УДК 621.315.592

ЭФФЕКТ ТЕНЗОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ ОБЩЕГО ТИПА

Л.В. Дехтярук, С.И. Проценко[1], А.Н. Чорноус[1]
Харьковский государственный технический университет строительства и архитектуры, г. Харьков, Украина;
[1] Сумский государственный университет, г. Сумы, Украина

Излагается теория тензочувствительности для многослойных поликристаллических пленочных структур, в которой учтено поверхностное и зернограничное рассеяние электронов. Рассмотрены предельные случаи, когда приведенная средняя длина свободного пробега $k_i>>1$ или $k_i<<1$. Приведены асимптотические выражения для коэффициентов продольной и поперечной тензочувствительности.

ВСТУПЛЕНИЕ

Исследованию эффекта тензочувствительности в многослойных пленках посвящено чрезвычайно мало работ. Исторически первой такой работой является [1] работа, в которой рассмотрен случай двухслойных монокристаллических пленок металлов. Впоследствии авторы [2] адаптировали основные соотношения работы [1] применительно к двухслойным поликристаллическим пленкам, по сути предложив полуфеноменологические соотношения для коэффициентов продольной и поперечной тензочувствительности. Однако соответствие экспериментальных и расчетных данных на основе соотношений [2] является плохим (расхождение до 100 %), поэтому имеется необходимость в разработке более общей и корректной теоретической модели для многослойных пленочных структур.

1. ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Рассмотрим периодическую многослойную структуру (МС), состоящую из чередующихся поликристаллических слоев металла разной толщины ($d_i \neq d_j$) и степени чистоты ($\lambda_{0i} \neq \lambda_{0j}$). Будем считать, что нормаль к границе раздела слоев параллельна оси X, а размеры слоев в направлениях осей Y и Z "бесконечны". Согласно стандартному определению [3], коэффициенты продольной γ_l и поперечной γ_t тензочувствительности равны:

$$\gamma_l = \frac{d\ln R}{d\ln l}, \quad \gamma_t = \frac{d\ln R}{d\ln a}, \tag{1}$$

$$R = \frac{b}{\sigma a d}. \tag{2}$$

Здесь R - сопротивление мультислоя; l, a, и $d=d_1+d_2$ - его длина, ширина и толщина элемента периодичности (фрагмента МС), σ – удельная проводимость многослойного образца, которая может быть рассчитана с помощью уравнения Больцмана и в рамках модели Маядаса и Шатцкеса (модель МШ) [4]:

$$\sigma = \frac{1}{d}\sum_{i=1}^{2} d_i \sigma_{0i} F_i, \tag{3}$$

где d_i – толщина i – го слоя МС, σ_{0i} - удельная электропроводность монокристаллического безграничного образца. Функция F_i, которая определяет влияние толщины слоев МС на ее проводимость, может быть записана в таком виде:

$$F_i = f(\alpha_i) - \langle G_i \rangle;$$

$$G_i = 1 - \frac{1}{\Delta}\left\{(1+P\varepsilon_i)(1+P\varepsilon_j) - Q^2\varepsilon_i\varepsilon_j\right\}\times$$

$$\times\left\{C_i(1-P\varepsilon_j) + Q\tau_{j,i}\varepsilon_j C_j\right\} \equiv 1 - \frac{AB_i}{\Delta},$$

где $C_i = P(1-\varepsilon_i) + Q\tau_{j,i}(1-\varepsilon_j)$;

$$\Delta = 1 - P^2(\varepsilon_i^2 + \varepsilon_j^2) - 2Q^2\varepsilon_i\varepsilon_j + (Q^2 - P^2)^2\varepsilon_i^2\varepsilon_j^2.$$

$$\varepsilon_i = \exp\left\{-\frac{k_i H_i}{x}\right\}; \quad H_i = 1 + \frac{\alpha_i}{\cos\varphi\sqrt{1-x^2}};$$

$$\tau_{j,i} = \frac{\tau_{0j}}{\tau_{0i}}\frac{H_i}{H_j} \equiv \tau_{0j,i}H_{i,j};$$

$$\langle \ldots \rangle = \frac{6}{\pi k_i}\int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^2\varphi \int_0^1 dx \frac{(x-x^3)(1-\varepsilon_i)}{H_i^2(x,\varphi)}\left\{ \ldots \right\}.$$

Здесь P - вероятность зеркального отражения носителей заряда межслойной границей; Q – вероятность прохождения электрона в соседний слой МС без рассеяния, так что $P+Q \leq 1$, $\alpha_i = \frac{\lambda_{0i}}{L_i}\frac{R_i}{1-R_i}$ – параметр, который, с одной стороны, определяет структуру образца (в зависимости от соотношения между длиной свободного пробега электронов λ_{0i} и средним размером кристаллитов в плоскости образца L_i), с другой –

характер взаимодействия носителей заряда с межкристаллитными границами, так как R_i определяет вероятность рассеяния носителей заряда на границе зерна.

Функция $f(\alpha_i)$ описывает проводимость безграничного образца с поликристаллической структурой и в рамках модели МШ имеет вид [4]:

$$f(\alpha_i) = 1 - \frac{3}{2}\alpha_i + 3\alpha_i^2 - 3\alpha_i^3 \ln\left(1 + \frac{1}{\alpha_i}\right) \cong$$

$$\cong \begin{cases} 1 - 3\alpha_i + 3\alpha_i^2, & \alpha_i << 1; \\ \dfrac{3}{4\alpha_i} - \dfrac{3}{5\alpha_i^2}, & \alpha_i >> 1. \end{cases}$$

Если многослойный образец состоит из чередующихся толстых или тонких слоев металла, когда приведенная толщина $k_i = \dfrac{d_i}{\lambda_{0i}} >> 1$ или $k_i << 1$ соответственно, то коэффициент удельной электропроводности будет определяться формулой (3), в которой функция F_i в двух предельных случаях имеет такой вид.

1. Слои в МС толстые $(k_i >> 1)$:

$$F_i = f(\alpha_i) - \frac{3}{8k_i}\{(1-P)\Gamma_{1,i} - Q\tau_{0j,i}\Gamma_{2,i}\},$$

$$\Gamma_{1,i} = 1 - \frac{32}{3\pi}\alpha_i + 12\alpha_i^2 + \frac{80}{\pi}\alpha_i^3 -$$

$$- 40\alpha_i^4 - \frac{16}{\pi}\alpha_i(4 - 5\alpha_i)I_i;$$

$$\Gamma_{2,i} = 1 - \frac{16}{3\pi}\left\{\alpha_i + \alpha_j + \frac{3\pi}{4}\left(\alpha_i^2 + \alpha_i\alpha_j + \alpha_j^2\right) - \right.$$

$$- 3\left(\alpha_i^3 + \alpha_i^2\alpha_j + \alpha_i\alpha_j^2 + \alpha_j^3\right) +$$

$$+ \frac{3\pi}{2}\left(\alpha_i^4 + \alpha_i^3\alpha_j + \alpha_i^2\alpha_j^2 + \alpha_i\alpha_j^3 + \alpha_j^4\right) +$$

$$\left. + \frac{3}{\alpha_i - \alpha_j}\left[\alpha_i^4\left(1 - \alpha_i^2\right)I_i - \alpha_j^4\left(1 - \alpha_j^2\right)I_j\right]\right\};$$

$$I_i = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{1-\alpha_i^2}} \ln\dfrac{1 + \sqrt{1-\alpha_i^2}}{\alpha_i}, & \alpha_i \le 1; \\ \dfrac{\arccos\left(\dfrac{1}{\alpha_i}\right)}{\sqrt{\alpha_i^2 - 1}}, & \alpha_i > 1. \end{cases}$$

2. Слои в МС тонкие $(k_i << 1)$:

$$F_i \cong \frac{3}{4}\frac{1 - P^2 + Q^2 + 2Qd_{j,i}}{(1-P)^2 - Q^2}k_i \times$$

$$\times \begin{cases} \ln\dfrac{1}{k_i}, & \alpha_i \le k_i; \\ \ln\dfrac{1}{k_i} - \dfrac{4}{\pi}\alpha_i, & k_i < \alpha_i << 1; \\ \ln\dfrac{1}{\alpha_i k_i}, & 1 < \alpha_i << \dfrac{1}{k_i}, \end{cases}$$

где $d_{j,i} = d_j/d_i$ - отношение толщины соседних слоев мультислоя.

2. КОЭФФИЦИЕНТ ПРОДОЛЬНОЙ ТЕНЗОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ

Подставляя выражения для электропроводности (3) в соотношения сопротивления R (2), а полученный результат в формулу для γ_l (1), получим общее аналитическое выражение для коэффициента продольной тензочувствительности мультислоя с поликристаллической структурой:

$$\gamma_l = \sum_{i,j}\frac{1}{1 + R_{j,i}}\left\{\gamma_{0il} - \left(\eta_{\lambda_0 il} - \mu_{fi}\right)\frac{\partial \ln F_i}{\partial \ln k_i} - \right.$$

$$\left. - \left(\eta_{\lambda_0 jl} - \mu_{fj}\right)\frac{\partial \ln F_i}{\partial \ln k_j}\right\} -$$

$$- \left(\mu_{fi} - \eta_{\lambda_0 il}\right)\frac{\partial \ln F_i}{\partial \ln \alpha_i} - \left(\mu_j - \eta_{\lambda_0 jl}\right)\frac{\partial \ln F_i}{\partial \ln \alpha_j} - \tag{4}$$

$$\left. - \left(\eta_{\lambda_0 il} - \eta_{\lambda_0 jl}\right)\frac{\partial \ln F_i}{\partial \ln \tau_{0j,i}}\right\},$$

где $i \ne j = 1,2;$, $\eta_{\lambda_0 il} = -\dfrac{d\ln\lambda_{0i}}{d\ln l}$,

$\mu_{fi} = -\dfrac{d\ln d_i}{d\ln l} = -\dfrac{d\ln L_i}{d\ln l}$ - коэффициент Пуассона i-го слоя (отметим, что здесь и ниже нами допускается приближенное равенство $\mu_f = \dot{\mu}_f = -\dfrac{d\ln d}{d\ln l}$, где $\dot{\mu}_f$ - приведенный коэффициент Пуассона). Функция R_{ij} в формуле (4) равна:

$$R_{j,i} = \frac{d_j \sigma_{0j} F_j}{d_i \sigma_{0i} F_i}.$$

Коэффициент продольной тензочувствительности безграничного образца с монокристаллической структурой равен [3]:

$$\gamma_{0l} = \eta_{\lambda_0 i} + 2(1 + \mu_{fi}).$$

Подставляя в формулу (4) функцию F_i в виде $F_i = f(\alpha_i) - \langle G_i \rangle$, для коэффициента продольной тензочувствительности мультислойного образца получим следующее точное (в рамках данной модели) выражение:

$$\gamma_1 = \sum_{i,j}{}' \frac{1}{1+R_{j,i}} \left\{ \gamma_{\lambda_0 il} - M_i \right\}, \tag{5}$$

где $M_i = \frac{1}{F_i} \left\{ \left(\eta_{\lambda_0 il} - \mu_{fi} \right) J_{di} - \left(\eta_{\lambda_0 jl} - \mu_{fj} \right) J^*_{di} - \right.$

$$- \left(\mu_{fi} - \eta_{\lambda_0 il} \right) J_{\alpha i} - \left(\mu_{fj} - \eta_{\lambda_0 jl} \right) J^*_{\alpha i}$$

$$\left. - \left(\eta_{\lambda_0 il} - \eta_{\lambda_0 jl} \right) J_{\tau i} \right\};$$

$$J_{di} = \left\langle G_i - \frac{k_i \varepsilon_i H_i}{x} \left\{ G_i (1-\varepsilon_i)^{-1} - \Theta_i \right\} \right\rangle;$$

$$J^*_{di} = \left\langle \frac{k_j \varepsilon_j H_j}{x} \Theta^*_i \right\rangle;$$

$$J_{\alpha i} = f^*(\alpha_i) + \left\langle \frac{k_i \varepsilon_i}{x} (H_i - 1) \times \right.$$

$$\left. \times \left\{ G_i (1-\varepsilon_i)^{-1} - \Theta_i - \frac{x}{k_i \varepsilon_i H_i} \left(\Lambda_i + 2G_i \right) \right\} \right\rangle;$$

$$J^*_{\alpha i} = \left\langle \frac{k_j \varepsilon_j}{x} (H_j - 1) \left\{ \Theta^*_i + \frac{x}{k_j \varepsilon_j H_j} \Lambda_i \right\} \right\rangle;$$

$$J_{\tau i} = \left\langle \Lambda_i \right\rangle;$$

$$f^*(\alpha_i) = \frac{3}{2}\alpha_i - \frac{3\alpha_i^2 (2+3\alpha_i)}{1+\alpha_i} + 9\alpha_i^3 \ln\left(1 + \frac{1}{\alpha_i} \right) \cong$$

$$\cong \begin{cases} \frac{3}{2}\alpha_i - 6\alpha_i^2 & \alpha_i << 1; \\ \frac{3}{4\alpha_i} - \frac{6}{5\alpha_i^2} & \alpha_i >> 1. \end{cases}$$

Угловые скобки определены выше после формулы (4), а функции Θ_i, Θ^*_i і Λ_i равны:

$$\Theta_i = \left\{ P\left(A - B_i \right) + \left(Q^2 - P^2 \right)\left(A + B_i \right)\varepsilon_j \right\} \Delta^{-1} - B_i T_i;$$

$$\Theta^*_i = \left\{ A\left(\left(Q^2 - P^2 \right)\left(1 - \varepsilon_i \right) - Q\tau_{j,i} \right) + \right.$$

$$\left. + B_i \left(P - \left(Q^2 - P^2 \right)\varepsilon_i \right) \right\} \Delta^{-1} + B_i T_j;$$

$$T_i = 2A \left\{ P^2 \varepsilon_i + Q^2 \varepsilon_j - \left(Q^2 - P^2 \right)^2 \varepsilon_i \varepsilon_j^{\,2} \right\} \Delta^{-2};$$

$$\Lambda_i = Q\tau_{j,i} (1-\varepsilon_j) A \Delta^{-1}.$$

Если мультислой состоит из чередующихся слоев металла, разделенных диэлектрической прослойкой (Q=0), то функции $F_i, J_{di}, J^*_{di}, J_{\alpha i}, J^*_{\alpha i}, J_{\tau i}$ в каждом из слоев МС не зависят от параметров характеризующих соседний слой образца, а параметр P имеет смысл параметра зеркальности Фукса [4]. В этом случае МС формально можно рассматривать как поликристаллический слой металла, внешние границы которого рассеивают носители заряда с эффективным параметром зеркальности $q_{эф} = P$, а коэффициент продольной тензочувствительности МС будет совпадать с коэффициентом продольной тензочувствительности тонкой поликристаллической пластины. При отсутствии рассеяния электронов на границе раздела слоев (P+Q=1), одинаковой степени концентрации дефектов в слоях металла ($\lambda_{0i} = \lambda_{0j}$) и одинаковой структуре слоев $\left(\alpha_i = \alpha_j \right)$ коэффициент продольной тензочувствительности МС будет совпадать со своим объемным значением, и мультислой формально можно рассматривать как объемный поликристаллический образец. В том случае, когда мультислой состоит из слоев металла одинаковой толщины $(d = d_i = d_j)$, одинаковой степени чистоты слоев $(\lambda_0 = \lambda_{0i} = \lambda_{0j})$ и при одинаковой их структуре $\left(\alpha_i = \alpha_j \right)$, мультислой формально можно рассматривать как тонкую поликристаллическую пластину, внешние границы которой рассеивают носители заряда с эффективной вероятностью $q_{эф} = P + Q$, а величина γ_1 МС будет совпадать с коэффициентом продольной тензочувствительности поликристаллического слоя металла.

Полученное точное выражение (5) для величины γ_1 многослойной поликристаллической структуры может быть упрощено для предельных случаев толстых $(k_i >> 1)$ и тонких $(k_i << 1)$ слоев, из которых состоит МС. Если $k_i >> 1$, то коэффициент продольной тензочувствительности для произвольных значений P, Q и α_i снова определяется формулой (5), в которой функции $J_{di}, J^*_{di}, J_{\alpha i}, J^*_{\alpha i}$ и $J_{\tau i}$ могут быть записаны в виде:

$$J_{di} = F_i - f(\alpha_i) = \frac{3}{8k_i} \left\{ (1-P)\Gamma_{1,i} - Q\tau_{0j,i}\Gamma_{2,i} \right\},$$

$$J_{\alpha i} = f^*(\alpha_i) - \frac{6\alpha_i}{\pi k_i} \left\{ 2(1-P)\Gamma_{3,i} - Q\tau_{0j,i}\Gamma_{4,i} \right\},$$

$$J^*_{di} = 0;\ J^*_{\alpha i} = \frac{6\alpha_j}{\pi k_i} Q\tau_{0j,i}\Gamma_{5,i};\ J_{\tau i} = \frac{6}{\pi k_i} Q\tau_{0j,i}\Gamma_{2,i};$$

$$\Gamma_{3,i} = \frac{1}{3} \left\{ 1 - \frac{9\pi}{4}\alpha_i - 30\alpha_i^2 + 15\pi 5_i^3 + \right.$$

$$\left. + 6\alpha_i^2 \left(3 - 5\alpha_i^2 \right) I_i + \frac{3\alpha_i^2 \left(1 - \alpha_i^2 I_i \right)}{2\left(1 - \alpha_i^2 \right)} \right\};$$

$$\Gamma_{4,i} = \frac{1}{3} \left\{ 1 - 3\left(\alpha_i + \alpha_j \right)^2 - 6\alpha_i^2 + \frac{3\alpha_i^3}{\alpha_j - \alpha_i} + \right.$$

$$+ 3\pi\pi_i^2\alpha_j - \frac{3\pi}{2}\left(2\alpha_i - \alpha_j \right)\left(1 - 2\alpha_j^2 - 4\alpha_i^2 \right) -$$

$$- \frac{3\alpha_i^3 I_i}{\left(\alpha_j - \alpha_i \right)^2} \left(4\alpha_j - 3\alpha_i - 5\alpha_i^2\alpha_j + 4\alpha_i^3 \right) +$$

$$\left. + \frac{3\alpha_j^4 \left(1 - \alpha_j^2 \right)}{\left(\alpha_j - \alpha_i \right)^2} I_j \right\}. \tag{6}$$

Величина $\Gamma_{5,i}$ определяется формулой (6), в которой нужно сделать замену $i \to j$ и $j \to i$.

Для предельных значений параметра α_i, т.е. когда $\alpha_i << 1$ либо $\alpha_i >> 1$, коэффициент продольной тензочувствительности мультислоя равен:

$$\gamma_l = \sum_{i,j} \frac{1}{1+R_{j,i}} \left\{ \gamma_{0il} - \left(\mu_{fi} - \eta_{\lambda_0 il} \right) \frac{3}{2} \alpha_i - \frac{3}{16 k_i} [\ldots] \right\} \qquad (7)$$

Значения $\alpha_i << 1$ соответствует ситуация когда МС состоит из поликристаллических слоев с большими кристаллитами ($L_i >> \lambda_{0i}$) либо межкристаллитные границы в металлическом слое практически прозрачны для электронов ($R_i << 1$). Если же параметр $\alpha_i >> 1$, то слои МС имеют мелкозернистую структуру ($L_i << \lambda_{0i}$) либо границы зерен в слое почти не прозрачные для носителей заряда ($1 - R_i << 1$).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Если слои d_i МС тонкие $(k_i << 1)$, то для величины γ_l могут быть получены следующие приближенные выражения при произвольном соотношении соседних слоев $d_{j,i}$ многослойного образца:

$$\gamma_l = \sum_{i,j} \frac{1}{1+R_{j,i}} \left\{ \gamma_{0il} - \left(\eta_{\lambda_0 il} - \mu_{fi} \right) \left(1 - \ln^{-1} \frac{1}{k_i} \right) \right\}, \qquad (8)$$

$$\alpha_i \le k_i;$$

$$\gamma_l = \sum_{i,j} \frac{1}{1+R_{j,i}} \left\{ \gamma_{0il} - \eta_{\lambda_0 il} + \mu_{fi} + \frac{\eta_{\lambda_0 il} - \mu_{fi} + \left(\mu_{fi} - \eta_{\lambda_0 il} \right) \frac{4}{\pi} \alpha_i}{\ln \frac{1}{k_i} - \frac{4}{\pi} \alpha_i} \right\}, \qquad (9)$$

$$k_i < \alpha_i << 1;$$

$$\gamma_l = \sum_{i,j} \frac{1}{1+R_{j,i}} \left\{ \gamma_{0il} - \eta_{\lambda_0 il} + \mu_{fi} + \frac{\mu_{fi} (\mu_s - \mu_{fi})(1 - \mu_{fi})^{-1}}{\ln \frac{1}{\alpha_i k_i}} \right\}, \qquad (10)$$

$$1 < \alpha_i << \frac{1}{k_i}$$

Точное и асимптотические соотношения для коэффициента поперечной тензочувствительности γ_t мультислоя с поликристаллической структурой можно получить с соответствующих формул для коэффициента продольной тензочувствительности (5), (7) – (10), если в них сделать следующие замены $\eta_{\lambda_0 il} \to \eta_{\lambda_0 it}$ и $\gamma_{0il} \to \gamma_{0it}$. Отметим также, что коэффициент продольной тензочувствительности γ_{0it} для массивного монокристаллического образца, согласно [1], равен $\gamma_{0it} = \eta_{\lambda_0 it}$.

Экспериментальная проверка предложенной модели будет осуществлена в последующей нашей работе.

Авторы выражают благодарность проф. Ю.А.Колесниченко и проф. И.Е.Проценко за обсуждение результатов этой работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. F.Khater, M.El-Hiti // phys. stat. sol.(a). 1988, V.108, №1, p.241-249.

2. А.И. Кузьменко, С.В.Петренко, И.Е.Проценко // ВАНТ. 1990, №2 (10), с.87-89.

3. З.Г. Мейксин. Несплошные керментные пленки // Физика тонких пленок. Том VIII. Москва: «Мир», 1978, с.106 – 179.

4. A.F.Mayadas, M. Shatzkes. // Phys. Rev. B.: Cond. Matter. 1970, V.1, № 4, p.1382-1389.

THE EFFECT OF TENSOSENSENSIBILITY IN POLYCRYSTALLINE MULTILAYER STRUCTURES OF GENERAL TYPE

L.V. Dehtyaruk, S.I. Procenko[1], A.N. Chornous[1]
Kharkiv State Technical University of Building and Architecture, Kharkiv, Ukraine
[1] Sumy State University, Sumy, Ukraine

Theory for the coefficient of longitudinal tensosensibility for polycrystalline multilayer structures of general type has been developed. The theory takes into consideration as the scattering of conductivity electrons on external surfaces of separate layers and crystalline boundaries. The case of $k_i = \frac{d_i}{\lambda_{0i}} >> 1$ *and* $k_i << 1$ *are considering.*