

## СЕКЦИЯ «МИКРО-И НАНОЭЛЕКТРОНИКА»

УДК 539.23 + 533.343.2

### ФОРМИРОВАНИЕ, СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТЕКСТУРИРОВАННЫХ ПЛЕНОК CaSi НА Si(111)

Кропачев О.В.<sup>1</sup>, Чернев И.М.<sup>1</sup>, Галкин К.Н.<sup>1</sup>, Алексеев А. Ю.<sup>2</sup>

*Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН<sup>1</sup>*

*г. Владивосток, Российская Федерация*

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники<sup>2</sup>*

*г. Минск, Республика Беларусь*

*Галкин Н.Г.<sup>1</sup> – док. физ.-мат. наук, профессор*

*Миас Д.Б.<sup>2</sup> – док. физ.-мат. наук, доцент*

**Аннотация.** В работе исследован рост, структура и оптические свойства однофазных пленок CaSi на кремниевой подложке с ориентацией Si(111). Рентгеноструктурный анализ показал, что фазовый состав и кристаллическая структура пленок представляют собой поликристаллические пленки CaSi с преобладающей ориентацией CaSi(220) при росте методом молекулярно-лучевой эпитаксии и CaSi(010) – при росте методом реактивной эпитаксии. По данным оптической спектроскопии рассчитаны основные оптические функции пленки в диапазоне энергий фотонов 0.05 – 1.2 эВ. Проведено сравнение экспериментальных оптических данных с данными первопринципных расчетов оптических свойств CaSi. Показано хорошее совпадение основных межзонных переходов в спектрах оптических функций.

**Ключевые слова.** Моносилицид кальция, кремний, затравочный слой, молекулярно-лучевая эпитаксия, реактивная эпитаксия, структура, первопринципные расчеты, электронная структура, оптические функции, сравнение эксперимента и теории.

Силициды кальция являются экологически чистыми материалы и занимают особое место среди силицидов щелочноземельных металлов. Это связано в первую очередь с широким набором свойств силицидов кальция от полупроводниковых [1] до полуметаллических [2]. Это может привести к их широкому использованию в различных областях техники и электроники. Однако рост однофазных пленок моносилицида кальция на кремнии и исследование его оптических свойств осложнены из-за наличия не менее 6 силицидов разного состава в системе Ca-Si [3] и отсутствия методов выделения преимущественной ориентации при росте силицидов на кремнии.

Данная работа посвящена апробации двух методов роста моносилицида кальция на кремнии с ориентацией (111) методами молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) с использованием затравочного (жертвенного слоя) Mg<sub>2</sub>Si и методом реактивной эпитаксии (РЭ). Для выращенных пленок исследованы структура и оптические свойства, а также проведено их сравнение с данными первопринципных расчетов оптических функций из электронной структуры CaSi.

Рост пленок моносилицида кальция (CaSi) проводился в сверхвысоковакуумных (СВВ) камерах установок OMICRON Compact и VARIAN с базовым вакуумом  $1 \cdot 10^{-10}$  Торр, оснащенных анализатором ДМЭ и ЭОС/ХПЭЭ, блоком молекулярно-лучевых источников кремния (Si) и кальция (Ca) для проведения осаждения Ca, Mg и Si на кремниевые подложки. Рост пленки CaSi на подложке Si(111) (образец А) осуществлялся в СВВ-камере OMICRON Compact методом МЛЭ на предварительно сформированный затравочный (жертвенный) слой Mg<sub>2</sub>Si, который трансформировался в затравочный слой CaSi при осаждении Ca при T=250 °С. Для увеличения толщины слоя моносилицида кальция далее соосаждали атомы кальция и кремния в соотношении 4:1 при температуре 400 °С. В СВВ-камере VARIAN рост CaSi проводили методом РЭ (образец В) при температуре 500 °С и осаждении кальция на Si(111)7x7 с высокой скоростью (8.5 нм/мин). В СВВ-камерах скорости осаждения Ca, Mg и Si, откалиброванные по кварцевым датчикам толщины, составляли (2,0 и 8,5) нм/мин, 0.4 нм/мин и 0,5 нм/мин, соответственно, в разных экспериментах.

Спектры отражения (R-спектры) и спектры пропускания (Т-спектры) выращенных образцов регистрировали в течение одного дня после выгрузки при комнатной температуре в диапазоне энергий фотонов 0,05-6,20 эВ на спектрофотометре Hitachi U-3010 и Фурье-спектрометре Bruker Vertex 80v. Расчеты оптических функций проводили в области прозрачности из спектров пропускания и отражения. Структура пленок моносилицида Ca изучалась на дифрактометре RIGAKU SmartLab (вращающийся анод мощностью 9 кВт, CuK $\alpha$ -излучение, параллельный пучок (СВО-оптика), режим 2 $\theta$ / $\omega$ , размер падающего пучка 0,1 мм), с использованием кремниевого держателя образца с нулевым фоном и NuPix-3000 детектора (режим измерения 1D). Дифракционная картина записывалась в диапазоне углов 2 $\theta$  от 5° до 80°, с шагом 2 $\theta$  0,01°. Расчеты электронной зонной структуры и оптических функций также были выполнены с помощью метода самосогласованных

полнопотенциальных линейаризованных дополненных плоских волн (FLAPW) в его скалярно-релятивистской версии с использованием пакета WIEN2k [4].

После выгрузки образцов из ростовых камер были проведена регистрация спектров пропускания и отражения в диапазоне энергий фотонов от 0.05 эВ до 6.5 эВ. Основными особенностями для обоих образцов явились частичная прозрачность пленок CaSi в диапазоне энергий фотонов 0.2 – 1.1 эВ и плазменный минимум в отражении (Рис. 1 а), что ранее наблюдалось для пленок CaSi<sub>2</sub> [5] с полуметаллическими свойствами. Сравнение с данными теоретических

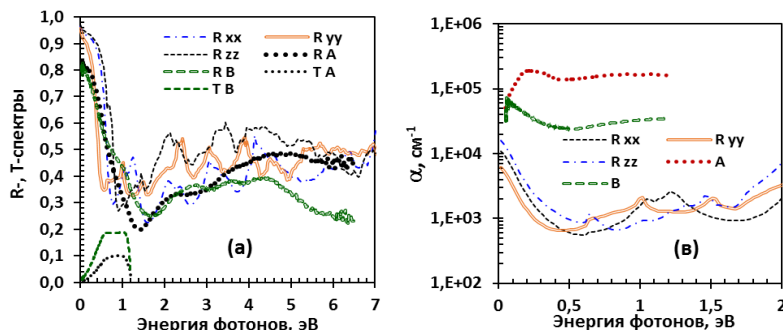


Рисунок 1 – (а) Спектры отражения (R) и пропускания (T) пленок CaSi в образцах А и В и результаты расчета спектров отражения монокристалла CaSi для различных плоскостей: xx, yy, zz. (б) спектры коэффициента поглощения для пленок CaSi в образцах А и В и для монокристалла CaSi (плоскости: xx, yy, zz)

спектров отражения для трех плоскостей монокристалла CaSi (рисунок 1а) показывает хорошее совпадение по положению плазменного минимума, который связан с вкладом двух типов носителей, согласно данным расчетов, проведенных в данной работе. Спектры отражения также согласуются по величине и положению основных пиков в диапазоне энергий фотонов 1.5 – 6.5 эВ, что соответствует основным межзонным переходам в монокристалле CaSi. Расчеты из R- и T- спектров коэффициентов поглощения ( $\alpha$ ) для выращенных пленок CaSi показали существенные значения ( $3 \times 10^4 - 2 \times 10^5 \text{ см}^{-1}$ ) в области менее 1.2 эВ (рисунок 1в), что можно связать с вкладом дефектов в пленках CaSi, на которых происходит дополнительное поглощение фотонов. Это подтверждается сравнением с данными для монокристалла CaSi (рисунок 1в), для которого коэффициент поглощения при энергиях фотонов 0.5 - 1.2 эВ меньше на полтора – два порядка по величине.

Сравнение данных действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости для монокристалла CaSi и текстурированных пленок CaSi (рисунок 2) показывает близкий характер зависимостей в диапазоне энергий 0.4 -1.2 эВ. Основные отличия наблюдаются при энергиях фотонов менее 0.2 эВ, что может быть связано с определенными ошибками при регистрации спектров отражения и пропускания от пленок, обладающих определенной шероховатостью, а значит и дополнительными потерями на отражение.

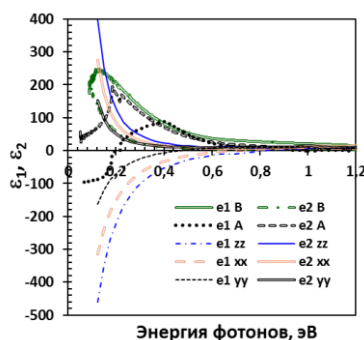


Рисунок 2 – Спектры действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости для пленок CaSi в образцах А и В для монокристалла CaSi для различных плоскостей: xx, yy, zz

В работе апробированы два метода роста однофазных пленок CaSi на кремнии с ориентацией (111) и определена текстура, которая зависит от температуры подложки при росте и скорости осаждения кальция. Проведены расчеты оптических функций выращенных пленок и сравнение с данными оптических функций, полученных из результатов первопринципных расчетов зонной структуры монокристалла CaSi.

Эти исследования выполнены при финансовой поддержке гранта РФФИ-БРФФИ № 20-52-00001\_Бел\_а.

#### Список использованных источников:

1. Calculated quasiparticle and optical properties of orthorhombic and cubic Ca<sub>2</sub>Si / S. Lebegue // Phys. Rev. B, – 2005. - V. 72. – P. 085103(1-9).

*57-я Научная Конференция Аспирантов, Магистрантов и Студентов БГУИР, 2021 г.*

- 2. Chemical bond and electronic states in calcium silicides: Theory and comparison with synchrotron-radiation photoemission / O. Bisi [et al.] // Phys. Rev. B. – 1989. – V. 40. – P. 10194-1202.*
- 3. The phase diagram of the Ca-Si system / P. Manfrinetti [et al.] // Intermetallics, 2000. – V. 8. – P. 223-228.*
- 4. P. Blaha, [et al.], WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Karlheinz Schwarz, Tech. Universität Wien, Vienna, 2001).*
- 5. Conducting CaSi<sub>2</sub> transparent in infra-red / N.G. Galkin [et al.] // J. Alloys and Compounds, - 2019. – V. 770. – P. 710-720.*