

Введение Во многих случаях при формировании наноразмерных включений новых фаз возникают агрегаты, подобные дендритам [1]. Чаще всего при описании процесса их формирования используется модель агрегации, ограниченной диффузией (АОД) [2]. В этой модели предполагается, что кластер формируется из тех частиц или атомов, которые поставляются в систему. Примерами таких кластеров могут служить дендриты металлов, образующихся при электроосаждении [3,4,5]. На базе классической модели Виттена-Сандера развился целый класс подходов, рассматривающих как решёточные так и континуальные среды, разные длины элементарных перескоков частиц, различные вероятности прилипания к формирующимся дендритам и т.д.[3,6,7]. Эти модели развивались для описания процесса формирования структур, более сложных, чем классический дендрит Виттена- Сандера, таких, например, как плотные радиальные структуры [7], кластеры повторяющие симметрию решётки [6] и т.д.. При этом сохраняется основной принцип формирования кластера только из того материала, который поставляется в систему. Однако в большом количестве случаев частицы, поступающие в матрицу, вступают в химическую реакцию с атомами матрицы и образует новое химическое соединение. Так, например, образуются нанокластеры карбидов [8, 9] и силицидов [10] и т.д. при ионной имплантации. В этом случае для моделирования процесса формирования кластеров новой фазы невозможно прямое применение подходов на основе моделей АОД, т.е. образование агрегатов из частиц, совершающих случайное блуждание по пустой решётке. Действительно, например, в случае образования кластеров силицидов при ионной имплантации металлов в кремний, в поверхностном слое мишени движутся атомы имплантируемого металла, которые затем, взаимодействуя с атомами кремниевой матрицы, формируют силициды с различными химическими формулами типа FeSi_2 , FeSi , Fe_3Si . Таким образом, наряду с диффузионной доставкой атомов к растущему кластеру происходит и трансформация структуры матрицы в его окрестности. Хотя формы кластеров силицидов или карбидов возникающие при ионной имплантации [8, 10] подобны формам дендритов, получаемых в моделях АОД, их фрактальные свойства существенно отличаются от свойств классических дендритов Виттена-Сандера. Перестройку матрицы при увеличении объёма растущей новой физической фазы можно попытаться учесть в модельном подходе, разделив процесс роста дендрита и трансформации структуры, следующим образом. На начальном этапе в рамках классической модели АОД вырастает дендрит из атомов железа, поставляемых в слой. Затем, вводя новую решётку, каждая ячейка которой содержит несколько ячеек исходной, можно оценить концентрацию атомов железа в пределах ячейки новой решётки и приписать ей ту или иную химическую формулу силицида. Пример структуры, получающейся в результате такого подхода, приведён на рис.1. Исходный кластер (1а) состоит из атомов железа. Переходя к новой решётке, каждая ячейка которой содержит 4

ячейки предыдущей, получаем структуру (16). Отметим, что эта структура подобна исходному кластеру, что подтверждает квазифрактальную природу классических дендритов Виттена-Сандера, обладающих свойством самоподобия. При этом интересующий нас железообогащённый магнитный силицид Fe_3Si , показанный на рис.16. чёрными квадратами, имеет структуру отдельных частиц, расположенных вдоль дендрита. Оставшаяся часть кластера может представлять из себя силициды типа FeSi , FeSi_2 или отдельные атомы железа в кремниевой матрице. Подобный подход позволяет легко проводить компьютерное моделирование, но является очень грубым приближением при описании процесса роста новой фазы.

а б Рис. 1 - а) Кластер, сформированный из атомов железа, б) Соответствующий кластер силицида Fe_3Si

Возникновение зародыша новой химической фазы (например, силицида) определяется как локальной концентрацией металла, которая должна обеспечивать нужный состав, так и достаточной легкостью трансформации решетки матрицы, чтобы сформировать решетку другой геометрии. Необходимо учитывать тот факт, что на начальном этапе возникновения фазы одновременно с формированием происходит и распад её, поэтому существует минимальный критический размер устойчивого зародыша, который может служить основой для дальнейшего роста кластера новой фазы. Многочисленные теории и модели, описывающие фазообразование на основе решения кинетических уравнений для концентраций исходных элементов, не ставят своей задачей установить реальную геометрическую форму кластеров новой фазы. Вместе с тем, именно форма возникающих кластеров может играть существенную роль в их физических свойствах. Так например анизотропия формы возникающих кластеров ферромагнитного силицида Fe_3Si может служить причиной наблюдаемой существенной одноосной магнитной анизотропии в плоскости имплантированного слоя кремния. В настоящей работе предлагается модель формирования квазидвумерного кластера магнитного силицида Fe_3Si при высокодозной ионной имплантации в кремний, учитывающая случайное блуждание имплантированных атомов металла и локальную перестройку структуры матрицы при возникновении новой химической фазы. Модель В процессе имплантации ионов железа в кремний в приповерхностном слое мишени могут возникать силициды различных химических формул FeSi , FeSi_2 . Особый интерес представляет формирование магнитного силицида Fe_3Si . Вероятность возникновения устойчивого зародыша этого железообогащённого силицида заметно отлична от нуля только в максимуме распределения ионов железа по глубине. В случае имплантации ионов железа с энергией 40 кэВ, максимум распределения расположен на глубине $\sim 250\text{Å}$ (25 нм) и полуширина распределения составляет величину порядка $\sim 100\text{Å}$ [11]. Поэтому можно считать, что зародыши силицида Fe_3Si возникают в квазиодномерном слое вблизи максимума распределения внедренных ионов железа. Поскольку

концентрация железа по этому слою при используемых дозах недостаточна для создания сплошного слоя силицида Fe_3Si будем считать, что устойчивые островки магнитной фазы возникают достаточно далеко друг от друга. Разобьём плоскость квазидвумерного слоя на области, в которых находится только один устойчивый зародыш силицида Fe_3Si . Будем предполагать, что в выделенной области не возникает новых зародышей Fe_3Si . Конечно, в этой области могут возникать участки, в которых локальная концентрация ионов железа соответствует составу Fe_3Si , но размеры этих участков не достигают критического и возникающие неустойчивые структуры распадаются. Однако, ситуация совершенно другая, если подобные участки с высокой концентрацией ионов железа возникают в непосредственной близости от имеющегося зародыша. В этом случае они присоединяются к объёму зародыша, и поскольку суммарный объём получившейся структуры больше критического, распада не происходит. Рассмотренный механизм роста кластера, соответствует механизмам реакционно-ограниченной агрегации и существенно отличается от стандартного подхода АОД. Возникновение зародышей железо-обогащенного силицида начинается при достижении достаточно высоких доз имплантации. При дальнейшем увеличении дозы изменение общего количества атомов железа в слое за счёт имплантации и поперечной диффузии мало по сравнению с уже достигнутой концентрацией. В настоящей работе мы будем рассматривать простейшую ситуацию, когда задается начальная концентрация железа в слое, а, затем, имеющийся устойчивый зародыш силицида Fe_3Si увеличивает свой размер только за счёт ионов, совершающих случайное блуждание внутри слоя. Для осуществления компьютерных экспериментов в рамках предложенного подхода роста кластера рассмотрим следующую конкретную ситуацию: на двумерной квадратной решётке $L \times L$ с постоянной решётки а случайным образом размещается N атомов. В центре решётки размещается зародыш новой фазы размером $l \times l$ постоянных решётки (l модельный критический размер зародыша). Каждому атому железа, находящемуся вне зародыша, предоставляется возможность совершить n случайных шагов по решётке. После перемещения всех атомов определяется концентрация железа в ближайшей окрестности зародыша. С этой целью в модели рассматривается слой толщиной $2a$ вдоль границы зародыша. Если концентрация железа на каком-либо участке этого слоя достаточна для образования Fe_3Si , этот участок присоединяется к зародышу и атомы железа, входящие в него, фиксируются. Если же концентрация на участке не достаточна, то на следующем этапе атомы железа, принадлежащие ему, могут опять совершать случайные блуждания. Атомы, во время случайного блуждания выходящие за внешние границы решётки, исключаются из рассмотрения. Описанный процесс повторяется до достижения некоторой критической плотности ρ атомов железа, на пространстве решётки, свободном от растущего кластера силицида. Результаты моделирования Компьютерное

моделирование роста двумерного кластера магнитного силицида проводилось на квадратной решётке размером 400×400 ($L=400$). На решётке случайным образом размещались $N=20000$ атомов железа. В центре решётки помещается квадрат 3×3 ($l=3$), соответствующий устойчивому зародышу силицида. Затем каждый из N атомов совершает $n=10$ шагов по решётке. Вероятности перескоков из точки $(x_i; y_i)$ решётки в соседние точки определяются формулами: (1) где T - температура, k_B - постоянная Больцмана, и W - нормирующий коэффициент: (2) В обычно рассматриваемых двухмерных моделях АОД все энергетические барьеры вокруг точки (x_i, y_i) считаются одинаковыми, т.е. что приводит к равным вероятностям для всех четырёх возможных направлений перескоков. В случае формирования магнитного кластера необходимо учитывать взаимодействие магнитного момента диффундирующего атома с магнитными моментами атомов кластера: (3) где μ_B - магнетон Бора, μ_i , μ_k - магнитные моменты атомов, размещённых в i и k точках решётки, r_{ik} - расстояние между этими частицами. Это взаимодействие приводит к изменению величины барьера: (4) Подставляя уравнения (3) в (4) величину барьера можно представить в следующем виде: (5) где μ_i . После того как все N атомов совершили перемещение проверяется концентрация в квадратах $2a$ вдоль границы устойчивого зародыша. Если концентрация железа в этом квадрате достаточна для формирования Fe_3Si , включаем этот квадрат в тело кластера. Для атомов железа не вошедших в кластер, указанный алгоритм повторяется ещё раз. Процесс повторяется до достижения концентрации свободно двигающихся атомов железа $\rho=0.005$. Кластер силицида Fe_3Si , сформированный в рамках изложенного алгоритма, приведен на рис. 2. Из рис. 2 видно, что в рамках рассмотренной модели формируется кластер значительно более плотный, чем классические кластеры Виттена-Сандерса (см. рис.1а.). Кластер отличается не только по виду но и по фрактальным свойствам, в частности если фрактальная размерность кластера на рис.1а. составляет примерно 1.66, то размерность кластера, приведённого на рис.2. равна 1.9 ± 0.04 . Рис. 2 - Кластер Fe_3Si сформировавшийся на решётке 400×400 при $\alpha=0.001$ Можно отметить, что подобная плотность кластеров и их фрактальные размерности порядка 1.9 получались нами ранее на основе методов АОД в многоцентровой модификации [12,13] при высокой степени заполнения решётки. На рис.3 приведена структура, возникающая в многоцентровой модели при 20 % заполнения решетки. Отдельные кластеры этой структуры имеют достаточно высокую плотность и фрактальную размерность порядка 1.85 ± 0.03 . Необходимо отметить, что в [12,13] предполагалась возможность генерации частиц внутри существующих кластеров, что и приводило к образованию кластеров с высокой плотностью при высоких степенях заполнения решётки. В предлагаемой в настоящей работе модели рост кластеров новой фазы обусловлен только внешним притоком атомов. Тем не менее, кластер обладает очень высокой плотностью, которая практически не зависит от степени заполнения решётки. В

случае, приведённом на рис.2. степень заполнения решётки соответствует 5%. Рис. 3 - Совокупность кластеров, выросших на решётке 1000x1000 в рамках многоцентровой модели АОД при 25% заполнении решетки [14] В настоящей работе рассмотрен случай слабого магнитного взаимодействия между магнитными моментами кластера и атомов, совершающих случайные блуждания ($\alpha=0.001$). Вместе с тем, полученный кластер имеет достаточно заметное удлинение в направлении внешнего магнитного поля (ось X). Оценивая средние размеры кластера R_x и R_y вдоль внешнего поля и в перпендикулярном направлении, можно получить для удлинения кластера, приведенного на Рис.2 величину $\varepsilon = R_x/R_y = 1.03$. При высокой плотности кластера такое удлинение приводит к заметной магнитной анизотропии. Зависимость среднего удлинения кластеров от постоянной решетки, магнитных моментов атомов, входящих в кластер и других параметров модели будет рассмотрена позднее. Выводы

Предложена модель, описывающая рост кластеров сложных силицидов при ионной имплантации. Показано, что учёт перестройки матрицы при формировании кластера приводит к возникновению более плотных структур даже при низком уровне заполнения решётки. Рассчитанная фрактальная размерность полученных при 5% заполнении решётки кластеров составляет величину порядка 1.9, что соответствует классическим АОД кластерам в многоцентровой модели при 25% заполнении решётки.