

УДК 539.216.1

© 2012 г. А.Д. Плутенко, д-р техн. наук,
И.Е. Еремин, канд. физ.-мат. наук,
В.В. Еремина, канд. физ.-мат. наук
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

МЕТОД ОПОСРЕДОВАННОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ НАНОСТРУКТУР

Рассматривается возможность визуального представления микроструктуры конденсированных сред, геометрические размеры элементов которой определяются на базе кибернетического моделирования оптических спектров вещества. Приведены результаты геометрического моделирования электронно-атомного строения ионных кристаллов и молекулярных связей воды.

Ключевые слова: комплексная диэлектрическая проницаемость, электронная оболочка, кристаллическая решетка, молекулярный кластер; конгломерат.

Введение

В настоящее время общепризнанно, что развитие современных нанотехнологий должно основываться на взаимной интеграции методов исследований, характерных для научных направлений, которые еще недавно считались независимыми. При этом четкое знание особенностей материи, проявляющихся на уровне межъядерных расстояний, открывает эффективные возможности разработки новых технологических приемов физико-химического синтеза перспективных конструкционных материалов, а также создания высокотехнологичных устройств, проектируемых на их основе [1 – 11].

В свою очередь, учитывая сложные квантово-механические эффекты, проявляющиеся на атомарном уровне, особое значение для эффективного решения названных задач приобретает формирование специальных методов моделирования структурных характеристик наносистем. При этом теоретическое рассмотрение возможности их практической реализации непосредственно выливается в отдельную весьма актуальную проблему, поскольку существующие на текущий момент квантовые методы описания атомных и молекулярных структур недостаточно совершенны и требуют слишком много времени для проведения прикладных расчетов [12 – 17].

Таким образом, прогресс в данной области может быть достигнут как за счет улучшения эффективности численных методов современных квантовых расчетов и повышения их достоверности, так и посредством разработки совершенно новых методик, основанных на принципиально иных методах расчета.

Возможности современной микроскопии высокого разрешения

Разрешающая способность оптических микроскопов принципиально ограничена половиной средней длины волны видимого света и составляет около 200 нм, что явно недостаточно для рассмотрения внутреннего строения вещества на молекулярном уровне. Единственным выходом из сложившейся ситуации стало создание приборов, принцип действия которых основан на использовании излучений с меньшей длиной волны, т.е. электромагнитных полей не световой природы. Рассмотрим основные характеристики существующих приборных средств электронной микроскопии [8, 10, 18 – 26].

Все технические устройства разбираемого типа классифицируются в соответствии с принципом их работы: просвечивающие электронные микроскопы (ПЭМ) и сканирующие электронные микроскопы (СЭМ). Ключевое различие между выделенными классами заключается в том, что в ПЭМ электронное излучение пропускается сквозь слои исследуемого вещества толщиной менее 1 мкм, а при использовании СЭМ электронный пучок последовательно отражается от микрорельефа изучаемой поверхности. Следует отметить, что условия эффективной эксплуатации названных микроскопов являются весьма сложными из-за необходимости тщательной подготовки образцов и обеспечения высокого вакуума внутри всей экспериментальной установки. Подобных недостатков лишены так называемые сканирующие зондовые микроскопы (СЗМ).

В просвечивающих электронных микроскопах с высоким разрешением излучение создается потоком электронов, испускаемых поверхностью кремниевого чипа под воздействием сильного электрического поля. При этом исследуемые в ПЭМ образцы должны быть очень тонкими, поскольку именно их толщина определяет размер деталей на формируемых изображениях. Электронный луч, просвечивая тонкий слой изучаемого вещества, позволяет получать дифракционные картины, характеризующие его внутреннюю структуру, кристаллографический анализ которых дает возможность устанавливать периодичность атомных структур, а также ориентацию кристаллов. Разрешающая способность новейших ПЭМ составляет около 0,2 нм, что соответствует величине межъядерного расстояния отдельных молекул.

Способы получения увеличенного изображения с помощью сканирующих электронных микроскопов значительно отличаются от методов, используемых в оптической и просвечивающей электронной микроскопии. Принцип работы СЭМ основан на эмиссии вторичных электронов, возникающей при облучении поверхности образца узким электронным пучком. При этом сканирование изучаемой поверхности достаточно интенсивным электронным лучом, проводимое совместно с измерением сигналов детектора вторичных электронов, дает возможность генерации ее фотографического изображения.

Характерной особенностью сканирующих зондовых микроскопов является то, что они исследуют поверхность образца при помощи микроскопического щупа, имеющего вид чрезвычайно тонкой металлической иголки. Отметим, что СЗМ обладают повышенной разрешающей способностью по отношению к измерению вертикальной координаты объекта.

Среди разновидностей СЭМ можно отметить сканирующий туннельный микроскоп (СТМ), атомарно-силовой микроскоп (АСМ) и сканирующий оптический микроскоп ближнего поля (СОМБП). Принцип работы СТМ основан на регистрации величины туннельного тока, возникающего между зондом и текущим участком изучаемой поверхности. Устройство СТМ использует измерение сил межатомного взаимодействия, величина которых определяется шероховатостью конкретной точки образца. Действие СОМБП связано с регистрацией так называемых «постоянно рождающихся» волн, обусловленных полным отражением света от облучаемого им участка, посредством микроскопического щупа, обладающего зеркальной поверхностью. Разрешающая способность СТМ и АСМ составляет 0,1 нм, а для СОМБП ее величина в настоящий момент равна 20 нм.

Примеры изображений структурных характеристик кристаллических наносистем [27], полученных с помощью новейших СЭМ, приведены на рис. 1.

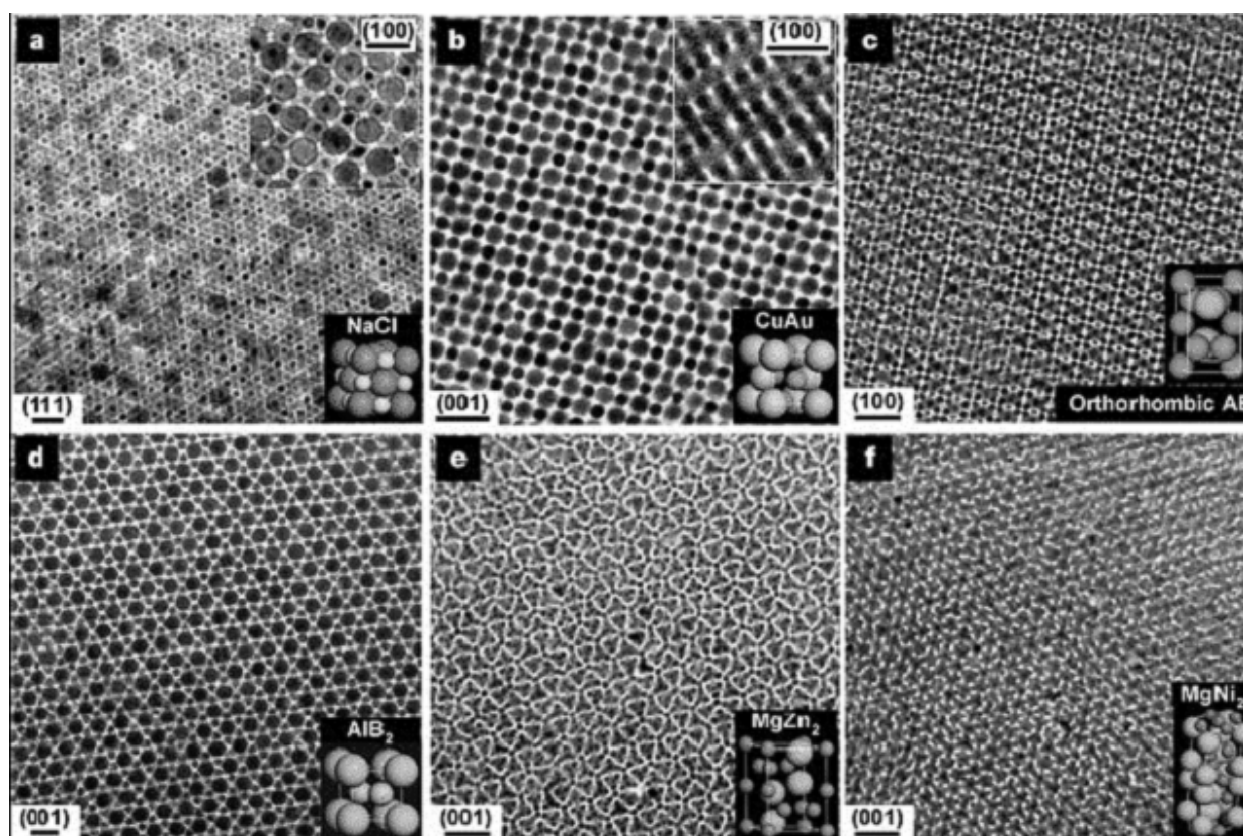


Рис. 1. Микрофотографии характерных проекций бинарных сверхрешеток и модельные элементарные ячейки соответствующих трехмерных структур.

Учитывая вышеизложенные обстоятельства, можно констатировать, что традиционные методы сбора первичной информации о молекулярном строении вещества связаны с изучением его дифракционных картин или сканированием микрорельефа поверхности. С другой стороны, одной из разновидностей фундаментальных констант, позволяющих определять физико-химические параметры конкретного материала, является дисперсия частотных спектров оптических показателей, наблюдаемая в области длин волн, характеризующейся собственным поглощением вещества.

Общая характеристика предлагаемого метода

Как было показано выше, традиционное решение рассматриваемой проблемы базируется на прямой фиксации электронно-атомного строения конкретных наноструктур, проводимой с помощью дорогостоящего приборного оборудования и требующей специальной технологической обработки изучаемых образцов. Однако визуализация структурных особенностей наносистем может быть выполнена и посредством пространственного геометрического моделирования узловых точек их атомного ядерного каркаса, окруженных электронными оболочками определенной конфигурации. При этом для опосредованного определения необходимых геометрических параметров можно реализовать относительно простые вычислительные методики, опирающиеся на использование небольшого числа легко генерируемых экспериментальных данных.

Для решения первой из рассматриваемых задач, в отличие от рассмотрения параметров кристаллических решеток, определяемых на базе традиционного рентгеноструктурного анализа, могут быть применены стереохимические формулы расчета межъядерных расстояний R в кристаллах с учетом типов их решеток, идея которых была впервые предложена В.Л. Брэггом еще в начале прошлого века. При этом знание коэффициента компактности g решетки конкретного кристалла, а также величины его молекулярной массы M и табличного значения физической плотности ρ позволяет использовать выражение [28 – 31]:

$$R = \sqrt[3]{\frac{gM}{\rho}}. \quad (1)$$

Таким образом, формирование геометрической модели атомного каркаса элементарных ячеек кристаллических структур заключается в следующем. Приняв позицию произвольного иона кристалла за начало трехмерной ортогональной системы отсчета, координаты частиц его ближайшего окружения, составляющих структуру рассматриваемого типа, можно выразить через величину межъядерного расстояния в его формульной единице.

Следует отметить, что основная трудность такого подхода связана с использованием численного значения коэффициента g , который в настоящее время однозначно определен для весьма незначительного типа кристаллических решеток. Однако, способ компактного описания координат пространственных узлов, приведенный в работе [32], потенциально обеспечивает возможность осуществления прямого численного расчета искомых величин по крайней мере для кристаллов кубической сингонии.

В свою очередь дефиницию геометрических параметров электронной конфигурации частиц вещества можно реализовать с помощью оптимизации частотных характеристик его упругой электронной поляризации. При этом предлагается использовать оригинальную «кибернетическую» модель рассматриваемых процессов, созданную на базе классических предпосылок теории поляризации с учетом явного выделения причинно-следственных связей, объективно существующих в традиционном описании напряженности локального поля Лорентца [33 – 36] вида:

$$e(j\omega) = 1 + \frac{2}{3e_0} \sum_{i=1}^K a_i(j\omega) N_i; \quad (2)$$

$$a_i(j\omega) = \frac{2e^2}{m_e} \cdot \frac{1}{\omega_{0k}^2 - \omega^2 + j2b_k\omega}, \quad k = \overline{1, K}, \quad (3)$$

где $e(j\omega)$ – комплексная диэлектрическая проницаемость конденсированного образца; e_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума; K – общее число разновидностей электронных орбиталей частиц исследуемого вещества; $a_i(j\omega)$ и N_i – комплексные поляризуемости и объемные концентрации орбиталей; e и m_e – заряд и масса электрона; ω_{0k} и b_k – собственная частота и коэффициент затухания рассматриваемых колебаний.

В рамках проведенного исследования было доказано, что значение экранирующих вкладов внешних (оптических) электронов одноименных анионов является переменной величиной, зависящей от разновидности присоединенных к ним катионов, а также вида образуемой химической связи. При этом параметрический синтез уравнений (3), описывающих упругую электронную поляризацию конкретных образцов, например, оксидов и фторидов, может быть эффективно реализован с помощью следующих формул [34, 35]:

$$\omega_{0k}^2 = \frac{Q_k e^2}{4\pi e_0 m_e r_k^3}, \quad 2b_k = \frac{2e^2 m_0 \omega_{0k}^2}{6\pi c m_e}, \quad k = \overline{1, K}; \quad (4)$$

$$r_k = \frac{n_k^2 \hbar^2}{Q_k e^2 m_e}, \quad Q_k = Z - \sum_{j=1}^{K-4} s_j z_j, \quad k = \overline{1, K-4}; \quad (5)$$

$$r_k = \frac{(n_k + 1)^2 \hbar^2}{Q_k e^2 m_e}, \quad Q_k = Z - \sum_{j=1}^{K-4} s_j z_j - \sum_{i=1}^4 s^*(2i-1), \quad k = \overline{K-3, K}, \quad (6)$$

где Q_k – эффективный заряд атомного остатка, влияющий на электронную орбиталь; r_k – ее радиус; m_0 – магнитная постоянная; c – скорость света в вакууме; n_k – главное квантовое число текущей электронной оболочки; \hbar – постоянная Планка; Z – заряды атомных ядер; s_j и z_j – величины экранирующих вкладов и количества электронов, определяемые по методике Слэтера; s^* – оптимизированные значения экранирующих вкладов оптических электронов аниона.

Оптимизация величин s^* , лежащая в основе определения численных значений динамических параметров ω_{0k} и b_k описываемых процессов, не может быть практически реализована без использования контрольных массивов экспериментальных данных об измерении оптических спектров конкретных образцов, которые физически связаны с частотными характеристиками комплексной диэлектрической проницаемости следующими соотношениями [37, 38]:

$$e_{\text{Re эксл}}(\omega) = n^2(\omega) - c^2(\omega); \quad (7)$$

$$e_{\text{Im эксл}}(\omega) = 2n(\omega)c(\omega); \quad (8)$$

$$n_{\text{теор}}(\omega) = \sqrt{\frac{e_{\text{Re}}^2(\omega) + e_{\text{Im}}^2(\omega) + e_{\text{Re}}(\omega)}{2}}; \quad (9)$$

$$c_{теор}(w) = \sqrt{\frac{e_{Re}^2(w) + e_{Im}^2(w) - e_{Re}(w)}{2}}, \quad (10)$$

где $e_{Re}(w)$ и $e_{Im}(w)$ – вещественная и мнимая частотные характеристики; $e(jw)$, $n(w)$ и $c(w)$ – физические зависимости показателей преломления и поглощения.

Следует отметить, что если в распоряжении исследователя имеются результаты физических измерений обеих частотных зависимостей $n(w)$ и $c(w)$, отражающих оптические свойства изучаемого материала в ультрафиолетовой части электромагнитного спектра, то для формирования экспериментального массива контрольных данных должно использоваться выражение (7). В этом случае определение динамических параметров колебаний электронных орбиталей частиц образца может быть выполнено посредством рассмотрения экстремальных значений названного массива и первых производных вещественных частотных составляющих комплексных уравнений (2) и (3), т.е. по формулам [38]:

$$w_{0k} = \sqrt{\frac{w_{\max k}^2 + w_{\min k}^2}{2}}, \quad b_k = \frac{w_{\min k}^2 - w_{\max k}^2}{4w_{0k}}, \quad k = \overline{1, K}, \quad (11)$$

где $w_{\max k}$ и $w_{\min k}$ – частоты парных максимумов и минимумов массива $e_{Re\ эксп}(w)$.

В свою очередь, учитывая объединение соотношений (4) и (5), предназначенных для теоретического определения w_{0k} и r_k , радиус конкретной электронной орбитали может быть рассчитан с помощью формулы:

$$r_k = 4 \sqrt{\frac{n_k^2 \mathbf{h}^2}{4\pi e_0 m_e^2 w_{0k}^2}}. \quad (12)$$

Таким образом, учитывая прямую связь значения частоты собственных колебаний w_{0k} электронного осциллятора с величиной соответствующего радиуса r_k , можно констатировать, что оптические спектры конкретных образцов, физически измеряемые в ультрафиолетовой области частот, дают возможность теоретического определения геометрических размеров частиц вещества. Однако подобные экспериментальные данные, как правило, оказываются труднодоступными, так как в справочной литературе обычно приводятся лишь зависимости $n(w)$, охватывающие видимую область оптического спектра частот. Поэтому приходится использовать теоретическую формулу (9), а также входящие в нее соотношения:

$$e_{Re}(w) = 1 + \frac{2}{3e_0} \sum_{i=1}^K \frac{2e^2 N_i}{m_e} \cdot \frac{w_{0i}^2 - w^2}{(w_{0i}^2 - w^2)^2 - (2b_i w)^2}, \quad (13)$$

$$e_{Im}(w) = \frac{2}{3e_0} \sum_{i=1}^K \frac{2e^2 N_i}{m_e} \cdot \frac{2b_i w}{(w_{0i}^2 - w^2)^2 - (2b_i w)^2}.$$

При этом в рамках непосредственного проведения практических расчетов основное внимание уделяется оптимизации величин экранирующих вкладов S^* , осуществляемой на базе уравнений (4) и (6), а в качестве используемых массивов контрольных данных выступают зависимости $n(w)$, наблюдаемые в видимом диапазоне и характерные для установившихся режимов исследуемых процессов.

Визуализация наноструктуры ионных кристаллов

Рассмотрим практическую реализацию предлагаемого метода на примере визуализации электронно-атомного строения ряда ионных кристаллов – некоторых фторидов [39] и оксидов [31], обладающих различными типами кристаллических решеток.

На рис. 2 – 8 приведены результаты моделирования диэлектрических спектров рассматриваемых образцов, характеризующие их упругую электронную поляризацию и рассчитанные с помощью уравнений (4)-(6), (13). Сплошные линии изображают расчетные кривые $\epsilon_{Re}(w)$, полученные для конкретных величин S^* , оптимизированных на базе использования контрольных значений $\epsilon_{Re\ эксн}(w)$, наблюдаемых в видимом диапазоне частот электромагнитного спектра и показанных на графиках точками.

Кроме того, на указанных рисунках представлены типовые модельные схемы элементарных ячеек рассматриваемых кристаллических структур, на основании которых построены сечения электронной конфигурации изучаемых материалов, отвечающие их расчетным диэлектрическим спектрам, а также приведены трехмерные визуализации соответствующих наноструктур. При этом для непосредственного определения пространственных координат узловых точек исследуемых кристаллических решеток применялись стереохимические формулы расчета межъядерных расстояний R вида (1).

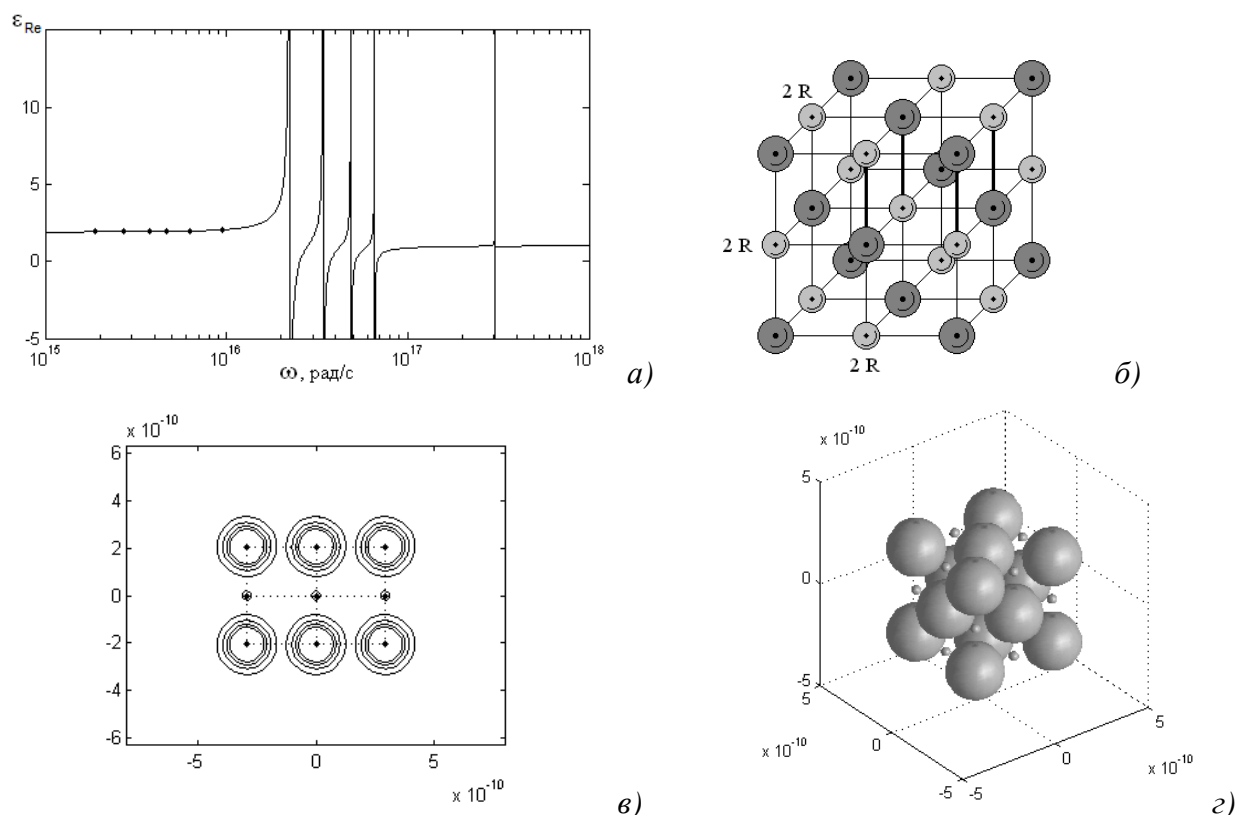


Рис. 2. Электронно-атомная структура кристалла фторида лития LiF : а) расчетный диэлектрический спектр ($S^*=0,455$); б) элементарная ячейка ($NaCl$); в) сечение в вертикальной диагональной плоскости; г) трехмерная визуализация.

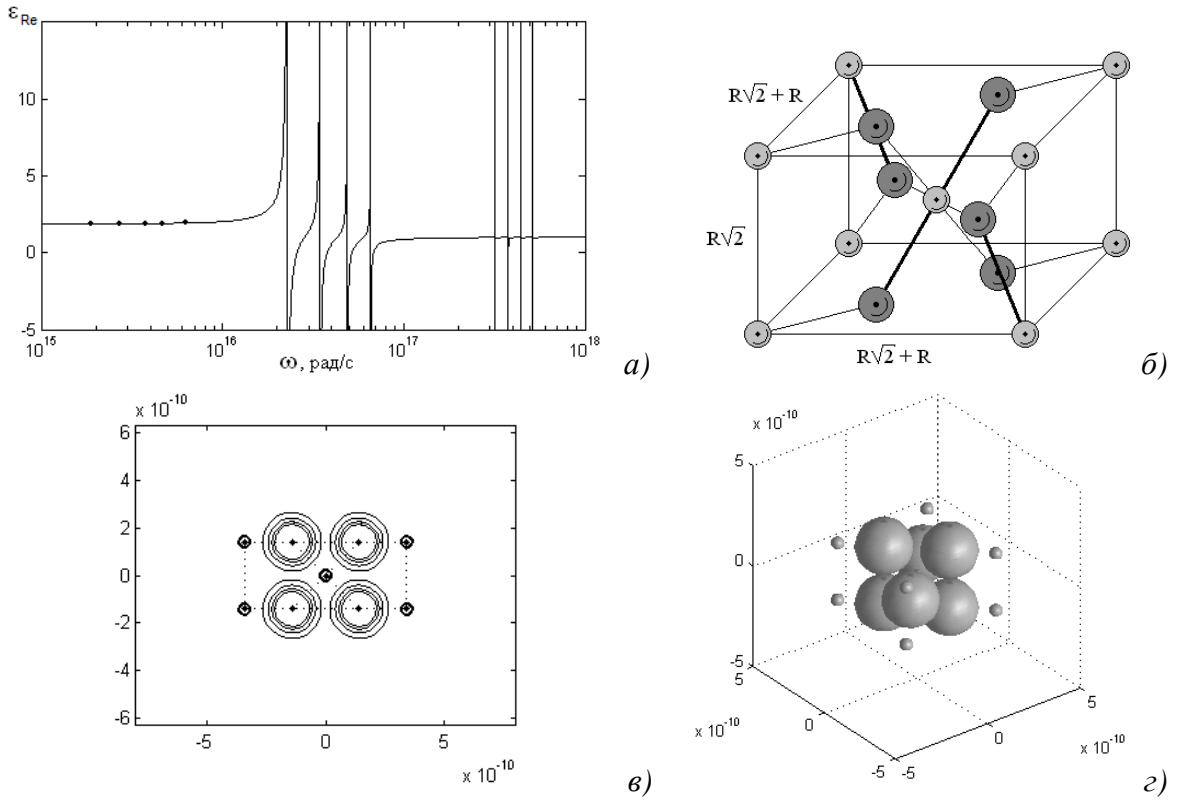


Рис. 3. Электронно-атомная структура кристалла селлита MgF_2 :
 а) расчетный диэлектрический спектр ($s^*=0,450$); б) элементарная ячейка ($a-TiO_2$);
 в) сечение в вертикальной диагональной плоскости; г) трехмерная визуализация.

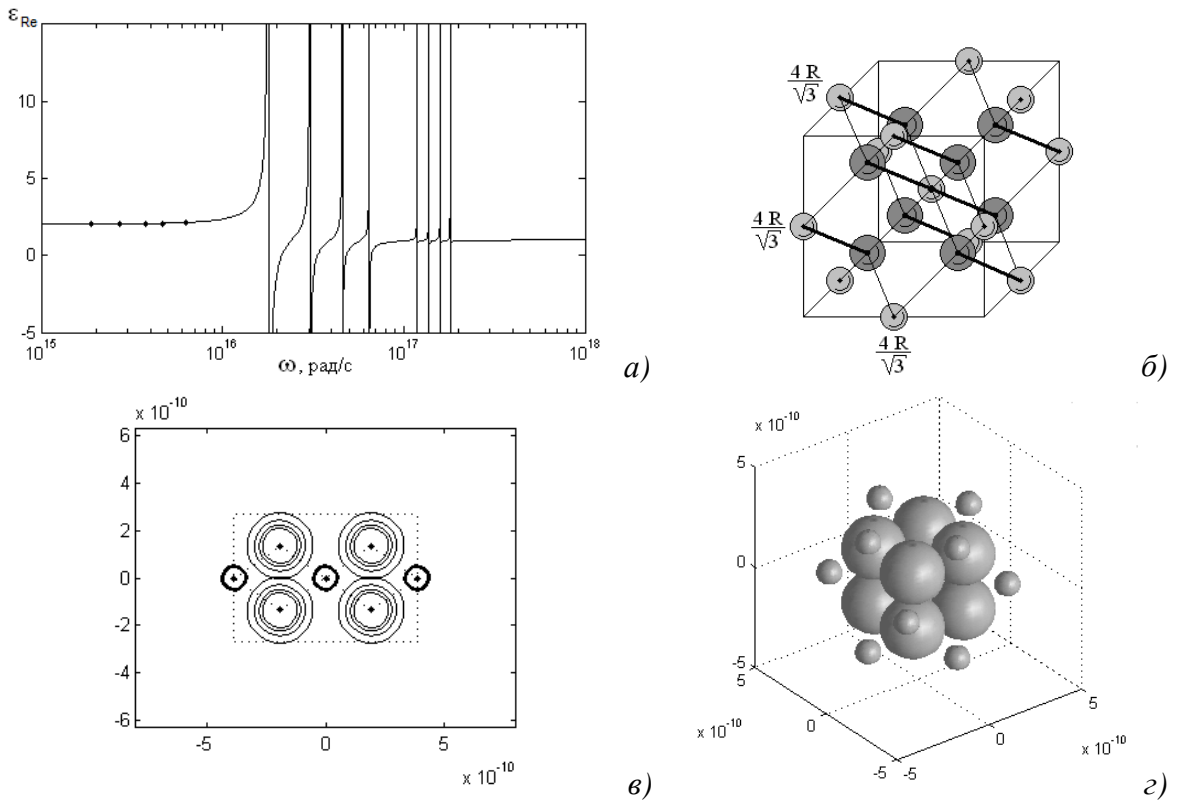


Рис. 4. Электронно-атомная структура кристалла флюорита CaF_2 :
 а) расчетный диэлектрический спектр ($s^* = 0,510$); б) элементарная ячейка (CaF_2);
 в) сечение в вертикальной диагональной плоскости; г) трехмерная визуализация.

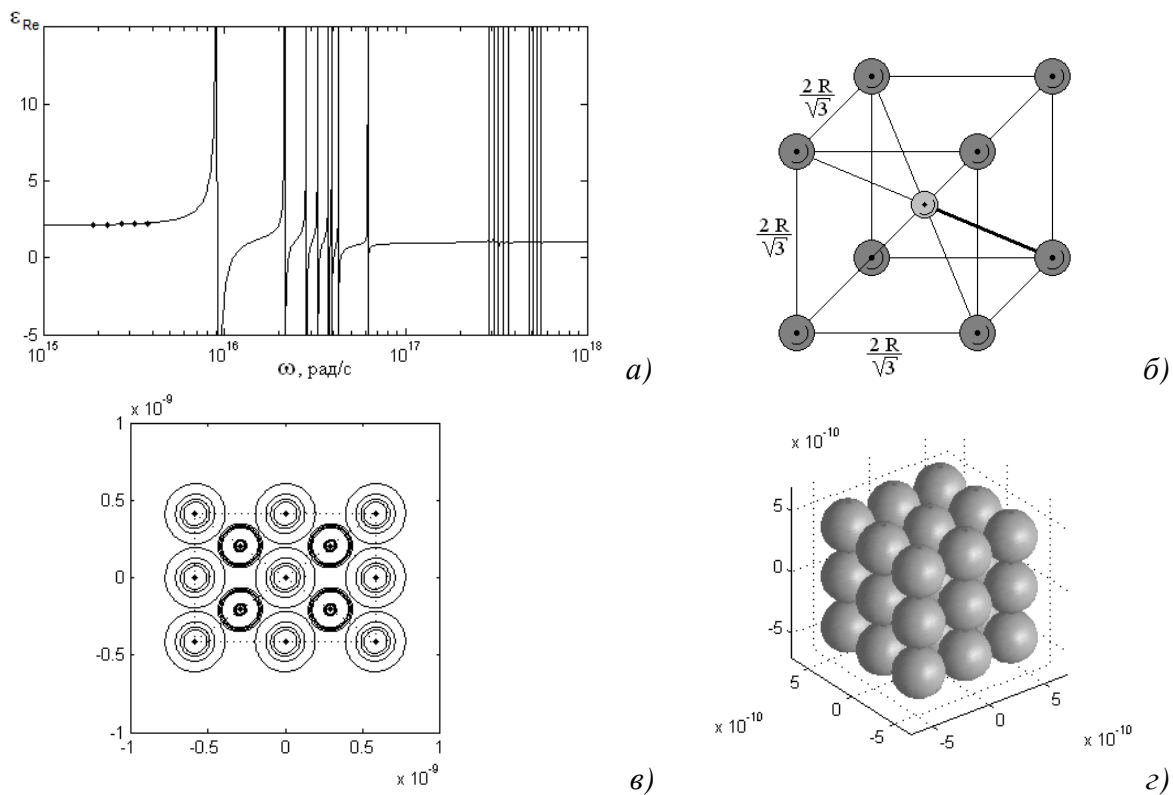


Рис. 5. Электронно-атомная структура кристалла фторида цезия CsF : а) расчетный диэлектрический спектр ($s^* = 0,650$); б) элементарная ячейка ($CsCl$); в) сечение в вертикальной диагональной плоскости; г) трехмерная визуализация.

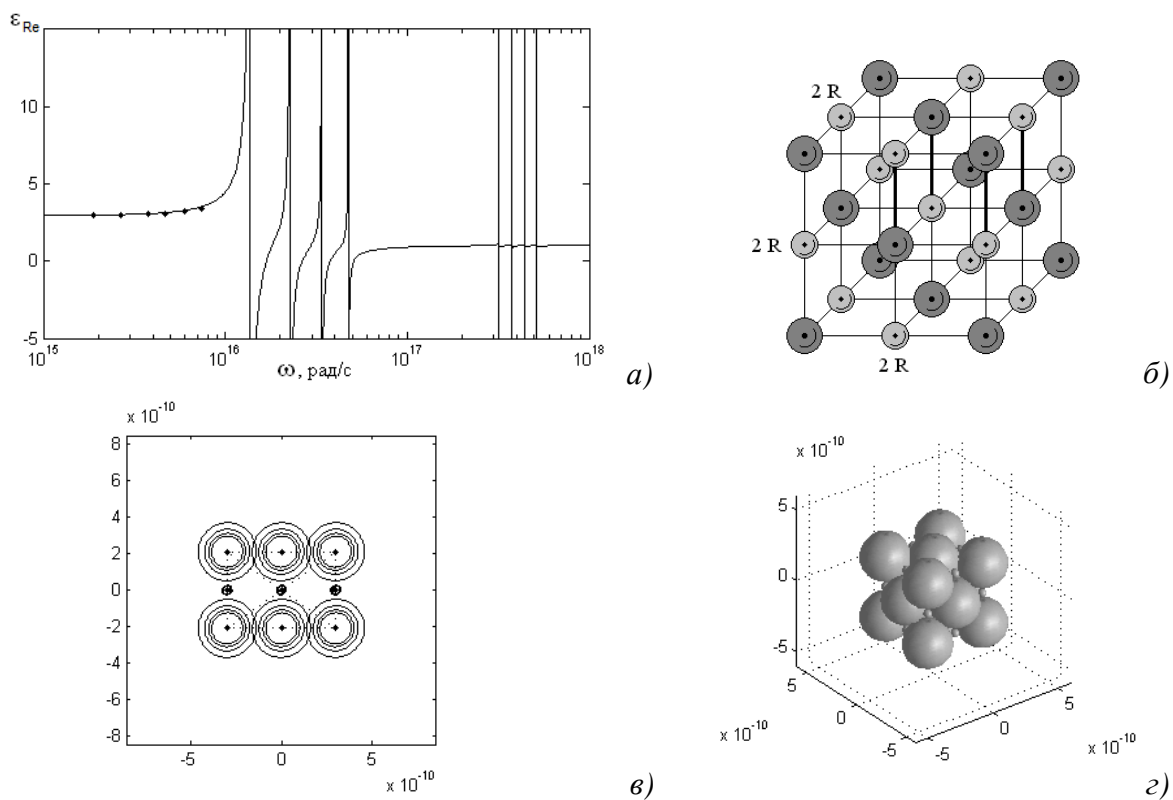


Рис. 6. Электронно-атомная структура кристалла периклаза MgO : а) расчетный диэлектрический спектр ($s^* = 0,430$); б) элементарная ячейка ($NaCl$); в) сечение в вертикальной диагональной плоскости; г) трехмерная визуализация.

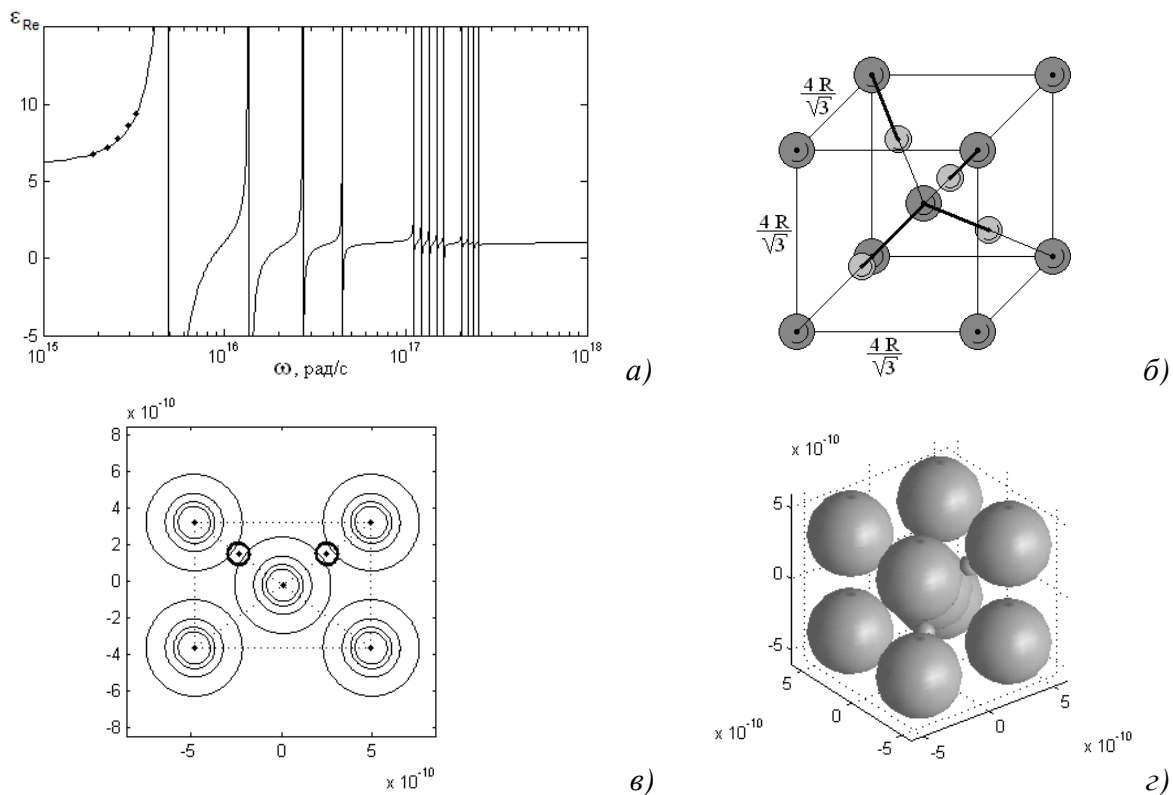


Рис. 7. Электронно-атомная структура кристалла куприта Cu_2O : а) расчетный диэлектрический спектр ($s^* = 0,600$); б) элементарная ячейка (Cu_2O); в) сечение в вертикальной диагональной плоскости; г) трехмерная визуализация.

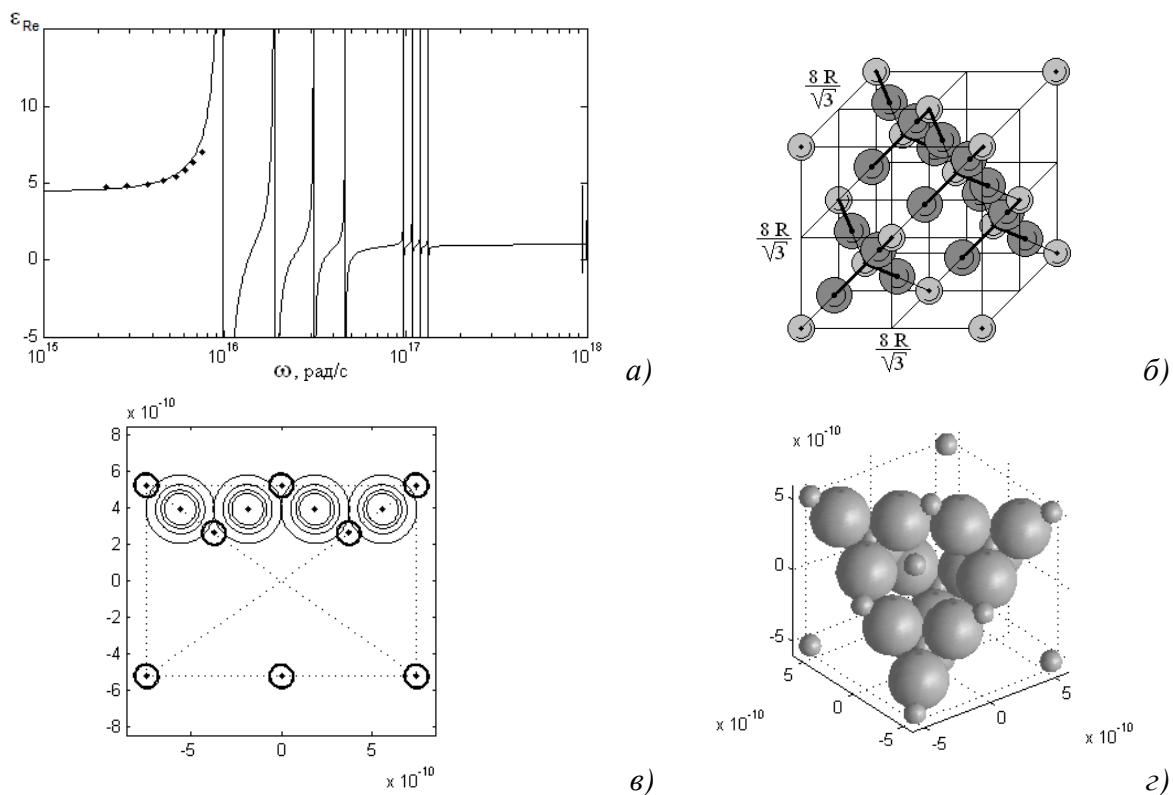


Рис. 8. Электронно-атомная структура кристалла бадделеита ZrO_2 : а) расчетный диэлектрический спектр ($s^* = 0,495$); б) элементарная ячейка (ZrO_2); в) сечение в вертикальной диагональной плоскости; г) трехмерная визуализация.

Визуализация наноструктуры ассоциатов воды

В настоящее время особый интерес вызывает изучение взаимосвязи геометрических и энергетических параметров различных молекулярных образований воды с ее уникальными физико-химическими свойствами. Актуальность подобных исследований обусловлена тем, что названная жидкость обладает весьма сложной внутренней структурой, так как представляет собой некоторую равновесную смесь ее мономерных молекул, а также молекулярных кластеров (замкнутых структур) и конгломератов (разомкнутых структур) [40].

Необходимо отметить, что реальные конфигурации молекулярных связок $(H_2O)_n$ не могут быть инструментально зарегистрированы средствами современной электронной микроскопии, поскольку время их существования в жидкой воде не превышает порядка $10^{-10} - 10^{-9}$ сек. Таким образом, изучение наноструктуры тех или иных ассоциатов воды, основанное на косвенных методах их компьютерной визуализации – единственный способ рассмотрения означенных задач, практически приемлемый на текущий момент.

Как известно, для воды характерна ярко выраженная способность к самоорганизации вследствие образования водородных связей. При этом первичными структурами могут являться димеры, тримеры и т.д., из которых в дальнейшем образуются циклические структуры в основном пяти- и шестичленные, приводящие к формированию различных пространственных многогранников. Таким образом, одним из ключевых вопросов, требующих поиска эффективных решений, является определение геометрических размеров молекулы H_2O , объективно определяющих длину водородной связи.

В работах [33, 41, 42] было показано, что практическое применение предлагаемого метода позволяет сформировать геометрическую модель молекулы воды, представленную на рис. 9.

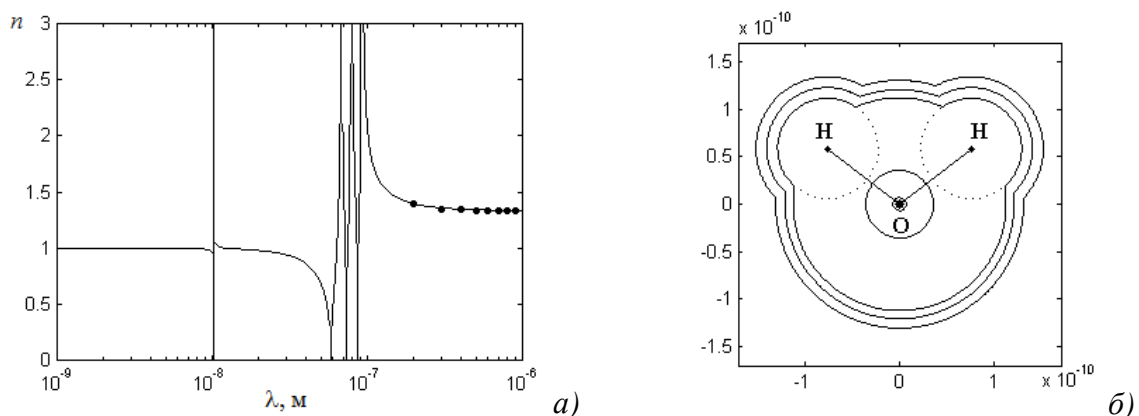


Рис. 9. Электронно-атомная структура молекулы воды H_2O :
а) расчетный оптический спектр; б) сечение в молекулярной плоскости.

На рис. 10 – 12 приведены результаты визуализации трехмерных молекулярных ассоциатов воды, атомно-молекулярные каркасы которых имеют форму правильных платоновых многогранников [43 – 45].

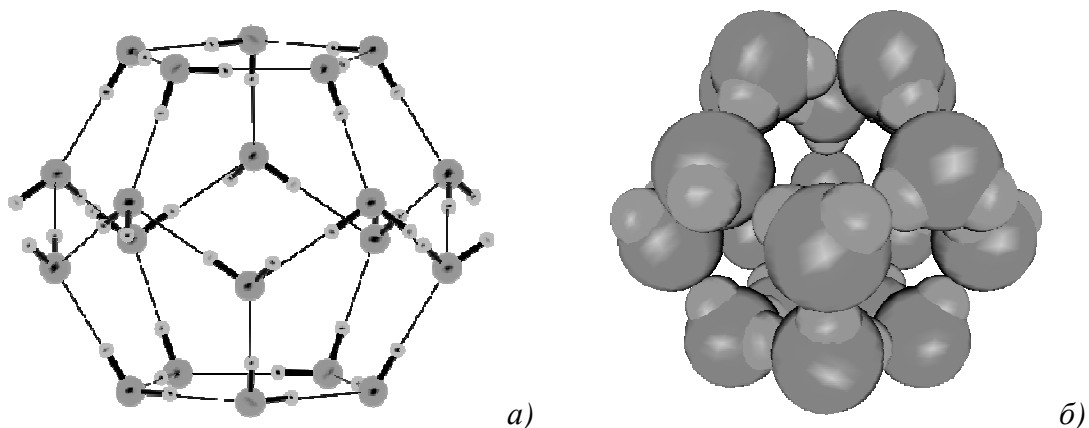


Рис. 10. Электронно-атомная структура додекаэдрического кластера $(H_2O)_{20}$:
 а) схема атомно-молекулярного каркаса; б) трехмерная визуализация.

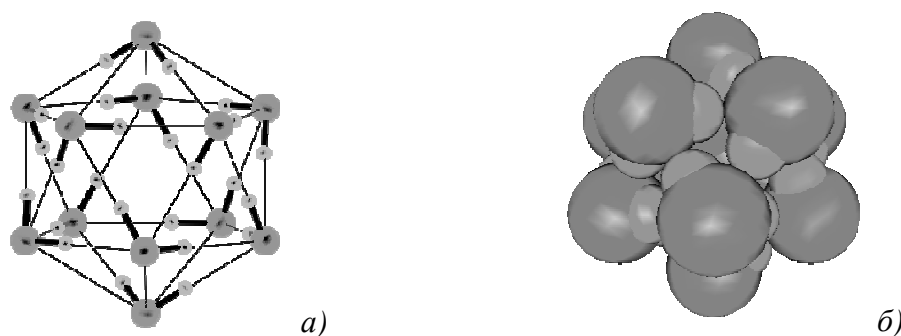


Рис. 11. Электронно-атомная структура икосаэдрического кластера $(H_2O)_{12}$:
 а) схема атомно-молекулярного каркаса; б) трехмерная визуализация.

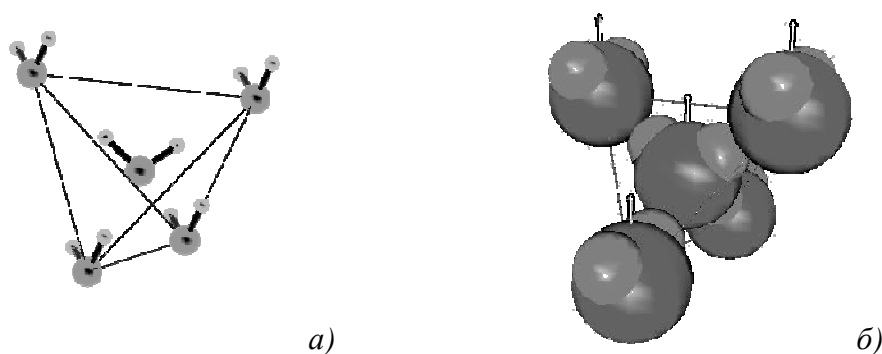


Рис. 12. Электронно-атомная структура тетраэдрического конгломерата $(H_2O)_5$:
 а) схема атомно-молекулярного каркаса; б) трехмерная визуализация.

Заключение

Главным достоинством описанного метода является реализуемая в его рамках возможность достаточно обоснованной визуализации наноструктуры материалов, проводимой на базе использования его легко измеряемых макропараметров. Кроме того, данный метод оказывается практически приемлемым для исследования образцов, находящихся в различных агрегатных состояниях, при этом уровень детализации внутренней структуры вещества оказывается выше, чем у современных средств электронной микроскопии высокого разрешения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Уайтсайдс и др. Нанотехнология в ближайшем десятилетии: Прогноз направления исследований / пер. с англ. – М.: Мир, 2002.
2. Ратнер М., Ратнер Д. Нанотехнология: Простое объяснение очередной гениальной идеи / пер. с англ. – М.: ИД Вильямс, 2004.
3. Пул Ч., Оуэнс Ф. Нанотехнологии / пер. с англ. – М.: Техносфера, 2004.
4. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. – М.: Физматлит, 2005.
5. Андриевский Р.А., Рагуля А.В. Наноструктурные материалы. – М.: ИЦ «Академия», 2005.
6. Нанотехнологии в электронике / под ред. Ю.А. Чаплыгина. – М.: Техносфера, 2005.
7. Суздалев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. – М.: КомКнига, 2006.
8. Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию / пер. с японск. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007.
9. Хартманн У. Очарование нанотехнологии / пер. с нем. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008.
10. Старостин В.В. Материалы и методы нанотехнологии. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008.
11. Рыжонков Д.И., Левина В.В., Дзидзигури Э.Л. Наноматериалы. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008.
12. Эткинс П. Кванты. Справочник концепций / пер. с англ. – М.: Мир, 1977.
13. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел / пер. с англ. – М.: Мир, 1978.
14. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. – М.: Мир, 2001.
15. Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // Успехи физических наук. – 2002. – Т. 172, № 3. – С. 336-348.
16. Попл Д.А. Квантово-механические модели // Успехи физических наук. – 2002. – Т. 172, № 3. – С. 349-356.
17. Потапов А.А. Деформационная поляризация. Поиск оптимальных моделей. – Новосибирск: Наука, 2004.
18. Никишин В.И., Луксинович П.Н. Нанотехнология и наноэлектроника // Электронная промышленность. – 1991. – № 3. – С. 4-13.
19. Адамчук В.К., Ермаков А.В., Федосеенко С.И. Сканирующий туннельный и силовой микроскопы для сверхплотной записи и считывания информации. Возможности практической реализации накопителей большой емкости // Электронная промышленность. – 1991. – № 3. – С. 14-25.
20. Неволин В.К. Управляемый массоперенос с нанометровым разрешением // Электронная промышленность. – 1991. – № 3. – С. 30-32.
21. Васильев С.И., Савинов С.В., Яминский И.В. Зондирующие эмиттеры для сканирующей туннельной микроскопии // Электронная промышленность. – 1991. – № 3. – С. 36-39.
22. Ерофеев А.А., Бойцов С.В., Поплевкин Т.А. Пьезоэлектрические микроманипуляторы для сканирующего туннельного микроскопа // Электронная промышленность. – 1991. – № 3. – С. 54-57.
23. Неволин В.К. Физические основы туннельно-зондовой нанотехнологии // Электронная промышленность. – 1993. – № 10. – С. 8-11.
24. Неволин В.К. Туннельно-зондовая нанотехнология в газах и жидкостях // Электронная промышленность. – 1993. – № 10. – С. 11-15.
25. Гринько В.В., Неволин В.К. Локальная модификация металлических пленок // Электронная промышленность. – 1993. – № 10. – С. 21-23.
26. Неволин В.К. Основы туннельно-зондовой нанотехнологии. – М.: МТИЭТ (ТУ), 1996.
27. Философия наносинтеза. – http://www.nanometer.ru/2007/12/15/samosborka_5415.html.

28. Костюков Н.С., Еремин И.Е., Коваленко Е.А. Геометрическая методика определения межъядерных расстояний в ионных кристаллах кубической сингонии // Вестник Амурского государственного университета. – 2003. – Вып. 21. – С. 7-8.
29. Еремин И.Е. Кибернетическая теория поляризации щелочно-галоидных кристаллов. I // Информатика и системы управления. – 2009. – № 1(19). – С. 40-45.
30. Еремин И.Е., Сычева М.П. Альтернативный способ визуализации электронной структуры ионного кристалла // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2010. – № 3(18). – С. 73-80.
31. Еремин И.Е., Бартошин А.С. Моделирование электронных свойств оксидных кристаллов кубической сингонии // Информатика и системы управления. – 2011. – № 4(30). – С. 79-88.
32. Еремин И.Е., Сычев М.С. Модифицированный алгоритм прямого расчета постоянной Маделунга // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 27-34.
33. Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С., Оверчук В.А. Элементы параметрического синтеза линейной модели процесса упругой электронной поляризации // Информатика и системы управления. – 2003. – № 1(5). – С. 26-32.
34. Костюков Н.С., Еремин И.Е., Оверчук В.А. Системная модель упругой электронной поляризации кристалла фторида лития // Перспективные материалы. – 2006. – № 2. – С. 33-38.
35. Костюков Н.С., Еремин И.Е. Моделирование диэлектрического спектра кварца в области установления процессов электронной поляризации // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2008. – Т. 51, № 11. – С. 32-38.
36. Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С., Моисеенко В.Г. Упругая электронная поляризация конденсированных диэлектриков // Доклады Академии наук. – 2010. – Т. 432, № 5. – С. 612-615.
37. Еремин И.Е., Еремина В.В. Моделирование поляризационных свойств конденсированных диэлектрических сред // Информатика и системы управления. – 2005. – № 1(9). – С. 41-55.
38. Еремин И.Е., Еремина В.В., Уляхина Д.А. Метод расчета динамических параметров поляризационных процессов // Информатика и системы управления. – 2011. – № 3(29). – С. 60-69.
39. Еремин И.Е., Цаплина С.А. Моделирование электронной поляризации кристаллических соединений фтора // Информатика и системы управления. – 2007. – № 2(14). – С. 67-78.
40. Габуда С.П. Связанная вода. Факты и гипотезы. – Новосибирск: Наука, 1982.
41. Еремина В.В. Систематизация математических моделей упругих видов поляризации воды. II // Информатика и системы управления. – 2007. – № 2(14). – С. 78-89.
42. Еремина В.В. Сравнительный анализ моментов инерции свободной и закрепленной молекулы воды // Информатика и системы управления. – 2009. – № 1(19). – С. 46-54.
43. Еремина В.В., Еремин И.Е., Квашинин В.И. Компьютерное моделирование поляризации додекаэдрического кластера воды // Вестник Амурского государственного университета. – 2007. – Вып. 37. – С. 45-48.
44. Еремина В.В., Уляхина Д.А. Имитационное моделирование электронного строения трехмерных многомолекулярных кластеров воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 57-60.
45. Еремина В.В., Уляхина Д.А. Имитационное моделирование структуры пятимолекулярных конгломератов воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 4(26). – С. 43-49.

E-mail:

Плутенко А.Д – plutenko@bk.ru;

Еремин И.Е – marinecops@mail.ru;

Еремина В.В. – banysheva@mail.ru.