



УДК: 537.533.537.534;

**Нодира МУСТАФОЕВА,**

Доцент Университета информационных технологий и менеджмента, PhD

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

E-mail: mustafoyevan@gmail.com.

**Ёкуб ЭРГАШОВ,**

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

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1884-9462>.

E-mail: y.ergashov@nuu.uz

**Алланазар ТАШАТОВ,**

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

ORCID: <https://orcid.org/0009-0006-0164-829X>,

E-mail: atashatov@mail.ru.

**Сафарали КУЧАРОВ,**

Базовый докторант Каршинского государственного университета

**Зуснора НОРКУЛОВА,**

Магистрантка Каршинского государственного университета.

## ИСЛЕДОВАНИЕ ШИРИНА ПЕРЕХОДНОГО СЛОЯ ДВУХСЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ СИЛИЦИД-КРЕМНИЙ

### Аннотация

В данной работе представлены результаты исследования параметров энергетических зон тонких пленок кремния (Si) и дисилицида бария (BaSi<sub>2</sub>), а также определены характеристики переходного слоя между ними. Метод ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии (УФЭС) использован для определения ширины запрещенной зоны (Eg) и положения потолка валентной зоны (Ev). Комплексный подход, включающий методы оптической электронной спектроскопии (ОЭС), УФЭС, растровой электронной микроскопии (РЭМ) и рентгеноструктурного анализа, позволил изучить состав, морфологию поверхности и электронную структуру нанопленочной системы BaSi<sub>2</sub>/Si/BaSi<sub>2</sub>/Si (111). Данная система была получена методом имплантации ионов бария (Ba<sup>+</sup>) в кремний с последующим прогревом. В работе определены параметры энергетических зон и построена энергетическая зонная диаграмма системы Si/BaSi<sub>2</sub>/Si. Также исследованы глубина образования и толщина слоя BaSi<sub>2</sub> в зависимости от энергии имплантируемых ионов Ba<sup>+</sup> в диапазоне от 0.5 кэВ до 30 кэВ. Полученные результаты имеют важное значение для понимания электронных свойств и потенциального применения таких систем в оптоэлектронике и энергетических устройствах.

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

## INVESTIGATION OF THE WIDTH OF THE TRANSITION LAYER IN A SILICIDE-SILICON BILAYER SYSTEM

### Annotation

This work presents the results of a study on the parameters of the energy bands of thin films of silicon (Si) and barium disilicide (BaSi<sub>2</sub>), as well as the characteristics of the transitional layer between them. Ultraviolet photoelectron spectroscopy (UPS) was used to determine the bandgap width (Eg) and the position of the valence band maximum (Ev). A comprehensive approach, including optical electron spectroscopy (OES), UPS, scanning electron microscopy (SEM), and X-ray structural analysis, allowed for the investigation of the composition, surface morphology, and electronic structure of the BaSi<sub>2</sub>/Si/BaSi<sub>2</sub>/Si (111) nanofilm system. This system was obtained by implanting barium ions (Ba<sup>+</sup>) into silicon followed by annealing.

The work determined the parameters of the energy bands and constructed the energy band diagram of the Si/BaSi<sub>2</sub>/Si system. Additionally, the depth of formation and thickness of the BaSi<sub>2</sub> layer were studied depending on the energy of the implanted Ba<sup>+</sup> ions in the range from 0.5 keV to 30 keV. The obtained results are of great importance for understanding the electronic properties and potential applications of such systems in optoelectronics and energy devices.

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

## SILITSID-KREMNIY IKKI QATLAMLI TIZIMIDAGI O'TISH QATLAMINING KO'NLIGINI TADQIQ QILISH

### Annotatsiya

Bu ishda kremniy (Si) va bariy disilitsidi (BaSi<sub>2</sub>) ingichka plenkalarining energetik zonalari parametrlarini o'rganish natijalari taqdim etilgan, shuningdek, ular o'rtaqidagi o'tish qavatining xususiyatlari aniqlangan. UFES (Ultrafiolet fotoelektron spektroskopiyasi) usuli yordamida to'siqli zonaning kengligi (Eg) va valentlik zonasining chegarasi (Ev) aniqlangan. Optik elektron spektroskopiyasi (OES), UFES, rastrali elektron mikroskopiyasi (REM) va rentgen strukturaviy tahlil usullarini o'z ichiga olgan kompleks yondashuv orqali BaSi<sub>2</sub>/Si/BaSi<sub>2</sub>/Si (111) nanoplenka tizimining tarkibi, yuza morfologiysi va elektron strukturasini o'rganildi. Bu tizim bariy ionlarini (Ba<sup>+</sup>) kremniya implantatsiya qilish va keyingi isitish orqali olingan.

Ishda energetik zonalar parametrlari aniqlandi va Si/BaSi<sub>2</sub>/Si тизимининг energetik zona diagrammasi qurildi. Shuningdek, 0.5 кэВдан 30 кэВ гacha bo'lgan implantatsiya qilingan Ba<sup>+</sup> ionlarining energiyasiga bog'liq ravishda BaSi<sub>2</sub> qavatining qaliligi va paydo bo'lish chuqurligi o'r ganildi. Olingan natijalar bu tizimlarning elektron xususiyatlarini tushunish va ularni optoelektronika va energetik qurilmalarda qo'llash imkoniyati uchun muhim ahamiyatga ega.

**Kalit so'zlar:** tarmoqli bo'shilg'i, nano qatlam, ion implantatsiyasi, morfologiya, tavlanish, energiya tasmasi parametrlari, yurqa pylonkalar, 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 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<sub>2</sub><sup>+</sup>) (Si<sub>4</sub>)<sup>4</sup>.

Диаграмма молекулярных орбитал 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<sup>+</sup> в Si в сочетании с отжигом, получена слоистая структура типа CoSi<sub>2</sub> / Si / CoSi<sub>2</sub> / Si (111) и изучены их состав и электронная структура. Однако, такие исследования в случае имплантации ионов Ba<sup>+</sup> в Si, практически, не проводились.

Целью данной работы является получение методом имплантации ионов Ba<sup>+</sup> в Si двухслойной нанопленочной системы типа BaSi<sub>2</sub> / Si / BaSi<sub>2</sub> / Si (111) и исследование их состава, структуры и параметров энергетических зон. Наноразмерные фазы и слои BaSi<sub>2</sub> на различных глубинах приповерхностного слоя Si получены имплантацией ионов Ba<sup>+</sup> с вариацией энергии *E*<sub>0</sub> до 30 кэВ, при вакууме не хуже 10<sup>-7</sup> 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 Р=10<sup>-7</sup> Па при Т=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<sup>+</sup>.

**Результаты и их обсуждение.** На рис. 1 приведена зависимость *C<sub>Ba</sub>* at.% от глубины *h* для Si (111), имплантированного ионами Ba<sup>+</sup> с *E*<sub>0</sub> = 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 оже – пика L<sub>2,3</sub>VV кремния показали, что в этих слоях образуются соединения типа BaSi<sub>2</sub>. На рисунке 2 приведена рентгенограмма системы BaSi<sub>2</sub> / Si / BaSi<sub>2</sub> / Si (111), снятая на дифрактометре STOE «STADI P» (CoKa – излучение). Видно, что на рентгенограмме, в основном, обнаруживается множество пиков, характерных для BaSi<sub>2</sub> 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.

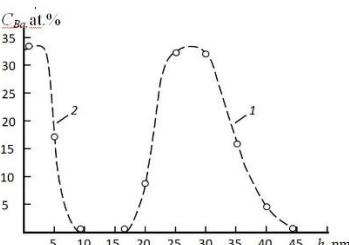


Рис.1. Концентрационные профили распределения Ba по глубине для Si, имплантированного ионами Ba<sup>+</sup> с *E*<sub>0</sub> = 30 кэВ – 1 и 1 кэВ – 2. После каждого цикла имплантации проводился прогрев при Т ≈ 900 К.

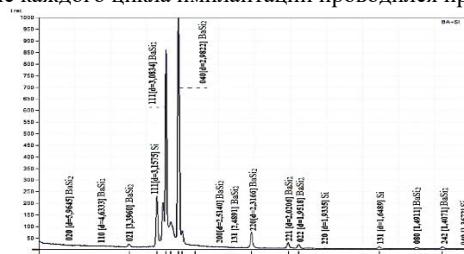


Рис. 2. Рентгенограмма поверхности системы BaSi<sub>2</sub>/Si/BaSi<sub>2</sub>/Si (111).

На рисунке 3 приведены картины ДБЭ для чистого Si и системы BaSi<sub>2</sub> / Si / BaSi<sub>2</sub> / 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.

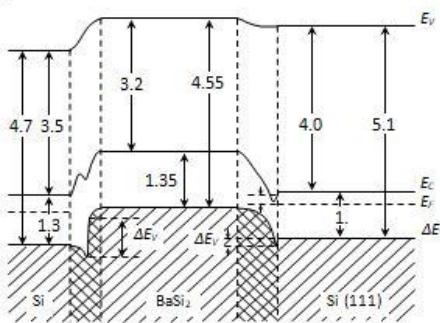


Рис. 3. Энергетическая зонная диаграмма для сверхрешетки Si/BaSi<sub>2</sub>/Si (111).

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<sub>2</sub> на поверхности Si кристаллизуется кубической решёткой с постоянной решётки  $a \approx 6.54$  Å [9; 10]. Однако, вследствие несоответствия параметров решёток 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)

Параметры	Si ( $d = 15$ nm)	BaSi <sub>2</sub> ( $h = 10\text{--}12$ nm)	I)
$E_g$ , эВ	1.3	1.35	
$E_V$ , эВ	4.7	4.55	
$\chi$ , эВ	3.5	3.2	
$\Delta E_C$ , эВ	0.1	0.5	
$\Delta E_V$ , эВ	0.3	0.1	
$\Delta h$ , нм	6-7	8-10	

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]:

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

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  $\Delta E_V = E_F2 - E_F1$  (2)

Согласно этим формулам для контакта нанопленки Si/BaSi<sub>2</sub>:  $\Delta E_C = 0.1$  эВ;  $\Delta E_V = 0.3$  эВ, а для контакта BaSi<sub>2</sub>/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 решёток 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  $\sim 6 \div 10$  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 энергий ионов Ba<sup>+</sup> 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 Тулинской 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

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., 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.
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., 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
12. K. Tashatov, N. M. Mustafoyeva // 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., Mustafoeva, 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.