

Угловая зависимость спектров комбинационного рассеяния в кристалле $ZnGeP_2$: анализ симметрии и определение компонентов рамановских тензоров*

А.И. Князькова¹, М.С. Снегерева², Д.А. Вражнов¹, Г.К. Распопин¹, Ю.В. Кистенев¹

¹ *Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, Россия*

² *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Представлены результаты экспериментального исследования угловой зависимости интенсивности поляризованных спектров комбинационного рассеяния света кристалла $ZnGeP_2$ для ориентации [001]. На основе экспериментальных данных восстановлены компоненты рамановских тензоров для мод A_1 , B_1 , B_2 . Экспериментально измеренные зависимости в поляризованных спектрах сопоставлены с теоретическими предсказаниями, что позволило однозначно идентифицировать симметрию колебательных мод. Представленные результаты могут в дальнейшем быть использованы для анализа дефектов в кристаллах $ZnGeP_2$.

Ключевые слова: $ZnGeP_2$, комбинационное рассеяние света, рамановские тензоры, поляризация, фононные моды.

Введение

Фосфид цинка-германия ($ZnGeP_2$) – это полупроводник с тетрагональной халькопиритовой структурой, обладающий нелинейными оптическими характеристиками, что делает его важным материалом в разработке устройств преобразования частоты, включая генерацию второй гармоники [1, 2]. При выращивании кристаллов $ZnGeP_2$ возникают дефекты в структуре, снижающие порог лазерного повреждения. Это связано с тем, что дефекты имеют большое количество энергетических состояний, которые легко поглощают энергию лазера [3]. С другой стороны, структурные дефекты в кристаллах приводят к образованию полос поглощения, которые ухудшают эффективность работы кристалла в оптических устройствах [4]. Поэтому разработка быстрых и неразрушающих методов качественной и количественной оценки дефектов является важной задачей.

Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) является информативным методом исследования колебательных состояний молекул. В твердых телах спектроскопия КРС позволяет регистрировать коллективные колебания атомов (фононные моды) внутри кристаллической решетки. Наличие дефектов нарушают периодичность решетки, что приводит к изменению существующих фононов или появлению новых [5].

Кристаллическая структура $ZnGeP_2$ относится к объемно-центрированной тетрагональной сингонии D_{2d} ($I-42d$) с номером пространственной группы 122 [6] (рис. 1, а). В спектроскопии КРС для измерений применяется прямоугольная система координат X , Y и Z . В случае тетрагональных кристаллов принято считать, что оси X , Y и Z соответствуют кристаллографическим осям a , b и c , которые ориентированы вдоль направлений [010], [100] и [001] (рис. 1, б).

Неприводимое представление рамановских активных мод кристалла $ZnGeP_2$ выглядит следующим образом [7]:

$$\Gamma = A_1 + 3B_1 + 3B_2 + 6E.$$

Моды A_1 , B_1 и B_2 являются невырожденными, мода E – дважды вырожденная. На практике из-за ограничений чувствительности измерительного оборудования и наличия дефектов внутри кристалла не все моды могут быть зарегистрированы.

Интенсивность n -й фононной моды КРС кристалла определяется выражением [8]

$$I_n \propto |\mathbf{e}_i R_n \mathbf{e}_s|^2, \quad (1)$$

где \mathbf{e}_i и \mathbf{e}_s – единичные векторы поляризации электрического поля для падающего и рассеянного света соответственно; R_n представляет собой рамановский тензор, соответствующий фононной моде (например, R_{A_1} соответствует A_1). Кристаллы $ZnGeP_2$ ранее исследовались методом КРС [6, 7, 9–12], однако информация об их рамановских тензорах в литературе отсутствует. Одним из воз-

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.