О.В. МЕЛЬНИЧУК,[1] Л.Ю. МЕЛЬНИЧУК,[1] Н.О. КОРСУНСЬКА,[2]
Л.Ю. ХОМЕНКОВА,[2,3] Є.Ф. ВЕНГЕР,[2] І.В. ВЕНГЕР[2]

[1] Ніжинський державний університет ім. Миколи Гоголя
(Вул. Графська, 2, Ніжин,16600; e-mail: mov310310@gmail.com)
[2] Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
(Просп. Науки, 41, Київ 03028)
[3] Національний університет "Києво-Могилянська академія"
(Вул. Г. Сковороди, 2, Київ 04070)

УДК 539

ФОНОН-ПОЛЯРИТОННІ ЗБУДЖЕННЯ В СТРУКТУРАХ MgZnO/6H-SiC

Для тонких плівок $Mg_xZn_{1-x}O$, нанесених на оптично-анізотропних підкладках 6H-SiC, вперше було змодельовано спектри зовнішнього інфрачервоного відбивання в області "залишкових променів" плівки та підкладки за орієнтації електричного поля $E\perp c$ з використанням взаємно узгоджених параметрів, отриманих раніше для монокристалів оксиду магнію, оксиду цинку та карбіду кремнію. Показано, що зміни товщини плівки і вмісту Mg суттєво деформують спектр відбивання та зменшують відбивальну здатність $R(\nu)$. Використовуючи співвідношення Крамерса–Кроніга, визначено спектральні області, де відбивальна здатність є чутливою до зміни товщини плівки, ступеня легування плівки та підкладки для структури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC. Основну увагу приділено аналізу даних для значення $x = 0{,}2$. Уперше теоретично продемонстровано існування поверхневих поляритонів для таких структур та побудовано поверхню порушеного повного внутрішнього відбивання $I(\nu)/I_0(\nu)$, яка являє собою тривимірне представлення коефіцієнта пропускання зазначеної вище структури і залежить від частоти випромінювання і кута падіння. Продемонстровано можливість досліджень резонансної взаємодії оптичних фононів та плазмонів плівки та підкладки.

Ключові слова: поверхневі поляритони, ІЧ-спектроскопія, оксид цинку, оксид магнію, $Mg_xZn_{1-x}O$, карбід кремнію.

1. Вступ і постановка задачі

Завдяки своїм унікальним властивостям (висока фоточутливість, високий вихід фото- і катодолюмінесценції, наявність піро- і п'єзоефекту тощо) плівки $Mg_xZn_{1-x}O$ належать до матеріалів, які являють собою основу найрізноманітніших оптоелектронних приладів, побудованих на використанні об'ємних та поверхневих хвиль [1–6]. Перевагою цих приладів є їх мініатюрність, висока ефективність роботи в широкому частотному діапазоні, а також можливість інтеграції з іншими мікроелектронними елементами [5–9]. Це зумовлено тим, що пристрої на основі структур, які містять оксид цинку та оксид магнію, мають низку істотних переваг.

Зазвичай створення плівок твердих розчинів $Mg_xZn_{1-x}O$ відбувається за рахунок поєднання відповідних оксидів, оксиду цинку (ZnO) та оксиду магнію (MgO), у певних концентраціях. Обидва оксиди належать до широкозонних напівпровідників типу A^2B^6.

Відомо, що ZnO має гексагональну кристалічну структуру з параметрами ґратки $a = 3{,}2495$ Å та $c = 5{,}2069$ Å, яка належить до групи $C^4_{6V}(P6_3mc)$, ширину забороненої зони близько 3,36 еВ та енергію зв'язку екситону 60 меВ. Оксиду цинку притаманна висока радіаційна, хімічна та термічна стійкості і на сьогоднішній день він уже є досить застосовним напівпровідником в акусто-, опто- та наноелектроніці [10–13]. Особливо актуальним оксид цинку є для виготовлення плівкових прозорих електродів для сонячних елементів [14], для створення детекторів та фільтрів для ультрафіолетового діапазону, одержанню лазерної генерації за кімна-

© О.В. МЕЛЬНИЧУК, Л.Ю. МЕЛЬНИЧУК, Н.О. КОРСУНСЬКА, Л.Ю. ХОМЕНКОВА, Є.Ф. ВЕНГЕР, І.В. ВЕНГЕР, 2020

тної температури [10, 11]. Крім того, оксид цинку знайшов широке застосування для виготовлення газових сенсорів, світловипромінюючих діодів, варисторів, фотокаталізаторів для очищення води та повітря [14]. Відомо, що легування оксиду цинку різними елементами дозволяє розширити його функціональні властивості [15]. Так, для збільшення E_g потрібно використовувати елементи другої групи, які знаходяться вище у таблиці Д.І. Менделєєва, наприклад, Mg [16], а для зменшення – елементи, які знаходяться нижче, наприклад, Cd [17].

Оксид магнію є одним із найпоширеніших природних мінералів, що кристалізуються в скелястій структурі Землі за будь-яких тисків і температур [18]. Кристали MgO є прозорі, пожежо- і вибухобезпечні. Вони мають високу температуру плавлення 2800 °C, тому широко використовуються як матеріал підкладки для процесів росту тонких плівок у сучасних мікроелектронних та оптоелектронних пристроях [18]. MgO практично нерозчинний у воді, однак розчиняється у соляній, сірчаній та оцтовій кислотах. MgO належить до групи $Fm\bar{3}m$, має кубічну структуру з параметром комірки $a = 4{,}216$ Å. На відміну від ZnO, MgO має набагато більшу ширину забороненої зони (від 7,8 до 8,2 еВ) і іноді розглядається як діелектрик.

Теоретично, імовірність утворення твердих розчинів $Mg_xZn_{1-x}O$ з різним вмістом Mg є високою, оскільки не потребує будь-якої компенсації заряду при вбудовуванні магнію на місце цинку у кристалічній ґратці. При цьому, як зазначалося вище, при збільшенні вмісті MgO відбувається збільшення ширини забороненої зони в порівнянні з зоною ZnO. Саме можливість зміни оптичних та електрофізичних властивостей у потрійних сполуках $Mg_xZn_{1-x}O$ розширює межі їх застосування, оскільки дозволяє зсунути робочу область лазерів, світлодіодів та фотодетекторів у бік глибшого ультрафіолету. Вперше це було описано у роботах Кавасакі та ін. [16, 17]. Такі матеріали є також перспективними для створення антивідбивних шарів у сонячних елементах великої площі [19–26].

У залежності від відносних концентрацій Mg і Zn, сполуки $Mg_xZn_{1-x}O$ можуть мати як гексагональну кристалічну структуру (типу вюрцит), так і кубічну. Наприклад, попередні дослідження авторів товстих шарів та керамічних зразків $Mg_xZn_{1-x}O$, виготовлених методом твердофазної реакції з суміші оксидів за високих температур, показали, що однорідний твердий розчин з гексагональною структурою можна одержати при максимальному вмісті оксиду магнію близько 20% ($x = 0{,}2$). При цьому спостерігається розширення забороненої зони до 3,7 еВ [27, 28]. При $x > 0{,}2$ відбувається додаткове утворення фази MgO з кубічною структурою. Тому, дослідження сполук $Mg_xZn_{1-x}O$ з $0 < x < 0{,}2$ є дуже привабливим, оскільки такі матеріали зберігають гексагональну кристалічну структуру та демонструють оптично-анізотропні властивості в ІЧ-області спектра.

З точки зору застосування матеріалів $Mg_xZn_{1-x}O$, використання саме плівок, нанесених на різні підкладки (наприклад, Si, SiO_2, Al_2O_3, 6H-SiC та ін.) є найбільш перспективним, оскільки плівки мають значно нижчу собівартість у порівнянні з монокристалами.

Слід зазначити, що в деяких роботах повідомлялося про одержання тонких плівок твердих розчинів з $x = 0{,}24$–$0{,}30$ з гексагональною структурою, а при збільшенні x до 0,4 відбувалося також утворення кубічної фази MgO [29–31]. В той самий час в літературі відсутні дані щодо властивостей тонких плівок з більшим вмістом магнію.

Серед різних підкладок, які можуть бути використані для виготовлення плівок $Mg_xZn_{1-x}O$, особливої уваги заслуговують підкладки на основі карбіду кремнію (SiC). Це – єдине бінарне з'єднання кремнію та вуглецю, що існує в твердій фазі. Хімічне з'єднання кремнію та вуглецю в ґратці карбіду кремнію характеризується сильним йонно-ковалентним зв'язком, який надає йому рідкісні фізико-хімічні властивості [32–34]. Як і ZnO, монокристали SiC-6H належать до просторової групи $C_{6V}^4(P6_3mc)$, але характеризуються сильною анізотропією властивостей плазмонної підсистеми на відміну від ZnO [33].

На даний час карбід кремнію є основою для створення ряду напівпровідникових приладів – люмінесцентних індикаторів, лічильників ядерних випромінювань, фотоприймачів, високотемпературних діодів, тензодатчиків, терморезисторів, польових транзисторів з p–n-переходом та ін. [32, 33]. Таке широке практичне застосування монокристалів карбіду кремнію пов'язане з можливістю зміни електричних, оптичних, люмінесцентних, фотоелектричних властивостей кристалів та їх унікальною стійкістю до зовнішніх дій, поєднанням фізико-хімічних властивостей – високої термі-

чної, механічної, радіаційної та хімічної стійкості. За твердістю карбід кремнію поступається тільки алмазу і карбіду бора; за температур до 400 °C він практично не взаємодіє ні з одним із відомих для інших напівпровідникових матеріалів травників [32, 33].

Спільним для перерахованих вище матеріалів, ZnO, MgO та SiC-6H, є область "залишкових променів", яка міститься в діапазоні від 400 до 1000 $см^{-1}$, що дозволяє розширити можливості їх практичного використання. Слід зауважити, що властивості кожного із згаданих монокристалів було досконало досліджено і опубліковано авторами раніше [25, 33, 35].

Нещодавно, було досліджено теоретично та експериментально тонкі плівки ZnO, нанесені на різні підкладки [36–38]. Проте дослідження плівок MgZnO з різним хімічним складом та різною концентрацією електронів, розташованих на діелектричних підкладках 6H-SiC, методами спектроскопії ІЧ-відбивання та порушеного повного внутрішнього відбивання (ППВВ) в області "залишкових променів" плівки та підкладки за орієнтацій $E \perp c$ в літературі нам невідомі. Тому, метою даної роботи є моделювання спектрів зовнішнього ІЧ-відбивання в залежності від ступеня легування плівки та підкладки та з'ясування частотних проміжків, у яких можливе збудження поверхневих фононних та плазмон-фононних поляритонів у плівках потрійних сполук $Mg_xZn_{1-x}O$ на оптично-ізотропних підкладках 6H-SiC.

2. Методи ІЧ-спектроскопії для дослідження MgZnO/6H-SiC

Як відомо, серед неруйнівних методів дослідження оптичних та електрофізичних властивостей тонких напівпровідникових та діелектричних оксидних плівок, що дозволяють контролювати їх якість і структурну досконаліть, є методи зовнішнього ІЧ-відбивання та поляритонної спектроскопії [19]. Обидва методи дають інформацію не лише про фізико-хімічні властивості плівки, а й про параметри підкладки та стан якості обробки її поверхні.

У роботах [36–38] подано детальний аналіз методики дослідження оптичних та електрофізичних характеристик плівок ZnO на напівпровідникових та діелектричних підкладках Si, SiO_2 та ін. за допомогою спектроскопії зовнішнього ІЧ-відбивання за врахування фононної та плазмон-фононної взаємодій у плівці та підкладці.

Що стосується методу ППВВ, то його суть полягає в такому [19]: при повному внутрішньому відбиванні промінь ІЧ-випромінювання здатний проникнути з прозорого в ІЧ-області оптично густішого середовища в середовище оптично менш густе на глибину, що співмірна з довжиною падаючої хвилі ІЧ-діапазону. За таких умов, якщо оптично менш густе середовище є поглинаючим, то інтенсивність світла, що проникає в досліджуване середовище, послаблюється і відбивання не буде повним. Слід пам'ятати, що досліджуване середовище має в даній ІЧ-області сильне поглинання. За таких умов спектральні прилади будуть реєструвати спектр ППВВ. При взаємодії електромагнітного випромінювання з різними типами коливань (наприклад, фононів, плазмонів тощо) в області "залишкових променів" одновісних кристалів та структур на їх основі відбуваються збудження і поширення поверхневих електромагнітних хвиль, тобто поверхневих поляритонів (ПП). Під останніми розуміють поверхневі квазічастинки, що відповідають коливанням змішаного електромагнітно-механічного характеру, максимум амплітуди поля яких знаходиться на поверхні твердого тіла, а амплітуда поля експоненційно зменшується в обох напрямках від межі поділу середовищ. Взаємодія поверхневих оптичних фононів із поверхневими плазмовими коливаннями вільних носіїв заряду призводить до збудження змішаних поверхневих плазмон-фононних поляритонів (ППФП), у яких перебудова спектра коливань максимальна, коли плазмова частота ν_p виявляється близькою до частоти поздовжніх оптичних фононів ν_L. Крім того, аналітичні можливості спектроскопії ПП різко збільшуються, якщо частоти оптичних фононів плівки попадають в частотний діапазон існування ПП підкладки. Внаслідок резонансу виникає розщеплення і зсув спектрів ПП підкладки. У цьому разі експериментальні дані дозволяють визначити діелектричні проникності плівки і підкладки, а також товщину плівки і охарактеризувати саму структуру [39].

3. Теорія та аналіз спектрів MgZnO/6H-SiC

На сьогодні існує ряд наукових праць з дослідження гексагональних монокристалів електронного

карбіду кремнію (політип 6H) неруйнівними методами ІЧ-спектроскопії та поверхневих поляритонів [19, 25, 33, 34, 40–43]. Експериментальні спектри відбивання від поверхні SiC-6H з великою концентрацією електронів ($>10^{18}$ см$^{-3}$) уперше досліджено авторами [25]. Авторами [19, 25, 33, 40–43] було вивчено питання про вплив анізотропії кристалічної ґратки й ефективних мас електронів, коефіцієнтів затухання фононів γ_f і плазмонів γ_p на коефіцієнт відбивання $R(\nu)$ від поверхні монокристалів SiC-6H в ІЧ-області спектра.

У роботі [44] методом ІЧ-спектроскопії зовнішнього відбивання отримано оптичні характеристики тонких плівок потрійних сполук $Mg_xZn_{1-x}O$ на діелектричній підкладці Al_2O_3 в області "залишкових променів" плівки та підкладки. Показано, що зміни товщини плівки і вмісту Mg суттєво деформують спектр відбивання в області "залишкових променів" плівки та підкладки, зменшують відбивальну здатність. Моделювання ІЧ-спектрів дозволило визначити статичну діелектричну проникність структури $Mg_xZn_{1-x}O$ за різних значень x за орієнтації $E\perp c$. Встановлено, що структури $Mg_xZn_{1-x}O/Al_2O_3$ добре моделюються у разі використання взаємно узгоджених параметрів для монокристалів оксиду магнію, оксиду цинку та лейкосапфіру при орієнтації $E\perp c$, що підтверджує перспективність неруйнівного методу ІЧ-спектроскопії для визначення оптичних характеристик плівок потрійних сполук, так і ступеня їх текстурованості.

Теоретичні дослідження спектрів ІЧ-відбивання плівки MgZnO на "напівнескінченній" напівпровідниковій підкладці з 6H-SiC проведено в області "залишкових променів" оксиду цинку, оксиду магнію та карбіду кремнію (політип 6H) за математичними виразами роботи [19, 35, 43], що для випадку $E\perp c$ враховують взаємодію ІЧ-випромінювання з фононною та плазмонною підсистемами плівки MgZnO на "напівнескінченних" підкладках SiC-6H.

Розрахунок виконано на основі моделі діелектричної проникності з адитивним внеском активних оптичних фононів і плазмонів [19, 42, 43]:

$$\varepsilon_j(\nu) = \varepsilon_{1j}(\nu) + i\varepsilon_{2j}(\nu) =$$

$$= \varepsilon_{\infty j} + \frac{\varepsilon_{\infty j}\left(\nu_{Lj}^2 - \nu_{Tj}^2\right)}{\nu_{Tj}^2 - \nu^2 - i\nu\gamma_{fj}} - \frac{\nu_{pj}^2\varepsilon_{\infty j}}{\nu(\nu + i\gamma_{pj})}, \qquad (1)$$

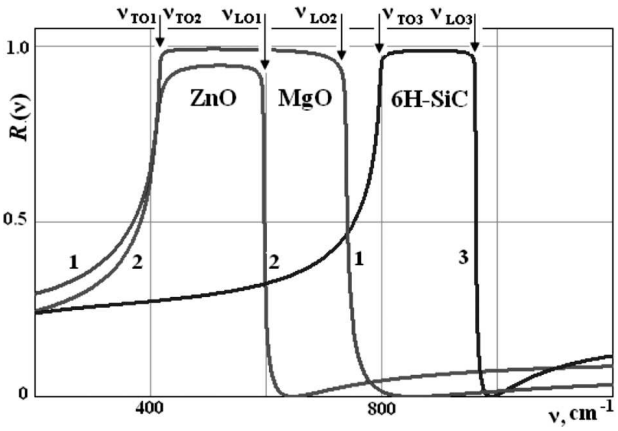

Рис. 1. Розрахункові спектри ІЧ-відбивання $R(\nu)$ монокристалів MgO (1), ZnO (2), 6H-SiC (3) при орієнтації ($E\perp c$)

де ν_L, ν_T – частоти поперечного і поздовжнього оптичних фононів; γ_f – коефіцієнт затухання оптичного фонона; γ_p і ν_p – коефіцієнт затухання та частота плазмового резонансу. Розрахунки спектрів зовнішнього ІЧ-відбивання проводились без урахування в математичних виразах поглинання відповідно в плівці та підкладці [19]. Коефіцієнт відбивання визначається як $R(\nu,\varphi) = I(\nu,\varphi)/I_0(\nu,\varphi)$, де $I_0(\nu,\varphi)$ та $I(\nu,\varphi)$ – інтенсивності випромінювання, що падає на поверхню та відбивається від неї, відповідно. Під час моделювання спектрів ІЧ-відбивання використано математичний редактор MATCAD.

На рис. 1 подано спектри ІЧ-відбивання монокристалів оксиду магнію (крива *1*), оксиду цинку (крива *2*) та карбіду кремнію (крива *3*) за орієнтації $E\perp c$, що отримані при врахуванні даних робіт [25, 33, 35]. Для моделювання спектрів ІЧ-відбивання використано математичні вирази одноосциляторної математичної моделі роботи [19]. Взаємоузгоджені параметри осциляторів для вказаних монокристалів наведено відповідно в табл. 1. Області "залишкових променів" до-

Таблиця 1. **Взаємно узгоджені об'ємні параметри монокристалів ZnO, 6H-SiC, MgO [25, 33, 35] (T = 293 K)**

Параметри	ε_0	ε_∞	ν_T, см$^{-1}$	ν_L, см$^{-1}$
ZnO ($E\perp c$)	8,1	3,95	412	591
6H-SiC ($E\perp c$)	9,66	6,52	797	961
MgO ($E\perp c$)	2,98	9,39	416	738

Таблиця 2. **Параметри фононної підсистеми $Mg_{0,2}Zn_{0,8}O$ та 6H-SiC**

Зразок	ε_∞	ε_0	ν_{TO1}, см$^{-1}$	ΔS_1	γ_{f1}, см$^{-1}$	ν_{TO2}, см$^{-1}$	ΔS_2	γ_{f2}, см$^{-1}$	ν_{TO3}, см$^{-1}$	ΔS_2	γ_{f3}, см$^{-1}$
$Mg_{0,2}Zn_{0,8}O$	3,51	8,0	414,1	0,69	13,8	551,8	1,8	17,7	605	2,0	70,7
6H-SiC	6,52	9,66	797	3,14	3,0	–	–	–	–	–	–

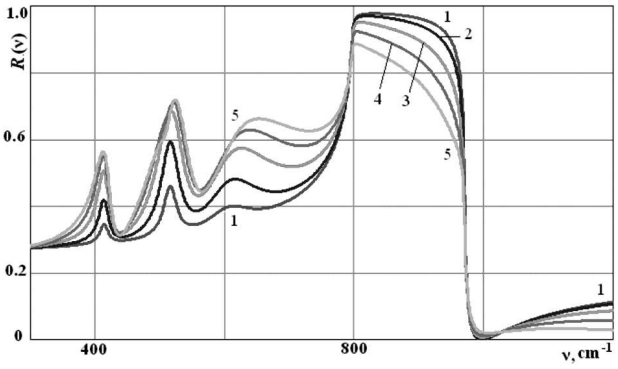

Рис. 2. Теоретичні спектри відбивання $R(\nu)$ структури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC при $x = 0{,}2$: *1–3* – $d_{\text{пл}} = 0{,}1$ (крива *1*); 0,25 (крива *2*); 0,5 (крива *3*); 0,75 (крива *4*); 1,0 (крива *5*) мкм

сліджуваних монокристалів розміщені в проміжку між частотою поперечного оптичного фонона оксидів магнію та цинку (ν_{TO1}, ν_{TO2}) та поздовжнього оптичного фонона карбіду кремнію (політип 6H) (ν_{LO3}). Максимуми коефіцієнтів відбивання становлять 0,99 (крива *1*), 0,94 (крива *2*) та 0,98 (крива *3*). Обидва монокристали ZnO і 6H-SiC кристалізуються в структурі вюртциту і належать до однієї просторової групи $C_{6\text{V}}^4$ (P6_3mc).

MgO має кристалічну структуру типу хлориду натрію. Детальніший аналіз отримання взаємоузгоджених параметрів одноосцилярної моделі для ZnO та 6H-SiC проведено в роботах [19, 25, 33]. Авторами [33] показано, що ZnO характеризується значною анізотропією властивостей фононної і слабкою анізотропією плазмонної підсистем, карбід кремнію (політип 6H) незначною анізотропією властивостей фононної підсистеми та сильною анізотропією властивостей плазмонної підсистеми [25]. Завдяки цьому монокристали є добрими модельними об'єктами, зручними під час дослідження анізотропії оптичних та електрофізичних властивостей методами спектроскопії ІЧ-відбивання та поверхневих поляритонів за наявності зв'язку довгохвильових оптичних коливань ґратки з електронною плазмою напівпровідників.

З рис. 1 видно, що область "залишкових променів" 6H-SiC розміщена у 800–1000 см$^{-1}$ і не перекривається з діапазонами $\nu_{TO1} - \nu_{LO1}$ та $\nu_{TO2} - \nu_{LO2}$ монокристалів ZnO та MgO. Однак, область "залишкових променів" ZnO розміщена між частотами $\nu_{TO2} - \nu_{LO2}$ для MgO, що буде потрібно враховувати при моделюванні та аналізі гетероструктури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC.

На рис. 2 показано залежність $R(\nu)$ нелегованої структури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC від товщини плівки $Mg_xZn_{1-x}O$. Криві *1–5* відповідають товщинам від 0,1 до 1,0 мкм. Розрахунок проведено за параметрів фононної підсистем плівки та підкладки, вказаних у табл. 2. Плазмонна підсистема визначалась при сталих значеннях $\gamma_{f6\text{H-SiC}} = 3$ см$^{-1}$, $\nu_{p\perp} = \gamma_{p\perp} = 1$ см$^{-1}$. Моделювання проведено при використанні співвідношень Крамерса–Кроніга та даних, отриманих авторами [45] і поданих у табл. 2. Значення статичної діелектричної проникності визначено авторами даної статті при використанні співвідношення Лідденна–Сакса–Теллера [44]. Отримані результати добре узгоджуються з даними, наведеними на графіку у роботах [25, 33, 35].

Як видно з рис. 2, збільшення товщини плівки від 0,1 до 1 мкм призводить до значного збільшення $R(\nu)$ в усій області "залишкових променів" $Mg_xZn_{1-x}O$ і зменшення коефіцієнта відбивання $R(\nu)$ в області "залишкових променів" підкладки 6H-SiC. В околі частоти поперечного оптичного фонона ZnO (412 см$^{-1}$) спостерігається максимум, що відповідає частоті 416 см$^{-1}$ (крива *1*), який зміщується в низькочастотний діапазон до 412 см$^{-1}$ (крива *5*) при збільшенні товщини плівки до 1 мкм. На частоті 520 см$^{-1}$ має місце зміна $R(\nu)$ від 0,44 для $d_{\text{пл}} = 0{,}1$ до 0,72 для $d_{\text{пл}} = 1$ мкм, для частоти 412 см$^{-1}$ спостерігається збільшення $R(\nu)$ від 0,34 для $d_{\text{пл}} = 0{,}1$ мкм до 0,56 для $d_{\text{пл}} = 1$ мкм. Однак, зміна товщини

плівки в діапазоні 500–550 см$^{-1}$ супроводжується зміщенням максимуму спектра у високочастотну область на 40 см$^{-1}$. Суттєві зміни спектра мають місце у проміжку від 600–720 см$^{-1}$, де $R(\nu)$ збільшується на 22% при зміщенні частоти максимуму від 615 до 654 см$^{-1}$. В області "залишкових променів" підкладки 6H-SiC у разі збільшення товщини плівки до 1 мкм зареєстровано зменшення $R(\nu)$ на частоті 900 см$^{-1}$ на 20%, що зумовлено впливом фононної підсистеми на спектр відбивання структури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC. Максимальна чутливість коефіцієнта відбивання $R(\nu)$ до збільшення товщини плівки спостерігається у низькочастотній області спектра. У діапазоні від 400 до 600 см$^{-1}$ зареєстровано збільшення коефіцієнта відбивання на 22%.

На рис. 3 подано залежність форми спектрів ІЧ-відбивання від концентрації вільних носіїв зарядів у плівках $Mg_xZn_{1-x}O$ товщиною 500 нм. Криві *1–5* розраховано при $\gamma_{p\perp} = \nu_{p\perp}$ у межах від 100 до 1000 см$^{-1}$. Із рисунка видно, що у спектрах відбивання $R(\nu)$ найбільш суттєві зміни мають місце в області 300–400 та 900–980 см$^{-1}$, де $R(\nu)$ зменшується від 0,96 до 0,5, та в діапазоні 1000–1100 см$^{-1}$, де $R(\nu)$ зростає від 0 до 0,38.

Максимуми $R(\nu)$ розміщені на частотах 413 см$^{-1}$ ($R(\nu) = 0{,}49$), 516 см$^{-1}$ ($R(\nu) = 0{,}68$) і 630 см$^{-1}$ ($R(\nu) = 0{,}57$). При цьому, незалежно від ступеня легування плівки, спостерігається зменшення значень коефіцієнта зовнішнього відбивання $R(\nu)$ зі збільшенням частоти у високочастотній ділянці спектра. Розрахункові криві *1–5* для $R(\nu)$ отримано за параметрів фононної підсистеми плівки $Mg_xZn_{1-x}O$ та підкладки 6H-SiC, поданих у табл. 2. Параметри плазмонної підсистеми $Mg_xZn_{1-x}O$ змінювались у межах 100–1000 см$^{-1}$ для випадку $\nu_p = \gamma_p$, що відповідає зміні концентрації від 10^{16} до 10^{19} см$^{-3}$, рухливості від 90 до 200 см^2/(В$\cdot$с) та провідності від 100 до 410 Ом$^{-1}\cdot$см$^{-1}$. На частоті 970 см$^{-1}$ значення $R(\nu) \approx 0{,}5$ є незмінним при легуванні плівки та підкладки.

Як видно з рис. 3, наявність вільних носіїв зарядів (електронів) у плівках $Mg_xZn_{1-x}O$ порядку $n_0 = 10^{16}$–10^{19} см$^{-3}$ істотно деформує спектр відбивання в діапазонах 420–480 та 800–1000 см$^{-1}$. Це зумовлено взаємодією фононної та плазмонної підсистем плівки $Mg_xZn_{1-x}O$ з фононною та плазмонною підсистемами підкладки 6H-SiC.

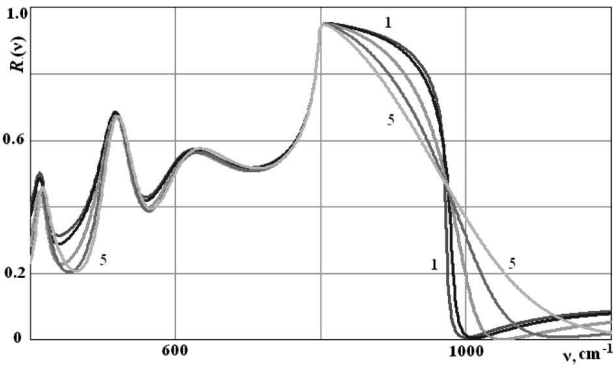

Рис. 3. Теоретичні спектри $R(\nu)$ структури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC при $d_{\text{пл}} = 500$ нм, $\gamma_{f\text{6H-SiC}} = 3$ см$^{-1}$: *1–5* – $\nu_{p\text{6H-SiC}} = \gamma_{p\text{6H-SiC}} = 100$ (*1*), 250 (*2*), 500 (*3*), 750 (*4*), 1000 (*5*) см$^{-1}$

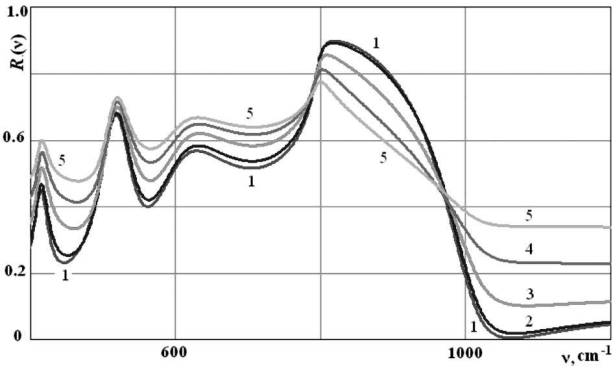

Рис. 4. Спектри $R(\nu)$ структури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC при $d_{\text{пл}} = 500$ нм

Плівка ($Mg_xZn_{1-x}O$): криві *1–5* – $\nu_p = \gamma_p = 100$ (*1*), 250 (*2*), 500 (*3*), 750 (*4*), 1000 (*5*) см$^{-1}$. Підкладка: $\gamma_{f\text{6H-SiC}} = 12$ см$^{-1}$; $\nu_{p\text{6H-SiC}} = 550$ см$^{-1}$; $\gamma_{p\text{6H-SiC}} = 620$ см$^{-1}$

На рис. 4 наведено спектри $R(\nu)$ при скануванні за ν_p (концентрацією вільних носіїв зарядів) у плівці $Mg_xZn_{1-x}O$, нанесеній на леговану оптично-ізотропну підкладку 6H-SiC за незмінних параметрів фононної підсистеми плівки і підкладки, поданих у табл. 1, 2. Моделювання спектра $R(\nu)$ проведено при $\nu_{p\text{6H-SiC}\perp} = 550$ см$^{-1}$ та $\gamma_{p\text{6H-SiC}\perp} = 620$ см$^{-1}$, що відповідає концентрації вільних носіїв зарядів у підкладці 6H-SiC відповідно $n_0 = 5\cdot 10^{18}$ см$^{-3}$ та рухливості $\mu =$ $= 370$ см^2/(В$\cdot$с). З рисунка видно, що збільшення частоти плазмонів (концентрації вільних носіїв зарядів) у плівці $Mg_xZn_{1-x}O$ для випадку $\nu_p = \gamma_p$ від 100–1000 см$^{-1}$, нанесеній на сильно

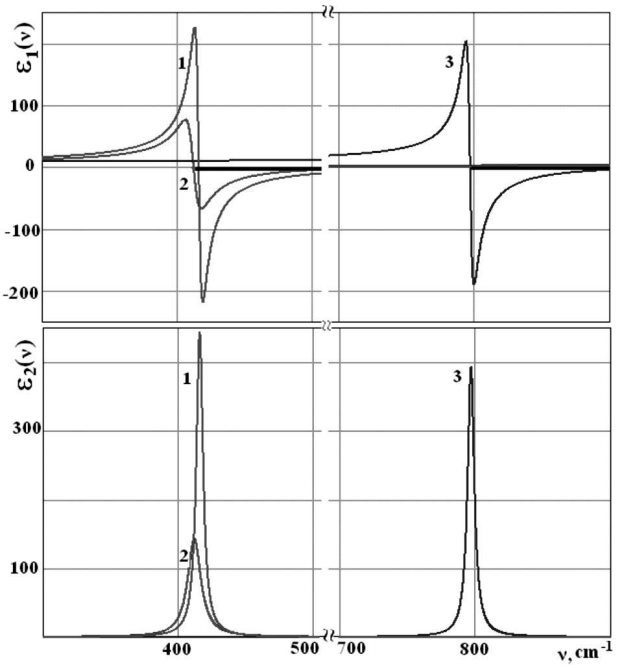

Рис. 5. Залежність дійсної $\varepsilon_1(\nu)$ та уявної $\varepsilon_2(\nu)$ частин діелектричної проникності від частоти ν у монокристалах MgO (крива *1*), ZnO (крива *2*) та 6H-SiC (крива *3*)

леговану підкладку 6H-SiC, призводить до зміни спектра $R(\nu)$ в усій ІЧ-області. У низькочастотній області, яка формується практично параметрами плівки $Mg_xZn_{1-x}O$, спостерігається збільшення $R(\nu)$ на 25%, у той самий час високочастотна область, спектр якої формується підкладкою з оптично-анізотропного напівпровідника, має місце зменшення $R(\nu)$ в області "залишкових променів" на 20% і зростання $R(\nu)$ на 35% у проміжку 1000 (крива *1*) 1200 $см^{-1}$ (крива *5*). Максимальна зміна $\Delta R(\nu)$ проявляється на частотах $\nu \approx \nu_L$. Останнє вказує на необхідність врахування плазмон-фононної взаємодії у плівці та підкладці під час моделювання спектрів ІЧ-відбивання та проведення дисперсійного аналізу структури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC.

Як відомо, крім методу спектроскопії зовнішнього ІЧ-відбивання для дослідження оптичних та електрофізичних властивостей тонких легованих (нелегованих) плівок на легованих (нелегованих) підкладках є метод поляритонної спектроскопії [19], який дає інформацію не лише про фізико-хімічні властивості плівки, а і про параметри підкладки та стан якості обробки її поверхні.

Отримані вище дані дозволили провести комплексні дослідження можливості збудження поверхневих поляритонів у структурі $Mg_xZn_{1-x}O$/ 6H-SiC. При розрахунках спектрів ППВВ використано взаємоузгоджені параметри $Mg_xZn_{1-x}O$ та 6H-SiC (табл. 1, 2). Що стосується коефіцієнтів затухання плазмонів у плівках $Mg_xZn_{1-x}O$, то розрахунок усіх кривих проведено для випадку $\nu_p = \gamma_p$. Затухання фононної підсистеми для 6H-SiC становить $\gamma_f = 3$ $см^{-1}$.

Поверхневі поляритони в полярних кристалах збуджуються лише у так званих поверхнево-активних середовищах, які мають від'ємну діелектричну проникність у певному частотному діапазоні електромагнітних хвиль [19].

На рис. 5 показано дійсні $\varepsilon_1(\nu)$ та уявні $\varepsilon_2(\nu)$ частини діелектричної проникності для монокристалів MgO (1), ZnO (2) і SiC 6H (3). Розрахунок $\varepsilon_1(\nu)$ та $\varepsilon_2(\nu)$ проведено за математичними виразами роботи [19]:

$$\varepsilon_1(\nu) = \varepsilon_{\infty 1} + \frac{\nu^2 - \nu_{L1}^2}{(\nu^2 - \nu_{T1}^2) + i\nu\gamma_{f1}}, \qquad (2)$$

$$\varepsilon_2(\nu) = \varepsilon_{\infty 2} + \frac{\nu^2 - \nu_{L2}^2}{(\nu^2 - \nu_{T2}^2) + i\nu\gamma_{f2}}. \qquad (3)$$

Як видно з рис. 5, уздовж осі абсцис існують проміжки $|\nu_{TO1} - \nu_{LO1}|$, $|\nu_{TO2} - \nu_{LO2}|$, $|\nu_{TO3} - \nu_{LO3}|$ (жирна лінія), в яких значення дійсної частини діелектричної проникності $\varepsilon_1(\nu) \leqslant 0$. Виділені частотні "вікна", згідно з [19] вказують на те, що саме в цих проміжках можливе існування поверхневих фононних та плазмон-фононних поляритонів в оптично-ізотропних кристалах та структурах на їх основі. Граничні значення вказаних частот визначаються з умови [19]:

$$\varepsilon_1(\nu_s) + \varepsilon_2(\nu_s) = 0. \qquad (4)$$

Згідно з рис. 5, у випадку монокристалів MgO, ZnO і 6H-SiC проміжки аномальної дисперсії розміщені в різних частотних діапазонах. Кожне із середовищ буде поверхнево-активним у відповідному діапазоні (412–590 $см^{-1}$ для ZnO, 416–738 для MgO та 797–970 $см^{-1}$ для SiC 6H), при цьому друге середовище (повітря), з яким межує кристал, буде поверхнево-неактивним. Отже, для досліджуваної системи справедливе співвідношення щодо розташування частот поперечних і поздовжніх оптичних фононів:

$$(\nu_{TO1}, \nu_{TO2}) < \nu_{LO1} < \nu_{LO2} < \nu_{TO3} < \nu_{LO3}, \qquad (5)$$

в якому індекси 1, 2 та 3 характеризуватимуть, відповідно, плівку та підкладку.

Розрахунок спектрів ППВВ проведено за формулами, що враховують взаємодію ІЧ-випромінювання з фононною та плазмонною підсистемами плівки і "напівнескінченної" підкладки з напівпровідника або діелектрика для випадку $E \perp c$ при використанні математичного редактора "MATHCAD":

$$R(\nu,\varphi) = \left(\left| \frac{1 + iP(\nu,\varphi)}{1 - iP(\nu,\varphi)} \right| \right)^2, \qquad (6)$$

де

$$P(\nu,\varphi) = \frac{\beta_2(\nu,\varphi)}{\beta_1(\nu,\varphi)} \times$$

$$\times \frac{\beta_3(\nu,\varphi) A(\nu,\varphi) + \beta_2(\nu,\varphi) \tanh(k_2(\nu,\varphi) \times 2\pi d)}{\beta_2(\nu,\varphi) + \beta_3(\nu,\varphi) A(\nu,\varphi) \tanh(k_2(\nu,\varphi) \times 2\pi d)},$$

$$A(\nu,\varphi) = \frac{\beta_4(\nu,\varphi) + \beta_3(\nu,\varphi) \tanh(k_3(\nu,\varphi) \times 2\pi d)}{\beta_3(\nu,\varphi) + \beta_4(\nu,\varphi) \tanh(k_3(\nu,\varphi) \times 2\pi\nu)},$$

$$\beta_i(\nu,\varphi) = \frac{\varepsilon_i}{k_i(\nu,\varphi)} \quad (i = 1,2,3,4),$$

$$k_1(\nu,\varphi) = \sqrt{\varepsilon_1} \cos(\varphi),$$

$$k_i(\nu,\varphi) = \sqrt{(k_x(\nu,\varphi))^2 - \varepsilon_i} \quad (i = 2,3,4),$$

$$k_x(\nu,\varphi) = \sqrt{\varepsilon_1} \sin(\varphi).$$

Знаки 1–4 належать відповідно призмі ППВВ, вакуумному зазору товщиною $d_з$, напівпровідниковій (діелектричній) плівці товщиною $d_{пл}$ та "напівнескінченній" підкладці; $\varepsilon_3(\nu)$ – діелектрична проникність плівки, яка адитивно враховує внесок активних оптичних фононів ν_T і плазмонів ν_p у тонких сильно легованих плівках.

На рис. 6 наведено розрахунковий спектр ППВВ для монокристалів ZnO (криві *1, 2*), MgO (криві *3, 4*) і 6H-SiC (криві *5, 6*) з концентрацією носіїв заряду $n \approx 10^{16}$ см$^{-3}$ для ZnO і 6H-SiC. Спектр отримано при скануванні за частотою ν і фіксованих кутах падіння ІЧ-випромінювання α у призмі ППВВ. Сканування проведено при кутах $\alpha = 35°$ (крива *1, 3, 5*) та $\alpha = 40°$ (крива *2, 4, 6*) і різних значеннях величини зазору $d_з$ між призмою ППВВ і досліджуваним зразком. Для MgO, ZnO при $\alpha = 35°$ $d_з = 9{,}5$ мкм, а при 40° – 7,5 мкм. Для монокристалів 6H-SiC ці значення становили відповідно 5,8 і 4,8 мкм, частоти мінімуму у спектрах ППВВ: ν_{1-6} = 537, 545, 621, 637, 931, 937 см$^{-1}$, яким відповідає коефіцієнт відбивання $R(\nu_{1-6}) =$ = 0,82; 0,86; 0,88; 0,91; 0,85; 0,91.

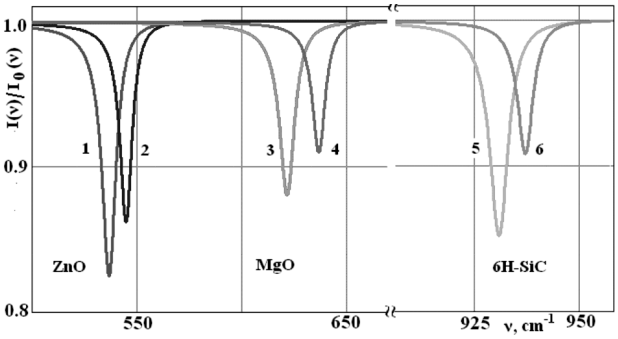

Рис. 6. Спектри ППВВ ZnO, MgO і 6H-SiC

Математичне моделювання спектрів ППВВ показало, що при зменшенні величини зазору між призмою і зразком мінімум спектра ППВВ розширюється і зміщується за частотою або кутом падіння у високочастотну область. Крім того, у спектрах ППВВ спостерігається зменшення коефіцієнта $I(\nu)/I_0(\nu)$ (у порівнянні 100 %) за даної частоти поверхневого поляритона. У випадку, якщо зазор між призмою ППВВ і досліджуваним кристалом недостатньо великий (у межах довжини світлової хвилі), то відбувається зворотнє перетворення ПП у світлову хвилю, так званий радіаційний розпад ПП, який спотворює результати досліджень [19]. Отже, між призмою ППВВ і досліджуваним кристалом за допомогою прокладок утворювався зазор $d_з$, який поступово збільшували, спостерігаючи за сигналом відбивання $I(\nu)/I_0(\nu)$, до тієї межі, поки положення мінімуму не переставало зміщуватись по частоті, а інтенсивність поглинутої хвилі не перевищувала 20%. Це і є шукана величина зазору. Критерієм відсутності радіаційного впливу на спектр ППВВ є значення $I(\nu)/I_0(\nu) \geqslant 80$ %.

На рис. 7 (криві *1*, 2) наведено розрахункові спектри ППВВ $I(\nu)/\mathrm{I}_0(\nu)$ $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC (n = = 10^{16} см$^{-3}$), що записані при повітряному проміжку $d_з = 4$ мкм і кутах 30° (1), 33° (2). Розрахунок проведено за формулами (5) при $E \perp c$. Величина повітряного проміжку між призмою ППВВ і зразком $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC варіювалась до прояву у спектрах ППВВ мінімуму [2].

У системі $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC є дві межі поділу: повітря–плівка $Mg_xZn_{1-x}O$ та плівка $Mg_xZn_{1-x}O$-підкладка 6H-SiC. 6H-SiC, на відміну від $Mg_xZn_{1-x}O$, характеризується сильною анізотропією властивостей плазмонної підсисте-

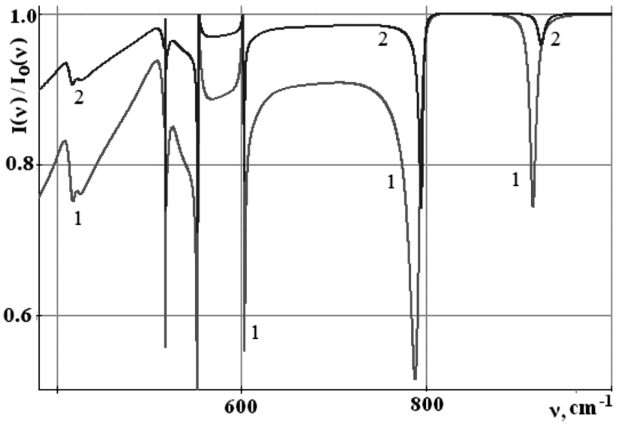

Рис. 7. Спектри ППВВ структури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC: криві *1*, *2* – $d_з = 4$ мкм; $\phi = 30$ і 33°

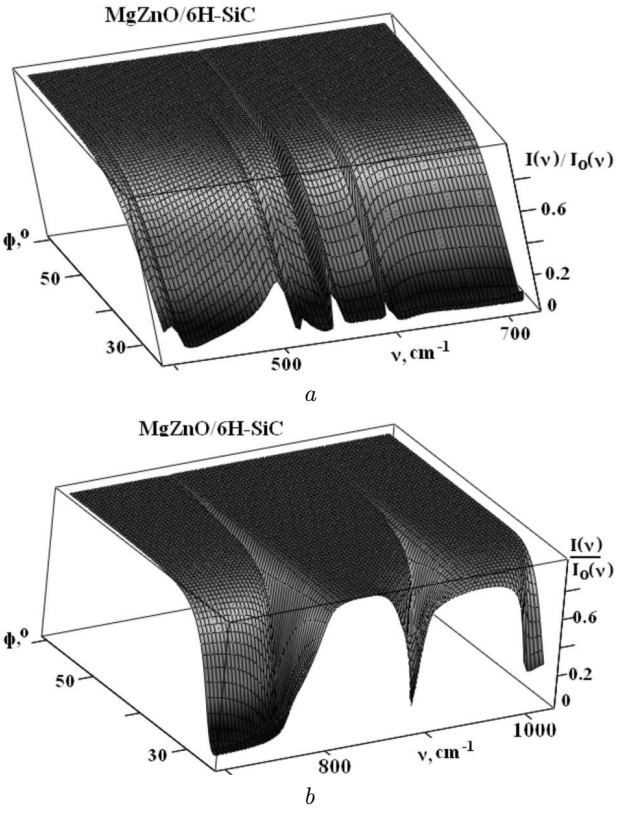

Рис. 8. Поверхня модифікованого ППВВ системи плівка $Mg_xZn_{1-x}O$ на оптично-анізотропній підкладці 6H-SiC при орієнтації $E \perp c$

ми [44], тоді як структурам $Mg_xZn_{1-x}O$, навпаки, притаманна фононна оптична анізотропія. Структура $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC складається з двох поверхнево-активних середовищ. Аналіз показав, що на межі плівка–повітря може існувати три ПП і ще два на межі плівка–підкладка ПП.

Підтвердженням того, що у системі $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC збуджуються поверхневі поляритони є прояв мінімумів у спектрах ППВВ лише в *p*-поляризованому ІЧ-випромінюванні та належність до області від'ємних значень діелектричної проникності (область між частотами поперечного і поздовжнього оптичного фонона). Крім того, мінімум спектра ППВВ зміщується у високочастотну область у разі збільшення кута падіння світла в призмі ППВВ і при зменшенні інтенсивності поглинання за незмінної величини зазору між призмою ППВВ та системою $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC [40–42]. Підтвердженням існування ПП в структурі $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC є і той факт, що із збільшенням кута падіння має місце зміщення частоти мінімуму в спектрах ППВВ на рис. 7 в більш високочастотну область та зменшення "напівширини" спектра.

Очевидно, що точніші дані можна отримати при побудові так званої поверхні відбивання ППВВ. Поверхня відбивання $I(\nu)/I_0(\nu)$ являє собою тривимірне подання коефіцієнта пропускання зазначеної вище системи і залежить від частоти випромінювання і кута падіння. За відсутності взаємодії випромінювання з поверхнею структури значення $I(\nu)/I_0(\nu) = 1$ і в даній області поверхня плоска, але за наявності збудження поверхневих поляритонів у плівці або підкладці на поверхні $I(\nu)/I_0(\nu)$ проявляється ряд "ущелин" (рис. 8, *a*), *b*)). Глибина "ущелин" залежить від параметрів системи: величини зазору між напівциліндром ППВВ і зразком, частоти випромінювання тощо. Розрахунки показують, що зміна товщини плівки від 0,001 до 0,05 мкм практично не проявляється в спектрах ППВВ, однак подальше збільшення товщини плівки $Mg_xZn_{1-x}O$ за незмінних параметрів фононної та плазмонної підсистем призводить до значної деформації спектра ППВВ в смузі "залишкових променів" плівки $Mg_xZn_{1-x}O$ та підкладки. При $d_{пл} > 0{,}1$ мкм зареєстровано зближення мінімумів в діапазоні збудження ПП в плівці $Mg_xZn_{1-x}O$. За допомогою математичного експерименту показано, що при $d_{пл} = 10$ мкм високочастотні та низькочастотні мінімуми у спектрах ППВВ співпадають між собою та даними для монокристала оксиду цинку. У спектрах ППВВ в діапазоні 300–800 $см^{-1}$ має місце лише один мінімум для кожного ку-

та падіння ІЧ-випромінювання в призмі ППВВ. Збільшення концентрації та рухливості електронів у плівці $Mg_xZn_{1-x}O$ призводить до істотного деформування спектра ППВВ в області "залишкових променів" структури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC за фіксованого значення товщини плівки.

Для поверхневих коливань у плівці та підкладці характерні затухання амплітуди при віддаленні від поверхні і залежність енергетичного спектра від діелектричної проникності оточуючого середовища. Так з'являється взаємозалежність поверхневих збуджень в двох середовищах, яка призводить частково і до виникнення змішаних плазмон-фононних коливань, які затухають по обидва боки від межі поділу (рис. 7, 8).

Коли товщина плівки набагато більша довжини хвилі випромінювання, поверхневі електромагнітні хвилі поширюються уздовж обох поверхонь і не взаємодіють між собою.

На рис. 8, *б* чітко видно, що частоти мінімумів спектрів ППВВ ПП підкладки 6H-SiC при зменшенні кута від 40 до 25° збільшуються від 956 до 960 $см^{-1}$. Далі частоти мінімумів спектра зміщуються від 980 до 1000 $см^{-1}$ при збільшенні кутів до 30°. Урахування затухання оптичного фонона призводить до утворення на поверхні відбивання $R(\nu)$ другої "ущелини" з "перевалом" у першу в області частот, що можуть бути зареєстровані експериментально під час запису спектрів ППВВ ПП при скануванні за кутами.

4. Висновки

Таким чином, у даній роботі методом ІЧ-спектроскопії зовнішнього відбивання отримано оптичні характеристики тонких плівок потрійних сполук $Mg_xZn_{1-x}O$ на напівпровідниковій підкладці 6H-SiC в області "залишкових променів" плівки та підкладки. Показано, що зміни товщини плівки і вмісту Mg суттєво деформують спектр відбивання в області "залишкових променів" плівки та підкладки, зменшують відбивальну здатність. Комп'ютерний експеримент ІЧ-спектрів дозволив змоделювати спектри ІЧ-відбивання та ППВВ структури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC за значень $x = 0{,}2$ при орієнтації $E \perp c$.

Встановлено, що структури $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC добре моделюються при використанні взаємно узгоджених параметрів, отриманих у табл. 1, 2, для монокристалів оксиду магнію, оксиду цинку та карбіду кремнію (політип 6H) за орієнтації $E \perp c$. Це підтверджує перспективність неруйнівного методу ІЧ-спектроскопії у разі визначення оптичних характеристик плівок потрійних сполук, так і їх оптичних і електрофізичних властивостей.

Отже, із проведених досліджень можна зробити такі висновки:

- у напівпровідниковій структурі $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC в області "залишкових променів" плівки $Mg_xZn_{1-x}O$ та підкладки 6H-SiC існують частотні "вікна", в яких можливе збудження та поширення поверхневих поляритонів;
- за допомогою математичного експерименту показано можливість експериментального дослідження поверхневих поляритонів у системі $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC методом ППВВ за фіксованих товщин плівок (0,1–1 мкм): *а* – сканування за частотою при фіксованих кутах падіння ІЧ-випромінювання; *б* – сканування за кутом при фіксованих значеннях частоти.

Робота виконувалась у рамках теми № 89452 "Вплив легування на структурні, оптичні та електрон-фононні властивості та стабільність анізотропних кристалів" при фінансовій підтримці Міністерства освіти і науки України.

1. A. Janotti, Ch.G. Van de Walle. Fundamentals of zinc oxide as a semiconductor. *Rep. Prog. Phys.* **72**, 126501 (2009).
2. A. Ohtomo, M. Kawasaki, T. Koida, K. Masubuchi, H. Koinuma, Y. Sakurai, Y. Yoshida, T. Yasuda, Y. Segawa. $Mg_xZn_{1-x}O$ as a II–VI widegap semiconductor alloy. *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2466 (1998).
3. A. Ohtomo, K. Tamura, M. Kawasaki, T. Makino, Y. Segawa, Z.K. Tang, L.G.K. Wong, Y. Matsumoto, H. Koinuma. Room-temperature stimulated emission of excitons in ZnO/(Mg, Zn)O superlattices. *Appl. Phys. Lett.* **77**, 2204 (2000).
4. Y. Jin, B. Zhang, Y. Shuming, Y. Wang, J. Chen, H. Zhang, C. Huang, C. Cao, H. Cao, R.P.H. Chang. Room temperature UV emission of $Mg_xZn_{1-x}O$ films. *Solid State Commun.* **119**, 409 (2001).
5. T. Makino, Y. Segawa, A. Ohtomo, K. Tamura, H. Koinuma. Band gap engineering based on $Mg_xZn_{1-x}O$ ternary alloy films. *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1237 (2001).
6. Th. Gruber, C. Kirchner, R. Kling, F. Reuss, A. Waag. ZnMgO epilayers and ZnO–ZnMgO quantum wells for optoelectronic applications in the blue and UV spectral region. *Appl. Phys. Lett.* **84**, 5359 (2004).
7. *Поверхностные акустические волны.* Под ред. Олнера А. (Мир, 1981).
8. А.И. Морозов, В.В. Проклов, Б.А. Станковский. *Пьезоэлектрические преобразователи для радиоэлектронных устройств* (Радио и связь, 1981).

9. К. Чопра, С. Дас. *Тонкопленочные солнечные элементы* (Мир, 1986).
10. Ü. Özgür, Ya.I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M.A. Reshchikov, S. Doğan, V. Avrutin, S.-J. Cho, H. Morkoç. A comprehensive review of ZnO materials and devices. *J. Appl. Phys.* **98**, 041301 (2005).
11. A.B. Djurisic, A.M.C. Ng, X.Y. Chen. ZnO nanostructures for optoelectronics: Material properties and device applications. *Progr. Quant. Electron.* **34**, 191 (2010).
12. A. Moezzi, A.M. McDonagh, M.B. Cortie. Zinc oxide particles: Synthesis, properties and applications. *Chem. Eng. J.* **22**, 185 (2012).
13. А.І. Євтушенко, Г.В. Лашкарьов, В.Й. Лазоренко, В.А. Карпина, В.Д. Храновський. ZnO – детектори ультрафіолетового випромінювання. Фізика і хімія твердого тіла **9**, 869 (2008).
14. R. Scheer, H.-W. Schock. *Chalcogenide Photovoltaics: Physics, Technologies, and Thin Film Devices* (WILEY–VCH Verlag, 2011).
15. G. Shukla. ZnO/MgZnO p–n junction light-emitting diodes fabricated on sapphire substrates by pulsed laser deposition technique. *J. Phys. D* **42**, 075105 (2009).
16. Y. Hu, B. Cai, Z. Hu, Y. Liu, Sh. Zhang, H. Zeng, The impact of Mg content on the structural, electrical and optical properties of MgZnO alloys: A first principles study. *Current Applied Physics* **15** (3), 423 (2015).
17. S.P. Bharath Kasturi, V. Bangera, G.K. Shivakumar. Effect of cadmium incorporation on the properties of zinc oxide thin films. *Appl. Nanoscience* **8** (1–2), 187 (2018).
18. Б.М. Михалічко. *Курс загальної хімії: Теоретичні основи* (Знання, 2009).
19. Є.Ф. Венгер, О.В. Мельничук, Ю.А. Пасічник. *Спектроскопія залишкових променів* (Наук. думка, 2001).
20. Ye.F. Venger, I.V. Venger, D.V. Korbutyak, N.O. Korsunska, L.Yu. Melnichuk, O.V. Melnichuk, L.Yu. Khomenkova. Surface polaritions in MgZnO/6H-SiC heterostructures. In *Materials of the International Conference "Functional materials for innovative energy–FMIE-2019"* (Kyiv, 2019), p. 4 (Y24).
21. U. Rau, D. Abou–Ras, T. Kirchartz. *Advanced Characterization Techniques for Thin Film Solar Cells* (*WILEY–VCH Verlag,* 2011).
22. Н.А. Ковтун, Б.Т. Бойко, Г.С. Хрипунов, В.Р. Копач. Электрические свойства прозрачных поликристаллических плёнок ZnO:Al, полученных методом магнетронного распыления. *Вопросы атомной науки и техники* **10**, 75 (1999).
23. Н.В. Романова. *Загальна і неорганічна хімія* (ВТФ "Перун", 1998).
24. П.И. Баранский, В.П. Клочков, И.В. Потыкевич. *Полупроводниковая электроника. Свойства материалов: справочник* (Наук. думка, 1975).
25. А.В. Мельничук, Ю.А. Пасечник. Анизотропия эффективных масс электронов в карбиде кремния. *ФТТ* **34**, 423 (1992).
26. Chunming Jin. *Growth and Characterization of ZnO and ZnO-Based Alloys $Mg_xZn_{1-x}O$ and $Mn_xZn_{1-z}O$.* Ph.D. Thesis (North Carolina State University, Raleigh, 2003).
27. I. Markevich, T. Stara, L. Khomenkova, V. Kushnirenko, L. Borkovska. Photoluminescence engineering in polycrystalline ZnO and ZnO-based compounds. *AIMS Mater. Sci.* **3**, 508 (2016).
28. L. Borkovska, L. Khomenkova, I. Markevich, M. Osipyonok, O. Kolomys, S. Rarata, O. Oberemok, O. Gudymenko, A. Kryvko, V. Strelchuk. The effect of high temperature annealing on the photoluminescence of ZnMgO alloys. *Phys. Status Solidi A* **215**, 1800250 (2018).
29. D. Thapa, J. Huso, J. Lapp, N. Rajabi, J.L. Morrison, M.D. McCluskey, L. Bergman. Thermal stability of ultra-wide-bandgap MgZnO alloys with wurtzite structure. *J. Materials Science: Materials in Electronics* **29** (19), 16782 (2018).
30. Z. Xi-Jian, M. Hong-Lei, L. Yu-Xiang, W. Qing-Pu, M. Jin, Z. Fu-Jian, X. Hong-Di. The optical properties of $Mg_xZn_{1-x}O$ thin films. *Chin. Phys.* **15**, 2385 (2006).
31. K. Hoggas, C. Nouveau, A. Djelloul, M. Bououdina. Structural, microstructural, and optical properties of $Zn_{1-x}Mg_xO$ thin films grown onto glass substrate by ultrasonic spray pyrolysis. *Appl. Phys. A* **120**, 745 (2015).
32. П.А. Иванов, В.Е. Челноков. Полупроводниковый карбид кремния: технология и приборы. *ФТП* **29**, 1921 (1995).
33. E.F. Venger, A.V. Melnichuk, L.Ju. Melnichuk, Ju.A. Pasechnik. Anisotropy of the ZnO single crystal reflectivity in the region of residual rays. *Phys. Status Solidi B* **188**, 823 (1995).
34. H. Karakachian, M. Kazan. Dependence of surface plasmon-phonon-polariton in 4H-SiC on free carrier concentration. *J. Appl. Phys.* **121**, 093103 (2017).
35. Є.Ф. Венгер, А.І. Євтушенко, Д.В. Корбутяк, Л.Ю. Мельничук, О.В. Мельничук. Дослідження оксиду магнію методами ІЧ-спектроскопії. *Фізико-математичні записки: Збірник наук. праць* 53 (2010).
36. O. Melnichuk, L. Melnichuk, B. Tsykaniuk, Z. Tsybrii, P. Lytvyn, C. Guillaume, X. Portier, V. Strelchuk, Ye. Venger, L. Khomenkova, N. Korsunska. Investigation of undoped and Tb-doped ZnO films on Al_2O_3 substrate by infrared reflection method. *Thin Solid Films* **673**, 136 (2019).
37. N. Korsunska, L. Borkovska, Yu. Polischuk, O. Kolomys, P. Lytvyn, I. Markevich, V. Strelchuk, V. Kladko, O. Melnichuk, L. Melnichuk, L. Khomenkova, C. Guillaume, X. Portier. Photoluminescence, conductivity and structural study of terbium doped ZnO films grown on different substrates. *Mater. Sci. Semicond. Process.* **94**, 51 (2019).
38. O.V. Melnichuk, L.Yu. Melnichuk, N.O. Korsunska, L.Yu. Khomenkova, Ye. Venger. Optical and electrical properties of Tb–ZnO/SiO_2 structure in the infrared spectral interval. *Ukr. J. Phys.* **64**, 431 (2019).
39. Е.А. Виноградов, Н.Н. Новикова, В.А. Яковлев. Фонон-поляритонная спектроскопия ближнего поля как метод исследования оптических свойств наноплёнок. *УФН* **184**, 653 (2014).
40. А.В. Мельничук. Исследование поверхностных плазмон-фононных поляритонов в монокристаллах SiC-6H методом НПВО. *Поверхность. Физика, химия, механика* **7**, 76 (1998).

41. Є.Ф. Венгер, Л.Ю. Мельничук, О.В. Мельничук, Ю.А. Пасічник, О.І. Суxенко. Поверхневі плазмон-фононні поляритони карбіду кремнію. *Український фізичний журнал* **43**, 598 (1998).
42. А.В. Мельничук, Ю.А. Пасечник. Влияние анизотропии на дисперсию поверхностных плазмон-фононных поляритонов карбида кремния. *ФТТ* **40**, 636 (1998).
43. М.А. Ильин, Ф.Ф. Кухарский, Е.П. Рашевская, В.К. Субашиев. Эффективные массы свободных электронов в карбиде кремния. *ФТТ* **13**, 2478 (1971).

Одержано 28.08.19

O.V. Melnichuk, L.Yu. Melnichuk,
N.O. Korsunska, L.Yu. Khomenkova,
E.F. Venger, I.V. Venger

PHONON-POLARITON EXCITATIONS
IN MgZnO/6H-SiC STRUCTURES

S u m m a r y

Specular infrared reflection spectra in the range of "residual rays" of the film and the substrate and in the case of the $E\perp c$ orientation of the electric field have been simulated for the first time for thin $Mg_xZn_{1-x}O$ films deposited on optically anisotropic 6H-SiC substrates. The simulation was carried out making use of self-consistent parameters obtained earlier for magnesium oxide, zinc oxide, and silicon carbide single crystals. The film thickness and the Mg content x in the film are demonstrated to considerably distort the reflection spectra and to change the reflectivity of the $Mg_xZn_{1-x}O$/6H-SiC structure. Using the Kramers–Kronig relation, the spectral intervals, where the reflectivity is sensitive to the film thickness and to the doping levels of the film and the substrate, are determined. The main attention is paid to analyze results obtained for $x = 0.2$. The existence of surface polaritons in such structures is theoretically demonstrated for the first time, and the attenuated total reflectance surface $I(\nu)/I_0(\nu)$ is plotted as a three-dimensional representation of the structure transmittance dependence on the radiation frequency and the incidence angle. A possibility to study the resonant interaction of optical phonons with plasmons in the film and the substrate is demonstrated.