

01;05

## **Влияние геометрических размеров на кинематические параметры нанотолщинных бислойных пленок**

© С.Г. Псахье, Г.Е. Руденский, А.В. Железняков, Т.В. Меньщикова, А.И. Дмитриев, К.П. Зольников

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск  
E-mail: kost@ispms.tsc.ru

*В окончательной редакции 8 октября 2008 г.*

Методом молекулярной динамики проведено изучение поведения нанотолщинных бислойных пленок (пластин) конечной длины, сформированных из кристаллических пленок Ni–Cu. Межатомное взаимодействие описывалось в рамках метода погруженного атома. Показано, что формируемые наноструктуры в отсутствие внешних воздействий совершают механические колебания. Амплитуда и частота колебаний зависят от длины и толщины исходной пластины. Установлены зависимости параметров колебаний наноструктур от их геометрических размеров. Полученные закономерности представляют интерес при конструировании компонентов наноустройств различного функционального назначения.

PACS: 62.25.Jk

В последние годы вопросам разработки различных наноустройств и изучения особенностей их свойств и поведения уделяется пристальное внимание [1–3]. Такой интерес обусловлен тем, что наноразмерные структуры обладают принципиально новыми физико-химическими и биологическими свойствами.

При разработке наноустройств различного функционального назначения важно предельно точно подобрать геометрические размеры комплектующих их компонентов. Свойства получаемых наноструктур определяются не только химическим составом кристаллической пленки, но и ее геометрическими размерами. Одним из наиболее перспективных подходов наноструктур, различных по форме, размерам и свойствам, является использование многослойных кристаллических наноразмерных пленок, наносимых на подложку методами молекулярно-лучевой

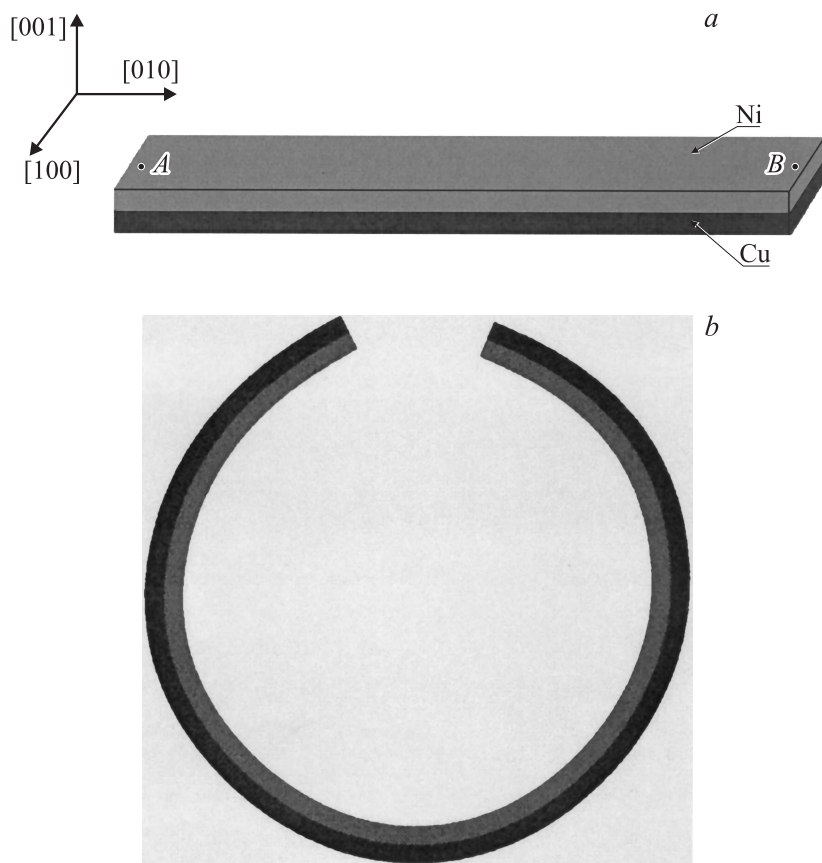
эпитаксии с последующим отделением с помощью химического травления жертвенного слоя [3]. Данная технология позволяет регулировать толщину исходной пленки (число атомных слоев), что является фактором, явно влияющим на физико-механические свойства формирующихся наноструктур.

Очевидно, что ввиду малости времен характерных процессов и размеров изучаемых объектов компьютерное моделирование позволяет получать информацию, труднодостижимую при проведении экспериментальных исследований. Необходимость явного учета дискретности атомной структуры моделируемых объектов делает использование метода молекулярной динамики [4,5] эффективным инструментом для изучения свойств и поведения наноразмерных структур.

В силу вышесказанного в настоящей работе была поставлена задача молекулярно-динамического изучения влияния геометрических размеров исходных кристаллических многослойных пленок на свойства формируемых наноструктур.

В качестве основы для формирования наноразмерных структур была выбрана пленка, состоящая из кристаллических слоев меди и никеля. Выбор металлов обоснован малым различием параметров их кристаллических решеток (отличие составляет около 2.5%), что позволяет наносить достаточно большое число атомных слоев и получать на основе этих металлов различные по конфигурации и свойствам наноразмерные структуры [6]. Расчеты показывают, что поведение двухфазной бислоистой пластины с макротолщиной отличается от поведения соответствующей пластины с нанотолщиной. Отличие заключается в том, что напряжения, возникающие в пластине с макротолщиной, обусловленные несоответствием параметров решетки, будут недостаточны для ее значительного изгиба. Поэтому начиная с некоторой пороговой толщины возникающие в пластине напряжения будут релаксироваться генерацией дефектов структуры. Эти результаты подтверждаются экспериментальными данными. Согласно [6], толщина бездефектной кристаллической нанопластины, выращиваемой методами молекулярно-лучевой эпитаксии, быстро уменьшается при увеличении несоответствия параметров кристаллических решеток выращиваемых слоев.

Начальная ориентация моделируемой бислоистой пленки показана на рис. 1, *a*. Вдоль двух направлений ( $[010]$  и  $[001]$ ) моделировались свободные поверхности, а вдоль  $[100]$  задавались периодические граничные условия. Вдоль направления  $[001]$  моделируемая структура



**Рис. 1.** *a* — схематическое изображение начальной структуры моделируемой бислоистой пленки; *b* — структура с максимально сведенными свободными краями.

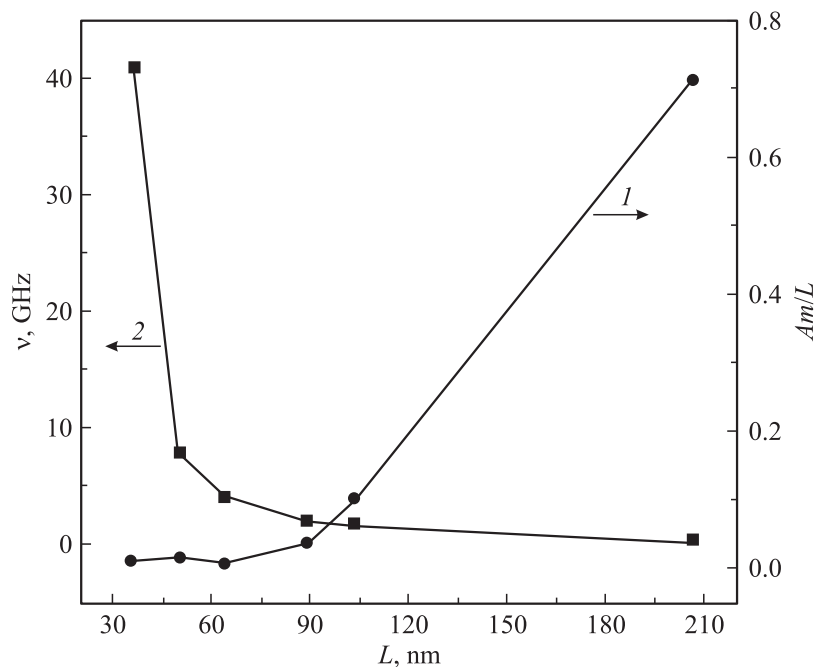
разбивалась на два равных по толщине слоя. Один слой состоял из атомов никеля, а другой — из атомов меди. Период решетки каждого слоя задавался равным среднему значению равновесных периодов решеток Cu и Ni. Таким образом, оба слоя изначально напряжены. Для ускорения формирования наноструктуры процесс травления упустился из численного расчета. Для задания взаимодействия использовался

межатомный потенциал, рассчитанный в рамках метода погруженного атома [7]. Данный потенциал позволяет с хорошей точностью описывать упругие характеристики материала, поверхностную энергию, равновесные объемы металлов и сплавов на их основе, что является важным при моделировании процесса формирования наноструктуры из кристаллической бислойной пленки.

Ввиду того, что слой атомов Ni изначально искусственно растянут, а соответственно слой Cu — сжат, моделируемая гетерогенная пленка в отсутствие внешних воздействий начинала сворачиваться в сторону атомного слоя никеля. Достигнув положения, показанного на рис. 1,  $h$ , когда свободные края пленки были максимально сведены, пленка начинает разгибаться до состояния, близкого к первоначальному. После этого происходит повторяющийся процесс „сворачивание—распрямление“ пленки с периодическим достижением двух крайних положений. В то же время диссипативные процессы, связанные с тепловыми колебаниями атомов, ведут к затуханию осцилляций бислойной пленки. Энергия механических осцилляций со временем трансформируется в энергию тепловых колебаний атомов. Оценки показывают, что для моделируемых наноструктур уменьшение амплитуды колебаний на 10% может достигаться за время  $\sim 5 \mu\text{s}$ .

Геометрические размеры моделируемой пленки вдоль направлений [010] и [001] подбирались таким образом, чтобы в максимально сжатом состоянии изменение расстояния между точками „А“ и „В“ (рис. 1,  $a$ ) (амплитуда колебаний) достигало бы  $\sim 70\%$ . Ограничение амплитуды колебаний связано с вероятностью возникновения необратимых структурных изменений в ходе осцилляций и замыкания краев структуры.

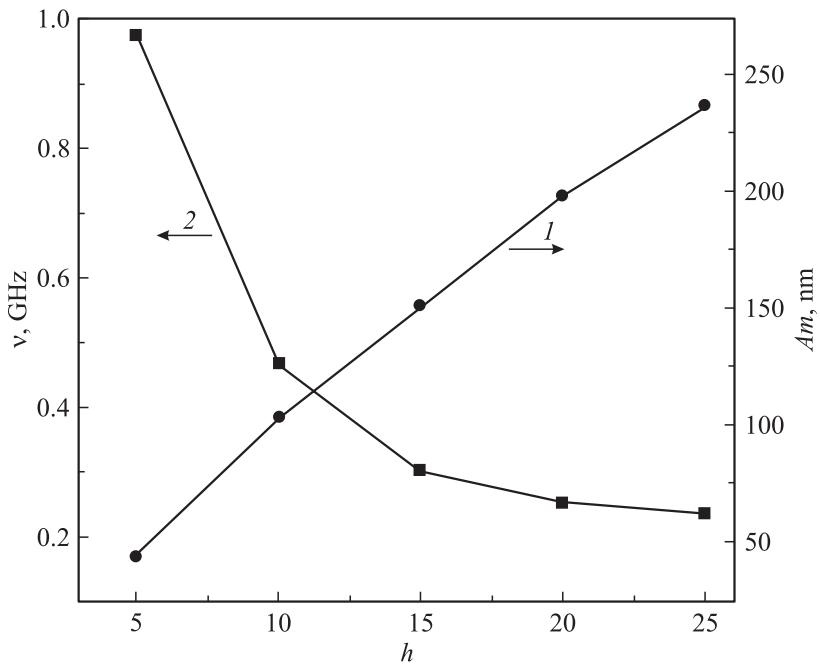
Полученные результаты показали, что амплитуда  $A_m$  и частота  $\nu$  колебаний краев сформированной наноструктуры существенно зависят от ее геометрических размеров (начальной длины  $L$  и толщины  $h$ ). Так, на рис. 2 (кривая 1) показана зависимость приведенной амплитуды колебаний бислойной пленки, содержащей по 15 атомных плоскостей меди и никеля, от ее начальной длины. Согласно этим результатам, амплитуда колебаний при фиксированной толщине нарастает нелинейно с увеличением длины ( $L$ ) исходной пленки. Подобные зависимости были получены для наноструктур с другими толщинами исходной пленки. Кривая 2 на рис. 2 показывает зависимость изменения частоты колебаний моделируемой наноструктуры от ее исходной длины. Видно, что частота колебаний достаточно быстро уменьшается с ростом длины



**Рис. 2.** Зависимость амплитуды (в приведенных единицах) и частоты колебаний бислоистой пленки от ее длины.

исходной пленки. Анализ показывает, что для длин свыше 40 nm частота колебаний обратно пропорциональна  $L^2$ , что согласуется с данными работы [8].

Для исследования зависимости амплитуды и частоты колебаний бислоистой пленки от ее толщины проводилось моделирование с варьированием толщины слоев Cu и Ni. Слои Cu и Ni содержали по 5, 10, 15, 20 и 25 атомных плоскостей. Для каждого из этих образцов подбиралась длина пленки, при которой амплитуда колебаний для каждой из толщин составляла  $\sim 70\%$  от  $L$ . Результаты вычислений приведены на рис. 3. Видно, что если частота колебаний нелинейно уменьшается с ростом толщины пленки  $h$  (кривая 2), то рост амплитуды колебаний с увеличением  $h$  (кривая 1) в исследуемом диапазоне толщин хорошо описывается линейным законом.



**Рис. 3.** Изменение амплитуды и частоты колебаний бислоистой пленки от ее толщины.

Согласно проведенным расчетам, амплитуда колебаний наноструктур зависит от начального распределения упругих деформаций в исходной бислоистой пленке. Исходное распределение упругой деформации между слоями можно менять, варьируя материал подложки. Таким образом, можно регулировать величину и распределение упругих деформаций в бислоистых пленках. Так, согласно полученным результатам, гетерогенная пленка, в которой изначально напряжен главным образом только один слой, совершает колебания с большей амплитудой.

Таким образом, наноразмерные структуры, сформированные на основе бислоистых кристаллических пленок в отсутствие внешних воздействий, совершают гармонические колебания. При этом показана возможность направленного воздействия на их поведение и кинематические свойства путем варьирования геометрических параметров

исходной пленки. Установлено, что амплитуда и частота механических колебаний зависят от геометрических размеров (длины и толщины). По мере роста длины нанопленки при ее фиксированной толщине происходят нелинейное увеличение амплитуды и уменьшение частоты колебаний. При одновременном пропорциональном увеличении длины и толщины исходной кристаллической пленки приведенная амплитуда линейно возрастает.

Полученные результаты представляют интерес для разработки компонентов наноустройств различного функционального назначения.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП (гос. контракт № 02.513.11.3215), „Фонда содействия отечественной науке“ и гранта президента РФ № МД-1771.2008.8. Расчеты проведены с использованием суперкомпьютера Skif-cyberia Томского государственного университета.

## Список литературы

- [1] Пул Ч., Оуэнс Ф. Нанотехнологии. М.: Техносфера, 2005. 336 с.
- [2] Eric Vogel // Nature nanotechnology. 2007. V. 2. N 1. P. 25–32.
- [3] Nastaushev Yu.V., Pronz V.Ya., Svitashcheva S.N. // Nanotechnology. 2005. V. 16. P. 908–912.
- [4] Дмитриев А.И., Псахье С.Г. // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. В. 15. С. 40–44.
- [5] Мелькер А.И., Корнилов Д.А. // ФТТ. 2005. Т. 47. В. 6. С. 979–985.
- [6] Болховитянов Ю.Б., Пчеляков О.П., Чикичев С.И. // УФН. 2001. Т. 171. В. 7. С. 689–715.
- [7] Williams P.L., Mishin Y., Hamilton J.C. // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2006. V. 14. P. 817–833.
- [8] Коноваленко Ив.С., Зольников К.П., Псахье С.Г. // Изв. вузов. Физика. 2006. Т. 49. № 3. С. 38–39.