第 57 卷 第 7 期 2008 年 7 月
1000-3290/2008/57(07)/4322-06

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.57, No.7, July, 2008
©2008 Chin. Phys. Soc.

Mn_xSi_{1-x} 磁性薄膜的结构研究*

任 鹏 刘忠良 叶 剑 姜 泳 刘金锋 孙 玉 徐彭寿‡ 孙治湖 潘志云 闫文盛 韦世强†

(中国科学技术大学国家同步辐射实验室,合肥 230029)

(2007 年 10 月 1 日收到;2007 年 12 月 11 日收到修改稿)

利用 X 射线衍射(XRD)和 X 射线吸收近边结构(XANES)方法研究了在 Si(100)衬底上及 600℃温度条件下用分子束外延(MBE)共蒸发方法生长的 Mn_xSi_{1-x} 磁性薄膜的结构.由 XRD 结果表明,只有在高 Mn 含量(8%和 17%)样品中存在着 Mn_4Si_7 化合物物相.而 XANES 结果则显示,对于 Mn 浓度在 0.7%到 17%之间的 Mn_xSi_{1-x} 样品,其 Mn 原子的 XANES 谱表现出了一致的谱线特征.基于多重散射的 XANES 理论计算进一步表明,只有根据 Mn_4Si_7 模型计算出的理论 XANES 谱才能够很好的重构出 Mn_xSi_{1-x} 样品的实验 XANES 谱.这些研究结果说明在 Mn_xSi_{1-x} 样品中,Mn 原子主要是以镶嵌式的 Mn_4Si_7 化合物纳米晶颗粒存在于 Si 薄膜介质中,几乎不存在间隙位和替代位的 Mn 原子.

关键词:Mn_xSi_{1-x} 磁性薄膜,分子束外延,XRD,XANES

PACC:6110,6155

1. 引 言

稀磁半导体(dilute magnetic semiconductor, DMS)是在半导体中掺杂低浓度的过渡金属离子而具有铁磁性的新型半导体材料,在磁记忆存储、磁传感器等自旋电子学领域存在较强的应用前景[1,2].多年来,由于实验上易于掺杂较高浓度的磁性过渡金属离子,以Ⅲ-Ⅴ族和Ⅱ-Ⅵ族化合物半导体为基础的稀磁半导体材料发展迅速[3—9].但是,Mn,Co 等过渡金属离子在Ⅳ族 Si 和 Ge 等半导体材料中的饱和溶解度很小,约为 1%—2%,难于制备出良好性能的稀磁半导体,导致该领域的研究较少.由于 Si 和 Ge 基的稀磁半导体材料与已有的半导体技术具有良好的兼容性,近年来,也逐渐受到关注[1,10,11].

目前,一些 XRD 的研究结果表明,Si 极易与 Mn 形成化合物[12—18],难于制备出理想的替代位 Mn_xSi_{1-x} 稀磁半导体. Kwon 等人和 Soo 等人对 Mn_xSi_{1-x} 磁性膜薄的研究表明,127℃到 400℃温度范围内,由分子束外延(MBE)方法在 SiO_2/Si(100)衬底上生长不同浓度的 Mn_xSi_{1-x} ($x=0.15$—0.5)磁性薄膜中存在 Mn_5Si_3, MnSi 等多种铁磁及反铁磁性的合金化合物.将其在更高温度如 700℃退火后会转变为 Mn_4Si_7 等另外一些化合物或合金团簇.并且在某一固定温度下有倾向于生成某一两种特定化合物的趋势[16—18].Mn 浓度较低时 Zhang 等人曾报道[19],200℃下由 MBE 共蒸发方法在 Si(100)衬底上生长的 Mn_xSi_{1-x} ($x=0.005$—0.035)薄膜,电镜结果表明存在富 Mn 的合金相,同时离子沟道技术(ion channeling)表明还有以替代位形式 Mn 掺入 Si 晶格的物相存在.

X 射线衍射(XRD)方法作为一种物相分析的有力手段,在对 Mn_xSi_{1-x} 薄膜中合金相成分及结构的研究中已经发挥了重要作用[14,16].荧光 X 射线吸收近边结构谱学(XANES)技术对低含量元素的测量具有较高的灵敏度,同时对局域结构十分敏感,可以研究中心原子周围的短程有序结构的变化情况[20—22].联合 XRD 和 XANES 两种方法能够对 Mn_xSi_{1-x} 薄膜的成分和结构进行全面细致地研究,尤其是深入研究低浓度样品的结构.

本文利用 XRD 和 XANES 技术研究在 600℃温度下,MBE 方法生长的 Mn_xSi_{1-x} 薄膜样品在不同掺杂浓度下 Mn 原子在 Si 晶格中的存在形式以及其结构随着掺杂浓度 x 的变化规律,从而确定 Mn 原子

* 国家自然科学基金重点项目(批准号:10635060),国家自然科学基金(批准号:10725522)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail:sqwei@ustc.edu.cn

‡ 通讯联系人. E-mail:psxu@ustc.edu.cn

在 Mn_xSi_{1-x} 薄膜样品中的局域结构，明确不同的 Mn 掺杂浓度下 Mn 原子在半导体 Si 中的分布情况，为认识 Mn_xSi_{1-x} 薄膜的铁磁性来源提供实验依据.

2. 实验方法

采用共蒸发分子束外延方法在 600℃的条件下和 p 型 Si(100)衬底上生长不同 Mn 原子浓度的 Mn_xSi_{1-x} 薄膜样品，选择 600℃温度条件以获得具有较高结晶质量的 Si 基质. Si 源为电子束蒸发[23]，Mn 源为加热炉蒸发. 具体的生长条件为：生长室本底真空为 6.0×10^{-8} Pa，Si 衬底使用一种改进的 RCA 方法进行清洗[24]；生长 Mn_xSi_{1-x} 薄膜之前，先将衬底温度升到 600℃后，再生长一层厚约 5 nm 的 Si 缓冲层，然后以 Si，Mn 共蒸发的方式生长一系列厚度约 80 nm 的薄膜，Mn 含量分别为 0.7%，3%，8%，17%，最后在样品表面覆盖约 2 nm 厚的 Si 保护层以防止薄膜被氧化. 生长过程中由反射高能电子衍射仪(RHEED)实时监测薄膜的表面状况，其工作电压为 22 kV，发射电流为 50 μA. 生长后的样品利用 XRD 进行物相分析，X 射线衍射仪为日本玛珂公司的 MXPAHF 型 18 kW 转靶 X 射线衍射仪，光源为 Cu 的 $K\alpha$ 线，流强为 200 mA.

样品中 Mn 的 K 边 XANES 谱是在日本高能物理研究所光子工厂(KEK-PF，Japan)的 BL-13B 光束线站于室温下采集. KEK 的储存环电子能量为 2.5 GeV，平均流强 300 mA，高亮度光源由磁场强度为 1.5 T 的 27 极 Wiggler 磁铁插入件产生，单色器为固定出口的 Si (111) 平面双晶，采用 100 元高纯 Ge 固体探测器收集样品的 Mn 的 K 边荧光 XANES 信号，使用 Cr 箔滤波片消除由弹性散射产生的本底噪声. XANES 理论计算使用华盛顿大学的 FEFF8.2 软件包[25].

3. 结果和讨论

图 1(a)为 Si(100)衬底上生长 Si 缓冲层后的 RHEED 图. RHEED 结果显示 Si(100)表面为 2×1 重构，说明清洗并生长 Si 缓冲层后的 Si(100)衬底表面清洁有序. 图 1(b)和(c)分别对应于 Mn 含量为 0.7%和 3%的 Mn_xSi_{1-x} 样品的 RHEED 图，它们在生长过程中始终保持 2×1 重构. 图 1(d)为 8%样品的 RHEED 结果，可以看到条纹变模糊，但仍可辨认出微弱的重构斑点. 而图 1(e)中 Mn 含量高达 17%的 $Mn_{0.17}Si_{0.83}$ 样品表面的 2×1 重构已完全消失. 从样品的 RHEED 结果来看，随着 Mn 的含量增加到 8%—17%，表面的 2×1 重构条纹逐渐变弱直至消失，这表明较高含量的 Mn 掺入对 Si 晶格的影响较大.

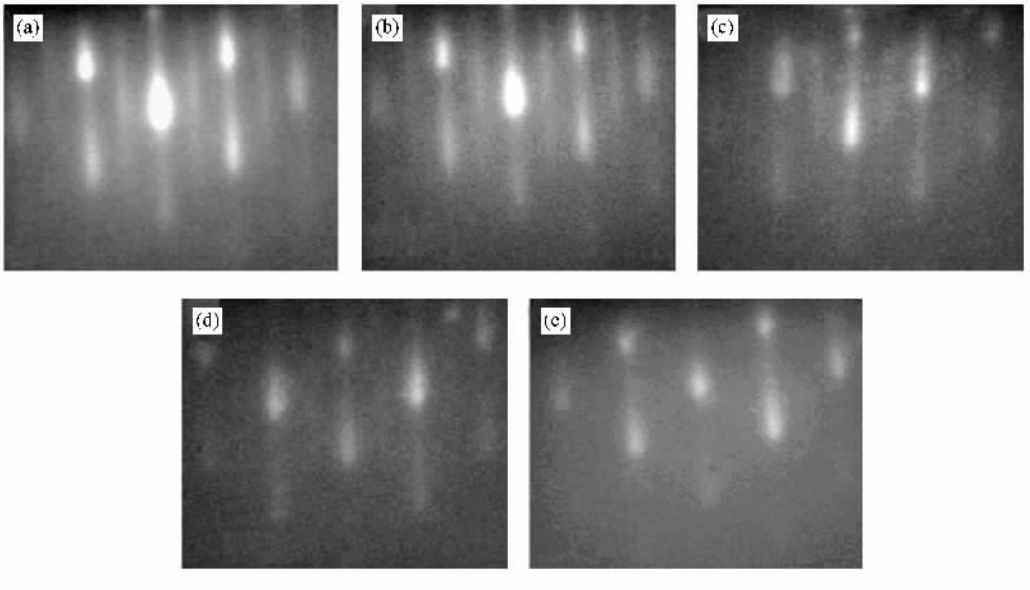

图 1　Si 衬底和不同浓度样品的 RHEED 图　(a) Si(100)衬底；(b) $Mn_{0.007}Si_{0.993}$；(c) $Mn_{0.03}Si_{0.97}$；(d) $Mn_{0.08}Si_{0.92}$；(e) $Mn_{0.17}Si_{0.83}$

图 2 是 Mn 浓度分别为 3%，8% 和 17% 的 Mn_xSi_{1-x} 样品的 XRD 图. 对于 $Mn_{0.17}Si_{0.83}$ 样品，在 2θ 值为 42.08°，43.04°，44.6°，46.58°，47.78° 和 54.14° 处出现六个分别对应于 Mn_4Si_7 的(214)，(117)，(108)，(220)，(118)和(304)晶面的衍射峰，表明 $Mn_{0.17}Si_{0.83}$ 薄膜形成了 Mn_4Si_7 化合物. 并且还可以看到 Mn_4Si_7 的(220)面次强衍射峰明显强于其(214)面的最强衍射峰，表明 $Mn_{0.17}Si_{0.83}$ 薄膜具有(220)面的取向生长. 对于 Mn 掺杂浓度稍低的 $Mn_{0.08}Si_{0.92}$ 样品，只能观察到位于 46.58° 的(220)衍射峰，峰的强度比较弱. Teichert 等人也有类似的报道[26]，他们在 600℃ 下和 Si(100)衬底上，采用 MBE 方法生长组成约为 37% 的 Mn_xSi_{1-x} 薄膜，其结果为具有(220)取向，单一组成的 Mn_4Si_7 合金薄膜. 对于更低浓度的 $Mn_{0.03}Si_{0.97}$ 样品，XRD 谱线上观察不到任何衍射峰，此时无法得到有用的结构信息.

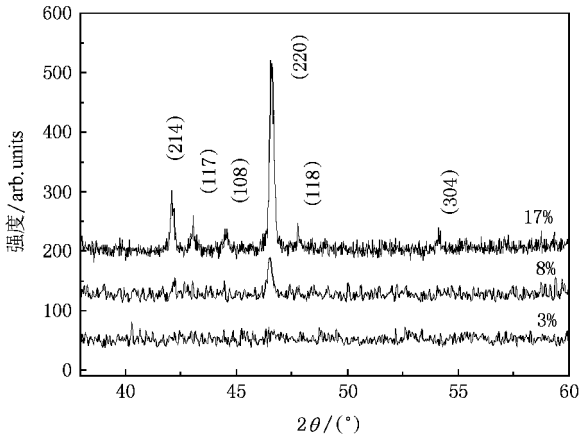

图 2 掺杂 Mn 浓度分别为 3%，8%，17% 的 Mn_xSi_{1-x} 薄膜样品的 XRD 图

为了确定低掺杂浓度的 Mn 原子在 Mn_xSi_{1-x} 薄膜中的存在形式和 Mn 原子的局域结构，我们利用 X 射线吸收近边结构(XANES)谱学方法对 Mn 原子周围的局域结构进行深入研究. 考虑到理论计算 XANES 谱的收敛性，我们采用了一个半径为 0.82 nm 的原子团簇(包含 190 个原子). 另外，由谢乐公式可以知道在我们的样品中，Mn_4Si_7 晶粒尺寸约为 20 nm. 因此，Mn_xSi_{1-x} 纳米颗粒的表面原子占的比例较小，实验 XANES 谱应该表现出近似于体相 Mn_4Si_7 的特征，Mn_4Si_7 与 Si 基体之间形成的边界对实验 XANES 谱几乎没有影响. 在 Mn_4Si_7 的 XANES 计算中，只是采用了一个含有 Mn_4Si_7 的团簇，忽略了 Mn_4Si_7 与 Si 基体形成的边界对 XANES 的影响. 图 3 给出 Mn_xSi_{1-x} 样品的实验 XANES 谱，可以看到不同 Mn 浓度样品的 XANES 谱的形状相似，都具有 3 个明显的特征峰，即吸收谱的边上肩膀峰(A)、白线峰(B)以及其后的振荡结构(C)，以吸收边位置取为 0 eV，各峰的位置分别为 14 eV，28 eV，75 eV. 由于 XRD 结果已经表明 Mn 含量为 8% 和 17% 的样品中 Mn 原子以 Mn_4Si_7 合金相存在，这说明在低 Mn 含量的 Mn_xSi_{1-x} 样品中，也形成了类似于 Mn_4Si_7 的结构.

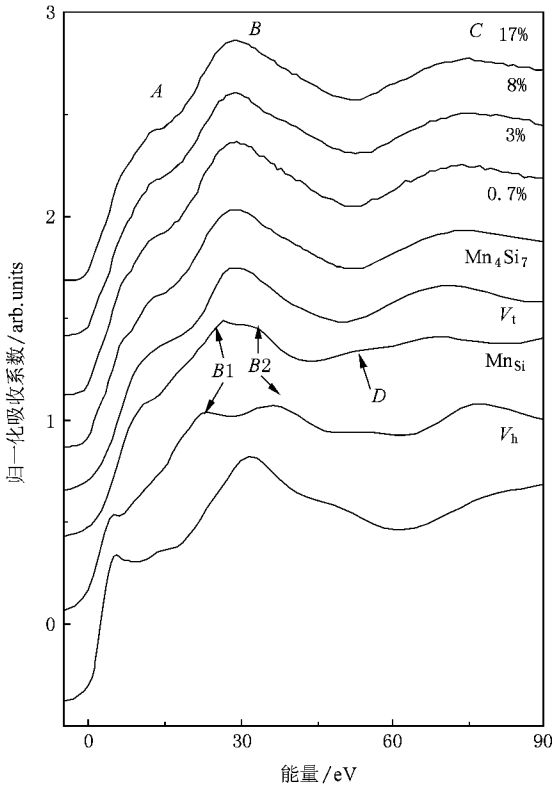

图 3 Mn_xSi_{1-x} 样品实验 XANES 谱与 Mn_4Si_7、替代位、四角间隙位及六角间隙位计算谱

为了进一步证实在 Mn_xSi_{1-x} 薄膜中，Mn 以 Mn_4Si_7 化合物的形式存在，我们根据 Mn_4Si_7 晶体结构特点，利用 FEFF8.2 软件包计算了 Mn_4Si_7 的 XANES 谱. 作为少数具有半导体特性的锰硅化合物之一[27]，Mn_4Si_7 为四方结构，属于 $P\text{-}4\ c\ 2$ 空间群，其结构如图 4(a)所示. 在其晶体结构中，Mn 原子有五种不同的位置[16]，编号分别记为 Mn1—Mn5. 根据不同 Mn 原子在原胞中的数目可以确定晶体中 Mn1—Mn5 的原子个数比为 1∶1∶2∶2∶2；不同 Mn 原子周围的配位数和键长略不相同，Mn-Si 第一配位

壳层的键长主要在 0.23 nm 到 0.26 nm 之间，其中 Mn1 和 Mn2 原子最近邻配位都是 4 个 Si 原子，键长分别为 0.232 nm 和 0.238 nm. Mn1 的次近邻为 2 个 Si 原子，键长 0.260 nm. Mn2 的次近邻为 4 个 Si 原子，键长 0.239 nm. Mn3，Mn4 和 Mn5 最近邻原子分别为 2 个 Si 原子，键长为 0.227 nm，0.236 nm 和 0.229 nm，次近邻分别为 2 个 Si 原子，键长为 0.233 nm，0.237 nm 和 0.233 nm. Mn-Mn 第二配位壳层的键长约为 0.3 nm. 计算中首先以不同 Mn 原子为吸收中心，算得各自的 XANES 谱，然后按照其原子个数比线性叠加，得到图 3 所示的 Mn_4Si_7 总的吸收谱. 值得一提的是，不同占位 Mn 原子之间的 XANES 谱的形状基本相似，稍有的区别主要表现在对吸收谱中 C 峰的贡献上，Mn1 和 Mn5 对总吸收谱中 C 峰低能侧有较多贡献，Mn3 与总吸收谱中 C 峰位置相同，而峰宽较窄，Mn2 与 Mn4 使 C 峰向高能侧延伸，从而在 Mn_4Si_7 总吸收谱中形成宽化的 C 峰. 由图 3 可见，Mn_4Si_7 计算谱的 A，B，C 峰能够与 Mn_xSi_{1-x} 系列样品的实验 XANES 谱符合得很好，证实低 Mn 浓度(0.7%，3%)的 Mn_xSi_{1-x} 样品与较高 Mn 浓度(8%，17%)的样品一样，Mn 主要以 Mn_4Si_7 化合物的形式存在.

实际上在 Mn_xSi_{1-x} 样品中，除形成 Mn-Si 间化合物外，Mn 原子还可能以如图 4 所示的其他三种占位方式存在[2]，即替代位(Mn_{Si})、四角间隙位(Mn_{V_t})和六角间隙位(Mn_{V_h})[16]. 替代位和四角间隙位中 Mn 的最近邻都是 4 个 Si 原子，键长为 2.35 nm 左右. 所不同的是，替代位的次近邻为 12 个 Si 原子，键长约为 0.384 nm，而四角间隙位的次近邻为 6 个 Si 原子，键长约为 0.272 nm. 六角间隙位中 Mn 最近邻为 6 个 Si 原子，键长约为 0.225 nm，次近邻为 8 个 Si 原子，键长约为 0.353 nm. 为了确定 Mn 原子在 Mn_xSi_{1-x} 样品中是否可能同时占据上述不同位置，我们同样计算了这三种占位情况下 Mn 的 K 边 XANES 谱，结果示于图 3. 可以看出，与 Mn_4Si_7 化合物的计算谱和 Mn_xSi_{1-x} 实验谱相比较，这三种占位情况下的谱形具有完全不同的特征，Mn_{V_t} 和 Mn_{Si} 的 XANES 谱在白线峰位置分裂为 B_1，B_2 两个峰，并且在边后 52 eV 处出现 D 峰，而 Mn_{V_h} 的 A 峰和 B 峰与之有明显的差别. 这说明在 Mn_xSi_{1-x} 样品中，在 XANES 探测的精度范围内，不存在替代位或间隙位的 Mn 原子. 相类似地，Wolska 等人在利用离子注入

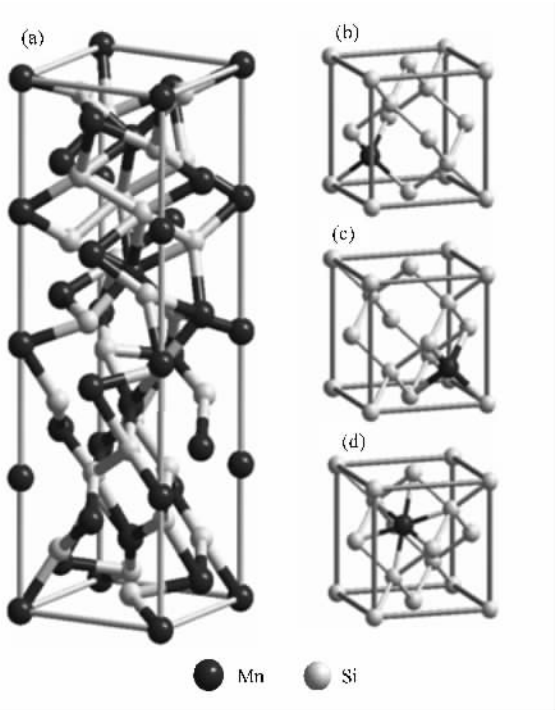

图 4　Mn 在 Si 晶格中的不同占位的结构示意图　(a) Mn_4Si_7 晶胞结构；(b) 替代位 MnSi；(c) 四角间隙位 V_t；(d) 六角间隙位 V_h

方法于较低衬底温度下(67℃和 337℃)制备出的 Mn_xSi_{1-x} 样品中，也没有观察到存在替代位或间隙位的 Mn 原子[28].

综上所述，在 600℃的生长温度下，以 MBE 共蒸发方法制备的 Mn_xSi_{1-x} 样品中，当 Mn 的原子浓度在 0.7%到 17%的范围内，几乎全部的 Mn 原子都与共蒸发的 Si 原子反应生成 Mn_4Si_7 化合物. Teichert 和 Kwon 的实验结果也表明用分子束外延方法在 600℃下制备的 Mn_xSi_{1-x} 薄膜中 Mn_4Si_7 是稳定存在的合金相[17,26]. 另外，Soo 和 Kim 等人的研究结果表明：室温时，Mn-Si 之间易形成 Mn_5Si_3[18]，400℃则形成 MnSi[16,17]. 这些研究结果说明在 Mn_xSi_{1-x} 样品中生成的 Mn-Si 化合物并不是依赖于 Mn 的浓度，而是依赖于衬底的温度. 虽然 Dalpian 等的计算结果说明：在 Si 介质中，Mn 原子占据 Si 晶格的四角间隙位和替代位是比较稳定的亚稳中间态，其形成能分别为 2.47 和 2.90 eV[13]，但在实际的样品制备中，只有 Zhang 等报道用 MBE 共蒸发方法在 200℃的低温生长条件下在 Si(100)衬底上生长的 Mn_xSi_{1-x} 薄膜中有少量 Mn 原子以替代位掺入 Si 晶格，其大部分 Mn 原子生成 Mn_xSi_{1-x} 化合物[19]. 在 600℃的高温下，Mn 原子有相当强的扩散能力和反应能力，即使有处在

四角间隙位和替代位的 Mn 原子也比较容易地克服扩散势垒而进行扩散，并成核、长大形成 Mn 原子局部富集的 $MnSi_x$ 化合物晶粒[12,18]．这使得对于 Mn 含量很低的在 600℃温度下制备的 $Mn_{0.007}Si_{0.993}$ 样品，Mn 原子也没有生成替代或间隙式的 Mn_xSi_{1-x} 稀磁半导体薄膜，而是生成 Mn_4Si_7 化合物．考虑到样品的组成和 XRD 结果，我们认为在 Mn_xSi_{1-x} 薄膜中，Mn 原子是以镶嵌式的 Mn_4Si_7 纳米晶化合物存在于 Si 介质中．值得指出的是，在高温下生长 Mn_xSi_{1-x} 与 Mn_xGe_{1-x} 的情况是相当不同的．如孙玉等人报道[29]，650℃温度条件下由磁控溅射方法生长的 Mn_xGe_{1-x} $(0.07 < x < 0.36)$ 磁性薄膜中，随着 Mn 浓度的降低，Mn 逐渐由以化合物为主转为以替代位为主．这可能是因为低 Mn 浓度下在 Ge 基中占据替位式的 Mn 原子的形成能最低[30]．因此，在 Ge 基中占据替代位的 Mn，不能像在 Si 中那样以间隙机理进行快扩散，从而保留有部分的替代位结构．

4. 结 论

通过 RHEED，XRD 和 XANES 方法研究了 MBE 方法制备的 Mn_xSi_{1-x} 薄膜的长程和短程有序结构．RHEED 显示薄膜保持了 Si 晶格，具有良好的外延生长特性．XRD 结果表明 8% 和 17% 样品中存在以(220)取向生长的 Mn_4Si_7 合金相．对 XANES 的分析表明 0.7% 和 3% 的样品也是以 Mn_4Si_7 合金相形式存在，低浓度的样品中也没有发现有替代位及间隙位结构出现．结合 RHEED，XRD 和 XANES 结果，我们认为在 600℃下生长，掺杂浓度在 0.7%—17% 范围内的 Mn_xSi_{1-x} 薄膜中 Mn 均以镶嵌在 Si 晶格中具有一定取向性的 Mn_4Si_7 晶粒形式存在．

感谢合肥国家同步辐射实验室 U7C-XAFS 实验站提供用光时间．

[1] Ohno H 1998 *Science* **281** 951

[2] Dietl T, Ohno H, Matsukura F, Cibert J, Ferrand D 2000 *Science* **287** 1019

[3] Makler S S, Ritter C F, Cunha L 2007 *Physica* B **398** 389

[4] Pearton S J, Abernathy C R, Norton D P 2003 *Mater Sci. and Engin.* **40** 137

[5] Wang Y, Sun L, Han D D, Liu L F, Kang J F, Liu X Y, Zhang X, Han R Q 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6651 (in Chinese) [王漪、孙 雷、韩德栋、刘力锋、康晋锋、刘晓彦、张 兴、韩汝琦 2006 物理学报 **55** 6651]

[6] Lin Q B, Li R Q, Zeng Y Z, Zhu Z Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 873 (in Chinese) [林秋宝、李仁全、曾永志、朱梓忠 2006 物理学报 **55** 873]

[7] Liu X C, Shi E W, Song L X, Zhang H W, Chen Z Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2557 (in Chinese) [刘学超、施尔畏、宋力昕、张华伟、陈之战 2006 物理学报 **55** 2557]

[8] Guo X G, Chen X S, Sun Y L, Zhou X H, Sun L Z, Lu W 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3545 (in Chinese) [郭旭光、陈效双、孙沿林、周孝好、孙立忠、陆 卫 2004 物理学报 **53** 3545]

[9] Ouyang C Y, Xiang Z H, Ouyang Q Z, Liu G D, Ye Z Q, Lei M S 2006 *Chinese Physics* **15** 158506

[10] Tsui F, He L, Ma L Tkachuk A, Chu Y S, Nakajima K, Chikyow T 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 17

[11] Park Y D, Hanbicki A T, Erwin S C, Hellberg C S, Sullivan J M, Mattson J E, Ambrose T F, Wilson A, Spanos G, Jonker B T 2002 *Science* **295** 25

[12] Wang J L, Hirai M, Kusaka M 1997 *Appl. Surf. Sci.* **113** 53

[13] Dalpian G M, Antonio J R, Silva D, Fazzio A 2003 *Phys. Rev.* B **68** 113310

[14] Magnano E, Carleschi E, Nicolaou A 2006 *Surf. Sci.* **600** 3932

[15] Hwang Y, Cho S, Kim H, Um Y 2006 *J. Magn. Magn. Mater.* **304** e173

[16] Kim H K, Kwon D, Kim J H, Ihm Y E, Kim D K, Kim H, Baek J S, Kim C S, Choo W K 2004 *J. Magn. Magn Mater.* **282** 244

[17] Kwon D, Kim H K, Kim J H, Ihm Y E, Kim D, Kim H, Baek J S, Kim C S, Choo W K 2004 *J. Magn. Magn Mater.* **282** 240

[18] Soo S Y, Kim K H, Ihm Y E, Kim D, Kim H, Hong S K, Kim C S, Ryu H, Oh S 2006 *J. Magn. Magn. Mater.* **304** e167

[19] Zhang Y T, Jiang Q, Drucker J 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 033512

[20] Pan Z Y, Sun Z H, Xie Z, Yan W S, Wei S Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3344 (in Chinese) [潘志云、孙治湖、谢 治、闫文盛、韦世强 2007 物理学报 **56** 3344]

[21] Wei S Q, Yan W S, Sun Z H Liu Q H, Zhong W J 2006 *Appl. Phy. Lett.* **89** 121901

[22] Bacewicz R, Twarog A, Malinowska A 2005 *J. Phys. Chem. Soilds* **66** 2004

[23] Wang K F, Liu J F, Zou C W, Xu P S, Pan H B, Zhang X G, Wang W J 2005 *J. Vac. Sci. Tech.* **25** 75 (in Chinese) [王科范、刘金峰、邹崇文、徐彭寿、潘海滨、张西庚、王文君 2005 真空科学与技术学报 **25** 75]

[24] Wang K F, Liu J F, Zou C W, Zhang W H, Xu P S, Xu F Q 2007 *J. Vac. Sci. Tech.* **27** 4 (in Chinese) [王科范、刘金峰、邹崇文、张文华、徐彭寿、徐法强 2007 真空科学与技术学报 **27** 4]

[25] Ankudinov A L, Bouldin C, Rehr J J, Sims J, Huang H 2002 *Phys. Rev.* B **65** 104107

[26] Teichert S, Sarkar D K, Schwendler S *et al* 2001 *Microelectronic Engineering* **55** 227

[27] Teichert S, Schwendler S, Sarkar D K, Mogilatenko A, Falke M, Beddies G, Kleint C, Hinnebrerg H J 2001 *J. Cryl. Grow.* **227** 882

[28] Wolska A, Jablonska L, Klepka M, Walczak M S 2007 *Phys. Rev.* B **75** 113201

[29] Sun Y, Sun Z H, Zhu S Y, Shi T F, Ye J, Pan Z Y, Liu W H, Wei S Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5471 (in Chinese) [孙　玉、孙治湖、朱三元、史同飞、叶　剑、潘志云、刘文汉、韦世强 2007 物理学报 **56** 5471]

[30] Continenza A, Profeta G, Picozzi S 2006 *Phys. Rev.* B **73** 035212

Structural study of Mn_xSi_{1-x} magnetic semiconductor thin films*

Ren Peng　Liu Zhong-Liang　Ye Jian　Jiang Yong　Liu Jin-Feng　Sun Yu　Xu Peng-Shou‡
Sun Zhi-Hu　Pan Zhi-Yun　Yan Wen-Sheng　Wei Shi-Qiang†
(*National Synchrotron Radiation Laboratory*, *University of Science & Technology of China*, *Hefei*　230029, *China*)
(Received 1 October 2007; revised manuscript received 11 December 2007)

Abstract

The structure of Mn_xSi_{1-x} magnetic semiconductor thin films prepared by molecular beam epitaxy (MBE) on Si(100) substrate at 600 ℃ has been studied by X-ray diffraction (XRD) and X-ray absorption near edge structure (XANES) technique. The XRD results show that in the Mn_xSi_{1-x} thin films with high Mn doping concentrations (x = 0.08 and 0.17), only diffraction peaks of crystalline Mn_4Si_7 are observed. XANES results indicate that all the Mn K-edge XANES spectra of Mn_xSi_{1-x} thin films with different Mn doping concentrations (x = 0.007, 0.03, 0.08 and 0.17) show the similar feature. XANES calculation based on multiple-scattering theory further reveals that the experimental spectra for samples with different Mn doping concentrations are reproduced by the calculated Mn_4Si_7 spectrum. These results reveal that for the Mn_xSi_{1-x} magnetic semiconductor thin films, Mn atoms mainly exist in the Si thin film substrate in the form of Mn_4Si_7 nanocrystalline grains, the substitutional or interstitial Mn atoms scarcely exist.

Keywords: Mn_xSi_{1-x} magnetic semiconductor thin film, MBE, XRD, XANES
PACC: 6110, 6155

* Project supported by the State Key Program of National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10635060) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10725522).

† Corresponding author. E-mail: sqwei@ustc.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: psxu@ustc.edu.cn