

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА МЕЖДУ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ НАНОПЛЕНКАМИ

А.М. Игошкин, И.Ф. Головнев, В.М. Фомин

В настоящее время изучение совокупности механизмов, ответственных за формирование наноструктур на подложке при осаждении металлов из пучка или из газовой фазы, не завершено. Для выявления этих механизмов необходимы методы исследования процессов на атомарном уровне, среди которых одним из самых мощных является метод молекулярной динамики, что обуславливает его актуальность при решении данной задачи. В работе исследуется влияние ориентации и температуры подложки на формирование границы раздела Ag/Cu.

Ключевые слова: осаждение из газовой фазы, молекулярно-динамическое моделирование, наноструктуры, граница раздела.

Введение

Среди всего многообразия технологических задач, решаемых на данный момент, одной из важнейших является задача формирования металлических нанопленок на металлической подложке при осаждении из пучка или из газовой фазы. Существует большое число как теоретических, так и экспериментальных исследований данной проблемы. Однако, в настоящее время изучение совокупности механизмов, ответственных за формирование наблюдаемых структур тонких пленок, далеко не завершено. Для выявления этих механизмов необходимы различные методы исследования динамических процессов на атомарном уровне. К ним относятся метод молекулярной динамики, Монте-Карло, а также прямые квантовые расчеты. Самым мощным среди них при работе с системами порядка нескольких тысяч частиц является метод молекулярной динамики, что обуславливает его актуальность при решении данной задачи.

Металлизация поверхности является многосоставной проблемой, поэтому необходимо ее разбиение на более обозримые подзадачи. Из них одной из самых важных является проблема влияния границы раздела осажденный слой – подложка. Особое значение и интерес имеет исследование гетероструктур из материалов, значительно отличающихся по параметру решетки. Среди металлов это, как правило, медь и серебро или никель и золото. И в том, и в другом случае параметр решетки отличается примерно на 20%, в силу этого наблюдаются абсолютно аналогичные явления на границе раздела данных материалов.

В работе [1] было впервые обнаружено формирование периодической (9 × 9) структуры на границе раздела Ag/Cu (111). Теоретическое объяснение этого явления было дано в работе [2]. С помощью метода молекулярной динамики было показано, что на границе раздела Ag/Cu (111) образуется муаровая структура в виде периодически расположенных в шахматном порядке шестиугольных выступов и углублений. Из-за такого характерного распределения напряжений ее также называют шахматной структурой. Там же впервые было показано формирование ряда других периодических суперструктур на границе раздела Ag/Cu (100) и Ag/Cu (110), в том числе (2 × 10) структура на Ag/Cu (100).

Наличие муаровой структуры экспериментально было подтверждено на примере очень похожей системы Au/Ni (111) [3]. В этой же работе обнаружена еще одна устойчивая конфигурация границы раздела данной системы – так называемая треугольная структура, а также

выявлена ключевая роль поверхностных вакансий в процессе ее формирования. Позже было подтверждено существование данных устойчивых суперструктур и на границе раздела Ag/Cu (111) [4].

В процессе детальных исследований треугольных структур было показано, что при формировании тонких пленок часть атомов верхней плоскости подложки под действием определенных механизмов удаляются из нее. Это в свою очередь дает возможность формированию дислокационных петель в подложке. Они прорастают на поверхности пленки в виде треугольников, во внутренней области которых атомы относительно нижних плоскостей имеют упаковку АВА, а во внешней АВС. Тут стоит выделить два важных аспекта. Во-первых, в отличие от подавляющего большинства систем, где для того, чтобы снять излишнее напряжение в структуре, дислокации образуются в осажденном слое, в данном случае дислокационные петли возникают в подложке. Во-вторых, оказывается необходимым формирование точечных дефектов в подложке, чтобы дать возможность проявиться треугольной структуре.

Более поздние теоретические работы носили в основном уточняющий характер [5–8]. Так, в работе [5] исследовалось влияние числа вакансий в приграничном слое. В [6–8] проведены детальные энергетические исследования влияния размеров ячейки, числа вакансий и температуры, на формирование и устойчивость межграничных конфигураций. Несколько отличается от них работа [9], где впервые и, насколько известно авторам, в единственном случае рассматривается именно переход от одной структуры к другой. В ней, в частности исследованы, всевозможные диффузионные пути с указанием активационных барьеров, им отвечающих. Следует заметить, что во всех вышеприведенных теоретических работах, за исключением работы [9], рассматриваются только конечные структуры. То есть никак не моделируется процесс непосредственно осаждения тонкой пленки, что является их главным на данный момент недостатком. Как итог, на в настоящее время нет достаточно четкого понимания механизма перехода от муаровой структуры к треугольной.

Следует заметить, что в большинстве из вышеприведенных работ рассматриваются только конечные структуры (за исключением [9]). То есть никак не моделируется процесс непосредственно осаждения тонкой пленки, что является их главным на данный момент недостатком. Как итог, на данный момент нет достаточно четкого понимания механизма перехода от муаровой структуры к треугольной. Отличие настоящей работы в том, что в ней моделируется максимально близкое подобие технологического процесса (МВЕ), которое только возможно из-за масштабных и временных ограничений, связанных с использованием метода молекулярной динамики. Основной целью исследования является отыскание движущей силы и механизмов перехода.

1. Физико-математическая модель осаждения

В данной работе рассматривается формирование нанослоя на поверхности медной подложки путем моделирования осаждения серебра из пучка методом молекулярной динамики. Взаимодействие между атомами меди описывалось многочастичным потенциалом Вoutersа [11], полученным в рамках метода внедренного атома (Embedded atom method) [10]. Общий вид ЕАМ потенциала

$$E_i = \frac{1}{2} \sum_j \phi(r_{ij}) + F(\bar{\rho}_i),$$

$$\bar{\rho}_i = \sum_j \rho(r_{ij}),$$

где r_{ij} – скалярное расстояние между атомами i и j , ϕ – парное взаимодействие между атомами, ρ – другое парное взаимодействие, описывающее плотность электронов i -го атома в месте расположения j -го атома.

Сумма по ближайшим атомам, ограниченная длиной обрывания для ϕ и ρ , обычно включает в 1 – 4 оболочки ближайших соседей (потенциал Воутера учитывает взаимодействие атомов до третьего ближайшего соседа включительно). Для данного потенциала имеются константы взаимодействия для семи металлов: Ni, Pb, Pt, Cu, Ag, Au и Al. Несмотря на то, что в данной работе проводились исследования осаждения только серебра на медь, был создан комплекс программ, позволяющий моделировать любые материалы из этого списка.

Численный расчет траекторий производился с помощью скоростной модификации схемы Верле второго порядка точности с использованием «списков Верлета». В работе использован ряд обезразмеривающих множителей: координаты измерялись в 10^{-10} м, время – в 10^{-13} с, масса – в 10^{-27} кг, энергия – в 10^{-21} Дж, скорость – в 10^3 м/с, сила в 10^{-11} Н, давление и напряжение – в 10^9 Па. Шаг времени был выбран равным 10^{-16} с.

Первым этапом данной работы стало моделирование начального состояния системы. Для этого была сформирована подложка в виде трехмерного кристалла меди в форме параллелепипеда с числом n_x, n_y, n_z кристаллических плоскостей вдоль соответствующих осей координат. Расчеты проводились для различных значений n_x, n_y, n_z , в зависимости от условий численного эксперимента. После построения идеального кристалла с параметрами из макросреды было произведено его охлаждение методом искусственной вязкости для приведения в состояние минимума энергии [12]. Для создания начального состояния с ненулевой температурой подложка нагревалась методом стохастических сил [13].

Следующим этапом является осаждение металла на идеальную поверхность медной подложки с помощью метода прямого статистического моделирования. В области над подложкой в форме параллелограмма со средним временем τ производилось добавление атомов. Варьируя интервал между их генерациями, можно изменять скорость роста пленки. В нашем случае $\tau \approx 2 \cdot 10^{-14}$ с. Распределение координат в области полагалось равномерным. Начальная энергия атомов в пучке равна средней энергии равновесного газа при температуре 1000 К, что соответствует примерно 0,1 эВ. Направление осаждения перпендикулярно к поверхности подложки. Для того чтобы подложка не сдвигалась под действием осаждаемых атомов, было произведено закрепление нижней плоскости гармоническим потенциалом.

Температура подложки поддерживалась на постоянном уровне посредством введения диссипативного члена следующего вида $\vec{F}_i = -\alpha(T)\vec{p}_i$ в уравнения движения атомов подложки, находящихся на несколько атомарных слоев ниже поверхности, чтобы данная добавка не оказывала влияния на процессы, происходящие на поверхности подложки. Функция $\alpha(T)$ является модифицированным вариантом выражения, используемого в термостате Берендсена [14]. В частности, в ней введена поправка на поток тепловой энергии, образующийся в результате высвобождения скрытой теплоты при осаждении атомов.

Из-за того, что постоянные решетки меди и серебра значительно отличаются, в гетероструктурах в периодических граничных условиях с фиксированными размерами ячейки возникают значительные неестественные деформации. Чтобы их исключить, были построены периодические граничные условия, в которых фиксируются не размер ячейки, а компоненты напряжений с точностью до осцилляций вдоль соответствующих направлений [15]. Данный метод также позволяет естественным образом учитывать термическое расширение кристалла.

2. Структура границы раздела Ag/Cu

2.1. Осаждение Ag на Cu (001)

В качестве тестовой задачи на первом этапе было рассмотрено осаждение меди на идеальную медную подложку с ориентацией (001). Конечная структура представлена на рис. 1,

из которого следует, что формирующийся нанослой копирует ГЦК-структуру подложки, что подтверждается также радиальной функцией распределения на рис. 2.

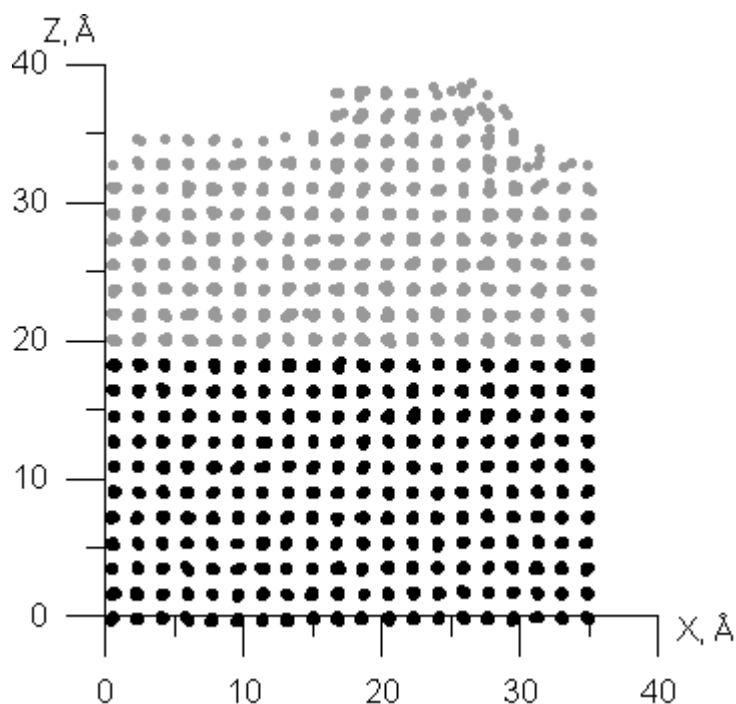


Рис. 1. Проекция XZ структуры, полученной в результате осаждения 9 монослоев меди на медную подложку (001) при температуре 300 К. Серыми кружками обозначены атомы осажденного слоя, черными – подложки

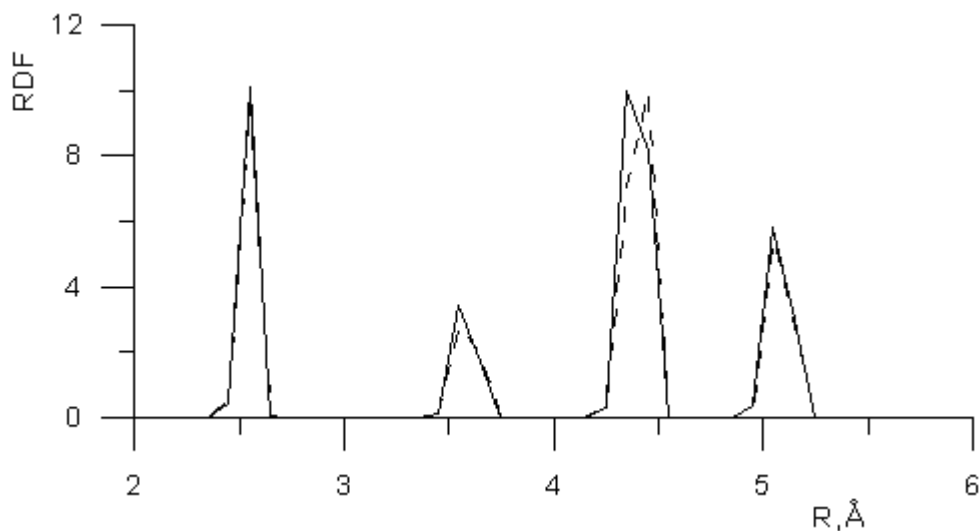


Рис. 2. Радиальная функция распределения атомов осажденной медной пленки (пунктирная линия) и идеального кристалла (сплошная линия)

Для осаждения Ag на Cu (001) была приготовлена подложка так, как это описано в предыдущем разделе, содержащая в себе 21 (100), 21 (010), 10 (001) кристаллических плоскостей вдоль осей координат x , y и z , соответственно. Затем на этой подложке были сфор-

мированы нанослой с различными толщинами покрытия от 0,64 монослоя до 18 монослоев при температуре 300 К.

Структура, полученная при 300 К, с серебряным слоем толщиной 12 монослоев представлена на рисунках 3 и 4. На них отчетливо видно, что осажденная пленка имеет кристаллическое строение. Более того, можно предполагать, основываясь на том, что серебро – ГЦК-металл, что данная решетка данной пленки также ГЦК с (111) ориентацией. Чтобы проверить правильность этой гипотезы, сформированная нанопленка разбивалась на горизонтальные кристаллические плоскости. Данный анализ, наряду с радиальной функцией, показал, что структура состоит из (111) ГЦК-плоскостей, имеющих преимущественно АВС упаковку, что однозначно указывает на истинность предположения.

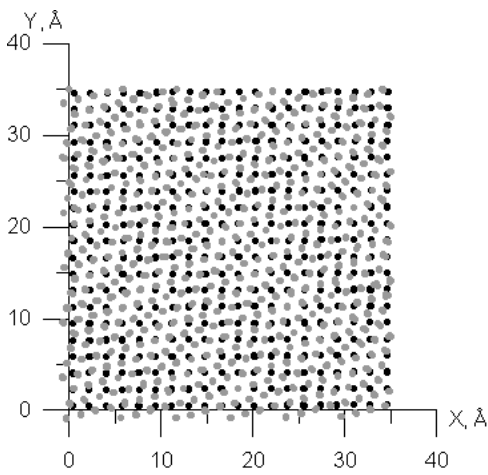


Рис. 3. Проекция XY структуры, полученной в результате осаждения 12 МС серебра на медную подложку (001) при температуре 300 К. Серыми кружками обозначены атомы осажденного слоя, черными – подложки

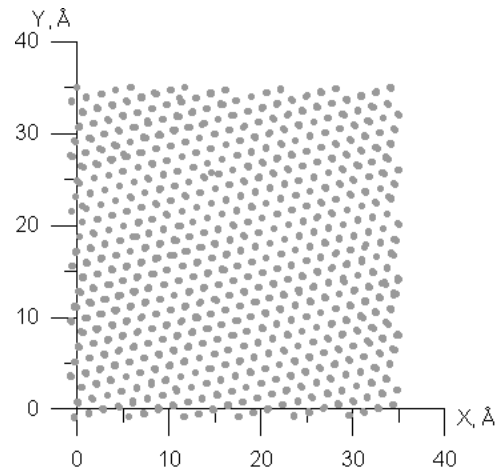


Рис. 4. Проекция XY нанослоя серебра, полученного в результате осаждения серебра на медную подложку (001) при температуре 300 К

Однако визуальный анализ не может дать полной информации о структуре полученных нанопленок. Поэтому для исследования границы раздела материалов в гетероструктуре использовались следующие характеристики.

1. Координаты векторов смещений атомов верхней плоскости медной подложки относительно их положений в идеальном кристалле:

$$\Delta x_i^0 = x_i - x_i^0, \Delta y_i^0 = y_i - y_i^0, \Delta z_i^0 = z_i - z_i^0.$$

2. Аналогии компоненты тензора напряжений, найденные следующим образом. Находились компоненты полной силы, действующей на каждый атом меди, лежащий на интерфейсе, со стороны всех атомов серебра. Далее эти компоненты сил делились на площадь, отнесенную одному атому меди на границе раздела. Поскольку эти характеристики не усреднялись по большому количеству атомов, а относились к каждому атому, они названы аналогами компонент тензора деформации:

$$\sigma_{zx}(\vec{r}_i^{Cu}) = \left(\sum_{j(Ag)} F_{x(ij)} \right) / S_{z(i)}, \sigma_{zy}(\vec{r}_i^{Cu}) =$$

$$= \left(\sum_{j(Ag)} F_{y(ij)} \right) / S_{z(i)}, \sigma_{zz} (\vec{r}_i^{Cu}) = \left(\sum_{j(Ag)} F_{z(ij)} \right) / S_{z(i)}.$$

Везде ниже на рисунках эти характеристики обозначены черным цветом, если они отрицательны, и серым, если положительны. Конкретно в нашем случае распределение компонент тензора псевдонапряжений выглядит так, как показано на рисунке 5. Отчетливо видно периодическое (2×10) распределение напряжений на интерфейсе, причем период совпадает как с экспериментальными исследованиями, так и с молекулярно-динамическими, проводимыми ранее [2]. Следует заметить, что координаты векторов смещений дают тот же результат, в связи с чем их распределение не приводятся.

2.2. Осаждение Ag на Cu (111)

Аналогично предыдущему исследованию для осаждения нанослоев Ag на Cu(111) сформирована подложка, содержащая в себе 30(110), 48(112), 10 (111) кристаллических плоскостей вдоль x, y и z соответственно. На этой подложке были сформированы нанослои с толщинами покрытия от 0,5 монослоя до 14 монослоев в диапазоне температур 30 – 600 К.

После того как было произведено осаждение нанослоев серебра на медную подложку с ориентацией (111), оказалось, что во всем диапазоне температур сформированные гетероструктуры имеют одну и ту же морфологию. В качестве примера структура, полученная при 300 К, с серебряным слоем толщиной 5,5 монослоев представлена на рис. 6 и 7. На них отчетливо видно, что осажденная пленка имеет ГЦК-структуру и формируется с ориентацией подложки, то есть (111). В проекции XY сформированной гетероструктуры наблюдается муаровая структура, которая образуется из-за наложения друг на друга двух решеток с различным периодом. Чтобы убедиться, что это не исключительно визуальный эффект, аналогично тому, как это делалось в предыдущем случае, производился анализ нанослоя на основе векторов смещения и тензора псевдонапряжений. Он представлен на рис. 8. Было показано, что реальный период данных структур в два раза больше как в направлении (112), так и (110). Это, в частности, позволяет говорить о совпадении данных результатов с экспериментом [3, 4].

Необходимо отметить следующий важный момент. Из рисунка видно, что размеры ячейки в периодических граничных условиях не кратны ожидаемым соответствующим пространственным периодам суперструктуры. Однако она даже в этом случае стремится воспроизвести размеры, наблюдаемые в эксперименте. Это доказывает, что получаемые с помощью компьютерного моделирования суперструктуры соответствуют экспериментальным данным, а не определяются параметрами численной схемы (например, размерами периодической ячейки).

Важно заметить, что во всем диапазоне температур не было обнаружено формирования треугольной структуры, что на первый взгляд находится в противоречии с экспериментами [7], в которых было показано, что при температуре подложки свыше 400 К на интерфейсе преобладает именно треугольная структура. Причина этому в игнорировании температурной или «медленной» диффузии в методе молекулярной динамики. Под «медленной» подразумевается та, характерные времена которой значительно превышают физическое время численного эксперимента.

В более ранних молекулярно-динамических расчетах было показано, что причиной формирования треугольной структуры является возникновение вакансий в верхней кристаллической плоскости подложки. Причем необходимо, чтобы количество вакансий становилось равным примерно пяти в расчете на одну периодическую ячейку (9×9). И тут на первое место встает необходимость отыскания механизма возникновения этих вакансий, которые в более ранних исследованиях никак не вводились. И как было упомянуто во Введении,

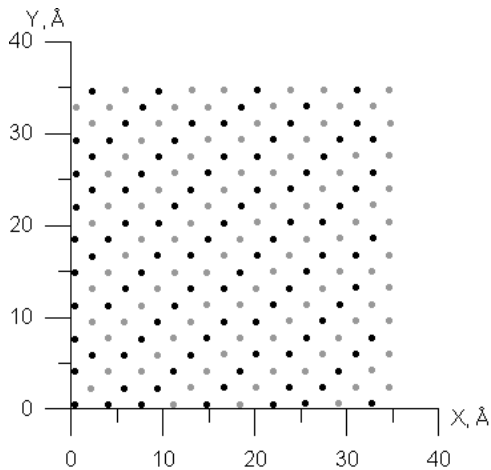


Рис. 5. Распределение компоненты σ_{zz} тензора псевдонапряжений в верхней плоскости медной подложки (001) в структуре, сформированной при осаждении серебра. Черными кружкам обозначены атомы, имеющие положительную соответствующую компоненту тензора, серыми – отрицательную

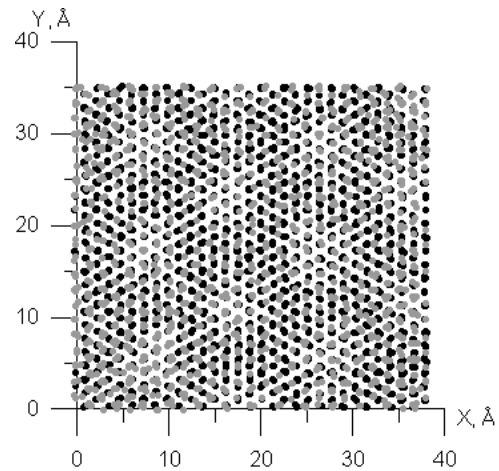


Рис. 6. Проекция XY структуры, полученной в результате осаждения 5,5 МС серебра на медную подложку (111) при температуре 300 К. Серыми кружками обозначены атомы осажденного слоя, черными – подложки

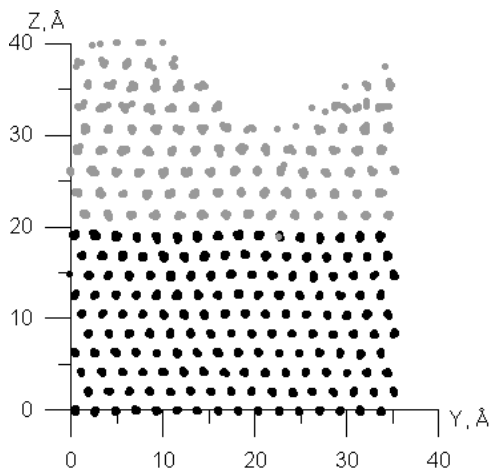


Рис. 7. Проекция YZ той же структуры

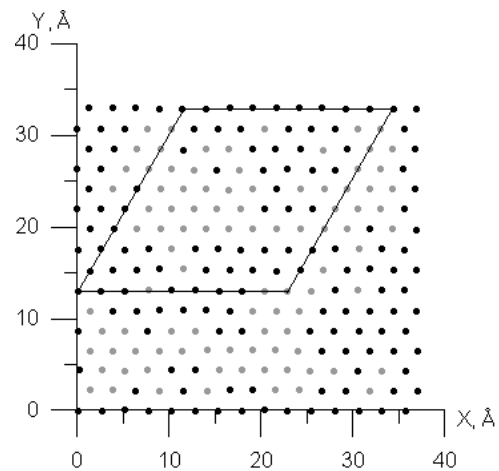


Рис. 8. Распределение компоненты σ_{zz} тензора псевдонапряжений в верхней плоскости медной подложки (111) в структуре, сформированной при осаждении серебра на эту подложку. Черными кружкам обозначены атомы, имеющие положительную соответствующую компоненту тензора, серыми – отрицательную. Сплошной линией выделена ячейка суперструктуры

представленный в настоящей работе подход выгодно отличается тем, что благодаря внесению в модель исследований некоторых деталей технологического процесса, естественным

образом возникают возможные механизмы формирования приповерхностных вакансий. В частности, благодаря высвобождению скрытой теплоты десублимации, адатомы в течение короткого времени обладают достаточно высокой энергией, чтобы стало возможным посредством обменного механизма образование точечных дефектов. В наших расчетах концентрация вакансий была значительно меньше необходимой. Это приводит к предположению, что за формирование треугольных суперструктур ответственна термическая диффузия.

2.3. Осаждение Ag на модифицированную подложку Cu (111)

В предыдущем параграфе было показано, что при осаждении серебра на чистую (111) медную подложку формирование треугольной сверхрешетки на границе раздела не происходит. Обусловлено это, вероятнее всего, тем, что основным механизмом ее самоорганизации является термическая диффузия, которая, по большей части, заморожена в рамках ограничений по времени, диктуемых самим методом молекулярной динамики. В действительности остается открытым вопрос, является ли ограничение на термическую диффузию единственным препятствием для образования треугольной структуры. Среди других факторов, которые могут влиять на процесс моделирования данного процесса, следует выделить в первую очередь граничные условия и потенциал взаимодействия. Не вдаваясь в подробности, заметим, что детальное исследование влияния этих двух факторов слишком обширно, чтобы его рассматривать в рамках одной статьи. Поэтому их детальный анализ был заменен следующим принципиальным вопросом и, по сути, самым важным в данном случае. Возможна ли вообще самоорганизация треугольной структуры в рамках метода молекулярной динамики с неким заданным потенциалом и граничными условиями, причем с помощью любого процесса, в котором начальными условиями не задано данной суперструктуры?

В качестве такого был выбран процесс осаждения нанослоев из пучка (МВЕ), но верхний слой подложки при этом претерпевал модификации. Сначала аналогично предыдущему исследованию была сформирована подложка, содержащая в себе 40(110), 60(112), 10 (111) кристаллических плоскостей вдоль x , y и z соответственно. Затем в ней искусственно формировались поверхностные вакансии, местоположение которых задавалось генератором случайных чисел. Всего было введено 43 такие вакансии. Затем на данной подложке были сформированы нанослои с различной толщиной покрытия от 0,25 монослоя до 19 монослоев в диапазоне температур 300 – 600 К.

В результате анализа полученных структур было обнаружено, что структура границы раздела осажденный слой-подложка изобилует различными дефектами, поскольку является неравновесной. По этой же причине нельзя ожидать повторяемости результатов при одинаковых макроскопических условиях, таких как плотность потока атомов на поверхность и температура подложки, что и наблюдалось в численных экспериментах, где от расчета к расчету строение границы раздела сильно изменялось. После накопления статистического материала треугольной структуры была обнаружена в одном из численных экспериментов (рис. 9).

Обращает на себя внимание то, что приведенная граница раздела также содержит множество дефектов. Так, например, на приведенном рисунке видно, что суперструктура искажена. Также было выявлено, что некоторое число атомов серебра находятся в верхней кристаллографической плоскости подложки, и, наоборот, несколько атомов меди можно обнаружить в нижнем слое осажденной серебряной нанопленки. Но, несмотря на наличие дефектов, морфология данной структуры хорошо соотносится с экспериментальными данными, полученными с помощью СТМ.

Таким образом, впервые показано, что в молекулярно-динамических расчетах возможно наблюдать самоорганизацию треугольной суперструктуры на границе раздела Ag/Cu (111).

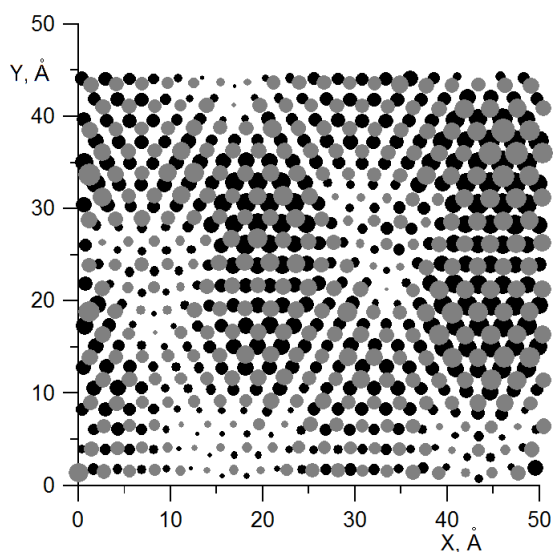


Рис. 9. Распределение векторов смещений атомов относительно средней высоты в кристаллографической плоскости. Более крупный кружок соответствует большей высоте. Серыми кружками обозначены атомы осажденного слоя, черными – подложки

В предшествующих исследованиях [9], где производилось моделирование отжига, удавалось получить лишь отдельные фрагменты такой сверхрешетки.

Заключение

В настоящей работе методом молекулярной динамики исследовано формирование Ag/Cu структур при осаждении атомов из пучка с тепловыми энергиями на поверхность подложек Cu (001) и Cu (111). Было показано, что:

1. На границе раздела нанопленок в Ag/Cu (001) формируется суперструктура (2×10). Анализ с помощью тензора псевдонапряжений и векторов смещений атомов верхней плоскости подложки показал, что она представляет собой периодическое распределение напряжений на интерфейсе материалов. Данные наблюдения согласуются с экспериментальными исследованиями.
2. При осаждении серебра на подложку Cu (111) происходит формирование муаровой структуры (9×9), что также согласуется с экспериментом. Было показано, что период ее не зависит от размеров ячейки при использовании периодических граничных условий. Данный вывод опровергает аргумент о том, что получаемые с помощью компьютерного моделирования суперструктуры полностью определяются параметрами численной схемы (а именно размерами периодической ячейки).
3. Высвобождение скрытой теплоты десублимации в процессе осаждения неспособно инициировать возникновение достаточного для формирования треугольной структуры числа вакансий в верхней плоскости подложки. Это приводит к выводу, что за формирование треугольных суперструктур ответственна исключительно термическая диффузия.
4. При осаждении серебра на (111) медную подложку с искусственно введенными вакансиями впервые в молекулярно-динамических расчетах наблюдалось формирование треугольной суперструктуры.

Литература

1. Mitchell, K.A.R. A Test of Energy Averaging in LEED: The Coincidence Lattice Structure Formed by Ag on Cu (111) / K.A.R. Mitchell, D.P. Woodruff, G.W. Vernon // *Surface Science*. – 1974. – V. 46, issue 2. – P. 418–426.
2. Mottet, C. Structures of a Ag Monolayer Deposited on Cu (111), Cu (100), and Cu (110) Substrates: an Extended Tight-Binding Quenched-Molecular-Dynamics Study / C. Mottet, G. Treglia, B. Legrand // *Phys. Rev. B*. – 1992. – V. 46, № 24. – P. 16018–16030.
3. Atomic-Scale Determination of Misfit Dislocation Loops at Metal-Metal Interfaces / J. Jacobsen, L. Pleth Nielsen, F. Besenbacher, I. Stensgaard, E. Laegsgaard, T. Rasmussen, K. W. Jacobsen, J.K. Norskov // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – V. 75, №3. – P. 489–492.
4. Ag/Cu (111): an Incommensurate Reconstruction Studied with Scanning Tunneling Microscopy and Surface X-Ray Diffraction / B. Aufray, M. Gothelid, J.-M. Gay, C. Mottet, E. Landemark, G. Falkenberg, L. Lottermoser, L. Seehofer, R.L. Johnson // *Microscopy Microanalysis Microstructures*. – 1997. – V. 8, № 3. – P. 167–174.
5. Ag/Cu (111) Structure Revisited Through an Extended Mechanism for Stress Relaxation / I. Meunier, G. Treglia, J.-M. Gay, B. Aufray, B. Legrand // *Phys. Rev. B*. – 1999. – V. 59. – P. 10910–10917.
6. Molecular Dynamics Simulations for the Ag/Cu (111) System: from Segregated to Constitutive Interfacial Vacancies / I. Meunier, G. Treglia, B. Legrand, R. Tetot, B. Aufray, J.-M. Gay // *Appl. Surf. Sci.* – 2000. – V. 219. – P. 162–163.
7. Thermal Dependence of Surface Polymorphism: the Ag/Cu (111) Case / I. Meunier, R. Tetot, G. Treglia, B. Legrand // *Applied Surface Science*. – 2001. – V. 177, № 4. – P. 252–257.
8. Misfit Dislocation Loops or Incommensurate Structure at an Interface: Vibrational and Anharmonic Effects / I. Meunier, G. Treglia, R. Tetot, J. Creuze, F. Berthier, B. Legrand // *Phys. Rev. B*. – 2002. – V. 66, №12. – P. 125409–125423.
9. Rasmussen, T. Simulation of Misfit Dislocation Loops at the Ag/Cu (111) Interface / T. Rasmussen // *Phys. Rev. B*. – 2000. – V. 62, №19. – P. 12664–12667.
10. Daw, M.S. Embedded Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces and Other Defects of Metals / M.S. Daw and M.I. Baskes // *Phys. Rev. B*. – 1984. – V. 29, № 12. – P. 6443–6453.
11. Voter, A.F. Embedded Atom Method Potentials for Seven fcc Metals: Ni, Pb, Pt, Cu, Ag, Au and Al / A.F. Voter // Los Alamos Unclassified technical report # LA-UR 93-3901, 1993.
12. Головнева, Е.И. Моделирование квазистатических процессов в кристаллах методом молекулярной динамики / Е.И. Головнева, И.Ф. Головнев, В.Ф. Фомин // *Физ. мезомеханика*. – 2003. – Т. 6, № 6. – С. 5–10.
13. Болеста, А.В. Плавление на контакте при соударении кластера никеля с жесткой стенкой / А.В. Болеста, И.Ф. Головнев, В.Ф. Фомин // *Физ. мезомеханика*. – 2001. – Т. 4, № 1. – С. 5–10.
14. Molecular Dynamics with Coupling to an External Bath / H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren, A. DiNola, J.R. Haak // *J. Chem. Phys.* – 1984. – V. 81, № 8. – P. 3684–3690.
15. Ray, J.R. Statistical Ensembles and Molecular Dynamics Studies of Anisotropic Solids / J.R. Ray, A. Rahman // *J. Chem. Phys.* – 1984. – V. 80, № 9. – P. 4423–4428.

Антон Михайлович Игошкин, лаборант, Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения РАН (г. Новосибирск, Российская Федерация), igoshkin@itam.nsc.ru.

Игорь Федорович Головнев, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения РАН (г. Новосибирск, Российская Федерация), golovnev@itam.nsc.ru.

Василий Михайлович Фомин, доктор физико-математических наук, академик РАН, заместитель председателя СО РАН, директор, Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения РАН (г. Новосибирск, Российская Федерация), fomin@itam.nsc.ru.

Bulletin of the South Ural State University.
Series «Mathematical Modelling, Programming & Computer Software»,
2013, vol. 6, no. 1, pp. 13–24.

MSC 76T30

The Molecular Dynamics Research of the Formation of the Separation Boundary Between Metal Nanofilms

A.M. Igoshkin, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Novosibirsk, Russian Federation, igoshkin@itam.nsc.ru,
I.F. Golovnev, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Novosibirsk, Russian Federation, golovnev@itam.nsc.ru,
V.M. Fomin, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Novosibirsk, Russian Federation, fomin@itam.nsc.ru

At the present time studying the aggregate of the mechanisms responsible for the formation of nanostructures on the substrate during the deposition of metals from the beam or the gas phase is not completed. In order to identify these mechanisms are necessary methods of processes at the atomic level, among them one of the most powerful is the method of molecular dynamics. This presents its relevance the solution this problem. In this paper the influence of the orientation and the substrate temperature on the formation of the separation boundary Ag/Cu.

Ключевые слова: vapor deposition, molecular dynamics modelling, nanostructure, separation boundary.

References

1. Mitchell K.A.R., Woodruff D.P., Vernon G.W. A Test of Energy Averaging in LEED: The Coincidence Lattice Structure Formed by Ag on Cu (111). *Surface Science*, 1974, vol. 46, issue 2, pp. 418–426.
2. Mottet C., Treglia G., Legrand B. Structures of a Ag Monolayer Deposited on Cu (111), Cu (100), and Cu (110) Substrates: an Extended Tight-Binding Quenched-Molecular-Dynamics Study. *Phys. Rev. B*, 1992, vol. 46, issue 24, pp. 16018–16030.
3. Jacobsen J., Pleth Nielsen L., Besenbacher F., Stensgaard I., Laegsgaard E., Rasmussen T., Jacobsen K.W., Norskov J.K. Atomic-Scale Determination of Misfit Dislocation Loops at Metal-Metal Interfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 1995, vol. 75, issue 3, pp. 489–492.

4. Aufray B., Gothelid M., Gay J.-M., Mottet C., Landemark E., Falkenberg G., Lottermoser L., Seehofer L., Johnson R.L. Ag/Cu (111): an Incommensurate Reconstruction Studied with Scanning Tunneling Microscopy and Surface X-Ray Diffraction. *Microsc. Microanal. Microstruct.*, 1997, vol. 8, no. 3, pp. 167–174.
5. Meunier I., Treglia G., Gay J.-M., Aufray B., Legrand B. Ag/Cu (111) Structure Revisited Through an Extended Mechanism for Stress Relaxation. *Phys. Rev. B*, 1999, vol. 59, pp. 10910–10917.
6. Meunier I., Treglia G., Legrand B., Tetot R., Aufray B., Gay J.-M. Molecular Dynamics Simulations for the Ag/Cu (111) System: from Segregated to Constitutive Interfacial Vacancies. *Appl. Surf. Sci.*, 2000, vol. 219, pp. 162–163.
7. Meunier I., Tetot R., Treglia G., Legrand B. Thermal Dependence of Surface Polymorphism: the Ag/Cu (111) Case. *Applied Surface Science*, 2001, vol. 177, issue 4, pp. 252–257.
8. Meunier I., Treglia G., Tetot R., Creuze J., Berthier F., Legrand B. Misfit Dislocation Loops or Incommensurate Structure at an Interface: Vibrational and Anharmonic Effects. *Phys. Rev. B*, 2002, vol. 66, issue 12, pp. 125409–125423.
9. Rassmussen T. Simulation of Misfit Dislocation Loops at the Ag/Cu (111) Interface. *Phys. Rev. B*, 2000, vol. 62, issue 19, pp. 12664–12667.
10. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces and Other Defects of Metals. *Phys. Rev. B*, 1984, vol. 29, issue 12, pp. 6443–6453.
11. Voter A.F. Embedded Atom Method Potentials for Seven fcc Metals: Ni, Pb, Pt, Cu, Ag, Au and Al. Los Alamos Unclassified technical report # LA-UR 93-3901, 1993.
12. Golovneva E.I., Golovnev I.F., Fomin V.M. Modeling Quasi-Static Processes in Crystals by Molecular Dynamics. *Physical Mesomechanics*, 2003, vol. 6, no. 6, pp. 5–10. (in Russian)
13. Bolesta A.V., Golovnev I.F., Fomin V.M. Melting on Contact with Nickel Cluster Collision with a Rigid Wall. *Physical Mesomechanics*, 2001, vol. 4, no. 1, pp. 5–10. (in Russian)
14. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R. Molecular Dynamics with Coupling to an External Bath. *J. Chem. Phys.*, 1984, vol. 81, issue 8, pp. 3684–3690.
15. Ray J.R., Rahman A. Statistical Ensembles and Molecular Dynamics Studies of Anisotropic Solids. *J. Chem. Phys.*, 1984, vol. 80, issue 9, pp. 4423–4428.

Поступила в редакцию 7 ноября 2012 г.