

ОБРАЗОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ В УЛЬТРАТОНКИХ МЕДНЫХ НАНОПРОВОДАХ

Свечников А.Б.

НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Свечников А.Б.
НИЦ «Курчатовский
институт»

Цель работы состояла в изучении дефектов, образующихся при бомбардировке ультратонких нанопроводов меди атомами аргона. Была выбрана 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 энергий 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].

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

К серьезным дефектам в виде сквозных отверстий приводит приблизительно 7,6% столкновений (второй тип дефектов). При этом диаметр отверстий составлял приблизительно 1/3 ширины нанополосы.

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

Система все время находилась в термостате, и температурного программирования не проводилось. Продолжительность экспериментов была выбрана достаточно большой, 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 Cu₂. Протяженность области нанопровода с высокой концентрацией дефектов, как правило, составляла порядка 1/5 длины суперячейки. 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 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.