

# ОБРАЗОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ В УЛЬТРАТОНКИХ МЕДНЫХ НАНОПРОВОДАХ

*Свечников А.Б.*

РНИЦ «Курчатовский институт», г.Москва

[asvech@mail.ru](mailto:asvech@mail.ru)

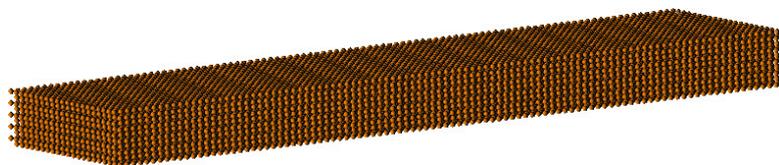
*Методом молекулярной динамики выполнены численные эксперименты по бомбардировке медных нанопроводов атомами аргона. Обсуждается характер структурных повреждений и вероятности их образования. Полученные данные свидетельствуют об уязвимости наноструктур к воздействиям извне.*

Нанопровода представляют собой кристаллические наноструктуры с поперечным сечением порядка нескольких квадратных нанометров и продольным размером в несколько микрон. К перспективным приложениям нанопроводов относят следующие: проводящие соединения в наноэлектронных приборах, компоненты прозрачных полимеров и композитов, узлы микроэлектромеханических систем (MEMS) и другие.

Миниатюризация материалов ставит перед исследователями новые проблемы. В частности, медь, широко используемая в производстве чипов, имеет длины свободного пробега электронов порядка 40 нм. В медных нанопроводах проводимость должна заметно снизиться, причина - отражение от границ. А влияние микроскопических дефектов структуры на работу устройств может стать основной проблемой, от решения которой будет напрямую зависеть время бесперебойной работы наноэлектронных устройств.

Цель работы состояла в изучении дефектов, образующихся при бомбардировке ультратонких нанопроводов меди атомами аргона. На рис.1 изображена 21210-атомная суперячейка медного нанопровода с размерами  $5,2 \times 26 \times 1,6$  нм., границы которой ориентированы в направлении (100). Широко известный метод молекулярной динамики был основой численных экспериментов, объем выборки результатов составил 2000. В начале каждого расчета положения атомов меди рандомизовались с помощью колебательных смещений Дебая-Воллера [1] для комнатной температуры. Затем атом аргона с энергией 20 кэВ падал по нормали на плоскость x-y нанопровода, значения координат на плоскости выбирались случайным образом. Динамика системы отслеживалась на протяжении 2 пс.

Взаимодействия между атомами Cu - Cu определялось многочастичным притягивающим потенциалом сильной связи (ТВ), который гладко сшивался с отталкивающим боровским потенциалом [2,3]. Боровский потенциал также применялся для взаимодействий Cu - Ar [3].



*Рис.1. Структура суперячейки медного нанопровода.*

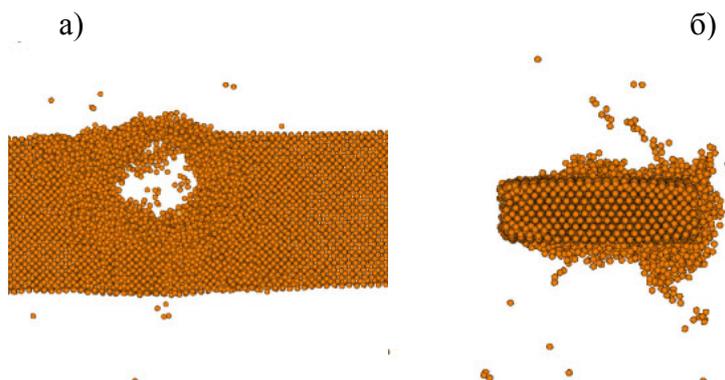
В результате бомбардировки атомы аргона практически всегда прошивали нанопровод насквозь, и лишь в 2% случаев наблюдалось отражение. К моменту завершения эксперимента атомы Ar удалялись от мишени на 600 нм со средней кинетической энергией 18,96 кэВ. Переданная атомам Cu кинетическая энергия в ряде случаев порождала каскады столкновений, в результате которых шло образование дефектов структуры и распыление атомов в вакуум.

Наиболее редко наблюдаемым результатом был поперечный разрыв нанопровода, всего 0,2%, представленный на рис.2 (первый тип дефектов).



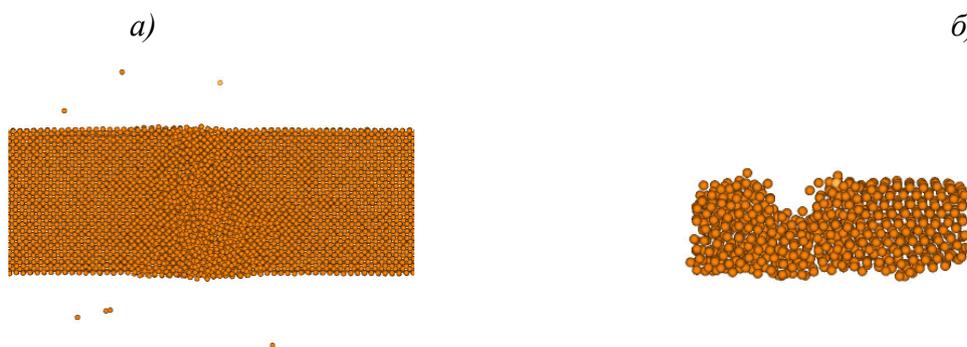
*Рис.2. Разрыв медного нанопровода в результате бомбардировки атомом Ar с начальной энергией 20 кэВ. а) вид в плоскости (x,y), б) (x,z).*

К серьезным дефектам в виде сквозных отверстий приводит приблизительно 7,6% столкновений (второй тип дефектов). На рис.3 видно, что диаметр отверстий составляет приблизительно 1/3 ширины нанополосы.



*Рис.3. Сквозное отверстие в медном нанопроводе. а) (x,y), б) (x,z).*

Основную часть дефектов составляют менее заметные, но от этого не менее важные (третий тип дефектов). Например на рис.4 показан нанопровод, на внешней поверхности которого образовался кратер. В окрестности кратера атомы Cu занимают позиции, которые заметно отличаются от положений в кристалле.



*Рис.4. Кратер на поверхности медного нанопровода. а) (x,y), б) сечение (x,z).*

Система все время находилась в термостате, и температурного программирования не проводилось. Продолжительность экспериментов была выбрана достаточно большой (2 пс.), что позволило провести анализ динамики процессов структурной релаксации. Согласно статистике, около 27 атомов Cu покидали нанопровод за 1 эксперимент. Из них в среднем образовывалось около 2 димеров Cu<sub>2</sub>. Протяженность области нанопровода с высокой концентрацией дефектов, как правило, составляла порядка 1/5 длины суперячейки (рис.1). Смещения атомов Cu из равновесных положений, приблизительно в 30% экспериментов, были причиной частичной аморфизации данной области наноструктуры.

Очевидно, что дефекты первого типа приведут к 100% отказу нанопровода, выступающего в роли проводника. Аналогичный вывод следует и из анализа дефектов второго типа. Действительно, здесь можно ожидать 30-50%% изменения характеристик нанопровода, что на практике приравнивается к отказу. Для понимания роли дефектов третьего типа, рис.4, необходимо проведение дополнительных исследований. В дальнейшем предполагается поместить нанопровод на подложку и провести сравнительный анализ с представленными выше данными.

### Литература

1. *Jackson D.P.* Approximate calculation of surface Debye temperatures.// *Surface Science*. 1974. V. 43. N.2. P. 431-440.
2. *Karolewski M.A.* Optimization Tight-binding potentials for sputtering simulations with fcc and bcc metals. // *Radiation Effects & Defects in Solids*. V.153. P. 239-235.
3. *Karolewski M.A.* Repulsive interatomic potentials for noble gas bombardment of Cu and Ni targets// *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* .2006. V.B243. P. 43-50.