Федотов, А.Ю. Моделирование деформационного поведения ниобия и его нанопленок: структурные изменения и остаточные напряжения / А.Ю. Федотов, Ф.А. Виноградов. – DOI: 10.15593/perm.mech/2025.5.10 // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2025. – № 5. – С. 144–154.

Perm Polytech Style: Fedotov A.Yu., Vinogradov F.A. Simulation of deformation behavior of niobium and its nanofilms: structural changes and residual stresses. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2025, no. 5, pp. 144-154. DOI: 10.15593/perm.mech/2025.5.10

пермский политех

ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА
№ 5, 2025
PNRPU MECHANICS BULLETIN
https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2025.5.10
УДК 539.21 + 676.017

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ НИОБИЯ И ЕГО НАНОПЛЕНОК: СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ И ОСТАТОЧНЫЕ НАПРЯЖЕНИЯ

А.Ю. Федотов, Ф.А. Виноградов

Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук, Ижевск, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 01 июля 2025 г.
Одобрена: 09 октября 2025 г.
Принята к публикации:
25 октября 2025 г.

Ключевые слова:

ниобий, молекулярная динамика, математическое моделирование, ММПА, LAMMPS, механические свойства, модуль Юнга, тензор напряжений, нанопленки, нанокомпозит, осаждение.

АННОТАЦИЯ

Работая посвящена исследованию механических свойств наноматериалов из ниобия. Исследования проводились при помощи атомистического математического моделирования с помощью метода молекулярной динамики. В качестве силового потенциала был использован модифицированный метод погруженного атома. В исследовании проведен комплексный анализ механических свойств кристаллического ниобия и его нанопленок с использованием математического моделирования, а также изучены остаточные напряжения при осаждении нанопленки кобальта. Для кристаллического ниобия установлено, что скорость деформации существенно влияет на неупругое поведение материала, в то время как упругий отклик (модуль Юнга ≈ 120 ГПа) демонстрирует высокую согласованность с литературными данными (погрешность 3,2 %), подтверждая адекватность модели. Разрушение образца происходит ближе к центру, сопровождаясь образованием зон разрыва при критической деформации, что указывает на послойную перестройку структуры. Исследование нанопленок ниобия выявило снижение модуля Юнга до 30 ГПа при толщине 3,3 нм, что объясняется эффектами микроразмеров, дефектами и границами зерен. Наблюдаемое перед разрушением чередование упорядоченных и неупорядоченных атомных зон подчеркивает роль структурной неоднородности. При осаждении 1,5 нм пленки кобальта на ниобиевую подложку выявлены колебательные изменения компонент тензора напряжений, связанные с тепловыми флуктуациями и локальным взаимодействием. Гидростатическое напряжение близко к нулю, что свидетельствует об отсутствии объемных деформаций. Ключевым выводом является доминирование упругих деформаций в подложке, несмотря на воздействие осаждаемых атомов. Работа демонстрирует высокую чувствительность механических свойств ниобия к структурным особенностям и внешним условиям. Полученные результаты значимы для проектирования наноустройств и покрытий, где критичны контроль остаточных напряжений и учет размерных эффектов.

© **Федотов Алексей Юрьевич** – д. т. н., доцент, в. н. с. группы моделирования структур и функциональных материалов, e-mail: alezfed@gmail.com
Виноградов Федор Андреевич – аспирант, м. н. с. группы моделирования структур и функциональных материалов, e-mail: fvinog3@gmail.com

Aleksey Yu. Fedotov – Doctor of Engineering Sciences, Associate Professor, Leading Researcher, Group for Modeling Structures and Functional Materials, e-mail: alezfed@gmail.com
Fedor A. Vinogradov – Postgraduate Student, Junior Researcher, Group for Modeling Structures and Functional Materials, e-mail: fvinog3@gmail.com

Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)
This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

SIMULATION OF DEFORMATION BEHAVIOR OF NIOBIUM AND ITS NANOFILMS: STRUCTURAL CHANGES AND RESIDUAL STRESSES

A.Yu. Fedotov, F.A. Vinogradov

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

ARTICLE INFO

Received: 01 July 2025
Approved: 09 October 2025
Accepted for publication:
25 October 2025

Keywords:

niobium, molecular dynamics, mathematical modeling, MEAM, LAMMPS, mechanical properties, Young's modulus, stress tensor, nanofilms, nanocomposite, deposition.

ABSTRACT

The work is devoted to the study of mechanical properties of niobium nanomaterials. The studies were carried out using atomistic mathematical modeling using the molecular dynamics method. A modified embedded atom method was used as a force potential. The study carried out a comprehensive analysis of the mechanical properties of crystalline niobium and its nanofilms using mathematical modeling, and also studied the residual stresses during the deposition of a cobalt nanofilm. For crystalline niobium, it was found that the strain rate significantly affects the inelastic behavior of the material, while the elastic response (Young's modulus ≈ 120 GPa) demonstrates high consistency with literature data (error 3.2%), confirming the adequacy of the model. The destruction of the sample occurs closer to the center, accompanied by the formation of rupture zones at critical deformation, which indicates a layer-by-layer rearrangement of the structure. The study of niobium nanofilms revealed a decrease in Young's modulus to 30 GPa at a thickness of 3.3 nm, which is explained by microsize effects, defects and grain boundaries. The alternation of ordered and disordered atomic zones observed before failure emphasizes the role of structural inhomogeneity. When depositing a 1.5 nm cobalt film on a niobium substrate, oscillatory changes in the stress tensor components associated with thermal fluctuations and local interactions were revealed. Hydrostatic stress is close to zero, indicating the absence of volumetric deformations. The key conclusion is the dominance of elastic deformations in the substrate, despite the effect of deposited atoms. The work demonstrates a high sensitivity of the mechanical properties of niobium to structural features and external conditions. The results are important for the design of nanodevices and coatings, where control of residual stresses and consideration of size effects are critical.

Введение

Исследования, посвященные изучению технологий нанесения тонких пленок, остаются актуальными, так как позволяют установить базовые механизмы формирования новых материалов, проанализировать и оптимизировать процессы их нанесения и выявить новые перспективные свойства образцов. Например, метод атомно-слоевого осаждения [1–3] за счет течения последовательных химических реакций позволяет обеспечить равномерный управляемый рост нанопленок, в результате чего становится возможен более точный контроль толщины и структуры пленок, что, в свою очередь, приводит к совокупному улучшению свойств финального материала. Исследования, связанные с комбинацией атомно-слоевого осаждения и других методов, таких как магнетронное распыление [4; 5] или химическое осаждение из паровой фазы [6; 7], могут привести к созданию пленок с заданными параметрами, которые будут более устойчивыми к коррозии и другим внешним негативным воздействиям.

Одним из перспективных и многообещающих элементов для использования в области наноиндустрии является ниобий. Актуальность использования нанопленок и наноструктур ниобия связана с уникальными физико-химическими свойствами этого элемента, которые делают его востребованным в современных технологиях. Ниобий обладает относительно высокой температурой перехода в сверхпроводящее состояние, по сравнению с другими сверхпроводящими элементами, что делает его незаменимым при создании нанопленок для квантовых компьютеров [8; 9], МРТ-аппаратов [10] и ускорителей частиц [11; 12]. За счет снижения энергопотерь наноструктурированные пленки ниобия [13; 14] могут улучшить эффективность работы электронных компонентов и устройств.

Нанопокрытия из ниобия применяются в литий-ионных батареях [15–17] для увеличения срока эксплуатации и емкости устройств. Пленки ниобия предотвращают деградацию электродов [18; 19], что особенно важно для развития возобновляемой энергетики и электромобилей. Ниобий биосовместим и устойчив к коррозии, что позволяет использовать его нанопленки в имплантатах и хирургических инструментах [20; 21]. Также наноструктурированный ниобий служит эффективным катализатором в химических реакциях, включая очистку воды от токсинов [22] и преобразование углекислого газа [23], что эффективно может быть использовано в экологической сфере человеческой деятельности.

Важным вопросом при исследовании наноматериалов, в составе которых встречается ниобий, является анализ их механических свойств. Во-первых, механические свойства нанопленок ниобия напрямую влияют на эксплуатационные свойства, если данные материалы используются для защиты от коррозии [20; 21]. Во-вторых, остаточные напряжения, возникающие в про-

цессе роста наноструктур и последующей их обработки, могут влиять на другие физические и функциональные характеристики, например магнитные или каталитические.

Остаточные напряжения могут возникать из-за различных факторов, включая температурные изменения, несовершенства кристаллической решетки, условия обработки, используемые во время осаждения, а также различия в коэффициентах теплового расширения между подложкой и нанопленкой. Исследования показывают, что в результате осаждения нанопленок с использованием таких методов, как лазерная абляция, молекулярно-лучевая эпитаксия, магнетронное распыление, и других остаточные напряжения в нанесенных тонкопленочных слоях изменяются в достаточно широком диапазоне значений [24]. Также известно, что увеличение толщины нанопленок приводит к изменению их механических характеристик [25], включая накопление остаточных напряжений, которые могут достигать больших значений и приводить к растрескиванию или деформации материалов.

Изучение динамики и вариативности остаточных напряжений в нанопленках ниобия имеет критическое значение для оптимизации свойств наноматериалов и расширения их области применения. Проведение исследований в этой области может привести к созданию более устойчивых и эффективных материалов для использования в различных современных технологиях, включая электронику, спинтронику, сверхпроводимость и теорию магнитных полей.

Целью работы являлись апробация на конкретных материалах (ниобий) и применение методики атомистического моделирования для вычисления механических характеристик наноматериалов.

Математическая модель и теоретические сведения

Моделирование стало неотъемлемой частью современного инженерного анализа. Поэтому исследования механических свойств нанокомпозитов проводились при помощи математического моделирования. В настоящее время высокую эффективность имеют многоуровневые модели расчета напряженно-деформированного состояния материалов [26–28], так как они позволяют провести всесторонний анализ эволюции внутренней структуры материала, описать физические механизмы деформирования: внутризеренный и зернограничный эффекты, повороты решеток кристаллитов.

Тем не менее тенденция к миниатюризации и высокой плотности элементов при изготовлении электронных устройств актуализируют развитие атомистических методов математического моделирования и квантовой механики [29]. Модели молекулярной динамики получили распространение в современной химии [30] и материаловедении [31] благодаря своей способности эффективно и точно описывать взаимодействия на уровне атомов и молекул. Молекулярная динамика представляет собой мощный инструмент для изучения временной эволюции систем, состоящих из большого числа частиц, и позволяет исследовать динамические свойства материалов, таких как диффузия [32], термодинамические характеристики [33] и механические свойства [34], при конкретных условиях.

Вычисления механических характеристик проводились для процесса осаждения многослойного нанокомпозита «ниобий – кобальт», структурные и физические свойства которого были проанализированы в более ранних публикациях авторов [35–37]. Исследование процессов осаждения нанопленок «ниобий – кобальт» происходило в рамках атомистической модели молекулярной динамики. В работе была использована классическая модель молекулярной динамики, описывающая движение каждого атома системы через силовой потенциал. В качестве силового потенциала был выбран модифицированный метод погруженного атома (ММПА) [38], так как он учитывает влияние электронной плотности атомов в пространстве и за счет этого обеспечивает более точное описание их взаимодействий. Особенно хорошо ММПА зарекомендовал себя в задачах моделирования систем с тяжелыми элементами и сложными многокомпонентными структурами. Более подробно модель молекулярной динамики и ММПА описаны в [35].

При проведении расчетов вычисление тензора напряжений в каждый момент времени осуществлялось на основании радиус-векторов, скоростей и сил атомов. Подобный подход был предложен, проанализирован и подробно описан в [39] и основывался на определении тензора напряжений по следующей формуле:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \frac{1}{V}\left(\sum_{i=1}^{N} m_i \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i + \mathbf{W}(\mathbf{r}) \right), \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ и $\sigma_{\alpha\beta}, \alpha,\beta = \{x,y,z\}$ – тензор напряжений и его компоненты; V – объем системы; N – общее число атомов в объеме; m_i и $\mathbf{v}_i$ – масса и скорость атома соответственно; $\mathbf{W}(\mathbf{r})$ – глобальный вириальный тензор; $\mathbf{r} = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N\}$ – обобщающая переменная, указывающая на зависимость от радиус-векторов всех атомов. Символ $\otimes$ обозначает тензорное произведение.

Тензор вириала вычисляется через сумму произведений радиус-векторов и сил, действующих на атомы:

$$\mathbf{W}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{r}_i \otimes \mathbf{F}_i. \quad (2)$$

Переход к скалярному виду выражений (1) и (2) приводит к следующим выражениям:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V}\left(\sum_{i=1}^{N} m_i v_{i\alpha} v_{i\beta} + W_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) \right), \; W(\mathbf{r}) = \mathrm{Tr}\,\mathbf{W}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

$$W_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N} m_i r_{i\alpha} F_{i\beta} + W_{\alpha\beta}(\mathbf{r}), \; \alpha,\beta = \{x,y,z\}, \quad (4)$$

где $v_{i\alpha}, r_{i\alpha}, F_{i\alpha}$ компоненты векторов скорости, координат и сил соответственно. Следует отметить, что в случае использования периодических граничных условий взаимодействия атомов рядом с границами в (1)–(4) вычисляются с учетом симметричных образов расчетной ячейки.

Для интегральной оценки напряженно-деформированного состояния в работе вычислялись гидростатическое напряжение σ_{h}, напряжение фон Мизеса σ_{vM} и девиаторное напряжение фон Мизеса σ_{dvM}:

$$\sigma_{\text{h}} = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3}, \tag{5}$$

$$\sigma_{\text{vM}} = \sqrt{\frac{\left(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}\right)^2 + \left(\sigma_{yy} - \sigma_{zz}\right)^2 + \left(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}\right)^2 + 6\left(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2\right)}{2}}, \tag{6}$$

$$\sigma_{\text{dvM}} = \left(\sigma_{xx} - \sigma_{\text{h}}\right)\left(\sigma_{yy} - \sigma_{\text{h}}\right)\left(\sigma_{zz} - \sigma_{\text{h}}\right) - \sigma_{xy}^2\left(\sigma_{zz} - \sigma_{\text{h}}\right) - \sigma_{xz}^2\left(\sigma_{yy} - \sigma_{\text{h}}\right) - \sigma_{yz}^2\left(\sigma_{xx} - \sigma_{\text{h}}\right) + 2\sigma_{xy}\sigma_{xz}\sigma_{yz}. \tag{7}$$

В качестве программного комплекса для проведения вычислительных экспериментов был использован LAMMPS [40]. Благодаря своей модульной структуре LAMMPS является гибким инструментом для проведения молекулярного моделирования широкого диапазона физических процессов, начиная от динамики жидкостей и газов и заканчивая структурными изменениями в кристаллах, фазовыми переходами и самосборкой наноструктур.

Постановка задачи

В рамках проведенных численных исследований было решено 3 задачи. Схематически постановка задач показана на рис. 1.

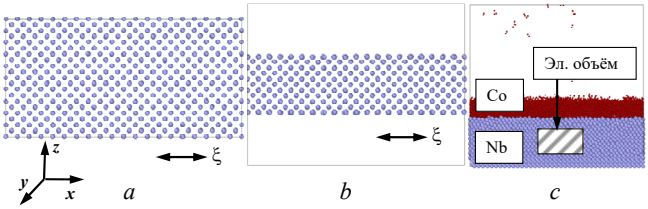


Рис. 1. Постановка задач исследования механических характеристик ниобия для: a – объемного материала; *b* – нанопленки ниобия; *c* – подложки ниобия в процессе осаждения атомов кобальта

Fig. 1. Statement of the problems of studying the mechanical characteristics of niobium for: *a* – bulk materia; *b* – niobium nanofilm; *c* – niobium substrate during deposition of cobalt atoms

В первой задаче (рис. 1, *a*) рассматривался образец кристаллического ниобия размером $20 \times 10 \times 10$ кристаллических ячеек, что соответствовало размеру в нанометрах – $6{,}6 \times 3{,}3 \times 3{,}3$. По всем координатным направлениям действовали периодические граничные условия, которые позволили рассматривать систему как часть объемного кристаллического материала. Температура в расчете поддерживалась на уровне 300 К. В процессе моделирования образец растягивался до разрыва вдоль направления оси x с постоянной скоростью деформации ξ. Задача представляла интерес для сравнения данных моделирования с уже известными механическими характеристиками объемного ниобия.

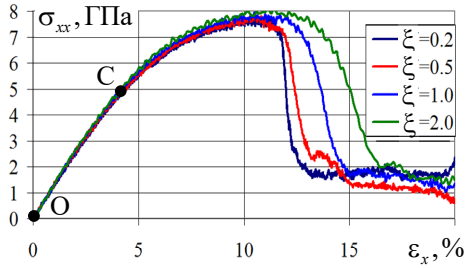
Во второй задаче (рис. 1, *b*) в качестве объекта исследования выступала нанопленка ниобия размером $20 \times 20 \times 10$ кристаллических слоев ($6{,}6 \times 6{,}6 \times 3{,}3$ нм). От первой задачи расчет отличался тем, что сверху и снизу от нанопленки по оси z находилось свободное пространство. По осям x и y действовали периодические граничные условия. Аналогично первой задаче нанопленка растягивалась в направлении x с постоянной скоростью деформации ξ. Целью численного эксперимента было вычисление напряженно-деформированного состояния нанопленки и сопоставление полученных расчетных значений с соответствующими величинами объемного материала.

Принципиально другая постановка использовалась в третьей задаче (рис. 1, *c*). В задаче рассматривалась подложка кристаллического ниобия размером $40 \times 40 \times 10$ кристаллических решеток ($13{,}2 \times 13{,}2 \times 3{,}3$ нм). Сверху на подложку в процессе моделирования осаждалось 18 тыс. атомов кобальта так, чтобы результирующий размер нанопленки составил 1,5 нм. В горизонтальных направлениях (оси x и y) действовали периодические граничные условия. В вертикальном направлении (ось z) были наложены условия отражения. При помощи алгоритма термостата Нозе – Гувера температура атомов подложки в течение осаждения поддерживалась на уровне 300 К. Цель задачи – оценка остаточных напряжений в подложке ниобия, возникающих в процессе осаждения нанопленки кобальта. Более подробно моделирование процессов формирования подобных нанокомпозитов и исследования их структурных свойств представлено в работе [37]. В качестве элементарного объема, для которого вычислялись тензор напряжений и другие механические характеристики, выступал объем в центре подложки, показанный на рис. 1 штриховкой. Размеры элементарного объема соответствовали 1/3 протяженности подложки по каждой оси.

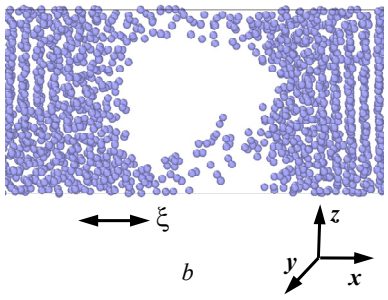
Результаты и обсуждение

Исследования кристаллического ниобия в первой задаче показали, что неупругие изменения в материале начинали происходить при значениях деформации $\varepsilon_x > 5\%$. Изменение компоненты тензора напряжения, в направлении которой происходило принудительное удлинение образца, для разных скоростей деформации и иллюстрация момента разрушения материала приведены на рис. 2. Здесь и далее скорость деформации ξ приведена для размерности $10^{10}, 1/\text{с}$. Большие значения

скоростей деформации связаны с масштабами времени в использованной математической модели и малым шагом (10^{-15} с) интегрирования. Несмотря на большие скорости деформаций, атомистические модели активно используются для исследований механических свойств и поведения наноматериалов [41–43], а в работе [44] критически рассмотрен вопрос соответствия результатов реальных экспериментов данным моделирования методом молекулярной динамики с высокими скоростями деформации.



a



b

Рис. 2. Зависимость компоненты тензора напряжений σ_{xx} от относительного удлинения образца кристаллического ниобия (*a*) и иллюстрация момента разрушения материала (*b*)

Fig. 2. Dependence of the stress tensor component on the relative elongation of a crystalline niobium sample (*a*) and illustration of the moment of material destruction (*b*)

Из зависимостей на рис. 2 видно, что скорость деформации влияет в основном на неупругое поведение материала. На начальном участке ($\varepsilon_x = 0 \div 5\%$) напряжение σ_{xx} ведет себя подобным образом при разных скоростях деформации. Линейный участок ОС графиков на рис. 2 позволяет вычислить модуль Юнга исследуемого образца через отношение приращения напряжения к изменению деформации. Среднее значение модуля Юнга для образца составило 120 ГПа. В разных литературных источниках для модуля упругости ниобия приведены разные величины: 106,2 ГПа [45], 111 ГПа [46], 155 ГПа [47]. Если ориентироваться на среднее значение, то можно сделать вывод, что расчетное значение модуля Юнга кристаллического ниобия, рассчитанное с помощью моделирования (120 ГПа), удовлетворительно согласуется с ранее опубликованными данными (124 ГПа). Поученные результаты свидетельствуют об относительной погрешности вычислений, равной 3,2 %, что подтверждает адекватность использованной математической модели.

Визуальный анализ процесса деформации образца ниобия показал послойную перестройку его структуры. Разрушение образца происходило не в периферийной его части, а в центральной области. На первых этапах кристаллическое строение материала сохранялось. Затем при $\varepsilon_x \approx 35\ \%$ стали заметны две области, где происходило разрушение образца. Разрыв происходил в различные моменты времени для разных скоростей деформации. Например, для $\xi = 10^{10}\ 1/\text{с}$ разрыв был зафиксирован при $\varepsilon_x \approx 70\ \%$, а для $\xi = 2 \cdot 10^{10}\ 1/\text{с}$ – при $\varepsilon_x \approx 63\ \%$. Моделирование процессов деформации образцов осуществлялось в интервале до 10 пс. В течение этого времени для скоростей $\xi = 0{,}2 \cdot 10^{10}\ 1/\text{с}$ и $\xi = 0{,}5 \cdot 10^{10}\ 1/\text{с}$ разрыв материала не наблюдался. Анализ полученных данных свидетельствует о целесообразности применения атомистических методов моделирования для исследования механизмов перестройки атомов, возникновения и изменения зернограничных областей и механики дислокаций на начальных стадиях деформации. Подобные результаты были получены в [41], где показано, что механические свойства нанокристаллического алюминия не зависят от скоростей деформации $\xi = 10^9 \div 10^{10}\ 1/\text{с}$.

Решение второй задачи – исследование механических характеристик нанопленки ниобия при ее растяжении – качественно показало похожие результаты, что и в первой задаче. Вначале (при $\varepsilon_x \approx 15\%$) плоское строение нанопленки исказилось, появилась область ее изгиба (рис. 3, *b*). Как видно из рис. 4, перед разрушением нанопленки заметны участки кристаллической структуры материала A, которые с ростом деформаций уменьшались, а также участки некристаллического строения B, которые увеличивались. Графики напряжения σ_{xx} от деформации нанопленки ниобия для разных скоростей ее растяжения ξ представлены на рис. 3.

По данным современной литературы модуль Юнга нанопленок ниобия изменяется в зависимости от толщины пленки, технологии ее получения, от процента кристалличности и экспериментальных условий. Для тонких пленок толщиной менее 100 нм модуль Юнга может быть ниже по сравнению с объемным материалом из-за эффекта микроразмеров (эффект, когда свойства и поведение материала меняются при приближении к микрометровым или нанометровым размерам) и изменения механических свойств из-за дефектов и границ зерен. В одном из исследований [48] упоминается, что модуль упругости для пленок ниобия толщиной 50 нм может составлять 117–268 ГПа. В другой публикации [49] приводится величина модуля Юнга 80 ± 30 ГПа для нанопорошка ниобия дисперсностью 10 нм. По причине значительной вариативности механических параметров

наноматериалов в зависимости от многих факторов (технология и параметры изготовления образцов, размерные свойства, химический состав и наличие примесей, структурные дефекты) сопоставление их между собой затруднено.

По результатам проведенных исследований был вычислен модуль упругости нанопленки ниобия. Величина модуля упругости была рассчитана через отношение σ_{xx} к ε_x на линейном участке графиков напряжений, приведенных на рис. 3, *a*. Далее для различных скоростей деформации через среднее арифметическое был вычислен средний модуль Юнга, величина которого составила 30 ГПа. Расхождение полученного значения с данными из [48] может быть связано с тем, что при моделировании рассматривалась нанопленка ниобия меньшей толщины (3,3 нм вместо 50 нм). Также в [48] не указаны условия и технология изготовления нанопленки, а пленка исследовалась не из чистого ниобия, а из его наноструктур с примесями (H-Nb_2O_5). Такое различие в значениях модулей Юнга подчеркивает необходимость учета влияния методов нанесения пленок, их физико-химических свойств и внешних условий на механические характеристики материалов.

В дальнейшем развитии исследований был выполнен расчет остаточных напряжений в подложке ниобия при осаждении 1,5-нанометровой пленки кобальта. В этом случае изменение формы наноматериала происходило только под действием осаждаемых атомов, принудительно образец не растягивался. Для изучаемого элементарного объема (см. рис. 1, *c*) был вычислен тензор напряжений, динамика изменения компонент которого в процессе осаждения приведена на рис. 5.

Анализ зависимостей на рис. 5 свидетельствует об изменчивости поведения тензора напряжений. Графики компонент тензора имеют колебательный, скачкообразный характер. Подобное их поведение связно с тем, что вычисление механических параметров в модели производилось на основании мгновенных значений сил, радиус-векторов и скоростей атомов ниобия, которые, в свою очередь, перестраиваются из-за тепловых флуктуаций и локального взаимодействия с осаждаемым кобальтом.

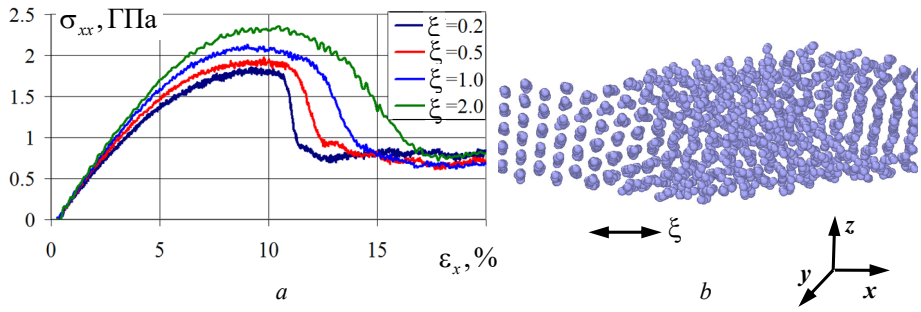


Рис. 3. Зависимость компоненты тензора напряжений σ_{xx} от относительного удлинения нанопленки ниобия (*a*) и иллюстрация возникновения области ее изгиба (*b*)

Fig. 3. Dependence of the stress tensor component on the relative elongation of the niobium nanofilm (*a*) and illustration of the emergence of its bending region (*b*)

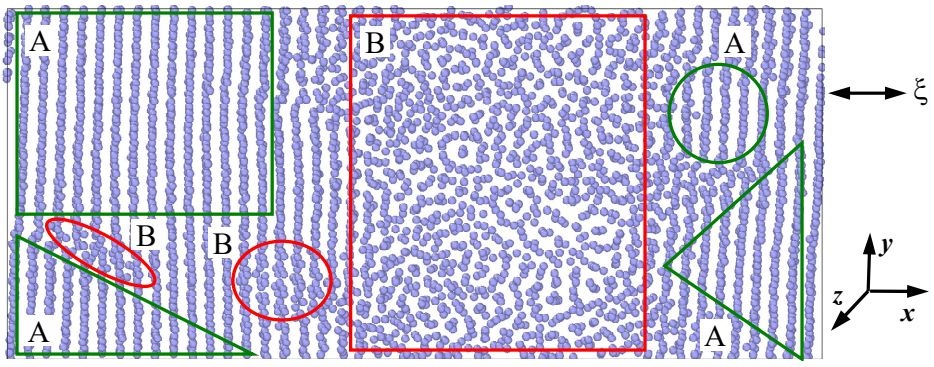


Рис. 4. Вид и структура нанопленки ниобия при растяжении, $\varepsilon_x = 80\ \%$. Буквой «А» показаны упорядоченные участки атомов, «В» – неупорядоченные

Fig. 4. The appearance and structure of a niobium nanofilm under tension. The letters “A” show ordered sections of atoms, “B” show disordered sections of atoms

Большинство компонент тензора напряжений ($\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}$) на рис. 5 совершают колебания около нулевого значения по оси ординат. Компонента σ_{zz} после начала осаждения принимает отрицательную величину, приблизительно равную -1 ГПа, которая означает, что подложка ниобия подвергается сжатию. В конце процесса осаждения некоторые компоненты тензора такие, как σ_{xx}, σ_{yy} и σ_{xy}, показали рост до 1 ГПа, что может быть связано с компенсацией воздействия осаждаемых атомов. С ростом толщины осаждаемой нанопленки горизонтальные составляющие тензора напряжений увеличиваются, так как подложка испытывает сжатие в вертикальном направлении, а в горизонтальных расширяться не может вследствие периодических граничных условий.

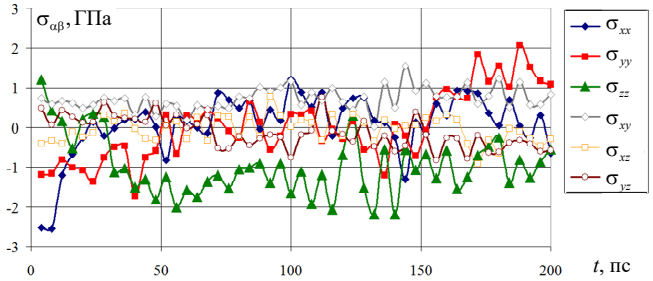


Рис. 5. Изменение компонентов тензора напряжений элементарного объема подложки ниобия в процессе осаждения нанопленки кобальта, температура подложки $T = 300\,K$

Fig. 5. Change in the stress tensor of the elementary volume of the niobium substrate during the deposition of a cobalt nanofilm, substrate temperature $T = 300\,K$

Следующим шагом были вычислены обобщающие величины гидростатического напряжения, напряжения фон Мизеса и девиаторного напряжения фон Мизеса. Их изменение в процессе осаждения нанопленки показано на рис. 6. Аналогично поведению отдельных компонент тензора напряжений графики данных величин демонстрируют флуктуационный характер с низким уровнем гладкости кривых.

Гидростатическое напряжение представляет собой напряжение, которое действует на атомы или молекулы материала, обеспечивая их равновесие под действием внешних сил. Это приводит к тому, что при наличии гидростатического напряжения материал не деформируется с точки зрения изменения его формы, а только изменяет объем, что называется объемной деформацией. На рис. 6 изменение данной величины происходит около нулевого значения, что говорит об отсутствии изотопического равномерного сжатия или растяжения в образце.

Напряжение фон Мизеса может служить критерием для оценки условий начала пластической деформации в материалах, особенно в случаях, когда они подвергаются сложным напряженным состояниям, отличным от простого одноосного сжатия или растяжения. Данная характеристика учитывает не только единичные компоненты напряжения, но и их комбинацию и общее состояние деформации, позволяя более точно описать сложное механическое поведение. Учитывая, что ниобий является достаточно пластичным тугоплавким металлом с физическими свойствами, существенно зависящими от температуры, точки соприкосновения с «горячими» осаждаемыми атомами могут в значительной степени влиять на его механические свойства. Тем не менее величина σ_{vM} в процессе моделирования приблизительно составляла 2 ГПа, что меньше средней твердости объемного ниобия ($4{,}8 \pm 0{,}5$ ГПа), приведенной в [48]. Этот факт свидетельствует, что полный переход структуры подложки в пластическое состояние не происходит, хотя и ощущается влияние быстрых осаждаемых атомов.

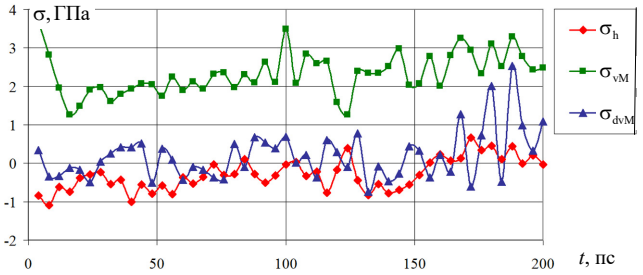


Рис. 6. Изменение гидростатического напряжения, напряжения фон Мизеса и девиаторного напряжения фон Мизеса элементарного объема подложки ниобия в процессе осаждения нанопленки кобальта, температура подложки $T = 300\,K$

Fig. 6. Change in hydrostatic stress, von Mises stress and von Mises deviatoric stress of the elementary volume of the niobium substrate during the deposition of cobalt nanofilm, substrate temperature $T = 300\,K$

Девиаторное напряжение фон Мизеса вычислялось для анализа неравномерности распределения напряжений в подложке, при этом все нормальные напряжения снижались до одного значения, которое соответствовало среднему, чтобы выявить дополнительные напряжения, вызывающие сдвиг. Величина σ_{dvM} на рис. 6 колеблется около нулевого значения. В связи с этим можно сделать вывод, что в подложке ниобия при осаждении не происходит отклонения от гидростатического состояния, а касательные напряжения не приводят к переходу ниобия в пластический режим.

Заключение

В работе описана методика использования модели молекулярной динамики для вычисления механических характеристик наноматериалов, в том числе остаточных напряжений композитов и их производных, возникающих в процессе осаждения нанопленок. Математическая модель обеспечивает хорошую воспроизводимость

результатов, что делает ее полезной для теоретических и практических исследований в области физики, химии и материаловедения. Методика позволяет не только глубже понять природу взаимодействий на атомном уровне, но и находить практическое применение в разработке новых материалов и технологий, исследовать процесс формирования материалов, их структуру и поведение при различных условиях.

Моделирование механических свойств кристаллического ниобия показало, что среднее расчетное значение модуля Юнга составляет 120 ГПа и удовлетворительно (на уровне относительной ошибки 3,2 %) согласуется с ранее известными литературными данными. При растяжении разрушение образца начиналось ближе к его центру, а не у границ. На ранних этапах моделирования процесса деформации сохранялась кристаллическая структура материала, но при критической деформации возникали зоны разрыва. Скорость деформации существенно влияла на неупругое поведение материала, но начальный упругий участок графиков напряжения был аналогичен для всех скоростей деформации.

При решении задачи растяжения нанопленки ниобия и анализе ее свойств было получено, что среднее значение модуля упругости 30 ГПа значительно ниже, чем у объемного материала, что связано с ультрамалой толщиной пленки (3,3 нм) и такими эффектами микроразмеров, как дефекты, границы зерен и т.д. Перед разрушением нанопленки наблюдались области с упорядоченной и неупорядоченной атомной структурой, что указывает на локальную потерю кристалличности. Значительный разброс значений механических параметров наноматериалов ниобия в литературе подчеркивает важность учета технологии изготовления наноматериалов и условий эксперимента при проведении подобных исследований.

Исследование остаточных напряжений в подложке при осаждении нанопленки кобальта толщиной 1,5 нм продемонстрировало колебательный характер изменения тензора напряжений. Данное поведение может быть связано с тепловыми флуктуациями и локальными взаимодействиями с осаждаемыми атомами кобальта. Отсутствие значительных отклонений от нуля гидростатического напряжения и девиаторного напряжения фон Мизеса указывает на равномерное распределение напряжений без объемной деформации, а касательные напряжения не приводят к переходу ниобия в пластический режим.

Библиографический список

1. Атомно-слоевое осаждение и термические превращения титан-ванадиевых оксидных тонких пленок / А.И. Абдулагатов, А.М. Максумова, Д.К. Палчаев, М.Х. Рабаданов, И.М. Абдулагатов // Журнал прикладной химии. – 2021. – Т. 94, № 7. – С. 835–848.

2. George, S.M. Atomic layer deposition: an overview / S.M. George // Chemical reviews. – 2010. – Vol. 110, no. 1. – P. 111–131. DOI: 10.1021/cr900056b

3. Морозова, А.А. Атомно слоевое осаждение сверхтонких пленок для наноэлектроники / А.А. Морозова // Наноинженерия. – 2012. – № 11. – С. 3–6.

4. Кашин, А.С. Формирования наноразмерных покрытий и наночастиц металлов путем магнетронного распыления и их исследование методом сканирующей электронной микроскопии / А.С. Кашин, В.П. Анаников // Известия Академии наук. Серия химическая. – 2011. – № 12. – С. 2551–2551.

5. Gudmundsson, J.T. Introduction to magnetron sputtering / J.T. Gudmundsson, D. Lundin // High power impulse magnetron sputtering: chapter in book. – Elsevier, 2020. – P. 1–48. DOI: 10.1016/B978-0-12-812454-3.00006-1

6. Структура покрытий Ir-Al_2O_3, полученных методом химического осаждения из паровой фазы в атмосфере водорода / Н.В. Гельфонд, Н.Б. Морозова, И.К. Игуменов, Е.С. Филатов, С.А. Громилов, Р.И. Квон // Журнал структурной химии. – 2009. – Т. 50, № 5. – С. 955–959.

7. Zhang, Y.I. Review of chemical vapor deposition of graphene and related applications / Y.I. Zhang, L. Zhang, C. Zhou // Accounts of chemical research. – 2013. – Vol. 46, no. 10. – P. 2329–2339. DOI: 10.1021/ar300203n

8. Vacancy dynamics in niobium and its native oxides and their potential implications for quantum computing and superconducting accelerators / M. Wenskat, J. Čižek, M.O. Liedke, M. Butterling, M. Stiehl, G.D.L. Semione [et al.] // Physical Review B. – 2022. – Vol. 106, no. 9. – P. 094516. DOI: 10.1103/PhysRevB.106.094516

9. Niobium quarter-wave resonator with the optimized shape for quantum information systems / S.V. Kutsaev, K. Taletski, R. Agustsson, P. Carriere, A.N. Cleland, Z.A. Conway, É. Dumur, A. Moro, A.Y. Smirnov // EPJ quantum technology. – 2020. – Vol. 7, no. 1. – P. 1–17. DOI: 10.1140/epjqt/s40507-020-00082-8

10. Ultra-high field NMR and MRI–the role of magnet technology to increase sensitivity and specificity / E. Moser, E. Laistler, F. Schmitt, G. Kontaxis // Frontiers in Physics. – 2017. – Vol. 5. – P. 33.1–15. DOI: 10.3389/fphy.2017.00033

11. Ciovati, G. Effect of low-temperature baking on the radio-frequency properties of niobium superconducting cavities for particle accelerators / G. Ciovati // Journal of applied physics. – 2004. – Vol. 96, no. 3. – P. 1591–1600. DOI: 10.1063/1.1767295

12. Ricker, R.E. Evaluation of the propensity of niobium to absorb hydrogen during fabrication of superconducting radio frequency cavities for particle accelerators / R.E. Ricker, G.R. Myneni // Journal of research of the National Institute of Standards and Technology. – 2010. – Vol. 115, no. 5. – P. 353–371. DOI: 10.6028/jres.115.025

13. Schubert, W.K. Electron-energy-loss spectra of vanadium, niobium, molybdenum, and tantalum / W.K. Schubert, E.L. Wolf // Physical Review B. – 1979. – Vol. 20, no. 5. – P. 1855. DOI: 10.1103/PhysRevB.20.1855

14. Beall, Jr W.T. AC Energy Losses Above and Below H_{c1} in Niobium and Niobium-25 At.% Zirconium / W.T. Beall Jr, R.W. Meyerhoff // Journal of Applied Physics. – 1969. – Vol. 40, no. 5. – P. 2052–2059. DOI: 10.1063/1.1657910

15. Niobium-Based Oxide for Anode Materials for Lithium-Ion Batteries / Y. Sheng, Y. Wang, S. Yin, L. Zhao, X. Zhang, D. Liu, G. Wen // Chemistry–A European Journal. – 2024. – Vol. 30, no. 19. – P. e202302865. DOI: 10.1002/chem.202302865

16. The role of niobium in layered oxide cathodes for conventional lithium-ion and solid-state batteries / B.N. Nunes, W. van den Bergh, F. Strauss, A. Kondrakov, J. Janek, T. Brezesinski // Inorganic Chemistry Frontiers. – 2023. – Vol. 10, no. 24. – P. 7126–7145. DOI: 10.1039/D3QI01857A

17. Niobium doped lithium titanate as a high rate anode material for Li-ion batteries / B. Tian, H. Xiang, L. Zhang, Z. Li, H. Wang // Electrochimica Acta. – 2010. – Vol. 55, no. 19. – P. 5453–5458. DOI: 10.1016/j.electacta.2010.04.068

18. Xu, L. A promising electrode material modified by Nb-doped TiO_2 nanotubes for electrochemical degradation of AR 73 / L. Xu, G. Liang, M. Yin // Chemosphere. – 2017. – Vol. 173. – P. 425–434. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2017.01.077

19. Lee, G.R. Studies on the electrochemical deposition of niobium oxide / G.R. Lee, J.A. Crayston // Journal of Materials Chemistry. – 1996. – Vol. 6, no. 2. – P. 187–192. DOI: 10.1039/JM9960600187

20. Investigating the structure and biocompatibility of niobium and titanium oxides as coatings for orthopedic metallic implants / D. Pradhan, A.W. Wren, S.T. Misture, N.P. Mellott // Materials Science and Engineering: C. – 2016. – Vol. 58. – P. 918–926. DOI: 10.1016/j.msec.2015.09.059

21. Niobium based coatings for dental implants / G. Ramírez, S.E. Rodil, H. Arzate, S. Muhl, J.J. Olaya // Applied Surface Science. – 2011. – Vol. 257, no. 7. – P. 2555–2559. DOI: 10.1016/j.apsusc.2010.10.021

22. Milanović M. Nikolić L.M., Stijepović I., Kontos A.G., Giannakopoulos K.P. Steps in growth of Nb-doped layered titanates with very high surface area suitable for water purification // Materials Chemistry and Physics. – 2014. – Vol. 148, No. 3. – pp. 874-881. doi: 10.1016/j.matchemphys.2014.08.064

23. Sievers M.R., Armentrout P.B. Gas phase activation of carbon dioxide by niobium and niobium monoxide cations // International journal of mass spectrometry. – 1998. – Vol. 179. – pp. 103-115. doi: 10.1016/S1387-3806(98)14064-2

24. Huff, M. Residual stresses in deposited thin-film material layers for micro-and nano-systems manufacturing / M. Huff // Micromachines. – 2022. – Vol. 13, no. 12. – P. 2084.1–56. DOI: 10.3390/mi13122084

25. Li, X. Microstructure and stress evolution of W nanofilms prepared by arc ion plating under different deposition time and substrate bias / X. Li, Z. Mu, X. Song // Journal of Materials Science. – 2024. – Vol. 59, no. 40. – P. 19254–19272. DOI: 10.1007/s10853-024-10329-9

26. Швейкин, А.И. Двухуровневая конститутивная модель металла с комплексным учетом изменяющихся температурно-скоростных условий / А.И. Швейкин, А.А. Вшивкова, П.В. Трусов // Физическая мезомеханика. – 2024. – Т. 27, № 2. – С. 50–68. DOI: 10.55652/1683-805X_2024_27_2_50-68

27. Многоуровневая модель описания мартенситного превращения: формирование полиэдрической структуры мартенсита / А.Н. Подседерцев, Н.С. Кондратьев, П.В. Трусов, Е.С. Макаревич // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2024. – № 2. – С. 79–96. DOI: 10.15593/perm.mech/2024.2.09

28. Трусов, П.В. О двухуровневых моделях типа Тейлора – Бишопа – Хилла для описания упругопластического деформирования поликристаллических тел: один вариант решения проблемы неопределенности выбора активных систем скольжения / П.В. Трусов, П.А. Гладких // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2024. – № 4. – С. 56–69. DOI: 10.15593/perm.mech/2024.4.06

29. Pourfath, M. Modeling demands for nanoscale devices / M. Pourfath, V. Sverdlov, S. Selberherr // 68th Device Research Conference. – 2010. – P. 211–214. DOI: 10.1109/DRC.2010.5551915

30. Classical and reactive molecular dynamics: Principles and applications in combustion and energy systems / Q. Mao, M. Feng, X.Z. Jiang, Y. Ren, K.H. Luo, A.C. van Duin // Progress in Energy and Combustion Science. – 2023. – Vol. 97. – P. 101084. DOI: 10.1016/j.pecs.2023.101084

31. Review of molecular dynamics simulation in extraction metallurgy / W. Yang, Z. Gao, S. Li, L. Deng, B. Liang, X. Kong, X. Chen, D. Liu, B. Yang // Computational Materials Science. – 2025. – Vol. 258. – P. 114111. DOI: 10.1016/j.commatsci.2025.114111

32. Molecular Dynamics Simulation of Diffusive Process of Chemotherapeutic Drug / L.N. Zhang, L.Q. Wu // Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. – 2015. – Vol. 12, no. 12. – P. 5711–5715. DOI: 10.1166/jctn.2015.4706

33. Xiong, D.X. Molecular dynamics simulation on thermodynamic properties and transport coefficients / D.X. Xiong, Y.S. Xu, Z.Y. Guo // Journal of Thermal Science. – 1996. – Vol. 5, no. 3. – P. 196–200. DOI: 10.1007/BF02653185

34. Mechanical properties of nanocrystalline aluminium: A molecular dynamics investigation / S. Subedi, S.M. Handrigan, L.S. Morrissey, S. Nakhla // Molecular Simulation. – 2020. – Vol. 46, no. 12. – P. 898–904. DOI: 10.1080/08927022.2020.1788217

35. The influence of structure and local structural defects on the magnetic properties of cobalt nanofilms / A.V. Vakhrushev, A.Yu. Fedotov, O.Yu. Severyukhina, A.S. Sidorenko // Beilstein Journal of Nanotechnology. – 2023. – Vol. 14, no. 1. – P. 23–33. DOI: 10.3762/bxiv.2022.64.v1.

36. Исследование магнитных свойств нанокомпозита Co-Fe / А.Ю. Саломатина, А.Ю. Федотов, О.Ю. Северюхина, Ф.А. Виноградов // Физико-химические аспекты изучения кластеров. – 2024. – Вып. 16. – С. 267–276. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.267

37. Vakhrushev, A.V. Simulation of Multilayer Nanosystems Interface Formation Process for Spintronics / A.V. Vakhrushev, A.Yu. Fedotov, A.S. Sidorenko // Key Engineering Materials. – 2021. – Vol. 888. – P. 57–65. DOI: 10.4028/www.scientific.net/kem.888.57

38. Baskes, M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities / M.I. Baskes // Physical Review B. – 1992. – Vol. 46, no. 5. – P. 2727–2742. DOI: 10.1103/PhysRevB.46.2727

39. Thompson, A.P. General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions / A.P. Thompson, S.J. Plimpton, W. Mattson // The Journal of chemical physics. – 2009. – Vol. 131, no. 15. – P. 154107.1-6. DOI: 10.1063/1.3245303

40. Plimpton, S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics / S. Plimpton // Journal of Computational Physics. – 1995. – Vol. 117, no. 1. – P. 1–19. DOI: 10.1006/jcph.1995.1039

41. Mechanical properties of nanocrystalline aluminium: a molecular dynamics investigation / S. Subedi, S.M. Handrigan, L.S. Morrissey, S. Nakhla // Molecular Simulation. – 2020. – Vol. 46, no. 12. – P. 898–904. DOI: 10.1080/08927022.2020.1788217

42. Deformation-mechanism map for nanocrystalline metals by molecular-dynamics simulation / V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot, A.K. Mukherjee, H. Gleiter // Nature materials. – 2004. – Vol. 3, no. 1. – P. 43–47. DOI: 10.1038/nmat1035

43. Alam, M.F. Temperature and strain rate dependent mechanical properties of ultrathin metallic nanowires: a molecular dynamics study / M.F. Alam, M.R.B. Shahadat // AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing LLC. – 2018. – Vol. 1980, no. 1. – P. 030015. DOI: 10.1063/1.5044294

44. Deformation of nanocrystalline materials by molecular-dynamics simulation: relationship to experiments? / D. Wolf, V. Yamakov, S.R. Phillpot, A. Mukherjee, H. Gleiter // Acta Materialia. – 2005. – Vol. 53, no. 1. – P. 1–40. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.08.045

45. Связь структуры, фазового состава, физико-механических свойств в закаленных сплавах системы Ti–Nb / А.Г. Илларионов, С.В. Гриб, С.М. Илларионова, А.А. Попов // Физика металлов и металловедение. – 2019. – Т. 120, № 2. – С. 161–168. DOI: 10.1134/S0015323019020050

46. Бадамшин, И.Х. От четырех к одному. Силы внутриатомного взаимодействия и прочность материалов / И.Х. Бадамшин. – М.: Издательский дом Академии Естествознания, 2016. – 134 с.

47. Нелинейные акустические эффекты в монокристаллах ниобия, обусловленные дислокациями / П.П. Паль-Валь, В.Д. Нацик, Л.Н. Паль-Валь, Ю.А. Семеренко // Физика низких температур. – 2004. – Т. 30, вып. 1. – С. 115–125.

48. Ломыгин, А.Д. Свойства ниобия и пентаоксида ниобия в микро-и наноструктурах / А.Д. Ломыгин, А.А. Павельева, И.С. Саквин // Международный студенческий научный вестник. – 2018. – № 6. – С. 176–176.

49. Лй, Х.Ю. Сравнительные характеристики элемента ниобия в микро и наноструктурах / Х.Ю. Лй, Ш. Тянь, М. Чжан // Международный студенческий научный вестник. – 2018. – № 6. – С. 179–179.

References

1. Abdulagatov A.I., Maksumova A.M., Palchaev D.K., Rabadanov M.Kh., Abdulagatov I.M. Atomno-sloevoe osazhdenie i termicheskie prevrashcheniia titan-vanadievykh oksidnykh tonkikh plenok [Atomic layer deposition and thermal transformations of titanium-vanadium oxide thin films]. *Journal of Applied Chemistry*, 2021, Vol. 94, No. 7, pp. 835-848.

2. George S.M. Atomic layer deposition: an overview. *Chemical reviews,* 2010, Vol. 110, No. 1, pp. 111-131. doi: 10.1021/cr900056b

3. Morozova A.A. Atomno sloevoe osazhdenie sverkhtonkikh plenok dlia nanoelektroniki [Atomic layer deposition of ultra-thin films for nanoelectronics]. *Nanoengineering*, 2012, No. 11, pp. 3-6.

4. Kashin A.S., Ananikov V.P. Formirovaniia nanorazmernykh pokrytii i nanochastits metallov putem magnetronnogo raspyleniia i ikh issledovanie metodom skaniruiushchei elektronnoi mikroskopii [Formation of nanosized coatings and metal nanoparticles by magnetron sputtering and their study by scanning electron microscopy]. *Bulletin of the Academy of Sciences. Chemical Series*, 2011, No. 12, pp. 2551-2551.

5. Gudmundsson J.T., Lundin D. Introduction to magnetron sputtering. High power impulse magnetron sputtering: chapter in book. Elsevier, 2020, pp. 1-48. doi: 10.1016/B978-0-12-812454-3.00006-1

6. Gelfond N.V., Morozova N.B., Igumenov I.K., Filatov E.S., Gromilov S.A., Kvon R.I. Struktura pokrytii Ir-Al_2O_3, poluchennykh metodom khimicheskogo osazhdeniia iz parovoi fazy v atmosfere vodoroda [Structure of Ir-Al_2O_3 coatings obtained by chemical vapor deposition in a hydrogen atmosphere]. *Journal of Structural Chemistry*, 2009, Vol. 50, No. 5, pp. 955-959

7. Zhang Y.I., Zhang L., Zhou C. Review of chemical vapor deposition of graphene and related applications. *Accounts of chemical research,* 2013, Vol. 46, No. 10, pp. 2329-2339. doi: 10.1021/ar300203n

8. Wenskat M., Čižek J., Liedke M.O., Butterling M., Stiehl M., Semione G.D. L. et al. Vacancy dynamics in niobium and its native oxides and their potential implications for quantum computing and superconducting accelerators. *Physical Review B,* 2022, Vol. 106, No. 9. pp. 094516. doi: 10.1103/PhysRevB.106.094516

9. Kutsaev S.V. Taletski K., Agustsson R., Carriere P., Cleland A.N., Conway Z.A., Dumur É., Moro A., Smirnov A.Y. Niobium quarter-wave resonator with the optimized shape for quantum information systems. *EPJ quantum technology,* 2020, Vol. 7, No. 1, pp. 1-17. doi: 10.1140/epjqt/s40507-020-00082-8

10. Moser E. Laistler E., Schmitt F., Kontaxis G. Ultra-high field NMR and MRI–the role of magnet technology to increase sensitivity and specificity. *Frontiers in Physics*, 2017, Vol. 5, pp. 33.1-15. doi: 10.3389/fphy.2017.00033

11. Ciovati G. Effect of low-temperature baking on the radio-frequency properties of niobium superconducting cavities for particle accelerators. *Journal of applied physics*, 2004, Vol. 96, No. 3, pp. 1591-1600. doi: 10.1063/1.1767295

12. Ricker R.E., Myneni G.R. Evaluation of the propensity of niobium to absorb hydrogen during fabrication of superconducting radio frequency cavities for particle accelerators. *Journal of research of the National Institute of Standards and Technology*, 2010, Vol. 115, No. 5, pp. 353-371. doi: 10.6028/jres.115.025

13. Schubert W.K., Wolf E.L. Electron-energy-loss spectra of vanadium, niobium, molybdenum, and tantalum. *Physical Review B*, 1979, Vol. 20, No. 5, pp. 1855. doi: 10.1103/PhysRevB.20.1855

14. Beall Jr W.T., Meyerhoff R.W. AC Energy Losses Above and Below H_{c1} in Niobium and Niobium-25 At.% Zirconium. *Journal of Applied Physics*, 1969, Vol. 40, No. 5, pp. 2052-2059. doi: 10.1063/1.1657910

15. Sheng Y. Wang Y., Yin S., Zhao L., Zhang X., Liu D., Wen G. Niobium-Based Oxide for Anode Materials for Lithium-Ion Batteries. *Chemistry–A European Journal*, 2024, Vol. 30, No. 19, pp. e202302865. doi: 10.1002/chem.202302865

16. Nunes B.N. van den Bergh W., Strauss F., Kondrakov A., Janek J., Brezesinski T. The role of niobium in layered oxide cathodes for conventional lithium-ion and solid-state batteries. *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2023, Vol. 10, No. 24, pp. 7126-7145. doi: 10.1039/D3QI01857A

17. Tian B. Xiang H., Zhang L., Li Z., Wang H. Niobium doped lithium titanate as a high rate anode material for Li-ion batteries. *Electrochimica Acta,* 2010, Vol. 55, No. 19, pp. 5453-5458. doi: 10.1016/j.electacta.2010.04.068

18. Xu L., Liang G., Yin M. A promising electrode material modified by Nb-doped TiO_2 nanotubes for electrochemical degradation of AR 73. *Chemosphere,* 2017, Vol. 173, pp. 425-434. doi: 10.1016/j.chemosphere.2017.01.077

19. Lee G.R., Crayston J.A. Studies on the electrochemical deposition of niobium oxide. *Journal of Materials Chemistry*, 1996, Vol. 6, No. 2, pp. 187-192. doi: 10.1039/JM9960600187

20. Pradhan D. Wren A.W., Misture S.T., Mellott N.P. Investigating the structure and biocompatibility of niobium and titanium oxides as coatings for orthopedic metallic implants. *Materials Science and Engineering: C*, 2016, Vol. 58, pp. 918-926. doi: 10.1016/j.msec.2015.09.059

21. Ramírez G. Rodil S.E., Arzate H., Muhl S., Olaya J.J. Niobium based coatings for dental implants. *Applied Surface Science,* 2011, Vol. 257, No. 7, pp. 2555-2559. doi: 10.1016/j.apsusc.2010.10.021

22. Milanović M. Nikolić L.M., Stijepović I., Kontos A.G., Giannakopoulos K.P. Steps in growth of Nb-doped layered titanates with very high surface area suitable for water purification. *Materials Chemistry and Physics,* 2014, Vol. 148, No. 3, pp. 874-881. doi: 10.1016/j.matchemphys.2014.08.064

23. Sievers M.R., Armentrout P.B. Gas phase activation of carbon dioxide by niobium and niobium monoxide cations. *International journal of mass spectrometry*, 1998, Vol. 179, pp. 103-115. doi: 10.1016/S1387-3806(98)14064-2

24. Huff M. Residual stresses in deposited thin-film material layers for micro-and nano-systems manufacturing. *Micromachines*, 2022, Vol. 13, No. 12, pp. 2084.1-56. doi: 10.3390/mi13122084

25. Li X., Mu Z., Song X. Microstructure and stress evolution of W nanofilms prepared by arc ion plating under different deposition time and substrate bias. *Journal of Materials Science*, 2024, Vol. 59, No. 40, pp. 19254-19272. doi: 10.1007/s10853-024-10329-9

26. Shveikin A.I., Vshivkova A.A., Trusov P.V. Dvukhurovnevaia konstitutivnaia model' metalla s kompleksnym uchetom izme-

niaiushchikhsia temperaturno-skorostnykh uslovii [Two-level constitutive model of metal with complex consideration of changing temperature-speed conditions]. *Physical mesomechanics*, 2024, Vol. 27, No. 2, pp. 50-68. doi: 10.55652/1683-805X_2024_27_2_50-68

27. Podsedertsev A.N. Kondratiev N.S., Trusov P.V., Makarevich E.S. Mnogourovnevaia model' opisaniia martensitnogo prevrashcheniia: formirovanie poliedricheskoi struktury martensita [Multilevel model for describing martensitic transformation: formation of polyhedral structure of martensite]. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2024, No. 2, pp. 79-96. doi: 10.15593/perm.mech/2024.2.09

28. Trusov P.V., Gladkikh P.A. O dvukhurovnevykh modeliakh tipa Teilora – Bishopa – Khilla dlia opisaniia uprugoplasticheskogo deformirovaniia polikristallicheskikh tel: odin variant resheniia problemy neopredelennosti vybora aktivnykh sistem skol'zheniia [On two-level models of the Taylor-Bishop-Hill type for describing elastic-plastic deformation of polycrystalline bodies: one option for solving the problem of uncertainty in the choice of active slip systems]. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2024, No. 4, pp. 56–69. doi: 10.15593/perm.mech/2024.4.06

29. Pourfath M., Sverdlov V., Selberherr S. Modeling demands for nanoscale devices. 68th Device Research Conference, 2010, pp. 211-214. doi: 10.1109/DRC.2010.5551915

30. Mao Q., Feng M., Jiang X.Z., Ren Y., Luo K.H., van Duin A.C. Classical and reactive molecular dynamics: Principles and applications in combustion and energy systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2023, Vol. 97, pp. 101084. doi: 10.1016/j.pecs.2023.101084

31. Yang W., Gao Z., Li S., Deng L., Liang B., Kong X., Chen X., Liu D., Yang B. Review of molecular dynamics simulation in extraction metallurgy. *Computational Materials Science*, 2025, Vol. 258, pp. 114111. doi: 10.1016/j.commatsci.2025.114111

32. Zhang L.N., Wu L.Q., Molecular Dynamics Simulation of Diffusive Process of Chemotherapeutic Drug. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 2015, Vol. 12, No. 12, pp. 5711-5715. doi: 10.1166/jctn.2015.4706

33. Xiong D.X., Xu Y.S., Guo Z.Y. Molecular dynamics simulation on thermodynamic properties and transport coefficients. *Journal of Thermal Science*, 1996, Vol. 5, No. 3, pp. 196-200. doi: 10.1007/BF02653185

34. Subedi S., Handrigan S.M., Morrissey L.S., Nakhla S. Mechanical properties of nanocrystalline aluminium: A molecular dynamics investigation. *Molecular Simulation*, 2020, Vol. 46, No. 12, pp. 898-904. doi: 10.1080/08927022.2020.1788217

35. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Severyukhina O.Yu., Sidorenko A.S. The influence of structure and local structural defects on the magnetic properties of cobalt nanofilms. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 2023, Vol. 14, No. 1, pp. 23-33. doi: 10.3762/bxiv.2022.64.v1.

36. Salomatina A.Iu., Fedotov A.Yu., Severiukhina O.Yu., Vinogradov F.A. Issledovanie magnitnykh svoistv nanokompozita Co-Fe [Study of magnetic properties of Co-Fe nanocomposite]. *Physicochemical aspects of cluster study*, 2024, No.. 16, pp. 267-276. doi: 10.26456/pcascnn/2024.16.267

37. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Sidorenko A.S. Simulation of Multilayer Nanosystems Interface Formation Process for Spintronics. *Key Engineering Materials,* 2021, Vol. 888, pp. 57-65. doi: 10.4028/www.scientific.net/kem.888.57

38. Baskes M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities. *Physical Review B*, 1992, Vol. 46, No. 5, pp. 2727-2742. doi: 10.1103/PhysRevB.46.2727

39. Thompson A.P., Plimpton S.J., Mattson W. General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions. *The Journal of chemical physics*, 2009, Vol. 131, No. 15, pp. 154107.1-6. doi: 10.1063/1.3245303

40. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, Vol. 117, No. 1, pp. 1-19. doi: 10.1006/jcph.1995.1039.

41. Subedi S., Handrigan S.M., Morrissey L.S., Nakhla S. Mechanical properties of nanocrystalline aluminium: a molecular dynamics investigation. *Molecular Simulation,* 2020, Vol. 46, No.12, pp. 898-904. doi: 10.1080/08927022.2020.1788217

42. Yamakov V., Wolf D., Phillpot S.R., Mukherjee A.K., Gleiter H. Deformation-mechanism map for nanocrystalline metals by molecular-dynamics simulation. *Nature materials,* 2004, Vol. 3, No. 1, pp. 43-47. doi: 10.1038/nmat1035

43. Alam M.F., Shahadat M.R.B. Temperature and strain rate dependent mechanical properties of ultrathin metallic nanowires: a molecular dynamics study. *AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing LLC*, 2018, Vol. 1980, No. 1, pp. 030015. doi: 10.1063/1.5044294

44. Wolf D., Yamakov V., Phillpot S.R., Mukherjee A., Gleiter H. Deformation of nanocrystalline materials by molecular-dynamics simulation: relationship to experiments? *Acta Materialia,* 2005, Vol. 53, No. 1, pp. 1-40. doi: 10.1016/j.actamat.2004.08.045

45. Illarionov A.G. Grib S.V., Illarionova S.M., Popov A.A. Sviaz' struktury, fazovogo sostava, fiziko-mekhanicheskikh svoistv v zakalennykh splavakh sistemy Ti–Nb [Relationship between structure, phase composition, physical and mechanical properties in hardened alloys of the Ti–Nb system]. *Physics of Metals and Metal Science*, 2019. Vol. 120, No. 2, pp. 161-168. doi: 10.1134/S0015323019020050

46. Badamshin I.Kh. Ot chetyrekh k odnomu. Sily vnutriatomnogo vzaimodeistviia i prochnost' materialov [From four to one. Forces of intra-atomic interaction and strength of materials]. Moscow, Publishing House of the Academy of Natural Sciences2016, 134 p.

47. Pal-Val P.P., Natsik V.D., Pal-Val L.N., Semerenko Yu.A. Nelineinye akusticheskie effekty v monokristallakh niobiia, obuslovlennye dislokatsiiami [Nonlinear acoustic effects in niobium single crystals caused by dislocations]. *Low Temperature Physics*, 2004. Vol. 30, No. 1, pp. 115-125.

48. Lomygin A.D., Pavelieva A.A., Sakvin I.S. Svoistva niobiia i pentaoksida niobiia v mikro-i nanostrukturakh [Properties of niobium and niobium pentoxide in micro- and nanostructures]. *International Student Scientific Bulletin*, 2018, No. 6, pp. 176-176.

49. Li Kh.Iu., Tian Sh., Chzhan M. Sravnitel'nye kharakteristiki elementa niobiia v mikro i nanostrukturakh [Comparative characteristics of the niobium element in micro and nanostructures]. *International Student Scientific Bulletin*, 2018, No. 6, pp. 179-179.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема №FUUE-2025-0001 «Моделирование и экспериментальные исследования структуры и магнитных параметров контакта Джозефсона из многослойной наноструктуры», № гос. регистрации 125020501412-9).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов равноценен.

Funding. The work was carried out within the framework of the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (topic No. FUUE-2025-0001 “Modeling and experimental studies of the structure and magnetic parameters of a Josephson contact from a multilayer nanostructure”, state registration No. 125020501412-9).

Conflict of interest. The authors declare no conflict of interest.

The authors' contributions are equal.