МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ИНТЕРФЕЙСА МНОГОСЛОЙНОЙ НАНОСИСТЕМЫ Nb-Co

¹ВАХРУШЕВ А. В., ¹ФЕДОТОВ А. Ю., ²СИДОРЕНКО А. С., ³КЛЕНОВ Н. В.,
³СОЛОВЬЕВ И. И.

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

² Орловский государственный университет имени И.С. Тургенева,
302026, г. Орел, ул. Комсомольская, 95

³ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1

АННОТАЦИЯ. В работе выполнено моделирование процессов формирования контактных областей (интерфейса) многослойной наносистемы ниобий-кобальт. Исследована морфология и состав интерфейса многослойной наносистемы. Показано, что морфология границ слоев зависит от температуры подложки, на которую происходит осаждение, и, в значительной степени, определяется подготовкой поверхности для осаждения. В работе рассмотрено модифицирование поверхности путем удаления дефектов с поверхности нанослоя. Моделирование показало, что подготовка поверхности влияет на морфологию и состав интерфейса многослойной наносистемы.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: многослойные наносистемы, интерфейс, математическое моделирование, молекулярная динамика.

ВВЕДЕНИЕ

Появление новых электронных устройств на основе наносистем требует тщательного исследования их свойств на атомарном и молекулярном уровне, так как от структуры и строения наносистем зависят их функциональные характеристики: оптическое поглощение [1 – 3], электромагнитные параметры [4, 5] и т.д. В последнее время большое внимание уделяется таким наносистемам, как сверхпроводники [6, 7], магнетики [8, 9], гетероструктуры для спинтроники [10, 11]. Данные системы представляют собой слоистые или нанодисперсные композиты, в которых имеются зоны локальных неоднородностей [12]. Наличие локальных неоднородностей приводит к формированию устойчивых вихреподобных областей обратной намагниченности, названными магнитными скирмионами [13, 14] и антискирмионами [15], являющимися весьма перспективными инструментами использования в области спинтроники.

Особо важное влияние на свойства объектов спинтроники и других наноразмерных элементов оказывает структура слоев, доменов, областей, пленок, возникающая в процессе их изготовления. Структура зарождается на атомарном уровне, поэтому основные механизмы регуляции, активации и взаимодействия атомов необходимо отслеживать в данном масштабе. Моделирование позволяет выявить режимы и параметры технологических процессов, обеспечивающих строение нанопленок и наноструктур наиболее приближено к требуемым характеристикам. Например, при формировании наноматериала может быть актуален режим образования квантовых точек. Также остро стоит проблема формирования многослойных композитов с четкими границами разделов различных составляющих композита.

Рис. 1. Изображение, полученное с помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, слоистой наноструктуры Co, CoOx и CuNi, сформированной методом магнетронного распыления

В качестве примера на рис. 1 представлена фотография, полученная с помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, слоистой наноструктуры Co, CoOx и CuNi, сформированной методом магнетронного распыления [16]. Как видно из рисунка, структура реальной слоистой наносистемы далека от идеальной. В частности, можно отметить, что поверхность (интерфейс), разделяющая различные нанослои системы, не является идеально плоской. Интерфейс имеет заметные неровности, проникающие в соприкасающиеся слои. Из фотографии также видно, что происходит взаимное проникновение атомов одного контактирующего слоя в другой. Следовательно, граница раздела слоев имеет определенную толщину. Кроме того, следует отметить, что атомная структура каждого слоя не образует идеальный монокристалл, а образуется система поликристаллов.

Экспериментальные исследования [17–18] показали, что влияние качества интерфейса (квантово-механическая прозрачность интерфейса T_F) на функциональность спинового вентиля, представляющего собой многослойную наносистему, является особенно важным вопросом. Параметр прозрачности T_F границы раздела для полностью не смачивающих металлов весьма мал $T_F \approx 0.4$. Это снижает вероятность проникновения Куперовских пар из сверхпроводника в ферромагнетик и заставляет работать с меньшими толщинами сверхпроводящих слоев, чтобы получить существенное влияние ферромагнетизма на сверхпроводимость. В свою очередь, структурное качество сверхпроводящих слоев ниобия, толщиной примерно или менее 10 нм, хуже, чем у более толстых пленок, а разрушающее влияние шероховатости границы раздела также подавляет проявление интерференционных эффектов в нанопленках. Для хорошо растворимых друг в друге металлов параметр квантово-механической прозрачности выше $T_F \approx 1.6$.

В случае смачивания материалов и материалов с ограниченной взаимной растворимостью (как в ниобий-никеле, ниобий-кобальте – растворимость около 5 % при комнатной температуре) параметр прозрачности составляет $T_F \approx 2$ и является максимальным из возможных пар металлов.

Таким образом, различного типа дефекты интерфейса приводят к уменьшению параметра прозрачности T_F и ухудшению функциональных параметров слоистой наносистемы сверхпроводник-ферромагнетик. Экспериментальные исследования и моделирование, выполненное ранее авторами данной работы, показывает, что качество

интерфейса с увеличением числа слоев заметно ухудшается [19], вследствие накопления числа дефектов и увеличения их размеров на поверхности каждого последующего осаждаемого нанослоя многослойной системы. Поэтому задача поиска технологических приемов, обеспечивающих “идеальный” интерфейс многослойных наносистем, является актуальной задачей.

Целью работы являлось моделирование процессов формирования интерфейса многослойных наносистем и анализ способов модификации поверхности осаждаемых атомарных слоев с целью получения более четких границ разделов между различными слоями наносистемы.

Данная публикация является продолжением и развитием исследований авторов по моделированию и оптимизации процессов формирования различных наносистем включающих наночастицы [20 – 23], квантовые точки [24], пористые материалы [25] и другие наноэлементы [26].

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

В качестве метода исследований структуры и рельефа поверхности формируемых многослойных наносистем использован метод молекулярной динамики с использованием потенциалов, основанных на теории функционала электронной плотности. В данных потенциалах в общей энергии взаимодействия моделируемой системы выделяют вклад некоторой функции погружения отдельного атома в электронный газ. Поэтому этот метод получил название метода погруженного атома (EAM – Embedded Atom Method). EAM силовые поля относятся к многочастичным, так как учитывают одновременное взаимодействие нескольких атомов. В работе [27] была разработана модификация данного семейства потенциалов (MEAM – Modified Embedded Atom Method), учитывающая несимметричность электронных облаков атомов и достаточно полно описывающая физику потенциальных полей атомистических объектов.

Использованный в работе модифицированный метод погруженного атома основывается на разделении общей потенциальной энергии на две части, представленные в виде отдельных слагаемых

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

где $U_i(r)$ – вклад в общую энергию каждого атома; $F_i(\bar{\rho}_i)$ – функция погружения, зависящая от фоновой электронной плотности $\bar{\rho}_i$; $\phi_{ij}(r_{ij})$ – слагаемое, отвечающее за парное взаимодействие атомов; r_{ij} – расстояние между двумя рассматриваемыми атомами.

Функция погружения описывает изменение энергии при помещении некоторого атома в газ с электронной плотностью. Теоретически и экспериментально было подтверждено, что вклад данной функции является существенным. Физический смысл функции погружения основывается на частичной заполненности внешних электронных оболочек некоторых атомов. При взаимодействии данные атомы предоставляют друг другу необходимые для стабильного существования электроны и незаполненные облака, за счет чего получается выигрыш в энергии, записанный в виде функции погружения.

Подробное описание функции погружения, фоновой электронной плотности, эмпирических коэффициентов модели, а также видов атомных орбиталей и соответствующих им формулировок электронных плотностей приведено в работе [28]. Парный потенциал $\phi_{ij}(r_{ij})$ в зависимости от конкретного вида потенциала из семейства методов погруженного атома может быть задан различными способами. Данная функция должна быть непрерывной, плавно затухать на больших расстояниях и значительно возрастать по абсолютному значению на малых, существенно меньше равновесного дистанциях, приводя к

отталкиванию атомов. Таким образом, при приближении атомов на расстояние ближе половины координационной сферы решающую роль оказывает не функция погружения, а парный потенциал.

В работе использовалась формулировка парного потенциала, связанная с зарядами взаимодействующих атомов

$$\Phi_{ij}(r_{ij}) = \bar{\Phi}_{ij}(r_{ij}) S_{ij}, \quad (2)$$

$$\bar{\Phi}_{ij}(r_{ij}) = \frac{1}{Z_{ij}} \left[2E_{ij}^u(r_{ij}) - F_i \left(\frac{Z_{ij}}{Z_i} \rho_i^{a(0)}(r_{ij}) \right) - F_j \left(\frac{Z_{ij}}{Z_j} \rho_j^{a(0)}(r_{ij}) \right) \right], \quad (3)$$

$$E_{ij}^u(r_{ij}) = -E_{ij} \left(1 + a_{ij}^*(r_{ij}) \right) \cdot \exp \left[-a_{ij}^*(r_{ij}) \right], \quad (4)$$

$$a_{ij}^*(r_{ij}) = \alpha_{ij} \left(\frac{r_{ij}}{r_{ij}^0} - 1 \right), \quad (5)$$

где $\bar{\Phi}_{ij}(r_{ij})$ – полный потенциал парного взаимодействия; S_{ij} – коэффициенты экранирования, которые применяются для экономии вычислительных ресурсов и реалистичного сглаживания потенциала; $E_{ij}, \alpha_{ij}, r_{ij}^0$ – параметры потенциала, зависящие от типов взаимодействующих атомов; Z_{ij} – определяется структурой рассматриваемой системы; $\rho_i^{a(0)}$ – фоновая электронная плотность.

Фоновая плотность $\rho_i^{a(0)}$ в общем случае вычисляется для всех типов s -, p -, d -, f -электронных облаков, но для парного потенциала рассматриваются только сферически симметричные электронные s -орбитали

$$\rho_i^{a(0)}(r_{ij}) = \rho_{i0} \exp \left[-\beta_i^{(0)} \left(\frac{r_{ij}}{r_i^0} - 1 \right) \right], \quad (6)$$

где r_i^0 – расстояние до ближайшего соседа в монокристаллической структуре, характерной для химического типа данного атома; $\beta_i^{(0)}$ – эмпирический параметр модели.

Более подробно математическая постановка задачи, применительно к многослойным наносистемам приведена в работе авторов [19].

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим результаты моделирования процессов модификации поверхности при формировании нанопленок для многослойной наносистемы на основе кобальта и ниобия. Структура исследуемой наносистемы, полученной экспериментально магнетронным напылением в условиях глубокого вакуума в работе [29], представлена рис. 2. Ферромагнитные нанопленки кобальта, разделенные тонкими сверхпроводящими слоями ниобия, образуют структуру со спиновым вентилем, которая эффективно может быть использована при изготовлении устройств памяти и других электромагнитных преобразователей. Цифрами на рис. 2 рядом с элементами в слоях обозначена толщина нанопленок в нанометрах.

В настоящей работе рассматривается формирование первых четырех нанопленок чередующегося состава. Одним из регулирующих технологических параметров является температура подложки, поэтому в работе рассматривается диапазон температур 300 – 800 К.

Рис. 2. Схематическая структура многослойного нанокompозита на основе кобальта и ниобия, обладающего спиновым вентилем

Ранее в работе [19] представлены детальные теоретические исследования процессов формирования и структуры нанопленок, образующихся в результате магнетронного напыления, а также приведены размерные параметры образца и длительности стадий осаждения атомов. Анализ состава слоев наносистемы осуществлялся последовательно в слоях толщиной 0.1 нм. На рис. 3 (построенного на основе работы [19]) приведены графики изменения процентной доли атомов ниобия и кобальта по отношению к общему числу атомов в слое нанокompозита в котором выполняется расчет.

Рис. 3. Относительный послойный состав нанокompозита на основе кобальта и ниобия, сформированного при различных температурах подложки

Из рисунка видно, что интерфейс между слоями наносистемы не является “идеальным”. Также как и в эксперименте (рис. 1), не существует четкой границы атомов между слоями наносистемы и наблюдается взаимное проникновение атомов одного контактирующего слоя в другой. Отметим, что для разных типов осаждаемых атомов наблюдается разная структура интерфейса. При осаждении кобальта на ниобий наблюдается более четкая граница слоев, чем в случае осаждения ниобия на поверхность кобальта. Это объясняется более сильными связями между атомами ниобия чем между атомами кобальта. Поэтому слои из ниобия более устойчивы при осаждении на них атомов кобальта. Они меньше подвергаются разрушениям и деформациям при осаждении следующих слоев. При осаждении ниобия на поверхность кобальта наблюдается обратная картина. Поверхность слоя кобальта под действием атомом ниобия значительно деформируется и разрушается.

Из рис. 3 также видно, что структура и состав нанослоев и интерфейса между ними в значительной степени зависит от температуры подложки, на которую происходит осаждение. Повышение температуры подложки вызывает увеличение взаимного проникновения и

смешивания атомов соседних нанослоев вследствие ускорения диффузных процессов. Толщина интерфейса между первым слоем кобальта и ниобием составляет 1.3, 2.2 и 5.3 нм для температуры подложки 300, 500 и 800 К соответственно. Толщина интерфейса между слоем ниобия и вторым слоем кобальта составляет 0.7, 0.75 и 0.9 нм для температуры подложки 300, 500 и 800 К соответственно.

Следует обратить внимание, что осаждение на ровную поверхность подложки при осаждении первого нанослоя дает наиболее резкие границы между нанослоями. Если осаждение происходит на рельефную поверхность, толщина интерфейса значительно увеличивается.

Анализ результатов расчетов показывает, что подготовка или модернизация поверхности для повышения ее качества, на которую наносятся атомы следующего слоя наносистемы, очень актуальна для формирования качественного интерфейса между слоями. Технологии формирования многослойных наносистем должны включать данную операцию. В реальных технологических процессах удаление дефектов производится при помощи бомбардировки ионами, атомами или молекулами инертных газов, например, аргона. В некоторых случаях дополнительная обработка осуществляется для удаления окисленных поверхностных слоев с целью дальнейшего улучшения сцепления нанопленок разного состава между собой.

Рассмотрим в качестве варианта модернизации поверхности удаление (срез) дефектной слоя, содержащего атомы разных материалов таким образом, чтобы последующее осаждение происходило на ровную поверхность, сформированную после среза дефектов. Места срезов поверхностного слоя кобальта (место среза первой пленки) и поверхностного слоя ниобия (место среза второй пленки) показаны пунктирными линиями на рис. 3. Нанопленка кобальта срезалась на 1.25 нм, нанопленка ниобия – на 1.0 нм. В дальнейшем моделирование выполнялось при тех же технологических режимах, как и без подготовки поверхности осаждения.

Результаты моделирования осаждения атомов на обработанные поверхности (после удаления дефектного слоя) в виде графиков относительного послойного состава нанокompозита на основе кобальта и ниобия после среза слоя кобальта и ниобия нанопленок представлены на рис. 4, а и рис. 4, б соответственно.

Рис. 4. Относительный послойный состав нанокompозита после среза слоя кобальта (а) и ниобия (б)

Как показали расчеты рис. 4, а, срез нанопленки кобальта на формирование интерфейса кобальт-ниобий существенного влияния не оказывает. Толщина интерфейса между слоем кобальта и ниобия после удаления дефектной области составляет 1.2, 2.2 и 5.4 нм для температуры подложки 300, 500 и 800 К соответственно. Сравнивая с результатами моделирования формирования интерфейса кобальт – ниобий без удаления дефектного слоя, можно отметить, что они практически не отличаются. Таким образом, в данном случае модернизация поверхности кобальта неэффективна.

Результаты расчетов формирования интерфейса слоев ниобия и кобальта рис. 4, б показали, что после среза поверхности нанопленки ниобия, напротив, структура интерфейса значительно улучшилась, появились более четкие границы слоев. Толщина интерфейса между слоем ниобия и кобальта после удаления дефектной области составляет 0.3, 0.32 и 0.6 нм для температуры подложки 300, 500 и 800 К соответственно. Как следует из расчетов, толщина интерфейса уменьшилась в 2.33, 2.34 и 1.5 раза при температурах подложки 300, 500 и 800 К соответственно. Очевидно, что уменьшение толщины интерфейса наблюдается при всех рассмотренных температурах подложки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Моделирование процесса формирования интерфейса многослойной наносистемы Nb-Co показало, что качество границы и структура формируемых нанопленок в значительной степени зависит от подготовки поверхности для осаждения. Удаление (срез) дефектов с поверхности, как один из способов ее модернизации, может оказывать различное влияние на строение и морфологию формируемой наносистемы в зависимости от химического типа осаждаемых атомов. При осаждении атомов с более сильными связями на поверхность слоя, состоящего из атомов с менее сильными связями, модификация поверхности в виде предварительного удаления дефектного слоя малоэффективна. Как показали расчеты, в данном случае, даже осаждение атомов на ровную поверхность приводит к ее деформации, разрушению и формированию дефектов. Удаление (срез) дефектов с поверхности слоя и атомов с более сильными связями, чем у атомов, осаждаемых на поверхность нанослоя, весьма эффективно и заметно улучшает качество интерфейса. Отметим, что эффективность данной операции зависит от температуры.

Проведенные исследования могут быть использованы как средство предварительного выбора подходящих режимов и параметров технологических процессов изготовления многослойных наносистем, предсказания их структуры, а также применяться как потенциальные рекомендации для улучшения функциональных свойств, зависящих от морфологии интерфейса многослойной наносистемы.

Целью дальнейших исследований является поиск методов модификации поверхности, обеспечивающих высокое качество интерфейса независимо от атомарного состава поверхностного слоя и типа осаждаемых атомов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке проекта РНФ 20-62-47009 «Физические и инженерные основы вычислителей не фон Неймановской архитектуры на базе сверхпроводниковой спинтроники».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kumar M., Sandeep C. S., Kumar G., Mishra Y. K., Philip R., Reddy G. B. Plasmonic and nonlinear optical absorption properties of Ag:ZrO₂ nanocomposite thin films // Plasmonics, 2014, vol. 9, iss. 1, pp. 129-136.
2. Heiba Z. K., Mohamed M. B., Imam N. G. Fine-tune optical absorption and light emitting behavior of the CdS/PVA hybridized film nanocomposite // Journal of Molecular Structure, 2017, vol. 1136, pp. 321-329.
3. Yasmeen S., Iqbal F., Munawar T., Nawaz M. A., Asghar M., Hussain A. Synthesis, structural and optical analysis of surfactant assisted ZnO–NiO nanocomposites prepared by homogeneous precipitation method // Ceramics International, 2019, vol. 45, iss. 14, pp. 17859-17873.
4. Bayrakdar H. Electromagnetic propagation and absorbing property of ferrite-polymer nanocomposite structure // Progress In Electromagnetics Research M, 2012, vol. 25, pp. 269-281.
5. Arranz-Andrés J., Pulido-González N., Marín P., Aragón A. M., Cerrada M. L. Electromagnetic shielding features in lightweight PVDF-aluminum based nanocomposites // Progress In Electromagnetics Research B, 2013, vol. 48, pp. 175-196.

6. Tsai H. L., Schindler J. L., Kannewurf C. R., Kanatzidis M. G. Plastic superconducting polymer - NbSe₂ nanocomposites // *Chemistry of Materials*, 1997, vol. 9, iss. 4, pp. 875-878.
7. Palau A., Parvaneh H., Stelmashenko N. A., Wang H., Macmanus-Driscoll J. L., Blamire M. G. Hysteretic vortex pinning in superconductor-ferromagnet nanocomposites // *Physical Review Letters*, 2007, vol. 98, iss. 11, pp. 117003.
8. Zeng H., Li J., Liu J. P., Wang Z. L., Sun S. Exchange-coupled nanocomposite magnets by nanoparticle self-assembly // *Nature*, 2002, vol. 420, iss. 6914, pp. 395-398.
9. Dai Q., Xiao J. Q., Ren S. Solution processed MnBi-FeCo magnetic nanocomposites // *Nano Research*, 2016, vol. 9, iss. 11, pp. 3222-3228.
10. Puydinger dos Santos M. V., Barth S., Beron F., Pirota K. R., Pinto A. L., Sinnecker J. P., Moshkalev S., Diniz J. A., Utke I. Magnetoelectrical Transport Improvements of Postgrowth Annealed Iron-Cobalt Nanocomposites: A Possible Route for Future Room-Temperature Spintronics // *ACS Applied Nano Materials*, 2018, vol. 1, iss. 7, pp. 3364-3374.
11. Tanabe S., Miwa S., Mizuguchi M., Shinjo T., Suzuki Y., Shiraishi M. Spin-dependent transport in nanocomposites of Al q₃ molecules and cobalt nanoparticles // *Applied Physics Letters*, 2007, vol. 91, iss. 6, pp. 063123.
12. Liao L., Li X., Wang Y., Fu H., Li Y. Effects of surface structure and morphology of nanoclays on the properties of jatrophia curcas oil-based waterborne polyurethane/clay nanocomposites // *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2016, vol. 55, iss. 45, pp. 11689-11699.
13. Palermo X., Reyren N., Mesoraca S., Samokhvalov A. V., Collin S., Godel F., Sander A., Bouzehouane K., Santamaria J., Cros V., Buzdin A. I., Villegas J. E. Tailored flux pinning in superconductor-ferromagnet multilayers with engineered magnetic domain morphology from stripes to skyrmions // *Physical Review Applied*, 2020, vol. 13, iss. 1, pp. 014043.
14. Nagaosa N., Tokura Y. Topological properties, and dynamics of magnetic skyrmions // *Nature Nanotechnology*, 2013, vol. 8, iss. 12, pp. 899-911.
15. Koshibae W., Nagaosa N. Theory of antiskyrmions in magnets // *Nature Communications*, 2016, vol. 7, iss. 1, pp. 1-8.
16. Lenk D., Morari R., Zdravkov V. I., Ullrich A., Khaydukov Y., Obermeier G., Mueller C., Sidorenko A. S., K. von Nidda H.-A., Horn S., Tagirov L. R., Tidecks R. Full Switching FSF-type Superconducting Spin-Triplet MRAM-Element // *Physical Review B*, 2017, vol. 96, pp. 184521(1-18).
17. Lazar L., Westerholt K., Zabel H., Tagirov L. R., Goryunov Yu. V., Garif'yanov N. N., Garifullin I. A. Superconductor/ferromagnet proximity effect in Fe/Pb/Fe trilayers // *Physical Review B*, 2000, vol. 61, pp. 3711-3722.
18. Sidorenko A. S., Zdravkov V. I., Prepelitsa A. A., Helbig C., Luo Y., Gsell S., Schreck M., Klimm S., Horn S., Tagirov L. R., Tidecks R. Oscillations of the critical temperature in superconducting Nb/Ni bilayers // *Annalen der Physik (Leipzig)*, 2003, vol. 12, iss. 1-2, pp. 37-50.
19. Вахрушев А. В., Федотов А. Ю., Савва Ю. Б., Сидоренко А. С. Моделирование процессов формирования атомарной структуры сверхпроводящего спинового вентиля // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. 2020. № 2. С. 16-27.
20. Вахрушев А. В., Федотов А. Ю. Вероятностный анализ моделирования распределения структурных характеристик композиционных наночастиц, сформированных в газовой фазе // *Вычислительная механика сплошных сред*. 2008. Т. 1, № 3. С. 34-45.
21. Вахрушев А. В., Липанов А. М. Численный анализ атомной структуры и формы металлических наночастиц // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2007. Т. 47, № 10. С. 1774-1783.
22. 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 // *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2011, vol. 2, iss. 3, pp. 205-216.
23. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Yu., Vakhrushev A. A. Modeling of processes of composite nanoparticle formation by the molecular dynamics technique. Part 1. Structure of composite nanoparticles // *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2011, vol. 2, iss. 1, pp. 9-38.
24. 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 // *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2012, vol. 3, iss. 1, pp. 51-75.

25. Вахрушев А. В., Северюхин А. В., Федотов А. Ю., Валеев Р. Г. Исследование процессов осаждения нанопленок на подложку из пористого оксида алюминия методами математического моделирования // Вычислительная механика сплошных сред. 2016. Т. 9, №. 1. С. 59-72.
26. Vakhrushev A. V. Computational Multiscale Modeling of Multiphase Nanosystems. Theory and Applications. Waretown, New Jersey, USA: Apple Academic Press, 2017. 402 p.
27. Baskes M. I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities // Physical Review B, 1992, vol. 46, iss. 5, pp. 2727-2742.
28. 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.
29. 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.

Simulation of Forming Multilayer Interface Nanosystems Nb-Co

¹Vakhrushev A. V., ¹Fedotov A. Yu., ²Sidorenko A. S., ³Klenov N. V., ³Soloviev I. I.

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

²Orel State University named after I.S. Turgenev, Orel, Russia

³Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

SUMMARY. This paper presents the simulation of forming contact regions (interface) of the multilayer nanosystems niobium-cobalt. The morphology and composition of the interface of a multilayer nanosystem is investigated. It is shown that the morphology of the layer boundaries depends on the temperature of the substrate on which the deposition takes place and, to a large extent, is determined by the preparation of the surface for deposition. The paper considers the modification of the surface by removing defects from the surface of the nanolayer. Modeling of the process showed that the quality of the boundary and the structure of the formed nanofilms largely depend on the preparation of the surface for deposition. Removing (cutting) defects from the surface, as one of the methods of its modernization, can have a different effect on the structure and morphology of the formed nanosystem, depending on the chemical type of the deposited atoms. When atoms with stronger bonds are deposited on the surface of a layer consisting of atoms with less strong bonds, surface modification in the form of preliminary removal of the defect layer is ineffective. Calculations showed that in this case, even the deposition of atoms on a flat surface leads to its deformation, destruction, and the formation of defects. Removal (cutting) of defects from the surface of the layer and atoms with stronger bonds than those of atoms deposited on the surface of the nanolayer is highly effective and noticeably improves the quality of the interface. Note that the efficiency of this operation depends on temperature. The conducted studies can be used as a means of preliminary selection of suitable modes and parameters of technological processes for the manufacture of multilayer nanosystems, predicting their structure, and also used as potential recommendations for improving the functional properties depending on the morphology of the interface of a multilayer nanosystem. The aim of further research is to search for methods of surface modification that provide a high interface quality regardless of the atomic composition of the surface layer and the type of deposited atoms.

KEYWORDS: multilayer nanosystems, interface, mathematical modeling, molecular dynamics.

REFERENCES

1. Kumar M., Sandeep C. S., Kumar G., Mishra Y. K., Philip R., Reddy G. B. Plasmonic and nonlinear optical absorption properties of Ag:ZrO₂ nanocomposite thin films. *Plasmonics*, 2014, vol. 9, iss. 1, pp. 129-136. <https://doi.org/10.1007/s11468-013-9605-z>
2. Heiba Z. K., Mohamed M. B., Imam N. G. Fine-tune optical absorption and light emitting behavior of the CdS/PVA hybridized film nanocomposite. *Journal of Molecular Structure*, 2017, vol. 1136, pp. 321-329. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.02.020>
3. Yasmien S., Iqbal F., Munawar T., Nawaz M. A., Asghar M., Hussain A. Synthesis, structural and optical analysis of surfactant assisted ZnO–NiO nanocomposites prepared by homogeneous precipitation

- method. *Ceramics International*, 2019, vol. 45, iss. 14, pp. 17859-17873. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.06.001>
4. Bayrakdar H. Electromagnetic propagation and absorbing property of ferrite-polymer nanocomposite structure. *Progress In Electromagnetics Research M*, 2012, vol. 25, pp. 269-281. <https://doi.org/10.2528/PIERM12072303>
5. Arranz-Andrés J., Pulido-González N., Marín P., Aragón A. M., Cerrada M. L. Electromagnetic shielding features in lightweight PVDF-aluminum based nanocomposites. *Progress In Electromagnetics Research B*, 2013, vol. 48, pp. 175-196. <https://doi.org/10.2528/PIERB12121109>
6. Tsai H. L., Schindler J. L., Kannewurf C. R., Kanatzidis M. G. Plastic superconducting polymer - NbSe₂ nanocomposites. *Chemistry of Materials*, 1997, vol. 9, iss. 4, pp. 875-878. <https://doi.org/10.1021/cm960516a>
7. Palau A., Parvaneh H., Stelmashenko N. A., Wang H., Macmanus-Driscoll J. L., Blamire M. G. Hysteretic vortex pinning in superconductor-ferromagnet nanocomposites. *Physical Review Letters*, 2007, vol. 98, iss. 11, pp. 117003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.117003>
8. Zeng H., Li J., Liu J. P., Wang Z. L., Sun S. Exchange-coupled nanocomposite magnets by nanoparticle self-assembly. *Nature*, 2002, vol. 420, iss. 6914, pp. 395-398. <https://doi.org/10.1038/nature01208>
9. Dai Q., Xiao J. Q., Ren S. Solution processed MnBi-FeCo magnetic nanocomposites. *Nano Research*, 2016, vol. 9, iss. 11, pp. 3222-3228. <https://doi.org/10.1007/s12274-016-1200-0>
10. Puydinger dos Santos M. V., Barth S., Beron F., Pirota K. R., Pinto A. L., Sinnecker J. P., Moshkalev S., Diniz J. A., Utko I. Magneto-electrical Transport Improvements of Postgrowth Annealed Iron-Cobalt Nanocomposites: A Possible Route for Future Room-Temperature Spintronics. *ACS Applied Nano Materials*, 2018, vol. 1, iss. 7, pp. 3364-3374. <https://doi.org/10.1021/acsanm.8b00581>
11. Tanabe S., Miwa S., Mizuguchi M., Shinjo T., Suzuki Y., Shiraishi M. Spin-dependent transport in nanocomposites of Al q₃ molecules and cobalt nanoparticles. *Applied Physics Letters*, 2007, vol. 91, iss. 6, pp. 063123. <https://doi.org/10.1063/1.2769748>
12. Liao L., Li X., Wang Y., Fu H., Li Y. Effects of surface structure and morphology of nanoclays on the properties of jatropha curcas oil-based waterborne polyurethane/clay nanocomposites. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2016, vol. 55, iss. 45, pp. 11689-11699. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.6b02527>
13. Palermo X., Reyren N., Mesoraca S., Samokhvalov A. V., Collin S., Godel F., Sander A., Bouzehouane K., Santamaria J., Cros V., Buzdin A. I., Villegas J. E. Tailored flux pinning in superconductor-ferromagnet multilayers with engineered magnetic domain morphology from stripes to skyrmions. *Physical Review Applied*, 2020, vol. 13, iss. 1, pp. 014043. <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.13.014043>
14. Nagaosa N., Tokura Y. Topological properties, and dynamics of magnetic skyrmions. *Nature Nanotechnology*, 2013, vol. 8, iss. 12, pp. 899-911. <https://doi.org/10.1038/nnano.2013.243>
15. Koshibae W., Nagaosa N. Theory of antiskyrmions in magnets. *Nature Communications*, 2016, vol. 7, iss. 1, pp. 1-8. <https://doi.org/10.1038/ncomms10542>
16. Lenk D., Morari R., Zdravkov V. I., Ullrich A., Khaydukov Y., Obermeier G., Mueller C., Sidorenko A. S., K. von Nidda H.-A., Horn S., Tagirov L. R., Tidecks R. Full Switching FSF-type Superconducting Spin-Triplet MRAM-Element. *Physical Review B*, 2017, vol. 96, pp. 184521(1-18). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.184521>
17. Lazar L., Westerholt K., Zabel H., Tagirov L. R., Goryunov Yu. V., Garif'yanov N. N., Garifullin I. A. Superconductor/ferromagnet proximity effect in Fe/Pb/Fe trilayers. *Physical Review B*, 2000, vol. 61, pp. 3711-3722. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.3711>
18. Sidorenko A. S., Zdravkov V. I., Prepelitsa A. A., Helbig C., Luo Y., Gsell S., Schreck M., Klimm S., Horn S., Tagirov L. R., Tidecks R. Oscillations of the critical temperature in superconducting Nb/Ni bilayers. *Annalen der Physik (Leipzig)*, 2003, vol. 12, iss. 1-2, pp. 37-50. <https://doi.org/10.1002/andp.200310005>
19. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Yu., Savva Yu. B., Sidorenko A. S. Modelirovanie processov formirovaniya atomarnoy struktury sverhprovodjashhego spinovogo ventilja [Modeling the processes of formation of the atomic structure of a superconducting spin valve]. *Vestnik Permskogo nacional'nogo issledovatel'skogo politehnicheskogo universiteta. Mehanika* [Bulletin of the Perm National Research Polytechnic University. Mechanics], 2020, iss. 2, pp. 16-27. <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2020.2.02>
20. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Yu. Veroyatnostnyj analiz modelirovaniya raspredeleniya strukturnykh harakteristik kompozicionnykh nanochastic, sformirovannykh v gazovoj faze [Probabilistic

analysis of modeling the distribution of structural characteristics of composite nanoparticles formed in the gas phase]. *Vychislitel'naja mehanika sploshnyh sred* [Computational Continuum Mechanics], 2008, vol. 1, iss. 3, pp. 34-45. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2008.1.3.25>

21. Vakhrouchev A. V., Lipanov A. M. Numerical analysis of the atomic structure and shape of metal nanoparticles. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2007. vol. 47, no. 10, pp. 1702-1711. <https://doi.org/10.1134/S0965542507100107>

22. 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. *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2011, vol. 2, iss. 3, pp. 205-216. <https://doi.org/10.1615/NanomechanicsSciTechnolIntJ.v2.i3.20>

23. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Yu., Vakhrushev A. A. Modeling of processes of composite nanoparticle formation by the molecular dynamics technique. Part 1. Structure of composite nanoparticles. *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2011, vol. 2, iss. 1, pp. 9-38. <https://doi.org/10.1615/NanomechanicsSciTechnolIntJ.v2.i1.20>

24. 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. *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2012, vol. 3, iss. 1, pp. 51-75. <https://doi.org/10.1615/NanomechanicsSciTechnolIntJ.v3.i1.30>

25. Vakhrushev A. V., Severyukhin A. V., Fedotov A. Yu., Valeev R. G. Issledovanie processov osazhdeniya nanoplenok na podlozhku iz poristogo oksida aljuminija metodami matematicheskogo modelirovaniya [Investigation of deposition of nanofilms on a substrate of porous alumina using mathematical modeling]. *Vychislitel'naja mehanika sploshnyh sred* [Computational Continuum Mechanics], 2016, vol. 9, iss. 1, pp. 59-72. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2016.9.1.6>

26. Vakhrushev A. V. *Computational Multiscale Modeling of Multiphase Nanosystems. Theory and Applications*. Waretown, New Jersey, USA: Apple Academic Press, 2017. 402 p. <https://doi.org/10.1201/9781315207445>

27. 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>

28. 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>

29. 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>

Вахрушев Александр Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий отделом «Моделирование и синтез технологических структур» УдмФИЦ УрО РАН, 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, тел. (3412) 21-45-83, e-mail: alezfed@gmail.com

Сидоренко Анатолий Сергеевич, доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент АНМ, заведующий научно-исследовательской лабораторией «Функциональные наноструктуры» ОГУ, тел. (373 22) 73-70-92, e-mail: anatoli.sidorenko@kit.edu

Кленов Николай Викторович, доктор технических наук, доцент, Кафедра атомной физики, физики плазмы и микроэлектроники, физический факультет МГУ, тел. (495) 939-25-88, e-mail: nvklenov@gmail.com

Соловьев Игорь Игоревич, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник НИИЯФ имени Д.В. Скобельцына МГУ, тел. (495) 939-25-88, e-mail: igor.soloviev@gmail.com