

11,12

## Формирование наночастиц катализатора роста углеродных нанотрубок при отжиге аморфных пленок Co-Zr-O

© С.В. Булярский<sup>1</sup>, П.Е. Львов<sup>1,2</sup>, А.А. Павлов<sup>1</sup>, А.В. Терентьев<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup> Ульяновский государственный университет, Ульяновск, Россия

<sup>3</sup> Московский институт электроники и математики, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия

E-mail: bulyar2954@mail.ru

Поступила в Редакцию 2 июня 2022 г.

В окончательной редакции 2 июня 2022 г.

Принята к публикации 12 июня 2022 г.

Формирование наноразмерных частиц катализатора роста углеродных нанотрубок может быть осуществлено при кристаллизации аморфных пленок, состоящих из двух металлов, один из которых имеет более высокую свободную энергию оксида. При отжиге, в присутствии кислорода, этот металл окисляется с восстановлением второго металла, который образует наночастицы, размещенные в оксиде первого. Этот процесс экспериментально и теоретически изучен на примере образования наночастиц кобальта на поверхности аморфных пленок Co-Zr-O в результате распада пересыщенного твердого раствора и механических напряжений, возникающих при окислении циркония. Предложен механизм и феноменологическая модель формирования наночастиц кобальта, разработанная на основе теории фазового поля.

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки, наночастицы катализаторов, фазовые переходы, распад пересыщенных твердых растворов.

DOI: 10.21883/FTT.2022.11.53340.394

### 1. Введение

Вертикальные массивы углеродных нанотрубок, выращенные на кремниевых планарных подложках, используются в различных устройствах электроники. Углеродные нанотрубки в этих массивах, должны иметь малый разброс по своим диаметрам и быть преимущественно без изгибов. Для достижения таких параметров, важны выбор и технология подготовки наночастиц катализатора на планарной подложке. Данные наночастицы определяют основные характеристики нанотрубок: совершенство графеновых плоскостей, их образующих, возникновение изгибов трубок, диаметр, длину и темпы роста массива [1,2]. Одним из основных недостатков наночастиц, которые формируются при плавлении тонких пленок металла катализатора, является большая дисперсия распределения наночастиц по размерам и явление коалесценции, которое приводит к изменению размеров частиц непосредственно при синтезе УНТ. При этом синтезированные нанотрубки также имеют большой разброс диаметров и на них появляются изгибы. Оба фактора отрицательно влияют на качество приборов. Для преодоления этих недостатков разрабатываются иные технологии формирования наночастиц, в том числе с использованием мезоскопических нанопористых материалов для формирования наночастиц катализаторов [3–5]. Результатом являются пористые оксидные системы и наночастицы катализатора размеща-

ются в этих порах. Такой подход имеет ряд недостатков для планарной технологии. Во-первых, технология формирования таких катализаторов достаточно сложная, она включает несколько стадий, которые могут быть источниками загрязнения планарной подложки, на которой формируется интегральная схема. Во-вторых, металлическая наночастица оказывается погруженной в оксид, который, как правило, является диэлектриком и плохо проводит электрический ток, что ограничивает его применение для создания нанoeлектронных элементов.

Для преодоления этих недостатков были предложены катализаторы, которые используют явления распада пересыщенных твердых растворов [7–10]. Изготовление таких катализаторов заключается в напылении на подложку тонкой аморфной пленки, которая является твердым раствором оксида либо оксинитрида с растворенным в нем переходным металлом, выступающим в роли катализатора роста углеродных нанотрубок. При нагревании пленки происходит распад пересыщенного твердого раствора, в результате которого формируются наночастицы катализатора. Преимуществом этих катализаторов перед мезапористыми являются более высокая проводимость каталитического слоя. Целью данной работы является обоснование механизма формирования частиц катализатора при распаде пересыщенных твердых растворов на основе экспериментальных данных, полученных на аморфных пленках Co-Zr-O, а также

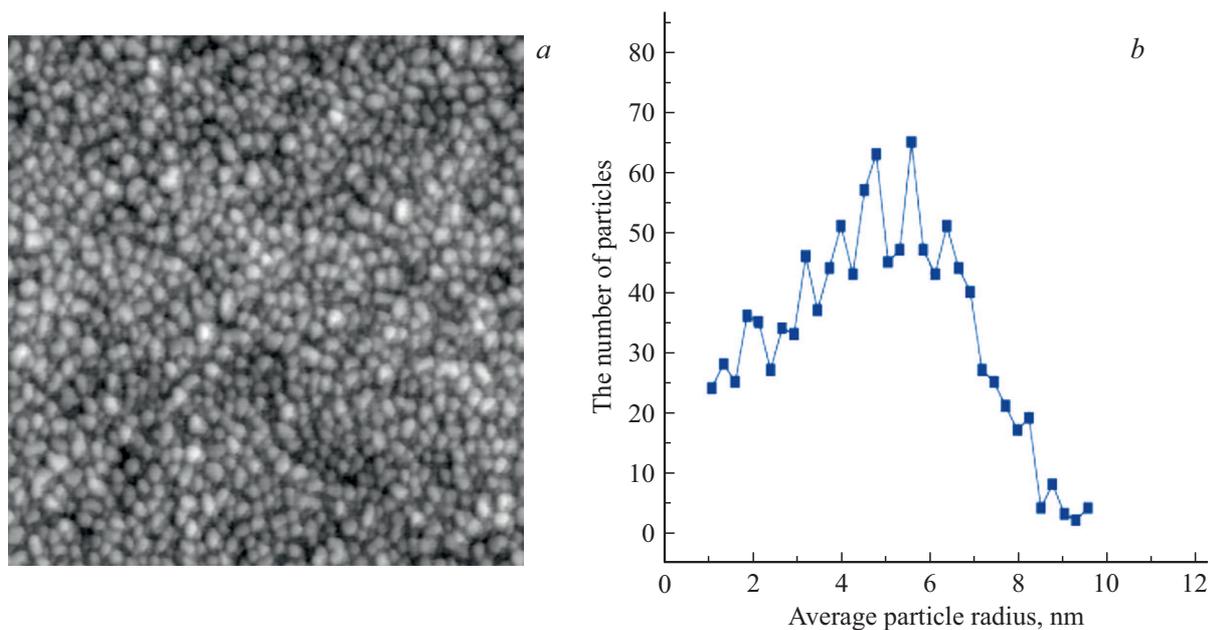


Рис. 1. Изображение поверхности пленки в атомно-силовом микроскопе (а) и распределение наночастиц по величине радиуса (б).

создание теоретической модели, описывающей данный процесс.

## 2. Экспериментальные результаты

Для изучения формирования частиц катализатора из аморфных пленок Co-Zr-O были изготовлены образцы на кремниевой планарной подложке. Тонкие пленки этого материала создавались методом электронно-лучевого напыления кобальта и циркония одновременно сразу из двух тиглей. Мощность электронных лучей подбиралась так, чтобы состав пленки соответствовал 30% кобальта и 70% циркония. Величина потока кислорода в реакторе, при испарении металлов, составляла 5 сссм. Толщина пленки составляла от 25 до 30 nm.

Пленки подвергались отжигу. Первая стадия отжига (окисление) проводилась при температуре 280°C в течении 5 минут в плазме кислорода, возбуждаемой высокочастотным разрядом мощностью 30 W. Вторая стадия отжига (восстановление) проводилась в атмосфере аргона и аммиака при температуре 700°C в течении 5 минут. Синтез углеродных нанотрубок осуществлялся в смеси ацетилена, аммиака и аргона 30 : 20 : 100 при температуре 700°C в течении 10 минут. Массив углеродных нанотрубок, полученный по данной технологии, состоял из вертикальных, хорошо ориентированных нанотрубок с диаметром от 8 до 14 nm. В дальнейшем, для анализа формирования наночастиц катализатора, проводилась имитация процесса синтеза, при которой длительность второй стадии составляла 15 минут, а ацетилен в реакторе отсутствовал.

Изображение поверхности катализатора после второй стадии было получено с помощью атомно-силового

микроскопа и показано на рис. 1. Частицы катализатора четко ограничены и имеют узкую дисперсию распределения по величине среднего радиуса. Диаметр частиц соответствует диаметру формируемых на них нанотрубок.

Фазовый состав пленок до и после образования наночастицами катализатора, изучался методом рентгеноструктурного анализа. Исходные образцы, сразу после нанесения пленки, являются рентгеноаморфными. В процессе отжига при температуре 700°C, происходит кристаллизация пленки. Таким образом, после отжига при 700°C происходит распад рентгеноаморфного твердого раствора с образованием оксида циркония и металлического кобальта. Металлический кобальт выходит на

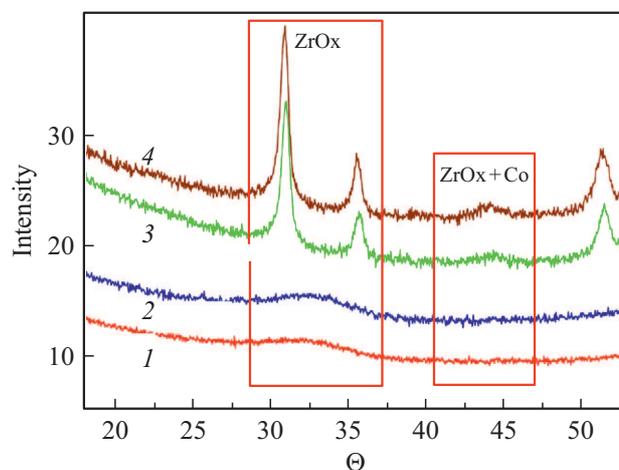


Рис. 2. Результаты рентгеноструктурного анализа первой партии образцов: 1 — исходный, 2 — окисленный, 3 — восстановленный 5 min, 4 — восстановленный 15 min.

поверхность в виде наночастиц катализатора, которые имеют высокую однородность и узкую дисперсию распределения (рис. 2).

В процессе отжига дисперсия распределения не изменяется и явление коалесценции не наблюдается, в отличие от формирования наночастиц при плавлении тонкой пленки металла катализатора.

### 3. Феноменологическая модель формирования наночастиц катализатора при кристаллизации аморфных пленок

Для анализа процесса формирования частиц будем использовать феноменологические подходы теории фазового поля [10]. В соответствии с базовой концепцией данного подхода вводится набор неконсервативных параметров порядка  $\eta_i$ , каждый из которых соответствует некоторой ориентации зерна относительно выбранного направления [11–16]. Обычно количество рассматриваемых параметров порядка составляет несколько десятков, а динамика каждого из них рассматривается с помощью уравнения Гинзбурга–Ландау. Такой подход широко применяется для анализа процесса формирования и роста зерен как в однофазных [11], так и в двухфазных системах [12–16]. Данный феноменологический подход позволяет рассчитать динамику роста зерен, определить функции распределения по размерам, а также получить сведения о характере формирования границ зерен и стыков, которые в значительной степени определяют механические и электрические свойства материала.

Главной особенностью системы Co-Zr-O, и подобных ей систем, является изменение объема пленки при переходе из аморфного состояния в кристаллическое состояние. При этом в ней возникают механические напряжения. Данный процесс обнаруживается в экспериментах по наличию некоторого растрескивания пленки. Таким образом, при отжиге аморфной пленки Co-Zr-O происходит ее кристаллизация с образованием обедненных (Zr-O) и обогащенных по растворенному компоненту (Co). Будем характеризовать зерна параметрами порядка  $\eta_i^\alpha$  и  $\eta_i^\beta$ , где индексы  $\alpha$  и  $\beta$  относятся к обогащенной и обедненной по кобальту фазам, соответственно. Данные параметры порядка имеют значение равное 0 в аморфном и  $\pm 1$  в кристаллизованном состоянии. Используя базовые подходы теории фазового поля [10–12], запишем функционал плотности свободной энергии в виде

$$F = \int_V \left[ f(\xi, c, \{\eta_i^\alpha\}, \{\eta_i^\beta\}) + \frac{\kappa_\xi}{2} (\nabla \xi)^2 + \frac{\kappa_c}{2} (\nabla c)^2 + \frac{\kappa_\alpha}{2} \sum_i (\nabla \eta_i^\alpha)^2 + \frac{\kappa_\beta}{2} \sum_i (\nabla \eta_i^\beta)^2 \right] dV, \tag{1}$$

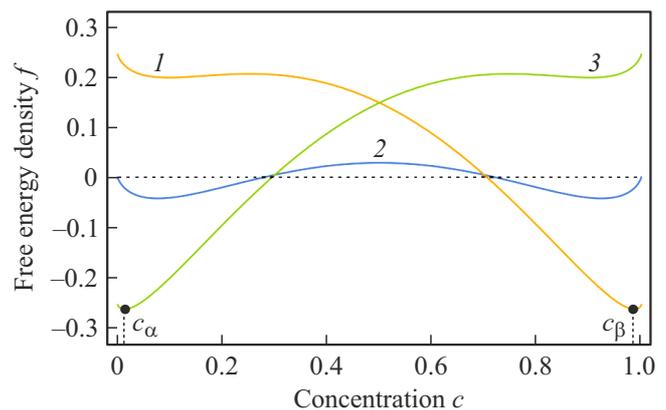
где  $\xi$  — параметр порядка пропорциональный концентрации вещества, который принимает значение 1 в

твердом состоянии и 0 во внешней среде,  $c$  — концентрационное поле, соответствующее распределению кобальта в системе,  $\kappa_\xi, \kappa_c, \kappa_\eta^\alpha, \kappa_\eta^\beta$  — коэффициенты градиентной энергии.

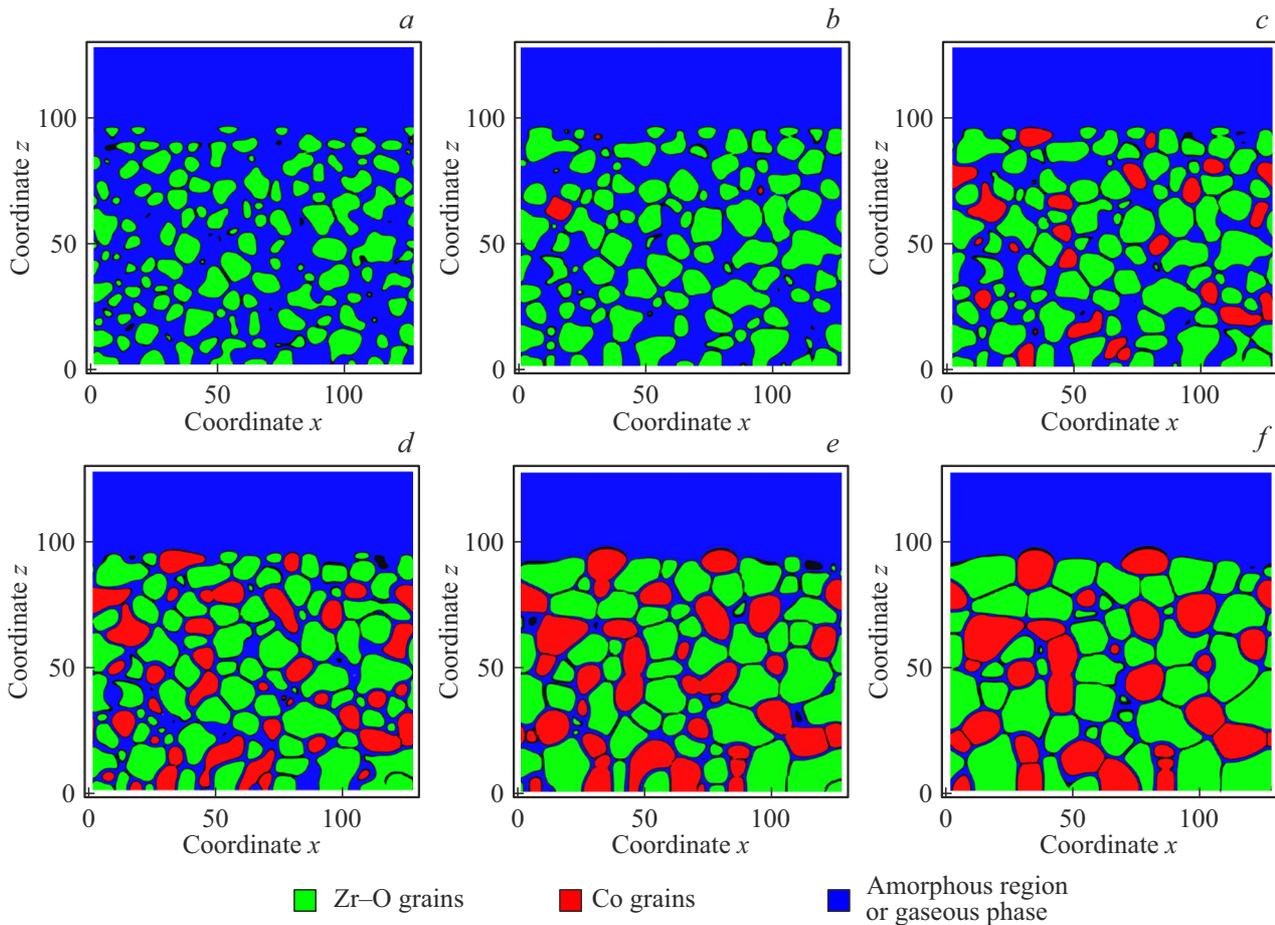
Принимая приближение регулярных растворов (смесей), в системе с переменным значением параметра порядка  $\xi$  плотность свободной энергии может быть записана в виде

$$f(\xi, c, \{\eta_i^\alpha\}, \{\eta_i^\beta\}) = \frac{1}{2} W \xi^2 (1 - \xi)^2 + \Omega(\xi) c (1 - c) \xi^2 + k_B T [\xi c \ln(\xi c) + (1 - c) \xi \ln(\xi(1 - c))] - \frac{a_\alpha}{2} \xi^4 (1 - c)^2 \sum_i (\eta_i^\alpha)^2 - \frac{a_\beta}{2} \xi^4 c^2 \sum_i (\eta_i^\beta)^2 + \frac{b_\alpha}{4} \xi^4 \sum_i (\eta_i^\alpha)^4 + \frac{b_\beta}{4} \xi^4 \sum_i (\eta_i^\beta)^4 + \xi^4 \frac{d_{\alpha\beta}}{2} \sum_{ij} (\eta_i^\alpha)^2 (\eta_j^\beta)^2 + \xi^4 \frac{d_{\alpha\alpha}}{2} \sum_{i \neq j} (\eta_i^\alpha)^2 (\eta_j^\alpha)^2 + \xi^4 \frac{d_{\beta\beta}}{2} \sum_{i \neq j} (\eta_i^\beta)^2 (\eta_j^\beta)^2, \tag{2}$$

где  $W$  — параметр взаимодействия для параметра порядка  $\xi$ ,  $\Omega(\xi) = \Omega_S h(\xi) + \Omega_G (1 - h(\xi))$  — параметр взаимодействия в растворе ( $\xi = 1, \Omega_S$ ) или газовой фазе ( $\xi = 0, \Omega_G$ ),  $h(\xi) = \xi^2 (3 - 2\xi)$ ,  $a_i, b_i, d_{ij}$  ( $i, j = \{\alpha, \beta\}$ ) — параметры взаимодействия для параметров порядка, описывающих кристаллизацию. В формуле (2) и далее подразумевается суммирование по всем индексам  $i$  и  $j$ , имеющим значения от 1 до  $P_\alpha$  и  $P_\beta$  соответственно.



**Рис. 3.** Зависимость плотности свободной энергии  $f$  от концентрации  $c$  для кристаллизованных и аморфной фаз ( $\xi = 1, T = 0.68, \Omega_G = 2.8, W = 10.0, a_\alpha = a_\beta = 1.0, b_\alpha = b_\beta = 0.98$ ). Сплошными линиями обозначены зависимости для различных состояний: 1 — кристаллизованная фаза обогащенная кобальтом ( $\eta_i^\alpha = 1, \eta_i^\beta = 0$  при  $i > 1; \eta_i^\alpha = 0$  для всех  $i$ ), 2 — аморфная фаза ( $\eta_i^\alpha = 0, \eta_i^\beta = 0$  для всех  $i$ ), 3 — кристаллизованная фаза обедненная кобальтом ( $\eta_i^\alpha = 1, \eta_i^\beta = 0$  при  $i > 1; \eta_i^\beta = 0$  для всех  $i$ ). Значения концентрации  $c_\alpha$  и  $c_\beta$  соответствуют равновесным составам зерен обедненных и обогащенных кобальтом соответственно.



**Рис. 4.** Динамика образования и роста зерен в пленке. Рисунки соответствуют различным моментам времени  $t$ : (a) — 55, (b) — 105, (c) — 130, (d) — 155, (e) — 305, (f) — 500. Зерна показаны в виде поверхностей постоянного значения параметров порядка  $\phi_\alpha = 0.7$  и  $\phi_\beta = 0.7$ .

Важной особенностью плотности свободной энергии (2) является наличие экстремумов по множеству параметров порядка  $\eta_i^\alpha$  и  $\eta_j^\beta$ , в котором лишь один из параметров имеет значение 1 или  $-1$ , а все остальные равны нулю, что и позволяет наблюдать формирование обособленных зерен, характеризуемых своим (ненулевым) параметром порядка [11–13].

Зависимости плотности свободной энергии, поясняющие формирование образование обогащенных и обедненных по кобальту зерен показаны на рис. 3. Из рисунка следует, что наиболее устойчивым является состояние системы, когда образуются зерна, характеризуемые составами  $c_\alpha$  и  $c_\beta$ . Также очевидно, что аморфная фаза, которая после кристаллизации сосредоточена вблизи границ зерен, оказывается энергетически невыгодной, поэтому ее доля должна испытывать тенденцию к снижению. Также границы зерен характеризуются положительной энергией взаимодействия, описываемой параметрами  $d_{ij}$  (см. формулу 2), что приводит к возникновению поверхностного натяжения на границах. Таким образом, границы зерен, как дефекты структуры, приводящие к повышению энергии системы, оказываются энергетиче-

ски невыгодными. В связи с этим система должна эволюционировать в сторону уменьшения зернограницной области, что достигается при росте размера зерна.

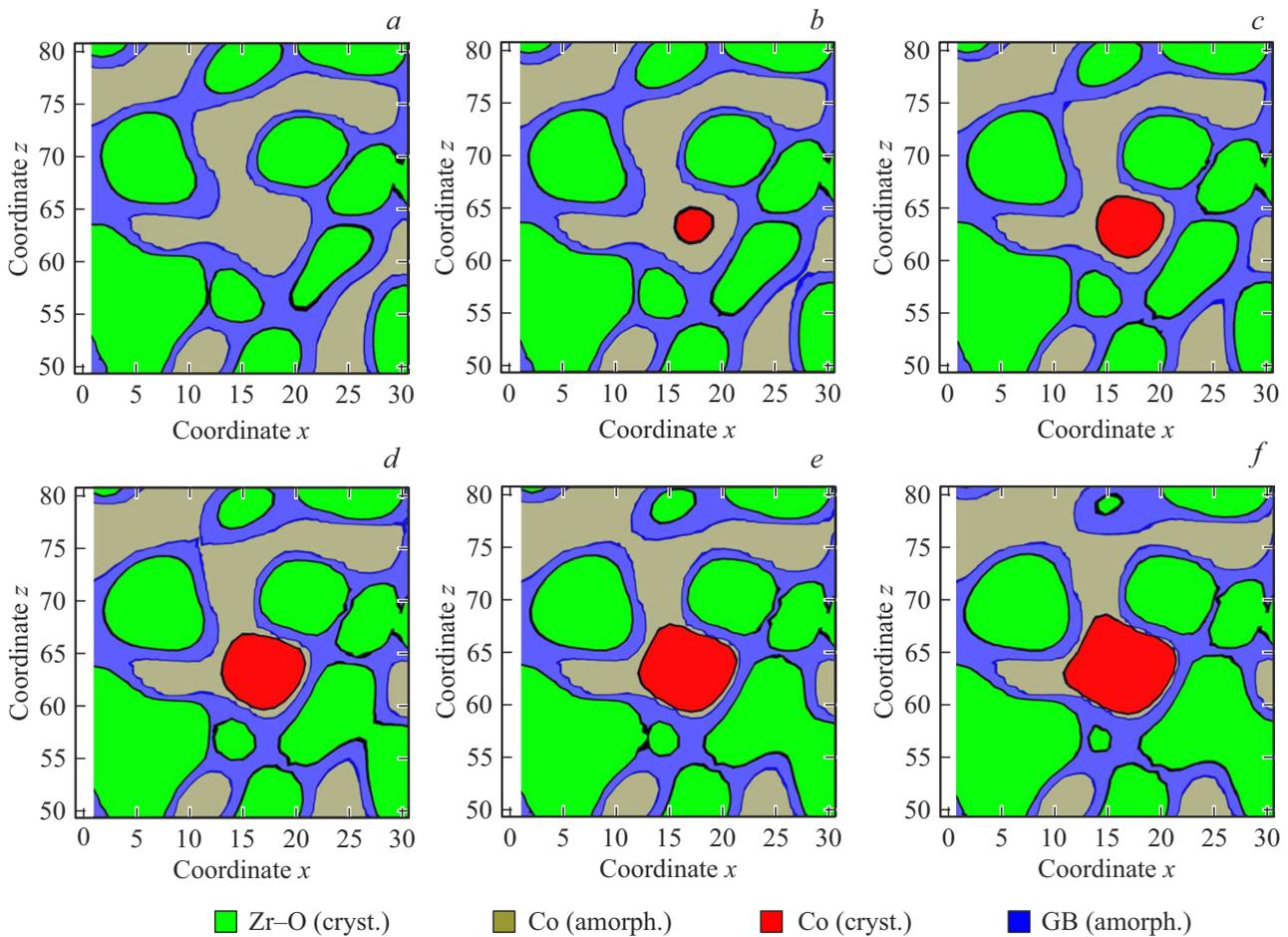
Параметр порядка  $\xi$  (фактически количество частиц в единице объема) и концентрация кобальта  $c$  являются сохраняющимися параметрами порядка, а  $\eta_i^\alpha$  и  $\eta_i^\beta$  являются несохраняющимися параметрами порядка, тогда уравнения, описывающие их динамику, могут быть получены с помощью уравнения непрерывности и введенного функционала плотности свободной энергии (1):

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \nabla \left[ M_\xi \nabla \left( \frac{\delta F}{\delta \xi} \right) \right] = \nabla \left[ M_\xi \nabla \left( \frac{\partial f}{\partial \xi} - \kappa_\xi \nabla^2 \xi \right) \right],$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \left[ M_c \nabla \left( \frac{\delta F}{\delta c} \right) \right] = \nabla \left[ M_c \nabla \left( \frac{\partial f}{\partial c} - \kappa_c \nabla^2 c \right) \right],$$

$$\frac{\partial \eta_i^\alpha}{\partial t} = -M_\alpha \left( \frac{\delta F}{\delta \eta_i^\alpha} \right) = M_\alpha \left( \kappa_\alpha \nabla^2 \eta_i^\alpha - \frac{\partial f}{\partial \eta_i^\alpha} \right),$$

$$i = 1 \dots P_\alpha,$$



**Рис. 5.** Динамика формирования одного из зерен обогащенного кобальтом (красный цвет). Другими цветами показаны: синий цвет — аморфная область, зеленый — зерна обедненные кобальтом, серый цвет — аморфная область обогащенная кобальтом. Рисунки соответствуют различным моментам времени  $t$ : (a) — 80, (b) — 85, (c) — 90, (d) — 95, (e) — 100, (f) — 105. Зерна показаны в виде поверхностей постоянного значения параметров порядка  $\phi_\alpha = 0.7$  и  $\phi_\beta = 0.7$ .

$$\frac{\partial \eta_i^\beta}{\partial t} = -M_\beta \left( \frac{\delta F}{\delta \eta_i^\beta} \right) = M_\beta \left( \kappa_\beta \nabla^2 \eta_i^\beta - \frac{\partial f}{\partial \eta_i^\beta} \right), \quad i = 1 \dots P_\beta. \quad (3)$$

Здесь  $M_\xi$ ,  $M_c(\xi)$ ,  $M_a$ ,  $M_\beta$  — подвижности. Уравнения относительно  $c$  и  $\xi$  соответствуют уравнению Кана–Хилларда, а уравнения относительно  $\eta_i^\alpha$  и  $\eta_i^\beta$  являются нестационарными уравнениями Гинзбурга–Ландау. Единицы измерения для температуры и феноменологических параметров модели были приняты равными

$$[T] = T_C, \quad [\Omega] = k_B T_C, \quad [\mathbf{r}] = [l],$$

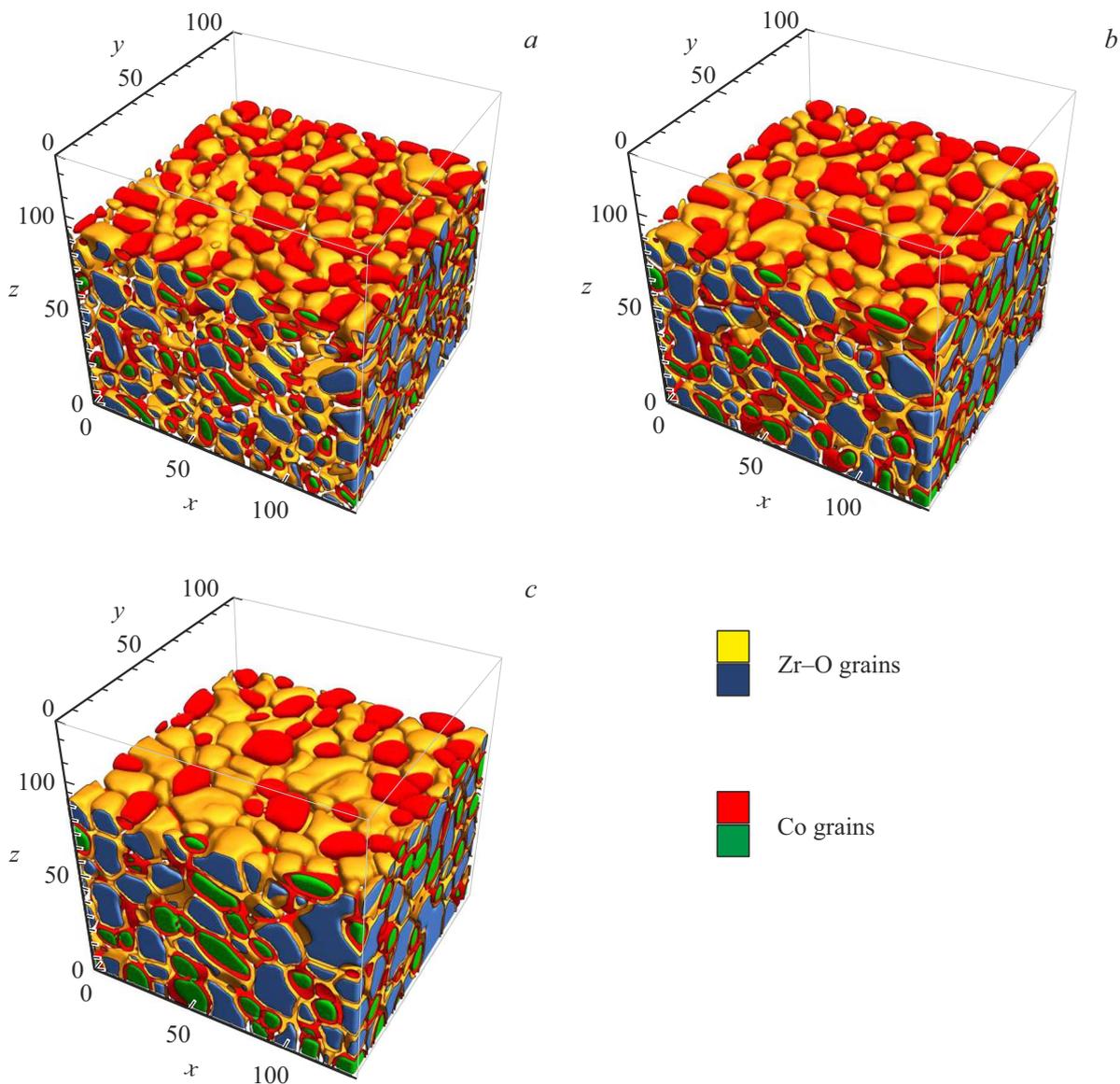
$$[\kappa] = 2k_B T_C l^2, \quad [t] = M_c k_B T_C / l^2,$$

где  $l$  — корреляционная длина, которая обычно оценивается как величина равная нескольким периодам решетки.

Решение системы дифференциальных уравнений (3) выполнялось численно с помощью метода конечных разностей [17], который оказывается достаточно эффективным при решении уравнений нелинейной диффузии.

Решение проводилось для системы, имеющей размер  $128l \times 128l \times 128l$ . Количество рассматриваемых параметров порядка, соответствующих образующимся фазам, обогащенным и обедненным кобальтом, составляло  $P_\alpha = 28$ ,  $P_\beta = 28$ .

Феноменологические параметры взаимодействия были приняты равными:  $T = 0.68$ ,  $\Omega_G = 2.8$ ,  $\Omega_S = 2.0$ ,  $W = 10.0$ ,  $\kappa_c = \kappa_\alpha = \kappa_\beta = 0.5$ ,  $\kappa_\xi = 3.0$ ,  $a_\alpha = a_\beta = 1.0$ ,  $b_\alpha = b_\beta = 0.98$ . В начальный момент времени система состояла из твердой и газовой фазы, граница раздела которых имела координату  $z = 96$ . Ниже данной границы располагалась аморфная пленка, по объему которой был распределен кобальт с полной общей концентрацией равной  $\langle c \rangle = 0.3$ , которое соответствует области неустойчивых состояний, где может наблюдаться безактивационное формирование вторых фаз (спинодальный распад). Исходная пленка находилась в аморфном состоянии, что соответствует средним значениям параметров порядка  $\langle \eta_i^\alpha \rangle = 0$  и  $\langle \eta_i^\beta \rangle = 0$  по всему объему, занимаемому пленкой. В исходной газовой фазе концентра-



**Рис. 6.** Результаты моделирования рекристаллизации пленки (Co-Zr-O) с формированием частиц катализатора (Co) на поверхности частиц. Рисунки соответствуют различным моментам времени: *a* — 155, *b* — 305, *c* — 500.

ция растворенного компонента была мала и считалась равной 0.012. Параметр порядка в аморфной пленке был принят равным  $\xi = 0.8$ , а в газовой фазе  $\xi = 0.01$ . Концентрационное поле, а также параметры порядка в начальный момент времени характеризовались малыми гауссовыми флуктуациями с дисперсией  $\sigma^2 = 10^{-4}$ .

Распределение зерен по объему системы фиксировалось с помощью параметров  $\phi_\alpha = \sum_i \eta_i^{\alpha^2}$  и  $\phi_\beta = \sum_i \eta_i^{\beta^2}$ , которые дальше использовались для визуализации распределения зерен разных типов по объему системы.

Динамика процесса образования и роста зерен в исходной аморфной пленке была получена при решении системы уравнений (2). Результаты моделирования показаны на рис. 4–6. Для рассмотренных феноменологических параметров модели наблюдается следующая

последовательность процесса формирования частиц катализатора на поверхности пленки. В начале процесса отжига исходной пленки происходит формирование зерен обедненных по кобальту (рис. 4, *a*, 5, *a*). При их образовании кобальт вытесняется в область между зернами за счет движения фронта кристаллизации. Концентрация кобальта становится достаточно высокой и происходит формирование аморфной фазы обогащенной кобальтом по спиновальному механизму (рис. 5, *a*). Области, обогащенные по кобальту, постепенно переходят из аморфного состояния в кристаллическое с образованием наночастиц (рис. 5, *a–d*). Наночастицы кобальта фактически формируются по двухстадийному механизму: образование обогащенной аморфной фазы и ее последующая кристаллизация (см. так же [18]). В ре-

зультате формируется система из чередующихся зерен разного типа (рис. 4, *c–f*). Крупные зерна испытывают рост, а малые зерна исчезают (рис. 4, *d–f*).

Для рассмотренных параметров взаимодействия наблюдаются преимущественно тройные стыки зерен, что обычно связывается с наиболее устойчивой конфигурацией [11]. Формирование четверных стыков наблюдается достаточно редко и, в большей степени, относится к кратковременным процессам релаксации системы после исчезновения мелких зерен или слияния крупных зерен, имеющих одинаковую ориентацию.

Возможными механизмами роста среднего размера зерна на завершающей стадии являются механизмы Оствальда и Смолуховского. В случае, если рядом оказываются зерна, имеющие одинаковую ориентацию, они сливаются с формированием более крупного зерна. Данный процесс укрупнения зерен наблюдается как для зерен, находящихся в объеме пленки, так и для зерен находящихся на поверхности. В целом акты слияния зерен с одинаковой ориентацией являются сравнительно редкими из-за небольшой вероятности образования таких зерен вблизи друг друга. Процесс слияния частиц катализатора (созревание по Смолуховскому) на поверхности практически не происходит по ряду причин. Во-первых, концентрация частиц катализатора на поверхности не велика, что делает их латеральное взаимодействие редким явлением. Во-вторых, частицы катализатора оказываются частично погруженными в пленку и окружены преимущественно зернами обедненными кобальтом (рис. 4, *e, f*). В-третьих, большинство частиц катализатора, оказавшихся вблизи друг друга, имеют различную ориентацию кристаллических решеток, т.е. их граница раздела, обладая энергией, препятствует их прямому слиянию (рис. 6, *b, c*). Таким образом, процесс изменения наноструктуры пленки в основном связан с механизмом Оствальдовского созревания, при котором происходит постепенное растворение малых зерен и рост крупных. Этот механизм реализуется для зерен как обогащенных, так и обедненных по кобальту.

Важно заметить, что при переходе к поздней стадии роста частиц катализатора происходит обмен веществом между частицами на поверхности и зернами кристаллического кобальта сосредоточенными в толщине пленки (рис. 6). Этот процесс может приводить к убыванию полного количества вещества, сосредоточенного в частицах на поверхности пленки. К аналогичному явлению может приводить и нерассмотренный в данной работе механизм диффузии кобальта в кремниевую подложку.

## 4. Заключение

На основе анализа экспериментов и моделирования можно понять механизм формирования частиц катализатора (Co) при кристаллизации аморфных пленок (Co-Zr-O). Образование наночастиц катализатора на поверхности пленки происходит при ее переходе от аморф-

ного к кристаллическому состоянию. Образующиеся кристаллические фазы, обогащенные и обедненные по кобальту, характеризуются разным значением атомного объема, что приводит к вытеснению катализатора на поверхность в процессе формирования и роста зерен.

Образующиеся на поверхности пленки частицы катализатора оказываются частично погруженными в пленку и, как правило, окружены зернами, обедненными по кобальту. Редкие акты взаимодействия между частицами катализатора не приводят к их слиянию ввиду наличия между ними границы, обусловленной различными ориентациями решеток внутри частиц. Основным механизмом роста частиц катализатора является постепенный рост крупных зерен за счет растворения мелких (Оствальдовское созревание), которое обеспечивает постепенное уменьшение совокупной площади и энергии границ зерен.

Диффузионный обмен веществом между частицами на поверхности пленки и зернами, находящимися в объеме пленки может приводить к уменьшению общей массы катализатора на поверхности. К аналогичному эффекту может также приводить диффузия атомов катализатора к границе с подложкой или буферным слоем, которая может являться эффективным стоком атомов катализатора.

## Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России, проект № 0004-2022-0004, с использованием уникальной научной установки кремний-углеродной технологии гетерогенной интеграции Института нанотехнологий микроэлектроники Российской академии наук.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] K. Dasgupta, J.B. Joshi, S. Banerjee. Chem. Eng. J. **171**, 841 (2011).
- [2] M. Kumar, Y. Ando. J. Nanosci. Nanotechnol. **10**, 6, 3739 (2010).
- [3] S.-W. Lee, J. Han, H.I. Won, C. Young. J. Kor. Phys. Society **66**, 11, 1715 (2015).
- [4] E.Z. Karimi, S.M. Zebarjad, I.A. Bataev, A.G. Bannov. Bull. Mater. Sci. **37**, 1031 (2014).
- [5] M. Li, X. Liu, X. Zhao, F. Yang, X. Wang, Y. Li. Top Curr. Chem. Z **375**, 29 (2017).
- [6] D.G. Gromov, S. Bulyarskii, A. Pavlov, S. Scorik, A. Shulyatév, A.Y. Trifonov. Diamond Relat. Mater. **64**, 97 (2016).
- [7] S. Dubkov, A. Trifonov, E. Kitsyuk, A. Pavlov, S. Bulyarsky, S. Skorik, T. Maniecki, P. Mierczynski, D. Gromov, S. Gavrilo. J. Phys. Conf. Ser. **829**, 12002 (2017).

- [8] P. Mierczynski, S.V. Dubkov, S.V. Bulyarskii, A.A. Pavlov, S.A. Gavrilov, T.P. Maniecki, D.G. Gromov. *J. Mater. Sci. Technol.* **34**, 472 (2018).
- [9] Y. Chen, D.-H. Riu, Y.-S. Lim. *Met. Mater. Int.* **14**, 385 (2008).
- [10] N. Provatas, K. Elder. *Phase-Field Methods in Material Science and Engineering*. Wiley-VCH, Weinheim (2010). 345 p.
- [11] D. Fan, S. P. Chen, L.-Q. Chen. *J. Mater. Res.* **14**, 1113 (1999).
- [12] D. Fan, L.-Q. Chen. *Acta Mater.* **45**, 3297 (1997).
- [13] S.O. Poulsen, P.W. Voorhees, E. M. Lauridsen. *Acta Mater.* **61**, 1220 (2013).
- [14] L. Vanherpe, N. Moelans, B. Blanpain, S. Vandewalle. *Phys. Rev. E* **76**, 056702 (2007).
- [15] P.G.K. Amos, R. Perumal, M. Selzer, B. Nestler. *J. Mater. Sci. Technol.* **45**, 215 (2020).
- [16] B. Nestler, H. Garcke, B. Stinner. *Phys. Rev. E* **71**, 041609 (2005).
- [17] S.B. Biner. *Programming Phase-Field Modeling*. Springer, Cham. (2017).
- [18] P.E. L'vov, A.R. Umantsev. *Crystal Growth Des.* **21**, 1, 366 (2021).

*Редактор К.В. Емцев*