

DOI: 10.7242/1999-6691/2016.9.1.6

УДК 539.216+539.231

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОСАЖДЕНИЯ НАНОПЛЕНОК НА ПОДЛОЖКУ ИЗ ПОРИСТОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ МЕТОДАМИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.В. Вахрушев^{1,3}, А.В. Северюхин¹, А.Ю. Федотов^{1,3}, Р.Г. Валеев²¹Институт механики УрО РАН, Ижевск, Российская Федерация²Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Российская Федерация³Ижевский государственный технический университет им. М.Т. Калашикова, Ижевск, Российская Федерация

В работе приведена постановка задачи и описание методики изучения процессов осаждения нанопленок на подложку из пористого алюминия. Рассмотрены уравнения, составляющие основу многочастичного потенциала, отвечающего модифицированному методу погруженного атома. В качестве осаждаемых материалов брались золото, серебро, железо, галлий, германий и палладий. Расчеты показали, что существуют разные механизмы зарастивания пористой подложки из оксида алюминия данными материалами. Для каждого из типов осаждаемых атомов были зафиксированы свои процессы взаимодействия наноструктур и механизмы зарастивания подложек и пор. Так, атомы серебра и золота равномерно закрывали поры нанопленкой без проникновения внутрь их, имело место лишь незначительное проседание нанопленки в поры. Атомы железа генерировали наноструктуры в безвоздушной среде над подложкой; зарастивание подложки происходило по островному принципу; мелкие наноструктуры железа на подложке постепенно укрупнялись и группировались в большие по размеру; наблюдалось образование наноструктуры железа внутри поры. При осаждении атомов галлия пора также полностью не зарастала, а нанопленка на поверхности подложки формировалась в виде отдельных областей; были заметны небольшие наночастицы галлия на поверхности подложки. Палладий порождал равномерную пленку с небольшим проседанием в области поры; при осаждении атомов палладия непосредственно над порой на протяжении всего этапа конденсации сохранялось отверстие, которое так и не заросло. У всех типов осаждаемых атомов имелись единичные экземпляры, которые достигали дна поры. Наиболее полное и плотное зарастивание поры зафиксировано при эпитаксии галлия. Установлено, что пора, заполненная атомами, может рассматриваться как квантовая точка и использоваться для получения оптических и электрических эффектов. Сформулированы практические рекомендации для производства нанопленочных материалов различной структуры. Методики осаждения наноразмерных пленок могут применяться для контроля в конкретных технологических процессах, а также для прогнозирования и проектирования нанопленочных материалов.

Ключевые слова: пористый оксид алюминия, нанопленки, моделирование, модифицированный метод погруженного атома, молекулярная динамика

INVESTIGATION OF DEPOSITION OF NANOFILMS ON A POROUS ALUMINIUM OXIDE SUBSTRATE BY MATHEMATICAL MODELING TECHNIQUES

A.V. Vakhrushev^{1,3}, A.V. Severyukhin¹, A.Yu. Fedotov^{1,3} and R.G. Valeev²¹Institute of Mechanics UB RAS, Izhevsk, Russian Federation²Physico-Technical Institute UB RAS, Izhevsk, Russian Federation³Kalashnikov Izhevsk State Technical University, Izhevsk, Russian Federation

The paper presents a formulation of the problem and the methods used to study the deposition of nanofilms on a porous alumina substrate. The equations of a modified embedded-atom method that form the basis for the many-particle interaction potential are described. Aurum, argentum, iron, gallium, germanium and palladium were used as the materials to be deposited. Various mechanisms involved in the occlusion of the pores of alumina substrate with these materials were determined. Different processes of interaction between the nanostructures were observed for different types of deposited atoms. Slight sagging of nanofilms occurred in the region of a pore. The iron atoms formed nanostructures in the air above the substrate. The coating substrate occurred on island basis. Small iron nanostructures on the substrate were gradually being consolidated and grouped into larger nanostructures. Generation of iron nanostructures within the pores was observed. In the process of deposition of gallium atoms, a pore was not completely occluded as well, and a nanofilm was formed on the substrate surface as separate areas. Small gallium nanoparticles were formed on the substrate surface. Palladium generated a uniform nanofilm with a slight sagging in the pore area. When palladium atoms were deposited directly over the hole, throughout the condensation phase one could observe a hole, which was not occluded during the modeling process. In all types of deposited atoms there were single atoms, which reached the bottom of the pores. The most complete and dense filling of pores was obtained in the course of epitaxy of gallium. Pores filled by atoms can be regarded as quantum dots and used to obtain optical and electrical effects. Recommendations for obtaining nanofilm materials of different structures are presented. Nanoscale film deposition techniques show promise for some specific manufacturing processes and can be used to predict the behavior of available nanofilm materials and to create new nanofilm materials.

Key words: porous alumina, nanofilms, simulation, modified embedded-atom method (MEAM), molecular dynamics

1. Введение

В настоящее время ведется много работ по созданию массивов упорядоченных наночастиц с контролируемыми свойствами и размерами для применения в наноэлектронике. К материалам, обладающим пространственным упорядочением пор в объеме вещества, относятся супрамолекулярные материалы, цеолиты, мезопористые молекулярные сита, мезопористые структуры на основе блоксополимеров и пленки из пористого оксида алюминия. По мнению авторов настоящей статьи, один из наиболее перспективных материалов, в силу широкого спектра возможных приложений, — это

пористый оксид алюминия. Пленка из пористого оксида алюминия представляет собой систему упорядоченных пор с плотнейшей гексагональной упаковкой, где поры располагаются перпендикулярно поверхности подложки. Размеры пор и расстояния между соседними порами можно варьировать в достаточно широком диапазоне.

Материалы на основе пористого алюминия нашли применение в технике, например в микро- и наноэлектронике [1, 2], как чувствительные слои для сенсорных устройств [3, 4]. Поры оксида алюминия заполняют диэлектрическими материалами, что впоследствии позволяет получить пленку с низкой диэлектрической проницаемостью [5]. Перспективным является и использование пористого оксида алюминия в качестве матрицы для синтеза наноматериалов.

Кроме того, интерес к таким структурам связан как с возможностью изучения на их примере фундаментальных задач (процессов самоорганизации и магнетизма в пространственно-упорядоченных наносистемах), так и с решением широкого круга прикладных вопросов, касающихся создания высокоэффективных гетерогенных катализаторов для нефтехимии и магнитных нанокompозитов для устройств хранения информации со сверхвысокой плотностью записи.

На сегодняшний день внимание к наноразмерным материалам только усиливается. Каждый год публикуется множество работ, посвященных исследованиям структуры и свойств наногетероструктур и нанопленок [6, 7], в том числе и с оксидной подложкой [8, 9]. Открытия в области полупроводниковых гетероструктур для высокоскоростной электроники и оптоэлектроники способствовали появлению быстродействующих элементов электронной техники. Без них не могут существовать ни спутниковые антенны, ни компьютеры, ни сотовые телефоны.

Благодаря своим уникальным свойствам, подложки из пористого алюминия перспективны для использования в качестве катализаторов и элементов солнечной энергетики [10]. Солнечные батареи на основе нанокompозиционных материалов уже сегодня могут преобразовывать свет в электричество с КПД около 40%. Современные солнечные элементы производятся на базе полупроводниковых нанопленок, содержащих до тридцати чередующихся слоев, каждый из которых имеет нанометровую толщину. Отдельного внимания заслуживает область, в которой благодаря пористым структурам алюминия и его оксида создаются оптические эффекты [11–13]. Пористый оксид алюминия обладает особой структурой, позволяющей изготавливать элементы с нанометровыми размерами: столбиковые, нитевидные, точечные, конусообразные и другие [14], из которых в дальнейшем могут быть произведены полупроводниковые точки и квантовые нити. В наноматериалах из пористого оксида алюминия, в отличие от традиционных композиционных материалов, даже небольшое локальное колебание дисперсности или состава компонентов нанокompозита приводит к существенному изменению макроскопических физико-механических характеристик [15–17]. Процессы, протекающие в наноматериалах, как правило, нелинейны и достаточно сложны, что делает применение математического моделирования для их исследования перспективным направлением [18, 19].

Несмотря на широкое распространение нанопленок, возникают вопросы детального исследования их состава, структуры и протекающих в них процессов. Подобные проблемы активно рассматриваются и решаются другими авторами зачастую, с целью уменьшения затрат, при помощи теоретических методов и аппарата математического моделирования [20, 21]. При этом становится возможным учет всей совокупности явлений и процессов, протекающих в нанопленках. Понимание механизмов и многоуровневое изучение процессов формирования и функционирования нанопленок, взаимодействия содержащихся в них наноструктур и наночастиц, а также развитие инженерных идей и подходов к управлению и использованию данных процессов позволит правильно проектировать нанокompозиты и находить перспективные области их приложения.

Целями работы являются создание алгоритмов и методов моделирования процессов осаждения наноразмерных пленок на подложки из пористого оксида алюминия, изучение кинетики указанных процессов и структуры наноразмерных пленок. Материалы для эпитаксии варьируются, используются золото, серебро, железо, галлий, германий и палладий.

2. Постановка задачи и теоретическая часть

Задача осаждения нанопленок на пористые подложки из оксида алюминия решается методом молекулярной динамики (МД) [22]. Метод МД получил широкое распространение при моделировании поведения наносистем благодаря простоте реализации, удовлетворительной точности и небольшим затратам вычислительных ресурсов. В основе данного метода лежит решение дифференциального уравнения движения Ньютона для каждой частицы.

Один из главных недостатков метода молекулярной динамики заключается в невозможности сравнения результатов вычисления с реальными экспериментальными данными. Так, для устойчивости и сходимости решения задачи моделирования наносистем методом МД необходим выбор такого шага интегрирования, который удовлетворял бы перемещениям самых малых и подвижных атомов. В большинстве случаев адекватным был бы шаг $0,5\text{--}2,0$ фс (или в системе СИ $(0,5\div 2,0)\cdot 10^{-15}$ с). Тогда для сопоставления

вычисленных данных с экспериментом потребовался бы расчет поведения наносистем на 10^{15} и более итерационных шагах, что сопряжено с большим объемом вычислительных затрат и на данном этапе развития компьютерной техники не осуществимо.

Разрешить проблему помогает комбинирование подходов. Однако, в отличие от метода МД, сложность перехода от одних управляющих переменных к другим при совмещении нескольких методов затрудняет разработку гибридных алгоритмов, поскольку ведет к росту как объема параметров, которые необходимо учесть, так и времени интегрирования. К тому же возможна потеря деталей описания изучаемой физической системы и некоторых атомарно-молекулярных эффектов.

В зависимости от потенциала, представляющего изучаемую систему, и действующих внешних сил рассматриваемая задача в процессе моделирования будет иметь различную точность и разные термодинамические параметры. Вопрос отыскания параметров потенциала сложен и трудоемок. В качестве источников данных могут служить расчеты из первых принципов или экспериментальные данные. Наборы достаточно хорошо подобранных параметров для однотипных молекул объединены в специальные базы данных и библиотеки, с помощью которых можно установить тип влияющих на атомы силовых полей. Вид потенциалов и потенциальная энергия наноструктурных фотоэлектронных систем вносят определяющий вклад в тип, характер и величину взаимодействий объектов. При решении вид потенциала задачи во многом обуславливается наличием параметров в библиотеках и силовых полей в базах данных для моделирования наноструктурных фотоэлектронных систем.

Так, потенциал Леннарда-Джонса (Lennard-Jones) [22, 23] широко практикуется при расчете свойств газов, жидкостей, в которых проявляются межмолекулярные силы. Потенциал описывает парное взаимодействие сферических неполярных молекул и включает в себя энергии взаимодействия двух частиц в зависимости от расстояния между ними — отталкивания на малых расстояниях и притяжения на больших. Потенциал Леннарда-Джонса имеет следующий вид:

$$U^{LJ}(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right),$$

где ϵ — глубина потенциальной ямы, r — расстояние между центрами частиц, σ — расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю. Величины ϵ и σ определяются свойствами материала. Этот потенциал, будучи притягивающим на больших расстояниях, имеет минимум в точке $r_{\min} = \sqrt[6]{2}\sigma$. При $r > r_{\min}$ силы притяжения преобладают над силами отталкивания, чему в формуле соответствует слагаемое $(\sigma/r)^6$. Природа сил притяжения объясняется диполь-дипольным индуцированным взаимодействием [24, 25] (силы Ван-дер-Ваальса). При расстоянии между центрами частиц $r < r_{\min}$, вследствие обменного взаимодействия, силы отталкивания преобладают над силами притяжения, чему отвечает член $(\sigma/r)^{12}$ (при перекрытии электронных облаков молекулы начинают сильно отталкиваться).

Недостаток потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса заключается в том, что силы, отвечающие за взаимное отталкивание частиц на малых расстояниях, изображаются степенной зависимостью лишь приближенно. К достоинствам потенциала относится его вычислительная простота, не требующая привлечения иррациональных и трансцендентных функций. Потенциал Леннарда-Джонса применяется как классический модельный потенциал и предназначен для описания общих физических закономерностей, а не получения точных количественных результатов [26].

Как оказалось, при учете только парного межатомного взаимодействия в математическом моделировании металлических и/или полупроводниковых систем возникает ряд проблем. В работе [27] показано, что при использовании парного потенциала взаимодействия в системах металл и/или полупроводник выполняется нефизическое соотношение для коэффициентов Коши ($C_{12} = C_{44}$), то есть парный потенциал не обеспечивает реалистичных значений физических характеристик материала [28].

Для корректного подхода к изучению свойств твердых тел необходимо прибегать к многочастичным потенциалам. Известно, что ни один из существующих потенциалов не способен воспроизвести полный набор характеристик твердых веществ. Таким образом, выбор потенциала для математического моделирования — сложная комплексная задача. Большинство эмпирических потенциалов хорошо представляют объемные свойства материалов, но в то же время некоторые из них с успехом применяются и для описания поверхностных свойств.

Реальные соотношения упругих постоянных металлов и полупроводников можно построить только с учетом парных и многочастичных взаимодействий. При моделировании металлических и полупроводниковых систем наиболее распространены следующие потенциалы и методы:

- потенциал Стиллинджера–Вебера [29];
- потенциал Абея–Терсоффа [30];
- метод погруженного атома [27, 31, 32];
- модифицированный метод погруженного атома [33].

В методе погруженного атома (ЕАМ) энергия связи системы атомов представляется в виде:

$$E = \sum_i F_i \left[\sum_{j \neq i} \rho_j(R_{ij}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(R_{ij}), \quad (1)$$

где $\sum_i F_i \left[\sum_{j \neq i} \rho_j(R_{ij}) \right]$ — функция погружения атома i , зависящая от суммарной электронной плотности области его погружения; $\phi_{ij}(R_{ij})$ — энергия парного взаимодействия. Вывод выражения (1) с использованием теории функционала электронной плотности (DFT) можно найти в работе [32].

Каждый атом системы рассматривается как частица, погруженная в электронный газ, создаваемый остальными атомами моделируемой системы. Энергия, необходимая для погружения, зависит от электронной плотности в точке погружения. Введенная таким образом функция погружения позволяет определить обменную и корреляционную энергии электронного газа системы.

Смысл функции погружения может быть истолкован как энергия, необходимая для погружения одного атома в однородный электронный газ с плотностью ρ . Однако существуют и другие преобразования [34], позволяющие изменять функции (1), но с тем условием, что результирующие энергия и межатомные силы не изменятся.

В ЕАМ принимаются следующие приближения:

1) Функция электронной плотности одного атома является сферически симметричной и зависящей только от расстояния между атомами. Данное приближение существенно ограничивает область применения ЕАМ и позволяет рассматривать с его помощью только системы, в которых направленностью ковалентной составляющей связи можно пренебречь.

2) Электронная плотность в области погружения атома i определяется как линейная суперпозиция электронных плотностей остальных атомов системы: $\sum_{j \neq i} \rho_j(R_{ij})$. Данное приближение существенно упрощает вычисление электронной плотности.

3) В металлических системах в области расположения атома i величина $\sum_{j \neq i} \rho_j(R_{ij})$ меняется слабо по сравнению с электронной плотностью самого атома ρ_i . Таким образом, в области расположения атома i член $\sum_{j \neq i} \rho_j(R_{ij})$ заменяется константой $\bar{\rho}$ [32]. Энергия электронного газа аппроксимируется функцией, зависящей только от величины среднего значения электронной плотности в области погружения, а не сложными функционалами, как в методе DFT.

В настоящее время выведены потенциалы ЕАМ для большинства металлов и некоторых бинарных систем. Также установлены потенциалы для тройных систем [35]. Однако такие «тройные» потенциалы качественно не воспроизводят физические свойства материалов.

На основе названных выше многочастичных потенциалов был предложен полуэмпирический подход, объединяющий преимущества их и метода погруженного атома. Теория модифицированного метода погруженного атома (МЕАМ — Modified Embedded-Atom Method) сформулирована с применением теории функционала электронной плотности (DFT) [36]. Метод DFT в настоящее время считается наиболее признанным при описании электронных свойств твердых тел. В методе ЕАМ полная электронная плотность представляется в виде линейной суперпозиции сферически усредненных функций. Данный недостаток устранен в МЕАМ. Здесь энергия связи системы записывается в следующем виде:

$$E = \sum_i \left(F_i \left(\frac{\bar{\rho}_i}{Z_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(R_{ij}) \right), \quad (2)$$

где E — энергия атома i ; F_i — функция погружения для атома i , находящегося в среде с электронной плотностью $\bar{\rho}_i$; Z_i — число ближайших соседей атома i в его референтной кристаллической структуре; ϕ_{ij} — парный потенциал между атомами i и j , находящимися на расстоянии R_{ij} . В (2) функция погружения $F_i(\rho)$ имеет вид:

$$F_i(\rho) = A E_c \rho \ln \rho, \quad (3)$$

где A — регулируемый параметр; E_c — энергия связи; ρ — электронная плотность.

Парный потенциал взаимодействия между атомами i, j определяется по формуле:

$$\Phi_{ij}(R) = \frac{2}{Z_i} \left\{ E_i^u(R) - F_i \left(\frac{\bar{\rho}_i^0(R)}{Z_i} \right) \right\},$$

где $\bar{\rho}_i^0$ — полная электронная плотность для структуры атомов типа i . Полная электронная плотность в точке погружения включает в себя угловые зависимости $G(\Gamma)$ и записывается в виде:

$$\bar{\rho} = \rho^{(0)} G(\Gamma),$$

где $\rho^{(0)}$ — электронная плотность идеального кристалла кубической сингонии. Существует много разновидностей записи функции $G(\Gamma)$, например:

$$G(\Gamma) = \sqrt{1+\Gamma}; \quad G(\Gamma) = e^{\Gamma/2}; \quad G(\Gamma) = 2/(1+e^{-\Gamma}); \quad G(\Gamma) = \pm\sqrt{|1+\Gamma|}.$$

Наибольшее распространение получила первая форма:

$$G(\Gamma) = \sqrt{1+\Gamma}.$$

Функция Γ вычисляется по формуле $\Gamma = \sum_{h=1}^3 t^{(h)} (\rho^{(h)} / \rho^{(0)})^2$, где $h = 0, 1, 2, 3$ соответствуют s, p, d, f симметрии; $t^{(h)}$ — весовые множители; $\rho^{(h)}$ — величины, определяющие отклонение распределения электронной плотности от $\rho^{(0)}$ при разных видах симметрии:

$$\begin{aligned} s(h=0): \quad \rho^{(0)} &= \sum_i \rho^{a(0)}(r^i), \\ p(h=1): \quad (\rho^{(1)})^2 &= \sum_{\alpha} \left[\sum_i \rho^{a(1)}(r^i) \frac{r_{\alpha}^i}{r^i} \right]^2, \\ d(h=2): \quad (\rho^{(2)})^2 &= \sum_{\alpha, \beta} \left[\sum_i \rho^{a(2)}(r^i) \frac{r_{\alpha}^i r_{\beta}^i}{r^{2i}} \right]^2 - \frac{1}{3} \sum_i \left[\sum_i \rho^{a(2)}(r^i) \right]^2, \\ f(h=3): \quad (\rho^{(3)})^2 &= \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \left[\sum_i \rho^{a(3)}(r^i) \frac{r_{\alpha}^i r_{\beta}^i r_{\gamma}^i}{r^{3i}} \right]^2. \end{aligned}$$

Здесь: $\rho^{a(h)}$ — радиальные функции, которые представляют уменьшение вклада расстояний r^i между соседними атомами; верхний индекс i указывает ближайшие атомы; α, β, γ — индексы суммирования по каждому из трех возможных направлений. Наконец, индивидуальный вклад вычисляется по формуле

$$\rho^{a(h)}(r) = \rho_0 e^{-\beta^{(h)}((r/r_e)-1)},$$

r_e — расстояние до ближайшего атома в состоянии равновесия.

Для проведения численных исследований используется пакет программ для параллельных вычислительных процессов LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Пакет LAMMPS написан группой ученых из Сандийских национальных лабораторий (США) и является свободно распространяемым пакетом для математических моделей различного уровня, в том числе и классической молекулярной динамики.

Задача моделирования процесса формирования нанопленочных покрытий решается в несколько этапов. Общая схема формирования гетерогенных оптико-электронных покрытий приведена на рисунке 1. На первом этапе создается подложка из аморфного оксида алюминия (состояние аморфности определяется по величине параметра идеальности кристаллической решетки [37]). Атомы алюминия и кислорода в необходимой пропорции (2:3) помещаются в расчетную ячейку с периодическими граничными

условиями по бокам (Рис. 1а). Под воздействием потенциальных сил при нормальных термодинамических условиях подложка постепенно приходит в состояние покоя (Рис. 1б). Стабилизация подложки обусловлена именно потенциальными силами, так как образуется она за счет самоорганизации атомов алюминия и кислорода. При этом тепловые флуктуации и диффузия в рамках заданной температуры в подложке присутствуют, но существенной перестройки ее структуры не происходит, атомы лишь незначительно колеблются вблизи занятых положений.

На втором этапе в подложке вырезается отверстие — пора требуемого радиуса и глубины (подложка с порой показана в разрезе на рисунке 1в). Впоследствии эта пора будет зарастаться атомами различного типа (Рис. 1г).

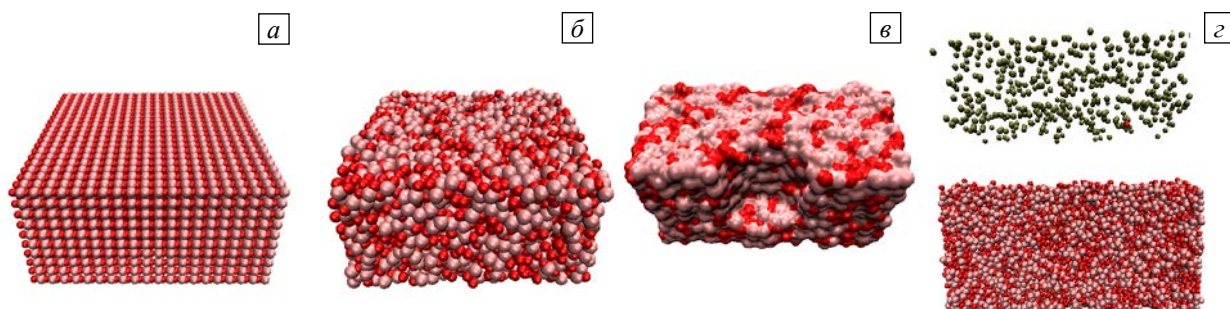


Рис. 1. Этапы формирования нанопленочных покрытий на основе из пористого оксида алюминия

Решение осуществлялось в декартовой системе координат, при этом плоскость Oxy совпадала с поверхностью подложки. Граничные условия и внешний вид моделируемой системы представлены на рисунке 2. В силу периодичности граничных условий по направлениям x и y в работе рассматривается только одна пора. В горизонтальных направлениях периодические граничные условия предусматривают параллельный перенос расчетной ячейки на расстояния L_x и L_y (горизонтальные размеры наносистемы) вдоль соответствующих координатных осей. Сверху и снизу моделируемая система имеет жесткие граничные условия. При приближении атомов к верхней границе исследуемой системы имитируется их отскок от жесткой стенки. Снизу положения атомов в тонком слое вблизи границы расчетной ячейки жестко фиксируются. Данный тип граничных условий не позволяет атомам наносистемы покидать расчетную область в случае отклонения от основной траектории осаждения.

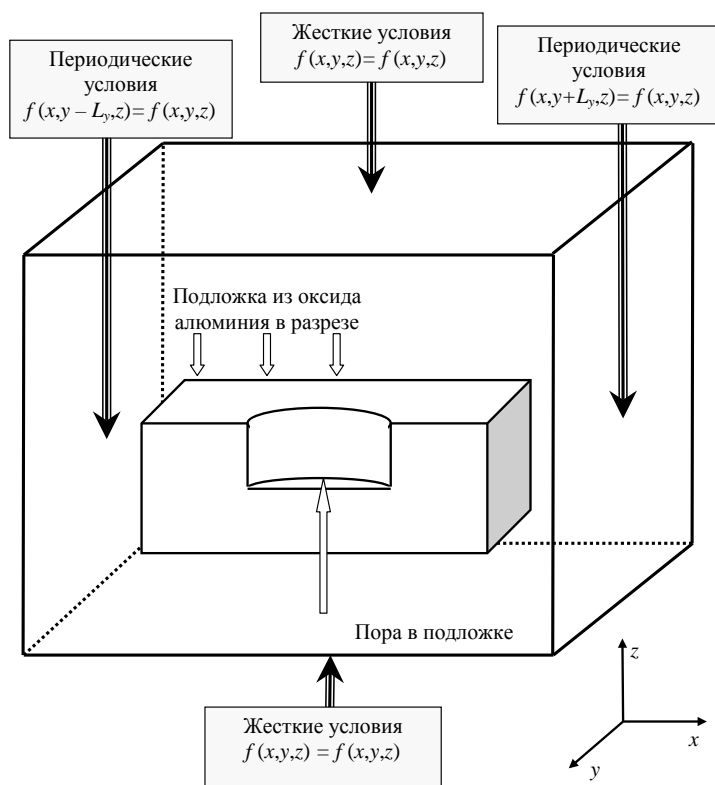


Рис. 2. Граничные условия и внешний вид моделируемой системы

От выбора соответствующего шага интегрирования зачастую зависит сходимость численного решения поставленной задачи. Шаг должен быть достаточно малым, чтобы корректно отображалось поведение системы. При использовании методов молекулярной динамики на величину шага интегрирования оказывает влияние значение массы моделируемых веществ. Шаг берется в пределах от 0,5 до 2 фс. В данной работе шаг интегрирования по времени равняется 1 фс. Общее время счета при моделировании системы на этапе стабилизации (Рис. 1а) составляет порядка 0,5 нс, на этапе релаксации (Рис. 1б, в) — 0,2 нс, на этапе осаждения (Рис. 1г) — 0,2 нс.

Заращивание пористой подложки осуществляется равномерным напылением атомов по нормали к подложке. В течение стадии заращивания в область над подложкой добавляются атомы наносимых веществ. Их положение над подложкой определяется равномерным случайным законом распределения. Управляющими параметрами процесса являются количество добавляемых атомов в единицу времени и их общее число. Начальная скорость этих атомов постоянна. Скоростные параметры меняются только при взаимодействии осаждаемых атомов с подложкой. Для проведения тестовых расчетов рассматривается отдельная наноструктура в безвоздушной среде и ее динамика во время релаксационной самоорганизации атомов.

Молекулярно-динамическое моделирование проводится при постоянной температуре, которая поддерживается в системе при помощи алгоритма термостата. Термостат служит средством отвода энергии, охлаждения слишком быстрых атомов, подкачки энергии, когда наносистема недостаточно разогрета. В настоящее время алгоритмы термостата весьма разнообразны: коллизионный термостат, термостат Берендсена (Berendsen), термостат трения, термостат Нозе–Гувера (Nose–Hoover). В данной работе используется термостат Нозе–Гувера. Скорости атомов в начальный момент времени задаются в соответствии с распределением Максвелла. Более подробно методика моделирования приведена в [38], где рассматривается формирование нанопленочных покрытий на монокристаллической подложке (без пор) методом эпитаксии.

3. Результаты моделирования и их анализ

При моделировании аморфные подложки полагались изготовленными из оксида алюминия и имели следующие размеры: длина — 12,4 нм; ширина 12,4 нм; высота — 6,2 нм. В подложке после образования поры насчитывалось приблизительно 60,5 тысяч атомов. До начала процесса осаждения подложка находилась в состоянии покоя, ее температура равнялась 300 К и в дальнейшем поддерживалась на таком же уровне. График изменения температуры подложки, а также кинетической энергии на этапе стабилизации и релаксации приведен на рисунке 3.

В подложке из оксида алюминия вырезалась пора радиусом 2 нм и глубиной 4 нм. В состоянии покоя (без осаждения атомов) заращивание поры оксидом алюминия не наблюдалось. Нижний слой подложки закреплялся, для того чтобы исключить ее вертикальное движение на этапе осаждения. Остальные атомы подложки не фиксировались и могли свободно перемещаться в любом направлении.

В данной работе на подложку из оксида алюминия наносились атомы различных материалов: золота (Au), серебра (Ag), железа (Fe), галлия (Ga), германия (Ge), палладия (Pd). Количество атомов равнялось 20000. Эпитаксия происходила равномерно по всей поверхности подложки и с одинаковой интенсивностью во времени, скорость атомов составляла 0,05 нм/пс.

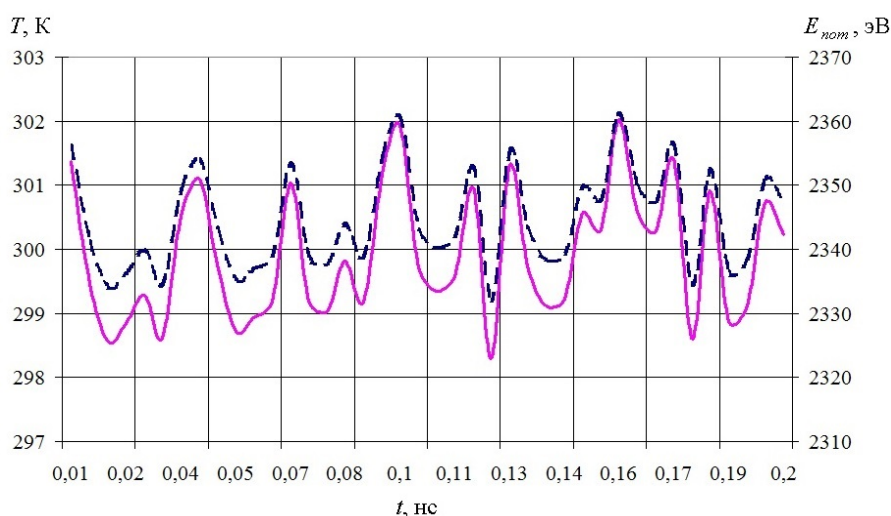


Рис. 3. Зависимость температуры (левая ордината, сплошная линия на графике) и кинетической энергии (правая ордината, штриховая линия) подложки из пористого алюминия от времени на этапе релаксации

Результаты эпитаксиального формирования нанопленки из атомов серебра на подложке из пористого оксида алюминия приведены на рисунке 4. Осаждение атомов было равномерным, образование крупных агломератов в вакууме не наблюдалось. Пленка на подложке получалась однородная, с небольшим проседанием в области поры. Полностью атомами серебра пора не зарастала, вблизи верхней части было замечено незначительное попадание атомов серебра внутрь нее, но в основном пора оставалась поллой на протяжении всего этапа эпитаксии. На рисунке 4б представлен слой толщиной 0,2 нм, вырезанный из центральной части системы, с созданной на подложке нанопленкой из серебра. Анализ данного рисунка подтверждает неполное зарастивание поры. На этапе осаждения к моменту времени 0,2 нс в безвоздушной среде над подложкой практически не остается атомов серебра. Имеет место частичное «вытягивание» атомов кислорода из подложки и попадание их в нижние слои нанопленки над поверхностью подложки. На этапе моделирования внутри подложки в течение всего времени происходит незначительная миграция атомов кислорода и алюминия, которая объясняется температурными колебаниями системы.

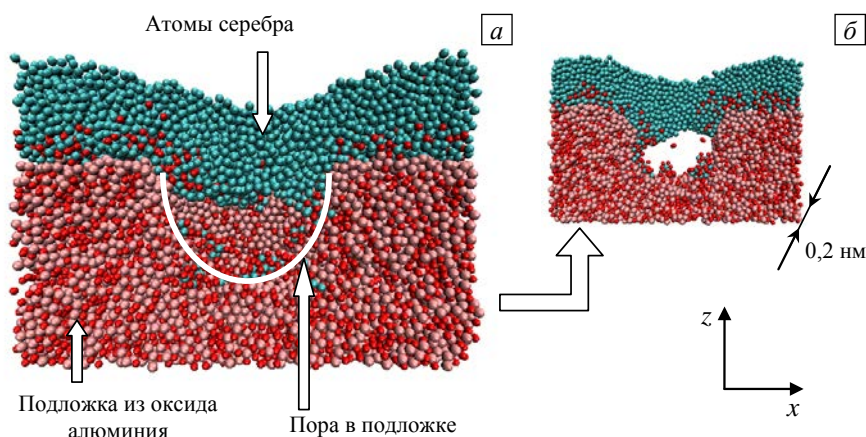


Рис. 4. Результаты осаждения атомов серебра на подложку из пористого алюминия, время осаждения 0,2 нс: вертикальный разрез через центр поры в плоскости (x, z) (а); слой толщиной 0,2 нм, вырезанный из центральной части системы плоскостями, параллельными поверхности (x, z) (б)

Горизонтальный разрез нанопленочного покрытия по поверхности подложки (в плоскости (x, y)) после осаждения атомов серебра в момент времени $t = 0,2$ нс представлен на рисунке 5. Наблюдается локальные островки кристаллической структуры из атомов алюминия. Локальные области кристаллического алюминия возникают под влиянием напыляемой пленки и формируются для некоторых типов наносимых материалов (серебра, галлия, железа). На чистой подложке подобные области отсутствуют. Кристаллические участки образуются вследствие частичного «вытягивания» атомов кислорода из подложки и их взаимодействия с осаждаемыми атомами.

Атомы серебра, изображенные в центре подложки на рисунках 4 и 5, находятся только на поверхности поры, внутри поры остается поллой. Несимметричность картины объясняется псевдостохастическим поведением наносистемы, обусловленным температурными законами начального распределения скоростей атомов.

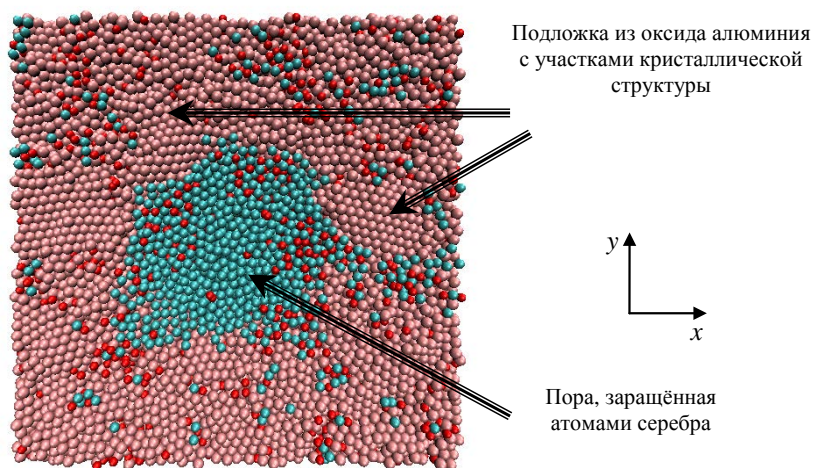


Рис. 5. Горизонтальный разрез нанопленочного покрытия после осаждения атомов серебра вдоль поверхности подложки, время осаждения 0,2 нс

Результаты эпитаксии атомов золота на подложку из пористого оксида алюминия похожи на описанные выше для атомов серебра. В обоих случаях подложка покрывается достаточно ровным слоем с прогибом в месте расположения поры. Пора при этом полностью не зарастает, атомы, осаждаясь, создают подобие пробки или крышки.

Атомы железа при зарастивании поры в подложке начинают группироваться в наноструктуры еще в вакууме, не достигнув поверхности подложки. Сильного укрупнения агломератов при этом не наблюдается, они продолжают двигаться по направлению к подложке. Вид пленки из атомов железа в фиксированные моменты времени показан на рисунках 6 и 7.

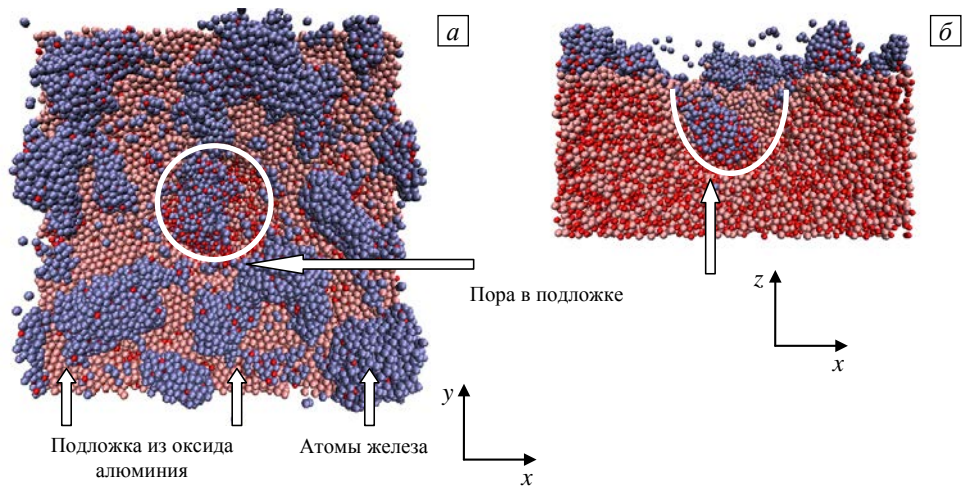


Рис. 6. Зарастивание подложки из пористого оксида алюминия атомами железа к моменту времени осаждения 0,05 нс: вид сверху (а), вертикальный разрез через центр поры (б)

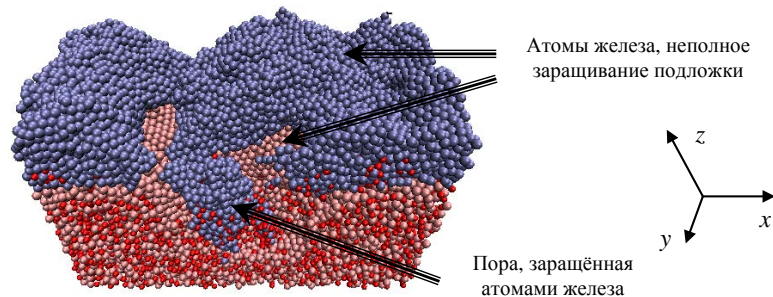


Рис. 7. Зарастивание подложки из пористого оксида алюминия атомами железа: вертикальный разрез по центру поры; время осаждения 0,2 нс

На рисунке 6 продемонстрировано зарастивание подложки из пористого оксида алюминия атомами железа для времени осаждения 0,05 нс. Так как атомы железа начинают группироваться еще в безвоздушной среде над подложкой, то и зарастивание подложки происходит по островному принципу. Мелкие наноструктуры железа на подложке постепенно укрупняются и группируются в большие по размеру. Одна из наноструктур железа появляется внутри поры, особенно хорошо ее видно в вертикальном разрезе по центру поры (Рис. 6б). Атомы кислорода из верхних слоев подложки активно взаимодействуют с атомами железа, образуя при этом аморфные оксидные структуры. Рисунок 7 (ось z наклонена на 45 градусов в сторону наблюдателя) иллюстрирует поверхность сформированной нанопленки железа на подложке. Пленка получается неровной. Атомы железа, в отличие от атомов серебра и золота, не полностью покрывают подложку. Кроме того, наблюдаются достаточно сильные перепады толщин нанопленки, достигающие местами нескольких нанометров.

Картины, соответствующие осаждению атомов галлия и германия, похожи между собой по физическому процессу. Результат для времени 0,2 нс представлен на рисунке 8. Пора при этом также полностью не зарастает. Нанопленка на поверхности подложки формируется в виде островков, на рисунке видны крупные незарастившие участки подложки. Заметны небольшие наночастицы галлия на поверхности подложки. «Вытягивание» атомов кислорода из верхних слоев подложки происходит интенсивнее, чем в ранее рассмотренных случаях. Атомы германия при осаждении проникают в область поры в большем количестве, но впоследствии перемещаются на поверхность под действием межатомных сил. Профиль поверхности нанопленки, полученной из атомов германия, неравномерный, с перепадами высот и крупными незарастившими областями.

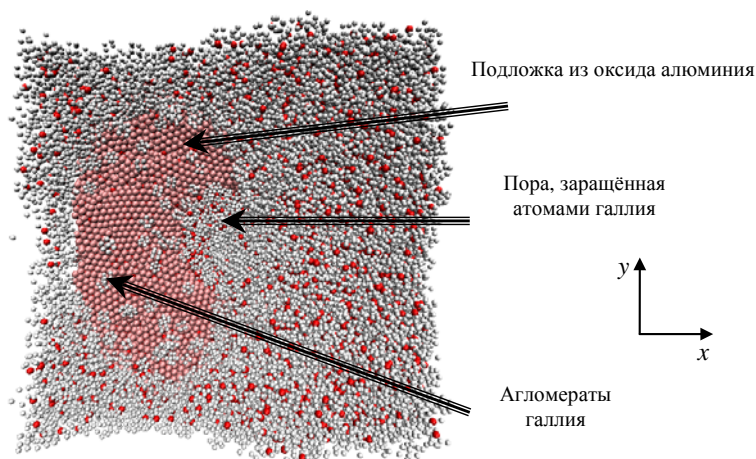


Рис. 8. Зарощивание подложки из пористого оксида алюминия атомами галлия к моменту времени осаждения 0,2 нс

Интересный эффект наблюдается при эпитаксии атомов палладия и платины. Для атомов палладия результат осаждения в двух проекциях приведен на рисунке 9. Нанопленка в данном случае формируется равномерная, с небольшим проседанием в области поры. Однако непосредственно над порой на протяжении всего этапа конденсации сохраняется отверстие, которое так и не зарастает. Попадание атомов палладия внутрь поры, как это видно на вертикальном разрезе по центру поры, показанном на рисунке 9б, незначительное.

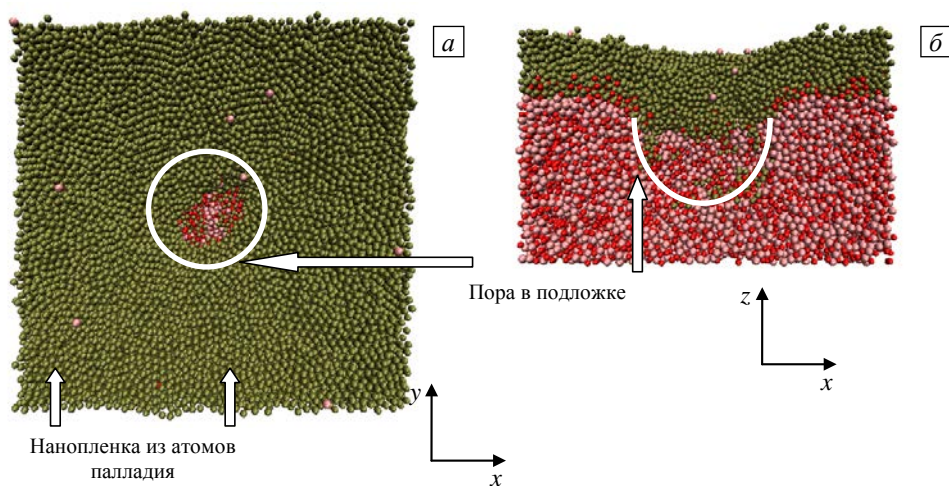


Рис. 9. Зарощивание подложки из пористого оксида алюминия атомами палладия к моменту времени осаждения 0,2 нс: вид сверху (а), вертикальный разрез по центру поры (б)

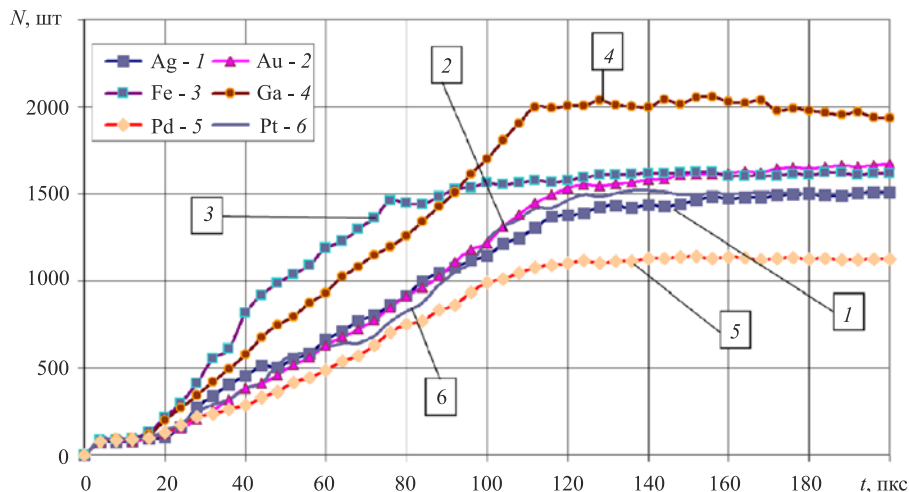


Рис. 10. Количество атомов в поре оксида алюминия

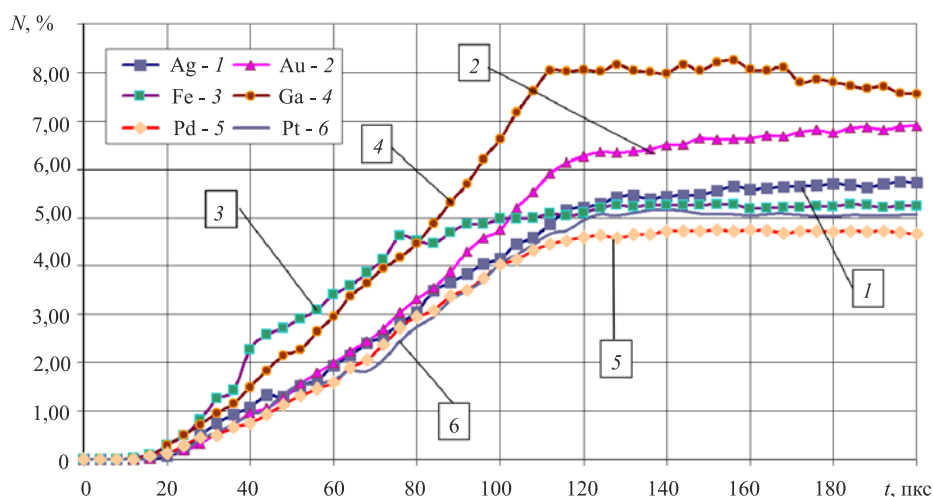


Рис. 11. Процент попавших в пору атомов по отношению к общему числу осажденных атомов

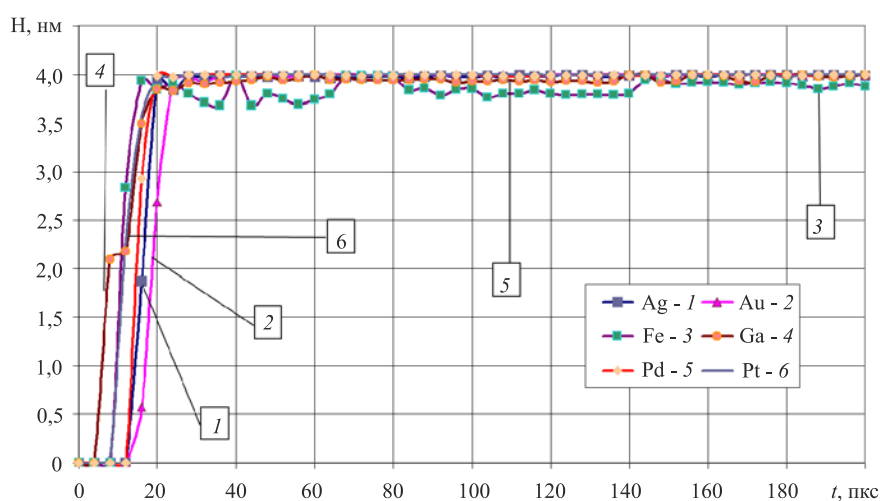


Рис. 12. Глубина проникновения в пору атомов испытуемых веществ

На рисунке 10 представлен график проникновения атомов рассматриваемых веществ в пору на подложке из оксида алюминия. Наибольшее количество показывают атомы галлия, а наименьшее — атомы палладия. Золото имеет лучшее проникновение среди благородных металлов. По прошествии примерно 120 пкс интенсивность осаждения атомов веществ всех типов в пору снижается и в дальнейшем изменяется незначительно (см. Рис. 10 и 11). На начальном этапе моделирования (примерно до 90 пкс) наибольшую интенсивность демонстрируют атомы железа и галлия.

Так как начальное распределение атомов имеет стохастический характер, интересно было посмотреть, какие из рассматриваемых веществ осядут в пору на максимальную глубину. По рисунку 12 видно, что атомы всех рассматриваемых материалов проникают в пору полностью (на глубину поры). Причем на начальном этапе (до 20 пкс) ведут себя подобным образом.

4. Выводы

Приведены уравнения молекулярной динамики с использованием многочастичного потенциала взаимодействия — уравнения модифицированного метода погруженного атома. Рассмотрено различие потенциала MEAM и потенциала погруженного атома, а также функционала электронной плотности.

Представлена постановка задачи изучения процессов осаждения наноразмерных пленок на подложки из пористого оксида алюминия. Установлены различные варианты эпитаксиального зарастивания пористых подложек из оксида алюминия атомами различных веществ. Для каждого из типов рассмотренных атомов зафиксированы собственные процессы взаимодействия и механизмы зарастивания подложек и пор:

1. Для случаев эпитаксии атомов серебра и золота наблюдается равномерное покрытие поры нанопленкой, основная часть осаждаемых атомов не проникает внутрь поры. Непосредственно над порой происходит незначительное проседание нанопленки.

2. Атомы железа демонстрируют образование наноструктур еще в безвоздушной среде над подложкой, подложка зарастает по островному принципу. Мелкие наноструктуры железа на подложке постепенно укрупняются и группируются в большие по размеру, наноструктуры железа появляются внутри поры.

3. При нанесении атомов галлия пора также полностью не зарастает, нанопленка на поверхности подложки имеет островной характер. Заметны небольшие наночастицы галлия на поверхности подложки.

4. Нанопленка при эпитаксии атомов палладия формируется равномерная, с небольшим проседанием в области поры, но над порой на протяжении всего этапа конденсации сохраняется отверстие, которое так и не зарастает.

5. У всех типов осаждаемых атомов единичные атомы достигают дна поры. Наиболее полное и плотное зарастивание поры зафиксировано для галлия.

Пора, заполненная атомами, может рассматриваться как квантовая точка и использоваться для создания оптических и электрических эффектов. Методики осаждения наноразмерных пленок применимы в конкретных технологических процессах, а также могут быть полезными при прогнозировании и проектировании нанопленочных материалов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-08-01072-а) и РНФ (грант № 15-19-10002). В рамках проекта РФФИ была скорректирована и расширена математическая модель, подготовлена методика моделирования. В рамках проекта РНФ проведены вычислительные эксперименты и получены основные результаты исследований.

Литература

1. *Mozalev A., Sakairi M., Saeki I., Takahashi H.* Nucleation and growth of the nanostructured anodic oxides on tantalum and niobium under the porous alumina film // *Electrochim. Acta.* – 2003. – Vol. 48. – P. 3155-3170.
2. *Лазарук С.К., Кацуба П.С., Лешок А.А., Высоцкий В.Б.* Влияние локальной напряженности электрического поля на формирование упорядоченной структуры пористого анодного оксида алюминия // *ЖТФ.* – 2015. – Т. 8, № 9. – С. 86-90. (English version [DOI](#)).
3. *Войтович И.Д., Лебедева Т.С., Шпилевой П.Б., Беднов Н.В.* Покрyтия из нанопористого анодного оксида алюминия для сенсорных применений // *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии.* – 2014. – Т. 12, № 1. – С. 169-180.
4. *Vasiliev A.A., Pavelko R.G., Gogish-Klushin S.Yu., Kharitonov D.Yu., Gogish-Klushina O.S., Sokolov A.V., Pislakov A.V., Samotaev N.N.* Alumina MEMS platform for impulse semiconductor and IR optic gas sensors // *Sensor. Actuat. B-Chem.* – 2008. – Vol. 132, no. 1. – P. 216-223. [DOI](#)
5. *Филяк М.М., Каньгина О.Н.* Особенности формирования анодного оксида алюминия в щелочных электролитах // *Вестник ОГУ.* – 2013. – № 1 (150). – С. 154-159.
6. *Grynko D., Grytsenko K., Lozovski V., Sopinsky M., Strilchuk G.* Optical absorption of nano-composite thin films of Au in Teflon // *Materials Sciences and Applications.* – 2010. – Vol. 1, no. 3. – P. 141-151. [DOI](#)
7. *D'Addabbo A., Valentini A., Convertino A.* Swelling of CF_x and $CF_x(Au)$ films // *J. Appl. Phys.* – 2000. – Vol. 87, no. 1. – P. 2039-2043. [DOI](#)
8. *Basim G.B., Karagoz A., Ozdemir Z.* Metal oxide nano film characterization for CMP optimization // *ECS Trans.* – 2013. – Vol. 50, no. 39. – P. 3-7. [DOI](#)
9. *Trakhtenberg L.I., Gerasimov G.N., Gromov V.F., Belysheva T.V., Ilegbusi O.J.* Gas semiconducting sensors based on metal oxide nanocomposites // *Journal of Materials Science Research.* – 2012. – Vol. 1, no. 2. – P. 56-68. [DOI](#)
10. *Голицына О.М., Дрождин С.Н., Нечаев В.Н., Висковатых А.В., Кашкаров В.М., Гриднев А.Е., Чернышев В.В.* Диэлектрические свойства пористых оксидов алюминия и кремния с включениями триглицинсульфата и его модифицированных аналогов // *ФТТ.* – 2013. – Т. 55, № 3. – С. 479-484. (English version [DOI](#)).
11. *Чукавин А.И., Валеев Р.Г., Бельтюков А.Н.* Синтез наноразмерных структур на основе германия в матрице пористого оксида алюминия // *Вестник Удмуртского университета. Серия: Физика. Химия.* – 2011. – № 4-2. – С. 3-7.
12. *Валеев Р.Г., Бельтюков А.Н., Сурнин Д.В., Закирова Р.М., Ветошкин В.М.* Люминесценция наноструктур Ge в пористом Al_2O_3 // *Химическая физика и мезоскопия.* – 2014. – Т. 16, № 1. – С. 115-118.
13. *Валеев Р.Г., Романов Э.А., Хохряков С.В.* Люминесценция наноструктур ZnS и ZnSe в пористых матрицах анодного оксида алюминия // *Известия РАН. Серия физическая.* – 2011. – Т. 75, № 11. – С. 1573-1574. (English version [DOI](#)).
14. *Медведева С.Ю.* Получение оптически активных структур на основе гидроокиси и оксида алюминия с добавлением ионов металлов // *Труды МФТИ.* – 2010. – Т. 2, № 1 (5). – С. 37-42.
15. *Vakhrushev A.V., Fedotov A.Y., Vakhrushev A.A., Golubchikov V.B., Givotkov A.V.* Multilevel simulation of the processes of nanoaerosol formation. Part 1. Theory foundations // *Nanomechanics Science and Technology.* – 2011. – Vol. 2, no. 2. – P. 105-132. [DOI](#)
16. *Вахрушев А.В., Федотов А.Ю.* Исследование процессов формирования композиционных наночастиц из газовой фазы методом математического моделирования // *Химическая физика и мезоскопия.* – 2007. – Т. 9, № 4. – С. 333-347.
17. *Vakhrouchev A.V.* Simulation of nano-elements interactions and self-assembling // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2006. – Vol. 14, no. 6. – P. 975-991. [DOI](#)
18. *Vakhrouchev A.V.* Computer simulation of nanoparticles formation, moving, interaction and self-organization // *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2007. – Vol. 61, no. 1. – P. 26-30. [DOI](#)
19. *Вахрушев А.В., Федотов А.Ю.* Исследование вероятностных законов распределения структурных характеристик наночастиц, моделируемых методом молекулярной динамики // *Вычисл. мех. сплош. сред.* – 2009. – Т. 2, № 2. – С. 14-21. [DOI](#)

20. Wadley H.N.G., Zhou X., Johnson R.A., Neurock M. Mechanisms, models and methods of vapor deposition // *Prog. Mater. Sci.* – 2001. – Vol. 46, no. 3-4. – P. 329-377. DOI
21. Song H., Ilegbusi O.J., Trakhtenberg L.I. Modeling vapor deposition of metal/semiconductor-polymer nanocomposite // *Thin Solid Films.* – 2005. – Vol. 476, no. 1. – P. 190-195. DOI
22. Lennard-Jones J.E. On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas // *Proc. Roy. Soc. A.* – 1924. – Vol. 106, no. 738. – P. 463-477. DOI
23. Lennard-Jones J.E. Wave functions of many-electron atoms // *Math. Proc. Cambridge.* – 1931. – Vol. 27, no. 3. – P. 469-480. DOI
24. Зиненко В.И., Сорокин Б.П., Турчин П.П. Основы физики твердого тела. – М.: Физматлит, 2001. – 336 с.
25. Stoddard S.D., Ford J. Numerical experiments on the stochastic behavior of a Lennard-Jones gas system // *Phys. Rev. A.* – 1973. – Vol. 8, no. 3. – P. 1504-1512. DOI
26. Кривцов А.М., Кривицова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // *Дальневосточный математический журнал.* – 2002. – Т. 3, № 2. – С. 254-276.
27. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Phys. Rev. B.* – 1984. – Vol. 29, no. 12. – P. 6443-6453. DOI
28. <http://www.fisica.uniud.it/~ercolessi/> (дата обращения: 24.02.2016).
29. Stillinger F.H., Weber T.A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // *Phys. Rev. B.* – 1985. – Vol. 31, no. 8. – P. 5262-5271. DOI
30. Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // *Phys. Rev. B.* – 1988. – Vol. 37, no. 12. – P. 6991-7000. DOI
31. Daw M.S., Baskes M.I. Semiempirical, quantum mechanical calculations of hydrogen embrittlement in metals // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – Vol. 50, no. 17. – P. 1285-1288. DOI
32. Daw M.S. Model of metallic cohesion: The embedded-atom method // *Phys. Rev. B.* – 1989. – Vol. 39, no. 11. – P. 7441-7452. DOI
33. Baskes M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities // *Phys. Rev. B.* – 1992. – Vol. 46, no. 5. – P. 2727-2742. DOI
34. Ruda M., Farkas D., Abriata J. Interatomic potentials for carbon interstitials in metals and intermetallics // *Scripta Mater.* – 2002. – Vol. 46, no. 5. – P. 349-355. DOI
35. Tomar V., Zhou M. Classical molecular-dynamics potential for the mechanical strength of nanocrystalline composite fcc Al+ α -Fe₂O₃ // *Phys. Rev. B.* – 2006. – Vol. 73, no. 17. – P. 174116. DOI
36. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // *Phys. Rev. B.* – 1964. – Vol. 136, no. 3. – P. 864-871. DOI
37. Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol. 58, no. 17. – P. 11085-11088. DOI
38. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Северюхин А.В., Суворов С.В. Моделирование процессов получения специальных наноструктурных слоев в эпитаксиальных структурах для утонченных фотоэлектрических преобразователей // *Химическая физика и мезоскопия.* – 2014. – Т. 16, № 3. – С. 364-380.

References

1. Mozalev A., Sakairi M., Saeki I., Takahashi H. Nucleation and growth of the nanostructured anodic oxides on tantalum and niobium under the porous alumina film. *Electrochim. Acta*, 2003, vol. 48, pp. 3155-3170.
2. Lazarouk S.K., Katsuba P.S., Leshok A.A., Vysotskii V.B. Effect of the local electric field on the formation of an ordered structure in porous anodic alumina. *Tech. Physics*, 2015, vol. 60, no. 9, pp. 1343-1347. DOI
3. Voitovich I.D., Lebedeva T.S., Shpilevoi P.B., Bednov N.V. Pokrytiya iz nanoporistogo anodnogo oksida aliuminiya dlya sensornykh primenenij [Coatings made of nanoporous anodic aluminum oxide for sensor applications]. *Nanosistemy, nanomaterialy, nanotekhnologii – Nanosystems, nanomaterials and nanotechnologies*, 2014, vol. 12, no. 1, pp. 169-180.
4. Vasiliev A.A., Pavelko R.G., Gogish-Klushin S.Yu., Kharitonov D.Yu., Gogish-Klushina O.S., Sokolov A.V., Pislakov A.V., Samotaev N.N. Alumina MEMS platform for impulse semiconductor and IR optic gas sensors. *Sensor. Actuat B-Chem.*, 2008, vol. 132, no. 1, pp. 216-223. DOI
5. Filyak M.M., Kanygina O.N. Osobennosti formirovaniya anodnogo oksida aliuminiya v shchelochnykh elektrolitakh [The features of formation of porous anodic aluminum oxide in alkaline electrolyte]. *Vestnik Orenburgskogo gosudarstvennogo universiteta – Vestnik of the Orenburg State University*, 2013, no. 1, pp. 154-159.
6. Grynko D., Grytsenko K., Lozovski V., Sopinsky M., Strilchuk G. Optical absorption of nano-composite thin films of Au in Teflon. *Materials Sciences and Applications*, 2010, vol. 1, no. 3, pp. 141-151. DOI
7. D'Addabbo A., Valentini A., Convertino A. Swelling of CF_x and CF_x(Au) films. *J. Appl. Phys.*, 2000, vol. 87, no. 1, pp. 2039-2043. DOI
8. Basim G.B., Karagoz A., Ozdemir Z. Metal oxide nano film characterization for CMP optimization. *ECS Trans.*, 2013, vol. 50, no. 39, pp. 3-7. DOI
9. Trakhtenberg L.I., Gerasimov G.N., Gromov V.F., Belysheva T.V., Ilegbusi O.J. Gas semiconducting sensors based on metal oxide nanocomposites. *Journal of Materials Science Research*, 2012, vol. 1, no. 2, pp. 56-68. DOI
10. Golitsyna O.M., Drozhdin S.N., Nechaev V.N., Viskovatykh A.V., Kashkarov V.M., Gridnev A.E., Chernyshev V.V. Dielectric properties of porous aluminum and silicon oxides with inclusions triglycine sulfate and its modified analogs]. *Phys. Solid State*, 2013, vol. 55, no. 3, pp. 529-535. DOI
11. Chukavin A.I., Valeev R.G., Beltyukov A.N. The synthesis of germanium nanostructures in porous anodic alumina matrix. *Vestnik udmurtskogo universiteta – Bulletin of Udmurt University. Physics. Chemistry*, 2011, no. 2, pp. 3-7.
12. Valeev R.G., Beltyukov A.N., Surmin D.V., Zakirova R.M., Vetoshkin V.M. The luminescence of Ge nanostructures embedded to porous Al₂O₃. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya – Chemical Physics and Mesoscopics*, 2014, vol. 16, no. 1, pp. 115-118.

13. Valeev R.G., Romanov E.A., Khokhryakov S.V. Luminescence of ZnS and ZnSe nanostructures in anodic aluminium porous matrices. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2011, vol. 75, no. 11, pp. 1480-1481. DOI
14. Medvedeva S.Yu. Poluchenie opticheski aktivnykh struktur na osnove gidrookisi i oksida alyuminiya s dobavleniem ionov metallovo [Production of optically active aluminum hydroxide and oxide-based structures by adding metal ions]. *Trudy MFTI – Proceedings of Moscow Institute of Physics and Technology*, 2010, vol. 2, no. 1(5), pp. 37-42.
15. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Y., Vakhrushev A.A., Golubchikov V.B., Givotkov A.V. Multilevel simulation of the processes of nanoaerosol formation. Part 1. Theory foundations. *Nanomechanics Science and Technology*, 2011, vol. 2, no. 2, pp. 105-132. DOI
16. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Y. Issledovanie protsessov formirovaniya kompozitsionnykh nanochastits iz gazovoy fazy metodom matematicheskogo modelirovaniya [Investigation of the formation of composite nanoparticles from a gas phase by mathematical modeling]. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya – Chemical Physics and Mesoscopics*, 2007, vol. 9, no. 4, pp. 333-347.
17. Vakhrouchev A.V. Simulation of nano-elements interactions and self-assembling. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2006, vol. 14, no. 6, pp. 975-991. DOI
18. Vakhrouchev A.V. Computer simulation of nanoparticles formation, moving, interaction and self-organization. *J.Phys.: Conf. Ser.*, 2007, vol. 61, no. 1, pp. 26-30. DOI
19. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Y. Investigation of probability distribution laws of structural properties of nanoparticles simulated by molecular dynamics method. *Vychislitel'naya mehanika sploshnykh sred – Computational continuum mechanics*, 2009, vol. 2, no. 2, pp. 14-21. DOI
20. Wadley H.N.G., Zhou X., Johnson R.A., Neurock M. Mechanisms, models and methods of vapor deposition. *Prog. Mater. Sci.*, 2001, vol. 46, no. 3-4, pp. 329-377. DOI
21. Song H., Ilegbusi O.J., Trakhtenberg L.I. Modeling vapor deposition of metal/semiconductor-polymer nanocomposite. *Thin Solid Films*, 2005, vol. 476, no. 1, pp. 190-195. DOI
22. Lennard-Jones J.E. On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas. *Proc. Roy. Soc. A*, 1924, vol. 106, no. 738, pp. 463-477. DOI
23. Lennard-Jones J.E. Wave functions of many-electron atoms. *Math. Proc. Cambridge*, 1931, vol. 27, no. 3, pp. 469-480. DOI
24. Zinenko V.I., Sorokin B.P., Turchin P.P. *Osnovy fiziki tverdogo tela* [Fundamentals of solid state physics]. Moscow: Fizmatlit, 2001. 336 p.
25. Stoddard S.D., Ford J. Numerical experiments on the stochastic behavior of a Lennard-Jones gas system. *Phys. Rev. A*, 1973, vol. 8, no. 3, pp. 1504-1512. DOI
26. Krivtsov A.M., Krivtsova N.V. Method particle and its application to solids. *Dal'nevostochnyi Matematicheskii Zhurnal – Far Eastern Mathematical Journal*, 2002, vol. 3, no. 2, pp. 254-276.
27. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Phys. Rev. B*, 1984, vol. 29, no. 12, pp. 6443-6453. DOI
28. <http://www.fisica.uniud.it/~ercolessi/> (accessed 24 February 2016).
29. Stillinger F.H., Weber T.A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. *Phys. Rev. B*, 1985, vol. 31, no. 8, pp. 5262-5271. DOI
30. Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. *Phys. Rev. B*, 1988, vol. 37, no. 12, pp. 6991-7000. DOI
31. Daw M.S., Baskes M.I. Semiempirical, quantum mechanical calculations of hydrogen embrittlement in metals. *Phys. Rev. Lett.*, 1983, vol. 50, no. 17, pp. 1285-1288. DOI
32. Daw M.S. Model of metallic cohesion: The embedded-atom method. *Phys. Rev. B*, 1989, vol. 39, no. 11, pp. 7441-7452. DOI
33. Baskes M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities. *Phys. Rev. B*, 1992, vol. 46, no. 5, pp. 2727-2742. DOI
34. Ruda M., Farkas D., Abriata J. Interatomic potentials for carbon interstitials in metals and intermetallics. *Scripta Mater.*, 2002, vol. 46, no. 5, pp. 349-355. DOI
35. Tomar V., Zhou M. Classical molecular-dynamics potential for the mechanical strength of nanocrystalline composite fcc Al+ α -Fe₂O₃. *Phys. Rev. B*, 2006, vol. 73, no. 17, 174116. DOI
36. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev. B*, 1964, vol. 136, no. 3, pp. 864-871. DOI
37. Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation. *Phys. Rev. B*, 1998, vol. 58, no. 17, pp. 11085-11088. DOI
38. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Severyukhin A.V., Suvorov S.V. Simulation of producing special nanostructural layers in epitaxial structures for thin photoelectric converters]. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya – Chemical Physics and Mesoscopics*, 2014, vol. 16, no. 3, pp. 364-380.

Поступила в редакцию 23.11.2015; опубликована в электронном виде 30.03.2016

Сведения об авторах

Вахрушев Александр Васильевич, дфмн, проф., гнс, Институт механики УрО РАН (ИМ УрО РАН), 426067, Ижевск, ул. Т. Барамзиной, д. 34; e-mail: vakhrushev-a@yandex.ru

Северюхин Александр Валерьевич, кфмн, учен. секр., ИМ УрО РАН; e-mail: severfam@mail.ru

Федотов Алексей Юрьевич, кфмн, снс, ИМ УрО РАН; e-mail: alezfed@gmail.com

Валеев Рихат Галеевич, кфмн, снс, Физико-технический институт УрО РАН (ФТИ УрО РАН), 426000, Ижевск, ул. Кирова, д. 132; e-mail: rishatvaleev@mail.ru