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 13

ТВЕРЬ 2021

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: Издательство Тверского государственного университета, 2021. – Вып. 13. – 956 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, 2021

© Тверской государственнй университет, 2021

УДК 539.216.2

Оригинальная статья

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОСЛОЙНОГО РОСТА ФРАКТАЛЬНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК Pt-Rh

Д.В. Иванов¹, В.А. Анофриев¹, В.А. Кошелев^{1,2}, А.С. Антонов^{1,3}, С.А. Васильев¹,
Н.Ю. Сдобняков¹

¹ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

²ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет ИТМО»

197101, Россия, Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, 49, литер А

³ФГБОУ ВО «Тверская государственная сельскохозяйственная академия»

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

nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.682

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 платины на поверхности родия. Установлена возможность формирования фрактальных структур как в островковых пленках платины на поверхности родия, так и в сплошной пленке. Установлены параметры компьютерного эксперимента, определяющие переход от отдельных островковых пленок к сплошной пленке в указанной системе. С использованием различных программных продуктов Gwyddion и Image Analysis, а также собственной разработки FractalSurface проанализирован диапазон изменения фрактальной размерности при различных условиях молекулярно-динамического эксперимента методом подсчета кубов. Полученные значения фрактальной размерности в целом находятся в приемлемом согласии между собой, однако существует ряд исключений, которые обсуждаются более подробно. Сравнительный анализ получаемых результатов позволяет формулировать рекомендации для методики создания, корректировки и прецизионного контроля при «выращивании» структур с заданной морфологией поверхности.

Ключевые слова: молекулярно-лучевая эпитаксия, молекулярно-динамическое моделирование, потенциал сильной связи, фрактальная размерность, метод подсчета кубов, платина, родий, программное обеспечение по обработке изображений.

1. Введение

Модификация поверхности является эффективным подходом, позволяющим создавать функциональные наноматериалы, включая пленочные структуры [1], с принципиально новыми свойствами, в том числе за счет образования фрактальных структур [2]. В настоящее время развиваются различные подходы к формированию наноразмерной гетероструктуры на поверхности твердого тела: коллоидно-химический и механохимический синтез [3], лазерное испарение атомов с поверхности [4], нанолитография [5] или модификация поверхности при взаимодействии зонда сканирующего туннельного микроскопа [6], молекулярно-лучевая эпитаксия [7] и др. Последний метод представляет собой формирование наноразмерной гетероструктуры на поверхности твердого тела в результате осаждения атомов из молекулярного пучка и

© Д.В. Иванов, В.А. Анофриев, В.А. Кошелев, А.С. Антонов, С.А. Васильев, Н.Ю. Сдобняков, 2021

является современным вариантом динамической эпитаксиальной технологии. Данный 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. С целью прогнозирования свойств, в том числе определённых параметров шероховатости и возможности создания фрактальных структур в наноразмерных по толщине пленках активно используется компьютерный эксперимент.

В настоящее время активно используется применение компьютерного эксперимента для прогнозирования поведения наноразмерных объектов. В частности в работе [8] методом молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи проведено моделирование процесса молекулярно-лучевой эпитаксии с целью определения закономерностей при формировании фрактальных металлических пленок золота на поверхности меди. Была показана возможность формирования фрактальных структур, в том числе высокоразвитого фрактального рельефа, в островковой пленке золота (соответствующей типу «плато») на поверхности меди, а также проанализирован диапазон изменения фрактальной размерности при различных условиях молекулярно-динамического эксперимента.

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 [9], о том, что при заданной температуре и параметрах подложки наноразмерные гетероструктуры, формирующиеся в результате кристаллизации нанокapель на поверхности твердого тела с использованием процесса молекулярно-лучевой эпитаксии, являются практически идентичными фрактальным структурам, нуждается в дополнительной апробации.

Однако в настоящее время существует несколько вариантов программного обеспечения (ПО) [10-12] для анализа поверхности образцов как полученных в натурном эксперименте, например, с использованием атомно-силовой или туннельной микроскопии, а также результатов компьютерного моделирования [8]. Все перечисленные варианты ПО не имеют возможности редактирования модулей кода или их пользовательский интерфейс не всегда позволяет в полной мере регулировать входные параметры, используемые для анализа изображений

на наличие фрактальных структур и соответственно определения фрактальной размерности. Вот почему нами была поставлена задача разработка собственного ПО с максимально развитым пользовательским интерфейсом. В данной работе мы проводим дальнейшую апробацию данного ПО [13] и сравнительный анализ получаемых в результате компьютерного эксперимента конфигураций пленочных структур на примере пленки платины на поверхности родия.

2. О методиках моделирования и нахождения фрактальной размерности

Основы применения фрактального анализа к наноразмерным по толщине пленкам, в части проведения натурального эксперимента и компьютерного моделирования, заложены в монографии [2], а также в наших работах [14-17]. В данной работе мы продолжаем исследования по апробации программного комплекса по определению фрактальной размерности наноразмерных пленок [8, 13]. В качестве подложки используется пленка родия, пучок частиц формируется из атомов платины. Использовались следующие параметры молекулярно-динамического эксперимента: время процесса роста пленки 10^5 шагов (время одного шага 1 фс), атомы поступали в систему по одному раз в 10 шагов, диаметр пучка: 3,3 и 7 нм, энергия пучка 3 эВ. Для описания межатомного взаимодействия используется потенциал сильной связи [18], параметры представлены в Таблице 1 [19]. Для нахождения перекрестных параметров потенциала использовали модифицированное правило Лоренцо-Бертло [20].

Таблица 1. Параметры потенциала сильной связи.

Элемент	A , эВ	ζ , эВ	p	q	r_0 , Å
$Pt - Pt$	0,2975	2,695	10,612	4,004	2,78
$Rh - Rh$	0,0629	1,660	18,450	1,867	2,69
$Pt - Rh$	0,1368	2,115	14,531	2,9355	2,735

Для характеристики основного свойства фрактальных кластерных агрегатов – самоподобия их внутренней структуры, определяют кластерную размерность D_c [21], которая согласно [22, 23] используется в качестве эффективной характеристики развитости микро- и наноструктуры шероховатой поверхности

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

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). Важным критерием для определения фрактальной размерности, в том числе с использованием методов, описанных в [8], является построение высотной карты для профиля

поверхности пленки. Такой подход не является новым и используется всеми известными программными продуктами. Однако, точность построения высотной карты, учет плотности упаковки атомов в пленке, а также контроль перехода от островковой пленки к сплошной является нетривиальной технологической задачей. На рис. 1 представлен профиль образца, для которого была построена высотная карта. Заметим, что атомы подложки в построении карты не участвуют (окрашены одним цветом, соответствующим нулевому уровню).

Рис. 1. Пример поперечного профиля поверхности пленки платины на родии для построения высотной карты (общее число атомов $N = 7000$, приведенный диаметр пучка $D^* = d/a = 25$, энергия пучка $E = 3$ эВ, высота указана в ангстремах).

На рис. 2, 3 представлены результаты моделирования роста фрагментов наноразмерных пленок платины на поверхности родия, полученные методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Для анализа фрактальной структуры сплошных пленок с развитым рельефом (т.е. при наличие нескольких монослоев) мы анализировали конфигурации, отвечающие $N = 7000$. В Таблице 2 представлены результаты сравнения значений фрактальной размерности, полученной с использованием разных ПО методом подсчета кубов (cube counting). Установлено, что ПО [11] является наименее чувствительным при анализе двух различных итоговых конфигураций при моделировании роста фрагментов наноразмерных пленок платины на родии ($D_c = 2,62 \div 2,64$). Результаты, полученные с использованием ПО [12, 13], в случае низкоэнергетических пучков находятся в хорошем согласии, в то время как для высокоэнергетических пучков различие значений фрактальной размерности составляет $\Delta D_c = 0,13$. Отметим, что погрешность нашего ПО [13] составляет не более 0,05.

Таблица 2. Сравнение значений фрактальной размерности для пленок платины на родии при $N = 7000$.

ПО	Параметры моделирования			
	$E = 0,5$ эВ, $D^* = 12$	$E = 0,5$ эВ, $D^* = 25$	$E = 3$ эВ, $D^* = 12$	$E = 3$ эВ, $D^* = 25$
Gwyddion [11]	2,62	2,63	2,62	2,64
Image Analysis [12]	2,54	2,71	2,50	2,63
FractalSurface [13]	2,57	2,69	2,63	2,76

Рис. 2. Результаты моделирования роста фрагментов наноразмерных пленок (линейный масштаб положки 10×10 нм, масштаб по высоте указан в ангстремах) платины на родии при диаметре пучка $d = 3,3$ нм.

Рис. 3. То же при диаметре пучка $d = 7$ нм.

Практический интерес представляет возможность создания

конвейерной технологии по «выращиванию» сплошных пленок с определенным набором параметров шероховатости, в том числе значения фрактальной размерности. Для этого нами была произведена оценка параметров, прежде всего числа атомов, минимально необходимых для фиксации момента, когда пленка хотя бы в одном монослое становится сплошной (см. данные Таблицы 3).

Установлено, что на данных масштабах для характерного значения N_{ch} диапазон составляет 4000–4500 атомов. При этом ни энергия исходного пучка, ни его диаметр не оказывают решающего влияния как на значение N_{ch} , так и на максимальную толщину формируемой пленки h_{max} . По-видимому, эти параметры в большей степени зависят именно от параметров подложки (высоко- или низкоэнергетическая подложка, начальная температура и размер напыляемой поверхности). Лишь в случае, когда и энергия пучка, и его диаметр одновременно принимают максимальное из рассматриваемых значений число атомов, необходимых для создания непрерывного первого монослоя, несколько уменьшается и составляет $N_{ch} = 4000$.

Таблица 3. Значения параметров моделирования для определения технологической границы образования сплошной пленки.

Параметры	Значения			
E , эВ	0,5	0,5	3	3
d , нм	3,3	7	3,3	7
h_{max} , нм	1,1	1,1	1,1	1,1
N_{ch}	4500	4500	4500	4000

3. Заключение

Согласно [22, 23] величина фрактальной размерности эквивалентно заменяет целый комплекс амплитудных и шаговых характеристик шероховатости поверхности. Таким образом, разработка и апробация универсального ПО, позволяющего учитывать различные особенности анализируемого рельефа поверхности в пользовательских настройках, является перспективным направлением. Его развитие позволит в будущем разработать методику для создания, совершенствования и прецизионного контроля при «выращивании» структур с заданной морфологией поверхности, а также структур, обладающих определенными физическими свойствами, с помощью подбора условий эксперимента (выбор высоко- или низкоэнергетической подложки, температуры подложки, наличие внешнего давления и последующей химической обработки, а также ряд других технологических факторов), так и использование определенных методик подготовки (последовательности действий и условий

эксперимента) наноразмерных пленок [24].

Проведенные оценки для моделируемых пленок платины на поверхности родия показывают, что программный комплекс FractalSurface в целом может адекватно воспроизводить значения фрактальной размерности. Полученные значения коррелируют с данными, полученными с использованием ПО [12], а наличие настраиваемого пользовательского интерфейса позволяет более точно учитывать локальные особенности исследуемого рельефа при заданных параметрах компьютерного эксперимента.

Вместе с тем, не стоит забывать, что анализ получаемых поверхностей является вторичной задачей, по отношению к дальнейшему тестированию и модернизации ПО, обеспечивающего симулирование эксперимента методом молекулярно-лучевой эпитаксии [25].

Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2020-0007) и при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-37-70007).

Библиографический список:

1. **Benelmekki, M.** Chapter 1 - Nanostructured thin films–background, preparation and relation to the technological revolution of the 21st century / M. Benelmekki, A. Erbe // *Frontiers of Nanoscience*. – 2019. – V. 14. – P. 1-34. DOI: 10.1016/B978-0-08-102572-7.00001-5.
2. **Сдобняков, Н.Ю.** Морфологические характеристики и фрактальный анализ металлических пленок на диэлектрических поверхностях: монография / Н.Ю. Сдобняков, А.С. Антонов, Д.В. Иванов. – Тверь: ТвГУ, 2019. – 168 с.
3. **Xu, C.** Mechanochemical synthesis of advanced nanomaterials for catalytic applications / C. Xu, S. De, A.M. Balu, M. Ojeda, R. Luque // *Chemical Communications*. – 2015. – V. 51. – I. 31. – P. 6698-6713. DOI: 10.1039/C4CC09876E.
4. **Roth, N.** Creation of micro/nano surface structures on silver using collinear double femtosecond laser pulses with different pulse separation / N. Roth, C. Zuhlke, E. Peng et al. // *Multiscale and Multidisciplinary Modeling, Experiments and Design*. – 2018. – V. 1. – I. 2. – P. 145-153. DOI: 10.1007/s41939-018-0011-2.
5. **Shedd, G.M.** The scanning tunneling microscope as a tool for nanofabrication / G.M. Shedd, P.E. Russel // *Nanotechnology*. – 1990. – V. 1. – № 1. – P. 67-80. DOI: 10.1088/0957-4484/1/1/012.
6. **Соколов, Д.Н.** О моделировании термических эффектов при взаимодействии зонда сканирующего туннельного микроскопа с образцом / Д.Н. Соколов, Н.Ю. Сдобняков, П.С. Кутилин и др. // *Нанотехника*. – 2013. – № 2 (34). – С. 78-80.
7. **Goswami, D.K.** Growth of self-assembled nanostructures by molecular beam epitaxy / D.K. Goswami, B. Satpati, P.V. Satyam, B.N. Dev // *Current Science*. – 2003. – V. 84. – № 7. – P. 903-910.
8. **Иванов, Д.В.** Моделирование процесса формирования фрактальных металлических пленок / Д.В. Иванов, С.А. Васильев, Н.Ю. Сдобняков и др. // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2020. – Вып. 12. – С. 424-437. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.424.
9. **Бембель, А.Г.** Компьютерное моделирование роста субмикронных островковых пленок с учетом атомистической структуры твердой поверхности / А.Г. Бембель, В.М. Самсонов, М.Ю. Пушкарь, М.В. Самсонов // *Вестник ТвГУ, серия «Физика*. – 2009. – Вып. 6. – С. 98-106.
10. DigitalSurf. – Режим доступа: [www.url: https://www.digitalsurf.com](http://www.digitalsurf.com). – 15.08.2021.
11. Gwyddion – Free SPM (AFM, SNOM/NSOM, STM, MFM, ...) data analysis software. – Режим доступа: [www.url: http://gwyddion.net](http://gwyddion.net). – 15.09.2021.
12. Image Analysis P9. Руководство пользователя. – М.: НТ-МДТ СИ, 2019. – 582 с.
13. **Свидетельство № 2021618928 Российская Федерация.** FractalSurface: программа для анализа

- поверхности на наноуровне / Н.Ю. Сдобняков, В.А. Анофриев, В.А. Кошелев, А.С. Антонов, Д.В. Иванов; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет». – № 20216180353; заявл. 27.05.2021; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 02.06.2021. – 1 с.
14. **Сдобняков, Н.Ю.** Определение фрактальной размерности островковых плёнок золота на слюде / Н.Ю. Сдобняков, Т.Ю. Зыков, А.Н. Базулев, А.С. Антонов // Вестник ТвГУ, серия «Физика». – 2009. – Вып. 6. – С. 112-119.
15. **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.
16. **Иванов, Д.В.** Получение наноразмерных пленок платины, обладающих фрактальными свойствами / Д.В. Иванов, А.С. Антонов, Е.М. Семенова и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2020. – Вып. 12. – С. 73-88. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.073.
17. **Ivanov, D.V.** Determination of the fractal size of titanium films at different scales / D.V. Ivanov, A.S. Antonov, E.M. Semenova et al. // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – V. 1758. – Art. № 012013. – 6 p. DOI: 10.1088/1742-6596/1758/1/012013.
18. **Gupta, R.P.** Lattice relaxation at a metal surface / R.P. Gupta // Physical Review B. – 1981. – V. 23. – I. 12. – P. 6265-6270. DOI: 10.1103/PhysRevB.23.6265.
19. **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.
20. **Paz Borbón, L.O.** Computational studies of transition metal nanoalloys / L.O. Paz Borbón // Doctoral Thesis accepted by University of Birmingham, United Kingdom. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. – 155 p. DOI: 10.1007/978-3-642-18012-5.
21. **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.
22. **Иванов, Г.С.** Фрактальная геометрическая модель микроповерхности / Г.С. Иванов, Ю.В. Брылкин // Геометрия и графика. – 2016. – Т. 4. – № 1. – С. 4-11. DOI: 10.12737/18053.
23. **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.
24. **Антонов, А.С.** О методике подготовки образцов для изучения фрактальной размерности и электрических свойств образцов с помощью сканирующего туннельного микроскопа / А.С. Антонов, О.В. Михайлова, Е.А. Воронова, Н.Ю. Сдобняков // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2014. – Вып. 6. – С. 15-21.
25. **Свидетельство № 2013610101 Российская Федерация.** Компьютерная программа для молекулярно-динамического моделирования нанокластеров / В.М. Самсонов, А.Г. Бембель, М.Ю. Пушкарь; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВПО «Тверской государственный университет». – № 2013610101; заявл. 08.11.2012; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 09.01.2013. – 1 с.

References:

1. Benelmekki M., Erbe A. Chapter 1 - Nanostructured thin films—background, preparation and relation to the technological revolution of the 21st century, *Frontiers of Nanoscience*, 2019, vol. 14, pp. 1-34. DOI: 10.1016/B978-0-08-102572-7.00001-5.
2. Sdobnyakov N.Yu., Antonov A.S., Ivanov D.V. *Morfologicheskie kharakteristiki i fraktal'nyj analiz metallicheskih plenok na dielektricheskikh poverkhnostyakh: monografiya* [Morphological characteristics and fractal analysis of metal films on dielectric substrates: monography]. Tver: Tver State University Publ., 2019, 168 p. (In Russian).
3. Xu C., De S., Balu A.M., Ojeda M., Luque R. Mechanochemical synthesis of advanced nanomaterials for catalytic applications, *Chemical Communications*, 2015, vol. 51, issue 31, pp. 6698-6713. DOI: 10.1039/C4CC09876E.
4. Roth N., Zuhlke C., Peng E. et al. Creation of micro/nano surface structures on silver using collinear double femtosecond laser pulses with different pulse separation, *Multiscale and Multidisciplinary Modeling, Experiments and Design*, 2018, vol. 1, issue 2, pp. 145-153. DOI: 10.1007/s41939-018-0011-2.
5. Shedd G.M., Russel P.E. The scanning tunneling microscope as a tool for nanofabrication, *Nanotechnology*, 1990, vol. 1, no. 1, pp. 67-80. DOI: 10.1088/0957-4484/1/1/012.
6. Sokolov D.N., Sdobnyakov N.Yu., Kutilin P.S. et al. O modelirovanii termicheskikh effektov pri vzaimodejstvii 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], *Nanotekhnika [Nanotechnology]*, 2013, no. 2 (34), pp. 78-80. (In Russian).
7. Goswami D.K., Satpati B., Satyam P.V., Dev B.N. Growth of self-assembled nanostructures by molecular beam epitaxy, *Current Science*, 2003, vol. 84, no. 7, pp. 903-910.
8. Ivanov D.V., Vasilyev S.A., Sdobnyakov N.Yu. et al. Modelirovanie protsessa formirovaniya fraktal'nykh metallicheskih plenok [Simulation of the fractal metal films formation], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2020, issue 12, pp. 424-437. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.424. (In Russian).
9. Bembel A.G., Samsonov V.M., Pushkar M.Yu., Samsonov M.V. Komp'yuternoe modelirovanie rosta submikronnykh ostrovkovykh plenok s uchetom atomisticheskoy struktury tverdoj poverkhnosti [Computer simulation of the growth of submicron island films taking into account the atomistic structure of the solid surface], *Vestnik TvGU, seriya «Fizika» [Herald of Tver State University, series «Physics»]*, 2009, issue 6, pp. 98-106. (In Russian).
10. DigitalSurf. Available at: [www.url: https://www.digitalsurf.com](http://www.digitalsurf.com) (accessed 15.08.2021).
11. Gwyddion – Free SPM (AFM, SNOM/NSOM, STM, MFM, ...) data analysis software. Available at: [www.url: http://gwyddion.net](http://gwyddion.net) (accessed 15.09.2021).
12. *Image Analysis P9. Rukovodstvo pol'zovatelya [Image Analysis P9. User guide]*. Moscow: NT-MDT SI Publ., 2019, 582 p. (In Russian).
13. Sdobnyakov N.Yu., Anofriev V.A., Koshelev V.A., Antonov A.S., Ivanov D.V. *FractalSurface: programma dlya analiza poverkhnosti na nanourovne [FractalSurface: software for surface analysis at nanoscale]*. Certificate RF, no. 2021618928, 2021. (In Russian).
14. Sdobnyakov N.Yu., Zykov T.Yu., Bazulev A.N., Antonov A.S. Opredelenie fraktal'noi razmernosti ostrovkovykh plenok zolota na slyude [Determination of the fractal dimension of island films of gold on mica], *Vestnik TvGU, seriya «Fizika» [Herald of Tver State University, series «Physics»]*, 2009, issue 6, pp. 112-119. (In Russian).
15. Antonov A.S., Sdobnyakov N.Yu., Ivanov D.V. et al. Issledovanie fraktal'nykh svoystv nanorazmernykh plenok zolota, serebra i medi: atomno-silovaya i tunnel'naya mikroskopiya [Investigation of fractal properties of nanosized gold, silver and copper films: atomic force and tunnelling microscopy], *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya [Chemical Physics and Mesoscopy]*, 2017, vol. 19, no. 3, pp. 473-486. (In Russian).
16. Ivanov D.V., Antonov A.S., Semenova E.M. et al. Poluchenie nanorazmernykh plenok platiny, obladayushchikh fraktal'nymi svoystvami [Obtaining nanosized platinum films with fractal properties], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2020, issue 12, pp. 73-88. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.073. (In Russian).
17. Ivanov D.V., Antonov A.S., Semenova E.M. et al. Determination of the fractal size of titanium films at different scales, *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, vol. 1758, art. no. 012013, 6 p. DOI: 10.1088/1742-6596/1758/1/012013.
18. Gupta R.P. Lattice relaxation at a metal surface, *Physical Review B*, 1981, vol. 23, issue 12, pp. 6265-6270. DOI: 10.1103/PhysRevB.23.6265.
19. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys, *Physical Review B*, 1993, vol. 48, issue 1, pp. 22-33. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.22.
20. Paz Borbón L.O. *Computational studies of transition metal nanoalloys*. Doctoral Thesis accepted by University of Birmingham, United Kingdom. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2011, 155 p. DOI: 10.1007/978-3-642-18012-5.
21. Belko A.V., Nikitin A.V., Strekal' N.D., German A.E. Fractal structure of gold clusters formed under vacuum deposition on dielectric substrates, *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2009, vol. 3, issue 3, pp. 338-342. DOI: 10.1134/S1027451009030021.
22. Ivanov G.S., Brylkin Yu.V. Fraktal'naya geometricheskaya model' mikropoverkhnosti [Fractal geometric microsurface model], *Geometriya i grafika [Geometry & Graphics]*, 2016, vol. 4, no. 1, pp. 4-11. DOI: 10.12737/18053. (In Russian).
23. Brylkin Yu.V., Kusov A.L., Florov A.V. Testirovanie algoritma modelirovaniya rel'efa sherokhovatoj poverkhnosti na osnove teorii fraktalov [Testing a rough surface relief modeling algorithm based on fractal theory], *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo gosudarstvennogo universiteta [Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University]*, 2014, vol. IV, no. 5, pp. 86-89. (In Russian).
24. Antonov A.S., Mikhailova O.V., Voronova E.A., Sdobnyakov N.Yu. O metodike podgotovki obraztsov dlya izucheniya fraktal'noj razmernosti i elektricheskikh svoystv obraztsov s pomoshch'yu skaniruyushchego tunnel'nogo mikroskopa [On the technique of preparing samples to study fractal dimension and electrical properties of samples using a scanning tunneling microscope], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov,*

nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2014, issue 6, pp. 15-21. (In Russian).

25. Samsonov V.M., Bembel A.G., Pushkar M.Yu. *Komp'yuternaya programma dlya molekulyarno-dinamicheskogo modelirovaniya nanoklasterov* [Computer program for molecular dynamics simulation of nanoclusters]. Certificate RF, no. 2013610101, 2013. (In Russian).

Original paper

SIMULATION OF LAYER BY LAYER GROWTH OF FRACTAL METAL Pt-Rh FILMS

D.V. Ivanov¹, V.A. Anofriev¹, V.A. Koshelev^{1,2}, A.S. Antonov^{1,4}, S.A. Vasilyev¹, N.Yu. Sdobnyakov¹

¹*Tver State University, Tver, Russia*

²*ITMO University, Saint Petersburg, Russia*

³*Tver State Agricultural Academy, Tver, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.682

Abstract: In this work, the molecular dynamics method and the tight-binding potential are used to simulate the process of molecular beam epitaxy in order to determine the regularities in the formation of fractal platinum metal films on the rhodium surface. The possibility of formation of fractal structures both in island platinum films on the rhodium surface and in a continuous film has been established. The parameters of the computer experiment, which determine the transition from individual island films to a continuous film in the indicated system, have been established. Using various software products Gwyddion and Image Analysis, as well as our own software FractalSurface, the range of changes in the fractal dimension has been analyzed under various conditions of a molecular dynamics experiment by the method of cube counting. The obtained values of the fractal dimension are generally in acceptable agreement with each other; however, there is a number of exceptions, which are discussed in more detail. A comparative analysis of the results obtained allows one to formulate recommendations for the methodology for creating, adjusting and precision control when «growing» structures with a given surface morphology.

Keywords: *molecular beam epitaxy, molecular dynamics modeling, tight-binding potential, fractal dimension, cube counting, platinum, rhodium, imaging software.*

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

Анофриев Виталий Александрович – студент 1 магистратуры кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Кошелев Владимир Александрович – научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», студент 1 курса магистратуры факультета фотоники ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет ИТМО»

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

Васильев Сергей Александрович – старший преподаватель кафедры прикладной физики, научный сотрудник Управления научных исследований ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

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

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

Vitaly A. Anofriev – 1st year graduate student, General Physics Department, Tver State University

Vladimir A. Koshelev – Researcher, General Physics Department, Tver State University, 1st year graduate student, Faculty of Photonics, ITMO University

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

Sergey A. Vasilyev – Senior Lecturer, Applied Physics Department, Researcher, Management of Scientific Research, Tver State University

Nikolay Yu. Sdobnyakov – Ph. D., Docent, General Physics Department, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 01.10.2021; после рецензирования/revised: 21.10.2021; принята/accepted 22.10.2021.