

УДК 539.216.2: 538.951

## РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ПЛОТНОСТЕЙ СОСТОЯНИЯ ПЛЕНКИ ДИСИЛИЦИДА КОБАЛЬТА

Н.С. Переславцева, С.И. Курганский

Воронежский государственный университет

Пленочным методом линеаризованных присоединенных плоских волн рассчитаны полные и локальные парциальные плотности электронных состояний и фотоэлектронные спектры для различных энергий возбуждающих фотонов пленки дисилицида кобальта. Структура фотоэлектронных спектров пленки при малых энергиях возбуждения (12 – 40 eV) обусловлена  $d$ -состояниями Co и  $s$ - и  $p$ -состояниями Si. При более высоких энергиях падающего фотона форма спектров определяется практически только лишь  $d$ -состояниями Co.

### ВВЕДЕНИЕ

Силициды переходных металлов нашли широкое применение в изделиях микроэлектроники благодаря высокой проводимости этих материалов и стабильности их характеристик к нагреву. Некоторые силициды могут исполнять роль омического контакта, в то время как другие выступают в качестве диффузионных барьеров. Дисилицид кобальта привлекает особое внимание к своим структурным и электрофизическим свойствам вследствие возможности высококачественного эпитаксиального выращивания этого материала на кремниевой подложке. Проведенный в данной работе теоретический расчет спектральных характеристик пленки  $\text{CoSi}_2$  и сравнение полученных результатов с известными экспериментальными данными [1 – 4] должны способствовать лучшему пониманию электронных свойств дисилицида кобальта.

Пленка (001) дисилицида кобальта, для которой мы провели расчет полных и локальных парциальных плотностей электронных состояний (ЛППЭС) и фотоэлектронных спектров, имеет кубическую структуру типа флюорита ( $\text{CaF}_2$ ) с постоянной решетки  $a_0 = 5.362 \text{ \AA}$  [5]. Приведенная на рис. 1 элементарная ячейка рассчитанной пленки состоит из двух элементарных ячеек объемного кристалла плюс два дополнительных поверхностных слоя кремния. Дальнейшие обозначения атомов пленок становятся ясными из подрисуночной подписи.

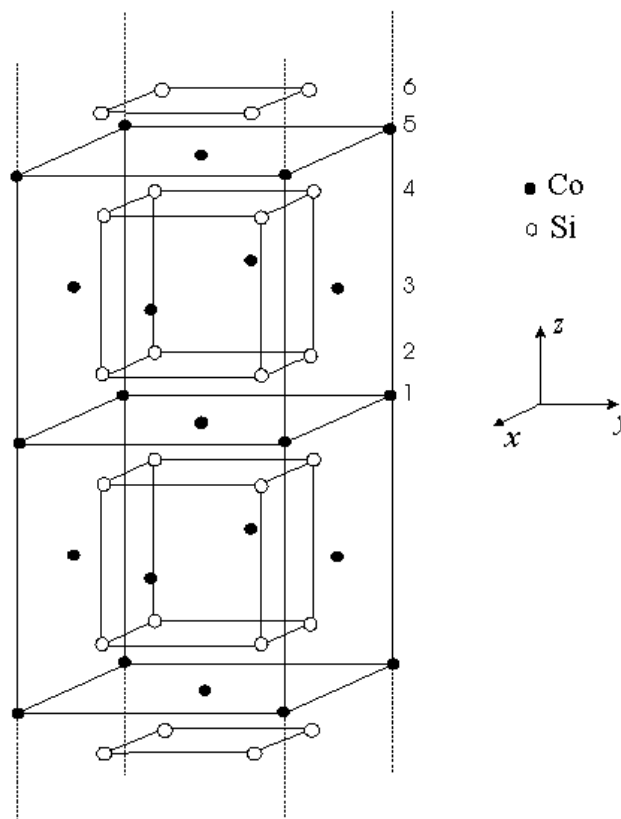


Рис. 1. Элементарная ячейка (001) плёнки дисилицида кобальта: 1, 3 и 5 – центральный, промежуточный и приповерхностный слой кобальта; 2, 4 и 6 – внутренний, промежуточный и поверхностный слой кремния.

## МЕТОД РАСЧЕТА

Для расчета электронной структуры пленок использовался пленочный метод линейризованных присоединенных плоских волн (ПЛППВ). Волновая функция  $\Psi_{i,k}(r)$  ищется в виде линейной комбинации известных базисных функций  $\Phi_{\mu n}(r)$ :

$$\Psi_{i,k}(r) = \sum_{\mu n} v_{\mu n}^i \Phi_{\mu n}(r). \quad (1)$$

В этом методе в качестве базисных функций процедуры Ритца используются пленочные линейризованные присоединенные плоские волны, при определении которых делается предположение о том, что эффективный пленочный потенциал имеет “muffin-tin-z” (MTZ) форму. В MTZ-приближении элементарная ячейка разбивается на три области, каждая из которых характеризуется своим видом потенциала и базисной функции, а именно:

1. В MT-области, которая представляет собой часть элементарной ячейки, заключенной внутри непересекающихся сфер, окружающих каждый атом пленки, потенциал сферически симметричен. В этом случае базисная функция записывается в виде разложения по сферическим гармоникам

$$\begin{aligned} \Phi_{\mu n}^{l\pm}(r) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l [A_{lm}^{s\pm}(k_{\mu}, k_n) R_{sl}(E_l, r) + \\ + B_{lm}^{s\pm}(k_{\mu}, k_n) \dot{R}_{sl}(E_l, r)] \times Y_{lm}(r - \tau_s) \begin{cases} i^l & (+) \\ i^{l-1} & (-) \end{cases}. \quad (2) \end{aligned}$$

Здесь  $\tau_s$  указывает положение s-го атома в элементарной ячейке;  $k_{\mu} \equiv k + K_{\mu}$ , где  $k$  – двумерный волновой вектор состояния, принадлежащий двумерной зоне Бриллюэна, а  $K_{\mu}$  – вектор двумерной обратной решетки;

$$k_n = \begin{cases} \frac{2\pi}{D + 2R_{MT}} n & (+) \\ \frac{2\pi}{D + 2R_{MT}} (n + \frac{1}{2}) & (-) \end{cases}, \quad (3)$$

где  $D$  – толщина пленки, а  $R_{MT}$  – радиус MT-сферы.

2. В области, заключенной в пределах плоских поверхностей пленки, вне сфер потенциал постоянен и базисная функция может быть пред-

ставлена в виде произведения двумерной плоской волны на одномерную симметризованную по  $z$  плоскую волну

$$\Phi_{\mu n}^{2\pm}(r) = \sqrt{\frac{2}{\Omega}} e^{ik_{\mu}r} \begin{cases} \cos(k_n z) & (+) \\ \sin(k_n z) & (-) \end{cases}. \quad (4)$$

Здесь  $\Omega$  – объем элементарной ячейки, заключенной между плоскостями  $z = \pm \frac{D}{2}$ .

3. В вакуумной области, расположенной за пределами плоских границ пленки, потенциал зависит только от нормальной компоненты к поверхности пленки  $z$ . В соответствии с такой формой потенциала базисная функция строится в виде произведения двумерной плоской волны на сумму  $z$ -зависящей функции и ее энергетической производной

$$\Phi_{\mu n}^{3\pm}(\mathbf{r}) = [A_{\mu n}^{v\pm} R_{\mu}(E_v, z) + B_{\mu n}^{v\pm} \dot{R}_{\mu}(E_v, z)] e^{i\mathbf{k}_{\mu}\mathbf{r}}. \quad (5)$$

Коэффициенты  $A_{lm}^{s\pm}$  и  $B_{lm}^{s\pm}$  определяются из условия непрерывности базисной функции вместе со своей первой производной на поверхности s-ой MT-сферы, а коэффициенты  $A_{\mu n}^{v\pm}$  и  $B_{\mu n}^{v\pm}$  – из условия непрерывности и дифференцируемости на границах пленки при  $z = \pm \frac{D}{2}$ .

На этих базисных функциях строятся матричные элементы гамильтониана  $H_{\mu n, \nu n'}$  и перекрытия  $O_{\mu n, \nu n'}$ . Используя вариационный принцип Ритца, для отыскания вариационных коэффициентов  $v_{\mu n}^i$  получаем систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{\nu, n'} [H_{\mu n, \nu n'} - E_i(k) O_{\mu n, \nu n'}] v_{\nu n'}^i = 0. \quad (6)$$

Из условия разрешимости этой системы вытекает уравнение для нахождения собственных значений энергии электрона в пленке

$$\det[H_{\mu n, \nu n'} - E_i(k) O_{\mu n, \nu n'}] = 0. \quad (7)$$

Полученные в результате зонного расчета собственные функции  $\Psi_{i,k}(\mathbf{r})$  и собственные значения энергии  $E_i(\mathbf{k})$  использовались для вычисления плотностей состояний и фотоэлектронных спектров согласно методике [6, 7].

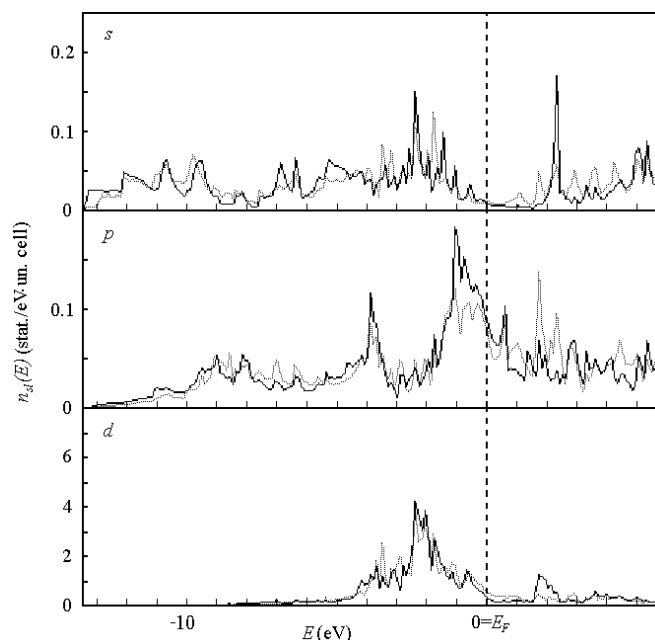
**Таблица**

Положение главного пика фотоэлектронных спектров пленки дисицида кобальта (eV).

CoSi <sub>2</sub>	$\hbar\omega$ , eV	25	35	70	120
	[calculation]	2.11	2.16	2.16	2.20
	[1]	1.30	1.30	1.40	1.40

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Нами были рассчитаны локальные парциальные плотности электронных состояний всех неэквивалентных атомов пленки CoSi<sub>2</sub>, а на рис. 2 и 3 проведено сравнение ЛППЭС центрального и приповерхностного атомов Co и внутреннего и поверхностного атомов Si. Основной вклад в формирование валентной зоны силицида делают *d*-состояния Co, локализованные вблизи 2.3 eV ниже уровня Ферми ( $E_F$ ), и *s*- и *p*-состояния Si, сосредоточенные в двух энергетических областях: 5 – 11 и 0 – 1 eV ниже  $E_F$ . *s*- и *p*-состояния Co распределены по всей валентной зоне и величина их вклада в полную плотность состояний, как и *d*-состояний Si, относительно невелика.



**Рис. 2.** ЛППЭС атомов Co: сплошной линией обозначены ЛППЭС центрального атома; пунктирной – приповерхностного.

На рис. 4 проведено сравнение рассчитанных фотоэлектронных спектров пленки CoSi<sub>2</sub> для различных значений энергии возбуждения  $\hbar\omega$  с известными экспериментальными данными [1], а в таблице указано положение главного максимума этих спектров. Из сравнения рис. 4 с рис. 2 и 3 становится очевидно, что основной пик спектров обусловлен *d*-состояниями Co и с увеличением энергии возбуждения от 25 до 120 eV происходит его удаление от уровня Ферми с 2.11 до 2.2 eV. Из таблицы видно, что существует значительное расхождение (~ 0.8 eV) между нашим расчетом положения главного пика и экспериментальными данными работы [1]. Обратившись к работе [2], в которой представлены результаты рентгеновских эмиссионных исследований валентной зоны дисицида кобальта, мы обнаружили, что главная особенность  $M_{2,3}$ -спектра Co, определяющаяся теми же *d*-состояниями, расположена около 2.4 eV, что достаточно хорошо согласуется с нашими расчетами. При малых энергиях возбуждения (до 50 eV) в фотоэлектронных спектрах можно выделить небольшие “наплывы” в области 0 – 1.25, 3.2 – 4.5 и 6 – 8 eV ниже  $E_F$ , которые обусловлены преимущественно *s*- и *p*-состояниями Si. С увеличением энергии возбуждения эти особенности становятся менее интенсивными, поскольку сечение фотоионизации для *d*-состояний ПМ с ростом энергии возбуждения растет быстрее, чем для *s*- и *p*-состояний атомов Si и, следовательно, вклад *d*-состояний ПМ будет существенно больше.

### ВЫВОДЫ

1. Валентная зона пленок формируется в основном *d*-состояниями Co, локализованными вблизи 2.3 eV ниже  $E_F$ , с примесью *s*- и *p*-состояний, распределенных по всей зоне; а также *s*- и *p*-состояниями Si, сосредоточенными в двух энергетических областях (5 – 11 и 0 – 1 eV ниже  $E_F$  для CoSi<sub>2</sub>) с примесью *d*-состояний Si. Шири-

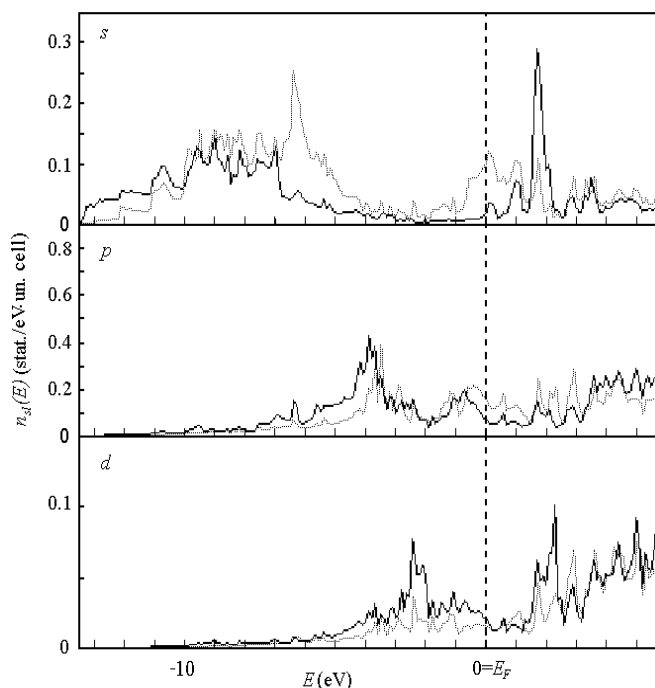


Рис. 3. ЛППЭС атомов Si: сплошной линией обозначены ЛППЭС внутреннего атома; пунктирной – поверхностного

на валентной зоны дисилицида кобальта составляет порядка 13. 51 eV.

2. Структура фотоэлектронных спектров пленок при малых энергиях возбуждения (12 – 40 eV) обусловлена  $d$ -состояниями Co и  $s$ - и  $p$ -состояниями Si. При более высоких энергиях падающего фотона форма спектров определяется практически только лишь  $d$ -состояниями Co.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. J. H. Weaver, A. Franciosi, V. L. Moruzzi. Phys. Rev. **B29**, 6, 3293 (1984).
2. H. Nakamura, M. Iwami, M. Hirai, M. Kusaka, F. Akao, H. Watabe. Phys. Rev. **B41**, 17, 12092 (1990).
3. E. P. Domashevskaya, Yu. A. Yurakov. J. Electron. Spectroscopy related Phenomena **96**, 195 (1998).

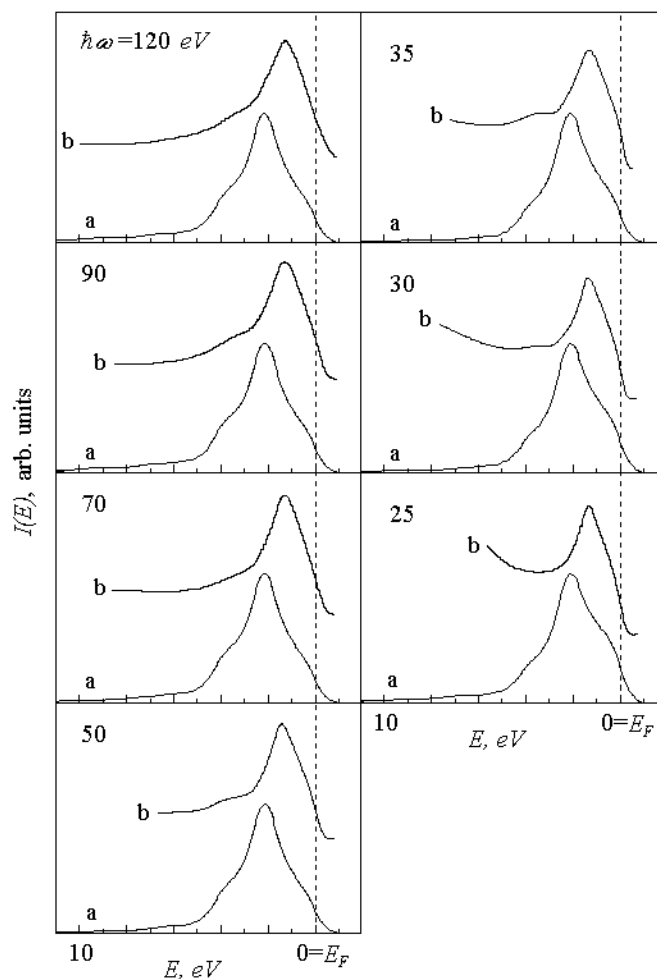


Рис. 4. Фотоэлектронные спектры пленки  $\text{CoSi}_2$ :  $a$  – настоящий расчет,  $b$  – эксперимент [1].

4. J. J. Jia, T. A. Callcott, W. L. O'Brien, Q. Y. Dong, J.-E. Rubensson, D.R. Mueller, D. L. Ederer, J. E. Rowe. Phys. Rev. **B43**, 6, 4863 (1991).
5. Е. И. Гладышевский. Кристаллохимия силицидов и германидов. Металлургия. М. (1971), 296 с.
6. S. I. Kurganskii, O. I. Dubrovskii, E. P. Domashevskaya. Phys. stat. sol. (b), **129**, 1, 293 (1985).
7. S. I. Kurganskii, M. A. Kharchenko, O. I. Dubrovskii, A. M. Bugakov, E. P. Domashevskaya. Phys. Stat. Sol. (b) **185**, 1, 179 (1994).