НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ
ІНСТИТУТ імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

Фізико-математичний факультет
Кафедра загальної фізики та моделювання фізичних процесів

«На правах рукопису»
УДК 538.91-022.532](043.3)

«До захисту допущено»
Завідувач кафедри
Віталій КОТОВСЬКИЙ
(підпис) (ім'я, прізвище)
“___”_____20___р.

Магістерська дисертація

зі спеціальності 104 – фізика та астрономія

Освітньо – професійна програма «Комп’ютерне моделювання фізичних процесів»

на тему: Розмірні ефекти трансформаціїї на поверхні одно- та двовимірних нанооб'єктів

Виконав (-ла): студент (-ка) другого (магістерського) рівня вищої освіти, групи ОФ-11МП
(шифр групи)

Березников Олексій Віталійович (підпис)
(ПІБ)

Науковий керівник проф., д. ф.-м. н, проф. Горшков В.М. _____
(посада, науковий ступінь, вчене звання, ПІБ) (підпис)

Консультант ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ СТИМУЛЬОВАНОЇ ПОВЕРХНЕВОЇ ДИФУЗІЇ д.ф-м. н., проф., Горшков В.М. _____
(науковий ступінь, вчене звання, , ПІБ) (підпис)

Рецензент проф., д.ф.-м.н., проф. Горобець О.Ю. _____
(посада, науковий ступінь, вчене звання, ПІБ) (підпис)

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації немає запозичень з праць інших авторів без відповідних посилань.
Студент _____
(підпис)

Київ – 2022 року

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут
імені Ігоря Сікорського»

Інститут/факультет фізико-математичний
(повна назва)

Кафедра загальної фізики та моделювання фізичних процесів
(повна назва)

Рівень вищої освіти – другий (магістерський) за освітньо-професійною програмою «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів»

Спеціальність 104 – фізика та астрономія

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри
_____ Віталій КОТОВСЬКИЙ
(підпис) (ім'я, прізвище)
«___»_____20___р.

ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студенту

Березникову Олексію Віталійовичу
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема дисертації Розмірні ефекти трансформації на поверхні одно- та двовимірних нанооб'єктів
Науковий керівник дисертації Горшков В'ячеслав Миколайович, доктор фіз.-мат. наук, професор.
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від «07 »листопада 2022 р. № 4071-с

2. Строк подання студентом дисертації 16.12.2022

3. Об'єкт дослідження *Фізичні механізми суттєвого впливу зовнішнього опромінення на динаміку морфології квазіодновимірних наносистем внаслідок інтенсифікації поверхневої дифузії атомів*

4. Предмет дослідження *Чисельне моделювання трансформації поверхонь металевих нанодротів внаслідок поверхневої дифузії атомів при підвищених температурах в режимах предплавлення без руйнування внутрішньої кристалічної структури*

5. Перелік завдань, які потрібно розробити (мінімум 4)

1. Встановити чутливість різних граней металів з гранецентрованою кристалічною ґраткою до штучної стимуляції поверхневої дифузії.

2. Порівняти отримані результати з випадком, коли поверхнева дифузія посилюється простим підвищенням температури

3. Виконати моделювання термічного розпаду нанодротів з різною орієнтацією внутрішньої кристалічної структури відносно їх осей і різним рівнем анізотропії густини поверхневої енергії.

4. Розкрити мікроскопічні фізичні фактори, які відповідають за різку зміну в динаміці нанодротів в залежності від рівня інтенсифікації поверхневої дифузії.

5. Провести термодинамічний аналіз явищ, що спостерігаються, та виконати кількісні оцінки їх показових параметрів на основі статистичної динаміки.

6. Розробити рекомендації для методів керованого синтезу квазі-одновимірних наносистем з розвиненою морфологією типу «зелена гусениця»

6. Перелік графічного (ілюстративного) матеріалу 17 рисунків

7. Орієнтовний перелік публікацій 1. V. N. Gorshkov,V.V. Tereshchuk , O.V. Bereznykov, G. K. Boiger, A. S. Fallah, Dynamics of Quasi-One-Dimensional Structures under Roughening Transition Stimulated by External Irradiation, Nanomaterials 2022, 12(9), 1411

2. Book Chapter : Prime Archives in Nanotechnology Self-Ordering in the Dynamics of Forming Periodic 1D-Structures Controlled by External Irradiation. V. N. Gorshkov, V. V. Tereshchuk, O. V. Bereznykov, G. K. Boiger and A. S. Fallah.

8. Консультанти розділів дисертації*

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
2	Проф. Горшков В.М.	01.09.2022	
3	Проф. Горшков В.М.	01.09.2022	

9. Дата видачі завдання 01.09.2022

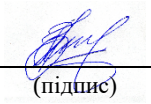
Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Строк виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Проходження інструктажу з техніки безпеки та охорони праці	01.09.2022	
2	Ознайомлення з місцем роботи	01.09.2022	
3	Вивчення літературних джерел,складання огляду літератури	02.09-15.09.2022	
4	Пошук і добір фактичних матеріалів, їх групування	07.09-15.09.2022	
5	Наукові дослідження за темою МД	17.09-25.10.2022	

6	Аналіз отриманих результатів	18.10-17.11.2022	
7	Підготовка розділів МД на основі отриманих даних по темі МД	17.11-23.11.2022	
8	Підготовка звіту з МД та оформлення презентацій до захисту	24.11.2022	
9	Надання роботи на перевірку керівнику МД	25.11.2022	
10	Отримання відгуку від керівника МД	27.11.2022	
11	Перевірка МД на плагіат	01.12.2022	
12	Формування плану публікацій по темі МД або документів по впровадженню (лист з підприємства або подання проекту впровадження в «КПІ ім. Ігоря Сікорського»)	03.12.2022	
13	Подання МД на рецензію	10.12.2022	
14	Здача МД на нормо-контроль (додержання вимог до оформлення МД)	14.12.2022	
15	Попередній захист МД	06.12.2022	
16	Виправлення матеріалу МД згідно з зауваженнями комісії на попередньому захисті	07.12.-13.12.2022	
17	Здача МД (друкований та електронний варіанти),Відгуку та Рецензії на кафедру загальної фізики та МФП	16.12.2022	
18	Відправка анотації МД на сайт кафедри загальної фізики та МФП	16.12.2022	
19	Остаточний захист МД	21.12.2022	
20	Відправка матеріалів МД у бібліотеку «КПІ ім. Ігоря Сікорського» та сайт кафедри загальної фізики та ФТТ	16.12.2022	

Студент _____ Березников О.В.

(підпис) (ініціали, прізвище)

Науковий керівник дисертації  Горшков В.М.

(підпис) (ініціали, прізвище)

* Консультантом не може бути зазначено наукового керівника

РЕФЕРАТ

Актуальність теми *Отримані результати можуть бути корисними в гнучкій електроніці, де широко використовуються впорядковані ланцюги наночастинок Au та Ag, а також радіально модульовані квазіодновимірні структури.*

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами *ФМФ-07 Динаміка та властивості багаточастинкових систем*

Об'єкт дослідження *Фізичні механізми суттєвого впливу зовнішнього опромінення на динаміку морфології квазіодновимірних наносистем внаслідок інтенсифікації поверхневої дифузії атомів*

Предмет дослідження *Чисельне моделювання трансформації поверхонь металевих нанодротів внаслідок поверхневої дифузії атомів при підвищених температурах в режимах предплавлення без руйнування внутрішньої кристалічної структури*

Мета роботи *Знайти можливості контрольованого синтезу періодично модульованих за перерізом квазіодновимірних наноструктур*

Методи дослідження *Числовий експеримент на основі Монте-Карло моделі*

Задачі дослідження

1. Встановити чутливість різних граней металів з гранецентрованою кристалічною ґраткою до штучної стимуляції поверхневої дифузії.
2. Порівняти отримані результати з випадком, коли поверхнева дифузія посилюється простим підвищенням температури.
3. Виконати моделювання термічного розпаду нанодротів з різною орієнтацією внутрішньої кристалічної структури відносно їх осей і різним рівнем анізотропії густини поверхневої енергії.
4. Розкрити мікроскопічні фізичні фактори, які відповідають за різку зміну в динаміці нанодротів в залежності від рівня інтенсифікації поверхневої дифузії.
5. Провести термодинамічний аналіз явищ, що спостерігаються, та виконати кількісні оцінки їх показових параметрів на основі статистичної динаміки.
6. Розробити рекомендації для методів керованого синтезу квазі-одновимірних наносистем з розвиненою морфологією типу «зелена гусениця»

Наукова новизна одержаних результатів *Розробити рекомендації для методів керованого синтезу квазі-одновимірних наносистем з розвиненою морфологією типу «зелена гусениця»*

Практичне значення одержаних результатів *Збудженні модуляції поверхні товстих нанодротів можна використати як зародки для синтезу впорядкованих ланцюжків вторинних наноголок в дифузійному режимі осадження вільних атомів*

Апробація результатів дисертації Зроблені доповіді на конференціях:

1. XX Всеукраїнській науково-практичній конференції «Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики»
2. X Міжнародній науково-практичній конференції «Нанотехнології та наноматеріали» (НАНО-2022)

Публікації автора МД *1. V. N. Gorshkov,V.V. Tereshchuk , O.V. Bereznykov, G. K. Boiger, A. S. Fallah, Dynamics of Quasi-One-Dimensional Structures under Roughening Transition Stimulated by External Irradiation, Nanomaterials 2022, 12(9), 1411*

2. Book Chapter : Prime Archives in Nanotechnology Self-Ordering in the Dynamics of Forming Periodic 1D-Structures Controlled by External Irradiation. V. N. Gorshkov, V. V. Tereshchuk, O. V. Bereznykov, G. K. Boiger and A. S. Fallah.

Ключові слова *нестійкості наноструктур, кінетична модель Монте-Карло, розпад нанодроту, анізотропія поверхневої енергії*

В роботі наведено: використаної літератури - 90 , сторінок: - 69 , рисунків - 17 .

ABSTRACT

Actuality of theme *The obtained results may be useful in flexible electronics, where ordered chains of Au and Ag nanoparticles, as well as radially modulated quasi-one-dimensional structures, are widely used.*

Relationship of work with scientific programs, plans, themes *FPM-07 Dynamics and properties of multiparticle systems*

Object of research *Physical mechanisms of significant external influence irradiation on the dynamics of the morphology of quasi-one-dimensional nanosystems due to the intensification of the surface diffusion of atoms*

Subject of research *Numerical modeling of the transformation of the surfaces of metal nanowires due to the surface diffusion of atoms at elevated temperatures in premelting regimes without destruction of the internal crystal structure*

Purpose of work *To find the possibilities of controlled synthesis of quasi-one-dimensional nanostructures periodically modulated in cross-section*

Research methods *A numerical experiment based on the Monte Carlo method*

Tasks of research *1. To establish the sensitivity of various faces of metals with a face-centered crystal lattice to artificial stimulation of surface diffusion.*

2. Compare the obtained results with the case when surface diffusion is enhanced by a simple increase in temperature.

3. Model the thermal decay of nanowires with different orientations of the internal crystal structure relative to their axes and different levels of surface energy density anisotropy.

4. To reveal microscopic physical factors that are responsible for a sharp change in the dynamics of nanowires depending on the level of intensification of surface diffusion.

5. Conduct a thermodynamic analysis of the observed phenomena and perform quantitative assessments of their indicative parameters based on statistical dynamics.

6. Develop recommendations for methods of controlled synthesis of quasi-one-dimensional nanosystems with a developed morphology of the "green caterpillar" type

Scientific novelty of the results *Develop recommendations for methods of controlled synthesis of quasi-one-dimensional nanosystems with developed "green caterpillar" morphology*

The practical significance of the results *Excitation modulations of the surface of thick nanowires can be used as seeds for the synthesis of ordered chains of secondary nanoneedles in the diffusion mode of deposition of free atoms*

Approbation of the results of the dissertation *Reports made at conferences:*
1. XX All-Ukrainian Scientific and Practical Conference "Theoretical and Applied Problems of Physics, Mathematics and Informatics"
2. X International Scientific and Practical Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" (NANO-2022)

Publications *1. V. N. Gorshkov,V.V. Tereshchuk , O.V. Bereznykov, G. K. Boiger, A. S. Fallah, Dynamics of Quasi-One-Dimensional Structures under Roughening Transition Stimulated by External Irradiation, Nanomaterials 2022, 12(9), 1411*

2. Book Chapter : Prime Archives in Nanotechnology Self-Ordering in the Dynamics of Forming Periodic 1D-Structures Controlled by External Irradiation. V. N. Gorshkov, V. V. Tereshchuk, O. V. Bereznykov, G. K. Boiger and A. S. Fallah.

Keywords *instability of nanostructures, kinetic Monte Carlo model, nanowire decay, surface energy anisotropy*

The article contains: used literature - 90 , pages: - 69, pictures - 17.

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ

МК	Монте-Карло
m_c	координаційне число
a	стала гратки
ГЦК	гранецентрована кубічна гратка
N_0	початкове число атомів в нанодроті/пластині
N_t	число атомів в нанодроті/пластині на кінцевій стадії процесу розпаду/синтезу
$N_{layer}(x,t)$	функція кількості атомів в атомних шарах, що перпендикулярні осі наностержня (напрямленій вздовж осі x) в момент часу t
α	безрозмірний параметр моделі, що характеризує енергію парної взаємодії
p	параметр моделі, що характеризує мобільність поверхневих атомів (коефіцієнт поверхневої дифузії)
r_0	початковий радіус нанодроту
r_{eff}	радіус нанодроту після встановлення рівноваги між нанодротом та паром вільних атомів
d	діаметр нанодроту
L	довжина нанодроту/пластини
h	висота нанокластера/пластини
w	ширина нанокластера/пластини
A_{slab}	площа поверхні пластини
A_{nw}	площа поверхні нанодроту
A_s	частина площі грані наноструктури, що приходиться на один поверхневий атом

n_{br}	число розірваних зв'язків на один поверхневий атом
σ	густина поверхневої енергії
Λ	середня відстань між центрами сформованих нанокрапель/нанокластерів
λ_{max}	гармоніка, що має максимальну амплітуду при перетворенні Фур'є функції $N_{layer}(x,t)$
λ_{cr}	мінімально можливе значення довжини хвилі поперечного перерізу нанодроту згідно з аналітичною моделлю Ніколса-Маллінза; значення довжини хвилі модуляцій для циліндричних систем з ізотропною густиною поверхневої енергії при яких поверхнева енергія системи не буде змінюватися з ростом амплітуди модуляцій
λ_{bead}	довжина хвилі збурень поперечного перерізу нанодроту до моменту злиття сусідніх областей уширення
Λ/r_0	параметр розпаду нанодроту
t_{br}	час розпаду нанодроту
$\langle n_b(t)\rangle$	середня кількість зв'язків, що припадають на один атом
κ_w	кривизна поверхні в зонах уширення
κ_n	кривизна поверхні в зонах звуження
Γ^+_{surf}	густина потоку атомів, що осаджуються на нанодріт
Γ^-_{subl}	густина потоку атомів, що сублімують з поверхні нанодроту
$\eta(z)$	відносна густина дифузійного потоку
n_0	безрозмірна одиниця концентрації вільних атомів
n_{free}	концентрація вільних атомів на границі обчислювальної області
β	коефіцієнт пропорційності ($\beta = n_{free}/n_0$)

$\langle n_s(x,t)\rangle_x$	середня лінійна густина осаджених атомів в областях між нанокластерами
l_{int}	відстань між нанокластерами
l_{clust}	середня довжина сформованих нанокластерів

Зміст

Вступ 14
РОЗДІЛ 1 Теоретичний аналіз 17
1.1 Використання нанооб'єктів 17
1.2 Термічна нестійкість 18
1.3. Вплив анізотропії густини поверхневої енергії на розпад нанодротів 19
1.4 Числова модель 21
Висновки до розділу 1 33
РОЗДІЛ 2 ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИСТИМУЛЬОВАНОЇ ПОВЕРХНЕВОЇ ДИФУЗІЇ 35
2.1 Стимуляція ефекту roughening transition 35
2.2 Фізичні механізми стимульованого roughening transition 39
Висновки до розділу 2 46
РОЗДІЛ 3 РЕЗУЛЬТАТИ РОБОТИ 48
3.1 Двохмодовий режим трансформації 48
3.2 Одномодовий режим трансформації 50
3.3 Режим довгохвильових трансформацій 53
3.4 Практичне використання отриманих результатів. 54
Висновки до розділу 3 56
ВИСНОВКИ 58
Перелік джерел посилання 58

Вступ

Нанодроти з ГЦК, ОЦК, та кристалічною граткою типу алмазу (наприклад, Si та Ge-нанодроти) викликають все більший інтерес до їх використання. Завдяки їх хімічним та фізичним властивостям стає можливим їх використання у ряді хімічних, оптичних, оптоелектричних та електромеханічних приладах.

Наприклад, низький питомий опір золотих нанодротів робить їх майже ідеальними одновимірними провідниками, що дає змогу використовувати ці структури як з'єднувачі[1], тоді як завдяки своїй високій стабільності вольфрамові нанодроти є незамінними для таких застосувань, як інтелектуальні покриття[2], літій-іонні батареї[3] і каталізатори[4]. У той же час можливість налаштування ширини забороненої зони в кремнієвих нанодротах робить їх особливо придатними для застосування в оптоелектроніці[5-6].

Також електричні та оптичні властивості квазіодновимірних наноструктур істотно залежать від морфології їх поверхні, яка може періодично змінюватися вздовж осі. Зокрема, сучасні методи синтезу наноструктур дають змогу створювати одновимірні нанодроти «ядро-оболонка» з різною морфологією поверхні, які зараз використовуються для перетворення сонячної енергії та електрохімічного накопичення енергії. Крім того, сучасні методи синтезу нанодротів дозволяють налаштовувати періодичність модуляції діаметра та анізотропію поперечного перерізу нанодротів, що дозволяє виготовляти одновимірні структури з різною морфологією поверхні[7-9]. Однак, синтез нанодротів з бажаними морфологічними ознаками, як, наприклад, висока періодичність синтезованих гетероструктур, на сьогоднішній день залишається надзвичайно складною задачею.

У даній роботі пропонується новий метод синтезу періодично модульованих структур. Даний метод може бути реалізован на основі двох

рушійних фізичних факторів. Перший з них це розпад нанодроту при підвищених температурах, що є значно нижчими за температуру плавлення. Другим фактором, згаданим вище, є ефект стимулювання поверхневої дифузії атомів(roughening transition effect – RT). Якщо температура системи перевищує певне критичне значення ($T > T_k$), то на гладкій кристалічній грані виникають періодичні «горби та порожнини».

В проведених дослідженнях, вивчення процесів дезінтеграції та синтезу проводиться на основі кінетичного методу Монте-Карло. Даний підхід позбавлений недоліків присутніх в більшості аналітичних моделей, не вимагає високих затрат часу, та дозволяє отримати глибоке розуміння ролі різних факторів у кінетиці процесів розпаду нанодротів і у синтезі наноструктур типу ядро-оболонка та їх впливу на самоорганізацію елементів досліджуваних систем.

Встановлення основних фізичних механізмів в кінетиці нанодротів при підвищених температурах в режимах як розпаду так і синтезу нанокластерів на їх поверхнях дозволить розробити рекомендації по забезпеченню контролю над процесами реструктуризації досліджуваних багаточастинкових квазіодновимірних систем та отримати нанооб'єкти з бажаними геометричними параметрами, та фізичними властивостями. Існуючі аналітичні моделі досить грубо описують дезінтеграцію наностержнів оскільки в їх основу покладено припущення, що густина поверхневої енергії нанодроту є ізотропною, модуляція поверхні нанодроту має строго синусоїдальну форму, а сублімація та десублімація атомів не враховуються при описанні процесу. Дослідження термічної нестійкості та процесів нуклеації нанокластерів на поверхнях нанодротів методами молекулярної динаміки також не дало бажаних результатів, оскільки обчислювальні можливості не дозволяють розраховувати кінетику систем розміром до 10^6 атомів. В проведених дослідженнях, вивчення процесів дезінтеграції та синтезу проводиться на основі кінетичного методу Монте-Карло. Даний підхід позбавлений недоліків присутніх в більшості аналітичних моделей, не

вимагає високих затрат часу, та дозволяє отримати глибоке розуміння ролі різних факторів у кінетиці процесів розпаду нанодротів і у синтезі наноструктур типу ядро-оболонка та їх впливу на самоорганізацію елементів досліджуваних систем.

РОЗДІЛ 1 Теоретичний аналіз

1.1 Використання нанооб’єктів

Нанооб’єкти – мікпоскопічні об’єкти розміри яких хоча в одному вимірі знаходиться в нанодіапазоні. Як правило це відповідає розмірам від 1 до 100 нм. Нанооб’єкти мають багато цікавих властивостей, які не спостерігаються в масових або тривимірних матеріалах.

Зокрема, механічні та електричні властивості золотих нанодротів призвели до їх використання для виявлення біоелектричних сигналів.[10–12] У той же час можливість налаштування ширини забороненої зони в кремнієвих нанодротах робить їх особливо придатними для застосування в оптоелектроніці.[13,14] Крім того, Сучасні методи синтезу нанодротів[15–20] дозволяють налаштовувати періодичність модуляції діаметра та анізотропію поперечного перерізу нанодротів, що дозволяє виготовляти 1D-структури з різною морфологією поверхні. Наприклад, велика розтяжність кремнієвих нанодротяних пружин[21], виготовлених за допомогою низькотемпературної тонкоплівкової технології, робить їх ідеальними кандидатами на будівельні блоки біо/механічних датчиків.[22–26] Однак через велике співвідношення поверхні до об’єму, нанодроти демонструють низьку термостабільність і розпадаються на ізомерні наночастинки при температурах перед плавленням.[27–30] З одного боку, це явище може значно погіршити оптоелектричні властивості пристроїв. З іншого боку, нестабільність нанодроту можна використовувати для виготовлення довгих ланцюгів ізомерних наночастинок, які можна використовувати для побудови плазмонних хвилеводів, здатних транспортувати електромагнітну енергію нижче межі дифракції.[31,32]

Обмеження звуку крихітною областю в твердих тілах може бути корисним для визначення суміжних газів або наночастинок. Для цієї мети вже існують датчики на основі нанорозмірних граток, які генерують і виявляють поверхневі акустичні хвилі.

1.2 Термічна нестійкість

Розпад нанодроту при його нагріванні на окремі кластери досліджувався в багатьох експерементальних[33-40] та теоретичних роботах[41-46]. В моделі Ніколса та Малінса[41] передбачалося, що густина поверхневої енергії, σ, ізотропна(не залежить від орієнтації бічної поверхні даного фрагмента відносно збереженої внутрішньої кристалічної структури нанодроту). За відсутності внутрішніх потоків динаміку морфології поверхні нанодроту визначає поверхнева дифузія атомів. Отриманий результат для довжини хвилі збурень, що утворюються з часом з максимальним інкрементом росту збігаються з класичною теорією Релея для рідких струменів: $\lambda_{max} = 9.02\, r_{nw}$, де r_{nw} початковий радіус нанодроту[41, 47]. Розпад нанодроту на нанокластери, об'єми яких відповідають об'єму ділянки вихідної нанонитки довжиною λ_{max}, справді спостерігалися в експерементальних роботах. Проте в чисельних роботах відмічалося значне відхилення від передбачення теорії Ніколса та Малінса($\lambda_{max}/r_{nw} \sim 25 - 30$).

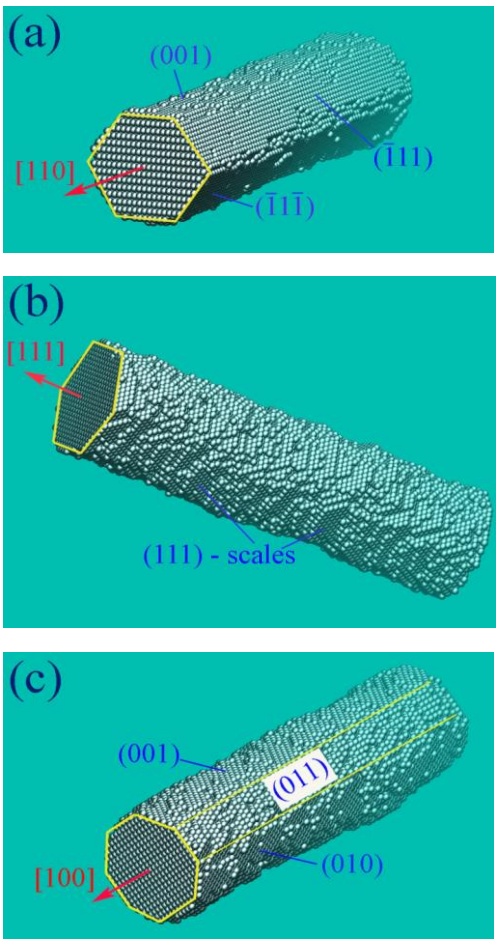


Рисунок 1.1. – Конфігурації бічної поверхні наностержня, коли його вісь орієнтована у: (a) [110] -, (b) [111] - і (c) [100]-напрямках (на рисунку показані фрагменти довгих нанодротів).

Причини таких відхилень пов'язані з анізотропією густини поверхневої енергії. Як було показано в попепедніх дослідженнях, на початкових етапах еволюції поверхня циліндричного нанодроту перебудовується з мінімізацією поверхневої енергії. На рис. показано структуру бічної поверхні деяких

нанодротів у результаті такого перетворення. Зазначена властивість зумовлює сильну залежність характеристик розпаду на нанокраплі від орієнтації осі нанодроту відносно його внутрішньої кристалічної структури.

У випадку орієнтації [110] (Рис. 1.1 (а)) бічна поверхня нанодроту представлена в основному гранями (111) з мінімальною густиною поверхневої енергії, σ. На (100) гранях σ також відносно низька. Розвиток нестійкості супроводжується формуванням областей звуження (перетяжок) зі схилами, які покриті гранями з більшими значеннями σ.

1.3. Вплив анізотропії густини поверхневої енергії на розпад нанодротів

Довжина хвилі поверхневих збурень з максимальним інкрементом наростання оцінюється з узагальненого рівняння руху для речовини у напівхвильовому відрізку струменя рідини/нанодроту (в області між мінімальним та максимальним значеннями радіусу поперечного перерізу) з масою $m_{\lambda/2}$ ($m_{\lambda/2}{\sim}\lambda$). Збільшення амплітуди початкових збурень радіуса, $\Delta r = -\varepsilon(t)\cos(2\pi x/\lambda)$, супроводжується зміною поверхневої енергії, ΔE_{surf}, аналізованого сегмента і зміщенням його центра мас, Δ_{cm} ($\Delta_{cm}{\sim}\varepsilon(t)\times\lambda$). Основне рівняння є добре відомим для дисипативних систем.

$$m_{\lambda/2}\left(\frac{d^2}{dt^2}\Delta_{cm} + \chi\frac{d}{dt}\Delta_{cm}\right) = -\frac{\partial\Delta E_{surf}}{\partial\Delta_{cm}}. \qquad (1.1)$$

У випадку нев'язкого струменя рідини коефіцієнт затухання, χ, дорівнює нулю ($\chi = 0$). У динаміці нанодроту інерціальним доданком, $\frac{d^2}{dt^2}\Delta_{cm}$, можна знехтувати.

Розрахунок ΔE_{surf} виконується для циліндра зі змінним радіусом уздовж його осі, X наступним чином

$$r(x, t=0) = r_0 - \left({\varepsilon^2}/{4r_0}\right) - \varepsilon\cos(kx), \quad k = 2\pi/\lambda, \ \varepsilon \ll r_0, \qquad (1.2)$$

Вираз (1.2) відповідає збереженню об'єму нанодроту / струменя з точністю ε^2. Будемо вважати, що густина поверхневої енергії, σ, залежить від кута, γ, між нормаллю до осі нанодроту і нормаллю до поверхні в даній точці. У цьому наближенні функція $\sigma(\gamma)$ є парною (для «симетричних» орієнтацій наностержня, що розглядаються), а для малих збурень, $\varepsilon(t)$, вона має наступний вигляд

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{1}{2}\frac{d^2\sigma}{d\gamma^2} \times \gamma^2 \approx \sigma_0(1 + \beta \times tan^2\gamma) = \sigma_0\left[1 + \beta \times \left(\frac{dr}{dx}\right)^2\right] =$$

$$= \sigma_0[1 + \beta \times (\varepsilon(t)k \times sinkx)^2], \quad (1.3)$$

де $\beta = \frac{1}{2}\frac{d^2}{d\gamma^2}\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)$. Таким чином маємо

$$\Delta E_{surf} \sim \int_0^{\lambda/2} r\sqrt{1 + (\varepsilon(t)k \times sinkx)^2}\,[1 + \beta \times (\varepsilon(t)k \times sinkx)^2]dx - r_0\lambda/2\ . \quad (1.4)$$

З точністю до ε^2

$$\Delta E_{surf} \sim \varepsilon^2\left[\hat{k}^2(1 + 2\beta) - 1\right]/\hat{k},\ \hat{k} = 2\pi r_0/\lambda. \quad (1.5)$$

Беручи до уваги що $m_{\lambda/2}{\sim}\lambda{\sim}1/\hat{k}$, $\varepsilon(t){\sim}\Delta_{cm}/\lambda \sim\Delta_{cm}\hat{k}$, та що $\frac{\partial \Delta E_{surf}}{\partial \Delta_{cm}} = \frac{\partial \Delta E_{surf}}{\partial \varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \Delta_{cm}}$, з рів. (1.11) можна отримати дисперсійні співвідношення

$\ddot{\varepsilon}(t)/\hat{k}^2 \sim \varepsilon(1 - \hat{k}^2)$ – для нев'язкого струменя рідини ($\beta = 0$), (1.6a)

$\chi \times \dot{\varepsilon}(t)/\hat{k}^2 \sim \varepsilon\left[1 - \hat{k}^2(1 + 2\beta)\right]$ – для наностержня. (1.6b)

Таким чином, інкремент росту, γ, ($\varepsilon(t) = \varepsilon_0 \exp(\gamma t)$) досягає свого максимального значення, γ_{max}, для відповідного значення хвильового вектора $k_{max} = 1/\sqrt{2(1 + 2\beta)}$ в обох розглянутих випадках. Інакше кажучи

$$\lambda_{max}/r_0 \approx 8.89 \times \sqrt{1 + 2\beta}. \quad (1.7)$$

У випадку, коли густина поверхневої енергії є ізотропною, $\beta = 0$, формула (1.7) дає добре відомий результат (отриманий Ніколсом і Маллінсом [39]).

Якщо прийняти за одиницю густину поверхневої енергії на грані типу (111), тобто $\sigma_{(111)}$=1, то згідно правила розірваного зв'язку для поверхневих енергій благородних металів [49] матимемо $\sigma_{(100)} = 1.155$ і $\sigma_{(110)} = 1.225$. Результати, представлені в [43] для Au, дають дещо різні значення густини поверхневої енергії, але у всіх випадках має місце співвідношення $\sigma_{(111)} < \sigma_{(100)} < \sigma_{(110)}$, що дозволяє оцінити значення λ_{max}/r_0 для нанодротів з різною орієнтацією на основі формули (1.7). Така оцінка дозволяє передбачити відхилення параметра λ_{max}/r_0 від класичного значення чи то в сторону більших чи то в сторону менших значень. Як буде показано в наступному розділі, в деяких випадках ці відхилення можуть значно перевищувати 9 (відповідно до експериментів [43,50,51]).

1.4 Числова модель

Застосовувана модель Монте-Карло (МС) була успішно використана для моделювання росту нерівноважної поверхні [52], синтезу наночастинок [53] та формування наностовпів і нанокластерів для спікання та каталізу [54–56]. У цьому розділі наведено лише основні поняття даного методу. У проведеному моделюванні обчислювальний домен має циліндричну форму довжини L і радіуса R. Нанодрот радіусом $r_{nw}(R \gg r_{nw})$, атоми якого займають ділянки гратки FCC-структури гратки, вставляється в область таким чином, щоб осі нанодроту і циліндра збігалися. Поверхневі атоми можуть підскочити до найближчих вакансій або відокремитися від наноструктури і стати вільними відповідно до ймовірних співвідношень, наведених нижче. Відокремлені атоми стрибають у випадкових напрямках у межах обчислювальної області з постійним кроком довжини l, величина якого дорівнює половині постійної решітки a. Стінки контейнера вважаються відбиваючими, тому кількість атомів у всій системі, що розглядається, є незмінною у часі. Вільні атоми можуть знову приєднуватися до поверхні кристалічної структури на вакантних ділянках, які примикають до місць,

зайнятих атомами наноструктури. Кожна ділянка представлена областю простору в елементарній комірці Вігнера–Зейтца в решітці. Коли атом стрибає в одну з клітин Вігнера-Зейтца, він розташовується в центрі цієї клітини і приєднується до наноструктури. Для моделювання динаміки поверхні наноструктур у моделі використовуються два параметри. Перший параметр α має свою величину як ε, масштабований на kT, де k — стала Больцмана, T — температура системи, а $\varepsilon < 0$ відображає локальне зв'язування сусідніх атомів:

$$\alpha = |\varepsilon| / kT \tag{1.8}$$

Наступний параметр, p, визначає коефіцієнт поверхневої дифузії і залежить від активаційного/енергетичного бар'єру Δ, визначеного таким чином:

$$p = exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) \tag{1.9}$$

Для системи, що складається з N_0 атомів, один крок МК складається з таких операцій, що повторюються N_0 разів: (1) випадковий вибір атома; (2) визначення його нового положення. Таким чином, в середньому кожен атом вибирається один раз за один крок МК. Якщо атом має n_{vac} незайняті сусідні ділянки решітки, він може перескочити в один з них з імовірністю p_{jump}, розрахованою таким чином

$$p_{jump} = p^{m0} \tag{1.10}$$

де m_0 являє собою кількість найближчих сусідів (зайнятих ділянок решітки). Якщо відбувається стрибок, нове положення атома вибирається з $n_{vac} + 1$ ділянок решітки (включається також початковий стан). «Напрямок» здійсненого стрибка вибирається випадковим чином відповідно

до ймовірностей цільових місць, $p_{target}\,(i)\,(i = 1,2,3,\ldots nvac + 1)$, які дорівнюють

$$p_{target}^{(i)} = \gamma \times exp\,(m_t^{(i)}\,|\varepsilon|/kT), \gamma = \sum_{j=1}^{n_{vac}+1} \exp\,(m_t^{(j)}\,\frac{|\varepsilon|}{kT}) \qquad (1.11)$$

де $m_t^{(j)}$ позначає кількість найближчих сусідніх атомів у передбачуваному новому стані, індексована (i). Отже, кінцеве положення визначається набором факторів Больцмана. У нашій моделі зміна температури відображається шляхом зміни параметра α (зверніть увагу, що $\alpha \sim 1/T$, використовуючи рівняння (1)). Зв'язок між параметрами α і p описується наступним рівнянням [56]:

$$p = (p_0)^{\alpha/\alpha 0} \qquad (1.12)$$

Гарне узгодження експериментальних результатів з нашими попередніми чисельними дослідженнями [47, 56-57] було отримано з використанням таких опорних значень для ГЦК ґратки: $\alpha_0 = 1{,}0$ і $p_0 = 0{,}7$. У подальшому чисельному моделюванні вплив зовнішнього опромінення на поверхневу дифузію атомів включається у збільшення параметра p, що відповідає за частоту стрибків. Розглянемо деякі технічні деталі застосовуваної моделі. При моделюванні розриву нанодротів ми робимо останні п’ять атомних шарів на обох кінцях нанодроту, що складаються із заморожених («нерухливих») атомів решітки. Це завдання, еквівалентне накладенню періодичних граничних умов, і проводиться для виключення так званих кінцевих ефектів [57,58] на ранніх стадіях процесу розпаду. Наша модель МК розглядає лише взаємодію атомів з їх найближчими сусідами. Ми не розглядаємо взаємодію атомів із сусідами другого чи вищого порядку, головним чином тому, що, згідно з експериментальними дослідженнями [52], вони вносять невеликий внесок у потенціал чи силу у випадку ГЦК-гратки. Крім того, при моделюванні динаміки нестійкої системи ми не вказуємо тип початкових збурень, оскільки вони розвиваються природним шляхом через

теплові флуктуації, властиві цій моделі. Перш ніж представити отримані результати, необхідно зробити наступне зауваження: ефект RT на плоскій кристалічній грані пов'язаний з утворенням кластерів з атомів, які перескочили з тієї ж грані в приповерхневий шар вакансій (позначаємо цей шар з індексом +1). Підвищення температури кристала призводить до зменшення ступеня анізотропії як частоти стрибків над поверхнею структури (збільшується параметр p), так і розподілу ймовірностей за можливими напрямками стрибків (параметр α зменшується). У цьому випадку конкурують два фізичні процеси. З одного боку, потік атомів від поверхневого шару 0 до шару +1 збільшується, збільшуючи щільність рухомих атомів у цьому шарі. З іншого боку, підвищення температури перешкоджає однорідній нуклеації в двовимірному/поверхневому «газі» цих атомів. Домінування першого фактора досягається при $T > T_k$ лише на виділених кристалічних гранях і визначає появу на них упорядкованих структур з характерним розміром l_{RT}. Враховуючи можливість розвитку такого впливу на бічній поверхні нанодроту, немає підстав порівнювати розміри фрагментів під час її розриву з класичним параметром $9r_{nw}$. Примітно, що для обраних орієнтацій нанодроту RT може не розвиватися на його бічній поверхні. У цьому випадку його динаміка буде відповідати прояву термічної нестабільності зі зміненим параметром p.

1.6. Аналіз розпаду нанодротів з орієнтаціями [100], [110] та [111]-типів при різних температурних режимах

Тут представлено результати чисельних експериментів для нанодротів з орієнтаціями осей [100], [110] та [111]-типів при різних температурах.

Розглянуто три температурні режими:

$$\text{«холодний» - } \alpha = 0.96 - 1.2,\ p = 0.71 - 0.65;$$
$$\text{«теплий» - } \alpha = 0.9,\ p = 0.725; \qquad (1.13)$$

«гарячий» - $\alpha = 0.8,\ p = 0.752.$

Вибрані параметри базуються на опорних значеннях, $\alpha_0 = 1$, $p_0 = 0.7$, та формулі (1.12). Варіація параметра α відповідає різним температурним режимам у попередніх експериментах ($T \approx 300^{\text{o}} - 700^{\text{o}}$ C). Діаметр дроту $d_0 = 10a - 12.5a$ (a - період ГЦК кристалічної гратки). Для золота $d_0 \sim 4 - 5\ nm$. Довжина нанодроту - $L = 60r_0 - 125r_0$.

Аналіз чисельних результатів буде розпочато з найцікавішого випадку, коли нанодріт орієнтований вздовж осі [110]. Як зазначалося в багатьох експериментальних роботах (наприклад, [43,50,51]), в цьому стані нанодріт є найбільш стійким до розриву і характеризується аномально великим значенням параметра розпаду $\Lambda/r_0 \sim 20 - 30$. Той факт, що довжина хвилі збурень, λ_{max}, радіусу нанодроту повинна перевищувати $9r_0$ безпосередньо перед початком розриву, випливає з формули (1.7) та ґрунтується на міркуваннях, які представлено нижче.

Відомо, що поверхня циліндричного нанодроту змінюється шляхом мінімізації вільної енергії на початкових етапах еволюції. Рис.1.1 ілюструє структуру бічної поверхні деяких нанодротів в результаті такого перетворення. У випадку орієнтації [110] (Рис. 1.1 (а)) бічна поверхня нанодроту представлена в основному гранями (111) з мінімальною густиною поверхневої енергії, σ. На (100) гранях σ також відносно низька. Розвиток нестійкості супроводжується формуванням областей звуження (перетяжок) зі схилами, які покриті гранями з більшими значеннями σ. Таким чином, середнє значення параметра β у виразі (1.7) є додатним, тобто $\beta > 0$, що відповідає збудженню довгохвильових модуляцій радіусу нанодроту: $\lambda_{max}/r_0 > 9$. Результати чисельних експериментів (Рис. 1.2) підтверджують цю попередню оцінку. Дані, представлені на Рис. 1.2, були отримані блокуванням випаровування атомів з поверхні наностержня ($P_{filter} = 0$). Тобто розвиток нестабільності пов'язаний лише з поверхневою дифузією, ефект якої враховувався при виведенні виразу (1.7).

Варто відмітити, що параметр розпаду, Λ/r_0, монотонно зменшується із збільшенням температури. Згідно з результатами, представленими на Рис. 1.2, відношення Λ/r_0 має значення близьке до 9 при високих температурах (Рис. 1.2C; $\Lambda/r_0 \approx 10$) і значно перевищує 9 в холодному режимі (Рис. 1.2A; $\Lambda/r_0 \approx 14.5$). Фізична інтерпретація цього експериментально

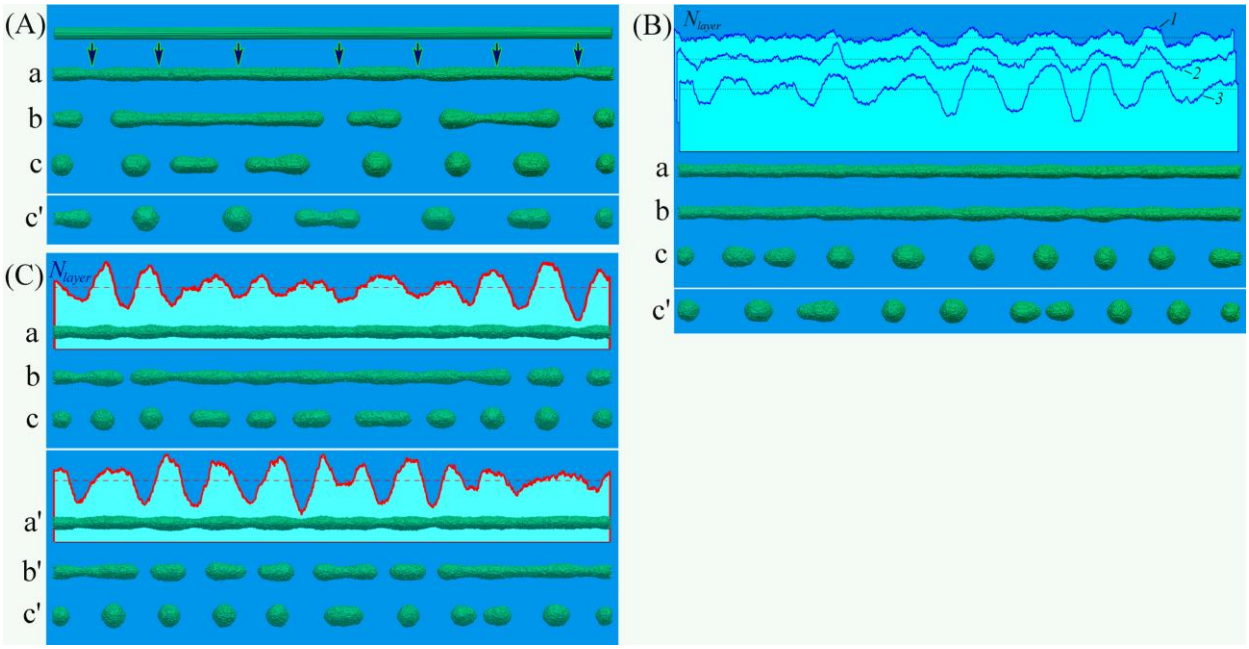


Рисунок 1.2 – Розпад нанодротів з [110]-орієнтацією; випаровування заблоковано; $L = 510$, $d_0 = 10$, число атомів в нанодроті на початку процесу $N_0 \approx 167400$.

(A) Холодний режим: $\alpha = 0.96$, $p = 0.71$; підрисунки (a), (b) та (c): $t = 7.5, 10.5, 13.5$ $(\times 10^6)$) МК кроків відповідно і $\Lambda/r_0 \approx 14.5$. Конфігурація (c′) - це результат іншої реалізації процесу в момент часу $t = 16.7 \times 10^6$ МК кроків.

(B) Теплий режим: $\alpha = 0.9$, $p = 0.725$; на підрисунках (a), (b) та (c): $t = 1.5,\ 3.0,\ 6.8$ $(\times 10^6)$ МК кроків відповідно. Верхня вставка показує розподіл $\widehat{N}_{layer}$ вздовж осі нанодроту при $t = 0.75, 1.5, 3.0$ $(\times 10^6)$. $\widehat{N}_{layer}$ - це кількість атомів в атомних шарах, які перпендикулярні осі наностержня. Пунктирними лініями показано кількість атомів в атомних шарах на початку процесу. Конфігурація (c′) є результатом іншої МК реалізації процесу в момент $t = 7.74 \times 10^6$ МК кроків та $\Lambda/r_0 \approx 11.3$.

(C) Гарячий режим: $\alpha = 0.8$, $p = 0.752$; на підрисунках (a), (b) та (c): $t = 1.2,\ 1.8,\ 2.4$ $(\times 10^6)$ МК кроків відповідно. Конфігурації (a′), (b′), and (c′) показують результати додаткових симуляцій процесу в моменти часу $t = 1.5,\ 2.1,\ 3.45$ $(\times 10^6)$ МК кроків відповідно, де $\lambda_{max}/r_0 \approx 9.7$, а $\Lambda/r_0 \approx 10$. Як на цьому малюнку верхні вставки показують розподіли $\widehat{N}_{layer}$ для конфігурацій (a).

спостережуваного факту [59] є досить простою у даній чисельній моделі. Частота стрибків зв'язаних атомів - яка локально визначається значенням $p_{jump} = p^{m_0} = \exp(-m_0 \times \triangle / kT)$ (див. підрозділ 1.4) - неоднорідна вздовж поверхні нанодроту (p_{jump} має мінімальне значення в областях уширення). При низьких температурах ця неоднорідність стає більш вираженою. В результаті, більша поверхнева активність атомів в областях звуження призводить до накопичення атомів перед зонами уширення і призводить до збільшення довжини хвилі поверхневих збурень.

Результати, представлені на Рис. 1.2, показують, що при довгохвильових збуреннях кількість нанокрапель після розпаду нанодроту збігається з числом періодів модуляції його перерізу, тобто $\Lambda = \lambda_{max}$. Однак зовсім інша картина спостерігається у випадку [100]-орієнтації (див. нижче), коли на етапі розпаду нанодроту розвинуті короткохвильові збурення поверхні зливаються в окремі нанокластери, що в результаті дає нерівність $\Lambda > \lambda_{max}$.

Варто відмітити, що значні зміни параметра розпаду, Λ/r_0, як функції температури спостерігаються в раніше опублікованих експериментальних роботах з Cu [59], коли температура зростає з $400\ ^{o}\mathrm{C}$ ($\Lambda/r_0 \approx 13-15$) до $500\ ^{o}\mathrm{C}$. При температурі в $500\ ^{o}\mathrm{C}$ діаметр утворених нанокрапель такий, що зазор між ними приблизно дорівнює їх діаметру. Для такого геометричного співвідношення параметр розпаду: $\Lambda/r_0 \approx 9-10$. Однак в експериментах з Au, про які повідомляється в роботах [43] та [51], спостережуване співвідношення Λ/r_0 становить $20-24$ (при $T \approx 500\ ^{o}\mathrm{C}$), а при $T \approx 400\ ^{o}\mathrm{C}$ воно має рекордно високе значення $\Lambda/r_0 \approx 30-35$. В даних чисельних експериментах подібні результати було отримано при врахуванні випаровування зв'язаних атомів з поверхні нанодроту (P_{filter}=1) (див. Рис. 1.3). Ефект обміну атомами між поверхнею наностержня та поверхневим шаром вільних атомів збільшує параметр Λ/r_{eff} з 10 до 16 у гарячому режимі та з 14,5 до 24-30 у холодному режимі.

Значне збільшення параметра Λ/r_{eff} (порівняйте результати Рис. 1.2 та Рис. 1.3) та чутливість цього параметра до температурних перепадів властиві лише у випадкові [110] - орієнтації. Абсолютно протилежними є характеристики розпаду нанодроту з [111] - орієнтацією. Якщо випаровування атомів з поверхні нанодроту заблоковано ($P_{filter} = 0$), то в

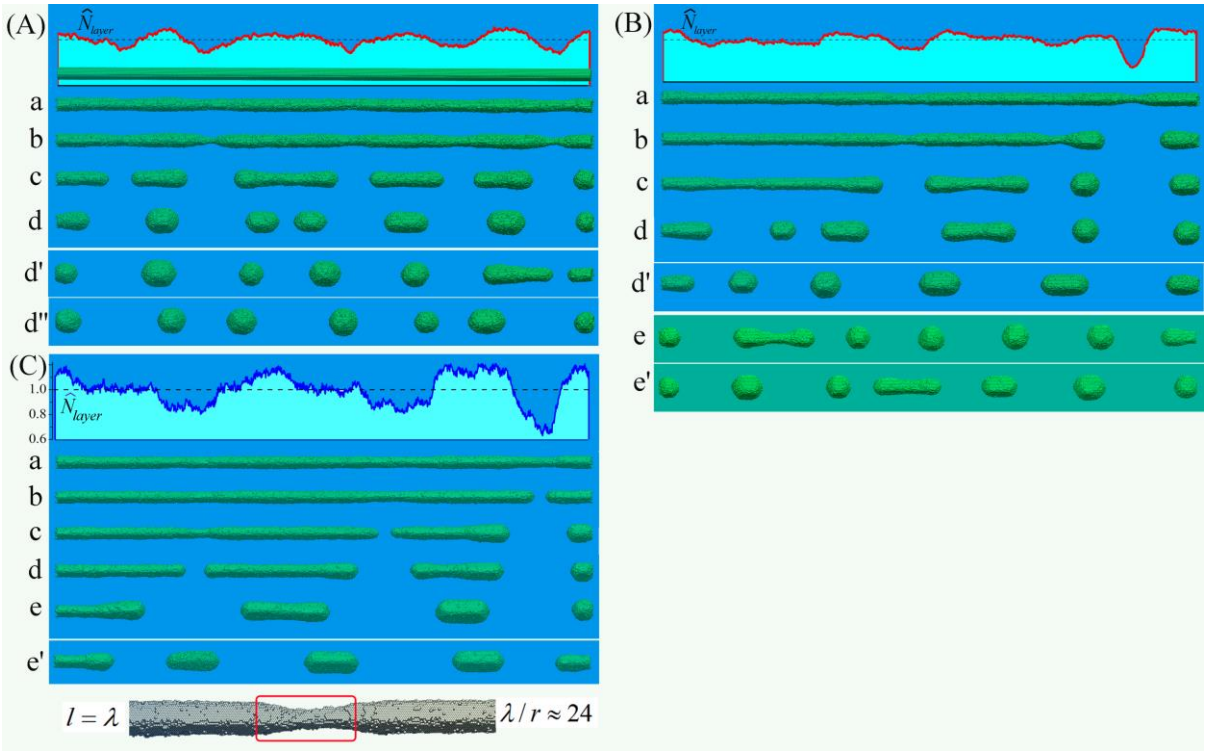


Рисунок 1.3. Розпад нанодроту з [110]-орієнтацією (L = 510). Для даних реалізацій ефект обміну атомами між поверхнею та приповерхневим шаром було враховано ($P_{filter} = 1$). Верхні вставки показують розподіли $\widehat{N}_{layer}$ для конфігурацій (a)

(A) Гарячий режим: $\alpha = 0.8$, $p = 0.752$; $d_0 = 10.9$, $N_0 \approx 182.5 \times 10^3$, $N_t \approx 168 \times 10^3$, та $d_{eff} \approx 10.4$; (a)-(d): $t = 2.1,\ 2.83,\ 3.7,\ 4.75 (\times 10^6)$ МК кроків. Конфігурації (d′) і (d′′) – результати двох інших реалізацій процесу в моменти часу $t = 5 \times 10^6$ і $t = 6.35 \times 10^6$ МК кроків, відповідно ($\Lambda/r_{eff} \approx 16$).

(B) Теплий режим: $\alpha = 0.9$, $p = 0.725$, $d_0 = 10.2$; $N_0 \approx 164.2 \times 10^3$, $N_t \approx 157.5 \times 10^3$, та $d_{eff} \approx 10$; (a)-(d): $t = 5.5, 8.0, 10.0, 13.3$ $(\times 10^6)$ МК кроків. Конфігурація (d′) – результат іншої симуляції процесу в момент часу $t = 11.5 \times 10^6$ МК кроків ($\Lambda/r_{eff} \approx 20$). Конфігурації (e) та (e′) – результати двох інших реалізацій, коли випаровування атомів з поверхні нанодроту було зменшено ($P_{filter} = 0.3$); (e): $t = 16.5 \times 10^6$; (e′): $t = 14.1 \times 10^6$ МК кроків.

(C) Холодний режим: $\alpha = 0.96$, $p = 0.71$; $d_0 = 10.25$, $N_0 \approx 173100$, $N_t \approx 167300$, та $d_{eff} = 10.1$; (a) - (e): $t = 12.0, 14.4, 17.4, 18.9, 24.5 (\times 10^6)$ МК кроків. Конфігурація (e′) – результат додаткової реалізації процесу в момент часу $t = 21 \times 10^6$ МК кроків ($\Lambda/r_{eff} \approx 24$). Нижня вставка показує фрагмент нанодроту в момент часу $t = 10.5 \times 10^6$ МК кроків.

теплому режимі $\Lambda/r_0 \approx 12.5$ (див. Рис. 1.4D). Врахування процесу сублімації атомів з поверхні ($P_{filter} = 1$) не збільшує (як це відбувається в [110] -орієнтації), а навпаки зменшує параметр розпаду до класичного значення $\Lambda/r_{eff} \approx 9$ незалежно від температури (див. Рис. 1.4A, B і C).

Настільки сильну відмінність результатів процесу розпаду, як показано нижче, можна пояснити на основі структурних особливостей бічної поверхні нанодроту у розглянутих випадках (для [110] та [111] -орієнтацій).

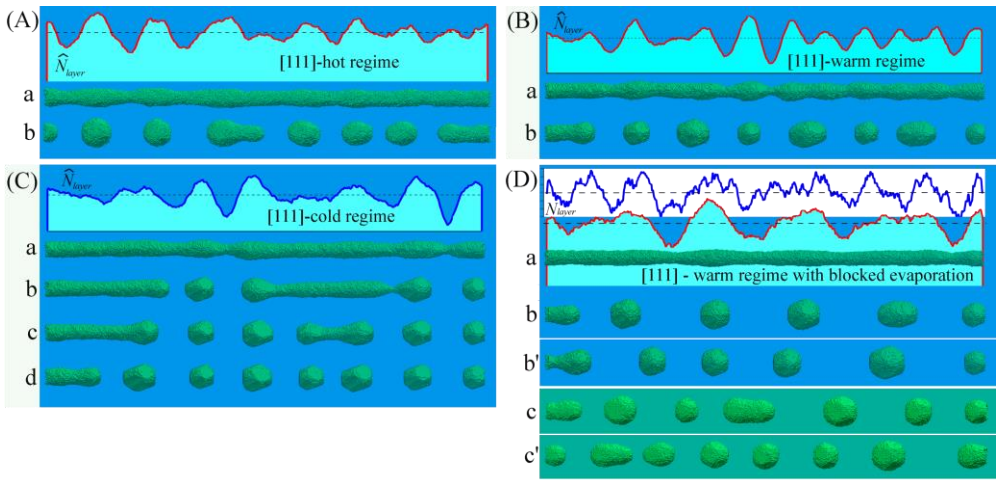


Рисунок 1.4. Розпад нанодроту вісь якого напрямлена вздовж [111]-напрямку ($L = 360$). Верхні вставки показують розподіли $\widehat{N}_{layer}$ для конфігурацій (a)

(A) Гарячий режим: $\alpha = 0.8$, $p = 0.752$; $d_0 = 12.3$, $N_0 \approx 171.2 \times 10^3$, і $N_t \approx 161.5 \times 10^3$; (a): $t = 1.2 \times 10^6$, та (b): $t = 2.25 \times 10^6$ МК кроків.

(B) Теплий режим: $\alpha = 0.9$, $p = 0.725$; $d_0 = 12$, $N_0 \approx 160 \times 10^3$ і $N_t \approx 156.3 \times 10^3$; (a): $t = 2.25 \times 10^6$, і (b): $t = 4.5 \times 10^6$ МК кроків.

(C) Холодний режим: $\alpha = 1.2$, $p = 0.65$; $d_0 = 12$, $N_0 \approx 160 \times 10^3$, і $N_t \approx 159.6 \times 10^3$; (a)-(d): $t = 24, 30, 36, 45$ ($\times 10^6$) МК кроків відповідно.

(D) Теплий режим з блокованим випаровуванням: $\alpha = 0.9$, $p = 0.725$; $d_0 = 11.5$ і $N_0 \approx 150 \times 10^3$; (a): $t = 13 \times 10^6$, та (b): $t = 24 \times 10^6$ МК кроків ($\Lambda/r_0 \approx 12.5$). Розподіли $\widehat{N}_{layer}$ вздовж нанодроту показані в моменти часу $t = 4.5 \times 10^6$ (блакитна крива; $0.85 \leq \widehat{N}_{layer} \leq 1.15$) та $t = 13 \times 10^6$ МК кроків. Конфігурація (b′) – результат іншої реалізації процесу в момент часу $t = 27 \times 10^6$ МК кроків. Конфігурації (c) і (c′) результати двох додаткових реалізацій зі зменшеним випаровуванням з поверхні нанодроту ($P_{filter} = 0.3$); (c): $t = 14.7 \times 10^6$, та (c′): $t = 10.2 \times 10^6$ МК кроків.

Густина потоку випаровування атомів з поверхні нанодроту, Γ_{subl}^{-}, є локальною характеристикою, яка в грубому наближенні залежить від середньої кривизни поверхні. Осадження вільних атомів (густина їх зворотного потоку, Γ_{surf}^{+}) залежить від розподілу кривизни поверхні вздовж всього нанодроту. Баланс цих потоків (Γ_{surf}^{+} та Γ_{subl}^{-}) є неоднорідним вздовж поверхні нанодроту. При синусоїдальних збуреннях радіуса провода, $\varepsilon \ll r_0$, в виразі (1.2), значення Γ_{surf}^{+} в зонах звуження є меншим, ніж в областях уширення, якщо довжина хвилі $\lambda \lesssim 10r_0$. У цьому випадку виникають умови для розвитку нестабільності, яка подібна до нестабільного росту оболонки під час дифузійного осадження матеріалу на нанодріт [60] (цей тип нестійкості може бути якісно представлений моделлю, розробленою Маллінсом та Секеркою [61]). Саме цей механізм спостерігається в динаміці нанодроту з орієнтацією [111]. Дуже важливим фактором є те, що поверхня нанодроту до розпаду має лускату структуру в зонах уширення (див. Рис. 1.1 (b)), які складені з фрагментів граней [111]-типу (результат roughening transition [62]). Вільні атоми, які осіли на такій поверхні, "захоплюються" численними кутовими вакансіями, що сприяє подальшому перерозподілу атомів до областей уширення та розвитку нестійкості (див. Рис. 1.4A, B та C). Відсутність такого механізму переносу атомів в режимі блокованого випаровування ($P_{filter} = 0$) призводить до очікуваного результату, який може бути отриманий на основі виразу (1.7).

Слід зазначити, що "луската" бічна поверхня [111]-типу (Рис. 1.1(b)) має досить низьку густину поверхневої енергії. У той же час схили перетяжок, що виникають на кінцевих стадіях процесу розпаду, сформовані фрагментами [111] та [100] граней [63], які мають більше значення σ, що відповідає $\beta > 0$ в виразі (1.7) і, отже, $\lambda_{max} > 9$. Цей якісний прогноз узгоджується з даними Рис. 1.11D: $\Lambda/r_0 \approx 12.5$.

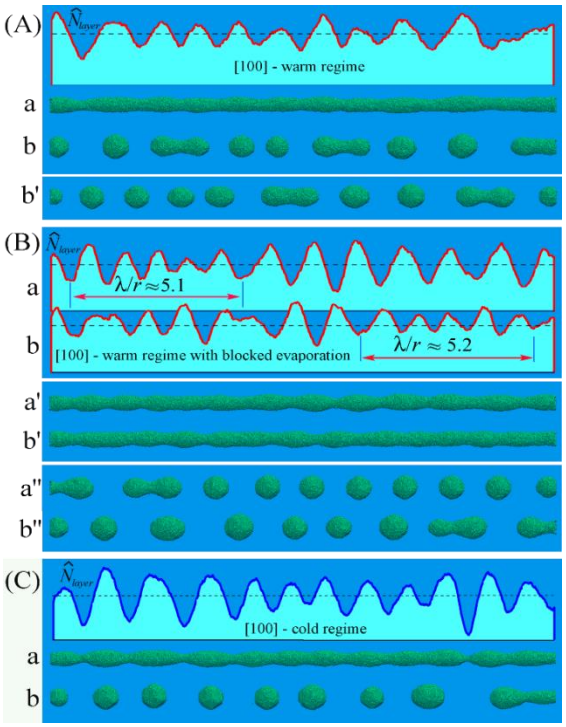


Рисунок 1.5. Розпад нанодроту з [100]-орієнтацією. Верхні вставки показують розподіли $\widehat{N}_{layer}$ для конфігурацій (a) **(A) та (B)** – теплий режим: $\alpha = 0.9$ та $p = 0.725$; $L = 450$, $d_0 \approx 12.5$, і $N_0 \approx 215.5 \times 10^3$. **(A)** $N_t \approx 199.6 \times 10^3$; (a) $t = 1.8 \times 10^6$ і (b) $t = 3.7 \times 10^6$ МК кроків. Конфігурація (b') –результат додаткової реалізації процесу в момент часу $t = 4 \times 10^6$ МК кроків. **(B)** Розподіли $\widehat{N}_{layer}$ вздовж нанодротів для двох реалізацій процесу: (a) $t = 2.3 \times 10^6$ та (b) 2.5×10^6 МК кроків. На конфігураціях (a') і (b') показана форма нанодротів в моменти часу $t = 2.3 \times 10^6$ і 2.5×10^6 МК кроків , відповідно. На конфігураціях (a'') і (b'') показані фінальні стадії процесу розпаду: (a'') $t = 7.3 \times 10^6$ і (b'') $t = 7.8 \times 10^6$ МК кроків. **(C)** Холодний режим: $\alpha = 1.2$ і $p = 0.65$; $L = 450$, $d_0 \approx 12$, $N_0 \approx 199 \times 10^3$, та $N_t \approx 197.5 \times 10^3$; (a) $t = 14 \times 10^6$, та (b) $t = 32 \times 10^6$ МК кроків.

Повертаючись до аналізу [110] -нанодротів, зауважу, що на противагу [111] -нанодротам ефект обміну атомами між поверхнею та приповерхневим шаром вільних атомів призводить до значного збільшення параметра Λ/r_{eff} (див. Рис.1.3). У цьому випадку бічна поверхня нанодроту в основному складається з граней [111]-типу (див. Рис. 1.1 (a) та нижню вставку на Рис. 1.3C). Атоми, що осіли на переважно плоскі грані [111]-типу, мають лише три зв'язки і високий коефіцієнт поверхневої дифузії. Якщо відстань між сусідніми областями звуження незначна, то у осівших атомів не буде достатньо часу для утворення нових скупчень на бічних гранях. В результаті, потоки поверхневої дифузії зв’язаних атомів, спрямовані в область звуження зліва і справа (див. нижню вставку на Рис. 1.3C, червоний квадрат), можуть призвести до її скорочення, що зменшує інтенсивність процесу

випаровування в цій області. Таким чином, нестабільність може виникнути лише для більш витягнутих областей звуження та уширення, ніж у випадку заблокованого випаровування. Також було проаналізовано розпад [100]-нанодроту. Результати, представлені на Рис. 1.5, показують, що в цьому випадку спостерігається слабка реакція параметра розпаду Λ/r_{eff} на коливання температури та ефекти обміну атомами між поверхнею нанодроту та паром вільних атомів. Структура бічної поверхні наностержня до розпаду приведена на Рис. 1.1(c). Він складається з чотирьох [100] - і чотирьох шорстких (внаслідок ефекта roughening transition) [110] - граней. Беручи до уваги, що схили областей звуження в основному утворені плоскими [111] гранями, [63] з найменшою густиною поверхневої енергії, можна стверджувати, що значення $\beta < 0$ в виразі (1.17) та довжина хвилі збурень поверхні повинна бути менше $9r_0$.

Чисельну оцінку λ_{max} в цьому випадку можна отримати на основі наступних припущень. Оскільки бічна поверхня нанодроту обмежена (100) - і "лускатими" (110) - гранями, значення σ_0 в виразі (1.13) можна встановити рівним $\sigma_{(100)}$. Кут, γ, між нормаллю до осі нанодроту та нормаллю до площин (111)-типу, що формують схили областей звуження, становить $\gamma = 0.62$ радіана. А отже

$$\beta = \frac{1}{2}\frac{d^2}{d\gamma^2}\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right) \approx \frac{\sigma_{(111)}/\sigma_{(100)}-1}{\gamma^2} \approx -0.33, \qquad (1.14)$$

звідки випливає що $\frac{\lambda_{max}}{r_0} = 9\sqrt{1+2\beta} \approx 5.2$.

Це передбачення узгоджується з результатами, наведеними на Рис. 1.4B, в областях, де відхилення $\Delta\widehat{N} = \widehat{N} - 1$ можуть бути пов'язані з лінійною стадією динаміки процесу. Більше того, подібні короткохвильові, $\lambda_{max}/r_0 \approx 5.7$, модуляції, ε, радіусу нанодроту ($\varepsilon \approx 0.5r_0$) спостерігалися в роботі [24]. На останній стадії процесу розпаду (див. Рис. 1.4B), коли модуляції радіусу досить помітні, $\lambda_{max} \approx 6.3$, згідно з $\widehat{N}(x) -$

перетворенням Фур'є. Однак ці короткохвильові модуляції радіусу не можуть призвести до розпаду нанодроту на окремі краплі відповідного розміру на нелінійній стадії процесу, тому вони або зливаються в більші кластери (у всіх розглянутих випадках: $\Lambda/r_{eff} \approx 8.3 - 9.5$) або довго залишаються в метастабільному стані [33].

Тепер буде коротко обговорено причини нечутливості параметра розпаду [100]-нанодротів Λ/r_{eff} до змін температури. Для синусоїдальних короткохвильових збурень ($\lambda/r_{eff} \lesssim 8$ і $\varepsilon \lesssim 0.4r_0$) густина потоку Γ^{+}_{surf} є найбільшою в областях уширення [64], хоча кривизна поверхні в цих областях κ_w, може бути нижчою, ніж у зонах звуження, κ_n. Якщо густина потоку сублімації з поверхні нанодроту, Γ^{-}_{subl}, пов'язана з локальною кривизною $\kappa(x)$ поверхні, то в зонах звуження $\Gamma^{-}_{subl} > \Gamma^{+}_{surf}$. Додатковий перенос атомів у приповерхневому шарі прискорює процеси розпаду. Цей ефект реалізується у випадку [100]-орієнтації з максимальним порядком обертальної симетрії та синусоїдальними збуреннями поверхні (див. дані, представлені на Рис. 1.4A та B).

Незначне збільшення довжини хвилі λ_{max} на Рис. 1.4A порівняно з Рис. 1.4B є результатом ефекту roughening transition на поверхні нанодроту, спричиненого обміном атомами між поверхнею та приповерхневим шаром вільних атомів, що знижує рівень анізотропії σ. При зниженні температури цей обмін пригнічується, і λ_{max} приймає попереднє значення (див. Рис. 1.4B і C).

Висновки до розділу 1

Впродовж останнього десятиліття металеві та напівпровідникові наноматеріали викликають все більший інтерес через їх потенційне використання в ряді електроних, оптоелектроних та електрохімічних пристроях. Їх властивості напряму залежать від морфології їх поверхні, яка може періодично змінюватися вздовж вісі. Зокрема, сучасні методи синтезу

наноструктур дають змогу створювати одновимірні нанодроти «ядро-оболонка» з різною морфологією поверхні, які зараз використовуються для перетворення сонячної енергії та електрохімічного накопичення енергії.[15-20,22-26]

Анізотропія поверхневої енергії розширює можливий набір еволюційних траєкторій для нанодротів. Очевидно, що в предплавільному режимі [65], коли лише внутрішні атоми мають кристалічну структуру, розпад нанодротів більше нагадує розпад струменів рідини. Однак при нижчих температурах для нанодротів можна спостерігати ефекти, не властиві струменям рідини. Найяскравішими прикладами є поява змієподібних/зигзагоподібних поверхневих збурень у нанодротах з орієнтацією (211)-типу та довгоживучих гантелеподібних структур, головним чином для наностержнів з орієнтаціями (100) та (111)-типів.

Процеси розпаду нанодротів і струменів рідини схожі лише в тому, що в обох випадках морфологічна еволюція призводить до зменшення поверхневої енергії. Особливості розпаду нанодротів базуються на факторах, що визначають рух "ефективної маси", $1/\hat{k}^2$, і "рушійну силу" $-\partial\Delta E_{surf}/\partial\Delta_{cm}$. Обидва ці параметри продиктовані орієнтацією осі нанодроту відносно площин, що утворюють рівноважну конфігурацію Вульфа. На нелінійній стадії саме ці площини визначають морфологію схилів перешийків та розподіл густини поверхневої енергії на протокаплях.

Метод синтезу, що розглядається в даній роботі, залежить від двох факторів: термічної нестійкості та ефекту roughening transition. Перший фактор представляє собою розпад нанодротів в результаті їх нагрівання до температур, що значно менша за температуру їх плавання. Другий фактор пов'язаний зі стимулюванням поверхневої дифузії атомів, наприклад, шляхом облученням зразка електроним пучком або холдною плазмою Ar^+[21,24].

РОЗДІЛ 2 ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИСТИМУЛЬОВАНОЇ ПОВЕРХНЕВОЇ ДИФУЗІЇ

2.1 Стимуляція ефекту roughening transition

В цьому підрозділі пояснюються цікаві результати, отримані в експериментах [33] з надтонкими золотими нанодротами ($d_0 < 10$ нм) – з гранецентрованою кристалічною решіткою (ГЦК). Слід зауважити, що температури $T > 200^{\circ}\mathrm{C}$ достатньо для розвитку теплової нестабільності нанодроту діаметром 25 нм [51]. Динаміка золотих наностержнів вивчалась у багатьох роботах. Їх результати показують, що залежно від орієнтації нанодроту відносно його внутрішньої кристалічної структури довжина хвилі модуляцій поверхні часто наближається до класичного значення $\lambda \sim \lambda_{max} = 9r_{nw}$, але суттєві відхилення від теоретичних прогнозів $\lambda \sim (25-30)r_{nw}$ також часто спостерігаються. Результат, представлений в [33], є несподіваним в тому сенсі, що для нанодроту, який опромінений електронним пучком, довжина хвилі збуджених модуляцій радіуса зменшується принаймні до $\lambda \sim 5.5r_{nw} < \lambda_{cr}$ (за моїми оцінками даних представлених в [33]). Амплітуда модуляцій досягає максимуму за кілька хвилин (~ 10 хв), а потім конфігурація нанодроту застигає у часі. Мінімальний радіус кривизни поверхні в областях її звуження та час досягнення квазістаціонарного стану різко зменшуються із збільшенням інтенсивності пучка. Автори відзначають помірне нагрівання
нанодроту при опроміненні електронами ~$100^{\circ}\mathrm{C}$) і вказують на «ефект розміру» - через малий радіус модифікації нанодротів з’являються при слабкому нагріванні. Спостережувані особливості перетворення форми нанодротів, «яка відрізняється від тієї, що спостерігається у металевих нанодротах діаметром більше 10 нм [33]», пов'язані з посиленням поверхневої дифузії атомів під дією опромінення.

Інтерпретація, представлена нижче, добре корелює з концепціями, представленими авторами [33], які розглядають збільшення коефіцієнта поверхневої дифузії як головний фактор модифікації нанодротів. Взаємодія поверхневих атомів з електронами призводить до зменшення енергії активації стрибків, Δ, і відповідно до збільшення їх частоти (параметр p у нашій моделі). Однак, як показано нижче, спостережувані ефекти у [33] можуть бути реалізовані лише при певних орієнтаціях осі нанодроту, а саме [110]-напряму. У цьому випадку бічна поверхня нанодроту (на початковому етапі еволюції) в основному обмежена чотирма площинами (111)-типу, які відповідають мінімальній густині поверхневої енергії в кристалічній ОЦК решітці. На двох додаткових (00 ± 1) гранях σ також є відносно низькою [104,106]. З цієї причини нанодроти з такою орієнтацією є найбільш стійкими

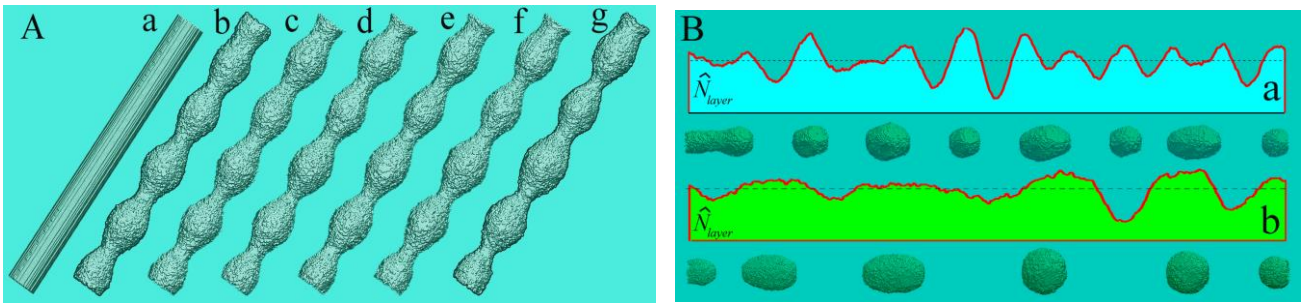


Рисунок 2.1. Процеси перетворення ГЦК нанодротів з різними орієнтаціями, коли поверхнева дифузія атомів прискорена зовнішнім впливом.

(A) [110]-орієнтація, холодний режим з увімкненим випаровуванням: $\alpha = 1, p = 0.85, L = 350,\ d_0 = 34$ та $\lambda/r_0 \approx 4.6$. Нанодріт містить $N_t \approx 160 \times 10^3$ атомів. Підзображення (a), (b), (c), (d), (e), (f) і (g) показують стабілізовані в часі короткохвильові конфігурації нанодротів в моменти часу $t = 0.0, 0.36, 0.72, 1.08, 1.44, 1.8$ та 2.16 $(\times 10^6)$ МК кроків, відповідно.

(B) [111]-орієнтація, теплий режим: $\alpha = 0.9$ та $p = 0.725$; $L = 720$, $d_0 = 24$, $N_t \approx 159 \times 10^3$; на підрисункові (a) показано розподіл кількості атомів у атомних шарах (111)-типу уздовж нанодроту, $\widehat{N}_{layer} = N_{layer}/\langle N_{layer}\rangle$, при $t = 2.25 \times 10^6$ та конфігурацію нанодроту на заключному етапі його розпаду, $t = 4.5 \times 10^6$ МК кроків; на підрисункові (b) показано розпад нанодроту з довгохвильовими модуляціями для більших значень параметра p ($p = 0.8, d_0 = 25$, та $N_t \approx 169 \times 10^3$) моменти $t = 3.9 \times 10^6$ і $t = 7.8 \times 10^6$ МК кроків відповідно.

до розпаду [50, 51, 66]. Природно, що на схилах областей звуження, що розвиваються, значення σ вище, ніж на бічній поверхні областей уширення. Отже, максимальний інкремент розвитку нестабільності зміщується в бік довжин хвиль $\lambda > \lambda_{max}$, що відповідає більшому зменшенню загальної площі поверхні нанодроту, A_{nw}. У роботі [47] в так званому "холодному режимі" (α = 0.96 і p = 0.71 для ГЦК решітки) помітні модуляції радіуса нанодроту з довжиною хвилі $\lambda/r_{nw}\sim$ 14.5 ($r_{nw} = 10$) виникли при $t \approx 8 \times 10^6$ МК кроків. Відповідно, при радіусі $r_{nw} = 17$ очікується, що час розпаду значно зросте, що суперечить результатам, представленим на Рис. 2.1А.

На Рис. 3.9 представлені результати моделювання динаміки нанодротів у випадку помірного температурного режиму ($\alpha = 1$), беручи до уваги, що нагрівання електронним пучком є низьким. Інтенсифікація поверхневої дифузії відображена у збільшенні параметра p ($p = 0.85$; для $\alpha = 1$ у моделі [43-45, 49, 54, 58,59], $p = 0.725$). Діаметр нанодроту, $d_0 = 34$, у випадку золота відповідає 6,9 нм. Видно, що насичення амплітуди короткохвильових модуляцій радіуса нанодроту (див. підзображення (b) на Рис. 2.1А; $\lambda/r_{nw} \approx$ 4.6) досягається за досить короткий проміжок часу, $t_s = 0.36 \times 10^6$, порівняно з часом розпаду нанодрота за відсутності опромінення електронами ($t > 8 \times 10^6$-див. вище).

Конфігурація нанодроту практично не змінюється до моменту часу $t \approx 6t_s$. Заморожування еволюції нанодроту при короткохвильових збуреннях, як вже зазначалося вище, є прямим аналогом рівноважних модульованих по радіусу конфігурацій нескінченних струменів рідини - андулоїдів [69]. У випадку наностержнів такі конфігурації врешті-решт руйнуються в результаті злиття сусідніх областей уширення [64].

Зменшенням довжини хвилі λ із часом насичення амплітуди збурень, t_s, можна керувати шляхом варіації значенням параметра p при фіксованому $\alpha = 1$. Таким чином, параметр $\lambda/r_{nw}\sim$5.5, який спостерігається в [33],

досягається, коли p збільшується з 0,725 [38,49,54] до 0,77. Зауважу, що при $p = 0.725$ довжина хвилі збурення становить $\lambda{\sim}24r_{nw}$ [47].

Результати, показані на Рис. 2.1A, були отримані з урахуванням сублімації атомів з поверхні нанодроту, що відображає наявність ефекту "бомбардування" в [33]. Однак блокування цього процесу (обчислення динаміки нанодроту без сублімації) практично не змінило модифікації нанодроту (лише незначне, ~ 7%, зменшення λ спостерігається на початковій стадії виникаючих збурень, але ця відмінність поступово зникає з часом).

Тут слід відзначити важливу деталь. Спостережувані ефекти безпосередньо не пов'язані з нагріванням дроту електронним пучком. Основну роль відіграє інтенсифікація поверхневої дифузії. Без цієї інтенсифікації значне нагрівання нанодроту в «гарячому режимі» ($\alpha = 0.8$ і $p = 0.752$) призводить до збудження модуляцій радіуса з довжиною хвилі $\lambda{\sim}10r_{nw}$ [47].

Роль електронного пучка у розвитку нестабільності нанодроту є абсолютно неоднозначною (див. Рис. 2.1B). При орієнтації осі вздовж [111]-напрямку бічна поверхня нанодроту обмежена шістьма площинами (110)-типу з найбільшою густиною поверхневої енергії $\sigma_{(110)}$, для випадку ГЦК гратки. Коли виникає нестабільність, області звуження утворюються трьома гранями (111)-типу і трьома гранями (100)-типу з меншими густинами поверхневої енергії, $\sigma_{(110)} > \sigma_{(100)} > \sigma_{(111)}$ [70]. При такій анізотропії σ довжина хвилі збурень дещо нижча, ніж $\lambda_{max} \approx 9r_{nw}$ (див. конфігурацію (a) на Рис. 3.9B). Зменшення бар'єру активації ($p = 0.8$ замість 0,725) різко збільшує як час розпаду, так і період модуляції перерізу нанодроту, $\lambda{\sim}14r_{nw} > \lambda_{max}$. Тобто результат, пов’язаний із впливом інтенсифікації поверхневої дифузії на довжину хвилі збурень, різко залежить від орієнтації осі нанодроту. Зауважу, що ефект суттєвого збільшення довжини хвилі збурень ($\lambda \gtrsim 14r_{nw} > \lambda_{max}$) справді спостерігається в останніх експериментах, в яких аномально висока дифузія поверхневих атомів

спричинена бомбардуванням нанодротів Ag іонами Ar^+, що утворюються в низькотемпературній РЧ (радіочастотній) плазмі (температура нанодроту не перевищувала 100^oC).

Зі зменшенням порогу активації, Δ, довжина хвилі, λ, помітно зростає для випадку [111]-орієнтації (див. Рис. 2.1B, (b)); однак цей ріст не змінює сценарій розвитку нестабільності: поверхнева енергія зменшується внаслідок більш виразного зменшення $A_{nw}(\lambda)$ ($\partial A_{nw}(\lambda)/\partial\lambda < 0$, якщо $\lambda > \lambda_{cr}$), що супроводжується меншим σ в зонах звуження, ніж в зонах уширення. В орієнтації [110] ситуація кардинально змінюється: поверхнева енергія E_s зростає як за рахунок збільшення $A_{nw}(\lambda)$ при $\lambda < \lambda_{cr}$, так і за рахунок збільшення густини поверхневої енергії, σ, в областях звуження. Виникаюча короткохвильова модифікація поверхні пов'язана з розвитком roughening transition. Слід зазначити, що ефект низького нагрівання нанодроту - як це вже було згадано в [64] і обговорено вище - має велике значення у випадку опромінення нанодротів.

2.2 Фізичні механізми стимульованого roughening transition

У даній роботі показано, що прояв RT в динаміці поверхні нанодроту може бути ініційований опроміненням її зовнішнім потоком електронів або іонів Ar^+ холодної плазми. При цьому важливо, щоб зовнішня дія, яка стимулює поверхневу дифузію атомів, не призводила до значного нагрівання дроту. Звучить парадоксально, але можливий «перегрів» системи може нівелювати роль RT на тлі розвитку нестійкості Релея. Вагомим аргументом для наших теоретичних досліджень стали результати експериментів із золотими (електронне опромінення) та срібними нанодротами (опромінення іонами Ar^+). Найбільш цікаві сценарії трансформації нанодротів виникають при їх малих радіусах - $r_{nw} \lesssim 5$ нм.

Вимоги до малості поперечного перерізу нанодроту наочно демонструє рис. 2.1, на якому наведено результати нашого чисельного експерименту.

Поверхневі модуляції з'являються на фасетках-смугах типу [100] саме завдяки стимульованому РТ. Видно, що довжина утворених наногорбів порівнянна з радіусом r_{nw} ($l_x \sim r_{nw}$), що помітно нижче так званого «енергетичного порогу», який забороняє фрагментацію нанодроту на фрагменти. довжиною l менше $\Delta l_{min} \approx 4.5 r_{nw}$ (при $l = \Delta l_{min}$) поверхнева енергія утворених нанокрапель дорівнює поверхневій енергії вихідного нанодроту).

Як вже зазначалося, в початкові моменти часу при підвищеній температурі, поверхня нанодроту трансформується з мінімізацією загальної поверхневої енергії і може бути представлен у вигляді набору граней-смуг різного типу(див. рис.1.1). Подальша динаміка морфології його поверхні (як буде показано нижче) пов'язана зі складною системою поверхневих потоків атомів з обміном атомами між суміжними «смугами». На (Рис. 2.2) продемонстровано прояв стимульованого RT на ізольованих гранях-смужках різного типу. Розглянуто динаміку атомів, розташованих у приповерхневих шарах протяжної грані. Передбачається, що рухливими є лише атоми, які заповнюють пластину розмірами L (довжина), w (ширина) і h (висота). Рухомі атоми не можуть вийти за периметр верхньої грані. Вибраний для чисельного моделювання об’єкт наочно демонструє основні результати стимуляції поверхневої дифузії атомів. Одиницею довжини в дашій моделі є відстань між атомними шарами типу (100) у ГЦК кристалічній ґратці. Для випадку золота ця одиниця довжини відповідає приблизно 2Å.

В даній моделі, вплив зовнішнього опромінення на частоту стрибків поверхневих атомів відповідає вибору такого параиетра p при заданому α, яке є трохи більшим за значення, отримане в рівнянні (5). В початкові моменти часу приповерхневий атомний шар (+1-шар) заповнюється атомами початкового 0-шару і в процесі дифузії по цьому (початковому шару можуть утворюватися кламтери менших розмірів((Рис 2.2A,a). Проте утворені кластери не здатні створювати кластери другого покоління в +2-шарі.

Впорядковані виражені модуляції поверхні пластини виникають тільки при її опроміненні, яке збільшує частоту виходу атомів з деякого і-шару в і+1-шар, та інтенсифікує дифузію атомів на цьому шарі, що сприяє утворенню нових кластерів. Природно, що цей процес відбувається швидше на грані (111) оскільки у міжатомних зв'язків, що утворюються (111)-кластерах в цілому більше, ніж у (100)-кластерах і вони більш стійкі при малих розмірах, що є дуже важливим на початковій стадії нуклеації. Варто

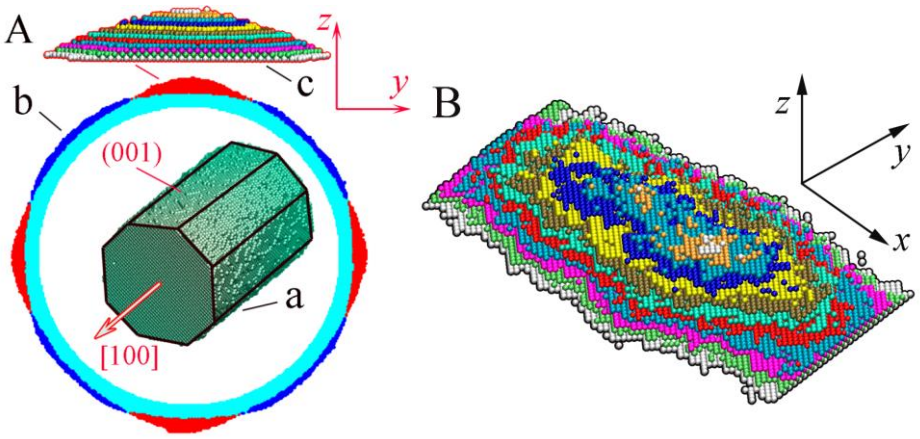


Рисунок 2.2. – Морфологія товстого нанодроту з ГЦК структурою гратки на початковому етапі його еволюції. (а)

А- типова форма початково циліндричного нанодроту за відсутності ефекту шорсткості переходу. (б) – перерізи нанодроту з початковим радіусом $r_{nw} = 55a$ (a – постійна гратки) в області його максимального розміру по осях y та z у двох варіантах його динаміки для різних значень параметра p при фіксованому $\alpha = 1$: фізичний зміст параметрів α і p наведено в описі моделі (див. Підрозділ 2). Атоми, позначені блакитним і синім кольором, представляють приповерхневі атоми, коли $p = 0.7$. Синій і червоний атоми відповідають випадку з $p = 0.825$ (випадок стимульованої поверхневої дифузії атомів). Обидва перерізи розраховуються в момент часу $t = 3 \times 10^6$кроків часу МС. (с) – детальне представлення структури горба різнокольоровими (001) – атомними шарами.

В – типовий горбок, що утворився на бічній поверхні нанодроту до моменту часу $t = 3 \times 10^6$кроків часу МС. Розміри найнижчого (001)-шару (позначеного червоним), який ізольовано вздовж осі x, становлять близько $l_x \sim 53a$, $l_y \sim 23a$.

відмітити, що на (110)-грані не вдалося спостерігати стимульовану поверхневу дифузію при обраних параметрах.

При спостережуваних на Рис. 2.3 модуляціях поверхнева енергія пластини зростає, оскільки площа модульованої поверхні перевищує початкову площу. Однак такий процес не суперечить законам термодинаміки. У даній моделі передбачається, що температура системи є незмінною, а в такому випадку дозволені всі процеси зі зменшенням вільної енергії Гельмгольця, F: $dF = dU - TdS$. У даному варіанті збільшення поверхневої енергії, U, компенсується зростанням ентропії, що пов'язано зі збільшенням числа поверхневих станів. Однак загальні термодинамічні

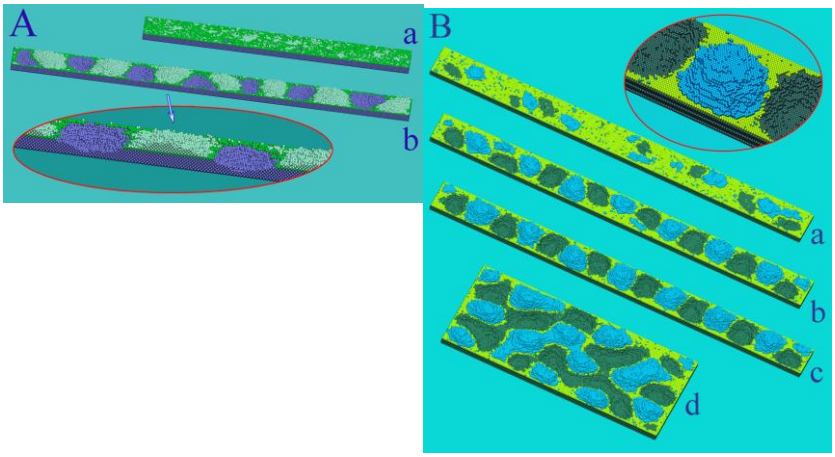


Рисунок 2.3 – Прояв стимульованої поверхневої дифузії на верхніх гранях пластин з різною орієнтацією. Допускається, що усі грані пластини за вийнятком верхної грані контактують з «замороженими»/нерухомими атомами, а рухомі атоми пластини не можуть вийти за периметр верхньої грані.

A – Верхня грань пластини є частиною (100)-площини. Конфигурація (a)- $\alpha = 1, p = 0.7$. Довжина пластини рівна $L = 400$, ширина $w = 70$, висота $h = 10$. У стані, що встановився атомний шар +1 (верхній атомний шар в початковому стані відмічено іиндексом 0), містить приблизно сталу кількість атомів – 1600. Утворені поверхневі кластери дрейфують по нульовому шару, розпадаються і виникають знову. (b) - $\alpha = 1, p = 0.825$. – $L = 600, w = 70$, $h = 10$. $t = 2.9 \times 10^6$ MC steps. Число розірваних зв'язків в системі рухомих атомів, $N_{bb}(t)$, досягає насичення в момент часу, що дорівнює $\tau_{sat} \approx 2.5 \times 10^6$ МК кроків. На нижній вставці вказана структура поверхні пластини в повздовжньому середньому перерізі.

B – Динаміка пластини з верхньою гранню (111)-типа. a, b, c– $L = 700, w = 70, h = 10$. $\alpha = 1, p = 0.825$. $t = 0.5,\ 1.0,\ 1.5 (\times 10^6) \approx \tau_{sat}$. d- $L = 370, w = 200$. $t = 1.4 \times 10^6$.

концепції не відображають деталі кінетики процесу і не відповідають на питання, які механізми призводять до формування горбків та впадин на гранях-смужках.

Більше запутана картина виникає у динаміці поверхневих потоків нанодротів та, відповідно, у динаміці морфології їхньої поверхні. Тому нижче буде продемонстровано, як зміни параметрів моделі, p і $\alpha = |\varepsilon|/kT$, змінюють перебіг процесу несподіваним чином.

Зараз будуть продемонстровані деякі оцінки для поверхневих потоків на бічній поверхні дроту при розвинених модуляціях радіуса і на бічній поверхні горбків, що утворюються (Рис. 2.4).

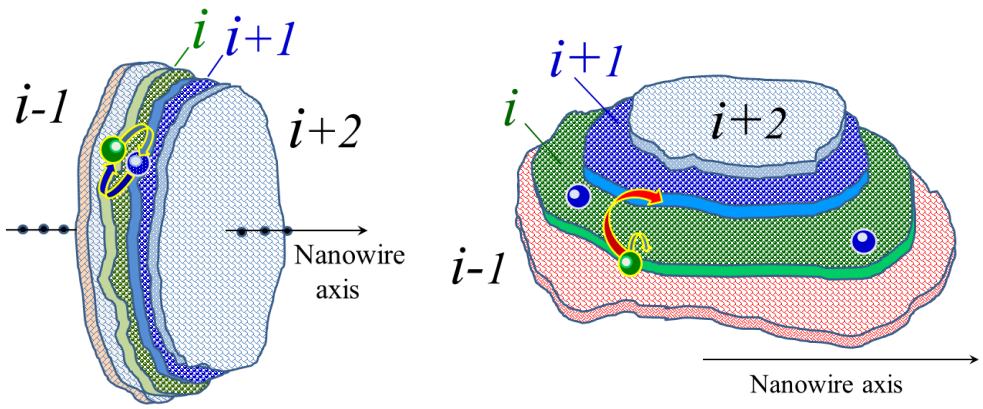


Рисунок 2.4 – Схема фрагмента нанопроводу (A) та hillock (B) для оцінки розрахунку балансу поверхневих потоків атомів із шару i на шар (i+1) та назад.

Для конфігурації (A) передбачається, що розміри атомних шарів слабо відрізняються один від одного і при стрибку контурного (периферійного) атома з шару i стає контурним атомом в одному з прилеглих шарів. Тоді потік атомів з шару i шар i+1, Φ^+ , і зворотний потік, Φ^-, рівні

$$\Phi^+ = \Gamma_i \times p^{\langle n\rangle_i} \times \{\gamma_i \exp[\langle n\rangle_{i+1}\alpha]\} \qquad (2.1a).$$

$$\Phi^- = \Gamma_{i+1} \times p^{\langle n_{bb}\rangle_{i+1}} \times \{\gamma_{i+1} \exp[\langle n_{bb}\rangle_i\alpha]\} \qquad (2.1b)$$

тут Γ – кількість контурних атомів на межі шару, $\langle n_{bb}\rangle$ – середня кількість зв'язків для контурних атомів шару. Значення у фігурних дужках представляють коефіцієнт Больцмана (1.11) для стрибків атомів з шару на шар

$$\gamma_i = (\exp[\langle n_{bb}\rangle_{i-1}\alpha] + \exp[\langle n_{bb}\rangle_i\alpha] + \exp[\langle n_{bb}\rangle_{i+1}\alpha])^{-1},$$
$$\gamma_{i+1} = (\exp[\langle n_{bb}\rangle_i\alpha] + \exp[\langle n_{bb}\rangle_{i+1}\alpha] + \exp[\langle n_{bb}\rangle_{i+2}\alpha])^{-1}. \quad (2.2)$$
$$\langle n_{bb}\rangle_{i-1} > \langle n_{bb}\rangle_i > \langle n_{bb}\rangle_{i+1} > \langle n_{bb}\rangle_{i+2}$$

Результати Рис.2.5 демонструють можливість різкої зміни характеру динаміки гантелеподібного нанокластера. У відсутність опромінення він розпадається на дві частини, оскільки потоки поверхневої дифузії спрямовані від області його початкового звуження. Стимуляція поверхневої дифузії (збільшення параметра p до величини 0.825) змінює напрями дифузійних потоків у його центральній частині та призводять до формування цілісного кластера. Наведені результати стійко відтворюються інших випадкових реалізаціях динаміки вихідного нанокластера.

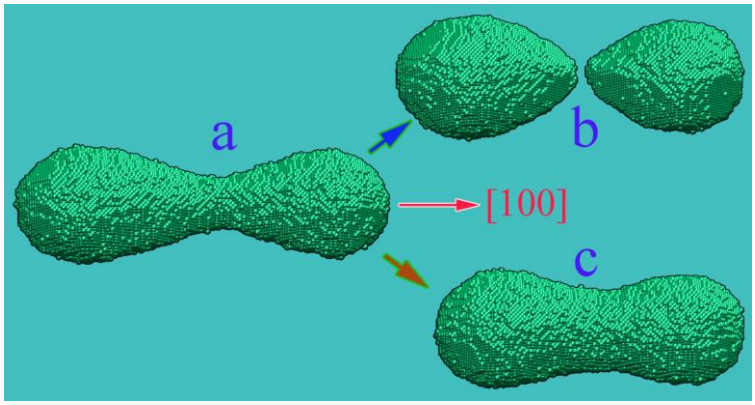


Рисунок 2.5 – Контролювання напрямку поверхневих потоків атомів у зоні звуження нанокластера. Конфігурація (b) формується з початкового стану (a) в результаті відтоку атомів від звуження області у випадку низького темпу поверхневої дифузії - $p = 0.7, \alpha = 1$. При стимулюванні поверхневої дифузії, $p = 0.825,\ \alpha = 1$,, приплив атомів до цієї зони формує цілий кластер (c).

Порогове значення параметра для стимульованої поверхневої дифузії (створення умов для потоку атомів від широкої частини наноструктури до вузької) отримаємо з наступних міркувань. Максимальна середня кількість зв'язків на кордоні (111)-кластера з гексагональною структурою є близько 4,

а мінімальна близько 3. Тоді відповідно до нерівності (8) стимуляція поверхневої дифузії опроміненням повинна забезпечити параметр p на рівні

$$p > 0.75 \qquad (2.3)$$

Отримана груба оцінка узгоджується з результатами наших численних експериментів.

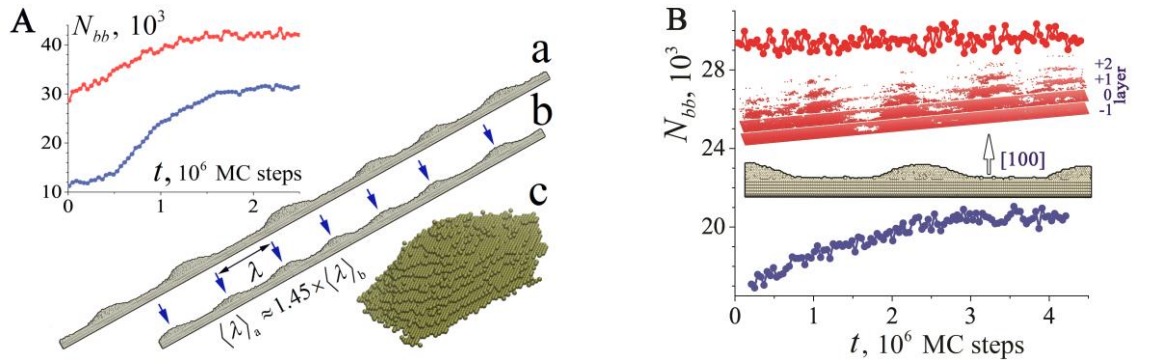


Рисунок 2.6 – Вплив можливого нагріву на прояв стимульованого roughening transition на гранях різної орієнтації.

A – Зовнішня поверхня пластини є гранню [111]-типа. Верхня вставка – число розірваних зв'язків (відносно початкового стану) , $N_{bb}(t)$ в «холодному» ($p = 0.825, \alpha = 1$ – синя крива) и горячому ($p = 0.825, \alpha = 0.75$ – червона крива) режимах. (a),(b) – встановлені профілі пластин в горячому варіанті при довжині $L = 700$ та 550 (в обох випадках $w = 70, h = 10$). Нижня вставка – один из горбків утворених на верхній грані пластини (a)

B – Результати для випадку [100]-орієнтації верхньої грані. $L = 550$, $w = 70$, $h = 10$. Блакитні та червоні кружки демонструють часову залежність, $N_{bb}(t)$, для «холодного» та «гарячого» режимів відповідно. В холодному режимі на верхній площині формуються шість горбків висотою в 8-10 атомних шарів. Нижня вставка демонструє профіль фрагменту площини. В горячому режимі частково заповнені лише два-три приповерхностні атомні шари (верхня вставка). Спостережувана низька структурованість поверхні характеризується збуреннями з більшою довжиною хвилі.

Оцінити роль розігріву системи при опроміненні досить складно. Справа в тому, що згідно зі співвідношенням (2.1), (2.2) всяке додаткове нагрівання, що супроводжує зростання параметра p, призводить до нерівності

$$d(\gamma_i \exp[\langle n\rangle_{i+1}\alpha]) > d(\gamma_{i+1} \exp[\langle n\rangle_i \alpha]), \qquad (2.4)$$

що означає більше посилення потоку зліва-направо, ніж праворуч наліво. І це справді спостерігається в наших чисельних експериментах, у яких нагрівання нанопроводу суттєво змінює трансформацію його поверхні (див. нижче). Однак для нано-горбків зроблений висновок не може бути віднесений. Причина в тому, що ланцюжки граничних атомів шарів і та i+1 відірвані один від одного (див. Рис.2.2,2.3, 2.4В). В результаті кожен атомний шар представлений і цілісним кластером, і оточуючим його двовимірним простором, в який може здійснюватися випаровування атомів кластера. Оціночний аналіз динаміки такої системи скрутний, але кінцевий результат цілком зрозумілий. Розігрів при опроміненні інтенсифікує руйнування кластерів та стримує розвиток стимульованого RT (Рис.2.6). Природно, що руйнівний ефект нагріву більшою мірою позначається на межі (100) з меншою кількістю горизонтальних зв'язків у кластері (чотири) порівняно з шістьма горизонтальними зв'язками в кластері на (111)-грані. У результаті, на межі (100) лише у двох приповерхневих атомних шарах формуються сильно розріджені кластери.

Висновки до розділу 2

У даному розділі розглянуто фізичні основи утворення періодичних модуляцій за поперечним перерізом нанодроту. В проведених дослідженнях, вивчення процесів дезінтеграції та синтезу проводиться на основі кінетичного методу Монте-Карло. Даний підхід позбавлений недоліків присутніх в більшості аналітичних моделей, не вимагає високих затрат часу, та дозволяє отримати глибоке розуміння ролі різних факторів у кінетиці

процесів розпаду нанодротів і у синтезі наноструктур типу ядро-оболонка та їх впливу на самоорганізацію елементів досліджуваних систем.

Розпад нанодротів в результаті термічної нестійкості згідно з передбаченням Ніколса та Малінза збігається з розпад рідких струменів В теорії Плато-Релея, однак дане припущення є вірним лише у випадку анізотропної густини поверхневої енергії.

Додаткову зміну в динаміку нанодроту вносить стимуляція поверхневої дифузії атомів. Як було показано, воно може змінити потоки атомів до зон звуження.

РОЗДІЛ 3 РЕЗУЛЬТАТИ РОБОТИ

3.1 Двохмодовий режим трансформації

Характерна довжина горбків, l_{hl}, що спостерігається на рисунках,2.2,2.3,2.6, близько 100 одиниць (50 постійних грат), що для золота відповідає 20 нм. Розмір l_{hl} не пов'язаний з розмірами пластини, як можна помітити на Рис. 2.3B,d. Якщо радіус нанодроту обрати таким, що довжина модуляцій його поверхні, λ, при розвитку релеєвської нестійкості відсутність опромінення буде порівнянна з довжиною l_{hl}, то при стимуляції поверхневої

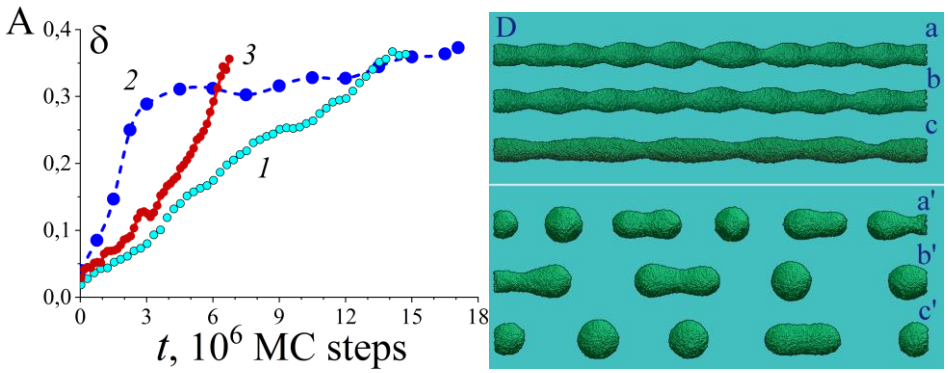


Рисунок 3.1 – Динаміка нанодротів з [100]-орієнтацією в різних режимах.

A – залежність рівня модуляції поперечного перерізу нанопроводу, $\delta(t)$,, від часу: $\delta = \left[\langle \Delta N_{layer}^2 \rangle / \langle N_{layer} \rangle^2\right]^{1/2}$, N_{layer} - число атомів у поперечних атомних шарах. Початковий радіус нанопроводу $r_{nw} = 15.5$, довжина $L = 700$. Крива 1 (Cyan circles) - $p = 0.7, \alpha = 1$ (розпад без зовнішнього навчання). Blue circles - $p = 0.825, \alpha = 1$ (розпад при зовнішньому опроміненні без нагрівання). Red curve (3) - $p = 0.825, \alpha = 0.8$ (розпад при зовнішньому опроміненні з розігрівом). Залежності $\delta(t)$наведено до першого розриву проводу.

B – Конфігурації (a), (b), (c) зображують форми нанодротів, близькі до першого розпаду для режимів (1), (2), (3), представлених у підрозділі A; $t = 13.5, 12, 6.5 (\times 10^6$ кроків MC. Для цих випадків параметр $\delta \approx 0.33$. Конфігурації (a'), (b'), (c') показують форми нанодротів на кінцевих стадіях розпаду: $t = 27.9, 27.9, 11.7 (\times 10^6)$ кроків MC відповідно.

дифузії виникне виражений двомодовий режим еволюції його поверхні. Прояв цього режиму залежить від орієнтації нанодроту, оскільки вона визначає тип граней-смуг його бічної поверхні на початковому етапі (див. рис.1.1). Саме з таким двомодовим режимом динаміки нанопроводу можна пов'язати результати, зареєстровані в експериментах із золотом [24].

У режимі опромінення модуляції перерізу нанодроту (рис. 3.1, крива 2) виходять на насичення за той же час, що й потрібне для встановлення квазістаціонарного стану на грані-смузі (100)-типу – див. рис. 2.5B, нижня залежність $N_{bb}(t)$. Це означає, що на цій стадії динаміки дроту домінує RT на чотирьох (100)-гранях-смужках бічної поверхні (див. конфігурацію (c) на Рис.1.1). Утворення горбків пов'язане з поздовжнім транспортом атомів уздовж (100)-смуг і з поперечним дрейфом зі суміжних (110)-смуг, на яких RT не розвивається.

Якщо при опроміненні допустити нагрівання дроту, то ефект стимульованого RT не проявляється у його динаміці (див. криву 3 на рис. 3.1). Швидкість зростання модуляцій нанодроту, $\delta(t)$, різко знижується у початковій стадії. Варто зазначити, що на стадії розвинених модуляцій стимульована поверхнева дифузія також уповільнює їх подальший розвиток. Ці два фактори призводять до того, що на нелінійній стадії розпаду дроту, коли сусідні “намистини” можуть зливатися, кількість окремих нанокластерів, n_{cl} , стійко зменшується (що встановлено в серії інших чисельних експериментів) у послідовності режимів 1-3-2, представлених на Рис.3.2 :

$$n_{cl}\,(1) > n_{cl}\,(3) > n_{cl}\,(2)\,, \tag{3.1}$$

як показано на конфігураціях (a'), (b') та (c') на рис. 3.1.

3.2 Одномодовий режим трансформації

Без зовнішнього опромінення нанопроводу з [110]-орієнтацією значно стійкі по відношенню до термічного розпаду, оскільки в початковій стадії трансформації обмежені двома парами граней-полос типу (111) з малою щільністю поверхневої енергії (з малим числом розірваних зв'язків) – див. рис. 3.2.А. Довжина хвилі з максимальним інкрементом наростання в часі, $\lambda_{max} \sim(25-30)r_{nw}$, значно вища за прогнози теорії Ніколса та Малінса($\lambda_{max}\sim 9r_{nw}$). Очевидно, що при опроміненні нанопроводу інтенсивно розвиваються горбки на його поверхні з довжиною, l_{hl}, близько 100 одиниць будуть домінувати в трансформації поверхні, якщо $\lambda_{max} > l_{hl}$ або $r_{nw} \gtrsim 1\ nm$ для Au. Однак, для того, щоб вони були помітні на поверхні нанопроводу, його радіус не повинен значно перевищувати висоту цих hillocks, h_{hl} (згідно з нашими даними висота h_{hl} досягає близько 10

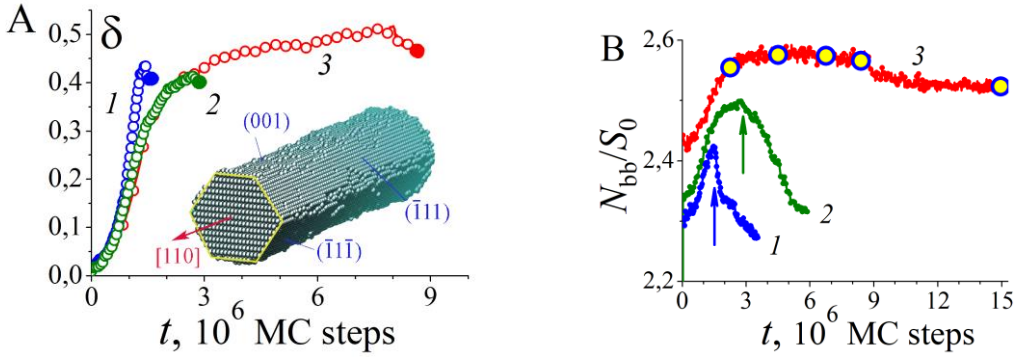


Рисунок 3.2 – Динаміка характеристик морфології нанопроводів з орієнтацією [110] за стимулювання поверхневої дифузії атомів. $\alpha = 1$, $p = 0.825$.

А – зміна рівня модуляції поперечного перерізу нанопроводів, δ(t), різних радіусів. Криві 1, 2, 3 - $r_{nw} = 15.5$, $L = 700$; $r_{nw} = 17.5$, $L = 700$; та $r_{nw} = 20.5$, $L = 500$ відповідно. Кольорові кружки показують час першого розриву. На вставці показана типова форма нанодроту з [110]-орієнтацією, встановленою на початковому етапі її перетворення.

В - Зміна числа розірваних зв'язків на поверхні нанопроводів для тих же параметрів. S_0 є стороною регіону області новаторського штату. Стрілками вказані моменти перших розривів нанодротів.

міжатомних відстаней між сусідніми (111)-шарами).

Відстань між (111) атомними шарами дорівнює $2/\sqrt{3}$, та $h_{hl} \approx 12$. Тому модуляції поверхні стануть слабко вираженими при радіусі нанопроводу $r_{nw} \gtrsim 50$ або $r_{nw} \gtrsim 10\ nm$ для Au.

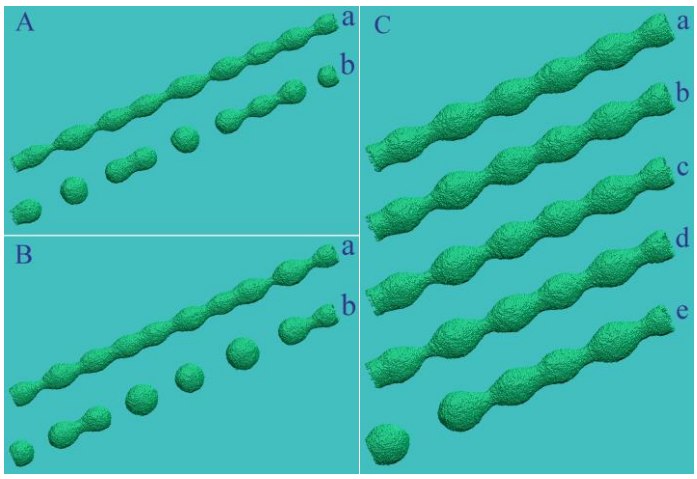


Рисунок 3.3 – Форми нанодротів з орієнтацією [110] на різних стадіях розпаду при стимулюванні поверхневої дифузії атомів: $\alpha = 1, p = 0.825$.

A - $r_{nw} = 15.5$, $L = 700$; (a), (b) - $t = 1.5$ та $3.54(\times 10^6)$ кроків МК.

B - $r_{nw} = 17.5$, $L = 700$; (a), (b) - $t = 2.7$ and $5.88(\times 10^6)$ кроків МК.

C - $r_{nw} = 20.5$, $L = 500$; (a), (b), (c), (d), (e) - $t = 2.25, 4.5, 6.75$, 8.4 та $15(\times 10^6)$ МК кроків(ці моменти часу відмічені кружками на залежності $N_{bb}(t)$ – див. крива 3 на рис. 3.2.B)

Результати моделювання одномодового розпаду наведено на рис. 3.2 та 3.3. Варто відмітити слабку залежність зростання збурень поверхні дроту у часі, $\delta(t)$, від його радіусу. Не помітні також відмінності у довжині хвиль збурень поверхні. Ці два факти демонструють домінування стимульованого RT в еволюції нанопроводу. При відносно малих радіусах розвиток горбків (кількість розірваних зв'язків стрімко зростає – рис. 3.2B) швидко призводить до розриву нанопроводу під час $\tau_{br} \lesssim 3 \times 10^6$ МК кроків.

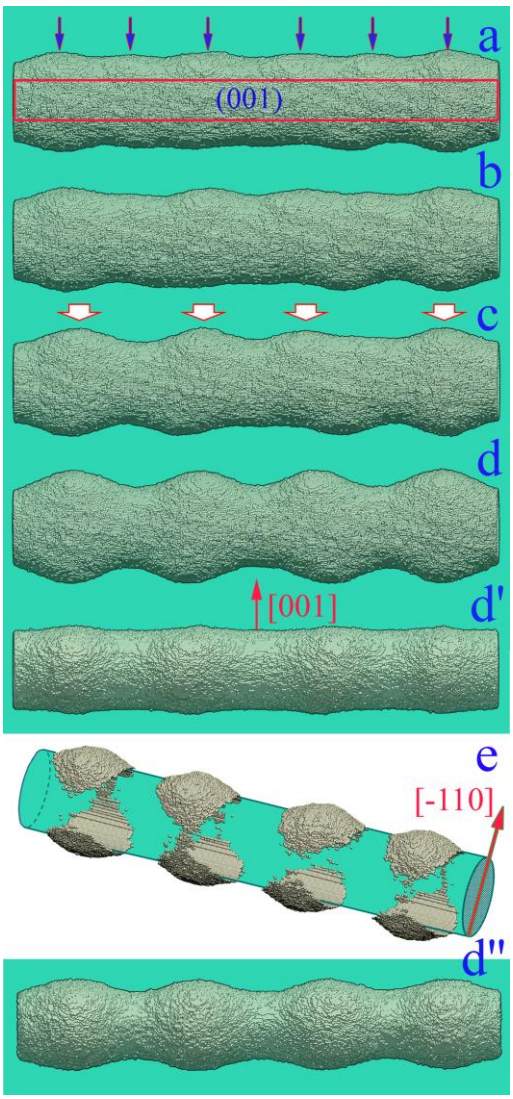


Рисунок 3.4 – Динаміка поверхні нанопроводу з радіусом $r_{nw} = 45$ в умовах стимульованої поверхневої дифузії атомів ([110]-орієнтація, $L = 500$). Subparts (a)-(d) показують форму нанопроводу в моменти часу часу часу $t = 2.25; 3.0; 3.9; 5.1 (\times 10^6)$ МК кроків (вид зверху вздовж напрямку [00-1]). Конфігурація (e) відображає атоми, що вийшли за початкову циліндричну межу дроту (зелений циліндр) для конфігурації (d'). Конфігурації (d') і (d'') показують форму дроту (d) збоку - при погляді вздовж площини (001) у моменти часу $t = 5.1 \times 10^6$ та $t = 12.6 \times 10^6$ МК кроків.

Зі збільшенням радіусу величина модуляцій поперечних розмірів нанодроту стає виражено анізотропною (див. рис. 3.4, конфігурації (d) та (d')). Незважаючи на те, що в початкові моменти часу бічна поверхня сформована не тільки двома парами граней-смужок типу (111), але і двома смугами граней типу (100) (див. рис. 2.2(a), стимульований RT домінує на (111) - гранях, викликаючи видиму конфігурації (e) (див. рис. 3.4) асиметрію в деформаціях поверхні нанопроводу.

Таким чином, розглянуті вище фізичні механізми динаміки морфології поверхні вказують на те, що при строгому теоретичному розгляді нестійкостей нанодроту в умовах опромінення немає сенсу шукати залежність характеристик цієї нестійкості від параметра $\beta = \lambda / r_{nw}$.

3.3 Режим довгохвильових трансформацій

При орієнтації дроту в напрямку [111] його бічна поверхня на початковому етапі має вигляд шестикутної призми з бічними гранями типу [110]. Термічна нестабільність нанодротів з такою орієнтацією, що виникає без стимуляції поверхневої дифузії, характеризується довжиною поверхневих збурень на лінійній стадії приблизно $\lambda \approx 7r_{nw}$ (див. рис. 10A). При $r_{nw} \approx 14$

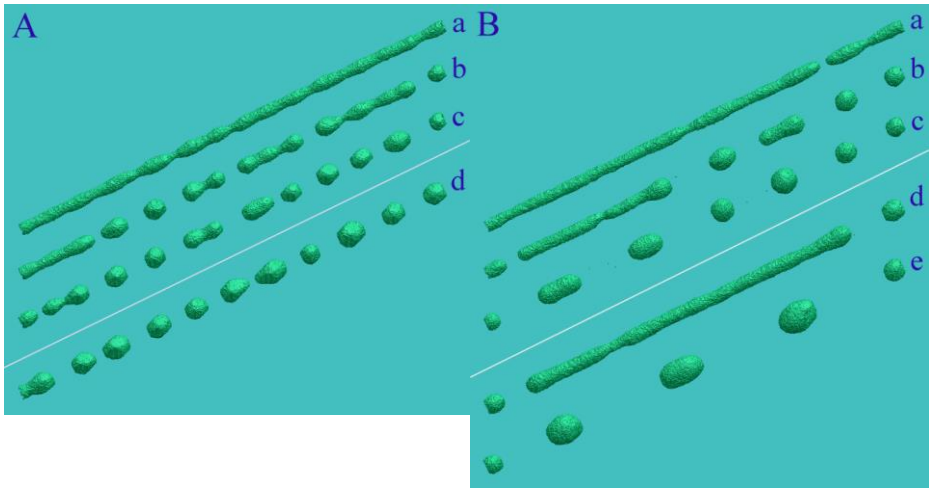


Рисунок 3.5. – Розпад нанопроводів з [111] орієнтацією без зовнішнього опромінення (subpart (A)) та в умовах стимульованої поверхневої дифузії атомів (subpart (B)).

A - $\alpha = 0.9$, $p = 0.725$, $L = 1050$. Конфігурації (a), (b),(c) - $r_{nw} = 12.5$; $t = 3.0, 4.2, 5.4(\times 10^6)$ MC steps. Конфігурація (d) - $r_{nw} = 14.5$; $t = 9.45(\times 10^6)$ MC steps.

B - $\alpha = 0.9$, $p = 0.8$, $L = 1050$. Конфігурації (a), (b),(c) -- $r_{nw} = 12.5$; $t = 3.0, 4.8, 7.2(\times 10^6)$ MC steps . Конфігурації (d),(e) - $r_{nw} = 14.5$; $t = 12.0, 26.1(\times 10^6)$ MC steps.

довжина хвилі становить $\lambda \approx 100$, що збігається з довжиною горбків h_{hl}, вплив яких на динаміку дроту було розглянуто вище. Однак передбачуване дворежимне перетворення дроту в цьому випадку не може бути реалізовано. Справа в тому, що, як ми зазначали вище, ефект RT не розвивається на (110)-гранях-смужках, якими зв'язаний нанодрот. Проте стимуляція поверхневої дифузії призводить до вираженого ефекту, зареєстрованого в експериментальній роботі, в якій срібні нанонитки опромінювалися

холодною аргоновою плазмою без значного нагріву. У результаті параметр розпаду $\beta = \lambda/r_{nw}$ значно збільшився порівняно з тим, що спостерігався за відсутності опромінення. Цей ефект також було виявлено в наших чисельних експериментах (див. рис. 10B). Параметр розпаду $\beta = \lambda/r_{nw}$ збільшується від значення $\beta \approx 7$ (конфігурація (d) на рис. 10A) до значення $\beta \approx 18$, що добре узгоджується з даними.

Фізичні механізми ефекту значного подовження збуджених збурень можна якісно пояснити на основі результатів, отриманих при обговоренні балансу потоку в області вузького місця (див. рівняння 2.1(a) і 2.1(b), рис. 2.3, 2.4). Було продемонстровано, що, стимулюючи поверхневу дифузію, можна запобігти розпаду нанокластера гантелі на дві частини шляхом зміни напрямку атомних потоків в області раніше утвореного вузького місця. У цьому випадку інтенсифікація поверхневої дифузії пригнічує майже одночасне утворення сусідніх вузьких місць на коротких відстанях (див. конфігурацію (a) на рис. 3.5A) через інтенсивне дифузійне перемішування атомів, що потрапляють у приповерхневі шари при спробі сформувати перетяжку нанодроту. регіони. Результат такого перемішування послаблюється лише зі збільшенням зазору між утвореними вузькими місцями.

3.4 Практичне використання отриманих результатів.

Фізичні та хімічні властивості напівпровідникових і металевих нанодротів викликають зростаючий інтерес через їх потенційне застосування в ряді електронних, оптоелектронних і електромеханічних пристроїв. Зокрема, переваги гранецентрованих кубічних (ГЦК) нанодротів дозволяють використовувати ці структури в біосенсорах[71-74], елементах сонячних панелей[75-76], а також у плазмонних хвилеводах[77]. Висока електрична та низька теплопровідність, характеристики оптичного поглинання та ефекти квантового обмеження роблять кремнієві наностржні потенційно корисними

як будівельні блоки для термоелектричних і фотонних пристроїв, таких як нанопровідні польові транзистори [78–80], надчутливі біологічні, хімічні чи масові сенсори [81–89] та фотодетектори [90].

Отримані результати можуть бути корисними в гнучкій електроніці, де широко використовуються впорядковані ланцюги наночастинок Au та Ag, а також радіально модульовані квазіодновимірні структури. Крім того, стимуляція поверхневої дифузії може знайти застосування в синтезі наноструктур з розвиненою морфологією поверхні для сенсорних конструкцій. Наприклад, горбки, що розвинулися на бічній поверхні відносно товстого нанодроту, можуть бути використані як система зародків у подальшому синтезі впорядкованих ланцюжків бічних наностовпів, орієнтованих перпендикулярно до осі нанодроту. Дифузійний режим осадження вільних атомів на поверхні нанодроту є нестабільним, оскільки вершини сформованих горбків є зонами високої концентрації дифузійних потоків, що створюють навколо них тіньові зони[52-54]. В результаті два або чотири поздовжні ряди нанополюсів (відносно осі нанодроту) можуть бути синтезовані на вихідних нанодротах з орієнтацією (110) або (100) відповідно (рис. 1A(b) і 3.4e).

Приклад використання використання впорядкованих квазіодномірних наноструктур ви можете побачити на рис. 3.6. Дана система використовується для генерування та виявлення поверхневих акустичних хвиль. Короткий опис роботи даної системи є наступним:

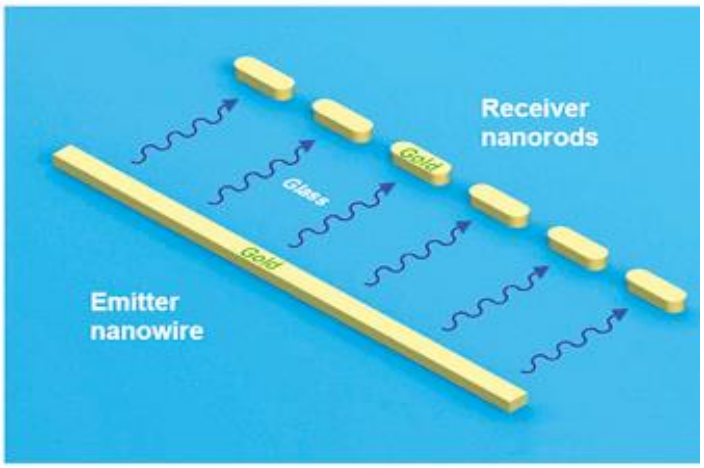


Рисунок 3.6. – На діаграмі показано зразок із двома нанолініями, розділеними кількома мікронами. Стрілки показують поверхневі акустичні хвилі.

- Ультракороткий лазерний імпульс генерує звук в нанодроті
- Збуджуються поверхневі акустичні хвилі, які досягають ланцюжка нанокластерів і збуджуть його коливання
- Коливання нанокластерів фіксуються вторинним світовим імпульсом
- Система надчутлива до всякого роду обєктів між нанодротом та ланцюжком нанокластерів

Висновки до розділу 3

Стимуляція поверхневої дифузії атомів вносить різноманітні та значні поправки в сценарії еволюції морфології поверхні нанодроту, яка залежить від орієнтації нанодроту відносно його внутрішньої кристалічної структури. Якщо можливо розробити штучний RT-ефект на деяких фасетних смугах бічної поверхні нанодроту, то його результат залежить від співвідношення розмірів горбів, що виникають, l_{hl}, з характерною довжиною λ нестабільності Релея, яка може розвинутися в відсутність опромінення. При обраній орієнтації осі нанодроту стимуляція поверхневої дифузії може не призвести до збудження RT. У цьому випадку поверхнева нестабільність, яка виникла б навіть без зовнішнього опромінення, очікувано збільшує довжину хвилі збурень за нових фізичних умов. Теоретичні концепції, розроблені в цьому дослідженні, були підтверджені в кількох експериментах [32,58].

Отримані результати можуть бути корисними в гнучкій електроніці, де широко використовуються впорядковані ланцюги наночастинок Au та Ag, а також радіально модульовані квазіодновимірні структури. Крім того, стимуляція поверхневої дифузії може знайти застосування в синтезі наноструктур з розвиненою морфологією поверхні для сенсорних конструкцій. Наприклад, горбки, що розвинулися на бічній поверхні відносно товстого нанодроту, можуть бути використані як система зародків у подальшому синтезі впорядкованих ланцюжків бічних наностовпів, орієнтованих перпендикулярно до осі нанодроту. Дифузійний режим осадження вільних атомів на поверхні нанодроту є нестабільним, оскільки

вершини сформованих горбків є зонами високої концентрації дифузійних потоків, що створюють навколо них тіньові зони [61,63,66]. В результаті два або чотири поздовжні ряди нанополюсів (відносно осі нанодроту) можуть бути синтезовані на вихідних нанодротах з орієнтацією (110) або (100) відповідно (рис. 1.1(b) і 3.4(e)).

ВИСНОВКИ

1. Встановити чутливість різних граней металів з гранецентрованою кристалічною ґраткою до штучної стимуляції поверхневої дифузії.
2. Порівняти отримані результати з випадком, коли поверхнева дифузія посилюється простим підвищенням температури
3. Виконати моделювання термічного розпаду нанодротів з різною орієнтацією внутрішньої кристалічної структури відносно їх осей і різним рівнем анізотропії густини поверхневої енергії.
4. Розкрити мікроскопічні фізичні фактори, які відповідають за різку зміну в динаміці нанодротів в залежності від рівня інтенсифікації поверхневої дифузії.
5. Провести термодинамічний аналіз явищ, що спостерігаються, та виконати кількісні оцінки їх показових параметрів на основі статистичної динаміки.
6. Розробити рекомендації для методів керованого синтезу квазі-одновимірних наносистем з розвиненою морфологією типу «зелена гусениця»

Перелік джерел посилання

1. A. Roy, T. Pandey, N. Ravishankar and A. K. Singh, Single crystalline ultrathin gold nanowires: Promising nanoscale interconnects, AIP Adv., 2013, 3, 032131.
2. K. Hong, M. Xie, R. Hu and H. Wu, Diameter control of tungsten oxide nanowires as grown by thermal evaporation, Nanotechnology, 2008, 19(8), 085604.
3. Z. Gu, H. Li, W. Yang, Y. Xia and J. Yao, Large-scale synthesisof single-crystal hexagonal tungsten trioxide nanowires and electrochemical lithium intercalation into the nanocrystals, J. Solid State Chem., 2007, 180(1), 98–105.
4. T. Pei, S. Thiyagu and Z. Pei, Ultra high-density silicon nanowires for extremely low reflection in visible regime, Appl. Phys. Lett., 2011, 99(15), 153108.
5. W. Liu, Tunable light absorption of Si nanowires by coating non-absorbing dielectric shells for photovoltaic applications, Optoelectron. Adv. Mater., Rapid Commun., 2011, 5, 916–919.
6. X. Hua, Y. Zeng and W. Shen, Semiconductor/dielectric halfcoaxial nanowire arrays for large-area nanostructured photovoltaics, J. Appl. Phys., 2014, 115(12), 124309.
7. Zheng, H.; Zhai, T.; Yu, M.; Xie, S.; Liang, C.; Zhao, W.; Wang, S.C.I.; Zhang, Z.; Lu, X. TiO2@C Core–Shell Nanowires for High-Performance and Flexible Solid-State Supercapacitors. J. Mater. Chem. C Mater. Opt. Electron. Devices 2013, 1, 225–229.
8. Adachi, M.M.; Anantram, M.P.; Karim, K.S. Core-Shell Silicon Nanowire Solar Cells. Sci. Rep. 2013, 3, 1546.

9. Li, Z.;Wang, J.; Singh, N.; Lee, S. Optical and Electrical Study of Core-Shell Silicon Nanowires for Solar Applications. Opt. Express 2011, 19 (Suppl. S5), A1057–A1066.
10. K. Dawson and A. O'Riordan, Towards Nanowire (Bio) Sensors, J. Phys.: Conf. Ser., 2011, 307, 012004.
11. J. Cao, T. Sun and K. Grattan, Gold nanorod-based localized surface plasmon resonance biosensors: A review, Sens. Actuators, B, 2014, 195, 332–351.
12. K. Dawson, J. Strutwolf, K. Rodgers, G. Herzog, D. Arrigan, A. Quinn and A. O'Riordan, Single Nanoskived Nanowires for Electrochemical Applications, Anal. Chem., 2011, 83(14), 5535–5540.
13. W. Liu, Tunable light absorption of Si nanowires by coating non-absorbing dielectric shells for photovoltaic applications, Optoelectron. Adv. Mater., Rapid Commun., 2011, 5, 916–919.
14. X. Hua, Y. Zeng and W. Shen, Semiconductor/dielectric halfcoaxial nanowire arrays for large-area nanostructured photovoltaics, J. Appl. Phys., 2014, 115(12), 124309.
15. R. Day, M. Mankin, R. Gao, Y. No, S. Kim, D. Bell, H. Park and C. Lieber, Plateau–Rayleigh crystal growth of periodic shells on one-dimensional substrates, Nat. Nanotechnol., 2015, 10(4), 345–352.
16. Z. Xue, M. Xu, Y. Zhao, J. Wang, X. Jiang, L. Yu, J. Wang, J. Xu, Y. Shi, K. Chen and P. Roca i Cabarrocas, Engineering island-chain silicon nanowires via a droplet mediated Plateau-Rayleigh transformation, Nat. Commun., 2016, 7(1), 12836.
17. I. Goldthorpe, A. Marshall and P. McIntyre, Synthesis and Strain Relaxation of Ge-Core/Si-Shell Nanowire Arrays, Nano Lett., 2008, 8(11), 4081–4086.
18. P. Namdari, H. Daraee and A. Eatemadi, Recent Advances in Silicon Nanowire Biosensors: Synthesis Methods, Properties, and Applications, Nanoscale Res. Lett., 2016, 11(1), 406.

19. S. Dong, P. Hu, X. Zhang, Y. Cheng, C. Fang, J. Xu and G. Chen, Facile synthesis of silicon nitride nanowires with flexible mechanical properties and with diameters controlled by flow rate, Sci. Rep., 2017, 7(1), 45538.
20. Y. Chu, S. Jing, X. Yu and Y. Zhao, High-Temperature Plateau–Rayleigh Growth of Beaded SiC/SiO2 Nanochain Heterostructures, Cryst. Growth Des., 2018, 18(5), 2941–2947.
21. Z. Xue, M. Xu, X. Li, J. Wang, X. Jiang, X. Wei, L. Yu, Q. Chen, J. Wang, J. Xu, Y. Shi, K. Chen and P. Roca i Cabarrocas, In-Plane Self-Turning and Twin Dynamics Renders Large Stretchability to Mono-Like Zigzag Silicon Nanowire Springs, Adv. Funct. Mater., 2016, 26(29), 5352–5359.
22. S. Hwang, C. Lee, H. Cheng, J. Jeong, S. Kang, J. Kim, J. Shin, J. Yang, Z. Liu, G. Ameer, Y. Huang and J. Rogers, Biodegradable Elastomers and Silicon Nanomembranes/Nanoribbons for Stretchable, Transient Electronics, and Biosensors, Nano Lett., 2015, 15(5), 2801–2808.
23. J. Durham and Y. Zhu, Fabrication of Functional Nanowire Devices on Unconventional Substrates Using Strain-Release Assembly, ACS Appl. Mater. Interfaces, 2012, 5(2), 256–261.
24. W. Wang, C. Chen, K. Lin, Y. Fang and C. Lieber, Label-free detection of small-molecule-protein interactions by using nanowire nanosensors, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., 2005, 102(9), 3208–3212.
25. E. Stern, A. Vacic, N. Rajan, J. Criscione, J. Park, B. Ilic, D. Mooney, M. Reed and T. Fahmy, Label-free biomarker detection from whole blood, Nat. Nanotechnol., 2009, 5(2), 138–142.
26. J. Chua, R. Chee, A. Agarwal, S. Wong and G. Zhang, Label-Free Electrical Detection of Cardiac Biomarker with Complementary Metal-Oxide Semiconductor-Compatible Silicon Nanowire Sensor Arrays, Anal. Chem., 2009, 81(15), 6266–6271.
27. H. Li, J. Biser, J. Perkins, S. Dutta, R. Vinci and H. Chan, Thermal stability of Cu nanowires on a sapphire substrate, J. Appl. Phys., 2008, 103(2), 024315.

28. M. Rauber, F. Muench, M. Toimil-Molares and W. Ensinger, Thermal stability of electrodeposited platinum nanowires and morphological transformations at elevated temperatures, Nanotechnology, 2012, 23(47), 475710.

29. A. Volk, D. Knez, P. Thaler, A. Hauser, W. Grogger, F. Hofer and W. Ernst, Thermal instabilities and Rayleigh breakup of ultrathin silver nanowires grown in helium nanodroplets, Phys. Chem. Chem. Phys., 2015, 17(38), 24570–24575.

30. S. Gill, Controlling the Rayleigh instability of nanowires, Appl. Phys. Lett., 2013, 102(14), 143108.

31. S. Maier, P. Kik, H. Atwater, S. Meltzer, E. Harel, B. Koel and A. Requicha, Local detection of electromagnetic energy transport below the diffraction limit in metal nanoparticle plasmon waveguides, Nat. Mater., 2003, 2(4), 229–232.

32. Y. Yin, Y. Sun, M. Yu, X. Liu, T. Jiang, B. Yang, D. Liu, S. Liu and W. Cao, ZnO Nanorod Array Grown on Ag Layer: A Highly Efficient Fluorescence Enhancement Platform, Sci. Rep., 2015, 5(1), 8152.

33. Xu, S.; Li, P.; Lu, Y. In Situ Atomic-Scale Analysis of Rayleigh Instability in Ultrathin Gold Nanowires. Nano Res. 2018, 11, 625–632.

34. Karim, S.; Toimil-Molares, M.E.; Balogh, A.G.; Ensinger, W.; Cornelius, T.W.; Khan, E.U.; Neumann, R. Morphological Evolution of Au Nanowires Controlled by Rayleigh Instability. Nanotechnology 2006, 17, 5954–5959.

35. Karim, S.; Toimil-Molares, M.E.; Ensinger, W.; Balogh, A.G.; Cornelius, T.W.; Khan, E.U.; Neumann, R. Influence of Crystallinity on the Rayleigh Instability of Gold Nanowires. J. Phys. D Appl. Phys. 2007, 40, 3767–3770.

36. Li, P.; Han, Y.; Zhou, X.; Fan, Z.; Xu, S.; Cao, K.; Meng, F.; Gao, L.; Song, J.; Zhang, H.; et al. Thermal Effect and Rayleigh Instability of Ultrathin 4H Hexagonal Gold Nanoribbons. Matter **2020**, 2, 658–665.

37. Li, H.; Biser, J.M.; Perkins, J.T.; Dutta, S.; Vinci, R.P.; Chan, H.M. Thermal Stability of Cu Nanowires on a Sapphire Substrate. J. Appl. Phys. **2008**, 103, 024315.

38. Toimil Molares, M.E.; Balogh, A.G.; Cornelius, T.W.; Neumann, R.; Trautmann, C. Fragmentation of Nanowires Driven by Rayleigh Instability. Appl. Phys. Lett. 2004, 85, 5337–5339.

39. Rauber, M.; Muench, F.; Toimil-Molares, M.E.; Ensinger, W. Thermal Stability of Electrodeposited Platinum Nanowires and Morphological Transformations at Elevated Temperatures. Nanotechnology 2012, 23, 475710.

40. Volk, A.; Knez, D.; Thaler, P.; Hauser, A.W.; Grogger, W.; Hofer, F.; Ernst, W.E. Thermal Instabilities and Rayleigh Breakup of Ultrathin Silver Nanowires Grown in Helium Nanodroplets. Phys. Chem. Chem. Phys. **2015**, 17, 24570–24575.

41. Nichols, F.A.; Mullins, W.W. Surface- (interface-) and volume-diffusion contributions to morphological changes driven by capillarity. Trans. Metall. Soc. AIME **1965**, 233, 1840–1848.

42. Gurski, K.F.; McFadden, G.B. The Effect of Anisotropic Surface Energy on the Rayleigh Instability. Proc. Math. Phys. Eng. Sci. **2003**, 459, 2575–2598.

43. Vigonski, S.; Jansson, V.; Vlassov, S.; Polyakov, B.; Baibuz, E.; Oras, S.; Aabloo, A.; Djurabekova, F.; Zadin, V. Au Nanowire Junction Breakup through Surface Atom Diffusion. Nanotechnology **2018**, 29, 015704.

44. Min, D.;Wong, H. Rayleigh's Instability of Lennard-Jones Liquid Nanothreads Simulated by Molecular Dynamics. Phys. Fluids**2006**, 18, 024103.

45. Zhao, C.; Sprittles, J.E.; Lockerby, D.A. Revisiting the Rayleigh–Plateau Instability for the Nanoscale. J. Fluid Mech. **2019**, 861, R3.

46. Lai, K.C.; Evans, J.W. Reshaping and Sintering of 3D Fcc Metal Nanoclusters: Stochastic Atomistic Modeling with Realistic Surface Diffusion Kinetics. Phys. Rev. Mater. **2019**, 3, 026001.

47. Gorshkov, V.N.; Tereshchuk, V.V.; Sareh, P. Diversity of Anisotropy Effects in the Breakup of Metallic FCC Nanowires into Ordered Nanodroplet Chains. CrystEngComm **2020**, 22, 2601–2611.

48. Nichols, F. A.; Mullins, W. W. Morphological Changes of a Surface of Revolution Due to Capillarity-induced Surface Diffusion. *J. Appl. Phys.* **1965**, *36* (6), 1826–1835.

49. Galanakis, I.; Bihlmayer, G.; Bellini, V.; Papanikolaou, N.; Zeller, R.; Blügel, S.; Dederichs, P. H. Broken-Bond Rule for the Surface Energies of Noble Metals. *EPL* **2002**, *58* (5), 751–757.

50. Rauber, M.; Muench, F.; Toimil-Molares, M. E.; Ensinger, W. Thermal Stability of Electrodeposited Platinum Nanowires and Morphological Transformations at Elevated Temperatures. Nanotechnology 2012, 23 (47), 475710.

51. Karim, S.; Toimil-Molares, M. E.; Balogh, A. G.; Ensinger, W.; Cornelius, T. W.; Khan, E. U.; Neumann, R. Morphological Evolution of Au Nanowires Controlled by Rayleigh Instability. Nanotechnology 2006, 17 (24), 5954–5959.

52. Gorshkov, V.; Zavalov, O.; Atanassov, P.B.; Privman, V. Morphology of Nanoclusters and Nanopillars Formed in Nonequilibrium Surface Growth for Catalysis Applications. Langmuir 2011, 27, 8554–8561. DOI: http://doi.org/10.1021/la103113f

53. Privman, V.; Gorshkov, V.; Yaish, Y.E. Kinetics Modeling of Nanoparticle Growth on and Evaporation off Nanotubes. J. Appl. Phys. 2017, 121, 014301.

54. Privman, V.; Gorshkov, V.; Zavalov, O. Formation of Nanoclusters and Nanopillars in Nonequilibrium Surface Growth for Catalysis Applications: Growth by Diffusional Transport of Matter in Solution Synthesis. Heat Mass Transf. 2014, 50, 383–392. DOI: http://doi.org/10.1007/s00231-013-1272-2

55. Gorshkov, V.; Kuzmenko, V.; Privman, V. Nonequilibrium Kinetic Modeling of Sintering of a Layer of Dispersed Nanocrystals. CrystEngComm 2014, 16, 10395–10409. DOI: http://doi.org/10.1039/C4CE01477D

56. Gorshkov, V.; Kuzmenko, V.; Privman, V. Mechanisms of Interparticle Bridging in Sintering of Dispersed Nanoparticles. J. Coupled Syst. Multiscale Dyn. 2014, 2, 91–99. DOI: http://doi.org/10.1166/jcsmd.2014.1043

57. Gorshkov, V.N.; Sareh, P.; Tereshchuk, V.V.; Soleiman-Fallah, A. Dynamics of Anisotropic Break-Up in Nanowires of FCC Lattice Structure. Adv. Theory Simul. 2019, 2, 1900118.

58. Gorshkov, V.; Privman, V. Kinetic Monte Carlo Model of Breakup of Nanowires into Chains of Nanoparticles. J. Appl. Phys. 2017, 122, 204301.

59. Toimil Molares, M. E.; Balogh, A. G.; Cornelius, T. W.; Neumann, R.; Trautmann, C. Fragmentation of Nanowires Driven by Rayleigh Instability. *Appl. Phys. Lett.* **2004**, *85* (22), 5337–5339.

60. Yin, Y.; Sun, Y.; Yu, M.; Liu, X.; Jiang, T.; Yang, B.; Liu, D.; Liu, S.; Cao, W. ZnO Nanorod Array Grown on Ag Layer: A Highly Efficient Fluorescence Enhancement Platform. *Sci. Rep.* **2015**, *5* (1), 8152.

61. Mullins, W. W.; Sekerka, R. F. Stability of a Planar Interface during Solidification of a Dilute Binary Alloy. In *Dynamics of Curved Fronts*; Elsevier, 1988; pp 345–352.

62. Heyraud, J. C.; Métois, J. J.; Bermond, J. M. The Roughening Transition of the Si113 and Si110 Surfaces – an in Situ, Real Time Observation. *Surf. Sci.* **1999**, *425* (1), 48–56.

63. Gorshkov, V. N.; Sareh, P.; Tereshchuk, V. V.; Soleiman-Fallah, A. Dynamics of Anisotropic Break-up in Nanowires of FCC Lattice Structure. *Adv. Theory Simul.* **2019**, *2* (9), 1900118.

64. Gorshkov, V. N.; Tereshchuk, V. V.; Sareh, P. Restructuring and Breakup of Nanowires with the Diamond Cubic Crystal Structure into Nanoparticles. Mater. Today Commun. 2020, 22 (100727), 100727.
65. Dutta, A.; Chatterjee, S.; Raychaudhuri, A. K.; Moitra, A.; Saha-Dasgupta, T. In-Silico Investigation of Rayleigh Instability in Ultra-Thin Copper Nanowire in Premelting Regime. J. Appl. Phys. 2014, 115 (24), 244303.
66. Chen, Z.-G.; Cheng, L.; Zou, J.; Yao, X.; Lu, G. Q. M.; Cheng, H.-M. Zinc Sulfide Nanowire Arrays on Silicon Wafers for Field Emitters. *Nanotechnology* **2010**, *21* (6), 065701.
67. Gorshkov, V.; Zavalov, A.; Privman, V. Shape Selection in Diffusive Growth of Colloids and Nanoparticles. *Langmuir* **2009**, *25* (14), 7940–7953.
68. Gorshkov, V.; Privman, V. Models of Synthesis of Uniform Colloids and Nanocrystals. *Physica E Low Dimens. Syst. Nanostruct.* **2010**, *43* (1), 1–12.
69. Bernoff, A. J.; Bertozzi, A. L.; Witelski, T. P. Axisymmetric Surface Diffusion: Dynamics and Stability of Self-Similar Pinchoff. *J. Stat. Phys.* **1998**, *93* (3/4), 725–776.
70. Wang, S. G.; Tian, E. K.; Lung, C. W. Surface Energy of Arbitrary Crystal Plane of Bcc and Fcc Metals. J. Phys. Chem. Solids 2000, 61 (8), 1295–1300.
71. Chen, Y.-L.; Lee, C.-Y.; Chiu, H.-T. Growth of Gold Nanowires on Flexible Substrate for Highly Sensitive Biosensing: Detection of Thrombin as an Example. J. Mater. Chem. B Mater. Biol. Med. 2013, 1, 186–193.
72. Salvo-Comino, C.; Martin-Pedrosa, F.; Garcia-Cabezon, C.; Rodriguez-Mendez, M.L. Silver Nanowires as Electron Transfer Mediators in Electrochemical Catechol Biosensors. Sensors 2021, 21, 899.
73. Wang, Q.; Min, F.; Zhu, J. Preparation of Gold Nanowires and Its Application in Glucose Biosensing. Mater. Lett. 2013, 91, 9–11.
74. Yang, X.; Bai, J.; Wang, Y.; Jiang, X.; He, X. Hydrogen Peroxide and Glucose Biosensor Based on Silver Nanowires Synthesized by Polyol Process. Analyst 2012, 137, 4362–4367.

75. Azani, M.-R.; Hassanpour, A.; Torres, T. Benefits, Problems, and Solutions of Silver Nanowire Transparent Conductive Electrodes in Indium Tin Oxide (ITO)—Free Flexible Solar Cells. Adv. Energy Mater. 2020, 10, 2002536.
76. Zhai, H.; Li, Y.; Chen, L.;Wang, X.; Shi, L.;Wang, R.; Sun, J. Semi-Transparent Polymer Solar Cells with All-Copper Nanowire Electrodes. Nano Res. 2018, 11, 1956–1966.
77. Cordaro, C.E.A.; Piccitto, G.; Priolo, F. Quantum Plasmonic Waveguides: Au Nanowires. Eur. Phys. J. Plus 2017, 132, 453.
78. Goldberger, J.; Hochbaum, A.I.; Fan, R.; Yang, P. Silicon Vertically Integrated Nanowire Field Effect Transistors. Nano Lett. 2006, 6, 973–977.
79. Brönstrup, G.; Jahr, N.; Leiterer, C.; Csáki, A.; Fritzsche,W.; Christiansen, S. Optical Properties of Individual Silicon Nanowires for Photonic Devices. ACS Nano 2010, 4, 7113–7122.
80. Elyamny, S.; Dimaggio, E.; Magagna, S.; Narducci, D.; Pennelli, G. High Power Thermoelectric Generator Based on Vertical Silicon Nanowires. Nano Lett. 2020, 20, 4748–4753.
81. Cui, Y.; Wei, Q.; Park, H.; Lieber, C.M. Nanowire Nanosensors for Highly Sensitive and Selective Detection of Biological and Chemical Species. Science 2001, 293, 1289–1292.
82. Mohammadnejad, S.; Tahi, I.; Nouri Rezaie, M. Design and Simulation of InP and Silicon Nanowires with Different Channel Characteristic as Biosensors to Improve Output Sensitivity. Opt. Quantum Electron. 2022, 54, 1–20.
83. Li, Z.; Chen, Y.; Li, X.; Kamins, T.I.; Nauka, K.; Williams, R.S. Sequence-Specific Label-Free DNA Sensors Based on Silicon Nanowires. Nano Lett. 2004, 4, 245–247.
84. Llobet, J.; Rius, G.; Chuquitarqui, A.; Borrisé, X.; Koops, R.; van Veghel, M.; Perez-Murano, F. Arrays of Suspended Silicon Nanowires Defined by

Ion Beam Implantation: Mechanical Coupling and Combination with CMOS Technology. Nanotechnology 2018, 29, 155303.

85. Zhang, Y.; Chen, R.; Xu, L.; Ning, Y.; Xie, S.; Zhang, G.-J. Silicon Nanowire Biosensor for Highly Sensitive and Multiplexed Detection of Oral Squamous Cell Carcinoma Biomarkers in Saliva. Anal. Sci. 2015, 31, 73–78.

86. Cui, H.;Wang, B.;Wang,W.; Hao, Y.; Liu, C.; Song, K.; Zhang, S.;Wang, S. Frosted Slides Decorated with Silica Nanowires for Detecting Circulating Tumor Cells from Prostate Cancer Patients. ACS Appl. Mater. Interfaces 2018, 10, 19545–19553.

87. Legallais, M.; Nguyen, T.T.T.; Cazimajou, T.; Mouis, M.; Salem, B.; Ternon, C. Material Engineering of Percolating Silicon Nanowire Networks for Reliable and Efficient Electronic Devices. Mater. Chem. Phys. 2019, 238, 121871.

88. Namdari, P.; Daraee, H.; Eatemadi, A. Recent Advances in Silicon Nanowire Biosensors: Synthesis Methods, Properties, and Applications. Nanoscale Res. Lett. 2016, 11, 406.

89. Hochbaum, A.I.; Fan, R.; He, R.; Yang, P. Controlled Growth of Si Nanowire Arrays for Device Integration. Nano Lett. 2005, 5, 457–460.

90. Yang, C.; Barrelet, C.J.; Capasso, F.; Lieber, C.M. Single P-Type/Intrinsic/n-Type Silicon Nanowires as Nanoscale Avalanche Photodetectors. Nano Lett. 2006, 6, 2929–2934.

НАПРАВЛЕННЯ НА РЕЦЕНЗІЮ

Шановний _____
(вчене звання, прізвище та ініціали рецензента)

Прошу Вас до «___»_____20___р. підготувати й надати рецензію
(дата надання рецензії)

на магістерську дисертацію на здобуття ступеня магістра

студента (-тки) _____
(прізвище, ініціали)

на тему _____

Завідувач кафедри

(назва кафедри) (підпис) (ім"я,прізвище)

«___»_____20___р.

РЕЦЕНЗІЯ

на магістерську дисертацію

на здобуття ступеня магістра

виконану на тему: Розмірні ефекти в трансформації одно- та двовимірних нанооб'єктів

студентом (-кою) Березниковим Олексієм Віталійовичем

ПІБ)

Сучасні методи синтезу наноструктури дозволяють створити одновимірні нанодроти типу ядро-оболонка з різною морфологією поверхні, які зараз використовуються в перетворенні сонячної енергії та зберіганні електрохімічної енергії. Магістерська дисертація, представлена Березниковим О.В., є актуальною і присвячена дослідженню фізичних механізмів впливу зовнішнього опромінення на динаміку морфології квазіодновимірних наносистем внаслідок інтенсифікації поверхневої дифузії атомів.

У магістерській дисертації Березникова О.В. отримано наступні наукові результати:

- Встановлено чутливість різних граней металів з гранецентрованою кристалічною ґраткою до штучної стимуляції поверхневої дифузії.
- Отримані результати порівняно з випадком, коли поверхнева дифузія посилюється простим підвищенням температури.
- Виконано моделювання термічного розпаду нанодротів з різною орієнтацією внутрішньої кристалічної структури відносно їх осей і різним рівнем анізотропії густини поверхневої енергії.
- Були розкриті мікроскопічні фізичні фактори, які відповідають за різку зміну в динаміці нанодротів в залежності від рівня інтенсифікації поверхневої дифузії.
- Проведено термодинамічний аналіз явищ, що спостерігаються, та виконати кількісні оцінки їх показових параметрів на основі статистичної динаміки.
- Розроблено рекомендації для методів керованого синтезу квазі-одновимірних наносистем з розвиненою морфологією типу «зелена гусениця».

Магістерська дисертація Березникова О.В. відповідає вимогам, що висуваються до магістерських дисертацій зі спеціальності 104 «фізика та астрономія», рекомендована оцінка роботи – «відмінно».

Рецензент

д.ф.-м.н., професор кафедри ЗФ та МФП		Горобець О.Ю.
(посада, науковий ступінь, вчене звання)	(підпис)	(ПІБ)

Печатка установи, організації рецензента *(тільки для зовнішнього рецензента)*

ВІДГУК
наукового керівника
магістерської дисертації на здобуття ступеня магістра

виконаної на тему: *розмірні ефекти в трансформації одно- та двовимірних нанооб'єктів*

студентом (-кою) *Березниковим Олексієм Віталійовичем*
(ПІБ)

Магістерська дисертація є змістовним і комплексним науковим дослідженням, яке присвячено сучасним методам синтезу наноструктур, що дозволяє створювати одновимірні нанодроти типу «ядро-оболонка» з різною морфологією поверхні. Магістерська дисертація, представлена Березниковим О.В., є актуальною і присвячена дослідженню фізичних механізмів впливу зовнішнього опромінення на динаміку морфології квазіодновимірних наносистем внаслідок інтенсифікації поверхневої дифузії атомів.

Позитивним у магістерській дисертації Березникова О.В. є те, що студент зміг:

- розкрити мікроскопічні фізичні фактори, які відповідають за різку зміну в динаміці нанодротів в залежності від рівня інтенсифікації поверхневої дифузії.
- виконати моделювання термічного розпаду нанодротів з різною орієнтацією внутрішньої кристалічної структури відносно їх осей і різним рівнем анізотропії густини поверхневої енергії.
- Провести термодинамічний аналіз явищ, що спостерігаються, та виконати кількісні оцінки їх показових параметрів на основі статистичної динаміки.

У роботі виконано огляд літератури за темою «Переваги, проблеми та методи синтезу нанодротів, їх використання», виконано моделювання термічного розпаду нанодротів з різною орієнтацією внутрішньої кристалічної структури відносно їх осей і різним рівнем анізотропії густини поверхневої енергії, розроблено рекомендації для методів керованого синтезу квазі-одновимірних наносистем з розвиненою морфологією типу «зелена

гусениця».

Магістерська дисертаця могла би містити більш детальний аналіз Фізичні механізми суттєвого впливу зовнішнього опромінення на динаміку морфології квазіодновимірних наносистем. Але ці побажання не впливають на загальну якість виконаної роботи.

Магістерська дисертація Березникова О.В. відповідає вимогам, що висуваються до магістерських дисертацій зі спеціальності 104 «фізика та астрономія», рекомендована оцінка роботи – «відмінно».

Науковий керівник магістерської дисертації

Проф., д.ф.-м.н., проф.		**В'ячеслав Горшков**
(посада, науковий ступінь, вчене звання)	(підпис)	(ім'я,прізвище

АНОТАЦІЯ

ДО МАГІСТЕРСЬКОЇ ДИСЕРТАЦІЇ

СТУДЕНТА ФМФ, другого (магістерського) рівня вищої освіти, гр. ОФ-11МП

Березникова Олексія Віталійовича

(ПІБ)

На тему *Розмірні ефекти на поверхні одно- та двовимірних нанооб'єктів*

Науковий керівник *док. ф-м. наук, професор, професор Горшков В'ячеслав Миколайович*

(науковий ступінь, вчене звання, посада, ПІБ)

Актуальність *методи синтезу наноструктури дозволяють створити одновимірні нанодроти типу ядро-оболонка з різною морфологією поверхні*

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами кафедри *ФМФ-07 Динаміка та властивості багаточастинкових систем*

Об'єкт дослідження *Фізичні механізми суттєвого впливу зовнішнього опромінення на динаміку морфології квазіодновимірних наносистем внаслідок інтенсифікації поверхневої дифузії атомів*

Предмет дослідження *Чисельне моделювання трансформації поверхонь металевих нанодротів внаслідок поверхневої дифузії атомів при підвищених температурах в режимах предплавлення без руйнування внутрішньої кристалічної структури*

Мета роботи *Знайти можливості контрольованого синтезу періодично модульованих за перерізом квазіодновимірних наноструктур*

Методи дослідження *Числовий експеримент на основі Монте-Карло моделі*

Відомості про обсяг робрти, кількість ілюстрацій, таблиць, додатків і літературних найменувань за переліком використаних *використаної літератури - 90 , сторінок: - , рисунків - 17 .*

Мета індивідуального завдання, використані методи та отримані результати *Оцінити рольоблученння та нагрівання на трансформацію нанодротів різної орієнтації, Провести розрахунок трансформації товстих нанодротів при різних параметрах системи(нагрівання та облучення).*

Висновок *Проведено оцінку ролі облученння та нагрівання на трансформацію нанодротів різної орієнтації,Оптимізувати програму обрахунку розпаду нанодротів, провести розрахунок трансформації товстих нанодротів при різних параметрах системи(нагрівання та облучення), Отримані результати можуть бути корисними в гнучкій електроніці, де широко використовуються впорядковані ланцюги наночастинок Au та Ag, а також радіально модульовані квазіодновимірні структури*

Перелік ключових слів (не більше 20) *нестійкості наноструктур, кінетична модель Монте-Карло, розпад нанодроту, анізотропія поверхневої енергії*

Підпис керівника _____

SUMMARY

TO THE REPORT TO SCIENTIFIC AND RESEARCHING PRACTICE

STUDENT OF FMF, 2 COURSE OF THE MASTER LEVEL, GR. OF-

Bereznykov Oleksii

(FULL NAME)

On the topic *dimensional effects in the transformation of one- and two dimensional nanoobjects*

Scientific supervisor *prof., D. Sc., prof. Gorshkov Vyacheslav Mykolayovych*

(scientific degree, academic status, position, FULL NAME)

Topicality *The obtained results may be useful in flexible electronics, where ordered chains of Au and Ag nanoparticles, as well as radially modulated quasi-one-dimensional structures, are widely used*

Relationship of work with scientific programs, plans, themes cathedra *FPM-07 Dynamics and properties of multiparticle systems*

Object of research *Physical mechanisms of significant external influence irradiation on the dynamics of the morphology of quasi-one-dimensional nanosystems due to the intensification of the surface diffusion of atoms*

Subject of research *Numerical modeling of the transformation of the surfaces of metal nanowires due to the surface diffusion of atoms at elevated temperatures in premelting regimes without destruction of the internal crystal structure*

Purpose of work *To find the possibilities of controlled synthesis of quasi-one-dimensional nanostructures periodically modulated in cross-section*

Research methods *A numerical experiment based on the Monte Carlo method*

Information about the volume of the report, the number of illustrations, tables, applications and literary names in the list of used ones *used literature - 90 , pages: - , pictures - 17*

The purpose of the individual task, the methods used and the results obtained *To evaluate the role of irradiation and heating on the transformation of nanowires of different orientations, to calculate the transformation of thick nanowires at different system parameters (heating and irradiation).*

Conclusion *An assessment of the role of irradiation and heating on the transformation of nanowires of different orientations was carried out, to optimize the program for calculating the decay of nanowires, to calculate the transformation of thick nanowires at different system parameters (heating and irradiation), the obtained results can be useful in flexible electronics, where ordered chains of Au nanoparticles are widely used and Ag, as well as radially modulated quasi-one-dimensional structures*

Keyword list (no more than 20) *instability of nanostructures, kinetic Monte Carlo model, nanowire decay, surface energy anisotropy*

Signature of the head

UNICHECK

Ім'я користувача:
Чижська Тетяна Григорівна

ID перевірки:
1013142992

Дата перевірки:
02.12.2022 00:41:44 EET

Тип перевірки:
Doc vs Internet + Library

Дата звіту:
02.12.2022 00:48:01 EET

ID користувача:
77188

Назва документа: Березников_ОФ_11мп_МД

Кількість сторінок: 41 Кількість слів: 8438 Кількість символів: 60474 Розмір файлу: 27.48 MB ID файлу: 1012910828

0%
Схожість

Збіги відсутні

0% Цитат

Вилучення цитат вимкнене

Вилучення списку бібліографічних посилань вимкнене

0%
Вилучень

Немає вилучених джерел

Модифікації

Виявлено модифікації тексту. Детальна інформація доступна в онлайн-звіті.

Замінені символи	222