

СТАБИЛЬНОСТЬ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК Mg_2Si

Алексеев А. Ю.¹, Кропачев О.В.², Чернев И.М.², Галкин К.Н.²

¹Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

²Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН
г. Владивосток, Российская Федерация

Мигас Д.Б. – д.ф.-м.н., профессор

В результате моделирования из первых принципов были предсказаны наиболее стабильные структуры тонких пленок силицида магния, состоящего из одного, двух и трёх 2D Mg_2Si -слоёв. Двумерная структура из одного 2D Mg_2Si -слоя стабильна в Td фазе и является прямозонным полупроводником с шириной запрещённой зоны 0,45 эВ. Обнаружено, что построение тонких пленок из большего количества 2D слоёв в Td фазе воспроизводит орторомбическую фазу, типичную для Ca_2Si . Установлено, что многослойные тонкие пленки в Td фазе оказались менее стабильными, чем структуры в фазе T, которые воспроизводят объёмную кубическую фазу Mg_2Si , и имеют ширину запрещённой зоны 0,74 и 0,56 эВ для двух и трёх 2D Mg_2Si -слоёв, соответственно.

Исследование наноструктур различных силицидов, которые не токсичны и их формирование совместимо с хорошо развитой кремниевой технологией, представляет интерес для создания приборов микро- и наноэлектроники [1]. Среди них выделяются силициды металлов второй группы [2], включающие Mg, Ca и Ba. Силицид магния (Mg_2Si) имеет кубическую гранецентрированную структуру с пространственной группой $Fm\bar{3}m$ (№ 225, структуру типа анти- CaF_2) [2]. Ранее методами моделирования из первых принципов была предсказана динамическая стабильность Td фазы двумерного (2D) Mg_2Si , известной по дихалькогенидам тугоплавких металлов (пространственная группа $P2_1/m$, № 11), которая является искажением гексагональной T фазы [3,4]. В данной работе расширенно исследование структуры и электронных свойств тонких пленок Mg_2Si , когда их толщина составляет два и три 2D Mg_2Si -слоя.

Полная оптимизация исследуемых структур с последующим расчётом их фононного спектра и электронных зонных структур были выполнены методами из первых принципов в рамках теории функционала плотности. Для обменно-корреляционного функционала применялось приближение обобщённых градиентов Пердю-Бурке-Эрнцерхофа. Использовался метод сверхячейки с толщиной вакуума 12 Å.

2D Mg_2Si в T фазе с гексагональной структурой представляет собой «строительный блок», воспроизводящий тонкие пленки кубического Mg_2Si с ориентацией (111). Как было предсказано ранее [3,4], структура из одного 2D Mg_2Si -слоя в T фазе не стабильна и трансформируется в Td фазу (T distorted) в результате колебаний решётки. Хотя эти две фазы имеют близкие структуры, оказалось, что полная энергия 2D Mg_2Si в Td фазе меньше на 23 мэВ (здесь и далее, под полной энергией структур подразумевается их полная энергия в расчете на одну формульную единицу). В связи с этим была исследована возможность увеличения количества 2D Mg_2Si -слоёв в Td фазе (или толщины) в тонких пленках Mg_2Si . Это можно осуществить несколькими способами в результате различных смещений и/или отражений последующего 2D Mg_2Si -слоя относительно первого. В результате

оптимизации установлено, что наиболее стабильной по полной энергии является структура на основе Т фазы. За ней следует структура, которая может быть получена, если второй Mg_2Si -слоем был отражён в плоскости (110) и смещён на половину оси [010] по отношению к первому слою. Продолжая таким образом строить структуру из большего количества 2D Mg_2Si -слоёв, можно получить орторомбическую фазу Ca_2Si (пространственная группа $Pnma$, № 62, структура типа анти- $PbCl_2$), которая не характерна для Mg_2Si . Расчет показал, что такая структура из двух 2D Mg_2Si -слоёв в Тd фазе оказалась на 163 мэВ менее энергетически стабильнее структуры из двух 2D Mg_2Si -слоёв в Т фазе, тогда как гипотетический объёмный орторомбический Mg_2Si на 171 мэВ выше по полной энергии, чем объёмный кубический Mg_2Si . Таким образом, все 2D структуры и тонкие плёнки Mg_2Si с более чем одним 2D Mg_2Si -слоем имеют Т фазу в качестве стабильной структуры.

Кроме того, был посчитан фононный спектр структуры из двух 2D Mg_2Si -слоёв в Т фазе для выявления его динамической стабильности, который представлен на рисунке 1. Отсутствие в фононном спектре мод с мнимыми частотами свидетельствует о динамической стабильности такой структуры при абсолютном нуле температур в отличие от структуры из одного 2D Mg_2Si -слоя в Т фазе.

На рисунке 2 представлены электронные зонные структуры тонких пленок, состоящих из одного, двух и трёх 2D Mg_2Si -слоёв в случае наиболее стабильных структур. Тонкие пленки из двух и трех 2D Mg_2Si -слоев являются непрямозонными полупроводниками с переходом из центра зоны Бриллюэна (точка Γ) на её край в точку высокой симметрии М. Их ширины запрещённой зоны равны 0,74 эВ и 0,56 эВ, соответственно, причём возможная причина изменения энергетического зазора при изменении толщины пленки может быть связана как с эффектом квантового ограничения (изменение толщины потенциального колодца для электронного газа внутри 2D структуры), так и с изменением расстояний между атомами и появлением атомов Mg с другим координационным числом (атомы Mg_2Si в промежуточном Mg_2Si -слое в структуре из трёх 2D Mg_2Si -слоёв отличаются от атомов Mg в структуре из двух 2D Mg_2Si -слоёв). Для структуры из одного 2D Mg_2Si -слоя происходит фазовый переход, в результате которого материал оказывается прямозонным полупроводником с шириной запрещённой зоны 0,45 эВ. Наличие прямого перехода может быть использовано в оптоэлектронике и подлежит дальнейшему изучению.

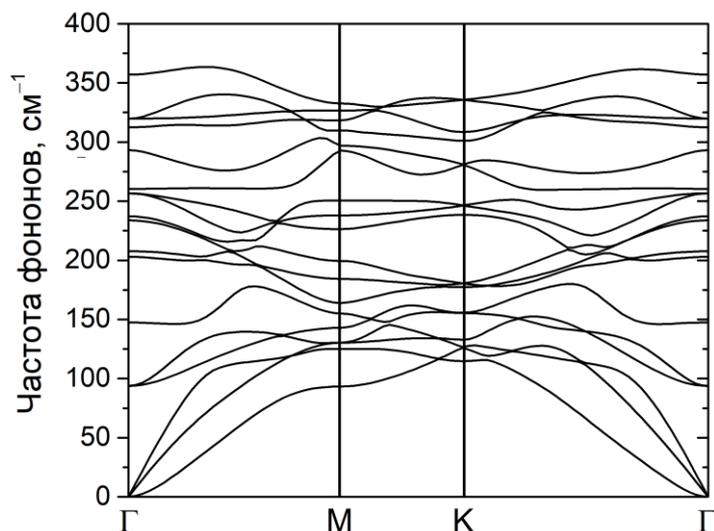


Рисунок 1 – Фононный спектр структуры из двух 2D Mg_2Si -слоёв в Т фазе

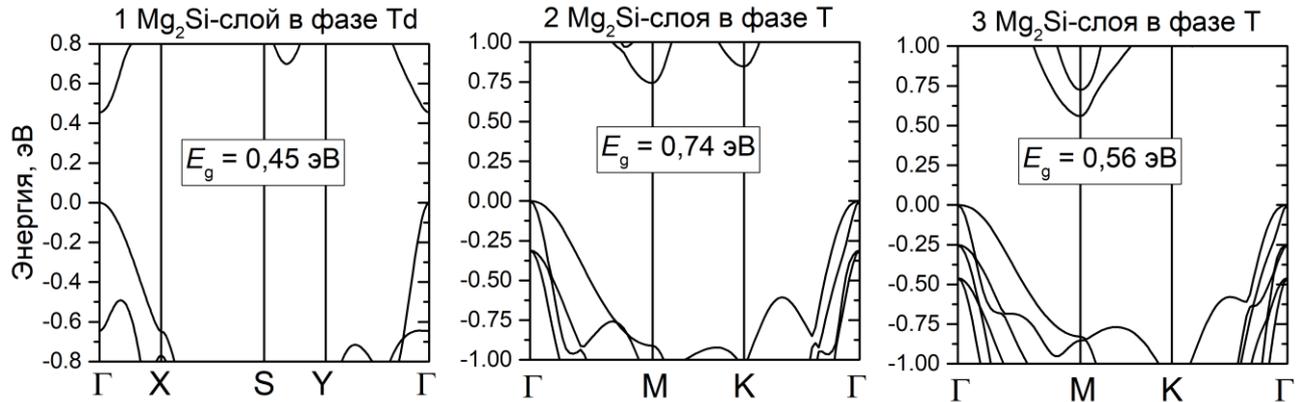


Рисунок 2 – Зонные структуры стабильных тонких пленок Mg_2Si из одного, двух и трёх 2D Mg_2Si -слоёв. За нуль энергии приняты максимумы валентных зон. Ширины запрещённых зон (E_g) так же приведены

Таким образом, были проанализированы и смоделированы потенциальные структуры тонких пленок Mg_2Si , состоящих из нескольких 2D Mg_2Si -слоёв. Установлено, что тонкие пленки Mg_2Si , имеющие более одного 2D Mg_2Si -слоя, стабилизируются в структуру, воспроизводящую объёмную кубическую фазу Mg_2Si (т.е. T фазу). Получены зонные структуры тонких пленок Mg_2Si из одного, двух и трёх 2D Mg_2Si -слоёв и оценена ширина их запрещенной зоны. Для оценки перспектив исследуемых материалов необходимы их дальнейшие теоретические и экспериментальные исследования, в том числе, исследование путей их модификации (влияние внешних условий, подложек, адатомов, варьирование стехиометрии и пр.).

Список использованных источников:

1. *Properties of Metal Silicides* / ed.: K. Maex, M. van Rossum. – London : Inspec, 1995.
2. *Semiconducting Silicides* / ed.: V. E. Borisenko. – Berlin : Springer, 2000.
3. *Stability of 2D Alkaline-Earth Metal Silicides, Germanides and Stannides* / A. Yu. Alekseev [et al.] // *International Journal of Nanoscience*. 2019. – Vol. 18, № 03n04. – P. 1940013.
4. *Structural stability and electronic properties of 2D alkaline-earth metal silicides, germanides, and stannides* / A. Y. Alekseev [et al.] // *Japanese Journal of Applied Physics*. 2020. – Vol. 59. – P. SF0801.