

МЕТОДИКА РАЗДЕЛЕНИЯ ВКЛАДА ЗЕРНОГРАНИЧНОГО И ПОВЕРХНОСТНОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ВЕЛИЧИНУ УДЕЛЬНОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ И ТЕРМИЧЕСКОГО КОЭФФИЦИЕНТА СОПРОТИВЛЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК

С. И. Проценко, А. Н. Черноус
Сумский государственный университет

Предложена методика разделения вклада зернограничного и поверхностного рассеяния электронов в размерный эффект удельного сопротивления и термического коэффициента сопротивления пленки металлических пленок Cr, Co, Ni, Cu и Re. Получены соотношения, которые позволяют количественно оценить величины ρ_{20} , ρ_2 и β_{20} , β_2 .

1. ВСТУПЛЕНИЕ

При исследовании электрофизических свойств пленочных образцов необходимо учитывать кроме рассеяния электронов проводимости в объеме пленки на фононах и дефектах (обуславливает удельное сопротивление ρ_0) также рассеивание на внешних поверхностях пленки (ρ_d) и границах зерен (ρ_{20}). Известно, что последние два механизма рассеяния носят название внешнего и внутреннего размерного эффектов соответственно. Считая вклад трех механизмов рассеяния аддитивно, можно записать выражение для удельного сопротивления пленки (ρ) в таком виде

$$\rho = \rho_0 + \rho_{20} + \rho_d. \quad (1)$$

где величина $\rho_0 + \rho_{20} = \rho_{\infty}$ в работе [1] обозначена через ρ_2 и соответствует удельному сопротивлению поликристаллической пленки бесконечной толщиной (т.е. $d \rightarrow \infty$). Кроме того, необходимо подчеркнуть, что объемное удельное сопротивление ρ_0 соответствует монокристаллу с таким же типом и концентрацией дефектов, как и в объеме зерна поликристаллической пленки (в наших расчетах мы будем использовать величины ρ_0 для массивных монокристаллов или, при отсутствии таковых, - для массивного полностью рекристаллизованного поликристалла [2]).

Воспользовавшись соотношением (1), можно решить вопрос о разделении вклада в удельное сопротивление и термический коэффициент сопротивления (ТКС) поверхностного и зернограничного рассеяния электронов.

2. ПОЛУЧЕНИЕ ОСНОВНЫХ СООТНОШЕНИЙ

Исходя из определения ТКС через удельное сопротивление и после дифференцирования по температуре соотношение (1) можно записать:

$$\beta = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT} = \frac{d \ln \rho}{dT}$$

или

$$\beta = \frac{1}{\rho} \left(\frac{d\rho_0}{dT} + \frac{d\rho_{20}}{dT} + \frac{d\rho_d}{dT} \right) \quad (2)$$

После домножения левой и правой части на ρ и домножения и деления каждого слагаемого в правой части соответственно на ρ_0 , ρ_{20} и ρ_d получаем:

$$\beta\rho = \beta_0\rho_0 + \beta_{20}\rho_{20} + \beta_d\rho_d. \quad (3)$$

В случае толстых пленок ($d \rightarrow \infty$) последним слагаемым можно пренебречь, а соотношение (3) переписать таким образом:

$$\beta_2\rho_2 = \beta_0\rho_0 + \beta_{20}\rho_{20}. \quad (4)$$

Учитывая, что $\beta_{\rho} = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT}$, получаем:

$$\frac{d\rho_{\rho}}{dT} = (\beta_2\rho_2 - \rho_0\beta_0)$$

$$\rho_{20}(T) = (\beta_2\rho_2 - \beta_0\rho_0)T - (\rho_{20})_0. \quad (5)$$

где $(\rho_{20})_0$ - постоянная интегрирования, равная величине ρ_{20} при $T \rightarrow 0$ К.

Величину $(\rho_{20})_0$ можно оценить с помощью соотношения:

$$(\rho_{20})_0 \approx \rho_2(0) - \rho_0(0) \approx \rho_d(0). \quad (5)$$

где $\rho_2(0)$ и $\rho_0(0)$ - остаточное сопротивление поликристаллических пленочных и монокристаллических массивных образцов.

Воспользовавшись определением β_{20} и соотношением (5), получаем рабочую формулу:

$$\beta_{\rho_2}(T) = \frac{(\beta_2\rho_2 - \beta_0\rho_0)}{(\beta_2\rho_2 - \beta_0\rho_0)T + (\rho_{20})_0} - \frac{1}{T}. \quad (7)$$

на основе которой будет производиться расчет.

Для нахождения $\beta_d(T)$ соотношение (3) запишем в таком виде:

$$\beta\rho = \beta_2\rho_2 - \beta_d\rho_d, \quad (3')$$

и после некоторых преобразований получаем выражения для $\rho_d(T)$ и $\beta_d(T)$.

$$\rho_d(T) = (\beta\rho - \beta_{gh}\rho_g)T + (\rho_d)_0$$

$$\beta_d(T) = \frac{(\beta\rho - \beta_{gh}\rho_g)T + (\rho_d)_0}{(\beta\rho - \beta_{gh}\rho_g)T + (\rho_d)_0} \quad (8)$$

где $(\rho_d)_0$ - постоянная интегрирования, равна ρ_d при $T \rightarrow 0$ К. Ее величину можно оценить на основе соотношения:

$$(\rho_d)_0 - \rho(0) - \rho_g(0) \approx \rho(0) \quad (9)$$

Соответственно для $\rho_d(T)$ исходя из (1) можно написать такое соотношение:

$$\rho_d(T) - \rho(T) - \rho_g(T) \quad (10)$$

3. РАСЧЕТ ρ_{gh} , β_{gh} , ρ_d И β_d

Используя экспериментальные результаты, полученные нами и частично опубликованные в работах [3-5], произведем расчет относительного вклада зернограничного и поверхностного рассеяния электронов в удельное сопротивление и ТКС пленок Cr, Co, Ni, Cu и Re.

В таблице 1 представлены значения величин, используемых при расчетах.

Таблица 1. Экспериментальные значения удельного сопротивления и ТКС для пленок и массивных образцов

Металл	$\rho_0 \times 10^8$, Ом м [2]	$\beta_0 \times 10^4$, K ⁻¹ [2]	$\rho_g \times 10^8$, Ом м	$\beta_g \times 10^4$, K ⁻¹	$\rho_d(0) \times 10^8$, Ом м	$\rho_g(0) \times 10^8$, Ом м
Cr	13	25,0	26	15,0	0,66	11,0
Co	6,5	63,0	50	30,0	0,07	0,10
Ni	7,1	55,0	10	40,0	0,1	0,86
Cu	1,5	43,0	1,6	41,0	0,15	0,34
Re	21,1	31,1	58	20,0	<0,10	0,10

Таблица 2. Расчет относительного вклада зернограничного и поверхностного рассеяния электронов в удельное сопротивление и ТКС

Металл	$\rho_{gh} \times 10^8$, Ом м	$\beta_{gh} \times 10^4$, K ⁻¹	d, нм	$\rho \times 10^8$, Ом м	$\beta \times 10^4$, K ⁻¹	$\rho(0) \times 10^8$, Ом м	$\rho_d \times 10^8$, Ом м	$\beta_d \times 10^4$, K ⁻¹	$\frac{\rho_{gh}}{\rho_d}$	$\frac{\beta_{gh}}{\beta_d}$
Cr	12,29	5,20	36	56,67	5,90	48,17	30,67	-1,5	0,4	3,4
			60	40,83	8,42	31,83	14,83	-2,4	0,8	2,2
			76	37,50	9,00	25,83	11,50	-3,9	1,1	1,3
			100	35,00	9,09	23,35	9,00	-7,0	1,4	0,7
			200	30,83	13,82	19,66	4,83	3,7	2,5	1,4
Co	32,70	33,3	45	93,97	23,60	12,0	43,97	21,4	0,7	1,6
			60	74,78	25,60	3,5	24,78	26,2	1,3	1,3
			110	69,56	32,10	0,1	19,56	33,2	1,7	1,0
Ni	1,04	9,11	15	12,45	27,73	2,86	2,45	-151	0,4	0,06
			37	11,41	34,00	1,81	1,41	-20,4	0,7	0,45
			83	10,75	34,13	0,86	0,75	33,3	1,4	0,27
Cu	0,19	1,41	55	3,95	20,00	2,40	2,37	5,7	0,08	0,24
			75	3,61	24,00	2,30	2,03	8,3	0,10	0,16
			130	3,11	26,00	2,10	1,53	7,2	0,13	0,19
			380	1,60	38,00	0,34	0,01	33,2	20	0,04
Re	15,21	33,11	21	257,57	7,41	193,94	199,57	3,4	0,08	9,7
			54	112,12	12,22	75,15	54,12	2,5	0,28	13,2
			100	69,70	15,92	40,00	11,70	-1,3	1,30	25,5

Укажем, что необходимые значения $\rho(0)$ и $\rho_g(0)$ были получены нами путем экстраполяции от 80–100К на 0 К экспериментальных зависимостей $\rho(T)$ для пленочных и массивных образцов. Величина $\rho_g(0)$ соответствует значению $\rho(0)$ для пленки максимально исследуемой толщины.

В таблице 2 представлены результаты расчета ρ_{gb} , β_{gb} , ρ_d и β_d при 300К по соотношениям (5), (7), (8) и (10).

Из полученных результатов вытекают такие выводы.

Вклад поверхностного рассеяния электронов в удельное сопротивление при не зависшем от толщины значении ρ_{gb} проявляется сильнее при относительно малых толщинах. При увеличении толщины роль этого рассеяния уменьшается и основным механизмом становится, как и в массивных образцах, рассеяние на фононах и дефектах кристаллического строения. В этом смысле можно говорить о том, что в этой части получены вполне предсказуемые результаты, но очень важно то, что они имеют количественный характер.

Вклад поверхностного рассеяния электронов в величину ТКС в значительной степени определяется степенью дисперсности пленок в случае пленок Cr и Ni становится отрицательным по отношению к вкладу зернограничного рассеяния. При этом проявляется устойчивая тенденция для пленок всех металлов (за исключением пленок Re), заключающаяся в уменьшении величины

$$\left| \frac{\beta_{gb}}{\beta_d} \right| c$$

ростом толщины, что объяснимо некоторым увеличением размеров зерен (или уменьшение их площади) по мере возрастания толщины. При анализе вклада различных механизмов рассеяния в ТКС необходимо отметить, что ТКС не является аддитивной величиной и соотношение между β , β_a , β_d и β_{gb} определяется формулой (3). Этим можно объяснить кажущееся противоречие между значениями β , β_d и β_{gb} , приведенными в таблице 2.

Работа была частично поддержана Международным фондом "Відродження", грант № GSU 082078 1998 года.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mayadas A.F., Shatzkes M. Electrical-Resistivity Model for Polycrystalline Films: the Case of Arbitrary Reflection at External Surfaces// Phys. Rev. B 1970. V.1, № 4. P. 1382-1389.
2. Физико-химические свойства элементов: Справочник/ Под ред. В.Г. Самсонова. Киев: Наук. думка, 1965.
3. Проценко И.Е., Смолин М.Д., Шамоны В.Г., Яременко А.В. Размерная и температурная зависимость электросопротивления пленок кобальта в области промежуточных температур// УФЖ. 1984. Т.29. №6. С.920-925.
4. Лобода В.Б., Проценко И.Е., Смолин М.Д., Яременко А.В. Исследование и температурных эффектов в тонких пленках переходных металлов// УФЖ. 1985. Т.30. №3. С.435-440.
5. Проценко И.Е., Смолин М.Д., Яременко А.В., Лобода В.Б. Температурная зависимость удельного сопротивления тонких пленок пермальных металлов// УФЖ. 1988. Т.33. №6. С.875-880.

METHOD OF SEPARATING OF THE CONTRIBUTION OF BOTH GRAIN BOUNDARY AND SURFACE ELECTRONS SCATTERING ON RESISTIVITY AND THERMAL COEFFICIENT OF RESISTANCE VALUES OF METAL FILMS.

S.I. Prochenko, A.M. Chornous
Sumy State University, Sumy

The method of separating of the share of both grain boundary and surface electronscattering on size effect of resistivity and thermal coefficient of resistance of Cr, Co, Ni, Cu and Re metal films was proposed. The ratio which are received allow quantitatively to estimate ρ_{gb} , ρ_d and β_{gb} , β_d .