МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ЕЛЕКТРОПРОВІДНОСТІ В ПОЛІКРИСТАЛІЧНИХ МЕТАЛЕВИХ ПЛІВКАХ

Білоус О.А., доцент

Серед моделей розмірного ефекту електропровідності полікристалічних плівок слід відзначити роботи, що базуються на теорії Майядаса-Шатцкеса (МШ).

В ній вводиться припущення, що межі всіх зерен утворюють сукупність перпендикулярних зовнішнім поверхням плівки хаотично розміщених площин, які розсіюють електрони, причому відстань між ними підчиняється гаусовському розподілу та дорівнює середньому розміру кристалів (L).

Співвідношення для питомої провідності (σ) в рамках цієї моделі має вигляд

$$\frac{\sigma}{\sigma_\infty} = \frac{\rho_\infty}{\rho} = f(\alpha) - \frac{3}{\pi k}\int_0^{\pi/2} d\Phi \cos^2\Phi \int_0^t dt \frac{(t-t^3)(1-\varepsilon)}{H^2(t,\Phi)} \cdot Q(\varepsilon) \quad (1)$$

де $\sigma_\infty, \rho_\infty$ - питомий опір і провідність нескінченого товстого зразка; $f(\alpha),\ \alpha = \lambda L^{-1} \cdot R(1-R)^{-1}$, R – функція, параметр та коефіцієнт зерномежевого розсіювання, $k = \frac{d}{\lambda}$ - приведена товщина (d – товщина; λ - середня довжина вільного пробігу носіїв електричного струму; t, Ф – змінні інтегрування, пов’язані з кутом підльоту носіїв струму до зовнішніх поверхонь та меж зерен відповідно;

$$Q(\varepsilon) = \frac{2 - p_1 - p_2 + (p_1 + p_2 - 2p_1 p_2)\varepsilon}{1 - p_1 p_2 \varepsilon^2},$$

p_n - коефіцієнти дзеркальності зовнішніх поверхонь.

Дана модель дуже складна щодо обробки даних експерименту. Спроба спростити дане відношення групою французьких вчених Темє, Тоссе та Пішарош привели до лінеаризованої та ізотермічної моделей. Вони базуються на припущеннях що розміру зерна L відносно товщини полікристалічного зразка d.

Вирази лінеаризованої та ізотермічної моделей є послідовними і дозволяють проводити розрахунок параметрів електропереносу, якщо плівки задовольняють пред’явленим до них вимогам. Так, зокрема, середній розмір зерна не повинен залежати від товщини, що експериментально досягти не завжди вдається.

У зв'язку з тим в рамках моделі МШ отримані асимптотичні вирази для питомого опору та температурного коефіцієнту опору для різних граничних випадків значень провідної товщини (k>>1, k<<1) та параметра зерномежевого розсіювання ($\alpha \ll 1, \quad \alpha \gg 1$), які можна використовувати як функцію точки при обробці експериментальних результатів у реальних плівкових зразках.

Так для граничного випадку k>>1 та $\alpha \ll 1$, який відповідає моно блочним плівкам Cuта Niвирази мають вигляд:

$$\frac{\sigma}{\sigma_\infty} = \frac{\rho_\infty}{\rho} = 1 - \frac{3}{2}\alpha - \frac{3(2 - p_1 - p_2)}{16k}\left[1 - \frac{32}{3\pi}\alpha\right]$$

Допускаючи умову $\lambda = const$ та змінюючи величину α для ожної конкретної товщини, вдалось реалізувати спів падання розрахункових і експериментальних результатів в данній точці (при данній товщині).