

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](mailto:mustafoyevan@gmail.com),

**Ёкуб ЭРГАШОВ,**

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

**Алланазар ТАШАТОВ,**

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

**Сафарали КУЧАРОВ,**

Базовый докторант Кишиневского государственного университета

**Хуснора НОРКУЛОВА,**

Магистрантка Кишиневского государственного университета

## ИССЛЕДОВАНИЕ ШИРИНЫ ПЕРЕХОДНОГО СЛОЯ ДВУХСЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ СИЛИЦИД-КРЕМНИЙ

Аннотация

В работе приведены параметры энергетических зон тонких пленок Si, BaSi<sub>2</sub> 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 BaSi<sub>2</sub>/Si/BaSi<sub>2</sub>/Si (111), полученных методом имплантации ионов Ba<sup>+</sup> в Si в сочетании с прогревом. Определены параметры энергетических зон и построена энергетическая зонная диаграмма системы Si/BaSi<sub>2</sub>/Si. Определены глубина образования и толщина слоя BaSi<sub>2</sub> для различных энергии ионов Ba<sup>+</sup> в диапазоне от 0.5 кэВ до 30 кэВ

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

## 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, BaSi<sub>2</sub> 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 BaSi<sub>2</sub>/Si/BaSi<sub>2</sub>/Si (111) nanofilm system obtained by implantation of Ba<sup>+</sup> 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/BaSi<sub>2</sub>/Si system was constructed. The formation depth and thickness of the BaSi<sub>2</sub> layer were determined for different energies of Ba<sup>+</sup> 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 TIZIMNING O'TISH QAT'ATINING KENGLIGINI O'RGANISH

Annotatsiya

Maqolada Si, BaSi<sub>2</sub> yupqa plyonkalarining energiya diapazonlarining parametrlari va o'tish qatlamining kengligi keltirilgan. Tarmoq oralig'ining qiymatlari -  $E_g$  va valentlik zonasining yuqori qismining holati -  $E_v$  UVES usuli bilan aniqlandi. OES, UVES, SEM va rentgen difraksion tahlil usullaridan foydalanib, isitish bilan birgalikda Ba<sup>+</sup> ionlarini Si ga implantatsiya qilish natijasida olingan BaSi<sub>2</sub>/Si/BaSi<sub>2</sub>/Si (111) nanofilm tizimining tarkibi, sirt morfologiyasi va elektron tuzilishi o'rganildi. Energiya diapazonlarining parametrlari aniqlandi va Si/BaSi<sub>2</sub>/Si tizimining energiya diagrammasi tuzildi. BaSi<sub>2</sub> qatlamining hosil bo'lish chuqurligi va qalinligi 0,5 keV dan 30 keV gacha bo'lgan Ba<sup>+</sup> ionlarining turli energiyalari uchun aniqlangan.

**Kalit so'zlar:** tarmoqli bo'shlig'i, nano qatlam, ion implantatsiyasi, morfologiya, tavlaniish, energiya tasmasi parametrlari, yupqa plyonkalar, valentlik zonasi 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 расчёт показывают, что функциональная плотность BaSi<sub>2</sub> принадлежит фазе *Zintl* со смешанной ковалентной связью тетраэдрического Si<sub>4</sub> и с ионной связью типа (2Ba<sup>2+</sup>)(Si<sub>4</sub>)<sup>4-</sup>.

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  $\text{Co}^+$  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  $\text{Ba}^+$  в Si, практически, не проводились.

Целью данной работы является получение методом имплантации ионов  $\text{Ba}^+$  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  $\text{BaSi}_2$  на различных глубинах приповерхностного слоя Si получены имплантацией ионов  $\text{Ba}^+$  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 метода Оже- и фотоэлектронной спектроскопии. Очистка Si (111) осуществлялась при вакууме  $P=10^{-7}$  Па при  $T=1100$  К длительно ( $\sim 4-5$  часов) и кратковременно при температуры  $\sim 1350$  К.

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  $\text{Ag}^+$ .

**Результаты и их обсуждение.** На рис. 1 приведена зависимость  $C_{\text{Ba}}$  от глубины  $h$  для Si (111), имплантированного ионами  $\text{Ba}^+$  с  $E_0 = 30$  и 1 кэВ. После каждого цикла ионной имплантации проводился прогрев при оптимальной температуре 900 К в течении 30 ÷ 40 мин. Видно, что на поверхности и на глубине 20 ÷ 30 нм концентрация Ba составляет 30 ÷ 35 ат.%. Анализ изменения положения и формы пика  $L_{2,3}VV$  кремния показали, что в этих слоях образуются соединения типа  $\text{BaSi}_2$ . На рисунке 2 приведена рентгенограмма системы  $\text{BaSi}_2 / \text{Si} / \text{BaSi}_2 / \text{Si}$  (111), снятая на дифрактометре *STOE «STADI P»* ( $\text{CoK}\alpha$  – излучение). Видно, что на рентгенограмме, в основном, обнаруживается множество пиков, характерных для  $\text{BaSi}_2$  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.

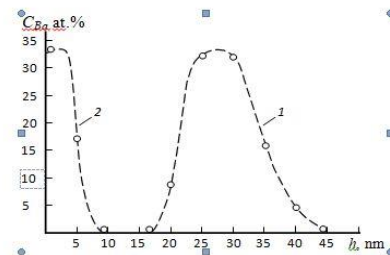


Рис.1. Концентрационные профили распределения Ba по глубине для Si, имплантированного ионами  $\text{Ba}^+$  с  $E_0 = 30$  кэВ – 1 и 1 кэВ – 2. После каждого цикла имплантации проводился прогрев при  $T \approx 900$  К.

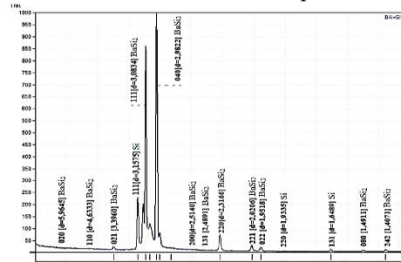


Рис. 2. Рентгенограмма поверхности системы  $\text{BaSi}_2/\text{Si}/\text{BaSi}_2/\text{Si}$  (111).

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.

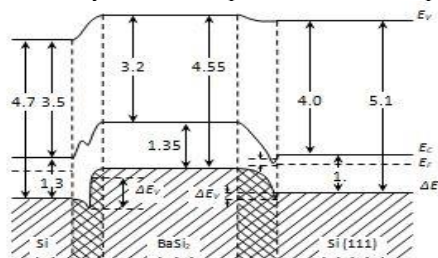


Рис. 3. Энергетическая зонная диаграмма для сверхрешетки  $\text{Si}/\text{BaSi}_2/\text{Si}$  (111).

При этом, на фоне поликристаллических колец с узкими линиями, появляются точечные рефлексы. Отметим, что при малых толщинах ( $\theta \leq 0.2 \div 1$  нм)  $\text{BaSi}_2$  на поверхности Si кристаллизуется кубической решёткой с постоянной

решётки  $a \approx 6.54 \text{ \AA}$  [9; 10]. Однако, вследствие несоответствия параметров решеток Si и пленки BaSi<sub>2</sub>, на поверхности Si, даже после прогрева при определенной температуре, сохраняются дендритные структуры.

Таблица

**Параметры энергетических зон тонких пленок Si и BaSi<sub>2</sub> и ширина переходного слоя ( $\Delta h$ ) на границе Si/BaSi<sub>2</sub> и BaSi<sub>2</sub>/Si(111)**

|  |  |  |  |
|--|--|--|--|
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |

В таблице приведены параметры энергетических зон тонких пленок Si, BaSi<sub>2</sub> и ширина переходного слоя. Значения ширины запрещенной зоны -  $E_g$  и положения потолка валентной зоны -  $E_v$  определялись методом УФЭС. Значение сродства к электрону -  $\chi$  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 ширины 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/BaSi<sub>2</sub>:  $\Delta E_c = 0.1 \text{ эВ}$ ;  $\Delta E_v = 0.3 \text{ эВ}$ , а для контакта BaSi<sub>2</sub>/Si (111):  $\Delta E_c = 0.5 \text{ эВ}$   $\Delta E_v = 0.1 \text{ эВ}$ . Необходимо отметить, что  $E_g$  нанопленки Si с толщиной  $10 \div 15 \text{ \AA}$  на  $0.05 \div 0.1 \text{ эВ}$  больше, чем толстой пленки.

Как видно из таблицы, вследствие заметного различия постоянных решеток Si и BaSi<sub>2</sub>, происходит интенсивная взаимодиффузия атомов и на границе Si/BaSi<sub>2</sub> и BaSi<sub>2</sub>/Si (111) формируются переходные области толщиной  $\sim 6 \div 10 \text{ нм}$ .

На основе данных таблицы нами построена примерная зонно-энергетическая диаграмма системы Si(111)/BaSi<sub>2</sub>/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 BaSi<sub>2</sub>/Si/BaSi<sub>2</sub>/Si (111), полученных методом имплантации ионов Ba<sup>+</sup> в Si в сочетании с прогревом. Определены параметры энергетических зон и построена энергетическая зонная диаграмма системы Si/BaSi<sub>2</sub>/Si. Определены глубина образования и толщина слоя BaSi<sub>2</sub> для различных энергии ионов Ba<sup>+</sup> в диапазоне от 0.5 кэВ до 30 кэВ [13-15].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Гомоюнова М.В., Пронин И.И., Галль Н.Р., Молодцов С.Л., Вялых Д.В. // ФТТ. 2003. Т. 45. Вып. 8. С. 1519–1522.
2. 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.
3. 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
4. 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
5. Dubinin D.V., Geringer V. // Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. 2015. Vol. 326, № 3. p. 58-62.
6. 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
7. 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.
8. Galkin N.G., Goroshko D.L., Dubov V.L., Fomin D.V., Galkin K.N., Chusovitina E.A., Chusovitina S.V. // Japanese Journal of Applied Physics 59, SFFA11 (2020). P. SFFA11-1-7. doi.org/10.35848/1347-4065/ab6b76.
9. 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.
10. 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.
11. Umirzakov B.E., Tashmukhamedova D.A., Tashatov A.K., Mustafeyeva 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
12. K. Tashatov, N. M. Mustafeyeva // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2020, Vol. 14, No. 1, pp. 81–84.
13. Umirzakov, B.E., Tashmukhamedova, D.A., Tashatov, A.K., Mustafeyeva, N.M. // Electronic and Optical Properties of NiSi<sub>2</sub>/Si Nanofilms // Technical Physics, 2019, 64(5), стр. 708–710
14. Эргашов Ё.С. // Журнал технической физики, 2017, Том 87, вып. 5. с.758-761.
15. 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.