *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1586 (2003).
- [4] O. Diéguez, K.M. Rabe, D. Vanderbilt. *Phys. Rev. B* **72**, 144 101 (2005).
- [5] F.D. Guerville, M.E. Marssi, I.P. Raevski, M.G. Karkut, Yu.I. Yuzyuk. *Phys. Rev. B* **74**, 064 107 (2006).
- [6] P.R. Choudhury, S.B. Krupanidhi. *J. Appl. Phys.* **104**, 114 105 (2008).
- [7] J. Kim, Y. Kim, Y.S. Kim, J. Lee, L. Kim, D. Jung. *Appl. Phys. Lett.* **80**, 3581 (2002).
- [8] А.И. Лебедев. *ФТТ* **52**, 1351 (2010).
- [9] H. Tabata, H. Tanaka, T. Kawai. *Appl. Phys. Lett.* **65**, 1970 (1994).
- [10] B.D. Qu, M. Evstigneev, D.J. Johnson, R.H. Prince. *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1394 (1998).
- [11] T. Shimuta, O. Nakagawara, T. Makino, S. Arai, H. Tabata, T. Kawai. *J. Appl. Phys.* **91**, 2290 (2002).
- [12] L. Kim, D. Jung, J. Kim, Y.S. Kim, J. Lee. *Appl. Phys. Lett.* **82**, 2118 (2003).
- [13] A.Q. Jiang, J.F. Scott, H. Lu, Z. Chen. *J. Appl. Phys.* **93**, 1180 (2003).
- [14] S. Rios, A. Ruediger, A.Q. Jiang, J.F. Scott, H. Liu, Z. Chen. *J. Phys.: Cond. Matter* **15**, L305 (2003).
- [15] R.R. Das, Yu.I. Yuzyuk, P. Bhattacharya, V. Gupta, R.S. Katiyar. *Phys. Rev. B* **69**, 132 302 (2004).
- [16] R.S. Katiyar, Y.I. Yuzyuk, R.R. Das, P. Bhattacharya, V. Gupta. *Ferroelectrics* **329**, 907 (2005).
- [17] D.A. Tenne, A. Bruchhausen, N.D. Lanzillotti-Kimura, A. Fainstein, R.S. Katiyar, A. Cantarero, A. Soukiassian, V. Vaithyanathan, J.H. Haeni, W. Tian, D.G. Schlom, K.J. Choi, D.M. Kim, C.B. Eom, H.P. Sun, X.Q. Pan, Y.L. Li, L.Q. Chen, Q.X. Jia, S.M. Nakhmanson, K.M. Rabe, X.X. Xi. *Science* **313**, 1614 (2006).
- [18] E. Bousquet, M. Dawber, N. Stucki, C. Lichtensteiger, P. Hermet, S. Gariglio, J.-M. Triscone, P. Ghosez. *Nature* **452**, 732 (2008).
- [19] S. Lisenkov, L. Bellaiche. *Phys. Rev. B* **76**, 020 102 (2007).
- [20] V.V. Lemanov, E.P. Smirnova, P.P. Syrnikov, E.A. Tarakanov. *Phys. Rev. B* **54**, 3151 (1996).
- [21] О.А. Маслова, Ю.И. Юзюк, N. Ortega, A. Kumar, R.S. Katiyar. *ФТТ* **53**, 999 (2011).

- [22] N. Ortega, A. Kumar, O.A. Maslova, Yu.I. Yuzyuk, J.F. Scott, R.S. Katiyar. *Phys. Rev. B* **83**, 144 108 (2011).
- [23] Ю.И. Головкин, В.М. Мухортов, О.А. Бунина, И.Н. Захарченко, А.С. Анохин, В.Б. Широков, Ю.И. Юзюк. *ФТТ* **52**, 1336 (2010).
- [24] Yu.I. Yuzyuk, A. Almeida, M.R. Chaves, V.A. Alyoshin, I.N. Zakharchenko, E.V. Sviridov. *Phys. Status Solidi B* **222**, 535 (2000).
- [25] E.E. Fullerton, I.K. Schuller. *Phys. Rev. B* **45**, 9292 (1992).
- [26] P.R. Choudhury, S.B. Krupanidhi. *Appl. Phys. Lett.* **92**, 102903 (2008).
- [27] M. El Marssi, Y. Gagou, J. Belhadi, F. De Guerville, Yu.I. Yuzyuk, I.P. Raevski. *J. Appl. Phys.* **108**, 084 104 (2010).
- [28] В.И. Иверонова, Г.П. Ревкевич. Теория рассеяния рентгеновских лучей. Изд-во МГУ, М. (1972). 246 с.
- [29] A. Segmuller, A.E. Blakeslee. *J. Appl. Cryst.* **6**, 19 (1973).
- [30] Powder Diffraction File. Data Cards. Inorganic Section. Set 39, 34, 44. JCPDS, Swarthmore, Pennsylvania, USA (1948).
- [31] Powder Diffraction File. Data Cards. Inorganic Section. Set 5. JCPDS, Swarthmore, Pennsylvania, USA (1948).
- [32] Yu.I. Yuzyuk, J.L. Sauvajol, P. Simon, V.L. Lorman, V.A. Alyoshin, I.N. Zakharchenko, E.V. Sviridov. *J. Appl. Phys.* **93**, 9930 (2003).
- [33] Ю.И. Юзюк, И.Н. Захарченко, В.А. Алешин, И.Н. Леонтьев, Л.М. Рабкин, В.М. Мухортов, P. Simon. *ФТТ* **49**, 1676 (2007).
- [34] C.H. Perry, D.B. Hall. *Phys. Rev. Lett.* **15**, 700 (1965).
- [35] A. Scalabrin, A.S. Chaves, D.S. Shim, S.P.S. Porto. *Phys. Status Solidi B* **79**, 731 (1977).
- [36] M.H. Frey, D.A. Payne. *Phys. Rev. B* **54**, 3158 (1996).
- [37] Y. Shiratori, C. Pithan, J. Dornseiffer, R. Waser. *J. Raman Spectroscopy* **38**, 1288 (2007).
- [38] В.Б. Широков, Ю.И. Юзюк, В. Dkhil, В.В. Леманов. *ФТТ* **50**, 889 (2008).
- [39] V.B. Shirokov, Yu.I. Yuzyuk, V. Dkhil, V.V. Lemanov. *Phys. Rev. B* **75**, 224 116 (2007).
- [40] B.K. Lai, I.A. Kornev, L. Bellaiche, G.J. Salamo. *Appl. Phys. Lett.* **86**, 132904 (2005).