

УДК 530.1: 519.21 + 621.382

ОСОБЕННОСТИ КЛАСТЕРИЗАЦИИ БИДИСПЕРСНЫХ ФАЗ

Е.Г. Волков, С.С. Дереченник, А.С. Тушский, А.С. Дереченник

УО «Брестский государственный технический университет», Брест, Беларусь

Зарождение и рост многочастичных образований (кластеров) – одна из важнейших стадий формирования тонких поликристаллических пленок на подложках, которая во многом определяет морфологические особенности пленочной структуры, и, в конечном итоге – электрофизические параметры созданных на ее основе тонкопленочных элементов. Одним из эффективных средств исследования как структурно-морфологических, так и топологических свойств образующихся поликристаллических структур является имитационное атомно-статистическое моделирование, основанное на известных механизмах нарастания кристаллической фазы на поверхности и задаваемых технологических параметрах процесса. Поликристаллические пленки из металлов и их сплавов представляются при этом в виде развивающейся системы многоатомных кластеров, которые можно характеризовать также и в терминах фрактальной геометрии.

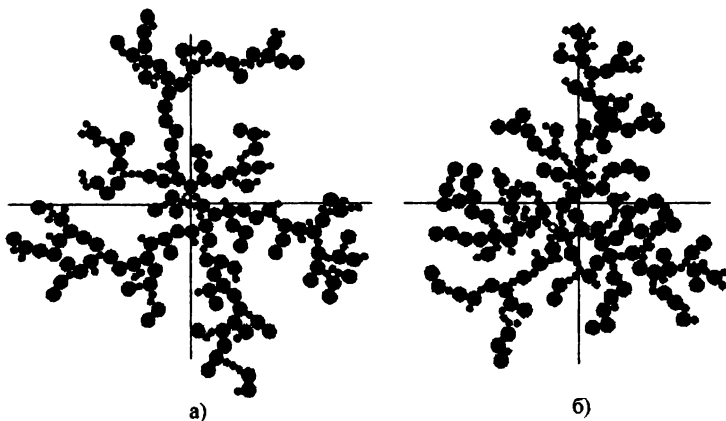
Для моделирования многочастичных кластеров исходят из различных механизмов агрегации частиц в кластер, которые отличаются траекторией движения частиц по поверхности подложки, а также условиями их при-

соединения (прилипания) к растущему агрегату. Так, наиболее изученным является механизм ограниченной диффузией агрегации (ОДА), где движение частиц приближается ломаными линиями, имеющими случайные направление и длину каждого отрезка. Модификацией этого механизма является ограниченная диффузией вероятностная агрегация (ОДВА), в которой частица присоединяется к кластеру не в каждом случае соприкосновения, а с задаваемой вероятностью, зависящей от термодинамических параметров процесса. Возможен вариант приближения траекторий частиц прямыми линиями со случайным направлением, что соответствует механизму баллистической агрегации (БА).

Кластеры, образующиеся по различным механизмам, очевидно, будут характеризоваться различной фрактальной размерностью. Так, установлено, что механизму ОДА соответствует размерность 1,71 кластера в двумерном евклидовом пространстве, а кластеры коллоидного золота (механизм их роста близок к БА) имеют размерность в пределах 1,75...1,79 [1]. Ранее нами показано, что при снижении вероятности прилипания частицы с 1,0 до 0,01 фрактальная размерность кластеров алюминия, образующихся по механизму ОДВА, повышается примерно логарифмически в интервале 1,71...1,96 [2].

Известные теоретические и экспериментальные исследования структуры кластеров, в том числе на имитационных моделях, как правило, относятся к монодисперсным системам, частицы которых одинаковы или весьма близки по размерам. Имеется, однако, чрезвычайно обширный класс объектов, в том числе и применяемых в электронике, дисперсная фаза которых состоит из частиц различного размера – например, многокомпонентные материалы, полидисперсные структуры и др. Агрегация частиц в подобных системах может иметь существенные особенности, что необходимо отразится и на фрактальных свойствах образующихся кластеров.

В работе исследованы кластеры, агрегирующие из поверхностной дисперсной фазы частиц двух различных размеров (бидисперсной фазы) по механизмам ОДА и БА, полученные с помощью внерешеточного имитационного моделирования. Соотношение диаметров больших и малых частиц варьировалось в пределах 1...10, кластеры включали не менее 25 000 (ОДА) и 50 000 (БА) частиц с равным количественным составом частиц обоих типов. Классический способ определения фрактальной размерности кластера по соотношению «число частиц – радиус гирации кластера» модифицирован в части использования зависимости «масса – радиус гирации кластера» (аналог массы в данном случае – суммарная площадь частиц). Типичные кластеры, порождаемые моделирующей программной системой на начальных этапах генерации, изображены на рисунке.



Кластеры, образующиеся в результате двумерной агрегации из бидисперсной фазы по механизмам ОДА (а) и БА (б). Число частиц – 216, соотношение по диаметру – 2:1, по количеству – 1:1. Центр масс кластера находится на пересечении координатных осей, начальная частица изображена окружностью без заливки

Сравнительный анализ структур, порождаемых по рассматриваемым механизмам, показывает, что плотность массы кластеров вида БА выше, они содержат большее количество замкнутых (кольцевых) фрагментов, их форма напоминает структуры коллоидного типа. Отметим, что координаты центра масс кластера – величина относительно устойчивая на всех этапах его роста, за исключением начального (примерно до 100 первых частиц): в кластерах вида ОДА отклонение положения центра масс относительно начальной частицы не превышало 1,5 диаметров, в кластерах вида БА – находилось обычно в пределах 3...5 диаметров большей частицы. Фрактальная размерность кластеров видов ОДА и БА, усредненная по выборке модельных образцов, составила, соответственно: для монодисперсного набора частиц – 1,71 и 1,75, для бидисперсной фазы с равным числом частиц, отличающихся в 2 раза по диаметру – 1,74 и 1,77. Полученные результаты позволяют утверждать о подобии исследуемых объектов структурам, соответственно, диффузионного и коллоидного типов.

Установлено, что фрактальная размерность кластеров, вычисляемая по соотношению «масса – радиус гирации», для обоих механизмов агрегации существенно зависит от размерного состава дисперсной фазы. Так, при изменении соотношения диаметров большей и меньшей частиц размерность кластера сначала экспоненциально возрастает, а затем снижается, асимптотически приближаясь к начальному значению (размерности моно-

дисперсного кластера). Экстремум данной зависимости для кластеров вида ОДА, при количественном составе бидисперсной фазы 1:1, соответствует примерному отношению радиусов 2,5 и достигает значения 1,81.

Проведено сравнение различных методов вычисления фрактальной размерности кластеров на основе зависимостей «масса (плотность массы) – радиус», а именно – поэтапно с ростом кластеров либо после завершения их формирования, а также с определением суммарной массы внутри некоторого радиуса либо массы на таком радиусе (внутри кольца). Обнаружено, что перечисленные методы, примерно равноценные в исследованиях монодисперсных кластеров, могут давать существенно отличающиеся результаты применительно, в частности, к кластерам из бидисперсных фаз. Данный факт свидетельствует о более сложных структурных закономерностях кластеризации таких фаз, и заслуживает дальнейшего исследования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Федер Е. Фракталы. – М.: Мир, 1991. – 254 с.
2. Моделирование монослойной агрегации и вертикального роста кластеров при физическом осаждении металлической пленки / С.С. Дереченник, А.В. Раткевич, В.С. Разумейчик, В.В. Баранов // Вестник Полоцкого гос. ун-та. – Сер. Фундаментальные науки. – 2004. – № 11. – С. 79 – 85.