МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СПИНОВОГО ВЕНТИЛЯ НА ОСНОВЕ МНОГОСЛОЙНОЙ НАНОСТРУКТУРЫ “СВЕРХПРОВОДНИК-ФЕРРОМАГНЕТИК”

^{1,2}ВАХРУШЕВ А. В., ^{1,2}ФЕДОТОВ А. Ю., ³САВВА Ю. Б., ^{3,4}СИДОРЕНКО А. С.

¹ Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения РАН, 426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

² Ижевский государственный технический университет имени М.Т. Калашникова, 426069, г. Ижевск, ул. Студенческая, 7

³ Орловский государственный университет имени И.С. Тургенева, 302026, г. Орел, ул. Комсомольская, 95

⁴ Институт Электронной Инженерии и Нанотехнологий имени Д. Гицу, Молдова, МД-2028, г. Кишинев, ул. Академическая, 3/3

АННОТАЦИЯ. Работа посвящена исследованию процессов формирования и анализу структуры сверхпроводящего спинового вентиля на основе многослойной наноструктуры “сверхпроводник-ферромагнетик”. Актуальность исследований обусловлена необходимостью разработки энергоэффективной элементной базы для микроэлектроники, базирующейся на новых физических принципах и появлением устройств, основанных на спиновых и квантово-механических эффектах. Разрабатываемый сверхпроводящий спиновый вентиль представляет собой многослойную структуру, состоящую из ферромагнитных нанопленок кобальта, которые разделены пленками сверхпроводника ниобия. Исследования проводились при помощи моделирования методом молекулярной динамики. В качестве потенциала взаимодействия атомов в моделируемой системе использован модифицированный метод погруженного атома. Формирование спинового вентиля осуществлялось послойным осаждением элементов в условиях вакуума. Моделирование процесса напыления атомов производилось в стационарном температурном режиме. В работе представлено моделирование осаждения первых нескольких слоев наносистемы. Рассмотрены атомарная структура отдельных нанослоев системы. Особое внимание уделено анализу атомарной структуры контактных областей на стыке слоев, поскольку качество границы раздела слоев играет решающую роль в создании работоспособного устройства. Реализованы три температурных режима осаждения: 300, 500 и 800 К. Расчеты показали, что при увеличении температуры наблюдается перестроение структуры слоев системы и их разрыхление. Структура нанослоя из ниобия близка к кристаллической с разделением на области разной кристаллографической ориентации атомных слоев. Для кобальтовых нанопленок более характерно аморфное строение. Полученные результаты моделирования могут быть использованы как при разработке, так и оптимизации технологий формирования спиновых вентилях и других функциональных элементов для спинтроники.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: спиновый вентиль, математическое моделирование, молекулярная динамика, наноструктура, вакуумное напыление.

ВВЕДЕНИЕ

С развитием нанотехнологий появилась значительная заинтересованность науки и промышленности в специальном разделе квантовой электроники, которая занимается изучением переноса тока спинов в твердых телах и называется спинтроникой [1 – 3]. В отличие от обычной электроники, целевым объектом исследования в спинтронике является не электрический ток, а ток спинов, который может быть использован для транспортировки информации. Основой систем в спинтронике служат гетероструктуры, состоящие из ферромагнетиков, сверхпроводников и нормальных металлов (парамагнетиков) [4, 5], что предполагает создание многослойных наноконструкций, образованных нанопленками с достаточно сильно отличающимися физическими свойствами.

В настоящее время известен прототип наноразмерного аккумулятора со значительной электродвижущей силой спиновой природы [6, 7]. Сложность производства спиновых аккумуляторов обусловлена необходимостью формирования специального магнитного туннельного перехода, который является конструктивной особенностью таких устройств. Наличие туннельного перехода сильно зависит от исходных материалов гетероструктур и их свойств.

Перспективно использование спиновых эффектов для хранения и обработки информации. Авторами [8, 9] было показано, что гексагональная структура из наноразмерных магнитов под внешним воздействием способна перестраиваться с образованием фазовых переходов, потоков магнитных частиц и магнитных дефектов. Изменение состояний отдельных магнитных ячеек происходит по цепочке и влияет на полярность соседних областей, что напоминает принцип передачи сигнала нейронами и лежит в основе хранения и процессорной обработки данных. Температура функционирования устройства существенно ниже комнатной, поэтому авторы разработки называли созданный магнитный процессор «искусственным спиновым льдом».

Устройства, основанные на манипуляции спинами частиц, потребляют несравнимо меньше энергии по сравнению с традиционными полупроводниковыми приборами микроэлектроники, в связи с чем данные материалы служат многообещающей альтернативой элементам из обычной электроники, вырабатывая разность потенциалов за счет спин-поляризованного транспорта. Как описано в [10], источником спин-поляризованных электронов может служить намагниченный стержень из никель-железного сплава. Нагревание и охлаждение противоположных концов стержня приводит к перераспределению электронов с разными спинами и, следовательно, создаёт электрическое напряжение. В перспективе на базе подобных схем возможно построение мощных и малогабаритных вычислительных машин.

За последнее десятилетие сформировалось направление исследований [11, 12], в которых материалы под воздействием внешних электрических и магнитных полей на несколько порядков способны изменять электросопротивление. Подобное явление получило название колоссального магнитного сопротивления и имеет значительные перспективы при создании новых технологий записи и хранения информации с повышенной плотностью и малым энергопотреблением по сравнению с обычными современными носителями данных. Изучение кристаллического образца манганита перовскитной структуры методом встроеного совмещения сканирующего туннельного микроскопа и электронного микроскопа выявило искажение кристаллической решётки вещества, вызванное совместным движением электронов и фононов. Материалы с колоссальным магнитным сопротивлением могут быть использованы для создания компьютерной энергонезависимой памяти (MRAM), а также в других устройствах спинтроники и электроники.

Несмотря на разнообразие спиновых эффектов и реализованных с их использованием устройств, одно из основополагающих значений имеет структура магнитного материала. Как отмечено в [13 – 15], на границе раздела сверхпроводника и ферромагнетика возникает область взаимного влияния конкурирующих состояний, которая под действием направленного магнитного поля позволяет переключать гетероструктуру из нормального состояния в сверхпроводящее и обратно [16 – 19]. Изучение структуры промежуточной области является объектом интенсивных теоретических [13] и экспериментальных [14, 20] исследований. В исследованиях [14] продемонстрировано, что граница раздела сверхпроводника и ферромагнетика влияет не только на характеристики контактного слоя, но и приводит к изменению свойств окрестности данной смежной области. Кроме того, в реальных материалах граница контактного слоя является достаточно протяженной и структурно неоднородной. Магнитные свойства конечного материала находятся в прямой зависимости от нанометровых магнитных кластеров и ферромагнитных доменов в зоне контакта, а также их взаимодействия между собой [21].

В связи с вышесказанным, актуальна задача детального исследования структуры контактного слоя слоистых материалов сверхпроводник-ферромагнетик и определения его пространственного профиля. Для построения методологических основ и проведения теоретических исследований структуры многослойных спиновых систем в данной работе смоделирована наносистема с управляемой эффективной энергией обмена для устройств памяти и переключателей типа «спиновый вентиль» [22, 23], представляющая собой многослойную структуру, состоящую из ферромагнитных нанопленок кобальта, которые разделены тонкими слоями сверхпроводника ниобия.

Целью настоящего исследования является анализ процессов формирования и структуры сверхпроводящего спинового вентиля на основе многослойной наноструктуры «сверхпроводник-ферромагнетик».

Настоящая работа является продолжением и развитием исследований, посвященных моделированию процессов формирования, атомарной структуры и свойств различных комплексных многофазных наносистем [24], приготовленных в вакууме и в газовой фазе [25 – 26], в нанокристаллических и металл-органических системах [27 – 29], на сплошных [30 – 31] и пористых подложках [32].

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Общая схема магнитной гетероструктуры с указанием направления внешнего магнитного поля $\mathbf{H}$ продемонстрирована на рис. 1 (в работе рассмотрен случай $\mathbf{H}=\mathbf{O}$). Цифрами рядом с элементами в слоях приведена их толщина в нанометрах. Изготовление образца происходит осаждением материала в условиях, близких к вакууму. В общем случае наносистема содержит более 20 слоев, но процессы их формирования, а также их структурные особенности подобны. Поэтому в данной работе будет рассмотрено осаждение только первых нескольких слоев образца.

Рис. 1. Структурная схема многослойного магнитного композита на основе кобальта и ниобия, используемого при создании устройств памяти

Исследование контактного слоя между сверхпроводящими и ферромагнитными материалами осуществлялось методом молекулярной динамики. При этом рассматривался как сам процесс формирования многослойных нанопленок, так и полученная результирующая структура, образованная атомами внутри многослойного нанокompозита. Основу метода молекулярной динамики составляет уравнение движения Ньютона, которое решается для каждой элементарной частицы:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}_i} + \mathbf{F}_{ex}, \quad \mathbf{r}_i(t_0) = \mathbf{r}_{i0}, \quad \frac{d\mathbf{r}_i(t_0)}{dt} = \mathbf{V}_{i0}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где N – общее число атомов наносистемы; m_i – масса i -го атома; $\mathbf{r}_{i0}, \mathbf{r}_i(t)$ – начальный и текущий радиус-векторы i -го атома соответственно; $U(\mathbf{r})$ – потенциальная энергия или

потенциал системы, зависит от взаимного расположения всех частиц; $\mathbf{V}_{i0}, \mathbf{V}_i(t)$ – векторы скорости в начальный и текущий момент; $\mathbf{r}(t) = \{\mathbf{r}_1(t), \mathbf{r}_2(t), \dots, \mathbf{r}_K(t)\}$ – обобщающая переменная, указывает на зависимость от всех координат атомов; $\mathbf{F}_{ex}$ – сила внешней среды, служит в том числе и для поддержания постоянной температуры. Для определенности решения уравнения молекулярной динамики необходимо наличие уточняющих условий, в качестве которых в (1) выступает указание начальных координат и скоростей для всех атомов.

Результаты решения задач молекулярной динамики сильно зависят от вида и точности потенциального поля $U(\mathbf{r})$ в уравнении (1). В настоящее время существует большое количество разновидностей потенциалов как парных, так и многочастичных. Хорошо зарекомендовавшим потенциалом с широким спектром применения является модифицированный метод погруженного атома – MEAM (modified embedded atom method). Данный потенциал динамически имитирует образование и разрыв связей между атомами, учитывает несимметричную направленность электронных облаков и способен адекватно воспроизвести физические свойства сложных по конфигурации кристаллитов металлов и полупроводников [33, 34].

Результирующая потенциальная энергия наносистемы в методе MEAM представляется через сумму энергий отдельных атомов

$$U(r) = \sum_i U_i(r) = \sum_i \left(F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) \right), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2)$$

где $U_i(r)$ – потенциал i -го атома, влияет на тип взаимодействия атомов и величину сил в уравнениях движения; F_i – функция погружения i -го атома, размещенного в точке пространства с электронной фоновой плотностью $\bar{\rho}_i$; $\phi_{ij}(r_{ij})$ – величина парного потенциала между i -м и j -м атомами, удаленными на расстоянии r_{ij} .

Функция погружения зависит от фоновой электронной плотности, имеет вариативный вид для разных типов химических элементов периодической системы и записывается при помощи выражения

$$F_i(\bar{\rho}_i) = \begin{cases} A_i E_i^0(\bar{\rho}_i) \ln(\bar{\rho}_i), & \bar{\rho}_i \geq 0 \\ -A_i E_i^0 \bar{\rho}_i, & \bar{\rho}_i < 0 \end{cases}, \quad (3)$$

где A_i – эмпирический параметр потенциального поля; E_i^0 – величина энергии сублимации; $\bar{\rho}_i$ – фоновая электронная плотность; индекс i указывает на принадлежность определенному типу атома.

Фоновая электронная плотность в точке погружения определяется следующей функциональной зависимостью

$$\bar{\rho}_i = \frac{\rho_i^{(0)}}{\rho_i^0} G(\Gamma_i), \quad \Gamma_i = \sum_{k=1}^3 t_i^{(k)} \left(\frac{\rho_i^{(k)}}{\rho_i^{(0)}} \right)^2, \quad (4)$$

где индексы $k = 1, 2, 3$ соответствуют p -, d -, f -электронным орбиталям i -го атома; $t_i^{(k)}$ – весовые коэффициенты модели; ρ_i^0 – фоновая электронная плотность исходной структуры; $\rho_i^{(k)}$ – параметры, характеризующие отклонение электронной плотности от ее идеального состояния, когда все атомы находятся в узлах кристаллической решетки.

Для вычисления функции $G(\Gamma)$ используются различные варианты формулировки. Общая фоновая электронная плотность $\bar{\rho}_i$ содержит частичные вклады отдельных плотностей атомных орбиталей. Атомные орбитали разделяют на сферически-симметричное s -облако, которому соответствует электронная плотность $\rho_i^{(0)}$, и угловые p -, d -, f -облака, с распределениями $\rho_i^{(1)}, \rho_i^{(2)}, \rho_i^{(3)}$.

Для определения весовых коэффициентов модели из (4) применяется выражение

$$t_i^{(k)} = \frac{\sum_{i \neq j} t_{0,j}^{(k)} \rho_j^{A(0)} S_{ij}}{\sum_{i \neq j} \left(t_{0,j}^{(k)}\right)^2 \rho_j^{A(0)} S_{ij}}, \quad (5)$$

где $t_{0,j}^{(k)}$ – параметры, зависящие от химического типа j -го элемента.

Совместно с потенциалом МЕАМ используется функция экранирования, которая применяется для уменьшения вычислительных затрат и снижения погрешности потенциала

$$S_{ij} = f_c \left(\frac{r_c - r_{ij}}{\Delta r} \right) \prod_{k \neq i, j} f_c \left(\frac{C_{ikj} - C_{\min, ikj}}{C_{\max, ikj} - C_{\min, ikj}} \right), \quad (6)$$

$$C_{ikj} = 1 + 2 \frac{r_{ij}^2 r_{ik}^2 + r_{ij}^2 r_{jk}^2 - r_{ij}^4}{r_{ij}^4 - (r_{ik}^2 - r_{jk}^2)^2}, \quad (7)$$

$$f_c(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 1 \\ \left[1 - (1 - x)^4 \right]^2, & 0 < x < 1, \\ 0, & x \leq 0 \end{cases} \quad (8)$$

где r_c – радиус обрезания потенциала; $C_{\min}, C_{\max}$ – формулируются для каждой тройки атомов i, j, k и зависят от их химических типов; Δr – определяет расстояние, превышающее радиус обрезания, на котором происходит плавное сглаживание силового поля.

Уравнение молекулярной динамики (1) с учетом начальных условий и потенциала модифицированного погруженного атома (2)–(8) решается численно. В результате проведенных численных исследований становится известна детальная информация обо всех атомах наносистемы в каждый момент времени. Основополагающими базовыми переменными являются скорости и координаты частиц, а также действующие между ними силы. На основании полученных переменных анализируется структура многослойного наноконпозиционного материала, вычисляются его размерные характеристики, определяются механические свойства и наличие дефектов.

Общая постановка задачи формирования многослойной гетероструктуры представлена на рис. 2. Первый слой материала, образованный атомами ниобия, является подложкой и основой для вакуумного напыления последующих нанопленок. Подложка помещается в нижнюю область расчетной ячейки, крайний ее слой фиксируется, чтобы исключить хаотичное перемещение образца в процессе моделирования. В горизонтальных направлениях на расчетную ячейку накладываются периодические граничные условия, позволяющие сократить вычислительные затраты. В верхней области присутствуют граничные условия отражения, чтобы осаждаемые атомы не покидали систему моделирования. Процесс напыления имитируется посредством появления атомов в зоне над подложкой. При этом осаждаемым атомам придается скорость по направлению к подложке. Напыление слоев происходит поэтапно.

Рис. 2. Постановка задачи формирования гетероструктур сверхпроводник-ферромагнетик и исследования их свойств

В качестве программного средства для проведения теоретических исследований использовался вычислительный комплекс LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [35]. Данный программно-инструментальный пакет является свободно распространяемым, содержит возможности для выполнения параллельных вычислений и поддерживает разноуровневые математические модели, в том числе и молекулярную динамику. Визуализация результатов осуществлялась через отдельное программное средство при помощи VMD (Visual Molecular Dynamics) [36]. Алгоритмы анализа результатов описывались на языке tcl и C++ с использованием дополнительной консоли программирования.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ И ИХ АНАЛИЗ

Формирование многослойных нанопленок осуществлялось поэтапно. Первый слой составляли атомы кобальта, осаждаемые на слой ниобия, играющего роль подложки. Подложка представляла собой кристаллическую структуру размером 13,2 нм в каждом горизонтальном направлении и высотой 3,7 нм. Для удобства построения графиков за отметку нулевой высоты была принята верхняя граница подложки, которая является одной из зон контакта сверхпроводник-ферромагнетик. Количество атомов ниобия в подложке составило 33,6 тысяч.

В первой серии вычислительных экспериментов формирование гетероструктур происходило на подложке при температуре близкой к нормальной комнатной – 300 К. Поддержание температуры подложки осуществлялось при помощи термостата Нозе – Гувера. Температура осаждаемых атомов не корректировалась термостатом, так как к ним прикладывалась направленная скорость, через которую варьировалась интенсивность формирования нанопленки.

В соответствии с техническими характеристиками из экспериментальных исследований [19] в гетероструктуре требовалось сформировать первый слой кобальта толщиной 1,5 нм. Для достижения данной толщины на подложку осаждались атомы кобальта количеством 18 тысяч. Результат моделирования при напылении первого слоя проиллюстрирован на рис. 3. Здесь и далее время моделирования на рисунках указывается от начала осаждения соответствующего слоя. Процесс формирования второго слоя гетероструктуры показан на рис. 4. Второй слой был образован атомами ниобия общим числом 70 тысяч. На моделирование данного слоя потребовалось более продолжительное время осаждения для достижения целевой толщины нанопленки 8 нм.

Рис. 3. Осаждение первого слоя кобальта на подложку ниобия при температуре 300 К, время моделирования: а) – 0,1 нс; б) – 0,2 нс

Рис. 4. Осаждение нанопленки ниобия на подложку ниобия и первый слой кобальта при температуре 300 К, время напыления: а) – 0,2 нс; б) – 0,6 нс

Третий слой гетероструктуры, образованный атомами кобальта в количестве 30 тысяч, продемонстрирован на рис. 5. После каждой стадии осаждения над поверхностью образца оставалось небольшое количество атомов, не достигших конечной зоны. Также для всех этапов моделирования не наблюдалось объединение осаждаемых атомов в крупные конгломераты до контакта с подложкой или с верхним слоем нанопленки. Изображения на рис. 3, 4 и 5 характеризуют качественную картину процессов формирования гетероструктуры ниобия и кобальта и визуальную структуру (морфологию) слоев. Для детализации и количественного описания состава итогового нанокompозита могут быть использованы рис. 6 и рис. 7.

Рис. 5. Осаждение третьей нанопленки в гетероструктуре из ниобия и кобальта при температуре 300 К, время напыления: а) 0,1 нс; б) – 0,2 нс и в) – 0,4 нс

Рис. 6. Процентный состав многослойного нанокompозита, сформированного при температуре 300 К

Рис. 7. Процентный состав многослойного нанокompозита, сформированного при температуре 800 К

На рис. 6 и рис. 7 проиллюстрирован послойный анализ структуры в вертикальном направлении. В качестве ординаты на графиках указана доля атомов определенного типа, попавшая в тонкий горизонтальный слой толщиной 0,1 нм. Круглые маркеры характеризуют содержание ниобия, квадратные – кобальта. Для большей информативности доля атомов

отнесена к их общему количеству в текущем слое. Косыми наклонными линиями приведен разрыв графиков, так как вторая нанопленка имеет значительную протяженность по высоте, но изменения зависимостей на данном участке не происходит.

Осаждение трех слоев, соответствующих поочередно чередующимся элементарным типам, привело к формированию в нанокompозите трех контактных слоев – интерфейсов сверхпроводник-ферромагнетик. Области контакта на рис. 6 и 7 характеризуются сменой структуры и наличием смешанного состава на высотах 0,0 нм (верхняя плоскость подложки), 1,5 нм и 9,5 нм. Первая зона контакта ниобий-кобальт имеет наименьшую размытость, так как формирование первой нанопленки происходит на ровной поверхности подложки. Остальные слои начинают осаждаться на рельефную структуру, образованную на предыдущей стадии моделирования. Поэтому рост второй и третьей нанопленки сопровождается протяженными контактными областями. Смешанное распределение атомов разного типа в слоях хорошо визуально заметно также на ранее приведенных рис. 4 и рис. 5. Анализ структуры данных слоев показывает, что ниобий формируется кристаллическими областями различной направленности. Образование кристаллитов происходит с временным отставанием от поверхностного слоя. Данный эффект виден на рис. 4, а и связан с последующим перестроением атомов и стремлением их занять энергетически более выгодное состояние. Для нанопленок кобальта характерно строение близкое к аморфному.

В работе были проведены еще две серии вычислительных экспериментов, в которых исследовалось формирование аналогичных гетероструктур при температурах 500 К и 800 К. Результаты моделирования визуально подобны полученным ранее, поэтому структурные изображения данных образцов не приводятся. Количественные оценки строения материалов свидетельствуют о некоторых расхождениях процессов роста нанопленок для разных температур. Повышенная температура привела к формированию структуры более разреженных образцов. При 800 К и 300 К разница в высотах итоговых нанокompозитах составила 0,3 нм и накапливалась постепенно, с каждым слоем. Также с повышением температуры увеличилась зона смешанных контактных областей, что хорошо заметно на графиках на рис. 7. Характер поведения доли элементарных типов в слоях изменился на менее стабильный, стали видны небольшие вариации состава. Полученные результаты свидетельствуют о существенной зависимости процессов формирования многослойных нанопленок, их контактных областей, а также состава и строения от температуры, при которой происходит формирование многослойной наносистемы.

ВЫВОДЫ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе описаны методика и теоретические основы исследования многослойных гетероструктур типа сверхпроводник-ферромагнетик. Алгоритмы анализа позволяют детально исследовать процессы формирования нанопленок, идентифицировать их строение и состав, выявлять дефектность структуры образцов, а также прогнозировать качество интерфейса контактных слоев, приготовленных на основе выбранных материалов для осаждения.

Исследование структуры нанопленок показало, что ниобий формируется кристаллическими областями различной ориентации. Образование кристаллитов происходит с временным отставанием от поверхностного слоя, что связано с перестроением атомов и стремлением их занять энергетически более выгодное состояние после соприкосновения с твердой поверхностью. Для нанопленок кобальта характерно строение близкое к аморфному.

Структурные особенности контактных слоев сверхпроводник-ферромагнетик в значительной степени зависят от рельефа поверхности, на которую осуществляется осаждение. Наименьшую вариацию по составу имеет первая зона контакта ниобий-кобальт, так как формирование первой нанопленки происходит на ровной плоскости подложки. Остальные слои начинают осаждаться на уже сформированный рельефный профиль твердого материала и, как следствие, имеют более протяженные контактные области.

Анализ влияния температурного режима при напылении наносистемы свидетельствуют о зависимости процессов формирования многослойных нанопленок, их контактных

областей, а также состава и морфологии гетероструктур от температуры, при которой происходит изготовление нанокompозита. Повышенная температура приводит к формированию структуры более разреженных образцов и увеличению зон смешанных контактных областей за счет интердиффузии атомов напыляемых материалов.

Теоретические исследования фундаментальных процессов формирования и физических свойств многослойных сверхпроводящих гетероструктур, включающие описание методики и комплексного анализа границы раздела контактного слоя материалов сверхпроводник-ферромагнетик, позволяют детально изучить пространственный профиль контактной области, структурные особенности и дефекты в смежной области. Идентификация и описание топологических квантовых явлений в многослойных наносистемах найдут применение при разработке новых перспективных спиновых устройств.

Полученные результаты моделирования могут быть использованы как при разработке, так и оптимизации технологий формирования спиновых вентилях и других функциональных элементов для спинтроники.

Исследование выполнено при финансовой поддержке грантов: 28.04.01/18BAB ИжГТУ, проект 0427-2019-0029 УрО РАН и WIDESPREAD-05-2017-Twinning project "SPINTECH" under grant agreement Nr. 810144.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Krupa M. M. Spintronics. Problems and prospects of practical application // Advantage Engineering Technologies, 2007, vol. 2, pp. 1-9.
2. Endoh T., Honjo H. A Recent Progress of Spintronics Devices for Integrated Circuit Applications // Journal of Low Power Electronics and Applications, 2018, vol. 8, iss. 44, pp. 1-17.
3. Chang C., Kostylev M., Ivanov E. Metallic spintronic nanofilm as a hydrogen sensor // Applied Physics Letters, 2013, vol. 102, iss. 14, pp. 1-18.
4. Deminov R. G., Useinov N. Kh., Tagirov L. R. Magnetic and superconducting heterostructures in spintronics // Magnetic Resonance in Solids. Electronic Journal, 2014, vol. 16, iss. 2, pp. 14209(1-9).
5. Bell C., Burnell G., Leung C. W., Tarte E. J., Kang D.-J., Blamire M. G. Controllable Josephson current through a pseudospin-valve structure // Applied Physics Letters, 2004, vol. 84, iss. 7, pp. 1153-1155.
6. Hai P. N., Ohya S., Tanaka M., Barnes S. E., Maekawa S. Electromotive force and huge magnetoresistance in magnetic tunnel junctions // Nature, 2009, vol. 458, pp. 489-492.
7. Hai P. N., Tanaka M. Memristive magnetic tunnel junctions with MnAs nanoparticles // Applied Physics Letters, 2015, vol. 107, pp. 122404(1-5).
8. Branford W. R., Ladak S., Read D. E., Zeissler K., Cohen L. F. Emerging Chirality in Artificial Spin Ice // Science, 2012, vol. 335, iss. 6076, pp. 1597-1600.
9. Dion T., Arroo D. M., Yamanoi K., Kimura T., Gartside J. C., Cohen L. F., Kurebayashi H., Branford W. R., Tunable magnetization dynamics in artificial spin ice via shape anisotropy modification // Physical Review B, 2019, vol. 100, iss. 5, pp. 054433(1-11).
10. Uchida K., Takahashi S., Harii K., Ieda J., Koshibae W., Ando K., Maekawa S., Saitoh E. Observation of the spin Seebeck effect // Nature, 2008, vol. 455, pp. 778-781.
11. Jooss Ch., Wu L., Beetz T., Klie R. F., Beleggia M., Schofield M. A., Schramm S., Hoffmann J., Zhu Y. Polaron melting and ordering as key mechanisms for colossal resistance effects in manganites // Proceedings of the National Academy of Sciences, 2007, vol. 104, iss. 34, pp. 13597-13602.
12. Hoffmann J., Moschkau P., Mildner S., Norpoth J., Jooss Ch., Wu L., Zhu Y. Effects of interaction and disorder on polarons in colossal resistance manganite $\text{Pr}_{0.68}\text{Ca}_{0.32}\text{MnO}_3$ thin films // Materials Research Express, 2014, vol. 1, iss. 4, pp. 046403(1-25).
13. Гайфуллин Р. Р., Кушнir В. Н., Деминov Р. Г., Тагиров Л. Р., Куприянов М. Ю., Голубов А. А. Эффект близости в сверхпроводящем триплетном спиновом клапане $S_1/F_1/S_2/F_2$ // Физика твердого тела. 2019. Т. 61, № 9. С. 1585-1588. <https://doi.org/10.21883/FTT.2019.09.48093.21N>
14. Жакетов В. Д., Никитенко Ю. В., Хайдуков Ю. Н., Скрыбина О. В., Чик А., Борисов М. М., Мухамеджанов Э. Х., Вдовичев С. Н., Литвиненко Е. И., Петренко А. В., Чураков А. В. Магнитные и сверхпроводящие свойства неоднородных слоистых структур $\text{V}/\text{Fe}_{0.7}\text{V}_{0.3}/\text{V}/\text{Fe}_{0.7}\text{V}_{0.3}/\text{Nb}$ и $\text{Nb}/\text{Ni}_{0.65}(0.81)\text{Cu}_{0.35}(0.19)$ // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2019. Т. 156, № 2(8). С. 310-330.
15. Sidorenko A. C. Reentrance Phenomenon in Superconductor/Ferromagnet Nanostructures and their Application in Superconducting Spin Valves for Superconducting Electronics // Физика низких температур. 2017. Т. 43, № 7. С. 962-968.
16. Fominov Ya. V., Golubov A. A., Karminskaya T. Yu., Kupriyanov M. Yu., Deminov R. G., Tagirov L. R. Superconducting triplet spin valve // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2010. Т. 91, № 6. С. 329-334.

17. Fominov Ya. V., Golubov A. A., Kupriyanov M. Yu. Triplet proximity effect in FSF trilayers // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2003. Т. 77, № 9. С. 609-614.
18. Zdravkov V. I., Lenk D., Morari R., Ullrich A., Obermeier G., Müller C., Krug von Nidda H.-A., Sidorenko A. S., Horn S., Tidecks R., Tagirov L. R. Memory Effect and Triplet Pairing Generation in the Superconducting Exchange Biased Co/CoO_x/Cu₄₁Ni₅₉/Nb/Cu₄₁Ni₅₉ Layered Heterostructure // Applied Physics Letters, 2013, vol. 103, iss. 6, pp. 062604(1-9).
19. Zdravkov V. I., Kehrle J., Obermeier G., Lenk D., Krug von Nidda H.-A., Müller C., Kupriyanov M. Yu., Sidorenko A. S., Horn S., Tidecks R., Tagirov L. R. Experimental observation of the triplet spin-valve effect in a superconductor–ferromagnet heterostructure // Physical Review B, 2013, vol. 87, pp. 144507(1-6).
20. Vad K., Csik A., Langer G. Secondary neutral mass spectrometry-a powerful technique for quantitative elemental and depth profiling analyses of nanostructures // Spectroscopy Europe, 2009, vol. 21, iss. 4, pp. 13-16.
21. Вдовичев С. Н., Ноздрин Ю. Н., Пестов Е. Е., Юнин П. А., Самохвалов А. В. Фазовые переходы в гибридных SFS структурах с тонкими сверхпроводящими слоями // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2016. Т. 104, № 4-5. С. 336-341.
22. Klenov N., Khaydukov Y., Bakurskiy S., Morari R., Soloviev I., Boian V., Keller T., Kupriyanov M., Sidorenko A., Keimer B. Periodic Co/Nb pseudo spin valve for cryogenic memory // Beilstein Journal of Nanotechnology, 2019, vol. 10, pp. 833-839.
23. Stamopoulos D., Aristomenopoulou E., Lagogiannis A. Co/Nb/Co trilayers as efficient cryogenic spin valves and supercurrent switches: the relevance to the standard giant and tunnel magnetoresistance effects // Superconductor Science and Technology, 2014, vol. 27, iss. 9, pp. 095008(1-13).
24. Vakhrushev A. V. Computational Multiscale Modeling of Multiphase Nanosystems. Theory and Applications. Waretown, New Jersey, USA: Apple Academic Press, 2017. 402 p.
25. Вахрушев А. В., Федотов А. Ю. Моделирование формирования композиционных наночастиц из газовой фазы // Международный научный журнал Альтернативная энергетика и экология. 2007. № 10(54). С. 22-26.
26. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Y., Vakhrushev A. A., Golubchikov V. B., Givotkov A. V. Multilevel simulation of the processes of nanoaerosol formation. Part 2. Numerical investigation of the processes of nanoaerosol formation for suppression of fires // International Journal of Nanomechanics Science and Technology, 2011, vol. 2, iss. 3, pp. 205-216.
27. Suyetin M. V., Vakhrushev A. V. Nanocapsule for safe and effective methane storage // Nanoscale Research Letters, 2009, vol. 4, iss. 11, pp. 1267-1270.
28. Volkova E. I., Suyetin M. V., Vakhrushev A. V. Temperature sensitive nanocapsule of complex structural form for methane storage // Nanoscale Research Letters, 2010, vol. 5, iss. 1, pp. 205-210.
29. Suyetin M. V., Vakhrushev A. V. Guided carbon nanocapsules for hydrogen storage // Journal of Physical Chemistry C, 2011, vol. 115, iss. 13, pp. 5485-5491.
30. Воробьев В. Л., Быков П. В., Баянkin В. Я., Шушков А. А., Вахрушев А. В., Орлова Н. А. Изменение механических свойств углеродистой стали ст.3 в зависимости от средней плотности тока в пучке при импульсном облучении ионами аргона // Физика и химия обработки материалов. 2012. № 6. С. 5-9.
31. Vakhrushev A. V., Severyukhina O. Y., Severyukhin A. V., Vakhrushev A. A., Galkin N. G. Simulation of the processes of formation of quantum dots on the basis of silicides of transition metals // International Journal of Nanomechanics Science and Technology, 2012, vol. 3, iss. 1, pp. 51-75.
32. Valeev R. G., Vakhrushev A. V., Fedotov A. Yu., Petukhov D. I. Functional Semiconductor Nanostructures in Porous Anodic Alumina Matrices: Modeling, Synthesis, Properties. Waretown, USA: Apple Academic Press, 2019. 285 p.
33. Baskes M. I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities // Physical Review B, 1992, vol. 46, iss. 5, pp. 2727-2742.
34. Lee B.-J., Baskes M. I., Kim H., Cho Y. K. Second nearest-neighbor modified embedded atom method potentials for bcc transition metals // Physical Review B, 2001, vol. 64, iss. 18, pp. 184102(1-11).
35. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // Journal of Computational Physics, 1995, vol. 117, iss. 1, pp. 1-19.
36. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. VMD: visual molecular dynamics // Journal of Molecular Graphics, 1996, vol. 14, iss. 1, pp. 33-38.

THE SIMULATION OF PROCESSES FOR FORMING A SUPERCONDUCTOR SPIN VALVE BASED ON THE “SUPERCONDUCTOR-FERROMAGNETIC” NANOSTRUCTURE

^{1,2}Vakhrushev A. V., ^{1,2}Fedotov A. Yu., ³Savva Yu. B., ^{3,4}Sidorenko A. S.

¹ Udmurt Federal Research Center of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Izhevsk, Russia

² Kalashnikov Izhevsk State Technical University, Izhevsk, Russia

³ Orel State University named after I.S. Turgenev, Orel, Russia

⁴ Ghitu Institute of Electronic Engineering and Nanotechnologies, Chisinau, Republica Moldova

SUMMARY. The work is devoted to the study of the formation processes and analysis of the structure of a superconducting spin valve based on a multilayer superconductor-ferromagnet nanostructure. The relevance of the research is due to the need to develop an energy-efficient element base for microelectronics, based on new physical principles and the advent of devices based on spin and quantum-mechanical effects. The superconducting spin valve being developed is a multilayer structure consisting of ferromagnetic cobalt nanofilms, which are separated by niobium superconductors. The studies were carried out using molecular dynamics modeling. As the interaction potential of atoms in the simulated system, the modified immersed

atom method is used. The spin valve was formed by layer-by-layer deposition of elements in a vacuum. The atom deposition process was simulated in a stationary temperature regime. The paper presents a simulation of the deposition of the first few layers of a nanosystem. The atomic structure of individual nanolayers of the system is considered. Particular attention is paid to the analysis of the atomic structure of contact areas at the junction of the layers, since the quality of the layer interface plays a crucial role in creating a workable device. Three temperature deposition regimes were implemented: 300, 500, and 800 K. Calculations showed that with an increase in temperature there is a rearrangement of the structure of the system layers and their loosening. The structure of the nanolayer from niobium is close to crystalline with division into regions of different crystallographic orientations of atomic layers. For cobalt nanofilms, an amorphous structure is more characteristic. The obtained simulation results can be used as in development, as well as optimization of technologies for the formation of spin valves and other functional elements for spintronics.

KEYWORDS: spin valve, mathematical modeling, molecular dynamics, nanostructure, vacuum deposition.

REFERENCES

1. Krupa M. M. Spintronics. Problems and prospects of practical application. *Advantage Engineering Technologies*, 2007, vol. 2, pp. 1-9. <http://dx.doi.org/10.21065/>
2. Endoh T., Honjo H. A Recent Progress of Spintronics Devices for Integrated Circuit Applications. *Journal of Low Power Electronics and Applications*, 2018, vol. 8, iss. 44, pp. 1-17. <https://doi.org/10.3390/jlpea8040044>
3. Chang C., Kostylev M., Ivanov E. Metallic spintronic nanofilm as a hydrogen sensor. *Applied Physics Letters*, 2013, vol. 102, iss. 14, pp. 1-18. <https://doi.org/10.1063/1.4800923>
4. Deminov R. G., Useinov N. Kh., Tagirov L. R. Magnetic and superconducting heterostructures in spintronics. *Magnetic Resonance in Solids. Electronic Journal*, 2014, vol. 16, iss. 2, pp. 14209(1-9). http://mrsej.kpfu.ru/contents/2014/MRSej_14209.pdf
5. Bell C., Burnell G., Leung C. W., Tarte E. J., Kang D.-J., Blamire M. G. Controllable Josephson current through a pseudospin-valve structure. *Applied Physics Letters*, 2004, vol. 84, iss. 7, pp. 1153-1155. <https://doi.org/10.1063/1.1646217>
6. Hai P. N., Ohya S., Tanaka M., Barnes S. E., Maekawa S. Electromotive force and huge magnetoresistance in magnetic tunnel junctions. *Nature*, 2009, vol. 458, pp. 489-492. <https://doi.org/10.1038/nature07879>
7. Hai P. N., Tanaka M. Memristive magnetic tunnel junctions with MnAs nanoparticles. *Applied Physics Letters*, 2015, vol. 107, pp. 122404(1-5). <https://doi.org/10.1063/1.4931141>
8. Branford W. R., Ladak S., Read D. E., Zeissler K., Cohen L. F. Emerging Chirality in Artificial Spin Ice. *Science*, 2012, vol. 335, iss. 6076, pp. 1597-1600. <https://doi.org/10.1126/science.1211379>
9. Dion T., Arroo D. M., Yamanoi K., Kimura T., Gartside J. C., Cohen L. F., Kurebayashi H., Branford W. R. Tunable magnetization dynamics in artificial spin ice via shape anisotropy modification. *Physical Review B*, 2019, vol. 100, iss. 5, pp. 054433(1-11). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.054433>
10. Uchida K., Takahashi S., Harii K., Ieda J., Koshibae W., Ando K., Maekawa S., Saitoh E. Observation of the spin Seebeck effect. *Nature*, 2008, vol. 455, pp. 778-781. <https://doi.org/10.1038/nature07321>
11. Jooss Ch., Wu L., Beetz T., Klie R. F., Beleggia M., Schofield M. A., Schramm S., Hoffmann J., Zhu Y. Polaron melting and ordering as key mechanisms for colossal resistance effects in manganites. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2007, vol. 104, iss. 34, pp. 13597-13602. <https://dx.doi.org/10.1073/pnas.0702748104>
12. Hoffmann J., Moschkau P., Mildner S., Norpoth J., Jooss Ch., Wu L., Zhu Y. Effects of interaction and disorder on polarons in colossal resistance manganite $\text{Pr}_{0.68}\text{Ca}_{0.32}\text{MnO}_3$ thin films. *Materials Research Express*, 2014, vol. 1, iss. 4, pp. 046403(1-25). <https://doi.org/10.1088/2053-1591/1/4/046403>
13. Gaifullin R. R., Kushnir V. N., Deminov R. G., Tagirov L. R., Kupriyanov M. Yu., Golubov A. A. Proximity Effect in a Superconducting Triplet Spin Valve $\text{S}_1/\text{F}_1/\text{S}_2/\text{F}_2$. *Physics of the Solid State*, 2019, vol. 61, iss. 9, pp. 1535-1538. <https://doi.org/10.1134/S1063783419090063>
14. Zhaketov V. D., Nikitenko Ju. V., Hajdukov Ju. N., Skryabina O. V., Chik A., Borisov M. M., Muhamedzhanov Je. H., Vdovichev S. N., Litvinenko E. I., Petrenko A. V., Churakov A. V. Magnitnye i sverhprovodjashhie svoystva neodnorodnyh sloistyh struktur $\text{V}/\text{Fe}_0.7\text{V}_0.3/\text{V}/\text{Fe}_0.7\text{V}_0.3/\text{Nb}$ i $\text{Nb}/\text{Ni}_0.65(0.81)\text{Cu}_0.35(0.19)$ [Magnetic and superconducting properties of inhomogeneous layered structures $\text{V}/\text{Fe}_0.7\text{V}_0.3/\text{V}/\text{Fe}_0.7\text{V}_0.3/\text{Nb}$ and $\text{Nb}/\text{Ni}_0.65(0.81)\text{Cu}_0.35(0.19)$]. *Zhurnal eksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki* [Journal of Experimental and Theoretical Physics], 2019, vol. 156, iss. 2(8), pp. 310-330. <https://doi.org/10.1134/S0044451019080108>
15. Sidorenko A. C. Reentrance Phenomenon in Superconductor/Ferromagnet Nanostructures and their Application in Superconducting Spin Valves for Superconducting Electronics. *Low Temperature Physics*, 2017, vol. 43, iss. 7, pp. 766-771. <https://doi.org/10.1063/1.4995623>
16. Fominov Ya. V., Golubov A. A., Karminskaya T. Yu., Kupriyanov M. Yu., Deminov R. G., Tagirov L. R. Superconducting triplet spin valve. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 2010, vol. 91, iss. 6, pp. 308-313. <https://doi.org/10.1134/S002136401006010X>
17. Fominov Ya. V., Golubov A. A., Kupriyanov M. Yu. Triplet proximity effect in FSF trilayers. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 2003, vol. 77, issue 9, pp. 510-515. <https://doi.org/10.1134/1.1591981>
18. Zdravkov V. I., Lenk D., Morari R., Ullrich A., Obermeier G., Müller C., Krug von Nidda H. A., Sidorenko A. S., Horn S., Tidecks R., Tagirov L. R. Memory Effect and Triplet Pairing Generation in the Superconducting Exchange Biased $\text{Co}/\text{CoO}_x/\text{Cu}_{41}\text{Ni}_{59}/\text{Nb}/\text{Cu}_{41}\text{Ni}_{59}$ Layered Heterostructure. *Applied Physics Letters*, 2013, vol. 103, iss. 6, pp. 062604(1-9). <https://doi.org/10.1063/1.4818266>

19. Zdravkov V. I., Kehrle J., Obermeier G., Lenk D., Krug von Nidda H.-A., Müller C. Kupriyanov M. Yu., Sidorenko A. S., Horn S., Tidecks R., Tagirov L. R. Experimental observation of the triplet spin-valve effect in a superconductor–ferromagnet heterostructure. *Physical Review B*, 2013, vol. 87, pp. 144507(1-6). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.144507>
20. Vad K., Csik A., Langer G. Secondary neutral mass spectrometry-a powerful technique for quantitative elemental and depth profiling analyses of nanostructures. *Spectroscopy Europe*, 2009, vol. 21, iss. 4, pp. 13-16.
21. Vdovichev S. N., Nozdrin Ju. N., Pestov E. E., Junin P. A., Samohvalov A. V. Phase transitions in hybrid SFS structures with thin superconducting layers. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 2016, vol. 104, iss. 5, pp. 329-333. <https://doi.org/10.1134/S0021364016170148>
22. Klenov N., Khaydukov Y., Bakurskiy S., Morari R., Soloviev I., Boian V., Keller T., Kupriyanov M., Sidorenko A., Keimer B. Periodic Co/Nb pseudo spin valve for cryogenic memory. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 2019, vol. 10, pp. 833-839. <https://doi.org/10.3762/bjnano.10.83>
23. Stamopoulos D., Aristomenopoulou E., Lagogiannis A. Co/Nb/Co trilayers as efficient cryogenic spin valves and supercurrent switches: the relevance to the standard giant and tunnel magnetoresistance effects. *Superconductor Science and Technology*, 2014, vol. 27, iss. 9, pp. 095008(1-13). <https://doi.org/10.1088/0953-2048/27/9/095008>
24. Vakhrushev A. V. *Computational Multiscale Modeling of Multiphase Nanosystems. Theory and Applications*. Waretown, New Jersey, USA: Apple Academic Press, 2017. 402 p.
25. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Yu. Modelirovaniye formirovaniya kompozitsionnykh nanochastits iz gazovoy fazy [Modeling of composite nanoparticle formation from a gas phase]. *Mezhdunarodnyy nauchnyy zhurnal Al'ternativnaya energetika i ekologiya* [International Scientific Journal Alternative Energy and Ecology], 2007, iss. 10(54), pp. 22-26.
26. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Y., Vakhrushev A. A., Golubchikov V. B., Givotkov A. V. Multilevel simulation of the processes of nanoaerosol formation. Part 2. Numerical investigation of the processes of nanoaerosol formation for suppression of fires. *International Journal of Nanomechanics Science and Technology*, 2011, vol. 2, iss. 3, pp. 205-216. <https://doi.org/10.1615/NanomechanicsSciTechnolIntJ.v2.i3.20>
27. Suyetin M. V., Vakhrushev A. V. Nanocapsule for safe and effective methane storage. *Nanoscale Research Letters*, 2009, vol. 4, iss. 11, pp. 1267-1270. <https://doi.org/10.1007/s11671-009-9391-x>
28. Volkova E. I., Suyetin M. V., Vakhrushev A. V. Temperature sensitive nanocapsule of complex structural form for methane storage. *Nanoscale Research Letters*, 2010, vol. 5, iss. 1, pp. 205-210. <https://doi.org/10.1007/s11671-009-9466-8>
29. Suyetin M. V., Vakhrushev A. V. Guided carbon nanocapsules for hydrogen storage. *Journal of Physical Chemistry C*, 2011, vol. 115, iss. 13, pp. 5485-5491. <https://doi.org/10.1021/jp111415q>
30. Vorobiev V. L., Bykov P. V., Bayankin V. Ya., Shushkov A. A., Vakhrushev A. V., Orlova N. A. Izmeneniye mekhanicheskikh svoystv ugleorodistoy stali st.3 v zavisimosti ot sredney plotnosti toka v puchke pri impul'snom obluchenii ionami argona [Mechanical properties of carbon steel changes with the beam mean current density under pulsed irradiation with Ar ions]. *Fizika i khimiya obrabotki materialov* [Physics and Chemistry of Materials Processing], 2012, iss. 6, pp. 5-9.
31. Vakhrushev A. V., Severyukhina O. Y., Severyukhin A. V., Vakhrushev A. A., Galkin N. G. Simulation of the processes of formation of quantum dots on the basis of silicides of transition metals. *International Journal of Nanomechanics Science and Technology*, 2012, vol. 3, iss. 1, pp. 51-75. <https://doi.org/10.1615/NanomechanicsSciTechnolIntJ.v3.i1.30>
32. Valeev R. G., Vakhrushev A. V., Fedotov A. Yu., Petukhov D. I. *Functional Semiconductor Nanostructures in Porous Anodic Alumina Matrices: Modeling, Synthesis, Properties*. Waretown, USA: Apple Academic Press, 2019. 285 p.
33. Baskes M. I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities. *Physical Review B*, 1992, vol. 46, iss. 5, pp. 2727-2742. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.2727>
34. Lee B.-J., Baskes M. I., Kim H., Cho Y. K. Second nearest-neighbor modified embedded atom method potentials for bcc transition metals. *Physical Review B*, 2001, vol. 64, iss. 18, pp. 184102(1-11). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.184102>
35. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, vol. 117, iss. 1, pp. 1-19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
36. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. VMD: visual molecular dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, 1996, vol. 14, iss. 1, pp. 33-38. [https://doi.org/10.1016/0263-7855\(96\)00018-5](https://doi.org/10.1016/0263-7855(96)00018-5)

Вахрушев Александр Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий отделом «Моделирование и синтез технологических структур» УдмФИЦ УрО РАН, заведующий кафедрой «Нанотехнологии и микросистемная техника» ИжГТУ имени М.Т. Калашиникова, тел. (3412) 21-45-83, e-mail: vakhrushev-a@yandex.ru

Федотов Алексей Юрьевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела «Моделирование и синтез технологических структур» УдмФИЦ УрО РАН, доцент кафедры «Нанотехнологии и микросистемная техника» ИжГТУ имени М.Т. Калашиникова тел. (3412) 21-45-83, e-mail: alexfed@gmail.com

Савва Юрий Болеславович, кандидат технических наук, доцент кафедры «Информационная безопасность» ОГУ имени И.С. Тургенева, заведующий научно-исследовательской лабораторией «Функциональные наноструктуры», тел. (4862) 75-13-18, e-mail: su_fio@mail.ru

Сидоренко Анатолий Сергеевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик АНМ, директор ИЭИН имени Д. Гицу, научный консультант лаборатории «Функциональные наноструктуры» ОГУ имени И.С. Тургенева, тел. (373 22) 73-70-92, e-mail: anatoli.sidorenko@kit.edu