

УДК 536.75; 538.9

## СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОВРЕМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ НАПЫЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ НАНОПОКРЫТИЙ

А. В. Тихонравов<sup>1</sup>, И. В. Кочиков<sup>1</sup>, Т. В. Амочкина<sup>1</sup>, Ф. В. Григорьев<sup>1</sup>,  
О. А. Кондакова<sup>1</sup>, В. Б. Сулимов<sup>1</sup>

В работе исследуется возможность применения метода молекулярной динамики (МД) для суперкомпьютерного моделирования современных процессов напыления оптических нанопокровов. Дается обоснование выбора физических и технологических условий процесса напыления, проводятся оценки наиболее значимых параметров моделирования. Обсуждаются первые результаты использования МД для моделирования процессов напыления пленок диоксида кремния, свидетельствующие о перспективности применения суперкомпьютерного моделирования для исследования данных процессов.

**Ключевые слова:** суперкомпьютерное моделирование, молекулярная динамика, тонкие пленки, нанопокровы, диоксид кремния.

**1. Введение.** Оптические нанопокровы являются ключевым элементом многих современных технологий [1]. Без них не обходится ни одно оптическое или оптоэлектронное устройство. Так, любой современный телефон или фотокамера имеют десятки покрытий, преобразующих различным образом спектральный состав проходящего в них излучения. Области применения нанопокровов охватывают широчайший спектр длин волн от рентгеновского диапазона (рентгеновская литография) до инфракрасного диапазона (мощные технологические лазеры). Современные оптические нанопокровы представляют собой последовательности тонких плоскопараллельных диэлектрических слоев с толщинами от долей до сотен нанометров, наносимых на поверхности оптических элементов путем напыления в глубоком вакууме [1].

Проектирование оптических нанопокровов невозможно без решения сложной обратной математической задачи определения параметров, в первую очередь, толщин слоев покрытия, обеспечивающих требуемые спектральные свойства этого покрытия [2]. В последние годы достигнут огромный прогресс в развитии численных методов проектирования оптических нанопокровов [3]. Этот прогресс сопровождался постоянным совершенствованием технологий напыления тонких слоев в вакууме [4]. В настоящее время используются десятки различных методов напыления, причем все более широкое распространение приобретают так называемые высокоэнергетические процессы напыления материалов, в которых энергии напыляемых атомов и молекул составляют десятки и даже сотни электронвольт. Последнее связано с тем, что высокоэнергетические процессы позволяют получить наиболее качественные слоистые покрытия.

Качество слоев нанопокровов определяется их плотностью, однородностью, поверхностной шероховатостью, оптическими параметрами и т.п. Все эти характеристики связаны с процессом осаждения атомов и молекул и образования ими тонких слоев. Формирование тонких слоев, в свою очередь, зависит от энергии напыляемых частиц, плотности их потока, температуры подложки, на которой формируются слои, и других технологических параметров процесса напыления. Выбор оптимальных параметров процесса напыления — ключевой момент в совершенствовании технологий создания оптических нанопокровов. В настоящее время совершенствование процессов напыления нанопокровов основывается на большом числе дорогостоящих натуральных экспериментов.

Новые перспективы в совершенствовании технологических процессов напыления оптических нанопокровов открывает возможность использования методов суперкомпьютерного моделирования этих процессов. В первую очередь это относится к использованию метода молекулярной динамики (МД). В последние годы МД стал одним из основных методов исследования физических и технологических процессов во многих областях знаний. Отметим в связи с этим ряд публикаций последнего времени [5–11]. Этот метод широко применяется и для суперкомпьютерного моделирования. По некоторым оценкам, до 30–40% всех

<sup>1</sup> Научно-исследовательский вычислительный центр, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Ленинские горы, 119991, Москва; А. В. Тихонравов, директор, e-mail: tikh@srcc.msu.ru; И. В. Кочиков, вед. науч. сотр., e-mail: igor@kochikov.ru; Т. В. Амочкина, вед. науч. сотр., e-mail: tatiana@srcc.msu.ru; Ф. В. Григорьев, ст. науч. сотр., e-mail: fedor.grigoriev@gmail.com; О. А. Кондакова, ст. науч. сотр., e-mail: olga.kondakova@srcc.msu.ru; В. Б. Сулимов, зав. лабораторией, e-mail: vladimir.sulimov@gmail.com

задач, решаемых в крупнейших суперкомпьютерных центрах мира, связано с использованием МД. Благодаря суперкомпьютерам удастся моделировать системы с числом атомов до одного триллиона [12]. Наряду с МД для суперкомпьютерного моделирования процессов образования систем с большим числом атомов и молекул с успехом используются также методы Монте-Карло (МК) и различные квантово-механические методы [13–16].

В последние годы суперкомпьютерное моделирование стало активно применяться и для исследования процессов роста тонких пленок [17–26]. Однако все эти работы непосредственно не связаны с технологическими процессами напыления оптических нанопокровов и не могут быть непосредственно использованы для их изучения и совершенствования. Тем не менее, они свидетельствуют о значительных потенциальных возможностях изучения процессов роста тонких диэлектрических пленок, входящих в состав оптических нанопокровов, методом суперкомпьютерного моделирования. Данная работа делает первый шаг в этом направлении. В разделе 2 обосновывается выбор объекта исследования, т.е. процесса напыления и используемых в нем диэлектрических материалов. В разделе 3 проводится оценка наиболее существенных параметров, влияющих на выбор методов моделирования и способы их применения. В разделе 4 приводятся первые результаты суперкомпьютерного моделирования процесса напыления пленок двуокиси кремния. Выводы по работе представлены в разделе 5.

**2. Выбор объекта исследования.** Как уже упоминалось во введении, в настоящее время используются десятки различных методов напыления оптических нанопокровов. Условно их можно разделить на два основных класса: методы, использующие испарение материалов, и методы, основанные на распылении пленкообразующих материалов за счет, например, магнетронного распыления или бомбардировки мишени пучком ионов инертных газов. Характерной особенностью методов первого класса является низкая кинетическая энергия напыляемых частиц (атомов или молекул), составляющая доли электронвольт. Методы распыления характеризуются, наоборот, высокой кинетической энергией напыляемых частиц, которая может достигать десятков и даже сотен электронвольт.

Исторически первыми методами напыления оптических нанопокровов были методы термического и электронно-лучевого испарения пленкообразующих материалов. Из-за низкой кинетической энергии напыляемых частиц слои покрытий, получаемых этими методами, оказывались пористыми, что отрицательно сказывается на их оптических и механических свойствах. Существенный прогресс в технологиях нанесения покрытий был достигнут за счет использования так называемого ионного бомбардирования, состоящего в том, что на поверхность с растущей тонкой пленкой направляется дополнительный поток ионов инертных газов. Бомбардировка ионами увеличивает энергию напыляемых частиц, за счет чего увеличивается их подвижность на поверхности осаждения и, как следствие, увеличивается плотность растущей пленки. Уже из этого краткого описания ясно, что динамика атомов и молекул на поверхности и в объеме напыляемой пленки играет ключевую роль в определении ее свойств.

Понимание того, что большая кинетическая энергия напыляемых частиц приводит к улучшению свойств образующих покрытие тонких пленок, привело к широкому внедрению методов распыления пленкообразующих материалов. Среди этих методов наибольшие перспективы имеет метод ионно-лучевого распыления пленкообразующих материалов [27]. Метод был впервые использован около тридцати лет назад и в настоящее время широко применяется для создания наиболее сложных типов оптических нанопокровов, таких, например, как покрытия для узкополосных фильтров WDM-технологий (технологий сверхплотной передачи информации по телекоммуникационным сетям) [28–30]. В этой связи в данной работе при постановке задачи суперкомпьютерного моделирования процесса напыления оптических нанопокровов мы ориентируемся на характерные особенности этого метода. Соответствующие оценки основных параметров пучка распыляемых частиц приведены в следующем разделе.

Наиболее широко используемыми материалами для создания оптических нанопокровов являются тугоплавкие окислы [31]. Современные нанопокровы состоят, как правило, из чередующихся слоев двух материалов, один из которых имеет низкий, а другой — высокий показатель преломления [3]. В качестве материала с низким показателем преломления используется практически во всех случаях диоксид кремния  $\text{SiO}_2$ , поэтому при суперкомпьютерном моделировании процесса напыления естественно в первую очередь рассмотреть этот материал. Одним из наиболее широко используемых материалов с высоким показателем преломления является двуокись титана  $\text{TiO}_2$ . Для ряда современных покрытий в качестве такого материала используются также окислы тантала, ниобия, циркония и гафния. Для начальной стадии суперкомпьютерного моделирования процессов напыления нанопокровов наибольший интерес представляет двуокись титана, поскольку, с одной стороны, для этого материала имеются некоторые данные о моделировании свойств тонких пленок [25, 26], а с другой стороны,  $\text{TiO}_2$  представляет собой весьма сложный объект исследования в силу разнообразия его возможных структурных свойств [25]. Наряду с

SiO<sub>2</sub>, на этом втором материале мы и остановим свой выбор.

**3. Оценки параметров процесса напыления и выбор методов моделирования.** Как было отмечено выше, характерной особенностью процесса ионно-лучевого распыления является высокая кинетическая энергия напыляемых частиц, составляющая 20–100 эВ [4]. Как правило, напыление слоев производится на подложку, нагретую до 200–300°C. При таких температурах подложки средняя энергия ее молекул – около 0.05 эВ, т.е. на три порядка ниже энергии осаждаемых частиц. Из этой оценки с очевидностью следует, что процессы взаимодействия напыляемой частицы с молекулами подложки в первые моменты после ее соударения с подложкой будут играть определяющую роль. Эти процессы могут моделироваться с помощью МД.

Напыление слоев SiO<sub>2</sub> может производиться как путем распыления аморфного SiO<sub>2</sub>, так и путем распыления атомов кремния с добавлением в напылительную камеру потока кислорода [27]. Напыление слоев TiO<sub>2</sub> производится, как правило, распылением атомов титана с последующим его окислением подаваемым в камеру кислородом [33]. Таким образом, в процессе моделирования необходимо учитывать образование химических связей атомов металла и кислорода. Образование таких связей также может быть учтено с помощью МД. Существенным при этом является экспериментально установленный факт образования химических связей непосредственно на подложке, о которую ударяются атомы металла и кислорода. Вероятность химических взаимодействий между этими атомами в свободном пространстве напылительной камеры пренебрежимо мала [4]. В силу высокой энергии распыляемых атомов или молекул (в случае SiO<sub>2</sub>) на поверхности подложки возможно не только образование, но и разрыв химических связей. Последний процесс также эффективно учитывается МД.

Для получения физически значимых результатов суперкомпьютерного моделирования огромное значение имеет выбор репрезентативного числа рассматриваемых частиц. В зависимости от условий напыления тонкие оптические слои могут иметь аморфную или поликристаллическую структуру [32]. Аморфные слои при определенных параметрах напыления могут образовывать колончатые структуры. Характерные поперечные размеры всех возможных неоднородностей – от нескольких нанометров до нескольких десятков нанометров. Таким образом, участок слоя с поперечными размерами 100 × 100 нм является вполне репрезентативным. Существенные изменения плотности слоя и начальные особенности его формирования также проявляются при толщинах слоя до нескольких десятков нанометров [32].

В качестве подложек, на которые осаждаются напыляемые слои, широко используются хорошо отполированные пластины плавленого кварца. Именно такие подложки мы и будем рассматривать в дальнейшем. На начальных стадиях напыления важное значение имеет взаимодействие осаждаемых частиц с несколькими верхними атомными слоями подложки. В дальнейшем с ростом слоя значение имеет только температура подложки. Поэтому для учета влияния подложки на процесс напыления достаточно рассматривать ее поверхностный слой толщиной всего в несколько нанометров. В целом вертикальный размер исследуемого образца величиной 100 нм достаточен для рассмотрения всех основных процессов образования слоя.

Итак, для моделирования основных особенностей процесса напыления слоя достаточно рассмотреть кубический объем со стороной 100 нм. Оценивая возможное число молекул SiO<sub>2</sub> в таком объеме, получаем верхнюю оценку  $2.2 \times 10^7$  молекул. Для TiO<sub>2</sub> соответствующая оценка дает  $3.2 \times 10^7$  молекул. Суперкомпьютерное моделирование динамики такого числа молекул с помощью МД классических потенциалов, описывающих взаимодействие атомов, вполне реально. При этом следует отметить, что для многих целей достаточно будет рассмотреть и существенно меньшие ансамбли частиц.

Оценим далее среднее время между падениями напыляемых частиц на участок подложки с размерами 100 × 100 нм. Типичная скорость роста толщины слоя при использовании ионно-лучевого распыления составляет 0.3 нм/с. Таким образом, за одну секунду на рассматриваемую поверхность падает около  $6.6 \times 10^4$  молекул SiO<sub>2</sub>. Среднее время между падениями отдельных молекул составляет  $1.5 \times 10^{-5}$  с. Это время на много порядков больше типичных времен всех основных процессов, рассчитываемых с помощью МД.

В случае ионно-лучевого распыления металлов с последующим их окислением на поверхности подложки плотность потока атомов металла оценивается примерно теми же величинами. При этом в напылительную камеру подается поток кислорода, температуру которого можно считать близкой к 300 К. Типичное давление кислорода в камере составляет  $10^{-6}$  бар [4]. Для суперкомпьютерного моделирования процесса напыления необходимо оценить плотность потока молекул кислорода, падающих на напыляемую подложку. Исходя из приведенных данных о температуре и давлении кислорода в камере, требуемую оценку можно провести следующим образом.

Рассмотрим элемент подложки с площадью  $\Delta S$ . За время  $\Delta t$  с этим элементом столкнутся молеку-

лы кислорода с проекцией скорости  $v$ , направленной в сторону подложки, и находящиеся в цилиндре с площадью основания  $\Delta S$  и высотой  $v\Delta t$ . Для оценки предположим, что все молекулы движутся со среднеквадратичной скоростью только либо по осям системы координат, либо против осей. Отметим, что в этом приближении уравнение молекулярно-кинетической теории выводится точно. Тогда число молекул  $\Delta N$ , находящихся в цилиндре и движущихся к элементу подложки, определяется равенством

$$\Delta N = \frac{1}{6} v \Delta t \Delta S n,$$

где  $n$  — концентрация молекул в камере.

Принимая во внимание уравнение Клапейрона–Менделеева в форме  $p = nk_B T$ , где  $p$ ,  $T$  и  $k_B$  — давление, температура газа и постоянная Больцмана, получаем для числа соударений молекул кислорода в единицу времени с единицей площади подложки следующую оценку:

$$\frac{\Delta N}{\Delta t \Delta S} = \frac{1}{6} v n = \frac{p}{2} \sqrt{\frac{1}{3mk_B T}}, \quad (1)$$

где  $m$  — масса молекулы  $O_2$ . В (1) мы также учли, что  $\frac{3}{2} k_B T = \frac{mv^2}{2}$ .

Полагая  $p = 0.1$  Па и  $T = 300$  К, получаем следующую численную оценку для числа соударений о поверхность площадью  $1 \text{ м}^2$  за  $1 \text{ с}$ :

$$\frac{\Delta N}{\Delta t \Delta S} = \frac{p}{2} \sqrt{\frac{1}{3mk_B T}} \approx 2 \times 10^{21}.$$

Эта оценка дает  $2 \times 10^7$  падений молекул в секунду на площадку размером  $100 \times 100$  нм. Таким образом, из нее следует, что плотность потока молекул кислорода, падающего на подложку, на три порядка выше плотности потока атомов металла. Соотношение этих плотностей является одним из важных параметров, влияющих на свойства напыляемого слоя. Исследование зависимости свойств слоя от данного параметра будет являться одной из задач суперкомпьютерного моделирования.

**4. Моделирование напыления слоя диоксида кремния.** В данном разделе представлены первые результаты моделирования роста пленки диоксида кремния на подложке из аморфного плавленого кварца.

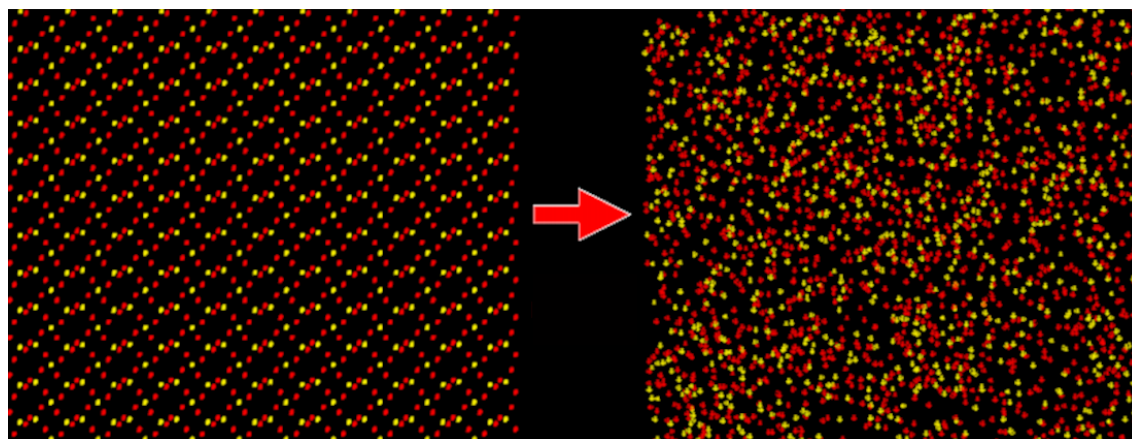


Рис. 1. Кристаллическая (слева) и аморфная (справа) структура оксида кремния  $SiO_2$ .

Желтым показаны атомы кремния, красным — кислорода

Целью производившихся расчетов была проверка состоятельности подхода к изучению процесса напыления оптических покрытий на основе МД. Для этого решались две взаимосвязанные задачи. Первая из них играет вспомогательную роль и связана с применением выбранного метода исследования. Она состоит в подготовке молекулярной структуры подложки для последующего решения второй задачи — собственно моделирования процесса роста слоя  $SiO_2$ . Оценка состоятельности выбранного подхода проводится путем сравнения важнейших макроскопических параметров, рассчитанных на основе МД, с известными экспериментальными данными.

Рассмотрим первую задачу — формирование структуры подложки из плавленого кварца. В качестве начальной структуры для ее решения нами был взят кристаллический кластер  $SiO_2$ . Положения

атомов в этом кластере задавались по известным координатам атомов кислорода и кремния в элементарной ячейке  $\alpha$ -кварца. Число элементарных ячеек в кластере достигало  $10^3$  (по десять вдоль каждого вектора трансляции). Аморфная структура подложки сформирована с помощью МД с использованием многопроцессорной версии программы GROMACS [35] по следующей процедуре:

- 1) нагрев структуры до 3500 К с шагом по 500 К (длина траектории на каждом шаге — 500 пс);
- 2) отжиг до комнатной температуры (длина траектории — 1 нс) с шагом 100 К.

В результате использования данной процедуры был получен кластер аморфного диоксида кремния, представленный в правой части рис. 1. Плотность полученного кластера  $2.2 \text{ г/см}^3$ , что близко к экспериментальным значениям плотности плавленого кварца. Заметим, что плотность исходной кристаллической структуры составляла  $2.6 \text{ г/см}^3$ .

Полученная аморфная структура содержит характерные для подложек из плавленого кварца дефекты: кольца, отличные от наблюдаемых в кристалле шестичленных, а также недокоординированные и перекоординированные атомы кислорода и кремния. В то же время использованный нами относительно плавный разогрев позволяет избежать “взрыва” структуры, в результате которого образуются полости с характерными размерами порядка нанометра.

Для моделирования было выбрано двухчастичное силовое поле [33, 34], позволяющее, как показывает проведенный численный эксперимент, при своей относительной простоте и высокой численной эффективности воспроизводить плотность аморфного кварца и его радиальную функцию распределения. В рамках этого силового поля потенциальная энергия взаимодействия между атомами дается выражением

Параметры потенциала Морзе для (2) [33, 34]

| Пара атомов | $R_0(\text{\AA})$ | $D_0$ (ккал/моль) | $\gamma$ |
|-------------|-------------------|-------------------|----------|
| O-O         | 3.7910            | 0.5363            | 10.4112  |
| Si-Si       | 3.7598            | 0.17733           | 15.3744  |
| Si-O        | 1.6280            | 45.9970           | 8.6342   |

$$U_{ij} = \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + D_0 \left( \exp \left( \gamma \left( 1 - \frac{r_{ij}}{R_0} \right) \right) - 2 \exp \left( 0.5 \gamma \left( 1 - \frac{r_{ij}}{R_0} \right) \right) \right), \quad (2)$$

где  $q_i$  и  $q_j$  — заряды на атомах  $i$  и  $j$  ( $-0.65e$  для кислорода,  $1.3e$  для кремния,  $e$  — элементарный заряд),  $D_0$ ,  $\gamma$ ,  $R_0$  — параметры потенциала Морзе,  $r_{ij}$  — расстояние между атомами  $i$  и  $j$ . Используемые нами параметры потенциала Морзе приведены в таблице.

В рамках МД с этим же силовым полем решалась и вторая задача — моделирование осаждения молекул  $\text{SiO}_2$  на подложку. Нижнюю часть ячейки занимала подложка, способ получения структуры которой описан выше. Молекулы  $\text{SiO}_2$  падали на подложку сверху. Один цикл моделирования состоял из следующих этапов.

1. В верхнюю область ячейки помещались молекулы  $\text{SiO}_2$ , обладающие начальными скоростями, направленными вертикально вниз.

2. После запуска МД молекулы  $\text{SiO}_2$  в течение 1–2 пс достигали подложки и взаимодействовали с ее атомами.

3. Релаксация подложки и напыленных атомов.

Весь цикл расчета с помощью МД занимает 5 пс. По истечении этого времени цикл повторяется. Объем ячейки был постоянным, температура подложки поддерживалась равной 1000 К. Заметим, что из экспериментальных данных известно, что при таких температурах подложки получают поликристаллические структуры пленки.

В результате моделирования была получена структура, показанная на рис. 2. Предварительный визуальный анализ показывает, что длины связи Si-O в напыленном кластере варьируются около значения  $1.6 \text{ \AA}$ , характерного для кристалла, и сохраняется тетраэдрическая структура молекул, образующих кластер. Присутствуют типичные для аморфной структуры точечные дефекты — недокоординированные атомы кремния и немостиковые атомы кислорода, а также заметны небольшие полости.

**5. Заключение.** Полученные в данной работе оценки показывают, что суперкомпьютерное моделирование с использованием МД может быть применено для исследования наиболее современных процессов напыления оптических нанопокровов. Результаты приведенных расчетов подтверждают этот вывод. Состоятельность выбранного подхода обосновывается совпадением важнейших макроскопических параметров пленки, рассчитанных на основе МД, с известными экспериментальными данными. Дальнейшее совершенствование подхода и получение на его основе значимых предсказательных результатов требует уточнения параметров используемых потенциалов, отработки процедуры использования МД и дальнейшей детализации его этапов.

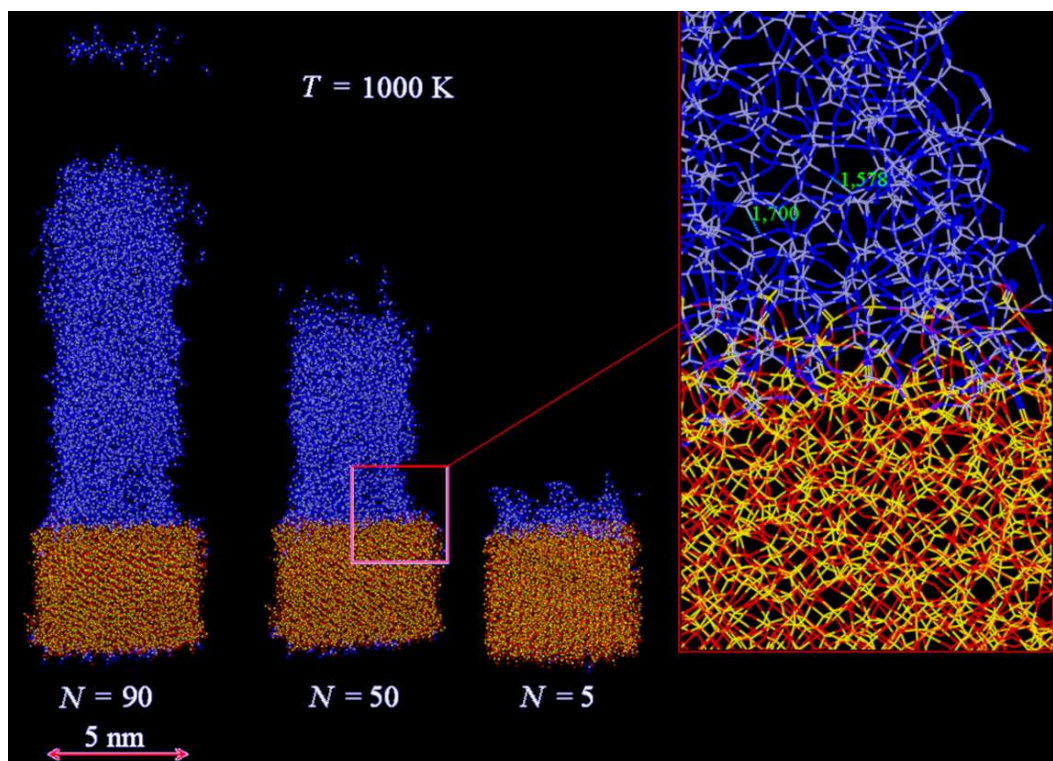


Рис. 2. Структура пленки оксида кремния, напыляемой на подложку аморфного кварца,  $N$  – число циклов (см. пояснение в тексте). Желтым и красным (атомы кремния и кислорода) показана подложка, серым и синим (кремний и кислород) — напыляемая пленка

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России по государственному контракту от 14.06.2012 г. № 07.514.11.4149 в рамках ФЦП “Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 годы”.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Optical Interference Coatings / Kaiser N., Pulker H., Eds. Berlin: Springer, 2003.
- Тихонравов А.В. Обратные задачи оптики сплошных сред // Вестник Моск. ун-та. Серия 15. Вычислительная математика и кибернетика. 2006. № 3. 66–76.
- Tikhonravov A., Trubetskov M. Modern design tools and a new paradigm in optical coatings design // Appl. Optics. 2012. **57**.
- Pulker H. Film deposition methods // Optical Interference Coatings / Kaiser N., Pulker H., Eds. Berlin: Springer, 2003. 131–153.
- Schlick T. Molecular modeling and simulation. New York: Springer, 2002.
- Rapaport D.C. The art of molecular dynamics simulation. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- Рудяк В.Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 1. Кинетическая теория. Новосибирск: НГАСУ, 2004.
- Hinchliffe A. Molecular modelling for beginners. Chichester: Wiley, 2008.
- Tuckerman M.E. Statistical mechanics: theory and molecular simulation (Oxford Graduate Texts). Oxford: Oxford University Press, 2010.
- Marx D., Hutter J. Ab initio molecular dynamics: basic theory and advanced methods. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.
- Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Матем. моделирование. 2012. **24**, № 6. 3–44.
- Germann T.C., Kadau K. Trillion atom molecular dynamics simulation becomes a reality // Int. J. Mod. Phys. C. 2008. **19**. 1315–1319.
- Coquil F., Fang J., Pilon L. Molecular dynamics study of the thermal conductivity of amorphous nanoporous silica // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2011. **54**, N 21–22. 4540–4548.
- Taguchi M., Hamaguchi S. MD simulations of amorphous  $\text{SiO}_2$  thin film formation in reactive sputtering deposition processes // Thin Solid Films. 2007. **515**. 4879–4882.

15. Tangney P., Scandolo S. An ab initio parametrized interatomic force field for silica // J. Chem. Phys. 2002. **117**. 8898–8905.
16. Pedone A., Malavasi G., Menziani M.C., Segre U., Musso F., Corno M., Civalieri B., Ugliengo P. FFSiOH: a new force field for silica polymorphs and their hydroxylated surfaces based on periodic B3LYP calculations // Chem. Mater. 2008. **20**. 2522–2531.
17. Sayle D.C., Catlow C.R.A., Dulamita N., Healy M.J.F., Maicaneanu S.A., Slater B., Watson G.W. Modelling oxide thin films // Molecular Simulation. 2002. **28**. 683–725.
18. Hasnaoui A., Politano O., Salazar J.M., Aral G., Kalia R.K., Nakano A., Vashishta P. Molecular dynamics simulation of the nano-scale room-temperature oxidation of aluminum single crystals // Surface Science. 2005. **579**. 47–57.
19. Adamović D., Chirita V., Münger E.P., Hultman L., Greene J.E. Kinetic pathways leading to layer-by-layer growth from hyperthermal atoms: a multibillion time step molecular dynamics // Phys. Rev. B. 2007. **76**. 115418.
20. Taguchi M., Hamaguchi S. MD simulation of amorphous SiO<sub>2</sub> thin film formation in reactive sputtering deposition processes // Thin Solid Films. 2007. **515**. 4879–4892.
21. Georgieva V., Saraiva M., Jehanathan N., Lebelev O.I., Depla D., Bogaerts A. Sputter-deposited Mg-Al-O thin films: linking molecular dynamics simulations to experiments // J. Phys. D: Appl. Phys. 2009. **42**. 065107.
22. Baguer N., Georgieva V., Calderin L., Todorov I.T., van Gils S., Bogaerts A. Study of the nucleation and growth of TiO<sub>2</sub> and ZnO films by means of molecular dynamics simulations // J. Cryst. Growth. 2009. **311**. 4034–4043.
23. Saraiva M., Georgieva V., Mahieu S., van Aeken K., Bogaerts A., Depla D. Compositional effects on the growth of Mg(M)O films // J. Appl. Phys. 2010. **107**. 034902.
24. Georgieva V., Todorov I.T., Bogaerts A. Molecular dynamics simulation of oxide thin film growth: importance of the inter-atomic interaction potential // Chemical Physics Letters. 2010. **485**. 315–319.
25. Landmann M., Köhler T., Köppen S., Rauls E., Frauenheim T., Schmidt W.G. Fingerprints of order and disorder in the electronic and optical properties of crystalline and amorphous TiO<sub>2</sub> // Phys. Rev. B. 2012. **86**. 064201.
26. Prasai B., Cai B., Underwood M.K., Lewis J.P., Drabold D.A. Properties of amorphous and crystalline titanium dioxide from first principles // J. Mater. Sci. 2012. **47**. 7515–7521.
27. Pochon S., Pearson D. Ion beam deposition ([www.oxford-instruments.com](http://www.oxford-instruments.com)).
28. Stevenson I., Zinone F., Morton D. Choosing a chamber ([www.dentonvacuum.com](http://www.dentonvacuum.com)).
29. [www.mldtech.com](http://www.mldtech.com)
30. [www.veeco.com](http://www.veeco.com)
31. Tikhonravov A. et al. Optical parameters of oxide films typically used in optical coating production // Appl. Optics. 2011. **50**. 75–85.
32. Kaiser N. Some fundamentals of optical thin film growth // Optical Interference Coatings / Kaiser N., Pulker H., Eds. Berlin: Springer, 2003. 59–80.
33. Hoang V.V. Molecular dynamic simulation of amorphous SiO<sub>2</sub> nanoparticles // J. Phys. Chem. B. 2007. **111**. 12649–12656.
34. Von Alfthan S., Kuronen A., Kaski K. Realistic models of amorphous silica: a comparative study of different potentials // Phys. Rev. B. 2003. **68**. 073203.
35. [www.gromacs.org](http://www.gromacs.org)

Поступила в редакцию  
02.10.2012

---