

05;11

## Увеличение плотности нанокластеров $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> на поверхности Si(111) с помощью формирования реконструкции Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ –В

© М.В. Иванченко, Е.А. Борисенко, В.Г. Котляр, О.А. Утас,  
В.В. Устинов, В.Г. Лифшиц

Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, Владивосток  
E-mail: maxim@iacp.dvo.ru  
Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург

Поступило в Редакцию 29 ноября 2005 г.

С помощью метода сканирующей туннельной микроскопии исследовано формирование нанокластеров дисилицида железа  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> в результате твердофазной эпитаксии при температурах отжига 500–700°C и покрытиях железа 0.05–0.5 монослоем на модифицированной бором поверхности Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ –В. Сопоставление с результатами для чистой поверхности Si(111)7 × 7 показало, что плотность нанокластеров  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> на Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ –В значительно превышает их плотность на поверхности Si(111)7 × 7. При этом плотность точечных дефектов и структур, обладающих металлическим типом проводимости, на поверхности Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ –В на несколько порядков ниже, чем на поверхности Si(111)7 × 7 при аналогичных покрытиях Fe и температурах отжига.

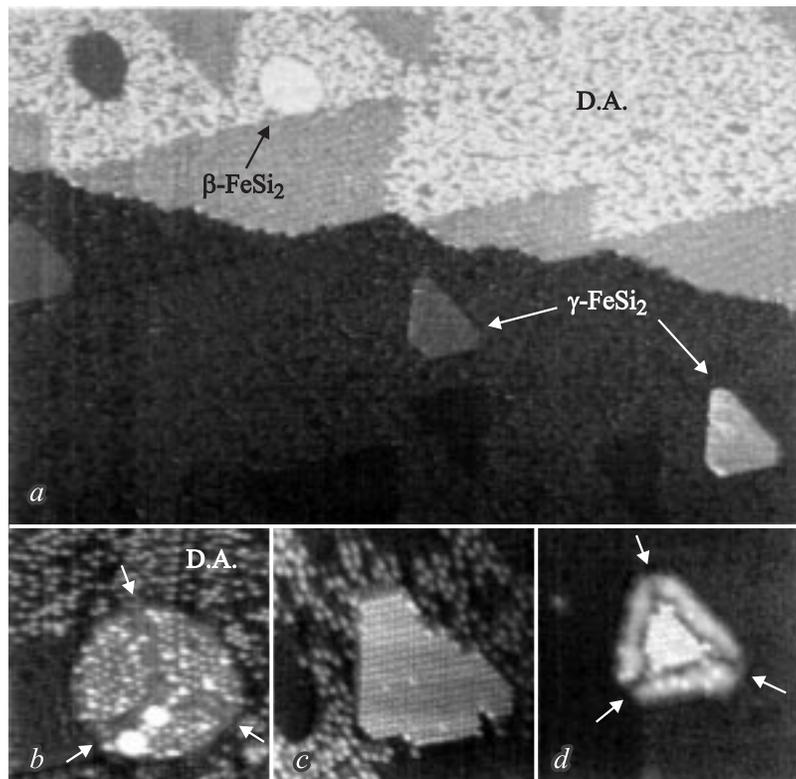
PACS: 81.07.-b

Благодаря активному использованию оптических соединений в последние годы значительно возрос интерес к прямозонным полупроводниковым силицидам. Длина волны излучения  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> идеально соответствует максимуму пропускания оптоволоконных структур, что необходимо для создания эффективных оптических передатчиков [1–3]. Для уменьшения размеров светоизлучающих приборов исследуются структуры на основе наночастиц  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> [4–6]. Однако из-за снижения эффективности излучения при повышении температуры лишь некоторые из многочисленных работ сообщают о фотолюминесценции частиц  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>, внедренных в  $p$ – $n$ -переход, при комнатной температуре [5].

Среди причин снижения эффективности одной из основных является безызлучательная рекомбинация носителей на дефектах [7].

Хотя массивный силицид  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> стабилен, сплошные тонкие пленки этого силицида сложно вырастить на поверхности Si(111), так как из-за несоответствия решеток имеет место островковый рост. При этом известно, что, как правило, происходит формирование нескольких видов островков. Кроме островков со структурой  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> (такие островки состоят из трех доменов, разделенных углублениями вдоль направлений  $[11\bar{2}]$ ), образуются островки со структурой дисилицида  $\gamma$ -FeSi<sub>2</sub>, обладающего металлическими свойствами [2] (такие островки имеют реконструкцию  $2 \times 2$  на поверхности островка) [8,9]. Присутствующие частицы  $\gamma$ -FeSi<sub>2</sub> могут служить центрами безызлучательной рекомбинации, а также дефектами, увеличивающими вероятность пробоа. Так как атомная структура поверхности оказывает значительное влияние на рост пленок, мы исследовали силицидообразование на модифицированной бором поверхности Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ -В с целью улучшения однородности структуры островков, а также повышения их плотности.

Эксперименты проводили в сканирующем туннельном микроскопе (СТМ) фирмы „Omicron“ с базовым давлением  $1.2 \cdot 10^{-10}$  Торг. В качестве подложек использовали пластины кремния *n*-типа с удельным сопротивлением  $0.03 \Omega \cdot \text{cm}$  и размером  $12 \times 2 \times 0.5$  mm. Атомарно-чистую поверхность Si(111) $7 \times 7$  получили *in situ* кратковременным отжигом при  $1280^\circ\text{C}$  после того, как образец был прогрет при  $600^\circ\text{C}$  в течение нескольких часов. Поверхность Si(111) со структурой  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ -В получали разложением оксида бора B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, который осаждали из эффузионной ячейки из нитрида бора на поверхность Si(111) $7 \times 7$  при температуре образца  $800^\circ\text{C}$  [10]. Пленки Fe осаждали из танталовой эффузионной ячейки. Для формирования нанокластеров использовали метод твердофазной эпитаксии (ТФЭ), а именно напыленные при комнатной температуре пленки Fe отжигали при заданной температуре в диапазоне  $500$ – $700^\circ\text{C}$  в течение 5 min пропуском тока через образец. Для исследования поверхности методом СТМ использовались вольфрамовые иглы, получаемые электрохимическим травлением и очищенные отжигом в вакууме. СТМ изображения получали в режиме постоянного тока после охлаждения образца до комнатной температуры.



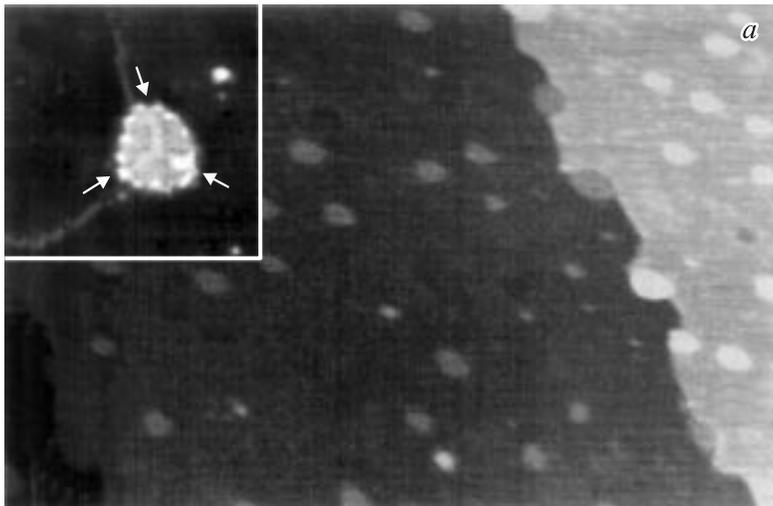
**Рис. 1.** *a* — СТМ-изображение ( $200 \times 140$  nm,  $-2.0$  V,  $0.19$  nA) заполненных состояний поверхности Si(111) $7 \times 7$  после осаждения  $0.5$  МС Fe с последующим отжигом при  $700^\circ\text{C}$ . Область неупорядоченной структуры обозначена буквами D.A. *b* — СТМ-изображение ( $30 \times 30$  nm,  $-1.9$  V,  $0.19$  nA) заполненных состояний поверхности Si(111) $7 \times 7$  после осаждения  $0.5$  МС Fe с последующим отжигом при  $700^\circ\text{C}$ . В центре виден островок  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>. Углубления, разделяющие островок на домены, обозначены стрелками. *c* — СТМ-изображение ( $30 \times 30$  nm,  $-1.9$  V,  $0.17$  nA) заполненных состояний поверхности Si(111) $7 \times 7$  после осаждения  $0.2$  МС Fe с последующим отжигом при  $600^\circ\text{C}$ . В центре виден островок  $\gamma$ -FeSi<sub>2</sub>. *d* — СТМ-изображение ( $30 \times 30$  nm,  $2.0$  V,  $0.37$  nA) незаполненных состояний поверхности Si(111) $7 \times 7$  после осаждения  $0.2$  МС Fe с последующим отжигом при  $700^\circ\text{C}$ . В центре виден островок  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> с частицей  $\gamma$ -FeSi<sub>2</sub> в центре.

Результаты наших контрольных экспериментов по ТФЭ на поверхности Si(111)7 × 7 в целом согласуются с известными литературными данными. Общие тенденции формирования островков на поверхности Si(111)7 × 7 в диапазоне покрытий 0.05–0.5 моноатомного слоя (МС) Fe и температур 550–700°C следующие. Формирование островков начинается при температуре 550°C (рис. 1, *a-d*). Одновременно с ростом островков на поверхности формируются области с неупорядоченной структурой (рис. 1, *a, b*). Эти области начинают расти от атомных ступеней и доменных границ исходной структуры Si(111)7 × 7, и их площадь увеличивается с ростом покрытия Fe. При температуре 700°C и покрытии Fe до 0.2 МС на поверхности формируются только островки  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>. При меньших температурах отжига и при больших покрытиях Fe формируются также островки  $\gamma$ -FeSi<sub>2</sub>, которые составляют примерно четвертую часть от общего числа островков. Встречались также островки  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>, в центре которых формировались частицы  $\gamma$ -FeSi<sub>2</sub> (рис. 1, *c*). При изменении температуры отжига и покрытия Fe суммарная плотность всех островков остается практически постоянной.

При ТФЭ на поверхности Si(111) со структурой  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ –В области неупорядоченной фазы не образуются, а происходит только рост островков (рис. 2, *a*). Плотность и размер островков сильно зависят от температуры отжига. В диапазоне 500–700°C температурная зависимость плотности островков  $N$  описывается соотношением Аррениуса:

$$N = N_0 \exp\left(\frac{E_{eff}}{k_B T}\right),$$

где  $T$  — температура отжига,  $k_B$  — постоянная Больцмана, а эффективная энергия активации  $E_{eff}$  равна  $(0.87 \pm 0.03)$  eV. В результате при изменении температуры на 200°C плотность островков меняется примерно на порядок величины. С ростом покрытия Fe плотность островков возрастает практически линейно, как видно из сравнения данных для начальных покрытий 0.2 и 0.5 МС (показаны черными и белыми квадратиками соответственно на графике на рис. 2, *b*). Это сильно отличается от результатов для ТФЭ на поверхности Si(111)7 × 7, где плотность островков практически не зависит от температуры и покрытия (см. данные, показанные черными и белыми кружками на графике на рис. 2, *b*). Отметим также то, что плотность островков на



**Рис. 2.** *a* — СТМ-изображение ( $200 \times 140$  nm, 1.8 V, 0.17 nA) незаполненных состояний поверхности  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ\text{-В}$  после осаждения 0.5 МС Fe с последующим отжигом при  $700^\circ\text{C}$ . Вставка: СТМ-изображение ( $30 \times 30$  nm,  $-1.9$  V, 0.19 nA) заполненных состояний поверхности  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ\text{-В}$  после осаждения 0.2 МС Fe с последующим отжигом при  $700^\circ\text{C}$ . В центре виден островок  $\beta\text{-FeSi}_2$ . Углубления, разделяющие островок на домены, обозначены стрелками. *b* — график Аррениуса, показывающий зависимость плотности нанокластеров  $N$  на поверхности в зависимости от температуры  $T$  твердофазной эпитаксии: 0.5 МС и 0.2 МС Fe на реконструкции  $\text{В}\sqrt{3}$  (точки типов [a] и [b] соответственно); 0.5 МС и 0.2 МС Fe на  $\text{Si}(111)7 \times 7$  (точки типов [c] и [d] соответственно).

поверхности  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ\text{-В}$  всегда значительно выше, чем на поверхности  $\text{Si}(111)7 \times 7$ .

Анализ структуры островков показал, что во всем исследованном диапазоне температур ( $500\text{--}700^\circ\text{C}$ ) и покрытий Fe (0.05–0.5 МС) все островки на поверхности  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ\text{-В}$  имеют структуру  $\beta\text{-FeSi}_2$ , а островки  $\gamma\text{-FeSi}_2$  с характерной структурой  $2 \times 2$  на поверхности не образуются. Последнее может быть связано с тем, что островки  $\beta\text{-FeSi}_2$  переходят в островки  $\gamma\text{-FeSi}_2$  при достижении критического размера, а при росте на поверхности  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ\text{-В}$  плотность

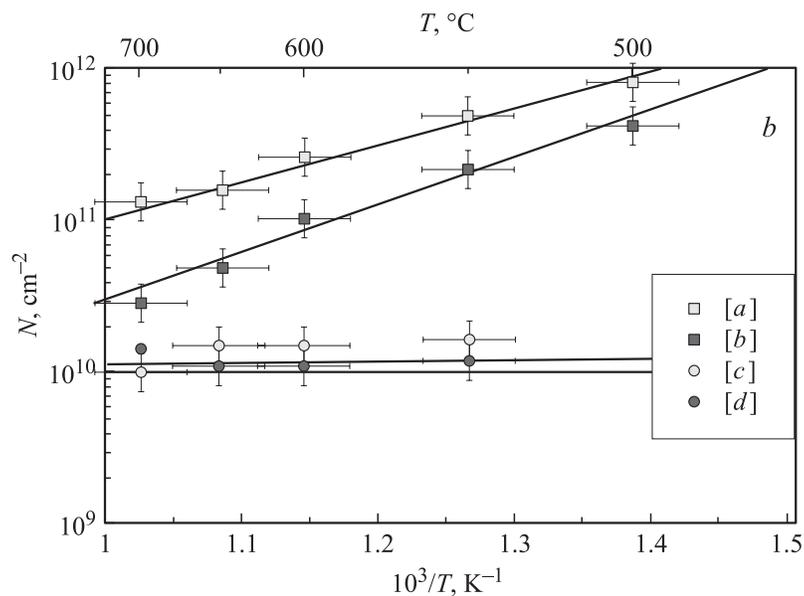


Рис. 2 (продолжение).

островков настолько высока, что все островки имеют размер меньше критического.

Таким образом, можно сделать вывод, что присутствие структуры  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ\text{-В}$  на поверхности Si(111) приводит к значительному увеличению плотности островков  $\beta\text{-FeSi}_2$  при отсутствии областей неупорядоченной структуры и островков  $\gamma\text{-FeSi}_2$  с металлическими свойствами, т.е. количество потенциальных излучающих центров возрастает при многократном снижении числа дефектов по сравнению с тем, что можно получить методом ТФЭ на поверхности Si(111)  $7 \times 7$ .

Исследования проведены при поддержке грантов РФФИ (№ 05-02-17823), НШ (№ 1369.2003.2), а также президиумов ДВО РАН и УрО РАН (№ 04-2-1-00-014).

Мы благодарим профессоров А.А. Саранина, А.В. Зотова и В.В. Коробцова за помощь в обсуждении результатов экспериментов.

## Список литературы

- [1] *Bost M.C., Mahan J.E.* // J. Vac. Sci. Technol. B. 1986. V. 4. P. 1336.
- [2] *Christensen N.E.* // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. N 11. P. 7148–7153.
- [3] *Bellani V., Guizzetti G., Marabelli F.* et al. // Solid State Commun. 1995. V. 96 (10). P. 751–756.
- [4] *Suemasu T., Fujii T., Takakura K., Hasegawa F.* // Thin Solid Films. 2001. V. 381. P. 209–213.
- [5] *Suemasu T., Negishi Y., Takakura K.* et al. // Japan J. Appl. Phys. 2000. V. 39. Part 2. N 10B. P. L1013–L1015.
- [6] *Lourenco M.A., Milosavljevic M., Gwilliam R.M.* et al. // Thin Solid Films. 2004. V. 461. P. 219–222.
- [7] *Lourenco M.A., Butler T.M., Kewell A.K.* et al. // Japan J. Appl. Phys. 2001. V. 40(1). 6A. P. 4041–4044.
- [8] *Manassen Y., Reaple H., Shneck R.* et al. // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 075412-1–075412-11.
- [9] *Krause M., Blobner F., Hammer L.* et al. // Phys. Rev. B. 2003. V. 68, P. 125306-1–125306-10.
- [10] *Nogami J., Yoshikawa S., Glueckstein J.S.* et al. // Scanning Microscopy. 1994. V. 8. N 4. P. 835–840.