

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОСАЖДЕНИЯ НАНОПЛЕНОК НА ПОДЛОЖКУ ПОРИСТОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

¹ВАХРУШЕВ А.В., ¹ФЕДОТОВ А.Ю., ¹СЕВЕРЮХИН А.В., ²ВАЛЕЕВ Р.Г.

¹Институт механики Уральского отделения РАН, 426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

²Физико-технический институт Уральского отделения РАН, 426000, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

АННОТАЦИЯ. В работе приведена постановка задачи и описание методики изучения процессов осаждения нанопленок на подложку пористого алюминия. Рассмотрены уравнения, составляющие основу многочастичного потенциала – модифицированного метода погруженного атома. В качестве осаждаемых материалов использовались различные элементы периодической системы Менделеева. Получены различные механизмы зарастивания пористой подложки оксида алюминия. Сформулированы рекомендации для получения нанопленочных материалов различной структуры.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: пористый оксид алюминия, модифицированный метод погруженного атома, эпитаксия, нанопленки, моделирование, молекулярная динамика.

ВВЕДЕНИЕ

Материалы на основе пористого алюминия широко используются в науке и технике. Данные материалы нашли применение в микро- и нанoeлектронике [1, 2], например, в качестве чувствительных слоев для сенсорных устройств [3, 4]. Поры оксида алюминия заполняют диэлектрическими материалами, что впоследствии позволяет получить пленку с низкой диэлектрической проницаемостью [5].

Благодаря своим уникальным свойствам, подложки, образованные пористым алюминием, перспективны в качестве катализаторов и элементов солнечной энергетики [6]. Отдельное внимание заслуживает область применения пористого структур алюминия и его оксида для создания оптических эффектов [7 – 9]. Пористый оксид алюминия обладает особой структурой, позволяющей изготавливать элементы с нанометровыми размерами: столбиковые, нитевидные, точечные, конусообразные и другие [10]. Данные элементы в дальнейшем могут быть использованы для полупроводниковых точек и квантовых нитей. В наноматериалах из пористого оксида алюминия, в отличие от традиционных композиционных материалов, даже небольшое локальное изменение дисперсности или состава компонентов нанокompозита приводит к существенному изменению макроскопических физико-механических характеристик [11 – 13]. Процессы, протекающие в наноматериалах, как правило, нелинейны и достаточно сложны, что делает применение математического аппарата для их исследования перспективным направлением [14, 15].

Целью работы являлось описание алгоритмов и методов для изучения процессов осаждения наноразмерных пленок на подложки пористого оксида алюминия. Материалы, использованные для эпитаксильных процессов, варьировались. Методики осаждения наноразмерных пленок на подложки пористого оксида алюминия могут быть использованы для конкретных технологических процессов и применяться для прогнозирования и проектирования нанопленочных материалов.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Задача нанопленочного осаждения на пористые подложки оксида алюминия решалась методом молекулярной динамики. Метод молекулярной динамики 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 каждого атома.

В зависимости от вида потенциала и внешних сил, входящих в систему, задача моделирования процессов осаждения нанопленок будет иметь различную точность и различные термодинамические параметры. Вопрос получения и поиска параметров потенциала сложен и трудоемок. В качестве источников данных могут служить расчеты методами первых принципов или экспериментальные данные. Наборы достаточно хорошо подобранных параметров для однотипных молекул объединяют в специальные базы данных и библиотеки – силовые поля. Вид потенциалов и потенциальная энергия наноструктурных фотоэлектронных систем вносят определяющий вклад в тип, характер и величину взаимодействий объектов наносистем. Потенциалы разделяют на многочастичные и парные, осесимметричные и пространственные. Во многом вид потенциала при решении задачи определяется наличием параметров в библиотеках и силовых полях баз данных для моделирования наноструктурных систем.

В настоящее время существует хорошо зарекомендовавший себя полуэмпирический подход, объединяющий преимущества многочастичных потенциалов и метода погруженного атома (EAM – embedded-atom method). Теория модифицированного метода погруженного атома (MEAM – modified embedded-atom method) выведена с применением теории функционала электронной плотности (DFT) [16]. Метод DFT в настоящее время считается наиболее признанным подходом к описанию электронных свойств твердых тел. В методе погруженного атома полная электронная плотность представляется в виде линейной суперпозиции сферически усредненных функций. Данный недостаток устранен в модифицированном методе погруженного атома.

В методе MEAM энергия связи системы записывается в следующем виде:

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

где E – энергия атома i ; F_i – функция погружения для атома i , погруженного в электронную плотность $\bar{\rho}_i$; Z_i – число ближайших соседей атома i в его референтной кристаллической структуре; ϕ_{ij} – парный потенциал между атомами i, j , находящимися на расстоянии R_{ij} .

В MEAM функция погружения $F(\rho)$ определяется как

$$F(\rho) = AE_c \rho \ln \rho, \quad (2)$$

где A – регулируемый параметр; E_c – энергия связи.

Парный потенциал между атомами i, j определяется по формуле

$$\phi_{ij}(R) = \frac{2}{Z_i} \left\{ E_i^u(R) - F_i \left(\frac{\bar{\rho}_i^0(R)}{Z_i} \right) \right\}, \quad (3)$$

где $\bar{\rho}_i^0$ – электронная плотность.

Полная электронная плотность в точке погружения включает в себя угловые зависимости и записывается в виде:

$$\bar{\rho} = \rho^{(0)} G(\Gamma). \quad (4)$$

Существует много разновидностей для функции $G(\Gamma)$ [17]:

$$G(\Gamma) = \sqrt{1 + \Gamma}, \quad (5)$$

$$G(\Gamma) = e^{\frac{\Gamma}{2}}, \quad (6)$$

$$G(\Gamma) = \frac{2}{1 + e^{-\Gamma}}, \quad (7)$$

$$G(\Gamma) = \pm \sqrt{|1 + \Gamma|}. \quad (8)$$

Наибольшее распространение получила форма записи в виде:

$$G(\Gamma) = \sqrt{1 + \Gamma}. \quad (9)$$

Функция Γ вычисляется по формуле:

$$\Gamma = \sum_{h=1}^3 t^{(h)} \left(\frac{\rho^{(h)}}{\rho^{(0)}} \right)^2, \quad (10)$$

где $h = 0-3$, соответствуют s, p, d, f симметрии; $t^{(h)}$ – весовые множители; $\rho^{(h)}$ – величины, определяющие отклонение распределения электронной плотности от распределения в идеальном кристалле кубической сингонии $\rho^{(0)}$:

$$s(h=0): \rho^{(0)} = \sum_i \rho^{a(0)}(r^i), \quad (11)$$

$$p(h=1): (\rho^{(1)})^2 = \sum_{\alpha} \left[\sum_i \rho^{a(1)}(r^i) \frac{r_{\alpha}^i}{r^i} \right]^2, \quad (12)$$

$$d(h=2): (\rho^{(2)})^2 = \sum_{\alpha, \beta} \left[\sum_i \rho^{a(2)}(r^i) \frac{r_{\alpha}^i r_{\beta}^i}{r^{2i}} \right]^2 - \frac{1}{3} \sum_i \left[\sum_{\alpha} \rho^{a(2)}(r^i) \frac{r_{\alpha}^i}{r^i} \right]^2, \quad (13)$$

$$f(h=3): (\rho^{(3)})^2 = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \left[\sum_i \rho^{a(3)}(r^i) \frac{r_{\alpha}^i r_{\beta}^i r_{\gamma}^i}{r^{3i}} \right]^2. \quad (14)$$

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

$$\rho^{a(h)}(r) = \rho_0 e^{-\beta^{(h)} \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right)}. \quad (15)$$

Задача моделирования формирования нанопленочных покрытий решалась в несколько этапов. На первом этапе происходит формирование подложки из аморфного оксида алюминия. Атомы алюминия и кислорода в необходимой пропорции (2:3) помещаются в расчетную ячейку с периодическими граничными условиями по бокам (рис. 1, а). Под воздействием потенциальных сил при нормальных термодинамических условиях подложка стабилизируется и приходит в состояние покоя (рис. 1, б). На втором этапе в подложке вырезается отверстие – пора требуемого радиуса и глубины (разрез подложки с порой показан на рис. 1, в). Впоследствии эта пора будет зарастаться атомами различного типа (рис. 1, г). Общая схема задачи формирования гетерогенных оптико-электронных покрытий приведена на рис. 1.

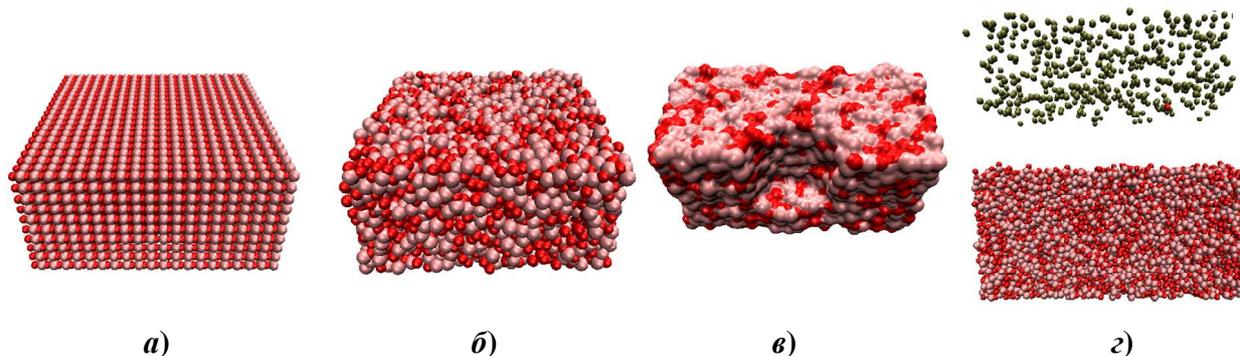


Рис. 1. Этапы решения задачи формирования нанопленочных покрытий на основе пористого оксида алюминия

Граничные условия и внешний вид моделируемой системы представлены на рис. 2. В силу периодических граничных условий по направлениям x и y , в работе рассматривалась только одна пора. В горизонтальных направлениях периодические граничные условия предусматривают зеркальное отражение расчетной ячейки. Сверху и снизу моделируемая система находилась под воздействием жестких граничных условий. Данный тип граничных условий не позволял атомам наносистемы покидать расчетную область в случае отклонения от основной траектории осаждения.

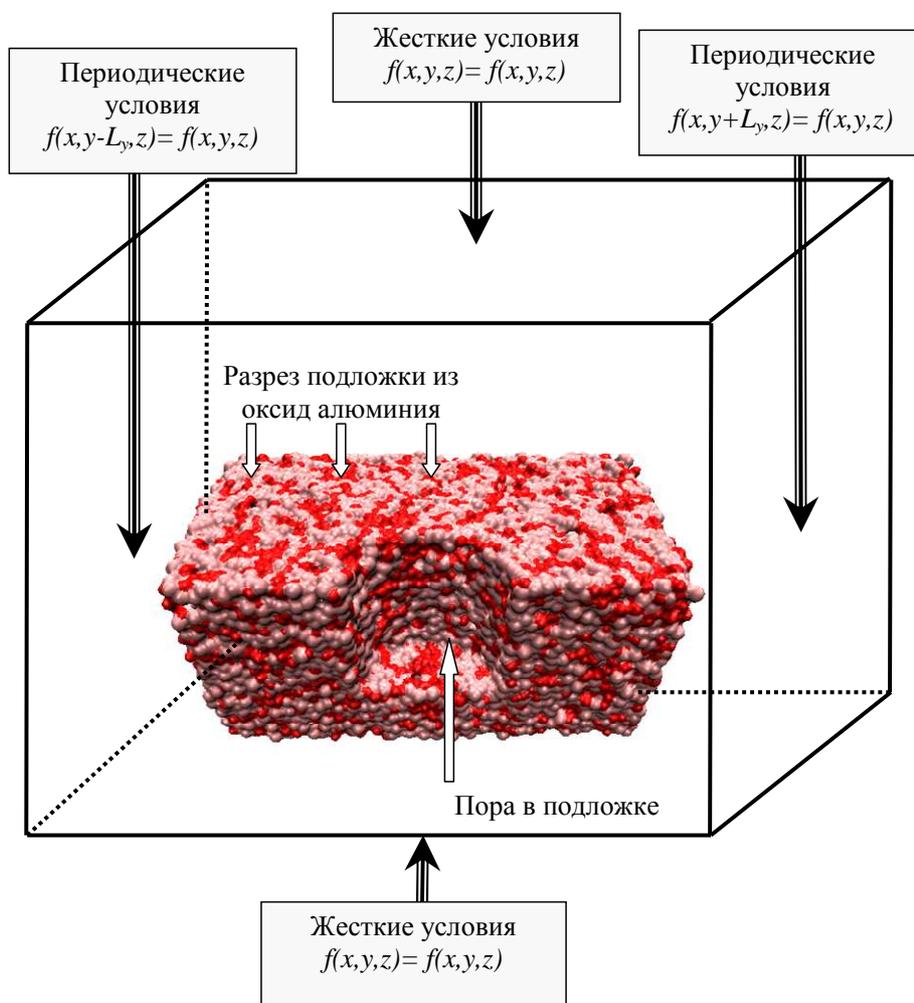


Рис. 2. Граничные условия и внешний вид моделируемой системы

От выбора соответствующего шага интегрирования зачастую зависит сходимость численного решения поставленной задачи. Шаг должен быть достаточно мал, чтоб корректно отображать поведение системы. При использовании методов молекулярной динамики на величину шага интегрирования оказывает влияние значение массы моделируемых веществ. Он выбирается в пределах от 0,5 до 2 фс. В данной работе шаг интегрирования по времени составил 1 фс. Общее время при моделировании системы для этапа стабилизации (рис. 1, а) составило порядка 0,5 нс, для этапа релаксации (рис. 1, б и в) – 0,2 нс и этапа осаждения (рис. 1, г) – 0,2 нс.

Заращивание пористой подложки осуществлялось равномерным напылением атомов по нормали по отношению к подложке. Скорость осаждаемых атомов поддерживалась постоянной и снижалась только при взаимодействии с подложкой. Для проведения тестовых расчетов рассматривалась отдельная наноструктура в безвоздушной среде и ее динамика во время релаксационной самоорганизации атомов.

Молекулярно-динамическое моделирование проводилось при постоянной температуре. Постоянная температура в системе поддерживается при помощи алгоритма термостата. Термостат является средством отвода энергии и охлаждения слишком быстрых атомов и средством подкачки энергии, когда наносистема недостаточно разогрета. В настоящее время алгоритмы термостата достаточно разнообразны: коллизионный (столкновительный) термостат, термостат Берендсена, термостат трения, Nose-Hoover термостат. В данной работе использовался Nose-Hoover и термостат Берендсена. Скорости атомов в начальный момент времени задавались в соответствии с распределением Максвелла. Более подробно методика моделирования и параметры использованных силовых полей приведены в ранее опубликованных работах [18 – 20].

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ АНАЛИЗ

При моделировании использовались аморфные подложки оксида алюминия, имеющие следующий размер: длина – 12,4 нм, ширина 12,4 нм, высота – 6,2 нм. Общее количество атомов в подложке после образования поры было приблизительно равно 60,5 тыс. До начала процесса осаждения подложка находилась в состоянии покоя, ее температура в начальный момент была равна 300 К и в дальнейшем поддерживалась на таком же уровне. График изменения температуры подложки, а также кинетической энергии для этапа стабилизации и релаксации приведен на рис. 3.

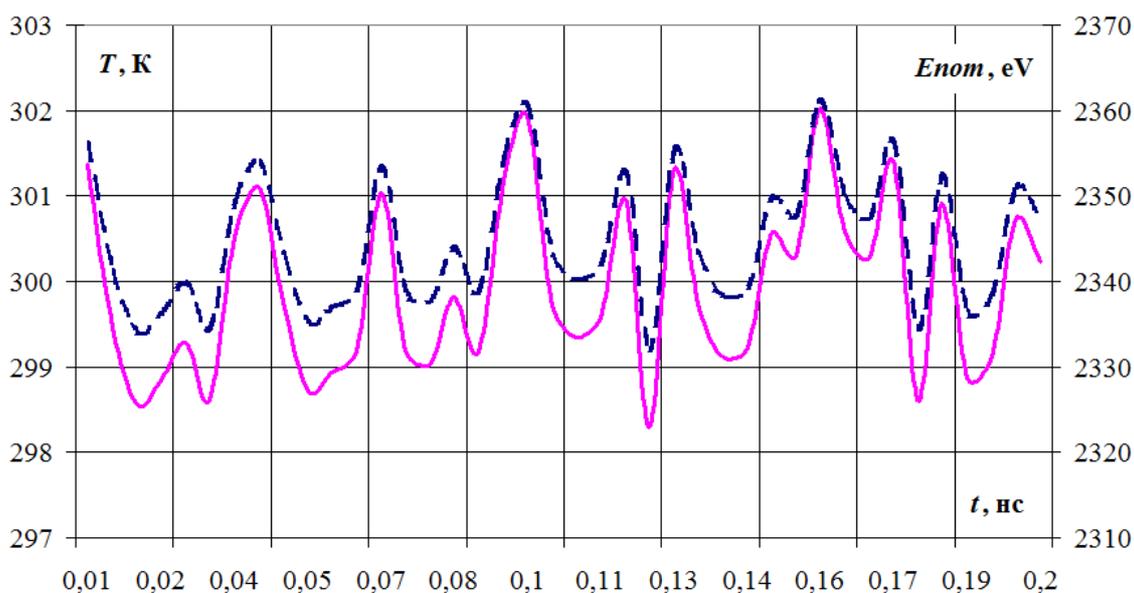


Рис. 3. Зависимость температуры (левая ордината) и кинетической энергии (правая ордината) подложки пористого алюминия для этапа релаксации

Пора в подложке оксида алюминия вырезалась радиусом 2 нм и глубиной 4 нм. В состоянии покоя без осаждения атомов заравнивание поры оксидом алюминия не наблюдалось. Нижний слой подложки был закреплен, для того чтобы не происходило ее вертикальное движение на этапе осаждения. Остальные атомы подложки не фиксировались и могли свободно перемещаться в любом направлении.

В работе на подложку оксида алюминия осаждались различные типы атомов. Количество осаждаемых атомов было равным 20 000. Осаждение происходило равномерно по всей поверхности подложки и с одинаковой интенсивностью по времени. Скорость атомов при эпитаксии составила 0,05 нм/пс. Физические характеристики веществ, используемых при моделировании процесса заравнивания пор и формирования пленочных покрытий, представлены в таблице.

Физические свойства осаждаемых элементов

Элемент	Название	Масса, а.е.м.	Структура кристаллической решетки	Параметр решетки, нм	Температура плавления, К
Ag	Серебро	107,868	кубическая гранцентрированная	$a=0,4086$	1235
Cr	Хром	51,996	кубическая объемноцентрированная	$a=0,2885$	2130
Cu	Медь	63,546	кубическая гранцентрированная	$a=0,3615$	1356
Fe	Железо	55,847	кубическая объемноцентрированная	$a=0,2866$	1812
Ga	Галлий	69,723	орторомбическая	$a=0,4519$ $b=0,7658$ $c=0,4526$	302,93
Ge	Германий	72,630	алмазная	$a=0,566$	1210,6
Li	Литий	6,938	кубическая объемноцентрированная	$a=0,3490$	453,69
Mg	Магний	24,304	гексагональная	$a=0,32029$ $c=0,52000$	923
Mn	Марганец	54,938	кубическая	$a=0,889$	1517
Ti	Титан	47,867	гексагональная плотноупакованная	$a=0,2951$ $c=0,4697$	1933±20
Pd	Палладий	106,42	кубическая гранцентрированная	$a=0,3890$	1827
Pt	Платина	195,084	кубическая гранцентрированная	$a=0,3920$	2041,4
V	Ванадий	50,9415	кубическая объемноцентрированная	$a=0,3024$	2160

Результаты эпитаксиального формирования нанопленки из атомов серебра на подложке из пористого оксида алюминия приведены на рис. 4. Осаждение атомов происходило равномерно, образование крупных агломератов в воздушной среде не наблюдалось. Пленка на подложке формировалась равномерная с небольшим проседанием в области поры. Пора полностью атомами серебра не зарастала, вблизи ее верхней части было замечено попадание части атомов серебра внутрь поры. Остальная область поры оставалась полой на протяжении всего этапа эпитаксии. На рис. 4 справа представлен центральный слой толщиной 0,2 нм подложки с сформированной на ней нанопленкой серебра. Анализ данного рисунка подтверждает неполное зарастивание поры.

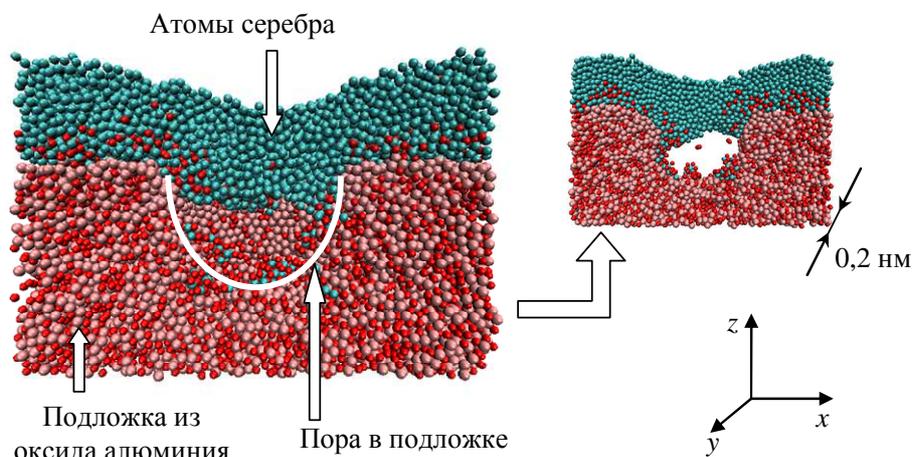


Рис. 4. Результаты осаждения атомов серебра на подложку пористого алюминия, время осаждения 0,2 нс

К моменту времени 0,2 нс этапа осаждения атомов серебра в воздушной среде над подложкой практически не остается. Наблюдается частичное вытягивание атомов кислорода из подложки и попадание их в нижние слои нанопленки на поверхности подложки. Внутри подложки на протяжении всего этапа моделирования происходит незначительная миграция атомов кислорода и алюминия, которая объясняется температурными движениями атомов системы.

Горизонтальный разрез нанопленочного покрытия вдоль поверхности подложки после осаждения атомов серебра для времени осаждения 0,2 нс представлен на рис. 5. В некоторых местах наблюдается частичное образование кристаллической структуры, сформированной атомами алюминия.

Атомы серебра, изображенные в центре подложки на рис. 5, находятся только на поверхности, внутри поры остается полый. Несимметричность картины объясняется псевдостохастическим поведением наносистемы, созданным температурными законами начального распределения скоростей атомов.

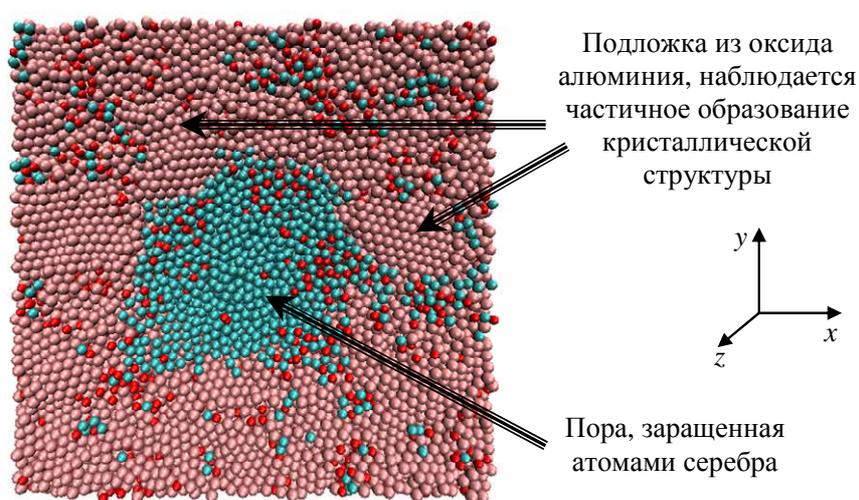


Рис. 5. Горизонтальный разрез нанопленочного покрытия после осаждения атомов серебра вдоль поверхности подложки, время осаждения 0,2 нс

Результаты осаждения атомов золота и магния на подложку пористого оксида алюминия похожи на уже описанный процесс эпитаксии атомов серебра. Покрытие подложки в данных случаях происходит достаточно ровным слоем с прогибом в месте расположения поры. Пора, при этом, полностью не зарастает, осаждающие атомы создают подобие пробки или крышки вблизи ее поверхности.

Атомы хрома, меди и железа при зарощивании подложки начинают группироваться в наноструктуры еще в воздухе, не достигнув поверхности подложки. Сильного укрупнения агломератов при этом не наблюдается, они продолжают двигаться по направлению к подложке. Пример осаждения атомов железа показан на рис. 6 и 7.

На рис. 6 продемонстрировано зарощивание подложки из пористого оксида алюминия атомами железа для времени осаждения 0,05 нс. Так как атомы железа начинали группироваться еще в воздушной среде над подложкой, то и зарощивание подложки происходило по островному принципу. Мелкие наноструктуры железа на подложке постепенно укрупнялись и группировались в большие по размеру. Наблюдалось образование одной из наноструктур железа внутри поры, особенно хорошо ее видно на вертикальном сечении по центру поры (рис. 6, б). Атомы кислорода из верхних слоев подложки активно взаимодействуют с атомами железа, образуя при этом аморфные оксидные структуры.

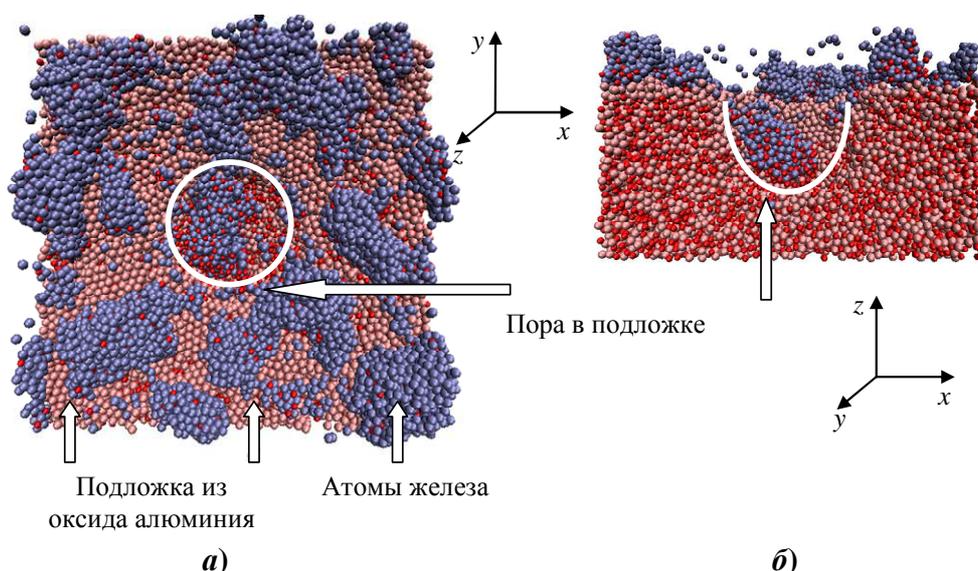


Рис. 6. Зарождение подложки из пористого оксида алюминия атомами железа: а) вид сверху; б) вертикальное сечение по центру поры, время осаждения 0,05 нс

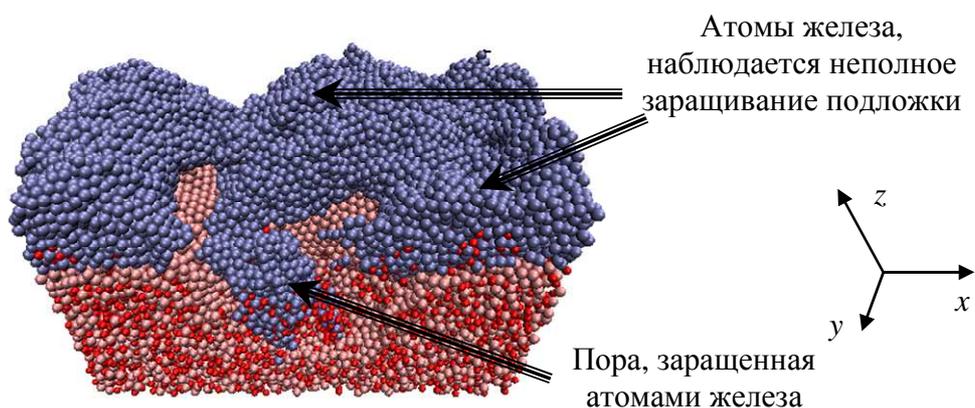


Рис. 7. Зарождение подложки из пористого оксида алюминия атомами железа: вертикальное сечение по центру поры, время осаждения 0,2 нс

Рис. 7 (ось z наклонена на 45 градусов в сторону наблюдателя) иллюстрирует, что поверхность сформированной нанопленки железа на подложке получается не ровной. В отличие от случая эпитаксии атомов серебра и золота, железо не полностью покрывает подложку. Кроме того, наблюдаются достаточно сильные перепады высот в нанопленке, достигающие местами нескольких нанометров. Для покрытий пористых подложек атомами хрома характерны такие же результаты, как и для атомов железа, с тем исключением, что нанопленка получается более ровная, а агломерация атомов хрома в воздушной среде происходит менее интенсивно.

Картина, наблюдаемая при осаждении атомов галлия и германия, похожа между собой по физическому процессу. Результат для времени 0,2 нс представлен на рис. 8. Пора в этих случаях также полностью не зарастает. Нанопленка на поверхности подложки формируется областями, незарощенная подложка также видна крупными регионами на рис. 8. Заметны небольшие наночастицы галлия на поверхности подложки. Вытягивание атомов кислорода из верхних слоев подложки происходит сильнее, чем в ранее рассмотренных случаях.

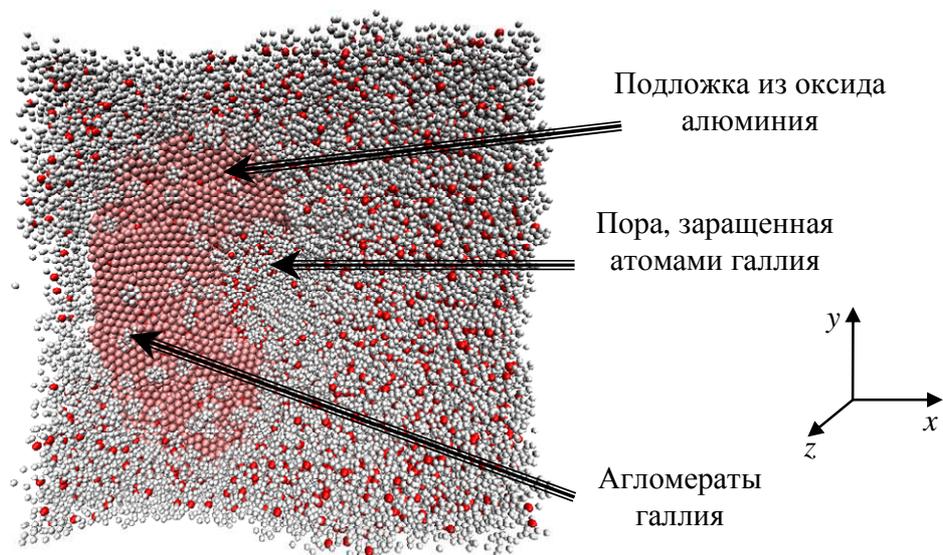


Рис. 8. Зарощивание подложки из пористого оксида алюминия атомами галлия, время осаждения 0,2 нс

Атомы германия при осаждении проникали в область поры более интенсивно, но впоследствии при формировании нанопленки были вытянуты на поверхность. Профиль поверхности полученной нанопленки из атомов германия был неравномерным, с перепадами высот и крупными незарощенными областями.

Интересный эффект наблюдался при эпитаксии атомов палладия и платины на подложку из пористого оксида алюминия. Для случая атомов палладия результат осаждения в двух проекциях приведен на рис. 9. Нанопленка в данном случае формировалась равномерная, с небольшим проседанием в области поры. Однако, непосредственно над порой на протяжении всего этапа конденсации наблюдалось отверстие, которое так и не заросло. Попадание атомов палладия внутрь поры было незначительно, как это видно из вертикального сечения по центру поры, показанного на рис. 9, б.

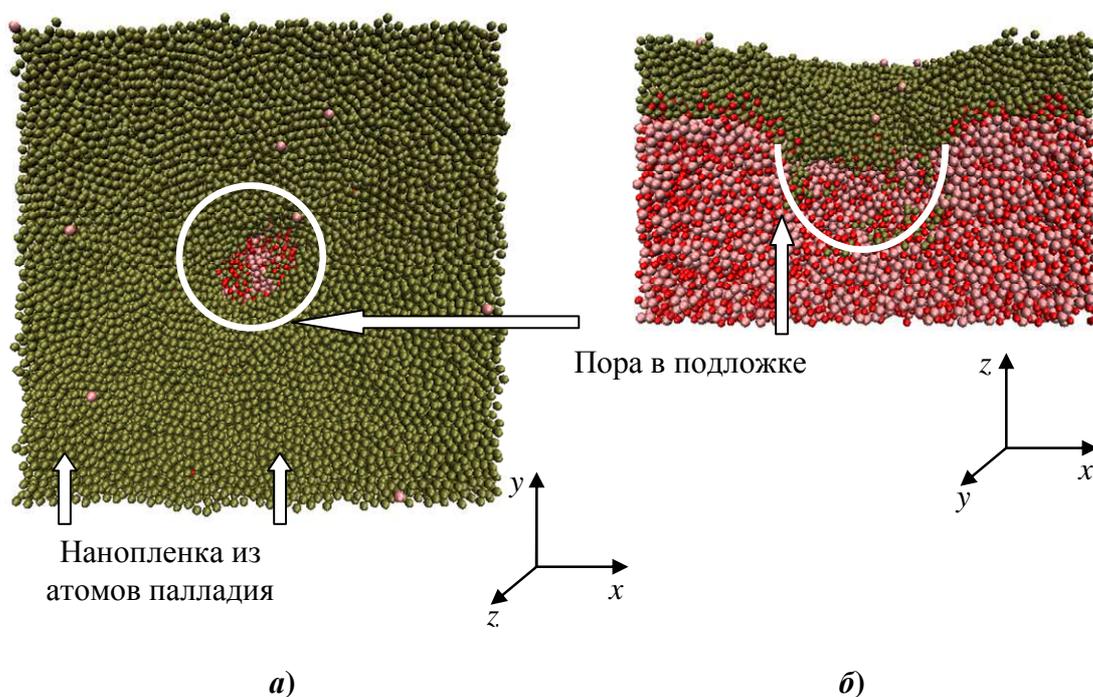


Рис. 9. Зарощивание подложки из пористого оксида алюминия атомами палладия: *a)* вид сверху; *б)* вертикальное сечение по центру поры, время осаждения 0,2 нс

Заращивание подложки из пористого оксида алюминия атомами титана для времени осаждения 0,2 нс продемонстрировано на рис. 10. Для данного типа атомов внешний вид сформированной нанопленки выглядел рыхлым, негладким. Внутри поры атомы попадали незначительно и на протяжении всего этапа конденсации оставались на поверхности подложки. Для эпитаксии подложки атомами ванадия было зафиксировано ее заращивание, Большое количество атомов ванадия попало внутрь поры, но непосредственно на самой поверхности подложки остались незаращенные участки.

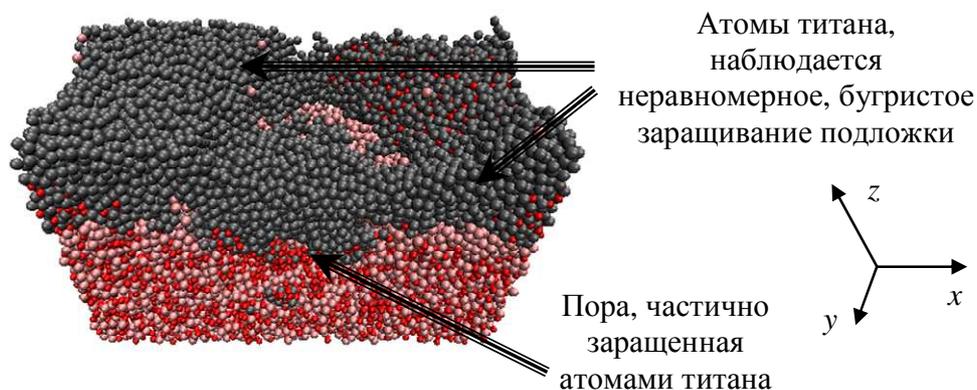


Рис. 10. Заращивание подложки из пористого оксида алюминия атомами титана: вертикальное сечение по центру поры, время осаждения 0,2 нс

ВЫВОДЫ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведены уравнения молекулярной динамики с использованием многочастичного потенциала взаимодействия – модифицированного метода погруженного атома. Рассмотрено различие потенциала MEAM и потенциала погруженного атома и теории функционала электронной плотности.

Представлена постановка задачи для изучения процессов осаждения наноразмерных пленок на подложки пористого оксида алюминия. Методики осаждения наноразмерных пленок используются для конкретных технологических процессов и применяются для прогнозирования и проектирования нанопленочных материалов.

Проиллюстрированы варианты эпитаксиального заращивания пористых подложек на основе оксида алюминия различными типами атомов. Для разных типов осаждаемых атомов были зафиксированы разные процессы взаимодействия наноструктур и механизмы заращивания подложек и пор:

1. Для случаев заращивания атомами серебра, золота и магния наблюдалось равномерное покрытие поры нанопленкой без проникновения этих атомов внутрь. В области поры происходило незначительное проседание нанопленки.

2. Атомы хрома и железа демонстрировали образование наноструктур еще в воздушной среде над подложкой, заращивание подложки происходило по островному принципу. Мелкие наноструктуры железа на подложке постепенно укрупнялись и группировались в большие по размеру, наблюдалось образование наноструктуры железа внутри поры.

3. При осаждении атомов галлия и германия пора также полностью не зарастает, нанопленка на поверхности подложки формируется областями. Заметны небольшие наночастицы галлия на поверхности подложки. Атомы германия при осаждении проникали в область поры более интенсивно, но впоследствии при формировании нанопленки были вытянуты на поверхность.

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

5. Заращивание подложки из пористого оксида алюминия атомами титана характеризовалось рыхлым, негладким внешним видом сформированной нанопленки. Внутри поры атомы попадали незначительно и оставались на поверхности подложки.

6. Для эпитаксии подложки атомами ванадия было зафиксировано ее заращивание, Большое количество атомов ванадия попало внутрь поры, но непосредственно на самой поверхности подложки остались незаращенные участки.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ (проект № 15-19-10002) и РФФИ (проект № 13-08-01072 а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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 // *Electrochimica Acta*. 2003. № 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 // *Журнал технической физики*. 2015. Т. 8, Вып. 9. С. 86-90.
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. et al. Alumina MEMS platform for impulse semiconductor and IR optic gas sensors // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2008. V. 132, Is. 1. P 216-223.
5. Филяк М.М., Каньгина О.Н. Особенности формирования анодного оксида алюминия в щелочных электролитах // *Вестник ОГУ*. 2013. № 1. С. 154-159.
6. Голицына О.М., Дрождин С.Н., Нечаев В.Н., Висковатых А.В. и др. Диэлектрические свойства пористых оксидов алюминия и кремния с включениями триглицинсульфата и его модифицированных аналогов // *Физика твердого тела*. 2013. Т. 55, Вып. 3. С. 479-484.
7. 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 и химия*. 2011. Вып. 2. С. 3-7.
8. Валеев Р.Г., Бельтюков А.Н., Сурнин Д.В., Закирова Р.М., Ветошкин В.М. Люминесценция наноструктур Ge в пористом Al₂O₃ // *Химическая физика и мезоскопия*. 2014. Т. 16, № 1. С. 115-118.
9. 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.
10. 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.
11. 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 // *International Journal of Nanomechanics Science and Technology*. 2011. Т. 2, № 2. С. 105-132.
12. 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.
13. Вахрушев А.А., Федотов А.Ю., Шушков А.А., Шушков А.В. Моделирование формирования наночастиц металлов, исследование структурных, физико-механических свойств наночастиц и нанокomпозитов // *Известия Тульского государственного университета. Естественные науки*. 2011. № 2. С. 241-253.
14. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Y., Vakhrushev A.A., Golubchikov V.B., Givotkov A.V. Multilevel simulation of the processes of nanoaerosol formation. Part 2. Numerical investigation of the processes of nanoaerosol formation for suppression of fires // *International Journal of Nanomechanics Science and Technology*. 2011. Т. 2, № 3. С. 205-216.
15. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Исследование вероятностных законов распределения структурных характеристик наночастиц, моделируемых методом молекулярной динамики // *Вычислительная механика сплошных сред*. 2009. Т. 2, № 2. С. 14-21.
16. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // *Phys. Rev. B*. 1964. V. 136. № 3. P. 864-871.
17. Baskes M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities // *Phys. Rev. B*. 1992. V. 46. № 5. P. 2727-2742.
18. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Моделирование формирования композиционных наночастиц из газовой фазы // *Альтернативная энергетика и экология*. 2007. № 10. С. 22-26.

19. 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.

20. Вахрушев А.В., Федотов А.Ю. Многоуровневое математическое моделирование процессов конденсации в аэрозольных наносистемах // Альтернативная энергетика и экология. 2014. № 8. С. 8-21.

SIMULATION OF THE DEPOSITION PROCESS ON A SUBSTRATE NANOFILMS OF POROUS ALUMINA

¹Vakhrushev A.V., ¹Fedotov A.Y., ¹Severyukhin A.V., ²Valeev R.G.

¹Institute of Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Science, Izhevsk, Russia

²Physical-Technical Institute, Ural Branch of the Russian Academy of Science, Izhevsk, Russia

SUMMARY. In the paper formulation of the problem and describe the study of deposition of nanofilms on porous alumina substrate are shown. The equations of the modified embedded atom method are considered. These equations are the basis of many-particle interaction potential of atoms. Various elements of the Mendeleev periodic system are used as deposition materials. Various mechanisms overgrowth of a porous substrate of alumina are obtained. Recommendations for obtaining of nanofilms materials of different structures are formulated.

KEYWORDS: porous alumina, modified embedded atom, epitaxy, nanofilms, simulation, molecular dynamics.

Вахрушев Александр Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории информационно-измерительных систем ИМ УрО РАН, заведующий кафедрой «Нанотехнологии и микросистемная техника» ИЖГТУ имени М.Т. Калашиникова, тел. (3412) 21-45-83, e-mail: vakhrushev-a@yandex.ru

Федотов Алексей Юрьевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории информационно-измерительных систем ИМ УрО РАН, e-mail: alezfed@gmail.com

Северюхин Александр Валерьевич, кандидат физико-математических наук, ученый секретарь ИМ УрО РАН, e-mail: severfat@mail.ru

Валеев Ришат Галеевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории атомной структуры и анализа поверхности ФТИ УрО РАН, тел. (3412) 43-01-63, e-mail: rishatvaleev@mail.ru