**Григорьев Федор Васильевич Математическое моделирование процесса напыления тонких пленок, их структуры и свойств**

ОГЛАВЛЕНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

доктор наук Григорьев Федор Васильевич

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА 1. СХЕМА МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА НАПЫЛЕНИЯ ТОНКИХ

ПЛЕНОК

§1.Моделирование тонкопленочных материалов и тонких пленок (обзор)

1.1.Методы моделирования

1.1.1.Входные данные

1.1.2.Классическая молекулярная динамика и метод Монте-Карло

1.1.3.Кинетический метод Монте-Карло

1.1.4.Квантовые методы

1.1.5.Другие методы моделирования

1.1.6.Многомасштабное моделирование

1.2.Программное обеспечение для моделирования тонких пленок

1.3.Структурные свойства

1.4.Механические свойства

1.5.Оптические и электронные свойства

§ 2. Схема молекулярно-динамического моделирования напыления тонких пленок

2.1.Экспериментальные условия приготовления тонких пленок. Выбор объекта

моделирования. Выделение области атомистического моделирования

2.2.Параматеризация силового поля БЕБГЬ

2.3.Подготовка подложки

2.4.Взаимодействие одиночного атома с подложкой

2.5.Алгоритм моделирования

2.6.Программная реализация алгоритма моделирования. Численная эффективность

2.7. Моделирование напыления тонких пленок с использованием программы

ЬЛММРБ

§ З.Заключение к Главе

ГЛАВА 2.СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА

§ 1.Профиль плотности

§ 2.Пористость

§ З.Шероховатость

§ 4.Статистика структурных колец

§ 5.Влияние наночастиц на структуру пленки

§ б.Экспериментальное сравнение показателей преломления стекла и пленки

§ 7.Заключение к Главе

ГЛАВА 3.МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

§ 1. Механические напряжения в тонких пленках

§ 2.Расчет механических потерь

§ З.Заключение к Главе

ГЛАВА 4.МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОСТ-ПРОЦЕССИНГА

§ 1.Термический отжиг

§ 2.Комбинированное воздействие температуры и давления

§ 3.3аключение к Главе

ГЛАВА 5.ПЛЕНКИ С НИЗКИМ ПОКАЗАТЕЛЕМ ПРЕЛОМЛЕНИЯ

§ 1.Структура слоя с низким показателем преломления

§ 2.Структура переходного слоя

§ 3.Показатель преломления переходного слоя

§ 4.Отжиг слоев с чередующейся плотностью

§ 5.Напыление с альтернированием угла

§ б.Заключение к Главе

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ ДИССЕРТАЦИИ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ СОКРАЩЕНИЙ

БЛАГОДАРНОСТИ