

# Количественный анализ пленочных структур с диффузной границей раздела, исследованных методом электронной Оже-спектроскопии

© В.Е. Ремеле, М.А. Митцев, М.В. Кузьмин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: m.kuzmin@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 25 июня 2023 г.

В окончательной редакции 25 июня 2023 г.

Принята к публикации 3 июля 2023 г.

Предложена модель для интерпретации результатов электронной Оже-спектроскопии в случае пленочных систем с реакционно-способными границами раздела. Установлена количественная связь параметров переходного слоя и формы зависимостей величины Оже-сигнала подложки от толщины пленки в таких системах. Апробация модели проведена для трех границ раздела редкоземельный металл (Yb, Sm, Gd) — Si(111). Получены количественные данные, касающиеся их структуры и стехиометрического состава, а также зависимости указанных характеристик от термодинамических свойств исследованных редкоземельных металлов.

**Ключевые слова:** поверхность, тонкие пленки, граница раздела, электронная Оже-спектроскопия, редкоземельные металлы, кремний.

DOI: 10.21883/FTT.2023.09.56260.89

## 1. Введение

В настоящее время электронная Оже-спектроскопия (ЭОС) остается одним из наиболее информативных методов в исследованиях тонкопленочных структур [1]. Так, например, с помощью ЭОС можно получать сведения о механизмах роста тонких пленок в интервале толщин  $l$  от  $\sim 10^{-1}$  до  $10^3$  Å. Классификацию таких механизмов, как правило, сводят к трем основным случаям: *a*) островковый рост, начиная с самых малых покрытий (механизм Фольмера–Вебера, VW), *b*) послойный, или двумерный, рост (механизм Франка–ван-дер-Мерве, FM) и *c*) послойный рост, сменяемый островковым ростом (механизм Странского–Крастанова, SK) [1,2]. Примерами пленочных структур, в которых реализуются механизмы VW и SK, могут служить эпитаксиальные системы вида „пленка  $A_3B_5$  — кремниевая подложка“ [3] и Ge–Si [4] соответственно. В свою очередь, послойный режим роста наблюдается, в частности, для таких металлопленочных систем, как Pb–Ag(111) [5], Na–W(100) [6] и Pd–W(110) [7].

Несмотря на удобство приведенной выше классификации, она далеко не всегда позволяет адекватно описать механизм роста тонких пленок. Одним из таких случаев является класс пленочных структур редкоземельный металл (РЗМ) — кремний [8,9]. В настоящее время актуальность исследования этих систем обусловлена, прежде всего, тем, что в них возможно образование соединений, в частности, дисилицидов РЗМ, обладающих интересными физико-химическими свойствами [10–19]. Ранее было показано [8], что на границах раздела РЗМ–Si даже при комнатной температуре может происходить

перемешивание, или, строго говоря, диффузия атомов подложки в растущую пленку. В результате перемешивания формируется переходный слой, образованный атомами металла и полупроводника, а граница раздела между кремниевым кристаллом и металлической пленкой трансформируется из химически резкой в диффузную. В экспериментальных исследованиях [20–28] формирование переходного слоя в структурах РЗМ–кремний сопровождалось появлением характерной особенности в виде „плеча“ на зависимостях интенсивности оже-сигнала подложки  $I$  от количества напыляемого материала (более подробно об этой особенности в разделах 3 и 4). Интерпретация подобных зависимостей до сих пор проводилась только на качественном уровне, так как в литературе отсутствовала модель для их количественного анализа. По этой причине до настоящего времени опубликовано крайне мало надежных данных о структуре и механизме формирования границ раздела РЗМ–Si при комнатной температуре. Кроме того, неясны толщина и стехиометрический состав переходного слоя, а также как эти свойства зависят от степени заполнения  $4f$ -оболочки атомов РЗМ. Очевидно, что такая информация важна для понимания механизмов силицидообразования в структурах РЗМ–кремний.

В настоящей работе сделана попытка устранить указанные выше пробелы. В ней предложена модель, позволяющая количественно описывать результаты ЭОС для пленочных структур РЗМ–кремний с диффузными границами раздела при комнатной температуре. Апробация этой модели проведена для трех систем: Yb–Si(111) [23], Sm–Si(111) [26] и Gd–Si(111) [21]. Рассмотренная модель может быть применена также

и для других пленочных структур, в которых атомы подложки диффундируют в пленку в процессе ее роста.

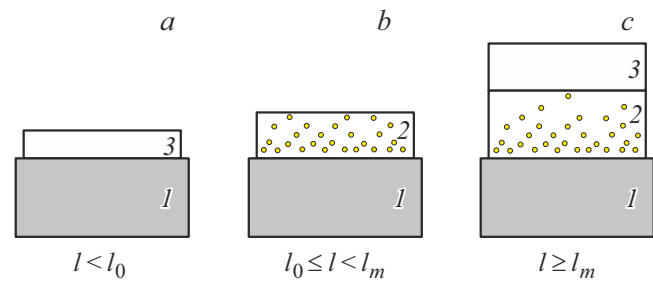
## 2. Модель

В основу модели были положены результаты исследований [8,29]. По данным работы [29], в структурах Yb–Si(111) при комнатной температуре рост осаждаемой пленки металла происходит послойно, а интенсивность перемешивания зависит от условий эксперимента. Согласно [8], для начала такого перемешивания пленка РЗМ должна достичь критической толщины  $l_0$ . Исходя из этих результатов, будем предполагать, что формирование границ раздела РЗМ–Si проходит три стадии. На первой из них при толщинах  $l < l_0$  (рис. 1, *a*) пленка растет послойно, и атомы подложки в нее не диффундируют. При данных значениях  $l$  граница раздела является химически резкой, а переходный слой отсутствует. При увеличении толщины пленки и достижении значения  $l = l_0$  атомы подложки начинают диффундировать в нее, что приводит к качественному изменению свойств границы раздела: на ней появляется переходный слой, образуемый атомами наносимого металла и кремния (вторая стадия). Из-за ограниченной подвижности атомов Si в пленке РЗМ при комнатной температуре [8] толщина переходного слоя конечна, и при  $l = l_m$  на его поверхности начинается рост чистого металла (третья стадия). Две последние стадии формирования пленочных структур, т.е. случаи  $l_0 \leq l < l_m$  и  $l \geq l_m$ , схематически проиллюстрированы на рис. 1, *b* и 1, *c* соответственно.

Определим выражение для зависимости величины  $I$  Оже-сигнала атомов подложки от толщины  $l$  растущей пленки для структур, показанных на рис. 1. Для удобства вначале не будем учитывать влияние атомов кремния, продиффундировавших в пленку (примесных атомов), на общую ее толщину и длину свободного пробега  $\lambda$  электронов в ней. Очевидно, что данный подход справедлив, если концентрация таких атомов значительно меньше концентрации атомов металла в одном монослое (ML) пленки. В этом случае зависимость  $I(l)$  принимает следующий вид:

$$I(l) = \begin{cases} I_0 \exp\left(-\frac{l}{\lambda \cdot \cos \vartheta}\right), & l < l_0, \\ I_0 \exp\left(-\frac{l}{\lambda \cdot \cos \vartheta}\right) + I'(l), & l \geq l_0, \end{cases} \quad (1)$$

где  $I_0$  — величина оже-сигнала подложки до нанесения на ее поверхность пленки металла,  $I'$  — величина оже-сигнала от примесных атомов в пленке и  $\vartheta$  — угол сбора оже-электронов, отсчитываемый от нормали к поверхности. Для нахождения выражения для функции  $I'(l)$  необходимо рассмотреть распределение атомов кремниевой примеси в пленке металла. С этой целью будем использовать второе уравнение Фика для одномерного



**Рис. 1.** Три стадии формирования границ раздела РЗМ–кремний. Цифрами обозначены: 1 — кремниевая подложка, 2 — переходный слой, 3 — металлическая пленка.

случая в стационарных условиях

$$\frac{d^2 N(z)}{dz^2} = 0,$$

где  $N$  — концентрация атомов Si в пленке и  $z$  — координата вдоль нормали к поверхности. Для решения данного уравнения перейдем от непрерывной величины  $N(z)$  к дискретной  $N(i)$  ( $i$  — порядковый номер слоя пленки металла, отсчитываемый от границы раздела с подложкой) и поставим следующие граничные условия:  $N(i) \equiv N_0$  при  $i = 1$  и  $N(i) \equiv 0$  при  $i = l_m$ . Тогда получим выражение

$$N(i) = -\frac{N_0}{l_m - 1} i + \frac{N_0 l_m}{l_m - 1} \equiv N_0 f(i), \quad (2)$$

где  $f(i)$  — функция распределения кремниевой примеси в пленке. В силу физических ограничений она определяется выражением

$$f(i) = \begin{cases} -\frac{1}{l_m - 1} i + \frac{l_m}{l_m - 1}, & i < l_m, \\ 0, & i \geq l_m. \end{cases} \quad (3)$$

Выразим величину  $N_0$  через концентрацию  $N_{ML}$  атомов в одном ML кремниевой подложки (для Si(111) концентрация  $N_{ML} = 7.84 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ ) следующим образом:

$$N_0 = \gamma N_{ML}, \quad (4)$$

где  $\gamma$  — постоянный коэффициент, определяемый реакционной способностью границы раздела (параметр перемешивания). Тогда с учетом (3) и (4) интенсивность оже-сигнала от примесных атомов в  $i$ -ом слое пленки металла может быть представлена в виде

$$I'_i = \gamma f(i) I_{ML} \exp\left(-\frac{l-i}{\lambda \cdot \cos \vartheta}\right), \quad (5)$$

где  $I_{ML}$  — величина оже-сигнала от 1 ML атомов кремния (верхнего атомного слоя чистой подложки). Для нахождения значения  $I_{ML}$  величину  $I_0$  (ее можно

непосредственно измерить в эксперименте) разложим в ряд Тейлора:

$$I_0 = I_{ML} + I_{ML} \exp\left(-\frac{d_S}{\lambda_S \cos \vartheta}\right) + I_{ML} \exp\left(-\frac{2d_S}{\lambda_S \cos \vartheta}\right) + \dots = \sum_{j=1}^{\infty} I_{ML} \exp\left(-\frac{(j-1) \cdot d_S}{\lambda_S \cos \vartheta}\right), \quad (6)$$

где  $d_S$  — толщина одного монослоя атомов подложки и  $\lambda_S$  — длина свободного пробега оже-электронов в ней. Из выражения (6) получим

$$I_{ML} = I_0 \left(1 - \exp\left(-\frac{d_S}{\lambda_S \cdot \cos \vartheta}\right)\right). \quad (7)$$

Теперь определим величину  $I'(l)$  для пленки толщиной  $l$ . Она равна

$$I'(l) = \sum_{i=1}^l I'_i = \sum_{i=1}^l \gamma f(i) I_{ML} \exp\left(-\frac{l-i}{\lambda \cdot \cos \vartheta}\right). \quad (8)$$

Подставляя (8) в (1), найдем выражение для интенсивности Оже-сигнала подложки  $I$  как функции толщины пленки  $l$ :

$$I(l) = \begin{cases} I_0 \exp\left(-\frac{l}{\lambda \cdot \cos \vartheta}\right), & l < l_0, \\ I_0 \exp\left(-\frac{l}{\lambda \cdot \cos \vartheta}\right) + \sum_{i=1}^l \gamma f(i) I_{ML} \exp\left(-\frac{l-i}{\lambda \cdot \cos \vartheta}\right), & l \geq l_0. \end{cases} \quad (9)$$

Как уже отмечалось, выражение (9) применимо, когда выполняется условие  $\gamma \ll 1$ . Далее рассмотрим более универсальный случай, когда параметр перемешивания имеет произвольное значение. Очевидно, что растворение атомов кремния в пленке металла (при  $l \geq l_0$ ) будет сопровождаться увеличением ее фактической толщины, что, в свою очередь, должно приводить к изменению условий экранировки подложки растущей пленкой. При этом фактическую толщину  $l'$  пленки можно записать в виде

$$l' = l + \sum_{i=1}^l \gamma f(i) d_S = \sum_{i=1}^l d(i), \quad (10)$$

где  $d(i) = d + \gamma f(i) d_S$  — эффективная толщина  $i$ -го слоя такой пленки.

Помимо увеличения фактической толщины пленки, растворение атомов подложки в ней должно приводить к изменению длины свободного пробега электронов, так как последние будут испытывать неупругие взаимодействия не только с атомами металла, но и с примесными атомами Si. Будем полагать, что длина свободного пробега  $\lambda'$  в такой пленке зависит от функции распределения  $f(i)$ . Тогда ее можно представить как

$$\lambda'(i) = \frac{1}{1 + \gamma f(i)} \lambda + \frac{\gamma f(i)}{1 + \gamma f(i)} \lambda_S. \quad (11)$$

Таким образом, с учетом (10) и (11) выражение (9) может быть переписано в общем виде

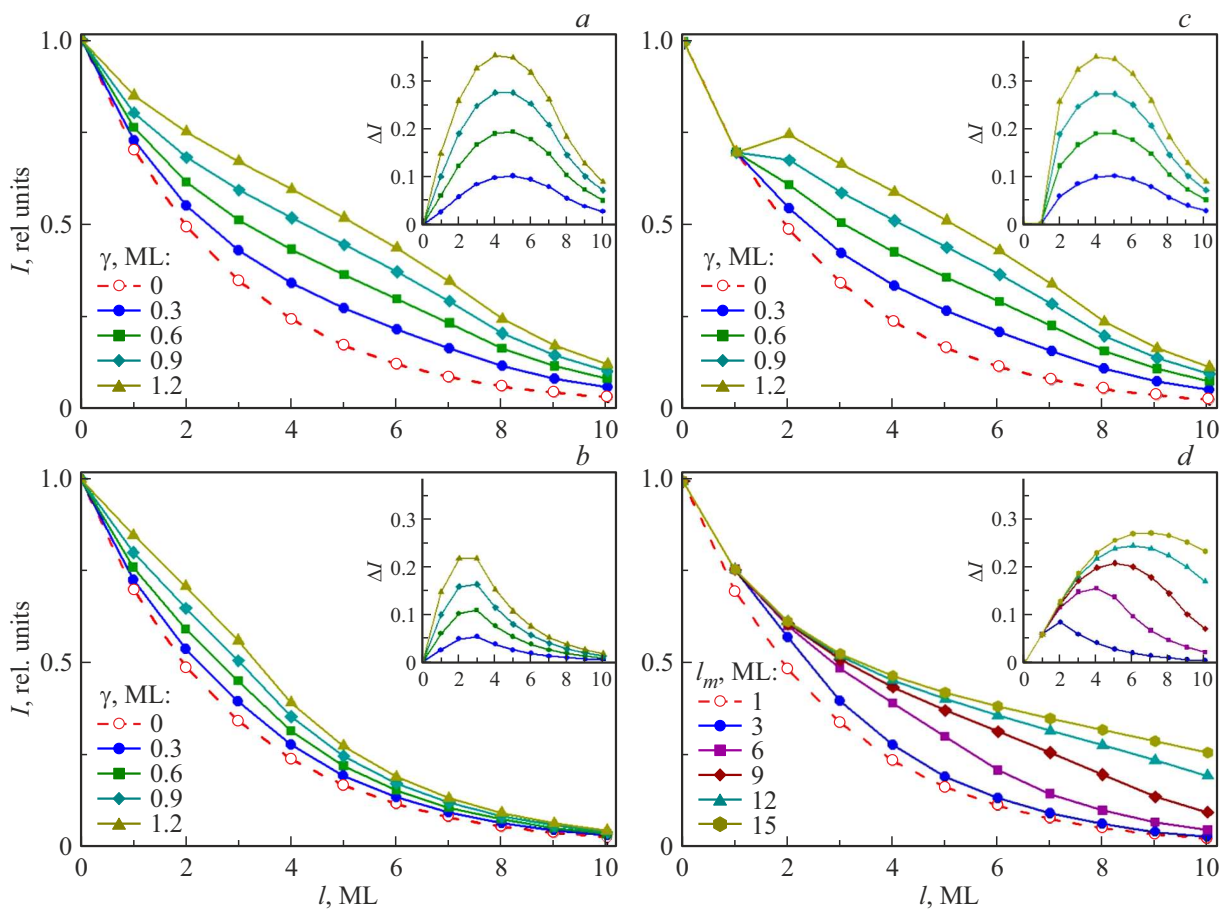
$$I(l) = \begin{cases} I_0 \exp\left(-\frac{l}{\lambda \cdot \cos \vartheta}\right), & l < l_0, \\ I_0 \prod_{j=1}^l \exp\left(-\frac{d(j)}{\lambda'(j) \cdot \cos \vartheta}\right) + \sum_{i=1}^l \gamma f(i) I_{ML} \prod_{j=i+1}^l \exp\left(-\frac{d(j)}{\lambda'(j) \cos \vartheta}\right), & l \geq l_0. \end{cases} \quad (12)$$

### 3. Влияние свойств переходного слоя на вид зависимостей $I(l)$

Выражение (12) дает возможность проанализировать, как параметры переходного слоя  $l_0$ ,  $l_m$  и  $\gamma$  влияют на форму зависимостей  $I(l)$  для типичных структур РЗМ–Si(111). Результаты анализа представлены на рис. 2. На этом рисунке область толщин пленок ограничена диапазоном 0–10 ML, так как в этом интервале происходят наиболее значимые изменения свойств границ раздела в процессе формирования пленочных структур. Пунктирными линиями показаны зависимости  $I(l)$ , полученные для случая  $\gamma = 0$  (перемешивание отсутствует). Этот случай соответствует режиму послойного роста пленки по механизму FM. Семейство зависимостей, изображенных сплошными линиями на рис. 2, *a*, получено при фиксированных значениях  $l_0 = 1$  ML и  $l_m = 8$  ML, т.е. при неизменной толщине переходного слоя, и различных значениях коэффициента перемешивания ( $\gamma = 0.3, 0.6, 0.9$  и  $1.2$ ). Как видно, диффузия атомов подложки в пленку металла сдерживает уменьшение величины  $I$  с ростом покрытия и приводит к появлению на зависимостях  $I(l)$  особенности в виде „плеча“, ранее уже упоминавшейся в разделе 1. Интенсивность этой особенности монотонно увеличивается с ростом количества примесных атомов в пленке. Для количественной оценки на вставке представлены разностные зависимости  $\Delta I(l)$ , полученные вычитанием  $I(l)$  при  $\gamma = 0$  из аналогичных кривых при  $\gamma > 0$ . Видно, что величина  $\Delta I$  быстро возрастает, начиная с самых малых покрытий, достигает максимума при  $l = 4$ – $5$  ML, а затем довольно быстро уменьшается, но не становится равной нулю даже при 10 ML.

При уменьшении толщины переходного слоя вдвое, т.е. при  $l_0 = 1$  ML и  $l_m = 4$  ML результаты носят качественно подобный характер (рис. 2, *b*). Основное отличие состоит в том, что „плечо“ на зависимостях  $I(l)$  становится менее выражено, а максимум зависимости  $\Delta I(l)$  смещается в область меньших покрытий ( $\sim 3$  ML).

При увеличении параметра  $l_0$  появление „плеча“ на зависимостях  $I(l)$  носит более резкий (пороговый) характер (рис. 2, *c*). На этом рисунке представлены результаты, полученные при  $l_0 = 2$  ML,  $l_m = 8$  ML и варьируемом значении  $\gamma$ . Как видно, при интенсивной диффузии атомов подложки в пленку (при  $\gamma = 1.2$ ) на зависимостях  $I(l)$  может наблюдаться даже небольшой максимум при  $l = 2$ .



**Рис. 2.** Расчетные зависимости  $I(l)$  для типичных структур РЗМ–Si(111). Интенсивность Оже-сигнала  $I$  нормирована на величину  $I_0$ . Значения параметров переходного слоя: (а)  $l_0 = 1$  ML,  $l_m = 8$  ML,  $\gamma = 0, 0.3, 0.6, 0.9$  и  $1.2$  ML; (б)  $l_0 = 1$  ML,  $l_m = 4$  ML,  $\gamma = 0, 0.3, 0.6, 0.9$  и  $1.2$  ML; (с)  $l_0 = 2$  ML,  $l_m = 8$  ML,  $\gamma = 0, 0.3, 0.6, 0.9$  и  $1.2$  ML; (д)  $l_0 = 1$  ML,  $\gamma = 0.6$  ML,  $l_m = 1, 3, 6, 9, 12$  и  $15$  ML. На вставках представлены разностные зависимости  $\Delta I(l)$ , полученные как разность Оже-сигналов для структур, в которых перемешивание происходит, и структур, в которых оно отсутствует. Толщина монослоя атомов пленки наносимого вещества равна  $3.8 \text{ \AA}$ .

Наконец, при изменении параметра  $l_m$ , что соответствует увеличению или уменьшению толщины переходного слоя, центр тяжести „плеча“ смещается в область соответственно больших или меньших покрытий. На рис. 2, *d* представлены данные, полученные при  $l_0 = 1$  ML,  $\gamma = 0.6$  и варьируемом значении  $l_m = 3, 6, 9, 12$  и  $15$  ML. Как показано на вставке, максимум зависимости  $\Delta I(l)$  с ростом  $l_m$  монотонно сдвигается вправо.

Таким образом, модель, предлагаемая в настоящей статье, позволяет установить взаимосвязь формы зависимости  $I(l)$ , с одной стороны, и структуры и состава переходного слоя диффузных границ раздела, с другой стороны.

#### 4. Количественный анализ пленочных структур РЗМ (Yb, Sm, Gd)–Si(111)

В этом разделе предложенная модель используется для интерпретации экспериментальных резуль-

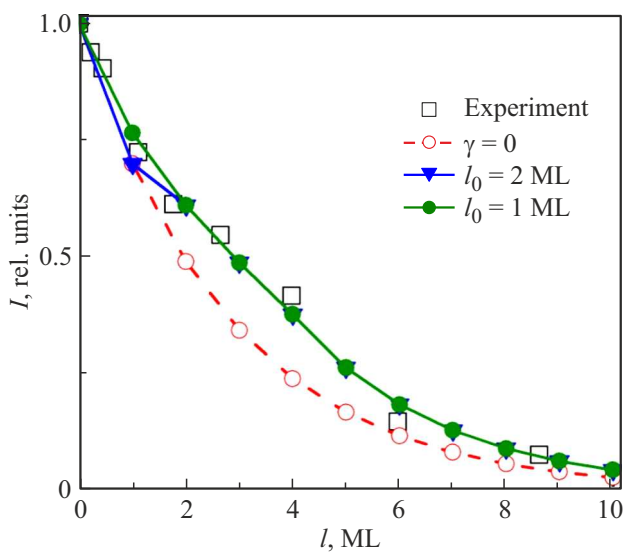
татов, полученных ранее для пленочных структур Yb–Si(111) [23], Sm–Si(111) [26] и Gd–Si(111) [21]. Выбор данных структур обусловлен тем, что на зарегистрированных для них зависимостях  $I(l)$  наблюдаются более или менее четко выраженные особенности в виде „плеча“, подобные рассмотренным в разделе 3. В настоящей работе моделирование таких зависимостей проводилось на основе выражения (12). В расчетах толщина  $d$  одного ML иттербия, самария и гадолиния была принята равной диаметру их атомов ( $3.86, 3.62$  и  $3.58 \text{ \AA}$  соответственно [30]). Длина свободного пробега  $\lambda$  электронов в пленках этих РЗМ (в экспериментах регистрировался оже-пик Si  $L_{VV}$  с энергией  $92 \text{ eV}$ ) составляет  $3.77$  ML [31], что соответствует  $14.55, 13.65$  и  $13.50 \text{ \AA}$ . Толщина  $d_S$  одного ML атомов Si равнялась  $1.57 \text{ \AA}$ . Наконец, в качестве длины свободного пробега  $\lambda_S$  электронов в кремнии было взято значение  $5.07 \text{ \AA}$  [32]. На рис. 3–5 представлены результаты моделирования зависимостей  $I(l)$ . На них экспериментальные данные показаны квадратами. Расчетные зависимости изображены сплошными линиями и закрашенными кружками.

Параметры переходного слоя для пленочных структур РЗМ–Si(111). (Значения выражены в ML. Для структуры Sm–Si(111) приведено усредненное значение  $N_{total}$  для  $l_m = 8$  и 9 ML)

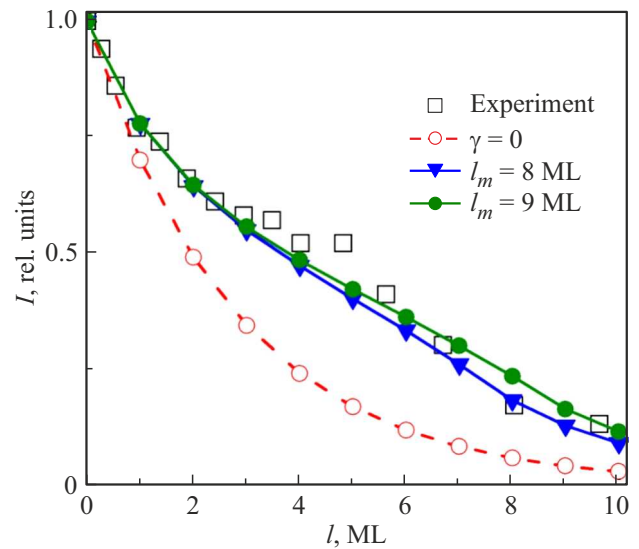
Структура	$l_0$	$l_m$	$\gamma$	$N_{total}$
Yb–Si(111)	1–2	5	0.65	1.6
Sm–Si(111)	1	8–9	0.75	3.2
Gd–Si(111)	1	11	1.0	5.5

Оптимизация этих зависимостей производилась путем варьирования параметров  $l_0$ ,  $l_m$  и  $\gamma$ . Первым двум из них присваивались целочисленные значения, а коэффициенту перемешивания — произвольные. Оптимизация проводилась до тех пор, пока не достигалось наилучшее согласие между расчетом и экспериментом. Параметры, при которых это согласие было достигнуто, представлены в таблице. Также в ней для каждой из пленочных структур приведено значение  $N_{total} = \sum_{i=1}^{l_m} \gamma f(i)$ , равное полному количеству атомов кремния в переходном слое. Наконец, для сравнения на рис. 3–5 пунктирной линией также изображены зависимости, полученные для случая, когда переходный слой на границе раздела отсутствует ( $\gamma = 0$ , рост по механизму FM).

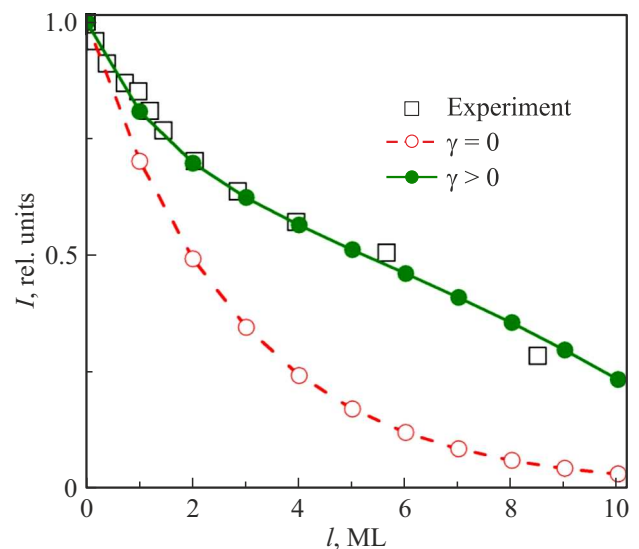
Анализ результатов на рис. 3–5 сразу позволяет сделать вывод, что во всех трех системах РЗМ–кремний с разной степенью интенсивности происходит перемешивание и формируется переходный слой на границе раздела. Как видно из рис. 3 и таблицы, для системы Yb–Si(111) критическая толщина пленки металла, при которой в нее начинается диффузия атомов подложки, лежит в интервале  $1 < l_0 < 2$  ML. Заканчивается же перемешивание при  $l_m = 5$  ML. Принимая во внимание величину  $\gamma$  (0.65) и соответствующее ей количественное



**Рис. 3.** Сравнение экспериментальных и расчетных зависимостей  $I(l)$  для пленочной системы Yb–Si(111). Подробности в тексте. Экспериментальные данные взяты из работы [13].



**Рис. 4.** То же, что и на рис. 3, но для системы Sm–Si(111). Экспериментальные данные взяты из работы [16].

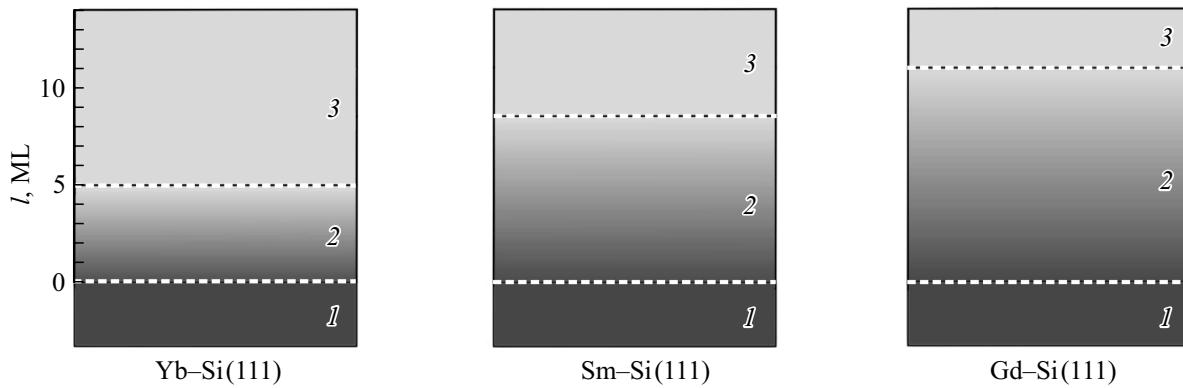


**Рис. 5.** То же, что и на рис. 3, но для системы Gd–Si(111). Экспериментальные данные взяты из работы [11].

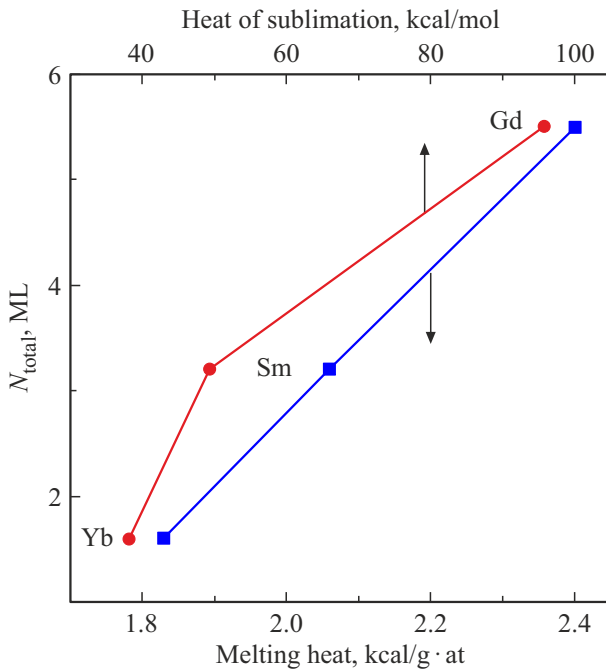
соотношение атомов Si и Yb ( $\sim 3 : 5$ ), можно предположить, что на границе переходного слоя с кремниевой подложкой формируется силицид  $\text{Yb}_5\text{Si}_3$ , обогащенный иттербием. Такое соединение имеет структуру типа  $\text{Mn}_5\text{Si}_3$  и является устойчивым при комнатной температуре [33].

В системах Sm–Si(111) (рис. 4) и Gd–Si(111) (рис. 5) критическое покрытие в рамках модели составляет  $l_0 = 1$  ML, а перемешивание начинается, скорее всего, при меньших количествах атомов РЗМ на поверхности. Заканчивается же оно при  $l_m = 8$ –9 ML и 11 ML соответственно. Таким образом, протяженность переходного слоя для трех исследованных границ раздела возрастает в ряду Yb  $\rightarrow$  Sm  $\rightarrow$  Gd, что полностью согласуется с





**Рис. 6.** Модели границ раздела РЗМ (Yb, Sm, Gd)–Si(111). Цифрами обозначены: 1 — кремниевая подложка, 2 — переходной слой, 3 — пленка металла.



**Рис. 7.** Зависимости величины  $N_{total}$  для структур РЗМ (Yb, Sm, Gd)–Si(111) (см. таблицу) от теплоты сублимации (верхняя шкала абсцисс) и теплоты плавления (нижняя шкала абсцисс) иттербия, самария и гадолиния. Значения теплоты сублимации и плавления взяты из [23].

представлениями о химической активности указанных адсорбатов: наиболее активным из них является гадолиний, а наименее активным — иттербий.

Аналогичная корреляция прослеживается и при сравнении значений параметра  $\gamma$  для трех указанных границ раздела. Как видно из таблицы, в ряду иттербий → самарий → гадолиний его величина монотонно возрастает и составляет 0.65, 0.75 и 1.0 соответственно. Из этого можно сделать вывод, что в системах Sm–Si(111) и Gd–Si(111) на границе с кремниевой подложкой возможно образование устойчивых соединений  $\text{Sm}_5\text{Si}_4$  и  $\text{GdSi}$  [9]. На рис. 6 для визуального

сравнения трех границ раздела представлены графические диаграммы, иллюстрирующие их структуру и стехиометрический состав.

Наконец, заслуживает быть отмеченной корреляция величины  $N_{total}$  (таблица) и термодинамических свойств осаждаемых РЗМ. На рис. 7 на вертикальной оси отложены значения  $N_{total}$ , полученные для структур Yb–Si(111), Sm–Si(111) и Gd–Si(111) в настоящей работе, а на двух горизонтальных осях — значения теплоты сублимации (верхняя шкала) и теплоты плавления (нижняя шкала) для иттербия, самария и гадолиния, приведенные в [34]. Из графиков на рис. 7 можно сделать ряд важных выводов. Во-первых, количество атомов Si в переходном слое монотонно возрастает с увеличением теплоты сублимации и плавления исследованных РЗМ. Во-вторых, обращает на себя внимание линейный характер зависимости величины  $N_{total}$  от теплоты плавления. Механизм перемешивания в структурах РЗМ–кремний в настоящее время еще детально не исследован. Тем не менее, на основе полученных результатов, можно предположить, что при  $l = l_0$  в растущей пленке происходит фазовый переход, например, ее металлизация. Этот переход сопровождается выделением энергии, пропорциональной теплоте плавления РЗМ, что приводит, в конечном счете, к разрыву межатомных связей в кремниевой подложке и аморфизации ее поверхностных атомных слоев. Последнее открывает путь для диффузии атомов Si в металлическую пленку и образованию переходного слоя.

## 5. Заключение

Рассмотрена модель, позволяющая количественно описывать концентрационные зависимости оже-сигналов для пленочных систем с диффузионными границами раздела. Исследована форма зависимостей величины оже-сигнала подложки от толщины напыляемой пленки как функция критического покрытия  $l_0$ , толщины переходного слоя  $l_m$  и параметра перемешивания  $\gamma$ . Для проверки модели проведено сравнение расчетных

и экспериментальных данных для пленочных систем Yb–Si(111), Sm–Si(111) и Gd–Si(111). На основе этого сравнения получены количественные данные, характеризующие структуру и состав указанных систем. Показано, что параметры границ раздела коррелируют с термодинамическими свойствами исследованных РЗМ, в частности, величины  $l_m$  и  $\gamma$  возрастают в ряду Yb → Sm → Gd. Полученные данные могут быть использованы для создания обобщенной модели пленочных структур РЗМ-кремний при комнатной температуре.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] Л. Фельдман, Д. Майер. Основы анализа поверхности и тонких пленок. Мир, М. (1989). 342 с.
- [2] Г.Г. Владимиров. Физика поверхности твердых тел. Лань, СПб. (2016). 352 с.
- [3] I. Lucci, S. Charbonnier, L. Pedesseau, M. Vallet, L. Cerutti, J.-B. Rodriguez, E. Tournié, R. Bernard, A. Létoublon, N. Bertru, A. Le Corre, S. Rennesson, F. Semond, G. Patriarche, L. Largeau, P. Turban, A. Ponchet, C. Cornet. *Phys. Rev. Mater.* **2**, 060401-1-6 (2018).
- [4] D.J. Eaglesham, M. Cerullo. *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1943 (1990).
- [5] R.C. Newman. *Phil. Mag.* **2**, 750 (1957).
- [6] A. Mlynczak, R. Niedermayer. *Thin Solid Films* **28**, 37 (1975).
- [7] R. Kern, G. Le Lay, J.J. Metois. In: *Current Topics in Material Science* / Ed. E. Kaldis. North-Holland, Amsterdam (1979). V. 3. P. 178.
- [8] G. Rossi. *Surf. Sci. Rep.* **7**, 1 (1987).
- [9] F.P. Netzer. *J. Phys. Condens. Matter* **7**, 991 (1995).
- [10] A. Seiler, O. Bauder, S. Ibrahimkuty, R. Pradip, T. Prüßmann, T. Vitova, M. Fiederle, T. Baumbach, S. Stankov. *J. Cryst. Growth* **407**, 74 (2014).
- [11] S. Sanna, C. Dues, W.G. Schmidt, F. Timmer, J. Wollschläger, M. Franz, S. Appelfeller, M. Dähne. *Phys. Rev. B* **93**, 195407 (2016).
- [12] M. Franz, S. Appelfeller, C. Prohl, J. Große, H.-F. Jirschik, V. Füllert, C. Hassenstein, Z. Diemer, M. Dähne. *J. Vac. Sci. Technol. A* **34**, 061503 (2016).
- [13] S. Chandola, E. Speiser, N. Esser, S. Appelfeller, M. Franz, M. Dähne. *Appl. Surf. Sci.* **399**, 648 (2017).
- [14] S. Tanusilp, Y. Ohishi, H. Muta, S. Yamanaka, A. Nishide, J. Hayakawa, K. Kurosaki. *Phys. Status Solidi RRL* **12**, 2, 1700372 (2018).
- [15] I. Goldfarb, F. Cesura, M. Dascalu. *Adv. Mater.* **30**, 41, 1800004 (2018).
- [16] A.M. Tokmachev, D.V. Averyanov, I.A. Karateev, O.E. Parfenov, O.A. Kondratev, A.N. Taldenkov, V.G. Storchak. *EPJ Web of Conf.* **185**, 01010 (2018).
- [17] K. Holtgrewe, S. Appelfeller, M. Franz, M. Dähne, S. Sanna. *Phys. Rev. B* **99**, 214104 (2019).
- [18] D.V. Averyanov, I.S. Sokolov, M.S. Platunov, F. Wilhelm, A. Rogalev, P. Gargiani, M. Valvidares, N. Jaouen, O.E. Parfenov, A.N. Taldenkov, I.A. Karateev, A.M. Tokmachev, V.G. Storchak. *Nano Res.* **13**, 3396 (2020).
- [19] A.M. Tokmachev, D.V. Averyanov, A.N. Taldenkov, I.S. Sokolov, I.A. Karateev, O.E. Parfenov, V.G. Storchak. *ACS Nano* **15**, 12034 (2021).
- [20] S. Gokhale, N. Ahmed, S. Mahamuni, V.J. Rao, A.S. Nigavekar, S.K. Kulkarni. *Surf. Sci.* **210**, 85 (1989).
- [21] W.A. Henle, F.P. Netzer, R. Cimino, W. Braun. *Surf. Sci.* **221**, 131 (1989).
- [22] A. Siokou, S. Kennou, S. Ladas. *Surf. Sci.* **331–333**, 580 (1995).
- [23] Т.В. Крачино, М.В. Кузьмин, М.В. Логинов, М.А. Митцев. *ФТТ* **39**, 1672 (1997).
- [24] А.Ю. Григорьев, А.М. Шикин, Г.В. Прудникова, С.А. Горюшков, В.К. Адамчук. *ФТТ* **40**, 562 (1998).
- [25] А.Ю. Григорьев, А.М. Шикин, Г.В. Прудникова, С.А. Горюшков, В.К. Адамчук. *Поверхность* **8–9**, 146 (1998).
- [26] Т.В. Крачино, М.В. Кузьмин, М.В. Логинов, М.А. Митцев. *ФТТ* **40**, 1937 (1998).
- [27] W.A. Henle, M.G. Ramsey, F.P. Netzer, S. Witzel, W. Braun. *Surf. Sci.* **243**, 141 (1991).
- [28] J. Onsgaard, M. Christiansen, F. Orskov, P.J. Godowski. *Surf. Sci.* **247**, 208 (1991).
- [29] Д.В. Бутурович, М.В. Кузьмин, М.В. Логинов, М.А. Митцев. *ФТТ* **50**, 168 (2008).
- [30] Свойства элементов. Справочник. Металлургия, М. (1976). Ч. 1.
- [31] F. Gerken, J. Barth, R. Kammerer, L.I. Johansson, A. Flodström. *Surf. Sci.* **117**, 468 (1982).
- [32] S. Tanuma, S.J. Powell, D.R. Penn. *Surf. Interface Anal.* **17**, 911 (1991).
- [33] A. Grytsiv, D. Kaczorowski, A. Leithe-Jasper, V.H. Tran, A. Pikul, P. Rogl, M. Potel, H. Noël, M. Bohn, T. Velikanova. *J. Solid State Chem.* **163**, 178 (2002).
- [34] Е.М. Савицкий, В.Ф. Терехова, *Металловедение редкоземельных металлов*. Наука, М. (1975). 271 с.

Редактор Е.Ю. Флегонтова