

Численная модель для исследования 3D-островковых пленок методом электронной Оже-спектроскопии. Система Sm—Si(111)

© В.Е. Ремеле, М.В. Кузьмин[†]

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

[†] E-mail: m.kuzmin@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 29 октября 2024 г.

В окончательной редакции 28 декабря 2024 г.

Принята к публикации 5 января 2025 г.

Предложена модель для расчета интенсивности сигналов в электронной Оже-спектроскопии для тонкопленочных структур, формируемых по механизму Фольмера–Вебера, Странского–Крастанова или близкому к ним. Модель может применяться для обработки экспериментальных результатов и дает возможность получать сведения о плотности и форме трехмерных островков. Проведена ее апробация для реакционно-способной системы Sm—Si(111). Установлено, что в этой системе изменение структуры смачивающего слоя, т. е. переход от реконструкции $\sqrt{3}$ к реконструкции (5×1) сопровождается увеличением аспектного отношения кристаллитов дисилицида самария более чем в семь раз. Предложено физическое объяснение указанной трансформации.

Ключевые слова: тонкие пленки, концентрационная зависимость оже-сигнала, механизм роста, трехмерные островки, смачивающий слой, дисилицид самария.

DOI: 10.61011/FTT.2025.01.59786.287

1. Введение

Как известно, одним из наиболее широко применяемых методов в исследованиях процессов роста тонких пленок (films) остается электронная Оже-спектроскопия (ЭОС) [1–4]. С ее помощью может быть получена информация не только об элементном составе, но и о механизмах роста пленочных структур. Для этого проводят анализ зависимостей интенсивности оже-пиков пленки и/или адсорбента от степени покрытия, или количества напыляемого на поверхность подложки (substrate) вещества, выраженного в монослоях (концентрационных зависимостей оже-сигналов). Однако в большинстве случаев, за исключением наиболее простых, в которых происходит послойный (двумерный) рост пленки по механизму Франка–ван-дер-Мерве (FM, Frank–van-der-Merwe), такой анализ, как правило, носит качественный характер из-за отсутствия численных моделей. Очевидно, что это сужает возможности метода ЭОС и не позволяет с его помощью определять многие количественные характеристики тонких пленок и границ раздела.

Недавно в работе [5] была предложена модель для исследования с помощью ЭОС реакционно-способных пленочных структур, в которых в области контакта подложка–пленка происходит перемешивание атомов, приводящее к образованию диффузных границ раздела. С помощью этой модели на основе анализа концентрационных зависимостей оже-сигналов для ряда систем редкоземельный металл (РЗМ)—кремний были получены данные о структуре и стехиометрическом составе границ раздела при комнатной температуре, а также

было показано, что указанные данные коррелируют с термодинамическими свойствами адсорбатов.

Настоящая статья представляет развитие подхода, использованного в [5]. В ней предложена численная модель для исследования с помощью ЭОС процессов роста пленок, образованных трехмерными (3D) островками. Объектами применения этой модели могут быть пленки, рост которых происходит по механизму Фольмера–Вебера (VW, Volmer–Weber) или Странского–Крастанова (SK, Stranski–Krastanov), включая их разновидности. Она позволяет установить взаимосвязь между плотностью островков, их формой и степенью покрытия, что, свою очередь, дает возможность проводить моделирование концентрационных зависимостей оже-сигналов для пленки и подложки. Модель может применяться и для решения обратной задачи — по имеющимся экспериментальным данным ЭОС определять морфологические характеристики островковой пленки. В конце статьи приведены результаты апробации этой модели для пленок дисилицида самария на подложке Si(111) (более подробно о выборе этой пленочной системы в разделе 5).

2. Модель

Будем считать, что пленка образована 3D-островками, имеющими форму полуэллипсоида, и что их плотность ρ не зависит от степени покрытия N . Выделим на поверхности квадратную ячейку со стороной $L = 1/\sqrt{\rho}$, в которой находится основание одного островка. Пусть центры основания островка и ячейки совпадают (рис. 1).

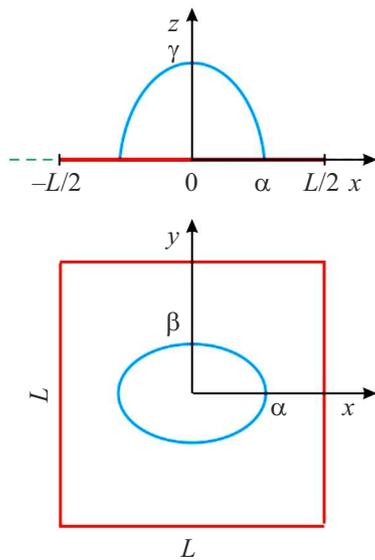


Рис. 1. Изображение 3D-островка и ячейки $L \times L$ в двух проекциях. Плоскость проекции проходит а) перпендикулярно поверхности и б) параллельно поверхности.

Выбрав декартову систему координат, как показано на рис. 1, и используя каноническое уравнение эллипсоида $\frac{x^2}{\alpha^2(N)} + \frac{y^2}{\beta^2(N)} + \frac{z^2}{\gamma^2(N)} = 1$, введем аналитическую функцию для описания совокупности всех точек поверхности островка:

$$H(x, y, N) = \gamma(N) \sqrt{1 - \frac{x^2}{\alpha^2(N)} - \frac{y^2}{\beta^2(N)}}. \quad (1)$$

Здесь $\alpha(N)$, $\beta(N)$ и $\gamma(N)$ — длины полуосей эллипсоида, зависящие от покрытия. Найдём связь между этими величинами. Для этого зададим коэффициенты $n \equiv \beta(N)/\alpha(N)$ и $m \equiv (N)/\alpha(N)$, определяющие геометрическую форму островка, и выразим объём последнего через величину покрытия:

$$V_{\text{isl}}(N) = \frac{2}{3} \pi \alpha(N) \beta(N) \gamma(N) = N d_f L^2, \quad (2)$$

где d_f — толщина одного монослоя пленки. Теперь из уравнения (2) можно получить выражение для длины полуоси α эллипсоида:

$$\alpha(N) = \sqrt[3]{\frac{3d_f N L^2}{2\pi m n}} = \sqrt[3]{\frac{3d_f N}{2\pi m n \rho}}. \quad (3)$$

В дальнейшем для простоты ограничимся рассмотрением случая $n = 1$. При выполнении данного условия островки принимают форму либо сплюснутого (при $n > m$) или вытянутого (при $n < m$) полусфероида, либо полусферы (при $n = m$). Условие $n = 1$ не принципиально. Аналогичный вывод можно провести и при $n \neq 1$.

Теперь, используя приведенные выше выражения, перейдем к рассмотрению концентрационных зависимостей оже-сигналов для пленочной системы. Анализ

проведем отдельно для случая, когда рост пленки происходит по механизму VW, и для случая, когда пленка формируется по механизму SK.

2.1. Случай VW

Интенсивность оже-сигнала подложки представим как сумму двух слагаемых:

$$I_s^{\text{VW}} = I_s^{\text{unscr}} + I_s^{\text{scr}}. \quad (4)$$

Первое из них равно интенсивности сигнала от той части подложки, которая свободна от адсорбата. Так как эта величина пропорциональна площади поверхности, то первое слагаемое в (4) может быть записано в виде:

$$I_s^{\text{unscr}} = \frac{S'}{L^2} I_0, \quad (5)$$

где S' — площадь части ячейки на рис. 1, которая не покрыта островком, и I_0 — величина оже-сигнала для подложки, на поверхности которой нет адсорбата.

Для вычисления площади S' введем вспомогательную функцию

$$\begin{aligned} \sigma_s(x, y, N) &= \\ &= \begin{cases} 0, & \text{если } |x + y| + |y - x| \leq L \cap x^2 + y^2 \leq \alpha^2(N) \\ 1, & \text{в противном случае.} \end{cases} \end{aligned} \quad (6)$$

Тогда она может быть определена с помощью двойного интеграла по площади ячейки:

$$S' = \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} \sigma_s(x, y, N) dx dy, \quad (7)$$

а выражение (5) может быть переписано с учетом (7):

$$I_s^{\text{unscr}} = \frac{I_0}{L^2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} \sigma_s(x, y, N) dx dy. \quad (8)$$

Второе слагаемое в (4) представляет величину оже-сигнала от той части подложки, которая покрыта пленкой (островками). Для его вычисления определим величину сигнала, создаваемого малым элементом площади $dx dy$ поверхности. Она равна $\frac{dx dy}{L^2} I_0 \varphi_s(x, y, N)$, где $\varphi_s(x, y, N)$ — функция, позволяющая учесть эффект экранирования подложки нанесенной на ее поверхность пленкой. Так как величина оже-сигнала подложки экспоненциально уменьшается с ростом толщины пленки, функцию экранирования можно выразить следующим образом:

$$\begin{aligned} \varphi_s(x, y, N) &= \\ &= \begin{cases} \exp\left(-\frac{H(x, y, N)}{\lambda_f}\right), \\ \text{если } |x + y| + |x - y| \leq L \cap x^2 + y^2 \leq \alpha(N)^2 \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \end{aligned} \quad (9)$$

В этом выражении λ_f — глубина выхода оже-электронов. Она определяется длиной свободного пробега в пленке и углом выхода с поверхности.

Тогда с учетом (9) второе слагаемое в (4) равно

$$I_s^{\text{scr}} = \frac{I_0}{L^2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_s(x, y, N) dx dy, \quad (10)$$

а окончательное выражение для величины оже-сигнала подложки с учетом нормировки $I_0 = 1$ будет иметь вид

$$I_s^{\text{vw}} = \frac{1}{L^2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} [\varphi_s(x, y, N) + \sigma_s(x, y, N)] dx dy. \quad (11)$$

Проведем подобный вывод для оже-сигнала пленки. С этой целью выделим малый элемент объема $dx dy dz$ островка в произвольной точке с пространственной координатой z . Ему соответствует величина сигнала, равная $\frac{dx dy dz}{L^2 d_f} I_{\text{ML}} \varphi_f(x, y, z, N)$. Здесь I_{ML} — интенсивность оже-сигнала от одного монослоя адсорбата, а $\varphi_f(x, y, z, N)$ — функция экранирования, подобная функции (9). Найдем для нее аналитическое выражение. По аналогии с формулой (9) ее можно записать в виде:

$$\varphi_f(x, y, z, N) = \begin{cases} \exp\left(\frac{z - H(x, y, N)}{\lambda_f}\right), \\ \text{если } |x+y| + |x-y| \leq L \cap x^2 + y^2 \leq \alpha'(z, N)^2 \\ 0, \text{ в противном случае.} \end{cases} \quad (12)$$

Чтобы найти $\alpha'(z, N)$, вновь обратимся к каноническому уравнению эллипсоида и преобразуем его следующим образом:

$$\frac{x^2}{\alpha^2(N)} + \frac{y^2}{\beta^2(N)} = 1 - \frac{z^2}{\gamma^2(N)}. \quad (13)$$

Введем обозначения

$$\alpha'(z, N) = \alpha(N) \frac{\sqrt{\gamma(N)^2 - z^2}}{\gamma(N)} \quad (14)$$

и

$$\beta'(z, N) = \beta(N) \frac{\sqrt{\gamma(N)^2 - z^2}}{\gamma(N)}. \quad (15)$$

Теперь с помощью (14) и (15) получим выражение

$$\frac{x^2}{\alpha'^2(z, N)} + \frac{y^2}{\beta'^2(z, N)} = 1. \quad (16)$$

Оно представляет собой уравнение эллипса, который является сечением полуэллипсоида на высоте z на рис. 1. Отсюда, в частности, понятен физический смысл функции $\alpha'(z, N)$: при выполнении условия $n = 1$ ее величина равна радиусу окружности, которая является сечением сфероида на высоте z .

Наконец, получим выражение для величины оже-сигнала подложки $I_f^{\text{vw}}(N)$. Для этого необходимо провести интегрирование по трехмерной ячейке с основанием $L \times L$:

$$I_f^{\text{vw}}(N) = \frac{I_{\text{ML}}}{L^2 d_f} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_0^{\gamma(N)} \varphi_f(x, y, z, N) dx dy dz. \quad (17)$$

Для окончательного ответа необходимо найти величину I_{ML} . Для этого определим, какова интенсивность сигнала для сплошной пленки толщиной $N d_f$. Она равна

$$I_N = I_{\text{ML}} \int_0^{N d_f} \frac{dz}{d_f} \exp\left(-\frac{(N d_f - z)}{\lambda_f}\right). \quad (18)$$

Положим $I_N = 1$ при $N \rightarrow +\infty$ (условие нормировки в ЭОС). Тогда получим предел, с помощью которого можно определить величину I_{ML} :

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} I_{\text{ML}} \int_0^{N d_f} \frac{dz}{d_f} \exp\left(-\frac{(N d_f - z)}{\lambda_f}\right) = I_{\text{ML}} \frac{\lambda_f}{d_f} = 1. \quad (19)$$

2.2. Случай SK

Проведем рассмотрение для случая механизма SK. Вначале получим выражение для интенсивности оже-сигнала подложки. Так как данный механизм роста является двухстадийным, искомая функция будет кусочно-непрерывной:

$$I_s^{\text{SK}} = \begin{cases} I_s^{\text{wet}}, & \text{если } N \leq N_{\text{wet}} \\ I_s^{\text{isl}}, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (20)$$

Здесь I_s^{wet} — величина оже-сигнала подложки на стадии формирования смачивающего слоя (wetting layer), т.е. до образования 3D-островков, и I_s^{isl} — аналогичная величина на стадии формирования островковой пленки. Первая из этих величин равна $I_s^{\text{wet}}(N) = \exp(-\frac{d_f}{\lambda_f} N)$. Что же касается второй величины, то ее можно представить в виде $I_s^{\text{isl}} = I_s^{\text{scr}} + I_s^{\text{unscr}}$, где I_s^{scr} — величина сигнала для той части поверхности, которая покрыта 3D-островками, и I_s^{unscr} — аналогичная величина для части поверхности, на которой островков нет. Воспользовавшись формулами (6) и (9), получим окончательное выражение для интенсивности оже-сигнала подложки:

$$I_s^{\text{isl}} = \frac{1}{L^2} \exp\left(-\frac{d_f}{\lambda_f} N_{\text{wet}}\right) \times \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} [\varphi_s(x, y, N - N_{\text{wet}}) + \sigma_f(x, y, N - N_{\text{wet}})] dx dy. \quad (21)$$

Теперь выведем выражение для сигнала адсорбата. Как и в случае подложки, его интенсивность будет иметь кусочно-непрерывную форму:

$$I_f^{SK} = \begin{cases} I_f^{wet}, & \text{если } N \leq N_{wet} \\ I_f^{isl}, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (22)$$

Здесь I_f^{wet} и I_f^{isl} — величины оже-сигнала на первой и второй стадиях формирования пленочной структуры соответственно. Для нахождения первой части (22) воспользуемся соотношениями (18) и (19) и распространим их на трехмерный случай:

$$I_f^{wet}(N) = \frac{1}{\lambda_f L^2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_0^{Nd_f} \exp\left(-\frac{Nd_f - z}{\lambda_f}\right) dz dx dy. \quad (23)$$

Теперь найдем вторую часть функции (22). Ее можно представить в виде $I_f^{isl} = I_f^{scr} + I_f^{unscr} + I_f^{isl}$, где I_f^{scr} — величина сигнала адсорбата, находящегося в той части смачивающего слоя, которая экранируется 3D-островками, I_f^{unscr} — то же для части смачивающего слоя, которой свободна от островков, I_f^{isl} — величина сигнала адсорбата, находящегося в 3D-островках. Теперь, используя формулы, полученные ранее, можно вывести окончательное выражение:

$$I_f^{isl} = \frac{I_f^{wet}(N_{wet})}{L^2} \times \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} [\varphi_f(x, y, N - N_{wet}) + \varphi_f(x, y, N - N_{wet})] dx dy + \frac{1}{\lambda_f L^2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_0^{\gamma_s(N - N_{wet})} \varphi_f(x, y, N - N_{wet}) dz dx dy. \quad (24)$$

Как видно из вышеизложенного, интенсивности оже-сигналов пленочной системы обусловлены двумя параметрами, характеризующими морфологическую структуру островковой 3D-пленки. Одним из них является величина L , определяемая плотностью ρ островков на поверхности. Другим параметром является коэффициент m , равный отношению высоты островка к радиусу его основания (для случая $n = 1$). Далее будем называть эту величину аспектным отношением (aspect ratio) островка. В следующем разделе рассмотрим, как эти параметры влияют на процесс роста пленок.

3. Влияние L и m на вид концентрационных зависимостей оже-сигналов

На рис. 2 показаны концентрационные зависимости величины оже-сигнала адсорбата при различных значениях

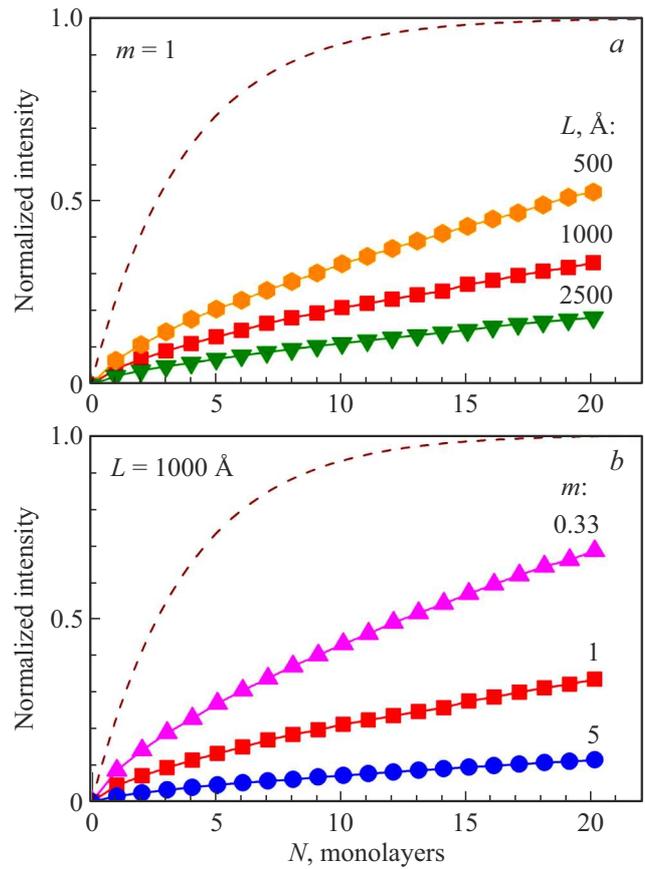


Рис. 2. Вид концентрационных зависимостей интенсивности оже-сигнала адсорбата при различных значениях параметров L и m для случая VW. Пунктирной линией показана аналогичная зависимость для механизма FM. Нормировка произведена на величину сигнала для массивной сплошной пленки.

параметров L и m . Расчет проводился для случая, когда рост пленки происходит по механизму VW, а ее материалом является металлический самарий ($\lambda_f = 13.65 \text{ \AA}$ и $d_f = 3.62 \text{ \AA}$ [5]). Для сравнения на этом рисунке также приведена аналогичная зависимость, рассчитанная для случая механизма FM (изображена пунктирной линией). Как следует из рис. 2, *a*, увеличение значения L островковой пленки, или, иными словами, уменьшение плотности островков (их форма при этом остается неизменной), приводит к тому, что величина оже-сигнала уменьшается, приведенная зависимость становится более полой, ее отклонение от аналогичной кривой для сплошной пленки усиливается, а выход зависимости в насыщение сдвигается в область больших покрытий. Это означает, что по мере увеличения L коалесценция для островковых пленок должна происходить на все более поздней стадии роста.

Аналогичные выводы можно сделать и для случая, когда величина L фиксирована, а изменяется форма островков. Как видно на рис. 2, *b*, вид концентрационной зависимости адсорбата весьма чувствителен к аспектному отношению m . По мере того, как его величина

возрастает, т. е. островки приобретают все более вытянутую вверх форму, значение покрытия N_{CL} , при котором наступает коалесценция, сдвигается в область больших величин.

Отметим, что подобные выводы вытекают и из анализа аналогичных зависимостей для подложки.

4. Зависимость N_{CL} от L и m

Для более наглядной иллюстрации того, как переход к стадии коалесценции зависит от параметров L и m , рассмотрим результаты, показанные на рис. 3. На нем приведены зависимости величины N_{CL} от аспектного отношения m у островков при различных значениях L . Для расчета этих зависимостей в качестве величины N_{CL} использовалось значение покрытия, при котором интенсивность оже-сигнала самария составляет 0.95.

Из рис. 3 можно сделать следующие выводы.

При увеличении значения L и уменьшении плотности островков крутизна зависимости $N_{CL} = f(m)$ заметно повышается. Иными словами, при сравнительно малых плотностях ρ количество наносимого на поверхность материала, необходимого для образования сплошной пленки, очень резко зависит от формы островков. Так, при $\rho = 1.6 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ($L = 2500 \text{ \AA}$) величина N_{CL} составляет 32 монослоя при $m = 0.1$ и 320 монослоев при $m = 1$.

При сравнительно низких значениях L и высоких плотностях островков наклон зависимости $N_{CL} = f(m)$ относительно невелик, и для слияния $3D$ -островков требуются меньшие количества осаждаемого на подложку материала. Например, при $\rho = 1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ($L = 100 \text{ \AA}$) значение N_{CL} составляет 16 монослоев при $m = 1$ и 62 монослоя при $m = 5$. Попутно отметим, что, согласно предсказаниям модели, при дальнейшем уменьшении параметра L тангенс угла наклона зависимости

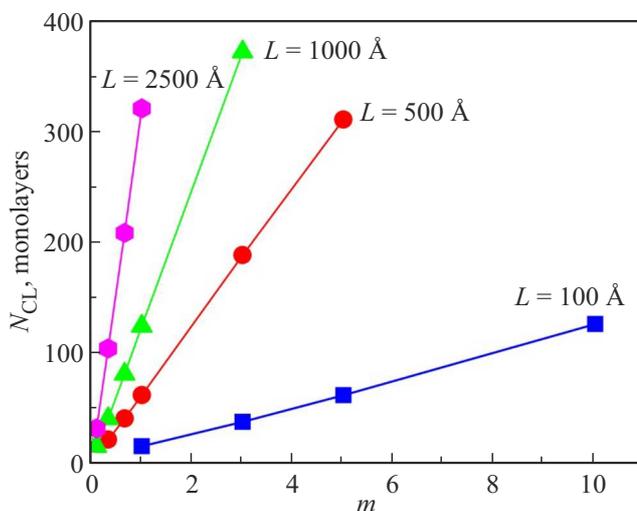


Рис. 3. Зависимости величины N_{CL} от аспектного отношения m островков при различных значениях L .

$N_{CL} = f(m)$ будет приближаться к нулю, а островковая пленка по своим свойствам будет становиться ближе к сплошной.

Таким образом, на основе изложенной модели можно предсказывать ход концентрационных зависимостей оже-сигналов пленочных структур, для которых известна плотность и форма $3D$ -островков.

5. Система Sm—Si(111)

На практике, однако, зачастую приходится решать обратную задачу, а именно — получать сведения о процессах роста и морфологии пленок из анализа известных экспериментальных данных ЭОС. В данном разделе рассмотрим такую задачу и с помощью описанной модели определим параметры островковых $3D$ -пленок, используя концентрационные зависимости оже-сигналов. Хорошим кандидатом для апробации модели может служить пленочная система Sm—Si(111). Это обусловлено тем, что, во-первых, механизм формирования этой системы при высоких температурах подобен механизму SK: после заполнения смачивающего $2D$ -слоя наблюдается эпитаксиальный рост $3D$ -кристаллитов дисилицида самария [6]. Во-вторых, для нее ранее были получены подробные данные ЭОС [7], а также целый комплекс других результатов [6,8,9]. Наконец, в предыдущих исследованиях, посвященных структурам Sm—Si(111), было установлено, что вид концентрационных зависимостей оже-сигналов для нее существенно меняется при переходе от одной структуры смачивающего слоя к другой [7]. Как показано далее, природу этого различия и помогает объяснить предложенная в настоящей работе модель.

На рис. 4 представлены данные ЭОС и результаты их количественного анализа для системы Sm—Si(111). Символами показаны экспериментальные кривые, полученные для сигнала самария в [7]. Для регистрации этих кривых был использован оже-пик $M_{5N_{4,5}N_{4,5}}$ с энергией 816 eV. Кривая 1 соответствует случаю, когда кристаллиты силицидной пленки выращивались на поверхностной реконструкции (смачивающем слое) Sm—Si(111) $\sqrt{3}$, формируемой при покрытии ~ 0.5 монослоя атомов самария. Кривая 2 соответствует случаю, когда кристаллиты создавались на реконструкции Sm—Si(111)(5×1) при покрытии металла ~ 0.3 – 0.4 монослоя. Также на рис. 4 приведены расчетные зависимости для обоих случаев. Они изображены сплошными линиями. При моделировании длина свободного пробега в дисилициде самария определялась как статистическая сумма аналогичных величин для металлического Sm (16.6 Å) и кремния (21.0 Å) [10] с весовыми коэффициентами 1/3 и 2/3 соответственно. Такой подход успешно применялся ранее в [5]. Также в расчетах учитывалась геометрия опыта в [7], а именно, угол выхода оже-электронов из образца (42.18°). Кроме того, для учета кристаллической структуры островков дисилицида самария перед последним слагаемым в выражении (24) вво-

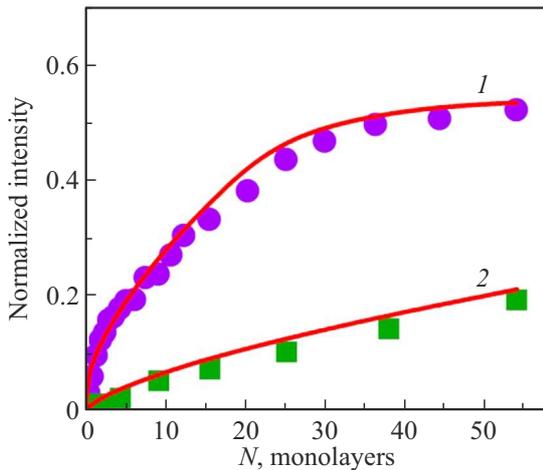


Рис. 4. Концентрационные зависимости величины оже-сигнала самария для системы Sm–Si(111). Структура смачивающего слоя: кривая 1 — $\sqrt{3}$, 2 — (5×1) . Представлены экспериментальные данные из работы [7] (символы) и результаты моделирования, полученные в настоящем исследовании (сплошные линии).

дился множитель $\theta_f = \frac{d_f}{d_f + 2d_s}$, в котором использовались значения $d_f = 3.62 \text{ \AA}$ и $d_s = 1.57 \text{ \AA}$ [5].

Из результатов, представленных на рис. 4, сразу можно сделать выводы о том, что а) зависимости 1 и 2 существенно различаются между собой и б) использованная модель позволяет довольно точно воспроизвести ход каждой из них. В работе [7] указанное различие интуитивно объяснено на основе изменения формы 3D-кристаллитов. Расчеты, сделанные в настоящей работе, полностью подтверждают такую интерпретацию. Расчетная кривая 1 получена при аспектном отношении кристаллитов $m_1 = 0.75$. Кривой 2 соответствует аспектное отношение кристаллитов, равное $m_2 = 5.55$. Это означает, что в случае смачивающего слоя со структурой $\sqrt{3}$ происходит преимущественно латеральный рост кристаллитов дисилицида, т.е. такие островки имеют относительно „плоскую“ форму. В случае же смачивающего слоя со структурой (5×1) латеральный рост кристаллитов заметно ограничен, и они приобретают форму вытянутых вверх островков, причем соотношение m_2/m_1 равно 7.4. Отметим, что данные выводы находятся в полном согласии с результатами дифракционных наблюдений в работе [7]. Плотность кристаллитов в обоих случаях равна $\rho = 2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Эта величина хорошо коррелирует с аналогичными величинами для островков силицидов РЗМ на кремниевых подложках в других исследованиях [11,12].

Из только что сказанного неизбежно вытекает вопрос: почему же 3D-кристаллиты дисилицида самария меняют свою форму при переходе от одного смачивающего слоя к другому? Одной из возможных причин могло бы быть различие в температурах, при которых выращивались силицидные пленки (900 К в случае смачивающего слоя

$\sqrt{3}$ и 1140 К в случае смачивающего слоя (5×1) [7]). Однако указанное различие не столь велико, чтобы объяснить изменение аспектного отношения островков более чем в семь раз. Поэтому далее в статье данная причина обсуждаться не будет.

Другая причина может быть связана с согласованием решеток дисилицида самария и смачивающего слоя (поверхностной реконструкции кремния, индуцированной атомами самария). Анализ показывает, что в случае реконструкции (5×1) , такое согласование, скорее всего, должно быть хуже, чем для реконструкции $\sqrt{3}$. В принципе, при переходе от первой структуры ко второй это должно способствовать повышению аспектного отношения m островков. Тем не менее, авторы не считают убедительной и эту причину. Действительно, согласование решеток на границе раздела смачивающий слой — дисилицид могло бы играть ключевую роль, если пленочная система не являлась реакционно-способной и структура поверхности кремния и смачивающего слоя не была подвержена перестройке. Очевидно, что для системы Sm–Si(111) такое условие не выполняется.

По мнению авторов, наиболее вероятную причину изменения формы 3D-силицидных кристаллитов при переходе $\sqrt{3} \leftrightarrow (5 \times 1)$ можно сформулировать следующим образом. При повышении покрытия латеральный рост островка, т.е. увеличение его параметра $\alpha(N)$, должен сопровождаться структурной перестройкой сопредельных участков смачивающего слоя. По сути, такая трансформация предполагает разложение поверхностной реконструкции, вероятность которого определяется энергией активации процесса и температурой. Можно ожидать, что для смачивающего слоя с меньшей термостабильностью будут формироваться 3D-кристаллиты с более низким значением параметра m , а для слоя с большей термостабильностью — кристаллиты с более высоким значением m . Первый случай соответствует преимущественно латеральному росту островковой пленки, для которой коалесценция наступает на более ранней стадии формирования. Вторым случаем соответствует росту пленки, для которой сильнее выражен островковый характер и коалесценция наступает на более поздней стадии формирования. Экспериментальные результаты [6] полностью подтверждают такую картину. Структура Sm–Si(111)(5×1) имеет более высокую температуру разложения и энергию удаления из нее атомов самария, чем структура $\sqrt{3}$. Это, в конечном счете, и обуславливает форму 3D-кристаллитов дисилицида самария в системе Sm–Si(111).

6. Заключение

Разработана модель для расчета интенсивности оже-сигналов островковой пленки и подложки как функции количества нанесенного на поверхность адсорбата для двух случаев роста пленочной системы: а) по механизму VW и б) по механизму SK. С помощью

этой модели получены и проанализированы типичные концентрационные зависимости оже-сигнала металлической пленки самария. В частности, показано, какое влияние на вид этих кривых оказывают значения параметров L и m . Также модель была апробирована для реакционно-способной системы Sm–Si(111). Анализ полученных для нее экспериментальных данных дал возможность определить параметры 3D-кристаллитов дисилицида самария, создаваемых на разных переходных (смачивающих) 2D-слоях. В частности, установлено, что на смачивающем слое со структурой $\sqrt{3}$ происходит преимущественно латеральный рост 3D-кристаллитов дисилицида и что их аспектное отношение составляет $m = 0.75$. В то же время на переходном слое со структурой (5×1) образуются компактные, вытянутые вверх, кристаллиты, для которых параметр m возрастает более чем в семь раз (5.55). Высказаны соображения, касающиеся физической природы такой трансформации островков. Изменение их формы обусловлено, в конечном счете, тем, что структура (5×1) имеет более высокую термостабильность, чем структура $\sqrt{3}$, и поэтому замещение первой из них кристаллитами дисилицида энергетически менее выгодно, чем второй. Это и способствует увеличению аспектного отношения островков при переходе к смачивающему слою (5×1) .

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] C.J. Powell. *Microscopy Today* **24**, 2, 16 (2016).
- [12] W.-C. Lin, W.-C. Lo, J.-X. Li, P.-C. Huang, M.-Y. Wang. *ACS Omega* **6**, 50, 34606 (2021).
- [3] R.A. Vidal, J. Ferron. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **48**, 43, 435302 (2015).
- [4] M. Xu, D. Fujita, J. Gao, N. Hanagata. *ACS Nano* **4**, 5, 2937 (2010).
- [5] В.Е. Ремеле, М.А. Митцев, М.В. Кузьмин. *ФТТ* **65**, 9, 1611 (2023).
- [6] Т.В. Крачино, М.В. Кузьмин, М.В. Логинов, М.А. Митцев. *ФТТ* **40**, 2, 371 (1998). [T.V. Krachino, M.V. Kuz'min, M.V. Loginov, M.A. Mittsev. *Phys. Solid State* **40**, 2, 341 (1998).]
- [7] Т.В. Крачино, М.В. Кузьмин, М.В. Логинов, М.А. Митцев. *ФТТ* **40**, 10, 1937 (1998). [T.V. Krachino, M.V. Kuz'min, M.V. Loginov, M.A. Mittsev. *Phys. Solid State* **40**, 10, 1758 (1998).]
- [8] F. Palmino, E. Duverger. *Surf. Sci.* **603**, 17, 2771 (2009).
- [9] E. Ehret, F. Palmino, L. Mansour, E. Duverger, J.-C. Labrune. *Surf. Sci.* **569**, 1–3, 23 (2004).
- [10] C.J. Powell, A. Jablonski. NIST Electron Inelastic-Mean-Free-Path Database, Version 1.2, SRD 71. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2010).
- [11] R. Hofmann, F.P. Netzer, A.J. Patchett, S.D. Barrett, F.M. Leible. *Surf. Sci.* **291**, 3, 402 (1993).
- [12] M. Kuzmin, R.E. Perälä, R.-L. Vaara, P. Laukkanen, I.J. Väyrynen. *J. Cryst. Growth* **262**, 1–4, 231 (2004).

Редактор Е.В. Толстякова