



Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 537.226

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11311>**Взаимодиффузия при формировании тонких плёнок ниобия на монокристаллическом кремнии в условиях вакуумного отжига**Н. Н. Афонин¹✉, В. А. Логачева²¹ФГБОУ ВО «Воронежский государственный педагогический университет», ул. Ленина, 86, Воронеж 394043, Российская Федерация²ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Университетская пл., 1, Воронеж 394018, Российская Федерация**Аннотация**

Для проектирования технологического процесса создания приборных структур на основе ниобия и монокристаллического кремния с заданными свойствами необходимы эмпирические и теоретические знания о твердофазном процессе взаимодействия в системе тонкая плёнка ниобия – монокристаллический кремний. Цель работы – комплексное исследование перераспределения компонентов в процессе формирования тонких плёнок ниобия на монокристаллическом кремнии, полученных методом магнетронного распыления с последующим вакуумным отжигом.

Структура и фазовый состав исследовались методами рентгенофазового анализа, растровой электронной микроскопии и атомно-силовой микроскопии. Распределение компонентов по глубине определялось методом резерфордовского обратного рассеивания.

Традиционным экспериментальным методом исследования процесса взаимодиффузии компонентов в бинарных макроскопических системах является метод инертных меток. Однако применение его в системах, содержащих тонкие плёнки, затруднено соизмеримостью толщин плёнок и самих меток. Это обстоятельство делает метод математического моделирования наиболее удобным для анализа процесса взаимодиффузии в тонкоплёночных системах.

Разработана модель взаимодиффузии при формировании систем поликристаллическая плёнка ниобия – монокристаллический кремний, развивающая теорию Даркена на случай ограниченной растворимости компонентов. Предполагается зернограничная диффузия кремния в межзёрненном пространстве поликристаллической плёнки ниобия. Численным анализом экспериментальных концентрационных распределений в рамках модели установлено, что в исследуемой системе доминирующим диффузантом является кремний. Определена температурная зависимость индивидуального коэффициента диффузии кремния $D_{Si} = 3.0 \cdot 10^{-12} \cdot \exp(-0.216 \text{ эВ}/(kT)) \text{ см}^2/\text{с}$ в диапазоне температур 423–773 К.

Модель применима к описанию перераспределения компонентов в системе тонкая плёнка ниобия – монокристаллический кремний до условий синтеза, обеспечивающих химическое взаимодействие металла с кремнием и образование силицидов. Она иллюстрирует механизм возможного образования силицидных фаз не путём послойного роста на межфазной границе Nb/Si, а в её окрестности за счёт глубокой взаимной диффузии компонентов.

Ключевые слова: реакционная взаимодиффузия, ограниченная растворимость, тонкие плёнки, ниобий, монокристаллический кремний, магнетронное распыление, вакуумный отжиг, метод резерфордовского обратного рассеивания, метод моделирования, теория Даркена

Благодарности: Рентгенофазовый анализ и исследования методом атомно-силовой микроскопии проводились с использованием оборудования Центра коллективного пользования научной аппаратуры ВГУ <https://ckp.vsu.ru/>

Для цитирования: Афонин Н. Н., Логачева В. А. Взаимодиффузия при формировании тонких плёнок ниобия на монокристаллическом кремнии в условиях вакуумного отжига. *Конденсированные среды и межфазные границы.* 2023;25(3): 333–342. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11311>

✉ Афонин Николай Николаевич, e-mail: nafonin@vspu.ac.ru

© Афонин Н. Н., Логачева В. А., 2023



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.

For citation: Afonin N. N., Logacheva V. A. Interdiffusion in the formation of thin niobium films on single-crystal silicon under vacuum annealing conditions. *Condensed Matter and Interphases*. 2023;25(3): 333–342. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11311>

1. Введение

Тонкопленочные системы ниобий-кремний широко используются в сверхпроводниках [1–2]. Высокая радиационная стойкость слоистых систем NbC–Si и Nb–Si в сочетании с их термической стабильностью делают перспективным их применение в рентгеновской оптике [3, 4]. В технологии интегральных микросхем тонкие слои ниобия применяются в качестве барьерных между переходными металлами и монокристаллическим кремнием или диоксидом кремния [5].

Особенностью системы Nb–Si является незначительная растворимость кремния в кристаллитах ниобия и ниобия в монокристаллическом кремнии. Согласно бинарной фазовой диаграмме Nb–Si (рис. 1) максимальная растворимость Si в объемных образцах Nb составляет

3.5–4.36 ат. %, а растворимость ниобия в кремнии незначительна, рис. 2 [6].

В [7] было экспериментально установлено, что в двухслойных системах Nb–Si и Si–Nb, полученных методом вакуумного распыления на монокристаллический Si (100), в условиях незначительной растворимости Si и Nb друг в друге (предел растворимости Si в фазе твердого раствора Nb от 0.6 до 1.7 ат. % [8]) взаимная диффузия между Nb и Si в процессе отжига при 200 °C приводит к твердофазной аморфизации поликристаллического слоя Nb и образованию перемешанного аморфного слоя. Взаимная диффузия слоев материалов при низкотемпературных отжигах (100–250 °C) – обычно наблюдаемое явление в системах металл – кремний [9, 10]. При этих температурах зернограничная диффузия, как правило, преобладает по сравнению с диф-

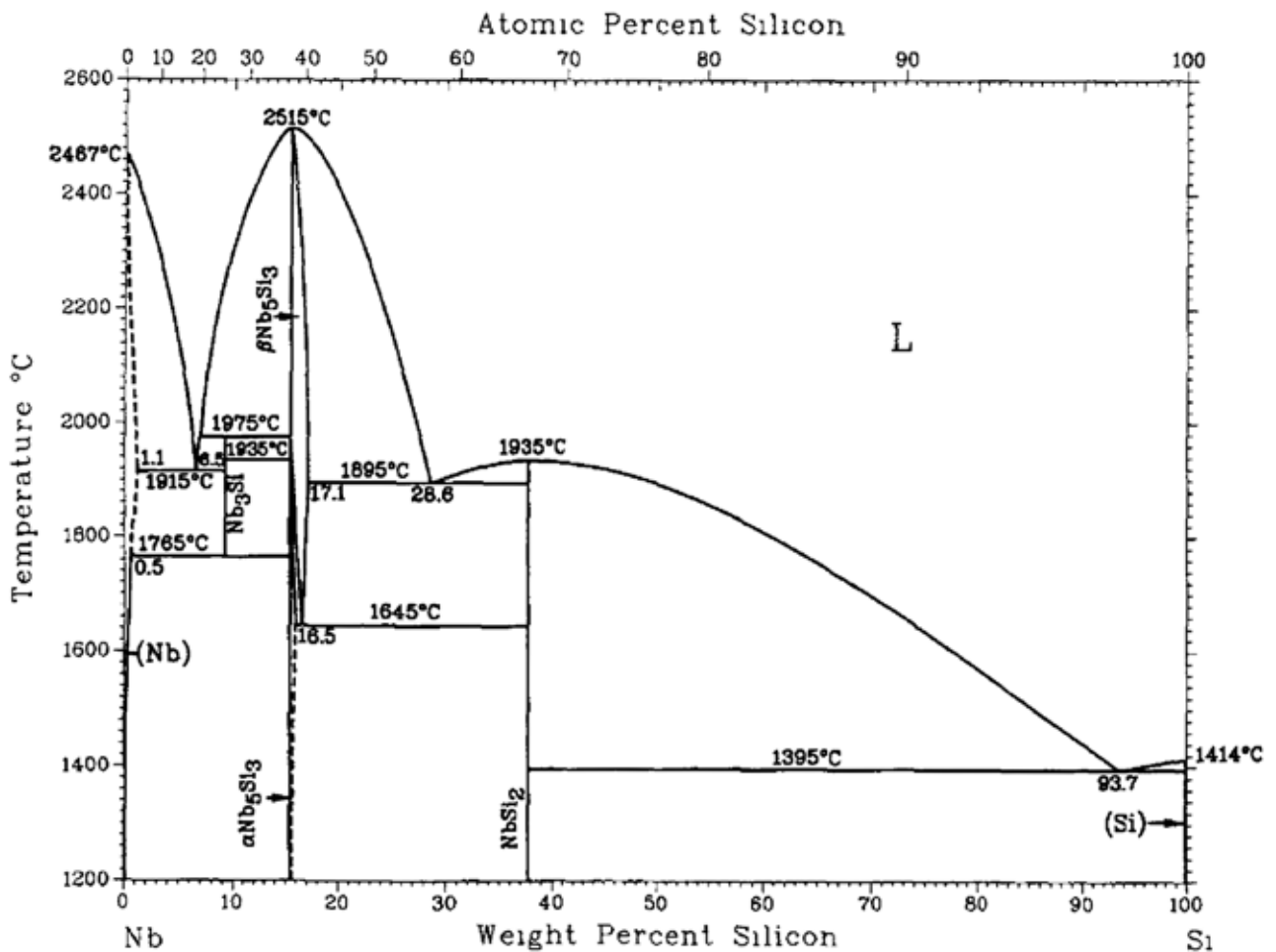


Рис. 1. Фазовая диаграмма системы ниобий – кремний [6]

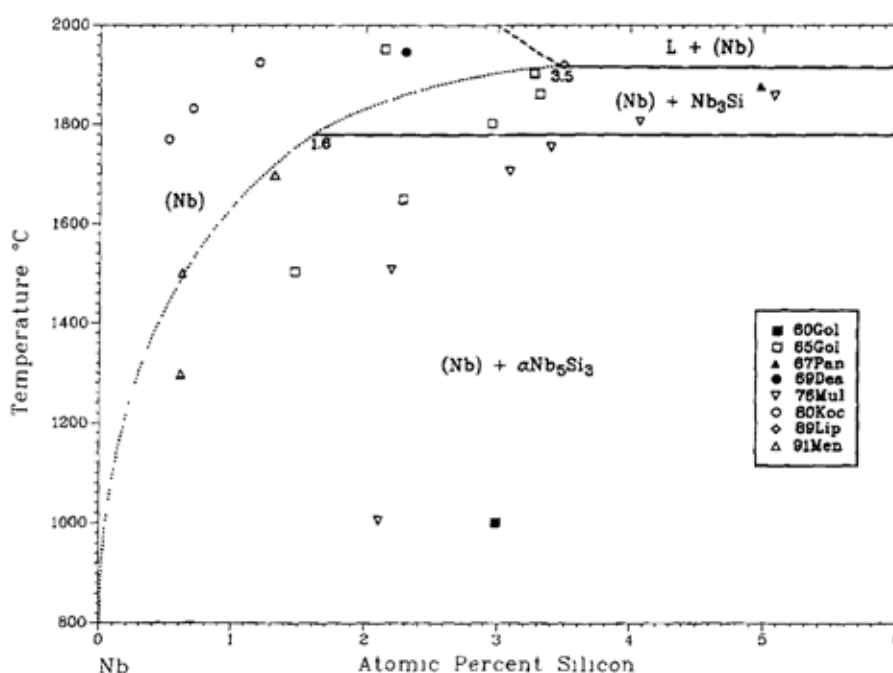


Рис. 2. Измеренная разными авторами [6] растворимость Si в Nb

фузией вакансий через объем. Взаимную диффузию в системе Nb–Si при отжиге $T = 200$ °C авторы [7] объясняют диффузией атомов Si в слой Nb, что обусловлено присутствием границ зерен в поликристаллическом слое Nb. Термически активированная взаимная диффузия в наноразмерных тонкопленочных системах инициирует несколько различных температурно-зависимых процессов, таких как твердофазная аморфизация, фазообразование и кристаллизация.

Другая особенность системы Nb–Si состоит в том, что плёнка металла как после осаждения на монокристаллический кремний, так и в ходе последующего отжига в инертной среде имеет поликристаллический характер [7, 11].

Согласно современным представлениям взаимодействие атомов металла с кристаллической решёткой кремния ослабляет ковалентные связи Si–Si и приводит к образованию в ней свободных собственных атомов [12]. Термообработка может способствовать ускоренной диффузии подвижного кремния по межзёрненным границам металла в условиях малой твёрдой растворимости в его кристаллитах и образованию твердых растворов в широком температурном диапазоне.

Процесс взаимного диффузионного перераспределения в системе Nb–Si предполагает, что поток атомов кремния в плёнку ниобия сопровождается противоположно направленным потоком атомов ниобия в кремний. Существенное различие в интенсивности этих потоков будет

приводить к перемещению межфазной границы (МФГ) в диффузионной паре (эффект Киркендалла) [13].

Вопрос о механизмах гетеродиффузии ниобия в кремнии и кремния в ниобии, а также о взаимодиффузии в системе Nb–Si в литературе разработан недостаточно.

Для проектирования технологического процесса создания приборных структур на основе ниобия и монокристаллического кремния с заданными свойствами необходимы эмпирические и теоретические знания о твердофазном процессе взаимодействия в системе тонкая плёнка ниобия – монокристаллический кремний. Недостаточная освещённость в литературе делает их комплексное исследование актуальной и важной задачей.

Цель настоящей работы состояла в комплексном исследовании перераспределения компонентов в процессе формирования тонких плёнок ниобия на монокристаллическом кремнии в условиях вакуумного отжига.

2. Методика эксперимента

Плёнки ниобия осаждали на подложки монокристаллического кремния методом магнетронного распыления. В вакуумной камере непосредственно перед процессом распыления с помощью диффузионного насоса достигался уровень остаточного давления $2.7 \cdot 10^{-3}$ Па. Затем в арго-не марки ВЧ возбуждался электрический разряд

при давлении $13.3 \cdot 10^{-2}$ Па, напряжении разряда 430 В и силе тока 0.7 А. Скорость осаждения плёнки ниобия составила 0.67 нм/с, время распыления определяло толщину осаждаемых плёнок. В качестве материала катода использовали металлическую ниобиевую мишень с содержанием примесей не более 0.01 ат. %.

Синтезированные образцы отжигали с помощью галогенных ламп ЛГ – 220/1000 в вакуумной камере при остаточном давлении $P = 2.7 \cdot 10^{-3}$ Па в температурном диапазоне 423–773 К.

Рентгенофазовый анализ системы тонкая плёнка Nb – моно-Si осуществляли на дифрактометре ARLX-TRA (Швейцария). Исследования выполняли с использованием излучения $K\alpha_1$ линии меди (1.54056 \AA) в автоматическом режиме с шаговым перемещением 0.05° . Время экспозиции в каждой точке составляло 1 с. Расшифровку дифрактограммы проводили, используя базу данных JCPDC [14].

Рельеф поверхности пленок исследовали методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на микроскопе Solver P47PRO (Россия) в полуконтактном (прерывисто-контактном) режиме сканирования.

Микроструктуру и толщину пленок изучали на сколах образцов в растровом электронном микроскопе JSM-6380 LV.

Концентрационные распределения компонентов по глубине системы определялись методом резерфордовского обратного рассеяния (РОР) на пучках протонов и однозарядных ионов гелия – 4 электростатического генератора ЭГ–5 в лаборатории нейтронной физики Объединенного института ядерных исследований.

Традиционным экспериментальным методом исследования процесса взаимодиффузии

компонентов в бинарных макроскопических системах является метод инертных меток [13]. Однако применение его в системах, содержащих тонкие плёнки, затруднено соизмеримостью толщин плёнок и самих меток. Это обстоятельство делает метод математического моделирования наиболее удобным для анализа процесса взаимодиффузии в исследуемой системе.

3. Экспериментальная часть

На рис. 3 представлены микрофотографии скола системы тонкая плёнка Nb – моно-Si после осаждения (а) и вакуумного отжига при $T = 773 \text{ К}$ в течение 30 мин (б). Толщина пленки металла составила 189 нм.

Как видно из рис. 3, на межфазной границе (МФГ) ниобий – кремний после осаждения наблюдается тонкий переходный слой, толщина которого увеличивается в ходе последующего вакуумного отжига. Взаимодиффузию в системе ниобий – кремний также наблюдали в [7].

На рис. 4. приведена дифрактограмма пленки ниобия на моно-Si после отжига при $T = 773 \text{ К}$ в течение 30 мин (дифракционные линии от кремниевой подложки при $2\theta = 32.906^\circ$ были отсечены). Единственной фазой, обнаруженной в пленке, был Nb кубической структуры: $2\theta = 37.14^\circ$, $d = 2.41901 \text{ \AA}$ (карта ICDD № 00-003-0905).

По соотношению Дебая–Шеррера [15] была оценена область когерентного рассеяния (ОКР), значение которой составило 52 нм.

АСМ-изображения поверхности пленки Nb после вакуумного отжига при $T = 773 \text{ К}$ представлены на рис. 5. Пленка имеет гладкую поверхность со средним размером шероховатости 0.18 нм. Распределение высот на гистограмме (рис. 4г) позволяет оценить размер зер-

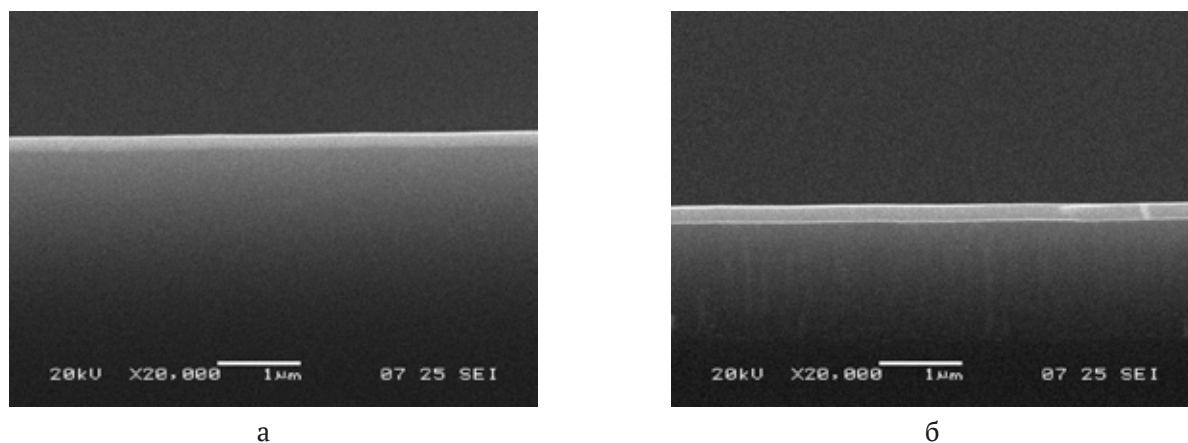


Рис. 3. Микрофотографии скола системы тонкая плёнка Nb – моно-Si после осаждения (а) и отжига в вакууме при $T = 773 \text{ К}$ в течение 30 минут (б)

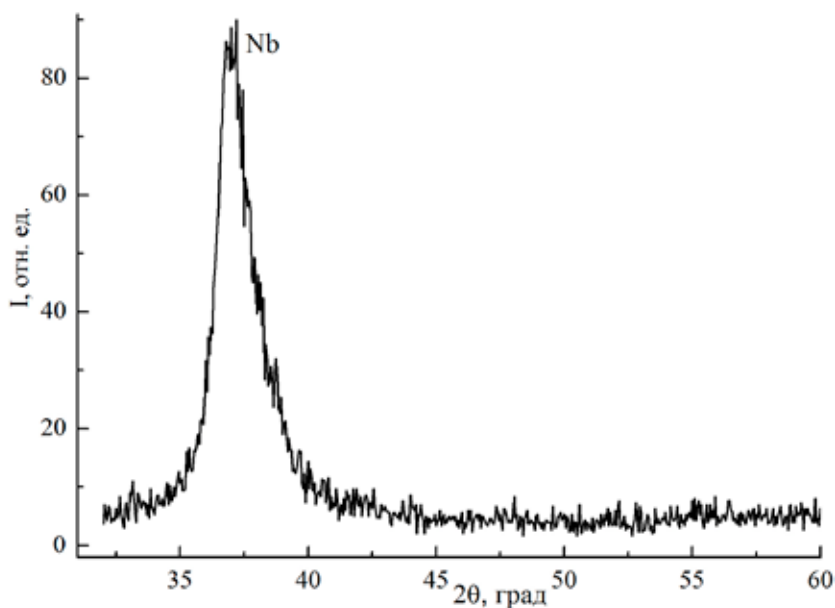


Рис. 4. Дифрактограмма системы тонкая плёнка Nb – моно-Si после отжига при $T = 773$ К в течение 30 мин

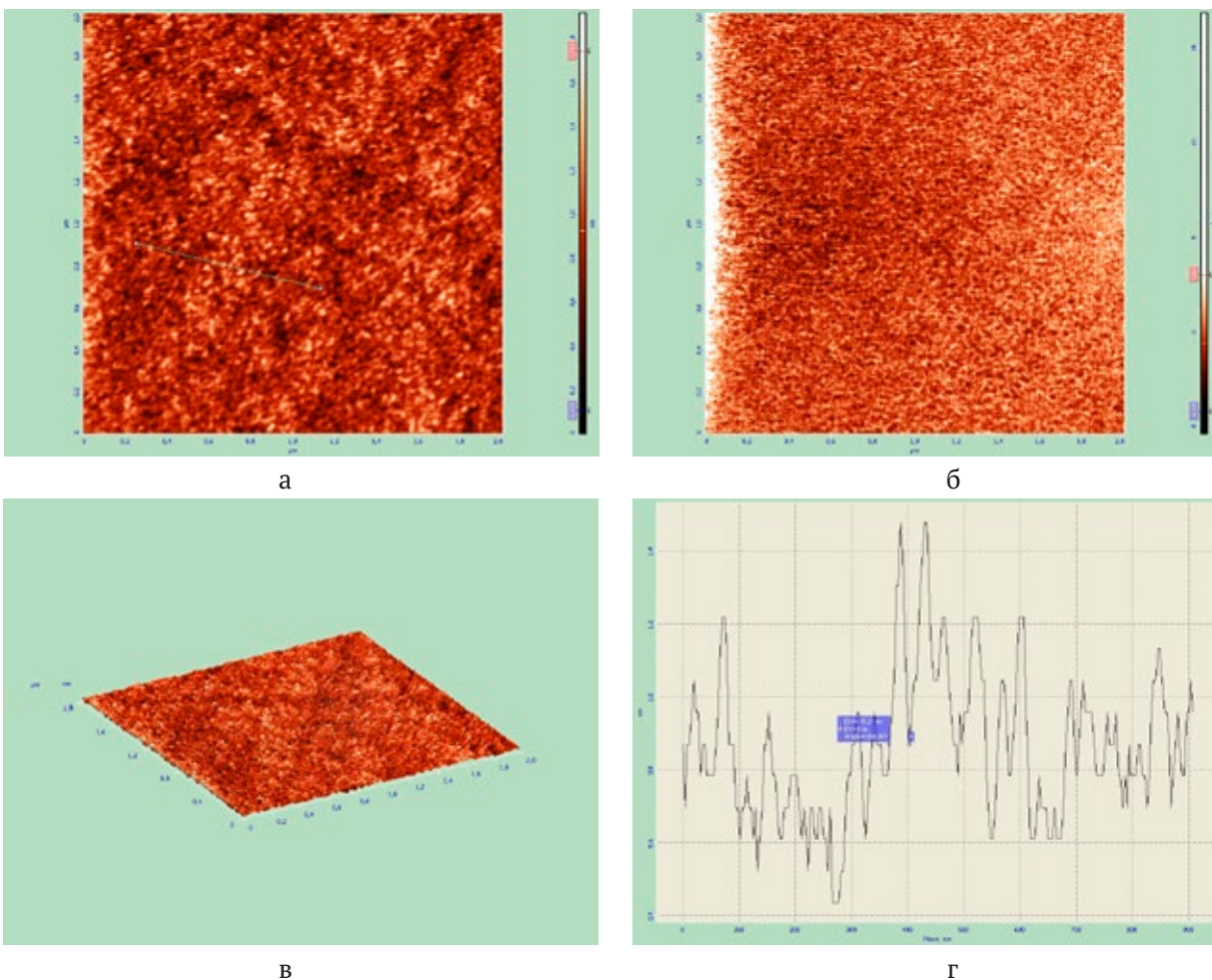


Рис. 5. АСМ-изображение поверхности пленок 2×2 мкм системы тонкая плёнка Nb – моно-Si после отжига при $T = 773$ К в течение 30 мин: поверхность пленки (а); фазовый контраст (б); 3-d изображение поверхности (в); сечение рельефа поверхности (г)

на ~ 32 нм высотой (Z) от 0.4 до 2 нм. Фазовый контраст подтверждает отсутствие других, кроме ниобия, фаз (рис. 4б).

Расчитанный размер ОКР по уравнению Шеррера (~ 52 нм), и размер зерен по АСМ-изображениям поверхности (~ 35 нм) подтверждает наноразмерную поликристаллическую природу металлической пленки ниобия, сформированной магнетронным распылением с последующим отжигом в вакууме.

Результаты анализа образцов методом POP приведены на рис 6. Как видно из рис. 6, в полученной системе МФГ Nb/Si имеет вид переходной по концентрации пограничной области.

4. Описание модели взаимодиффузии в системе тонкая плёнка Nb – моно-Si

Качественная картина процесса предполагает, что взаимодействие ниобия с решёткой монокристаллического кремния приводит к её

частичному разрушению. Механизм этого разрушения оставим за рамками модели. Следствие этого взаимодействия – появление свободных, способных к миграции атомов кремния. В решётке кремния они могут мигрировать как собственные междоузельные атомы.

В объёме кристаллитов ниобия кремний имеет малую растворимость. Это обстоятельство делает оправданным пренебрежение диффузионным проникновением и растворением кремния в объёме кристаллитов ниобия. Однако наличие развитых межзёренных границ делает потенциально возможными глубокую диффузию кремния в плёнке ниобия и повышает его растворимость в межзёренном пространстве.

Межзёренное пространство поликристаллической плёнки ниобия содержит координационно-ненасыщенные связи. Будем полагать, что в отношении подвижных атомов кремния они действуют как сегрегационные ловушеч-

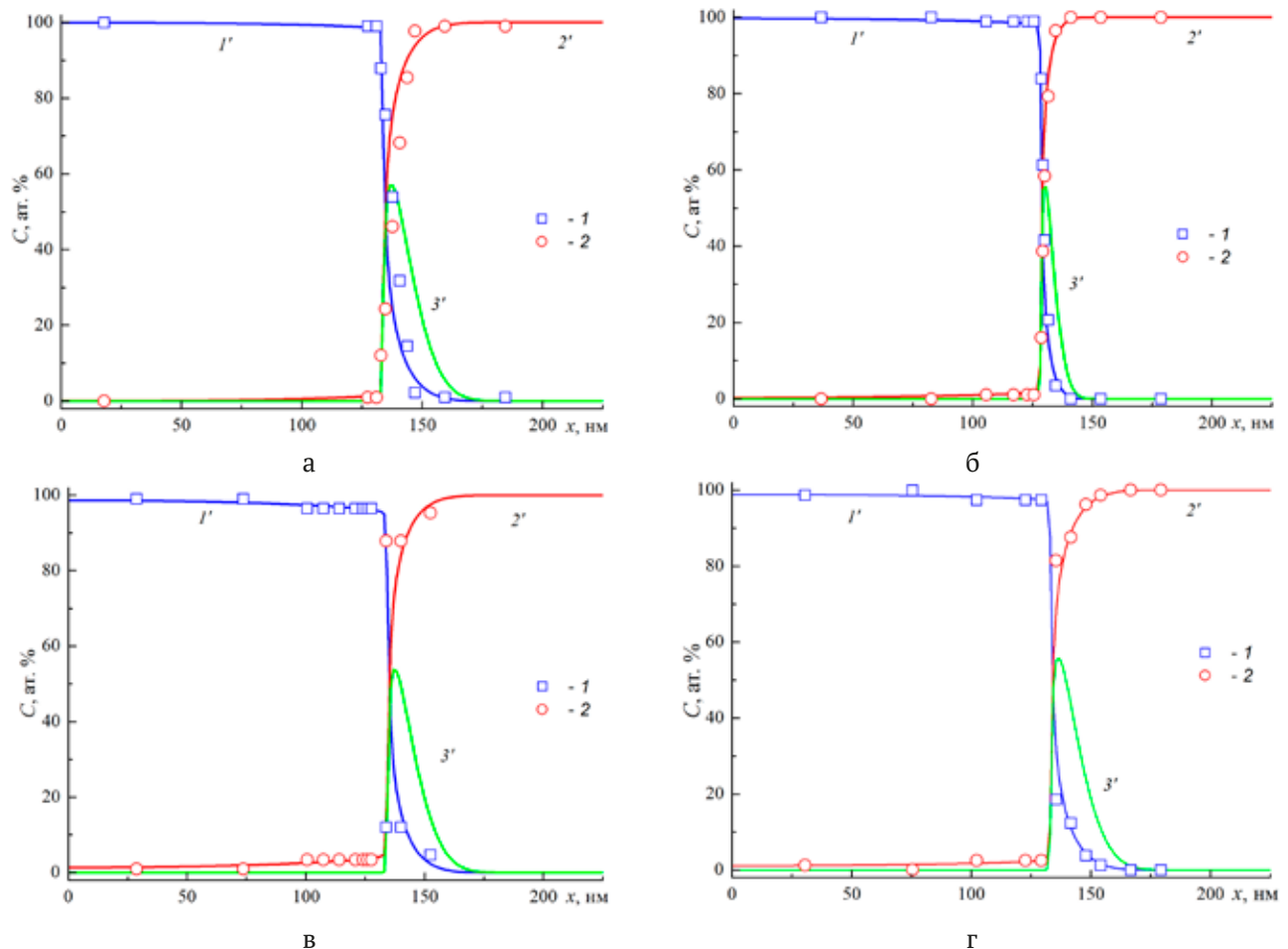


Рис. 6. Экспериментальные (метод POP, символы 1, 2) и расчетные (кривые 1', 2', 3') распределения по глубине системы плёнка Nb – моно-Si полной концентрации C ниобия (1'), кремния (2') и подвижной его части (3'). 1 – Nb, 2 – Si; кривые: 1' – Nb, 2' – Si после магнетронного распыления и вакуумного отжига в режиме $T = 673 \text{ K}$, $t = 30 \text{ мин}$

ные центры, на которые кремний захватывается с высвобождением свободного ниобия. Таким образом, растворение кремния в плёнке ниобия будем представлять, как процесс его реакционной зернограничной диффузии в межзёренном пространстве.

Стадия сегрегационного захвата кремния на межзёренные ловушки осуществляется изначально по механизму физической сорбции и не сопровождается химическим взаимодействием с образованием силицидов. Она происходит в объёме пленки металла, носит топохимический характер и локализуется в её межзёренном пространстве. Высокая дефектность межзёренного пространства плёнки содержит достаточный свободный объём, обеспечивающий обменный сорбционный процесс при минимальных потерях энергии на деформацию связей.

Процесс образования твёрдого раствора кремния в плёнке ниобия будет ограничен концентрацией ловушек, составляющей долю r от общей концентрации металла.

В отношении ниобия будем полагать, что его диффузия и растворимость как примеси в монокристаллическом кремнии ограничены процессом распада твёрдого раствора ниобия в кремнии с образованием неподвижных многоатомных комплексов, содержащих собственные точечные дефекты кремния и атомы металла.

В [16] предложена математическая модель, описывающая процесс взаимодиффузии в бинарной системе с неограниченной растворимостью компонентов. Она предполагает неизменность мольного объёма системы и отсутствие изменения его состава в результате химических превращений. Теория [16] предполагает получение концентрационных распределений компонентов как решение краевой задачи, содержащих два уравнения диффузии с одним эффективным коэффициентом взаимодиффузии.

В [17] модель [16] применялась к анализу фазообразования в диффузионной зоне. В [18] модель [16] была развита применительно к описанию объёмных реакций силицидообразования в системе Ni – SiC. В [19] математическая форма [16] использовалась в количественной модели, развивающей модель [16] применительно к реакционной взаимодиффузии в двухслойных системах металл–оксид второго металла с ограниченной растворимостью компонентов. В [20] она развита на случай реакционной взаимодиффузии компонентов в условиях вакуумного отжига поликристаллических нестехиоме-

трических плёночных оксидных систем с ограниченной растворимостью. В [21] показана возможность использования математической формы модели [16] для описания процесса взаимодиффузии в системе тонкая поликристаллическая плёнка металла – монокристаллический кремний в условиях ограниченной растворимости компонентов.

В нашем случае качественная картина твёрдофазного взаимодействия в системе тонкая плёнка Nb – моно-Si в процессе вакуумного отжига также предполагает постоянство мольного объёма. Поэтому используем математический формализм теории [17] для описания процесса реакционной взаимодиффузии в ней. Диффузионно-реакционные уравнения для компонентов системы тонкая плёнка Nb – моно-Si имеют вид:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^* \frac{\partial C_A}{\partial x} \right) - k_1 \cdot C_C \cdot C_A, \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^* \frac{\partial C_B}{\partial x} \right) + k_1 \cdot C_A \cdot C_C - k_2 \cdot C_{Ct} \cdot C_B - k_3 \cdot C_B \cdot C_C, \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_{Bt}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^* \frac{\partial C_{Bt}}{\partial x} \right) + k_2 \cdot C_{Ct} \cdot C_B, \quad (3)$$

$$\frac{\partial C_{Ct}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^* \frac{\partial C_{Ct}}{\partial x} \right) - k_2 \cdot C_B \cdot C_{Ct}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_{Cp}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^* \frac{\partial C_{Cp}}{\partial x} \right) + k_3 \cdot C_B \cdot C_C, \quad (5)$$

$$\frac{\partial C_C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^* \frac{\partial C_C}{\partial x} \right) + k_2 \cdot C_{Ct} \cdot C_B - k_3 \cdot C_B \cdot C_C, \quad (6)$$

где t – время, x – глубина, отсчитываемая от внешней поверхности плёнки ниобия; $C_A, C_B, C_{Bt}, C_{Ct}, C_{Cp}, C_C$ – концентрация кремния (A) в узлах кристаллической решётки кремния, подвижного кремния (B), образующегося в результате взаимодействия ниобия с кремнием; кремния (Bt), захваченного на ловушки в межзёренном пространстве плёнки ниобия; свободных ловушечных центров (C_t) для подвижного кремния в межзёренном пространстве плёнки ниобия; неподвижных комплексов (C_p) в кремнии, содержащих атом ниобия и кремния; и подвижного ниобия (C) соответственно; k_1, k_2 и k_3 – константы скорости генерации свободного кремния B, захвата его на межзёренные ловушки в ниобии и образования комплексов ниобий-кремний C_p соответственно.

Для эффективного коэффициента взаимодиффузии использовалось соотношение:

$$D^* = \frac{D_B \cdot C_C + D_C \cdot C_B}{C_{tot}}, \quad (7)$$

где D_B и D_C – индивидуальные коэффициенты диффузии подвижных компонентов – свободного кремния В и ниобия С соответственно, $C_{tot} = C_A + C_B + C_C + C_{cp} + C_{bt} + C_{ct}$ – общая (суммарная) концентрация всех компонентов системы.

В том случае, когда значения индивидуальных коэффициентов диффузии подвижных компонентов системы существенно отличаются друг от друга, МФГ Nb/Si в выбранной системе отсчёта будет перемещаться, при этом неподвижные компоненты системы будут играть роль инертных меток в опыте Смигельскаса и Киркендалла [22].

В качестве граничного условия для всех компонентов системы полагалось условие отражения:

$$\frac{\partial C_A}{\partial x} = \frac{\partial C_B}{\partial x} = \frac{\partial C_C}{\partial x} = \frac{\partial C_{cp}}{\partial x} = \frac{\partial C_{bt}}{\partial x} = \frac{\partial C_{ct}}{\partial x} = 0 \quad (8)$$

при $x = 0$ и $x = L$,

где L – толщина области решения в кремнии.

В качестве начальных использовались следующие условия:

$$C_A(x,0) = 0, C_{ct}(x,0) = r \cdot N_{sc}, C_C(x,0) = (1 - r) \cdot N_{sc}, \quad (9)$$

при $0 \leq x \leq h$,

$$C_A(x,0) = N_{sa}, C_{ct}(x,0) = 0, C_C(x,0) = 0, \quad (10)$$

при $h < x \leq L$,

$$C_B(x,0) = 0, C_{bt}(x,0) = 0, C_{cp}(x,0) = 0 \quad (11)$$

при всех $0 \leq x \leq L$,

где h – толщина пленки ниобия, $N_{sa} = 4.98 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ – собственная концентрация атомов Si, $N_{sc} = 5.55 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ – собственная концентрация атомов ниобия, r – доля ловушек для атомов кремния в межзёрненном пространстве плёнки ниобия.

Для численного решения системы диффузионно-реакционных уравнений (1)–(6) с зависимым от концентрации эффективным коэффициентом взаимодиффузии (7) использовались неявные консервативные разностные схемы и метод факторизации [23].

Параметрами модели являлись: индивидуальные коэффициенты диффузии кремния и ниобия, константы скорости k_1, k_2 и k_3 , а также r .

На рис. 6а-с представлены результаты численного моделирования (кривые 1', 2') в срав-

нении с полученными методом POP экспериментальными концентрационными распределениями Nb и Si по глубине системы плёнка Nb – моно-Si (точки 1, 2) после магнетронного распыления Nb на монокристаллический кремний и вакуумного отжига при изохронном отжиге при $t = 30$ мин в диапазоне температур $T = 423\text{--}673$ К.

Хорошее приближение экспериментальных и расчётных распределений достигнуто при одинаковых значениях $k_1 = 1 \cdot 10^{-25} \text{ см}^3/\text{с}$, $k_2 = 1 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}$, $k_3 = 1 \cdot 10^{-19} \text{ см}^3/\text{с}$, $r = 0.028$. Индивидуальный коэффициент диффузии ниобия в исследуемой системе в условиях эксперимента составил значение $D_{Nb} = 4.0 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2/\text{с}$, а для кремния определена температурная зависимость вида (рис. 7):

$$D_{Si} = 3.0 \cdot 10^{-12} \cdot \exp(-0.216 \text{ эВ}/(kT)) \text{ см}^2/\text{с}. \quad (12)$$

В [24] при изучении взаимной диффузии при отжиге в температурном диапазоне 423–523 К аморфных мультислоев Si–Nb, полученных методом ионно-лучевого распыления с повторяющейся толщиной пленок 3.2 нм, был определён коэффициент взаимодиффузии $D' = 2.2 \cdot 10^{-18} \cdot \exp(-0.55 \text{ эВ}/(kT)) \text{ см}^2/\text{с}$. Низкое значение предэкспоненциального множителя авторы объясняют высокой концентрацией ловушек в аморфном кремнии [24].

Как видно из полученных данных, доминирующим диффузантом в исследуемой системе является подвижный кремний (кривые 3' на рис. 6а–г). Максимум его распределения локализуется на МФГ Nb/Si.

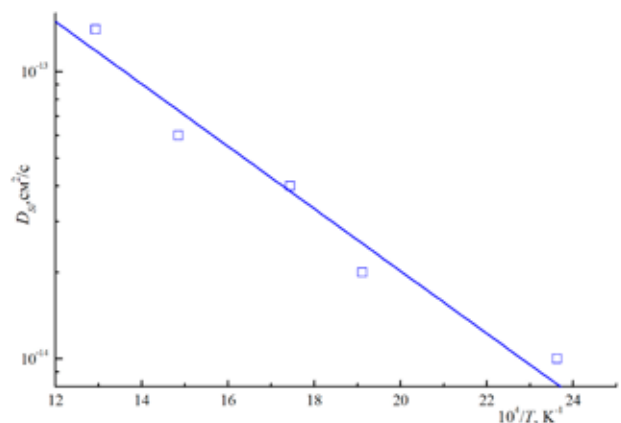


Рис. 7. Температурная зависимость индивидуального коэффициента диффузии кремния в системе плёнка Nb – моно-Si. Точки – результаты численного анализа; кривая – аппроксимация уравнением Аррениуса (12)

4. Заключение

Полученные на монокристаллическом кремнии методом магнетронного распыления с последующим отжигом в вакууме тонкие плёнки ниобия были поликристаллическими с размером зерна ~ 32 нм. МФГ Nb/Si имеет вид переходной по концентрации области, свидетельствующей о взаимной диффузии компонентов в системе поликристаллическая плёнка ниобия – монокристаллический кремний. Этот процесс исследовался методом моделирования. Была разработана модель, учитывающая ограниченную растворимость компонентов. Модель описывает растворимость кремния в межзёренном пространстве ниобия с сегрегацией его на межзёренных ловушках, а также растворимость металла в кремнии, ограниченную процессом комплексообразования. Она применима к описанию перераспределения компонентов до условий синтеза, обеспечивающих химическое взаимодействие ниобия с кремнием и образование силицидов.

Численным анализом экспериментальных концентрационных распределений компонентов в системе плёнка Nb – моно-Si в рамках модели установлено, что в исследуемой диффузионной паре доминирующим диффузантом является кремний. Определены значения индивидуальных коэффициентов диффузии ниобия и кремния в температурном диапазоне 423–773 К, а также доля ловушек для атомов Si в межзёренном пространстве Nb.

Заявленный вклад авторов

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы

1. Bromley D., Wright A. J., Jones L. A. H., ... O'Brien L. Electron beam evaporation of superconductor-ferromagnet heterostructures. *Scientific Reports*. 2022;12(1): 7786. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-11828-y>
2. Yusuf S.; Iii R. M. O.; Jiang J. S.; Sowers C. H.; Bader S. D.; Fullerton E. E.; Felcher G. P. Magnetic profile in Nb/S isuperconducting multilayers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 1999;198–199(1-3): 564–566. [https://doi.org/10.1016/s0304-8853\(98\)01215-3](https://doi.org/10.1016/s0304-8853(98)01215-3)

3. Modi M. H., Rai S. K., Idir M., Schaefer F., Lodha G. S. NbC/Si multilayer mirror for next generation EUV light sources. *OptExpress*. 2012;14: 15114–15120. <https://doi.org/10.1364/OE.20.015114>
4. Ichimaru, S.; Ishino, M.; Nishikino, ... Oku, S. Irradiation damage test of Mo/Si, Ru/Si and Nb/Si multilayers using the soft X-ray laser built at QST. In: Kawachi, T., Bulanov, S., Daido, H., Kato, Y. (eds) *X-Ray Lasers 2016. ICXRL 2016*. Springer Proceedings in Physics, vol. 202. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-319-73025-7_45
5. Jang S.-Y.; Lee S.-M.; Baik H.-K. Tantalum and niobium as a diffusion barrier between copper and silicon. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 1996;7(4): 1736–1738. <https://doi.org/10.1007/BF00188954>
6. Schlesinger M. E., Okamoto H., Gokhale A. B., Abbaschian, R. (1993). The Nb-Si (Niobium-Silicon) system. *Journal of Phase Equilibria*. 1993;14(4): 502–509. <https://doi.org/10.1007/bf02671971>
7. Chandrasekaran A., van de Kruijs R. W. E., Sturm J. M., Bijkerk F. Nb texture evolution and interdiffusion in Nb/Si-layered systems. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2021;13(26): 31260–31270. <https://doi.org/10.1021/acsami.1c06210>
8. Saito S., Takashima T., Horiuchi T., Miura S., Narita, T. Investigation of the cross-sectional structure and isothermal section at 1150°C of a Nb-Re-Si alloy fabricated using a tetra-arc furnace. *Materials Transactions*. 2019;60(4): 611–615. <https://doi.org/10.2320/matertrans.m2018396>
9. Bruijn S., Van De Kruijs R. W. E., Yakshin A. E., Bijkerk F. In-situ study of the diffusion-reaction mechanism in Mo/Si multilayered films. *Applied Surface Science*. 2011;257: 2707–2711. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2010.10.049>
10. Huang Q., Zhang, J., ... Wang Z. Structure and stress studies of low temperature annealed W/Si multilayers for the X-ray telescope. *Express*. 2016;24: 15620. <https://doi.org/10.1364/oe.24.015620>
11. Zaytseva I., Abal'oshev O., Dłużewski P., ... Cieplak M. Z. Negative Hall coefficient of ultrathin niobium in Si/Nb/Si trilayers. *Physical Review B*. 2014;90(6). <https://doi.org/10.1103/physrevb.90.060505>
12. Тонкие пленки. Взаимная диффузия и реакции / Под ред. Дж. Поута, К. Ту, Дж. Мейера. М.: Мир; 1982. 576 с.
13. Smigelskas A. D., Kirkendall E. O. Zinc diffusion in alpha-brass. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*. 1947;171: 130–142.
14. JCPDC PCPDFWIN: A Windows Retrieval/Display Program for Accessing the ICDD PDF — 2 Data Base, International Centre for Diffraction Data, 1997.

15. Brandon D., Kaplan W.D. Microstructural Characterization of Materials. John Wiley & Sons Ltd. 1999. 409 p.
16. Darken L. S., Diffusion, mobility and their interrelation through free energy in binary metallic systems. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*. 1948;175: 84–201. <https://doi.org/10.1007/s11661-010-0177-7>
17. Гуров К. П., Карташкин Б. А., Угасте Ю. Э. *Взаимная диффузия в многофазных металлических системах* / Под ред. К. П. Гурова. М.: Наука; 1981. 352 с.
18. Александров О. В., Козловский В. В. Моделирование взаимодействия никеля с карбидом кремния при формировании омических контактов. *Физика и техника полупроводников*. 2009;43(7): 917–923. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=20317760>
19. Афонин Н. Н., Логачева В. А. Моделирование реакционной взаимодиффузии в поликристаллических системах с ограниченной растворимостью компонентов. *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. 2019;85(9):35–41. <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2019-85-9-35-41>
20. Афонин Н. Н., Логачева В. А. Реакционная взаимодиффузия компонентов в нестехиометрической двухслойной системе поликристаллических оксидов титана и кобальта. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2020;22(4): 430–437. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2020.22/3058>
21. Афонин Н. Н., Логачева В. А. Модель взаимодиффузии при формировании тонких плёнок металлов на монокристаллическом кремнии в условиях ограниченной растворимости компонентов. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2022;24(1), 129–135. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/9063>
22. Smigelskas A. D., Kirkendall E. O. Zinc diffusion in alpha-brass. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*. 1947;171: 130–142.
23. Самарский А. А. *Теория разностных схем*. М.: Наука; 1977. 656 с.
24. Zhang M., Yu W., Wang W. H., Wang, W. K. Interdiffusion in compositionally modulated amorphous Nb/Si multilayers. *Thin Solid Films*. 1996;287(1–2), 293–296. [https://doi.org/10.1016/s0040-6090\(96\)08765-2](https://doi.org/10.1016/s0040-6090(96)08765-2)

Информация об авторах

Афонин Николай Николаевич, д. х. н., с. н. с., профессор кафедры технологических и естественных дисциплин, Воронежский государственный педагогический университет (Воронеж, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-9163-744X>
nafonin@vspsu.ac.ru

Логачева Вера Алексеевна, к. х. н., с. н. с. кафедры общей и неорганической химии, Воронежский государственный университет (Воронеж, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-2296-8069>
kcmf@main.vsu.ru

Поступила в редакцию 22.12.2022; одобрена после рецензирования 27.01.2023; принята к публикации 15.02.2023; опубликована онлайн 25.09.2023.