—— ФИЗИКА —

УЛК 535.34: 54.027

ЗАВИСИМОСТЬ ПОЛОЖЕНИЯ ФОНОННЫХ ПОЛОС ИК-ПОГЛОЩЕНИЯ ИЗОТОПОВ ГЕРМАНИЯ ОТ ИХ МАССОВОГО ЧИСЛА

© 2023 г. Г. И. Кропотов^{1,*}, член-корреспондент РАН А. Д. Буланов², В. Е. Рогалин^{3,**}, И. А. Каплунов^{4,***}, А. А. Шахмин¹

> Поступило 13.01.2023 г. После доработки 13.01.2023 г. Принято к публикации 24.04.2023 г.

Впервые, в едином эксперименте, исследована зависимость положения пиков фононного поглощения в ИК-спектре (диапазон 11-40 мкм) для всех пяти стабильных моноизотопных монокристаллов германия. Полученная зависимость может быть использована при исследовании массового состава германия различной изотопической чистоты.

Ключевые слова: германий, изотопы, массовое число изотопа, монокристаллы, спектр поглощения, полоса поглощения, коэффициент поглощения, фононное поглощение DOI: 10.31857/S2686740023040077, EDN: VORYLJ

Германий, как кристаллы, так и его соединения, широко используются в науке и технике разного назначения. Наиболее существенные направления применения – оптика (детали проходной оптики и акустооптики инфракрасного диапазона, стекла разного назначения, волоконная оптика), полупроводниковая промышленность (датчики, фотоприемники, детекторы гамма-излучений, фотоэлектрические преобразователи), химическая промышленность [1, 2, 4, 6].

Природный германий содержит в своем составе стабильные изотопы с массовыми числами 70, 72, 73, 74, 76 (⁷⁰Ge – 20.57%, ⁷²Ge – 27.45%, ⁷³Ge – 7.75%, ⁷⁴Ge – 36.50%, ⁷⁶Ge – 7.73%) [3]. Использование изотопически чистых кристаллов связано с возможностью технологий их получения [4-6] и открывает ряд новых применений материала. В моноизотопных монокристаллах выявляются новые, ранее не известные свойства. Имеет место значительная аномалия в температурных зависимостях теплопроводности для изотопически чистых монокристаллов [6–9]. При низких температурах (от 100 К и ниже) моноизотопный Ge обладает не только более высокой теплопроводностью, но и термо-ЭДС [10]. Делается предположение о "гигантском" вкладе в коэффициент затухания гиперзвука от рассеяния звуковых волн на изотопическом беспорядке в монокристаллах ^{nat}Ge, по сравнению с моноизотопными кристаллами. Моноизотопные кристаллы отличаются по физическим и структурным характеристикам от кристаллов природного состава (температура фазового перехода, параметры кристаллической решетки, коэффициенты поглощения и отражения) [11-14].

Направления исследований изотопически чистых кристаллов Ge обусловлены новыми применениями материала в микро- и наноэлектронике, инфракрасной оптике, оптике терагерцового диапазона, нанофотонике и других областях.

Моноизотопный Ge может быть перспективен для создания элементов спинтроники, квантовых компьютеров и других задач наноэлектроники [15]. Для использования в квантовых компьютерах в качестве матрицы изотопов германия с четной атомной массой (которые обладают нулевым ядерным спином) требуется минимизировать содержание нечетных изотопов в матрице (⁷³Ge).

В настоящее время монокристаллы изотопа ⁷⁶Ge уже используются как материал детекторов для исследований процессов двойного бета-распада и ряда фундаментальных физических процессов [6, 16, 17]. Применение изотопически чи-

¹ ООО "Тидекс", Санкт-Петербург, Россия

² Институт химии высокочистых веществ

им. Г.Г. Девятых Российской академии наук,

Нижний Новгород, Россия

³ Институт электрофизики и электроэнергетики Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Тверской государственный университет, Тверь, Россия **E-mail:* grigorykropotov@tydex.ru

^{**}E-mail: v-rogalin@mail.ru

^{***}E-mail: kaplunov.ia@tversu.ru



Рис. 1. Спектр поглощения (ослабления) моноизотопных образцов германия.

стого германия позволяет управлять процессом нейтронного трансмутационного легирования полупроводников, управлять степенью компенсации примесей в германии, обеспечивать однородное распределение примесей, достигать высоких концентраций примесей при легировании [18].

Ранее в работах [19, 20] при исследовании спектров ИК-поглощения изотопически чистых монокристаллов ⁷⁰Ge и ⁷⁴Ge, полученных в ИАЭ им. И.В. Курчатова, был обнаружен сдвиг нескольких полос фононного поглощения при изменении массового состава. В работах [13, 14] были исследованы оптические характеристики изотопов ⁷²Ge, ⁷³Ge, ⁷⁴Ge, ⁷⁶Ge.

В данной работе это исследование было впервые, в едином эксперименте, продолжено для всех пяти стабильных изотопов германия, причем было рассмотрено положение всех основных полос фононного поглощения в ИК-области спектра.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Эксперименты проводили на образцах изотопически чистых монокристаллов германия ⁷⁰Ge, ⁷²Ge, ⁷³Ge, ⁷⁴Ge, ⁷⁶Ge. Германий получали гидридным методом в Институте химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятых РАН, затем очищали с получением изотопно обогащенного поликристаллического германия методом зонной плавки [3, 5].

Монокристаллы выращивали в кристаллографическом направлении (100) в лаборатории Института роста кристаллов (IKZ, г. Берлин) методом Чохральского из кварцевого тигля в среде высокочистого аргона [5, 21]. Выращивались нелегированные кристаллы с высоким удельным электросопротивлением.

Образцы для исследований вырезались из выращенных монокристаллов и затем полировались по специально разработанной технологии химико-механической оптической обработки.

Измерения спектров пропускания проводили на фурье-спектрометре Bruker Vertex 70 в спектральном диапазоне 1.3-670 мкм. Погрешность измерения величины волнового числа составляла ~1 см⁻¹, а коэффициента пропускания – 0.5%. В качестве образцов сравнения использовались оптически обработанные пластины из монокристалла Ge природного изотопического состава (^{nat}Ge), выращенного в Тверском государственном университете.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 приведена спектральная зависимость коэффициента поглощения (ослабления) природного германия (^{nat}Ge) и пяти моноизотопных образцов германия в диапазоне 10-40 мкм. Характер каждого спектра примерно одинаков, наблюдается незначительная разница в величине коэффициента поглощения. Для более наглядной визуализации специфического характера спектров кривые сдвинуты вверх путем коррекции значений коэффициента ослабления (изотоп ⁷⁰Ge без коррекции, 72 Ge – коррекция +2 см⁻¹, природный германий +5 см⁻¹, изотопы ⁷³Ge + 8 см⁻¹, 74 Ge + 10 см⁻¹, 76 Ge +12 см⁻¹). Основное отличие заключается в соответствии полос поглощения соответствующей длине волны (частоте); наглядно видно, что изотопический состав кристаллов влияет на положение характерных полос поглощения Ge в рассматриваемом спектральном диапазоне. В спектральном диапазоне 11-40 мкм нами выявлено 16 полос поглощения, что соответствует данным работ [13, 14, 22]; для изотопа ⁷⁰Ge положение ряда характерных полос было выявлено впервые.

В табл. 1 представлены соответствующие значения положения максимума выявленных полос поглощения и сопоставление результатов измерений с известными данными. Эти полосы интерпретированы как двухфононное поглощение в критических точках зоны Бриллюэна [23]. Плотность состояний выражается максимумами полос поглощения, изотопический сдвиг которых относительно спектра природного германия связан с изменением средней атомной массы образца. Наиболее интенсивные полосы наблюдаются в области 23–38 мкм. В области 11–23 мкм выявлены полосы, имеющие малую интенсивность. Полосы невелики, но точно определены, и их зафиксированное положение заметно превышает по-

	Обозначение фононных линий [22]															
Образцы германия	3T0	2TO+LA	2T0+TA	2TO _X	(T0+L0)L	(T0+L) _x	Q ₂ +Q ₂ (0)	(L0+LA) _K	(T0+TA ₂) _K	$\Sigma_1(O) + \Sigma_3(A)$	(TO+TA) _X	(TO+TA)L	$\Lambda_3(O) + \Lambda_3(A)$	$(L+TA)_Z$	(LA+TA) _K	$(LA+TA_1)_K$
^{nat} Ge	839.6	750.3	641.9	560.2	522.2	502.5	469.2	423.2	389.2	360.4	350.8	351.5	342.5	318.5	287.4	273.2
^{nat} Ge [14]	841.0	750.8	647.2	560.9	522.6	501.6	473.7	423.0	389.9	361.0	351.0	348.7	342.8	318.7	286.0	271.5
⁷⁰ Ge	856.9	763.2	655.6	571.4	532.2	506.6	471.0	429.2	390.3	367.0	354.4	352.0	347.2	324.7	292.8	278.9
⁷⁰ Ge [19, 20]	855.0	760.0	655.0	—	—	—	—	—	—	_	_	—	—	—	—	_
⁷² Ge	844.9	751.8	643.5	563.4	526.0	504.3	470.2	424.4	389.6	361.7	353.7	344.8	342.4	321.5	289.0	276.6
⁷² Ge [14]	844.0	754.0	649.8	564.5	525.0	504.4	476.5	426.3	392.3	361.5	353.0	349.9	343.3	320.7	286.0	272.0
⁷³ Ge	839.5	750.2	641.5	558.7	521.6	502.4	469.0	421.0	388.8	360.2	351.4	346.2	341.3	319.5	287.4	272.9
⁷³ Ge [14]	840.0	750.0	645.5	559.6	521.8	499.0	474.0	422.0	389.6	359.0	350.9	348.3	342.4	318.4	285.0	271.5
⁷⁴ Ge	833.7	743.6	638.1	554.0	519.4	498.0	466.7	418.4	385.2	356.5	344.8	344.8	338.4	315.5	284.1	270.6
⁷⁴ Ge [14]	833.5	744.6	640.2	555.7	517.3	497.0	469.1	419.9	387.2	356.4	348.0	345.4	339.8	316.0	284.0	270.6
⁷⁴ Ge [19, 20]	830.0	740.0	635.0	_	—	_	-	_	_	_	_	_	_	-	-	_
⁷⁶ Ge	822.9	736.2	629.5	548.9	512.6	492.3	466.2	414.1	380.8	352.7	344.2	342	335.6	313.5	278.6	266.7
⁷⁶ Ge [14]	823.4	736.0	633.0	549.9	511.0	491.0	464.5	415.0	382.5	353.3	344.5	342	335.7	313.0	281.0	267.0

Таблица 1. Положение максимума полос поглощения, см⁻¹

грешность прибора. Наличие изотопного сдвига однозначно свидетельствует о том, что эти полосы связаны с фононной структурой монокристаллов изотопов германия. массового состава и обобщенно этот сдвиг был аппроксимирован выражением

$$\mathbf{v} = 1.6 \mathbf{v}_0 e^{-kM},\tag{1}$$

Ранее в работах [19, 20] при исследовании спектров ИК-поглощения изотопически чистых монокристаллов ⁷⁰Ge и ⁷⁴Ge был обнаружен сдвиг полос фононного поглощения при изменении

где v_0 — частота максимума соответствующей полосы фононного поглощения природного германия; M — массовое число изотопа; k — степенной коэффициент, находящийся в диапазоне 0.0062— 0.0072.



Рис. 2. Зависимости частот v пиков фононного поглощения изотопически чистых монокристаллов германия от *M* – массового числа изотопа для пиков табл. 2.

	Максимумы фононных полос поглощения в германии												
Состав германия	ν ₁ , α	cm^{-1}	v ₂ , c	cm^{-1}	v ₃ , c	cm^{-1}	v_4, c	cm^{-1}	v ₅ , см ⁻¹		v ₆ , см ⁻¹		
	Экспер.	Φ ормула (1) k = 0.00645	Экспер.	Формула (1) k = 0.00645	Экспер.	Формула (1) k = 0.00645	Экспер.	Формула (1) k = 0.00645	Экспер.	Формула (1) k = 0.00645	Экспер.	Формула (1) k = 0.0065	
⁷⁰ Ge	856.9	856.0	763.2	762.9	655.6	653.9	571.4	570.7	532.2	532.0	506.6	510.0	
⁷² Ge	844.9	845.0	751.8	753.2	643.5	645.5	563.4	563.4	526.0	525.1	504.3	503.5	
^{72.59} Ge (nat)	839.6	841.8	750.3	750.3	641.9	643.1	560.2	561.2	522.2	523.1	502.5	501.6	
⁷³ Ge	839.5	839.6	750.2	748.4	641.5	641.4	558.7	559.7	521.6	521.7	502.4	500.3	
⁷⁴ Ge	833.7	834.2	744.6	743.5	638.1	637.2	554.0	556.1	519.4	518.4	498.0	497.0	
⁷⁶ Ge	822.9	823.5	736.2	734.0	629.5	629.1	548.9	549.0	512.6	511.8	492.3	490.6	

Таблица 2. Положение максимума полос поглощения: эксперимент, расчет

Результаты настоящего эксперимента показали (табл. 2), что решеточные пики поглощения для первых 6 полос (табл. 1), наблюдаемые в монокристаллах германия природного изотопического состава, в образцах моноизотопных кристаллов германия (⁷⁰Ge, ⁷²Ge, ⁷³Ge, ⁷⁴Ge, ⁷⁶Ge) сдвигаются в соответствии с зависимостью (1). Результат наглядно проиллюстрирован на рис. 2 на частотах для первых шести полос: зависимости частот V пиков фононного поглощения этих кристаллов от M – массового числа изотопа.

Таким образом, зарегистрирована зависимость положения максимумов фононных полос поглощения от состава изотопа германия (уравнение (1)). Сдвиг наблюдался от массового числа 76 до 70 (в пределах ~34 см⁻¹ для первого пика, в пределах ~26–27 см⁻¹ для второго и третьего пика, ~22 см⁻¹ для четвертого пика, ~19 см⁻¹ для пятого пика и ~14 см⁻¹ для шестого пика). Частотный сдвиг полос поглощения уменьшается по величине с ростом длины волны падающего излучения.

Причем в монокристаллах ⁷⁰Ge и ⁷²Ge наблюдается рост частоты полосы поглощения (v), а в монокристаллах ⁷³Ge, ⁷⁴Ge и ⁷⁶Ge — частота уменьшается по сравнению с монокристаллами природного изотопического состава (^{72,59}Ge). В работе использовались тонкие образцы монокристаллов (толщина составляла 1.55 мм), что обеспечивало точное количественное определение различия в сдвигах полос поглощения спектров образцов природного (^{nat}Ge) и моноизотопных кристаллов германия (⁷⁰Ge, ⁷²Ge, ⁷³Ge, ⁷⁴Ge, ⁷⁶Ge) во всех частотных областях спектра.

Ранее в работах [19, 20] с использованием двулучевого ИК-спектрофотометра "Hitachi-225" исследовались спектры ИК-поглощения изотопически чистых монокристаллов ⁷⁰Ge и ⁷⁴Ge. Изотопы получены центробежным методом разделения в Институте молекулярной физики РНЦ "Курчатовский институт" с обогащением 99.99%. В Лаборатории им. Лоуренса в Беркли была проведена их тонкая химическая очистка методом многократной зонной плавки (33 прохода). Очищенные таким образом поликристаллические слитки ⁷⁰Ge и ⁷⁴Ge применялись в качестве исходного сырья для выращивания монокристаллов Ge *n*-типа методом Чохральского. Технология получения этих изотопов, а также роста кристаллов, описанная в работах [7, 23], существенным образом отличалась от методов получения образцов, исследовавшихся в данной работе.

Однако полученные при этом значения изотопических сдвигов полос ИК-поглощения полностью коррелировали между собой и соответствовали зависимости (1), экспериментально полученной при измерениях, проведенных на образцах изотопно обогащенного германия, полученного различными методами.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые, в едином эксперименте, исследована зависимость положения ИК-полос поглощения в диапазоне 11—40 мкм от массового состава для всех пяти стабильных изотопов германия.

Результаты работы наглядно показали, что даже незначительное изменение массы изотопа заметно влияет на положение пиков фононного поглощения.

Полученные данные могут быть применены при исследовании массового состава кристаллов германия различной изотопической чистоты.

ИСТОЧНИКИ ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена в рамках государственного задания по научной деятельности № 75-03-2022-056, № 0817-2023-0006 и № 122031000234-2 с использованием ресурсов Центра коллективного пользования Тверского государственного университета и ресурсов ООО "Тидекс".

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Claeys L., Simoen E. Germanium–based technologies: from materials to devices. Berlin: Elsevier, 2007. 449 p. https://doi.org/10.1016/B978-0-08-044953-1.X5000-5
- Каплунов И.А., Рогалин В.Е. Оптические свойства и области применения германия в фотонике // Фотоника. 2019. Т. 13. № 1. С. 88–106. https://doi.org/10.22184/FRos.2019.13.1.88.106
- Гусев А.В., Гибин А.М., Андрющенко И.А., Гавва В.А., Козырев Е.А. Теплоемкость высокочистого изотопно-обогащенного германия-76 в интервале 2-15 К // ФТТ. 2015. Т. 57. № 9. С. 1868–1870.
- Чурбанов М.Ф., Карпов Ю.А., Зломанов П.В., Фёдоров В.А. Высокочистые вещества. М.: Научный мир, 2018. 996 с.
- Гавва В.А., Трошин О.Ю., Адамчик С.А., Лашков А.Ю., Абросимов Н.В., Гибин А.М., Отопкова П.А., Созин А.Ю., Буланов А.Д. Получение монокристаллического изотопно-обогащенного германия-70 гидридным методом // Неорганические материалы 2022. Т. 58. № 3. С. 258–263. https://doi.org/10.31857/S0002337X22030058
- Изотопы: свойства, получение, применение. под ред. В.Ю. Баранова. В 2 т. Т. 1. М.: Физматлит, 2005. 600 с.
- Ожогин В.И., Инюшин А.В., Талденков А.Н., Тихомиров А.В., Попов Г.Э., Халлер Ю., Ито К. Изотопический эффект в теплопроводности монокристаллов германия // Письма в ЖЭТФ. 1996. Т. 63. № 6. С. 463–467.
- Sanati M., Estreicher S.K., Cardona M. Isotopic dependence of the heat capacity of c-C, Si, and Ge: an ab initio calculation // Solid State Commun. 2004. V. 131. Is. 3–4. P. 229–233. https://doi.org/10.1016/j.ssc.2004.04.043
- Inyushkin A.V., Taldenkov A.N., Gibin A.M., Gusev A.V., Pohl H.-J. On the isotope effect in thermal conductivity of silicon // Physica status solidi (C). 2005. V. 1. Is. 11.
- of silicon // Physica status solidi (C). 2005. V. 1. Is. 11. P. 2995–2998. https://doi.org/10.1002/pssc.200405341
- Кулеев И.Г., Кулеев И.И., Инюшкин А.В., Ожогин В.И. О возможности "гигантского" изотопического эффекта для поглощения ультразвука в кристаллах // ЖЭТФ. 2005. Т. 128. Вып. 2 (8). С. 370–380.
- Hu M.Y., Sinn H., Alatas A., Sturhahn W., Alp E.E., Wille H.-C., Shvyd'ko Yu.V., Sutter J.P., Ozhogin V.I., Rodriguez S., Colella R., Kartheuser E., Villeret M.A. Effect of isotopic composition on the lattice parameter of germanium measured by X-ray backscattering // Phys. Rev. B. 2003. V. 67. 113306. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.079902

- Gavva V.A., Bulanov A.D., Kut'in A.M., Plekhovich A.D., Churbanov M.F. Melting point of high-purity germanium stable isotopes // Physica B: Condensed Matter. 2018. V. 537. P. 12–14. https://doi.org/10.1016/j.physb.2018.01.056
- Lipskiy V.A., Nazaryants V.O., Kotereva T.V., Bulanov A.D., Gavva V.A., Koltashev V.V., Churbanov M.F., Plotnichenko V.G. Refractive index spectral dependence, Raman spectra, and transmission spectra of high-purity ⁷²Ge, ⁷³Ge, ⁷⁴Ge, ⁷⁶Ge, and ^{nat}Ge single crystals // Appl. Opt. 2019. V. 58. Is. 27. P. 7489–7496. https://doi.org/10.1364/AO.58.007489
- 14. Липский В.А. Получение и оптические свойства высокочистого изотопно обогащенного германия. Дис. ... канд. хим. наук. 2021. Н. Новгород. 119 с.
- Мандель А.М., Ошурко В.Б., Першин С.М., Карпова Е.Е., Артёмова Д.Г. О лазере с перестраиваемой частотой на тонких полупроводниковых квантовых кольцах // ДАН. Физика, технические науки. 2021. Т. 498. С. 17–21. https://doi.org/10.31857/S2686740021030147
- Verkhovskii S.V., Yakubovsky A.Y., Malkin B.Z., Saikin S.K., Cardona M., Trokiner A., Ozhogin V.I. Isotopic disorder in Ge single crystals probed with 73GeNMR // Physical Review B. 2003. V. 68. 104201. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.104201
- Agostini M., Allardt M., Andreotti E., et al. Production, characterization and operation of ⁷⁶Ge enriched BEGe detectors in GERDA // The European Physical Journal C. 2015. V. 75: 39. 22 p. https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-014-3253-0
- Haller E.E. Semiconductor isotope engineering // Solid State Phenomena. 1993. V. 32–33. P. 11–20. https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.32-33.11
- Рогалин В.Е., Ценина И.С., Каплунов И.А. Исследование влияния изотопической чистоты на оптические свойства германия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2013. № 4–1 (183). С. 352–358.
- 20. Каплунов И.А., Рогалин В.Е., Гавалян М.Ю. Влияние примесного и изотопического состава монокристаллического германия на оптическое пропускание в области 520–1000 см⁻¹ // Оптика и спектроскопия. 2015. Т. 118. № 2. С. 254–260. https://doi.org/10.1134/S0030400X15020083
- Churbanov M.F., Gavva V.A., Bulanov A.D., Abrosimov N.V., Kozyrev E.A., Andryushchenko I.A., Lipskii V.A., Adamchik S.A., Troshin O.Yu., Lashkov A.Yu., Gusev A.V. Production of germanium stable isotopes single crystals // Cryst. Res. Technol. 2017. V. 52. № 4. P. 1700026 (6). https://doi.org/10.1002/crat.201700026
- 22. Fuchs H.D., Grein C.H., Bauer M. and Cardona M. Infrared absorption in ⁷⁶Ge and natural Ge crystals: Effects of isotopic disorder on q ≠ 0 phonons // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 4065–4070. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.45.4065
- Etchegoin P., Fuchs H.D., Weber J., Cardona M., Pintschovius L., Pyka N., Itoh K., Haller E.E. Phonons in isotopically disordered Ge // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 12661–12671. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.48.12661

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ том 511 2023

DEPENDENCE OF THE POSITION OF PHONON IR ABSORPTION BANDS OF GERMANIUM ISOTOPES ON THEIR MASS NUMBER

G. I. Kropotov^{*a*}, Corresponding Member of the RAS A. D. Bulanov^{*b*}, V. E. Rogalin^{*c*}, I. A. Kaplunov^{*d*}, and A. A. Shakhmin^{*a*}

^a Tydex LLC, St. Petersburg, Russia

^b G.G. Devyatykh Institute of Chemistry of High-Purity Substances of the Russian Academy of Sciences, Nizhny Novgorod, Russia

^c Institute of Electrophysics and Electric Power of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia ^d Tver State University, Tver, Russia

For the first time, in a single experiment, the dependence of the position of the phonon absorption peaks in the IR spectrum (range 11–40 μ m) for all five stable monoisotopic germanium single crystals was studied. The dependence obtained can be used to study the mass composition of germanium of various isotopic purity.

Keywords: germanium, isotopes, isotope mass number, single crystals, absorption spectrum, absorption band, absorption coefficient, phonon absorption