

УДК 539.14(075)+530.14(075)  
ББК 22.383я7  
Б 82

*Борман В.Д., Тронин В.Н., Троян В.И.* **Физическая кинетика атомных процессов в наноструктурах: Учебное пособие** / Под ред. В.Д. Бормана – М.: НИЯУ МИФИ, 2011. – 476 с.

Пособие посвящено описанию закономерностей и механизмов атомных процессов в наноструктурах. Ключевыми направлениями в кинетике атомных процессов являются процессы образования наночастиц, включая углеродные нанотрубки и фуллерены, на поверхности, в объеме материалов, в каналах и порах, процессы формирования пленок нанометровой толщины, многослойных сэндвичей, упорядоченных наноструктур из наночастиц в объеме материалов и на поверхности, процессы нанопрофилирования, полировки, формирования нанопористых сред и при их использовании. Пособие ограничено пятью примерами неравновесных процессов, на которых демонстрируется реализация различных сценариев формирования наноструктур с различными свойствами в зависимости от давления, температуры, концентрации, и соотношением между характерным временем наблюдения и характеристиками системы. Они являются ключевыми в нескольких современных технологиях, широко используемых либо разрабатываемых в настоящее время. На этих примерах показаны возможности современных экспериментальных методов исследования процессов в наносистемах, описаны закономерности и механизмы процессов. Изложены аналитические методы теоретического описания атомных процессов, основанные на методе функционала плотности и кинетических уравнениях для плотной системы частиц. Эти методы позволяют выяснить возможные сценарии развития процессов, вычислить измеряемые величины, сравнить полученные зависимости с экспериментальными данными и предсказать возможные свойства наночастиц и наноструктур. Изложенное в книге отражает современное состояние представлений о кинетике рассмотренных неравновесных процессов.

Предназначено для студентов НИЯУ МИФИ, обучающихся по специальностям «Физика кинетических явлений», «Физика конденсированного состояния». Может быть полезно для студентов и аспирантов ведущих вузов РФ, а также для специалистов, занимающихся исследованиями наносистем и разработкой нанотехнологий.

Пособие подготовлено в рамках  
Программы создания и развития НИЯУ МИФИ

Рецензенты: чл.-кор. РАН Максимов Л.А., д-р физ.-мат. наук Жданов В.М.

ISBN 978-5-7262-1667-6

© Национальный исследовательский  
ядерный университет «МИФИ», 2011

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	8
Список литературы .....	30

### Часть 1. НЕРАВНОВЕСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В НАНОСТРУКТУРАХ

Глава 1. Кинетика начальной стадии образования нанооксида SiO <sub>2</sub> на поверхности кристалла кремния .....	31
Введение.....	31
1.1. Методика исследования роста оксида SiO <sub>2</sub> с помощью РФЭС и СТМ .....	32
1.2. Динамика роста субмонослойного оксида SiO <sub>2</sub> .....	39
1.3. Кинетика послойного роста первых монослоев оксида SiO <sub>2</sub> .....	44
Контрольные вопросы к главе 1 .....	48
Список литературы .....	49
Глава 2. Неустойчивость и наноструктурирование поверхности кремния при адсорбции кислорода ....	51
Введение.....	51
2.1. Исследование наноструктурирования методами РФЭС, СТМ и АСМ.....	51
2.2. Образование квазипериодического рельефа на поверхности кремния .....	57
Контрольные вопросы к главе 2 .....	64
Список литературы .....	64
Глава 3. Кинетика образования нанокластеров металла при импульсном лазерном осаждении .....	65
Введение.....	65
3.1. Методика исследования нанокластеров на поверхности .....	66
3.2. Фрактальные нанокластеры и их ансамбли.....	72
3.3. Плавление нанокластеров золота, сформированных импульсным лазерным осаждением на различных подложках.....	81
Контрольные вопросы к главе 3 .....	88
Список литературы .....	89

Глава 4. Транспорт атомных частиц и нанокластеры в субнанометровых каналах цеолитов .....	91
Введение.....	91
4.1. Методика исследования атомного транспорта в цеолитовых мембранах .....	91
4.2. Адсорбция в субнанометровых каналах цеолитов.....	96
4.3. Атомный транспорт и разделение двухкомпонентных смесей в каналах цеолитов.....	99
4.4. Подвижность частиц в субнанометровых каналах.....	105
Контрольные вопросы к главе 4 .....	106
Список литературы .....	107
 Глава 5. Заполнение несмачивающими жидкостями неупорядоченных нанопористых сред.....	108
Введение.....	108
5.1. Заполнение нанопористой среды при медленном росте давления.....	110
5.2. Динамика заполнения при высоких скоростях сжатия ...	119
5.3. Осцилляции заполнения .....	130
Контрольные вопросы к главе 5.....	133
Список литературы .....	133

## **Часть 2. МЕТОДЫ ОПИСАНИЯ КИНЕТИКИ АТОМНЫХ ПРОЦЕССОВ В НАНОСТРУКТУРАХ**

Глава 6. Метод функционала плотности для атомных частиц в среде.....	135
Введение.....	135
6.1. Многочастичные функции распределения .....	139
6.2. Частичные функции распределения и корреляционные функции в равновесном состоянии.....	141
6.3. Выражения термодинамических величин системы атомных частиц с помощью частичных функций распределения. Функции отклика.....	143
6.4. Интегродифференциальные уравнения для функции отклика.....	151
6.5. Уравнения для функции отклика неравновесной системы.....	156

6.6. Функции отклика системы невзаимодействующих частиц.....	166
6.7. Нормальные моды системы взаимодействующих атомных частиц в локальном приближении.....	169
6.8. Фазовые переходы в системе взаимодействующих атомных частиц в среде .....	172
6.9. Модифицированный метод функционала плотности ...	175
6.10. Уравнение для параметра порядка в методе функционала плотности .....	178
6.11. Вакансионная неустойчивость приповерхностного слоя кристалла при окислении.....	184
Контрольные вопросы к главе 6 .....	190
Список литературы .....	190

Глава 7. Кинетика образования нанослойного оксида $\text{SiO}_2$ на поверхности кристалла кремния.....	192
Введение.....	192
7.1. Микроскопическая модель образования оксида вблизи порога зародышеобразования .....	195
7.2. Рост субмонослойного оксида вблизи порога зародышеобразования. Взаимодействие островков .....	205
7.3. Обсуждение результатов. Сравнение с экспериментом.....	216
Контрольные вопросы к главе 7 .....	221
Список литературы .....	222

Глава 8. Неустойчивость и наноструктурирование поверхности кремния $\text{Si}(100)$ при взаимодействии с кислородом. Теория .....	224
Введение.....	224
8.1. Кинетика накопления кислорода при малом времени экспозиции .....	227
8.2. Огрубление поверхности $\text{Si}(100)$ вблизи порога зародышеобразования при адсорбции кислорода .....	231
8.3. Обсуждение результатов. Сравнение с экспериментом.....	238
Контрольные вопросы к главе 8 .....	244
Список литературы .....	245

Глава 9. Кинетика образования нанокластеров металла при импульсном лазерном осаждении. Теория .....	247
Введение.....	247
9.1. Характерные времена распада термодинамически неустойчивого состояния адатомов на поверхности .....	249
9.2. Механизм образования кластеров при высоких скоростях осаждения .....	254
9.3. Сравнение с экспериментом .....	267
Контрольные вопросы к главе 9 .....	272
Список литературы .....	273
Глава 10. Транспорт, подвижность и кластеры в одномерных наносистемах.....	275
Введение.....	275
10.1. Изотерма сорбции в 1D-канале.....	278
10.2. Транспорт в 1D плотной системе.....	286
10.3. Эффективное взаимодействие и образование кластеров частиц в канале .....	293
10.4. Влияние межмолекулярного взаимодействия на транспортные свойства 1D-системы частиц .....	299
10.5. Сравнение с экспериментом.....	306
10.6. Подвижность частиц в 1D-канале .....	311
10.7. Формирование искусственных 1D-цепочек атомов металла с различным межатомным расстоянием .....	325
Контрольные вопросы к главе 10.....	339
Список литературы .....	339
Глава 11. Транспорт двухкомпонентной системы частиц в 1D-каналах .....	342
Введение .....	342
11.1. Изотерма сорбции двухкомпонентного газа в 1D-канале .....	345
11.2. Флуктуации в двухкомпонентной системе частиц и уравнение движения для параметра порядка в 1D-каналах .....	349
11.3. Основное состояние системы в 1D-каналах .....	358
11.4. Транспорт двухкомпонентного газа в 1D плотной системе .....	363
11.5. Сравнение с экспериментом.....	377

Контрольные вопросы к главе 11 .....	382
Список литературы .....	383
Глава 12. Заполнение пористого тела несмачивающей жидкостью. Теория .....	
Введение .....	385
12.1. Постановка задачи .....	389
12.2. Основные уравнения .....	393
12.3. Кинетика заполнения при медленном изменении давления.....	398
12.4. Кинетика заполнения при быстром изменении давления.....	411
12.5. Осциллирующие режимы заполнения .....	420
12.6. Физическая картина заполнения пористого тела несмачивающей жидкостью .....	424
12.7. Обсуждение результатов и сравнение с экспериментом.....	426
Контрольные вопросы к главе 12.....	436
Список литературы .....	437
Глава 13. Корреляционные эффекты при заполнении жидкостью гидрофобных нанопористых сред .....	
Введение .....	438
13.1. Модель заполнения пористой среды несмачивающей жидкостью .....	442
13.2. Гистерезис угла смачивания .....	452
13.3. Тепловой эффект в цикле заполнение-вытекание .....	453
13.4. Сравнение с экспериментом .....	458
Контрольные вопросы к главе 13.....	470
Список литературы .....	470