

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»

На правах рукописи

**Бухаров Дмитрий Николаевич**

**ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫЕ НАНОКЛАСТЕРЫ НА ТВЕРДОЙ  
ПОВЕРХНОСТИ С УПРАВЛЯЕМЫМИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ  
ХАРАКТЕРИСТИКАМИ: ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И СТРУКТУРЫ В  
ЭЛЕКТРОПРОВОДИМОСТИ**

1.3.19 – «Лазерная физика»

Диссертация

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук,  
профессор Аракелян С.М.

Владимир–2023

## Содержание

ВВЕДЕНИЕ .....	4
Глава 1. Литературный обзор: методы управляемого лазерного синтеза нанокластеров на твердой поверхности, уникальность их свойств и возможности их моделирования.....	15
Введение.....	15
1.1 Нанокластерные/островковые структуры и актуальность их применения для различных приложений .....	17
1.2 Лазерные методы получения нанокластерных структур .....	21
1.3 Математическое моделирование как метод исследования структурных особенностей и электрофизических свойств нанокластерных/островковых пленок .....	25
1.3.1 Общие методы моделирования структурных особенностей наносистем .....	26
1.3.2 Модели нанокластерных систем.....	31
1.4 Модели электропроводимости нанокластерных/островковых пленок .....	32
1.5 Современное состояние исследований электропроводимости нанокластерных/островковых пленок.....	35
Заключение и выводы по главе 1.....	36
Глава 2. Лазерные методы получения нанокластеров на твердой поверхности ...	38
Введение.....	38
2.1 Лазерно-индуцированные методы получения нанокластерных структур различной топологии на твердой поверхности .....	38
2.2 Анализ и классификация нанокластерных структур, осажденных на твердую поверхность.....	45
Заключение и выводы по главе 2.....	54

Глава 3. Экспериментальное исследование электрофизических свойств нанокластерных/островковых нанопленок.....	56
Введение.....	56
3.1 Особенности электропроводимости нанокластерных/ островковых пленок ...	57
3.2 Экспериментальные исследования электропроводимости полупроводниковых нанокластерных/островковых нанопленок.....	61
Заключение и выводы по главе 3.....	71
Глава 4. Применение аппарата математического моделирования для описания топологических особенностей и свойств электропроводимости нанокластерных/островковых структур на твердой поверхности .....	73
Введение.....	73
4.1 Математическое моделирование структуры нанокластерных/островковых нанопленок.....	74
4.2 Связь управляющих параметров схемы лазерного синтеза и модели структуры системы нанокластеров.....	98
4.3 Математическое моделирование электрофизических свойств нанокластерных/островковых нанопленок.....	101
Заключение и выводы по главе 4.....	115
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	117
Список используемой литературы .....	120
Приложение 1 .....	141
Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ.....	141

## **ВВЕДЕНИЕ**

### **Общая характеристика работы**

Диссертационная работа посвящена исследованию электрофизических характеристик нанокластерных структур/островковых нанопленок теллурида свинца (PbTe), индуцированных при лазерном воздействии на твердые поверхности. Рассмотрены механизмы электропроводимости в таких гранулированных системах в зависимости от их топологических характеристик. Проведено сравнение результатов выполненного математического моделирования с наблюдаемыми и измеренными при различных условиях лазерного эксперимента параметрами. Предложены способы управления электрофизическими свойствами сформированных наноструктур по их топологическим особенностям, исходя из их оптических изображений. Это должно позволить разработать на новых физических принципах подходы к получению требуемых электрофизических характеристик в подобных тонкопленочных нанокластерных структурах, индуцированных лазерным излучением, для различных приложений квантовой электроники, оптоэлектроники и фотоники.

### **Актуальность и перспективность работы**

Полупроводниковые нанокластерные/островковые наноструктуры с заданными управляемыми функциональными характеристиками разного состава находят широкое применение в нанoeлектронике и оптоэлектронике, а также используются как люминесцентные метки для сверхчувствительного детектирования биохимических реакций, и для визуализации структуры разнотипных биологических объектов, и в других приложениях, в частности, как подложки для направленного выращивания углеродных нанотрубок.

В настоящее время при разработке новых физических принципов для создания наноструктур с заданными управляемыми функциональными характеристиками, к которым и относятся кластерные нанопленки, используются лазерные экспериментальные схемы получения поверхностных топологических

объектов. Неотъемлемое условие этих методов – математические и компьютерные модели должны адекватно описывать наблюдаемые особенности и ключевые параметры для их направленного синтеза. Нахождение оптимального решения в рамках моделирования требует разработки алгоритмов и моделей с прогнозом элементного состава, характеристик и свойств синтезируемых нанообъектов на поверхности образцов для использования в практических устройствах.

В данной работе акцент сделан на изучении электрофизики подобных систем в зависимости от конкретной созданной управляемым образом топологии: плотности расположения на поверхности, размеров и формы отдельных кластеров, а также элементного состава и граничных условий. Предложенные подходы могут быть полезны в сфере разработки перспективных устройств фотоники/оптоэлектроники, с использованием элементной базы, основанной на новых физических принципах. Для этого могут быть применимы новые материалы, на основе наноструктур с требуемыми функциональными характеристиками, которые могут быть сформированы с использованием различных схем эксперимента при лазерном воздействии на вещество, с управляющими параметрами, определенными с помощью предварительного моделирования динамических процессов, протекающих во время синтеза.

**Предметом исследования** являются электрофизические свойства наноструктурированных тонкопленочных кластерных структур теллурида свинца в зависимости от их топологических особенностей, сформированных под воздействием лазерного излучения.

**Объектом исследования** являются лазерно-индуцированные наноструктурированные кластерные полупроводниковые поверхностные структуры теллурида свинца и фрактальные объекты с изменяемыми и контролируемыми параметрами (латеральный размер и форма, плотность расположения и т.д.).

**Целью диссертационной работы** является исследование и разработка методов моделирования и оценки характеристик электропроводимости лазерно-индуцированных наноструктурированных объектов на твердой поверхности и

островковых пленок в зависимости от их топологических особенностей и фрактальных размерностей, и с учетом реализуемых граничных условий и конкретного элементного состава образцов.

В соответствии с поставленной целью решались нижеперечисленные научные **задачи**.

1. Обоснование методов лазерно-индуцированного получения кластерных нанопленок, имеющих принципиальные преимущества перед другими применяемыми подходами, и получение опытных образцов перспективных для создания элементов и систем топологической фотоники и оптоэлектроники на новых физических принципах.

2. Разработка методов моделирования для управляемого получения топологических наноструктур на твердой поверхности, включая фрактальные объекты, перспективные для практических приложений в квантовой электронике.

3. Использование современных подходов математического и компьютерного моделирования для получения заданных топологических нанокластеров на твердой поверхности, включая фрактальные структуры, в различных схемах лазерного эксперимента.

4. Создание алгоритмов и процедур численных методов управления электрофизическими характеристиками в подобных структурах в зависимости от их заданной лазерно-индуцированной топологии и элементного состава.

5. Моделирование механизмов и процессов распространения заряженных носителей/электронов в таких неоднородных наноструктурированных образцах с возможностью сопоставления в принципиальных управляющих параметрах полученных теоретических результатов с экспериментальными данными по зависимостям для электропроводимости.

**Методы исследования.** В проведенных исследованиях применялись экспериментальные и теоретические подходы с использованием современного специализированного оборудования, а также методов и алгоритмов численных вычислений и компьютерного моделирования с анализом, допускающим

сравнение с экспериментом для лазерно-индуцированных нанокластеров на твердой поверхности при различных условиях.

### **Научная новизна**

1. Разработаны численные методы и подходы к планированию лазерных методов управляемого получения нанокластерных структур/островковых нанопленок и получению полупроводниковых (PbTe) образцов с размерами от 10 нм до 13 мкм, перспективных для создания элементов и систем топологической фотоники и оптоэлектроники на новых физических принципах.

2. Созданы динамические модели и алгоритмы для расчета характеристик индуцированных при лазерном воздействии на твердую поверхность нанокластерных структур/островковых нанопленок с управляемой топологией, включая фрактальные объекты и структуры с размерными квантовыми состояниями. Предложенный подход основан на генерации стохастических фрактальных объектов разной размерности (оцениваемой по методу boxcounting) с определением их вольт-амперных характеристик с учетом эффектов туннелирования на оптимизации траектории в 2D-сети Миллера-Абрахамса.

3. Выявлены условия реализации различных механизмов и процессов электропроводимости в нанокластерных системах (туннелирование, прыжки между разными кластерами) на отрезке напряжений  $[0,1 \div 1]$  В при температурах от  $20^0$  до  $100^0$  С в зависимости от их топологических особенностей, индуцированных в лазерном эксперименте при соответствующих граничных условиях и поверхностных неоднородностях, позволяющих получать локальное усиление электрического поля.

4. Получено на количественном уровне согласование результатов проведенного моделирования структуры и электрофизических параметров неоднородных наноструктур с измеренными экспериментальными данными в лазерном эксперименте по индуцированию поверхностных структур с управляемой топологией.

5. Совокупность проведенных исследований, как в моделях, так и в лазерном эксперименте позволяет рассмотреть перспективы создания на новых

физических принципах элементов и систем топологической фотоники и оптоэлектроники нового поколения.

### **Практическая значимость**

1. Обоснованы лазерные методы получения островковых нанопленок теллурида свинца с перспективой их использования в различных приложениях.

2. Разработаны подходы и алгоритмы для моделирования управляемых нанокластерных/островковых наноструктур теллурида свинца на твердой поверхности, получаемых в разных схемах лазерного эксперимента, которые имеют перспективы использования при создании на новых физических принципах практических устройств топологической фотоники и оптоэлектроники.

3. Предложены математические модели для различных механизмов электропроводимости (туннелирование, прыжковые), которые могут быть полезны для оценки методов получения и прогнозирования характеристик, разрабатываемых наноструктурированных элементов и систем с требуемыми электрофизическими характеристиками, получаемыми при лазерном воздействии на вещества с разным элементным составом в определенных схемах эксперимента.

4. Рассмотрены процессы образования фрактальных объектов и их развития на твердотельной поверхности образца в зависимости от граничных условий и расположения начальных источников возбуждения. Эти подходы имеют универсальное значение и применимы для различных направлений моделирования в разных областях.

5. Результаты работы используются в научно-образовательном процессе в ФГБОУ ВО ВлГУ, в том числе в рамках выполнения ряда научно-технических программ федерального уровня.

Среди них можно выделить такие как:

- Федеральная целевая программа «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы»: Лазерный синтез полупроводниковых

наночастиц/квантовых точек с использованием уникальной установки упорядоченного наноструктурирования объектов фемтосекундным излучением (ГК 14.518.11.7030). 20.07.2012- 23.09.2013. Научный руководитель С.М. Аракелян.

- Госзадание Минобр науки: Развитие методов фемто- и нанофотоники для контролируемого лазерного формирования наноструктурированных кластерных материалов: фазовые переходы и коррелированные/квантовые состояния (Код проекта 2803). 03.02.2014- 31.12.2016. Научный руководитель С.М. Аракелян.
- Грант Президента РФ для поддержки молодых кандидатов наук (№ МК-4321.2014.2): Лазерное формирование многокомпонентных тонких наноструктурированных пленок с изменяемыми оптическими и электрофизическими свойствами с использованием методов осаждения наночастиц (№14.Z56.14.4321-МК). 01.01.2014-31.12.2015. Научный руководитель С.В. Кутровская.
- Грант РФФИ: Исследование процессов формирования полупроводниковых наночастиц/квантовых точек (13-02-97513 р\_центр\_a). 19.06.2013-31.12.2015. Научный руководитель А.О. Кучерик.
- Грант Президента РФ для поддержки ведущих школ (№ НШ-89.2014.2): Фундаментальные процессы управляемого лазерного синтеза поверхностных наноструктур/нанокластеров и квантовая обработка информации на основе достижений фемто- нанофотоники (№ 14.Z57/14/89-НШ) 01.01.2014-31.12.2015. Научный руководитель С.М. Аракелян.
- Грант Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук (№ МК-3053.2017.2): Лазерный синтез гибридных материалов с изменяемыми электрофизическими и оптическими свойствами (14.Z56.17.3053-МК) 22.02.2017-10.12.2018. Научный руководитель А.А. Антипов.

- Госзадание Минобр науки: Экспериментальные и теоретические исследования формирования и распространения локализованных поверхностных электромагнитных возбуждений в низкоразмерных квазипериодических структурах (№16.1123.2017/ПЧ) 01.02.2017-31.12.2019. Научный руководитель С.М. Аракелян.
- Федеральная целевая программа «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 - 2020 годы»: Разработка многофункционального высокотехнологического комплекса для послойной микро- и наномодификации поверхностей ответственных деталей машиностроения с применением лазерно – гибридных технологий (№075-15-2019-1838) 06.12.2019-30.09.2020. Научный руководитель С.М. Аракелян.
- Грант РФФИ: Электрофизика и оптика лазерно-индуцированных нанокластерных тонкопленочных структур с управляемой топологией на твердой поверхности – размерные эффекты, квантовая проводимость и связанные состояния электронов (№20-02-00515 А от 25.02.2020) 25.02.2020-25.02.2023. Научный руководитель С.М. Аракелян.
- Грант РФФИ: Исследование оптических свойств квазиодномерных углеродных структур для разработки модулятора интенсивности в волоконном тракте (№ 23-12-20004) 20.04.2023-31.12.2024. Научный руководитель А.О. Кучерик.
- Госзадание Минобр науки «Алмазная долина»: Разработка методов поверхностной лазерной модификации пленок из синтетического алмаза и широкозонных композиций на его основе для управления оптическими и электрофизическими свойствами структурированных материалов (№ FZUN-2023-0003) 09.2023-31.12.2025. Научный руководитель А.О. Кучерик.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Методы управляемого непрерывного воздействия YAG:Nd<sup>3+</sup>-лазера с центральной длиной волны 1,06 мкм и гауссовым профилем пучка при

варьировании мощности в пределах 5-10 Вт, скорости сканирования поверхности от 40 до 160 мкм/с и диаметра пучка от 30 до 100 мкм позволяют синтезировать нанокластерные поверхностные структуры теллурида свинца с изменяемой и контролируемой топологией, включая фрактальные объекты, с латеральными размерами 10 нм – 13 мкм.

2. Вольт-амперные характеристики полупроводниковых нанокластерных структур теллурида свинца, измеренные четырехзондовым методом в диапазоне напряжений  $[0 \div 1]$  В, демонстрируют локальные отклонения от омической зависимости, с амплитудой, зависящей от поверхностной плотности нанокластеров, достигающей максимальной величины в 50% относительной средней величины.

3. Модели диффузионно-ограниченной агрегации позволяют рассчитывать нанокластерные структуры теллурида свинца, качественно соответствующие экспериментальным с относительной погрешностью фрактальных размерностей не более 10% в сравнении с экспериментальным данным.

4. Модель на основе определения оптимальных траекторий туннелирования электронов в приближении Миллера-Абрахамса позволяет оценивать омическое поведение вольт-амперных характеристик нанокластерных/островковых пленок теллурида свинца в зависимости от топологических особенностей образца, с относительной погрешностью не более 10% в сравнении с экспериментальными данными.

**Личный вклад автора** состоит в самостоятельной разработке и реализации математических моделей, проведении на их основе численных вычислений и компьютерного моделирования, а также участие в планировании и проведении лазерного эксперимента с необходимыми начальными условиями для получения наноструктур с требуемыми характеристиками, и обсуждении их результатов совместно с соавторами научных работ. Диссертация выполнялась в научных лабораториях кафедры физики и прикладной математики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего

образования «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых» (ВлГУ)

### **Краткое содержание работы**

Работа состоит из четырех глав, введения и заключения, а также списка цитируемой литературы (178 наименования).

Каждая глава диссертационной работы начинается с краткого введения и заканчивается выводами.

Во **Введении** обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цель и задачи проведенных исследований, определена их методическая основа, изложена научная новизна и практическая ценность полученных результатов, приведены основные положения, выносимые на защиту, и дано краткое описание сути работы по главам диссертации.

В **первой главе** приводится краткий обзор научной литературы по современному состоянию результатов в исследуемой области, приведены основные понятия и проанализированы популярные лазерные методы синтеза нанокластерных структур с изменяемой топологией на твердой поверхности. Обсуждаются специфика и особенности получения наноструктурированных тонкопленочных кластерных полупроводниковых структур в различных схемах реализации лазерного эксперимента. Обсуждаются существующие подходы и алгоритмы для математического моделирования и компьютерной симуляции рассматриваемых задач и процессов. Делаются выводы о необходимости разработки и использования соответствующих подходов моделирования, адекватно описывающего процессы образования лазерно-индуцированных нанокластерных поверхностных твердотельных структур, имеющих перспективное применение в сфере разработки элементов и систем топологической фотоники и оптоэлектроники, основанных на элементной базе на новых физических принципах.

Во **второй главе** приводятся результаты оригинальных экспериментов по лазерно-индуцированному получению полупроводниковых нанокластеров и их систем на поверхности эпитаксиальной пленки РbТе. Произведено исследование и

классификация полученных образцов в соответствии с их геометрическими (фрактальными) характеристиками.

В **третьей главе** приведены результаты экспериментальных исследований электрофизических свойств нанокластерных/островковых нанопленок теллурида свинца, реализованные через измерение их вольтамперных характеристик (ВАХ). Для выяснения механизма электропроводимости была исследована резистометрия пленок, которая показала ее смешанный туннельно-прыжковый характер.

В **четвертой главе** рассмотрены результаты применения аппарата математического моделирования с учетом сравнения с полученными экспериментальными данными. Это позволяет оценивать электрофизические характеристики нанокластерных/островковых нанопленок в зависимости от их топологических особенностей. Предложены фрактальные модели структуры нанокластерных/островковых нанопленок. Рассмотрены подходы для описания электрофизических свойств, учитывающие топологические особенности и смешанный характер электропроводимости нанокластерных/островковых нанопленок.

В **заключении** сформулированы основные результаты и выводы по работе в целом.

### **Апробация работы**

Основные результаты работы опубликованы в научных журналах «Nanomaterials», «Известия РАН. Серия физическая», «Квантовая электроника», «Journal of Physics: Conference Series», «Physics Procedia», «Южно-сибирский научный вестник», а также неоднократно докладывались на профильных всероссийских и международных конференциях: на III, IV, VI, VII Международных конференциях/молодежных школах-семинарах «Современные нанотехнологии и нанофотоника для науки и производства» (г. Владимир, 2010, 2014, 2017, 2018 г.), на Молодежных научных форумах «ЛОМОНОСОВ-2012», «ЛОМОНОСОВ-2019», «ЛОМОНОСОВ-2020», «ЛОМОНОСОВ-2021», «ЛОМОНОСОВ-2022», «ЛОМОНОСОВ-2023» (г. Москва 2012, 2019, 2020, 2021, 2022, 2023 г.), на XI конференции «Лазеры и лазерно-информационные

технологии: фундаментальные проблемы и применения» (ILLA-2014) (г. Шатура, 2014 г.), на VI, VII, VIII Международных симпозиумах по когерентному оптическому излучению полупроводниковых соединений и структур (г. Москва-Звенигород, 2017, 2019, 2021 г.), на International conference on nanophotonics, metamaterials and photovoltaics (г. Santiago de Cuba, Cuba, 2018 г.), на VII, VIII Международных молодежных научных школах-конференциях «Современные проблемы физики и технологий» (г. Москва, 2018, 2019 г.), на VIII, IX, X, XIV, XV, XVI, XVII всероссийских конференциях молодых ученых «Нанoeлектроника, нанофотоника и нелинейная физика», (г. Саратов, 2013, 2014, 2015, 2019, 2020, 2021, 2022 г.), на II, III, IV всероссийских научных конференциях «Омские научные чтения» (г. Омск, 2018, 2019, 2020 г.), на VI, VII, VIII, IX, X, XI международных научных конференциях «Математическое и компьютерное моделирование» ( г. Омск, 2018, 2019, 2020, 2021, 2022, 2023 г.), на VIII международной конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» (г. Москва, 2019 г.), на III, IV, V, VI международных научно-технических конференциях молодых ученых «Инновационные материалы и технологии» (г. Минск, 2020, 2021, 2022, 2023 г.), на IV, V, VI междисциплинарных научных форумах с международным участием «Новые материалы и перспективные технологии» ( г. Москва, 2018, 2019, 2020 г.), на Международных конференциях «Modern Nanotechnologies and Nanophotonics for Science and Industry» (г. Владимир, 2019,2020, 2021 г.), на XVIII, XIX, XX, XXI,XXII Международных конференциях по фотонике и информационной оптике (г. Москва 2019, 2020, 2021, 2022, 2023 г.).

# **Глава 1. Литературный обзор: методы управляемого лазерного синтеза нанокластеров на твердой поверхности, уникальность их свойств и возможности их моделирования**

## **Введение**

Сегодня под нанокластерами понимают объекты, состоящие из сравнительно небольшого числа атомов или молекул, от единиц до сотен тысяч, имеющие наноразмерную структуру с размерами десятков или сотен нанометров. По своей природе кластер занимает промежуточное место между атомами или молекулами, с одной стороны, и макроскопическими частицами, с другой. Поэтому можно ожидать, что кластеры, состоящие из большого числа одинаковых атомов, будут проявлять свойства макроскопических частиц [1]. В связи с этим материалы, образованные нанокластерами, например, ансамбли нанокластеров на твердой поверхности с нано или микрометровыми размерами, образующие нанокластерные/островковые пленки, обладают уникальными физическими и химическими свойствами [2]. В связи с этим под нанокластерами на твердой поверхности будем подразумевать нанокластерные/островковые нанопленки.

В сфере современной нанотехнологии применяется широкий спектр методов получения нанокластерных/островковых нанопленок, которые можно классифицировать в соответствии со способом генерации дисперсных наносистем с целью последующего формирования наноструктурированных покрытий: Выделяют механические методы, например, газофазный синтез, измельчение и деформация, диспергирование и др. Также используются физические способы, такие как, например, распыление расплава, испарение с последующей конденсацией и т.д. Кроме указанных выше методов применяются химические способы, например, использование нанореакторов, реакции термического разложения и восстановления, окисления, кристаллизации из растворов и др. [2].

При использовании указанных методов нанокластерные структуры синтезируются в соответствии с принципами «снизу-вверх» и «сверху-вниз» [3]. При реализации первого принципа для создания тонкой нанокластерной пленки набираются отдельные атомы и молекулы, которые далее выстраиваются в необходимые наноструктуры. Во втором случае наночастицы формируются путем обработки макрообъекта или его структуры с постепенным уменьшением размеров до требуемых.

Зачастую состояние наночастиц, используемых для последующего формирования нанокластерной структуры на твердой поверхности, носит неравновесный метастабильный характер. Такое состояние создает некоторые сложности в исследовании их свойств, полезных для различных приложений, например, для производства стабильных наноустройств. И наоборот, наличие неравновесной системы позволяет реализовывать новый химический синтез, в результате которого становится возможным получить материалы с новыми свойствами [4].

Новые уникальные свойства материалов, полученных с использованием наночастиц, обусловлены размерами этих частиц, состоящих из множества атомов (например, десятков тысяч). Это явление связывают с понятием размерного эффекта [5].

Исследование свойств нанокластерных структур, обусловленных размерными эффектами, достаточно удобно производить, используя моделирование атомной динамики ансамблей нанокластеров, которое позволяет оценивать структурные, тепловые и электронные свойства наноструктуры в целом [6].

## 1.1 Нанокластерные/островковые структуры и актуальность их применения для различных приложений

При синтезе островковых нанокластерных структур с требуемыми свойствами проявляется необходимое условие, заключающееся в необходимости учета процессов, происходящих во время их образования. Наиболее лаконично и просто процессы, имеющие место во время образования нанокластерных/островковых пленок, рассматриваются в приближении атомистической теории роста Уолтона – Родина, чьи положения подтверждены в ходе многочисленных и подробных экспериментальных исследований [7,8].

Ее суть состоит в том, что процессе образования нанокластерной пленки выделяется ряд последовательных этапов: образование зародышевых структур (рисунок 1.1а), их рост и формирование нанокластеров/островков (рисунок 1.1б), увеличение площади нанокластеров и формирование каналов (рисунок 1.1в-е), организация сплошной пленки (рисунок 1.1ж) [9].



Рисунок 1.1 – Этапы формирования наноструктуры в соответствии с теорией Уолтона - Родина: образование зародышевых структур(а); рост зародышей с образованием нанокластеров/островков (в); увеличение площади нанокластеров, слияние в обширные структуры (в, г); объединение групп нанокластеров в каналы, появление связности топологии (д); формирование полностью связной наноструктуры с наличием дыр (е); образование сплошной пленки(ж) [9].

В соответствии с теорией Уолтона - Родина в качестве нанокластерных/островковых пленок можно рассматривать образцы, изображенные на рисунке 1.1б-д. С точки зрения топологии их можно классифицировать на образцы с разреженной структурой (например, рисунок 1.1а, б), обладающие несвязной топологией, в которых выделяется достаточно большое

количество мелких нанокластеров/островков, а также образцы с хорошо сформированной структурой, обладающие связной топологией, в который выделяются обширные нанокластеры/островки.

К нанокластерным структурам/островковым пленкам можно отнести наноматериалы с размерами порядка десятков и сотен нм [10,11], обладающие поверхностным сопротивлением в диапазоне  $10^6 \dots 10^{13}$  Ом/см.

Размерные эффекты, проявляющиеся в нанокластерных структурах, обуславливают уникальность их электрофизических свойств. Так, например, эффект размерного квантования энергетических уровней электрона проявляется в нанокластерах/островках с размерами от 2 до 10 нм, которые называют «квантовыми точками» [11]. В них поведение электрона может быть описано в приближении трехмерной потенциальной ямы [12]. Более того, квантовые точки образованные множеством атомов (порядка сотен тысяч), проявляют свои свойства как один атом. Например, идеальная квантовая точка обладает электронным спектром, сходным с одиночным атомом [13]. Также структуры, образованные квантовыми точками, позволяют реализовывать различные механизмы электропроводимости. Они могут быть получены в зависимости от расстояния между нанокластерами/островками. Так, например, термоэлектронный механизм преобладает при расстояниях между нанокластерами порядка 10 нм, а туннельный эффект переноса носителей [14, 15] реализуется, когда их величина порядка 2,5 нм. Наличие ярко проявляемых размерных эффектов, реализующих уникальные свойства, обуславливает актуальность применения нанокластерных/островковых структур. Так, например, в различных областях современной науки и техники, а также высокотехнологичной промышленности, широко применяются и имеют большое перспективное значение металлические и полупроводниковые нанокластерные/островковые наноструктуры. В настоящее время полупроводниковые квантовые точки, размещенные в органических и водных растворах, широко и активно используются как люминесцентные метки, в задачах сверхчувствительного детектирования биохимических реакций, а также для визуализации структуры разнотипных биологических объектов [16] в

молекулярной и клеточной биотехнологии, медицинской диагностике и терапии [17].

Квантовые точки также применимы в сфере современных оптоволоконных телекоммуникаций, требующих реализации с использованием малогабаритных высокоэффективных полупроводниковых лазеров [18] и оптических усилителей, которые работают в спектральной области минимальных потерь волноводов (1,25...1,65 мкм) [19, 20].

В связи с миниатюризацией современной микроэлектроники нанокластерные структуры применяются при создании микропроцессорных устройств и схем памяти с латеральными размерами менее 100 нм [21]. Кроме того, в современных нанотранзисторах, модулях памяти, устройствах с электрически стираемыми перепрограммируемыми постоянными запоминающими устройствами (ПЗУ) [22], реализованными с использованием квантовых точек, наиболее ярко проявляется преимущество эффектов размерного квантования энергетического спектра носителей заряда и туннелирование [23].

Нанокластеры на твердой поверхности могут применяться как подложки для направленного выращивания углеродных нанотрубок [24] для изготовления автоэммиттеров [25], микрорадиоламп, экономных приборов-индикаторов и осветительной техники, а также высокоскоростных ПЗУ [26]. Нанокластеры на твердой поверхности обладают яркими автоэмиссионными свойствами, которые применяются в наномеханических акселерометрах и гироскопах [27].

Применение нанотехнологий в электронике позволяют сделать переход от микроэлектроники к наноэлектронике. Оно дает множество преимуществ [28], которые выражаются в миниатюризации, высокой надежности и долговечности [29] элементной базы вычислительных систем, в существенном увеличении их производительности, пропускной способности каналов связи, информационной емкости, при значительном снижении уровня затрат электроэнергии [30]; в повышении чувствительности сенсорных цифровых устройств, а также в возможностях разработки новых электронных приборов с высоким коэффициентом полезного действия. Например, светодиоды, реализованные с

использованием островковых пленок, проявляют лучшую спектральную чистоту [31].

Кроме того, наноэлектроника позволяет значительно увеличить долю компонентов электроники в сферах медицины, биологии, экологии, химии, а также во всей промышленности в целом.

Современный научно-технический прогресс, определяемый в основном достижениями электроники, возможен при условии применения новых технологических идей. Наиболее подходящей базой для развития инновационной промышленности являются нанотехнологии, позволяющие разрабатывать новую элементную базу с размерами от десятков до единиц нанометров, для которой квантовые (туннелирование, размерное квантование) и интерференционные эффекты и др. существенно воздействуют на физические процессы на структурном уровне, влияя в целом на функционирование прибора на ее основе.

Разработка устройств, в которых отдельные молекулы [17] выполняют роли функциональных элементов, даст возможность применять биологические подходы к данным и информации.

Инновационные идеи, направления и технологические достижения вакуумной и твердотельной электроники (вакуумная наноэлектроника) [21, 32] дают новые возможности для разработки приборов с улучшенными характеристиками по мощности, температурной и радиационной устойчивости, расширению диапазона частот, а также эргономики.

Использование особенностей электропроводимости нанокластерных систем, когда при расстоянии между кластерами порядка 10 нм она носит туннельный характер, позволяет увеличить энергию электронов до такой степени, что они смогут производить эмиссию в вакуум.

Использование этой особенности позволяет разрабатывать катоды с эмиссией горячих электронов на основе нанокластерной пленки металла или полупроводника на диэлектрической подложке [21, 33] с требуемой геометрией, формируемой в ходе управляемого метода получения.

Предложенный подход позволяет добиться эффективности, выраженной в отношении тока эмиссии к току, протекающему через пленку, близкой к 100 % [21].

Кроме того исследование спиновых эффектов в наноструктурах позволило разработать такие устройства как спиновый транзистор и даже квантовый компьютер [34].

## **1.2 Лазерные методы получения нанокластерных структур**

В результате обзора литературных и патентных источников можно выделить три глобальные группы методов управляемого лазерного синтеза тонкопленочных нанокластерных/островковых наноструктур: методы физического осаждения (PVD), методы химического осаждения, термодиффузионные абляционные методы.

Для получения необходимой нанокластерной структуры на твердой поверхности методом физического осаждения (PVD) используется образец материала, подвергающийся тепловому воздействию, таким образом, что часть его переходит из твердого состояния в газообразное и распыляется в вакуумной камере с находящейся в ней подложкой с формируемым образцом. Форма источника наночастиц и параметры напыления [35] являются определяющими в процессе формирования образца. Указанный метод применим для любых материалов, металлов, их сплавов и соединений [8].

В случае управляемого получения наноструктур методом PVD напыление происходит, например, в вакууме или в газовой среде с учетом смещения. Управлять синтезом можно через интенсивность нагрева мишени и ее расположение относительно подложки с формируемым образцом. Кроме этого частичное перекрывание образца или систематическое перемещение его или мишени позволяет управлять и контролировать толщину формируемого слоя при

локальном осаждении. Для получения равномерных покрытий наночастицы помещают на специальные подставки, вращающиеся вокруг своей оси [35].

Метод PVD обладает своими преимуществами и недостатками. К преимуществам PVD [35] обычно относят относительно высокие скорости и низкие температуры осаждения (от 450 °С и ниже). Недостатки – ограничение зоны осаждения пленки «линией видимости осаждения», слабая адгезия покрытий, использование сложного и дорогостоящего оборудования, вследствие чего себестоимость и трудоемкость получения таких наноструктур достаточно высока [8].

Механизмы эпитаксиального роста позволяют получать высококачественные нанокластерные ансамбли и многослойные структуры полупроводников, металлов, диэлектриков, магнитных материалов, высокотемпературных сверхпроводников и многих других веществ, расположенные на монокристаллической подложке. Наиболее популярен метод молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) [35]. Он дает возможность синтезировать совершенные монокристаллические слои различных материалов в сверхвысоком вакууме.

Суть метода МЛЭ заключается в формировании тонких монокристаллических слоев на сильно нагретой монокристаллической подложке вследствие реакций между молекулярными или атомными пучками вещества и поверхностью подложки. За счет высокой температуры подложки происходят перемещения атомов по поверхности подложки с последующим расположением их в положениях, определяющих ориентацию роста нанокластеров в формируемом образце. По сравнению с другими технологиями МЛЭ имеет ряд недостатков, заключающихся в высокой стоимости исходных материалов и оборудования, а также невысокой производительности и сложности подбора параметров управления. Среди достоинств МЛЭ можно выделить возможность создания однородных химически чистых наноструктур, которые обладают малым количеством дефектов и относительно низкой температурой роста. Указанный

метод позволяет формировать многослойные структуры с резкими границами между слоями путем возможности резкого прерывания поступления на поверхность подложки молекулярных пучков с последующим возобновлением процесса.

Химический способ осаждения (CVD) [35] реализуется за счет химических реакций на/или около поверхности подложки, на которой создается нанопленка. В процессе химического осаждения в камеру с подложкой для формирования нанопленки, с высоким вакуумом ( $10^{-5}$ - $10^{-6}$  бар), при температуре около  $1100^{\circ}\text{C}$ , для поддержания химической реакции подается газовая смесь из кислорода, азота или различных углеводородов, которая позволяет формировать на подложке нанокластерные структуры из любого материала, например, из оксидов, нитридов или карбидов металлов.

Для управления, а также формирования равномерного покрытия применяется газовый душ. Наноструктуры, полученные CVD методом, обладают хорошими адгезивными свойствами, за счет активной диффузии, обусловленной высокой температурой. Для металлов с температурой отпуска, ниже  $1100^{\circ}\text{C}$  был разработан среднетемпературный метод CVD (MT-CVD) [35], в котором достигается температура не более  $800^{\circ}\text{C}$ . Метод химического осаждения из газовой фазы обладает рядом важных преимуществ: зона осаждения пленки не ограничивается так называемой «линией видимости осаждения»; с относительной легкостью и высокой скоростью возможно осаждать пленки большой толщины на сложных трехмерных поверхностях; оборудование для CVD осаждения обычно не требует сверхвысокого вакуума и может быть адаптировано для многих вариаций процесса, что является экономически более выгодным по сравнению с PVD осаждением. Метод химического осаждения из газовой фазы не является панацеей для всех типов покрытий. CVD метод имеет ряд недостатков: во-первых, необходимость использования высоких температур ( $600^{\circ}\text{C}$  и выше), когда многие материалы являются термически нестабильными; во-вторых, в процессе осаждения используются высокотоксичные химические вещества прекурсоры, находящиеся под большим давлением; в-третьих, побочные продукты реакции

при CVD осаждении могут обладать повышенной токсичностью, что приводит к необходимости их нейтрализации и утилизации [7].

Лазерные методы представляют собой одно из альтернативных и достаточно удобных решений для реализации управляемого синтеза нанокластерных/островковых пленок на различные поверхности [36]. Одним из популярных методов получения таких структур является лазерная абляция. Во время нее нанокластерная/островковая пленка на подложке формируется в процессе осаждения парогазового облака, содержащего наночастицы и/или нанокластеры [37], полученные путем разрушения твердого тела, минуя фазу плавления [37-39]. Процесс синтеза нанокластеров и их распределения по поверхности может быть контролируемым [39-41]. В этом случае управление начальными профилями плотности энергии лазерного излучения и давлением в парогазовом облаке позволяет получать образцы с требуемой структурой.

Управление параметрами лазерного излучения позволяет формировать генерационно-рекомбинационно деформационные и дефекто-деформационные неустойчивости, которые влияют на упорядоченность приповерхностных и объемных структур [42, 43] и используются для синтеза образцов с требуемой топологией.

Интенсивность падающего излучения, число и длительности лазерных импульсов, воздействующих на среду, также оказывают сильное влияние на топологические особенности сформированных наноструктур [39].

Нанокластерные структуры также можно получать, используя лазерную абляцию в жидкости. Группа этих методов основана на том, что при воздействии непрерывного лазерного излучения на поверхности полупроводникового образца могут образовываться ансамбли наночастиц с бимодальным распределением [42-44].

В качестве альтернативного метода может применяться осаждение нанокластеров по капельной технологии [45]. Это метод позволяет формировать требуемые структуры управляемым способом. Его управляемость связана с

зависимостью морфологии осажденного слоя от свойств жидкой фракции, частиц коллоида, температуры капли и подложки.

Лазерные методы характеризуются возможностью получать пленки сложных соединений. Лазерно-индуцированные нанокластерные структуры отличаются химической чистотой, с минимальным количеством примесей. Лазерные методы получения наноструктур достаточно простоты и технологичны, а их основная особенность заключается в возможности гибкого управления формой и размерами наноструктур, обусловленных свойствами среды и параметрами лазерного излучения.

### **1.3 Математическое моделирование как метод исследования структурных особенностей и электрофизических свойств нанокластерных/островковых пленок**

Математическое/компьютерное моделирование сегодня является «третьим методом познания» и широко применяется в различных областях науки и техники. Сегодня применение моделирования является золотым стандартом научного исследования и органично дополняет теоретические исследования и натурный эксперимент [46]. В связи со сложностью исследуемых сегодня систем, решения, принимаемые на основе численных/компьютерных экспериментов, существенно сокращают затраты ресурсов, необходимых для научного исследования [47]. Зачастую компьютерные реализации математических моделей делают возможной оценку и проведение исследований систем, натурные эксперименты для которых невозможны.

В настоящее время в задачах синтеза и исследования свойств наноструктур, используются дорогостоящие экспериментальные методы. Поэтому целесообразно применять методы математического/компьютерного моделирования. Они позволяют производить планирование эксперимента и предварительную оценку параметров установок, используемых в нем. Кроме

этого применение компьютерных моделей делает возможной оценку динамики формирования наноструктуры, а также прогнозирование состава, характеристик и свойств будущих образцов.

Например, экспериментальное изучение процессов транспортнодиффузионного переноса в нанокластерных структурах затруднено, а часто вообще невозможно. В этой связи компьютерное моделирование указанных процессов является эффективным методом исследования и прогнозирования в задачах синтеза материалов с требуемыми свойствами. На сегодняшний день универсальных методов для описания синтеза и свойств образцов нанокластерных структур на твердой поверхности практически не разработано. В связи с этим возникает задача разработки новых и применения уже созданных хорошо зарекомендовавших себя моделей и численных методов, адекватно отражающих протекающие процессы в исследуемых наноструктурах.

Математическое и компьютерное моделирование может быть использовано не только для описания образцов, полученных в результате экспериментов, но и для прогнозирования свойств новых материалов, с требуемыми характеристиками, обусловленными глубокой взаимосвязью структурных, механических, химических и электрических свойств в наноразмерной области. Указанные выше причины позволяют говорить об адекватности применения метода математического и компьютерного моделирования в задачах исследования нанокластерных структур на твердой поверхности.

### **1.3.1 Общие методы моделирования структурных особенностей наносистем**

Существует достаточно большое количество подходов для теоретических исследований наноматериалов. Их многообразие приведено на рисунке 1.2. Каждый из методов, показанных на рисунке 1.2, имеет свои достоинства и недостатки и применяется при решении определенных задач в области нанотехнологий в зависимости от масштаба системы [48].

Модели наносистем охватывают достаточно большой диапазон пространственных и временных масштабов (см. рисунок 1.2), поэтому одной из главнейших проблем моделирования является задача масштабирования.

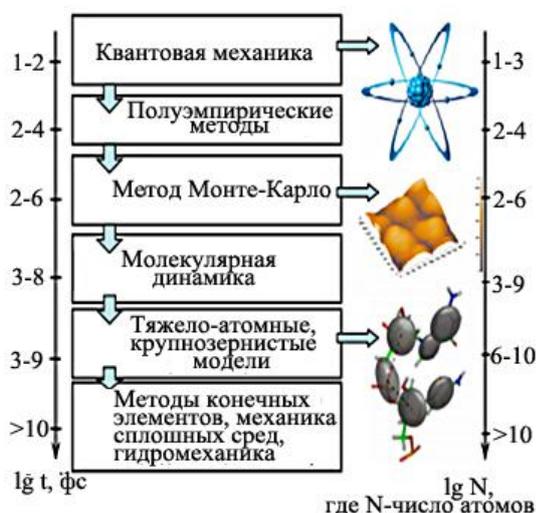


Рисунок 1.2 – Многообразие методов моделирования наносистем [48].

Величины наноразмерных объектов могут находиться в диапазоне от 1 до 100 нм и более (а число, образующих их частиц может варьироваться от  $10^2$  до  $10^{11}$ ). Вследствие указанных выше размеров для них значительно усиливается значение поверхностных эффектов и взаимодействий. Все это приводит к необходимости применения химических потенциалов [49] для описания взаимодействий в таких системах. Широкий временной диапазон масштабов (от  $10^{-15}$  с до 1 с) моделируемых систем требует учета временных флуктуаций частиц и неоднородности их распределения по размерам. Принципиальное значение имеет надежность моделирования и соотношение результатов различных моделей между собой, которые преимущественно связаны с разницей относительной точности параметров в различных временных и пространственных масштабах [66]. Кроме этого, динамика многих процессов в наноструктурах реализуется в малоизученной области явлений, в пограничных условиях классической и квантовой механики.

Применительно к наноразмерным системам использование компьютерного моделирования имеет принципиальные трудности [50]. С одной стороны, они не обладают дальним порядком в связи с чем невозможно уменьшить число

независимых степеней свободы системы. С другой стороны, в случае ближнего порядка становится невозможно определить все функциональные свойства наноматериалов. Также для моделирования макрообъектов на атомном уровне существуют технические трудности, связанные с возможностью реализации таких моделей. Так, например, в кубе вещества со стороной 100 нм содержится примерно  $10^7$  атомов. Прямое моделирование таких систем в приближении молекулярной динамики и, тем более, квантовой механики потребует значительных затрат вычислительных ресурсов, например, процессорного времени и объема памяти. Указанная проблема может быть решена применением современных суперкомпьютерных технологий и облачных вычислений, но в этом случае также возникают трудности, заключающиеся в необходимости разработки специальных программных средств, а также в стоимости моделирования.

Если рассматривать применяемые модели в соответствии с увеличением характерного масштаба, то поведение систем из нескольких десятков и сотен атомов с характерным масштабом от 0,1 до 10 нм (атомно-молекулярный уровень) достаточно адекватно отображается в рамках моделей квантовой механики на первых принципах [51]. В указанном приближении модель основана на решении уравнения Шрёдингера для атомных систем (для ядер и электронов):

$$\hat{H}\Psi(r, R) = E\Psi(r, R), \quad (1.1)$$

где  $\Psi(r, R)$ ,  $E\Psi(r, R)$  - собственные значения волновой функции и энергии соответственно,  $r$  и  $R$  - координаты электронов и ядер соответственно,  $\hat{H}$  - гамильтониан многочастичной системы, который можно определить как:

$$\hat{H} = T_э(r) + T_я(R) + V_ээ(r) + V_эя(r, R) + V_яя(R), \quad (1.2)$$

где  $T_э(r)$ ,  $T_я(R)$  - кинетическая энергия электронов и ядер соответственно;  $V_ээ(r)$ ,  $V_эя(r, R)$ ,  $V_яя(R)$  - потенциальные энергии взаимодействия между электронами, электронами и ядрами и между ядрами соответственно [52].

Для систем, с большим характерным масштабом 10 – 100 нм, для которого уже проявляются размерные эффекты, для моделирования используют приближения в рамках сильной связи или полуэмпирические приближения,

основанные на квантовой механике совместно с молекулярной динамикой. Например, это приближение Борна-Оппенгеймера, метод Кара-Парривелло, метод псевдопотенциалов и т.д. [53]. Для полуэмпирических моделей гамильтониан квантовой системы параметризуется, что делает достаточно эффективными расчеты в таком приближении. К сожалению, моделирование сложных систем, состоящих из множества атомов, исходя из приближения первых принципов, затруднительно вследствие значительных затрат по вычислительным мощностям, по времени расчета и по памяти, необходимой для хранения промежуточных результатов.

Для наносистем с размерами, превосходящими 12 нм и числом атомов более  $10^5$  (0.1 – 100 мкм), на уровне микроструктуры удобно применять методы молекулярной динамики (МД) [54]. Так сегодня метод МД широко используется в задачах моделирования атомных кластерных структур [55]. Указанный метод требует нахождения потенциала межатомного взаимодействия, который будет связывать уровни атомной структуры и молекулярной динамики.

В МД каждая частица  $i$  представляется или материальной точкой с массой  $m_i$ , или как твердая сфера без учета внутренней структуры. Частицы взаимодействуют друг с другом, проявляя свои потенциальные силы, определяемые в соответствии с потенциальной функцией  $U(r_i)$  при сближении на расстояние  $r_i$  друг к другу. Квантовомеханические расчеты позволяют определить значение  $U(r_i)$ . Обычно оно рассматривается как парный потенциал в уравнении молекулярной динамики в рамках уравнений Ньютона:

$$m_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial t^2} = - \frac{\partial U(r_i)}{\partial r_i}. \quad (1.3)$$

Не менее популярен аналог МД – метод Монте – Карло (М-К) [56], который определяет каждое следующее состояние системы в рамках случайных процессов. Метод М-К реализует относительно большие движения системы и определяет энергетически возможные состояния с учетом заданной температуры. Он дает возможность моментально преодолевать энергетические барьеры. При этом рассматривают только соотношения энергий системы до и после преодоления

барьера. Метод М-К удобнее МД в случае описания систем, требующих оценки термодинамических характеристик составляющих их молекул. Сегодня существует множество алгоритмов и механизмов, позволяющих описывать наносистемы в приближении М-К. Одним из популярных и удобных механизмов реализации метода М-К является алгоритм Метрополиса. В нем каждое следующее состояние системы формируется путем определения флуктуаций. Новое состояние системы реализуется с вероятностью  $p$ , определяемой как:

$$p(\Delta E) = \min \left[ 1, \exp \left( -\frac{\Delta E}{k_b T} \right) \right], \quad (1.4)$$

где  $\Delta E$  - разность энергий новой и старой конформаций,  $T$  – температура,  $k_b$  - постоянная Больцмана.

Другая модификация метода М-К, называемая кинетическим методом Монте-Карло[57] (КМ-К), применяется для описания неравновесных состояний на основе уравнения Ланжевена, с учетом скоростей переходов. Он также применим для исследования достаточно продолжительных по времени процессов, например, процессов диффузии и роста наноструктур, для которых описание методом МД требует значительных вычислительных затрат.

Кроме этого КМ-К вместе с уравнением Шредингера позволяет моделировать кванты механической энергии, волновые функции, а также электронную структуру.

Метод М-К широко используется для моделирования роста и морфологии структуры нанокластеров, например, однокомпонентных нановискеров [58]. В наноструктурированных диэлектриках он применяется для описания транспорта и эмиссии электронов. При моделировании нанокристаллических структур метод М-К позволяет описать рост кристаллов, а также процессы, возникающие во время него, например, адсорбцию-десорбцию, различные поверхностные реакции переноса веществ и т.д.

При использовании методов МД и М-К следует иметь в виду, то, что результаты моделирования приближенные и их адекватность во-многом обуславливается свойствами описываемой системы.

Моделирование объемных систем, находящихся на мезоскопическом уровне, реализуется через механизмы усреднения характеристик материала по объему, с учетом их флуктуаций. Результаты мезоскопического приближения могут быть использованы для описания параметров моделей макроскопического уровня.

К числу моделей мезоскопического уровня можно отнести модель виртуального атомного кластера (ВАК). В рамках указанной модели кластер рассматривается с заданной плотностью энергии, которая определяется минимальным набором образующих его атомов.

На макроскопическом уровне применяют модели, основанные на уравнениях механики сплошных сред, совмещенных с соотношениями, описывающими особенности моделируемой системы, решаемые различными численными методами.

### **1.3.2 Модели нанокластерных систем**

Исследование структурных особенностей и обусловленных ими свойств (размерных эффектов) нанокластерных систем удобно производить путем моделирования ансамбля нанокластеров, отображающих изменение атомной динамики, тепловых, структурных и электронных свойств.

Среди моделей можно выделить следующие [57]:

1. Модели атомной подвижности;
2. Структурные модели кластера;
3. Электронные оболочечные модели;
4. Модели самоорганизующихся кластеров (фрактальные модели).

В моделях атомной подвижности имеется возможность находить наиболее важные параметры движения, такие как среднеквадратичное смещение атомов в кластере и коэффициент диффузии с учетом частотных характеристик. Структурные модели кластера, например, приближение плотной атомной

упаковки позволяет предсказывать число атомов в кластере с плотной упаковкой, подобной заданной фигуре (например, икосаэдру), а также оценивать стабильность таких структур на основе «магических чисел» [58].

Электронная оболочечная модель позволяет строить кластерную модель по принципу расположения нуклонов в ядре, определять энергию связи и свободную энергию для сферического кластера [59].

Модели самоорганизующихся кластеров (фрактальные модели) [60] позволяют описывать самосборку наноструктуры при агрегации кластеров, когда наблюдается уменьшение средней плотности вещества в объеме, ограниченном кластером [61]. Наиболее популярны две модели формирования фрактальных кластеров: модель диффузионно-ограниченной агрегации (DLA) и кластер-кластерной агрегации (CCA) [62].

#### **1.4 Модели электропроводимости нанокластерных/островковых пленок**

Одним из факторов, оказывающих заметное влияние на электропроводимость нанокластерных/островковых пленок, является топология их структуры. Действительно, характер расположения, расстояние, сформированность и размеры отдельных нанокластеров образуют топологию их ансамбля на твердой поверхности. Таким образом, топология структуры нанокластеров задает тот или иной тип электропроводимости, для описания которого выделяют три вида моделей:

1) Диэлектрическая модель [63] достаточно адекватно описывает электрические свойства разреженных структур, в которых имеется система из несвязанных друг с другом нанокластеров/островков, проявляющих очень слабую электропроводимость, сильно зависящую от расстояния между ними.

2) Перколяционная модель [64] предполагает существование непрерывного пути электропроводимости между точками приложения напряжения. Сопротивление наноструктур, которые возможно описывать в перколяционном

приближении, имеет меньшую величину по сравнению с образцами с первым типом электропроводимости. Вследствие значительного рассеяния электронов на неоднородностях отдельных нанокластеров, а также их границах, зернах и т.д. сопротивление металлических нанокластерных структур выше, чем у сплошной пленки. Для полупроводниковых наноструктур наблюдается обратная зависимость.

3) Металлическая модель электропроводимости применима для металлических нанокластерных/островковых пленок со структурой достаточно близкой к сплошной, а также полупроводниковым нанокомпозитам, легированным металлами при наличии акцепторной проводимости [65].

Указанные модели могут описывать электрические свойства пленок со связной топологией в случае перколяционного и металлического типа. Для несвязных образцов применима диэлектрическая модель.

В диэлектрическом подходе электропроводимость реализуется через механизм туннельного переноса электронов через вакуумный промежуток между нанокластерами/островками [66].

Действительно, при заданной температуре в металлической нанопленке под действием электрического поля происходит направленное туннелирование электронов с отрицательно заряженных гранул на нейтральные и с нейтральных – на положительно заряженные. Увеличение температуры позволяет произвести активацию проводимости, характеризующуюся в увеличении количества заряженных гранул.

Применительно к полупроводниковым образцам роль отрицательно и положительно заряженных гранул выполняют электроны и дырки, количество которых также зависит от температуры и позволяет говорить о сходном термоактивационном характере проводимости [67].

Особенно важным для различных приложений является низкотемпературный термоактивационный механизм проводимости, представленный прыжковой проводимостью, под которой подразумевается туннелирование электронов между соседними центрами локализации.

Приближение прыжковой проводимости позволяет оценивать усредненную проводимость системы или коэффициент диффузии. Электропроводимость в таких системах реализуется через описание случайных блужданий электронов по случайно расположенным локализованным примесным центрам [68]. Для оценки проводимости применяется полуфеноменологический метод, на основе случайной сетки сопротивлений Миллера–Абрахамса [69, 70] и теории перколяции [71]. Также популярен микроскопический подход, заключающийся в описании блуждания частицы по случайным узлам.

В дальнейшем базовая модель туннельного переноса была усовершенствована. В ней стало учитываться понижение потенциального барьера, вызванное поляризационным взаимодействием между гранулами и туннелирующим электроном. Также, появилась возможность оценить влияние подложки на проводимость, через описание туннелирования электрона по диэлектрической подложке благодаря термоактивации.

Указанное приближение позволяет добиться хорошей точности моделирования для нанопленок из мелких эллипсоидов, с размерами порядка 4 нм и несколько меньшими средними промежутками между ними [72].

В случае расстояния между нанокластерами более 10 нм моделирование предпочтительнее проводить с учетом влияния подложки.

Кроме того, в дальнейших усовершенствованиях базовой модели учитывалось влияние размеров и форм гранул, когда перенос заряда с большей заряженной на меньшую нейтральную гранулу реализуется за счет термоактивации.

Нанокластерные ансамбли, в которых существуют системы удлинённых взаимосвязанных структур, обладают меньшим сопротивлением, чем разреженные образцы. Их электропроводимость описывается перколяционными моделями, основанными либо на решетчатых приближениях, либо на случайных, позволяющих учесть распределение структур на подложке. Такой учет реализуется введением в модель параметра  $p$ , степени покрытия, характеризующего долю занятой поверхности подложки. Его пороговое значение

$p_c$ , называемое порог перколяции, определяет наличие непрерывной дорожки проводимости электронов. Так, при  $p > p_c$  в нанокластерной структуре существует непрерывная дорожка проводимости, и сопротивление образца можно описать как

$$R \sim (p - p_c)^{-\mu}, \quad (1.5)$$

где  $\mu$  – показатель проводимости, зависящий от размерности системы [73]. В перколяционной модели есть возможность перейти от степени покрытия поверхности  $p$  к геометрическому параметру наноструктуры, к средней толщине  $\bar{t}$ . Тогда

$$(p - p_c)^{-\mu} \sim (\bar{t} - \bar{t}_c)^{-\mu}, \quad (1.6)$$

где  $\bar{t}_c$  – критическая толщина пленки.

### **1.5 Современное состояние исследований электропроводимости нанокластерных/островковых пленок**

На сегодняшний день существует множество работ, в которых изучаются электрофизические свойства полупроводниковых наноструктур. В [74] отмечается, что электропроводимость пленок с диэлектрическим типом связана с термоактивационным туннелированием, и в образцах с металлическим характером подчиняется закону Ома.

В работе [75] обосновывалась экспоненциальная зависимость электропроводимости от температуры, полученная с использованием прыжковой модели с переменной длиной прыжка.

В [76] рассмотрены результаты экспериментального исследования явлений электропроводимости в образцах теллурида свинца (PbTe), анализ которых проводился на основе прыжкового механизма, показавшего ее экспоненциальный характер и зависимость от температуры. Также были определены условия перехода Мотта от диэлектрической к металлической электропроводимости.

В [77] показано, что у пленок с удельным сопротивлением  $0,03\text{—}15 \text{ Ом} \cdot \text{см}$  при комнатной температуре электропроводимость растет с повышением температуры и имеет две компоненты — термоактивационную и постоянную, предположительно туннельного характера.

В [78] исследована электропроводимость тонких пленок нанокристаллов CdSe n-типа в зависимости от температуры и электрического поля, показавшая экспоненциальный характер. Полное поведение такой системы хорошо описывалось прыжковым механизмом с переменной длиной прыжка.

В [79,80] изучена электропроводимость образца с перколяционным типом электропроводимости. Благодаря исследованию топологической структуры перколяционного кластера в приближении Шкловского–деЖена была выявлена зависимость модели решетчатой проводимости от порога перколяции с учетом изменения степени покрытия. Также была рассмотрена скейлинговая зависимость электропроводимости для различных решеток.

В [81] исследованы электронно-микроскопические 3D и 2D изображения, с выделенными каналами протекания заряда по неоднородной наноструктуре, с элементами величиной  $5\text{—}20 \text{ нм}$  в межслоевой области  $\text{Te}(1) - \text{Te}(1)$ . Проведенное моделирование структуры в рамках перколяционного кластерного подхода соответствовало распределению наночастиц на плоскости, полученному в эксперименте.

### **Заключение и выводы по главе 1**

Островковые/нанокластерные пленки актуальны, перспективны и находят широкое применение в современных устройствах электроники и фотоники благодаря своим уникальным электрофизическим свойствам, зависящим от их топологических особенностей.

Существует ряд методов, позволяющих синтезировать наноструктуры, причем использование стандартных методов зачастую достаточно трудоемко и требует больших финансовых затрат, а также и не всегда позволяет получать

хорошо сформированные образцы с требуемыми характеристиками. Этого можно избежать, применяя лазерные методы, которые обладают хорошей управляемостью через параметры лазерного излучения и позволяют получать достаточно качественные наноструктуры. Для предварительной оценки параметров лазерного синтеза и топологических особенностей, обуславливающих электрофизические свойства образцов, применим аппарат математического моделирования. Такие модели существуют, но реализованы для достаточно узкого спектра образцов и условий получения, поэтому возникает необходимость в разработке моделей более широкого спектра, учитывающих параметры лазерного синтеза, оказывающих влияние на структуру образцов и на их электрофизические свойства, обусловленные их структурными особенностями. Разработка достаточно адекватных моделей невозможна без исследования экспериментальных условий получения образцов, а также оценки их топологических и обусловленных ими электрофизических особенностей, которым и посвящены следующие оригинальные главы.

## **Глава 2. Лазерные методы получения нанокластеров на твердой поверхности**

### **Введение**

В данной главе рассмотрено лазерно-индуцированное получение нанокластерных/островковых пленок, образованных из наноразмерных фрактальных кластеров полупроводников, которые образуют особый класс материалов с уникальными свойствами. Такое исследование находится в сфере популярных и перспективных направлений современных нанотехнологий, обширно представленных в научной литературе (например, [1-5, 13,16-18, 21,23, 25, 27-35]). Акцент в данной главе сделан на методе синтеза подобных кластерных структур, а также анализе их топологических особенностей. Предложенные методы так же несут прикладное значение в аспекте разработке новых физических принципов создания устройств нанофотоники.

Основные материалы данной главы опубликованы в наших работах [82, 83, 90, 102, 109,110].

### **2.1 Лазерно-индуцированные методы получения нанокластерных структур различной топологии на твердой поверхности**

Лазерные методы являются удобным способом получения нанокластерных структур на твердой поверхности (см. главу 1). В связи с этим метод лазерной наномодификации был применен для синтеза образцов полупроводниковых нанокластеров теллурида свинца (PbTe) на твердой поверхности.

Для твердофазной модификации использовались полупроводниковые пленки PbTe толщиной 1,6мкм. Они были синтезированы методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках (111) Si с тонким буферным слоем фторида

кальция толщиной 2 нм. Слои PbTe имели монокристаллическую структуру с ориентацией (111) вдоль оси роста. Поверхность пленок характеризовалась блочным, ламелиобразным строением с латеральным размером блоков 1-3 мкм и перепадом высот рельефа 10-20 нм.

Эпитаксиальные структуры PbTe со стороны пленки теллурида свинца подвергались воздействию непрерывного излучения YAG:Nd<sup>3+</sup> – лазера с длиной волны 1,06 мкм с длиной оптического поглощения  $h_{abs} \sim 10^{-5}$  см, мощность которого варьировалась от 1 до 15 Вт, что соответствовало интервалу интенсивности ( $I_{л}$ )  $10^4 - 10^6$  Вт/см<sup>2</sup>. Лазерный пучок имел гауссов профиль, с диаметром, варьировавшимся от 30 до 100 мкм. Сканирование образцов в процессе облучения производилось на пошаговом координатном столике, перемещавшемся со скоростью 40-160 мкм/с [82]. На рисунке 2.1 изображена описанная выше схема эксперимента по лазерной модификации поверхности слоя PbTe.

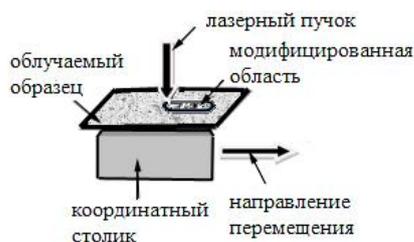


Рисунок 2.1 – Схема эксперимента по лазерной модификации поверхности слоя PbTe.

Режим твердофазной лазерной наномодификации, с использованием которого синтезировались полупроводниковые образцы PbTe, реализуется в достаточно узком промежутке значений мощности лазерного излучения.

Для определения границ интервала мощностей лазерного излучения производился анализ поверхности полученных образцов при варьировании ее значений от 1 до 10 В, который позволил сделать заключение о том, что при значениях менее 5 Вт поверхность практически не менялась, а значит модификация поверхности образца не производилась (рисунок 2.2а), а при значениях выше 10 В – наблюдался оплавленный рельеф (рисунок 2.2б).

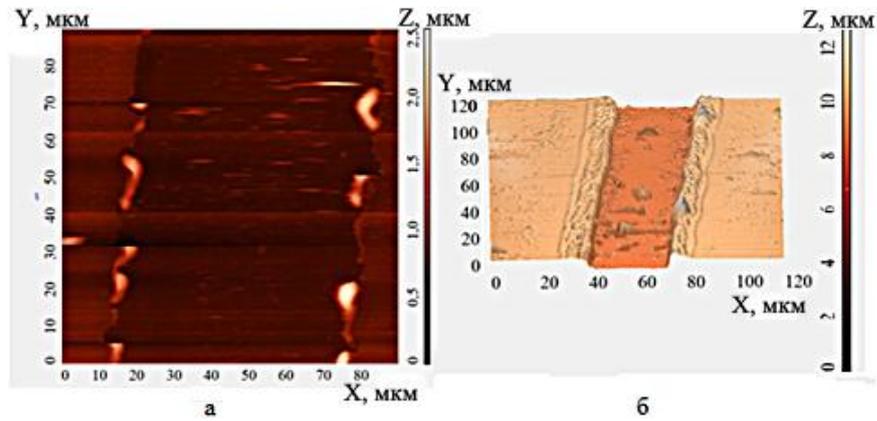


Рисунок 2.2 – АСМ-изображение нанокластерной поверхности РbТе после облучения непрерывным лазерным излучением мощностью 5 Вт (а), 12 Вт (б).

Расчеты показали, что наибольший охват области нагрева и интенсивность распространения тепла достигалась при скорости сканирования 80 мкм/с, для диаметров пучков 30-100 мкм.

На рисунке 2.3 приведены изображения поверхности полупроводниковых образцов теллурида свинца (РbТе), полученных с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) Интегра-Аура после лазерного облучения пучком диаметром  $d_{\text{п}}=50$  мкм. Образец располагался на координатном столике, перемещавшемся пошагово со скоростью  $v_{\text{ск}}=40$  мкм/с, так что время воздействия в одной точке оценивалось как  $\tau_{\text{irr}}=d_{\text{п}}/v_{\text{ск}}\sim 0,625$  с [83]. Модифицированная поверхность синтезировалась в левом нижнем углу, в правом верхнем углу располагалась исходная поверхность. Размер наночастиц убывал с приближением к границе двух зон – облученной и необлученной областей (рисунки 2.3 и 2.4).

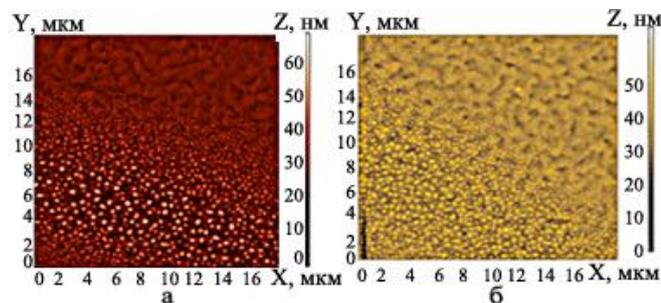


Рисунок 2.3 – АСМ-изображение нанокластерной поверхности РbТе после воздействия непрерывным лазерным излучением мощностью 7 Вт (а), 8Вт (б).

В результате лазерного облучения в зоне воздействия лазерного пучка образовывался ансамбль наночастиц (рисунок 2.3) с бимодальной функцией

распределения по латеральным размерам  $\Lambda$ , обладающей двумя ярко выраженными максимумами при  $\Lambda=100$  нм и  $\Lambda=300$  нм, определенными с погрешностью 10 нм относительно среднего размера. При мощности лазерного излучения 8 Вт плотность числа наночастиц (наноточек) составляла  $n_{\text{dot}}=5,25 \cdot 10^8$  см<sup>-2</sup>. Высота поверхностных шероховатостей, образованных наночастицами, находилась в диапазоне 30-60 нм. Средний латеральный размер наноструктур уменьшался с расстоянием от центра лазерного пятна (рисунок 2.4).

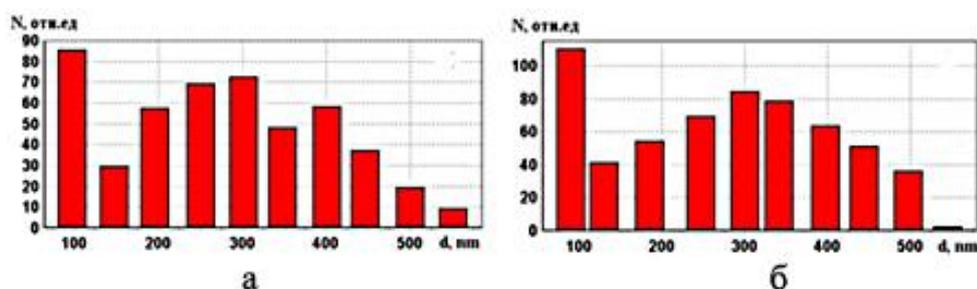


Рисунок 2.4 – Экспериментальная нормированная гистограмма распределения латеральных размеров наночастиц. Для ее построения использовался пакет Image Analysis поставляемый с микроскопом Ntegra Aura. Мощность излучения 7 Вт (а) мощность излучения 8 Вт (б).

В пространственном распределении наночастиц имеется скрытый квазигексагональный порядок, выявляемый фурье-преобразованием АСМ-изображения поверхности (рисунок 2.5).

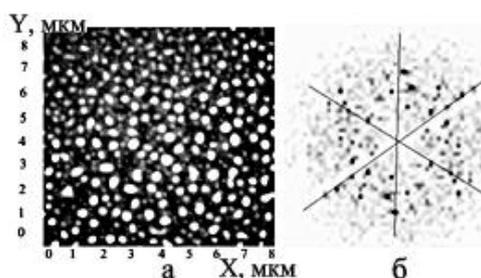


Рисунок 2.5 – Фрагмент облученной поверхности с ансамблем наночастиц (а), соответствующий Фурье-спектр (б).

Экспериментально было установлено, что эффект образования наночастиц с бимодальным распределением наблюдался в узком диапазоне мощности (6-10 Вт) для диаметров пучков 30-100 мкм, и не зависел от толщины пленки.

Варьирование мощности излучения в диапазоне от 6 Вт до 10 Вт слабо изменяло относительную интенсивность двух пиков, оставляя неизменными их положения и ширины (рисунок 2.6).

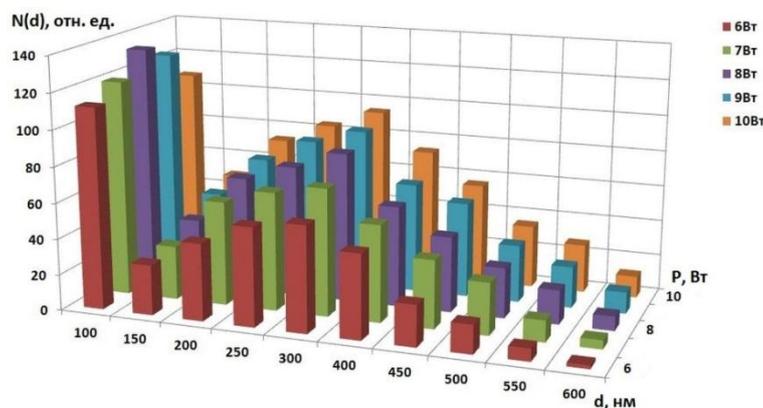


Рисунок 2.6 – Гистограммы распределения частиц в области лазерного воздействия. Погрешность составляет порядка 10 нм. Диаметр лазерного пучка 30 мкм, скорость сканирования 80 мкм/с.

Увеличение интенсивности лазерного излучения приводило к увеличению плотности числа формирующихся частиц в области модификации поверхности (рисунок 2.7). Полученная зависимость была аппроксимирована логарифмической функцией:

$$n(P) = (0,4091 \ln(P) + 4,8069) * 10^8, \quad (2.1)$$

полученной с использованием метода наименьших квадратов, реализованного в среде MATLAB. Мощность  $P$  оценивалась как

$$P = I_L \pi \frac{d_{\Pi}^2}{4}. \quad (2.2)$$

На рисунке 2.7а приведена полученная зависимость  $n(P)$  для мощностей излучения, соответствующих экспериментальным при  $I_L = 10^4$  Вт/см<sup>2</sup>. На рисунке 2.7б приведена зависимость  $n(d_n)$  для различных значений интенсивности.

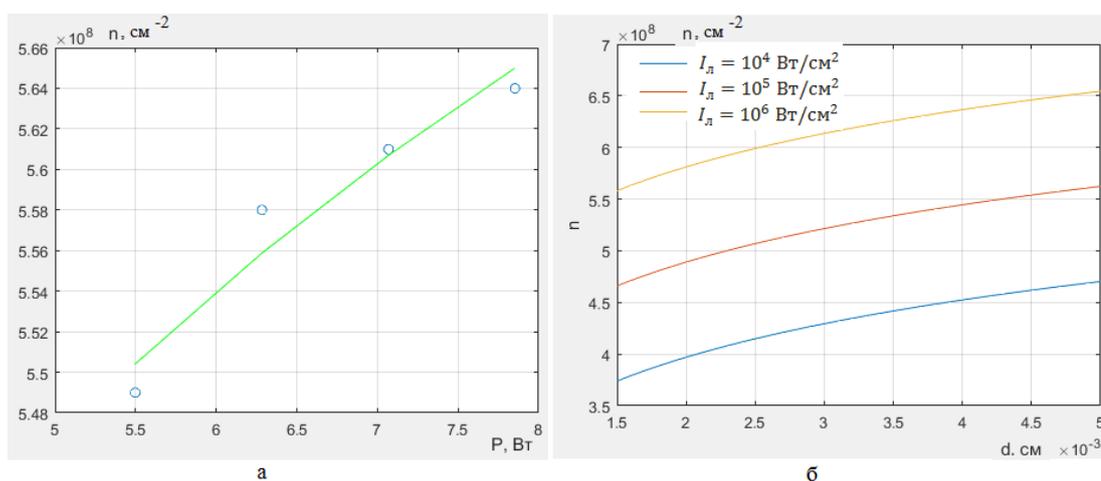


Рисунок 2.7 – Поверхностная плотность наночастиц в области лазерной модификации ( $n$ ): зависимость от мощности лазерного излучения ( $P$ ) для пучка диаметром 100 мкм: овалы – экспериментальные измерения; линия – аппроксимация по методу наименьших квадратов с максимальной погрешностью  $0,24 \times 10^7 \text{ см}^{-2}$  (а), зависимость от диаметра пучка от 30 до 100 мкм при различных величинах интенсивности (б).

Детальный анализ АСМ-изображений нанокластерной поверхности PbTe (например, на рисунке 2.3), показал наличие плавной границы между обработанной лазером и необлученной зонами. Кроме этого под сгенерированной системой нанокластеров проявляется рельеф поверхности исходной эпитаксиальной пленки. Все это позволяет говорить о твердофазной модификации исходной эпитаксиальной пленки PbTe.

В общем случае образование системы кластеров из сплошного образца обычно описывается в рамках уравнения Фоккера-Планка, которое может быть сведено к уравнению диффузии [84].

Образование ансамбля нанокластеров на поверхности эпитаксиальной пленки может быть объяснено в рамках модели термодиффузии точечных дефектов/вакансий (дефектно-деформационная (ДД) теория), когда концентрация дефектов быстро подстраивается под распределение деформации в вертикальном направлении [43] (рисунок 2.8).



Рисунок 2.8 – Схема формирования ансамбля нанокластеров на поверхности эпитаксиальной пленки в рамках ДД- теории.

Воздействие лазерного излучения позволяет добиться появления дефектно обогащенного слоя около поверхности полупроводниковой эпитаксиальной пленки. Его высоту [85] можно оценить как:

$$l_d = \sqrt{D_d \tau_{irr}}, (2.3)$$

где  $D_d$  – коэффициент диффузии дефекта.

Коэффициент диффузии дефектов  $D_d$  [86] можно определить через выражение:

$$D_d = \frac{1}{6} \Delta^2 \Gamma, (2.4)$$

где  $\Delta$  – длина скачка дефекта (постоянная кристаллической решетки),  $\Gamma$  – частота скачков дефектов по кристаллической решетке. Коэффициент диффузии дефектов зависит от температуры через длину скачка дефекта. Так зависимость изменения периода кристаллической решетки от температуры [87] имеет следующий вид

$$d\Delta(\Delta T) = \frac{1}{2} \left( \frac{q^2}{\frac{q^2}{\Delta} - c_v^1 \Delta T 2\pi \epsilon_0} - \Delta \right), (2.5)$$

где  $q = 1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл – элементарный заряд, равный по модулю заряду электрона;  $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$  Кл<sup>2</sup>/Н·м<sup>2</sup> – электрическая постоянная;  $c_v^1 = 4,12 \cdot 10^{-23}$  Дж/К – теплоемкость атома при постоянном объеме.

В условиях лазерного нагрева теллурида свинца при  $\Delta T = 773$  K частота скачка становится  $\Gamma \sim 10^8$  Hz,  $\Delta \sim 0,656$  нм и  $D_d = 7,12 \cdot 10^{-11}$  см<sup>2</sup>/с. Тогда с учетом  $\tau_{irr} = 0,625$  можно оценить  $l_d$  как  $6,67 \cdot 10^{-6}$  см.

Вследствие воздействия лазерного излучения, повышающего температуру, вызывающего механические напряжения и рекомбинационно-стимулированную диффузию, создаются сильно неравновесные условия, при которых будет происходить достаточно активный выход дефектов на поверхность. В случае, когда концентрация дефектов превосходит критическое значение, приповерхностный слой становится неустойчивым и переходит от плоской геометрии к периодически изогнутой поверхности, которая характеризуется сосредоточением вакансий во впадинах и междоузлий на холмах. Таким образом, на поверхности эпитаксиальной пленки формируется ДД-структура. Она представляется суперпозицией решеток нормального смещения поверхности, спаренных с решетками концентрации поверхностных дефектов. Такая структура способствует тому, что вещество из впадин со скоплениями вакансий переносится с большей скоростью, чем с холмов со скоплениями междоузлий. Такой процесс формирует гексагональную ячеистую структуру системы нанокластеров на твердой поверхности. Для такой системы функция распределения по размерам идентична функции распределения по размерам с бимодальным инкрементом для ДД-структуры [43].

Уменьшение длины диффузии дефектов при условии гауссова распределения температуры позволяет объяснить уменьшение среднего латерального размера полученных наноструктур по мере удаления от центра лазерного пучка.

## **2.2 Анализ и классификация нанокластерных структур, осажденных на твердую поверхность**

Более детально изображения, полученные в ходе экспериментов, исследовались и обрабатывались с использованием Image Processing Toolbox научной среды MATLAB [88], возможности которого позволили произвести выделение и группировку нанокластеров/островков по высоте и оценить

распределение их площадей.

Для выделения нанокластеров/островков исходное изображение бинаризировалось с использованием функции `im2bw`. Поиск объектов реализовывался с помощью функции `bwlabel` с величиной связности, равной 8. Такая ее величина позволила проигнорировать небольшие незначащие артефакты на изображении. Площадь объектов в пикселях ( $S$ ) вычислялась с помощью функции `regionprops` [89]. Латеральный размер объекта в мкм ( $L$ ) оценивался как:

$$L = d\sqrt{S}, \quad [90] \quad (2.6)$$

где  $d$  – количество пикселей на 1 мкм.

Использование возможностей упомянутого выше инструментария позволило провести выделение нанокластеров по размерам для АСМ изображений нанокластерных/островковых пленок (рисунок 2.9).

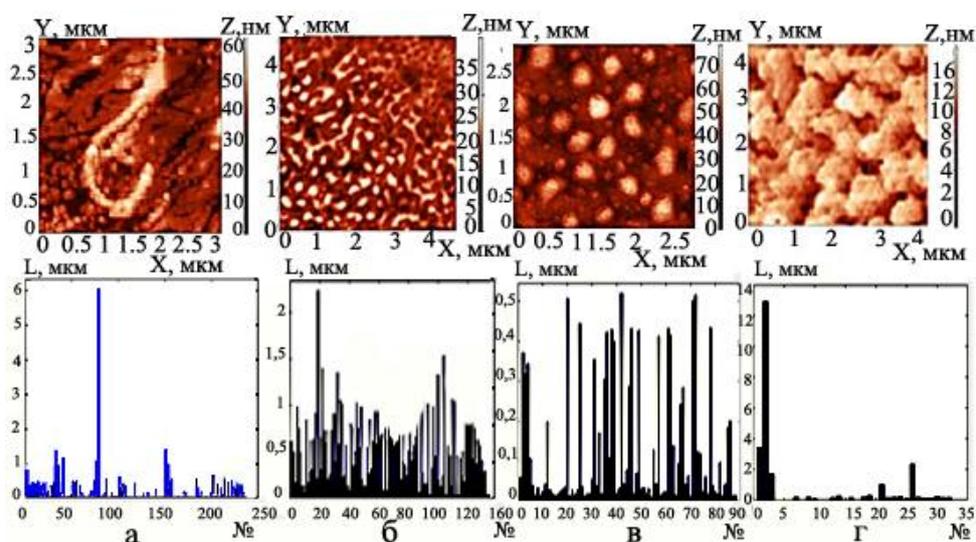


Рисунок 2.9 – АСМ-изображения различных модификаций осажденных на подложке с эпитаксиальной пленкой кластерных структур PbTe (сверху) и соответствующие им столбцовые диаграммы размеров образующих их объектов (снизу): от 38,21 нм до 6,05 мкм (а), от 30 нм до 2,23 мкм (б), от 9,08 нм до 0,52 мкм (в), появление гранулированной/лабиринтной структуры с размерами объектов от 25,43 нм до 12,91 мкм (г).

Исходя из литературных источников [91-93], в которых имеется описание структуры и условий синтеза образцов, полученных схожими методами, можно

предположить, что полупроводниковые структуры, полученные нами, обладают фрактальной структурой.

Для подтверждения этого предположения была произведена оценка фрактальной размерности образцов полупроводниковых нанокластерных/островковых пленок.

Существует множество методов оценки фрактальной размерности ( $D$ ) для АСМ изображений, но наиболее удобным, на наш взгляд, является использование приближения размерности Минковского [94]:

$$D = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\varepsilon)}{\log 1/\varepsilon} = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\varepsilon)}{\log \varepsilon} \quad (2.7),$$

где  $N(\varepsilon)$  минимальное число множеств диаметра  $\varepsilon$ , которыми можно покрыть исходное множество.

Таким образом, обозначим  $D_{bc}$  как приближенное значение размерности Минковского, и запишем ее определение, убрав предел, поскольку он будет учитываться как уменьшение размера ячеек на каждой итерации расчета:

$$D_{bc} = \frac{\log N(\varepsilon)}{\log \frac{1}{\varepsilon}} \sim D_{bc} \log \frac{1}{\varepsilon} = \log N(\varepsilon) \sim D_{bc} \log \frac{1}{\varepsilon} - \log N(\varepsilon) = 0 \quad (2.8).$$

Фиксируя размеры  $\varepsilon$ , и рассматривая  $D_{bc}$  как неизвестное, очевидно, что приведенное выше выражение – уравнение линии. Рассмотрев различные размеры  $\varepsilon$ , и оценив результат, становится возможным построить линию регрессии для полученного множества данных, которая будет являться аппроксимацией фрактальной размерности Минковского.

Расчет  $D$  удобно производить по алгоритму box-counting [95], который, применительно к цифровым изображениям, формируется из следующих действий:

1. На изучаемый объект наносится равномерная сетка с квадратными ячейками с длиной стороны величиной  $\varepsilon$  пикселей.
2. Подсчитывается количество ячеек ( $N(\varepsilon)$ ), содержащих исследуемый объект или его фрагменты  $N(\varepsilon)$ . Значения  $\varepsilon$  и  $N(\varepsilon)$  сохраняются.
3. Величина  $\varepsilon$  уменьшается (обычно в 2 раза) и рассчитывается новое значение  $N(\varepsilon)$ , новая пара значений  $\varepsilon$  и  $N(\varepsilon)$  сохраняется.

4. Процедура уменьшения  $\varepsilon$  и подсчета  $N(\varepsilon)$  повторяется многократно, до тех пор, пока  $\varepsilon$  не станет равным 1 пикселю.

5. По сохраненным значениям  $\varepsilon$  и  $N(\varepsilon)$  производится построение линии регрессии для значений  $\log(N(\varepsilon))$  и  $\log(1/\varepsilon)$ , угловой коэффициент которой соответствует  $D$ .

Предложенный подход был применен для оценки фрактальной размерности образца нанокластерной/островковой пленке PbTe (рисунок 2.10.) В итоге ее размерность составила значение  $1,8133 \pm 0,01$ , поэтому ее структуру с достаточной степенью адекватности можно соотнести с перколяционным фракталом со связной топологией [93].

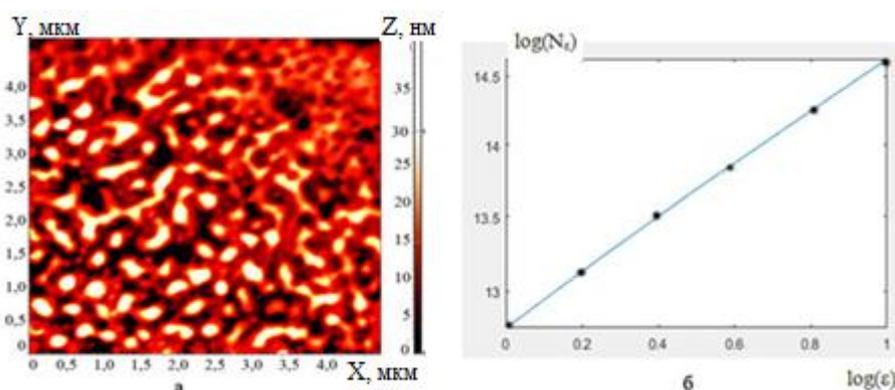


Рисунок 2.10 – Нанокластерная/островковая пленка PbTe (а), линии регрессии для значений  $\log(N)$  и  $\log(1/\varepsilon)$  построенная по методу наименьших квадратов в среде MATLAB (б).

Таким образом, оценив фрактальную размерность можно произвести классификацию полученных нанопленок, а также выделить основные виды фракталов [96-99], структура которых с достаточной степенью соответствует рельефу кластеров/островков нанопленки, полезную при разработке моделей, описывающих особенности морфологии полученных пленок.

Процессы формирования нанокластерных/островковых пленок достаточно сложны и обусловлены влиянием множества сложно учитываемых факторов. Поэтому адекватные модели, описывающие структуру таких образцов, должны быть не полностью детерминированными и содержать в себе случайные параметры, позволяющие учитывать случайные факторы. Такими свойствами обладают модели на основе рандомизированных фракталов, которые можно

генерировать различными методами [96-99].

В качестве моделей первого приближения для описания топологии нанокластерных/островковых пленок могут использоваться стохастические геометрические фракталы, например, на основе снежинки Коха[96], дракона Хартера-Хетуэя, треугольника Серпинского [97], а также структуры на основе алгебраических фракталов – множества Жюлиа [100] или броуновского движения [101]. Некоторые из них, имеющие перспективу в качестве моделей нанокластеров [102], приведены на рисунке 2.11.

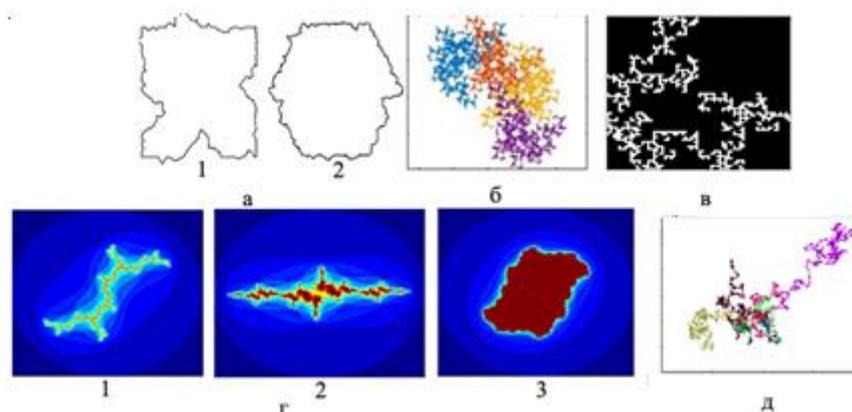


Рисунок 2.11 – Фракталы, перспективные в качестве моделей нанокластеров: рандомизированная снежинка Коха: 1 – после 4 итераций, 2 – после 5 итераций (а), рандомизированный дракон Хартера-Хетуэя после 12 итераций (б), рандомизированный треугольник Серпинского после 7 итераций (в), фрактал Жюлиа в случае различных порождающих отображений: 1 –  $c=i$ , 2 –  $c=-1,3+0,1i$ , 3 –  $c=0,1+0,4i$  (г), фрактальное броуновское движение (д).

Перечисленные выше фракталы позволяют моделировать форму нанокластеров/островков, но, к сожалению, в алгоритмы их генерации достаточно сложно, а зачастую и вообще невозможно вносить или явно учитывать физические параметры системы и условия получения пленок, например, такие как температура системы.

С другой стороны, существуют алгоритмы генерации фракталов, которые позволяют достаточно очевидно или явно учитывать физические процессы, приводящие к образованию нанокластерных/островковых пленок. Среди множества таких алгоритмов можно выделить два наиболее популярных и

широко представленных в научной литературе: диффузно-ограниченная агрегация (DLA) [103-108] и перколяция [101].

Алгоритм генерации DLA (рисунок 2.12) широко применяется для описания неравновесных явлений, таких как коллоидная агрегация, электроосаждение и рост дендритов, вязкое проникновение в жидкости, диэлектрический пробой, отложение минералов, рост бактериальных колоний [64, 103-105]. В рамках DLA моделей рост моделируется добавлением частиц по одной к растущей структуре (или к центру агрегации), при их случайном блуждании (или броуновском движении) (рисунок 2.12б) [64]. Такой механизм позволяет генерировать стохастические фракталы с варьируемой формой путем введения и изменения различных параметров, таких как, например, вид, число и расположение центра агрегации, вероятность прилипания [106-108] и т.д.

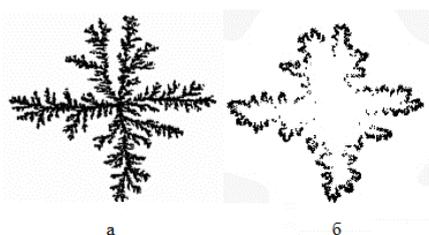


Рисунок 2.12 – DLA кластер: его структура из  $4 \cdot 10^6$  частиц (а), места, где происходит рост (б) [64].

В структуре пленки, поверхность которой можно соотнести с DLA фракталом, выделяются кластеры/островки разветвленной формы с дендритной геометрией, которые обычно образуются вследствие термодиффузионных процессов, имеющих место при получении кластерных/островковых пленок. В зависимости от условий получения варьируется форма образующих пленку кластеров. Так, в случае быстрого остывания системы (быстрая термодиффузия) форма кластеров сильно разветвлена, граница сильно изрезана, кластеры разрежены, слабо заполнены, величина площади имеет небольшие значения, фрактальная размерность составляет порядка 1,75 – 1,85. При медленном остывании (медленная термодиффузия) кластеры/островки обладают округлой формой с менее изрезанными границами. В этом случае наблюдаются хорошо сформированные структуры с высокой степенью заполненности. Величина

площади нанокластеров, полученных вследствие медленной термодиффузии, большие, чем у образцов, сформированных более быстрым процессом. Это подтверждается большими величинами фрактальной размерности, порядка 1,9 – 2,02. Островковые/нанокластерные пленки, соотносимые с DLA фракталами, образуются в результате термодиффузионных процессов осаждения наночастиц благородных металлов, а так же молекулярно-лучевой эпитаксии полупроводниковых образцов.

Перколяционные фракталы [101] (рисунок 2.13) относятся к стохастическим объектам, которые образуются путем многократных повторений случайных изменений своих параметров. Перколяционный фрактал генерируется из занятых ячеек расчетной области с вероятностью, превышающий заданный порог с учетом соседних от текущей ячеек. Размерность пленок оценивается как  $D = \log(9p) / \log 3$ , где  $p$  – порог перколяции. Например, для разреженной системы длинных узких нанокластеров/островков она составляет величину порядка 1,73, для образцов с хорошо сформированными, соединенными между собой кластерами – 1,8958.

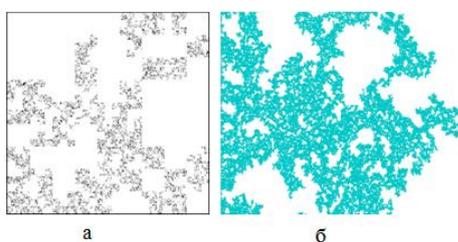


Рисунок 2.13– Перколяционный фрактал:  $p=0,75$   $D=1,75$  (а),  $p= 0,89$   $D=1,898$  (б) [98].

Применяя фрактальный подход, заключающийся в расчете фрактальных размерностей, становится можно произвести классификацию полученных нами пленок. Указанный подход заключался в расчете фрактальных размерностей полученных структур и сравнении ее величины со стандартными фракталами [96-99].

Для оценки возможности синтеза структур с требуемой топологией производилось соотношение рельефа полученных образцов и их фрактальных размерностей с параметрами лазерного излучения, при которых они были

получены.

Исследование АСМ изображений продемонстрировало фрактальный характер нанокластерных пленок, который подтвердился сравнением фрактальных размерностей образцов с размерностями стандартных фракталов.

На рисунках 2.14а,б изображены фрактальные кластерные/островковые полупроводниковые пленки РbТе, форма объектов которых может быть соотнесена с дендритной, характерной для DLA-фракталов. На рисунках 2.14в,г приведены ансамбли нанокластеров с перколяционным характером.

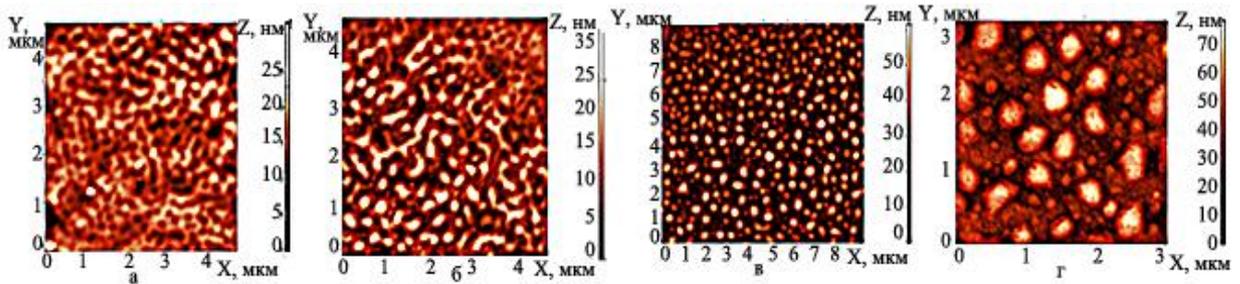


Рисунок 2.14 – АСМ изображения кластерных структур РbТе: образцы с дендритным (а,б) и перколяционным рельефами (в, г).

Указанные на рисунке 2.13 образцы были получены с использованием непрерывного излучения YAG:Nd<sup>3+</sup>-лазера ( $\lambda=1,06$  мкм). В ходе экспериментов варьировались мощность излучения и диаметр лазерного пучка на поверхности подложки.

Образцы со структурой, соотносимой с дендритной, были получены в случае мощности 7 Вт (рисунок 2.14а) и 8 Вт (рисунок 2.14б), скорости сканирования 80 мкм/с с одинаковой величиной лазерного пучка – 50 мкм. Их фрактальные размерности составили значения 1,737 и 1,834, соответственно. Образцы со структурой, близкой к перколяционной синтезировались при применении источника мощностью 6,5 Вт (рисунок 2.14в) и 6 Вт (рисунок 2.14г) скорости сканирования 75 мкм/с с одинаковой величиной пучка излучения 50 мкм. Их фрактальные размерности составили значения 1,841 и 1,867, соответственно.

Образцы нанопленок с системой вытянутых червеобразных островков/кластеров с протяженностью в разы большей ширины, разделенные разветвленной сетью каналов, можно отнести к лабиринтным кластерным структурам [70]. На рисунке 2.15 приведены изображения образцов системы нанокластеров PbTe со структурой, соотносимой с лабиринтной.

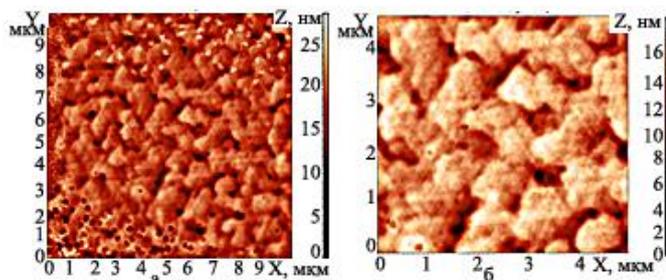


Рисунок 2.15 – АСМ изображения кластерных структур PbTe с лабиринтным рельефом: мощность излучения 8,5 Вт, скоростью движения 70 мкм/с (а), мощность излучения 9 Вт, скорость движения 60 мкм/с.

Для их получения использовался источник излучения с величиной пучка 50 мкм. Для получения образца из рисунка 2.15а мощность выбиралась равной 8,5 Вт, скоростью движения – 70 мкм/с. Образец из рисунка 2.15б синтезировался при мощности 9 Вт и скорости 60 мкм/с. Их фрактальные размерности составили значения 1,972 и 1,994, соответственно.

Расчет фрактальных размерностей для АСМ изображений образцов, показал, что в основном, форма их кластеров/островков на начальных этапах может быть соотнесена с формой перколяционного фрактала. В дальнейшем она становилась дендритной. В случае достаточно длительного воздействия излучения на сгенерированную структуру происходило образование нанокластерных структур на твердой поверхности с лабиринтным рельефом. Анализируя фрактальные размерности образцов на разных стадиях эксперимента, можно заключить, что с течением времени они изменяются в сторону увеличения. Такое поведение размерности соответствовало процессу формирования кластерных структур с хорошо заполненной топологией из системы разрозненных зародышей. Синтезируемые на данном этапе кластеры впоследствии объединялись мостиками и формировали связную структуру.

Указанные выше утверждения достаточно адекватно описывают полученные образцы, изображенные на рисунке 2.9. Так, например, система нанокластеров из рисунка 2.9б, сгенерированная за  $t=0,29$ с может быть отнесена к семейству объектов с перколяционным характером с фрактальной размерностью  $D=1,737$ . Структура нанокластеров из рисунка 2.9в, сформированная за более длительный период времени, порядка  $0,31$ с может быть отнесена к дендритным объектам с большей фрактальной размерностью величиной  $D=1,867$ . На рисунке 2.9г приведена гранулированная/островковая поверхностная пленка, со структурой, относимой к лабиринтной, полученная, формирующиеся за счет более длительного лазерного воздействия за период  $0,36$ с с еще большей фрактальной размерностью  $D=1,972$ .

Такая картина достаточно адекватна теоретическим моделям и механизмам формирования нанокластерных структур, описанным в главе 1.

Таким образом, оценивая геометрические и фрактальные характеристики нанокластерных структур, можно определить физический механизм их формирования в зависимости от условий получения.

## **Заключение и выводы по главе 2**

В данной главе приведены результаты исследований процессов управляемого лазерного синтеза нанокластерных/островковых нанопленок теллурида свинца (PbTe).

Варьирование мощности и длительности лазерного воздействия позволяет синтезировать образцы с различной топологией. Их структура может быть соотнесена с рядом фракталов, от диффузионно-ограниченной агрегации и перколяции до фрактального лабиринта.

Проведенный анализ и классификация полученных образцов показал, что существует глубокая связь между геометрией структуры и физическим

механизмом получения пленок, что обусловлено нелинейными эффектами и нестабильностью роста пленки.

Проведенные исследования будут полезны в сфере создания управляемых принципов получения новых материалов лазерными методами, на основе нанокластерных структур на твердой поверхности с требуемыми свойствами [109]. В частности, исследуемые нанокластерные образцы, могут быть перспективными материалами, на основе которых возможна разработка различных элементов нанофотоники [110,111], например, диэлектрического нанополаризатора [111]. Так, например, образец из рисунка 2.9а может быть использован как микроконтакт и представляет интерес для изготовления фото- или терморезисторов.

### **Глава 3. Экспериментальное исследование электрофизических свойств нанокластерных/островковых нанопленок**

#### **Введение**

В данной главе рассмотрено экспериментальное исследование электрофизических свойств нанокластерных/островковых нанопленок теллурида свинца, реализованное через измерение вольт-амперных характеристик (ВАХ) на отрезке напряжений [0,1; 1] В. При этом анализ проводился с использованием четырехзондовой схемы с линейным расположением контактов. На указанном отрезке напряжений для многих материалов ВАХ имеют омический (линейный) характер, поэтому наличие отклонения от линейного поведения позволяет продемонстрировать влияние топологических особенностей структуры на электрофизические свойства. Действительно, полученные ВАХ показали появление резонансного всплеска силы тока, свидетельствовавшего о том, что электрофизические свойства нанокластерных/островковых нанопленок во многом зависят от их топологических особенностей.

Для выяснения механизма электропроводимости была исследована резистометрия пленок от температуры в диапазоне от 20 до 100° С, которая показала наличие переключения режимов электропроводимости от туннельного к прыжковому вследствие термоактивационных процессов. Сравнение электрофизических свойств нанокластерных/островковых и сплошных пленок свидетельствует о перспективности и значимости использования таких материалов, а также открывает дополнительные возможности их применения в задачах формирования оптических и оптоэлектрических устройств с изменяемыми характеристиками.

Основные материалы данной главы опубликованы в наших работах [121-124, 128,129, 131].

### 3.1 Особенности электропроводимости нанокластерных/ островковых пленок

Проведенные теоретические и экспериментальные исследования электрофизических свойств нанокластерных структур [112-113], позволяют утверждать, что нанокластеры/островки могут быть заряженными вследствие частичной ионизации молекулярного пучка, формирующего образец, а также благодаря существованию электрически заряженных областей, служивших центрами зародышеобразования.

Электропроводимость нанокластерной пленки может быть описана в рамках трех подходов, позволяющих учитывать зависимость от структуры и топологических особенностей (см. главу 1). Это диэлектрический, перколяционный и металлический подходы.

В общем случае для оценки электрофизических свойств нанокластерных/островковых пленок, с несвязной топологией, когда отсутствует непрерывная дорожка проводимости, рассматривают электрический ток между двумя нанокластерами. В рамках такого подхода нанокластеры/островки представляются потенциальными ямами, а промежутки между ними выполняют роль потенциальных барьеров [113] (рисунок 3.1).



Рисунок 3.1 – Схема прохождения электрического тока между двумя нанокластерами.

Эмиссия в вакуум или положку, а также прямое или прыжковое туннелирование электронов формирует механизм переноса зарядов между нанокластерами на твердой поверхности.

Так, расчеты показывают, что при не слишком широких зазорах между нанокластерами/островками величина термоэмиссионного тока может быть значительной [114].

Электропроводимость нанокластерных/островковых систем имеет термоактивационный характер с экспоненциальной зависимостью от температуры. Кроме того, существует температура, позволяющая переключать режимы электропроводимости от туннелирования к прыжковому механизму. Так, например, туннелирование преобладает при комнатной температуре, а при величинах значительно выше главная роль переходит к прыжковой электропроводимости.

Туннельный эффект в нанокластерных/островковых пленках [115] заключается в том, что у заряженной частицы с заданной полной энергией существует возможность переместиться с одного нанокластера на другой, отделенный областью, классически недоступной для этой частицы (рисунок 3.2).

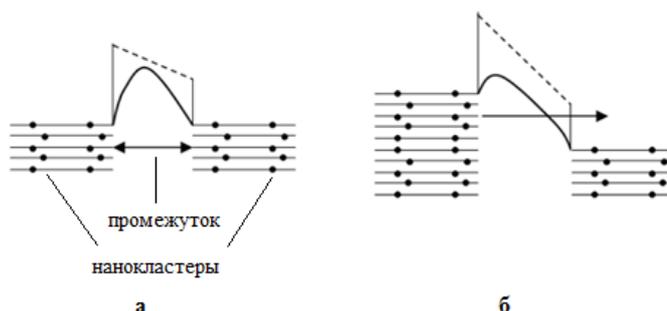


Рисунок 3.2 – Туннелирование между двумя нанокластерами при отсутствии (а) и наличии (б) внешнего электрического поля.

В рамках классических представлений электрон с величиной энергии, меньшей высоты потенциального барьера, падающий на него, будет отражаться и электрический ток не появится. В рамках квантовой теории, электрон обладает волновой функцией. Для нее возникает вероятность, связанная с ее величиной, которая позволяет электрону проникнуть в запрещенную зону барьера [116] и реализовать возможность протекания электрического тока. Величина этой вероятности зависит от размеров барьера. Действительно, волновая функция электрона, удаляющегося от границы барьера, стремительно уменьшается. Так, в

случае широкого барьера, уже на противоположной границе она обнуляется. Наоборот, когда барьер узкий, например, его ширина не превосходит 10 нм, волновая функция на его противоположной границе ненулевая. Поэтому в таком случае существует вероятность прохождения электрона через барьер, а значит потечет электрический ток.

Прохождение электрического тока по поверхности структуры может реализовываться как прямым туннелированием, так и туннелированием через стабильные энергетические примесные состояния (прыжковая проводимость), и через подложку [116].

Увеличение диэлектрической проницаемости подложки позволяет уменьшить энергию активации. В этом случае высота потенциального барьера становится меньше термодинамической работы выхода электрона. Это позволяет значительно увеличить туннельный ток через подложку. Кроме того, прозрачность потенциального барьера может дополнительно увеличиваться при наличии на подложке свободных ионов щелочных металлов, которые могут образовывать на ней поверхностные электронные состояния.

Другим отличительным свойством электропроводимости нанокластерных структур является отклонение вольт-амперных характеристик от закона Ома, обусловленное особенностями структуры пленки и напряженности поля.

Одним из факторов, оказывающим влияние на вольт-амперные характеристики наноструктур с размерами объектов ~10-100 нм, является полное электросопротивление  $R$  образовавшегося в неоднородной структуре микроконтакта с характерной длиной резисторного участка определяемой длиной свободного пробега электрона как [117]:

$$R = \frac{16\rho^\infty\lambda^\infty}{\pi d^2} \left(1 + \frac{L}{d} + \frac{d}{\lambda^\infty}\right), \quad (3.1)$$

где  $d$  – диаметр контакта,  $\lambda^\infty$  – длина свободного пробега электронов в массивном материале,  $\rho$  – удельное электросопротивление контактирующих частиц материала,  $L$  – длина микроконтакта.

При этом ток в данной системе соприкасающихся наночастиц будет протекать только через поверхности соприкосновения – площадки с площадью, стремящейся к нулю.

Таким образом, речь идет об образовании множества продольных каналов для протекания тока, что существенно затрудняет поперечное распространение тока (нет целостного/однородного поперечного сечения для участка цепи проводника). В этом случае для оценки полного электросопротивления микроконтакта необходимо модифицировать выражение для стандартного закона Ома для участка цепи, из которого выведено и соотношение (3.1).

Расчет электросопротивления для неоднородного по поперечному сечению участка цепи зернистой структуры с фрактальным рельефом может определяться соотношением [117]:

$$R = A\rho \frac{l_{\pi} \left(\frac{L_0}{l_{\pi}}\right)^D}{S_{\pi} \left(\frac{S_0}{S_{\pi}}\right)^{2-D_1}}, \quad (3.2)$$

где  $A$  – нормировочный коэффициент,  $L_0$  – длина наблюдаемой кривой по прямой от начальной до конечной точки контактов на проводящей поверхности,  $l_{\pi}$  – длина множества покрытия (расстояние между точками),  $D$  – фрактальная размерность наблюдаемого осредненного рельефа вдоль продольного направления,  $S_{\pi}$  – площадь минимального элемента покрытия,  $S_0$  – площадь эллипса, в который вписан усредненный рельеф поперечного среза,  $D_1$  – фрактальная размерность границы поперечного среза проводящего участка на поверхности подложки.

Таким образом, при измерении электросопротивления в наноструктурах необходимо учитывать изменение значения сопротивления в зависимости от морфологии полученного в процессе лазерного осаждения поверхностного нанослоя [117].

Таким образом, классический метод оценки вольт-амперных характеристик на основе закона Ома и методов фрактальной геометрии может быть применим для нанокластерных структур.

### 3.2 Экспериментальные исследования электропроводимости полупроводниковых нанокластерных/островковых нанопленок

Для исследования электропроводимости нанокластерных/островковых нанопленок широко применяют резистометрию. В настоящее время существует множество методов измерения удельного сопротивления полупроводниковых островковых наноматериалов и кластерных структур [118-120]. Основные характеристики наиболее популярных и удобных методов определения удельного сопротивления наноструктур сведены в таблицу 3.1. Анализируя приведенную таблицу, можно заключить, что для измерения полученных нами нанокластерных/островковых нанопленок наиболее подходящим является четырехзондовый метод.

Таблица 3.1– Характеристики методов измерения удельного сопротивления полупроводниковых структур

Метод	Погрешность, %	Локальность	Диапазон $\rho$ , Ом*см
Четырехзондовый	1-5	10-50 мкм	$10^{-4} - 5 \cdot 10^3$
Сопротивления растекания	5-20	10 мкм	$10^{-3} - 5 \cdot 10^2$
Бесконтактный	10-20	1 мм	$10^2 - 5$

Экспериментальные исследования электрофизических свойств полученных нами нанокластерных/островковых нанопленок реализовались через измерение их вольтамперных характеристик (ВАХ). При этом анализ проводился с использованием четырехзондовой схемы с линейным расположением контактов (рисунок 3.3) [121, 122]: два крайних контакта обеспечивали подвод постоянного тока  $I$  с использованием стабилизированного источника питания и располагались на одинаковом расстоянии друг от друга,  $S_1 = S_2 = S_3 = S_4 = 6 \pm 0,01$  мм. Внутренние зонды представляли собой проводящие иглы атомно-силового микроскопа с

радиусом закругления 100 нм. Сила прижима зонда составляла величину порядка 1 Н.

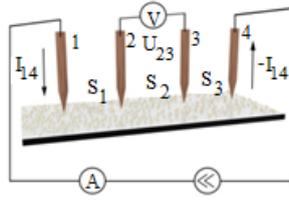


Рисунок 3.3– Схематическое представление 4-х зондовой схемы [122].

На источнике выставлялся необходимый ток, а с вольтметра снималось соответствующее напряжение. Для проведения температурных измерений вся схема была собрана в вакуумной термокамере с возможностью достижения давления  $10^{-3}$  Торр и нагревом образца до 100 °С.

Вольт-амперные характеристики исходной и модифицированных пленок РbТе показаны на рисунке 3.4.

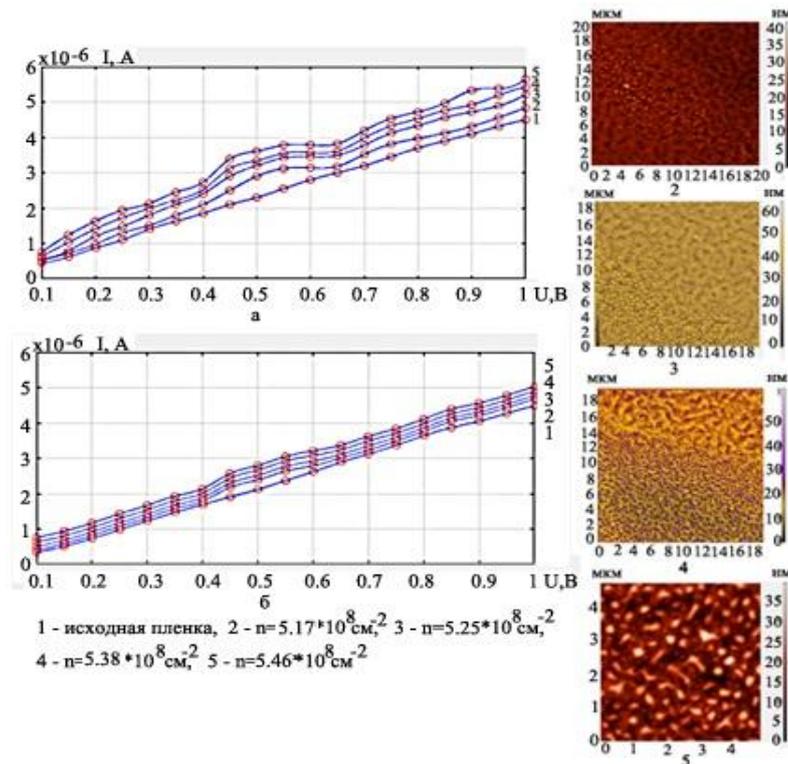


Рисунок 3.4 – Вольт-амперные характеристики исходной (1) и модифицированных(2-5) нанокластерных/островковых пленок РbТе для различных поверхностных плотностей гранцул при измерении в продольном направлении (а), в поперечном (б) с учетом аппроксимации кубическими сплайнам среды MATLAB.

Для усреднения результата использовалось 8-10 точек на поверхности образца [123]. Полученная зависимость аппроксимировалась кубическими сплайнами для 100 точек, реализованными в среде MATLAB. Сила тока составляла величину порядка  $10^{-6}$  А [124]. Погрешность измерения силы тока – 0,5% от ее средней величины. Измерение ВАХ производилось при комнатной температуре  $25^0 \pm 2^0$  С. Напряжение варьировалось от 0,1 до 1 В. Величина сопротивления в исследуемом диапазоне напряжений для образцов 1-5 не превосходила величины порядка  $2,6 \cdot 10^7$  Ом.

Значения сопротивлений при температуре  $25^0$  С приведены в таблице 3.2.

Таблица 3.2– Значения сопротивления образцов 1-5 из рисунка 3.5.

Образец	Удельное сопротивление $\rho$ , Ом*м	Среднее сопротивление $R_{cp}$ , Ом
1	$2,56 \cdot 10^7$	$0,24 \cdot 10^6$
2	$2,32 \cdot 10^7$	$0,22 \cdot 10^6$
3	$2,18 \cdot 10^7$	$0,20 \cdot 10^6$
4	$2,1 \cdot 10^7$	$0,19 \cdot 10^6$
5	$1,95 \cdot 10^7$	$0,18 \cdot 10^6$

На рисунке 3.5 приведена зависимость сопротивления для образцов 2-5 (рисунок 3.4) в зависимости от поверхностной плотности гранул с учетом аппроксимации кубическими сплайнами.

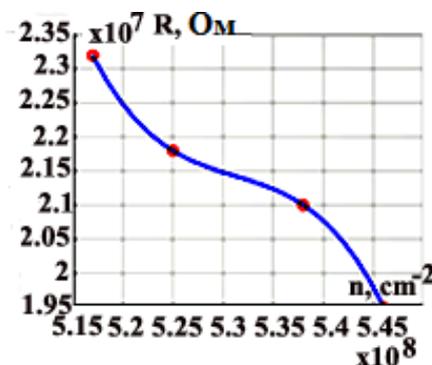


Рисунок 3.5 – Зависимость сопротивления образцов (2)-(5) (рисунок 3.4а) от поверхностной плотности гранул для измерения в продольном направлении.

Из рисунка 3.4а (прямая 1) очевидно, что в отсутствии ансамбля наноточек на поверхности пленки ее ВАХ имеет линейный характер, в соответствии с законом Ома, с зависимостью плотности тока от внешнего приложенного поля  $E_e$ :

$$J(E_e) = \sigma E_e, \quad (3.3)$$

где  $\sigma$  - проводимость.

Анализируя рисунок 3.4 можно заключить то, что наномодификация поверхности приводит к появлению характерных особенностей ВАХ для PbTe: увеличению ее наклона и появлению ярко выраженного локального максимума. Так она носила в среднем линейный характер на интервалах напряжения (0,1; 0,4) В и (0,65; 1) В, а для средних значений напряжения в интервале (0,4; 0,65) В наблюдался резонансный всплеск силы тока. Величина этого всплеска была порядка 50% от среднего значения для измерения в продольном направлении (рисунок 3.4а). В случае измерения в поперечном направлении ее величина была меньше и составляла значение порядка 20% (рисунок 3.4б). Например, для образца 5 максимальное значение всплеска ВАХ составляет величину  $0,5 \cdot 10^{-6}$  А (рисунок 3.4а). Такая картина может быть вызвана большей плотностью гранул в данном образце. Сравнивая рисунки 3.4а и 3.4б, можно заключить, что всплеск силы тока имеет большую величину для продольного направления при одинаковом значении плотности гранул. Этот факт демонстрирует влияние формы нанокластеров на электропроводимость.

Появление резонансного всплеска, а также увеличение наклона ВАХ рассматривается как результат участия в поверхностной электропроводимости слабо и сильно связанных электронов, находящихся изначально на уровнях размерного квантования в наноточках, с учетом усиления локального поля. Так, изначально, электроны находятся в потенциальной яме шириной  $2a$ , глубиной  $P$ , и занимают энергетические уровни размерного квантования, причем самый верхний ( $N$ -ый) из заполненных обладает энергией  $\varepsilon_N = N^2 \pi^2 \hbar^2 / 8m^* a^2$  где,  $m^*$  – эффективная масса электрона,  $\hbar$  – постоянная Планка и отделен от верха потенциальной ямы энергетическим расстоянием  $\Delta_N = P - \varepsilon_N \gg k_B T$ ,  $T$  –

температура,  $k_B$  – постоянная Больцмана. При указанных условиях маловероятен самопроизвольный переход связанных электронов в свободное состояние (в зону проводимости).

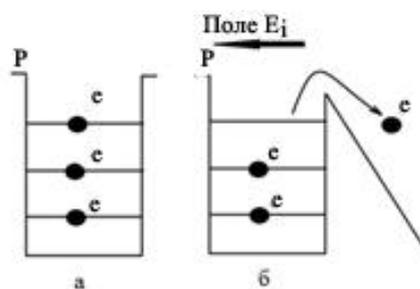


Рисунок 3.6 – Электроны на уровнях размерного квантования в потенциальной яме глубиной  $P$ . Поле  $E_i = 0$  (а). Поле  $E_i \neq 0$ . Тепловой выброс электрона из ямы через барьер (б).

Приложение внутреннего поля  $E_i$ , отличающегося от внешнего приложенного поля  $E_e$  уменьшает эффективную для электрона глубину энергетического барьера на величину  $eE_i 2a$ . В этом случае становится возможным тепловой выброс из ямы электрона с верхнего уровня (рисунок 3.6). Так, в плотном ансамбле наночастиц на поверхности полупроводника со статической диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_S$  (для PbTe  $\epsilon_S \sim 400$  при  $T = 296$  К [125]), локальное электростатическое поле  $E_i$  внутри наночастицы, благодаря коллективным эффектам, может испытывать сильное возрастание по сравнению с внешне приложенным полем  $E_e$ . Для описания этого эффекта ансамбль нанокластеров на поверхности полупроводника будем моделировать цилиндрическими нановыступами [126] со статической проницаемостью  $\epsilon_S$ , высотой  $2b$  и диаметром  $2a$ :  $b \ll a$ . Выступы случайным образом распределены по поверхности с плотностью  $n$  [см<sup>-2</sup>] и находятся под воздействием внешнего латерального электростатического поля  $E_e$ .

Локальное поле внутри выделенного нановыступа формируется как сумма поля деполяризации  $E_L$  и поля  $E_\beta$ , действующего на выделенный нановыступ со стороны окружающих его:

$$E_i = E_e - E_L + E_\beta, \quad (3.4)$$

где  $E_L = \frac{4\pi Ld}{V}$ ,  $L$  – фактор деполяризации цилиндрического нанокластера,  $d$  – дипольный момент,  $V = 2\pi a^2 b$  – его объем,  $E_\beta = \frac{4\pi\beta d}{V}$ ,  $\beta$  – фактор действующего поля [127].

Учитывая, что

$$\frac{d}{V} = \frac{(\varepsilon_S - 1)E_i}{4\pi}, \quad (3.5)$$

получим усиление локального поля внутри нанокластера:

$$E_i = \frac{E_e}{[1 - (\varepsilon_S - 1)(\beta - L)]} = GE_e, \quad (3.6)$$

где  $G = 1/[1 - (\varepsilon_S - 1)(\beta - L)]$  – коэффициент усиления поля внутри нановыступа (при условии  $\beta > L$ ).

Для оценки  $\beta$ , рассчитаем поле, создаваемое внутри выделенного цилиндрического нановыступа (с радиусом-вектором  $\mathbf{r} = 0$ ) окружающими диполями. Диполь  $d$ , с радиусом-вектором  $\mathbf{r}$ , создает в центре основания выделенного цилиндра поле  $E_d = d/r^3$ . Суммируя по всем диполям, кроме выделенного, имеем для суммарного поля диполей в центре выделенной квазиплоской наноточки

$$E_d = n \int_0^{2\pi} d\varphi \int_a^\infty r(d/r^3)dr = d2\pi n/a. \quad (3.7)$$

Из равенства  $4\pi\beta d/V = E_d$  находим оценку фактора действующего электростатического поля  $\beta = \pi nab$ .

Определение фактора деполяризации цилиндра в случае электростатического поля производится численно [127]. Оно показывает, что фактор деполяризации цилиндра практически совпадает с фактором деполяризации эллипсоида с таким же аспектным отношением  $b/a$ .

Так, для эллипсоида при условии  $a \gg b$  деполяризацию можно представить как:

$$L = \left(\frac{b}{2a}\right) \operatorname{arctg}\left(\frac{a}{b}\right) < \left(\frac{b}{a}\right) \left(\frac{\pi}{4}\right) \quad (3.8)$$

а фактор действующего поля, используя соотношение  $n = \frac{1}{\pi a^2}$  в виде

$$\beta = \pi nab = \frac{b}{a} > \left(\frac{b}{a}\right) \left(\frac{\pi}{4}\right). \quad (3.9)$$

Сравнивая (3.8) и (3.9), можно заключить, что в рассматриваемом электростатическом случае возможна ситуация, когда  $\beta > L$ . При наличии широкого разброса аспектного отношения наноточек в ансамбле возможно наличие подансамбля с  $\beta \sim L$ . Тогда из (3.4) следует, что в рассматриваемом случае при  $\varepsilon_s \gg 1$ , возможно усиление на порядки ( $G \gg 1$ ) электростатического поля  $E_i$  внутри наноточки по сравнению с внешним полем  $E_e$  (соотношение (3.6)) при  $\beta > L$  имеет физический смысл при условии  $(\varepsilon_s - 1)(\beta - L) \leq 1$ .

Проведем оценку коэффициента усиления  $G$  в указанном выше приближении в зависимости от плотности наноточек на поверхности образца ( $n$ ). Определим зависимость радиуса нановыступ от плотности наноточек как  $a(n) = \frac{1}{\sqrt{\pi n}}$ . Тогда с учетом соотношений 3.8 и 3.9 зависимость коэффициента усиления от плотности наноточек будет иметь вид:

$$G(n) = \frac{1}{1 - (\varepsilon_s - 1) \left( \frac{b}{a(n)} - \frac{b}{a(n)} \arctg\left(\frac{a(n)}{b}\right) \right)}. \quad (3.10)$$

Тогда для значений  $n$  из рисунка 3.4а и  $\varepsilon_s \sim 400$  при  $T = 295$  К для параметра  $b=100$  нм в приближении цилиндрических нановыступов расчетное усиление поля не превосходит величины 1,56 или 50% от среднего значения (рисунок 3.7). Погрешность моделирования оказалась порядка 3,8% для продольного направления. Такая величина погрешности свидетельствует об удовлетворительной адекватности предложенной модели.

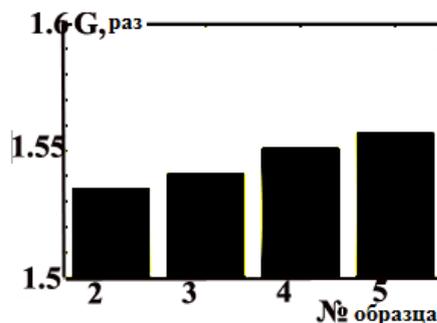


Рисунок 3.7 – Расчетное значение коэффициента усиления напряженности по модели системы нановыступов для образцов 2-5 из рисунка 3.4а.

По мере роста напряжения достигается некоторое критическое значение электростатического поля внутри наноточки  $E_i$ , когда  $eE_i 2a \sim P$  и  $P - \varepsilon_N \geq k_B T$ , где  $e$  – заряд электрона. Это приводит к появлению дополнительного электрического тока на поверхности полупроводника.

Полная ВАХ полупроводника получается сложением линейной плотности тока проводимости полупроводника,  $\sigma E_e$ , где  $\sigma$  – проводимость и плотности тока ансамбля наноточек  $J(E_e)$ :

$$J_{ful}(E_e) = \sigma E_e + J(E_e). \quad (3.10)$$

Так, тепловой выброс электрона с верхнего уровня  $\varepsilon_N$  (рис.3.6.б) приводит к появлению тока с плотностью

$$j(E_i) = const \times \exp[-(\Delta_N - eE_i 2a)/k_B T] \Phi(\Delta_N - eE_i 2a), \quad (3.11)$$

где функция  $\Phi(x) = 0$ , если  $x < 0$  и  $\Phi(x) = 1$ , если  $x > 0$ , Экспонента в (3.11) определяет вероятность теплового переброса электрона с энергией  $\varepsilon_N$  через барьер высотой  $(\Delta_N - eE_i 2a)$ , а функция  $\Phi(\Delta_N - eE_i 2a)$  зануляет эту вероятность, поскольку, при  $eE_i 2a > \Delta_N$ , уровень с энергией  $\varepsilon_N$  опустошен.

Плотность электрического тока, создаваемая при этом ансамблем наноточек с гауссовым распределением по латеральным размерам  $a$ , определяется формулой

$$J(E_e) = const \times n \int \exp[-(\Delta_N - eGE_e 2a)/k_B T] \Phi(\Delta_N - eGE_e 2a) \exp[-(a - a_0)^2/\delta^2] da, \quad (3.12)$$

где  $\delta$  дисперсия распределения наноточек по латеральным размерам,  $n$  – поверхностная плотность числа наноточек. Высоту энергетического барьера  $\Delta_N$  оценим как  $\Delta_N = (N_p^2 - N^2)\pi^2 \hbar^2 / 8m^* a^2$  (глубина ямы грубо оценивается как  $P = N_p^2 \pi^2 \hbar^2 / 8m^* a^2$ , где  $N_p > N$ ).

В безразмерных величинах формула (3.10) примет вид

$$J(E) = \int_{y_1}^{y_2} \left[ \exp\left(-\left(y^{-2} - E_y\right)\right) \right] \left[ \Phi\left(y^{-2} - E_y\right) \right] \exp\left[-\Gamma\left(y - y_0 + y^6\right)^2\right] dy. \quad (3.13)$$

Здесь  $y = a/a_T$ , где  $a_T = \pi \hbar (N_p^2 - N^2)^{1/2} / (8m^* k_B T)^{1/2} \sim 10^{-5}$  см, при  $N_p = 10$ ,  $N = 6$ ,  $m^* = 0.02m$ , где  $m$  – масса свободного электрона,  $T = 300$ К;  $E = E_e/E_0$ ,  $E_0 = (k_B T)^{3/2} m^{*1/2} / 2\pi \hbar G \sim 1$  В/см, при  $G \sim 10^3$ ;  $\Gamma = \alpha_T^2 / \delta^2 \sim 10$  и  $\delta = \alpha_T / 3$ . В

(3.11) в показателе экспоненты гауссова распределения введено слагаемое  $y^6$ , которое делает его асимметричным для того, чтобы учесть, что в области больших размеров наноточек  $\Delta_N$  становится меньше  $k_B T$ .

Зависимость плотности тока ансамбля наноточек от внешнего приложенного поля  $E_e$ , т.е. ВАХ ансамбля одноэлектронных наноточек, определенная по формуле (3.13), изображена на рисунке 3.8.

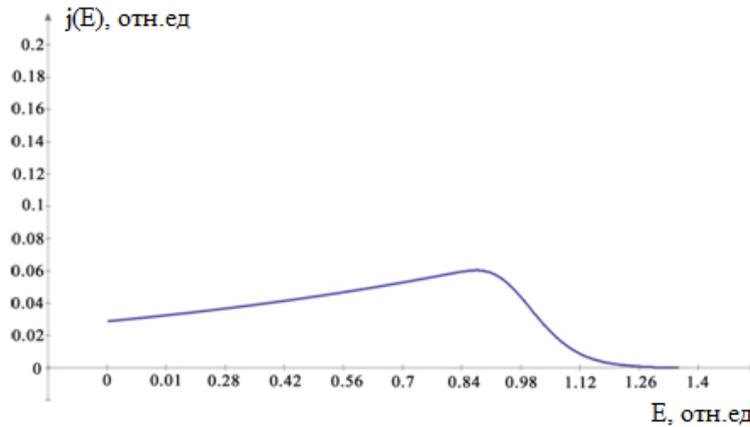


Рисунок 3.8 – ВАХ ансамбля одноэлектронных наноточек при  $\Gamma = 8, y_0 = 2,5, y_1 = 0,01, y_2 = 3$ .

Скачок силы тока размыт из-за разброса размеров наночастиц на поверхности. Действительно, вследствие широкого разброса размеров ямы  $a$  реализуется разброс величины  $\Delta_N$ , когда выход электрона из потенциальной ямы происходит при различных значениях напряжения. Относительно слабо связанные электроны освобождаются уже при малых полях, что приводит к увеличению электропроводимости  $\sigma$  и, соответственно, к увеличению наклона зависимости ВАХ. Причем увеличение силы тока прямо пропорционально поверхностной плотности наноточек. Сильно связанные электроны в ямах большей глубины освобождаются при больших полях.

Наличие одного ярко выраженного максимума на ВАХ говорит об участии в этом процессе одного электрона, находящегося на самом верхнем уровне размерного квантования в глубокой яме.

Наличие одного и/или нескольких явно выраженных максимумов на ВАХ свидетельствует об участии в этом процессе одного и/или нескольких электронов,

находящихся на самом верхнем и/или более глубоких уровнях размерного квантования в потенциальной яме.

Величина локального максимума силы тока зависит от плотности наночастиц на поверхности пленки, которая обуславливает особенности распространения электронов в нанопленке. По этой же причине в поперечном направлении эффект выражен слабее, так как в этом случае количество наночастиц через которые протекает ток между двумя измерительными контактами существенно меньше.

Сравнивая ВАХ сплошной PbTe пленки (линия 1 на рисунке 3.4а) и островковых пленки (линии 2 – 5 на рисунке 3.4а) можно сделать заключение о том, что величина ВАХ и ее усиление зависят от величин гранул, таким образом, что в сплошном образце не наблюдается локального усиления силы тока. Такая картина свидетельствует о том, что электропроводимые свойства нанокластерных/островковых пленок PbTe выражены несколько лучше по сравнению с образцами со сплошной структурой.

Применимость и актуальность нанокластерных образцов оправдана в связи с возможностью получения образцов с требуемыми свойствами за счет возможности управления и предопределения топологии. Эти особенности, во многом, обуславливают их актуальность, значимость и применимость для современной техники и технологии [128,129].

Для выяснения механизма электропроводимости была исследована резистометрия нанокластерных пленок в зависимости от температуры в диапазоне от 20 до 100°C. Погрешность измерения сопротивления составляла величину порядка 5%. На рисунке 3.9 приведены зависимости натурального логарифма сопротивления от обратной температуры для нанокластерной/островковой пленки PbTe. Кривые R1 – R5 соответствуют пленкам с различной плотностью расположения точек на поверхности (1-5 из рисунка 3.4).

Как видно из рисунка 3.9 в диапазоне от 20 °C до 85 °C электропроводимость носит туннельный характер. При температуре выше 85 °C

поведение проводимости меняется, что обуславливается появлением термоактивации, и ее характер становится преимущественно прыжковым [130].

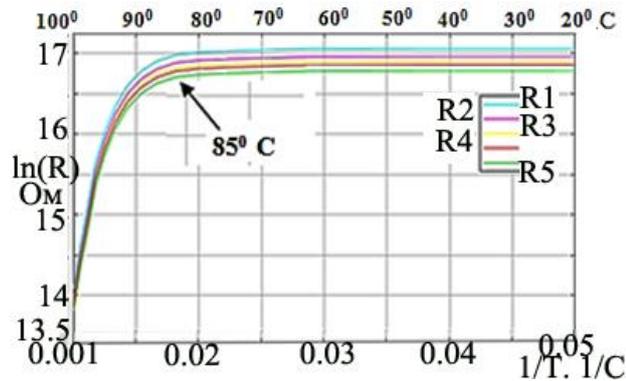


Рисунок 3.9 – Температурная зависимость натурального логарифма сопротивления образцов (1-5) из рисунка 3.5, с единой энергией активации, равной 0,3 эВ.

Поэтому для оценки экспериментальной зависимости сопротивления  $R$  от температуры  $T$  применимо соотношение [130]:

$$R \sim R_0 + R_1 \exp\left(\frac{\varphi}{kT}\right), \quad (3.14)$$

где  $k$  – константа Больцмана,  $\varphi$  – энергия активации.

Первое слагаемое обусловлено независимым от температуры туннельным эффектом, а второе определяется термоактивированными прыжками электронов. Энергия термоактивации прыжков между островками оказывается существенно меньше работы выхода электрона, что обуславливается влиянием подложки.

Резистометрия системы кластеров благородных металлов на подложке аналогично показывает наличие переключения режима электропроводимости в температурном диапазоне от 20 до 100° С [131].

### Заключение и выводы по главе 3

В данной главе приведены результаты экспериментальных исследований электрофизических свойств полупроводниковых нанокластерных/островковых нанопленок теллурида свинца. Исследование ВАХ показало наличие

особенностей, обусловленных топологией образцов. Они проявили себя в локальном усилении силы тока на (0,4; 0,65) В, обусловленным участием в поверхностной электропроводимости слабо и сильно связанных электронов, находившихся изначально на уровнях размерного квантования в наноточках, с учетом усиления локального поля. Скачок силы тока был размыт из-за разброса размеров наночастиц на поверхности. Также было установлено наличие увеличения наклона линий ВАХ в зависимости от величин наноточек/гранул, образующих нанопленку. Для оценки механизма электропроводимости была исследована резистометрия пленок в зависимости от температуры на отрезке от  $20^0$  до  $100^0$  С, которая показала наличие переключения электропроводимости с туннельного на прыжковый характер вследствие термоактивации. Этот факт свидетельствует о варьируемом, управляемом характере электрофизических свойств нанокластерных/островковых пленок РbТе.

Сравнения ВАХ сплошных и нанокластерных/островковых образцов РbТе, позволили сделать вывод о том, что электропроводимые свойства нанокластерных образцов выражены несколько лучше, чем сплошных. Кроме того для нанокластерных образцов влияние топологии отражается на электрофизических свойствах в сторону их увеличения. Также переключение режимов электропроводимости свидетельствует об управляемой, варьируемой электропроводимости нанокластерных образцов.

Все это обосновывает актуальность применения наноструктур в различных приложениях.

## **Глава 4. Применение аппарата математического моделирования для описания топологических особенностей и свойств электропроводимости нанокластерных/островковых структур на твердой поверхности**

### **Введение**

В данной главе рассмотрено возможное применение аппарата математического моделирования для объяснения полученных экспериментальных результатов и возможного прогнозирования свойств разрабатываемых нанокластерных/островковых нанопленок.

В предыдущей главе было показано, что свойства нанокластерных/островковых нанопленок существенно зависят от структуры образующих их нанокластеров: от количества, близости друг от друга, формы и т.д. Исходя из этого моделирование, описывающее свойства нанокластерных/островковых пленок, должно, на наш взгляд, состоять из нескольких этапов. Во-первых, должно реализовываться моделирование формы нанокластеров/островков и структуры нанопленки в целом. Во-вторых, должно производиться описание электрофизических свойств нанопленок, с учетом их смоделированной структуры.

Такое моделирование, на наш взгляд, позволит в первом приближении описать свойства полученных нами полупроводниковых нанокластеров на твердой поверхности.

Основные материалы данной главы опубликованы в наших работах [132, 133, 134, 138, 139, 141, 144, 147, 150-152, 154, 157, 159, 168, 175-178].

#### 4.1 Математическое моделирование структуры нанокластерных/островковых нанопленок

В главе 2 была приведена классификация полученных образцов в соответствии с их фрактальной размерностью и соотношение их с различными фрактальными объектами. Такой подход позволяет определить основные модели в рамках фрактальной геометрии, применимые для описания структуры полученных нами образцов.

Анализ результатов экспериментов по получению нанокластерных/островковых пленок (см. главу 2) позволил сделать заключение о том, что основным процессом, влиявшим на форму нанокластеров/островков, была термодиффузия [132]. В случае образцов РbТе может быть рассмотрена диффузия дефектов из приповерхностного слоя (см. главу 2).

Таким образом, рассмотрение таких процессов позволяет внести в модель физические параметры системы.

В общем случае моделирование процессов агрегации объектов в кластеры с последующим формированием тонких пленок, протекавших вследствие диффузионных процессов, может рассматриваться в двумерной геометрии расчетной области. Такая модель, при условии рассмотрения расчетной области без градиента температуры, может основываться на решении двумерного уравнения диффузии в относительных единицах [133]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C + I, \quad C(0) = C_0, \quad (4.1)$$

где  $C$  – концентрация блуждающих частиц,  $D$  – нормированный коэффициент диффузии для броуновской частицы,  $I$  – нормированный источник частиц, вводимых в расчетную область,  $C_0$  – начальная концентрация частиц (зародышей).

В рамках фрактального приближения структуры, синтезируемые благодаря термодиффузионным процессам, могут быть смоделированы на основе диффузионно-ограниченной агрегации, механизма перколяции, а также их

модификаций и варьировании начальных и/или граничных условий.

Для хорошо сформированных нанокластерных образцов со структурой, соотносимой с дендритной, применима модель фрактала диффузионно-ограниченной агрегации (DLA), реализуемого методом клеточного автомата [133, 134] для модельных частиц.

Для моделирования структуры таких нанокластеров с учетом физических параметров системы могут применяться различные модификации стандартного метода DLA с учетом варьирования своих допущений. Такой подход позволяет учитывать физические параметры экспериментальной схемы синтеза образцов и их геометрические особенности.

Для моделирования структуры нанокластеров в качестве базового приближения рассматривалась модель DLA с учетом следующих допущений (1-8):

1. Модель описывала структуру кластера в относительных единицах с возможностью перехода к абсолютным величинам.
2. Выбиралась квадратная изотропная расчетная область с наложенной равномерной сеткой, формировавшая ячеичную структуру.
3. Рассматривалась замкнутая расчетная область, из которой не уходили и в которой не уничтожались введенные в нее частицы.
4. Модельные частицы, из которых формировался смоделированный кластер, обладали одинаковыми характеристиками (размерами, скоростью).
5. Физические параметры моделируемой системы, предствленные в относительных переменных, были постоянными во всей расчетной области.
6. В каждый момент времени в расчетную область вводилась только одна модельная частица, с размером, равным одной ячейке расчетной области.
7. Сформированный агрегат фиксировался в расчетной области до конца процесса моделирования.

8. В сформированном агрегате не различались вертикальные особенности рельефа: частицы рассматривались как одинаковые, не делились на объекты формировавшие пики и низины.

В общем случае алгоритм базового приближения состоит из шагов (1-5).

#### Шаг 1. Инициализация алгоритма

В расчетной области, с наложенной на нее равномерной сеткой задавалась стартовая структура (зародыш).

#### Шаг 2. Начало текущей итерации. Генерация частицы

На верхней границе расчетной области генерировалась единичная частица.

#### Шаг 3. Движение и фиксация частицы

Частица блуждала случайным образом по расчетной области, до тех пор, пока в ее окрестности не оказывалась уже ранее занятая ячейка расчетной области. После наступления этого события частица с заданной вероятностью прилипала и фиксировалась до конца расчета в текущей позиции. В противном случае ее движение продолжалось.

#### Шаг 4. Завершение текущей итерации. Завершение движения частицы

Процесс случайного блуждания завершался в случае фиксации частицы в текущей позиции. После этого происходил переход к шагу 2.

#### Шаг 5. Завершения процесса построения кластера

Критерий окончания процесса построения кластера задавался как одно из взаимоисключающих событий:

- а) достижение требуемой поверхностной плотности частиц в расчетной области,
- б) размещение в расчетной области требуемого количества модельных частиц
- в) достижение требуемой фрактальной размерности.

Схема стандартного алгоритма, описывающего процесс построения кластера DLA в рамках одной итерации, изображена на рисунке 4.1.

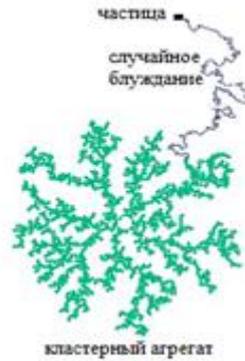


Рисунок 4.1 – Схема одной итерации построения DLA кластера на плоскости. Рассмотрим шаги 1-5 подробнее.

На этапе инициализации задавались следующие относительные величины: размер квадратной расчетной области  $\bar{L}$  как целая величина:  $100 \leq \bar{L} \leq 200$  отн.ед., размер ячейки расчетной области с наложенной равномерной сеткой:  $\bar{\Delta l} = 1$  отн.ед., вероятность прилипания  $\bar{s}$ :  $0,01 \leq \bar{s} \leq 1$ , общее требуемое относительное количество наночастиц  $\bar{N}_p$  требуемая относительная поверхностная плотность частиц  $\bar{\rho}_p = \bar{N}_p / \bar{L}^2$ , требуемая фрактальная размерность  $D_f$ . Стартовая структура зародышей задавалась как множество случайно расположенных заполненных ячеек, а также могла определяться как детерминированная фигура, например, прямая линия, расположенная в расчетной области определенным образом.

Процесс построения кластера носил итерационный характер. Новая итерация начиналась с введения частицы в расчетную область (шаг 2). Итерация заканчивалась фиксацией частицы (шаг 4) и увеличением относительного текущего количества введенных в расчетную область частиц ( $\bar{N}_{pt}$ ) на единицу  $\bar{N}_{pt} = \bar{N}_{pt} + 1$ . Производился расчет текущей относительной поверхностной плотности частиц ( $\bar{\rho}_{pt}$ ):  $\bar{\rho}_{pt} = \bar{N}_{pt} / \bar{L}^2$ . Также производилась оценка текущей фрактальной размерности как  $D_{ft} = \frac{\log \bar{N}_t}{\log \bar{L}}$ . Относительное время построения фрактального кластера оценивалось через итоговое количество введенных в расчетную область частиц  $\bar{t} = \bar{N}_t$ .

Движение частицы по расчетной области на одной итерации (шаг 3)

моделировалось в рамках броуновского движения [135], когда один шаг блуждания частица совершала случайные смещения по горизонтали или вертикали. В дискретном виде смещения выбирались как  $\overline{\Delta l_x} = \overline{\Delta l_y} = 1$  и новые координаты рассчитывались как  $x_n = x_c + r\Delta l_x = x_c + r$ ,  $y_n = y_c + r\Delta l_y = y_c + r$ , где величина  $r$  – принимала значения  $\pm 1$  с одинаковой вероятностью,  $x_c, y_c$  – координаты на прошлом смещении. После каждого случайного смещения проводился анализ окрестности модельной частицы. В случае наличия в окрестности модельной частицы ранее занятых ячеек, генерировалось равномерно распределенное случайное число  $r_s$ . Если было выполнено условие  $r_s \geq \bar{s}$ , то частица фиксировалась в текущей позиции и ячейка становилась занятой. В качестве окрестности частицы рассматривалась окрестность Неймана порядка 1 (рисунок 4.2).

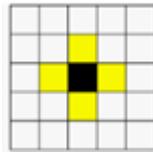


Рисунок 4.2 – Окрестность Неймана порядка 1 [136].

Итерационный процесс заканчивался (шаг 5), если выполнилось одного из взаимоисключающих условий:  $\bar{\rho}_{pt} - \bar{\rho}_p < \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  – требуемая погрешность  $N_{pt} = N_p$ ,  $D_{ft} - D_f < \varepsilon$ . Указанные условия окончания позволили провести количественную оценку результатов моделирования.

Параметром модели, позволившим учесть тепловые характеристики моделируемой системы являлась относительная вероятность прилипания ( $\bar{s}$ ) [137].

С физической точки зрения процесс формирования рельефа образца РbТе под действием лазерного излучения можно рассматривать как процесс диффузии дефектов. В таком приближении под вероятностью прилипания  $\bar{s}$  будем понимать величину, обратную относительному коэффициенту подвижности дефекта ( $\bar{B}$ ):

$$\bar{B} \sim \frac{\bar{B}_0}{\bar{s}}, \quad (4.2)$$

где  $\bar{B}_0$  - коэффициент нормировки. Положим, что коэффициент подвижности дефектов пропорционален частоте перескоков дефектов [86]:

$$B \sim \Gamma_v = \Gamma_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_b T}\right), \quad (4.3)$$

где  $\Gamma_0$  - коэффициент пропорциональности,  $E_a$  - энергия активации перемещения дефекта,  $k_b$  - постоянная Больцмана.

Тогда

$$\bar{s} \sim \bar{s}_0 \exp\left(\frac{A_0}{T}\right), \quad (4.4)$$

где  $\bar{s}_0$  - коэффициент нормировки,  $A_0 = \frac{E_a}{k_b}$  - коэффициент пропорциональности,  $E_a$  - энергия активации перемещения вакансии,  $k_b$  - постоянная Больцмана,  $\bar{T} = \frac{T}{T_s}$  - относительная температура,  $T$  - температура,  $T_s$  - нормирующий коэффициент температуры.

Таким образом, по мере увеличения температуры коэффициент подвижности будет возрастать (рисунок 4.3а), а величина вероятности прилипания уменьшаться (рисунок 4.3б). Их поведение изображено на рисунке 4.4 при  $\bar{s}_0 = \bar{B}_0 = \frac{1}{L} = \frac{1}{100}$ ,  $A_0 = 1,6$ ,  $T$  из рисунка 4.11.

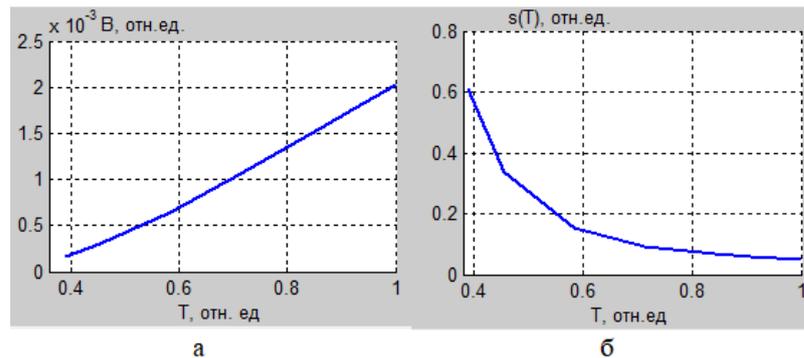


Рисунок 4.3 – Зависимость параметров модели DLA от относительной температуры: относительный коэффициент подвижности(а), вероятность прилипания(б)

Указанный выше алгоритм был реализован в среде MATLAB и позволил оценить влияние модельных параметров на результирующие расчетные

структуры .

Так из рисунка 4.4 можно оценить влияние количества начальных зародышей и величины вероятности прилипания на результирующие структуры при использовании окрестности Неймана на расчетной области величиной  $100 \times 100$  отн.ед. На рисунке 4.4а приведено начальное случайное распределение 17 затравочных частиц, начиная с которых происходит моделирование роста нанокластерных агрегатов для рисунка 4.4б. На рисунке 4.4б изображена итоговая модельная структура для вероятности прилипания  $\bar{s}=0,9$ . На рисунке 4.4в приведена итоговая структура при  $\bar{s} = 0,5$ , когда рост начинался от 12 случайно расположенных затравочных частиц. Рисунки 4.4б и 4.4в были получены после введения в расчетную область  $10^4$  модельных частиц.

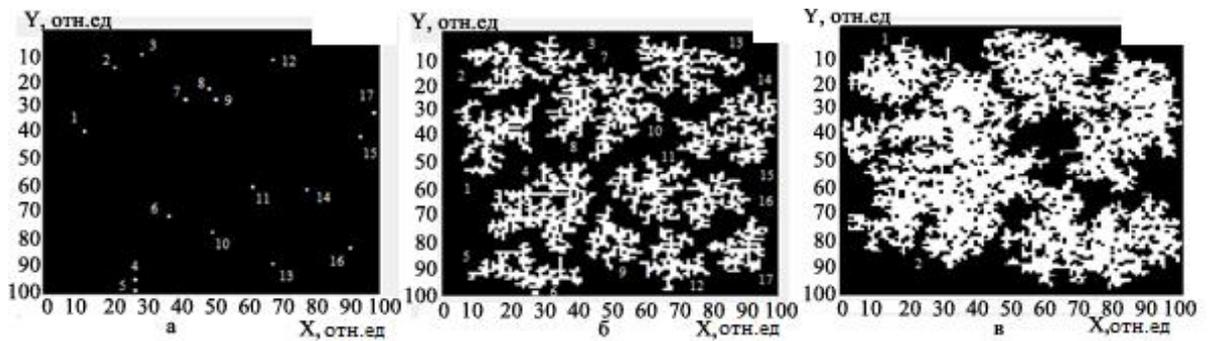


Рисунок 4.4 – DLA модель нанокластерных/островковых пленок: начальное распределение из 17 затравочных частиц (а), итоговая структура при  $\bar{s}=0,9$  для начальных условий из рисунка 4.4а (б), итоговая структура при  $\bar{s}=0,5$  при случайном распределении 12 затравочных частиц (в).

Таким образом, из рисунков 4.4б и 4.4в очевидно, что вероятность прилипания сильно влияет на форму смоделированной структуры [138]. При ее высоком значении даже в случае большого числа затравочных частиц система итоговых нанокластеров/островков не имеет единой структуры, а значит ее топология не связная. Так, на рисунке 4.4б при достаточно высоком значении  $\bar{s}$  17 затравочных частиц в итоге образовали 17 островков, не соединенных друг с другом. С другой стороны, в случае малой величины вероятности прилипания за аналогичное время, даже при меньшем количестве затравочных частиц, нанокластеры/островки успевают образовать друг с другом единую структуру

или вообще несколько структур со связными топологиями. Так, на рисунке 4.4в при  $\bar{s} = 0,5$  изображена итоговая нанокластерная/островковая пленка из 2 островков, полученная из 12 затравочных частиц.

Таким образом, случае роста нанокластеров из первоначально однородной системы (рисунок 4.4а), одновременно возникает нескольких кластеров, и их рост реализуется за счёт поглощения мелких частиц, а также агрегации уже сформированных структур друг с другом. Такие условия позволяют получать хорошо сформированные нанокластерные/островковые пленки, сходные с образцами, синтезируемыми в случаях большого количества проходов лазерного пучка и достаточно медленного его движения и достаточно длительного времени воздействия.

Стандартная модель также позволяет ввести в рассмотрение параметр относительной максимальной длины диффузии дефекта  $\bar{l}_{md}$ . Он в относительном виде определяет максимальный путь, который пройдет модельная частица до фиксации. Таким образом, после каждого случайного единичного смещения текущая длина пути диффузии:

$$\bar{l}_{dt} = \sum \bar{\Delta}l = \sum \sqrt{2\bar{D}\bar{\tau}}, \quad (4.5)$$

где  $\bar{D}$  – относительный коэффициент диффузии,  $\bar{\tau}$  – относительное время диффузии, увеличивается на единицу:  $\bar{l}_{dt} = \bar{l}_{dt} + 1$ . Тогда в случае наступления события  $\bar{l}_{dt} = \bar{l}_{md}$  блуждающая частица фиксируется в текущей ячейки независимо от состояния своей окрестности. Поведение температурной зависимости максимальной длины диффузии аналогичное коэффициенту подвижности: она увеличивается по мере увеличения температуры.

На рисунке 4.5 приведены модели фрактальных структур, построенные с использованием модифицированного базового DLA приближения, учитывающего относительную максимальную длину диффузии. Объекты были построены, начиная от 5 случайно расположенных зародышей, при одинаковом значении вероятности прилипания  $\bar{s} = 0,402$ , когда критерием окончания расчета служило

достижение требуемой относительной поверхностной плотности частиц:  $\bar{\rho}_p=5,17$  с учетом  $\varepsilon = 10^{-2}$  при  $\bar{N}_p=5170$  частиц.

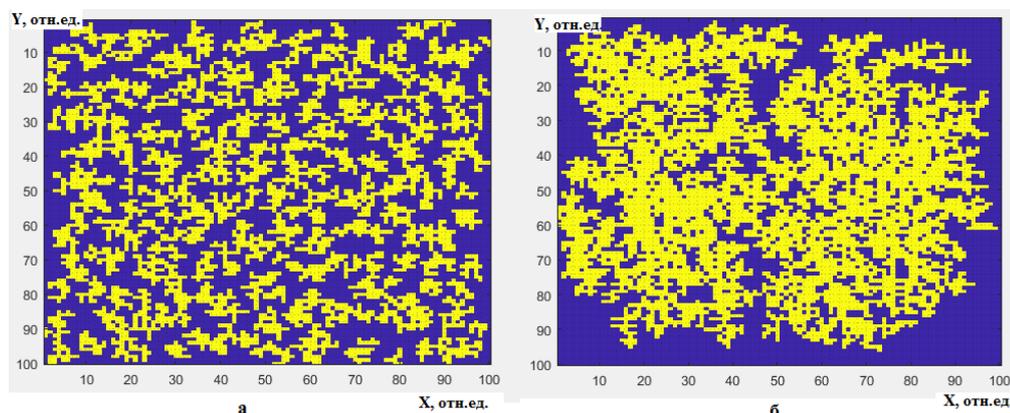


Рисунок 4.5 – DLA модель кластерной структуры при различных относительных максимальных длинах диффузии:  $\bar{l}_{md} = 10^2$  отн.ед (а),  $\bar{l}_{md} = 10^6$  отн.ед.

Сравнивая рисунки 4.5а и 4.5б можно заключить, что величина максимальной длины диффузии существенно влияет на структуру кластерного объекта. При низких значениях длины диффузии формируется несвязная система кластеров, состоящая из множества объектов различного размера ( $D_f$ ) [139]. При высоких значениях длины диффузии получаемая система кластеров обладает связной структурой, когда кластеры объединены в единую структуру (рисунок 4.5б). Этот факт также подтверждается небольшим увеличением значений фрактальной размерности. Для системы кластеров из рисунка 4.5а значение  $D_f=1,74$ , а из рисунка 4.5б –  $D_f=1,78$ . Таким образом, приращение длины диффузии на  $10^4$  вызывает приращение фрактальной размерности на  $4 \cdot 10^{-2}$ . Такие небольшие приращения фрактальной размерности обусловлены тем, что рассматривается замкнутая расчетная область (допущение 3).

Устранить допущение 3 о замкнутости расчетной области и допущение 2 о ее изотропности становится возможным, задав анизотропию расчетной области.

Одним из способов задания анизотропии является разделение расчетной области на ряд подобластей [140]. Таким образом, можно рассматривать следующие круговые подобласти:

1. область зарождения ( $R_p$ ), в которой генерируется новая частица,
2. внешняя область ( $R_e$ ), расположенная достаточно далеко от формируемого кластера, выход из которой приводит к уничтожению блуждающей частицы,
3. минимальная область покрытия кластерного агрегата ( $R_b$ ), которая охватывает весь агрегат (рисунок 4.76 [141]).

Таким образом, выделяется область, в которой не возможно формирование кластерного агрегата.

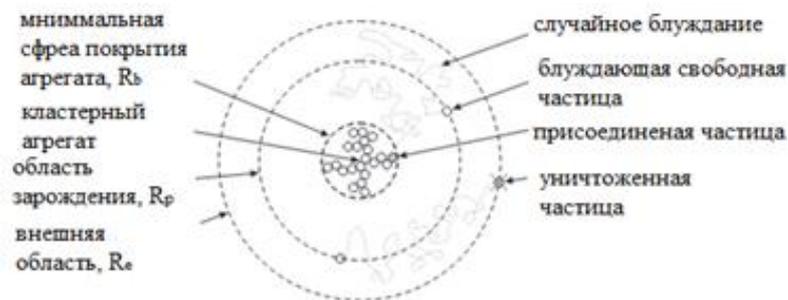


Рисунок 4.6 – Схема DLA для двумерного случая с разбиением расчетной области на круговые подобласти [140].

Влияние величины вероятности прилипания на форму кластера и его фрактальную размерность можно оценить из рисунка 4.7. На рисунке 4.7 приведены изображения отдельных кластеров, полученные с использованием схемы DLA при условии учета анизотропии расчетной области (рисунок 4.6). В расчетах во время случайных блужданий частица совершала равновероятные смещения и рассматривалась окрестность Неймана. Расчетная область выбиралась размером  $330 \times 330$  отн.ед.,  $R_p = 100$  отн.ед.,  $R_e = 150$  отн.ед., всего было выпущено  $10^5$  модельных частиц. В расчетах варьировалась вероятность прилипания ( $\bar{s}$ ) и количество стартовых зародышевых структур, расположенных в центральной подобласти расчетной области. Для полученных фрактальных объектов оценивалась их фрактальная размерность ( $D_f$ ), и число образующих их частиц ( $\overline{N_p}$ ). Анализируя динамику процесса образования кластеров, можно установить, что в начале процесса образовывалось большое число кластеров малого размера. В дальнейшем они объединялись в обширные агрегаты.

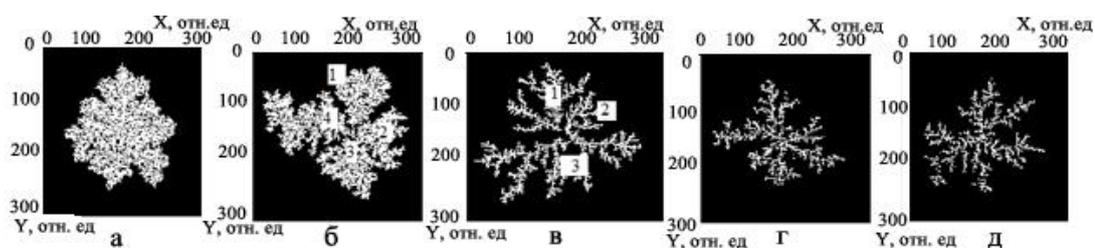


Рисунок 4.7 – Модельные изображения кластеров:  $\bar{s}=0,01$ ,  $D_f=2,02$ ,  $\bar{N}_p=9007$  шт.

(а),  $\bar{s}=0,03$ ,  $D_f=1,9412$ ,  $\bar{N}_p=5391$  шт. (б),  $\bar{s}=0,3$ ,  $D_f=1,8137$ ,  $\bar{N}_p=3052$  шт. (в),  $\bar{s}=0,5$ ,  $D_f=1,7845$ ,  $\bar{N}_p=2705$  шт. (г),  $\bar{s}=0,6$ ,  $D_f=1,7839$ ,  $\bar{N}_p=2679$  шт. (д).

Так, на рисунке 4.9в первоначально были заданы три единичные зародышевые структуры (отмечены цифрами 1, 2, 3). Две из них (вторая и третья) в итоге объединились в один кластер, обладающий достаточно высоким значением фрактальной размерности. На рисунке 4.7б из четырех зародышевых структур, отмеченных цифрами 1, 2, 3, 4, сформировался единый кластер. Таким образом, при низком значении вероятности прилипания до момента присоединения к кластеру частицы проходили дальше по расчётной области, в отличие от случая высокого значения вероятности прилипания. При достаточно высоком значении вероятности прилипания фрактальные кластеры будут иметь достаточно рыхлую структуру и сильно изрезанную границу (рисунки 4.7в,г,д) с меньшим значением фрактальной размерности, по сравнению с кластерами, полученными при низких значениях вероятности прилипания, которые имеют хорошо заполненную структуру и достаточно гладкие границы, и как следствие большую фрактальную размерность (рисунки 4.7а,б) [141]. Таким образом, параметр вероятности прилипания позволяет учитывать интенсивность термодиффузии в моделируемой системе. Его величина существенно влияет на форму нанокластеров/островков нанопленки: при ее малых значениях генерируются кластеры с высокими степенями заполнения, а при больших значениях – с низкими степенями заполнения. Степень разветвленности структуры (величина и количество ветвей), выраженная величинами фрактальной размерности, характеризующими неоднородность, пропорциональна вероятности прилипания (рисунки 4.7) [142].

Так количество основных ветвей  $N_{bm}$  одиночного кластера может оцениваться в зависимости от фрактальной размерности на основе соотношения:

$$N_{bm}(D_f) = \left\lfloor \frac{2}{D_f - 1} + 1 \right\rfloor + 1, \quad (4.6)$$

где  $\lfloor \cdot \rfloor$  – взятие целой части числа.

Выполненные вычислительные эксперименты и их статистическая обработка показали, что модель агрегации, ограниченной диффузией (DLA) позволяет получать фрактальные кластеры с размерностями в пределах от 1,67 до  $2,02 \pm 0,03$  при варьировании вероятности прилипания  $\bar{s}$  на  $[1; 0,01]$  (рисунок 4.8). Подлученная зависимость может быть сведена методом наименьших квадратов к функции (рисунок 4.8б):

$$D_f(\bar{s}) = -0,0558 \ln(\bar{s}) + 1,7343 \quad (4.7)$$

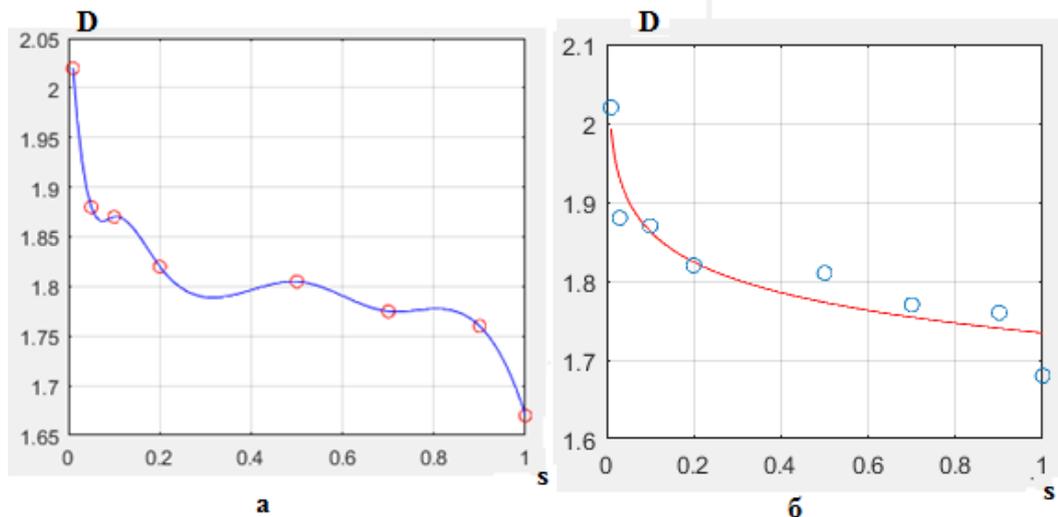


Рисунок 4.8– Зависимость фрактальной размерности ( $D_f$ ) от величины вероятности прилипания ( $\bar{s}$ ) (круги – значения, линия – аппроксимация) : с учетом аппроксимации кубическими сплайнами среды MATLAB(а), в приближении к логарифмической зависимости по методу наименьших квадратов (б).

В свою очередь зависимость фрактальной размерности от температуры, определенная через вероятность прилипания (формула 4.4) имеет следующий вид:

$$D_f(T) \sim \frac{Y_0}{T} + Y_1, \quad (4.8)$$

где  $Y_0$  и  $Y_1$  – коэффициенты пропорциональности.

Так, например, для зависимостей с параметрами из рисунка 4.3 с учетом формулы 4.8 зависимость фрактальной размерности от температуры имеет вид (рисунок 4.9):

$$D_f(\bar{T}) \sim \frac{-9,28 \cdot 10^{-4}}{\bar{T}} + 1,7343. \quad (4.9)$$

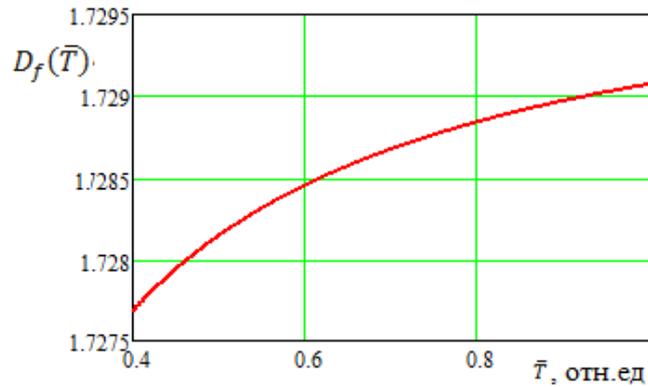


Рисунок 4.9 – Зависимость фрактальной размерности ( $D_f$ ) от относительной температуры ( $\bar{T}$ )

Анизотропию расчетной области можно задать, определив не равновероятные единичные случайные смещения частицы во время ее блуждания. Такой способ учета анизотропии позволяет задать направление диффузии частиц в область нагрева как повышенную вероятность случайных смещений.

Так на рисунке 4.10 приведен расчет в рамках схемы DLA из рисунка 4.10 в случае неравновероятных смещений от единичного зародыша, расположенного в центре расчетной области.

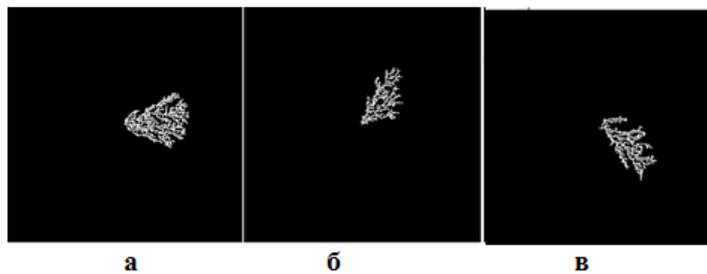


Рисунок 4.10 – Модельные изображения кластеров при  $\bar{s} = 1$  в случае неравновероятных смещений: вероятности смещения вверх и вниз одинаковые по 0,25, влево – 0,05, вправо – 0,45(а); вверх – 0,45, вниз – 0,05, влево – 0,05, вправо – 0,45(б); вверх – 0,03, вниз – 0,22, влево – 0,05, вправо – 0,45(в).

Из рисунка 4.10 очевидно, что рост кластера реализуется по направлениям с максимальными вероятностями единичных смещений. Таким образом, область воздействия излучения находится справа от центра для модели из рисунка 4.10а, вверху на правой диагонали для модели из рисунка 4.10б, внизу на левой диагонали для модели из рисунка 4.10в.

Анизотропия расчетной области также может быть задана через определение поля температуры. Тогда, имея распределение температуры в плоском случае в виде системы изотермических областей, становится возможной оценка вероятности прилипания для блуждающей частицы в случае попадания в ту или иную изотермическую область [143]. Для определения поля температуры используем модель нагревания движущимся источником непосредственно для образца PbTe. Поскольку длина тепловой диффузии по нормали к поверхности за время прохождения лазерного пучка ( $\sim 1$  мм) оценивалась величиной много больше длины поглощения лазерного излучения ( $\sim 10$  мкм), то источник тепла можно считать поверхностным [144]. Кроме этого, источник излучения обладал достаточно большой скоростью движения, поэтому тепловыми потерями можно пренебречь и рассмотреть плоский случай без учета тепловых потоков. Также в виде того, что толщина прогреваемого слоя много меньше толщины эпитаксиальной пленки, то можно пренебречь влиянием подложки.

Таким образом, предлагаемая модель обладает следующими допущениями:

1. Рассматривается плоский случай на квадратной расчетной области.
2. Тепловые потери и влияние подложки на поле температуры не учитываются.
3. Граничные условия задаются условиями I-рода: на границах поддерживается постоянная температура.
4. Рассматривается квазистационарный случай.

Поле температуры для PbTe было построено с использованием среды Matlab путем применением специализированных функций, размещенных в MatlabLaserToolbox [145]. Распределение интенсивности лазерного излучения в форме гауссова пучка на плоскости облучаемой пленки задавалось в виде:

$$I(x, y) = \frac{8P}{\pi d_{\text{п}}^2} \exp \left[ - \left( \frac{2\sqrt{2}}{d_{\text{п}}} \right)^2 (x^2 + y^2) \right], \quad (4.10)$$

где  $P$  – мощность лазерного излучения,  $d_{\text{п}}$  – диаметр пучка на поверхности мишени.

Поле температуры движущегося источника имело вид:

$$T(x, y) = \iint_{-\infty}^{\infty} AI(x', y')W(x, y, x', y', v)dx'dy', \quad (4.11)$$

где  $W(x, y, z, x', y', v) = \frac{1}{2\pi KR} \exp(-\frac{v}{2a}(x - x' + R))$  и  $R = \sqrt{x^2 + y^2}$ , где  $A$  – поглощательная способность материала,  $K$  – теплопроводность (Вт/м\*К),  $a=K/\rho c_p$  – температуропроводность (м<sup>2</sup>/с) материала,  $v$  – скорость сканирования (м/с).  $\rho$  – плотность(кг/м<sup>3</sup>) и  $c_p$  – удельная теплоемкость. Выражение (4.11) вычислялось с использованием быстрого преобразования Фурье (БПФ) [145].

Были проведены расчеты распределения температурного поля на поверхности мишени из теллурида свинца [146] для параметров  $A=0.01$ ,  $K=2.3$  Вт/(м\*К),  $\rho=8200$  кг/м<sup>3</sup>,  $c_p=151$  Дж/(кг\*К) на квадратной расчетной области размером 400 мкм.

Например, результаты расчетов для случая лазерного воздействия с мощностью  $P = 8$  Вт при диаметрах пучка  $d_{\text{п}}=30$  мкм и  $d_{\text{п}}=100$  мкм при скорости сканирования 80 мкм/с приведены на рисунке 4.11. Источник излучения был приложен к центру расчетной области. Начальная температура пластины составляла 300 К. Из приведенного рисунка видно, что в случае диаметра пятна 30 мкм максимальная температура в центре пятна составляет  $776 \pm 0,2$  К, что значительно меньше температуры плавления теллурида свинца (1190 К). С увеличением диаметра пучка температурное поле значительно расширяется, но температура существенно понижается до  $420 \pm 0,2$  К в центре пятна. Распределение температуры несимметрично на плоскости и вытянуто по направлению движения: материал впереди движущегося источника ( $x > 0$ ) прогревается слабо.

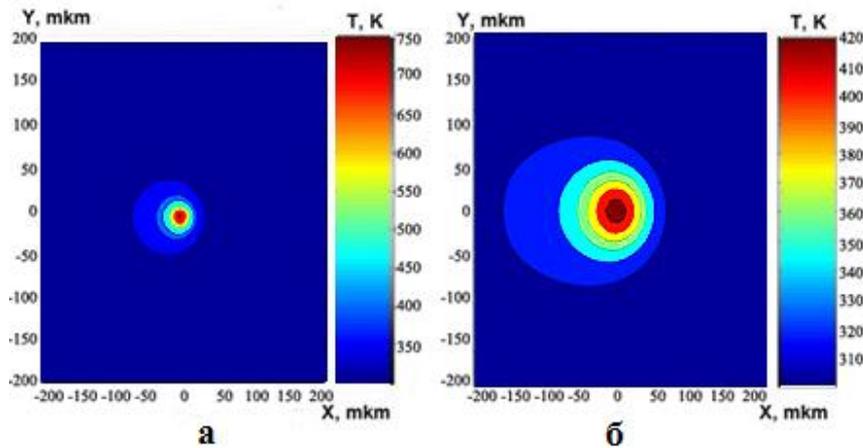


Рисунок 4.11 – Поле температуры на поверхности нанокластерной структуры PbTe при сканировании поверхности со скоростью  $v = 80$  мкм/с источником мощностью  $P = 8$  Вт, диаметр пучка  $d_{\text{л}} = 30$  (а) и 100 мкм (б).

Характерная область прогрева (рисунок 4.11) имеет величину порядка площади сечения лазерного пучка на поверхности образца. Ее форма отличается от круглой и является вытянутой по направлению движения источника излучения. Температура области прогрева слабо затухает, причем длина вытянутой части не превосходит четверти длины области прогрева. В центре лазерного пятна за время 0.1с температура достигает значения  $771 \pm 0.2$  К после чего, за 1 с плавно увеличивается до максимального значения  $776 \pm 0.2$  К (рисунок 4.12). Полученная зависимость аппроксимировалась к логарифмической методом наименьших квадратов как :

$$T(t) = 2,1605 \ln(t) + 776,5014. \quad (4.12)$$

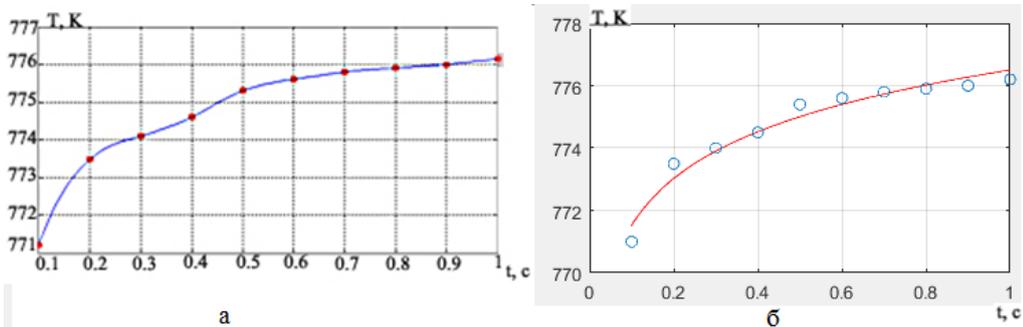


Рисунок 4.12 – Зависимость температуры от времени в центре лазерного пятна от времени для рисунка 2.3 (а), интерполированная кубическими сплайнами в среде MATLAB с погрешностью 0,2 К(а), аппроксимация к логарифмической зависимости методом наименьших квадратов(б) .

Так на рисунке 4.13 приведена модель DLA с учетом смоделированного поля температуры из рисунка 4.11а. Таким образом, расчетная область разбивается на 8 изотермических областей, для которых оценивалась вероятность прилипания. Так, вероятность прилипания для областей 1-8 возрастала и принимала значения от 0,01 до 0,6, в соответствии с графиком функции из рисунка 4.3б. Рассматривался случай не равновероятных смещений блуждающих частиц. Направление роста кластера выбиралось по направлению движения пучка лазерного излучения. Направление движения лазерного пучка выражалось через вытяжение формы изотермических областей. Таким образом, полученный фрактал располагался по направлению от наиболее горячей области, вытягивался преимущественно влево по направлению движения пучка лазера и вверх. Для этого вероятность смещения блуждающей частицы влево и вверх задавалась величиной 0,45, вверх – величиной 0,35. В центральных областях (области 1-3 на рисунке 4.13) с более высокими температурами величина вероятности прилипания принимала низкие значения, фрактальный кластер обладал хорошо заполненной достаточно однородной структурой с высокой фрактальной размерностью. По мере удаления от нагретых центральных областей структура кластера становилась более неоднородной, разветвленной, появляются лакуны, фрактальная размерность уменьшается.

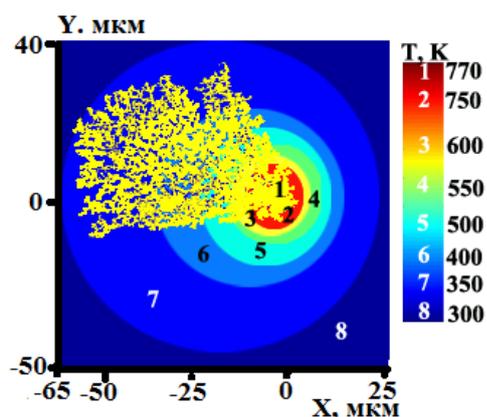


Рисунок 4.13 – Модель кластера DLA заданного направления для изотермических областей: 1-8.

Базовая модель была модифицирована путем введения возможности варьирования размеров частиц, образующих кластерный агрегат. В рамках такого

подхода двигалась единичная частица, а когда реализовывалась ее агрегация и фиксация в текущей ячейке расчетной области занятыми оказывалось заданное количество ячеек из заданного интервала с некоторой вероятностью. Тем самым реализовывался случай гереации кластера из объектов различного размера [147]. Так на рисунке 4.14 приведен случай постоения агрегатов при  $\bar{s}=0,1$  в случае формирования кластера из модельных частиц различного размера. Из рисунка можно заключить, что форма и размер оказывают значительное влияние на структуру кластера: в случае образования кластера из цепочек (рисунок 4.14 б-г) уменьшается количество основных ветвей (с 4 до 1) по сравнению со случаем формирования кластера из единичных частиц (рисунок 4.14а), фрактальная размерность уменьшается на величину порядка 0,1 ( $D_f=1,8$  для рисунка 4.14а и  $D_f=1,7$  для рисунков 4.14б-г ). В случае формирования кластера из образующих различных форм и размеров (рисунок 4.14д) количество ветвей и фрактальная размерность не меняются по сравнению со случаем формирования из единичных частиц. Кроме того направление формирования кластера зависит от направления образующие его элементов. Так, например, в случае образующих горизонтальных цепочек весь кластер также вытянут в горизонтальном направлении (рисунок 4.14в).

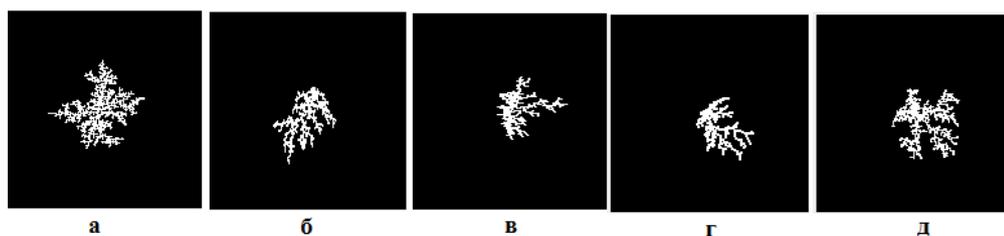


Рисунок 4.14 – Модель кластера DLA в случае различных размеров и форм образующих частиц: образующие – единичные частицы (а), образующие – горизонтальные цепочки из 2 частиц (б), образующие – горизонтальные цепочки из 2 частиц (в), образующие – диагональные цепочки из 2 частиц с направлением слева на право вверх(г), образующие –горизонтальные, вертикальные, диагональные цепочки из 2 частиц и единичные частицы, которые генерировались с заданной вероятностью 0,25, 0,35, 0,2, 0,2 соответственно(д).

Модификация базовой модели путем введения разделения образующих частиц позволяет учитывать неоднородность модельной пленки по высоте. Так, используя кластерный анализ, проводилось выделение группы цветов, отображающих разные высоты объектов на изображении. На основе проведенной кластеризации, выполненной на основе алгоритма K-means в среде MATLAB [148], были оценены доли площадей, приходящиеся на эти цвета. Эти доли задавали вероятности образующей частицы быть того или иного цвета из группы. Таким образом, образующие частицы получали значения высот с заданными вероятностями. На рисунке 4.15 приведены результаты указанной выше процедуры.

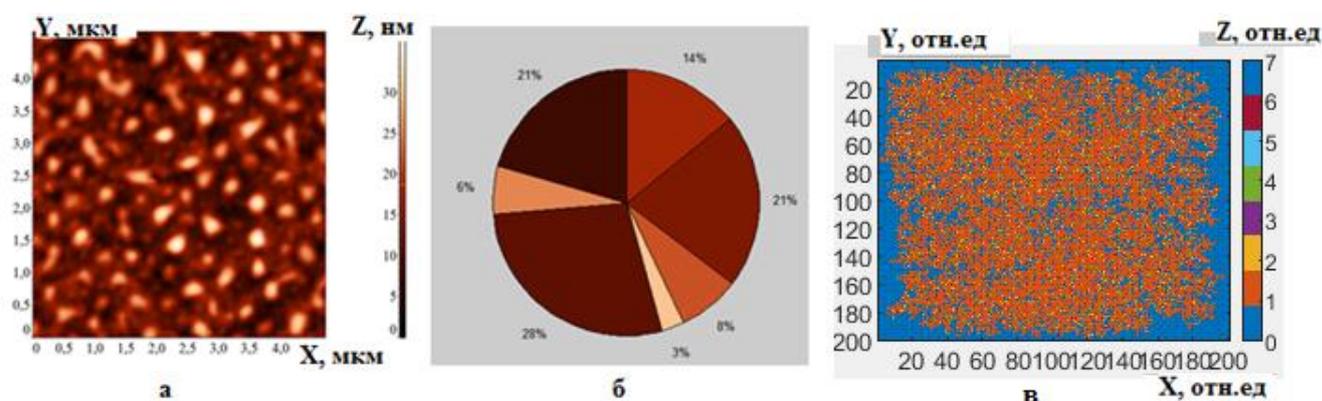


Рисунок 4.15 –Модель DLA нанокластерной структуры с учетом высоты образующих частиц: АСМ изображение (а), распределение долей цветов, определяющих высоты (б), модель DLA(в).

На рисунке 4.15а приведен образец пленки PbTe, на рисунке 4.15б приведено распределение долей цветов, определяющих значения высот в образце, оцененное с использованием кластеризации по алгоритму K-means в среде MATLAB. На рисунке 4.15в приведена DLA-модель образца, где цветами отмечены относительные высоты образующих модельных частиц. Так, вероятность того, что высота частицы меньше 5 нм составляет значение 20%, с вероятностью 28% высота будет находиться в промежутке 5-10 нм, с вероятностью 21% высота будет находиться в промежутке 10-15 нм, с вероятностью 14% высота будет находиться в промежутке 15-20 нм, с вероятностью 8% высота будет находиться в промежутке 20-25 нм, с вероятностью 6% высота будет находиться в

промежутке 25–30 нм, с вероятностью 3% высота будет больше 30 нм (рисунок 4.15б).

На рисунке 4.15в приведена DLA модель структуры при  $s=0,1$  и  $D_f=1,89$  с учетом высоты образующих частиц: маркером 0 – отмечена подложка, маркерами 1– 8 частицы. Маркеры упорядочены по возрастанию вероятностей. Погрешность модели, оцененная как разность фрактальных размерностей модели и образца составила величину порядка  $2 \cdot 10^{-2}$ .

Наконец базовая модель может быть рассмотрена в динамике тепловых параметров путем варьирования во времени вероятности прилипания и максимального пути диффузии. На рисунке 4.16а приведена DLA модель для случая уменьшения вероятности прилипания от 0,6 до 0,01 с течением времени и увеличения пути диффузии от  $10^2$  до  $10^5$  отн.ед., соответственно. Фрактальный кластер был сформирован из  $5,4 \cdot 10^3$  частиц, изменение параметров вероятности прилипания и максимального пути диффузии происходило через каждые 100 относительных временных единиц. Для сравнения на рисунке 4.16б приведен DLA кластер при построенных значениях вероятности прилипания и максимального пути диффузии, равных 0,01 и  $10^2$  соответственно.

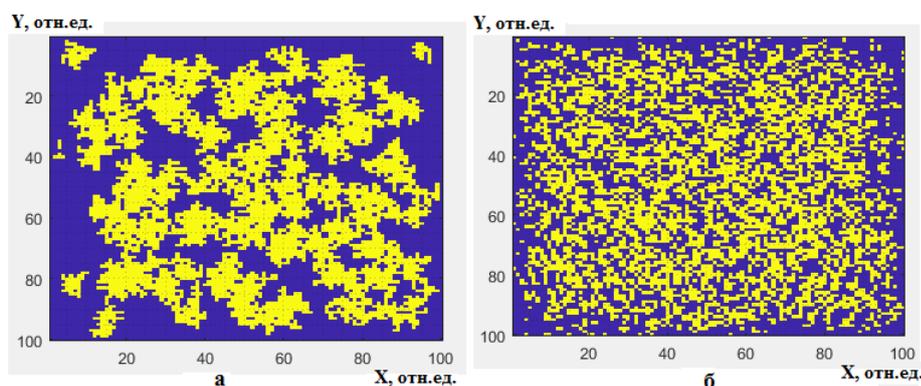


Рисунок 4.16 –Модель DLA кластерной структуры: кластер при динамическом изменении во времени параметров вероятности прилипания и максимального пути диффузии (а), кластер при построенных значениях параметров вероятности прилипания и максимального пути диффузии(б).

Описанные выше модельные приближения были реализованы в среде MATLAB как комплекс программ, позволяющих моделировать структуру

кластерных систем, оценивать фрактальную размерность и производить сравнение результатов с данными экспериментального синтеза.

По предложенным моделям были проведены расчеты структуры осажденных нанокластерных пленок из примере образцов PbTe и проведено сравнение результатов моделирования с данными экспериментального синтеза.

Так, например, модель DLA позволяет моделировать образцы фрактальных нанокластерных/островковых пленок с бимодальным распределением размеров, образующих их объектов. Такой подход позволяет получить достаточно адекватные результаты моделирования для нанокластеров PbTe. Результаты такого моделирования приведены на рисунке 4.17.

В качестве модельного приближения рассматривался случай изотропной расчетной области размером  $200 \times 200$  отн.ед. с температурой 775 К и значениями вероятности прилипания и максимального пути 0,05 и  $10^6$  отн.ед. соответственно. В качестве начальных условий было задано распределение из  $10^3$  зародышевых частиц случайно расположенных в расчетной области. На рисунке 4.17а приведено изображение модели кластерной системы, полученной при указанных выше параметрах

На рисунке 4.7б изображена гистограмма распределения объектов ансамбля по размерам, имеющая бимодальный характер. Результаты этого расчета сравнивались с характеристиками экспериментального образца из рисунка 2.3а главы 2. Производилось соотношения времени формирования структуры нанокластеров и их фрактальной размерности.

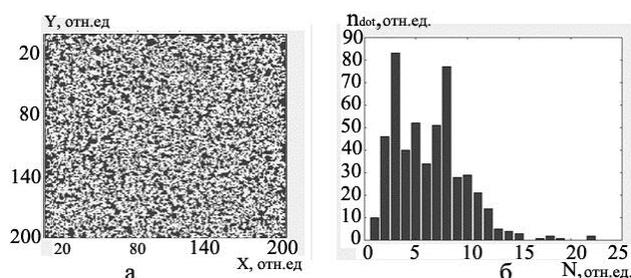


Рисунок 4.17– Модельное изображение нанокластерной/островковой пленки PbTe: модель DLA – КА с окрестностью фон Неймана (а), нормированная гистограмма размеров объектов (б).

Переход к абсолютным единицам позволил оценить абсолютное модельное время как  $t_m = \bar{t}t_0$ , где  $t_0 = \frac{x_0^2}{D_d}$ , где  $x_0$  – характерный пространственный масштаб,  $D_d$  – коэффициент диффузии вакансии,  $\bar{t}$  – относительное время моделирования. Коэффициент диффузии вакансии оценивался как [149]

$$D_d = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_b T}\right), \quad (4.13)$$

где  $E_a=1,6$  эВ – энергия активации,  $D_0=1 \cdot 10^{-6}$  см<sup>2</sup>/с.

Положив  $x_0=1$  нм и  $D_d=6 \cdot 10^{-11}$  см<sup>2</sup>/с, получим  $t_0=0,16 \cdot 10^{-3}$  с. Тогда с учетом  $\bar{t}=2 \cdot 10^3$  отн.ед., разница между  $t_m$  и  $\tau_{irr}$  составила 0,032 с. Таким образом, погрешность расчета времени составила 6,6%.

Для облученной области образца из рисунка 2.3а главы 2 была оценена фрактальная размерность в величину  $D=1,841$ . Фрактальная размерность модели отличалась от  $D$  на величину порядка  $2 \cdot 10^{-2}$ . Полученные величины погрешностей свидетельствует об адекватности применяемой модели для образцов РbTe.

По предложенным алгоритмам также можно смоделировать боковое сечение нанокластерных систем на твердой поверхности [150]. Для этого в расчетной области, с наложенной на нее равномерной сеткой, на границе (например, на нижней) необходимо задать стартовую структуру и повторить шаги DLA алгоритма. Так на рисунке 4.18 приведена модель бокового сечения пленки, позволяющая оценивать высоты системы нанокластеров на твердой поверхности.

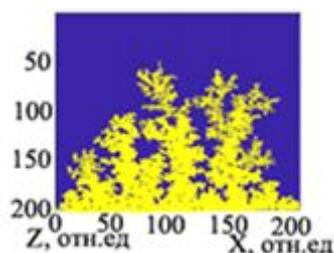


Рисунок 4.18– Модель бокового сечения в приближении DLA: образец РbTe при уменьшении  $\bar{t}$  от 1 до 0,01 в случае нагревания от 300 до 774 К.

Для описания нанокластерных/островковых нанопленок с перколяционным характером рельефа поверхности применялась модель перколяционного фрактала [101]. Фрактальные нанопленки с перколяционной структурой и хорошим

наполнением нанокластеров/островков могут моделироваться в приближении направленной перколяции [101,151,152]. Указанная техника позволяет генерировать кластеры Эдена.

Как и в случае DLA, в модели Эдена кластеры начинают генерироваться от начальной структуры, в заранее заданной точке, расположенной в расчетной области с наложенной на нее равномерной сеткой. В дальнейшем они формируются путем добавления частиц по периметру генерируемой структуры [153].

Таким образом, текущий кластер состоит из занятых ячеек расчетной области и новых присоединенных на текущем шаге. Ячейки присоединяются к сформированной структуре с заданной вероятностью ( $p$ ), если их соседи уже включены в кластер.

Если  $p \approx 1$ , то большинство занятых ячеек образуют кластер, соединяющий границы расчетной области. Существует вероятность  $p_c$  (порог перколяции), когда при  $p \geq p_c$  существует один соединяющий кластер, а для  $p < p_c$  нет ни одного соединяющего кластера [101]. Таким образом, система занятых ячеек образует перколяционный кластер (рисунок 4.19).

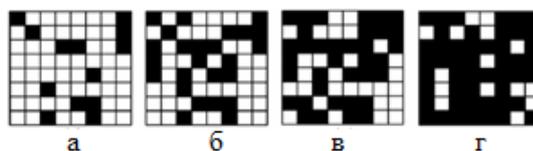


Рисунок 4.19 – Примеры перколяционных кластеров на квадратной решетке при  $p_c = 0,2$  (а),  $0,4$ (б),  $0,6$ (в) и  $0,8$  (г): в среднем доля занятых ячеек соответствует величине  $p$ ; для  $p = 0.6$  выделяется кластер, соединяющий границы расчетной области только в горизонтальном направлении; при  $p = 0,8$  существует кластер, соединяющий границы расчетной области как по вертикали, так и по горизонтали.

Перколяционный кластер может быть построен путем применения клеточного автомата, с различными функциями соседства (окрестностями), когда динамика роста рассматривается в динамике эпох (рисунок 4.20).

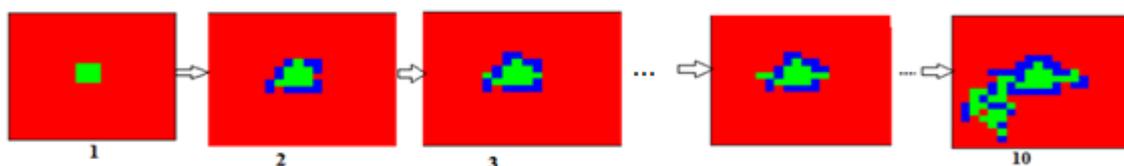


Рисунок 4.20 – Состояние расчетной области клеточного автомата после эпох 1 - 10 при реализации модели направленной перколяции.

На рисунке 4.21 показаны возможные направления роста кластера Эдена, представленные клеточным автоматом с окрестностями Неймана (рисунок 4.21а) и Мура (рисунок 4.21б) порядка 1. Соседей занятого участка определяют как 4 участка (рисунок 4.21а) или как 8 участков роста (рисунок 4.21б). Каждая ячейка, расположенная по периметру, имеет равные шансы быть выбранной и с заданной вероятностью, добавленной в кластер.

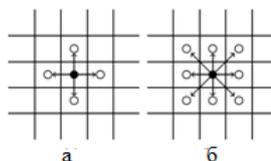


Рисунок 4.21– Схема возможных направлений роста кластера Эдена, в которой в центре закрашенная окружность – затравочная структура, не закрашенные окружности – распространяющиеся частицы. Окрестность Неймана предоставляет 4 направления роста(а), окрестность Мура позволяет использовать 8(б) [153].

В рамках перколяционной модели вероятность  $p$  имеет смысл, аналогичный вероятности прилипания модели DLA.

Указанное выше модельное приближение направленной перколяции было реализовано в среде MATLAB и позволило проводить оценку особенностей кластерных структур в первом приближении

На рисунке 4.22 изображена островковая нанопленка в соответствии с моделью направленной перколяции, реализованная как соединяющий границы расчетной области кластер Эдена в рамках клеточного автомата с окрестностью Мура в расчетной области величиной  $100 \times 100$  отн.ед. при  $p_c=0,5$ . Из приведенных рисунков, очевидно, что характер структуры нанопленки зависит от начального расположения и формы затравочной структуры [154]. Так, например, если затравочная структура располагается в центре (рисунок 4.22а) или в углу (рисунок

4.22в), то границы расчетной области будут охвачены соединяющим кластером всего за 500 эпох. В случае начала распространения процесса формирования нанокластерной пленки от диагонали расчетной области (рисунок 4.22б) за аналогичный период времени будет охвачена только небольшая часть расчетной области и для генерации соединяющего границы кластера будет необходимо уже порядка 3000 эпох. Более того, для формирования соединяющего кластера, распространяющегося от вертикальных и горизонтальных границ потребуется уже 3000 и 6000 эпох соответственно.

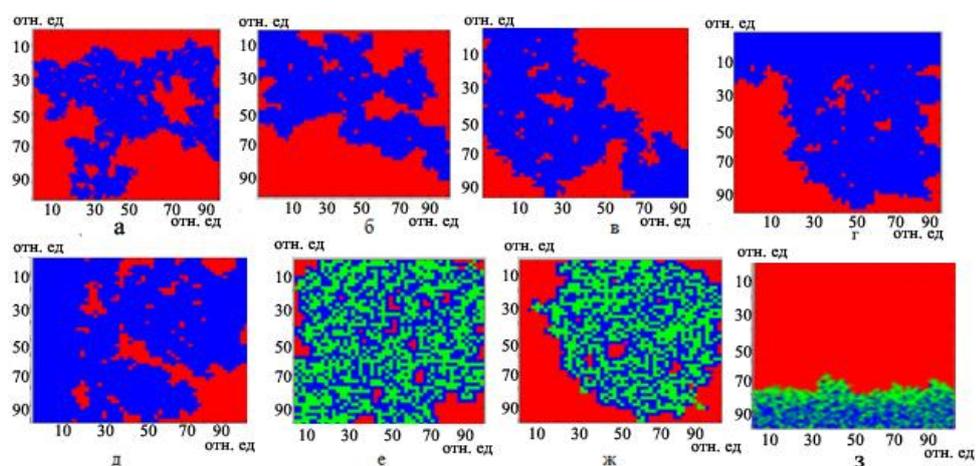


Рисунок 4.22 – Перколяционная модель нанокластерной/островковой пленки при формировании начинающимся: из центра при  $T=500$  (а), от диагонали при  $T=3000$  (б), из правого нижнего угла при  $T=500$  (в), от верхней границы при  $T=6000$  (г) от левой границы при  $T=3000$  (д), от диагонали при  $T=3000$  (е), из центра при  $T=500$  (ж), от границы  $T=100$  (з).

#### 4.2 Связь управляющих параметров схемы лазерного синтеза и модели структуры системы нанокластеров

Оценка влияния управляющих параметров схемы лазерного синтеза на модельные образцы была установлена через анализ их влияния на смоделированное поле температур. Так в относительно сильно нагретых областях моделировались образцы с достаточно однородной, хорошо заполненной

структурой с высокой фрактальной размерностью с высокой поверхностной плотностью наноточек. В менее прогретых областях моделировались образцы с более разреженной неоднородной структурой с более низкой величиной фрактальной размерности с меньшей поверхностной плотностью наноточек. Так, с увеличением мощности прямо пропорционально растет максимальная температура, до которой нагревается образец. Так, анализируя поля температур при фиксированных  $v_{ск}=80$  мкм/с и  $d_{п}=50$  мкм  $\tau_{irr}=0,625$ , зависимость максимальной температуры от мощности на отрезке 6-9 Вт может быть аппроксимирована (рисунок 4.23а) по методу наименьших квадратов как:

$$T_{max}(P) = 50P + 300, (4.14)$$

таким образом, что увеличение мощности на 1 Вт сопровождается увеличением максимальной температуры на 50 К. Кроме этого с увеличением мощности при фиксированных  $v_{ск}$  и  $d_{п}$  реализуется увеличение площадей прогретых до одинаковой температуры областей, которое можно аппроксимировать, например, для области прогретой до температуры 600 К (рисунок 4.23б) как:

$$S(P) = 2,74P - 14,8.$$

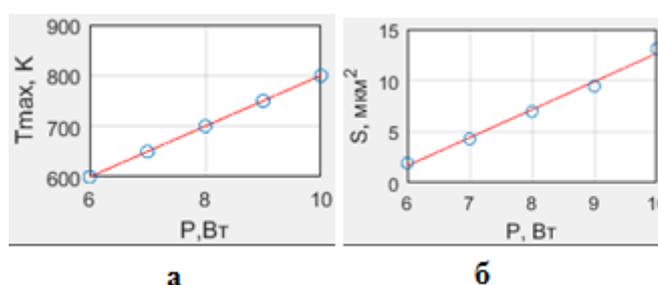


Рисунок 4.23 – Влияние мощности на поле температуры: зависимость максимальной температуры от мощности (а), зависимость площади прогретой области от мощности(б).

При фиксированных значениях  $P$ ,  $d_{п}$  при увеличении  $v_{ск}$  реализуется уменьшение  $t_{irr}$ , форма слабо прогретых областей отклоняется от круговой и становится вытянутой против движения пучка (рисунок 4.24а), эксцентриситет увеличивается (рисунок 4.24б), максимальная температура уменьшается (рисунок 4.25в) и может быть аппроксимирована как:

$$T_{max}(v_{ск}) = -0,75v_{ск} + 745,89. (4.15)$$

Площади областей с одинаковой температурой также уменьшаются, например для подобластей нагретых до 400 К (рисунок 4.24г), их величина может быть аппроксимирована как:

$$S(v_{\text{СК}}) = -0,59v_{\text{СК}} + 194,17. \quad (4.16)$$

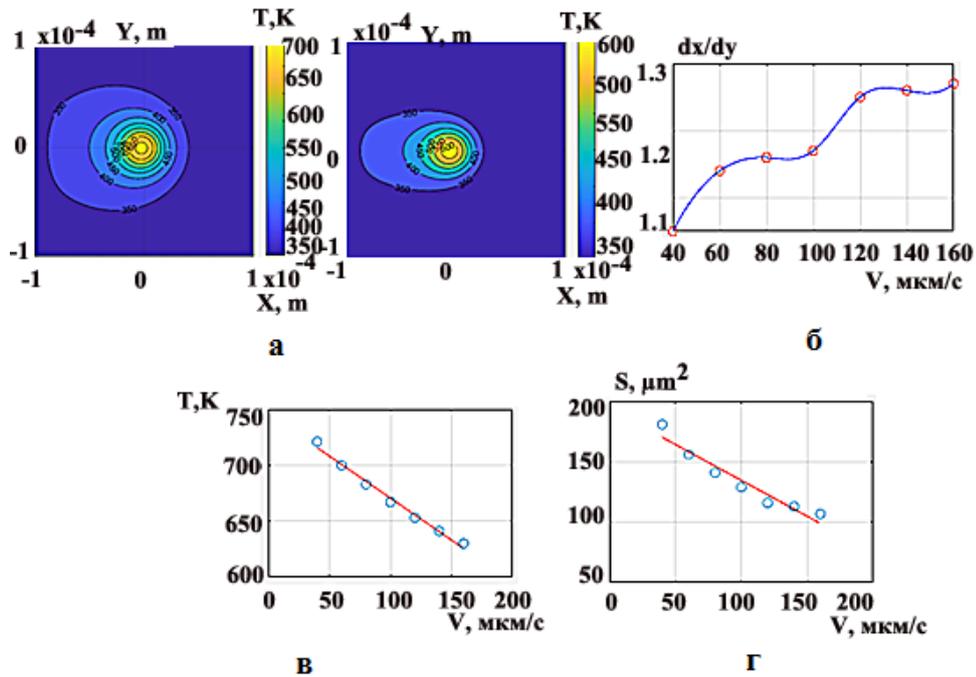


Рисунок 4.24 – Влияние скорости движения пучка на поле температуры при  $P=7$  Вт,  $d_{\text{п}}=50$  мкм: поле температур в случае скорости 40 мкм/с (слева) и 160 мкм/с (справа)(а), зависимость эксцентриситета от скорости при аппроксимации сплайнами(б) зависимость максимальной температуры от скорости(в), зависимость площади прогретой области от скорости (г).

В случае увеличения  $d_{\text{п}}$  при фиксированных  $P=7$  Вт,  $v_{\text{СК}}=80$  мкм/с реализуется увеличение  $\tau_{\text{irr}}$ . По мере увеличения  $d_{\text{п}}$  максимальная температура уменьшается (рисунок 4.25а) и может быть аппроксимирована как:

$$T_{\text{max}}(d_{\text{п}}) = -0,0061d_{\text{п}} + 1,0279. \quad (4.17)$$

В свою очередь площадь нагретой подобласти значительно растет (рисунок 4.25б).

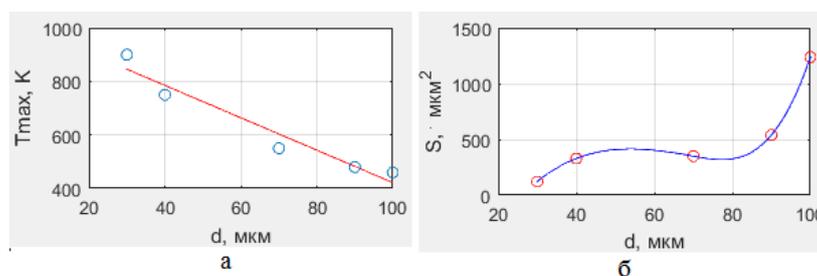


Рисунок 4.25 – Влияние диаметра пучка на поле температуры: зависимость максимальной температуры от диаметра пучка(а), площади областей с одинаковой температурой 350 К (аппроксимация сплайнами) (б).

Таким образом, подставляя полученные зависимости в соотношения для определения вероятности прилипания (формула 4.4) и фрактальной размерности (формула 4.8) становится возможным произвести соотношение модельных параметров и параметров экспериментальной схемы.

Таким образом, модели на основе фракталов позволяют проводить оценку и прогнозирование структурных особенностей получаемых нанопленок.

### 4.3 Математическое моделирование электрофизических свойств нанокластерных/островковых нанопленок

В настоящее время существует ряд стандартных моделей электропроводимости неупорядоченных структур, к которым относятся нанокластерные/островковые нанопленки (см. главу 1). В связи со смешанным характером электропроводимости, выявленным для полученных нами нанокластерных/островковых пленок (см. главу 3), использование стандартных моделей электропроводимости не позволяет получать удовлетворительного совпадения теории и эксперимента.

Ниже предлагается модель электропроводимости на основе стандартных, учитывающая структурные особенности и ее смешанный характер.

Смоделированная система нанокластеров/островков нанопленки в рамках такой модели формирует кластер электропроводимости – площадку, в рамках которой наиболее вероятно протекание тока [155, 156].

Выделение в нем дорожки электропроводимости, по которой возможно протекание электрического тока с учетом структуры смоделированной пленки, позволяет оценить вольт-амперные характеристики (ВАХ).

С точки зрения электропроводимости и топологических особенностей нанокластерные/островковые пленки можно разделить на образцы с достаточно частым расположением нанокластеров/островков, а также на образцы с разреженной структурой.

Первые обладают достаточно густой сетью близко расположенных нанокластеров/островков, соединенных друг с другом «мостиками», формирующими связную топологию, которая позволяет выделить непрерывную дорожку протекания тока. Поэтому их можно причислить к нанопленкам с перколяционным типом электропроводимости.

Вторые образцы обладают системой изолированных друг от друга большими расстояниями нанокластеров/островков, и могут характеризоваться диэлектрическим типом проводимости, при котором кластер электропроводимости образует несвязное множество. Поэтому в таких наноструктурах отсутствует непрерывная дорожка протекания тока.

Для нанокластерных/островковых нанопленок с перколяционным типом электропроводимости ВАХ ( $I$ ) вычислялись по классической формуле закона Ома

$$I = \frac{U}{R}, \quad (4.18)$$

где  $U$  – напряжение,  $R$  – поверхностное сопротивление дорожки проводимости, которое оценивалось как

$$R = \rho l/S, \quad (4.19)$$

где  $\rho$  – удельное электрическое сопротивление материала,  $l$  – длина проводящей дорожки,  $S$  – площадь.

Зависимость силы тока от поверхностной плотности образца ( $n$ ) учитывалась как поправочный коэффициент ( $\gamma$ ):  $\gamma = \frac{n}{n_m}$ , где  $n_m$  – минимальная поверхностная плотность. Таким образом, для образцов 2-5 можно определить зависимость  $I_j = \gamma_j I_{cp}$ , где  $\gamma_j$  – поправочный коэффициент  $j$  образца,  $I_{cp}$  – усредненное значение силы тока. В качестве  $I_{cp}$  можно брать значение минимальное значение, равное  $I_1$ .

Метод оценки длины дорожки протекания тока  $l$  позволяет учитывать в модели структурные особенности нанокластерных/островковых нанопленок. Туннелирование электрона может протекать как по кратчайшей траектории, так и не по ней. В связи с этим были рассмотрены два приближения для оценки длины траектории: оценка ее как кратчайшего расстояния туннелирования и вычисление диаметра окружности минимального покрытия. Так вычисление  $l$  как кратчайшего расстояния между возможными точками приложения напряжения позволяет учесть эффект туннелирования электронов [157, 159].

Для нанопленок со структурой нанокластеров/островков, смоделированной в диффузионном, перколяционном, броуновском и лабиринтном приближениях  $l$  может оцениваться через выделение эластичного остова [160] или скелета кластера [161].

Скелет кластера – объединение всех кратчайших путей от данного узла до узлов на заданном расстоянии. Кратчайшее расстояние от начального узла до всех текущих для перколяционной структуры на прямоугольной расчетной области можно определить как номер текущей итерации [161].

В общем случае нанокластер можно представить как случайный лабиринт, поэтому для выделения его скелета или острова можно применять алгоритмы поиска пути в лабиринте [162]. Например, для выделения ветвей кластера можно использовать алгоритм Грассбергера [163] на основе широко известного «правила левой руки».

Для нахождения частного случая эластичного остова – кратчайшего пути между двумя заданными точками может использоваться популярный алгоритм поиска пути в лабиринте – волновой алгоритм Ли [164].

На рисунке 4.26 изображена схема волнового алгоритма Ли, который состоит из двух фаз: распространение волны и восстановление пути. Распространение волны характеризуется тем, что, начиная со стартовой ячейки соседние с текущей, находящиеся в рамках окрестности Неймана, помечаются числом на единицу большим, чем текущая. Восстановление пути реализуется когда, начиная с финишной ячейки, путь строится как выбор соседних ячеек с меткой на единицу меньшей, чем текущая. Таким образом, длина пути будет соответствовать количеству ячеек расчетной области, из которых он состоит.

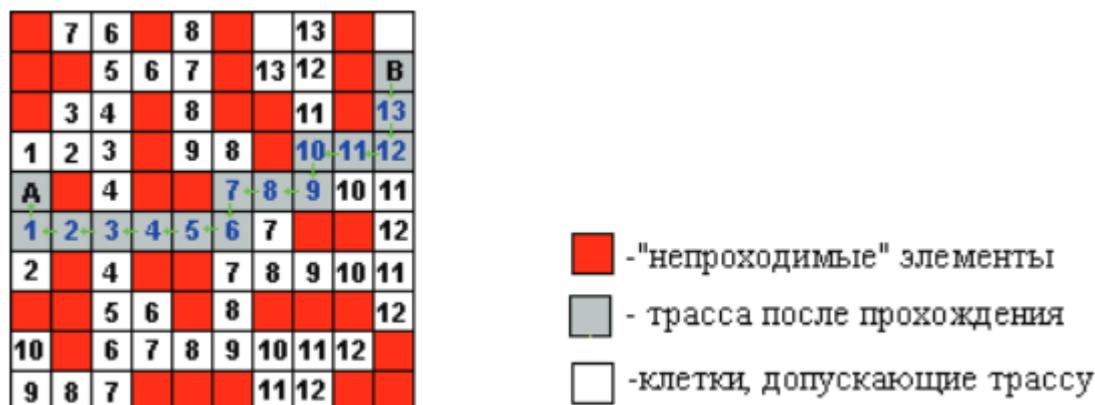


Рисунок 4.26 – Построение дорожки проводимости по алгоритму Ли [164].

На рисунке 4.27а изображена модель островковой пленки PbTe в целях сравнения с образцом 2 из рисунка 3.4а из главы 3. Модель кластерной структуры была построена в рамках DLA приближения при изменении вероятности прилипания во времени на  $[1; 0,01]$  для трех случайно расположенных зародышевых частиц с итоговой поверхностной плотностью  $5,17 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$  с выделенной дорожкой проводимости (AB) длиной 90 отн.ед., определенной по алгоритму Ли. На рисунке 4.27 приведена соответствующая ВАХ при величине гранулы 10 нм и параметре удельного электрического сопротивления  $\rho_{\text{PbTe}} = 2,32 \cdot 10^7 \text{ (Ом} \cdot \text{м)}$  [165], характерным для образца 2 (см. главу 3 рисунок 3.4а). Указанные значения позволяют оценить сопротивление дорожки проводимости как  $0,208 \cdot 10^6 \text{ Ом}$ . Разница между вычисленным значением сопротивления и

смоделированнм составляет величину 5,45%. Разница ВАХ, оцененных на основе среднего значения сопротивления из экспериментальных данных и модельными зависимостями ВАХ составляет величину порядка 5,76%. Полученные погрешности свидетельствуют об адекватности применяемого приближения для описания ВАХ образца 2.

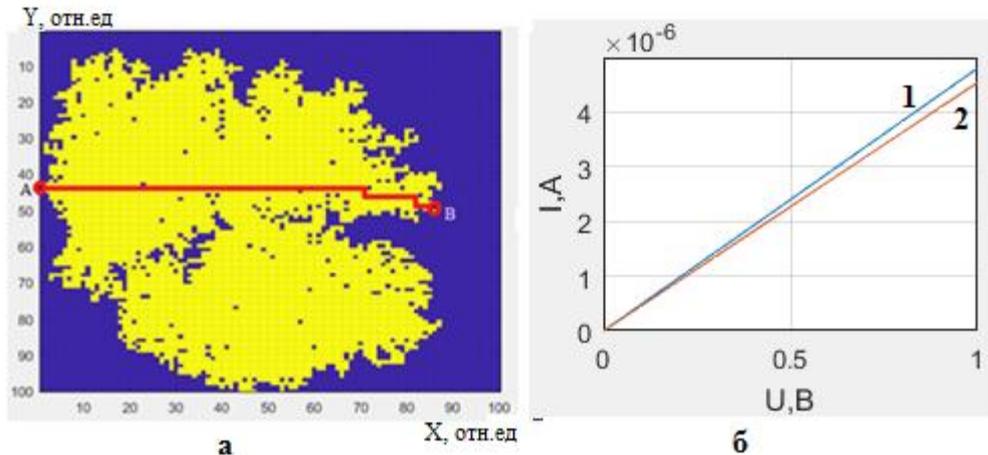


Рисунок 4.27 – Модель пленки PbTe с выделенной дорожкой проводимости (а), ВАХ пленки для дорожки АВ при величине гранулы 10 нм (б): 1 – модельная зависимость, 2 – зависимость на основе оцененного экспериментально среднего сопротивления, вычисленная в приближении закона Ома.

На рисунке 4.28б изображена расчетная ВАХ при величине гранулы 20 нм для модели хорошо сформированной полупроводниковой нанокластерной/островковой пленки PbTe в приближении модели направленной перколяции при  $\beta=0,5$  с поверхностной плотностью  $5,38 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$  на расчетной области величиной  $50 \cdot 50$  отн.ед. (рисунок 4.28а), с выделенной дорожкой проводимости в соответствии с алгоритмом Ли длиной 85 отн.ед. Сравнение проводилось с образцом 4 для которого удельное сопротивление составляло значение  $2,1 \cdot 10^7 \text{ Ом} \cdot \text{м}$ . Для модельной структуры вычисленное сопротивление составило величину  $0,17 \cdot 10^6 \text{ Ом}$ . Разница между вычисленным значением сопротивления и измеренным экспериментально составила значение 10%. Аналогичная разница наблюдалась между значениями ВАХ. Полученные величины погрешности свидетельствуют об адекватности применяемой модели для образца 4.

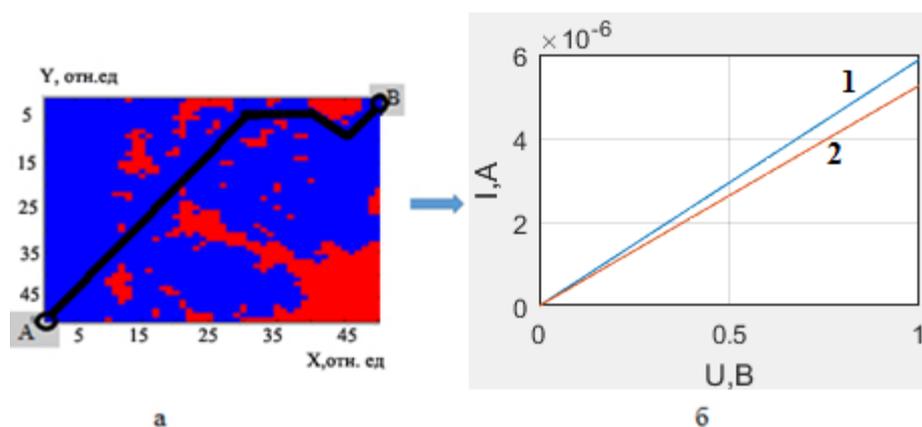


Рисунок 4.28 – Модель нанокластерной/островковой PbTe пленки в приближении направленной перколяции (а), ее ВАХ при величине гранулы 20 нм: 1 – модельная зависимость, 2 – зависимость на основе оцененного экспериментально среднего сопротивления, вычисленная в приближении закона Ома (б).

Результаты расчетов наиболее адекватно соответствуют экспериментально измеренным для образцов 4 и 5 из рисунке 3.4а (см. главу 3).

На рисунке 4.29 изображены модели нанокластеров при различных вероятностях прилипания  $s=1$ , у которых произведено выделение скелета. Он имеет тенденцию к усложнению своей структуры с увеличением величины  $s$  и ведет себя аналогичным образом, что и сам фрактал, его содержащий.

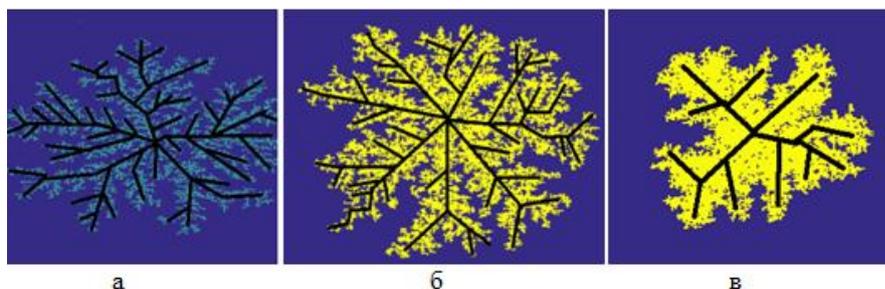


Рисунок 4.29– Скелет нанокластерной пленки при  $s=1$ (а),  $s=0,1$ (б),  $s=0,01$ (в).

Для нанопленок с диэлектрическим типом электропроводимости, с разреженной структурой нанокластеров/островков, нами была разработана модель электропроводимости, реализующая оценку ВАХ с учетом эффекта туннелирования [166] и прыжков зарядов/электронов между островками [167] (они показаны ниже на рисунке 4.30).

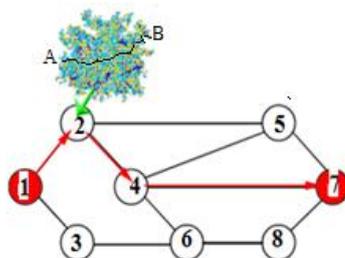


Рисунок 4.30 – Схема модели: к кластерам/островкам 1 и 7 подведено электрическое напряжение; траектория движения тока проходит по островкам 1-2-4-7; внутри островка 2 траектория показана в виде линии АВ.

Расчет ВАХ в указанном случае состоял из 4 этапов:

1. Вычисление длины дорожки проводимости в рамках нанокластера/островка  $L_c$  с учетом его геометрических особенностей.
2. Оценка длины дорожки проводимости между нанокластерами/островками  $L_h$ .
3. Расчет сопротивлений дорожек проводимости в нанокластерах  $R_c$  и между ними  $R_h$ .
4. Расчет вольт-амперных характеристик по закону Ома.

Таким образом, ВАХ нанопленки оценивалась как сумма сил токов, протекающих по нанокластерам/островкам и между ними, вычисленных в соответствии с законом Ома [168]. Сопротивление дорожки проводимости в нанокластере/островке рассчитывалось по классической формуле с учетом того, что длина возможной дорожки прохождения тока должна составлять кратчайшее расстояние между точками приложения напряжения.

Длина дорожки протекания электрического тока в нанокластерах/островках  $L_c$  может оцениваться как кратчайшее расстояние между точками вхождения электрона на них. Для нанопленок со структурой островков, смоделированной в диффузионном, лабиринтном и перколяционном приближениях эту величину можно определить путем выделения скелета кластера (см. выше), или через диаметр окружности минимального покрытия. Второй вариант оценки кажется более удобным по причине отсутствия информации о точках в нанокластерах/островках, с которых стартуют и в которые попадают перемещающиеся между ними электроны. Поэтому удобнее оценивать

усредненную характеристику, которую предоставляет величина диаметра окружности минимального покрытия. Процедура ее расчета состояла из последовательности шагов:

1. Построение выпуклой оболочки нанокластера/островка.
2. Расчет центра многоугольника выпуклой оболочки  $(x_c, y_c)$  как среднего от координат всех его вершин.
3. Поиск максимально удаленной угловой точки  $(x_l, y_l)$ , через оценку расстояния от нее до центра  $r_b = \sqrt{(x_l - x_c)^2 + (y_l - y_c)^2}$ .
4. Расчет диаметра окружности минимального покрытия:  $d_b = 2r_b$ .

Построение выпуклой оболочки осуществлялось в соответствии с алгоритмом Quickhull, реализованным в среде MATLAB [169]. Quickhull [170] состоит из ряда шагов. Задается стартовый многогранник, построенный через точки с максимальными и минимальными координатами, которые войдут во множество вершин выпуклой оболочки. Остальные точки распределяются в списки внешних точек граней. Их образуют ещё не рассмотренные точки, внешние по отношению к плоскости грани. Таким образом, многогранник достраивается до тех пор, пока не останется граней с непустыми списками внешних точек. На рисунке 4.31 для кластера, построенного в приближении DLA при  $s=0,01$ , произведено выделение центра выпуклой оболочки (точка С) с координатами (48, 49), через который проведена окружность минимального покрытия радиусом  $r_b=24$  отн.ед.

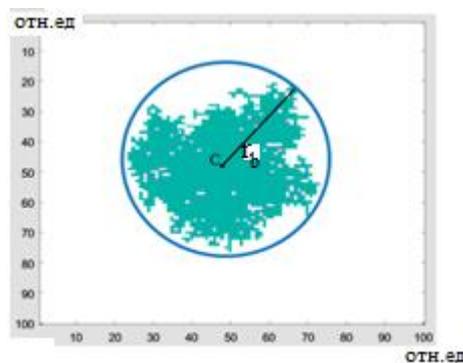


Рисунок 4.31 – DLA кластер с отмеченной окружность минимального покрытия с центром в точке С и радиусом  $r_b$ .

Для определения дорожки электропроводимости между островками использовалось приближение прыжковой проводимости, которое реализовывалось как процесс переноса носителей с учетом локализованных состояний при заданной температуре. Под локализованными состояниями понимались состояния, представленные волновыми функциями, сконцентрированными в ограниченной области пространства и, экспоненциально совпадающие с расстоянием вне нее:

$$\Psi(r) \sim \exp(-r/a_B), \quad (4.20)$$

где  $a_B$  – радиус локализации.

Таким образом, прыжковая проводимость реализовывалась как перенос носителей по локализованным центрам [171].

Прыжковая проводимость может быть описана в рамках подхода Миллера - Абрахамса, когда на основе локализованных волновых функций электрона становится возможно оценить вероятность его перехода между двумя соседними центрами локализации. Далее, вычисляя возникающий ток, можно оценить сопротивление электронного перехода и свести задачу к вычислению электропроводимости эквивалентной сети случайных сопротивлений. Сопротивление, включенное между парой узлов сетки Миллера-Абрахамса [172] имеет вид:

$$R_{ij} = R_{ij}^0 \exp\left(\frac{2r_{ij}}{a} + \frac{\varepsilon_{ij}}{k_B T}\right), \quad (4.21)$$

где  $R_{ij}^0$  – коэффициент пропорциональности,  $r_{ij}$  – расстояние между узлами  $i$  и  $j$  сетки,  $a$  – радиус локализации электрона,  $\varepsilon_{ij}$  – разность энергий электрона на  $i$  и  $j$  узлах,  $k_B$  – постоянная Больцмана.

Сетка Миллера-Абрахамса, соответствовавшая прыжкам электронов, задавалась на основе случайного взвешенного ориентированного графа  $G(V,E)$ , реализованного в среде МАТАВ, без дуг – «петель», где вершины  $V=(v_1, v_2, \dots, v_m)$  соответствовали островкам нанопленки, ребра  $E=(e_1, e_2, \dots, e_n)$  – траекториям тока, а веса  $W=\{w_{ij}\}$  – расстояниям между  $i$  и  $j$  островками [173].

Случайный граф прыжков формировался на основе матрицы смежности из полносвязного графа путем удаления ребер с весами большими величины радиуса локализации электрона.

Длина дорожки проводимости между нанокластерами/островками  $L_n$  определялась по алгоритму Дейкстры [174] как кратчайшее расстояние с минимальным весом. В общем случае алгоритм позволяет найти кратчайшее расстояние от заданной вершины до остальных. Опишем алгоритм Дейкстры на примере нахождения кратчайшего расстояния для заданного графа из рисунка 4.23 от вершины А до G. Определим А как вершину источник. Начальное состояние алгоритма Дейкстры определяется набором меток для вершин графа, а также их свойством посещенная/непосещенная. Под меткой вершины понимается минимальное известное расстояние от нее до вершины источника. Вершина А получает метку 0, а остальные —  $\infty$ . Все вершины графа помечаются как непосещенные. Алгоритм обладает итерационной структурой. Итерация алгоритма описывается как посещение вершины. Условие окончания итерационного процесса – все вершины обладают свойством посещенная. На каждой итерации из непосещенных вершин выбирается вершина U, обладающая наименьшей меткой. Рассматриваются всевозможные маршруты, в которых вершина U является предпоследним пунктом(предшественником). Для каждой непосещенной соседней вершины, относительно U, соединенной с ней ребром, рассматривается новая длина пути, равная сумме значений текущей метки U и веса ребра, соединяющего ее с соседом. Если полученное значение меньше величины метки соседа, метка заменяется этим значением. Если все соседние вершины рассмотрены, то U становится посещенной и производится переход к следующей итерации алгоритма.

На рисунке 4.32 приведен результат поиска кратчайшего пути с использованием алгоритма Дейкстры между вершинами А и G для взвешенного графа. Таким образом, кратчайший путь от вершины А к вершине G содержит вершины {А, В, D, G}, а его вес составляет 11.

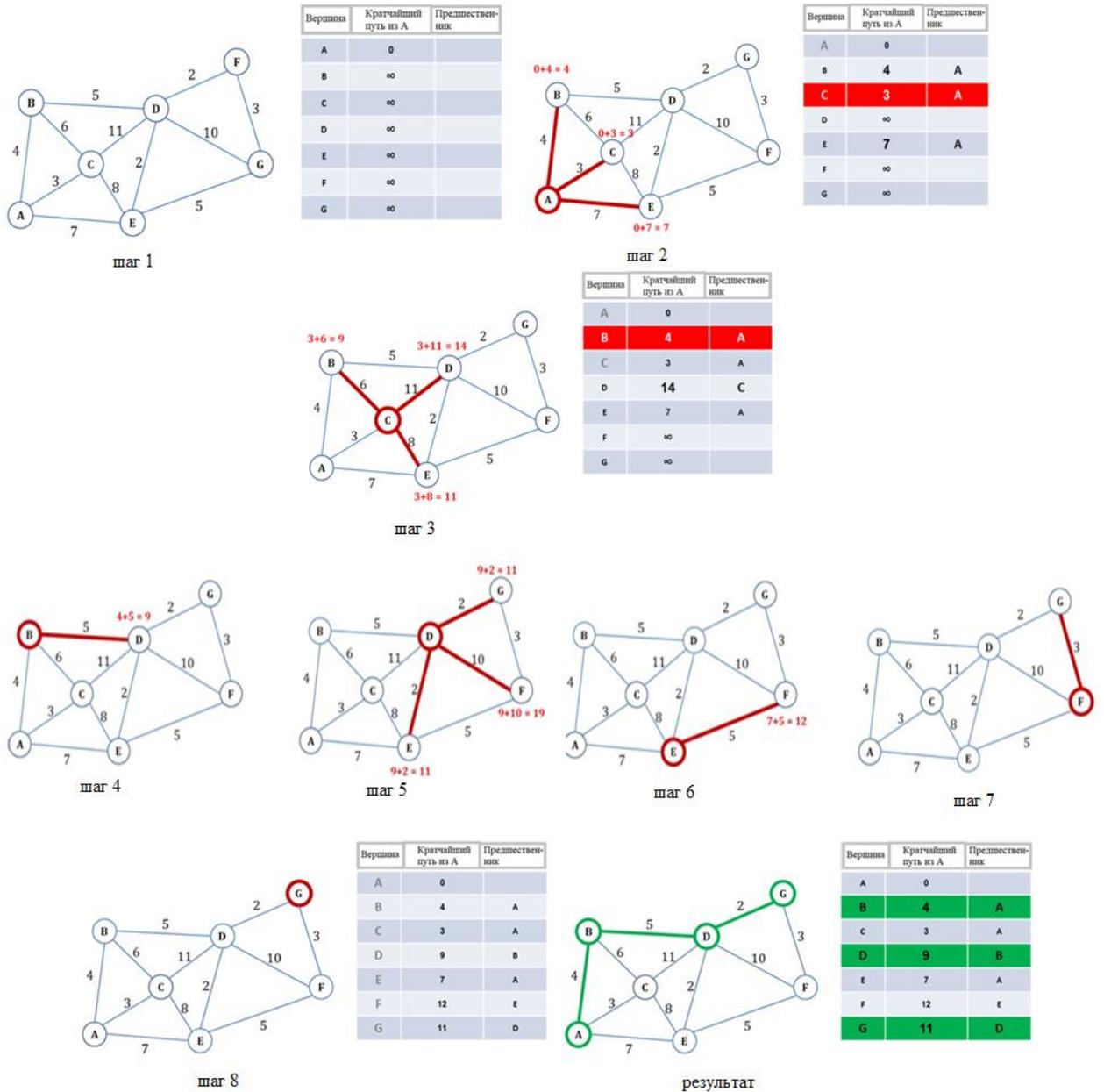


Рисунок 4.32 – Поиск кратчайшего пути по алгоритму Дijkstra.

Сопротивление  $R_h$  для одноэлектронного случая (см. главу 3) вычисляется как

$$R_h = \sum_{i=1}^n R_{ij}, \quad R_{ij} = R_{03} \exp\left(\frac{2w_{ij}}{a} + \frac{\varphi}{k_B T}\right) \quad [172], \quad (4.22)$$

где  $n$  – количество ребер, из которых состоит дорожка проводимости,  $R_{ij}$  – сопротивление ребер, входящих в дорожку проводимости  $L_n$ ;  $R_{03}$  – постоянная, зависящая от радиуса и характера распределения центров локализации островков,  $w_{ij}$  – вес ребра, входящего в дорожку проводимости,  $a$  – радиус локализации электрона,  $\varphi$  – энергия активации проводимости,

T – температура.

Для случайного распределения центров локализации  $R_{03}$  имеет вид:

$$R_{03} = L \frac{\pi \hbar a}{16q^2} \exp\left(\frac{2}{aN^{1/3}}\right), [172] \quad (4.23)$$

где N – концентрация центров локализации, q – заряд электрона,  $\hbar$  – приведенная постоянная Планка, L – масштабный коэффициент.

На рисунке 4.33 приведено модельное изображение пленки PbTe с поверхностной плотностью наноточек, характерной для образца 2 (рисунок 3.4а, глава 3). Для кластеров выделены окружности минимального покрытия (рисунок 4.33а), а также построен соответствующий граф (рисунок 4.33б) прыжков электрона, с приложенным напряжением к точкам А и В с учетом максимальной величины прыжка, равной радиусу локализации для PbTe величиной  $\alpha=50$  нм.

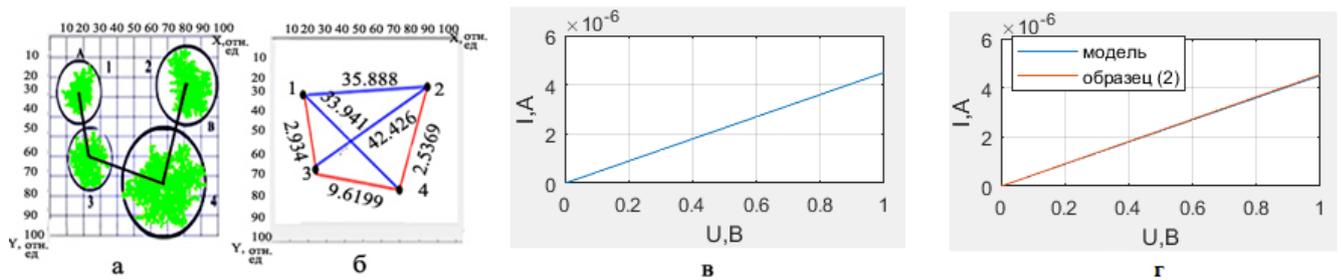


Рисунок 4.33 – Модель островковой пленки PbTe из 4 изолированных островков и ее ВАХ при T=300 К: DLA модель структуры с выделенными окружностями минимального покрытия, А и В точки приложения напряжения(а), граф прыжков электрона(б), соответствующие ВАХ (в), сравнение ВАХ для образца 2, вычисленного по закону Ома с результатами моделирования (г).

Таким образом, общая длина дорожки проводимости по островкам составила величину 140 отн.ед., с учетом величины ячейки расчетной области в 10 нм, ее абсолютное значение – 1400 нм (рисунок 4.33а).

На рисунке 4.33б на графе отмечено кратчайшее расстояние между островками 1 и 2, величина которого составила значение 15,917 нм. Тогда при T=300 К и параметрах, соответствующих образцу 2 (см. рисунок 3.4а, глава 3) PbTe ( $\rho=2,23$  Ом\*м.,  $\phi=0,31$  эВ,  $\alpha=50$  нм,  $N=0,15 \cdot 10^{16}$ ),  $R_h=0,021 \cdot 10^6$  Ом, и

$R_c=0.1909 \cdot 10^6$  Ом и суммарное сопротивление составило величину  $R=0,2119 \cdot 10^6$  Ом.

Величина погрешности расчета оценивались разницей между расчетным ( $R_m$ ) и средним измеренным ( $R_e$ ) сопротивлениями:  $d(R_f)=|R_m - R_e|$ . Величина разницы между сопротивлениями составила 3,8% .

На рисунке 4.33в изображена расчетная ВАХ с учетом вычисленного сопротивления, для отрезка напряжений [0; 1] В при  $\gamma=1$ . На рисунке 4.33г приведено сравнение ВАХ, рассчитанных по закону Ома для образца 2 (рисунок 3.4а, глава 3), с учетом экспериментально измеренных значений сопротивлений, с расчетным значением силы тока. Из указанного рисунка можно сделать вывод об удовлетворительном совпадении результатов экспериментальных измерений и расчета – их разница не превосходит величины 10% .

На рисунке 4.34 приведено модельное изображение пленки PbTe с поверхностной концентрацией наноточек, характерной для образца 3 (рисунок 3.4а, глава 3). На модельном изображении выделены кратчайшие расстояния между заданными точкам в островках (рисунок 4.34а). Напряжение прикладывалось к точкам А, Н , величина ячейки расчетной области полагалось равной 10 нм. Траектория тока по островкам складывалась из кратчайших траекторий АВ, CD, EF, GH, суммарная длина которых составляла величину 1673 нм, а траектория вероятных прыжков – из ВС, DE, GH, суммарно составляла величину 12,27 нм. Тогда при  $T=300$  К и параметрах, соответствующих кластерной структуре PbTe образца 3  $R_h=0,016 \cdot 10^6$  Ом, и  $R_c=0.196 \cdot 10^6$  Ом суммарное сопротивление составляло величину  $R=0,212 \cdot 10^6$  Ом. Оценивая разницу между результатами экспериментального измерения среднего сопротивления и модельного расчета для сопротивления, можно заключить, что она не превосходит величины 6%, что свидетельствует об удовлетворительной степени совпадения результатов моделирования и измерений.

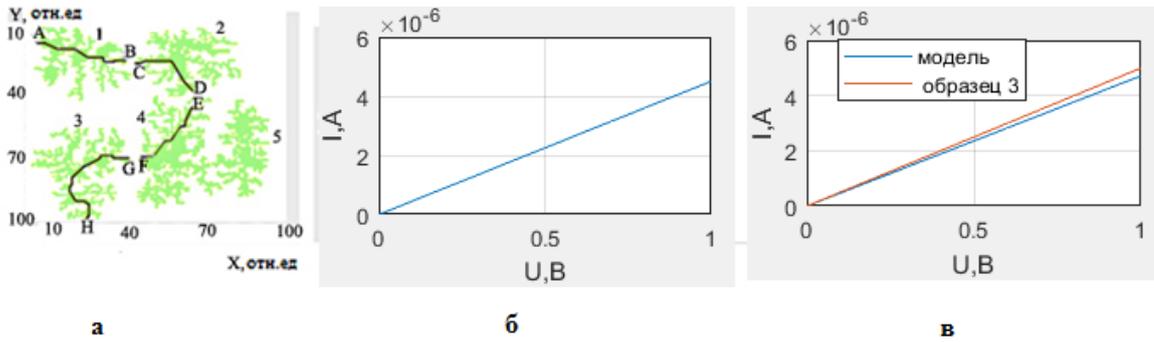


Рисунок 4.34 – Модель островковой пленки PbTe из 5 изолированных островков и ее ВАХ при  $T=328^0$  К: DLA модель структуры с выделенным кратчайшим расстоянием между заданными точками (а), ВАХ (б), разница между расчетным и измеренным сопротивлением  $d(R_f)$  для образца 3(в).

В случае выделения минимальных покрывающих окружностей для модели из рисунка 4.34а получается более длинная суммарная дорожка проводимости, проходящая по нанокластерам/островкам 1-2-4-3. Ее величина составляет значение, 193 отн.ед или 1930 нм, при условии величины ячейки расчетной области, равной 10 нм. Тогда сопротивление составит величину  $0,25 \cdot 10^6$  Ом, в связи с чем ВАХ будет иметь несколько меньшую величину (примерно в 1,2 раза), причем максимальная разница между силами тока, вычисленными с выделением кратчайшего расстояния и минимальными покрывающими окружностями составит  $1,783 \cdot 10^{-7}$  А.

Фрактальная диффузионная модель структуры системы нанокластеров позволяет в первом приближении произвести оценку оптических свойств на основе фрактальных характеристик.

Так, например, интенсивность рассеяния излучения на фрактальном кластере может быть положена пропорциональной фурье-компоненте от плотности материала в нем:

$$S(k) \sim k^{-D}, \quad (4.24)$$

где  $S$  — интенсивность рассеянного света,  $k=2\pi/\lambda$ ,  $\lambda$  — длина волны,  $D$  — фрактальная размерность кластера. [175]

На рисунке 4.35 изображена зависимость интенсивности рассеяния излучения от длины волны при различных фрактальных размерностях.

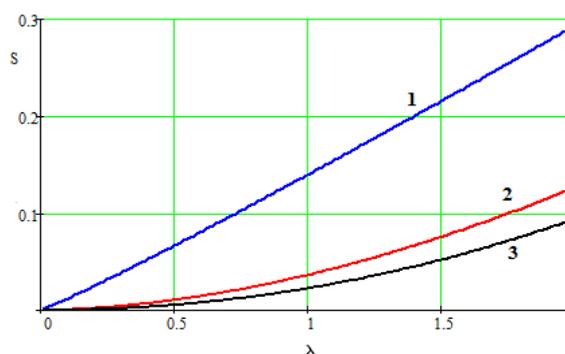


Рисунок 4.35 – Интенсивность рассеяния от длины волны отн.ед: 1:  $D_f=1,07$ ,  
2:  $D_f=1,8$ , 3:  $D_f=2,06$ .

Результаты оценки интенсивности рассеяния показывают увеличение ее величины по мере уменьшения фрактальной размерности. Такое поведение объяснимо в связи с усложнением рельефа системы нанокластеров, связанного с появлением множества пиков, конусов и сложных поверхностей на которых может происходить рассеяние. Полученные результаты непротиворечат литературным данным, что позволяет использовать указанную модель как первое приближение для оценки оптических свойств систем нанокластеров.

#### Заключение и выводы по главе 4

В данной главе представлены модели, описывающие структуру нанокластерных/островковых нанопленок теллурида свинца, выбранные с учетом структуры (фрактальной размерности) и характера формирования особенностей их рельефа (термодиффузионные процессы). Также предложены подходы для описания их электрофизических свойств, учитывающие смешанный характер электропроводимости (эффект туннелирования и прыжков зарядов/электронов между нанокластерами/островками), а также особенности смоделированной геометрии. Проведенное моделирование, применительно к полупроводниковым образцам (PbTe) показало удовлетворительную степень совпадения с результатами экспериментальных исследований. Таким образом, можно сделать

вывод о том, что использование модели электропроводимости на основе формирования кластера проводимости, с учетом туннелирования и прыжкового механизма между островками-кластерами, позволяет описывать экспериментально наблюдаемые явления для островковых/нанокластерных нанопленок различного элементного состава (Au, Ag и их комплексы, PbTe и др.).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные лазерные методы позволяют синтезировать нанокластерные структуры на твердой поверхности, с возможностью управления их получением. Предложены модели, полезные для предварительной оценки параметров экспериментального получения нанокластерных образцов. На примере оценки электрофизических свойств полупроводниковых нанокластеров теллурида свинца показано, что предложенный подход позволяет получать структуры с требуемыми свойствами. В частности, в исследуемых образцах наблюдалось переключение режимов электропроводимости в зависимости от температуры, а также локальное усиление силы тока, особенно ярко проявляющиеся для полупроводниковых нанокластеров, зависящее от их топологических особенностей. Для описания такого характера электропроводимости предложены модели, также учитывающие различные ее режимы, которые могут быть полезны для оценки свойств и условий экспериментального получения будущих образцов.

Рассмотренные образцы нанокластеров на твердой поверхности перспективны для возможных приложений при условии их лазерного возбуждения. В этом случае уже при невысоких температурах у них проявляются новые свойства, макроскопические квантовые состояния, эффекты корреляции в термодинамике и электропроводимости и др.

Так, для сферы разработки сверхпроводников перспективны полупроводниковые нанокластеры на твердой поверхности, в которых наблюдается уменьшение сопротивления при увеличении температуры, а также увеличение силы тока при температурах, не слишком отличающихся от комнатной. Для таких материалов особенно важна электронная структура, когда варьирование топологии способствует проявлению новых энергетических зон, усиливающих электропроводимые свойства.

Кроме этого для нанокластеров на твердой поверхности возможны особенно яркие проявления эффектов корреляции, особенно когда такие структуры образуют тонкие нанопленки с изменяемыми расстояниями между наноансамблями/кластерами и перекрытиями, когда обеспечивается их туннельная связь. Так в ультратонких пленках золота на карбине проявляется резкое увеличение проводимости вследствие фотостимуляции, обеспечивающей туннельную проводимость [176]. Кроме этого, сильные размерные и интерференционные эффекты в оптических характеристиках образцов наблюдаются в нанокластерных биметаллических структурах Ag/Au с управляемой топологией, полученные в лазерном эксперименте [177]. Все это позволяет надеяться на создание на новых физических принципах элементов и систем фотоники и оптоэлектроники в различных гибридных схемах, в том числе для задач квантовой обработки информации [178].

Основные выводы по диссертационной работе сводятся к следующим.

1. Разработаны подходы и условия для использования лазерных методов, позволяющие получать в эксперименте кластерные системы из полупроводниковых материалов с управляемой топологией на твердотельной поверхности, перспективные для создания элементов и систем топологической фотоники и оптоэлектроники на новых физических принципах.
2. Созданы динамические модели и алгоритмы для оценки характеристик и методов управления нанокластерными структурами/ островковыми нанопленками с заданной топологией, включая фрактальные объекты и размерные квантовые состояния нанокластерных структур, индуцированными при лазерном воздействии на твердую поверхность.
3. Выявлены условия реализации различных механизмов электропроводимости в нанокластерных системах (туннелирование и прыжковые процессы между разными кластерами в условиях термоактивации) и установлены зависимости электрофизических параметров от топологических особенностей таких объектов,

возникающих в лазерном эксперименте при соответствующих граничных условиях и неоднородностях поверхности.

4. Проведено сравнение полученных модельных зависимостей для электрофизических параметров неоднородных наноструктур разной топологии на твердой поверхности с экспериментальными данными при предложенных подходах моделирования, обеспечивающих их разумное соответствие.

5. Рассмотрены перспективы создания на новых физических принципах управляемых тонкопленочных элементов и систем топологической фотоники и оптоэлектроники с использованием разработанных комплексных многофакторных моделей и с соответствующей их адаптацией к реально наблюдаемым в лазерном эксперименте топологическим поверхностным структурам.

### XXX

В заключение выражаю благодарность своему научному руководителю, заведующему кафедрой физики и прикладной математики, доктору физико-математических наук, профессору С.М. Аракеляну всестороннюю помощь в работе, а также создание условий для комфортной работы. Также выражаю свою искреннюю признательность доктору физико-математических наук, профессору А.О. Кучерику за всестороннюю помощь в работе, в обсуждении методов проведения экспериментов и их результатов

Кроме того, хочу выразить благодарность всем моим соавторам и в целом коллективу кафедры физики и прикладной математики Владимирского государственного университета им. А.Г. и Н.Г. Столетовых, в составе которого мне было приятно и комфортно работать.

### Список используемой литературы

1. Каштанов, П. В. Нанокластеры: свойства и процессы/ П. В. Каштанов, Б. М. Смирнов// ТВТ.— 2010.— 48:6.—С. 886–900.
2. Елисеев, А.А. Функциональные наноматериалы/ А.А. Елисеев, А.В. Лукашин.— М.:Физматлит,2010.—456 с.
3. Rempel, A.A. Nanotechnologies. Properties and applications of nanostructured materials/ A.A Rempel//Russian Chemical Reviews.—2007.—76(5):435.  
<http://dx.doi.org/10.1070/RC2007v076n05ABEH003674>.
4. Phan, H. T. “What Does Nanoparticle Stability Mean?/ H. T. Phan, A.J. Haes, //The journal of physical chemistry C.— 2019.—vol. 123(27) .—PP. 16495-16507.  
[doi:10.1021/acs.jpcc.9b00913](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b00913).
5. Родунер, Э. Размерные эффекты в наноматериалах/ Э. Родунер. .— М.:Техносфера, 2010.— 368 с.
6. Суздаев, И. П. Размерные эффекты и межкластерные взаимодействия в наносистемах/ И. П. Суздаев, В. Н. Буравцев, Ю. В. Максимов, В. К. Имшенник, С. В. Новичихин, В. В. Матвеев, А. С. Плачинд// Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева) .— 2001.— т. XLV.—№ 3.—С. 66-73.
7. Дунюшкина, Л.А. Введение в методы получения пленочных электролитов для твердооксидных топливных элементов: монография/ Л.А. Дунюшкина. — Екатеринбург: УРО РАН.— 2015. —126 с.
8. Дубровкий, В.Г. Кинетика роста тонких пленок при зародышевом механизме формирования слоев/ В.Г. Дубровкий, Г.Э. Цырлин //Физика и техника полупроводников.— 2005.— т. 39.— вып. 11.— С. 1312-1319.
9. Хасса, Г. Физика тонких пленок: Том 3 / Г. Хасса – М.: Книга по Требованию, 2012. –331 с.
10. Сидорова , С. В. Исследование формирования островковых наноструктур в вакууме/ С. В. Сидорова , П. И. Юрченко//Нано-и микросистемная техника.— 2011.— №5.— С. 9-11.

11. Фреик, Д. М. Квантово-размерные эффекты в наноструктурах и проблемы термоэлектричества / Д. М. Фреик, И. К. Юрчишин, Ю. В. Лысюк // Термоэлектричество.—2012.— № 2.— С. 5-30.
12. Федоров, А.В. Оптика наноструктур / А.В. Федоров.— СПб.: Недра, 2005. – 181 с.
13. Кульбачинский, В.А. Полупроводниковые квантовые точки/ В.А. Кульбачинский // Соросовский образовательный журнал.— 2001.—№4.—С. 98-104.
14. Laucht, A. Electrical control of spontaneous emission and strong coupling for a single quantum dot / A. Laucht, F. Hofbauer, N. Hauke, J. Angele, S. Stobbe, M. Kaniber, G. Böhm, P. Lodahl, M.-C. Amann and J. J. Finley // New Journal of Physics. – 2009. – Vol. 11. P. 023034.
15. Sarkar, D. K. Growth of self-assembled copper nanostructure on conducting polymer by electrodeposition / D. K. Sarkar, X. J.Zhou, A. Tannous, M. Louie, K.T. Leung // Solid State Communications. – 2003. –Vol. 125. P. 365–368.
16. Грибачев, В. Наносенсоры/ В. Грибачев //Компоненты и технологии. – 2009. – №4. – С. 21– 24.
17. Агравал, А. Наноструктуры в биомедицине/ А.Агравал, Г.В. Батагери, У.Х. Блэкборн, С. Бхаттачариа.— М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012 .— 519 с.
18. Крыжановская, Н. В. Лазеры на основе квантовых точек и микрорезонаторов с модами шепчущей галереи/ Н. В. Крыжановская, М. В. Максимов, А. Е. Жуков// Квантовая электроника. – 2014. – т.44. – № 3. – с. 189–200.
19. Karachinsky, L.Y.Optical Gain in Laser Heterostructures with an Active Area Based on an InGaAs/InGaAlAs Superlattice/ L. Ya. Karachinsky, I. I. Novikov, A. V. Babichev, A. G. Gladyshev, E. S. Kolodeznyi, S. S. Rochas, A. S. Kurochkin, Yu. K. Bobretsova, A. A. Klimov, D. V. Denisov, K. O. Voropaev, A. S. Ionov, V. E. Bougrov & A. Yu. Egorov//Optics and Spectroscopy. – 2019. – vol. 127.–PP 1053–1056. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0030400X19120099>.
20. Слипченко, С.О. Сверхнизкие внутренние оптические потери в квантово-размерных лазерных гетероструктурах раздельного ограничения/ С.О. Слипченко,

- Д.А. Винокуров, Н.А. Пихтин, З.Н. Соколова, А.Л. Станкевич, И.С. Тарасов, Ж.И.Алферов //Физика и техника полупроводников. – 2004. – том 38. – вып. 12. – С.1477-1486.
21. Асеев, А.Л. Наноматериалы и нанотехнологии для современной полупроводниковой электроники/ А.Л. Асеев // Российские нанотехнологии. – 2006. – № 1-2. – С. 97-110.
22. Кревчик, В. Д. Квантовый размерный эффект и квантовое туннелирование с диссипацией как основа представлений современной наноэлектроники. Часть I. Классические и квантовые размерные эффекты / В. Д. Кревчик // Инжиниринг и технологии. – 2016. – №1(1).
23. Кругляк, Ю. А. Физика нанотранзисторов: 2D-электростатика MOS и модель виртуального истока/ Ю. А. Кругляк// Наносистемы, Наноматериалы, Нанотехнологии.– 2018.– т.16.–№ 4.–С.599–631.
24. Чупров, С. С. Нанесение слоя углеродных нанотрубок на поверхность реакторных сплавов/ С. С. Чупров, К. А. Мелешевич, В. А. Боголепов, В. М. Адеев, Д. В. Щур, Н. Д. Рудык // // Наносистемы, Наноматериалы, Нанотехнологии.– 2012. – т. 10. – № 4. С. 753—761.
25. Ильичев, Э.А. Углеродные материалы в электронике: состояние и проблемы/ Э.А.Ильичев, Р.М.Набиев, Г.Н.Петрухин, Г.С.Рычков, А.Е.Кулешов, Д.М.Мигунов// Известия вузов. Электроника. – 2011. – № 5(91) . – с. 18-35.
26. Лысенко, И.Е. Разработка и исследование конструкции микромеханического сенсора линейных ускорений / И.Е. Лысенко, О.А. Ежова// Известия Южного федерального университета. Технические науки. – 2013. – с. 223-232.
27. Ачильдиев, В.М. Информационные измерительные и оптико-электронные системы на основе микро- и наномеханических датчиков угловой скорости и линейного ускорения/В.М. Ачильдиев, Ю.К. Грузевич, В.А. Солдатенков . – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2016. – 260 с.
28. Cao, G. Nanostructures and nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications / G. Cao, // World Scientific Publishing, 2011. – 581 p.

29. Гулякович, Г.Н. Перспективы и проблемы полупроводниковой наноэлектроники/ Г.Н. Гулякович, В.Н. Северцев, И.О. Шурчков // Инженерный вестник Дона. – 2012. – 2(20). – с. 315 -319.
30. John R., Vermesan O., Ottella M., Perlo P. Nanoelectronics: Key Enabler for Energy Efficient Electrical Vehicles. In: Meyer G., Valldorf J., Gessner W. (eds) Advanced Microsystems for Automotive Applications.— VDI-Buch. Springer, Berlin, Heidelberg,2009. [https://doi.org/10.1007/978-3-642-00745-3\\_2](https://doi.org/10.1007/978-3-642-00745-3_2).
31. Туркин, А. Полупроводниковые светодиоды: история, факты, перспективы/ А. Туркин// Полупроводниковая Светотехника.— 2011. –№ 5. – с. 28-33.
32. Dalvinder, S. G. Present and Future Nanoelectronics Devices-An Analytical Study/ S. G. Dalvinder// Res Dev Material Sci . –2018. – 8(4). DOI: 10.31031/RDMS.2018.08.000693.
33. Алферов, Ж.И. Наноматериалы и нанотехнологии / Ж.И.Алферов, А.Л.Асеев, С.В.Гапонов, П.С.Копьев, В.И.Панов, Э.А.Полторацкий, Н.Н.Сибельдин, Р.А.Сурис // Микросистемная техника. - 2003. - №8. - С.3-13.
34. Моисеев, С.А. Квантовый компьютер в схеме атомного квантового транзистора с логическим кодированием кубитов / С.А. Моисеев, С.Н. Андрианов, Е.С. Моисеев // Оптика и спектроскопия. - 2013. – Т. 115, №3. – С. 406–414.
35. Локтев, Д. Методы и оборудование для нанесения износостойких покрытий/ Д. Локтев, Е. Ямашкин // Наноиндустрия . – 2007. – № 4. – С.18-24.
36. Popescu, C. Laser Ablation Applied for Synthesis of Thin Films: Insights Into Laser Deposition Methods. –IntechOpen, 2016.
36. Зуев, Д.А. Импульсное лазерное осаждение тонких пленок ИТО и их характеристики/ Д.А. Зуев, А.А. Лотин, О.А. Новодворский, Ф.В. Лебедев, О.Д. Храмова, И.А. Петухов,Ф.Н. Путилин, А.Н. Шатохин, М.Н. Румянцева, А.М. Гаськов// Физика и техника полупроводников. –2012. – т.46, вып. 3.- с. 425-429.
37. Ерошова, О. И. Структурные свойства кремниевых наночастиц, изготовленных методом импульсной лазерной абляции в жидких средах / О. И. Ерошова, П. А. Перминов, С. В. Заботнов, М. Б. Гонгальский, А. А. Ежов, Л. А.

- Головань, П. К. Кашкаров// Кристаллография. – 2012. – том 57. – № 6. – с. 942–947.
38. Domke, M. Understanding Thin Film Laser Ablation: The Role of the Effective Penetration Depth and the Film Thickness/ M. Domke, L.Nobile, Rapp, S. Eiselen, S. Sotrop, J. Huber, H. Schmidt// Physics Procedia. . – 2014 . – 56. –PP. 1007-1014. DOI: 10.1016/j.phpro.2014.08.012.
39. Аракелян, С.М. Топологические лазерно индуцированные квантовые состояния в нанокластерных структурах: фундаментальные эффекты и возможные применения(электрофизика и оптика/ С.М. Аракелян, Т.А. Худаберганов, А.В. Истратов, А.В. Осипов, К.С. Хорьков// Оптика и спектроскопия. – 2019 . – том 127. – вып.1. –С. 125-136.
40. Shuleiko, D.V. Femtosecond laser pulse modification of amorphous silicon films: control of surface anisotropy/ D.V. Shuleiko, F.V. Potemkin, I.A. Romanov, I.N. Parhomenko, A.V. Pavlikov, D.E. Presnov, S.V. Zaboltnov, A.G. Kazanskii, P.K. Kashkarov // Laser Physics Letters. –2018. –vol. 15. – pp. 056001-1-056001-8.
41. Drampyan, R. Laser controlled deposition of metal microstructures via nondiffracting Bessel beam illumination"/ R. Drampyan, N. Leonov, T. Vartanyan// Proc. SPIE 9884, Nanophotonics VI. – 98841J (19 April 2016); <https://doi.org/10.1117/12.2227763>
42. Емельянов, В.И. Образование и эволюции наноструктур на поверхности полупроводников при лазерном неупругом фотодеформировании / В.И. Емельянов, В.Б. Зайцев, Г.С. Плотников // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2008. – №5. – С.80-87.
43. Емельянов В. И. Дефектно-деформационная теория образования ансамбля наночастиц с бимодальным распределением по размерам при непрерывном лазерном облучении твердых тел// В. И. Емельянов// Квантовая электроника. – 2011. – Т. 41. – № 8. – С. 738–741.
44. Arakelian, S.M. Laser-Induced Nanocluster Thin-Film Systems with Controlled Topology and Composition: The Possibility of Creating Superconducting Structures Based on New Physical Principles/ S.M. Arakelian, A.O. Kucherik, S.V. Kutrovskaya,

- A.V. Osipov, K.S. Khorkov, A.V. Istratov// *Crystallography Reports*. –2018. –vol. 63. – №7. – PP. 1173-1177. DOI: 10.1134/s1063774518070027.
45. Antipov, A.A. Laser formation of semiconductor coatings using droplet technology / A.A.Antipov, S.M.Arakelian, S.P.Zimin, S.V.Kutrovsкая, A.O.Kucherik, A.V.Osipov, V.G. Prokoshev // *Physics Procedia*. –2012. –V.39. –P.401-408.
46. Самарский, А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры/ А.А. Самарский, А.П. Михайлов. – М.:Физматлит, 2005. – 320 с.
47. Смирнов, В.А. Моделирование и инструментальные средства численного анализа в нанотехнологии и материаловедении: обзор / В.А. Смирнов, Е.В. Королев, А.В. Евстигнеев // *Нано технологии в строительстве*. – 2014. – Том 6. – № 5. – С. 34–58.
58. Федотов, А.Ю. Моделирование процессов образования и свойств наноструктур и нанопленок, сформированных в газовой среде/ А.Ю. · Федотов// *Химическая физика и мезоскопия*. – 2017. – Том 19. – №2. – С. 230-249.
49. Wang J. Importance of surface/interface effect to properties of materials at nano-scale. / J.Wang, B.Karihaloo, H.Duan, Z.Huang // *Solid Mechanics and Its Applications* . – 2006. – vol 135. DOI: [https://doi.org/10.1007/1-4020-4566-2\\_26](https://doi.org/10.1007/1-4020-4566-2_26).
50. Зинченко, Л.А. Особенности математического моделирования в задачах проектирования наносистем/ Л.А. Зинченко, В.А. Шахнов // *Нанотехнологии. Информационные технологии и вычислительные системы*. – 2009. –4. –С. 84-92.
51. Rieth, M. Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology/ . M. Rieth, W. Schommers. – American Scientific Publishers, 2006.
52. Кабалдин, Ю.Г. Информационная модель сборки наноструктур / Ю.Г.Кабалдин// *Труды Нижегородского государственного технического университета им. Р.Е. Алексеева* . – 2010. – № 3(100) . –С. 90-99.
53. Тапилин, В.М. Новый подход к проблеме корреляции: величина потенциала межэлектродного взаимодействия как переменная при решении многочастичного уравнения Шредингера/ В. М. Тапилин // *Журнал структурной химии*. – 2008. –т. 49. – №3. –С. 407-414.

54. Холмуродов, Х.Т. Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов/ Х.Т. Холмуродов, М.В. Алтайский, И.В. Пузырин, Т. Дардин, Ф.П. Филатов //Физика элементарных частиц и атомного ядра. –2003. – Т. 34. – Вып. 2.
55. Шилов, М.А. Компьютерное моделирование молекулярных систем методом молекулярной динамики / М.А. Шилов, В.В. Веселов. – Иваново: ИГТА, 2010. – 168 с.
56. Гришко, М.С. Компьютерное моделирование методом Монте-Карло процессов формирования кластеров никеля в нанопорах материалов/ М.С. Гришко, С.А. Безносок, М.С. Жуковский, Т.М. Жуковская //Известия АлтГУ. – 2007. – №3.
57. Колесников, С.В. Кинетический метод Монте-Карло: математические основы и приложения к физике низкоразмерных наноструктур/ С.В.Колесников, А.М. Салецкий, С.А. Докукин, А.Л. Клавсюк // Математическое моделирование. – 2018. –Т. – 30. – № 2. –С. 48-80.
58. Настовьяк, А. Г.Особенности реализации процесса кристаллизации при моделировании методом Монте-Карло роста нановискеров/ А. Г. Настовьяк, И. Г.Неизвестный, С. В. Усенков, Н. Л. Шварц // Известия вузов. Физика. –2009. – Т. – 52. –№11. –С. 52-57.
59. Суздаев, И.П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов/ И.П.Суздаев .– М.: URSS, 2008. – 589 с.
60. Редель, Л.В. Роль ”магических“ чисел при формировании структуры в малых нанокластерах серебра/ Л.В. Редель, Ю.Я. Гафнер, С.Л. Гафнер// Физика твердого тела. – 2015. – том 57. – вып. 10. –С. 2061-2070.
61. Мазалова, В. Л. Нанокластеры: рентгеноспектральные исследования и компьютерное моделирование / В.Л. Мазалова, А.Н. Кравцова, А.В. Солдатов. – Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2013. – 184 с.
62. Деревянко, А. И. Компьютерное моделирование динамики фазового перехода в процессах агрегации / А. И. Деревянко // Адаптивные системы автоматического

- управления: межведомственный научно-технический сборник. – 2005. – № 8 (28).  
–С. 11-15.,
63. Ролдугин , В.И. Фрактальные структуры в дисперсных системах/ В.И. Ролдугин // Успехи химии. – 2003. – Т. 72. –№ 10. – С. 931-959.
64. Зырянов, Р. С. Развитие фрактальных моделей агрегации коллоидных частиц / Р. С. Зырянов// Молодой ученый. — 2016. — № 24 (128). — С. 72-76.
65. Wei, H. From silver nanoparticles to thin films: Evolution of microstructure and electrical conduction on glass substrates / H.Wei, H. Eilers // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2009. – V. 70. – P. 459–465.
66. Gladskikh, I.A. Silver structures at the percolation threshold, prepared by laser annealing/ I.A. Gladskikh, V.A. Polishchuk, T.A. Vartanyan//Phys. Solid State. – 2017. –59. –PP. 601–606. DOI: <https://doi.org/10.1134/S106378341703012X>
67. Лысенков, Э.А. Особенности перколяционного поведения систем на основе полиэфиров и углеродных нанотрубок с добавлением  $\text{LiClO}_4$ / Лысенков Э.А., В.В. Клепко, Ю.В. Яковлев // Электронная обработка материалов. – 2016. –52(2). –С. 62–68.
68. Трахтенберг, Л.И. Синтез, строение и свойства металл/полупроводник содержащих наноструктурированных композитов / Л.И. Трахтенберг, М.Я. Мельников. – М.: ТЕХНОСФЕРА, 2016. – 624 с.
69. Ростовщикова, Т.Н. Межкластерные взаимодействия в катализе наноразмерными частицами металлов/ Т.Н. Ростовщикова, В.В. Смирнов, В.М. Кожевин, Д.А. Явсин, С.А. Гуревич // Российские нанотехнологии. – 2007. – т.2. – №1–2. – с. 47-60.
70. Вартанян, Т.А. Тонкие структуры и переключение электропроводности в лабиринтных пленках серебра на сапфире/ Т.А. Вартанян, И.А. Гладских, Н.Б. Леонов, С.Г. Пржибельский // Физика твердого тела. – 2014. –т. 56. – вып. 4.
71. Фатеев, М.П. Теория прыжкового переноса в неупорядоченных системах/ М.П. Фатеев// Физика твердого тела. – 2010. – т. 52. – вып. 6. . – С. 1053-1059.

72. Bleibaum, O. Random-resistor network description for hopping transport in the presence of Hubbard interaction/ O Bleibaum, H Böttger, V V Bryksin// *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2003. –15. – 1719.
73. Faggionato, A. Connection probabilities in Poisson random graphs with uniformly bounded edges/ A. Faggionato, H. A. Mimun// *ALEA, Lat. Am. J. Probab. Math. Stat.* – 2019. – 16. – PP 463–486. DOI: 10.30757/ALEA.v16-18.
74. Sieradzki, K. Agglomeration and percolation conductivity/ K. Sieradzki, K. Bailey, T.L. Alford // *Appl. Phys. Lett.* – 2001. – V. 79. – P. 3401–3403.
75. Fedorovich, R.D. Electron and light emission from island metal films and generation of hot electrons in nanoparticles/ R.D. Fedorovich, A.G. Naumovets, P.M. Tomchuk // *Phys. Rep.* – 2000. – V. 328. – P. 73–179.
76. Болтаев, А.П. Активационная проводимость в островковых металлических пленках/ А.П. Болтаев, Н.А. Пенин, А.О. Погосов, Ф.А. Пудонин // *ЖЭТФ*. – 2004. – Т. 126. – С. 954–961.
77. Равич, Ю.И. Прыжковая проводимость по сильно локализованным состояниям индия в РbТе и твердых растворах на его основе/ Ю.И. Равич, С.А. Немов // *Физика и техника полупроводников*. – 2002. – т.36. – вып. 1. – с. 3-23.
78. Анфимов, И. М. Механизмы электропроводности кремний–углеродных нанокompозитов с наноразмерными включениями вольфрама в интервале температур 20—200 °С/ И. М. Анфимов, С. П. Кобелева, М. Д. Малинкович, И. В. Щемеров, О. В. Торопова, Ю. Н. Пархоменко// *Материалы электронной техники*. –2012. –№ 2. – с. 58-60.
79. Yu, D. Variable Range Hopping Conduction in Semiconductor Nanocrystal Solids/ D.Yu, C. Wang, B. L. Wehrenberg, P. Guyot-Sionnest // *Physical Review Letters*. – 2004. – vol 92. – № 21. DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.216802.
80. Галлямов, С. Р. Перколяционная модель проводимости двухфазной решетки: теория и компьютерный эксперимент / С. Р. Галлямов, С.А. Мельчуков // *Вестн. Удмуртск. ун-та. Матем. Мех. Компьют. Науки*. – 2010. – вып. 4. – с. 112–122.

81. Алескеров, Ф. К. Перколяционный эффект в кристаллах  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , легированных медью или никелем// Ф. К. Алескеров, К. Ш. Кахраманов, С. Ш. Кахраманов//Неорганические материалы. – 2012. – 48 . – № 5. – с. 536–541.
82. Аракелян, С. М. Бимодальный ансамбль наночастиц на поверхности эпитаксиальных пленок теллурида свинца при воздействии непрерывного лазерного излучения/ С. М. Аракелян, Д. Н. Бухаров, В. И. Емельянов, С. П. Зимин, С. В. Кутровская, А. О. Кучерик, А. А. Макаров, А. В. Осипов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2015. – № 11. – С. 41-49. DOI: 10.7868/S0207352815110062.
83. Arakelian S.M. Laser nanostructuring of the  $\text{PbX}$  thin films for creation of the semiconductor devices with controlled properties/ S.M. Arakelian, D.N. Bukharov, V.I. Emel'yanov, S.P. Zimin, S.V. Kutrovskaya , A.O. Kucherik , A.A. Makarov, A.V. Osipov //Physics Procedia. – 2014. – Vol. 56–PP. 1115-1125. <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2014.08.026>.
84. Bengfort, M. The Fokker–Planck law of diffusion and pattern formation in heterogeneous environments/ M. Bengfort, H. Malchow, F.M. Hilker// J. Math. Biol. . –2016. –№73. –PP. 683–704. <https://doi.org/10.1007/s00285-016-0966-8>
85. Макаров, А.А. Имитационное моделирование процесса образования ансамбля наночастиц с бимодальным распределением по размерам при воздействии непрерывного лазерного излучения на пленки  $\text{PbTe}$ / А.А. Макаров, А.О. Кучерик //Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2013. – № 1(3) . – с. 218-223.
86. Новоселов, И.И. Коэффициенты диффузии вакансий и междоузлий вдоль межзеренных границ наклона в молибдене/ И.И. Новоселов, А.Ю. Куксин, А.В. Янилкин //Физика твердого тела. – 2014. – том 56. – вып. 51. – с. 988-994.
87. Бадамшин, И.Х. От четырех к одному. Силы внутриатомного взаимодействия и прочность материалов: монография / И.Х. Бадамшин – М.: ИД Академии Естествознания, 2016. – 134 с.

88. Гонсалес, Р. Цифровая обработка изображений в среде MATLAB/ Р. Гонсалес, Р. Вудс, С. Эддинс. – М.: Техносфера, 2006. – 616 с.
89. Дьяконов, В.П. MATLAB. Обработка сигналов и изображений. Специальный справочник/ В.П. Дьяконов, И.В. Абраменкова.— СПб.: Питер, 2002. —608 с.
90. Бухаров, Д.Н. Применение возможностей MATLAB для оценки распределения дендритов на поверхности наномодифицированной стали/ Д.Н. Бухаров, О.Я. Бутковский, С.М. Аракелян// Современная наука и практика в вопросах и ответах: сборник научных статей по материалам Всероссийской студенческой заочной конференции (г. Москва, 1 августа 2020 г.) . – М. : МФЮА, 2020. –384 с.
91. Будаев, В.П. Фрактальная нано- и микроструктура осажденных пленок в термоядерных установках / В.П. Будаев, Л.Н. Химченко // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Термоядерный синтез.- 2008. - Вып. 3. - С.34-61.
92. Cavaliere, E. (2013). Fractal TiO<sub>2</sub> Nanostructures by Nonthermal Laser Ablation at Ambient Pressure/ E. Cavaliere, G. Ferrini, P. Pingue, L. Gavioli// The Journal of Physical Chemistry C. – 117. – 44.–PP 23305–23312. 10.1021/jp406603q.
93. Cavaliere, E. Aggregation and fractal formation of Au and TiO<sub>2</sub> nanostructures obtained by fs-pulsed laser deposition: experiment and simulation/ E.Cavaliere, G. Benetti, G.L. Celardo, D. Archetti , P. Pingue, G. Ferrini, L. Gavioli// J Nanopart Res.–2017.– 19.– 311. <https://doi.org/10.1007/s11051-017-4009-1>.
94. Шуплецов, Ю. В.Алгоритм вычисления размерности Минковского для полутоновых изображений / Ю. В. Шуплецов, Н. Б. Ампилова // Известия РГПУ им. А.И. Герцена. – 2014. – №165.
95. Jie X.,G. A Modified Box-Counting Method to Estimate the Fractal Dimensions/ X. Jie, G. Lacidogna// АММ. – 2011. – Vol. 58–60, –PP. 1756–1761.
96. Федер, Е. Фракталы: пер. с англ. - 2-е изд./ Е. Федер - М.: УРСС: Ленанд, 2014. - 256 с.
97. Мандельброт, Б. Фрактальная геометрия природы/Б. Мандельброт. — М.: Институт компьютерных исследований, 2002. –656 с.
98. Кроновер, Р. М. Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории/ Р. М. Кроновер. — М.: Постмаркет, 2000. — 352 с.

99. Falconer, K. Fractal Geometry: Mathematical Foundations and Applications/ K. Falconer. – John Wiley & Sons, New York, 2013. – 400 p.
100. Mahanta, A. Julia set and some of its properties/ A. Mahanta, H. Sarmah, R. Paul, G. Choudhury//International Journal of Applied Mathematics & Statistical Sciences (IJAMSS). – 2016. – Vol. 5. – Issue 2. – PP. 99-124.
101. Иудин, Д.И. Фракталы: от простого к сложному / Д.И. Иудин, Е.В. Копосов; Нижегород. гос. архитектур. -строит. ун-т. –Н. Новгород: ННГАСУ, 2012. . – 200 с.
102. Bukharov, D N. Fractal models of the PbTe nanocluster structures on a solid surface/ D. N. Bukharov, A .S. Abramov, O. A. Novikova , V. D. Samyshkin// J. Phys.: Conf. Ser. – 2022. – 2316. – 012013.
103. Braga, .L. Diffusion Limited Aggregation: Algorithm optimization revisited// L. Braga, M.S. Ribeiro//Computer Physics Communications. – 2011. – V. 182, Is. 8. –PP. 1602-1605.
104. Tronnolone, H. Diffusion-Limited Growth of Microbial Colonies/ H. Tronnolone, A. Tam, Z. Szenczi, , E. Green, S. Balasuriya, E. L. Tek, J Gardner, J. Sundstrom, V. Jiranek, S. Oliver, B. Binder//Scientific Reports. – 2018. – 8. 10.1038/s41598-018-23649-z.
105. Тыртышников, А.Ю. Сравнение алгоритмов DLA и RLA при моделировании пористых структур/ А.Ю.Тыртышников, И.В. Лебедев, С.И.Иванов, Н.В.Меньшутина//Программные продукты и системы. –2017 . –Т. 30. –№ 4 . – С. 758–764.
106. Nicolás-Carlock, J.Fractality à la carte: a general particle aggregation model/ J. Nicolás-Carlock, J. Carrillo-Estrada, V. Dossetti //Sci Rep . –2016. –6. – 19505. <https://doi.org/10.1038/srep19505>.
107. Martineau, S. Directed Diffusion-Limited Aggregation/ S. Martineau// ALEA, Lat. Am. J. Probab. Math. Stat. – 2017. –14. –pp 249–270. DOI: 10.30757/ALEA.v14.
108. Heinson, W. A three parameter description of the structure of diffusion limited cluster fractal aggregates/ W. Heinson, C. Sorensen, A. Chakrabarti// Journal of colloid and interface science. – 2012– 375. –.pp 65-9. DOI 10.1016/j.jcis.2012.01.062.

109. Бухаров, Д. Н. Компьютерное моделирование структурных особенностей и электропроводимости нанокластерных образцов теллурида свинца как перспективных материалов электроники/ Д. Н. Бухаров // Россия молодая: Сборник материалов XV Всерос. научно-практической конференции с международным участием, 18-21 апр. 2023 г., Кемерово [Электронный ресурс]. – Кемерово, 2023.
110. Аракелян, С. М. Динамические и квантовые эффекты в кластерных низкоразмерных многослойных твердотельных наноструктурах для элементной базы микро- и нанoeлектроники/ С. М. Аракелян, Д. Н. Бухаров, А. О. Кучерик, Т. А. Худайбергенов// Известия РАН. Серия физическая. – 2022. – Т. 86, № 4. – С. 834-840.
111. Павлова, Е.Г. Поляризаторы на основе пленочных наноструктур и их применение в волоконно-оптических системах связи / Е.Г. Павлова // Lightwave Russian Edition . – 2006. – № 3. – С. 49–52.
112. Марциновский, Г.А. Возбуждение поверхностных электромагнитных волн в полупроводниках при фемтосекундном лазерном воздействии/ Г.А. Марциновский, Г.Д. Шандыбина, Ю.С. Дементьева, Р.В. Дюкин, С.В. Заботнов, Л.А. Головань, П.К. Кашкаров//Физика и техника полупроводников. – 2009. –Т. 43. – № 10 . – С.1339-1345.
113. Мансуров, Г.Н. Электрохимия тонких металлических пленок. Монография/ Г.Н. Мансуров, О.А. Петрий. – М.: МГОУ, 2011. – 351 с.
114. Доброхотов, Э.В. Размерные эффекты в тонких плёнках алюминия/ Э.В. Доброхотов // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, 2010. – №3(1) . – с. 61–67.
115. Иванова, Я. В. Численный расчет коэффициента прозрачности легированной гетероструктуры с квантовой ямой методом внутренней задачи/ Я. В. Иванова, В. И. Зубков// Известия СПбГЭТУ «ЛЭТИ» . – 2018. – № 5. –с. 5-10.

116. Бланк, Т.В. Механизмы протекания тока в омических контактах металл–полупроводник обзор// Т.В.Бланк, Ю.А.Гольдберг// Физика и техника полупроводников. – 2007. – Том: 41. – № 11. – С. 1281-1308.
117. Кутровская, С.В. Измерение электрофизических свойств металлических микроконтактов с применением методов фрактальной геометрии для анализа данных атомно-силовой микроскопии/ С.В. Кутровская, А.А. Антипов, С.М. Аракелян, А.О. Кучерик, А.В. Осипов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2017. – Т. 3, №1. – С. 59-65.
118. Радьков, А. В. Методы измерения удельного сопротивления полупроводниковых материалов/ А. В. Радьков, А. А. Малаханов // Актуальные вопросы технических наук: V Междунар. науч. конф. (г. Санкт-Петербург, февраль 2019 г.). — СПб: ООО «Издательство Молодой ученый», 2019.
119. Афонский, А.А. Электронные измерения в нанотехнологиях и микроэлектронике/ А.А. Афонский, В.П. Дьяконов. — 2011. — М.: ДМК Пресс, 688 с.
120. Васильев, И. Особенности измерения удельного и поверхностного сопротивления четырехзондовым методом/ И. Васильев// Вектор высоких технологий. –2020. –№2(47) . – с. 8-14.
121. Аракелян, С.М. Математическое моделирование и исследование электропроводности островковых металлических и полупроводниковых пленок/ С.М. Аракелян, Д.Н. Бухаров, А.В. Истратов, С.В. Кутровская, А.О. Кучерик, А.В. Осипов // Динамика сложных систем – XXI век. – 2014. – №5. – С.36-40.
122. Bukharov, D.N. Graph-analytical model of the electrical conductivity of a semiconductor island plumbum telluride nanofilm/ D.N. Bukharov, A.V.Osipov, S.M. Arakelyan, A.O. Kucherik // Journal of Physics Conference Series.–2019.– 1331:012008. DOI: 10.1088/1742-6596/1331/1/012008.
123. Bukharov, D.N., Arakelyan S.M., Istratov A.V., Samyshkin V.D. PbTe island film hopping electrical conductivity model/ D.N. Bukharov, S.M. Arakelyan, A.V. Istratov, V.D. Samyshkin // Journal of Physics: Conference Series.–2019.– 1189:012017. DOI: 10.1088/1742-6596/1189/1/012017.

124. Бухаров, Д.Н. Исследование особенностей электропроводимости нанокластерных структур теллурида свинца/ Д.Н. Бухаров // Сборник Тезисов V Всероссийской с международным участием школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века».– Казань.: КФУ, 2022.
125. Alves, H. W.L. Lattice contribution to the high dielectric constant of PbTe / H. W. L. Alves, A. R. R. Neto, L. M. R. Scolfaro, T. H. Myers, and P. D. Borges //Phys. Rev. B . – 87. – PP.115-120.
126. Бутько, Л. Н. Электродинамические свойства структуры, образованной регулярной решёткой проводящих цилиндров/ Л. Н. Бутько, А. П. Анзулевич, Д. С. Лихарев, С. Г. Моисеев // Вестник ЧелГУ. – 2013. – №9 (300) . – С. 11-17.
127. Venermo, J. Dielectric polarizability of circular cylinder/ J. Venermo, A. Sihvola Journal of Electrostatics. – 2005. –vol. 63. – issue 2. – pp. 101-107.
128. Arakelian S. Digital sovereignty of Russia based on the element base of topological nanostructures on a solid surface induced by laser radiation/ S., Arakelian, A. Kucherik, D. Bukharov, T. Khudaïberganov// J. Phys.: Conf. Ser. – 2021. – Vol. 2131. – 052082.
129. Arakelian, S. M. Electrophysics and optics in topological quantum nanophotonics of low-dimensional systems/ S. M Arakelian, D. N Buharov, T. A Khudaiberganov, A. V Osipov. –2021. – J. Phys.: Conf. Ser. – 1822. – 012001.
130. Kavokin, A. The crossover between tunnel and hopping conductivity in granulated films of noble metal/ A.Kavokin, S. Kutrovskaya, A. Kucherik, A. Osipov, T. Vartanyan, S. Arakelyan Superlattices and Microstructures. – 2017. – vol. 111. – PP. 335-339. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.06.050>.
131. Герке М.Н. Исследование структуры и электропроводности тонких биметаллических гранулированных пленок/ М.Н. Герке, А.В. Истратов, Д.Н. Бухаров, О.А. Новикова, И.О. Скрябин, С.М. Аракелян //Известия РАН. Серия физическая. – 2017. – Т.81, №12. – С.1572-1575.
132. Бухаров, Д.Н. Компьютерное моделирование структурных особенностей и электропроводимости нанокластерных образцов перспективных материалов

теллурида свинца/ Д.Н. Бухаров, С.М. Аракелян//Оптические технологии, материалы и системы («ОПТОТЕХ 2022»). Сборник докладов конференции. – М. МИРЭА - Российский технологический университет, 2022. – 484 с.

133. Bukharov D.N., Arakelyan S.M., Kucherik A.O., Novikova O.A., Samyshkin V.D. Mathematical modeling of the structure and optical properties of the fractal island metal nanofilm/ D.N. Bukharov, S.M. Arakelyan, A.O. Kucherik, O.A. Novikova, V.D. Samyshkin. – 2020 // Journal of Physics: Conference Series. – 1439. 012050. DOI: 10.1088/1742-6596/1439/1/012050

134. Kucherik, A. Formation of Fractal Dendrites by Laser-Induced Melting of Aluminum Alloys// A. Kucherik, V. Samyshkin, E. Prusov, A. Osipov, A. Panfilov, S. Arakelian, D. Buharov, I. Skryabin, A.V. Kavokin, S. Kutrovskaya. – Nanomaterials. – 2021. –Vol. 11, № 4.

135. Self-avoiding walk, spin systems and renormalization/ G. Slade// Proc.R. Soc. A.– 2019. –Vol. 475. –Issue 2221. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.2018.0549>

136. Zaitsev, D. A. A generalized neighborhood for cellular automata/ D. A. Zaitsev//Theoretical Computer Science. – 2017. –Vol. 666. –PP. 21-35.

137. Zhang, J. DLA Simulation with Sticking Probability for Viscous Fingering, Proceeding//J. Zhang, J. Luo, Z. Liu// Science college IEEE. – 2011. –PP.4044-4047.

138. Бухаров, Д.Н. Математическое моделирование структуры и оптических свойств фрактальной островковой металлической нанопленки/ Д.Н. Бухаров, А.О. Кучерик, О.А. Новикова // Современные проблемы физики и технологий. VIII-я Международная молодежная научная школа- конференция, 15–20 апреля 2019 г.: Сборник тезисов докладов. Часть 2. М.: НИЯУ МИФИ, 2019.–356 с.

139. Бухаров, Д.Н. Моделирование структуры полупроводниковой островковой нанопленки РbTe/ Д.Н. Бухаров, А.О. Кучерик, С.М. Аракелян//VIII Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов». Москва. 19-22 ноября 2019 г./ Сборник материалов. – М: ИМЕТ РАН, 2019, 860 с.

140. Mroczka, J. Algorithms and methods for analysis of the optical structure factor of fractal aggregates / J. Mroczka, M. Woźniak, F.R.A. Onofri// *Metrol. Meas. Syst.* – 2012. – Vol. XIX, № 3. – PP. 459-470. DOI: 10.2478/v10178-012-0039-2.Slade G.
141. Bukharov, D.N. Structural and scattering characteristics model of a fractal nanoclustered island Ag-Au films/D.N. Bukharov, O.A. Novikova, S.P.E. Essaka, S.M. Arakelian//2021 . – *J. Phys.: Conf. Ser.* – 1822. – 012011.
142. Hanan, W. G. Multifractal analysis of the branch structure of diffusion-limited aggregates/ W. G. Hanan and D. M. Heffernan// *Phys. Rev. E* . –2002. – 85. – 021407.
143. Ryabov, A. B. Diffusion-Limited Aggregation: A Continuum Mean Field Model/A. B. Ryabov , E. B. Postnikov, A. Yu. Loskutov//*Journal of Experimental and Theoretical Physics.* – 2005. –Vol. 101, № 2. – PP. 253–258.
144. Бухаров, Д.Н. Моделирование поля температуры для предварительной оценки лазерного излучения при получении островковых нанопленок теллурида свинца/ Д.Н. Бухаров, А.О. Кучерик, С.М. Аракелян// VI Международная научно-техническая конференция «Современные методы и средства исследований теплофизических свойств веществ». 27 – 28 мая 2021 г.: Материалы конференции. – СПб.: Университет ИТМО, 2021. – 99 с.
145. Römer, G.R.V.E. Matlab Laser Toolbox/ G.R.V.E. Römer, A. Huis in 't Veld // *Physics Procedia.* – 2010. – 5. –PP. 413-419. 10.1016/j.phpro.2010.08.068.
146. Зимин, С. П. Наноструктурированные халькогениды свинца: монография / С. П. Зимин, Е. С. Горлачев. – Ярославль: ЯрГУ, 2011.-211 с.
147. Рыжова, Т. В. Моделирование процессов возникновения и роста фрактальных структур и дефектов камер теплоэнергетических установок. Часть 1./ Т. В. Рыжова, Д. Н. Бухаров, С. М. Аракелян// *Наука и техника.* – 2023.– 22(3). –С. 231-242.
148. Chamundeswari, G. An Experimental Analysis of K-means Using Matlab/ G. Chamundeswari, G. Pardasaradhi Varma, Ch. Satyanarayana// *IJERT.* – 2012. – V. 1, 5. – P. 1-5.

149. Люев, В.К. Коэффициент диффузии и энергии активации диффузии легирующих элементов в поверхностном слое монокристалла кремния/ В.К. Люев, А.М. Кармоков// Современные наукоемкие технологии. – 2016. – № 5 (часть 2) – С. 262-265.
150. Bukharov, D.N. Modeling of a profile of a PbTe semiconductor nanofilm/ D.N. Bukharov, A.O. Kucherik, S.M. Arakelyan, A. A. Lotin//2019. – J. Phys.: Conf. Ser. – 1331. – 012002.
151. Бухаров, Д.Н. Перколяционная модель электропроводности биметаллической островковой пленки/ Д.Н. Бухаров, А. А. Антипов, С. М. Аракелян, А. В. Истратов, А. Ю. Шагурина // Южно-Сибирский научный вестник. – 2018. – № 4 (24). –С 55-58.
152. Бухаров, Д.Н. Моделирование электропроводности металлических островковых нанопленок на основе клеточного автомата/ Д.Н. Бухаров, А.О. Кучерик, А.В. Осипов, И.О. Скрыбин, О.А. Новикова // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2019» [Электронный ресурс]. — М.: МАКС Пресс, 2019.
153. Agyingi, E. Eden Model Simulation of Re-Epithelialization and Angiogenesis of an Epidermal Wound/ E. Agyingi, L. Wakabayashi, T. Wiandt, S. Maggelakis// Processes. – 2018. –6. – 207. Doi:10.3390/pr6110207.
154. Trifonova, T. Catastrophic Floods in Large River Basins: Surface Water and Groundwater Interaction under Dynamic Complex Natural Processes—Forecasting and Presentation of Flood Consequences/ T. Trifonova, M. Arakelian, S. Abrakhin, S.Abrakhina, D. Bukharov, S. Arakelian// Water. – 2022. – 14, 1405. <https://doi.org/10.3390/w14091405>.
155. Suvakov, M. Modeling collective charge transport in nanoparticle assemblies/ M. Suvakov, B. Tadic // Journal of physics. Condensed matter. – 2010. – 22(16):163201. DOI: 10.1088/0953-8984/22/16/163201.
156. Parthasarathy, R. Percolating through Networks of Random Thresholds: Finite Temperature Electron Tunneling in Metal Nanocrystal Arrays/ R. Parthasarathy, X. Lin,

K. Elteto, T. F. Rosenbaum, H. M. Jaeger// Physical Review Letters. – 2004. – Vol. 92, № 7. DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.076801.

157. Bukharov, D.N. Modeling of electrical conductivity of labyrinth bimetallic nanofilms/ D.N. Bukharov, A.O. Kucherik, S.M. Arakelyan // Journal of Physics Conference Series.–2019.–1331:012017. DOI: 10.1088/1742-6596/1331/1/012017.,

158. Bukharov, D.N. Percolation model of electric properties of laser modified PbTe film/.N. Bukharov, I.O. Scryabin, A.F. Lelekova, M.R. Sisoyev, S.M. Arakelian//2021.–J. Phys.: Conf. Ser.–1822.–012014.

159. Бухаров, Д.Н. Моделирование вольт-амперных характеристик нанопленки теллурида свинца/ Д.Н. Бухаров, А.О. Кучерик, С.М. Аракелян //«Нанoeлектроника, нанофотоника и нелинейная физика»: тез. докл. XVI Всерос. конф. молодых ученых. – Саратов: Изд-во “Техно-Декор”, 2021. – 228 с.

160. Гордеев, И.И. Нахождение проводящего остова в двумерной решетка методом заливки / И.И. Гордеев, Овчаренко С. С., Сизова А. А. // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2020. – №1 (49). – С. 94-111.

161. Москалев, П.В. Анализ структуры перколяционного кластера/ Журнал технической физики. – 2009. – т. 79. –вып. 6.

162. Murata, Y. A study of shortest path algorithms in maze images/Y. Murata, Y. Mitani//SICE Annual Conference 2011. –2011. –PP. 32-33.

163. Гордеев, И.И. Анализ недостатков алгоритма Грассбергера для поиска перколяционного остова на квадратной решетке и возможность его распараллеливания/ И.И. Гордеев, Н.С. Саенко// «Актуальные проблемы информационно-телекоммуникационных технологий и математического моделирования в современной науке и промышленности». Материалы I Международной научно-практической конференции молодых учёных. Комсомольск-на-Амуре, 2021. – С. 12-14.

164. Козадаев, А.С. Реализация волнового алгоритма для определения кратчайшего маршрута на плоскости при моделировании трасс с препятствиями /А.С. Козадаев, Е.В. Дубовицкий// Вестник ТГУ. – 2010. – т.15. – вып.6..

165. Kungumadevi, L. Structural, Electrical, and Optical Properties of PbTe Thin Films Prepared by Simple Flash Evaporation Method/ L. Kungumadevi, R. Sathyamoorthy//Advances in Condensed Matter Physics. – 2012. – vol. 2012. – Article ID 763209. – 5 p.
166. Parthasarathy, R. Percolating through Networks of Random Thresholds: Finite Temperature Electron Tunneling in Metal Nanocrystal Arrays/ R. Parthasarathy, X. Lin, K. Elteto, T. F. Rosenbaum, H. M. Jaeger// Physical Review Letters. – 2004. – Vol. 92, № 7. DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.076801.
167. Kurdak, C. Au Nanoparticle Clusters: A New System to Model Hopping Conduction/ C. Kurdak, J. Kim, L. Farina, L. Kim, B. Xiaoyong, M. Rowe, A. Matzger// Turkish Journal of Physics. – 2003. – 27(5). – PP.419 – 426.
168. Бухаров, Д.Н. Совмещенная модель электропроводимых свойств островковой нанопленки PbTe/ Д.Н. Бухаров, А.О. Кучерик, С.М. Аракелян // Математическое и компьютерное моделирование [Электронный ресурс] : сборник материалов VIII Международной научной конференции, посвященной памяти А.Л. Иозефера (Омск, 20 ноября 2020 г.). – Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та. – 2020.
169. Ивановский, С.А. Алгоритмы вычислительной геометрии. Выпуклые оболочки: простые алгоритмы/ С.А. Ивановский, А.С.Преображенский// Компьютерные инструменты в образовании. – 2007. – №1. – С. 4-10.
170. Barber, C. B. Qhull: Quickhull algorithm for computing the convex hull /C. B. Barber, D. P. Dobkin, H. Huhdanpaa //Astrophysics Source Code Library. – 2013. – record ascl:1304.016, ascl:1304.016.
171. Гантмахер, В.Ф. Электроны в неупорядоченных средах/ В.Ф. Гантмахер.— М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. — 288 с.
172. Почтенный, А. Е. Прыжковая проводимость постоянном токе в собственных и примесных органических полупроводниках: монография / А. Е. Почтенный. – Минск: БГТУ, 2016. – 171 с.
173. Klima, R. Applications of Abstract Algebra with Maple and MATLAB/R. Klima, N. P. Sigmon, E. Stitzinger. – CRC Press, 2006. –528 p.

174. Зябиров, Э.В. Методы определения кратчайшего пути между вершинами графа / Э.В. Зябиров, С.П. Токарев, Л.И. Федосеева // Успехи современного естествознания. – 2011. – № 7. – С. 113-114.
175. Бухаров, Д. Н. Моделирование оптических свойств фрактальной островковой металлической пленки/ Д. Н. Бухаров, С.М. Аракелян, А. О. Кучерик//IX Международная конференция по фотонике и информационной оптике: Сборник научных трудов. – М.: НИЯУ МИФИ, 2020. – 704 с.
176. Samyshkin, V. Photosensitive free-standing ultra-thin carbyne–gold films// V. Samyshkin, A. Lelekova, A. Osipov, D. Bukharov, I. Skryabin, S. Arakelian, A. Kucherik, S. Kutrovskaya// Opt Quant Electron. – 2019. – 51. – 394. <https://doi.org/10.1007/s11082-019-2114-3>
177. Arakelian, S. M.Nanophysics in laser-induced cluster systems: topological quantum states in electrical conductivity and features of optical spectra—theory and experiment for dimensional effects/ S. M. Arakelian, A. O. Kucherik, T. A. Khudaberganov, D.N. Bukharov, A. V.Istratov, K. S., Khorkov, A. V.Osipov, O. Ya. Butkovskiy //Opt Quant Electron. – 2020. – 52. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11082-020-02308-6>.
178. Багаев, С. Н. Нанооптика тонкопленочных лазерно-индуцированных топологических структур на поверхности твердого тела: фундаментальные явления и их приложения/ С. Н. Багаев, С. М. Аракелян, А. О. Кучерик, Д. Н. Бухаров, О. Я. Бутковский // Известия РАН. Серия физическая, 2020, Т. 84, № 12, стр. 1682-1695.

**Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ**

- Бухаров Д.Н., Кучерик А.О., Самышкин В.Д., Осипов А.В., Кутровская С.В. Модель формирования нанодендритной структуры. Свидетельство на регистрацию программ для ЭВМ № ЭВМ № 2021660172 от 22.06.2021
- Бухаров Д.Н., Лелекова А.Ф., Кучерик А.О., Антипов А.А., Кутровская С.В. Модель прыжковой электропроводности Свидетельства на регистрацию программ для ЭВМ № 2019663686 от 22.10.2019.
- Бухаров Д.Н., Кучерик А.О., Осипов А.В., Кутровская С.В., Новикова О.А. Перколяционная модель структуры и электропроводности биметаллической Ag/Au островковой пленки Свидетельства на регистрацию программ для ЭВМ № 2019662653 от 23.09.2019.
- Бухаров Д.Н., Кучерик А.О., Кутровская С.В. DLA модель формирования поверхности островковой пленки PbTe Свидетельства на регистрацию программ для ЭВМ №2018618644 от 17.07.2018.