

УДК 538.9:517.957:519.633:621.382

МОДЕЛЬ РОСТА ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК СПЛАВА ГЕЙСЛЕРА

© 2021 г. И. В. Воротынцева^а, А. Э. Рассадина^{б, *}, Л. А. Фомин^{б, с, **}, И. В. Маликов^с

^аНижегородский государственный технический университет,
Нижний Новгород, 603950 Россия

^бНижегородское математическое общество, Нижний Новгород, 603950 Россия

^сИнститут проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН,
Черноголовка, Московская область, 142432 Россия

*e-mail: brat_ras@list.ru

**e-mail: fomin@iptm.ru

Поступила в редакцию 10.06.2020 г.

После доработки 17.08.2020 г.

Принята к публикации 22.08.2020 г.

Проведено сравнение экспериментально изученной морфологии поверхности пленок сплава Гейслера Fe₂CoAl с теорией формирования фрактальной поверхности пленок. В основу этой теории положена задача Коши для упрощенного уравнения Кардара–Паризи–Жанга. Показано, что для начального фрактального профиля пленки ее можно сразу решить, применяя принцип Олейник–Лакса (слабое решение задачи). В рамках метода простого перебора предложена численная реализация принципа Олейник–Лакса. Введен векторный критерий качества роста поверхности исследуемой пленки. В качестве компонентов этого критерия апробированы следующие функционалы: норма спектральной плотности автокорреляционной функции поверхности пленки в гильбертовом пространстве, информация по Шеннону и фрактальная размерность поверхности пленки. Все эти функционалы вычисляются по профилю поверхности пленки в каждый момент времени. Описана методика получения образцов сплава Гейслера Fe₂CoAl.

Ключевые слова: атомно-силовая микроскопия, наноинженерия, метод характеристик, гессиан, сеточная функция, формула прямоугольных параллелепипедов, банахово пространство, формула Планшереля.

DOI: 10.31857/S1028096021040166

ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие во всем мире различные варианты сплавов Гейслера подвергаются интенсивным исследованиям. Значительный интерес к этим тройным соединениям переходных металлов с элементами III–V групп обусловлен перспективностью их применения в спинтронике. В зонной структуре некоторых из этих соединений уровень ферми находится в запрещенной зоне для электронов со спинами вверх (или вниз), в то время как для электронов с противоположными спинами это не так. Таким образом, ток переносят исключительно электроны с одним направлением спинов. Благодаря этому в спиновых вентилях на основе сплавов Гейслера было достигнуто гигантское магнитосопротивление: 40% при комнатной температуре и 200% при 10 К [1]. Однако помимо зонной структуры важную роль в увеличении магнитосопротивления играет морфология границы раздела. Следовательно, для понимания механизма максимизации магнитосопротивления необходим анализ моделей про-

странственно-временной эволюции поверхности пленок при их росте.

К настоящему времени предпринято довольно много попыток описания формирования неоднородного рельефа на поверхности твердого тела в разных физических ситуациях с помощью дифференциальных уравнений в частных производных следующего вида [2–4]:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = F\left(\frac{\partial H}{\partial x_1}, \frac{\partial H}{\partial x_2}, \frac{\partial^2 H}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 H}{\partial x_1 \partial x_2}, \frac{\partial^2 H}{\partial x_2^2}, \dots\right), \quad (1)$$

где функция $H(\mathbf{x}, t)$ — высота поверхности кристалла в точке $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ в каждый момент времени t , а нелинейная функция $F(\dots)$ определяется физическими механизмами процессов роста или эрозии рассматриваемой поверхности. Порядок пространственных производных, являющихся аргументами функции $F(\dots)$ в правой части уравнения (1), может быть весьма высок. Например, в модели Брэдли–Харпера для эволюции неоднородностей рельефа кристалла при бомбар-

дировке его ионами [3] учитывают производные до четвертого порядка включительно.

Как правило [2–4], для уравнения (1) ставится задача Коши, начальное условие

$$H(\mathbf{x}, 0) = H_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega_0 \subset R^2 \quad (2)$$

задает начальный профиль исследуемой поверхности над областью Ω_0 плоскости R^2 , перпендикулярно к которой происходит временная эволюция этой поверхности.

В настоящей работе эта процедура применена к описанию роста поверхности пленок сплава Гейслера Fe_2CoAl . Приведена методика экспериментов, в результате которых получены образцы сплавов Гейслера. Предложена математическая модель роста этих образцов. Описаны результаты численных расчетов временной эволюции толщины пленки сплава Гейслера и ряда функционалов, связанных с этой физической величиной.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Эпитаксиальные пленки сплава Гейслера Fe_2CoAl выращивали методом импульсного лазерного испарения в сверхвысоком вакууме на R -плоскости сапфира (Al_2O_3) с подслоем вольфрама (W) толщиной 10 нм с ориентацией (001) и без подслоя при температурах подложки 20–550°C. Скорость роста пленок c составляла 4 нм/мин, для получения средней толщины пленки 80 нм было выбрано время роста τ 20 мин. Технология выращивания пленок сплава Гейслера была аналогична той, которую с успехом применяли для эпитаксиального выращивания пленок никеля и железа на сапфире [5, 6]. Для исследования их морфологии использовали атомно-силовую микроскоп P47 solver НТ-МДТ, с помощью которого определяли начальный рельеф $H_0(\mathbf{x})$ поверхности подложки (2) и пленки $\tilde{H}(\mathbf{x}, \tau)$ после окончания ее роста в момент времени τ . Исследовали участки поверхности размерами 0.5×0.5 мкм с разрешением 512×512 точек. Измерения проводили в полуконтактном режиме с использованием кантилеверов Tipsnano с резонансной частотой около 180 кГц.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РОСТА ПЛЕНОК

Гипотезу о виде правой части уравнения (1), описывающего рост поверхности пленок сплава Гейслера Fe_2CoAl , сформулируем, отталкиваясь от феноменологической модели Кардара–Паризи–Жанга (КПЖ) [4]:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = c\sqrt{1 + (\nabla H)^2} + v\nabla^2 H, \quad (3)$$

где ∇ – двумерный градиент.

Это уравнение описывает два конкурирующих процесса: рост поверхности строго по локальной

нормали $\mathbf{n}(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{-\nabla H}{\sqrt{1 + (\nabla H)^2}}, \frac{1}{\sqrt{1 + (\nabla H)^2}} \right)$ к ней

со скоростью c и поверхностную диффузию осаждающегося на этой поверхности вещества с коэффициентом поверхностной диффузии v .

Однако уравнение (3) нелинейно и потому чрезвычайно сложно для исследования. Упростим его, рассмотрев малоугловое приближение: $|\nabla H| \ll 1$. Тогда после разложения, входящего в правую часть этого уравнения квадратного корня в ряд Тейлора получим:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = c + \frac{c}{2}(\nabla H)^2 + v\nabla^2 H. \quad (4)$$

Для уравнения (4) известны точные решения [7], однако будем считать, что характерная высота поверхности H удовлетворяет неравенству $H \gg v/c$. В этом случае второй член в правой части уравнения (4) доминирует над третьим членом. Это означает, что поверхностной диффузией можно пренебречь.

Таким образом, будем предполагать, что рост поверхности пленок сплава Гейслера Fe_2CoAl описывается следующей упрощенной моделью КПЖ:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = c + \frac{c}{2}(\nabla H)^2. \quad (5)$$

Решение $H(\mathbf{x}, t)$ уравнения (5) с начальным условием (2) в момент времени t с помощью метода характеристик [8] записывается неявно:

$$\mathbf{x} = \mathbf{y} - ct\nabla H_0(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y} \in \Omega_0, \quad (6)$$

$$H = H(\mathbf{y}, t), \quad (7)$$

где

$$H(\mathbf{y}, t) = ct + H_0(\mathbf{y}) - \frac{ct}{2}(\nabla H_0(\mathbf{y}))^2, \quad (8)$$

первый член в формуле (8) выражает однородный рост высоты пленки.

Однако представление решения уравнения КПЖ (5) в виде выражений (6)–(8) справедливо только до некоторого момента времени t_* – до наступления так называемой градиентной катастрофы [8]. После же градиентной катастрофы решение уравнения (5) строится с помощью принципа абсолютного максимума Олейник–Лакса [8].

Для того чтобы определить величину t_* , нужно обратиться к геометрическому смыслу переменных \mathbf{x} и \mathbf{y} , входящих в формулы (6)–(8). Вектор $\mathbf{y} \in \Omega_0$ является вектором лагранжевых координат, которые по формуле (6) преобразуются в эйлеровы координаты \mathbf{x} . Для получения высоты

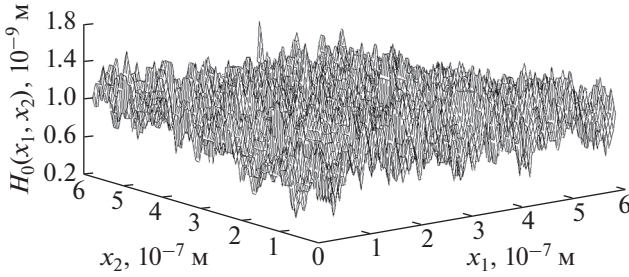


Рис. 1. Профиль подложки из сапфира, измеренный с помощью АСМ.

пленки $H(\mathbf{x}, t)$ необходимо обратить (6), т.е. получить зависимость лагранжевых координат от эйлеровых $\mathbf{y} = \mathbf{y}(\mathbf{x}, t)$ в момент времени t и подставить эту зависимость в формулу (7).

Взаимная однозначность отображения (6) определяется его якобианом:

$$J(\mathbf{y}, t) = \det \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1(\mathbf{y}, t)}{\partial y_1} & \frac{\partial x_1(\mathbf{y}, t)}{\partial y_2} \\ \frac{\partial x_2(\mathbf{y}, t)}{\partial y_1} & \frac{\partial x_2(\mathbf{y}, t)}{\partial y_2} \end{bmatrix}. \quad (9)$$

Вычисление величины (9) с помощью формулы (6) дает:

$$J(\mathbf{y}, t) = 1 - c y t \nabla^2 H_0(\mathbf{y}) + c^2 y t^2 y H e(\mathbf{y}), \quad (10)$$

где определитель матрицы Гессе начального профиля (2):

$$H e(\mathbf{y}) = \det \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 H_0(\mathbf{y})}{\partial y_1^2} & \frac{\partial^2 H_0(\mathbf{y})}{\partial y_1 \partial y_2} \\ \frac{\partial^2 H_0(\mathbf{y})}{\partial y_2 \partial y_1} & \frac{\partial^2 H_0(\mathbf{y})}{\partial y_2^2} \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Время t_* , когда отображение (6) теряет свою взаимную однозначность, и место \mathbf{y}_* , где это происходит, т.е. пространственно-временное положение градиентной катастрофы, находятся из системы уравнений:

$$J(\mathbf{y}_*, t_*) = 0, \quad \nabla J(\mathbf{y}_*, t_*) = 0. \quad (12)$$

На рис. 1 приведен типичный результат измерения начального рельефа поверхности исследуемых образцов с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ). Из этого рисунка видно, что функция $H_0(\mathbf{x})$ является существенно негладкой и, вообще говоря, фрактальной во всей области своего определения. Очевидно также, что любые попытки какой-либо аппроксимации [9] этих экспериментальных данных с гладкостью не меньше третьего порядка для того чтобы задать функцию (10), входящую в уравнения (12), обречены на неудачу. К счастью, вычислительный

эксперимент, проведенный в [10] для одномерного варианта уравнения (5), т.е. для поверхностей с цилиндрической образующей, показал, что для начального профиля со сколько-нибудь заметной фрактальностью градиентная катастрофа наступает практически мгновенно. Это означает, что можно сразу применять принцип абсолютного максимума Олейник–Лакса, дающий слабое решение задачи Коши для уравнения (5).

Напомним, следуя [8], основные положения этого принципа. Выделим из функции $H(\mathbf{x}, t)$ однородный рост высоты пленки:

$$H(\mathbf{x}, t) = ct + h(\mathbf{x}, t), \quad (13)$$

где $h(\mathbf{x}, t)$ – приведенная высота поверхности, и рассмотрим следующую функцию пяти переменных:

$$G(\mathbf{y}; \mathbf{x}, t) = H_0(\mathbf{y}) - \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{x})^2}{2ct}, \quad (14)$$

экстремум которой определяется условием $\nabla_{\mathbf{y}} G(\mathbf{y}; \mathbf{x}, t) = \nabla H_0(\mathbf{y}) - \frac{\mathbf{y} - \mathbf{x}}{ct} = 0$ и совпадает с формулой (6), определяющей отображение лагранжевых координат в эйлеровы.

Пусть $\mathbf{y}_w(\mathbf{x}, t)$ – точка абсолютного максимума функции (14) при фиксированных \mathbf{x} и t , которая найдена каким-либо методом:

$$\mathbf{y}_w(\mathbf{x}, t) = \arg \max_{\mathbf{y} \in \Omega_0} G(\mathbf{y}; \mathbf{x}, t). \quad (15)$$

Тогда согласно принципу Олейник–Лакса приведенная высота поверхности равна:

$$h(\mathbf{x}, t) = H_0(\mathbf{y}_w(\mathbf{x}, t)) - \frac{(\mathbf{y}_w(\mathbf{x}, t) - \mathbf{x})^2}{2ct} \equiv G(\mathbf{y}_w(\mathbf{x}, t); \mathbf{x}, t). \quad (16)$$

ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ В РАМКАХ ПРЕДЛОЖЕННОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Для соответствия с методикой проведенного эксперимента в качестве области Ω_0 целесообразно выбрать квадрат $\Omega_0 = (0, L) \times (0, L)$ со стороной $L = 0.5$ мкм. Поскольку данные АСМ о высоте поверхности образцов представляют собой квадратную матрицу большого размера, естественно в области Ω_0 ввести квадратную сетку $\omega_\Delta = \{(l\Delta, m\Delta); l, m = \overline{1, N}\}$ с $N = 512$ и шагом $\Delta = L/N \approx 1$ нм. Результаты измерений начального профиля $H_0(\mathbf{x})$ в момент времени $t = 0$ и приведенной высоты образца $h(\mathbf{x}, t)$ в моменты времени $t = t_k$ становятся сеточными функциями на ω_Δ : $h_{lm}^0 = H_0(l\Delta, m\Delta)$ и $h_{lm}^k = h(l\Delta, m\Delta, t_k)$ соответственно.

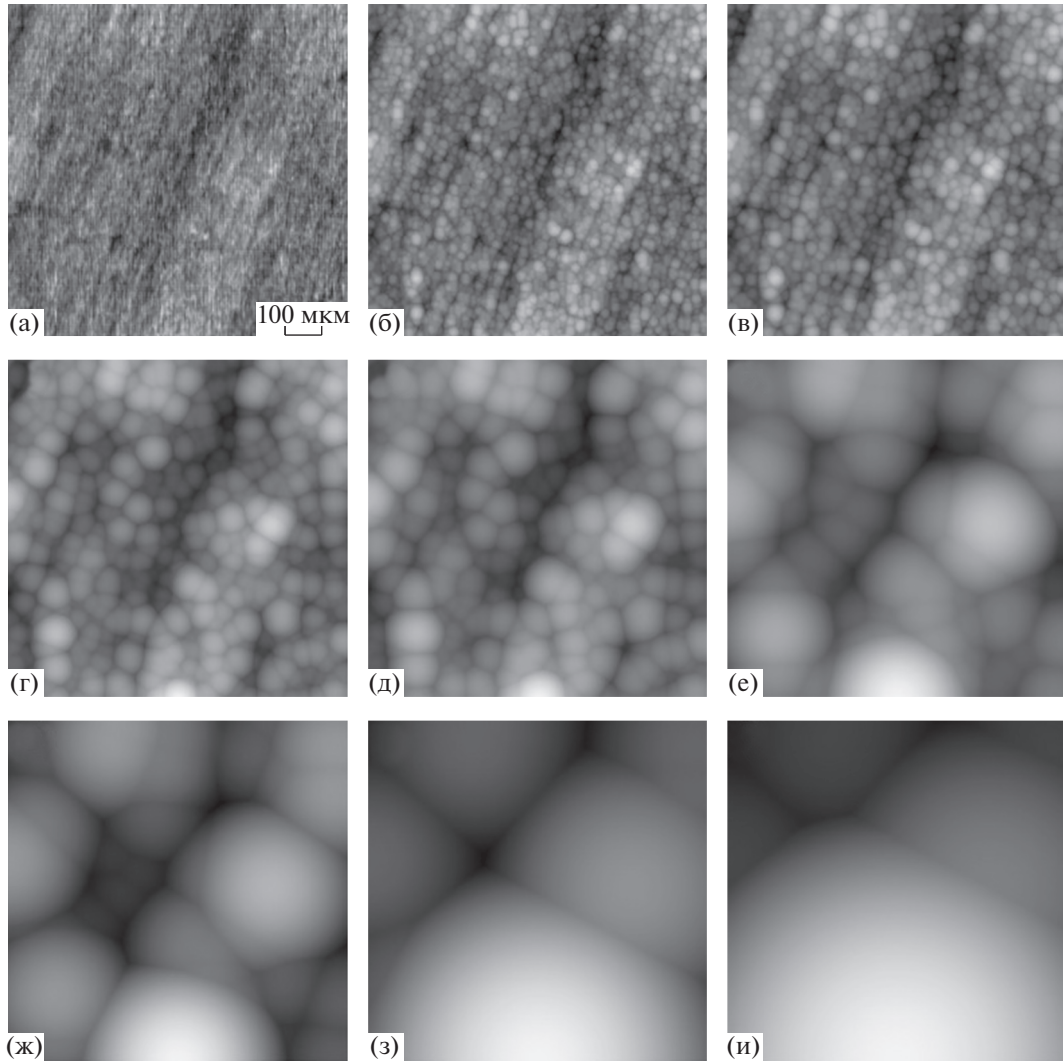


Рис. 2. Результат моделирования поверхности растущей пленки согласно теории КПЖ при нормированном времени роста t/t_0 : 1×10^{-6} (а); 5×10^{-5} (б); 1×10^{-4} (в); 5×10^{-4} (г); 1×10^{-3} (д); 5×10^{-3} (е); 1×10^{-2} (ж); 5×10^{-2} (з); 1×10^{-1} (и).

Максимум (15) функции (14) принципа Олейник–Лакса отыскивали методом простого перебора, а именно для фиксированного вектора $\mathbf{x} \in \omega_\Delta$ при $t = t_k$ вычисляли значения функции (14), когда вектор \mathbf{y} пробегал всю сетку ω_Δ . Затем по найденным индексам (l, m) , соответствующим максимальной величине этой функции, определялся вектор \mathbf{y}_{lm}^k , т.е. отображение эйлеровых координат в лагранжевы в момент времени t_k на сетке ω_Δ , и затем по нему рассчитывали по формуле (16) приведенную высоту поверхности $h(\mathbf{x}, t)$. Результаты этих расчетов приведены на рис. 2.

Знание сеточной функции h_{lm}^k позволяет исследовать временную эволюцию таких важных ха-

рактеристик приведенной высоты $h(\mathbf{x}, t)$ поверхности образца, как автокорреляционная функция

$$K(\mathbf{x}, t) = \langle h(\boldsymbol{\xi}, t)h(\boldsymbol{\xi} + \mathbf{x}, t) \rangle \quad (17)$$

и ее спектральная плотность

$$S(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega_0} K(\mathbf{x}, t) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}) d^2x. \quad (18)$$

Особенно интересна следующая интегральная характеристика функции (18):

$$\|S\|_2(t) = \left[\int_{R^2} |S(\mathbf{q}, t)|^2 d^2q \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (19)$$

т.е. ее норма в гильбертовом пространстве $L^2(R^2)$.

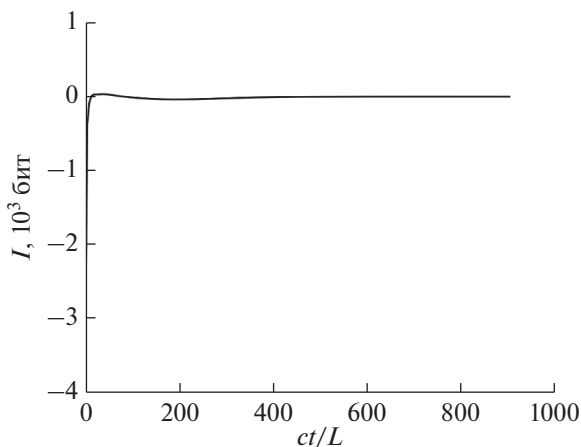


Рис. 3. Зависимость количества информации смоделированной поверхности растущей пленки согласно теории КПЖ от нормированного на размер скана времени роста.

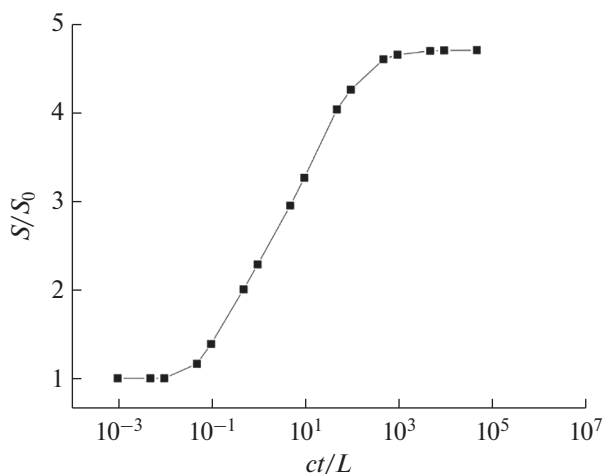


Рис. 4. Зависимость нормы спектральной плотности, отнесенной к ее значению при $t = 0$, смоделированной поверхности растущей пленки согласно теории КПЖ от нормированного на размер скана времени роста.

Для того чтобы избежать вычисления двумерного преобразования Фурье в (18) и последующего интегрирования по всей плоскости, величину (19) удобно переписать с помощью формулы Планшелля следующим образом:

$$\|S\|_2(t) = \left[\int_{\Omega_0} K^2(\mathbf{x}, t) d^2x \right]^{1/2}. \quad (20)$$

Для приведенной высоты поверхности $h(\mathbf{x}, t)$ можно рассмотреть еще один функционал – информацию по Шеннону:

$$I[h(\mathbf{x}, t)] = -\frac{1}{\sigma_0^2} \int_{\Omega_0} \frac{|h(\mathbf{x}, t)|}{\sigma_0} \log_2 \frac{|h(\mathbf{x}, t)|}{\sigma_0} d^2x, \quad (21)$$

где $\sigma_0 = \sqrt{\langle H_0^2(\mathbf{x}) \rangle} \equiv K(0, 0)$.

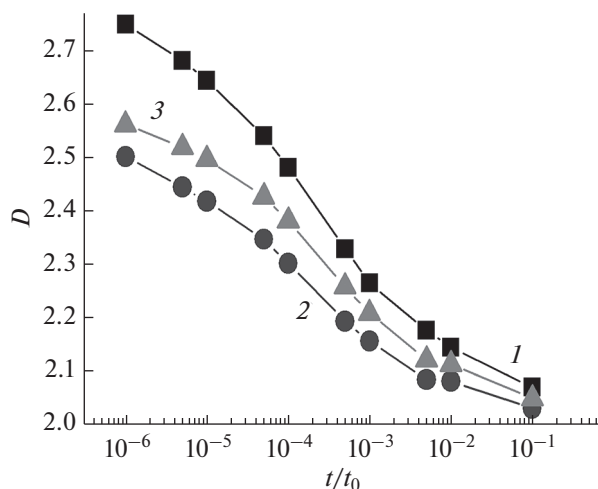


Рис. 5. Зависимость фрактальной размерности смоделированного согласно теории КПЖ рельефа поверхности пленок, растущих на подложке сапфира, от нормированного времени роста. Фрактальную размерность рассчитывали методами декомпозиции (1), подсчета числа кубов (2) и триангуляции (3).

По известной сеточной функции h_{lm}^k функционалы (20) и (21) можно оценить следующим образом:

$$I_k \approx -\frac{\Delta^2}{\sigma_0^2} \sum_{l=1}^N \sum_{m=1}^N \frac{|h_{lm}^k|}{\sigma_0} \log_2 \frac{|h_{lm}^k|}{\sigma_0} \quad (22)$$

и

$$\|S\|_2(t_k) \approx \Delta \left[\sum_{l=1}^N \sum_{m=1}^N (K_{lm}^k)^2 \right]^{1/2}, \quad (23)$$

где K_{lm}^k – значения функции (17) на сетке ω_Δ . Результаты вычислений по формулам (22) и (23) представлены на рис. 3 и 4 соответственно.

Приведенная высота поверхности $h(\mathbf{x}, t)$ в каждый момент времени также может быть охарактеризована своей фрактальной размерностью. На рис. 5 показана зависимость фрактальной размерности смоделированного согласно теории КПЖ рельефа поверхности пленок, растущих на подложке сапфира, от нормированного времени роста. Эту величину оценивали с помощью методик [11] подсчета кубов, триангуляции, декомпозиции.

На рис. 6 показаны зависимости фрактальной размерности пленок сплава Гейслера от температуры роста, вычисленные по АСМ-изображениям с помощью разных методик [11]: подсчета кубов, триангуляции, декомпозиции, а также расчета спектральной плотности флуктуаций. Для пленок, выращенных с подслоем W, фрактальная

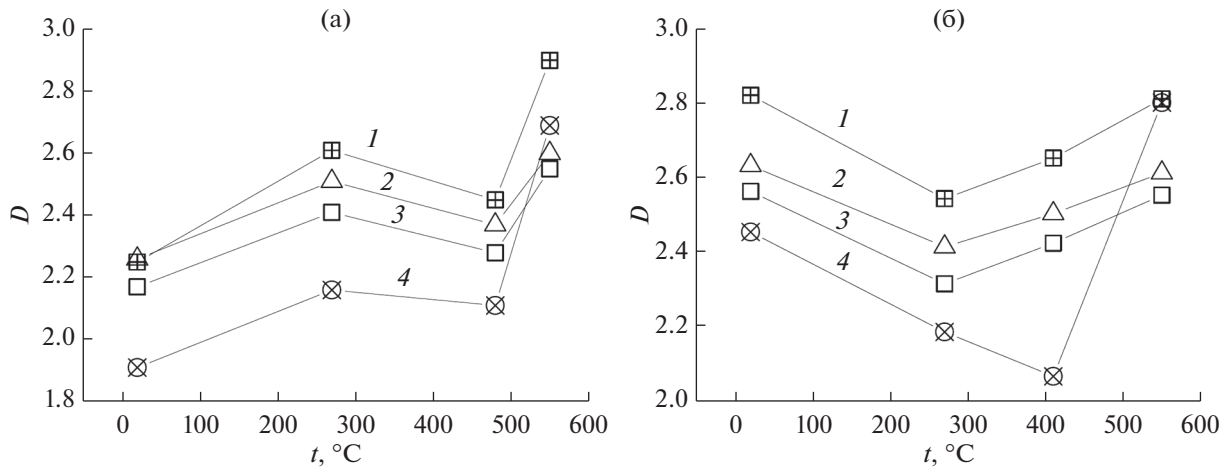


Рис. 6. Зависимость фрактальной размерности от температуры роста пленок сплава Гейслера, выращенных с подслоем W (а) и без подслоя (б), вычисленная по АСМ-изображениям с помощью разных методов: декомпозиции (1); триангуляции (2); подсчета кубов (3); расчета спектральной плотности флуктуаций (4).

размерность повышается с увеличением температуры роста, однако имеется локальный минимум при 480°C. Фрактальная размерность пленок, выращенных без подслоя, минимальна при 270°C, однако метод спектральной плотности показывает минимум при большей температуре. Возможно, это связано с ошибками, вносимыми прибором при сканировании поверхности. Таким образом, оптимальная по фрактальной размерности температура роста пленок без подслоя составляет 270°C, а с подслоем W 480°C.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сравнение АСМ-изображений выращенных пленок сплавов Гейслера с упрощенной моделью роста поверхности КПЖ (5) показало качественное согласие. Безусловно, на сигнал АСМ и, соответственно, на его расшифровку помимо топографии поверхности влияет еще много факторов, а именно жесткость и амплитудно-частотные характеристики системы кантилевер—поверхность, адгезионные свойства поверхности, зависящие от ее кривизны, внутренние напряжения и дефекты структуры. В рамках представленного анализа влияние этих факторов считается пренебрежимо малым, однако в перспективе планируется оценка масштаба вклада в сигнал АСМ всех этих факторов.

Значение обработки методов оценки спектрального (20) и информационного (21) функционалов, связанных с высотой растущей поверхности, состоит в следующем. Особенностью моделей вида (1), к которым принадлежит и рассмотрен-

ная выше модель КПЖ (5), является возможность введения в них управления u :

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \tilde{F} \left(\frac{\partial H}{\partial x_1}, \frac{\partial H}{\partial x_2}, \frac{\partial^2 H}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 H}{\partial x_1 \partial x_2}, \frac{\partial^2 H}{\partial x_2^2}, \dots; u \right), \quad (24)$$

где $u(\mathbf{x}, t) \in R^m$ — вектор-функция, определенная на цилиндре $\Omega_0 \times [0, \tau]$. Каждую из m компонент вектор-функции $u(\mathbf{x}, t)$ можно трактовать как распределение тензора упругих напряжений на поверхности, напряженность электрического или магнитного поля на поверхности, температуру поверхности и так далее. Очевидно, что в отсутствие управления функция \tilde{F} должна переходить в функцию F : $\tilde{F}|_{u=0} = F$.

Для уравнения (24) целесообразно выбрать пространство состояний — функциональное пространство, для того чтобы рассматривать в нем это уравнение как бесконечномерную динамическую систему. Наиболее удобным выбором является банахово пространство $L^p(\Omega_0)$ с нормой:

$$\|H\|_p = \left[\int_{\Omega_0} |H(\mathbf{x}, t)|^p d^2x \right]^{\frac{1}{p}}, \quad 1 \leq p < \infty. \quad (25)$$

Управление $u(\mathbf{x}, t)$ можно считать элементом банахова пространства $L_m^p(\Omega_0)$ с нормой:

$$\|u\|_p = \left[\sum_{k=1}^m \int_{\Omega_0} |u_k(\mathbf{x}, t)|^p d^2x \right]^{\frac{1}{p}}, \quad 1 \leq p < \infty. \quad (26)$$

Рассмотрим функционал вида:

$$\Phi[H, u] = \int_0^\tau \int_{\Omega_0} \varphi \left(\frac{\partial H}{\partial x_1}, \frac{\partial H}{\partial x_2}, \dots; u \right) d^2 x dt. \quad (27)$$

В этом случае возможна постановка задачи оптимального управления распределенной системой [12]: найти функции $H \in L^p(\Omega_0)$ и $u \in L_m^p(\Omega_0)$ такие, что на отрезке времени $t \in [0, \tau]$ эти функции удовлетворяют уравнению (24) и минимизируют функционал (27). Это означает, что при придании функционалу (27) ясного физического смысла открывается возможность для осуществления нанотехнологии, т.е. выращивания наноструктур с заданными свойствами. В частности, в [13] был предложен следующий функционал:

$$\int_{\Omega_0} [H(\mathbf{x}, \tau) - H_*(\mathbf{x})]^2 d^2 x \rightarrow \min, \quad (28)$$

имеющий смысл наилучшего приближения (в норме пространства $L^2(\Omega_0)$) с помощью управления $u(\mathbf{x}, t)$ фиксированного профиля $H_*(\mathbf{x})$ высотой поверхности образца $H(\mathbf{x}, \tau)$ к моменту времени τ .

Однако для практической реализации нанотехнологии в каждом конкретном случае в первую очередь необходимо верифицировать уравнение (1), т.е. убедиться, что для каждого конкретного материала формирование неоднородного рельефа поверхности кристалла идет согласно этому уравнению с соответствующей данному материалу и физическому процессу функцией $F(\dots)$. Для формализации процедуры верификации рассмотрим вектор-функцию:

$$\mathbf{Q}(t) = (\|S\|_2(t) / \|S\|_2(0), I(t), D(t))^T, \quad t \in [0, \tau], \quad (29)$$

в которую входят функционалы (20) и (21), а также фрактальная размерность поверхности, определенные по решению $H(\mathbf{x}, t)$ задачи Коши (1), (2) с выбранным априори видом функции $F(\dots)$. И пусть $\tilde{\mathbf{Q}}(t)$ – вектор той же структуры, компоненты которого оцениваются по данным АСМ-измерений.

Введем в пространстве вектор-функций (29) норму

$$\|\mathbf{Q}\|_p = \left[\int_0^\tau \left(\sum_{j=1}^3 |Q_j(t) - \tilde{Q}_j(t)|^p \right) dt \right]^{1/p}, \quad 1 \leq p < \infty \quad (30)$$

и зафиксируем порог $\varepsilon > 0$. Тогда, если для критериев $\mathbf{Q}(t)$ и $\tilde{\mathbf{Q}}(t)$, начинающихся в одной точке, $\|\mathbf{Q} - \tilde{\mathbf{Q}}\|_p < \varepsilon$, то выбор функции $F(\dots)$ считается соответствующим эксперименту. В противном случае функцию $F(\dots)$ надо изменить – дополнить новыми членами, модифицировать уже име-

ющиеся в ней выражения и так далее. Поскольку норма (30) определяется по разности векторов вида (29), критерий качества $\|\mathbf{Q} - \tilde{\mathbf{Q}}\|_p < \varepsilon$ был назван векторным критерием качества.

Подчеркнем, что включение в векторный критерий качества функционала, характеризующего фрактальность поверхности, обусловлено обработкой результатов эксперимента. Ранее это обстоятельство привело к рассмотрению в [5] процессов рассеяния электронов на фрактальных поверхностях эпитаксиальных металлических пленок и ферромагнитных наноструктур. Более того, в [14] на основе изучения АСМ-изображений поверхностей для целого ряда образцов конструктивных материалов, подвергнутых типовым процессам физико-химической обработки, таким как микродуговое окислирование, алмазное шлифование, однозначно показано, что исследованные поверхности являются фрактальными. Таким образом, фрактальность в физике поверхности является правилом, а не исключением.

В векторный критерий качества могут быть включены не только величины, связанные с АСМ, но и результаты других возможных, не повреждающих поверхность измерений. Так, в [15] рассматривали не только АСМ-измерения, но данные рассеяния света на поверхности образца. Интегралы (20) и (21) можно вычислять не только по формулам прямоугольных параллелепипедов (22) и (23), но и с помощью более точных кубатурных формул [16]. Освоение таких продвинутых численных алгоритмов открывает дорогу к верификации нелокальных моделей эволюции поверхности [17, 18] на суперЭВМ экзафлопсной производительности [19].

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа поддержана РФФИ (грант № 18-08-01356-а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Nakatani T.M., Hase N., Goripati H.S. et al. // IEEE Trans. Magn. 2012. V. 48. № 5. P. 1751.
2. Горай Л.И., Лубов М.Н. // Поверхность. Рентген-, синхротр. и нейтрон. исслед. 2014. № 5. С. 39.
3. Кудряшов Н.А., Рябов П.Н., Стриханов М.Н. // Ядерная физика и инжиниринг. 2010. Т. 1. № 2. С. 151.
4. Kardar M., Parisi G., Zhang Y.C. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 889.
5. Фомин Л.А., Маликов И.В., Винниченко В.Ю. и др. // Поверхность. Рентген-, синхротр. и нейтрон. исслед. 2008. № 2. С. 27.
6. Fomin L.A., Malikov I.V., Pyatkin S.V., Mikhailov G.M. // J. Magn. Magn. Mater. 2010 V. 322. P. 851.
7. Рассадин А.Э., Степанов А.В., Фомин Л.А. // Adv. Sci. 2018. № 1. P. 28.

8. Гурбатов С.Н., Руденко О.В., Саичев А.И. Волны и структуры в нелинейных средах без дисперсии. Приложения к нелинейной акустике. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 496 с.
9. Стечкин С.Б., Субботин Ю.Н. Сплайны в вычислительной математике. М.: Наука, 1976. 248 с.
10. Rassadin A.E., Stepanov A.V., Fomin L.A. Peculiarities of Evolution of Regularized Fractal Shapes on Surface of Solid State in the Vicinity of Gradient Catastrophe // Book of Abstr. Int. Conf.-School "Dynamics, Bifurcations and Chaos 2018 (DBC V)". Nizhny Novgorod, 2018. P. 30.
11. Потапов А.А., Гуляев Ю.В., Никитов С.А. и др. Новейшие методы обработки изображений / Ред. Потапов А.А. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 496 с.
12. Фурсиков А.В. Оптимальное управление распределенными системами. Теория и приложения. Новосибирск: Научная книга, 1999. 352 с.
13. Rassadin A.E., Sazanova T.S., Stepanov A.V., Fomin L.A. // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2018. V. 443. № 1. P. 012027.
14. Потапов А.А., Булавкин В.В., Герман В.А., Вячеславова О.Ф. // ЖТФ. 2005. Т. 75. № 5. С. 28.
15. Rassadin A.E. // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2019. V. 699. P. 012039.
16. Мысовских И.П. Интерполяционные кубатурные формулы. М.: Наука, 1981. 336 с.
17. Рудый А.С., Куликов А.Н., Куликов Д.А., Метлицкая А.В. // Микроэлектроника. 2014. Т. 43. № 4. С. 282.
18. Куликов А.Н., Куликов Д.А. // Математическое моделирование. 2016. Т. 28. № 3. С. 33.
19. Ким А.К., Перекаатов В.И., Фельдман В.М. // Вопросы радиоэлектроники. 2018. № 2. С. 6.

Model of the Growth of Epitaxial Films from Heusler Alloy

I. V. Vorotyntsev¹, A. E. Rassadin², *, L. A. Fomin^{2,3}, **, I. V. Malikov³

¹Nizhny Novgorod State Technical University, Nizhny Novgorod, 603950 Russia

²Nizhny Novgorod Mathematical Society, Nizhny Novgorod, 603600 Russia

³Institute of Microelectronics Technology and High Purity Materials RAS, Chernogolovka, Moscow Region, 142432 Russia

*e-mail: brat_ras@list.ru

**e-mail: fomin@iptm.ru

The experimentally studied surface morphology of films of the Heusler alloy Fe_2CoAl is compared with the theory of formation of the fractal surface of the films. This theory is based on the Cauchy problem for the simplified Kardar–Parisi–Zhang equation. It is shown that for the initial fractal shape of the film it can be solved immediately by applying the Oleinik–Lax principle (a weak solution of the problem). A numerical implementation of the Oleinik–Lax principle is proposed within the framework of the simple sorting method. A vector criterion for the growth quality of the surface of the studied film is introduced. The following functionals have been tested as components of this criterion: the norm of the spectral density of the autocorrelation function of the film surface in the Hilbert space, Shannon information, and the fractal dimension of the film surface. All these functionals are calculated from the shape of the film surface at each moment of time. A procedure for obtaining samples of the Heusler alloy Fe_2CoAl is described.

Keywords: atomic force microscopy, nanoengineering, method of characteristics, Hessian, network function, rectangular parallelepiped formula, Banach space, Plancherel formula.