

ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ, ОПТИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЁНОК Mg_2Si НА $Si(111)$

© 2024

- Д. В. Фомин** кандидат физико-математических наук, доцент, директор научно-образовательного центра им. К.Э. Циолковского; Амурский государственный университет, г. Благовещенск; e-office@yandex.ru
- А. В. Поляков** магистрант, младший научный сотрудник научно-образовательного центра им. К.Э. Циолковского; Амурский государственный университет, г. Благовещенск; polyakov_a_1999@mail.ru
- К. Н. Галкин** кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник; Институт автоматизации и процессов управления Дальневосточного отделения РАН, г. Владивосток; galkinkn@iacp.dvo.ru
- Н. Г. Галкин** доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник; Институт автоматизации и процессов управления Дальневосточного отделения РАН, г. Владивосток; galkin@iacp.dvo.ru

Представлены результаты исследования элементного состава, морфологии поверхности, оптических и электронных свойств тонких плёнок Mg_2Si , сформированных на $Si(111)$. Оба образца, содержащие плёнки, формировались послойно методом реактивной эпитаксии, но при разной температуре прогрева подложек. Сформированные плёнки, состоящие из чередующихся слоёв Mg и Si в соотношении 3:1, по данным электронной оже-спектроскопии содержат атомы Mg и Si в соответствующих слоях. Методом комбинационного рассеяния света установлено наличие на графиках образцов пиков при сдвиге 258 и 348 cm^{-1} , принадлежащих Mg_2Si . Данные инфракрасной спектроскопии также свидетельствуют о наличии силицида магния в составе плёнок. Проведена оценка толщины выращенных плёнок Mg_2Si , исходя из известных данных о зависимости амплитуды пиков поглощения при 272 cm^{-1} от коэффициента поглощения. По результатам исследования образцов в инфракрасном-ультрафиолетовом диапазоне и на основе геометрических расчётов определена ширина запрещённой зоны Mg_2Si .

Силицид магния; тонкие плёнки; реактивная эпитаксия; морфология поверхности; атомно-силовая микроскопия; оптическая спектроскопия; ширина запрещённой зоны; не прямые и прямые переходы

Цитирование: Фомин Д.В., Поляков А.В., Галкин К.Н., Галкин Н.Г. Исследование морфологии поверхности, оптических и электронных свойств тонких плёнок Mg_2Si на $Si(111)$ // Вестник Самарского университета. Аэрокосмическая техника, технологии и машиностроение. 2024. Т. 23, № 1. С. 203-215. DOI: 10.18287/2541-7533-2024-23-1-203-215

Введение

Большой интерес у исследователей вызывают тонкие плёнки Mg_2Si , поскольку данный материал является перспективным для производства оптических датчиков, находящихся широкое применение как на Земле, так и в космосе. Предполагается более высокое быстродействие у приборов, использующих такие датчики, по сравнению с приборами, использующими датчики на основе Si , Ge и $GaAs$ [1]. Это связано с тем, что Mg_2Si обладает более узкой шириной запрещённой зоны (от 0,6 до 0,8 эВ) по сравнению с кремнием, германием и арсенидом галлия, а также широким диапазоном фоточувствительности (от 200 до 2100 нм) [1 – 5; 22 – 24]. Помимо этого, использование Mg_2Si в качестве материала для оптических датчиков актуально в связи

с тем, что Mg и Si являются экологически чистыми элементами и широко распространены в Земной коре. Формирование низкоразмерных структур Mg_2Si , исследованных и представленных в данной работе, осуществлялось на базе научно-образовательного центра им. К.Э. Циолковского Амурского государственного университета, сотрудники которого уже имеют опыт формирования и исследования тонких плёнок других силицидов на кремнии [6 – 9].

Формирование тонких плёнок Mg_2Si и исследование их методом электронной ОЖЕ-спектроскопии

Формирование образцов осуществлялось методом реактивной эпитаксии, а послойное исследование их элементного состава проводилось методом электронной оже-спектроскопии (ЭОС). В качестве подложек использовались пластины 15×5 мм, вырезанные из шайбы кремния электронной проводимости, легированного фосфором, (КЭФ) Si (111) с удельным сопротивлением от 2 до 15 Ом·см. Источник Mg брался чистотой 99,999%. Перед проведением эксперимента выполнялась стандартная двухэтапная (до и после загрузки в камеру) очистка подложек и источников.

Образцы формировались в камере Varian с базовым давлением 10^{-7} Па при температурах прогрева подложек $T_{n1} = 240^\circ\text{C}$ для первого образца и $T_{n2} = 250^\circ\text{C}$ – для второго. Сначала на подложках формировался буферный слой Si, затем поочередно проводилось осаждение трёх бислоев Mg и Si. Скорости осаждения магния и кремния определялись с помощью кварцевого датчика толщины с частотой 6 МГц. Они составили 8,5 нм/мин для магния и 1,4 нм/мин для кремния. Толщина слоёв магния и кремния на начальном этапе определялась по времени осаждения. Подробный перечень этапов формирования образцов и толщин слоёв представлен в табл. 1.

Таблица 1. Перечень этапов формирования образцов

№	Этап	Образец 1	Образец 2
		Толщина слоя h , нм	
1	Осаждение буферного слоя Si	60	60
2	Осаждение 1 слоя Mg	30	30
3	Осаждение 2 слоя Si	10	10
4	Осаждение 3 слоя Mg	30	30
5	Осаждение 4 слоя Si	10	10
6	Осаждение 5 слоя Mg	30	30
7	Осаждение 6 слоя Si	10	10

Исследование элементного состава образцов (для контроля роста плёнок на каждом этапе их формирования) осуществлялось методом ЭОС с помощью двухпролётного энергоанализатора типа «цилиндрическое зеркало» PHI-model 15-255g, установленного в камере Varian. Спектры образцов, полученные методом ЭОС, представлены на рис. 1.

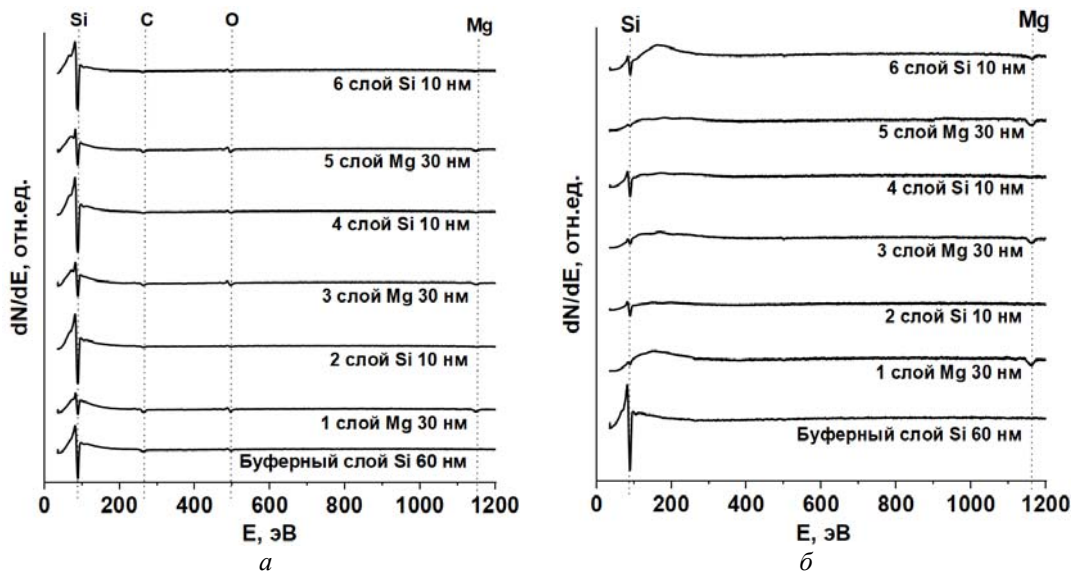


Рис. 1. Спектры зависимости первой производной количества вторичных электронов по энергии от энергии оже-электронов, полученные методом электронной оже-спектроскопии:

a – образец 1; *б* – образец 2

На нижних спектрах (рис. 1), соответствующих слою кремния толщиной 60 нм (буферный слой), чётко виден LVV-пик большой амплитуды при 92 эВ, принадлежащий Si, согласно (здесь и далее при анализе спектров) атласу спектров оже-электронов [10]. На кривых, полученных при исследовании слоёв магния толщиной 30 нм (1, 3 и 5 слой), наблюдается KLL-пик Mg с энергией 1186 эВ. При этом, кроме этих пиков, на этих же кривых наблюдаются LVV-пики Si (92 эВ). Графики, которые соответствуют слоям кремния, для обоих образцов толщиной 10 нм (2, 4 и 6 слой) содержат только LVV-пик с энергией 92 эВ, подтверждающий наличие атомов Si.

На основе сравнительного анализа данных ЭОС образцов для слоёв Mg, где одновременно наблюдаются ЭОС пики и кремния и магния, можно заключить, что интенсивность LVV-пика с энергией 1186 эВ более выражена, а интенсивность LVV-пика с энергией 92 эВ менее выражена у второго образца. При этом плёнка, сформированная при более низкой температуре (240°C), содержит примеси, включающие в себя углерод (272 эВ) и кислород (503 эВ) с малой концентрацией.

Таким образом, в результате исследования элементного состава образцов на каждом этапе их формирования методом ЭОС было установлено наличие Mg (1186 эВ) и Si (92 эВ) в соответствующих слоях плёнок. Плёнка, сформированная при 250°C, не содержит примесей.

Исследование образцов методами колебательной спектроскопии

Исследование образцов методами оптической спектроскопии и атомно-силовой микроскопии проводилось в лаборатории оптики и электрофизики Института автоматизации и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук. На первом этапе оптические свойства сформированных образцов изучались методом комбинационного рассеяния света (КРС) с помощью спектрофотометра NTEGRA Spectra II (NT-MDT) при длине волны лазера $\lambda = 473$ нм. Спектры КРС образцов представлены на рис. 2.

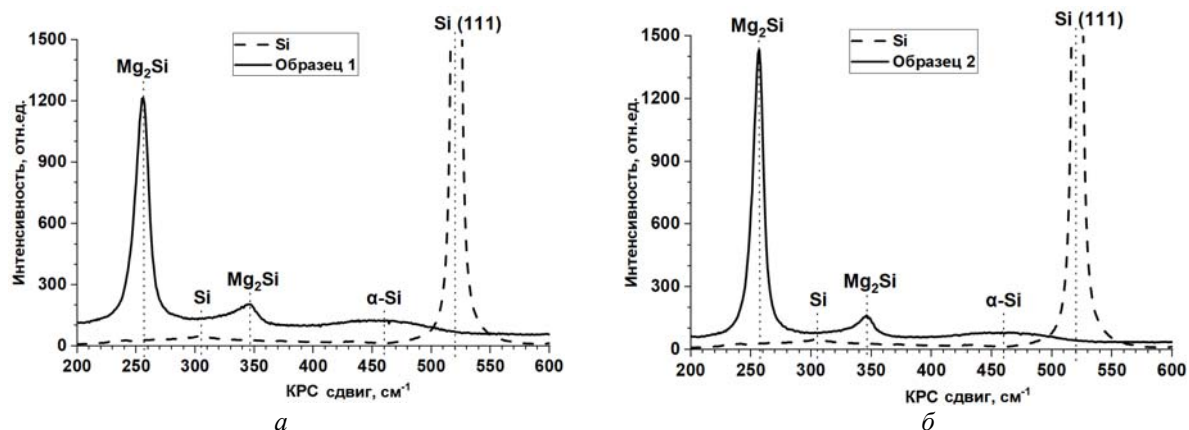


Рис. 2. Спектры, полученные методом комбинационного рассеяния света:
 а – образец 1; б – образец 2

На кривой, соответствующей Si (рис. 2), наблюдается пик большой амплитуды при КРС сдвиг 520 см^{-1} и слабо выраженный рефлекс при 305 см^{-1} , по [11 – 13] принадлежащие монокристаллическому кремнию.

Проанализировав спектры первого образца (рис. 2, а) и второго образца (рис. 2, б), можно отметить резкое увеличение интенсивности пиков при КРС сдвиге 258 см^{-1} и незначительное её увеличение при 348 см^{-1} . Указанный факт, согласно [5; 11; 13], свидетельствует о наличии силицида магния со стехиометрическим соотношением состава атомов Mg и Si (Mg_2Si) у обеих плёнок. Сопоставительный анализ этих графиков также показал, что пик при КРС сдвиге 258 см^{-1} имеет большее значение амплитуды у образца, сформированного при $T_{\text{п}2} = 250^\circ\text{C}$, по сравнению с образцом, сформированным при $T_{\text{п}1} = 240^\circ\text{C}$. Это может быть обусловлено повышенной чувствительностью применённого метода в связи с большим количеством Mg_2Si в плёнке, реально осаждённом при более высокой температуре прогрева подложки.

Также на обоих графиках (рис. 2) наблюдается пик большой полуширины и малой амплитуды при КРС сдвиге от 400 до 500 см^{-1} с максимумом при 460 см^{-1} , который по данным [5; 14] указывает на то, что обе сформированные плёнки содержат в своем составе незначительное количество аморфного кремния.

На втором этапе исследование оптических свойств образцов проводилось методом инфракрасной колебательной спектроскопии с помощью Фурье-спектрофотометра Bruker VERTEX 80v. Спектры пропускания и отражения образцов, полученные этим методом, показаны на рис. 3.

Анализ спектров пропускания и отражения первого и второго образцов (рис. 3), сформированных при температуре прогрева подложек $T_{\text{п}1} = 240^\circ\text{C}$ и $T_{\text{п}2} = 250^\circ\text{C}$ соответственно, показал, что на них отчётливо видна спектральная линия при 272 см^{-1} . При этом для неё наблюдается пик минимума коэффициента пропускания и пик коэффициента отражения у обеих плёнок при одном волновом числе. Вышеперечисленные наблюдения по данным [13; 15; 16] трактуются как возбуждение фонона Mg_2Si , отвечающего в том числе за поглощение в плёнке силицида.

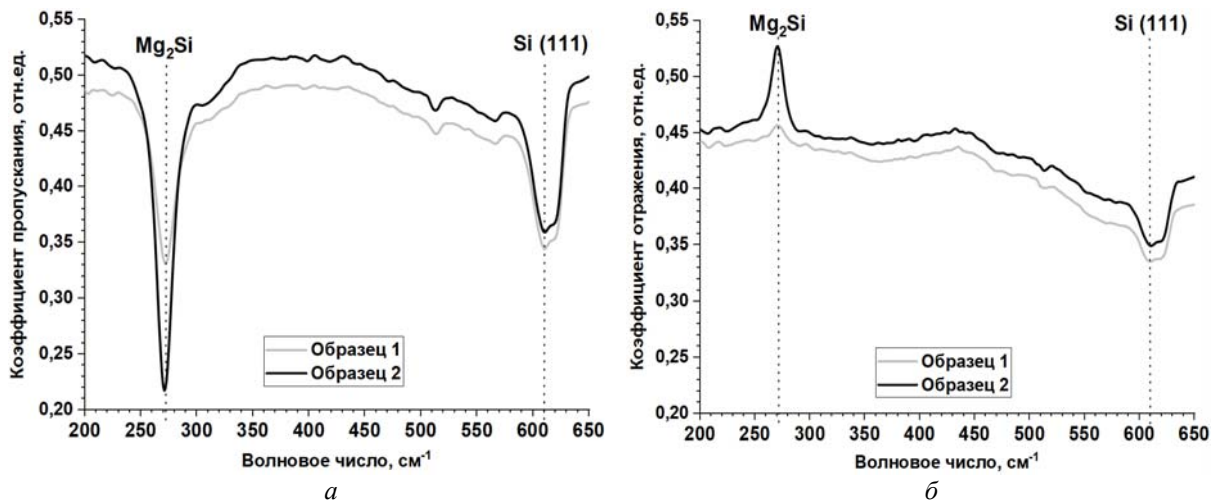


Рис. 3. Спектры, полученные методом инфракрасной колебательной спектроскопии:
а – пропускания; б – отражения

В результате сравнения спектров пропускания (рис. 3, а) видно, что интенсивность спектральной полосы, соответствующей Mg_2Si , больше у образца 2, чем у образца 1. Аналогичное поведение заметно и при сопоставлении спектров отражения (рис. 3, б). Также значение коэффициента пропускания при 272 см^{-1} уменьшилось (до 0,33 для образца 1 и до 0,22 для образца 2), а значение коэффициента отражения увеличилось (до 0,46 для первого и 0,53 для второго образца). Эти результаты анализа, согласно [11; 15], подтверждают повышенное количество Mg_2Si в плёнке, сформированной при температуре 250°C . Проведём оценку толщин плёнок в образцах 1 и 2 по методике, описанной в работе [17]. Интенсивность пика поглощения при 252 см^{-1} экспоненциально зависит от произведения толщины плёнки на коэффициент поглощения в ней. С помощью величин пропускания в области основания пика I_0 и пропускания в области минимума пика I (рис. 3, а) были рассчитаны реальные толщины плёнок. Для образца 1 они составили 69 нм, а для образца 2 – 149 нм. То есть толщины плёнок отличаются от данных в табл. 1, которые определялись исходя из средней скорости осаждения магния и кремния на кварцевый датчик толщины. Несоответствие с данными скорости осаждения на образцы связано, по-видимому, с различием в геометрии осаждения на три образца в держателе.

Дополнительно на спектрах пропускания и отражения (рис. 3) наблюдается спектральная полоса с минимумом при 610 см^{-1} , по данным [13] свидетельствующая о возбуждении фонона монокристаллического кремния Si (111).

Исследование морфологии поверхности образцов методом атомно-силовой микроскопии

Морфологию поверхности сформированных плёнок исследовали методом атомно-силовой микроскопии с использованием атомно-силового микроскопа Solver P47. Изображения образцов, полученные данным методом, представлены на рис. 4, 5.

Анализ изображений первого образца показал, что для плёнки характерен островковый рост Вольмера-Вебера [18]. При этом наблюдаются как отдельные островки, так и образовавшиеся в результате их коалесценции зёрна. Латеральные размеры мелких островков конической формы составляют от 0,1 до 0,3 мкм, а крупных – от 0,7 до 1 мкм.

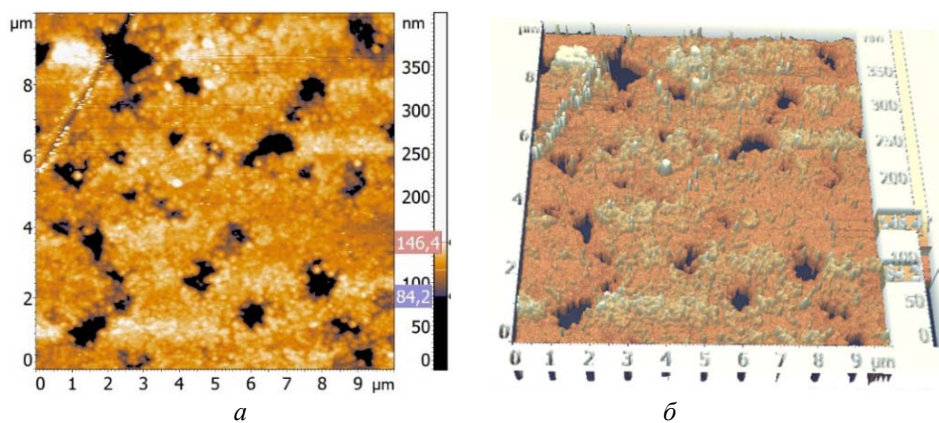


Рис. 4. Изображения образца 1, полученные методом атомно-силовой микроскопии:
а – 2D; б – 3D

Видно, что количество мелких островков превышает количество крупных. Также заметно, что зёрна имеют следующие размеры: длина от 2 до 3 мкм, ширина от 1 до 1,5 мкм. Исходя из этого, площадь отдельных островков составляет от 0,01 до 0,78 мкм², а зёрен – от 2 до 4,5 мкм². Поверхность этой плёнки характеризуется достаточно развитым рельефом, так как на изображениях отчётливо видны не только островки, но и проколы. Максимальная высота островков составляет 25 нм, а глубина проколов 40 нм. Расстояние между проколами составляет от 2 до 4 мкм, латеральные их размеры от 0,6 до 1,2 мкм, площадь от 0,3 до 1,1 мкм².

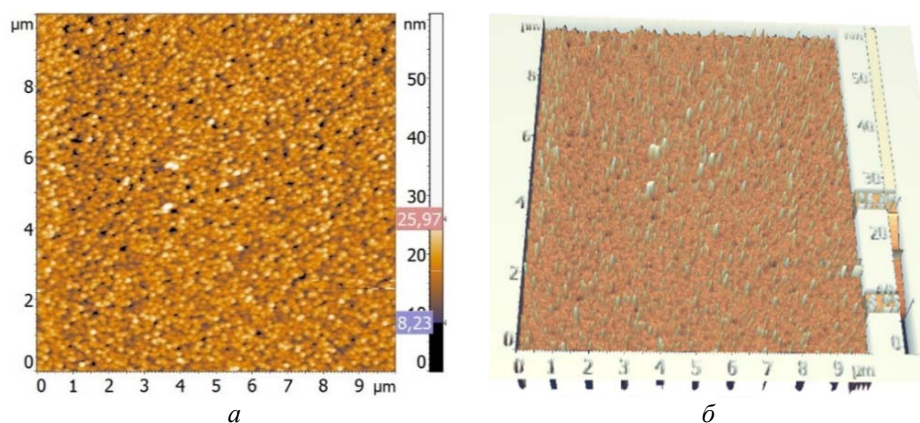


Рис. 5. Изображения образца 2, полученные методом атомно-силовой микроскопии:
а – 2D; б – 3D

Проанализировав микрофотографии, полученные при исследовании образца 2, можно сделать вывод, что рост плёнки происходил по механизму Странского-Крастанова (послойно-островковый рост) [18]. При этом у данного образца латеральные размеры и высота островков меньше (не превышают 0,3 мкм и 5 нм, соответственно), а их количество больше по сравнению с предыдущим. В то же время второй образец, в отличие от первого, обладает следующими особенностями морфологии поверхности: более однородная структура, отсутствие проколов, что обусловлено повышенной диффузией атомов Mg при более высокой температуре прогрева образца 2 и более высокой скоростью осаждения магния, определенной из спектров пропускания в области фонона Mg₂Si по методике, описанной в работе [17].

Исследование электронных свойств образцов методом инфракрасной-ультрафиолетовой спектроскопии

Оптические и электронные свойства плёнок были исследованы методом оптической спектроскопии в инфракрасном-ультрафиолетовом диапазоне на Spectrophotometer U-3010 (рис. 6, 7).

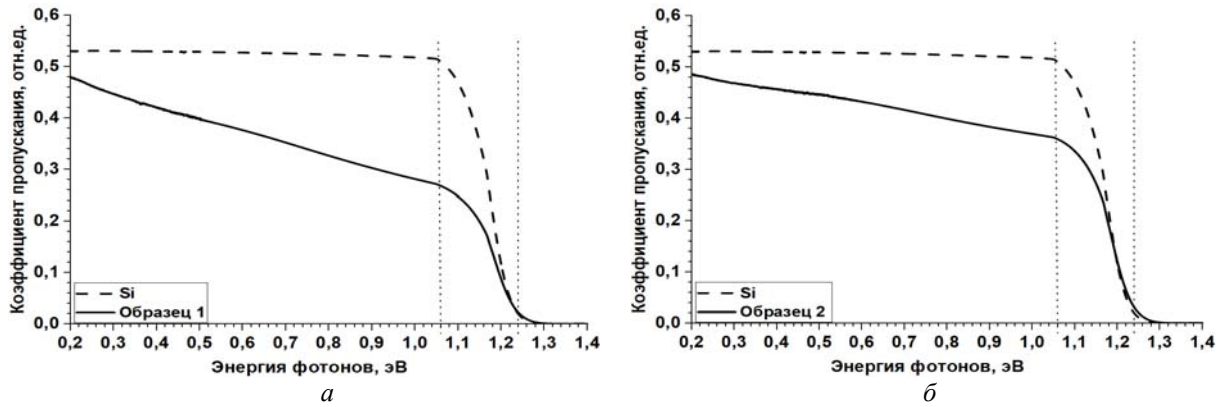


Рис. 6. Спектры пропускания инфракрасного диапазона:
а – образец 1; б – образец 2

Из графиков зависимости коэффициента пропускания от энергии фотонов (рис. 6) видно, что в прозрачной области ИК-спектра плёнки обоих образцов пропускают меньшую часть падающего света по отношению к кремнию. Сравнивая кривые как первого, так и второго образца относительно графика, соответствующего Si, можно сделать вывод, что в диапазоне энергий от 0,2 до 1,06 эВ величина коэффициента пропускания Si не изменяется, а у сформированных плёнок уменьшается линейно, что характерно согласно [11] для полупроводникового силицида магния.

Из анализа спектров пропускания видно, что в области энергий от 1,06 до 1,24 эВ как у Si, так и у образцов, происходит существенное уменьшение величины пропускания. Более плавное уменьшение величины пропускания у сформированных плёнок по отношению к Si, по данным [11], свидетельствует о прошедшем процессе силицидообразования.

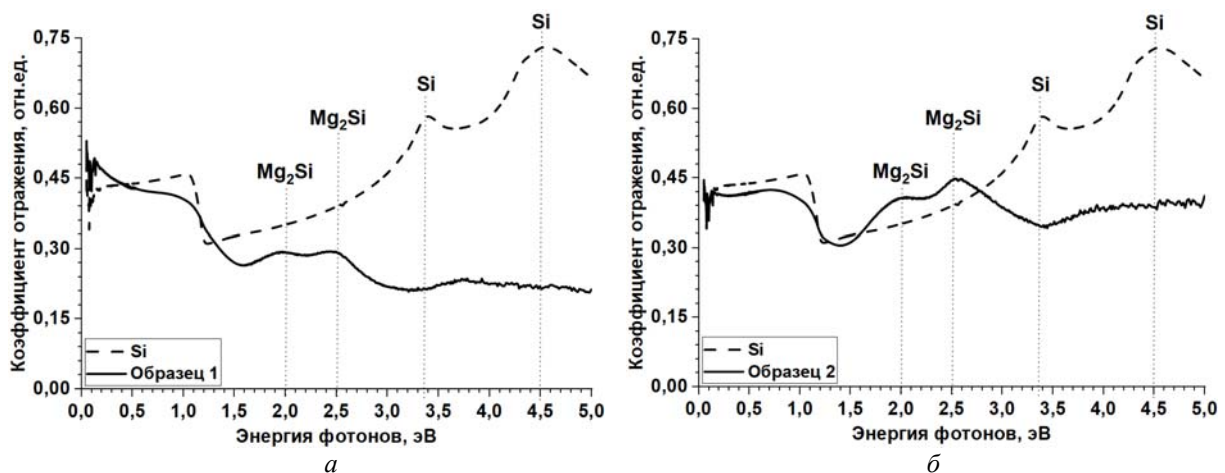


Рис. 7. Спектры отражения инфракрасного-ультрафиолетового диапазона:
а – образец 1; б – образец 2

Анализ графиков зависимости коэффициента отражения от энергии фотонов (рис. 7), соответствующих Si, показал наличие пиков в УФ-области спектра при 3,35 и 4,5 эВ, согласно [11] указывающие на монокристаллический кремний. Пики в видимой области при энергии фотонов 2,0 и 2,5 эВ по данным [11; 13; 16] принадлежат Mg_2Si . Пик при 2,5 эВ более интенсивный у образца 2, чем у образца 1. Это может быть связано с более сплошной и гладкой плёнкой образца, сформированного при 250°C, что коррелирует с данными АСМ, представленными выше (рис. 4, 5).

Для обеих плёнок при энергиях фотонов более 2,5 эВ на графике образцов отчётливо видно уменьшение коэффициента отражения относительно графика Si. Данный факт согласно [12; 13] указывает на сильное рассеяние света в плёнках. В то же время при анализе спектров (рис. 6, 7) в ИК-области в диапазоне энергий от 1,3 до 1,5 эВ у тонких плёнок происходит монотонное уменьшение коэффициента отражения (рис. 7), что связано с одновременным уменьшением прозрачности кремниевой подложки и прозрачности пленки Mg_2Si и уменьшением вклада от многократного отражения света в кремниевой подложке [19]. В этом диапазоне энергий фотонов коэффициент пропускания уменьшается до нуля (рис. 6), что соответствует резкому увеличению поглощения в плёнке за счёт межзонных переходов, что характерно для полупроводникового Mg_2Si [11; 13; 15; 16].

На основе полученных оптических данных обоих образцов были проведены расчёты ширины запрещённой зоны как для непрямых, так и для прямых переходов. Спектры поглощения были получены с помощью следующих формул [20]:

$$\alpha = 1 - R - T, \quad (1)$$

$$a = \alpha(h\nu), \quad (2)$$

где α , T , R – величины поглощения, пропускания и отражения, соответственно; $h\nu$ и a – энергия фотонов и коэффициент поглощения (в cm^{-1}), соответственно.

Чтобы вычислить ширину запрещённой зоны для непрямых переходов, были построены графики зависимости квадратного корня коэффициента поглощения от энергии фотонов [21] (рис. 8).

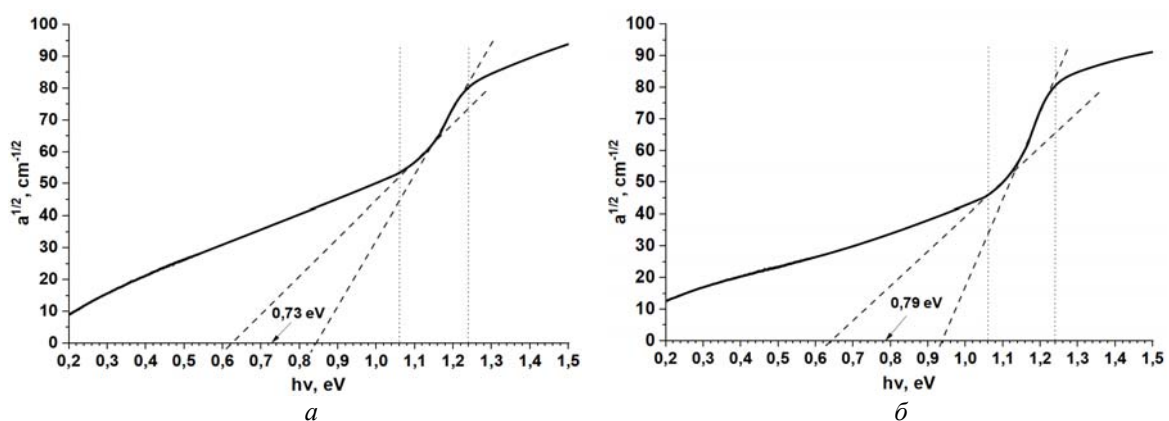


Рис. 8. Графики зависимости $a^{1/2}(h\nu)$ и схема расчёта ширины запрещённой зоны для непрямых переходов: а – образец 1; б – образец 2

Как видно из графиков зависимости $a^{1/2}(h\nu)$, расчёт ширины запрещённой зоны тонких плёнок Mg_2Si для непрямых переходов проводился геометрическим методом пу-

тём экстраполяции прямолинейных участков и касательных в области резкого увеличения поглощения света (от 1,06 до 1,24 эВ) до пересечения с горизонтальной осью. Усредняя значения двух соседних пересечений с осью абсцисс, получаем, что величина ширины запрещённой зоны Mg_2Si для непрямых переходов составляет 0,73 и 0,79 эВ для первого и второго образца, соответственно. Полученные значения согласуются со справочными данными [1 – 4; 22 – 24].

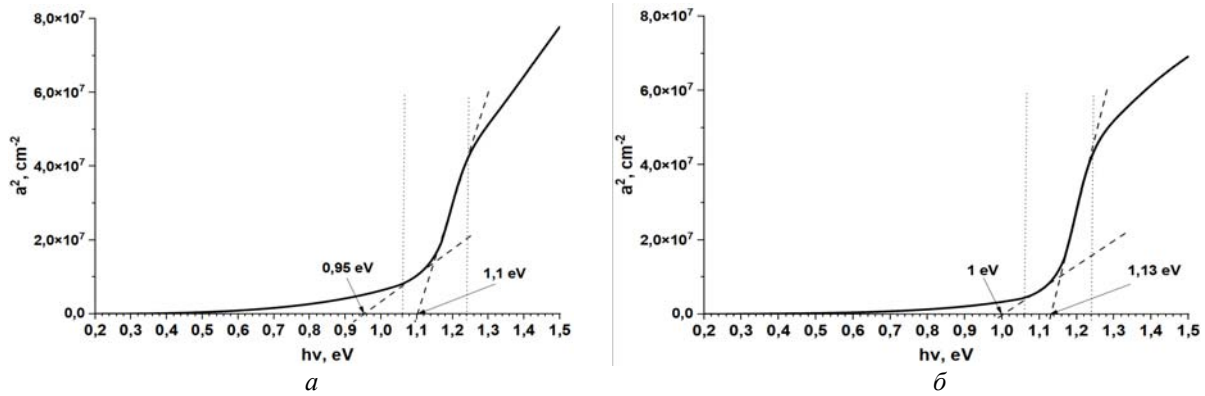


Рис. 9. Графики зависимости $a^2(h\nu)$ и схема расчёта ширины запрещённой зоны для прямых переходов: а – образец 1; б – образец 2

Для расчёта ширины запрещённой зоны для прямых переходов были построены графики зависимости квадрата коэффициента поглощения от энергии фотонов [21] (рис. 9).

Вычисление ширины запрещённой зоны для прямых переходов выполнялось также на основе геометрических расчётов. В результате экстраполяции линейных участков графиков зависимости $a^2(h\nu)$ и касательных к ним в области энергий от 1,06 до 1,24 эВ до пересечения с осью абсцисс определили значения ширины запрещённой зоны Mg_2Si для прямых переходов. Для первого образца они составляют 0,95 и 1,1 эВ, для второго – 1,0 и 1,13 эВ. Результаты проведённых расчетов хорошо коррелируют с данными [1 – 5].

Заключение

По результатам работы можно сделать следующие выводы. Сформированные методом реактивной эпитаксии плёнки при температурах подложки 240°C (образец 1) и 250°C (образец 2), состоящие из чередующихся слоёв Mg и Si, по данным электронной оже-спектроскопии содержат атомы Mg (1186 эВ) и Si (92 эВ) в соответствующих слоях. Методом комбинационного рассеяния света (КРС) установлено наличие на графиках образцов пиков при КРС-сдвигах 258 и 348 см^{-1} , принадлежащих Mg_2Si . Данные ИК-спектроскопии также свидетельствуют о наличии силицида магния в составе плёнок (спектральная полоса при 272 см^{-1}). Оценка толщины из амплитуды пика поглощения при 272 см^{-1} показала, что в образце 1 толщина плёнки составляет 69 нм, а в образце 2 – 149 нм. Пики на спектрах отражения в видимой области при 2,0 и 2,5 эВ подтверждают формирование Mg_2Si в образцах. По результатам исследования образцов в ИК-УФ диапазоне и на основе геометрических расчётов определена ширина запрещённой зоны в выращенных пленках Mg_2Si . Для непрямых переходов для образца 1 и образца 2 она составила 0,73 и 0,79 эВ, соответственно. Расчётные значения ширины запрещённой зоны прямых переходов для первого образца составили 0,95 и 1,1 эВ, для второго – 1,0 и

1,13 эВ. С помощью метода атомно-силовой микроскопии показано, что для плёнки образца 1 характерен островковый рост Вольмера-Вебера, а для образца 2 – послойно-островковый рост Странского-Крастанова. При этом плёнка второго образца, по сравнению с первым, обладает большей однородностью структуры и отсутствием проколов.

Библиографический список

1. Поляков А.В., Фомин Д.В., Новгородцев Н.С. Силицид магния – перспективный материал для оптических датчиков // Успехи прикладной физики. 2023. Т. 11, № 1. С. 52-60. DOI: 10.51368/2307-4469-2023-11-1-52-60
2. Yu H., Gao Ch., Zou J., Yang W., Xie Q. Simulation study on the effect of doping concentrations on the photodetection properties of Mg₂Si/Si heterojunction photodetector // Photonics. 2021. V. 8, Iss. 11. DOI: 10.3390/photonics8110509
3. Yu H., Ji Sh., Luo X., Xie Q. Technology CAD simulations of Mg₂Si/Si heterojunction photodetector based on the thickness effect // Sensors. 2021. V. 26, Iss. 16. DOI: 10.3390/s21165559
4. Yu H., Deng R., Mo Zh., Ji Sh., Xie Q. Fabrication and characterization of visible to near-infrared photodetector based on multilayer Graphene/Mg₂Si/Si heterojunction // Nanomaterials. 2022. V. 12, Iss. 18. DOI: 10.3390/nano12183230
5. Shevlyagin A., Il'yaschenko V., Kuchmizhak A., Mitsai E., Amosov A., Balagan S., Kulinich S. Textured stainless steel as a platform for black Mg₂Si/Si heterojunction solar cells with advanced photovoltaic performance // Materials. 2022. V. 15, Iss. 19. DOI: 10.3390/ma15196637
6. Goroshko D.L., Galkin N.G., Fomin D.V., Gournalnik A.S., Vavanova S.V. An investigation of the electrical and optical properties of thin iron layers grown on the epitaxial Si (111)-(2 × 2)-Fe phase and on an Si (111) 7 × 7 surface // Journal of Physics: Condensed Matter. 2009. V. 21. DOI: 10.1088/0953-8984/21/43/435801
7. Galkin N.G., Fomin D.V., Dubov V.L., Galkin K.N., Pyachin S.A., Burkov A. Comparison of crystal and phonon structures for polycrystalline BaSi₂ films // Defect and Diffusion Forum. 2018. V. 386. P. 48-54. DOI: 10.4028/www.scientific.net/ddf.386.48
8. Дубов В.Л., Фомин Д.В. BaSi₂ – перспективный материал для фотоэлектрических преобразователей // Успехи прикладной физики. 2016. Т. 4, № 6. С. 599-605.
9. Galkin N.G., Goroshko D.L., Dubov V.L., Fomin D.V., Galkin K.N., Chusovitin E.A., Chusovitina S.V. SPE grown BaSi₂ on Si (111) substrates: Optical and photoelectric properties of films and diode heterostructures on their base // Japanese Journal of Applied Physics. 2020. V. 59. DOI: 10.35848/1347-4065/ab6b76
10. Sekine T., Nagasawa Y., Kudoh M., Sakai Y., Parkes A.S., Geller J.D., Mogami A., Hirata K. Handbook of Auger Electron Spectroscopy. JEOL, 1982. 200 p.
11. Галкин Н.Г., Ваванова С.В., Галкин К.Н., Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Нуждин В.И. Наносекундный импульсный отжиг кремния, имплантированного ионами магния // Журнал технической физики. 2013. Т. 83, № 1. С. 99-104.
12. Galkin K.N., Galkin N.G., Batalov R.I., Bayazitov R.M. Synthesis of Mg₂Si precipitates in Mg-implanted silicon by pulsed ion-beam treatment // Physics Procedia. 2012. V. 23. P. 45-48. DOI: 10.1016/j.phpro.2012.01.012
13. Terai Y., Hoshida H., Kinoshita R., Shevlyagin A., Chernev I., Gournalnik A. Photoreflectance spectra of highly-oriented Mg₂Si (111)/Si (111) films // JJAP Conference Proceedings. 2020. V. 8. DOI: 10.56646/jjapcp.8.0_011004

14. Нежданов А.В., Афанаскин А.Ю., Ершов А.В., Машин А.И. Рамановская спектроскопия аморфного кремния, подвергнутого лазерному отжигу // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2012. № 1. С. 3-7.
15. Галкин К.Н., Маслов А.М., Давыдов В.А. Оптические свойства мультислойных материалов на основе кремния и наноразмерных кристаллитов силицида магния // Журнал прикладной спектроскопии. 2006. Т. 73, № 2. С. 204-209.
16. Galkin N.G., Galkin K.N., Vavanova S.V. Multilayer Si (111)/Mg₂Si clusters/Si heterostructures: Formation, optical and thermoelectric properties // e-Journal of Surface Science and Nanotechnology. 2005. V. 3. P. 12-20. DOI: 10.1380/ejssnt.2005.12
17. Baleva M., Marinova M., Atanassov A. Infrared spectra of semiconducting silicides nanolayers // Journal of Physics: Conference Series. 2008. V. 113. DOI: 10.1088/1742-6596/113/1/012043
18. Оура К., Лифшиц В.Г., Саранин А.А., Зотов А.В., Катаяма М. Введение в физику поверхности. М.: Наука, 2006. 490 с.
19. Galkin N.G., Maslov A.M., Konchenko A.V. Optical and photospectral properties of CrSi₂ A-type epitaxial films on Si (111) // Thin Solid Films. 1997. V. 311, Iss. 1-2. P. 230-238. DOI: 10.1016/S0040-6090(97)00678-0
20. Наджафов Б.А. Определение оптических констант в тонких плёнках a-Si:H и a-NK-C:H // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. 2016. № 12, ч. 9. С. 1613-1617.
21. Шалимова К.В. Физика полупроводников. М.: Атомэнергоиздат, 1985. 392 с.
22. Akiyama T., Hori N., Tanigawa Sh., Tsuya D., Udono H. Fabrication of Mg₂Si pn-junction photodiode with shallow mesa-structure and ring electrode // JJAP Conference Proceedings. 2017. V. 5. DOI: 10.56646/jjapcp.5.0_011102
23. Shevlyagin A., Chernev I., Galkin N., Gerasimenko A., Gutakovskii A., Hoshida H., Terai Y., Nishikawa N., Ohdaira K. Probing the Mg₂Si/Si (111) heterojunction for photovoltaic applications // Solar Energy. 2020. V. 211. P. 383-395. DOI: 10.1016/j.solener.2020.09.085
24. Stathokostopoulos D., Teknetzi A., Tarani E., Karfaridis D., Chrissafis K., Hatzikraniotis E., Vourlias G. Synthesis and characterization of nanostructured Mg₂Si by pack cementation process // Results in Materials. 2022. V. 13. DOI: 10.1016/j.rinma.2021.100252

INVESTIGATION OF SURFACE MORPHOLOGY, OPTICAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF Mg₂Si THIN FILMS ON Si (111)

© 2024

- D. V. Fomin** Candidate of Science (Phys. & Math.), Associate Professor, Director of the K.E. Tsiolkovsky Scientific and Educational Center; Amur State University, Blagoveshchensk, Russian Federation; e-office@yandex.ru
- A. V. Polyakov** Master's student, M.Sc. of the K.E. Tsiolkovsky Scientific and Educational Center; Amur State University, Blagoveshchensk, Russian Federation; polyakov_a_1999@mail.ru
- K. N. Galkin** Candidate of Science (Phys. & Math.), Senior Researcher; Institute of Automation and Control Processes, FEB RAS, Vladivostok, Russian Federation; galkinkn@iacp.dvo.ru
- N. G. Galkin** Doctor of Science (Phys. & Math.), Chief Researcher; Institute of Automation and Control Processes, FEB RAS, Vladivostok, Russian Federation; galkin@iacp.dvo.ru

The article presents the results of a study of the elemental composition, surface morphology, optical and electronic properties of Mg₂Si thin films formed on Si (111). Both samples containing films were formed in layers by the method of reactive epitaxy, but at different heating temperatures of the substrates. The formed films consisting of alternating layers of Mg and Si at a ratio of 3:1, according to electron Auger spectroscopy, contain Mg and Si atoms in the associated layers. The Raman light scattering method established the presence of peaks on the graphs of samples at a shift of 258 and 348 cm⁻¹ belonging to Mg₂Si. Infrared spectroscopy data also indicate the presence of magnesium silicide in the films. The thickness of Mg₂Si films was estimated from the data of the known dependence of the amplitude of absorption peaks at 272 cm⁻¹ on the absorption coefficient, which gave the values of the thicknesses of the grown films. Based on the results of the study of samples in the infrared-ultraviolet range and on the basis of geometric calculations, the width of the Mg₂Si band gap was determined.

Magnesium silicide; thin films; reactive epitaxy; surface morphology; atomic force microscopy; optical spectroscopy; band gap; indirect and direct transitions

Citation: Fomin D.V., Polyakov A.V., Galkin K.N., Galkin N.G. Investigation of surface morphology, optical and electronic properties of Mg₂Si thin films on Si(111). *Vestnik of Samara University. Aerospace and Mechanical Engineering*. 2024. V. 23, no. 1. P. 203-215. DOI: 10.18287/2541-7533-2024-23-1-203-215

References

1. Polyakov A.V., Fomin D.V., Novgorodtsev N.S. Magnesium silicide is a promising material for optical sensors. *Uspekhi Prikladnoi Fiziki*. 2023. V. 11, no. 1. P. 52-60. (In Russ.). DOI: 10.51368/2307-4469-2023-11-1-52-60
2. Yu H., Gao Ch., Zou J., Yang W., Xie Q. Simulation study on the effect of doping concentrations on the photodetection properties of Mg₂Si/Si heterojunction photodetector. *Photonics*. 2021. V. 8, Iss. 11. DOI: 10.3390/photonics8110509
3. Yu H., Ji Sh., Luo X., Xie Q. Technology CAD simulations of Mg₂Si/Si heterojunction photodetector based on the thickness effect. *Sensors*. 2021. V. 26, Iss. 16. DOI: 10.3390/s21165559
4. Yu H., Deng R., Mo Zh., Ji Sh., Xie Q. Fabrication and characterization of visible to near-infrared photodetector based on multilayer Graphene/Mg₂Si/Si heterojunction. *Nanomaterials*. 2022. V. 12, Iss. 18. DOI: 10.3390/nano12183230
5. Shevlyagin A., Il'yaschenko V., Kuchmizhak A., Mitsai E., Amosov A., Balagan S., Kulinich S. Textured stainless steel as a platform for black Mg₂Si/Si heterojunction solar cells with advanced photovoltaic performance. *Materials*. 2022. V. 15, Iss. 19. DOI: 10.3390/ma15196637
6. Goroshko D.L., Galkin N.G., Fomin D.V., Goralnik A.S., Vavanova S.V. An investigation of the electrical and optical properties of thin iron layers grown on the epitaxial Si (111)-(2 × 2)-Fe phase and on an Si (111) 7 × 7 surface. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2009. V. 21. DOI: 10.1088/0953-8984/21/43/435801
7. Galkin N.G., Fomin D.V., Dubov V.L., Galkin K.N., Pyachin S.A., Burkov A. Comparison of crystal and phonon structures for polycrystalline BaSi₂ films. *Defect and Diffusion Forum*. 2018. V. 386. P. 48-54. DOI: 10.4028/www.scientific.net/ddf.386.48
8. Dubov V.L., Fomin D.V. BaSi₂ is a promising material for photovoltaic cells. *Uspekhi Prikladnoi Fiziki*. 2016. V. 4, no. 6. P. 599-605. (In Russ.)
9. Galkin N.G., Goroshko D.L., Dubov V.L., Fomin D.V., Galkin K.N., Chusovitin E.A., Chusovitina S.V. SPE grown BaSi₂ on Si (111) substrates: Optical and photoelectric properties of films and diode heterostructures on their base. *Japanese Journal of Applied Physics*. 2020. V. 59. DOI: 10.35848/1347-4065/ab6b76
10. Sekine T., Nagasawa Y., Kudoh M., Sakai Y., Parkes A.S., Geller J.D., Mogami A., Hirata K. Handbook of Auger Electron Spectroscopy. JEOL, 1982. 200 p.

11. Galkin N.G., Vavanova S.V., Galkin K.N., Batalov R.I., Bayazitov R.M., Nuzhdin V.I. Pulsed nanosecond annealing of magnesium-implanted silicon. *Technical Physics*. 2013. V. 58, Iss. 1. P. 94-99. DOI: 10.1134/S1063784213010064
12. Galkin K.N., Galkin N.G., Batalov R.I., Bayazitov R.M. Synthesis of Mg₂Si precipitates in Mg-implanted silicon by pulsed ion-beam treatment. *Physics Procedia*. 2012. V. 23. P. 45-48. DOI: 10.1016/j.phpro.2012.01.012
13. Terai Y., Hoshida H., Kinoshita R., Shevlyagin A., Chernev I., Gournalnik A. Photorefectance spectra of highly-oriented Mg₂Si (111)//Si (111) films. *JJAP Conference Proceedings*. 2020. V. 8. DOI: 10.56646/jjapcp.8.0_011004
14. Nezhdanov A.V., Afanaskin A.Y., Ershov A.V., Mashin A.I. Raman spectroscopy of amorphous silicon subjected to laser annealing. *Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2012. V. 6, Iss. 1. P. 1-5. DOI: 10.1134/S1027451012010181
15. Galkin K.N., Maslov A.M., Davydov V.A. Optical properties of multilayer materials based on silicon and nanosized magnesium silicide crystallites. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2006. V. 73, Iss. 2. P. 227-233. DOI: 10.1007/s10812-006-0063-7
16. Galkin N.G., Galkin K.N., Vavanova S.V. Multilayer Si (111)/Mg₂Si clusters/Si heterostructures: Formation, optical and thermoelectric properties. *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology*. 2005. V. 3. P. 12-20. DOI: 10.1380/ejsnt.2005.12
17. Baleva M., Marinova M., Atanassov A. Infrared spectra of semiconducting silicides nanolayers. *Journal of Physics: Conference Series*. 2008. V. 113. DOI: 10.1088/1742-6596/113/1/012043
18. Oura K., Lifshits V.G., Saranin A.A., Zotov A.V., Katayama M. *Surface Science: an introduction*. Springer, 2003. 440 p.
19. Galkin N.G., Maslov A.M., Konchenko A.V. Optical and photospectral properties of CrSi₂ A-type epitaxial films on Si (111). *Thin Solid Films*. 1997. V. 311, Iss. 1-2. P. 230-238. DOI: 10.1016/S0040-6090(97)00678-0
20. Najafov B.A. Determining the optical constants in thin films a-Si:H and a-nk-C:H. *International Journal of Applied and Fundamental Research*. 2016. No. 12, part 9. P. 1613-1617. (In Russ.)
21. Shalimova K.V. *Fizika poluprovodnikov* [Physics of semiconductors]. Moscow: Atomenergoizdat Publ., 1985. 392 p.
22. Akiyama T., Hori N., Tanigawa Sh., Tsuya D., Udono H. Fabrication of Mg₂Si pn-junction photodiode with shallow mesa-structure and ring electrode. *JJAP Conference Proceedings*. 2017. V. 5. DOI: 10.56646/jjapcp.5.0_011102
23. Shevlyagin A., Chernev I., Galkin N., Gerasimenko A., Gutakovskii A., Hoshida H., Terai Y., Nishikawa N., Ohdaira K. Probing the Mg₂Si/Si (111) heterojunction for photovoltaic applications. *Solar Energy*. 2020. V. 211. P. 383-395. DOI: 10.1016/j.solener.2020.09.085
24. Stathokostopoulos D., Teknetzi A., Tarani E., Karfaridis D., Chrissafis K., Hatzikraniotis E., Vourlias G. Synthesis and characterization of nanostructured Mg₂Si by pack cementation process. *Results in Materials*. 2022. V. 13. DOI: 10.1016/j.rinma.2021.100252