

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ИНТЕРФЕЙСНЫХ ПЛОСКОСТЕЙ И ДЕФОРМАЦИЙ РЕШЕТКИ В СИСТЕМЕ $\text{Fe}_3\text{Si}/\alpha\text{-FeSi}_2/\text{Si}$ ДЛЯ РОСТА АНИЗОТРОПНЫХ МАГНИТНЫХ НАНОСТРУКТУР

М. А. Высотин^{a,b*}, *И. А. Тарасов*^a, *Н. В. Луточкина*^c, *А. С. Федоров*^{a,b},
С. Н. Варнаков^a, *С. Г. Овчинников*^{a,b}

^a *Институт физики им. Л. В. Киренского
Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^b *Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия*

^c *Сибирский университет науки и технологий
660037, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 5 марта 2025 г.,
после переработки 5 марта 2025 г.
Принята к публикации 31 марта 2025 г.

Интерфейсные плоскости и ориентационные соотношения между ферромагнитным силицидом Fe_3Si и кремнием были спрогнозированы в рамках кристалло-геометрического подхода. Показана возможность образования атомарно гладкого интерфейса между Fe_3Si и подложками $\text{Si}(001)$ и $\text{Si}(111)$, а также $\alpha\text{-FeSi}_2(001)$. На основе анализа ориентационных соотношений в системе $\text{Fe}_3\text{Si}/\alpha\text{-FeSi}_2/\text{Si}$ предложен способ выращивания отдельно стоящих нанокристаллов Fe_3Si на подложках $\text{Si}(001)$ и $\text{Si}(111)$ с помощью нанокристаллов $\alpha\text{-FeSi}_2$ в качестве буферного слоя. В зависимости от типа подложки и параметров роста буферного слоя кристаллическая решетка нанокристаллов Fe_3Si , выращенных в подобной тройной системе, может претерпевать понижение симметрии с кубической до тетрагональной и далее, до орторомбической, со сжатием вдоль направлений $[110]$ на 3.93 % или 5.31 %. Полученные результаты указывают на возможность создания ансамблей ферромагнитных наночастиц с управляемыми магнитными свойствами, которые могут использоваться для систем хранения данных высокой плотности, спинтроники и магнитных датчиков.

DOI: 10.31857/S0044451025070090

1. ВВЕДЕНИЕ

Нанокристаллические магнитные материалы все больше привлекают внимание ученых и инженеров благодаря возможности изучать нетривиальные магнитные явления и большому потенциалу применения в различных сферах. Такие функциональные материалы в первую очередь востребованы для увеличения плотности хранения в энергонезависимых носителях, основанных на принципе магнитной записи [1]. В частности, для преодоления ограничений, связанных с доменными границами, предлагается

использование ансамблей физически разделенных ферромагнитных нанокристаллов, например, нанокристаллов тетрагональной фазы FePt , размеры которых могут составлять всего 3 нм [2]. При этом для чтения данных с массивов такой плотности требуется существенная миниатюризация считывающей головки, что тоже может решаться с помощью нанокристаллов магнитомягких материалов. Также существенный интерес вызывают тонкие пленки, содержащие суперпарамагнитные нанокристаллы, которые могут применяться в магнитных туннельных переходах и в устройствах на их основе [3–5], магнитной памяти [6] и сенсорике [7, 8].

Среди магнитных материалов особо выделяются нанокристаллы железа и его силицида Fe_3Si , которые не содержат в своем составе редкоземельных и

* E-mail: mav@iph.krasn.ru

драгоценных элементов и, следовательно, более перспективны с точки зрения дешевизны и экологичности производства. Ферромагнитный силицид Fe_3Si в последние годы находится в центре внимания исследователей как перспективный материал для спинтроники благодаря высокой спиновой поляризации, низкой магнитокристаллической анизотропии и высокой температуре Кюри (~ 840 К) [9–11]. При этом известно, что величиной магнитной анизотропии можно управлять за счет влияния подложки, а также размера и огранки самих нанокристаллов [9, 11–14]. Кроме того, стоит особо выделить такое преимущество силицида Fe_3Si , как совместимость с технологиями кремниевой микроэлектроники.

Однако в описанных в литературе экспериментах Fe_3Si имеет тенденцию к росту в форме не нанокристаллов, а сплошной пленки [10, 11, 15–17]. Поэтому интересной представляется идея выращивания Fe_3Si на поверхности кристаллов $\alpha\text{-FeSi}_2$, которые будут играть роль буферного слоя, задающего морфологию растущих структур Fe_3Si . Высший силицид $\alpha\text{-FeSi}_2$ образуется при высоких температурах подложки при осаждении атомов металла на поверхность кремния. Низкая смачиваемость поверхности приводит к формированию эндотаксиальных нанокристаллов с различными формами и огранкой, часть которых выдаются над поверхностью, а часть погружена в подложку. Контроль над ориентационными соотношениями и размерами таких нанокристаллов может позволить создавать текстурированную поверхность кремния для последующего формирования ферромагнитных нанокристаллов. Интерфейс $\text{Fe}_3\text{Si}/\alpha\text{-FeSi}_2$ в таком случае может служить инициатором роста определенной ориентации ферромагнитных слоев, невозможной на обычной кремниевой подложке. В дополнение к этому, формируемый гетероинтерфейс становится источником напряжений кристаллической решетки, которые могут использоваться как инструмент направленного изменения электронных и магнитных свойств [18–21]. Конечный малый размер нанокристалла позволяет сохранять такие напряжения, в отличие от случая тонкой пленки, где наведенные механические напряжения снимаются прорастанием дислокаций. В результате этого могли бы быть получены структуры Fe_3Si со значительной магнитной анизотропией [12], величиной которой можно будет управлять [22] с помощью параметров синтеза буферного слоя: размер и форма нанокристаллов $\alpha\text{-FeSi}_2$ будут влиять на анизотропию формы, а ориентационные соотношения растущей фазы с подложкой — на анизотропную деформацию решетки.

В данной работе изучаются возможные ориентационные соотношения и интерфейсные плоскости при росте ферромагнитного силицида Fe_3Si на кремниевых подложках и на островках буферного слоя $\alpha\text{-FeSi}_2$. Для этого применяется кристаллогеометрический подход к прогнозированию гетероинтерфейсов между данными фазами, который был ранее успешно применен к системе высших силицидов железа и кремния [23]. Результаты показывают наиболее вероятные ориентации растущих нанокристаллов силицидов железа, величины сжатия и растяжения их кристаллических решеток.

2. МЕТОДИКА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ИНТЕРФЕЙСОВ

Предлагаемая методика использует систематическую комбинацию двух кристаллогеометрических методов: наложение ячеек ряд-к-ряду (edge-to-edge matching) [24], чтобы найти возможные ориентационные соотношения и интерфейсные плоскости, и последующую максимизацию доли близко-совпадающих узлов (near-coincidence sites, NCS) [25] для прогнозирования относительного положения решеток фаз на границе раздела и для сравнения различных интерфейсов между собой.

Соответственно, наибольшая вероятность образования будет у тех гетероинтерфейсов, которые имеют наибольшее отношение числа близко-совпадающих узлов к полному числу узлов в интерфейсной области. Данное отношение обозначено далее как R и изменяется от 0 до 1. Близко-совпадающими узлами здесь считаются пары узлов, относящиеся к одному химическому элементу и находящиеся на расстоянии не более 0.47 \AA , что соответствует 20 % длины связи Si–Si. Второстепенную роль при этом играет степень сжатия/растяжения растущей пленки для совмещения с подложкой, которая здесь представлена величиной деформации интерфейса

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{1}{2} \sqrt{\varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{yy}^2 + \varepsilon_{xx}\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xy}^2},$$

где $\varepsilon_{\alpha\beta}$ — компоненты тензора деформации в плоскости.

Подробное описание расчетных моделей и используемых параметров представлено в работе [23]. В качестве входных данных использовались кристаллические ячейки кремния ($Fd\bar{3}m$, $a = 5.4307 \text{ \AA}$) и силицидов Fe_3Si ($Fm\bar{3}m$, $a = 5.653 \text{ \AA}$) и $\alpha\text{-FeSi}_2$ ($P4/mmm$, $a = 2.684 \text{ \AA}$, $c = 5.128 \text{ \AA}$).

Таблица. Наиболее вероятные ориентационные соотношения и интерфейсы при росте Fe₃Si на кремнии, α-FeSi₂ на кремнии и Fe₃Si на α-FeSi₂. Приведены только интерфейсы с низкоиндексными плоскостями подложки, номера в первой колонке указывают на порядок этих интерфейсов в списке среди всех плоскостей

№	R	(hkl)	(hkl)	[uvw]	[uvw]	$\tilde{\epsilon}$, %
Fe ₃ Si Si						
		Fe ₃ Si	Si	Fe ₃ Si	Si	
1	0.75	(001)	(001)	[1 $\bar{1}$ 0]	[1 $\bar{1}$ 0]	3.41
2	0.75	(111)	(111)	[1 $\bar{1}$ 0]	[1 $\bar{1}$ 0]	3.41
28	0.40	(111)	(001)	[1 $\bar{1}$ 0]	[1 $\bar{1}$ 0]	4.79
33	0.39	(011)	(011)	[100]	[100]	3.41
α-FeSi ₂ Si						
		α-FeSi ₂	Si	α-FeSi ₂	Si	
1	0.90	(112)	(111)	[0 $\bar{2}$ 1]	[1 $\bar{1}$ 0]	2.15
4	0.75	(001)	(001)	[2 $\bar{2}$ 0]	[1 $\bar{1}$ 0]	0.64
5	0.75	(112)	(111)	[2 $\bar{2}$ 0]	[1 $\bar{1}$ 0]	2.15
6	0.75	(100)	(001)	[0 $\bar{2}$ 1]	[1 $\bar{1}$ 0]	2.98
24	0.50	(112)	(110)	[2 $\bar{2}$ 0]	[1 $\bar{1}$ 0]	7.41
Fe ₃ Si α-FeSi ₂						
		Fe ₃ Si	α-FeSi ₂	Fe ₃ Si	α-FeSi ₂	
1	1.00	(001)	(001)	[1 $\bar{1}$ 0]	[2 $\bar{2}$ 0]	4.37
12	0.52	(001)	(011)	[100]	[200]	2.18
17	0.46	(221)	(001)	[1 $\bar{1}$ 0]	[2 $\bar{2}$ 0]	4.37
22	0.41	(001)	(010)	[100]	[200]	2.26
28	0.38	(331)	(001)	[1 $\bar{1}$ 0]	[2 $\bar{2}$ 0]	3.88

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В первую очередь были определены наиболее выгодные интерфейсы, которые может образовывать ферромагнитный силицид с кремниевыми подложками Si(001), Si(110) и Si(111). Соответствующие ориентационные соотношения, параллельные кристаллографические векторы (с плотной атомной упаковкой), доли близко-совпадающих узлов *R* и величины деформации интерфейсов $\tilde{\epsilon}$ представлены в таблице.

Первые два интерфейса, соответствующие подложкам Si(001) и Si(111), имеют высокую долю близко-совпадающих узлов *R* = 0.75, что указывает на возможность роста качественных эпитаксиальных пленок Fe₃Si на этих подложках. Используемая методика прогнозирования интерфейсов позволяет также смоделировать атомную структуру межфазной границы. Полученные таким образом структуры Fe₃Si(001)||Si(001) и Fe₃Si(111)||Si(111) представ-

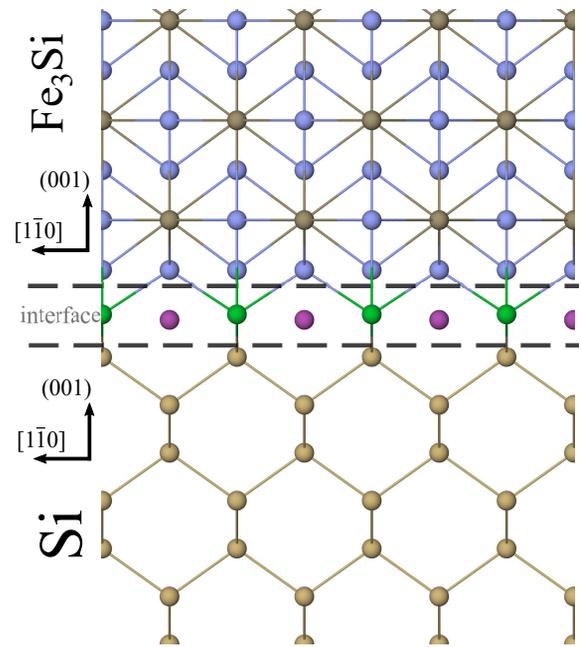


Рис. 1. Атомная структура интерфейса Fe₃Si(001)||Si(001). Бежевые шарики обозначают атомы кремния, синие — железа, зеленые — близко-совпадающие узлы, фиолетовые — несовпадающий узел одной фазы в междоузлии другой

лены на рис. 1 и 2 соответственно. В обоих случаях совмещение решеток происходит по одинаковому сценарию: атомы кремния в Fe₃Si имеют кубическое окружение (образованное восемью связями Si-Fe), из которого можно получить тетрагональное окружение атома Si (как в решетке кремния, с четырьмя связями Si-Si) удалением каждой второй связи. Совпадающие узлы кремния в интерфейсной области образуют переходный вариант с четырьмя связями Si-Fe и двумя, в случае Si(001), или тремя, в случае Si(111), связями Si-Si, что должно составлять стабильную структуру с учетом амфотерного характера кремния как химического элемента. При этом узлы железа из силицида в интерфейсном регионе не накладываются на узлы решетки кремния, а попадают в междоузлия. Формально данные узлы не дают вклада в рассчитываемую долю близко-совпадающих узлов *R*, но энергия такого интерфейса должна быть ниже, чем в случае, когда несовпадающие узлы из решеток разных фаз накладываются друг на друга.

В экспериментальных работах имеются сведения об эпитаксиальном росте Fe₃Si именно на этих двух типах кремниевых подложек, при этом для пленок Fe₃Si//Si(111) характерен более высокий структурный порядок [9–11], чем для Fe₃Si//Si(001) [17]. Следует отметить, что в реальных образцах тонких пленок

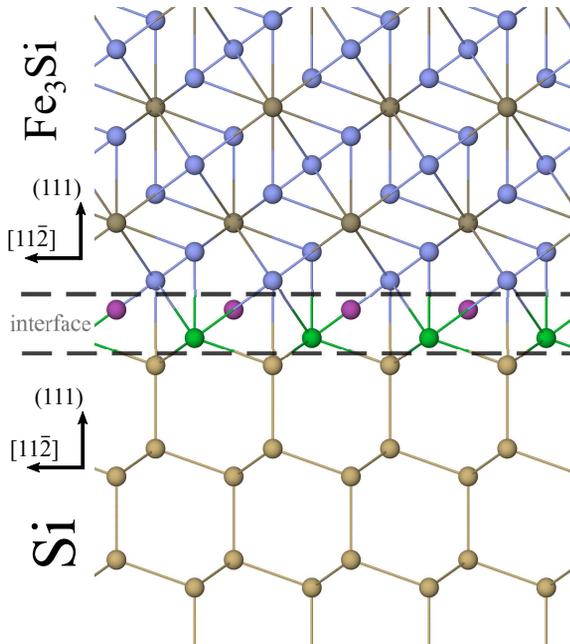


Рис. 2. Атомная структура интерфейса $\text{Fe}_3\text{Si}(111)\|\text{Si}(111)$. Бежевые шарики обозначают атомы кремния, синие — железа, зеленые — близко-совпадающие узлы, фиолетовые — несовпадающий узел одной фазы в междоузлии другой

нок Fe_3Si степень химического упорядочения типа $D0_3$ может варьироваться непрерывно вплоть до полного беспорядка по типу $A2$, тем самым уменьшая плотность близко-совпадающих узлов на интерфейсе. При этом такое перемешивание будет приводить к большему вкладу энтропийной составляющей в полную энергию интерфейса, что позволяет учитывать при расчете параметра R совпадения по типу Fe-Si , а не только Si-Si . В таком случае интерфейс $\text{Fe}_3\text{Si}(111)\|\text{Si}(111)$ будет иметь максимальную величину плотности совпадающих узлов $R = 1$. В случае $\text{Fe}_3\text{Si}(001)\|\text{Si}(001)$ полное совпадение наблюдаться не может.

Для интерфейсов с кремниевой плоскостью (011) наиболее выгодным оказывается интерфейс $\text{Fe}_3\text{Si}(011)\|\text{Si}(011)$, занимающий позицию № 33 среди всех вариантов. Для этого интерфейса вариант построения, аналогичный описанным ранее, не дает высокой плотности близко-совпадающих узлов кремния, и величина R оказывается почти в два раза меньше. Исходя из этого, можно предположить, что эпитаксиальный рост пленок ферромагнитного силицида с образованием атомарно-тонкого интерфейса с подложкой $\text{Si}(011)$ маловероятен. В имеющихся в литературе одиночных сообщениях по синтезу ферромагнитного силицида на

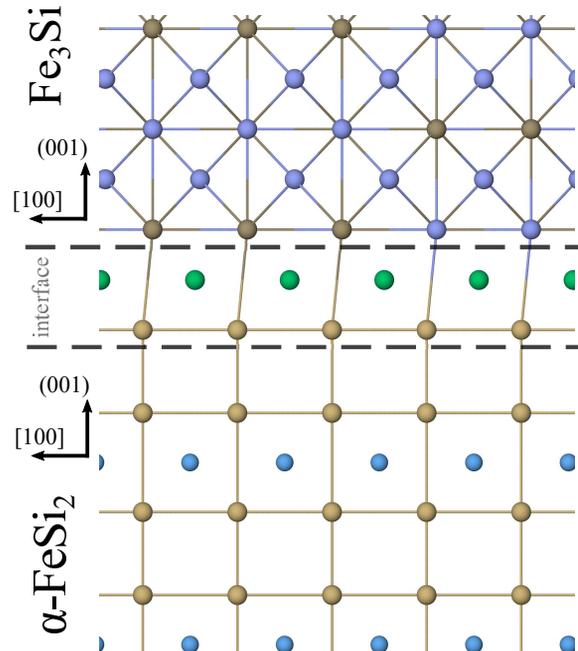


Рис. 3. Атомная структура интерфейса $\text{Fe}_3\text{Si}(001)\|\alpha\text{-FeSi}_2(001)$. Бежевые шарики обозначают атомы кремния, синие — железа, зеленые — близко-совпадающие узлы

поверхности $\text{Si}(011)$ получаемые пленки имеют поликристаллический, высокотекстурированный, но не эпитаксиальный характер [16].

Более выгодным представляется рост ферромагнитной фазы Fe_3Si на плоскостях силицида $\alpha\text{-FeSi}_2$. Для этой пары кристаллических решеток имеется интерфейс с $R = 1.00$, т. е. с идеальным совпадением по узлам (рис. 3). Такое идеальное совмещение кристаллических решеток двух силицидов возможно благодаря наличию атомных плоскостей, содержащих только атомы железа в квадратной решетке — в плоскостях $\text{Fe}_3\text{Si}\{100\}$ и $\alpha\text{-FeSi}_2\{001\}$. Следующие по величине R интерфейсы, с долями совпадающих узлов до 0.75, получаются при совмещении кубической кремниевой подрешетки альфа-силицида с кремниевой подрешеткой Fe_3Si . Наибольшее значение R в интерфейсах, где отсутствует совмещение кубических подрешеток, составляет 0.38 — структура такого интерфейса представлена на рис. 4.

Таким образом, можно прогнозировать, что рост фазы Fe_3Si на $\alpha\text{-FeSi}_2$ возможен, а наиболее благоприятной для роста плоскостью оказывается (001). Соответственно, следует проанализировать возможность формирования нанокристаллов $\alpha\text{-FeSi}_2$ со свободной поверхностью такой ориентации.

В таблице приведены интерфейсы для системы $\alpha\text{-FeSi}_2/\text{Si}$, предсказанные ранее в работе [23].

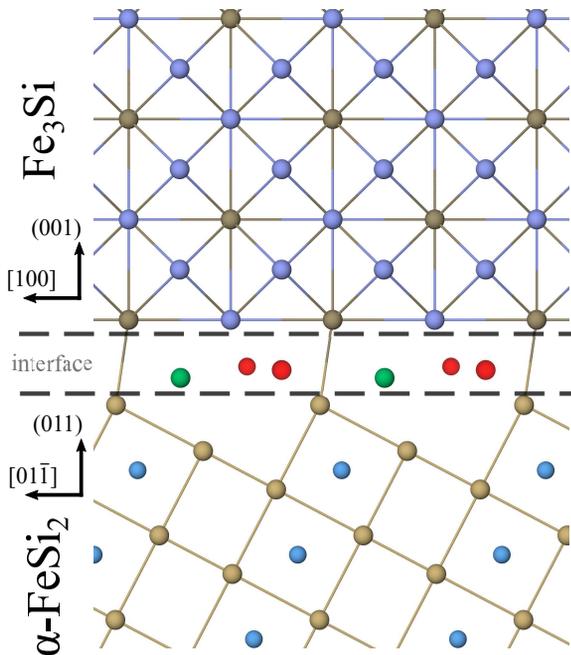


Рис. 4. Атомная структура интерфейса $\text{Fe}_3\text{Si}(001) \parallel \alpha\text{-FeSi}_2(011)$. Бежевые шарики обозначают атомы кремния, синие — железа, зеленые — близко-совпадающие узлы, красные — близкое расположение несовпадающих узлов

Первый интерфейс, имеющий наиболее высокую долю близко-совпадающих узлов $R = 0.90$, намного превышает по этому параметру все остальные интерфейсы не только для $\alpha\text{-FeSi}_2//\text{Si}$, но и для других силицидов, растущих на кремнии. Поскольку высокие значения R указывают на низкие величины удельной энергии межфазной границы, предполагается, что образование интерфейса $\alpha\text{-FeSi}_2(112) \parallel \text{Si}(111)$ настолько выгодно, что заставляет нанокристаллы силицида вращаться в глубь кремниевой подложки (001) [19, 26, 27]. При этом, по данным квантово-химических расчетов, наиболее выгодными свободными поверхностями $\alpha\text{-FeSi}_2$ являются плоскости (001) и (100) [28]. В результате этих тенденций к вращению в глубь подложки и к огранке по плоскостям (001) и (100) силицид $\alpha\text{-FeSi}_2$ в обычных условиях не образует плоских сплошных пленок, а растет в виде отдельно стоящих нанокристаллов [29]. Также могут образовываться другие интерфейсы, включая $\alpha\text{-FeSi}_2(001) \parallel \text{Si}(001)$, однако их доля близко-совпадающих узлов R намного ниже.

Таким образом, теоретические и экспериментальные свидетельства указывают на то, что при росте $\alpha\text{-FeSi}_2$ на чистом кремнии будут образовываться

отдельные нанокристаллы, большинство из которых содержат поверхность (001), которая может служить площадкой для эпитаксиального роста $\text{Fe}_3\text{Si}(001)$. В первую очередь, это нанокристаллы с плоским интерфейсом с подложкой $\text{Si}(111)$ и нанокристаллы $\alpha\text{-FeSi}_2$, растущие в подложку $\text{Si}(001)$ (рис. 5). И в том, и в другом случае последующее осаждение атомов железа и кремния в соотношении 3:1 при низких температурах ($300 \text{ K} < T < 450 \text{ K}$) будет приводить к росту стехиометричной фазы Fe_3Si на ограниченных в размерах гранях $\alpha\text{-FeSi}_2(001)$, а на чистой поверхности кремниевой подложки за счет диффузии атомов Si будет образовываться более богатая кремнием фаза. Более того, фаза $\alpha\text{-FeSi}_2$ является наиболее богатой кремнием и высокотемпературной фазой среди силицидов, вследствие чего пленки $\alpha\text{-FeSi}_2//\text{Si}$ не претерпевают фазовых переходов при отжиге, в отличие от $\beta\text{-FeSi}_2$ — другого высшего силицида, или Fe_3Si , который вступает в реакцию с подложкой и превращается в парамагнитные FeSi и FeSi_2 . Таким образом, использование такого буферного слоя позволяет вырастить массив ограниченных в размерах нанокристаллов ферромагнитного силицида Fe_3Si .

Кроме этого, в зависимости от режима роста буферного слоя $\alpha\text{-FeSi}_2$ разными будут и механические напряжения, вызываемые рассогласованием решеток на интерфейсах, а также ориентации плоскостей Fe_3Si , что будет сказываться на анизотропии магнитных свойств получаемых пленок ферромагнитного силицида. Величины деформаций решеток Fe_3Si могут быть рассчитаны на основе спрогнозированных выше ориентационных соотношений.

Для начала рассмотрим базовый случай, когда Fe_3Si растет на чистой кремниевой подложке, с которым далее будут сравниваться тройные системы $\text{Fe}_3\text{Si} // \alpha\text{-FeSi}_2 // \text{Si}$. Межфазная граница Fe_3Si с кремнием строится при совмещении кубических решеток (интерфейсы №№ 1, 2, 33 из таблицы), и деформация решетки растущей фазы происходит изотропно в плоскости интерфейса и составляет 3.93 % сжатия. Стоит заметить, что в перпендикулярном направлении решетка Fe_3Si может релаксировать и растягиваться на величину, пропорциональную коэффициенту Пуассона.

При росте нанокристаллов $\alpha\text{-FeSi}_2$ на $\text{Si}(111)$ их кристаллическая решетка будет растягиваться в плоскости (112), причем растяжение будет анизотропным вследствие изначальной анизотропии самой фазы $\alpha\text{-FeSi}_2$: вдоль плотноупакованного направления $[1\bar{1}0]$ силицид растягивается на 1.17 %, а вдоль перпендикулярного ему $[1\bar{1}\bar{1}]$ — на 4.25 %. В

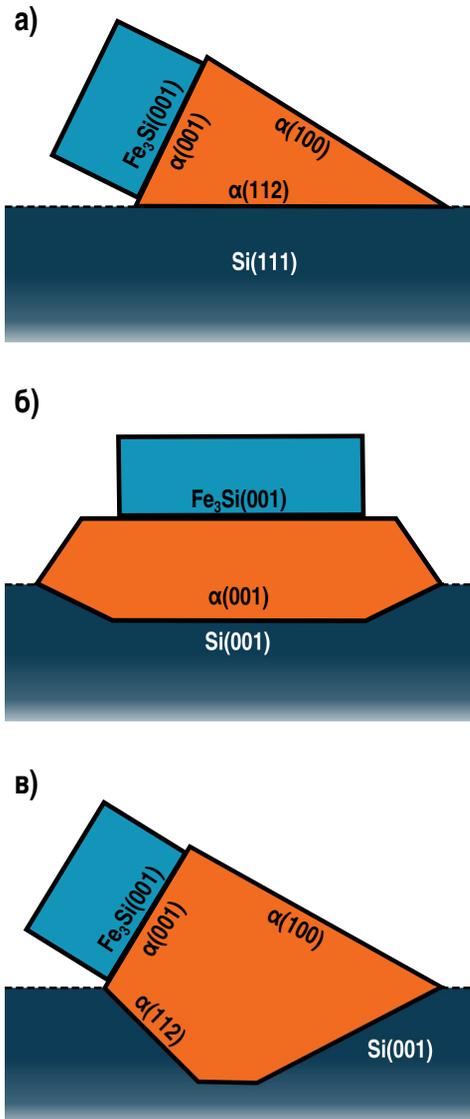


Рис. 5. Схематическое изображение возможных тройных структур $\text{Fe}_3\text{Si}/\alpha\text{-FeSi}_2/\text{Si}$ с ростом нанокристаллов Fe_3Si на подложках $\text{Si}(111)$ (а) и $\text{Si}(001)$ (б, в). Рост Fe_3Si на гранях $\alpha\text{-FeSi}_2$, отличных от (001), с образованием менее выгодных интерфейсов не изображен для удобства

направлении, перпендикулярном плоскости, решетка силицида также может релаксировать.

Далее мы исходим из предположения, что при росте зародыша ферромагнитной фазы Fe_3Si на грани (001) нанокристалла $\alpha\text{-FeSi}_2$ параметры решетки зародыша будут подстраиваться под параметры решетки $\alpha\text{-FeSi}_2$. При этом возможны два варианта: либо нанокристалл $\alpha\text{-FeSi}_2$ достаточно большой и напряжения на интерфейсе скомпенсированы путем образования дислокаций или межзеренных границ, либо нанокристалл слишком мал и напряжения

от интерфейса распространяются по всей решетке и передаются на свободную грань (001), на которой предполагается рост Fe_3Si . В первом случае величина сжатия решетки Fe_3Si не зависит от типа кремниевой подложки и ориентации нанокристалла $\alpha\text{-FeSi}_2$ на ней и составит 5.31 %, т. е. больше, чем на просто кремниевой подложке, что должно отразиться на величине магнитокристаллической анизотропии. В случае, когда напряжение от интерфейса $\alpha\text{-FeSi}_2$ с кремнием передается на решетку нанокристалла Fe_3Si , растущего на гранях нанокристалла (001), величина и анизотропия деформации ферромагнитного силицида может быть разной в зависимости от типа кремниевой подложки и того, как на ней растет $\alpha\text{-FeSi}_2$.

Для $\text{Si}(111)$ растяжение решетки силицида на интерфейсе $\alpha\text{-FeSi}_2(112)\|\text{Si}(111)$ передается на грань (001) только вдоль направления $[1\bar{1}0]$, в перпендикулярном направлении решетка $\alpha\text{-FeSi}_2$ будет релаксировать. Поэтому нанокристаллы Fe_3Si , растущие на этой грани (см. рис. 5 а), окажутся сжаты на 3.93 % в направлении $[1\bar{1}0]$ и на 5.31 % в направлении $[110]$. При этом плоскость $\text{Fe}_3\text{Si}(001)$ окажется под углом 53.5° к поверхности подложки $\text{Si}(111)$.

Для $\text{Si}(001)$, в первую очередь, предполагается врастание нанокристалла $\alpha\text{-FeSi}_2$ в глубь подложки (см. рис. 5 б) и образование интерфейса $\alpha\text{-FeSi}_2(112)\|\text{Si}(111)$. Поэтому кристаллические решетки $\alpha\text{-FeSi}_2$ и, следовательно, Fe_3Si будут деформироваться так же, как и в предыдущем случае. Однако ориентация интерфейсной плоскости $\text{Fe}_3\text{Si}(001)$ будет другой, так как параллельная ей грань $\alpha\text{-FeSi}_2(001)$ может быть ориентирована относительно одного из трех симметричных направлений, лежащих в плоскости $\text{Si}(111)$, по которой происходит врастание нанокристалла дисилицида. Таким образом, растущий интерфейс $\text{Fe}_3\text{Si}(001)\|\alpha\text{-FeSi}_2(001)$ может оказаться под углами 71.7° и 47.2° к поверхности подложки $\text{Si}(001)$.

Для подложки $\text{Si}(001)$ в определенных случаях [29] также возможен рост нанокристаллов $\alpha\text{-FeSi}_2(001)$ (см. рис. 5 в). При выращивании Fe_3Si на таких нанокристаллах параметры решетки кремния «передаются» через буферный слой, и сжатие решетки ферромагнитного силицида будет изотропным в плоскости и составит 3.93 %, так же как и в простой пленке $\text{Fe}_3\text{Si}(001)\|\text{Si}(001)$. В этом случае плоскость $\text{Fe}_3\text{Si}(001)$ будет параллельна плоскости подложки. Кроме этого, в случае реализации интерфейса № 6 $\alpha\text{-FeSi}_2(100)\|\text{Si}(001)$ нанокристаллы Fe_3Si будут расти на боковых гранях (001) кристаллов $\alpha\text{-FeSi}_2$ и при этом испытывать

сжатие на 5.31 % в направлении $\text{Fe}_3\text{Si}[001]$ и 3.93 % в направлении $\text{Fe}_3\text{Si}[010]$. Плоскость $\text{Fe}_3\text{Si}(001)$ также окажется параллельна плоскости подложки.

Как мы видим, решетка ферромагнитного силицида Fe_3Si , выращенного на буферном слое с нанокристаллами $\alpha\text{-FeSi}_2$, окажется сжата на 3.93 % в направлении $[\bar{1}\bar{1}0]$, на 5.31 % в направлении $[110]$ и будет свободно релаксировать в направлении $[001]$. Такое понижение симметрии с кубической до орторомбической должно изменить величины магнитокристаллической анизотропии и коэрцитивной силы. При этом ориентация легкой оси (или легкой плоскости) будет различной для пленок, выращенных на $\text{Si}(001)$ и $\text{Si}(111)$. Таким образом, использование системы $\text{Fe}_3\text{Si}/\alpha\text{-FeSi}_2/\text{Si}$ дает дополнительную возможность управления магнитными свойствами.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ ориентационных соотношений и интерфейсных плоскостей в системе $\text{Fe}_3\text{Si}/\alpha\text{-FeSi}_2/\text{Si}$ показывает ее перспективность для получения ансамблей ферромагнитных наночастиц, которые могут использоваться для различных применений. Особенности тройной системы $\text{Fe}_3\text{Si}/\alpha\text{-FeSi}_2/\text{Si}$ являются предполагаемая меньшая интерфейсная энергия, контролируемое ограничение латеральных размеров нанокристаллов Fe_3Si и большая термическая стабильность вследствие более высоких барьеров диффузии при обмене кремнием и железом между подложкой и Fe_3Si через слой стабильного высшего силицида $\alpha\text{-FeSi}_2$. При этом пленки кубического ферромагнитного силицида Fe_3Si , выращенные на нанокристаллах $\alpha\text{-FeSi}_2$, будут приобретать анизотропные искажения кристаллической решетки (3.93–5.31 % в зависимости от направления) и, как следствие, различные магнитные свойства, определяемые не только типом кремниевой подложки, но и параметрами роста буферного слоя.

Благодарности. Исследование выполнены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта № 20-42-240012.

ЛИТЕРАТУРА

1. N. A. Frey and S. Sun, in *Inorganic Nanoparticles*, ed. by C. Altavilla and E. Ciliberto, CRC Press, London (2017), p. 33.
2. K. D. Gilroy, A. Ruditskiy, H.-C. Peng et al., *Chem. Rev.* **116**, 10414 (2016), DOI:10.1021/acs.chemrev.6b00211.
3. J. Torrejon, M. Riou, F. A. Araujo et al., *Nature* **547**, 428 (2017), DOI:10.1038/nature23011.
4. W. A. Borders, A. Z. Pervaiz, S. Fukami et al., *Nature* **573**, 390 (2019), DOI:10.1038/s41586-019-1557-9.
5. L. Schnitzspan, M. Kläui, and G. Jakob, *Phys. Rev. Appl.* **20**, 024002 (2023), DOI:10.1103/PhysRevApplied.20.024002.
6. J. J. Nowak, R. P. Robertazzi, J. Z. Sun et al., *IEEE Magn. Lett.* **7**, 1 (2016), DOI:10.1109/LMAG.2016.2539256.
7. D. L. Graham, H. Ferreira, J. Bernardo et al., *J. Appl. Phys.* **91**, 7786 (2002), DOI:10.1063/1.1451898.
8. R. L. Edelstein, C. R. Tamanaha, P. E. Sheehan et al., *Biosens. Bioelectron.* **14**, 805 (2000), DOI:10.1016/S0956-5663(99)00054-8.
9. D. Odkhuu, W. S. Yun, and S. C. Hong, *Thin Solid Films* **519**, 8218 (2011), DOI:10.1016/j.tsf.2011.03.093
10. K. Hamaya, K. Ueda, Y. Kishi et al., *Appl. Phys. Lett.* **93**, 132117 (2008), DOI:10.1063/1.2996581.
11. И. А. Яковлев, С. Н. Варнаков, Б. А. Беляев и др., *Письма в ЖЭТФ* **99**, 610 (2014), DOI:10.7868/S0370274X14090082.
12. Б. А. Беляев, А. В. Изотов, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 44 (2016), DOI:10.1134/S0021364016010033.
13. D. Zhang, Y. Xue, D. Tian et al., *Appl. Surf. Sci.* **506**, 144691 (2020), DOI:10.1016/j.apsusc.2019.144691.
14. A. Grunin, S. Shevyrtalov, K. Chichay et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **563**, 170047 (2022), DOI:10.1016/j.jmmm.2022.170047.
15. Н. Г. Барковская, А. И. Грунин, Е. С. Клементьев и др., *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* **12**, 28(2020), DOI:10.31857/s1028096020120092.
16. K. Ueda, R. Kizuka, H. Takeuchi et al., *Thin Solid Films* **515**, 8250 (2007), DOI:10.1016/j.tsf.2007.02.052.
17. K. Trunov, M. Walterfang, W. Keune et al., *Thin Solid Films* **516**, 6205 (2008), DOI:10.1016/j.tsf.2007.11.108.
18. П. В. Прудников, В. В. Прудников, М. А. Медведева, *ЖЭТФ* **100**, 501 (2014), DOI:10.7868/S0370274X14190060.

19. J. K. Tripathi, G. Markovich, and I. Goldfarb, *Appl. Phys. Lett.* **102**, 251604 (2013), DOI:10.1063/1.4812239.
20. J. K. Tripathi, R. Levy, Y. Camus et al., *Appl. Surf. Sci.* **391**, 24 (2017), DOI:10.1016/j.apsusc.2016.02.168.
21. J. K. Tripathi, M. Garbrecht, W. D. Kaplan et al., *Nanotechnology* **23**, 495603 (2012), DOI:10.1088/0957-4484/23/49/495603.
22. А. В. Минькова, В. В. Прудников, П. В. Прудников, *ЖЭТФ* **164**, 782 (2023), DOI:10.31857/S0044451023110081.
23. M. A. Visotin, I. A. Tarasov, A. S. Fedorov et al., *Acta Crystallogr. B* **76**, 469 (2020), DOI:10.1107/S2052520620005727.
24. M.-X. Zhang, P. M. Kelly, M. Qian et al., *Acta Mater.* **53**, 3261 (2005), DOI:10.1016/j.actamat.2005.03.030.
25. Q. Liang and W. T. Reynolds Jr., *Metall. Mater. Trans. A* **29**, 2059 (1998), DOI:10.1007/s11661-998-0032-2.
26. I. A. Tarasov, I. A. Yakovlev, M. S. Molokeev et al., *Mater. Lett.* **168**, 90 (2016), DOI:10.1016/j.matlet.2016.01.033.
27. R. V. Pushkarev, N. I. Fainer, H. Katsui et al., *Mater. Des.* **137**, 422 (2018), DOI:10.1016/j.matdes.2017.10.030.
28. M. A. Visotin, I. A. Tarasov, A. S. Fedorov et al., in *The Fourth Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (ASCO-NANOMAT 2018)* (2018), p. 133.
29. I. A. Tarasov, T. E. Smolyarova, I. V. Nemtsev et al., *CrystEngComm* **22**, 3943 (2020), DOI:10.1039/d0ce00399a.