

空位晶体相场模型模拟二维晶体相形貌图*

Phase Field Model Simulation of Bumps and Holes Pattern of Two Dimension Crystals

高英俊, 杨瑞琳, 王玉玲, 邓芊芊, 黄创高

GAO Ying-jun, YANG Rui-lin, WANG Yu-ling, DENG Qian-qian, HUANG Chuang-gao

(广西大学物理科学与工程技术学院, 广西南宁 530004)

(College of Physics Science and Engineering, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China)

摘要:【目的】揭示空位晶体相场模型(VPFC)中二维周期性晶体相空位缺陷结构形貌。【方法】对标准晶体相场模型的自由能函数进行修正得到空位晶体相场模型,再利用空位晶体相场方程,研究二维相图中不同相晶体结构形貌图,以及晶体结构中出现空位的条件。【结果】当平均原子密度数值位于不同晶体相时,呈现出不同的二维周期性晶体结构形貌图。【结论】将晶体结构形貌图与其原子密度曲线对照,可见该模型中晶体相结构主要有六角“凸起”相、条状相和六角“凹坑”相。当平均原子密度数值位于相图中局部粒子相和六角“凸起”相之间时,二维周期性晶体结构中将出现空位,并且晶粒内部空位随机分布,空位数目与原子密度值有关。

关键词:空位晶体相场模型 相结构形貌图 计算模拟

中图分类号: TG111 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-9164(2015)05-0485-07

Abstract:【Objective】The vacancy morphology of two-dimensional periodic crystal structure was estimated through the vacancy phase field crystal (VPFC) model. 【Methods】The free energy function of VPFC model was obtained by modifying simple phase field crystal model. The VPFC model was used to study the different periodic crystal profiles in the two-dimensional phases diagram and explore the condition of vacancy presenting. 【Results】Different kinds of the two-dimensional periodic crystal structure patterns were obtained by selecting the average atomic density values in different phases. 【Conclusion】Combining topography of crystal structure with atomic density curve reveals that hexagonal bumps, stripes and hexagonal holes are main structures in the crystal sample. When the average atomic density value is located in the phase diagram of the coexistence zone of the local particles and hexagonal bumps phase, vacancy structures appear in the crystal. Moreover, the vacancies are randomly distributed and their number are related to the atomic density values.

Key words: vacancy phase field crystal, phase structure morphology, computational simulation

0 引言

【研究意义】材料的微观结构决定材料的宏观性

收稿日期: 2015-08-10

作者简介: 高英俊(1962-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事纳米结构材料设计与计算模拟实验方面的研究。

* 国家自然科学基金项目(51161003, 50661001)和广西研究生教育创新计划基金项目(YCSZ2014039, YCSZ2015029)资助。

能^[1], 那么控制金属材料微观缺陷(空位、位错)等因素的作用, 可以提升材料的性能。但是目前实验上对材料微结构演变的观测还存在局限, 所以人们更多的依赖于计算模拟手段来研究材料微观结构的演变过程。分子动力学方法^[2]和晶体相场方法^[3,4]是当前计算模拟材料微观结构在原子尺度上演化的两种主要手段。相比分子动力学, 晶体相场法的时间尺度更具优势, 它既能研究原子尺度上的晶体内部的微观结构, 还能研究扩散时间尺度上的微观结构。【前人研

究进展】晶体相场方法,是基于经典密度泛函理论与结合 Swift-Hohenberg 自由能函数发展起来的^[3,5],它通过自由能最小驱动的耗散动力学方程,描述系统原子密度场的演化。目前晶体相场模型(PFC)已被广泛应用于多晶凝固过程,裂纹扩展,位错运动,晶界能,晶粒粗化,线性和非线性弹性变形和塑性变形等研究领域^[5~14],而且应用范围还在不断扩大。近年来,众学者根据自己研究的材料对 PFC 模型进行了不同修正。所以 PFC 模型不仅仅应用于纯物质,通过对 PFC 模型修正并联系密度泛函,而且可以模拟二元合金^[15]。通过对 PFC 模型中自由能更为复杂的修正,该模型还可以应用到更多的领域,例如铁磁态的系统^[16],它是通过在自由能表达式中添加附加的磁化场而实现的。同样它也成功的模拟了玻璃态^[17]和具有软凝聚态物质体系^[18],包括胶体和液晶。晶体相场方法在研究材料的微结构尤其是原子尺度的微结构方面展现了强大的潜力。**【本研究切入点】**为了弥补 PFC 模型的缺陷,Chan 等^[19]通过对晶体相场模型的自由能表达式进行修正,引入新的参量,提出空位晶体相场模型(VPFC),该模型的优点是可以考虑晶体空位缺陷的情况。即 VPFC 模型研究晶体缺陷时,可以同时考虑空位和位错存在的情况。**【拟解决的关键问题】**在晶体相场模型的基础上利用空位晶体相场模型,通过改变体系的平均原子密度,模拟不同晶体相结构形貌图,并与实验中制备的二维周期性形貌图进行对比分析,以期揭示出 VPFC 模型中二维周期性晶体相空位缺陷结构形貌。

1 模型与方法

1.1 空位晶体相场模型

晶体相场模型最早由 Elder 等^[3,4]基于密度泛函理论提出,它的基本思想是引入具有周期性原子密度场作为序参量构建自由能密度函数,揭示材料晶体学结构特性以及原子尺度行为。体系无量纲的自由能函数表示为

$$F = \int \left[\frac{\rho}{2} \omega (\nabla^2) \rho + \frac{\rho^4}{4} \right] dr, \quad (1)$$

r 是与体系温度有关的参量, ∇^2 为拉普拉斯算子, ρ 为原子密度。体系的自由能密度函数为

$$f = \frac{\rho}{2} [r + (1 + \nabla^2)^2] \rho + \frac{\rho^4}{4}. \quad (2)$$

VPFC 模型是对 PFC 模型的修正,在 PFC 模型的自由能表示中添加一项反映空位自由能的表达式 f_{vac} ,该模型的体系自由能函数表达式为^[14]

$$F = \int [f + f_{vac}] dV. \quad (3)$$

f_{vac} 的作用是排斥 ρ 为负数的数值,在运算过程

中,如果 f_{vac} 所起的排斥作用非常大,它就可以控制原子密度 ρ 数值,使其在体系演化过程中永远保持大于零,这样就可以保证 VPFC 模型可以描述空位结构。 ρ 数值为 0 或者接近于 0 时代表空位, ρ 数值为极大值时代表原子。 f_{vac} 有很多的选择,经过推算,为使方程最稳定和最简单,表达式^[19]写成

$$f_{vac} = H(|\rho|^n - \rho^n), \quad (4)$$

其中, $H = 1500, n = 3$ 。

VPFC 模型中原子密度场变化演化过程中的无量纲化 Cahn-Hilliard 动力学方程^[18]可描述为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla^2 \{ [r + (1 + \nabla^2)] \rho + \rho^3 + H \rho (|\rho| - \rho) \}. \quad (5)$$

考虑到 VPFC 模型的特殊性质,为了保证模拟体系中有空位存在,则平均原子密度 ρ_0 和温度参数 r 应满足

$$\rho_0 < \sqrt{\frac{(-48 - 56r)}{133}}, -\frac{636}{343} < r < -\frac{6}{7}. \quad (6)$$

对于动力学方程(5)进行单模近似可得到体系在该模型下平衡时六角相的 ρ ,

$$\vec{\rho}(x) = 4A \left(\frac{1}{2} \cos x + \cos \frac{1}{2} x \cos \frac{\sqrt{3}}{2} y \right) + \rho_0, \quad (7)$$

其中, $A = \sqrt{(-48 - 56r)/133}$ 。

1.2 计算方法及参数的选取

动力学方程(5)左边的部分是与时间有关的项,可以采用显示欧拉法求解,而等式右边含有 Laplace 算子的项可以采用九点格子离散化处理,也可以采用半隐式 Fourier 谱方法进行求解。本文采用半隐式 Fourier 谱方法求解 VPFC 动力学方程。

对方程(5),采用半隐式 Fourier 谱方法可以写成

$$\frac{\hat{\rho}_k(t + \Delta t) - \hat{\rho}_k(t)}{\Delta t} = [- (1 + r) k^2 + 2k^4 + k^6] \hat{\rho}_k(t + \Delta t) - k^2 \hat{\rho}_k^3(t) + 3H \hat{\rho}_k(t) (|\hat{\rho}_k(t)| - \hat{\rho}_k(t)). \quad (8)$$

式中 $\hat{\rho}_k(t + \Delta t)$ 为 Fourier 空间下 $t + \Delta t$ 时刻的原子密度, $\hat{\rho}_k(t)$ 为 Fourier 空间下 t 时刻的原子密度。

模拟时,体系空间步长设为 $\Delta x = \Delta y = \pi/4$,时间步长设为 $\Delta t = 0.0075$,模拟面积为 $L_x \times L_y = 200\Delta x \times 200\Delta y$,边界条件为周期性边界条件。初始条件为模拟区域中由式(7)设置晶体时原子密度 ρ 的初始分布。体系的温度 $r = -0.9$,并保持不变。根据 VPFC 模型得相图如图 1 所示,再改变平均原子密度,制备不同形貌图的二维晶体。

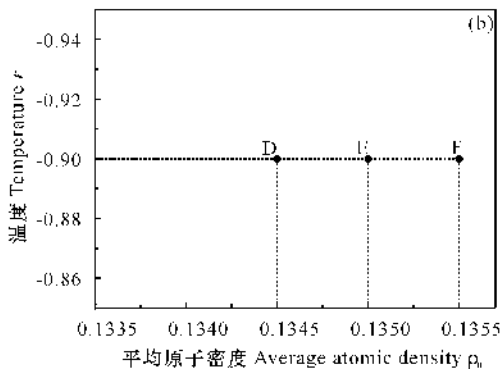
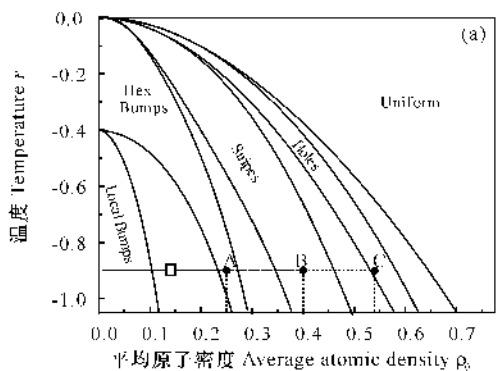


图1 空位晶体相场模型二维相图(a)及其灰色方框的放大图(b)^[18]

Fig. 1 Two-dimensional phase diagram of vacancy phase field crystal (a) and magnified image of gray box (b)

1.3 样品的制备

首先是根据 VPFC 相图确定每个样品所对应的参数值,然后用 1.2 节所述的方法设置初始条件。在空位晶体相场动力学演化方程的控制下,经过一段时间的演化直到系统达到平衡,则可形成不同形貌的二维周期性结构。设置不同二维周期性形貌图的参数如表 1。

表 1 制备样品的参数

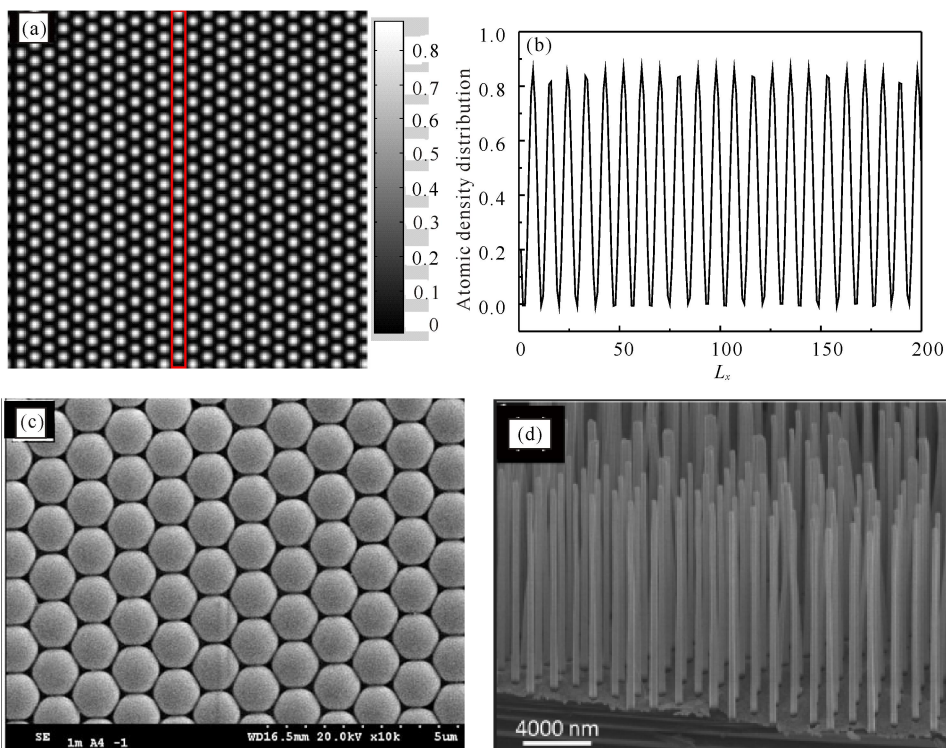
Table 1 The parameters for preparing sample

Sample preparation	r	ρ_0
A	-0.9	0.23
B	-0.9	0.40
C	-0.9	0.53
D	-0.9	0.1345
E	-0.9	0.1350
F	-0.9	0.1355

2 结果与分析

2.1 六角“凸起”相

当 $\rho_0 = 0.23$, 体系位于六角“凸起”相时,制备了 A 样品。图 2a 为利用 VPFC 模型制备的 A 样品形



(a)VPFC 模型制备的二维六角相形貌图,(b)原子密度曲线,(c)聚苯乙烯胶体晶体平面形貌图^[20,21], (d)胶体包装和金属辅助沉积的纳米线^[16]

(a)Snapshots of two-dimensional PS hexagonal phase by VPFC model, (b)The curve of atomic density, (c)The images of the structures after colloidal crystal of PS beads^[20,21], (d)nanowires from colloidal packing and metal-assisted etching^[16]

图 2 六角“凸起”相

Fig. 2 Hexagon bumps phase

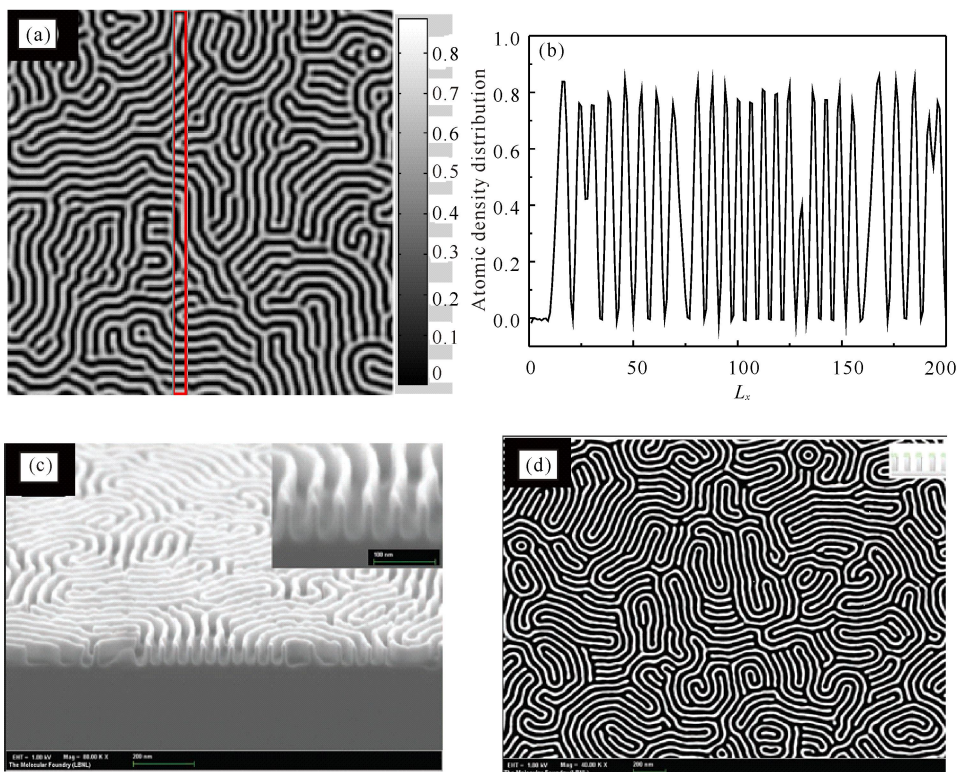
貌图,晶体结构为周期性排布的六角结构。通过观察晶体结构形貌图,发现在该晶体相中,利用 VPFC 模型模拟的晶体结构与 PFC 模型所模拟的晶体结构没有明显的差别。对比模拟结果的可视化灰度图中数值,可知二者在本质上有一定的不同^[3]。在 VPFC 模型中,代表原子的原子密度数值全大于零,在原子密度分布函数中最大值就代表原子(或粒子)的位置,而没有原子(粒子)位置的数值约等于零。A 样品形貌图中白色点代表原子,而黑色部分就是没有原子的位置。原子密度曲线图 2b(图 2a 中红色框中的原子分布图)也体现了晶体结构形貌图,可以看出原子密度是一个周期性分布的曲线,与图 2a 原子周期性排布一致,并且在原子密度函数曲线的极小值位置(接近于零的位置)应是原子之间的间隙,而最高点极大值的位置则是原子(或粒子)。通过原子密度曲线和六角相晶体结构的形貌图,可以体现出 VPFC 模型的优势。而从真实材料晶体结构角度出发,六角“凸起”相也是研究纳米晶金属材料的重要相。

文献^[13]提到,VPFC 模型可以解释粗晶-胶体

晶体结构形貌图。图 2c 是在硅衬底上自组装单分散的聚苯乙烯胶状晶体^[17]形貌图。从电镜照片可以看出聚苯乙烯胶状晶体也是六角相排布的周期性结构,组成周期性结构的粒子就像一个球铺在硅衬底上。而 VPFC 模型代表原子(或粒子)的是大于零的数值,而没有原子(或粒子)则是用数值零来表示。结合原子排布形貌图和原子密度曲线,VPFC 模型还可以形象的描述在实验室中制备的金属纳米线,如图 2d 所示。通过图 2a、图 2c 和图 2d 可以看出,利用 VPFC 模型模拟的二维周期性六角相结构可以作为实验室中制备真实晶体结构时的理论模型图。因此,VPFC 模型可以更形象的代表晶体结构。

2.2 条状相

当 $\rho_0 = 0.40$, 体系位于条状相时制备 B 样品。图 3a 为利用 VPFC 模型制备 B 样品的形貌图,此时体系达到稳定状态时呈现出周期性平行条纹结构。该条状相结构与实验室实验中利用液相沉积方法自组装胶状晶体的薄片状结构吻合。图 3c 是 SEM 电镜下薄膜表面胶状晶体的薄片状结构相貌图^[22,23],



(a)VPFC 模型制备二维条状相形貌图,(b)原子密度曲线,(c)聚苯乙烯共聚物薄膜侧视形貌图^[23],(d)聚苯乙烯共聚物薄膜平面形貌图^[23]

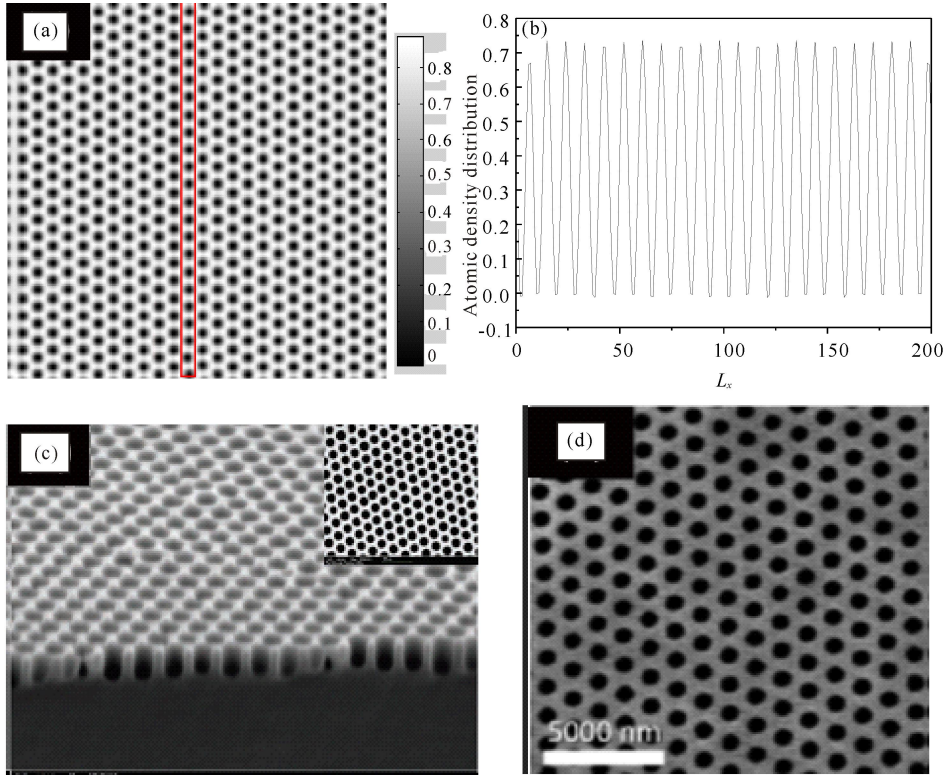
(a)Snapshots of two-dimensional stripes phase by VPFC model,(b)The curve of atomic density,(c)SEM images of thin film surface of nanophase-separated block copolymer in plane topography^[23],(d) SEM images of thin film surface of nanophase-separated block copolymer in lateral topography^[23]

图 3 条状相
Fig. 3 Stripes phase

为在硅衬底上制备的聚苯乙烯共聚物(PS-b-P2VP)薄膜。通过倾斜一定角度的 SEM 照片,可以看出它的轮廓图是像栅栏一样的周期性高低起伏的障碍物,高的部分对应 VPFC 模型中原子密度分布函数的最高值,在硅衬底上就是 VPFC 模型的原子密度最小值。图 3b 是图 3a 红色框中原子密度曲线,曲线的高低起伏形象的表示出 SEM 电镜下图 3c 中胶状晶体的薄片状结构的轮廓图。图 3d 则为图 3c 中的平面图,与 VPFC 模型模拟二维周期性条状相结构相吻合。

2.3 六角“凹坑”相

当 $\rho_0 = 0.53$, 体系位于六角“凹坑”相时制备 C



(a)VPFC 模型制备二维六角相形貌图,(b) 原子密度曲线,(c)纳米孔薄膜相貌侧视图^[19], (d)图(c)平面图^[24]

(a)Snapshots of two-dimensional hexagon holes phase by VPFC model,(b)The curve of atomic density,(c)Nanopores of thin film in plane topography^[19], (d)The lateral topography^[24] in Fig. 4 (c)

图 4 六角“凹坑”相

Fig. 4 Hexagon holes phase

该 VPFC 模型还可以解释在实验中制备的胶状晶体平底六角相凹坑结构。图 4c 和图 4d 是利用 ICP 刻蚀工艺制备规则的硅纳米凹坑薄膜^[24,25]。可以看出利用 VPFC 模型制备的样品形貌图,可以完全用于描述实验制备的样品形貌图。

2.4 晶体结构中存在空位时的形貌图

在真实材料中材料缺陷不仅有线缺陷还有点缺陷,金属材料的点缺陷主要是空位。在 PFC 模型中只讨论到位错而没有讨论空位的情况。而 VPFC 模

样品。图 4a 为利用 VPFC 模型制备 C 样品的形貌图。该样品晶体结构中的原子和 A 样品一样都是六角相晶体结构,但是二者有本质的区别。对比图 4a 和图 2a 可以看出,A 样品中构成晶体结构的原子是白色的点,而 C 样品构成晶体结构的原子是黑色的点。由空位晶体相场模型可视化图可知,黑色部分代表原子密度比较低的值,白色部分代表原子密度比较高的值。因此,C 样品中的原子应该就是平底上的凹坑位置。图 4b 是 C 样品原子密度曲线分布图,曲线的最低值对应于图 4a 形貌图中红色框中原子——凹坑。

型较 PFC 模型最大的区别在于,通过给 PFC 模型的自由能加上一项空位自由能补偿函数,使原子密度的数值恒大于等于零。而原子密度数值接近于零,表示该位置没有晶体结构的原子。利用表 1 提供的参数来进行模拟,从而揭示晶体中存在空位的参数位置。图 5a,b,c 分别对应 D 样品、E 样品和 F 样品形貌图。图 6a,b,c 对应于图 5a,b,c 中红色框中的原子密度分布。

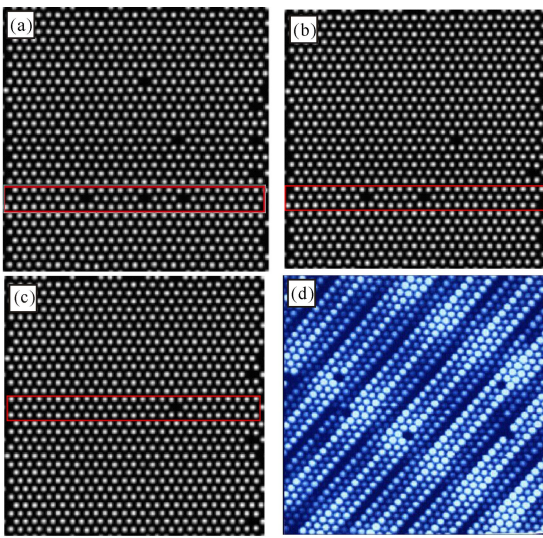


图 5 晶体中的空位相貌图
像^[26]

(a)Sample D, (b)Sample E, (c)Sample F, (d)STM image of Pt surface^[26]

图 5 晶体中的空位相貌图

Fig. 5 Snapshots of vacancy in the crystal

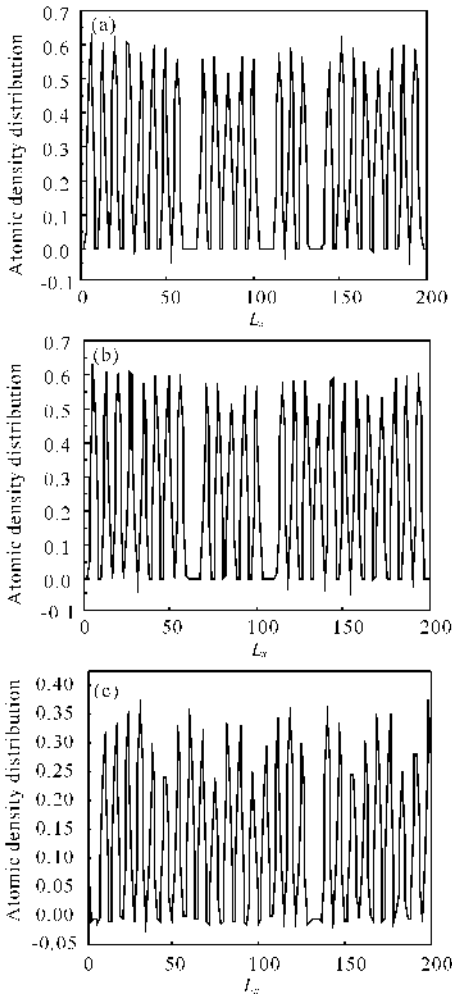


图 6 D 样品 (a)、E 样品 (b) 和 F 样品 (c) 红色框中原子密度

Fig. 6 The atomic density profiles of Samples D, E and F in the red box

由图 5 可以看出,当体系处于 Local Bumps 和

Hex Bumps 相之间时,取不同的平均原子密度最终演化成不同的晶体形貌图。图 5a 对应 D 样品 $\rho_0 = 0.1345$ 时图像,可以看出最终演化相貌图晶体内部有 8 个空位存在。图 5b 对应 E 样品 $\rho_0 = 0.1350$ 时的图像,可以看出最终演化相貌图晶体内部有 4 个空位存在。而图 5c 对应 F 样品 $\rho_0 = 0.1355$ 时的图像,最终演化相貌图晶体内部有 4 个空位存在。通过 D 样品、E 样品和 F 样品可以看出,晶粒内部的空位存在位置是随机的,并没有限定的位置,这是因为在实验室实验中晶体的空位分布也是随机的,如图 5d,表示 Pt 表面的 STM 像,在 Pt 晶粒中空位随机分布在晶粒中。研究还发现,当平均原子密度数值越接近 Hex Bumps 相时,晶粒内部的空位数目就越少,而越接近于 Local Bump 相时,空位的数目也越多。通过比较观察原子密度分布曲线图 6a, b, c 可以看出,代表原子的数值全大于零,原子的位置为曲线的最大值位置,而空位的位置则是曲线中等于零并且有一定宽度的位置。

3 结论

本文采用空位晶体相场模型 (VPFC) 模拟二维周期性晶体结构的形貌图,通过改变平均原子密度数值,模拟在不同相中二维周期性晶体结构的形貌图,得出以下结论:当体系中平均原子数值位于 VPFC 模型二维相图中六角“凸起”相、条状相和六角“凹坑”相区时,呈现出不同形貌的二维周期性晶体结构形貌图。对于不同形貌的二维周期性晶体结构的形貌图与原子密度曲线结合,可以描述在实验室中制备不同相结构的高质量薄膜的二维周期性形貌图。当体系中平均原子密度位于相图局部格点相和六角“凸起”相之间时,二维周期性晶体结构形貌图可以用于描述真实材料中的晶体结构。此时晶粒内部有点缺陷-空位的存在,晶粒内部的空位存在位置是随机的,当平均原子密度数值越接近六角“凸起”相边界时,晶粒内部的空位数目就越少,而越接近于局部粒子相时,空位的数目越多。其对应的原子密度分布图,空位的位置有一定宽度且数值为零,原子的位置则是原子密度曲线极大值的位置。

参考文献:

- [1] 徐恒钧. 材料科学基础[M]. 北京:北京工业大学出版社,2001.
Xu H J. Foundation of Materials Science[M]. Beijing : Beijing University of Technology Press,2001.
- [2] Keglinski P, Phillpot S R, Wolf D A N L, et al. Amorphous structure of grain boundaries and grain junctions

- in nanocrystalline silicon by molecular-dynamics simulations[J]. *Acta Materialia*, 1997, 45(3):987-998.
- [3] Elder K R, Grant M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals[J]. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 2004, 70(5):1605-1618.
- [4] Elder K R, Rossi G, Kanerva P, et al. Patterning of heteroepitaxial over layers from nano to micron scales[J]. *Phys Rev Lett*, 2012, 108:6102-6106.
- [5] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, et al. Modeling elasticity in crystal growth[J]. *Physical Review Letters*, 2002, 88(24):930-933.
- [6] 高英俊, 罗志荣, 黄礼琳, 等. 韧性材料的微裂纹扩展和连通的晶体相场模拟[J]. *中国有色金属学报*, 2013, 20(4):316-320.
- Gao Y J, Luo Z R, Huang L L, et al. Phase-field-crystal modeling for microcrack propagation and connecting of ductile materials[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2013, 20(4):316-320.
- [7] Berry J, Grant M, Elder K R. Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions[J]. *Physical Review E*, 2006, 73(3):80-98.
- [8] Hm S I S. Analysis and visualization of multiply oriented lattice structures by a two-dimensional continuous wavelet transform[J]. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 2006, 74(3):236-243.
- [9] Chan P. Scaling and pattern formation in condensed matter systems[J]. *Pro Quest Dissertations and Theses; Thesis—University of Illinois at Urbana-Champaign*, 2007(1):21-25.
- [10] 高英俊, 黄礼琳, 周文权, 等. 高温应变作用下的亚晶界湮没与位错旋转机制的晶体相场模拟[J]. *中国科学-技术科学*, 2015, 45(3):306-321.
- Gao Y J, Huang L L, Zhou W Q, et al. Phase field crystal simulation of subgrain boundary annihilation and dislocation rotation mechanism under strain at high temperature[J]. *Science in China E*, 2015, 45(3):306-321.
- [11] 高英俊, 全四龙, 邓芊芊, 等. 剪切应变下刃型位错的滑移机制的晶体相场模拟[J]. *物理学报*, 2015, 64(10):106105.
- Gao Y J, Quan S L, Deng Q Q, et al. Phase field crystal simulation of grain boundary annihilation under strain at high temperature[J]. *Acta Phys Sin*, 2015, 64(10):106105.
- [12] Gao Y J, Deng Q Q, Quan S L, et al. Phase field crystal simulation of grain boundary movement and dislocation reaction[J]. *Frontiers of Materials Science*, 2014(8):176-184.
- [13] 罗志荣, 黄世叶, 茹谢辛, 等. 晶体相场法模拟大角度晶界的变形过程[J]. *广西科学*, 2013, 20(4):311-315.
- Luo Z R, Huang S Y, Ru X X, et al. Phase-field-crystal modeling for deformation process of high-angle grain boundary[J]. *Guangxi Sciences*, 2013, 20(4):311-315.
- [14] 卢成健, 蒋丽婷, 王玉玲, 等. 晶体相场法模拟小角度晶界的位错结构及其演化[J]. *广西科学*, 2013, 20(4):316-320.
- Lu C J, Jiang L T, Wang Y L, et al. Dislocation structure evolution in low angle grain boundary[J]. *Guangxi Sciences*, 2013, 20(4):316-320.
- [15] Elder K R, Provatas N, Berry J, et al. Phase-field crystal modeling and classical density functional theory of freezing[J]. *Physical Review B*, 2007, 75(6):794-802.
- [16] Faghihi N, Provatas N, Elder K R, et al. Phase field crystal model for magneto-elasticity in isotropic ferromagnetic solids[J]. *Physical Review E*, 2013, 88(3):29-44.
- [17] Berry J. Simulation of an atomistic dynamic field theory for monatomic liquids: Freezing and glass formation[J]. *Physical Review E*, 2008, 77(6):601-611.
- [18] Robbins M J, Archer A J, Thiele U, et al. Modeling the structure of liquids and crystals using one- and two-component modified phase-field crystal models[J]. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 2012, 85(6):61408.
- [19] Chan P Y, Goldenfeld N, Dantzig J. Molecular dynamics on diffusive time scales from the phase-field-crystal equation[J]. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 2009, 79(32):35701.
- [20] Silván M M, Hernández M A, Costa V T, et al. Structured porous silicon sub-micrometer wells grown by colloidal lithography[J]. *Epl*, 2006, 76(4):690-695.
- [21] Huang Z. Metal-assisted chemical etching of silicon: A review[J]. *Advanced Materials*, 2011, 23(2):285-308.
- [22] M M S, M A H, V T C. Structured porous silicon sub-micrometer wells grown by colloidal lithography[J]. *EPL (Europhysics Letters)*, 2006, 76(4):690-695.
- [23] Faustini M, Sko G L, Boissiere C, et al. Liquid deposition approaches to self-assembled periodic nanomasks[J]. *Scripta Materialia*, 2014, 74(2):13-18.
- [24] Sousa C T, Leitao D, Proenca M P, et al. Nanoporous alumina as templates for multifunctional application[J]. *Appl Phys Rev*, 2014, 1:031102.
- [25] Vohra V, Yunus S, Attout A, et al. Bifunctional microstructured films and surfaces obtained by soft lithography from breath figure arrays[J]. *Soft Matter*, 2009, 5(8):1656-1661.
- [26] 刘培生. 晶体点缺陷基础[M]. 北京: 科学出版社, 2010.
- Liu P S. *Crystal Point Defect Foundation* [M]. Beijing: Science Press, 2010.

(责任编辑:尹 闯)