

13,12

Особенности фазообразования и электронного строения в пленочных композитах $Al_{1-x}Si_x$ при магнетронном и ионно-лучевом напылении

© В.А. Терехов, Д.С. Усольцева, О.В. Сербин, И.Е. Занин, Т.В. Куликова, Д.Н. Нестеров, К.А. Барков, А.В. Ситников, С.К. Лазарук, Э.П. Домашевская

Воронежский государственный университет,
Воронеж, Россия

E-mail: ftt@phys.vsu.ru

(Поступила в Редакцию 14 июня 2017 г.)

Методами рентгеновской дифракции и ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии исследованы особенности фазового состава и электронного строения композитных пленок алюминий–кремний вблизи состава $Al_{0.75}Si_{0.25}$ на кремниевой подложке Si(100), полученных методами магнетронного и ионно-лучевого напыления. При магнетронном напылении в поликристаллической Al матрице кроме нанокристаллов кремния размерами около 25 nm, образуется упорядоченный твердый раствор, соответствующий неизвестной ранее фазе Al_3Si . Пленки, полученные ионно-лучевым распылением составной мишени, оказались однофазными и содержащими только одну фазу упорядоченного твердого раствора силицида алюминия Al_3Si кубической сингонии Pm3m с параметром примитивной ячейки $a = 4.085 \text{ \AA}$. Однако последующий импульсный фотонный отжиг различными дозами от 145 до 216 J/cm^2 приводит к частичному распаду фазы Al_3Si с формированием в композите свободного металлического алюминия и нанокристаллов кремния с размерами в интервале 50–100 nm в зависимости от дозы ИФО.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания вузам в сфере научной деятельности на 2017–2019 гг. Проект № 3.6263.2017/ВУ.

DOI: 10.21883/FTT.2018.05.45804.193

1. Введение

Формирование нанокристаллов кремния различными способами в диэлектрических, полупроводниковых и металлических матрицах с различными электрофизическими свойствами позволяет получать композитные материалы с новыми многофункциональными оптическими, электрофизическими и механическими свойствами [1].

Среди этого множества сплавы и композиты алюминия с кремнием (силумины) широко применяются в различных областях техники, и их механические свойства сильно зависят от размеров кристаллов кремния, находящихся в матрице алюминия. Поэтому развитие технологии получения таких композитов с размерами кристаллов кремния порядка нескольких десятков нанометров может обеспечить существенное улучшение этих свойств.

В работе [2] нами было установлено, что в композитных пленках $Al_{1-x}Si_x$, полученных магнетронным напылением с содержанием кремния 30 и 45 at.%, нанокристаллы кремния имеют близкие средние размеры — 20 и 25 nm. При селективном вытравливании алюминия из композита оставшийся кремний образует губчатую структуру в виде сросшихся конгломератов из нанокристаллов кремния.

Диаграмма состояний алюминий–кремний показывает [3], что в объемных силуминовых сплавах в заэвтектической области составов должны присутствовать

твердые растворы кремния в алюминии и фаза кристаллического кремния. Кроме того, в реестре международной базы дифракционных данных (International Centre for Diffraction Data) существует карта метастабильного алюминида кремния $Al_{3.21}Si_{0.47}$ [4], в котором набор межплоскостных расстояний включает значения, близкие к кремнию и алюминию, с самым сильным отражением этой фазы, соответствующим $d = 2.3432 \text{ \AA}$. Более того, в работе [5] сообщалось о появлении метастабильной фазы с простой кубической решеткой и параметром $a = 6.975 \text{ \AA}$, образующейся при сверхбыстром охлаждении расплава $Al_{0.80}Si_{0.20}$, содержащего 20% кремния.

В нашей предыдущей работе [2] мы уделили основное внимание образованию нанокристаллов кремния в магнетронных композитных пленках, в то время как образование упорядоченных твердых растворов или новых фаз в неравновесных условиях не рассматривалось. Между тем, энергия частиц, попадающих на подложку при магнетронном напылении, составляет несколько электровольт, так что даже без дополнительного разогрева подложки возможно образование и твердых растворов, и интерметаллических метастабильных фаз. Поэтому данная работа посвящена детальным исследованиям фазового состава и электронного строения в композитных пленках Al–Si, полученных не только магнетронным, но и ионно-лучевым напылением вблизи состава $Al_{0.75}Si_{0.25}$.

2. Объекты и методы исследования

Пленки состава $Al_{0.73}Si_{0.27}$ были получены на кремниевой подложке Si(100) в Белорусском государственном университете информатики и радиоэлектроники магнетронным распылением составной мишени на установке Оратория-29 [6]. Пленки примерно такого же состава $Al_{0.75}Si_{0.25}$ были получены в Воронежском техническом университете на аналогичных подложках Si(100) ионно-лучевым напылением при давлении аргона в камере $8.0 \cdot 10^{-4}$ mm Hg, токе плазмы 170 mA и напряжении 3500 V [7]. Далее образцы, полученные ионно-лучевым напылением, подвергались импульсному фотонному отжигу (ИФО) на установке УОЛП-1М, в которой используются ксеноновые лампы с диапазоном длин волн 200–1200 nm. Толщина пленок в обоих случаях составляла около 0.5 μ m.

Морфология пленок и элементный состав исследовались на растровом электронном микроскопе JEOL JSM-6380LV ЦКП НО ВГУ. Рентгенофазовый анализ (РФА) проводился с помощью рентгеновского дифрактометра PANalytical Empyrean с $CuK_{\alpha 1}$ -излучением в ЦКП НО ВГУ.

Электронное строение валентной зоны тонкопленочных композитов Al–Si анализировалось по энергетическому распределению локальной парциальной плотности валентных состояний кремния и алюминия на лабораторном ультрамягком рентгеновском спектрометре-монохроматоре РСМ-500 [5,8]. Эмиссионные рентгеновские Si $L_{2,3}$ -спектры были получены при возбуждении электронами с энергией 3 keV, соответствующей глубине анализа 60 nm [9–11].

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Дифрактометрические исследования фазового состава. Результаты дифрактометрических исследований пленочных композитов Al–Si, приведенные на рис. 1 и в табл. 1, показали следующее: в пленке $Al_{0.73}Si_{0.27}$, сформированной магнетронным напылением, так же как и ранее в работе [2], обнаруживаются рефлексы кристаллических фаз алюминия и кремния (кривая 3 на рис. 1). Кроме того, тщательный анализ данных РФА показывает наличие дополнительных рефлексов, не принадлежащих ни кремнию, ни алюминию, обведенных кружками на рис. 1, которым соответствуют межплоскостные расстояния $d = 4.09$; 2.04 и 1.67 Å. В табл. 1 они отмечены как принадлежащие неизвестной фазе.

В случае композита $Al_{0.75}Si_{0.25}$, полученного ионно-лучевым распылением, на дифрактограмме присутствуют только рефлексы той же самой неизвестной фазы, в то время как рефлексы кремния и алюминия отсутствуют. Самый интенсивный рефлекс, близкий к рефлексу Al(111), как будет показано ниже по тексту, также принадлежит фазе, которую пока мы называем неизвестной.

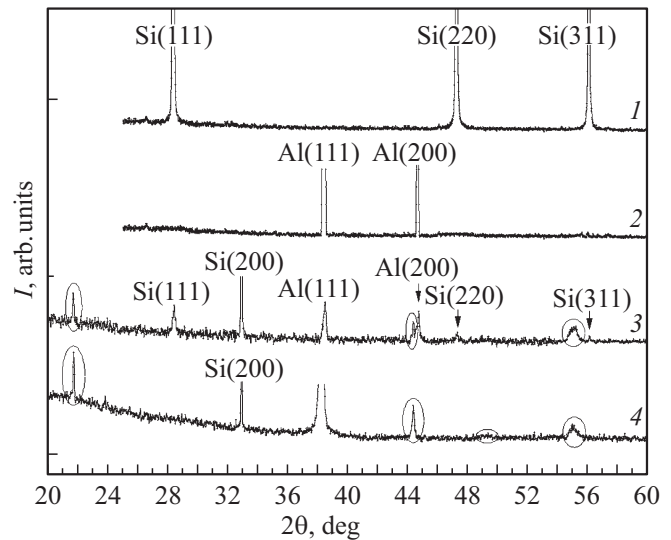


Рис. 1. Дифрактограммы эталонных образцов поликристаллического кремния (1) и поликристаллического алюминия (2), а также образцов, полученных методами магнетронного напыления (3) и ионно-лучевого напыления (4).

Рефлекс Si(200), присутствующий на дифрактограммах обеих пленок (кривые 3 и 4 на рис. 1) и отсутствующий на дифрактограмме poly-Si, обусловлен слабым запрещенным рефлексом от монокристаллической подложки Si(100) во втором порядке отражения. Так как рентгеновский микроанализ показал, что в этом композите содержится около 25 at.% кремния и 75 at.% алюминия, то отсутствие на дифрактограмме 4 рефлексов кремния и алюминия, кроме сильно сдвинутого рефлекса Al(111), может означать, что весь распыленный материал вошел в состав неизвестной фазы или какие-то фазы находятся в аморфном состоянии.

3.2. Распределение плотности электронных состояний в валентной зоне пленочных композитов по данным ультрамягкой рентгеновской спектроскопии. Далее для исследования композитов с возможными аморфными компонентами мы использовали метод ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС), который прекрасно отражает распределение локальной парциальной плотности состояний электронов в валентной зоне как кристаллических, так и аморфных фаз. На спектрометре РСМ-500 для этих пленочных композитов были получены Si $L_{2,3}$ -спектры, отражающие распределение Si 3s,d-состояний в валентной зоне [8,9]. Сопоставление представленных на рис. 2 результатов (шкала энергий — относительно Si 2p-уровня) с Si $L_{2,3}$ -спектрами эталонных c-Si (кривая 1) и a-Si (кривая 2) показало, что при ионно-лучевом напылении композитов Al–Si распределение Si 3s,d-состояний кремния в данном композите состава $Al_{0.75}Si_{0.25}$ (кривая 4) отличается от первых двух наличием одного максимума плотности состояний при ~ 91 eV, принадлежащего единственной кристаллической фазе (пока неизвестной)

Таблица 1. Межплоскостные расстояния эталонных образцов поликристаллического кремния, поликристаллического алюминия, а также исходных образцов пленочных композитов, полученных методами магнетронного и ионно-лучевого напыления (по данным дифрактометрии в интервале углов $2\theta = 20-60^\circ$)

№ п/п	Межплоскостные расстояния (Å) отражений на дифрактограммах рис. 1				Принадлежность фазе
	poly-Si	poly-Al	Образец, полученный магнетронным напылением	Образец, полученный ионно-лучевым напылением	
1	—	—	4.09	4.09	Неизвестная фаза
2	3.14	—	3.14	—	Si(111)
3	—	—	2.72	2.72	Si(200)-подложка
4	—	2.33	2.34	—	Al(111)
				2.35	Неизвестная фаза
5	—	—	2.04	2.04	Неизвестная фаза
6	—	2.02	2.02	—	Al(200)
7	1.92	—	1.92	—	Si(220)
8	—	—	—	1.85	Неизвестная фаза
9	—	—	1.67	1.67	Неизвестная фаза
10	1.638	—	1.63	—	Si(311)

в этом композите, содержащей как кремний, так и алюминий. В то же время в пленке, полученной магнетронным напылением, в Si $L_{2,3}$ -спектре (кривая 3 на рис. 2) наблюдаются два выраженных максимума плотности состояний нанокристаллического кремния — при 89.5 и 92.0 eV, относящиеся к первым двум валентным подзонам кремния. Влияние неизвестной фазы проявляется в выравнивании интенсивности этих двух максимумов в композите, тогда как в кристаллическом кремнии главный максимум расположен при 92.0 eV (кривая 1 на рис. 2).

Полученные результаты УМРЭС объясняют, почему на дифрактограмме композита, полученного магнетронным напылением, обнаруживаются рефлексы нанокристаллического кремния, тогда как на дифрактограмме композита, полученного ионно-лучевым напылением, рефлексов кристаллического кремния (кроме одного рефлекса подложки), как и рефлексов кристаллического алюминия не наблюдается (рис. 1). Это происходит из-за образования на монокристаллической подложке новой неизвестной фазы в системе Al–Si, химическая формула которого должна соответствовать составу упорядоченного твердого раствора $Al_{0.75}Si_{0.25}$, то есть силициду алюминия Al_3Si .

Подобный результат был достигнут в работе [12], авторы которой в процессе магнетронного распыления мишени соответствующего состава получили однофазный конденсат упорядоченного твердого раствора $Pd_{0.5}Cu_{0.5}$ с примитивной кубической кристаллической решеткой типа CsCl (β -фаза).

По оценкам авторов работы [12] температура ненагреваемой подложки в процессе роста может повышаться от исходной (около 300 K) на 50–100 K вследствие

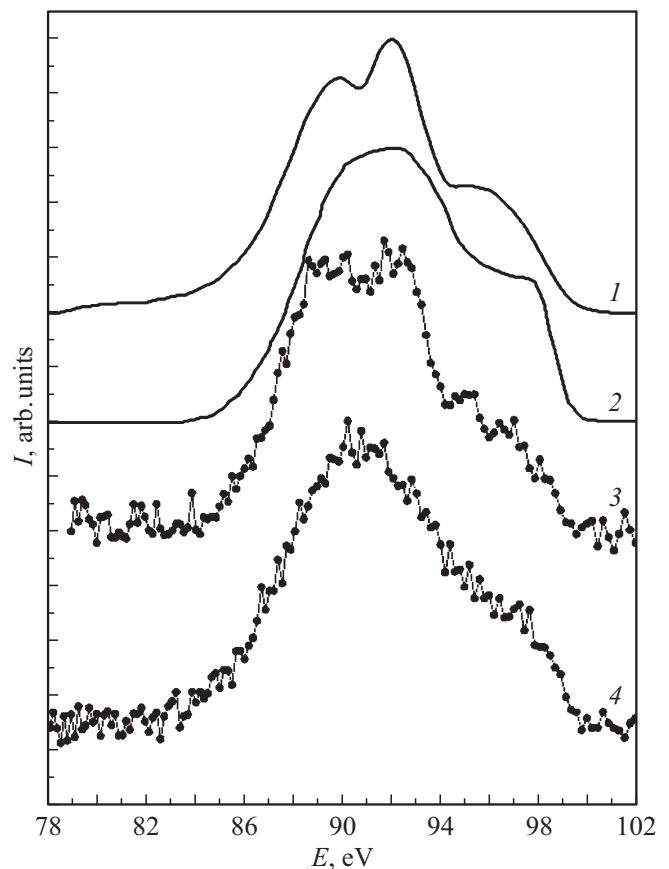


Рис. 2. Рентгеновские эмиссионные Si $L_{2,3}$ -спектры эталонных образцов кристаллического (1) и аморфного кремния (2) и образцов, полученных методами магнетронного (3) ионно-лучевого напыления (4).

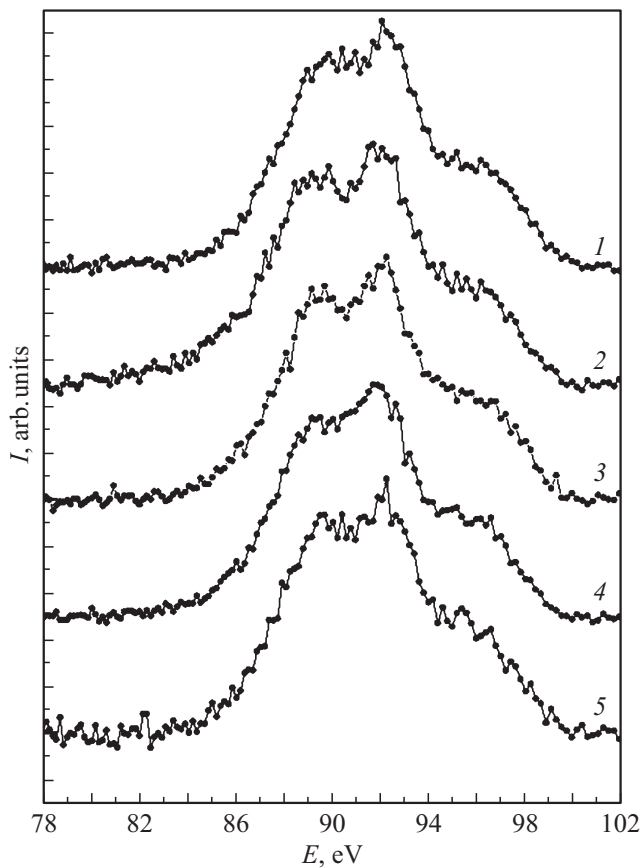


Рис. 3. Ультрамягкие рентгеновские эмиссионные Si L_{2,3}-спектры образцов, полученных методом ионно-лучевого напыления, после ИФО дозами 145 (кривая 1), 150 (2), 160 (3), 180 (4) и 216 (5) J/cm².

высокой энергии конденсируемых атомов и воздействия компонентов плазмы.

Для того, чтобы проверить стабильность фазы Al₃Si и возможность формирования в таком пленочном конденсате нанокристаллов кремния, пленочные образцы, полученные ионно-лучевым напылением, были подвергнуты импульсному фотонному отжигу дозами в интервале от 145 до 215 J/cm². ИФО проводился в вакууме ~ 10⁻⁵ mm Hg в течение нескольких секунд для того, чтобы окисление кремния и алюминия в остаточной атмосфере было минимизировано.

На рис. 3 представлены Si L_{2,3}-спектры этих композитов после отжига различными дозами. Анализ формы спектров показывает, что отжиг при 145 J/cm² приводит к появлению главного максимума плотности s-состояний кремния при энергии 92 eV, что характерно для кристаллического c-Si (рис. 2) и нанокристаллического кремния nc-Si [2], а также плеча в области 89–91 eV (кривая 1 на рис. 3). Присутствие данных структур свидетельствует о появлении нанокристаллического кремния в составе композита при ИФО. В то же время отсутствие четкого провала между двумя максимумами плотности состояний при $h\nu \approx 91$ eV, как это наблюдается в c-Si и nc-Si,

то есть четко выраженной тонкой структуры плотности состояний в главной части валентной зоны, обусловлено влиянием Al₃Si фазы, не полностью распавшейся после ИФО.

Увеличение дозы ИФО до 150 и 160 J/cm² приводит к увеличению влияния нанокристаллического кремния на Si L_{2,3}-спектры облученных композитов, которые становятся все ближе к спектрам pc-Si (кривые 2 и 3 на рис. 3), однако по-прежнему испытывают влияние фазы Al₃Si, которое сохраняется и при дальнейшем увеличении дозы ИФО вплоть до 180 и 216 J/cm².

На рис. 4 представлены ультрамягкие рентгеновские эмиссионные Al L_{2,3}-спектры этих же композитов до и после ИФО различными дозами. Нижняя кривая на рис. 4 принадлежит металлическому алюминию. Выпуклая полупараболическая кривая зависимости плотности состояний от энергии в первой заполненной и второй полузаполненной зонах Al хорошо описывается в приближении почти свободных электронов. Резкий высокоэнергетический край эмиссионной полосы соответствует положению уровня Ферми в металле. Выше-расположенный Al L_{2,3}-спектр, относящийся к исходному неотожженному образцу Al_{0.75}Si_{0.25} с единственной кристаллической фазой Al₃Si, существенно отличается от предыдущего спектра металла и описывается вогнутой по отношению к шкале энергий полупараболой.

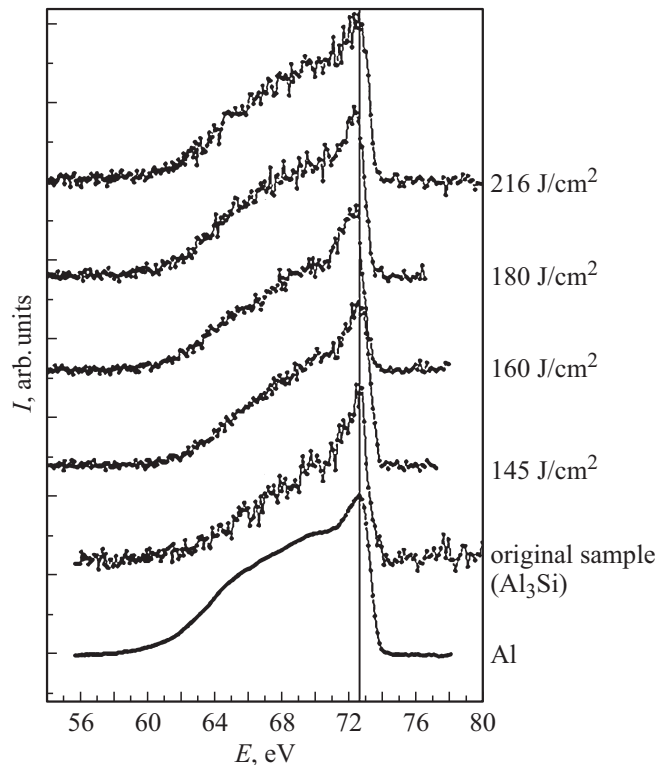


Рис. 4. Рентгеновские эмиссионные Al L_{2,3}-спектры образцов, полученных методом ионно-лучевого напыления, до и после проведения ИФО различными дозами: 145 (2), 150 (3), 160 (4), 180 (5) и 216 (6) J/cm².

Таблица 2. Межплоскостные расстояния образцов пленочных композитов, полученных методом ионно-лучевого напыления до и после проведения ИФО различными дозами (по данным дифрактометрии в интервале углов $2\theta = 20-60^\circ$)

№ п/п	Межплоскостные расстояния (Å) отражений на дифрактограммах рис. 4						Принадлежность фазе
	До ИФО	ИФО 145 J/cm ²	ИФО 150 J/cm ²	ИФО 160 J/cm ²	ИФО 180 J/cm ²	ИФО 216 J/cm ²	
1	4.09	4.08	4.09	4.09	4.08	4.08	Неизвестная фаза
2	—	3.13	3.14	3.14	3.14	3.14	Si (111) (nc)
3	2.72	2.72	2.72	2.72	2.72	2.72	Si (200)-подложка
4	—	2.34	2.34	2.34	2.34	2.34	Al (111)
5	2.35	—	—	—	—	—	Неизвестная фаза
6	2.04	2.04	2.04	2.04	2.04	2.04	Неизвестная фаза
7	—	—	2.03	2.03	2.03	2.03	Al (200)
8	—	1.92	1.92	1.92	1.92	1.92	Si (220) (nc)
9	1.85	1.86	—	—	1.85	1.86	Неизвестная фаза
10	1.67	1.67	1.67	1.67	1.67	1.67	Неизвестная фаза
11	—	1.63	1.64	1.64	1.64	1.64	Si (311) (nc)

Дальнейший анализ формы спектров образцов после ИФО различными дозами приводит к постепенному подъему интенсивности спектра в области первой зоны и приближению его формы к спектру металла в результате увеличения части фазы Al_3Si , распавшейся на алюминий и кремний.

3.3. Рентгенодифракционные исследования образцов $Al_{0.75}Si_{0.25}$, полученных методом ионно-лучевого напыления, после воздействия ИФО. Рентгенодифракционные исследования этих же образцов $Al_{0.75}Si_{0.25}$ после воздействия ИФО показали (рис. 5 и табл. 2), что ИФО дозой 145 J/cm² приводит к появлению трех рефлексов нанокристаллической фазы кремния: Si(111), Si(220) и Si(311) — достаточно слабых и широких.

С увеличением дозы отжига до 150–160 J/cm² интенсивность рефлексов кремния увеличивается, а затем — при увеличении дозы до 180–216 J/cm² — вновь падает. Данный эффект может свидетельствовать о частичном распаде кристаллической фазы Al_3Si при быстром расплавлении пленки под более мощным потоком ИФО и последующем охлаждении, в результате которого образуются нанокристаллические фазы кремния и алюминия (рис. 5 и табл. 2).

Оценка среднего размера нанокристаллов кремния по уширению рефлексов в соответствии с формулой Дебая–Шеррера дает значение от ~ 50 nm при дозах отжига 145–160 J/cm² и до ~ 100 nm при дозах 180–216 J/cm².

Интенсивность рефлексов алюминия Al(111) и Al(200), отсутствующих в исходном композите, с увеличением дозы ИФО изменяется немонотонно: то резко падает, то растет (см. рис. 5), что, по-видимому, связано с перестройкой взаимной ориентации микрокристаллов и текстурированием пленки.

Далее рассмотрим более детально влияние ИФО на поведение рефлексов фазы Al_3Si в композитах

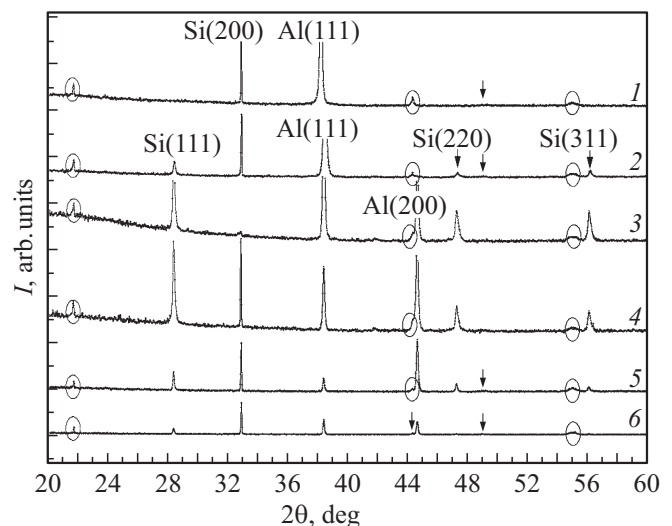


Рис. 5. Дифрактограммы образцов, полученных методом ионно-лучевого напыления, до (1) и после ИФО дозами 145 (2), 150 (3), 160 (4), 180 (5) и 216 (6) J/cm². Кругжками показаны рефлексы неизвестной фазы.

$Al_{0.75}Si_{0.25}$, полученных ионно-лучевым напылением. На рис. 6 представлены те участки дифрактограмм, на которых наблюдаются рефлексы данной фазы. Кроме того, на этом рисунке показаны рефлексы алюминия Al(111) и Al(200) и рефлекс кремния S(311). Положение рефлексов Al(111) и Si(311) в эталонных поликристаллических образцах кремния и алюминия отмечено прерывистыми вертикальными линиями.

В случае пленки, полученной ионно-лучевым напылением, до проведения ИФО кроме заметно смещенных рефлексов Al(111) с $d = 2.35 \text{ \AA}$ и Al(200) с $d = 2.04 \text{ \AA}$, которые относятся к фазе Al_3Si , на дифрактограмме присутствуют дополнительные рефлексы $d = 4.09$

($2\theta = 21.74^\circ$), 1.67 \AA ($2\theta = 55.02^\circ$), относящиеся к той же фазе. При отжиге дозой 145 J/cm^2 появляется рефлекс нанокристаллического кремния и наплыв от отражения Al(200) справа от линии $d = 2.04 \text{ \AA}$ фазы Al_3Si (кривая 2 на рис. 6). Отжиги дозами 150, 160 и 180 J/cm^2 приводят к появлению не только интенсивного рефлекса кремния Si(311), но и очень интенсивного рефлекса Al(200), по положению соответствующего поликристаллическому алюминию $d = 2.02 \text{ \AA}$, в результате чего на дифрактограмме присутствуют 2 рефлекса, один из которых ($d = 2.04 \text{ \AA}$) соответствует фазе Al_3Si , а второй — с $d = 2.02 \text{ \AA}$ — соответствует алюминию. Оба этих рефлекса остаются и при более мощных отжиге, но с разной относительной интенсивностью (см. рис. 6).

Рефлекс Al(111) ведет себя при ИФО несколько иначе. В исходной пленке межплоскостное расстояние, равное $d = 2.35 \text{ \AA}$, увеличено по сравнению с чистым алюминием и соответствует фазе Al_3Si . После отжига 145 J/cm^2 рефлекс смещается в сторону больших углов на $\sim 0.3^\circ$ и становится более широким — $\Delta\theta \approx 0.30^\circ$, но после отжига дозой 150 J/cm^2 — снова становится более узким — $\Delta\theta \approx 0.11^\circ$. При больших дозах ИФО положение рефлекса Al(111) не меняется и соответствует чистому Al (рис. 6).

Как видно из рис. 6, во всех отожженных композициях независимо от режима отжига одновременно с рефлексами кристаллического алюминия появляется рефлекс нанокристаллического кремния Si(311), относительная интенсивность которого изменяется синхронно с относительной интенсивностью рефлекса Al(200), что еще раз подтверждает их происхождение в результате частичного распада фазы Al_3Si под действием ИФО.

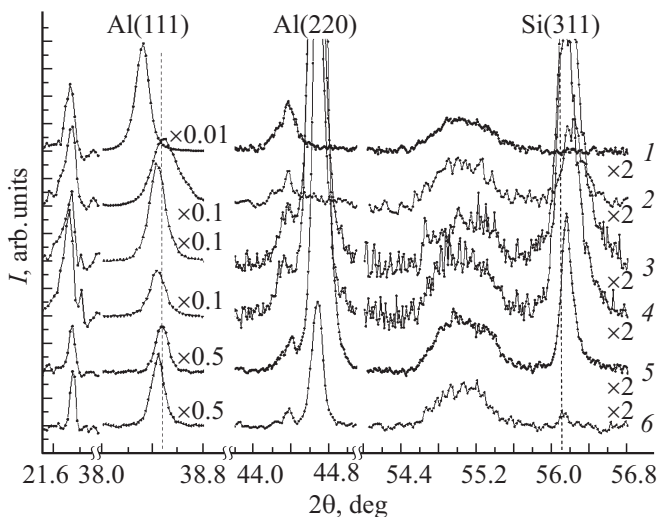


Рис. 6. Дифрактограммы образцов, полученных методом ионно-лучевого напыления, до (1) и после проведения ИФО дозами 145 (2), 150 (3), 160 (4), 180 (5) и 216 J/cm^2 (6) в области «дополнительных» рефлексов и рефлексов Al(111), Al(200) и Si(311). Прерывистой линией показано положение рефлексов Al(111) и Si(311) в эталонных поликристаллических образцах алюминия и кремния.

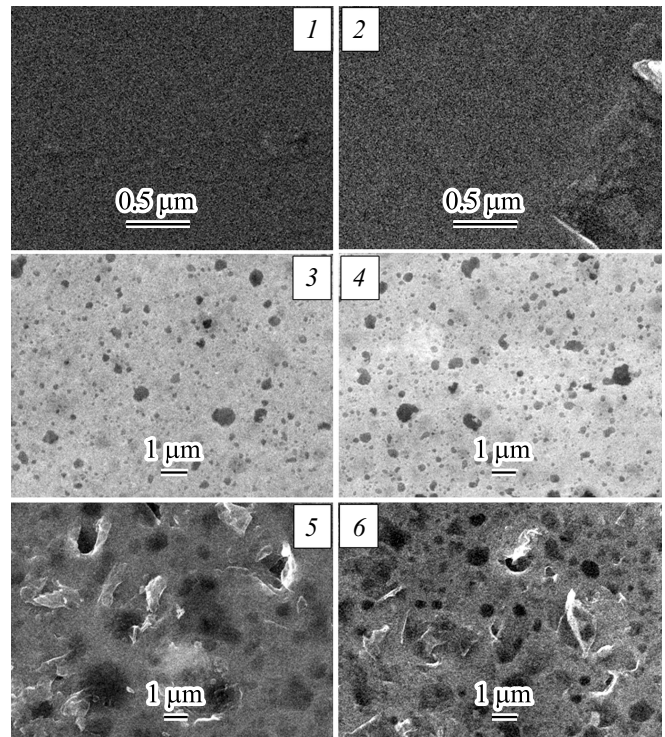


Рис. 7. Данные растровой электронной микроскопии образцов, полученных методом ионно-лучевого напыления, до (1) и после проведения ИФО дозами 145 (2), 150 (3), 160 (4), 180 (5) и 216 J/cm^2 (6).

О возможности такой перестройки свидетельствуют данные растровой электронной микроскопии (рис. 7). До проведения ИФО и после ИФО дозой 145 J/cm^2 на поверхности пленки отсутствуют выраженные неоднородности. После ИФО дозами $150\text{--}160 \text{ J/cm}^2$ на поверхности пленки возникает множество неоднородностей субмикронного размера. Дальнейшее увеличение дозы отжига до $180\text{--}216 \text{ J/cm}^2$ сопровождается появлением более крупных неоднородностей.

3.4. Тип и параметры кристаллической структуры фазы Al_3Si . Итак, все предыдущие данные рентгенофазовых и рентгеноспектральных исследований убеждают нас в том, что кремний, взаимодействующий с алюминием в неравновесных условиях как ионно-лучевого, так и магнетронного распыления составной мишени образует упорядоченный твердый раствор состава $\text{Al}_{0.75}\text{Si}_{0.25}$, соответствующий фазе силицида алюминия Al_3Si с набором межплоскостных расстояний $4.085, 2.352, 2.040, 1.847$ и 1.668 \AA , приведенным в табл. 3. Этому набору межплоскостных расстояний соответствует примитивный тип элементарной ячейки кубической сингонии $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ с параметром решетки $a = 4.085 \text{ \AA}$. Кристаллическую структуру соединения Al_3Si можно представить четырьмя примитивными кубическими подрешетками, одна из которых образована атомами кремния, а три других, образованных атомами

Таблица 3. Теоретически рассчитанные и экспериментальные значения межплоскостных расстояний упорядоченного твердого раствора $Al_{0.75}Si_{0.25}$ (силицида Al_3Si) с примитивным типом элементарной ячейки кубической сингонии $Pm\bar{3}m$ и параметром решетки, равным 4.085 \AA

hkl	Теоретически рассчитанные значения межплоскостных расстояний d (\AA) для плоскостей с индексами (hkl)	Экспериментальные значения межплоскостных расстояний d (\AA) для исходного образца, полученного методом ионно-лучевого напыления	Экспериментальные значения абсолютной (импульсов в секунду) и относительной (%) интенсивностей дифракционных линий
100	4.085 (001)	4.085	259 (5.2%)
110	2.885 (110)	—	—
111	2.356 (111)	2.352	4993 (100%)
200	2.040 (200)	2.040	158 (3.2%)
210	1.825 (210)	1.847	24 (0.5%)
211	1.666 (211)	1.668	67 (1.3%)

алюминия, сдвинуты относительно первой на расстояния $(1/2; 0; 0)$, $(0; 1/2; 0)$ и $(0; 0; 1/2)$, выраженные в параметрах решетки. Данному параметру решетки $a = 4.085 \text{ \AA}$ соответствует рассчитанный набор межплоскостных расстояний с соответствующими индексами кристаллографических плоскостей, приведенный в первом столбце табл. 3.

В эксперименте наблюдаются рефлексы со значениями межплоскостных расстояний, близкими к рассчитанным (табл. 3) — за исключением рефлекса $d = 2.88 \text{ \AA}$. Даже в режиме накопления нам не удалось зафиксировать данный рефлекс; это может быть связано с его крайне низкой относительной интенсивностью.

4. Заключение

Таким образом, результаты исследования фазового состава и распределения локальной парциальной плотности состояний в валентной зоне тонких пленок $Al-Si$, содержащих 23–25 at.% кремния, полученных ионно-лучевым и магнетронным напылением, показали, что в зависимости от способа и условий формирования пленок их фазовый состав может отличаться наличием или отсутствием нанокристаллов кремния.

Композитные пленки, полученные магнетронным напылением, кроме фаз кристаллического алюминия и нанокристаллического кремния со средним размером зерна около 25 nm включают фазу упорядоченного твердого раствора Al_3Si с кубической решеткой $Pm\bar{3}m$ и параметром решетки $a = 4.085 \text{ \AA}$.

В то же время в исходных пленках $Al_{0.75}Si_{0.25}$, полученных ионно-лучевым напылением, присутствует только фаза Al_3Si . Импульсно-фотонный отжиг этих пленок приводит к частичному распаду фазы Al_3Si с образованием в составе композита металлического алюминия и нанокристаллического кремния. Размер нанокристаллов кремния составляет $50-100 \text{ nm}$ и зависит от режима отжига.

Список литературы

- [1] Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Под ред. М.К. Роко, Р.С. Уильямса, П. Аливисатоса. Мир, М. (2002). 292 с.
- [2] В.А. Терехов, С.К. Лазарук, Д.С. Усольцева, А.А. Лешок, П.С. Кацуба, И.Е. Занин, Д.Е. Спирин, А.А. Степанова, С.Ю. Турищев. ФТТ **56**, 2452 (2014).
- [3] Диаграммы состояния двойных металлических систем. Том 1. Под ред. Н.П. Лякишева. Машиностроение, М. (1996). 992 с.
- [4] JCPDS — International Centre for Diffraction Data. PCPDFWIN v. 22. card № 41-1222.
- [5] А.К. Кушнерева, И.В. Салли. Неорганические материалы **6**, 1867 (1970).
- [6] С.К. Лазорук, А.А. Лешок, В.А. Лабунов, В.Е. Борисенко. ФТП **39**, 149 (2005).
- [7] Yu.E. Kalinin, A.V. Sitnikov, O.V. Stognei, I.V. Zolotukhin, P.V. Neretin. Mat. Scien. and Engin. **304–306**, 941 (2001).
- [8] Т.М. Зимкина, В.А. Фомичев. Ультратонкая рентгеновская спектроскопия. ЛГУ, Ленинград (1971). 132 с.
- [9] В.В. Немощкаленко, А.Г. Алешин. Теоретические основы рентгеновской эмиссионной спектроскопии. Наукова думка, Киев. (1974). 376 с.
- [10] А.С. Шулаков, А.П. Степанов. Поверхность. Физ. Хим. Мех. **10**, 146 (1988).
- [11] В.А. Терехов, С.Н. Тростянский, А.Е. Селезнев, Э.П. Домашевская. Поверхность. Физ. Хим. Мех. **5**, 74 (1988).
- [12] V.M. Ievlev, A.A. Maksimenko, S.V. Kannykin, A.I. Dontsov, K.A. Solntsev, E.K. Belonogov, N.R. Roshan. Dokl. Phys. Chem. **457**, 127 (2014).