

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

выпуск 12

ТВЕРЬ 2020

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2020. – Вып. 12. – 908 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Журнал предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2020

© Тверской государственный университет, 2020

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ФРАКТАЛЬНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК

Д.В. Иванов¹, С.А. Васильев^{1,2}, Н.Ю. Сдобняков¹, Е.В. Романовская³, В.А. Анофриев¹,
В.А. Кошелев¹, А.С. Антонов^{1,4}

¹ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

²ФГБУН «Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им.
А.Г. Мерджанова РАН»

142432, Россия, Московская область, Черноголовка, ул. Академика Осипьяна, 8

³УО «Белорусский государственный технологический университет»

220006, Республика Беларусь, Минск, ул. Свердлова, 13а

⁴ФГБОУ ВО «Тверская государственная сельскохозяйственная академия»

170904, Россия, Тверь, ул. Маршала Василевского, 7

nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.424

Аннотация: В данной работе методом молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи проведено моделирование процесса молекулярно-лучевой эпитаксии с целью определения закономерностей при формировании фрактальных металлических пленок на твердой поверхности. В качестве подложки использовалась медь, пленка формировалась из атомов золота. Показана возможность формирования фрактальных структур в островковой пленке золота на поверхности меди. Различными аналитическими методами с использованием программного продукта Gwyddion проанализирован диапазон изменения фрактальной размерности при различных условиях молекулярно-динамического эксперимента.

Ключевые слова: молекулярно-лучевая эпитаксия, молекулярно-динамическое моделирование, потенциал сильной связи, фрактальная размерность, золото, медь.

1. Введение

Процессы нанесения металлических пленок на поверхность твердой фазы-подложки занимают весьма существенное место в современных технологиях микро- и нанoeлектроники. В настоящее время метод молекулярно-лучевой эпитаксии, т.е. формирование наноразмерной гетероструктуры на поверхности твердого тела в результате осаждения атомов из молекулярного пучка является современным вариантом динамической эпитаксиальной технологии. Такой метод сочетает осаждение очень тонких монокристаллических пленок с совершенной морфологией поверхности и возможность контроля с высокой точностью в процессе роста (*in situ*) толщины, качественного состава и уровня легирования растущих слоев. Особый технологический интерес представляет технология «выращивания» фрактальных структур с определенной фрактальной размерностью, которая по мнению [1, 2] должна использоваться в качестве эффективной характеристики развитости микро- и наноструктуры шероховатой поверхности, а величина фрактальной размерности эквивалентно заменяет целый комплекс

амплитудных и шаговых характеристик шероховатости поверхности.

В настоящее время разделяют два универсальных предельных режима агрегации (роста фрактального кластера): диффузионно-ограниченная агрегация (ДОО) и реакционно-ограниченная агрегация (РОА), которые отличаются вероятностью присоединения частиц к кластеру [3, 4]. Однако, также практический интерес [5] представляют промежуточные случаи, к которым относятся и некоторые режимы ионно-стимулированного роста кластеров на поверхности твердых тел [6], в частности при проведении процессов молекулярно-лучевой эпитаксии [7]. В работе [8] было проведено моделирование ионно-стимулированного роста фрактального кластера на подложке в режимах, промежуточных между ДОО и РОА. Важным с практической точки зрения результатом работы [8] является то, что фрактальная размерность растущего кластера и тип формируемой эпитаксиальной структуры обусловлены последовательностью ионно-стимулированных процессов с различными величинами фрактальных размерностей. Очевидно, что не только последовательность ионно-стимулированных процессов влияет на фрактальную размерность отдельных агломератов и поверхности в целом, но и характеристики режима напыления, в том числе внешние факторы (морфология и температура подложки, отсутствие или наличие обработки поверхности сразу после процесса окончания напыления).

2. Постановка задачи

Целью настоящей работы является изучение в рамках компьютерного эксперимента зависимости морфологии получаемых наноразмерных металлических пленок, в том числе от фрактальной размерности и управляющих параметров в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии. В данном случае компьютерный эксперимент (см. примеры компьютерных экспериментов различных технологических процессов [9-11]) может помочь в обеспечении воспроизводимости результатов натуральных экспериментов при заданных условиях (метод подготовки пленки, внешние факторы, выбранный металл), описания специфических особенностей наноразмерных пленок (тип рельефа (например, тип «плато»), площадь локальных зон, в которых не сформировался «фрактальный рельеф», пределы значений для фрактальной размерности профиля и поверхности). В настоящей работе для моделирования молекулярно-лучевой эпитаксии мы используем программный комплекс [12]. Схематично процесс моделирования представлен на рис. 1. В качестве подложки используется пленка из неподвижных атомов меди, пучок частиц формируется из атомов золота.

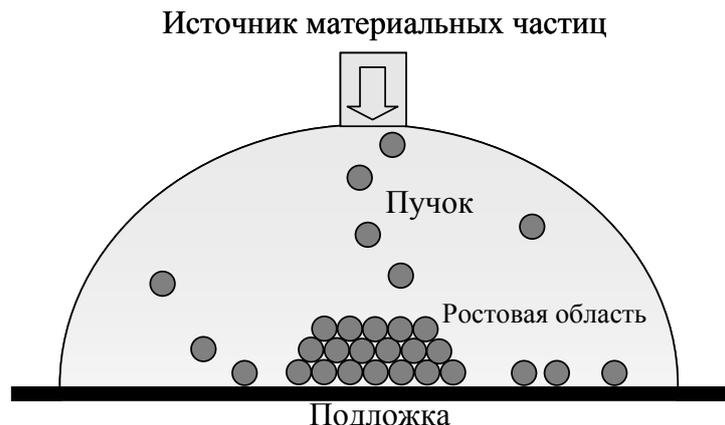


Рис. 1. Схематическое изображение установки моделирования процесса взаимодействия атомного пучка с твердой поверхностью [13].

Использовались следующие параметры молекулярно-динамического эксперимента: время процесса роста и последующей релаксации пленки 100000 шагов (время одного шага 1 фс), атомы поступали в систему по одному раз в 10 шагов. Рассматривались следующие параметры пучка: диаметр – и нм, энергия – и эВ соответственно. Ячейка моделирования представляла собой куб со стороной 10 нм, под нижней гранью которого находилась подложка толщиной в 7 атомных слоев. Для описания межатомного взаимодействия используется потенциал сильной связи, параметры которого взяты из работы [14]. После напыления пленка выдерживалась при температуре $T = 400\text{ К}$ (при использовании термостата Берендсена [15]) с контролем максвелловского распределения скоростей.

3. Методика определения фрактальной размерности

Как правило [16-20], для характеристики основного свойства фрактальных кластерных агрегатов – самоподобия их внутренней структуры, мы вводили в рассмотрение кластерную размерность D_c , определяемую из соотношения

$$N = (d/a)^{D_c}, \quad (1)$$

где N – число частиц в кластере (число мономеров), d – линейный размер, т.е. диаметр кластера (агрегата), a – размер частиц, из которых состоит кластер (средний размер мономера).

Для анализа изображений на наличие фрактальных структур мы использовали свободное ПО [21]. Для обработки нами загружались файлы координат XYZ . Особенностью работы данного ПО является то, что данные XYZ представляют собой облака точек, которые соответствуют измерениям в произвольном наборе точек, лежащих в плоскости XOY . Таким образом, по умолчанию считается, что данные задают функцию поверхности $f = f(x, y)$ формально при $z = const$. ПО [21] позволяет

загружать произвольные трехмерные объекты, но обработка производится с допущением, что данные соответствуют однозначной поверхности. Таким образом, наборы данных XYZ , отвечающие разным значениям z , но определенные на одинаковых наборах точек в плоскости XOY , считаются в [21] «совместимыми». Данное допущение в нашей работе является приемлемым, поскольку моделирование роста островковых пленок ограничивается всего лишь несколькими монослоями, и в нашем случае более важным объектом исследования является граница островковой пленки, которая как правило и соответствует лишь одному монослою. В [21] реализуется ряд методов для определения фрактальной размерности:

1. Метод подсчета кубов [22, 23]. Кубическая решетка с заданной постоянной решетки l (box length или grid length) накладывается на поверхность определенной толщины. Цель метода в построении графика зависимости $\log(N(l))$ от $\log(1/l)$ путем подсчета числа всех кубов $N(l)$, содержащих хотя бы один пиксель изображения, при уменьшении постоянной решетки l в два раза. Наклон графика $\log(N(l))$ от $\log(1/l)$ определяет фрактальную размерность D_f .

2. Метод триангуляции [22] заключается в наложении сетки с размером ячейки в одну единицу измерения l на поверхность и определении положения вершин набора треугольников. Далее рассчитываются и суммируются площади всех треугольников для того чтобы получить приближенную площадь поверхности $S(l)$. Также как и в методе подсчета кубов размер сетки уменьшается последовательно в два раза на каждом шаге. По графику зависимости $\log(S(l))$ от $\log(1/l)$ определяют наклон графика, соответствующий значению $D_f - 2$.

3. Вариационный метод [24, 25] основан на делении поверхности на равносторонние квадратные блоки, при этом вариация A (степень среднеквадратичного значения высоты) рассчитывается для заданного размера блоков. Фрактальная размерность определяется исходя из наклона β аппроксимированной методом наименьших квадратов линии на графике в двойном логарифмическом масштабе вариации как $D_f = 3 - \beta/2$. Также $\beta/2$ называют скейлинговым коэффициентом, показателем шероховатости или показателем Херста [26].

4. Метод спектра мощности (power spectrum) [24, 25, 27] основан на зависимости спектра мощности дробного броуновского движения. В методе спектра мощности каждый линейный профиль высоты, из которых состоит изображение, преобразуется с помощью преобразования Фурье, рассчитывается спектр мощности, и затем все эти спектры усредняются. Фрактальная размерность определяется из наклона β аппроксимирующей линии, проведенной по методу наименьших квадратов на построенном в

двойном логарифмическом масштабе графике спектра мощности, как $D_f = 7/2 + \beta/2$.

К сожалению, результаты, полученные с использованием ПО [21], несколько различаются, что вызвано систематическими ошибками различных методов фрактального анализа (подробно это обсуждается нами в [16-18]), которые авторами [21] не обсуждаются и не оцениваются. В нашей работе мы не ставим задачу точного нахождения абсолютного значения фрактальной размерности для металлической наноразмерной островковой пленки. Цель данной работы показать возможность получения фрактального рельефа и зависимости фрактальной диапозона размерности, полученной разными методами от условий процесса молекулярно-лучевой эпитаксии.

4. Результаты и обсуждение

В данной работе анализ конечных конфигураций для определения фрактальной размерности D_f (см. данные Таблицы 1) проводился с использованием ПО [21], в том числе с учетом методики, изложенной в [16-20] (для использования соотношения (1) смысл значений величин d и l эквивалентен). На рис. 2, 3 представлены конечные конфигурации, полученные при моделировании роста островковых наноразмерных пленок золота на меди методом молекулярно-лучевой эпитаксии при различных характеристиках пучка (диаметр, энергия).

Таблица 1. Фрактальная размерность пленок золота на поверхности меди, полученная различными аналитическими методами.

Метод	Диаметр пучка, нм	Энергия пучка, эВ	Фрактальная размерность, D_f
1	7,2	0,5	2,595
2	7,2	0,5	2,650
3	7,2	0,5	2,734
4	7,2	0,5	2,871
1	14,4	0,5	2,594
2	14,4	0,5	2,691
3	14,4	0,5	2,736
4	14,4	0,5	2,911
1	7,2	3	2,592
2	7,2	3	2,680
3	7,2	3	2,734
4	7,2	3	2,881
1	14,4	3	2,595
2	14,4	3	2,673
3	14,4	3	2,741
4	14,4	3	2,928

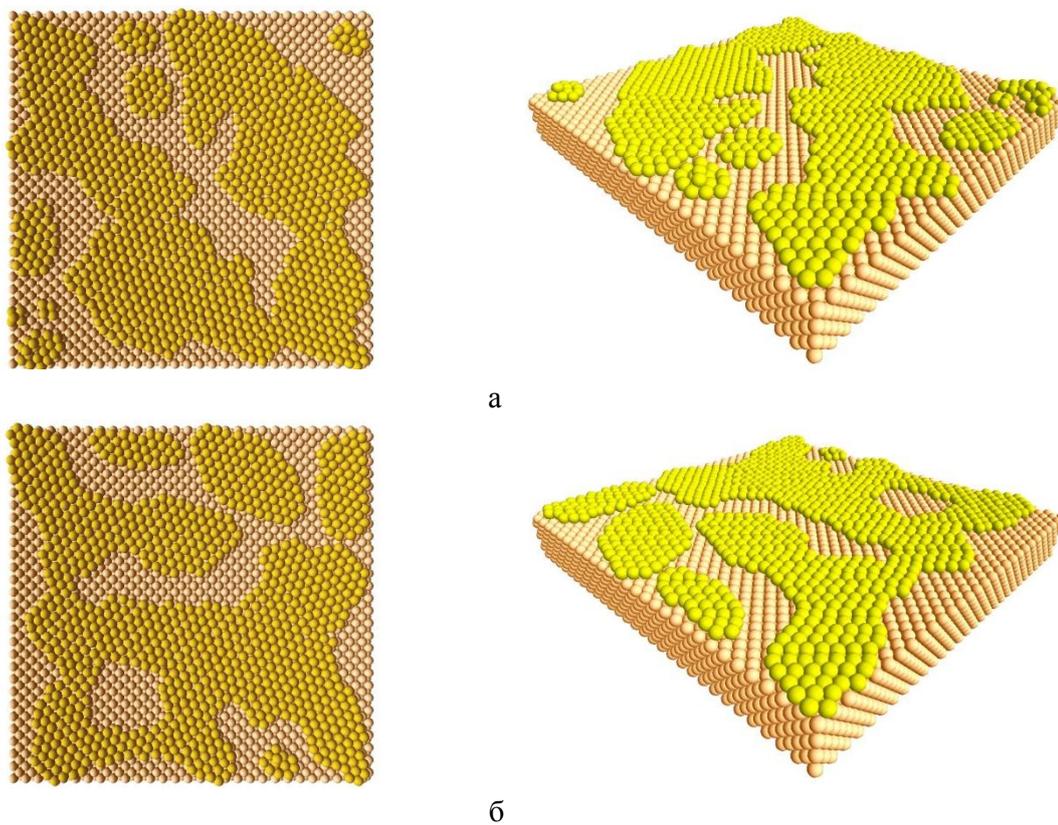


Рис. 2. Конечные конфигурации островковых пленок золота на меди (слева – вид сверху, справа – 3D вид). Диаметр пучка 7,2 нм. Энергия пучка: а – 0,5 эВ, б – 3,0 эВ.

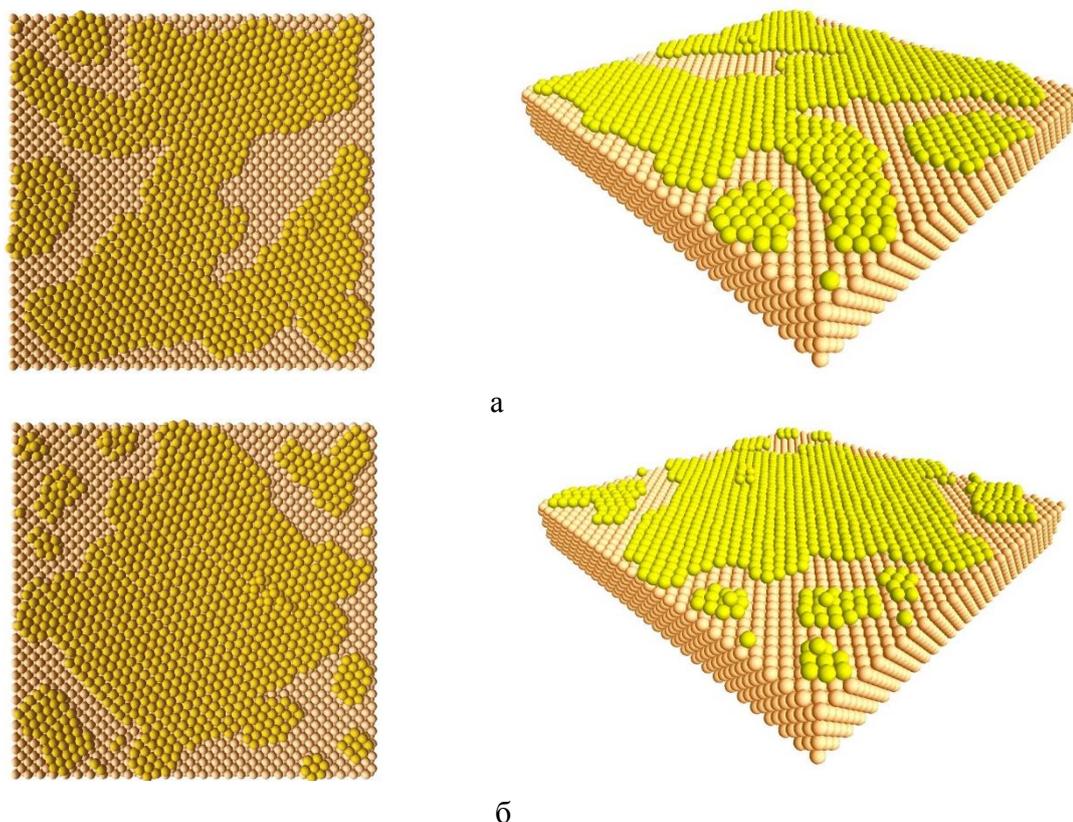


Рис. 3. То же, что на рис. 2. Диаметр пучка 14,4 нм. Энергия пучка – 0,5 эВ, б – 3,0 эВ.

Анализ данных представленных в Таблице 1 позволяет сделать следующие выводы:

- с увеличением диаметра низкоэнергетического пучка фрактальная размерность, определенная по методам № 1 и № 3, практически не меняется. Однако методы № 2 и № 4 предсказывают увеличение значения фрактальной размерности в пределах 1,5 %;

- с увеличением диаметра высокоэнергетического пучка фрактальная размерность, определенная по методам № 1, № 2, № 3 практически не меняется. При этом метод № 4 предсказывает увеличение значения фрактальной размерности на 1,6 %;

- совместное увеличение как диаметра, так и энергии пучка для метода № 1 не меняет значения фрактальной размерности, методы № 2 и № 3 предсказывают незначительное увеличение фрактальной размерности в пределах 0,3–0,9% и лишь метод № 4 предсказывает рост на уровне 2 %.

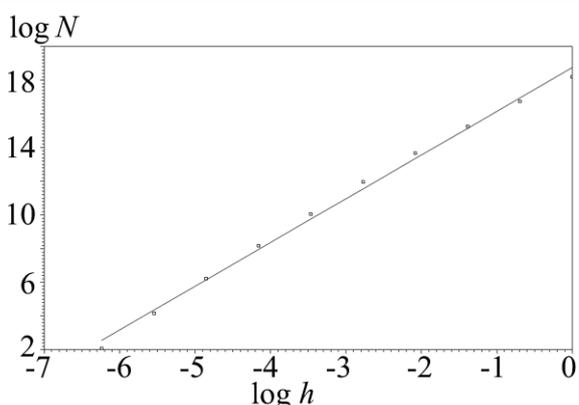


Рис. 4. К определению D_f методом подсчета кубов ($h = 1/l$).

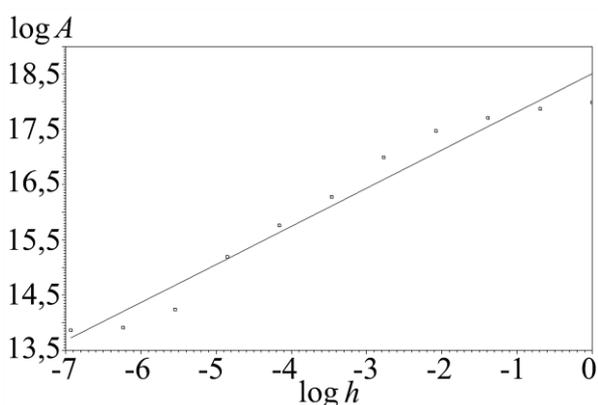


Рис. 5. К определению D_f методом триангуляции ($h = 1/l$).

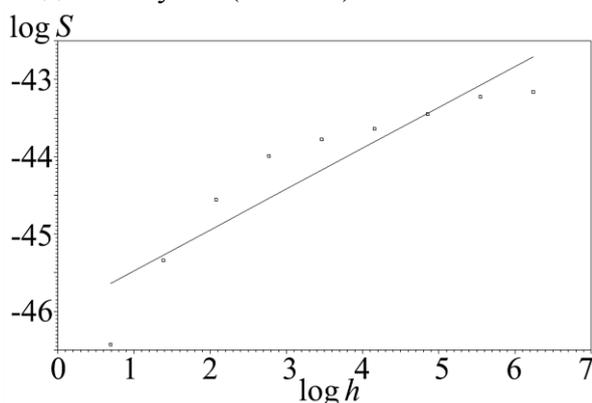


Рис. 6. К определению D_f вариационным методом.

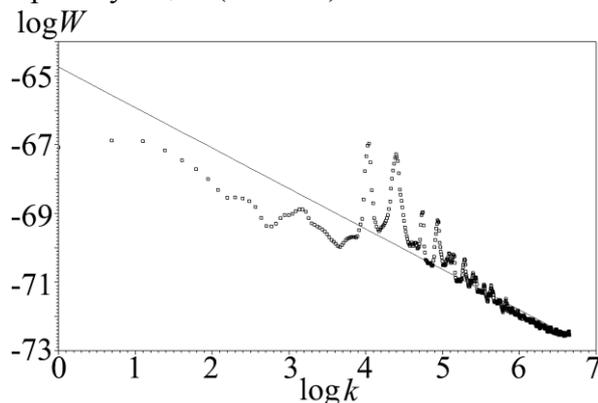


Рис. 7. К определению D_f методом спектра мощности W (k – волновое число).

На рис. 4-7 представлены типичные кривые в двойном логарифмическом масштабе, позволяющие определить фрактальную

размерность соответствующим методом (сохранены обозначения используемые в [21], определение которых дано в [22-27]). На всех графиках экспериментальные данные аппроксимированы линейной функцией для определения фрактальной размерности. Анализ рис. 4-7 позволяет оценить систематическую ошибку используемых методов в части ошибки определения угла наклона, т.е. линейной аппроксимации представленных данных.

Полученные данные могут представлять особый интерес для интерпретации результатов при изучении явления смачивания в твердом состоянии. Так ранее в работе [28] с использованием молекулярной динамики изучалось явление смачивания в твердом состоянии в системах Cu (наночастица) / Cu (подложка). Было установлено, что механизм смачивания в твердом состоянии отвечает объемной и, в большей степени, поверхностной диффузии, что обосновывается линейной зависимостью квадрата радиуса нижнего монослоя растекающейся частицы от времени растекания. Выдвинута и обоснована гипотеза о деградации нанорельефа по механизму смачивания в твердом состоянии. Влияние внешних условий компьютерного эксперимента на скорость деградации нанорельефа и его параметры шероховатости позволяют также внести свой вклад в разработку технологии «выращивания» фрактального рельефа профиля и поверхности островковых пленок.

5. Заключение

Установлено, что при получении наноразмерных пленок золота на поверхности меди методом электронно-лучевой эпитаксии существует возможность формирования высокоразвитого фрактального рельефа, даже при том, что для наноразмерных пленок золота сам рельеф поверхности в большей степени соответствует типу «плато». Очевидно, что изучение и описание механизма образования фрактальных структур, в том числе за счет механизма ассоциации, тесно связано как с учетом поля твердой поверхности (в нашем случае определяется параметрами потенциала сильной связи), так и с влиянием ряда начальных условий эксперимента – шероховатости подложки, энергии и плотности атомного пучка. Отметим, что вывод, сделанный в [13] о том, что при заданных температуре и параметрах подложки наноразмерные гетероструктуры, формирующиеся в результате кристаллизации нанокapель на поверхности твердого тела с использованием процесса молекулярно-лучевой эпитаксии, являются практически идентичными для фрактальных структур, нуждается в дополнительной апробации.

Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности

(проект № 0817-2020-0007) и РФФИ (проекты № 18-03-00132 и 20-37-70007).

Библиографический список:

1. **Брылкин, Ю.В.** Фрактальная геометрическая модель микроповерхности / Г.С. Иванов, Ю.В. Брылкин // Геометрия и графика. – 2016. – Т. 4. – № 1. – С. 4-11. DOI: 10.12737/18053.
2. **Брылкин, Ю.В.** Тестирование алгоритма моделирования рельефа шероховатой поверхности на основе теории фракталов / Ю.В. Брылкин, А.Л. Кусов, А.В. Флоров // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. – 2014. – Т. IV. – № 5. – С. 86-89.
3. **Lin, M.Y.** Universal diffusion-limited colloid aggregation / M.Y. Lin, H.M. Lindsay, D.A. Weitz, et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1990. – V. 2. – № 13. – P. 3093-3113. DOI: 10.1088/0953-8984/2/13/019.
4. **Lin, M.Y.** Universal reaction-limited colloid aggregation / M.Y. Lin, H.M. Lindsay, D.A. Weitz, et al. // Physical Review A. – 1990. – V. 41. – I. 4. – P. 2005-2020. DOI: 10.1103/PhysRevA.41.2005.
5. **Смирнов, Б.М.** Физика фрактальных кластеров / Б.М. Смирнов. – М.: Наука, 1991. – 136 с.
6. **Гусева, М.Б.** Послойный анализ методом вторично-ионной масс-спектрометрии с измерением тока в цепи образца/ М.Б. Гусева, В.Г. Бабаев, В.В. Хвостов // Поверхность. рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2007. – № 12. – С. 30-43.
7. **Barabásy, A.L.** Fractal concepts in surface growth / A.L. Barabásy, H.E. Stanley. – Cambridge: Cambridge University Press, 1995. – XX, 366 p.
8. **Ашуров, Х.Б.** Моделирование роста фрактального кластера на подложке при ионном облучении / Х.Б. Ашуров, С.Е. Максимов, Б.Л. Оксенгендлер, О.Е. Сидоренко, М.Б. Гусева // Поверхность. рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2011. – № 6. – С. 89-92.
9. **Бембель, А.Г.** Молекулярно-динамическое моделирование эпитаксиального роста наноразмерных гетероструктур свинца на никеле / А.Г. Бембель, С.А. Васильев, В.М. Самсонов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2012. – Вып. 4. – С. 10-18.
10. **Соколов, Д.Н.** О моделировании термических эффектов при взаимодействии зонда сканирующего туннельного микроскопа с образцом / Д.Н. Соколов, Н.Ю. Сдобняков, П.С. Кутилин, Н.В. Новожилов, О.В. Михайлова, А.С. Антонов // Нанотехника. – 2013. – № 2 (34). – С. 78-80.
11. **Колосов, А.Ю.** Моделирование процесса коалесценции наночастиц золота методом Монте-Карло / А.Ю. Колосов, Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров, Д.Н. Соколов, Т.Ю. Зыков, В.А. Хашин // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2012. – Вып. 4. – С. 129-142.
12. **Свидетельство № 2013610101 Российская Федерация.** Компьютерная программа для молекулярно-динамического моделирования нанокластеров: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ / В.М. Самсонов, А.Г. Бембель, М.Ю. Пушкарь; заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Тверской государственный университет». – № 2013610101; заявл. 08.11.2012; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 09.01.2013. – 1 с.
13. **Бембель, А.Г.** Молекулярно-динамическое моделирование структурных и фазовых

превращений в свободных нанокластерах и наночастицах на поверхности твердого тела: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07: защищена 2.03.2012 / Бембель Алексей Глебович. – Тверь: ТвГУ, 2012. – 173 с.

14. **Cleri, F.** Tight-binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // *Physical Review B*. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.22.

15. **Berendsen, H.J.C.** 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 // *The Journal of Chemical Physics*. – 1984. – V. 81. – I. 8. – P. 3684-3690. DOI: 10.1063/1.448118.

16. **Сдобняков, Н.Ю.** Морфологические характеристики и фрактальный анализ металлических пленок на диэлектрических поверхностях: монография / Н.Ю. Сдобняков, А.С. Антонов, Д.В. Иванов. – Тверь: Тверской государственный университет, 2019. – 168 с.

17. **Антонов, А.С.** Исследование фрактальных свойств наноразмерных пленок золота, серебра и меди: атомно-силовая и туннельная микроскопия / А.С. Антонов, Н.Ю. Сдобняков, Д.В. Иванов и др. // *Химическая физика и мезоскопия*. – 2017. – Т. 19. – № 3. – С. 473-486.

18. **Антонов, А.С.** Исследование морфологии рельефа пленок меди на поверхности слюды / А.С. Антонов, Н.Ю. Сдобняков, Д.В. Иванов, К.Б. Подболотов // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2017. – Вып. 9. – С. 19-26. DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.019.

19. **Сдобняков, Н.Ю.** Определение фрактальной размерности островковых пленок золота на слюде / Н.Ю. Сдобняков, Т.Ю. Зыков, А.Н. Базулев, А.С. Антонов // *Вестник ТвГУ, серия «Физика»*. – 2009. – № 41. – Вып. 6. – С. 112-119.

20. **Белко, А.В.** Фрактальная структура кластеров золота, образованных при осаждении в вакууме на диэлектрические подложки / А.В. Белко, А.В. Никитин, Н.Д. Стрекаль, А.Е. Герман // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. – 2009. – № 5. – С. 11-15.

21. Gwyddion – Free SPM (AFM, SNOM/NSOM, STM, MFM, ...) data analysis software. – Режим доступа: www.url: http://gwyddion.net. – 15.10.2020.

22. **Douketis, C.** Rough silver films studied by surface enhanced Raman spectroscopy and low temperature scanning tunnelling microscopy / C. Douketis, T.L. Haslett, Z. Wang, M. Moskovits, S. Iannotta // *Progress in Surface Science*. – 1995. – V. 50. – I. 1-4. – P. 187-195. DOI: 10.1016/0079-6816(95)00053-4

23. **Zahn, W.** The dependence of fractal dimension on measuring conditions of scanning probe microscopy / W. Zahn, A. Zösch // *Fresenius' Journal of Analytical Chemistry*. – 1995. – V. 365. – I. 1-3. – P. 168-172. DOI: 10.1007/s002160051466.

24. **Van Put, A.** Quantitative characterization of individual particle surfaces by fractal analysis of scanning electron microscope images / A. Van Put, A. Vertes, D. Wegrzynek, B. Treiger, R. Van Grieken // *Fresenius' Journal of Analytical Chemistry*. – 1994. – V. 350. – I. 7-9. – P. 440-447. DOI: 10.1007/BF00321787.

25. **Mannelquist, A.** Influence of tip geometry on fractal analysis of atomic force microscopy images / A. Mannelquist, N. Almquist, S. Fredriksson // *Applied Physics A*. – 1998. – V. 66. – Supplement I. 1. – P. S891-S895. DOI: 10.1007/s003390051262.

26. **Иванов, Д.В.** Фрактальные свойства наноразмерных пленок никеля и хрома / Д.В. Иванов, А.С. Антонов, Сдобняков Н.Ю. и др. // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2019. – Вып. 11. – С. 138-152. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.138.

27. **Zahn, W.** Characterization of thin-film surfaces by fractal geometry / W. Zahn, A. Zösch

// Fresenius' Journal of Analytical Chemistry. – 1997. – V. 358. – I. 1-2. – P. 119-121. DOI: 10.1007/s002160050360.

28. **Бембель, А.Г.** Смачивание в твердом состоянии и динамика нанорельефа твердой поверхности / А.Г. Бембель, И.В. Талызин, В.М. Самсонов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2018. – Вып. 10. – С. 83-92. DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.083.

References:

1. **Brylkin, Yu.V.** Fraktal'naya geometricheskaya model' mikropoverkhnosti [Fractal geometric microsurface model] / G.S. Ivanov, Yu.V. Brylkin // Geometriya i grafika. – 2016. – Т. 4. – № 1. – P. 4-11. DOI: 10.12737/18053. (In Russian).
2. **Brylkin, Yu.V.** Testirovanie algoritma modelirovaniya rel'efa sherokhovatoi poverkhnosti na osnove teorii fraktalov [Testing a rough surface relief modeling algorithm based on fractal theory] / Yu.V. Brylkin, A.L. Kusov, A.V. Florov // Izvestiya Kabardino-Balkarskogo gosudarstvennogo universiteta. – 2014. – V. IV. – № 5. – P. 86-89. (In Russian).
3. **Lin, M.Y.** Universal diffusion-limited colloid aggregation / M.Y. Lin, H.M. Lindsay, D.A. Weitz, et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1990. – V. 2. – № 13. – P. 3093-3113. DOI: 10.1088/0953-8984/2/13/019.
4. **Lin, M.Y.** Universal reaction-limited colloid aggregation / M.Y. Lin, H.M. Lindsay, D.A. Weitz, et al. // Physical Review A. – 1990. – V. 41. – I. 4. – P. 2005-2020. DOI: 10.1103/PhysRevA.41.2005.
5. **Smirnov, B.M.** Fizika fraktal'nykh klasterov [Physics of fractal clusters] / B.M. Smirnov. – M.: Nauka, 1991. – 136 p. (In Russian).
6. **Guseva, M.B.** Ion-enhanced processes on a solid surface / M.B. Guseva, V.G. Babaev, V.V. Khvostov // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2007. – V. 1. – I. 6. – P. 722-733. DOI: 10.1134/S1027451007060183.
7. **Barabási, A.L.** Fractal concepts in surface growth / A.L. Barabási, H.E. Stanley. – Cambridge: Cambridge University Press, 1995. – XX, 366 p.
8. **Ashurov, Kh.B.** Simulation of fractal cluster growth on a substrate under ion bombardment / Kh.B. Ashurov, S.E. Maksimov, B.L. Oksengendler, O.E. Sidorenko, M.B. Guseva // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2011. – V. 5. – I. 3. – P. 587-590 DOI: 10.1134/S1027451011060048.
9. **Bembel, A.G.** Molekulyarno-dinamicheskoe modelirovanie ehpitaksial'nogo rosta nanorazmernykh geterostruktur svintsa na nikle [Molecular-dynamics simulation of epitaxial growth of nanosized lead heterostructures on nickel] / A.G. Bembel, S.A. Vasilyev, V.M. Samsonov // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2012. – I. 4. – P. 10-18. (In Russian).
10. **Sokolov, D.N.** O modelirovanii termicheskikh ehffektov pri vzaimodeistvii zonda skaniruyushchego tunnel'nogo mikroskopa s obraztsom [On the simulation of thermal effects in interaction between a probe tip of the scanning tunneling microscope and a sample] / D.N. Sokolov, N.Yu. Sdobnyakov, P.S. Kutilin, N.V. Novozhilov, O.V. Mikhajlova, A.S. Antonov // Nanotekhnika. – 2013. – № 2 (34). – P. 78-80. (In Russian).
11. **Koloso, A.Yu.** Modelirovanie protsessa koalestsentsii nanochastits zolota metodom Monte-Carlo [Simulation of the coalescence process of gold nanoparticles by Monte-Carlo method] // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2012. – I. 4. – P. 129-142. (In Russian).
12. **Certificate № 2013610101 Russian Federation.** Komp'yuternaya programma dlya

molekulyarno-dinamicheskogo modelirovaniya nanoklasterov [Computer program for molecular dynamics modeling of nanoclusters]: certificate of state registration of a computer program / V.M. Samsonov, A.G. Bembel', M.Yu. Pushkar'; zayavitel' i pravoobladatel' Federal'noe gosudarstvennoe byudzhethoe obrazovatel'noe uchrezhdenie vysshego professional'nogo obrazovaniya «Tverskoi gosudarstvennyi universitet». – № 2013610101; zayavl. 08.11.2012; zaregistrirvano v reestre programm dlya EVM 09.01.2013. – 1 p. (In Russian).

13. **Bembel, A.G.** Molekulyarno-dinamicheskoe modelirovanie strukturnykh i fazovykh prevrashchenii v svobodnykh nanoklasterakh i nanochastitsakh na poverkhnosti tverdogo tela [Molecular dynamics modeling of structural and phase transformations in free nanoclusters and nanoparticles on the surface of a solid]: dis. ... kand. fiz.-mat. nauk: 01.04.07: zashchishchena 2.03.2012 / Bembel Aleksei Glebovich. – Tver': TSU, 2012. – 173 p. (In Russian).

14. **Cleri, F.** Tight-binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // *Physical Review B*. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.22.

15. **Berendsen, H.J.C.** 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 // *The Journal of Chemical Physics*. – 1984. – V. 81. – I. 8. – P. 3684-3690. DOI: 10.1063/1.448118.

16. **Sdobnyakov, N.Yu.** Morfologicheskie kharakteristiki i fraktal'nyi analiz metallicheskih plenok na dielektricheskikh poverkhnostyakh: monografiya [Morphological characteristics and fractal analysis of metal films on dielectric surfaces: monograph] / N.Yu. Sdobnyakov, A.S. Antonov, D.V. Ivanov. – Tver: Tverskoj gosudarstvennyi universitet, 2019. – 168 p. (In Russian).

17. **Antonov, A.S.** Issledovanie fraktal'nykh svoistv nanorazmernykh plenok zolota, serebra i medi: atomno-silovaya i tunnel'naya mikroskopiya [Investigation of the fractal properties of nanoscale films of gold, silver and copper: atomic force and tunneling microscopy] / A.S. Antonov, N.Yu. Sdobnyakov, D.V. Ivanov et al. // *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya*. – 2017. – V. 19. – № 3. – P. 473-486. (In Russian).

18. **Antonov, A.S.** Issledovanie morfologii rel'efa plenok medi na poverkhnosti slyudy [Research of morphology of the relief of copper films on the mica surface] / A.S. Antonov, N.Yu. Sdobnyakov, D.V. Ivanov, K.B. Podbolotov // *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*. – 2017. – I. 9. – P. 19-26. DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.019. (In Russian).

19. **Sdobnyakov, N.Yu.** Opredelenie fraktal'noi razmernosti ostrovkovykh plenok zolota na slyude [Determination of the fractal dimension of island films of gold on mica] / N.Yu. Sdobnyakov, T.Yu. Zykov, A.N. Bazulev, A.S. Antonov // *Vestnik TvGU, seriya «Fizika»*. – 2009. – № 41. – I. 6. – P. 112-119. (In Russian).

20. **Belko, A.V.** Fractal structure of gold clusters formed under vacuum deposition on dielectric substrates / A.V. Belko, A.V. Nikitin, N.D. Strekal', A.E. German // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. – 2009. – V. 3. – I. 3. – P. 338-342. DOI: 10.1134/S1027451009030021.

21. Gwyddion – Free SPM (AFM, SNOM/NSOM, STM, MFM, ...) data analysis software. – Access mode: [www.url: http://gwyddion.net](http://www.gwyddion.net). – 15.10.2020.

22. **Douketis, C.** Rough silver films studied by surface enhanced Raman spectroscopy and low temperature scanning tunnelling microscopy / C. Douketis, T.L. Haslett, Z. Wang, M. Moskovits, S. Iannotta // *Progress in Surface Science*. – 1995. – V. 50. – I. 1-4. – P. 187-195. DOI: 10.1016/0079-6816(95)00053-4

23. **Zahn, W.** The dependence of fractal dimension on measuring conditions of scanning

- probe microscopy / W. Zahn, A. Zösch // Fresenius' Journal of Analytical Chemistry. – 1995. – V. 365. – I. 1-3. – P. 168-172. DOI: 10.1007/s002160051466.
24. **Van Put, A.** Quantitative characterization of individual particle surfaces by fractal analysis of scanning electron microscope images / A. Van Put, A. Vertes, D. Wegrzynek, B. Treiger, R. Van Grieken // Fresenius' Journal of Analytical Chemistry. – 1994. – V. 350. – I. 7-9. – P. 440-447. DOI: 10.1007/BF00321787.
25. **Mannelquist, A.** Influence of tip geometry on fractal analysis of atomic force microscopy images / A. Mannelquist, N. Almquist, S. Fredriksson // Applied Physics A. – 1998. – V. 66. – Supplement I. 1. – P. S891-S895. DOI: 10.1007/s003390051262.
26. **Ivanov, D.V.** Fraktal'nye svoistva nanorazmernykh plenok nikelya i khroma [Fractal properties of nanosized films of nickel and chromium] / D.V. Ivanov, A.S. Antonov, N.Yu. Sdobnyakov et al. // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2019. – I. 11. – P. 138-152. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.138. (In Russian).
27. **Zahn, W.** Characterization of thin-film surfaces by fractal geometry / W. Zahn, A. Zösch // Fresenius' Journal of Analytical Chemistry. – 1997. – V. 358. – I. 1-2. – P. 119-121. DOI: 10.1007/s002160050360.
28. **Bembel, A.G.** Smachivanie v tverdom sostoyanii i dinamika nanorel'efa tverdoi poverkhnosti [Solid state wetting and dynamics of solid surface nanorelief] / A.G. Bembel, I.V. Talyzin, V.M. Samsonov // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2018. – I. 10. – P. 83-92. (In Russian). DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.083.

Original paper

SIMULATION OF THE FRACTAL METAL FILMS FORMATION

D.V. Ivanov¹, S.A. Vasilyev^{1,2}, N.Yu. Sdobnyakov¹, E.V. Romanovskaia³, V.A. Anofriev¹,
A.V. Koshelev¹, A.S. Antonov^{1,4}

¹Tver State University, Tver, Russia

²Merzhanov Institute of Structural Macrokinetics and Materials Science RAS, Moscow region,
Chernogolovka, Russia

³Belarusian State Technological University, Minsk, Belarus

⁴Tver State Agricultural Academy, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.424

Abstract: In this work, molecular dynamics method and the tight binding potential was used to simulate the process of the molecular beam epitaxy in order to determine regularities in the formation of fractal metal films on a solid surface. Copper was used as a substrate, the film was formed from gold atoms. The possibility of formation of fractal structures in an island gold film on the copper surface is shown. Various analytical methods using the Gwyddion software product have used to analyze a range of changes in the fractal dimension under different conditions of molecular dynamics experiment.

Keywords: *molecular beam epitaxy, molecular dynamics modeling, tight-binding potential, fractal dimension, gold, copper.*

Иванов Дмитрий Викторович – аспирант кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Васильев Сергей Александрович – младший научный сотрудник Управления научных исследований ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»; младший научный сотрудник лаборатории высокоэнергетических методов синтеза сверхвысокотемпературных керамических материалов (лаборатория № 16), ФГБУН «Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им.

А.Г. Мержанова РАН»

Сдобняков Николай Юрьевич – к.ф.-м.н., доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Романовская Елена Владимировна – к.х.н., ассистент кафедры химии, технологии электрохимических производств и материалов электронной техники, УО «Белорусский государственный технологический университет»

Анофриев Виталий Александрович – студент 4 курса кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Кошелев Владимир Александрович – студент 4 курса кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Антонов Александр Сергеевич – к.ф.-м.н., научный сотрудник ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», старший преподаватель ФГБОУ ВО «Тверская государственная сельскохозяйственная академия»

Dmitry V. Ivanov – postgraduate student of the General Physics Department, Tver State University

Sergey A. Vasilyev – Junior Researcher of Management of Scientific Research, Tver State University; Junior Researcher, Laboratory of High-Energy Methods for the Synthesis of Ultrahigh-Temperature Ceramic Materials (Laboratory № 16), Merzhanov Institute of Structural Macrokineics and Materials Science RAS

Nickolay Yu. Sdobnyakov – Ph. D., Docent of the General Physics Department, Tver State University

Elena V. Romanovskaia – Ph. D., Assistant of the Department of Chemistry, Technology of Electrochemical Production and Electronic Engineering Materials, Belarusian State Technological University

Vitaly A. Anofriev – 4th year student, General Physics Department, Tver State University

Vladimir A. Koshelev – 4th year student, General Physics Department, Tver State University

Alexander S. Antonov – Ph. D., Researcher, Tver State University, Senior Lecturer, Tver State Agricultural Academy

Поступила в редакцию/received: 01.10.2020; после рецензирования/reviced: 20.10.2020; принята/accepted 29.10.2020.