

**Тема работы:** Моделирование процессов напыления структурированных пленок силицидов железа на кремниевые поверхности

**Состав коллектива:**

Байдышев Виктор Сергеевич, кфмн, доцент, ФГБОУ ХГУ им. Н.Ф. Катанова

Чепкасов Илья Васильевич, кфмн, доцент, ФГБОУ ХГУ им. Н.Ф. Катанова

**Информация о гранте:** РФФИ, 17-42-190308 р\_а «Комплексное экспериментальное и теоретическое исследование эпитаксиальных пленок силицидов железа и марганца», рук. Чепкасов И.В., 2017-2019.

**Научное содержание работы:**

**1. Постановка задачи**

Актуальность исследований формирования сверхтонких эпитаксиальных пленок переменного состава на поверхности кремния связана с тем, что в материалах данного класса наиболее ярко проявляется взаимосвязь оптических, электрических и магнитных свойств [1-3], которыми, в свою очередь, можно управлять на этапе роста пленки. В частности, большой интерес представляют тонкие эпитаксиальные ферромагнитные плёнки  $Fe_{1-x}Si_x$ . [4, 5] Однако, в процессе осаждения слоя железа на монокристаллическую поверхность кремния на начальных этапах, даже при комнатной температуре, неконтролируемо образуются несколько фаз немагнитных силицидов [6]. Данные соединения негативно влияют на спиновую поляризацию и могут даже полностью разрушить ее. В процессе эпитаксиального роста тонких пленок силицидов на поверхности кремния образуется целый ряд силицидов железа, таких как  $Fe_3Si$ ,  $Fe_5Si_3$ ,  $\alpha$ - $FeSi$ ,  $\beta$ - $FeSi$ ,  $\epsilon$ - $FeSi_2$ . В многослойных системах  $(Fe/Si)_n$  и  $(Fe_3Si/\beta$ - $FeSi_2)_n$  на подложках кремния наблюдаются явления межслоевого обменного взаимодействия и гигантского магнетосопротивления, что делает данные системы весьма перспективными кандидатами для создания высокоэффективных носителей информации и функционального материала для энергонезависимой памяти [7-9]. При теоретическом моделировании роста пленок на кремниевых подложках изучается в основном влияние какого-то одного параметра. Также, в связи со сложностью корректного описания межатомного взаимодействия, существовали трудности в масштабном компьютерном моделировании процессов соосаждения атомов железа и кремния на подложки кремния, с формированием силицида железа. В связи с этим, в данной работе, для проведения теоретического изучения процессов роста тонких пленок силицида железа проведена серия компьютерных экспериментов для изучения механизмов роста тонких пленок силицида железа.

**2. Современное состояние проблемы**

В настоящее время больше внимание уделяется ферромагнитному силициду  $Fe_5Si_3$ , так как при имплантировании в кремний данный силицид демонстрирует эффект гигантского магнетосопротивления (2400%) [10], однако является термодинамически нестабильным в объемном состоянии при комнатной температуре [11]. Полупроводниковый дисилицид железа  $\beta$ - $FeSi_2$  в последнее время также привлек значительное внимание из-за его прямой запрещенной зоны (~0,85 эВ) и высокого коэффициента оптического поглощения, равного  $10^5 \text{ cm}^{-1}$  at 1.0 eV [12, 13]. Наибольший интерес вызывает силицид  $Fe_3Si$ , имеющий высокую температуру Кюри (840K) [14], и являющийся перспективным материалов для спинтроники.

В связи с тем, что даже незначительные отклонения в процессе синтеза данных тонких пленок силицидов может приводить к изменению их свойств, особое внимание уделяется определению условий формирования, составу и свойствам межслойных интерфейсов [15, 16]. Кроме того, на процессы формирования силицидов железа на начальных этапах оказывает влияние множество факторов, таких как ориентация подложки, состояние поверхности, температурные условия, количество осажденного материала, скорость осаждения [17-20]. При этом незначительное отклонение температуры подложки приводят к кардинальным изменениям в полученной структуре, и результаты, полученные различными исследовательскими группами в ходе идентичных экспериментов, могут существенно различаться друг с другом [21]. Это позволяет сделать предположение о том, что расхождения в результатах исследований формирования тонких пленок силицидов могут быть связаны с закономерностями формирования данных материалов, что требует их дополнительного исследования. В свою очередь, использование современных методов компьютерного моделирования, в частности метода молекулярной динамики, со все более совершенными потенциалами межчастичного взаимодействия, способными с большой точностью описать поведение систем металл-полупроводник, позволяет проводить комплексные исследования формирования силицидов железа.

Метод молекулярной динамики успешно применяется для моделирования процессов роста различных металлических [22-25], полупроводниковых [26-28], а также металл-полупроводниковых

пленок [29-31]. Где детально рассматривались вопросы влияния температуры подложки, угла напыления, ориентация поверхности на структурные свойства синтезируемых пленок. В частности, при МД моделировании роста пленки  $\text{SiH}_3$  на кремниевой подложке (001) исследовалось влияние угла падения налетающих атомов. Было установлено, что при углах падения  $0^\circ$ ,  $15^\circ$  и  $30^\circ$  тонкая пленка  $\alpha\text{-Si}$ : H имеет атомарно гладкую поверхность. Противоположный результат наблюдался в случае, когда угол падения приближается к большому ( $60^\circ$  и  $75^\circ$ ), он растет столбчато или островковидно и имеет шероховатую поверхность [28]. При МД моделировании роста тонких пленок меди на поверхности кремния (001) изучалось влияния температуры кремниевой подложки на структурообразование в напыленном слое и диффузия атомов в зоне интерфейса [29].

### 3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы

Компьютерная модель, описывающая процессы роста тонких пленок силицида железа, была создана с максимальным учетом процессов происходящих на экспериментальных установках для эпитаксиального роста пленок [32-34]. Моделирование соосаждения атомов железа и кремния на поверхность Si(111) и (100) проводилось методом молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS [35], с использованием GPU-технологии [36]. Для численного интегрирования уравнений движения использовался алгоритм Верлета с временным шагом  $t=0,5$  фс. Подложка представляла собой прямоугольный блок кристаллического Si. Были рассмотрены подложки двух размеров,  $(19.43 \times 43.24 \times 43.24)$  Å и  $(19.41 \times 43.24 \times 43.24)$  Å для (100) и (111) поверхностей соответственно

Атомы подложки были разделены на три группы. В первую группу входили атомы из двух нижних атомных плоскостей и в процессе моделирования на каждом временном шаге скорости этих атомов обнулялись, эта процедура позволяла избежать смещения подложки и ее деформацию. Вторая группа атомов (nvt) представляла собой “термо-слой”, состояла из 6 плоскостей, к атомам этой группы применялся термостат Нозе-Гувера (NVT) при заданной температуре, основное назначение данного слоя заключалось в поддержании постоянной температуры подложки путем поглощения кинетической энергии падающих атомов и теплоты, выделяющейся в процессе образования связей. В третью группу (NVE) входили, атомы верхних плоскостей подложки (для первого размера - 6 плоскостей, второго - 14 плоскостей), а также, напыляемые атомы. В процессе моделирования атомы из данной группы не подвергались термостатированию, к ним применялся NVE ансамбль. Такой подход является физически адекватным, так как, в процессе напыления происходит образование связей между атомами, вследствие чего локально выделяется достаточно большая энергия, что может являться существенным аспектом формирования напыляемой структуры. В направлении осей  $y$  и  $z$  были применены периодические граничные условия. Напыление производилось вдоль оси  $x$ , на плоскость  $yz$ .

Перед процессом напыления, подложка была отрелаксирована к заданной температуре. Вначале с применением термостата NPT для снятия внутреннего напряжения в течении  $t=0,5$  нс, а затем с применением термостата NVT также в течении  $t=0,5$  нс. Напыляемые атомы располагались на расстоянии 35 Å от верхней плоскости подложки. Для эталонной системы угол напыления  $\alpha$  составлял 14 градусов к нормали подложки и задавался проекциями скоростей атома. Скорость осаждаемых атомов подбиралась в соответствии с тепловой скоростью при температуре  $T=1000$  К. В эталонной системе моделирования интервал между двумя столкновениями атомов Fe с подложкой составлял  $\Delta t=9$  ps, а для атомов Si  $\Delta t=27$  ps (в соответствии со стехиометрией Fe:Si 3:1). Выбранный шаг осаждения позволял погасить локальные температурные флуктуации, вызванные падением атомов, между двумя последовательными столкновениями. Также, исследовались другие частоты  $\Delta t=45$  ps,  $\Delta t=90$  ps для Fe и  $\Delta t=135$  ps,  $\Delta t=270$  ps для Si соответственно. Температура в формирующемся слое в течении напыления, соответствовала температуре термо-слоя (NVT слоя), в пределах 10 градусов. Анализ и визуализация результатов моделирования проводился с помощью программного пакета OVITO [37]. Для изучения структур в напыленных силицидах использовался метод CNA анализа. CNA (Common Neighbor Analysis) анализ проводился в при определении соседних атомов использовался радиус обрезания 3,475 Å, соответствующий среднему между радиусами второй и третьей координационных сфер.

### 4. Полученные результаты

Для изучения влияния температуры подложки на структуру напыляемой пленки силицида железа было проведено моделирование осаждения атомов Fe и Si на подложку кремния имеющую различную температуру ( $26^\circ\text{C}$ ,  $300^\circ\text{C}$  и  $1200^\circ\text{C}$ ). Для изучения влияния скорости напыления на структуру силицида, проводилось моделирование с различными скоростями осаждения атомов железа и кремния на подложку, в частности изменялось время между столкновениями атомов железа и кремния с подложкой, для атомов железа использовались временные интервалы 9 пс, 45 пс и 90 пс, для атомов кремния значения увеличивались в три раза соответственно. Для случая напыления на подложку кремния с поверхностью (100) также было показано влияние угла напыления на формирование структуры в напыленном слое силицида, угол напыления составлял  $14^\circ$  и  $45^\circ$ .

Результаты проведенного CNA анализа структур напыленных силицидов железа на подложки кремния 100 и 111 приведены в таблице 1 и таблице 2. В таблицах представлены данные анализа структуры в напыленных пленках Fe<sub>3</sub>Si, в частности зависимость количества атомов ОЦК структуры в напылённой плёнке силицида железа полученные при различных параметрах напыления ( $\alpha$ –угол напыления;  $\Delta t$ -интервал между двумя столкновениями атомов Fe с подложкой; T-температура). Также, в таблицах приведено количество атомов кремния в структуре ОЦК относящиеся к атомам подложки- N(Si<sub>s</sub>), количество напылённых атомов кремния в структуре ОЦК - N(Si<sub>d</sub>), количество атомов железа в структуре ОЦК - N(Fe), количество атомов кремния имеющих 8 соседей другого типа атомов в структуре ОЦК - N(Si<sub>n</sub>), количество атомов железа имеющих 8 соседей другого типа атомов в структуре- N(Fe<sub>n</sub>).

Таблица 1 –Анализ структуры в напылённых плёнках силицида железа (Fe<sub>3</sub>Si) на подложке кремния (100)

$\alpha$ , °	$\Delta t$ , ps	T, °C	N(ОЦК), at.	N(Si <sub>s</sub> ), at.	N(Si <sub>d</sub> ), at.	N(Fe), at.	N(Si <sub>n</sub> ), at.	N(Fe <sub>n</sub> ), at.
14°	9 ps	26°C	0	0	0	0	0	0
14°	9 ps	26°C	0	0	0	0	0	0
14°	9 ps	300°C	0	0	0	0	0	0
14°	9 ps	300°C	0	0	0	0	0	0
14°	9 ps	1200°C	3003(55,8%)	232(7,7%)	701(23,3%)	2070(68,9%)	898(96,24%)	551(26,61%)
14°	9 ps	1200°C	2347(43,6%)	276(11,8%)	590(25,1%)	1481(63,1%)	817(94,34%)	442(29,84%)
14°	45 ps	26°C	0	0	0	0	0	0
14°	45 ps	300°C	766(14,3%)	22(2,9%)	213(27,8%)	531(69,3%)	147(62,5%)	3(0,5%)
14°	90 ps	26°C	0	0	0	0	0	0
14°	90 ps	300°C	1604(32,8%)	78(4,9%)	424(26,4%)	1102(68,7%)	305(60,75%)	16(1,45%)
45°	9 ps	1200°C	3071(57,1%)	274(8,9%)	598(22,7%)	2099(68,3%)	922(94,85%)	525(25,01%)
45°	9 ps	1200°C	2953(54,9)	255(8,6%)	715(24,2)	1983(67,2%)	941(97,01%)	550(27,73%)
45°	90 ps	300°C	1122(26,2%)	100(8,9%)	271(24,2%)	751(66,9%)	248(66,84%)	15(2%)

Таблица 2–Анализ структуры в напылённых плёнках силицида железа (Fe<sub>3</sub>Si)на подложке кремния (111).

$\alpha$ , °	$\Delta t$ , ps	T, °C	N(bcc), at.	N(Si <sub>s</sub> ), at.	N(Si <sub>d</sub> ), at.	N(Fe), at.	N(Si <sub>n</sub> ), at.	N(Fe <sub>n</sub> ), at.
14°	9 ps	26°C	337(5,9%)	2(0,6%)	101(30%)	234(69,4%)	71(68,93%)	6(2,5%)
14°	9 ps	26°C	994(17,4%)	7(0,7%)	261(26,3%)	726(73%)	171(63,80%)	11(1,5%)
14°	9 ps	300°C	1924(34%)	36(1,9%)	510(26,5%)	1378(71,6%)	348(63,73%)	15(1,08%)
14°	9 ps	300°C	1959(34,6%)	45(2,3%)	510(26%)	1404(71,1%)	382(68,82%)	13(0,92%)
14°	45 ps	26°C	159(2,8%)	4(2,5%)	45(28,3%)	110(69,2%)	32(65,30%)	3(2,72%)
14°	45 ps	26°C	720(12,6%)	2(0,3%)	189(26,2%)	529(73,5%)	114(59,68%)	5(0,94%)
14°	45 ps	300°C	2667(46,8%)	77(2,9%)	693(26%)	1897(71,1%)	486(63,11%)	30(1,8%)
14°	45 ps	300°C	2298(40,3%)	58(2,5%)	610(26,5%)	1630(70,9%)	445(66,61%)	25(1,5%)
14°	90 ps	26°C	2185(38,3%)	22(1,1%)	578(26,5%)	1584(72,5%)	320(53,33%)	7(0,4%)
14°	90 ps	300°C	2161(37,9%)	100(4,6%)	566(26,2%)	1495(69,2%)	449(67,41%)	36(2,4%)

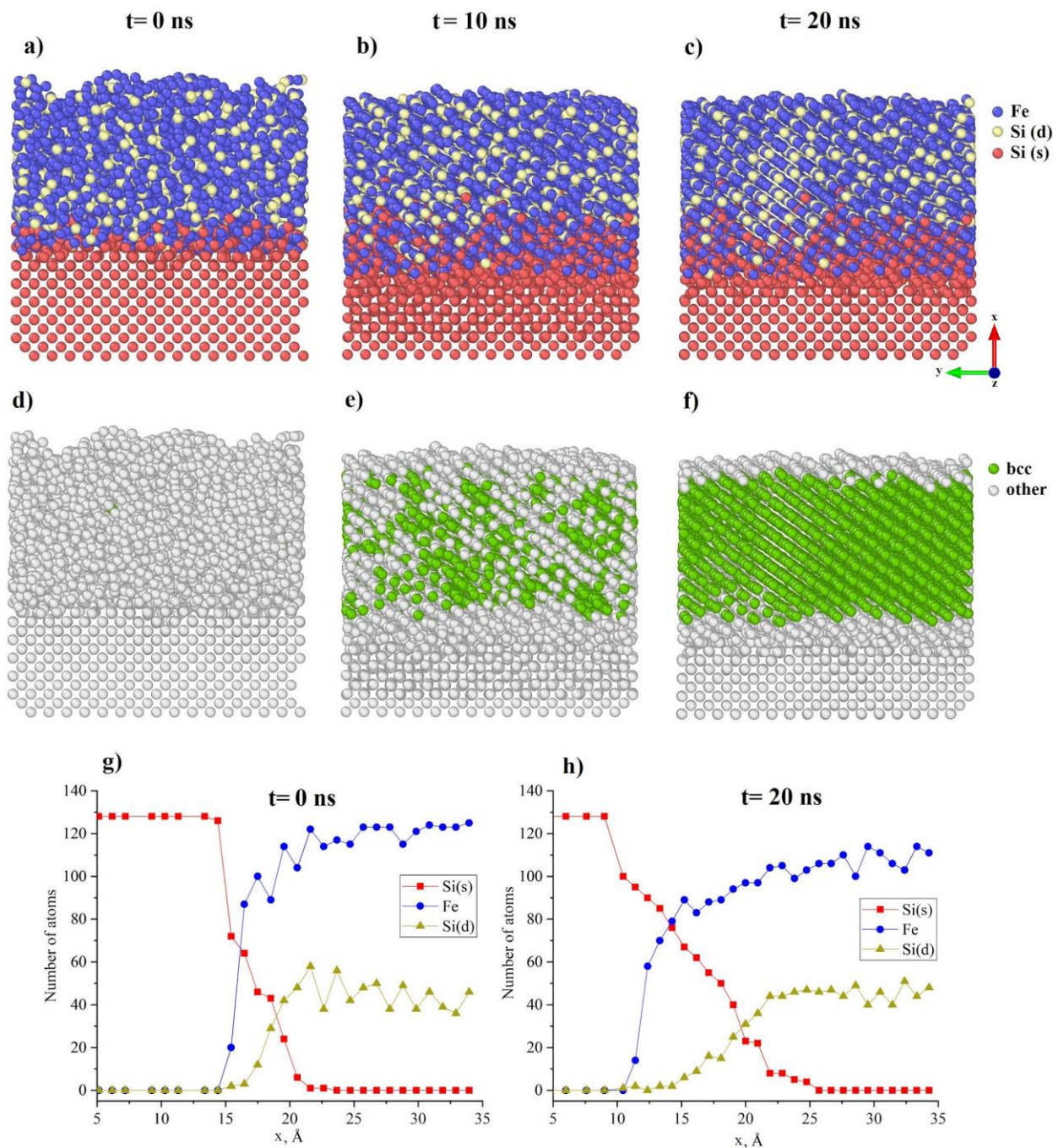


Рис. 1. Изображение отжига напыленной пленки Fe<sub>3</sub>Si на Si (100), при температуре  $T=1200$  К. а, б, с - общий вид пленки, d, e, f - CNA анализ структуры на временах моделирования  $t = 0, 10$  и  $20$  ns. g, h - количество атомов железа и кремния в направлении роста пленки силицида. Si (s) - атомы кремния из подложки, Si (d) - напыленные атомы кремния

В результате моделирования было определено, что поверхность кремниевой подложки в значительной мере влияет на формирование структуры в напыленном слое силицида железа. Как видно из таблицы 1 и 2 на поверхности (100) формирование структуры ОЦК проходит менее активно чем на поверхности (111), а при низких температурах 26 °С и 300°С кристаллическая фаза силицида не формируется совсем. Однако при увеличении температуры и уменьшении скорости напыления процессы формирования кристаллической структуры проходят более активнее в случаях как с поверхностью (100), так и с поверхностью (111). Причем уменьшение скорости напыления может быть идентично увеличению температуры подложки. В частности, на поверхности кремния (111) при частоте напыления  $\Delta t(\text{Fe}) = 9$  ps

с изменением температуры подложки от 26°C до 300°C происходит увеличение атомов с бсс структурой на ~17-28 % (в зависимости от системы напыления). А в системах напыления с одинаковой температурой подложки 300°C, но с изменением частоты напыления с  $\Delta t(\text{Fe}) = 9 \text{ ps}$  до  $\Delta t(\text{Fe}) = 45 \text{ ps}$  происходит увеличение процента атомов отнесенных к бсс структуре на ~6-12 %. Данный эффект может быть объяснен тем, что при уменьшении скорости напыления, атом обладает большим временем для хаотичного движения по поверхности с нахождением наиболее выгодного положения в формирующемся кристалле силицида. С другой стороны, увеличение температуры подложки, при больших скоростях осаждения, дает необходимую кинетическую энергию атому для преодоления энергетических барьеров при движении по поверхности силицида с нахождением энергетически выгодного положения.

При проведении *CNA* анализа сформированной бсс структуры было определено, что в ее состав также входят атомы кремния, которые изначально входили в состав подложки и диффундировали в формирующуюся пленку силицида. Для поверхностей (100) и (111) количество таких атомов было различным, не более 11,8 % для поверхности кремния (100) и не более 4,6% поверхности кремния (111). Количество и расстояние диффузии данных атомов увеличивается с увеличением температуры.

Также при анализе процессов термообработки аморфного слоя силицида железа  $\text{Fe}_3\text{Si}$  было определено, что с началом структурообразования бсс фазы прекращается взаимная диффузия атомов железа и кремния. Диффузию атомов железа вызванную отжигом, можно увидеть как изменение стехиометрии на графиках количества атомов железа и кремния в направлении оси роста пленки на начальном и на конечном шаге отжига (рис. 6 г, h). Ранее в работе [40] при исследовании  $\text{Fe}_3\text{Si}$  on Si(111) было показано, что температурная зависимость статистического смещения для атомов Fe больше чем для атомов Si, что хорошо коррелирует с полученными нами данными. Сравнение рис. 6г и 6h, показывает смещение графика количественного содержания атомов железа на 5 ангстрем в сторону кремниевой пластины без изменения угла наклона графика, в то время как график количества атомов кремния из кремниевой пластины смещается на 5 ангстрем в сторону силицидной пленки со значительным изменением угла наклона. Анализ энтальпий образования и миграции дефектов в структуре  $\text{Fe}_3\text{Si}$  при помощи DFT расчетов в работе [41] продемонстрировал асимметричный характер диффузии атомов железа и кремния в этой структуре. Из-за асимметричного характера взаимной диффузии, в образовавшемся диффузионном слое в области от 10 до 25 ангстрем (рис 6h) соотношение количества атомов Fe к Si отличается от стехиометрии  $\text{Fe}_3\text{Si}$ . Данное поведение также наблюдалось при ступенчатом вакуумном отжиге при температурах 350 °C, 450 °C и 550 °C пленок силицидов  $\text{Fe}_3\text{Si}$  на Si [42]. В частности, было показано, что при температуре отжига 350 °C происходит увеличение толщины пленки на ~19 %, что связано с изменением параметров решетки вызванного диффузией атомов железа в кремниевую подложку и образованием диффузионного слоя силицида. При достижении температуры отжига 450 °C наблюдалось формирование поликристаллического подслоя  $\epsilon\text{-FeSi}$ . С дальнейшим образованием поликристаллической пленки содержащей  $\text{FeSi}$ ,  $\text{Fe}_5\text{Si}_3$  и  $\text{FeSi}_2$  фазы после отжига при 550 °C. Стоит отметить, что толщина диффузионного слоя у исследуемых экспериментальным образом структур составляет десятки нанометров, что на много больше чем в нашей модели. Для подтверждения эффекта остановки взаимной диффузии при образовании бсс фазы в нашем исследовании был предложен подход при котором между аморфной фазой напыленного силицида и кремниевой подложкой взамен диффузионного слоя помещался слой бсс фазы  $\text{FeSi}$  с соотношением атомов 1 к 1, основываясь на экспериментальных данных из [42, 43] с дальнейшим отжигом всей структуры при температуре от 300 до 1200 K в течении 100 нс. В результате моделирования было показано, что внедренный бсс слой  $\text{FeSi}$  не только препятствовал взаимной диффузии атомов железа и кремния, но также инициировал зародышеобразование бсс структуры в аморфном слое  $\text{FeSi}$ . Таким образом проведенное моделирование показало влияние образования структурированных зародышей на предотвращение взаимной диффузии.

Таким образом, в результате проведенного моделирования была предложена методика моделирования процесса напыления бикомпонентных соединений на примере атомов железа и кремния. Теоретическому моделированию процесса напыления пленки силицидов железа на кремниевую подложку различной поверхности показало влияние таких параметров, как ориентация поверхности подложки, температура подложки, угол напыления и скорость напыления атомов на структуру формируемой пленки силицида. Было определено, что формирование ОЦК структуры напыленного силицида железа  $\text{Fe}_3\text{Si}$  проходит более активно на подложках кремния с поверхностью (111), даже при низких температурах. Было показано, что низкий градиент температур между напыляемой пленкой и подложкой способствует формированию БСС фазы в области интерфейса. Однако формирование упорядоченной бсс структуры силицида железа происходит без химического упорядочения, отсутствие которого объясняется близостью энергий разупорядоченной структуры и В2 структуры  $\text{Fe}_3\text{Si}$  рассчитанной как при помощи DFT так и при использовании Bond-order-potentials (от 0.1 до 0.16 эВ). Было продемонстрировано, что формирование упорядоченной кубической структуры в области интерфейса в процессе отжига будет приводить к прекращению взаимной диффузии железа и кремния.

1. Liu W., Wong P. K. J., Xu Y. Hybrid spintronic materials: Growth, structure and properties //Progress in

- Materials Science. – 2019. – T. 99. – C.27-105.
2. Lyashchenko S. A. et al. Analysis of optical and magneto-optical spectra of Fe<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> and Fe<sub>3</sub>Si magnetic silicides using spectral magnetoellipsometry // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2015. – T. 120. – №. 5. – C. 886-893.
  3. Sandalov I. et al. Effect of electron correlations on the Fe<sub>3</sub>Si and  $\alpha$ -FeSi<sub>2</sub> band structure and optical properties // *Physical Review B*. – 2015. – T. 92. – №. 20. – C. 205129.
  4. Yoshitake T. et al. Room-temperature epitaxial growth of ferromagnetic Fe<sub>3</sub>Si films on Si (111) by facing target direct-current sputtering // *Applied Physics Letters*. – 2005. – T. 86. – №. 26. – C. 262505.
  5. Hamaya K. et al. Epitaxial ferromagnetic Fe<sub>3</sub>Si/Si (111) structures with high-quality heterointerfaces // *Applied Physics Letters*. – 2008. – T. 93. – №. 13. – C. 132117.
  6. Varnakov, S.N. Magnetic properties and nonmagnetic phases formation in (Fe/Si)<sub>n</sub> films / S.N. Varnakov, S.V. Komogortsev, S.G. Ovchinnikov, J. Bartolome, J. Sese // *J. Appl. Phys.* – Vol. 104. – 2008. – P. 104.
  7. Badia-Romano L. Thermomagnetic behaviour and compositional irreversibility on (Fe/Si)<sub>3</sub> multilayer films / L. Badia-Romano, J. Rubina, C. Magen et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2014. – Vol. 364. – P. 24.
  8. Yoshitake, T. Interlayer coupling in ferromagnetic epitaxial Fe<sub>3</sub>Si/FeSi<sub>2</sub> superlattices / T. Yoshitake, T. Ogawa, D. Nakagauchi et al. // *J. Appl. Phys.* – 2006. – Vol. 89. – P. 253110-1.
  9. Hirakawa, S. Temperature-dependent current-induced magnetization switching in Fe<sub>3</sub>Si/FeSi<sub>2</sub>/Fe<sub>3</sub>Si trilayered films / S. Hirakawa, S. Takayuki, K. Sakai et al. // *Japanese Journal of Applied Physics*. – 2011. – Vol. 50. – P. 08JD06.
  10. P. C. Srivastava and J. K. Tripathi, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 39, 1465 (2006).
  11. K. S. K. Varadwaj, K. Seo, J. In, P. Mohanty, J. Park, and B. J. Kim, *J. Am. Chem. Soc.* 129, 8594 (2007).
  12. M. C. Bost and J. E. Mahan, *J. Appl. Phys.* 58, 2696 ~1985.
  13. K. Yamaguchi and K. Mizushima, *Phys. Rev. Lett.* 86, 6006 ~2001.
  14. S. H. Liou, S. S. Malhotra, J. X. Shen, M. Hong, J. Kwo, H. S. Chen, and J. P. Mannaerts, *J. Appl. Phys.* <https://doi.org/10.1063/1.352479> 73, 6766 (1993).
  15. Walter S. et al. Interface structure and stabilization of metastable B<sub>2</sub>-FeSi/Si (111) studied with low-energy electron diffraction and density functional theory // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2003. – T. 15. – №. 30. – C. 5207.
  16. Kim S. et al. Direct observation of nanometer-scale strain field around CoSi<sub>2</sub>/Si interface using scanning moiré fringe imaging // *Applied Physics Letters*. – 2014. – T. 104. – №. 16. – C. 161610.
  17. Gomoyunova M. V. et al. Initial stages of iron silicide formation on the Si (1 0 0) 2 × 1 surface // *Surface Science*. – 2007. – T. 601. – №. 21. – C. 5069-5076.
  18. Dascalu M. et al. Controlling the supermagnetic response of tetragonal  $\alpha$ -FeSi<sub>2</sub> nanoislands // *Applied Surface Science*. – 2019. – T. 476. – C.189-197.
  19. Nakano H. et al. Variety of iron silicides grown on Si (0 0 1) surfaces by solid phase epitaxy: Schematic phase diagram // *Surface Science*. – 2007. – T. 601. – №. 22. – C. 5088-5092.
  20. Goldfarb I. et al. Tuning magnetic response of epitaxial iron-silicide nanoislands by controlled self-assembled growth // *Physical Review B*. – 2017. – T. 96. – №. 4. – C. 045415.
  21. Pushkarev R. V. et al. Structural features and surface composition of epitaxial  $\alpha$ -FeSi<sub>2</sub> films obtained by CVD // *Materials & Design*. – 2018. – T. 137. – C.422-429.
  22. Hassani A. et al. Incidence energy effect and impact assessment during homoepitaxial growth of nickel on (001),(111) and (110) surfaces // *Thin Solid Films*. – 2017. – T. 640. – C. 123-133.
  23. Hong Z. H., Hwang S. F., Fang T. H. Atomic-level stress calculation and surface roughness of film deposition process using molecular dynamics simulation // *Computational Materials Science*. – 2010. – T. 48. – №. 3. – C. 520-528.
  24. Hassani A. et al. Molecular dynamics study of growth and interface structure during aluminum deposition on Ni (1 0 0) substrate // *Applied Surface Science*. – 2015. – T. 349. – C.785-791.
  25. El Azrak H. et al. Investigation of fcc and hcp island nucleated during homoepitaxial growth of copper by molecular dynamics simulation // *Superlattices and Microstructures*. – 2019. – T. 127. – C.118-122.
  26. Divi S., Chatterjee A. Study of silicon thin film growth at high deposition rates using parallel replica molecular dynamics simulations // *Energy Procedia*. – 2014. – T. 54. – C.270-280.
  27. Grigoriev F. V., Sulimov V. B., Tikhonravov A. V. Atomistic simulation of the glancing angle deposition of SiO<sub>2</sub> thin films // *Journal of Non-Crystalline Solids*. – 2019. – T. 512. – C.8-102.
  28. Luo Y. et al. Molecular dynamics simulation study of the microstructure of a-Si: H thin film grown by oblique-angle deposition // *Physica B: Condensed Matter*. – 2018. – T. 545. – C.80-85.
  29. Zhu G. et al. Molecular dynamics simulation of temperature effects on deposition of Cu film on Si by magnetron sputtering // *Journal of Crystal Growth*. – 2018. – T. 492. – C.60-66.
  30. Xie L. et al. Molecular dynamics simulations of clusters and thin film growth in the context of plasma sputtering deposition // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2014. – T. 47. – №. 22. – C. 224004.

31. Xie L. et al. Sensitive five-fold local symmetry to kinetic energy of depositing atoms in Cu-Zr thin film growth //Materials. – 2018. – Т. 11. – №. 12. – С. 2548.
32. Tarasov A. S. et al. Approach to form planar structures based on epitaxial Fe<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> films grown on Si (111) //Thin Solid Films. – 2017. – Т. 642. – С. 20-24.
33. Tarasov I. A. et al. Si/Fe flux ratio influence on growth and physical properties of polycrystalline  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> thin films on Si (100) surface //Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. – Т. 440. – С. 144-152.
34. Tarasov A. S. et al. Spin-dependent electrical hole extraction from low doped p-Si via the interface states in a Fe<sub>3</sub>Si/p-Si structure //Semiconductor Science and Technology. – 2019. – Т. 34. – №. 3. – С. 035024.
35. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics //Journal of computational physics. – 1995. – Т. 117. – №. 1. – С. 1-19.
36. Nguyen, Trung Duc. "GPU-accelerated Tersoff potentials for massively parallel molecular dynamics simulations." Computer Physics Communications 212 (2017): 113-122.
37. Stukowski, A. Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO—the Open Visualization Tool. Model. Simul. Mater. Sci. Eng.2009, 18, 015012.
38. Coleman S. P., Spearot D. E., Capolungo L. Virtual diffraction analysis of Ni [0 1 0] symmetric tilt grain boundaries //Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2013. – Т. 21. – №. 5. – С. 055020.
39. Childs H. VisIt: An end-user tool for visualizing and analyzing very large data. – 2012.
40. Maeda Y. et al. Ion beam analysis of Heusler alloy Fe<sub>3</sub>Si epitaxially grown on Si (111) //physica status solidi (c). – 2014. – Т. 11. – №. 11-12. – С. 1570-1573.
41. Dennler S., Hafner J. First-principles study of lattice dynamics and diffusion in DO 3-type Fe<sub>3</sub>Si //Physical Review B. – 2006. – Т. 73. – №. 17. – С. 174303.
42. Volochaev M. N. et al. The regularities of phase formation in Fe<sub>3</sub>Si (111)/Si (111) structure at vacuum annealing //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2017. – Т. 857. – №. 1. – С. 012053.
43. Nakane R., Sugahara S., Tanaka M. Structural and magnetic properties of ferromagnetic Fe<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> (0.18 ≤ x ≤ 0.33) films formed by rapid thermal annealing on silicon-on-insulator substrates //Journal of Applied Physics. – 2015. – Т. 117. – №. 13. – С. 133906.

## 6. Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Большая часть выполненных работ была проведена с использованием пакета для молекулярнодинамических исследований LAMMPS, который позволяет эффективно использовать многопроцессорные вычисления, в том числе технологию GPU. В частности, проведение численного моделирования методом молекулярной динамики процессов напыления пленок на обычных рабочих станциях является трудновыполнимой задачей вследствие большого времени счета. Поэтому использование кластера является определяющим для успешного достижения поставленных целей.

## 7. Перечень публикаций, содержащих результаты работы

1. Cherkasov, I. V., Baidyshev, V. S., Sukhanova, E. V., Visotin, M. A., Süle, P., & Popov, Z. I. (2020). Iron silicides formation on Si (100) and (111) surfaces through theoretical modeling of sputtering and annealing. Applied Surface Science, 527, 146736. (WoS, Scopus)
2. Cherkasov I. V., Baidyshev V. S., Tsuru V.A. Molecular dynamic simulation of melting copper-silicon nanoparticles // J. Phys.: Conf. Ser. 2018, 1015, 032023(WoS, Scopus)
3. Байдышев В.С. Компьютерное моделирование процесса формирования ядро-оболочечных наночастиц Cu@Si // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2018. – Вып.10. – С. 64-71. (ВАК)
4. Чепкасов И.В., Байдышев В.С., Высотин М.А., Попов З.И. Исследование процесса напыления тонких пленок силицида железа на поверхность кремния // Четвертый междисциплинарный научный форум с международным научный форум участием «Новые материалы и перспективные технологии» . Москва. 27-30 ноября 2018 г./ Сборник материалов. ТОМ I - М: ООО «Буки Веди», 2018 г. С. 529-530
5. Высотин М.А., Чепкасов И.В., Попов З.И. Исследование свойств интерфейса тонких пленок силицида марганца и поверхности Si (111) // Четвертый междисциплинарный научный форум с международным научный форум участием «Новые материалы и перспективные технологии». Москва. 27-30 ноября 2018 г./ Сборник материалов. ТОМ I - М: ООО «Буки Веди», 2018 г. С. 112-114.