ДИСПЕРСИЯ ДЛИННОВОЛНОВЫХ ФОНОНОВ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ. МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

САЛАМАТОВ Е. И., ДОЛГУШЕВА Е. Б.

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

АННОТАЦИЯ. Исследована стабильность тонкой (5 атомных слоев) пленки ГЦК-Al и рассчитан спектр колебаний атомов. Предложен оригинальный подход, позволяющий в рамках метода молекулярной динамики вычислять закон дисперсии длинноволновых фононов в тонких пленках. Предварительно проведенный симметричный анализ колебаний атомов позволяет однозначно установить, к какой ветви фононного спектра относятся рассматриваемые колебания с частотой ω , и определить длину волны λ соответствующего фонона. Совпадение вычисленного закона дисперсии с полученным в теории упругости (в отсутствии экспериментальных данных) служит критерием адекватности использованного в работе потенциала межатомного взаимодействия.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: метод молекулярной динамики, дисперсия колебаний, фононный спектр, преобразование Фурье.

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время большое внимание уделяется исследованиям нанопленок, находящихся в метастабильном состоянии, что связано с их уникальными свойствами, которые находят все новые применения в промышленности. Одной из главных задач, стоящих перед исследователями, является повышение их стабильности, поскольку из многочисленных экспериментов по синтезированию ультратонких (в несколько атомных слоев) пленок известно, что такие пленки в свободном состоянии нестабильны – они сворачиваются в трубки, изгибаются или вообще разрушаются [1–4]. Для решения поставленной задачи необходимо понять, какие изменения в системе сигнализируют о начале процесса потери стабильности и выделить факторы, оказывающие решающее влияние на этот процесс.

В объемных кристаллах при описании структурных переходов, как правило, используют концепцию динамической стабильности, согласно которой динамическая матрица стабильной фазы должна быть положительно определена [5]. При движении к границе раздела фаз в некоторой точке зоны Бриллюэна появляется фононная мода, частота которой при приближении к границе раздела стремится к нулю, и динамическая матрица перестает быть положительно определенной. Смещения атомов в данной фононной моде описывают процесс фазового перехода на микроскопическом уровне в реальном пространстве [6, 7]. Этот подход подтверждается экспериментальными данными, полученные методом рассеяния нейтронов [8] и Рамановской спектроскопии [9]. Время жизни для тонких кристаллических пленок в свободном состоянии слишком мало для проведения таких экспериментов. Казалось бы, что для малых времен перспективно использовать метод молекулярной динамики (ММД), который позволяет рассматривать детальную микроскопическую картину движения больших атомных систем на малых временных интервалах. Однако, расчеты ММД предварительно необходимо протестировать, сравнивая их с известными физическими характеристиками моделируемых объектов, чтобы убедиться в адекватности описания. При моделировании термодинамических свойств объемных систем сравнивается, как правило, плотность фононных состояний. Представляется, что при отсутствии экспериментальных данных такое тестирование можно провести из сравнения с результатами, полученными в других апробированных подходах.

В данной работе предлагается метод, позволяющий проводить тестирование результатов молекулярно-динамических расчетов динамики тонких пленок, сравнивая их с аналитическими результатами, полученными в рамках теории упругости. Поскольку динамика кристаллической системы описывается в рамках теории упругости только в длинноволновом пределе, такой подход потребовал более тщательного, чем обычно, анализа низкочастотного участка колебательного спектра системы. В работе представлен оригинальный метод вычисления длинноволнового участка закона дисперсии фононов в тонких пленках методом молекулярной динамики, который основывается на предварительном анализе симметрии колебаний атомов пленки. Проведенный симметричный анализ позволяет однозначно установить, к какой ветви фононного спектра относятся рассматриваемые колебания с частотой, ν и найти длину волны соответствующего фонона λ , что позволяет определить закон дисперсии $\nu(k)$. Полученный таким образом закон дисперсии длинноволновых фононов тонкой алюминиевой пленки, содержащей всего пять атомных монослоев, совпадает с аналитическим результатом из теории упругости. Это позволяет утверждать, что метод МД, постановка задачи и выбранный межатомный потенциал могут адекватно описывать динамику ультратонких пленок.

МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Для описания межатомного взаимодействия в алюминии был выбран многочастичный потенциал [10], построенный в рамках модели «погруженного атома» [11]. Авторами работы [10] было показано, что эти потенциалы позволяют получить, с высокой степенью точности, параметры ГЦК алюминия, когезионную энергию, упругие постоянные, температуру плавления и другие физические характеристики объемного алюминия. Ранее с этим потенциалом в работах [12, 13] были получены плотности колебательных состояний при различной температуре, упругие модули, температурная зависимость теплоемкости, тепловое расширение и др. для ГЦК-Al как в объемном состоянии, так и для нанопленок. Сравнение рассчитанных характеристик с экспериментом по неупругому рассеянию нейтронов для Al показывает, что выбранный потенциал позволяет описать экспериментально наблюдаемые особенности фононного спектра алюминия, в том числе, и его "смягчение" с повышением температуры.

Моделирование проводилось с помощью пакета XMD [14]. Во всех вариантах расчет начинался с формирования кристаллита с идеальной ГЦК структурой и релаксации в течение 0,6 нс в условиях NPT – ансамбля, при заданной температуре и нулевом давлении, минимизировалась энергия и определялись параметры ячейки (рис. 1). Расчеты проводились на кристаллите с размерами $N_x = 5$, $N_y = 30$, $N_z = 42$ моноатомных слоев, содержащих 6300 атомов, который можно представить в виде 150 цепочек вдоль оси z . Уравнения движения интегрировались с временным шагом $dt = 0,1$ фс. Вдоль осей y и z задавались периодические граничные условия, вдоль оси x – свободные. Для задания постоянной температуры используется режим масштабирования скоростей, а для поддержания постоянного давления — баростат Берендсена.

Рис. 1. Схематическое изображение моделируемого базового кристаллита, имитирующего пленку. Толщина пленки $N_x = 5$ моноатомных слоев Al, $N_y = 30$, $N_z = 42$. Параметр решетки: $a = 3,976$ Å. Число атомов: $N = 6300$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ ТОНКОЙ ПЛЕНКИ

Прежде чем проводить Фурье-анализ частотного спектра исследуемой системы необходимо определить временной интервал (Δt), в течение которого система остается стабильной при всех рассмотренных температурах. Так как нас в дальнейшем будет интересовать низкочастотная область колебательного спектра, Δt должен быть достаточно большим, поскольку минимальная частота Фурье-преобразования связана с интервалом наблюдения $\nu_{\min} = 1/\Delta t$. Проведенные вычисления показали, что оптимальный временной интервал необходимый для расчетов 0,6 нс. На рис. 2 показаны функции радиального распределения атомов при различных значениях температуры. Сдвоенными вертикальными линиями обозначены положения атомов соответствующие идеальной ГЦК структуре. Видно, что в интервале температур 200 – 600 К решетка сохраняет первоначальную структуру и практически не изменяются размеры всего базового кристаллита. Также ведут себя и элементы тензора внутренних напряжений σ_{yy} и σ_{zz} , кроме σ_{xx} , который отвечает за сохранение формы пленки. На рис. 3, а приведены графики временной зависимости элемента σ_{xx} тензора внутренних напряжений при различных температурах. Из рисунка видно, что σ_{xx} растет по абсолютной величине с увеличением температуры, а форма пленки немного изменяется уже при $T = 600$ К, как видно из рис. 3, б, на котором показаны усредненные по всему временному интервалу положения поверхностных атомов пленки в проекции на плоскость xz .

Рис. 2. Функции радиального распределения атомов ГЦК-Al пленки при различных температурах. Прямые двойные линии показывают положения пиков для идеальной ГЦК решетки

Рис. 3. а) – временная зависимость элемента тензора внутренних напряжений σ_{xx} ; б) – проекции усредненных положений поверхностных атомов пленки на плоскость xz при различных температурах

Время жизни пленки становится меньше 0,6 нс, когда температура приближается к 800 К. Это проявляется в быстром, экспоненциальном уменьшении размера базового кристаллита вдоль направления z , что и демонстрирует рис. 4.

Рис. 4. Изменение размера базового кристаллита вдоль оси z при различных температурах в зависимости от времени

МЕТОД РАСЧЕТА ДИСПЕРСИОННОГО СПЕКТРА КОЛЕБАНИЙ

Как уже упоминалось во введении, экспериментальных данных по динамическим свойствам свободных тонких пленок не существует, и сравнивать результаты численных расчетов можно только с аналитическими результатами, полученными для закона дисперсии в рамках теории упругости, которая хорошо описывает поведение дискретной кристаллической решетки в длинноволновом пределе.

Из теории упругости следует, что наличие в пленках плоскости симметрии, параллельной поверхности и проходящей через середину толщины пленки, позволяет представить смещения всех атомов в виде суммы симметричного (с-compression) и антисимметричного (b-bending) вкладов (рис. 5, *a*). Законы дисперсии для этих типов колебаний принципиально различны и имеют вид, показанный сплошными линиями на рис. 5, *б*. Эти линии могут быть рассчитаны по формулам [15]:

$$\nu_b(k) = \frac{\left(\frac{(1+\sigma)}{6}\right)^{1/2} \cdot c_t b_0 k^2}{\pi}, \quad (1)$$

$$\nu_c(k) = \frac{c_t k}{2\pi}, \quad (2)$$

где k – волновой вектор, c_t – скорость поперечного звука объемного материала, σ – коэффициент Пуассона, b_0 – толщина пленки.

Рис. 5. *a*) – схематическое изображение изгибных (bending) и сжимающих (compression) колебаний; *б*) – дисперсия длинноволновых фононов, распространяющихся вдоль направления z . Сплошные линии – расчет по формулам (1,2) с параметрами для объемного кристалла из [16]. Символы – результаты наших расчетов (см. ниже)

После проведенного анализа колебаний всех атомов расчетной ячейки был сделан вывод, что для наших целей можно ограничиться рассмотрением только проекцией колебаний на ось x двух цепочек поверхностных атомов с одинаковым значением координаты y . Нечетное число цепочек в направлении x позволяет легко перейти от реальных координат смещений к симметризованным:

$$u_{n,b} = \frac{u_{n,top} + u_{n,bot}}{2}; \quad u_{n,c} = \frac{u_{n,top} - u_{n,bot}}{2}, \quad (3)$$

где индекс $n = 1, \dots, 42$ обозначает номер атома в цепочке, а *top* (*bot*) – верхнюю или нижнюю цепочку. На рис. 6, *a* представлена временная зависимость координат x пары атомов из верхней и нижней поверхностных атомных цепочек, имеющих одинаковую координату по оси $y = 28,7 \text{ \AA}$ и порядковый номер $n = 20$ при температуре системы $T = 200 \text{ K}$. На рис. 6, *б* показано как при этом изменяются симметризованные смещения u_c и u_b . Из рисунка следует, что перпендикулярные поверхности пленки смещения атомов в основном определяются изгибными колебаниями u_b .

Рис. 6. Временная зависимость: *a*) – координаты x пары атомов из верхней и нижней цепочек при $T = 200 \text{ K}$; *б*) – сжимающих (u_c) и изгибных (u_b) смещений

Фурье-преобразование ($F(v)$) траекторий смещений b , c -типа проводился для каждого значения n . В этом случае частотные спектры (т.е. модуль Фурье-преобразования $F(v)$) изгибных ($g_{x,b}$) и сжимающих ($g_{x,c}$) колебаний атомов в поверхностных цепочках являются суммой спектров отдельных пар атомов, в верхней и нижней цепочках с одинаковым значением координаты y . Низкочастотная часть этих спектров представлена на рис. 7, на котором хорошо видны резонансные пики. Спектр изгибных колебаний показан на рисунке сплошной линией, а сжимающих, умноженный на 30, – штриховой.

Рис. 7. Частотные спектры изгибных ($g_{x,b}$) и сжимающих ($g_{x,c}$) колебаний поверхностных атомов. Спектр сжимающих колебаний $g_{x,c}$ увеличен в 30 раз

Очевидно, что резонансные пики в низкочастотной области колебательного спектра относятся к каким-то определенным колебательным модам. Чтобы понять это, рассмотрим, какие пары атомов формируют самый низкочастотный резонансный пик с частотой $\nu = 0,033 \text{ ТГц}$, соответствующий изгибным колебаниям. На рис. 8 показаны вклады колебаний некоторых пар поверхностных атомов в общий спектр вблизи данной резонансной частоты. На рис. 8, *a* представлен модуль $F(v)$ (собственно частотный спектр g_n) и на 8, *б* – только его мнимая часть ($\text{Im}(F_n(v))$), которая сохраняет информацию о фазе колебаний преобразования, где n – номер атомов в верхней и нижней цепочках.

Как изменяются значения $\text{Im}(F_n(\nu))$ при резонансной частоте $\nu = 0,033$ ТГц от каждого атома n в отдельно взятой цепочке показано на рис. 9, а. Их огибающая представляет собой участок изгибной волны, распространяющейся вдоль направления z , а длина волны λ равна размеру расчетной ячейки в направлении z и является максимальной для данной геометрии задачи.

Применяя эту же процедуру для более высокочастотных резонансных пиков в спектре изгибных колебаний (см. рис. 7) найдена связь длины волны с частотой, то есть, рассчитан закон дисперсии для изгибных колебаний. На рис. 9, б показаны соответствующие различным резонансным частотам изгибные колебания, для каждого из которых можно определить длину волны. Аналогично находится соответствие резонансных частот с длинами волн и для сжимающих колебаний. Полученным таким образом значениям соответствуют символы на рис. 5, б, а линии на этом рисунке построены по формулам (1), (2). Наблюдается хорошее соответствие вычисленных результатов с аналитическими, полученными в теории упругости, что указывает на перспективность такого подхода для исследования низкочастотных фононов тонких пленок.

Рис. 8. а) – частотный спектр и б) – мнимая часть изгибных колебаний на резонансной частоте $\nu = 0,033$ ТГц

Рис. 9. а) – мнимые значения Фурье-преобразования $F_n(\nu)$ при резонансной частоте $\nu = 0,033$ ТГц для всей атомной цепочки; б) – изгибные колебания, соответствующие различным резонансным частотам

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью метода молекулярной динамики проведены исследования решеточной стабильности и колебательных свойств тонкой (5 атомных слоев) алюминиевой пленки с ГЦК структурой. Проблема тестирования расчетов при отсутствии экспериментальных данных для тонких пленок была решена путем сравнения рассчитанного закона дисперсии с аналитическими результатами, полученными в рамках теории упругости, что потребовало уделить особое внимание низкочастотному участку колебательного спектра системы. Предложен оригинальный подход, позволяющий в рамках метода молекулярной динамики вычислять закон дисперсии длинноволновых фононов в тонких пленках. Подход опирается на предварительно проведенный симметричный анализ колебаний атомов пленки, что

позволяет независимо вычислять колебательный спектр для симметризованных координат, соответствующих изгибным и сжимающим колебаниям тонкой пленки. Это дает возможность однозначно установить, к какой ветви фононного спектра относятся рассматриваемые колебания с заданной резонансной частотой ν . Использование мнимой части Фурье-преобразования, сохраняющей информацию о фазе колебаний, позволяет определить смещения атомов в реальном пространстве и найти длину волны соответствующего фонона λ , т.е. вычислить закон дисперсии.

Таким образом, предложенный в работе оригинальный метод, кроме своего основного назначения – рассчитывать дисперсию длинноволновых фононов в тонких пленках методом молекулярной динамики, делает возможным тестирование численных результатов путем сравнения с аналитическими выражениями из теории упругости, при отсутствии экспериментальных данных по динамике исследуемой системы.

Работа выполнена в рамках темы НИР УдмФИЦ УрО РАН «Теоретические исследования электронных, магнитных, решеточных и транспортных свойств слоистых и наноструктурированных систем» АААА-А17-117022250041-7 и при финансовой поддержке гранта УрО РАН № 18-2-2-12.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Evans J. W., Thie P. A., Bartelt M. C. Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2D islands and 3D mounds // Surface Science Reports, 2006, vol. 61, iss. 1-2, pp. 1-128.
2. Venables J. A., Seguin J. L., Suzanne J., Bienfait M. Crystallography and growth modes of thick physisorbed films on graphite // Surface Science, 1984, vol. 145, iss. 2-3, pp. 345-363.
3. Venables J. A., Spiller G. D. T., Hanbucken M. Nucleation and growth of thin films // Reports on Progress in Physics, 1984, vol. 47, no. 4, pp. 399-459.
4. Venables J. A. Atomic processes in crystal growth // Surface Science, 1994, vol. 299-300, pp. 798-817.
5. Лейбфрид Г., Людвиг В. Теория ангармонических эффектов в кристаллах / пер. с англ. В.Л. Гуревича, под ред. В.Л. Бонч-Бруевича. М.: Изд-во иностранной литературы, 1963. 232 с.
6. Ostanin S. A., Salamatov E. I., Trubitsin V. Y. Anharmonic model of instability evolution near the bcc $\rightarrow$ hcp phase transition in Zr // Physical Review B, 1998, vol. 57, iss. 9, pp. 5002.
7. Ostanin S. A., Salamatov E. I., Trubitsin V. Y. Pressure effect on the transverse Γ -point optical phonon in hcp Zr // Physical Review B, 1998, vol. 58, iss. 24, pp. R15962.
8. Stassis C., Zarestky J., Wakabayashi N. Lattice dynamics of bcc zirconium // Physical Review Letters, 1998, vol. 41, iss. 25, pp. 1726.
9. Olijnyk H., Jephcoat A. P. Effect of pressure on Raman phonons in zirconium metal // Physical Review B, 1997, vol. 56, iss. 17, pp. 10751.
10. Zope R. R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system // Physical Review B, 2003, vol. 68, iss. 2, pp. 024102.
11. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Physical Review B, 1984, vol. 29, iss. 12, pp. 6443.
12. Долгушева Е. Б., Трубицын В. Ю. Решеточная теплоемкость наноструктурированных материалов на основе титана/циркония и алюминия // Физика твердого тела. 2018. Т. 60, № 5. С. 835-845. <https://doi.org/10.21883/FTT.2018.05.45774.329>
13. Dolgusheva E. B. Thermal properties of fcc titanium and aluminum thin films // Computational Materials Science, 2018, vol. 155, pp. 55-62.
14. Rifkin J. XMD - Molecular Dynamics Program (Univ. Of Connecticut, Center for Materials Simulation, Storrs, CT, 2002). URL: <http://xmd.SourceForge.net/> (дата обращения 07.05.2019).
15. Cross M. C., Lifshits R. Elastic wave transmission at an abrupt junction in a thin plate with application to heat transport and vibrations in mesoscopic systems // Physical Review B, 2001, vol. 64, iss. 8, pp. 085324.
16. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела / пер. с англ. А.В. Пахнева, А.А. Гусева. М.: Наука, 1978, 792 с.

DISPERSION OF LONG-WAVE PHONONS IN THIN FILMS. MOLECULAR DYNAMICS METHOD

Salamatov E. I., Dolgusheva E. B.

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

SUMMARY. Using the molecular dynamics method, the lattice stability and vibrational properties of a thin (5 atomic layers) aluminum film with FCC structure were studied. In the numerical solution of physical problems, it is always necessary to compare the calculation results with some known physical characteristics, best of all with those obtained experimentally. In

the study of vibrational properties of crystal systems, as a rule, the calculated density of phonon states is compared with the experimental data on inelastic neutron scattering. Unfortunately, there is no such data for free thin films. The problem of testing calculations in the absence of experimental data for thin films was solved in the paper by comparing the dispersion law obtained from the simulation results with the analytical one obtained within the theory of elasticity. An original approach is proposed that allows calculating the dispersion law of long-wave phonons in thin films within the framework of the molecular dynamics method. The approach is based on a preliminary symmetry analysis of the atomic vibrations of the film, which allows one to calculate independently the vibrational spectrum for the symmetrized coordinates corresponding to the bending and compressive vibrations of the thin film. This makes it possible to establish unambiguously to which branch of the phonon spectrum the considered vibrations with a given resonance frequency ν belong. The imaginary part of the Fourier transform, which stores information about the vibration phase, allows one to determine the atomic displacements in real space and find the wavelength λ of the corresponding phonon, i.e. calculate the dispersion law. Thus, the original method proposed in this paper, in addition to its main purpose - to calculate the long-wave phonon dispersion in thin films using molecular dynamics, provides an opportunity to test the numerical results, comparing them with analytical expressions from the theory of elasticity, in the absence of experimental data on the dynamics of the system under study.

KEYWORDS: molecular dynamics method, vibration dispersion, phonon spectrum, Fourier transform.

REFERENCES

1. Evans J. W., Thie P. A., Bartelt M. C. Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2D islands and 3D mounds. *Surface Science Reports*, 2006, vol. 61, iss. 1-2, pp. 1-128. <https://doi.org/10.1016/j.surfrep.2005.08.004>
2. Venables J. A., Seguin J. L., Suzanne J., Bienfait M. Crystallography and growth modes of thick physisorbed films on graphite. *Surface Science*, 1984, vol. 145, iss. 2-3, pp. 345-363. [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(84\)90087-6](https://doi.org/10.1016/0039-6028(84)90087-6)
3. Venables J. A., Spiller G. D. T., Hanbucken M. Nucleation and growth of thin films. *Reports on Progress in Physics*, 1984, vol. 47, no. 4, pp. 399-459. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/47/4/002>
4. Venables J. A. Atomic processes in crystal growth. *Surface Science*, 1994, vol. 299-300, pp. 798-817. [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(94\)90698-X](https://doi.org/10.1016/0039-6028(94)90698-X)
5. Leibfried G. and Ludwig W. *Theory of anharmonic effects in crystals*. New York-London, Acad. Press, 1961. (Solid State physics. Ed. F. Seitz and D. Turnbull. Vol. 12.
6. Ostanin S. A., Salamatov E. I., Trubitsin V. Y. Anharmonic model of instability evolution near the bcc $\rightarrow$ hcp phase transition in Zr. *Physical Review B*, 1998, vol. 57, iss. 9, pp. 5002. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.5002>
7. Ostanin S. A., Salamatov E. I., Trubitsin V. Y. Pressure effect on the transverse Γ -point optical phonon in hcp Zr. *Physical Review B*, 1998, vol. 58, iss. 24, pp. R15962. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.R15962>
8. Stassis C., Zarestky J., Wakabayashi N. Lattice dynamics of bcc zirconium. *Physical Review Letters*, 1998, vol. 41, iss. 25, pp. 1726. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.41.1726>
9. Olijnyk H., Jephcoat A. P. Effect of pressure on Raman phonons in zirconium metal. *Physical Review B*, 1997, vol. 56, iss. 17, pp. 10751. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.56.10751>
10. Zope R. R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system. *Physical Review B*, 2003, vol. 68, iss. 2, pp. 024102. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.024102>
11. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*, 1984, vol. 29, iss. 12, pp. 6443. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>
12. Dolgusheva E. B., Trubitsin V. Yu. Lattice Heat Capacity of Nanostructured Materials Based on Titanium/Zirconium and Aluminum. *Physics of the Solid State*, 2018, vol. 60, iss. 5, pp. 837-846. <https://doi.org/10.1134/S1063783418050074>
13. Dolgusheva E. B. Thermal properties of fcc titanium and aluminum thin films. *Computational Materials Science*, 2018, vol. 155, pp. 55-62. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.08.033>
14. Rifkin J. *XMD Molecular Dynamics Program* (Univ. Of Connecticut, Center for Materials Simulation, Storrs, CT, 2002). URL: <https://xmd.SourceForge.net/> (accessed May 7, 2019).
15. Cross M. C., Lifshits R. Elastic wave transmission at an abrupt junction in a thin plate with application to heat transport and vibrations in mesoscopic systems. *Physical Review B*, 2001, vol. 64, iss. 8, pp. 085324. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.085324>
16. Kittel Ch. *Introduction to Solid State Physics*. USA, New York, John Wiley & Sons, Inc., 1953.

Саламатов Евгений Иванович, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник УдмФИЦ УрО РАН, тел. 8(3412)213966, e-mail: esalama2i@gmail.com

Долгушева Елена Борисовна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник УдмФИЦ, e-mail: elena@udman.ru