



doi 10.26089/NumMet.v27r439

УДК 536.75. 538.9

Суперкомпьютерное моделирование напряжений в тонких оптических пленках при различных температурах подложки

Ф. В. Григорьев

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
Научно-исследовательский вычислительный центр, Москва, Российская Федерация
Московский Центр фундаментальной и прикладной математики,
Москва, Российская Федерация

ORCID: 0000-0001-6893-3008, e-mail: fedor.grigoriev@rcc.msu.ru

В. Б. Сулимов

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
Научно-исследовательский вычислительный центр, Москва, Российская Федерация

ORCID: 0000-0002-7102-6107, e-mail: v.sulimov@rcc.msu.ru

А. В. Тихонравов

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
Научно-исследовательский вычислительный центр, Москва, Российская Федерация

ORCID: 0000-0001-7773-7068, e-mail: tikh@srcc.msu.ru

Аннотация: В данной работе выполнен суперкомпьютерный расчет механических напряжений в тонких пленках диоксида кремния и диоксида титана методом молекулярной динамики при различных температурах процесса напыления. Для расчета напряжений требуются атомистические кластеры больших размеров, что обуславливает необходимость использования технологий параллельных вычислений. Показано, что характер и величины напряжений существенно зависят от пленкообразующего материала, температуры подложки и энергии напыляемых атомов. Проведен анализ численной эффективности суперкомпьютерных вычислений с учетом большого размера области атомистического моделирования, а также определены способы ее повышения.

Ключевые слова: атомистическое моделирование, тонкие пленки, высокопроизводительные расчеты, напряжения в тонких пленках.

Благодарности: Статья подготовлена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках программы Московского центра фундаментальной и прикладной математики по Соглашению № 075–15–2025–345.

Для цитирования: Григорьев Ф.В., Сулимов В.Б., Тихонравов А.В. Суперкомпьютерное моделирование напряжений в тонких оптических пленках при различных температурах подложки // Вычислительные методы и программирование. 2026. 27, № 4. 639–650. doi 10.26089/NumMet.v27r439.

Supercomputer modeling of stresses in thin optical films at different substrate temperatures

Fedor V. Grigoriev

Lomonosov Moscow State University,
Research Computing Center, Moscow, Russia
Moscow Center for Fundamental and Applied Mathematics, Moscow, Russia
ORCID: 0000-0001-6893-3008, e-mail: fedor.grigoriev@rcc.msu.ru

Vladimir B. Sulimov

Lomonosov Moscow State University,
Research Computing Center, Moscow, Russia
ORCID: 0000-0002-7102-6107, e-mail: v.sulimov@rcc.msu.ru

Alexander V. Tikhonravov

Lomonosov Moscow State University,
Research Computing Center, Moscow, Russia
ORCID: 0000-0001-7773-7068, e-mail: tikh@srcc.msu.ru

Abstract: In this paper supercomputer simulations of mechanical stresses in thin silicon dioxide and titanium dioxide films at various deposition temperatures are performed using molecular dynamics. Stress calculations require large atomic clusters, which necessitates the use of parallel computing technologies. It is shown that the type and value of stresses depend significantly on the film material, substrate temperature, and the energy of the deposited atoms. An analysis of the numerical efficiency of supercomputer calculations is performed with taking into account the large size of the atomic simulation box and methods for its improvement are also proposed.

Keywords: atomistic modeling, thin films, high-performance computing, stress in thin films.

Acknowledgements: The work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation as part of the program of the Moscow Center for Fundamental and Applied Mathematics under the Agreement No. 075–15–2025–345.

For citation: F. V. Grigoriev, V. B. Sulimov, A. V. Tikhonravov, “Supercomputer modeling of stresses in thin optical films at different substrate temperatures,” Numerical Methods and Programming, 27 (4), 639–650 (2026). doi 10.26089/NumMet.v27r439.

1. Введение. Многослойные оптические покрытия, изготавливаемые для различных целей, состоят из нескольких десятков слоев с чередующимися значениями показателя преломления [1]. Структуру покрытий схематически можно представить в виде SHLHL...HLA, где S — подложка, H — слой с высоким показателем преломления, L — слой с низким показателем преломления и A — воздух. В качестве материала с низким показателем преломления часто используют SiO₂, а в качестве материала с высоким — TiO₂.

Механические напряжения являются одним из ключевых факторов, влияющих на свойства покрытий и ограничивающих их использование в лазерном оборудовании сверхвысокой мощности. Они возникают из-за различий в физических свойствах пленкообразующих материалов. Напряжения могут приводить к деформации покрытий [2], частичному расслоению соседних слоев [3], увеличению концентрации дефектов, влияющих на оптические свойства покрытий, и другим эффектам, ухудшающим характеристики многослойных покрытий [4]. В связи с этим определение технологических условий, при которых могут быть изготовлены многослойные покрытия с низкими абсолютными значениями механических напряжений, является актуальной задачей в оптической и оптоэлектронной промышленности.

Для теоретического изучения зависимости напряжений в растущей пленке от условий напыления можно использовать методы атомистического моделирования, такие как метод молекулярной динамики

ки (МД), метод Монте-Карло (МК) и другие. При использовании этих методов тензор напряжений рассчитывается на основе траектории МД моделирования по величинам скоростей и координат каждого атома в кластере. В настоящее время такой подход широко используется при расчете напряжений в различных материалах, включая тонкие пленки. Метод МД использовался в работе [5] для исследования дефектов и напряжений, вызванных бомбардировкой пленки молибдена высокоэнергетическими ионами аргона. Было выявлено, что размеры кристаллических зерен в пленках уменьшаются с ростом энергии ионов, приводя к увеличению концентрации междоузельных дефектов. Также увеличивается значение сжимающего напряжения (compressive stress). При этом изменение угла падения осаждаемых атомов незначительно влияет на напряжения и структуру пленок [5]. Структура и механические свойства тонких пленок DLC (Diamond-like carbon)/Ni-DLC были изучены в [6] с использованием метода МД. Показано, что легирование никелем и целенаправленный подбор параметров напыления снижают значения напряжений в пленках DLC. В работе [7] было проведено моделирование напыления методом МД покрытий из тантала и нитрида тантала, изготовленных химическим осаждением из газовой фазы. На основе экспериментальных результатов и моделирования сделан вывод, что межфазное напряжение в покрытии Ta/TaN существенно ниже, чем в покрытии Ta/(нержавеющая сталь). Зависимость напряжений пленок диоксида кремния от их толщины изучалась в [8] методом МД с эмпирическим силовым полем DESIL [9]. В случае нормального осаждения (атомы падают перпендикулярно подложке) напряжение является сжимающим и незначительно изменяется с увеличением толщины пленки. Осаждение под большими углами (glancing angle deposition) приводит к уменьшению абсолютных значений напряжений в несколько раз [9]. Напряжения в алмазоподобных углеродных пленках были рассчитаны в [10] с использованием МД моделирования. Показано, что напряжения уменьшаются с увеличением угла напыления. Авторы [10] объяснили этот эффект релаксацией напряженных связей C–C. Расчет механических напряжений в пленках TiO₂, SiO₂ и TiO₂–SiO₂ выполнен в [11] с использованием МД моделирования. Обнаружено, что при осаждении, когда угол падения не превышает 30°, главные компоненты тензора напряжений отрицательны, что соответствует сжимающему напряжению. Абсолютные значения напряжений незначительно изменяются в указанных диапазонах угла напыления. При углах падения выше 30° абсолютные значения тензора напряжений уменьшаются, а при напылении под скользящим углом напряжения падают в несколько раз. Кроме того, в [11] наблюдалась значительная анизотропия напряжений в плоскости подложки.

Таким образом, к настоящему времени накоплен значительный опыт в области расчета механических напряжений в тонких пленках различного состава, напыленных в различных условиях, с использованием методов атомистического моделирования. В данной работе мы используем МД моделирование для изучения зависимости напряжений в растущих пленках диоксида кремния и диоксида титана от температуры подложки. Также исследуется влияние охлаждения подложки после осаждения. Важно отметить, что для расчета тензора напряжений с использованием МД моделирования необходимы кластеры больших размеров, состоящие из десятков и сотен тысяч атомов. Это связано с зависимостью величин напряжений от толщины пленок. Чтобы учесть этот эффект, характерные размеры кластеров моделирования должны достигать нескольких десятков нанометров [9]. Такое моделирование может быть выполнено только с использованием технологии параллельных вычислений. Эффективность суперкомпьютерного моделирования, проведенного в настоящей работе, также анализируется.

2. Метод моделирования. Процедура МД моделирования для расчета напряжений в напыляемой пленке при различных температурах состоит из следующих этапов:

1. Моделирование напыления тонкой пленки диоксида кремния (диоксида титана) на горячей подложке. Компоненты тензора напряжений рассчитываются по мере роста толщины пленки с шагом по толщине, приблизительно равным 3 нм.
2. Конечный кластер пленки толщиной около 18 нм охлаждается от температуры напыления до комнатной температуры (300 K) в течение 200 пс. Скорость охлаждения постоянна.
3. Проводится МД моделирование напыленного кластера при температуре 300 K в течение 200 пс. Затем компоненты тензора напряжений рассчитываются с использованием полученной траектории МД моделирования.

Описанная процедура схематически показана на рис. 1. Моделирование напыления (рис. 1, левая сторона) воспроизводит технологические условия метода физического напыления из газовой фазы (physical vapor deposition, PVD) [1]. Пленка диоксида кремния (диоксида титана) формируется в вакуумной камере при низком давлении атомами, извлеченными из мишени [12]. Эти атомы движутся в камере от мишени

к подложке, реагируют с молекулами кислорода и формируют новые слои пленки. Как правило, характерный размер подложки существенно меньше расстояния от мишени до подложки. При таком условии можно считать, что начальные скорости осаждаемых на подложку атомов одинаковы по направлению.

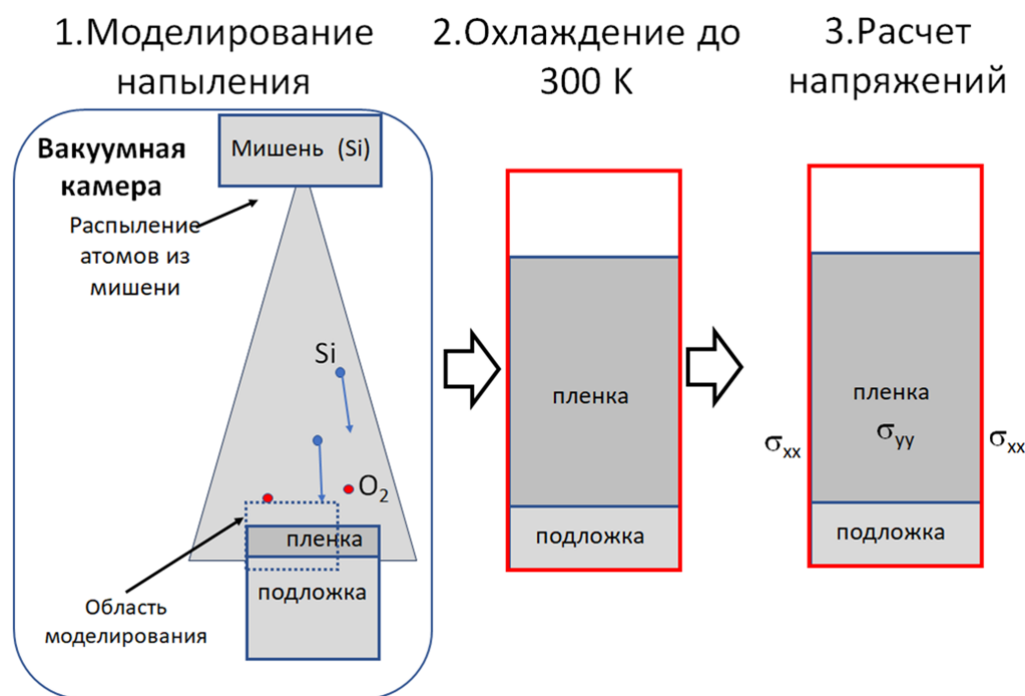


Рис. 1. Схема расчета напряжений по результатам моделирования напыления пленки методом молекулярной динамики

Fig. 1. Scheme for calculating stresses based on the results of film deposition modeling using the molecular dynamics simulation

Моделирование процесса напыления методом МД включает следующие стадии:

1. Подготовка структуры подложки. Ее горизонтальные размеры определяются, исходя из имеющихся вычислительных ресурсов и масштабируемости рассчитываемых характеристик пленки. Например, плотность пленки можно рассчитать, используя относительно небольшие кластеры с характерным размером в несколько нанометров. В то же время для расчета пористости требуются кластеры с размерами в десятки нанометров. Толщина подложки обычно выбирается равной 4–6 нм. Этот диапазон превышает глубину проникновения высокоэнергетических атомов и ассистирующих ионов (в случае напыления с ассистированием) в подложку и осаждаемую пленку.
2. Проведение циклов напыления, описанных в [9]. В каждом цикле атомы кремния (титана) и кислорода вводятся в верхнюю часть области моделирования над подложкой. Начальные скорости атомов кремния (титана) и кислорода соответствуют энергии и температуре напыляемых частиц в вакуумной камере. Длительность одного цикла составляет 6 пс [9].
3. Прекращение напыления. Оно останавливается, когда толщина пленки достигает заданных значений.

Моделирование методом МД выполняется в NVT ансамбле (постоянное число частиц, объем и температура). Чтобы учесть рост толщины пленки, после каждого цикла осаждения вертикальный размер области моделирования увеличивается. Температура области моделирования контролируется с помощью термостата Берендсена [13]. Шаг по времени в уравнениях движения составляет 0.5 фс. Потенциальная энергия межатомного взаимодействия рассчитывается с использованием эмпирического силового поля DESIL следующего вида:

$$U = q_i q_j / r_{ij} + A_{ij} / r_{ij}^{12} - B_{ij} / r_{ij}^6, \quad (1)$$

где q_i — заряд i -го атома. Для атомов кислорода и кремния в диоксиде кремния $q_O = -0.65e$, $q_{Si} = 1.3e$. Для атомов кислорода и титана в диоксиде титана $q_O = -1.098e$, $q_{Ti} = 2.196e$. Величина элементарного



Таблица 1. Параметры потенциала Леннарда–Джонса для SiO₂ [14] и TiO₂ [15]

Table 1. Lennard–Jones potential parameters for SiO₂ [14] and TiO₂ [15]

Типы взаимодействующих атомов Types of interacting atoms	A_{ij} , кДж·нм ¹² /моль A_{ij} , kJ · nm ¹² /mol	B_{ij} , кДж·нм ⁶ /моль B_{ij} , kJ · nm ⁶ /mol
Si–Si	$1.5 \cdot 10^{-6}$	$5.0 \cdot 10^{-4}$
O–O	$1.5 \cdot 10^{-6}$	$5.0 \cdot 10^{-4}$
Si–O	$4.6 \cdot 10^{-8}$	$4.2 \cdot 10^{-3}$
Ti–Ti	$5.06 \cdot 10^{-4}$	$3.12 \cdot 10^{-8}$
O–O	$3.00 \cdot 10^{-3}$	$1.735 \cdot 10^{-6}$
Ti–O	$1.44 \cdot 10^{-3}$	$2.909 \cdot 10^{-7}$

заряда равна e . Параметры потенциала Леннарда–Джонса (последние два слагаемых в (1)) приведены в табл. 1.

Радиус обрезания неэлектростатической части потенциала равен 1 нм, как и в наших предыдущих работах [11, 14]. Электростатическая составляющая энергии взаимодействия рассчитывается без обрезания с использованием метода Particle Mesh Ewald (PME) [16]. Моделирование выполнено с использованием оборудования центра коллективного пользования для высокопроизводительных вычислений Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова [17]. Молекулярно-динамическое моделирование выполняется с использованием программного пакета GROMACS [18], установленного на суперкомпьютере “Ломоносов-2”. Визуализация напыленных атомистических структур выполнена с помощью программы Visual Molecular Dynamics (VMD) [19].

3. Результаты и обсуждение.

3.1. Результаты моделирования. В настоящей работе моделируется высокоэнергетическое и низкоэнергетическое напыление оптических пленок из газовой фазы. При высокоэнергетическом напылении атомы кремния (титана) выбиваются из мишени (левая часть рис. 1) ионами благородных элементов, ускоренными электрическим полем. В результате распыленные атомы Si(Ti) имеют начальную энергию порядка нескольких эВ [20]. Как правило, при моделировании высокоэнергетического напыления методом МД начальную энергию осаждаемых атомов выбирают равной 10 эВ [21–23]. Такая же величина используется и в настоящей работе. При низкоэнергетическом напылении (методы термического или электронно-лучевого испарения) кинетическая энергия вылетающих из мишени частиц значительно ниже и не превышает нескольких десятых эВ [1]. В нашей работе начальная энергия атомов кремния (титана) при низкоэнергетическом напылении равна 0.1 эВ. Энергия атомов кислорода равна 0.1 эВ как при низкоэнергетическом напылении, так и при высокоэнергетическом.

Для температуры горячей подложки выбраны следующие значения: 400 К, 500 К и 600 К. Эти величины соответствуют экспериментальным условиям в [24, 25]. Моделирование напыления пленок диоксида кремния осуществлялось в соответствии с методикой, описанной выше. Толщина атомистического кластера, сформированного напылением, достигла приблизительно 18 нм. Для этого потребовалось около 1500 циклов осаждения. Горизонтальные размеры подложки составляли 30 нм × 10 нм.

Результаты расчета напряжений представлены на рис. 2, 3.

При высокоэнергетическом напылении главные компоненты тензора напряжений имеют отрицательный знак (рис. 2, левая сторона), что соответствует сжимающему напряжению (compressive stress), при котором напыленная пленка стремится увеличить свой объем, а подложка препятствует этому. Этот результат согласуется с экспериментальными данными по напряжениям в пленках, полученными высокоэнергетическим напылением [4, 26]. С ростом толщины пленки абсолютная величина компонентов тензора напряжений растет. Такое поведение сходно с тем, что наблюдалось ранее при моделировании на холодной подложке [8] и на качественном уровне может объясняться следующим образом. Осаждаемые атомы, обладая большой кинетической энергией (около 10 эВ), при столкновении с атомами пленки и подложки отталкивают их в стороны. Этот эффект сопровождается увеличением давления на границы области моделирования, что и выражается в росте напряжений. Тенденция к росту напряжений наблюдается при всех выбранных величинах температуры подложки.

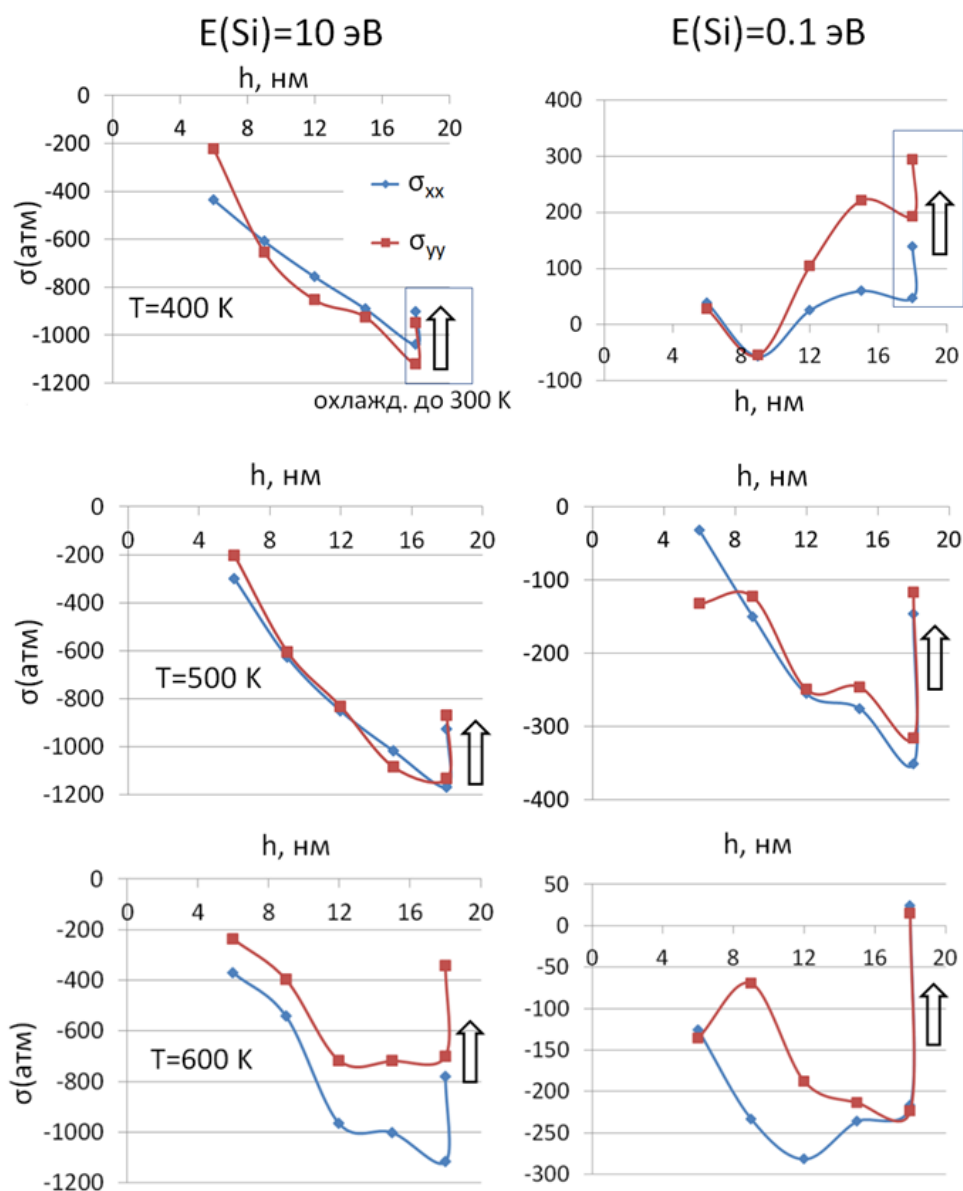


Рис. 2. Зависимость главных компонент тензора напряжений в плоскости подложки от толщины пленки h при различных температурах T горячей подложки в пленках диоксида кремния. Стрелками показано изменение напряжений при охлаждении подложки до комнатной температуры после напыления (300 K)

Fig. 2. Dependence of the principal components of the stress tensor in the substrate plane on the film thickness h at different temperatures T of the hot substrate in silicon dioxide films. The arrows show the change in stress caused by cooling the substrate to room temperature after deposition (300 K)

Охлаждение подложки до комнатной температуры ведет к существенному уменьшению абсолютных величин напряжений приблизительно на 200–300 атм, причем эффект уменьшения усиливается с увеличением температуры подложки в фазе нагрева. Этот результат может быть на качественном уровне объяснен тем, что снижение температуры приводит к снижению давления атомов пленки на границы области моделирования, что влечет за собой уменьшение абсолютных величин напряжений.

При низкоэнергетическом напылении поведение напряжений с ростом толщины пленки, изменением температуры подложки и последующим охлаждением существенно отличается от характера изменения напряжений в случае высокоэнергетического напыления. Теперь абсолютные значения главных компонент тензора напряжений оказываются существенно ниже. Этот результат согласуется с экспериментальными данными [27]. Отметим, что при $T = 400\text{ K}$ напряжения в основном имеют положительный знак (tensile

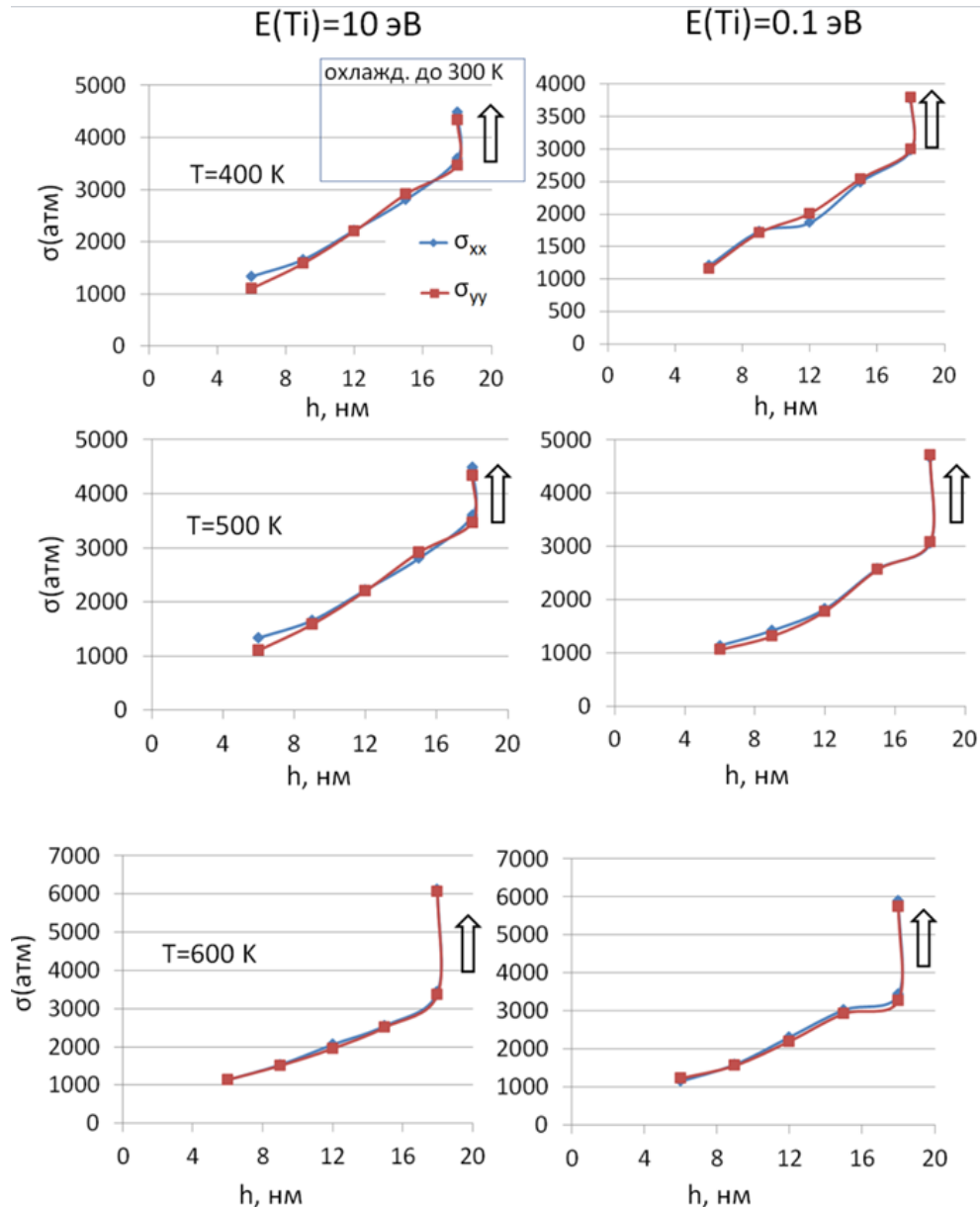


Рис. 3. Зависимость главных компонент тензора напряжений от толщины пленки h при различных температурах T горячей подложки в пленках диоксида титана. Стрелками показано изменение напряжений при охлаждении подложки до комнатной температуры (300 K)

Fig. 3. Dependence of the principal components of the stress tensor on the film thickness h at different temperatures T of the hot substrate in titanium dioxide films. The arrows show the change in stress caused by cooling the substrate to room temperature (300 K)

stress), то есть напыленная пленка стремится сжаться, чему препятствует подложка. С ростом температуры подложки напряжения становятся отрицательными, как и при высокоэнергетическом напылении, однако их абсолютные величины остаются в несколько раз меньше. Охлаждение подложки приводит к росту абсолютных величин напряжений в случае $T = 400\text{ K}$, и к уменьшению при $T = 500\text{ K}$ и 600 K . Эти различия объясняются тем, что при $T = 400\text{ K}$ напряжения в ходе напыления имеют положительный знак, а при $T = 500\text{ K}$ и 600 K — отрицательный. Как и при высокоэнергетическом напылении, рост температуры подложки сопровождается ростом абсолютной величины изменения напряжений при последующем охлаждении.

Расчет напряжений по описанной выше методике также был выполнен и для диоксида титана. Мак-

симальная толщина напыленной пленки составляет около 18 нм, горизонтальные размеры подложки составляют 14 нм × 14 нм. Напыление проводилось по той же схеме, что и в случае диоксида кремния. Результаты показаны на рис. 3. В отличие от диоксида кремния, главные компоненты тензора напряжений имеют положительный знак (tensile stress) как при высокоэнергетическом, так и при низкоэнергетическом напылении. Такой результат соответствует экспериментальным данным [28]. По абсолютной величине напряжения растут с увеличением толщины пленки. Вероятно, эффект “расталкивания” атомов пленки осаждаемыми атомами титана не сказывается в такой мере, как в диоксиде кремния. Охлаждение подложки после завершения напыления приводит к увеличению напряжений, которое на качественном уровне объясняется аналогично случаю диоксида кремния. С ростом температуры подложки эффект от ее охлаждения несколько возрастает.

Таким образом, можно сделать следующие выводы. Охлаждение подложки после напыления на горячую подложку приводит к уменьшению абсолютных величин компонент тензора напряжений в случае, если напряжения имеют отрицательный знак. Напряжения, имеющие положительный знак, возрастают по величине при охлаждении. Количественно изменение напряжений при охлаждении зависит от пленкообразующего материала, температуры горячей подложки и толщины пленки. Возможно, разница в поведении напряжений в оксидах кремния и титана обусловлена различием коэффициентов температурного расширения.

3.2. Эффективность моделирования. Все расчеты проведены в разделе Pascal суперкомпьютера “Ломоносов-2” со следующими основными характеристиками: общее число узлов равно 160, центральный процессор Intel Xeon Gold 6126 (12 ядер, 2.6 ГГц), графический ускоритель 2 × NVIDIA P100 (3584 CUDA-ядер, 16 ГБ памяти), объем оперативной памяти на узле равен 96 ГБ.

Эффективность параллельных расчетов a в зависимости от числа ядер N_c определялась следующим образом:

$$a = (N_{at}(N_c)/N_{at}(4)) \cdot (4/N_c),$$

где N_{at} — число напыленных атомов. Эффективность при $N_c = 4$ принята равной 100%.

Результаты показаны на рис. 4. Видно, что с ростом числа ядер эффективность моделирования заметно уменьшается и при числе ядер, равном 32, снижается приблизительно до 1/3 от исходного значения.

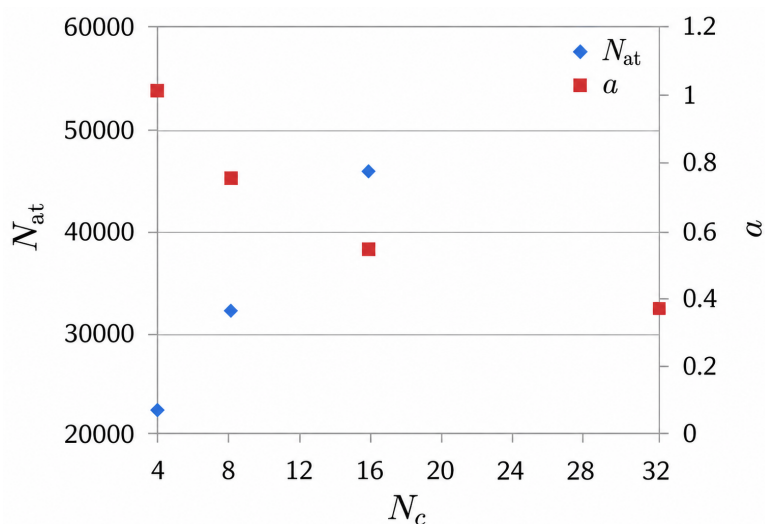


Рис. 4. Зависимость числа напыленных атомов N_{at} и эффективности a параллельных расчетов от числа ядер N_c . Время моделирования во всех случаях равно 500 мин

Fig. 4. Dependence of the number of deposited atoms N_{at} and the efficiency a of parallel computations on the number of cores N_c . The simulation time in all cases is 500 min

Анализ снижения численной эффективности проведен средствами, имеющимися в рабочем кабинете пользователя суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М. В. Ломоносова. Интенсивность передачи данных по MPI находится в зеленой зоне (существенных проблем нет). В то же время интенсивность чтения из файловой системы и интенсивность записи в файловую систему низкие (красная зона). Загрузка GPU находится либо в желтой, либо в красной зоне.

Таким образом, основным фактором, ограничивающим эффективность параллельных вычислений, являются операции чтения и записи в файловой системе. Вероятно, наиболее простой путь увеличения эффективности заключается в сокращении объема сохраняемой в выходных файлах GROMACS информации, в частности, координат атомов и их скоростей. Такой подход может быть использован в задачах, в которых характеристики пленок могут быть рас-

считаны по конечной геометрии или по ограниченному набору снимков траектории. Дальнейшее повышение эффективности потребует перестройки описанной выше схемы моделирования. В настоящий момент в



каждом цикле напыления требуется запуск GROMACS, при котором программа заново считывает данные о предыдущей конфигурации кластера, а также проводит подготовительные процедуры для начала МД моделирования. В условиях, когда длительность цикла напыления мала (всего 6 пс), а размер файлов с геометрией атомистического моделирования велик, относительный вклад этих процедур в общее время моделирования возрастает с увеличением числа ядер, используемых в параллельных расчетах. Именно с этим связано снижение эффективности (рис. 4). Для решения проблемы необходимо собрать исполняемый модуль GROMACS, в котором предусмотрено моделирование напыления — например, так, как это сделано в программе Lammmps [29].

4. Заключение. В настоящей работе проведено суперкомпьютерное моделирование напыления тонких пленок диоксида кремния и диоксида титана на горячей подложке. Рассчитаны напряжения при различных толщинах пленки, а также изменение напряжений при охлаждении подложки после завершения напыления.

В пленках диоксида кремния напряжения в основном сжимающие, а их абсолютная величина существенно зависит от энергии напыления. При высокоэнергетическом напылении охлаждение подложки приводит к уменьшению напряжений по абсолютной величине, при низкоэнергетическом напылении абсолютные величины главных компонент тензора напряжений могут как увеличиваться, так и уменьшаться. В диоксиде титана как при высокоэнергетическом, так и при низкоэнергетическом напылении наблюдаются растягивающие напряжения. При охлаждении подложки их абсолютная величина растет.

Проведен анализ численной эффективности суперкомпьютерных расчетов с учетом больших размеров области атомистического моделирования. Найдено, что запись в файловую систему и чтение из нее в наибольшей степени снижают эффективность расчетов. Предложены способы решения этой проблемы.

Список литературы

1. Kaiser N. Review of the fundamentals of thin-film growth // Appl. Opt. 2002. **41**, N 16. 3053–3060. doi [10.1364/AO.41.003053](https://doi.org/10.1364/AO.41.003053).
2. Qiao G., Hu H., Zhang X., et al. Stress-induced deformation of the coating on large lightweight freeform optics // Optics. Opt. Express. 2021. **29**, N 4. 4755–4769. doi [10.1364/OE.414953](https://doi.org/10.1364/OE.414953).
3. Forschelen P.J.J., Suiker A.S.J., van der Sluis O. Effect of residual stress on the delamination response of film-substrate systems under bending // Int. J. Solids Struct. 2016. **97–98**, N 8. 284–299. doi [10.1016/j.ijsolstr.2016.07.020](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2016.07.020).
4. Abadias G., Chason E., Keckes J., et al. Review article: stress in thin films and coatings: current status, challenges, and prospects // J. Vac. Sci. Technol. A: Vacuum, Surfaces, and Films. 2018. **36**, N 2. Article Number 020801. doi [10.1116/1.5011790](https://doi.org/10.1116/1.5011790).
5. Zhang M., Rao Z., Kim K.-S., et al. Molecular dynamics simulation of stress induced by energetic particle bombardment in Mo thin films // Materialia. 2021. **16**, N 1. Article Number 101043. doi [10.1016/j.mtla.2021.101043](https://doi.org/10.1016/j.mtla.2021.101043).
6. Xiaoqiang W., Xu Z., Xiangyi H., et al. Molecular dynamics simulation of hybrid structure and mechanical properties of DLC/Ni-DLC thin films // Sci. Rep. 2024. **14**, N 1. Article Number 18885. doi [10.1038/s41598-024-69759-9](https://doi.org/10.1038/s41598-024-69759-9).
7. Ghorbani H., Poladi A. MD-simulation of duty cycle and TaN interlayer effects on the surface properties of Ta coatings deposited by pulsed-DC plasma assisted chemical vapor deposition // Int. J. Eng. 2020. **33**, N 5. 861–869. doi [10.5829/ije.2020.33.05b.18](https://doi.org/10.5829/ije.2020.33.05b.18).
8. Grigoriev F.V., Sulimov V.B., Tikhonravov A.V. Atomistic simulation of stresses in growing silicon dioxide films // Coatings. 2020. **10**, N 3. 220–230. doi [10.3390/coatings10030220](https://doi.org/10.3390/coatings10030220).
9. Grigoriev F.V., Sulimov A.V., Kochikov I.V., et al. Supercomputer modeling of the ion beam sputtering process: full-atomistic level // in Optical Systems Design: Advances in Optical Thin Films V. Proceedings of SPIE — The International Society for Optical Engineering. Vol. 9627, Article Number 962701. Bellingham: SPIE, the International Society for Optical Engineering, 2015. doi [10.1117/12.2190938](https://doi.org/10.1117/12.2190938).
10. Li X., Ke P., Lee K.-R., Wang A. Molecular dynamics simulation for the influence of incident angles of energetic carbon atoms on the structure and properties of diamond-like carbon films // Thin Solid Films. 2014. **552**. 136–140. doi [10.1016/j.tsf.2013.12.012](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2013.12.012). <http://dx.doi.org/10.1016/j.tsf.2013.12.012>. Cited September 21, 2026.
11. Grigoriev F.V., Sulimov V.B., Tikhonravov A.V. Study of thin optical films properties using high-performance atomistic simulation // Supercomput. Front. Innov. 2024. **11**, N 1. 97–108. doi [10.14529/jsfi240105](https://doi.org/10.14529/jsfi240105).

12. Baptista A., Silva F., Porteiro J., et al. Sputtering physical vapour deposition (PVD) coatings: a critical review on process improvement and market trend demands // *Coatings*. 2018. **8**, N 11. Article Number 402. doi [10.3390/coatings8110402](https://doi.org/10.3390/coatings8110402).
13. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., Van Gunsteren W.F., et al. Molecular dynamics with coupling to an external bath // *J. Chem. Phys.* 1984. **81**, N 8. 3684–3690. doi [10.1063/1.448118](https://doi.org/10.1063/1.448118).
14. Grigoriev F.V., Sulimov A.V., Kochikov I.V., et al. High-performance atomistic modeling of optical thin films deposited by energetic processes // *Int. J. High Perform. Comput. Appl.* 2015. **29**, N 2. 184–192. doi [10.1177/1094342014560591](https://doi.org/10.1177/1094342014560591).
15. Grigoriev F.V., Sulimov V.B., Tikhonravov A.V. Application of a large-scale molecular dynamics approach to modelling the deposition of TiO₂ thin films // *Comput. Mater. Sci.* 2021. **188**, N (4–6). Article Number 110202. doi [10.1016/j.commatsci.2020.110202](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110202).
16. Darden T., York D., Pedersen L. Particle mesh Ewald: an $N \cdot \log(N)$ method for Ewald sums in large systems // *J. Chem. Phys.* 1993. **98**, N 12. 10089–10092. doi [10.1063/1.464397](https://doi.org/10.1063/1.464397).
17. Voevodin V.V., Antonov A.S., Nikitenko D.A., et al. Supercomputer Lomonosov-2: large scale, deep monitoring and fine analytics for the user community // *Supercomput. Front. Innov.* 2019. **6**, N 2. 4–11. doi [10.14529/jsfi190201](https://doi.org/10.14529/jsfi190201).
18. Abraham M.J., Murtola T., Schulz R., et al. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers // *SoftwareX*. 2015. **1–2**. 19–25. doi [10.1016/j.softx.2015.06.001](https://doi.org/10.1016/j.softx.2015.06.001).
19. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. VMD: visual molecular dynamics // *J. Mol. Graph.* 1996. **14**, N 1. 33–38. doi [org/10.1016/0263-7855\(96\)00018-5](https://doi.org/10.1016/0263-7855(96)00018-5).
20. Winters H.F. Physical sputtering: a discussion of experiment and theory. In radiation effects on solid surfaces // *Radiation Effects on Solid Surfaces*, Vol. 158. Washington: ACS Press, 1976. pp. 1–29. <https://doi.org/10.1021/ba-1976-0158.ch001>. Cited September 21, 2026.
21. Badorreck H., Steinecke M., Jensen L., et al. Correlation of structural and optical properties using virtual materials analysis // *Opt. Express*. 2019. **27**, N 16. 22209–22225. doi [10.1364/OE.27.022209](https://doi.org/10.1364/OE.27.022209).
22. Taguchi M., Hamaguchi S. MD simulations of amorphous SiO₂ thin film formation in reactive sputtering deposition processes // *Thin Solid Films*. 2007. **515**, N 12. 4879–4882. doi [10.1016/j.tsf.2006.10.097](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2006.10.097). <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2006.10.097>. Cited September 21, 2026.
23. Grigoriev F.V., Sulimov A.V., Katkova E.V., et al. Full-atomistic nanoscale modeling of the ion beam sputtering deposition of SiO₂ thin films // *J. Non. Cryst. Solids*. 2016. **448**. 1–5. doi [10.1016/j.jnoncrysol.2016.06.032](https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2016.06.032).
24. Amirzade M.R., Tatzel A., Viereck V., Hillmer H. Surface roughness analysis of SiO₂ for PECVD, PVD and IBD on different substrates // *Appl. Nanosci.* 2016. **6**. 215–222. doi [10.1007/s13204-015-0432-8](https://doi.org/10.1007/s13204-015-0432-8).
25. Juárez H., Pacio M., Díaz T., et al. Low temperature deposition: properties of SiO₂ films from TEOS and Ozone by APCVD system // *J. Phys. Conf. Ser.* 2009. **167**, N 1. Article Number 012020. doi [10.1088/1742-6596/167/1/012020](https://doi.org/10.1088/1742-6596/167/1/012020).
26. Bischoff M., Nowitzki T., Voß O., et al. Postdeposition treatment of IBS coatings for UV applications with optimized thin-film stress properties // *Appl. Opt.* 2014. **53**, N 4. A212–A220. doi [10.1364/AO.53.00A212](https://doi.org/10.1364/AO.53.00A212).
27. Tolenis T., Grinevičiūtė L., Smalakys L., et al. Next generation highly resistant mirrors featuring all-Silica layers // *Sci. Rep.* 2017. **7**, N 1. Article Number 10898. doi [10.1038/s41598-017-11275-0](https://doi.org/10.1038/s41598-017-11275-0).
28. Chen T., Luo C., Wang D., Xiong Y. Effect of ion beam bombarding on stress in TiO₂ thin films // *Phys. Procedia*. 2011. **18**. 136–142. doi [10.1016/j.phpro.2011.06.071](https://doi.org/10.1016/j.phpro.2011.06.071).
29. Aktulga H.M., Fogarty J.C., Pandit S.A., Grama A.Y. Parallel reactive molecular dynamics: numerical methods and algorithmic techniques // *Parallel Comput.* 2012. **38**, N (4–5). 245–259. doi [10.1016/j.parco.2011.08.005](https://doi.org/10.1016/j.parco.2011.08.005).

Получена
2 июня 2026 г.

Принята
14 августа 2026 г.

Опубликована
21 октября 2026 г.

Информация об авторах

Федор Васильевич Григорьев — д.ф.-м.н., вед. науч. сотр.; 1) Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Научно-исследовательский вычислительный центр, Ленинские горы, 1, стр. 4, 119991, Москва, Российская Федерация; 2) Московский Центр фундаментальной и прикладной математики, Ленинские горы, 1, 119991, Москва, Российская Федерация.



Владимир Борисович Сулимов — д.ф.-м.н., заведующий лабораторией; Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Научно-исследовательский вычислительный центр, Ленинские горы, 1, стр. 4, 119991, Москва, Российская Федерация.

Александр Владимирович Тихонравов — д.ф.-м.н., профессор, заведующий лабораторией; Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Научно-исследовательский вычислительный центр, Ленинские горы, 1, стр. 4, 119991, Москва, Российская Федерация.

References

1. N. Kaiser, “Review of the fundamentals of thin-film growth,” *Appl. Opt.* **41** (16), 3053–3060 (2002). doi [10.1364/AO.41.003053](https://doi.org/10.1364/AO.41.003053).
2. G. Qiao, H. Hu, X. Zhang, et al., “Stress-Induced Deformation of the Coating on Large Lightweight Freeform Optics,” *Optics. Opt. Express* **29** (4), 4755–4769 (2021). doi [10.1364/OE.414953](https://doi.org/10.1364/OE.414953).
3. P. J. J. Forschelen, A. S. J. Suiker, and O. van der Sluis, “Effect of Residual Stress on the Delamination Response of Film-Substrate Systems under Bending,” *Int. J. Solids Struct.* **97–98** (8), 284–299 (2016). doi [10.1016/j.ijsolstr.2016.07.020](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2016.07.020).
4. G. Abadias, E. Chason, J. Keckes, et al., “Review Article: Stress in Thin Films and Coatings: Current Status, Challenges, and Prospects,” *J. Vac. Sci. Technol. A: Vacuum, Surfaces, and Films* **36** (2), Article Number 020801 (2018). doi [10.1116/1.5011790](https://doi.org/10.1116/1.5011790).
5. M. Zhang, Z. Rao, K. S. Kim, et al., “Molecular Dynamics Simulation of Stress Induced by Energetic Particle Bombardment in Mo Thin Films,” *Materialia* **16** (1), Article Number 101043 (2021). doi [10.1016/j.mtla.2021.101043](https://doi.org/10.1016/j.mtla.2021.101043).
6. W. Xiaoqiang, Z. Xu, H. Xiangyi, et al., “Molecular Dynamics Simulation of Hybrid Structure and Mechanical Properties of DLC/Ni-DLC Thin Films,” *Sci. Rep.* **14** (1), Article Number 18885 (2024). doi [10.1038/s41598-024-69759-9](https://doi.org/10.1038/s41598-024-69759-9).
7. H. Ghorbani and A. Poladi, “MD-Simulation of Duty Cycle and TaN Interlayer Effects on the Surface Properties of Ta Coatings Deposited by Pulsed-DC Plasma Assisted Chemical Vapor Deposition,” *Int. J. Eng.* **33** (5), 861–869 (2020). doi [10.5829/ije.2020.33.05b.18](https://doi.org/10.5829/ije.2020.33.05b.18).
8. F. V. Grigoriev, V. B. Sulimov, and A. V. Tikhonravov, “Atomistic Simulation of Stresses in Growing Silicon Dioxide Films,” *Coatings* **10** (3), 220–230 (2020). doi [10.3390/coatings10030220](https://doi.org/10.3390/coatings10030220).
9. F. V. Grigoriev, A. V. Sulimov, I. V. Kochikov, et al., “Supercomputer Modeling of the Ion Beam Sputtering Process: Full-Atomistic Level,” in *Optical Systems Design: Advances in Optical Thin Films V. Proceedings of SPIE — The International Society for Optical Engineering* Vol. 9627, Article Number 962701. (SPIE, the International Society for Optical Engineering, Bellingham, WA, United States, 2015). doi [10.1117/12.2190938](https://doi.org/10.1117/12.2190938).
10. X. Li, P. Ke, K.-R. Lee, and A. Wang, “Molecular Dynamics Simulation for the Influence of Incident Angles of Energetic Carbon Atoms on the Structure and Properties of Diamond-like Carbon Films,” *Thin Solid Films* **552**, 136–140 (2014). doi [10.1016/j.tsf.2013.12.012](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2013.12.012). <http://dx.doi.org/10.1016/j.tsf.2013.12.012>. Cited September 21, 2026.
11. F. V. Grigoriev, V. B. Sulimov and A. V. Tikhonravov, “Study of Thin Optical Films Properties Using High-Performance Atomistic Simulation,” *Supercomput. Front. Innov.* **11** (1), 97–108 (2024). doi [10.14529/jsfi240105](https://doi.org/10.14529/jsfi240105).
12. A. Baptista, F. Silva, J. Porteiro, et al., “Sputtering Physical Vapour Deposition (PVD) Coatings: A Critical Review on Process Improvement and Market Trend Demands,” *Coatings* **8** (11), Article Number 402 (2018). doi [10.3390/coatings8110402](https://doi.org/10.3390/coatings8110402).
13. H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. Van Gunsteren, et al., “Molecular Dynamics with Coupling to an External Bath,” *J. Chem. Phys.* **81** (8), 3684–3690 (1984). doi [10.1063/1.448118](https://doi.org/10.1063/1.448118).
14. F. V. Grigoriev, A. V. Sulimov, I. V. Kochikov, et al., “High-Performance Atomistic Modeling of Optical Thin Films Deposited by Energetic Processes,” *Int. J. High Perform. Comput. Appl.* **29** (2), 184–192 (2015). doi [10.1177/1094342014560591](https://doi.org/10.1177/1094342014560591).
15. F. V. Grigoriev, V. B. Sulimov and A. V. Tikhonravov, “Application of a Large-Scale Molecular Dynamics Approach to Modelling the Deposition of TiO₂ Thin Films,” *Comput. Mater. Sci.* **188** (4–6), Article Number 110202 (2021). doi [10.1016/j.commatsci.2020.110202](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110202).
16. T. Darden, D. York and L. Pedersen, “Particle Mesh Ewald: An $N \cdot \log(N)$ Method for Ewald Sums in Large Systems,” *J. Chem. Phys.* **98** (12), 10089–10092 (1993). doi [10.1063/1.464397](https://doi.org/10.1063/1.464397).

17. V. V. Voevodin, A. S. Antonov, D. A. Nikitenko, et al., “Supercomputer Lomonosov-2: Large Scale, Deep Monitoring and Fine Analytics for the User Community,” *Supercomput. Front. Innov.* **6** (2), 4–11 (2019). doi [10.14529/jsfi.190201](https://doi.org/10.14529/jsfi.190201).
18. M. J. Abraham, T. Murtola, R. Schulz, et al., “GROMACS: High Performance Molecular Simulations through Multi-Level Parallelism from Laptops to Supercomputers,” *SoftwareX* (1–2), 19–25 (2015). doi [10.1016/j.softx.2015.06.001](https://doi.org/10.1016/j.softx.2015.06.001).
19. W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten, “VMD: Visual Molecular Dynamics,” *J. Mol. Graph.* **14** (1), 33–38 (1996). doi [org/10.1016/0263-7855\(96\)00018-5](https://doi.org/10.1016/0263-7855(96)00018-5).
20. H. F. Winters, “Physical Sputtering: A Discussion of Experiment and Theory. In Radiation Effects on Solid Surfaces,” in *Radiation Effects on Solid Surfaces*, Vol. 158. (American Chemical Society, Washington, DC, 1976), pp. 1–29. <https://doi.org/10.1021/ba-1976-0158.ch001>. Cited September 21, 2026.
21. H. Badorreck, M. Steinecke, L. Jensen, et al., “Correlation of Structural and Optical Properties Using Virtual Materials Analysis,” *Opt. Express* **27** (16), 22209–22225 (2019). doi [10.1364/OE.27.022209](https://doi.org/10.1364/OE.27.022209).
22. M. Taguchi and S. Hamaguchi, “MD Simulations of Amorphous SiO₂ Thin Film Formation in Reactive Sputtering Deposition Processes,” *Thin Solid Films* **515** (12), 4879–4882 (2007). doi [10.1016/j.tsf.2006.10.097](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2006.10.097). <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2006.10.097>. Cited September 21, 2026.
23. F. V. Grigoriev, A. V. Sulimov, E. V. Katkova, et al., “Full-Atomistic Nanoscale Modeling of the Ion Beam Sputtering Deposition of SiO₂ Thin Films,” *J. Non. Cryst. Solids* **448**, 1–5 (2016). doi [10.1016/j.jnoncrysol.2016.06.032](https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2016.06.032).
24. M. R. Amirzada, A. Tatzel, V. Viereck, and H. Hillmer, “Surface Roughness Analysis of SiO₂ for PECVD, PVD and IBD on Different Substrates,” *Appl. Nanosci.* **6**, 215–222 (2016). doi [10.1007/s13204-015-0432-8](https://doi.org/10.1007/s13204-015-0432-8).
25. H. Juárez, M. Pacio, T. Díaz, et al., “Low Temperature Deposition: Properties of SiO₂ Films from TEOS and Ozone by APCVD System,” *J. Phys. Conf. Ser.* **167** (1), Article Number 012020 (2009). doi [10.1088/1742-6596/167/1/012020](https://doi.org/10.1088/1742-6596/167/1/012020).
26. M. Bischoff, T. Nowitzki, O. Voß, et al., “Postdeposition Treatment of IBS Coatings for UV Applications with Optimized Thin-Film Stress Properties,” *Appl. Opt.* **53** (4), A212–A220 (2014). doi [10.1364/AO.53.00A212](https://doi.org/10.1364/AO.53.00A212).
27. T. Tolenis, L. Grinevičiūtė, L. Smalakys, et al., “Next Generation Highly Resistant Mirrors Featuring All-Silica Layers,” *Sci. Rep.* **7** (1), Article Number 10898 (2017). doi [10.1038/s41598-017-11275-0](https://doi.org/10.1038/s41598-017-11275-0).
28. T. Chen, C. Luo, D. Wang, and Y. Xiong, “Effect of Ion Beam Bombarding on Stress in TiO₂ Thin Films,” *Phys. Procedia* **18**, 136–142 (2011). doi [10.1016/j.phpro.2011.06.071](https://doi.org/10.1016/j.phpro.2011.06.071).
29. H. M. Aktulga, J. C. Fogarty, S. A. Pandit, and A. Y. Grama, “Parallel Reactive Molecular Dynamics: Numerical Methods and Algorithmic Techniques,” *Parallel Comput.* **38** (4–5), 245–259 (2012). doi [10.1016/j.parco.2011.08.005](https://doi.org/10.1016/j.parco.2011.08.005).

Received
June 2, 2026

Accepted
August 14, 2026

Published
October 21, 2026

Information about the authors

Fedor V. Grigoriev — Ph.D., Leading Scientist; 1) Lomonosov Moscow State University, Research Computing Center, Leninskie Gory, 1, building 4, 119991, Moscow, Russia; 2) Moscow Center for Fundamental and Applied Mathematics, Leninskie Gory, 1, 119991, Moscow, Russia.

Vladimir B. Sulimov — Dr. Sci., Head of the laboratory; Lomonosov Moscow State University, Research Computing Center, Leninskie Gory, 1, building 4, 119991, Moscow, Russia.

Alexander V. Tikhonravov — Dr. Sci., Professor, Head of the laboratory; Lomonosov Moscow State University, Research Computing Center, Leninskie Gory, 1, building 4, 119991, Moscow, Russia.