



УДК: 537.533.537.534;

Нодира МУСТАФОЕВА,

Доцент, Университет информационных технологий и менеджмента, PhD

<https://orcid.org/0000-0003-2693-0751>,

E-mail: mustafoyevan@gmail.com,

Ёкуб ЭРГАШОВ,

Профессор Национального университета Узбекистана, д.ф.-м.н.

Алланазар ТАШАТОВ,

Профессор Каршинского государственного университета, д.ф.-м.н.

Сафарали КУЧАРОВ,

Базовый докторант Каршинского государственного университета

Хуснора НОРКУЛОВА,

Магистрантка Каршинского государственного университета

ИСЛЕДОВАНИЕ ШИРИНА ПЕРЕХОДНОГО СЛОЯ ДВУХСЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ СИЛИЦИД-КРЕМНИЙ

Аннотация

В работе приведены параметры энергетических зон тонких пленок Si, BaSi₂ и ширина переходного слоя. Значения ширины запрещенной зоны - E_g и положения потолка валентной зоны - E_V определялись методом УФЭС. С использованием методов ОЭС, УФЭС, РЭМ и рентгеноструктурного анализа исследованы состав, морфология поверхности и электронная структура нанопленочной системы BaSi₂/Si/BaSi₂/Si (111), полученных методом имплантации ионов Ba⁺ в Si в сочетании с прогревом. Определены параметры энергетических зон и построена энергетическая зонная диаграмма системы Si/BaSi₂/Si. Определены глубина образования и толщина слоя BaSi₂ для различных энергий ионов Ba⁺ в диапазоне от 0.5 кэВ до 30 кэВ

Ключевые слова: ширина запрещенной зоны, нанослой, имплантация ионов, морфология, отжиг, параметры энергетических зон, тонких пленок, потолок валентной зоны.

STUDY OF THE WIDTH OF THE TRANSITION LAYER OF A BILAYER SILICIDE-SILICON SYSTEM

Annotation

The paper presents the parameters of the energy bands of Si, BaSi₂ thin films and the width of the transition layer. The values of the band gap - E_g and the position of the valence band ceiling - E_V were determined by the UFES method. The composition, surface morphology and electronic structure of the BaSi₂/Si/BaSi₂/Si (111)nanofilm system obtained by implantation of Ba+ ions into Si in combination with heating were studied using OES, UFES, SEM and X-ray diffraction analysis. The parameters of the energy bands were determined and the energy band diagram of the Si/BaSi₂/Si system was constructed. The formation depth and thickness of the BaSi₂ layer were determined for different energies of Ba+ ions in the range from 0.5 keV to 30 keV

Key words: band gap, nanolayer, ion implantation, morphology, annealing, parameters of energy bands, thin films, valence band ceiling.

SILICID-SILITSID BI-QATATLI TIZIMINING O'TISH QAT'ATINING KENGLIGINI O'RGANISH

Annotatsiya

Maqolada Si, BaSi₂ yupqa plynokalarining energiya diapazonlarining parametrlari va o'tish qatlamining kengligi keltirilgan. Tarmoq oralig'ining qiyamatlari - E_g va valentlik zonasining yuqori qismining holati - E_V UVES usuli bilan aniqlandi. OES, UVES, SEM va rentgen difrakcion tahlil usullaridan foydalaniib, isitish bilan birligida Ba+ ionlarini Si ga implantatsiya qilish natijasida olingan BaSi₂/Si/BaSi₂/Si (111) nanofilm tizimining tarkibi, sirt morfologiysi va elektron tuzilishi o'rganildi. Energiya diapazonlarining parametrlari aniqlandi va Si/BaSi₂/Si tizimining energiya diagrammasi tuzildi. BaSi₂ qatlamining hosil bo'lish chuqurligi va qalinligi 0,5 keV dan 30 keV gacha bo'lgan Ba+ ionlarining turli energiyalari uchun aniqlangan. **Kalit so'zlar:** tarmoqli bo'shlig'i, nano qatlam, ion implantatsiyasi, morfologiya, tavlanish, energiya tasmasi parametrlari, yupqa plynokalar, valentlik zonasini shifti.

В настоящее время во многих научных центрах ведется поиск материалов для создания фотоэлектрических преобразователей с лучшими физическими свойствами. Основой для таких материалов могут служить тонкие пленки силицидов, в частности дисилицида бария [1-4]. Поэтому ведется активная работа по поиску оптимальных методов получения одно- и двухслойных нанопленочных систем типа силицид металл - кремний. Теоретические исследования и расчёты показывают, что функциональная плотность BaSi₂ принадлежит фазе *Zintl* со смешанной ковалентной связью тетраэдрического Si₄ и с ионной связью типа (2Ba²⁺) (Si)⁴⁻.

Диаграмма молекулярных орбиталей объясняется на основе электронных структур, предполагая, что переход с переносом заряда от *p* - состояния Si к *d* - состоянию Ba, что значительно увеличивает оптическое поглощение. Большой коэффициент фотопоглощения подтверждается расширенными расчетами возбужденного состояния, которые включают экситонные эффекты. Уровень Ферми закреплен в середине запрещенной зоны для всего диапазона химических

потенциалов кремния и широкого диапазона температур роста, что указывает на возможность биполярного легирования, которое является преимуществом для изготовления *p-n*-переходов [5].

В [6], с использованием метода поэтапной имплантации Co^+ в Si в сочетании с отжигом, получена слоистая структура типа $\text{CoSi}_2 / \text{Si} / \text{CoSi}_2 / \text{Si}$ (111) и изучены их состав и электронная структура. Однако, такие исследования в случае имплантации ионов Ba^+ в Si, практически, не проводились.

Целью данной работы является получение методом имплантации ионов Ba^+ в Si двухслойной нанопленочной системы типа $\text{BaSi}_2 / \text{Si} / \text{BaSi}_2 / \text{Si}$ (111) и исследование их состава, структуры и параметров энергетических зон. Наноразмерные фазы и слои BaSi_2 на различных глубинах приповерхностного слоя Si получены имплантацией ионов Ba^+ с вариацией энергии E_0 до 30 кэВ, при вакууме не хуже 10^{-7} Па [7-8].

Методика эксперимента. В качестве подложки использовались хорошо полированные монокристаллические пластины Si (111) *p*-типа. Эти образцы установили в сверхвысоковакуумный-универсальный прибор типа УСУ-2, где проводился все технологические операции (прогрев, напыление атомов Ni и Si) и исследования состава и электронной структуры с использованием методом Оже- и фотоэлектронной спектроскопии. Очистка Si (111) осуществлялась при вакууме $P=10^{-7}$ Па при $T=1100$ К длительно (~4-5 часов) и кратковременно при температуре ~ 1350 Т.

Морфология и кристаллическая структура, спектр поглощения света и удельные сопротивления пленок исследовались на стандартных приборах типа Jeol, ЭМР-2 и UV-1280

Профили распределения атомов по глубине исследовались методом ОЭС в сочетании с травлением поверхности Ar^+ .

Результаты и их обсуждение. На рис. 1 приведена зависимость C_{Ba} от глубины h для Si (111), имплантированного ионами Ba^+ с $E_0 = 30$ и 1 кэВ. После каждого цикла ионной имплантации проводился прогрев при оптимальной температуре 900 К в течении 30 \div 40 мин. Видно, что на поверхности и на глубине 20 \div 30 нм концентрация Ba составляет 30 \div 35 ат.%. Анализ изменения положения и формы оже-пика $L_{2,3}VV$ кремния показали, что в этих слоях образуются соединения типа BaSi_2 . На рисунке 2 приведена рентгенограмма системы $\text{BaSi}_2 / \text{Si} / \text{BaSi}_2 / \text{Si}$ (111), снятая на дифрактометре STOE «STADI P» (*CoKa* – излучение). Видно, что на рентгенограмме, в основном, обнаруживается множество пиков, характерных для BaSi_2 и Si, а пики посторонних элементов, практически, отсутствуют. Исходя из этого можно полагать, что данная система имеет поликристаллическую структуру. Данное предположение подтверждалось результатами, полученными методом ДБЭ.

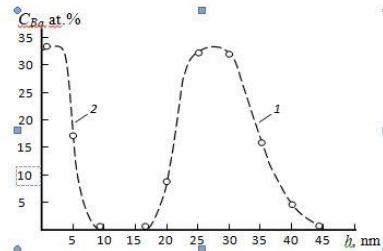


Рис.1. Концентрационные профили распределения Ba по глубине для Si, имплантированного ионами Ba^+ с $E_0 = 30$ кэВ – 1 и 1 кэВ – 2. После каждого цикла имплантации проводился прогрев при $T \approx 900$ К.

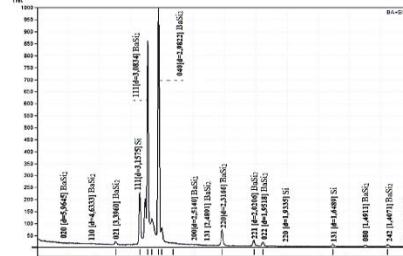


Рис. 2. Рентгенограмма поверхности системы $\text{BaSi}_2 / \text{Si} / \text{BaSi}_2 / \text{Si}$ (111).

На рисунке 3 приведены картины ДБЭ для чистого Si и системы $\text{BaSi}_2 / \text{Si} / \text{BaSi}_2 / \text{Si}$ (111). Видно, что на электронограмме поверхности чистого Si наблюдаются рефлексы, характерные для грани (111), а в случае двухслойной системы устанавливается структура, соответствующая поликристаллическим образцам.

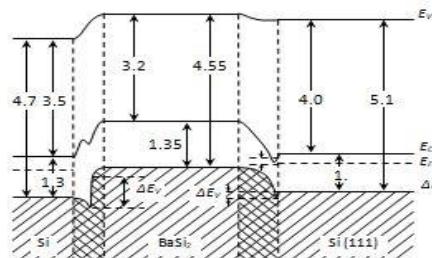


Рис. 3. Энергетическая зонная диаграмма для сверхрешетки $\text{Si/BaSi}_2 / \text{Si}$ (111).

При этом, на фоне поликристаллических колец с узкими линиями, появляются точечные рефлексы. Отметим, что при малых толщинах ($\Theta \leq 0.2 \div 1$ нм) BaSi_2 на поверхности Si кристаллизуется кубической решёткой с постоянной

решётки $a \simeq 6.54 \text{ \AA}$ [9; 10]. Однако, вследствие несоответствия параметров решёток Si и пленки BaSi₂, на поверхности Si, даже после прогрева при определенной температуре, сохраняются дендритные структуры.

Параметры энергетических зон тонких пленок Si и BaSi₂ и ширина переходного слоя (Δh) на границе Si/BaSi₂ и BaSi₂/Si(111)

SALES/NET PROFIT(XXX)

В таблице приведены параметры энергетических зон тонких пленок Si, BaSi₂ и ширина переходного слоя. Значения ширины запрещенной зоны - E_g и положения потолка валентной зоны - E_V определялись методом УФЭС. Значение сродства к электрону - χ оценивалось по формуле $\chi = E_V - E_g$. Разрыв краев зон проводимости - по разности значений электронного сродства двух полупроводников [11]:

$$\Delta E_C = \chi_1 - \chi_2 \quad (1)$$

Предполагая справедливой одноэлектронную теорию, имеем $\Delta E_g = \Delta E_C - \Delta E_V$, где $\Delta E_g = E_{g2} - E_{g1}$ - разность ширин запрещенных зон. Учитывая соотношение $E_F = \chi + E_g$, получаем для разрыва краев валентных зон

$$\Delta E_v = E_{F2} - E_{F1} \quad (2)$$

Согласно этим формулам для контакта нанопленки Si/BaSi₂: $\Delta E_C = 0.1$ эВ; $\Delta E_V = 0.3$ эВ, а для контакта BaSi₂/Si (111): $\Delta E_C = 0.5$ эВ $\Delta E_V = 0.1$ эВ. Необходимо отметить, что E_g нанопленки Si с толщиной 10 \div 15 Å на 0.05 \div 0.1 эВ больше, чем толстой пленки.

Как видно из таблицы, вследствие заметного различия постоянных решеток Si и BaSi₂, происходит интенсивная взаимодиффузия атомов и на границе Si/BaSi₂ и BaSi₂/Si (111) формируются переходные области толщиной ~ 6 ÷ 10 нм.

На основе данных таблицы нами построена примерная зонно-энергетическая диаграмма системы $\text{Si}(111)/\text{BaSi}_2/\text{Si}$ (рис.3). Для построения этой диаграммы мы пользовались моделью Шокли-Андерсона [12].

Согласно этой модели, после установления контакта между двумя полупроводниками, происходит выравнивание уровней Ферми E_F путем перемещения электронов из одного материала в другой. Образование слоя пространственного заряда вблизи границы раздела сопровождается изгибом зон.

С использованием методов ОЭС, УФЭС, РЭМ и рентгеноструктурного анализа исследованы состав, морфология поверхности и электронная структура нанопленочной системы $\text{BaSi}_2/\text{Si}/\text{BaSi}_2/\text{Si}$ (111), полученных методом имплантации ионов Ba^+ в Si в сочетании с прогревом. Определены параметры энергетических зон и построена энергетическая зонная диаграмма системы $\text{Si}/\text{BaSi}_2/\text{Si}$. Определены глубина образования и толщина слоя BaSi_2 для различных энергии ионов Ba^+ в диапазоне от 0.5 кэВ до 30 кэВ [13-15].

ЛИТЕРАТУРА

- Гомоюнова М.В., Пронин И.И., Галль Н.Р., Молодцов С.Л., Вялых Д.В. // ФТТ. 2003. Т. 45. Вып. 8. С. 1519–1522.
 - Нормурадов М.Т., Рысбаев А.С., Нормурадов Д.А., Турсунметова З.А. // Тезисы докладов 50-й международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. Москва 2021. с.140.
 - Алексеев А.А., Олянич Д.А., Утас Т.В., Котляр В.Г., Зотов А.В., Саранин А.А. // ЖТФ. 2015. Т. 85. Вып. 10. С. 94–100
 - Алексеев А.А., Олянич Д.А., Утас Т.В., Котляр В.Г., Зотов А.В., Саранин А.А. // ЖТФ. 2015. Т. 85. Вып. 10. С. 94–100
 - Dubinin D.V., Geringer V. // Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. 2015. Vol. 326, № 3. p. 58-62.
 - Kirilin A.N., Tkachenko S.I., Salmin V.V.,et.al.// 2015. Vol.14, № 4. p.58-71. doi: 10.18287/2412-7329-2015-14-4-58-71
 - Hara K.O., Nakagawa Y., Suemasu T., Usami N. // Selection and/or peer-review under responsibility of the scientific committee of Symposium 2015 ICMAT. p.28-31. doi: 10.1016/j.proeng.2015.08.1103.
 - Galkin N.G., Goroshko D.L., Dubov V.L., Fomin D.V., Galkin K.N., Chusovitin E.A., Chusovitina S.V. // Japanese Journal of Applied Physics 59, SFFA11 (2020). P. SFFA11-1-7. doi.org/10.35848/1347-4065/ab6b76.
 - Yamashita Y., Sato T., Saitoh N., Yoshizawa N., Toko K., Suemasu T. // J. Appl. Phys. 2019. 126, 215301-1-215301-7. doi: 10.1063/1.5128690.
 - Эргашов Ё.С., Умирзаков Б.Е. // Журнал технической физики, 2018, том 88, вып. 12. с. 1859-1862. doi:10.21883/JTF.2018.12.46788.12-18.
 - Umirkazov B.E., Tashmukhamedova D.A., Tashatov A.K., Mustafoeva N.M., Muradkabilov D.M. // Effect of the Disordering of Thin Surface Layers on the Electronic and Optical Properties of Si(111) // Semiconductors, 2020, 54(11), стр. 1424–1429
 - K. Tashatov, N. M. Mustafoyeva // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2020, Vol. 14, No. 1, pp. 81–84.
 - Umirkazov, B.E., Tashmukhamedova, D.A., Tashatov, A.K., Mustafoeva, N.M. //Electronic and Optical Properties of NiSi2/Si Nanofilms // Technical Physics, 2019, 64(5), стр. 708–710
 - Эргашов Ё.С// Журнал технической физики, 2017, Том 87, вып. 5. с.758-761.
 - Умирзаков Б.Е., Ташмухамедова Д.А., Рузибаева М.К., Ташатов А.К., Донаев С.Б., Мавлянов Б.Б. // Журнал технической физики, 2013, Том 83, вып. 9. с. 146-149.