

**СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**Чорноус Анатолій Миколайович**

**УДК 539.292**

**РОЗМІРНІ ЕФЕКТИ В ЕЛЕКТРОФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЯХ  
НАНОКРИСТАЛІЧНИХ ПЛІВКОВИХ СИСТЕМ В УМОВАХ  
ВЗАЄМНОЇ ДИФУЗІЇ ТА ФАЗОУТВОРЕННЯ**

01.04.07 – фізика твердого тіла

**АВТОРЕФЕРАТ**  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
доктора фізико-математичних наук

Суми – 2006

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана у Сумському державному університеті  
Міністерства освіти і науки України.

Офіційні опоненти – член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук,  
професор

**Фірстов Сергій Олексійович,**

заступник директора з наукової роботи Інституту  
проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича  
НАН України;

доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник

**Татаренко Валентин Андрійович,**

провідний науковий співробітник відділу теорії твердого тіла Інституту ме-  
талофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України;

доктор фізико-математичних наук, професор

**Равлік Анатолій Георгійович,**

професор кафедри фізики металів та напівпровідників Харківського націо-  
нального технічного університету „ХП”.

Провідна установа –Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна МОН України (ка-  
федра фізики твердого тіла).

Науковий консультант – заслужений діяч науки і техніки України, доктор фізико-математичних  
наук, професор

**Проценко Іван Юхимович,**

завідувач кафедри прикладної фізики Сумського  
державного університету.

Захист відбудеться “11” травня 2006 р. о 14<sup>00</sup> годині на засіданні спеціалізованої вченої ради  
Д 55.051.02 у Сумському державному університеті за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римсько-  
го-Корсакова, 2, корпус ЕТ, ауд.236.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Сумського державного університету.

Автореферат розісланий “10” квітня 2006 р.

Учений секретар спеціалізованої вченої ради

А.С.Опанасюк

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Нанокристалічні плівкові системи у вигляді дво- чи багат шарових структур знайшли досить широке використання при виготовленні мікроелектронних приладів і сенсорів, елементів опто- і акустоелектроніки, спінтроніки, пристроїв для запису інформації та ін. Але при цьому можливості вакуумних тонкоплівкових технологій ще далеко не вичерпані, про що свідчать успіхи у створенні нових нанокристалічних і композиційних матеріалів, мультишарів, елементів геліоелектроніки та надрешіток. Параметри мікроприладів значною мірою визначаються електрофізичними властивостями плівок, які, у свою чергу, залежать від ряду факторів технологічного і фізичного характеру. Останні пов'язані з дією розмірних ефектів, що проявляються як у структурно-фазових характеристиках, так і в електрофізичних властивостях. На властивості багат шарових систем також впливають явища і процеси, які обумовлені взаємною дифузією і фазоутворенням.

Внаслідок високої дисперсності кристалітів і малої товщини окремих шарів дифузія у плівках проходить більш інтенсивно порівняно з масивними зразками і може відігравати як позитивну, так і негативну роль у стабільній роботі елементів на їх основі. Так, швидке масоперенесення по межах зерен і дислокаціях може бути однією з важливих причин відмов при роботі мікроелектронних приладів. Все це стимулювало активні теоретичні і експериментальні дослідження процесів взаємної дифузії атомів у дво- і багат шарових плівкових структурах, яка може супроводжуватися твердо-фазними хімічними перетвореннями.

Дослідження явищ, пов'язаних з електронним транспортом у багат шарових плівкових системах, постійно знаходиться в полі зору науковців. Незважаючи на накопичений у цій галузі великий теоретичний і експериментальний матеріал, ряд фундаментальних питань залишається до кінця не з'ясованим. Так, існує необхідність в розробленні та апробації теоретичних моделей розмірного ефекту в електропровідності, температурному коефіцієнті опору та тензочутливості багат шарових полікристалічних плівок, які б коректно враховували розсіювання носіїв заряду на межах зерен і поділу шарів та задовільно відповідали експерименту. Поряд з цим потребує встановлення взаємозв'язку між електрофізичними властивостями, з одного боку, та дифузійними процесами і фазоутворенням – з іншого. Зокрема, за рахунок зерномежової дифузії будуть змінюватися умови розсіювання носіїв заряду на межах кристалітів, відповідно коефіцієнти розсіювання і проходження меж відрізнятимуться від аналогічних в одношарових плівках. На параметри електроперенесення, крім цього, впливає ряд факторів, які пов'язані з дією температури і деформації та ступенем дисперсності кристалітів. Неврахування температурних і деформаційних ефектів у теоретичних моделях, можливо, обумовлює одну з причин невідповідності експериментальних і розрахункових значень температурного коефіцієнта опору та коефіцієнта тензочутливості.

Вищесказане вимагає нового і більш детального підходу до вивчення електрофізичних властивостей одношарових плівок. Хоча слід відмітити, що на момент постановки задач цієї роботи був розвинутий як у теоретичному, так і експериментальному плані напрям фізики тонких плівок, що пов'язаний із дослідженням розмірних і розмірно-температурних ефектів у кристалічній структурі та електрофізичних властивостях в умовах прояву дії зовнішнього і внутрішнього розмірних ефектів.

Отже, є очевидним науковий та практичний інтерес до фундаментальної проблеми фізики тонких плівок, яка пов'язана із комплексним експериментальним і теоретичним дослідженням впливу на параметри електроперенесення і електрофізичні властивості плівкових систем ступеня дисперсності кристалітів, дифузійних процесів і фазоутворення та температури або деформації зразків. Це відкриває можливості для прогнозування поведінки (зі зміною товщини і температури) електрофізичних властивостей плівкових систем, які характеризуються різним ступенем взаємної розчинності компонент, та визначає актуальність подальшого розвитку наукового напрямку "Розмірні явища в кристалічній структурі та електрофізичних властивостях багат шарових плівкових систем" з точки зору взаємозв'язку з дифузійними процесами і фазоутворенням в нанокристалічних плівкових матеріалах.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами.** Дисертаційна робота виконана на кафедрі прикладної фізики Сумського державного університету у рамках держбюджетних тем №197U016610 "Електрофізичні властивості багат шарових плівок в умовах взаємної дифузії елементів" (1997-1999 рр.); №0100U003219 "Дифузійні процеси у багат шарових системах плівка/плівка і плівка/масивний матеріал" (2000-2002 рр.); №0103U000773 "Вплив статичної деформації і температури на електрофізичні властивості багат шарових плівкових систем" (2003-2005 рр.) та спільного проекту науково-технічного співробітництва "Дифузійні процеси і транспортні властивості мульт-

тишарів і тонких плівок” між Сумським державним університетом і Інститутом ядерної фізики ПАН (м.Краків, Польща) (договір №М/18-2004 від 29 березня 2004 р.) (2004-2005 рр.). Дисертант здійснював керівництво науковою групою і брав участь у дослідженнях та підготовці проміжних і заключних звітів.

**Мета і задачі дослідження.** Мета дисертаційної роботи полягає у встановленні загальних закономірностей розмірних ефектів в електрофізичних властивостях багат шарових нанокристалічних плівкових систем (на основі перехідних d-металів) з різним типом взаємної розчинності компонент та з'ясуванні впливу на питомий опір, температурний коефіцієнт опору (ТКО), коефіцієнти тензочутливості (КТ) та параметри електроперенесення (середня довжина вільного пробігу (СДВП), коефіцієнти розсіювання і проходження міжкристалічних меж і меж поділу) температури, деформації, товщини окремих шарів, ступеня дисперсності кристалітів та процесів взаємної дифузії і фазоутворення.

Відповідно до цього у роботі необхідно було вирішити такі наукові задачі:

- розроблення і уточнення теоретичних моделей у рамках феноменологічного підходу (враховується залежність від температури і деформації параметрів електроперенесення) для розмірного ефекту у температурному коефіцієнті опору і коефіцієнті поздовжньої тензочутливості багат шарових металевих плівок;
- на основі обробки експериментально отриманих розмірних залежностей для електрофізичних властивостей одношарових плівок встановлення впливу ступеня дисперсності кристалітів, температури, деформації та дифузії чужорідних атомів на параметри електроперенесення;
- розроблення методики розділення та аналіз внеску у загальну величину питомого опору, ТКО і КТ об'ємного, поверхневого і зерномежового механізмів розсіювання носіїв заряду;
- встановлення загальних закономірностей у температурних залежностях питомого опору і ТКО для багат шарових систем в інтервалі проміжних температур;
- здійснення апробації існуючих, відкорегованих і запропонованих теоретичних співвідношень для температурного коефіцієнта опору і коефіцієнта поздовжньої тензочутливості багат шарових металевих плівок;
- на основі результатів чисельних розрахунків, комп'ютерного моделювання та експериментальних даних з'ясування характеру розмірних залежностей електрофізичних властивостей багат шарових систем загального і періодичного типів;
- на основі обробки експериментальних даних про структурний, фазовий і елементний аналізи побудова схем еволюції (у результаті дії температурного фактора) структурно-фазового стану плівкових систем з різним типом взаємної розчинності компонент;
- встановлення загальних закономірностей взаємозв'язку структурно-фазового стану плівкових систем та їх електрофізичних властивостей;
- узагальнення отриманих результатів про вплив температури, кількості шарів і масоперенесення на електрофізичні властивості багат шарових систем під кутом зору використання їх при створенні сенсорів температури і деформації.

**Об'єкт досліджень** – розмірні, температурні і деформаційні ефекти в електрофізичних властивостях і параметрах електроперенесення нанокристалічних плівкових систем в умовах взаємної дифузії атомів і фазоутворення.

**Предмет досліджень** – електрофізичні властивості (питомий опір, температурний коефіцієнт опору і коефіцієнт поздовжньої тензочутливості), дифузійні процеси та твердофазні реакції в нанокристалічних плівкових системах на основі перехідних d-металів (Ni і (V, Ti, Cr або Co), Co і (Ti, Cr або Cu) та Cr, Cu і Sc) з різним типом кристалічної решітки та взаємної розчинності компонент.

Відповідно до поставлених задач використовувалися такі **методи отримання і експериментального дослідження зразків**: вакуумна пошарова конденсація плівок термічним і електронно-променевим способами; метод резистометрії при відпалюванні і деформації зразків у високому вакуумі; електронна просвічуюча, растрова і атомно-силова мікроскопія (ПЕМ, РЕМ і АСМ); вторинна іонна мас-спектрометрія (ВІМС); електронна оже-спектроскопія (ЕОС); комп'ютерне моделювання термо- і тензорезистивних властивостей плівкових систем; методи теоретичного аналізу і узагальнення результатів.

### **Наукова новизна одержаних результатів**

1. У плані подальшого розвитку уявлень про дифузійні процеси та фазоутворення у нанокристалічних плівкових системах метал/метал проведено експериментальне дослідження цих явищ у

плівкових системах на основі Ni і (V, Ti, Co або Cr), Co і (Ti, Cr або Cu) та Cu, Cr і Sc та встановлено:

- ефективний коефіцієнт взаємної дифузії в області проміжних температур має величину  $\sim 10^{-20} - 10^{-18} \text{ м}^2/\text{с}$ , яка більша, ніж у масивних зразках, що пояснюється меншим середнім розміром зерна у плівках і, як наслідок, більш розвинутою поверхнею меж зерен;
  - фазові перетворення у плівках відбуваються фактично у відповідності до діаграми стану для масивних зразків, відмінність полягає лише у пониженні температури утворення тієї чи іншої фази і збільшенні меж розчинності елементів.
2. Здійснено подальший розвиток уявлень про зовнішній і внутрішній розмірні ефекти у електрофізичних властивостях одношарових металевих плівок, отримані результати, які застосовувалися при аналізі властивостей багатошарових плівкових систем, полягають у такому:
- вперше для обробки експериментальних результатів були використані тривимірні моделі Тельє, Тоссе і Пішар для ТКО і КТ, модель Ухлінова-Косаківської для електропровідності (у наближенні масивних конденсатів) та асимптотичні співвідношення для питомого опору, ТКО і КТ, які отримані у рамках модифікованої теорії Маядаса-Шатцкеса; підтверджено, що моделі для тензочутливості кількісно описують експериментальні результати, якщо вважати, що деформаційний коефіцієнт середньої довжини вільного пробігу залежить від товщини плівок (розміру кристалітів);
  - вперше запропонована методика, на основі якої проведено розрахунок внеску у величину питомого опору, ТКО і КТ одношарових металевих плівок об'ємного, поверхневого і зерномежового розсіювання електронів, що дозволяє визначити статистичну вагу названих механізмів у зміні величини СДВП при зміні температури або деформації;
  - на основі порівняльного аналізу параметрів електроперенесення у одношарових полікристалічних плівках металів товщиною до 500 нм і дротах з діаметром 0,03-0,5 мм показано, що величина коефіцієнтів дзеркальності, розсіювання і проходження меж зерен та СДВП визначається ступенем дисперсності кристалітів.
3. Проведено дослідження температурних залежностей питомого опору і ТКО у багатошарових системах; встановлено, що в міру збільшення кількості шарів і прояву концентраційних ефектів на зазначених залежностях зникають особливості при характерних температурах (Дебая, Кюрі і Нееля).
4. Здійснено подальший розвиток уявлень про розмірний ефект в електрофізичних властивостях багатошарових плівкових систем в умовах прояву дії процесів взаємної дифузії і фазоутворення:
- на основі теоретичних розрахунків і експериментальних результатів вперше встановлено характер залежності ТКО і КТ багатошарових металевих плівок від товщини окремих шарів; показано, що для систем загального типу залежно від співвідношення асимптотичних значень цих коефіцієнтів для матеріалів окремих шарів величина ТКО і КТ буде збільшуватися, зменшуватися або осцилювати; при цьому їх значення практично не залежать від кількості фрагментів багатошарової періодичної структури і монотонно змінюється із збільшенням товщини фрагментів.
  - вперше одержано, що величина коефіцієнтів тензочутливості багатошарових плівок більша (у деяких випадках – на порядок), ніж у одношарових, що дає можливість розглядати такі структури, як перспективний матеріал для створення тензодатчиків;
  - вперше пройшли експериментальну перевірку асимптотичні співвідношення для ТКО у рамках модифікованої теорії Маядаса-Шатцкеса дво- і багатошарових зразків; показано, що для систем на основі Cr і Co, Cu і Cr та Sc і Cu, в яких після термообробки зберігається індивідуальність шарів, спостерігається точність узгодження розрахункових і експериментальних даних до 30%.
5. На підставі аналізу результатів апробації теоретичних моделей для ТКО і КТ багатошарових металевих плівкових систем зроблено висновок про певний вплив на їх величину температурних і деформаційних ефектів у параметрах електроперенесення. Для підтвердження цього:
- вперше запропоновано і апробовано феноменологічну модель для ТКО;
  - вперше розроблено методику визначення деформаційних коефіцієнтів параметрів електроперенесення ( $\eta_{pl}$ ,  $\eta_{rl}$  і  $\eta_{ql}$ ) та здійснено експериментальну перевірку феноменологічної моделі для КТ;
  - показано, що введення температурних ( $\beta_p$ ,  $\beta_r$  і  $\beta_q$ ) і деформаційних ( $\eta_{pl}$ ,  $\eta_{rl}$  і  $\eta_{ql}$ ) коефіцієнтів параметрів електроперенесення у теоретичні співвідношення для ТКО і КТ призводить до кількісного узгодження (до 22-25%) експериментальних і розрахункових значень у плівкових системах з низькою взаємною розчинністю компонентів.

**Практичне значення одержаних результатів.** Фундаментальне значення отриманих у роботі результатів полягає у розширенні уявлень про розмірні явища в електрофізичних властивостях металоплівкових матеріалів мікроелектроніки в умовах зовнішнього і внутрішнього розмірних ефектів, взаємної дифузії та фазоутворення. Теоретичні співвідношення для ТКО і КТ, отримані і/або апробовані у роботі, можуть бути застосовані для прогнозу електрофізичних властивостей багатошарових плівкових структур на основі металів з різним типом взаємної розчинності компонент. У цьому контексті виключно важливе значення для більш глибокого розуміння процесів електронного транспорту має висновок про те, що врахування зміни з температурою і деформацією параметрів електроперенесення забезпечує краще узгодження розрахункових і експериментальних величин ТКО і КТ. Самостійний інтерес як в практичному, так і в теоретичному відношенні має запропонована методика розділення внеску у електрофізичні властивості об'ємного, поверхневого та зерномежового розсіювання носіїв заряду у плівкових зразках. Результати про взаємну дифузю та процеси фазоутворення у плівкових металевих системах можуть застосовуватися при підборі сумісних між собою пар матеріалів мікроелектронних структур для забезпечення стійкості, надійності і підвищення експлуатаційних характеристик приладів. Одержані у роботі дані про температурну залежність опору, ТКО та результати про вплив кількості шарів на тензочутливість багатошарових систем можуть бути використані для створення високо-стабільних, технологічних і дешевих термоперетворювачів опору і тензодатчиків.

**Особистий внесок здобувача.** Наведені у дисертаційній роботі результати наукових досліджень виконані як особисто автором, так і у співпраці з колегами (доц. Ододворець Л.В., доц. Опанасюк Н.М., доц. Овчаренком Ю.М., доц. Ласюченко О.Б., ст. викл. Шпетним І.О. і інженером Токманем В.В.) та з учнями (доц. Білоус О.А. і ст. викл. Проценком С.І.) під його керівництвом. Дисертант брав участь у пошуку і аналізі літературних даних, постановці задач, у проведенні, обробці і обговоренні результатів експериментальних і теоретичних досліджень (вивчення електрофізичних властивостей одно- і багатошарових металевих плівок, кристалічної структури, фазоутворення і взаємної дифузії). Автором були розроблені методики отримання багатошарових систем і товстих конденсатів, дослідження електропровідності і тензочутливості плівок з тонким покриттям, вивчення механічних властивостей. Ідеї, які висунуті у роботі, і результати досліджень обговорювались і узагальнювались разом з науковим консультантом проф. Проценком І.Ю. і учнями. Теоретичні моделі, що запропоновані у роботі, були розроблені спільно з проф. Проценком І.Ю. і доц. Дехтяруком Л.В. Дослідження фазового і елементного складу у плівкових зразках проводилися за участю доц. Салтикової А.І., ст. викл. Проценка С.І., ст. викл. Шпетного І.О. та інженера Токманя В.В. Особисто автором підготовлені статті [2,4,5,10-12,14, 15,17,21,25,28,30,31,32,36,40,41] і авторське свідоцтво [27], підготовлені окремі розділи у роботах [8,9,20,22,23,26,39] та обговорювались матеріали решти статей. Основна частина отриманих результатів доповідалася автором на конференціях і семінарах.

**Апробація результатів дисертації.** Основні результати роботи доповідалися та представлялися на таких наукових конференціях: II і III Міжнародних конференціях з модифікації властивостей поверхневих шарів ненапівпровідникових матеріалів MPSL (Суми, 1996, 1999 рр.); Міжгалузевому науково-практичному семінарі "Вакуумна металізація" (Харків, 1996 р.); Міжнародній конференції "Іонна імплантація в науці і техніці" (Люблін, Польща, 1997 р.); 3-й, 5-й і 6-й Міжнародних конференціях "Фізичні явища в твердих тілах" (Харків, 1997, 2001, 2003 рр.); Міжнародній конференції ECASIA'97 (Гетеборг, Швеція, 1997 р.); 8-му, 12-му, 14-му і 15-му Міжнародних симпозиумах "Тонкі плівки в оптиці та електроніці" (Харків, 1997, 2001, 2002, 2003 рр.); XIII Національній школі-семінарі "Спектроскопія молекул та кристалів" (Суми, 1997 р.); VI, VII, VIII, IX і X Міжнародних конференціях з фізики та технології тонких плівок (Івано-Франківськ, 1997, 1999, 2001, 2003, 2005 рр.); Міжнародній конференції "Електронно-променеві технології ЕВТ'97" (Варна, Болгарія, 1997 р.); Міжнародній конференції DIFTRANS'98 (Черкаси, 1998 р.); 3-му Міжнародному симпозиумі "Вакуумні технології та обладнання" (Харків, 1997 р.); 3-му і 5-му Всеросійських семінарах "Нелінійні процеси та проблеми самоорганізації в сучасному матеріалознавстві" (Воронеж, Росія, 2000, 2004 рр.); Конференції молодих вчених та аспірантів ІЕФ'2001 (Ужгород, 2001 р.); Міжнародних конференціях студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРІКА'2001 (Львів, 2001, 2004 рр.); Відкритій Всеукраїнській конференції молодих вчених та науковців "Сучасні питання матеріалознавства" (Харків, 2003 р.); I

Науково-технічній конференції “Матеріали електронної техніки та сучасні інформаційні технології” (Кременчук, 2004 р.).

**Публікації.** Результати дисертації опубліковані в 47 статтях у наукових журналах і збірниках наукових праць, в 1 авторському свідоцтві та 32 тезах доповідей на наукових конференціях (43 назви праць наведено у списку опублікованих праць в авторефераті).

**Структура та обсяг роботи.** Дисертація складається із вступу, шести розділів, висновків і списку використаних джерел із 362 найменувань. Загальний обсяг дисертації складає 334 сторінки, містить 110 рисунків і 46 таблиць.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми роботи, сформульовані мета і задачі досліджень, показаний зв'язок з науковими темами і програмами, висвітлено наукову новизну, практичне значення одержаних результатів і внесок здобувача, наведені відомості про апробацію роботи, основні публікації автора та структуру і обсяг дисертації.

У **першому розділі** “Розмірні ефекти в електрофізичних властивостях та дифузійні процеси у металевих плівках” перш за все проведено аналіз теоретичних моделей та експериментальних результатів, присвячених дослідженню розмірних ефектів у електрофізичних властивостях (питомий опір, температурний коефіцієнт опору і коефіцієнти тензочутливості) в одношарових металевих плівках. На основі аналізу і узагальнення цих результатів зроблено висновок, що не існує систематичних даних про вплив на параметри електроперенесення (СДВП, параметр дзеркальності зовнішніх поверхонь, коефіцієнтів розсіювання і проходження меж зерен) ступеня дисперсності кристалітів, температури, деформації та сегрегації чужорідних атомів на внутрішніх і зовнішніх межах. Поряд з цим існує необхідність в розробленні методики розділення внеску у величину електрофізичних властивостей поверхневого, зерномежового та об’ємного розсіювання носіїв заряду.

Основна особливість розмірного ефекту в електрофізичних властивостях багатошарових плівок в порівнянні з одношаровими пов’язана із взаємодією носіїв заряду з межами поділу (МП) між шарами, які суттєвим чином повинні впливати на величину електропровідності та ТКО. Вивченню процесів електронного транспорту у дво- і багатошарових плівках присвячені роботи Ф. Варкуша, Р. Дімміха, Ю.О. Колісниченка, І.Ю. Проценка, Л.В. Дехтярука, Ф. Катара, М. Ель-Хіті, М. Фена, Д. де Врайса, Д. Ваври, С. Любі, Д. Девіда, С. Чена та ін. Ними було започатковано відповідний напрям у фізиці тонких металевих плівок.

Для визначення величини ТКО багатошарових плівкових зразків може бути використане спрощене співвідношення моделі Дімміха у такому вигляді:

$$\beta = \sum_{i=1}^n A_i \beta_{\infty i} \left( 1 - \frac{\partial \ln F_i}{\partial \ln k_i} - \frac{\partial \ln F_i}{\partial \ln m_i} \right), \quad (1)$$

де  $A_i = \frac{d_i \sigma_{\infty i} F_i}{\sum_{i=1}^n d_i \sigma_{\infty i} F_i}$ ;  $\beta_{\infty i}$  і  $\sigma_{\infty i}$  – ТКО і питома провідність матеріалу і-го шару при  $d_i \rightarrow \infty$ ;

$F_i = \sigma_i / \sigma_{\infty i}$  – функція Фукса ( $\sigma_i$  – питома провідність і-го шару);  $k_i = d_i / \lambda_{0i}$ ,  $m_i = L_i / \lambda_{0i}$  – наведені товщина і середній розмір зерна ( $d_i$  – товщина,  $L_i$  – середній розмір зерна і  $\lambda_{0i}$  – СДВП).

Одним з недоліків розглянутої вище моделі є те, що у наведеній формі запису виразу (1) фактично не враховується розсіювання носіїв заряду на МП. Це коректно можна зробити у рамках напівкласичної і феноменологічної моделей. Відмітимо, що в останньому випадку можна отримати робочі співвідношення для ТКО і КТ плівкових систем, де буде враховано вплив температури і деформації на параметри електроперенесення. У випадку тензоефекту було запропоновано таку модель у роботі І.Ю.Проценка, О.Б.Ласюченко і Л.В.Ододворець. Оскільки в отриманому ними співвідношенні для коефіцієнта поздовжньої тензочутливості не зовсім коректно було враховано внутрішній розмірний ефект, то нами було проведено відповідне корегування моделі (розділ 6). Відмітимо, що деформаційні коефіцієнти параметра дзеркальності ( $p$ ), коефіцієнта проходження меж зерен ( $r$ ) і меж

поділу ( $Q$ ) в рамках цієї моделі означаються так:  $\eta_{pl} = -\frac{d \ln p}{d \ln l}$ ,  $\eta_r = -\frac{d \ln r}{d \ln l}$  і  $\eta_Q = -\frac{d \ln Q}{d \ln l}$  відповідно.

У результаті проведеного аналізу та узагальнення літературних результатів про вивчення розмірних ефектів у ТКО і КТ багат шарових плівкових систем зроблено висновок, що існує необхідність в апробації існуючих теоретичних моделей; у встановленні характеру залежності електрофізичних властивостей від товщини окремих шарів (системи загального типу), товщини фрагментів і їх кількості (періодичні структури) та розробленні і експериментальній перевірці нових моделей, які б враховували недоліки існуючих, зокрема, для ТКО в рамках феноменологічного підходу.

На електрофізичні властивості плівкових систем з різним типом взаємної розчинності компонент певним чином повинні впливати процеси, пов'язані із взаємною дифузійною та фазоутворенням. Тому однією із задач наших досліджень було вивчення названих явищ. У зв'язку з цим в останньому підрозділі проаналізовано теоретичні підходи до описання взаємної дифузії у плівкових зразках і експериментальні дані, отримані рядом авторів, таких, як К. Уївер, І. Каур, В. Густ, Дж. Белінг, Дж. Поут, Д. Гупта, Дж. Фішер, Р. Уїпл, Т. Сузуокі, М.В. Білоус, А.М. Гусак і С.І. Сидоренко.

**Другий розділ** “Методика підготовки зразків та проведення досліджень” присвячено описанню методів отримання плівкових систем, дослідження електрофізичних властивостей в умовах температурної і деформаційної дій та вивчення структурних характеристик і елементного складу.

Плівкові зразки були отримані у вакуумі  $10^{-5}$ – $10^{-4}$  Па термічним та електронно-променевим випаруванням. При розробленні методики отримання шарів конкретного матеріалу враховувався вплив умов осадження (температура підкладки, швидкість конденсації, склад і тиск залишкової атмосфери). З цією метою проводились спеціальні мас-спектрометричні дослідження складу залишкової атмосфери (прилад МХ-7304А) на різних стадіях конденсації. У результаті були визначені та підтримувались швидкості осадження, що мали такі значення: 0,2-0,5 (V, Ni); 0,05-0,1 (Ti); 0,2-0,8 (Co); 0,3-2,7 (Cr); 1,5-3 (Cu); 0,9-1,1 (Mo) і 1,5-3 (Sc) нм/с при  $T_{IT} \approx 300\text{K}$ , при яких фазовий склад плівок цих металів відповідає масивним зразкам.

Вимірювання товщини проводилось як у процесі конденсації методом кварцового резонатора, так і після отримання зразків інтерферометричним методом.

З метою рекристалізації структури, термостабілізації електричних властивостей та забезпечення необхідних умов для масоперенесення і фазоутворення плівкові зразки відпалювались протягом декількох циклів за схемою “нагрівання $\leftrightarrow$ охолодження” з постійною швидкістю у інтервалах 300-(650-700)К та 300-900К, що визначалось метою конкретного експерименту. Контроль температури здійснювався за допомогою термопар. Вимірювання опору проводилось з використанням цифрових вольтметрів.

Для вимірювання електричного опору в процесі відпалювання застосовувались підкладки двох типів: скляні поліровані пластини із вплавленими металевими стержнями та ситалові (або полікорові) підкладки. В останньому випадку попередньо виготовлялись контактні майданчики у вигляді двошарових структур. Дослідження методом растрової електронної мікроскопії (прилад РЕММА-102) показали відсутність мікро-тріщин у місці контакту плівка/майданчик. Підкладки для вивчення тензоефекту виготовлялись із покритого фольгою склотекстоліту та фторопласту або нікелевої фольги, на яку було скондесовано плівку SiO. Для створення електричного контакту, який би не розтріскувався при деформації, між плівками і зовнішніми выводами на фторопласт і SiO наносились багат шарові контактні майданчики з використанням термовакуумного і електролітичного осадження. Відпалювання та деформація плівок на підкладках проводилось за допомогою спеціально сконструйованих пристроїв. Наприклад, пристрій для вивчення тензоефекту дозволив розмістити на ньому дві підкладки, одна з яких знаходилась у недеформованому стані, а інша – могла розтягуватись до деформації 2% з кроком  $\Delta\epsilon_l = 0,05\%$ . Величина поздовжньої деформації визначалась за формулою  $\epsilon_l = \Delta l / l$  ( $l$  і  $\Delta l$  – довжина підкладки і її зміна при деформації).

З метою вивчення фазового і елементного складу та кристалічної структури плівкових зразків проводились електроннографічні і електронно-мікроскопічні дослідження (прилади ЕММА-4 і ПЕМ-125К), дослідження методами атомно-силової мікроскопії, вторинної іонної мас-спектрометрії (прилад МС-7201М) і електронної оже-спектроскопії. Обробка результатів здійснювалась за стандартними методиками.

При дослідженні елементного складу методом ВІМС у результаті взаємодії первинного пучка іонів з твердотільною мішенню має місце утворення багатоатомних кластерів. На підставі аналізу мас-спектрометричних даних, отриманих для двошарових (на основі Ni і Cr, Co і Cr, Ni і Co та Co і Ti) та тришарових (на основі Cr, Cu і Sc) плівкових систем, зроблено висновок, що основна кількість кластерів утворюється на початкових стадіях травлення зразка з дуже низькою інтенсивністю піків.



Тому наявність кластерів у мас-спектрі вторинних іонів істотним чином не впливає на загальну інформацію про розподіл елементів з товщиною у плівкових системах.

Оскільки на величину електрофізичних властивостей певним чином впливає адгезія плівки до підкладки та макронапруження структурного і термічного походження, то у роботі було проведено експериментальне дослідження цих явищ. Вивчення розмірних та термодинамічних ефектів в адгезії для плівок ряду металів показали, що величина адгезії зменшується при збільшенні поверхневої енергії плівки і підкладки та товщини плівкового зразка (рис.1), що частково можна пояснити на основі уявлень про вільну енергію адгезії та розмірну залежність поверхневої енергії. Величина нормальної складової адгезії ( $A_n$ ) завжди менша тангенціальної ( $A_t$ ), що пов'язано з внеском міжфазної поверхневої енергії у тангенціальну силу тертя.

Макронапруження структурного походження ( $S_C$ ) мають величину, що на порядок більша за термічні (наприклад, для плівок Cr, Co і Cu значення  $S_C$  становить  $(0,5-2,6) \cdot 10^9$ ,  $(0,9-4,8) \cdot 10^9$  і  $(2-8) \cdot 10^9$  Па відповідно).

Рис.1. Залежність адгезії від товщини для плівок Cu (1,2) і Cr (3)

Із збільшенням товщини плівок і середнього розміру зерна відбувається зменшення рівня структурних макронапружень, що пояснюється на основі моделі взаємодії зерен.

**Третій розділ** “Кристалічна структура, фазовий і елементний склад та процеси взаємної дифузії” присвячений експериментальному дослідженню явищ масоперенесення у плівкових системах з різним типом взаємної розчинності компонентів після термовідпалювання у вакуумі.

У першому підрозділі спочатку наведені дані про вивчення структурних характеристик одношарових плівок, що були отримані в одних умовах з багатошаровими структурами. Такі результати необхідні для більш коректного аналізу даних про фазовий склад плівкових систем та для отримання інформації про середній розмір зерна розрахункового параметра в моделях електрофізичних властивостей. У свіжосконденсованому стані плівки мають такий фазовий склад: ГЦК-Cu, ГЦК-Ni, ГЦК( $\alpha$ )+ГЦП( $\beta$ )-Co, ОЦК-Cr, ОЦК-V, ОЦК-Mo, ГЦП-Ti та ГЦП-Sc, який зберігається після відпалювання до температури  $T_e \leq 700$ К. Параметр решітки для плівок дуже близький до відповідних величин масивних зразків. Термообробка при більш високих температурах  $T_e = 800-1000$ К призводить у більшості випадків до зміни фазового складу. Найбільш чутливі до атмосфери залишкових газів плівки V, Cr, Ti і Sc, на електроннограмах яких фіксуються лінії від ряду оксидів. У плівках Co, відпалених до  $T_e = 1000$ К і досліджених при кімнатній температурі, фіксується  $\beta$ -фаза (рис. 2). Лише у плівкових зразках Ni після термообробки до 1000К не відбувається ніяких фазових змін, які б фіксувались електроннографічно. Обробка даних електронно-мікроскопічних досліджень показала, що у одношарових плівках, що пройшли термообробку до  $T_e \leq 700$ К, середній розмір зерна має такі значення:  $L \approx kd$ , де  $k \approx 1,5-2$  (Cu при  $d < 180$  нм),  $k \approx 1$  (Ni при  $d < 400$  нм) і  $k \approx 0,5$  (Co і Cr при  $d > (30-40)$  нм); Sc- $L \approx (50-65)$  нм при  $30 \leq d \leq 90$  нм; V і Ti- $L \approx (10-20)$  нм при  $d = (20-70)$  нм та Mo- $L \approx 10$  нм при  $d < 100$  нм і  $L \approx 20$  нм при  $d > 250$  нм.

Рис.2. Електроннограми від плівкового зразка Co товщиною  $d = 25$  нм після термообробки до 800 К(а) і 1000 К(б)

Вивчення процесів фазоутворення у плівкових системах з різним типом взаємної розчинності компонентів дало можливість встановити такі закономірності. Для системи на основі Ni і Co, яка характеризується у масивному стані необмеженою взаємною розчинністю, після термообробки при  $T_e = 700$ К спостерігається утворення ГЦК т.р.-(Ni-Co), якщо концентрація Ni ( $c_{Ni}$ ) у вихідному стані перебільшує концентрацію Co ( $c_{Co}$ ). При оберненому співвідношенні концентрацій ( $c_{Ni} < c_{Co}$ ) у плівках частково зберігається індивідуальність шарів після відпалювання до більш високих температур. Після термообробки при  $T_e = 900$ К у зразках зникає ГЦП-фаза і система повністю гомогенізується внаслідок утворення ГЦК твердого розчину на основі ГЦК- решітки Co. У плівках на основі Ti і Co або Ni, що належать до систем, у яких утворюються інтерметаліди, зародки фаз  $TiCo_2$  і  $Ni_3Ti$  електроннографічно фіксуються у зразках, які пройшли термообробку при  $T_e = 700$ К. По мірі збільшення температури і часу відпалювання фазоутворення поширюється на всю плівкову систему (таблиця 1). У плівках на основі Ni і V утворюється метастабільна фаза  $NiV_2$  при  $800 < T_e < 900$ К, яка зникає після

відпалювання при  $T_g=1000\text{K}$ . Аналіз електронографічних даних для одношарових плівок Ni і V та систем на їх основі, що пройшли термообробку у інтервалі температур  $700 < T_g < 1000\text{K}$ , показує, що в останньому випадку фазовий склад зразків відповідає ГЦК т.р.-(Ni-V) із слідами  $\text{VO}_x$ ,  $\text{V}_2\text{O}_3$  і зазначеного вище інтерметаліду. У плівках на основі Co і Cr, термооброблених до  $T_g=800\text{K}$ , фазовий склад відповідає ОЦК-Cr+ГЦП і ГЦК-Co (рис.3). При збільшенні температури відпалювання до  $T_g=900\text{K}$  він трансформується в ОЦК-Cr+ГЦК-Co + тетрагональний  $\text{CoCr} + \text{Cr}_2\text{O}_3$ . У плівкових системах на основі Ni і Cr, що відносяться до евтектичного типу, вихідний двофазний склад ГЦК-Ni+ОЦК-Cr перетворюється після термообробки при  $800 < T_g < 900\text{K}$  у квазіевтектичну суміш зерен двох типів ГЦК т.р.-(Ni-Cr) і ОЦК т.р.-(Cr-Ni) відповідно на місці шарів Ni і Cr. При переході до трикомпонентних плівкових систем на основі Ni, Co і Cr фактично спостерігаються ті самі закономірності, що і у двокомпонентних плівках. Дослідження двошарових плівок Cr/Cu, Cr/Sc і Cu/Sc у невідпаленому стані та після термообробки до  $T_g < (600-670)\text{K}$  вказують на їх двофазний склад (ОЦК Cr + ГЦК Cu або (ГЦП Sc) та ГЦК Cu + ГЦП Sc), що повністю узгоджується із літературними даними про евтектичну рівновагу в системах на основі зазначених металів (у масивному стані системи на основі Cr і Cu, Cu і Sc, Cr і Sc мають низьку взаємну розчинність (~0,1 ат.%)). Величини параметрів решітки для компонентів плівкових систем у межах точності експерименту збігаються з даними для відповідних одношарових зразків. Подібний результат спостерігається при переході до тришарових зразків.

Рис.3. Електронограми від плівкової системи Cr/Co та відповідна їй кристалічна структура після термообробки до 300 К(а, б), 800 К(в), 900 К(г, д)

Таблиця 1

Розшифрування електронограм від плівок Ni/Ti

№ п/п	Невідпалені і $T_g=600\text{K}$			$T_g=800\text{K}$			$T_g=900, 1000\text{K}$		
	I, в.о.	$d_{hkl}$ , нм	$hkl$ , фаза	I, в.о.	$d_{hkl}$ , нм	$hkl$ , фаза	I, в.о.	$d_{hkl}$ , нм	$hkl$ , фаза
1.	–	–	–	–	–	–	д.сл.	0,350	(100)NiTi
2.	сл.	0,251	(100) $\alpha$ -Ti	д.сл.	0,252	(110)NiTi	сл.	0,252	(110)NiTi
3.	сл.	0,225	(100) $\alpha$ -Ti	–	–	–	сл.	0,241	(111)NiTi <sub>2</sub>
4.	–	–	–	сл.	0,222	(200)Ni <sub>3</sub> Ti	сл.	0,220	(200)Ni <sub>3</sub> Ti
5.	–	–	–	сер.	0,208	(004)Ni <sub>3</sub> Ti	сер.	0,208	(004)Ni <sub>3</sub> Ti
6.	С.	0,202	(111)Ni	–	–	–	сер.	0,203	(200)NiTi <sub>2</sub>
7.	–	–	–	С.	0,196	(202)Ni <sub>3</sub> Ti	–	–	–
8.	сер.	0,175	(200)Ni	–	–	–	сер.	0,181	(111)NiTi
9.	–	–	–	–	–	–	сл.	0,169	(105) $\beta$ -TiO <sub>2</sub>
10.	–	–	–	д.сл.	0,151	(204)Ni <sub>3</sub> Ti	сер.	0,149	(204)Ni <sub>3</sub> Ti
11.	сл.	0,147	(110) $\alpha$ -Ti	–	–	–	сер.	0,147	(200)NiTi (220)NiTi <sub>2</sub>
12.	–	–	–	С.	0,128	(220)Ni <sub>3</sub> Ti	–	–	–
13.	сер.	0,124	(220)Ni	–	–	–	сер.	0,124	(211)NiTi (311)NiTi <sub>2</sub>
14.	–	–	–	д.сл.	0,119	(206)Ni <sub>3</sub> Ti	–	–	–
15.	–	–	–	–	–	–	сер.	0,107	(310)NiTi
16.	–	–	–	сер.	0,110	(310)Ni <sub>3</sub> Ti	–	–	–
17.	сер.	0,106	(311)Ni	–	–	–	–	–	–

Другий підрозділ присвячений результатам дослідження дифузійних процесів у плівкових системах з різним ступенем взаємної розчинності компонентів. Типові дифузійні профілі на прикладі двошарових плівок на основі Ni і V, що пройшли термообробку при різних температурах, ілюструє рисунок 4. Існування дифузійної зони на концентраційному профілі від плівок у вихідному стані може бути пов'язане з більш високим градієнтом концентрації біля МП шарів; вищими шорсткістю

поверхні плівок, концентрацією структурних дефектів і ступенем дисперсності кристалітів у свіжо-сконденсованих зразках, конденсаційно- та іоно-стимульованим масоперенесенням. Останнього можна уникнути, провівши дослідження процесів масоперенесення неруйнівним методом, наприклад, методом ЕОС без травлення плівок пучком іонів. Запис оже-спектрів у нашому випадку проводився при кожному збільшенні товщини верхнього шару на 0,5-1,0 нм при фіксованій товщині базисного. Отримані результати (рис.5) свідчать про те, що дифузійний пробіг атомів  $z$  (товщина, при якій зникає оже-сигнал від атомів нижнього шару при конденсації верхнього) для двошарових плівок на основі Cu, Cr і Sc має такі значення:  $z=7,0$  нм (Cr→Cu); 3,5 нм (Cu→Cr); 4,5 нм (Cu→Sc); 5,0 нм (Sc→Cu); 6,0 нм (Cr→Sc) та 5,0 нм (Sc→Cr).

Рис.4. Приклади дифузійних профілів. Плівки Ni(35)/V(45)/П. Температура відпалювання, К: 300(○,●); 500(□,■); 700(Δ,▲)

Рис.5. Приклади оже-спектрів від двошарової плівки Cu/Cr(20)/П. Товщина шару Cu, нм: 0 (крива 1); 0,5 (2); 1 (3); 2 (4); 3 (5); 4 (6); 6 (7) і 10 (8)

При відпалюванні плівкових зразків залежно від температури і часу відбувається подальший розвиток дифузійних процесів (рис.4) з виходом атомів на поверхню сусіднього шару та накопичення на ній. При високотемпературній термообробці ( $T_s > 700-900$ К) у деяких випадках (плівки на основі Co і Ni або Cr) спостерігається повне дифузійне перемішування шарів.

Розрахунок ефективного коефіцієнта дифузії ( $D$ ) проводився з використанням співвідношення:

$$\frac{c}{c_0} = \operatorname{erfc} \left[ \frac{z}{2\sqrt{Dt}} \right], \quad (2)$$

де  $c$  і  $c_0$  – концентрації атомів дифузанта на глибині  $z$  і на поверхні верхнього шару ( $z=0$ ) відповідно;  $t$  – час дифузії.

Аналізуючи отримані результати про величину  $D$  у різних плівкових системах, можна відмітити такі загальні закономірності.

По-перше, значення ефективного коефіцієнта дифузії має величину порядку  $10^{-20}-10^{-18}$  м<sup>2</sup>/с (у таблиці 2 проілюстровано дані на прикладі плівок на основі Cu і Cr). Такий результат узгоджується з відомими літературними даними і свідчить, що основним механізмом масоперенесення у плівкових системах є зерномежова дифузія.

Таблиця 2

Залежність ефективного коефіцієнта дифузії від середнього розміру зерна у плівках Cr/Cu/П

Система $d, \text{ нм} / L, \text{ нм}$	$T_s, \text{ К}$	$D \cdot 10^{20}, \text{ м}^2/\text{с}$	
		Cr→Cu	Cu→Cr
Cr(60/30)/Cu(30/80)/П	300	2,7	23,0
	570	6,6	20,4
	770	9,8	29,3
Cr(60/30)/Cu(50/110)/П	300	2,2	8,0
	570	4,9	9,9
	770	8,1	17,7
Cr(60/30)/Cu(70/120)/П	300	2,1	5,5
	570	4,1	6,4
	770	6,4	13,6

По-друге, величина  $D$  при конденсаційно-стимульованій дифузії у плівках, що отримані переважно електронно-променевим методом, приблизно на порядок більша порівняно з термодифузією

при  $T_e=500-700\text{K}$ . Це пов'язано з насиченням меж зерен атомами іншого сорту на стадії конденсації, що обумовлює зменшення зерномежового масоперенесення при термодифузії.

По-третє, при збільшенні величини середнього розміру зерна в одному із шарів і фіксованому в іншому спостерігається розмірний ефект у коефіцієнті дифузії, а саме із збільшенням значення  $L$  величина  $D$  зменшується, що обумовлено більшою густиною меж зерен у дрібнодисперсних шарах.

І нарешті, величина ефективного коефіцієнта дифузії визначається ступенем взаємної розчинності компонент. Так, вона максимальна для плівок на основі Ni і Co ( $D_{Co \rightarrow Ni} \approx (17-37) \cdot 10^{-19} \text{ м}^2/\text{с}$ ,  $D_{Ni \rightarrow Co} \approx (10-16) \cdot 10^{-19} \text{ м}^2/\text{с}$ ) і мінімальна для систем з низькою взаємною розчинністю ( $D_{Cr \rightarrow Cu} \approx (0,6-0,9) \cdot 10^{-19} \text{ м}^2/\text{с}$ ,  $D_{Cr \rightarrow Co} \approx (1,3-2,9) \cdot 10^{-19} \text{ м}^2/\text{с}$ ) ( $T_e=770\text{K}$ ).

Узагальнення результатів з вивченням процесів взаємної дифузії і фазоутворення показало, що вони узгоджуються між собою. Це дало можливість для кожної конкретної плівкової системи, яка пройшла термообробку, побудувати діаграми структурно-фазового стану (рис.6).

*Рис.6. Схематичне зображення структурно-фазового стану плівкових систем на прикладі двошарових плівок у вихідному стані та після відпалювання до  $T_e=700-800\text{K}$*

**Четвертий розділ** “Температурна залежність опору та температурного коефіцієнта опору” містить дані про дослідження ряду температурних ефектів у питомому опорі ( $\rho$ ) та ТКО плівкових зразків. У першому його підрозділі аналізуються питання, пов'язані з термостабілізацією електрофізичних властивостей. Встановлено, що характер залежності опору ( $R$ ) від температури у процесі термостабілізації подібний для одно- і багатошарових плівок за винятком систем Ni/(V або Cr). В усіх випадках, крім останнього, на залежностях  $R(T)$  під час нагріву протягом першого циклу можна відмітити три характерні ділянки. Зокрема, на першій величина  $R$  у більшості випадків повільно зростає, у той час як на другій спостерігається незворотне зменшення опору з підвищенням температури. Такий результат обумовлений заліковуванням дефектів кристалічної будови у свіжосконденсованих зразках. Обробка експериментальних даних для одношарових плівок на основі методики Венда дозволила отримати спектри дефектів, на яких спостерігається декілька максимумів з енергіями активації заліковування  $E_m < 1\text{eV}$  (наприклад, для плівок ГЦК-металів  $E_{m1}=0,62-0,70$ ;  $E_{m2}=0,75-0,80$  і  $E_{m3}=0,81-0,92\text{ eV}$ ).

У системах на основі Ni і V або Cr величина опору приблизно у 2 рази менша для свіжосконденсованих плівок, ніж після термостабілізації. Останнє виражається в тому, що крива нагрівання при першому циклі проходить нижче решти кривих  $R(T)$ . Такий результат пов'язаний з утворенням у процесі відпалювання високоомних твердих розчинів.

На відміну від одношарових плівок, на температурних залежностях опору і ТКО, для яких спостерігаються особливості при характерних температурах (температура Дебая ( $\Theta_D$ ),  $(2/3)\Theta_D$  (плівки Mo, Cr і Sc), Кюрі (плівки Ni) та Нееля (плівки Cr)) для багатошарових систем існує ряд закономірностей, що обумовлені їх структурно-фазовим станом. Зокрема, на залежностях  $\rho(\square)$  і  $\beta(\square)$ , за рахунок процесів взаємної дифузії і фазоутворення, відбувається розмиття особливостей при характерних температурах. На ступінь цього впливає кількість шарів у системі, максимальна температура відпалювання та співвідношення концентрацій окремо взятих компонент. Наприклад, у плівках Ni/(Cr, V, Co або Ti) згин на кривих  $\rho(T)$  біля точки Дебая зникає, якщо концентрація Ni нижча за концентрацію іншої компоненти системи. Збільшення кількості шарів у двокомпонентних (на основі Cr і Co або Cu) (рис. 7) та трикомпонентних (на основі Cr, Co і Ni) викликає лінійну залежність  $\rho(T)$  і призводить до незалежності від температури величини ТКО.

*Рис. 7. Залежність від температури і кількості шарів ( $n$ ) опору для багатошарової плівкової системи ...Cr(80)/Co(10)/Cr(80)/Co(10)/П*

Таким чином, на відміну від одношарових плівок на температурних залежностях опору і ТКО багатошарових плівкових систем проявляються особливості, що пов'язані з проявом дії не тільки розмірно-температурних ефектів, а і з процесами взаємної дифузії і фазоутворення.

**П'ятий розділ** “Розмірні ефекти у температурному коефіцієнті опору” складається з трьох підрозділів. У першому підрозділі наведені розмірні залежності питомого опору і ТКО одношарових полікристалічних плівок Cu, Ni, Cr, Mo, V, Co, Ti і Sc. Використовуючи ці дані, було проведено роз-

ділення внеску у величину електрофізичних властивостей різних механізмів розсіювання носіїв заряду на основі запропонованої методики. Суть підходу полягає в тому, що, розглядаючи адитивний внесок у загальну величину питомого опору його складових  $\rho_0$ ,  $\rho_{gb}$  і  $\rho_d$ , які відповідно обумовлені розсіюванням в об'ємі зерен, на їх межах і на поверхні плівки, можна записати своєрідне правило адитивності для ТКО:

$$\beta = \frac{\rho_0}{\rho} \beta_0 + \frac{\rho_{gb}}{\rho} \beta_{gb} + \frac{\rho_d}{\rho} \beta_d, \quad (3)$$

де  $\rho_0/\rho$ ,  $\rho_{gb}/\rho$ ,  $\rho_d/\rho$  – статистична вага внеску у ТКО різних механізмів розсіювання;  $\beta_0$  – ТКО масивного зразка.

Враховуючи, що  $\rho_\infty \beta_\infty = \rho_0 \beta_0 + \rho_{gb} \beta_{gb}$ , можна отримати вирази для  $\beta_{gb}$  та  $\beta_d$  у вигляді:

$$\beta_{gb} = \frac{\rho_\infty \beta_\infty - \rho_0 \beta_0}{\rho_{gb}}, \quad \beta_d = \frac{\rho \beta - \rho_\infty \beta_\infty}{\rho_d}. \quad (4)$$

З отриманих розрахунків випливає, що збільшення товщини призводить до зменшення значень  $\rho_d$  і в окремих випадках  $\beta_d$  (таблиця 3). Поряд з цим величини  $\rho_d$ ,  $\rho_{gb}$  і  $\beta_{gb}$  визначаються ступенем дисперсності кристалітів. У дрібнодисперсних зразках проявляється сильніше як поверхневе, так і зерномежеве розсіювання носіїв заряду.

Таблиця 3

Внесок зерномежевого та поверхневого розсіювання у питомий опір і ТКО

Плівки	$\rho_{gb} \cdot 10^8$ , Ом·м	$\beta_{gb} \cdot 10^3$ , К <sup>-1</sup>	$d$ , нм	$\rho_d \cdot 10^8$ , Ом·м	$\beta_d \cdot 10^3$ , К <sup>-1</sup>	$\left  \frac{\rho_{gb}}{\rho_d} \right $	$\left  \frac{\beta_{gb}}{\beta_d} \right $
Mo	15,0	2,8	45	25,7	0,14	0,56	19,7
			185	7,9	0,17	1,88	16,2
Cr	13	0,5	25	14	-2,07	0,92	0,24
			100	4,1	-2,17	3,17	0,23
Ni	5,9	3,3	45	7,05	2,57	0,83	1,28
			230	1,18	2,71	5,00	1,21
			400	1,08	2,96	5,46	1,11
Cu	0,1	1,51	55	3,39	0,97	0,029	1,6
			175	1,50	0,23	0,066	6,6
			355	0,41	0,07	0,243	21,6

Розрахунок параметрів електроперенесення проводився з використанням асимптотичних співвідношень лінеаризованої, ізотропної і тривимірної моделей Тельє-Тоссе-Пішар, моделі Ухлінова-Косаківської та асимптотичних співвідношень, які отримані у рамках теорії Маядаса-Шатцкеса. Порівняльний аналіз та узагальнення отриманих результатів показав наступне.

По-перше, всі моделі забезпечують приблизно однаковий результат, якщо їх граничні співвідношення адекватно відповідають експериментальній ситуації. По-друге, величина параметрів електроперенесення визначається ступенем дисперсності кристалітів. Так, зменшення середнього розміру зерна викликає погіршення дзеркальності зовнішніх поверхонь плівкових зразків (для плівок, в яких  $L < 20$  нм  $p=0$ ; при  $L=(30-100)$  нм  $p=(0,05-0,1)$ ). Для великодисперсних і полікристалічних орієнтованих плівок ( $L > 200$  нм)  $p=(0,2-0,6)$ ). При збільшенні значення  $L$  спостерігається зменшення коефіцієнта розсіювання на межах зерна від  $R \approx 0,7$  (дрібнодисперсні плівки з  $L < 20$  нм) до 0,1-0,2 (великодисперсних моноблочні полікристалічні плівки і дроти), в той час як величина СДВП зростає (рис.8). Такий результат, у випадку СДВП, пояснюється на основі уявлень про адитивність різних механізмів розсіювання у плівкових зразках, а дані для коефіцієнта  $R$  узгоджуються з розрахунковою тенденцією залежності  $R$  від  $L$  (отримана із використанням рівняння Пуассона і уявлень теорії Маядаса-Шатцкеса).

Рис.8. Залежність коефіцієнта зерномежового розсіювання та СДВП від середнього розміру

зерна: ●,○ - Cu; ▲,△ - Ni; ■,□ - Mo; ◆ - Sc;  
× - Co,Cr; ▼ - V,Ti. ○,△,□ – літературні дані

Встановленню загальних закономірностей розмірного ефекту в ТКО багат шарових систем присвячений другий підрозділ. Зокрема, використання спрощеного співвідношення (1) моделі Діміха виразу для ТКО, що отримане нами у рамках макроскопічного підходу, дозволило провести розрахунок залежностей ТКО від товщини окремих шарів ( $d_i$ ) (системи загального типу), фрагменту ( $d_\phi$ ) і їх кількості ( $N$ ) (системи періодичного типу), тенденція яких підтверджується експериментально (рис. 9).

Рис. 9. Порівняння розрахункових на основі співвідношень (1) і макроскопічної моделі (криві 1 і 2 відповідно) та експериментальних (3) величин ТКО для дво-  
(Co(20)/Cr(60)/П) -, ... , -  
п'ятишарових  
(Co(40)/Cr(45)/Ni(45)/Co(20)/Cr(60)/П)  
плівки

Узагальнення отриманих експериментальних і розрахункових результатів (рис. 10) показало наступне. У багат шарових системах періодичного типу значення ТКО від товщини може збільшуватися (якщо  $\beta_1$  та  $\beta_{\infty 1} < \beta_{\infty 2} \dots < \beta_{\infty n}$ ), зменшуватися (при зворотній нерівності) або осцилювати.

Наприклад, для тришарової плівки останнє буде мати місце, якщо  $\beta_1$  і  $\beta_{\infty 1} < \beta_{\infty 2}$ , а  $\beta_2$  і  $\beta_{\infty 2} > \beta_{\infty 3}$  або  $\beta_1$  і  $\beta_{\infty 1} > \beta_{\infty 2}$ , а  $\beta_2$  і  $\beta_{\infty 2} < \beta_{\infty 3}$ . Від загальної товщини фрагмента періодичної системи величина ТКО може як збільшуватися, так і зменшуватися (рис. 11), у той час як від кількості фрагментів вона не залежить.

Найкраще узгодження експериментальних значень ТКО з розрахунковими на основі співвідношень моделі Діміха і макроскопічної моделі спостерігається для плівкових систем, де після термовідпалювання зберігається індивідуальність окремих шарів (плівки на основі Co і Cr та Cu, Cr і Sc).

Рис.10.Якісна залежність ТКО від товщини: 1 – залежності  $\beta(d_1)$  для одношарових плівок; 2-3 –  $\beta(d_2)$  при  $d_1 = \text{const}$ ; 4-6 – залежності  $\beta(d_3)$  при фіксованих значеннях  $d_1$  і  $d_2$

Для систем, в яких відбувається утворення інтерметалідів (Ti/(Ni або Co)) лише біля межі поділу, розрахункові значення відповідають експериментальним з точністю до 40-50%. Подібна ситуація має місце для багат шарових плівок на основі Ni і Co, в яких після відпалювання утворюється твердий розчин в усьому об'ємі. Найгірша відповідність експериментальних значень ТКО спостерігається для плівок на основі Ni і V або Cr, у яких термообробка призводить до часткової або повної втрати індивідуальності шарів і виникнення високоомних твердих розчинів. Для них, як і для систем на основі Ni і Co, прогноз величини ТКО можна проводити з використанням формули для ТКО плівкових сплавів.

Рис. 11. Залежність ТКО від товщини фрагмента: 1 – Co/Ni; 2 – Cr/Co/Ni; 3 – Cr/Co;  
4 – Co/Cr/Co;  
5 – Cr/Co/Cr/Co; 6 – r/Co/Cr/Co/Cr/Co

Один із недоліків розглянутих вище моделей для ТКО пов'язаний із неврахуванням ними розсіювання носіїв на межах поділу шарів. Останнє можна коректно здійснити у рамках напівкласичної

моделі, отриманої на основі теорії Маядаса-Шатцкеса. Асимптотичний вираз ( $\alpha \ll 1$ ) для ТКО багат шарової плівки за умови, що  $P_{ij}=P_{ji}=P$ ,  $Q_{ij}=Q_{ji}=Q$ , має такий вигляд:

$$\beta = \sum_{i \neq j} A_i \beta_{\alpha i} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \alpha_i - \frac{3 \lambda_{0i}}{8 d_i} \left[ (1-P) \left( 1 - \frac{12}{\pi} \alpha_i \right) + \frac{3}{5\pi} Q \frac{\lambda_{0j}}{\lambda_{0i}} \alpha \right] + \frac{3}{8} Q \frac{\lambda_{0j}}{d_i} \frac{\beta_{\alpha j}}{\beta_{\alpha i}} \left[ 1 - \frac{32}{3\pi} \left( \alpha_j + \frac{1}{16} \alpha_i \right) \right] \right\}. \quad (5)$$

Проведена нами апробація зазначеної моделі для ТКО двошарових плівок і багат шарових структур періодичного типу (двошарова плівка тут є фрагментом) на основі металів з низькою взаємною розчинністю показала наступне. По-перше, краще узгодження розрахункових і експериментальних значень ТКО (з точністю до 30%) має місце при припущенні, що коефіцієнт розсіювання на межі поділу ( $P$ ) дорівнює не параметру дзеркальності  $p$ , а коефіцієнту розсіювання на межах зерен  $R$ . По-друге, дані розрахунку на основі співвідношення (5) більш якісно узгоджуються з експериментом за умови, якщо значення параметра  $\alpha_i$  збільшити на декілька відсотків. Така ситуація можлива коли, прозорість меж зерен знижується внаслідок взаємної дифузії. Тоді слід очікувати зменшення ТКО за рахунок збільшення зерномежового і, як наслідок, загального опору плівки. Аналіз розрахункових з використанням виразів цієї моделі розмірних залежностей ТКО (рис.12) свідчить, що тенденція зміни з товщиною узгоджується з отриманими з використанням співвідношень (1) і макроскопічної моделі.

Рис. 12. Розрахункові залежності ТКО від товщини для плівок на основі Sc і Cr

У рамках напівкласичної моделі складно отримати робоче співвідношення, яке б враховувало зміну з температурою параметрів електроперенесення. З цієї причини врахування зазначених ефектів проводилося в рамках феноменологічної моделі, як це було здійснено у випадку тензочутливості (розділ 6). Температурні ефекти в параметрах електроперенесення враховано відповідними термічними коефіцієнтами:  $\beta_{0i} = -\frac{d \ln \lambda_{0i}}{dT}$ ,  $\beta_{pi} = -\frac{d \ln p_i}{dT}$ ,  $\beta_{ri} = -\frac{d \ln r_i}{dT}$  та  $\beta_{Qij} = -\frac{d \ln Q_{ij}}{dT}$ . Отримане співвідношення для ТКО на прикладі тришарової плівкової системи (за умови, що  $i-1=0, 1, 2$ ;  $i+1=2, 3, 4$ ) має такий вигляд:

$$\begin{aligned} \beta = \sum_{i=1}^3 A_i \left\{ \beta_{0i} - \left( 1 - \frac{\beta_i}{\beta_{0i}} \right) \left[ \left( 2\beta_{0i} + \beta_{ri} \frac{\partial \ln m_i}{\partial \ln r_i} + \beta_{pi} \frac{\partial \ln k_i}{\partial \ln p_i} + \beta_{Qi} \frac{\partial \ln k_i}{\partial \ln Q_i} \right) + \right. \\ \left. + \left( 2\beta_{0i-1} + \beta_{ri-1} \frac{\partial \ln m_{i-1}}{\partial \ln r_{i-1}} + \beta_{pi-1} \frac{\partial \ln k_{i-1}}{\partial \ln p_{i-1}} + \beta_{Q(i-1)i} \frac{\partial \ln k_{i-1}}{\partial \ln Q_{(i-1)i}} \right) \frac{\beta_{0i}}{\beta_{0i-1}} + \right. \\ \left. + \left( 2\beta_{0i+1} + \beta_{ri+1} \frac{\partial \ln m_{i+1}}{\partial \ln r_{i+1}} + \beta_{pi+1} \frac{\partial \ln k_{i+1}}{\partial \ln p_{i+1}} + \beta_{Q(i+1)i} \frac{\partial \ln k_{i+1}}{\partial \ln Q_{(i+1)i}} \right) \frac{\beta_{0i}}{\beta_{0i+1}} \right] \right\}. \quad (6) \end{aligned}$$

Розрахунок термічних коефіцієнтів параметрів електроперенесення і похідних, які входять у (6), проводився шляхом обробки експериментальних даних з розмірної залежності для ТКО одношарових плівок при декількох температурах. У результаті було отримано, що значення  $\beta_p$  та  $\beta_r$  порядку  $10^{-4}$ - $10^{-3} \text{ K}^{-1}$ , тобто сумірні з ТКО. Оскільки межі зерен та поділу шарів структурно подібні, то при апробації запропонованого співвідношення вважалося, що величини  $Q_{ij}$  і  $\beta_{Qij}$  приблизно дорівнюють  $r_i$  і  $\beta_{ri}$ . Запропонована модель добре описує експериментальні результати (таблиця 4) для систем, де зберігається індивідуальність окремих шарів, оскільки відхилення від експериментальної величини розрахункового значення ТКО не перевищує 22%.

Таблиця 4

Порівняння експериментальних і розрахункових на основі (6) величин ТКО

Плівкова система ( $d, \text{нм}$ )	$\beta_{\text{експ}} \cdot 10^3, \text{K}^{-1}$	$\beta_{\text{роз}} \cdot 10^3, \text{K}^{-1}$	$\frac{ \beta_{\text{експ}} - \beta_{\text{роз}} }{\beta_{\text{експ}}}, \%$
Cu(30)/Cr(30)/П	1,64	1,61	1,8
Cu(48)/Cr(55)/П	2,58	2,05	20,5
Sc(65)/Cu(43)/П	1,90	1,50	21,0
Sc(93)/Cu(38)/П	1,69	1,32	21,9
Cu(40)/Cr(25)/Cu(55)/П	1,25	1,28	2,4
Cr(20)/Cu(50)/Cr(35)/П	0,99	1,03	4,0
Cr(30)/Cu(30)/Cr(30)Cu(30)/П	1,83	2,05	12,0
Cu(22)/Cr(20)/Cu(22)/Cr(20)/П	1,60	1,70	6,3

Одна із причин, яка впливає на експериментальну величину ТКО та, як наслідок, на відповідність із розрахунковими значеннями на основі розглянутих вище моделей, обумовлена зерномежовою дифузією. У зв'язку з цим в останньому підрозділі проведено аналіз і узагальнення власних і літературних експериментальних даних про вплив на параметри електроперенесення дифузії чужорідних атомів по межах зерен у плівках з покриттям. У результаті було показано, що сегрегація на межах зерен атомів із покриття може призводити як до збільшення, так і до зменшення коефіцієнта розсіювання на межах зерен. Це пов'язано із утворенням або заліковуванням чужорідними атомами дефектів на МЗ, що узгоджуються з результатами аналізу в рамках термодинамічного підходу.

Якщо заліковування дефектів відбувається, то кількість дефектів, яка залишилася після заліковування  $N'_s = Ne^{-\varepsilon/kT}$ , буде менша від рівноважної концентрації вакансій на межі зерна  $N_s = Ne^{-E/kT}$ , а це можливо лише за умови, коли енергія заліковування дефекту чужорідним атомом більша за енергію утворення дефекту атомом базисної плівки, тобто  $\varepsilon > E$ .

**Шостий розділ** “Тензорезистивний ефект” містить в собі результати вивчення розмірних ефектів у тензочутливості одно- та багат шарових плівок металів. На початку розділу наведені деформаційні залежності  $\Delta R/R_0$  від поздовжньої деформації  $\varepsilon_l$  (рис. 13), використовуючи які проводився розрахунок коефіцієнтів поздовжньої тензочутливості. З цих результатів випливає, що у більшості випадків величина  $\gamma_l$  не змінюється після другого – третього циклів “деформації ↔ зняття навантаження” зразків.

Рис. 13. Деформаційна залежність для чотирьох циклів “деформації ↔ зняття навантаження” для плівки Cr(70)/Cu(45)/Sc(55)/П

Отримані експериментальні розмірні залежності КТ для одношарових плівок показують, що із збільшенням товщини його значення може монотонно зменшуватися (плівки Cr, Cu, Sc і Ni) або збільшуватися (плівки Co і Ti), асимптотично наближуючись до  $\gamma_{l\infty} = \lim_{d \rightarrow \infty} \gamma_l$ . Розділення внеску поверхневого, зерномежового і об'ємного механізмів розсіювання на основі співвідношень:

$$\gamma_{gb}^{\rho} = \frac{\gamma_{\infty l}^{\rho} \rho_{\infty} - \gamma_{0l}^{\rho} \rho_0}{\rho_{gb}}, \quad \gamma_{dl}^{\rho} = \frac{\gamma_l^{\rho} \rho - \gamma_{\infty l}^{\rho} \rho_{\infty}}{\rho_d} \quad (7)$$

( $\gamma_l^{\rho}$  – КТ зразка, виражений через питомий опір) – показують, що величина КТ, яка обумовлена поверхневим розсіюванням ( $\gamma_{dl}^{\rho}$ ), найменша у великокристалічних плівках Cu. Останнє пов'язане з найвищою, порівняно з іншими плівками металів, дзеркальністю зовнішніх поверхонь. Значення  $\gamma_{gb}^{\rho}$ , яке обумовлене зерномежовим розсіюванням, найбільше у плівках Co. Таким чином, ефективність прояву зерномежового або поверхневого розсіювання спричиняє відповідний характер розмірних залежностей КТ.

Обробка розмірних залежностей КТ від товщини для одношарових плівок проводилася в рамках тривимірної моделі Тельє-Тоссе-Пішар. У результаті був підтверджений на прикладі плівок Cu і



Со відомий висновок, отриманий для плівок Cr, що досягти узгодження експериментальних і розрахункових значень КТ можна лише за додаткової умови, що деформаційний коефіцієнт середньої довжини вільного пробігу ( $\eta_l$ ) – розмірно залежна величина. Цей висновок також підтверджується при апробації напівкласичної моделі тензоефекту одношарових плівок (рис.14), яка отримана у рамках теорії Маядаса-Шатцкеса. Наприклад, для плівок Sc товщиною від 30 до 250 нм досягти відповідності експериментальних і розрахункових даних можна лише у випадку, якщо  $\eta_l$  також змінюється від  $\eta_l = -0,23$  (для  $d=30$  нм) до  $\eta_l = -0,91$  (для  $d=250$  нм).

Рис.14. Експериментальна (1) та розрахункові (2–4) залежності коефіцієнтів поздовжньої тензочутливості від товщини для плівок Sc:

$$2 - \gamma_{10} = -1,44; \eta_l = -4,04;$$

$$3 - \gamma_{1\infty} = 0,3; \eta_{l\infty} = -2,3;$$

$$4 - \gamma_{10} = 0,3; \eta_l = -0,6$$

Для прогнозу тензорезистивних властивостей багатошарових плівкових систем зручно користуватися, як і у випадку ТКО, макроскопічною моделлю, у рамках якої співвідношення для КТ може бути подано у вигляді:

$$\gamma_l^p = \frac{\sum_{i=1}^n \gamma_{li}^p - \frac{\sum_{i=1}^n d_i (\gamma_{lk}^p + \gamma_{lm}^p + \dots - \mu_{fi}) \rho_k \rho_m}{\sum_{i=1}^n d_i \rho_k \rho_m \dots} - \frac{\sum_{i=1}^n \mu_{fi} d_i}{\sum_{i=1}^n d_i}}{\sum_{i=1}^n \gamma_{li}^p} \quad (8)$$

Незважаючи на свою простоту, ця модель забезпечує узгодження з експериментальними даними з точністю до 30% (таблиця 5).

Таблиця 5

Порівняння експериментальних та розрахункових на основі (8) значень КТ

Плівка (d, нм)	$\gamma_l$		$\left  \frac{\gamma_{експ} - \gamma_{роз}}{\gamma_{експ}} \right , \%$
	експер.	розрах.	
Cr(20)/Co(20)/Ni(20)/П	23,1	24,3	5,2
Cr(40)/Co(30)/Cr(40)/П	22,3	28,3	26,9
Cu(25)/Cr(70)/Cu(50)/П	10,0	7,2	28,0
Cu(34)/Cr(70)/Sc(54)/П	9,9	9,3	6,1
Cu(25)/Cr(80)/Cu(50)/П	9,5	7,1	14,7
Cr(42)/Cu(20)/Sc(145)/П	12,5	11,1	11,2
Cr(85)/Cu(10)/Cr(85)/Cu(10)/П	7,6	5,7	25,0
Ni(50)/Cr(10)/Ni(50)/Cr(10)/П	20,7	22,2	7,2

Аналізуючи експериментальні і розрахункові дані про вплив товщини окремих шарів багатошарової структури загального типу та товщини фрагмента і їх кількості в періодичних системах, можна зазначити наступне. Збільшення загальної товщини приводить до того, що розмірний ефект у КТ стає менш вираженим. Величина КТ монотонно зменшується зі збільшенням товщини фрагмента (рис.15) та не залежить від їх кількості.

Рис. 15. Залежність КТ від  $d_\phi$  для плівкових систем, у яких фрагментом є:

1 – Co/Ni; 2 – Ni/Co/Cr; 3 – Co/Cr; 4 – Co/Cr/Co; 5 – Cr/Cu; 6 – Cr/Cu/Sc; 7 – Cr/Cu/Cr

Розрахунок значень коефіцієнтів тензочутливості багатошарових плівок на основі феноменологічної моделі показує, що вони відповідають експериментальним даним з точністю до 25% (таблиця 6). Відмітимо, що методика визначення деформаційних коефіцієнтів параметрів електроперенесення полягала у обробці результатів про розмірну залежність ТКО для недеформованих і деформованих одношарових плівок у рамках лінеаризованої та ізотропної моделей Тельє-Тоссе-Пішар. Отримані

значення  $p$  і  $r$  використовуються для розрахунку деформаційних коефіцієнтів  $\eta_{pl}$  і  $\eta_{rl}$ . Результат, наведений у таблиці 6, свідчить на користь того, що зміна з деформацією параметрів електроперенесення відіграє суттєву роль у тензочутливості, і це дозволяє використовувати співвідношення феноменологічної моделі для прогнозування тензорезистивних властивостей багатошарових систем.

Таблиця 6

Експериментальні та розрахункові, на основі феноменологічної моделі значення КТ

Плівкова система ( $d$ , нм)	КТ			$\left  \frac{\gamma_{\text{експ}} - \gamma_{\text{роз}}}{\gamma_{\text{експ}}} \right , \%$
	експер.	розрах.		
		*	**	
Cr(70)/Cu(45)/Sc(55)/П	17,5	17,6	8,0	3
Cr(55)/Cu(120)/Sc(250)/П	7,5	8,3	5,9	11
Cu(140)/Cr(65)/Sc(200)/П	8,2	7,1	3,6	13
Cu(25)/Cr(70)/Cu(50)/П	9,5	7,1	4,1	25
Cu(34)/Cr(70)/Sc(54)/П	9,9	9,7	4,9	2
Cu(140)/Sc(124)/Cr(66)/П	7,9	8,3	4,8	18
Cr(42)/Cu(20)/Sc(145)/П	12,5	14,2	8,4	14
Cr(70)/Sc(25)/Cu(145)/П	9,8	8,1	4,7	17

\* – з урахуванням деформаційних дефектів; \*\* – без урахування деформаційних дефектів

Рис. 16. Тривимірні діаграми для КТ для плівкової системи Cr/Cu/Sc/(46)П

Аналізуючи розрахункові розмірні залежності КТ (рис. 16), відмітимо, що при збільшенні товщини окремих шарів системи загального типу спостерігається зменшення значення коефіцієнта поздовжньої тензочутливості. Зроблений висновок узгоджується з відповідними результатами, які отримані на основі макроскопічної моделі.

В останньому підрозділі було проаналізовано результати дослідження тензорезистивного ефекту під кутомзору можливого використання плівкових систем як чутливих елементів тензодатчиків. Таблиця 7 ілюструє, яким чином співвідносяться значення коефіцієнтів поздовжньої тензочутливості в одно- ( $\gamma_{11}$ ,  $\gamma_{12}$  і  $\gamma_{13}$ ) та багатошарових ( $\gamma_l$ ), плівках однакової товщини.

Таблиця 7

Порівняння величини КТ одно- та багатошарових плівок однакової товщини

Плівкова система ( $d$ , нм)	$d$ , нм	$\gamma_{ln}/\gamma_{11}$	$\gamma_{ln}/\gamma_{12}$	$\gamma_{ln}/\gamma_{13}$
Cr(20)/Co(20)/Ni(20)/П	60	1,5	1,4	1,6
Cr(60)/Co(30)/Cr(40)/П	130	3,1	2,2	3,1
Co(50)/Cr(50)/Co(55)/П	155	2,4	3,9	2,4
Ni(75)/Co(75)/Cr(65)/П	215	4,1	4,1	4,1
Cu(25)/Cr(70)/Cu(50)/П	145	4,6	7,7	4,5
Cu(120)/Sc(70)/Cu(75)/П	265	3,7	10,0	3,7
Cu(140)/Cr(80)/Cu(75)/П	295	3,5	6,3	3,5
Cu(140)/Sc(124)/Cr(60)/П	330	6,7	10,0	3,8

Cu(140)/Cr(65)/Sc(200)/П	405	11,1	7,7	4,6
Ni(50)/Cr(10)/Ni(50)/Cr(10)/П	120	2,6	2,6	2,6
Ni(30)/Co(30)/Cr(30)/Ni(30)/Co(30)/Cr(30)/П	180	6,6	6,6	6,6

Порівнюючи ці дані, відмітимо, що багат шарові плівкові системи за рахунок появи у них додаткового механізму розсіювання електронів мають кращі тензорезистивні характеристики порівняно з одношаровими плівками. Тому плівкові системи, у яких зберігається індивідуальність шарів, можуть розглядатися як матеріал для чутливого елемента тензодатчика. Такі сенсори пружних механічних деформацій зможуть використовуватися у тих місцях, де контроль за допомогою традиційних напівпровідникових тензодатчиків неможливий або неефективний.

Для прогнозування тензорезистивних властивостей чутливих елементів на основі багат шарових систем можуть бути використані апробовані нами теоретичні моделі, які забезпечують досить високу точність співвідношення з експериментальними результатами.

У **висновках** подано перелік та стислу характеристику основних результатів роботи.

## ВИСНОВКИ

Проведене у дисертаційній роботі комплексне дослідження дало можливість здійснити подальший експериментальний та теоретичний розвиток наукового напрямку “Розмірні явища в кристалічній структурі та електрофізичних властивостях багат шарових плівкових систем” щодо нанокристалічних зразків, в яких проходять процеси взаємної дифузії і відбувається фазоутворення. В результаті були сформульовані такі узагальнюючі висновки:

1. На основі дослідження розмірних і термодинамічних ефектів у механічних властивостях тонких плівок Cr, Cu, Ni, Co та ін. можна говорити про такі закономірності:
  - макронапруження структурного походження мають величину, що на порядок більше за макронапруження термічного походження;
  - із збільшенням товщини (середнього розміру кристалітів) величина структурних макронапружень зменшується, що узгоджується з теоретичними розрахунками на основі моделі взаємодії зерен;
  - за рахунок зміни внеску міжфазної поверхневої енергії у силу тертя ковзання величина тангенціальної складової адгезії більша нормальної у 1,5–3 рази;
  - величина адгезії зменшується при збільшенні поверхневої енергії плівки і підкладки, і товщини зразків, що можна пояснити на основі уявлень про вільну енергію адгезії і розмірну залежність поверхневої енергії.
2. Вивчення структурно-фазового та елементного складу нанокристалічних багат шарових плівкових систем дозволило встановити такі закономірності:
  - у свіжоосаджених зразках спостерігається індивідуальність окремих шарів, хоча в них і відбувається взаємне проникнення компонентів (переважно по межах зерен) за рахунок конденсаційно-стимульованої дифузії, кількісною характеристикою якої є ефективна температура, еквівалентна температурі термодифузії;
  - у плівкових системах на основі Ni і (Co, Ti, V або Cr) та Ti і Co у результаті термостимульованої дифузії при  $T_e > 700-900$  K відбувається утворення твердих розчинів (плівки Ni/(Co, V або Cr)) переважно на основі ГЦК-решітки Ni та проміжних фаз  $Ni_3Ti$ ,  $NiT_i$ ,  $NiT_i_2$ ,  $Ti_2Co$ ,  $TiCo$ ,  $TiCo_2$  і  $NiV_2$  (плівки Ni/(V або Ti) і Co/Ti) відповідно до діаграми стану спочатку біля межі поділу шарів з подальшим поширенням фазоутворення на увесь зразок у міру збільшення температури і часу відпалювання;
  - у плівкових системах на основі Co і Cr та Co, Cu і Sc, що пройшли термообробку до 650-800 K до великої міри спостерігається індивідуальність окремих шарів, хоча у них і відбувається взаємна зерномежова дифузія; різні варіанти дво- і трикомпонентних плівкових зразків на основі зазначених металів являють собою зручні об’єкти для апробації теоретичних моделей розмірного ефекту у електрофізичних властивостях багат шарових систем;
  - величина ефективного коефіцієнта термодифузії має величину ( $D \sim 10^{-18} \text{ м}^2/\text{с}$ ) для систем з необмеженою взаємною розчинністю компонентів (плівки на основі Ni і Co) і зменшується до  $D \sim 10^{-20} \text{ м}^2/\text{с}$  у міру зниження ступеня розчинності (плівки на основі Cu і Cr).

3. Вперше експериментально показано, що у багатошарових плівкових системах на хід температурних залежностей електричного опору та ТКО впливають дифузійні процеси в об'ємі зразків, які викликають концентраційні ефекти. Зокрема, особливості при характерних температурах (Дебая, Кюрі і Неєля) на температурних залежностях електрофізичних властивостей можуть як проявлятися чітко, так і бути розмитими і повністю вироджуватися, що пов'язано із ступенем взаємного проникнення компонентів системи.
4. На основі вперше запропонованої методики проведено розрахунок внеску в питомий опір, ТКО і КТ об'ємного, поверхневого і зерномежового розсіювання електронів для плівок Ti, V, Cr, Ni, Co, Cu і Mo. Встановлено, що внесок кожного механізму є розмірно залежною величиною від товщини і розміру кристалітів.
5. Вперше проведений порівняльний аналіз величини параметрів електроперенесення в металевих зразках (плівки товщиною до 500 нм і дроти діаметром 0,03-0,5 мм) показав, що їх значення визначається ступенем дисперсності кристалітів. Із зменшенням розміру зерен від 600 до 10 нм величини параметра дзеркальності і СДВП зменшується (від  $p \approx 0,6$  до  $p \approx 0$  і від  $\lambda_0 \approx 90$  до  $\lambda_0 \approx 10$  нм відповідно), а коефіцієнта розсіювання на міжкристалітних межах зростає (від  $R \approx (0,1-0,2)$  до  $R \approx (0,6-0,7)$ ).
6. Встановлено, що одна із причин, яка суттєво впливає на експериментальну величину ТКО багатошарових плівкових структур та узгодження її з теоретично розрахованим значенням, пов'язана з процесами взаємної дифузії і фазоутворення. У системах з низькою взаємною розчинністю (на основі Co і Cr та Co, Cu і Sc) за рахунок зерномежової дифузії змінюються умови розсіювання на межах зерен, що викликає зміну електрофізичних властивостей зразків. Для плівкових систем (на основі Ni і (V, Cr або Co)), в яких утворюються тверді розчини в усьому об'ємі зразка, найкращу відповідність експериментальним даним забезпечує формула для ТКО плівкового сплаву.
7. Вперше на основі теоретичних розрахунків та експериментальних результатів встановлено загальні закономірності у розмірних залежностях ТКО і КТ для багатошарових плівкових систем загального і періодичного типу. Показано, що в межах фрагмента значення ТКО і КТ із збільшенням товщини окремих шарів можуть залежно від співвідношення між собою їх асимптотичних величин  $\beta_{\infty i}$  і  $\gamma_{\infty i}$  монотонно збільшуватися, зменшуватися або осцилювати. Величини ТКО і КТ не залежать від кількості фрагментів і монотонно змінюються із збільшенням їх товщини.
8. Вперше проведено апробацію асимптотичних співвідношень для ТКО одно-, дво- та багатошарових плівок металів, що отримані з використанням модифікованої теорії Маядаса-Шатцкеса. Показано, що для дво- і багатошарових зразків періодичного типу, у яких зберігається індивідуальність шарів (на основі Co і Cr та Co, Cu і Sc), експериментальні та розрахункові значення ТКО узгоджуються з точністю до 30%.
9. Врахування температурних і деформаційних ефектів для параметрів електроперенесення у рамках феноменологічних моделей для ТКО і КТ дозволило досягти узгодження експериментальних даних з розрахованими з точністю до 22-25%, що свідчить про суттєвий вплив зазначених явищ на електрофізичні властивості.
10. Вперше експериментально показано, що багатошарові плівкові системи мають у декілька разів вищу (від 1,4 до 16,7) чутливість до деформації, ніж одношарові металеві плівки, що обумовлено появою у них додаткового механізму розсіювання носіїв заряду – меж поділу між шарами. У зв'язку з цим багатошарові металеві плівки на основі металів Co і Cr та Co, Cu і Sc з низькою взаємною розчинністю можуть бути використані як чутливі елементи для тензодатчиків.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Protsenko I., Odnodvoretz L., **Chornous A.** Electroconductivity and tensosensibility of multilayer films // Металлофиз. новейшие технол.–1998.–Т.20, №1.– С. 36–44.
2. Проценко И.Е., **Чорноус А.Н.**, Шовкопляс О.В. Исследование электрофизических свойств двухслойных пленочных систем на основе титана, кобальта, никеля // ВАНТ. Серия Вакуум, чистые материалы, сверхпроводники.–1998.–№2(3)–3(4).– С. 102–106.

3. Lasyuchtnko O.B., Protsenko I.Yu., **Chornous A.M.** Contribution of the grain-boundary and surface scattering of conductivity electrons to the size effect of tensorsensibility // *Functional Materials.*—1999.—V.6, №5.— P. 880–883.
4. Проценко С.И., **Чорноус А.Н.** Методика розділення вклада зернограничного і поверхнового розсіяння електронів в величину удельного опору і термічного коефіцієнта опору металічних плівок // *ВАНТ. Серія Вакуум, чисті матеріали, надпровідники.*—1999.—№2(10).— С. 107–109.
5. Белоус Е.А., **Чорноус А.Н.** Зернограничне розсіяння електронів в плівках міді // *ВАНТ. Серія Вакуум, чисті матеріали, надпровідники.*—1999.—№1(9).— С. 76–78.
6. Однорець Л.В., Проценко С.І., **Чорноус А.М.** Про можливість макроскопічної апроксимації мікроскопічної моделі Дімміха // *Вісник СумДУ.*— 1999.— № 2(13).—С. 18–21.
7. Experimental test of a three-dimensional model for electrophysical properties of metal films / **A.M. Chornous**, N.M. Oranasyuk, A.D. Pogrebnyak., I.Yu. Protsenko // *Jpn. J. Appl. Phys.*— 2000.— V.39, №12B.— L1320–L1323.
8. Білоус О.А., Дехтярук Л.В., **Чорноус А.М.** Розмірно-кінетичні ефекти у полікристалічних металевих плівках Cu та Ni // *Металлофіз. новіші технології.*—2001.— Т.23, № 1.—С.43–50.
9. Розмірні ефекти в термічному коефіцієнті опору та коефіцієнті розсіювання електронів на межі зерна в тонких металевих плівках / О.А. Білоус, Л.В. Дехтярук, С.І. Проценко, **А.М. Чорноус** // *Вісник СумДУ. Серія Фізика, математика, механіка.*— 2001.— № 3(24),4(5).— С.—67–73.
10. Проценко І.Ю., **Чорноус А.М.**, Шпетний І.О. Електрофізичні властивості двошарових плівок на основі Co, Cr, Ni в умовах взаємної дифузії атомів // *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика.*—2001.— № 10.— С. 199–206.
11. Вплив дифузійних процесів на електрофізичні властивості металевих плівок з покриттям / І.Ю. Проценко, Ю.М. Овчаренко, **А.М. Чорноус**, Т.П. Говорун // *Вісник СумДУ. Серія Фізика, математика, механіка.*— 2002.— №5–6.— С.50–56.
12. Проценко С.И., Токмань В.В., **Чорноус А.Н.** Формирование многослойных пленочных структур с отрицательным термическим коэффициентом сопротивления и увеличенным коэффициентом тензочувствительности // *Вестник Воронежского ГТУ. Серія Материаловедение.*— №1.11.— 2002.— С.—17–19.
13. Фазоутворення та структурні зміни в двошарових плівкових системах Ti/Co і Ni/(Ti, V, Co, Cr) у процесі ізохронного відпалу / І.Ю. Проценко, В.В. Токмань, **А.М. Чорноус**, І.О. Шпетний // *Металлофіз. новіші технології.*—2003.— Т.25, № 3.—С.319–331.
14. Проценко С.І., **Чорноус А.М.** Дослідження і прогнозування тензорезистивних властивостей плівкових систем на основі Cr, Cu, і Sc // *Металлофіз. новіші технології.*—2003.— Т.25, №5.—С.587–601.
15. Білоус О.А., **Чорноус А.М.** Електрофізичні властивості плівок молібдену в умовах внутрішнього розмірного ефекту // *ВАНТ. Серія Вакуум, чисті матеріали, надпровідники.*—2003.—№5.— С.146–151.
16. Проценко І.Ю., **Чорноус А.М.**, Шпетний І.О. Дифузійні процеси у двошарових металевих плівках // *Вісник Львівського університету. Серія Фізична.*—2003.—Вип.36.—С.116–122.
17. Білоус О.А., Проценко І.Ю., **Чорноус А.М.** Вплив ступеня дисперсності кристалітів на параметри електропереносу металевих матеріалів // *ФХТТ.*—2003.—Т.4, №1.—С.48–57.
18. Проценко С.І., **Чорноус А.М.** Температурні ефекти в термічному коефіцієнті опору багатошарових плівкових систем // *Вісник СумДУ. Серія Фізика, математика, механіка.*—2003.—№10(56).—С.43–51.
19. Вплив розсіювання електронів на міжфазній межі на величину коефіцієнта тензочутливості металевих плівок / Є.О. Забіла, Л.В. Однорець, С.І. Проценко, **А.М. Чорноус** // *Вісник СумДУ. Серія Фізика, математика, механіка.*—2003.—№.8(54)—С. 71–78.
20. Conductivity and temperature coefficient of resistance of two-layer polycrystalline films / L. Dekhtyruk, S. Protsenko, **A. Chornous**, I. Shpetnyi // *Ukr. J. Phys.*—2004.—V. 49, № 6.—P.587–597.
21. **Chornous A.**, Protsenko I., Shpetnyi I. Electrophysical properties of double-layer nickel-base and vanadium-base films within the intermediate temperature range // *Cryst. Res. Technol.*— 2004.—V.39, №7.— P.602–610.

- 22.Ефект тензочутливості у тонких металевих полікристалічних плівках / Л.В. Дехтярук, Є.О. Забіла, С.І. Проценко, **А.М. Черноус** // *Металлофиз. новейшие технол.* –2004.– Т.26, № 10.–С.–1333–1345.
- 23.Some thermodynamic effect in thin films adhesion / **A.M. Chornous**, G.V. Kirik, I.Yu. Protsenko, O.D. Stadnik // *Functionals Materials.*–2005.–V.12,№1.–P.51–54.
- 24.Стадник А.Д., Кирик Г.В., **Черноус А.Н.** Технология получения и свойства покрытий на композиционных материалах // *Металлофиз. новейшие технол.*–2005.–Т.27, №8.– С. 1027–1037.
- 25.Проценко С.І., Синашенко О.В., **Черноус А.М.** Внесок температурних ефектів у термічний коефіцієнт опору багатошарових плівкових систем // *Металлофиз. новейшие технол.*–2005.–Т.27, №12.– С.1621 –1633.
- 26.Conductivity and temperature coefficient of resistance of multilayer polycrystalline films / L. Dekhtyruk, I. Protsenko, **A. Chornous**, M. Marszalek // *Cryst. Res.Technol.*– 2006 .–V.41,№4.– P.388–399.
- 27.А.с. 0031144А Україна, 6G01B7/16. Чутливий елемент тензодатчика / Л.В. Однодворець, С.І. Проценко, **А.М. Черноус.**– № 98073761; Заявлено 14.07.1998; Опубл. 15.12.2000, Бюл. N 7–II.– С. 1.190.
- 28.Электрофизические свойства одно– и многослойных пленок металлов. I. Удельное сопротивление и тензочувствительность однослойных пленок / Л.В. Однодворец, Ю.М. Овчаренко, Н.Н. Опанасюк, И.Е. Проценко, **А.Н. Черноус** // *Вісник СумДУ .*– 1996.– № 1(5).–С.9–17.
- 29.Однодворец Л.В., Проценко И.Е., **Черноус А.Н.** Тензочувствительность многослойных металлических пленок // *Труды Украинского вакуумного общества.*– Харьков: УВО, 1996.– Т.2 – С. 225–229.
- 30.**Черноус А.М.** Тензочувствительность тонких плёнок на основе переходных d–металлов // *Вісник СумДУ.*– 1997.– № 1(7).–С.87–94.
- 31.Особенности размерного эффекта в электропроводности двохшаровых плёнок с различным температурным коэффициентом опору / **А.М. Черноус**, Ю.М. Овчаренко, С.І. Проценко, О.В. Шовкопляс // *Вісник СумДУ.*– 1997.– № 1(7).–С.95–99.
- 32.Chemical transformations in metal films under influence of electrons / I. Protsenko, **A. Chornous**, L. Odnodvoretz, N. Opanasyuk, O. Shovkoplyas // *Materials International Conference on Electron Beam Technologies.* –Varna: IE, 1997.– P. 239–244.
- 33.Chemical and structure transition in metallic films under influence of electrons / I. Protsenko, O. Shovkoplyas, **A. Chornous**, Y. Ovcharenko // *Materials International Sumposium IIST97.*– Lublin: TUL, 1997.–P. 160–164.
- 34.Розмірні ефекти в електричних властивостях тонких плівок титану / О.В. Шовкопляс, **А.М. Черноус**, О.Б. Ласюченко, І.Ю. Проценко // *Труды Украинского вакуумного общества.*– Харьков: УВО, 1997.– Т.3 – С.533–536.
- 35.Електрон–фононна взаємодія у конденсатах міді / О.А. Білоус, В.С. Кшнякін, В.О. Черкаська, **А.М Черноус** // *Вісник СумДУ .*– 1999.– № 2(13).–С. 22–25.
- 36.Білоус О.А., Токмань В.В., **Черноус А.М.** Вплив товщини конденсатів Ni,Cu та Mo на структурні характеристики // *Тонкие пленки в электронике.* – Харьков: ННЦ ХФТИ, 2001.– С. 177–181.
- 37.Вплив статичної деформації на фізичні процеси у металевих плівках О.Б. Ласюченко, І.Ю. Проценко, В.А. Хворост, **А.М. Черноус** // *Тонкие пленки в электронике.* – Харьков: ННЦ ХФТИ, 2001.– С. 122–125.
- 38.Токмань В.В., Проценко И.Е., **Черноус А.Н.** Особенности кристаллической структуры и электрофизических свойств пленочных материалов на основе Ni, Ti и Co // *Тонкие пленки в электронике.* – Харьков: ННЦ ХФТИ, 2001.– С.23–26.
- 39.Проценко И.Е., **Черноус А.Н.**, Хворост В.А. Фазообразование, диффузионные процессы и электрофизические свойства многослойных металлических пленочных структур // *Тонкие пленки в оптике и электронике.*– Харьков:ННЦ ХФТИ, 2002.–С. 6–22.
- 40.Проценко С.И., **Черноус А.Н.** Особенности размерного эффекта тензочувствительности в одно и трехслойных пленках на основе Cr, Cu и Sc // *Тонкие пленки в оптике и электронике.* – Харьков:ННЦ ХФТИ, 2002.–С. 136–140.

41. Маршалек М., Проценко С.И., **Чорноус А.Н.** Структурно–фазовое состояние двухслойных пленок Co/Cu и Co/Cr // Тонкие пленки в оптике и электронике.–Харьков:ННЦ ХФТИ, 2003.–С. 205–208.
42. **Чорноус А.М.** Загальні закономірності розмірного ефекту в електрофізичних властивостях багатошарових металевих плівок // Матеріали 6-й Международной конференции "Физические явления в твердых телах".– Харьков: НУ, 2003.–С.27.
43. Диффузионные процессы в нанопленочных системах на основе Cr и Cu, Cr и Fe / В.В Бирик, Л.В. Дехтярук, С.И. Проценко, **А.Н. Чорноус** // Матеріали V Международной конференции "Нелинейные процессы и проблемы самоорганизации в современном материаловедении".– Воронеж: ВГТИ, 2004. – Т.1. –С.163-164.

### АНОТАЦІЯ

**Чорноус А.М. Розмірні ефекти в електрофізичних властивостях нанокристалічних плівкових систем в умовах взаємної дифузії та фазоутворення. – Рукопис.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07-фізика твердого тіла.–Сумський державний університет.– Суми, 2006.

Дисертація присвячена встановленню загальних закономірностей у структурно-фазовому стані та електрофізичних властивостях (температурний коефіцієнт опору (ТКО) і коефіцієнт поздовжньої тензочутливості (КТ)) багатошарових металевих плівкових систем. Комплексне дослідження фазового складу, кристалічної структури і дифузійних процесів для систем, які у масивному стані характеризуються різним типом взаємної розчинності компонент, показало, що у плівкових зразках на основі Ni і Co, Ti, V або Cr та Ti і Co у результаті дифузії після відпалювання до температури  $T_0 > 700-800$  К відбувається утворення твердих розчинів (плівки Ni/(Co, V або Cr) та Co/Cu)) та інтерметалідів (плівки Ni/(V або Ti) і Co/Ti) у відповідності до діаграми стану спочатку біля межі поділу шарів з подальшим поширенням твердофазних реакцій на увесь зразок у міру збільшення температури і часу відпалювання. У плівках на основі Co і Cr та Cu, Sc і Cr за таких умов термообробки зберігається індивідуальність шарів. На основі запропонованої методики проведено розрахунок внеску в питомий опір, ТКО і КТ одношарових плівок об'ємного поверхневого і зерномежового розсіювання електронів. Проведений порівняльний аналіз величин параметрів електроперенесення, з якого випливає, що їх значення визначається ступенем дисперсності кристалітів. Встановлено загальні закономірності у розмірних залежностях ТКО і КТ для багатошарових металевих систем загального і періодичного типу. Показано, що в межах фрагмента значення електрофізичних властивостей залежно від співвідношення між собою їх асимптотичних величин зі збільшенням товщини окремих шарів можуть монотонно збільшуватися, зменшуватися або осцилювати. Встановлено, що існує кореляція між величинами електрофізичних властивостей і структурно-фазового стану плівкових систем. На основі порівняльного аналізу результатів апробації макроскопічних, напівкласичних і феноменологічних моделей для ТКО і КТ зроблено висновок, що врахування температурних і деформаційних ефектів для параметрів електроперенесення дозволяє досягти кращого узгодження експериментальних даних з теоретично розрахованими.

**Ключові слова:** розмірний ефект, багатошарові плівкові системи, фазоутворення, дифузійні процеси, температурний коефіцієнт опору, коефіцієнт тензочутливості, параметри електроперенесення.

### АННОТАЦИЯ

**Чорноус А.Н. Размерные эффекты в электрофизических свойствах нанокристаллических пленочных систем в условиях взаимной диффузии и фазообразования. – Рукопись.**

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07-физика твердого тела. –Сумский государственный университет.– Сумы, 2006.

Диссертация посвящена установлению общих закономерностей в структурно-фазовом состоянии и электрофизических свойствах (температурный коэффициент сопротивления (ТКС) и коэффициент продольной тензочувствительности (КТ)) многослойных металлических пленочных систем. Комплексное исследование фазового состава, кристаллической структуры и диффузионных процессов для систем, которые в массивном состоянии характеризуются различным типом взаимной растворимости компонентов, показало, что у пленочных образцах на основе Ni и Co, Ti, V или Cr а также Ti и Co в результате диффузии после отжига до температуры  $T_0 > 700-800$  К происходит образование твердых растворов (пленки Ni/(Co, V или Cr); Co/Cu)) и интерметаллидов (пленки Ni/(V или Ti) и Co/Ti) в со-

ответствии с диаграммой состояния сначала возле границы раздела слоев с дальнейшим распространением твердофазных реакций на весь образец при увеличении температуры и времени отжига. У пленках на основе Co и Cr, а также Cu, Sc и Cr при таких условиях термообработки сохраняется индивидуальность слоев. С использованием предложенной методики произведено расчет вклада в удельное сопротивление, ТКС и КТ однослойных пленок объемного, поверхностного и зернограничного рассеивания электронов. Сравнительный анализ величин параметров электропереноса показал, что их значения определяются степенью дисперсности кристаллитов. Установлено общие закономерности в размерных зависимостях ТКС и КТ для многослойных металлических систем общего и периодического типа. Показано, что в границах фрагмента значения ТКС и КТ, в зависимости от соотношения между собой их асимптотических величин, с увеличением толщины отдельных слоев могут монотонно увеличиваться, уменьшаться или осцилировать. Установлено, что существует корреляция между величинами электрофизических параметров и структурно-фазовым составом пленочных систем. На основе сравнительного анализа результатов апробации макроскопической, полуклассической и феноменологической моделей для ТКС и КТ сделан вывод, что учет температурных и деформационных эффектов для параметров электропереноса позволяет достичь лучшего согласования экспериментальных данных с теоретически рассчитанными.

**Ключевые слова:** размерный эффект, многослойные пленочные системы, фазообразование, диффузионные процессы, температурный коэффициент сопротивления, коэффициент тензочувствительности, параметры электропереноса.

## THE SUMMARY

**A.M. Chornous. Size Effects in Electrophysical Properties of Nanocrystalline Film Systems under the Conditions of Interdiffusion and Phase-Formation. – Manuscript.**

Thesis for a doctor's degree of physical and mathematical science by speciality 01.04.07- solid state physics. – Sumy State University, Sumy, 2006.

This thesis is devoted on determination of the general principles of structural and phase state and electrophysical characteristics (the thermal coefficient of resistance (TCR) and the coefficient of longitudinal deformation (CD)) of multilayer metal film systems. Comprehensive research of phase structure, crystalline structure and diffusion processes for the systems, which in bulk state are characterized by various types of mutual solubility of the components, showed that in film specimens on the basis of Ni and Co, Ti, V or Cr, as well as Ti and Co, as a result of diffusion after annealing up to the temperature  $T_a > 700-800$  K, formation of solid solutions (Ni/(Co, V or Cr) films; Co/Cu films) and intermetallides (Ni/(V or Ti) films and Co/Ti films) takes place close by the boundary of layers from the beginning with subsequent spread of solid-phase reactions through the whole specimen when increasing the temperature and time of annealing in accordance with the constitution diagram. In the films on the basis of Co and Cr, as well as Cu, Sc and Cr, individuality of layers remains under such conditions of thermal treatment. Using the proposed technique, calculation of influence of volume, surface and grain-boundary scattering of electrons on the resistivity, TCR and CD of single-layer films was performed. Comparative analysis of the electron transfer parameters proved that their values depend upon the degree of dispersion of crystallites. General regularities of size effects on TCR and CD for the general-type and periodic-type multilayer metal film systems are stated. It is shown in this thesis that within the boundaries of a fragment, the values of TCR and CD, depending on the interrelation of their asymptotic values, may monotonically increase, decrease or oscillate с увеличением толщины отдельных слоев It is stated that there exist correlation It is also stated that there is correlation between the values of the electrophysical parameters and the phase-structure of the film systems. On basis of the comparative analysis of the approbation results of macroscopic, semiclassical and phenomenological models for TCR and CD the following conclusion is drawn that taking into account temperature and deformation effects for the electron transfer parameters gives opportunity to obtain better agreement of the experimental data with the theoretically calculated data.

**Key words:** size effect, multilayer metal film systems, phase formation, diffusion processes, thermal coefficient of resistance, coefficient of deformation, electron transfer parameters.



Підп. до друку 24.03.2006.  
Тираж 130 прим.  
Замовлення № 214

Формат 60×84/16.  
Папір офсетний.  
Друк офсетний.

Ум. друк. арк. 2,3.  
Обл. - вид. арк. 1,5.

Вид-во СумДУ. Свідоцтво ДК №2365 від 08.12.2005р.  
вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007.

Друкарня СумДУ.  
вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007.