

---

## Р а з д е л II

### КОНТАКТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ НА ГРАНИЦЕ С ТВЕРДЫМИ И ЖИДКИМИ ФАЗАМИ

---

УДК 621.791.3

**В. М. Самсонов, Д. Г. Зыков \***

#### МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПАЙКИ ДОРОЖЕК НАНОРАЗМЕРНОЙ ШИНЫ

Работа посвящается 80-летию  
академика Ю. В. Найдича,  
одного из ведущих  
специалистов по теории  
и практике пайки

Пайка соседних проводящих дорожек наноразмерной шины, то есть шины с дорожками шириной порядка 1 нм, моделировалась на основе изотермической молекулярной динамики. Проводящие дорожки и диэлектрические зазоры между ними воспроизводились гетерогенной поверхностью с высоко- и низкоэнергетическими полосами соответственно. Исследована роль основных управляющих параметров: размеров капли припоя, ширины диэлектрического зазора и др.

*Ключевые слова:* наноразмерная шина, ширина зазора, потенциал Леннарда-Джонса.

Изучение наноструктур знаменует новый этап в развитии физики, химии и технологии. Большой интерес в настоящее время проявляется к нанокomпьютерам, отвечающим новому этапу в миниатюризации электронных схем [1]. Одним из этапов такого рода разработок является создание наноразмерных процессоров и логических элементов. Возможны различные варианты архитектуры нанокomпьютеров, в том числе принципиально отличающиеся от обычных образцов [2]. Однако наиболее вероятной возможностью в ближайшее время является распространение

---

\* В. М. Самсонов — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики Тверского государственного университета, Россия; Д. Г. Зыков — студент 3 курса физико-технического факультета Тверского государственного университета, там же.

© В. М. Самсонов, Д. Г. Зыков, 2009

на наноразмерный уровень принципов и подходов, которые уже используются в компьютерной технике. Современные микросхемы, включая процессор, сводятся к тем или иным комбинациям переключателей (активных элементов) и проводников (пассивных элементов). Даже современные компьютеры невозможно представить без шин, то есть систем, состоящих из большого числа параллельных проводников, которые соединяют в единое целое различные элементы компьютера. Внутренние шины используются и в микросхемах, включая процессор [3].

В связи с перспективами создания нанокomпьютера возникает необходимость получения и использования наноразмерных шин, то есть шин с шириной дорожки порядка 1 нм. Технология получения гетерогенных поверхностей такого типа уже разработана и является малозатратной. Речь идет о нанопечатной литографии [1]. Однако все необходимые соединения между дорожками шин, то есть перемычки между ними, невозможно создать заранее. Соответственно, одним из наиболее оптимальных технологических решений является использование локальной пайки соседних дорожек наноразмерных шин. Закономерности и механизмы такой пайки практически не изучены. В данной работе соответствующая задача решается на основе использования компьютерного молекулярно-динамического эксперимента.

Растекание металлических нанокapель, совмещенное с их последующей кристаллизацией, может использоваться и в так называемой металлической наноэлектронике для создания активных элементов. Например, в элементарной базе на основе металлических квазиодномерных проводов — квазиодномерных микроконтактов, проявляющих квантовые свойства [4]. Процессы, лежащие в основе пайки, — растекание и кристаллизация малых капель — представляют интерес и для молекулярной электроники, а также для технологии нанокomпозиционных материалов. Очевидно, результаты по смачиваемости гетерогенных поверхностей, полученные в данной работе, представляют также интерес для понимания закономерностей и механизмов пайки на макроскопических масштабах.

### *Постановка задачи и метод исследования*

В качестве метода исследования нами использована изотермическая молекулярная динамика (термостат Берендсена). Компьютерная программа для моделирования малых систем, включая растекание нанокapель, была разработана одним из авторов и В. В. Дронниковым. Имеющийся к настоящему времени вариант программы ориентирован на моделирование леннард-джонсовских систем. Иными словами, межатомное взаимодействие в моделируемой наносистеме, например капле, и в подложке описывается потенциалом Леннард-Джонса

$$\Phi(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right],$$

где  $\Phi$  — потенциал Леннард-Джонса;  $r$  — межатомное расстояние;  $a$  — эффективный атомный диаметр;  $\varepsilon$  — энергетический параметр (глубина потенциальной ямы). Как известно, потенциал Леннард-Джонса наиболее адекватно описывает взаимодействие между сферически симметричными молекулами, в том числе одноатомными. Однако известно также [6], что парные потенциалы, включая потенциал Леннард-Джонса, применимы в некотором приближении и к металлам с плотно упакованной решеткой. В дальнейшем нами планируются аналогичные исследования с использованием коллективных потенциалов, предложенных для конкретных металлов.

Наша компьютерная программа позволяет строить различные гетерогенные поверхности, в том числе полосатые, а также поверхности с квадратными высоко- и низкоэнергетическими включениями [5, 7]. Очевидно, шина может быть смоделирована системой чередующихся высоко- и низкоэнергетических полос. Высокоэнергетическая полоса воспроизводит проводящую дорожку шины, а низкоэнергетическая — диэлектрический зазор между ними. Было принято, что относительный энергетический параметр для дорожки  $\varepsilon_1^* = \varepsilon_1 / \varepsilon_l = 5$ , где  $\varepsilon_1^*$  — относительный энергетический параметр высокоэнергетической полосы;  $\varepsilon_l$  — значение энергетического параметра для капли припоя, а для диэлектрического зазора  $\varepsilon_2^* = \varepsilon_2 / \varepsilon_l = 0,5$ . Как известно, пайка сводится к формированию контакта между каплей припоя и подложкой, растеканию капли припоя по области пайки и последующей кристаллизации расплава. Соответственно, для воспроизведения пайки соседних дорожек шины сферическую нанокapлю помещали над центром низкоэнергетической полосы. Как и ожидалось, при определенных условиях растекание капли сопровождается соединением соседних высокоэнергетических полос (дорожек) переключкой расплава. Чтобы обеспечить кристаллизацию припоя, компьютерные эксперименты проводили в условиях постепенного понижения температуры до заведомо более низкой, чем макроскопическая температура плавления вещества припоя. Для рассматриваемой модельной капли приведенная температура плавления  $\dot{O}_m^*$  равна 0,65 [8], где  $\dot{O}_m^* = k T / \varepsilon_l$  ( $k$  — постоянная Больцмана).

Варьируя параметры системы, включая ширину зазора, размер нанокapли, скорость охлаждения и другие, можно исследовать условия и механизмы пайки дорожек наноразмерной шины. Рассмотрим в настоящей работе лишь технологический аспект нанопайки, не изучая проводимость низкоразмерных систем. Однако хорошо известно, что сплошные пленки металлов наноразмерной толщины обладают металлической проводимостью, несмотря на ряд размерных эффектов [9], и лишь при особых условиях, отвечающих квазиодномерности, — полупроводниковой проводимостью.

## Результаты и их обсуждение

### Зависимость минимального числа атомов капли, при котором образуется перемычка, от ширины зазора между дорожками

Для моделирования пайки дорожек наноразмерной шины капли различного размера помещали над серединой зазора (на рис. 1 и 2, а также последующих иллюстрациях они представлены белым цветом) между дорожками шины (показаны черным цветом). Ширина зазора  $L$  изменялась от  $3a_l$  до  $12a_l$  ( $L^* = L/a_l = 3-12$ ). Эволюция нанокapли проходила в условиях постепенного понижения температуры (приведенная температура  $T^*$  изменялась в пределах 0,65—0,16 за заданное число шагов эволюции). В дальнейшем режим охлаждения, при котором происходит уменьшение температуры в указанном интервале за 20 000 шагов эволюции, будет квалифицироваться как медленное охлаждение. На рис. 3 представлены все результаты исследования, которые демонстрируют зависимость минимального числа атомов  $N_{\min}$  в нанокapле, необходимого для образования паяного соединения между дорожками шины, от ширины зазора. Имеется в виду, что при количестве атомов в капле припоя  $N < N_{\min}$  перемычка между соседними дорожками шины не образуется. При малой ширине зазора ( $L^* = 3-7$ ) случай  $N < N_{\min}$  отвечает распределению атомов капли между соседними дорожками. На рис. 1 воспроизведен близкий к этому вариант, когда перемычка заметно сужается в центре зазора. На рис. 2 продемонстрирован другой возможный случай, отвечающий большому зазору между проводниками. В этой ситуации дальнейшее уменьшение  $N$  приводит к тому, что капля затвердевает, находясь между дорожками, то есть процесс пайки не

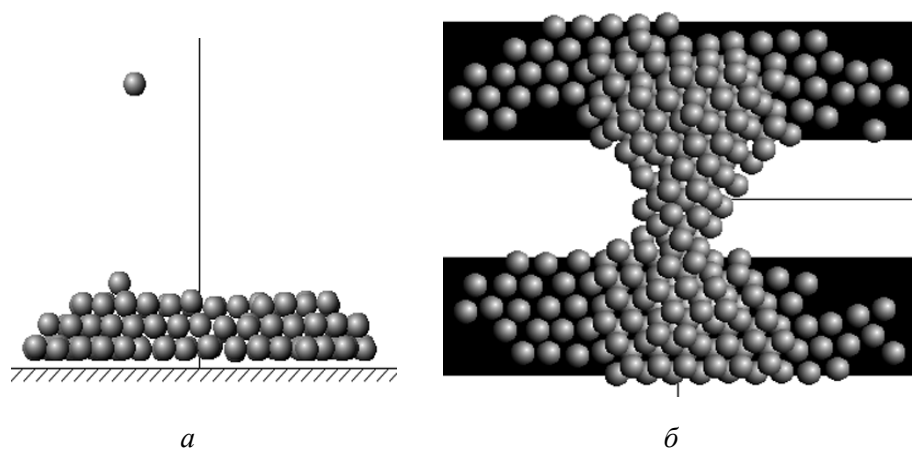


Рис. 1. Образование перемычки при ширине зазора  $L^* = 5$ :  $a$  — вид сбоку;  $b$  — вид сверху (число атомов в капле припоя — 280, охлаждение за 20 000 шагов)

Fig. 1. The solder bridge formation at the reduced gap width  $L^* = 5$ :  $a$  — a lateral site;  $b$  — a site from the above ( the number of atoms in the solder droplet is 280, cooling for 20 000 steps)

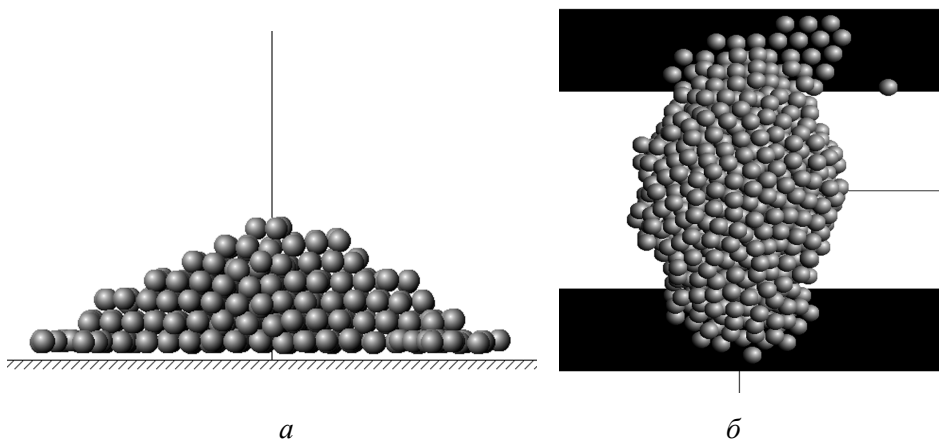


Рис. 2. Образование перемычки при зазоре  $L^* = 12$ :  $a$  — вид сбоку;  $b$  — вид сверху ( $N = 800$ , охлаждение за 20 000 шагов)

Fig. 2. The solder bridge formation at the gap width  $L^* = 12$ :  $a$  — a lateral site;  $b$  — a site from the above ( $N = 800$ , cooling for 20 000 steps)

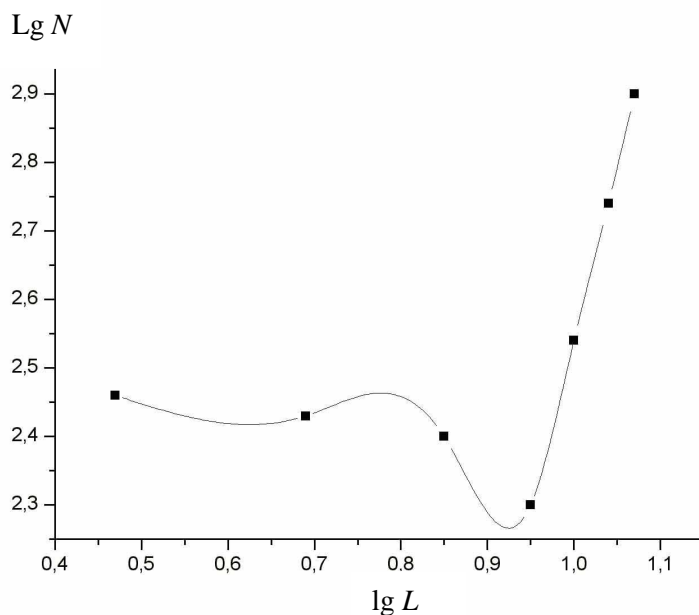


Рис. 3. Зависимость минимального числа атомов капли  $N_{\min}$ , необходимого для образования перемычки между дорожками шины, от ширины зазора  $L^*$  между ними

Fig. 3. The dependence of the minimal number of atoms in droplet  $N_{\min}$ , which is necessary for the bridge formation between the bus ways, on the gap width  $L^*$

осуществляется. Согласно рис. 3, зависимость  $\lg N_{\min}$  от  $\lg L^*$  имеет минимум, а при  $L^* > 10$  эта зависимость приобретает линейный характер согласно степенному закону  $N_{\min} \sim L^3$ . Как видно на рис. 3, при  $L^* = 15$  количество атомов, необходимое для образования перемычки, равно 1700. Такая капля образует полусферу высотой около 16 атомных диаметров. Иными словами, при таком большом зазоре использование пайки соседних дорожек шины становится нецелесообразным.

***Зависимость скорости охлаждения, благоприятной для образования перемычки, от расстояния между проводниками***

При проведении данной серии компьютерных экспериментов число атомов  $N$ , содержащихся в капле припоя, предполагалось постоянным ( $N = 250$ ), а ширина зазора  $L^*$  варьировалась от 3 до 7. Приведенная скорость охлаждения определяется числом шагов эволюции системы, которому соответствует уменьшение температуры в указанных пределах. В наших исследованиях время охлаждения изменялось от 6000 до 20 000 условных единиц. Соотношение с реальным временем зависит от параметров парного потенциала и массы атома. По порядку величины один элементарный шаг составляет 0,01 пс. Таким образом, наиболее быстрое охлаждение происходит за 60 пс, а наиболее медленное — за 200 пс. Установлено, что при малых зазорах между дорожками ( $L^* = 3-7$ ) более быстрое охлаждение благоприятствует пайке, уменьшая минимальное количество атомов, необходимых для образования соединения. Так, согласно рис. 4, при медленном охлаждении (за 20 000 шагов эволюции) и  $L^* = 3$  минимальное число атомов в капле припоя, необходимое для соединения соседних дорожек шины, равно 290, а при быстром охлаждении (за 6000 шагов эволюции)  $N_{\min} = 250$  (рис. 5). Вместе с тем следует отметить, что при медленном охлаждении

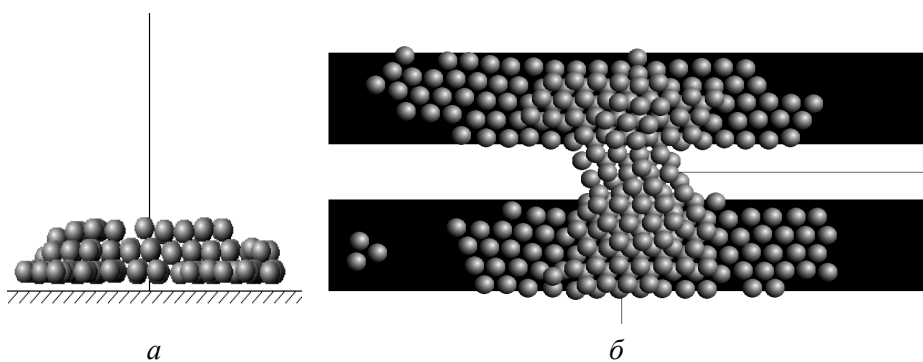


Рис. 4. Образование перемычки при ширине зазора  $L^* = 3$ :  $a$  — вид сбоку;  $b$  — вид сверху (число атомов в капле припоя — 290, охлаждение за 20 000 шагов)

Fig. 4. The bridge formation at the gap width  $L^* = 3$ :  $a$  — a lateral site;  $b$  — a site from the above (the number of atoms in the solder droplet is 290, cooling for 20 000 steps)

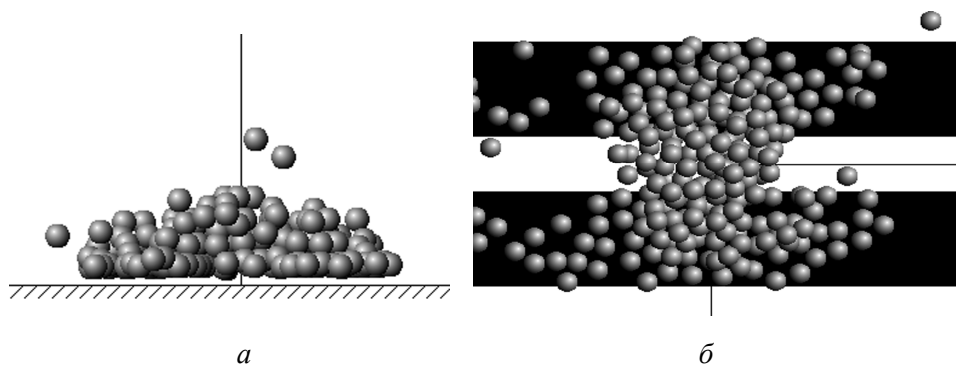


Рис. 5. Образование перемычки при ширине зазора  $L^* = 3$ :  $a$  — вид сбоку;  $b$  — вид сверху (число атомов в капле припоя — 250, охлаждение за 6000 шагов)

Fig. 5. The bridge formation at the gap width  $L^* = 3$ :  $a$  — a lateral site;  $b$  — a site from the above ( the number of atoms in the solder droplet is 250, cooling for 6000 steps)

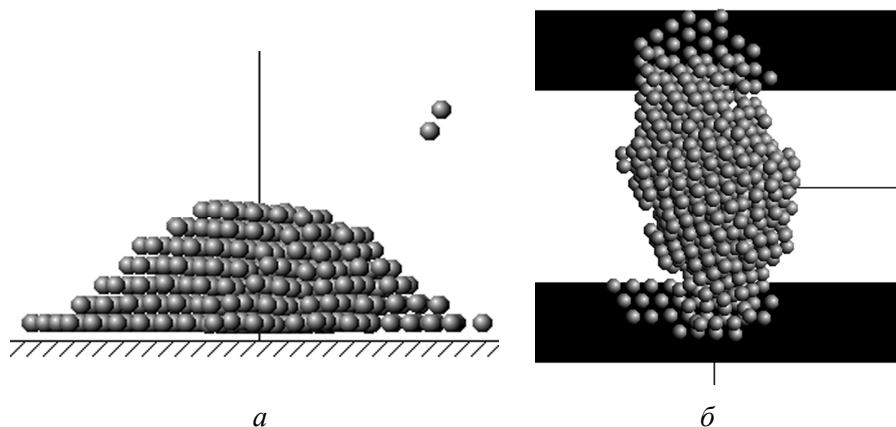


Рис. 6. Образование перемычки при зазоре  $L^* = 12$ :  $a$  — вид сбоку;  $b$  — вид сверху (число атомов в капле припоя — 580, охлаждение за 40 000 шагов)

Fig. 6. The bridge formation at the gap width  $L^* = 12$ :  $a$  — a lateral site;  $b$  — a site from the above (the number of atoms in the solder droplet is 580, cooling for 40 000 steps)

образуется высокоупорядоченная гетероструктура, соответствующая ГПУ решетке, характерной для леннард-джонсовских нанокристаллов [10], а быстрое охлаждение приводит к формированию аморфной гетероструктуры, отвечающей большей смоченной площади в зазоре между дорожками.

Напротив, при большой ширине зазора ( $L^* > 7$ ) пайке благоприятствует медленное охлаждение. Действительно, согласно рис. 2, при медленном охлаждении (за 20 000 шагов эволюции)  $N_{\min} = 800$ , а при еще более медленном охлаждении (за 40 000 шагов эволюции)

$N_{\min} = 580$  (рис. 6). При зазоре между проводниками  $L^* \geq 11$  приходится повышать количество атомов в капле-припое, поскольку уже нельзя добиться возникновения перемычки при  $N_{\min} = 250$ , варьируя только скорость охлаждения. Причина, очевидно, в том, что столь малого числа атомов уже не хватает для образования перемычки с плотностью, соответствующей плотности массивных конденсированных фаз того же вещества.

### **Выводы**

Представленные результаты свидетельствуют о возможности практического осуществления нанопайки, включая соединение соседних проводящих дорожек шины, разделенных диэлектрическим зазором наноразмерной ширины. Выявлен ряд параметров, определяющих возможность проведения пайки и влияющих на структуру перемычки. Установлено, что процесс нанопайки является весьма сложным, характеризуется рядом критических значений управляющих параметров, которые необходимо учитывать при использовании пайки в нанoeлектронике и других областях нанотехнологии.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 08-03-97511-р\_центр\_а).

**РЕЗЮМЕ.** Пайка сусідніх провідних доріжок нанорозмірної шини, тобто шини з доріжками шириною порядку 1 нм, моделювалася на основі ізотермічної молекулярної динаміки. Провідні доріжки і діелектричні зазори між ними відтворювалися гетерогенною поверхнею з високо- і низькоенергетичними смугами відповідно. Досліджено роль основних керуючих параметрів: розмірів краплі припою, ширини діелектричного зазору та ін.

**Ключові слова:** нанорозмірна шина, ширина зазору,, потенціал Леннард-Джонса.

1. *Нанотехнология в ближайшем десятилетии.* — М.: Мир, 2002. — 291 с.
2. *Balzani V., Credi A., Venturi M. Molecular Devices and Machines.* — Weinheim: Villy-VCH Verlag, 2003.
3. *Таненбаум А.* Архитектура компьютера. — М. — С.-Пб., 2005.
4. *Нанотехнология в электронике.* — М.: Техносфера, 2005. — С. 263—267.
5. *Самсонов В. М., Дронников В. В., Муравьев С. Д.* Компьютерное моделирование формирования наноструктур при растекании малых капель по неоднородным подложкам //Журн. физ. хим. — 2002. — **76**, № 11. — С. 2068—2072.
6. *Tersoff J.* New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // Phys. Rev. B. — 1988. — **37**. — P. 6991—7000.



7. *Samsonov V. M., Dronnikov V. V., Volnukhina A. A., Muravyev S. D.* Molecular dynamical simulation of structure formation after nanodroplet spreading over heterogeneous surfaces // *Surface Science*. — 2003. — **532—535**. — P. 560—566.
8. *Самсонов В. М., Дронников В. В., Мальков О. А.* Зависимость температуры плавления нанокристаллов от их размера // *Журн. физ. хим.* — 2004. — **78**, № 7. — С. 1203—1207.
9. *Шук А. Я., Бакуева Л. Г., Мусихин С. Ф., Рыков С. А.* Физика низкоразмерных систем. — С.-Пб., 2001.
10. *Самсонов В. М., Харечкин С. С., Гафнер С. Л. и др.* Молекулярно-динамическое исследование плавления и кристаллизации наночастиц // *Кристаллография*. — 2009. — **54**, № 3. — С. 530—536.

Поступила 11.11.09

**Samsonov V. M., Zykov D. G.**

### **Soldering of nanosized bus ways: molecular dynamics simulation**

Soldering of neighboring conductive ways of a nanosized bus, i.e. the bus with the way width of about 1 nm, was simulated using the isothermal molecular dynamics. Conductive ways and dielectric gaps between them were reproduced by a heterogeneous surface with high- and low-energy stripes respectively. The role of main controlling parameters (the solder droplet size, the width of the dielectric gap and other) was investigated.

**Keywords:** *dimensional tire, gap width, Lennard-Jones potential.*