

Шифр: Q89ER7M5GHI654D

**ЗАСТОСУВАННЯ СТОХАСТИЧНОГО КІНЕТИЧНОГО СЕРЕДНЬО-
ПОЛЬОВОГО МЕТОДУ ДО ОПИСУ ПОРОУТВОРЕННЯ І
ЕЛЕКТРОМІГРАЦІЇ ПОР**

ЗМІСТ

ВСТУП	3
РОЗДІЛ 1	5
ЗАСТОСУВАННЯ СЕРЕДНЬО-ПОЛЬОВИХ МЕТОДІВ ДЛЯ ОПИСУ АТОМНОЇ МІГРАЦІЇ	5
1.1. Основні рівняння Мартена	5
1.2. Основи моделі Мартена-Ерделі-Беке (МЕВ).....	6
1.3. Тривимірне узагальнення моделі МЕВ	8
1.4. Стохастичний кінетичний середньо-польовий метод	9
РОЗДІЛ 2	12
МОДЕЛІ ПОРОУТВОРЕННЯ В СПЛАВІ, ПЕРЕСИЧЕНОМУ ВАКАНСІЯМИ	12
2.1. Вакансійний механізм дифузії і пороутворення в сплавах	12
2.2. Феноменологічна модель пороутворення.....	14
2.3. Комп'ютерна модель пороутворення	19
РОЗДІЛ 3	24
ЕЛЕКТРОМІГРАЦІЯ ВАКАНСІЙ	24
3.1. Електронний вітер і поняття ефективного заряду	24
3.2. Феноменологічний опис електроміграції атомів і вакансій	25
3.3. Модифікація методу SKMF на випадок електричного поля	27
ВИСНОВКИ	29
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	30

ВСТУП

Утворення пор у матеріалах (зокрема, у металах і сплавах) – це розповсюджене явище, яке може бути як шкідливим, так і корисним, в залежності від технологічних вимог.

Шкідливим пороутворення є у електронних мікросхемах, оскільки утворення пор біля контактів мікросхем призводить або зразу до розриву контакту, або до погіршення механічних властивостей з перспективою легкого розповсюдження тріщин у випадку механічних ударів або термонапруг. Іншим прикладом шкідливого пороутворення є розпухання стінок ядерних реакторів під дією випромінювання нейтронів та інших високоенергетичних частинок. Ці частинки зазвичай мають енергію значно більшу за енергію утворення вакансії та міжвузлового дефекту (пари Френкеля). Тому така частинка утворює цілий каскад дефектів – вакансій та міжвузельних атомів. При цьому матеріал стає пересиченим вакансіями, вони конденсуються в пори, які спричиняють ризик руйнування стінки реактора.

Корисним пороутворення є, наприклад, у проблемі доставки ліків: Як відомо, при боротьбі з онкологічними захворюваннями, необхідно доставляти ліки («кіллера» ракової клітини) в певні місця людського організму. Для цього треба ці ліки капсулювати, але ці капсули повинні бути нанорозмірні. 13 років тому були розвинуті способи отримання порожнистих наноструктур (шляхом твердофазних реакцій), які можуть використовуватись як носії протипухлинних ліків. Відповідна задача (drug delivery) вже частково розв'язана, їй присвячені численні медичні конференції. Іншим випадком корисності пористості є створення пористих металів.

В нашій роботі ми зосередимось на вивченні утворення пор у металевих контактах мікросхем (алюмінієвих, мідних або олов'яних) і їх міграції під дією електричного струму. Те, що пори можуть мігрувати як цілі об'єкти під дією електричного струму і цим спричинювати відмови мікросхем, вперше було відкрито в мідних нанопровідниках інтегральних схем лише в 2004 році [21]. До цього вважалося, що під дією електроміграції дрейфують окремі вакансії,

вони накопичуються біля катодного кінця провідника, створюють перенасичення і, в результаті пору, яка розростається (стоячи на місці) і зрештою порушує контакт. Щоб прогнозувати середній час до відмов, необхідно передбачувати рухливість пори як функцію від її розміру. Теоретично це вивчено лише для пор в об'ємі провідника і не вивчено для руху пор уздовж поверхні або вздовж меж зерен. Знайти рухливість пори методом молекулярної динаміки (MD) неможливо в силу обмежень на машинний час, методом Монте-Карло (MC), в принципі, можливо [20], але вимагає дуже довгих обчислень. В нашій роботі ми намагаємося застосувати до проблеми прогнозування утворення та електроміграції пор нещодавно запропонований стохастичний кінетичний середньо-польовий метод (SKMF).

РОЗДІЛ 1

ЗАСТОСУВАННЯ СЕРЕДНЬО-ПОЛЬОВИХ МЕТОДІВ ДЛЯ ОПИСУ АТОМНОЇ МІГРАЦІЇ

1.1. Основні рівняння Мартена

Середньопольові методи в фізиці відомі з часів Ван дер Ваальса Власова, Вейса. Однак вони застосовувались в основному до наближеного розрахунку рівноважних термодинамічних характеристик речовини. Застосування середньо-польових методів до кінетики, і зокрема, до атомної міграції в твердих тілах, має значно коротшу історію. Зокрема, зараз дость відома самоузгоджена середньо-польова кінетична модель [1], запропонована відомим французьким науковцем Жоржем Мартеном, який довгі роки очолював теоретичний відділ французького ядерного центру. У своїй роботі Мартен розглянув просту одновимірну модель, де енергія зв'язку і активаційний бар'єр для міжатомних обмінів, рахуються як сума енергій парних взаємодій, але в наближенні середнього поля. На (рис.1.1.) розглядаються площини решітки, які перпендикулярні до осі X . Кожна площина містить Ω атомних вузлів. Кожен вузол (наприклад, у площині n) має z_0 найближчих сусідів у площині n , z у площині $(n + 1)$ і z у площині $(n - 1)$. Координаційне число $Z = 2 \cdot z + z_0$. Два види атомів A і B розподіляються по $N \times \Omega$ вузлах решітки [1].

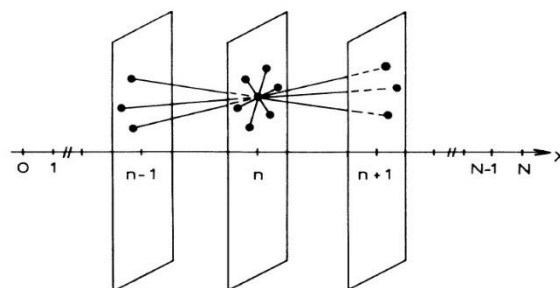


Рис.1.1. Зв'язки між сусідніми площинами: один атом в площині n , має $z_0 (= 6)$ найближчих сусідів, і $z (= 3)$ сусідів в площинах $n + 1$ і $n - 1$. Координаційна сфера $Z = z_0 + 2 \cdot z (= 12)$ [1]

Відповідно до цієї моделі, Мартен вивів наступні рівняння [1]:

зміна концентрації B у площині n задається

$$\frac{dc_n}{dt} = J_{n-1 \rightarrow n} - J_{n \rightarrow n+1}, \quad (1.1)$$

де

$J_{n \rightarrow n+1}$ – чистий потік атомів B від площини n до площини $n + 1$ через вузол решітки:

$$J_{n \rightarrow n+1} = z \cdot (C_n \cdot (1 - C_{n+1}) \cdot \Gamma_{n \rightarrow n+1} - C_{n+1} \cdot (1 - C_n) \cdot \Gamma_{n+1 \rightarrow n}), \quad (1.2)$$

де

$\Gamma_{n \rightarrow n+1}$ – частота, з якою один атом B у площині n обмінюється з одним атомом A у площині $n + 1$,

$\Gamma_{n+1 \rightarrow n}$ – частота, з якою один атом B у площині n обмінюється з одним атомом A у площині $n - 1$,

$$\Gamma_{n \rightarrow n+1} = \vartheta \cdot e^{-\beta \cdot E_{n \rightarrow n+1}}, \quad (1.3)$$

$$\Gamma_{n+1 \rightarrow n} = \vartheta \cdot e^{-\beta \cdot E_{n+1 \rightarrow n}}, \quad (1.4)$$

де

$$\beta = \frac{1}{k_B \cdot T}, \text{ де } k_B \text{ – стала Больцмана,} \quad (1.5)$$

ϑ – передекспоненційний множник, пропорційний частоті коливань атомів,

$E_{n \rightarrow n+1}$ – бар'єр активації для обміну між B у площині n і A у площині $n + 1$,

$E_{n+1 \rightarrow n}$ – бар'єр активації для обміну між B у площині n і A у площині $n - 1$,

$$E_{n \rightarrow n+1} = E^0 + (\epsilon_{AB} - \epsilon_{BB}) \cdot (Z \cdot C_{n-1} + Z \cdot C_{n+1} + Z_0 \cdot C_n) + (\epsilon_{AA} - \epsilon_{AB}) \cdot (Z \cdot C_n + Z \cdot C_{n+2} + Z_0 \cdot C_{n+1}), \quad (1.6)$$

$$E_{n+1 \rightarrow n} = E^0 + (\epsilon_{AB} - \epsilon_{BB}) \cdot (Z \cdot C_n + Z \cdot C_{n+2} + Z_0 \cdot C_{n+1}) + (\epsilon_{AA} - \epsilon_{AB}) \cdot (Z \cdot C_{n-1} + Z \cdot C_{n+1} + Z_0 \cdot C_n), \quad (1.7)$$

де

E^0 – енергія в сідловій точці, $\epsilon_{AB}, \epsilon_{AA}, \epsilon_{BB}$ – енергії зв'язку AB, AA, BB .

1.2. Основи моделі Мартена-Ерделі-Беке (МЕВ)

Модель МЕВ використовувалась Беке та ін. для вивчення дифузії асиметричних систем останні 10 років. Асиметрія дифузії означає, як правило, що один із компонентів дифузійної пари більш легкоплавкий, і тому всі коефіцієнти дифузії сильно залежать від концентрації, яка змінюється на кілька порядків в межах допустимого діапазону концентрацій. Ерделі і Беке показали, що дифузія на початковій стадії нелінійна і призводить до загострення профіля концентрації, а не до його згладжування.

Недавно Ерделі представив модель, яка використовувалась для опису формування впорядкованих фаз. Зокрема, автори [8] виявили, що в дуже асиметричних системах з об'ємноцентрованою кубічною (ОЦК) ґраткою, яка характеризується можливістю переходу II порядку в порядок β -латуні (B2), формування проміжної впорядкованої фази може починатись далеко за межами рівноважної концентрації.

В [8] автори застосували цей метод для вивчення утворення проміжних фаз для випадку граноцентрованої кубічної (ГЦК) ґратки. Автори мали справу з фазовим переходом I роду. Те, що вони отримали, можна назвати «моделлю сірих вузлів» або «моделлю середнього поля».

В оригінальній моделі МЕВ значення концентрації було присвоєне атомній площині. Детальніші міркування Мартена привели до наступної системи рівнянь для кожної з площин:

$$\frac{dC_i}{dt} = -Z\vartheta \cdot [C_i \cdot (1 - C_{i-1}) \cdot \Gamma_{i,i-1} - (1 - C_i) \cdot C_{i-1} \cdot \Gamma_{i-1,i} + C_i \cdot (1 - C_{i+1}) \cdot \Gamma_{i,i+1} - (1 - C_i) \cdot C_{i+1} \cdot \Gamma_{i+1,i}], \quad (1.8)$$

де $Z\vartheta$ – число атомів в сусідній площині і $\Gamma_{i,i+1}$ – частота стрибків від i -ї площини до $(i + 1)$ площини. Передекспоненційний множник вважається незалежним від локального складу:

$$\Gamma_{i,i+1} = \vartheta \cdot e^{-\frac{E_0 - \overline{E_{i,i+1}}}{k_B T}}, \quad (1.9)$$

де $\overline{E_{i,i+1}}$ – це енергія системи перед стрибком атома у зовнішньому середньому полі і E_0 – енергія сідлової конфігурації.

Найпростіше припущення про сідлову точку, яке спочатку було запропоновано Мартеном, полягало в тому, щоб взяти всі сідлові точки з однаковою енергією. Наприклад, з нульовою енергією.

1.3. Тривимірне узагальнення моделі МЕВ

Головне узагальнення МЕВ-моделі: призначення концентрації певному вузлові (замість конкретної площини). Це дає можливість побудувати тривимірну сітку «сірих» вузлів [8].

Швидкість зміни концентрації в кожному вузлі i з тривимірної сітки визначається відповідно до збереження матерії і відповідному локальному балансу потоку на кожній ділянці:

$$\begin{aligned} \frac{dC_i}{dt} &= - \sum_{j=1}^Z [C_i \cdot (1 - C_j) \cdot \Gamma_{i,j} - C_j \cdot (1 - C_i) \cdot \Gamma_{j,i}] \\ &= -C_i \cdot \sum_{j=1}^Z (1 - C_j) \cdot \Gamma_{i,j} + (1 - C_i) \cdot \sum_{j=1}^Z C_j \cdot \Gamma_{j,i}, \quad (1.10) \end{aligned}$$

де C_i – концентрація A у цьому вузлі (атомна доля), C_j – концентрація в j -му сусідньому вузлі з загальною кількістю найближчих сусідів Z , $C_i \cdot (1 - C_j)$ – ймовірність того, що i -й вузол зайнятий атомом A , а сусідній j -й вузол зайнятий атомом B , тобто можливий обмін атомів і $\Gamma_{i,j}$ – ймовірність такого обміну за одиницю часу, тобто швидкість стрибка атомів A з цього вузла до j -го сусіднього вузла (і зворотні стрибки атомів B), яка визначається:

$$\Gamma_{i,j} = \vartheta \cdot e^{-\frac{Q_{i,j}}{k_B T}}, \quad (1.11)$$

де $Q_{i,j} = E_0 - \overline{E_{i,j}}$, E_0 приймається однаковим для всіх стрибків,

$$\overline{E_{i,j}} = E_i^A + E_j^B, \quad (1.12)$$

$$E_i^A = V_{AA} \cdot \sum_{j=1}^Z C_j + V_{AB} \cdot \sum_{j=1}^Z (1 - C_j), \quad (1.13)$$

$$E_j^B = V_{AB} \cdot \sum_{k=1}^Z C_k + V_{BB} \cdot \sum_{k=1}^Z (1 - C_k), \quad (1.14)$$

E_i^A і E_j^B – енергії взаємодії атома A чи B в i -му вузлі з його сусідами. Таким чином, частоти стрибків можуть бути виражені безпосередньо через атомну енергію у вузлі:

$$\Gamma_{i,j} = \vartheta' \cdot e^{\frac{E_{i,j}}{k_B T}}, \quad (1.15)$$

$$\text{де } \vartheta' = \vartheta \cdot e^{-\frac{E_0}{k_B T}}. \quad (1.16)$$

Основна мета моделі [8] – дослідження часу інкубації і/або подавлення різних фаз в залежності від розміру і асиметрії початкового шуму концентрації. Моделювання проводилось для ГЦК ґратки, з початковим розподілом концентрації в дифузійній парі $A - B$ [8].

1.4. Стохастичний кінетичний середньо-польовий метод

Всі системи, оброблені за допомогою методу КМФ, альтернативно можуть бути оброблені за допомогою КМС [5]. Основною перевагою алгоритмів, заснованих на кінетичному середньо-польовому (КМФ) наближенні є те, що вони дають досить точні результати. Нам не потрібно запускати алгоритм кілька разів, а потім усереднювати результати, щоб передбачити найбільш ймовірний сценарій процесу. Але вони мають суттєвий недолік: процеси, викликані стохастичними флуктуаціями, не можуть бути змодельовані [4].

Саме тому в [3] [4] метод кінетичного середнього поля (КМФ), стохастичним шляхом, за рахунок введення динамічного шуму Ланжевена, був перетворений в стохастичний кінетичний середньо-польовий метод (SKMF).

Основні положення методу SKMF [3]:

швидкість зміни концентрації у кожному вузлі i тривимірної ґратки, визначається відповідно до збереження речовини, а відповідний локальний баланс потоку в кожному вузлі:

$$\frac{dC_i}{dt} = - \sum_{j=1}^Z [C_i \cdot (1 - C_j) \cdot (\Gamma_{i,j}^{mean-field} + \delta\Gamma_{i,j}^{Lang}) - C_j \cdot (1 - C_i) \cdot (\Gamma_{j,i}^{mean-field} + \delta\Gamma_{j,i}^{Lang})], \quad (1.17)$$

де C_i – концентрація в даному вузлі i , C_j – концентрація в j -му сусідньому вузлі, а Z – загальне число найближчих сусідів.

$C_i \cdot (1 - C_j)$ – це, насправді, ймовірність того, що вузол i зайнятий атомом A , і сусідній вузол j – атомом B ; тобто можливий обмін $A - B$.

$\Gamma_{i,j}^{mean-field}$ – це ймовірність такого обміну за одиницю часу, тобто це швидкість стрибків атомів A від вузла i до сусіднього вузла j і зворотніх стрибків атомів B ($\Gamma_{j,i}^{mean-field}$ – це ймовірність обміну атомів A і B , які перебувають у вузлі j і i , відповідно).

$$\Gamma_{i,j}^{mean-field} = \Gamma_0 \cdot e^{-\overline{E}_{i,j}/k_B T}, \quad (1.18)$$

$$\text{з } \overline{E}_{i,j} = (M - V) \cdot \sum_{l=1}^Z C_l + (M + V) \cdot \sum_{n=1}^Z C_n, \quad (1.19)$$

де

$V_{\alpha,\beta}$ ($\alpha, \beta = A, B$) – енергії парної взаємодії,

$$M = \frac{V_{AA} - V_{BB}}{2}, V = V_{AB} - \frac{V_{AA} + V_{BB}}{2}, \Gamma_0 = \vartheta \cdot e^{-E_0 + Z \cdot (V_{AB} + V_{BB})/k_B T},$$

(ϑ – частота спроб, E_0 – енергія сідлової точки), V – параметр регулярного твердого розчину пропорційний теплоті перемішування, і M визначає міцність залежності складу від коефіцієнта дифузії обраного атома (дифузійна асиметрія) [9].

$\delta\Gamma_{i,j}^{Lang}$, у рівнянні (1.17), відповідає за шум і є стохастичним значенням, що додається до частоти стрибків атомів [6]:

$$\delta\Gamma_{i,j}^{Lang} = \frac{A_n}{\sqrt{dt}} \cdot \sqrt{3} \cdot (2 \cdot random - 1), \quad (1.20)$$

де $2 \cdot \text{random} - 1$ генерує випадкове число на проміжку від -1 до 1,
 A_n – амплітуда шуму, dt – безрозмірний крок по часу [6].

РОЗДІЛ 2

МОДЕЛІ ПОРОУТВОРЕННЯ В СПЛАВІ, ПЕРЕСИЧЕНОМУ ВАКАНСІЯМИ

2.1. Вакансійний механізм дифузії і пороутворення в сплавах

Механізми дифузії різні і залежать від типу кристалічної ґратки, видів хімічних зв'язків, температури, і, найголовніше, дефектів кристалічної структури. Їх налічують три: первинні дефекти, дефекти ґратки і двовимірні дефекти. Мова йтиме про дефекти ґратки, а конкретніше – вакансії.

Вакансія – це відсутність атома у вузлі кристалічної ґратки. Вакансії завжди є в чистих сплавах і металах, також у напівпровідниках. Інакше, вакансії називають точковими дефектами. І завдяки вакансіям відбувається дифузія.

Вакансійний механізм – це коли атом мігрує на місце вакансії і тим самим звільняє своє місце у вузлі кристалічної ґратки. При температурі, відмінній від нуля, любе тверде тіло містить певне число дефектів кристалічної ґратки у вигляді вакансій. З енергетичної точки зору цей механізм кращий, тому що енергія активації витрачається майже виключно на відрив частинок. При цьому не відбувається спотворення ґратки.

Вакансійний механізм можна отримати узагальнивши тривимірну модель КМФ, таким чином отримаємо три рівняння атомів сорту A і B та вакансій V , при цьому враховується, що обмін A або B можливий лише з вакансіями V [23]:

$$\begin{aligned} \frac{dC_V(i)}{dt} = & -C_V(i) \cdot \sum_{k=1}^Z C_A(k) \cdot \Gamma_{ki}^{AV} - C_V(i) \cdot \sum_{k=1}^Z C_B(k) \cdot \Gamma_{ki}^{BV} + C_A(i) \\ & \cdot \sum_{k=1}^Z C_V(k) \cdot \Gamma_{ik}^{AV} - C_B(i) \cdot \sum_{k=1}^Z C_V(k) \cdot \Gamma_{ik}^{BV}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\frac{dC_A(i)}{dt} = -C_A(i) \cdot \sum_{k=1}^Z C_V(k) \cdot \Gamma_{ik}^{AV} - C_V(i) \cdot \sum_{k=1}^Z C_A(k) \cdot \Gamma_{ki}^{AV}, \quad (2.2)$$

$$\frac{dC_B(i)}{dt} = -C_B(i) \cdot \sum_{k=1}^Z C_V(k) \cdot \Gamma_{ik}^{BV} - C_V(i) \cdot \sum_{k=1}^Z C_B(k) \cdot \Gamma_{ki}^{BV}, \quad (2.3)$$

де $C_A(i)$, $C_B(i)$ та $C_V(i)$ – концентрації A , B та вакансій в i -му вузлі. Оскільки в даній моделі концентрація розглядається як імовірність знаходження атома у вузлі, то сума концентрацій рівна 1, відповідно справедлива наступна рівність: $C_A + C_B + C_V = 1$.

Значення Γ_{ik}^{AV} , Γ_{ik}^{BV} – частоти обміну атому $A(B)$ в i -му вузлі та вакансії в k -му вузлі. Значення частоти ϑ може бути різним для компонентів A і B та залежить від рухливості кожного з компонентів, враховуючи це, отримаємо такі вирази:

$$\Gamma_{ik}^{AV} = \vartheta_{0A} \cdot e^{-\frac{E_{saddle} - E^{before}}{k_B \cdot T}}, \quad \Gamma_{ik}^{BV} = \vartheta_{0B} \cdot e^{-\frac{E_{saddle} - E^{before}}{k_B \cdot T}}.$$

Енергії до стрибка визначаються за наступними формулами:

$$E^{before} = \sum_{i'=1}^Z (C_A(i') \cdot V_{AA} + C_B(i') \cdot V_{AB}), \quad (2.4)$$

$$E^{before} = \sum_{i'=1}^Z (C_A(i') \cdot V_{BA} + C_B(i') \cdot V_{BB}), \quad (2.5)$$

де i' – номер одного з Z сусідів i -го вузла. Для інших частот формули аналогічні.

Отриману систему рівнянь (2.1 – 2.3) можна розв'язати безпосередньо, але крок по часу потрібно брати досить малий, оскільки частота стрибків вакансій набагато більша за частоти стрибків атомів компонентів A і B (в $1/C_V$ разів). Моделювання за цим алгоритмом буде занадто повільним, тому потрібно ввести умову квазістаціонарності для вакансій:

$$\frac{dC_V(i)}{dt} = 0. \quad (2.6)$$

Квазістаціонарність вакансій ґрунтується на тому, що коефіцієнт дифузії вакансій на декілька порядків вищий за коефіцієнти дифузії основних компонентів.

Нові значення концентрацій, в кожному вузлі, знаходяться за допомогою ітераційної процедури, на кожному кроці по часу. Перетворивши рівняння (2.1) з урахуванням рівняння (2.6) отримаємо:

$$C_V^{iter+1}(i) = \frac{C_A(i) \cdot \sum_{k=1}^Z C_V^{iter}(k) \cdot \Gamma_{ik}^{AV} + C_B(i) \cdot \sum_{k=1}^Z C_V^{iter}(k) \cdot \Gamma_{ik}^{BV}}{\sum_{k=1}^Z (C_A(i) \cdot \Gamma_{ki}^{AV} + C_B(i) \cdot \Gamma_{ki}^{BV})}. \quad (2.7)$$

Ітераційний процес має тривати до поки не виконається умова збіжності $|\bar{C}^{iter+1} - \bar{C}^{iter}| < \varepsilon$, де ε має бути значно менше ніж значення середньої концентрації вакансій. Після ітераційної процедури отримані концентрації вакансій будуть використані в рівняннях (2.2) і (2.3).

Для виконання умови постійної суми концентрацій всіх компонентів, потрібно ввести процедуру нормування:

$$C_V^{iter+1}(i) = \frac{S_0}{S} \cdot C_V^{iter}(i), \quad S = \sum C_V^{iter+1}, \quad S_0 = \sum C_V^0, \quad (2.8)$$

де S_0 – це сума значень концентрацій вакансій заданих початковим розкидом. S – сума значень концентрацій вакансій після кожної ітерації. Відповідно середнє значення концентрації вакансій в системі буде константою [23].

2.2. Феноменологічна модель пороутворення

В моделі решіткового газу передбачається, що концентрація «сірих частинок» є відношенням кількості частинок даного сорту і загальної кількості вузлів:

$$C_V = \frac{N_V}{N_{sites}} \quad (2.9)$$

Суть «сірої частинки» полягає в тому, що у вузлі ґратки знаходиться не якийсь конкретний атом A чи B , чи вакансія, а є лише така ймовірність, що у вузлі може знаходитись якийсь із цих трох компонент.

Термодинаміка решіткового газу.

Вільна енергія Гіббса для системи буде [17]:

$$G = U - T \cdot S + p \cdot V, \quad (2.10)$$

де $F = U - T \cdot S$ – вільна енергія Гельмгольца. (2.11)

В якій $U = \frac{Z \cdot N}{2} \cdot \bar{\varphi}$ – потенціальна енергія, (2.12)

де

Z – координаційне число,

N – кількість атомів,

$\bar{\varphi}$ – середнє значення енергії взаємодії між двома атомами.

$$\bar{\varphi} = C_A \cdot C_A \cdot \varphi_{AA} + C_A \cdot C_V \cdot \varphi_{AV} + C_V \cdot C_A \cdot \varphi_{VA} + C_V \cdot C_V \cdot \varphi_{VV}, \quad (2.13)$$

Оскільки вакансія – це відсутність атома у вузлі кристалічної ґратки, тобто пустота, то логічно прийняти $\varphi_{AV} = 0$ і $\varphi_{VV} = 0$. Тобто

$$\bar{\varphi} = C_A \cdot C_A \cdot \varphi_{AA} = C_A^2 \cdot \varphi_{AA}, \quad (2.14)$$

C_A і C_V – концентрації атомів і вакансій відповідно, тобто $C_A + C_V = 1$.

$$\bar{\varphi} = (1 - C_V)^2 \cdot \varphi_{AA}, \quad (2.15)$$

де

φ_{AA} – енергія взаємодії найближчих сусідів А.

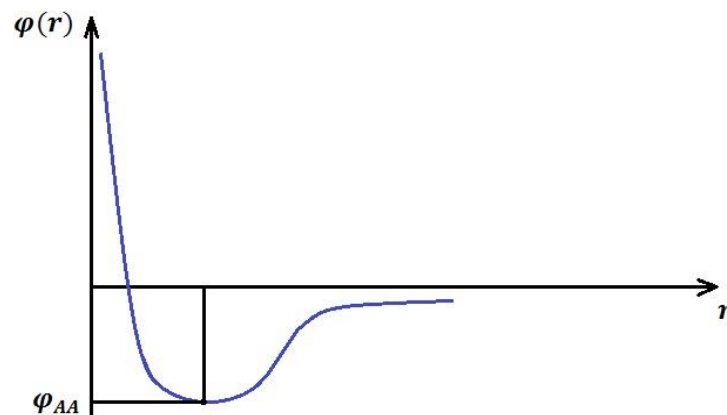


Рис.3.1. Енергія взаємодії найближчих сусідів А [17]

З іншого боку, ентропію можна знайти з рівняння Больцмана [17]:

$$\frac{S}{k_B} = \ln \frac{N!}{N_A! \cdot N_V!}. \quad (2.16)$$

Використавши формулу Стірлінга ($\ln N! \approx N \cdot \ln N - N$) для перетворення отримаємо:

$$\frac{S}{k_B} = -N \cdot (C_A \ln C_A + C_V \cdot \ln C_V). \quad (2.17)$$

Підставимо все у формулу (2.10)

$$G = \frac{Z \cdot N}{2} \cdot (1 - C_V)^2 \cdot \varphi_{AA} + k_B \cdot T \cdot N \cdot (C_A \ln C_A + C_V \cdot \ln C_V), \quad (2.18)$$

Поділивши потенціал Гіббса на кількість вакансій, отримаємо потенціал Гіббса на одну частинку:

$$\begin{aligned} \frac{G}{N} = g = \frac{Z}{2} \cdot (1 - C_V)^2 \cdot \varphi_{AA} + k_B \cdot T \\ \cdot ((1 - C_V) \ln(1 - C_V) + C_V \cdot \ln C_V). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Знайдемо I та II частинні похідні потенціалу Гіббса на одну частинку по концентрації вакансій:

$$\frac{\partial g}{\partial C_V} = -Z \cdot \varphi_{AA} \cdot (1 - C_V) - k_B \cdot T \cdot \ln \frac{1 - C_V}{C_V}, \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial C_V^2} = Z \cdot \varphi_{AA} + \frac{k_B \cdot T}{(1 - C_V) \cdot C_V}, \quad (2.21)$$

Очевидно, що

$$C_V \rightarrow 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 g}{\partial C_V^2} \rightarrow +\infty, \quad (2.22)$$

$$C_V = \frac{1}{2} \Rightarrow g'' = Z \cdot \varphi_{AA} + 4 \cdot k_B \cdot T > 0, \quad (2.23)$$

$$C_V \rightarrow 1 \Rightarrow \frac{\partial^2 g}{\partial C_V^2} \rightarrow +\infty, \quad (2.24)$$

$$C_V = \frac{1}{2} \Rightarrow g'' = Z \cdot \varphi_{AA} + 4 \cdot k_B \cdot T < 0. \quad (2.25)$$

Тобто маємо два випадки:

$$1. T > \frac{Z \cdot |\varphi_{AA}|}{4 \cdot k_B} \Rightarrow g'' > 0, \quad (2.26)$$

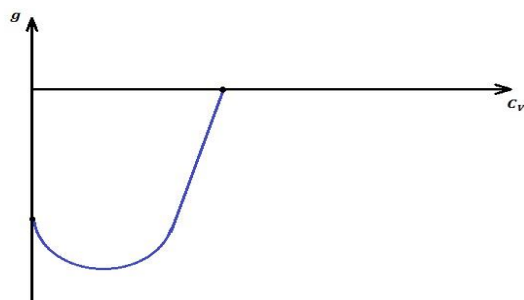


Рис.2.2. Залежність потенціалу Гіббса на одну частинку від концентрації вакансій при $g'' > 0$ [17]

$$2. T < \frac{Z \cdot |\varphi_{AA}|}{4 \cdot k_B} \Rightarrow g'' < 0, \quad (2.27)$$

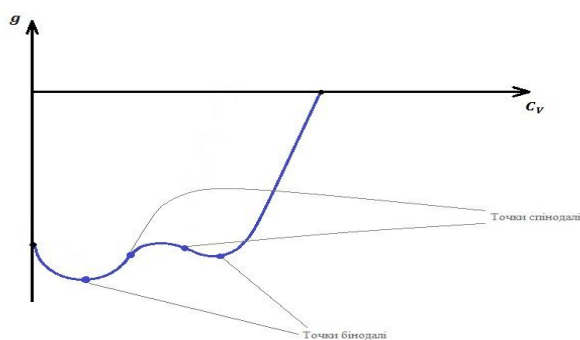


Рис.2.3. Залежність потенціалу Гіббса на одну частинку від концентрації вакансій при $g'' < 0$ [17]

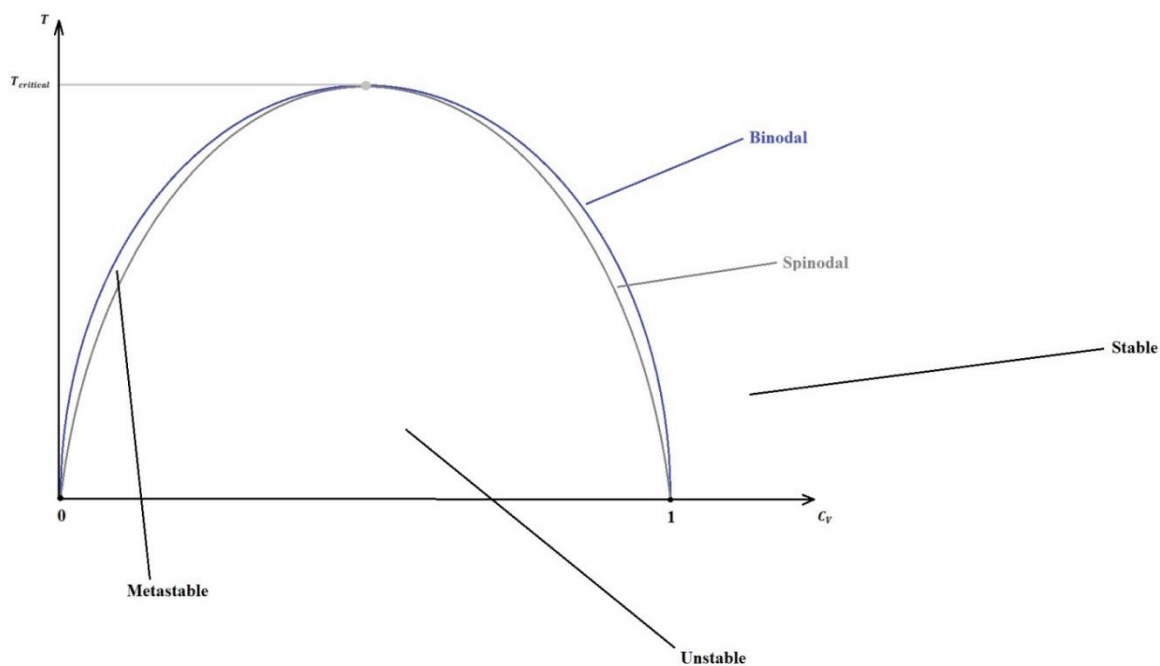


Рис.2.4. Фазова діаграма решіткового газу: купол розпаду [17]

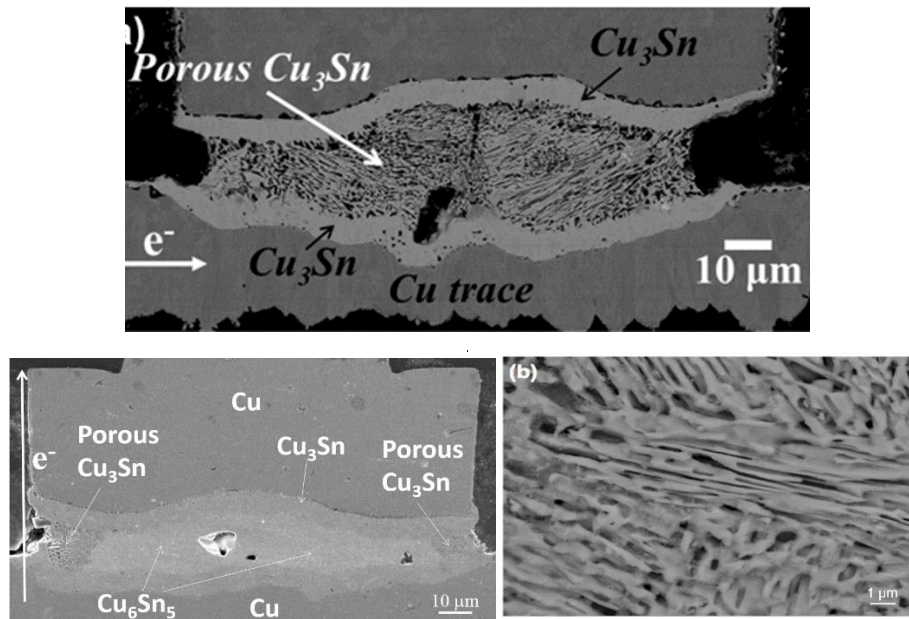


Рис.2.5. Приклад розпаду з утворенням пористої структури Cu_3Sn у системі Cu-Sn [15]

Бінодаль – це крива рівноваги фази сплаву. Тобто сплав з будь-якою концентрацією і температурою нижче бінодалі, нестійкий. Однак нестійкість може бути відносною (метастабільний стан) і абсолютною (абсолютно нестабільний стан). Точки між кривими спінодалі і бінодалі, відповідають метастабільним станам сплаву. Це означає, що ці сплави можуть існувати протягом тривалого часу, але все одно будуть розпадатись.

Концентрації спінодалі і бінодалі виражаються наступними рівняннями відповідно [16-17]:

$$C_V^{spinodal} = \frac{1}{2} \cdot \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{T}{T_{critical}}} \right), \quad (2.28)$$

$$\frac{T}{T_{critical}} = \frac{1 - 2 \cdot C_V^{binodal}}{\ln\left(\frac{1 - C_V^{binodal}}{C_V^{binodal}}\right)}, \quad (2.29)$$

де

$$T_{critical} = \frac{Z \cdot |\varphi_{AA}|}{4 \cdot k_B} - \text{критична температура.} \quad (2.30)$$

2.3. Комп'ютерна модель пороутворення

Маємо квадратну 2D-гратку розміром $N \times N$ (рис. 2.5.), в кожному вузлі якої знаходиться так званий «сірий атом».

Взагалі, суть «сірого атома» полягає в тому, що у вузлі ґратки знаходиться не якийсь конкретний атом A чи B , а лише є така ймовірність, що у вузлі може знаходитись якийсь із двох атомів. Ці ймовірності визначаються за допомогою генератора псевдовипадкових чисел, на проміжку від -1 до 1.

Дану модель, квазібінарний розпад в системі А-V, можна представити як чистий метал, в якому відбувається самодифузія за рахунок вакансій.

Модель була описана наступними рівняннями:

$$\frac{dC_V(I)}{dt} = -C_V(I) \cdot \sum_{I_n=1}^Z (C_A(I_n) \cdot \Gamma_{AV}^{I_n I}) + C_A(I) \cdot \sum_{I_n=1}^Z (C_V(I_n) \cdot \Gamma_{AV}^{II_n}), \quad (2.31)$$

з $\Gamma_{AV}^{I_n I} = \vartheta_D \cdot e^{\left(-\frac{E^S - E_{AV}^{I_n I}}{k \cdot T}\right)}$ ($\Gamma_{AV}^{II_n}$ – аналогічно) – ймовірності обміну вакансії V з атомом A ,

$$(2.32)$$

де

$$E_{AV}^{I_n I} = E_A(I_n) + E_V(I) = \sum_{I_{nn}=1}^Z C_A(I_{nn}) \cdot \varphi_{AA}, \quad (2.33)$$

$$E_{AV}^{II_n} = E_V(I_n) + E_A(I) = \sum_{I_n=1}^Z (1 - C_V(I_n)) \cdot \varphi_{AA}, \quad (2.34)$$

Тобто,

$$\Gamma_{AV}^{I_n I} = \vartheta_D \cdot e^{\left(\frac{\sum_{I_{nn}=1}^Z (1 - C_V(I_{nn})) \cdot \varphi_{AA}}{k \cdot T}\right)}, \quad (2.35)$$

$$\Gamma_{AV}^{II_n} = \vartheta_D \cdot e^{\left(\frac{\sum_{I_n=1}^Z (1 - C_V(I_n)) \cdot \varphi_{AA}}{k \cdot T}\right)}, \quad (2.36)$$

Тут φ_{AA} – енергія парної взаємодії, ϑ_D – частота Дебая, E^S – енергія сідлової точки.

Початковий розкид «сірих атомів» був здійснений за допомогою наступного виразу:

$$C_V(I) = \frac{1}{2} + \varepsilon \cdot (2 \cdot \text{random} - 1), \quad (2.37)$$

де $\varepsilon = 10^{-4}$.

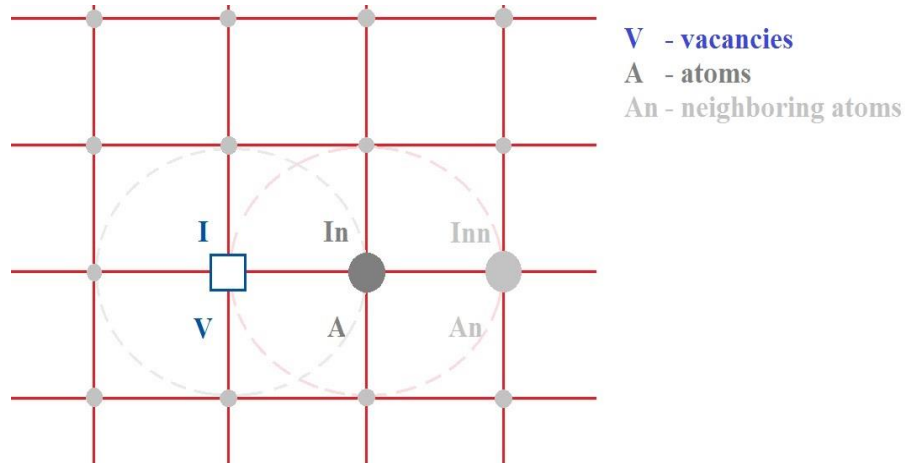


Рис.2.6. Схематичне зображення до рівняння (2.31)

Рівняння (2.31) є звичайним диференціальним рівнянням і перетворене за допомогою схеми Ейлера. До сторін ґратки застосовані періодичні граничні умови.

Результати моделювання пороутворення методом SKMF в квазібінарній системі A-V.

Використавши описані вище рівняння, було змодельовано процес розпаду в квазібінарній системі для квадратної ґратки ($Z = 4$) і, також, для її модифікації – трикутної ґратки ($Z = 6$). Модель була написана на мові C++ в середовищі DevC++. Для спрощення розрахунків, енергія в сідловій точці приймалася як $E^S = 0$. Температура в процесі моделювання $T = 550$ K. Частота спроб близька до частоти Дебая $\vartheta_D = 10^{13}$ Гц. Енергія парної взаємодії $\varphi_{AA} = -2 \cdot 10^{-20}$ Дж. Для візуалізації результатів моделювання використовувалася програма OVITO – Open Visualization Tool [7].

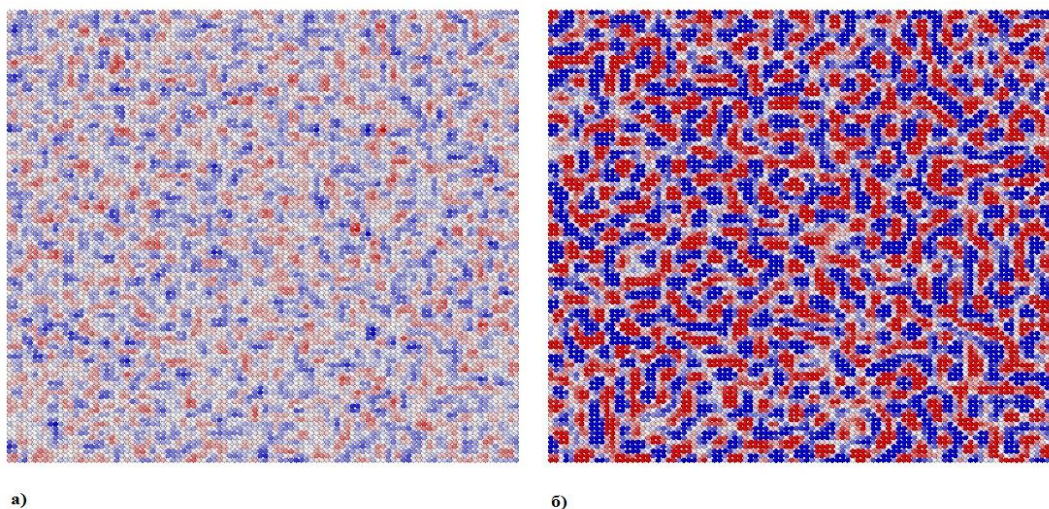


Рис.2.7. Розпад в квазібінарній системі $A - V$ на квадратній ґратці:
а) початковий розподіл вакансій, б) розподіл вакансій на 3500 ітерації

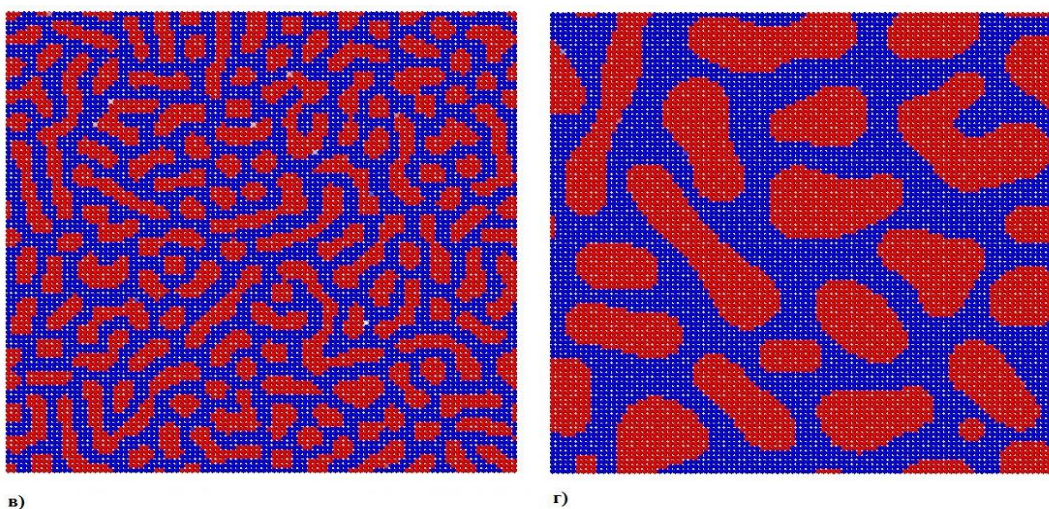


Рис.2.8. Розпад в квазібінарній системі $A - V$ на квадратній ґратці:
в) розподіл вакансій на 27000 ітерації, г) розподіл вакансій на 316500 ітерації

Також була виконана модифікація квадратної ґратки: перехід до трикутної двовимірної ґратки (рис. 2.7.). Це призводить до збільшення кількості сусідніх атомів, а отже і до збільшення точності обчислень. Тобто, якщо сусідніх атомів більше, то точніше описується взаємодія даного атома з його оточенням.

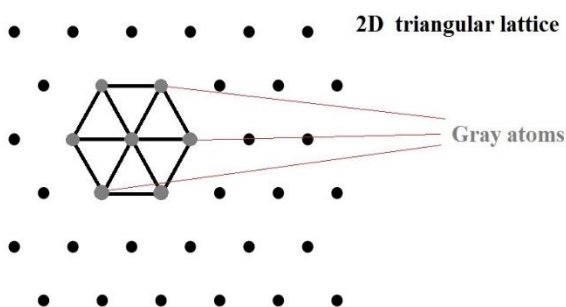


Рис.2.9. Трикутна 2D-гратка з вузлами, в яких знаходяться «сірі атоми». Координаційне число $Z = 6$

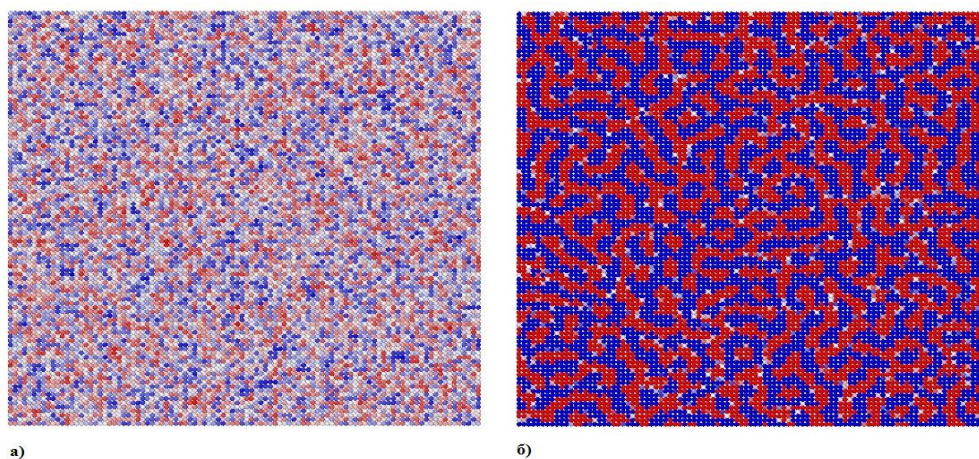


Рис.2.10. Розпад в квазібінарній системі $A - V$ на трикутній гратці:
а) початковий розподіл вакансій, б) розподіл вакансій на 34500 ітерації

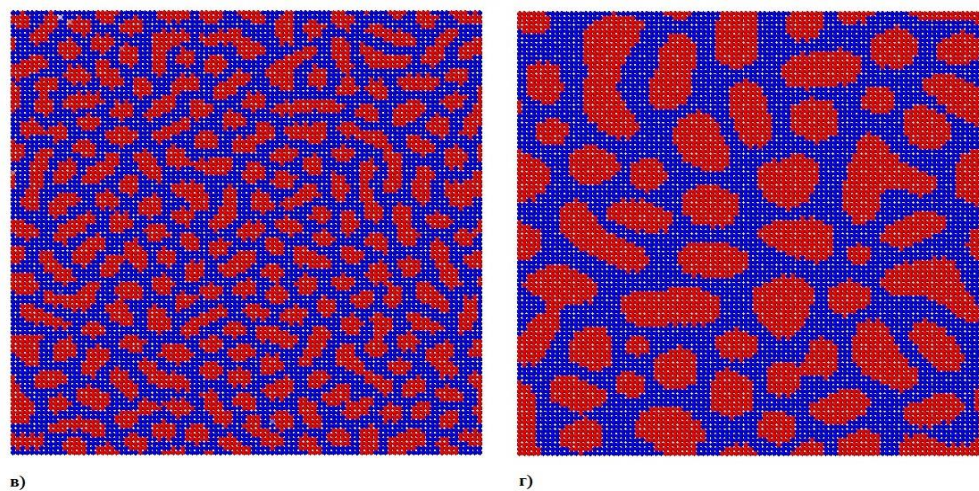


Рис.2.11. Розпад в квазібінарній системі $A - V$ на трикутній гратці:
в) розподіл вакансій на 118500 ітерації, г) розподіл вакансій на 629000 ітерації

Також було виконано перехід від двовимірної моделі до тривимірної моделі. Модель була виконана на граноцентрованій кубічній (ГЦК) гратці

($Z = 12$). Температура в процесі моделювання $T = 550$ К. Енергія парної взаємодії $\varphi_{AA} = -0.32 \cdot 10^{-20}$ Дж.

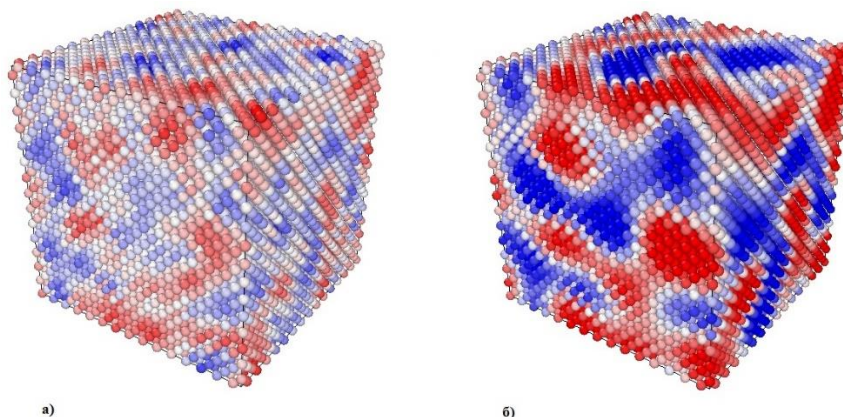


Рис.2.12. Розпад в квазібінарній системі $A - V$ на ГЦК гратці:
а) початковий розподіл вакансій, б) розподіл вакансій на 1200 ітерації

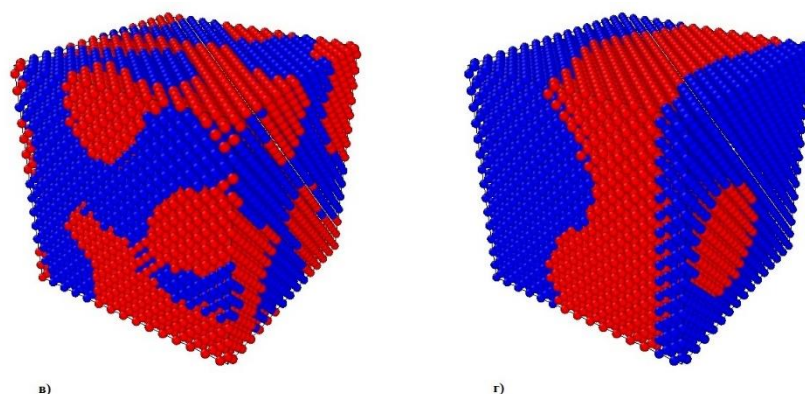


Рис.2.13. Розпад в квазібінарній системі $A - V$ на ГЦК гратці:
в) розподіл вакансій на 11650 ітерації, г) розподіл вакансій на 56300 ітерації

На рисунках видно, що в результаті розпаду, вакансії будуть групуватись. Тобто, якщо спочатку експерименту вони були рівномірно розподілені по всьому зразку, то під кінець експерименту вони будуть утворювати кластери. Якщо вакансії будуть формувати кластери, то це може призвести до утворення пор.

РОЗДІЛ 3

ЕЛЕКТРОМІГРАЦІЯ ВАКАНСІЙ

3.1. Електронний вітер і поняття ефективного заряду

Електронний вітер – це ефект «захоплення» сильним електричним струмом в провідниках донорного типу (металах або n-напівпровідниках) власних іонів і різних дефектів структури: домішкових атомів або іонів, вакансій, дислокацій тощо. Явище електронного вітру було відкрито в 1861 р М. Жірданіном. Причини виникнення електронного вітру схожі з причинами збудження звуку в металі електромагнітної хвилею і пояснюються порушенням локальної механічної рівноваги металу в електричному полі і перерозподілом імпульсу між електронами провідності і іонною ґраткою [23].

Електричне поле в провіднику викликає не тільки потік електронів, а й переміщення власних або домішкових іонів (електроліз). Існують дві причини руху іонів під дією електричного поля: кулонівська сила, що діє на їх заряди Z , і сила, що виникає внаслідок передачі імпульсу іонам при розсіюванні на них електронів провідності. Неоднорідне поле деформацій, що оточує дислокації, також розсіює електрони провідності, завдяки чому відбувається захоплення дислокацій спрямованим потоком електронів і виникає колективне переміщення іонного острову - рух дислокацій і відповідна пластична деформація (електропластичний ефект) [24].

Захоплення іонів і дислокацій.

Повна сила F , що діє на віддалений іон в металі у зовнішньому електричному полі E , складається з двох компонент:

$$F = Z_i + F_{ei}, \quad (3.1)$$

де Z_i – власний заряд іона; перший доданок в (3.1) описує кулонівську силу; другий доданок F_{ei} , виникає внаслідок розсіювання носіїв заряду на іоні. В рамках лінійної теорії електропровідності сила F_{ei} пропорційна густині електричного струму, а разом з нею і напруженості поля E . Це дозволяє ввести так званий заряд захоплення $Z_{ei} = \frac{F_{ei}}{E}$ і ефективний заряд Z_i^* іона:

$$F = Z_i^* \cdot E, \quad Z_i^* = Z_i + Z_{ei}, \quad (3.2)$$

$$\text{де } Z_{ei} = e \cdot (n_e \cdot l_e \cdot \sigma_{ie} - n_d \cdot l_d \cdot \sigma_{id}), \quad (3.3)$$

тут e – заряд електрона, n – концентрація носіїв у металі, l – довжина вільного пробігу носіїв, σ – перетин розсіювання носіїв на іоні. Індeksi e і d означають електрони і дірки відповідно [24].

3.2. Феноменологічний опис електроміграції атомів і вакансій

Електроміграція іонів в металах, як фізичне явище була відкрита в кінці 50-х років. Вона стала, практично, дуже важливою в зв'язку з розвитком інтегральних схем [10-14].

Електроміграція – це явище переносу речовини в провіднику за рахунок поступового дрейфу іонів, що виникає завдяки обміну імпульсом при зіткненнях між провідними носіями і атомною ґраткою. Цей ефект грає істотну роль в тих прикладних областях, де використовуються постійні струми великої густини – наприклад, в мікроелектроніці. Чим менше стають інтегральні схеми, тим більш помітну практичну роль відіграє цей ефект [20].

При досить високій температурі і густині струму, в металах, під впливом електричного поля, електрони зіштовхуються з атомами решітки і штовхають їх в сторону позитивно зарядженого електрода. Таким чином, в провіднику з'являються збіднені речовиною зони, внаслідок чого опір, а як наслідок, і густина струму в цій зоні істотно зростають, що призводить до ще більшого нагрівання цієї ділянки провідника. В результаті, ефект електроміграції може привести до часткового або повного руйнування провідника під впливом температури (плавлення металу) або через повне розмиття металу під впливом електроміграції (void - «порожнеча»). З іншого боку, речовина, що накопичилась може сформувати нове ненавмисне з'єднання (hillock - «горбок, купка»), що може призвести як до деградації продуктивності схеми (збільшення паразитних ємностей і перехресних перешкод), так і до короткого замикання [22].

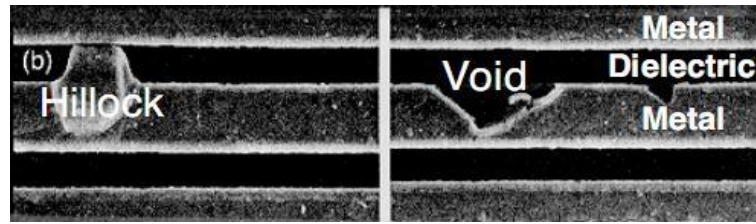


Рис.3.1. Ілюстрація пошкодження провідника під впливом ефекту електроміграції [22]

Баланс концентрації атомів.

Визначальне рівняння, яке описує еволюцію концентрації атомів, є звичайним (безперервність) рівнянням балансу маси:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0, \quad (3.4)$$

де $N(\vec{x}, t)$ – концентрація атомів в точці з координатами $\vec{x} = (x, y, z)$ в даний момент часу t , і J – це загальний потік атомів в цьому місці. Загальний потік атомів J являє собою поєднання потоків, викликаних різними силами атомної міграції. Основні сили викликані електричним струмом, градієнтами температури, механічним напруженням і концентраціями:

$$\vec{J} = \vec{J}_c + \vec{J}_T + \vec{J}_\sigma + \vec{J}_N. \quad (3.5)$$

Потоки, згадані вище, визначаються як:

$$\vec{J}_c = \frac{N \cdot eZ \cdot D \cdot \rho}{k_B \cdot T} \cdot \vec{j}, \quad (3.6)$$

де e – заряд електрона, eZ – це ефективний заряд мігруючого атома, ρ – питомий опір провідника, де відбувається міграція атома, \vec{j} – це локальна густина струму, k_B – стала Больцмана, T – абсолютна температура. $D(\vec{x}, t)$ – час і положення, які залежать від коефіцієнта дифузії.

$$\vec{J}_T = \frac{N \cdot D \cdot Q}{k_B \cdot T^2} \cdot \nabla T, \quad (3.7)$$

де Q – теплота термічної дифузії.

$$\vec{J}_\sigma = \frac{N \cdot D \cdot \Omega}{k_B \cdot T} \cdot \nabla H, \quad (3.8)$$

де $\Omega = \frac{1}{N_0}$ – атомний об'єм і N_0 – початкова концентрація атомів.

$H = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3}$ – гідростатичний тиск.

$$\vec{J}_N = -D \cdot \nabla N, \quad (3.9)$$

D можна виразити як функцію від гідростатичного тиску $D = D_0 \cdot e^{\frac{\Omega \cdot H - E_A}{k_B T}}$, де E_A – ефективна енергія активації теплової дифузії атомів металу. Концентрація вакансій представляє наявність порожніх вузлів решітки, які можуть бути зайняті мігруючим атомом [22].

3.3. Модифікація методу SKMF на випадок електричного поля

При моделюванні розпаду в квазібінарній системі $A - V$, ми не враховували електричне поле. Для забезпечення електричного поля, і, як наслідок, електроміграції вакансій, потрібно внести зміни у рівняння, які визначають ймовірності обміну вакансії V з атомом A (і навпаки): $\Gamma_{AV}^{InI} = \vartheta_D \cdot e^{\left(-\frac{E^S - E_{AV}^{InI}}{k \cdot T}\right)}$ (Γ_{AV}^{InI} – аналогічно), а саме: додається електрична складова

$$\Gamma_{AV}^{InI} = \vartheta_D \cdot e^{\left(-\frac{E^S - E_{AV}^{InI} + \Delta E^{elect}}{k \cdot T}\right)}, \quad (3.10)$$

де $\Delta E^{elect} = E_{after}^{elect} - E_{before}^{elect} = Z_A \cdot e \cdot \varphi_j - Z_A \cdot e \cdot \varphi_i = Z_A \cdot e \cdot (\varphi_j - \varphi_i) = -Z_A \cdot e \cdot (\vec{E} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)) = -Z_A \cdot e \cdot E_x \cdot (x_j - x_i)$, (3.11)

тут $Z_A \approx -10 \div -30$ – ефективний заряд, $E_x \sim 10^4 \div 10^5 \frac{B}{m}$ – проекція напруженості поля на вісь x , $e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл – заряд електрона, $(x_j - x_i)$ – відстань між даним вузлом та його сусідом.

Результати моделювання руху вакансій під дією електричного поля методом SKMF в квазібінарній системі A-V.

Використавши описані в розділі 4 рівняння, було змодельовано процес розпаду в квазібінарній системі для ГЦК ґратки ($Z = 12$). Для спрощення розрахунків, енергія в сідловій точці приймалася як $E^S = 0$. Температура в процесі моделювання $T = 550$ К. Частота спроб близька до частоти Дебая

$\vartheta_D = 10^{13}$ Гц. Енергія парної взаємодії $\varphi_{AA} = -0.32 \cdot 10^{-20}$ Дж, ефективний заряд $Z_A = -15$, проекція напруженості поля $E_x = 10^{+8} \frac{\text{В}}{\text{м}}$.

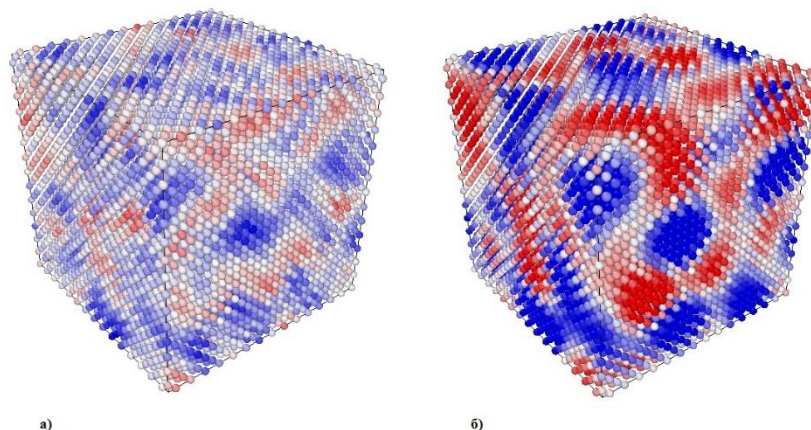


Рис.3.2. Розпад і електроміграція вакансій в квазібінарній системі $A - V$ на ГЦК гратці:
а) початковий розподіл вакансій, б) розподіл вакансій на 1450 ітерації

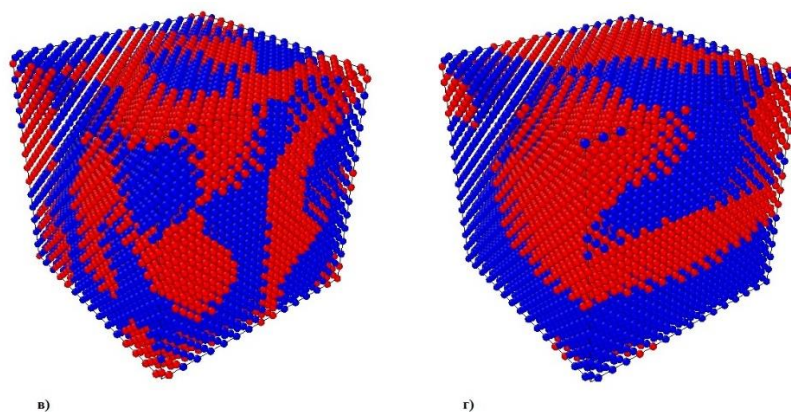


Рис.3.3. Розпад і електроміграція вакансій в квазібінарній системі $A - V$ на ГЦК гратці:
в) розподіл вакансій на 7700 ітерації, г) розподіл вакансій на 24950 ітерації

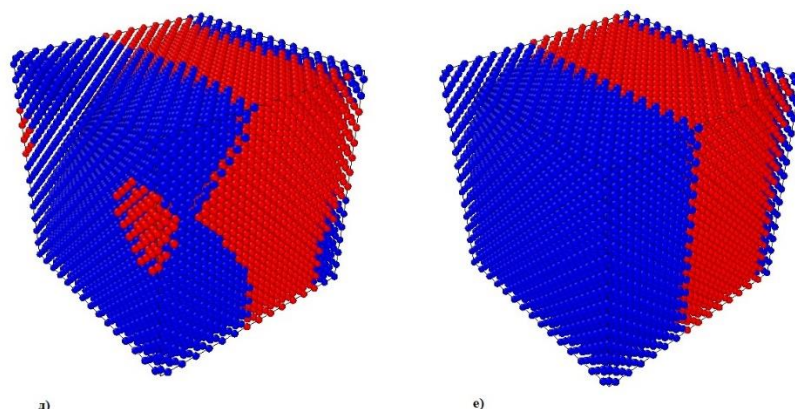


Рис.3.4. Розпад і електроміграція вакансій в квазібінарній системі $A - V$ на ГЦК гратці:
д) розподіл вакансій на 100100 ітерації, е) розподіл вакансій на 156750 ітерації

ВИСНОВКИ

В роботі за допомогою стохастичного кінетичного середньопольового методу було описано пороутворення і електроміграцію пор.

Результати роботи полягають у наступному:

1. Вивчено недавно створений метод моделюванн атомної міграції SKMF.
2. Проаналізовані особливості електроміграції та пороутворення і інтегральних мікросхемах.
3. Метод SKMF вперше узагальнено на ківазібінарну систему метал-вакансії.
4. Змодельовано перетворення пересиченого вакансіями металу на пористу структуру.
5. Змодельовано перерозподіл вакансій у електричному полі.
6. Проведена підготовка до моделювання утворення і руху пори в умовах струму з урахуванням перерозподілу електричних потенціалів в умовах атомної міграції.

Алгоритм методу SKMF був реалізований на мові C++, в середовищі DevC++, для візуалізації результатів моделювання використовувалася програма OVITO – Open Visualization Tool [7].

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Martin G. Atomic mobility in Cahn's diffusion model. / G. Martin // *Physical Review B* – 1990. - Vol. 41, №4. – P. 2279–2283.
2. Валерий А. Р. Успехи физических наук [Текст] / А. Р. Валерий // *Магнетизм и локальные молекулярные поля.* – 1972. - № 107. – С. 186-195.
3. Stochastic Kinetic Mean-Field [Электронный ресурс]:<http://skmf.eu/>
4. Zoltán Erdélyi, Mykola Pasichnyu, Volodymyr Bezpalychuk, János J. Tomán, Bence Gajdics, Andriy M. Gusak: Stochastic kinetic mean field model. *Computer Physics Communications* 204: 31-37 (2016).
5. F. Soisson, G. Martin, Monte Carlo simulations of the decomposition of metastable solid solutions: Transient and steady-state nucleation kinetics, *Phys. Rev. B* 62 (2000) 203–214.
6. В. М. Безпальчук, М. О. Пасічний, А. М. Гусак / Застосування стохастичного кінетичного середньопольового (SKMF) методу до впорядкування атомів заміщення в макро- та нанорозмірних ГЦК-гратницях,- *Строение и свойства наноразмерных и мезоскопических материалов*, 2016
7. Stukowski A. (2010). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 18, 015012
8. Mean-field and quasi-phase-field models of nucleation and phase competition in reactive diffusion / N.V. Storozhuk, K.V. Sopiga & A.M. Gusak Department of Physics, Cherkasy National University, Cherkasy, 18031, Ukraine Version of record first published: 29 Nov 2012.
9. Безпальчук Володимир Миколайович / Комп'ютерне моделювання спінодального розпаду та впорядкування кінетичним середньопольовим методом
10. Zaporozhets, T. V., Gusak, A. M., Tu, K. N., & Mhaisalkar, S. G. (2005). Three-dimensional simulation of void migration at the interface between thin metallic film and dielectric under electromigration. *Journal of applied physics*, 98(10), 103508.

11. Gusak, A. M., Zaporozhets, T. V., Lyashenko, Y. O., Kornienko, S. V., Pasichnyy, M. O., & Shirinyan, A. S. (2010). *Diffusion-controlled solid state reactions: in alloys, thin-films, and nanosystems*. John Wiley & Sons.
12. Vairagar, A. V., Mhaisalkar, S. G., Krishnamoorthy, A., Tu, K. N., Gusak, A. M., Zaporozhets, T., ... & Zschech, E. (2004, December). Study of electromigration induced void nucleation, growth, and movement in Cu interconnects. In P. S. Ho, S. P. Baker, & T. Nakamura (Eds.), *AIP Conference Proceedings* (Vol. 741, No. 1, pp. 135-147). AIP.
13. Gan, Z., Gusak, A. M., Shao, W., Chen, Z., Mhaisalkar, S. G., Zaporozhets, T., & Tu, K. N. (2007). Analytical modeling of reservoir effect on electromigration in Cu interconnects. *Journal of materials research*, 22(01), 152-156.
14. Zaporozhets, T. V., Sobchenko, I. V., & Gusak, A. (2005). 3D-Simulation of Void Formation, Growth and Migration under Electromigration. In *Defect and Diffusion Forum* (Vol. 237, pp. 1306-1311). Trans Tech Publications.
15. Gusak A. M., Chen C., Tu K. N. Flux-driven cellular precipitation in open system to form porous Cu₃Sn //Philosophical Magazine. – 2016. – Т. 96. – №. 13. – С. 1318-1331
- 16.. Turlo, V. V., Gusak, A. M., & Tu, K. N. (2013). Model of phase separation and of morphology evolution in two-phase alloy. *Philosophical Magazine*, 93(16), 2013-2025.
17. AM Гусак, АО Ковальчук/SOLID STATE PHYSICS: bilingual course
18. Zaporozhets, T. V., Gusak, A. M., Tu, K. N., & Mhaisalkar, S. G. (2005). Three-dimensional simulation of void migration at the interface between thin metallic film and dielectric under electromigration. *Journal of applied physics*, 98(10), 103508.
19. Gusak, A. M., Hodaj, F., & Zaporozhets, T. V. (2011). Thermodynamics of void nucleation in nanoparticles. *Philosophical Magazine Letters*, 91(12), 741-750
20. Electromigration [Электронный ресурс]: <https://en.wikipedia.org/wiki/Electromigration>
21. Фикс В. Б. Ионная проводимость в металлах и полупроводниках (Электроперенос), М., 1969

22. Gusak, A. M., Zaporozhets, T. V., Lyashenko, Y. O., Kornienko, S. V., Pasichnyy, M. O., & Shirinyan, A. S. (2010). *Diffusion-controlled solid state reactions: in alloys, thin-films, and nanosystems*. John Wiley & Sons.
23. Безпальчук, В. М., & Гусак, А. М. (2015). Узагальнення кінетичного середньопольового методу на вакансійний механізм і його застосування до опису спінодального розпаду. *Металлофізика и новейшие технологии*.
24. Електронний ветер [Електронний ресурс]:
http://www.femto.com.ua/articles/part_2/4703.html