УДК 535.24.2

ПРО МОЖЛИВІСТЬ МАКРОСКОПІЧНОЇ АПРОКСИМАЦІЇ МІКРОСКОПІЧНОЇ МОДЕЛІ Р.ДІММІХА

Л.В.Однодворець, ст.викл.; С.І.Проценко, студ.; А.М.Чорноус, доц.

ВСТУП

Питання про розмірну і температурну залежність електричного опору багатошарових плівкових систем перебуває постійно у полі зору інженерів мікроелектронної техніки та дослідників фундаментальних властивостей зразків малої товщини (плівки, фольги, тонкі дроти та ін.).

Незважаючи на те, що в експериментальному відношенні це питання достатньо вивчене (див., наприклад, роботи [1-4] та літературу, яка в них цитується), теоретично залишається актуальним питання розробки теоретичних моделей, які хоча б якісно узгоджувалися із експериментальними даними. У попередніх роботах розглянуто послідовні і відомі теоретичні моделі для термічного коефіцієнта опору (ТКО) двошарових плівкових систем [5-7]. У цих та багатьох інших роботах, які не цитуються, нами була здійснена апробація більш простої у математичному відношенні моделі Р.Дімміха [5].

У найбільш загальному вигляді співвідношення Р.Дімміха для ТКО двошарової плівки має такий вигляд:

$$\beta = A_1\left[\beta_{g1}\left(1-\frac{d\ln F_1}{d\ln k_1}-\frac{d\ln F_1}{d\ln l_1}+\frac{d\ln F_1}{d\ln a}\right)-\beta_{g2}\left(\frac{d\ln F_1}{d\ln k_2}+\frac{d\ln F_1}{d\ln l_2}+\frac{d\ln F_1}{d\ln a}\right)\right]+$$
$$+A_2\left[\beta_{g2}\left(1-\frac{d\ln F_2}{d\ln k_2}-\frac{d\ln F_2}{d\ln l_2}-\frac{d\ln F_2}{d\ln a}\right)-\beta_{g1}\left(\frac{d\ln F_2}{d\ln k_1}+\frac{d\ln F_2}{d\ln l_1}-\frac{d\ln F_2}{d\ln a}\right)\right], \quad (1)$$

де $A_i = \dfrac{d_i \cdot \sigma_{gi} \cdot F_i}{d_1 \cdot \sigma_{g1} \cdot F_1 + d_2 \cdot \sigma_{g2} \cdot F_2}$ (i=1, 2), d_i - товщина i-го шару; $F_i = \dfrac{\sigma_i}{\sigma_{gi}}$ - функція Фукса (σ_i - питома провідність i-го шару; σ_{gi} - те ж саме при $d \to \infty$); $k_i = \dfrac{d_i}{\lambda_{gi}}, l_i = \dfrac{L_i}{\lambda_{gi}}$ - зведена товщина і середній розмір кристалітів в i-му шарі (λ_g - середня довжина вільного пробігу електрона в об'ємі плівки, L - середній розмір кристалітів); β_{gi} - ТКО при $d_i \to \infty$, тобто для масивних зразків з такими ж фізико-хімічними властивостями, як і тонка плівка; $a = \dfrac{\lambda_{g1} \cdot H_2(\alpha) m_2^*}{\lambda_{g2} \cdot H_1(\alpha) m_1^*}$ ($H_i(\alpha)$ - відома функція; m_i^* - ефективна маса електрона).

При спробі порівняння співвідношення (1) з експериментальними даними автори [2-4] припускали, що похідні $\dfrac{d\ln F_1}{d\ln a}$ та $\dfrac{d\ln F_2}{d\ln a} \cong 0$, оскільки параметр a можна вважати константою. Відносно перехресних похідних у роботах [2-4] припускалося, що коефіцієнт проходження електронами межі двох плівок дорівнює нулю, і, як наслідок цього, ці похідні також прирівнювалися до нуля. Така процедура допомагала спростити (1) до такого вигляду, який дозволяє провести порівняння з експериментом:

$$\beta = A_1\left[\beta_{g1}\left(1-\frac{d\ln F_1}{d\ln k_1}-\frac{d\ln F_1}{d\ln l_1}\right)\right]+A_2\left[\beta_{g2}\left(1-\frac{d\ln F_2}{d\ln k_2}-\frac{d\ln F_2}{d\ln l_2}\right)\right]. \quad (1')$$

Підкреслимо, що в роботах [2-4] похідні в правій частині (1′) визначалися шляхом графічного диференціювання залежності $\ln\left(\sigma_i \cdot \sigma_{gi}{}^{-1}\right)$ від $\ln\left(d_i \cdot \lambda_{gi}{}^{-1}\right)$ або $\ln\left(L_i \cdot \lambda_{gi}{}^{-1}\right)$. За невеликим винятком, експериментальні та розрахункові результати відрізнялися більше ніж на 50%, що дозволяло говорити лише про якісне узгодження моделі Р.Дімміха з експериментальними результатами. Відзначимо також, що неможливо одержати у мікроскопічному наближенні явний вигляд похідних $\frac{d\ln F_i}{d\ln k_k}$ та $\frac{d\ln F_i}{d\ln l_k}$ $\left(i \neq k; i,k = 1{,}2\right)$, хоча у макроскопічному наближенні це здійснити відносно легко.

АПРОКСИМАЦІЙНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

Для знаходження перехресних похідних необхідно враховувати, що вираз для ТКО можна записати як у макроскопічному ($\beta_i = -\frac{1}{\sigma_i}\cdot\frac{\partial\sigma_i}{\partial T}$), так і у мікроскопічному ($\beta_i = -\frac{1}{\lambda_i}\cdot\frac{\partial\lambda_i}{\partial T}$ або $\beta_{gi} = -\frac{1}{\lambda_i}\cdot\frac{\partial\lambda_{gi}}{\partial T}$) наближеннях. Крім цього, подамо похідні $\frac{d\ln F_i}{d\ln k_k}$ та $\frac{d\ln F_i}{d\ln l_k}$ таким чином:

$$\frac{d\ln F_i}{d\ln k_k}=\frac{d\ln F_i}{d\ln k_i}\frac{d\ln k_i}{d\ln k_k} \text{ та } \frac{d\ln F_i}{d\ln l_k}=\frac{d\ln F_i}{d\ln l_i}\frac{d\ln l_i}{d\ln l_k}. \quad (2)$$

Записавши $d\ln F_i$ та $d\ln k_i$ у явному вигляді:

$$d\ln F_i = \left(\frac{d\sigma_i}{\sigma_i}-\frac{d\sigma_{gi}}{\sigma_{gi}}\right) \text{ та } d\ln k_i \cong -\frac{d\lambda_{gi}}{\lambda_{gi}}, \quad (3)$$

помноживши та поділивши два рази на dT, одержимо

$$\frac{d\ln F_i}{d\ln k_k}=\left(\frac{d\sigma_i}{\sigma_i}-\frac{d\sigma_{gi}}{\sigma_{gi}}\right)\cdot\frac{1}{dT}\left(-\frac{\lambda_{gi}}{d\lambda_{gi}}\right)dT\frac{d\lambda_{gi}}{\lambda_{gi}dT}\cdot\frac{\lambda_{gk}dT}{d\lambda_{gk}}=\left(1-\frac{\beta_i}{\beta_{gi}}\right)\cdot\frac{\beta_{gi}}{\beta_{gk}}. \quad (4)$$

Оскільки k_i та l_i фізично еквівалентні величини, то похідна $\frac{d\ln F_i}{d\ln l_k}$ також дорівнює $\left(1-\frac{\beta_i}{\beta_{gi}}\right)\cdot\frac{\beta_{gi}}{\beta_{gk}}$. Після підстановки в (1) одержуємо *апроксимаційне співвідношення*:

$$\beta = A_1\Big[\ \beta_{g1}\left(1-2\left(1-\frac{\beta_1}{\beta_{g1}}\right)+\frac{d\ln F_1}{d\ln a}\right)-\beta_{g2}\left(2\left(1-\frac{\beta_1}{\beta_{g1}}\right)\cdot\frac{\beta_{g1}}{\beta_{g2}}+\frac{d\ln F_1}{d\ln a}\right)\ \Big]+$$

$$+A_2\Big[\ \beta_{g2}\left(1-2\left(1-\frac{\beta_2}{\beta_{g2}}\right)-\frac{d\ln F_2}{d\ln a}\right)-\beta_{g1}\left(2\left(1-\frac{\beta_2}{\beta_{g2}}\right)\cdot\frac{\beta_{g2}}{\beta_{g1}}-\frac{d\ln F}{d\ln a}\right)\ \Big]. \quad (1'')$$

У припущенні, що $\frac{d\ln F_i}{d\ln a} \approx 0$, співвідношення (1''') приймає повністю макроскопічний вигляд:

$$\beta = A_1\beta_{g1}\left[1-2\left(1-\frac{\beta_1}{\beta_{g1}}\right)\right] + A_2\beta_{g2}\left[1-2\left(1-\frac{\beta_2}{\beta_{g2}}\right)\right] -$$

$$-2A_1\cdot\beta_{g2}\cdot\frac{\beta_{g1}}{\beta_{g2}}\cdot\left(1-\frac{\beta_1}{\beta_{g1}}\right) - 2A_2\cdot\beta_{g1}\cdot\frac{\beta_{g2}}{\beta_{g1}}\cdot\left(1-\frac{\beta_2}{\beta_{g2}}\right). \qquad (1''')$$

ПОРІВНЯННЯ З ЕКСПЕРИМЕНТОМ

На основі експериментальних результатів, одержаних раніше [3, 4], здійснена апробація співвідношення (1'''). Таблиця 1 дає уявлення про те, наскільки спрощене в роботах [2-4] співвідношення (1') і (1''') відповідають експериментальним даним.

Таблиця 1 - Експериментальні та розрахункові дані для ТКО

Плівкова система (товщина, нм)	d_1+d_2 нм	ТКО · 10^3, К$^{-1}$				
		Експер	Розрах. за (1')	$\frac{\lvert\beta_e-\beta_p\rvert}{\beta_e}$, %	Розрах за (1''')	$\frac{\lvert\beta_e-\beta_p\rvert}{\beta_e}$, %
Cr(35)/Co(85)/П*	120	1,62	2,00	23	0,91	44
Cr(70)/Co(90)	160	2,20	2,60	18	1,02	53
Co(75)/Cr(55)	130	1,56	2,60	67	0,54	65
Co(85)/Cr(120)	205	1,42	2,70	90	0,62	56
Co(90)/Ni(30)	120	2,25	3,20	42	1,52	32
Co(100)/Ni(65)	165	2,45	3,45	41	2,42	1
Ni(80)/Co(70)	150	2,50	3,40	36	2,41	4
Ni(140)/Co(60)	200	2,13	3,83	80	3,16	48
Cu(50)/Cr(55)	105	2,58	1,84	28	-1,72	167
Cr(180)/Cu(90)	270	1,90	1,81	5	-0,49	126

*П - підкладка

Аналізуючи отримані результати, підкреслимо, що деяка невідповідність співвідношення (1''') експериментальним даним пов'язана з двома причинами.

По-перше, у моделі Р.Дімміха не враховуються наступні фактори: виникнення макронапружень на межі двох плівок; процеси взаємної дифузії атомів (у роботі [6] одержано відповідне співвідношення, для перевірки якого необхідно ставити спеціальний експеримент); утворення проміжного шару на межі розділу плівок; технологічні фактори та ін.

По-друге, у співвідношенні (1''') враховуються процеси міжшарових переходів електронів, які обумовлюють в цілому зменшення величини ТКО і порівняно з експериментом, і з розрахунковою за формулою (1') величиною. Однак спостерігається лише якісне узгодження співвідношення (1''') з експериментальними результатати, що пов'язано з допущенням про те, що $\frac{d\ln F}{d\ln a} \cong 0$. Із (1'') випливає, що різниця β - $\beta_{розр}$ дорівнює:

$$\beta - \beta_{розр.} \cong \frac{d \ln F}{d \ln a} \cdot \left(\beta_{g1} - \beta_{g2}\right) \cdot \left(A_1 + A_2\right) = \frac{d \ln F}{d \ln a} \cdot \left(\beta_{g1} - \beta_{g2}\right),$$

де β та $\beta_{розр}$ - експериментальне та розрахункове за (1''') значення ТКО. Звідси можна легко одержати, що величина $\frac{d \ln F_l}{d \ln a} \cong 10^{-3} K^{-1}$. Таким чином, вклад похідних $\frac{d \ln F_l}{d \ln a}$ може бути сумірним з величиною ТКО. Причому залежно від співвідношення між β_{g1} та β_{g2} цей вклад може бути додатним або від'ємним, що обумовить кращу або гіршу відповідність з експериментальними результатами.

Нами було також помічено, що модель Р.Діммiха у наближенні (1') чи (1''') дуже погано узгоджується з експериментальними результатами при відносно малих товщинах (товщина плівки повинна бути такою, щоб її ТКО задовольняв вимозі: $\beta_l \geq 0{,}25(3\beta_{gi} - (\beta_{gi} - \beta_{gk})\frac{d \ln F}{d \ln a}))$. Крім цього, дуже суттєву роль відіграють доданки $\frac{d \ln F_i}{d \ln a}$ у випадку, коли питомий опір матеріалу окремих плівок дуже помітно відрізняється (у нашому випадку це має місце для систем Cu/Cr/П та Co/Cr/П). Цим можна пояснити, що розрахунок за (1''') дає значення $\beta < 0$ (табл.1).

Автори виражають подяку проф. І.Ю.Проценку за обговорення результатів роботи.

SUMMARY

In frameworks of the macroscopic approach is carried out aprocsimation simplification of a common ratio of model by R. Dimmich to a kind, which is suitable for comparison with experiment. Comparison of settlement and experimental data of a thermal coefficient of resistance for multilayer metal films is conducted. The reasons of qualitative conformity of theoretical model with experiment are analysed.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Проценко І.Ю., Чорноус А.М. Розмірний ефект в електропровідності двошарових полікристалісних плівок в умовах взаємної дифузії металів// Вісник Сумс.держ.ун-та, 1994.-№1.-С.19-25.
2. Однодворец Л.В., Проценко И.Е., Салтыкова А.И. Размерный эффект электропроводности в трехслойных пленочных системах на основе Cr и Co и Ni и Co //ВАНТ. Серия: Ядерно-физические исследования. - 1994. - №1.-С.85-87.
3. Protsenko I., Odnodvoretz L., Petrenko S., Chornous A. Size effect and processes of interdiffusion in multilayer films // Cryst.Res.Technol.- 1995.- V.30. - № 8.- P.1079-1083.
4. Protsenko I., Odnodvoretz L., Chornous A. Electroconductivity and tensosensibility of multilayer films // Металлофизика и новейшие технологии. - 1998.- Т.20. - № 1. - С.36-44.
5. Dimmich R. Electrical conductance and temperature coefficient of resistivity of double-layer films // Thin Solid Films. -1988. - V.158. - №1. - P.13-24
6. Дехтярук Л.В., Колесниченко Ю.А. Влияние взаимной диффузии на электропроводность двухслойных металлических пластин // ФММ.-1993.-Т.75. - № 5. - С. 21 - 30.
7. Дехтярук Л.В., Колесніченко Ю.О. Кінетичні коефіцієнти металевих мультишарів // УФЖ.- 1997.- Т.42. - № 9. - С.1094-1101.

Надійшла до редколегії 27 жовтня 1998 р.